

ポスト「京」による成果創出に向けた提言

令和元年6月13日

一般社団法人 HPCI コンソーシアム

## 提言の骨子

ポスト「京」による早期成果創出に向けて、計算科学・計算機科学コミュニティから聴取した意見をもとに、以下の通り提言する。

### (1) ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策

ポスト「京」により早期成果創出を図るためには、重点課題等で開発してきたアプリケーションソフトウェア(以下、アプリと記す)を利用することが最も効率的である。したがって、重点課題の成果創出フェーズは、当初の計画通り 2020 年度から開始すべきである。実施にあたっては、これまでに得られたアプリの開発成果と現体制の評価を行った上で、早期成果創出に向けて最適な実施体制をとることが必要である。またポスト「京」のシステム調整段階における試行的利用(以下、試行的利用と記す)など、ユーザ向けの利用環境を早期に整えるべきである。

ポスト「京」は、ユーザコミュニティや研究コミュニティの意見を反映させつつ運用すべきである。運用に際しては、社会的課題の解決という目的に鑑み、柔軟で使いやすい産業利用課題枠を設置して、産業利用を推進すべきである。その際、企業ユーザが安心して使えるセキュリティを確保することが必要である。試行的利用の機会を、企業ユーザにも提供すべきである。また「京」でプリインストールされているアプリは、引き続きポスト「京」でも利用できる様にすべきである。

### (2) アプリの普及とデータの利活用

国産アプリの国内外への普及、すなわちユーザ増や新たな利活用事例の創出は、それ自体がポスト「京」および HPCI の成果である。各分野のコミュニティの力を借りつつも、ポスト「京」の成果創出フェーズを機に公的資金により、アプリ普及・利用サポートのための継続性のある体制づくりを急ぐべきである。

また HPCI で得られる大量のシミュレーション結果のデータは、適切な形で研究者や社会に提供され、利用されることで、新たな価値を生み出す可能性がある。そのようなデータの価値に留意し、HPCI として、データの蓄積と提供を組織的に行うべきである。

### (3) 新規分野・新規ユーザの開拓

HPCI で生成されるビッグデータを利用した AI 研究や、AI 手法を用いたシミュレーション結果の解析は、HPCI の普及と発展につながる、新しい重要な方向性である。今後、AI を計算科学戦略の中に位置づけ、それらの HPCI 利用促進にむけて、ソフトウェア整備やシミュレーションデータの蓄積と提供など、必要な環境整備を行うべきである。

新分野のユーザを獲得するため、応募・採択の容易な、小規模の一般課題枠(お試し課題)を設けることが望ましい。試行的利用の機会を、これらのユーザにも提供すべきである。

またポスト「京」および HPCI 利活用促進に向けて、戦略的な人材育成活動が重要である。人材育成の取り組みは継続的に行うことが重要であり、そのためには関係機関で行われる人材育成活動の情報を集約し、一元化して提供する仕組みを整備すべきである。

## 目次:

1. はじめに	…4
2. HPCIによる成果創出のあり方	…4
3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策	…5
4. アプリの普及とデータの利活用	…6
5. 新規分野・新規ユーザの開拓	…7
6. あとがき	…8
【附録】	…10

## 1. はじめに

我が国では、フラッグシップ計算機を頂点とし、大学情報基盤センター等が運用するスーパーコンピュータ(第二階層計算機)を高速ネットワークで接続して、ひとつのユーザ ID で全ての計算資源にアクセスできる体制、HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)を構築し、計算科学の振興に努めてきた。初代フラッグシップ計算機である「京」は 2012 年 9 月に共用を開始したが、間もなくその役目を終え、機器入れ替えのための期間を経て、2021 年度中にも次期フラッグシップ計算機であるポスト「京」の運用が開始される予定である。

ポスト「京」による早期成果創出は、ポスト「京」プロジェクトに参画するすべてのメンバーが共有する目標であり、責務である。またポスト「京」の共用開始により新たなフェーズに入る HPCI は、計算科学・計算機科学の研究基盤であるだけでなく、産業の発展や国民の安全・安心にもつながる重要な社会基盤であり、将来にわたって、その継続的発展と成果創出が望まれる。そこで本報告書では、計算科学・計算機科学コミュニティから聴取した意見をもとに、ポスト「京」による早期成果創出と、HPCI の継続的発展のための方策について取りまとめることとした。

まず第 2 章で、HPCI による成果創出のあり方について整理したのち、第 3 章ではポスト「京」による早期成果創出に向けた具体的方策として、ポスト「京」向けに開発されてきたアプリの利活用とポスト「京」の資源配分について述べる。第 4 章では、中長期的視野に立ち、幅広い成果創出に不可欠なアプリの普及と、シミュレーションで得られたデータの利活用について、第 5 章では HPCI の新規分野・新規ユーザの開拓について述べる。第 6 章のあとがきでは、HPCI の継続性に資するエコシステムの構築のため、今後検討すべき課題を述べる。

## 2. HPCI による成果創出のあり方

計算科学は、科学技術分野の研究・開発において大きな役割を果たしており、今後さらに重要性が増すと考えられる。一方で、フラッグシップ計算機の開発・整備には多額の国家予算が投入されており、その成果について、研究者は重大な説明責任を負っている。このことを前提に、この章では HPCI による成果のあり方について整理する。

### (1) 科学的成果、社会的成果

- ・ HPCI の成果としてまず想定されるのは、HPCI を利用して得られた知見としての科学的成果、あるいは産業応用や災害予測といった社会的成果である。
- ・ 創出された成果は、論文などの学術的な成果による評価だけでなく、実際の製品への貢献など、社会還元の視点から長期的な評価を行うことも必要である。
- ・ 評価にあたっては、実験・観測等により、シミュレーション結果を検証することも重要である。

- ・ HPCI の成果を最大化するためには、長期的展望に立ってアプリ開発計画を立案すべきである。

#### (2) アプリ開発と社会への普及

- ・ HPCI で開発されたアプリが社会に普及し、実際に役立つことも、HPCI の重要な成果である。論文だけでなく、アプリが実社会でどれだけ役立っているかも評価すべきである。
- ・ 産業界等、実社会での活用を目指したアプリは、開発段階から産学共同体制をとるなど、開発の出口を見据えるべきである。

#### (3) IT 産業への波及効果

- ・ フラッグシップ計算機の開発やデザインを通して得られた技術が、IT 産業へと波及することも、HPCI の大きな成果である。

#### (4) 国民に向けた成果の説明

- ・ 国民に向けて HPCI 成果をわかりやすく伝えるため、継続的な努力が必要である。説明に際しては、計算機から得た直接の成果だけでなく、実際の製品等への貢献についても説明すべきである。
- ・ 専門家による評価の基準と、非専門家(主に納税者)による評価の基準は必ずしも一致せず、両面で成果を説明することが必要である。

### 3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策

#### (1) 重点課題等で開発してきたアプリの利用

～重点課題や萌芽的課題の、成果創出フェーズへの移行

- ・ ポスト「京」においては、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に戦略的に取り組み、我が国の成長に寄与し世界を先導する成果を創出することが期待されている。文科省の「ポスト『京』で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会」(平成 26 年度 5 回開催、主査 小宮山宏)では、9つの重点課題が選定されたほか、新たにに取り組むチャレンジングな課題として4つの萌芽的課題が選定された。またこれらの課題実施にあたっては、アプリ開発を行う本格実施フェーズに続き、ポスト「京」を用いる成果創出フェーズを実施する年次計画が立てられた。
- ・ 上記の委員会で選定された課題において、ポスト「京」により早期成果創出を図るためには、重点課題等で開発してきたアプリを利用することが最も効率的である。ポスト「京」の運用は当初計画より遅れることとなったが、研究を継続しながら準備を整え、ポスト「京」運用開始と同時にその利活用をすすめるため、重点課題の成果創出フェーズは当初の計画通り 2020 年度から開始すべきである。
- ・ 成果創出フェーズの実施にあたっては、これまでに得られたアプリケーションの開発成果と現体制の評価を行った上で、産業上の実課題への取り組みも視野に

入れつつ早期成果創出に向けて最適な体制を検討すべきである。

- ・ フラッグシップ計算機停止期間中に成果創出フェーズを開始するに当たっては、ポスト「京」に近い利用環境を研究者に事前に提供する施策(第二階層資源の活用、ポスト「京」の試行的利用の運用等)が必要である。
  - ・ その他、これまで RIST が「京」のためにプリインストールしてきたアプリを、引き続きポスト「京」で利用できるように維持・管理すべきである。
- (2) トップダウン(重点課題等)とボトムアップ(一般課題)の資源配分の考え方
- ・ ポスト「京」の資源配分にあたっては、着実な成果の期待できる重点課題だけでなく、そこで開発されたアプリを利用して全く新しい課題に取り組む提案や、新規なアプリ開発を伴う一般課題にも、バランスよく資源を配分すべきである。
  - ・ 新分野(AI、データサイエンス等)への戦略的な取り組みの必要性、裾野拡大や産業利用促進へのなお一層の取り組みの必要性等も勘案し、最適に資源配分していくことが必要である。
- (3) ポスト「京」の産業利用
- ・ ポスト「京」の運用においては、社会的課題の解決という目的に鑑み、産業利用を推進すべきである。
  - ・ 「京」では、成果公開を前提とした無償利用枠である「トライアルユース」、「実証利用」、成果非公開の有償利用枠である「個別利用」、ASP 事業を実施中または計画中の企業を対象とした「ASP 事業実証利用」という産業利用枠が用意されている。これらを参考に、ポスト「京」でも、柔軟で使いやすい産業利用枠を設置すべきである。
  - ・ スーパーコンピューティング技術産業応用協議会と関係諸機関の間で、先行調査を実施済みである通り、企業が求めるセキュリティを確保することが、産業利用(特に有償利用)促進に向けて重要な課題である。より多くの企業ユーザが安心して使える利用環境を提供すべきである。
  - ・ 複数の企業や大学等からなるコンソーシアムを組織して、産業利用における基盤的なアプリ実証研究を進めるなど、将来的に HPCI の枠を超えたスーパーコンピューティングの産業利用につながる施策を、これまで以上に積極的に推進すべきである。
  - ・ 産業界におけるポスト「京」の早期利用を促進するため、企業ユーザに対しても、ポスト「京」の試行的利用の機会を提供すべきである。
  - ・ ポスト「京」で得られた膨大な計算結果の産業利用についても推進すべきである。
4. アプリの普及とデータの利活用
- (1) 分野やアプリの特性に応じたアプリ普及の在り方
- ・ 我が国では、ポスト「京」や HPCI などでの利用を想定して、多くのアプリが開発さ

れている。これら国産アプリの国内外での普及、すなわちユーザ増、新たな利活用事例の創出は、それ自体がポスト「京」および HPCI の成果であると同時に、HPCI の継続的発展を支える大きな力となる。

- ・ 主要アプリの数、利用が想定されるコミュニティの規模、産業利用の有無など、アプリ開発の状況は分野毎に大きな差異がある。アプリ普及は、画一的な手法ではなく、分野の特性に合った手法で進めるべきである。

#### (2) アプリ維持・普及の仕組みと戦略

- ・ アプリ開発者が中心となってアプリ普及を進めることは、開発者への負担が大きく困難である。RIST、FOCUS、R-CCS、一部の重点課題等の組織では、アプリ普及にむけて努力がなされているが、いまだに十分とは言えない。各分野のコミュニティの力を借りつつも、ポスト「京」の成果創出フェーズを機に公的資金により、アプリ普及・利用サポートのための継続性のある体制づくりを急ぐべきである。
- ・ 我が国の計算科学研究の国際競争力を高めながら、同時にアプリ普及を推進するため、国および計算科学コミュニティは、アプリの維持、普及を専門に担う人材の育成、処遇、キャリアパスの確立に尽力すべきである。
- ・ 国プロアプリの産業利用を進めるためには、産業上の必要性や、産業実課題でどのように使えるかという適用性の観点での評価が必要である。
- ・ アプリ普及の具体的手段としては、多数の事例を含むわかりやすいウェブサイトの構築、ユーザ視点で行う講習会活動、ワンストップの相談窓口の提供などが考えられる。HPCI を構成する第二階層計算機にアプリをインストールし、すぐに利用できる環境を用意することや、手持ちの計算機に導入するためのツールの開発も有効である。

#### (3) データの利活用

- ・ HPCI で得られるシミュレーション結果のデータは、適切な形で研究者や社会に提供され、利用されることで、新たな価値を生み出す可能性がある。そのようなデータの価値に留意し、HPCI として、メタデータの整備を含め、データの蓄積と提供を組織的に行うべきである。

#### (4) 国際性の担保

- ・ アプリの普及とデータの利活用について、海外への普及や国際連携も推進すべきである。ドキュメントの整備などを通して、海外からのアクセス性を高めるための努力が必要である。

### 5. 新規分野・新規ユーザの開拓

HPCI は、新規分野に開かれたインフラである。科学技術の発展や社会的要請に応じて、HPCI に馴染みのない新規分野の研究者を HPCI ユーザとして取り込むことは、計算科学と HPCI を活性化させ、その継続的発展をもたらす重要な手段である。



#### (1) AI、データ科学分野への取り組み

- ・ Society 5.0 による超スマート社会実現に向けて、近年発展の著しい人工知能(AI)やデータ科学などの新分野には、社会の期待が高まっている。HPCI 分野においても、AI を利用することで、HPCI で大量に生成されるデータから新たな価値を生み出すことは、重要な研究の方向性である。今後、AI を計算科学戦略の中に位置づけ、それらの HPCI 利用促進にむけて、ソフトウェア整備(スクリプト言語, 機械学習フレームワーク, コンテナ環境など)やシミュレーションデータの蓄積と提供など、必要な環境整備を行うべきである。

#### (2) 新規分野の振興

- ・ 新規分野の振興のため、現在の「萌芽的課題」のような準備段階のプロジェクトを立ち上げ、評価を経て本格実施に移行する仕組みを用意することが有効と思われる。
- ・ 新規分野の振興には、HPCI の新規ユーザを開拓することも必要である。

#### (3) 新規ユーザの開拓

- ・ HPCI の多様なユーザを獲得するため、応募・採択の容易な、小規模の一般課題枠(お試し課題)を設け、新規ユーザの利用促進を図ることが望ましい。
- ・ 新規ユーザの開拓には、「知る→試す→使う」というプロセスをユーザに体験させる環境が必要である。より具体的には、「知る」ための WEB サイト、「試す」ための講習会活動、「使う」ための導入環境のセットが効果的である。
- ・ 産業利用促進のためには、有償利用制度の充実が必要である。HPCI の実証利用後の受け皿となる民間クラウドとの連携協力も、検討すべきである。
- ・ ポスト「京」および HPCI 利活用促進に向けて戦略的な人材育成活動が重要である。これまで、物性科学や生命科学の分野でのネット配信の講義や理化学研究所の計算科学の e ラーニングのサイト、各スパコンセンターにおけるセミナー等、様々な人材育成の取り組みが行われてきた。これから、重点課題プロジェクト等で開発されたアプリを用いて最大限の成果を創出するためには、ポスト京や各センターの HPCI 資源で利用可能にするだけでなく、普及させるための講習会等の取り組みが重要となる。また、ビックデータ処理や AI/ディープラーニングを利用したアプリ開発など、新しいテクノロジーに関する情報提供に取り組むことも必要である。このような取り組みは継続的に行うことが重要であり、そのためには関係機関で行われる人材育成活動の情報を集約し、一元化して提供する仕組みを整備すべきである。

#### 6. あとがき

本提言は、ポスト「京」の運用開始を前に早期に解決すべき課題を検討し、コミュニティの意見を取りまとめたものである。

本提言に含まれない以下の項目については、HPCI の継続的発展と将来につながるエコシステム構築に向け、今後検討する予定である。

(1) HPCI の体制と役割分担

HPCI コンソーシアム、理化学研究所、登録機関が連携して実施することとなっている成果発信、利用支援、利用者選定、理解増進活動のあり方、ポスト「京」とその他の HPCI 機関との適切な役割分担と有機的な連携のあり方、登録機関の運営にユーザコミュニティや研究コミュニティの意見をより良く反映させる仕組みについて。

(2) HPCI 向けアプリ開発・普及・利用に向けた人材育成

機関や分野を横断した教育体制構築と、その継続的運用について。

(3) HPCI ユーザコミュニティの拡大

HPCI の情報提供、計算科学者と実験科学者との交流をはじめとする研究者間の交流、産業界とアカデミアを含むユーザコミュニティの育成、HPCI 課題立案に産業界の参画も得つつ、産業上真に必要とされる課題に取り組む方策等について。

(4) フラッグシップ計算機の研究開発と運用の在り方

フラッグシップ計算機ハードウェアの下方展開、次期フラッグシップ計算機の開発と運用等について。

(5) 第二階層計算資源の有効利用

アプリの下方展開、OSSや商用ソフトの充実について。

(6) 次世代スーパーコンピュータの研究開発

ポストムーア時代を意識した次世代のスーパーコンピュータの基礎・応用研究を実施する体制について。

## 【附録】

本提言は、一般財団法人高度情報科学技術研究機構内に設置された下記のワーキンググループと一般社団法人 HPCI コンソーシアムが連携して実施した調査検討結果に基づき、ユーザからの意見も反映させて、提言として取り纏めたものであることを付記する。

### HPCI システムの今後の運営の在り方に関する調査検討ワーキンググループ 委員リスト

委員	伊藤 宏幸	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
委員	佐藤 三久	理化学研究所計算科学研究センター
委員	白井 宏樹	アステラス製薬モダリティ研究所
委員	田浦 健次郎	東京大学情報基盤センター
委員	高木 周	東京大学大学院工学系研究科
主査代理	高木 亮治	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所
委員	高津 英幸	高度情報科学技術研究機構神戸センター
委員	高野 直樹	慶應義塾大学理工学部
主査	常行 真司	東京大学大学院理学系研究科
委員	朴 泰祐	筑波大学計算科学研究センター

※50音順

※オブザーバ: 文部科学省研究振興局参事官(情報担当)、加藤千幸(HPCI コンソーシアム理事長)、平澤健一(HPCI コンソーシアム・事務スーパーバイザー)

### 検討の記録

第1回	2018年9月28日 15:00~17:00
第2回	2018年10月25日 10:00~12:00
第3回	2018年11月21日 10:00~12:00
第4回	2018年12月25日 16:00~18:00
意見交換会	2019年1月31日 14:00~16:00
第5回	2019年2月21日 15:00~17:00
第6回	2019年3月15日 10:00~12:00
第7回	2019年4月25日 15:00~17:00