

今後の計算科学技術振興のあり方に関する提言

平成27年5月28日

一般社団法人 HPCI コンソーシアム

## 目次

はじめに	1
1. 現在の計算科学技術振興体制	1
(1)HPCI の構築(第1期)	1
(2)HPCI による計算科学技術振興体制の構築	2
(3)HPCI 戦略プログラムによる計算科学技術振興体制の構築	2
2. 計算科学技術振興体制の課題	2
(1)HPCI システムの構成の課題	2
(2)HPCI 振興体制の課題	3
(3)HPCI 戦略プログラムの課題	3
(4)ポスト「京」プロジェクトにおける分野振興活動の必要性	4
3. 第2期の計算科学技術振興体制に必要なこと	4
(1)HPCI における計算機科学・計算科学の支援体制の構築	5
(2)科学技術・産業の国際競争力強化に向けた 実用的アプリケーションソフトウェアの実証	5
(3)人材育成及び広報・広聴	6
(4)HPCI システムの設計と「京」の戦略的な計算資源の運用	6

はじめに

「京」をはじめとする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(以下、HPCI)は、多様なユーザーニーズに応える共用計算資源を計算科学コミュニティに提供することで、様々な分野の科学技術や産業の発展に大きく貢献することができるシステムである。このシステムは、平成24年1月30日付で公表されたHPCI準備段階コンソーシアムの報告書『HPCIとその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて-最終報告-』を敷衍してその利活用方針が策定され、平成24年9月の「京」の供用開始以降、現在まで多くのユーザに使われてきた。この間、平成22年1月からのフィージビリティスタディ、平成22年9月からの準備研究を経て、平成23年度にHPCI戦略プログラムが本格実施となった。HPCI戦略プログラムでは、5つの科学分野を担う複数の戦略機関が、「京」を利用した成果創出に加え、それぞれの科学分野の振興活動や人材育成・教育活動、「京」の運用機関である理化学研究所計算科学研究機構(以下、AICS)とも連携した分野横断の取り組みなど、我が国の計算科学技術振興体制の構築に資する様々な活動を行ってきており、平成27年度末までプロジェクトとしての活動が行われる予定である。こうしたHPCI戦略プログラムが終了する平成27年度末までのHPCIの振興体制を本提言では、第1期のHPCIと定義する。

一方、平成26年度には「京」の後継機となるフラッグシップシステム(以下、ポスト「京」)の開発、及び「ポスト『京』で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」の9つの重点課題の事業(以下、重点課題)に関するプロジェクト(以下、ポスト「京」プロジェクト)が開始され、大学の情報基盤センター等でも、平成27年度以降に「京」に匹敵する性能を有する計算機への更新が計画されている。このような計算資源環境変化の中、HPCIの発展、及び計算科学技術の振興を効果的かつ効率よく実施するための具体的な方策を検討する必要がある。本提言は、現況の把握と課題の分析に基づき、計算科学コミュニティの意見を踏まえ、HPCI戦略プログラム終了後の平成28年度からポスト「京」が稼働する平成32年頃までの第2期のHPCIにおける計算科学技術振興のあり方をまとめたものである。

## 1. 現在の計算科学技術振興体制

### (1)HPCIの構築(第1期)

我が国の計算科学技術インフラは、世界トップレベルの性能を有するシステムを頂点に、大学の情報基盤センター、附置研究所、大学共同利用機関法人、国立研究開発法人等が有するシステム群である第二階層<sup>※1</sup>、さらには各研究室等で個別の目的のために活用されるシステム群が裾野を支えるピラミッド型の計算資源構造として構築されている。このような計算資源構造において、より多様なユーザーニーズに応えるための計算科学技術振興体制となるHPCIの運用が平成24年9月に開始された。このHPCIは現在のフラッグシップシステムである「京」を頂点として、9大学の情報基盤センター等が有するスーパーコンピュータ群から構成され、それらを学術情報ネットワーク(SINET)による高速ネットワークで結び、多様なユーザーニーズに応える共用計算環境を提供している。

## (2)HPCIによる計算科学技術振興体制の構築

利用に供する計算資源の現状は以下の通りである。HPCIの中核である「京」の計算資源の約50%はHPCI戦略プログラムの課題により利用され、それ以外の「京」の計算資源、及び第二階層からHPCIに提供されている計算資源は、「京」の登録施設利用促進機関(以下、登録機関)でもある高度情報科学技術研究機構(以下、RIST)による一般公募、審査を経て採択された課題に利用されている。萌芽的研究から大規模研究、産業利用にわたる幅広い課題が採択され、高並列計算を活用するコミュニティの醸成・拡大が図られている。

利用支援の現状は以下の通りである。「京」の運用機関であるAICS及び登録機関であるRISTは、HPCIを利用する課題実施者のアプリケーションソフトウェア(以下、アプリ)の高並列計算向けの高度化支援を実施している。HPCIに計算資源を提供している大学の情報基盤センター等の第二階層のシステム構成機関も、それぞれ各提供資源に適した利用支援を実施している。加えて、AICSは「京」で動作する各種のアプリやミドルウェアの開発と「京」上でアプリの公開を、RISTはソフトウェアの移植に関する技術的支援等の業務を行っている。産業界での利用者の利便性等を意識し、通信的な意味に加えて利用相談窓口機能も担うアクセスポイントが東西2か所に設置され、東側をRISTが、西側をHPCIの産業利用促進を担う計算科学振興財団が運用している。

さらに、HPCIの申請支援システムを利用して、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点事業(以下、JHPCN)の一括した課題募集・審査が行われている。このJHPCNでは、8つの大学情報基盤センターが連携したネットワーク型の体制のもと、計算機科学を中心とした共同研究が実施されている。

## (3)HPCI戦略プログラムによる計算科学技術振興体制の構築

HPCI戦略プログラムにおいては、国が高並列計算により大きなブレイクスルーが期待できる科学分野として設定した5つの戦略分野について、各分野の中核を担う戦略機関が社会的・科学的課題の解決を目的として活動を進めている。その実施内容は「京」及び第二階層の計算資源を活用した各戦略分野の研究開発と、各科学分野における計算科学技術の振興体制の構築である。この振興体制では、開発されたアプリの普及活動、最先端計算技術やアプリ普及を実施する人材の育成・教育活動、実験・観測や企業との連携促進活動、研究成果の社会への情報発信などが実施されている。このような活動を通して、昨今、開発された先端アプリの一部は、既に産業界や実験科学者を含む多くのユーザにも活用され、成果が創出されている。

## 2. 計算科学技術振興体制の課題

### (1)HPCIシステムの構成の課題

平成26年1月28日付で公表したHPCIコンソーシアムの報告書『将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言-最終報告-』には、今後のHPCIは世界トップレベルの性能を有す

るフラッグシップシステムに併せて、第二階層を構成する情報基盤センター等のシステムを整備するとともに、両者の連携によって、現在開発が進められているソフトウェア資産を継続して活用することの重要性が示されている。しかし、これを実現するための第二階層システム全体の整備のあり方等に関する議論は十分には行われていないのが現状である。今後、情報基盤センター等の第二階層の計算資源は、それぞれの更新計画に従って性能は飛躍的に向上し、平成27年度以降には、性能面で「京」に匹敵するスーパーコンピュータの導入が進む見通しである。これによって、高並列計算を実施する環境がさらに整うことから、この機会をユーザをさらに増加させるきっかけとすべきである。第2期の HPCI システムの構成の在り方は、このような変化に対応すべく、計算科学技術振興体制も含めた全体像として検討する必要がある。

## (2)HPCI 振興体制の課題

登録機関における利用支援は、当初、アプリの高並列化へのチューニングや「京」への移植支援など、計算機科学的な支援<sup>※2</sup>を想定していた。しかし、HPCI の利用が増えるにつれ、そうした「京」を活用するための支援と同時に、計算科学的な支援<sup>※3</sup>のニーズが増えてきている。これは登録機関が実施している利用支援の中ではなく、HPCI 戦略プログラムにおける計算科学技術推進体制の構築及び分野振興という形で取り組まれてきた。本来、利用者視点に立てば、これら計算機科学と計算科学双方の面からの利用支援を一体的に提供することが必要である。今後、オープンソースや HPCI 戦略プログラムで開発されたアプリ、また商用アプリを活用する「アプリ開発者」ではない「アプリ利用者」の増加が想定されることから、今後さらに高まっていく計算科学的な支援のニーズや産業利用のニーズをいかに HPCI に組み込んでいくかが大きな課題である。

また、HPCI に計算資源を提供している第二階層のシステム構成機関においても、各提供資源に適した計算機科学的な利用支援を中心に計算科学的な利用支援まで含めた支援が実施されているが、この取り組みをさらに充実させていくことが求められている。

今後の HPCI の振興体制においては、変化するユーザニーズを的確に捉え、求められる利用支援、技術の共有、併せてそれを支える人材の育成を進め、成果を最大化する必要がある。

また、産業界からは、当初より柔軟性の高い利用形態のニーズがあった。そのため、試し計算を行うトライアル・ユース、自社の課題で高並列計算の効果等を検証する実証利用、さらには今すぐに「京」の規模を用いて秘匿性の高い実問題解決を行うための成果非公開の個別利用枠を設けてきた。産業界の要望に迅速に応えるために、トライアル・ユース、個別利用に関しては随時申請としている。今後もアカデミアの利用も含めて継続的にユーザニーズを吸い上げ、利用形態や資源配分に反映していく必要がある。

## (3)HPCI 戦略プログラムの課題

HPCI 戦略プログラムにおいて、「京」の性能を最大限に引き出す先端アプリが開発され、その活用により各分野において様々な成果が創出されている。また、それらの先端アプリは、分野振興の観点から普及を目指して公開されているものも多い。これらは最先端の知見に基づいた特

徴あるソフトウェアではあるが、多くの場合、堅牢性が十分でないなど、開発者以外の研究者・技術者の利活用には課題が残っている。欧米ではそうしたアプリを産業界や実験科学者を含む多くのユーザが実務に使う実用の段階まで作り上げる取り組みがなされている。HPCI 戦略プログラムで要素開発されたアプリの実用化を進めることは、我が国の科学技術・産業の国際競争力強化の観点からも重要である。

一方で、HPCI 戦略プログラムが進めてきた当該分野の計算科学技術推進体制の構築と分野振興は、これまで十分でなかった当該分野の計算科学コミュニティの構築に大きな成果を挙げている。今後、戦略5分野において構築されたコミュニティを核として、さらに周辺分野や新規分野における計算科学の振興を進めなければならないが、その取り組みは立ち遅れている。また、HPCI 戦略プログラムは「京」での成果創出を目的とした事業であることから、研究開発そのものは「京」での実装を中心に行われてきた。先端アプリを第二階層など「京」以外の資源で動作させ、コミュニティを発展的に拡充するという下方展開の試みはまだ不足している。今後、個人や研究室レベルのPC、PC クラスター利用者がスーパーコンピュータ利用者に育つような上方展開の仕組みに加えて、このようなアプリの下方展開を進め、下層から上層までアプリのシームレスな利用を可能とする方法を検討する必要がある。

#### (4) ポスト「京」プロジェクトにおける分野振興活動の必要性

平成26年度から、9つの重点課題の事業が着手された。本事業は国により選定された課題の研究開発を行うものであり、HPCI 戦略プログラムで実施された計算科学技術推進体制の構築が事業に含まれるかは明確ではない。そのため、HPCI 戦略プログラムで実施している計算科学振興活動の中で継続性が必要とされるもの、たとえば先端アプリ群の維持・発展・活用促進や人材育成、広報活動等を、今後どのように発展させていくのか検討する必要がある。さらに、今後、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、4つの萌芽的課題の検討も進められ、多様な成果創出が期待されている。これらに留まることなく、広範な萌芽的課題に取り組み、分野融合や新分野開拓を進めることが長期的な我が国の計算科学技術振興には不可欠であるが、これらを継続的に実施していくための取り組みは立ち遅れているのが現状である。

ポスト「京」プロジェクトにおいては「使いやすさ」にも配慮したシステム開発及び重点課題の研究を着実に進め、直面する科学的ないし社会的課題を解決する必要がある。それに加えて、「京」を中核とした HPCI での実績・経験を踏まえて、広範な萌芽的課題によって新たに開拓される分野も含め計算科学技術の普及促進活動や計算と実験との連携等による分野振興活動にも十分取り組む必要がある。

### 3. 第2期の計算科学技術振興体制に必要なこと

上述の第1期の HPCI の現状と課題を踏まえ、第2期となる HPCI 戦略プログラム終了後の平成28年4月以降における計算科学技術の更なる振興に向けて、利用支援のあり方、開発したアプリの利活用促進、加えてそれらの活動を発展させる体制や人材育成等に関して以下に示す

事項が求められる。

#### (1) HPCIにおける計算機科学・計算科学の支援体制の構築

今後の利用者視点に立てば、計算機科学と計算科学双方の面からの利用支援が求められる。その際には、システムとアプリの協調最適化技術など、計算機科学と計算科学の両方にまたがる利用支援における技術開発<sup>※4</sup>が必要となる。従来のように利用支援業務を一体化させるだけの取り組みではなく、登録機関や第二階層システムを提供する機関が、それらの技術を個別機関に閉じることなく他の機関と連携して保有すること、さらには HPCI 戦略プログラムを実施している機関もこの技術開発に参加し、個別に実施されていた利用支援を HPCI として実施しうる一体の体制として設計・整備し、継続的にこれを実施すべきである。すなわち、システムとアプリのコミュニティの連携によって計算機科学と計算科学の両者にまたがる技術開発を進め、その成果を活かした利用支援を提供する取り組みによって初めて、利用者は自らの必要性に応じて最適な計算環境の場で課題解決を行うことができ、HPCI の更なる活用が可能となる。

このような体制の検討においては、HPCI 運用機関の役割の再検討や発展的機能強化も視野に入れ、さらには HPCI 戦略プログラムで培われた知見・人材等の積極的な活用も含めた弾力的な制度設計とその実施が求められる。社会における社会的・科学的なニーズは変化し続ける。計算科学技術がこれらの変化に適切に対応し、成果を出す形で貢献していくためには、ニーズ志向で継続的に HPCI の制度を見直すことが求められる。

#### (2) 科学技術・産業の国際競争力強化に向けた実用的アプリケーションソフトウェアの実証

HPCI 戦略プログラムで開発された先端アプリの利活用促進活動は HPCI 戦略プログラム終了後、戦略プログラムを担った機関を中心に実施すべきである。各分野でコミュニティの育成状況等が異なることから、画一的ではなくニーズに応じた活動とすべきであり、かつ継続的に実施することが求められる。これらは我が国の計算科学技術の振興を支える活動であるため、一定の支援の継続を検討する必要がある。

一方で、高並列計算性能で他の既存アプリに対して優位性を持つ先端アプリ群のうち、産業界や実験科学者を含む多くのユーザの課題で多用が見込まれるアプリについては、我が国が保有する知の財産として戦略的にその活用を推進すべきである。具体的には、HPCI 戦略プログラム等で開発されたアプリ群、及びポスト「京」の重点課題で開発するアプリ群について、産業界や実験科学者を含む多くのユーザニーズを踏まえて、今後、国費を投入して我が国の基盤ソフトウェアとして整備すべきか、厳しい評価を実施のうえ、ポスト「京」が稼働する時代において高並列計算で幅広く、かつシームレスに使われるよう、ユーザビリティの向上や信頼性の確保の観点から必要な技術開発を行うべきである。

とくに産業界での HPC 技術の利活用を進めるには、こうしたアプリの実用化実証が極めて重要であり、この点は平成25年9月に文部科学省 HPCI 計画推進委員会の『今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ 産業利用アプリケーション検討サブワーキンググル

ープ』によって取りまとめられた報告書にも記載されている通りである。

上記の事業においては、利用者視点に立った解析環境の技術的要素<sup>※5</sup>を含めて技術開発を行い、事業終了後は当該アプリの維持管理・高度化を継続的に行える体制を構築することが求められる。また、これまで計算科学技術の導入が進んでいなかった分野も含め多方面での利活用推進とそれによる新市場の開拓を進め、ひいては当該アプリをデファクトスタンダードとして確立させることも目指すべきである。本事業においては、産業界の協力を得てそのニーズを事業内容に反映させるとともに、当初より年度傾斜型マッチングファンド制度の導入やステージゲートを設けたプロジェクト評価・管理も検討されるべきである。このような取り組みを HPCI 戦略プログラム終了後切れ目なく開始することで、成果創出による成長戦略への寄与も含め、我が国における科学技術・産業の国際競争力の強化に繋げるべきである。

これまで、産業界での HPC 技術の利活用促進はさまざまな形で進められてきた。「京」を中心とした HPCI システムの利用に関する支援や HPCI 戦略プログラムの産業展開など一定の成果は出始めている。しかしながら、これまでの利用支援や上記アプリの展開などに加え、産業利用の大きな流れを一気に生み出せるような施策を改めて議論する必要がある。

### (3) 人材育成及び広報・広聴

今後の HPCI においては、計算機科学と計算科学の研究者の強い連携のもと、「Co-design」によるシステム開発が進められる。これら計算機科学と計算科学が協調する研究開発を通じて、次世代の計算科学コミュニティを担う人材の育成を継続的に実施すべきである。その際は、HPCI 戦略プログラムでの取り組みなど、第 1 期の HPCI で培われた人材育成の知見や実績を活用し、計算科学コミュニティ全体で分野を超えた交流や人材の流動を図るなど、キャリアパスの構築に向けた活動も進め、大学での教育とも連携のうえで人材育成を継続的、かつ発展的に推進していくことが重要である。このような人材育成を進めるための具体的な方策等については、国や計算科学コミュニティにおいて、今後、さらに議論を深める必要がある。

さらに、社会や技術の動向を見据え、常に変化を先取りする体制構築が必要である。計算科学コミュニティを構成する機関それぞれが、コミュニティ内でのニーズの吸い上げに加えて、計算機科学や計算科学以外の分野の研究者や産業界、一般社会からの意見を常に吸い上げ、世界の動向も見据えて、より広範な課題に取り組んで分野融合や新分野開拓を進めること、さらには国際競争力のある魅力的なシステムを設計し、必要に応じて HPCI の構成を見直し、整備・運用していくことが求められる。そのためには、情報発信を主体とした広報機能だけではなく、情報受信を重視した社会の課題を理解する広聴機能をより強化し、計算科学コミュニティを構成する機関それぞれが、HPCI 振興体制にフィードバックしていく仕組みを構築すべきである。

前述してきた計算機科学と計算科学が協調した利用支援やその技術の共有、それを可能とする HPCI 体制の構築、シームレスなアプリ利用環境の構築、人材育成、広報・広聴を HPCI 一体として継続的に実施することで、計算科学技術の利用者が下層から上層へと上方展開し、同時に計算科学技術が上層から下層へと下方展開していくことが可能となる。



#### (4)HPCIシステムの設計と「京」の戦略的な計算資源の運用

平成26年1月28日付で公表した HPCI コンソーシアムの報告書『将来のスーパーコンピューティングのあり方についての提言-最終報告-』にもあるように、第二階層の中で一定の条件を満たすシステムに関しては、競争的に厳選したうえで、フラッグシップシステムに併せて適切な規模の国費投入を行い、戦略的・計画的に開発を進めることが必要である。第二階層を構成するシステムについては、こうした国費が投入されるシステムも含めて、第2期以降も含めた長期的な視野のもと、時系列を意識しながらそのあり方を検討すべきである。HPCI システムでは計算資源に加えて、学術情報ネットワーク(SINET)や HPCI 共用ストレージの着実な整備・運用があつてはじめて多様なユーザーニーズに応えうる共用計算環境が整う。このことにも留意し、継続的に HPCI システムの最適な設計を検討すべきである。

また、「京」の配分資源の約50%を占めている HPCI 戦略プログラム終了後の平成28年度からポスト「京」が稼働する平成32年度頃までにおける「京」の計算資源利用については、これまでの成果や今後の研究計画を踏まえて検討されなければならない。重点課題におけるアプリ開発や研究開発、本提言で述べた戦略的なアプリ活用に向けた研究開発、分野コミュニティや産業界のコンソーシアムなどにおける分野振興利用、産業界による利用、若手人材育成施策での利用、重要かつ緊急を要する国の政策的な利用などに、これまでの実績を踏まえて戦略的な資源配分を行うべきである。その際、我が国の計算科学技術振興を支える上述の分野振興利用については、ポスト「京」の稼働期も含めて、継ぎ目なく適切な資源配分を行うことが望まれる。

利用形態についても、ユーザーニーズを踏まえた多様な形態で利用できるよう、継続的に議論すべきである。

以上

#### ※1 第二階層

国内システムにより構成するピラミッド型の計算資源構造において、頂点となる国家プロジェクトとして整備されるフラッグシップシステムの次に位置する多様な特徴を有するシステムであり、我が国の計算科学技術の発展や様々な成果の創出に貢献するシステム。

HPCI コンソーシアムの理念に賛同し、当該システムを HPCI 共用計算資源として幅広く計算科学コミュニティに提供する意思を有するとともに、適切に運用及び利用支援を実施することで、画期的な成果創出、人材の育成、研究教育拠点の形成等を推進する。平成26年度時点では、9大学の大学情報基盤センター、海洋研究開発機構、統計数理研究所がその計算資源の一部を提供している。

※2 計算機科学的な支援

アプリのプログラム作成やコンパイル、デバッグ作業における相談という支援だけでなく、計算機システムに固有の特性(ハードウェアだけでなく、システムソフトウェアを含む)を踏まえた、高並列化などの技術支援。

※3 計算科学的な支援

利用者の科学的課題に対してどのアプリが最適か、どのシステムを利用するのが最適かなど、アプリ利用方法や改良等のアドバイスを与えるもの。また、課題に関連した研究の活動紹介や共同研究を実施する候補者の推薦などの助言も含む。

※4 計算機科学と計算科学の両方にまたがる利用支援における技術開発

Co-design の観点で、システム(ハードウェアとソフトウェアを含む)の改良・最適化とアプリのアルゴリズムや実装の改良・最適化を協調して行うなど、計算機科学的な支援と計算科学的な支援の双方に関する知見を必要とする技術開発。

※5 利用者視点に立った解析環境の技術的要素

アプリの堅牢性(さまざまな入力データに対する動作の検証や障害、セキュリティ上のリスクなどに柔軟に対応できること)や解析品質の実証(解析結果が実験値を正しく再現できること)、マルチプラットフォーム検証(アプリが各種の OS 環境に対応していること)、バージョンアップシステム(常に最新の状態を保つ)、データ駆動型科学との融合(ビッグデータ解析技術を活用したシミュレーション技術)、ユーザビリティの確保(入出力データ処理の容易さ、ドキュメント類の整備等)など。