

【提言】「富岳」本格運用期における計算科学技術振興の在り方について

令和3年6月10日

一般社団法人 HPCI コンソーシアム

目次

| | |
|---------------------------------------|----|
| 1. はじめに..... | 3 |
| 2. 「富岳」運用について..... | 3 |
| ① 基礎科学分野や基礎的な研究への配慮..... | 4 |
| ② 成果創出加速プログラム新規課題の募集..... | 4 |
| ③ 新規利用・運用形態の検討..... | 4 |
| 3. 計算科学技術振興について..... | 5 |
| ① アプリケーション・ソフトウェア利用促進のための体制構築..... | 5 |
| ② 人材育成（アプリケーション・ソフトウェアの利用者）..... | 6 |
| ③ 人材育成（アプリケーション・ソフトウェアの開発者）..... | 7 |
| ④ コミュニティの構築と活性化支援..... | 8 |
| ⑤ コデザインに向けたコミュニティの連携..... | 8 |
| 4. フラッグシップ計算機の在り方について..... | 9 |
| ① 優位性のある性能..... | 9 |
| ② 商用計算機への展開..... | 9 |
| ③ 開発期間・システム形態・開発方針..... | 10 |
| 5. 第二階層計算資源..... | 12 |
| ① HPCI における第二階層計算機やその資源提供機関の位置付け..... | 12 |
| ② 多様性の維持..... | 12 |
| 6. あとがき..... | 13 |
| 【附録】..... | 14 |

1. はじめに

我が国は世界トップクラスのスーパーコンピュータである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、全ての計算資源へのシングルサインオン、共用ストレージ、利用者からの共通窓口を運用するインフラである 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、2012年9月の HPCI 運用開始以来、卓越した成果の創出を通じて、我が国の計算科学・計算機科学の振興に貢献してきた。

世界的な新型コロナウイルス感染症拡大は、我が国のみならず、全人類に甚大な被害を及ぼしている。この国難とも言える状況に対応すべく、HPCI では緊急措置的な対応として新型コロナウイルス感染症対策に資する様々な研究開発課題の実施を行っている。新型コロナウイルスの特性に関する解析や治療薬候補の探索など専門家向けの解析のみならず、様々な状況下でのウイルス飛沫感染の予測とその対策に関わる解析は、マスクの有効性や普段の生活における効果的な対策を示すなど、一般の人々向けの感染症対策にも大きく貢献している。HPCI が社会的課題解決の一助になっていることが目に見える形で示されたと言える。

HPCI の中心的な存在であるフラッグシップ計算機に関しては、初代フラッグシップ計算機「京」の後を受け、二代目フラッグシップ計算機「富岳」の共用が 2021年3月に開始された。「富岳」は共用開始に先立ち、2020年6月、11月に Top500 で世界第一位の性能を示した他、HPCG、HPL-AI、Graph500 においても世界第一位の性能を示すなど、その実力の片鱗を既に見せている。今後、成果創出加速プログラムを始め、様々な成果が期待されている。

このような状況下において、令和元年に発出した「ポスト「京」による成果創出に向けた提言」及び、令和2年に発出した「【提言】今後の HPCI システムの構築とその利用に関する基本的な考え方について」を踏まえつつ、計算科学・計算機科学コミュニティから寄せられた意見をもとに、「富岳」本格運用期における計算科学技術振興の在り方について調査・検討を行い、その結果を提言としてまとめた。

第2章では、喫緊の課題である「富岳」の運用に関する提言を述べる。次に、これまでの提言でも幾度か言及されているが、昨今問題が深刻化していると思われる計算科学技術振興に関する議論および提言を第3章で述べる。第4章では近々に議論が開始されるこれからのフラッグシップ計算機に関しての議論と提言を述べる。第5章では、これまでの提言において今後の課題として挙げられていた HPCI 第二階層計算資源について言及する。第6章のあとがきでは、引き続き検討が必要な課題について述べる。

2. 「富岳」運用について

「富岳」の利活用促進については、「HPCI 計画推進委員会報告書（令和元年5月）」、改訂「特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針（令和元年9月17日施

行)」さらには「【提言】今後の HPCI システムの構築とその利用に関する基本的な考え方について（令和 2 年 6 月 15 日）」等での議論を踏まえて、文部科学省「スーパーコンピュータ「富岳」利活用促進の基本方針（令和 2 年 7 月 17 日）」が示された。そこでは、「京」で培ってきた制度の利点を踏襲しつつ、利用者本位の考え方を基本とし、更なる利便性の向上、今まで「京」を利用していなかった分野への利用の拡大、産業界へのさらなる利用の促進、国として重点的に推進すべき研究開発の促進を目指している。それら現状の「富岳」運用方針を踏まえて以下を提言する。

① 基礎科学分野や基礎的な研究への配慮

「富岳」一般利用枠の課題選定に対して重点分野が設定されることとなっている。重点分野は政府の方針等を踏まえて年度毎に決定し、課題選択の際に優位性を持たせる等により当該研究分野の推進を図ることとし、その決定は登録施設利用促進機関に設置される選定委員会における議論に委ねられている。令和 3 年度定期募集に関しては感染症対策に資する研究開発および、次世代コンピューティングに資する基盤研究開発が重点分野として既に設定されている。それに留まらず、計算科学における基礎的な科学分野の研究課題にも十分配慮した設定をお願いしたい。計算科学における基礎的な科学分野に関しては、HPCI 戦略プログラムやポスト「京」重点課題、成果創出加速プログラムで、ある程度の課題数が設定されてきたが、昨今ノーベル賞受賞者による基礎科学軽視への警鐘を踏まえると十分とは言い難い状況である。重点分野だけでなく、一般利用枠での課題選定に関しても、基礎的な科学分野や、応用的な科学分野における基礎的な研究にも十分な配慮をお願いする。

② 成果創出加速プログラム新規課題の募集

現在実施している成果創出加速プログラムにおいては、重点課題等で開発してきたアプリケーション・ソフトウェアの活用により、より早期に成果の創出が期待される研究課題が実施されている。しかしながら、重点課題で開発してきたアプリケーション・ソフトウェアを用いた一部の課題が先行して実施されている状況であり、現在実施している課題以外にも、重点課題・萌芽的研究課題やそれ以外で成果が見込まれる新規分野での課題等のプログラム化も必要である。「富岳」の成果最大化に向けて成果創出加速プログラムの枠を拡充し、新規課題の公募を実施すべきである。課題実施に際しては、現在の実施課題も含め、この後 3 章で述べる計算科学技術振興を積極的に推進できる施策を実施し、成果創出をサポートすべきである。

③ 新規利用・運用形態の検討

今後ニーズが増えると想定されるデータ科学との連携で、観測データやセンサデータ、外部データベースからのデータを直接取り込みながらのリアルタイム処理など新しい利用形態の実現に向けた検討も必要である。また、今後におけるキー技術であるハードウェアの電力削減、省エネ技術に関連して、それらを有効利用した省エネ実行に対するユーザーのインセンティブの明確化と運用での利活用法に関して積極的に検討すべきである。

「富岳」の運用は、「京」での実績を踏まえ様々な制度の改善が行われているが、引き続き利用者視点に立った運用改善をお願いすると同時に、「富岳」の成果最大化に向けて成果創出加速プログラムの枠の拡充と新規課題の公募、課題選定における基礎的な科学分野や、応用的な科学分野における基礎的な研究への配慮、外部データとの連携など新しい利用形態やハードウェアの電力削減、省エネ技術の利活用法の検討などを実施すべきである。

3. 計算科学技術振興について

HPCI 戦略プログラム（2012 年 4 月～2016 年 3 月の 5 年間で合計 122 億円）では各戦略分野において「計算科学推進体制の構築」が重要なミッションとして設定され、各分野において約半分の予算がこれに充てられ、その分野における計算科学技術振興の原動力となっていた（以後、各分野における計算科学技術振興を分野振興と呼ぶ）。この分野振興事業により、開発されたアプリケーション・ソフトウェアの普及活動、最先端計算技術やアプリケーション・ソフトウェアの開発および利用を行える人材の育成・教育活動、実験・観測や産業界との連携促進活動、研究成果の社会への情報発信などが実施され、開発されたアプリケーション・ソフトウェアが産業界や実験科学者を含む多くのユーザーにも活用されることで「京」の成果創出の拡大に大きく貢献した。

HPCI 戦略プログラム終了後、ポスト「京」重点課題（2016 年 4 月～2020 年 3 月）が開始されたが、そこでは社会的課題・科学的課題の解決を目標としたアプリケーション・ソフトウェアの開発が目的とされ、分野振興は補助的な扱いとなり予算的な手当てもなくなった。2020 年 4 月から開始された成果創出加速プログラムでは、予算の大幅な削減（令和 2 年度は 9 億円）、プログラム実施期間の短縮（5 年→3 年）、各課題の規模が小さく（令和 2 年度は最大でも 1 億円/課題）なったことなどから、それぞれの課題はもとより我が国の HPC 全体においても分野振興的な活動は大幅な縮小を余儀なくされている。もし、このまま分野振興活動に対する支援が行われなかったら、これまで開発されたアプリケーション・ソフトウェアを利用できる機会、人材が不足し、折角開発したアプリケーション・ソフトウェアが使われなくなる。アプリケーション・ソフトウェアの開発者はもとより、アプリケーション・ソフトウェアを使いこなせる人材すらいなくなれば、開発したスパコンも成果を創出することができなくなる。また、長期的にはアプリケーション・ソフトウェアを開発できる人材が減少することとなり、その結果先端的アプリケーション・ソフトウェアの開発能力が激減し、計算科学、ひいては基礎科学の衰退、更には世界に対する研究競争力、産業競争力の低下を招くこととなる。これまでの提言でも度々指摘されているが、分野振興をより積極的かつ継続的に推進するための施策が必要であり、以下を提言する。

① アプリケーション・ソフトウェア利用促進のための体制構築

国プロソフトを初め、開発したアプリケーション・ソフトウェアが、プロジェクト終了後

も継続的に利用され、社会的・科学的成果を創出し続けるためには、アプリケーション・ソフトウェア開発者（個人もしくはグループ）だけでなく、アプリケーション・ソフトウェアの利用者との連携を含めた体制を構築し、アプリケーション・ソフトウェアの利用支援や発展を継続して実施する必要がある。そのために、関係者の意見が反映できる透明性の高い組織を設置し、アプリケーション・ソフトウェアの維持・管理、開発者との連携でプログラムの発展・高度化、利用者とのマッチングを含めた普及促進を継続的に実施すべきである。具体的には、関係者の連携の場であるコミュニティの構築と維持（以下④）、人材育成（以下②と③）を継続的に支援する体制を整備すべきである。更に、アプリケーション・ソフトウェアのマニュアルの整備や、特に産業界で求められる品質保証なども実施すべきであり、具体的な方法に関しては引き続き検討が必要である。

② 人材育成（アプリケーション・ソフトウェアの利用者）

対象となる物理現象をより忠実に、より正確に再現するために、シミュレーションモデルの高度化や、計算規模の拡大にともなってアプリケーション・ソフトウェアは非常に複雑化している。そのため、複雑化したアプリケーション・ソフトウェアの中身を理解した上で利用することは困難となり、中身がわからないままブラックボックスとして利用している例も少なくない。特に産業界においては、例えば構造解析ソフトウェアなどが製品開発に必須のものとして広く使われているが、解析手法の詳細を理解した上で使われているとは限らないのが現状である。アプリケーション・ソフトウェアを利用するだけの場合でも解析対象に関する知識、具体的には、解析対象の物理・数学モデルとモデル化の前提条件や仮定、適用範囲、更には解析手法やアルゴリズム等の特性に関して十分理解した方が良いことは明らかである。これらの知識を有する、言わばアプリケーション・ソフトウェアを使いこなせる人材の育成が重要となる。何故ならアプリケーション・ソフトウェアを使いこなせる人材を継続的に育成し産業界に供給することが、アプリケーション・ソフトウェアの利用促進を通じた産業競争力の強化には必須であり、他方、アカデミアにおいても先端的アプリケーション・ソフトウェアを使いこなせる人材の育成は、研究競争力の強化に直結するからである。さらに、アプリケーション・ソフトウェアが多くの局面で利用されれば、解析手法やシミュレーションモデルの検証、品質保証の蓄積、新たな手法や機能に対するニーズの顕在化などを通じて、アプリケーション・ソフトウェアの高度化にもつなげることができる。そのため、アプリケーション・ソフトウェアの開発プロジェクトにおいては、開発を支える人材としてアプリケーション・ソフトウェアを開発できる人材だけでなく、開発されたアプリケーション・ソフトウェアを使って成果が出せる人材の確保や継続的な育成が絶対に必要となる。

これまで国プロ等で開発されてきた多くのアプリケーション・ソフトウェアはフラッグシップ計算機だけでなく第二階層計算機にも精力的に移植されてきた。第二階層計算機より規模の小さい計算環境として、個人や研究室レベルのPCやWS、PCクラスターといったものが第三階層計算機と位置付けられる。それら比較的容易に利用できる計算環境へのアプリケーション・ソフトウェアの普及も人材育成という観点では重要である。第三階層計

算機で普段使っているアプリケーション・ソフトウェアが、ほぼそのまま第二階層計算機やフラッグシップ計算機で使える状況であれば、第三階層計算機の利用者が、第二階層計算機やフラッグシップ計算機の利用者へと育つことが想定される。フラッグシップ計算機並びに第二階層計算機と、第三階層計算機との間には規模の違い等大きな溝があり、フラッグシップ計算機向けに開発されたアプリケーション・ソフトウェアを第三階層計算機で利用できる様にするには様々な困難が想定される。しかしながら、まずは実行できることが重要であり、そのためには OSS (Open Source Software) 化によるボランティアベースでの移植など工夫の余地はある。フラッグシップ計算機のみならず第二階層計算機、第三階層計算機で実行できるアプリケーション・ソフトウェアを増やしていくことは、アプリケーション・ソフトウェアの利用促進の側面のみならず、アプリケーション・ソフトウェア利用者の人材育成の観点からも重要である。特に第三階層計算機への普及に関しては、分野振興におけるコミュニティが、その担い手の有力な候補と考えられ、このような観点でもコミュニティの活性化が鍵となる。

③ 人材育成 (アプリケーション・ソフトウェアの開発者)

高度に複雑化したアプリケーション・ソフトウェアの開発では、その基盤となる科学に関する新しい物理・数学モデルや計算手法の開発もさることながら、計算機ハードウェアを使いこなす実装技術など、計算科学および計算機科学の両面からの知識が必要となる。また大規模化しより複雑化するプログラム自体の開発にも、これまでに比べて多くの時間がかかるようになってきている。ましてや、最先端のフラッグシップ計算機を使うためには高度なチューニング技術が必要となり、プログラム開発やチューニングに関わる研究者は、彼らの評価の源泉である論文がなかなか書けないのが現状である。大学や国立研究所の研究者は、評価の絶対軸が論文であり、特に我が国の計算科学分野においては、往々にしてプログラム開発は殆ど評価されず、その結果彼らのポストやキャリアパスは非常に貧弱な状態である。世界的に著名なアプリケーション・ソフトウェアの殆どが欧米で開発されたものである一方、我が国から殆ど出てこない大きな一因は、このプログラム開発が評価されない点にあると言っても過言ではない。一方、産業界における研究部門では、計算科学のためのアプリケーション・ソフトウェア開発には人的投資も少なく、もっぱら外部、それも海外で開発されたアプリケーション・ソフトウェアの利用が主である。その結果、アプリケーション・ソフトウェア開発者の採用ならびにキャリアパスが形成されておらず、プログラミングスキルの高い人材の育成はもとより雇用すら困難な状況である。アプリケーション・ソフトウェアを開発できる人材が必要不可欠である以上、ポストの確保、キャリアパスの形成、肯定的な社会的評価を実現することが最重要課題であることをこれまで度々訴えてきたが、未だ改善されるどころか改善の兆しもない。早急な対応が必要であることをここでも強く提言する。

アプリケーション・ソフトウェアの開発者はその多くが大学や公的研究機関に所属するが、特に産業界に多いアプリケーション・ソフトウェアの利用者との人材交流を活性化 (産業界からアカデミアへのインターンシップ制度などが有効) し、開発者から利用者へ、もし

くは利用者から開発者へといった相互連携を強化することが重要である。そのためにも、アプリケーション・ソフトウェアの開発者と利用者の交流の場としてコンソーシアムの設置など、前述(①)したコミュニティの構築と活性化を支援する体制を早急に整備すべきである。また、HPCI コンソーシアムでも優秀なソフトウェアの開発者の表彰制度をつくるなど、側面からの支援を検討すべきである。

HPC に留まらず、今後は社会全体としてプログラミングスキルを有する人材はますます重要となってくる。今後の人材育成・教育においては、興味を持った中・高校生向けのプログラミング教育の場を用意するなど、学校教育のより早い時期にプログラミングに親しむ場を用意するなどの工夫が必要である。HPC に関わる様々な組織においては、学校教育で行われるプログラミング教育への積極的な協力が求められ、そのための支援が必要である。

④ コミュニティの構築と活性化支援

分野振興の中核はコミュニティ活動であるが、この活動は HPCI 戦略プログラムでの分野振興で誕生、拡大したものである。その後の分野振興予算の大幅な削減にともない、折角軌道に乗りつつあった分野振興は、多くの分野で後退してしまったのが現状である。物質科学分野における PCoMS (計算物質科学人材育成コンソーシアム) の様に、自助努力で事業として組織的に継続できているものもあるが、多くの分野では草の根的な活動としてボランティアベースで支えられ細々と活動している状況である。

コミュニティ活動では、上述した様に人材育成、人材交流など人が中心であり、スパコン利用の促進にも重要な役割を果たしている。例えば、スパコン利用が進まない原因として、スパコン利用の暗黙の前提であるバッチジョブによる利用の不便さや、スパコン利用を希望しても周りにスパコンユーザーが不在で、細かな事を相談できる相手がいないなどの事例も報告されている。マニュアルの整備、セミナーの開催など引き続き裾野拡大のための地道な活動を継続的に実施する必要があるが、それらに加えて、身近に気軽に相談できる人、場を用意するために、新規分野はもとより既存の分野でも人が交流できる場、すなわちコミュニティの構築・維持を支援する施策を実施すべきである。

⑤ コデザインに向けたコミュニティの連携

「京」、「富岳」の開発を通じてコデザインの重要性は十分認識されてきたが、今後のシステム開発においても更にその重要性が増加することは疑う余地がない。ハードウェアとソフトウェアの協調設計をより効率良く、強力に実施するためには、それぞれの専門家間で如何に密なコミュニケーションが実現できるかにかかっており、そのための場を継続的に維持することが重要となる。計算機科学のコミュニティで検討されている次世代計算基盤に関するシステムの観点からの検討や、計算科学のコミュニティで作成される計算科学ロードマップは、今後のフラッグシップ開発に必要不可欠であり、今後コデザインを進めていく上では、これらの二つのコミュニティとそれらを支える各分野におけるコミュニティの維持と相互の密な連携が必須である。

上記で述べた人材育成、アプリケーション・ソフトウェアの利用促進、裾野拡大、様々なコミュニティの構築・維持・活性化など、その実施主体は我々HPC関係者であるが、継続的な分野振興を行うためには、予算措置などの支援が必要となることは言うまでもない。これらを全て国の予算で実施するのではなく、本事業がエコシステムとして継続的に実施できるようにユーザー、特に産業界からの投資も実現すべきであり、その方策の検討も必要である。さらに、現状の枠組み（成果創出加速プログラム）でも実現できることとして、RIST、R-CCS、各大学情報基盤センター、各課題実施機関、各分野・コミュニティの中核機関などの役割分担を再整理し、各機関での活動の強化に留まらず広く連携を強化することにより、効率良く、かつ継続的に分野振興を推進する体制の実現が求められる。更により強力に推進するための施策として、産官学連携によるマッチングファンドの導入、文科省内で実施される各種プロジェクトでの計算科学的な課題に関する連携、更には省庁間（文科省、経産省、総務省）の連携も必要と考えられる。関係機関の役割分担の見直しに関しては今後も検討が必要である。

4. フラッグシップ計算機の在り方について

過去の提言において、何度かフラッグシップ計算機に関する議論を行い、直近の提言として、今後の科学技術発展のための重要な研究基盤としてフラッグシップ計算機を設備整備し続けること、実行可能な最大計算規模の観点から、中規模なスパコンを複数台開発・整備するのではなく、最大規模のものを開発し設備整備すべきであること、整備にあたっては、半導体技術等の進歩速度にも配慮しながら、できる限りフラッグシップ計算機の端境期が生じないような開発・整備方法を検討すべきであること、ハードウェア本体とアプリケーション・ソフトウェアの協調的开发を可能とするために、フラッグシップ計算機を独自に開発することが必須であることなどを提言してきた。フラッグシップ計算機を含む HPCI を取り巻く環境も変化し続けており、これまでの議論をベースにしつつ昨今の情勢を考慮して改めてフラッグシップ計算機の在り方に関する議論を行った。

① 優位性のある性能

フラッグシップ計算機はイノベーションの起爆剤であり、利用の困難さを克服するに足るだけの魅力的な高い性能が絶対的に必要である。先端的・先導的研究基盤として、超大規模計算を実現すべく、同時期中規模なスパコンを複数台開発・整備するのではなく、最大規模のものを開発し、設備整備するのが望ましい。

② 商用計算機への展開

HPCI のピラミッド構造において、頂点のフラッグシップ計算機、第二階層計算機それらに続く、第三階層の計算機（研究室レベルの PC クラスタ・サーバや個人の WS・PC）の階層構造がシームレスに利用できることが理想的であるが、その実現に関しては様々な課題がある。しかしながら、少なくともフラッグシップ計算機向けに開発された技術は、比較的

安価な商用計算機として第二階層計算機に展開される必要がある。更に、数年後には第三階層計算機以下に波及し、より広い範囲の HPC ユーザーに利用されることが望ましい。

一方、今後のフラッグシップ計算機は、HPC だけではなくデータ科学や AI などデータ処理全般にも適用可能なものになると予想されるので、その様な分野における利用も大いに想定すべきである。データ科学や AI などを含めたより広い分野での利用という観点は今後ますます重要となると思われるため、HPC での絶対的な性能を目指しつつ、商用計算機としてより広い範囲での利用も想定した開発を行うべきである。

より広い範囲のユーザーや分野での利用を想定した開発は、フラッグシップ計算機の開発を受託した計算機ベンダーが、その商用化と第二階層以下への展開によって開発費の投資を回収できることを意味し、フラッグシップ計算機を今後も継続的に開発し続けるエコシステムとして実現すべきことである。

③ 開発期間・システム形態・開発方針

フラッグシップ計算機を継続的に開発・運用していくことは論を待たないが、現状の課題として、ハードウェア・ソフトウェアの開発からそれを利用した成果が十分に得られるまでの期間が 10 年弱と極めて長くなっており、さらに単一種類の CPU を利用するシステムの絶対性能及び電力当たり性能が技術的限界に近づきつつあることが挙げられる。開発期間を短縮する方法としては、開発期間が長期化する大規模ジャンプではなく、小規模ジャンプでも良いので数年に一度の開発を行う方が望ましいという意見もある。CPU に関しては、これまでの議論において、計算機ハードウェアとアプリケーション・ソフトウェアとの相性の観点で整理した場合、システムの演算器性能、メモリ性能、ネットワーク性能等のバランスの観点で 3~4 程度のアプリケーション・ソフトウェア群に分けられ、それぞれに適したシステムバランス（アーキテクチャ）が想定される旨の報告がなされている。特定のアプリケーション・ソフトウェアに適した CPU は他のアプリケーション・ソフトウェアでは性能が出し難いことになり、単一種類の CPU で全てのアプリケーション・ソフトウェアを高性能に実行するのは困難になりつつある。

これらの状況を鑑みると、それぞれの特徴的なアプリケーション・ソフトウェア群に適した複数システムを数年毎に時期をずらせて整備する方針も考えられる。端境期を発生させないという点で、複数の異なるシステムを同時に開発するのではなく、異なるシステムを、開発・利用フェーズをずらしながらパイプライン的に実現していくのが望ましい。しかしながらこの様なやり方は理想的ではあるが、実際問題として様々な困難を伴うため現実的ではないと言わざるを得ない。我が国の開発予算・体制、計算機ベンダーなどの状況を考慮した場合、各種リソースを集中した開発を実施する必要があり、「京」「富岳」でのやり方である単一種類の汎用 CPU を用いた比較的長期スパンでの国産開発を続けるという選択が概ね妥当と考えられる。

他方、後述する第二階層計算機の議論で言及する HPCI 全体における多様性を戦略的に確保する観点から、フラッグシップ計算機とは異なる特性を有した比較的小規模な革新的・

先端的計算機システム（サブマシン）を、機動的に開発もしくは整備し、フラッグシップ計算機を補完するといった方法も考えられる。このサブマシンは、開発・利用スケジュールや採用するアーキテクチャをフラッグシップ計算機と調整することで、フラッグシップ計算機の端境期の一部解消、フラッグシップ計算機が不得意とするアプリケーション・ソフトウェアの担当など、フラッグシップ計算機を幾つかの観点で補完できると想定される。また、この様なやり方を行う場合は、フラッグシップ計算機を補完する計算機という位置づけから、このサブマシンの開発はフラッグシップ計算機開発プロジェクトの一環として実施するのが妥当と考える。

「富岳」の開発においては、フラッグシップ計算機の技術検討を目的とした調査検討プロジェクト（フィージビリティスタディ：FS）「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」が文部科学省委託研究として 2012 年 7 月から 2014 年 3 月まで実施され、その成果を起点にフラッグシップ 2020 プロジェクトが発足し、「富岳」の開発へと繋がった。FS に先行する形で、SDHPC（戦略的高性能計算機システム開発に関するワークショップ）およびアプリケーション作業部会によるボランタリーベースでの技術的な議論が行われ、その成果は FS での議論のベースとなり「富岳」開発では重要な役割を果たした。現在、次期フラッグシップ計算機に関する技術的な議論が NGACI（Next-Generation Advanced Computing Infrastructure）で行われ、アプリケーションに関しては計算科学フォーラムで計算科学ロードマップにまとめられている。この様に、フラッグシップ計算機開発の初期の段階では、ボランタリーベースを含め、より多くの知見を集約して議論を行うのが望ましい。特に、コデザインの重要性を鑑みると、今後のフラッグシップ計算機の開発においても、我が国の HPC 関係者の知見を集約し、特に計算機科学コミュニティと計算科学コミュニティが密接に連携し、フラッグシップ計算機に関して自由に議論ができる体制を、予算を確保し構築した上で開発を進めるべきである。フラッグシップ計算機とサブマシンのパイプライン的な整備、端境期への対応、HPCI 全体としての多様性の戦略的な確保などには長期的な議論が必要である。国家プロジェクトとしての評価も含め、その都度議論を行うのではなく、計算科学並びに計算機科学コミュニティを含めた形で長期的な議論を実施できる体制を構築し、長期的な視点での議論を行うべきである。

フラッグシップ計算機に関して、性能における絶対的優位性およびより広い範囲・分野への展開を想定した開発が重要であることを改めて強調する。最終的にフラッグシップ計算機の開発を受託した計算機ベンダーが、その商用展開によって開発費の投資を回収できる仕組みがなければ、単発のシステム開発だけのために膨大な予算が使われることになってしまう。我が国の状況を考慮した場合、これまでのやり方での開発が概ね妥当と考えられるが、開発の長期化とそれにとまらぬ端境期への対応、多様性確保の観点で、フラッグシップ計算機を補完するサブマシンをフラッグシップ計算機開発とセットで開発・整備する案も併せて検討することを提言する。

5. 第二階層計算資源

第二階層計算資源はフラッグシップ計算機とともに、HPCI システムの中核的な計算資源を構成している。第二階層計算資源は全国の大学情報基盤センター等が整備・運用する第二階層計算機の計算資源の一部が HPCI に提供され、一元的な課題選定やユーザー管理の下、運用されているものである。「京」の共用が開始された平成 24 年（2012 年）9 月より、各大学の情報基盤センター等からの資源提供が開始され、現時点で、北海道大学情報基盤センター、東北大学サイバーサイエンスセンター、筑波大学計算科学研究センター、最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC）、東京大学情報基盤センター、東京工業大学学術国際情報センター、名古屋大学情報基盤センター、京都大学学術情報メディアセンター、大阪大学サイバーメディアセンター、九州大学情報基盤研究開発センター、国立研究開発法人海洋研究開発機構地球情報基盤センター、国立研究開発法人産業技術総合研究所の合計 12 機関（等）が、各機関のポリシーおよび財源により独自に設備整備した計算資源を HPCI 計算資源として提供している。このため、第二階層計算資源は GPGPU などの加速演算器が具備された計算ノードから構成されるものも含めて多岐にわたり、様々なユーザーニーズに応えられるものとなっている。

① HPCI における第二階層計算機やその資源提供機関の位置付け

第二階層計算資源はフラッグシップ計算機が提供する計算資源と並んで、HPCI の中核的な計算資源を成すものである。また計算資源間を有機的に連携させることが本来の HPCI 計画の要諦であり、そのソフトウェア（シングルサインオンや共用ストレージなど）整備においてはフラッグシップのみならず、第二階層計算資源提供機関が本質的な役割、人的貢献を果たしている。今後の HPCI、それを通じた我が国の計算科学の発展のためには、このような多機関の連携からなる推進体制を維持することは不可欠であり、そのためには HPCI 計画が、その参画機関に対して強い求心力を持った計画である必要がある。そのために、第二階層計算資源を提供している大学情報基盤センター等が HPCI に参画することのメリットをより明確化する必要性がこれまでの提言でも言及されている。第二階層を含めた計算資源の利用促進（潜在的ユーザへのアウトリーチ）、成果の広報、ユーザサポートなどを HPCI としてこれまで以上により一体的に行うこと、また参画機関による資源間連携に資するソフトウェア開発や次世代基盤開発を促進できる機動的・柔軟な計画運営を行うことなどが必要である。また一案として、フラッグシップ計算機またはこれを補完するサブマシンの開発に第二階層資源提供機関が積極的に関与するという一方で、HPCI に参画していることの意義を明確化するという考え方もある。

② 多様性の維持

第二階層計算資源の最大の特徴は提供されている資源の多様性とその運用の機動性にある。各情報基盤センター独自の戦略によってシステム選定・導入が行われているが、それぞ

れ独自色を出す方針によって多様性が確保されている状況と考えられる。引き続きこの多様性を確保することが期待されるが、HPCIにおける多様性の確保を第二階層資源提供機関が独自の判断だけで実現するのは必ずしも最適ではなく、HPCI全体における課題と考えることによって資源の配置や多様性が効率的に保たれると考えられる。現在は第二階層資源の将来計画を情報共有することで各機関が独自の考えで整備を進めているが、今後、より密接な情報共有や議論を積極的に進めることが望ましい。

HPCIにおける多様性は現時点では第二階層計算機に負うところが大きいですが、HPCI全体として、多様性を戦略的に確保する手段を検討すべきであり、上記で示したサブマシンの導入などはその一案である。一方、HPCIが多くの参画機関に対して求心力を維持していくための推進体制に関しては、HPCI自身の体制・マインドに関する再認識を含め、引き続き検討が必要である。

6. あとがき

本提言は、「富岳」本格運用開始に伴う喫緊の課題（富岳本格運用期における計算科学技術振興のあり方、次世代計算基盤の研究開発と運用のあり方）と比較的長期的課題（第二階層計算資源）について、コミュニティの意見を踏まえて議論を行った結果をとりまとめたものである。以下の項目については、本提言で十分に議論ができなかったため、引き続き検討することが必要である。

① HPCIの体制（第二階層計算資源を中心に）

- HPCIが多くの参画機関に対して求心力を維持していくための推進体制

② 各組織の今後の役割分担

- RIST、R-CCS、各大学情報基盤センター、各課題実施機関、各分野・コミュニティの中核機関などの役割分担
- 文科省内で実施される各種プロジェクトでの計算科学的な課題に関する連携
- 省庁間（文科省、経産省、総務省）の連携
 - ✓ デバイスや要素技術の研究開発、システム全体の分担など

③ アプリケーション・ソフトウェアのマニュアル、品質保証

- マニュアルの整備方針や品質保証に向けた取り組みに関して

フラッグシップ計算機開発をはじめ HPCI の構築・運営には国費が投じられており、これらの国費投入に対して国民の理解を得ることは非常に重要である。HPCI が様々な社会的課題の解決を通じて国民の期待に応えられることはもちろん、国民に広く夢を与えられることを示すことも我々 HPC に関わる全ての関係者が検討すべきことである。

【附録】

本提言は、HPCI 計画推進委員会における決定を受けて高度情報科学技術研究機構内に設置された「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」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、ユーザーからの意見も反映させ、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 | 合田 憲人 | 国立情報学研究所 |
| 委員 | 伊藤 宏幸 | ダイキン工業株式会社 |
| 委員 | 片桐 孝洋 | 名古屋大学情報基盤センター |
| 委員 | 川島 直輝 | 東京大学物性研究所 |
| 委員 | 近藤 正章 | 東京大学大学院情報理工学系研究科 |
| 委員 | 白井 宏樹 | アステラス製薬 |
| 主査代理 | 田浦 健次朗 | 東京大学情報基盤センター |
| 主査 | 高木 亮治 | 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 |
| 委員 | 高野 直樹 | 慶応義塾大学理工学部 |
| 委員 | 富田 浩文 | 理化学研究所計算科学研究センター |
| 委員 | 森 雅博 | 高度情報科学技術研究機構 |

※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）付、朴泰祐（HPCI コンソーシアム理事長）、常行真司（HPCI コンソーシアム理事）、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

令和 2 年（2020 年）6 月 30 日（火） HPCI コンソーシアム理事会

- ・ 検討テーマ、検討期間、検討委員、検討日程の案を提示
- ・ 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（以下、「調査検討 WG」）の設置を決定

令和 2 年（2020 年）9 月 18 日（金） HPCI コンソーシアム理事会

- ・ 調査検討 WG の計画を確認

令和 2 年（2020 年）9 月 25 日（金） 第 1 回調査検討 WG

- ・ 文部科学省、高度情報科学技術研究機構よりヒアリング
- ・ 調査検討テーマを決定

令和2年(2020年)10月26日(月) 第2回調査検討WG

- ・人材育成コンソーシアムの検討結果および第二階層から見たHPCIについてのヒアリング

令和2年(2020年)11月26日(木) 第3回調査検討WG

- ・分野振興の観点から「重点課題から成果創出加速プログラムへ移行後の計算科学技術振興の在り方」のヒアリング
- ・システムの観点およびアプリ的観点から「次世代計算基盤の研究開発と運用の在り方」に関するヒアリング

令和2年(2020年)12月17日(木) 第4回調査検討WG

- ・これまでの検討における論点整理および討論
- ・次世代コンピューティング・フォーラムの開催を決定

令和2年(2020年)12月22日(火) HPCIコンソーシアム理事会

- ・調査検討WGの進捗を確認

令和3年(2021年)1月29日(金) 第5回調査検討WG

- ・スーパーコンピュータのメーカー2社のヒアリング
- ・これまでの検討における論点整理および討論
- ・次世代コンピューティング・フォーラムの開催計画に関する討論

令和3年(2021年)2月17日(水) 第6回調査検討WG

- ・「富岳本格運用期における計算科学技術振興の在り方について」(案)について討論

令和3年(2021年)2月18日(木) HPCIコンソーシアム理事会

- ・「富岳本格運用期における計算科学技術振興の在り方について」(案)の確認

令和3年(2021年)2月25日(木) 次世代コンピューティング・フォーラム、意見交換会

令和3年(2021年)3月31日(水) 第7回調査検討WG

- ・「富岳本格運用期における計算科学技術振興の在り方について」(案)の確認

令和3年(2021年)5月31日(月) HPCIコンソーシアム総会