

【提言】「富岳」本格運用時の HPCI および次期フラッグシップ計算機の在り方について

令和 4 年 6 月 21 日

一般社団法人 HPCI コンソーシアム

目次

1. はじめに.....	2
2. 「富岳」成果創出加速プログラム	2
2.1 人材育成.....	3
2.2 課題実施体制	3
2.3 評価および進捗管理.....	5
2.4 「富岳」運用への要望.....	5
3. HPCI エコシステムの構築.....	6
4. 次期フラッグシップ計算機の開発	8
4.1 独自技術とコモディティ技術.....	8
4.2 目指すべき方向性	9
4.3 アプリケーション・ソフトウェア.....	10
4.4 フラッグシップ計算機と第2階層計算機.....	11
4.5 費用配分.....	11
4.6 Feasibility Study(FS).....	11
5. あとがき.....	12
附録.....	12
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	12
検討の記録.....	13

1. はじめに

我が国における 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) 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り、2012 年 9 月の運用開始以来、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。

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、成果創出加速プログラムを始め、様々な成果が創出されている。

HPCI を取り巻く我が国の状況としては、第 6 期科学技術・イノベーション基本計画が策定され、国が推進する長期的な科学技術政策として Society5.0 の実現、持続可能な社会への変革、研究力強化、教育・人材育成などが謳われており、これらの事業に対して「富岳」を中心とした HPCI を活用した計算科学が非常に重要な役割を担うことが期待されている。

その様な状況下で設置された 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において、令和 3 年に発出した「【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」に続き、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、現在実施されている「富岳」成果創出加速プログラム、HPCI エコシステム並びに次期フラッグシップ計算機に関して調査・検討を行い、その結果をまとめたものである。

第 2 章では、「富岳」成果創出加速プログラムに関する議論および提言について述べる。第 3 章では、HPCI エコシステムに関する議論および提言について述べる。第 4 章では近々開始される次期フラッグシップ計算機開発に関する議論と提言を述べる。

2. 「富岳」成果創出加速プログラム

フラッグシップ計算機を活用するための重点分野並びに課題の設定やそれに向けたアプリケーション・ソフトウェアの開発、人材育成などフラッグシップ計算機の利活用を進めるための施策として、これまで HPCI 戦略プログラム (2011 年度～2015 年度で合計 124.1 億円)、ポスト「京」重点課題 (2016 年度～2019 年度で合計 109.8 億円) が実施されてきた。HPCI 戦略プログラムの重要な事業であった「計算科学推進体制の構築」によって計算科学の様々な分野での計算科学技術振興が開始され、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「京」の成果創出の拡大に大きく貢献した。しかしながら「富岳」本格稼働と前後して開始された「富岳」成果創出加速プログラム (2020 年 4 月～2023 年 3 月の 3 年間で予定) では、予算が大幅に削減 (令和 2 年度は 9.0 億円、令和 3 年度は 10.9 億

円)された。この予算削減によって、HPCI 戦略プログラムで誕生し、ポスト「京」重点課題で準備が進められた「富岳」で実施すべき科学的・社会的重点課題のうち、中断もしくは規模の縮小を余儀なくされた課題もあり、短期的には「富岳」による成果創出が十分に実施できない可能性がある。また、長期的には人材育成・教育活動への投資が不十分になった事により、将来的なアプリケーション・ソフトウェアの研究開発能力が低下し、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が危惧されている。ここでは、現状実施している「富岳」成果創出加速プログラムの問題点を指摘し、改善点を提言する。

2.1 人材育成

HPCI 戦略プログラムやポスト「京」重点課題を通じて若手研究者の育成が行われ、育成された若手研究者等による成果創出への貢献が多く見られた。「富岳」成果創出加速プログラムにおいては大幅な予算削減により、折角育った若手研究者の雇用を大幅に減らざるを得ず、「富岳」が稼働して研究が本格化した段階で貴重な人材を失った課題もある。当然のことながら「富岳」があるだけでは、科学的・社会的成果を出すことはできず、「富岳」の成果を創出する多様な人材（大学、研究機関における研究人材、ソフトウェアベンダーにおける開発人材、産業界における活用人材）が必要であり、どのタイプの人材が欠けても継続的に成果が創出できる所謂エコシステムにはならない。結局のところ計算機を使って成果を挙げるのは人であり、研究プロジェクトでは基本的に人への投資が重要である。また、優秀な人材を育成するには時間が必要であり、戦略的な取り組みが必要となる。特に、アプリケーション・ソフトウェアの開発やチューニングを行える人材の育成は、これまでフラッグシップ計算機開発プロジェクト（HPCI 戦略プログラムやポスト「京」重点課題）で行われてきたが、現在のようにフラッグシップ計算機開発の端境期（運用期）において、人材育成を主眼としない成果創出加速プログラムだけが実施されている状況では、人材育成のための予算が非常に少なく継続的な人材育成が困難な状況である。また、科学技術関連の競争的資金では成果創出に重きが置かれ、このような人材育成は非常に困難である。後述する国の長期的な科学技術政策への貢献の際にもスキルをもった優秀な人材が鍵となるため、計算科学・計算機科学における人材育成に対して継続的かつ計画的に投資すべきである。

2.2 課題実施体制

「富岳」成果創出加速プログラムは予算が大幅に削減された状況下で 4 領域、計 22 課題の課題を実施しているため、従来と比較して多少のメリハリがあるにしても全体的に課題の規模が小さくなっている。課題規模を小さくしたことで、各課題における事務処理が簡素化されより研究に集中できるなど研究活動の機動性の向上や、新たな研究分野の研究者・グループの参入の容易化など、ある程度のメリットがあったが、はるかに大きなデメリット、弊害があると指摘されている。特に、予算削減によって成果の普及や人材育成などの計算科学技術振興に関する活動が実施できなくなっていることが大きな問題となっている。また、課題が細切れになったことで、それぞれがばらばらに研究を進めることになり、課題間での

情報交換や連携が困難になったとの指摘もある。研究分野間や領域間においても、計算機利用のノウハウだけでなく、科学研究の内容自体に関する情報交換は本来有効である。科学の本質は、様々な分野における本質的な共通概念を見出す事である。その努力を継続的に行わないと新しい学問は生まれられないため、分野交流は積極的に進めるべきものである。HPCI 戦略プログラムなどの際には積極的な分野交流が実施できた。現在、それぞれの立場で努力はされているが予算削減の影響が大きく非常に困難な状況である。分野間の情報交換や分野間連携は短期的に成果に結びつくことは多くないかもしれないが、言わば研究の基礎体力を向上させるものであり、長期的な視点で継続して実施することが重要であり、そのための予算的な支援が必要である。一方、分野内においても、いくつかの小規模な課題に分割された結果、当該分野全体における実施すべき課題やその優先順位、それらの進め方の議論などが十分に行えない状況となり、分野全体として戦略的に研究を進めることができず研究の効率が悪くなっている。課題および分野間の交流・連携を進める施策を積極的に実施すべきである。

研究開発や人材育成などの計算科学技術振興などの進め方はそれぞれの分野で違いがあり、コミュニティが活発に活動できている分野では比較的まとまったグループで研究開発を実施する場合が望ましい場合もある。一方で、参加者の固定化は避けるべきであり、少人数による挑戦的な課題が容易に参入できるなど、課題もしくは分野の状況に応じたより柔軟な制度が望ましい。

これまで述べてきたように、「富岳」を利活用する重点課題として「富岳」成果創出“加速”プログラムが実施されている。ポスト「京」重点課題で準備が行われ、早期に成果を創出することを目的として本プログラムは、勿論重要ではあるが、現状で短期的な成果が求められる本プログラムしかない状態では、様々な工夫が必要である。最も重要な科学的・社会的成果を継続して創出することは困難である。これら重要な科学的・社会的成果の創出には、戦略的に研究を進めるために 5 年もしくはそれ以上のプログラムを設定して本格的な研究ができる体制が必要である。実際、人材育成・教育の観点から大学・研究機関はもとより産業界等の若手人材を「富岳」成果創出加速プログラムに関与させたくても、現状の進め方では、短期間プロジェクトのため、参加させることが難しい。「富岳」の成果最大化のためには、今後数年間に亘って「富岳」をフルに活用できる安定的な体制（プロジェクト）を継続することが必要である。特に、将来を考えたときに継続的かつ安定して人材育成ができる体制は必須であり、そのような施策を実施すべきである。

「富岳」が本格稼働したにも関わらず、HPCI 戦略プログラム、ポスト「京」重点課題に比べて「富岳」成果創出加速プログラムでは、大幅な予算削減が行われている。その結果、期待される成果の縮小、今後継続的に成果創出を担う人材の減少による研究および産業競争力の低下が危惧されている。大幅な予算の増額による継続的かつ安定的なプロジェクト体制の構築が必要である。

2.3 評価および進捗管理

HPCI 戦略プログラムやポスト「京」重点課題と同様に成果創出加速プログラムでも、科学に基づく評価・議論が実施されるべきである。特に「富岳」だからできること、できたことが評価されるべきである。一方、プロジェクトの進捗管理に関して、研究においては当初の予定と異なる方向に進むことは普通にあることで、思わぬ方向に発展することはむしろ望ましい場合もある。各分野の科学研究の実情に即した進捗管理が望まれる。

令和 3 年度末において「富岳」成果創出加速プログラムの第 1 期採択課題の実施は 2 年を経過しており、令和 4 年度末をもってプロジェクト研究期間が終了する。令和 3 年度半ばに採択された第 2 期課題群と違い、第 1 期課題群は 3 年間という比較的短い期間での成果の創出が求められるが、その前半は「富岳」が本格的な共用を開始する前であったため、科学上の成果の他に、システム上の細かい問題の洗い出しにもつながるといふ副産物もあった。令和 3 年度終盤において、全ての課題の研究進捗の評価が成果創出加速課題領域総括を中心に行われ、進捗や目標達成の度合いに応じた最終年度の資源配分の調整などに生かされた。また、オープンな場での研究交流会やシンポジウムを通じ、研究成果や「富岳」利用上のノウハウなどが情報共有された。第 1 期課題群の最終年度に当たる令和 4 年度末には、課題目標の達成度と科学的成果の適切な評価が領域総括を中心とした有識者により行われるべきであり、その結果は広く関連研究分野に共有されるべきである。また、この評価と進捗管理に関してはより長期間の研究が許されている第 2 期課題群にも同様に適用されるべきである。

2.4 「富岳」運用への要望

アプリケーション・ソフトウェアの実行性能はコンパイラの最適化性能によるところが大きい。「富岳」においては様々な高速化技術が採用されているが、その特性をコンパイラが必ずしも十分に引き出せていない場合がある。成果創出加速プログラムにおいては、「富岳」の特性を十分に考慮したアプリケーション・ソフトウェアのチューニングを実施すると同時に、コンパイラの改善活動も実施している。「富岳」の利用を高度化するためにもアプリケーション・ソフトウェアの継続的な性能チューニングと同時に、それを支えるコンパイラの機能強化が必要である。コンパイラを含めたシステム側とアプリケーション・ソフトウェア開発側との性能向上のための継続的な議論と、そこでの議論を反映したコンパイラの機能強化が望まれる。

「富岳」のデータストレージが必要量に比べて大幅に不足しているという声が少なからずある。本来出力したいデータの出力をあきらめるなど、課題によっては保存できるデータ量の制限のため「富岳」の性能を発揮できていないもの、成果の最大化が制限されているものもある。分野によっては、計算規模の拡大だけでなく、計算の質の変化によって出力すべきデータが飛躍的に増大したケースもある。一方、昨今、研究不正防止などの観点から論文の執筆に使ったデータはある程度の期間保持することが求められるなど、データストレージ

ジ容量への要求は増大している。更には、今後のデータ科学・AIの推進にともなって扱うべきデータ量は飛躍的に増大すると思われる。「富岳」のストレージ容量の拡大を始め、今後のシステム開発においては、これまで以上に大量のデータを保存・高速に利用できる仕組みを整備することが望まれる。

「富岳」などフラッグシップ計算機における全系規模の超大規模解析と、フラッグシップ計算機の一部や第二階層計算資源における大規模解析との解析規模のギャップが大きく、フラッグシップ計算機での超大規模解析成果の下方展開が依然として困難である。主な理由としては、前後処理も含めて大規模大量データの取り扱いの困難さであり、具体的にはデータ I/O 性能やネットワーク（フラッグシップ計算機内外）性能、可視化処理など解析の前後処理ツールの大規模大量データに対する性能不足などが挙げられる。これら大規模解析を支える周辺技術の高性能化も必要である。実際問題、フラッグシップ計算機の性能向上に比較して、周辺技術に対する投資はあまり行われていない状況である。今後ますますその差が大きくなると思われるので、「富岳」での環境改善はもとより、今後のシステム開発においては、これら周辺技術への大幅な投資が必要である。

3. HPCI エコシステムの構築

第6期科学技術・イノベーション基本計画では、我が国が推進する長期的な科学技術政策として Society5.0 の実現、持続可能な社会への変革、研究力強化、教育・人材育成などが謳われている。また短期的な科学技術政策として、デジタル田園都市国家構想、気候変動問題、経済安全保障などが重要視されており、これらの政策に対して「富岳」を中心とした HPCI を活用した計算科学・計算機科学が非常に重要な役割を担うことが期待されている。HPCI には、例えば Society5.0 における物理空間とサイバー空間を融合するデジタルツインの実現に向けて、情報基盤である HPCI（計算機パワー）と、各種アプリケーション・ソフトウェアとそれらを開発もしくは使いこなすスキルを持った人材（ソフトパワー）の両者が揃っている。また実利用の際に重要となる、HPCI の計算機群と手元の計算機をシームレスに連携するために必要なネットワークも整備されている。この様に「富岳」を中心とした HPCI は、計算機パワー、ネットワーク、アプリケーション・ソフトウェア、人材、技術の観点で重要な貢献が可能であり、持続可能な社会への変革や Society5.0 の実現に向けた重要な国家基盤として適切な予算を配分すべきである。その際に、これら科学技術政策を実現するための鍵は人材であるということに留意すべきである。そのため長期的な視点で継続的な人材育成に十分な投資を実施すべきである。人材育成に関しては、昨年度発出した【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」においても最重要事項であると指摘し、様々な人材を育成することの重要性を提言している。それらに加えて、ここでは特に人材育成の入り口である大学学部生や大学院生など将来を担う学生に関して指摘する。彼らが自由な発想で様々な課題に挑戦できるように、フラッグシップ計算機や第二階層計算機を気軽に利用できる環境を整備すべきである。その際、十分なスキルを持たず

いきなりフラッグシップ計算機を利用することは、利用側、システム運用側の両者にとって望ましい状況ではないため、スキルや問題規模に応じて第二階層計算機からフラッグシップ計算機へと順番にステップアップすることが望ましく、この様なステップアップができる環境を整備することが望ましい。

国として重要な政策に対しては適切な予算を配分すべきである。しかしながら我が国の予算状況も厳しい状況下では、十分な予算を継続的に確保することは困難な状況であり、HPCI としても様々なルートから継続的に予算を確保する仕組み（エコシステム）を確立することが我々に求められている。前出した Society5.0 や持続可能な社会の実現など重点化された政策に対し、HPCI を活用した具体的な事業を積極的に提案し、より大きく貢献することが必要である。さらに、より広い意味で計算科学は重要な共通基盤ツールであり、様々な科学技術分野での成果創出に貢献している。計算科学主導のプロジェクトに限らず、共通基盤ツールである計算科学を媒介に広く一般的な科学技術プロジェクトや事業との連携や新規応用分野の開拓を積極的に推進し、HPCI の利用促進や研究コミュニティの活性化、人材育成など計算科学技術の振興を進めるべきである。

産業界からの投資を呼び込むための施策を実施すべきである。産業界では、確実な成果、自社にとって有益な成果が見込めないと資金は出し辛いため、「富岳」がないと解けない問題で、実際に解ければ産業界にとって大きなプラスである問題を設定し、解いて見せることが必要である。一方で解析技術そのものは、もっと規模の小さな問題もしくは、企業の手元の計算機であれば普通に使えるものであることも必要である。「富岳」を使えば今まで解けなかった問題が解けるということが重要であるが、それと同時に「富岳」と手元の計算機がシームレスに連携できることも重要である。その観点でアプリケーション・ソフトウェアの第二階層計算資源やより広い計算機への普及活動を推進すべきである。また、産業界へのアプリケーションの普及のためには、主にアプリケーション・ソフトウェアの研究開発を担当する人材と主にアプリケーション・ソフトウェアの保守サービスやマイナーな改良等のサポートを担当する人材との戦略的連携が必要であり、そのための継続的な予算が必要である。しかしながら、国プロアプリの開発や普及活動などのプロジェクトは期限が設定されており継続的に予算が確保できるプロジェクトはない。国の財政状況が厳しいこともあり、普及活動を継続的に実施するためには企業からの投資を呼び込む必要がある。

企業において数値シミュレーションはかなり普及しており、自社の計算機での利用を中心に日常的に利用されている場合もある。しかしながら「富岳」や第二階層計算機の利用となると依然としてハードルが高い状況である。その理由としては、自社開発ソフトウェアの移植や並列化・チューニングが困難、大規模データのハンドリングが困難、商用ソフトウェアや OSS（オープンソース・ソフトウェア）が利用できない、利用したいソフトウェアに関する情報や利用のためのサポートが少ない、可視化ソフトウェアを含む前後処理ソフトウェアの性能不足、セキュリティへの不安といった問題点が指摘されている。これらの問題点を解決するためには、アプリケーション・ソフトウェアの移植や並列化、高速化チューニ

ング、更にはアプリケーション・ソフトウェアの使い方や解析のサポートなどを行える人材の育成や確保が必要である。産業界だけではなく一般的な利用支援は登録機関でも実施されており、登録機関におけるこれら裾野拡大のための各種事業や人材育成に向けた取り組みを更に強化する必要がある。それに加えて、特にサポートを担当できるソフトウェアベンダーの育成も必要であり、マッチングファンドやベンチャーファンドの利用などで、企業の設立と育成を支援する投資を実施すべきである。また、セキュリティに関しては産業分野において基準となるものがまとめられている場合もあり、それらを参考にしつつも個々のケースでは個別事情もあるため最終的には企業側の要件とのマッチングを図る取り組みが必要となる。このような取り組みも利用支援の一環として進めるのが望ましい。

4. 次期フラッグシップ計算機の開発

4.1 独自技術とコモディティ技術

「富岳」の開発においては「京」での反省も踏まえ、わが国の独自技術を採用しつつも商用展開（商用機としての展開）ならびに産業展開（産業利用）を念頭に、世界共通的に使われる OSS への対応も考慮したシステム開発が行われた。次期フラッグシップ計算機開発においても、上記観点を考慮した開発を行うべきである。世界共通的に使われる OSS 等が実行できる程度の汎用性を有する計算機であることは、商用展開や産業展開だけでなく、学術成果の創出においても重要な観点である。と言うのも、もし次期フラッグシップ計算機が汎用性の全くない我が国独自仕様のシステムを採用した場合、アプリケーション・ソフトウェアの開発において国際協力によるアプリケーション・ソフトウェア開発が困難になる。また、開発したアプリケーション・ソフトウェアも日本でしか使えなくなるなど、国際協力の観点で望ましい状況ではなくなる。科学技術における国際協力の現状を考えると、海外の研究者とも共同研究等で共通的に使えるものを開発する必要がある。次期フラッグシップ計算機向けアプリケーション・ソフトウェアの開発では、高性能を実現しつつ他の計算機でも実行できるアプリケーション・ソフトウェアを開発する必要があり、その様なアプリケーション・ソフトウェアが開発できる計算機にすべきである。海外の人とアプリケーション・ソフトウェアを共有できないシステムや世界的に共通的に使われる OSS が実行できないシステムは避けるべきである。

産業応用を考えた場合、市販ソフト、OSS といったアプリケーション・ソフトウェアが実行できるといった観点からコモディティ CPU を搭載したマシンが使いやすいという意見も少なくない。その一方で、市販ソフトや OSS よりも高性能な国家プロジェクト等で開発された流体・構造アプリケーション・ソフトウェアは利用希望が多く、大規模解析のニーズも高い。この様に産業界が必要とするアプリケーション・ソフトウェアを始め、それぞれの分野で必要とされるアプリケーション・ソフトウェアが動かせないとなると、これまで築いてきた計算科学技術振興の成果が無駄になってしまう。そのためある程度の汎用性は必須であり、これまで開発、利用してきたアプリケーション・ソフトウェアを継続的に利用で

きることへの配慮も必要である。

開発した次期フラッグシップ計算機の商用展開の観点からも、次期フラッグシップ計算機の開発では、国際マーケットを考慮して、海外でも共有できる、ある程度汎用性を持ったアーキテクチャを採用すべきである。OSS 等が実行可能な汎用性を確保しつつ次期フラッグシップ計算機としての圧倒的な性能を実現するためには、次期フラッグシップ計算機のどの部分は我が国独自技術を用い、どの部分は OSS を含めコモディティ技術を採用するかを検討を慎重に実施すべきである。

特に、フラッグシップ計算機としての圧倒的な高性能の実現に向けて、必要に応じて OSS などコモディティ技術を積極的に活用することも検討すべきである。特にコンパイラ技術などユーザーの使い勝手や性能に直結する技術に関して、より有望な OSS の採用を積極的に検討すべきである。その際、それらの OSS を単に利用するだけでなく、使いこなす、更には良くするための投資も同時に実施すべきである。これらの投資は計算機ベンダーだけが負うべきものではなく、計算機科学・計算科学コミュニティにおいてオープンかつ ALL-Japan 的な活動として実施することが望ましい。また、このような活動は次期フラッグシップ計算機だけに向けたものではなく、第二階層計算機も含めた HPCI 全体での活動とすべきである。

「富岳」で進めてきたように、OSS や市販ソフトも実行できるような汎用性をある程度確保することは今後も重要な観点である。しかしながら後述するように、汎用性を強く求めると性能的な限界が見えてきたという状況でもある。そのため次期フラッグシップ計算機においては、フラッグシップ計算機だけで汎用性を確保するのではなく、HPCI 全体において汎用性を確保する考え方もありえる。これまでの提言でも、主に第二階層計算資源が中心となって HPCI 全体でのアーキテクチャの多様性を確保することを提言してきた。そのため、次期フラッグシップ計算機のシステム検討の際には、第二階層計算資源との連携、役割分担も考慮に入れた上で次期フラッグシップ計算機の検討を行うことが望ましい。

世界的な商用展開や国際協力による成果の創出など国際的な視点で次期フラッグシップ計算機を考えた場合、このような規模の科学技術プロジェクトでは国際共同開発という選択肢も考えられる。その場合、国内に留まらずより大きな国際的コミュニティにおけるエコシステムとしてのメリットも考えられるが、次期フラッグシップ計算機は我が国における重要な戦略的基盤であり、その開発においては、科学技術や産業競争力の強化、更には経済安全保障といった観点を考慮する必要がある。将来的に、フラッグシップ計算機開発プロジェクトがより一層大規模なものになったり、国際的コミュニティにおけるエコシステムとしての優位性が顕著になるなど我が国を取り巻く状況が変化した場合は、国際共同開発という選択肢も検討すべきである。

4.2 目指すべき方向性

次期フラッグシップ計算機は圧倒的な性能・機能を実現することが求められているが、ムーアの法則の終焉など従来の要素技術の延長でその圧倒的な性能を実現することは非常に

困難な状況にある。フラッグシップ計算機は科学的・社会的課題を解決するツールであり、アプリケーション・ソフトウェアでどの様な成果が出せるかが重要である。「京」や「富岳」の開発においては重要なアプリケーション・ソフトウェアで成果が出せるシステムという観点でシステム検討（アプリケーション・ドリブン）が進められ、できるだけ多くのアプリケーション・ソフトウェアで成果を出せるように汎用的なシステムが開発されてきた。しかしながら、それぞれの要素技術での性能限界が見えてきた現在において、従来の延長線での性能向上の限界が見えてきた。その結果、これまでのように引き続き性能向上を求めるなら、このようなアーキテクチャでしか実現できないといった検討結果（アーキテクチャ・ドリブン）が示されている。アプリケーション・ドリブンにしる、アーキテクチャ・ドリブンにしる、次期フラッグシップ計算機開発においては、従来以上に協調設計（Co-designing）での取り組みが重要となる。

協調設計を突き詰めると、最終的には各アプリケーション・ソフトウェアの特性に合わせた、それぞれの専用機にたどり着くことにもなる。複数の異なる特性を持ったアプリケーション・ソフトウェアに対し、それぞれに特化することで圧倒的な性能を実現する複数のシステムを開発することも考えられるが、我が国の状況を考えると現実的ではない。一方、これまでのように汎用性を求めると大きな性能向上は見込めない状況であり、もし性能を求めるならこのようなシステム、このような性能バランスでしか実現できないといった状況に近づきつつある。そのような状況下では、何を目指して次期フラッグシップ計算機を開発するのかの議論および実現に向けた協調設計が従来以上に重要となる。そのため、今後実施する次期フラッグシップ計算機開発のための議論や協調設計において十分な検討ができるように適切な予算と十分な体制を構築して、しっかりとした議論を実施すべきである。

4.3 アプリケーション・ソフトウェア

アプリケーション・ソフトウェアの計算性能は、計算機ハードウェアの性能バランス（演算性能、メモリアクセス性能・容量、ネットワーク性能のバランス）とアプリケーション・ソフトウェアの特性（演算量、メモリアクセス量、データ通信量など）が合致するかどうかで決まるため、それぞれの分野で成果を挙げているアプリケーション・ソフトウェアは、使われているアルゴリズムの特性に起因して計算機との相性がある。性能チューニングも含めて、アプリケーション・ソフトウェアの特性にあった性能バランスの計算機では高い性能を出せるが、合わない性能バランスの計算機では性能チューニングを頑張ってもそれほど性能が出せないことはしばしば見られることである。「京」「富岳」では、多くの特性が異なるアプリケーション・ソフトウェアに対してある程度の性能を出すことを目指して、汎用的システムとして開発されてきた。しかしながら、それも限界に近づいており、特に性能バランスをアプリケーション・ソフトウェアの要求に応じて自由に設定することは困難になりつつある。そのため、将来にわたって継続的に成果を出すためにはアプリケーション・ソフトウェア側も、それぞれのアルゴリズムなど従来の特性を見直し、必要に応じてアルゴリズムを変えるなどして特性を変化させ、アプリケーション・ソフトウェアの特性と適合した性

能バランスを有する計算機の選択の幅を広げることが求められている。継続的に成果を創出するためにも、アプリケーション・ソフトウェア側も将来を見越して様々な性能バランスを持った計算機への適合性を向上させる努力が必要である。

4.4 フラッグシップ計算機と第二階層計算機

次期フラッグシップ計算機は、従来通りできるだけ汎用的なシステムとするのか、汎用性のある程度犠牲にしてより性能を追求したシステムにするのかなどの選択肢が考えられる。次期フラッグシップ計算機としては、より多くのアプリケーション・ソフトウェアで性能が出せるものが望ましいが、計算機の性能バランスとアプリケーション・ソフトウェアの特性とが適合しないものも存在することになる。しかしながら計算機の性能バランスと適合しないアプリケーション・ソフトウェアに対しても、フラッグシップ計算機は絶対的な規模・性能を有した唯一無二の計算機でありその存在価値は大きい。実際問題として、様々な特性を持ったアプリケーション・ソフトウェアを使って、超大規模解析から中小規模の大量解析など様々な解析が実行される。これらの解析を次期フラッグシップ計算機だけで全て対応することは不可能であり、次期フラッグシップ計算機や第二階層計算資源を含めた HPCI 全体として適材適所で対応すべきである。この様な観点も含めて次期フラッグシップ計算機の議論を行うべきである。計算機は科学的・社会的成果を創出するためのツールである。技術的な困難、予算、体制など様々な境界条件の中で、次期フラッグシップ計算機を中心に HPCI 全体としての成果を最大とするためにはどうすべきかの議論を十二分に実施すべきであり、そのための適切な予算配分と体制を構築すべきである。

4.5 費用配分

フラッグシップ計算機は科学的・社会的成果を出すためのツールであり、システムの開発完了後は、ただ運用するだけで良いというものではない。フラッグシップ計算機を使って成果を出すのは人である。そのためシステムを運用するための運用費だけでなく、フラッグシップ計算機を使って成果を出す人の人件費も成果を創出するための必須費用として当然考慮すべきである。開発段階においても、「京」「富岳」のプロジェクトでは、システム開発の費用に対して、アプリケーション・ソフトウェアの開発費用、フラッグシップ計算機運用期間における解析実施の費用が必ずしも十分ではなかった。次期フラッグシップ計算機開発においては、アプリケーション・ソフトウェアの開発費用はもとより、運用期間における解析実施のための費用も最初から考慮しておくべきである。またユーザーの使い勝手の良さの観点で、プログラム開発の効率化に大きく寄与するコンパイラ能力の強化、実際の解析を実施する上で必要となるストレージ性能・容量、ネットワーク性能、可視化などの前後処理を担当する周辺システム・環境の整備等に従来以上の投資が望ましい。

4.6 Feasibility Study(FS)

次期フラッグシップ計算機の開発に向けた Feasibility Study(FS)が今後予定されている。ポスト「京」時代の FS では、複数のシステム設計研究チームと、1つのアプリチームを編成して FS を実施した。各システムチームでは、それぞれのアーキテクチャに適合するアプ

リケーション・ソフトウェアを選定し、チューニング・評価を実施し、エクサスケールコンピューティングのための特徴的なアーキテクチャのあり方が示された。その一方で、各チームの成果はそれぞれのアーキテクチャに強く紐付く結果となり、アプリチームを含むチームを横断した形で統一的な評価も必要という指摘もあった。今後の FS では、アーキテクチャ・ドリブンで検討されたポスト京 FS と、汎用 CPU ベースのもとアプリケーション・ドリブンで進められた「富岳」の協調設計 (Co-designing) の両方を睨み、次期フラッグシップ計算機開発時の技術的制約の下で適切な協調設計を進めることが望まれる。

次期フラッグシップ計算機開発に関しては、これまで指摘した様々な重要な課題があり、これらの課題に対する十分な検討が必要である。そのため、今後実施する次期フラッグシップ計算機開発のための議論 (FS) において十分な議論ができるように、ALL-Japan 的な体制を構築し、適切な規模の予算を配算すべきである。FS においては次期フラッグシップ計算機だけの議論ではなく、第二階層計算資源も含めて、アプリケーション・ソフトウェアと計算機の適合性に関する整理も実施すべきである。アプリケーション・ソフトウェア側とシステム側との議論は、FS での実施だけにとどまらず、次期フラッグシップ計算機運用開始後も、性能改善活動によるコンパイラ機能の強化やアプリケーション・ソフトウェアのチューニング、更には次次期フラッグシップ計算機への提言などを引き続き実施すべきであり、そのための継続的な体制を構築すべきである。

5. あとがき

本書は現在実施されている「富岳」成果創出加速プログラム、HPCI エコシステム並びに次期フラッグシップ計算機に関して、計算科学・計算機科学コミュニティからの意見を踏まえて議論を行った結果をまとめたものである。フラッグシップ計算機を中心とした HPCI が、様々な科学的・社会的課題の解決を通じて、より良い社会の実現に継続的に貢献することが期待されている。

附録

本報告書は、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」において、一般社団法人 HPCI コンソーシアムが中心となり、調査・検討した結果を報告する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

主査	高木 亮治	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所
主査代理	田浦 健次郎	東京大学情報基盤センター
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	慶應義塾大学理工学部情報工学科
委員	白井 宏樹	元アステラス製薬
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）、その他 HPCI コンソーシアムメンバで希望するもの

検討の記録

令和3年（2021年）7月6日（火） HPCI コンソーシアム理事会

- ・「将来のスーパーコンピュータの在り方の検討」業務体制の継続、および 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
- ・実施方針（テーマ、検討期間、検討委員）を確認

令和3年（2021年）9月10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3年（2021年）9月27日（月） HPCI コンソーシアム理事会

- ・調査検討 WG の計画を確認

令和3年（2021年）10月13日（水） 第2回調査検討 WG

- ・成果創出加速プログラム（領域1、領域3）の現状についてのヒアリング

令和3年（2021年）11月11日（木） 第3回調査検討 WG

- ・成果創出加速プログラム（領域2）の現状についてのヒアリング
- ・産業利用に関するヒアリング（フラッグシップ、HPCI 第二階層）

令和3年（2021年）12月17日（金） 第4回調査検討 WG

- ・次世代計算基盤に係るシステム検討 WG の検討状況のヒアリング
- ・これまでの検討における論点整理

- 令和3年(2021年)12月22日(水) HPCI コンソーシアム理事会
 ・調査検討WGの進捗を確認
- 令和4年(2022年)1月5日(水) 第5回調査検討WG
 ・報告書案(提言案)の検討
- 令和4年(2022年)2月2日(水) 第6回調査検討WG
 ・「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方について」の報告書案について検討
- 令和4年(2022年)2月21日(月) HPCI コンソーシアム理事会
 ・「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方について」の提言案の確認
- 令和4年(2022年)3月4日(金) 「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方に関する意見交換会
 ・「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方について」の報告書案(提言案)への意見聴取
- 令和4年(2022年)3月14日(月)、15日(火) 「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会
 ・「富岳」ならびにHPCIおよび次期フラッグシップ計算機に関する意見聴取
- 令和4年(2022年)3月22日(火) 第7回調査検討WG
 ・「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方について」の報告書案の検討
- 令和4年(2022年)3月30日(水) HPCI コンソーシアム理事会
 ・「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方について」の提言案の確認
- 令和4年(2022年)5月10日(水) HPCI コンソーシアム理事会
 ・「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方について」の提言案の確認
- 令和4年(2022年)5月26日(木) HPCI コンソーシアム総会
 ・「富岳」本格運用時のHPCIおよび次期フラッグシップ計算機の在り方について」の提言案の承認