

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 2 月 28 日 HPCI 計画推進委員会（第 42 回）配布資料

一般社団法人 HPCI コンソーシアム

目次

第1章 前書き.....	1
第2章 HPCIの達成目標とHPCIの推進について.....	2
2.1 HPCIが達成しようとしているビジョン.....	2
2.2 HPCIの推進方法.....	3
第3章 HPCIのこれまでの成果と顕在化した課題.....	3
3.1 フラッグシップ計算機「京」の開発と運用.....	3
3.2 第二階層計算資源の運用.....	8
3.3 利用者拡大・利用支援.....	11
3.4 アプリケーションの開発・利用・普及.....	13
3.5 コミュニティ形成と人材育成.....	16
第4章 HPCIで利用されるハードウェアとソフトウェアの開発・整備・運用に関する基本的な考え方.....	18
4.1 HPCIシステムが提供するハードウェア.....	19
(ア) フラッグシップ計算機.....	19
(イ) 第二階層計算資源.....	22
(ウ) 共有ストレージ.....	25
(エ) 高速ネットワーク.....	25
(オ) その他の計算資源.....	25
4.2 HPCIシステムで利用されるソフトウェア.....	26
(ア) システムソフトウェア.....	26
(イ) ソフトウェアツール.....	27
(ウ) 国プロで開発されるアプリケーション・ソフトウェア.....	27
(エ) 商用アプリケーション・ソフトウェア.....	28
(オ) オープン・ソースのアプリケーション・ソフトウェア.....	29
(カ) 利用者（利用する機関）自らが開発したアプリケーション・ソフトウェア.....	29
第5章 HPCI利用課題の実施の在り方.....	30
5.1 利用課題に関する基本的な考え方.....	30
5.2 フラッグシップ計算機における実施課題.....	30
5.3 第二階層計算資源における実施課題.....	32
5.4 産業利用に関する基本的な考え方.....	32
5.5 HPCIの利用料金に関する基本的な考え方.....	34
5.6 利用者支援について.....	35
第6章 後書き.....	36
【附録】.....	38

第1章 前書き

我が国の革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラストラクチャー（以下、HPCI）はフラッグシップ計算機「京」の共用が開始された平成24年（2012年）9月からその運用が開始され、運用開始後、すでに7年あまりの年月が経過している。「京」は令和元年（2019年）8月16日を以って、ほぼ7年間に及んだ共用が終了された。一方、アプリケーションで「京」の最大100倍の性能を発揮することが既に確認されている、次期フラッグシップ計算機「富岳」の共用が早ければ令和3年（2021年）4月に開始される見通しである。HPCIはフラッグシップ計算機を中核として、全国の大学情報基盤センター等のスーパーコンピュータ（以下、スパコン）を高速ネットワークで接続するとともに、10PB（ペタバイト）級の大容量ストレージを全国に2ヵ所配置し、コミュニティにおけるデータの共有環境も含めて、利用分野を特定しない、延べ13,000人以上の多くのユーザに計算資源を提供してきた。また、HPCIではシングルサインオンシステムの利用により、同一のユーザ識別番号（ユーザID）でユーザ認証が行われ、ワンストップ・サービスにより、HPCI内の全ての情報が閲覧できるなど、ユーザの使いやすさに配慮した、ユーザ目線に立ったシステムの構築と運用が行われてきた。具体的な成果に関しては第3章に詳述するが、HPCIは運用開始以来、上記のような利用者の拡大に加えて、ゴードンベル賞の受賞（2回）に代表されるHPCI戦略プログラムの成果、スパコンの産業利用の拡大、「京」を利用して大きな業績を上げた若手のキャリアアップなど多くの成果を上げてきた。

これまで7年半の間のHPCIの構築と運用は、文部科学副大臣からの下命により、HPCIの構築と運用に関する詳細な検討を依頼された、「HPCI準備段階コンソーシアム」内に設置された「HPCI検討委員会」、および、その下に設置された合計5つのワーキンググループから平成24年（2012年）1月に出された、「HPCIとその構築を主導するコンソーシアムの具現化に向けて-最終報告-」に基づいて行われてきた。前記の最終報告には、HPCIを構成する計算資源（高速ネットワークや大容量ストレージを含む）、HPCI計画推進の仕組み、産業利用の在り方、課題選定の在り方、利用者支援の在り方など、HPCIの構築と運用方法に関して詳細な言及がされている。また、HPCI計画は、「HPCI計画推進委員会（平成22年（2010年）8月設置）」により所管されてきた。

HPCIの運用が開始されてから7年間以上が経過し、その間に、人工知能（AI）に代表されるデータ科学の台頭など、高速計算技術（HPC）を取り巻く環境にも大きな変化が生じている。また、フラッグシップ計算機停止期間における、計算科学の持続的振興の在り方など、幾つかの課題も顕在化している。次期フラッグシップ計算機「富岳」の運用開始が早ければ1年後に迫っている中、HPCIがこれまで以上に大きな成果を創出し、我が国のHPCIが長期にわたり持続的に発展を続けるためには、これまでのHPCIの

運用実績、ならびに、それによる成果を検証するとともに、今後の HPCI の構築と運用に関する基本的な考え方を改めて整理し、明確にしておく必要がある。

本報告書は上記の目的を達成するために、HPCI の運営主体等からのヒアリング結果などに基づき、HPCI コンソーシアムが主体的に検討し、ユーザコミュニティの意見も集約した上で、取り纏めたものである。なお、本報告書は今後の HPCI の構築と運用に関する基本的な考え方を再整理したものであり、たとえば、HPCI システム利用研究課題の具体的な選定方法などに関して言及するものではない。それらの具現化にあたっては、HPCI の運営主体等が、「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-」も参照し、また、事業を所管する文部科学省（HPCI 計画推進委員会）にも諮りながら、各実施主体内のルールとして決めることとする。

第 2 章 HPCI の達成目標と HPCI の推進について

本章では、HPCI の運用開始後の 7 年半の間の世の中の変化も考慮し、HPCI 計画を推進することにより実現しようとしている将来ビジョンを明確にする。また、それを踏まえた上で、今後の HPCI の推進方法について言及する。

2.1 HPCI が達成しようとしているビジョン

前述のように、HPCI はフラッグシップ計算機を中核として、全国の大学情報基盤センター等のスパコンを高速ネットワークで接続するとともに、10 PB（ペタバイト）級の大容量ストレージを全国に 2 ヶ所配置することにより、全国の HPC リソースを幅広いユーザ層が効率良く利用できる科学技術計算環境を実現することを目的として、平成 24 年（2012 年）4 月にその運用が開始された。

HPCI がその構築と運用を通じて達成しようとしているビジョンは、多様なユーザニーズに応えることができる最先端の計算機環境を提供することにより、画期的な研究成果を創出し、科学技術の発展や産業競争力強化に資するとともに、人材の育成やスパコン利用の裾野の拡大に貢献することである。つまり、HPCI には、我が国の計算科学技術振興の中核的研究基盤として、世界最高水準の成果創出と成果の社会還元を実現することが期待されている。また、AI やデータ科学が HPC と融合することにより飛躍的に発展していくためには、大規模なデータを多様なユーザが共有し、新しい方法論の提案や知見の発見のために活用することが重要となる。高速ネットワークで相互接続された大容量ストレージが具備された HPCI は、我が国が AI やデータ科学の分野においても国際的なリーダーシップを発揮するためにも必須の研究基盤となることが期待されている。このことに関連して、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」（平成 23 年（2011 年）文部科学省告示第 120 号（令和元年（2019 年）9 月 17 日改正））にお

いても、フラッグシップ計算機に関して、「従来の研究開発に加え、人工知能、ビッグデータに関する研究開発を実施するための不可欠な計算基盤として活用され、それを通じて Society5.0 の実現に大きく貢献する。」と言及されている。

2.2 HPCI の推進方法

HPCI を世界最高水準の成果創出と成果の社会還元を推進する研究基盤とするために、スパコンを運用したり、利用したりする機関等からなる一般社団法人 HPCI コンソーシアム（以下、HPCI コンソーシアム）が平成 24 年（2012 年）4 月に設立され、利用者視点に立って、HPCI の構築と運用を主導してきた。HPCI コンソーシアムは HPCI システムに関わるコミュニティの代表機関として、HPCI に計算資源を提供する機関や HPCI を利用するユーザコミュニティから幅広い意見を集約し、HPCI の構築、運用、利用促進、成果創出等に関する基本的な在り方について文部科学省に提言を行ってきた。

HPCI コンソーシアムは令和 2 年（2020 年）3 月現在、正会員 35 名（ユーザコミュニティ代表機関代表者 16 名、システム構成機関代表者 19 名）、アソシエイト会員 16 名の合計 51 名のメンバーを擁している。今後は、時代の新たな潮流にも対応すべく、HPC に関連する機関だけではなく、AI やデータ科学に関連する、さらに多くの機関が HPCI コンソーシアムの活動に参加することにより、より幅広いユーザ層から集約された意見に基づいて、HPCI コンソーシアムが HPCI の運営を主導していくことが望まれる。そのうえで、HPCI システムの中核を成すフラッグシップ計算機の開発・運用主体である国立研究開発法人理化学研究所（以下、理化学研究所）、第二階層計算資源を提供している全国の大学情報基盤センター等、フラッグシップ計算機および第二階層計算資源の利用者選定や利用支援を行う登録施設利用促進機関（以下、登録機関）等の三者が一体となって、HPCI を運営していくべきである。

第 3 章 HPCI のこれまでの成果と顕在化した課題

本章では、「2.1 HPCI が達成しようとしているビジョン」に言及した、HPCI が達成しようとしている成果目標を踏まえ、過去 7 年半にわたる HPCI の運用により得られた成果を検証するとともに、顕在化した課題を明確にする。HPCI の運用により顕在化した課題や新たな潮流などへの対応に関しては、次章「HPCI で利用されるハードウェアとソフトウェアの開発・整備・運用に関する基本的な考え方」において言及する。なお、HPCI で得られた具体的な成果は定期的に HPCI ポータルサイト（<http://www.hpci-office.jp/>）から発信されているので、参照されたい。

3.1 フラッグシップ計算機「京」の開発と運用

HPCI システムはフラッグシップ計算機と第二階層計算資源（3.2 節に詳述）を車

の両輪として構成されており、これらのスパコンは高速ネットワークシステムで接続され、大容量ストレージとともに幅広いユーザ層に世界最高水準の計算機環境を提供している。フラッグシップ計算機としては、高い計算性能を持ち、幅広い分野をカバーする汎用のスパコンとして、平成 24 年（2012 年）9 月に「京」の共用が開始され、令和元年（2019 年）8 月にその運用が終了した。「京」に次ぐ次期フラッグシップ計算機である「富岳」は令和 3 年度（2021 年度）の運用開始を目指して、開発・整備が進められている。

「京」の共用開始前に我が国で開発・整備された代表的なスパコンとしては、「地球シミュレータ」があった。「地球シミュレータ」は 5,120 個の CPU（いわゆる、計算ノード）が単段クロスバースイッチで接続されたスパコンであり、行列計算においてスパコンの実効性能の高さを競う LINPACK ベンチマーク（TOP500）において、平成 14 年（2002 年）6 月に 35.86 テラフロップス（1 秒間に 35 兆 8,600 億回の浮動小数点演算を行う計算能力）という世界第 1 位の性能を記録し、その後 5 期連続 2 年半の間、世界第 1 位の性能を記録し続けた。これに対して、「京」は「地球シミュレータ」の 10 倍以上の数にあたる、88,128 個の CPU と主記憶（計算ノード）が 864 個の筐体に収められた、我が国のプロジェクトとしてははじめて開発・整備された超並列計算機であった。「京」は前記の TOP500 において平成 23 年（2011 年）11 月に 10.51 ペタフロップス（毎秒 1.051 京回の浮動小数点演算を行う計算能力）という世界第 1 位の性能を記録し、2 期 1 年の間、世界第 1 位の性能を記録した。特に、それまでのスパコンは理論ピーク性能に対して高々 80% 程度の実効性能しか達成できていなかったことに対して、「京」が達成した 93.2% という驚異的な実効性能の高さに大きな注目が集まった。「京」は平成 24 年（2012 年）11 月の性能ランキングにおいて、米国のローレンス・リバモア国立研究所と IBM が共同開発した BlueGene/Q "Sequoia" に世界第 1 位の座を引き渡すことになったが、産業利用に供されるアプリケーションなどの多くに用いられている共役勾配法の処理速度を競う HPCG（High Performance Conjugate Gradient）においてはその後も 3 期連続で世界第 1 位を獲得した。「京」は、令和元年（2019 年）8 月に共用を終了するまでの間、汎用性、実効性能ともに優れたスパコンとして、産業利用も含めて大きな成果を出し続けた。特に、それまでのジョブ（計算プログラムの実行単位）の規模は多くても数 100 計算ノードを使う程度であったものが、図 1 に示すように、1,000 以上の計算ノードを利用したジョブの実行が全体の 6 割から 7 割を占めるなど、「京」がその開発・運用の目標とした「超並列計算機環境の提供により、従来できなかった規模の計算の実行を可能にする。」というミッションは十分に果たすことができた。

フラッグシップ計算機「京」に関しては、上記のような開発・整備の成功に加えて、その運用実績も高く評価された。「京」は Tofu とよばれる高速なインターコネクで接続された 8 万個以上の計算ノードから構成された超並列計算機であったが、ノード数の

多さとは対照的に、故障等により運用できなかった時間は極めて短く、共用開始からその終了までの間、平均 93%以上という高い稼働実績を記録し、次節以降に言及するように数多くの学術的成果や産業利用上の成果を創出した。このような高い稼働実績には、それまでは大規模ジョブの実行中は使用することができなかった計算ノードを有効に活用できるようにした、「マイクロキュー」とよばれた新たな運用方法の導入なども少なからず貢献した。

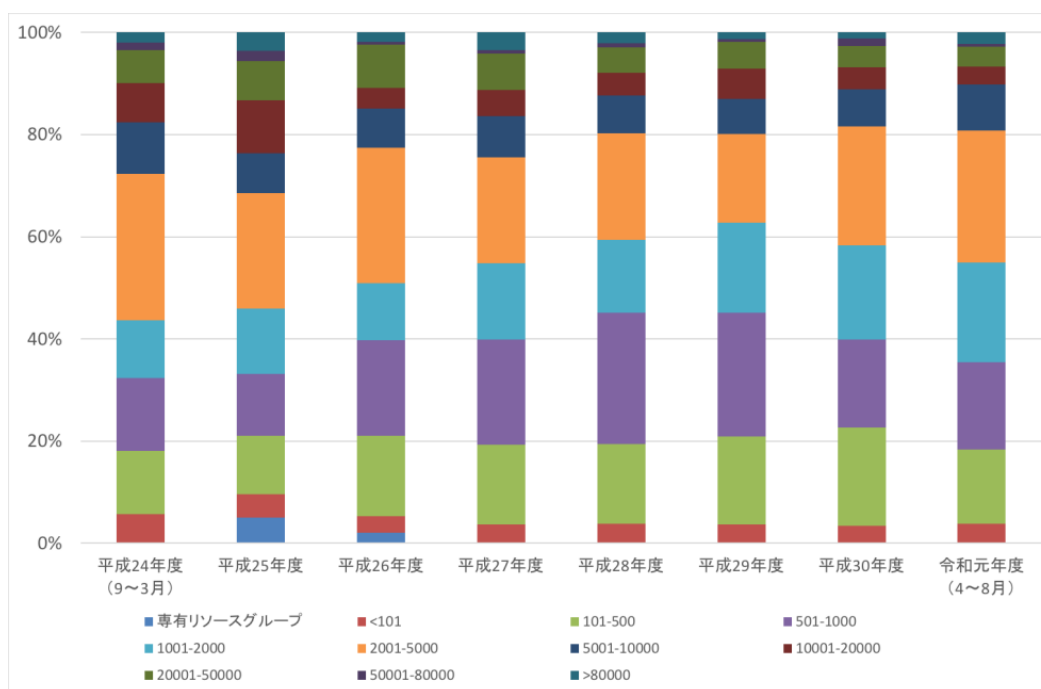


図1 フラッグシップ計算機「京」の各ジョブクラスが全ノード時間積に占める割合

フラッグシップ計算機「京」の登録機関として登録され、利用促進業務を行う機関として選定された一般財団法人高度情報科学技術研究機構（以下、高度情報科学技術研究機構）は、「京」の利用者の裾野を拡大するための、一般利用課題のトライアル・ユース制度の導入（平成27年度（2015年度））、利用者の要望を反映した「京」の年2回の課題募集の開始（平成29年度（2017年度））、大規模計算に対する利用者の要望と利用者の裾野拡大という二律相反する課題に対応するための、一つの課題あたりの計算資源上限値の変更および要求資源量のクラス分けによる課題選定方式の採用（平成30年度（2018年度））、など利用課題の実施面から、「京」の利用拡大に貢献した。また、コンソーシアム型「京」産業利用課題の設定、コンシェルジュ的利用相談、産業界でよく利用される商用アプリケーションの移植支援、産業利用課題のアプリケーションの高度化支援などを実施し、「京」の産業利用の促進を図った。

「京」の高い実効性能と稼働率、優れた汎用性に加えて、利用課題の実施面からのさまざまな工夫により、3.3 節に後述するように、「京」は延べ 11,000 人以上に利用され、数多くの成果を創出した。「京」のように開発・運用されたフラッグシップ計算機は世界中にも他に例がなく、このことは高く評価される。

表 1 「京」の一般利用枠の研究課題で利用されたアプリケーション
(成果非公開課題を除く)

全公開課題			産業以外の公開課題			産業利用の公開課題		
ソフトウェア名	分類	課題数	ソフトウェア名	分類	課題数	ソフトウェア名	分類	課題数
LAMMPS	分子動力学	32	NTChem	量子化学	16	LAMMPS	分子動力学	29
GROMACS	分子動力学	25	SCALE	気象・気候	16	OpenFOAM	流体解析	23
OpenFOAM	流体解析	25	GENESIS	分子動力学	14	FrontFlow/blue	流体解析	20
FrontFlow/blue	流体解析	22	2D-DMRG	物性物理	13	LS-DYNA	構造・衝突解析	13
FrontFlow/red	流体解析	17	GROMACS	分子動力学	13	FrontFlow/red	流体解析	12
MODYLAS	分子動力学	17	LANS3D	流体解析	12	GROMACS	分子動力学	12
SCALE	気象・気候	17	NICAM	気象・気候	12	SeanFEM		9
NTChem	量子化学	16	MODYLAS	分子動力学	11	CPMD	分子動力学	8
LANS3D	流体解析	15	GKV	流体解析(核融合プラズマ)	7	FrontISTR	構造・衝突解析	8
GENESIS	分子動力学	14	hnpack	物性物理	7	NuFD/FrontFlowRed	流体解析	8
2D-DMRG	物性物理	13	Boltzmann-radiation-hydrodynamic code	流体解析(ボルツマン輻射)	5	CUBE	流体解析	7
LS-DYNA	構造・衝突解析	13	FrontFlow/red	流体解析	5	ELSESES	物性物理	6
CPMD	分子動力学	12	GT5D	流体解析(核融合プラズマ)	5	J-OCTA	分子動力学	6
NICAM	気象・気候	12	NEURON_K+	計算生物学	5	MODYLAS	分子動力学	6
CUBE	流体解析	10	OpenMX	物性物理	5	VASP	物性物理	6
ELSESES	物性物理	10	Quantum ESPRESSO	物性物理	5	ABINIT-MP	量子化学	5
Quantum ESPRESSO	物性物理	10	TurboRVB	物性物理	5	AMBER	分子動力学	5
FrontISTR	構造・衝突解析	9	AMaTeRAS	流体解析(太陽対流層)	4	MP-CAFEE	分子動力学	5
OpenMX	物性物理	9	CPMD	分子動力学	4	Quantum ESPRESSO	物性物理	5
VASP	物性物理	9	ELSESES	物性物理	4	HELIX	流体解析	4
			FrontFlow/violet	流体解析	4	MOE	計算生物学	4
			GAMERA	地震動解析	4	OCTA	分子動力学	4
			LDDHMC	格子QCD	4	OpenMX	物性物理	4
			LETKF	気象・気候	4	PHASE/0	物性物理	4
			NHM	気象・気候	4			
			QMAS	物性物理	4			
			SMASH	量子化学	4			

RISTが「京」へのプリインストール対象としたソフト
商用ソフト

一方、7年近くに及んだ「京」の共用によりいくつかの課題も顕在化した。そのひとつがアプリケーション・ソフトウェアのポーティング(移植)の問題である。研究者がソースコードを自由に改変することができる、研究開発用のアプリケーション・ソフトウェアの実行環境としては「京」は汎用性・実効性能ともに優れたスパコンであり、数多くのアプリケーションが「京」を利用し、大きな成果を創出した。また、LINPACK べ

ンチマークやアプリケーションで高い実効性能を引き出せる高性能な CPU から構成される計算ノードや高速なノード間通信を可能にするインターコネクタ装置 (Tofu) など、我が国のスパコン開発の技術力の高さを示すことができた。一方、「京」の計算ノードには、SPARC アーキテクチャ (Instruction Set Architecture、ISA：命令セット) に基づき富士通株式会社が独自に開発した SPARC64 VIIIfx という CPU が用いられたが、世の中で主流となっている x86 アーキテクチャとは異なったアーキテクチャの CPU であったため、商用アプリケーション・ソフトウェアの移植はあまり進まなかった。産業界で多く利用されている商用アプリケーション・ソフトウェアはそれを利用している多くのユーザーに対応する必要がある、研究開発用のアプリケーションのように自由に改変することができない。そのため、これらのアプリケーションの利用を促進するためには、ソースコードにほとんど手を加えることなく当該アプリケーションが稼働することが重要である。そういった意味での「京」の移植性は高かったとは言えない。実際、「京」に対して商用アプリケーション・ソフトウェアを移植して欲しいという強い要望が産業界から寄せられていたが、表 1 参照に示すように、「京」で利用された商用アプリケーション・ソフトウェアの数は多くはなかった。

このことにも関連して、「京」の高い実効性能や汎用性とは対照的に、「京」の商用機として富士通株式会社が製品化した FX10 やその後継機にあたる FX100 の普及は限定的なものに留まった。したがって、**超並列計算環境を提供し、従来は実行不可能であった大規模な計算を実現することにより、産業利用も含めて大きな科学的・社会的な成果を創出するという目標は達成されたが、フラッグシップ計算機を独自に開発し、それに関連したハードウェア技術も普及させるという波及効果は期待どおりではなかった。**次期フラッグシップ計算機「富岳」に関しては、このような課題にも十分に配慮した開発・整備が進められているが、このことに関しては、次章にて改めて言及する。

フラッグシップ計算機「京」には、成果の公開が義務付けられないが、利用料金を徴収する「個別利用課題」が設定され、利用料収入は「京」の運用経費の一部に充てられた。しかし、「京」の運用経費に較べて利用料収入はごくわずかなものに留まった。フラッグシップ計算機を開発・整備・運用する目的は、産業利用も含めて、我が国の科学技術の振興と発展に寄与することであり、運用経費の回収が目的ではない。しかしながら、**開発・整備に加えて、多額の運用経費が必要となるフラッグシップ計算機を中核として、長期にわたり持続可能なものとして HPCI 計画を推進していくためには、運用経費の一部を利用料金により充当するという考え方もあり得る。**このことに関しては、第 5 章において検討結果を報告する。

3.2 第二階層計算資源の運用

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大学情報基盤センター等が整備・運用するスパコン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、令和 2 年（2020 年）3 月現在、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（以下、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（以下、産業技術総合研究所）の合計 12 機関（等）が、各機関のポリシーにより設備整備したスパコンの計算資源の一部を HPCI に提供している。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など多岐にわたり、さまざまなユーザニーズに応えられるものとなっている。令和 2 年（2020 年）3 月現在、第二階層計算資源量は約 20 万ペタフロップス時間に及んでいる。計算機の年間稼働時間を 8,000 時間と仮定すると、25.5 ペタフロップスの性能を持つ計算機が第二階層計算資源として HPCI に提供されていることになり、フラッグシップ計算機「京」の 2.5 倍の総資源量に相当する。

第二階層計算資源を利用した HPCI 研究課題の選定および利用支援は、効率性向上の観点から、登録機関として「京」の共用促進業務を実施していた、高度情報科学技術研究機構が HPCI 運営事業の一環として実施している。HPCI ポータルサイト（<http://www.hpci-office.jp/>）からは、全国の第二階層計算資源に関する情報が集約された形で配信されており、ユーザの利便性向上に貢献した。図 2 に示すように、第二階層計算資源の利用課題への応募数は確実に増加している。その結果、第二階層計算資源の利用者は延べ、4,200 人以上（「京」との同時利用課題の利用者約 1,800 人を含む）に上っている。これらの利用課題からも多くの成果が創出されており、たとえば、ブラックホールの量子効果を数値シミュレーションにより初めて実証した成果は Nature news の記事として取り上げられ、平成 25 年（2013 年）で最も読まれた記事として世界的に大きな注目を集めた。第二階層計算資源は学術的な成果創出に留まることなく、産業利用でも大きな成果を創出した。たとえば、自動車のタイヤまわりの空気の流れから音が発生するメカニズムを数値流体音響解析によって解明した成果などが得られ、低騒音タイヤの開発への応用が期待されている。このように、第二階層計算資源は産業界からも広く利用され、産業利用課題は延べ 74 課題（「京」との同時利用課題 12 を含む）に上っている。

数万ノードを利用する大規模計算がいきなり産業界で実用化されることは少なく、数百ノードを利用した計算から実用化されることが多い。HPCの本格的な実用化を検討している企業に対して、第二階層計算資源がHPCの利用効果を定量的に予測し得る、多様な計算機アーキテクチャにおけるベンチマーク環境を提供したという意義は大きい。

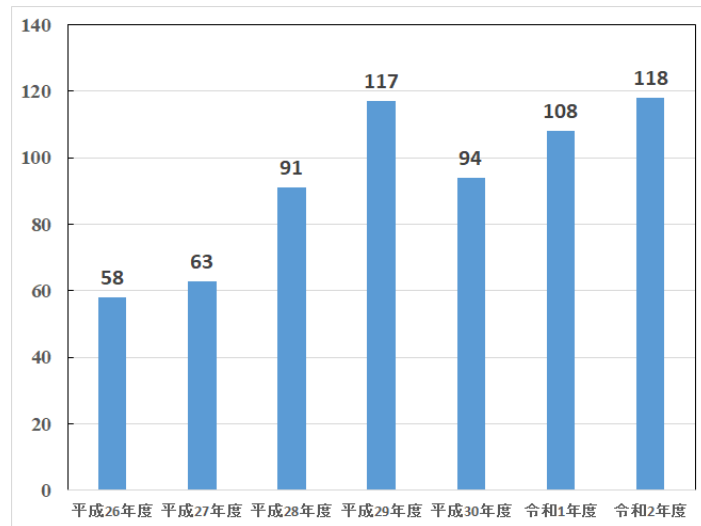


図2 第二階層計算資源の利用課題への応募数の推移

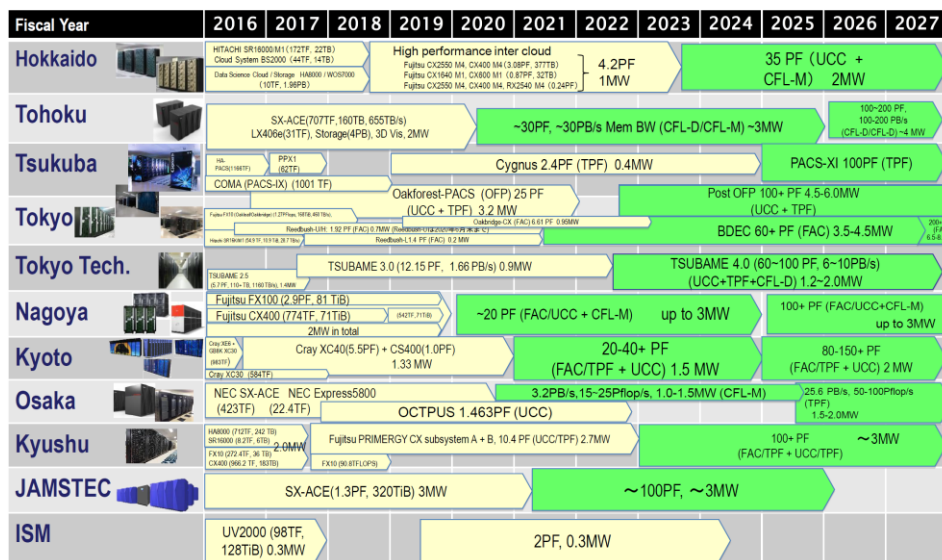


図3 HPCI 第二階層資源のロードマップ。図中の FAC、CFL-M、CFL-D、UCC、TPF については、「4.1 HPCI システムに提供されるハードウェア」(イ)を参照。
(引用: https://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/020/shiryo/_icsFiles/afieldfile/2019/09/24/1421321s23.pdf)

第二階層計算資源の提供が開始される前の、平成 24 年 (2012 年) 5 月に第二階層

計算資源を提供している情報基盤センター等の代表者からなる「連携サービス委員会」が HPCI の運営事業の一環として設置された。この委員会の活動によって、図 3 に示すような、各情報基盤センター等の計算機の整備状況や整備計画に関する最新情報が集約・共有されることになり、第二階層計算資源を提供している各情報基盤センター等は、より適切な設備整備計画の検討や見直しが可能になったり、設備整備したスパコンをより効率的に運用することが可能になったりした。このように、第二階層計算資源の運用は HPCI の構築・運用上の効果のみではなく、計算資源を提供している各情報基盤センター等に対しても、直接的・間接的なメリットをもたらす結果となった。

一方、これまでの 7 年半あまりの期間において第二階層計算資源を運用してきたが、その間にいくつかの課題も顕在化した。その一つが HPCI 利用研究課題の公募時に発生する問題である。HPCI 利用研究課題は課題の実施開始時期の半年以上前に課題公募に関する実施要綱が決められ、半年前くらいに実際に課題が公募され、2 ヶ月程度前に採択課題が決定される。前述のように、第二階層計算資源は各情報基盤センター等が独自のポリシーに基づいて設備整備し、運用しているスパコンの計算資源の一部が HPCI に提供されている計算資源である。各情報基盤センター等のスパコンの設備整備は、仕様策定委員会等で仕様を策定した後、入札により決定された業者等により実施される。このため、第二階層計算資源を利用した研究課題を公募する段階では具体的なスパコンの機種やそのスペック等が決定されていない場合もあり、このような場合は当該スパコンの利用を検討しているユーザに対して十分な情報を提供できない。

フラッグシップ計算機の停止期間中における、第二階層計算資源の提供に関しても課題が顕在化した。前述のように、「京」は昨年（令和元年（2019 年））8 月 16 日に 7 年近くに及んだ共用を終了した。一方、現在開発・整備が進められている、次期フラッグシップ計算機「富岳」の共用開始は早くても来年（令和 3 年（2021 年））4 月になる見通しである。したがって、短くとも 1 年半の間、HPCI はフラッグシップ計算機が無い状態で、第二階層計算資源のみで運用されている。このことに対処するために、HPCI コンソーシアムを中心として、この期間における我が国の計算科学技術の持続的な振興を図るための種々の検討が行われた。検討結果は、「フラッグシップ計算機停止期間中における HPCI の資源提供の在り方とポスト「京」への移行に関する調査・検討報告書」という提言に纏められ、平成 30 年（2018 年）6 月に文部科学省研究振興局長に手交された。文部科学省ではこの提言を受けて、具体的な実施策を検討し、「京」が停止後に必要となる計算資源を確保するために、令和元年度（2019 年度）の第二階層計算資源の配分量を大幅に増加させた。しかしながら、追加配分された上記の第二階層計算資源の利用は当初の想定どおりには進まず（令和 2 年（2020 年）3 月現在）、フラッグシップ計算機の停止期間中の計算科学技術の持続的な発展方法に関しては検証が必要な状況にある。このこ

とに関しては次の第4章において改めて言及する。

前述のとおり、第二階層計算資源はフラッグシップ計算機とともに HPCI の中核的な計算資源を成すものであり、第二階層計算資源無しには我が国の HPCI は成り立たないことは自明である。その意味では、**第二階層計算資源を提供している各情報基盤センター等が、HPCI 計画の推進に対して、より主体的・積極的に参画できる体制を構築していくことが、長期的に見て、我が国の HPCI 計画が強い求心力を維持しながら推進されるために必須であると考えられる。**そのためには、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として HPCI に参画することのメリットをより明確に享受できるような HPCI の推進体制を構築していく必要がある。

3.3 利用者拡大・利用支援

平成 24 年（2012 年）9 月に運用を開始して以来、HPCI の利用研究課題に参加した研究者等の総数は令和 2 年（2020 年）3 月末時点で、延べ 13,500 人あまりに上っている。その内、11,000 人あまりは「京」の利用研究課題（「京」と「京」以外の HPCI の同時利用課題を含む）の参加者であり、残りの 2,400 人あまりは「京」以外の HPCI の利用研究課題への参加者である。平均すると、年間 2,000 人近くの研究者等により HPCI システムは利用されたことになり、その利用は確実に拡大したと言える。利用者の拡大には、理化学研究所によるフラッグシップ計算機「京」の効率的な運用や第二階層計算資源を提供している各大学情報基盤センター等の HPCI への協力に加えて、高度情報科学技術研究機構が登録機関および HPCI の運営事業の一環として実施した利用支援が大きく貢献した。また、産業利用の拡大という意味では、公益財団法人計算科学振興財団（以下、計算科学振興財団）、および、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会の活動も大きく貢献した。以下、これらの取り組みとその成果に関して言及する。なお、フラッグシップ計算機「京」や第二階層計算資源へのアプリケーション・ソフトウェアの整備も利用者の拡大に重要な役割を果たしたが、このことに関しては次節にて言及する。

フラッグシップ計算機および第二階層計算資源を駆使し、従来は得ることができなかった成果を創出するためには、その利用を支援する取り組みも重要である。高度情報科学技術研究機構では、平成 26 年度（2014 年度）から第二階層計算資源を利用する産業利用課題に対して、また、翌平成 27 年度（2015 年度）からは同アカデミアの課題に対して、ノード単体性能や並列性能向上に向けたアプリケーションの高度化支援を開始した。これまでに第二階層計算資源を利用する 30 あまりの課題に対して高度化支援を実施してきたが、負荷分散を最適化し、かつ、無駄な計算を極力排除することにより、最大で 16 倍のアプリケーションの高速化が達成されるなど、第二階層計算資源の効率的な利用や成果の早期創出に貢献してきた。

計算科学振興財団は、HPCI の運営事業の受託機関の一つとして、高度情報科学技術研究機構とともに HPCI の産業利用促進に係る事業を担っており、HPC の普及啓発や年間数百件に上る積極的な企業訪問等を通じた新規利用者の開拓、セキュリティを確保した作業個室（アクセスポイント神戸）の運用、技術的な利用相談、講習会の開催、大規模入出力データの転送等の利用支援を実施している。なお、アクセスポイントは神戸、東京の 2 か所に設置され運用されたが、東京に設置されたアクセスポイント（アクセスポイント東京）は高度情報科学技術研究機構により運用されたことを付記する。また、計算科学振興財団独自の利用者支援・利用者拡大事業として、産業界向け利用相談窓口の設置や商用アプリケーションや国プロアプリケーションをプリインストールした小規模なスパコン（通称、「FOCUS スパコン」）の設備整備とその計算資源の有償での産業界への提供などを実施し、産業界ユーザの、フラッグシップ計算機や第二階層計算資源へのステップアップに貢献してきた。さらに、企業の経営者層や技術部門トップに対して、スパコンによる技術革新の潮流を啓発するために、「トップセミナー」を定期的に開催してきた。

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（以下、産応協）は、産業界におけるスーパーコンピューティング技術の利活用を促進し、そのことにより、日本の産業競争力の強化を図ることを目的として平成 17 年（2005 年）に設立された任意団体である。産応協はフラッグシップ計算機を始めとした HPCI の産業応用促進に向けた意見集約や政策提言を行っているほか、シミュレーション技術の利活用推進のために「スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム」、「産応協セミナー」や「産応協スクール」などの普及啓発活動を実施したり、欧米における HPC の開発利用技術の調査結果に基づき、シミュレーションロードマップを策定したりしており、産業界における HPC の利活用を促進する組織として重要な役割を担ってきた。

HPCI は国費により実施されている事業であるため、得られた成果を広く一般社会に対して発信するという重要な責務も負っている。高度情報科学技術研究機構では、毎年、成果報告会・シンポジウム（理化学研究所と合同開催）を開催し、異分野のユーザ間の連携強化や一般に向けた計算科学の理解の促進に努めてきた。また、HPCI ポータルサイトを運営し、利用研究課題の成果を収録した利用報告書の公開や発表された成果のデータベース化とその公開、定期的な刊行物（京算百景 1～29 号・成果事例集 1～7 号）の発行などを実施し、HPCI 利用研究課題の成果の普及にも努めてきた。特に、利用報告書のダウンロード件数は年間 3 万件に上った。なかには、一つの課題で 1 年間に 1,897 回ダウンロードされた、バイオ・ライフサイエンス分野の HPCI 利用課題もあり、利用報告書には一般からも大きな注目が寄せられた。

関係機関のこのような努力の結果、HPCIの利用者数は増大したものの、**利用者が固定化する、すなわち、同一の研究者等が異なる利用研究課題のために HPCI システムを長期にわたり利用するという傾向が見られ、新規利用者数の増加という観点では必ずしも利用者が拡大したとは言えない状況にある。**さらなる利用拡大を図るためには、新規利用者の開拓に向けた方策を検討し、実践する必要がある。

3.4 アプリケーションの開発・利用・普及

平成 23 年（2011 年）4 月から平成 28 年（2016 年）3 月の 5 年間にわたり、フラッグシップ計算機「京」の実証研究事業である「HPCI 戦略プログラム」が総額 100 億円以上の研究経費を掛けて実施され、フラッグシップ計算機「京」に対応した高度なアプリケーション・ソフトウェアにより、**卓越する数々の成果が創出された。**HPCI 戦略プログラムでは、「京」を戦略的に利用することにより大きな成果の創出が期待される 5 つの「戦略分野」（戦略分野 1：予測する生命科学・医療および創薬基盤、戦略分野 2：新物質・エネルギー創成、戦略分野 3：防災・減災に資する地球変動予測、戦略分野 4：次世代ものづくり、戦略分野 5：物質と宇宙の起源と構造）が設定され、公募によりそれぞれの分野の研究を実施する中核機関（「戦略機関」）が採択され、事業が実施された。HPCI 戦略プログラムは「研究開発の推進」と「計算科学技術推進体制の構築」を事業の柱として推進され、前者の研究開発の推進事業により、「京」に対して最適化と高速化が施された高度なアプリケーションにより数々の実証研究が実施された。また、**本事業のもう一つの柱であった、「計算科学技術推進体制の構築」により、人材育成、開発されたアプリケーション・ソフトウェアの普及、アウトリーチ活動などが実施され、各戦略分野において、強固なユーザコミュニティが形成され、現在のユーザコミュニティの原型が形成された。**

上記の実証研究において、電子の状態や原子・分子の挙動の精緻なシミュレーションに基づく物質特性の予測や薬の候補化合物の探査が可能になったり、それまでは不可能であった、線状降水帯（スコールライン）の予測が初めて実現されたりするなど、多くの成果が創出された。また、建物の被害予測や最適な避難誘導も含めた地震・津波のシミュレーション、風洞実験や水槽試験の代替えとなり得る精度を有した自動車や船のまわりの流れの予測、ならびに、宇宙初期におけるダークマター粒子の重力進化を解く、宇宙現象のこれまでにない大規模なシミュレーションなども「京」により初めて実現された。特に、「京」を利用した研究成果を纏めた二つの論文（"First principles calculation of electronic states of a silicon nanowire with 100,000 atoms on the K computer"、および、"4.45 Pflops Astrophysical N-Body Simulation on K Computer - The Gravitational Trillion-Body Problem"、図 4 および図 5 参照）が平成 23 年（2011 年）と平成 24 年（2012 年）に 2 年連続してゴードンベル賞を受賞するなど、フラッグシップ計算機「京」の利用により、

卓越した成果が創出され、世界的にも大きな注目を集めた。

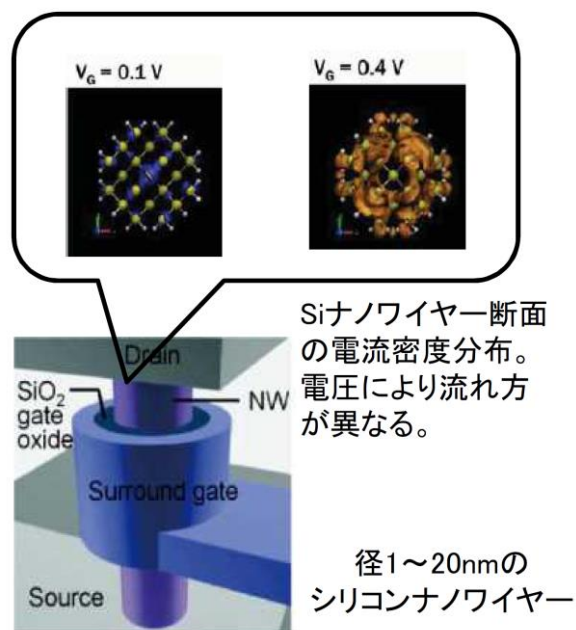


図 4 Si ナノワイヤ断面の電流密度分布

(引用 : https://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/042/shiryo/_icsFiles/afieldfile/2016/04/21/1368453_06.pdf)

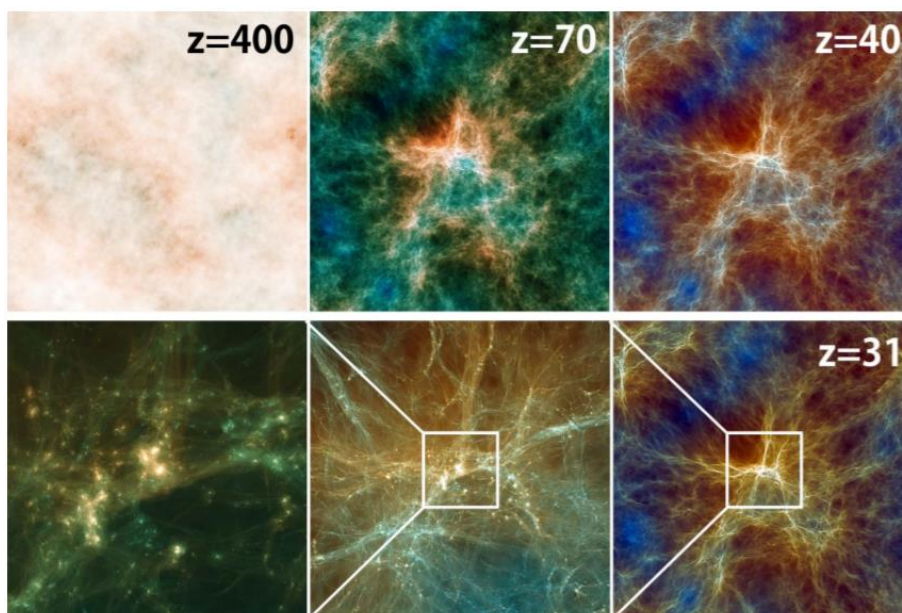


図 5 宇宙初期のダークマター密度分布

(引用 : http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/028/gaiyou/1348991.htm)

HPCI 戦略プログラムの計算科学技術推進体制の構築においては、各戦略分野において、アプリケーション・ソフトウェアの普及活動が精力的に展開された。たとえば、MateriApps（戦略分野 2）や計算工学ナビ（戦略分野 4）といった HPC 向けアプリケーション・ソフトウェアのポータルサイトが整備され、利用マニュアルやチュートリアルデータも含めて、数多くのアプリケーションが自由にダウンロードできるようになった。このようなコミュニティ毎のアウトリーチ活動は、現在は HPCI の運営事業の一環として、フラッグシップ計算機や第二階層計算資源へのアプリケーション・ソフトウェアの整備事業として展開されている（後述）。

表 2 HPCI システムに利用環境が整備されたアプリケーション・ソフトウェア

		理研	北大	東北大	筑波大	JCAHPC	東大	東工大	名大		京大	阪大	九大
		「京」	Grand Chariot	LX 406Re-2	Cygnus	Oakforest-PACS	Oakbridg e-CX	TSUBAME 3	FX100	CX400	XC40	OCTOPUS	ITO-A ITO-B
材 料 バ イ オ	ABINIT-MP (国プロ)		○			○	○	○		●	○	○	○
	LAMMPS (OSS)	●							●				
	PHASE/0 (国プロ)		○			○	○	●		●	○	○	●
	GENESIS (国プロ)		○		○(G)	○	○	●(+G)		●	○	○(+G)	●(+G)
	MODYLAS (国プロ)		○	●		●	○	●		●	●	●	●
	Quantum ESPRESSO (OSS)	●							●				
	GROMACS (OSS)	●							●				
	NTChem (国プロ)		○	●		●	○	●		●	●	●	●
	SALMON (国プロ)		○	●		○	○	○		●	○	○	○
	HΦ (国プロ)		○	●		○	○	○		●	○	○	○
	OpenMX (国プロ)		○	●		●	○	●		●	●	●	●
	SMASH (国プロ)		○	●		●	○	●		●	●	●	●
CAE	FrontFlow/blue (国プロ)		○			○	○	●		●	○	○	●
	FrontISTR (国プロ)		○			○	○	○		●	○	○	○
	OpenFOAM (OSS)	●							●				

【凡例】 黒●：整備済、赤○：2019年度整備予定、緑○：2019年度バージョンアップ予定
(G)：GPU版のみ、(+G)：CPU版に加えてGPU版を整備

高度情報科学技術研究機構では、HPCI コンソーシアムの提言「今後の HPCI 第二階層計算資源の整備とその活用に関する提言」（平成 29 年（2017 年）5 月に文部科学省

研究振興局長に手交)を受け、アプリケーション・ソフトウェアを第二階層計算資源にも整備し、利用の拡大やユーザの裾野の拡大を図ってきた。表 2 に示すように、ユーザの利用頻度が高いオープン・ソース・ソフトウェアや国のプロジェクトで開発されたアプリケーション・ソフトウェア等をフラッグシップ計算機「京」、および各大学情報基盤センター等のスパコンに整備を進めたことも HPCI 利用者の拡大に貢献した。なお、表 2 は一般ユーザも利用できるように HPCI システム（フラッグシップ計算機、および第二階層計算資源を提供している各情報基盤センター等のスパコン）に整備されたアプリケーションの状況（令和 2 年（2020 年）3 月現在）を示すものであり、一方、前掲の表 1 はフラッグシップ計算機「京」の利用研究課題で実際に利用されたアプリケーションと利用課題の数を示したものであることに留意されたい。

3.5 コミュニティ形成と人材育成

前述のように、HPCI 戦略プログラムの計算科学技術推進体制の構築事業において、戦略機関を中心とした研究支援、人材育成、人的ネットワークの形成、研究成果の普及、スパコンを効率的に利用するためのマネジメント等が実施された。各戦略分野において、HPCI 戦略プログラムの枠を越えた、研究機関と企業の連携・協力体制が構築され、多くの企業が参加する大型のコンソーシアムなどが組織された。このような大型コンソーシアムにより実施された「京」の産業利用課題（「コンソーシアム型「京」産業利用課題」）からも大きな成果が創出された。たとえば、FMO 創薬コンソーシアム (<https://fmodd.jp/>) は、日本発の理論手法であるフラグメント分子軌道（FMO）法を実用的な創薬手法に発展させることを目的とした産学官連携のコンソーシアムであり、図 6 に示すように、海外からの参加 2 社を含む製薬企業 17 社、IT 企業 4 社、アカデミア 15 機関が参画している。同コンソーシアムでは、「京」の産業利用課題を実施すると共に、名古屋大学の FX100 や東京工業大学の TSUBAME3.0 などの第二階層計算資源も活用し、さらに、計算手順の標準化や処理の自動化を進めることで、従来の 100 倍以上高速に、創薬に対して重要となるたんぱく質のデータ収集がとなった。その成果により、2,400 以上のたんぱく質の構造が収録された「FMO database」(<https://drugdesign.riken.jp/FMODB/>) が平成 31 年（2019 年）2 月から一般公開されている。

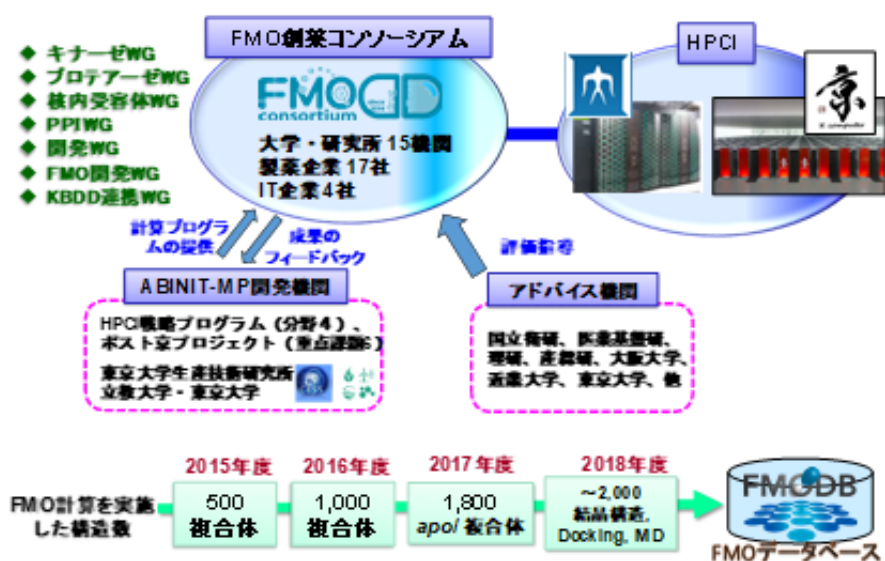


図 6 FMO 創薬コンソーシアムによるたんぱく質データベースの構築と公開
(引用：https://fmodd.jp/)

一方、人材育成に関しては、ウェブ配信講義「計算科学技術特論」のアクセス数が 3 万件を超えたり、戦略分野を超えた合同の研究会が頻繁に開催されたりした。また、理化学研究所計算科学研究機構（現、計算科学研究センター）では、e ラーニングアーカイブページを開設している。このホームページには、理化学研究所や各戦略分野等で実施されたスクール、シンポジウム等に関する、100 を超える講義の動画や資料が収録され、公開されている。また、高度情報科学技術研究機構においては、「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」（以下、重点課題プロジェクト）実施者、大学情報基盤センター、産協とも連携し、「京」の講習会やハンズオン、HPC プログラムセミナーなど、HPC で利用されるアプリケーション・ソフトウェアに特化した講習会や各種ワークショップを開催してきた。表 3 にこれらの人材育成事業を示す。

理化学研究所や高度情報科学研究機構を中心とした上記のような人材育成事業の成果により、コミュニティを繋ぐネットワークが形成され、これまでは各大学や大学情報基盤センター等で個別に実施されていた計算科学人材の育成事業が全国的に展開されるようになったことは特筆に値する。たとえば、平成 23 年（2011 年）8 月以降、春と夏の年に 2 回、理化学研究所計算科学研究機構（現、計算科学研究センター）、神戸大学計算科学教育センター、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科が、RIKEN AICS HPC Summer School（現、KOBЕ HPC サマースクール、延べ参加者数 241 人）、RIKEN AICS HPC Spring School（現、KOBЕ HPC スプリングスクール、延べ参加者数 105 人）を共同で開講している。さらに、理化学研究所計算科学研究機構（現、計算科学研究セ

ンター)が International HPC Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences (IHPCSS、延べ参加者数 23 人)を平成 25 年(2013 年)から開催し、また、RIKEN International HPC Summer School(延べ参加者数 70 人)を平成 30 年(2018 年)から開催している。これらの「スクール」は、学生、若手の研究者、ならびに企業の技術者などを対象とし、フラッグシップ計算機を駆使し、計算科学の新しい世界を自ら開拓していくことができるような人材を育成することを目的としている。ここでは、座学のみならず実践形式の演習が実施されているが、これまでに延べ 439 人が日本全国から本スクールに入校した。特に IHPCSS は、HPC サービスを提供する国際的な非営利組織である PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe、欧州)や HPC も含む先端的なデジタルサービスを提供する XCEDE (The Extreme Science and Engineering Discovery Environment、米国)とも共同で実施している、国際的な教育事業として高く評価されている。また、高度情報科学技術研究機構では平成 30 年(2018 年)8 月以降、上記のスクールの参加者よりもさらに若年の、中学生から高等専門学校生を対象としたプログラミング講習会(初心者向けの「はじめてのプログラミング」、上級者向けの「スパコン体験塾」)を開催し、これまでに延べ 134 名が受講している。

表 3 理化学研究所および高度情報科学技術研究機構が実施してきた人材育成事業

事業名	実施機関
公開ソフト講習会	理化学研究所計算科学研究機構
RIKEN AICS HPC Summer School (現、KOBE HPC Summer School)	理化学研究所計算科学研究機構、神戸大学計算科学教育センター、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科
RIKEN AICS HPC Spring School (現、KOBE HPC Spring School)	理化学研究所計算科学研究機構、神戸大学計算科学教育センター、兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科
International Summer School	理化学研究所計算科学研究機構
RIKEN AICS H P C I nternship	理化学研究所計算科学研究機構
「京」講習会・ハンズオン講習会	高度情報科学技術研究機構
アプリケーション講習会	高度情報科学技術研究機構

第 4 章 HPCI で利用されるハードウェアとソフトウェアの開発・整備・運用に関する基本的な考え方

前章「HPCI のこれまでの成果と顕在化した課題」では、HPCI を構築し、7 年間以上運用してきて得られた成果を検証した。また、その間に顕在化した課題に関しても言及した。本章ではこれらの結果を踏まえて、HPCI で利用されるハードウェア、およびソフトウェアに関して、その開発・整備・運用に関する基本的な考え方に関して検討した結果を報告する。

4.1 HPCI システムが提供するハードウェア

現在の HPCI システムの計算資源は、フラッグシップ計算機と第二階層計算資源を車の両輪として構成されている。第二階層計算資源は各大学情報基盤センター等のポリシーにより整備・運用されているスパコンの計算資源の一部が HPCI システムに供出され、ユーザに提供されているものである。HPCI および各大学情報基盤センター等のそれぞれのメリットや国全体としての効率性などを検証し、HPCI の計算資源をこのように構成することの意義を関係者が改めて共有する必要がある。

(ア) フラッグシップ計算機

フラッグシップ計算機「京」は我が国の計算科学、ひいては、科学技術の発展の中核的研究基盤として開発・整備され、7年半にわたり運用された結果、前述したような卓越した成果を創出した。我が国は今後も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の設備整備を続けていくことが妥当である。以下では、フラッグシップ計算機を独自に開発することの要否や意義、フラッグシップ計算機の規模、および開発のインターバルなどを含めた、フラッグシップ計算機の開発の在り方や運用の仕方に関して言及する。

「京」の果たした大きな成果の一つとして、産業利用も含めて、超大規模計算の実行環境を提供したことがある。「京」の登場以前は数 100 ノードから多くても 1,000 ノード程度の計算ノードを用いた並列計算しか実施されていなかったが、「京」の登場により、並列計算に用いられる計算ノード数は一気に数千から数万に飛躍的に大きくなり、上述したような大きな成果が創出された。一般に、フラッグシップ計算機のように多くの利用者の共用に供されるスパコンの日常的な運用の中で一人のユーザが使用することができる計算ノード数は全計算ノード数の数分の 1 以下である。したがって、数万計算ノードを用いた大規模な計算は、10 万規模の計算ノードを有するスパコンを利用して始めて実施可能となる。実行可能な最大計算規模の観点から、フラッグシップ計算機は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。つまり、フラッグシップ計算機の開発は集約的に実施すべきである。

フラッグシップ計算機の開発や設備整備のインターバルに関して言及する。前述のように、「京」は平成 24 年（2012 年）9 月に共用が開始され、7 年近くの間、共用に供され、令和元年（2019 年）8 月に運用が終了した。次期フラッグシップ計算機「富岳」は早ければ令和 3 年（2021 年）4 月に運用が開始される予定であるため、フラッグシップ計算機の開発・整備のインターバルは 8 年から 9 年ということになる。フラッグシップ計算機とは定義されてないが、「京」の前に我が国のプロジェクトで開発されたスパコンである、「地球シミュレータ」は平成 14 年（2002 年）に運用が開始されたため、「京」

とのインターバルはやはり 10 年程度ということになる。「京」の運用終了と「富岳」の運用開始の間には 1 年半以上にわたり我が国にフラッグシップ計算機が存在しない、フラッグシップ計算機の「端境期」が存在している。

文部科学省では、フラッグシップ計算機の端境期における HPCI の運用方法に関する HPCI コンソーシアムからの提言「フラッグシップ計算機停止期間における HPCI の資源提供の在り方とポスト「京」への移行に関する提言」（平成 30 年（2018 年）6 月に文部科学省研究振興局長に手交）などを受け、第二階層計算資源を充当するなど、適切な予算措置を実施したところであるが、3.2 節において言及したように、充当された第二階層計算資源の利用は必ずしも当初の想定通りには進まなかった。この理由を考察した上で、今後のフラッグシップ計算機の開発の在り方に関して言及する。

過去 25 年間のスパコン性能（TOP500）の推移を図 7 に示す。オレンジ色で示した、「Top」とあるのが世界最速のスパコン性能（LINPACK 性能）であるが、「地球シミュレータ」や「京」が登場したタイミングでスパコン性能が数倍に向上していることがわかる。次期フラッグシップ計算機の運用開始の 1 年から 2 年前は、スパコン性能が数 10 倍以上に向上する前兆期である。このため、フラッグシップ計算機で超大規模な計算を実施している、いわゆる、「ビッグユーザ」に対しては、総計算資源量ではフラッグシップ計算機のそれを上回る第二階層計算資源は、フラッグシップ計算機の代替えとしては必ずしも十分には機能しないものと考えられる。今後のフラッグシップ計算機の開発整備にあたっては、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。

フラッグシップ計算機を独自に開発することの要否に関して検討した結果を報告する。まず、フラッグシップ計算機の大規模性と先端性から、これを調達よって設備整備することは現実的ではない。このことから、フラッグシップ計算機は独自に開発することが前提となる。しかし、フラッグシップ計算機の独自開発が必要となる、より本質的な理由としてアプリケーション開発に係ることがある。すなわち、フラッグシップ計算機のような大規模なスパコンにおいてアプリケーションの実効性能を引き出すことは容易ではなく、アプリケーション開発者がスパコンの設計段階からハードウェア開発に積極的に関与できる環境がなければ、フラッグシップ計算機の性能を十分に引き出すことは不可能である。ハードウェア（スパコン）本体とアプリケーションの協調的开发を可能にするために、フラッグシップ計算機を独自に開発することが必須となる。

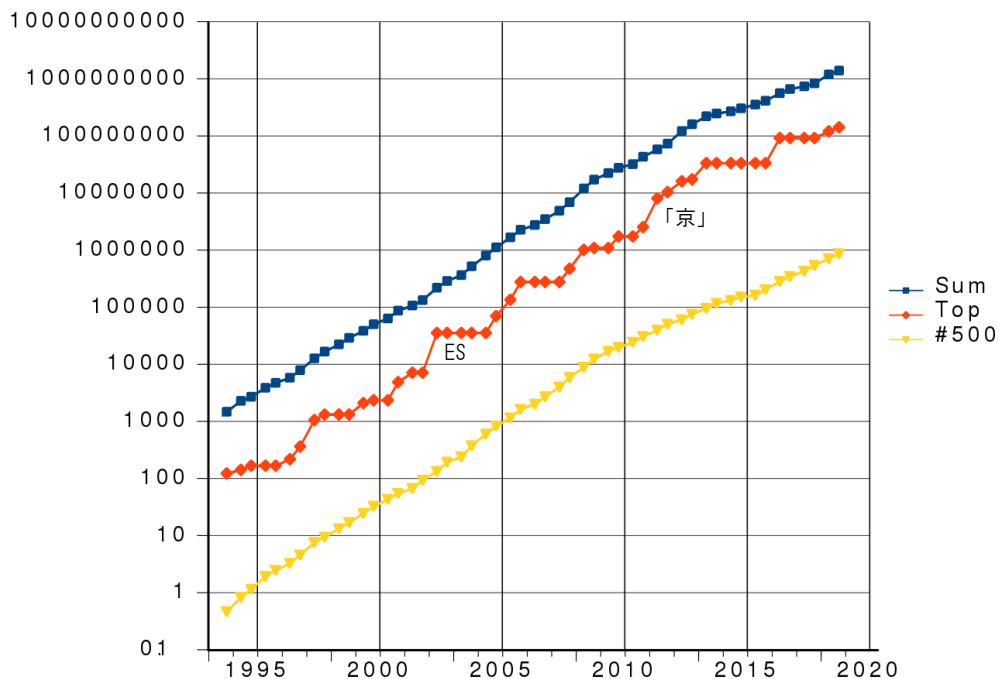


図7 スパコン性能の推移
 (引用： <https://www.top500.org/>)

「京」の開発時にもターゲットアプリケーションとよばれる、「京」の性能を発揮し、大きな成果を創出することが期待されたアプリケーション21本が文部科学省により選定され、その一部に関しては政府予算の中で開発が進められた。「富岳」の開発においては、この取り組みがさらに強化され、「コデザイン」という枠組みの中で、ハードウェア開発とアプリケーション開発が協動的に実施され、アプリケーション開発に関する大きな成果の創出につながった。「富岳」のコデザインに関しては次節「HPCIシステムで利用されるソフトウェア」に言及する。

フラッグシップ計算機を独自に開発する場合、それを利用した成果の創出だけではなく、その波及効果、すなわち、CPUやインターコネクト技術、あるいはフラッグシップ計算機の商用機が広く普及することが、我が国が今後もフラッグシップ計算機の独自開発を続け、世界をリードしていくためには重要となる。また、商用アプリケーションは産業利用で重要となるため、その移植性にも十分に配慮した開発を実施する必要がある。次期フラッグシップ計算機「富岳」の心臓部であるCPU(A64FXプロセッサ)では、欧州を中心に広く普及しているArmを基に開発(拡張)された、Armv8.2-A SVEアーキテクチャ(前述のISA)が採用されており、Arm用に開発された多くのアプリケーションが、原則、そのまま動作するようになっている。

すでに言及したように、フラッグシップ計算機も含めて、今後、HPCI の利用分野を拡大していくことが重要である。特に、AI 分野への応用や実時間におけるシミュレーションと観測結果の同化計算などを考えた場合、フロントエンド環境も重要となる。従来、フラッグシップ計算機や大学情報基盤センター等のスパコンは主として、ジョブをキューイングシステムに投入し、ジョブの実行終了後、ジョブの実行結果がキューイングシステムから報告され、ユーザはその報告を受けて、ファイル転送などの後処理を実施していた。今後のフラッグシップ計算機の開発・整備にあたっては、リアルタイムジョブの実行や大規模なデータの可視化処理などを実行する環境を提供することも検討すべきである。

我が国のフラッグシップ計算機はこれまで理化学研究所計算科学研究センター（旧・計算科学研究機構）がその開発および運用を行ってきた。「富岳」も特定先端大型研究施設と位置付けられるため、我が国の研究基盤を強化し、研究者等の相互の間の交流を促し、多様な知識の融合等を図り、そのことにより、科学技術の振興に寄与することを目的に運用されるべきである。フラッグシップ計算機「富岳」の開発者である理化学研究所が「富岳」の維持管理を行うとともに、これを研究者等の共用に供し、加えてそれに付帯する業務を実施することが妥当である。ただし、文部科学大臣が定めるところによって、「利用者選定業務」と「利用支援業務」の全部（あるいは、文部科学省令で定める特定先端大型研究施設の利用の区分に従い、登録施設利用促進機関がどちらの業務も行う場合は、その部分。以降、単に「全部または一部」と記載する。）を前記の登録機関が行うこともできる。文部科学大臣が告示する基本方針に沿って、登録機関と連携しながら「富岳」の利用環境の構築・整備・運用ルール具体化を行い、具体化されたルールに従って「富岳」を運用すべきである。

(イ) 第二階層計算資源

HPCI 計画推進委員会の下に設置された今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループから提出された報告書「今後の HPCI 計画推進の在り方について」（平成 26 年（2014 年）3 月）によれば、第二階層計算資源に関して以下のように記述されている。なお、括弧内は補足として追記したものである。

「(前略) 当該インフラを整備・運用する組織が抱えるユーザニーズと将来の HPC 技術動向を見据えた各組織のポリシーを尊重しつつ、フラッグシップシステムを支える特徴あるシステムの方向性も考慮すると、(第二階層計算資源は) 主に以下の 4 つの分類に則して、整備を進めていくべきである。

- (a) フラッグシップシステムと同様のアーキテクチャを有するシステム (Flagship-Aligned Commercial Machine (FAC))

フラッグシップシステムへの橋渡しを担う、フラッグシップシステムと同様のアーキテクチャを有するシステム。

- (b) フラッグシップシステムがカバーできない領域を支援するシステム (Complimentary Function Leading Machine (CFL-M, CFL-D))

フラッグシップシステムで実行しても効率よく実行できない応用領域のユーザニーズに沿ったシステム。

- (c) コモディティクラスタからの大規模並列処理を支援するシステム (Upscale Commodity Cluster Machine (UCC))

コモディティクラスタを利用するユーザが、より大規模並列処理へと向かうように整備されたシステム。

- (d) 将来の HPC 基盤に向けた先端システム (Technology Path-Forward Machine (TPF))

応用分野が要求する計算手法や計算資源量を勘案し、市場には投入されていない先端マシンを設計・試作しながら整備されたシステム。(後略)」

たとえば、フラッグシップ計算機「京」の時代には東京大学情報基盤センターに設備整備され、その一部が HPCI 計算資源として提供された FX10 が「京」と類似なアーキテクチャを有するシステム (上記分類(a)) として「京」との橋渡しの機能を果たしてきた。九州大学情報基盤研究開発センターから HPCI に提供されている ITO システムは、x86 アーキテクチャの CPU から構成される計算ノードが 2,000 基具備された大規模なスパコンであり、コモディティクラスタを利用するユーザが、より大規模並列処理へ向かうように整備されたシステム (上記分類(c)) と捉えることができる。また、東京大学情報基盤センターと筑波大学計算科学研究センターが共同運営する、最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) から HPCI に供出され、ユーザに提供されている Oakforest-PACS システムは、512 ビットの SIMD 演算器が具備されたメニーコア (ノードあたり最大 72 コアを搭載) から構成される、将来の HPC 基盤に向けた先端システム (上記分類(d)) として整備されたシステムである。多様なユーザニーズに応えるために、上記分類に則して第二階層計算資源を設備整備していくべきである。今後も、AI やデータ科学の潮流も鑑み、HPCI がより強力な研究基盤設備となるために、人工知能 (AI) の分野で重要となる半精度演算器の性能が高かったり、ビッグデータ分野で重要となるストリーム処理が高速に実施できたりするようなスパコンを上記(d)に分類される第二階層計算資源として設備整備していくべきである。さらに、このような先導的な第二階層計算資源を活用して得られる成果を今後のフラッグシップ計算機の開発・整備計画に反映させていくべきである。

第二階層計算資源は情報基盤センター等が独自のポリシーに基づいて整備・運用をしている計算資源の一部が HPCI の計算資源として提供されたものであるため、その最大の特長は提供されている計算資源の多様性にある。特に、情報科学分野や AI 分野へ

の展開も含めて、HPCI の利用分野の拡大や利用者の裾野拡大に対して大きく貢献していくことが期待される。現在、全国の 9 大学基盤センター等ならびに 1 国立研究開発法人が設備整備し、運用しているスパコンの計算資源の一部を HPCI に供出している。これらのスパコンの更新のインターバルは 5 年から 6 年程度であるため、第二階層計算資源全体を見た場合、フラッグシップ計算機よりもはるかに短いインターバルで最先端のスパコンが設備整備されていることになり、第二階層計算資源は多様なユーザーズに応えることができる、最新鋭のスパコンの利用環境を提供しているということも重要な意義を持っている。以上のような観点から、第二階層計算資源は今後も HPCI の重要な計算資源として整備・運用をしていくべきである。

前掲の図 3 に示したように、令和 2 年（2020 年）3 月現在、全国 9 つの大学の情報基盤センター等ならびに 1 つの国立研究開発法人（海洋研究開発機構地球情報基盤センター）から第二階層計算資源として HPCI に計算資源が供出されている。これらの計算資源は HPCI 全体で一括して運用され、統一されたルールに基づいて HPCI の運営事業の一環としてそれを利用した研究課題が選定され、実施されている。一方、図 3 には記載されていないが、一括した課題選定の対象とはせずに、各機関のルールにより当該計算資源を利用する課題が選定されている、通称「赤資源」とよばれる無償／有償の計算機資源も HPCI の計算資源の一部を構成している。HPCI の運用開始当初から平成 27 年（2015 年）までは、海洋研究開発機構地球情報基盤センターの地球シミュレータがそれに該当し、また、令和元年度（2019 年度）から産業技術総合研究所の AI 橋渡しクラウド（AI Bridging Cloud Infrastructure、ABCI）がそのような計算資源を提供している。上記のように、第二階層計算資源の最大の特長はその多様性にあり、特に、ABCI は HPCI が AI やデータ科学分野に強力に展開していくための重要な足掛かりとなることが期待される。

また、東京大学情報基盤センターを中核拠点とし、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、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、および九州大学情報基盤研究開発センターが連携参画する、ネットワーク型全国共同利用・共同研究拠点である、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（以下、JHPCN 拠点）が形成され、HPC の普及に向けた積極的な研究教育活動が展開されている。JHPCN 拠点では、HPCI の運営事業と連携して、HPCI-JHPCN 課題の公募・課題審査を実施している。

ABCI の研究課題や HPCI-JHPCN 利用課題も HPCI 課題の一つと位置付けられており、課題の公募が行われているが、課題審査はそれぞれの機関が独自に実施している。

両課題とも HPCI の利用分野の拡大や利用者の裾野を拡大するという貢献が期待されるため、HPCI としては今後とも積極的にこのような課題を実施すべきであるが、利用者の多様性から、HPCI の運営を実施する機関がこのような課題の審査まで実施することには無理があり、これまでと同じく、それぞれの機関の独自の判断で課題審査を実施すべきである。一方、HPCI の発展のためには、これらの利用課題によって得られた成果を共有することが重要であり、成果の共有に関してはより積極的な取り組みがなされるべきである。また、積極的な省庁連携を進めるという意味では、それぞれの機関を所管する省庁から、HPCI のさらなる発展に向けた支援も検討されるべきである。

(ウ) 共有ストレージ

コミュニティにおけるデータ共有、HPCI 利用に係る大量のデータの格納やアーカイブを実現するため、ストレージ間の相互利用性が担保された複数の大容量ストレージが HPCI の計算資源の一部としてユーザに提供されている。HPCI の運用が開始された当初は、最先端研究基盤事業で東京大学情報基盤センター（約 12 ペタバイト）と理化学研究所（9.5 ペタバイト）に設置されたストレージが HPCI の計算資源として提供されてきた。また、平成 26 年度（2014 年度）から平成 28 年度（2016 年度）には、東京工業大学学術国際情報センターに整備されたストレージ（0.4 ペタバイト）も HPCI の共用ストレージとして提供されていた。現在（令和 2 年（2020 年）3 月時点）は、東拠点（東京大学情報基盤センターの 45 ペタバイト）と西拠点（理化学研究所計算科学研究センターの 45 ペタバイト）の 2 拠点到整備されている大容量ストレージシステムが HPCI の計算資源として提供されている。また、これらのストレージ間の相互利用性を確保するため、ネットワーク共有ファイルシステム Gfarm で運用されている。

本格的な AI やデータ科学の時代を迎え、今後設備整備すべき適切な資源量を早期に検討し、必要な予算措置を実施すべきである。

(エ) 高速ネットワーク

HPCI システムが提供している計算資源および共有ストレージをつなぐ高速ネットワーク基盤として、大学共同利用機関法人情報・システム研究機構国立情報学研究所が運用している、学術情報ネットワーク SINET5 (Science Information NETwork 5) が利用されている。AI やデータ科学の時代を迎え、ネットワーク基盤の重要性は従来にも増して高くなることが予想される中、共用ストレージも含めて、HPCI 利用者の具体的な利用形態を早期に検討し、適切な予算措置を実施すべきである。

(オ) その他の計算資源

第二階層計算資源には含まれない大学共同利用機関法人、大学附置研究所、国立研

究開発法人等に設備整備されているスパコンや、産業界における HPC の利用を促進することを目的として、計算科学振興財団に設備整備された FOCUS スパコンなど、比較的小規模な計算資源がある。これらの計算資源は、HPCI システムの利用者のすそ野の拡大や産業利用の加速に対する貢献が期待されるものであり、今後も HPCI の重要な計算資源の一つとして位置付け、必要な措置を実施すべきである。

「京」の時代には、プリ・ポスト処理、可視化の計算資源（ソフトウェア資源を含む）の重要性が指摘されたが、このような資源に関しては本格的な整備には至っていない。今後、AI やデータ科学などの新たな潮流なども踏まえて、設備整備の方針を改めて検討していく必要がある。特に、スパコンで計算されたすべてのデータを一旦貯蔵し、後処理により機械学習などのデータ処理を実施していくことには限界があると考えられる。計算と同時にデータを処理し、必要な情報を取得する、いわゆる「ストリーム」処理の重要性が今後、高くなることが予想される。そのような処理に対する可視化装置の必要性も含めて、改めて検討する必要がある。

4.2 HPCI システムで利用されるソフトウェア

本節では HPCI システムで利用されるソフトウェアの種類を確認するとともに、その開発や整備の在り方についての基本的な考え方を整理する。システムソフトウェアやソフトウェアツールに関しては、クラウド利用のための基盤となるソフトウェアや AI 応用などの新しい潮流を鑑みた場合に重要となるコンテナ技術の基盤となるツール群なども含めてソフトウェアの整備の在り方に関して言及する。重点課題プロジェクトや「富岳」成果創出加速プログラム等の、アプリケーション・ソフトウェアの研究開発・実証研究に関する国プロの実施について、HPCI のソフトウェアの整備・維持・普及の観点からもその在り方についても言及する。また、利用者が多いオープン・ソース・ソフトウェアの整備の在り方についても検討する。さらに、HPCI システムの産業利用を一層促進させ、それにより、我が国の産業競争力の強化を図るために、商用のアプリケーション・ソフトウェアの整備の在り方について検討し、基本的な考え方を明確にする。

(ア) システムソフトウェア

「富岳」では、OS として Linux を用いて、Fujitsu MPI、MPICH 等や、Fortran、C、C++、OpenMP、Java などのコンパイラ、Python 等のスクリプト言語が準備されている。また、第二階層計算資源では各情報基盤センター等のポリシーに従ってこれらのシステムソフトウェアが整備されている。これらのソフトウェアの整備・運用に関してはシステム（スパコン）開発時に十分な検討を行い、基本的にはハードウェアの開発経費や設備整備経費の一部として予算措置されるべきものであるが、時代の変化や利用者のニーズの変化に迅速に対応するために、登録機関および HPCI の運営事業の実施機関におい

て、フラッグシップ計算機「富岳」を含む HPCI システムに整備すべきシステムソフトウェアに関する要望を定期的に調査し、その結果に応じて運用主体や資源提供機関において、随時ソフトウェアの整備が進められることが望まれる。

(イ) ソフトウェアツール

ソフトウェアツール群に関しては「富岳」では、Lapack、EigenEXA 等の科学技術計算用ライブラリが準備されている。第二階層計算資源に関しては当該スパコンを設備整備している各情報基盤センター等の整備・運用ポリシーに従って、各種のソフトウェアツールが準備されている。(ア)と同様、これらのソフトウェアツールはハードウェアの設備整備の一環として整備されるものである。ただし、HPC の利用分野や利用者のすそ野の拡大のために、登録機関および HPCI の運営事業の実施機関において、これらのソフトウェアツールに関する要望を定期的に調査し、運用主体や資源提供機関が利用者のニーズが高いソフトウェアツールを随時インストールしていくことが望まれる。また、AI 応用などへの対応についても、同様にユーザの要望に応じて、運用主体や資源提供機関において、利用希望の高いソフトウェアをインストールしていくことが望まれる。

(ウ) 国プロで開発されるアプリケーション・ソフトウェア

重点課題プロジェクトの本格実施フェーズ（平成 28 年度（2016 年度）～令和元年度（2019 年度））においては、ハードウェアとソフトウェアの協同開発（コデザイン）によって、「富岳」において、最大で「京」の 100 倍のアプリケーション実効性能を実現することを目標にアプリケーション・ソフトウェアが開発された。コデザインの中では代表的な分野をカバーするアプリケーション 9 本（ターゲットアプリケーション）が選定され、その第一フェーズにより、ターゲットアプリケーションの詳細なプロファイリング結果に基づき、広範な分野において高い実効性能を発揮できるようなハードウェアの基本設計が実施された。ハードウェアの詳細設計が確定した後はシミュレータや「富岳共用前評価環境」を用いたアプリケーションの性能向上に向けた取り組みが実施された。「富岳」の共用開始よりも 1 年以上前の令和 2 年（2020 年）3 月現在、「京」の 100 倍以上の性能を発揮できるアプリケーションが既に複数本開発されるなど、コデザインにより大きな成果が得られ、「富岳」の共用開始と同時にその本格利用により卓越した成果が創出されることが期待されている。表 4 にコデザインにより開発されたアプリケーションの性能を示す。フラッグシップ計算機の開発は今後もコデザインにより実施すべきあり、そのためにもフラッグシップ計算機を独自に開発することは必須の条件となる。

上記のターゲットアプリケーションも含めて、フラッグシップ計算機で高性能を発揮するアプリケーション・ソフトウェアを研究者個人が独自に開発することは困難であり、プロジェクト体制で開発を実施すべきである。また、これら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でその性能や効果が検証されてはじめて開発の第一段階が終了する。したがって、これらのアプリケーション開発プロジェクトは単に、アプリケーションの開発に留まることなく、アプリケーション・ソフトウェアの性能や社会実装性を見極めた上で、フラッグシップ計算機上での実証研究を展開すべきである。さらには、**実証後の当該アプリケーションの維持・普及の在り方も含めた、長期的な観点からプロジェクトを設計して当該事業を実施すべきである。**本件に関して、重点課題プロジェクト等で開発されたアプリケーション・ソフトウェアは登録施設利用促進業務、あるいは HPCI の運営事業の一環として、高度情報科学技術研究機構により HPCI システムにプリインストールされ、HPCI システムの利用者に提供されている。

表 4 コデザインにより開発されたアプリケーションの「富岳」における性能

	アプリケーション	計算手法	対「京」性能向上比
重点課題①	GENESIS	分子動力学	125倍以上
重点課題②	Genomon	大容量データ解析	8倍以上
重点課題③	GAMERA	波動伝播の非構造・構造格子ステンシル複合の有限要素法	45倍以上
重点課題④	NICAM+LETKF	構造格子ステンシル有限体積法+局所アンサンブル変換カルマンフィルター法	120倍以上
重点課題⑤	NTChem	高精度分子軌道法（疎+密行列計算）	40倍以上
重点課題⑥	ADVENTURE	非構造格子・有限要素法、特に構造解析	35倍以上
重点課題⑦	RSDFT	密度汎関数法（密行列計算）	30倍以上
重点課題⑧	FrontFlow/blue	熱流体の非構造格子・有限要素法	25倍以上
重点課題⑨	LQCD	構造格子経路積分モンテカルロ法	25倍以上

(エ) 商用アプリケーション・ソフトウェア

商用アプリケーション・ソフトウェアは、産業界で最も多く利用されており、フラッグシップ計算機「京」では、前掲の表 1 に示したとおり、構造解析分野で利用される LS-DYNA、流体解析分野で利用される NuFD/FrontFlowRed、物性物理分野で利用される VASP、分子化学分野で利用される J-OCTA、AMBER 等が利用された。技術的・知的財産権的な観点から、商用アプリケーション・ソフトウェアを他の計算機に移植するためには、開発者やソフトウェアベンダーの協力が必須となる。登録機関や HPCI の運営事業の実施者が商用アプリケーション・ソフトウェアに関するユーザーニーズを調査し、その結果に基づき、フラッグシップ計算機の運用主体や第二階層計算資源を供出している大学情報基盤センター等は、当該ソフトウェアがユーザに提供されるように配慮することが望ましい。上述の理由により、**フラッグシップ計算機や大学情報基盤センター等のスパコンに対する商用アプリケーション・ソフトウェアの移植作業はソフトウェアの開発**

者（あるいは、ソフトウェアベンダー等）が行うことになるが、それを加速するための取り組みを、国からの適切な支援策の下、フラッグシップ計算機や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実施することが望まれる。

(オ) オープン・ソースのアプリケーション・ソフトウェア

オープン・ソースのアプリケーション・ソフトウェア（以下、オープン・ソース・ソフトウェア）は、ソースコードを公開し、自由な再配付や派生物の作成を認め、多数の有志が開発、検証、サポートを行うことで透明性の保証、開発や知識共有のスピードアップが図られている。CAE 分野の OpenFOAM、材料系分野の Quantum ESPRESSO など、オープン・ソース・ソフトウェアは海外で開発されたものが多い。前掲の表 1 に示したように、「京」においても多くの利用者がオープン・ソース・ソフトウェアを利用したことがわかる。今後も、HPCI の運営事業の一環として、フラッグシップ計算機や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のスパコンに、特に利用希望が多いオープン・ソース・ソフトウェアを整備（プリインストール）していくべきである。オープン・ソース・ソフトウェアは我が国のみならず世界中で広く利用されていることを考えると、多くのオープン・ソース・ソフトウェアが整備された HPCI を構築していくことは、HPCI の国際的な利用拡大に貢献していくことも期待され、ひいては、HPCI の国際的なプレゼンスの向上をもたらす。

(カ) 利用者（利用する機関）自らが開発したアプリケーション・ソフトウェア

本項で言及するアプリケーション・ソフトウェアは、利用者（利用する機関）自らが開発したものであり、当該利用者の責任の下、（必要に応じて）ソフトウェアの維持や普及を実施すべきである。ただし、このようなアプリケーション・ソフトウェアの中にも汎用性・機能性・高速性に優れたものがある可能性もあるため、登録機関等の責任において、ソフトウェアの利用状況を定期的に調査し、上記の条件に該当するアプリケーション・ソフトウェアに関しては、「(ウ) 国プロで開発されたアプリケーション・ソフトウェア」や「(オ) オープン・ソースのアプリケーション・ソフトウェア」と同様に、多くのユーザが利用できるような形に整備していくべきである。

フラッグシップ計算機に係わらず、スパコンの相対的な性能は年々低下していく。フラッグシップ計算機「京」は平成 23 年（2011 年）11 月、および平成 24 年（2012 年）6 月の性能ランキングでは世界最速のスパコンであったが、その共用が終了された令和元年（2019 年）8 月時点においては、「京」の 2 倍以上の性能に相当する計算資源が第二階層計算資源として HPCI に提供されている。したがって、フラッグシップ計算機はその共用開始直後から大きな成果が創出できるように、商用アプリケーション・ソフトウェアも含めて早期にアプリケーションの利用環境を整備しておくべきである。関連して、

平成 30 年（2018 年）6 月に文部科学省研究振興局長に手交された提言「フラッグシップ計算機停止期間における HPCI の資源提供の在り方とポスト「京」への移行に関する提言」にもあるように、フラッグシップ計算機へのアプリケーションの移植がスムーズに行える体制を構築しておく必要があると言及されている。

第 5 章 HPCI 利用課題の実施の在り方

本報告書ではこれまで、HPCI を構築整備し、それを運用することにより達成しようとしている目標、すなわち、将来ビジョンを明確にした後（第 2 章）、7 年あまりの間における運用実績とそれにより得られた成果や顕在化した課題に関して検証した（第 3 章）。次いで、その結果も踏まえて、今後の HPCI の開発・整備・運用の在り方に関して検討した結果を報告した（第 4 章）。言うまでもなく、HPCI の成果は研究課題を実施することにより創出される。そこで、本報告書の最後に本章では、HPCI でどのように研究課題を実施していくべきか、という点に関して検討した結果を報告する。

5.1 利用課題に関する基本的な考え方

「2.1 HPCI が達成しようとしているビジョン」に記載したとおり、HPCI がその構築・運用を通じて達成しようとしているビジョンは、多様なユーザーニーズに応えることができる、世界最高水準の計算機環境を提供することにより、画期的な研究成果を創出し、科学技術の発展や産業競争力強化に資するとともに、人材の育成やスパコン利用の裾野の拡大に貢献することである。したがって、HPCI では基本的に優れた研究課題が実施され、また、その成果は原則的に公開されるべきである。HPCI はフラッグシップ計算機、および第二階層計算資源により構成されている。これらは相補的に機能するものであるが、第 4 章において言及したとおり、二つの計算資源は設備整備の仕方や計算機の特徴も異なるため、本報告書ではまずそれぞれの計算資源ごとに、利用課題に関する基本的な考え方に関して言及する。

5.2 フラッグシップ計算機における実施課題

フラッグシップ計算機「京」には、一般利用枠（45%程度）、ポスト「京」研究開発枠（40%程度）、京調整高度化枠（15%程度）、成果創出加速枠（100%の枠外）、重点化促進枠（100%の枠外、上限 10%）のそれぞれの利用枠が設定され、共用に供された。一般利用枠では、一般課題（トライアル・ユース、競争的資金等獲得課題を含む）、若手人材育成課題、産業利用課題（トライアル・ユース、実証利用、個別利用、ASP 事業実証利用を含む）が実施された。これらの課題のうち、競争的資金等獲得課題（成果公開課題）、個別利用の産業利用課題、および ASP 事業実証利用の産業利用課題（いずれも成果非公開課題）は有償課題とされ、残りの全ての課題は無償課題として実施された。

京調整高度化枠以外の利用枠において実施される全ての利用課題は、a. 科学的に卓越した課題であるか、社会的に意義の高い課題であるか、ブレークスルーが期待できる課題であるか、b. 大規模計算機のリソースを真に必要としているか、c. ソフトウェアの効率性（並列性）、計算処理、データ収集、結果の解析等が既に十分検証済されているか、という点を選定基準として課題審査と審査結果に基づく課題の選定が行われた。

一方、「富岳」の利用については、HPCI 計画推進委員会の下に設置された、「ポスト『京』の利活用促進・成果創出加速に関するワーキンググループ」（平成 30 年（2018 年）11 月～平成 31 年（2019 年）4 月）において議論され、その最終報告書には、

- ① 一般利用枠（40%程度）
- ② 産業利用枠（10%程度）
- ③ 成果創出加速枠（40%程度）
- ④ 調整・高度化・利用拡大枠（うち、高度化・利用拡大枠は 10%程度）
- ⑤ 政策対応枠（100%の枠外で実施）

の 5 つの利用枠が設定されている。これらの利用枠の内、④ 調整・高度化・利用拡大枠は、安定運転のためのシステム調整に必要な取り組み、「富岳」の利用の高度化に資する研究、および利用支援やユーザ拡大のための取り組みを実施するために設けられたものであり、フラッグシップ計算機「富岳」の開発・運用主体である理化学研究所計算科学研究センターにより、その計算資源は運用されることになっている。また、⑤ 政策対応枠は、宇宙開発など国家的に重要度の高い課題や災害対策など緊急性が求められる課題などを総資源の枠外において実施することが認められている計算資源である。これらの利用枠を除く①～③の利用枠内で実施される課題に関しては、基本的には上記の「京」と同様な観点から利用課題の審査と選定が行われるべきであるが、第 3 章において言及した、「京」の運用成果や顕在化した課題にも鑑み、以下の点も考慮して利用課題の審査と選定を実施すべきである。

フラッグシップ計算機は、大規模な予算措置を行って開発・整備し、共用に供している、世界的に見ても卓越した性能を有するスパコンである。したがって、フラッグシップ計算機は基本的には他の計算機では実施できない研究開発に利用され、フラッグシップ計算機上では、科学技術の発展や産業競争力の強化などに対して大きな寄与が期待される課題が実施されるべきである。具体的には、数千ノード以上の大規模な超並列計算（Capability Computing）や、1 ケースの計算規模は大きくはないが、データ同化計算や設計最適化計算のように、実行するケース数は数 10 から数千に及ぶような超多ケースの計算（Capacity Computing）などが想定される。

また、海外の著名な研究機関とレベルの高い共同研究を実施することにより、大きな成果を創出することもフラッグシップ計算機に期待される重要なミッションであり、このようなことが積極的に進められるような課題の選定をすべきである。

一方、国費により開発・整備された研究基盤施設はその利用に関心を持つ、多くのユーザに対して開かれた利用を促進すべきであるが、3.3 節において言及したように、「京」の課題実施においては新規利用者数の増大が限定的なものに留まるという問題も顕在化した。フラッグシップ計算機の利用に興味を持つ、より多くの利用者に対してその利用を拡大できるような課題の審査と選定を実施すべきである。利用研究課題に応募する時点ではフラッグシップ計算機の利用課題の審査に関する観点に必ずしも合致しない課題であっても、フラッグシップ計算機の利用拡大に繋がり、将来的には科学技術の発展・振興に寄与することが期待される課題を積極的に選定すべきである。たとえば、利用者自らが比較的容易にアプリケーション・ソフトウェアの調整や利用効果に関する情報を取得するための試行的な利用課題（トライアル・ユース課題）、必ずしも前記の条件に合致しない、比較的小規模の計算の実施を目的とした有償の利用課題などを実施することも検討すべきである。フラッグシップ計算機の計算資源の内の一定量に関しては、課題の応募を随時受け付け、1 週間から 2 週間程度の短期間の簡略化された審査により、上記のような利用課題を選定することも検討すべきである。その際、ユーザの利用の利便性を向上させるために、ユーザが必要なときに必要な量の高い処理能力を持った計算資源を提供する HPC クラウド的な利用を前提とした課題の実施も併せて検討すべきである。これらのことを踏まえた基準のもとで、利用課題の審査と選定は行われるべきである。なお、フラッグシップ計算機を含めた、HPCI 研究課題の利用料金に関する基本的な考え方に関しては 5.5 節において言及する。

5.3 第二階層計算資源における実施課題

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ことを踏まえ、実施される利用課題に関しては、HPCI の新規利用分野の開拓や利用者の裾野拡大に対する貢献度も重要な観点として、課題審査と審査結果に基づく課題選定を実施すべきである。たとえば、HPC と AI を応用したデータ科学を高度に融合した、経済情勢のリアルタイム予測を目的とする利用研究課題、気象衛星による観測データのリアルタイム入力による、局所的な降雨予報（線状降水帯の予報）の実現可能性を検証する課題、あるいは、超大規模データのストリーミングな可視化手法を研究開発することを目的とした課題などを積極的に選定すべきである。

5.4 産業利用に関する基本的な考え方

「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-」(HPCI

準備段階コンソーシアム、平成 24 年（2012 年）1 月）において、HPCI の産業利用に関して、「共用計算資源が産業利用に役立つことを広く産業界の理解につなげ、ユーザ開拓など産業利用の促進につなげる、実証利用に重点をおいて運用をする。」と言及されている。また、「産業界も含めてオールジャパン体制で HPCI の発展並びに普及促進を行うためには、産業界ユーザといえども、それに資するような情報を提供すべきであり、その観点から、成果は公開を原則とすべきである。」とも言及されている。このことを踏まえて、次のような審査基準の下に、利用課題の選定が行われた。すなわち、①自社内では実施できない解析規模や難易度の課題であること、②産業応用の出口戦略が明確な課題であること、③産業利用の開拓に向けた波及効果（社会への貢献）が十分期待できる課題であること、を基準に利用課題が選定されてきた。

2.1 節で言及した HPCI の達成すべきビジョンを踏まえ、フラッグシップ計算機を含めた今後の HPCI 計算資源の産業利用に関しても、優れた「研究開発」のために利用されるべきである。5.2 節において言及したように、フラッグシップ計算機の利用拡大や HPCI の産業利用を進めるために、HPC クラウドを介した利用課題の実施や ASP 実証研究課題の実施なども進めるべきであるが、このような場合も基本的にはフラッグシップ計算機を含めて HPCI は研究開発のために利用するということが大原則になる。ただし、「研究開発」の定義自体に関しては時代の変化に応じて、適切な定義づけが行われるべきである。

前述のとおり、HPCI の産業利用を進める目的は、スパコンの産業利用上の効果に関する認識が産業界で共有されることによる、産業界におけるスパコンの利用を加速することであり、我が国の国際的な産業競争力の強化を図ることにある。同時に、スパコンの産業利用が進めば、フラッグシップ計算機の開発・利用により得られた製品・サービスが広く普及することに繋がり、我が国のスパコン技術が全体的・相乗的に向上していくことも期待される。

フラッグシップ計算機を始めとした HPCI における産業利用課題の選定にあたっては、このような貢献が期待される課題が選定されるべきであり、そのような選定が可能な体制を構築すべきである。

また、フラッグシップ計算機を含む HPCI の計算資源は研究開発のために利用されるべきであるが、一方で、HPCI で開発され、実証されたアプリケーション・ソフトウェアが産業界で広く普及していくことも重要である。そのためには、開発・実証・普及がスムーズに進んでいくような枠組みを構築していくことが重要となる。特に、HPCI システム上で開発されたアプリケーションを HPCI 以外のシステムでも利用できるように移

植を進めていく必要があるが、技術的観点、また、知的財産権の問題も含めて、これを
実現できるシステムを構築していくべきである。

5.5 HPCIの利用料金に関する基本的な考え方

第二階層計算資源として提供されている大学情報基盤センター等のスパコンの利用
課題の一覧を表5(抜粋)に示す。これらの利用課題は備考欄に無償と記載された、公
募により選定される特別な利用課題を除いて全て有償の利用課題である。利用者から徴
収された計算機利用料金は電気代などのスパコンの運用経費に充当されている。一方、
フラッグシップ計算機を中核とするHPCIにより達成しようとしている目的は、従来は
達成できなかった革新的な成果の創出を図ることにある。この目的を達成するために、
HPCIの利用課題の内、産業利用課題も含めて、特に優れた課題の利用料金は補助金等の
国費により充当されるべきである。また、フラッグシップ計算機の利用に供するアプリ
ケーション・ソフトウェアの開発には高度な能力を有した研究者や技術者が必要になり、
さらに、フラッグシップ計算機を利用した大規模な実証研究にも相当な研究費が必要に
なる。このことも踏まえると、アプリケーション・ソフトウェアの開発やその実証研究
も適切に計画された国の事業として実施されるべきである。その際、アプリケーション・
ソフトウェアの開発・実証後の整備も当該事業の一環として検討すべきであり、たとえ
ば、登録機関やHPCIの運営事業の実施者がアプリケーション・ソフトウェアの開発や
その実証研究の段階から関与することより、国プロで開発されたアプリケーション・ソ
フトウェアの整備がより効率的に進められるようにすべきである。

一方、フラッグシップ計算機の利用は多くのユーザに対して開かれたものである
べきであり、5.2節に言及したような、比較的小規模な計算を実施すること目的とした課
題などは、情報基盤センター等の利用料金も参考にした上で、適切な利用料金が設定さ
れた、有償の課題として実施されるべきである。また、産業利用の拡大を図るために、
成果の公開を義務付けなかったり、一定の期間、成果の公開を延期することを認めたり
する有償の課題も設定すべきである。さらに、これらの有償利用課題に関しては、フラ
ッグシップ計算機の筐体毎の占有利用を認めたり、計算機の繁忙期においても短時間以
内に計算が実行されることを保証したりする課題なども検討すべきである。

フラッグシップ計算機を開発・整備し、運用する目的は、前述のように科学的・社
会的に画期的な成果を創出し、運用等に掛かる経費を回収することが目的ではないこと
は自明である。しかしながら、フラッグシップ計算機の運用には相当の運営経費が必要
となり、運用開始から終了までの間には、開発・整備に要する経費に相当する、あるい
は、それ以上の経費が必要となる。そのため、上記のような有償の課題利用が拡大する
ことは、より幅広いユーザ層に対する利用の拡大に加えて、フラッグシップ計算機を含

めた HPCI 計画の安定的・持続的な推進にも繋がることを期待される。

表 5 情報基盤センター等のスパコンの利用課題（一部抜粋）

			最大並列実行ノード数	備考
東大	Oakbridge-CX	一般利用	256	
		教育利用	16	無償、演習用
		企業利用	256	
		若手・女性利用	256	無償、審査あり
		大規模HPCチャレンジ	1,280	無償、1か月に1回23時間占有利用
	Oakforest-PACS	一般利用	2,048	
		教育利用	8	無償、演習用
		企業利用	2,048	
		若手・女性利用	2,048	無償
		大規模HPCチャレンジ	8,208	無償、1か月に1回21時間占有利用
九大	ITO（共有）	一般利用	256	
		民間利用	256	
		先端的計算科学研究プロジェクト	256	無償、審査あり
名大	FX100		864	通常ジョブクラスで提供
			2,592	事前予約制のジョブクラスで提供
東北大	SX-ACE	学術利用	1,024	
		民間企業利用	1,024	

5.6 利用者支援について

フラッグシップ計算機のような最先端の大型研究施設は、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」（以下、共用法）により運営される。共用法第八条第1項において、当該設備の利用者選定業務と同様に、文部科学大臣は利用支援業務の全部または一部を登録機関に行わせることができると定められている。また、これまではフラッグシップ計算機「京」以外の HPCI 計算資源（第二階層計算資源）の利用者選定業務および利用者支援業務も業務遂行上の効率性の観点から、登録機関に選定された高度情報科学技術研究機構が HPCI の運営事業の一環として、前記のフラッグシップ計算機の利用者選定および利用支援業務と一元的に実施してきた。

HPCI の利用者に対する適切な情報提供に加えて、ソフトウェアの高度化支援とソフトウェアの整備・利用促進事業が利用者支援の柱になる。HPCI の利用拡大を図るためには、HPCI の利用者支援は必須のことと考えられ、HPCI の運営事業の一環として継続すべきである。ソフトウェアの整備に関しては、各分野のコミュニティの特性にも十分に

配慮してこれを実施すべきであり、また、コミュニティの協力なくしてアプリケーション・ソフトウェアの整備事業は進まない。その意味では、各分野におけるコミュニティ活動の維持・強化も含めて、支援事業の在り方を検討していくべきである。また、将来的にはこのようなソフトウェアの整備事業は、一過性の事業として実施されるのではなく、恒久的な（長期的な）事業として実施されるように、事業の実施の在り方を検討すべきである。その際、これまで実施してきた利用者支援事業の成果やその効率性などを十分に検証した上で、有償による利用者支援なども含めて今後の支援事業を実施すべきである。たとえば、利用者自らが開発したアプリケーション・ソフトウェアをフラッグシップ計算機や第二階層計算資源にインストールしたり、これらのスパコンに対して最適化したりする、有償によるサービスを提供するなど、利用者支援事業の具体的な在り方に関しては改めて詳細な事業設計をすべきである。

第6章 後書き

本報告書は HPCI 計画推進委員会における決定を受けて、HPCI の運営事業の実施機関の一つである、高度情報科学技術研究機構の下に設置された、「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、HPCI コンソーシアムが中心となり、調査・検討した結果を取り纏めたものである。

本報告書を取り纏めるにあたり、フラッグシップ計算機の開発・運用主体である理化学研究所や HPCI の運営事業の実施機関である高度情報科学技術研究機構などの関係機関にヒアリングしたり、「京」の中間評価結果を改めて精査したりすることにより、これまでの7年間あまりの HPCI の運用実績やそれにより得られた成果、および顕在化した課題を検証した。本報告書は、それらの結果に基づいて、「富岳」の運用開始が早ければ約1年後に迫っている中で、今後の HPCI の構築とその利用に関する基本的な考え方を纏めたものであり、これからの HPCI の推進に対して、重要度の高いものである。

本報告書ではフラッグシップ計算機の最も重要な役割として、超大規模な計算が実施できる環境を多様なユーザに対して提供することにあると定義し、その定義に基づいたフラッグシップ計算機の開発・利用の在り方に関して言及した。今後の計算科学や計算機科学、さらに、人工知能やデータ科学の発展に伴い、フラッグシップ計算機のミッションやそれを達成するための開発の在り方に変化が生じていくことも考えられる。そのことに関連して、フラッグシップ計算機よりも小規模なスパコンであるが、総体として常に、時代の最新鋭、かつ、多様なスパコン群である第二階層計算資源の運用成果が、将来のフラッグシップ計算機の在り方を検討するための貴重な知見を与える。その際、ハードウェアの開発の在り方だけではなく、そこで稼働するアプリケーション・ソフトウェアの開発に関しても十分な検討が実施されるべきであることを付記する。今後

も世の中の変化や HPCI の運用実績や成果などを定期的に自己検証し、HPCI の持続的発展に繋げていく必要がある。

【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

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 健次朗	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）付、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

令和元年（2019年）7月3日（水） 第40回 HPCI 計画推進委員会

・ HPCI コンソーシアムにおいて検討することを決定

令和元年（2019年）7月4日（木） HPCI コンソーシアム理事会

・ 報告書の目次・論点（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」）において検討することを決定

令和元年（2019年）7月8日（月） 第9回調査検討 WG

・ 報告書の目次・論点（案）に基づいて議論

令和元年（2019年）9月30日（月） 第10回調査検討 WG

・ 理化学研究所、高度情報科学技術研究機構よりヒアリング

令和元年（2019年）9月30日（月） HPCI コンソーシアム理事会

・ 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（案）の確認

令和元年（2019年）10月25日（金） 第11回調査検討WG

- ・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関する討論

令和元年（2019年）11月15日（金） 第12回調査検討WG

- ・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関する討論

令和元年（2019年）12月25日（水） 第13回調査検討WG

- ・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関する討論

令和元年（2019年）12月26日（木） HPCIコンソーシアム理事会

- ・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（案）の確認

令和2年（2020年）1月27日（月） 意見交換会

令和2年（2020年）2月20日（木） 第14回調査検討WG

- ・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関する討論

令和2年（2020年）2月28日（金） 第42回HPCI計画推進委員会

- ・報告