

【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（案）

HPCIコンソーシアム理事長

朴泰祐

2022/5/13

提言（案）の位置づけ

令和3年：「【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」（人材育成について多く議論した）

に続き、計算科学・計算機科学コミュニティからの意見や議論

- HPCIシステムの今後の運営の在り方に関する調査検討WG（計7回）
- HPCIコンソーシアム意見交換会（R4.3.4）
- 「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会（R4.3.14-15）

をもとに

- 「富岳」成果創出加速プログラム（2章）
- HPCIエコシステム（3章）
- 次期フラッグシップ計算機（4章）

に関して調査・検討を行い、その結果をまとめた。

2. 「富岳」成果創出加速プログラム

- HPCI戦略プログラム（124.1億円）、ポスト「京」重点課題（109.8億円）からの**大幅な予算削減**（令和2年度は9.0億円、令和3年度は10.9億円）
- **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**
- **長期的には人材育成・教育活動への投資が不十分**
- 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の低下、計算科学ひいては基礎科学の衰退、世界に対する研究競争力、産業競争力の低下
- 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

- 大幅な予算削減により、「富岳」が稼働して研究が本格化した段階で貴重な人材（若手研究者）を失った課題もある。
- 「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）が必要である。
- 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、これまでもフラッグシップ計算機開発プロジェクトで行われて来たが、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。
- **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序に困難である。
- 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 (1/2)

- 全体的に課題の規模が小さくなったことによるメリットもあったが、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。
- 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た。
- 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、比較的まとまったグループで研究開発を実施する場合は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。

2.2 課題実施体制（2/2）

- 現状で、**短期的な成果が求められる「富岳」成果創出加速プログラムしかない状態**では、**最重要な科学的・社会的成果を継続して創出することは困難である。**
- 「富岳」の**成果最大化のためには、今後数年間に渡って「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。**

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。
- 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。
- 第1期課題群の前半は「富岳」が本格的な共用を開始する前であったため、システム上の細かい問題の洗い出しにもつながるという副産物もあった。
- 第1期、第2期を含む全ての課題に対して、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。

2.4 「富岳」運用への要望

- 「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。「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継続的に必要**である。
- 「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り、**「富岳」のストレージ容量の拡大**を初め、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」における全系規模の超大規模解析と、第2階層計算資源における大規模解析とでは、大規模大量データの取り扱いの困難さによるギャップが大きく、**大規模解析を支える周辺技術の高性能化**も必要である。「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におけるSociety5.0の実現、持続可能な社会への変革等に対して「富岳」を中心としたHPCIが非常に重要な役割を担うことが期待されており、**重要な国家基盤として適切な予算を配分**すべきである。
- **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）**を確立することが求められている。
- 前述した**重点化政策に対するHPCIを活用した具体的な事業**を積極的に提案する。
- 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する。
- **企業からの投資**を呼び込むための施策を実施する。
 - 産業界へのアプリケーションの普及のためには、アプリケーション・ソフトウェアの**サポートを行う企業の育成**が必要。

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（1/2）

- 「京」「富岳」での経験を踏まえ、**世界共通的に使われるOSSへの対応**も含め、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**継続的に利用できる事**への配慮が必要。
- OSS等が実行可能な汎用性を確保しつつ、圧倒的な性能を実現するためには、**我が国独自技術の利用**と必要に応じてOSSなど**コモディティ技術の積極的な活用**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（LLVMなど）の採用を積極的に検討すべきである。
- 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。

4.1 独自技術とコモディティ技術 (2/2)

- 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、この様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 (1/2)

- 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。
- 「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出せるように汎用的なシステムが開発されてきた。
- 従来の延長線での性能向上の限界が見えてきたため、これまでの様に引き続き性能向上を求めるなら、この様なアーキテクチャでしか実現できないと言った検討結果（**アーキテクチャ・ドリブン**）が示されている。

4.2 目指すべき方向性 (2/2)

- 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) での取り組みが極めて重要**となる。
- 協調設計を突き詰めると、**各アプリケーション・ソフトウェアの専用機**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**。
- 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協調設計が従来以上に重要となる。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とアプリケーション・ソフトウェアの特性が合致するかどうかで決まるため、**計算機との相性**がある。
- 「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、それも限界に近付いている。
- 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、アルゴリズムを見直すなど特性を変化させ、**計算機選択の幅を広げる**ことが求められている。

4.4 フラッグシップ計算機と第2階層計算機

- 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。
- 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に対応すべき**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。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。
- 「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基より、**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。
- 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

- 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2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。