

「HPCI システムの今後の在り方」に関する調査検討について

令和4年度報告書

令和5年5月19日

一般社団法人 HPCI コンソーシアム

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

目次

1. はじめに.....	3
2. 文部科学省「次世代計算基盤に係る調査研究」のシステム調査検討への要望.....	3
2.1 協調設計ならびにアプリケーション・ソフトウェアと計算機の適合性.....	4
2.2 AI・データサイエンスへの活用や産業利用.....	7
2.3 目指すべき方向性の実現に向けて（開発の継続性、人材育成を含む）.....	9
3. HPCI の成果最大化に向けて来年度の調査検討 WG で検討すべき課題.....	10
3.1 HPCI システムの定義.....	10
3.2 HPCI のシームレス化.....	10
3.3 HPCI の優位性・独自性.....	11
3.4 人材育成・分野振興・ユーザー層の拡大.....	11
4. あとがき.....	12
付録.....	13
調査検討 WG 委員リスト.....	13
検討の記録.....	14

1. はじめに

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）や大規模共用ストレージ等を高速ネットワークで接続したインフラであり、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・計算機科学の振興と、企業等の利用を通してその成果の社会展開に貢献してきた。また、HPCIの中心的な存在であるフラッグシップ計算機として「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はじめとした戦略的活用により様々な成果が創出されている。

その様な状況の下、HPCIコンソーシアムと「HPCIの運営」代表機関である高度情報科学技術研究機構は連携して「HPCIシステムの今後の在り方に関する調査検討ワーキンググループ」（以後、調査検討WG）を設置し、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HPCIによる成果を最大化するためのシステム構成や制度のあり方などについて調査・検討を進めている。

本報告は、「HPCIシステムの今後の在り方」に関する調査検討として令和4年度に実施された検討にもとづき、（1）文部科学省「次世代計算基盤に係る調査研究」のシステム調査検討への要望、（2）HPCIの成果最大化に向けて来年度の調査検討WGで検討すべき課題について、令和5年度の提言書にむけた中間報告として取りまとめたものである。

2. 文部科学省「次世代計算基盤に係る調査研究」のシステム調査検討への要望

HPCIコンソーシアムでは、R4年6月に【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」を発出しており、次期フラッグシップ計算機の開発に関する議論・提言を述べている。その最後で、以下のようにFeasibility Study（FS）に対して提言している。

「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（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。」

この提言の方向性とも調和する形で、令和4年度からALL-Japan的な体制のシステム調査検討のFSが複数立ち上がり、令和6年度までの予定で包括的な調査検討が進行中である。本WGでは、HPCIコンソーシアムとして発出してきた提言のもと、次期フラッグシップ計算機をはじめ、次世代計算基盤が科学的・社会的課題解決に最大限活用されるものになるた

めに、FS で調査検討頂きたい課題をユーザー側の視点から検討してきた。ここではその中で重点的に取り上げて検討した以下の項目について報告する。

- ・協調設計ならびにアプリケーション・ソフトウェアと計算機の適合性
- ・AI・データサイエンスへの活用や産業利用
- ・目指すべき方向性の実現に向けて（開発の継続性、人材育成を含む）

2.1 協調設計ならびにアプリケーション・ソフトウェアと計算機の適合性

より重点的に検討した項目として、第一に協調設計(Co-design)を取り上げる。先の提言でも、ムーアの法則の破綻により、演算性能・メモリ性能を含め、汎用 CPU だけを用いた従来の延長線では、これまでのようなシステムの飛躍的な性能向上が望めないことが懸念されていることから、より協調設計の重要性が増すとされている。本 WG では、今後どのような協調設計が望ましいかを考える上で、「富岳」で進められた協調設計の良かった点、改善すべき点を掘り下げておくことが重要であると考え、協調設計を実際に進める立場にあった方々（システム、ソフトウェアそれぞれ）からヒアリングを行い、議論した。またその結果を踏まえて、システム調査検討 FS の代表の方々からもヒアリングを行うとともに、HPCI コンソーシアムでの意見交換、WG での議論を行った。

良かった点としては、協調設計が進められている間については、ターゲットとなったアプリケーション開発者と開発メーカーや理研のソフトウェア開発チーム等とのハード・システムに関するかなり密接な連携（性能最適化の方法が「京」とは変わったことに対応するためのコンパイラの開発等を含む）が行われるとともに、実際のハードウェアがまだない段階から、使い勝手の良い評価ツールを活用しつつ、アプリケーションの改良・最適化が進められたことが挙げられる。その結果として、目標となっていた「京」の 100 倍の性能向上を一部のターゲットアプリで達成するとともに、すべてのターゲットアプリで数十倍の性能向上を達成することができた。それらのターゲットアプリの中には、その後「富岳」を用いた大規模計算でゴードンベル賞ファイナリストに選ばれたものも複数あり、また、「富岳」成果創出プログラム等を通して社会的・科学的成果の創出にも貢献している。

一方で、共用開始後、ターゲットアプリ以外で性能が出にくいものがあることが報告され、協調設計によって一部のアプリケーションに特化されたのではといった指摘があった。システム調査検討 FS でも同様の課題が挙げられている。しかし、これは以下で述べる協調設計が抱えていた実際の課題とは別の部分が問題視されている懸念がある。より良い協調設計を実現するためには、実際の課題を明確にして、それを改善することが重要である。以下では、それらを踏まえて（1）システム開発、（2）アプリケーション・ソフトウェア開発、（3）アプリケーション・ソフトウェアと計算機の適合性の観点で報告する。

（1）システム開発

協調設計におけるシステム開発上の課題としては、協調設計が開始した時点で、すでにハードウェア設計上の自由度がある程度限られていたことが挙げられる。協調設計の下でア

アプリケーションにとって使いやすいハードウェア機構を加えたいと要望があった際、コストの問題や電力キャップの問題から、メーカーとの協議で不採用となるケースもあった。実際のハードウェアがない状態での設計選択の問題もある。例えば、物理レジスタを含む Out of Order 実行のリソースを増やすことでアプリケーション性能が出しやすいことは定量的に示されていたが、電力性能が実際にどうなるかがまだわからない段階でどこまで増やすかを決めなければならず、より安全側（電力消費を抑える側、アプリケーションから見れば性能が出にくい側）の選択をすることになった。最終的な電力性能から考えれば、より増やすこともできた可能性はあるが、決定段階では難しい選択だった。もしプロトタイプチップがあり、アプリケーション（カーネルだけでなく通信等も含む）を使って、より現実的な性能評価までできれば、適切な選択ができた可能性がある。このように、ハードウェアの設計上の制約から、必ずしもアプリケーション側からの要望とは合致せず、上記の様々な理由で断念せざるを得なかった項目もあったことは認識しておくべきことであろう。

以上のことから、設計の方向性の大枠が決まるよりも前の段階（つまり FS の段階）で、アプリケーション性能を向上するために満たすべき項目を整理して示し、それがハードウェア的に実現可能なものかの検討を進め、実際の設計の方向性に反映させるようにすることが望まれる。また、電力効率などの制約が厳しい中での適切な性能評価のためには、プロトタイプチップを製造して、その上で、通信等も含んだ様々なアプリケーションでのベンチマークテストを行えるかどうかを鍵を握ると考えられる。プロトタイプチップの製造は予算的に大きな負担になるが、実機での電力効率とアプリケーション性能や性能を出す効率に大きく影響すること、すなわち運用時点の成果に対するコストパフォーマンスに直結することを考えれば、検討すべき課題の一つとも考えられる。

（2）アプリケーション・ソフトウェア開発

アプリケーション・ソフトウェア開発については、協調設計段階よりもむしろ共用開始後の課題が見出された。協調設計をしている段階まではメーカー協力のもとでコンパイラやライブラリ等の開発・性能向上ができていた。一方共用開始後は、RIST による高度化支援によるチューニング等のサポートは行われたものの、協調設計時と同様のサポートという訳にはいかず、多様なアプリケーションに対して、ユーザーが性能を出すことは困難であった。また、協調設計をしている中で、ハードウェアの制約の下ではあったがアプリケーションの性能向上のための知見が様々に得られていたが、共用開始後のアプリケーション開発者にその知見が広く提供されたり、十分活用されたりしたとは残念ながら言えない。なお、協調設計の成功とされるターゲットアプリの性能目標達成は、コンパイラの開発やライブラリの最適化等によって、よりアプリケーションの性能が出しやすくなったことはあるものの、各アプリケーションの開発グループが、メーカーや理研のソフトウェア開発チーム等と密接に連携して、アーキテクチャの特性に合わせたチューニング（場合によってはアルゴリズムの大幅な変更を含む）を行なったことによることも明記しておく必要があると思われる。

以上のことから、アプリケーション性能を引き出すためのコンパイラの開発・改良や、アーキテクチャの特性に合わせたアプリケーション開発に対するサポートが、可能な限り様々なタイプのアプリケーションに対して行われるとともに、協調設計段階からはもちろんのこと、共用後にも継続して行われることが不可欠である。コンパイラ開発については、現在は HPC 業界全体がオープンソースコンパイラ LLVM に集約傾向にあることや理研 R-CCS でも LLVM ベースでメーカーのコンパイラ並みの機能を入れようと開発が進んでいることから、こうした取り組みを発展させていけば、アプリケーション性能を引き出すコンパイラの開発をコミュニティで継続的に実施できる可能性があり、FS でもこの取り組みを有効に活用し、発展させることが望まれる。アプリケーション開発については(3)で述べる。これらのためには、継続的なコンパイラの開発やアプリケーションの開発(アルゴリズムの検討を含む)の予算が、FS 実施段階から必要になると考える。

(3) アプリケーション・ソフトウェアと計算機の適合性

システム調査検討 FS 両代表へのヒアリングや意見交換会での説明で、どちらの FS でもアプリケーションの実行効率の向上のため、演算性能だけでなく、メモリ性能の向上(帯域性能の向上やレイテンシーの最小化等)が不可欠であるとの認識のもと、技術的な検討を徹底的に行っていることが示された。また、アプリケーション側でどのようなハードウェア性能が求められるかについても、FS のアプリケーショングループに参加する様々な分野のメンバーに対して、アンケートを行って情報収集を進めていることも紹介された。これに対して、WG としてこうした取り組みを支持すると同時に、こうした取り組みをより有効にするために、以下のような課題・要望が挙げられた。

技術的な検討は、ハードウェアの設計を行う上での制約条件(予算、電力、技術等)のもとでのトレードオフの中で進められるが、アプリケーション開発側から見ると、そのトレードオフの幅が、FS の段階である現時点でも、すでに限定されているように見える。例えば、メモリ容量(総容量だけでなく、ノード単位やコア単位でも)の制約などである。FS の段階では、まず、各ハードウェアの特性(演算性能、メモリ性能等)に対して、どのような制約条件からどのようなトレードオフがあるのかを、できるだけ広い範囲のパラメータに対して示されることが望ましい。その上で、それらのトレードオフが、様々な特性をもつアプリケーションに対してその特性を再検討しつつ、どのような性能の出し易さ・出しにくさに関係しているのかを網羅的に整理することが望まれる。その上で、設計段階で取捨選択された後には、トレードオフにおいて、どの選択が行われ、何が捨てられたのかを明確に示すとともに、アプリケーション側でそれを補うためにはどのような工夫が必要とされることになるかの性能向上指針が与えられることが望まれる。

メモリ容量の制約に対しては、FS 側からは、それが予算や電力によるものであり、もし増やすとしたら、どれだけ成果(科学的・社会的課題の解決)へのゲインが見込まれるのかをアプリケーション開発側が示すことの必要性が意見交換会で指摘された。様々なアプリケーションによって、次世代計算基盤でどのような成果が期待されるかは、メモリ性能要求の

アプリケーションに限らず、HPCI コンソーシアムの計算科学ロードマップで示す必要がある。本来は完成したものを FS に引き渡すべきではあるが、分野ごとに作成進捗のばらつきが大きく、全体取りまとめが遅れているのが現状である。今後、完成した分野から公開するとともに、FS のアプリケーショングループに参加しているメンバーとも協力して取りまとめしていく予定である。また、対象とするアプリケーションが限られていたことが、「富岳」での協調設計で課題となっていたこと、FS のアプリケーショングループが十分に分野を網羅できているとは限らないことから、HPCI ユーザーにも FS のアンケート対象を広げる等の工夫が望まれる。

社会的課題解決への貢献という意味では、産業界での活用が重要である。スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協）では HPC 技術の産業利用の観点でのロードマップの取りまとめ作業が進んでいるので、FS での活用が望まれるとともに、「京」や「富岳」向けに開発されてきたアプリケーションの中で産業界での利用実績の高いものについて、次期フラグシップ計算機でも性能を出すことが可能か、そのためにはアプリケーション側の開発・チューニング作業がどの程度必要か、評価することが望ましい。さらに計算規模等を考慮して第二階層にスムーズに移行できるかといった検討も併せて評価することが必要となろう。

2.2 AI・データサイエンスへの活用や産業利用

次世代計算基盤に求められている Society5.0 社会実現や社会的課題解決への貢献のためには、AI やデータサイエンス分野の研究者・技術者が享受しているクラウドでの使い勝手の良さ（ユーザビリティ）を持ちつつ、世界的にもまだ実現していない規模や速度で問題解決できるシステムは構築可能か、それをサービス関連等の産業利用にも活かせるかといった観点や、産業利用されている商用アプリケーションを次世代計算基盤でどう扱うかといった観点での議論も必要になる。FS においては、「エコシステム」をキーワードとして取り組まれている内容に深く関係している。

(1) AI・データサイエンスへの活用

AI・データサイエンスは一過性のブームではなく、データ駆動と AI 駆動の融合という形で今後ますます発展していく分野であり、すでに社会的に大きな影響を与える存在となっている。Society5.0 社会実現や社会的課題解決のために AI やデータサイエンスをどう活かすか、そこに次世代計算基盤がどう貢献できるかは、協調設計の議論と並んで大きな柱となるべき課題である。

まず重要なことは、AI やデータサイエンスを活用している人たちが現在享受しているクラウドでの使い勝手の良さ（ユーザビリティ）をいかに次世代計算基盤において実現するかという点がある。ここでは、計算機のアーキテクチャというよりも、OS や開発環境、ユーザーインターフェース等の開発・整備が課題となる。ユーザーが本当に求めている使い勝手の良さは何なのか、次世代計算基盤に望むユーザーインターフェイスやプログラミング環

境がどのようなものか、といったことを整理して、その早期実現可能性を議論することが必要である。こうした検討も FS で進められることが望まれる。

ユーザビリティを確保した上で、差別化をすることも不可欠である。ハードウェアとしての優位性を生かして、他では扱えない規模のデータを使って一度に学習できる機能やより複雑な問題を扱うことができるといったことなども必要となる。学習に用いる大規模データとしては、フラグシップ計算機で行った超大規模計算や多数回行った計算のアウトプット、外部にある大規模実験施設や IoT 技術を通して得られる研究室レベルでのデータも対象とできることが望まれる。また、新しい傾向として、サイエンスにおける第一原理計算を深層学習でエミュレートすることが広がっていることから、将来、大規模化したこうした研究対象でも利用可能な計算機であることも、優位性として挙げられる。このように、クラウドをはじめとするネットワークを基盤とした社会において、HPC がどのような役割を担えるかを明らかにすることが課題と言える。

(2) 産業利用

次世代計算基盤は、Society5.0 社会実現の担い手である産業界の国際競争力強化に貢献することが重要である。この観点で、産業利用は「京」の時代から重視されてきたが、「京」の時代と比べると、商用クラウドビジネスの普及や産業技術総合研究所が運用する ABCI 等、文部科学省以外の計算資源の産業利用制度の普及など、産業界が利用しうる計算環境が大きく変化している。このことを踏まえると、これまでの基礎研究や試行を主とした出口戦略を見直し、より実情にあった産業利用制度を設計する必要がある。また、産業界のシミュレーション技術の活用が、従来の構造・流体解析、医薬品を含めた物質・材料解析等からサービス産業等の新しい分野にも広がっていることを踏まえて、次世代計算基盤利用の制度設計においては、以下の観点での検討が必要である。

- これまでに「京」、「富岳」、第二階層システムなどの計算基盤を活用してきた分野でのさらなる活用施策の推進。現状の HPCI 基盤活用の経験を生かしシミュレーション技術による設計・解析が製品の研究開発において一般的になってきたことを踏まえて、これまでのアプリケーションが次世代計算基盤でも効率的に使えるのみならず、ソフトウェアの将来にわたる継続的な維持・発展の担保、各社の戦略に沿った計算資源（商用クラウドなど）へのスムーズな展開を可能とする技術・制度を整備する必要がある。
- AI・データサイエンスの急速な展開は産業構造そのものを変革しつつある。この産業化に対応できる技術・制度・仕組みとすることが望まれる。この分野では、企業が保有するデータの取り扱いが必要になることや、大規模シミュレーション結果をデータとして学習することが必要になってくること等から、計算基盤の視点のみならずデータ基盤の視点を取り入れることが要求される。

産業界においては国の計算基盤は産業界が活用する計算資源の一部であり、この観点からは、これまでは他の計算資源との相互運用性があまり検討されてこなかったが、次世代計算

基盤では柔軟な相互運用性を確保することが望まれる。

2.3 目指すべき方向性の実現に向けて（開発の継続性、人材育成を含む）

先の提言で、目指すべき方向性についての中で、「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。」としており、協調設計の重要性については 2.1 に述べた。「何を指して」という意味では、「中間取りまとめ」に書かれている通り、卓越した科学的な成果を出すことと、Society5.0 社会実現や産業競争力の強化等の社会的貢献ということになるが、そのために「どのような次期フラッグシップ計算機を開発するのかの議論や、その実現に向けた協調設計以外の観点として、開発の継続性や人材育成について取り上げる。

（1）どのような次期フラッグシップ計算機を開発するのか

提言には明記されていないが、WG では一昨年度以前からサブマシンやサブシステムの必要性についての議論があり、また意見交換会においても、一つの方式ですべてに対応するのは無理があるのではないかと、応用の用途や傾向に応じた複数のアーキテクチャを開発せざるを得ないのではといった意見も出されている。一方で、「京」や「富岳」でも FS の段階までは複数のアーキテクチャが検討されていたが、最終的には 1 台のフラッグシップ計算機になった経緯も踏まえる必要があるとのコメントがあった。ただし、検討されたアーキテクチャの一部の成果は第二階層に反映されているとも考えられる。

2.1 に述べたように、FS の段階では、複数のアーキテクチャに対して、多様なアプリケーションとの適合性を網羅的に整理することを要望している。また、2.2 に述べたように、AI 活用や産業利用の観点でのユーザビリティ実現のための OS や開発環境・インターフェイスの開発検討も FS に対して要望している。これらの検討から得られる知見にもとづいて、目指す方向性を実現するために、「次期フラッグシップ計算機」が 1 台でどこまでカバーできるか、サブマシンが必要になるか、第二階層まで含めてどのように役割分担することが必要になるかといった議論をしていくことが、フラッグシップ計算機を中心とした HPCI 全体のシステムとしての次世代計算基盤を検討する上で重要と考える。

（2）開発の継続性や人材育成

2.1 においてはコンパイラ開発の継続性、2.2 においては産業利用されているアプリケーションの開発の継続性について触れたが、WG（ヒアリングを含む）においては、国内での継続的なチップ開発の必要性、研究者によるスパコンアプリケーション開発の継続性、継続的なプロジェクトを通しての民間のアプリケーションエンジニアの技術継承、計算科学ロードマップ検討を含めた計算科学全体での世代交代による継続性など、様々な観点での継続性とそのための人材育成の必要性が指摘された。そのためには、開発メーカー、OS・コ

ンパイラ開発を行う研究グループ、スパコンアプリケーションを開発する研究グループ等が参画できる継続的な事業実施が不可欠である。これは、短期間で成果が求められる成果創出加速プログラムのような枠組みでは対応できず、むしろ FS やその後の設計段階のプロジェクトが、これらの役割を担えるように予算化するとともに、こうした役割を主体的に担える実施機関・体制にすることが望まれる。こうした継続的な活動の有無が、最終的に完成する次世代計算基盤の成果に対するコストパフォーマンスに大きく影響すると考えられる。

3. HPCI の成果最大化に向けて来年度の調査検討 WG で検討すべき課題

ここでは、HPCI の成果最大化に向けた HPCI システムの今後のあり方として、検討すべき課題について、WG や HPCI コンソーシアムの意見交換会で出てきた以下の観点を整理する。

- ・ HPCI システムの定義
- ・ シームレス化
- ・ HPCI の優位性・独自性
- ・ 人材育成・分野振興・ユーザー層の拡大

3.1 HPCI システムの定義

対象とするシステムの範囲を定義することの重要性が WG でまず指摘された。はじめに書いた通り、HPCI 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）や大規模共用ストレージ等を高速ネットワークで接続したインフラ」である。本 WG で今後のあり方を検討する対象は、「次世代計算基盤に係る調査研究」で対象としている、次世代の HPCI である。クラウドをはじめとするネットワークを基盤とした状況がさらに進むと考えられる次世代の社会において、HPCI がどのような役割を担えるかが課題であり、現在の HPCI の課題が何かといった議論やその対策を検討することは本 WG の主な目的ではない。また、現在は第二階層に資源提供していない機関も議論の対象となる。さらに、HPCI システムとしては、ハードウェアやそれを動かす OS 等だけでなく、その上で走るアプリケーションやユーザーコミュニティまでを含めた総体を対象として、その成果を最大化するためのあり方を検討する。ただし、議論をする際には、その全体のうちのどの部分が対象であるかを明確にすることが必要である。

3.2 HPCI のシームレス化

シームレスには様々な観点があると思われるが、2.2（1）で述べたように、次世代計算基盤を AI・データサイエンスに活用していくためには、これらを活用している人たちが現在享受しているクラウドでの使い勝手の良さを次世代計算基盤で実現する必要がある。つまり、システムのクラウド化が挙げられる。すでにクラウドシステムが普及しつつある現状

に対して、次世代計算基盤を AI・データサイエンスに活用していく際の差別化の観点で、フラグシップ計算機で行った超大規模計算や多数回計算のアウトプットを学習データとして活用できることや、外部にある大規模実験施設や IoT を通して得られる大規模データも学習の対象とできることが望まれることを 2.2 (1) で指摘した。これらはすなわち、HPCI の内部での大容量データのシームレスなやり取りと、HPCI の外部との大容量データのシームレスなやり取りということになる。クラウドでは、IoT からの入力からデータ解析までパッケージ化されているが、HPCI システムとしてそのような仕組みを構築できるか？そこを目指すのか？といったことが検討課題として挙げられる。また、こうした仕組みができた場合に、どのようなユースケースが考えられるかといった課題もある。さらに、オープンにできないデータを含む産業利用等に活かせるものにしていくためのセキュリティ等に関わる技術的な検討も課題である。

こうしたシームレス化を将来実現するための技術的な検討は、「次世代計算基盤に係る調査研究」の運用技術調査研究 FS において進められている。そこで、WG では令和 5 年度の早い時期にヒアリングを行う計画である。その際、アプリケーションのユースケースも FS の検討対象に加えることを提案する予定である。また、FS 以外の複数の機関でもデータや ID の連携可能性の議論が進んでおり、意見交換をすることが有益と考えられる。

3.3 HPCI の優位性・独自性

圧倒的な計算能力をもつフラグシップ計算機と多様なアーキテクチャを備えた第二階層計算機との組み合わせによって科学的・社会的課題を解決するということが、HPCI の第一義的な優位性・独自性であることは、次世代計算基盤においても変わらないと考える。圧倒的な計算能力の活用という観点で、ニューラルネットでの大規模な物理シミュレーションが実行できることが期待される。また、HPCI は共同事業であり、インフラやアプリケーションだけでなく、それを提供している技術力も共用し得る。技術力まで含めて共同研究等を実施することが優位性・独自性になり得る。すなわち次世代計算基盤が産学連携プラットフォームとなり、HPCI 外のシステムとシームレスの繋がる環境の実現は計算資源の活用のみならず、アカデミアの研究力の社会実装という面においても効果的である。一方、HPCI の多様性を活かす意味では、やりたいことを実現するためにどれを使うべきかを選べたり、それをサポートしたりする仕組み（人や AI）があってもよい。また、アプリケーションのベンチマークで HPCI の全アーキテクチャを一気に使えるような制度も考えられる。さらに、新計算原理調査研究 FS で検討されているような量子コンピューティング技術を、どのように次世代 HPCI システムに位置づけて活用できるかという観点もある。以上のようなことを含めて、さらに HPCI の優位性・独自性を検討課題として掘り下げる予定である。

3.4 人材育成・分野振興・ユーザー層の拡大

人材育成は、ハードウェア開発、ソフトウェア開発、アプリケーション開発、アプリケー

ション活用など、あらゆる面で必要となるが、特に、計算科学の各分野でのキャリアパスが人材育成での課題として大きいと考えられる。ソフトウェア・アプリケーションの実装・チューニングといったこの計算科学特有の技術に長けた人材の育成、評価、処遇がとくに課題である。2.3 で述べたような、様々な面で開発の継続性とそのための人材育成のためのプロジェクト等の取り組みが、次世代計算基盤の開発や HPCI システムの整備といったハードウェアやインフラへの投資と並行して行われていけば、その中で開発者のキャリアパスが見えてくることになることが期待される。もちろん、計算科学の各分野で、次の世代にとって魅力的な成果を出して、科学的あるいは社会的貢献をしていくことも不可欠である。なお、若手研究者を対象とした HPCI コンソーシアムの HPCI ソフトウェア賞の創設は一つの取り組みであるが、その賞がどうキャリアパスに結び付くかは今後の課題である。

計算科学の分野振興については、「京」時代の HPCI 戦略プログラムやその後のポスト「京」研究開発枠重点課題後は分野振興を含むプロジェクトがなく、分野別のコミュニティ活動が停滞している現状である。このことは計算科学ロードマップ活動への貢献が評価され難く、現状では協力するインセンティブがない状況である。また現在のプロジェクトの仕組みでは、有期雇用の研究者は専従義務があるため分野振興活動に関われないという制度的な課題もある。ただし、各学会などで分野としての取り組みは少しずつ出てきている。また、「富岳」での協調設計は、各ターゲットアプリについては比較的うまく進んだが、その一方で、そこで得られた様々な知見のアプリケーション間での共有や各分野への展開については、十分とは言えないとの指摘も挙がっている。アプリケーション間の横のつながりや各分野への広がりをもたらすことはできなかった。さらに、成果創出加速プログラムでは個別の課題に細分化されており、「フラッグシップで何ができるか」が問われているようにみえるが、計算科学としては、第二階層まで含めた HPCI システムを活用するさまざまな新しい課題が分野全体で出せるような環境が大切であると考えられる。

HPC ユーザー層の拡大については、AI・データサイエンス、産業利用の面については、2.2 や 3.1 で述べたことで実現につながると期待される。例えば、ChatGPT のようなサービス産業が日本でもできる環境が必要であり、やはりソフトウェアインターフェースが重要である。このことは従来の産業利用でも同様であり、工学的シミュレーションと組み合わせることも考えられる。シームレスに使えるようになった上で、性能等で差別化ができる必要がある。意見交換会では、AWS やグーグルのクラウドのように学生を含めてお試しできるような仕組みが必要ではないかといった意見もあった。

いずれの課題も、以前から検討されてきた難しいものであるが、WG として引き続き検討していく予定である。

4. あとがき

本報告は、調査検討が現在進められている次期フラッグシップ計算機をはじめとする次世代計算基盤に関して、計算科学・計算機科学関係者からの意見も交えつつ、WG として、

システム調査検討への要望や HPCI システムの成果最大化に向けて、議論を行った結果を中間報告としてまとめたものである。R5年度は、HPCI システムの成果最大化に向けて、上に挙げた課題を含めて、将来の HPCI システムのあるべき姿を検討し、提言書としてまとめていく予定である。

【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

主査	堀 高峰	国立研究開発法人海洋研究開発機構 海域地震火山部門 地震津波予測研究開発センター
副主査	小林 広明	東北大学大学院情報科学研究科
副主査	藤堂 眞治	東京大学大学院理学系研究科
委員	合田 憲人	国立情報学研究所
委員	青木 尊之	東京工業大学 学術国際情報センター
委員	伊藤 聡	公益財団法人 計算科学振興財団
委員	上田 修功	理化学研究所 革新知能統合研究センター
委員	田浦 健次朗	東京大学 情報基盤センター
委員	高木 亮治	宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 学際科学研究系
委員	野澤 剛二郎	清水建設株式会社 技術研究所
委員	森 雅博	一般財団法人 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、富田浩文（HPCI コンソーシアム理事長）、西一成（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4年(2022年)5月10日(火) HPCI コンソーシアム第72回理事会
- ・ HPCI コンソーシアム新理事体制の確定
 - ・ 「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
- 令和4年(2022年)7月14日(木) HPCI コンソーシアム第74回理事会
- ・ 令和4年度 HPCI コンソーシアム理事の業務分担の決定
- 令和4年(2022年)10月5日(水) HPCI コンソーシアム第75回理事会
- ・ 調査検討WGの実施方針(テーマ、検討期間、検討委員)を確認
- 令和4年(2022年)11月9日(水) 第1回調査検討WG
- ・ 次世代計算基盤に係る検討状況について文科省からヒアリング
 - ・ 過去の検討の成果(HPCI コンソーシアムの提言)の確認
 - ・ 調査検討項目およびスケジュールを決定
- 令和4年(2022年)12月22日(木) 第2回調査検討WG
- ・ 計算科学ロードマップについてのヒアリング
 - ・ 「富岳」コデザインの経験について～システムの視点からのヒアリング
 - ・ 「富岳」コデザインの経験について～アプリの視点からのヒアリング
- 令和5年(2021年)1月12日(水) HPCI コンソーシアム第76回理事会
- ・ 調査検討WGの進捗を確認
- 令和5年(2023年)1月25日(水) 第3回調査検討WG
- ・ 次世代計算基盤に係る調査研究(近藤チームリーダー)の検討状況のヒアリング
 - ・ 次世代計算基盤に係る調査研究(牧野チームリーダー)の検討状況のヒアリング
 - ・ 現在の HPCI の課題の洗い出し
- 令和5年(2023年)2月17日(金) 第4回調査検討WG
- ・ 意見交換会の計画について
 - ・ 中間取りまとめ案について
- 令和4年(2023年)3月6日(月) 意見交換会
- ・ 中間取りまとめについての意見聴取
- 令和5年(2023年)3月15日(水) 第5回調査検討WG
- ・ 中間取りまとめの確認について

令和5年(2023年)4月24日(月) HPCIコンソーシアム第77回理事会

- ・令和4年度WG報告書(提言に向けた中間取りまとめ)として提出することの承認

令和5年(2023年)5月19日(金)(予定) HPCIコンソーシアム総会

- ・令和4年度WG報告書(提言に向けた中間取りまとめ)の報告