

次世代計算基盤を利用した 成果の最大化に向けて（案）

HPCIコンソーシアム理事

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 主査

堀 高峰（海洋研究開発機構）

2024年2月9日

提言（案）の位置付け

- 「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、WG）」において、

FSの研究代表や「富岳」開発関係の方々、WG委員等へのヒアリング

HPCIのユーザやHPCIシステム構成機関（以下、構成機関）の意見を踏まえて

将来、次世代計算基盤を利用することになるユーザ、ならびに構成機関の立場として、

成果を最大化するために、どのようなことが次期フラッグシップを含む次世代計算基盤の整備・運用の上で求められるか

についての議論と提言をまとめるもの

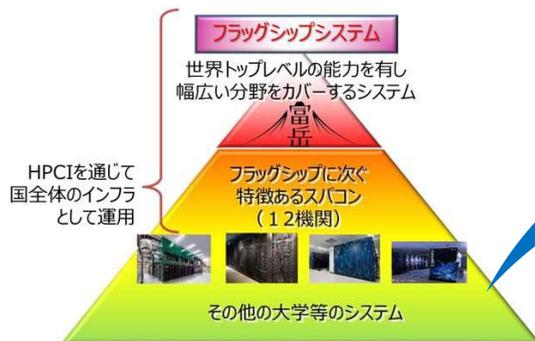
次世代計算基盤検討部会 中間取りまとめ 概要

次世代計算基盤のあり方

- ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤を国として戦略的に整備することは、科学技術・学術の成果創出のみならず、技術・人材の維持・育成や産業競争力の強化等の経済安全保障、新たな科学技術の創出、Society5.0の実現、国民の安心・安全の確保等の社会的課題の解決に貢献する観点から必要不可欠。
- ユーザーニーズの多様化や利用分野の拡大・変化に対応するため、「フラッグシップシステム」を頂点とする現在のHPCIから、「フラッグシップシステム」及び国内の主要な計算基盤、データ基盤、ネットワークが、一体的に運用され、総体として持続的に機能する基盤となることが望ましい。

現在の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



ポスト「富岳」時代に目指すべき姿

これをどう実現するか



- 「フラッグシップシステム」の開発にあたり、半導体やネットワーク等関連技術の動向及び利用ニーズの変化等を踏まえ、調査研究を行い、我が国として独自に開発・維持すべき技術を特定しつつ、具体的な性能・機能等について早急に検討を開始する必要がある。
- HPCIの戦略的な整備・運用についても継続的に議論が必要。

次世代計算基盤の利用成果の最大化へのポイント

- 従来のHPCIの殻を破り、AI・データサイエンスとの融合や量子コンピューティングとの連携を実現し、様々な応用分野や産業利用で**ユーザを拡大**すること
- そのために
 - 様々な観点での使いやすさ（**ユーザビリティ**）の向上が不可欠
 - 運用技術FSや「富岳」で進められているユーザビリティ向上の取組の継続・強化
 - 様々な分野でどのようなニーズがあるかを知って、それを順次**フラッグシップ開発**に反映していく
 - フラッグシップですべてまかなえるとは限らないので**第二階層の多様性**も重要
 - 使いやすさに加えて、**次世代計算基盤**でしか実現できないことも不可欠
→これを担うのが**次期フラッグシップ**
 - これまでのHPCとAI・データサイエンスの**両方で世界トップクラス**の実効性能
 - 2つのシステムFSの目指す**データ移動重視**を支持
 - **幅広くオープン**に様々な分野の**アプリケーション**を対象とした**コデザイン**とその**継続性**
 - これらの開発や利用を担う**若手の育成**とキャリアパスを見据えた**長期的視点**
 - 次期フラッグシップ「**開発期**」における人材の育成と「**運用期**」でのキャリアパス

提言（案）の内容

1. はじめに
2. 次世代計算基盤の整備・運用の方向性
 - 2.1 背景と課題
 - 2.2 シームレス化を軸としたユーザビリティ向上
 - 2.3 次世代計算基盤の戦略的な整備・運用
 - 2.4 産業利用の強化
 - 2.5 分野拡大（AI・データサイエンス、量子コンピュータ関係、その他応用分野）
 - 2.6 人材育成・分野振興
3. 次期フラッグシップシステムの方向性
 - 3.1 アーキテクチャの方向性
 - 3.2 コデザイン
 - 3.3 アプリケーション・ソフトウェアの開発について
4. おわりに

次世代計算基盤の整備・運用の方向性（1/2）

- 2.1 背景と課題
 - ユーザビリティやシームレスの定義
 - 運用技術FSで行われていること（ユーザビリティ向上の取組や端境期解消への検討）
- 2.2 シームレス化を軸としたユーザビリティ向上
 - 従来のHPCユーザ以外に向けたユーザビリティ向上
 - データ活用社会創成プラットフォームmdxでの仮想化基盤の構築や「富岳」のクラウド利用などの**試験的取組の強化**
 - HPCユーザ向けのユーザビリティ向上
 - HPCI関係で開発されたアプリケーション、商用アプリケーション、OSSなどの**移植性や継続性**が重要
 - アプリケーション開発者にとってのユーザビリティ向上は**コデザインの充実**（3章）
 - ユーザビリティ向上の取組の強化と**フラグシップ開発への反映**
 - ユーザのニーズを把握するためには、ユーザビリティ向上の取組を強化（例えば運用技術FSの継続・発展）し、その知見をフラグシップ開発（システムソフトウェア開発等）に順次反映していくことが重要
 - 最終段階では、それらの知見を踏まえた上で、ユーザビリティ向上に必要なフラグシップ周辺のハードウェア・ソフトウェア等の開発・製造も必要
- 2.3 次世代計算基盤の戦略的な整備・運用
 - ユーザビリティ向上やシームレス化には、**HPCIシステム構成機関の協力**も不可欠
 - HPCIシステム構成機関間での協調・連携や外部データ利用等を進めていくための運用体制の検討の必要性
 - フラグシップシステムの**端境期解消への期待**
 - フラグシップシステムは、本来のその卓越した計算性能から、入れ替わりに伴う端境期が生じると、第二階層の計算資源で代替できるものではない

次世代計算基盤の整備・運用の方向性 (2/2)

- 2.4 産業利用の強化
 - 産業界を取り巻く状況の変化を受けた**制度や仕組みの見直し**が必要
 - 2.2で述べたシームレス化を軸とした**ユーザビリティ向上**として対応が可能
- 2.5 分野拡大 (AI・データサイエンス、量子コンピュータ関係、その他応用分野)
 - ユーザビリティ向上に向けた**試行機会の提供と結果のフィードバック**
 - AI・データサイエンスや量子コンピュータ関連、産業利用を含めた様々な分野を対象に実施すれば、分野拡大の促進につながると期待
 - 当該分野で用いられているOSSの移植・継続的更新やライブラリの並列処理対応
 - AI・データサイエンス分野の専門家が大規模計算を手軽にできるようにするため**システム開発側での研究開発とその継続**が不可欠
 - AI・機械学習の大規模データ解析や量子コンピュータ関連計算のさらなる**大規模化・高速化**
 - GPUをはじめとした様々な加速機構が駆使されているものをさらに大規模化・高速化することが必要で、まさに**次期フラッグシップが担うべき**
 - 分野拡大のために**エンドユーザのニーズをどう把握するか**は、非常に重要かつ難しい問題
 - 実証試験的な取り組みと現状のHPCIシステムの連携や商用クラウドとの連携等を積極的に活用して、幅広いユーザのニーズを引き出すことが効果的
- 2.6 人材育成・分野振興
 - これまではフラッグシップシステム開発の「端境期」(運用期)であったが、今後は次期フラッグシップシステムの「**開発期**」に入る
 - **次期フラッグシップ開発プロジェクト**の中で課題を設定し、**人材育成**のための予算を配分することが求められる
 - 開発プロジェクトの中で**若手の人材育成**をどのように進めるのが効果的か、さらには、将来の運用期において、育成された人材の**キャリアアップ**をどのように実現するかは喫緊の課題
 - 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) の事例
 - 人材育成施策と協調した分野振興
 - 従来の計算科学分野だけでなく、AI・データサイエンスや量子コンピュータ関係、大規模実験・観測分野、IoTを活用する応用分野や産業界等、**幅広い分野を対象**とすることが不可欠

次期フラッグシップシステムの方向性 (1/2)

• 3.1 アーキテクチャの方向性

- 大規模シミュレーション向けとAI・データサイエンス向けが**高いレベルで両立**することが次期フラッグシップに求められる重要な方向性
 - 2つのシステム開発FSでは**電力制約のもとでデータ移動を効率よく行える**、相対的に高いメモリバンド幅のアーキテクチャを目指す：アプリケーション開発コミュニティとして支持
- アーキテクチャの持つ性能だけでは実効性能は決まらない
 - アプリケーション開発側との協調設計（すなわち**コデザイン**）があって初めて期待されるような実効性能が得られる
- 演算加速機構の必要性への理解と要望
 - 演算加速機構の性能を十分に引き出すためには、アプリケーションの中には**大幅なアルゴリズム改変を含む開発が必要**になるものが出てくる
 - アプリケーション開発側の自助努力だけではなく、アルゴリズムの工夫や実際のコーディングまで含めたフォローを、**FSや開発期からコデザインとして実施**することが不可欠

• 3.2 コデザイン

- ハードウェア開発の観点
 - 概念設計の段階で、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、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
 - 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する等の実際にできるだけ近い環境**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ことが鍵
- ソフトウェア・アプリケーション開発の観点
 - **幅広くオープンに様々な分野のアプリケーションを対象**として、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支援が**継続的**に行われる必要
 - コンパイラを含めたシステムソフトウェアの整備が、**システムの稼働開始までに高い水準**でなされることが次期フラッグシップでの成果最大化には不可欠

次期フラッグシップシステムの方向性 (2/2)

- 3.3 アプリケーション・ソフトウェアの開発について

- 概念設計段階

- 演算性能、メモリ性能等の各ハードウェアの特性に対して、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し、提示されることが必要

- 詳細設計でアーキテクチャの取捨選択がなされた際

- アプリケーション側でそれを補うためにどのような工夫が必要とされることになるかを示す**性能向上指針**が与えられることが不可欠
- 一部あるいは多くのアプリケーションにとって、性能を引き出すための大幅なアルゴリズムの改変が求められる選択がなされる場合は、できるだけ**早い段階で、情報が開示**される必要

次世代計算基盤の利用成果の最大化へのポイント

- 従来のHPCIの殻を破り、AI・データサイエンスとの融合や量子コンピューティングとの連携を実現し、様々な応用分野や産業利用で**ユーザを拡大**すること
- そのために
 - 様々な観点での使いやすさ（**ユーザビリティ**）の向上が不可欠
 - 運用技術FSや「富岳」で進められているユーザビリティ向上の取組の継続・強化
 - 様々な分野でどのようなニーズがあるかを知って、それを順次**フラッグシップ開発**に反映していく
 - フラッグシップですべてまかなえるとは限らないので**第二階層の多様性**も重要
 - 使いやすさに加えて、**次世代計算基盤**でしか実現できないことも不可欠
 - これを担うのが**次期フラッグシップ**
 - これまでのHPCとAI・データサイエンスの**両方で世界トップクラス**の実効性能
 - 2つのシステムFSの目指す**データ移動重視**を支持
 - **幅広くオープンに様々な分野のアプリケーション**を対象としたコデザインとその**継続性**
 - これらの開発や利用を担う**若手の育成**とキャリアパスを見据えた**長期的視点**
 - 次期フラッグシップ「**開発期**」における人材の育成と「**運用期**」でのキャリアパス