

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（HPCI）の運営の選定審査委員会における指摘事項に対する RIST 等対応まとめ

採択条件

第2期までに貴機構において実施した内容は評価する。今後も着実に実施していただきたい。一方、HPCIをめぐる状況の変化に即した提案が不十分であり、更なる改善に向けた新たな取組の検討・実施が必要である。特に、計算科学・計算機科学に関わる人材の育成及びHPCIの利用の裾野拡大は急務となっており、第2期までの取組の継続のみでは十分とは言い難い。以下の「HPCIの運営選定審査委員会」のコメントを踏まえ、既存の取組の見直しや新規の取組を早期に検討し、文部科学省と協議の上実施する計画を立てること。また、人材の育成及びHPCIの利用の裾野拡大については、HPCI計画推進委員会やHPCIコンソーシアム等においても継続的に議論されている事柄であることから、これらの議論も踏まえ、委託事業実施期間中も柔軟に計画を見直し、文部科学省と協議の上実施する計画を立てること。

<HPCIの運営選定審査委員会のコメント>

項目（1）実施体制

01 運用面での実施体制は、これまでの実績に基づいて盤石である。一方でさらなる改善に向けた新たな取組が希薄であり、特に人材育成に関してはこれまでの枠組みに加えて新たな仕組みを考えて欲しい。

■【10～12でまとめて記載】

02 3期で新たに取り組む意欲的な目標を掲げてほしい。審査員のダイバーシティに配慮し、女性研究者の採択率を上げるといったこともそのひとつであろう。

■RISTが行うHPCI課題選定の新たな取組として、HPCI定期募集課題の選定に当たり、審査結果が高評価にもかかわらず希望資源が枯渇する場合は、申請時の利用希望（第一希望及び第二希望）が特段ない課題に対しても同じアーキテクチャの代替資源を配分することで、公平・公正な利用者選定の実施及び利用ニーズへの適切な対応、計算資源の有効活用に資するとともに、将来的な「HPCI共用計算機資源のシームレス利用」に資する運用を行っている。更に、申請者の利用希望が一部のHPCI共用計算資源に集中していることから、共用計算機資源全体の一層の効率的・効果的な利活用推進に資する方策等を継続的に検討している。

■女性研究者によるHPCI利用研究の促進に関し、RISTはかねてより「富岳」を含むHPCI課題選定に係る外部有識者委員会である選定委員会及び課題審査委員会において、一定の配慮をしている。直近（2024～2025年度）の女性委員の構成は、選定委員会が全10名中2名（うち1名は委員長代理）、課題審査委員会が全18名中4名となっている。

項目（2）実施計画（計算資源の確保）

03 これまでの実績に基づいた計画となっており、大きな問題はない。

04 これまでどおりの予算（役務発注費）が担保されれば、従来実績からいって、HPCI ユーザが要求する資源に対して（採択率を考慮した上で）適切な資源量が確保できるという提案内容である。「富岳」および次のフラッグシステムへの移行、HPC とデータ科学との連携融合の進化、CPS など情報化社会への対応など、今後の社会環境の変化も考慮した上で、HPCI として提供すべき資源量を予測・検討し、必要な調整に努めていただきたい。

■HPCI 定期募集課題の申請数は、特に昨今の GPU 搭載機の利用ニーズの高まり等を背景に全体的に年々増加しており、「これまでどおりの予算」の範囲では、適切な資源量の配分や採択率の維持が困難な状況にある。そのような状況下ではあるが、RIST と HPCI 共用計算機資源提供機関が協力しながら利用ニーズに対応可能な資源量を確保するとともに、必要となる利用負担金予算に係る各種調整等を経て、これらの適正な資源配分及び配分した資源の利用促進に努めており、今後も継続する。

項目（2）実施計画（課題選定）

05 これまでの実績に基づいており、安定して遂行できると思われるが、是非、産業界ユーザを増やすための、もう一段進めた取組を検討し、実践していただきたい。

■RIST は、HPCI の産業利用促進に関し、HPC 経験が豊富な研究者による大・中規模利用、初心・初級者による小規模な利用（及びそこからのステップアップ）、及び利用成果を専有する有償利用それぞれの拡大を、利用促進の目標としている。このため、HPCI 利用課題においては、大・中規模利用をターゲットにした定期募集課題に加え、初心・初級利用者をターゲットにした随時募集の HPCI 産業試行課題、及び産業界のスパコン利用ニーズに即した HPCI 産業有償課題を設定するなど、様々な産業利用ニーズに対応している。

■上記のほか、「富岳」を含む HPCI 産業利用全体の促進に特化した RIST 産業利用推進部によるコンシェルジュ的相談対応や利用後の個別フォロー等の手厚い支援を行うとともに、HPCI 産業界利用候補者等も集う関連イベント（各種学会、国際フロンティア産業メッセ、SPring-8 産業利用報告会等々）でのポスター発表、講演、相談窓口による利用相談対応等を通じた HPCI 利活用 PR 活動や、HPCI ポータルサイトに「Hello!「富岳」～産業利用の広場～」を設けて産業界での「富岳」を含む HPCI の利活用事例の紹介、チラシやパンフレットを併用して利用制度や利用支援等をわかりやすく紹介するなど、日々普及・啓発活動に努めている。

■RIST が行う産業界利用者を対象とした伴走型利用支援において、2024 年度から HPCI 利用課題を対象とし、x86 系に加え GPU を含めた支援体制を確保している。本件は、関連イベントにおいて PR 活動を強化中。

■以上に示したような取組を、今後も継続する。

項目（2）実施計画（利用促進）

06 さまざまなレベルのユーザ支援があるが、ハードウェアの進歩を考えると、今後、ノード単体性能や並列性能を担保することが難しくなり、また、データ科学との連携融合の促進による、より高度な利用が求められるようになる。そのような中で、日本では HPCI が運営されていたので、これだけ HPC の利用が進んだ、と 5 年後に評価されるようなユーザ支援を検討し、実践していただきたい。

■RIST は「富岳」のみに設定していた重点分野（年度ごとに政府方針、社会情勢などを踏まえ重点的に推進する研究分野を重点分野として設定し、採択に際し一定の優位性を持たせる）の設定を 2024 年度

度定期募集より HPCI 課題にも拡大した。HPCI においては、特に AI/データサイエンスに関わる研究を重点分野とし、その分野の研究を促進することとした。

■RIST が主催する材料系ワークショップ（毎年 2 回開催、参加者計 500 名程度）において、AI やデータ科学の材料科学への適用に関する利用事例を積極的に発信することで、それらの普及・啓発に注力している。CAE ワークショップを開催し（毎年 1 回開催、参加者 100 名程度）、企業や大学・研究機関の CAE 分野の研究者及びアプリケーション開発者を対象に、CAE 分野の最新動向やアプリケーションの活用事例、並列計算を行うノウハウ等の情報を提供している。また、AI やデータ科学で利用されているソフトウェアやフレームワークに関する高度化支援を実施するとともに、「富岳」に関する移植・利用情報を HPCI ポータルサイト及び情報共有 CMS で「富岳」を含む HPCI 利用者に提供している。2023 年度以降はクラウド型材料計算プラットフォームを運営する(株)Quemix 主催の Quloud 講習会（2024 年度は 8 回開催、参加者計 635 名）に RIST が共催として参加し、「富岳」・HPCI における材料シミュレーション事例を紹介している。

■実験を主とする研究者と連携し、「富岳」をはじめとしたスパコンの利用を促進することによる実験と計算科学の融合・相補利用研究を推進することも RIST の重要課題と位置づけている。具体策の 1 つとして、SPring-8/SACLA/NanoTerasu の利用促進を行っている登録機関 JASRI の研究者と RIST の支援スタッフが連携協力して SPring-8 上の大規模な放射光利用実験データから測定サンプルの画像を高速かつ効率的に再構成するプログラムを開発し、「富岳」で活用し易い利用環境を整備してきている。RIST は更に J-PARC MLF 中性子線施設の登録機関 CROSS とも、2024 年度から連携協力を進めており、共同で論文執筆や学会発表を行っている。こうした取組を通じて大規模データの取扱いと「富岳」を含む HPCI スパコン利用の連携融合に係る知見の蓄積に努めている。

■HPC の動向を踏まえ、RIST は HPCI において利用ニーズや利用頻度が高い OSS（「富岳」にのみ整備）や国の資産として重要な国プロアプリ（2025 年時点で 17 本）の利用環境整備・バージョンアップ等の更新を適宜行うとともに、整備したアプリの講習会（年 8 回程度開催、参加者計 80 名程度）を開催するなど、利用状況の変化に応じたより有効な支援を行っている。なお、これら対象アプリケーションは、整備・更新に必要な限られたマンパワーや予算を踏まえ、外部有識者の参画を含むアプリケーションソフトウェア利用環境整備アドバイザリーワーキンググループにて、利用状況等を把握した上で適時選定等を行っている。また、利用状況に基づく整備・更新を進める上で、利用状況の把握精度の向上が不可欠であることから、利用実績情報の収集法や HPCI システム構成機関からの情報提供について RIST が各機関と協議し、2025 年度から国プロアプリを利用した際には確実に記録できるように改善するとともに、HPCI システム構成機関が RIST に対し、国プロアプリの全ての利用者に関する利用情報を提供することとした。

■RIST が開催している「HPC プログラミングセミナー」では、CPU コアを効率良く利用するための基本的な方法、共有メモリ型並列計算機を利用するための OpenMP を使用したスレッド並列化の方法、分散メモリ型並列計算機を利用するための MPI を使用したプロセス並列化の方法、さらには近年 HPCI でも増加している GPU を利用するための OpenACC を使用したプログラミング技法について、最新の内容を適宜テキストに盛り込みながら説明している。最近では、2023 年度は 222 名（ユニーク数で 123 名）、2024 年度は 269 名（ユニーク数で 143 名）が当該セミナーを受講した。HPCI 利用研究課題への参加状況が追跡・分析できる受講者（HPCI-ID 保有者）のうち約 2/3 の受講者は HPCI 利用研究課題に初めて参加あるいは参加を継続しており、当該セミナーの開催を通して HPCI の利用促進に寄与している。

■HPCI における GPU 搭載計算機の増加やポスト「富岳」を見据え、RIST は大学の情報基盤センターが HPCI 共用計算機資源として提供している GPU 搭載機を RIST 支援スタッフが申請により利用することで、HPCI において整備・利用されている OSS の GPU 対応に関する調査研究を、2024 年度より行っている。また、RIST 支援スタッフの GPU 対応のスキルアップを目的に、RIST が利用環境を整備している国のプロジェクトを通して開発されたアプリケーションソフトウェアの GPU 対応に向け、同

アプリケーションソフトウェアの開発者と共同研究を2024年度に1件、2025年度に1件開始した（現在、更に1件の開始に向け準備中）。

■ハードウェアの進歩等を背景に、より高度な利用が求められることに対する支援への取組を、今後も継続する。

07 大規模計算を希望するユーザは潜在的に存在するが、その困難さから実施に踏み切れないケースがある。大規模データのハンドリングや、前後処理などが障壁になっている場合が多く、周辺技術を含めた総合的な支援が必要である。往々にして個別事情があるためユーザの希望に寄り添う支援が必要である。そういう支援体制を強化して欲しい。

■RISTは、利用者からの高度化支援の希望・依頼を受けた際には、当該利用者から十分なヒアリングを行い、利用者の計算内容や達成目標に応じて2～4名程度の担当支援スタッフを割り当て、ユーザの個別事情に合わせた支援体制を構築している。大規模計算、大規模データのハンドリングや前後処理などを含め、全ての希望について高度化支援を実施している。その結果、支援後のアンケートでは、高い満足度（満足：85%、ほぼ満足：15%）が示されている。

■HPCI利用者の希望に寄り添う支援体制の構築・強化に向けて、「富岳」運用機関である理研R-CCSとRIST間の支援情報共有のため、R-CCSが中心となり導入したヘルプデスク問い合わせ管理システム（Zendesk）を、RISTと共同運用することで、支援業務の一層の迅速化、効率化を図っている。特に、利用支援を行う際に得た知見を中心にRISTがFAQ記事としてまとめ、類似の困難に遭遇する可能性があるユーザが情報を把握できるよう工夫している。

■RISTは多様なユーザのニーズに対応するため、2022年度には「富岳」利用セミナー英語版資料を作成し、また2023年度からはセミナー動画を「富岳」ユーザに公開した。東京大学と連携しWisteria/BDEC-01(Odyssey)を使った実習付き「富岳」講習会を2023年度から開催した。理化学研究所が開発したデータハンドリングや前後処理を含め計算資源の操作を容易にするツール「富岳」Open OnDemandやワークフロー・ツールWHEELを利用した講習会を実施するなど、支援内容の多様化を進めている。なお、Open OnDemandはいくつかのHPCI共用計算機でも導入が進むなど大学の利用者にも利用が拡大しているとともに、WHEELはAIの利用などで不可欠なワークフロー・ツールの一つとなっている。これらは「富岳」からHPCIへの利用拡大として重要であり、RISTが開催する講習会はその一翼を担っている。

■RISTは、HPCI利用者の中でも特に大規模な計算を要する利用者に対しては、「富岳」利用者への高度化支援を通して「富岳」での大規模実行（全系規模実行）への挑戦を促し、また、全系規模実行に関する「レクチャー」会で実施予定者を高度化支援に誘導した。全系規模実行に特有な実行上の問題の把握と適切な実行環境変数の決定を助言するとともに、全系規模実行実施時の24時間サポート体制の構築等、利用者に寄り添った様々な手厚い支援を行ったことで、目標としていた全ての実行が完走するなど、全系規模実行におけるユーザの目標達成に繋がったと認識している。その過程で、全系規模実行で用いる入力データが膨大なため利用者の研究室からのデータ転送では間に合わないことから、RISTはHPCI運営の一環として運用・利用者へ提供しているアクセスポイント東京（AP東京）の利用を助言することで、全系規模実行の効率的・効果的な実施を支援したケースがある。なお、一部の全系規模実行の利用者は、「富岳」以外のHPCIシステムにおいて全系規模実行を検討しており、RISTから各種助言を行っている。

■以上に示したような利用者の希望に寄り添う支援体制強化への取組を、今後も継続する。

08 これまでの実績に基づいており、運用上は問題ないと思われるが、より良い運用になるような新たな取組を進めて行って欲しい。

項目（2）実施計画（分野振興・人材育成）

09 これまでの実績同様の、一般向けの講習会などについては十分である。

【再掲】

01 運用面での実施体制は、これまでの実績に基づいて盤石である。一方でさらなる改善に向けた新たな取組が希薄であり、特に人材育成に関してはこれまでの枠組みに加えて新たな仕組みを考えて欲しい。

10 HPCI に資源を提供している機関（大学情報基盤センター等）のまわりには、HPCI ユーザよりもはるかに多くのユーザがいる。大学情報基盤センターとより強力に連携して人材育成を進めていくことが望まれる。

11 人材育成に向けて講習会よりもう一歩踏み込んだ対応が必要。特にチューニング専門家のキャリアパスの構築など、より強力な事業を推進して欲しい。

12 今後は高度な専門家についても、内部の人材も含めて育成に取り組み、広く計算科学分野の人材育成を担ってほしい。

■ 从來より実施している、HPC 分野の人材育成等を目的とした各種セミナー・講習会・ワークショップ等に加え、以下の取組を行っている。

■ RIST は HPCI 定期募集課題に若手課題を設定することで、将来の計算科学分野の発展を担う若手利用者的人材育成に注力している。なお、当該課題実施者の条件の一つである「39 歳以下」について、選定委員会の提案に基づき、出産・育児・介護により研究に専念できない期間があった場合は 39 歳以下の条件に当該期間分を加算することができるよう 2025 年度定期募集よりに条件を改めることで、更なる若手人材育成の機会拡大を図っている。

■ 上記 4 項目の人材育成に対するコメントを踏まえ、第 52 回 HPCI 計画推進委員会（2022.10.19 開催）での RIST の新たな取組に関する説明に先立ち、文部科学省と協議を行った。これまで、事業の趣旨や予算の性格等から、主要支援対象範囲を「HPCI の利用者、利用を計画している又は検討している人」としつつ、一方で RIST は、有効な人材育成・HPCI の利用促進に向けては初学者など主要対象範囲の拡大が不可欠と考えていた。当該協議において「利用支援の対象者について、そのような制限は法令その他においては見当たらない」旨を確認したことを踏まえ、RIST は HPCI プログラミングセミナー等の参加対象者を「HPC 向けプログラミング技法の習得を目指す方」などに拡大し、計算科学研究の初学者や HPC 向け計算機（分散共有メモリ型並列計算機）の未経験者などへも参加を促すこととした。

■ HPCI システムにおける GPU 搭載計算機を使用した HPCI 利用者からの支援依頼に適切に対応するため、RIST は GPU 搭載システムを導入して利用技術を習得し、HPCI 利用者からの高度化支援依頼に対応してきた（2017 年度～2023 年度に合計 15 件）。2024 年度からは HPCI システム構成機関に導入された最新の GPU 搭載計算機を利用し、各種のサンプルコード（OpenACC を中心に、OpenMP Target や Kokkos を取り入れている）の実行テストを行い、その結果を基に GPU 対応に関する講習会を拡充（HPC プログラミングセミナー：アクセラレータ入門）した。サンプルコードはポータルサイトで公開した。

■ 2017 年度以降、RIST は各 HPCI システム構成機関を 1 年に一度訪問し、アプリケーションソフトウェアの利用環境整備に関する協議を継続して行っている（コロナ禍の際はオンラインで協議）。整備したアプリソフトに関して HPCI システム構成機関やアプリ開発者と連携し、年に 8 回程度のアプリソフト利用講習会を開催してきた。また、当該協議に合わせ、他の講習会の開催についての要望、RIST 全体の業務への意見・要望など様々な意見交換を行い、更なる連携強化を模索してきた。その一環とし

て Wisteria/BDEC-01(Odyssey) (東大) 使った「富岳」講習会を開催するとともに、Camphor3 (京大) を使った LAMMPS 講習会を開催している。今後も、HPCI システム構成機関から要望があれば、構成機関と連携しつつ講習会の開催を検討する。

■ 将来の計算科学分野研究を担う若年層の育成に有益な施策であるスパコン「富岳」体験塾について、主催者 RIST 及び共催者 R-CCS に加え、2023 年度より HPCI システム構成機関である東京大学、2025 年度より東京大学に加え名古屋大学と九州大学の協力を得て開催地、関係機関、協力内容の範囲を拡大することで、参加者層や範囲を拡大している。このように、アウトリーチの面でも HPCI システム構成機関との連携を拡大している。

■ RIST は、初学者等による HPCI 計算資源の利用を通じた研究活動及び RIST のそれに対する支援を通じた人材育成を目的とした「人材育成型支援」制度を 2025 年度より設定し、公募を開始した（第 52 回 HPCI 計画推進委員会で人材育成の新たな取組として RIST が説明した 3 件の内の 1 件）。本制度は、RIST が実施する高度化支援に関する大学関係者との議論の過程で顕在化した若手人材の育成に関するニーズに基づき設定したものである。具体的には、原則、初学者等で日本国内の大学に在籍する学部 4 年生から大学院修士課程 1 年生程度までの学生を対象に、支援員等と相談の上、指導教官の同意の下で具体的なテーマを設定し、対象の学生に対し RIST が一定期間（数ヶ月～6 ヶ月程度を想定）の各種育成型支援（プログラム性能評価支援、並列化等による高速化支援、アルゴリズムの実装やプログラム開発に関する助言など）を実施する。これにより、計算機を用いた研究を進める上で必要な知識やプログラミング技術等を系統的に習得する機会を持続的に提供する。

■ 以上に示したような若手を含む人材育成に資する取組を、今後も継続する。

項目（2）実施計画（共用ストレージの運用）

13 安定した運用計画がなされているが、ストレージの効率的な利用のためには、gfarm 等のシステムソフトウェアのみではなく、大規模データの可視化ソフトウェアやデータ分析ソフトウェアが整備されていることが必須となる。そのようなソフトウェアを整備・運用していくことが望まれる。

■ R-CCS 及び東京大学が運営する HPCI 共用ストレージの適切な利活用に資するため、R-CCS 及び東京大学は、ストレージの更新・容量の拡張に加え、広域分散ファイルシステム Gfarm (東西拠点にファイル複製を 1 個ずつ配置する完全ミラー化として提供) や OS の Red Hat Enterprise Linux を整備・運用している（東拠点）。また、HPCI 共用ストレージの運用情報を可視化したダッシュボードを利用者へ提供し、稼働状況や利用量等の運用情報をリアルタイムで見ることが可能となっている。

■ 東西共用ストレージ拠点において、R-CCS 及び東京大学は大規模データの可視化ソフトウェア及びデータ分析に資するソフトウェア (ParaView) を整備し、利用に供している。現在、利用者からの更なる要望などは特段ないが、必要に応じて利便性の向上に努める。

■ 共用ストレージの運用としては、HPCI 共用ストレージ資源と RIST が募集・選定する HPCI 利用課題を紐づける（「富岳」を含む HPCI 課題申請及び HPCI 共用ストレージ利用申請を同時に受け付ける）ことで、利用ニーズに合わせた「富岳」及び HPCI 共用計算機群と HPCI 共用ストレージの一括した利活用を促進している。なお、RIST は、R-CCS 及び東京大学からの提案に基づき、HPCI 共用ストレージの利活用を更に促進するための試行的な利用機会として、その利用申請有無に問わらず、採択された「富岳」を含む HPCI 定期募集課題に対し、2024 年度より一律 500GB を割り当てる（500GB は 2025 年度現在。それ以上の割当を希望する場合は、課題ごとに設定された上限の範囲で申請により可）。また、HPCI 共用ストレージ利用について、RIST は計算機利用を伴わない独立した公募利用制度である「HPCI 共用ストレージ（共有型）課題」を別途設定している。更に、HPCI 利用制度の一環として、データ所有者が自ら公開したい HPCI 共用ストレージ上のデータを、設定したデータ閲覧者に

対し公開する「データ公開サービス」制度を、R-CCS からの提案に基づき RIST が新たに導入することとした。現在、導入に向けて各種調整等を行っている。

■以上に示したような取組を、今後も継続する。

項目（2）実施計画（認証局の運用）

14 特になし。

■認証局においては、認証基盤システムの更新（OAuth の導入）を行った。

項目（3）所要経費

15 特になし。

以上