

2023年6月29日

文部科学省研究振興局長 森 晃憲 殿

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）

2022年度運営委員長 掛川 秀史（清水建設株式会社）

2023年度運営委員長 向井 稔（株式会社東芝）

「富岳」をはじめとする HPCI の産業利用と利用支援について（提言）

シミュレーション技術は、理論、実験と並ぶ「第三の科学」として注目され、その重要性はさらに高まっていくが、近年は DX などの潮流を背景にスーパーコンピューティング技術の新たな側面として、「第四の科学」と呼ばれる IoT 技術や AI 技術にも大きな注目が集まっている。このような新たな技術の潮流は、我が国が掲げる次世代社会構想「Society5.0」の実現における重要な技術となるため、産応協では、AI、データサイエンス等をテーマとした活動を積極的に取り入れ活動の幅を広げている。また、2021年度供用開始の「富岳」では、シミュレーションと AI、データサイエンスの融合による新たな価値の創造が期待されている。産業界としてもこの機会を捉え、「富岳」をはじめとする HPCI の利活用を促進し、Society5.0 の実現に貢献することは重要な使命であると考えている。

産応協では、2022年6月に「富岳」利用者支援の充実と利用環境の整備、産業利用のためのアプリケーション開発と普及の推進について提言を行い、次期フラッグシップシステムへの期待・要望を述べた。また、2015年度にとりまとめた「HPCI 産業応用推進に向けた提言」について、近年の状況を踏まえ、更新している。

2022年度においては、登録機関等との意見交換を継続的に実施した結果、提言時点から「富岳」利用者支援の充実と利用環境の整備に関して改善されるなど状況が変わっていること、産業利用促進の観点で産業界に広く、未利用の人も含めて収集した意見を展開する必要があることから提言の見直が必要となっている。

また、産応協でまとめている HPC 技術ロードマップにおいて産業界の各分野で将来必要とする技術課題や計算機性能・機能を整理しており、それらを次期フラッグシップシステムの計画が検討されている段階で外部に展開することが、次期フラッグシップシステムにおける産業利用の拡大につながると考えられる。

上記状況を踏まえて、HPCI の産業利用促進の観点から以下の提言を述べさせていただく。

## (1) 「富岳」および第二階層計算資源利用者支援の充実と利用環境の整備

### ① 利用者目線でのアプリケーション整備、および利用者支援

産業界ユーザから要望の多いアプリケーションの整備、産業界ユーザが必要とする既往のチューニングや性能に関する情報の提供

・「富岳」や第二階層計算資源では順次利用可能なアプリケーションは増えているが、資源提供元や一般財団法人高度情報科学技術研究機構（以降、RIST）が整備していない OSS アプリケーション、あるいは商用ベンダがサポートしていないアプリケーションは未だ多くあり、産業界ユーザと RIST 等の連携により、要望の多いアプリケーションの整備が進むことが望まれる。

・産業界では自社 HPC や商用クラウドでも共通して使える OSS や商用アプリケーションの「富岳」および第二階層計算資源での利用を望んでいる。一方で「富岳」のような独自アーキテクチャに特化したチューニングは企業内で広く活用できる可能性が低いことから、チューニングなど準備段階での工数増加は避けることが望ましく、既存のチューニング情報が OSS や商用アプリケーションの利用で重要となっている。

・「富岳」で利用されたアプリケーションの利用実績報告等が公開されているが、チューニング内容や計算規模、利用ノード数などの情報は必ずしも示されていない。「富岳」等の利用を検討する場合に、チューニングなど準備段階の工数把握が容易となる情報の提供が望まれる。さらに、OSS アプリケーションではテストデータに基づく性能測定情報ではなく、実際の計算に即したデータによる性能情報を公開されることが望まれる。

・一方で商用アプリケーションは、公開条件があるために「富岳」での性能情報が公開されておらず、情報が入手しにくい状況にあり、産業利用を促進するためには新規ユーザが商用アプリケーション性能情報を確認できる仕組みが期待される。

「富岳」や第二階層計算資源の利用時の各種支援の継続的な取り組み、産業利用促進の観点で適切なタイミングで受けられる支援制度の拡充

・「富岳」で行われている RIST の高度化支援や伴走型利用支援などの利用を検討しているユーザの割合が高く、OSS アプリケーションや商用アプリケーションの導入支援、オンサイトでの可視化支援などが期待されている。

・産業利用促進の観点では適切なタイミングでの支援が重要である。産業利用では支援を受けられるまでの期間を重視する可能性があり、開始時期が限定されない支援制度、支援する人材の不足で支援を受けるまでの期間が長くない施策が産業利用促進するうえで必要と考える。

### ② フラッグシップシステム、および第二階層計算資源の利用制度

分散している第二階層計算資源に関する情報の集約、「富岳」や第二階層計算資源も含めたアプリケーション性能情報を比較できる仕組みの整備

・第二階層計算資源には「富岳」とは異なる様々なアーキテクチャのマシンがあり、「富岳」

と異なる OSS や商用のアプリケーション利用が期待されている。ただし、利用したいアプリケーションに適した計算資源の選択、チューニング等の準備段階の工数把握などの情報は各サイトから取得する必要がある。上記の情報をワンストップで得られ、性能等を比較できる仕組みができることが期待される。

- ・アンケート結果では第二階層 HPCI の利用者は「富岳」に比べると少なく、制度そのものの存在を知らない人もいた。各センターが独自に運用する外部利用制度との違いなど、第二階層計算資源の産業利用促進のためには制度の周知が必要だと考える。

- ・OSS や商用のアプリケーションによる産業利用促進のためには、複数の第二階層計算資源での試し計算を、ワンストップの申請手続きなどを容易に実施できる仕組みの構築が期待される。

- ・「富岳」のファーストタッチオプションのように申請手続きを簡易化した制度が増えることは新規ユーザを増やすために望ましいことである。併せて広く周知するための活動、第二階層計算資源においても同じような制度を利用できることが期待される。

#### 利用環境整備など登録機関、資源提供機関との意見交換の継続

- ・これまでに登録機関との意見交換により、利用環境整備に関する過去の提言で述べた課題は改善されており、引続き意見交換を継続させていただきたい。加えて、第二階層計算資源提供機関とも産業利用促進に向けて意見交換会を実施させていただきたい。

### (2) 次期フラッグシップ計算機への期待・要望

- ・国主導でポスト「富岳」時代の「次世代計算基盤に係る調査研究」において複数の調査チーム立ち上がり、学術領域だけでなく産業界の幅広い分野での展開を見据えた検討が行われており、その検討段階に産業界の意見を入れることが望ましい。

- ・産応協では 10 年程度の将来までを考慮した HPC 技術ロードマップを各分野で作成し、各産業分野の HPC 技術課題を整理しており、本提言では次期フラッグシップ計算機に関わる産業界の期待・要望を抽出して整理している。

- ・ただし、HPC 技術ロードマップがカバーしている産業分野は材料・化学分野、建設・機械分野であり、将来の HPC 技術利活用で想定される産業分野を全てカバーしているわけではない。

#### ① 開発方針への期待・要望

#### 従来の大規模解析において更なる計算能力向上、データ駆動型科学などの新たな取り組みによる大規模データへの対応

- ・産業界における HPC 技術のニーズは多岐に亘り、従来から行われているアカデミアとの連携による現象解明における高解像度化や評価技術の精度向上など基礎的な研究では大規模解析 (Capability Computing) において更なる計算能力向上が期待される。一方で、将来的にはデータ駆動型の各種設計に向けた AI や機械学習のデータ生成に資する大量計算 (Capacity Computing) の利用が増えると想定されている。

・材料・化学分野ではデータ駆動型材料設計であるマテリアルズ・インフォマティクス(MI)による材料設計技術がデファクト化し、新材料の予測・解析だけでなく、MI物性予測モデルの学習データ源として、定型ジョブ大量実行のニーズが増加すると予測されている。

・建設・機械分野では実務での計測や実験で得られる大規模データとシミュレーションを融合したデジタルツインなどの構築を介した合理的な設計や意志決定を目指しており、大規模データと大規模解析を効率的に扱う手法(データ同化やサロゲートモデル)の実用化が課題となっている。

・フラッグシップシステムだけでなく、それぞれに特徴を持った第二階層計算資源、機械学習やAIの解析に特化した専用アクセラレータなど様々な特性を持った計算機が、各利用者の用途に合わせて組み合わせて利用できる環境が期待される。

・さらに、研究開発段階とプロダクション・ランなど利用目的に応じて利用する計算機は異なるものとなるが、計算機やデータがシームレスに利用可能となることが必要である。

・学習データを作成する大規模解析や大量計算で用いる計算機と、それらを機械学習する計算機の間でシームレスに大規模データを扱うことができるデータ基盤(ネットワークやストレージ)の構築が期待される。

## ② 活用普及に対する期待・要望

産業競争力の観点での利用環境の整備、汎用デファクトスタンダードなOSSや商用のアプリケーションの整備、準備段階での工数増加を避けるためのコンパイラやライブラリの強化

・実務においては汎用的デファクトスタンダードなOSSや商用のアプリケーション利用が求められており、実務に近い研究開発においてはそれらOSSや商用アプリケーションが実装され、最大限に高速で動作することが期待される。

・上記OSSや商用アプリケーションは実務段階では自前計算機環境や商用クラウド環境での利用が想定され、研究開発段階のフラッグシップシステムなど特定の計算機利用のために準備段階での工数増加(大規模なチューニング作業)を避けられるように、コンパイラやライブラリ等により性能向上が図れることが期待される。そのためにはコンパイラやライブラリの開発段階だけでなく運用後も含めた継続的なサポートが必要である。

・「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、次期フラッグシップ計算機でも性能を出すことが期待される。

・データ駆動型科学による各種設計の実現に関して、大量データの生成などでHPC活用のコストパフォーマンス向上が普及に向けて重要であり、汎用的にAIや機械学習が使えるPython環境の導入などポータブル・シームレスな環境と柔軟なワークフローの構築などのUX(ユーザエクスペリエンス)整備が期待される。

アカデミアと連携したアプリケーションの研究開発段階だけでなく、普及段階までの支援の継続

・「京」や「富岳」向けに開発されてきたアプリケーションで産業界での利用実績の高いものについて、長期的な支援が必要である。研究開発段階から実務段階まで一般的に10年以上を要する。このため、研究開発段階だけでなく、継続的なアプリケーションの改修や使用する計算環境変化に合わせたチューニング等を行っていくための体制や費用、ポストクや留学生などの研究人材のキャリア形成を考慮した継続的な人材育成の施策や支援が期待される。