

# 次世代計算基盤に関する報告書

## 最終取りまとめ

令和6年6月  
HPCI 計画推進委員会

### 1. 本報告書の位置づけ

- 令和3年8月、科学技術・学術審議会情報委員会において、次世代計算基盤検討部会「中間取りまとめ」（別紙1、以下「令和3年中間取りまとめ」）が報告され、次世代計算基盤のあり方や次期フラッグシップシステムの必要性等について確認されるとともに、その後の検討は本 HPCI 計画推進委員会において進めることとなった。
- その後、本委員会において、「令和3年中間取りまとめ」以降の国内外の情勢変化を確認するとともに次世代計算基盤のあり方について更なる議論を進めてきたところ、今般、特に次期フラッグシップシステムの性能や機能等について取りまとめを行う。
- 本委員会の取りまとめ結果については、情報委員会等の関係委員会に報告する。また、ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤を一体的に運用する体制等、引き続き検討を要する事項については、本委員会にて今後も継続的に議論を行うこととする。

### 2. 「令和3年中間取りまとめ」以降の情勢の変化

- 「富岳」は、汎用型のマシンとして世界最高水準の性能を達成し、コロナ対策や自然災害（線状降水帯・地震）などの社会的な課題への対応を含め、産学官の各分野で着実に成果を創出。
- 近年、シミュレーション、データサイエンスの進展や生成 AI に係る技術革新などにより、研究開発に必要な計算資源の需要が急拡大するとともに、AI とシミュレーション、さらには自動実験や

リアルタイムデータを組み合わせることで科学研究分野で活用する取組の重要性が指摘されるなど、求められる計算資源がこれまで以上に多様化している。このような中、国内外では、高性能な大規模計算環境を活用して AI 基盤モデルを開発し、この AI 基盤モデルを基に異分野の知識を融合し様々な用途のアプリケーションを展開するアプローチが趨勢となっている。

- こうした状況を踏まえ、令和 4 年から稼働を開始した米国の Frontier や令和 5 年から稼働を開始した米国の Aurora をはじめ、今後も、米国、欧州、中国など世界各国で、「富岳」を上回る性能のエクサスケールスーパーコンピュータの開発・高度化が加速する見込み。また、近年稼働を開始した世界最高水準のスーパーコンピュータにおいては、CPU に加えて GPU などの加速部（アクセラレータ）を有し、計算の一部を加速部で処理することで最適化を図ることが主流となっている。
- 半導体の微細化は現在も進んでいるものの、微細化による性能上昇が鈍化するなど、微細化が限界を迎えつつあることが指摘されている。一方、現在の多くの大規模計算においては、計算処理能力に加え、メモリの容量や帯域幅が律速となっていることから、今後も拡大を続ける計算資源需要にスーパーコンピュータが対応していくためには、革新的なメモリ実装技術の導入をはじめとする 3次元集積回路実装が重要となる。
- 量子コンピュータについては、実用化に向けては超伝導方式をはじめとする様々な方式が検討されているが、未だに多くの課題が存在している。一方で、技術開発は進展しており、スーパーコンピュータとのハイブリッド環境での利活用の検討・実証が進められるなど、今後の発展への期待が高まっている。
- 経済安全保障や産業振興の観点から、国内半導体産業への大規模な支援が実施され、我が国の半導体分野をはじめとするデジタル産業の再興を目指した官民一体となった取組が進められている。
- また、情報処理を活用した先進事例を生み出し、科学分野のみな

らず我が国及び世界の産業の発展につなげるために、AI 技術のさらなる活用やソフトウェアの共通化等などによるユーザビリティ向上やシームレス化の重要性が指摘されている。

- このような状況変化を背景として、アカデミアや産業界からは、今後の計算科学分野や情報科学分野、ひいては情報産業を支える人材が不足しつつあることについても声が上がっている。

### 3. 次世代計算基盤に求められるフラッグシップシステム

近年、生成 AI の登場などにより、計算科学だけでなく科学技術全体、そして産業競争力等の観点からも、今後、計算基盤の重要性がさらに増し、求められる機能も多様化しつつ大きく移り変わっていくことが予想される。このような社会情勢の中であっても時代の要請に応える計算基盤を常に提供していくために、次世代のフラッグシップシステムには以下のような役割が求められる。

- 科学技術分野において AI を活用する「AI for Science」の取組を通じて、研究サイクルの飛躍的加速や研究探索空間の拡大といった科学研究の革新など、新たな時代を先導し、国際的に卓越した研究成果を創出していくこと
- このためには、計算速度の指標である TOP500 など単一の尺度を対象としたランキングのみを追求するのではなく、AI 性能をはじめ、あらゆる先端分野において世界最高水準の計算能力を提供すること
- また、10 年など長期間にわたり同一のシステムで稼働し続けるのではなく、多様化・拡大を続ける需要の変化に柔軟に対応し、時代時代の要請に応じた十分な性能を常に提供し続けること
- 自国の技術を中心にスーパーコンピュータを開発・整備する能力を確保し、人材育成や産業競争力の維持・発展に資するコア技術を特定すること

- ▶ 利用が大きく拡大するとともに、その要素技術が世界の情報基盤に採用され、広く普及することで我が国の産業競争力や経済安全保障の強化に資すること

具体的には、以下を提案する。

(新たなフラッグシップシステムに求められる性能・機能)

- 科学者コミュニティの試算では、我が国の研究開発分野での計算資源ニーズに応えるためには、2030年ごろに、通常のシミュレーションで少なくとも「富岳」の5倍以上の計算能力、AI向けの計算能力で約40～90EFLOPS程度の計算能力を有する計算資源が必要であり、その後もさらに高い計算性能が必要と見込まれている。また、調査研究(FS)においては、このような計算資源需要を満たすシステムが十分な実現可能性を持って検討が続けられている。
- したがって、今後、こうしたコミュニティの試算や産学官の更なる利用の拡大も見越しつつ、遅くとも2030年頃の運転開始を目指し、電力性能の大幅向上により、既存の「富岳」ユーザに対しては実効性能として現行の5～10倍以上の計算能力<sup>1</sup>を提供しつつ、AI性能<sup>2</sup>については運用開始時点で世界最高水準(実効性能<sup>3</sup>として少なくとも50EFLOPS以上)の利用環境を提供することを目標として、フラッグシップシステムの開発・整備を行うべき。
- その際には、今後も自国の技術を中心にスーパーコンピュータを開発・整備する能力を国内に維持し、国内人材育成や産業競争力の維持・発展に資するため、「京」や「富岳」の開発において蓄積してきたCPUの開発及びシステムのインテグレーションに加え、メモリ実装技術の開発をコア技術と位置付けて継続的に開発を行うべきである。また、更なる性能向上や生成AIへの対応を図るた

---

<sup>1</sup> 多くの科学技術計算や産業アプリケーションで使用される倍精度浮動小数点数演算等を利用する演算の計算能力

<sup>2</sup> AIの学習・推論に必要となる、低精度で大規模な行列演算を行う際の計算能力

<sup>3</sup> 2030年代に想定される最先端の基盤モデルを数か月程度で学習可能な実効的性能

め、加速部を導入するべき。さらに、大規模計算においてはメモリ性能が律速となっていることを踏まえて、最先端のメモリ実装技術を採用し、利用者にとってさらに魅力的なシステムとなることを期待。

これに加え、システムソフトウェア開発においては、アプリケーションやAI等の研究開発のプラットフォームとして、世界で使われている基本的なアプリケーションがこれまで以上に多様かつ円滑に利用できるように設計し、運用開始後も継続してシステムソフトウェアの改善を図るべきである。

また、フラッグシップシステム開発の成果を最大化し、わが国の産業競争力の強化や経済安全保障を含む社会的課題の解決に貢献していくためには、その要素技術（ハードウェアやソフトウェア）が成果としてクラウドを含む世界の情報基盤に採用されるとともに、開発の成果が社会実装され、広く普及することが重要。

（開発・整備の手法）

- 次世代計算基盤のフラッグシップシステムにおいては、多様化・拡大を続ける需要の変化に柔軟に対応し、時代時代の要請に応じた十分な性能を常に提供し続ける必要が生じている。そのために、フラッグシップシステムの開発・整備においては、
  - ① 「京」から「富岳」への移行時のようなシステムの入替えによる「端境期」を極力生じさせず、利用環境を維持すること
  - ② 最新の技術動向に対応するために適時・柔軟にシステムを入れ替え又は拡張可能とし、進化し続けるシステムとすること
  - ③ （例えば新たなアクセラレータやメモリなど、）現時点では未成熟であっても将来の計算資源需要への対応に大きく貢献し得る技術に関しては、AI技術の次の技術革新を含めた中長期的な視点から技術評価・研究開発を継続し、将来のシステムの入替え・拡張の際に反映させること

が重要。

- 今後のシステムの整備・入れ替え・拡充等にあたっては、政府全体として半導体産業への大規模な支援を実施していることを踏まえ、半導体産業をはじめとする国内企業の製造技術の成熟状況を見極めつつ構成要素の調達を進めることが求められる。

(利用拡大に向けた取組)

- 計算資源の需要は多様化しており、TOP500 などの単一の尺度を対象としたランキングのみを追求するのではなく、国内の多様な計算資源需要を着実に満たすとともに、新たなシステムによる世界最高水準の利用環境の提供を通じ、我が国の計算科学を中心とする様々な科学技術・産業分野の研究開発を先導することを期待。更に、科学技術分野における AI 基盤モデルの活用が促進されることを期待。
- アプリケーション開発においては、これまで発展してきたシミュレーションを中心とする計算科学をさらに発展させるため、加速部の導入などに際してもこれまで整備を行ってきたアプリケーションが安定して継続的に利用できるようにするとともに、必要に応じて改良を進める。あわせて、幅広いアプリケーションの利用を促進する。また、近年の動向を踏まえて、生成 AI の利用など、HPC の新たな領域を開拓することが期待されるアプリケーションの開発に取り組む。
- 革新的な成果の創出に加えて、我が国の計算科学を支える人材育成を目的として、フラッグシップシステムの整備により挑戦的な課題に取り組むことが可能な環境を提供するとともに、フラッグシップシステムを活用した成果創出の加速に加えて、HPC の新領域を拡大する研究開発を推進することを含めて研究開発プログラムを実施する。
- また、フラッグシップシステムの整備においては、システムソフトウェア環境の相互互換性を高めるとともに水平展開し、また、開発されたアプリケーションが国内外のシステムに簡便に移植できることも、利用者の拡大の観点からは重要。新たに整備されるフラ

ッグシップシステムが、これまで以上に、国内の産学の幅広い研究者による協働や、国際連携に活用されることを期待。

(開発主体について)

- ここまでの内容を踏まえ、これまで「京」や「富岳」を開発・整備・運用した実績を有する理化学研究所を開発主体候補として、ヒアリングを行った。理化学研究所からは、フラッグシップシステムや開発主体としての活動について別紙2のとおり説明があり、いずれも求められる性能・機能や開発・整備の手法・体制などを満たすため、妥当であると考えられる。
- そのため、理化学研究所を開発主体とし、フラッグシップシステムの開発・整備に向けて引き続き検討を進めることが適切である。
- なお、検討にあたっては、様々な利用方法においても十分な計算能力を提供できるよう留意するとともに、開発リスクに十分留意しつつ費用対効果を求め、開発費用の過度な増大を避けること、基本設計終了後などの節目において HPCI 計画推進委員会等の評価を適時受けることが求められる。

#### 4. 次世代計算基盤全体に係る事項の検討状況と今後の検討方針

- 各研究機関の連携による HPCI に接続される計算機の戦略的な整備、一体的な運用のための体制・制度については、フラッグシップシステムの性能・仕様を踏まえて整備を進めるため、今後数年でさらに検討を深め、具体化する。
- データサイエンスや AI 技術とシミュレーションの融合、リアルタイムデータ処理などのデータの収集、処理を効率的に行う必要がある利活用ニーズの拡大を踏まえ、従来の計算資源の配分による効率的な利用に加えて、大規模なデータを個別/共同で管理し、効率的に取り扱うことができるデータ基盤の在り方についても、今後検討を進める。

- その際、ソフト・ハードの両面におけるセキュリティ確保、個人データを扱う際のプライバシー保護など、利活用拡大に向けた課題を適切に整理し、技術面及び制度面において丁寧な対応を行っていく必要がある。
- 量子コンピュータについては、現時点で実用的な計算基盤として幅広く提供する段階には至っていないが、スーパーコンピュータとのハイブリッド計算の検討・実証が進んでいることを踏まえ、量子コンピュータを用いた計算を様々な分野の研究者が試すことができる環境を整備することを目指し、HPCI への接続や利用環境の提供を検討する。
- 計算機に係るサプライチェーンが複数の国にまたがっていることを踏まえ、我が国の技術の発展、人材育成を推進するため、スーパーコンピュータの整備・運用・利用に係る関係国との連携を強化する。特に世界を技術的にリードする米国については、システムソフトウェア分野のみならず、アプリケーション開発やシステム開発を含めた幅広い分野で協力関係を強化することを目指す。
- これまで培ってきた技術の継承や中長期的な技術の発展、それらを支える人材や HPC を利活用する人材の育成のため、半導体レベルのハードからソフトウェアまでを一気通貫で理解する人材など、我が国の技術の発展の観点から重要性が高いスキルセットを特定し、人材の育成を継続的に支援する取組について検討する。

以上

## HPCI 計画推進委員会 議題一覧（第7期：2023年4月1日～）

### 第53回（2023年5月31日）

- ・「富岳」、HPCI 関係の最近の取組状況について
- ・「富岳」・HPCI の運営について
- ・「HPCI システムの今後の在り方」に関する調査検討（中間報告）
- ・HPCI 計画推進委員会における検討事項について

### 第54回（2023年10月16日）

- ・HPCI 計画推進委員会における検討事項について
- ・「富岳」成果創出加速プログラムの中間評価について
- ・「富岳」を活用した生成 AI の研究開発について
- ・産応協 HPC 技術ロードマップについて
- ・HPC と量子コンピューティングの連携に向けた取組状況について

### 第55回（2023年12月18日）

- ・HPC を巡る国際動向及び次世代計算基盤の取りまとめに向けた検討について
- ・計算科学ロードマップについて
- ・AI for Science について
- ・「次世代計算基盤に係る調査研究」における検討状況（運用技術、新計算原理）について

### 第56回（2024年2月9日）

- ・我が国における半導体産業の戦略について
- ・HPCI コンソーシアム調査検討ワーキンググループ 提言案について
- ・「次世代計算基盤に係る調査研究」の検討状況について ※非公開
- ・次世代計算基盤に関する報告書 中間取りまとめ案について ※非公開

### 第57回（2024年3月19日）

- ・令和6年度予算案について
- ・令和6年度の政策対応課題について
- ・拡張型整備の実現可能性について
- ・次世代計算基盤に関する報告書 中間取りまとめ案について

### 第58回（2024年4月17日）

※「次世代計算基盤に係る調査研究」評価委員会（第9回）と合同開催

- ・理化学研究所からのヒアリング
- ・AI for Science ロードマップについて

### 第59回（2024年6月5日）

- ・次世代計算基盤に関する報告書 最終取りまとめ案について
- ・今後の HPCI の運営業務計画について

## HPCI 計画推進委員会 委員名簿

	合田 憲人	国立情報学研究所・アーキテクチャ科学研究系 教授
	伊藤 公平	慶應義塾 塾長
	伊藤 宏幸	ダイキン工業株式会社・テクノロジー・イノベーションセンター リサーチ・コーディネーター
	上田 修功	理化学研究所 革新知能統合研究センター 副センター長/ NTT コミュニケーション科学基礎研究所機械学習・データ科学センタ 代表
	梅谷 浩之	株式会社トヨタシステムズ制御解析本部シミュレーション技術室 MASTER
○	小林 広明	東北大学大学院 情報科学研究科 教授/ 東北大学サイバーサイエンスセンター センター長特別補佐/ 東北大学 総長特別補佐 (ICT 革新担当)
	田浦 健次郎	東京大学大学院 情報理工学系研究科電子情報学専攻 教授
	館山 佳尚	国立研究開発法人 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究センター グループリーダー/ 東京工業大学 科学技術創成研究院 化学生命科学研究所 教授
	中川 八穂子	日立製作所 研究開発グループ デジタルサービス研究統括本部 デジタルサービスプラットフォームイノベーションセンタ シニアプロジェクトマネージャ 兼 研究開発本部 技術戦略室 チーフデジタルオフィサー
	福澤 薫	大阪大学大学院 薬学研究科 教授
◎	藤井 孝藏	東京理科大学 工学部情報工学科 客員教授
	朴 泰祐	筑波大学 計算科学研究センター センター長
	棟朝 雅晴	北海道大学・情報基盤センター センター長・教授

(◎ : 主査、○ : 主査代理、50音順)

令和6年6月

次世代計算基盤検討部会  
中間取りまとめ

令和3年8月27日  
科学技術・学術審議会情報委員会  
次世代計算基盤検討部会

## 目次

<b>1. はじめに</b> .....	3
<b>2. 次世代計算基盤に係る政策・技術動向</b> .....	4
(1) 次世代計算基盤に係る我が国の政策動向 .....	4
(1)－1 計算基盤に係る事業の実施と評価.....	4
(1)－2 審議会等における検討.....	6
(1)－3 政府方針等.....	7
(2) スーパーコンピュータに係る各国の取組状況.....	8
(3) 計算科学、計算機科学技術の動向.....	9
(4) 関連技術に係る動向.....	10
<b>3. 我が国における次世代計算基盤の必要性</b> .....	13
(1) 科学技術・学術情報基盤の必要性.....	13
(2) HPCI の必要性.....	13
(3) 「フラッグシップシステム」の必要性.....	14
<b>4. 次世代計算基盤のあり方</b> .....	15
(1) 次世代計算基盤を構成する事業の方向性、目的の明確化.....	15
(2) アプリケーション開発の方向性.....	21
(3) 効果的な運用、利活用促進について.....	21
(4) 分野振興、人材育成について.....	22
<b>5. おわりに</b> .....	22

## 1. はじめに

- ・ 令和3年3月9日、スーパーコンピュータ「富岳（ふがく）」の共用が開始された。「富岳」は、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化、イノベーションの創出や国民の安心・安全の確保につながる最先端の研究基盤として平成26年度から開発された。世界最高水準の性能と汎用性を有し、共用開始前より、新型コロナウイルス感染症対策に一部の計算資源を緊急的に活用し、積極的に成果公開を行ってきたが、今後、さらに様々な分野で活用され、「富岳」の成果を国民がいち早く実感できるようにすることとともに、「富岳」を用いることで初めて得られる成果が継続的に生み出されることが期待されている。
- ・ 令和3年3月に閣議決定された第6期科学技術・イノベーション基本計画をはじめ、統合イノベーション戦略、AI戦略等において指摘されているとおり、近年、大量かつ多様なデータの収集や活用が進展し、データ駆動型科学が重要視される中で、シミュレーションやAI等を連携した研究の重要性がより一層高まっている。さらに、新型コロナウイルス感染症の拡大を契機として、研究のリモート化やスマート化、研究設備・機器への遠隔からの接続、データ駆動型研究の拡大など、世界的にも研究活動のデジタルトランスフォーメーション（研究DX）の必要性が高まっている。
- ・ 令和2年12月に取りまとめられたデータ戦略タスクフォース第一次とりまとめ、令和3年7月に取りまとめられた半導体戦略等でもデジタルインフラやそれを支える半導体技術の重要性が指摘されているとおり、社会のデジタル化を進め、サイバー空間とフィジカル空間の融合によって新たな価値を創出していく Society 5.0を実現するため、スーパーコンピュータのみならず、データセンターからエッジコンピューティング、それらを繋ぐネットワーク等様々な形態の社会情報基盤がますます重要となっている。また、これらの基幹技術を自国で保有することは経済安全保障の観点からも重要である。
- ・ 主として計算基盤、ネットワーク、データ基盤で構成される科学技術・学術情報基盤は、科学技術の様々な分野において不可欠な研究開発基盤であるだけでなく、産業競争力の強化、SDGs（Sustainable Development Goals）の達成や自然災害への対応、国民の安心・安全の確保等我々の社会が直面する様々な課題の解決を加速する社会情報基盤の発展をけん引する役割も担っている。
- ・ このように科学技術・学術情報基盤の重要性は高まる一方で、ムーアの法則の終

焉や、我が国の半導体関連産業の構造変化等、周辺の技術的・社会的・産業的課題は多い。

- ・ 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必要不可欠である。一方でそのあり方については、国内外の政策動向や技術動向を踏まえ、社会情報基盤全体の動向を注視しつつ、研究開発・技術開発の継続性維持とそれに基づく人材育成・確保の観点も含め、科学技術・学術研究の発展、ひいては産業競争力の強化、社会的課題の解決を支える科学技術・学術情報基盤全体における計算基盤の位置付け、意義、必要性等を改めて整理しつつ、検討を行うことが必要である。
- ・ 本部会は、次世代計算基盤、データ処理環境及びネットワークに係る事項について調査審議を行う組織として、令和元年10月に科学技術・学術審議会情報委員会の下に設置された。
- ・ 社会の大きな変化を踏まえ、ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤の在り方について、科学技術・学術情報基盤全体における計算基盤の役割、計算基盤の活用（計算科学及びAI・データ駆動型科学等）により期待される成果、計算基盤を構築し運用する計算機科学の立場などから学术界、産業界等における今後のニーズ及びシーズ等について、委員や有識者からのヒアリングを行いつつ議論を行った。（具体的なヒアリング内容は別紙1のとおり。）
- ・ 今般、ここまでの議論を一旦とりまとめ、ポスト「富岳」時代に求められる次世代計算基盤の在り方の方向性について、中間まとめとして報告する。この方向性を踏まえ、今後必要な調査研究等を行いつつ、引き続き検討を行うことが必要である。

## 2. 次世代計算基盤に係る政策・技術動向

### (1) 次世代計算基盤に係る我が国の政策動向

#### (1)－1 計算基盤に係る事業の実施と評価

- ・ 文部科学省では、スーパーコンピュータ「京（けい）」（以下、「京」という。）を中核として、国内の大学等の主要な計算基盤を学術情報ネットワーク（Science Information NETwork（SINET））で結び、全国の利用者が一つのユーザーアカウ

ントで用途に応じて多様な計算資源を利用できる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）の整備・運用を平成 24 年度から開始した。また、平成 26 年度から令和 2 年度にかけてスーパーコンピュータ「富岳」の開発・整備を推進し、令和 3 年 3 月から「富岳」の運用を開始し、現在は「富岳」を中核として HPCI を引き続き運営している。

- ・ スーパーコンピュータ「京」は平成 17 年度に開発を開始し、平成 24 年度に運用を開始した。安定した高い稼働率で運用され、多くの優れた研究成果を創出し、令和元年 8 月に運用を終了した。HPCI 計画推進委員会及び情報委員会では、「京」の運営の事後評価を令和 2 年度に実施した。この中では、
  - ・ 約 7 年間にわたり、のべ 1 万人以上、200 社以上の企業に利用され、我が国の国民の安心・安全の確保、健康医療の発展、産業競争力の強化などといった様々な分野において「京」でなければ実現し得なかった画期的な成果が多数創出されたこと
  - ・ 「京」の開発・運用を通じ、開発・運用とともに計算科学及び計算機科学の高度化研究を行う研究拠点が形成され、国内外の大学等教育機関や研究機関との連携により技術の波及や人材育成が進んだこと
  - ・ ポスト「京」として開発された「富岳」の開発、運用及び活用に対し、必要な計算科学及び計算機科学の様々な技術や知見を与え、現在の我が国の科学技術・学術計算基盤を構築する世界最先端の計算科学及び計算機科学の発展に貢献したこと
  - ・ 「京」と同じアーキテクチャを持つ CPU を搭載したスーパーコンピュータが東京大学、名古屋大学、九州大学等に導入されるなど、「京」の技術が着実に広がっていること
  - ・ 産業界の利用促進に努め、中には成果が社会実装され商品化に繋がった事例もあり、スーパーコンピュータによる産業技術の発展に寄与したこと等により、「京」が 計算科学（Computational Science）及び計算機科学（Computer Science）の発展、更に、幅広い分野の発展に貢献する情報基盤として、科学技術全体の発展のために果たした役割は大きいと評価されている。さらに、今後の展望として、
  - ・ 「富岳」の高い性能を活かした成果、「富岳」を用いて初めて得られる新しい科学技術の成果が継続的に生み出されること
  - ・ 計算科学・計算機科学の中長期的な展望についても「富岳」を活用した検証が実施され、「富岳」以降の中長期的な計算基盤の在り方の議論に活かされること等が期待されると指摘された。

- ・ 同年度には HPCI の運営の中間評価も実施された。「高速ネットワークにより「京」及び「富岳」を中核として国内の大学等のシステム（いわゆる第 2 階層計算資源）や共用ストレージを結んだシームレスな利用を実現する計算環境の構築により、世界トップクラスのスーパーコンピュータやその他の計算資源をユーザーが容易に利用できる計算科学技術環境を実現する」という事業目的に対し、我が国全体で研究ニーズと計算資源をマッチングし、多様な分野において優れた研究成果が創出されたこと、適切な利用者支援等により利用者が拡大されていること等の観点から、引き続き我が国の科学技術・学術の発展を支えるインフラとしてその運営を継続すべきと評価されている。また、令和 2 年度に新型コロナウイルス感染症対策に資する課題の臨時公募を行う等、緊急事態への迅速な対応に当たり、国内の主要な計算基盤を有効に活用する枠組みとして機能したことも高く評価された。また、今後の展望として、HPCI の長期的な発展については、今後の我が国の科学技術・学術を支える情報基盤の将来像、利用者の需要の動向、新規分野への利用拡大、新しい技術やアーキテクチャの導入の必要性、人材育成の機能強化などについて、世界的な動向も踏まえながら様々な立場からの意見を集約しつつ、今後引き続き検討する必要がある、と指摘されている。

#### (1)－2 審議会等における検討

- ・ 平成 29 年 6 月に設置された「HPCI 計画推進委員会 将来の HPCI の在り方に関する検討ワーキンググループ」において、計算科学及び計算機科学を取り巻く状況の大きな変化を踏まえ、将来の日本の計算科学及び計算機科学のあり方についての検討が行われ、令和元年 6 月に報告書が取りまとめられた。その中では、将来の HPCI のあり方について、
  - ・ 最先端の科学的成果を創出するための HPCI を、引き続き整備・運用していくことは我が国の科学力、産業力等の維持・向上に必要不可欠。
  - ・ 将来の HPCI の姿を具体化していく上で、アーキテクチャの多様性とプラットフォームの整備、データ利用基盤の構築、ボーダレス化の進展、人材育成に十分留意しながら検討すべき。といった方向性が提言されている。
- ・ 本部会の下に設置された「次世代学術情報ネットワーク・データ基盤整備作業部会」においては、Society 5.0 を具現化するための新たな価値創造システムを構築する必要性やオープンサイエンスの概念が世界的に急速な広がりを見せている状況を踏まえ、次世代の学術情報ネットワークとデータ基盤整備の在り方について検討が行われ、令和 2 年 7 月、「次世代の学術情報基盤ネットワークとデータ

基盤整備の在り方について（審議まとめ）」が取りまとめられている。この中では、我が国の大学・研究機関が国際競争力を保ち、優れた教育研究活動を展開していくためには、セキュアで高度な教育研究環境の持続的な確保につながる学術情報基盤の整備が不可欠であること等が提言されている。

- ・ 情報委員会においては、令和元年10月に「第6期科学技術基本計画に向けた今後のHPCIの方向性に関する検討論点まとめ」が取りまとめられ、各種応用分野に強みを発揮する専用機の発展、多様なシステムからなるバランスの取れたHPCI、ソフトウェア技術と人材育成等の重要性が示されるとともに、令和2年9月には「コロナ新時代に向けた今後の学術研究及び情報科学技術の振興方策について」が取りまとめられ、コロナ新時代に向けた学術研究及び情報科学技術の振興に当たっては、学術研究・情報科学技術が社会の負託に応えられるよう、諸施策の推進を通じ、研究を継続するためのレジリエンスの確保、新しい研究様式への転換及び研究者の交流・連携の担保を実現すべき旨が提言されている。

#### (1)－3 政府方針等

- ・ 第6期科学技術・イノベーション基本計画において、現状認識として、
  - ・ 我が国のデジタル研究基盤については、2020年、4つのスーパーコンピュータランキングにおいて、世界1位となった「富岳」や学術情報ネットワーク（SINET）などのインフラの整備が進み、質の高い研究・教育に貢献している。とされている。また、同計画における「あるべき姿とその実現に向けた方向性」及び「具体的な取組」として、
  - ・ ネットワーク、データインフラや計算資源について、世界最高水準の研究基盤の形成・維持を図り、産学を問わず広く利活用を進める。
  - ・ スパコン計算資源については、2021年よりスーパーコンピュータ「富岳」の本格的な共用を進めるとともに、国内の大学、国立研究開発法人等のスパコン計算資源について、全国の研究者の多様なニーズに応える安定的な計算基盤として増強する。加えて、次世代の計算資源について、我が国が強みを有する技術に留意しつつ、産学官で検討を行い、2021年度までに、その方向性を定める。この検討の結果を踏まえ、必要な取組を実施する。とされている。
- ・ データ戦略タスクフォース第一次とりまとめにおいても
  - ・ これまでデジタル化を支えるインフラとしては主に通信インフラが念頭に

置かれてきたが、社会全体のデジタル化を支えるためには、通信インフラにとどまらず、データを貯蔵するクラウドインフラ、データを処理し付加価値を与える計算インフラや半導体デバイス、データの信頼性を高めるためのトラストインフラなど幅広いインフラを念頭にデジタルインフラの整備を図っていくことが求められている。

- ・ デジタルインフラとして、スパコン富岳などの世界トップレベルの高度な計算資源を今後計画的に整備するとともに、当該資源を研究者だけでなく企業から国民に至るまで社会の幅広い層が活用できる仕組みを構築する必要がある。

と指摘されている。

## (2) スーパーコンピュータに係る各国の取組状況

- ・ 欧米、中国を中心に、科学技術・イノベーションだけでなく、産業競争力の強化や安全保障の観点からもスーパーコンピュータが重視されており、多額の投資が行われ、その開発が活発に行われている。
- ・ 米国で2016年に開始された Exascale Computing Project では合計約5,500億円以上が投入され、2021年以降にエクサ級のスーパーコンピュータを複数台導入する計画が立てられている。また、2022年度の予算教書においても、エネルギー省（Department of Energy (DOE)）や国立科学財団（National Science Foundation (NSF)）の関連予算として、高速コンピューティングやネットワークへの支援が含まれている。加えて、国家科学技術会議（National Science and Technology Council (NSTC)）が2020年にまとめた戦略計画では、科学技術や経済的競争力、国家安全保障においてリーダーシップを維持する基盤として、産・官・学・NPOにまたがる戦略的リソースとして、計算資源、データセット、AIに基づくデータ分析等を統合する「コンピューティング・エコシステム」を活用すること、コンピューティングとそのアプリケーションの未来を推進するべく基礎・応用・橋渡し研究開発を支援すること等が戦略目標として掲げられている。
- ・ 欧州のプロジェクト（EuroHPC）では、2021年以降に数百ペタ級のマシンを3箇所に整備する計画のほか、エクサ級のスーパーコンピュータの整備を含め、HPC関連として合計約1兆円以上の資金を投入する計画がある。産業界主導のシンクタンクであるETP4HP（European Technology Platform for High Performance Computing）が2020年にまとめたHPCの技術ロードマップでは、新しいコンセプトとして、HPCを他のデジタル技術と組み合わせリアルタイムなソリューション

を作り出すことを目指す Digital Continuum が提案されている。また、デジタルトランスフォーメーション (DX) を加速するための新規プログラムである「デジタル・ヨーロッパ」 (Digital Europe) においては、2021 年～2027 年の 7 年間で 75 億 8,800 万ユーロ (約 9,973 億円) を投入し、スーパーコンピュータ、AI、サイバーセキュリティ等の機能強化に必要なインフラを構築し、欧州の DX を促進することが掲げられている。

- ・ 中国でも、エクサ級のスーパーコンピュータに係る研究開発が進められているほか、科学技術・イノベーション関係の主要事項として、デジタル技術の革新的アプリケーションの強化が挙げられており、ハイエンドチップ、AI アルゴリズム等の主要技術の研究開発、ハード・クラウド・ソフトの統合研究開発、量子計算等の先端技術開発、情報・ライフ・材料等との融合強化等が計画されている。

### (3) 計算科学、計算機科学技術の動向

- ・ 計算科学の観点、つまり計算資源を利活用して科学的課題の解決に挑戦する観点からは、超高速・高並列可能な計算資源があればあるほど、計算対象に対してより大規模・長時間・多数の条件下でのシミュレーションが実行可能となる。それぞれの研究分野において、パラダイムシフトによる新たな推論や発見を期待するには、圧倒的性能・機能を持つ計算資源が求められる。
- ・ 従来の単なる数値計算だけでなく、AI によるパラメータ推定を活用したシミュレーションの効率化、データ同化による観測とシミュレーションの連携も進んでいる。このような計算科学と AI・データ科学との連携による社会的課題の解決など、スーパーコンピュータの利活用の範囲は拡大してきている。また、データ駆動型研究への移行に伴い、新しい大量データの生成を行う機能 (実験装置) としてのスーパーコンピュータの存在価値も注目されている。
- ・ 高性能な計算環境の必要性は高まる一方、計算機の性能向上のためのアーキテクチャ・システム等の設計・開発等計算機科学の観点からは、いわゆるムーアの法則の終焉や、従来とは異なる利用形態 (外部データベースのデータを直接取り込みながらリアルタイムに処理を行うことや、クラウド技術との連携による柔軟な資源配分等) への進化など、多くの技術的課題があることも事実である。
- ・ これまでに、学术界及び産業界の計算機科学分野の研究者を中心に行われている検討においては、電力消費量を「富岳」の開発目標と同程度と仮定した場合の 2028 年

の予測性能は、最も積極的な予測で「富岳」の性能の 3.37 倍（メニーコア型システム）、33.5 倍（GPU 混載型システム）と予測されており（NGACI : Next-Generation Advanced Computing Infrastructure「次世代先端的計算基盤に関する白書」より引用）、更なる性能向上を期待している計算科学側のニーズに応えるためには、アプリケーション開発とシステム開発における協調設計（いわゆる Co-design）をより一層進めるとともに、従来の技術の延長ではなく、飛躍的な技術の開発が必要となることが見込まれる。

- ・ スーパーコンピュータ全体の消費電力は、計算規模の拡大とともに増大しており、システム構築の大きな制約条件となっている。また、「京」から「富岳」への移行期に生じた「フラッグシップシステム」不在の期間、いわゆる「端境期」の存在についても検討が必要である。
- ・ CMOS デバイスの微細化がコスト的にも技術的にも限界に近付く中で、CPU 単体の性能向上にも陰りが見え始めている。集積度以外の様々な観点から CMOS デバイスを超える性能を持つ新デバイスや原理の異なる新しい計算機アーキテクチャへの期待も高まっている。
- ・ 近年、CPU コア数の増加やアクセラレータ（GPU・FPGA 等）の導入によってアーキテクチャの複雑化が進んでいる中で、これらを管理するシステムソフトウェア技術は、システム全体の実性能を高めるうえで非常に重要な役割を果たしており、その開発や保守技術の維持も大きな課題である。また、HPCI のように複数かつ多様なシステムの利活用にあたり、様々なプラットフォームやシステム環境におけるソフトウェアパッケージの管理や、コンテナ環境といった運用に関する技術の重要性も高まっている。
- ・ 「富岳」の開発プロジェクトが開始された頃と比較して、今日では国内外のプロバイダーによるサービスが数多く存在・充実しており、「富岳」でもクラウド的利用を実証研究中である。科学技術・学術研究においてもクラウド計算サービスが広く利用されるようになっており、次世代計算基盤に対しても利用者側の利用形態に関するニーズも従前とは異なることに留意する必要がある。

#### （４） 関連技術に係る動向

##### （ネットワーク）

- ・ 国内では、国立情報学研究所（NII）を運用母体とする SINET の運用が 1992 年に開

始された。2016年4月からはSINET5として運用され、日本全国の大学等を100Gbpsの高速回線で接続している。2020年3月末時点で、全国の大学・研究機関等932機関が参加している。今後の取組としては、上述した「次世代の学術情報基盤ネットワークとデータ基盤整備の在り方について（審議まとめ）」において、400Gbps光伝送技術と5Gモバイル技術が融合した革新的な「ネットワーク基盤」（SINET6）等による最先端の研究環境「次世代学術研究プラットフォーム」を、2022年4月に、世界に先駆けて実現するとしている。

- ・ 米国や欧州でも、国内ネットワークを100Gbps回線から400Gbps以上の回線へ増速する計画を推進している。
- ・ 国内外の企業において、光技術の活用による低消費電力、高品質・大容量、低遅延の伝送の実現に向けた技術開発も進められている。

#### （半導体）

- ・ 過去30年間、半導体世界市場の拡大にもかかわらず、日本の存在感は素材や製造装置では一定の世界的シェアを保有する一方で、各種半導体製品における設計や製造面では低下している。
- ・ デジタル化の進展、経済安全保障、サプライチェーン強靱化、カーボンニュートラル目標達成など、成長産業としての側面だけではなく、様々な観点での半導体の重要性の高まりを受けて、諸外国は、国際分業の体制の下でも自国技術開発、自国内での設計・生産能力など基幹技術の確保へと政策を転換している。
- ・ 「京」では国内でCPU製造を実施した一方、「富岳」ではCPU設計は国内企業で実施したものの、製造は海外企業へ委託した。海外への製造委託については、核となるCPUの設計技術の海外流出防止等、想定されるリスクへの十分な対応策が必要との指摘がある。ただ、次世代計算基盤に引き続き求められるハイエンドな半導体設計・製造技術については、現状を踏まえると、引き続き海外企業との連携が想定される。半導体戦略等を踏まえた関係機関の対応を注視しつつ、自国の技術として確保する部分と、世界的な標準的構成要素を利用する部分の見極めが重要である。

#### （量子コンピューティング）

- ・ 欧米や中国の企業において、量子コンピュータをはじめとする量子技術に積極的な投資を行っている。

- ・ 量子ビットの数が少ない、誤り訂正無しの量子コンピュータ（NISQ: Noisy Intermediate Scale Quantum）については、令和元年10月には、Googleが独自開発した量子コンピュータを用いて「量子超越（Quantum Supremacy）」を初めて達成（量子コンピュータがスーパーコンピュータをはじめとする従来のコンピュータを計算能力で上回ることを実証）したと発表している。また、令和3年7月には、東京大学とIBMが日本初のゲート型商用量子コンピューティング・システムを稼働したと発表した。ソフトウェアについては、言語設計から、アルゴリズム及び実装技術、アプリケーションまで、様々な技術において研究開発が進められており、その中には実用化に向けた研究開発の段階に入っているものも出てきている。しかしながら、全般的には、従来型の計算機と比べると技術確立の途上段階にある。
- ・ 汎用性が高いとされる誤り耐性量子コンピュータの実用化に向けては、現状、20～30年単位の時間を要すると見込まれているが、海外を含む各機関では研究開発が急速に進められており、これまでの予想より早く汎用型量子コンピュータの実現があり得ることに留意する必要がある。ソフトウェアについては様々な技術領域で具体的な実装が検討され始めたばかりであり、潜在的な課題の特定やその解決方法の模索など、量子計算科学・技術基盤の確立へ向けて基礎的な研究が進められている段階である。
- ・ 今後、スーパーコンピュータを活用した量子コンピュータ開発や計算科学の各分野におけるスーパーコンピュータと量子コンピュータの相補的な使い分けと連携システムの構築が想定される。引き続き研究開発の動向に注視する必要がある。

（脳型コンピューティング（ニューロモーフィックコンピューティング））

- ・ 脳の構造・機能の模倣により、AI処理等に求められる柔軟で高度な情報処理を人間の脳のエネルギー効率に迫る低消費電力で行うことを目指した「脳型コンピューティング」についても、米国・国防高等研究計画局（Defense Advanced Research Projects Agency（DARPA））のプロジェクトや、欧州のHuman Brain Project等で研究開発が進められている。
- ・ 国内でも、JSTの戦略的創造研究推進事業（さきがけ：革新的コンピューティング技術の開拓）や、NEDOの「高効率・高速処理を可能とするAIチップ・次世代コンピューティングの技術開発」における採択課題等で研究が実施されており、コンピュータシステムを進化させ続けるための新しい概念や技術の創出が期待される。

### 3. 我が国における次世代計算基盤の必要性

- ・ 本章では、社会情勢の変化等を踏まえ、科学技術・学術情報基盤と、それを構成する計算基盤の必要性について述べる。

#### (1) 科学技術・学術情報基盤の必要性

- ・ AI・データ科学の発展、社会のデジタル化の進展等を受け、主として計算基盤、ネットワーク、データ基盤で構成される科学技術・学術情報基盤は、科学技術の様々な分野において研究を支える、重要な研究開発基盤である。情報科学や計算機科学分野に限らず、医学・化学・物質科学・気象・防災・生命科学・ものづくり等のスーパーコンピュータをこれまでも利用してきた研究分野はもちろん、人文・社会科学や融合分野等を含め、今後さらに幅広く科学技術・学術分野全体の発展を支え、技術・人材の育成、産業競争力の強化、Society 5.0の実現、我が国が直面する社会的課題の解決に資するものとして必要不可欠である。
- ・ 社会のデジタル化が進む中、新型コロナウイルス感染症の拡大等、国際情勢の変化により自国で社会情報基盤を開発・製造・運用できるという経済安全保障の観点が見え、関連技術・人材の維持は、ますます重要性が高まっている。こうした技術や人材を維持・育成し、社会情報基盤の発展をけん引するためにも、科学技術・学術情報基盤の果たす役割は大きい。
- ・ この中で、計算基盤は高精度・高速なシミュレーションやデータ解析を可能とし、実験不可能な自然現象等を再現して実験を代替することや極限状態を含む広範な探索範囲から予測を超える未来や未知の状態の発見を可能とする計算科学のツールとして重要な役割を担っている。

#### (2) HPCI の必要性

- ・ HPCI は、高速ネットワークにより「京」や「富岳」のいわゆる「フラッグシップシステム」を中核として国内の大学等の主要な計算資源や共用ストレージを結んだシームレスな利用を実現する計算環境を構築することにより、全国の多様な研究ニーズと計算資源をマッチングし、優れた研究成果を創出するハブとして機能している。また、新型コロナウイルス感染症が拡大する状況下において、研究の継続や、新型コロナウイルス感染症対応課題を臨時公募し計 14 課題を選定するなど、緊急事態に対応した機動的な研究の実施に貢献した。

- ・ 科学技術の各研究分野においても、更なる実効性能の向上とともに、計算資源の整備・共用へのニーズは高い。また、産業界からも、性能及び利便性の更なる向上とともに多様な計算機環境の提供が継続的に要請されている。
- ・ 個別分野毎に個別に計算基盤に投資するよりも、HPCI のような共通基盤を整備・活用する方が、各分野の研究の進展と効率的な研究環境の実現や維持の両面から考えて望ましいとも言える。
- ・ HPCI は次の観点から今後も重要である。①我が国全体で研究ニーズと計算基盤をマッチングし、多様な研究成果を創出するハブとなる。②新型コロナウイルス感染症等の緊急事態において、研究継続を支える基盤となる。また、主要な国内のスーパーコンピュータが連動して機動的に危機対応に貢献する枠組みとして機能する。

### (3) 「フラッグシップシステム」の必要性

- ・ 「京」は多様な研究分野で活用できる汎用性の高い世界最高水準の性能を目指すとして平成 17 年から開発され、TOP500 で 2 期連続で世界 1 位を獲得した後、平成 24 年から運用が開始された。その後 7 年間の運用期間中に「京」を超える演算性能を持つマシンが国内でも導入されたが、HPCG (High Performance Conjugate Gradient) では 3 期連続して 1 位を獲得し、運用終了時まで 3 位にとどまったとともに、Graph500 においては運用終了まで 1 位を 9 期連続して獲得し、アプリケーション実効性能等において運用期間を通じて世界最高水準の能力を維持したこと、8 万を超える計算ノードを安定的継続的に高い稼働率で運用したことは、我が国の高い技術力を示したと言える。
- ・ 「京」がなければ実現し得なかった成果を多数創出した。細胞を構成する分子から心拍動までを繋ぐマルチスケール心臓シミュレーションや世界最大規模シミュレーションによるダークマター進化過程の解明等の科学的に卓越した成果を生み出しただけでなく、世界最大規模の全球大気・現実大気のアンサンブルデータ同化による新たな気象予測技術の開発、都市全域の地震等自然災害シミュレーション等で国民の安心・安全の確保に貢献した。
- ・ ナショナルプロジェクトとして開発・運用されたことで、国内の技術力、人材の維持、育成につながった。「京」を核として計算科学・計算機科学の研究開発拠点が形成され、我が国の計算科学・計算機科学の底上げにつながった。

- ・ 「京」で培われた技術、アプリケーションは本年3月に本格運用を開始した「富岳」に引き継がれ、既に、新型コロナウイルス感染症対策に係る研究や線状降水帯の予測精度向上等に貢献する成果が上げられている。
- ・ ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤に対して、スーパーコンピュータを利用する研究者や企業からは、より高い実効性能が求められている。大規模・長時間・多数のシミュレーションが実行可能となることで、例えば、より複雑な生命現象の再現が可能になる生命科学分野の進展や、工学分野における高精度なデジタルツインの実現等が期待される。「フラッグシップシステム」で開発された技術は5~10年後に一般的なスーパーコンピュータで利用可能となることで、幅広い研究分野の発展をけん引し、支える。また、今後、量子コンピュータ等の新たな技術の開発や実現においても、世界最高水準のスーパーコンピュータが必要とされている。
- ・ HPCIの中核である「フラッグシップシステム」は次の観点から今後も重要である。
  - ①科学技術の各研究分野からの利用ニーズに応え、世界最高水準の性能を有し、それが無ければ実現し得ない世界をリードする卓越した研究成果を創出する。
  - ②計算科学・計算機科学の技術と人材を維持・育成し、科学技術・学術情報基盤としてのみならず社会情報基盤としても重要な次世代計算基盤を我が国で開発・運用・活用できる能力を維持し、優位性、独自性を経済安全保障の観点からも確保する。
  - ③これらの結果として、新たな科学技術の創出、産業競争力の強化、Society 5.0の実現、国民の安心・安全の確保等の我が国が直面する社会的課題の解決に貢献する。加えて、「富岳」に対する政策的な利用ニーズが「京」と比較して格段に増えていることを踏まえ、今後も「フラッグシップシステム」には、政府における防災、気象予測、感染症対策、社会インフラの維持等の政策ニーズに応える機能を有することが適当である。この点については関係省庁とも連携して検討が進められることを期待する。

#### 4. 次世代計算基盤のあり方

- ・ 上述のとおり、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必要不可欠である。本章では、次世代計算基盤の目指すべき方向性、各事業の方向性や目的、分野振興、人材育成のあり方等について述べる。

##### (1) 次世代計算基盤を構成する事業の方向性、目的の明確化

- ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤の整備

(定義)

- ・ ポスト「富岳」時代においては、データサイエンスやAI技術とシミュレーションの融合、リアルタイムデータ処理といった先進的な処理方法等やデータ駆動型科学、研究のDXの進展を踏まえ、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、次期「フラッグシップシステム」（具体的性能等については、今後更に検討が必要である。）及び第2階層計算資源をはじめとする国内の主要な計算基盤、データ基盤、ネットワークが、それぞれ個別の基盤としての意義・機能に留まらず、これら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。
- ・ 従来型のアプリケーションニーズだけでなく、リアルタイム処理や複数拠点間でのデータ連携等、次世代型の運用ニーズにも応えられること、変化するニーズに対応可能な柔軟性等が必要である。
- ・ ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤は、様々な研究分野において幅広く活用され、その社会的・政策的重要性も高まっていくと考えられる。また、第6期科学技術基本計画等で指摘されているように、サイバー空間とフィジカル空間の融合による新たな価値を創出し、Society 5.0を実現するため、HPCを含む計算・データセンターからエッジコンピューティング、それらを繋ぐネットワーク等様々な種類の要素からなる社会情報基盤の構築が重要となっている。これらを踏まえ、複数システムと連動して運用される観点からも、ソフト・ハードの両方におけるセキュリティ確保や、個人データを扱う際のプライバシー保護、サプライチェーンリスクの管理について、システム設計・構築と並走してこれまで以上に検討していくことが必要である。また、最先端の能力を持つ情報基盤を継続的に社会に提供する必要がある、そのための研究開発を継続的かつ戦略的に進めるべきである。さらに、自国の技術として開発する部分と世界的な標準構成要素を利用する部分の区別が重要であり技術動向等を踏まえ今後見極めることが必要である。

(目的)

- ・ 科学技術の各研究分野からの研究ニーズに応え、世界最高水準の性能を有し、それが無ければ実現し得ない卓越した研究成果を創出するとともに、計算科学・計算機科学の技術と人材を維持・育成し社会情報基盤をけん引する役割を担う科学技術・学術情報基盤を我が国で開発・運用、製造・活用できる力を経済安全保障の観点か

らも確保する。また、これらの結果として、新たな科学技術の創出、産業競争力の強化、Society 5.0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。

(アウトプット)

- ・ 具体的には、以下を行う必要がある。
  - ・ ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤を一体的に運用する体制の検討
  - ・ HPCI の戦略的運用
  - ・ 次期「フラッグシップシステム」の検討
  - ・ SINETをはじめとするネットワーク基盤の確実な運用・強化
  - ・ 上記取組・検討と連携した、大学基盤センター等国内の主要な計算基盤の柔軟で効率的な運用の検討
  
- HPCI の戦略的な整備・運用
  - ・ 3. (2) で述べたとおり、HPCIの重要性は高く、今後も着実に運用するべきである。ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤においては、新たな研究ニーズに合わせ、計算基盤とデータ基盤、ネットワークが一体として運用されることが望ましい。この際、「フラッグシップシステム」と第2階層計算資源をSINETで繋ぎ一体的に運用する現在のHPCIの枠組みを基本とするが、今後は、「フラッグシップシステム」とHPCIを構成する「フラッグシップシステム」以外の計算資源、いわゆる第2階層計算資源との関係の見直しも含め、より戦略的に運用・整備が行えるよう、関係機関の連携の下で継続的に検討されるべきである。その際、以下に留意することが必要である。
    - ・ 科学技術・学術情報基盤全体を俯瞰しつつ、計算基盤については「フラッグシップシステム」を含む HPCI の構成資源をはじめ、国内の主要な計算基盤全体の在り方を考える必要がある。
    - ・ 第2階層計算資源については、一義的には各機関の研究基盤としてそれぞれの方針に基づいて整備運用していることにも留意しつつ、ポスト「富岳」時代において、HPCI に参画することの意義を明確化することが必要である。
    - ・ 第2階層を構成する各スーパーコンピュータについては、引き続き多様な計算資源を確保することが重要である。その際、「フラッグシップシステム」及び第2階層計算資源全体に係る俯瞰的視点から、各機関が長期的な整備計画を検討し、互いに連携して整備を進められるような体制を構築する必要がある。

- ・ 複数機関における共同調達・共同運用も、計算基盤の効率的・効果的な運用の観点で有効である。さらに、我が国のコンピュータサイエンスの技術力、人材を維持・育成するためには、第2階層計算資源についても、ベンダーとの共同開発や企画競争による特徴のあるシステム構築等が行われ、システムやアプリケーションの様々な技術が各機関に蓄積されることが望ましい。
- ・ 「京」から「富岳」への移行期には、周辺施設・環境等の制約により、「フラッグシップシステム」が不在となる「端境期」が生じた。HPCI全体として、計算資源の補填を行い、計算資源の総量としては「京」に相当する計算資源をHPCI全体で追加的に確保することができたが、大規模計算の実行環境には課題が残った。ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤への移行においては、第2階層資源と連携して「フラッグシップシステム」の「端境期」が生じない体制を検討することが必要である。
- ・ 以上のような観点から、様々な開発や調達の工夫を組み合わせ、「フラッグシップシステム」及び第2階層資源を合わせた全体として、継続的に複数のシステムの整備が行われることが理想的である。

#### ● 次期「フラッグシップシステム」の検討

- ・ 3. (3) で述べたとおり、「フラッグシップシステム」は、①科学技術の各研究分野からの利用ニーズに応え、世界最高水準の性能を有し、それが無ければ実現し得ない世界をリードする卓越した研究成果を創出する。②計算科学・計算機科学の技術と人材を維持・育成し、科学技術・学術情報基盤において重要な役割を果たす次世代計算基盤を我が国で開発・製造し、運用・活用できる能力を維持し、優位性、独自性を経済安全保障の観点からも確保する。③これらの結果として、新たな科学技術の創出、産業競争力の強化、Society 5.0の実現、国民の安心・安全の確保などの社会的課題の解決に貢献する観点から重要であり、国として戦略的に整備する必要がある。
- ・ その際、技術動向や周辺状況は急速に進化・変化していることから、これを見据えつつ、ポスト「富岳」時代に求められる次期「フラッグシップシステム」の具体的な機能・性能等について早急に検討を開始する必要がある。その際、以下を基本としつつ、半導体やネットワーク等国内外の周辺技術動向や利用側のニーズの調査、要素技術の研究開発等必要な調査研究を行い、更に多角的に検討するべきである。
  - ・ 次期「フラッグシップシステム」には、幅広い研究分野でパラダイムシフトを起こし得る、圧倒的性能・機能が期待される。一方で、その実現に

は、ムーアの法則の終焉等、関連技術が転換期にあること、性能の向上に伴い要求される電力量も増大すること等の技術的な課題や制約要因があることから、我が国の最先端の技術力・人材を結集し、これらの問題の解決のため、技術を飛躍的に進展させる必要がある。

- ・ 技術革新のためには、計算科学と計算機科学の関係者が両輪となって検討を行う必要があり、また、分野を超えてアカデミア、産業界、行政機関が結集し、広く国民が夢を持てるプロジェクトとして実施されるべきである。さらに、検討の初期段階から開発完了、その後の運用に至るまで、システムに限らずアプリケーションやネットワーク・データ基盤、セキュリティなど関連する分野における多くの研究者や技術者が連携し、かつオープンな形でプロジェクトが推進されていくことが望まれる。我が国における様々な研究開発プロジェクトとの連携も必要不可欠である。
- ・ システムの構成及び具体的な性能等は、多様な分野や利用ニーズの変化に対応し得る汎用性と世界最高水準の実効性能の確保を基本としつつ、省電力性能や他システムと連動して運用される観点からもセキュリティの確保も必須である。また、クラウド等新たな計算資源の利用形態の普及等周辺状況の変化を踏まえ、次世代の運用にも応えられるシステムである必要がある。この他、計算科学や関連技術に係る国内外の技術動向を踏まえて引き続き検討する必要がある。
- ・ 3. (3) で述べたとおり、防災、気象予測、感染症対策、社会インフラの維持等といった政策ニーズにも柔軟かつ速やかに対応できる機能を保持できるよう、検討を進めるべきである。
- ・ 主要アプリケーションでの高い実効性能の追求や、利用環境を検証し強化する観点から、「富岳」開発でも有効であった Co-design は必須である。このためには、システムを構成する各技術要素の評価とともに、アプリケーション側のニーズの掘り下げが必要である。
- ・ クラウド関連の技術は今後益々向上すると考えられる。ユーザー側が容易に自らのニーズに合った多様なアーキテクチャ・規模の計算機資源を仮想的に利用できる環境といった、クラウド関連技術の延長線上にあると考えられる新技術を見据えた検討も必要である。
- ・ データ基盤との一体化、仮想化ネットワーク技術を用いたマルチテナント化への対応など、様々なデータの取扱いに対して親和性の高いシステムを検討する必要がある。
- ・ 量子コンピュータや脳型コンピューティング等の新技術、その他のアーキテクチャの研究開発との協調・相補的役割分担などについても引き続き検討する必要がある。特に量子コンピュータに関しては、これを実現するた

めに最先端のスーパーコンピュータをどのように活用できるかについても並行して検討すべきである。

- ・ これら技術の進展や変化する利用ニーズに対応することが可能な拡張性も備えることが必要である。
- ・ 開発に当たっては、政府部内での我が国の半導体やAI技術等の開発に係る戦略の動向も含め、国内外の情勢を鑑みつつ進める必要がある。国際協調は不可欠である一方、自国で保有すべき技術は確実に確保することが重要である。世界的な標準的構成要素を利用する部分と、自国で保持すべき設計・開発技術の区別について一定の方向性を見出すことが極めて重要である。技術的側面だけでなく、我が国における産業構造や動向にも注意しつつ、我が国として独自に開発・維持すべき技術について産官学を跨いだ広い議論が求められる。
- ・ プロジェクトの継続性や技術・人材の維持のためには、プロジェクトを通じて生み出された技術ならびに人材が研究コミュニティや産業界に還元され、産業としても持続可能なエコシステムが構築されることも重要である。その際、計算機システムそのものだけでなく、システムソフトウェアやアプリケーションの展開も総合的に検討される必要がある。この点で、「富岳」においてはCPUの命令セットに汎用性の高い「Arm」を採用したこと、システムとアプリケーションの協調設計（Co-design）によりアプリケーションが同時に開発されたこと等から「京」よりも前進していると言えるが、ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤の検討においては、国内外の状況変化も踏まえて、我が国として確保すべき技術や国際連携の在り方について一層の検討が必要である。関係省庁や関係機関等における企業主体の研究開発を含め、我が国における様々な研究開発プロジェクトと連携し、産業への展開をあらかじめ想定した技術開発が行われることが必要不可欠である。これにより国内の企業の積極的な参画を促すことが望まれる。また、単一プロジェクトとしてその都度短・中期的な開発体制がとられるのではなく、長期的な技術の維持や人材の育成、利用側の利便性の観点を見据えた継続的な研究開発体制の構築が望まれる。
- ・ 「フラッグシップシステム」と第2階層計算資源をはじめとするその他主要な計算基盤、ネットワーク、データ基盤など他の科学技術・学術情報基盤との関係性は、引き続き俯瞰的視点も持ちつつ検討を継続する必要がある。

## (2) アプリケーション開発の方向性

- ・ 次期「フラッグシップシステム」開発の方向性として、Co-design は必須であり、この前提として、計算基盤の利用側のニーズを具体的に示すロードマップが不可欠である。これまでに蓄積されたシステム側の技術予測も踏まえて、ポスト「富岳」時代に、各研究分野や産業界がどのようなアプリケーションや利用環境、実効性能を必要としているのかを深掘りする必要がある。その際、より幅広い人々がより簡単に使用できるための、ユーザーフレンドリーなアプリケーション設計技術が併せて検討される必要がある。
- ・ AI、機械学習又はデータ科学と計算科学の融合や、研究分野間の融合など新しい計算機の使い方が広まる中、これらの新しい計算機の利用に対応した可搬性の高いフレームワークを併せて検討・開発する必要がある。

## (3) 効果的な運用、利活用促進について

- ・ ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤の整備にあたっては、システムに限らずアプリケーションやネットワーク・データ基盤など関連する分野における多くの研究者や技術者が連携できるようにする必要があり、これを実現する安定的な運用体制を構築すべきである。
- ・ 利用者・利用分野の裾野の拡大のため、HPC のシステムやアプリケーションの専門家以外にとっても使いやすく、利用開始までの敷居が高くないような運用とすべきである。
- ・ システムの運用開始後においても、技術の変遷やユーザーニーズの変化等に応じて、新たなアプリケーション・ライブラリ・フレームワーク等が容易に導入できる環境が必要である。この観点からも、システム運用機関やアプリケーション開発者だけでなく、国内外のベンダーを含めたエコシステムが構築されることが望ましい。
- ・ 利用支援の充実等により、AI やデータ科学と計算科学の融合や、計算機を利用する研究分野間の融合、計算機科学と利用研究分野の融合を図り、効果的な成果の創出に繋げることが望まれる。

#### (4) 分野振興、人材育成について

- ・ 大規模計算基盤を自国で開発・製造・運用できるという経済安全保障の観点からは、新型コロナウイルス感染症の拡大によってもますます顕在化している。この観点も踏まえ、次世代計算基盤に係る技術・人材を我が国として保持するためには、アプリケーション開発、アーキテクチャ、システムソフトウェア、コンパイラ、ライブラリ、フレームワーク等の研究者や技術者が将来にわたって活躍できるよう、産業界と連携したキャリアパスの構築が必要である。
- ・ 計算機を利用する研究者の育成としては、各分野のコミュニティの中で継続的に若手を育成する体制と研究者・研究機関間のネットワークが構築されていることが望ましく、そのための分野振興が十分に実施されるべきである。
- ・ 青少年を含む次世代の育成の観点から、「富岳」や HPCI の成果をわかりやすく見せる取組も重要である。

#### 5. おわりに

- ・ 本中間まとめは、ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤が目指すべき方向性を示した。
- ・ この方向性を踏まえ、今後必要な調査研究等を行いつつ、HPCI 計画推進委員会と連携しながら、以下の項目について具体化を行う。この結果を受け、引き続き最終まとめに向けた検討を行う。
  - ・ ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤を一体的に運用する体制の検討
  - ・ ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤における HPCI の戦略的な整備・運用
  - ・ 次期「フラッグシップシステム」の具体的な性能・機能等（計算科学ロードマップの検討含む）

## 次世代計算基盤検討部会の主な議題

### 第1回（令和2年5月1日（金））

- 次世代学術情報ネットワーク・データ基盤整備作業部会の設置について
- 今後の議論の方向性について

### 第2回（令和2年7月28日（火））

- スーパーコンピュータ「富岳」の整備進捗状況について
- 新型コロナウイルス対策に関する情報科学関係の取組
- 次世代学術情報ネットワーク・データ基盤整備作業部会の検討結果について

### 第3回（令和2年11月30日（月））

- 次世代計算基盤について
  - ヒアリング（次世代の情報基盤全体における計算基盤の役割について）
    - ・「将来のHPCIの在り方に関する検討ワーキンググループ」の議論について
    - ・大学の情報基盤の観点から
    - ・スーパーコンピュータのユーザーの観点から①
    - ・情報基盤全体の観点から

### 第4回（令和3年1月22日（金））

- 次世代計算基盤について
  - ヒアリング（計算基盤に関する技術・利用の観点から①）
    - ・量子コンピュータの観点から
    - ・スーパーコンピュータのユーザーの観点から②
    - ・ネットワークの観点から

### 第5回（令和3年4月21日（水））

- 次世代計算基盤について
  - ヒアリング（計算基盤に関する技術・利用の観点から②）

- ・スーパーコンピュータのユーザーの観点から③
- ・計算機運用等の観点から
- ・HPCI コンソーシアムからの提言案

第6回（令和3年5月27日（木））

- 次世代計算基盤について
  - ヒアリング（計算基盤に関する技術・利用の観点から③）
    - ・NGACIにおける検討状況
    - ・国際動向を含めた半導体技術・産業の動向
  - 中間取りまとめ（骨子案）

第7回（令和3年6月21日（月））

- 次世代計算基盤について
  - 中間取りまとめ（素案）

第8回（令和3年7月29日（木））

- 次世代計算基盤について
  - 中間取りまとめ（案）

# 次世代計算基盤 開発／運用に向けて 理化学研究所の果たすべき役割



理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)  
センター長 松岡 聡

2024年4月17日

- シミュレーション、データサイエンスの進展や生成AIに係る技術革新などにより、AIとシミュレーション、さらには自動実験やリアルタイムデータを組合せて科学研究分野で活用する取組の重要性が増しており、**シミュレーションとAI、両者において世界最高水準の性能を達成するフラッグシップシステムを構築することが、社会、産業、科学技術イノベーションの発展の鍵。**
  - ✓ 米国では、エネルギー省の支援によるフロンティアをはじめとするエクサスケールの新たなスーパーコンピュータの開発・整備が進展。
  - ✓ 世界最高水準のスーパーコンピュータにおいては、CPUに加えてGPUなどの加速部（アクセラレーター）を有し、計算の一部を加速部で処理することにより最適化。
- 理化学研究所は、「次世代計算基盤に関する報告書 中間取りまとめ」で示された**次世代計算基盤に求められるフラッグシップシステムに関する提案を踏まえ、シミュレーションとAIとが密に連携して処理が行えるシステムを構築することこそが、我が国の科学技術・イノベーションが世界をリードするために必要不可欠**と認識。
- また、そのシステムはスーパーコンピュータ「富岳」と同様に、**「アプリケーション・ファースト」で整備**されることが必要。

## 「次世代計算基盤に関する報告書 中間取りまとめ」より抜粋（一部補筆）

- （科学者）コミュニティの試算や産学官の更なる利用の拡大も見越しつつ、（略）、既存の「富岳」ユーザに対しては実行性能として現行の5～10倍以上の計算能力を提供しつつ、AI性能については運用開始時点で世界最高水準（実行性能として少なくとも50EFLOPS以上）の利用環境を提供することを目標として、フラッグシップシステムの開発・整備を行うべき。
- （フラッグシップシステムの開発・整備を行う際には、）今後も自国の技術を中心にスーパーコンピュータを開発・整備する能力を国内に維持し、国内人材育成や産業競争力の維持・発展に資するため、「京」や「富岳」の開発において蓄積してきたCPUの開発及びシステムのインテグレーションに加え、メモリ実装技術の開発をコア技術と位置付けて継続的に開発を行うべきである。また、更なる性能向上や生成AIへの対応を図るため、加速部を導入すべき。また、（略）、最先端のメモリ技術を採用し、利用者にとってさらに魅力的なシステムとなることを期待。
- （略）システムソフトウェア開発においては、アプリケーションやAI等の研究開発のプラットフォームとして、世界で使われている基本的なアプリケーションがこれまで以上に多様かつ円滑に利用できるように設計し、運用開始後も継続してシステムソフトウェアの改善を図るべきである。
- （開発・整備の手法について）（略）時代時代の要請に応じた十分な性能を常に提供し続ける必要が生じている。そのために、フラッグシップの開発・整備においては、
  - ① 「京」から「富岳」への移行時のようなシステムの入替えによる「端境期」を極力生じさせず、利用環境を維持すること
  - ② 最新の技術動向に対応するために適時・柔軟にシステムを入替え又は拡張可能とし、進化し続けるシステムとすること
  - ③ （略）将来の計算資源への対応に大きく貢献し得る技術に関しては、AI技術の次の技術革新を含めた中長期的な視点から技術評価・研究開発を継続し、将来のシステムの入替え・拡張の際に反映させること

が重要。

## 中間取りまとめをふまえて以下の方針でシステムを開発／整備

### ● 目指す次世代計算基盤の方向性

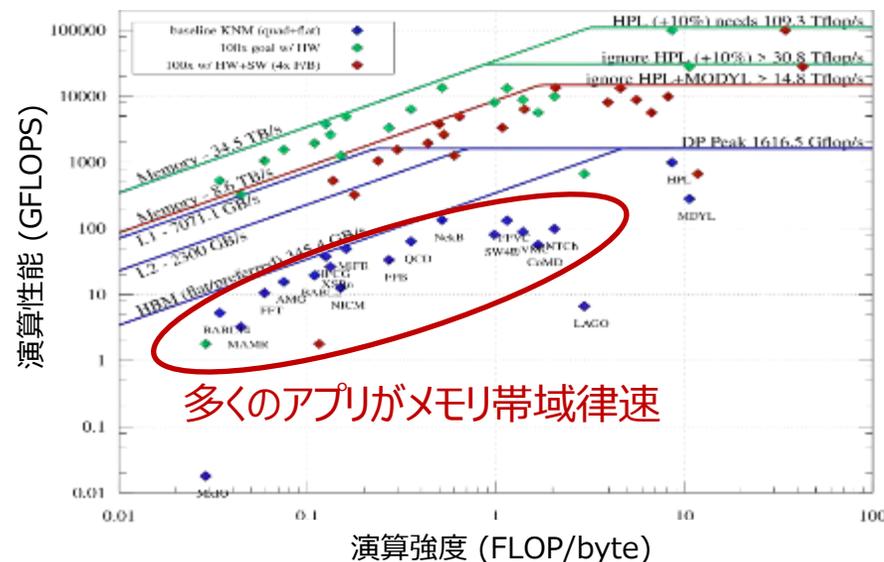
- データ移動の効率化を含めた実効性能重視のアプリケーションファーストなシステム。
- AI-for-Scienceの実現に向けたHPCとAI技術の高度な融合。
- エコシステムへ訴求が可能、かつポスト富岳のみならず広く利用される構成の探求。
- スーパーコンピュータ「富岳」の知見やソフトウェア資産の有効活用と継続的な研究開発。
- 量子コンピューティングとのハイブリッド利用を見据えたプラットフォームの実現。

### ● 想定するアーキテクチャ／システムソフトウェアの概要

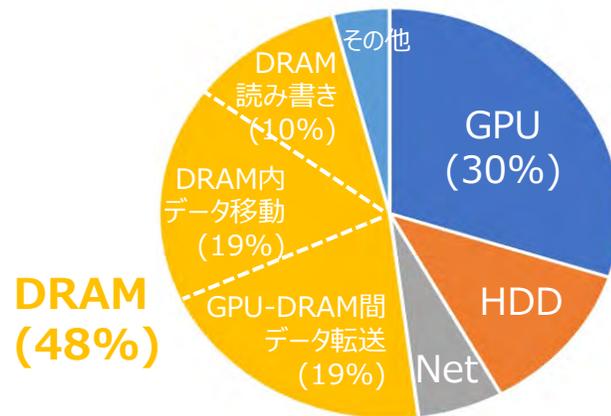
- 国産技術をベースとしたCPUの活用、および世界標準としてのGPUアーキテクチャ等に基づく演算処理加速器の導入。
- プロセッサとメモリの3次元積層など先進的なメモリ技術の積極的な採用。
- 標準規格や既存のエコシステムとの親和性が高いシステム構築。
- 理研で取り組み中の量子HPC連携プラットフォームやTRIP-AGISの発展形としてのシステム整備。

- シミュレーションとAI融合によるサイエンスの進化へ向けて
  - 両ワークロードで世界最高水準の性能を達成しつつ、密に連携して処理が行えるシステムの構築が重要。
  - 多くのHPCアプリやAI推論処理はデータ移動がボトルネック。
- **最先端3次元積層メモリ技術 → データ移動効率化のキー技術**
  - 導入時点で入手可能な最先端3次元積層メモリ技術を利用
  - 実効性能と電力効率の大幅な向上へ。
- **ヘテロジニアス&密結合アーキ**によるワークフロー実行の効率化
  - 国産技術ベースのCPU + GPUアーキ等に基づく演算処理加速。
- **エコシステムを重視しオープン規格を取り入れたシステム構成**
  - 既存のシステムソフトウェア（AIフレームワークやプログラミング環境、ファイルシステム）との互換性を担保。
  - ポスト富岳専用ではなくクラウド等に訴求できるシステムを探求。
- **計算科学ロードマップ / AI-for-Scienceロードマップと足並みをそろえたコデザインによるアーキテクチャ開発を推進**

### A64FX上でのルーブリック解析

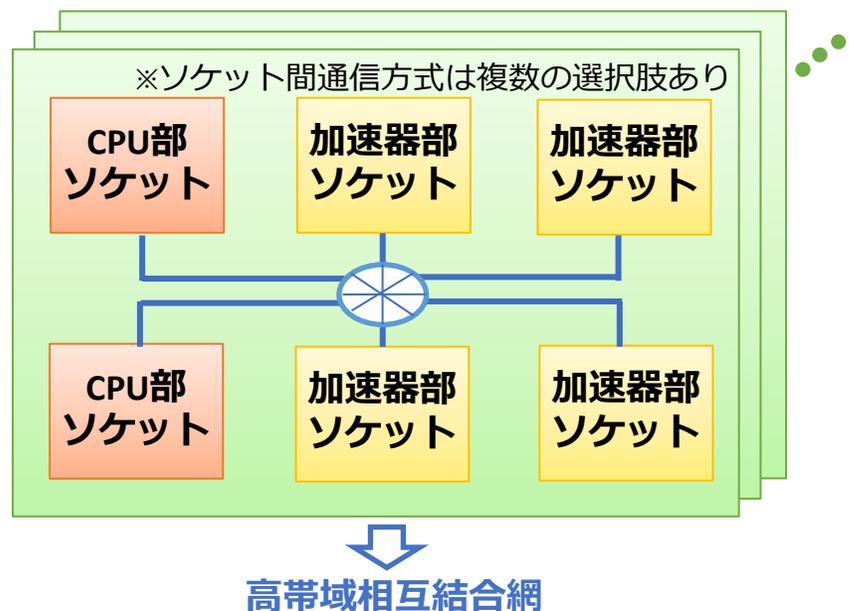


### AI時代のGPUサーバの消費電力内訳

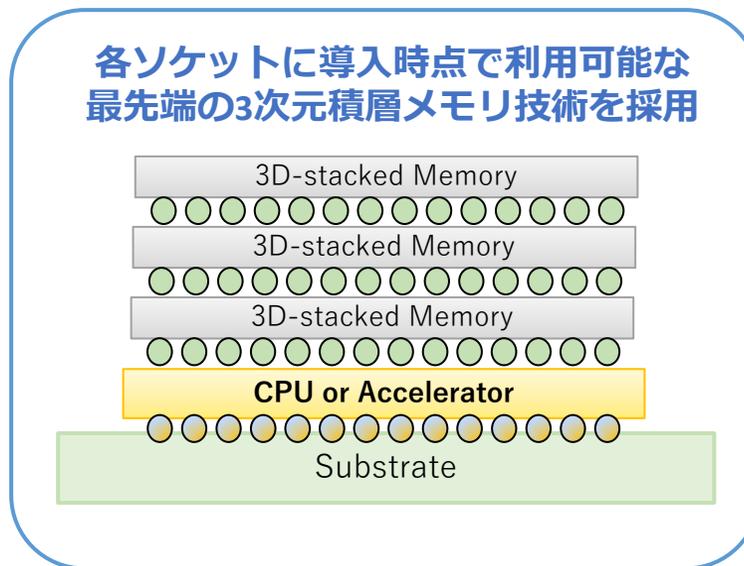


J. Zhao et al., "Optimizing GPU energy efficiency with 3D die-stacking graphics memory and reconfigurable memory interface," in *ACM Trans. Architecture and Code Opt.* vol. 10, Issue 4, pp. 1-25, 2013. を基にAI推論の電力内訳を分析

## 高帯域&ヘテロジニアスなノードアーキ例



## 3次元積層メモリ技術例



- CPU & 加速器を搭載する計算ノードを高帯域ネットワークにより数万ノード並列に接続
  - 各計算ノード性能（ピーク）想定：200～2000TFLOPS程度（倍精度）、4～40PFLOPS程度（AI向け半精度）、40～600TB/s程度（メモリ帯域）
  - ※ 参考：富岳計算ノード性能（ピーク）：3.4TFLOPS（倍精度）、13.5TFLOPS（半精度）、1.0TB/s（メモリ帯域）

既存HPCアプリで現行の5～10倍以上の計算能力、50EFLOPS以上のAI実効性能を達成可能なシステムを開発・整備し、シミュレーションとAIの融合により総合的に数十倍のアプリ実行高速化を目指す。

- **理研主導によるソフトウェアの標準化と継続的な発展、さらにクラウドへの展開**
  - バーチャル富岳(クラウドの『富岳』化)の実績を発展させ、クラウド上に次世代計算基盤と同等のソフトウェア環境を展開。
- **「富岳」で開発されたソフトウェア資産、OSS、クラウド技術の有効活用**
  - バーチャル富岳(『富岳』のクラウド化)の機能やインターフェースを継承・拡張をし、富岳から次世代計算基盤へ継続的なアプリケーションサービスを実現。
  - 「富岳」でのOSSを活用したソフトウェア開発・管理実績を継続し、次世代計算基盤のに向けた信頼性の高い次世代ソフトウェアを実現。
- **次世代計算基盤のアーキテクチャを効率よく利用するためのソフトウェア環境**
  - ゴードン・ベル賞受賞アプリケーションの実行を支えたソフトウェア環境の更なる発展により、科学シミュレーションのみならず、AI-for-Science、量子-古典計算やそれらの融合を可能にする最先端のソフトウェア環境の実現。
- **計算科学ロードマップ / AI-for-Science ロードマップに基づき将来必要とされるシステムソフトウェアの移植・新規開発の検討**



## システムソフトウェア群

プログラミング環境

数値計算ライブラリ

AIフレームワーク

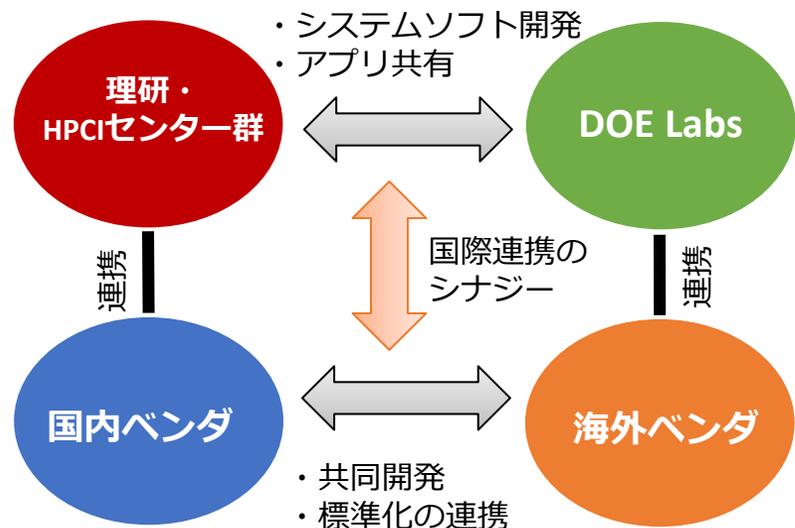
通信ライブラリ

ファイルシステム

スケジューラ

OS・コンテナ

- AIの隆盛によりHPC技術はビジネス・安全保障面で最重要要素の一つになっている  
→ 国内で活躍するだけでなく、国際的に通用する人材の育成・確保が急務
- 国内技術・人材と海外技術・人材の連携によるプロジェクト推進
  - 国内のCPU開発技術やシステム構築技術をベースに据えた開発体制の構築
  - 国際連携によりエコシステムに訴求できるハードウェアとシステムソフトウェアの開発を検討
- 文部科学省-米国エネルギー省（DOE）間連携やANL-理研連携の基盤も活用



文科省-DOE連携ワークショップ（2023年2月8日）



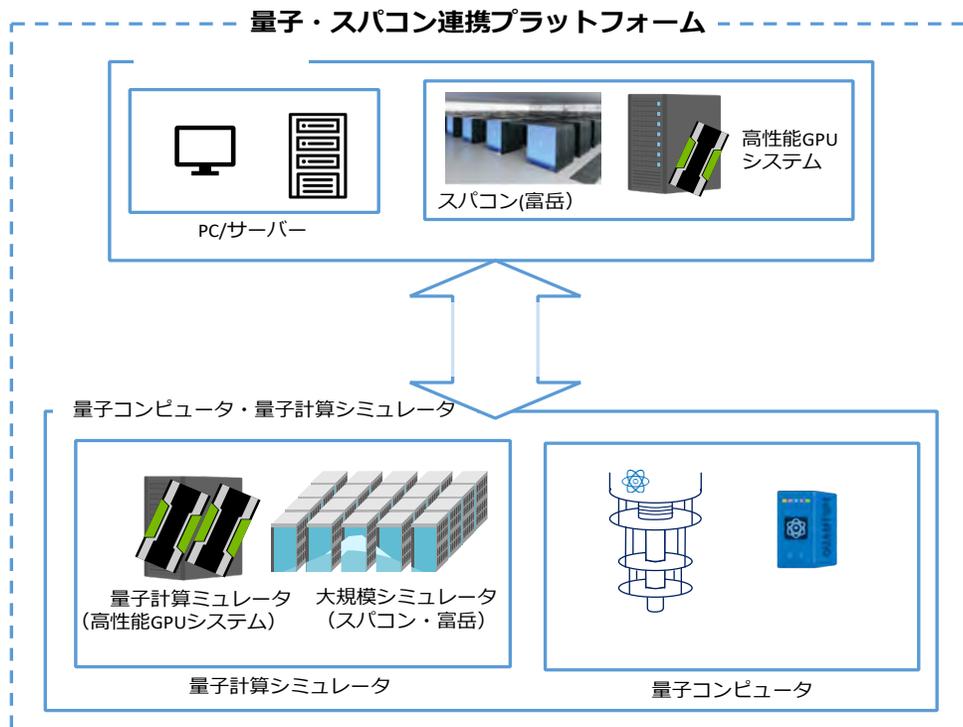
文科省-DOE連携のPAの署名（2024年4月9日）



国内の技術力強化と国際的に通用できる人材強化へ

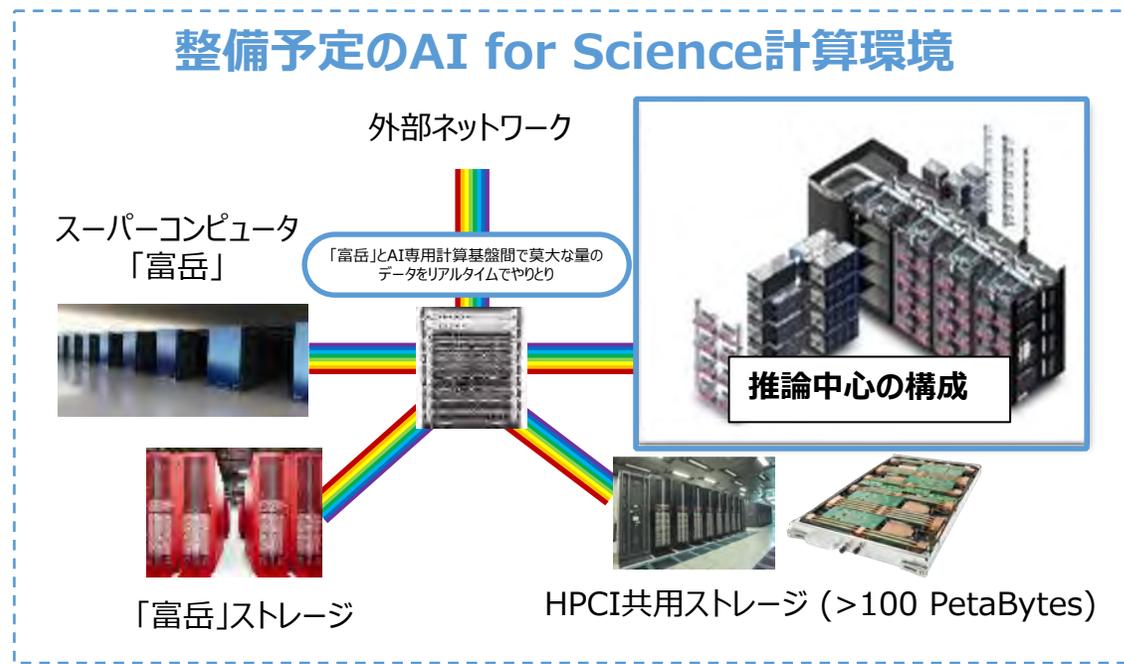
## ● 量子-HPC連携プラットフォームの構築

- 計算可能領域の拡張を目指すTRIP構想の一環として、R-CCSを中心に、量子コンピュータと「富岳」等HPCを連携させる汎用的なソフトウェアを開発し、「**量子-HPC連携プラットフォーム**」の構築に向けたソフトウェアスタックを開発。2023年度に外部資金を得て研究開発を加速。

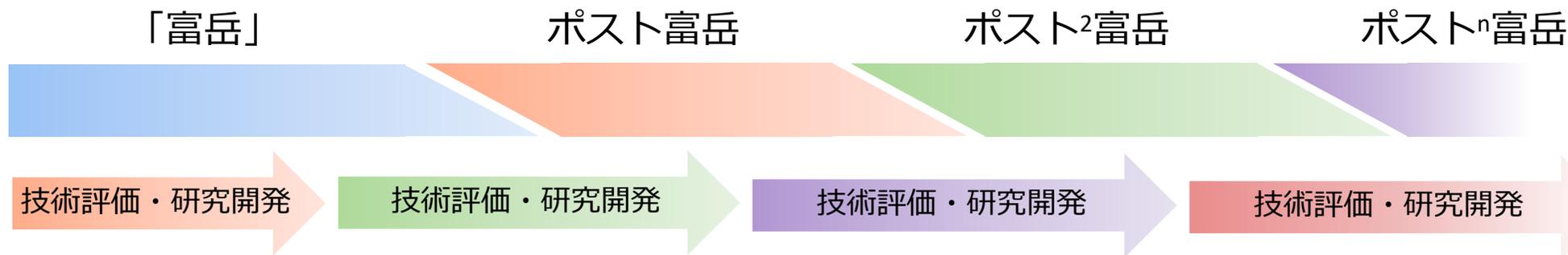


## ● TRIP-AGIS: 科学研究向け基盤モデルの開発／共用

- 多様な分野の**科学研究の革新**を目指し、科学研究データの追加学習（マルチモーダル化）によりドメイン指向の科学研究向け基盤モデルを開発するプロジェクト。R-CCSは、計算環境の整備・運用、ハードウェア・ソフトウェア開発を主導し「**革新的な計算基盤の開拓**」を推進。



これらの取り組みも発展させつつポスト富岳の開発／整備へ



- ポスト「京」の教訓（計算資源中断による機会損失）を踏まえ 2 システムを一体整備
  - 新旧システムの稼働時期をオーバーラップさせることで、世界最高水準の計算性能と計算資源量の継続的かつ安定的な提供が可能となり、計算科学の研究開発サイクルを途切れなく回すことで成果創出を加速。
  - システム稼働期間を適切に設定することで、将来のニーズの変化や最新の技術動向に柔軟かつ適時に対応。
  - 近接施設での一体整備・運用により、既存の運用体制・施設と共通化できる部分が多く効率化できるほか、最新設備へのアップグレードも容易となり高エネルギー効率かつ低カーボン排出のデータセンタ運用が可能。
  - 技術の評価・研究開発を継続的に実施することで、将来のニーズや最新の技術動向のキャッチアップが可能。



「富岳」利用者の利便性向上に資する先端的な運用技術の開発や導入を推進すると共に、それらの成果のHPCIの他センター等への導入に積極的に協力することで、我が国のHPCI及びコミュニティに大きく貢献。

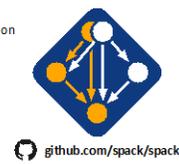
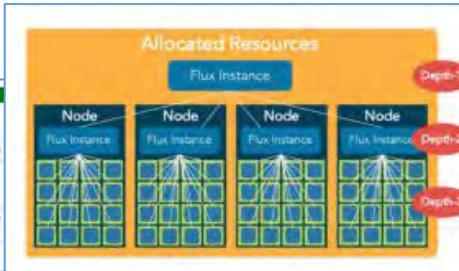
- Spackによるソフトウェアパッケージ管理
- Open OnDemandによる直感的な操作インターフェース
- Grafana等によるシステムモニタリング・可視化
- WHEELによるワークフロー型ジョブ実行
- 現在進行中の技術開発
  - 生成AIを活用した問い合わせ対応システム
  - 複数システムを対象としたメタジョブスケジューリング
  - 大規模データマネジメントシステム

### Spack enables Software distribution for HPC

- Spack automates the build and install of scientific software
- Packages are parameterized, so that users can easily tweak and tune configurations

#### Complex installs

```
spack install intel:19.5 compiler:"g++"
spack install intel:19.5 target:"x86_64"
spack install intel:19.5 mpi:"mpich3.2"
```

AIの台頭により、さらに拡大が見込まれるユーザが活用しやすい、アプリケーションファーストの次世代計算基盤とすることが重要であり、幅広い科学技術・産業分野の研究開発を先導し貢献する視点が重要\*。

- R-CCSは、計算科学および計算機科学だけでなく、計算による科学の研究開発に取り組んできており、HPCIのコミュニティと協業しつつ、計算科学分野での各ドメインにおける橋頭堡として、さまざまな研究成果を創出してきた。その中で、国内外の研究機関と連携して「富岳」を用いた成果がゴードン・ベル賞を受賞（2021,2022）するなど高い成果もあげてきている。
- また、HPCにおけるAIに関する研究開発（FugakuGPT等）や、各種アプリケーションにおけるAIの活用に取り組んできており、それらの成果を発信し続けている。その一例として、AIとシミュレーションを融合させた革新的な創薬DXプラットフォームを構築し、創薬プロセスの超効率化につなげるべく、官民一体となって推進。
- さらに、「富岳」Society5.0推進拠点を設置し、「富岳」の成果を「Society5.0」の実現に向けた基盤として社会で広く利活用されるよう社会実装につなげるための取組を推進。その成果の一つが社会実装への取組も認められ、**2023年度オープンイノベーション大賞 文部科学大臣賞を受賞**。

\*中間とりまとめより（抜粋）

計算資源の需要は多様化しており、（略）国内の多様な計算資源需要を 着実に満たすとともに、新たなシステムによる世界最高水準の利用環境の提供を通じ、我が国の計算科学を中心とする様々な科学技術・産業分野の研究開発を先導することを期待。



**文部科学大臣賞 分子動力学ソフトウェアGENESISの開発と社会実装**

杉田 有治(理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー)、李 秀榮(医薬基盤・健康・栄養研究所 主任研究員)、松崎 健一(株)理研数理 取締役、小沢拓(株)JSOL 部長、塩崎 亨(Quantum Simulation Technologies, Inc. 代表取締役CEO)

**概要** 理化学研究所(理研)を中心としたアカデミックの研究者がソフトウェア開発を行い、そのプロダクトであるソフトウェア「GENESIS」をフリーで公開。さらに産業界がこのソフトウェアを活用する場を提供することで、アカデミックの研究から生まれた最先端科学技術の社会実装を実現。

**目的** 理研計算科学研究センター(R-CCS)が新規開発した分子動力学ソフトウェア「GENESIS」が「富岳」開発プロジェクトにおいて新型コロナウイルス表面のスパイク蛋白質の動力学計算など世界最先端の基礎研究を実現。フリーソフトとして公開するとともに、アカデミアから産業界まで多様な研究者が集う「GENESISユーザー会」を主宰し、創薬や材料開発への応用を可能とした。

**内容** 理研R-CCSと理研数理の連携により、研究開発・技術指導は理研が、理研数理が窓口機能を提供することによって、産業界からの個別の問題解決に役立つ技術指導をスムーズに行うことを実現。さらに、理研数理が事務運営を行い、理研が研究紹介を行う「GENESIS ユーザー会」をユーザーと開発者が交流する場として設定した。

**効果** 新型コロナウイルススパイク蛋白質に関する3本の論文が合計68回引用。「GENESIS ユーザー会」は過去6回の研究会を実施し、参加者は延べ 141 名に及ぶ。GENESIS を利用した商用ソフトウェアが2つ開発され、販売されている。

**ポイント!**  
産業界でも自由に利用できるソフトウェア開発にとどまらず、ライセンスフリー化で民間企業でも産業界上の重要な解析を可能とした点も大きな成果。今後期待される産業界でのスパコン活用の一般化に向けた取組及びスタートアップを活用した社会実装の事例としても評価できる。

# まとめ

- 理化学研究所（理研）は、日本で唯一の自然科学の総合研究所として、物理学、工学、化学、数理・情報科学、計算科学、生物学、医科学などに及ぶ広い分野で研究を推進しており、同時に社会に貢献することをミッションとする特定国立研究開発法人である。
  - 理研は、計算科学・計算機科学分野における我が国の中核研究拠点として、計算科学研究センター（R-CCS）を設立し、スーパーコンピュータ「京」及び「富岳」の開発・運用だけでなく、その高度化を進めてきた。さらに、HPCIのコミュニティと協業しつつ、計算科学分野での各ドメインにおける橋頭堡として、アプリケーション・ファーストで我が国の研究開発をリードし、世界に冠する研究成果を上げてきた実績がある。
  - 一方、AIの開発やその活用に不可欠な計算資源を有しているかどうかは、今後の産業、科学技術イノベーションの鍵となっており、理研では、それらの技術を生み出す拠点として2022年度からTRIP（Transformative Research Innovation Platform of RIKEN platforms）構想を打ち立て、量子-HPCハイブリッド基盤など計算可能領域の拡張を進めているほか、2024年度からは「AI for Science」を推進するためのTRIP-AGISを立ち上げた。
  - また、文部科学省にて2022年度から進められている次世代計算基盤に係る調査研究、特にシステム（アーキテクチャ／システムソフトウェア・ライブラリ／アプリケーション）調査をR-CCSが受託し、国内外の企業等とともに報告書を取りまとめている。
- 
- 自らの有する能力、強み、人材、実績を最大限に活かし、国内外の関係機関の協力を得てきた理研が、次世代計算基盤に求められるフラッグシップシステムの開発・運用を担う役割（開発主体）を果たすことが最適であり、我が国の情報科学技術政策と、国立研究開発法人としての取り組みによる相乗効果が期待できる。
  - また、実施主体となれば、国内外の技術を結集したCPU・演算加速器・先端メモリ実装を導入し、高い汎用性とコミュニティの計算資源ニーズに応える性能・機能を合わせ持つ世界的に競争力のあるフラッグシップシステムの開発を推進する。

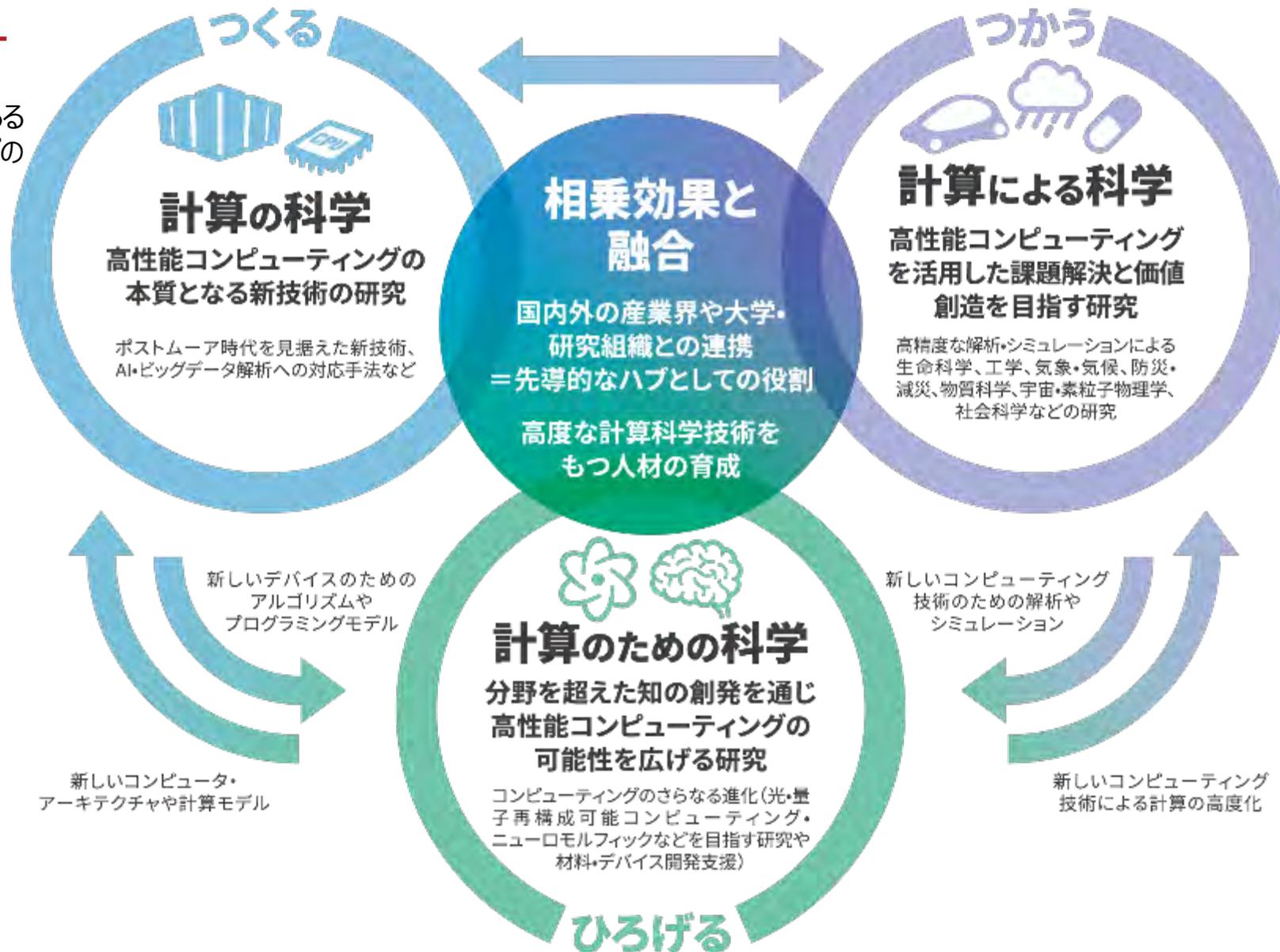
# 参考資料

# 「計算の 計算による 計算のための科学」

卓越したサイエンスの創出と、Society5.0実現の要となることを目指して

## 理研 計算科学研究センター (R-CCS)

理研の13研究センターの一つであると同時に高性能計算科学のトップの国家拠点



# 2024年度センター組織図

**\*女性限定PI2名 (TLorUL) 選考中** (17チーム/4部門 (19ユニット))

## 計算の科学

プロセッサ研究チーム  
佐野 健太郎

大規模並列数値計算  
技術研究チーム  
今村 俊幸

次世代高性能  
アーキテクチャ  
研究チーム  
近藤 正章

高性能ビッグデータ  
研究チーム  
佐藤 賢斗

高性能人工知能  
システム  
研究チーム  
Mohamed WAHIB

高性能計算モデリング  
研究チーム  
Jens DOMKE

大規模デジタルツイン  
研究チーム  
山口 弘純  
2024/4/1設置

## 計算による科学

連続系場の理論  
研究チーム  
青木 保道

離散事象シミュレ  
ーション研究チーム  
伊藤 伸泰

量子系分子科学  
研究チーム  
中嶋 隆人

量子系物質科学  
研究チーム  
柚木 清司

粒子系生物物理  
研究チーム  
杉田 有治

複合系気候科学  
研究チーム  
富田 浩文

複雑現象統一的解法  
研究チーム  
坪倉 誠

データ同化研究チーム  
三好 建正

計算構造生物学  
研究チーム  
Florence TAMA

総合防災・減災  
研究チーム  
大石 哲

## HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門

部門長 &  
バイオメディカル  
計算知能ユニット  
奥野 恭史

副部門長 &  
創薬化学AI  
アプリケーション  
ユニット  
本間 光貴

分子デザイン  
計算知能ユニット  
池口 満徳

AI創薬連携基盤  
ユニット  
奥野 恭史

## 量子HPC連携プラットフォーム部門

部門長  
佐藤 三久

量子HPCソフトウェア  
環境開発ユニット  
辻 美和子  
2024/4/1着任予定

量子計算シミュレーション  
技術開発ユニット  
伊藤 伸泰

量子HPC  
プラットフォーム  
運用技術ユニット  
三浦 信一

## AI for Scienceプラットフォーム部門 (新規設置)

部門長  
松岡 聡

AI開発計算環境運用技術  
ユニット  
三浦 信一

次世代AIデバイス  
開発研究ユニット  
佐野 健太郎

AI学習最適化  
基盤開発ユニット  
Mohamed WAHIB

AI学習・推論データ管理基盤  
開発ユニット  
佐藤 賢斗

生命・医科学アプリ  
インターフェース基盤開発ユニット  
杉田 有治

材料・物性アプリ  
インターフェース基盤開発ユニット  
中嶋 隆人

## センター長 松岡 聡

副センター長  
杉田 有治  
(計算による科学)  
2024/4/1着任

## 「富岳」 Society 5.0 推進拠点

拠点長  
松岡 聡

副センター長 &  
拠点長代理  
渡辺 康正

コーディネーター  
白井 宏樹

## 運用技術部門

部門長  
庄司 文由

副部門長 &  
システム運轉  
技術ユニット  
井口 裕次

データ連携  
技術ユニット  
甲斐 俊彦

施設運轉  
技術ユニット  
三浦 信一

ソフトウェア開発  
技術ユニット  
村井 均

先端運  
用技術ユニット  
山本 啓二

## 2021年度センター組織図 (17チーム/2部門 (9ユニット))

### 計算の科学



プログラミング環境  
研究チーム  
佐藤 三久



プロセッサ研究チーム  
佐野 健太郎



高性能人工知能  
システム  
研究チーム  
松岡 聡



大規模並列  
数値計算技術  
研究チーム  
今村 俊幸



高性能ビッグデータ  
研究チーム  
佐藤 賢斗



次世代高性能  
アーキテクチャ  
研究チーム  
近藤 正章

### 計算による科学



離散事象シミュ  
レーション  
研究チーム  
伊藤 伸泰



量子系分子科学  
研究チーム  
中嶋 隆人



量子系物質科学  
研究チーム  
柚木 清司



粒子系生物物理  
研究チーム  
杉田 有治



粒子系シミュレータ  
研究チーム  
牧野 淳一郎



複合系気候科学  
研究チーム  
富田 浩文



複雑現象統一的解法  
研究チーム  
坪倉 誠



連続系場の理論  
研究チーム  
青木 保道



総合防災・減災  
研究チーム  
大石 哲



データ同化  
研究チーム  
三好 建正



計算構造生物学  
研究チーム  
Florence TAMA

### HPC/AI駆動型医薬 プラットフォーム部門



バイオメディカル  
計算知能ユニット  
奥野 恭史



創薬化学AIアプ  
リケーション  
ユニット  
本間 光貴



分子デザイン計算  
知能ユニット  
池口 満徳



AI創薬連携基盤  
ユニット  
奥野 恭史

### 運用技術部門



施設運転技術  
ユニット  
塚本 俊之



システム運転技術  
ユニット  
宇野 篤也



チューニング技術  
ユニット  
庄司 文由



利用環境技術  
ユニット  
庄司 文由



先端運用技術  
ユニット  
山本 啓二

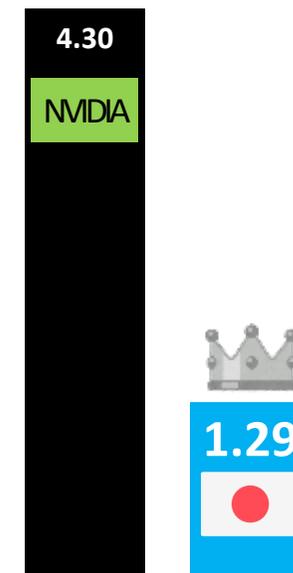
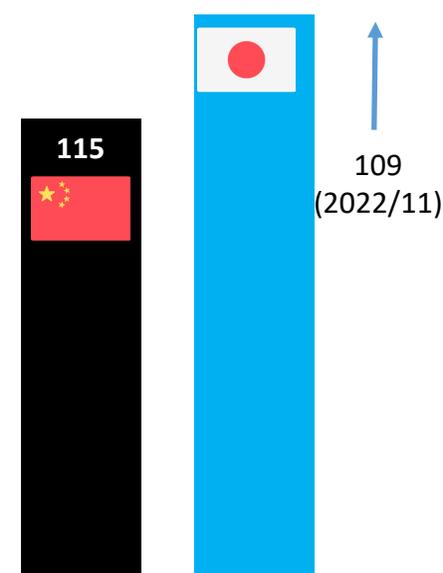
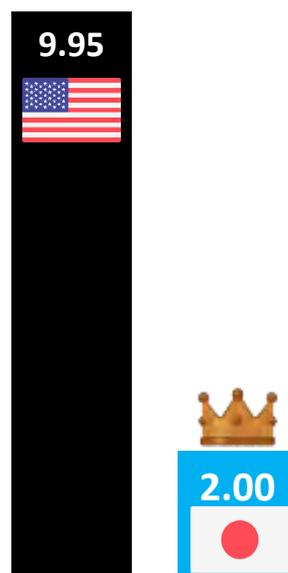
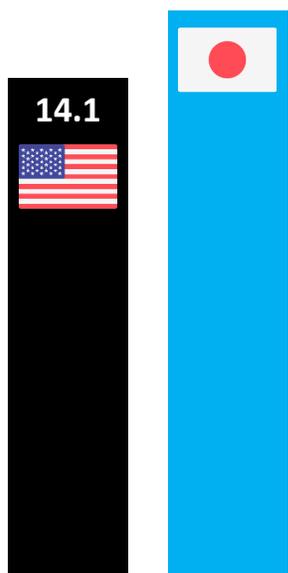
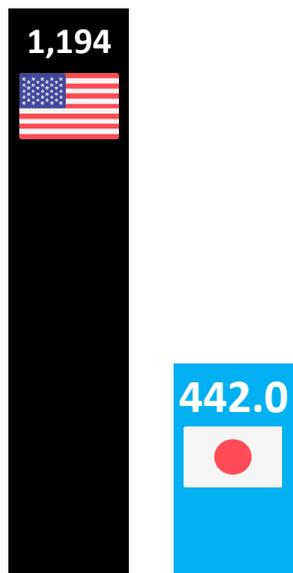
シミュレーション  
(クラシック)

シミュレーション  
(モダン)

AI  
(深層学習)

ビッグデータ  
(グラフ処理)

スループット性能  
(深層学習)



**TOP500**  
(単位：PFLOPS)

**HPCG**  
(単位：PFLOPS)

**HPL-MxP**  
(単位：EFLOPS)

**Graph500**  
(単位：TTEPS)

**ML Perf HPC**  
(CosmoFlow)  
(単位：モデル数/分)

浮動小数点の演算  
での性能評価

実際にアプリケーションを  
稼働させた性能評価

AI処理での  
性能評価

ビッグデータ処理での  
性能評価

AI処理の  
総合性能評価

**初登場から3年半経過も世界最高水準をキープ**

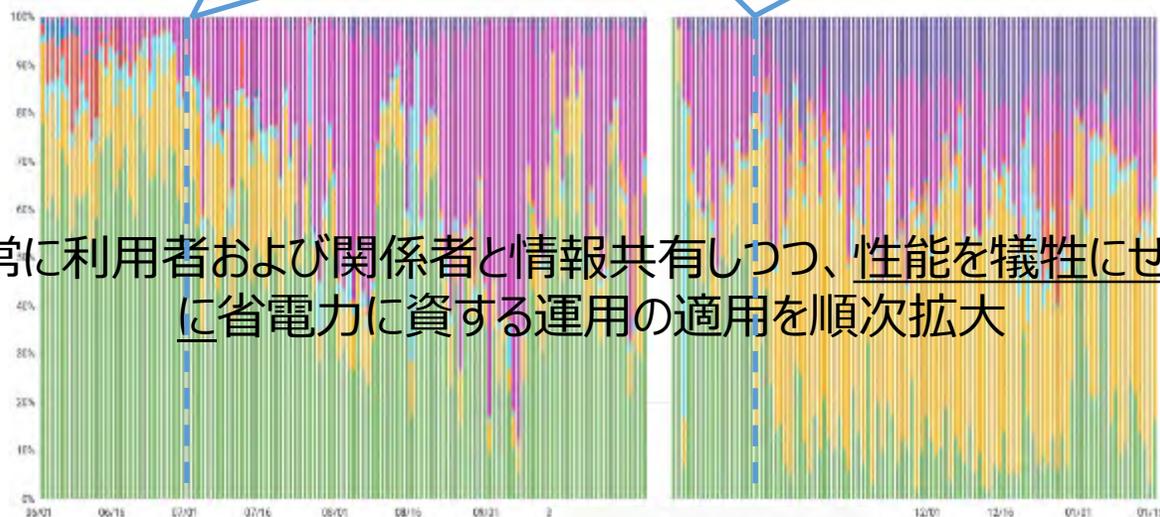
# 「富岳」の世界トップクラスの省電力化を高め電力危機を克服

- 光熱水費の高騰を受けて、2022年7月28日より「富岳」の約1/3を停止すること（省エネ運転の取組や補正予算の割り当てを受けて、11月8日に終了）、理研に配分された資源量の50%を停止分の補填の一部として拠出すること、省エネに資する機能の積極的な活用を決定し、利用者および関係者と共有。

## ジョブ実行モードの割合の推移

利用者に対し、省電力に資するジョブ実行のお願い(7/1)

遊休資源の電力カットの適用範囲の拡大(10/27)



0\_normal → 1\_retention → 6\_boost\_eco  
6\_boost\_eco → 7\_boost\_eco\_retention



約1/3停止等により約**30%**の省エネ化を達成  
(緊急避難的措置)

積極的な省エネ運用の活用により  
更に**10~15%**の省エネ化を達成

⇒運用時では世界トップの省電力(100W/ノード)

実運用に基づかないGreen500指標は実質的には無意味 21

常に利用者および関係者と情報共有しつつ、性能を犠牲にせず  
に省電力に資する運用の適用を順次拡大

これらの取り組みに加え、令和4年度補正予算を組み合わせることで、令和4年度の窮状に対応

R5年度には、省電力運用への協力の度合いに応じて、ユーザにインセンティブを与える運用を開始

# ACMゴードン・ベル賞 2021 2022連続受賞

スーパーコンピュータの世界で最も権威ある賞で、スパコン界のアカデミー賞年間最優秀作品賞にもなぞらえる。  
評価は、“Technology”、“Performance”、“Science Achieved”の三つの観点から行われる。

## 2021年ゴードン・ベル賞COVID-19研究特別賞 「富岳」を用いたCOVID-19の飛沫・エアロゾル拡散モデル 感染症疫学のデジタルトランスフォーメーションに初めて成功



評倉誠チームリーダー  
理化学研究所  
研究センター  
統一的開放研究  
学大学院システム  
究科教授)



## 2022年ゴードン・ベル賞 「富岳」「Frontier」等を用いたプラズマのレーザー加速器研究 国際連合チームが国際連合スパコン群を活用



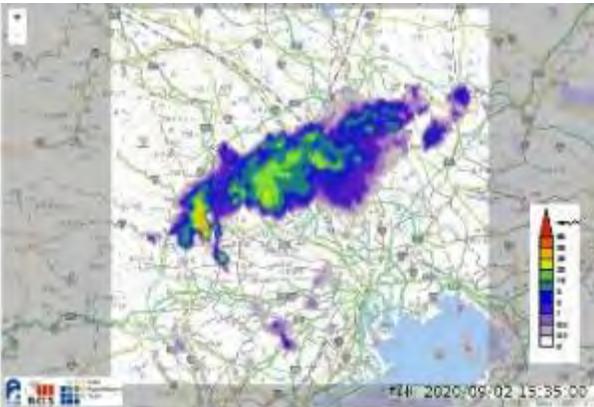
[Luca Fedeli](#), [France Boillod-Cerneaux](#), [Thomas Clark](#), [Neil Zaïm](#), and [Henri Vincenti](#), (CEA); [Axel Huebl](#), [Kevin Gott](#), [Remi Lehe](#), [Andrew Myers](#), [Weiqun Zhang](#), and [Jean-Luc Vay](#), (Lawrence Berkeley National Laboratory); [Conrad Hillairet](#), (Arm); [Stephan Jaure](#), (ATO S); [Adrien Leblanc](#), (Laboratoire d'Optique Appliquée, ENSTA Paris); [Christelle Piechurski](#), (GENCI); and [Mitsuhisa Sato](#), (RIKEN)

今回ファイナリストも6件中3件が富岳関係⇒ゴードン・ベル賞で受賞者やファイナリストが国際研究チームであり、かつ日本のスパコンを用いるのは史上初

ファイナリスト  
選出!

## 気候モデリング部門

地球規模の気候危機の解決に向けた革新的な並列コンピューティングの貢献を表彰することを目的として設置。初年度となる2023年は、ファイナリスト3件が選出されている。



予報Web画面のイメージ

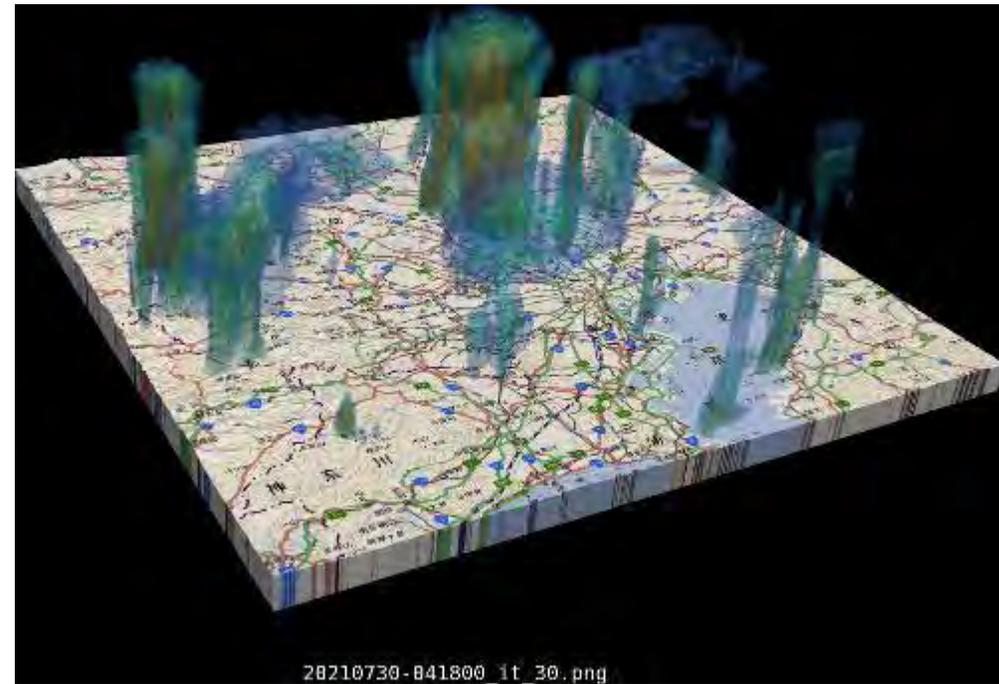
## 「スーパーコンピュータ「富岳」を用いた東京オリンピック・パラリンピック期間中に実施した、30秒ごとに更新するリアルタイム数値天気予報」

データ同化研究チーム  
三好建正チームリーダー

複合系気候科学研究チーム  
富田浩文チームリーダー

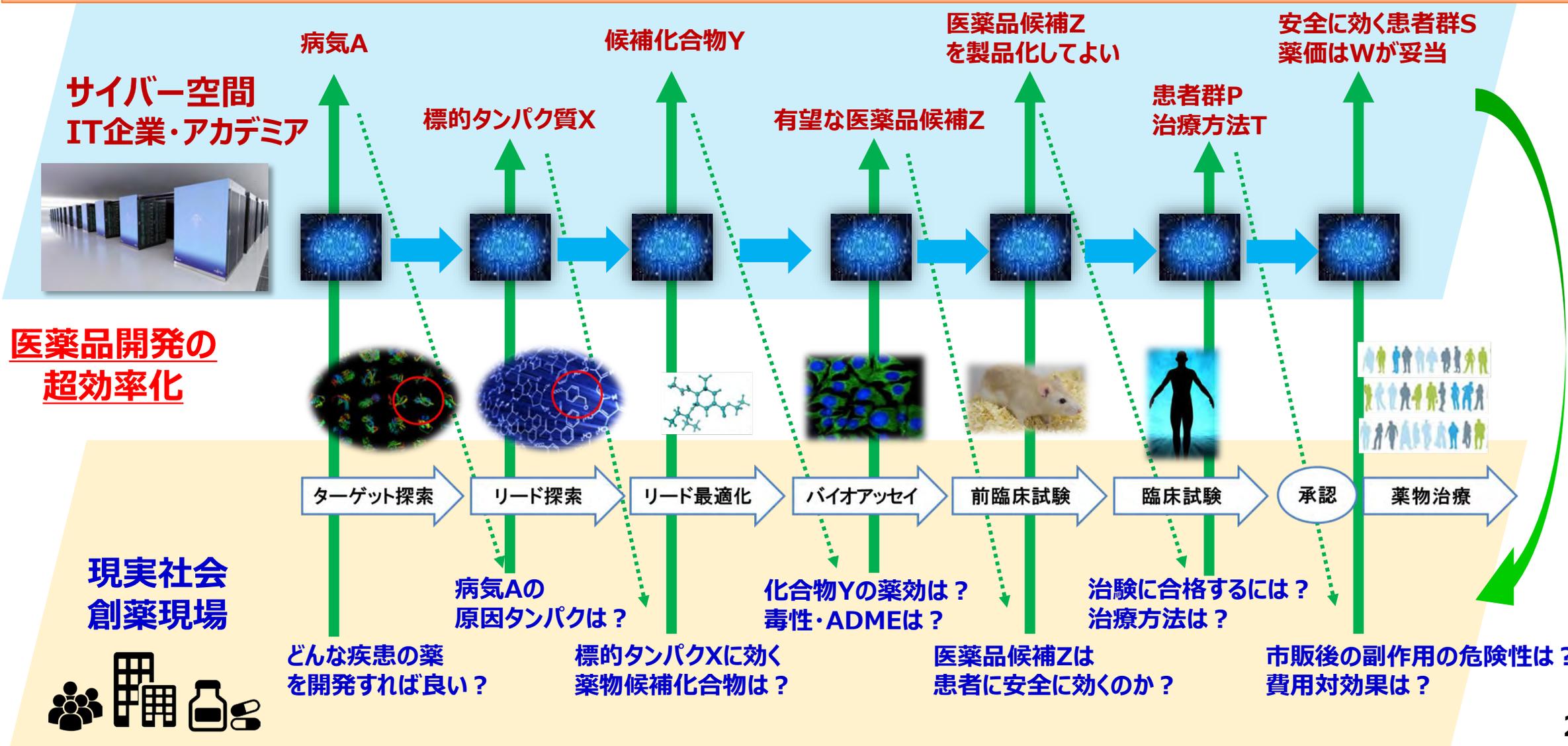
2013年「京」で研究開始  
2021年「富岳」で成果発表

本プロジェクトでは、地球規模の気候危機を解決するための一歩として、新しい数値天気予報システムを開発し、500メートル解像度の気象モデルで1,000通りのアンサンブル計算を行った。急速に発達するゲリラ豪雨に対しても30秒ごとの更新の有効性を明らかにし、複雑な気象の解明に向けて高度な計算手法を用いることの価値を証明した。

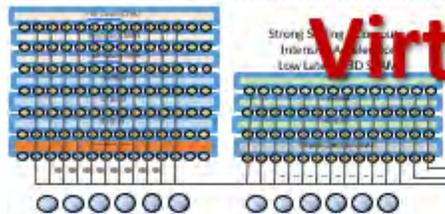


図：2021年7月30日13時18分00秒（日本時間）を初期時刻とする13時33分00秒（15分先）の3次元的な降水分布の予測。色は雨の強さを示す。見やすくするために鉛直方向は3倍に引き延ばしている。国土地理院の地図データを使用した。

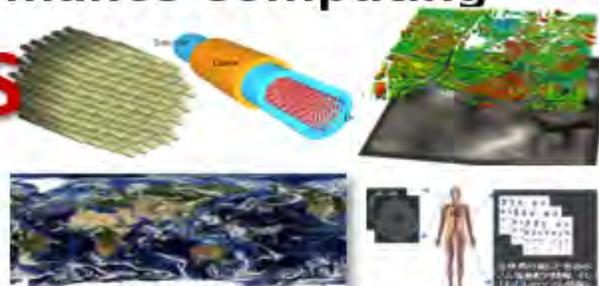
「富岳」を基軸として、AIとシミュレーションを融合させた革新的な創薬DXプラットフォームを構築し、創薬プロセスの超効率化を目指す。これにより、新薬やワクチン開発の少人数・低コスト・迅速化を実現する。



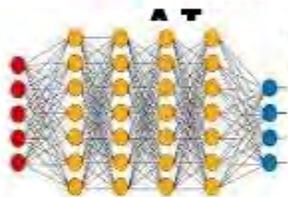
- 高性能計算の科学 **Science of High Performance Computing (towards 'Zettascale')**



## Virtual 富岳 w/AWS FugakuNEXT



- 高性能AIの科学 **Science of High Performance AI**



## 理研AI for Science TRIP-AGIS



- 量子-HPCハイブリッド計算の科学 **Science of Quantum-HPC Hybrid Computing**



## TRIP 量子-HPC ハイブリッド JHPC-Quantum



- 高性能計算による科学 **Science by High Performance Computing**

- 高性能AIによる科学 **Science by High Performance AI (AI for Science)**

- 量子-HPCハイブリッド計算科学による科学 **Science by Quantum-HPC Hybrid Computing**

## ● 連携大学院

- 神戸大学 筑波大学 東北大学

## ● KOBE HPC サマースクール

- 神戸大学及び兵庫県立大学と共同開催 スプリングスクールは2022から

## ● RIKEN International HPC Summer School / RIKEN International HPC

## ● 国際協力

- International HPC Summer School (IHPCSS) (アトランタ現地開催)  
日本 (理研)、EU (PRACE)、アメリカ (XSEDE)、カナダ (Scinet)、オーストラリア (Pawsey)
- ASEAN HPC School 2023 (インドネシア現地開催)  
ASEAN、EU (E-READI)、日本 (理研)

## ● インターンシップ

- 国内外から優秀な学生が参加 年々参加者が増加

## ● 中高生を含む若年層を対象とした取組み (スーパーコン等)

- Open OnDemandを利用した教材

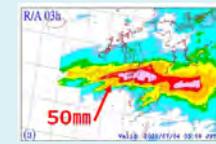


# HPCI計画推進委員会 次世代計算基盤に関する報告書 最終取りまとめ ポイント (R6年6月)

## <近年の情勢変化>

- ・「富岳」が令和3年3月より共用を開始。社会的な課題への対応を含め産学官の各分野で着実に成果を創出
- ・生成AIに係る技術革新などにより、研究開発に必要な計算資源の需要が急拡大するとともに多様化
- ・AIとシミュレーション、リアルタイムデータや自動実験などを組み合わせた取組(AI for Science)の重要性が指摘
- ・世界各国で、「富岳」を上回る性能の計算機の開発、高度化が加速
- ・GPUなどの加速部を活用した計算手法がこれまで以上に主流に
- ・半導体分野をはじめとするデジタル産業の再興を目指した取組が進展

(富岳の活用事例)



## <次世代計算基盤に求められるフラッグシップシステム>

計算基盤の重要性が増し、求められる機能も多様化・変化していく中であっても、**時代の要請に常に応える計算能力を提供**

### 【方向性】

- ・**AI for Science**をはじめとした新たな時代を先導し、卓越した研究成果を創出
- ・**計算速度のみの追求ではなく**、AI性能をはじめ、あらゆる分野で**世界最高水準の計算能力を提供**
- ・**自国の技術を中心にスパコンを開発・整備する能力を確保し**、**コア技術を特定**
- ・利用拡大、要素技術の**世界での普及**により、**我が国の産業競争力や経済安全保障の強化に貢献**
- ・長期間にわたり同一のシステムで稼働するのではなく、**需要の変化に柔軟に対応し**、**十分な性能を常に提供し続ける**

### 【求められる性能・機能】

- 遅くとも2030年頃の運転開始を目指し、科学者コミュニティの需要予測を踏まえ、**電力性能の大幅向上**により以下の計算環境を提供
  - ・既存の「富岳」でのシミュレーション → 現状の5～10倍以上の実効性能
  - ・AIの学習・推論に必要な性能 → 世界最高水準の利用環境(実効性能 **50EFLOPS以上**※) ※2030年代に想定される最先端の基盤モデルを数か月程度で学習可能な実効的性能
- 加速部の導入、**コア技術としてCPU開発、インテグレーション、メモリ実装技術を位置づけ**
  - システムソフトウェアの開発においては、運用開始後も継続的に改善を図るべき
  - 開発の成果が社会実装され、広く普及することが重要

### 【求められる開発・整備の手法、利用拡大に向けた取組】

- 「**端境期**」を極力生じさせず、**利用環境を維持**
- **適時・柔軟に入れ替え又は拡張可能とし**、**進化し続けるシステム**
- 将来の需要増に大きく貢献し得る技術の評価・研究開発を継続
- **開発アプリケーションの継続利用・改良に加え**、**生成AI利用など新たなHPC領域の開拓**
- **成果創出の加速、新領域の拡大に向けた研究開発プログラムの実施と利用の拡大**
  - 構成要素の調達には、国内の製造技術の成熟状況を見極めて対応
  - 量子コンピュータについては、別途計算機ネットワークに接続し、ユーザーに利用環境を提供する方針

(イメージ)



### 【開発主体】

- 理化学研究所を開発主体とし、引き続き検討を進める。検討にあたっては、節目におけるHPCI計画推進委員会等での評価、開発費用の過度な増大回避などが求められる