

「特定高速電子計算機施設の
共用の促進に関する基本的な方針」
に関する意見

平成20年3月

情報処理学会

ハイパフォーマンスコンピューティング研究会

有志一同

「特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針」に関する意見

情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会（以下、HPC 研究会）は、高性能計算システム及びこれを用いた各種応用プログラムに関する総合的な研究を対象とした研究会であり、国内の高性能計算に関する主要研究者を含む、登録会員数約 500 名を擁する国内随一の HPC 技術関連研究会である。この度、文部科学省から発表された、「特定高速電子計算機施設の共用の促進に関する基本的な方針に対する意見募集について」（平成 18 年 7 月 13 日）という呼びかけに対し、高性能計算システムとその応用というテーマを柱とする我々のコミュニティとして、何らかの意見・提言を行うべきであるという合意に達し、有志による議論を経てまとめることとなった。

公開議論の場として、HPC 研究会が毎年定例開催している「ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム HPCS2008（東京工業大学にて平成 20 年 1 月に開催）」において特別パネルセッションを行い、本テーマに関する議論を行った。その上で研究会執行部を中心に意見書をまとめ、パネルディスカッションのパネリストの意見を加えた上で最終版を作成した。ここに、表記呼びかけに対する HPC 研究会有志からの意見として、本提言をお送りする。

平成 20 年 3 月 31 日

情報処理学会

ハイパフォーマンスコンピューティング研究会

主査 朴泰祐（筑波大学）

寒川光（芝浦工業大学）

佐藤三久（筑波大学）

須田礼仁（東京大学）

関口智嗣（産業技術総合研究所）

松岡聡（東京工業大学）

他 研究会有志一同

提言1：次世代高性能計算機の利用形態について

特定高速電子計算機施設（以下、次世代スパコン）の敷設及び運用の第一義的目的は、言うまでもなく同システムが提供する圧倒的計算パワーを駆使し、先進的計算科学及び計算工学問題を解き、様々な応用分野において従来なし得なかった規模での計算を実現し、科学・工学分野での研究を加速することにある。これらはグランドチャレンジ的な応用であり、プログラムを高い効率で実行するためには、高度なプログラミングスキルと応用問題自身が持つ高い潜在的並列性等が要求される。これらはいわゆる **Capability Computing** に属する応用方法である。

しかしながら、同時に 10PFLOPS を越えるような計算パワーの使い道として、小・中規模のアプリケーションを大量に実行する、いわゆる **Capacity Computing** にも目を向ける必要がある。次世代スパコンは極めて高密度に集約された超高性能計算システムであり、集中管理されることにより、小・中規模の計算システムを多数分散配置するよりも、むしろ単位面積当たり、あるいは単位電力当りの計算性能とコストを高めることが可能である。従って、次世代スパコンを高スループット計算に用いることも、計算科学・計算工学技術の底上げや多くのより一般的な問題の処理性能を向上させることに大きく寄与するはずである。

従って、次世代スパコンの運用、特に応用プログラムの選択と実行においては、**Capacity Computing** と **Capability Computing** の理想的な融合が必要である。これだけのシステムをどちらか一方の用途のみに集中的に利用するよりも、それらをうまくバランスさせ、総合的な対費用効果を高める施策が必要と考えられる。

提言2：アプリケーション開発について

次世代スパコンを **Capability Computing** の最高峰ツールとして利用するためには、そのシステム（ハードウェア及びシステムソフトウェア）が整備されるだけでは全く不十分である。今日の先進的スパコンは全て、プロセッサの高速化だけでなくこれを多数用いた超並列技術によって達成されている。従って、ターゲットとなる応用プログラム自身にも高い並列性が求められる。

しかるに、現在稼働中のスパコンにおける応用プログラムの多くは、その並列性が比較的 low、最大のもは数千並列までの並列処理に耐えられるが、ほとんどはいわゆる「小粒」の計算である。提言1に示したように、次世代スパコンの用途は **Capability Computing** と **Capacity Computing** の両方が考えられるが、前者に関していえば、問題規模自体は大規模化したいという要求を持ちながら、並列化等のスキル不足によりこれを達成できない応用アプリケーションも潜在的に多数あるのが現状である。すなわち、高度な要請と、これを支える技術あるいは支援体制が十分でないというジレンマが生じていると考えられる。これを解決しなければ、両方の種類の計算をバランスさせることは不可能である。

従って、この状況を解決するために、真に大規模化が必要なアプリケーションに対する

十分なプログラム並列化・大規模化を支援する体制が必要である。特に応用プログラムのコーディングやアルゴリズム開発において、問題を解きたいというユーザだけにこれを任せていては、従来から抱えてきたこれらの問題を解決することは不可能である。これについては提言4でもう一度述べる。

提言3：並列化環境の必要性について

現在の大規模並列アプリケーションのほとんどは、分散メモリ型プログラミングモデル（代表的なものは MPI）によって記述されている。これは、大規模並列システムがアーキテクチャ的制約により分散メモリ型で実現されていることが理由であるが、大規模共有メモリシステムの高性能化・大規模化がますます困難になっている現状から、今後もこの種の実行モデルは続けざるを得ない。

しかし、MPI 等によるプログラミングはアプリケーションプログラムの負担を増大し、応用プログラムの真の目的である、問題解決のための努力以上にコーディングの労力を強いることになり、効率的な研究推進を達成することが困難になる。

次世代スパコンの開発というこの機会に、従来のプログラミングを方法論から見直し、分散メモリ型アーキテクチャという枠組みの中でもよりユーザがプログラミングし易い、何らかの言語あるいは計算モデルを構築していく努力が必要である。

提言4：応用分野とシステム分野の協力体制について

提言2でも述べた通り、次世代スパコンにおける **Capability Computing** のための大規模アプリケーションコードの開発は以下に挙げるような様々な工夫が必要である。

- ・ 大規模並列化を十分考慮した並列プログラミング
- ・ 個々のプロセッサ性能を最大限に生かすためのプロセッサアーキテクチャに依存した最適なプログラミング
- ・ メモリやネットワークの限られたバンド幅を最大限に生かすアルゴリズム開発
- ・ 性能ボトルネックを的確に明らかにする解析

現在、多くの応用プログラムではこれらの努力はユーザ自身あるいはそのコミュニティによって行われている。彼らの最大の関心事はプログラムを速くすることではなく、そのプログラムを使ってサイエンスを推進することである。また、アルゴリズム及びプログラムが複雑になるにつれ、これらのチューニングは二の次となり、プログラムが動くことを確認するだけで手一杯となる。また、これらのコードチューニングにはコンピュータサイエンス、並列処理技術者にとっては既知で常識的なことであっても、それらのアプリケーションユーザには理解されていないことが多い。

以上のような背景の下、今日の大規模かつ先進的な応用プログラムの実行では、必ずし

もシステム性能が十分に生かされているとは言い難く、これが大規模並列化への妨げにもなっている。従って、このような現状を打破し、次期スパコンを効率的に運用するため、またユーザにとって本当に必要なプログラムの効率的実行のためには、応用サイドとシステムサイドの両研究者並びに技術者が密に検討を行い、共同作業を行う必要がある。これは、単に「ユーザサイドからシステムサイドに下請けを出す」という形ではうまく行かず、双方の緊密な協力体制・相互理解・集中作業が必要である。また、これらを学際的に推進する仕組みや共同研究プログラムが必要である。

また、計算科学とハイパフォーマンスコンピューティング（以下、HPC）に関係する研究者は、これまで概ねユーザ側かシステム側のどちらかに属してきたが、上記のような学際的プログラムを発展させるには、その両者の仲立ちを行うポジションの重要性を双方が認識し、その部分が単なる「手伝い」になるだけでなく、例えばそのポジションがキャリアパスとして成り立つような仕組みや、コードチューニングに対する何らかのインセンティブを与える枠組みを考えるべきである。

提言5：システムの配備と計算センターについて

次世代スパコンはその規模において日本最大のシステムとなることは自明であるが、計算科学の底上げのためにはマシンが1台、中央集権的にあるだけでは不足である。Capability ComputingでもCapacity Computingでも、次世代スパコンの規模を1桁程度ダウンさせたシステムが各地の計算機センター等に分散配置されるべきである。それらの計算能力は次世代スパコンよりも小さいものとはなるが、そこで行われるプログラム開発と、そこで培われるプログラム開発技術の両者は、次世代スパコンの大規模化に耐えるクオリティのプログラム生成に不可欠である。そして、あらゆる計算科学コミュニティが、CapabilityなりCapacityなりのComputingを様々なシステム規模で推進し、我が国の計算科学技術、シミュレーション技術等を底上げしていくと思われる。

また、Capacity ComputingにしるCapability Computingにしる、いわゆる「計算のプロ」が利用するというのがこれまでのスパコン利用の形態であったが、計算科学を深く一般に浸透させ、技術の底上げを図るには、単に次世代スパコン(NLS)及びこれに続くセンタースパコン(NIS)を、それらのプロだけに占有させるだけでなく、より低いレベルの利用者（学生等）にも門戸を広げ、人材育成の初期段階からこれらのシステムを手軽に利用できるようなプログラム作りも重要であると考えられる。広範な科学技術分野における多くの研究者が、このような超高速計算機が科学の役に立つということを身をもって実感し、スパコンをあらゆる局面で利用することが当たり前になるような状況を作り出すためには、まずエントリーレベルを低くし、スパコンがいかに役立つかを体験する機会を提供することが重要である。

かつて国家プロジェクトとしてのスパコン開発は通産省主導で行われてきたが、ベンダーを中心とするコンピュータ産業技術の育成や経済効果の観点から、現経済産業省による

スパコン開発は行われていない。これに対し、大学・研究所における大規模計算科学・計算工学による研究推進はその必要性を増している。従って、これらの研究をバックアップするためには、次世代スパコンの設置だけでなく各センターへのサブシステムの配備を始めとする、様々な施策が文科省によって実施されることが不可欠である。このような枠組みの下、シームレスなアプリケーション開発が進めば我が国全体のスパコン技術の引き上げにつながり、さらに次の世代への技術的基盤が築かれるものと期待する。

課題6：グリッド運用について

次世代スパコンとこれを取り巻く各センター運用スパコンの利用技術としては、何らかのグリッド運用を行うことが自然である。現在、各大学における相互運用技術の研究が進められているが、ユーザがストレスなしに手軽に使える状況にはまだ達していない。次世代スパコンの運用を軌道に乗せ、課題5で述べたシームレスなスパコン利用を推進するためにも、グリッド環境を整備し、どのサイトでも確実に動いて **inter-operability** が提供されるような技術的枠組みが必要である。

また、グリッド技術の適用に当たっては、インタフェースの統一、認証システムの基盤整備、グリッド利用教育の推進等が必要不可欠である。これらの下に、システム利用環境が全国的に平準化され、スパコンを利用することがより身近になり、より広い分野でのスパコン利用が促進されるものと考えられる。

提言7：人材育成について

現在、我が国における計算科学と HPC 技術は米国のそれに対して、残念ながら遅れを取っていると言わざるを得ないのが現状である。システム開発、コード開発、応用研究推進のいずれを取っても、米国では我が国よりはるかに多くの予算と人材が投入されている。これは、単に TOP500 リスト上のシステム数というような物量的な違いだけでなく、応用研究のスキル、コード開発及びチューニングのスキルにおける質的な差も大きい。

今後の我が国の計算科学と HPC 技術を向上させ、応用プログラム開発力や研究推進力を高めるためには、当該分野の人材育成が急務である。これは単に、応用サイドやシステムサイドの PD を増やすような予算的措置だけでなく、提言4で述べたような応用とシステムの仲立ちとなる研究者・技術者が育つことが必要である。このためには、両サイドの研究者がこのような共通認識を持つことが必要条件であるが、その立場の人材がこれを「プロ」の仕事として捉え、社会もそのような認識を持つことが必要である。

現状では、このような人材育成は企業や研究所で行うのは困難であり、応用分野・情報系専攻・センターという三本柱を持ち、各分野で一流の人材及び体制を有する大学という組織がまさに最適な場であると考えられる。そして、このような人材育成は、応用からシステムまでという「幅」を広げるだけでなく、学部学生からスタッフレベルまでのあらゆる階層のキャリアパスにおいてこれを実施することが肝要である。

このためには、まず大学における計算科学と HPC 技術に関するカリキュラムを確立させ、これまで経験的・手探りのに行われてきた研究を体系化すると共に、予算措置を含めたバックアップを行うべきである。このような背景の下で育った人材が、応用とシステムのエコシステムを作り上げる上で重要な役割を果たすと信じる。

終わりに

本提言は、冒頭で述べたように、情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会が主催する「ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム 2008 (HPCS2008)」における特別パネルでの議論を元にまとめたものである。しかし、ここに述べた提言の多くは、計算機システム分野から HPC 応用分野を見ていて日常的に感じられてきたものであり、多くの HPC 研究者が共通認識を持つものと信ずる。我々 HPC 研究者は、我が国の応用研究者とシステム研究者がこれまで以上に手を組み、アルゴリズム開発からシステム運用までのあらゆる階層で協力関係を築いていくことが重要であると考えている。本提案の骨子をお汲み取り頂き、次世代スパコンの運用とその有効利用、さらに応用サイドとシステムサイドの研究者・技術者の協調関係を築く上で、この次世代スパコンが大きな役割を果たし、我が国の技術力を益々高める上で役立てば幸甚である。

(以上)