

将来のHPCIの在り方に関する検討ワーキンググループ

報告書

令和元年 6 月
文部科学省研究振興局
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

1. HPCI の現状と課題

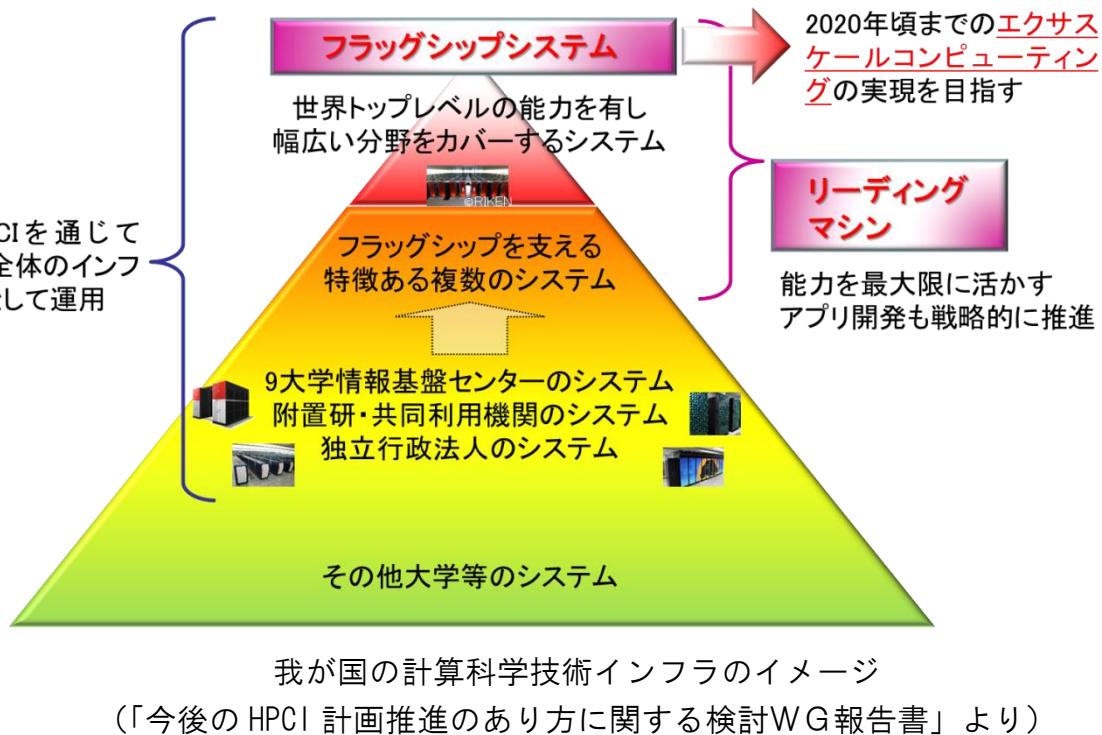
1－1 HPCI の現状

文部科学省では、平成 18 年度からスーパーコンピュータ「京」の開発・整備を推進するとともに、「京」を中心として国内の大学等のシステムを 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システムを利用できる 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）を構築し、平成 24 年度から運用してきた。

また、平成 26 年 3 月に HPCI 計画推進委員会の下におかれた「今後の HPCI 計画推進のあり方に関する検討ワーキンググループ」によって今後の HPCI 計画推進の在り方に関する報告書がとりまとめられており、その中では、今後の HPCI のグランドデザインとして、

- ◆ トップレベルやその次のレベルのスパコンを複層的に配置し、計算資源量ニーズの高まりや利用分野・形態の多様化に対し、それらのスーパーコンピュータ全体で対応する世界最高水準のインフラの維持・強化が重要。
- ◆ 我が国のトップレベルスパコンの性能を世界トップレベルに維持していくとともに、その中で得られた技術によってコストパフォーマンスが向上したスパコンを各層に普及させ、計算科学技術インフラ全体を引き上げることが重要。
- ◆ 計算科学技術インフラの戦略的整備とともに、HPCI のように、用途に応じた多様なシステムの利用、データの共有や共同での分析等の様々なニーズに応える仕組みの構築が重要。
- ◆ 我が国の計算科学技術を発展させ、科学技術の発展や産業競争力の強化に貢献できる、世界トップレベルの性能を持つシステムを、リーディングマシンとして、国が戦略的に整備していくことが重要。

といった方向性が述べられている。



この方向性に則り、文部科学省は、平成26年度から「京」の次のフラッグシップマシンであるスーパーコンピュータ「富岳」の開発に着手した。令和3年から令和4年の共用開始を目指し、理化学研究所を中心として開発を推進しており、平成30年11月に内閣府総合科学技術・イノベーション会議で実施された中間評価において、「製造・設置を遅延なく推進していくことが適当であると認められる」と評価されるなど、順調に進捗している。なお、「富岳」の製造・設置に伴い、京は本年8月に運用を停止する予定となっている。

また、リーディングマシンを設置している各大学の情報基盤センター等と連携し、HPCIも順調に運用されており、平成30年度末までに1,342件の研究課題（のべ11,685名）での利用実績がある。

1-2 将来のHPCIを巡る動向

HPC(High Performance Computing)も含めた計算科学分野、あるいは情報科学分野では、HPCIを取り巻く近年の技術動向や社会情勢の変化の速度が速く、その変化に適応するため、特に以下の事項について念頭におきながら検討を進める必要がある。

① 利用分野拡大およびユーザーニーズの多様化

計算科学は、これまで、対象の合理的な理解に基づくモデリングによる演繹的な方法、すなわちシミュレーションを主な方法論として発達してきており、理論、実験に続く第三の科

学的手法として様々な分野で活用が進んできた。

一方で、近年では AI(Artificial Intelligence), 特に深層学習の発達により、対象の観察に基づくモデリングによる帰納的な方法であるデータ科学が計算科学に新たな可能性をもたらしている。このデータ科学においては膨大なデータ処理のために HPC が活用されることが多く、データ科学的な手法の進展により、対象の合理的な理解に基づくモデリングが困難であったためにシミュレーションが利用されてこなかった分野でも HPC の需要が拡大していくことが想定される。また、演繹的な手法であるシミュレーションと帰納的な手法であるデータ科学を融合させた新たなアプローチが様々な分野で模索されており、さらに進展していく可能性も指摘されている。

一方で、分野によっては弱スケーリングに基づく高性能化が限界を迎えており、すなわち、スーパーコンピュータの規模が、アプリの問題規模に適したサイズを超えており、多数のプロセッサを用いても時間の短縮につながらない場合が出てきている。このような問題に対して、シミュレーション時間の短縮につながるような新たな計算機設計やソフトウェア開発への要請が高まっている。

このような利用分野の拡大、あるいは各分野におけるアプリケーションの開発方向性の変化、下記②に示すアーキテクチャの多様化等に伴い、HPC に求めるユーザーニーズがさらに多様化していくことが見込まれる。

② アーキテクチャの多様化

ムーアの法則に代表される計算機の今までの発展は、半導体の微細化によるところが大きく、現在は 10nm や 7nm のスケールの半導体が実用化されている。平成 31 年 4 月に 5nm スケールの半導体の生産を開始したことを発表するとともに、令和 4 年までに 3nm スケールの生産実現に挑戦することを表明している半導体ファウンドリも存在する。また、平面での微細化に加え、半導体の縦方向への積層を実現し、性能向上・消費電力低下を実現するための三次元積層技術の開発がすすめられている。しかし、半導体の微細化は近い将来限界を迎える可能性が指摘されている。また、微細化技術の進展が続いたとしても、コストの増大により、大規模システムでの採用が困難となる恐れもある。

一方で、現在でも CPU に加え GPU, FPGA が広く用いられ、さらには量子コンピューティング、ニューロコンピューティングなどの開発が進められており、今後はアーキテクチャの技術の多様化が一段と進むことが見込まれる。

以上により、アーキテクチャの将来像については不確定性が増しており、予測が困難な状況となりつつある。

③ 多様なデータの創出とその指数的増加

Society 5.0 化が進展することで、経済社会のあらゆる事項がリアルタイムにデータ化され、解析されるようになること、また、時間的・空間的解像度がさらに向上することが予想

される。すなわち、データ量とともにその多様性は増していく。このため、現在はビッグデータと認識されているデータ量が、10年後には「スマートデータ」になっている可能性がある。また、この「超データ駆動型社会」においては、データを有する者が勝者となるパワーゲームとなり、データを持つものと持たないものの間に競争力の格差が生じると言われている。すでにこの現象は、GAFA(Google, Amazon.com, Facebook, Apple Inc.)の台頭に代表されるように、社会の現実となりつつある。

さらに、シミュレーション科学とデータ科学の融合の進展により、様々なシナリオを想定して生み出されるシミュレーション結果をデータベース化し、そこから新たな価値を持つ情報を創出することも、Society 5.0 や「超データ駆動社会」の実現のために必要となってくる。

このような状況の中で、データの解析基盤としてはもちろんのこと、データを創出する基盤としても、HPCIに対するニーズがより高まっていくことが想定される。

④ 情報分野における教育への期待の高まり

Society5.0 の実現を進める中で、理数教育を通じたリテラシー向上や IT 人材の抜本的な増加等の必要性が唱えられている。こうした背景を踏まえ、我が国では情報分野等の教育を充実させる政策を進めており、小学校でのプログラミングの必修化や科学的探求学習活動の充実、高等学校における「情報 I」の必修化をはじめとする新学習指導要領における理数教育やプログラミング教育の充実、大学生への数理データサイエンス教育の充実、実務家教員の育成・活用、さらには産学連携による実績的活用スキルを習得できる機会の充実といった取組が推進されはじめている。

2. 本ワーキンググループの目的と検討内容

本ワーキンググループでは、1. で述べたような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検討するため、平成 29 年 6 月に HPCI 計画推進委員会の下に設置された。

将来の HPCI のあり方や将来の計算科学・計算機科学のあり方、海外の計算科学・計算機科学の状況に関することについて、委員や有識者からのヒアリングを行いつつ、計 7 回開催して議論を行った。その具体的なヒアリング実施者は以下の通りである（組織名、肩書きは当時）。

第 1 回

滝沢委員

「Space-Time Methods and Application」

鳥取大学 星健夫准教授

「100 ナノ電子状態計算とデータ科学による有機デバイス材料研究」

気象庁予報部 石田純一数値予報班長（第4回より委員）

「数値予報開発の現状と更なる進展の可能性」

第2回

東京大学 藤田航平准教授

「地震分野におけるアプリケーション開発の現状と更なる進展」

理化学研究所革新知能統合研究センター 上田修功副センター長

「HPC×物理・社会モデル×AI=シミュレーション科学」

理化学研究所計算科学研究機構 三好建正チームリーダー

「データ同化：シミュレーションと実測データを融合するデータサイエンス」

東京大学 藤堂真治准教授

「計算科学ロードマップ／計算科学フォーラムについて」

第3回

吉田委員

「データ科学とアプリケーションの融合のあり方」

第4回

佐野委員

「ハードウェア開発の現状と更なる進展の可能性」

大島委員

「これからの計算ハードウェアの動向とその活用・普及について」

第5回

伊達委員

「情報基盤センターの現状と将来像について」

これらの検討結果を踏まえ、今般、将来的な HPCI のあり方について報告書をとりまとめた。

3. 将來の HPCI のあり方について

将来的な HPCI のあり方に関する議論の中で、最先端の科学的成果を創出するための計算

プラットフォームである HPCI を、引き続き国が整備、運用していくことが、我が国の科学力、産業力等を維持・向上していくために必要不可欠である、という共通認識が得られた。また、最先端のテクノロジーによって新たな科学的アプローチが産み出されてゆくと考えられるので、そういった観点からも最先端のシステムを我が国が保有し続ける必要がある、との指摘もあった。

その上で、HPCI のあり方について、以下のような提案が寄せられた。今後、国によって将来の HPCI の姿を具体化していく中で、これらについて十分留意しながら検討していくことが求められる。

① アーキテクチャの多様性とプラットフォームの整備

半導体微細加工の限界とアーキテクチャ技術の多様化を踏まえ、将来的には、HPCI には異種アーキテクチャを混在させ、多様なアプリケーションに適応させるべきである。そのためには、「汎用的な高性能のスパコンを 1 つ、フラッグシップマシンとして開発し、その成果を第 2 階層のリーディングマシンに展開していく」という今までの HPCI のモデルのみでは不十分となる恐れがあり、フラッグシップマシンの定義や役割を再検討するとともに、より多様性を意識した HPCI の全体構成を長期的、俯瞰的な視点から検討する必要がある。

また、アーキテクチャが多様化する一方で、利用分野が拡大していくことでユーザーの HPCI に対する要望も多様化していくため、科学のあるいは社会的に重要であり、かつ HPC を必要とする多様なアプリケーション分野に適応すること、並びにユーザーの計算基盤利用プロセスの高効率化、高生産化を実現するための取組（ソフトウェア、人材育成、利用支援等）を行うことの重要性が増していくことになる。

② データ利活用基盤の整備

社会の IoT 化による多様なセンサー情報や、大規模観測・測定施設等から生み出される大規模なデータによってもたらされる「データ駆動型社会」において、HPCI 内外から得られる大規模データ処理のための計算基盤となる HPC の重要性は増していくことになる。そのため、それをリードするインフラである HPCI は大規模データ処理のニーズと整合性のとれたシステムを実現しなければならない。

また、HPCI を用いたシミュレーションで生成された大量のデータを AI の学習データとする手法も有望であるため、そのデータが有効に活用されるための基盤構築を推進する必要がある。現在、HPCI から得られるデータのうち、公開・共有する価値のあるものについては、作成者の合意のもとに、公共財として幅広くアクセスできるようにすることや、関係者間で共有することなどが検討されている。その際、科学的・社会的ニーズの高い分野について戦略的・優先的にデータを収集し、オープン・クローズ戦略に基づいて利活用を促進することも考えられる。

こうした大規模データの利活用を促進する観点から、基盤整備において、低レイテンシで

高バンド幅なネットワークの存在が極めて重要であり、それを提供する SINET の機能強化及び HPCI 構成システムとの連携が必要である。

③ ボーダレス化の進展

世界最高性能のスパコンを 1 つの国の技術と予算のみで作り上げることは困難になりつつあり、また天文分野や素粒子研究分野で代表される国際大型プロジェクトのように、そこで解析されるデータも国境を越えた連携によって収集されることが想定される。そのため、HPC 分野における国際連携をより推進していくべきである。具体的には、国内拠点だけではなく、国外拠点も参画する計算・データ共有基盤の構築、国内外の機関により収集された大規模データの共同解析プロジェクトの推進、HPC 分野における国内外の機関間の共同研究の促進などが考えられる。

また、民間企業によるクラウド型のサービスを科学者が自らの計算ニーズに応じて利用することが常態化しつつあるが、計算機資源を適材適所に利用する観点から、歓迎すべき状況である。科学、産業を支える計算基盤として、国と民間それぞれの特徴を踏まえた上で、ユーザー視点からみて最適となるような HPCI を実現すべきである。

④ 人材育成

Society 5.0 の実現に向けて、プログラミング教育や数理データサイエンス教育等の取組が推進されている。また、他国の技術に過度に依存しない、我が国の基幹技術として最先端のシステムを開発し続けていくためには、アーキテクチャ、OS、コンパイラ、基本ライブラリなどのシステム系の技術を保持し続け、また世界をリードする研究を推進し続けるための人材育成の努力が不可欠である。

さらに、HPC システムの高度利用のためには高度な技能を持つ支援要員の存在が重要であり、このような人々の育成に力をいれるとともに、キャリアパスをどのように構築していくのかについても、産学で真剣に検討されるべきである。

加えて、ボーダレス化に対応し、対等な立場で HPC に関する国際連携を推進する観点から、国際的にリーダーシップを発揮できる人材の育成も重要である。

4. 実現するための具体的な取組例

3. で示された方向性を実現するために、これまで行ってきた取組に加え、例えば以下のような取組を推進する必要がある。

- 将来的に HPCI に導入される可能性がある斬新な未開拓技術、およびそれらを用いた計算機構成方式・基盤ソフトウェア・アルゴリズムを研究する基礎研究段階の研究開発プロジェクト

- 多様なアーキテクチャから構成される HPCI 全体の有効活用を実証するための研究開発プロジェクト（ソフトウェア等の利用環境整備を含む）
- 海外の研究拠点との連携を推進するプロジェクト（国外拠点も参画する計算・データ共有基盤の構築、国内外の機関により収集された大規模データの共同解析プロジェクトの推進、HPC 分野における国内外の機関間の共同研究 等）
- 潜在的ユーザーが HPCI を活用するための支援体制強化、利用支援人材のキャリアパス構築を HPCI 参画機関が連携して実施するためのプロジェクト
- 5 年、10 年、さらにその先の科学的課題・社会的課題を見据えつつ、その解決に必要な計算科学・データ科学的アプローチと、それを実現するために必要となるネットワークも含めた HPCI の全体像を示すロードマップの策定
- 半導体・アーキテクチャ・システム・ソフトウェア等の技術研究開発プロジェクトから HPCI の利用に関するプロジェクトに跨った、ワークショップ等の開催

将来のHPCIの在り方について (第6回WG各委員説明資料)

大島委員

- スパコンセンター教員として調達・導入・運用・サポートに関わる。自らも計算機科学の研究者として、時には計算科学の研究者と協力し、スパコンを日常的に研究に用いている。

題目：<HPCI の将来像>

- ・ポスト「京」時代（2025年頃）
- ・ポスト「ポスト「京」」時代（2035年頃）

上記2つの時代におけるHPCIについて、目的および具体的姿は、それぞれ、どのようなものであるべきか。

2025年頃のHPCIについて

- 参考とした主な資料：これまでの半導体ロードマップ、第2階層システムの更新計画資料
- どのような時期か？

(ムーアの法則ではなく)プロセス微細化そのもの終焉期。微細化自体は継続するがコスト的に破綻し、最新プロセスをスパコンなどの大規模システムで利用するのが困難となる可能性も。

- 主流となる計算機システムは？

大規模システムを構成する主な要素は現在と劇的には変わらず、ホモジニアスシステムとヘテロジニアスシステム（アクセラレータ搭載型）が混在。主要な演算装置はCPU、FPGA、GPUなどのアクセラレータ。混載型もありえる。メモリ・ネットワーク・ストレージ等を強化して（もしくは絞って）差別化を図るシステムも考えられる。2019年と根本的に大きく異なるというよりも、バランスや組み合わせが異なるもの。プログラミング環境も多くが引き継がれていると思われるが、現在の機械学習分野のように分野によっては特定の（もしかしたら現在とは全く異なるタイプの）言語・ライブラリ・フレームワークなどが活用されるだろう。

- HPCIの目的及び具体的姿

基本的には従来通りの「フラッグシップシステムのための練習機（橋）としてのHPCI」と「フラッグシップシステムではカバーできない領域をカバーするためのHPCI」。FPGAやアクセラレータの普及具合が「ちょうど良い」場合は両方とも容易となる。普及具合によってはポスト「京」と他のシステムとの互換性が低下するため、より後者寄りになると思われるが、前者が困難とまではならないだろう。またHPCI構成機関のシステム同士の差異が大きくなると、システム間の移行や代替が困難となることや需要と共に有のバランスのミスマッチが発生しうることが懸念され、利用者にとって不便とならないよう注意して支えていくことが重要。

2035年頃のHPCIについて

- どのような時期か？

ムーアの法則は終わっているはずである。具体的に何が主流となっているかの想定が難しい。

- 主流となる計算機システムは？

現在のCPUやメモリが大きな変化をすることなく性能向上し続けるのは難しい。しかし膨大な資産を捨てて全く異なるシステムに全て移行するのは非現実的なため、「現在のスパコンを発展させたもの」と「大きく異なるもの」のハイブリッドが想定される。新たな計算原理を取り入れたものを含めて様々なア

セラレータ・専用計算機が活用されるが、特定用途向けに絞ることには良し悪しがあるため悩むことになる。

- HPCI の目的及び具体的姿

様々な分野でそれぞれの特定用途向けの HW や開発環境が用いられるようになり、従来のプログラム最適化技術とは異なる利用技術が求められ、最適化技術者とアプリ開発者の距離がさらに広がるかもしれない。レイヤ間・分野間の連携を支えることは HPCI の重要な仕事となるのではないだろうか。また同時に、汎用性があり一流の研究に使えるフラッグシップシステムは事実上構築不可能となるかもしれません、適切な対応が求められる。

滝沢委員

HPCI の将来像について

具象化と一般化のサイクルは様々な分野で行われてきている。例えば、組み込み OS と呼ばれるある用途に特化したシステムを各々が作成してきている。一方、近年では CPU やメモリーの工場により、Linux や Android といったシステム利用でも十分な性能が引き出せることがから、一般化されたシステムを利用することで効果的に利用が可能である。ユーザーという立場で見ると、組み込み OS かどうかはさて問題ではなく、直感的に利用できるか、すなわち、統一的な UI であるかが重要である。ここで重要なことは、この汎用システムの高度化が逆に組み込み OS と同等もしくは、速い動作を実現できることが少なくないことである。これは一般には、汎用化することによる研究開発のたまものであると言える。これは HPCI においても必ず起きることである。

ここで、HPCI におけるアクターとして 3 つに分類する。A) HPCI を利用した研究開発を行うこと。そして、B) 上位ユーザーが必要とする数字を計算機によって算出するための定式化やアルゴリズムを考えること。最後が、C) そのアルゴリズム実装しコンピュータを動かすことである。これまで、研究者の多くはこの内の 2 つを担っており、そして近隣の研究者との協働は多くない。したがって、専門性の増加と協働の増加の 2 つが必要とされている。これには、研究・教育・産業の 3 つを考えることが必要である。教育・産業の 2 つは継続的に変化する技術に対応するためには不可欠である。こうした一般論に対し、以下にポスト「京」、およびポスト「ポスト京」という枠で考えを述べる。

ポスト「京」

これまででは、開発コスト低減のために計算を活用したいと考えられてきた。一方、現在では、実機テストに基づく開発のほうが、コストが安いとも言われる業界もある。この計算コストは単純に電力相当だけでも大きすぎるのが現状である。ポスト京もハードウェアとしてこの点に注力した取り組みがなされているといえる。そして、運用面でもこの考え方を浸透させることが必要ではないかと考える。例えば、消費電力を低下する運用ということも考えられる。また、新しい計算機を作れば「速く」計算が可能になるという幻想を捨てることも必要である。多くの場合、並列数が少ない方が、計算効率が高く消費電力は低下する。これに反して計算時間を短縮させる意義についてもよく考える必要がある。

ポスト「ポスト京」

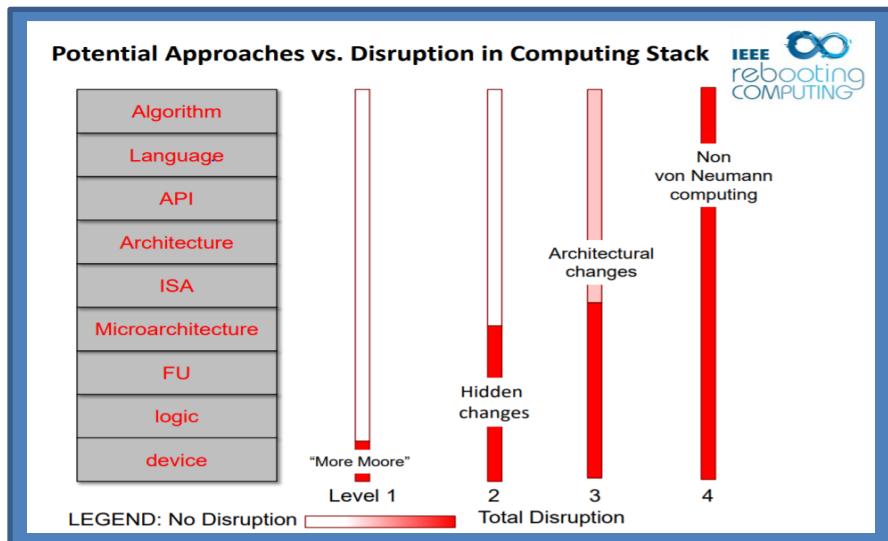
ポスト「京」運用からの現状の正しい理解に基づき、コンピュータのサイズが選ばるべきである。また、近年の機械学習の進展は、「考えないこと」への効率化を示しているようと思う。つまり、考えてしまうことはコストであり、考えて分かることであっても、考えずに計算機に答えを出させることの意義である。一方で、この考えは国費を投じて作る最大規模のコンピュータに適用することが妥当であるかは難しい判断のように思う。つまり、自動化と人材育成のバランスについてもよく考える必要がある。

鯉渕委員

HPCI の将来像

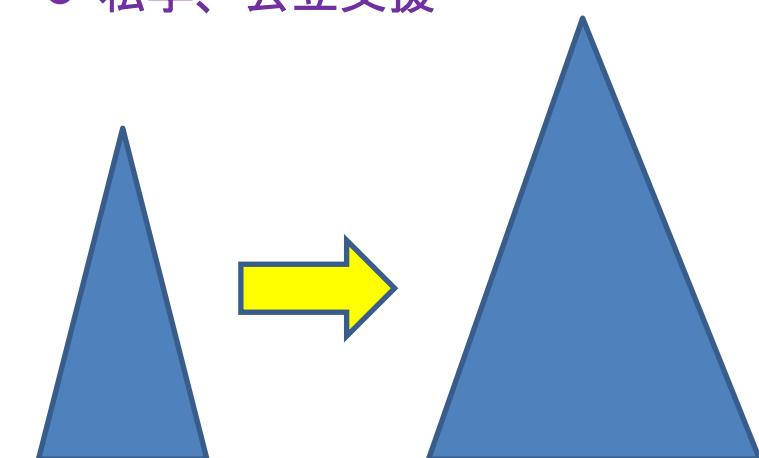
長期リスク(=不確定性) ←多様性が重要

- 正確な予測(時期、性能、方式、アプリ)が遂に困難に
 - ポストムーア(2025～2030)
 - Rebooting Computing



Tom Conte, https://orau.gov/exheterogeneity2018/presentations/1.23/03_Rebooting_T_Conte.pdf

- 研究開発者の多様性の確保
 - 私学、公立支援



国研+国立大学
中心

国研+国立大学
+私学+公立

吉田委員

超データ駆動型社会における HPCI の在り方

① 「ポスト」京

- AI (=機械学習) を国策スパコンのターゲットアプリの一つに位置付ける初の試み
- 現時点では、従来のシミュレーションと AI の融合のビジョンは明確でない。
- 「ポスト」京は、融合の方向性を決めるフェーズ
 - アプリケーション
 - 利用者・ニーズの量・多様性、分野（アカデミア・企業など）
 - システム（プロセッサ、アクセラレータ、メモリ、ストレージ、通信、ソフトウェア等）
- ビッグデータと AI
 - 大量のデータでディープラーニングの認識精度を上げるというトレンド（GPU・専用チップの優位性）に「ポスト」京がどこまで追従すべきか
 - 現時点でビッグデータの保有者は極めて少数（特にアカデミア）。ビッグデータの保有者は主に産業界に存在するが、「ポスト」京の潜在ユーザー数は不明
 - ディープラーニングは、データ科学のワークフローのほんの一部に過ぎない。また、ディープラーニングの隆盛も数年以内に収束する可能性が高い。
- 従来のシミュレーションと AI の融合
 - 実験計画法（ペイズ最適化等）を用いたインテリジェント・シミュレーションは、有望なアプリケーション。仮想空間上にラボラトリーアルワークフローを実装。
例：第一原理計算による物性評価を反復しながら最適な候補材料を絞り込む際、実験計画法を適用してシミュレーションの回数を抑制する。化学・材料科学で数多くの事例（マテリアルズインフォマティクス）。
 - ハイスループット計算によるデータベースの創出。シミュレーションで AI の学習データ（包括的なコモンデータ）を創出するという試み。
 - 例：シミュレーションで生成した大量のデータを AI に学習させて、超高速・高精度なサロゲートモデルを作り出す。マテリアルズインフォマティクスで、第一原理計算を機械学習のモデルに置き換えるという研究が進行。

② ポスト「ポスト」京

- データは無限に湧き出るオイルであり、データの量と多様性は単調増加。今のビッグデータは、ポスト「ポスト」京の時代から見れば「超スマールデータ」。
- 超データ駆動型社会の到来は、データを有する者が勝者というパワーゲームの始まりを意味する。その時、データを持つ者と持たない者の間に格差が生まれる（アカデミアと企業、大企業・中規模な企業及び研究グループ）。
- 格差を緩和するために、コモンデータを社会に提供するプレイヤーが必要になる。HPCI がその役割を担えないか。
- AI とシミュレーションの融合は、複合的なワークフローから成り、従来のシミュレーションに比べてより多様な機能と構成を持つシステムが必要になる。

伊達委員

<HPCIの将来像>

・ポスト「京」時代（2025年頃）

目的：高性能だけではなく、産業・学術の高生産性を追求する（もたらす）計算基盤

具体像：

- **[テーラーメイド化]** 利用者の計算ニーズが計算基盤を選択するのではなく、計算基盤が利用者の計算ニーズを柔軟に収容。単独拠点ではなく複数拠点により収容。[計算資源・ネットワーク資源の仮想化技術による占有資源提供]。
- **[高生産指向化]** 計算基盤の保有する潜在的な計算性能ではなく、利用者の計算基盤利用プロセス全体の高効率化・高生産化をもたらすアーキテクチャ。
- **[万人化]** 利用者プログラムからの最適な計算プラットフォーム（プロセッサ、アクセラレータ等）に適合した並列処理・分散処理の簡易化。
- **[データ集約化]** 利用者のデータ利活用を意識した透過的な集約基盤。

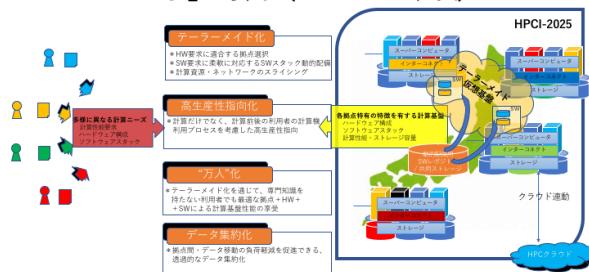
・ポスト「ポスト「京」」時代（2035年頃）

目的：ポスト「京」時代（2025年頃）のHPCIを継承・発展させ、国内外のあらゆる産業・学術を支える国際的な超高性能計算・データ基盤

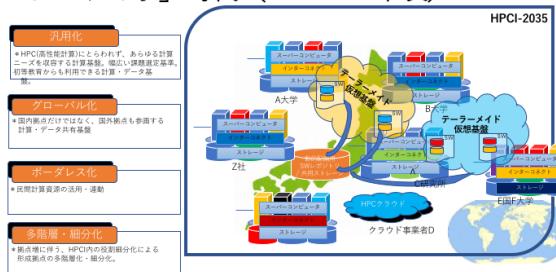
具体像：

- **[汎用化]** いわゆる HPC(高性能計算)にとらわれず、あらゆる計算ニーズを収容する計算基盤。初等教育から利用する計算・データ基盤。幅広い課題選定基準。
- **[グローバル化]** 国内拠点だけではなく、国外拠点も参画する計算・データ共有基盤。アジア、欧米と連動する産学の国際プロジェクトを発掘・支援し、ニーズ・シーズに基づく、わが国の先導的役割を強化。
- **[ボーダレス化]** 産学の枠を超えた民間（クラウド？）計算資源の活用・連動。
- **[多階層・細分化]** 拠点増に伴う、HPCI内の役割細分化による形成拠点の多階層化・細分化。

ポスト「京」時代（2025年頃）



ポスト「京」時代（2035年頃）



佐野委員

HPCI の将来像

・ ポスト「京」時代（2025年頃）

目的： 社会的・科学的に必要かつ民間による投資のみでは達成し得ないような大規模・高性能計算を容易に実現可能な、汎用計算プラットフォームの提供（ユーザーへのサービス）。また、上記のプラットフォームをより高度化し、次世代の高性能計算システムを探求するための、計算機科学のための研究・開発プラットフォームの提供（研究者・開発者へのサービス）。

具体的姿：

システムおよび知の統合・共有を進めたクラウド環境に似た形態。フラッグシップマシンを含む大規模・高性能計算を実行し得る汎用計算機システム群と、可能な限り共通のインターフェース、プログラミング環境、ストレージを提供するシステムソフトウェアから成る。また、ユーザーや研究者・開発者がプログラミング方法や最適化方法などのノウハウや知識を共有することを容易としHPCI 利用の生産性を向上させるための、SNS のようなオンラインのコミュニケーション環境や、そこでの技術支援を主とする組織や人材。

・ ポスト「ポスト「京」」時代（2035年頃）

目的： 高性能を達成するために現在とは異なるアーキテクチャ・方式を導入せざるを得ない時代においては、汎用な計算問題全てを大幅に高速化することが困難となる可能性が大である。このため、既存と同じアーキテクチャによる高性能計算プラットフォームの提供は引き続き必要であるものの、それに加えて、幾つかの特定の種類の計算問題を超高速に実行可能な専用システムを、汎用システムと同様なインターフェースまたはプログラミング方法によりできるだけ容易に利用可能とすることを目的とする。

具体的姿：

従来と同様なアーキテクチャに基づく汎用な高性能計算システム、幾つかの特定の計算問題を超高速に解く専用システム、また、対象問題毎に専用ハードウェアをユーザーが自由にプログラム可能な「汎用な専用システム」のような異種アーキテクチャが混在する形態。特に、命令列の逐次実行が基本のノイマン型アーキテクチャに縛られず、計算問題における演算とデータ移動を計算ハードウェア資源の時空間に効率良く割当て実行するような新しい方式と、そのためのプログラミングモデル・言語が重要となる。

異なるアーキテクチャ・方式から成る複雑なシステムは、プログラミングが従来よりも大幅に困難となるため、利用者の生産性向上が課題となる。そのためには、大規模かつ高性能な計算のみを追及するのではなく、それらを現実的かつ許容可能な生産性で実行可能とすることが重要となる。このためには、（従来と異なるであろう）次世代の計算モデル・プログラミングモデル、言語/インターフェース、効率的な実行を支援するためのコンパイラやシステムソフトウェア、等をも併せて研究開発し、ユーザーがアーキテクチャや方式の違いを意識せずに利用可能なシステムが求められると考えられる。以上要するに、これまで主流であった方式が性能向上の点で行き詰る時代において、ブレークスルーをもたらすような方式を、計算モデル、ハードウェア、ソフトウェア、アプリケーションに跨って継続して研究開発する必要があり、この時代のHPCI は特にそのような研究開発プラットフォームとしても利用可能な、HPC に限らずCS 系の様々な分野の研究者・開発者に開かれたシステムとなるべきである。

須田委員

(0) 背景

- ・半導体技術の進歩の鈍化に伴い、高性能アーキはさらに複雑化：ヘテロ、FPGA、量子など。
- ・一方で1つの計算機が長期間使えるように、またWS、PCでも並列計算が必要に。
- ・省メモリ、省電力、耐故障が必要；超大規模スパコンではMTBFが大きな問題。
- ・素子技術が安定するので、ハードの最適化で性能が決まるが、問題ごとに最適解が異なる。
- ・プログラミングの複雑化、大規模化、異種計算の協調（科学+データ解析等）。
- ・AI/ML、UQ（Uncertainty Quantification）、高精度、高速低精度など、ソフトウェア手法は拡大。
- ・京・ポスト京でも計算能力が足りない計算科学の問題はまだまだある。

(1) ポスト京：2025ごろ

- ・ポスト京は必要だがそれだけでなく、8大学センターが特色を出して多様なアプリをカバーすべき。
- ・WSが100コア超に。HPCプログラミングのさらなる普及。クラウドで済むものはクラウドに。
- ・計算科学がデータセントリックに。二次記憶・外部接続の強化が必須。関連研究分野を強力支援。
- ・計算科学とデータ科学の融合を牽引すべき。機械学習/AI、データ解析、データ同化、UQなど重要分野を定め、研究者の参画を促す。また、両者のブリッジになる人材の育成制度を創設。
- ・大学のシステム系研究が弱体化している。戦略的に維持が必要。アーキ、OS、コンパイラ、基本ライブラリなどの拠点形成とともに、長期にメンテナンスができる制度を。
- ・プログラミングモデルの革新がどこかで必要。斬新なプログラミングモデル研究に資源を提供。
- ・ハードウェアモデルもどこかで革新が必要。3D、FPGA、量子計算を含め幅広に参加と競争を促す。
- ・未来の計算機に関わるとっぴなアイデアに取り組むスタートアップ企業を支援。
- ・数値計算＝倍精度浮動小数計算もどこかで打破される必要。数値計算の基礎を支援。
- ・計算時間も消費電力も、主要部分はデータ移動。「計算効率」「並列化効率」からの脱却。「計算量」の概念すら革新が必要。高性能計算の基礎理論の再構築。
- ・国際連携を進め、必要な法制度やリソース共有のルール作りを。
- ・企業利用、社会科学の利用を促進。基礎物理や統計の概念を再学習してもらう必要。
- ・企業等と協力し、HPC専門家の多様なキャリアプランを示す。必要な技術も明確に。

(2) ポストポスト京：2035ごろ

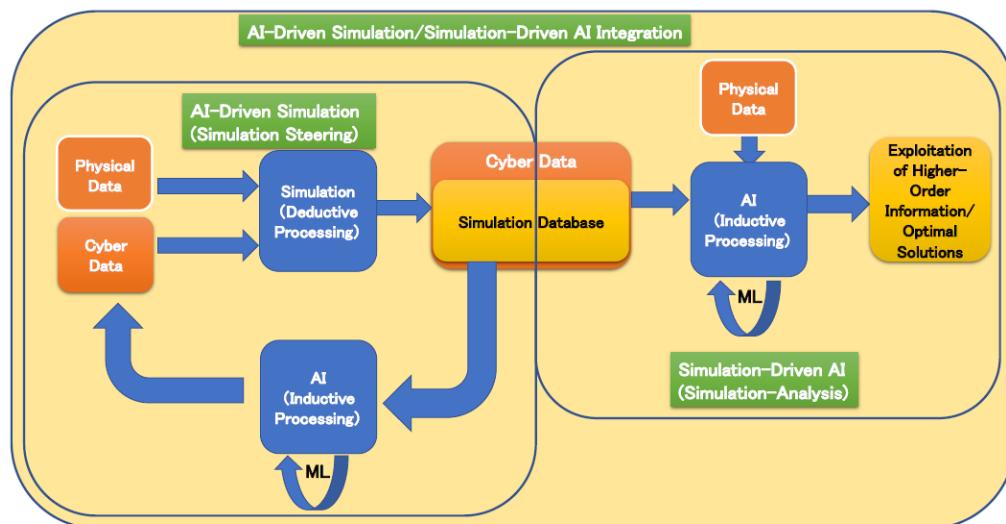
- ・フラグシップマシンは必要。物理のビッグサイエンスのような、国際連携を。
- ・半導体は限界に。更新のテンポは遅くなるので、長期計画の策定には新たな作戦が利用できる。
- ・新たな計算科学の潮流をとらえ、8大学センター等がそれぞれの道を選択する。
- ・日本発のアーキ、OS、コンパイラ、基本ライブラリなどを組織的・継続的に支援。
- ・革新的なハードウェア、プログラミングモデル、数値手法のうち、実用化できるものを世界に先駆けて支援。計算科学や機械学習などへの挑戦的な応用を積極的に促す。
- ・アモルファスアーキテクチャや自己修復的ソフトウェア、AIによる（半）自動ソフトウェア構築や計算科学モデリングなど、さらに挑戦的なテーマを積極的に支援する。

小林委員

HPCI の将来像

◆ ポスト「京」時代（2025年頃）

- 引き続き計算科学（シミュレーション科学）の推進に必要なインフラ
 - ✓ エクサ級を必要とする従来型アプリ研究開発のさらなる発展にマストなインフラ
 - ✓ その一方、力強く計算からの脱却を目指してデータサイエンスとの融合も進められる
- AI-Driven simulation, Simulation Driven AI, その融合アプリの開発が活発化
 - AI/MLによるモデリングの最適化・高度化・高精度化
 - シミュレーションの高度化・高精度化（ステアリング）
 - シミュレーション結果の解析・高次情報の抽出
- その姿
 - ✓ 従来型HPCIにアプリケーションドメインに特化した専用機（加速器）を付加する形
 - ✓ 個を生かし、全体でオーケストレーションすることにより汎用性を目指す「アンサンブルアーキテクチャ」へ
 - ✓ ヘテロ構成を意識した利用環境（プログラミング）



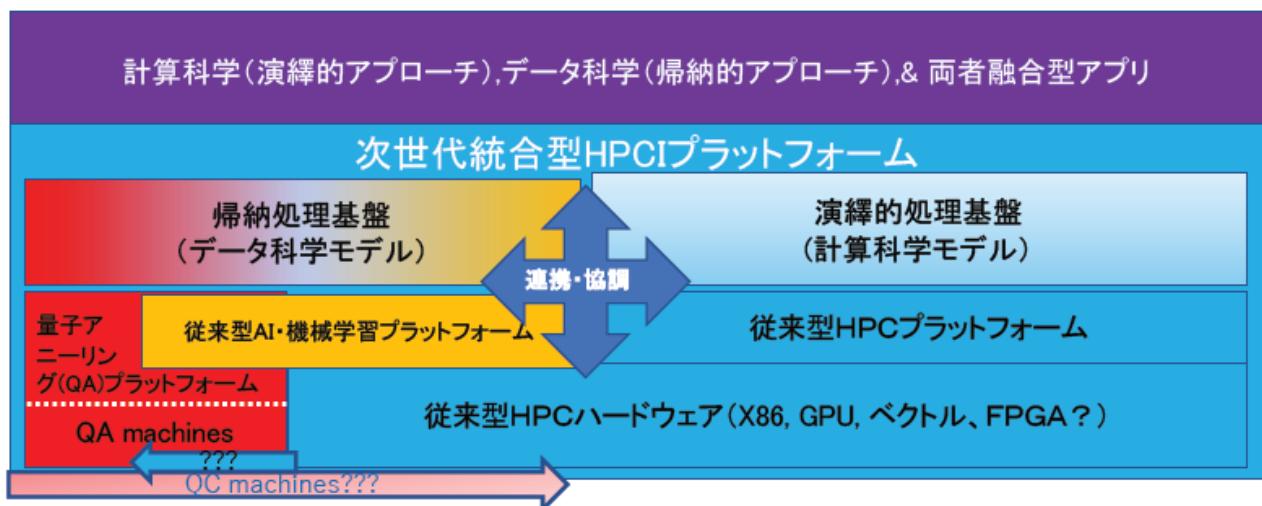
計算科学駆動型データ科学、データ科学駆動型計算科学、その融合アプリのワークフロー

◆ ポスト「ポスト「京」」時代（2035年頃）

- 従来型HPCハードウェアプラットフォームとポストムーア型ハードウェアプラットフォームのバランスよい共存
- ハードウェアプラットフォームの仮想化が進み、ヘテロ構成を意識しない利用環境が実現?!
 - ✓ 利用者は必要な機能を統一的なプログラミング環境で利用可能になる？
- QCはアニーリング型に加えゲート型にも実用アプローチで共存？従来型HPCとの境界はそれぞれの実用度次第

◆ その他コメント

- (ネットワークのように気がついたらインフラはすべて中国製?とならないように)デバイス, ハードウェアプラットフォーム, システムソフトウェア, アプリケーション等それぞれのレイヤで世界をリードする日本の技術を維持・発展させる政策が必要
- ムーアの法則を維持することが難しい状況において, One fits all はもはや無理なことから, 次世代HPCIではTier-0としても特徴を持ったシステムを複数配置し, 適材適所で利用できる環境を整備する必要があるのではないか
- 持続的なHPCIの維持・発展のため次のターゲットを35年とするのではなく, その前の28年頃もポスト京を相補的かつ重層的に機能するTier-0のシステムの導入を別途計画し, 21年, 28年, 35年と交互に一部重複する機関持たせたフラッグシップシステムの開発・導入計画を策定すべきである
- ムーアの法則の維持が難しいと呼ばれているが, コンピュータを実装する上でシリコンがなくなることはない。要は動く単一システムによる汎用の呪縛から脱却し, (一定の規模のアプリケーションドメイン, あるいは必要な機能実現のために)効果的にシリコンバジエットを活用すればよい (ハードのヘテロ性はシステムソフトで隠蔽)
- これまでの計算資源共用の視点から, データ科学・オープンサイエンス時代では, データ資源の共有インフラとしての機能も重要
 - ✓ コンピューティング・ストレージ・ネットワークへのバランスのよい投資が必要



次世代 HPCI システム& アプリの関係

參考資料

H P C I 計画推進委員会
将来のH P C I の在り方に関する検討ワーキンググループの
開催について

平成 29 年 6 月 29 日
H P C I 計画推進委員会

1. 趣旨

スーパーコンピュータ「京」を中心とす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（以下、「H P C I」という。）は、共用開始から 5か年にわたり、多くの成果を創出し、我が国全体の計算科学技術の発展に貢献してきた。

一方、この間、G P G P U や超メニーコア型等の新たなアーキテクチャのハードウェアが出現し、理論演算性能において「京」を超えるシステムが H P C I に導入され、また、計算科学とデータ科学との融合・連携に係る研究が進展するなど、計算科学及び計算機科学の取り巻く状況は大きな変化を遂げようとしている。

従って、これまでに H P C I に集積された人材や計算機インフラ等を活かし、海外の状況を踏まえつつ、将来の日本の計算科学及び計算機科学の在り方について検討する必要がある。このため、国として必要な検討等を行う「将来の H P C I の在り方に関する検討ワーキンググループ」（以下、「WG」という。）を、H P C I 計画推進委員会の下に開催する。

2. 調査事項

- (1) 将来の H P C I の在り方のこと
- (2) 将来の計算科学・計算機科学の在り方のこと
- (3) 海外の計算科学・計算機科学の状況のこと
- (4) その他

3. 構成及び運営

- ・ WG の構成員は、別紙のとおりとする。
- ・ WG の運営に係る事項は、WG において定める。

4. 実施期間

平成 29 年 6 月 29 日から調査事項の終了までとする。

5. その他

- ・ WG の庶務は、研究振興局参事官（情報担当）付計算科学技術推進室が処理する。
- ・ WG 委員の委嘱は 2 年ごとに行うものとする。

(別紙)

将来のHPC-I の在り方に関する検討ワーキンググループ委員

大島 聰史 九州大学情報基盤研究開発センター 助教

鯉渕 道紘 国立情報学研究所アキテクチャ科学研究系 准教授

◎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)

佐野健太郎 理化学研究所計算科学研究機構 チームリーダー

○須田 礼仁 東京大学情報理工学系研究科 教授

滝沢 研二 早稲田大学理学院 教授

伊達 進 大阪大学サイバーメディアセンター 准教授

本田 有機 気象庁予報部数値予報課 数値予報モデル開発推進官

吉田 亮 統計数理研究所モデリング研究系 教授／
統計数理研究所ものづくりデータ科学研究センター センター長

(◎：主査、○：主査代理)

9名 (敬称略、五十音順)