

将来のH P C I の在り方について (各委員説明資料)

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

大島聡史 (九州大学 情報基盤研究開発センター 助教)

- 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「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要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。新たな計算原理を採り入れたものを含めて様々なアクセラレータ・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ず、適切な対応が求められる。

HPCI の将来像について

早稲田大学 滝沢 研二

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 かどうかはさして問題ではなく、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。最後に、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」

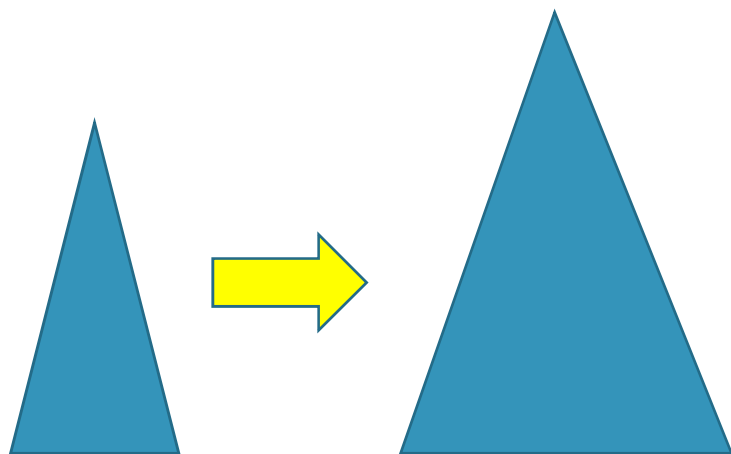
ポスト「京」運用からの現状の正しい理解に基づき、コンピュータのサイズが選ばれるべきである。また、近年の機械学習の進展は、「考えないこと」への効率化を示しているように思う。つまり、考えてしまうことはコストであり、考えて分かることであっても、考えずに計算機に答えを出させることの意義である。一方で、この考えは国費を投じて作る最大規模のコンピュータに適用することが妥当であるかは難しい判断のように思う。つまり、自動化と人材育成のバランスについてもよく考える必要がある。

HPCIの将来像

長期リスク(=不確定性) ← 多様性が重要

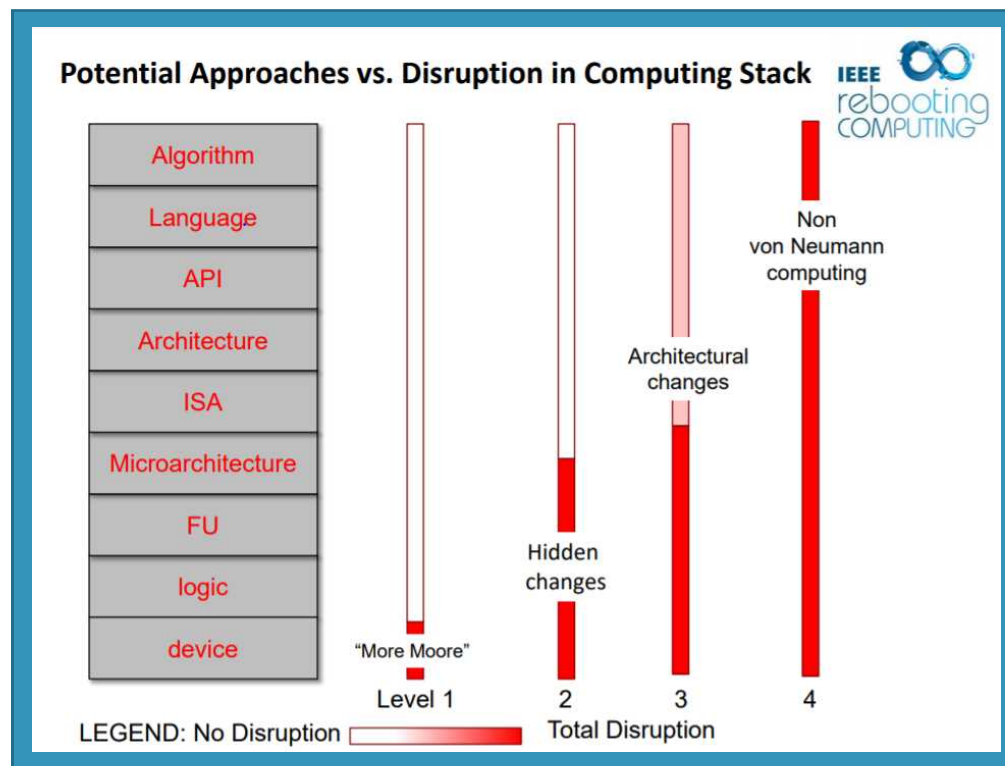
- 正確な予測(時期、性能、方式、アプリ)が遂に困難に
 - ポストムーア(2025~2030)
 - Rebooting Computing

- 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



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

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 (ベイズ最適化等) 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「超スモールデータ」。
- 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ーヤーが必要になる。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。

<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收容。単独拠点ではなく複数拠点により收容。[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。

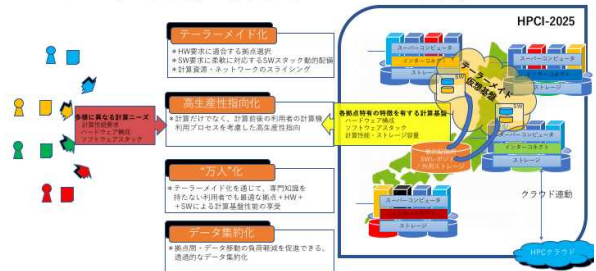
・ポスト「ポスト「京」」時代（2035年頃）

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

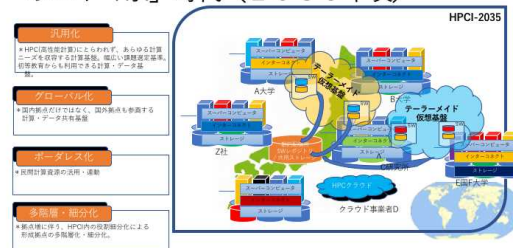
具体像：

- **「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收容する計算基盤。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）



HPCIの将来像

理化学研究所 計算科学研究センター 佐野 健太郎

・ポスト「京」時代（2025年頃）

目的： 社会的・科学的に必要で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。

HPCI の将来像についての意見

2019/4/10 須田礼仁

(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

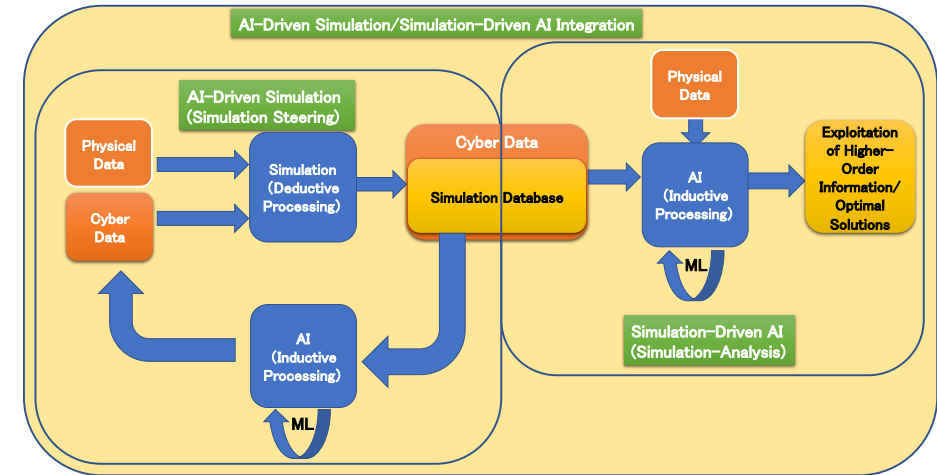
- ・ポスト京は必要だがそれだけでなく、8 大学センターが特色を出して多様なアプリをカバーすべき。
- ・WS が 100 コア超に。HPC プログラミングのさらなる普及。クラウドで済むものはクラウドに。
- ・計算科学がデータセントリックに。二次記憶・外部接続の強化が必須。関連研究分野を強力支援。
- ・計算科学とデータ科学の融合を牽引すべき。機械学習/AI, データ解析、データ同化、UQ など重要分野を定め、研究者の参画を促す。また、両者のブリッジになる人材の育成制度を創設。
- ・大学のシステム系研究が弱体化している。戦略的に維持が必要。アーキ、OS、コンパイラ、基本ライブラリなどの拠点形成とともに、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く参加と競争を促す。
- ・未来の計算機に関わるとつ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おう必要。
- ・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

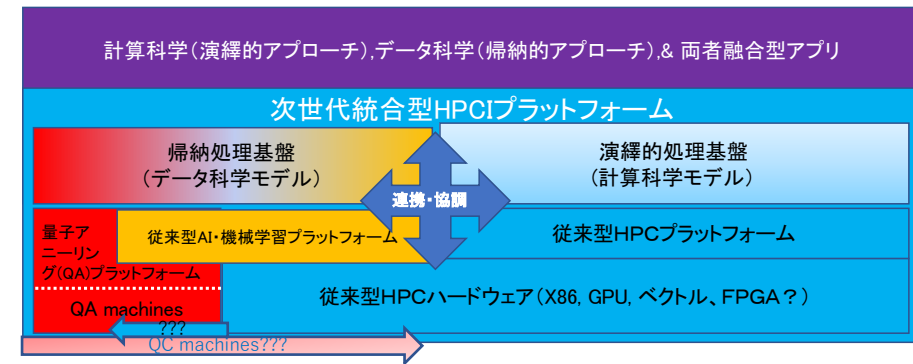
- ・フラグシップマシンは必要。物理のビッグサイエンスのような、国際連携を。
- ・半導体は限界に。更新のテンポは遅くなるので、長期計画の策定には新たな作戦が利用できる。
- ・新たな計算科学の潮流をとらえ、8 大学センター等がそれぞれの道を選択する。
- ・日本発のアーキ、OS、コンパイラ、基本ライブラリなどを組織的・継続的に支援。
- ・革新的なハードウェア、プログラミングモデル、数値手法のうち、実用化できるものを世界に先駆けて支援。計算科学や機械学習などへの挑戦的な応用を積極的に促す。
- ・アモルファスアーキテクチャや自己修復的ソフトウェア、AI による（半）自動ソフトウェア構築や計算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

HPCIの将来像 小林広明

- ◆ 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、力ずくの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に
 - 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・最適化（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旨す「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）
- ◆ 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リで共存? 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と
 - 持続的なHPCIの維持・発展のために次のターゲットを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期間持たせたフラ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叫ばれているが、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ェ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有の視点から、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



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



次世代HPCIシステム & アプリの関係