

# ポスト富岳にむけた計算科学ロードマップ

HPCIコンソーシアム計算科学フォーラム代表 / HPCIコンソーシアム理事

藤堂眞治 (東京大学大学院理学系研究科)

<wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp>

# これまでの活動

---

- ・ 今後のHPC技術の研究開発のあり方を検討するWG
  - ・ <https://sites.google.com/view/ngaci/home/sdhpc>
  - ・ 計算科学ロードマップ白書2012
- ・ 将来のHPCIシステムのあり方の調査研究「アプリケーション分野」
  - ・ <https://cs-forum.github.io/hpci-aplfs>
  - ・ 計算科学ロードマップ2014
- ・ 今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会（アーカイブ）
  - ・ <https://cs-forum.github.io/kentoukai/>
  - ・ 計算科学ロードマップ2017
- ・ HPCIC計算科学フォーラム
  - ・ <https://hpcic-kkf.com>
- ・ これまでの活動記録、ロードマップ2012, 2014, 2017
  - ・ <https://cs-forum.github.io/>

# ロードマップ2014以降の活動 (1/2)

---

- ・ 今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会 (2015/01-2017/06)
  - ・ <https://cs-forum.github.io/kentoukai/> (アーカイブ)
  - ・ 2015/01/05 第1回会合、2015/03/16 第2回会合、2015/06/15 第3回会合
    - ・ アプリFSの主要参加メンバーが集まり、活動の継続の可能性、組織のあり方、ロードマップのあり方などについて議論
  - ・ 2015/09/14 第4回会合 ~ ステージ1 (非公開)
    - ・ 新規分野(機械学習)に関する講演、ロードマップ編集方針
  - ・ 2016/02/15 第5回会合
    - ・ ミニアプリに関する講演、ロードマップ章立て・エディタ
  - ・ 2016/05/31 第6回会合
    - ・ 新規分野(脳科学)に関する講演、ロードマップ執筆要領
  - ・ 2016/07/29 性能測定WG
  - ・ 2016/11/07 第7回会合 ~ ステージ2 (公開)
    - ・ 社会シミュレーションに関する講演、ロードマップ進捗確認・調整

# ロードマップ2014以降の活動 (2/2)

---

- ・ 2017/02/13 第8回会合
  - ・ 地震・津波複合災害に関する講演、ロードマップ進捗確認・調整 2017/02～ HPCIコンソとの連携を議論
- ・ 2017/06/16 計算科学ロードマップ2017 初版公開
- ・ [HPCIC計算科学フォーラム](#) (2017/07-)
  - ・ <https://hpcic-kkf.com>
  - ・ HPCIC計算科学フォーラム開催 [2017/10、2018/2、2018/7、2019/2、2019/10、2020/2、2020/11、2021/03、2021/11、2022/03、2022/10、2023/3、2023/11]
    - ・ 様々な分野のシミュレーションに関する講演(ナノデバイス、太陽内部熱対流、乱流、計算創薬、気候気象、QCD相図、Matrix Functions、生体力学、マルチエージェント、他)、計算科学フォーラムの組織・運営・ロードマップ改定に関する議論
- ・ 活動形態
  - ・ 2014年度～2016年度: AICSの文科省委託業務「HPCIの運用」の中で実施
  - ・ 2017年度～: HPCIコンソの事業として実施

# 計算科学ロードマップ2017

---

- ・「計算科学ロードマップ」(2017年6月)
  - ・ <https://cs-forum.github.io/kentoukai/roadmap-2017/>
  - ・ 作成: 今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会
  - ・ 前回のロードマップ2013からの主な変更点
    - ・ 新規分野の追加 (「[脳科学](#)・[人工知能](#)」)
    - ・ 既存分野の数字や内容の確認と更新
    - ・ より広く読んでもらうためのフォーマットの見直し
  - ・ 1～3章を本編(計150p)とする
  - ・ 2章に[各計算科学分野の課題をコンパクトに](#)まとめ、詳細は4章へ。4章は別冊扱い
  - ・ 各節内の構成
    - ・ 分野の動向、長期目標と社会貢献、課題とその解決に必要な計算手法・アプリケーション、ロードマップ図、必要な計算資源表
  - ・ 想定する計算機アーキテクチャ
    - ・ 1-2 EF (2021年)、5-10 EF (2026年)

# 計算科学ロードマップ2023

---

- ・ ターゲット
  - ・ 2027年-2032年に実行・解決したい具体的な研究課題とそれに必要な計算機資源の見積もりを記載
- ・ 想定する計算機アーキテクチャ
  - ・ 「次世代先端計算基盤に関する白書」を基本とする(ピーク性能は2028年に2EF~20EF)がそれに厳密に合わせる必要はなく、無理に全部使う必要もない。むしろズレは歓迎
  - ・ サイエンスの観点から要求性能値を積み上げた時に、その値が想定マシンより著しく大きく/小さくなくても、その分野で合意の取れている値であればよい
- ・ 参考: NGACI: 次世代先端的計算基盤に関する白書(ハードウェアロードマップ)
  - ・ <https://sites.google.com/view/ngaci/home>

# 計算科学ロードマップ2023 - 編集方針

---

- ・ 内容

- ・ ロードマップ2017の**見直し・更新** + **新しいシミュレーション手法** + **新しい分野**

- ・ 富岳を使い始めて得られた知見や予想を取り込むことができるとよい
- ・ 今回のロードマップの想定時期ではまだ規模が小さいが、その後増大してフラッグシップ級が必要となると見込まれる、ということでもよい
- ・ フラッグシップだけでなく、必要に応じて第二階層、専用機等もターゲットマシンとして含めてよい
- ・ ロードマップ2017の内容との連続性・一貫性は必ずしも必要ではないが、大きな転換があった場合にはその点について触れることが望ましい

- ・ **計算機資源の要求性能表**

- ・ 必要な計算機資源の要求性能表の項目はロードマップ2017と同じ
- ・ 分野(節)毎に5個程度のアプリを選び、要求性能値を算出、表を作成する

# 計算科学ロードマップ2023 - 分野の構成

---

- ・ 変更点: 脳科学・人工知能を2つに分割
- ・ 分野・節の構成
  - ・ 2.1 素粒子・原子核
  - ・ 2.2 ナノサイエンス・デバイス
  - ・ 2.3 エネルギー・資源
  - ・ 2.4 生命科学
  - ・ 2.5 脳・神経科学
  - ・ 2.6 創薬・医療
  - ・ 2.7 設計・製造
  - ・ 2.8 社会科学
  - ・ 2.9 地震・津波
  - ・ 2.10 気象・気候
  - ・ 2.11 宇宙・天文
  - ・ 2.12 人工知能（機械学習とデータ科学）



# 計算科学ロードマップ2023

---

- ・ 参考

- ・ ロードマップ2017における想定: 1-2 EF (2021年)、5-10 EF (2026年)
- ・ NGACIハードウェアロードマップ(2020)における想定: 2-20 EF (2028年)
- ・ 各分野の要求性能の傾向 (ロードマップ2017からの比較) (集計作業中)
  - ・ 素粒子・原子核
    - ・ 格子QCD: 演算性能 0.3 EFLOPS → 1.5 EFLOPS
    - ・ 殻模型計算: ケース数 100 → 1000、総演算量 130 ZF → 3,000 ZF
  - ・ 生命科学・創薬医療
    - ・ 大規模遺伝子ネットワーク解析: 26,000 ケース、780 ZF、24.5 PFLOPS
    - ・ タンパク質ドッキングMD: 1 EFLOPS → 192 EFLOPS、メモリ 38.4 PB
  - ・ 気象気候・地震津波
    - ・ 領域気候計算: 200 ZF → 780 ZF、46 PFLOPS → 0.4 EFLOPS
    - ・ 全球マクロ地殻変動: 560 PFLOPS → 2.8 EFLOPS
- ・ 3つの方向性 (2027年-2032年にむけて)
  - ・ より高い演算性能(5-200倍)、より大きな総演算量・ケース数(5-25倍)、これまでフラッグシップでは行われてなかった計算

# 計算科学ロードマップ2023

---

- ・「人工知能」以外の節については、**2023年12月26日に公開予定**
  - ・ 最終取りまとめ作業中
- ・「2.12 人工知能」
  - ・ HPCでデータサイエンスをどう取り入れるか、急速に変化する時代に来ている
  - ・ 理研R-CCSでAI-for-Science (AI技術の基礎科学研究への活用)をとりまとめ
  - ・ 対象分野: ロードマップの11分野
  - ・ 執筆依頼先:
    - ・ AIに関連したHPCI課題参加者
    - ・ ロードマップ各分野執筆者
    - ・ 富岳創出加速プログラムPI、他
- ・ 2024年3月
  - ・ AI4Scienceロードマップを計算科学ロードマップの2.12に取り込み全体を公開
- ・ 2024年4-5月
  - ・ 全体を改訂
  - ・ 「概要版」(各分野を1ページにまとめたスライド)の作成・公開

# 計算科学ロードマップを取り巻く課題

---

- ・ 戦略分野・重点課題後
  - ・ 「分野の中心・代表」がぼやけてきている
  - ・ 「母体」がない: 貢献が明確にならない。現状では協力するインセンティブがない
- ・ 分野の断絶
  - ・ 富岳のコデザイン
    - ・ ターゲットアプリについてはうまくいったが、アプリ間の横のつながりや各分野への広がりがなかった
  - ・ 成果創出加速プログラムでは個別の課題に細分化
    - ・ フラッグシップで何ができるかだけが問われている
    - ・ 分野全体でさまざまな新しい課題が出せるような環境が大事では？
- ・ 世代交代の問題
  - ・ 実際に手を動かしている世代でロードマップの活動に取り組む人材が不足
  - ・ 戦略分野の時代は分野全体として分野振興をやるという意味・若手の後押しがあった
  - ・ 現在のプロジェクトの仕組みでは、有期雇用の研究者が分野振興に関われない
  - ・ 世代交代が起こらないと継続性・発展性がない
    - ・ ロードマップだけの問題ではない。計算科学全体の課題

# HPCIコンソーシアムからの提言書

---

- ・ HPCIシステムの今後のあり方に関する調査検討WG（主査 堀 高峰（JAMSTEC））
  - ・ 提言書「次世代HPCI成果最大化に向けた取り組みとその強化について」
  - ・ 以下の内容に関して提言取りまとめ中
    - ・ 次世代HPCIの整備・運用の方向性
      - ・ ユーザビリティ向上とシームレス化、戦略的な整備・運用、人材育成・分野振興・分野拡大
    - ・ 次期フラグシップシステムの方向性
      - ・ アーキテクチャの方向性
      - ・ コデザイン
    - ・ 産業利用の強化
  - ・ 今後の予定
    - ・ 2023/12/27 提言書(案)を公開
    - ・ 2024/1/15 HPCI意見交換会（於 秋葉原＋オンライン）
    - ・ 2024/5-6 文科省に手交予定