

HPCによる我が国の研究開発基盤の高度化



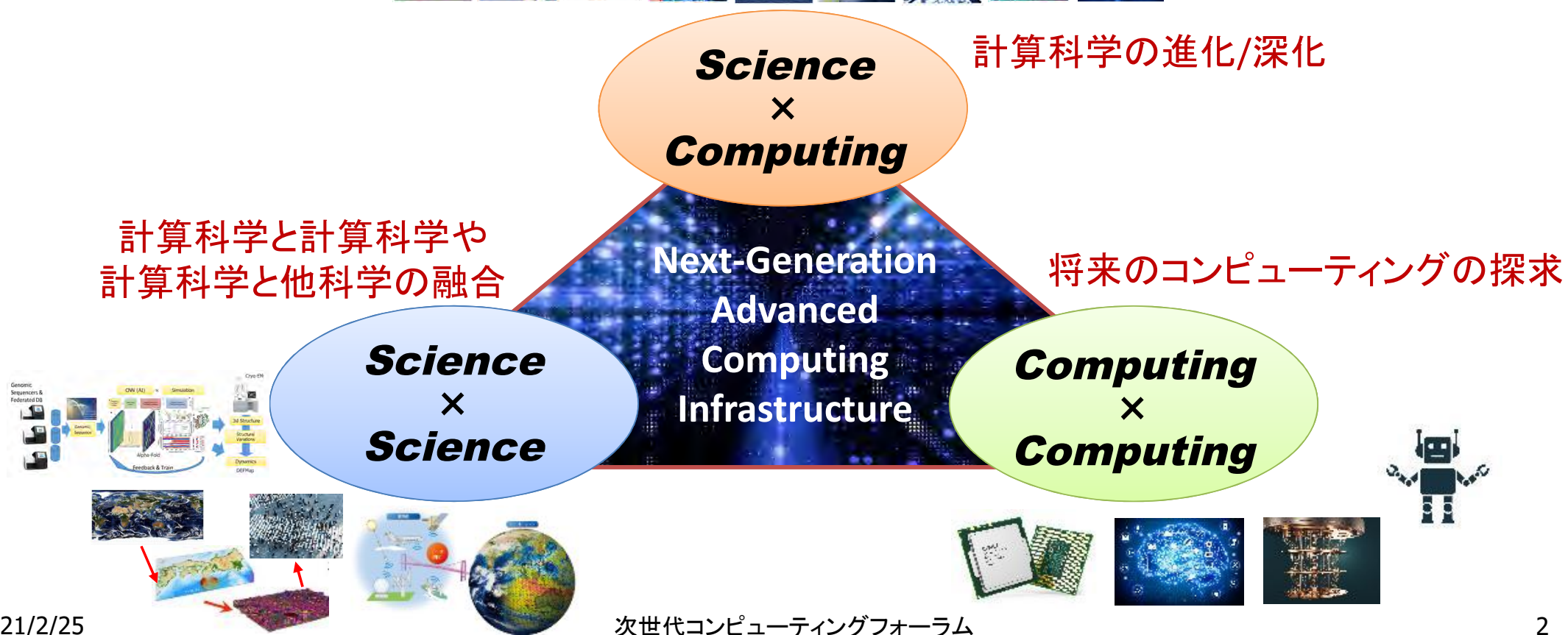
理化学研究所 計算科学研究センター
センター長 松岡 聡

2021年4月12日



次世代のイノベーションを生む先端的情報基盤

- 様々な科学(計算科学・計算機科学・情報科学など)の共創の場の創生へ



● 米国: DoEマシンとDoE ECP (Exascale Computing Project)

- エクサ級マシン 合計 \$2.3 bil
 - 2021~22 ORNL Frontier >\$600 mil
 - 2022~23 ANL Aurora A21 >\$500 mil
 - 2023~24 LLNL El Captain \$??mil
 - 運用コスト: 5年で\$900 mil
- ECP (マシン+ソフトウェア開発)
 - \$1.8 bil (うち\$258mil メーカー事前開発の xForwardプロジェクト)
- データセンターのインフラ更新
 - \$300 mil (冷却・電源施設)
- 計\$5 bil (約5500億円)以上

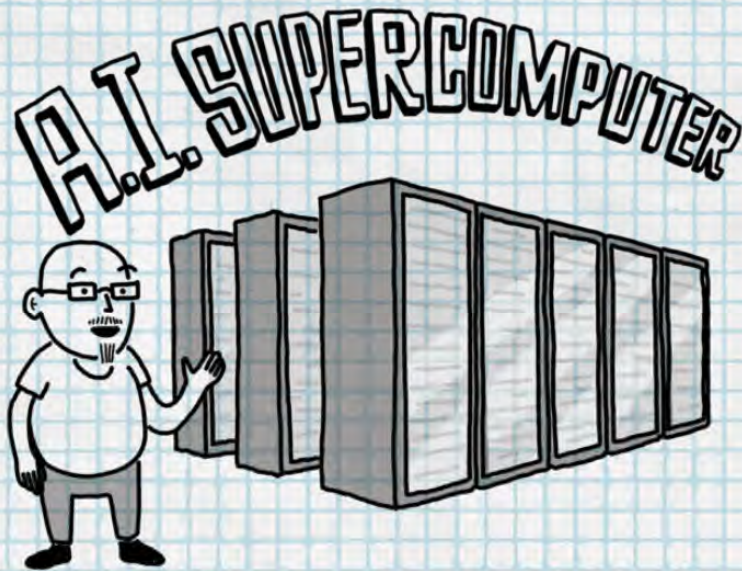
● 欧州: EuroHPC (EC+各国マッチング)

- 2021-2022 Pre-Exa €1.4 bil
 - ペタ数百ペタ級 x 3台 (フィンランド、イタリア、スペイン) (運用費含)
 - CSC Lumi 550ピークペタ(カタログ値、実アプリでは富岳をかなり下回る)
 - ペタ級 x 5台 (運用費含)
- 2020- 開発プロジェクト
 - EPI European Processor Initiative
 - HPC COE, HPCクラウドテストベッド
 - 合計 €1.4 bil
- 2021以降: 6年で €6 bil 以上
 - 2023-24 エクサ級マシン x 2台
 - EPI2, 他開発プロジェクト、ポストエクサ
- 計€8 bil (約一兆円)以上
 - 多くの計算機科学者も参加

マイクロソフト、新しいスーパーコンピューターを発表し、将来の AI の取り組みのビジョンを公表

2020年5月20日 | Japan News Center

「世界5位以内相当」(富岳以前)



ジェニファー ラングストン (Jennifer Langston)

※ このブログは、米国時間 5 月 19 日 に公開された "[Microsoft announces new supercomputer, lays out vision for future AI work](#)" の抄訳です。

開発者向けコンファレンス Build において、マイクロソフトは、世界トップ 5 に入る規模のスーパーコンピューターを構築し、超大規模人工知能 (AI) モデルの訓練のために Azure 上でそのインフラストラクチャを公開したことを発表しました。

[OpenAI](#) との協業により構築されたこのスーパーコンピューターは Azure 上でホストされ、同社の AI モデルの訓練のために設計されています。これは、Azure 上で新たなスーパーコンピューティングのテクノロジーを構築するという [昨年発表されたパートナーシップ](#) における主要なマイルストーンです。

AI of the Storm: How We Built the Most Powerful Industrial Computer in the U.S. in Three Weeks During a Pandemic

The making of Selene is a tale of systems expertise that's bringing high performance computing to the data center.

August 14, 2020 by RICK MERRITT



世界6位のスパコンは私企業 (NVIDIA)

1. **富岳等HPCを用いた、従来から踏襲するHPCの情報技術の深化と、個々の科学分野や産業分野の発展へ貢献する計算科学の研究開発の基盤**
 - 「計算の科学」と「計算による科学」の個々の探求
2. **「シミュレーション・ファースト」によるデジタルツイン基盤とSociety5.0の推進**
 - デジタルツインのシミュレーション：物理世界とサイバー空間を連結させたシミュレーション
 - 富岳は一般ITインフラとして先鋭的運用 => 例：Fugaku Cloud Platform (FCP), 更にDigital Twinのためのソフトウェアスタックの展開
3. **今後のHPCにおける“第一原理シミュレーション”、“AIによる経験則的予測”、“観測ビッグデータ”の三つの要素のコンバージェンスの科学的探求**
 - ‘Ad-hoc’ な組み合わせではなく、“将来の情報処理”の基本的パラダイムとしての研究
 - コンバージェンスの基礎理論から将来の高性能ITシステム的设计へ
4. **情報科学のグランドチャレンジとしての新しいコンピューティング・パラダイムの探求**
 - 従来型の計算の加速の探求→ ドグマでなくきちんとした定量性に基づく評価法の確立 (3.の評価も含む)
 - 量子計算、ニューロモーフィック(脳型)計算 => 富岳上でのシミュレーションによる探求

「シミュレーション・ファースト」によるデジタルツイン基盤と Society5.0の推進

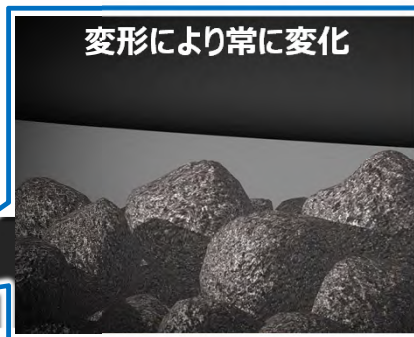
Society 5.0

超スマート社会



サイバー空間(仮想空間)
+
フィジカル空間(現実空間)

タイヤ情報のセンシング



顧客ごとに様々な使われ方をする



空気圧情報

エネルギーの
高効率化

摩耗・グリップ情報

メンテナンスフリー・安全
(サブスクリプション)

路面情報
(DRY・WET・SNOW等)

危険予知・回避(安全)

融合

潜在的ニーズから新製品・新サービス展開

市場データと同化させると
膨大な計算量!!

Society5.0におけるDXの「シミュレーション・ファースト」 「デジタルツイン」の基盤構築で世界をリード

- サイバー世界
(サイバー空間)

- 物理世界
(フィジカル空間)



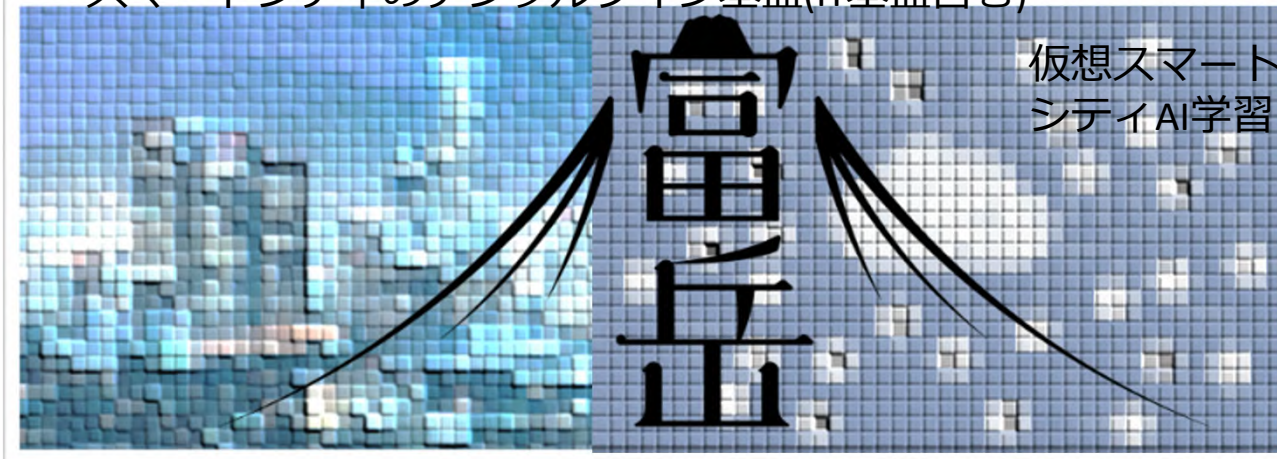
デジタルツインの実現のため、
同時に結合して全体を
（「富岳」上で）シミュレーション



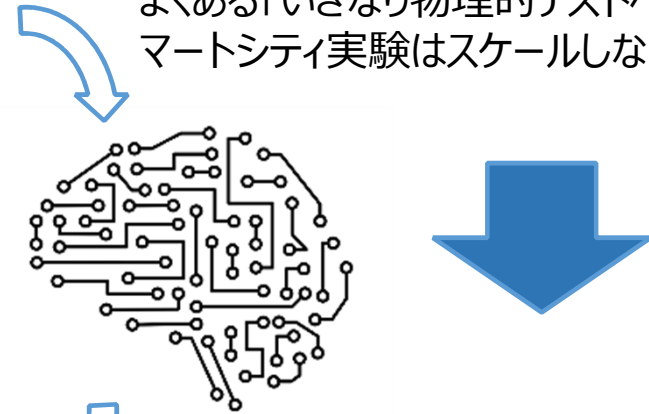
- 物理世界=>HPC分野が培ってきて富岳で世界一になった様々な分野の高度なシミュレーション(第一原理およびAIによる予測を含む)
- サイバー世界=> 単なる挙動のシミュレーションだけでなく、IoTからクラウドに至る実際のプログラムの実行
 - 富岳はIoTで主流のArduinoなどのArmプロセッサのプログラムをVM環境で直接実行可能 => デバッグを含む詳細なシステム開発が可能

「富岳」を基盤インフラとしたデジタルツインの基盤事例

スマートシティのデジタルツイン基盤(IT基盤含む)



よくある「いきなり物理的テストベッド」のスマートシティ実験はスケールしない



都市のITと物理環境のシミュレーション

実際の都市とそのITインフラ
実スマートシティAI推論



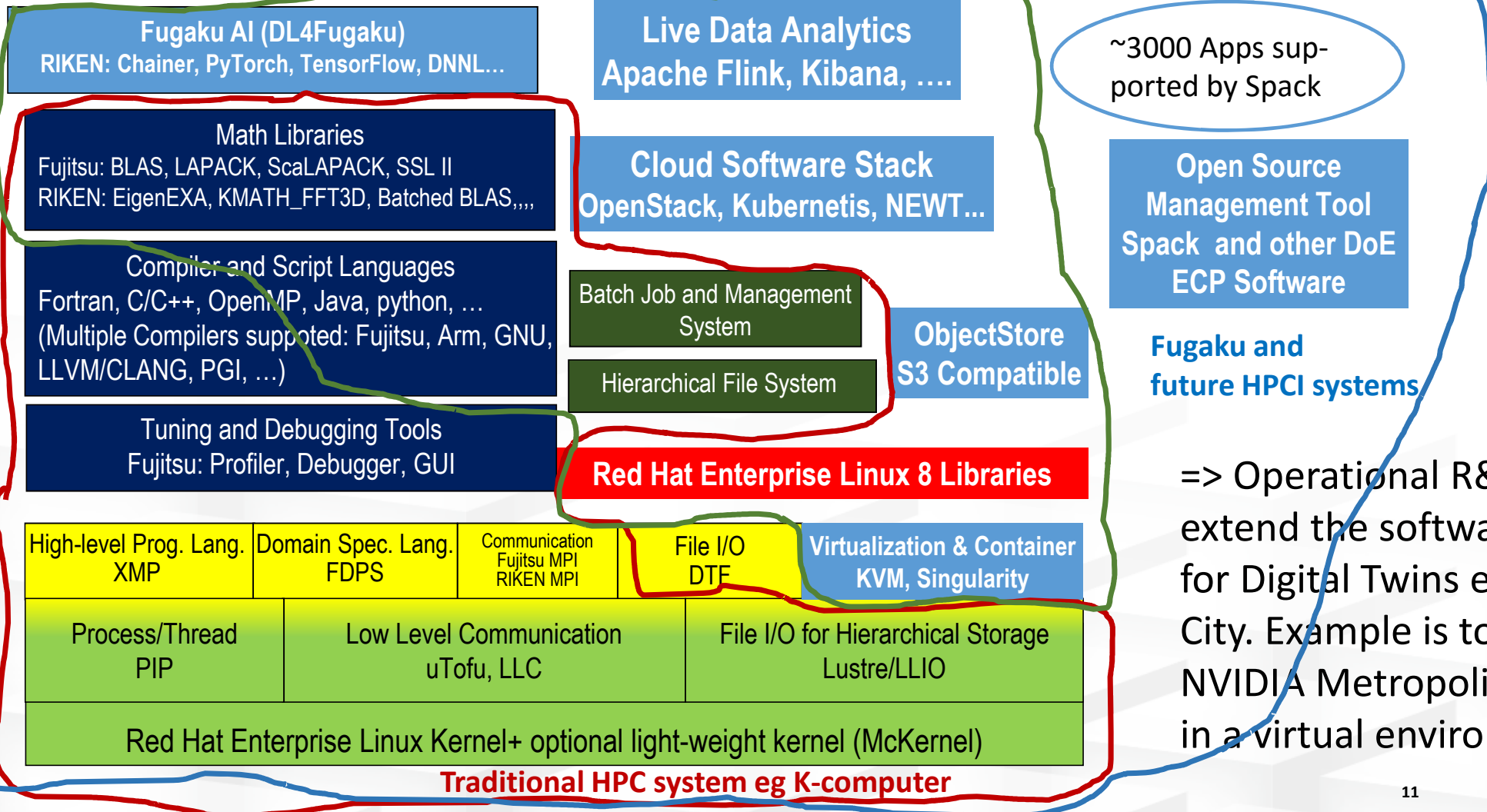
「富岳」でのスマートシティのデジタルツイン

- 都市現象シミュレーション
 - 交通等都市インフラ
 - 災害含む自然現象
- 都市ITインフラのデジタルツイン：仮想化シミュ
 - 数十万個のIoTセンサー
 - 5Gや光ネットワーク
- デジタルツインの教示データによる大規模AI学習

- **「富岳Arm」IoT主流のArmエコシステム・オープンソース**
 - A64fx CPU：世界最速の汎用プロセッサ(x86, Arm含)
 - HPC・クラウド・AI・IoT全て包括するオープンソース汎用ソフトウェアスタック
 - VM, コンテナ、Spack Package Managerなど、各種管理、デプロイ
 - **「富岳AI」の研究開発**
 - PyTorch, TensorFlow等の高速実装をDNNL for A64fx, Eigen等をベースに開発
 - 富士通・理研・Arm社等との産学連携による開発体制
 - **「富岳クラウドサービス」に向けたクラウドプロバイダとの連携**
 - 2020年度 「富岳クラウドサービス」のためクラウドプロバイダ8社と共同研究を開始。
「富岳」クラウド機能によるサービス基盤の構築と、その上での利用サービスの開発と実証
 - 2021年度以降 本格運用へ
 - **「富岳ライブストリーム」で多数のIoTストリームデータのアプリケーションへの提供**
 - 種々の研究機関・企業と連携し、一定期間以上保存される観測データの格納・分析・学習・推論機構を提供
 - **「富岳」Society5.0利用枠の新設：産業界・自治体・アカデミアの連合利用など**
 - **「富岳Society5.0シミュレーションファースト」デジタルツイン基盤の実現**
- ただし、富岳だけでなく、次世代HPCI全体の運用体制の検討が必要

Fugaku HPC+Big Data+AI+Cloud 'Converged' Software Stack

Traditional Clouds eg EC2

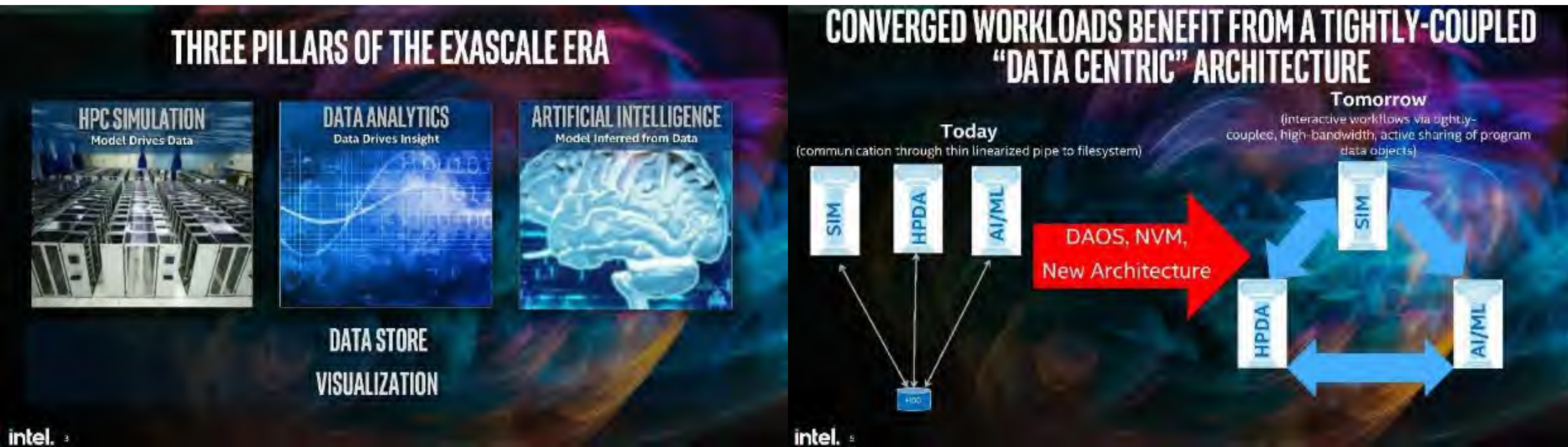


=> Operational R&D to extend the software stack for Digital Twins e.g. Smart City. Example is to facilitate NVIDIA Metropolis to work in a virtual environment

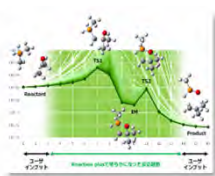
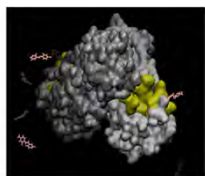


powered by
FUGAKU

今後のHPCにおける “第一原理シミュレーション” “AIによる経験則的予測” “観測ビッグデータ”の 三つの要素のコンバージェンスの科学と、それに適切な 情報基盤



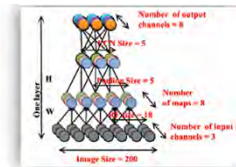
「将来の第一原理シミュレーション・AI・ビッグデータの統合インフラは密結合・リアルタイムでなくてはならない」



First Principle Based Simulation

Training Data Synthesis
Acceleration via Surrogates, Pareto optimization

Empirical AI-Based Prediction



Data Assimilation

Big Data Instrumentation

Trajectory Correction

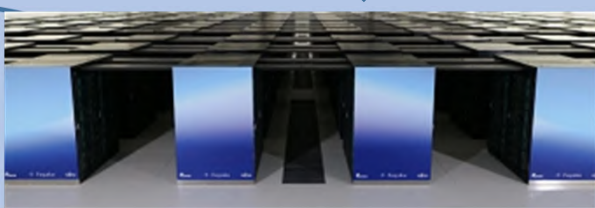
Inter/Extrapolation

Live Data Training

Prediction & Actuation

*What are the fundamental theories that define such relationships between compute, intelligence, and data?
(Collaborations with Riken AIP, AIST AIRC, ISM, NII,...)*

*What will be the underlying system (HW&SW) that will facilitate such convergence effectively?
(Collaborations with HPCI, Industry...)*



HPC (&Cloud) Infrastructure

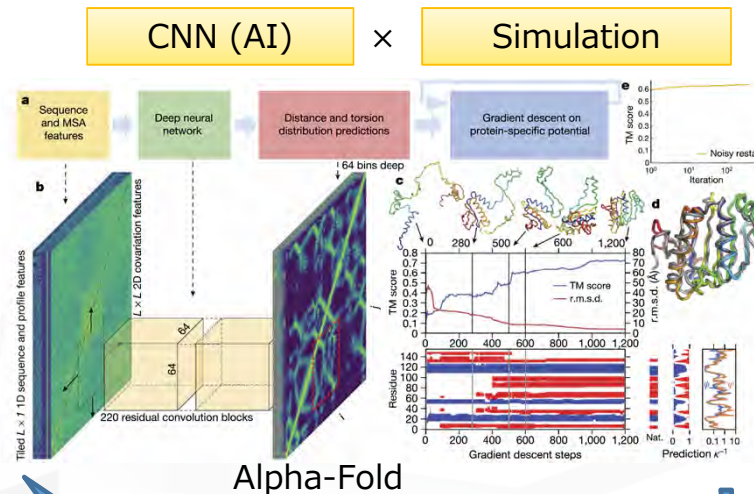
Example: Intelligent Genomics/Proteomics Drug Design based on Convergence

[New HPC/AI pharma division @ R-CCS]

Genomic Sequencers & Federated DB

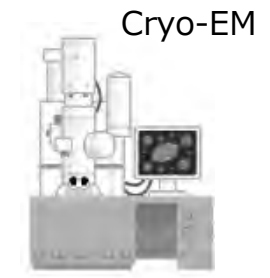


Genomic Sequence



Alpha-Fold

Feedback & Train



3d Structure

Structural Variations

Dynamics
DEFMap



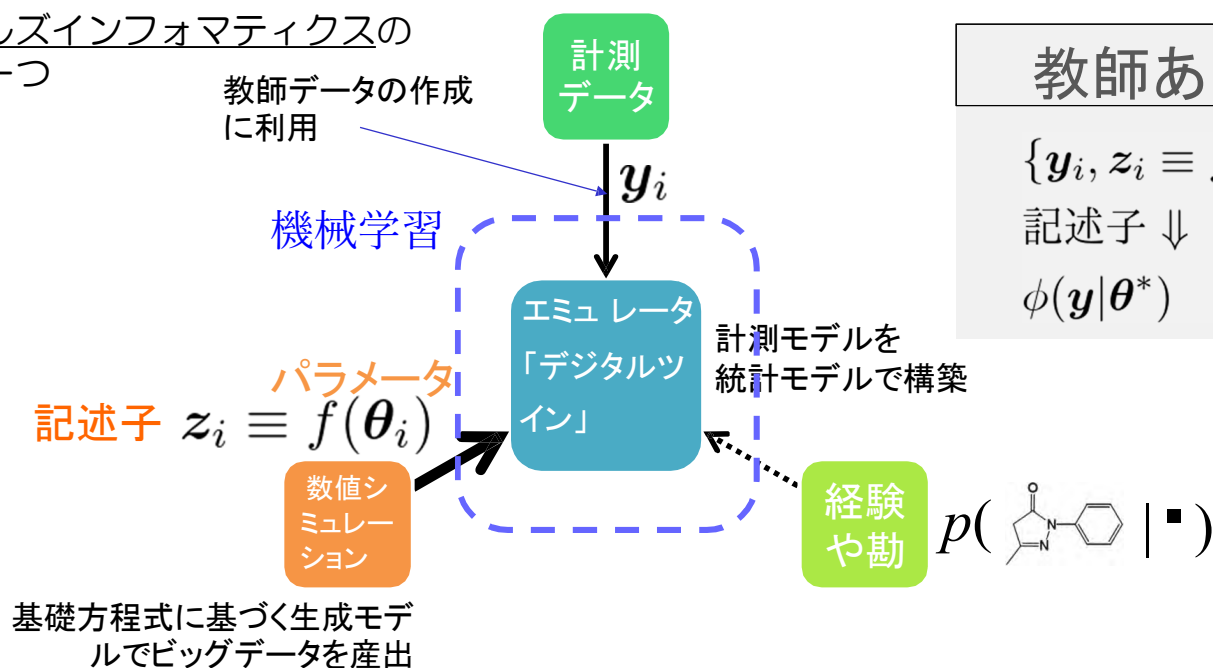
HPC (&Cloud) Infrastructure

機械学習の導入が急ピッチにすすむ マテリアルズインフォマティクス、ライフサイエンス



「AlphaFold」

マテリアルズインフォマティクスの
典型例の一つ



教師あり学習

$$\{y_i, z_i \equiv f(\theta_i)\}_{i=1}^N$$

記述子 ↓

$$\phi(y|\theta^*)$$

サロゲートシミュレータの構築と
その基盤となる理論の確立

樋口知之

中央大学理工学部 教授
AI・データサイエンスセンター 所長

(株)フレイバッド 顧問
(株)フリヂストン 特別技術顧問

新エネルギー産業技術総合開発機構 (NEDO)
ロボットAI部 部長

データサイエンティスト協会 理事

産業技術研究所 人工知能研究センター 顧問

情報・システム研究機構
理研究所

情報科学のグランドチャレンジとしての 新しいコンピューティング・パラダイムの探求



現在：メニーコア世代

5. Future Computing

ポストムーア世代

「計算カンブリア爆発」



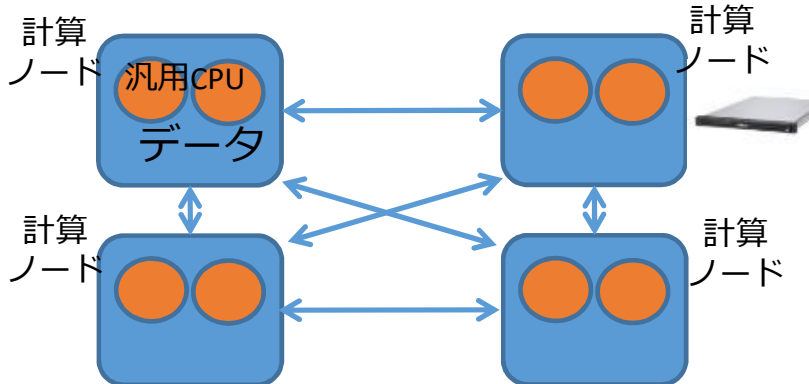
2025~
M-P
絶滅イベント

Flops計算中心のアルゴリズム・アプリ

Flops計算中心のシステムソフト・プログラミング

システムAPI
FLOPS中心の均質な超並列アーキテクチャ

均質で汎用の計算ノード+データの局所化



電気(銅線)ネットワークによる疎結合

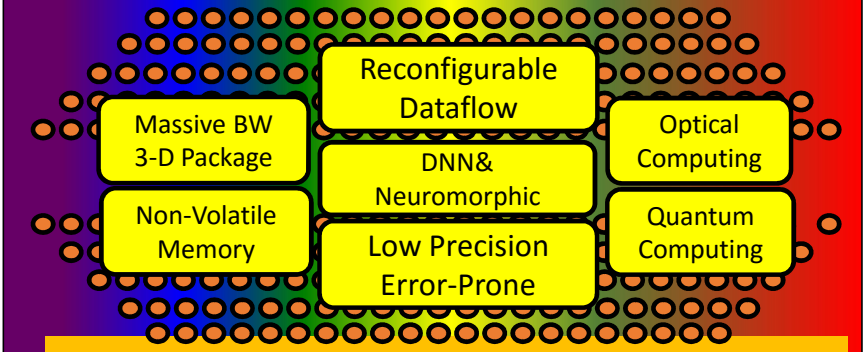
トランジスタのリソグラフィースケーリング
(CMOS ロジック回路、DRAM/SRAM)

多様性のあるデータ中心アルゴリズム・アプリ

多様性のあるデータ中心システムソフト・プログラミング

システム APIs
データ中心の多様性の高いアーキテクチャ

複数の異質なプロセッサ + 普遍的なデータ



Ultra Tightly Coupled w/Aggressive
3-D+Photonic Switching Interconnected

新デバイス + CMOS (ダークシリコン)
(Nanophotonics, Non-Volatile Devices etc.)

NGACI活動の紹介

• NGACI: Next-Generation Advanced Computing Infrastructure

– 概要と活動目的

今後の高性能計算機の持続的な発展を考えるにあたり、AIやビッグデータ技術とのさらなる融合、Society5.0といった新しい応用分野への展開など、さらなる発展も期待されますが、ムーアの法則の終焉など多くの技術的課題が待ち受けていることも事実です。本活動(NGACI)は、将来の高性能計算環境として、また共用計算機資源としてどのような技術的課題があり、どのような研究開発が必要なのか、コミュニティとしてどのような活動をしていくべきなのかなどに関して、オープンに意見交換をしつつそれをWhite Paperとしてまとめることで本分野の発展に寄与することを目的としています。



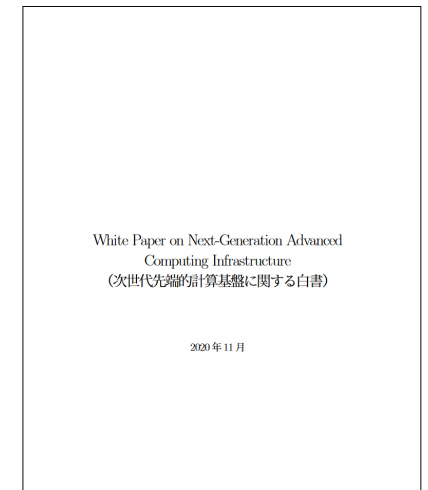
<https://sites.google.com/view/ngaci/home>

– これまでの実績

- 本活動に登録して頂いているコミュニティのメンバー数: 99人
- 7回の全体ミーティングと3回のセミナーを実施
- 4つのWGにより将来のシステム像や課題を集中的に議論
 - アーキテクチャWG、システムソフトWG、アプリ/ライブラリWG、システム運用WG

– White Paperについて

- 初版のドラフト(163ページ)が完成しチェック・校正中・広報中



2028年のCPU & CPU-GPU混載型システムの予測性能

システムの電力制約の仮定

- 最も積極的な予測でも最大1.8 EFLOPS (富岳の性能の3.37倍メモリバンド幅も4倍程度 → アプリケーション性能の向上はせいぜい3~4倍)

158,976
8.3×10^6
537
—
163
—
4.85
0.33

参考) 富岳の諸元

- GPU混載システム: 最も積極的な予測で最大18.0 EFLOPS (富岳の性能の33.5倍) => しかし、FLOPSは高いが、メモリバンド幅はCPUonlyと殆ど変わらない → 実際のアプリケーション性能はCPUシステム比でもあまり向上しない

CPUの電力バジェット

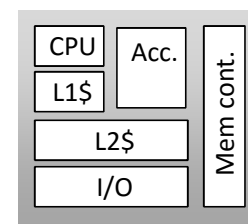
	30MW			40MW			50MW		
	60%	70%	80%	60%	70%	80%	60%	70%	80%
ソケット数	46620	54390	62160	62160	72520	82880	77700	90650	103600
総コア数	3.3×10^6	3.8×10^6	4.4×10^6	4.4×10^6	5.1×10^6	5.8×10^6	5.4×10^6	6.3×10^6	7.3×10^6
PFLOPS	815	950	1086	1086	1267	1448	1358	1584	1810
DDR 総BW (PB/s)	102	120	137	137	160	182	171	200	228
HBM 総BW (PB/s)	307	358	410	410	478	547	512	598	683
DDR 総容量 (PB)	17	20	23	23	27	31	29	34	39
HBM 総容量 (PB)	4	5	5	5	6	7	7	8	9
インジェクション BW	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6	1.6

	30MW			40MW			50MW		
	60%	70%	80%	60%	70%	80%	60%	70%	80%
GPU 数	50661	59104	67548	67548	78806	90064	84435	98508	112580
総コア数	3.4×10^9	3.9×10^9	4.5×10^9	4.5×10^9	5.2×10^9	6.0×10^9	5.6×10^9	6.5×10^9	7.5×10^9
PFLOPS	8083	9431	10778	10778	12574	14371	13472	15718	17963
HBM 総BW (PB/s)	334	390	445	445	520	594	557	650	743
HBM 総容量 (PB)	4	5	6	6	7	8	8	9	10

「アクセラレータ」「異機種性(ヘテロ)」は有効か？

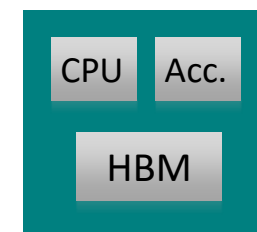
• チップ内拡張型 (SoC)

- CPUとアクセラレータが同一CPUダイ上で結合
- オンチップキャッシュなどのメモリ階層の一部を共有



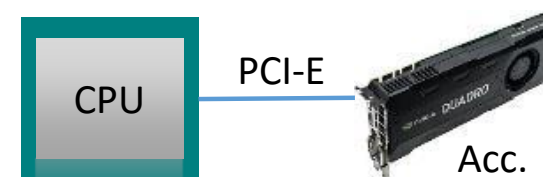
• チップ内拡張型 (マルチチップパッケージ)

- チップレットとして実装されたアクセラレータをインターポーザなどでCPUと結合
- 主記憶を共有



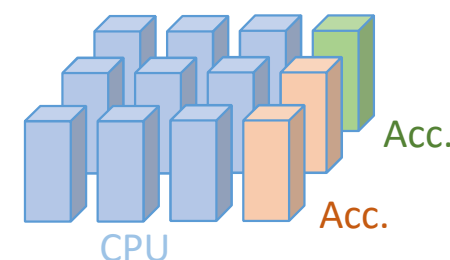
• ノード内拡張型

- アクセラレータがPCI-Express、CXL、CAPI等のインターコネクでCPUと結合
- メモリ間のデータ転送やアクセス制御の検討が必要



• 問題特化型ノードやラック、広域ネットワークによる疎結合型

- 独立したアクセラレータ専用ノードやラックをネットワークで結合

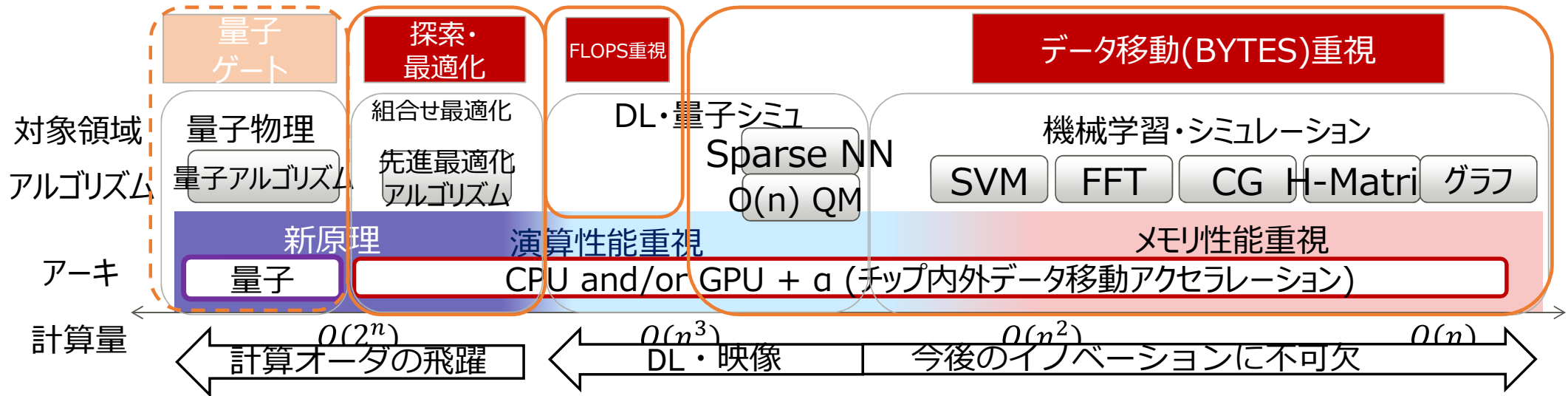
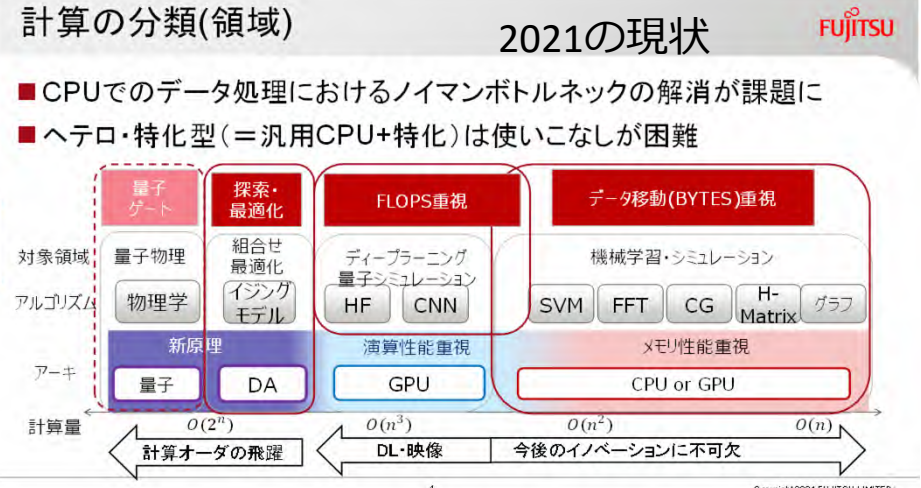


それは本末転倒、アクセラレータや異機種は最善で「必要悪」

- **本来、計算機システムはなるべく汎用で均質で分散性が見えないのがアプリケーション側からすれば望ましい**
 - 今回のサーベイでも「汎用」「使いやすい」→富岳の設計思想そのもの
- **クラウドの成功はそのような性質をきちんと担保したため**
 - 巨大なIDCに集中、汎用の資源を提供、分散に関しても標準APIで隠蔽
 - 一部DLなどにTPUなどのアクセラレータが存在するが、TensorFlowなどのフレームワークで一般ユーザからは隠蔽
 - 実際のDLワークロードの殆どは推論で、それらは未だにCPUベース
- **データ中心の観点からも、エネルギー効率が著しく悪い長距離転送はなるべく避け、集中すべき**
- **しかも、きちんとした分析は実は行われていない**

● 2030へ向けた変遷 (Post-Mooreの入り口)

- ムーア則の終焉による、演算性能の進化の終焉
- 新デバイス・パッケージングによるデータ移動コストの革新的削減
- アルゴリズムや利用法の進化による、計算量オーダーの削減 (+データ移動の相対的な要求の増加)
- BD/AI/第一原理の融合による、本誌的なデータ中心の流れ



2028年に性能100倍を達成する汎用性の高い高性能 計算機アーキテクチャとシステムソフトウェアの技術の探索

探索研究の目標

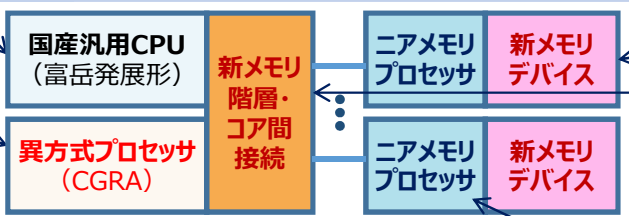
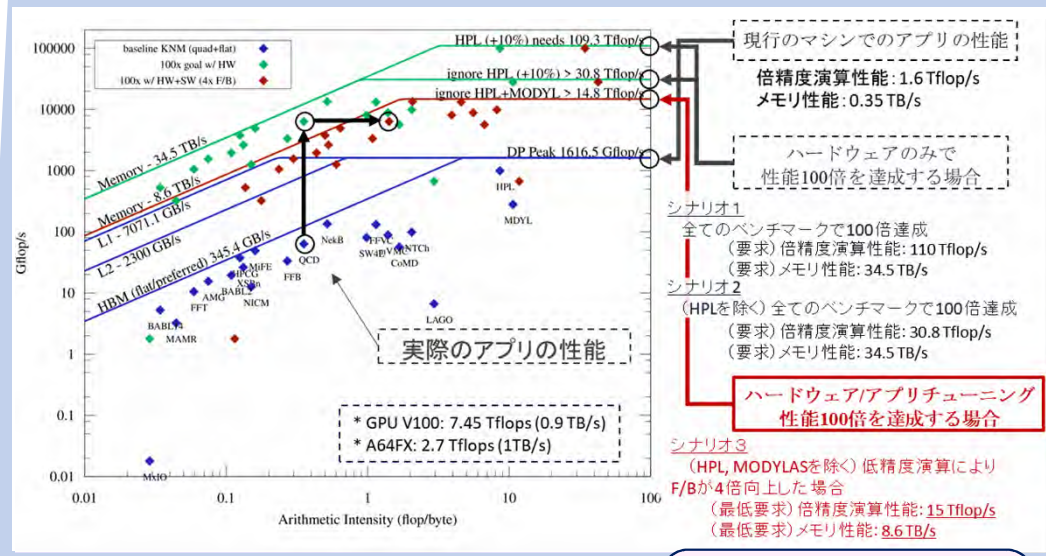
- 富岳Next 候補CPUの拡張を軸としてノードアーキテクチャ構成方式を探索
- そのための要素技術を探求

課題1.1 ベンチマークアプリの**性能特性解析**と**性能モデリング**による、既存方式の改善点と探求すべき方向性の明確化

本年度まで：ルーブリックモデルによる**100倍達成シナリオ**作成。演算性能・メモリ帯域・メモリ遅延など目標値設定

課題1.2 データ転送能力向上を性能向上につなげることが可能な**再構成型ベクトルデータフローアーキテクチャ (CGRA)**の探求

本年度まで：既存のCGRA研究開発の調査済。パラメータ化したCGRAのRTLシミュレータ構築。FPGA試作に向けた準備



課題2 超深化・超広帯域の**革新的メモリアーキテクチャ**の探索およびそれに対応する**システムソフトウェア**の探求

本年度まで：参照パターンによるメモリ性能推定。メニーコアメモリ特性評価

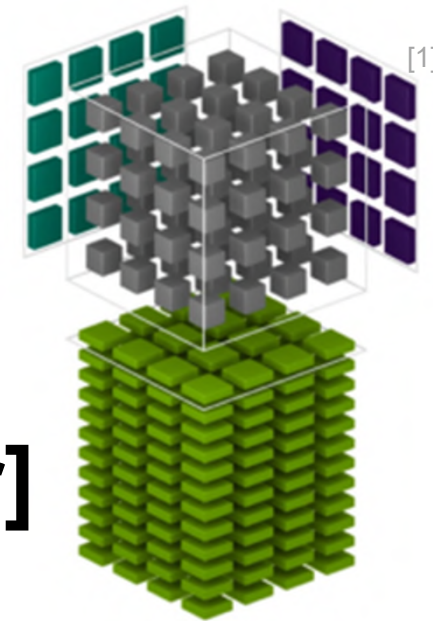
本年度まで：McIMエミュレータ設計と加速予算獲得・発注済 (年度内構築完了見込)、高速間接参照法や負荷分散法の検討

課題3 汎用性とソフトの連続性を重視した高い実効バンド幅と冷却効率が見られる**ニアメモリ計算方式**探求

最終目標の達成見込み

- 【2021年度】 各要素技術探索を継続し、定量的評価を達成予定。ノードアーキテクチャ案探索のため、富士通(株)が参画
- 【2022年度】 次年度よりステージアップし開発に移行するため、ノードアーキテクチャ構成案の確立を達成予定

Matrix Engines for HPC: A Paragon of Performance or Grasping at Straws? [IEEE IPDPS2021, to appear]



**Jens Domke, Emil Vatai, Aleksandr Drozd, Peng Chen,
Yosuke Oyama, Lingqi Zhang, Shweta Salaria, Daichi Mukunoki,
Artur Podobas, Mohamed Wahib, Satoshi Matsuoka**

(Collab. betw. researcher of RIKEN R-CCS, AIST, Tokyo Tech, and KTH)

Jens Domke, Dr. rer. nat.

< jens.domke@riken.jp >

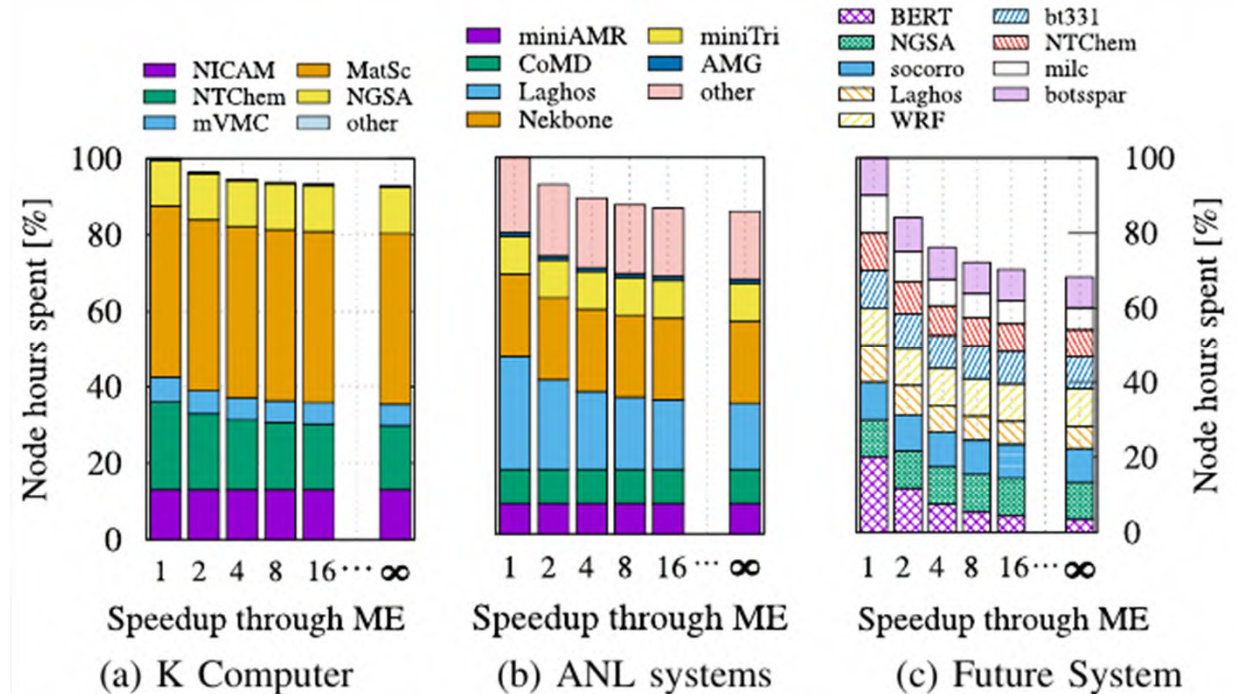
High Performance Big Data Research Team, RIKEN R-CCS, Kobe, Japan



What if... we have/had MEs?

Node-hour reduction extrapolation

- Future system w/ 10% equal distribution per science domain and **20% AI/DL/ML** (→ realistic for convergence of HPC and AI?)
- Under **ideal conditions w/ 4x ME speedup***:
 - **5.3% on K & 10.8% @ANL**
 - **23.8% future system**

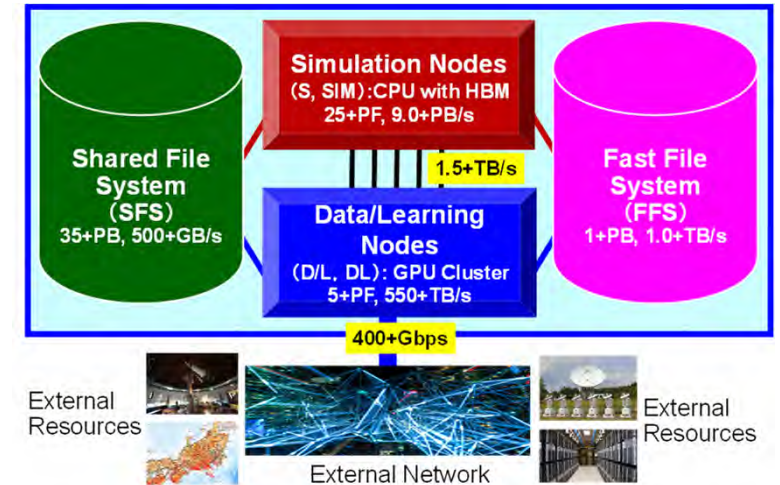


→ Matrix Engines will have limited utility, in future systems/workloads

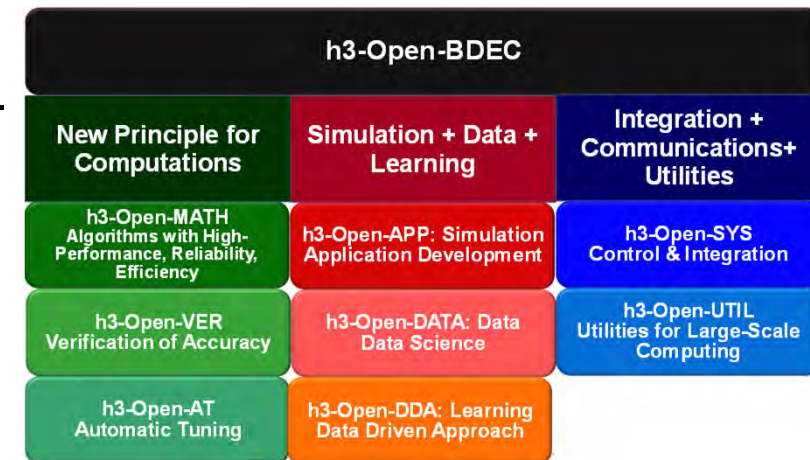
(*remark: 2-4x realistic w/o precision reduction as shown earlier)

(計算+データ+学習)融合によるエクサスケール時代の革新的シミュレーション手法

- 科研費基盤S(2019~2023年度, 153百万円)
 - 代表: 中島研吾(東大・理研)
- エクサスケール・Society5.0時代のスパコンによる科学的発見の持続的促進のため, 計算科学にデータ科学, 機械学習のアイデアを導入した(計算+データ+学習(S+D+L))融合による革新的シミュレーション手法を提案
- 東大BDECシステム, 富岳を「S+D+L」融合プラットフォームと位置づけ, スパコンの能力を最大限引き出し, 最小の計算量・消費電力での計算実行を実現するために, 下記2項目を中心に研究し, 革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」を開発する
 - 変動精度演算・精度保証・自動チューニングによる新計算原理に基づく革新的数値解法
 - 機械学習による革新的手法である階層型データ駆動アプローチ(hDDA: Hierarchical Data Driven Approach)
 - Hierarchical, Hybrid, Heterogeneous ⇒ h3
 - <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-Open-BDEC/>



東大BDECシステム(Big Data & Extreme Computing, 2021年5月運用開始予定)



革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」

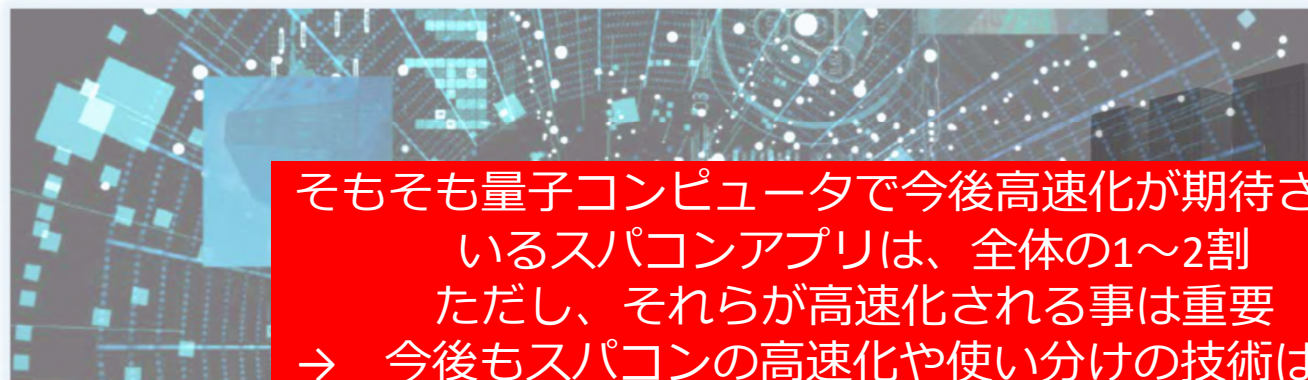
量子コンピュータに**スパコン（富岳）は不可欠**



- 量子ゲート素子開発のための物理シミュレーション
 - ✓ 多くの素子開発がスパコンのMaterial Informaticsをベースに実施中
- 量子アルゴリズムのシミュレーション
 - ✓ 米国、フランスで実際にスパコン上でシミュレーションを通じ研究中
- 量子超越性を比較・検証するためのHPCI
 - ✓ Googleの量子超越性の主張根拠とIBMの反証もスパコンで行われている



量子コンピュータの実現には、トップスパコンの開発と利用が必要



そもそも量子コンピュータで今後高速化が期待されているスパコンアプリは、全体の1~2割
 ただし、それらが高速化される事は重要
 → 今後もスパコンの高速化や使い分けの技術は必須





・量子-古典ハイブリッド環境の構築

(2) 量子計算機実機利用環境

量子-古典プログラミング環境

量子-古典計算機の協調のための統合プログラミング環境

量子数値計算ライブラリ

量子・古典ハイブリッド数値計算ライブラリ

・実装可能な量子AI技術の提供

(4) 量子AI技術の応用

量子マテリアルズ・インフォマティクス

大量データに対する量子機械学習の実証
有機系全固体電池・人工光合成錯体への適用

(1) 量子AIアルゴリズム

量子情報物理

量子-古典データ変換アルゴリズム
量子データのプロセッシング
量子データ学習

量子機械学習

カーネル法・深層学習の量子加速

量子最適化の数理

量子最適化計算の数理と基礎科学・実問題への応用

誤り耐性量子計算

エラー耐性を持つ線形代数アルゴリズム・量子回路構成法

・量子AI基盤技術の提供

クラウドシステム
社会問題の提供・解決
産業人材の受け入れ
量子人材の教育&輩出



(3) 富岳等による量子コンピュータシミュレータ (QS)

50Qubit級万能QS

World record QS
実機におけるノイズ等の解析

100Qubit級特定QS

実機の“量子優越性”の検証
量子AI技術応用の検証

50Qubit級擬似万能QS

量子アルゴリズム検証

・量子AI開発基盤の構築

Society 5.0

実用的な量子AIの普及と産業界への技術提供

産学連携

コンソーシアム形成

国内外の大学・研究機関との連携・人材交流

理研鼎業

連携

量子コンピュータ研究センター
(中村泰信センター長)



実機利用

外部実機提供企業との連携

IBM rigetti Etc.

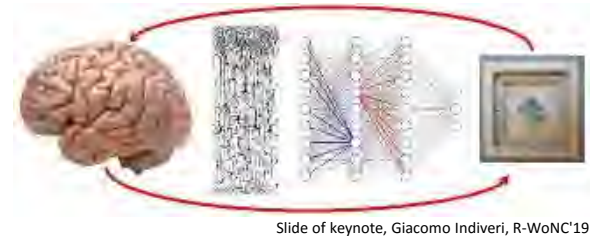
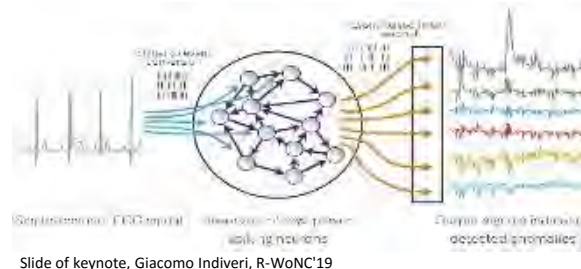
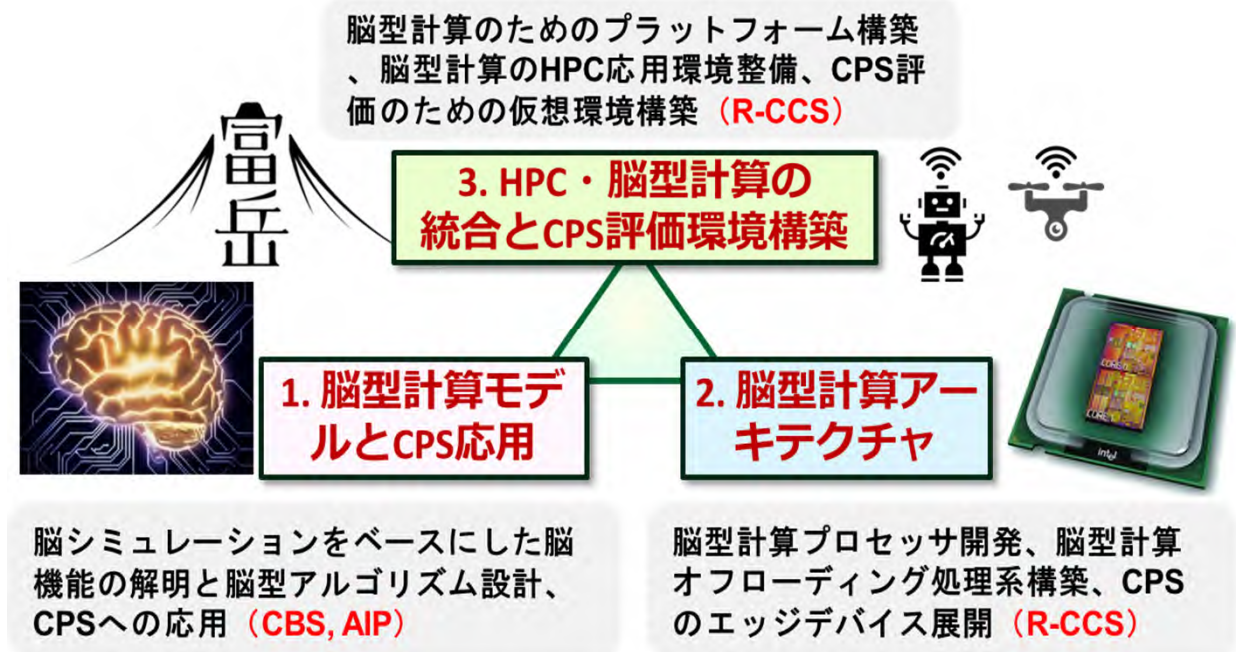
人材育成・交流、国内外連携、広報、連携企業の開拓

● ニューロモーフィックコンピューティング

- より脳を模倣した「脳型計算」
 - 深層学習よりも神経細胞らしい挙動
- Society5.0応用の可能性
 - Cyber-physical systems
 - Robots
 - 医療の高度化（脳の理解）

● 富岳を利用した脳型計算研究

- 脳シミュレーション（脳科学の解明）
- CPS応用などに対する脳型アルゴリズムや応用の研究
- エッジへの展開のための、プロセッサの探求



「富岳」を利用した脳型計算研究計画の例