



京×ポスト京 シンポジウム

～シミュレーション・AI・ビッグデータ～

2019年1月18日(金)

報告書





CONTENTS

イベント概要・プログラム	2
--------------	---

主催者挨拶	3
-------	---

講演会報告

スーパーコンピュータの歴史から将来を見る 小柳 義夫	4
-------------------------------	---

高速道路ネットワークの地震リダンダンシー評価の可能性 金治 英貞	6
-------------------------------------	---

計算シミュレーションの高分子材料基盤技術開発に向けた期待 中瀬古 広三郎	8
---	---

カジュアルなスーパーコンピュータ 鬼頭 周	10
--------------------------	----

人工知能とシミュレーション 辻井 潤一	12
------------------------	----

次世代高性能ARMプロセッサによるHPCとAIの統合 松岡 聡	14
------------------------------------	----

まとめ	16
-----	----



京×ポスト京シンポジウム

～シミュレーション・AI・ビッグデータ～

日 時:2019年1月18日(金)13:00～16:45

場 所:日本橋ライフサイエンスハブ(室町ちばぎん三井ビルオフィス棟8階)

主 催:理化学研究所計算科学研究センター、高度情報科学技術研究機構

後 援:文部科学省、日本経済団体連合会、経済同友会、日本商工会議所、HPCIコンソーシアム、
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、計算科学振興財団、
産業技術総合研究所 人工知能研究センター

参加費:無料

プログラム

時間	講演者(敬称略)
13:00-13:05	開会挨拶 関 昌弘 高度情報科学技術研究機構 理事長
13:05-13:15	挨拶 坂下 鈴鹿 文部科学省 研究振興局参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室長
13:15-13:45	スーパーコンピュータの歴史から将来を見る 小柳 義夫 高度情報科学技術研究機構 サイエンスアドバイザー/東京大学名誉教授
13:45-14:15	高速道路ネットワークの地震リダンダンシー評価の可能性 金治 英貞 阪神高速道路株式会社神戸建設部 部長
14:15-14:45	計算シミュレーションの高分子材料基盤技術開発に向けた期待 中瀬古 広三郎 住友ゴム工業株式会社 技監
14:45-15:05	コーヒーブレイク(産業利用相談会)
15:05-15:35	カジュアルなスーパーコンピュータ 鬼頭 周 ソフトバンク株式会社 常務執行役員 事業開発統括 ソリューション戦略開発室長
15:35-16:05	人工知能とシミュレーション 辻井 潤一 産業技術総合研究所人工知能研究センター センター長
16:05-16:35	次世代高性能ARMプロセッサによるHPCとAIの統合 松岡 聡 理化学研究所計算科学研究センター センター長
16:35-16:45	閉会挨拶 松岡 聡 理化学研究所計算科学研究センター センター長

主催者挨拶

「京」からポスト「京」へ フラッグシップとして 科学界・産業界にさらに貢献

スーパーコンピュータ「京」は2012年9月に共用が開始され、以来、日本のスーパーコンピュータの中核として活躍してまいりました。その「京」も本年(2019年)夏以降には運転を停止し、次のスーパーコンピュータであるポスト「京」(仮称)の建設の準備が始まります。

「京」の歴史を振り返ると、共用開始前である2011年6月の部分的な稼働状態において、早くもTOP500リストの世界第1位を記録しました。同年11月には、2期連続の世界第1位のみならず、HPCチャレンジ(HPCC賞)4部門、ゴードン・ベル賞等も受賞するという、鮮烈なデビューを果たしました。

その優れた実効性能は、Graph500という大規模グラフ解析にも威力を発揮しており、最新の2018年11月まで、8期間連続で世界第1位を達成しています。大規模なグラフ解析は、本日のテーマの1つであるビッグデータの処理や、AI、機械学習においても必要となるものであり、その性能における世界第1位は、「京」の汎用スーパーコンピュータとしての高い実効性能の証となるものです。

「京」は共用開始以来、その能力を遺憾なく発揮し、数々の科学的な成果を生み出しました。そればかりでなく、「京」によってスーパーコンピュータの産業利用もおおいに促進され、画期的な製品開発を実現してきています。また「京」はフラッグシップとして、わが国のHPCIの中核となり、計算科学のコミュニティを育成してまいりました。

そして今、新しいフラッグシップの登場が待ち望まれています。最大で「京」の100倍もの実効性能をもつシステム(ポスト「京」)が、約2年後には姿を現すことになります。ポスト「京」は世界の科学界に大きなインパクトをもたらすとともに、わが国の産業界にとって、国際競争を生き抜くための強力なツールになるであろうことは、疑う余地がありません。

本日は、わが国のスーパーコンピュータの発展を辿りながら、「京」がもたらした具体的な成果の事例、ポスト「京」の登場によって実現される新たな可能性を、シミュレーションとビッグデータ、機械学習、AIをテーマとしてご紹介したいと思います。このシンポジウムをきっかけに、皆様から計算科学にさらに期待を寄せていただき、「京」およびポスト「京」をはじめとするスーパーコンピュータの活用が今後一層進んでいくことを祈念いたします。



高度情報科学技術研究機構
理事長
関 昌弘

小柳 義夫 高度情報科学技術研究機構 サイエンスアドバイザー／東京大学名誉教授



スーパーコンピュータの歴史から 将来を見る

現在、コンピュータ開発は米日欧中の4つ巴の戦い

本日は最初の講演者として、コンピュータの歴史を振り返り、現在の状況を考察し、さらに将来を展望したいと思います。

まず、コンピュータの歴史の概要をお話しします。世界で初めて電子計算機が作られたのは1946年で、米国製の「ENIAC」でした。当時、日本は敗戦直後の混乱期でしたが、その後、日本は米国のあとを追いかけてきました。その結果、1970年代に入り米国の背中が見え始め、1980年代に入りスーパーコンピュータでは米国と並走、さらに一瞬追い越しました。半導体産業全体では、DRAMで世界を席卷。それにより日米貿易摩擦が起こりました。80～90年代、米国が汎用プロセッサを大量に並べてスーパーコンピュータを作っていたのに対し、日本はベクトルコンピュータという路線をとりました。2002年には、日本の「地球シミュレータ」が世界の度肝を抜きました。一方で、日本は、超並列計算という点において、米国に遅れをとりました。しかし、2011年、「京」が試運転を開始し世界トップに躍り出ました。ところが2010年頃から中国が台頭し始め、2013年、スーパーコンピュータ「天河2A」が世界トップを取りました。欧州勢も元々頑張っていたことから、現在は、米日欧中の4つ巴の戦いになっているという状況です。

米国との競争で日本のコンピュータ技術が発展

では、もう少し詳しくコンピュータの歴史を見ていきましょう。最初のコンピュータは真空管でできていましたが、トランジスタが発明され、日本でも1960年頃に各社が独自に計算機を作り始めました。

一方、米国では1964年に、スーパーコンピュータの元祖「CDC6600」が稼働を開始しました。新しい科学技術によるコンピュータの時代を歩み出したのです。同年には、IBMのメインフレームと呼ばれる汎用コンピュータが登場しました。ムーアの法則やアムダールの法則に関する論文が発表されたのもこの頃です。このように、米国はこの時期、コンピュータに対する基本概念を確立しており、このことは非常に重要だと私は考えています。つまり、1960年代の日本の問題点は、単なる個々の技術の遅れに留まらず、米国のように基本概念を打ち出すことができなかったということです(図1)。

技術的には、日本はメインフレームに対抗するため、通産省(現・経済産業省)が1966～72年に「超高性能大型電子計算機プロジェクト」を、次いで、1976～79年に「超LSI技術研究組合」を立ち上げました。ここで興味深い点は、IBMがシステムを目指したのに対し、日本はデバイスの開発を進めたことです。その結果、80年代、日本はDRAMで世界を席卷し、その間、米国は汎用プロセッサの開発に集中しました。

同じ80年代には、米国がスーパーコンピュータの開発に注力したのに対抗して、日本の通産省も開発プロジェクトを開始しました。製品開発までには至りませんでしたが、個別要素技術としては、その後の日本のスーパーコンピュータ開発の一助となりました。またこの時期、日本の三社はベクトルコンピュータの販売を始めました。当時の文部省(現・文部科学省)の素晴らしかった点は、このスーパーコンピュータを日本の大学や研究所に戦略的に配置し研究者がだれでも利用できるようにしたこと。そして、日本が徐々に優位になっていく中、日米貿易摩擦が自動車や

コンピュータの分野で勃発しました。1986年、日本は日米半導体協定という不平等な協定を締結させられました。それを機に、1990年代に入り、日本のコンピュータ開発は暗黒の時代に入りました。

スーパーコンピュータは国家にとって重要な基幹技術

このころ、米国は1995年に「ASCI計画」と呼ばれるスーパーコンピュータの戦略的な開発を開始し、1997年、世界トップを日本から奪いました。一方、このころから日本では、文部省や科学技術庁がスーパーコンピュータ開発に力を入れ始めました。通産省は日本全体の産業支援を目的に、スーパーコンピュータに関する技術として汎用性を指向しましたが、それに対し、文部省・科学技術庁系はユーザーの視点でニーズに合ったコンピュータの開発を推進しました。それにより、大きな教訓が得られました。それは、最初から汎用機を目指すとは焦点が定まらず良いものではないため、明確な目的意識をもって設計すべきだということです。この教訓は現在、「コ・デザイン」としてポスト「京」に活かされています。

2002年に稼働を開始した地球シミュレータは、2002～2004年、5回世界トップとなりました。そして、2011年に「京」が稼働を開始し、2回世界トップを取りました。日本で国家プロジェクトとして開発したスーパーコンピュータは「京」が初めてでした。そして、現在、ポスト「京」の時代を迎えようとしています。

ではなぜ、ポスト「京」が必要なのでしょう。それは、さらなる計算パワーが求められているからです。たとえば、メッシュをより細かくすれば、世界全体の気象を高い精度で予測できたとしても、1日分を予測するのに、20時間かかっていたのでは役立ちません。そのため、ポスト「京」により、計算科学の飛躍的な発展が期待されています。また、新たな展開としては、AIをはじめとするデータ科学への適用などがあります。

このように、スーパーコンピュータは国家にとって重要な基幹技術であり、その中で独自の技術開発を推進することは大変重要です(図2)。これまで日本のスーパーコンピュータはユーザーの視点で開発されてきましたので、この姿勢はポスト「京」でも活かされることになります。今後の発展を見守りたいと思います。

1960年代の日米格差

- アメリカは集積回路に移行、日本はまだトランジスタ
- アメリカで**科学技術用コンピュータ**の登場
 - CDC6600、IBM360/91、ILLIAC IVなど
- **基本概念の確立** • **Intel**や**AMD**の創立
 - IBMのMain Frame (1964)
 - Mooreの法則(1965)
 - Flynnの分類(1966)
 - Amdahlの法則(1967)
 - Tomasuloのアルゴリズム (1969)

2019年1月18日

京×ポスト京シンポジウム

図1 1960年代、米国ではコンピュータに対する基本概念を確立。それに対し日本では、単なる個々の技術の遅れに留まらず、基本概念を打ち出すことができていなかった。

まとめ

- スーパーコンピュータ技術は国家基幹技術である。独自技術開発の重要性。
- 日本は1980年代に一時アメリカに追いつき追い越した。
- その結果、さまざまな摩擦が起こった
- アメリカは日本を牽制しながら、国家プロジェクトを推進した。
- 1990年代前半、アメリカは超並列に急速に転換し、日本を引き離した。
- 「地球シミュレータ」で追い越したが、BG/L登場。
- 「京」で一瞬追い越したが、Sequoiaにすぐ挽回される
- 「ポスト京」に期待
- 新しい応用: AI、データ科学、社会経済、etc.

2019年1月18日

京×ポスト京シンポジウム

図2 スーパーコンピュータは国家にとって重要な基幹技術であり、その中で独自の技術開発を推進することは大変重要。ポスト「京」では、新たな展開として、社会科学や経済に関するシミュレーション、AIなどデータ科学への適用も期待されている。

金治 英貞 阪神高速道路株式会社神戸建設部 部長

高速道路ネットワークの 地震リダンダンシー評価の可能性



「守る」から「うまく壊す」へ

本日は、高速道路会社が地震に対する防災・減災等にスーパーコンピュータをどのように役立てようとしているかについてお話しします。

我々は、現在、「京」を使ったシミュレーションにより、弊社で管理している道路や橋梁などの構造物に加え、車両、人などを仮想空間内に設定し、そこに、地震や風、雨などの“作用”を入力することで、構造物がどのように振る舞うかを解析しています。そして、その結果を実際の構造物の設計に活かすことで、防災・減災、交通管制に役立て、BCP(事業継続計画)に活用していく予定です。加えて、先進構造や新たな技術の開発にもつなげていく考えです(図1)。そのため、弊社では現在、理化学研究所、神戸大学、阪神高速技術センター、(株)地震工学研究開発センターとの産官学連携で、プロジェクトを進めているところです。

そもそも私が強い問題意識をもったのは、1995年1月に発生した阪神淡路大震災がきっかけです。阪神高速道路も甚大な被害を受けたため、当時30歳だった私は現場に赴き、惨状を目の当たりにしました。阪神高速道路は、関東大震災規模の地震を想定して設計されたもので、それ以上の規模の地震に対しては、耐震性を評価できるツールなどはありませんでした。

また、東神戸大橋という長大橋が損傷、長大橋の被災は世界で初めてのことでした。橋脚や桁の部分には、風や地震による揺れを抑制するため、異なる機能をもつ複数の部材や部品が装備されています。ところが、想定外の揺れだったため、あらゆる部材、部品が連鎖的に破壊され、機能喪失に至りました。さらに、阪神淡路大震災で我々が得たもう1つの教訓は、構造物を破壊から完璧に守ることはできないため、致命的な破壊が発生しないように、うまく壊すこと(損傷制御設計)が重要だということでした。

「京」を使って内陸断層と南海トラフによる 長大橋の揺れ方の違いを比較

このような課題に対し、シミュレーションにより、いろいろな地震を発生させ、それにより橋がどのような挙動を示すかが可視化できれば、不確定性の高い地震の影響をこれまで以上に的確に把握することが可能となります。

また、道路は1本のラインとして機能しているため、凝視的に緻密に見ていくだけでなく、俯瞰的にも見ていく必要があります。そのため、解析モデルを橋単位だけでなく、道路というネットワークレベルで構築する必要があります。そこで、我々は、大規模計算が可能な「京」を活用しているのです。現在では、20kmの長さの高架橋を約1分間で数値計算できるようになりました。またこれまで知られていなかった揺れ方などもわかってきました。

2015年度には、「巨大地震による阪神高速道路長大橋の地震応答シミュレーション」を実施しました。これにより、阪神淡路大震災による東神戸大橋の損傷のプロセスを、忠実に再現できるようになりました。

また、2017年度には、「南海トラフ震源断層域を考慮した長大橋等湾岸道路の大規模地震応答シミュレーション」を

実施しました。これは、長大橋、高架橋からなる阪神高速湾岸線が、南海トラフを想定した地震にどのように応答するかを、ネットワークレベルでシミュレーションできるというものです。ここでは、まず、深層地盤の応答解析、次に、表層地盤の応答解析、そして、構造物の応答解析を行うという順番で、構造物の揺れを解析しています。それぞれの構造物の特性や箇所によって、応答が異なってくるため、補強や改善が必要な箇所に、集中的に予算を投入していくことができます。

実際に、上町断層帯という内陸断層と南海トラフのそれぞれを設定し、シミュレーションを行うことで、湾岸道路全体が、地震により、それぞれどのように振る舞うかを俯瞰的に比較して見られるようになりました(図2)。

安心・安全なインフラストラクチャーの構築を目指して

最後に、Society5.0に関連するお話をします。

2018年6月に、大阪府北部地震が発生しましたが、その際、我々は規則に則り、高速道路を封鎖し、安全点検を実施しました。実際に人が歩いて橋脚などをすべて点検したため、約5時間もかかりました。しかし今後、高速道路などに安価なセンサーを大量に装備し、センサーネットワークを構築すれば、地震により損傷した部分がわかるため、早期復旧が可能となります。このように、地震による損傷の評価ができる「スマートハイウェイ」を実現していきたいと考えています。

加えて、現在、神戸の六甲アイランドの西方に、世界最大級といわれる長大橋を含めた高速道路の建設が計画されています。この次世代の高速道路では、新たな設計手法、安全性照査の仕組みを構築すべく、「京」を使ったプロジェクトを推進中です。たとえば、構造物の骨格はなかなか交換できませんが、免震装置などの部材や部品は交換しやすいため、それらを、時代に応じて、先端材料を使った部材や部品に交換していくことで、進化し続ける100～200年の耐久性をもつ構造物を構築していきたいと考えています。

まとめになりますが、我々は、仮想空間における単なるシミュレーションではなく、実際の長大橋や道路の安全性を評価できるシミュレータの構築を使命としています。また、これを基盤プラットフォームとすることで、電気や交通管制など、土木以外の分野の技術との融合を果たしていきたいと考えています。加えて、道路のネットワークをより精密により早く解析するには、より大規模な数値計算が不可欠です。そのため、ポスト「京」には大いに期待しています。それにより、より安心・安全なインフラストラクチャーを構築していきます。

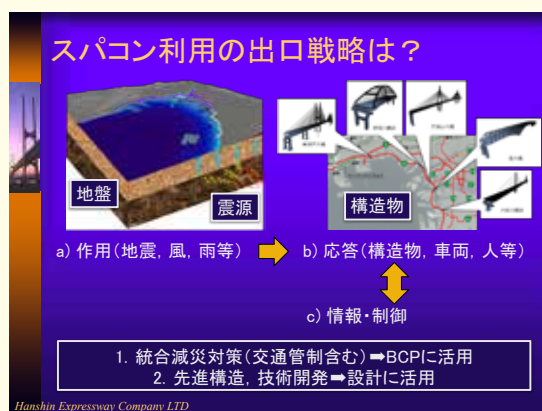


図1 道路や橋脚の構造物・車両・人などが、地震や風、雨などによってどのように振る舞うかをシミュレーションすることで、防災・減災、交通管制に役立て、BCPに活用するとともに、先進構造や新たな技術の開発につなげていく。(提供: 阪神高速道路株式会社)

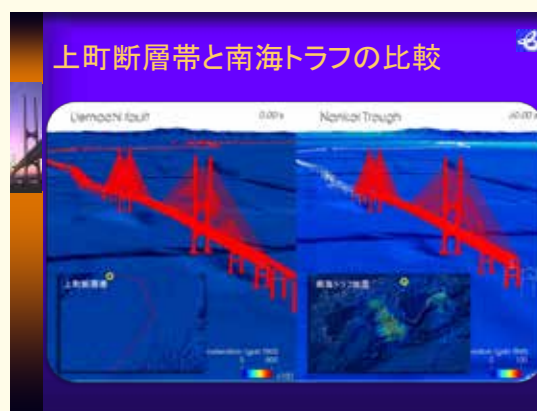


図2 2017年度に開発した「南海トラフ震源断層域を考慮した長大橋等湾岸道路の大規模地震応答シミュレーション」では、上町断層帯という内陸断層と、南海トラフとでは湾岸道路の地震による揺れ方がどのように異なるか、その違いの可視化に成功した。(提供: 阪神高速道路株式会社)

中瀬古 広三郎 住友ゴム工業株式会社 技監

計算シミュレーションの 高分子材料基盤技術開発に 向けた期待



相反する性能の同時改善で、さらなる低燃費を目指す

弊社の創業は1909年で、日本で初めて自動車のタイヤの生産を始めました。現在は売上の約86%をタイヤ事業が占めます。本日は、高分子材料であるタイヤのゴムの製品開発において、弊社がスーパーコンピュータを使い、どのようにして国際競争力を培ってきたか、イノベーションを起こそうとしているかについてお話しします。

日本では1970年代に勃発したオイルショック以来、自動車の低燃費競争が始まりました。また、2000年代に入り、CO2を含む排ガスの規制が実施されました。それに伴い、新車だけでなく市販のタイヤについても燃費向上が強く求められるようになりました。現在では、世界中でタイヤに関する燃費性能のグレーディングが行われており、燃費性能に関する競争が激化しています。

タイヤで低燃費を実現するには、走行中はすいすいと転がる“転がり抵抗(の低減)”、一方、停止するときはブレーキを踏んだらしっかり止まる“グリップ性能(の向上)”が不可欠です。また、省資源のためには“耐摩耗性能(の向上)”も重要です。しかし、この3つの性能は相反するもので、これらを同時実現させるのは容易ではありません。

そこで、弊社では早い時期から、実験に加えコンピュータ・シミュレーションを活用してきました。2000年代初めまでは、タイヤ単体の構造設計においてスーパーコンピュータを使っていましたが、現在は、燃費向上に向け、路面に接しているタイヤ表面のゴムの、原子・分子レベルでのシミュレーションに取り組んでいます。ここに製品開発におけるイノベーションの余地があります。

先端実験と「京」によるシミュレーションで、 世界最高性能のタイヤの開発に成功

ゴムの主原料はポリマーとゴムの強度を上げるための補強フィラーです。フィラーにはシリカ(二酸化ケイ素)、カーボンが使われます。ポリマーは有機化合物、シリカは無機化合物で、通常は結合しないため、結合材を使って結合させています。シリカは粒子状で、そこにポリマーが絡み合って結合し、界面ポリマーを形成しています(図1)。ゴムでイノベーションを起こすには、この構造と物性や強度との関係を解明していく必要があります。

ポリマーは数十ナノメートルの塊で絡み合って存在し、その分子鎖は硫黄で架橋されています。一方、シリカ粒子の直径は約10ナノメートルで、表面には結合剤がついています。これらが、一次凝集、二次凝集、三次凝集といった具合に、不均一に凝集した階層構造になっています。

材料構造の大きさが10～100ナノメートルの領域では、材料は1ピコ秒～1マイクロ秒という非常に速い微小運動をしています。これが、グリップ性能に関与しています。一方、100ナノメートル～10マイクロメートルの領域では、材料は数マイクロ秒～数ミリ秒という遅い運動をしています。これが転がり抵抗に関与しています。つまり、スケールの異なる階層ごとに、異なる動きをしており、それが、タイヤのそれぞれの性能を左右しているのです。

そこで、2000年代初めごろから、SPRING-8(大型放射光施設)でゴムの構造解析を始めました。次に、地球シミュ

レータでシリカの配分を決め、2010年頃から「京」で最終的なバルクとしての物性評価をしました。さらに、2015年からは、J-PARC(大強度陽子加速器研究施設)の中性子散乱装置で、ゴムの運動解析も行いました。それにより、リアルな大規模分子シミュレーションモデルを構築することができました。

最終的に「京」で計算したモデルは、一辺の長さが350ナノメートルのスケールで、ほぼリアルな凝集性、不均一性を表すことに成功しました。それにより、界面ポリマーの結合材と周囲の物性が、性能に大きく関与することがわかりました。この計算結果を基に、新しい分子構造を持った結合剤を開発してゴムを改良したところ、性能が飛躍的に向上しました。その成果が認められ、2017年には、市販タイヤの中で世界最高ランクのグリップ性能、燃費性能でありながら、従来の低燃費タイヤに比べて50%以上、耐摩耗性能を上げることができたとして、日経地球環境技術賞の最優秀賞などを受賞しました。

ポスト「京」利用により、全原子シミュレーションの実現へ

しかし、現在、新たな課題が浮上しています。電気自動車化、ドライブシェア、自動運転化です。まず、電気自動車は航続距離をさらに伸ばすための低燃費タイヤの必要があることと車重が重くなりかつトルクが大きいため、タイヤへの負荷が大きくなります。また、ドライブシェアにより自動車1台当たりの使用量が非常に増えます。加えて、自動運転化によりタイヤが古くなり性能が落ちてうまく制御できるか危惧されます。そのため、今後、タイヤに対する性能要求がますます高まっていくことが予想されるのです。

これには、シミュレーションのさらなる高度化が欠かせません。我々が「京」で行っているシミュレーションは、「粗視化分子動力学シミュレーション」と呼ばれるもので、材料の原子・分子構造を直接検討することまではできません。しかし、今後、ポリマーとフィラー界面の化学構造がゴムの物性や強度にどのような影響を与えているかを詳細に調べる必要があり、そのためには、「全原子(フルアトム)シミュレーション」を行う必要があります。

そこで、我々は、このモデルを新たに構築するとともに、粗視化分子動力学シミュレーションとリンクさせ、「次世代粗視化分子動力学シミュレーション」を構築しようと考えています(図2)。それにより、ナノメートルレベルからミリメートルレベルまでの材料の構造と運動特性、物理特性との関係の解明が期待されます。そして、そのために不可欠なのが、ポスト「京」です。加えて、2023年に仙台市で稼働予定の次世代のX線放射光施設では、ナノメートルレベルで化学状態そのものが見えるようになります。

弊社では今後も、先端実験とシミュレーションを融合させていくことで、材料のイノベーションを起こしていきたいと考えています。

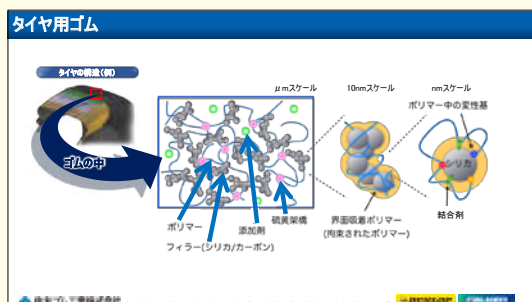


図1 ゴムの主原料はポリマーと補強フィラー。フィラーにはシリカ(二酸化ケイ素)が使われる。ポリマーとシリカは結合材を使って結合させており、この構造がゴムの物性や強度を左右する。
(提供:住友ゴム工業株式会社)

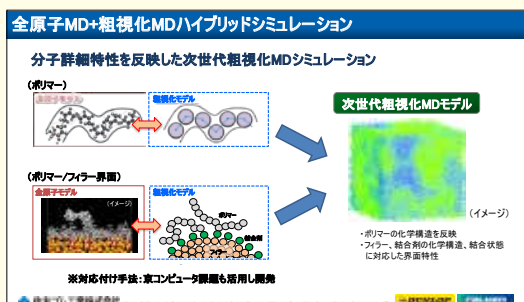


図2 ポスト「京」では、既存の「粗視化分子動力学シミュレーション」と「全原子シミュレーション」をリンクさせ、「次世代粗視化分子動力学シミュレーション」を構築することで、ナノメートルレベルからミリメートルレベルまでの材料の構造と運動特性、物理特性との関係の解明を図る。
(提供:住友ゴム工業株式会社)

鬼頭 周

ソフトバンク株式会社 常務執行役員
事業開発統括 ソリューション戦略開発室長

カジュアルな スーパーコンピュータ



いずれ一企業がヨタバイトのデータ量を保有し、 活用していく時代に

本日は、弊社の研究報告ではなく、「京」に対する期待を述べさせていただきます。

私が所属するソフトバンク株式会社は、ソフトバンクグループの日本の子会社です。ソフトバンクグループが買収した会社の1つに、イギリスに本社を置く半導体（プロセッサ）設計大手のArm社があります。現在、弊社ではスーパーコンピュータは扱っていませんが、近い将来、Armのプロセッサがスーパーコンピュータに使われるようになることも見据えています。

2025年には、IoTデバイスは750億台になり、データ量は163兆ギガバイト（ギガは10億）になると予想されます。本日は、このような時代が到来したときに、企業として一体この数字にどうやって向き合っていくべきかについて、お話しします。

私は、企業が勝ち残っていくための条件は、IoTサービスなどを通じて多くのデータを蓄積、保有し、それを賢く利用して、ビジネスサイクルに載せていくことだと考えています。具体例を紹介しますと、我々のグループ会社に、4つのライドシェア会社があります。4社を合わせた1日の乗車回数は約4,500万回、データ量は約8,100テラバイト（テラは1兆）です。年間に換算すると、3エクサバイト（エクサは100京）に及びます。これは自動運転が導入されていない段階の数値であり、自動運転が始まれば、この数値は桁違いに増えると予想されます。

このように、一企業でさえ、エクサバイトのデータ量を扱う時代が来ているわけです。ライドシェア会社だけでもこのデータ量ですから、将来的には、ヨタバイト（ヨタはエクサの106倍、1杼（じょ））の時代が来るのではないかと考えています。つまり、一企業がヨタバイトのデータ量を保有し、シミュレーションやAIを使って、データをうまく活用していかなければいけない時代を迎えるということです。しかし、それに気付いている企業はまだまだ少ないと感じています。

「京」のイメージは「敷居が高い」

エクサバイトといった膨大な量のデータを処理し、その中から、価値あるデータを抽出するには、高い計算能力が必要です。しかし、我々には「京」という強い味方がいます。ところが、50人の私の友人のCIOやエンジニアに、「京」に対するイメージを聞いてみたところ、次のような意見をいただきました（図1）。なかには事実と違うこともありますが、「イメージ」としてそのまま掲載しています。「民間では使えないんでしょ？」「抽選ででしょ？」「（高度なチューニングが必要なので）面倒くさい」「敷居が高い」「国家プロジェクト用でしょ？」「論文や利用報告書を提出しないといけないんでしょ？」などの意見があがっています。

カジュアルでオープンな スーパーコンピュータ・クラウドの実現に期待

そこで、次に、ポスト「京」に対する期待を述べたいと思います。それは、最先端の技術、最高性能であるのはもちろんのこと、是非、スーパー・コモディティ・コンピュータを実現していただき、一般企業がカジュアルに使えるオープンなスーパーコンピュータ・クラウドを作っていただきたいということです(図2)。現在の「京」は、高級なスポーツカーをごく一部の限られた人たちが乗り回しているといったイメージです。しかし、今後は、「京」およびポスト「京」の技術を民営化して、誰でも気軽に運転できるカジュアルな“軽(京)自動車”にしていきたいと思います。スーパーコンピュータがカジュアルになることで、スーパーコンピュータへのイメージは、大きく変わっていくと私は思います。

もう1点、実現していただきたいのが、利用する企業数が最も多いスーパーコンピュータにしてほしいということです。そのためには、利用料金を安くする、チューニングなど面倒な処理をなくして、敷居を低くするなどの施策が必要かと思っています。我々企業は、直面している課題を、計算科学を使って解決し、迅速に次の一手を打っていかねばなりません。スーパーコンピュータをカジュアルなものにしていくことで、企業の製品やサービスが向上し、日本のGDPも増えるはずです。

ソフトバンクグループとしては、今後、自動車自身がIoT化していく中、自動車に搭載されたセンサーなどによって蓄積されたビッグデータを、スマートシティの実現のために活かしていく計画です。そのためにも、是非、ポスト「京」には、カジュアルなスーパーコンピュータを目指していただきたいと願っています。

【質疑応答】

Q: HPCwire Japanの者です。ポスト「京」モデルのスパコンはいずれ外販されると思うのですが、御社が購入し、クラウドサービスとして提供されるご予定はありますか。

A: 今ここで即答することはできませんが、ライドシェア分野だけでなく、ヘルスケア分野など様々な業種の企業にとって、今後スーパーコンピュータは欠かせないものになっていくと予想されます。そのため、今よりも気軽にスーパーコンピュータを利用できる環境を整えることは重要です。そこに弊社が貢献できればよいなとは思っています。

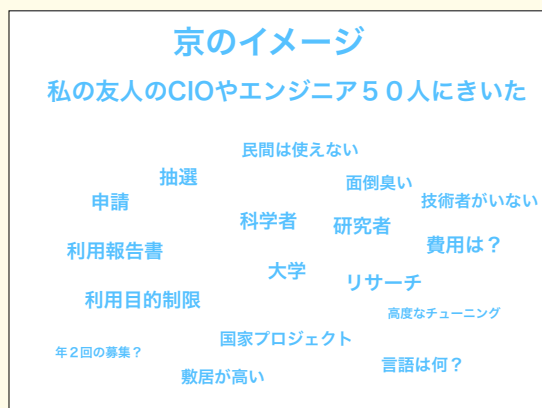


図1 鬼頭氏の周囲のCIOやエンジニアへのヒアリング結果より。「京」は「敷居が高い」「民間は使えない」といったイメージを持たれているという結果に。実際には、課題申請などの手続きにより、民間でも広く使用可能である。

ポスト京への期待

最先端の技術を
一般企業でもカジュアルに使えるオープンな

Supercomputer Cloud

京の技術の民営化

世界で一番早く一番利用企業の多いスパコン

企業の製品、サービスの競争力↑

日本のGDP ↑

図2 鬼頭氏は、一民間企業からの期待として、ポスト「京」では、最先端の技術でありながら、一般企業がカジュアルに使えるオープンなスーパーコンピュータ・クラウドとして提供してほしいと提案。

辻井 潤一 産業技術総合研究所人工知能研究センター センター長



人工知能とシミュレーション

AIにおける3つの手法の融合が重要

産業科学総合研究所・人工知能研究センター(AIRC)では、人工知能(AI)の研究に取り組んでいます。近年、スーパーコンピュータとAIという2分野が急速に融合してきています。今回はAIの研究者という立場から、現在の状況と今後の方向性についてお話しします。

AIとは一種のモデリングであるということが出来ます。AIにおけるモデリングの手法には、3つの技術的な柱があります。1つ目は機械学習や深層学習です。これは、データに基づき対象をモデリングするというものです。2つ目は人間の論理や知識をコンピュータに移植し、それを基にモデリングするというものです。1980年代、第二次AIブームが起こった際に盛んに研究された手法です。そして、3つ目はシミュレーションです。これは対象に対する基本的な原理を理解し、コンピュータ上で再現するというものです。当初はAI分野から少し離れたところにありましたが、現在、AIの研究者は、AIとシミュレーションとの融合の重要性に気付き始めています。

現在起こっている第三次AIブームの背景には、IoTなどによるビッグデータの蓄積があります。これまでは、人間の知識に基づくモデリングが盛んに試みられてきましたが、なかなかうまくいかない中、データを基に現実社会をモデリングすればよいのではないかという発想が生まれました。その結果、AI分野はデータ・オリエンティッドな手法に大きくシフトしてきました。このように、AIはビッグデータ解析に始まり、今では、データに基づき、判断から予測、行動までを行う自律的なシステムとして、我々の生活に変革をもたらし始めています。しかもこの変革は、サイバー空間を飛び出し、医療診断や自動運転、製造現場のロボットなど物理空間へと広がってきています。今後、AIは、Society5.0において重要な役割を担っていくことになるでしょう。

しかし、課題も浮上してきています。たとえば、医療分野の場合、データ解析から、ある結果が導き出されたとしても、その根拠や理由を人にわかるように説明できなければ、利用することはできません。したがって、人の知識とデータをうまくリンクさせて、“説明可能なAI”を実現することが強く求められ始めているのです。シミュレーションに関しても同様です。現在は、人間が対象を合理的に理解し、それに基づきモデリングしていますが、理解には限界があります。それに対し、シミュレーションとデータを融合させることで、データの説明性を高めたり、人間の理解を補ったりでき、シミュレーションの精度を高めることができます。したがって、今後、AIにおける3つの技術的な柱を融合させていくことが不可欠です。

シミュレーションとAIの融合により シミュレーションの予測精度を向上

しかし、日本にはオープンなAI専用の計算インフラがなかったことから、東京大学柏キャンパスに、人工知能用コンピュータ(ABCI)を設置し、2018年8月から運用を開始しました。現在、ABCIでは、膨大な画像データから深層学習モデルを構築するなどビッグデータを使ったAI研究を進めています。具体例を紹介しましょう。1つに、人の流れをトラッキングし、そのデータを基に、歩行をシミュレーションするというものがあります。これにより、たとえば、建物内で

火災が発生した際、人がどのように行動するかなどを予測できます。それにより、最適な避難誘導や建物の設計に役立てることが可能となります。

しかし、予測精度を高めるには、より多くのデータが不可欠です。また、取得できるデータの量や質によって精度にはばらつきが生じます。特に、稀にしか発生しない場合のデータは取得するのが困難です。たとえば、自動運転の研究では、自動車の前に人が急に飛び出してくる場合のデータはなかなか取得できません。そこで、AIRCはNECと共同で「人工知能連携研究室」を立ち上げました。現在、同研究室では、実際に得ることがむずかしいデータに関しては、シミュレーションと機械学習を統合し、それによって得られたデータを基に、シミュレーションの精度を高めるという研究を行っています。加えて、データと知識の融合にも取り組んでいます(図1)。この研究は、今後のAIの大きな流れになると考えられます。

具体例を紹介します。創薬の分野では、薬となる化合物とタンパク質との結合を見る必要があります。そのため、以前からシミュレーションが活用されてきましたが、タンパク質とそれに結合する化合物の三次元構造のモデル化やシミュレーションには、多くの時間と労力が必要です。それに対し、これまでの実験結果に基づき構築されてきたタンパク質と化合物の結合に関するデータベースを機械学習させることで、より少ない計算量で、しかも予想外の化合物を発見できるようになってきました。

人間の知識、計算科学、データ科学の相補関係が 計算による科学をドライブしていく

最後に、「計算科学(computational science)から計算による科学(science by computation)へ」というお話をします。これまでスーパーコンピュータは、シミュレーション手法による計算科学を扱ってきましたが、今後は、それに加え、データを基にモデリングを行うデータ・オリエンティッドな手法を併用することになります。

シミュレーションの場合、対象に対する基本的な原理への理解が低ければ、高い精度で計算結果を出すことはできません。一方、データ・オリエンティッドの場合、基本的な原理への理解がなくても、大量のデータに基づきモデリングすることができます。しかし、それに必要なデータを全て取得することはできません。それぞれ限界があるのです。そこで求められるのが、人間の知識です。

したがって、今後、計算による科学は、シミュレーションによるモデリング手法、データに基づくモデリング手法、そして、人間の知識の三者が融合し、三位一体となって発展していくものと予想されます(図2)。そして、この三者を統合しパワフルに扱える能力が、まさに次世代のスーパーコンピュータに求められていることです。AIRCがポスト「京」に大きな期待を寄せている理由はここにあります。

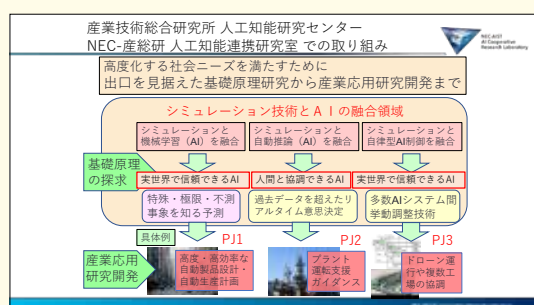


図1 NECとAIRCは、AIとシミュレーションの融合に向け「人工知能連携研究室」を設置。

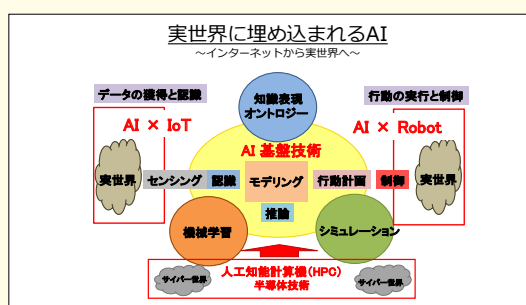


図2 今後「計算による科学」は、人間の知識、シミュレーションによるモデリング手法、データに基づくモデリング手法の3つが融合し相補関係を築くことによって発展していくと予想される。

松岡 聡 理化学研究所計算科学研究センター センター長

次世代高性能 Armプロセッサによる HPCとAIの統合



ゲームチェンジャーとして期待されるポスト「京」

理化学研究所計算科学研究センターは、「計算の科学」と「計算による科学」の両面を推進している拠点です。前者の「計算の科学」では、「京」やポスト「京」を支えるプログラミング手法、ビッグデータやAIに対応する手法など、高性能計算に関する研究を推進しています。また、後者の「計算による科学」では、生命科学、工学、気象・気候、防災・減災など我々の生活に直結する課題に対し、「京」やポスト「京」を用いて、基礎研究と応用研究を推進しています。そして、これら両者の融合を図ることで、世界トップレベルの国際的な「計算のための科学」の知の拠点としての確立を目指しています。両者の融合とは、システムとアプリケーションの協調的な開発手法であり、これを「コ・デザイン」と呼んでいます。

ポスト「京」は、「京」で得られた多くの成果を基に、さらなる高性能、高速、大規模な計算を実現するマシンです。最大で「京」の100倍以上のアプリケーション実効速度があります。しかも、「京」が成し得なかったイノベーションを数多く達成していくマシンでもあります。それは、コ・デザインに成功しているからです(図1)。通常コ・デザインを汎用マシンで実現するのは容易なことではありません。しかし、ポスト「京」では、開発の最初の段階から、非常に幅広い汎用アプリケーションを対象に、コ・デザインを推進してきました。加えて、AIの隆盛にも見事に追従してきました。したがって、今後、ポスト「京」は、スーパーコンピューティングに留まらず、ITやクラウドコンピューティング、AIといった分野において、ゲームチェンジをもたらすと私は確信しています(図2)。

最高の性能と最高の使いやすさを兼ね備えたポスト「京」

ポスト「京」向けに富士通と一緒に開発したCPU「A64FX」は、現在、最も高性能な機種の何倍もの性能を発揮します。しかも、世界トップクラスの低消費電力で、電力性能は従来の6、7倍です。A64FXは、Arm社のプロセッサを世界で初めてスーパーコンピュータ向けに採用したCPUです。Arm社のプロセッサは年間30億個も生産されており、エコシステムを形成しています。クラウドにも展開が容易です。Society5.0のアプリケーションへの展開も期待されます。今後、ポスト「京」の技術が他のスーパーコンピュータにも広く搭載され、クラウドで提供されることにより、世界を席巻していくことでしょう。

現在、スーパーコンピュータにおいては、CPUのデータを動かす帯域が、性能を決める大きな要因になっています。その点で、ポスト「京」のプロセッサの特徴は、データを動かす力が従来に比べて10倍近くも強いことです。しかも、それをWindowsでも動くようなCPUで実現したことは注目に値します。深層学習などは従来の処理速度の約10倍となります。加えて、世界で群を抜いて速いネットワークが、外付けではなくチップに内蔵されています。

また、我々はより多くの企業がポスト「京」を利用しやすいことを主眼におき、研究開発を進めてきました。ポスト「京」の技術が普及し、様々なアプリケーションが開発されて稼働すれば、日本全体に大きな利益をもたらすことになるでしょう。これが実現すれば、このプロジェクトは、大成功であると私は考えています。

米国の著名な調査会社(Hyperion Research社)の調査によれば、世界中のHPCの中で、ポスト「京」は最高の性能かつ最高の使いやすさであるという評価を得ています。これは、Armのエコシステムを重要視し、同社のプロセッサを採用したことによる成果です。

ポスト「京」により、 シミュレーションとAIの融合は新たなステージへ

最後に、AIとHPCの融合についてお話しします。

近年、AIが復興を遂げました。その要因の1つに、膨大なデータの蓄積とそれを処理できる計算能力をもつHPCの存在があります。

世界では、今まさにAIの高性能化において熾烈な戦いが繰り広げられています。この領域における覇権はシミュレーションと同等かそれ以上に重要です。ところが日本には、AIに関するインフラがないことに気づき、産業技術総合研究所、東京大学と協力して、東大柏キャンパスに、ABCI(AI Bridging Cloud Infrastructure)を創設しました。これは、世界トップレベルの計算処理能力とデータ処理能力をもつオープンなAI専用の計算インフラで、2018年8月より運用を開始しています。

現在、ABCIで得られたさまざまな成果を、ポスト「京」に活かしていけるよう、企業と共同で研究開発を進めているところです。開発中のCPUに、AIに対応する要素を入れたことで、最先端のGPUと同等の深層学習などに関する処理速度を実現します。また、来年度は、AIに関するソフトウェア基盤を作り上げる計画です。ポスト「京」の稼働により、シミュレーションとAIの融合は新たなステージを迎えます。HPCはオープンなインフラの中で、オープンな開発が行われ、オープンにシェアリングされたことで成功しました。AIもそうでなければなりません。ポスト「京」はまさにそれを目指しています。

【質疑応答】

Q: ソフトバンクの鬼頭です。最初に松岡センター長のお話を伺っていたら、私の講演は不要だったのではないかと(笑)。

A: スーパーコンピュータを作る側がいくら主張しても説得力はありません。やはり企業の方々からの切なる要望があるということを踏まえた上で、社会のニーズに合致した目標であるということを伝えることが大切だと思っておりますので、鬼頭様のご講演は大変参考になりました。

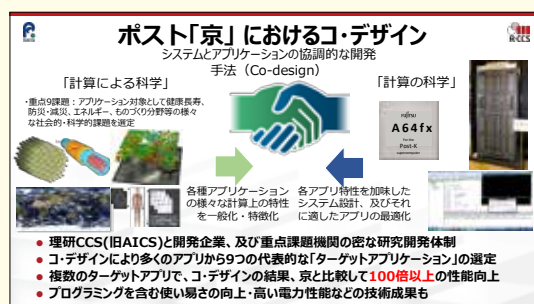


図1 理化学研究所計算科学研究センターは「計算の科学」と「計算による科学」の両面を推進している拠点で、両者の融合を図った「コ・デザイン」を重要視している。
(総合科学技術・イノベーション会議 第126回評価専門調査会資料より)

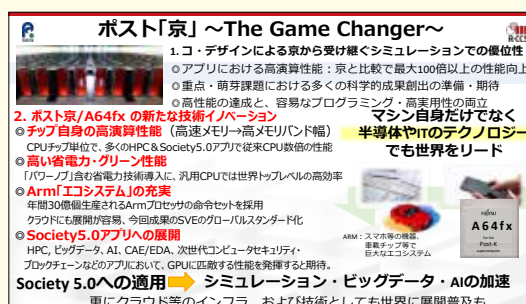


図2 Society 5.0に向け、ポスト「京」による新たな技術イノベーションがゲームチェンジをもたらすことが期待される。

まとめ Summary

ポスト「京」ではシミュレーション科学と データ科学の融合によるさらなる発展に期待

情報技術(IT)はこの30～40年の間で、我々の生活に大きな変革をもたらしてきました。ITの最たるものが、スーパーコンピュータです。今やスーパーコンピュータなしには自動車も医薬品も作ることはできませんし、天気予報も不可能です。内閣府が掲げる「Society5.0」の実現にも、スーパーコンピュータが不可欠です。

2012年9月に本格運用を開始した「京」は、基礎研究から産業応用まで数多くの成果を創出してきました。今回のシンポジウムでは産業応用の例として、阪神高速道路株式会社様の「京」を用いた精密なシミュレーションによる高速道路の防災・減災対策の事例や、住友ゴム工業株式会社様のSPring-8、J-PARC、「京」を連携活用させた高度なシミュレーション解析による低燃費タイヤの開発事例などを紹介していただきました。

加えて近年、IoTの発展や自動運転などの新たな技術の登場により、膨大な量のデータが蓄積され続けています。それに伴い、機械学習や深層学習といった人工知能(AI)の手法を用いて有用な情報を抽出したり、様々な予測に役立てたりしようという動きが活発化しています。いわゆるデータ科学と呼ばれる分野です。

これまでスーパーコンピュータはシミュレーション科学が中心でした。しかし今後、スーパーコンピュータの利用の主要な柱は、シミュレーション科学とデータ科学に2本化されていくものと思われます。

そのため、2021年頃の本格稼働に向け、現在開発中のポスト「京」では、最大で「京」の約100倍のアプリケーション実効速度という強力なパワーをフルに活かし、シミュレーション科学とデータ科学の融合を果たすことで、特に我々の生活にとって重要な健康分野、医療分野、防災・減災分野、運輸分野、経済分野において、さらなる成果の創出と研究の発展を目指して参ります。

広く産業界で利用される、 ユーザー視点に立ったスーパーコンピュータへ

今後、理化学研究所計算科学研究センターと高度情報科学技術研究機構は、「京」に続いてポスト「京」においても非常に大きな役割と責任を担っていきます。そのため、幅広い分野に対して貢献していくと同時に、ポスト「京」の研究開発を通して培った半導体技術をさらに磨いて参ります。世界最高レベルの性能、使い勝手のよいチップを開発して、鬼頭周氏の講演にあったように、それが世界中で使われることによって、日本の半導体技術の復興につながるとも考えています。

また、基礎研究も大変重要ですが、オープンなインフラとして広く産業界で利用されることで、国民生活を豊かなものにし、それにより、さらに日本の産業力が高まっていくという好循環を作ることも重要です。人口が減少する中であっても、日本が経済大国を維持し、国民生活の改善につながられるよう、ポスト「京」においてもユーザー視点を忘れずに、今後も精進して参ります。

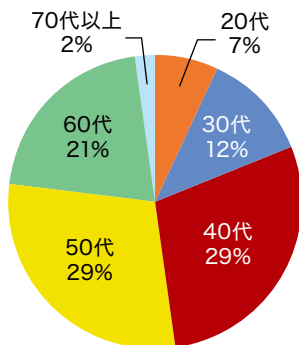
アンケート結果(抜粋)

京×ポスト京シンポジウム ～シミュレーション・AI・ビッグデータ～

※148名中103名から回答いただきました。ご協力ありがとうございました。

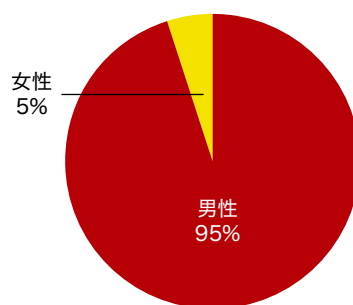
1 参加者の年齢層

10代以下	0名
20代	7名
30代	12名
40代	30名
50代	30名
60代	22名
70代以上	2名



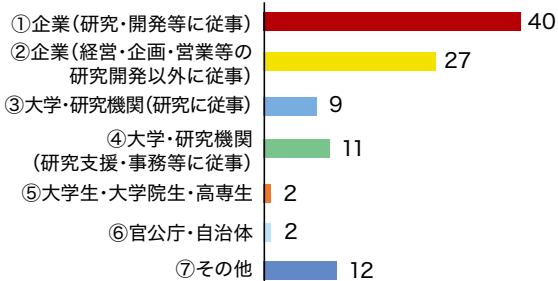
2 性別

男性	98名
女性	5名

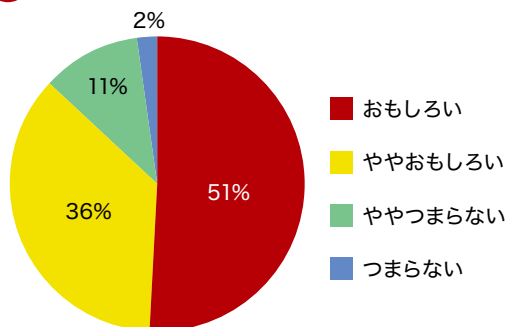


3 職業

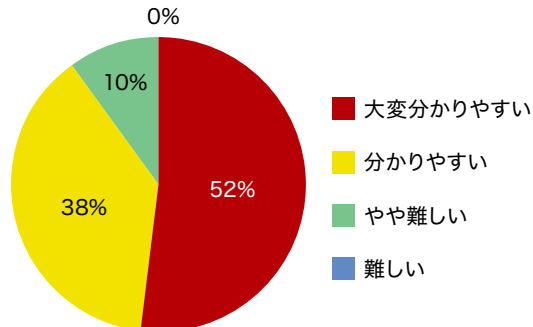
①企業(研究・開発等に従事)	40名
②企業(経営・企画・営業等の研究開発以外に従事)	27名
③大学・研究機関(研究に従事)	9名
④大学・研究機関(研究支援・事務等に従事)	11名
⑤大学生・大学院生・高専生	2名
⑥官公庁・自治体	2名
⑦その他	12名



4 講演内容について(全体)



講演のおもしろさ



講演のわかりやすさ



国立研究開発法人 理化学研究所計算科学研究センター
〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26
TEL: 078-940-5555(大代表) FAX: 078-304-4956
E-mail: r-ccs-koho@ml.riken.jp
ホームページ: <https://www.r-ccs.riken.jp/jp/>



一般財団法人 高度情報科学研究機構
〒650-004 兵庫県神戸市中央区港島南町1-5-2
TEL: 078-599-9511 FAX: 078-599-9512
E-mail: pr@rist.or.jp
ホームページ: <http://www.hpci-office.jp/>

京×ポスト京シンポジウム報告書

編集協力: 株式会社アテナ・ブレインズ 執筆協力: 山田久美
無断での転載・複写を禁じます。