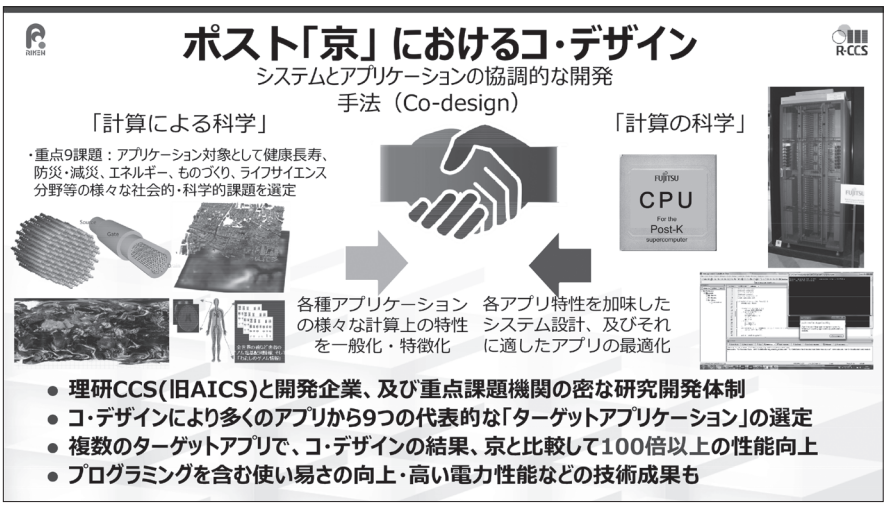
招待講演 2

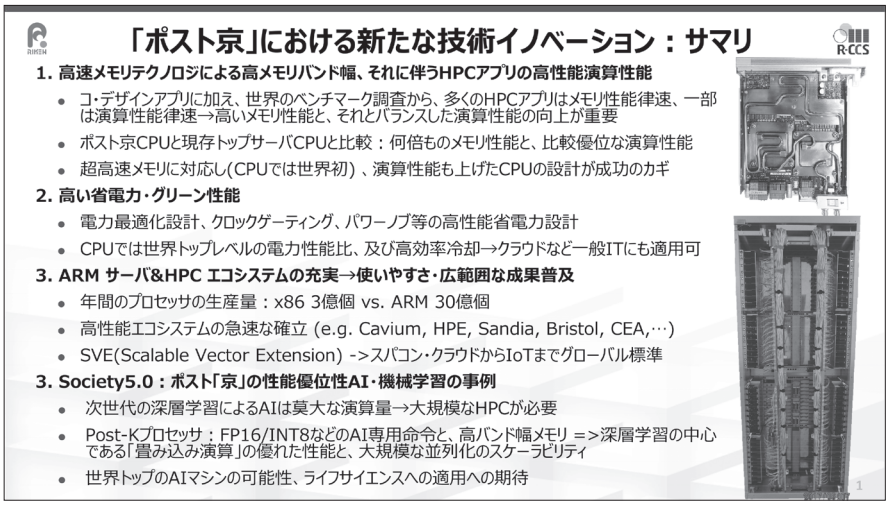
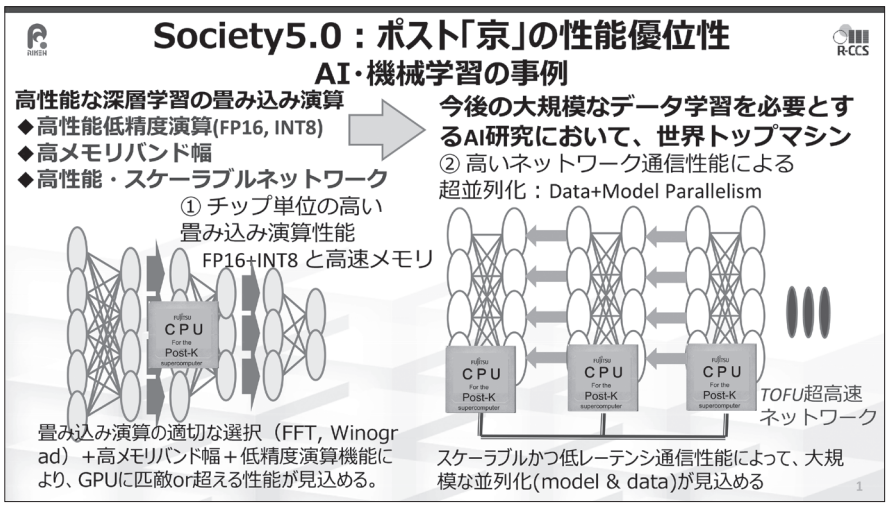
大規模スパコンにおける HPCとビッグデータ・AIの統合

松岡 聡
理化学研究所計算科学研究センター センター長

フラッグシップ2020「ポスト京」は我が国の次世代のトップスパコンとして、様々なアプリケーション分野とのコ・デザインにより高性能計算に特化しつつ汎用性を両立させる形で開発が進んでいる。その中心となるCPUであるA64fxは、2018年時点で既に最初のチップがテスト製造されているが、ARM v8の標準命令セットや他の標準に全て準拠する形でLinuxやWindowsなどの標準OSが動作する一方、HPCワークロードに特化することによって従来型のCPUと比較して数倍の性能を極めて低い電力で実現している。A64fxはCPUとしてはトップクラスの演算性能(FLOPS)を誇るものの、その一番の特徴はそれでなく、その高いバンド幅(BYTES)にある。メモリバンド幅は1 TByte ／秒と、通常のCPUの10倍近く、ハイエンドGPUと同等のメモリバンド幅である。ネットワークもインジェクションバンド幅が40 GByte/秒と、通常のクラスタ計算機の数倍の性能がある。また、個々のCPUコアは弱いコアではなく、ハイエンドのCPUのもので、それがチップあたり48コア存在し、高いスレッド性能とそのチップ内並列処理で、ライフサイエンスに重要なインデクス処理などで高い



性能を示す。「ポスト京」を単に「京」の延長線上にあるマシンとみなすのは大きな誤解であり、その良好な性質を受け継ぎながら、個々のプロセッサの世界トップの性能指標やあらたな分野への展開、エコシステムへの訴求により、従来のスパコンとは一線を画す、革新的なマシンであるといえる。

「ポスト京」は、CPUでありながらGPUのような性能を示すA64fxを超高速なTOFUネットワークを用いて10万ノード以上集積したものであるが、その性質上、ライフサイエンス系のアプリケーションに革新的な性能向上をもたらす可能性が高い。メモリとネットワークにおける高いバンド幅と低いレーテンシおよび並列性、更に高いシングルスレッド性能により、多くのゲノム系のアプリケーションは大変高い性能を発揮することが期待される。MO, MDなどの分子シミュレーションなども、GPUに匹敵する性能を発揮し、かつ非常に大規模までスケールする。更に、FP16, INT8などの機械学習用低精度演算命令、高いバンド幅によって、深層学習性能はGPUのそれに迫り、それによって医療画像解析や創薬のたんぱく質などの構造予測などの分野において複雑な経験的手法の適用の大幅な加速が期待される。これらの高性能は、特殊なソフトウェア環境が必要されることなく、ArmプロセッサのXeonに匹敵するソフトウェアエコシステムとの互換性により、従来のXeon向けの標準的なツールチェーンがほぼそのまま動作する事が数多く報告されている。

このように、「ポスト京」はライフサイエンスにおいて多大なる活躍が期待されるだけでなく、その高性能・汎用性によって、その派生品が多くのスパコン、クラスタ、ワークステーション、クラウドに浸透し、我が国ひいては世界のライフサイエンスを含む多くの分野の隆盛に貢献するであろう。本講演では、これらの技術的な詳細と、ライフサイエンスの適用への可能性について紹介する。