はじめに

2018 年 8 月 28 日，汐留シティセンター24 階大会議室にて SS 研 HPC フォーラム 2018 が開催された．まず，企画委員の田中輝雄氏から「次世代 HPC の息吹き」と題した本フォーラムの開催趣旨説明が行われた．

本フォーラムでは量子アニーリング，スパコンの医療応用と工学設計，全脳シミュレーション，ポスト京コンピュータの CPU アーキテクチャ，など次世代 HPC で重要になるハードウェアとその応用技術について 5 件の講演が行われた．参加者は 162 名で全体として熱い議論が行われた．

#「量子アニーリングや周辺技術の現状と展望　組合せ最適化処理の高速化・高精度化を目指して」
田中　宗（早稲田大学）

最初に，早稲田大学の田中　宗氏による量子アニーリング技術についての講演があった．まずはじめに，組合せ最適化処理の例として，配送計画などの例が紹介された．組合せ最適化処理は，社会における様々なところに内在していることが説明され，その上で，量子アニーリング技術について紹介された．

量子アニーリングは，組合せ最適化処理を実行する手法であること，また量子アニーリング技術で用いられる，量子ビットは 0 であるビット状態と 1 であるビット状態の重ね合わせが実現できること，量子ゆらぎを徐々に弱め，組合せ最適化処理を自然計算で実行することが紹介された．量子アニーリングを使うためには，問題をイジングモデルという，スピン（ビット）の向きと全体のエネルギーの関係式で定式化する．量子アニーリングを実現するハードウェアでは，まず，この定式化を元に，量子ビット間の結合係数や局所磁場の係数を設定し，次に，量子ゆらぎを徐々に弱める効果を導入する．それによって最終的に得られた各場所でのスピンの向きを結果として出力できる装置となっている．

イジングモデルは相転移を表現できる最も簡単な式であるそうで，スピン同士の相互の影響を表現する 2 次の項とそれぞれのスピンに個別に影響を与える 1 次の項がある．講演では，グラフを均等に 2 分割して境界上の枝の本数を最小化する問題をイジングモデルで表現する例が紹介されていた．

様々な問題でイジングモデルでの表現形式が研究されており，現状でイジングモデルで表現できる問題として知られているものについての参考文献なども紹介されていた．

次に量子アニーリングの成長性について説明があった．
D-Wave Systems による量子アニーリングマシンでは，マシンが保持している量子ビット数が 2 年で倍のペースで増大している，とのことだった．今後このペースが維持されるならば，ますます大規模な問題にも適用できるようになっていくと期待されている．

上記の扱える量子ビットの数であるが，これは量子ビット間の結合が疎結合であることに注意しなければならない．密結合のネットワークで表現されるような問題に対しては，マシン上で擬似的に密結合を実現する必要がある．そのため，マシンで対応できる問題のビット数は単純にビット数で比較するのではなく，ネットワーク構造も含めて考慮しなければならない．疎結合のマシンの場合，およそ平方根を取ったときのビット数が密結合問題のビット数に相当するという説明もあった．

最後に，量子アニーリングに関連する研究事例の紹介がされた．
まず田中氏が複数の企業と共同研究を行った量子アニーリングを機械学習へ応用した事例からはじまり，量子アニーリングシステムをハード，ソフト，アプリという観点からまとめて作っていくプロジェクト，さらに，関連する計算技術の例として，富士通のデジタルアニーラが紹介された．田中氏は富士通研究所との共同研究をすでに実施しており，利用シーンの検討を行っている．

量子アニーリングや関連技術はいま，性能を大幅に高めるための研究開発が行われているところである．現状での性能だけでなく，将来の成長を踏まえ，組合せ最適化処理を高速に実行することができるときのインパクトに注目し，中長期的視点で捉えていく必要があるかもしれない．

#「スパコンで暴き出すがんの複雑さ」宮野　悟（東京大学）

2 番目の講演は東京大学の宮野　悟氏によるスパコンでのがんに関連する研究がテーマとなっていた．

はじめに，がんと DNA との関係や，DNA 情報の求め方について紹介がされた．
具体的には，人は受精卵の単細胞から大人になる 37 兆個の細胞になるまで DNA はコピーをくりかえされるため，途中で DNA のコピーにエラーが混じり込んでしまう場合がある．これが，がんの原因になる，とのことだった．DNA のコピーが失敗しても，それを修復する機能が備わっており，通常は問題ないが，この修復に関わる遺伝子がうまく働かないとがんになりやすくなる．例えば，BRCA1 という遺伝子はこのエラーの修復に関わっており，この遺伝子が機能しない場合は，細胞分裂が盛んな乳腺や前立腺などで DNA の修復が効かなくなり，がんになりやすい傾向がある，とのことだった．

このため自分の DNA 情報も調べたくなるが，現代では 600 ドル程度で DNA 情報の入手できるということであった．ただ，DNA 情報をあきらかにするには，細かい分断された DNA 情報を組合せていく処理が必要になり，スパコンを使って DNA 情報全体をつなぎ合わせるために一人あたり 2 時間くらいかかる，ということも説明されていた．

次に，研究事例として，まず Genomon という遺伝子の構造異常を検知するスパコン上のソ

フトウェアを用いた研究が紹介された．具体的には，成人 T 細胞悪性リンパ腫（ATL）に対する研究で，40 名以上の患者の全ゲノムシーケンスなどを行い，遺伝子の構造異常を見つけ，これらの構造異常と ATL との関係を分析した研究であった．その中で，タンパク質をコードしていない DNA 領域の構造異常が原因で，PD-L1 というタンパク質が異常に作られ，そのために免疫細胞（T 細胞）が がん細胞を殺さなくなっていたことが分かった．また，おなじ原因によるものは複数種類のがんでも観察された，とのことであった．

さらに遺伝子ネットワークに関連する研究も紹介された．
全遺伝子の発現量がどのように変化したかは計測することができ，さらに特定の遺伝子の発現を抑えるなどの摂動をあたえることによって，遺伝子間の関係（ネットワーク）を構築することができる．抗がん剤が効くがん細胞の遺伝子ネットワークと抗がん剤が効かないものの遺伝子ネットワークを作成し，比較することで，その抗がん剤が効くかどうかの鍵となる遺伝子を明らかにした研究が紹介された．

最後に MYC と呼ばれるがん遺伝子についての研究が紹介された．
これまで 2 万本以上の論文に参照され注目されている遺伝子だが，京を用いて世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析を行うことで，MYC を操っているロングノンコーディング RNA を世界で初めて突き止めた，とのことであった．

宮野先生を中心に多くの医学的な研究成果がでているが，その中でスーパーコンピュータが必須の研究ツールになっていることが分かる講演内容であった．

計算知能と工学設計（多目的設計探査の考え方）大林　茂（東北大学）

3 番目は多目的設計探査技術に関する講演で東北大学の大林　茂氏が発表された．

まずはじめに，ナビエストークス方程式に基づいた数値シミュレーションと計算知能（CI：computational intelligence）について紹介があった．CI とはニューラルネットワークや進化計算（遺伝的アルゴリズム）といった，ヒューリスティックアルゴリズムを中心とする研究分野である．

次にこれらの技術を多目的設計探査のために用いて三菱リージョナルジェット（MRJ）の設計が行われたことが紹介された．まず，航空機設計には，空気力学，推進力学，構造力学，それぞれが許す妥協解を探すことが必要となる．つまり複数の目的関数がある複合最適化が必要となる．従来はこれに対し，それぞれの性能指標の影響度などをベースに一つの目的関数に統合化され，それにより改善の方向を決め，最適化していた．しかし，この性能指標の統合化方法によりどんな航空機設計になるかが，決まってしまう．そして，それがどんな設計になるのかあらかじめ分からない，という問題があった．

一般に目的関数が複数あるときには，パレート最適解と言われる，他の解よりも性能指標が劣っていない解の集合を求めることができる．遺伝的アルゴリズムなどの進化計算を使うと，一度に多数のパレート解が得られる．このパレート最適解の集合は，設計空間を特徴づける構造となっている．多次元データである設計空間の構造を可視化するため，ニューラル

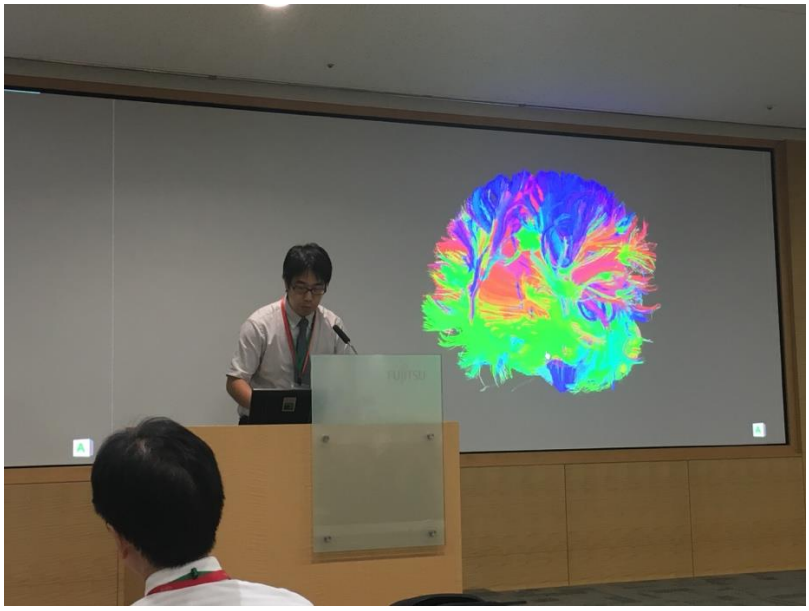
ネットの一種である自己組織化マップを使う．最適化の過程で得られた設計案（性能指標）を仮想的なデータベースとして自己組織化マップに学習させ，類似設計案が近くに配置されるような 2 次元マップを作成する．そのマップ上で全ての性能指標を可視化してみることで，性能指標のトレードオフに考慮しながら，より良い設計案を選択できる．

具体的に MRJ での主翼の最大厚みの場所など，30 個の設計変数と 3 つの目的関数が紹介され，設計空間を自己組織化マップで 2 次元化し，それぞれの性能指標をその上に表示し，MRJ の設計に利用された例が紹介された．他にも洗濯乾燥機における，風量は大きく，音は小さく，という目的にかなう設計をするための多目的最適化の例も紹介された．

この多目的最適化の手法により，設計空間の構造化と可視化がなされるため，設計者にとっては新しい仮説を考えさせるツールとして役立つことが説明された．最後にダブルループ学習という，本手法により注目領域をさだめ，さらに設計変数と性能の関係から新しいよりよい目的関数をつくるためにフィードバックをすることもされている，との説明があった．

多目的設計探査は多くの工学的設計問題で必須の技術であり，様々な設計ですでに本研究が利用されていることからも，非常に実用性の高いことが感じられる講演内容であった．設計者にあらたな仮設を考えさせるサポートをする，とのことであったが，応用できる分野は広く，今後の展開も期待したい．

- 全脳シミュレーションに向けた京による大脳皮質ー視床ー小脳の神経回路シミュレーション
理化学研究所　五十嵐　潤



4 番目の発表は，理化学研究所の五十嵐　潤氏による京コンピュータによる全脳シミュレーションに関する講演があった．

はじめに，脳は 860 億個の細胞からなり，神経細胞をつなぐ結合の数は 100 兆個以上となることから，とても複雑な構造物であることが紹介され，次に脳の仕組みを解明するため行われている研究が紹介された．一つ目は，京コンピュータを使った，パーキンソン病の腕の震えを再現する研究についてであった．この病気になるとドーパミンがなくなるため，脳の中でドーパミンがなくなったときのシミュレーションを行い，腕が一定周期で震えることが再現できた．また別の研究では京コンピュータを使い，17 億個の神経細胞と 10 兆個のシナプスがシミュレーションできたこと，さらに PEZY の暁光を使った研究では，80 億個の神経細胞のリアルタイムシミュレーションを行い，視機性眼球反応の再現に成功したことなどが紹介された．

これらの研究を踏まえて，全脳シミュレーションを目指すプロジェクトが紹介された．
まず一つの目標は全脳モデルを構築し，シミュレーションができることである．その上で完成度を高めて行き，脳の様々な機能の再現を目指していくとのことであった．　特に全脳シミュレーションをすることで，複数の機能が関連する影響の解析もできるようになるため，

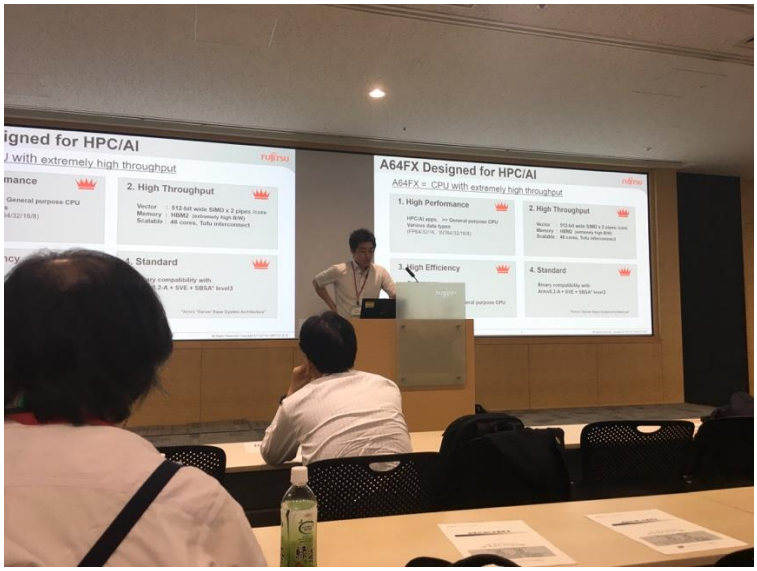
そのような現象の再現などをテーマにしていくと説明された．また例として，うつなどの脳疾患の解明などが挙げあれていた．

またポスト京コンピュータがでてくると，計算規模的にも全脳シミュレーションが実現可能な計算性能になるとのことだった．ひとの全脳シミュレーション実現に向けた取り組みとして，国際的な脳シミュレーター共同開発も進めており，新しいデータ構造を導入したり，allgather から alltoall に変更するなどし，スケーリング性能を改善させる研究開発がおこなわれているそうだ．

次に，現状で得られているシミュレーション結果の様子が紹介され，通信の最適化など様々な対応の結果，大脳小脳ともに良好なウィークスケーリング性能を示しており，互いに連結したシミュレーション結果も良好ということであった．小脳と視床と大脳の連携したシミュレーション結果も紹介されており，全脳シミュレーションの実現性の高さを感じさせる内容であった．

最後に，ポスト京上で実現を目指しているのは，単純な神経モデルを用いた，非実時間実行の全脳シミュレーションであるが，今後神経モデルの詳細度を上げていくとさらに 100 万倍以上計算が必要になることも考えられると説明されていた．このような意味からも次世代 HPC での重要なシミュレーションの一つになると期待される．

- Fujitsu High Performance CPU for the Post-K Computer　吉田 利雄氏



最後の発表は吉田 利雄氏による，ポスト京に搭載される CPU のアーキテクチャ紹介であった．Hot Chips 30 で発表した内容を中心に詳細に説明がされた．

まず設計方針は HPC と Deep Learning が二つとも高性能となるように設計されたとのことであった．主な特徴としては，512 ビットの SIMD 幅で 1 コアに 2 パイプライン動作するようにしており，アシスタントコアを除くとチップあたり 48 コアとなっていた．

チップ内は OS などの動作用にアシスタントコアが 4 つついており，それを含めると 1 チップに 52 コアとなっている．チップ内は ccNUMA 型で接続されており，13core × 4 という接続形態になるそうだ．Hot Chips での発表以降様々なメディアでまとめられているので，詳細はそのような記事や講演資料を参照していただきたい．

講演の中で特に印象に残った項目に絞って下にまとめる．

- 4 operand FMA は，MOV 命令と 3 operand FMA（FMA3 命令）で実現されているが，2 命令で実行されるオーバーヘッドを回避するため，命令デコードの段階で MOV 命令と FMA3 命令が組み合わされて 1 命令として処理されるようになっている．

- L1 データキャッシュの 2 ライン分をまとめて扱うことで，キャッシュラインに align されていない SIMD ロードについても align されているスループットと同等にする工夫が実

現されている.

- 電力の使用状況のモニタやアナライザも搭載され, チップレベルの電力やコアレベルの電力使用分析を可能にしている.

- power knob というインタフェースが用意され，それにより，デコード幅や，使用する実行パイプラインの本数，さらに動作周波数などを調整できるようにし，アプリケーションから電力を最適化できるようにする.

- 信頼性の確保のため，パリティなどのチェッカが様々な場所についており，広い範囲に 1 ビットエラーが起きても，修正可能か検知可能であり，信頼性が高い．実際にチップ上のどこに 1 ビットエラーがおきたときに，修正可能か，検知可能か示されていたが，ほぼチップ全体がカバーされており，かなり信頼性が高い印象を受けた.

現状のベンチマーク結果では，PRIMEHPC FX100 に載っている CPU よりも 2.5 倍以上高速になっており，整数演算では 9 倍以上高速なものあった．ポスト京コンピュータの計画が順調に進んでいることが感じられる講演内容だった.

#おわりに
閉会にあたり, 理化学研究所の今村俊幸氏から本フォーラムの総括と, 講演者, パネリスト, 会場の参加者全員への謝意が述べられた．懇親会には６２名が参加し，講演に関連した内容について活発な情報交換が行われ，大いに盛り上がっていた.