

国立研究開発法人科学技術振興機構  
戦略的創造研究推進事業  
CREST(チーム型研究)  
追跡評価用資料

研究領域

「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」  
(2010年度～2017年度)

研究総括: 佐藤 三久

2024年3月



## 目次

要旨	1
第 1 章 研究領域概要	7
1.1 戦略目標	7
1.2 研究領域の目的	8
1.3 研究総括	8
1.4 領域アドバイザー	9
1.5 研究課題および研究代表者	10
第 2 章 追跡調査	13
2.1 追跡調査について	13
2.1.1 調査の目的	13
2.1.2 調査の対象	13
2.1.3 調査方法	13
2.2 追跡調査結果	15
2.2.1 競争的研究資金等	15
2.2.2 論文	15
2.2.3 特許	17
2.2.4 受賞	18
2.2.5 アウトリーチ活動	18
2.3 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果	19
2.3.1 2010 年度採択課題(1 期)	19
2.3.1.1 櫻井鉄也「ポスト・ペタスケール」に対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発	19
2.3.1.2 建部修見「ポストペタスケールデータインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア」	22
2.3.1.3 中島研吾「自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境」	30
2.3.1.4 堀敦史「メニーコア混在型並列計算機用基盤ソフトウェア」	35
2.3.1.5 丸山直也「高性能・高生産性アプリケーションフレームワークによるポスト・ペタスケール高性能計算の実現」	37
2.3.2 2011 年度採択課題(2 期)	41
2.3.2.1 塩谷隆二「ポストペタスケールシミュレーションのための階層分割型数値解法ライブラリ開発」	41
2.3.2.2 滝沢寛之「進化的アプローチによる超並列複合システム向け開発環境の創出」	47
2.3.2.3 千葉滋「ポスト・ペタスケール時代のスーパーコンピューティング向けソフトウェア開発環境」	53

2.3.2.4 南里豪志「省メモリ技術と動的最適化技術によるスケーラブル通信ライブラリの開発」	56
2.3.2.5 藤澤克樹「ポストペタスケールシステムにおける超大規模グラフ最適化基盤」	62
2.3.3 2012 年度採択課題(3 期)	69
2.3.3.1 遠藤敏夫「ポスト・ペタスケール時代のメモリ階層の深化に対応するソフトウェア技術」	69
2.3.3.2 近藤正章「ポストペタスケールシステムのための電力マネジメントフレームワークの開発」	73
2.3.3.3 野田五十樹「超大並列計算機による社会現象シミュレーションの管理・実行フレームワーク」	76
2.3.3.4 朴泰祐「ポスト・ペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」	84
2.4 戦略目標、戦略研究推進事業や、本 CREST についてのご意見など	90

## 要旨

本報告書は、国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST) 戦略的創造研究推進事業 CREST (チーム型研究) の研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」(2010 年度～2017 年度) について、JST 事業及び事業運営の改善等に資するために、JST にて追跡調査を実施し、その結果をまとめたものである。ここでは、研究領域終了後、一定期間を経過 (5 年) した後の研究成果の発展状況や活用状況、副次的効果をまとめた。

本研究領域は、戦略目標「メニーコア (Many Core)」をはじめとした超並列計算環境に必要となるシステム制御等のための基盤的ソフトウェア技術の創出」の下で設定されたものである。本研究領域では、スーパーコンピュータ「京」の次の世代、あるいはそれ以降のスーパーコンピューティングに資する、システムソフトウェアやアプリケーション開発環境等の基盤技術の創出を目指し研究が行われた。

具体的には、今後多用される、メニーコア化された汎用型プロセッサや専用プロセッサ (GPGPU と呼ばれるものを含む) を用いて構成されるスーパーコンピュータの特徴を活かし、その上で実行されるアプリケーションを高効率・高信頼なものにするシステムソフトウェア、アプリケーション開発支援システム、超大規模データ処理システムソフトウェア等に関する実用を見据えた研究開発を対象とした。

本研究領域では、14 の研究課題が採択された。これらの研究課題は、“システムソフトウェア”、“プログラミング・モデル、言語”、“アプリケーション、数値ライブラリ” の 3 つに分類される。

本研究領域終了後の発展・展開例として、“システムソフトウェア”の研究では以下のものがあつた。

建部は、すばる望遠鏡データを題材とした、広域分散ファイルシステム Gfarm、データ移動を最小とするプロセススケジューラー Pwrake による大規模処理、大規模メタゲノムデータを題材とした、分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF、極端気象予測を題材とした大規模データ解析・機械学習基盤システム、スケーラブルにメタデータ性能を向上させる次世代ストレージアーキテクチャなどについて提案、開発した。これらは、データ取得、効率的ワークフロー、データアクセス最適化を頑強なソフトウェアスタックで実行する大規模データ解析技術である。今後、益々大規模化が進むデータの処理を可能とし幅広い産業でのイノベーションに貢献するものと考えられる。また、筑波大学 計算科学研究センターの異種演算加速スーパーコンピュータ「Pegasus」(2022 年 12 月運用開始) も開発、運用している。

堀は、本研究領域で開発したメニーコア向けタスクモデル PVAS をより実用的にした PiP を開発した。PVAS や PiP と目的を同じとする他ソフトウェアは、専用 OS や新たな言語処理系の導入などの必要性があり、完全にユーザレベルで実装した PiP が導入の容易さ、可搬性という点で優れている。また、本研究領域で開発した MPI プログラム実行中のノード故障時のアプリケーションの実行継続を可能とする ULFM は、MPI への標準規格拡張を織り込み、

アプリケーション試作や応用事例が多数出ており大きな波及を見せている。また、「富岳」を使ったゲリラ豪雨予報についても大きな貢献をした。

南里は、本研究領域で開発した省メモリ通信ライブラリ ACP を応用展開し、他研究者との連携で、プラズマ粒子-流体連成計算、地球磁気圏環境-人工衛星帯電連成物理シミュレーションなど複数の並列アプリケーションを結合可能とする連成計算フレームワーク CoToCoA を開発した。これは、今後、必須となる連成計算構築において、多大な工程数と人的リソースの制約を解消する有用なものである。また、NVDIMM での新たなアイデアのメッセージキューイングシステムを提案、通信性能を落とすことなく、メモリ消費を大幅削減できることを示した。これは、スケーラブルな通信ライブラリを実現する新たな手法で期待が大きいものである。

遠藤は、数値計算において幅広く応用されるステンシル計算の実装に、ドメイン特化言語 Halide を適用することを新たに提案、計算スケジュールの簡略化を行いつつステンシル計算の高性能化に成功した。また、グラフ解析の重要カーネルである APSP のワーシャル-フロイドアルゴリズムを題材に、SIMD とマルチコアを考慮した Cache-Oblivious の再帰的実装による高性能化アルゴリズムを提案した。この提案は、より不規則な構造を持つグラフ問題や、ディープラーニング、機械学習のカーネルなど、幅広い分野のアプリケーションに展開可能である。

近藤は、「富岳」の次の世代の高性能計算機システム開発の中心的な役割を果たしている。ニューロモーフィック計算、様々な演算加速機構と融合可能なアーキテクチャ、機械学習の計算加速や、量子、古典計算のハイブリッドな計算機アーキテクチャ、アルゴリズムなど、「京」、「富岳」上でのコ・デザイン評価を主軸に研究を実施した。また、自ら NGACI を設立し「京」、「富岳」をベースとしつつ、その改良を含むソフト、ハードウェアで構成される次世代高性能計算機アーキテクチャについて、我が国の研究開発指針の策定に取り組んだ。NGACI で全体取りまとめを担い作成したホワイトペーパーは、様々なところで引用され、本分野の発展に大きく寄与した。

朴は、oneAPI プログラミングによる並列 FPGA 処理システムを開発、それらを筑波大学の「Cygnus」で実現するための CIRCUS の提案を行った。これは、並列性が困難なアプリケーションにおいて低レイテンシを達成し、パイプライン処理により制御オーバーヘッドを抑え効率化を実現するものである。初期宇宙における天体形成をシミュレーションする宇宙輻射輸送コード ARGOT を題材に、本手法を検証し、大幅な性能向上が可能であることを示した。これらは、本研究領域での GPU と FPGA を演算、および通信のために融合させた異種演算加速スーパーコンピュータの実用性をさらに高めるものである。また、筑波大学の異種演算加速スーパーコンピュータ「Cygnus」(2019年4月運用開始)、「Pegasus」(2022年12月運用開始)を開発、運用している。さらに、FPGA の高性能計算への応用、高水準プログラミング技術、異種演算加速器の融合、並列 FPGA 利用技術など、本研究領域での発展技術に関し、米国及びヨーロッパの同種研究を行う研究者との研究コミュニティをワークショップなど主催し形成した。

“プログラミング・モデル、言語”の研究では以下のものがあつた。

丸山は、畳み込みニューラルネットワークにおいて、GPU等のアクセラレータを用いた並列機械学習の大規模実行を可能にする並列アルゴリズムを提案した。これにより、メモリ制約のため実行不可能であつた大きなサンプルを持つデータセットでのモデル学習を可能とし、学習のさらなる高速化を可能とした。これは、並列性利用の効果ある追求すべき研究の方向性となり、ここでの並列化ソフトウェアスタックは、一般的な方策として広く認知され利用されるようになった。大規模システムを活用して学習を高速化することは、新しいモデルの探索や、更新されたデータ統合にかかる反復時間を短縮し、生産性の高いデータサイエンス可能とする極めて効果の大きいものである。

滝沢は、ベクトルプロセッサを搭載したSX-Auroraを例に、異種複数プロセッサ搭載の大規模システムの性能を十分引き出すプログラミング環境を開発した。ここでは、標準プログラミングインタフェースSYCLを用いたオフロードプログラミングフレームワークneoSYCLを提案、プログラミングの生産性を大幅に向上させた。neoSYCLは、主要なSYCL実装の一つとして認知され、標準規格の議論が進んでいる。また、高性能計算分野において量子アニーリングを効果的に利用するための検討や、緊急時に通常ジョブを別ノードのメモリやストレージに退避し、緊急ジョブを実行する仕組みなど開発した。緊急ジョブを実行する仕組みは、リアルタイム津波浸水被害予測システム(内閣府)の実運用において中核技術として利用されている。

千葉は、大規模並列異種混在型ハードウェアを活用するソフトウェア開発の負担軽減、ユーザの利便性を向上させる埋め込み型領域特化プログラミング言語EDSLを用いた高性能計算のためのソフトウェア基盤、開発ツールを開発した。ホスト言語のライブラリとして実装するEDSLは、実行時にエラー検出されるため、プログラミング段階では、メソッドチェーンが有効かどうかのチェックができないという欠点があつた。メソッド呼び出しを連鎖させて利用できるFluent APIでEDSLを表現し、メソッド呼び出しの連鎖の誤りを、型検査器で検出可能にするFluent APIの実装を提案、その生成器typelevelLRを開発した。これにより、Fluent API構築の煩雑さが解消され、可読性、コード補完によるユーザビリティが向上する。本技術はEDSLの新しい設計技法として、今後、普及が期待されるものである。

“アプリケーション、数値ライブラリ”の研究では以下のものがあつた。

櫻井は、本研究領域で開発した技術を発展させ、周回積分型固有値解析による教師あり次元削減手法を開発した。これにより、高性能行列計算が必要な機械学習において、解析性能向上、解析時間削減、既存手法より高い認識性能を実現した。これは、生産性の高いデータサイエンスを可能とする極めて効果の大きいものである。また、本研究領域で開発した数値線形計算技術を発展させ、組織間に分散したデータの秘匿性を保持しながら解析する技術などを開発した。これにより、生データに含まれる秘匿性の高い情報の安全性を担保しつつ、多数のデータを利用してAI解析精度の大幅な向上を可能とした。

中島は、東京大学 情報基盤センターの中心的役割を担い、Oakforest-PACS、Oakbridge-CX などスーパーコンピューティングシステムの設計、運用をリードした。これらのシステムは、全国の大学、研究機関をネットワークで結んだシステム HPCI に組み込まれ、「富岳」を支える第二階層として計算機科学・工学の発展に大きく貢献した。さらに、計算、データ、学習の融合を実現するスーパーコンピュータシステム Wisteria/BDEC-01 とそのソフトウェア基盤 h3-Open-BDEC の開発も行った。これらの、大規模計算システムは、国内外産学官で実施されているスーパーコンピュータを使用した大規模シミュレーションによる計算科学・計算工学の研究成果創出に多大な貢献をしている。

塩谷は、本研究領域で得られた階層型領域分割法 HDDM を計算電磁気学分野に応用し、新規学術分野の大規模計算電磁気学の融合、確立に大きく貢献した。関連分野研究者と連携することで、回転機や MRI など電気機器、電子デバイスの開発設計、携帯電話や医療機器における生体電磁環境問題などに有用な研究開発を推進した。また、従来、電磁界解析での並列化が進まず、電磁界解析で扱える規模の制限から、高周波電磁界-熱伝導連成解析で扱えるモデルの規模が限られていたが、数百億規模の自由度の人体モデルの解析を成功させ、高周波電磁界-熱伝導連成解析システムの実現性を現実のものとした。これらの取り組みの中で、大規模電磁界数値解析手法に関するシンポジウムなど主催し新規分野のコミュニティを形成した。

藤澤は、超大規模グラフに対する探索アルゴリズムを開発、「富岳」を用い Graph500 において、世界第 1 位を 2022 年 11 月に 6 期連続で通算 16 期獲得した。また、格子暗号の安全性を正確に推定するための最短ベクトル問題に対する大規模並列ソルバーの開発を行い、Darmstadt SVP チャレンジにおいて 127 次元の記録を更新した。さらに、深層学習モデルの敵対的訓練の効率的な学習手法として、共役勾配法 CG に基づいた ACG 攻撃を提案し、既存の最先端アルゴリズムを大きく上回る攻撃成功率を達成した。社会実装に向けた取り組みとしては、多くの民間企業と共同で大量のセンサデータ(ヒト・モノの移動等)やオープンデータ(Wi-Fi 等の移動履歴)などを用いて、サイバー空間での最適化やシミュレーションを行う CPS モビリティ最適化エンジン CPS-MOE の開発を行った。これにより、新しい産業の創出、コストや廃棄物の削減、交通機関の最適制御スケジュールの算出に寄与するサービスの集合体を構築した。

野田は、本研究領域で開発したマルチエージェント社会シミュレーション MASS (Multi-Agent Social Simulation) の実行管理フレームワーク OACIS、CARAVAN について、「富岳」に引き継ぐための改版、高性能化を実施した。また、異なる時空間スケールや対象毎に構築されてきた異種現象のシミュレーションについて、各々の結果を相互に分析・再構成する相互連成シミュレーションの構築を行った。ここでは、OACIS と国立研究開発法人産業技術総合研究所が開発した人流シミュレータ CrowdWalk、東京大学が開発した交通シミュレータ ADVENTURE-MATES、立命館大学が開発した都市交通シミュレーション MACiMA などとの連成シミュレーションを開発し、スーパーコンピュータ上に構築した。さらに、OACIS による動的結合で、東京大学、東京工業大学が開発した金融市場と企業ネットワークの相互作用の時

間発展モデルの構築を行った。また、MaaS マネージメントデザイン技術、MaaS モデリング技術を構築した。本研究成果は、野田が取締役を務める株式会社未来シェアで、20 以上の地域で MaaS の導入、実証実験を実施するに至り、MaaS 普及の後押しになった。

これらの研究成果は、スーパーコンピュータが科学技術計算だけでなく、ビッグデータ処理など幅広い分野への応用でも必須であり、有効であることを示した。さらに、社会シミュレーションでは、計算リソースが豊富になることで、従来の問題解決のみで完結していたものから、今までなかった問題の創出や、より効率的な施策、新しい応用・サービスに繋がることを示した。

オープンソースに関して、半数以上の研究代表が GitHub など公開し、オープンコラボレーション、コミュニティ形成を推進している。例えば、建部のアドホック分散ファイルシステム CHFS、堀のメニーコア向けタスクモデル PiP、南里のコード間結合フレームワーク CoToCoA、丸山の畳み込み層の並列化アルゴリズム、滝沢のオフロードプログラミングフレームワーク neoSYCL、千葉の構文検査される Fluent API 生成器 typelevelLR、塩谷の高周波電磁界解析ソフトウェア ADVENTURE\_FullWave、波動音響解析ソフトウェア ADVENTURE\_Sound などがある。

本研究領域の研究期間中の成果論文数は 631 報、このうち Top10%以内は 73 報、研究終了後の発展・展開論文数は 270 報、このうち Top10%以内は 31 報であった。研究終了後は研究代表者のみのカウントのため、研究期間中よりは数が減少するが、それでも研究代表者だけでも研究期間中の半数近くの論文数、Top10%以内の報数がある。また、研究期間内、研究終了後のそれぞれでの総論文数に占める Top10%以内の割合は約 11%でほぼ同数である。研究終了後においても研究代表者は多くの研究者をリードし活発な研究活動を行っていること、質の高い研究活動が継続されていることがうかがえる。

特許出願件数は、研究期間内は国内 8 件(登録 6 件)、海外 11 件(登録 8 件)、研究終了後は国内 12 件(登録 3 件)、海外 1 件(登録 0 件)であった。国内出願だけでは、研究終了後の数が上回っている。研究終了後の国内出願 12 件の内、櫻井 6 件、野田 4 件となっている。櫻井は画像処理や分散データ処理、野田は MaaS のマルチエージェント社会シミュレーション・モデリング関連であり、社会実装が進んでいることがうかがえる。

受賞は、研究終了後、研究代表者の 7 割以上に実績があった。受賞例としては、HPC Pioneer & Achievement Award、Outstanding Effort Award、Asia HPC Leadership Award 各 1 件、国内では、文部科学大臣表彰 2 件、日本ソフトウェア科学会、人工知能学会での功労賞、業績に類するもの 6 件と多く見られた。研究終了後においても、本分野で、多大な学会貢献や高い業績が評価されており、研究代表者が現在でも本分野を牽引していることがうかがえる。また、研究終了後の 2017 年から Graph500 の世界 1 位を合計 11 回、藤澤が受賞している。これは、我が国の本分野の高い総合力が評価されたものであり、国内外にそれを示したことは特筆に値する。

アウトリーチ活動について、ポストペタスケールコンピューティングに関連するものとして、研究総括および半数の研究代表者の精力的な活動が見られた。主な内容は「富岳」の概要、取り組み、「富岳」の次の議論、国立研究開発法人理化学研究所の若手研究者育成のための国際 HPC スクール、各大学のスーパーコンピュータ施設(東京大学「Oakforest-PACS」、筑波大学「Cygnus」、「Pegasus」、九州大学「IT0」など)の概要、取り組みなど 30 件近くの活動があった。関連研究者、未来の研究者、非専門家に意義、可能性を伝えるこれらの活動は、長期的視点で、研究活動や科学技術への興味や関心を高め、利用人材の醸成、研究者育成、様々な研究者・開発者・利用者とのコデザイン、アプリケーション開発、維持、普及につながることを期待される。

各研究代表者へのアンケート調査では、本研究領域での活動について、全回答者の全員が良かった、役立ったとのポジティブな回答であった。戦略研究推進事業の大型研究資金や領域運営形態での特徴が本研究領域の分野にマッチし、本事業の効果がより発揮されたものと推測される。一方、研究継続、ソフトウェアメンテナンス、アウトリーチなど継続的な活動が研究期間終了後に支援がなくなり縮小、凍結になったなど、本研究領域のような、インフラに類し、分野にまたがり大きな波及効果のある研究は、継続できる何らかの支援が必要など、いくつかのコメントがあった。

本資料は全 2 章から構成されており、各章の概要は以下に示す通りである。

第 1 章では、研究領域概要、戦略目標、研究領域の目的、研究総括、領域アドバイザー、研究課題および研究代表者についてまとめた。

第 2 章では、本追跡調査の目的、調査対象、方法を述べ、競争的研究資金等獲得、論文、特許、受賞、アウトリーチ活動等についてまとめた。また、研究成果から生み出された波及効果について、研究成果の科学技術の進歩への貢献、社会・経済への貢献など研究代表者ごとにまとめた。最後に、各研究者からの、本制度へのコメント、助言などをまとめた。

## 第 1 章 研究領域概要

### 1.1 戦略目標

「メニーコアをはじめとした超並列計算環境に必要となるシステム制御等のための基盤的ソフトウェア技術の創出」

スーパーコンピュータを用いたシミュレーションは、従来の理論・実験とは異なる新しい研究手法を実現し、科学技術のブレークスルー達成や国際競争力の強化に資するものであり、その重要性はますます高まっている。その利用分野は、素粒子物理等の基礎科学からものづくり等の産業応用まで多岐にわたっており、また、環境・エネルギー、健康・医療、安全・安心等の社会課題解決への貢献も期待されている。

このような中、シミュレーションに求められる精度は高まる一方であり、また、扱うデータも爆発的に増大している。特に、観測機器の高度化に伴うデータの増大が加速しており、例えば、次世代シーケンサーは個人のゲノムデータを日々蓄積し、地球観測衛星からは日々大量の観測データが送られてくるといった状況にある。このような大量のデータを最大限に活用したシミュレーションを行うことが可能となれば、例えば、次世代シーケンサーのゲノムデータから遺伝子の振る舞いが細胞や臓器にどのように影響するかという問題を全身スケールで予測することが可能になると考えられる。これは、手術前の評価や実験が行い難い事象に対する事前検討を行うことを可能とするものであり、従来の診断や治療の概念を根本的に転換する可能性がある。また、地球観測衛星から日々送られてくる大量のデータを用いて生物・化学過程を含んだ高精度な気候シミュレーションにより、地球環境-人間社会系の相互作用を含めた精緻な予測が行えることとなり、さまざまな政策決定や社会システムづくりへの貢献が期待される。

以上のように、大量のデータを用いた大規模・複雑なシミュレーションを実現することは、多様な科学技術分野における革新的な成果に大きく貢献し、社会的、経済的に大きなインパクトをもたらすものと考えられる。

2012年に稼働開始となる次世代スーパーコンピュータでは10ペタ FLOPS 級の計算性能が実現することになるが、アプリケーションは、CPU レベルで8万並列(コア数で64万並列)を超える環境下での開発が求められている。今後の計算機開発の方向性からも、CMOS(Complementary Metal Oxide Semiconductor)を用いたCPUのメニーコア化や並列度が高まる傾向は明らかであり、大規模化・複雑化するシミュレーションを実現するためには、超並列コンピュータを明確に意識した先導的な取組が必要である。例えば、現在のノード間の並列は手動並列によって実現しているが、数十万を超える並列環境にあっては別の手法が必要となる等の将来のスパコン開発・利用における問題点が明確になっている。

上記のような課題の解決には、従来のハードウェアとアプリケーションを中心とした研究開発だけではなく、両者を繋ぐソフトウェアであるオペレーティングシステム(OS)やミドルウェア、言語、コンパイラ、ライブラリ、開発支援ツールといったソフトウェアレイヤ

(階層)に着目し、それぞれの要素を協調させた研究開発(例えば、将来の超並列時代におけるハイブリッド並列プログラミング手法や、超並列化されることによって発現する大量のファイル I/O による性能劣化への対処として超並列分散ファイルシステム等についての研究開発が考えられる)に取り組むことが重要である。

具体的には、ハイブリッド並列プログラミング手法としては、ノード内におけるメモリ転送性能がボトルネックになることを見越した「メニーコア環境におけるプログラミングモデル、言語、コンパイラ技術」、「コアに最適にタスクを割り当てる OS、ミドルウェア」等の研究開発、ノード間制御としては、将来のスパコンが数千万を越えるノード数になった場合でも利用者に負担をかけることなくスパコンを効率的に利用できる「分散並列プログラミング」、分散並列プログラムを実現する「プログラミング言語およびコンパイラや数値計算ライブラリ研究」等のノード間での自動並列を実現させるための研究開発等が考えられる。分散並列ファイルシステムとしては、「OS 内部の処理機構(ネットワークプロトコルなど)」、「並列 I/O ライブラリ」等の研究をしつつ、ファイルシステムとして重要な役割であるデータ保全も念頭においた上での研究開発等が考えられる。

本戦略目標では、超大規模シミュレーションやデータ解析を要する課題に対応するため、研究室単位の技術シーズをそれぞれの要素技術の協調を考慮しつつ高度化し、将来的な超並列システムの構成要素となることを目指したスーパーコンピューティング基盤技術の研究開発に戦略的に取り組む。これにより、新たな機能、手法の必要性やハードウェアに対する斬新な要求事項等、計算科学技術の革新的な展開を創出することが期待される。

## 1.2 研究領域の目的

本研究領域は、次々世代(次世代スーパーコンピュータ「京」の次の世代)あるいはそれ以降のスーパーコンピューティングに資する、システムソフトウェアやアプリケーション開発環境等の基盤技術の創出を目指すものである。

具体的には、2010 年代半ば以降に多用されるとされる、メニーコア化された汎用型プロセッサや専用プロセッサ(現在 GPGPU と呼ばれるものを含む)を用いて構成されるスーパーコンピュータの特徴を生かし、その上で実行されるアプリケーションを高効率・高信頼なものにするシステムソフトウェア(プログラミング言語、コンパイラ、ランタイムシステム、オペレーティングシステム、通信ミドルウェア、ファイルシステム等)、アプリケーション開発支援システム、超大規模データ処理システムソフトウェア等に関する、実用性を見据えた研究開発を対象としている。また、実用上の観点からそれらのソフトウェアレイヤをまたがる研究開発を奨励している。

## 1.3 研究総括

米澤 明憲 (2010 年 4 月～2015 年 3 月)

東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授

佐藤 三久 (2015年4月～2018年3月)

(研究領域終了時)

国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究機構フラッグシップ2020プロジェクト・副プロジェクトリーダー

(追跡調査時)

国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター副センター長

#### 1.4 領域アドバイザー

領域アドバイザーの人選においては、研究者として「現役」であり、本来ならば自らのこれまでの研究をベースにして、本研究領域で研究代表者として十分活躍できるような研究者を選んだ。また、本研究領域の対象分野をおおよそカバーできる必要最小の人数に抑えた。

このような人選をした結果、年齢層やポジションが低めの若手研究者を研究代表者として参画させ、優れた「現役」の研究者でもある領域アドバイザーからの助言・指示を得ることができる体制を実現した。これにより、スーパーコンピューティング分野における次代のリーダー育成にも大いに貢献できた。

表 1-1 領域アドバイザー (所属は研究開始時)

氏名	所属	役職	任期
青柳睦*	九州大学 情報基盤研究開発センター	センター長/教授	2010年10月～ 2014年12月
石川裕	東京大学 大学院情報理工学系研究科	教授	2010年10月～ 2018年3月
久門耕一	株式会社富士通研究所	取締役/IT システム 研究所長	同上
河野健二	慶應義塾大学 理工学部	准教授	同上
小林広明	東北大学 サイバーサイエンスセンター	センター長/教授	同上
佐藤三久	筑波大学 大学院システム情報工学研究科	教授	2010年10月～ 2015年3月
下條真司	大阪大学 サイバーメディアセンター	教授	2010年10月～ 2018年3月
中川八穂子	株式会社日立製作所 中央研究所新世代コンピューティングPJ	シニアPJ マネージャ	同上
中島浩	京都大学	センター長/教授	同上

氏名	所属	役職	任期
	学術情報メディアセンター		
牧野淳一郎	東京工業大学 大学院 理工学研究科	教授	同上
松岡聡	東京工業大学 学術国際情報センター	教授	同上
高橋桂子	海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	センター長	2015年06月～ 2018年3月

\* 2014年12月逝去

### 1.5 研究課題および研究代表者

戦略目標にしたがって、ポスト・ペタスケールのコンピューティング技術として、メモリーコアプロセッサや加速演算機構などのハードウェアとアプリケーションソフトウェアの両者を繋ぐソフトウェア、すなわち、オペレーティングシステム(OS)や通信ミドルウェア、データ入出力ソフトウェアなどのシステムソフトウェア、プログラミングモデルや言語・コンパイラ技術、数値計算ライブラリ・アルゴリズム、開発支援ツールの分野から、課題を採択した。特に、これからのアプリケーション分野の開拓に向けて、グラフ処理や社会シミュレーション技術のテーマも取り入れた。

研究課題の選考は、まず提案書等の書面をベースに一次選考をおこない、次いで領域アドバイザーとの合議を踏まえて採択数のおおよそ2倍程度の候補提案を選び、実際にヒアリングを実施する、という方針をとった。ヒアリングでは、書面提案での評価や印象をある程度忘れて評価することにして、プレゼンテーションによって研究内容が明確に示されており、またポスト・ペタスケール時代において有用性・実現性があるか、更にはチャレンジングで新規性があるかどうかを重視した。また、提案者が自己の提案のどの部分にどの程度リスクがあるかを把握しているかどうかも参考にした。

これらの方針に従って領域アドバイザーと協議し、合議結果を概ね尊重して採否を決定した。具体的には、三期にわたる選考の結果、合計14研究課題を採択した。この結果、本研究領域のテーマと関連した分野において国内外で活躍を続けている主要若手研究者を本研究領域に参加させることができ、またこれに加え、これまで目立たなかったが良い研究実績がある、あるいは良い潜在力を持った研究者を結集することができた。

また、上記の方針に加え、本研究領域のテーマと関連した分野において、既に大変良い実績を持ち、あるいは現在も顕著な成果をあげ続けている国内有数の研究者は、あえて研究代表者とはせず、むしろ領域アドバイザーという形での本研究領域への参画を要請することで、スーパーコンピューティングの分野において今後、我が国のリーダーとなり、次代を担うことが予想・期待される若手研究者を、研究代表者として相当程度網羅することができた。表1-2に各期の研究課題と研究代表者、所属と役職を示す。また、表1-3に各研究チームの主たる共同研究者を示す。

表 1-2 研究課題と研究代表者

採択年度	研究課題	研究代表者	採択時 所属・役職	終了時 所属・役職	追跡調査時 所属・役職
2010年度 (平成22年度)	ポスト・ペタスケールに対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発	櫻井鉄也	筑波大学 大学院システム情報 工学研究科・教授	筑波大学 システム情報系・教 授	同左
	ポストペタスケールデータインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア	建部修見	筑波大学 システム情報系・准教 授	筑波大学 システム情報系・教 授	筑波大学 計算科学研究セン ター・教授
	自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境	中島研吾	東京大学 情報基盤センター・教 授	同左	同左
	メニーコア混在型並列計算機用基盤ソフトウェア	堀敦史	理化学研究所 計算科学研究機構・研 究員	理化学研究所 計算科学研究機構・ 上級研究員	国立情報学研究所 アーキテクチャ科 学研究系・特任研 究員
	高性能・高生産性アプリケーションフレームワークによるポスト・ペタスケール高性能計算の実現	丸山直也	東京工業大学 学術国際情報センタ ー・助教	理化学研究所 計算科学研究機構・ チームリーダー	NVIDIA Senior Developer Technology Engineer
2011年度 (平成23年度)	ポストペタスケールシミュレーションのための階層分割型数値解法ライブラリ開発	塩谷隆二	東洋大学 総合情報学部・教授	同左	同左
	進化的アプローチによる超並列複合システム向け開発環境の創出	滝沢寛之	東北大学 大学院情報科学研究 科・准教授	東北大学 サイバーサイエン スセンター・教授	同左
	ポスト・ペタスケール時代のスーパーコンピューティング向けソフトウェア開発環境	千葉滋	東京工業大学 大学院情報理工学研 究科・教授	東京大学 大学院情報理工学 系研究科・教授	同左
	省メモリ技術と動的最適化技術によるスケーラブル通信ライブラリの開発	南里豪志	九州大学 情報基盤研究開発セ ンター・准教授	同左	同左
	ポストペタスケールシステムにおける超大規模グラフ最適化基盤	藤澤克樹	中央大学 理工学部・准教授	九州大学 マス・フォア・インダ ストリ研究所・教授	同左
2012年度 (平成24年度)	ポスト・ペタスケール時代のメモリ階層の深化に対応するソフトウェア技術	遠藤敏夫	東京工業大学 学術国際情報センタ ー・准教授	同左	東京工業大学 学術国際情報セン ター・教授
	ポストペタスケールシステムのための電力マネジメントフレームワークの開発	近藤正章	電気通信大学 大学院情報システム 学研究科・准教授	東京大学 大学院情報理工学 系研究科・准教授	慶應義塾大学 理工学部・教授
	超大並列計算機による社会現象シミュレーションの管理・実行フレームワーク	野田五十樹	産業技術総合研究所 サービス工学研究セ ンター・研究チーム長	産業技術総合研究所 人工知能研究セン ター・総括研究主幹	北海道大学 情報科学研究院・ 教授
	ポスト・ペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発	朴泰祐	筑波大学 システム情報系・教授	筑波大学 システム情報工学 研究科・教授	筑波大学 計算科学研究セン ター・教授

表 1-3 各研究チームの主たる共同研究者

研究代表者	主たる共同研究者
櫻井 鉄也	今村 俊幸 (理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダー) 藏増 嘉伸 (筑波大学 計算科学研究センター 教授) 張 紹良 (名古屋大学 大学院工学研究科 教授) 星 健夫 (鳥取大学 大学院工学研究科 准教授) 山本 有作 (電気通信大学 大学院情報理工学研究科 教授)
建部 修見	大山 恵弘 (筑波大学 学術情報メディアセンター 准教授)
中島 研吾	岩下 武史 (北海道大学 情報基盤センター 副センター長/教授) 奥田 洋司 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科 教授) 阪口 秀 (海洋政策研究所 所長) 佐藤 正樹 (東京大学 大気海洋研究所 教授) 古村 孝志 (東京大学 地震研究所 教授)
堀 敦史	須藤 敦之 (株式会社日立製作所 研究開発グループ 主任研究員) ※ 辻田 祐一 (理化学研究所 計算科学研究機構 研究員) 並木 美太郎 (東京農工大学 大学院工学府 教授)
丸山 直也	青木 尊之 (東京工業大学 学術国際情報センター 教授/副センター長) 田浦 健次朗 (東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授) 泰岡 顕治 (慶應義塾大学 理工学部 教授)
塩谷 隆二	萩野 正雄 (名古屋大学 情報学部 准教授) 越塚 誠一 (東京大学 大学院工学系研究科 教授)
滝沢 寛之	江川 隆輔 (東京電機大学 工学部情報通信工学科 教授) 須田 礼仁 (東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授) 高橋 大介 (筑波大学 計算科学研究センター 教授)
千葉 滋	五十嵐 淳 (京都大学 大学院情報学研究科 教授) 鶴林 尚靖 (九州大学 大学院システム情報科学研究所 教授) 増原 英彦 (東京工業大学 情報理工学大学院学長、数理・計算科学系教授)
南里 豪志	柴村 英智 (財団法人九州先端科学技術研究所 システム LSI 研究室 研究員) 住元 真司 (東京大学 情報基盤センター 特任教授) 高見 利也 (大分大学 理工学部 教授)
藤澤 克樹	佐藤 仁 (東京工業大学 学術国際情報センター 特任助教) 鈴村 豊太郎 (東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授) 脇田 建 (東京工業大学 情報理工学 准教授)
遠藤 敏夫	佐藤 幸紀 (豊橋技術科学大学 情報メディア基盤センター 准教授) 緑川 博子 (成蹊大学 理工学部 助教) ※
近藤 正章	井上 弘士 (九州大学 大学院システム情報科学研究所 教授) 三吉 郁夫 (富士通株式会社 次世代 IC 開発本部 部長) ※ 三輪 忍 (電気通信大学 大学院情報システム学研究科 准教授)
野田 五十樹	井手 剛 (IBM T. J. ワトソン研究所 Senior Technical Staff Member) 伊藤 伸泰 (理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダー) 鎌田 十三郎 (甲南大学大学院自然科学研究科 准教授) 服部 宏充 (立命館大学 情報理工学部 教授) 吉濱 佐知子 (アマゾン ウェブ サービス ジャパン合同会社 Professional Services) 水田 秀行 (日本アイ・ピー・エム株式会社 東京基礎研究所 リサーチスタッフメンバー) ※
朴 泰祐	天野 英晴 (慶應義塾大学 理工学部 教授) 梅村 雅之 (筑波大学 計算科学研究センター 教授) 村井 均 (理化学研究所 計算科学研究センター ユニットリーダー)

※主たる共同研究者の所属および役職は調査時点。ただし、不明の場合 (※) は終了時の所属・役職。

## 第 2 章 追跡調査

### 2.1 追跡調査について

#### 2.1.1 調査の目的

研究領域終了後、一定期間を経過した後の副次的効果を含めて研究成果の発展状況や活用状況を明らかにし、JST の事業および事業運営の改善に資することを目的とした。

#### 2.1.2 調査の対象

CREST 研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」(2010 年度～2017 年度)の表 2-1 に示す研究代表者、期間を対象とした。

表 2-1 調査対象と調査対象期間

採択年度	研究代表者	CREST 研究期間	CREST 終了後の調査対象期間
第 1 期 (2010 年)	櫻井 鉄也	2011 年 4 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
	建部 修見	2011 年 4 月～2017 年 3 月	2018 年 1 月～調査終了月
	中島 研吾	2011 年 4 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
	堀 敦史	2011 年 4 月～2016 年 3 月	2017 年 1 月～調査終了月
	丸山 直也	2011 年 4 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
第 2 期 (2011 年)	塩谷 隆二	2011 年 10 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
	滝沢 寛之	2011 年 10 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
	千葉 滋	2011 年 10 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
	南里 豪志	2011 年 10 月～2017 年 3 月	2018 年 1 月～調査終了月
	藤澤 克樹	2011 年 10 月～2017 年 3 月	2018 年 1 月～調査終了月
第 3 期 (2012 年)	遠藤 敏夫	2012 年 10 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
	近藤 正章	2012 年 10 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
	野田 五十樹	2012 年 10 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月
	朴 泰祐	2012 年 10 月～2018 年 3 月	2019 年 1 月～調査終了月

#### 2.1.3 調査方法

##### (1) 競争的研究資金等

調査対象期間は、本研究領域の研究期間中を含めて本追跡調査時点までとし、本研究領域の研究者が研究代表を務める競争的研究資金等を調査した。

この中で各研究課題の開始後に獲得し、当該研究課題が終了する前に、あるいは同年度に終了する事案に関しては対象外とした。獲得状況については、研究者へのアンケートおよび

科学研究費助成事業データベース<sup>1</sup>による検索で抽出した。(アンケートに回答無しの研究代表者に対しては、本データベースの検索のみ)

## (2) 論文

論文の抽出は、文献データベースとして Scopus を用い、Book、Editorial、Erratum を除く全文献タイプの論文を対象とし、研究代表者が著者になっている論文を著者名検索により抽出した。抽出した期間は 2022 年 8 月までとなっている。

(注：研究終了後は研究代表者のみのカウントのため、研究期間中よりは数が減少する)

これらから研究者ごとに論文リストを作成し、①本 CREST 研究期間内の研究成果論文、②研究終了後の研究成果の発展の論文、③研究終了後の新たな展開(②以外)に分類した。これら 3 つの分類は、研究終了報告書に記載の論文、競争的研究資金情報に JST または本 CREST の記載があるもの、謝辞の対象に JST があるもの、これらいずれかを満たせば①の論文とし、①の論文を引用している研究終了後の論文を②と暫定的に分類、その後、研究代表者へ確認し、修正など実施した。これら 3 つの分類のそれぞれの論文数、被引用回数上位 Top10% 以内を調査した。被引用回数はエルゼビア社 Scopus で用いられる指標 FWCI (Field Weighted Citation Impact) をベースとした値である。

## (3) 特許

研究代表者が発明者となっている特許で、出願日が課題開始以降から本追跡調査時点までの特許を抽出した。抽出は PatentSQUARE (パナソニック株式会社) で検索し、出願数、登録状況を調査した。(注：研究終了後は研究代表者のみのカウント)

これらから研究代表者ごとに特許リストを作成し、本 CREST 研究期間内の研究成果の特許、研究終了後の発展・展開の特許に暫定的に分類、その後、研究代表者へアンケートで確認し、修正など実施した。(アンケートに回答無しの研究代表者に対しては、本データベースの検索のみ)

## (4) 受賞

研究終了以降から現在に至るまでの受賞について、各研究代表者へのアンケートおよび Web 検索などで調査した。(アンケートに回答無しの研究代表者に対しては、Web 検索のみ)

## (5) 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果等

各研究代表者へのアンケートおよび Web 検索などで調査した。(アンケートに回答無しの研究代表者に対しては、Web 検索のみ)

---

<sup>1</sup> <https://kaken.nii.ac.jp/ja/>

## 2.2 追跡調査結果

### 2.2.1 競争的研究資金等

本 CREST 研究終了後、ほぼ全ての研究代表者は競争的研究資金等を獲得し、研究活動を進め、さらに発展、展開させている。

例えば、文部科学省「次世代計算基盤に係る調査研究事業」は近藤 1 件、「次世代領域研究開発」は朴 1 件、「共同利用・共同研究拠点」は朴 1 件、科研費 基盤研究(S)は中島 1 件、基盤研究(A)は建部 1 件、千葉 1 件、藤澤 2 件、朴 1 件、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)プロジェクトは、櫻井 2 件、遠藤 1 件、JST の未来社会創造事業は野田 1 件、CREST は建部 1 件、藤澤 1 件、近藤 1 件などあり、これら大型競争的研究資金等の研究代表者として採択されている。

これらから、ほとんどの研究者は活躍の場を拡大し、分野の中心となり、研究現場をリードし活躍していることがうかがえる。

### 2.2.2 論文

研究代表者の①本 CREST 研究期間内の研究成果論文、②研究終了後の研究成果の発展の論文と③研究終了後の新たな展開を合算した論文数、およびそれらの被引用回数上位 Top10%以内をまとめた。本研究領域の全体状況を図 2-1 に示す。また、研究代表者ごとについて図 2-2 に示す

図 2-1 に示すように研究領域全体で発表された論文数は、①研究期間内は 631 報、このうち Top10%以内は 73 報あり、②③研究終了後は 270 報、このうち Top10%以内は 31 報であった。研究終了後は研究代表者のみのカウントのため、研究期間中よりは数が減少するが、それでも研究代表者だけでも研究期間中の半数近くの論文数、Top10%以内の報数がある。研究終了後においても研究代表者は多くの研究者をリードし活発な研究活動を行っていることがうかがえる。また、①研究期間内、②③研究終了後のそれぞれでの総論文数に占める Top10%以内の割合は約 11%でほぼ同数である。Top1%以内は、①研究期間内で 5 報(丸山 3 報、藤澤 2 報)、②③研究終了後で 3 報(滝沢 2 報、遠藤 1 報)であった。これらのことから、質の高い研究活動が研究終了後においても継続されていることがうかがえる。

図 2-2 に示すように、各研究代表者の①研究期間内と②③研究終了後との比較では、前記理由で数は減少するものの各研究代表者は着実に論文を生産している。また、③研究終了後の新たな展開の論文が多い研究代表者は 14 人中 11 人で非常に多い。デバイスやアーキテクチャの進化、スーパーコンピュータ「京」から「富岳」へのさらなる大規模化・継承、AI 勃興など、進歩や変遷の早い分野の中で、研究を大幅に拡大したり、他の研究課題に果敢にチャレンジしていることがうかがえる。

論文数

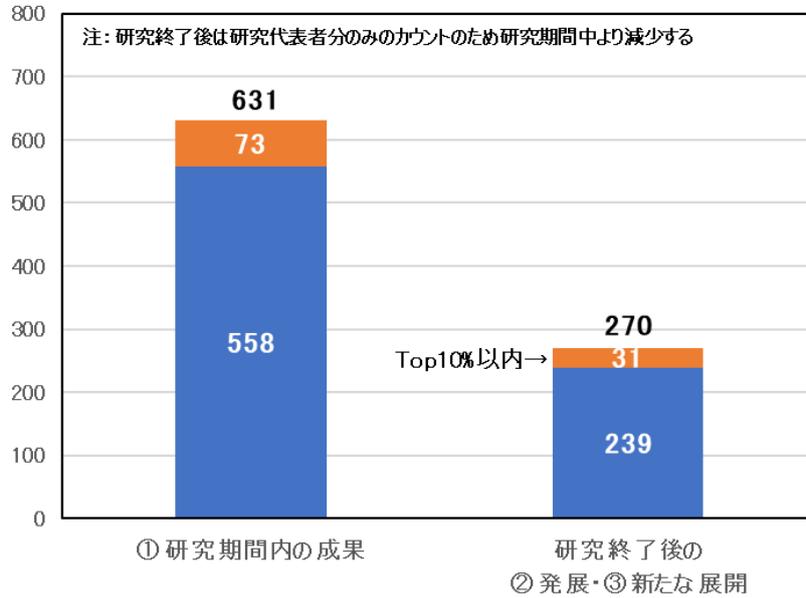


図 2-1 本 CREST の研究成果とその発展・新たな展開の論文  
(注：研究終了後は研究代表者分のみのカウント)

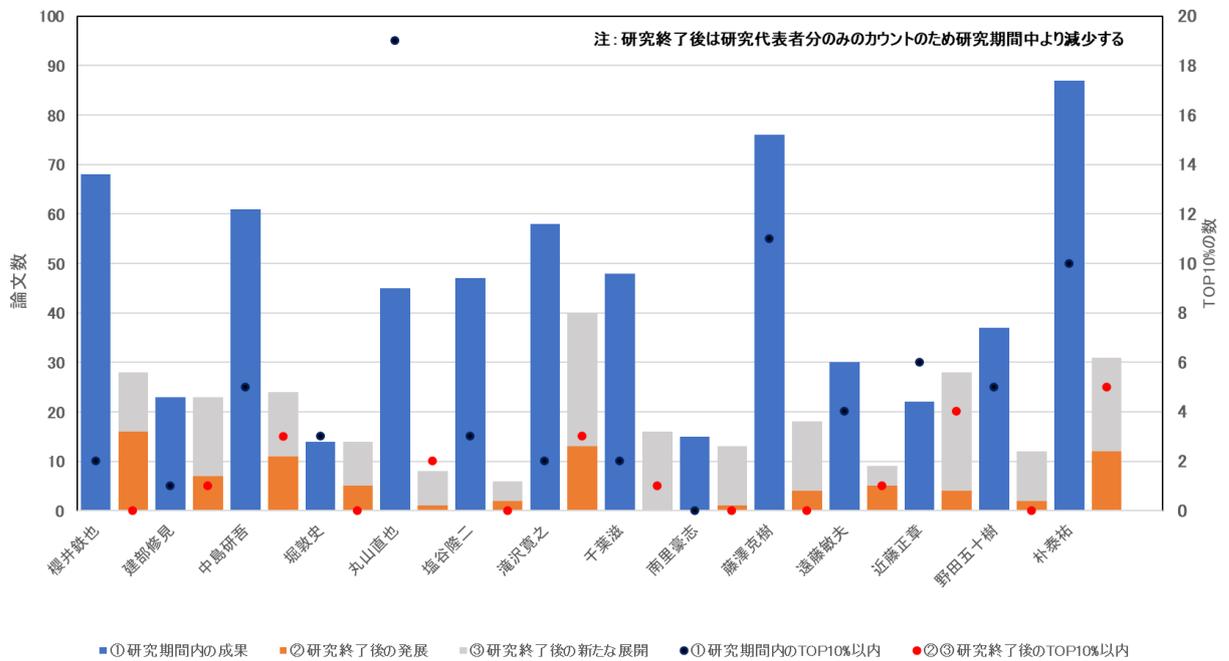


図 2-2 本 CREST の各研究代表者の研究成果とその発展・展開の論文  
(注：研究終了後は研究代表者分のみのカウント)

### 2.2.3 特許

研究代表者の本 CREST 研究期間内と、研究終了後の特許出願数、登録件数をまとめた。本研究領域の全体状況を図 2-3 に示す。

図 2-3 に示すように研究領域全体で出願された特許は、本 CREST 研究期間内は国内 8 件(登録 6 件)、海外 11 件(登録 8 件)、研究終了後は国内 12 件(登録 3 件)、海外 1 件(登録 0 件)であった。国内出願だけでは、研究終了後の数が上回っている。研究終了後の国内出願 12 件の内、櫻井 6 件、野田 4 件となっている。櫻井は画像処理や分散データ処理、野田は MaaS(Mobility as a Service)のマルチエージェント社会シミュレーション・モデリング関連であり、社会実装が進んでいることがうかがえる。

本研究領域のような分野では、アルゴリズムなどプログラムに類する場合など、特許取得が効力を発揮する特許侵害確認が困難なことや、オープン・クローズ戦略の中で、標準化を目指すものがあつたり、多数の人に供与することで社会受容性の醸成や新たな市場形成を狙うため、特許出願を控える場合がある。そのため、これらの特許業績については、研究成果が特許出願の形として必ずしも現れず、過小に見えることを加味する必要がある。

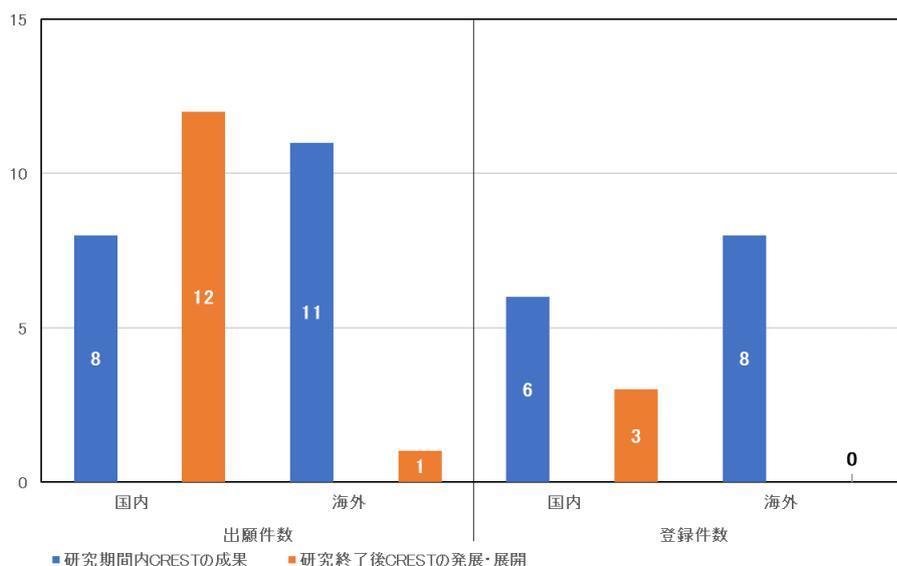


図 2-3 本 CREST の研究成果とその発展・展開の特許出願数  
(注：研究終了後は研究代表者分のみのカウント)

## 2.2.4 受賞

研究代表者の受賞について調査したところ、研究代表者の7割以上に実績があった。受賞例としては、各種学会のBest Paper Awardに類するものは12件あり、ほとんどの研究代表者が受賞している。

大規模グラフ解析に関するスーパーコンピュータの国際的な性能ランキングで著名なGraph500では、研究終了後の2017年から世界1位を第14回～第18回の連続5回、第20回～第25回の連続6回の合計11回を藤澤が受賞している。これは、我が国の本分野の高い総合力が評価されたものであり、国内外にそれを示したことは特筆に値する。

また、文部科学大臣表彰で櫻井1件、藤澤1件、Supercomputing Asia 2023 (SCA23)のHPC Pioneer & Achievement Awardで中島1件、cross-disciplinary workshop on computing Systems, Infrastructures, and programminG 2023 (xSIG 2023)のOutstanding Effort Awardで滝沢1件、Super Computing Asia 2020 (SCA20)のAsia HPC Leadership Awardで朴1件、Association Internationale pour les Technologies Objets (AITO)のTest of Time Winners for 2020で千葉1件受賞しており、これら国内外での多くの受賞は、研究代表者が現在でも本分野を牽引していることがうかがえる。さらに、日本ソフトウェア科学会の高橋奨励賞、基礎研究賞、功労賞で千葉が各1件、人工知能学会の功績賞、現場イノベーション賞 銀賞で野田が各1件、情報処理学会 コンピュータサイエンス領域功績賞で朴1件受賞しており、研究終了後においても本分野で、多大な学会貢献や高い業績が評価されていることも特筆すべきものである。

## 2.2.5 アウトリーチ活動

研究代表者のポストペタスケールコンピューティングに関連するアウトリーチ活動について調査した。抽出された活動では、研究総括5件、建部3件、中島5件、堀1件、南里1件、藤澤1件、近藤5件、朴8件あり研究総括および半数の研究代表者の精力的な活動が見られた。

主な内容はPost-Kや「富岳」のプロセッサに関するもの2件、「富岳」の取り組み、「富岳」の次の議論など10件、若手研究者が並列コンピュータのプログラミング技術を学び、この分野のリーダーとなる機会を提供する理化学研究所の国際HPCスクール4件、最先端共同HPC基盤施設JCAHPC(JCAHPC:Joint Center for Advanced High Performance Computing、東京大学、筑波大学で設立した最先端大規模高性能計算基盤を構築・運営する組織)の取り組みについて5件、筑波大学 計算科学研究センター運営の「Cygnus」、「Pegasus」の取り組みについて4件、九州大学 情報基盤研究開発センター運営の「IT0」の取り組みについて3件、次世代高性能計算基盤の開発について1件などある。

本研究領域の技術は、自然科学のみならず社会科学など広範にわたり波及効果があり根幹をなす分野である。関連研究者、未来の研究者、非専門家に意義、可能性を伝えるこれら活動は、長期的視点で、研究活動や科学技術への興味や関心を高め、利用人材の醸成、研究

者育成、様々な研究者・開発者・利用者とのコデザイン、アプリケーション開発、維持、普及につながることを期待される。

## 2.3 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果

### 2.3.1 2010年度採択課題(1期)

#### 2.3.1.1 櫻井鉄也「ポスト・ペタスケール」に対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発」

櫻井チームは、本研究領域で、大規模計算の実行において多くの時間を占め、高速化ニーズが高い固有値計算を対象として、ポストペタスケール規模のハードウェア性能を引き出す周回積分を用いた「超並列固有値解析エンジン」の開発を行った。

固有値問題は線形代数の最も基本的な問題の一つで、ナノマテリアルや機械設計、データ解析など、応用上極めて重要な問題であり、様々な大規模シミュレーションの計算時間の主要部となる。固有値問題の高速数値解法の研究は、数値線形計算分野のホットトピックの一つである。

本研究領域で開発した積分型疎行列固有値解析エンジン z-Pares (Parallel Eigenvalue Solver) はオープンソースとして公開しており、対称および非対称の一般化固有値問題の任意の領域内部の部分固有値および、対応する固有対を求めることができる。z-Pares は自動車部品の構造解析や、材料科学における電子状態計算など、国内外で利用されている。応用例として、自動車のオートマティクトランスミッションの開発過程において、実際の製品の有限要素モデルから得られる大規模な固有値問題に適用され、従来の解析計算に比べ、大幅な高速化を達成している。また、バレンシア工科大学(スペイン)で開発されている分散並列固有値計算ライブラリ SLEPc (Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations) の新規ソルバー CISS (Contour Integral Spectral Slicing) を開発し、既存ソフトウェア開発環境において、周回積分を用いた固有値解法のシームレスな利用を実現した。

本研究領域終了後、櫻井は、周回積分型固有値解析による教師あり次元削減手法、組織間に分散したデータの秘匿性を保持しながら解析する技術などを開発した。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1) 周回積分型固有値解析による教師あり次元削減手法【新理論の提唱】

観測されたデータや現象を教師データとし、その振る舞いを、モデルを用いて再現することで未知のデータの振る舞いを予測する教師あり機械学習は、データ解析における重要な問題設定であり、回帰問題や分類問題など、様々な機械学習アルゴリズムが求められている。機械学習は、特徴量の次元数が大きいほど教師データにおける最適化問題の関数値を小さ

くすることができるが、特徴量の次元数が大きすぎると過学習などによる解析性能低下、解析手法の計算コスト増大が生じる。

本研究では、高性能行列計算技術を前提とした機械学習法として、解析性能向上と同時に次元数削減による解析時間削減の実現を目指した。ここでは、局所性保存射影 LPP (Locality Preserving Projection) や主成分分析 PCA (Principal Component Analysis) など行列トレース最適化に基づく手法に着目し、解析性能を改善する新しい高性能次元削減法の開発に成功した。

行列トレース最適化問題は、元データの特性を保ったまま、低次元部分空間構築のための固有値問題を導くが、既存手法は、低次元空間を構築する際、少数の固有ベクトルのみしか利用しないため、分類を成功させる有用な情報が失われる可能性がある。本研究では、情報損失を克服するため、複数の固有ベクトルを含む複素モーメント型部分空間を利用する複素モーメント型次元削減法 CMSE (Complex Moment-based Supervised Eigenmap) を提案した。提案手法を用いた数値実験において、既存手法より高い認識性能が実現できることを実証した。本研究成果は、人工知能、機械学習分野の著名なカンファレンスの一つである AAAI-19 (33rd Association for the Advancement of Artificial Intelligence Conference on Artificial Intelligence) に採択された。(採択率 16.2%、投稿件数 7700 件)

## (2) 組織間に分散したデータを、秘匿性を保持しながら解析する技術

### 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

本技術は、本研究領域で基盤技術として開発した数値線形計算技術を NEDO「人工知能技術適用によるスマート社会の実現」の「データコラボレーション解析による生産性向上を目指した次世代人工知能技術の研究開発」プロジェクトにつなげ開発した。

近年、データ収集・蓄積が容易になったことで、様々な企業・機関が生産性向上や医療分野での早期治療などに向けて、独自でデータを蓄積し、AI による解析に取り組んでいる。その際、単独の企業・機関のデータのみを用いるとデータ数不足や分布偏りによる解析性能の低さが問題となる。AI による解析精度を上げるためには十分な数のデータを集めることが必要となるが、従来技術で複数企業・機関がそれぞれ保有する生データを共有することは、困難であった。具体的には、従来の準同型暗号の秘密計算を用いる手法は、計算負荷が高く大規模データ解析が困難であること、解析モデルを共有し、各機関で順次更新を行う連合学習は、機関を跨いだ通信が反復的に必要なため、データの秘匿性が高くネットワークにつながることができない場合には適用困難となることなどである。

本研究では、各企業・機関が保有するプライバシー情報などを含む生データの代わりに、AI により生データを変換した中間表現データのみを共有する仕組みを提案した。本技術は、準同型暗号を用いないため、計算負荷が小さく、機関を跨いだ通信は解析前後の 2 回のみ、データフォーマットの統一規格化が不要という大きな利点がある。これにより、生データに含まれる秘匿性の高い情報の安全性を担保しつつ、多数のデータを利用して AI 解析精度の大幅な向上を可能とした。

ここでは、データを直接共有せず解析するための手法として、データコラボレーション解析を開発した。データコラボレーション解析は、複数のデータ提供者パーティが各自の生データに独自に次元削減を行った中間表現を共有する手法である。

具体的には、データ提供者が共有可能な公開データや人工データを用いて作成したサンプルのデータをアンカーデータとし、各提供者パーティで同一のアンカーデータを共有する。ここでのアンカーデータは解析者には公開せず、各パーティが個別のマッピング関数を用い独自に次元削減を行った生データ、およびアンカーデータの中間表現を解析者の下に集める。マッピング関数は各パーティが任意に決める関数であり、この関数を持たない解析者は中間表現から元のデータを復元することはできない。マッピング関数は、主成分分析による次元削減等(秘匿性向上のため乱数行列を使用した変換を併用)の線形または非線形の行単位の変換関数である。生データ、およびアンカーデータの中間表現を受け取った解析者は、アンカーデータは元々同じ値であるため、アンカーデータの中間表現を基に、多数の生データの中間表現を比較可能な形に揃えた統合可能なデータコラボレーション形式に変換するマッピング関数を作成する。これら変換データを入力として機械学習モデルの学習を行う。サンプルおよび実データセットを用いた健康リスク推定モデル、画像認識モデルなどでの数値実験で、生データ共有に近い認識性能を発揮し、個別分析よりも高い認識性能を達成すること実証した。

また、複数の機関や国から統合された医療データを、プライバシーを守りながら生存解析する需要に応えるため、本技術のデータ連携フレームワークに基づく、新しいデータ連携の cocks 比例ハザードモデルも開発し、その有効性を実証した。

さらに、従来ではシーケンスデータの順序情報を保持して学習を行うことができない文章のような順序情報を持つデータにおいて、文章を単語の分散表現辞書と順序情報の 2 要素に分解して解析を行うことで、データコラボレーション文章解析を可能としており、その有効性も実証した。

#### 参考

- A. Imakura, M. Matsuda, X. Ye, T. Sakurai, Complex Moment-Based Supervised Eigenmap for Dimensionality Reduction, the Thirty-Third AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-19), Honolulu, pp.3910-3918 (2019).
- X. Ye, H. Li, A. Imakura and T. Sakurai, Distributed Collaborative Feature Selection Based on Intermediate Representation, Proceedings of the 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-19), Macao, pp.4142-4149 (2019).
- A. Imakura, T. Sakurai, Data collaboration analysis framework using centralization of individual intermediate representations for distributed data sets, ASCE-ASME J. Risk Uncertainty Eng. Syst., Part A: Civ. Eng., Vol. 6, 04020018 (2020).

- A. Imakura, R. Tsunoda, R. Kagawa, K. Yamagata, T. Sakurai, DC-COX: data collaboration Cox proportional hazards model for privacy-preserving survival analysis on multiple parties, Journal of Biomedical Informatics, Volume 137, 104264, 2023.
- 複数の企業・機関が保有するデータを統合解析できる AI 技術を開発  
[https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5\\_101175.html](https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_101175.html)
  - 分散文章データ統合解析のためのデータコラボレーション文章解析  
[https://www.anlp.jp/proceedings/annual\\_meeting/2023/pdf\\_dir/B1-4.pdf](https://www.anlp.jp/proceedings/annual_meeting/2023/pdf_dir/B1-4.pdf)

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

周回積分型固有値解析による教師あり次元削減手法は、現状では実現し得ない超大規模データの高速な解析を可能とする。このため、現在まで未処理のビックデータの活用や、それらからの新しい価値創出へと繋がることが期待される。

組織間に分散したデータを、秘匿性を保持しながら解析する技術は、医療データ解析では生活習慣病の進行予測による早期治療やメンタル疾患の予兆発見・早期対策、企業データ解析では企業間や企業内での生産・開発データ統合解析による生産性向上、教育データ解析では教育機関を超えた学生データの統合解析による教育効果の増進などが期待される。また、様々な機関にあるデータを、匿名性を維持したまま収集し、AI による分析を行う新たなプラットフォームの確立も期待される。

櫻井のこれらの研究成果は、今後、益々進むデータドリブン社会の中核となるデータ処理、解析を担う社会インフラとして大きく寄与するものと考えられる。

### 2.3.1.2 建部修見「ポストペタスケールデータインテンシブサイエンスのためのシステムソフトウェア

建部チームは、本研究領域で、大規模データ解析のためのシステムソフトウェアとして、ペタバイト規模のデータの高速アクセスを実現する分散ファイルシステム、計算ノード OS、大規模データ処理実行基盤の研究を実施した。ここでは、建部が中核となって開発した広域分散ファイルシステム Gfarm の高度化、ファイルシステム上の分散したデータを効率的に利用するための実行時システム、プラグインを開発した。

Gfarm は、メタデータサーバ、および I/O サーバから構成され、メタデータサーバは、Gfarm 上のファイルのメタデータを一括して管理、I/O サーバは複数存在し、ファイルの内容を保存する。クライアントが Gfarm 上のファイルにアクセスする際、先ずメタデータサーバへアクセスし、どの I/O サーバに目的のファイルがあるかを知り、次に I/O サーバにアクセスしてデータをやり取りする。

ポストペタスケールにおける数万計算ノードからの数百 TB/s 規模のデータの高性能計算では、CPU 性能、メモリ性能の向上、通信性能向上に応じたストレージ性能の向上が求めら

れる。本研究領域で、計算ノード数の増加に応じて、スケラブルにストレージ性能が増加可能な、計算ノード側にストレージを分散配置するストレージアーキテクチャを提案した。

本アーキテクチャでは、ファイルデータの格納場所が近いもの、遠いものがあり、それぞれアクセス性能が異なり、均一ではないという問題がある。ここでは、メタデータの分散・冗長管理、ファイルデータの冗長化・分散アクセス、ローカルストレージの高性能化などを行い、Gfarm に実装した。また、ファイルアクセスの局所性を高めるタスクスケジューリングの実現のため、MPI-IO、ワークフロー実行、バッチキューイングシステム、MapReduce 処理の設計、プラグインなどリリースしファイルシステム上に分散したデータのデータ移動量の自動最小化を可能とした。これらにより、スケールアウトする非均一アクセス性能を持つストレージを実現した。

また、冗長なメモリコピー、コンテキストスイッチを削減することで、他ノードのバッファキャッシュにデータを効率的に転送可能とする Gfarm カーネルドライバ、ネットワークアクセスを高速化するための RDMA (Remote Direct Memory Access) 通信モジュール、アプリケーションの性能低下を抑える OS ジッタ削減モジュールをリリースし、大規模データ処理性能をさらに向上させた。

本研究領域で開発した Gfarm、Gfarm カーネルドライバ、Gfarm 用 RDMA モジュール、Gfarm MPI-IO プラグイン、Gfarm Hadoop プラグイン、Linux 用ジッタ削減モジュール、FUSE (File system in User Space) 用ローカルアクセス最適化モジュール、Pwrake (データ移動を最小とする本研究領域で提案したプロセススケジューリングを行う) ワークフローシステムは公開しており、幅広い産業での利用や、これまでにはない大規模データ処理によるイノベーションに貢献をしている。

本研究領域終了後、建部は、大規模データ解析の実践的評価、大規模データ解析システム、機械学習基盤システムの研究や、次世代ストレージアーキテクチャの研究を実施した。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1) 大規模データ解析の実践的評価 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

本研究は、本研究領域で得られた研究成果を CREST 「ビッグデータ統合利活用のための次世代基盤技術の創出・体系化」の「EBD：次世代の年ヨッタバイト処理に向けたエクストリームビッグデータの基盤技術」に繋げ、実際の大規模環境での大規模データのデータ解析技術を開発した。

実環境において大規模データを解析するためには、データの取得、複雑な実ワークフローの効率的な実行、データアクセスの最適化のみならず、ソフトウェアスタックの頑強さが求められる。本研究では、Pwrake、Gfarm によるすばる望遠鏡データの大規模処理や、大規模メタゲノムデータに対する分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF の提案などを行った。

## ①Pwrake、Gfarmによるすばる望遠鏡データの大規模処理

宇宙全体の進化を知るためには、個々の天体を調べるのではなく、広域サーベイ(広域掃天観測)により、夜空を端から撮影し、銀河物質が全体としてどのように分布しているのかを調べる。ハワイのマウナケアの頂上にある自然科学研究機構国立天文台が運用する世界最大級の望遠鏡「すばる望遠鏡」の広視野撮像装置 Hyper-Suprime-Cam(HSC)は、焦点面に116個のCCDを配置し、遠方の銀河まで解像する高いイメージクオリティで、満月9個分の広さの天域を一度に撮影できる世界最高峰に類する性能を有する。すばる望遠鏡で取得した一つ一つの宇宙画像には、数多くの星や銀河、超新星(大質量星がその一生の最期に起こす大規模な爆発現象)を写すことができ、それらを検出、分類することで、珍しい天体の発見や宇宙全体の様子を知ることができる。ここでの、突発天体の発見、追観測では、迅速なデータ処理が科学的な研究成果を大きく左右する。

本研究では、遠方の超新星を検出、分類し、宇宙膨張の変化を検出するために有用な Ia型超新星(いちえー型と呼ばれる白色矮星の爆発的核融合による超新星)の早期発見のためのすばる望遠鏡 HSC のパイプライン処理の高速化を成功させた。

すばる望遠鏡の CCD が出力するデータ量は、一晩の観測で約 300GB に達する。それから、これらに対して装置特性に由来する補正、明るさ・位置キャリブレーション、画像重ね合わせなどの基本的な 6 種類のタスクの一次処理を HSC パイプライン処理で行い、観測データの約 10 倍の大きさになる研究用データを得る。

このパイプライン処理の内部コンポーネントは、日々機能拡張などの修正が重ねられているため、ソフトウェア開発におけるフォークを避ける必要がある。ここでは、内部コンポーネントの処理内容、アルゴリズムは変更せず、高並列処理による処理時間の短縮を図った。具体的には、ストレージサーバ構成から、計算ノード数でスケールするノードローカルストレージ構成への変更、広域分散ファイルシステム Gfarm の適用、ワークフローシステム Pwrake の拡張・改良を実施することで、I/O 性能のスケールとともに CPU コアの使用効率向上を実現した。

36 ノード、576 コアを用いた実験結果では、ストロングスケーリング実験で 576 コアまで性能がスケールすることを確認し、パイプラインの処理性能は 2.2 倍に向上することを実証した。

## ②大規模メタゲノムデータに対する分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF の提案

ヒトは自身の細胞数の 10 倍以上に相当する細菌を有しているとされており、それらの細菌叢はヒトが食べた物を栄養分に代謝したり、病原性細菌からの感染を防いだりと、ヒトの健康状態の維持や発病の抑制に関与している。一方、これらの細菌叢の異常が人体に及ぼす影響も大きく、生活習慣病や、がん、アレルギー、自閉症等、様々な疾患の原因となる。そのため、細菌叢の群集構造や機能を明らかにすることがこれらの疾患の治療や予防に繋がると期待されている。しかし、ほとんどの細菌は培養が困難であるため、従来手法では解析が容易ではなかった。メタゲノム解析は細菌に対する培養過程を経ずに細菌叢から直接そ

のゲノム DNA を調製することが可能である。これは、ヒトの体内の微生物群集構造を明らかにし、遺伝子プールの変動や環境との相互作用の解明を可能にする。

メタゲノム解析の過程で行われる相同性検索は、未知の DNA 配列をクエリとして、既知の DNA 配列データベース (DB) から相同なものを収集する手法である。現在まで様々なアルゴリズムを用いた相同性検索ツールが開発されているが、検索対象のクエリだけでなく既知の DB も次世代シーケンサーの誕生にともなって大規模なものになっており、既存ツールでは実行時間の肥大化と実行時のメモリ不足が問題となる。

クエリをいくつかのチャンクに分割し、これをスーパーコンピュータのような分散メモリシステム上で並列処理することで高速化を目指す研究が行われている。これらのクエリを分散する手法は、クエリに関して理論上使用ノード数を増加させれば相同性検索時のメモリ不足は発生しない。しかし、多くの未知のゲノム配列が解析されて DB に反映されるといふサイクルが繰り返され、DB 自体の塩基対およびシーケンス数が 1 つのサーバのメモリに収まりきれない程に増大しメモリ不足を引き起こし、さらなる実行時間の増大を招いている。

本研究ではクエリと DB の両方をチャンクに分割しそれらの全組合せに対して相同性検索を並列に実行する分散並列相同性検索システムを開発した。

相同性検索の分散並列実行においては、大量の通信が引き起こす I/O の低速化がスケラビリティを低下させるため、I/O 性能をスケールアウト可能にする必要がある。また、ゲノム解析は複数のツールを連続的に用いて処理するため、将来の拡張のため、MapReduce のようなプログラミングモデルに制限されずに、タスクレベルでの並列処理が可能であることが求められる。これらの課題を解決するため、広域分散ファイルシステム Gfarm と動的ワークフローエンジン Pwrake を用いた分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF を提案し実装した。

提案システムでは、ファイル分割プログラムの高速化、ストレージデバイスに NVMe SSD 等の高速な SSD を使用し、その性能が発揮できるように I/O 処理の高速化など様々な最適化を行った。

その結果、本提案システムは MPI や Hadoop、Spark といった分散処理フレームを用いた既存システムに対して同等以上の性能を示し、NVMe SSD や GPU を搭載した大規模環境におけるストロングスケリング実験では高いスケラビリティが得られることを実証した。また、東京工業大学 学術国際情報センターが運用するクラスタ型スーパーコンピュータ TSUBAME3.0 の 180 ノード用いた実験では、既存の手法では問題となる約 1 億シーケンスで構成される non-redundant DB と約 5 億シーケンスから構成されるデンタルプラークゲノムデータの大規模メタゲノムデータに対して、約 2 時間で相同性検索が可能であることを実証した。

## (2) 大規模データ解析システム、機械学習基盤システムの研究

### 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

気象予測にはスーパーコンピュータによるシミュレーションが用いられ、豪雨、突風、高温などの人類に甚大な被害をもたらす極端気象の予測は、膨大な気象データ、シミュレーションデータの分析による科学的知識で現実味が帯びてきた。データ分析には、気象の大規模データ整備と大規模機械学習によるデータ解析を可能とするシステムの開発が必須である。

本研究では、極端気象予測に必要な大規模気象データの整備、大規模気象データと極端気象予測とを結びつける機械学習手法、大規模気象データによる深層機械学習基盤の開発を行った。

大規模気象データの整備では、可降水量の急変と豪雨などの関連性の学習を想定し、2006年から2018年までの全国合成レーダ GPV (気象庁保有の全国20台の気象レーダから10分間隔で提供される換算降水強度のエコー強度と降水エコーの高さのエコー頂高度データ Grid Point Value)、国立研究開発法人海洋研究開発機構の協力により得た可降水量のデータを収集し、機械学習のためのデータ整備を行った。

大規模気象データと極端気象予測とを結びつける機械学習手法では、時空間分解能が高い Large Eddy Simulation (LES) モデルと時空間データから特徴構造を取り出す Dynamic Mode Decomposition (DMD) を組み合わせた大規模流体解析システムを提案した。

LES モデルでは、従来の気象シミュレーションに比べて時空間分解能が高いため、出力データやデータセットが膨大になる。このため I/O の速度低下やシミュレーション結果の解析が困難になる。

本研究では、LES モデルからの大規模出力データの一時記憶、DMD の読み出しデータ領域として、計算ノードと並列ファイルシステム間に NVMe SSD 等、高速な SSD をバーストバッファとして設けるアーキテクチャを提案し、その有効性を実証した。

大規模気象データによる深層機械学習基盤では、レスポンスタイムのボトルネックとなる大規模学習データの読込性能の影響を排除することに成功した。

大規模分散並列処理は、並列ファイルシステムの数多くの小規模データに対し、多数の計算ノードが一斉にランダムにアクセスするため読込性能が低下する。この影響を抑えるため、従来技術では、予め計算ノードのローカルストレージに必要な学習データをステージングするが、大規模データの場合、このステージングに要する転送時間が著しく増大する。本研究では、並列ファイルシステムの全データを予めステージングするのではなく、学習時間に、学習進捗とは無関係に、以降に必要なデータを計算ノードのローカル SSD に次々プリフェッチする方法を提案した。本提案は、機械学習ライブラリフレームワーク Chainer にミニバッチ生成、プリフェッチをオーバーラップさせ、その段数を増加させる手法を実装し実現した。

筑波大学 計算科学研究センター運営のスーパーコンピュータ Cygnus において評価を行い、ノードローカル SSD に予めステージングされている状態とほぼ同様の性能で大規模データの深層学習が可能であることを実証した。

これらの研究成果は、人類に甚大な被害をもたらす極端気象の高精度予測に必須の基盤技術であり、困難な予測の早期実現に大きく貢献するものと考えられる。また、本研究成果

は、汎用性があり、様々なビッグデータ解析の分散深層学習の効率向上に繋がると期待される。

### (3)次世代ストレージアーキテクチャの研究 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

スーパーコンピュータを用いた大規模データ解析では、CPU、GPU 性能ではなくメモリ容量、ストレージ性能がボトルネックとなることが多い。これは、2012年から2020年の8年間で見ても演算性能は50倍、メモリ容量は3.8倍とCPU、GPU性能の向上に比べメモリ容量が向上しておらず、またメモリにデータを供給するストレージ性能の向上はさらに遅いためである。このため、今後、ビッグデータサイエンス、AIをさらに進めるためには、新たなストレージアーキテクチャが求められる。

本研究では、DRAMに迫る遅延、バンド幅でありより多くのメモリ容量を持つ不揮発性メモリをローカルストレージとした計算ノードとして利用し、分散キーバリューストア、障害発生・復帰時にデータ移動を最小限に抑えるコンシステントハッシングを用いたアドホック分散ファイルシステム(CHFS: Parallel Consistent Hashing File System for Node-local Persistent Memory)を提案、開発した。

このシステムは、ジョブが割り当てられている間、一時的に構成する分散ファイルシステムであり、ステージング領域、並列ファイルシステムに対するキャッシュ領域としても用いられる。現在まで、並列ファイルシステムでは、メタデータとファイルデータ管理を分けて行い性能向上を図ってきたが、計算ノードの総コア数増大によりメタデータサーバの性能がボトルネックになっている。

本提案システムは、メタデータサーバを不要とし、メタデータアクセスのオーバーヘッドの削減、逐次処理、集中データ構造なしのアーキテクチャでスケラブルにメタデータ性能を向上させるものである。また、データをバイト単位でチャンクサイズに分割することでデータアクセス性能をスケラブルに向上させる。さらに、不揮発性メモリ以外のNVMe SSDなどのローカルファイルシステムも適用可能としていることや、オープンソースでの実装で、研究、商用のプラットフォームとしても貢献できるものである。

CHFSは、ファイルシステムインタフェースを提供するchfsクライアントライブラリと、分散キーバリューストアであるchfsdサーバで構成される。CHFSは、通信ライブラリと軽量スレッドライブラリを用いたネットワークサービスライブラリMochi-Margoで実装した。各サーバの不揮発性メモリはpmemkv(key-value datastore framework optimized for persistent memory)を用いてキーバリューストアとしてアクセスする。不揮発性メモリ以外のストレージについても利用可能とするため、キーバリューストアインタフェースをPOSIX(Portable Operating System Interface)でも実装した。

アドホック分散ファイルシステムとして、他ではGfarm/BB、BeeOND、GekkoFSなどが研究されている。Gfarm/BBはデータアクセスの局所性を利用することで、またBeeONDは分散メタデータサーバを用いることで性能向上を行っている。GekkoFSは、各ストレージサーバでメタデータを保持するがSSDに最適化したものである。

I0500 ベンチマークはストレージシステムの性能を評価するためのベンチマークセットである。IOR による読書きバンド幅、mdtest によるファイル作成/削除性能など複数のベンチマークで構成されている。バンド幅のベンチマークの幾何平均でバンド幅値、メタデータ性能のベンチマークの幾何平均でメタデータ性能値を算出し、バンド幅値とメタデータ性能値の幾何平均で全体のストレージ性能値を算出する。

4 ノード不揮発性メモリクラスターでの評価では、CHFS は IOR のベンチマークで、GekkoFS の 6.0 倍の性能を示した。mdtest のベンチマークでは、GekkoFS の最大 4.4 倍の性能を示した。

筑波大学のスーパーコンピュータ Cygnus10 台を用いたメタデータベンチマークでは、Gfarm/BB および BeeOND と比較して 8.6 倍から 23.5 倍の性能を得た。64 台の計算ノードでは、CHFS は 1 台の計算ノードの場合と比較して、I0500 帯域幅スコアで 17.3 倍、メタデータスコアで 15.8 倍となり、スケーラビリティについて、BeeOND や GekkoFS と比較し、帯域幅、メタデータ両方でこれらを上回る性能を得た。

これらの結果から、メタデータアクセスは、Gfarm/BB や BeeOND より低レイテンシかつ高スループットであること、BeeOND や GekkoFS より高いスケーラビリティ性能が得られることを実証した。

上記に加え、CHFS のバンド幅をさらに改善するアーキテクチャとして、バーストバッファとなるキャッシュ機構を備えた CHFS/Cache を提案した。

従来の分散ファイルシステムでのバーストバッファは、ステージイン、ステージアウトの操作が半自動となっており、処理が煩雑、入出力エラーでジョブの失敗や無駄なデータ転送が発生するなど問題がある。また、ファイルの一貫性を保つため、バーストバッファのディレクトリリスティングや状態情報取得でアクセスが抑制されるため、メタデータ性能が劣化してしまう問題がある。本提案システムは、妥当で理解や利用がしやすい範囲で一貫性を緩和し、ユーザ透過でメタデータ性能の劣化が発生しない新たなアーキテクチャである。

設計したキャッシュファイルシステムを実装し、I0500 ベンチマークを用いて性能評価を行った結果、メタデータ性能を犠牲にすることなく、ほぼ CHFS と同様の性能が得られることを実証した。

## 参考

- Masahiro Tanaka, Osamu Tatebe, Hideyuki Kawashima, “Applying Pwrake Workflow System and Gfarm File System to Telescope Data Processing”, Proceedings of 2018 IEEE International Conference on Cluster Computing, pp.124-133, 2018.
- すばる HSC サーベイによるビッグデータ宇宙論  
[https://www.jstage.jst.go.jp/article/jjsai/33/4/33\\_435/\\_pdf/-char/ja](https://www.jstage.jst.go.jp/article/jjsai/33/4/33_435/_pdf/-char/ja)
- Kenta Machida, Osamu Tatebe, “GHOSTZ PW/GF: Distributed Parallel Homology Search System for Large-scale Metagenomic Analysis”, Proceedings of the Third

- IEEE International Workshop on Benchmarking, Performance Tuning and Optimization for Big Data Applications (BPOD 2019), pp.3492-3700, 2019.
- 町田 健太, 建部 修見, “大規模メタゲノムデータに対する分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF の提案”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), Vol.13, No.2, pp.13-27, 2020年9月
  - Takuto Sato, Osamu Tatebe, Hiroyuki Kusaka, “In-situ data analysis system for high resolution meteorological large eddy simulation model”, Proceedings of the 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies, pp.155-158, 2019.
  - Kazuhiro Serizawa, Osamu Tatebe, “Accelerating Machine Learning I/O by overlapping data staging and mini-batch generations”, Proceedings of the 6th IEEE/ACM International Conference on Big Data Computing, Applications and Technologies, pp.31-34, 2019.
  - 科研費 「極端気象予測を拓くビッグデータ機械学習基盤の研究」  
<https://kaken.nii.ac.jp/ja/file/KAKENHI-PROJECT-17H01748/17H01748seika.pdf>
  - Osamu Tatebe, Kazuki Obata, Kohei Hiraga, Hiroki Ohtsuji, “CHFS: Parallel Consistent Hashing File System for Node-local Persistent Memory”, Proceedings of the ACM International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022), pp.115-124, 2022.
  - Osamu Tatebe, Hiroki Ohtsuji, “Caching Support for CHFS Node-local Persistent Memory File System”, Proceedings of 3rd Workshop on Extreme-Scale Storage and Analysis (ESSA 2022), pp.1103-1110, 2022.
  - 科研費 「次世代ストレージアーキテクチャの研究」  
<https://kaken.nii.ac.jp/grant/KAKENHI-PROJECT-22H00509/>
  - CHFS: コンシステントハッシュファイルシステムの設計  
[https://ipsj.ixsq.nii.ac.jp/ej/?action=repository\\_uri&item\\_id=210020&file\\_id=1&file\\_no=1](https://ipsj.ixsq.nii.ac.jp/ej/?action=repository_uri&item_id=210020&file_id=1&file_no=1)

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

すばる望遠鏡データの大規模データ解析は、暗くなる前や増光中の超新星発見や、既存データの再解析につながり、より精度の高い宇宙論分析に大きく寄与するものである。また、本技術はデータ処理と並列実行フレームワークを独立に設計可能である。データ処理部分を粒度の小さなタスクとして実装し、並列実行フレームワークをシステムに応じて適用することで、パイプライン処理の高速化が図られる。そのため、本研究のアプリケーションに留まらず、他の大規模処理に汎用的に利用可能である。

大規模メタゲノムデータの分散並列相同性検索システム GHOSTZ PW/GF の提案は、細菌叢の群集構造や機能の解明に貢献するものである。生活習慣病や、がん、アレルギー、自閉症等、様々な疾患の原因解明、これらの疾患の治療や予防に繋がると期待される。

大規模データ解析システム、機械学習基盤システムの研究は、豪雨、突風、高温などの極端気象の予測を可能とするもので、人類に甚大な被害の回避、軽減に繋がると期待される。

次世代ストレージアーキテクチャの研究は、今後、益々加速されるビッグデータサイエンス、AI 分野において、スーパーコンピュータを用いた大規模データ解析でのストレージ性能に対するボトルネック解消に繋がる。また、ここで開発されたアドホック分散ファイルシステム CHFS は公開しており (<https://github.com/otatebe/chfs>)、幅広い産業での利用や、さらに大規模なデータ処理によるイノベーションに貢献すると考えられる。

建部のこれらの研究成果は、いずれも膨大な大規模データ解析における、ストレージ性能のボトルネック解消に貢献する必須技術である。これらは、今後さらに社会的なインパクトとし顕著に現れ、寄与していくものと考えられる。

### 2.3.1.3 中島研吾「自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境」

中島チームは、本研究領域で、メニーコアの計算ノードを有するポストペタスケールシステムの処理能力を十分に引き出すため、科学技術アプリケーションの効率的な開発、安定実行を可能にするアプリケーション開発・実行環境 ppOpen-HPC を開発した。

ppOpen-HPC は、ppOpen-APPL、ppOpen-MATH、ppOpen-AT、ppOpen-SYS の 4 階層をパッケージングしたオープンソースフレームワークである。ppOpen-APPL は、大規模シミュレーションに適した 5 種の離散化手法(有限要素法、差分法、有限体積法、境界要素法、個別要素法)の並列プログラム開発のためのライブラリ群である。ppOpen-MATH は、多重格子法、可視化、カプラーなど、各離散化手法に共通の数値演算ライブラリ群である。ppOpen-AT は、世界的にほとんど研究されていない性能自動チューニングのための専用計算機言語である。有限差分法などで現れる演算カーネルの計算パターンに着目し、コンパイラではできないコード最適化を提供する。ppOpen-SYS は、耐故障機能に関連する実行支援のライブラリ群である。ppOpen-HPC は、ソースコード、英文ドキュメントとともに MIT ライセンスに基づき公開されている。

ppOpen-HPC 開発では、一般問題向けライブラリの整備が行われ、高性能な並列 H 行列ライブラリは、地震発生サイクルシミュレーションや電磁場シミュレーション等へ、LL 型疎行列格納法に基づく線形ソルバーは二酸化炭素地中貯留シミュレーション等へ、自動チューニング機構は、三次元地震波動伝搬シミュレーション等へ、並列カプラーは大気海洋シミュレーションや地震シミュレーション等へ適用され大きな成果を上げ、国際的に高く評価された。

また、汎用的な多色順序付け用の階層的な並列化手法を提案し、悪条件の連立一次方程式を想定した安定で効率的な疎行列計算向け前処理付き反復法ソルバを持つ ppOpen-HPC の拡

張版を開発した。これにより、従来の反復解法では求解が困難であった量子科学アプリケーションから導出される大規模な固有値問題を解けることも示した。

本研究領域終了後、中島は、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点中核拠点 (JHPCN) の東京大学 情報基盤センターで中心となり、Oakforest-PACS (OFP)、Oakbridge-CX (OBCX) などスーパーコンピューティングシステムの設計、運用をリードした。これらのシステムは、全国の大学、研究機関をネットワークで結んだシステム HPCI ([https://www.mext.go.jp/a\\_menu/kaihatu/jouhou/hpci/1307375.htm](https://www.mext.go.jp/a_menu/kaihatu/jouhou/hpci/1307375.htm)) に組み込まれ、ナショナルフラッグシップシステム「富岳」を支える第二階層として計算機科学・工学の発展に大きく貢献した。

さらに、エクサスケール時代のスーパーコンピュータによる科学的発見の促進加速のため、計算、データ、学習の融合を実現するスーパーコンピュータシステム Wisteria/BDEC-01 とそのソフトウェア基盤 h3-Open-BDEC の開発も推し進めた。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1) Oakforest-PACS (OFP)、Oakbridge-CX (OBCX) の設計、運用

#### 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

#### ①Oakforest-PACS (OFP)

中島は、東京大学 情報基盤センターにて、筑波大学と共同で 2013 年に最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC: Joint Center for Advanced High Performance Computing、<http://jcahpc.jp>) を設立し、国内最大級の計算性能を有する Oakforest-PACS (OFP) システムを設計、導入し、2016 年 10 月より運用を開始した。

OFP は、メニーコアプロセッサ技術を用いた米国インテル社プロセッサ Intel Xeon Phi を搭載し、ピーク性能 25PFLOPS を実現した。運用開始直後 2016 年 11 月の TOP500 で世界 6 位(「京」を上回り国内 1 位)、HPCG は 3 位(国内 2 位)、Green500 は 6 位(国内 2 位)を達成し、「京」の 2019 年 8 月の運用停止から 2021 年 3 月の「富岳」正式稼働までナショナルフラッグシップシステムとしての役割を果たした。

また、OFP は、理化学研究所 計算科学研究センターでの「富岳」の効率的運用のための OS (McKernel) の開発に大きく寄与した。McKernel は、メニーコアアーキテクチャプロセッサの特性に基づき、計算ノード内のスレッド処理を揃え、スレッド間待ち合わせによる性能低下を防ぐ機能や、超並列分散メモリシステム上でのメッセージパッシングを効率的に行う機能等を盛り込む必要があるが、国内でこの開発に使用できる計算機資源は少ないため、メニーコア型クラスタの代表として使用された。

OFP は国内外産学官で実施されているスーパーコンピュータを使用した大規模シミュレーションによる計算科学・計算工学の研究に多大な貢献をしている。顕著な研究成果の例として、以下のようなものが上げられる。

・全地球大気環境シミュレーション(東京大学 大気海洋研究所 佐藤正樹、羽角博康 他)

- [https://www.aori.u-tokyo.ac.jp/coop/files/kikou\\_H30\\_report.pdf](https://www.aori.u-tokyo.ac.jp/coop/files/kikou_H30_report.pdf)
- 地震シミュレーション(東京大学 地震研究所 古村孝志、市村強 他)  
<https://www.eri.u-tokyo.ac.jp/wp-content/uploads/2021/08/2020S04.pdf>  
[https://www.itc.u-tokyo.ac.jp/Seminar/20180905\\_DP\\_WS\\_poster/materials/E3-fujita.pdf](https://www.itc.u-tokyo.ac.jp/Seminar/20180905_DP_WS_poster/materials/E3-fujita.pdf)
  - 二酸化炭素地下貯留シミュレーション(大成建設 山本肇 他)  
<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/files/poster/jh170028-NAJC.pdf>
  - ゲリラ豪雨予測(理化学研究所 三好建正 他)  
[https://www.jcahpc.jp/files/release\\_200821.pdf](https://www.jcahpc.jp/files/release_200821.pdf)
  - ものづくりでの性能評価など(東京大学 新領域創成科学研究科 奥田洋司 他)  
<https://confit.atlas.jp/guide/event-img/aesj2017s/1G13/public/pdf?type=in>  
<https://www2.nagare.or.jp/cfd/cfd32/cfd32papers/paper/F07-3.pdf>

なお、OFP は 2022 年 3 月末で運用を終了しており、現在、JCAHPC で 2024 年 4 月の運用開始を目指し、後継機種 OFP-II (ピーク性能 200PFLOPS 以上を目標)の導入を進めている。

今後のスーパーコンピューティングへの高い性能要求、省電力、脱炭素化から GPU 等の演算加速装置の導入が不可避であり、OFP-II は、GPU 搭載ノードを中心としたシステムとなる予定である。また、国内の大学、研究機関の情報基盤に係わる組織が集結し、次世代先端的計算基盤開発についてのコミュニティ活動 NGACI (Next-Generation Advanced Computing Infrastructure、<https://sites.google.com/view/ngaci/home>)が 2019 年 7 月に設立され、OFP-II についてもこの中で議論が進んでいる。

## ②Oakbridge-CX (OBCX)

Oakbridge-CX (OBCX) は、Intel 社の Omni-Path アーキテクチャを搭載した計算ノード 1,368 台により構成される大規模超並列クラスター型スーパーコンピュータ(総理論演算性能 6.61PFLOPS、2020 年 6 月 TOP500 で 60 位)である。2019 年 7 月から運用を開始した。

全 1,368 ノードの内 128 ノードには、ステージング、チェックポイント、およびデータ集約型アプリケーションをサポートするために、各ノードで NVMe SSD を搭載している。これにより、ステージングを含む高速で効率的なデータ入出力を実現し、大容量データ処理をとともうデータ同化処理等に威力を発揮するものである。また、SSD は、BeeGFS on Demand (BeeOND) を使用し、単一の共有ファイルシステムとして動的に統合できる。データ科学アプリケーションソフトウェア類も充実しており、計算+データ+学習の融合に基づく次世代アプリケーションのためのプロトタイプにもなった。

OBCX は、国内外産学官で実施されているスーパーコンピュータを使用した大規模シミュレーションによる計算科学・計算工学の研究に多大な貢献をしている。顕著な研究成果の例として、以下のようなものが上げられる。

- 全固体電池の電極-電解質界面の DFT ミクロ解析(国立研究開発法人物質・材料研究機構 Bo Gao、館山佳尚 他)

Bo Gao, Randy Jalem, Yanming Ma, Yoshitaka Tateyama, Li<sup>+</sup> Transport Mechanism at the Heterogeneous Cathode/Solid Electrolyte Interface in an All-Solid-State Battery via the First-Principles Structure Prediction Scheme, *Chem. Mater.* 32, 85-96 (2020).

- ・ポリマーの相溶性判定のための全原子自由エネルギー計算(大阪大学 山田一雄、松林伸幸 他)

Kazuo Yamada, Nobuyuki Matubayasi, Chain-Increment Method for Free-Energy Computation of a Polymer with All-Atom Molecular Simulations, *Macromolecules*, 53, 775-788 (2020).

- ・新たに発見された疾患を引き起こす DNA の繰返し配列伸長異常(新潟医療福祉大学 石浦章一、東京大学 新領域創成科学研究科 森下真一 他)

Hiroyuki Ishiura, Koichiro Doi, Jun Mitsui, Jun Yoshimura, Miho Kawabe Matsukawa, Asao Fujiyama, et al., Expansions of intronic TTCA and TTTA repeats in benign adult familial myoclonic epilepsy, *Nature genetics* 50 (4), 581-590

- ・ヒト腸内細菌叢から発見された多様なプラスミド・ファージ配列(新潟医療福祉大学 石浦章一、東京大学 新領域創成科学研究科 鈴木慶彦、森下真一 他)

Yoshihiko Suzuki, Suguru Nishijima, Yoshikazu Furuta, Jun Yoshimura, Wataru Suda, Kenshiro Oshima, Masahira Hattori, Shinichi Morishita, Long-read metagenomic exploration of extrachromosomal mobile genetic elements in the human gut, *Microbiome* 7, 1-16

「2020 年度 HPCI システム利用研究課題募集における新型コロナウイルス感染症 (COVID-19) 対応臨時公募」においては、採択された全国 9 国立大学等の全 13 課題の内、ウイルスのタンパク質の挙動に関連した分子シミュレーション関連の 6 課題が OFP、OBCX を利用する結果となった

([https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/offer/2020\\_covid19.php](https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/offer/2020_covid19.php))。

さらに、東京大学 情報基盤センターの各スーパーコンピュータシステムがもつ最大規模の計算ノードを、最大 24 時間、1 研究グループで計算資源の専有利用ができる公募型プロジェクト「大規模 HPC チャレンジ」(<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/hpc/>)も 2017 年 10 月より開始し、数多くの課題を採択、利用拡大を促進した。中島はこれら活動にも中心的リーダーを果たし、我が国の計算機科学・工学の発展に大きく貢献した。

## (2) Wisteria/BDEC-01 の設計、運用【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

スーパーコンピューティングは、従来の計算科学・計算工学シミュレーションに加えて、データ科学、機械学習等の知見を融合した新しい手法を適用することにより、サイバー空間とフィジカル空間の融合を通じた Society5.0 実現に大きく貢献すると期待されている。

東京大学情報基盤センターは、2015年から、計算+データ+学習 (Simulation+Data+Learning、S+D+L)の融合を実現するプラットフォーム S+D+L 融合スーパーコンピュータシステム Wisteria/BDEC-01 (BDEC: Big Data & Extreme Computing) 構築を進め、2021年8月から正式運用を開始した。

Wisteria/BDEC-01 は、従来のスーパーコンピュータ向けに開発されたプロセッサ (A64FX) 7,680 ノードで構成されたシミュレーションノード群 (Odyssey) と GPU (A100 Tensor Core GPU) を搭載したデータ・学習ノード群 (Aquarius) の2つのサブシステムを持つ特徴的な構成となっている。Aquarius は、各ノード8基のGPUが搭載され、GPU単位の運用を可能としており、利用者の多様なニーズに応えることができる。

Odyssey の総ピーク性能は 25.9PFLOPS、Aquarius は 7.2PFLOPS で合計 33.1PFLOPS、2020年11月のTOP500では「富岳」に続く国内第2位の性能であった。

また、Wisteria/BDEC-01 をプラットフォームとし、S+D+L 融合による革新的シミュレーション手法を実現するソフトウェア基盤 h3-Open-BDEC (h3: Hierarchical、Hybrid、Heterogeneous) の整備を進めた。h3-Open-BDEC は、S+D+L 融合においてスーパーコンピュータの能力を最大限引き出し、最小の計算量・消費電力で計算実行を実現するためのものである。ここでは、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高性能・高信頼性・省電力数値解法と、機械学習による階層型データ駆動アプローチの2つを中心に研究開発を進めている。

Wisteria/BDEC-01、h3-Open-BDEC による S+D+L 融合の試みはハードウェア・ソフトウェア・アルゴリズム・アプリケーションが一体となった取り組みとして、世界的に注目され、高性能計算コミュニティにおける世界的ニュース媒体である HPCwire に記事として取り上げられた。S+D+L 融合は欧米を始めとして世界中でその重要性が唱えられているが、統一的なソフトウェア基盤のアイデアは未だなく、h3-Open-BDEC はその先駆的な存在となった。

h3-Open-BDEC における変動精度演算に基づく新計算原理の開発では、低精度・混合精度演算に加えて、FP21、FP42 等の変動精度演算の活用に向けた予備的検討を実施し、FP32、FP21 では従来の FP64 演算と比べて2倍以上の高速化が達成可能であることを確認した。

S+D+L 融合の開発では、多重格子法、時空間並列化手法、4次元変分法データ同化手法、階層型データ駆動アプローチ (hDDA) の研究開発を実施した。

統合・通信・ユーティリティ開発では、異機種混合コンテナなど異種システム間連成計算 (振幅も展開速度も違う複数の現象系を複合させて現実を再現する計算) 実行環境に向け、ヘテロジニアス環境下での異なるコンポーネント間ファイル経由連携ライブラリ h3-Open-SYS/WaitIO の開発を行った。また、多対多、多対1、シミュレーション+AI連携など、独創的アイデアに基づく多機能カプラー h3-Open-UTIL/MP を提案・開発した。

これらで整備したソフトウェア基盤の基幹部分を Oakbridge-CX システム上に実装し、「観測データ同化による長周期地震動リアルタイム予測」で検証した。本検証結果は、計算科学の著名な国際会議である SIAM (Society for Industrial and Applied Mathematics)

CSE21(Conference on Computational Science and Engineering 21)で発表し、SIAM Newsに記事として取り上げられた。

#### 参考

- HPCwire 記事  
<https://www.hpcwire.com/2021/02/25/japan-to-debut-integrated-fujitsu-hpc-ai-supercomputer-this-spring/>
- Nakajima, K., Matsuba, K., Hanawa, T., Furumura, T., Tsuruoka, H., Nagao, H.,  
Integration of 3D Earthquake Simulation & Real-Time Data Assimilation on h3-Open-BDEC, SIAM Conference on Computational Science & Engineering (CSE21)
- SIAM News 記事  
<https://sinews.siam.org/Details-Page/supercomputer-simulations-of-earthquakes-in-real-time>

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

中島が中心となって設計、運用を行っている東京大学情報基盤センターの OFP、OBCX などスーパーコンピューティング資源は総利用者数2,600人以上の利用があり、学外利用は55%以上である。各システムは、高い計算性能、利用しやすいプログラム開発環境、安定した運用が利用者に評価されている。本施設は、工学・ものづくり、地球科学・宇宙科学、材料科学、生物科学関連分野、医療画像処理を中心としたバイオインフォマティクスなど多種多様な分野で多岐に渡り活用されている。

中島の活動は、国内外の産学官の各機関で実施されているスーパーコンピュータを使用した大規模シミュレーションによる計算科学・計算工学の研究の発展に大きく貢献した。また、最先端研究だけでなく、計算科学・データ科学・機械学習やハイパフォーマンスコンピューティング分野の人材育成にも大きく寄与している。

### 2.3.1.4 堀敦史「メニーコア混在型並列計算機用基盤ソフトウェア」

堀チームは、本研究領域で、ポストペタスケールのメニーコア向けの新しいタスクモデル PVAS (Partitioned Virtual Address Space) およびメニーコアとマルチコアプロセッサ混在型並列計算機環境を想定した PVAS のヘテロアーキテクチャ拡張 Multiple PVAS (M-PVAS) を開発した。また、エクサ時代における故障レジリエンス担保のため、MPI (Message Passing Interface) プログラム実行中にノード故障が発生した場合のアプリの実行継続を可能とする ULFM (User-Level Fault Mitigation) の開発を進めた。

従来のマルチスレッド (OpenMP) やマルチプロセス (MPI) が元来シングルコア CPU を念頭に開発されたものであり、昨今のメニーコアが当たり前になった状況では、CPU の性能を最大限に引き出すことが難しい。本研究で開発された PVAS が提供する新しいノード内並列実行モデルは、まさにこの問題を解決するためのものである。PVAS では、複数のプロセスを同

じアドレス空間に配置することで、マルチスレッドにおける同期のオーバーヘッドや、マルチプロセスにおけるプロセス間通信のオーバーヘッドの問題を解決する。

ULFM の開発は、主たる共同研究者グループ(テネシー大学)で進め、MPI Forum に対し、MPI 標準規格の耐故障性に関する拡張への組み込み活動を進めた。

堀チームは、上記の他、関連する多岐に渡る要素技術の研究成果を創出している。

[https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research/s-houkoku/sh\\_h27/JST\\_1111059\\_10104043\\_2015\\_PER.pdf](https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research/s-houkoku/sh_h27/JST_1111059_10104043_2015_PER.pdf)

本研究領域終了後、堀は、PVAS をより実用的にした Process-in-Process (PiP) を新たに開発するなど本研究領域での研究成果を大きく展開した。また、ULFM は、現在 MPI 標準規格には含まれていないが、ULFM-MPI 見越し、これを利用した実アプリケーションも含めた応用事例が多数出現している。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

PVAS の最大の欠点は、Linux OS を改変していることであり、センター運用されているコンピュータへの適用が困難である。これを回避するために専用 OS を不要とした PiP を新たに開発した。PVAS や PiP と目的を同じとするソフトウェアとしては、米国 SNL(サンディア国立研究所)の SMARTMAP、仏 CEA(原子力・代替エネルギー庁)の MPC などがあるが、専用 OS や新たな言語処理系の導入などの必要性があり、完全にユーザレベルで実装した PiP が導入の容易さ、可搬性という点で優れている。PiP ライブラリは、x86\_64 だけでなく、Arm64、Sparc64(京コンピュータ)上での動作を確認している。また、米国 ANL(アルゴンヌ国立研究所)との共同研究により PiP の利点を生かした MPICH(ポータブルな MPI 実装)の研究開発も PiP と同時並行で進められている。

ULFM は、MPI への標準規格拡張を織り込み、ULFM で提供される関数群や定数群によりジョブ実行途中での利用計算機資源量変化を想定したアプリケーション試作や応用事例が多数出ている。また、それらは Oakbridge-CX 上での評価も実施されている。

PiP の新たなノード内並列実行モデルの提案は、多くの派生研究を生み出しただけでなく、下記の 3 名の学位取得に貢献した。この内 2 名は本研究のメンバーではない。これは PiP が提案する実行モデルの先進性と有用性が認められた結果と言える。

- 1) 島田明男 (2017. A Study on Task Models for High-performance and Efficient Intra-node Communication in Many-core. Ph. D. Dissertation. Keio University. (in Japanese))
- 2) Kaiming Ouyang (2022. Exploring Interprocess Techniques for High-Performance MPI Communication. Ph. D. Dissertation. University of California, Riverside.)

- 3) Sam White (2022. Runtime Techniques for Efficient Execution of Virtualized, Migratable MPI Ranks. Ph. D. Dissertation. University of Illinois at Urbana-Champaign.)

#### 参考

- ・中島研吾, 住元真司, 埜敏博, Urgent Computing に向けたアプリケーション, 情報処理学会 HPC 研究会 178, 1-8, 2021
- ・T.Fukasawa, F.Shazad, K.Nakajima, G.Welleinp, FEM-CRAFT: A Library for Application-Level Fault-Resilience Based on the CRAFT Framework, 2018 Society for Industrial and Applied Mathematics Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (SIAM PP18)

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

堀らが開発した PiP は、オープンソースとして配布可能な状態にあり、堀が保守を継続している (<https://github.com/procinproc>)。また、PiP の功績は、ACM(Association for Computing Machinery)主催の国際学会 HPDC 2018(The 27th International Symposium on High-Performance Parallel and Distributed Computing)において、Best Paper Award を受賞している (<https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/topics/180618/>)。

上記を含め、ULFM の MPI への標準規格拡張を見越した活動の広がりを見せるなど、堀の研究領域終了後の様々な研究活動は、今後の大規模スーパーコンピューティングの基盤ソフトウェア構築に引き続き着実に寄与している。また、「富岳」を使ったゲリラ豪雨予報への貢献や、一般向けの「スーパーコンピュータ『富岳』を知る集い」でのアウトリーチ活動などにも大きな貢献がある。

#### 参考

- ・「富岳」を使ったゲリラ豪雨予報  
<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20210713/pdf/20210713.pdf>
- ・「スーパーコンピュータ『富岳』を知る集い」  
[https://www.riken.jp/medialibrary/riken/pr/news/2019/20191206\\_1p.pdf](https://www.riken.jp/medialibrary/riken/pr/news/2019/20191206_1p.pdf)

### 2.3.1.5 丸山直也「高性能・高生産性アプリケーションフレームワークによるポスト・ペタスケール高性能計算の実現」

丸山チームは、本研究領域で、ポスト・ペタスケールスーパーコンピュータアーキテクチャとして重要性が高い GPU 等のアクセラレータを用いたヘテロジニアスなアーキテクチャを想定し、アプリケーションの生産性と性能を両立する垂直統合型ソフトウェアスタックの研究開発を行った。

従来の GPU 向けプログラミング手法は、ハードウェアを制御することに主眼を置いた抽象度の低いものであり、生産性の低さが大きな課題となっている。本研究領域では、大域アドレス空間モデルを実現するスケーラブルマルチスレッドランタイムを基盤とし、その上に将来に渡って有効なプログラミングモデルを実現するドメイン特化型アプリケーションフレームワークを中心とし開発した。

アプリケーションフレームワークは、特定の計算パターン専用のプログラミングに特化することで自動並列化や通常のコパイラ最適化を超えた高度な最適化を可能とするものである。また、汎用的なプログラムから GPU を含む種々のアーキテクチャ向けに最適化されたプログラムを自動生成する。これらにより、機能的可搬性および性能可搬性、プログラミングコストの大幅削減を目指した。

提案したソフトウェアスタックは、流体計算および分子動力学法を対象として設計した。それらを学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)の大規模ヘテロジニアススーパーコンピュータ TSUBAME2.0/2.5(東京工業大学 学術国際情報センター運用のクラスタ型スパコン)を基盤とし、格子系流体計算など材料分野で広く用いられている Phase-field 法プログラム、N 体問題の高速化手法である Fast Multipole Method(FMM)の高性能 GPU スパコン向け実装を開発した。Phase-field 法プログラムは 2011 年ゴードンベル賞を受賞し、FMM は世界最高レベルの性能を達成している。

ランタイム開発は、これらの参照実装を設計の指針として進め、ランタイムとして共有メモリメモリア向け軽量ユーザレベルスレッドライブラリ MassiveThreads、その分散メモリ版である MassiveThreads/DM、また、PGAS(Partitioned Global Address Space)ライブラリ MGAS 等を開発した。これらはワークスチーリングによる負荷分散機能を有し、FMM や流体計算における AMR(Adaptive Mesh Refinement)等の負荷の不均等性が生じるアプリケーションに特に有効なものである。

これらのランタイムを基盤とし、アプリケーションフレームワークの開発を進めた。

格子系流体計算はその基本計算パターンであるステンシル計算に着目し、ステンシル計算向けドメイン特化言語 DSL(Domain Specific Language)の Physis を開発した。これによって TSUBAME2.0 において高性能と高生産性の両立を実現した。またステンシル計算向けの種々の最適化アルゴリズムを開発し、気象・気候モデルなどの大規模実アプリケーションにおいて最大 1.7 倍の性能向上を達成した。典型的なステンシル計算である格子ボルツマン法による乱流計算の参照実装として、東京都心部の 10km 四方のエリアを 1m 格子で解像し、広域の都市気流解析を行った。空間平均を用いない大規模計算に適した LES(Large Eddy Simulation)モデルの導入に成功している。これらの研究成果は新聞、テレビ等、広くメディアに取り上げられた。また、FMM のような階層的近似計算を伴う粒子間相互作用力の計算を簡便に記述することが可能な階層的粒子法向けフレームワーク TAPAS(Tree-based Adaptively Partitioned Space)を開発した。TAPAS はノード内外および GPU 向けに自動並列化を実現しており、共有メモリメモリアについては MassiveThreads による負荷分散を

実現、Physis と同様に高い抽象度によってプログラミングコストを大幅に削減し、生産性の向上を実現した。

本研究領域終了後、丸山は、GPU 等のアクセラレータを用いた並列機械学習の大規模実行を可能にする並列アルゴリズムおよび高効率実装の研究を実施した。本研究成果は、IEEE Association for Computing Machinery (ACM) The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC) 19 などの並列高性能計算分野の著名な会議にて発表し評価を得ている。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### 大規模並列機械学習の進展 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

ディープラーニングは、十分な計算能力が利用可能となり、大規模データセットで複雑なモデル学習ができるようになったため、コンピュータビジョンから気候分析、宇宙物理学に至るまで、様々な分野で多大な研究成果を上げている。しかし、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) においては、高い精度を求め、より大規模なデータセットで複雑なモデルを何度も反復することや、新たに取り込んだデータやシミュレーション出力に基づき、頻繁にモデル探索、更新を行うなど行われるようになり、訓練収束まで膨大な時間がかかることが問題になっている。ここでは、1つのモデル学習に GPU クラスタを使用するため、GPU の大規模クラスタでの学習高速化が必須である。

従来のスケーリング手法は、ミニバッチのデータセットサンプルを各プロセッサに分割し、データを並列化している。プロセッサはフォワード、バックプロパゲーションを独立に実行し、更新パラメータを同期させる。このため、スケーリングはミニバッチのサンプル数で制限される。また、バックプロパゲーションが完了するまで、各レイヤのアクティベーション保持が必要で、アクティベーションの大きさが入力データサイズに依存するため、GPU のメモリ圧迫を避けるにはサンプルサイズを大きくできない。このため、スケーリングを制限するサンプル数削減は困難となっている。

丸山は畳み込み層の並列化を行うことで、データ並列を超えたスケーリングとメモリ圧迫の両問題を解決する手法を提案した。ここでは、畳み込みレイヤを、サンプル (Sample)、フィルタ (filter)、画像表現である高さ (Height)、幅 (Width)、奥行き (Channel) の 5 つの次元と捉え並列化を検討した。本研究では、入力サンプル分割による空間分解で次元を追加したサンプル並列化、および、チャンネルとフィルタの分割による並列化を提案した。

サンプル並列化は、データセットから数千個のサンプルで構成されるミニバッチをプロセッサ毎に分割、各プロセッサはモデルパラメータの完全なレプリカを持つ。各プロセッサは、ローカルデータサンプルに対し、それぞれ独立にフォワード、バックプロパゲーションを実行し、それに基づきパラメータ更新を行う。

本提案により、メモリ制約のため実行不可能であった大きなサンプルを持つデータセットでモデルの学習を可能とし、学習のさらなる高速化が可能であることを示した。

本提案では、アプリケーションによっては、実行するためのパーティショニングによりメモリ要件が大きくなる。また、更新パラメータの同期でのプロセス(確率的勾配降下法 SGD など)での集団通信アルゴリズム AllReduce の通信が効率的なスケーリングの大きなボトルネックになる。

丸山は、これを超えるチャンネルとフィルタ並列化の3つのアルゴリズムを提案した。これらのアルゴリズムでは、畳み込み層のパラメータを各プロセッサに完全に複製せずさらに分割し、パラメータとアクティベーションを分割する。本アルゴリズムは、モデル並列とデータ並列の両方を可能とするものである。プロセッサに分割されたサブセットは、パラメータの異なる部分について処理が同時に実行されるため同期ポイントが減り、Allreduce は、より小さなデータバッファとより少ないプロセッサ間での通信となるため、通信のオーバーヘッド削減とメモリ圧迫の軽減が可能となる。本提案により、ResNet(Residual Neural Networks)のトレーニング時間を最大4.1倍、Allreduce によるオーバーヘッドを4倍削減可能であることを実証した。

提案したアルゴリズムはオープンソースのフレームワーク LBANN(Livermore big artificial neural network HPC toolkit)で公開している。また、これらの研究成果は、IEEE ACM SC19 など並列高性能計算分野の著名な会議にて発表している。

これらの研究成果は、並列性利用の効果のある追求すべき研究の方向性を示すことになった。これに伴い、ディープラーニングのための並列化ソフトウェアスタックは、一般的な方策として広く認知され利用されるようになった。

## 参考

- Dryden N., Maruyama N., Benson T., Moon T., Snir M., Van Essen B., Improving strong-scaling of CNN training by exploiting finer-grained parallelism, Proceedings - 2019 IEEE 33rd International Parallel and Distributed Processing Symposium, IPDPS 2019
- Dryden N., Maruyama N., Moon T., Benson T., Snir M., Van Essen B., Channel and filter parallelism for large-scale CNN training, International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC, 2019

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

畳み込みニューラルネットワークの進歩は、画像や音声分類、自然言語処理、ゲームなどでインパクトが示され、宇宙論、画像解析医用、気候解析、乱流シミュレーションなど科学は元より、社会・経済にさらにインパクトを与える領域へと広がっている。このような中、生成された膨大なデータや、複雑なモデル生成の現実的な時間での処理技術の開発は喫緊となっている。丸山の研究成果は、これに応えるための重要な方向性や具体的な方法を示すものである。

また、大規模システムを活用して学習を高速化することは、新しいモデルの探索や更新されたデータ統合にかかる反復時間を短縮し、生産性の高いデータサイエンス可能とするものであるため、本研究成果がもたらす効果は極めて大きいものと考えられる。

## 2.3.2 2011年度採択課題(2期)

### 2.3.2.1 塩谷隆二「ポストペタスケールシミュレーションのための階層分割型数値解法ライブラリ開発」

ポストペタスケールシステムなど次世代の並列計算機アーキテクチャにおいて、大規模な数値計算データ処理を要するアプリケーションソフトウェアは、高い演算効率を持つ必要がある。そのためには、入力データ生成や可視化などプレ・ポスト処理から数値解析などソルバ処理に至るまで、全ての処理がスパコン上で行われることを想定し、マイクロプロセッサやメモリなどハードウェアが持つ階層構造を考慮したプログラミングモデルを採用する必要がある。

塩谷チームは、本研究領域で、階層型領域分割法 HDDM(Hierarchical Domain Decomposition Method)技術による大規模数値計算データ処理システムの基盤技術の研究開発を行った。ここでは、主に学術研究や産業界で需要が高い有限要素法 FEM と粒子法による連続体力学シミュレーションに対象を絞ることで高性能が得られるアプリケーション特化型システムソフトウェアの開発を行った。

本研究では、DDM(Domain Decomposition Method)入出力ライブラリ、DDMソルバライブラリ、連続体力学向けDSL、連続体力学系シミュレータの4つの研究開発を行った。

本研究成果の分散メモリ並列向け陽的 MPS(Moving Particle Semi-implicit)法ソルバライブラリ LexADV\_EMPS、領域分割法に基づく線形ソルバライブラリ LexADV\_TryDDM、並列オフライン可視化ツール LexADV\_WOVis など可視化ライブラリその他、多くの研究成果を、ADVENTURE(ADVanced ENgineering analysis Tool for Ultra large REal world)プロジェクトホームページ (<https://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/>) にて一般公開した。

大規模システムシミュレーションを可能とする本研究領域の数値計算ソフトウェアは、高い強スケーリング性能により、「京」の8千計算ノードを用いて、世界トップクラスとなる1,000億自由度規模の有限要素解析に成功している。開発したソフトウェアを用いた一例として、東日本大震災時に宮城県石巻市で発生した津波遡上の状況を大規模かつ三次元でシミュレーションする津波被害予測や被害予防など研究成果があり、様々な用途でスーパーコンピューティングが応用できることを示した。

本研究領域終了後、塩谷は、新規学術分野の大規模計算電磁気学の確立、大規模計算と計算電磁気学の融合に大きく貢献した。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1) 新規学術分野の大規模計算電磁気学の確立 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

本研究領域で得られた HDDM に関する技術やソフトウェアを計算電磁気学分野に応用した研究を実施した。関連分野研究者と連携することで、回転機や MRI (Magnetic Resonance Imaging) など電気機器、電子デバイスの開発設計、携帯電話や医療機器における生体電磁環境問題などを解決する大規模計算電磁気学を推進した。また、本新規分野のコミュニティを形成し、大規模電磁界数値解析手法に関するシンポジウム LSCEM (<https://sites.google.com/view/lscem2023/>) を 2022 年度まで 6 回主催し開催している。

#### ① COCR 法の提案による 160 億自由度の人体モデルの解析

反復法に基づく領域分割法 (DDM) は大規模有限要素解析のための効率的な並列計算手法である。塩谷らは、本研究領域での HDDM を展開し、大規模電磁界解析のための並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE Magnetic (AdvMag) の開発を行った。HDDM は、大規模な構造解析や熱伝導解析、電磁界解析に適用され、構造解析では、1,000 億自由度の解析に成功している。電磁界解析において、HDDM 以外の解析では、自由空間の単純な線電流モデルでの 8 億自由度が最大規模であった。HDDM での解析では、これより大幅な拡大が期待できるが、電場を未知関数としてベクトル波動方程式を有限要素法によって定式化した場合、その係数が複素対称行列となることや、行列が不定性を持つか悪条件で収束率が低いなどの理由で、最大自由度は 2015 年までは 35 億に留まっていた。

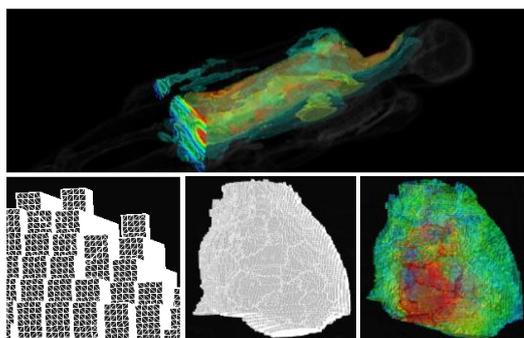
塩谷らは、エルミート行列向け解法である CR (Conjugate Residual method) 法を複素対称線形方程式向けに拡張した COCR (Conjugate Orthogonal Conjugate Residual) 法を提案した。COCR 法は DDM 法の界面問題に対する界面ソルバとして、複素数を含む対称系や非条件系を含む問題に対して有効なもので、反復回数と計算時間の両方が削減可能である。

本提案手法の効果検証のため、東京大学情報基盤センター運用の Oakleaf-FX の全ノードで、メモリ制限が発生しない単純なハイパーサーミア (癌の温熱治療法) のアプリケーション (マイクロ波加温用アンテナ) モデルの 300 億自由度の解析、様々な周波数を持つ 160 億自由度の人体モデルの解析を行った。

ハイパーサーミアは、副作用の少ない癌の温熱治療法として期待されており、数 MHz ～ 数百 MHz の高周波電磁波で、癌組織を高周波誘電加熱により死滅させるものである。ハイパーサーミアを効果的にするには体内の温度分布を把握する必要があり、そのための人体の高周波電磁界解析が重要となる。

ハイパーサーミアの対象となる癌の直径は数 mm であり、例えば、一辺 0.5mm のボクセルで人体を分割し、それらボクセルを四面体に分割した高周波電磁界解析モデルの自由度は 160 億になる。塩谷らは、TEAM29 (Testing Electromagnetic field Analysis Method Workshop Problem 29) で定義されたベンチマークの 1 つである単純な円筒形擬似人体モデルでのハイパーサーミア・アプリケーションモデルの解析を行い、COCR 法の有効性と、計算時間が約 19 分で 300 億自由度のメッシュを解析可能であることを示した。

また、国立研究開発法人情報通信研究機構(NICT)が公開している数値人体モデル(数 mm 角のブロックを数百万個積み上げた人体モデル。MRI 画像などに基づき、電波が人体のどこにどれだけ吸収されるかを正確に再現できる)を計算時間約 10 分で 160 億自由度(解像度 0.5mm)のメッシュを解析可能であることを示した。



160 億自由度数値人体モデルの高周波電磁界問題の大規模可視化

(杉本振一郎, 高橋一郎, 荻野正雄, 武居周,

日本機械学会 計算力学講演会講演論文集 2018.31 (0), 168-, 2018)

## ②COMINRES-QLP の提案による計算時間短縮と高精度化

複素対称線形方程式に特化した反復法 COMINRES-QLP を提案した。また、係数行列の条件数が未知である場合、実用的な計算において有用な新しい停止基準も提案した。これは、解の精度に直結する収束度と相対誤差の関係の規定を可能とするものである。

条件の整った問題では、COCR と比較して最大 10%の計算時間の短縮を実現した。悪条件問題では、COMINRES-QLP 以外の手法では、計算精度は小数点以下 1 桁であり、停止基準を用いた COMINRES-QLP は、どのような問題に対しても高精度化が可能であることを示した。

## (2)大規模計算と計算電磁気学の融合 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

2017 年度に本研究領域と SPPEXA(欧州のエクサ級コンピューティング向けソフトウェアの研究開発プロジェクト)の共同研究事業として、独 EXASOLVERS チーム(リーダー: Gabriel Wittum 独フランクフルト大学教授)との共同研究を始めた。現在も EXASOLVERS チームの UG ソルバと塩谷らの HDDM ソルバについて、ソフトウェアの相互利用や技術交流を推し進めている。

塩谷らは、工学、物理学の分野で広く利用されているオープンソースソフトウェアの数値解析プラットフォームの ADVENTURE を開発しており、EXASOLVERS チームは UG4 を開発している。両者とも世界各国において利用ユーザー数が年々増加しているが、近年需要が高まっている電磁界解析では高機能プラットフォームが存在していない。そのため、ADVENTURE と UG4

との相補的機能強化で電磁界解析アプリケーション分野をリードするプラットフォーム構築を目指した。

ここでは、両国共通の解決すべき課題である落雷時の感電事故防止に向けた非定常高周波電磁界—非定常電流密度の大規模連成解析手法の開発を進めた。

#### ①メッシュスムージング機能を含む GMG 法提案による高精度化、高速化、収束性改善

感電事故防止または事故発生時の負傷度を軽減することを目的として、数値人体モデルを用いた数値シミュレーションによる人体インピーダンスや電流密度分布の評価手法の検討を進めた。

これらの解析では大規模な連立方程式が用いられ、これをいかに効率よく高速に解くかが求められている。本研究では、高速化手法として、人体電流密度解析手法の一つである SPFD (Scalar Potential Finite Difference) 法に、行列規模にかかわらず収束性が一定である GMG (Geometric Multi Grid) 法を導入する手法を提案した。

GMG 法は、有限要素法や有限差分法において、ボクセルの頂点に未知数を設定する問題に広く用いられるが、ボクセルの重心に未知数を設定する SPFD 法を用いた人体解析に GMG 法を適用した例はなかった。

先行研究では、連立方程式の高速解法としてブロック ICCG (Incomplete Cholesky Conjugate Gradient) 法が提案されているがこの方法を用いても多くの反復が必要となる。評価の結果、本提案の GMG 法は、ブロック ICCG 法に比べて反復回数を大幅に削減可能であることを示した。また、スレッド数と粗格子の数によっては、計算時間が大幅に短縮されることを示した。さらに、マルチカラーオーダリングを用いることで、マルチカラーオーダリングを用いたブロック ICCG 法に比べ、本提案手法は並列性能を大幅に向上可能であることを示した。

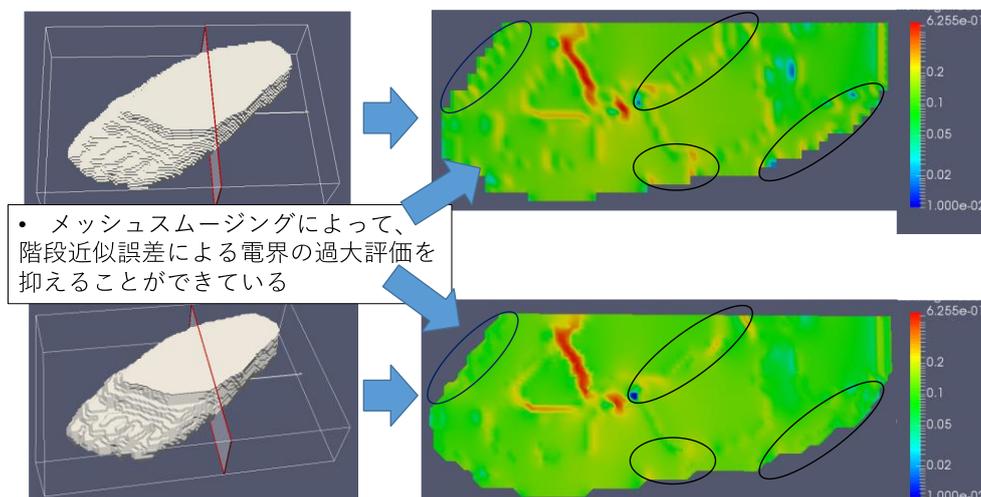
数値人体モデルを用いる数値解析は、1 辺 1~2 mm 程度のボクセルにより人体を近似するため大規模計算が必須であり、また、得られる電界強度の値は皮膚と脂肪などの異材境界の階段状の角点付近で階段近似誤差が生じる。このため、本来トレードオフとなる数値解析の高精度化と高速性の両立が求められる。ここでは、異種材料境界における複数の非構造格子を用いた有限要素解析が可能な UG4 をベースに、メッシュスムージング機能を含む GMG 法を開発した。

本研究では、階段近似誤差低減のため、数値人体モデルにマーチングキューブ法とラプラススムージングを、四面体や三角柱等の異なる要素タイプの混合により実現する平滑化機能を開発することで、階段状の異材境界を滑らかにし、接触電流密度解析の高精度化を実現した。また、メッシュ平滑化により、平滑化前のボクセルモデルと比較して更に増えた計算量に対処するため、混合要素に対応した並列 GMG 法を開発し、数値解析を高速化した。

ここでは、本来 2 種類の異材境界を平滑化するマーチングキューブ法において、3 種類の材料が隣接する境界のメッシュ平滑化手法を世界で初めて提案し、本手法による接触電流密度解析の高精度化に成功した。また、高精度化計算の高速化に向け、平滑化したメッシュ

に対し、混合要素に対応した並列 GMG 法を適用した。その結果、計算の高速化を実現したことに留まらず、メッシュ平滑化により幾何マルチグリッド法における反復法の収束性を改善できることを世界に先駆け示した。

- ボクセルモデル



数値人体モデルのメッシュスムージングによる高精度化

(野村政宗, 武居周, 第 33 回「電磁力関連のダイナミクス」シンポジウム SEAD33, 2021)

## ②CG 法への擬似 4 倍精度導入提案による収束性改善、高精度化、反復回数削減

高周波有限要素電磁界解析の並列化の一手法である反復型領域分割法における部分領域境界間インタフェース問題に対して、CG (Conjugate Gradient) 法に基づく反復ソルバに擬似 4 倍精度を導入することで収束性を改善する手法を提案した。

CG 法は、解析領域全体を重ならない部分領域に分け、部分領域内部の有限要素解析を、部分領域境界間インタフェース問題の 1 反復毎に解き、インタフェース問題の反復が収束した時に解析領域全体の解を得る手法である。部分領域同士は独立して計算できるため高い並列性が期待できる手法である。

しかし、一般に解くべき自由度が増大するほど、使用メモリ量が 2 乗のオーダーで増加することや、インタフェース問題の収束性が悪化する。解の精度を向上させることで、収束性の改善が可能であるが、倍精度浮動小数点型の有効桁により反復法における演算精度に限界が生じる。また、反復法により得られる解は打ち切り誤差が含まれるため、部分領域問題の高精度化が課題となる。

塩谷らは、部分領域問題における反復法に対して、倍精度の約 2 倍の有効桁を有する擬似 4 倍精度を適用することによって、近似解の精度向上、従来の倍精度演算では収束しない問題においても収束特性の改善が可能であること、反復回数の削減に繋がることを示した。

## 参考

- Sugimoto, S., Takei, A., and Ogino M. “Finite element analysis with tens of billions of degrees of freedom in a high-frequency electromagnetic field”. Mechanical Engineering Letters, Vol.3, Paper No. 16-00667-16-00667, 2017
- Takei, A., Ogino, M., and Sugimoto, S. “High-Frequency Electromagnetic Field Analysis by COCR Method Using Anatomical Human Body Models”. IEEE Transactions on Magnetics, Vol.54(3), Paper No.0018-9464, 2018
- Liu, L., Sekiya, K., Ogino, M., and Masui, K. “A COMINRES-QLP Method for Solving Complex Symmetric Linear Systems”. IEEJ Transactions on Power and Energy, Vol.140(12), 2020, pp. 832-841
- 杉本振一郎, 1,000 億自由度規模の電磁界解析を可能とするための, 階層分割型数値計算フレームワーク ADVENTURE\_Magnetic の高並列化・高速化研究, スーパーコンピューティングニュース, Vol20, No. Special Issue2, 2018.  
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL20/special2/09.201808SP-14.pdf>
- Nomura, M., Nakamura, Y., Tarao, H., Takei, A., “Contact Current Density Analysis Inside Human Body in Low-Frequency Band Using Geometric Multi-Grid Solver”. IEICE Transactions on Electronics, Vol. E103-C, No.11, pp.588-596, 2020
- Nomura, Y., Tarao, H., Takei, A., “Analysis of Current Density Inside Human Body Using Geometric Multi-Grid Method”. IEEE Transactions on Magnetics, Vol. 55, No. 6, 2019, DOI: 10.1109/TMAG.2019.2903320
- Takei, A., Kawai, H., Shioya, R., Yamada, T., “High-frequency electromagnetic field analysis using pseudo-quadruple precision in subdomain local solver”, Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol. 8, No. 2, pp.194-210, 2021
- 科研費「異なる数値計算プラットフォームの相互的構築」  
<https://kaken.nii.ac.jp/ja/grant/KAKENHI-PROJECT-18KK0278>

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

高橋産業経済研究財団などの民間助成を受け、癌の温熱療法の効果を定量的に評価するための高周波電磁界-熱伝導連成解析システムの研究に取り組んだ。

本研究では、癌の直径数 mm に対し、1 辺 0.25mm のボクセルで人体を分割し、さらに四面体に分割した高周波電磁界モデルは、その自由度が 1,300 億になる。ボクセル由来の階段形状での電界反射や回折による精度低下を抑えるスムージングなどを施すとさらに自由度は増加する。

従来、電磁界解析での並列化が進まず、電磁界解析で扱える規模の制限から、高周波電磁界-熱伝導連成解析で扱えるモデルの規模が限られていた。塩谷らの本研究領域終了後での

数百億規模の自由度の解析の成功が、高周波電磁界-熱伝導連成解析システムの実現性を現実のものとした。本研究では、塩谷らが達成した 1,300 億自由度(2019 年)の並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE Magnetic(AdvMag)と ADVENTURE プロジェクトの並列熱伝導解析ソルバ ADVENTURE Thermal(AdvThermal)を用いた高周波電磁界-熱伝導連成解析システムの開発を進めている。副作用の少ない癌の温熱治療法ハイパーサーミアのより効率的な癌治療の今後の進展が期待できる。

また、本研究領域終了後の高周波電磁界解析ソフトウェア ADVENTURE\_FullWave、ならびにその技術移転により完成した波動音響解析ソフトウェア ADVENTURE\_Sound をそれぞれオープンソースソフトウェアとして東京大学 ADVENTURE Project によりリリースした。

2022 年度より、高周波電磁界解析手法の実用化を目指し、ソニーグローバルマニュファクチャリング&オペレーションズ株式会社と宮崎大学(本研究領域の研究者武居周が所属)とで JST A-STEP「大規模・複雑構造を有する 5G 通信機器設計に向けた高性能電磁界解析手法の確立」による産学共同研究を進めている。

#### 参考

- ・高橋産業経済研究財団研究助成事業，医療応用を見据えた高周波電磁界-熱伝導連成解析システムの大規模化，2020 年度～2021 年度(代表者：杉本振一郎)  
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL22/special/06.202009SP.pdf>
- ・JST A-STEP トライアウト「大規模・複雑構造を有する 5G 通信機器設計に向けた高性能電磁界解析手法の確立」(代表者：武居周，2022 年度～2023 年度)  
<https://projectdb.jst.go.jp/grant/JST-PROJECT-22712307/>

### 2.3.2.2 滝沢寛之「進化的アプローチによる超並列複合システム向け開発環境の創出」

多くの高性能計算アプリケーションは特定のシステムを想定し、その上で高性能を達成するよう開発・最適化されている。そのため、既存アプリケーション資産のポストペタ以降へのシステム移行では、システム世代間の性能可搬性が低くなる。

滝沢チームは、本研究領域で、書き直し困難な規模のアプリケーション資産を対象にコードを段階的に再構成する分離作業の HPC リファクタリングの研究を実施した。

ここでは、性能可搬性の阻害要因を取り除く事例について、頻出する最適化事例を集約・体系化することで、性能可搬性を維持、向上するための実用的なコード最適化ガイドラインを構築した。また、これら最適化事例からなるリファクタリングカタログを公開した。

分離だけでは性能低下が生じるものに対しては、それぞれのシステム特有の性能最適化情報を階層的に抽象化し、アプリケーションコードとは別に表現し、管理・利用する仕組みのフレームワーク Xevolver を構築した。

Xevolver フレームワークは、高速フーリエ変換(FFT)、代数的多重格子法(AMG)、疎行列ベクトル積(SpMV)など汎用性の高い計算を、アプリケーションプログラムは極力修正せず高い性能を達成する数値計算ライブラリとして、抽象化・コード変換することで性能可搬性

を改善する。抽象化できないものに対しても、システム、アプリケーション特有のコード修正を、ユーザ定義変換として定義する仕組みを Xevolver およびその周辺ツールで実現した。ここでは、将来の超並列複合システムを想定し、OpenACC (Open ACcelerator) 向けのループ最適化やデータレイアウト最適化、MPI (Message Passing Interface) 通信隠蔽等のためのコード修正をユーザ定義コード変換として表現、活用できることも示した。また、ユーザ定義コード変換のルールを記述するための高水準インタフェースとして、ディレクティブを含む Fortran のダミーコードで変換を記述する Xevtgen を開発した。さらに、Xevolver や Xevtgen を中心としたツール群として Xevolver Tools を実装し、変換の記述と適用を容易にするとともに、Xevtgen だけでは記述できない変換ができる機能を拡張した。

上記のような、これまで手動で行われてきた作業を分離して記述、ノウハウ化し、自動化する実用性の高いフレームワークは、新たなシステムへの移行の簡易化に大きく貢献した。

本研究領域終了後、滝沢は、次世代高性能計算システム向けプログラミング環境の創出、高性能計算システムの新しい応用分野の創出を推し進めた。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1) 次世代高性能計算システム向けプログラミング環境の創出

#### 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

次世代高性能計算システムは、異種複数のプロセッサが搭載され、現在よりもさらにヘテロ化・複雑化が進むと予想される。このため、将来の高性能計算システムで性能を十分引き出すプログラミング環境の研究開発を行った。特に OpenCL や SYCL といった標準プログラミングインタフェースを用いつつ、多様なプロセッサの性能を引き出すことに成功した。研究成果は、国際論文誌 Parallel Computing のジャーナル論文や、著名な国際会議論文として掲載された。

#### ① OpenCL-like プログラミングによる異種混在プロセッサシステムへのオフロード

種々のプロセッサや計算資源が混在する環境で並列処理を行なう規格の OpenCL (Open Computing Language) を多様な計算環境に適応させる OpenCL-like オフロードプログラミングフレームワークを開発した。

本研究では、ベクトルプロセッサと主記憶を PCI Express カードに搭載したベクタエンジン (VE)、VE を制御する PCI Express カード接続の x86 サーバのベクタホスト (VH) で構成される NEC SX-Aurora TSUBASA (SX-Aurora) を例にとり開発した。

VE はプログラムのベクトル長が長いものを実行するのに最適であるため、ベクトルフレンドリーなループやカーネルを VE にオフロードすることでシステム性能を最大限引き出せる。これは、GPU コンピューティングと比較して、異種汎用プロセッサに対するオフロードプログラミングの例は少ない。ここでは、標準 OpenCL の実行モデルが適合しない SX-Aurora に対し、性能とコード移植性のトレードオフを考慮し開発を行った。

OpenCL プログラムは、ホストコードとデバイスコードから構成され、ホストコードがコンピューティングデバイスを制御する。提案フレームワークは、ホストコードを標準的な OpenCL ホスト関数 C/C++ で記述する。このため、他のコンピューティングシステム用に書かれた既存 OpenCL のホストコードが移植可能となる。ホストと VE 上で実行されるデバイスの両コードを C++ で、VH と VE 間の連携を OpenCL ホスト関数で記述し、プログラムのベクトル化可能な部分を VE にオフロードする。また、デバイスコードの移植性のため、デバイスコード生成にメタプログラミングを提案した。これは、OpenCL 用の既存メタプログラミングフレームワーク BOAST との連携が可能である。

評価の結果、VH と VE を適切に使い分けることができ、SX-Aurora の能力を引き出すことで性能向上が可能であることを示した。本アプローチは SX-Aurora だけではなく、OpenCL の実行モデルが適合しない他のアクセラレータにも有用となる。

## ②neoSYCL による異種混在プロセッサシステムへのオフロード

オフロードプログラミングの生産性をさらに向上させるため neoSYCL を提案した。

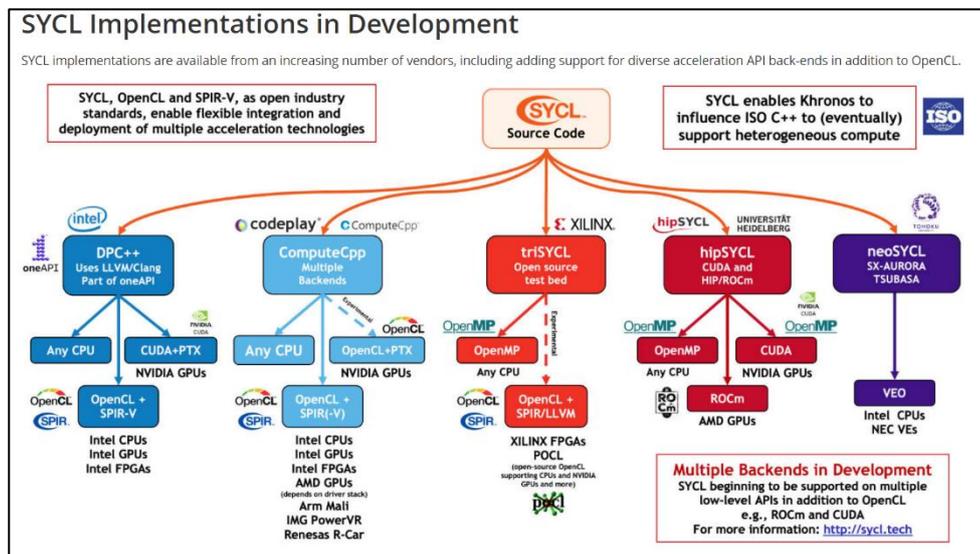
本提案は、OpenCL-like オフロードプログラミングにおける、ホスト、デバイスコードの 2 種類のコード、およびホスト、デバイスコードを連携させるグルーコードの記述による生産性低下の問題を解決するものである。

SYCL はシングルソースのプログラミングモデルであり、単一の C++ ソースで、種々アクセラレータ (GPU、FPGA など) 混在のヘテロジニアスアーキテクチャコードを記述する標準規格である。従来、SX-Aurora に適合する SYCL はなく、SYCL 実装が必要とするポータブル中間表現 SPIR (Standard Portable Intermediate Representation) などの提供もなかった。本研究では、ソースコードレベルでカーネルを分離し、どのコンパイラでもコンパイルでき、アプリケーション実行の一部を自動的に VE にオフロードできる新しい手法の neoSYCL を提案した。

評価の結果、アプリケーションの性能に依存するカーネル部分のみを VE にオフロードする既存の専用 API の VE0 (Vector Engine Offloading) と同等性能が確保でき、プログラミングは、生産性を大幅に向上可能であることを示した。この neoSYCL は GitHub に公開している。 (<https://github.com/Tohoku-University-Takizawa-Lab/neoSYCL>)。

また、neoSYCL は、主要な SYCL 実装の一つとして広く知られるようになり、今後、標準規格の議論に参加予定である。

これらの研究成果は、HPCI (革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ) や JHPCN (学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点) の拠点であり、2020 年 10 月に運用を開始した、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ AOBA にて、適用が進められている。



SYCL を策定している Khronos Group Inc. の資料 (2021 年)

## (2) 高性能計算システムの新しい応用分野の創出 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

高性能計算システムは主に学術分野の数値シミュレーションの高速化を目的として発展してきた。現在でも数値シミュレーションは高性能計算システムの重要な応用分野であるが、それに加えてデータ科学や量子計算など新しい応用分野や、防災減災といった社会的要請の強い用途にも用いられるようになってきた。本研究では、高性能計算分野において量子アニーリングを効果的に利用するための検討や、緊急時に通常ジョブを別ノードのメモリやストレージに退避し、緊急ジョブを実行する仕組みなどの研究開発を実施した。これらの成果は、国際論文誌や著名な国際会議論文として発表されており、さらに、東北大学サイバーサイエンスセンターのリアルタイム津波浸水被害予測システム(内閣府)の実運用において中核技術として利用された。

### ①アニーリングスケジュール制御による量子アニーリング効果の最大化

量子アニーリングは、最適化問題に適用可能なメタヒューリスティクスであり、解きたい最適化問題の評価関数を物理系エネルギー関数のハミルトニアンに見立て基底状態を探索するものである。量子揺らぎの初期状態の非常に大きな数多くの状態の重ね合わせを時間経過とともに小さくし状態探索することで、最終的に基底状態が選ばれ、問題の最適解に近づく。

量子アニーリングのアニーリングスケジュールでハミルトニアン進化を一時的に停止する手法は、基底状態確率の改善や、解の導出時間短縮に繋がる。しかし、一時停止時には最

適位置近傍に配置させていなければならない、離れた場合、性能向上が期待できなくなる。最適位置を求めるには、アニールを含むプロセスが必要で、多くの問題を解く場合、解を求める時間が長くなり、効率性、高速性の優位性が失われる。

本研究では、最適な一時停止位置の決定に必要な時間の短縮手法を提案した。本提案は、リアルタイムでのスケジュール調整を回避するため、複数の類似問題に分解できる問題や、繰り返しサンプリングされる問題で、クラス単位の最適スケジュールを予め導出し再利用できるようにするものである。

本提案を NP 完全問題である部分和问题で評価し、本手法が一時停止のないフォワードアニリングより 3.4 倍高速化が可能であることを示した。停止時間に基づいて最適停止位置のシフトを推定する本手法は、最適スケジュールを推定するためのアニール回数を減らすことにも繋がる。

## ②減災などのための緊急コンピューティング

大規模科学計算システムは、計算資源量/計算時間の予めの申告/予約を行い使用する通常ジョブと、予約のない緊急ジョブの利用がある。緊急ジョブは、地震、津波、暴風雨、洪水など災害発生時の被害軽減、犠牲者を減らす減災などタイムリーな意思決定を行う極めて緊急性を要する重要な計算である。緊急ジョブ対応で最も広く使用されている信頼性の高い手法は、専用インフラを準備することであるが、頻度が少ないため、膨大なリソースが無駄になる。そのため、緊急ジョブの共有インフラ利用が進められているが、通常ジョブによる緊急ジョブの大幅遅延や、緊急ジョブによる通常ジョブの復帰・処理時間増加などが問題になる。

本研究では、共有ヘテロジニアス環境での効率的利用を可能とする並列ジョブスケジューリング手法を提案した。本研究では、ベクトルホスト (VH) とコプロセッサのベクトルエンジン (VE) で構成された SX-Aurora を例にとり開発した。

本手法は、VH と VE 間メモリの命令単位ではなくプロセス単位の部分的プロセススワッピング PPS (Partial Process Swapping) を利用した優先実行機構と、緊急ジョブの先取り、通常ジョブの復帰・処理時間高速化を実現するジョブスケジューリングアルゴリズム UJFB (Urgent Job First with Backfilling) から構成される。

本研究では、緊急のリアルタイム津波浸水被害予測シミュレーションにおいて、緊急ジョブの先取りジョブスケジューリングアルゴリズムが有効であることを示した。また、実際の 3 つのワークロードを用い、従来の 4 つのジョブスケジューリングアルゴリズムと比較した。その結果、PPS によるプロセススワッピング時間は無視できるほど短く、UJFB は、通常ジョブの復帰・処理時間を大幅に増加させることなく、緊急ジョブの遅延をほとんど発生させないことを示した。

共有ヘテロジニアスシステムにおいて、緊急ジョブをサポートする新しい優先実行機構とジョブスケジューリングの研究は本研究が初めてのものである。

### ③リアルタイム洪水シミュレーション

異常気象などにより、記録的な豪雨がしばしば大洪水で被害をもたらす。洪水被害を最小限に抑えるためには、河川の水位や洪水規模を事前に予測することが重要である。このための洪水シミュレーションは、次の降雨データが到着する前の 20 分程度でシミュレーションを完了する必要がある。

本研究では大規模な洪水氾濫を予測する Rainfall-Runoff Inundation (RRI) モデルを使ったリアルタイム予測のための RRI コード最適化と、計算資源量予測手法の提案、開発を行った。

RRI コードの最適化では、メモリ負荷が高い RRI モデルのシミュレーションコードを最適化しベクトル計算システム SX-Aurora に実装した。RRI コードは中間結果を高い頻度で出力・保存する必要があるため、RRI コードをファイル I/O 処理とカーネル計算に分割し SX-Aurora の異なる種類のプロセッサに割り当て、並列化の MPI と OpenMP を応用したハイブリッド MPI で実装した。

計算資源量予測手法の提案では、システムを共有する他ユーザへの影響を低減するため、洪水氾濫予測に使用する共有計算資源量を最小化する資源需要推定手法を提案した。

評価の結果、提案手法は、固定量の計算資源を確保する場合と比較して、計算資源を 75% 削減することができ、20 分以内で洪水氾濫シミュレーションが完了可能であることを実証した。この事前の必要計算資源量予測は、降雨データに合わせて洪水シミュレーションの必要最小限の資源の割り当てを可能とするものである。

#### 参考

- Takizawa et al. “OpenCL-like offloading with metaprogramming for SX-Aurora TSUBASA”. *Parallel Computing*, Vol.102, 2021, 102754.
- Ke et al. “neoSYCL: a SYCL implementation for SX-Aurora TSUBASA”. *The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region*, 2021, 50-57.
- Zielewski et al. “A method for reducing time-to-solution in quantum annealing through pausing”. *The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region*, 2022, 137-145.
- Agung et al. “Preemptive parallel job scheduling for heterogeneous systems supporting urgent computing”. *IEEE Access*, Vol.9, 2021, 17557-17571.
- Shimomura et al, “A Real-time Flood Inundation Prediction on SX-Aurora TSUBASA”. *29th IEEE International Conference on High Performance Computing, Data & Analytics (HiPC2022)*, 2022.

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

異種混在プロセッサヘテロジニアスシステムでのオフロードプログラミングの生産性向上を目的とし提案した neoSYCL は、SYCL 標準化提案活動とともに日本電気株式会社と共同研究開発を行っており実用化を進めている。

実行中の通常ジョブを退避して緊急ジョブを実行する仕組みは、日本電気株式会社と研究開発を実施しており、研究成果は内閣府のリアルタイム津波浸水被害予測システムに使用され、実運用につながっている。

([https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/newsimg/tohokuuniv\\_press\\_20190205\\_02\\_jusyoubi\\_RTi.pdf](https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/newsimg/tohokuuniv_press_20190205_02_jusyoubi_RTi.pdf))

滝沢の高性能計算のためのプログラム高速化・高度化技術は高く評価され、三井共同建設コンサルタント株式会社との共同研究につながった。本共同研究では、降雨データを基に必要計算資源量予測を含むリアルタイム洪水シミュレーションで優れた研究成果を既に上げている。

([https://www.mccnet.co.jp/img/technology/technology\\_report11.pdf](https://www.mccnet.co.jp/img/technology/technology_report11.pdf))

滝沢らのヘテロジニアス大規模計算システムにおけるこれらの高速化・高度化技術は、量子アニーリングのスケジューリング技術などすそ野の広い展開を見せており、さらに、防災、減災に繋がる多大な貢献をしている。これらの研究成果は、多様な科学技術分野に貢献している東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ AOBA の中核技術となっており、我が国の科学計算分野の拡大や底上げにも確実に貢献していると考えられる。

### 2.3.2.3 千葉滋「ポスト・ペタスケール時代のスーパーコンピューティング向けソフトウェア開発環境」

千葉チームは、本研究領域で、大規模計算システムのプログラミングのモジュラリティに着目し研究を実施した。

ポストペタスケール時代には、並列規模が増大した異種混在型ハードウェアを活用できるソフトウェアを、高い計算精度、品質を保ち開発する必要がある。このため、ソフトウェア開発は人件費・期間とも負担が大きいものになる。また、従来からの膨大なライブラリ資産があること、多くのアプリケーションプログラムが長い年月をかけて少しずつ拡張されているため、新規開発が困難な状況にある。

このようなソフトウェア開発環境の中、千葉チームでは、領域特化プログラミング言語 DSL をホスト言語のライブラリとして実装する埋め込み型領域特化プログラミング言語 EDSL (Embedded DSL) を用いた高性能計算のためのソフトウェア基盤、開発ツールを研究した。EDSL により、ユーザの利便性は向上し、ソフトウェア開発者は最適化や型システムなどホスト言語の機能が利用可能となる。

本研究では、従来の汎用言語の Fortran や C、C++ ではなく、Java と Ruby を基にしたソフトウェア基盤、開発ツールを開発し、従来の技法を駆使し開発したアプリケーションプログ

ラムに近い実行性能を達成した。そして、抽象度の高い記述で、開発容易性、保守性が改善されることを実証した。

具体的には、Java をホスト言語として用い、MPI や GPU を用いる EDSL の Bytespresso を開発し、Java 風の言語で従来の C や Fortran に匹敵する性能を得た。また、産業界でのプログラム需要が増えている Ruby 上で GPU プログラミングを行うための言語基盤 Ikra を開発した。ここでは、動的言語のための型推論系を研究開発し、ステンシル計算を行う Ruby プログラムから型推論した上で CUDA (GPU 向けの C/C++言語の統合開発環境) コードを生成可能とした。

2017 年度に本研究領域と SPPEXA の共同研究事業として、SPPEXA の ExaStencil グループとの共同研究を始めた。ここでは ExaStencil グループが開発を進めているマルチグリッド法のステンシル計算向け DSL の ExaSlang と同等の抽象化を、本研究成果の Bytespresso で実現した。

本研究領域終了後、千葉らは、新しい視点を取り入れ創出した DSL の先進的な設計技術の提案などを行い、DSL をより広く汎用的な知見として展開することに成功した。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### 領域特化プログラミング言語の新しい設計技法【科学技術上の発見や発明】

ホスト言語のライブラリとして実装する EDSL は、実行時にエラー検出されるため、プログラミング段階では、メソッドチェーンが有効かどうかのチェックができないという欠点があった。

メソッド呼び出しを連鎖させて利用できるライブラリ API (Fluent API) は、トークンをメソッドチェーンスタイルで記述することで EDSL を表現でき、可読性、コード補完によるユーザビリティの向上が可能である。本研究では、メソッド呼び出しの連鎖の誤りを、型検査器で検出可能にする Fluent API の実装を提案し、その生成器 typelevelLR を開発、公開した。(https://github.com/csg-tokyo/typelevelLR)

typelevelLR は、LR 文法に対応し、構文量に対しコンパイル時間の増加が線形に収まる。本提案では、各メソッド識別子を 1 語と考え、メソッドの並びを文とみなし、正しい連鎖か否かは文法の構文検査と同じという新しい視点を導入した。LR 文法では、与えられた文に対し、右から左へ還元し、最終的に開始記号を得られるか検査する。連鎖の正誤検査は型検査器による構文検査であり、構文検査可能な Fluent API を提案した。本提案では、構文検査時に動作させる抽象機械のプッシュダウンオートマトンを型定義によって表現することで実現した。プッシュダウンオートマトンは、従来の正規文法しか扱えない決定性有限オートマトンより上位の文法クラス (LL(1)、LR 文法など) の対応が可能である。

オートマトンは、入力に応じて状態遷移することで計算を行う抽象機械である。オートマトンをうまく構築し、正しい文が与えられた場合、受理状態に遷移し、正しくない場合、受理状態以外に遷移、もしくは途中で動作を停止させることで正誤判定する。

プッシュダウンオートマトンは、スタックを持つ有限オートマトンである。初期状態のスタックは空になっており、入力を受け取った際、状態遷移を行うが、遷移先は入力とスタックの一番上にある記号により決まる。状態遷移と同時にスタックに対して 1 つ以上の記号の追加・削除を行うこともできる。与えられた文の全ての語を消費した受理状態でスタックが空である場合、正しいと判定する。

LR 文法は途中が曖昧でも結果的に文構造が決まればよいものであるため、遷移先の状態が曖昧になり、各メソッドがどのような型を返すべきか自明でなくなる。本提案では、LR 構文検査アルゴリズムをオートマトンに翻訳した LR オートマトンを型で表現し LR 文法への対応を可能にした。

入力を消費せずに状態だけを遷移させる  $\epsilon$ -遷移は、状態を遷移させるだけでなくスタックを操作することも必要であるが、Java 言語等の型システムではメソッド呼び出しを行うことなく型を変化させる仕組みが存在しない。本提案では、Scala 言語等がもつ高度な型システムを利用し、 $\epsilon$ -遷移にともなう曖昧な状態を再帰呼び出しによって表現し解決した。

あるメソッド呼び出しの中で同名のメソッドを再帰的に呼び出すと、入力を消費せずに異なるレシーバ型から計算を再開できる。しかし、 $\epsilon$ -遷移に対応する再帰的に定義されたメソッドは戻り値の型の推論が困難で Java 言語等の比較的簡単な型システムは定義できない。本研究では、型クラスやクラステンプレートを用いたメタプログラミングによって戻り値の型を計算、指定することでこの問題を解決した。

Intel Xeon E5-2637v3 Haswell 3.50GHz の CPU、512GB のメモリ、Ubuntu18.04 搭載環境での評価では、300 個のメソッド呼び出しからなる連鎖であっても C++(g++5.4.0) の場合 50 秒程度、Haskell(ghc 7.10.3) の場合 3.5 秒程度、Scala コンパイラ(scalac v2.11.6) の場合 10 秒程度でコンパイル可能であることを示した。

上記を含むこれまでの千葉らの研究により、より複雑な Fluent API も型検査器で検査できることが明らかになってきた。構文検査される Fluent API の構築の煩雑さは Fluent API 生成器によって実利用が加速され、EDSL の新しい設計技法として普及していくと期待される。

本研究成果は著名な国際会議 OOPSLA'19(Object-Oriented Programming, Systems, Languages & Applications) で発表され Distinguished Artifact Award を受賞した。また、一連の研究成果について高い評価を得、国際会議 Software Language Engineering 2022 において基調講演を依頼され実施した。

## 参考

- Tetsuro Yamazaki, Tomoki Nakamaru, Kazuhiro Ichikawa, and Shigeru Chiba, Generating a fluent API with syntax checking from an LR grammar, PACMPL, vol.3, no. OOPSLSA, 2019, pp.134:1-134:24
- Shigeru Chiba, People do not want to learn a new language but a new library (Keynote), ACM SLE 2022, pp.1.

・ [https://www.jstage.jst.go.jp/article/jssst/39/3/39\\_3\\_33/\\_pdf/-char/ja](https://www.jstage.jst.go.jp/article/jssst/39/3/39_3_33/_pdf/-char/ja)

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

ソフトウェア基盤、開発ツールとして開発した MPI や GPU を用いる EDSL の Bytespresso や、GPU プログラミングを行うための言語基盤 Ikra は、分散並列型スーパーコンピュータや GPU マシンで動作するアプリケーションソフトウェアの開発に向けて活用が進められている。Bytespresso については、民間企業と共同研究開発を実施し、既に当該企業内の開発に活用されている。

DSL の設計技法は、千葉らの研究により、関連研究が活発化しており、一方で千葉らはエッジコンピューティング型 IoT システムのための DSL などへの展開も進めている。これらの研究は、今後の社会インフラを担うシステムの技術進化の底上げや加速に著実に貢献するものと考えられる。

千葉は、ソフトウェアの仕様変更やバグフィックスでの修正漏れなど監視するソリューション「Sider Scan」を展開、提供している株式会社 Sider の社外取締役役に 2022 年 4 月に就任している。([https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000013.000054556.html](https://prt看imes.jp/main/html/rd/p/000000013.000054556.html))

### 2.3.2.4 南里豪志「省メモリ技術と動的最適化技術によるスケーラブル通信ライブラリの開発」

南里チームは、本研究領域で、エクサスケール規模での利用に耐える通信ライブラリとそれを用いたスケーラブルなアプリケーションの実現を目指し、省メモリ通信ライブラリ ACP(Advanced Communication Primitives)の提案・設計・実装と、動的通信最適化技術、アプリケーション性能解析技術 NSIM-ACE の研究を実施した。

計算機アーキテクチャの並列度の大規模化にともない、大規模並列化に対応したスケーラブルなソフトウェア開発が求められる。並列プログラミングにおいて最も広く用いられている通信インタフェース MPI(Message Passing Interface)は、各 MPI ライブラリ開発グループがスケーラビリティ向上を図っている。しかし、MPI は、送信・受信命令の対による message passing モデルであるため、それぞれのプロセスが通信相手のプロセス数に比例した大きさで待ち合わせのためのメモリ領域を必要とする。また、一度通信した相手と、その後、通信しないことを明示できないため、プログラム中で通信パターンが変わった場合でも、確保済みのメモリ領域は保持し、新しい通信相手のためのメモリ領域を新規に確保する。プロセス数増加に対し、通信ライブラリが使用するメモリ量は、最悪値でプロセス数の二乗に比例し増大するため、プロセス増加に伴うメモリ消費量が、計算のスケーラビリティを低下させる。

南里チームは、効率的な通信性能と省メモリを両立し、エクサスケール計算環境での高スケーラビリティを実現する通信ライブラリ ACP を開発した。

ACP は、片側通信とアトミック操作を前提とした通信プロトコルにより省メモリ性と低遅延性の両立を目指した。既存の両側通信では、待ち合わせのための一時的なメッセージのバ

バッファがプロセス数に応じて必要となるが、片側通信では、バッファが不要、同期が不要で低オーバーヘッドとなる。

ACP ライブラリは基本層と中間層で構成される。基本層は、通信抽象化層となっており、プロセス間の待ち合わせ不要な PGAS (Partitioned Global Address Space) モデルとすることで、省メモリ化を実現した。PGAS は、プロセス分割された大域アドレス空間に対するメモリ操作として、データの転送元や転送先の空間が割り当てられているプロセス状況に依存せず、非同期処理を行い、message passing モデルにおける待ち合わせ用のメモリ領域を不要とするものである。

中間層は、データライブラリとチャンネルライブラリで構成される。データライブラリは、グローバルメモリ空間上で分散データ構造を操作するインタフェース群であり、グローバルメモリ上での大域的なデータ配置を最適化し、データ転送のオーバーヘッドが小さいプロトコルとアルゴリズムを提供する。チャンネルライブラリは、アプリケーション中で頻繁に現れる、プロセス間の同期を伴うパターン通信を簡潔に表記する手段として、チャンネルとマルチチャンネルインタフェースを提供する。これらは、必要に応じてメモリ領域の確保と解放を明示するインタフェースとなっており、使用メモリ量を必要最小限にするものである。

ACPライブラリには複数のMPIプログラムをACPで連結させるACP+MPI機能を実装した。これは、個々のMPIプログラムの参加プロセス数を少なくしてMPIによる消費メモリ量を抑制しつつ、MPIプログラム間の通信をACPで行うことで全体のメモリ消費量削減を図るものである。これにより、既存MPIプログラムをベースとした、スケーラブルなアプリケーション開発が容易となる。これらの ACP ライブラリは一般に公開している。  
(<https://github.com/project-ace/ACP>)

本研究領域では、MPIで書かれた並列プログラムのACPによる実装を行った。分子軌道計算プログラムOpenFM0では、マスターワーカー型のプログラムにおいて、負荷分散のためのグローバルカウンタの操作、およびワーカー間のデータ共有を、それぞれACPの遠隔アトミック操作とデータライブラリを用いて実装し、メモリ消費量を削減できることを確認した。また、OpenFM0の簡易版に対してACP+MPI機能を用いることにより、省メモリ化が達成できることを確認した。電磁流体コードでは、ステンシル計算におけるHalo通信と、その通信に依存する計算をHaloスレッドと呼ぶ専用のスレッドに任せることで通信の隠蔽を図った。さらに、Halo通信を関数として定義し、pack/unpackを含めた最適化を適用して、通信の効率化を確認した。重力N体シミュレーションでは、粒子の移動、および領域の再分割に伴って発生する不規則な通信を、ACPのメモリコピーと遠隔アトミック操作で実装することにより、通信の効率化が図れることを示した。

動的通信最適化技術は、集団通信および隣接通信の動的最適化技術を開発した。集団通信の動的最適化手段としては、実行時のランク配置やトポロジー、負荷状況に応じてアルゴリズムを選択する動的アルゴリズム選択技術を実装し、有効性を確認した。また、ネットワークの混雑状況に応じてパケットの送信間隔を調整するパケットペーシング技術を集団通信に適用し、Tofu (Torus fusion) インターコネクタでの効果をシミュレーションと実測で確

認した。隣接通信については、複数の NIC(Network Interface Card)を用いた多次元トラス網を対象として、NIC を有効に活用して通信速度を向上させる動的最適化技術を開発し、Tofu での効果を確認した。

NSIM-ACEは、本研究領域で開発する通信最適化技術やアプリケーションの性能解析を目的として開発した通信シミュレータである。これは、MGENプログラムと呼ぶ擬似プログラムで表現された通信パターンと計算負荷に対し、対象のネットワークのトポロジーや各種パラメータに応じてパケットの動作をシミュレートするもので、通信路の衝突による性能低下まで見積もることが出来る。評価検証では、通信パターンによる通信性能特性の違いをNSIM-ACEで再現できることを確認した。

本研究領域終了後、南里は、ACP ライブラリの実装技術を応用し、複数の並列アプリケーションを結合した連成計算分野に応用するための連成計算フレームワーク CoToCoA(Code-To-Code Adapter)の研究開発を加藤雄人教授(東北大学)、深沢圭一郎准教授(京都大学)、三宅洋平准教授(神戸大学)との共同研究として進めた。また、省メモリ通信の取り組みとして新たなアイデアのNVDIMM(Non-Volatile Dual In-line Memory Module)上のメッセージキューイングシステムを提案、実装した。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1)省メモリ非同期通信ライブラリ技術の応用 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

#### ①連成計算フレームワーク CoToCoA の提案・評価

従来の計算機実験では、異なるシミュレーションコードを繋げて連成計算を行う場合、計算機リソースの制約とともに、異なる支配方程式の多様な時間・空間スケールのシミュレーションコードの連結のため、多大な工程数と人的リソースの制約が大きな課題となる。

このため、従来、個々の計算は独立に行われ、ファイルに出力された計算結果を参照して初期条件に反映させる弱連成計算が行われ、現象間の動的な結合を扱えなかった。

コード結合による強連成計算を構築する場合、部分プロセス空間内で独立に動作する複数のコードが高効率かつ正しく情報伝達を行う必要があるため、メモリ一貫性に配慮した上でリモートメモリアクセス方式に基づいた並列プログラムを記述するなど、各コードの中身や構造の大幅な書き換えが生じる。このため、個々のプログラムに関わり、プログラムの構造や中身を熟知した組織や研究者で、かつ計算機科学分野の知識と経験のある限られた人材での構築が必要となる。また、開発されたシミュレーションコードは目的に特化されたカスタムメイドとなり、可読性や互換性がなく汎用的な使用、流用は困難なものとなっていた。

南里らは、複数の計算モデルに対し、各プログラムの独立性を可能な限り維持しつつ、モデル間のデータ交換や制御を高効率に行う強連成シミュレーション構築のためのコード間結合フレームワーク CoToCoA を提案・開発し公開した。

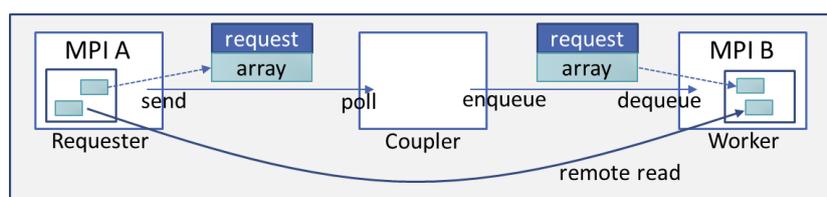
(<https://github.com/tnanri/cotocoa>)

ここでは、各プログラムに極力手を加えず、データ転送機能を持たず、参照するコードのデータフォーマットを知らなくても強連成シミュレーションを可能とすることを目指した。

CoToCoA は、各プログラムからコード間通信に必要な機能のみ分離し、各プログラムには各コードの通信部分だけを追加するものであり、MPMD (Multiple Program Multiple Data) モデルに基づくコード間結合フレームワークである。結合対象の各コードは、全プロセス空間を分割した部分プロセス空間のサブコミュニケータ内で従前通りの計算を進め、必要に応じて他のコードとの情報のやりとりを行う。サブコミュニケータは、各プログラムと MPI プロセスの部分集合から構成されるものであり、それらを監視し、必要に応じて制御するコンダクタプログラムを動作させることで、全体を一つの MPI 並列プログラムとして複数モデル間の協調動作を実現した。

ここでは、計算要求を発行する側プログラムのサブコミュニケータの Requester、Requester からの request に応じてプログラムを選択、空いているプロセス群に request を転送するコンダクタプログラムの Coupler、要求を受け取る側プログラムで Coupler からの request に応じてプログラムを実行するサブコミュニケータの Worker の 3 種類から構成される。コンダクタプログラムの Coupler は、コード間情報伝達の管理、同期、排他制御を担っている。これらにより、結合対象コードのプログラム修正、および実行性能への影響が最小化される。

プラズマ粒子-流体連成計算を CoToCoA に実装した強連成計算コードを用いて、九州大学情報基盤研究開発センター運営のスーパーコンピュータシステム ITO(いと：2018年1月に稼働開始した九州大学伊都キャンパスの名を冠したシステム)約 1000 ノードを利用した性能評価を行った。その結果、計算性能の低下は各コード単体での計算時間の 1%以下と限定的であることを示し、大規模並列環境においても高い演算性能を有する連成計算コードが実現可能であることを示した。



連成計算フレームワーク CoToCoA の構成

## ②CoToCoA による地球磁気圏環境-人工衛星帯電の連成物理シミュレーション

CoToCoA の、具体的な物理計算モデルとして地球磁気圏環境-人工衛星帯電結合系の連成計算モデルの開発を行った。

人工衛星は、設定された運用期間中は安定動作させる必要があるが、人工衛星が運用される宇宙空間は、地球磁場により荷電粒子が多量に捕獲されている放射線帯であるため、荷電粒子に起因した帯電・放電現象、材料劣化や絶縁破壊により誤作動や故障が発生する。特に、

宇宙天気じょう乱時には、人工衛星に宇宙プラズマ粒子が衝突し、異常帯電が発生、その放電が人工衛星の故障原因となる。

地球磁気圏で観測される現象は、マルチスケール、マルチフィジックスであり、様々な空間的・時間的スケールで起こるプロセスの結果として現れる。磁気流体力学 MHD (Magnetohydrodynamics) コードは、数分から数時間の時間スケールと地球磁気圏の空間スケールで発生する太陽風の変動に対する磁気圏の応答をシミュレートするために使用される。PIC (Particle-In-Cell) プラズマ粒子コードは宇宙空間を満たす無衝突プラズマの第一原理シミュレーション手法あり、地球磁気圏内の数十億個の電子の運動を個別に計算し、地球磁気圏から惑星への電子析出過程を 1 秒以下の時間スケールで計算するのに使われる。

南里らは、Requester に MHD コード、Worker に粒子コードを割り当て実装した CoToCoA で、地球磁気圏環境－人工衛星帯電結合系の連成プログラムを開発した。本プログラムでの連成計算は、粒子コードの帯電計算の遅延が MHD に影響しない非同期性を有し、帯電計算に必要な環境データ (プラズマ密度・温度) を MHD コードから随時取得できる。

スーパーコンピュータシステム IT0 を使い、2010 年の米国の静止衛星 Galaxy15 の故障を再現したシミュレーションで評価した結果、CoToCoA による連成計算が実現でき、衛星電位計算および連成計算通信は概ね MHD 計算時間内に隠蔽できることを示した。

### ③NVDIMM 上の通信バッファによるスケーラブルな非同期通信レイヤの開発

MPI は、プロセス間のメッセージパッシングのため、内部でバッファ領域を多く確保する。このバッファ領域が、計算機の大規模化に伴い増大し、アプリケーション用のメモリ領域を圧迫する。南里らは、多くの容量が必要な全対全通信用のバッファ領域を、安価で低消費電力の NVDIMM 領域に配置し、DRAM 領域をアプリケーション用に確保する NVDIMM 上の通信バッファによるスケーラブルな非同期通信レイヤの提案を行った。

NVDIMM は、容量単価が DRAM より安価で集積度の高い不揮発性メモリを DIMM スロットに装着する記憶デバイスである。これは、DRAM バスに載り、読み書き遅延時間が数  $\mu$  秒と SSD の数十分の一で高速であること、電源を落としてもデータが失われないなど、DRAM と SSD の間に位置づけられるものである。そのため、高速小容量の DRAM と、低速大容量の NVDIMM によるハイブリッド構成の主記憶層は、アクセス速度と大容量化の両立を実現する将来の主記憶構成として期待されている。

NVDIMM のアクセス遅延時間は、DRAM の数百～数千倍であり、通常の演算の利用は困難であるが、南里らの提案の通信用バッファ領域の利用としては、ネットワークの遅延時間が  $1\mu$  秒程度であることから十分実用的なものである。さらに、プログラム性能への影響が大きい通信のために、DRAM の一部の領域に高速バッファ領域を確保し、実行時に適切に使用バッファを選択することで、プログラムの性能を維持しつつ計算機の大規模化への対応も可能とした。従来の通信ライブラリは単一の主記憶層が対象となっており、このようなハイブリッド構成の主記憶層を対象としたものは存在しない。南里らの提案は、NVDIMM の特性を活かし、スケーラブルな通信ライブラリを実現できる新たな手法となる。

本研究では、通信ライブラリの基盤となる 2 つのバッファ領域を持つメッセージパッシング機構を開発した。バッファ領域の 1 つは通常のメモリ領域、他方は不揮発性メモリ上での領域とし、受信側の高速バッファの空き情報から実行中に任意のプロセス間で使用バッファを切り替えるプロトコルと、プログラムの実行状況に応じ重要な通信相手に優先的に高速バッファを割り当てるバッファ選択機構を開発し実装した。

本提案は、通信隠蔽に必要な Eager プロトコル (MPI がサポートしている非同期通信) のバッファ領域として、DRAM だけでなく NVDIMM も利用可能としており、通信用の DRAM の消費を最小限に抑えつつ、長メッセージの通信隠蔽を可能とした。

評価の結果、InfiniBand の通信遅延と NVDIMM のアクセス遅延が同程度であることを確認した。これにより、通信性能を落とすことなく、大規模並列計算での通信バッファによる DRAM 消費を大幅削減できることを示した。本研究成果は大学 ICT 推進協議会 2020 年度年次大会優秀論文賞を受賞した。(https://axies.jp/news/2754/)

本研究成果は、斬新なものであり、今後の計算科学やデータ科学におけるプログラムのスケラビリティ向上に大きく貢献するものと期待される。

#### 参考

- Takeshi Nanri, Proposal of Interface for Runtime Memory Manipulation of Applications via PGAS-based Communication Library, Workshop on PGAS programming models: Experiences and Implementations (PGAS-EI), 2018
- Keiichiro Fukazawa, Yuto Katoh, Takeshi Nanri, Yohei Miyake, Application of cross-reference framework CoToCoA to Macro- and micro-scale simulations of planetary magnetospheres, 7th International Symposium on Computing and Networking Workshops, CANDARW 2019
- Yuto Katoh, Keiichiro Fukazawa, Takeshi Nanri, Yohei Miyake, Cross-reference simulation by Code-To-Code Adapter (CoToCoA) library for the study of multi-scale physics in planetary magnetospheres, 2021 Ninth International Symposium on Computing and Networking Workshops (CANDARW), 2021.12.
- 科研費「スケラブル通信ライブラリを用いた次世代惑星電磁圏連成計算技術の創出」  
<https://kaken.nii.ac.jp/ja/grant/KAKENHI-PROJECT-17K18798/>
- 三宅洋平他, 「マルチスケール宇宙プラズマ連成シミュレーションの研究」  
<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/download/final/jh210047-NAH.pdf>
- 科研費「NVDIMM 上の通信バッファによるスケラブルな非同期通信レイヤの開発」  
<https://kaken.nii.ac.jp/ja/grant/KAKENHI-PROJECT-19K11991/>

- ・南里豪志, 大江和一, 吉田英司, 大辻弘貴, 林英里香, DIMM スロット装着型不揮発性メモリ上の RDMA によるメッセージキューイングシステムの試作, 大学 ICT 推進協議会 2020 年度年次大会  
[https://axies.jp/\\_files/conf/conf2020/FA1-4.pdf](https://axies.jp/_files/conf/conf2020/FA1-4.pdf)

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

南里らが提案した CoToCoA により、連成計算の技術的ハードルが下がり、異種コードの動的結合を容易に構築可能となった。本研究成果は、今後、新たなコード結合のアイデア創出にも繋がり、惑星圏科学に限らず様々な分野でのブレークスルーをもたらすものと期待される。

南里らが提案した NVDIMM の特性を活かしたスケーラブルな通信ライブラリは、従来にはなく斬新なものである。NVDIMM は将来の記憶デバイスとして期待されており、高速小容量の DRAM と、低速大容量の本デバイスによるハイブリッド構成の提案は、今後の大規模並列計算システムにおいて、計算科学・データ科学における計算プログラムのスケーラビリティ向上のためのキー技術になると期待される。

これら提案手法は様々な分野で利用される九州大学情報基盤研究開発センター運営のスーパーコンピュータシステム ITO にて実証検証や実運用へと進むと考えられ、多様な分野の研究の底上げ、研究加速、研究成果創出に大きく貢献するものと期待される。

### 2.3.2.5 藤澤克樹「ポストペタスケールシステムにおける超大規模グラフ最適化基盤」

藤澤チームは、本研究領域で、ポストペタスケールに向けて、大規模かつヘテロなシステムでの世界最高性能の大規模グラフ解析および数理最適化システムの開発と評価などを行った。

従来は、計算中心であったハイパフォーマンスコンピューティング分野においても大規模なデータ処理を中心に扱うアプリケーションが増加している。Graph500 は並行探索、最短路探索をはじめとする最適化、極大独立集合などのグラフ解析などの複数のグラフ処理カーネルからなるベンチマークにより計算機の性能を評価しランキングを行うものである。グラフ解析はサイバーセキュリティ、創薬、データマイニング、ネットワーク解析などの分野において必要とされる重要な計算カーネルとして位置づけられている。Graph500 ベンチマークでは 1 兆点を超えるような巨大グラフを扱うため、グラフのデータを複数台の計算機ノードに分散して配置する必要がある。藤澤チームは、次世代のスーパーコンピュータ上で大規模なグラフの高速な探索処理を行うソフトウェアの開発を進めた。

大規模グラフ解析では、超大規模ネットワーク(数兆頂点)に対する探索解析アルゴリズムにおいて、データ構造の工夫とグラフの特性を考慮した探索アルゴリズムの開発により、計算量と通信データ量の削減に成功、京コンピュータを使用し Graph500 ベンチマーク 4 期(第 8、10、11、12、13 回)で世界第 1 位を達成した。また、メモリの多階層化を考慮するこ

とにより、高速性と省電力性を両立したアルゴリズムを提案・開発し、Green Graph500 ベンチマーク 7 期連続(第 1~7 回)世界第 1 位を達成した。

また、大規模グラフ処理ライブラリ ScaleGraph や高階層のメモリ・ストレージを考慮した大規模グラフ処理ソフトウェアを開発・公開した。

大規模グラフ処理ライブラリ ScaleGraph は、グラフカーネル(グラフ間の類似性の定量評価のためのカーネル関数)を実装するビルディングブロックとして機能し、利用者は、数十億頂点以上の大規模グラフに対し汎用的に使用できる。これは、従来のグラフ解析ツールの標準的機能のページランク、最短路、重要性指標のアルゴリズムなどに加え、高速な疎行列ベクトル積など大規模並列性を備えている。また、PGAS 言語(Partitioned Global Address Space language: MPI など分散メモリ型モデルに対し、複数計算ノードにおいて、大域アドレス空間、大域データを仮想的に提供し、データのグローバルビューを確保することにより、より高生産なプログラム開発を目指した言語)の X10 を用いて一元的に記述されているため、1 台の PC からスーパーコンピュータまで利用可能である。

大規模グラフ処理ソフトウェアは、超大規模グラフ処理を支援するための階層型データ管理機能を備えたストレージ・メモリストアを実現する技術である。ここでは、Out-of-core なグラフ処理カーネルのインスタンスとして、不揮発性メモリを考慮したOut-of-coreな BFS(Breadth-first search: グラフ探索手法の幅優先探索)の実装と、GPUアクセラレータを考慮したMapReduceプログラミングモデルに基づくGIM-V(Generalized Iterative Matrix-Vector multiplication)によるグラフ処理実装の開発を行った。

BFS実装に関しては、ビッグデータ処理の省電力性能のGreen Graph500ベンチマークにおいて、ビッグデータカテゴリで3位、4位(2014年6月)を1台のサーバで達成し、大規模メモリが必要なアプリケーションにおける不揮発性メモリの利用有効性を示した。この大規模グラフ処理ソフトウェアにおける研究成果は、データアクセスがイレギュラーなタイプのアプリケーションでのアルゴリズムも考慮しており、容量が大きくバンド幅が低いデバイスにおいても、一定の性能を達成できることを示すものとなった。これらは、様々な記憶デバイスでメモリ階層が深化する将来の計算機に向けて有望なものとなった。

数理最適化システムでは、大規模な数理最適化問題である半正定値計画問題 SDP(SemiDefinite Programming)に対する並列ソルバの開発と評価を行った。

SDP は、現在最も注目されている数理最適化問題の一つであり、組合せ最適化、データマイニング、量子化学、制御分野など幅広い応用が可能である。ここでは、計算量とデータ移動量の正確な推定、疎性やサイズなどのデータ特性と性能値の見極めなどアルゴリズムの世界最高性能の並列ソルバの開発に成功し、東京工業大学学術国際情報センター運営のスーパーコンピュータ TSUBAME2.5 上で 1.774PFlops(4080GPU)を達成した。

上記の他、スーパーコンピュータの応用促進として、ヒト・モノの移動に関する数理・物理モデルによる現象の表現・再現・予測に取り組み、AI が不得意とする見えないデータ・過去のデータにない現象に対して最先端理論(Algorithm Theory) + 大規模実データ(Big

Data) + 最新計算技術(Computation)で予測や制御を可能するための共同研究を多数の企業と進めた。

本研究領域終了後、藤澤は、本研究領域の研究成果をさらに発展させ、スーパーコンピュータを用いた超大規模グラフに対する探索アルゴリズムの開発と評価、最短ベクトル問題に対する大規模並列ソルバーの研究開発、深層学習モデルに対する効率的な敵対攻撃方法の開発と評価など、多岐に渡り研究、開発を実施した。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

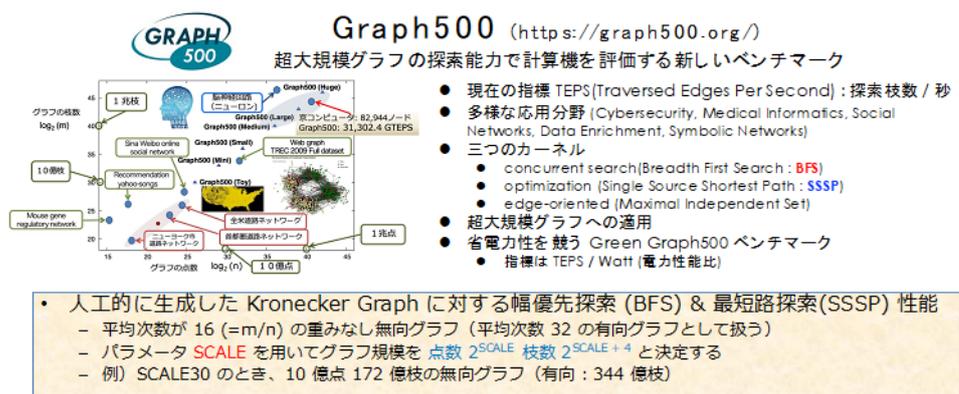
## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1) スーパーコンピュータを用いた超大規模グラフに対する探索アルゴリズムの開発と評価 【新しい分野の融合/新分野や新しい潮流の創出への貢献】

藤澤らは、理化学研究所、株式会社フィクスターズ、富士通株式会社との共同研究で、次世代のスーパーコンピュータ上で大規模なグラフの高速な探索処理を行うソフトウェアの開発をさらに進めた。

本研究では、「複数計算機ノード間でのグラフ隣接行列の効率的な分割方法」、「冗長なグラフ探索を削減するアルゴリズム」、「数千~数万台規模の高速ネットワークで接続された並列計算機上での通信性能の最適化」、「マルチコアプロセッサ上でのメモリへのアクセス最適化」の先進的なソフトウェア技術を高度に組み合わせることにより、今後予想される実データの大規模化および複雑化に対処し、かつ世界最高レベルの性能を持つグラフ探索ソフトウェアの開発に成功した。

その結果、スーパーコンピュータ「富岳」を用いた測定結果で、大規模グラフ解析に関するスーパーコンピュータの国際的な性能ランキング Graph500 における性能向上に成功し、世界第1位を2022年11月に6期連続で通算16期獲得した。



- メインメモリに対する質 (速度) ・量の両面への厳しい要求
  - 大規模システムではネットワーク性能が重要
  - 高速化だけでなく、省メモリ化も十分に考慮する必要がある

## (2)最短ベクトル問題に対する大規模並列ソルバの研究開発【新しい分野の融合】

格子暗号は、古典計算機や量子計算機からの攻撃に対しても安全であると考えられており、次世代の暗号化技術として注目されている。その本質的な安全性は最短ベクトル問題 SVP(Shortest Vector Problem)の求解困難性に依存しており、セキュリティレベルを決定するために大規模計算機により SVP の難易度を正確に推定することが重要である。

本研究では、世界初の分散型非同期並列 SVP ソルバである MAP-SVP(MAssively Parallel solver for SVP)を提案し、開発した。MAP-SVP は、並列化機能として、独自作成の仮想関数 parallelDispatch を汎用ソフトウェア Ubiquity Generator framework に追加実装した分枝限定ソルバを開発することで実現した。本ソルバは、チェックポイントや再起動が容易でありメモリ使用量も少なく、少ない通信オーバーヘッドで大量のプロセスを非同期的に情報共有しながら SVP アルゴリズムを大規模に並列実行することが可能である。

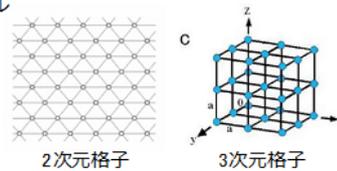
MAP-SVP の性能を実証するために Darmstadt SVP チャレンジ(2010 年から始まった独 Darmstadt 工科大学主催の SVP チャレンジ)のインスタンスを複数解き、最大 91,200 のコア数を用いた実行により 127 次元の記録を更新した。これらの研究成果は、高性能計算に関する著名な国際会議 SC20(International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis)などに論文が採択され、発表した。

## 格子と最短ベクトル問題 (SVP)

### □ 格子 (lattice)

- $\cdot = \{\cdot_1, \dots, \cdot_n\}$ : 一次独立なベクトル
- $\cdot$ : 次元格子 ( $\cdot$  は基底)

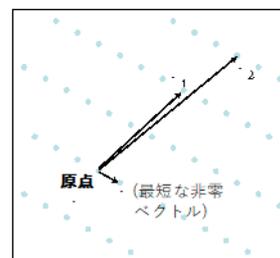
$$\cdot = \left\{ \sum_{i=1}^n \cdot_i \cdot i \mid \cdot_i \in \mathbb{Z} \right\}$$



### □ 最短ベクトル問題

#### (Shortest Vector Problem, SVP)

- 求解困難な古典的な計算問題
  - 現代の格子暗号の安全性を支える
- 格子  $\cdot$  の基底  $\cdot = \{\cdot_1, \dots, \cdot_n\}$  から
- 最短な非零ベクトルを求める問題 (右図)



## (3)深層学習モデルに対する効率的な敵対攻撃方法の開発と評価

### 【科学技術上の発見や発明/新分野や新しい潮流の創出への貢献】

深層学習モデルは敵対的攻撃と呼ばれる攻撃手法に対して脆弱であることが知られている。入力に対して人間に知覚できないほど微妙な摂動の敵対的サンプルを加え、出力を間違

えさせて行う敵対的生成ネットワークの深層学習モデル敵対的訓練は、自動運転などロバストなモデル構築に極めて効果的な手法である。この敵対的訓練の効率的な学習には、多くの敵対的サンプルを素早く生成することが必須である。

モデル詳細が既知前提のため防御策を講じる上で最悪シナリオであるホワイトボックス攻撃は、モデルの誤分類を引き起こさせるために、間違っ分て分類される領域への移動距離が最短になるように、スコアが下がる方向の勾配に沿って敵対的サンプルを生成する。

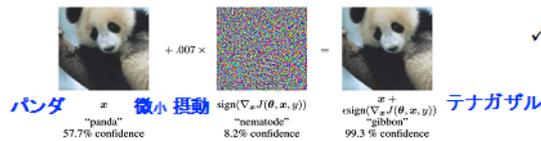
既存手法の多くは最急降下法(関数の最も勾配の急な方向に下っていく方法)に基づき高い攻撃成功率を達成しているが、目的関数が非凸や非線形、多峰性など悪条件問題に対して局所最適に陥り、急降下法がうまく機能しない場合がある。本研究では、この問題に対処するため、共役勾配法 CG(Conjugate Gradient method)に基づいた敵対的攻撃手法 ACG 攻撃(Auto Conjugate Gradient attack)を提案した。CG 法に基づくことで急峻な勾配方向に比べ、より多様な方向に探索点を更新し、広範囲の探索が可能となる。本提案手法により既存の APGD(Auto Projected Gradient Descent)など最先端アルゴリズムを大きく上回る攻撃成功率を達成した。

また、探索の多様化度合いを定量化し、敵対的攻撃を解析するための指標として、グラフのクラスタ係数に着目した Diversity Index を提案した。これにより、局所最適に陥るリスクを低減し、大域的最適を効率的に探索することに成功した。本研究成果は機械学習分野の著名なカンファレンスである ICML2022(The 39th International Conference on Machine Learning)に採択され発表した。

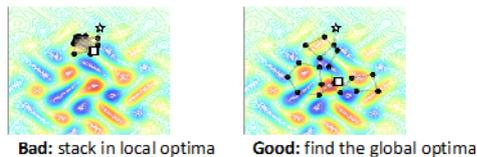
## AI によるデータ品質保証

K. Yamamura, H. Sato, N. Tateiwa, N. Hata, T. Mitsutake, I. Oe, H. Ishikura, K. Fujisawa  
 "Diversified Adversarial Attacks based on Conjugate Gradient Method" ICML 2022 採択

- ✓ 深層学習モデルの脆弱性: Adversarial Attack
- ✓ (微小な摂動を入力に加えて, 出力を間違えさせる)



- ✓ 深層学習に対する敵対的攻撃の研究
- ✓ 局所最適に陥るリスクを低減し、大域的最適を効率的に探索することに成功
- ✓ 既存の最先端アルゴリズムの性能を大きく上回る、最高の攻撃成功率を達成



- ✓ 最適化問題としての Adversarial Attacks

抽象的な定式化	記号
関数 $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ の $\arg\max_x f(x)$ を $y^*$ とする。 ・ 多くの場合、擾動を加えることによって解を壊す	$\mathcal{X} = \mathcal{X}_0 + \mathcal{B}$ 入力空間(攻撃可能な空間) $\mathcal{Y} = \mathcal{Y}_0 + \mathcal{B}$ 出力空間 $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ 攻撃対象モデル $x_0, y_0$ の 元データ $\mathcal{B} = \{b_1, \dots, b_n\}$ 元データに対する摂動レベル
最適化問題としての定式化	
定式化① $\max_{x \in \mathcal{X}_0} \min_{y \in \mathcal{Y}_0} d(x, f(y)) \leq \epsilon$ ・ 目的関数 $d(\cdot, \cdot)$ を最大化して誤分類を目標とする。 ・ 目的関数 $d(\cdot, \cdot)$ の最適解を求めたい	定式化② $\min_{x \in \mathcal{X}_0} \max_{y \in \mathcal{Y}_0} d(x, f(y)) \leq \epsilon$ s.t. $\arg\max_x f(x) = y^*$ ・ Adversarial example の中で既知の悪条件のもとで最適解を求めたい

最適化手法によってロバスト性の評価を行う  
 高いロバスト性を持つように学習可能

### 参考

- ・ Masahiro Nakao, Koji Ueno, Katsuki Fujisawa, Yuetsu Kodama and Mitsuhsa Sato, Performance of the Supercomputer Fugaku for Breadth-First Search in

Graph500 Benchmark, Intentional Supercomputing Conference (ISC 21), Online, 2021.

- [https://www.riken.jp/pr/news/2022/20221115\\_1/index.html](https://www.riken.jp/pr/news/2022/20221115_1/index.html)
- Nariaki Tateiwa, Yuji Shinano, Satoshi Nakamura, Akihiro Yoshida, Shizuo Kaji, Masaya Yasuda, Katsuki Fujisawa, ” Massive Parallelization for Finding Shortest Lat- tice Vectors Based on Ubiquity Generator Framework” , the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC20) to be held from 15-20 November 2020 in Atlanta, GA, USA.
- Nariaki Tateiwa, Yuji Shinano, Keiichiro Yamamura, Akihiro Yoshida, Shizuo Kaji, Masaya Yasuda and Katsuki Fujisawa, CMAP-LAP: Configurable Massively Paral- lel Solver for Lattice Problems, 28th IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON HIGH PERFORMANCE COMPUTING, DATA, & ANALYTICS (HiPC), Bangalore, 17th - 18th December 2021.
- Keiichiro Yamamura, Haruki Sato, Nariaki Tateiwa, Nozomi Hata, Toru Mitsutake, Issa Oe, Hiroki Ishikura and Katsuki Fujisawa, Diversified Adversarial Attacks based on Conjugate Gradient Method, Thirty-ninth International Conference on Machine Learning (ICML 2022), 19-21 Jul, 2022.

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

### サイバーフィジカルシステムと産学連携によるアプリケーション開発

近年の ICT の向上により、実社会で起きている現象を、計算機上で事前にモデル化し、さらに環境変化に対するシミュレーションや最適化を実施することで、サイバーフィジカルシステム CPS (Cyber-Physical System) を実現することができるようになった。

藤澤らは、多くの民間企業などと共同で CPS を対象として大量のセンサデータ (ヒト・モノの移動等) やオープンデータ (Wi-Fi 等の移動履歴) などを用いて、サイバー空間での最適化やシミュレーションを行う CPS モビリティ最適化エンジン (CPS-MOE) の開発を行い、新しい産業の創出、コストや廃棄物の削減、交通機関の最適制御スケジュールの算出に寄与するサービスの集合体を構築している。

また、コロナ禍においては、通勤手段の変化や在宅勤務の増加による配送サービスの急増に対応するため、MaaS 関連にも重点を置いて研究開発を進めた。特に配送最適化関連では実空間でのサービスレベルの向上やコスト削減の効果検証をソフトバンク株式会社と共同で行い、2022 年度にビジネス化した。ロート製薬株式会社との共同研究ではスマート工場の構築を進めた。

本研究では CPS-MOE の実現のために特に以下の 3 つのモビリティを表現、予測、最適化及び制御するための数理・情報の新技術の提案・開発を推進した。



### 2.3.3 2012 年度採択課題(3 期)

#### 2.3.3.1 遠藤敏夫「ポスト・ペタスケール時代のメモリ階層の深化に対応するソフトウェア技術」

遠藤チームでは、本研究領域で、高速だが小容量の高位メモリと大容量だが低速な低位メモリからなるメモリ階層を効率的に活用するシステムソフトウェアに関する研究開発を実施した。

ポスト・ペタスケール時代においては、プロセッサの演算速度の向上よりもメモリのバンド幅および容量の向上が遅いというメモリウォール問題がある。しかし、今後、気象・医療・防災など重要なシミュレーションをさらに大規模化・精緻化するためには、データ粒度をより細かく、より膨大にする必要があるため、メモリ階層の深化がより進む。このため、科学技術計算・シミュレーションの高速化かつ大規模化の両立を、アプリケーションプログラムの負担軽減をしつつ実現することが必須である。

遠藤チームは、コンパイラ・ランタイム・メモリ管理の連携によりデータの階層間配置・移動や、アプリケーションの局所性向上、強スケーラビリティ確保をシステムソフトウェアのレイヤで、アプリケーション開発コストを抑制しつつ実現することを目指した。

本研究では、GPU デバイスメモリの容量により実行可能問題サイズが限定されているマルチ GPU でのアプリケーションを主対象とし、その利用可能容量を仮想的に拡大するランタイムライブラリ、HHRT (Hybrid Hierarchical RunTime) を開発した。

HHRT は、アプリケーションがデバイスメモリ上に確保したデータ領域を自動的にホスト側のメモリにスワップアウトすることにより、アプリケーションから利用可能なメモリ総容量を下層のメモリ容量まで拡大するものである。

ステンシル計算においては、HHRT によるスワップ処理頻発による遅延を、時間ブロッキング手法を適用し抑圧した。これは、HHRT 上でステンシル計算を動作させた場合、時間ステップ毎に、隣接 MPI プロセスと境界領域の交換通信、配列全体の更新が行われ、その都度スワップ処理が発生するためである。時間ブロッキングは、各時間ステップで全体配列の計算を行うのではなく、ある部分配列の計算を始めたなら、その部分について時間ステップを複数回進めることでアプリケーションのアクセス局所性を高め遅延を抑えるものである。

評価実験では、ステンシルベースの実アプリケーションの都市気流シミュレーションコードにおいて、HHRT と時間ブロッキングを組み込むリファクタリングで GPU メモリ容量の 4 倍の問題サイズで、約 80%の性能が維持できることを示し、高い実用性を実証した。

また、GPU デバイスメモリ・ホストメモリ容量により HHRT の問題サイズが制限されていたものを、HHRT のスワップや、データ管理などの独自技術で拡張し、GPU デバイスメモリ・ホストメモリ・Flash SSD まで実現可能な問題サイズを上げ、扱える問題規模の大幅拡張に成功した。また、これは、MPI、CUDA (GPU 向けの C/C++ 言語の統合開発環境) のユーザプログラムから透過的に利用可能としている。

本技術により、東京工業大学 学術国際情報センター運営のスーパーコンピュータ TSUBAME3.0 において、問題規模 1PB 級のシミュレーションを学術・産業界に広く提供した。

さらに、動的なデータ依存関係、ループ階層や回転数など動的情報から、局所性を向上させる透過的チューニング、ループ構造、メモリレイアウトの最適化を行うメモリプロファイラツール Exana (EXcution - driven application ANALysis tool) を開発した。

Exana は、目的に応じて解析詳細レベルと解析時間のトレードオフを容易に調整可能な特徴を持ち、多数の研究グループによってアプリケーションソフトウェアのチューニングに用いられた。また、これにより本研究領域の藤澤克樹チームとの協働で、ビッグデータ処理の省電力性能 Green Graph500 ランキングの BFS (Breadth-first search: グラフ探索手法の幅優先探索) 処理のチューニングを行い、ビッグデータカテゴリで 3 位、4 位 (2014 年 6 月) を 1 台のサーバで達成した。

半導体微細化技術の鈍化に伴い、今後の高性能計算機アーキテクチャの継続的な性能進化が問題視されているが、メモリ速度についても同様であり、本研究領域で取り組んできた、キャッシュを含む高速小容量メモリと低速大容量メモリの効率的利用技術の必要性は益々高まっている。本研究領域終了後、遠藤らは、本研究領域での研究成果をさらに発展させており、10 年で 100 倍の性能達成を目標とし、将来の超メニーコアアーキテクチャを対象とした局所性向上アルゴリズムのシミュレーション技術や先端的なキャッシュオブリエイブ技術など幅広く研究し成果を創出している。また、これらは、東京工業大学の TSUBAME での実運用も期待されるものである。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### メモリ階層を効率的に活用するシステムソフトウェアの研究

#### ①局所性向上アルゴリズムによる高性能ソフトウェアの性能向上

##### 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

ステンシル計算での時間ブロッキングを組み込むリファクタリングでは、近傍データポイント間のデータ依存性、GPU やマルチコア CPU のような異種プロセッサのサポートなど考慮し、OpenMP や CUDA を用いた手書きコードで計算順序を変える必要がある。このため、アプリケーションプログラマの負担が大きい。

本研究では、時間ブロッキングを用いたステンシル計算の実装を、C++ をベースとしたドメイン特化言語 Halide を適用することを新たに提案、計算スケジュールの簡略化を行いつつステンシル計算の高性能化に成功した。

Halide は画像処理や深層学習などに特化した言語であり、コード記述部分が計算アルゴリズムとスケジュールの部分に分かれている。アルゴリズム部分は計算定義のみを記述し、スケジュール部分は並列化やループ変更、バッファ確保の仕方などを記述する。また、スケジュールはアーキテクチャ毎に記述可能である。

ステンシル計算は、ノイマン境界条件、ディリクレ境界条件や、計算された任意の境界条件など汎用的な境界条件が必要になる。しかし、Halide では定数境界条件、ミラー境界条件など単純な境界条件のみであり、また、通常、内部領域と境界領域の計算は別々に記述するため、時間計算と組み合わせると性能が著しく低下する。この解決手法として、ここでは、時間ステップ毎に単一の計算定義を記述することを提案した。

本提案では、タイリングをした領域ごとに任意に定めた一定の時間ステップ分を一度に計算する Overlapped tiling を用いて時間ブロッキングを実装した。Overlapped tiling は、各時間ブロックサイズ後の計算に必要なデータの範囲を重複しながら計算を行うため冗長となるが、他の時間ブロッキング手法に比べ、メモリアクセスの時間的局所性、空間的局所性の全体を考慮した場合、実行時間を減らすことができる。

本提案では、単一の Halide コードでマルチコア CPU と GPU 両方を効率的に動作させることができ、複数境界条件を用いることでより高い性能を維持することができる。

評価の結果、CPU 実装において、OpenMP での時間ブロッキングなしの実装と比べ、1.3～2.9 倍の性能向上が可能であることを実証した。また、条件によっては、OpenMP での時間ブロッキング実装に比べ、2.5～2.6 倍の性能向上を得た。GPU 実装では、CUDA による時間ブロッキング実装と比べ、0.95～1.54 倍の性能向上が可能であることを実証した。

さらに、単純なステンシルに加え、Rodinia benchmark suite の Hotspot3D(三次元空間上で変異が集中するホットスポットのクラスタを同定するプログラム)でのベンチマークでは、時間ブロッキングのコードは簡易統合でき、性能は OpenMP 版のものと比較し、3.58～5.60 倍の性能向上が可能であることを示した。

## ②Cache-Oblivious アプローチと最新プロセッサアーキテクチャの統合

### 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

本研究では、最新プロセッサアーキテクチャの SIMD(Single Instruction, Multiple Data)とマルチコアを考慮した Cache-Oblivious の再帰的実装による高性能化アルゴリズムを提案、実証した。

Cache-Oblivious アプローチは、キャッシュの階層構造を想定しつつ、通常の Cache-Aware とは異なり、キャッシュサイズ、転送速度、メモリ階層数などアーキテクチャパラメータを指定することなく、探索木(Van Emde Boas Layout など)を再帰的に分割統治し、作業セットサイズを各キャッシュレベルに自動的に適合させるアルゴリズムである。これは、同じ命令セットアーキテクチャ ISA(Instruction Set Architecture)をサポートしていても、プロセッサによってはキャッシュレベルの数が異なる場合や、大規模クラスタ環境のマシンのメモリや、CPU など不揃いの場合でも、それらアーキテクチャに依存しない手法となる。この Cache-Oblivious は、様々な手法が開発、実装されているが、最新プロセッサの高い性能を引き出すための SIMD を組み込んだ研究は従来ほとんどなされていない。

遠藤は、SIMD でチューニングされたカーネルを再帰呼び出しとして適用し、ブロックデータフォーマットとレジスタブロッキングを統合することで、本提案手法を実現した。

本提案は、マルチコア並列性も、再帰呼び出しにタスク生成を埋め込むことで、アーキテクチャに完全に実装が依存しないものとなっている。

ここでは、グラフ解析の重要カーネルである全点对最短経路問題 APSP (All Pair Shortest Path) 問題に着目し、その有名なアルゴリズムの一つであるワーシャル-フロイド (Floyd-Warshall) アルゴリズムを、AVX512 SIMD ISA を持つマルチコアプロセッサ上でのシングルノード実装で評価した。その結果、デュアルソケットの Skylake Xeon への実装では、約 1.1TFlops、Xeon Phi では 700GFlops (単精度) を達成した。

本研究成果の知見は、より不規則な構造を持つグラフ問題や、ディープラーニング、機械学習のカーネルなど、幅広い分野のアプリケーションに展開可能である。

遠藤らは、さらに、GPU クラスタにおけるデータ並列とモデル並列を組み合わせたハイブリッド並列でのディープニューラルネットワークの学習分散化方法など提案し、学習時間短縮など達成している。

## 参考

- Hiroki Aikawa, Toshio Endo, Tomoya Yuki, Takahiro Hirofuchi, Tsuomu Ikegami. Efficient Stencil Computation with Temporal Blocking by Halide DSL. In proceedings of 20th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (ISPA), online, December 2022.
- 相川洋貴, 遠藤敏夫, 幸朋矢, 広淵崇宏, 時間ブロッキングを用いたステンシル計算の Halide 言語による高性能実装と評価, 情報処理学会研究報告 2021 (HPC-180), 2021 年 (学生優秀発表賞)
- Toshio Endo. Integrating Cache Oblivious Approach with Modern Processor Architecture: The Case of Floyd-Warshall Algorithm. In proceedings of HPC Asia 2020, Fukuoka, Jan 2020.
- 細木隆豊, 野村哲弘, 遠藤敏夫, GPU クラスタにおけるハイブリッド並列 DNN 学習のボトルネック分析と改良, 情報処理学会研究報告 2021 (HPC-180) 2021 年

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

2022 年 10 月に東京工業大学と富士通株式会社は、「富士通次世代コンピューティング基盤協働研究拠点」を設置し、遠藤は副拠点長に就任した。

本協働研究拠点は、東京工業大学のスーパーコンピュータ TSUBAME などを超える次世代コンピューティング基盤の確立、およびその技術の社会応用の拡大を目指すものである。

遠藤らの次世代のメモリシステムアーキテクチャおよびアルゴリズムの改善とその活用 of 研究成果は、今後益々大規模、複雑化する CPU、GPU 上での科学技術計算や AI 処理の性能ボトルネック解消に繋がるものと考えられる。

### 2.3.3.2 近藤正章「ポストペタスケールシステムのための電力マネージメントフレームワークの開発」

近藤チームは、本研究領域で、ハードウェアコンポーネントのピーク電力が最大電力供給を超えることを許容し、それらを適応的に制御することで、実効消費電力を電力制約以下に維持しつつ実効性能を最大化するハードウェアオーバプロビジョニングの研究を実施した。これにより、限られた電力資源を各アプリケーション、ハードウェア要素に適応的に配分し、性能や電力効率を向上させる「電力制約適応型システム」の構築を行った。

本研究では、電力制約下のアプリケーションの実行性能最適化、複数ジョブ間の電力資源管理ツール、電力性能挙動予測、電力観測・制御 API などの研究開発を行った。

電力制約下のアプリケーションの性能最適化に関しては、各ジョブの電力配分最適化プロセスを自動化する電力性能最適化パッケージを開発・公開した。これは、プロファイリングした情報から各制御ポイントの電力配分を決定し、ジョブを実行するものである。簡単な最適化例では、最大で約2倍の性能向上が得られることを示した。

電力資源管理ツールに関しては、広く利用されているSlurmをベースに、システム全体の電力供給、使用状況、アプリケーション特性に応じたジョブスケジューリングや、ジョブ間で電力分配を行う電力管理機能付きSlurmリソースマネージャを開発した。これにより、世界で初めて1000ノード級の大規模システムでオーバプロビジョンドシステムの性能解析に成功した。この中では、CPU、主記憶、ネットワークなど各ハードウェア要素の電力余剰を検出し、より電力を効率的に利用できるハードウェアへと電力を分配するパワーシフティング技術も開発している。この技術は、スケルトンコードを用いて従来の最大11.5倍高速にネットワーク電力の使用状況プロファイリングができ、それを基にCPUへの適切な電力分配を可能とした。これらの電力資源管理ツールにより、従来のスケジューリングに比べ、システム全体のジョブ実行スループットを1.4倍向上可能であることを示した。

電力性能予測ツールに関しては、CPUの製造時の消費電力特性のばらつきに注目し、これを考慮した電力制御の必要性を世界で初めて指摘した。この性能ばらつきを考慮した電力制約下での性能推定フレームワークや、インターコネクットの電力性能をシミュレートするツールを開発した。

これらの電力制約適応型システムにより、均一に電力制約を適用する従来法に比べ、電力制約下での性能を最大5.4倍向上させることに成功した。

本研究領域終了後、近藤は、「次世代の計算環境を創る」をテーマに、スーパーコンピュータでの電力効率とシステム全体のスループット向上のための研究、これに関連するグラフ処理、ロボット知能処理などの特定の計算分野に最適化したドメイン特化型アーキテクチャ、人工知能・ニューロモーフィック計算・量子コンピュータなどの新しい計算原理と既存コンピュータの融合など、ハードウェア設計からアプリケーション開発まで幅広く研究活動を展開し研究成果を創出している。

また、近藤は、2018年に理化学研究所計算科学研究センター次世代高性能アーキテクチャ研究のチームリーダーに就任し、スーパーコンピュータ富岳の次の世代の高性能計算機システムの研究の中心的な役割を果たしている。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1) 次世代スーパーコンピュータのアーキテクチャ探索

#### 【新しい分野の融合/新分野や新しい潮流の創出への貢献】

科学シミュレーションとAI、ビッグデータのさらなる緊密な連携や、Society5.0という新たな応用領域など、スーパーコンピューティングの新たな波が期待される。一方で、ムーアの法則の終焉に備えるなど、いくつかの研究課題に取り組む必要がある。本研究では、「京」・「富岳」をベースとしつつ、その改良を含むソフト、ハードウェアで構成される次世代高性能計算機アーキテクチャについて、我が国の本分野の研究開発指針策定に取り組んだ。

ここでは、近藤ら理化学研究所計算科学研究センターのメンバーが発起人となり2019年7月に我が国の次世代先端的計算基盤に関する意見交換の場となるNGACI (Next-Generation Advanced Computing Infrastructure) を設立している。

(<https://www.r-ccs.riken.jp/research/feasibility-study/ngaci/>)

NGACIでは、将来のハイパフォーマンスコンピューティング基盤について、期待される次世代システム像、それを実現するための技術的課題、研究機会を議論する。また、ここでの議論をまとめたホワイトペーパー「次世代先端的計算基盤に関する白書」を2020年11月に発行している。本ホワイトペーパーでは近藤は全体取りまとめを担った。本ホワイトペーパーは様々なところで引用され、本分野の発展に大きく寄与している。

(<https://www.mext.go.jp/content/20210618-mxt-jyohoka01-000016078-08.pdf>)

### (2) エクサスケールシステムの電力効率改善に関する研究・開発

#### 【新しい分野の融合/新分野や新しい潮流の創出への貢献】

本研究では、デバイスの進化を踏まえたシストリックアレイやニューロモーフィック計算など非ノイマン型計算機、次世代の不揮発性メモリや様々な種類の演算加速機構と汎用プロセッサを高度に融合可能なアーキテクチャ、機械学習の計算加速によるシミュレーションの高度化、量子計算と古典計算のそれぞれの利点を生かしたハイブリッドな計算機アーキテクチャなど、次世代アーキテクチャやそれらを活かすアルゴリズムの研究を、「京」・「富岳」上でのコデザイン評価を主軸に研究を実施している。ここでは、一例として、パフォーマンスカウンタを用いたシステム性能解析、FPGAでのシストリックアレイをベースとしたドメイン固有アーキテクチャの研究について示す。

## ①パフォーマンスカウンタを用いたシステム性能解析

多くのハイパフォーマンスコンピューティング向けアプリケーションはプロセッサのピーク性能の一部しか活用されていない。新しいプロセッサはピーク演算性能を大幅に向上させるが、性能最適化の複雑さも増大する。プログラマやコンピュータアーキテクトに性能最適化の手がかりを提供するため、キャッシュミスやTLB(Translation Lookaside Buffers)ミスなど、プロセッサの命令実行中に発生するさまざまなイベントを監視することでアプリケーションの性能ボトルネックを特定する性能監視カウンタを開発した。

本研究では、性能情報を収集し、アプリケーションの性能を特徴付ける性能監視カウンタを開発した。本カウンタでは、トップダウン分析法を適用し、Front Bound(マイクロオペレーション供給不足)、Bad Speculation(分岐予測ミス復旧のため遅延)、Backend Bound(メモリアクセス、実行、ディスパッチ、割り当のボトルネック)、Retiring(CPU サイクル数消費)を分析する。また、Backend Bound 中の Core Bound、External Memory Bound、L1 Bound、L2 Bound、L3 Bound、Stores Bound の各々の分析も可能とした。

ここでは、PAPI(Performance Application Programming Interface)v6.0 に基づく監視、計測機能を開発することで、個々のアプリケーションの実行時間に占めるこれらの項目を内訳として可視化可能とした。

## ②FPGA でのシストリックアレイをベースとしたドメイン固有アーキテクチャ

時間領域の Maxwell 方程式を直接差分化する時間領域差分 FDTD(Finite Difference Time Domain)法は、一回の計算で広帯域の応答が得られ、また、非線形現象も扱えるなど特徴を持つ数値電磁界解析法である。これは、観測空間における電磁波分布の時間的変化を算出するものでアンテナ解析や電波伝搬散乱問題など幅広く用いられている。また、同様のアプローチで音波においても、空間の任意の点の音波形を算出し、音響解析する手法(周波数特性、残響時間、遮音性能、明瞭度など)としても用いられる。

FDTD 法は、その精度の高さ、実装の容易さ、並列性から、室内音響の分野では不可欠な手法となっており、音響特性データを元に可聴化する音空間レンダリングなどへの応用がなされているが、音空間が大きくなるにつれメモリ消費量が増大し計算が困難になる。

本研究では、音空間レンダリングに必要なメモリ削減のため、高次 FDTD アルゴリズムを提案、これを用いた FPGA ベースのアクセラレーションシステムを設計、開発した。

本提案では、メモリ帯域幅を削減するために空間ブロッキングを、データを再利用するために時間ブロッキングを適用した。空間ブロッキングは、外部メモリ帯域幅のボトルネックとオンチップバッファのサイズを緩和し、時間ブロッキングは、データを再利用し、連続した時間ステップで同じ空間ブロックの音圧を計算するために使用した。

システムは、データ入力モジュール、計算エンジン、データ出力モジュールから構成され、計算エンジンは、複数のプロセッシングエレメント PE をカスケード接続したシストリックアレイとなっている。PE は 1 つの時間ステップで音圧を計算、計算結果を隣の PE に送り、次の時間ステップの音圧を計算し、これが最後の PE まで繰り返される。このシストリック

アレイで、演算結果をレジスタに書き戻さないため、外部メモリへのアクセスが削減され、計算が高速化される。

128GB の DDR4 RAM と 3.6GHz 動作の Intel i7-7820X プロセッサを搭載したマシンで実行したソフトウェアシミュレーションと比較し、本提案の FPGA ベースのアクセラレータは、FPGA システムの動作周波数が約 267MHz と低いにもかかわらず、最大 2.98 倍の計算性能を達成した。

#### 参考

- RIKEN Center for Computational Science Annual Report FY2020  
[https://www.r-ccs.riken.jp/en/wp-content/uploads/sites/2/2022/03/r-ccs\\_annualreport\\_fy2020\\_links.pdf#chapter.13](https://www.r-ccs.riken.jp/en/wp-content/uploads/sites/2/2022/03/r-ccs_annualreport_fy2020_links.pdf#chapter.13)
- Yiyu Tan, Toshiyuki Imamura, and Masaaki Kondo, FPGA-based Acceleration of FDTD Sound Field Rendering, Journal of the Audio Engineering Society 69 (7/8), 542-556, 2021-11-11

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

近藤は、本研究領域での研究成果を大きく発展させ、ドメイン特化型アーキテクチャや、人工知能・ニューロモーフィック計算・量子コンピュータなど新計算原理と既存コンピュータの融合など、ハードウェア設計からアプリケーション開発まで幅広く研究活動を展開している。

また、所属機関内での研究活動は元より、我が国の様々な次世代高性能計算基盤の検討、研究開発を先導し貢献している。特に、NGACIは、自ら発起人となり設立した。ここでは、総勢60人のエキスパートが集まった4つのワーキンググループ(アーキテクチャ、システムソフトウェア、アプリケーション・ライブラリ・アルゴリズム、システム運用)の全体とりまとめを行い、ホワイトペーパーを発行している。本ホワイトペーパーは、各所で引用され本分野の研究指針のみならず科学技術政策にも影響を与えている。

これらの活動は、我が国の計算科学の底上げや、今後の大規模計算機インフラの構築、人材育成、また、様々な分野での計算科学活用による研究成果創出、社会実装に確実に繋がるものと考えられる。

### 2.3.3.3 野田五十樹「超大並列計算機による社会現象シミュレーションの管理・実行フレームワーク」

野田チームは、本研究領域で、社会システムを計算科学の対象とするマルチエージェント社会シミュレーション MASS (Multi-Agent Social Simulation) を網羅的かつ大規模に実行・制御するための開発・運用フレームワークを構築した。

本フレームワークは、MASS 計画・管理モジュール、MASS 分散実行ミドルウェアから成る。

MASS 計画・管理モジュールは、膨大な数の組み合わせ条件でのシミュレーションを分散環境で実行・管理するものである。ソフトウェアとして、OACIS(Organizing Assistant for Comprehensive and Interactive Simulations)、CARAVAN(Framework for comprehensive simulations on massive parallel machines)、およびそれらのプラグインモジュール群の開発を行った。OACIS は、多種類のパラメータの多数の組み合わせでのシミュレーションを分散環境で実行管理、結果収集し、その解析機能を提供する。CARAVAN は、OACIS の能力を超える  $10^7$  以上の条件の組み合わせについて MPI(Message Passing Interface) 並列で網羅実行を実現する枠組みを提供する。プラグインモジュールは、実験計画法と三分探索により、組み合わせ爆発を抑えながら主要因となっているパラメータ空間の探索を実現する機能や、GA(Genetic Algorithm)による多目的最適化をスーパーコンピュータの並列性を損なわずに行う機能などを提供する。これらにより、社会現象など厳格なモデル設定が困難な対象でもシミュレーションによる分析を、簡易に実施できるインタフェースの提供を可能とした。

MASS 分散実行ミドルウェアは、マルチエージェントシミュレーションで重要となるエージェント間通信を考慮に入れた大規模マルチコアアーキテクチャへの負荷分散の自動化を実現するものである。

本ミドルウェア開発では、エージェントシミュレーションで広く用いられる X10 言語のスーパーコンピュータへの移植、チューニングなどを行い、HPC Challenge(スーパーコンピュータの最大の国際学会 SC13にて開催された HPC Challenge Class 2 Awards)でファイナリストとして残るなど好成績を収めた。

また、実際のアプリケーション開発を通じ、スーパーコンピュータ上でのエージェントの並列実行を効率的に行うライブラリ群を開発した。さらに、分散したノード間でのメッセージおよびエージェント自体の移動を簡潔に記述し分散環境で効率よく実行するエージェントシミュレーション分散実行基盤 XASDI(X10-based Agent Simulation on Distributed Infrastructure)を開発した。XASDI は Java による Bridge API を提供するため、幅広いエージェントシミュレーションの移植を容易に可能とする。

これらのミドルウェアやモジュールは、オープンソースとして公開した他、out-of-the-box でフレームワークを容易に利用できる環境とし、Cloud Foundry(オープンソースの PaaS ソフトウェアのクラウドアプリケーションプラットフォーム)上のサービスとして実装し、サービスパッケージによるデモ検証や、GitHub において docker 化したファイルを公開した。

開発フレームワークの機能検証を含めた実用評価として、人流・交通・経済の3つの応用分野のアプリケーションを取り上げた。ここでは、スケーラビリティの確認や機能増強を行うとともに、これら応用分野について実用的なシミュレーション分析を行い、開発したフレームワークと各社会シミュレーションの有用性を具体的に示した。

人流シミュレーションの例では、津波からの避難を題材に、400万通りを超える条件での網羅的シミュレーションを行い、防災対策の有効性分析が可能であることを示した。また、大阪における津波避難を取り上げ、300を超えるパラメータを調整して、複数の目的での最

適化をシミュレーションで行う枠組みを実現し、避難の効率と誘導の困難さなどのトレードオフ状況の見える化を実現した。さらに、金沢を対象地域とした網羅的避難シミュレーションを実施し避難時間に対する要因分析を行った。ここでは、OACIS を使用しない2万通りのシミュレーションでは分離できなかった主効果を発見できるなど、実用上有益な情報を半自動で得られることを示した。

また、防災対策の担当者が事前対策を選択するゲーム形式の啓発アプリケーション NIGECHIZU SIMULATOR も開発し、地域防災コミュニティ啓発活動「逃げ地図プロジェクト」とタイアップし、各地美術館などで展示した。

交通シミュレーションの例では、全世界や日本全国規模の交通シミュレーションがスーパーコンピュータ上で可能であることを示した。ここでは、網羅的シミュレーションの枠組みを交通シミュレーションに適用し、タクシーの実車データからのデータ同化や、利便性とコスト、価格設定のトレードオフの解析を行い、公共交通サービスの設計支援が可能であること、大規模で網羅的なシミュレーションを行うことで、都市における交通制御方法の評価を様々な視点で評価できることを示した。

経済シミュレーションの例では、市場シミュレーションを用いて多数のパラメータスタディを行い、フラッシュクラッシュ(相場の瞬間的な急落)など市場での各種現象の再現を行った。例えば、株式市場におけるティックサイズ(注文価格の最小単位)とそれによる市場シェアの推移の変化を分析し、実際の東京証券取引所での実データと比較して、株価の変動に対して適正なティックサイズの閾値を求めた。また、自己資本比率規制などが市場に与える影響を調べ、各種制度設計の検証を行った。これらの分析結果は、東京証券取引所などに提供され、例えば、2014 年から実施された東京証券取引所のティックサイズ変更において銘柄の絞り込みの方針に反映されるなど活用された。

本研究領域終了後、野田は、MaaS(Mobility as a Service)シミュレーション、減災にも繋がる災害シミュレーション、人の移動と Covid19 感染の相関分析など様々なマルチエージェント社会シミュレーションや、マルチエージェント学習、RoboCup への参画、貢献など、多岐に渡る研究を実施し活動を拡大させた。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1) 人流・交通の相互の連成シミュレーションの開発

#### 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

野田らは、これまで開発・公開していた実行管理フレームワーク OACIS、CARAVAN について、ポスト「京」スーパーコンピュータの富岳に引き継ぐための改版、高性能化を実施した。また、異なる時空間スケールや対象毎に構築されてきた異種現象のシミュレーションと交通・人流シミュレーションについて、各々の結果を相互に分析・再構成する相互連成シミュレーションの構築を行った。

## ①OACIS、CARAVANのポスト「京」に引き継ぐための改版、高性能化

OACIS については、ユーザーインタフェースの改訂を実施し、操作性を大幅向上させた。また、ユーザへの OACIS バージョンアップとその操作の講習会を開催し、これまで進められてきた活用の流れを引き続き円滑に進むようにした。

CARAVAN については、「京」から「富岳」に引き継ぐため、これまでの X10 言語だけでなく C++言語を使ったバージョンへの改版を実施した。また「富岳」は CPU アーキテクチャ、OS から運用方法まで「京」とは異なるため、多岐に渡るすり合わせを行い改版した。

## ②異なる時空間スケールや対象毎に構築されてきた異種現象のシミュレーションと交通・人流シミュレーションの相互連成シミュレーションの構築

### ・CrowdWalk、ADVENTURE-MATES、OACIS を用いた連成シミュレーション

本研究では、2018 年 9 月に開催された福井国体の開会式での観覧者誘導を題材として、シャトルバス交通流と人流が交差する信号の最適化を取り上げ、連成誤差最適化と、同時に行う多目的最適化を行った。ここでは、産業技術総合研究所が開発した人流シミュレータ CrowdWalk、東京大学が開発した交通シミュレータ ADVENTURE-MATES (Mates)、シミュレーション管理フレームワーク OACIS を用いた連成シミュレーションを開発した。

本シミュレーションでは、信号切替のルールを定め、そのルールを基に、CrowdWalk で信号切替タイミングと全歩行者が目的地に到達する時間を記録、その切替タイミングを Mates に渡し、交通状況を再現しシャトルバスの到達時刻と信号における渋滞量を記録する。シャトルバスの到達時刻を基に、歩行者の出現時刻を調整して、再度 CrowdWalk でのシミュレーションを行う。信号切替ルール調整は、遺伝的アルゴリズムで多目的最適化を行った。この多目的最適化を大規模に行うため、シミュレーション設定管理と集合の世代交管理が可能で OACIS の Watcher 機能を用いた連成シミュレーションをスーパーコンピュータ上に構築した。

### ・ItkOacis の開発とオンデマンド型乗合サービスの価格決定モデルの構築

OACIS Watcher を活用する手法を汎用化し、様々な用途に使えるツールとして、ItkOacis を開発し、オープンソースのソフトウェアとして公開した (<https://github.com/crest-cassia/ItkOacis>)。これにより、単純な進化計算による最適化では、クラスに対しパラメータ設定を行うだけで、OACIS の制御を可能とした。

ItkOacis を利用し交通システムの持続的経済合理化などを連成的に進化型計算で探索する手法も開発した。シミュレーションの一例としては、乗り合い交通サービスの料金設定の適正化が上げられる。この事例では、乗り合いタクシーの料金について、距離に応じた加算料金と遅延時間に応じた割引料金を決定する係数について、その事業者の収入と、利用者における料金当たりの利便性をバランスさせ、その適正係数を求める。シミュレーションでは、複数の異なる料金体系を持つ事業者が競合する形で乗り合いサービスを展開し、利用者は

コストと利便性に従って業者を選ぶという強化学習を行う形式をとる。ItkOacis により事業者同士の競争のシミュレーションを実現できた。

#### ・MACiMA、OACIS の連成による交通シミュレーションの広域緻密化

立命館大学が開発した都市交通シミュレーションパッケージ MACiMA と OACIS の連成シミュレーションを構築した。

MACiMA は、様々な社会システムが複合する都市動態の模擬を目的としたシミュレーションで、GIS(Geographic Information System)データを基に実環境を精緻に再現するものである。MACiMA は、車輛、道路、交差点、建物、水源などの地物がエージェントとして生成され、各エージェントの内部計算処理とエージェント間のメッセージパッシングの連鎖によって進行する。例えば、車輛エージェントは、自動車の基本的な走行、異種性の走行モデル、および起終点など走行に関連する個別データの連携に基づいて多種多様な自動車の挙動を模擬できる。

本研究では、旅客を運ぶバスエージェント、旅客となる個々の移動者エージェント、およびバスと旅客のインタフェースとなるバス停エージェントがエージェントネットワークを形成し、適宜インタラクションする事で停車の要不要、旅客の乗降を判断し、旅客の移動を模擬した。また、地方都市全体程度の広域の交通流の品質を比較的シンプルなデータ同化によって確保可能とした。ここでは、公益財団法人日本道路交通情報センター(JARTIC)が公開する主要交差点の断面交通量と、交通シミュレーションにおける同一地点の交通量を比較し、差が小さくなる方向に各エージェントの OD(Origin Destination)を変化させる貪欲なパラメータ探索を行った。これらの開発で、人と車の移動情報を精緻に扱うことができ、交通シミュレーションの連成後の広域での再現交通の質の向上が可能となった。

#### ・OACIS との連成による金融市場と企業ネットワーク系連結のシミュレーション

東京大学、東京工業大学が開発した金融市場と企業ネットワークが相互作用しながら時間発展するモデルについて OACIS により動的に結合させ、大規模なモンテカルロシミュレーションの構築を行った。

本シミュレーションでは、金融市場側のモデルは銀行間ネットワークを考慮し、銀行が各企業に対してどのような戦略をもって融資するかをパラメータとして設定する。銀行の行動方針は、売上、売上成長率、継続性の重みをランダムで割り振ることによって決定する。企業ネットワーク側のモデルは拡張 Miura-Takayasu-Takayasu モデルで、企業成長率は投資金額によって変動するとした。これらにより、銀行の行動方針に依存して国内の企業の成長がどのように変化するかの見積りを可能とした。

## (2)MaaS のマルチエージェント社会シミュレーション・モデリングの開発

### 【新分野や新しい潮流の創出への貢献】

本研究では、デジタルツイン時代に対応したモビリティサービスの持続的な社会実装を可能とするマルチエージェント社会シミュレーション・モデリング技術の開発を行った。

ここでは、MaaS マネージメントデザイン技術、MaaS モデリング技術について、運用的視点の課題の解決を中心に、必要となる要素技術を構築した。

#### ①MaaS マネージメントデザイン技術

本研究では、多数のステークホルダが係わるモビリティサービスを、異なる目的関数をもつエージェント群の相互作用とみなし、ゲーム理論やマーケットデザインの枠組みでとらえ、人工市場を通じた需要・供給調整や異なるサービス形態間の競合を持続性の観点から評価する枠組みを構築した。この中の研究成果の一例として、利用者の利便性を大きく損なわない範囲で参画事業者の公平性を担保する方法を検討、実データによるベンチマークで評価を行い、有効性を確認したものを示す。

##### ・参画事業者の公平性を担保する方法の検討

オンデマンド型乗合サービス RS (Ridesharing Service) は、都市部での車両台数削減や、サービスの運営コストの削減も実現でき、海外では多くの乗客がこれを利用し、提供する企業が増加した。一方、サービスの急成長により RS で運行されるタクシーや車が増え、都市部などの交通量の多い地域で渋滞が問題視されている。また、RS のドライバは収益を上げるために、乗客を見つけやすい場所に集まる傾向があるため、都市部ではドライバの過剰供給が混雑を発生させ、郊外や住宅地ではドライバが不足し機会損失に陥るなど、供給の偏りが生じる。従来手法では、スマートフォンの GPS から得られた乗客の乗降場所の情報を分析した需要予測から供給偏りを解消する手法が提案されているが、予期せぬ需要や需要変動が発生するため予測誤差に対して脆弱性がある。

野田らは、需要予測からエージェントの待機位置とサービス提供範囲を示すサービスエリアを集中制御する SAAMS (service area adaptation method for ride sharing)、および個々のエージェントが独立にサービスエリアを判断する分散型の dSAAMS (distributed SAAMS) を提案した。これらは、深層強化学習でエージェントの待機位置を学習させるもので、シミュレーションを通じてサービスの性能改善が可能であることを示した。さらに、SAAMS、dSAAMS を拡張した dSAAMS\* (Modified dSAAMS) を提案した。

SAAMS、および dSAAMS は、それぞれのサービスエリアは他のエージェントの位置に関わりなく需要予測に従って移動する枠組みであったため、乗客の目的地がサービスエリアから遠い時、エージェントがサービスエリアに戻る間、乗客に配車されないことや、長時間の待機を強いる可能性がある。このため、目的地近くに乗客の発生しやすい場所があれば、移動中に他のエージェントと調整しながらサービスエリアを相互に移動させる制御手法 dSAAMS\* を提案した。dSAAMS\* は、報酬構造を改良し、利用者の要求に対し配車できないことに負の報酬を加えると共に、エージェントの移動情報に加え、それに呼応するサービスエリアを変更する協調的な制御を、マルチエージェント深層強化学習のアプローチで実現した。

乗客発生モデルに基づく乗車要求データ、およびニューヨーク・マンハッタン地区での実データに基づく比較実験を行い、dSAAMS\*は既存手法と比較して、多くの環境でサービスの性能改善が可能であることを示した。

## ②MaaS モデリング技術

本研究では、モビリティサービスの利用実績や、交通状況調査を基にした人の移動パターン分析の手法を高速な OD 交通量推定手法の形で開発し、実データやテストデータによりその機能を検証した。また、しずおか MaaS(<https://s-maas.jp/>)に技術会員として参画し、しずおか MaaS 実証実験のシミュレーション再現のため実地図による背景交通の交通需要推定を行い、シミュレーションの性能評価、Mass 導入効果の評価を行った。この中の研究成果の一例として、実データとシミュレーションを用いた Mass の導入効果の評価について示す。

### ・実データとシミュレーションを用いた Mass の導入効果の評価

MaaS は、利用者・供給者・自治体などの複数の利害関係者が相互に関係し合うサービスのため、各利害関係者のアウトカムを定義することは難しい。そのため、導入効果の評価が充分でなく、MaaS の大規模導入の障害の一つになっている。各地で行われている MaaS 実証実験では、MaaS アプリケーションのダウンロード数や利用回数などを評価指標としているもの多く、MaaS がもたらす便益そのものを評価指標としているものは少ない。

本研究では、実データとマルチエージェント交通シミュレータを用いて費用便益分析を行い、オンデマンド型乗合サービスを含めた MaaS の導入効果の評価した。

ここでは、供給者側は、利用者の需要に応じてリアルタイムに最適な経路を算出したオンデマンド型乗合サービスを提供し、利用者は、目的地に応じてリアルタイムに最適な経路を算出し、鉄道や路線バスと乗合サービスの所要時間や料金などサービスレベルを比較して最適な交通手段を選択する。また、複数の利害関係者の観点から社会的費用(運行費用、CO<sub>2</sub> 排出費用)と社会的便益(利用者の移動に係わる一般化費用の減少量、供給者の収益増加)を定義した。実データは、国土交通省の新モビリティサービス推進事業で 2019 年 11 月に静岡市で実施された MaaS 実証実験のものを使用した。

(<https://www.mlit.go.jp/sogoseisaku/transport/content/001406520.pdf>)

この実証実験では、鉄道と路線バスに加えて、株式会社未来シェアが提供するオンデマンド型乗合サービス SAVS(Smart Access Vehicle Service)が導入されている。株式会社未来シェアは、公立はこだて未来大学発ベンチャーであり、オンデマンド型公共交通シミュレーションの社会実装を目指して野田らが設立した企業である(野田は同社取締役。<https://www.miraishare.co.jp/>)。SAVS の車両エージェントは野田らが提案した逐次最適挿入法(Successive best insertion)に基づいて移動する。

本研究では、実証実験と同じ車両数、料金でシミュレーションし費用便益分析を行った。また、費用に対する便益が最大となるような車両数、料金など条件を算出した。

その結果、実証実験のデータでは、運賃収入のみで費用を回収することはできなかったが、車両数、料金など条件を適切に設定すればサービスが成立することを見出した。

#### 参考

- ・令和元年度 文部科学省 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する アプリケーション開発・研究開発(萌芽的課題), 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究  
[https://www.rist.or.jp/sc/report/r01/h2-1\\_r1.pdf](https://www.rist.or.jp/sc/report/r01/h2-1_r1.pdf)
- ・未来社会創造事業 探索加速型「超スマート社会の実現」領域 終了報告書(探索研究期間), 社会シミュレーション・分析技術によるモビリティサービス設計, 令和3年度研究開発終了報告書  
[https://www.jst.go.jp/mirai/jp/uploads/final2021/JPMJMI19B5\\_end.pdf](https://www.jst.go.jp/mirai/jp/uploads/final2021/JPMJMI19B5_end.pdf)
- ・野田五十樹, 学習する利用者と進化する運行者による共進化型相乗りタクシー配車料金体系設計の試み, 情報処理学会, 2020-ICS-198, 16, pp. 1-7, 2020.
- ・西田遼, 金森亮, 野田五十樹, 静岡市における Mass 実証実験のアプリ利用履歴データ分析, 第18回 ITS シンポジウム 2020  
<https://www.its-jp.org/wp-content/uploads/2020/12/2020-1-B-15.pdf>
- ・吉田直樹, 野田五十樹, 菅原俊治, 深層強化学習を用いたライドシェアリングのサービスエリアの協調制御法の提案, 人工知能学会, 36 巻, 5 号, p. AG21-D\_1-10, 2021.
- ・西田遼, 金森亮, 野田五十樹, 実データとシミュレーションを用いた MasS の導入効果の評価, 人工知能学会, 2I3GS5b01, 2021.
- ・Ryo Nishida, Ryo Kanamori, Itsuki Noda, “Modeling of a mode choice behavior toward agent-based Mobility as a Service simulation”, Proc. of AROB 2021, OS10-2, 2021.
- ・Ryo Nishida, Ryo Kanamori, Itsuki Noda, “Modeling of a mode choice behavior toward agent-based Mobility as a Service simulation”, Proc. of AROB 2021, 0, 0, OS10-2-OS10-2, 2021.
- ・Naoki Yoshida, Itsuki Noda., Toshiharu Sugawara, “Distributed Service Area Control for Ride Sharing by using Multi-Agent Deep Reinforcement Learning”, Proceedings of the 13th International Conference on Agents and Artificial Intelligence, 1, 0, 101-112, 2021.

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

野田らは、本研究領域終了後、それまで開発・公開していた OACIS、CARAVAN を富岳に引き継ぐための改版とさらなる高性能化を実施した。また、スーパーコンピュータでの社会的・科学的課題解決に向けた社会・経済シミュレーション構築のため、様々な機関で開発さ

れてきた異種現象のシミュレーションを集結させた。これにより、交通、人流、金融市場、企業活動など繋がった多岐に渡る社会・経済シミュレーションの基盤が構築された。

また、MaaS のマルチエージェント社会シミュレーション・モデリングの研究により、様々な観点、条件で定量的に MasS の導入効果の評価を可能とした。本研究成果は、今後の MaaS 事業の設計、評価に貢献し、MasS 普及の後押しになるものである。実際、野田が設立に係わり取締役を務め、MasS の社会実装を目指した株式会社未来シェアでは、日本各地の MaaS の導入、実証実験を実施しておりその数は 20 以上に上る。

野田らの本研究領域、およびその後の研究成果は、膨大な計算リソースの活用先として、その対象が従来の大規模数値計算による科学技術計算だけでなく、ビッグデータ処理など幅広い分野への応用でも必須であり、有効であることを示した。特に、社会シミュレーションでは、計算リソースが豊富になることで、従来の問題解決のみで完結していたものから、その解決手法が様々な環境で成立するか、推移していけるかなど次々と問題が発見でき、それが今までなかった問題を創出、より効率的な施策、新しい応用、サービスに繋がることを示したことは特筆に値する。

#### 参考

- ・株式会社未来シェア MaaS 導入事例  
<https://www.miraishare.co.jp/report/>
- ・株式会社構造計画研究所 クラウドベースの MAS プラットフォーム  
<https://mas.kke.co.jp/artisoccloud/>

#### 2.3.3.4 朴泰祐「ポスト・ペタスケール時代に向けた演算加速機構・通信機構統合環境の研究開発」

朴チームは、本研究領域で、高性能並列計算における演算系と通信系を TCA (Tightly Coupled Accelerators) という概念の下で融合し、GPU を中心とするアクセラレータによる演算加速、FPGA を用いたノード間直接通信ハードウェア、およびソフトウェアを統合した新しい演算加速並列処理の形を示した。そして、この概念に基づくハードウェア、システムソフトウェア、アプリケーションの開発を垂直統合的に行った。

本研究領域では、GPU 間データ通信を CPU の介在なく実行する PCIe intelligent switch PEACH2 (PCI Express Adaptive Communication Hub ver.2) を開発するとともに、アプリケーションレベルで利用可能なシステムの整備と最適化を行った。これにより、既存技術で 17  $\mu$  sec 程度を要していた並列 GPU ノード間通信のレイテンシを 2  $\mu$  sec に縮めるなど通信性能ボトルネックの大幅な改善に成功した。本研究成果は、HEART2014 (5th International Symposium on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies) において Best Paper Award を、ISC2014 (International Supercomputing Conference 2014) の HPC in Asia Poster Session で Best Poster Award を受賞している。

さらに、PCIe gen3 の利用による PEACH3 を開発し、実アプリケーションにおいて PEACH2 の性能を 20%以上向上させた。本研究成果は HEART2015 において Best Paper Award を受賞している。

また、アクセラレータ型クラスタのためのプログラミング言語 XcalableACC (XACC) の仕様設計とともに、その処理系の Omni XcalableACC の開発を行った。XcalableACC は、既存の XcalableMP (C 言語や Fortran 言語のコードに指示文を加える指示文ベースの分散メモリ環境を対象とした並列言語) と OpenACC (ヘテロジニアスな CPU/GPU システムに対応する標準並列プログラミングモデル) を統合・拡張したものである。Omni XcalableACC は、XcalableACC ソースコードを分散メモリ向けの並列化された中間ソースコードへと変換し、それらからアクセラレータ向け実行コードを生成するものである。これらより、アクセラレータ型クラスタにおいて、MPI (Message Passing Interface)、CUDA (GPU 向けの C/C++ 言語の統合開発環境) など既存手法ではできなかった、アクセラレータ制御とクラスタ間分散メモリ並列処理の両方を、指示文ベースの抽象度の高いプログラムで記述可能とした。また、XcalableACC と Omni XcalableACC は、いくつかのベンチマーク評価でその有効性を実証した。本研究成果は、SC14 (International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis 2014) の HPC Challenge Class2 部門において Best Performance Award を受賞している。

さらに、XcalableACC による様々なアプリケーション (宇宙分野の輻射輸送計算、重力計算コード、素粒子分野の格子 QCD 計算コード、気象学分野の都市街区気象 LES モデル、物質・生命科学分野の並列フラグメント分子軌道法プログラムなど) の開発・高速化も実施した。

これらに加え、TCA をさらに進めた、FPGA に演算のオフローディングを積極的に行う AiS (Accelerator in Switch) の概念を提唱した。ここでは、AiS を高位言語で実現する枠組みと、FPGA 間通信の基礎実験で、PEACH2 を上回る高速化が可能であることを示した。これにより、FPGA を用いた高性能通信・計算の融合という新たな方向性を提示した。

TCA、AiS のこれらの研究成果は、ポスト・ペタスケール時代の新たなデバイスの一つとして注目されている FPGA の活用を大きく促進するものとなった。

本研究領域終了後、朴は、FPGA 技術の高性能計算への実用化推進と筑波大学計算科学研究センターにおける次世代異種演算加速器・通信統合スーパーコンピュータ Cygnus、Pegasus の開発を行った。これらの研究では、GPU と FPGA のオフローディングをさらに簡潔に記述するプログラミング技術を開発し、FPGA ネットワークを光リンクで結合する CIRCUS (Communication Integrated Reconfigurable Computing System) を提案した。また、アプリケーションである宇宙輻射輸送コード ARGOT (Accelerated Radiative transfer on Grids using Oct-Tree) の並列 FPGA システムにおける演算加速など、多岐に渡る研究を実施し活動を拡大させた。

以下では、これらの中の研究成果の一例を示す。

## 1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

### (1)再構成可能プロセッサの高性能計算への適用と多種演算加速器との融合

#### 【科学技術上の発見や発明/新分野や新しい潮流の創出への貢献】

#### ①次世代異種演算加速器・通信統合スーパーコンピュータ Cygnus、Pegasus の開発

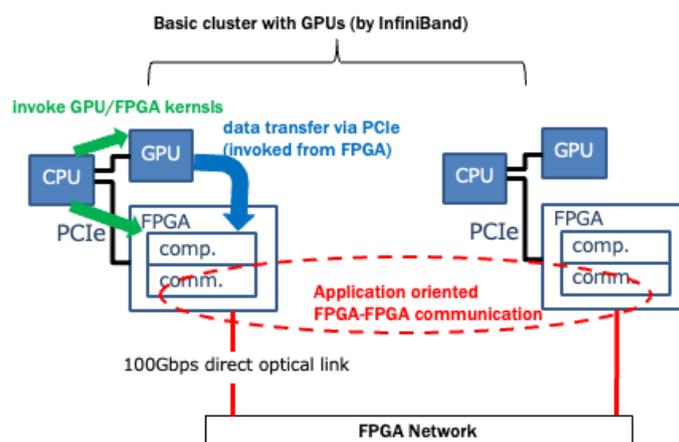
朴らは、筑波大学計算科学研究センターにて、多重複合型演算加速スーパーコンピュータ「Cygnus」を開発し、2019年4月から運用を開始した。

([https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/press\\_cygnus\\_20190326/](https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/press_cygnus_20190326/))

Cygnus は、各計算ノードにベースとなる 2 基の汎用 CPU に加え、4 基の GPU と、一部のノードにはさらに 2 基の FPGA を搭載したものである。スーパーコンピュータに FPGA を積極的に用いるのは国内初の試みであり、世界でも類を見ないものとなった。これにより、従来の単一種類の演算加速装置ではなし得なかった高い効率と低い電力での高性能計算の実現を目指した。

各ノードの GPU 部の倍精度浮動小数点演算性能は 28 テラフロップス、CPU 部は 2 テラフロップスで、合計 30 テラフロップスになる。FPGA 搭載ノードは、単精度浮動小数点演算性能 20 テラフロップスが加わる。全体では、CPU・GPU 搭載ノードが 48 台、CPU・GPU・FPGA 搭載ノードが 32 台の計 80 台のノードからなり、倍精度浮動小数点数総演算性能は 2.4 ペタフロップスになる。

Cygnus は、本研究領域研究成果の CHARM (Cooperative Heterogeneous Acceleration with Reconfigurable Multi-devices) という GPU と FPGA を演算、および通信のために融合させた異種演算加速スーパーコンピュータの概念を具現化したものである。



GPU と FPGA を演算、および通信のために融合させた異種演算加速スーパーコンピュータの概念 CHARM ([https://www.pcluster.org/ja/event/data/hpcossWS\\_220525\\_5\\_boku.pdf](https://www.pcluster.org/ja/event/data/hpcossWS_220525_5_boku.pdf))

さらに、朴は、本研究領域の建部らとともに、2022年12月に Cygnus の後継で、演算性能、メモリ帯域幅、メモリサイズを大きく向上させた「Pegasus」を開発し試験稼働を開始

した。Pegasus は 120 ノードの計算ノードで構成され、全体の理論ピーク性能は 6.5 ペタフロップスとなるものである。

(<https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/release221222/>)

## ②OpenCL プログラミングによる並列 FPGA 処理システムの開発

朴らは、高位合成処理系 OpenCL プログラミングによる並列 FPGA 処理システムの開発とそれを Cygnus 上で実現するための CIRCUS の提案を行った。

FPGA は、倍精度演算における絶対性能は GPU には及ばないものの、条件分岐発生、通信処理頻出などアプリケーションの並列性が不足し GPU では演算効率が低くなる問題では、GPU に代わり得る有効なものである。また、FPGA が持つ高速の 100Gbps×4 など外部通信ポートは、FPGA の内部回路に直接接続され、低レイテンシの FPGA 間通信が可能である。さらに、パイプライン処理が FPGA の基本処理構造であるため、ソフトウェア操作をカスタマイズした FPGA 上のハードウェアパイプラインをデータが流れ、データフロー、ハードウェアがソフトウェアと一致することから、制御のオーバーヘッドがなく、効率が向上する。

FPGA は、演算がパイプライン化されており、異なるデータを扱う新しい命令ストリームがクロックサイクル毎に実行される。これにより、演算と通信をクロックサイクルの粒度でオーバーラップできる。従来の複数ノードに跨がって並列化処理する MPI で通信と演算のオーバーラップさせる場合、演算を止めないために、通信のデータの寿命や、通信とデータの依存関係を考慮に入れつつ、アプリケーションの中で明示的に通信と演算のオーバーラップを記述しなければならなかった。

本研究では、FPGA の 100Gbps の外部通信を OpenCL から扱う FPGA を用いた並列システム CIRCUS を開発した。

CIRCUS は、FPGA のカーネル間でデータを直接やり取りできる Channel と呼ばれる仕組みを FPGA 間に拡張して実現した。Channel は、FPGA 内部メモリ (Block RAM) を用いた First-In-First-Out (FIFO) バッファである。OpenCL コンパイラはコード中にあるループからパイプラインを構築する。演算パイプラインと通信パイプラインを接続し、全てをパイプラインにして利用することで、アプリケーションを FPGA 上で演算加速する。

Pingpong (双方の単一転送で、データを Send、Recv 通信で往復させる) ベンチマークを用いた評価では、最小レイテンシ 0.5 $\mu$ s、最大スループット 90.2Gbps、1 ホップにかかる追加のレイテンシは約 250ns を得た。Pingpong ベンチマークの 1 ホップ状態に、演算をパイプラインに追加したことに相当する Allreduce (演算結果を集約、結果を他ノードに分配) ベンチマークでは、Pingpong ベンチマークと同じ 90.2Gbps のスループットを得ており、既存の実装と比較し高い性能を得た。これらにより、CIRCUS の実現性、有用性を実証した。

また、朴らは、FPGA 用コードの OpenCL、GPU 用コードの CUDA をそのまま複合的に利用する本手法をさらに進め、oneAPI で OpenCL、CUDA を吸収可能な手法も提案している。

oneAPI は、異なるアーキテクチャ間における開発を簡略化・統一化することを目的にインテルにより提唱された統合プログラミングモデルで、開発言語として SYCL をベースにし

た Data Parallel C++(DPC++)が提供されている。SYCL はシングルソースのプログラミングモデルであり、単一の C++ソースで、種々アクセラレータ (GPU、FPGA など) 混在のヘテロジニアスアーキテクチャコードを記述する標準規格である。朴らが提案しているような GPU と FPGA 併用システムには、実アプリケーション例がないため、ターゲットコードを定め、本技術の開発を進めた。

さらに、朴らは、OpenCL プログラミング以外のアプローチとして、アクセラレータ・デバイス上の並列プログラミングを行うための標準規格 OpenACC (Open Accelerator) による単一コード記述での可能性も研究中である。本研究は、所属の筑波大学、理化学研究所、米国 Oak Ridge National Laboratory (ORNL) との共同研究で進めている。

OpenACC は NVIDIA GPU と FPGA で利用可能であり、GPU は PGI OpenACC コンパイラを、FPGA は、OpenACC コードを Intel FPGA 向け OpenCL に変換する ORNL 開発の OpenARC を利用する。そしてホストコード上のランタイムシステムとのコンフリクトを解消、コード解析して分離し、両コンパイラを機能結合するトランスレータ MHOAT (Multi-Hybrid OpenACC Translator) の開発を進めている。

## (2) 宇宙輻射輸送コード ARGOT の並列 FPGA システムにおける演算加速

### 【科学技術上の発見や発明/新分野や新しい潮流の創出への貢献】

複数の物理モデルや複数の同時発生する物理現象を含むシミュレーションのマルチフィジックスアプリケーションには、GPU と FPGA を適材適所で併用する AiS が有効な手法である。本研究では、宇宙輻射輸送コード ARGOT を対象とし、並列 FPGA システムによる演算加速が可能であることを実証した。

ARGOT は、筑波大学 計算科学研究センターで開発されている初期宇宙における天体形成をシミュレーションするプログラムである。ARGOT コードは、点光源からの輻射輸送を計算する ARGOT 法と空間に広がる光源からの輻射輸送を計算する ART (Authentic Radiative Transfer) 法との 2 つのアルゴリズムの組み合わせで構成されており、これら 2 つで輻射輸送方程式を解く。

ARGOT 法は GPU に適する計算であるが、ART 法は、レイの進行方向によってメッシュデータのメモリアクセスパターンが変化するため、ランダムに近いアクセスパターンであることや、Atomic 演算が必要など GPU に不適な計算である。ART 法の GPU にのみによる演算では、ARGOT 全体の計算時間の 90% 以上を占める。

FPGA へのアプリケーション記述に際し、アプリケーションとシステム両サイドの研究者が協力し、解くべき問題の特性、規模、システム制約など総合的に検討し、最適なアルゴリズムの構築を行う必要があるため、本研究ではコデザインに基づく最適化を行った。

本研究では、従来の GPU の CUDA プログラムと FPGA の OpenCL プログラムを分離しコンパイルしていたものを、oneAPI 環境で統合コンパイル、実行する環境を構築した。

CUDA、OpenCL のプログラム部分コードを組み合わせるフレームワークとして oneAPI を用いた。oneAPI から呼び出す計算カーネルは CUDA、OpenCL で実装し、それらを oneAPI の Queue

で統一制御可能とした。本手法では、CUDA、OpenCL で記述されたコードを DPC+++ に書き直すことなく、oneAPI の枠組みで利用、連携できる。

Intel Xeon Gold 6242CPU を 1 台、PCIe カード型 NVIDIA Tesla V100 GPU を 1 台、Intel FPGA PAC D5005 を 1 台使用し、問題サイズ  $32^3$  でアプリケーションの性能評価を実施した。

ART 法の FPGA 実装と GPU 実装の比較では、18.7 倍の性能向上を達成した。ART 法 FPGA 実装 (OpenCL) + ARGOT 法 GPU 実装 (CUDA) による実装とこれらの CUDA、OpenCL を統一制御可能とした oneAPI 実装との比較では、oneAPI 実装の実行時間が 1.5% だけ増加するに留まり、制御オーバーヘッドは無視できるくらい小さいことを実証した。

ARGOT コードでは、ARGOT 法および ART 法を非同期実行が可能である。非同期実行は、CUDA カーネル、OpenCL カーネルのインタフェースの各 oneAPI の Queue を操作する OpenMP スレッドを生成し、並列実行することで実現できる。非同期実行の同期実行との比較では、さらに 1.38 倍の高速性能が実現できることを実証した。

## 参考

- Ryohei Kobayashi, Norihisa Fujita, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, Masayuki Umemura, Multi-Hybrid Accelerated Simulation by GPU and FPGA on Radiative Transfer Simulation in Astrophysics, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol. 13, No. 3, 17 pages 2020.
- 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 上野知洋, 佐野健太郎, 朴泰祐, OpenCL プログラミングを用いた並列 FPGA 処理システムの性能評価, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol. 13, No. 3, pp. 13-28, 2020.
- 藤田典久, 小林諒平, 山口佳樹, 朴泰祐, 吉川耕司, 安部牧人, 梅村雅之, “宇宙輻射輸送コードにおける OpenCL による FPGA 演算加速最適化”, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), Vol. 12, No. 3, pp. 64-75, 2019.
- Norihisa Fujita, Ryohei Kobayashi, Yoshiki Yamaguchi, Taisuke Boku, Kohji Yoshikawa, Makito Abe, Masayuki Umemura, OpenCL-enabled Parallel Raytracing for Astrophysical Application on Multiple FPGAs with Optical Links, Sixth International Workshop on Heterogeneous High-performance Reconfigurable Computing (H2RC' 20), 2020.
- 柏野隆太, 小林諒平, 藤田典久, 朴泰祐, oneAPI を用いた GPU・FPGA 混載ノードにおける宇宙物理シミュレーションコード ARGOT の実装, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2022-HPC-183 (12), pp. 1-9, 2022.
- 朴泰祐, 小林諒平, 藤田典久, 山口佳樹, 梅村雅之, 吉川耕司, GPU・FPGA 複合計算による次世代 HPC/AI 加速技術, PC クラスタ OSS ワークショップ (FPGA), 2022.
- 朴泰祐, 柏野隆太, 小林諒平, 藤田典久, oneAPI による GPU+FPGA マルチヘテロ環境プログラミングとアプリケーション実行, PCCC-OSS-Programming ワークショップ, 2022.

## 2. 研究成果の社会・経済への貢献

FPGA の高性能計算への応用、高水準プログラミング技術、異種演算加速器の融合、並列 FPGA 利用技術など、本研究領域からの発展技術に関し、米国及びヨーロッパの同種研究を行う研究者との研究コミュニティを形成し、過去 4 年間、ヨーロッパの ISC(International Supercomputing Conference) 及び米国の SC(International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis) といった国際的に著名な高性能計算に関する学会において、ワークショップ、BoF(Birds-Of-A-Feather)を定期開催し、同種研究の成果報告と研究コミュニティのプロモーションを行った。

また、所属の筑波大学計算物理学研究センターにて、1992 年から CP-PACS、FIRST、PACS-CS、HA-PACS/TCA、および本研究領域終了後には斬新なアーキテクチャの Cygnus、Pegasus など数多くのスーパーコンピューティングシステムを開発、運営している。

これらの多くの実績は、国内外の顕著な学会活動および我が国のスーパーコンピュータの進歩に大きく貢献している証左である。これらから開発されたスーパーコンピュータが様々な分野、業種で使われ、新たな発見や様々な製品、サービスに今後も繋がるものと期待される。

### 2.4 戦略目標、戦略研究推進事業や、本 CREST についてのご意見など

本 CREST 研究代表者に以下(1)～(3)についてアンケート(複数回答可)を実施した。

- (1)本 CREST で活動して良かったこと、役立ったこと
- (2)本 CREST で活動して悪かったこと
- (3)戦略目標、戦略研究推進事業(CREST、さきがけ、ERATO、ACT-X)について改善点、今後の望ましい方向、ご助言、ご要望など

回答率は約 70%であった。アンケート結果を表 2-2 に示す。

“(1)本 CREST で活動して良かったこと、役立ったこと”については、全回答者の全員がポジティブな回答であった。この中では、大型研究資金により、高額機材導入で研究が可能になったことや、研究が進みその後の自身の研究コアになった、リーダーとしての貴重な経験を積めたなど回答があった。また、多様な研究者との議論の場、人材交流ができ、研究が拡大、発展した、研究が認知されたなど回答があった。さらに、研究計画や予算執行など比較的柔軟な運営がなされたため、いい環境で研究が進んだなど回答があった。大規模複雑なシステム構成での実験評価や、多くの関連研究者との連携が必須の本研究領域では、戦略研究推進事業の大型研究資金や領域運営形態での特徴がマッチし、本事業の効果がより発揮されたものと推測される。

“(2)本 CREST で活動して悪かったこと”については、全回答者中 7 割が回答し、その内の半数が特になし、残りは、研究継続、ソフトウェアメンテナンス、アウトリーチなど継続的な活動が研究期間終了後に支援なく縮小、凍結になったこと、年度繰り越し予算措置の柔軟性が無いとの回答があった。本研究領域のように大規模プロジェクトで足の長い

研究分野では、研究期間中の研究成果が途絶えることなく継続的に貢献し、展開するための支援が課題である。

“(3)戦略目標、戦略研究推進事業について改善点、今後の望ましい方向、ご助言、ご要望など”については、全回答者中7割が回答し、その内の3割が特になし、残りは、研究領域設定において新規性や過去分野との差分を過度に重視し、地に足の付いた研究より流行に乗った研究分野に取り組みなければいけない状況になってないかや、挑戦者の参加しやすい環境構築と同時に研究途中でのチェックと適切な予算執行が必要であること、本研究領域のような広範囲に大きな波及効果のある分野の継続の要望、延長プログラムのようなイレギュラーな場合の評価についてのプロセスの見直し、周知の徹底など助言があった。

表 2-2 アンケート結果

戦略目標、戦略研究推進事業や、本 CREST についてのご意見など	
<p>(1) 本 CREST で活動して良かったこと、役立ったこと(全回答者中100%)</p>	<p><b>【大型研究資金によるスケールメリット】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・6年間に渡る大型研究資金が提供されたことで、特に高額最先端機器やサーバを複数導入することで、従来難しかった高性能計算への応用という研究を推進できた。</li> <li>・比較的自由に利用できる多額の研究費を得て、その後の発展につながる研究成果を生み出すことができた。</li> <li>・5年間2.5億円規模の研究プロジェクトを主宰し、複数グループの取りまとめや研究者雇用を行ったことは得難い経験だった。</li> <li>・このプロジェクトで培った技術が、現在も我々の研究のコアとなっている。</li> <li>・ポストドクの長期雇用により、その後のテニアポスト獲得へとつながった。</li> </ul> <p><b>【多様な研究者との議論の場、人材交流】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・単に個別の課題として取り組むのではなく領域として活動することによるスケールメリット。例えば領域全体のシンポジウムなどが開催でき、通常より多くの議論の場があったことなど。</li> <li>・スーパーコンピューティング分野の研究者と交流することにより、当該分野の研究者やソフトウェア開発者の考え方を知ることができ、その後の研究の発展に役立った。</li> <li>・領域内の他チームとの交流により、学会等に比べより密な情報交換が実現できた。</li> <li>・研究領域内のイベント開催などを通じて課題間の情報交換や議論を活発に行えたことが、研究推進だけでなく、その後の人材育成や交流に大きく役に立った。</li> <li>・システムの各階層における強力な共同研究者を得ることで、ハードウェアからプログラミング応用までの幅広い階層における一貫した研究を推進できた。</li> <li>・研究活動を通じて共同研究者以外の研究コミュニティも立ち上がり、所属研究機関は現在も同分野の主要研究機関として国内外に認知されている。</li> <li>・多くの共同研究者と同じ目標に向かって共同研究する機会となり、その後の研究活動にも大きくプラスの影響を与えた。</li> </ul> <p><b>【柔軟な運営】</b></p>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>・CREST は他の競争的研究資金に比べ大型の研究をかなり自由に実施可能なため、研究成果、人材育成効果、波及効果が大きい。</li> <li>・他の研究費助成制度と比較した場合では、研究内容の発展や新計画の発案等による予算執行の変更等についても、非常に柔軟に対応していただいた印象。</li> <li>・最初の研究計画書作成の段階での目標達成のみに拘るのではなく、新機軸による研究の推進に関して積極的に支援してもらい、研究参加者一同感謝している。</li> </ul>
<p>(2)</p> <p>本 CREST で活動して悪かったこと（全回答者中 70%）</p>	<p><b>【研究期間終了後の支援】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・悪かったことでは無く反省点だが、研究期間終了後に、継続的に予算獲得、共同研究は進めているものの、CREST の規模に比べると、研究活動が縮小してしまっている。</li> <li>・研究期間の終了後、CREST で開発したソフトウェアをメンテナンスし続けることができなかったこと</li> <li>・プロジェクト/CREST 領域終了後に、継続的な情報発信やソフトウェア公開も重要だと思うが、領域代表や各チームの手弁当で行う必要があるのがやや残念。</li> </ul> <p><b>【予算執行】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・研究予算の年度末調整においてある程度融通の効く繰り越し措置が行えれば予算をより有効に活用できた。</li> </ul> <p><b>【特になし】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・特に悪いことは感じてない。</li> <li>・特に思い当たることはない。</li> <li>・特になし。</li> <li>・特になし。</li> </ul>
<p>(3)</p> <p>戦略目標、戦略研究推進事業（CREST、さきがけ、ERATO、ACT-X）について改善点、今後の望ましい方向、ご助言、ご要望など（全回答者中 70%）</p>	<p><b>【新規性や過去分野との差分を過度に重視した研究領域設定】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・戦略研究推進事業は基礎研究から応用展開まで広くサポート頂いていると思うが、領域の研究分野の設定に関しては、新規性や過去の領域分野との差分を過度に重視しがちな傾向があると思う。そのため既存の分野をさらに発展させるといった貢献は十分に出来ていないような印象を受ける。戦略研究推進事業に挑戦したい特に若手研究者に流行に乗った研究分野に取り組まなければ採択されないという印象は与えるのはあまり好ましくないと思う。</li> </ul> <p><b>【挑戦者の参加しやすい環境構築とともに研究途中でのチェックと適切な予算執行】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・若手研究者、先進的・進歩的研究に挑戦する研究者が参加しやすい環境を目指すと同時に、研究年限の途中でのチェックポイントを行い、真に有用な研究に適切に予算が配分されるようマネジメントするとよいと思う。</li> </ul> <p><b>【スーパーコンピュータ研究の継続】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・スーパーコンピュータのシステム研究開発は自然科学・社会科学をはじめ機械学習等、非常に広範囲にわたり大きな波及効果のある分野であり、戦略目標として検討をお願いしたい。</li> <li>・研究領域終了後の継続的な活動のサポートの充実を期待したい。</li> </ul> <p><b>【評価プロセス】</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・2 年間の延長プログラムに採択していただいたが、その延長プログラムの最終評価が研究期</li> </ul>

	<p>間終了の半年以上前に十分な周知期間なくおこなわれたのは残念だった。延長部分の最終評価まで1年未満であり、実質的に半年強の期間で新しい成果を求められる形となってしまった。また、研究内容はカウンターパートの海外研究チームとの連携で決まるが、関係者にその点が周知されておらず、評価会での質疑や評価結果が、制度の中身とかみ合っていないように感じた。</p> <p><b>【特になし】</b></p> <ul style="list-style-type: none"><li>・特になし。</li><li>・特になし。</li></ul>
--	--