

スーパーコンピュータ「富岳」の夜明け



理化学研究所 計算科学研究センター
センター長 松岡 聡

2020年7月1日



「富岳」 ベンチマークテストで4冠達成

- 設置・調整中の「富岳」 がすべての大規模演算性能を示すベンチマークで**圧倒的1位**！
- ベンチマークテスト 4部門で同時に1位を獲得するのは世界初めての快挙！
- 世界で初めてのエクサスケールコンピュータ (HPL-AI)！

ベンチマークテスト	1位	スコア	単位	2位	スコア	単位	富岳の優位性
TOP500 (LINPACK)	富岳	415.5	PFLOPS	Summit (米国)	148.6	PFLOPS	2.80倍
HPCG	富岳	13.4	PFLOPS	Summit (米国)	2.93	PFLOPS	4.57倍
HPL-AI	富岳	1.42	EFLOPS	Summit (米国)	0.55	EFLOPS	2.58倍
Graph500	富岳	70,980	GTEPS	Sunway TaihuLight (中国)	23,756	GTEPS	2.99倍

- ギガ (Giga) = 10の9乗 テラ (Tera) = 10の12乗 ペタ(Peta) = 10の15乗 エクサ(Exa) = 10の18乗
- フロップス(FLOPS: Floating Operations Per Second) 一秒あたりの(浮動)小数点演算性能
- テップス (TEPS : Traversed edges per second) グラフ処理の能力表す単位



● 世界最高レベルの省エネ性能

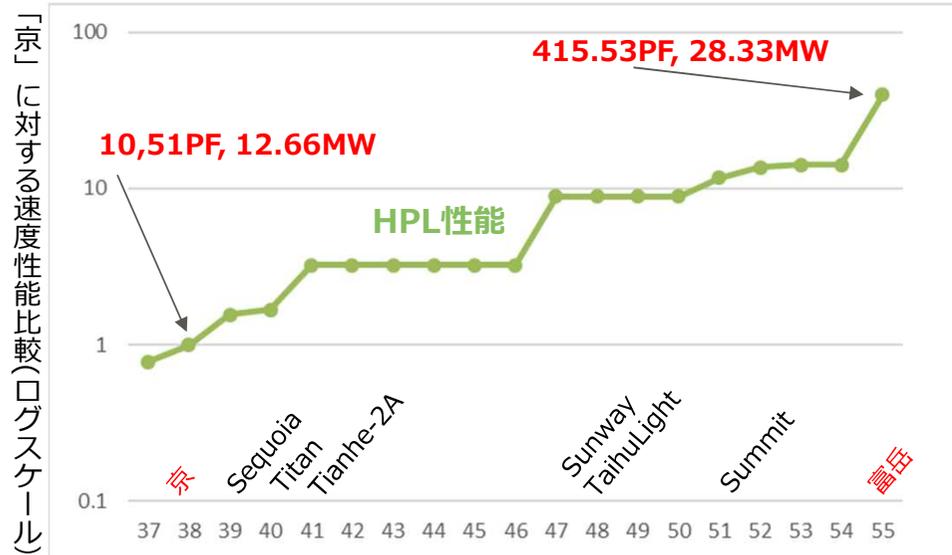
- 「京」の40倍の性能を発揮しながら電力増加はわずか2.2倍

● 超並列スーパーコンピュータの性能を引き出す最高性能のネットワーク技術

- 我が国オリジナルなインターコネクト技術が大幅に進化しマシン性能を向上 (Tofu⇒TofuD)

● 実アプリケーション性能を示す、HPCG及びGraph500でも圧倒的な優位性

HPC システム	ノード数	HPL性能	HPL 実効効率	ネットワーク
富岳 (Fugaku)	152,064	415.53PF	80.87%	Tofu interconnect D
Summit	4,608	148.60PF	74.01%	Infiniband
Sunway Taihulight	40,960	93.01PF	74.15%	Custom
Tianhe-2	16,000	33.86PF	61.68%	Custom (Fat tree)
Titan	18,688	17.59PF	64.88%	Gemini
Sequoia	98,304	16.32PF	81.09%	Custom (5D Tours)
京 (K computer)	88,128	10.51PF	93.17%	Tofu

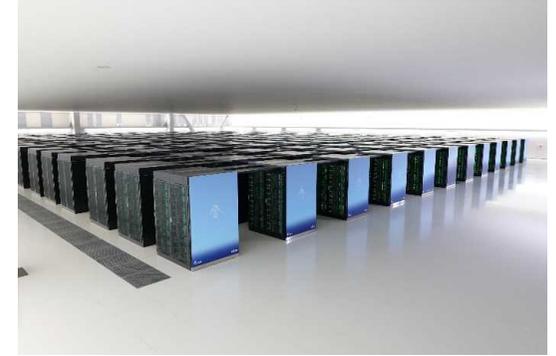


- ノード数：稼働させているCPUの数
- HPL: High Performance Linpack TOP500で使用されるLinpackベンチマーク

スーパーコンピュータ「富岳」とR-CCSの取り組み

世界一に輝いた スーパーコンピュータ「富岳」

- スーパーコンピュータ「富岳」の開発は**2014年4月から始められ、2019年3月から富士通ITプロダクツ（石川県かほく市）にて製造を開始**した。
- 2019年12月3日から理化学研究所 計算科学研究センター（神戸市）への搬入、設置・調整が始まった「富岳」は、新型コロナウイルスが蔓延する中、関係者の努力により2020年5月13日にすべての筐体の搬入を終了（大型10トントラック 72台分）。
- 今回、世界一に輝いたに**各種ベンチマークテストは、2020年4月から準備を始め、5月から本格的にテストを開始し、登録期限のぎりぎりまで調整を続け、今回の栄冠**にたどりついた。
- 「富岳」は現在、2021年度の共用開始に向けてシステムの調整中。なお、**一部の計算資源（ノード）については、試行的に利用を進め、新型コロナウイルス対策等に計算資源を提供中。**
- 併せて、Society5.0に対応したAIやビッグデータ処理、クラウド的利用に関するソフトウェア開発や環境整備を実施中。



世界のスーパーコンピュータを凌駕した「富岳」

- 新CPU **A64FX**等を理研・富士通が中心に全国のスパコン研究者も参加し共同開発

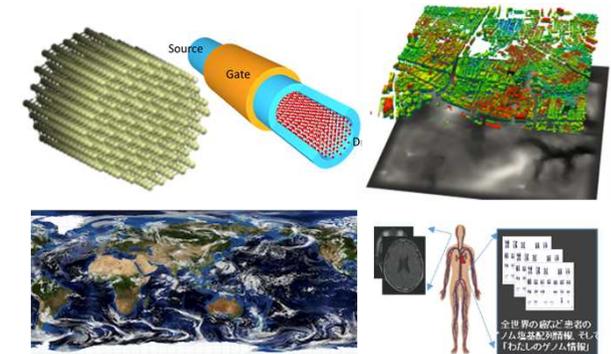


- 従来の米国製トップCPUの**3倍の性能**
- スマホで用いられる汎用Arm CPUの上位互換、あらゆるソフトに対応(パワポも)
- シミュレーションと共に**AI強化機能**も



- 「富岳」2~3台で日本全体のITの一年分

	スマートフォン		サーバ(クラウド含)		富岳		参考：京
台数	2,000万台 (国内の年間出荷台数の約2/3)	=	30万台 (国内の年間出荷台数の約2/3)	=	1台 (15.9万ノード)		最大120台
消費電力	10W×2,000万台= 200MW	=	600-700W×30万台= 200MW (冷却含)	>	30MW (超省電力)	>	15MW (富岳の1/10以下の効率)



- コデザインで進められた「富岳」の開発

「計算の科学」

「富岳」を用いて重点的に取り組むべき、社会的・科学的課題（9重点課題）に向けたアプリケーション開発を実施。



「計算による科学」

Armエコシステム・オープンソース等による高性能・省電力・汎用化を推進。

スーパーコンピュータ「富岳」の基本性能

- **総ノード数** : 158,976ノード

- 384 ノード x 396 ラック = 152,064
- 192 ノード x 36 ラック = 6,912
- (参考) 「京」 88,128 ノード

- **通常モード (CPU動作クロック周波数 2GHz)**

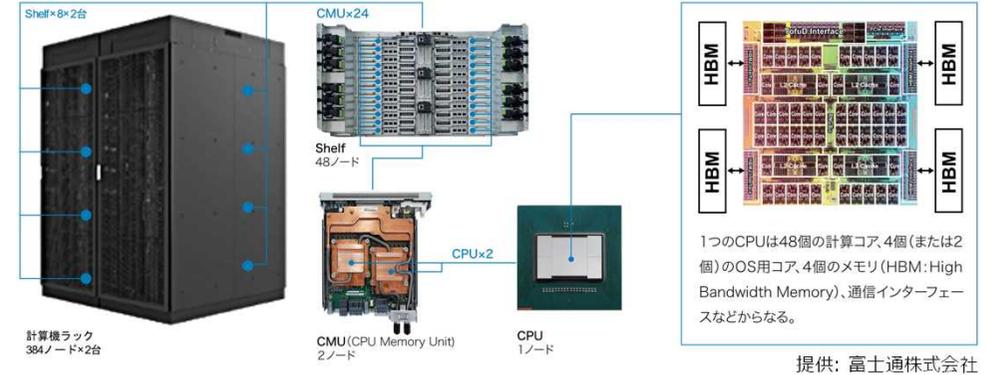
- 倍精度理論最高値 (64bit) 488 ペタフロップス
- 単精度理論最高値 (32bit) 977 ペタフロップス
- 半精度 (AI学習) 理論最高値 (16bit) 1.95 エキサフロップス
- 整数 (AI推論) 理論最高値 (8bit) 3.90 エキサオプス

- **ブーストモード (CPU動作クロック周波数 2.2GHz)**

- 倍精度理論最高値 (64bit) 537 ペタフロップス
- 単精度理論最高値 (32bit) 1070 ペタフロップス
- 半精度 (AI学習) 理論最高値 (16bit) 2.15 エキサフロップス
- 整数 (AI推論) 理論最高値 (8bit) 4.30 エキサオプス

- **理論総合メモリバンド幅 163ペタバイト/秒**

注釈) ここで示した数値は理論最高値であり、実際の速度は各種ベンチマークや、実アプリケーションによって測定される。



(参考) 単位

- ペタ(Peta)=10の15乗 エクサ(Exa)= 10の18乗
- フロップス(FLOPS: Floating Operations Per Second) 一秒あたりの(浮動)小数点演算性能
- オプス (OPS: (Integer) Operations Per Second) 一秒あたりの整数演算性能

- (参考) 「京」との比較 (「富岳」ブーストモード)

- 倍精度理論最高値 (64bit) 48倍
- 単精度理論最高値 (32bit) 95倍
- 半精度 (AI学習) 理論最高値 (16bit) 190倍
※「京」は、いずれの精度でも11.28 ペタフロップス
- 整数 (AI推論) 理論最高値 (8bit) 1,500倍以上
※「京」は、2.82 ペタオプス(64bit)
- 理論総合メモリバンド幅 29倍 ※「京」は5.64ペタバイト/秒

「富岳」は、（総合科学技術・イノベーション会議（CSTI）中間評価結果（2018年11月）等による）

■シミュレーションを中心にした計算科学の研究基盤

（科学的な面での成果創出（「京」時代から継続））

+

■Society5.0実現への貢献



新しい政策的目標の実現のため実施すべきこと

- ✓ Society5.0を担うユーザーへの利用拡大を図る
- ✓ それらユーザーが利活用できる環境整備（富岳の高度化）を、運用期間を通じて強力に行う



■ 「富岳」 Society5.0推進枠(仮称)と連動したパッケージ対応

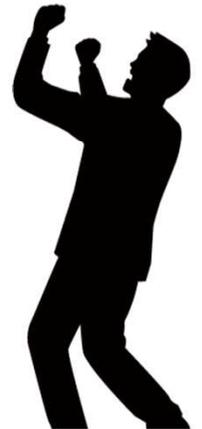
- Society5.0に対する「富岳」の技術的取り組み（9頁）
- Society5.0を担う潜在的ユーザーとの関係構築・発展
- ノウハウを有する機関との協働

■ パッケージ対応のハブとなる拠点設置など体制強化

- 「富岳」での新型コロナウイルス対策に関する研究(15頁)を通じてノウハウ蓄積、その後も試行錯誤的な取組を建設的に行って手法確立へ

- **「富岳Arm」 IoT主流のArmエコシステム・オープンソース**
 - A64fx CPU：世界最速の汎用プロセッサ(x86, Arm含)
 - HPC・クラウド・AI・IoT全て包括するオープンソース汎用ソフトウェアスタック
 - VM, コンテナ、Spack Package Managerなど、各種管理、デプロイ
- **「富岳AI」の開発**
 - PyTorch, TensorFlow等の高速実装をDNNL for A64fx, Eigen等をベースに開発
 - 富士通・理研・Arm社等との産学連携による開発体制
 - その他各種HPCとAIの融合
- **「富岳クラウドサービス（FUGAKU Web Service(FWS)）」に向けたクラウドプロバイダとの連携**
 - 2020年度 「富岳クラウドサービス」のためクラウドプロバイダと共同研究を開始。
富岳クラウド機能によるサービス基盤の構築と、その上での利用サービスの開発と実証
 - 2021年度以降 本格運用へ
- **「富岳ライブストリーム」で多数のIoTストリームデータのアプリケーションへの提供**
 - 種々の研究機関・企業と連携し、一定期間以上保存される観測データの格納・分析・学習・推論機構を提供

- 「京」コンピュータ
 - 特殊なアーキテクチャのため、オープンソースソフトウェアの活用が困難・・・
- スーパーコンピュータ「富岳」
 - 既存のArm向けオープンソースソフトウェア普及の取り組みに参画
 - ~ Arm HPC Users Group <https://arm-hpc.gitlab.io/>
 - ~ Linaro <https://www.linaro.org/>
 - ~ Spack: <https://spack.io/>  **Spack**
 - 米Exascale Computing Project公式ソフトウェアパッケージマネージャ
 - R-CCS ソフトウェアセンター
 - ~ R-CCSにおけるソフトウェアの開発支援、及び公開、普及に向けた取り組みを推進
 - DL4Fugaku
 - ~ 富岳向け深層学習フレームワークの整備を目的としたR-CCSと富士通の共同研究プロジェクト
 - ターゲット: PyTorch, TensorFlow, Chainer, 等



日本がAIで劣勢を跳ね返すには

- 莫大な学習データの収集
 - ✓ 今後の日本の政策により、統計的に有意なサンプル数は収集可能
- 高性能AIインフラ
 - ✓ Deep learning世界トップレベルのABCIの15~20倍以上の性能
- 高度人材
 - ✓ 上記条件が揃えば世界から人材が集まる



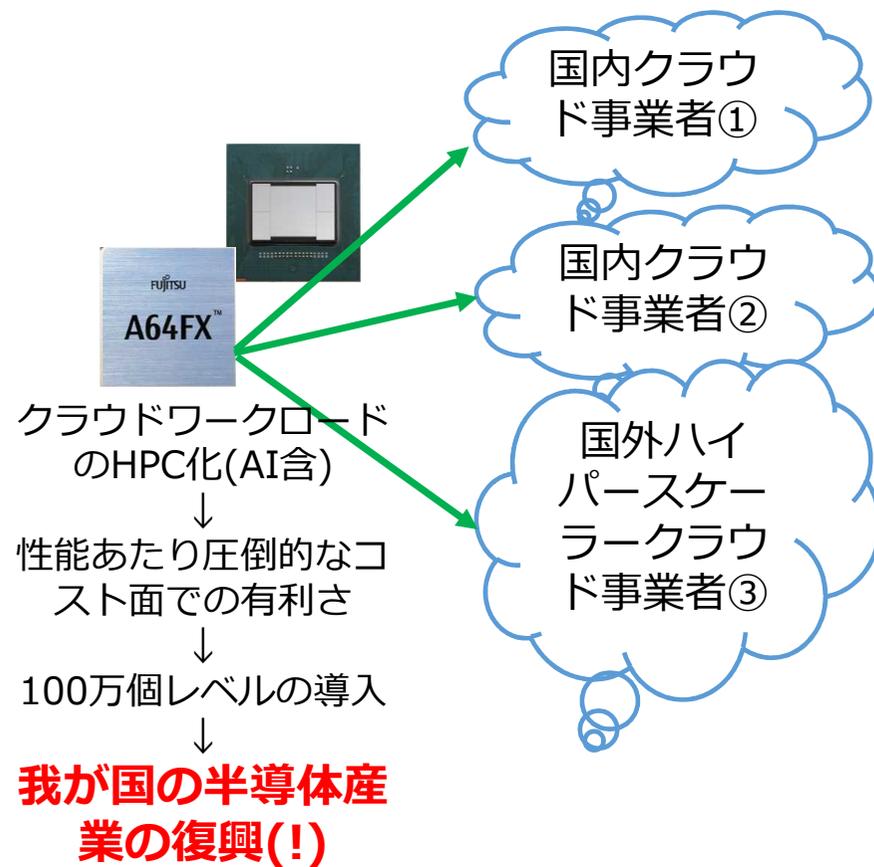
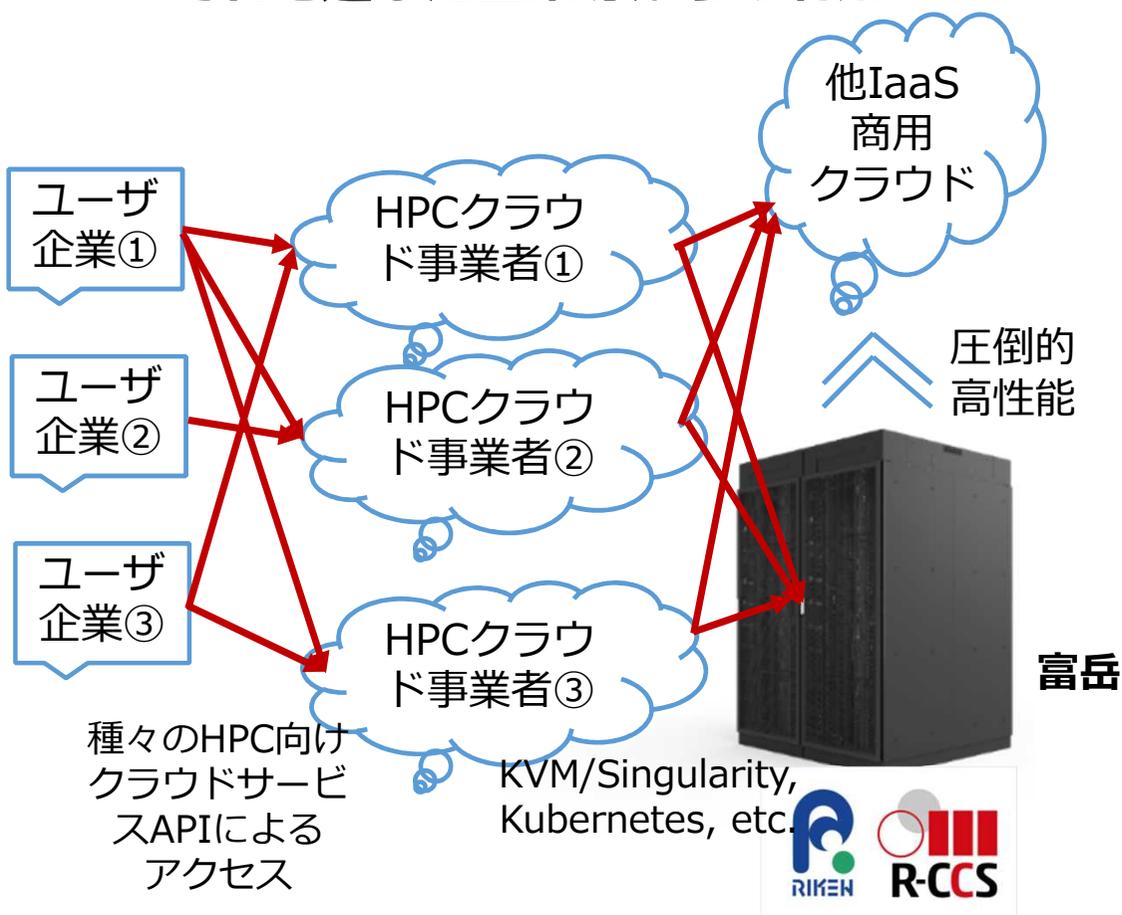
GAFGAに対抗し、追い越すことも可能
 (ABCIでは既に富士通・ソニーが一部)

- ◆ 「富岳試作機評価環境の利用に関する覚書」を富士通と締結し、「富岳」上にAIフレームワークを創り上げ「富岳」を中心とした世界トップクラスのAI学習・推論・利活用の計算機環境基盤を構築する。
- ◆ **大規模AIベンチマーク「HPL-AI」(2020年6月創設) に向け研究開発を行い、世界一位を獲得。**



超高速なAIソフトウェアを「富岳」、商用機、クラウド等に展開し **Society5.0 の中心的なインフラ**とする。

- HPCクラウド事業者と協業した富岳の IaaSとしてのクラウドAPIの整備、それを通じた企業等からの利用
- 富岳テクノロジー：研究開発された A64fxおよびその派生Arm CPUのハイパースケールクラウドへの展開

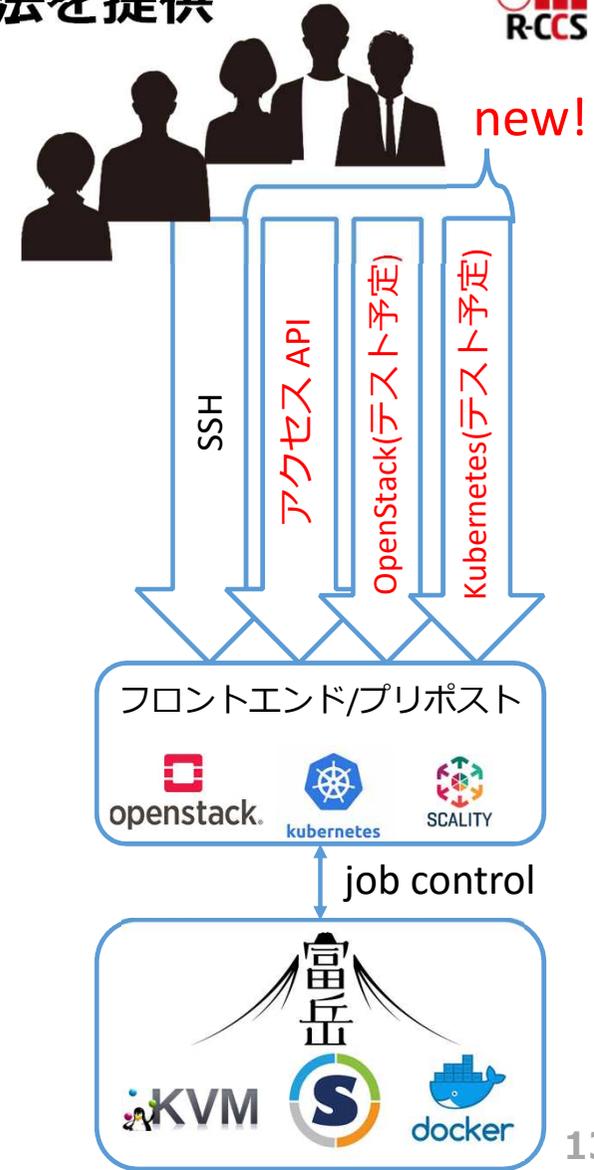


● 計算ノード

- 富士通製バッチジョブスケジューラを通してジョブを実行
 - CUI と **アクセス API(NEWT2.0がベース)** によりジョブの投入等が可能
 - インタラクティブもバッチジョブスケジューラの元で可能
- **KVM(仮想マシン) とSingularity (コンテナ) をテスト中**

● フロントエンド/プリポスト環境

- 様々なアーキテクチャのサーバで構成
 - x86(w/ GPU), arm TX2(w/ GPU), A64FX
- 様々な形態での利用が可能
 - インタラクティブ/バッチ/**OpenStack (テスト予定) /Kubernetes (テスト予定)**
- **Amazon S3 互換オブジェクトストレージ**

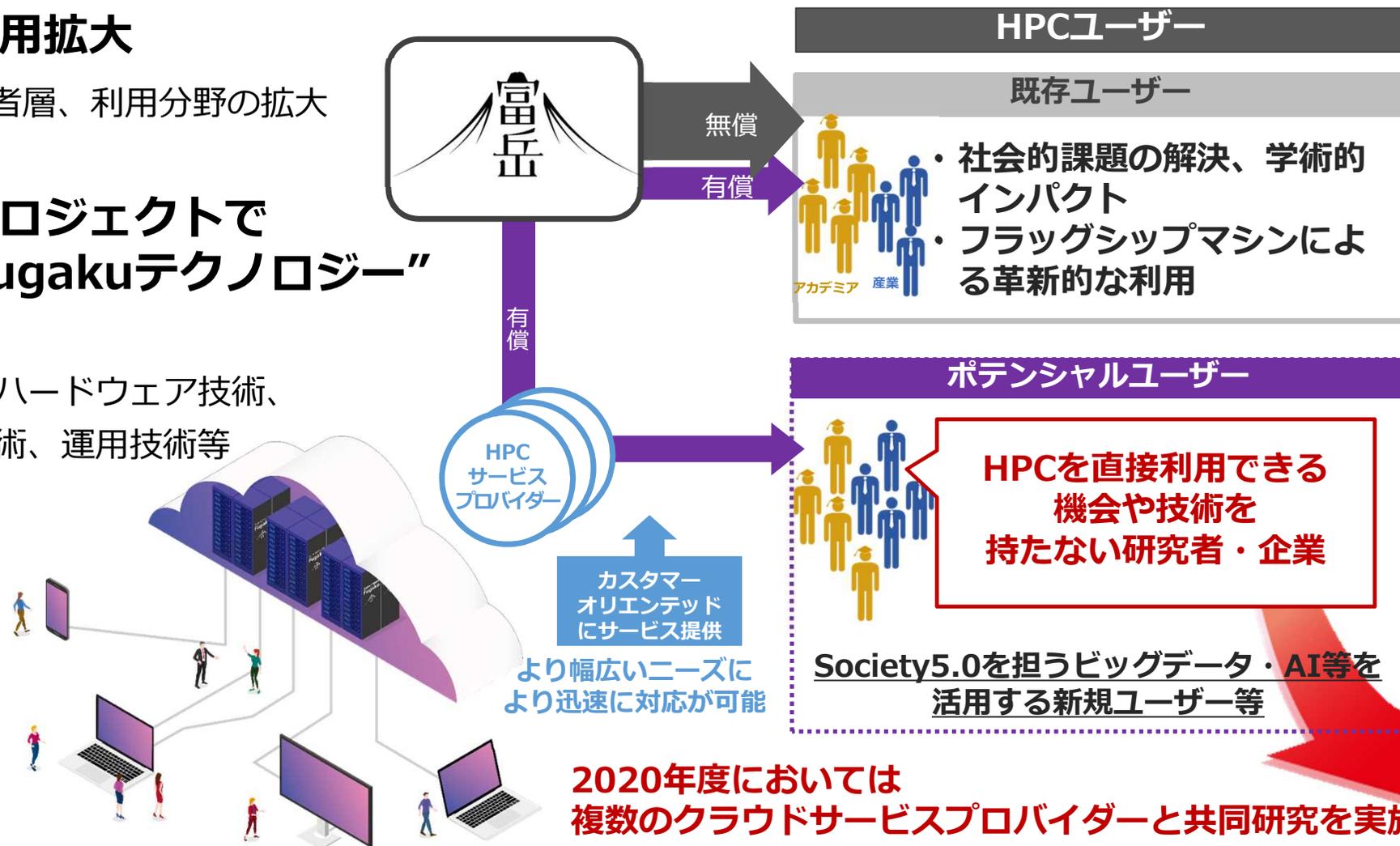


■ 「富岳」の利用拡大

利用者数、利用者層、利用分野の拡大

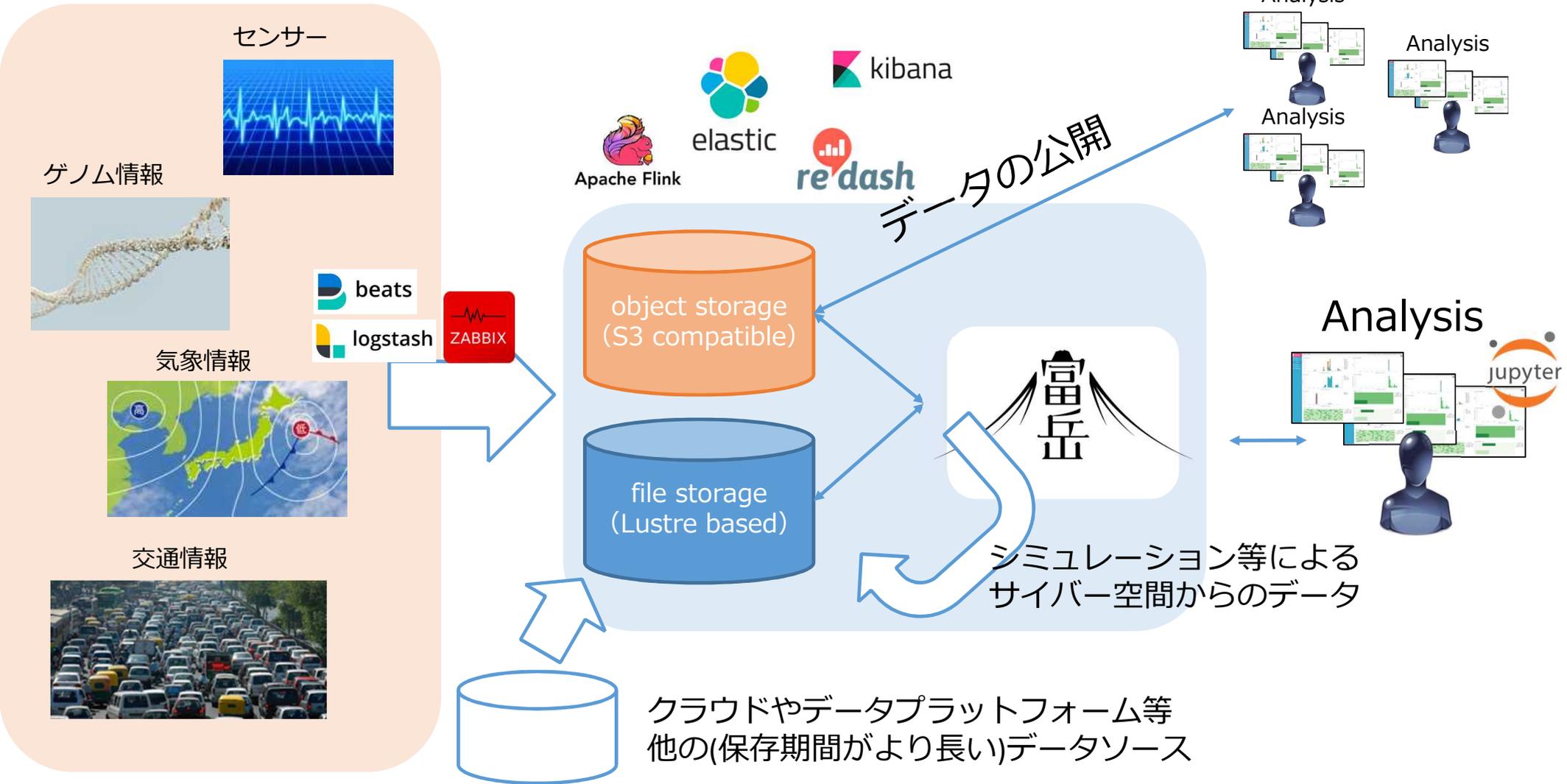
■ 「富岳」のプロジェクトで 培われた“Fugakuテクノロジー” の普及

HPCサービス、ハードウェア技術、
ソフトウェア技術、運用技術等



裾野拡大

ライブデータストリーム向けプラットフォーム



新型コロナウイルス対策に関する貢献 (Society 5.0推進枠 (仮称) の試行的取り組み)

医学的側面からの研究

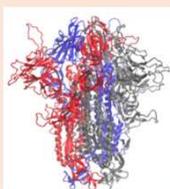
「富岳」による 新型コロナウイルスの治療薬候補同定



分子動力学計算により、約2000種の既存医薬品の中から、新型コロナウイルスの標的タンパク質に高い親和性を示す治療薬候補を探索・同定する。

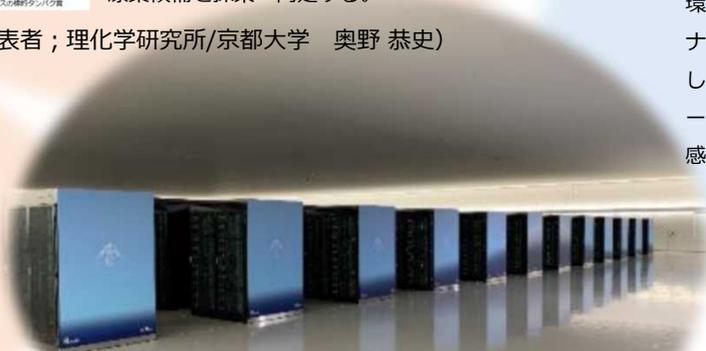
(課題代表者; 理化学研究所/京都大学 奥野 恭史)

「富岳」を用いた新型コロナウイルス 表面のタンパク質動的構造予測



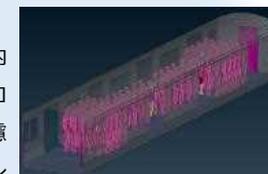
クライオ電子顕微鏡によって解かれたウィルス表面タンパク質の立体構造を初期モデルとして、その立体構造の動きを「富岳」を用いた分子動力学計算で予測する。

(課題代表者; 理化学研究所 杉田 有治)



室内環境におけるウイルス飛沫感染の 予測とその対策

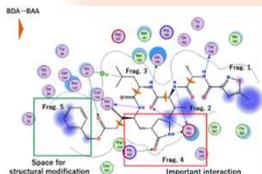
通勤列車内、オフィス、教室、病室といった室内環境において、新型コロナウイルスの特性を考慮した飛沫の飛散シミュレーションを行い、感染リスク評価を行った上で、感染リスク低減対策の提案を行う。



(課題代表者; 理化学研究所/神戸大学 坪倉 誠)

社会的側面からの研究

新型コロナウイルス関連タンパク質に対する フラグメント分子軌道計算

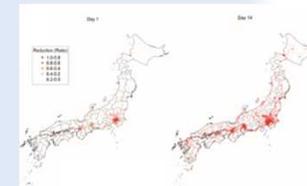


新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算を系統的に実施し、詳細な相互作用解析を行う。

(課題代表者; 立教大学 望月 祐志)

パンデミック現象および対策の シミュレーション解析

今後生じうる社会経済活動への影響を評価し、収束シナリオとその実現方法を探る。あわせてウイルスの変異などにより感染・発病の経過が変化した場合に起こりうる事象への対応を立案する。



(課題代表者; 理化学研究所 伊藤 伸泰)

また、理研は、スーパーコンピュータを用いた新型コロナウイルス対策研究のため本年3月に米国にて設立されたコンソーシアム (COVID-19 High Performance Computing Consortium) に参加