

スーパーコンピュータ「富岳」の開発に関する説明資料



理化学研究所 計算科学研究センター

2021年7月13日

計算の 計算による 計算のための科学

理研 計算科学研究センター (R-CCS)

理研の12研究センターの一つであると同時に
高性能計算科学における国家「知の拠点」センター



新しいコンピュータ・
アーキテクチャや
計算モデル

新しいデバイスの
ためのアルゴリズムや
プログラミングモデル

計算のための科学

さまざまな科学分野との連携により
高性能計算を進化させる

光・量子・再構成可能コンピューティング・ニューロモル
フィックコンピューティングなど、新しいコンピュ
ーティングの概念を支える材料やデバイスの開発

新しいコンピューティング
技術のための解析や
シミュレーション

新しいコンピューティング
技術による計算の高度化

理研の他の研究センター
および国内外の大学・
研究機関との連携

R-CCSが橋頭保的な役割

相乗効果と融合

計算の科学

高性能計算の本質となる
コンピューティング技術の研究

ポストムーア時代を見据えた新たなコンピューティング技術、
アーキテクチャ、アルゴリズム等の開発やプログラミング手
法、ソフトウェア、計算機の運用技術、ビッグデータ・
人工知能(AI)への対応を実現する手法
の開発、など

計算による科学

高性能計算を活用し
科学・社会の課題解決を目指す研究

高信頼性かつ高精度な解析・シミュレーションを用いた、
生命科学、工学、気象・気候、防災・減災、物質科学、宇
宙・素粒子物理学や社会科学などの研究、来る
べきSociety5.0社会に向けた機械学
習の応用開発など

高度な計算科学技術をもつ
人材の育成

産業界との連携

- 1. 富岳を用いた、従来から踏襲するHPCの情報技術の深化と、個々の科学分野や産業分野の発展へ貢献する計算科学の研究開発**
 - 「計算の科学」と「計算による科学」の個々の探求
- 2. 「シミュレーション・ファースト」によるSociety5.0の推進**
 - 富岳のクラウド的利用の整備および研究開発- Fugaku Cloud Platform (FCP)
 - デジタルツインのシミュレーション：物理世界とサイバー空間を連結させたシミュレーション
- 3. 今後のHPCにおける“第一原理シミュレーション”、“AIによる経験則的予測”、“観測ビッグデータ”の三つの要素のコンバージェンスの科学的探求**
 - ‘Ad-hoc’ な組み合わせではなく、“将来の情報処理”の基本的パラダイムとしての研究
 - コンバージェンスの基礎理論から将来の高性能ITシステム的设计へ
- 4. 情報科学のグランドチャレンジとしての新しいコンピューティング・パラダイムの探求**
 - 量子計算、ニューロモーフィック(脳型)計算 => 富岳上でのシミュレーションによる探求

アプリケーションファーストスパコン「富岳」

従来のスパコンアプリだけでなく
Society5.0-サイバーフィジカル
などへの幅広い分野へ対応

高い計算性能

広い応用分野

汎用的なアーキテクチャにもとづいて開発

世界のスーパーコンピュータを凌駕した「富岳」

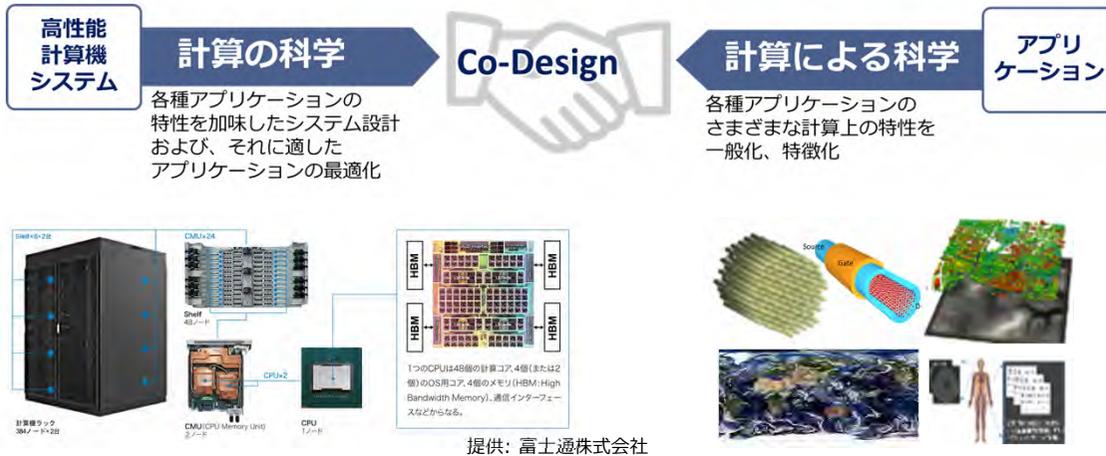
- “アプリケーションファースト”による“ムーンショット”マシン開発に我が国を挙げて**挑戦!**
- 新規に開発されたCPU「A64FX」など基幹となる技術を理化学研究所及び富士通、日本全国のスパコン研究者が参加して、**国家プロジェクト**として開発を推進。



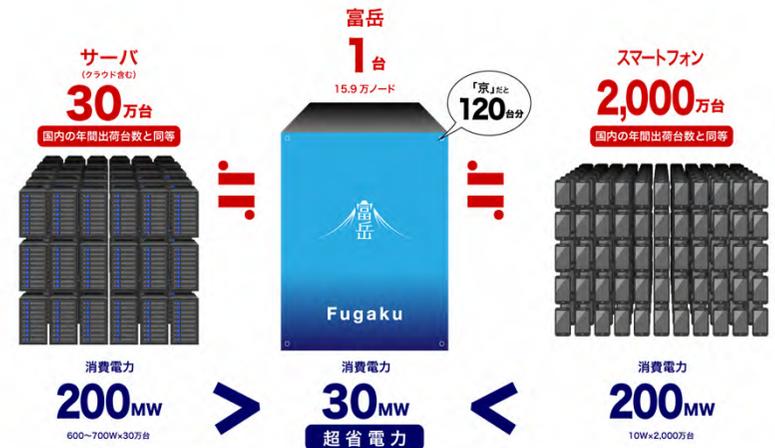
- 従来の米国製トップCPUの**3倍の性能**
- スマホで用いられる汎用Arm CPUの上位互換、あらゆるソフトに対応(パワポも)
- シミュレーションと共に**AI強化機能も**

全て同時達成はムーンショット的困難

● コデザインで進められた「富岳」の開発



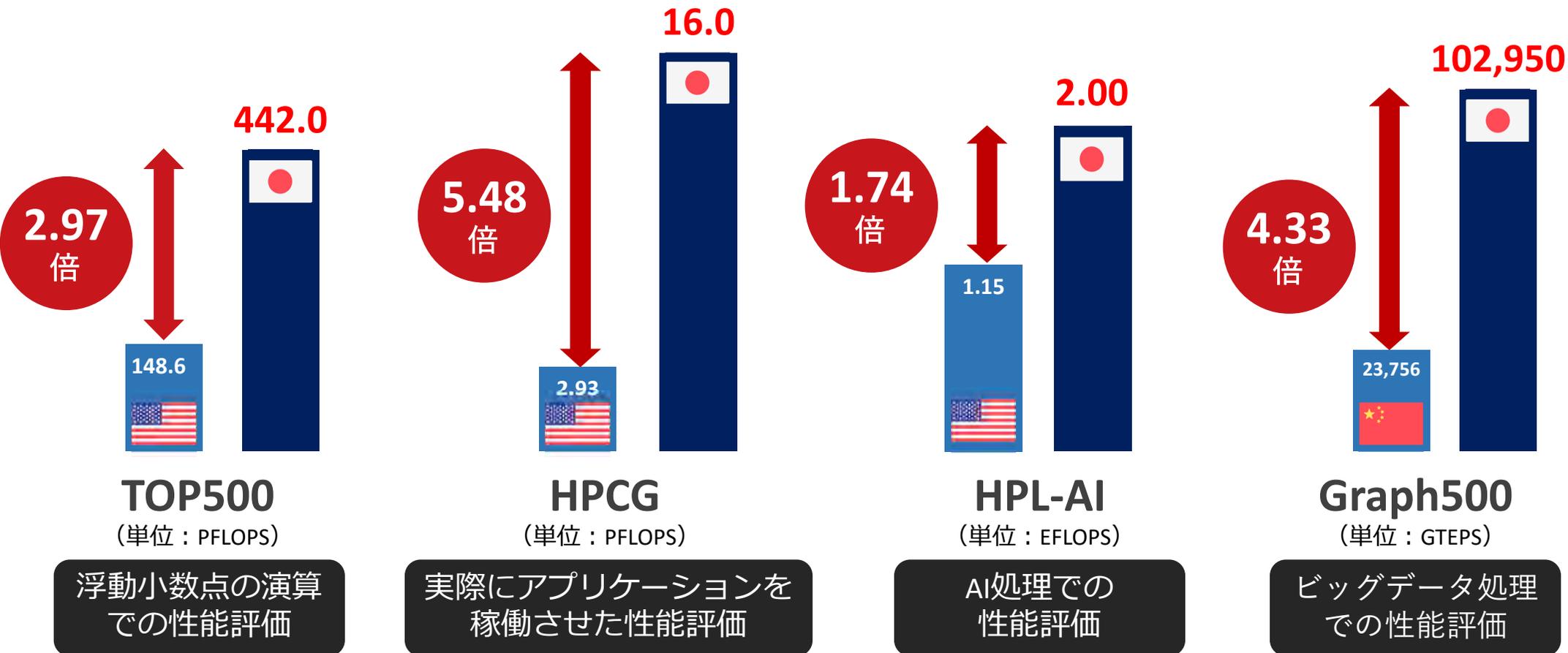
● 「富岳」2～3台で日本全体のITの1年分



シミュレーション

AI

ビッグデータ



2位に対して 約1.7倍から5.5倍の性能差を実現

- LINPACK（**密行列**の連立一次方程式の**直接解法**）は、科学技術計算性能のクラシックなスパコンベンチマーク。
- Top500リストは、LINPACKの実行性能を指標として、世界で最も高速なスーパーコンピュータの上位500位までを定期的にランク付けするベンチマークランキングの老舗。1993年に発足、ランキングを年2回（6月、11月）発表している。
- 近年、Top500の高ランク達成が自己目的化し、**実際のアプリケーションの性能との乖離が指摘**されている。

AI

- 低精度混合演算を用いることを認めたHPL（High-Performance LINPACK）の性能を計測するベンチマーク。
- 低精度演算での演算能力を評価することで、**ディープラーニングなどのAI処理の性能を評価することを目的とする。**
- HPL-AIは2019年11月にルールが公表されたため、今回が初めてのベンチマークランキングの発表となる。

Simulation

Top500



HPCG



HPL-AI



Graph500

- **疎行列**の連立一次方程式の**反復解法**である共役勾配法（conjugate gradient method）を用いた新たなスパコンベンチマーク。
- LINPACKが要求する性能要件とアプリケーションで求められる性能要件との乖離から、**産業利用など実際のアプリケーションでよく使われるCG法のプログラムで性能を評価するために提案**された。
- 演算性能よりは、むしろメモリアクセス性能がベンチマークの結果を大きく左右する。

Big Data

- 超大規模グラフの探索能力で計算機を評価するベンチマーク。
- ソーシャルネットワークなど、実社会における複雑な現象を表現するビッグデータである大規模グラフ（頂点と枝によりデータ間の関連性を示したものの）の解析力を評価する。
- 演算能力だけでなく、**メモリ性能、ネットワーク性能が重要！**
- 「京」は2014年6月 1位、2014年11月 2位、2015年6月から2019年6月まで 1位

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

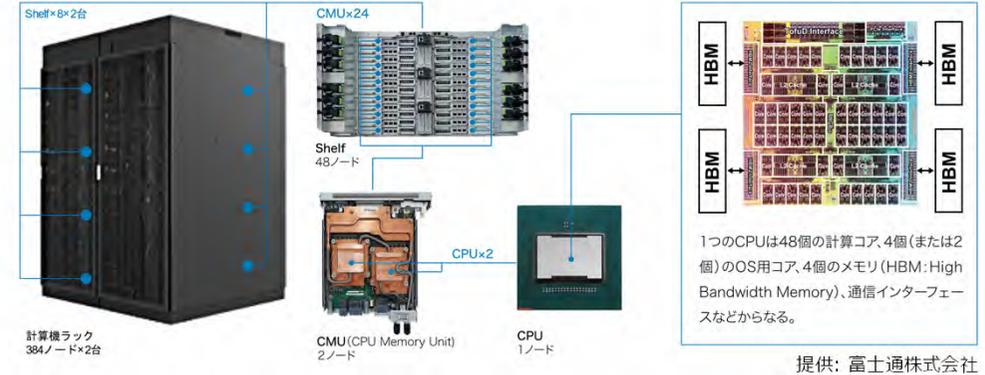
- **ブーストモード (CPU動作クロック周波数 2.2GHz)**

- 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) 1.070 エキサフロップス
- 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

- **総メモリ容量** 4.85 PiB

- **総メモリバンド幅** 163PB/s

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)
- 総メモリバンド幅 29倍 ※「京」は5.64ペタバイト/秒

● プログラミング環境

コンパイラ	Fortran2008 & Fortran2018サブセット
	C11 & GNU拡張仕様・Clang拡張仕様
	C++14 & C++17サブセット & GNU拡張仕様・Clang拡張仕様
	OpenMP 4.5 & OpenMP 5.0サブセット
	Java
並列プログラミング	XcalableMP
	FDPS
スクリプト言語	Python + Numpy + Scipy, Ruby
科学技術計算用 ライブラリ	BLAS, LAPACK, ScaLAPACK
	SSL II (Fujitsu), OneDNN_aarch64
	EigenExa, Batched BLAS, 2.5D-PDGEMM
AIフレームワーク	TensorFlow, PyTorch

● システムソフトウェア

オープンソース 管理ツール	Spack
コンテナ・ 仮想マシン	Singularity, KVM
OS	Red Hat Enterprise Linux 8
	McKernel
MPI	Fujitsu MPI (Based on OpenMPI), MPICH-Tofu (Based on MPICH)
File IO	LLIO
	DTF (Data Transfer Framework)

● リテンション機能

- コアまたはノード単位で使用していない部分の動作を止め、電力を節約する機能（アイドル時の電力を最大約60%削減）



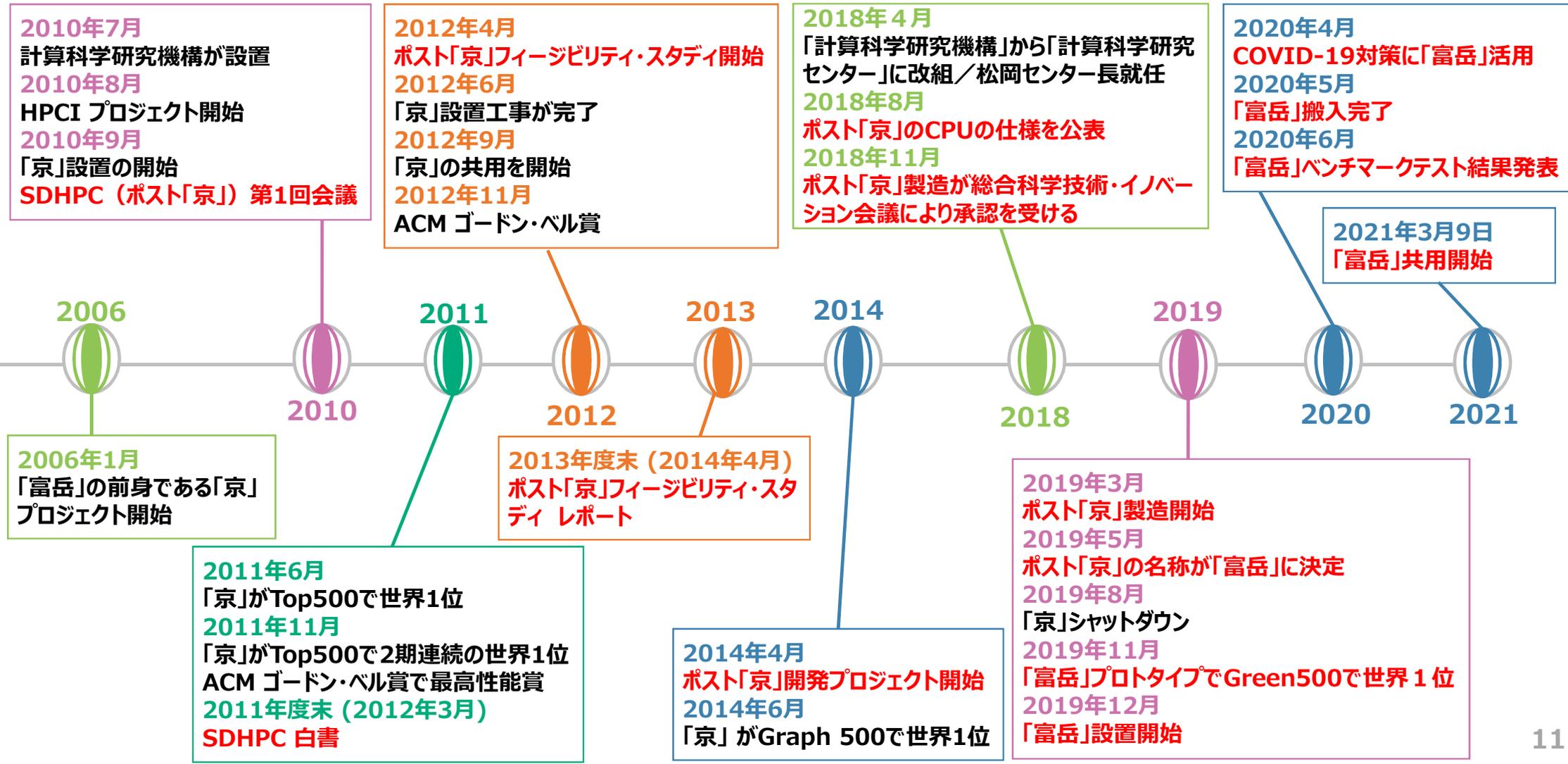
- ジョブが割り当てられていないノードに対し適用し、省電力に大きな効果があることを確認。今後ジョブが実行されているノードに対しても適用し、さらなる省電力化を追求

● パワーノブ

- 動作周波数、稼働する演算器の数、メモリ帯域幅等を管理者および利用者が変更できるようにすることで、電力を節約する機能



- ジョブのプロファイルデータと消費電力の相関を分析し、ジョブの特性に合わせた最適なパワーノブの設定を利用者に提示するシステムを開発中



Co-Designされたターゲットアプリケーション

富岳開発目標：「実アプリで京コンピュータ比で数十倍、最大100倍以上」

社会的・科学的課題（9重点課題）に向けた、アプリケーション性能

健康長寿社会の実現



生体分子システムの
機能制御による
革新的創薬基盤の構築

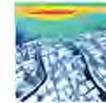
131倍
(GENESIS)



個別化・予防医療を
支援する
統合計算生命科学

23倍
(Genomon)

防災・環境問題



地震・津波による
複合災害の統合的
予測システムの構築

63倍
(GAMERA)



観測ビッグデータを活用した
気象と地球環境の
予測の高度化

127倍
(NICAM+ LETKF)

**平均
70倍**

エネルギー問題



エネルギーの高効率な
創出、変換・貯蔵、利用
の新規基盤技術の開発

70倍
(NTChem)



革新的クリーン
エネルギーシステムの
実用化

63倍
(Adventure)

産業競争力の強化



次世代の産業を支える
新機能デバイス・
高性能材料の創成

38倍
(RSDFT)



近未来型ものづくりを
先導する革新的設計・
製造プロセスの開発

51倍
(FFB)

基礎科学の発展



宇宙の基本法則と
進化の解明

38倍
(LQCD)

注：倍率は2021年3月現在

ターゲットアプリケーションの性能目標達成

	2014年度	2020年度
アプリ名	CSTI目標性能	達成した性能倍率
GENESIS	100 倍	131 倍
GENOMON	15 倍	23 倍
GAMERA	15 倍	63 倍
NICAM+LETKF	75 倍	127 倍
NTChem	40 倍	70 倍
ADVENTURE	15 倍	63 倍
RSDFT	35 倍	38 倍
FFB	20 倍	51 倍
LQCD	50 倍	38 倍

性能電力の評価結果 - 各電力制御モードにおける性能倍率と消費電力

「富岳」におけるアプリケーション性能評価においては、アプリケーション実行中の消費電力の最大値が、システムが許容できる上限値以下であることが重要な要件であった。アプリケーションによってはターゲット問題で最大性能を発揮するような設定で実行した場合に、許容できる上限値を超過する可能性が高いと判断されるケースもあり、各開発年度において基本的な電力制御モード4パターン全てで発揮される性能倍率と必要とする消費電力とを比較しながらコデザインを進めた。以下に最終年度に実施した各電力制御モードにおける性能測定結果とシステム消費電力を示す。

アプリケーション	エコモード 無効				エコモード 有効			
	ブースト 2.2 GHz		ノーマル 2.0 GHz		ブースト 2.2 GHz		ノーマル 2.0 GHz	
	性能倍率		性能倍率		性能倍率		性能倍率	
	平均電力	最大電力	平均電力	最大電力	平均電力	最大電力	平均電力	最大電力
GENESIS	131 倍		119 倍		126 倍		116 倍	
	22 MW	22 MW	20 MW	20 MW	16 MW	16 MW	14 MW	14 MW
GENOMON	23 倍		22 倍		23 倍		22 倍	
	18 MW	20 MW	16 MW	18 MW	13 MW	15 MW	12 MW	13 MW
GAMERA	63 倍		58 倍		56 倍		52 倍	
	22 MW	23 MW	20 MW	21 MW	17 MW	17 MW	16 MW	16 MW
NICAM+LETKF	127 倍		116 倍		121 倍		115 倍	
	24 MW	25 MW	22 MW	23 MW	19 MW	20 MW	18 MW	20 MW
NTChem	70 倍		67 倍		49 倍		45 倍	
	24 MW	26 MW	21 MW	23 MW	18 MW	19 MW	16 MW	17 MW
ADVENTURE	63 倍		60 倍		60 倍		57 倍	
	22 MW	28 MW	24 MW	25 MW	17 MW	22 MW	20 MW	22 MW
RSDFT	38 倍		35 倍		28 倍		25 倍	
	25 MW	28 MW	22 MW	25 MW	20 MW	20 MW	17 MW	18 MW
FFB	51 倍		51 倍		52 倍		50 倍	
	28 MW	29 MW	26 MW	26 MW	23 MW	23 MW	21 MW	21 MW
LQCD	38 倍		36 倍		36 倍		33 倍	
	21 MW	26 MW	19 MW	26 MW	16 MW	26 MW	15 MW	26 MW

「富岳」成果創出へ～「富岳」Begins～

- ・コデザインの結果は共用開始前（開発の余力を活用した試行的利用）から現出。
- ・本格稼働により科学的成果はもとより、Society5.0の機軸たるデジタルツインのプラットフォームへ。

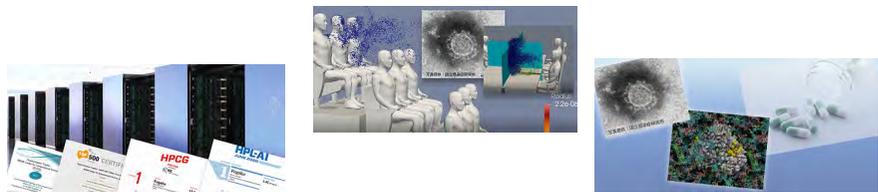
＜開発段階での試行的利用＞

- ・新型コロナ対策に即応
（HPCIでも特別プログラム実施）
- ・文科省・成果創出加速プログラム
-4領域・19課題
-2課題がゴードンベル賞ファイナリストに
- ・本格利用への準備的取組を公募で支援



＜本格稼働＞

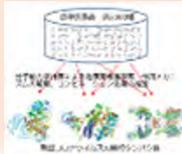
- ・ **成果創出加速プログラム**
2年目 + R3年度新規公募
（新規公募：感染症対策、デジタル・トランスフォーメーション（AI、データサイエンスの活用等を含む）により、ウイズコロナ、ポストコロナ時代の新たな科学的・社会的課題の解決に貢献する研究課題）
- ・ **共用施設として公募課題がスタート**
（R3年度定期募集1回目で74件（「富岳」分）。定期募集2回目、その他随時募集を実施中）
- ・ **国の重要課題として政策的必要性に基づく利用課題開始**
（コロナウイルス飛沫シミュレーション、豪雨防災・台風防災など4課題）
- ・ **理研にて高度化研究を引き続き実施**
（国際協力、人材育成の強化と、Society5.0貢献に向けた利用者拡大・成果創出支援と技術開発の相乗的実施のための体制整備等もあわせて実施）



新型コロナウイルス対策に関する貢献

「富岳」の性能を活かしたSociety5.0的社会要求に対する他国に無い迅速な対応

「富岳」による 新型コロナウイルスの治療薬候補同定

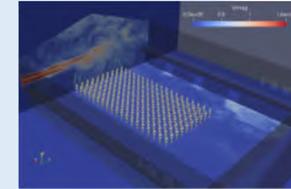


分子動力学計算により、約2000種の既存医薬品の中から、新型コロナウイルスの標的タンパク質に高い親和性を示す治療薬候補を探索・同定する。

(課題代表者；理化学研究所/京都大学 奥野 恭史)

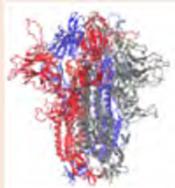
室内環境におけるウイルス飛沫感染の 予測とその対策

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)

「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

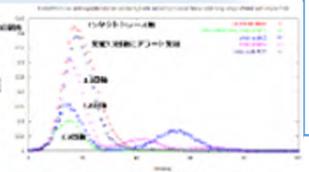


クライオ電子顕微鏡によって解かれたウイルス表面タンパク質の立体構造を初期モデルとして、その立体構造の動きを「富岳」を用いた分子動力学計算で予測する。

(課題代表者；理化学研究所 杉田 有治)

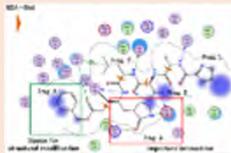
パンデミック現象および対策の シミュレーション解析

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)

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)

新型コロナウイルス感染症重症化 に関するヒト遺伝子解析

新型コロナウイルスの重症化例および軽症ないし無症状感染例について、全ゲノムシーケンスを用いた解析を実施し、スパコンシミュレーションによる重症化リスク関連遺伝子変異を同定する。



(課題代表者；東京医科歯科大学 宮野 悟)

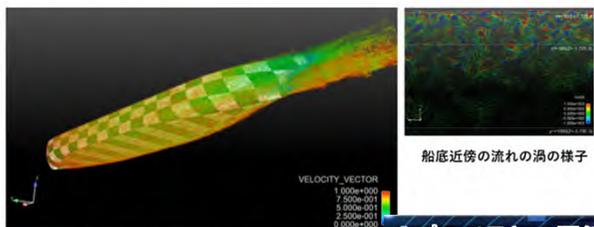
ゴードン・ベル賞とは米国ACMが、高性能並列計算を科学技術分野へ適用することに関してイノベーションの功績が最も顕著と認めた研究に与える賞。 最終候補6件のうち2件が「富岳」利用（2020年11月）

高度流体数値シミュレーションによる曳航水槽試験の代替に関する技術開発

船舶の周りの全ての流れの情報を数値化と視覚化

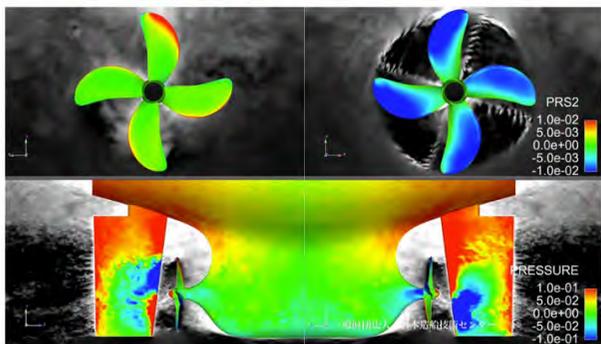
■ 模型船型(KVLCC2型)まわりの水の流れ

■ 320億の計算格子用いた大規模流体シミュレーション



計算された船体表面近傍の微細な渦

■ プロペラとの干渉効果を求めるシミュレーション



圧力分布（カラー）と流速分布（白黒）

加藤 千幸センター長
東京大学
生産技術研究所革新的
シミュレーション研究センター



高解像度シミュレーション・大アンサンブル同化 史上最大規模の全球気象シミュレーションとデータ同化の複合計算

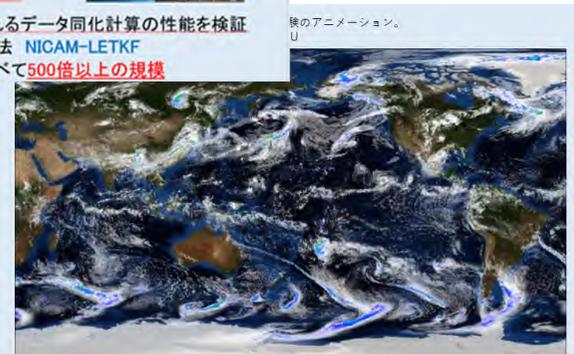
防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測

高解像度シミュレーション X 大アンサンブル同化手法



佐藤 正樹教授
東京大学大気海洋研究所

- ・本研究では、気象予報計算の前段階として行なわれるデータ同化計算の性能を検証
- ・高解像度シミュレーション X 大アンサンブル同化手法 **NICAM-LETKF**
- ・世界の気象機関が日々行っている同種の計算と比べて**500倍以上の規模**



HPL-AIで2エクサを達成 2期連続世界一

AIの計算などで活用されている単精度や半精度演算器などの能力も加味した計算性能を評価するベンチマーク「HPL-AI」で、「富岳」の432筐体（158,976ノード）を用い、**2.004EFLOPSを達成**。

「富岳」が世界で初めてHPL系ベンチマークで1エクサ（10の18乗）を達成した「ISC2020」（2020年6月時）の1.421EFLOPSを上回るもので、**2期連続で世界第1位を獲得**。「富岳」の高い性能を証明するとともに、「富岳」が**AIの計算やビッグデータ解析の研究基盤として Society5.0社会の推進に大いに貢献し得る**ことを証明。



MLPerf HPCで世界上位を独占

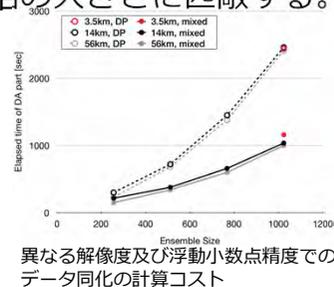
スーパーコンピュータ規模の処理を必要とする大規模機械学習処理のベンチマークであるMLPerf HPCにおいて、「**富岳**」の**約10分の1の規模を用い、汎用的な演算装置で構成されたCPUタイプのスーパーコンピュータの中で最高記録を達成**、CPUタイプのお他システムの性能の14倍となる処理速度を実現。また、産総研が運用する「ABCI」においても、約半分の規模を用いて計測。深層学習に特化した演算装置構成されたGPUタイプのスーパーコンピュータの中で最高記録を達成。GPUタイプのお他システムの20倍となる処理速度を実現し、**世界トップ2を独占した**。**我が国のAI研究開発プラットフォームの構築計画が世界的にも競争力がある**ことが証明された。



「富岳」を利用した史上最大規模の気象計算を実現

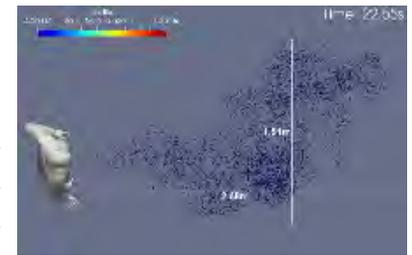
「富岳」を用いて、水平3.5kmメッシュかつ1,024個のアンサンブルという、**過去に例を見ないほど大規模な全球気象シミュレーションとデータ同化の複合計算を実現**。世界の気象機関が日々行う気象予測のためのアンサンブルデータ同化計算の約500倍の大きさに匹敵する。

本研究は、「富岳」の高い総合性能を実証するとともに、将来の気象予報・気候変動予測の精度向上に繋がることを期待される。計算科学において最も栄誉ある賞のひとつである**ゴードン・ベル賞のファイナリストに選出**された。



新型コロナウイルス対策への貢献

2020年4月より、新型コロナウイルスの対策に貢献する研究開発に「富岳」の計算資源を供出、これまでに全6課題が研究を実施し、新型コロナウイルスによる被害の軽減に貢献すべく取り組んできた。特に、「室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策」に関する研究では、**マスクの装着効果や効能を定量的なデータから証明し**、世界に向けて発信したほか、**シミュレーション結果がイベントや教育現場、飲食店における感染防止のガイドラインの策定に活用されるなど、社会に非常に強い影響を与えた**。



「富岳」共用開始

スーパーコンピュータ「富岳」共用開始記念イベントHPCIフォーラム
 ～スーパーコンピュータ「富岳」への期待～ (3月9日 オンライン開催)

Session 1 スーパーコンピュータ「富岳」共用開始記念式典 ～いよいよ共用開始～

セレモニー、甘利議員・渡海議員ら来賓による御挨拶、基調講演、
 「富岳」バーチャルツアー (YouTube ピーク閲覧者数：681名)



Session 2 Society 5.0へ向けた取り組み

ゴードンベル賞ファイナリスト 課題代表者加藤千幸氏、佐藤正樹氏
 を含む5名による講演 (YouTube ピーク閲覧者数：487名)



杉田 有治氏
 理化学研究所 開拓研究本部 杉田理論分子科学研究室
 主任研究員



加藤 千幸氏
 東京大学
 生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター
 センター長



佐藤 正樹氏
 東京大学大気海洋研究所教授



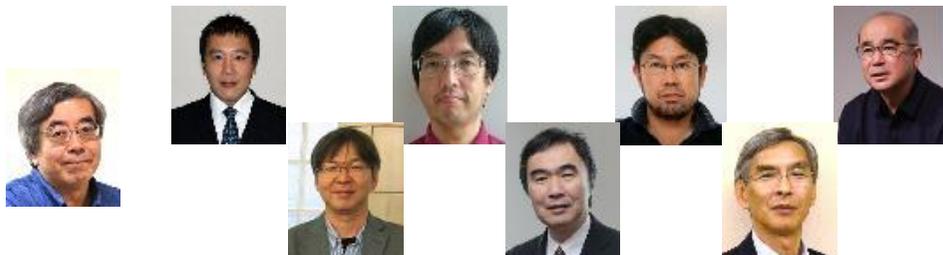
奥野幸洋氏
 富士フイルム株式会社
 解析技術センター
 主席研究員



松原 大氏
 一般社団法人 日本自動車工業会
 総合政策委員会 ICT 部会
 デジタルエンジニアリング分科会
 CAE タスク
 タスクリーダー

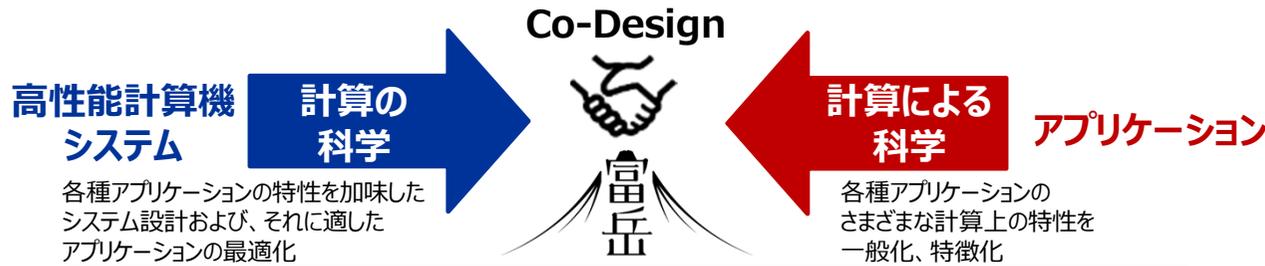
Session 3 スーパーコンピュータ「富岳」への期待

朴泰祐氏 (モデレータ) と7名のパネリストによるパネルディスカッション
 (YouTube ピーク閲覧者数：432名)

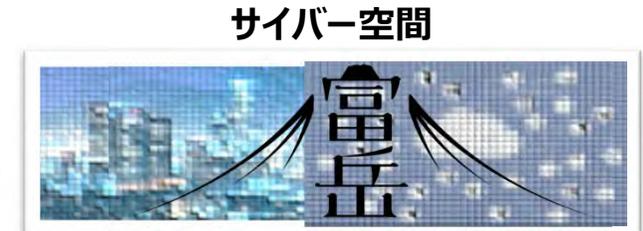


Society 5.0実現に資する「富岳」の開発

- ・社会ニーズに基づくアプリケーションとハードウェアの「コ・デザイン」で国家プロジェクトとして開発。
- ・Society5.0実現に貢献するポテンシャルを有する。



- ・フィジカル空間現象に加えてサイバー空間でのITのシミュレーションも必須。
- ・両者を同時に融合して全体をシミュレーションする (AI解析含む) ことではじめて全体最適が可能に。



Society 5.0の「実現」へ

Society 5.0で実現する社会 経済発展と社会的課題の解決を両立する「Society 5.0」へ

富岳の「重点課題」「成果創出」とほぼ一致

「サイバーフィジカル」「デジタルツイン」等は正にシミュレーションそのもの

富岳はシミュレーション、ビッグデータ、AIの全てで世界一

「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））

+

■Society 5.0実現への貢献、が新たに必要



理研は、「富岳」運用者の立場から対応するべく、計算科学研究センターに、
『「富岳」 Society5.0推進拠点』を新設（2021年4月、於：東京日本橋）
 【拠点長：計算科学研究センターセンター長 松岡 聡】

【ねらい】

- ・ **幅広い主体**による「富岳」を舞台にした連携を！
- ・ 特に**産業界**との本格的連携を！
- ・ 情報科学技術と他の科学技術との連携促進を！
- ・ 現場レベルでの連携をもとに政府の施策へ具体的な提案を！

【機能・体制】

- ・ 理研計算科学研究センター(R-CCS)のSociety5.0対応の先鋒部隊であり、Society5.0を担うであろう**新たな主体との連携窓口**。
- ・ ノウハウ(*)を有する公益財団法人**計算科学振興財団との協働チーム**。(*)スパコンの産業利用の促進
- ・ 立地を活かし新たな主体候補はもちろん、理化学研究所の本部・革新知能統合研究センター(AIP)、富士通、理研鼎業、理研数理等と円滑に連携。

お問合せ等は r-ccs-s5support@ml.riken.jp へ。

ウェブ：<https://www.r-ccs.riken.jp/about/s5-office/>

【すでに始まっている関連動向】

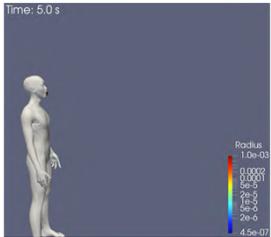
- ・ **飛沫シミュレーションにて、迅速な産学官連携が新たに構築され、成果を社会に発信。**
(令和3年版科学技術・イノベーション白書にて好事例として紹介)
- ・ 「富岳」**政策対応枠で4件**が始動。
- ・ 文部科学省にて「富岳」利用制度の一つとして「**Society5.0推進枠**」(「富岳」計算資源の5%を割当)が**新設**され、詳細設計中。
- ・ 「富岳」公募制度にて**簡便な利用を可能**とする枠組み(申請から**最短1週間**で結果通知)が創設。
(一般財団法人高度情報科学技術研究機構が運営するウェブ参照。<https://www.hpci-office.jp/>)

(坪倉ら、高度化+JST-CREST) 「ヒトはどのように、どのような確率で感染するか」

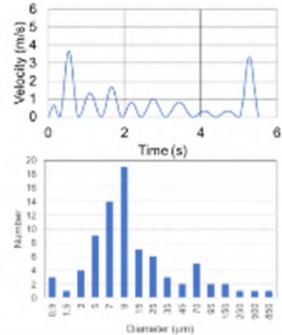
統合的飛沫感染リスク評価システムの概要

飛沫発生モデル

感染者の飛沫発生条件
(呼吸, 発話, 咳...)

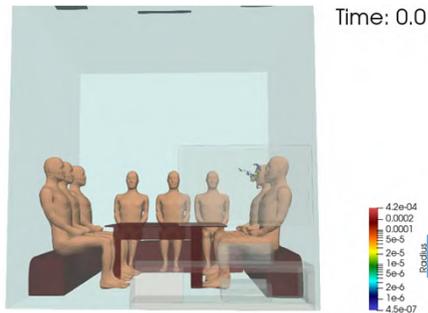


気流速度・粒径分布データ

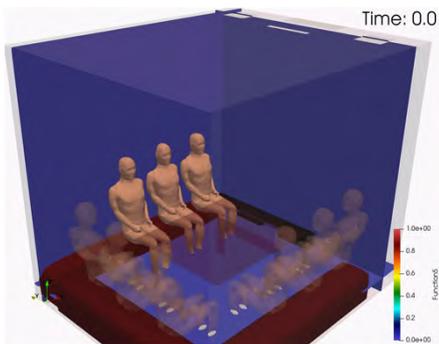


室内飛沫・エアロゾル飛散モデル

室内環境情報+人の配置状況



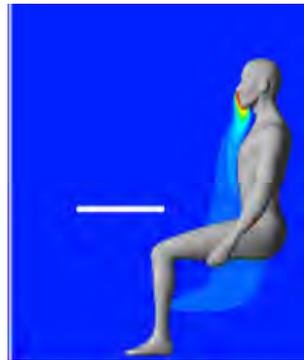
高精度気流・飛沫連成解析



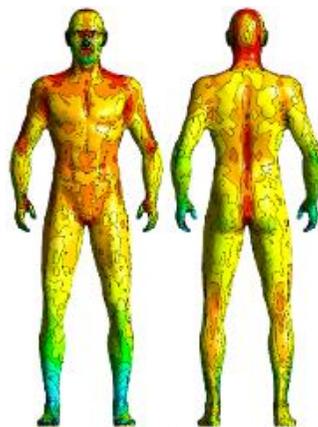
高精度乱流シミュレーションに基づく室内空気質評価

数値人体モデル

被感染者の生体情報データ



人体吸気の精密な再現



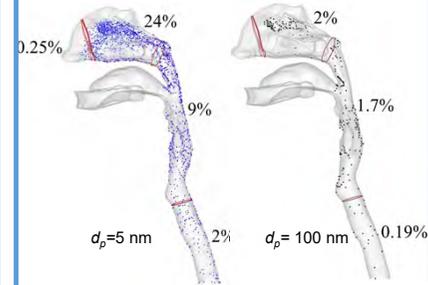
人体表面の精密な再現

数値気道モデル

被感染者の生体情報・吸気状態



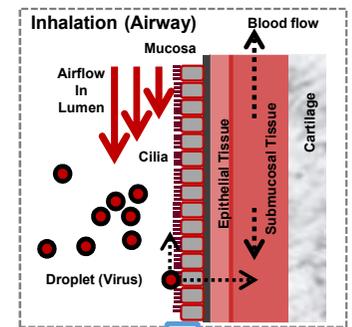
鼻腔・口腔から気管支まで再現



飛沫粒径に応じた気道内沈着分布の高精度予測

感染リスク推定モデル

被感染者の生体情報・対象ウイルスデータ



Bioregulation

(Host cells, Pathogen, Adaptive Immune System)

$$\frac{dT_T}{dt} = -\beta_T T_I V - \phi T_T + \xi R \frac{dR}{dt} \quad (\text{Target Cells})$$

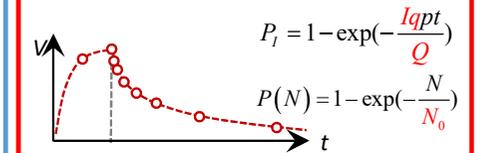
$$\frac{dI}{dt} = \beta_T T_I V - \kappa_F I F - \kappa_E I T_C - \delta_X I \quad (\text{Infected Cells})$$

$$\frac{dV}{dt} = \beta_E I - \delta_V V - \kappa_V V A \quad (\text{Virus})$$

$$\frac{dF}{dt} = \beta_F I - \kappa_A F \quad (\text{Interferon})$$

$$\frac{dT_H}{dt} = \left[\frac{\pi_{H2} D_M}{\pi_{H2} + D_M} \right] (1 - T_H / K_H) - \left[\frac{\delta_{H2} D_M}{\delta_{H2} + D_M} \right] T_H \quad (\text{Helper T Cells})$$

感染リスクの定量評価



SUNTORY

TOPPAN

具現化

“利便性”と“安全性”を踏まえ具現化。

「富岳」の研究成果活用



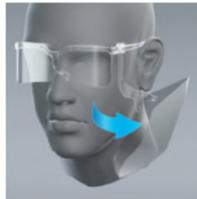
企業が実効性のある対策を実施

(理研による富岳での研究は特定の製品の性能の検証を行っているものではない)

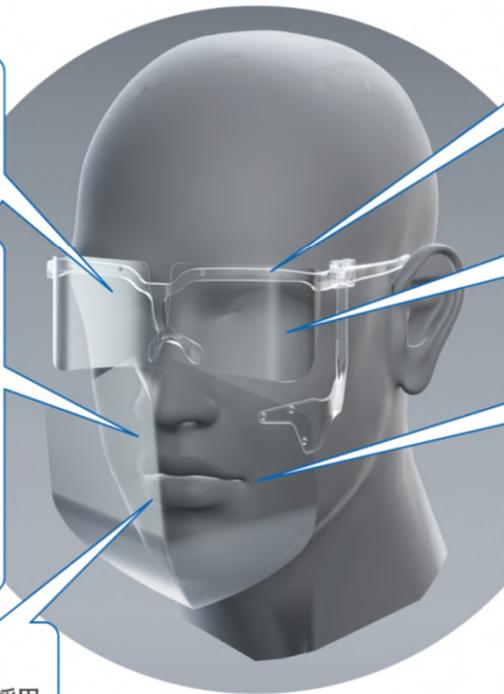
理研の飛沫削減効果の検証結果に基づいて、フェイスシールドをサントリーと凸版で開発するもの。新型コロナウイルスの感染防止には、換気等も重要で、このフェイスシールドだけで感染を完全に防げるものではない。

1 簡便さ(装着、使用)
メガネタイプの装着方式で
誰でも直感的に、簡単に着脱可能

2 飲食のしやすさ
飲食時はワンタッチで口鼻前の
シールドが可動



3 表情が見える
フレーム・シールドともに透明素材を採用



4 見た目
フレームパーツを極力削減し
見た目に配慮

5 運用面
シールドパーツは簡単に
着脱が可能

6 安全性
理化学研究所様の検証をふまえた
シールド構造の検討



富岳成果創出加速プログラム：19課題施行中

領域	課題名 課題代表者名（所属） ※所属は2020年2月28日時点
領域① 人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓	量子物質の創発と機能のための基礎科学 — 「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学 今田 正俊（早稲田大学理工学術院総合研究所）
	全原子・粗視化分子力学による細胞内分子動態の解明 杉田 有治（理化学研究所生命機能科学研究センター）
	シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで ■ 橋本 省二（高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所）
	宇宙の構造形成と進化から惑星表面環境変動までの統一的描像の構築 ■ 牧野 淳一郎（神戸大学理学研究科）
	大規模データ解析と人工知能技術によるがんの起源と多様性の解明 宮野 悟（東京大学医科学研究所）
	脳結合データ解析と機能構造推定に基づくヒトスケール全脳シミュレーション※ 山崎 匡（電気通信大学大学院情報理工学研究科）
	核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓 ■ 渡邊 智彦（名古屋大学大学院理学研究科）
領域② 国民の生命・財産を守る取組の強化	プレシジョンメディスンを加速する創薬ビッグデータ統合システムの推進 ■ 奥野 恭史（理化学研究所医科学イノベーション推進プログラム）
	防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測 ■ 佐藤 正樹（東京大学大気海洋研究所）
	マルチスケール心臓シミュレータと大規模臨床データの革新的統合による心不全パンドミックの克服 ■ 久田 俊明（株式会社UT-Heart研究所）
	大規模数値シミュレーションによる地震発生から地震動・地盤増幅評価までの統合的予測システムの構築とその社会実装 ■ 堀 高峰（海洋研究開発機構海域地震火山部門・地震津波予測研究開発センター）
領域③ 産業競争力の強化	省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション 押山 淳（名古屋大学 未来材料・システム研究所）
	「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発 加藤 千幸（東京大学 生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター）
	航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究

領域③ 産業競争力の強化	省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション 押山 淳（名古屋大学 未来材料・システム研究所）
	「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発 加藤 千幸（東京大学 生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター）
	航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究 河合 宗司（東北大学大学院 工学研究科）
	次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究 ■ 館山 佳尚（物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点）
	環境適合型機能性化学品 ■ 松林 伸幸（大阪大学 大学院基礎工学研究科）
領域④ 研究基盤	大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発 三宅 隆（産業技術総合研究所 材料・化学領域 機能材料コンピュータシミュレーション研究センター）
	スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用 ■ 吉村 忍（東京大学大学院工学系研究科）
	全脳血液循環シミュレーションデータ 科学に基づく個別化医療支援技術の開発※ 和田 成生（大阪大学院基礎工学研究科）

その他、コロナ課題(6)、試行的利用課題(30以上)、R-CCS高度化研究(16チーム)など、数多くのグループの利用が既に利用

- アプリケーションファーストによるCo-Designの有効性
- フィージビリティスタディ時からのCo-Designによるシステムアーキテクチャ検討の重要性
- 不測の事態における柔軟な対応（新型コロナウイルスに対する迅速な対応）
- システム開発における運用技術のCo-Designの重要性
- 将来のシステムアップグレードを担保する拡張性
- スーパーコンピュータによるSociety5.0：SDGs達成に向けたDXに対する価値提案の方策

参考資料



■従来のスクール、インターンシップ等の強化

欧米カナダと共催の「国際サマースクール」をはじめ、創立以来10年目を迎える「KOBE HPC サマースクール」など計算機を使った演習交えたスクールやワークショップ等、国内外の学生らを対象に多様なプログラム実施。

研究チームでの**実習生・研修生**の受入に加え、**連携大学院**により、大学と連携協力して学生の研究教育指導を推進。

さらに、企業との共同プログラムによるインターンシップ企画、企業への技術指導、地元自治体や神戸大・兵庫県立大との連携により、強化策の検討に着手。

■SuperCon + 「富岳」 (新たな取組)

高校生・高専生が参加する**スーパーコン** (1995年～東工大と大阪大によるプログラミングコンテスト) と連携し、次代を担う若手人材に「富岳」の体験機会を提供。

2020年度は本選中止となったスーパーコンにかわるイベント「**富岳**」**チャレンジ**を主催、2021年度スーパーコンから共催として参加。

また「富岳」本格稼働に伴い、**スパコン体験塾**(中高生対象) や各種講習会(一般対象)の演習等「富岳」の体験機会を拡大。

KOBE HPC サマー/スプリングスクール



arm



兵庫県・神戸市
COE形成推進事業



国際サマースクール



連携大学院

企業共同
インターンシップ

スーパーコン



スパコン体験塾



Supercomputing
Contest (SuperCon)
Programming Contest for High School Students

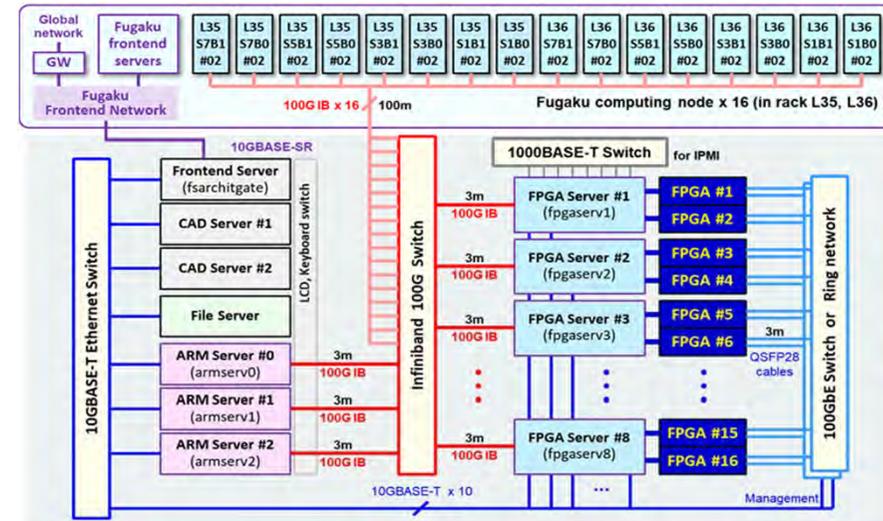
新たなる付加価値：PCI を使った拡張可能性の調査検討

- テクノロジ変更によるスケジュール延伸の際に、PCIを使ったデバイスの拡張を「新たなる付加価値」の1つとして検討することとした
- 現状のシャーシを変更せず、広帯域な汎用ネットワークとデバイスドライバのソフトウェアブリッジを用いて拡張する方式を採用した
- 拡張部としてFPGAクラスタを想定し、試作システムを開発した
- 富岳と接続する実機試験により動作および運用可能性を確認した
- アプリケーションのFPGA向け専用ハードウェアの設計を開始した

拡張方式の検討

- PCIにより接続する拡張デバイスとして、CPUと異なるFPGAを想定
- 富岳ラックの利用可能PCIスロット
 - ラックにあるPCIe Gen3 x16の空きスロットを拡張のために利用可
- PCIによる拡張方式への要件
 - 十分な大きさ・幅のカードが搭載できる
 - 最大225W程度の消費電力のPCIeカードを搭載できる
 - ラック外での拡張の場合には、100m程度延伸できる
- 拡張方式の検討結果
 - 広帯域な汎用ネットワークとソフトウェアブリッジで接続する方式を採用

拡張案	利点・欠点・コメントおよび採否
① シャーシ改造	設計見直しとコスト増のため、不可
② 現行のシャーシの利用	Half-profileの規格通りのsingle-wideのボードに限定され寸法が小さ過ぎる。供給可能電力は25Wのみであり不足。不可。
③ PCIスロットの直接引き出しによる延長	a) One stop systems社 ExpressBox、b) CUBIX社 Xpander、c) NEC社 ExpEther等がある。a, bは帯域不足、100m級ケーブルでの実績不足、将来に渡る技術継続性の問題により、不可。cは可能性がありながらも、ARM LinuxでのFPGAドライバコンパイルの問題やFPGAがPCIデバイスとしてOSに検出されない問題により、不可。
④ 汎用な広帯域ネットワークとソフトウェアブリッジ	Infinibandネットワークを用いて外部に延伸。FPGAデバイスのドライバソフトウェア層をブリッジとして遠隔化する。将来的な技術の継続性・発展性、さらなる広帯域化の可能性、長距離接続の可能性の点で合格。試作機でも動作したため、採用。



ポスト京
富岳

FPGAクラ
スタ実験
試作機
(ESSPER)

拡張部の試作システムを開発

- FPGAシステムオンチップ(SoC)およびシステムソフトウェア
 - 直接網・間接網のそれぞれの通信方式に対応した汎用のSoCを開発
 - FPGAドライバであるOPAEをIB経由で利用可とするソフトウェアブリッジを開発
 - FPGA SoCをオブジェクトとして扱うハードウェア抽象化レイヤーを開発
- 拡張部を利用するための非同期の遠隔手続き呼出し(RPC)とタスク並列モデルの検討
- FPGA資源を指定可能な富岳ジョブスケジューラを開発

アプリケーションの基礎検討とFPGA実装

- FPGAにより付加価値が得られそうな計算問題の特徴を分析し、可能性のある問題を検討 (特徴：HWアルゴリズム, 特殊演算, 高効率データ参照・再利用, 低遅延, 強スケーリング)
- 対象計算問題のFPGA実装を開始 (FFT, ゲノムデータ処理, グラフ処理, 流体計算等)

富岳を使用した実機試験の実施

- 運用前の富岳ノードに、IBスイッチを100mケーブルを用いて試作システムを接続
- ソフトウェアブリッジおよびRPCにより、富岳ノードからFPGAクラスタを利用できることを確認

共同研究に向けた準備

- 国内大学と共同研究の実施に向け準備中。計算機科学のより一層の進展の可能性