

「富岳」のシステム開発事業に係る自己点検結果報告書

(案)

2021年9月

理化学研究所計算科学研究センター

## 目 次

1. 事業概要
2. システム開発の進捗状況-システム開発目標の達成状況等-
  - 2.1 システムの構築
  - 2.2 システムの開発目標
  - 2.3 その他
    - 2.3.1 「京」の資産継承
    - 2.3.2 付加価値の検討
    - 2.3.3 Society5.0への貢献
    - 2.3.4 これまでの指摘事項等への対応
3. システム開発における技術的な判断とその効果
4. 今後のプロジェクトに向けた提言
5. まとめ

## 1. 事業概要

「富岳」のシステム開発事業は、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心の確保につながる最先端の研究基盤として、2021～22年の運用開始を目標に、世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指す事業(フラッグシップ2020プロジェクト)の一環として、2014年度から開始。

最先端のスーパーコンピュータは、科学技術の振興、産業競争力の強化、国民生活の安全・安心の確保等に不可欠な「国家基幹技術」であり、我が国としても、諸外国に対して競争力のあるフラッグシップシステム(世界トップレベルの性能を有し、幅広い分野をカバーするシステム)の開発を進める必要があることから、文部科学省は、

○システムとアプリケーションを協調的に開発(Co-design)し、我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを構築。

○2020年までに世界トップレベルで幅広い課題に対応できる汎用システムを実現し、性能はエクサスケールを目指す。

○成果をアウトカムに繋げるため、分野や組織の枠を超えた共創体制を構築。

○規格化を図ることにより利用者の利便性が高まるシステムソフトウェアは米国と協力しながら開発するなど、国際協力を戦略的に活用。また、開発されたテクノロジーもハードウェアを含め国際的に提供が可能に。

○理化学研究所が主体となってシステムを開発。

○ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題については、公募で決定する代表機関を中心にして、世界を先導する成果の創出が期待されるアプリケーションの開発に着手。

○総事業費約1,300億円(うち国費分約1,100億円)

を方針に、フラッグシップ2020プロジェクトを推進。(総合科学技術会議評価専門調査会資料「フラッグシップ2020プロジェクト(ポスト「京」の開発)について」平成26年9月12日文部科学省研究振興局参事官(情報担当)付計算科学技術推進室)

システムの開発目標については、消費電力を30～40MWとした上で、ターゲットアプリケーションについて、多重ケース処理型計算で最大「京」の100倍、大規模単一問題型計算で最大「京」の50倍の性能を、システムとアプリケーションのCo-design(協調設計)により達成することを提示。(「次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ報告書」平成26年10月文部科学省研究振興局HPCI計画推進委員会)

また、「世界最高水準の汎用的な計算機システム」の特徴として、①消費電力性能、

②計算能力、③ユーザの利便・使い勝手の良さ、④画期的な成果の創出を備えた2020年代において世界の他のシステムに対して総合力で卓抜するものであることを掲示。(「次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ(平成27年度)基本設計の評価に係る報告書」平成28年1月文部科学省研究振興局HPCI計画推進委員会)

さらに、最先端のスーパーコンピュータは、第5期科学技術基本計画で提唱されたSociety5.0の実現に必須の研究開発基盤としても期待されており、「富岳」の利活用を通じた具体的な取組みの検討が政策的な課題となっていることに言及。

なお、「富岳」のシステム開発事業とともにフラッグシップ2020プロジェクトを構成するアプリケーション開発事業については、別途、文部科学省でポスト「京」重点課題実施機関を選定して実施。

## 2. システム開発の進捗状況-システム開発目標の達成状況等-

### 2.1 システムの構築

○理化学研究所は、2013年10月、文部科学省よりシステム開発主体として指名を受け、自らもシステム開発方針として、課題解決型、国際競争力、国際協力、「京」の資産継承、性能拡張性を掲げ、2014年9月に公募で選定した開発担当企業(富士通株式会社)と協働し、国内外の関係機関とも連携を図りつつ、Co-design(協調設計)によるシステム開発を進めた。また、汎用性を担保する為に、命令セットアーキテクチャとして、組み込み系を中心に世界中に広く普及し、ソフトウェアエコシステムが整備されているArmアーキテクチャを採用することが決定された。

また、システム開発の進捗に合わせて、電力および冷却能力の強化をアセスメントし、神戸にある施設の拡張・整備を実施した。

○システム設計については、2014年度から、その進捗に応じて、毎年度、開発担当企業である富士通株式会社と契約を締結して実施した。

ハードウェアやシステムソフトウェアの開発とアプリケーションの開発の取組を協調させるため、ワーキンググループ等を設置して設計を進める連絡会議体制を導入し、開発の初期段階からアプリケーション開発者とともにハードウェアおよびシステムソフトウェアの設計・開発を密に進めたことにより、システム開発者はアプリケーションの特徴を認識し、アプリケーション開発者はハードウェアやシステムソフトウェアの構造および性能特性を認識することができた。アプリケーション開発者にとっては、これらの仕組みにより早期のソフトウェア開発・改良が可能となった。

○システムの製造・構築については、2018年5月に開発された高性能Arm CPUであるA64FXの初版がラインオフ・動作検証が可能となり、2018年9月にその評価結果を確認し、2018年秋の文部科学省、総合科学技術・イノベーション会議による中間評価で製造着手が認められたことから、2019年3月に富士通株式会社とシステムの製造・構築契約を締結し、製造を開始した。2019年12月から神戸サイトへのシステム搬入を開始し、2020年5月に搬入終了。2020年12月にシステムの検収を完了した。

システムの検収は、搬入時期に応じて3回に分けて実施し、各検収終了後からシステム保守契約を締結して運用に向けた環境を構築している(システムの保守費は、「特定高速電子計算機施設の運営費」として「システムの開発・整備費」とは別に予算化されている。)

また、システムの製造・構築契約と並行して、システムソフトウェアの開発調整を進め、2020年9月に検収を完了した。

検収後のシステムについては、運用開始に向けた調整を進め、文部科学省や登録機関とも相談を進めながら、2021年3月9日、次世代超高速電子計算機システムとして「富岳」を共用に供し、幅広いユーザによる利用と早期成果創出を実現するための環境を整えることができた。

○ソフトウェアの整備については、OSとしてはRed Hat Enterprise Linux Version 8(RHEL V8)が各ノードにインストールされ、その上に富士通株式会社が担当するソフトウェアや理化学研究所がOSSとして開発、改良するソフトウェアを含むプログラミング環境を整備した。理化学研究所の高度化研究で、ソフトウェア環境の向上は継続されている。

また、米国のExascale Computing Projectで採用されているオープンソース系パッケージツールであるSpackを使用することで、世界で使われている多くのHPCのOSが容易にインストールできるように整備し、国際協力の観点からも有効な取組みを進め、多くの標準的なOSSを整備した。

さらに、開発プロジェクトを超えたR-CCSの取組として、仮想マシンやコンテナなどの仮想化ソフト、また、ビッグデータ系のツール群など、富岳が従来型のスパコンとしてだけでなく、Society5.0向けのクラウドとして機能する種々のクラウドのソフトウェアスタックの整備を行った。また、AIに関しては、深層学習は性能が非常に重要だが、高度なソフトウェア技術を要するため、TensorFlow、PyTorchなどの主要フレームワークをA64FXに実現する理研・富士通・Armなどの合同チームを新たに形成し、高速実装の開発に成功した。

富岳で利用できる主要ソフトウェアの状況は資料1だが、今後拡充されていく予定である。

○システム性能については、これまでの設計過程での推定値や試作機による計測値に加え、ハードウェアやシステムソフトウェアの検収により、実機で確認した主要な数値を公開しており(<https://www.r-ccs.riken.jp/fugaku/system/> を参照)、幅広いユーザによる利用と早期成果創出に資することが期待される。

## 2.2 システムの開発目標

○消費電力30～40MW、ターゲットアプリケーションについて、多重ケース処理型計算で最大「京」の100倍、大規模単一問題型計算で最大「京」の50倍」の性能については、これまでの設計過程での推定値や試作機による計測値に加え、実機での計測を実施し、資料2、3及び別添の「ターゲットアプリケーションの概要と評価指標」のとおり目標の達成を確認しており、Co-designの成果として、汎用性の高いシステム開発を実証できたものと確信している。

○事業費については、契約ベースで、システム設計・ソフトウェア調整に106.4億円、システム製造に769.9億円、施設の改良に27.0億円、Co-designやシステムソフトウェア開発等に38.7億円を執行しており、想定された事業費の範囲内に収まっているものと認識している(アプリケーションの開発については、別途、文部科学省で実施)。

○電力性能、演算性能、使い勝手については、2019年11月のSCでプロトタイプによるGREEN500の受賞以降、資料4のとおり様々なベンチマークで優秀な成績を収めており、国際競争力や汎用機として総合的な性能の高さを確認している。とりわけ、メモリ性能やネットワーク性能の秀逸さは、汎用機として特筆すべきものと認識している。これにより、Top500、HPCG、HPL-AI、Graph500の4つのベンチマークランキングにて、同時に1位を達成した。これは、単にベンチマークにより他のシステムよりも優れた性能をもつシステムというだけでなく、幅広いアプリケーションで世界トップレベルの性能を発揮するシステムであることを示すものである。

○電力性能については、消費電力を抑える回路構成など、優れた省電力設計と最先端の半導体技術の採用により、省電力プロセッサとなった。なお、実際の運用に関しては、通常時では18MW程度で運用できることを確認しており、開発目標を大幅に上回る効率を達成している。

さらに、演算器などの機能ブロックを選択的に停止できるパワーノブ機能やそれを組み合わせた省電力モードを活用することによって、さらなる省電力を可能とする機能があり、これについてはどのようにユーザに利用してもらうかについて省電力運用へのインセンティブ付与を考慮した、1年ほどの運用での電力特性のデータ収集を経て実施を検討する

見込みである。また、システムに適したアプリケーションの開発・改良を効果的・効率的に進めていただくため、チューニングマニュアルやOSSの実装に関する情報を富岳利用者に公開している。( <https://www.fugaku.r-ccs.riken.jp/docs/manuals> から「チューニングマニュアル」メニュー、および「OSSの利用」メニュー)

○画期的な成果の創出については、共用開始前の試験利用段階において、新型コロナウイルスに対応するプログラムを富岳の設置中の4月から立ち上げ、原子レベルから社会レベルの多くの対コロナの成果を創出し、特に飛沫感染のシミュレーションは政府の政策に実際に直接活用されている。また、重点課題の後継として立ち当たった成果創出プログラムの19の課題は、多くのSDGsの社会課題や産業振興などに対する実際的な成果を創出しており、その一部はスーパーコンピュータの年次のアプリケーションの最高峰賞のACMゴードン・ベル賞におけるファイナリスト選出に選出されるなど、着実に成果(資料5参照)を発出してきている。このように、富岳は「アプリケーションファースト」のスーパーコンピュータとして開発されることにより、「京」の主要目標であった基礎科学に対する貢献のみならず、AIやビッグデータ処理・クラウド機能により、Society5.0への貢献といった幅広い分野への対応が可能になっており、今後SDGsのためのDXを実現する中心的な役割を果たしていくと期待される。

## 2.3 その他

### 2.3.1 「京」の資産継承

○「京」の資産継承については、システム開発やアプリケーションソフトウェア開発における技術継承や発展、神戸のサイトの有効利用の他、地元自治体からの支援(土地の無償貸与、税制優遇、研究助成、公益財団法人計算科学振興財団による産業利用の促進活動)の継続など、人的・物的な関係を継承してきている。とりわけ、研究助成に関しては、地元に対して4つのテーマ(①医療、②産業、③防災・減災、④人材育成)で連携・協力し、地元貢献をパッケージで可視化していくなど、一層効果的な活動を推進。また、R-CCSとしても、神戸大学や兵庫県立大学をはじめとする近隣教育機関との共同研究等、研究活動の連携に加え、連携大学院やスクーリング等若手の教育や人材育成事業、地域振興イベントや各種委員会への参加協力など、地域に根差した活動にも取り組んでいるところ。

### 2.3.2 付加価値の検討

○システムの性能拡張については、開発期間の延伸を機に、PCIeによる付加価値の検討を進め、資料6のとおり、その可能性を確認している。

### 2.3.3 Society5.0への貢献

○Society5.0への貢献については、開発プロジェクトとしてのAIやクラウド、ビッグデータ対応に関する体系的な取組みのほか、R-CCSとして、資料7のとおり、関係機関との連携による検討を進めてきている。

### 2.3.4 これまでの指摘事項等への対応

○これまでに実施された「コスト及び性能評価」や「中間評価」においては、主に①早期成果創出に必要な開発システムに関する情報開示や分かりやすい成果発信、②ビッグデータやAI対応といった新たな利用への対応状況、③研究開発基盤としての戦略的な運用、利活用の考え方、④フラッグシッププロジェクトの検証などについて指摘がなされている。

理化学研究所としては、①～③について、システム開発主体としての立ち位置を基本としつつ2.項を中心とした内容を実施しているが、R-CCSとして検討してきた「富岳」共用開始後のシステム運用やシステムの利活用に関する取組みもあることから、システム開発を超えた内容についても以下のとおり可能な範囲で対応している。

(開発システムに関する情報開示や分かりやすい成果発信)

SC等のスパコンランキングの機会等を通じ、システム性能、各種ベンチマークの評価結果や他システムとの比較優位性、Spack利用による国際連携やOSSを用いたプログラミング環境の構築、アプリケーション開発に関するチューニングマニュアルについての情報提供を実施し、世界最高水準の汎用性の高い計算機システムの特徴や使い勝手に関する情報発信に努めてきた。

また、シミュレータや性能推定ツールの提供、実機システムの試験的利用といったシステムの早期利用に関する環境を提供することにより、アプリケーション開発の促進についても対応を図ってきた。

更に、理化学研究所を中心に、システムの情報をいち早く公開する様々な努力を行い、Supercomputingなどの主要国際会議から種々のワークショップなどでの講演、マスコミに対する発信、その他の公開マテリアルの提供など、多くの情報開示をおこなった。

(新たな利用への対応状況)

CPU開発中に、高性能な単精度演算のみならず、ハードウェアレベルのAI向けの半精度演算対応の実現や、それらを活用するArm版のOneDNNの開発、およびそれを活かしたPyTorchなどの深層学習フレームワークの高速化、HPL-AIやMLPerfといったAI系ベンチマークにおける世界トップのスコアの獲得、クラウドや仮想化・データ解析ツール群の整備、ビッグデータベンチマークのGraph500における世界一位の獲得などにより、ビッグデータやAI利用においても「富岳」が高い性能を有することを示し、新たなユ

ーザ拡充への取組みも充実させてきている。

(運用、利活用の考え方)

通常運用時の消費電力については、システム運用を実質的に想定することで、20～30MW程度で運用可能であることが見込まれ、効率的な運用の検討が進み、現状の運用では18MW程度と、京をわずかに上回るだけの、当初見込みの半分程度の運用時消費電力を実現してきている。

また、共用開始後の戦略的利活用として、整備したクラウド機能を活かし、実際のクラウド的利用の試行的実施を進めている。「富岳」の全てのユーザはクラウド機能の利用が可能だが、今回は更に「富岳クラウド的利用プログラム」を施行し、サービスプロバイダ事業者等を通じて「富岳」の計算資源の上にクラウドAPIで利用する種々の高度な付加価値的機能を実現し、ユーザに提供する利用形態で、2020年度より共同研究によりその効果等の検証を行っている。このように、HPCの運用ノウハウを擁する理研とクラウド技術やアプリケーションサービス技術を擁するサービスプロバイダ事業者が連携することで「富岳」の利用者拡大及び「富岳」テクノロジーの普及に資することが期待される。

Society5.0への貢献に資する取組みについては、2.3.3項にあるように、R-CCS内に拠点を構築し、文部科学省を始め関係機関との連携を進めてきており、開発プロジェクトを超えた取組みも含め、R-CCSとしての可能な対応を図っている。

(その他)

製造段階における不測の事態への対応の必要性についての指摘もあったが、4.項にあるようにコロナ禍におけるリスク管理を的確に実施することで、対新型コロナや成果創出プログラムでの利用が共用前から実現し、さらに共用開始が2021～2022年度の予定から大幅に早まって、2020年度内(2021年3月9日)に開始された。

### 3. システム開発における技術的な判断とその効果

○プロジェクト開始当初のシステムは、汎用CPUと加速部が結合されたシステムであったが、開発コストの制限および加速部の適用アプリが十分でなく、かつ、プログラミングの困難が大いに予想されたため、不採用となり、「富岳」のArmメニーコア汎用CPUによる大規模システムとなった。開発当初においては、加速部により低電力化とシステムの全体性能の向上を狙ったものであったが、完成された「富岳」においては加速部の代表的な例であるGPU相当の電力効率を達成したことから、加速部がなくても目的のシステムは達成されたといえる。さらに、汎用部がArmアーキテクチャを採用し、一方加速部のための特別な可搬性のないプログラミングは不要となり、目標の一つである「使いやすい」システムとなった。

○メモリ技術については、基本設計において、2015年1月にHMCを用いることを決定したが、HBMは、チップサイズ、10nmテクノロジーでの信頼性確保、コスト、ロードマップに不明な点があったため、2015年6月のCPU構成の見直しで、CPUダイサイズが縮小、メモリチップ数も半減し、HBMに必要なSiインターポーザが妥当なサイズに収まることを確認し、重点アプリの再評価を行ったところ、メモリバンド幅律速なアプリについてはむしろ性能が改善(書き込み・読み込みが同時に可能)、ほぼすべてのアプリで性能の低下はなし、比較的大きい電力が常時必要な高速シリアル転送(SerDes)が必要ないため、多くのアプリで電力が下がることとなった。ただし、HBMで実装できるメモリサイズに制限があるため、2016年のスケジュール延伸に伴う再検討で、メモリ容量を増やすためのDDRメモリの追加を検討したが、コストから断念した。ノードごとにメモリを必要とするアプリには制限がかかることとなったが、スーパーコンピュータでは、並列化により多数のノードにより性能を高めつつ問題サイズを大きくするアプリケーション(スケールアウト)が主流なため、HBMのみの構成を採用することとなった。これにより、競合のCPUと比較し、多くのアプリケーションで数倍の性能を達成することが可能となった。現在でも、汎用CPUとしてHBMを採用しているのは、A64FXだけであり、その先進性がうかがえる。

○2016年ごろになって、当初想定していた10nmテクノロジーの性能が思わしくないことが分かってきたため、その後継である7nmテクノロジーを利用することとなった。ただし、7nmテクノロジーが利用可能になるのは、2017年以降であり、製造技術の安定を考慮すると、1年以上のスケジュールの延伸の可能性を検討せざるを得ないという判断に至った。7nmテクノロジーについては、2018年には安定して利用できるレベルになり、2018年8月にはA版のテストチップを入手できたことから、最速でコンティンジェンシープランを遂行することができたと考える。また、7nmテクノロジーを用いることにより、最先端の半導体技術をタイムリーに利用することができた。半導体の動作速度についても、予想よりも良好で、あまり電力を増加させることなく、2.2GHzのブーストモードを実現できた。これらにより、タイムラインの影響を最小化した形で、性能を向上させ、また、電力の低下を実現し、富岳の基本性能を大幅に向上させるという好結果となった。

なお、計画が1年遅れたことに関しては、

- 状況としては、半導体の製造遅延は国際的な情勢であり、テクノロジーを変更しない場合、システムの電力性能と開発費が予定した範囲に収まらないことから、リスクを勘案して遅延は1年以上最大2年程度としたが、2020年4月としていた当初運用開始が2021年3月となり、最速でコンティンジェンシープランを遂行することができた。
- これは、開発企業による新たな半導体設計・製造の着実な推進、開発企業と運用主体による運用に向けたシステム調整の効率化、加えて、システム設

置期間中に発生した新型コロナ禍においてもシステム製造メーカーを中心に対応を図ることでスケジュール遅延を回避したことによるものであり、最先端の研究開発に係る国家プロジェクトの実施において、開発側の関係者の努力とプロジェクト評価が相乗的に機能した結果である。

- なお、基本仕様については延伸前の仕様と変更はなかったが、延伸の期間には7nmテクノロジーへの対応、SVEに最終的に導入されたFP16の命令対応に伴う設計変更などが行われた。延伸の際には、富士通並びに半導体設計メーカーとの間の情報をさらに確実・迅速に共有するマネジメント体制の強化、設計については保守的な見込みの半導体でも動作できるようにマージンを想定して設計を進めた。
- 2018年から2019年には7nmテクノロジーの半導体が予定通り安定して利用可能になった。その結果、半導体の動作速度および消費電力については見込みよりも良好となり、動作周波数は最大2.2GHz、通常の動作周波数も見込みよりも高い2.0GHzになるとともに消費電力についても1割以上低いものになった。
- 国際的に見ても7nmテクノロジーの採用はトレンドであり、2020年頃を目途としていた開発目標を達成できた国は他に無く、結果として日本の「富岳」が世界に先んじた対新型コロナウイルスの対策評価プログラムの早期な創成や、ベンチマークランキング3期連続4冠を達成した。

○プロジェクト開始当初においては、米国・中国が2020年頃にはエクサフロップスのスーパーコンピュータを開発する計画が発表されており、競争力が心配されたが、インテルのロードマップの変更や半導体テクノロジーの進歩のスローダウンなどで、米国のエクサシステムが2023年に延伸するなどの状況の変化があり(その後、早ければ2021年後半に米国ORNLのFrontierがエクサの性能を達成するシステムとなる予想)、結果的に、「富岳」が2020年において4つの主要ベンチマーク全てで世界初のトップのシステムになることができた。米国の当初のロードマップでの目標では、2020年に1エクサフロップスを20MWで達成するということがあったが、富岳の運用電力は18MW程度であり、かつ、京に対するエクサスケールマシンで期待される性能向上目標を達成したことで、「富岳」は実質的に米国の目標をタイムラインを含めて達成したといえる。

○「富岳」では、Arm命令セットを採用した。これは形式的には理研が「富岳」の命令セットとして了承したものであるが、実質的には京の経験から理研は主張したものであり、また、開発企業である富士通も当初からSPARC命令セットからの切り替えを模索していた。採用後、富士通はArmとリードパートナーとしてSIMD拡張命令であるSVEの策定に貢献した。富岳のプロセッサであるA64FXは、SVE命令をサポートする初のArm命令セッ

トを持つプロセッサとして注目され、高性能を達成した。現在、HPCにおけるダイバーシティを目指して、Intelのx86命令セットに代わる命令セットとしてArmは注目されており、A64FXに引き続いて、AmazonのGraviton2やNVIDIAのAmpereなどArm命令セットを用いたハイエンド・サーバー向けのプロセッサが発表・開発されており、新たな可能性を拓く命令セットとして注目されている。結果として、ソフトウェアも充実し、ArmのHPCにおけるエコシステムが形成されることになり、「富岳」ユーザの利便性を向上させることとなった。

#### 4. 今後のプロジェクトに向けた提言

##### ○アプリケーションファーストによるCo-designの有効性

本プロジェクトにおける一つの大きな挑戦は、計算機システムと多くの計算科学分野にまたがるCo-designであり、各分野の代表的アプリケーションである多くの計算特性を網羅したアプリケーション群を選定して進めたことで(資料8参照)、アプリケーションの共通問題項目として他のアプリケーションにも有益な情報共有が可能となった(資料9参照)。

このような構造でシステム開発側との協調設計を組織的に進めることで、著しく高いハードルであった開発目標を達成し、世界トップのスーパーコンピュータを実現できた。また、インシデントに起因する検討時においても、最適な選択を短期間で見極めることができるなど、重要な局面での意思決定にとって極めて効果的に機能した。また、開発中途での、ビッグデータやAI深層学習への新世代のアプリケーションのニーズの高まりを的確にとらえ、ハードウェアレベルで必要な機能を追加で取り込み、それらを活用するために必要なOneDNN for Armなどの高度なソフトウェア開発にもつなげることができて、結果として「富岳」のすそ野の広いスーパーコンピュータとしての価値が大いに高まった。

なお、Co-designの課題や今後の改善点に関しては、

- 目標設定時の具体的なアプリを計算ロードマップに基づいて選択・設定し、Co-Designすることにより、それ以外の違う特性を持つアプリには十分に対応できない可能性がある。今回は重点課題アプリプロジェクトからの提案を取りまとめ多くのアプリをカバーするように努めたが、パフォーマンスプレディクションによるカバーなど、広範なターゲットに力点を置いて進めることが重要。
- 既存のプログラムに重きが置かれるために、プログラミングモデルの変更を伴うdisruptiveな技術は生み出されにくい。
- プロジェクトの期間が7年以上となり、当初選定したターゲットアプリの更新やAI/ML等の新規の動向を反映するのが難しい。これはプロジェクトマネジメントの問題であり、アプリケーション目標の設定の更新・変更について、柔軟に対応

できるマネージメントが望ましい。なお、本プロジェクトについてはAI/MLについては、プロジェクトの最終フェーズでの対応となった。

#### ○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

「富岳」の開発の事前段階のフィージビリティスタディでは、それぞれの独立したアーキテクチャ候補があり、また、それとは別途にアプリケーションのスタディグループが立ち上がり、それらの間での連携が比較的希薄であって、密なCo-Design体制になったのは実際に開発が始まってからであった。それにより、Co-Designの総合的な評価が得られる前に加速部の開発がスタートし、その欠点の後日の判明とそれによる中止が決定されるなどの事態が生じた。そのように事前にアーキテクチャを決めてからCo-Designで進展させるのではなく、寧ろ、フィージビリティスタディにおける事前検討において、「アプリケーションファースト」の観点から、Co-designが中心となる体制を敷き、その上でシステムを構成する各要素を検討することが肝要であることが強く感じさせられる。

なお、今回のフィージビリティスタディに関しては、

- 東北大のFSは、ベクトル機構と高バンド幅メモリについての調査であり、その調査結果と相同する形で、「富岳」のSVE命令の利用、および、HBMによる高バンド幅メモリの採用・活用など、多くの点でコンセプトを共有するものになった。
- 筑波大のFSは演算加速機構を持つシステムに関する調査であったが、当初は汎用プロセッサと統合したシステムでエクサスケールシステムを目指すシステムを提案したが、自己点検結果報告書(案)に記載されている通り、加速機構については取りやめとなった。しかし、こちらについても、一部のターゲットアプリの最適化などに知見が生かされている。
- 理研でのアプリケーションの調査研究の成果は、今回の開発プロジェクトの基礎となった計算科学ロードマップの策定、さらにいくつかのターゲットアプリの選択につながった。具体的には、アプリ調査研究では、計算科学者だけでなく実験科学者・理論科学者との意見交換をもとに広い科学分野にわたって、個別の深化と分野同士の必要な連携を計算科学ロードマップにまとめている。このことは、アプリケーションファーストを標榜する「富岳」開発へ具体的な指針を示した。上記の規模のスキームは、従来にはなかったことであり、アプリケーション側とシステム側双方にとって相乗効果を生み出した。今後の次世代スパコン開発においても、有効なスキームであると考えられる。

#### ○ハードウェア・ソフトウェア・運用の「同時」開発製造と迅速な提供の必要性

アプリケーションファーストの観点からは、ハードウェア開発の前に計算科学で今後どのような問題を解きたいか、あるいはどのような問題を解くべきか、また、それにはどのよ

うな連携が必要かを検討し、ハード・システムの必要機能や構成を合意する必要がある。そのためには、ハードウェアの開発と並行してソフトウェア開発が進み、ハードウェアの完成と同時にソフトウェアやシステム全体が機能する事が理想であり、開発システムの早期成果創出にもつながるが、「富岳」の場合、A64FXのファーストバージョンがラインオフしてからシステムが共用開始するまで3年近くの歳月を必要とした。最初の筐体が理研に導入されてからも15か月かかっている。寧ろ、商用版のFX1000を導入した名古屋大学が、「富岳」より8か月も早く運用を開始している。

これにより、「京」の停止から「富岳」の共用開始まで、18か月もの間フラッグシップマシンが不在、という好ましくない状況が発生した。その不足分は他のHPCIセンターの資源提供で補ったものの、我が国全体の総計算量という観点からはフラッグシップ不在は大きな欠損であった。

通常のITシステムの開発では、継続性に基づき、運用面を含む同時開発が有効に行われるので、ハードウェアの提供と同時にソフトウェアやそれに適した運用が提供されるのが常である。例えば、iPhoneは毎年新型が提供されるという早い製品サイクルであるが、ハードだけでなくソフトやサービスもユーザに同時提供されて、このようなギャップは生じない。

今後、システム開発において、このようなギャップが生じないことが大変望ましい。そのためには、既存システムを活かしながら次のシステムを導入する事が肝要である。それだけでなく、ソフトウェアの本格的開発や運用体制の確立が、ハードウェアの開発と同時並行に行える体制も重要である。そのためには、ハードウェアとしては一世代前なるも連続性のある小規模システムを計画的に確保し、システムソフトウェアやアプリケーションの開発プラットフォームとし、かつ、運用上の各種実験も行える体制が好ましい。

#### ○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)

新型コロナウイルス(COVID-19)のパンデミックが発生したことから、富岳の製造設置は大きな影響を受けた。逆に、この対応に貢献するべく、共用開始前であった富岳の利用も検討され、対新型コロナウイルスのプログラムの早期な創成と、飛沫感染シミュレーション等の大きなインパクトのある結果の創成につながった。

まずは、新型コロナウイルスのパンデミックによって、製造のサプライチェーンの問題が発生し、かつ、設置時の感染者発生の可能性も生じて、両者によってスケジュールが大幅に遅れる可能性があった。これに対し、理研・富士通を中心に、頻繁な協議を重ね、設置スケジュールに関する様々なコンティンジェンシープランを立案し、感染者が出ても設置継続が可能となる体制を敷くことで、スケジュール通りの設置と、初期試験運用による種々の成果創出、更には前倒しの共用開始を達成した。

また、それにより、成果創出プログラムを予定通り進め、それに加えて対新型コロナプログラムの種々のワークロードの実行を可能とした。特に、対新型コロナの各プロジェクト

は、試験運用段階とは言え、有効な結果を実際に得るためには、プロダクションレベルでのワークロードの量と、それらの迅速な実行を必要とした。それぞれのプログラムの計算は富岳の巨大スケールからすれば小中規模の計算とはなるものの、実際の成果を出すには、それらをパラメータを変化させて大量に同時に動かす必要があり、かつ、感染状況に応じて、迅速かつタイムリーに、通常の研究では年単位で行うものを月単位・週単位で行う必要がある。そのためには富岳レベルの性能が必要であり、かつ、それらが設置完了以前から実アプリで使えるレベルで提供される必要があった。それらを、既に決まっている設置やテストのスケジュールに割り込ませて行うのは非常に困難であったが、国難ということで理研および富士通の大いなる努力で実現した。

また、そもそも新型コロナプログラムで研究開始直後から実際の成果が出始めるというのは、極めて異例な快挙であるが、それを可能にしたのは、Co-Designの重点課題を中心に、富岳に最適化された多くのアプリケーションの開発が既に進んでいて、それらを新型コロナ向けに迅速に転用できたからである。例えば、飛沫感染のシミュレーションは、内燃機関における燃料インジェクターとほぼ同じ物理過程であり、そのシミュレーションを重点課題で行ってきたCUBEアプリケーションを転用したものである。

このような迅速な転用による早期の重要な成果創出が可能となったのは、

- 上記のような初期プリプロダクション段階からの運用
- 戦略分野→重点課題→成果創出という、富岳の開発に並行した継続的なアプリケーションの研究開発の大規模プロジェクトがドライブされ、かつ、R-CCSがそれぞれの分野の橋頭保かつ中心的な役割をはたせたこと
- A64FX/Armの汎用性とプログラミングの容易性により、新型コロナに適したアプリケーションの改変が容易であったこと

あたりが挙げられる。

#### ○システム開発における運用技術のCo-Designの重要性

システム開発において、運用面の体制や検討、それに必要な開発や設置がマシンが出来上がる前にされている事も大変重要である。

例えば、HPCシステムの運用において、エネルギー効率の改善は最も重要な課題の一つである。マシン自身がそもそも省電力なものとして開発されている必要があり、そのために富岳は省電力設計と、Power Knobなどの機能を各チップが内蔵され、システム全体でコントロール可能であるが、それらが施設における冷却や、実行されるジョブの特性に合わせて全体最適化されなければならない。このようなマクロな観点からの省電力技術は、一般のIDCの運用への貢献のみならず、施設設備を含めたシステムの規模、機能や演算性能、さらには開発費や運用費にも影響する。

このような事例からも、システムの安定的な運用を確保し高いエネルギー効率を達成し、運用コスト低減を達成するには、プロジェクトの立上時、さらにはフィージビリティスタデ

ィの段階から、冷却技術などとの運用技術のCo-Designを実施し、全体最適化を果たす必要がある。

#### ○将来のシステムアップグレードを担保する拡張性

フラッグシップシステムの稼働期間や重要性に対し、IT分野の進化の速度を考えると、他システムとの性能・機能差をカバーする観点から、将来の付加価値を見込んだ拡張可能な設計をシステム全系にあらかじめ取り入れておくことが重要である。「富岳」の開発途中でも、伝統的なモデルベースのシミュレーションに加え、ビッグデータやAIの重要性が大幅に増し、設計レベルの変更で対応した。しかしながら、一旦システムが完成してしまうと、その後のアップデートはソフトウェアに限られ、単なる速度向上というだけでなく、機能面でも大幅な遅れをとってしまう可能性がある。一般のITインフラはそのような事態でも対応できるように、システム自身にハードウェアアップデートを可能とする機能を有しており、実際の運用大規模スーパーコンピュータにおいても、そのようなアップグレードが行われた事例は多くある。

「富岳」も小規模ながらそのような拡張可能性の付加価値を開発プロジェクトの後半で担保したが、その用途はあくまでも高度化研究の実験が目的で、規模は小さく、プロダクションレベルで大規模アプリケーションの更なる高度化に直接用いられる規模ではない。

IT一般では、クラウドの大規模化・高度化に伴い、高性能な拡張を行う種々の高度な拡張企画が提案されている。事例としてはCCIX、CXL、GEN-Zなどがあげられ、コンソシウムも形成されている。HBM採用と同じように、このような拡張規格の世界に先駆けた採用により、システムの将来にわたる拡張性の担保が可能になるであろう。

#### ○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

「富岳」はSociety5.0の基盤としての側面を打ち出し、SDGsのゴールに対してDXを達成するという側面が、モデルベースのシミュレーションを中心とした成果創出や対新型コロナウイルスなどのプログラムで実現され、世間一般から広く支持を得ることに成功した。さらに、今後のサイエンスとしてのITのインフラ化を考えると、社会インフラの構築や産業競争力といった政策との連携に基づいたスパコンプロジェクトの推進を明確に打ち出すことが重要であり、プロジェクト経費の確保、更には民間からの利用だけでなくプロジェクトのデリバラブルや、プロジェクト自身への投資の呼び込みにも有効であろう。

また、開発主体は、開発段階においても、将来の利活用を想定した情報収集や研究活動を通じ、国による評価を踏まえつつ開発企業とも一層の連携を図ることで、シミュレーションユーザのみならず、より広いIT基盤やその利用コミュニティからの支持を得られるシステム開発を実現することが必須である。今回の「富岳」の開発では、Society5.0を支える研究基盤としての位置付けを明確に意識し、ビッグデータやAI対応が可能となる

よう、開発途上でもシステム性能の追加やプログラミング環境の充実について開発企業との密接な連携により対応し、また、Society5.0拠点の設立などにより、システムの更なる機能追加の可能性について企業や自治体、政府などと確認することで、今後の将来システムの検討などに繋がる取組みをコミュニティの協力を得つつ実施している。

## 5. まとめ

理化学研究所が担当した「富岳」開発は、ポスト「京」の開発に係る関係コミュニティの自立的な検討開始からその完成までに10年の歳月を要したこととなるが、「アプリケーションファースト」を目標としたCo-designにより2020年頃に世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータを実現するとのプロジェクトの目標を着実に達成することができた。

また、システムとして消費電力性能、計算能力、ユーザの利便・使い勝手の良さを備えた2020年代において世界の他のシステムに対して総合力で卓抜するものであるとの世界最高水準の汎用的な計算機システムの特色についても達成していると認識している。また、Co-Designによりアプリケーションの開発も多くの重要な分野で同時に進むことにより、対新型コロナウイルスを含む多くの重要な利用成果が初期から達成され、今後はさらに多くの画期的な成果の創出が期待される。

システム開発主体の責務は、予定したシステムの利用開始時に、最先端技術が適用され安定的な運用が可能となるシステムを提供することであり、その技術を的確に見極めることが最も困難な課題であった。

今回の設計期間中には、最先端の半導体の設計・製造に係る加工技術開発の困難さ等から世界的な遅延が生じ、ポスト「京」の開発スケジュールも約1年遅延したが、7nmの半導体プロセス技術、メモリにHBM2といった最適な技術を取り入れ、その後の開発はCPUの量産化も含めて順調に進んだ。

また、CPUにArmアーキテクチャを採用しSVE対応を図ったことで、ユーザの利便性の向上や新たなユーザの獲得、商用機展開にも期待が持てる。さらに、国際協力を通じてSpackを活用したシステムソフトウェアの充実を図ったところであり、システムとしての完成度を高めることができたと認識している。

システムの製造・構築・搬入にあたっては、世界的な新型コロナウイルス禍の中でも、富士通株式会社を始め関係者による最善の努力の結果、スケジュールどおり進み、その後の運用調整を経て、当初予定からは11ヶ月の延伸期間で、2021年3月9日に共用開始を迎えることができた。

「富岳」は、試行利用段階から、対新型コロナウイルスの感染対策などで非常に注目を浴び、国民の広い支持を集めることに成功し、それをベースに更なるSociety5.0を

中心とした成果が期待できる。一方、開発においては幾つかの課題も判明したが、これはハイリスクな国家プロジェクトとしてはむしろ教訓としてある意味で当然得られた成果ともいえ、今後の高度ITプロジェクトにそれらが確実に反映されていくことが重要であろう。開発プロジェクトに参画いただいた関係各位に感謝を申し上げますとともに、様々な利活用が進むことで十分な成果創出が達成され、今後のHPC、情報科学技術、科学技術振興に寄与することで、最先端スーパーコンピュータの研究開発基盤としての位置付けが益々高まるよう取り組んでいく。

## ● 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)

# 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

資料3



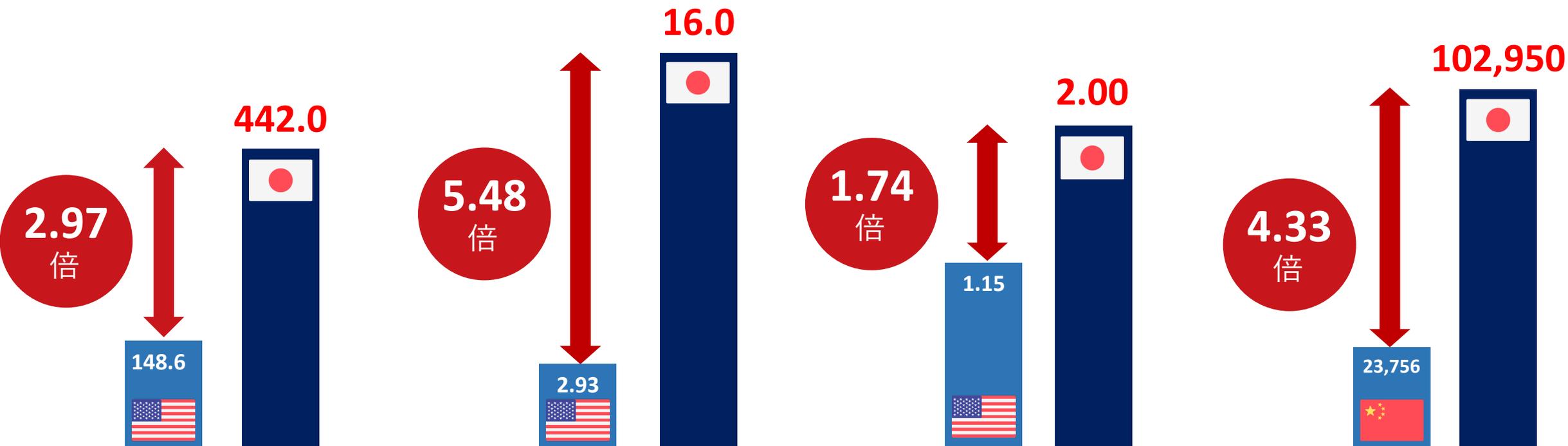
「富岳」におけるアプリケーション性能評価においては、アプリケーション実行中の消費電力の最大値が、システムが許容できる上限値以下であることが重要な要件であった。アプリケーションによってはターゲット問題で最大性能を発揮するような設定で実行した場合に、許容できる上限値を超過する可能性が高いと判断されるケースもあり、各開発年度において基本的な電力制御モード4パターン全てで発揮される性能倍率と必要とする消費電力とを比較しながらコデザインを進めた。以下に最終年度に実施した各電力制御モードにおける性能測定結果とシステム消費電力を示す。

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

## シミュレーション

## AI

## ビッグデータ



**TOP500**

(単位：PFLOPS)

浮動小数点の演算  
での性能評価

**HPCG**

(単位：PFLOPS)

実際にアプリケーションを  
稼働させた性能評価

**HPL-AI**

(単位：EFLOPS)

AI処理での  
性能評価

**Graph500**

(単位：GTEPS)

ビッグデータ処理  
での性能評価

**2位に対して 約1.7倍から5.5倍の性能差を実現**

## 富岳早期成果創出の例

ゴードンベル賞ファイナリスト論文：

- C. Kato, Y. Yamade, K. Nagano, K. Kumahata, K. Minami and T. Nishikawa, "Toward Realization of Numerical Towing-Tank Tests by Wall-Resolved Large Eddy Simulation based on 32 Billion Grid Finite-Element Computation," SC20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 2020, pp. 1-13, doi: 10.1109/SC41405.2020.00007.
- H. Yashiro, K. Terasaki, Y. Kawai, S. Kudo, T. Miyoshi, T. Imamura, K. Minami, H. Inoue, T. Nishiki, T. Saji, M. Satoh, and H. Tomita, "A 1024-Member Ensemble Data Assimilation with 3.5-Km Mesh Global Weather Simulations," in SC20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC), Atlanta, GA, US, 2020 pp. 1-10. doi: 10.1109/SC41405.2020.00005

「富岳」コロナ関連プレスリリース

リリース日	タイトル	報道数	発表元
2020/4/7	新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用について	44	理化学研究所
2020/4/24	室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策	61	理化学研究所
2020/5/8	スーパーコンピュータ「富岳」記者勉強会のお知らせ －「富岳」を利用した新型コロナウイルス対策研究－ ● スーパーコンピュータ「富岳」の特長と Society5.0 への貢献（松岡） ● 「富岳」による新型コロナウイルスの治療薬候補同定（奥野） ● 「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（杉田） ● パンデミック現象および対策のシミュレーション解析（伊藤）	1	理化学研究所

2020/6/11	<p>スーパーコンピュータ「富岳」 メディア向けイベント開催のお知らせ</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● スーパーコンピュータのランキングについて (佐藤三久)</li> <li>● 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 (立教大望月)</li> <li>● 室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策 (坪倉)</li> <li>● パンデミック現象および対策のシミュレーション解析 (伊藤)</li> </ul>	169	理化学研究所
2020/6/30	<p>スーパーコンピュータ「富岳」 記者勉強会のお知らせ</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● 「富岳」による新型コロナウイルスの治療薬候補同定 (奥野)</li> </ul>	57	理化学研究所
2020/8/19	<p>スーパーコンピュータ「富岳」 記者勉強会のお知らせ</p> <p>ー「富岳」を利用した新型コロナウイルス対策研究ー</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● 室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策 (坪倉)</li> </ul>	114	理化学研究所
2020/10/8	<p>スーパーコンピュータ「富岳」ウイルス飛沫感染の予測に関する記者勉強会・合同記者説明会について</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● 研究開発課題「室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策」の進捗状況と成果の説明 (坪倉)</li> <li>● 飲食業におけるフェイスシールドによる新型コロナウイルス対策に関する取組の説明 (サントリー、凸版印刷、坪倉)</li> </ul>	217	理化学研究所 サントリー酒類株式会社 凸版印刷株式会社
2020/10/15	<p>コロナウイルス飛沫感染に関する研究 ～マスクの効果と歌唱時のリスク検討～</p> <p>【機械工学系 飯田 明由 教授】</p>	14	国立大学法人豊橋技術科学大学
2020/11/20	<p>スーパーコンピュータ「富岳」ウイルス飛沫感染の予測に関する記者勉強会について</p>	178	理化学研究所

	<ul style="list-style-type: none"> <li>● 新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用 実施課題の追加について（実施課題6）（松岡）</li> <li>● 「室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策」の進捗状況と成果の説明（坪倉）</li> <li>● 日本航空株式会社/理化学研究所 共同プレスリリース「JAL×理化学研究所 スーパーコンピュータ「富岳」を活用した研究を実施」について（JAL）</li> </ul>		
2020/11/25	新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用 実施課題の追加について（実施課題⑥）	2	理化学研究所 東京医科歯科大学
2020/12/8	凸版印刷とサントリー酒類、フェイスシールドの設計情報を公開 スーパーコンピュータ「富岳」の研究成果を活用して開発した飲食用フェイスシールドの社会実装を実現	19	凸版印刷株式会社 サントリー酒類株式会社
2021/2/18	新型コロナウイルス感染の分子機構を解明 ー医薬品の分子設計に貢献する「富岳」による新しい知見ー	6	理化学研究所
2021/3/2	スーパーコンピュータ「富岳」 ウイルス飛沫感染の予測に関する記者勉強会について <ul style="list-style-type: none"> <li>● 「室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策」の進捗状況と成果の説明（坪倉）</li> </ul>	122	理化学研究所
2021/3/22	新型コロナウイルス感染拡大防止のための、お客様へのお願いと、航空会社の取組み等について（動画内容を一部変更しました）	2	定期航空協会
2021/4/21	マスク不満点1位「ムレる」2位「息苦しい」を軽減！「ハイパーブロックマスクムレ爽快」新発売高通気性素材&口元爽快ワイヤーで息も会話もしやすくウイルス飛沫99%カット&	0	大王製紙株式会社

	紙おむつの技術を応用した痛くなりにくい耳掛けを採用		
2021/4/23	<p>スーパーコンピュータ「富岳」新型コロナウイルス対策研究成果に関する記者勉強会について</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● 新型コロナウイルスの受容体結合ドメインとアンジオテンシン変換酵素2 (ACE2) の結合状態に関するフラグメント分子軌道計算による解析 (立教大望月、神戸大田中)</li> </ul>	8	理化学研究所

※報道数＝新聞＋Web（重複除く）＋TV（関東・関西のみ）

# 新たなる付加価値：PCI を使った拡張可能性の調査検討

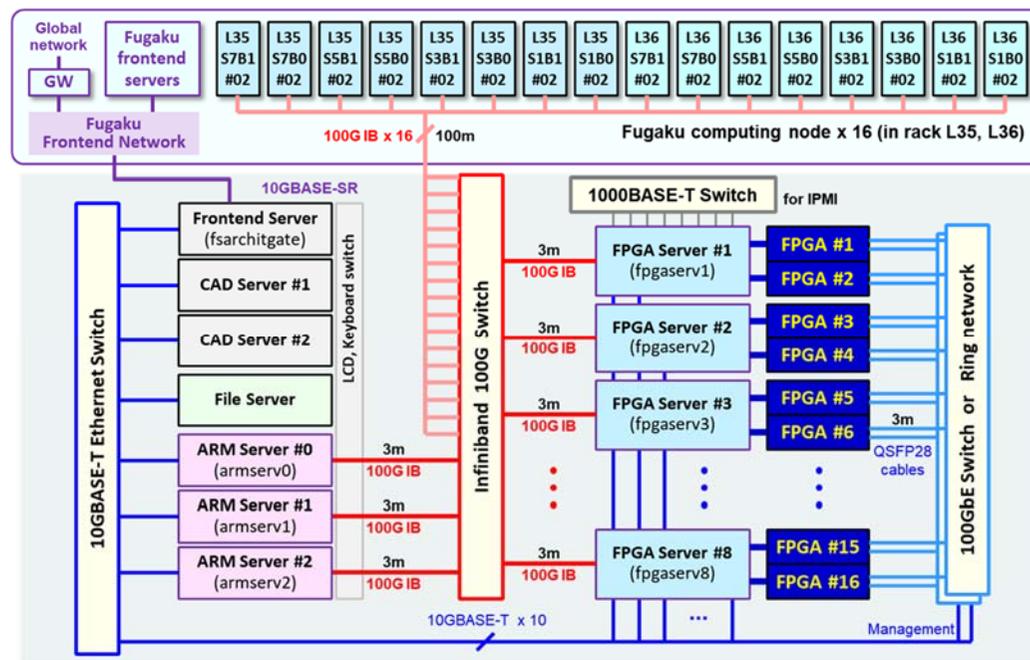
資料6



- 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



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<sup>®</sup>(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

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。

# 「富岳」成果創出へ ～「富岳」Begins～

- ・コ・デザインの成果は共用開始前（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、Society 5.0の機軸たるデジタルツインのプラットフォームへ。

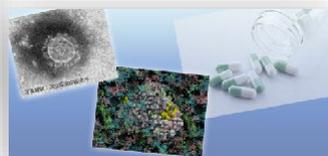
## ＜開発段階での試行的利用＞

- ・**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**



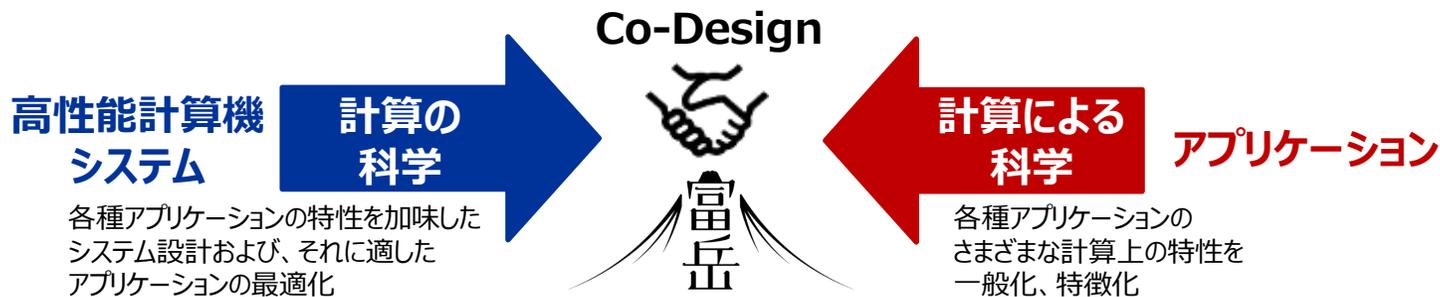
## ＜本格稼働＞

- **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、ウィズコロナ、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の開始**  
（新型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、Society 5.0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实施のための体制整備等もあわせて実施）

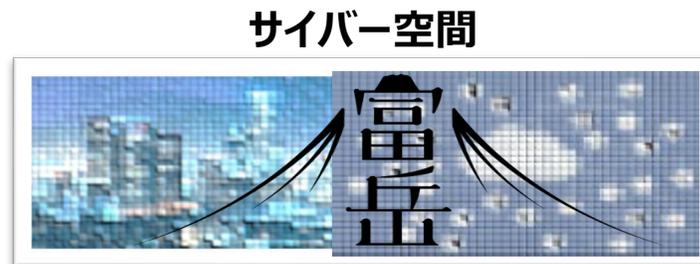


# Society 5.0実現に資する「富岳」の開発

- ・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。
- ・Society 5.0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

経済発展: エネルギーの需要増加, 食料の需要増加, 寿命延伸・高齢化, 国際的な競争の激化, 富の集中や地域間の不平等

社会的課題の解決: 温室効果ガス (GHG) 排出削減, 食料の増産やロスの削減, 高齢化に伴う社会コストの抑制, 持続可能な産業化の推進, 富の再配分や地域間の格差是正

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](mailto: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研究機構が運営するウェブ参照。<https://www.hpci-office.jp/>)

**【当面の方針】**

- ・ 「コ・デザイン」の考え方は設計・開発段階のみならず**運用段階でも**。すなわち、「富岳」の運用等の高度化はユーザーの拡がりと同乗的に。
- ・ それをベースに、
  - ✓ 前記の制度的・政策的動きとパッケージとなり、
  - ✓ それぞれの**発展を支援**するとともに、
  - ✓ 同様なものを**新たに創出**していく。
- ・ 「試行」の姿勢で**柔軟**に対応していくので、**幅広い連携・協働を皆様と**。  
(一部自治体、IT関連企業団体等とは連携開始)
- ・ なお、体制も順次強化。近々、コーディネーター公募を開始予定。

# 計算特性の網羅性

9本のターゲットアプリケーションは、各重点課題から代表的な計算手法を有するアプリとして選出されたものであるが、アプリ全体で計算科学的手法を広く網羅することも考慮されている。これらターゲットアプリとシステムとの協調設計を進めることによって、結果的により広範囲なアプリケーションに対しても高性能計算を実現することができるような基盤システムとしての完成を目指した。

アプリケーション	主な計算手法	構造格子計算	非構造格子	粒子法計算	整数演算	密行列計算 (局所的)	密行列計算 (大域的)	通信・低遅延	通信・高帯域	隣接通信	大域的通信	大容量I/O
GENESIS	分子動力学法			✓						✓	✓	
Genomon	大容量データ解析				✓							✓
GAMERA	非構造・構造格子 ステンシル複合の 有限要素法		✓					✓	✓		✓	
NICAM+LETKE	構造格子ステンシル有限体積法+局所アンサンブル変換カルマンフィルタ法	✓				✓			✓	✓		✓
NTChem	高精度分子軌道法 (疎+密行列計算)					✓	✓		✓	✓	✓	
ADVENTURE	非構造格子・有限要素法		✓			✓	✓	✓		✓	✓	
RSDFT	密度汎関数法 (密行列計算)	✓				✓			✓	✓	✓	
FFB	非構造格子・有限要素法		✓							✓	✓	
LQCD	構造格子経路積分モンテカルロ法	✓						✓	✓	✓	✓	

# アプリケーション検討会会議体

資料9



アプリケーション検討会は各重点課題アプリWGにおける議論を踏まえたコデザインに関する検討を行う会議体である。そのメンバーは重点課題アプリWG主催者、理研R-CCSでコデザインに関わる研究者、富士通担当者から構成される。重要事項・共通する課題の討議・トラッキング、システム設計開発への反映などが議論された。

WG1-WG9：各重点課題アプリWG。コデザインのアプリ側主要な実行部隊。各アプリ固有の課題の実行、性能・機能上の問題検討、改善、性能評価を実施する。各WGが独自に活動を行い、2-3週間に1度のペースで、アプリケーション検討会で全WGが一堂に会してコデザイン状況の相互フィードバックを行った。

アプリケーション検討会とシステム検討会とは同位の位置づけで進められた。

