

2020年8月27日、2020年度のSS研HPCフォーラムが開催された。新型コロナウイルスの影響で全国的にイベント自粛となった今夏、本フォーラムも初めての完全オンライン開催となった。参加人数は349名、時勢に合ったテーマが関心を集めたためか、現地への移動が不要である分だけ参加が容易となったためか、例年より多くの参加者となった。

今回は、2020年6月にスーパーコンピュータ「富岳」がTOP500の世界一位を含む4冠を獲得し大きな話題となったことをうけて、「富岳スペシャル～システムから応用～」と題し、「富岳」の開発と利用に関する話題、および「富岳」に先駆けてその商用版であるFUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000(以下FX1000)の一般向け運用を開始している名古屋大学の「不老」に関する講演が行われた。

冒頭、工学院大学の田中輝雄教授から挨拶（趣旨説明）があった。6月に「富岳」が世界一を獲得してから社会の中の多くの場でスパコンがとりあげられており、このようなことはこれまでになかったことである。新型コロナウイルス感染症対策の話題においても、西村経済再生担当大臣が「富岳」によるシミュレーションの結果に基づく発言をされるなど注目が高まっている。そのような中で「富岳」スペシャルという非常に魅力的な話題が提供できそうであるという趣旨の挨拶であった。

富岳：「アプリケーション・ファースト」の共同
研究開発の重要性と、Society5.0に向けた発展

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8月26日 SS研

富岳

RCCS

一件目の講演は、理化学研究所 計算科学研究センターの松岡聡センター長による「富岳：「アプリケーション・ファースト」の共同研究開発の重要性と Society5.0 に向けた発展」と題した講演である。本講演では、「富岳」がいかにして世界一の性能を達成したかについて、その背景と現状が紹介された。

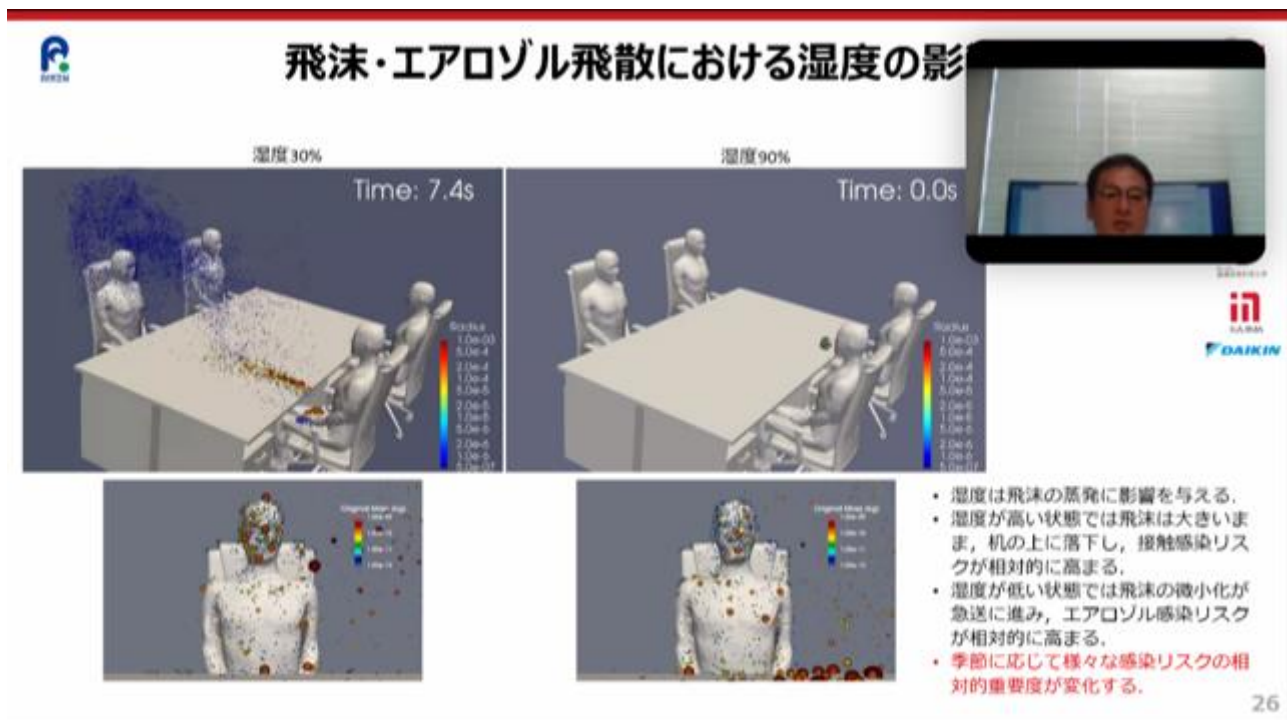
本講演で松岡センター長が特に強調されていたのは、「富岳」が「アプリケーション・ファースト」により開発されたものであり、多くの研究者・開発者の協力によるコデザインによって進められてきたからこそ様々な成果が得られていることである。「富岳」（ポスト「京」）開発プロジェクトが開始されたのは2014年4月であるが、実は「京」の設置が完了する以前より「京」の次世代のスーパーコンピュータについて検討するコミュニティは立ち上がっており、2010年9月には第1回の会合が持たれていた。そうしたコミュニティの中で議論された将来のスパコン像を踏まえた上で、次世代のスパコン（＝「富岳」）で重点的に取り組むべきターゲットアプリケーションが選定され、それらのアプリケーションの特性にあったスパコン設計を行ったからこそ、「富岳」は高いア

アプリケーション性能やベンチマーク性能を達成しているのである。

本講演では「富岳」の構成や性能、そして主要なベンチマークで4冠を獲得できた背景とその意義についても紹介された。特に重要なことは、「富岳」がベンチマークのために開発されたわけではなく、アプリケーションを高速化したいという課題・目標が先にあり、それを実現するにはどうすればよいかオールジャパンで取り組んだ結果、4冠という結果も得られたということである。松岡センター長は、あくまでもアプリケーション・ファーストの結果として4冠を獲得したのであって、その逆ではないことを強調されていた。また、長期にわたるコデザインや、国家プロジェクトとして進めてきたからこそその成果であり、富士通だけや理研だけでは達成できなかった成果であることも強調されていた。

さらに、産業利用・Society 5.0における「富岳」の活用についても紹介された。「富岳」が産業界など広い分野で利用されるうえでは、「富岳」を含むエコシステムが発展することが重要である。「京」のCPUがSPARC64というほぼ独自に近いアーキテクチャであることは、「京」を含むエコシステムの構築・活用という点では弱点であった。一方、「富岳」のCPUアーキテクチャはArmベースであるため既存のエコシステムと親和性が高く、さらに理研と富士通が協力して最新のオープンな機械学習ソフトウェアスタックへの対応やクラウド的な利用のサポートなど利便性の向上に努めており、今後ますます「富岳」のエコシステムが広がっていくことが期待される。また、AI研究基盤としても「富岳」への期待は大きく、単純に演算性能が高いだけではなく、学習データ・AIインフラ・人材が「富岳」に集うことで、日本のAI研究は海外のAI研究に対する劣勢を跳ね返せると期待を示した。

最後に、「富岳」による新型コロナウイルス感染症対策への取り組みについても紹介があった。メディアなどで多く紹介されているとおり、ウィルスに効果のある薬剤の発見・開発や、飛沫感染の予測などに「富岳」の活用が進んでいる。これは新型コロナウイルス感染症の流行を受けて理研やHPCI構成機関が計算機資源の提供を行っているものであり、「富岳」も構築途中ながら先行して計算資源を供出することで社会貢献を行っている。新型コロナウイルス感染症対策への「富岳」活用の事例を幾つか簡単に紹介して本講演を終えた。



二件目の講演は、神戸大学 大学院システム情報学研究科 教授/理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダーの坪倉誠教授による「富岳を用いた室内環境におけるウイルス飛沫・エアロゾル感染の予測とその対策提案」と題した講演である。本講演ではウイルスの飛沫やエアロゾルの飛散状況の予測と対策に関するシミュレ

ーションについて紹介された。

坪倉教授によると今回の研究のきっかけは、4月に「富岳」の新型コロナウイルス感染症対策向けの優先利用がアナウンスされた際に、在宅勤務中の自分たちには何ができるだろうかと考え、自動車エンジンの噴霧のシミュレーションが飛沫のシミュレーションにも活用できるのではないかと思いつき、関連する様々な研究分野の皆様に協力を仰いで実現したものであるそうだ。なお感染症の専門家については、当初はあてがなかったが、中間報告の際に厚労省のクラスター対策班の先生から連絡がありアドバイスいただけるようになったとのことである。

はじめに、坪倉教授らの利用している解析ソルバー「CUBE」についての紹介があった。CUBEは階層直交格子を用いた有限体積法ソルバーであり、熱流体運動・構造変形・化学反応のスケラブルな連成アルゴリズムが実装されており、元々は自動車の音響解析・構造解析・エンジンのシリンダのシミュレーションなどに用いていたものである。噴霧モデルについては蒸発や壁による反射も含めてシミュレーションしており、エンジンのシミュレーションにおいて実験との比較なども実施されている。CUBEに対して「富岳」に特化したチューニングはあまり行っていないためまだ性能向上の余地はあるが、現状で良好な性能が出ているとのことである。例えばシミュレーション時のセルの構成などには最適化の余地があるが、これを特化させてしまうと複雑形状に対する汎用性が失われてしまうという問題があるそうだ。ただしプロファイラを用いて確認してみたところ、対流項については演算効率の改善が、粘性項についてはキャッシュ利用効率の改善が必要そうということが明らかになっているとのことである。

つづいて、メディアでも多くとりあげられているマスクの効果に関するシミュレーションについて紹介された。本件については、シミュレーション自体が特別難しいわけではないが、マスクの素材や付け方など様々なケースについて知りたいという要望がありシミュレーションの数が増えやすいそうだ。シミュレーションの結果、マスクの素材を変更すると飛沫の透過しやすさや隙間からの漏れやすさは変わってしまうが、手作りマスクであっても多くの飛沫を防ぐことができることが確認された。空気の通りが良い綿のマスク・手作りマスクでも効果はあるため、例えば暑いときは無理せずに通気性の良いマスクを付けるなどの対応をするのが良いとのことである。ただし、いずれの素材でも漏れ出るエアロゾルを防ぐことはできず、マスクの装着とあわせて部屋の換気などの対策は必要とのことだ。さらにフェースシールドについては、飛沫をある程度防ぐ効果はあるが、エアロゾルは多く漏れるためマスク以上に換気を考える必要がある。また、マスクの主な効果は装着者が飛沫を飛ばすのを防ぐことだが、医療用でない不織布マスクでも大きめの飛沫については吸気に対するフィルタ効果も大きいことが判明したそうである。

つづいて、こちらもメディアでとりあげられた列車内の換気についてのシミュレーションが紹介された。山手線の車両を対象として分析とシミュレーションを行っており、そもそも車両は構造やエアコンの性能から10分弱で空気が入れ替わるようになっているのだが、人が乗っている状態でどの程度換気が行えるのかについてはシミュレーションが必要である。シミュレーションの結果、乗客が多い場合は車両下部の空気がなかなか入れ替わらないことが確認された。さらに、窓を開けると上部の換気が促進されるが、やはり乗客が多いと換気が阻害されることが明らかになった。換気量で見ると、窓を開ければ混雑していてもオフィス並みの換気量が確保できることが確認できたが、人が多いと空気の循環具合にむらができるため場所によってリスクが変わることには注意が必要とのことである。

さらに病室・オフィス・教室・多目的ホールといった室内の換気に関するシミュレーションも紹介された。各シチュエーションによって、広さだけではなく空調や遮蔽物の構成が異なっていることが大きく影響しており、例えば病室では狭い部屋に仕切りカーテンがあることで換気が阻害されるため、エアコンや扇風機で空気を動かすことが換気効率に大きく影響することが明確となった。一方オフィスでは、病室と比べて部屋が広かったり空調の能力が高いため換気能力が高い傾向にあるが、人が多いため呼気からの感染、特に湿度が高い場合は大きな飛沫の付着による接触感染、湿度が低い場合は飛沫が元となるエアロゾル感染に注意が必要とのことである。ま

た、パーティションの高さも重要であり、1.4m 程度の高さがあると効果が高く、一方で高いパーティションは煙突効果が働くのか空気がはやく綺麗になることもある一方でむらができやすい点には注意が必要とのことである。教室については、オフィスよりも人が多い割にエアコンなどによる換気能力が低いいため窓を開けた換気が重要であり、対角上に窓を 10cm 開けるだけでもオフィス並みに換気能力が得られるため、この換気方法を推奨するとのことである。最後に実在する多目的ホールについてシミュレーションした結果、換気について考慮された設計となっており空調の能力も高く換気能力は高いが、客席での飛沫・エアロゾル拡散は防げないため、空調をしっかりと付けた上で、マスクを付けて間隔を開けて座るのが良いだろうとのことである。

最後に坪倉教授は、今後はタクシー・長距離バス・飛行機などについてもシミュレーションを行っていきたい、また多目的ホールでの結果などを発信していくことでイベント再開のガイドライン作成や感染予防への啓発に協力したいと述べた。さらに、「富岳」を用いることで精度の高い大きなシミュレーションが行えるが、どうしても時間がかかってしまい、その一方で社会が求めているものは多岐にわたり、感染症が流行っているときと収束しているときで欲しい情報は異なるためタイミングに合わせた最適な情報を出すのは難しく、規模の小さいシミュレーションをたくさん実行することが多くなるという現状について紹介して講演を終えた。

国家プロジェクトと PRIMEHPC シリーズ

スーパーコンピュータ「京」

TOP 500 No.1(2011) HPCG No.1(-2017) GRAPH 500 No.1(-2019)

AWARDS Finalist(2016)

PRIMEHPC FX10 PRIMEHPC FX100 PRIMEHPC FX1000/FX700

スーパーコンピュータ「富岳」

- スーパーコンピュータ「京」は 7 年間の稼働ののち、2019 年 8 月に運用を停止
- スーパーコンピュータ「富岳」は 2020 年 5 月に出荷を完了
 - ISC2020においてTOP500, HPCG, HPL-AI, Graph500の世界1位を同時獲得(史上初)
 - 2021 年度からの共用開始に向けてソフトウェアの整備中
- 富岳テクノロジーPRIMEHPC FX1000, FX700の出荷を開始

講演者 3: 清水 俊幸 の画面

Copyright 2020 FUJITSU LIMITED

三件目の講演は富士通株式会社 清水俊幸氏による「FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000/FX700」と題した講演である。

本講演では、「富岳」を構成する様々なハードウェア機能について、それらがどのようなものであるかを紹介するとともに、その開発の背景や、どのような考えで・思いでそれらを作ったのかについても紹介が行われた。はじめに、「京」を開発したときと「富岳」の開発との大きな違いとして、「京」のときは「京」を作ることが目標であったためそこから商用版である FX10 をリリースするまで時間がかかったが、今回の「富岳」でははじめから商用版も考えていたため既に FX700/FX1000 をリリースできていることが紹介された。また「富岳」の開発にあたっては、「京」の前に開発した FX1 システムから新システム開発の度に、VISIMPACT、HW リダクション、Tofu ネットワーク、アシスタントコアと様々な要素技術を開発・導入してきたこと、またその途中で Feasibility Study による調査研究でも多くの議論ができており、「富岳」はそれらの結実であると紹介された。

「富岳」がベンチマークで 4 冠を獲得したことについては、松岡センター長の講演でも述べられていたことであるが、4 冠を獲得したことだけではなく、2 位以下に大差を付けての 1 位であることに大きなインパクトがある

と述べた。また、HPCG については性能は世界一だが実行効率では世界一ではない点に触れたうえで、大規模システムで高い効率が得られている点は意義のあることだと強調した。(TOP500 は問題規模が大きい方が良い性能値が出やすいため大規模システムに有利だが、HPCG の実行効率はそうではない。「富岳」は TOP500 の性能値と HPCG の実行効率を両立している点にインパクトがある。)

また Green500 の電力あたり性能については世界一には届かなかったものの、Green500 の上位を占めるアクセラレータ搭載システム群と比べて何倍もの差を付けられているわけではなく、またアクセラレータ非搭載システムの中では突出して高い電力効率を発揮できていることが紹介された。

さらにベンチマークのみならず、「富岳」の本来の目標であったアプリケーション性能 100 倍も達成の見込みが立っていることが紹介された。

「富岳」はアプリケーション性能・省電力・使いやすさという 3 つの目標を掲げてきたわけであるが、アプリケーション性能については目標アプリケーションやベンチマークランキングにて達成、省電力も Green500 にて達成、そして使いやすさについても広く普及している商用 Linux をサポートすることで達成しており、自己採点では満足できる状況にあると清水氏は語った。

その上で、「富岳」は世界一という「頂」は見えたとその「すそ野」は十分に広がっているのか、という疑問を提示した。例えばスパコンのインターコネクトを例に挙げると、TOP500 上位の超大規模システムはカスタマイズされた専用ネットワークや Proprietary なネットワークの採用が多い一方で、中位のシステムは InfiniBand や Omni-Path、下位のシステムは Ethernet とより業界標準のネットワークが占めている。このような点からも、より業界標準的なシステムを提供することも重要であると考え、FX1000 と比べてより業界標準的な構成である FX700 をラインナップしたことを紹介した。FX700 は FX1000 と比べてネットワークやアプリケーションスタックに x86 サーバと共通して使える部分が多く、また商用・OSS を問わず FX700/FX1000 の対応アプリケーション拡大を進めているため、これまでの富士通のフラッグシップ系システムになじみのなかった層にも触れやすくなることが期待される。

最後に清水氏は、富士通が 40 年にわたって大規模システム向けのハードウェアとソフトウェアの開発をしてきたことが「富岳」で実を結んだが、それに加えてすそ野の掘り返しも頑張っていきたい、そしてスパコンの生み出す成果を通じて豊かで夢のある未来を世界中に提供していきたいと述べて講演を終えた。

設置状況

- ▶ 2020年7月1日、スーパーコンピュータ「不老」が稼働開始しました。現在も順調に稼働中です。
- ▶ 名古屋大学 情報基盤センター 本館地下1階の様子



6

SS研HPCフォーラム2020 富岳スペシャル 20 億回 名古屋大学 NAGOYA UNIVERSITY

四件目の講演は名古屋大学 情報基盤センターの片桐孝洋教授による「数値計算と AI を融合するスーパーコンピュータ「不老」と題した講演である。

名古屋大学情報基盤センターでは 2020 年 7 月 1 日からスーパーコンピュータ「不老」の運用を開始しており、「不老」を構成する主要なサブシステムの 1 つである Type I サブシステムが「不老」の商用版である FX1000 によって構成されている。「不老」の Type I サブシステムは「不老」を構成する最も FLOPS 値の大きなサブシステムであり、2,304 ノードで 7.782PFLOPS、「富岳」の 158,976 ノード 488PFLOPS と比べると約 70 分の 1 と小さな規模ではあるが、国内でも有数の大規模なスーパーコンピュータシステムである。片桐教授は「不老」に FX1000 が採用されたことについて、単純に性能が高いというだけではなく、従来機（名古屋大では「京」の商用版後継機である FX10 や、その後継機である FX100 を運用してきた）からの継続性や、「富岳」に向けた練習環境、「富岳」向けプログラムの一般向け普及環境と多くの役割が期待されており、さらに「不老」は「富岳」と異なり利用審査がなく（平和利用に限るなど最低限のルールはある）誰でも利用できるため、利用者層は「富岳」よりも広くなり、多様な使い方がされると説明した。その一方で、多様なニーズに応えるため、「不老」は FX1000 とは異なる特徴を持つ計算サブシステムも併設した複合的なスーパーコンピュータシステムとなっている。とくに Type II サブシステムは Intel 社の Xeon CPU (Cascade-Lake アーキテクチャ)と NVIDIA 社の Tesla GPU (Volta アーキテクチャ)を搭載し、Type I サブシステムに匹敵する理論演算性能 (7.489PFLOPS) を備えていることから、利用者にとっては「富岳」型スパコンと GPU スパコンを同一システム内で同時に使ったり使い分けたりすることができる面白い環境とも言える。

「不老」の構成や利用制度の特徴に引き続き、HPL などの主要なベンチマークによる「不老」の性能評価結果が紹介された。測定対象は主に「不老」を構成する Type I, II サブシステム、およびクラウドシステム (4 ソケット Xeon によるサブシステム) である。FX1000 から構成される Type I サブシステム、1 ノードに Cascade Lake を 2 基と V100 を 4 基搭載する Type II サブシステム、1 ノードに Cascade Lake を 4 基搭載するクラウドシステムと、特徴の異なる計算サブシステムが一堂に会しており、性能やその傾向にどのような違いがあるのかが興味深い内容である。本レポートではその中から STREAM, HPL, HPCG の結果を簡単に紹介する。

メモリアクセス性能を測定する STRAEM の Triad については、高速な HBM2 メモリ (理論性能 1024 GB/s) を搭載する Type I サブシステムが 826 GB/s、同様に HBM2 メモリ (理論性能 900 GB/s) を備える Type II サブシステムの V100 GPU(1 基, OpenACC 実装)が 777 GB/s と高い性能を発揮した。DDR4 メモリを搭載する Type II サブシステムの CPU(2 基)は 202 GB/s、クラウドシステムの CPU(4 基)は 338 GB/s であり、これらも決して低い性能ではないが、メモリの種別が大きな性能差となった。

「富岳」が世界一を獲得した HPL については、「不老」も Type I サブシステムの結果が TOP500 ランキングに登録されており、6.6178 PFLOPS で世界 36 位である。国内のランキングとしては、「富岳」、産総研の ABCI、JCAHPC(筑波大・東大)の Oakforest-PACS、東工大の TSUBAME3 につづいて 5 位であるとの紹介があった。Type II サブシステムは導入タイミングの都合で TOP500 には未登録であるが、全系で 4.880 PFLOPS、世界 51 位相当の性能とのことである。クラウドシステムについては全系では測定しておらず、1 ノード 4CPU の性能で 3.25PFLOPS とのことである。(クラウドシステムはノードあたり性能では Type I サブシステムよりも高いが、全体で 100 ノード、理論演算性能でも 0.5PFLOPS 程度であり、TOP500 ランキングに登録される規模ではない。)

HPL と同じく「富岳」が世界一を獲得した HPCG については、やはり Type I サブシステムがランキングに登録されており 230.594 TFLOPS で世界 16 位、実行効率は 2.96%と「富岳」の 2.6%よりも高い。Type II サブシステムは未掲載であるが 100 ノードで 48.2544 TFLOPS を確認しており、全系では 100 TFLOPS 程度を期待しているとのことである。

その他、本講演では「不老」にて実施された・実施予定の主要なアプリケーションの紹介が行われた。「富岳」型の Type I サブシステムでは雲解像モデル CReSS を用いた台風解析や、フラグメント分子軌道計算 ABINIT-

MP を用いた COVID-19 解析などが既に進められているとのことである。

最後に、7 月から既に行われている正式運用にて生じた問題や今後の課題について紹介された。大規模システムでは運用初期に様々な問題が生じやすく、場合によっては全系システム障害なども発生することがあるものの、幸いにも「不老」はそのような大きな問題は発生しておらず、安定した運用が行えているとのことである。一方でサブシステムのバリエーションが多いためソフトウェア面での整備が追いついていなかったり、クラウドシステムが想像以上に混雑してしまっていてキュー構成の見直しが必要など、まだまだ改善すべき点はあるとのことである。これからも「富岳」型とそれ以外のサブシステムを連携させて様々なユーザーの要望に応えていけるシステムとして運用していきたいとして講演を締めた。

最後に、企画委員である九州大学の南里豪志准教授より閉会の挨拶として各発表のサマリが紹介され、「富岳」に関する半日の講演で聴講者の皆様がはやく「富岳」を使いたい気持ちになったのではないかと締めて閉会となった。

以上