

# 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27日 SS研

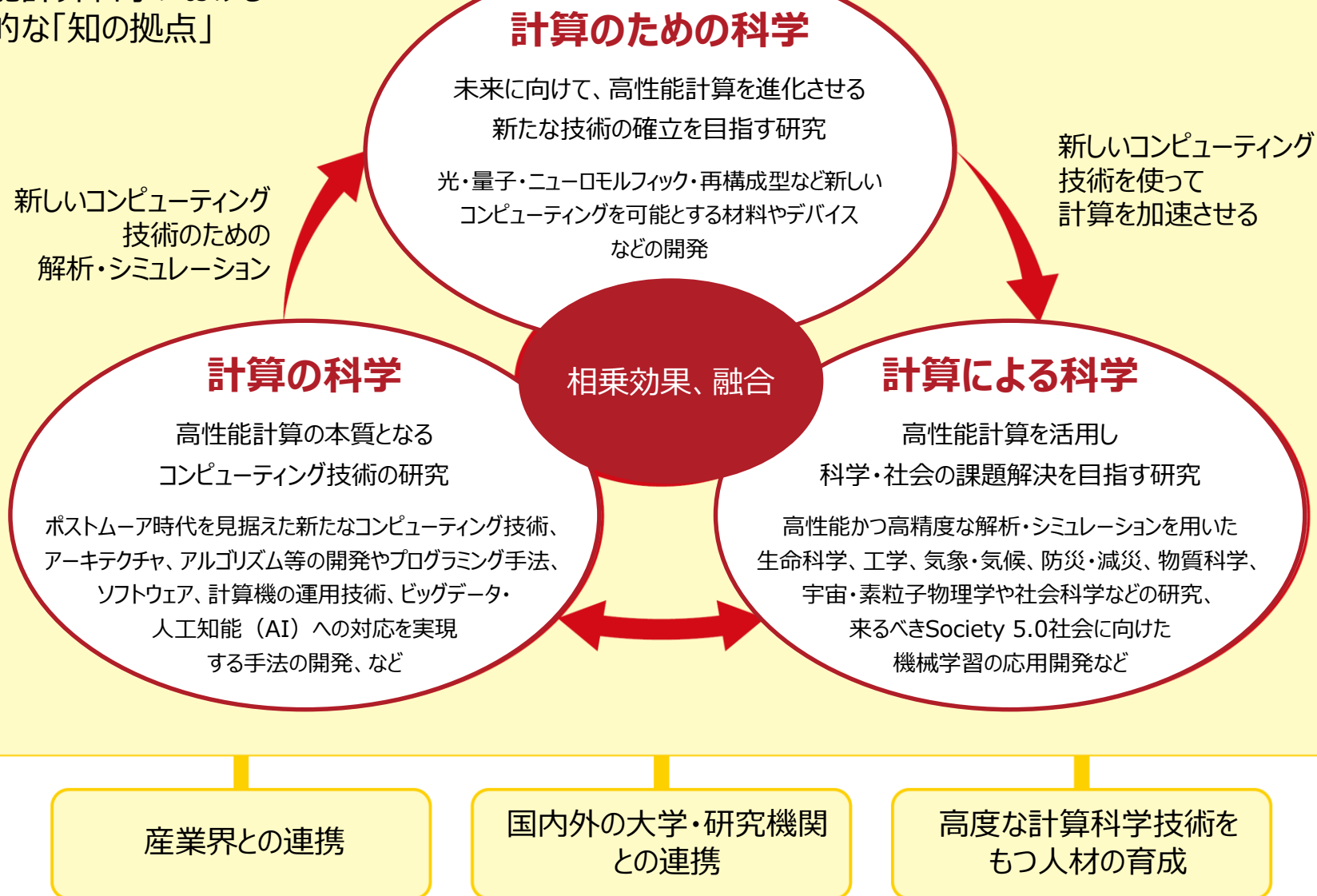


# 理研 計算科学研究センターの概要

# 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)

高性能計算科学における  
国際的な「知の拠点」





計算の科学



システムソフトウェア  
研究チーム  
石川 裕



プログラミング環境  
研究チーム  
佐藤 三久



プロセッサ研究チーム  
佐野 健太郎



大規模並列  
数値計算技術  
研究チーム  
今村 俊幸



高性能ビッグデータ  
研究チーム  
佐藤 賢斗



次世代高性能  
アーキテクチャ  
研究チーム  
近藤 正章



高性能人工知能  
システム  
研究チーム  
松岡 聡

計算による科学



離散事象シミュ  
レーション  
研究チーム  
伊藤 伸泰



量子系分子科学  
研究チーム  
中嶋 隆人



量子系物質科学  
研究チーム  
柚木 清司



粒子系生物物理  
研究チーム  
杉田 有治



粒子系シミュレータ  
研究チーム  
牧野 淳一郎



複合系気候科学  
研究チーム  
富田 浩文



複雑現象統一的解法  
研究チーム  
坪倉 誠



連続系場の理論  
研究チーム  
青木 保道



総合防災・減災  
研究チーム  
大石 哲



データ同化  
研究チーム  
三好 建正



計算構造生物学  
研究チーム  
Florence TAMA

運用技術部門



施設運転技術  
ユニット  
塚本 俊之



システム運転技術  
ユニット  
宇野 篤也



チューニング技術  
ユニット  
南 一生



利用環境技術  
ユニット  
庄司 文由

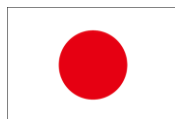


先端運用技術  
ユニット  
山本 啓二



# 「富岳」：アプリケーションファーストの開発歴史

富  
岳



# スーパーコンピュータ「富岳」



- スーパーコンピュータ「富岳」は、「アプリケーション・ファースト」のマシンとして2010年7月から検討をスタート。
- 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。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・調整を始め、新型コロナウイルスの渦中、2020年5月13日に筐体の搬入を終了（大型10トントラック 72台分）。
- 2020年6月に開催されたISC2020（International Supercomputing Conference）にて、史上初の4冠世界一を獲得。
- 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、新型コロナウイルス対策等に計算資源を提供中。
- Society5.0に対応したAIやビッグデータ処理、クラウド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」

## 「アプリケーション・ファースト」のマシン開発チャレンジ

- 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、**国家プロジェクト**として開発



- 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

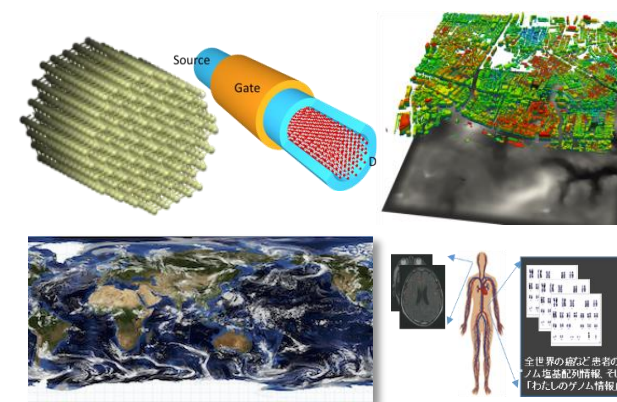
“Moonshot”的  
目標の達成

- 「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<br>(国内の年間出荷台数の約2/3) | = | 30万台<br>(国内の年間出荷台数の約2/3)         | =      | <b>1台</b><br>(15.9万ノード) |  | 最大120台                     |
| 消費電力 | 10W×2,000万台=<br>200MW       | = | 600-700W×30万台=<br>200MW<br>(冷却含) | ><br>> | <b>30MW</b><br>(超省電力)   |  | 15MW<br>(富岳の<br>1/10以下の効率) |

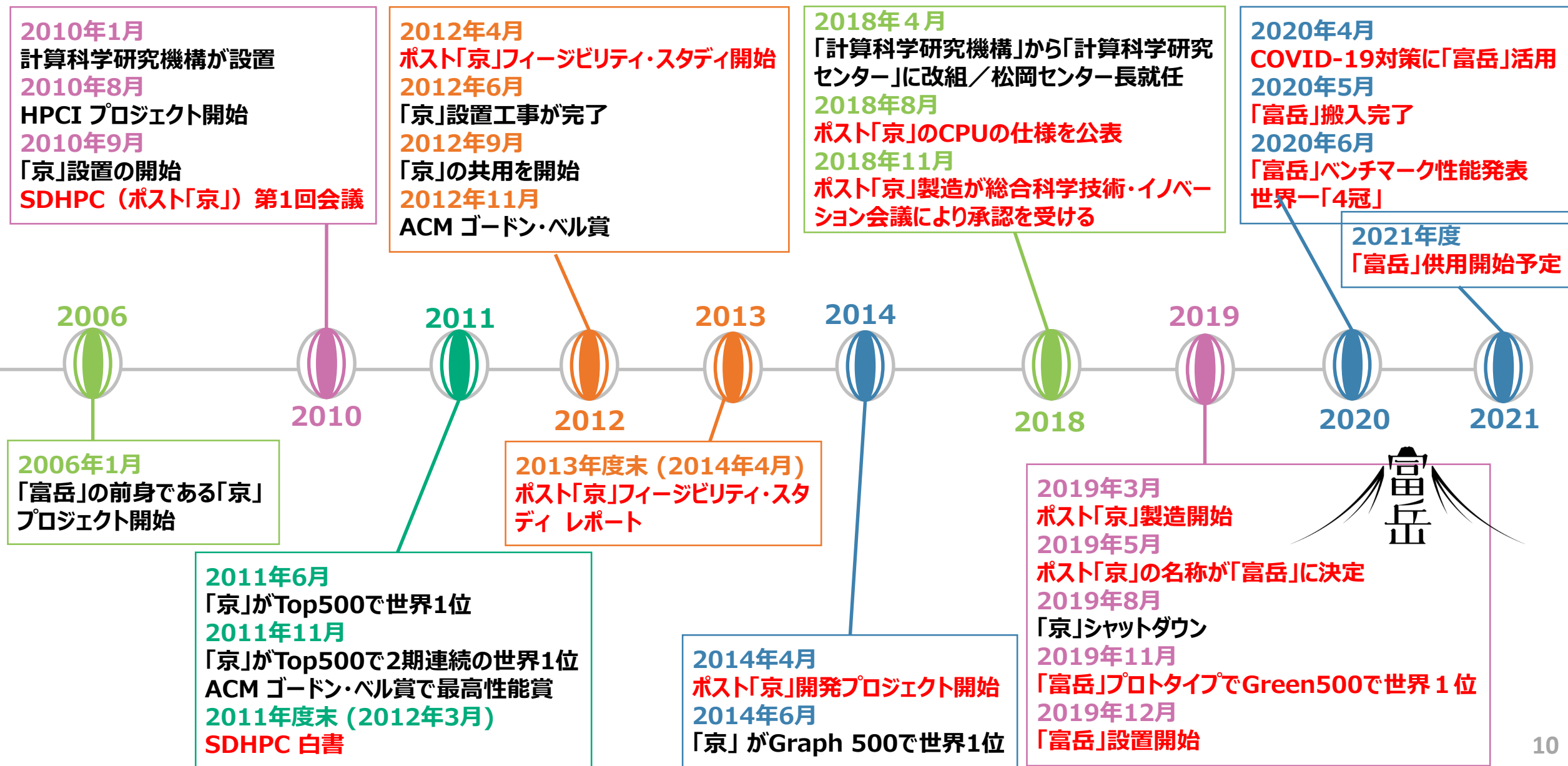
- コデザインで進められた「富岳」の開発  
「計算の科学」

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。



「計算による科学」

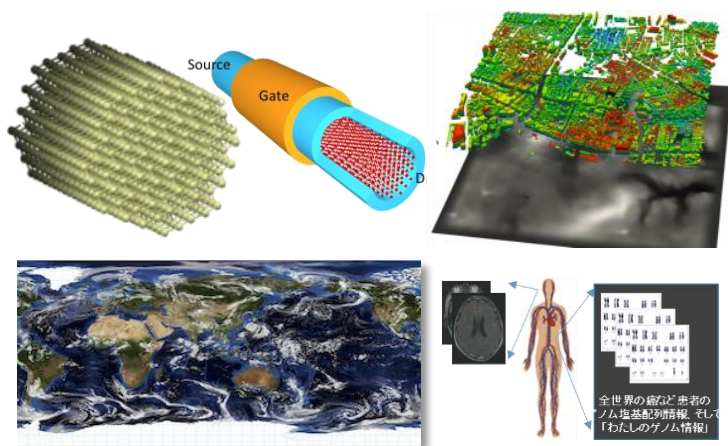
「富岳」を用いて重点的に取り組むべき、社会的・科学的課題（9重点課題）に向けたアプリケーション開発を実施。





## 「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。



|                |                            |
|----------------|----------------------------|
| GENESIS        | タンパク質の動きを計算                |
| Genomon        | ゲノム解析                      |
| GAMERA         | 地殻・都市の地震を計算                |
| NICAM+LETKF    | 観測データを融合した地球大気の大規模シミュレーション |
| NTChem         | 分子の構造を解明                   |
| ADVENTURE      | 大規模システムのシミュレーション           |
| RSDFT          | 物質の特性を解明                   |
| FrontFlow/blue | 乱れのある流れや音響を計算              |
| LQCD           | 素粒子の振る舞いを計算                |

<9つのターゲットアプリケーション>

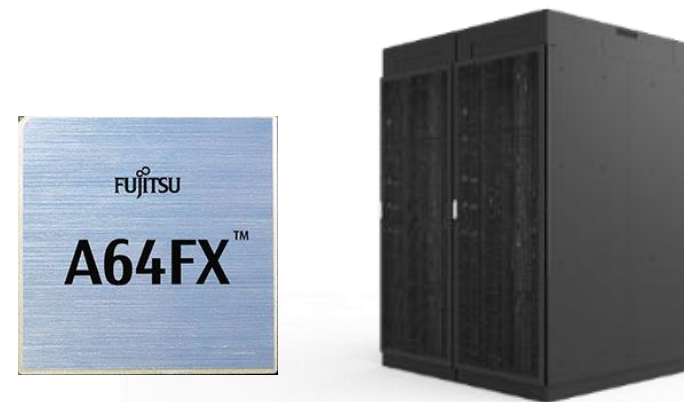


「京」と比較して100倍以上の性能向上を目指した「ターゲットアプリケーション」を選定し、性能を最適化。

計算科学で使用するアプリケーションの特性を踏まえた上で、スパコン性能を最適化するシステム設計を実施。

## 「計算による科学」

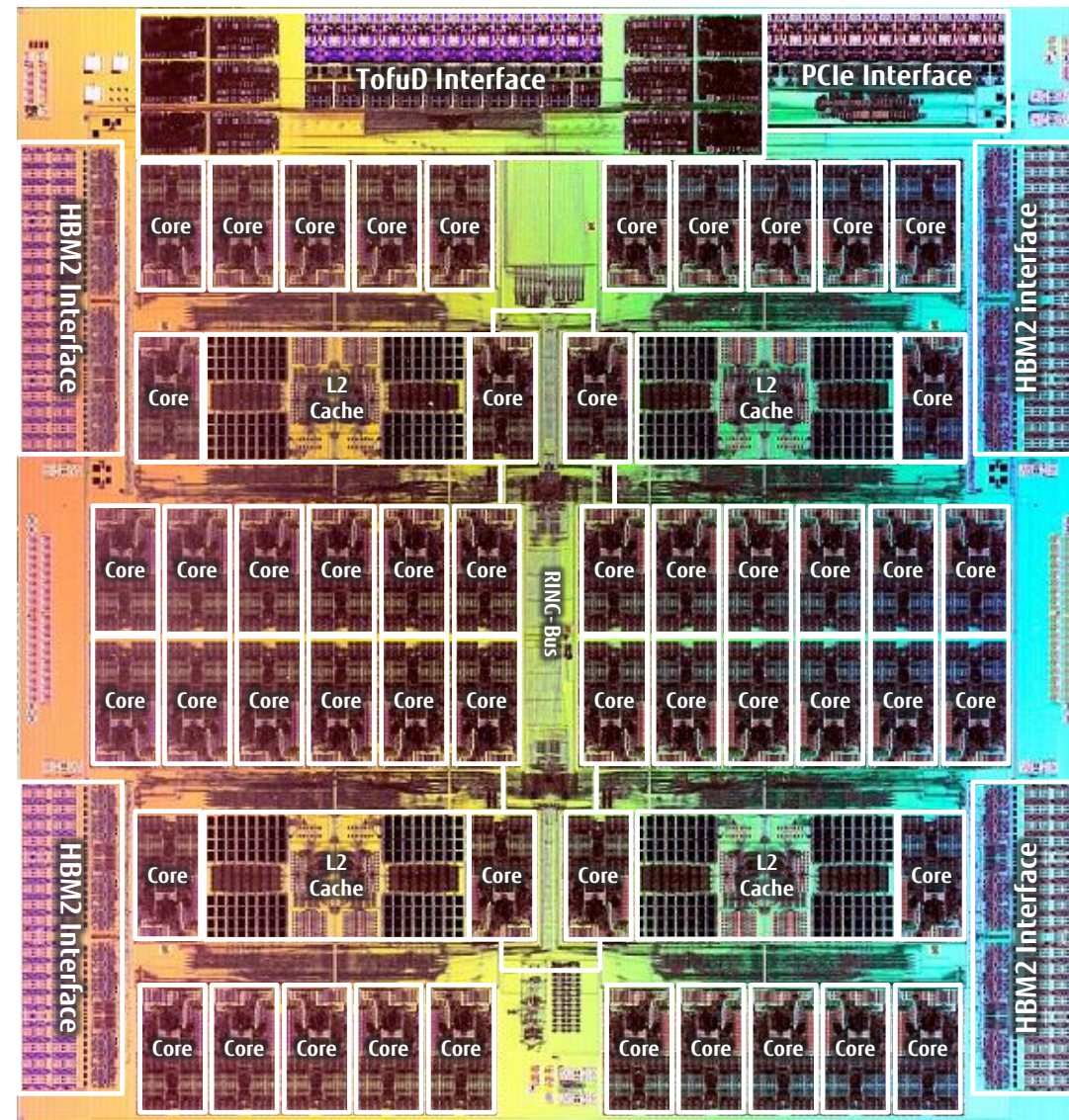
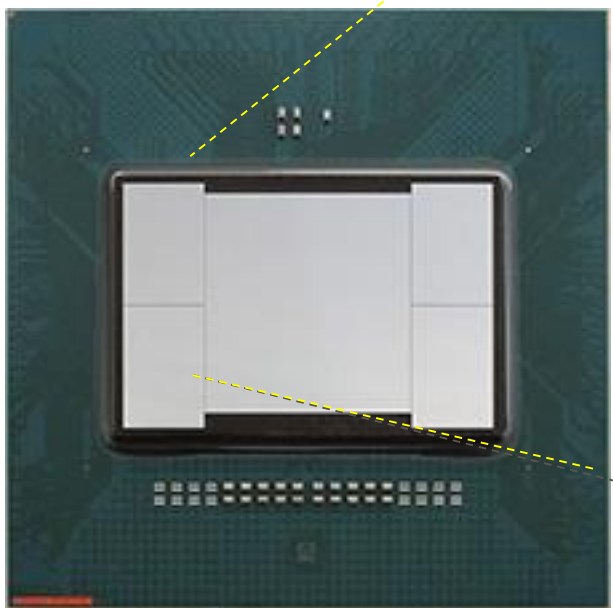
Armエコシステム・オープンソース等による高性能・省電力・汎用化を推進。



|                    |                          | Fugaku   | K              |
|--------------------|--------------------------|--|----------------|
| CPU Architecture   |                          | A64FX<br>(Armv8.2-A SVE<br>+Fujitsu Extension) | SPARC64 VIIIfx |
| Node               | Cores                    | 48   | 8              |
|                    | Peak DP performance      | 3.0720 TF<br>(3.3792 TF)                       | 0.128 TF       |
|                    | Main Memory              | 32 GiB   | 16 GiB         |
|                    | Peak Memory Bandwidth    | 1024 GB/s                                      | 64 GB/s        |
|                    | Peak Network Performance | 40.8 GB/s                                      | 20 GB/s        |
| Rack               | Nodes                    | 384  | 102            |
|                    | Peak DP performance      | 1.2/1.3 PF                                     | < 0.013PF      |
| Process Technology |                          | 7 nm FinFET                                    | 45 nm          |

# A64FX Leading-edge Si-technology

- TSMC 7nm FinFET & CoWoS
- Broadcom SerDes, HBM I/O, and SRAMs
- 8.8 billion transistors
- 594 signal pins





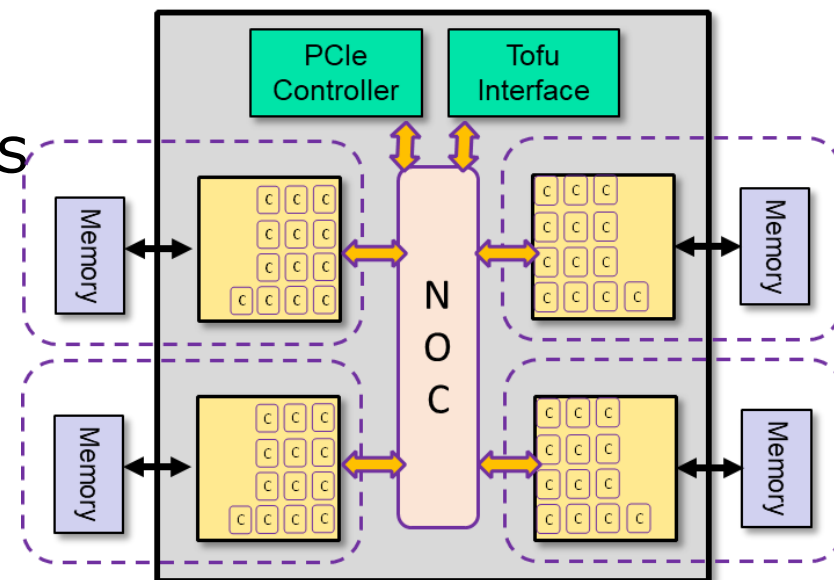
# Fugaku's FUjitsu A64fx Processor is...

- **an Many-Core ARM CPU...**

- 48 compute cores + 2 or 4 assistant (OS) cores
- Brand new core design
- Near Xeon-Class Integer performance core
- ARM V8 --- 64bit ARM ecosystem
- Tofu-D + PCIe 3 external connection

- **...but also an accelerated GPU-like processor**

- SVE 512 bit x 2 vector extensions (ARM & Fujitsu)
  - Integer (1, 2, 4, 8 bytes) + Float (16, 32, 64 bytes)
- Cache + memory localization (sector cache)
- HBM2 on package memory – Massive Mem BW (Bytes/DPF ~0.4)
  - Streaming memory access, strided access, scatter/gather etc.
- Intra-chip barrier synch. and other memory enhancing features



- **GPU-like performance in real-world HPC especially CFD-- Weather & Climate (even w/traditional Fortran code) + AI/Big Data**

## スパコンの省エネ性能を示す「Green500」で 世界1位を獲得（2019年11月、プロトタイプ）

- TOP500内のHPCで電力効率の良い高性能計算の実現を評価するランキング（他の性質の違うアプリでも同様の結果を確認）
- Green500は、これまでGPU搭載や特殊マシンが上位を独占していたが、**富岳は汎用CPU搭載で世界1位獲得**
- 汎用CPUとして、同条件の**Intel機と比べて3倍強**の省電力性能
- チップあたりの絶対性能でも2～4倍の性能⇒AIでは更なる性能差

米HPE/Cray社は、「富岳」に実装されているArmA64FXプロセッサを自社スパコンに採用（米国製プロセッサ以外では史上初）

2020年度以降、世界市場で販売



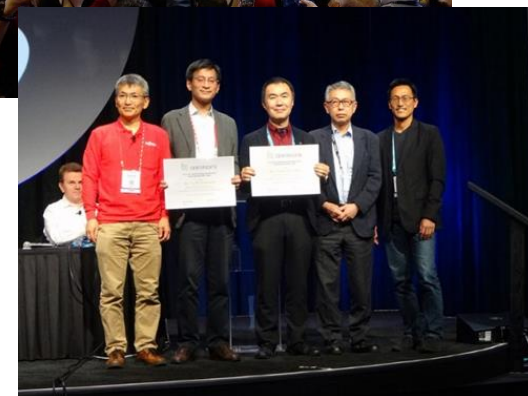
＜納入予定先＞

- ・ 米国ロスアラモス国立研究所
- ・ 米国オークリッジ国立研究所
- ・ 米国ストーニーブルック大学
- ・ 英国ブリストル大学 等



## 日本の半導体産業の復興へ

覇権維持のため開発を継続することが重要



国家プロジェクトならではの成果  
民間だけでは達成できなかった

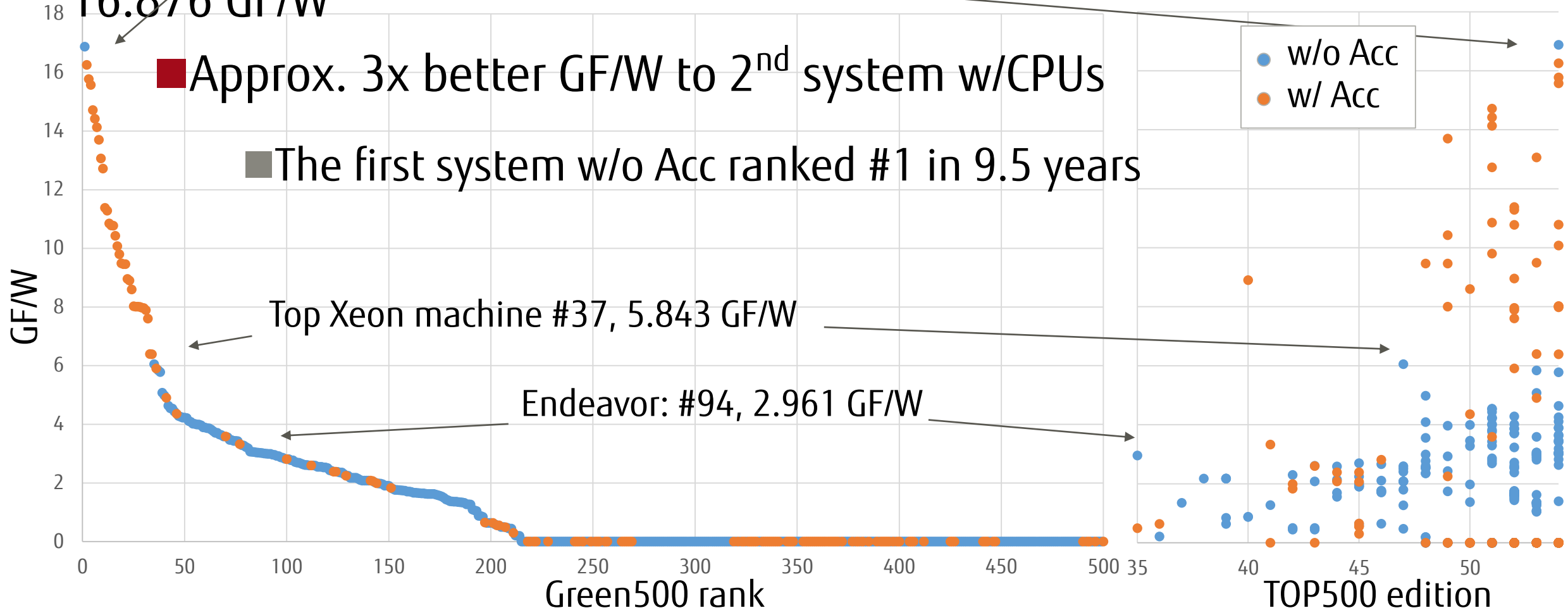


# SC19 Green500 ranking and 1<sup>st</sup> appeared TOP500 edition

■ "A64FX prototype", prototype of Supercomputer **Fugaku**, ranked #1, 16.876 GF/W

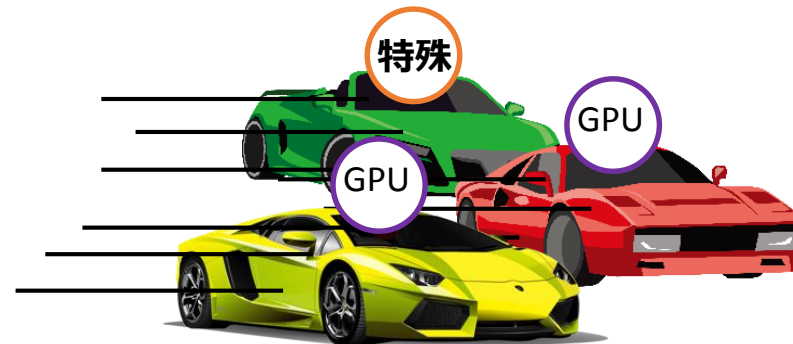
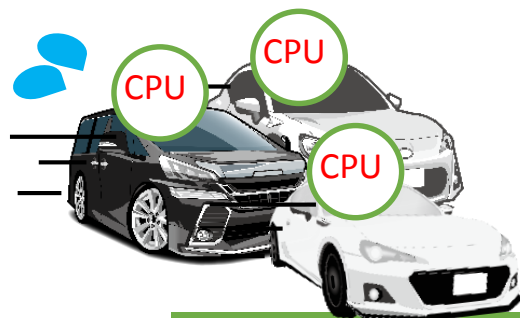
■ Approx. 3x better GF/W to 2<sup>nd</sup> system w/CPU

■ The first system w/o Acc ranked #1 in 9.5 years



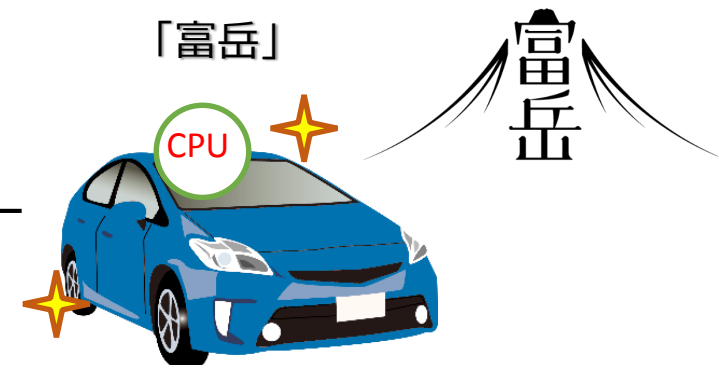
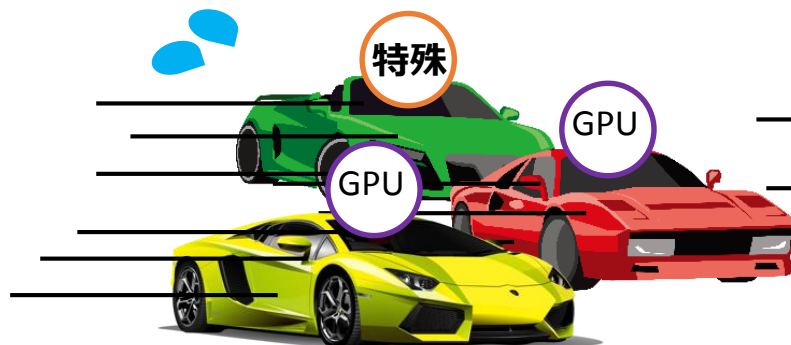
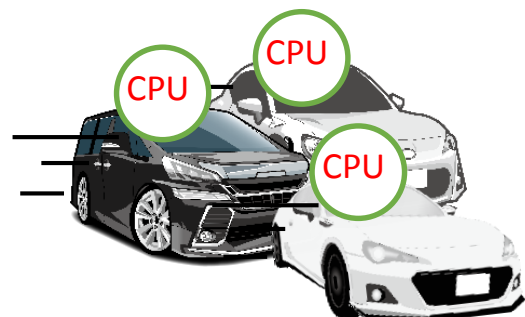
# Green500試作機1位獲得。何がすごいのか？

## ●これまでのGreen500



GPU搭載スパコンや特殊スパコンが上位を独占

## ●今回のGreen500

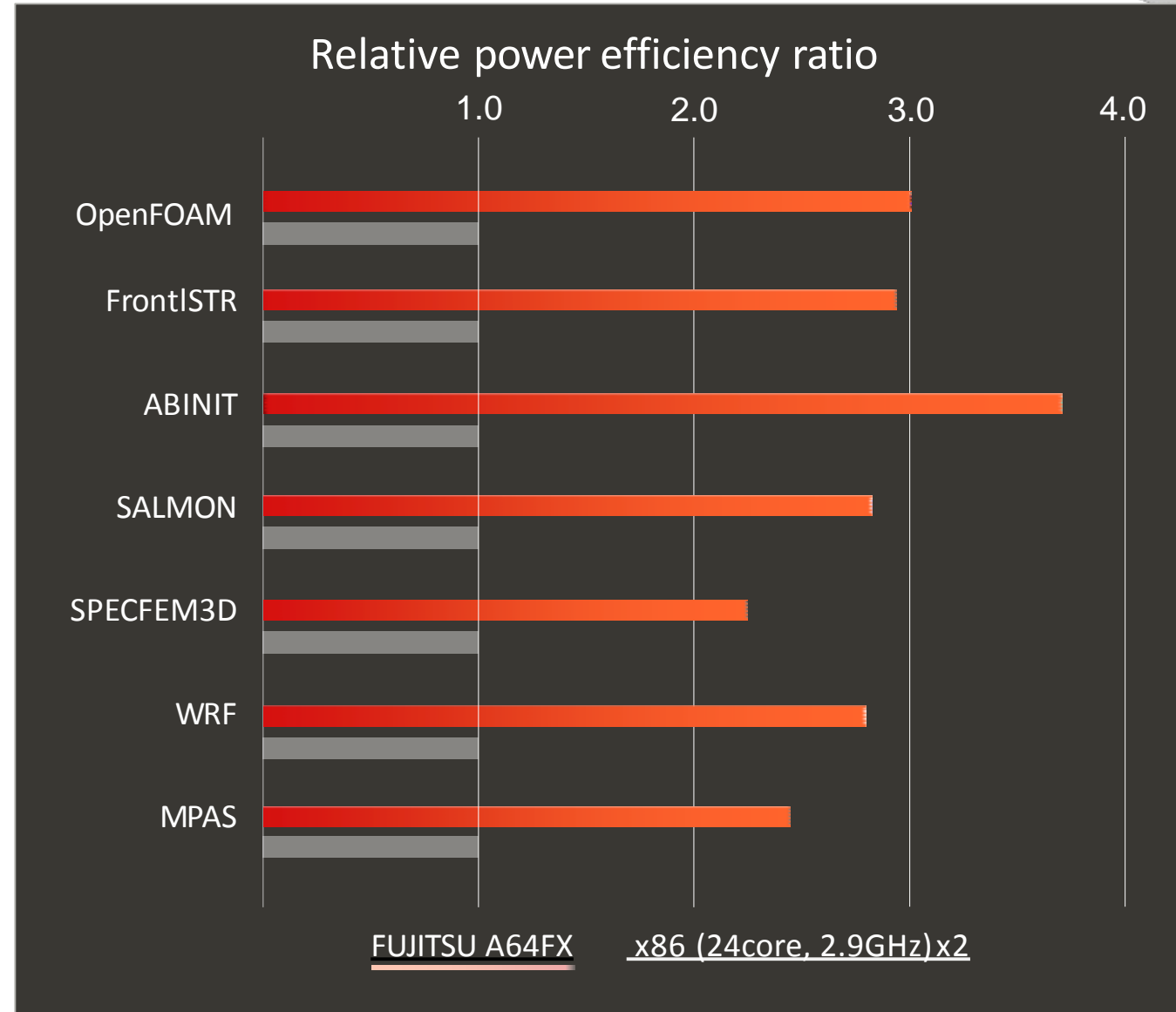


初めて汎用**CPU**搭載スパコンが世界1位に！  
「国プロ」としての「オールジャパン」研究開発の成果



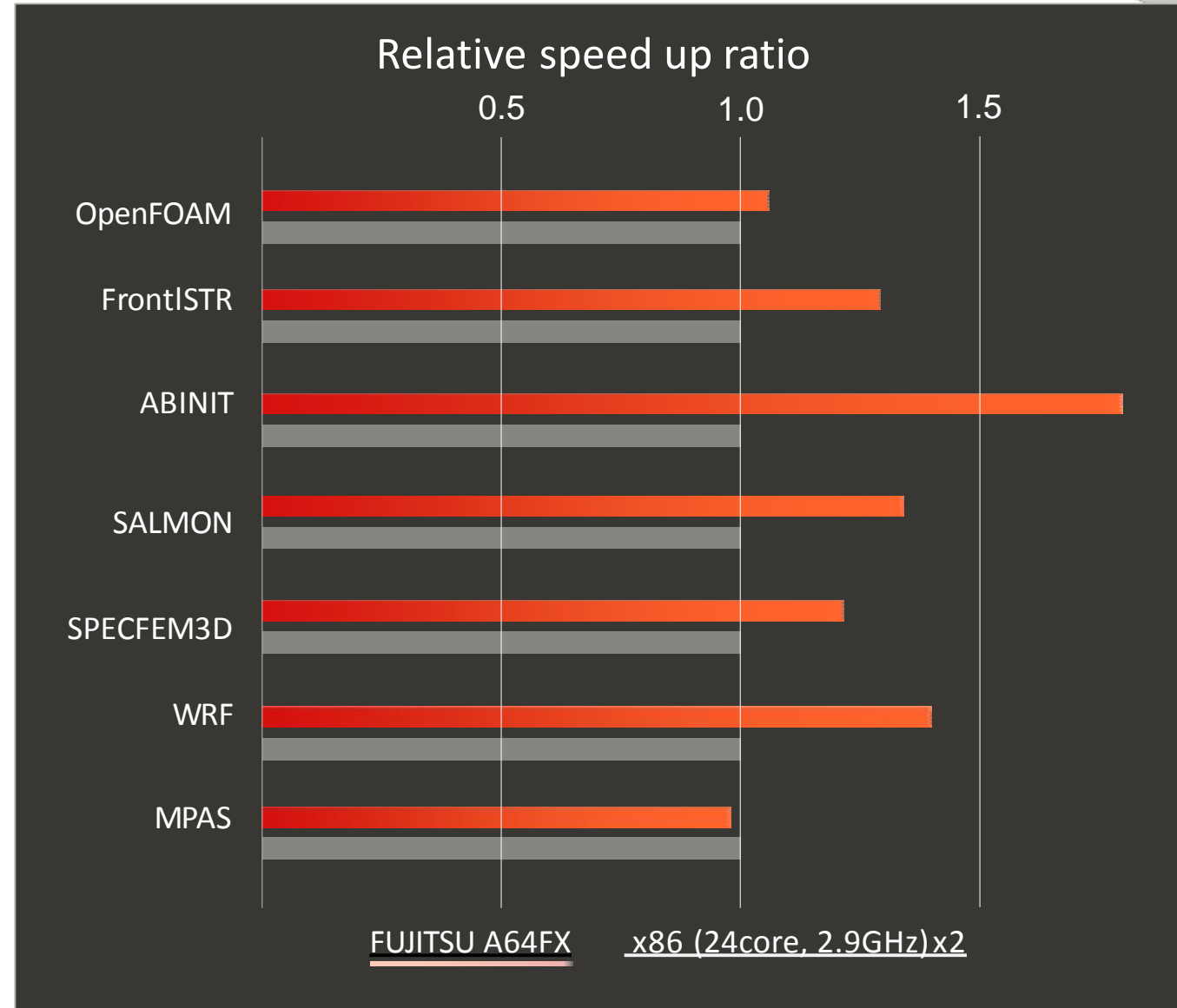
# A64FX CPU power efficiency for real apps

- Performance /Energy consumption on an A64FX @ 2.2GHz
- Up to 3.7x more efficient over the latest x86 processor (24core, 2.9GHz) x2
- High efficiency is achieved by energy-conscious design and implementation



# A64FX CPU performance evaluation for real apps

- Open source software, Real apps on an A64FX @ 2.2GHz
- Up to 1.8x faster over the latest x86 processor (24core, 2.9GHz) x 2, or 3.6x per socket
- High memory B/W and long SIMD length of A64FX work effectively with these applications

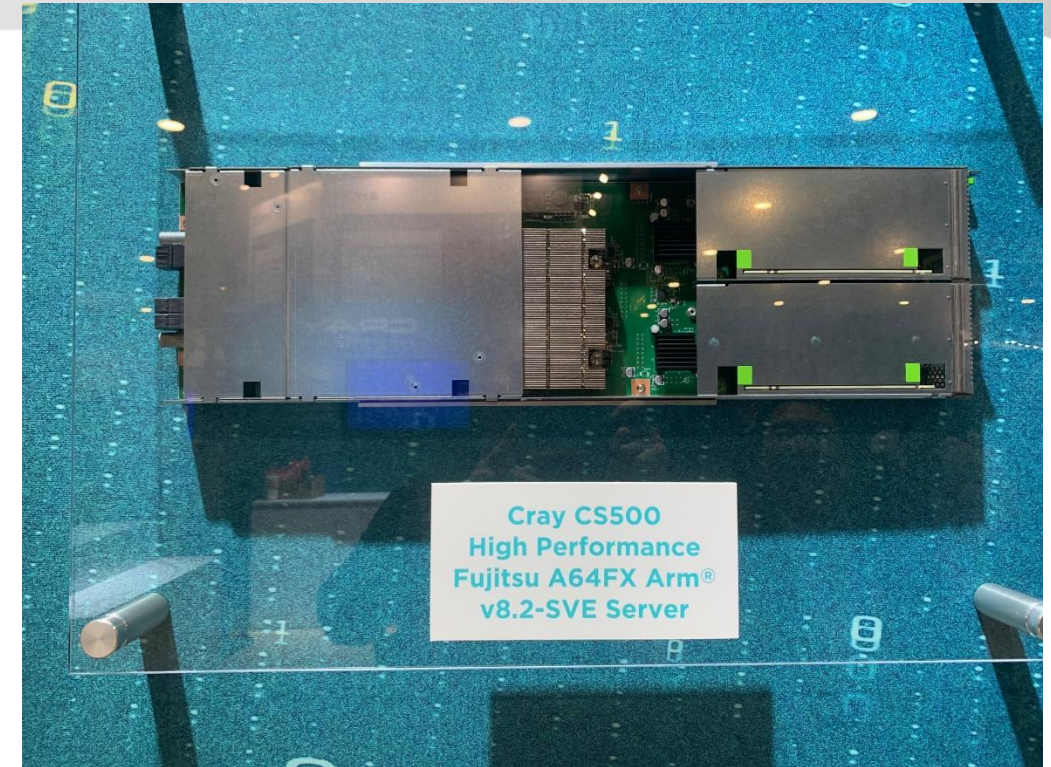




# The HPE/Cray CS500 - Fujitsu A64FX Arm-based Server



- Cray Fujitsu Technology Agreement
- Supported in Cray CS500 infrastructure
- Full Cray Programming Environment (note: HPE product, support only by HPE)
- Leadership performance for many memory intensive HPC applications, e.g., weather
- GA in mid'2020
- A number of adoptions  
US: Stony Brook, DoE Labs, etc.  
Multiple yet-to-be-named EU centers



# 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)

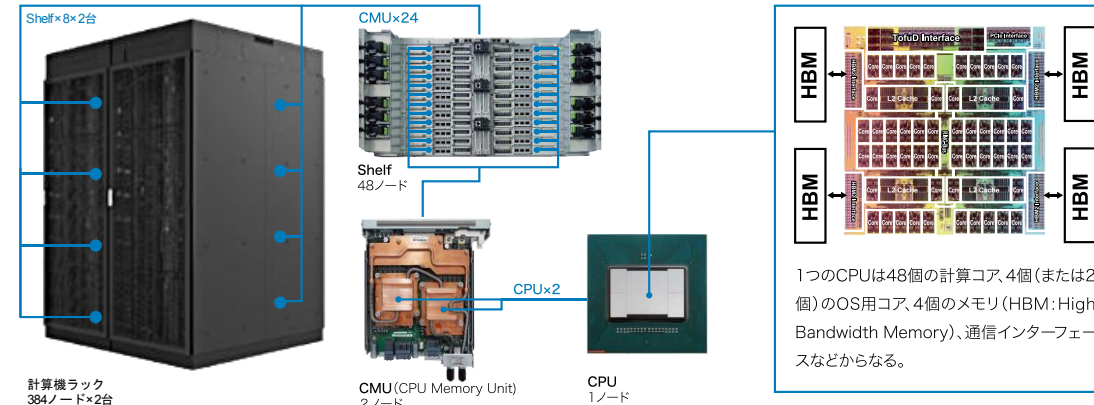
- 倍精度理論最高値 (64bit) 537 ペタフロップス

- 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



提供: 富士通株式会社

(参考) 単位

- ペタ(Peta)=10の15乗 エкса(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)

- 理論総合メモリバンド幅 29倍 ※「京」は5.64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。



# Fugaku Performance Estimate on 9 Co-Design Target Apps

## Performance target goal

- ✓ 100 times faster than K for some applications (tuning included)
- ✓ 30 to 40 MW power consumption

## Peak performance to be achieved

|                            | PostK                  | K           |
|----------------------------|------------------------|-------------|
| Peak DP (double precision) | >400+ Pflops (34x +)   | 11.3 Pflops |
| Peak SP (single precision) | >800+ Pflops (70x +)   | 11.3 Pflops |
| Peak HP (half precision)   | >1600+ Pflops (141x +) | --          |
| Total memory bandwidth     | >150+ PB/sec (29x +)   | 5,184TB/sec |


## Geometric Mean of Performance Speedup of the 9 Target Applications over the K-Computer

**> 37x+**

As of 2019/05/14

| Category                               | Priority Issue Area  | Performance Speedup over K | Application  | Brief description   |
|--|--|----------------------------|--------------|---|
| Health and longevity                   | 1. Innovative computing infrastructure for drug discovery              | <b>125x +</b>              | GENESIS      | MD for proteins   |
|  | 2. Personalized and preventive medicine using big data                 | <b>8x +</b>                | Genomon      | Genome processing (Genome alignment)  |
| Disaster prevention and Environment    | 3. Integrated simulation systems induced by earthquake and tsunami     | <b>45x +</b>               | GAMERA       | Earthquake simulator (FEM in unstructured & structured grid)                                |
|  | 4. Meteorological and global environmental prediction using big data   | <b>120x +</b>              | NICAM+ LETKF | Weather prediction system using Big data (structured grid stencil & ensemble Kalman filter) |
| Energy issue                           | 5. New technologies for energy creation, conversion / storage, and use | <b>40x +</b>               | NTChem       | Molecular electronic simulation (structure calculation)                                     |
|  | 6. Accelerated development of innovative clean energy systems          | <b>35x +</b>               | Adventure    | Computational Mechanics System for Large Scale Analysis and Design (unstructured grid)      |
| Industrial competitiveness enhancement | 7. Creation of new functional devices and high-performance materials   | <b>30x +</b>               | RSDFT        | Ab-initio simulation (density functional theory)  |
|  | 8. Development of innovative design and production processes           | <b>25x +</b>               | FFB          | Large Eddy Simulation (unstructured grid)   |
| Basic science                          | 9. Elucidation of the fundamental laws and evolution of the universe   | <b>25x +</b>               | LQCD         | Lattice QCD simulation (structured grid Monte Carlo)  |

# 富岳をスマートフォンやサーバと比較すると…？

|                | スマートフォン                         |   | サーバ<br>(クラウド含)                              |        | 富岳  |  | 参考：京                        |
|----------------|---------------------------------|---|---|--------|--|--|-----------------------------|
| 台数             | <b>2,000万台</b><br>(国内の年間出荷台数)   | = | <b>30万台</b><br>(国内の年間出荷台数)                  | =      | <b>1台</b>  |  | <b>30~100台</b>              |
| 消費電力           | 10W×2,000万台=<br><b>200MW</b>    | = | 600-700W×30万台<br>=<br><b>200MW</b><br>(冷却含) | ><br>> | <b>30MW</b>  |  | <b>15MW</b>                 |
| CPU種別<br>基本ソフト | Arm<br>iOS/<br>Android<br>Linux |   | x86/Arm<br>Linux (Red<br>Hat等)/Win          |        | Arm<br>Linux (Red<br>Hat等)   |  | Sparc<br>Linux(独自)<br>汎用性低い |
| AI 対応          | アプリに応じた<br>独自回路<br>推論のみ         |   | GPUなどの汎用加<br>速チップ、CPUの<br>加速命令              |        | 汎用CPU<br>SVE 加速機能  |  | なし                          |

- 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



# 「富岳」が制覇した4部門の概要



- 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。
- 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。

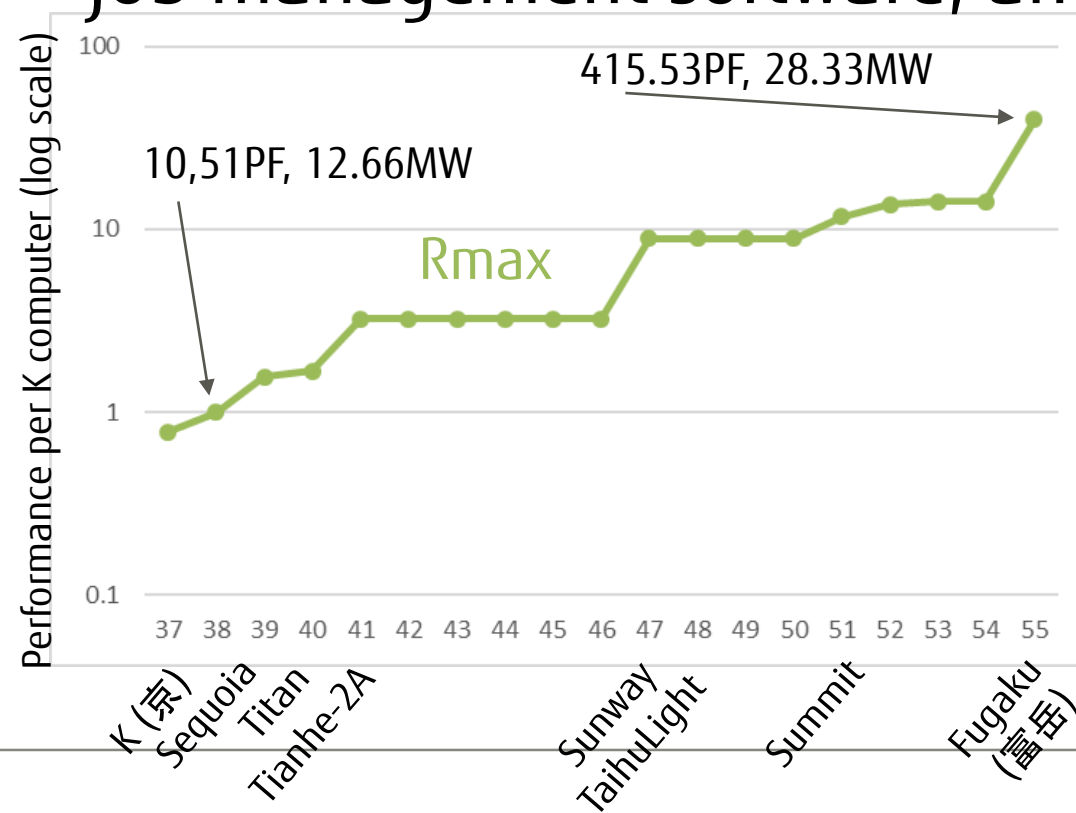


HPL-AI      Graph500

- **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。
- 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

# TOP500 #1 History from K computer to Fugaku

- Performance improvement from K computer is about 40x while power consumption is only 2.2x => 12.66MW vs 28.33MW
- Good scalability and HPL execution efficiency of TofuD interconnect, MPI, job management software, and reliable hardware

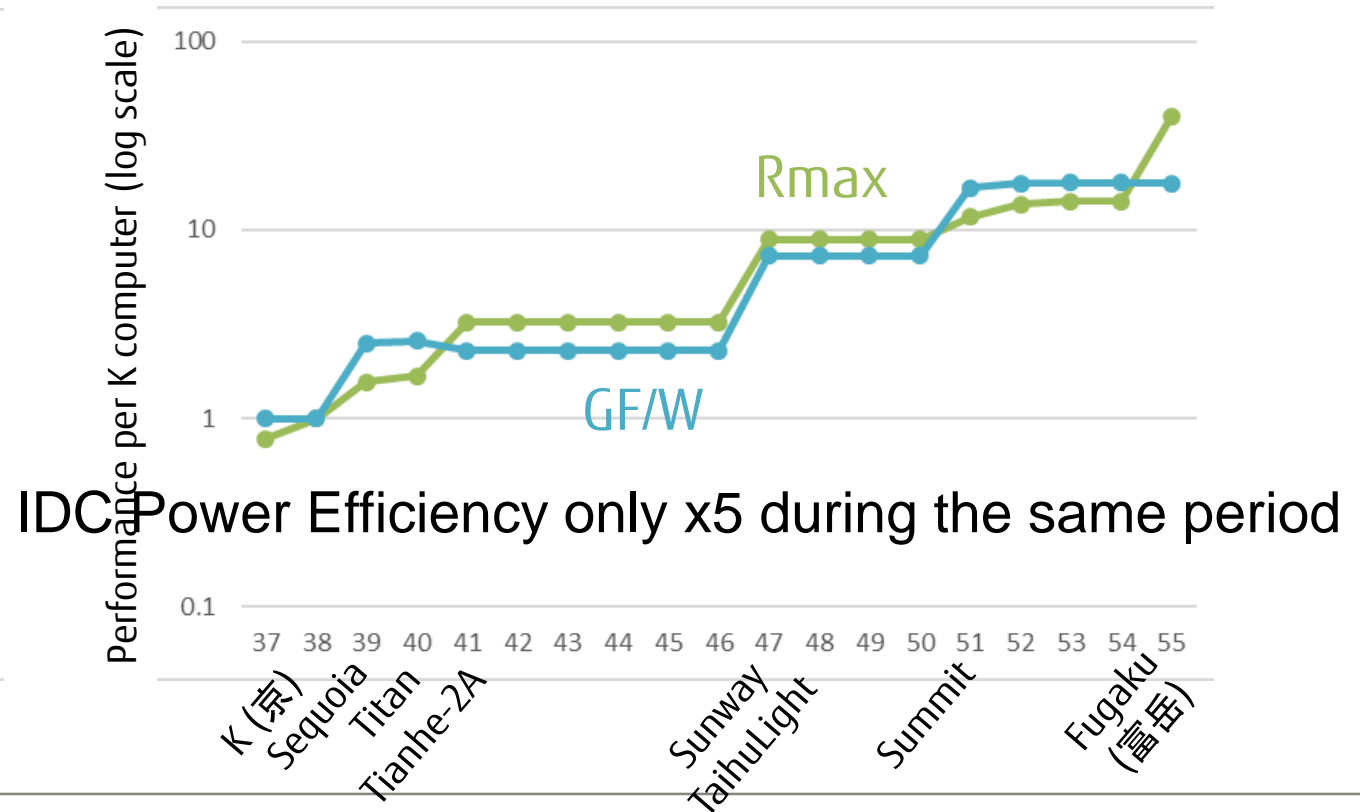
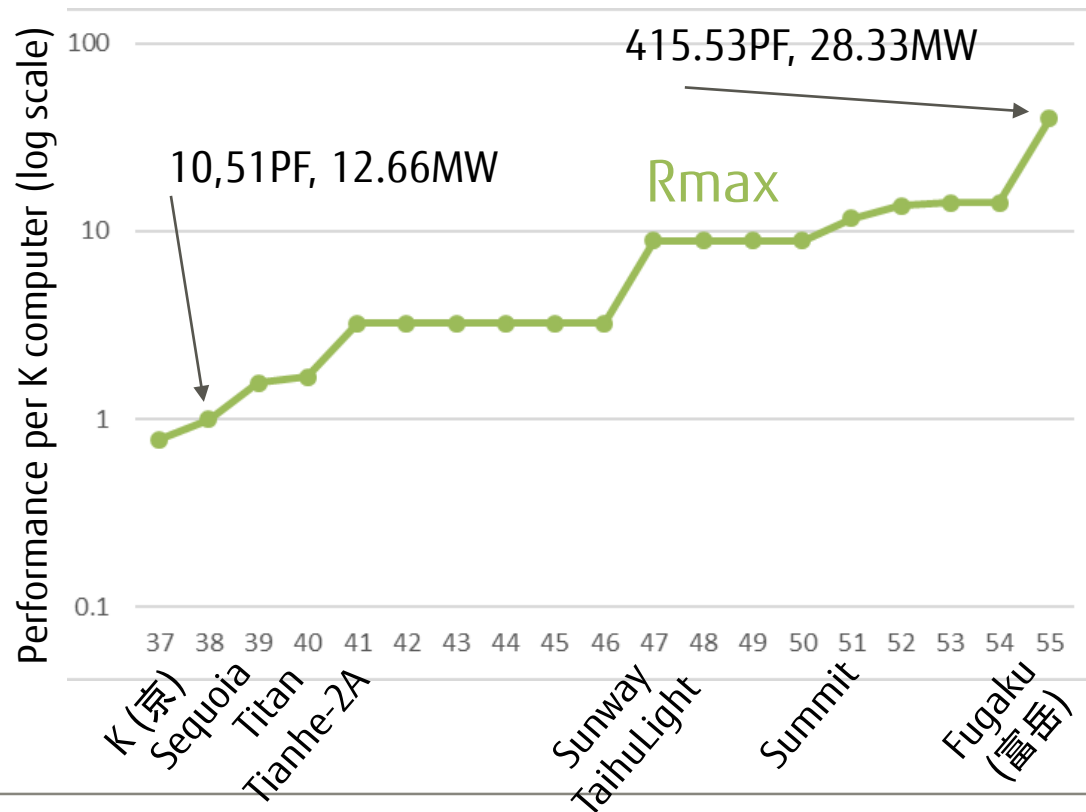


Scalability & HPL execution efficiency

| System                | # of nodes     | HPL eff       | Interconnect     |
|-----------------------|----------------|---------------|------------------|
| <b>Fugaku (富岳)</b>    | <b>152,064</b> | <b>80.87%</b> | <b>TofuD</b>     |
| Summit                | 4,356          | 74.01%        | Infiniband       |
| SunwayTaihuLight      | 40,960         | 74.15%        | Custom           |
| Tianhe-2              | 16,000         | 61.68%        | Custom(Fat tree) |
| Titan                 | 18,688         | 64.88%        | Gemini           |
| Sequoia               | 98,304         | 81.09%        | Custom(5D torus) |
| <b>K computer (京)</b> | <b>88,128</b>  | <b>93.17%</b> | <b>Tofu</b>      |

# TOP500 #1 History from K computer to Fugaku

- Performance improvement from K computer is about 40x while power consumption is only 2.2x => 12.66MW vs 28.33MW
- Good scalability and HPL execution efficiency of Tofu interconnect, MPI, job management software, and reliable hardware
- Flagship machine power consumption (GF/W) is important due to societal demand on limiting power consumptions of facilities



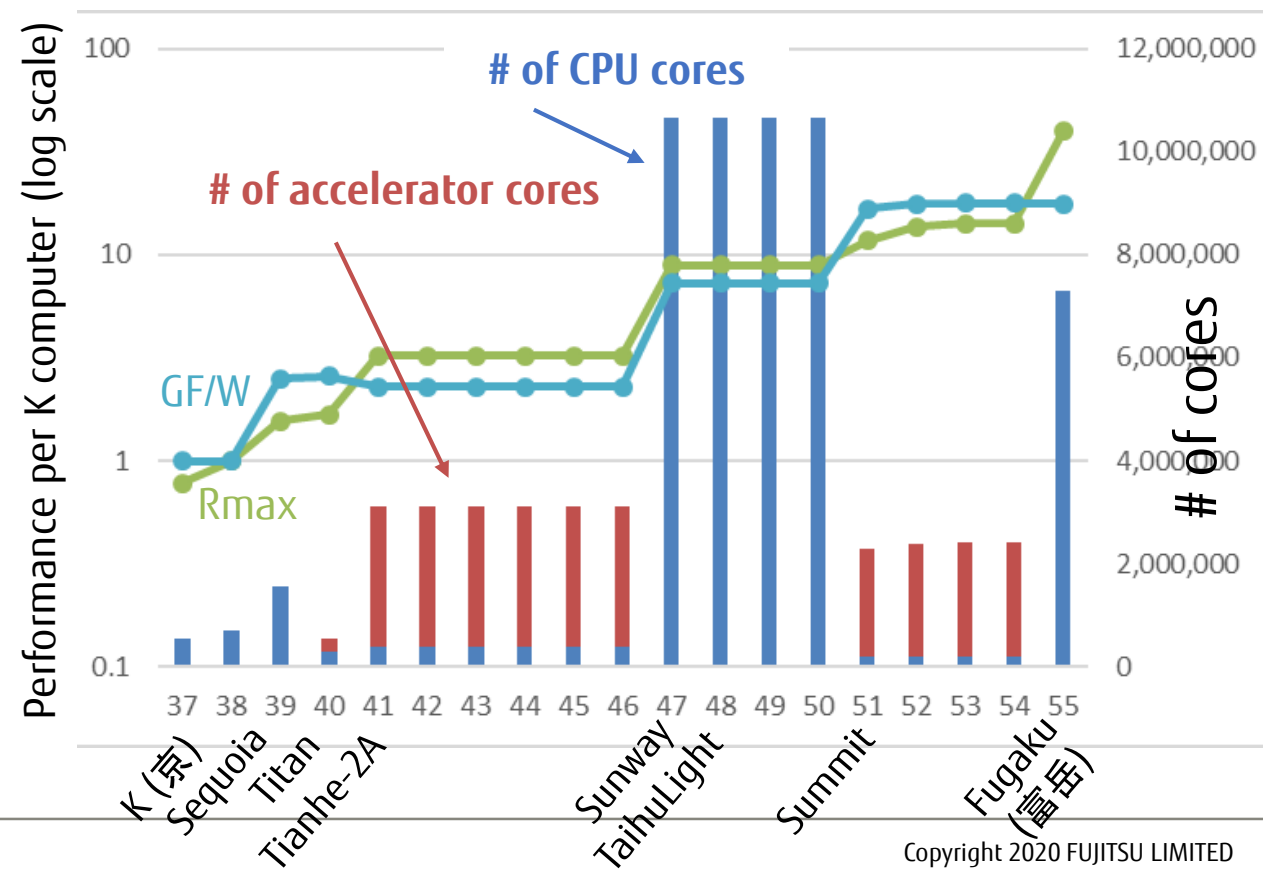


# TOP500 #1 History and Fugaku's Choice

- Performance improvement from K computer is about 40x while power consumption is only 2.2x => 12.66MW vs 28.33MW
- Good scalability and HPL execution efficiency of Tofu interconnect, MPI, job management software, and reliable hardware
- Flagship machine power consumption (GF/W) is important due to societal demand on limiting power consumptions of facilities
- Fugaku improved CPU core performance, avoiding external accelerators for apps execution performance

| Way for perf.    | Accelerator core | CPU core |
|------------------|------------------|----------|
| GF/W improvement | Easier           | Not easy |
| Apps development | Not easy         | Not easy |
| Apps domains     | Narrow           | Wider    |

Fugaku's choice



# TOP500 #1 History and Fugaku's Choice

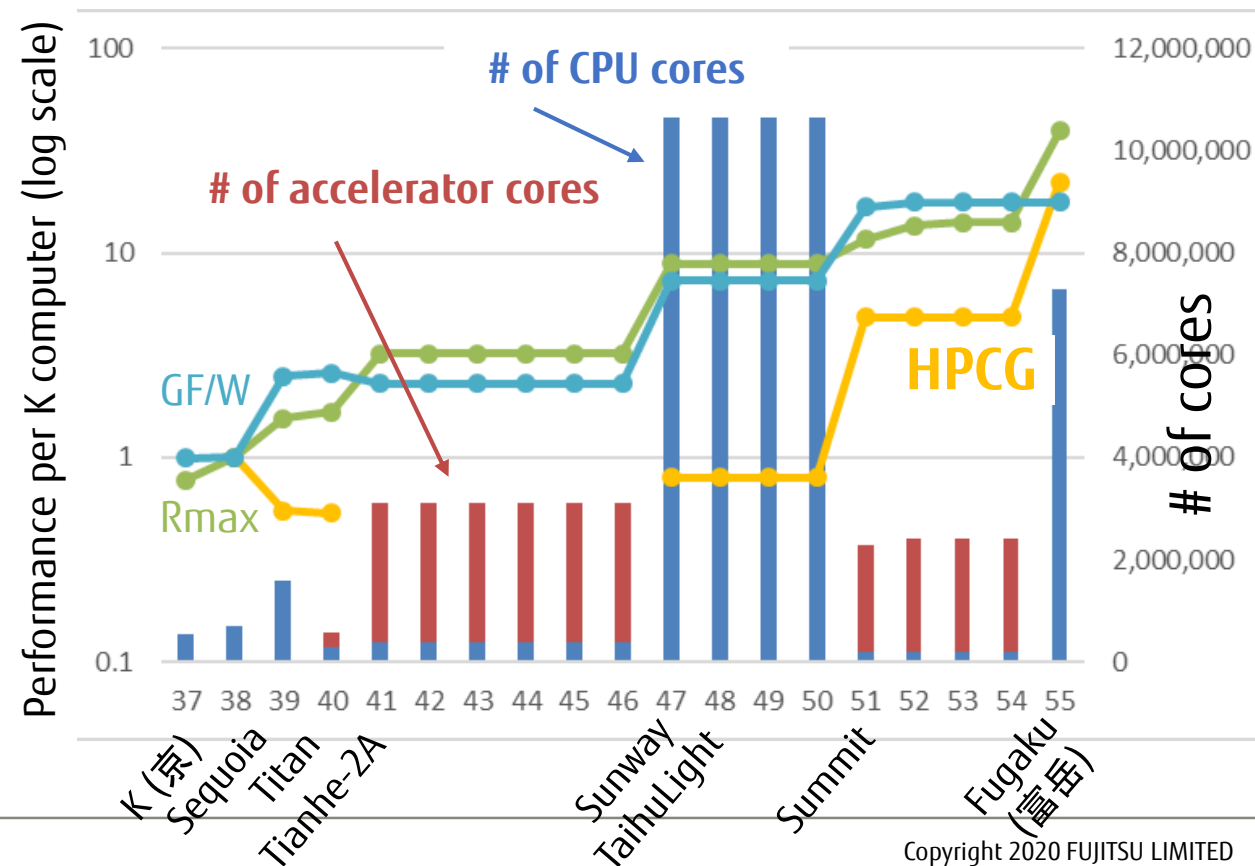
- Performance improvement from K computer is about 40x while power consumption is only 2.2x => 12.66MW vs 28.33MW
- Good scalability and HPL execution efficiency of Tofu interconnect, MPI, job management software, and reliable hardware
- Flagship machine power consumption (GF/W) is important due to societal demand on limiting power consumptions of facilities
- Fugaku improved CPU core performance, avoiding external accelerators for apps execution performance

| Way for perf.    | Accelerator core | CPU core |
|------------------|------------------|----------|
| GF/W improvement | Easier           | Not easy |
| Apps development | Not easy         | Not easy |
| Apps domains     | Narrow           | Wider    |

Fugaku's choice

■ **HPCG #1**, HPL-AI #1, Graph500 #1

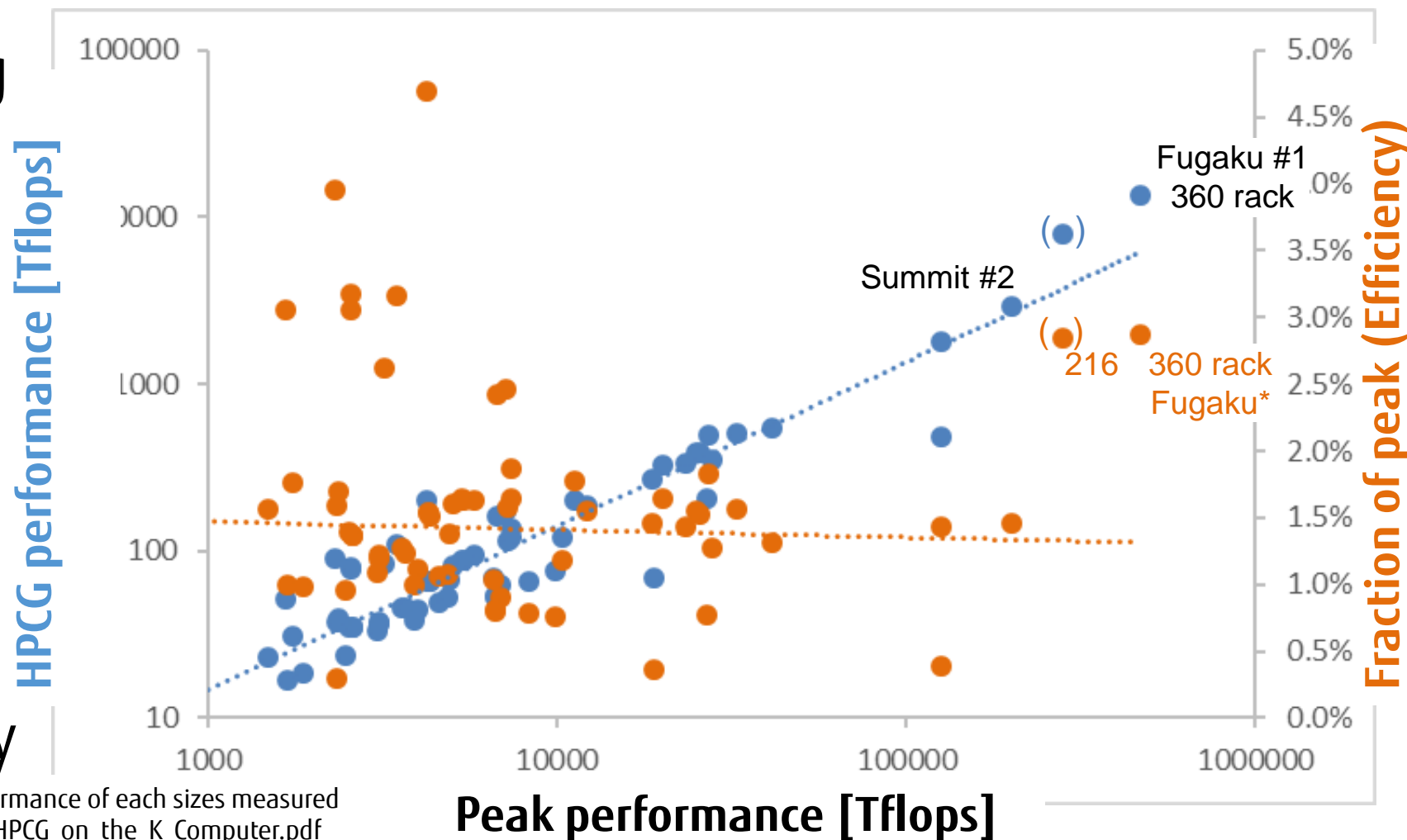
HPCG number of Tianhe-2A is not published



# HPCG Results of TOP500 + Fugaku's 216-rack Results



- Fugaku's efficiency is very high and the same in both system sizes ~3%
- Optimized by splitting Symmetric Gauss-Seidel loops[\*\*]
- Neighbor comm. using Tofu's 6-dir simultaneous comm.
- Tofu HW reduction for MPI\_allreduce is effective for scalability



[\*] Fractions of Fugaku are calculated by the peak performance of each sizes measured

[\*\*] [http://www.hpcg-benchmark.org/downloads/sc16/HPCG\\_on\\_the\\_K\\_Computer.pdf](http://www.hpcg-benchmark.org/downloads/sc16/HPCG_on_the_K_Computer.pdf)



# 今回の「世界一4冠」「早期コロナプログラム」達成の理由

プロジェクト初期から「アプリケーション・ファースト」コ・デザイン

- アプリケーション群の性能&キャパシティ&使いやすさ=>開発容易性の達成のため、CPU性能(特にメモリ帯域)&マシンサイズ=>電力性能(GFlops/W) & 汎用CPU(Arm)に関し、Moonshot的な高い目標を設定
- 企業のみでは困難なターゲット→イノベーション達成のためリスクテイクでき、国家プロジェクトでのみ実現可能
  - ⇒ 日本の叡智が結集しオールジャパンで開発
- 理研・富士通が先導し、日本のHPCコミュニティ全体で10年にもわたるCo-design (コデザイン) により、「高いメモリバンド幅等による高アプリ性能」、「マシンサイズを確保する省電力」、「使い勝手の良さのArm CPUへの移行・HPC向けベクトル拡張」を同時達成
- ベンチの「世界一4冠」等は、「アプリファースト」の結果であり、その逆ではない

# 富岳の産業利用・Society5.0への取り組み

富  
岳

- 全ての人とモノがつながり、今までにない新たな価値を生み出す超スマート社会の実現を目指す  
Society5.0において、シミュレーションによる社会的課題の解決や人工知能（AI）開発及び情報の流通・処理に関する技術開発を加速するためには、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠

・第5期科学技術基本計画（平成28年度～平成32年度）の柱である「超スマート社会」（Society5.0）を世界に先駆けて実現するためには、新たな価値創造の基盤としてのスーパーコンピュータが必要不可欠

（文部科学省 中間評価）

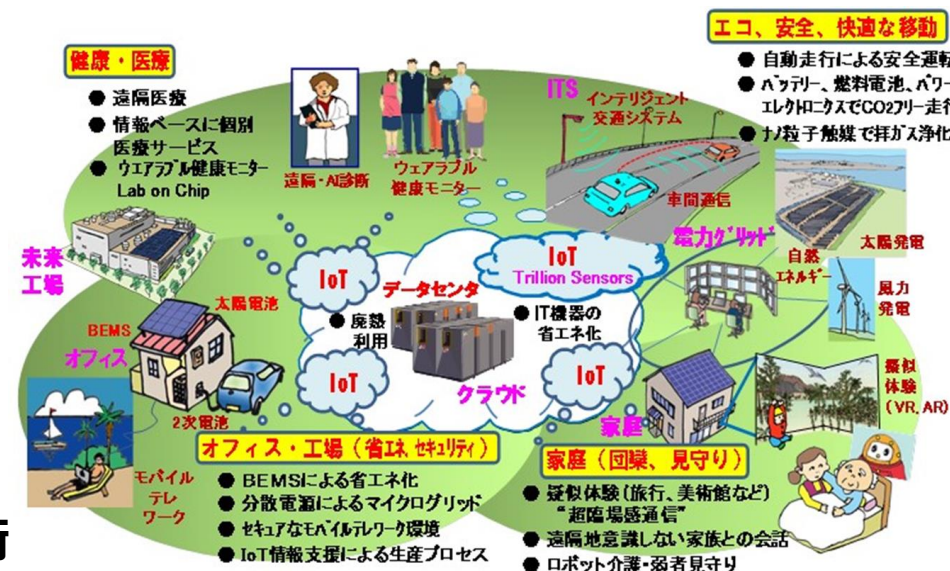
・〔1〕データ駆動型社会の共通インフラの整備

③研究生産性の向上

産学官連携を支え、生産性の飛躍的向上の基盤となる  
高速電子計算機施設等の先端的な研究施設・設備の  
整備・共用やポスト「京」の開発を進める

（未来投資戦略2018（平成30年6月15日閣議決定））

このためには富岳におけるA64fxやソフトウェア・アプリのHPC技術が、富岳に留まらず、クラウドにも大幅に波及し、エッジと接続してシミュレーション・AIを駆動することが重要



<超スマート社会における人々の生活>

（出典：JST/CRDS 曾根純一上席フェロー講演資料）



# Society5.0における富岳の中心的役割

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

IoT、ロボット、人工知能（AI）、ビッグデータ等の先端技術を用いて、あらゆる産業や社会生活に取り入れ、格差なく、多様なニーズにきめ細かに対応したモノやサービスを提供

経済発展と社会的課題の解決を両立

経済発展と社会的課題の解決を両立

イノベーションで創出される**新たな価値**により、格差なくニーズに対応したモノやサービスを提供することで、**経済発展と社会的課題の解決**を両立

サイバー空間とフィジカル空間の高度な融合

フィジカル（現実）空間から**センサー**とIoTを通じてあらゆる情報が集積（**ビッグデータ**）  
**人工知能（AI）**がビッグデータを解析し、高付加価値を**現実空間にフィードバック**

これまでの情報社会（4.0）

Society 5.0



「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

# 富岳の経済・産業界、社会、IoT イノベーションへ活用

## 企業でのイノベーション、富岳でのプロジェクトの例

- ・ **全固体電池（ポスト・リチウムイオン電池）** ⇒ 安全性向上、長寿命化、高出力化（トヨタ）
- ・ **世界最高水準の高効率・大型ガスタービン** ⇒ 地球環境やエネルギー問題に貢献（三菱重工）
- ・ タービン素材の合金比率
- ・ 高圧力比圧縮機



## 国民の命を守り、長寿健康社会へ

### ■ 防災・減災

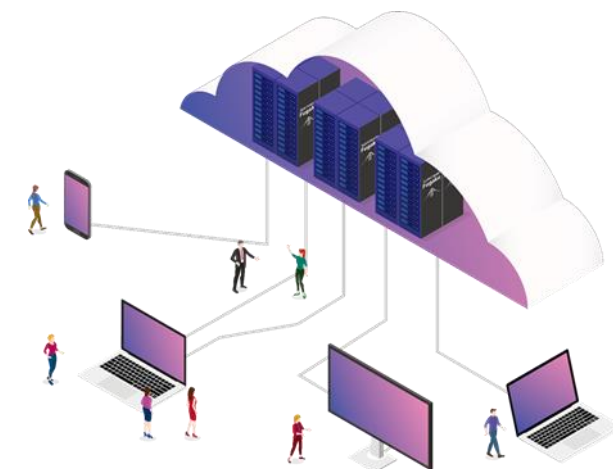
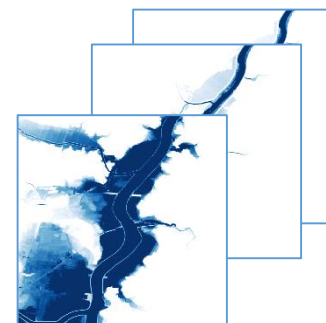
- ・ **AIとシミュレーションによる「全国規模の準リアルタイム災害状況把握」**

=> 東京オリンピックで試験、富岳で全国展開へ

- ・ 地震と津波の複合災害の「都市全体」シミュレーション
- ・ 豪雨対策

### ■ 医療

- ・ **高速・高精度な革新的な創薬基盤**
- ・ **臓器や血流など人体の再現による早期診断**



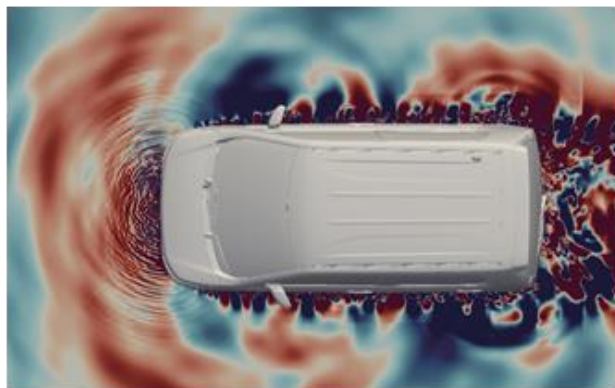
更に富岳の「クラウド利用」研究も民間と開始





## 理研コンソーシアム

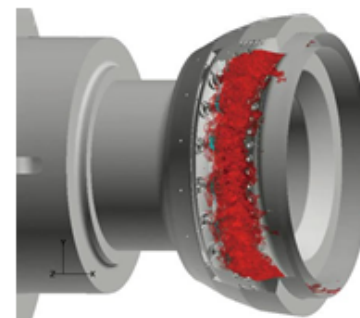
### ■ HPCを活用した自動車用次世代CAEコンソーシアム



自動車空力音直接解析（協力：スズキ（株））

- ・ トヨタ自動車株式会社
- ・ 日産自動車株式会社
- ・ 日野自動車株式会社
- ・ 株式会社プリヂストン
- ・ マツダ株式会社
- ・ アイシン精機株式会社
- ・ 株式会社小糸製作所
- ・ スズキ株式会社
- ・ 株式会社 SUBARU
- ・ 株式会社デンソー
- ・ TOYO TIRE 株式会社
- ・ マレリ株式会社
- ・ 三菱自動車工業株式会社
- ・ 宇宙航空研究開発機構
- ・ 神戸大学 ・ 成蹊大学
- ・ 東京大学 ・ 豊橋技術科学大学
- ・ 広島大学 ・ 北海道大学
- ・ 山梨大学

### ■ 燃焼システム用次世代CAEコンソーシアム



航空機用ガスタービン燃焼器燃焼流れの数値解析

- ・ 東芝エネルギーシステムズ株式会社
- ・ 株式会社豊田中央研究所
- ・ 株式会社本田技術研究所
- ・ 三菱重工業株式会社
- ・ 株式会社 IHI
- ・ 株式会社 IHI エアロスペース
- ・ 川崎重工業株式会社
- ・ 日本製鉄株式会社
- ・ 一般財団法人電力中央研究所
- ・ 東京ガス株式会社
- ・ 宇宙航空研究開発機構
- ・ 大阪大学 ・ 九州大学
- ・ 京都大学 ・ 神戸大学
- ・ 島根大学 ・ 徳島大学
- ・ 北海道大学 ・ 名城大学

他の産業分野のコンソーシアムも計画中  
(土木、創薬など)



- **「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
- **「富岳クラウド(FWS)」における複数のクラウドプロバイダとの連携**
  - 2020年度クラウドサービスの実験を公募、複数クラウドプロバイダ
  - 2021年度本格運用へ
- **「富岳AI」の研究開発**
  - 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と富士通等との産学連携プロジェクト
      - ターゲット: PyTorch, TensorFlow, Chainer, 等



**Fugaku AI (DL4Fugaku)**  
RIKEN: Chainer, PyTorch, TensorFlow, DNNL...

**Live Data Analytics**  
Apache Flink, Kibana, ....

~3000 Apps supported by Spack

**Math Libraries**  
Fujitsu: BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, SSL II  
RIKEN: EigenEXA, KMATH\_FFT3D, Batched BLAS,...

**Cloud Software Stack**  
OpenStack, Kubernetes, NEWT...

**Open Source  
Management Tool  
Spack**

**Compiler and Script Languages**  
Fortran, C/C++, OpenMP, Java, python, ...  
(Multiple Compilers supported: Fujitsu, Arm, GNU, LLVM/CLANG, PGI, ...)

Batch Job and Management  
System

**ObjectStore  
S3 Compatible**

Hierarchical File System

**Tuning and Debugging Tools**  
Fujitsu: Profiler, Debugger, GUI

**Red Hat Enterprise Linux 8 Libraries**

|  |                                       |   |  |  |
|--|---------------------------------------|---|--|--|
| High-level Prog. Lang.<br>XMP  | Domain Spec. Lang.<br>FDPS            | Communication<br>Fujitsu MPI<br>RIKEN MPI | File I/O<br>DTF                                  | Virtualization & Container<br>KVM, Singularity |
| Process/Thread<br>PIP  | Low Level Communication<br>uTofu, LLC |   | File I/O for Hierarchical Storage<br>Lustre/LLIO |  |
| Red Hat Enterprise Linux Kernel+ optional light-weight kernel (McKernel) |                                       |   |  |  |

Most applications will work with simple recompile from x86/RHEL environment. LLNL Spack automates this.

# Fugaku / FX1000 / FX700 Commercial Apps

Available soon

In a research & development phase (as of June 2020)

Engineering (Structural analysis, Fluid dynamics and Electronics)

LS-DYNA

(by Ansys, Inc.)

**ADVENTURECluster**

(by Allied Engineering Co.)

Altair Radioss™

(by Altair Engineering, Inc.)

Ansys FLUENT

(by Ansys, Inc.)

Poynting

(by Fujitsu Limited)

**CONVERGE**  
CFD SOFTWARE

(by Convergent Science)

**HELYX\***

(by ENGYS Ltd. & VINAS Co., Ltd.)

**JMAG®**  
Simulation Technology for Electromechanical Design

(by JSOL Corporation)

Chemistry\*

Amber

Marc

(by MSC Software Ltd.)

scFLOW

(by Software Cradle Co., Ltd.)

Simcenter STAR-CCM+

(by Siemens Industry Software Inc.)

Gaussian16

(by Gaussian, Inc.)

VASP

VPS (PAM-CRASH)

(by ESI Group)

\*Collaboration with Australian National University

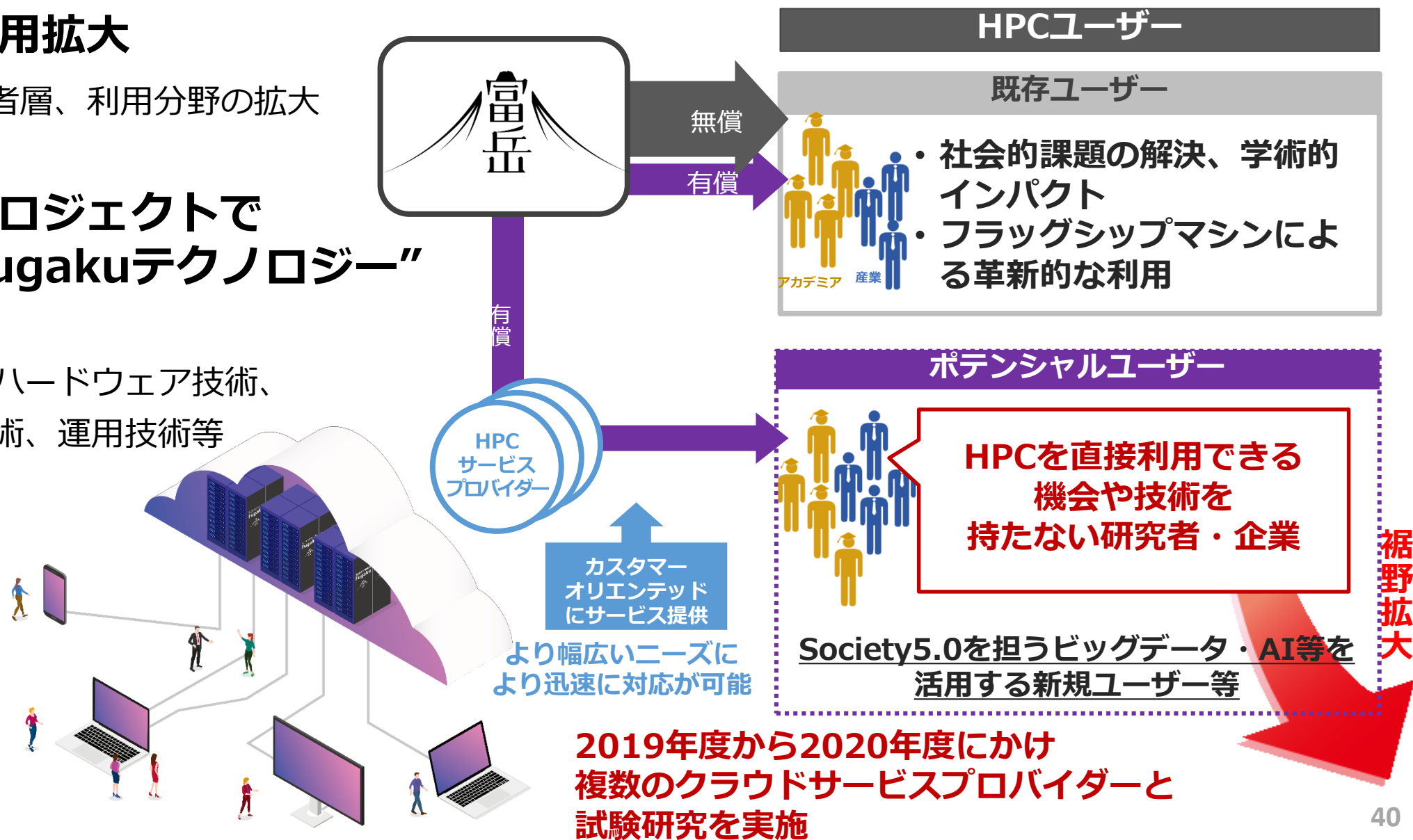
\*\*All application names used in this slide are trademarks or registered trademarks of their respective vendors.

## ■「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

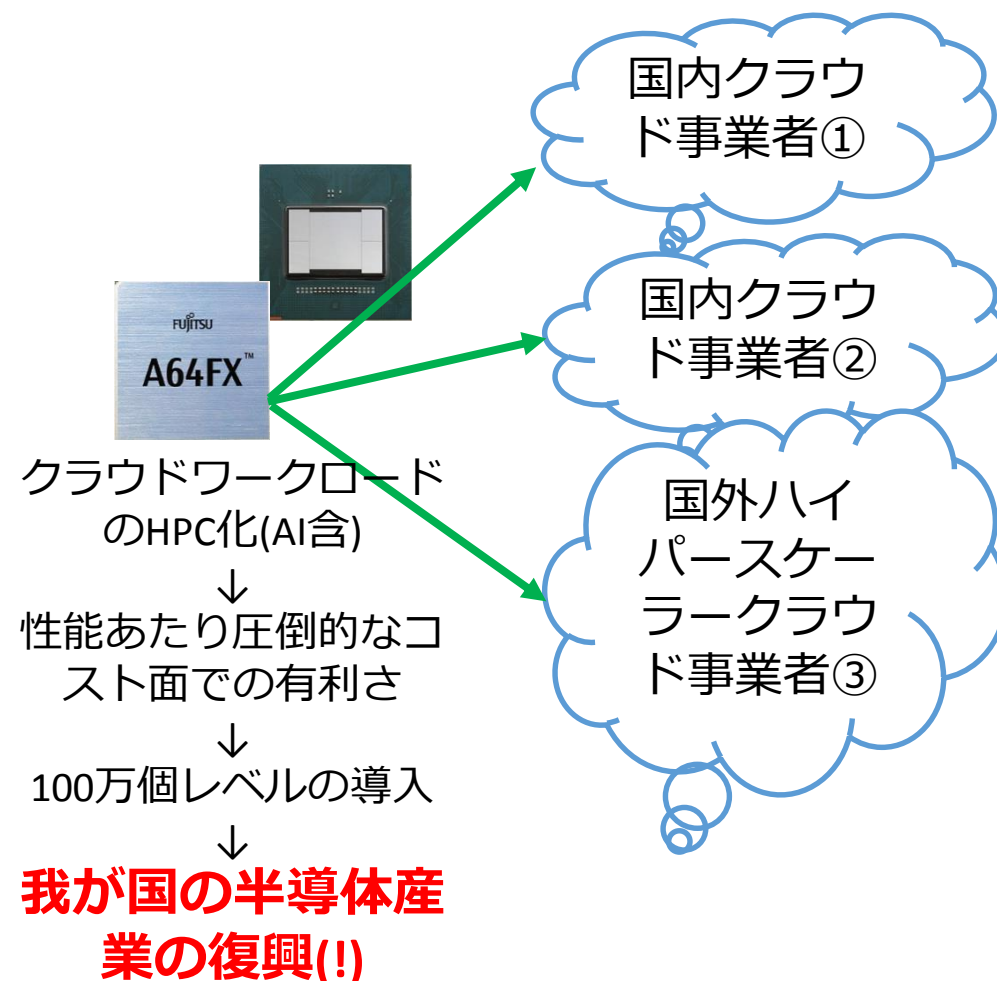
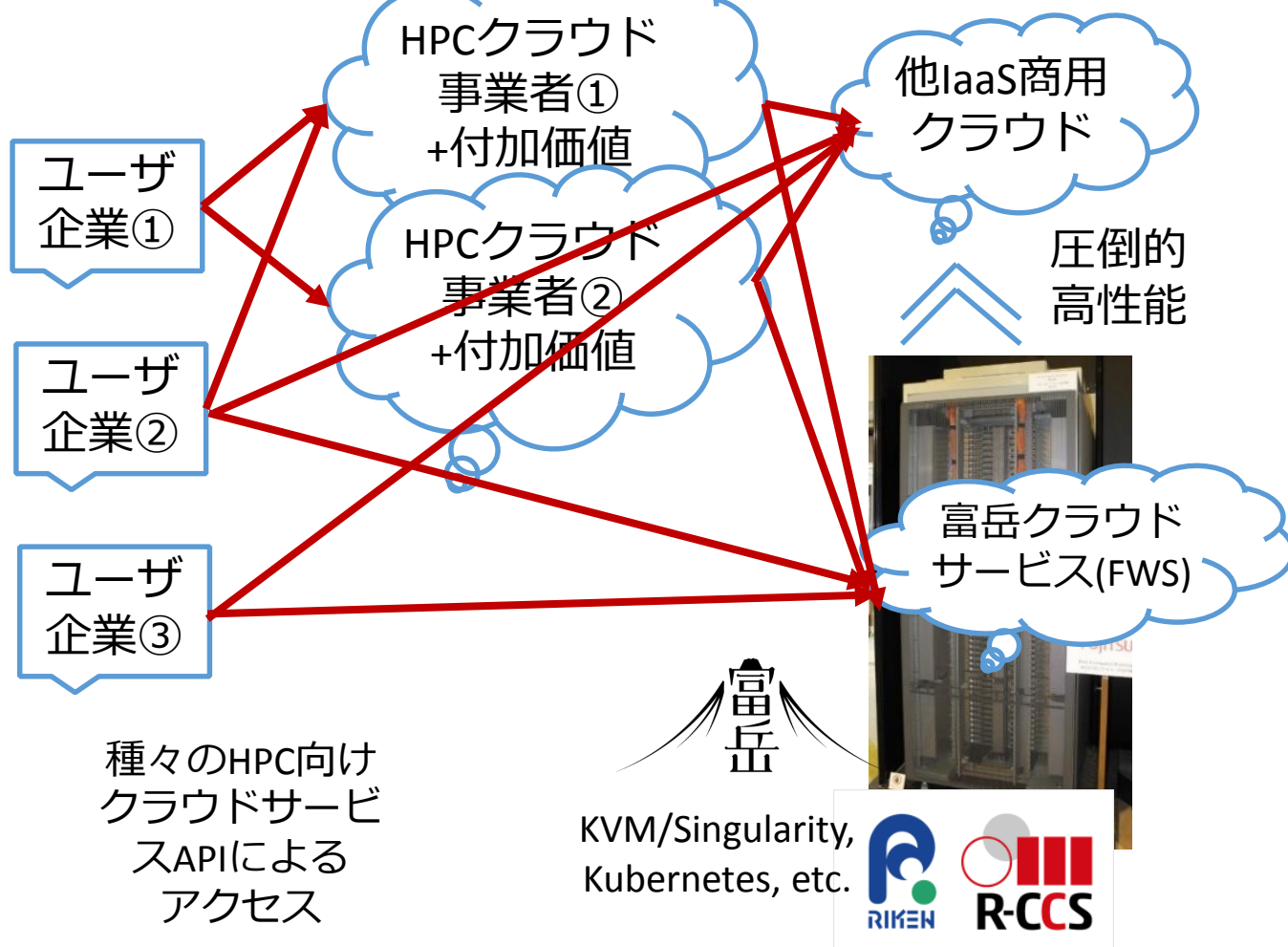
HPCサービス、ハードウェア技術、  
ソフトウェア技術、運用技術等





- 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

- 富岳で研究開発された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



# クラウド的利用 共同研究パートナー



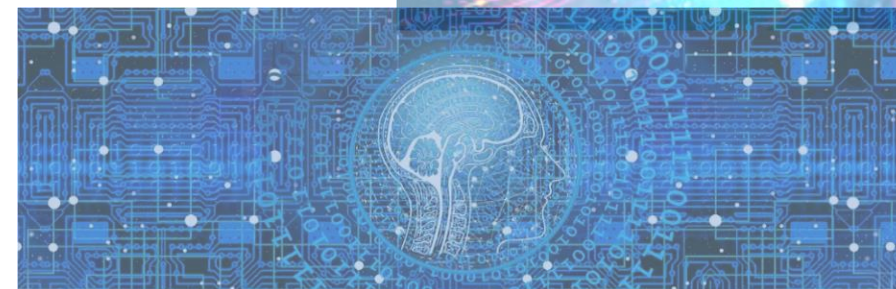
<https://www.r-ccs.riken.jp/library/topics/200213.html>

## ミッション

- プロジェクト名とロゴの策定
- プロバイダーを通して「富岳」の計算資源をエンドユーザーへ提供する方法について幅広く試行
- それぞれの効果を可能な限り定量的に評価することで有効性を検証するとともに課題を整理
- 得られた知見は、「富岳」のクラウド的な利用形態」の制度設計に反映

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



**GAFA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。

「富岳」の高いハードウェアスペック（高性能CPU/高メモリバンド幅/スケーラブルなTofuDインターコネクト）をフルに引き出し大規模深層学習ソフトウェアをチューニング

## ● 富士通と理研による覚書の締結

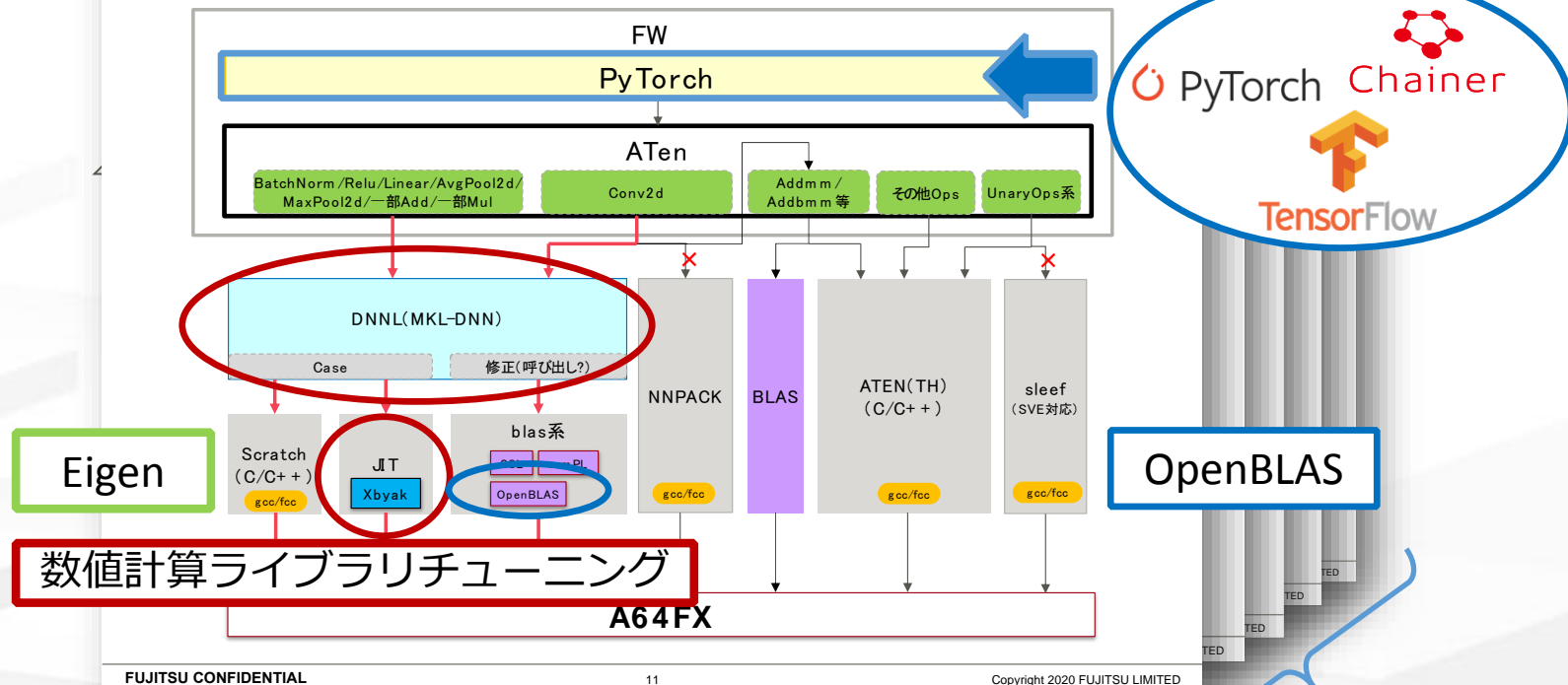
(2019年11月25日)



- Arm社を含め産学連携で推進
- AIのためのソフトウェア基盤の研究開発を行うことで、「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
- あらゆるAIアプリケーションを加速することが期待

## 富岳-AI PyTorch環境 状況報告(3/3) フレームワークチューニング

### ■ PyTorchソフトウェアスタック



Source: 富士通、富士通研究所、富岳AI連絡会資料  
(2020年3月12日)

並列学習チューニング



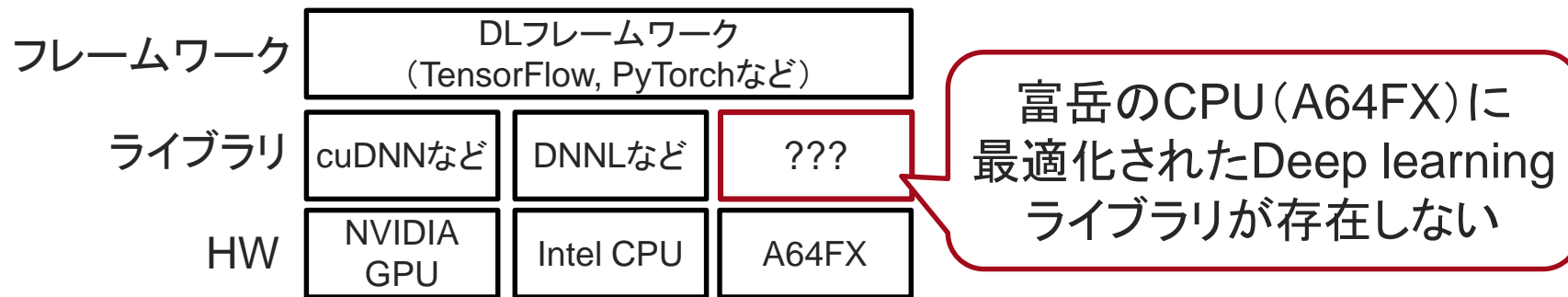
## 日本における公的大規模AI計算インフラ

推論  
838.5PF  
学習  
86.9 PF米国  
Summit比  
推論1/4  
学習1/5HPL-AIにて  
Summit比  
2.58倍  
(7万GPU相当)

|                            | Deployed              | Purpose            | AI Processor               | Inference<br>Peak Perf. | Training<br>Peak Perf.           | HPL-AI<br>Perf   | Top500<br>Perf/Rank    | Green500<br>Perf/Rank                              |
|----------------------------|-----------------------|--------------------|----------------------------|-------------------------|----------------------------------|------------------|------------------------|--|
| 東工大<br>TSUBAME3            | July 2017             | HPC + AI<br>Public | NVIDIA P100<br>x 2160      | 45.8 PF<br>(FP16)       | 22.9 PF / 45.8PF<br>(FP32/FP16)  |                  | 8.125 PF<br>#22        | 13.704 GF/W<br>#8                                  |
| 東大<br>Reedbush-H/L         | Apr. 2018<br>(update) | HPC + AI<br>Public | NVIDIA P100<br>x 496       | 10.71 PF<br>(FP16)      | 5.36 PF / 10.71PF<br>(FP32/FP16) |                  | (Unranked)             | (unranked)   |
| 九大<br>ITO-B                | Oct. 2017             | HPC + AI<br>Public | NVIDIA P100<br>x 512       | 11.1 PF<br>(FP16)       | 5.53 PF/11.1 PF<br>(FP32/FP16)   |                  | (Unranked)             | (Unranked)   |
| 産総研<br>AICC                | Oct. 2017             | AI<br>Lab Only     | NVIDIA P100<br>x 400       | 8.64 PF<br>(FP16)       | 4.32 PF / 8.64PF<br>(FP32/FP16)  |                  | (Unranked)             | (Unranked)   |
| 理研AIP<br>Raiden            | Apr. 2018<br>(update) | AI<br>Lab Only     | NVIDIA V100<br>x 432       | 54.0 PF<br>(FP16)       | 6.40 PF/54.0 PF<br>(FP32/FP16)   |                  | 1.213 PF<br>#462       | (Unranked)   |
| 産総研<br>ABCI                | Aug.<br>2018          | AI<br>Public       | NVIDIA V100<br>x 4352      | 544.0 PF<br>(FP16)      | 65.3 PF/544.0 PF<br>(FP32/FP16)  |                  | 19.88 PF<br>#8         | 14.423 GF/W<br>#6                                  |
| 情報通信研 &<br>Sakura Internet | Summer<br>2019        | AI<br>Lab Only     | NVIDIA V100<br>x 1700      | ~210 PF<br>(FP16)       | ~26 PF/~210 PF<br>(FP32/FP16)    |                  | 4.128 #51<br>3.712 #58 | (Unranked)   |
| 米国オーク<br>リッジ研<br>Summit    | Summer<br>2018        | HPC + AI<br>Public | NVIDIA V100<br>x 27,000    | 3,375 PF<br>(FP16)      | 405 PF/3,375 PF<br>(FP32/FP16)   | 550PF<br>(FP16)  | 148.6 PF<br>#2         | 14.719 GF/W<br>#5                                  |
| 理研 R-CCS<br>富岳             | 2020<br>~2021         | HPC + AI<br>Public | Fujitsu A64fx<br>x 158,976 | 4,300 PO<br>(Int8)      | 1070PF/2150PF<br>(FP32/FP16)     | 1420PF<br>(FP16) | 415.5PF<br>#1 Jun2020  | 16.876 GF/W<br>#1 Nov2019<br>(proto) <sup>45</sup> |

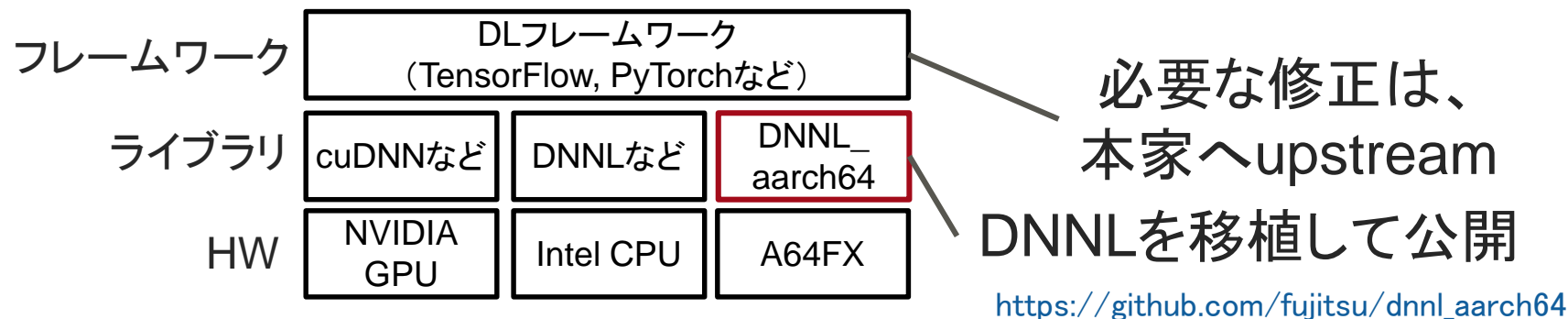
## ■ Deep learningのソフトウェアスタック

- 実行するHWに最適化されたDeep learningライブラリが必須

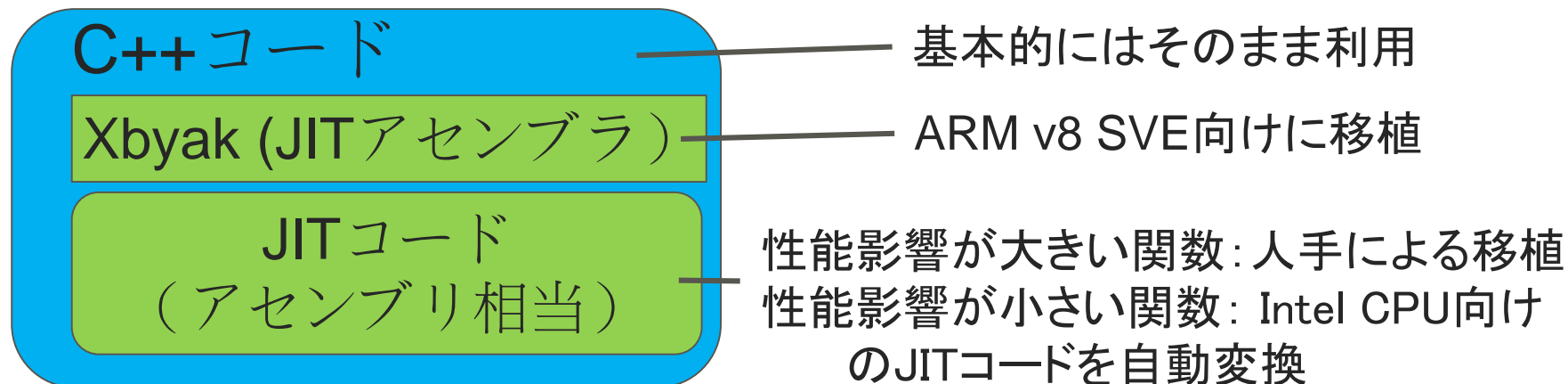


## ソフトウェアスタック構築方針

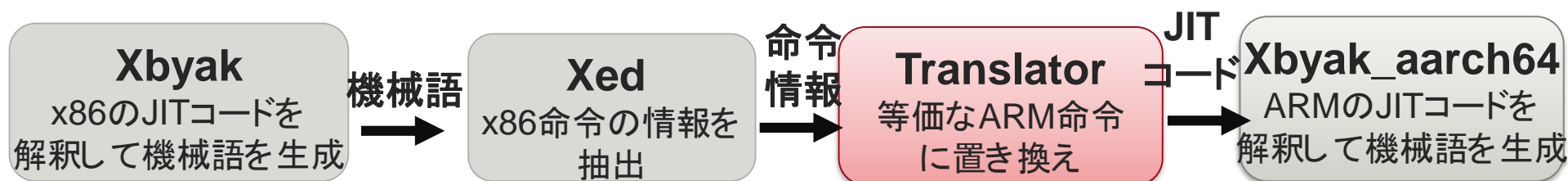
- 多くのDLフレームワークに対応したIntel社のDNNL (OneDNN)を移植・公開し、フレームワークの修正量抑えつつ、ソフトウェアスタックを構築



## DNNLの全体像



## 自動変換の流れ



x86のJITコードから等価なARMの機械語を生成

x86の新命令実装時にはTranslatorのみ更新して対応可能

**DNNL移植と最新版への追従工数を抑えつつ、高性能化**

## ■ 評価環境（1 ノード）

### ■ ハードウェア

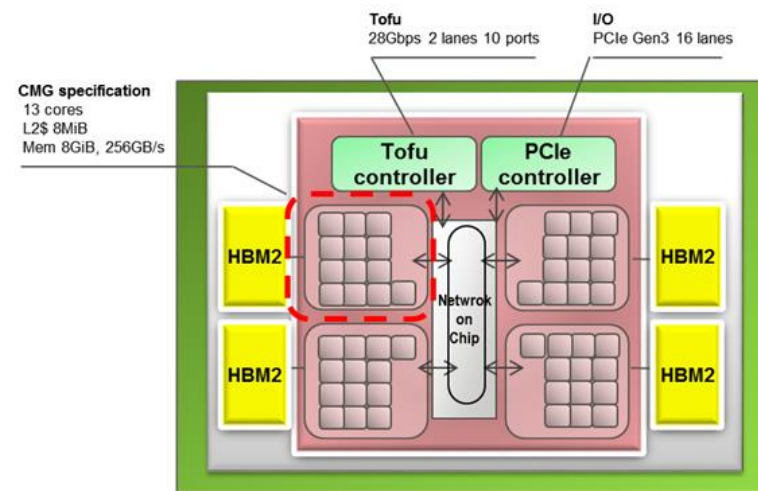
- A64FX 2.2GHz, 48cores
- HBM 32GB

### ■ ソフトウェア

- **PyTorch v1.5.0**
- 富士通コンパイラ fcc
- 富士通数学ライブラリ SSL II

### ■ ResNet50(FP32)性能測定

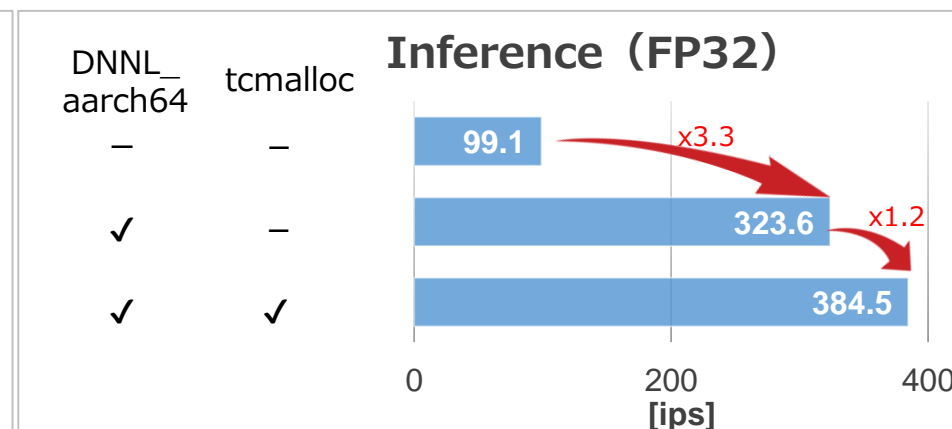
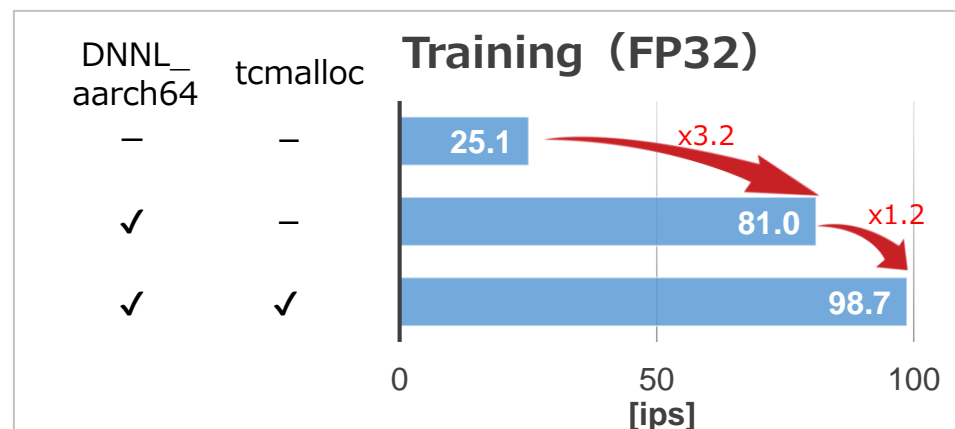
- DNNL\_aarch64の効果確認



A64FX ブロック図

チューニングメモ：

- CMG毎のプロセス割り当てによるNuma制御
- バッチサイズの最適化
- マルチプロセス学習にはHorovodを使用





## ■ 評価環境 (1 ノード)

### ■ ハードウェア

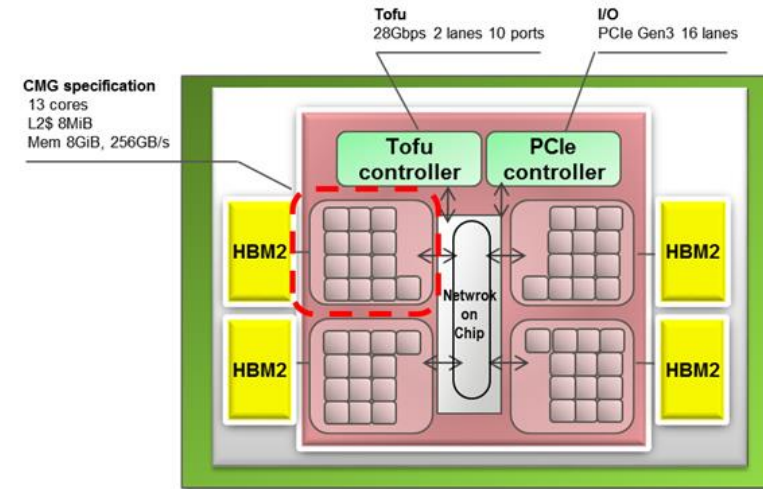
- A64FX 2.2GHz, 48cores
- HBM 32GB

### ■ ソフトウェア

- 📈 TensorFlow v2.1.0
- 🔗 富士通コンパイラ fcc
- 🔗 富士通数学ライブラリ SSL II

### ■ ResNet50(FP32)性能測定

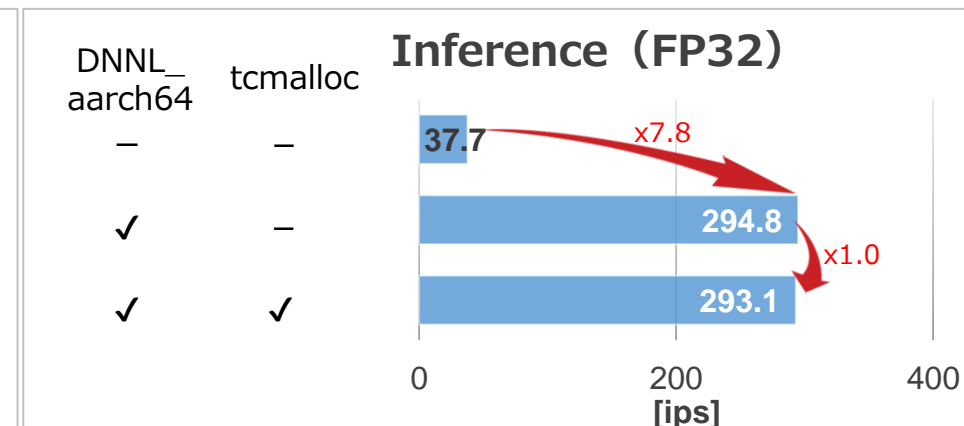
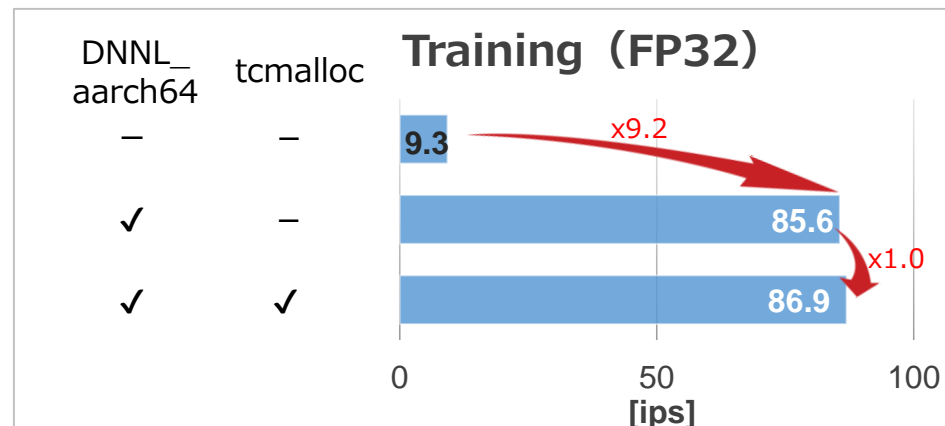
- DNNL\_aarch64の効果確認



A64FX ブロック図

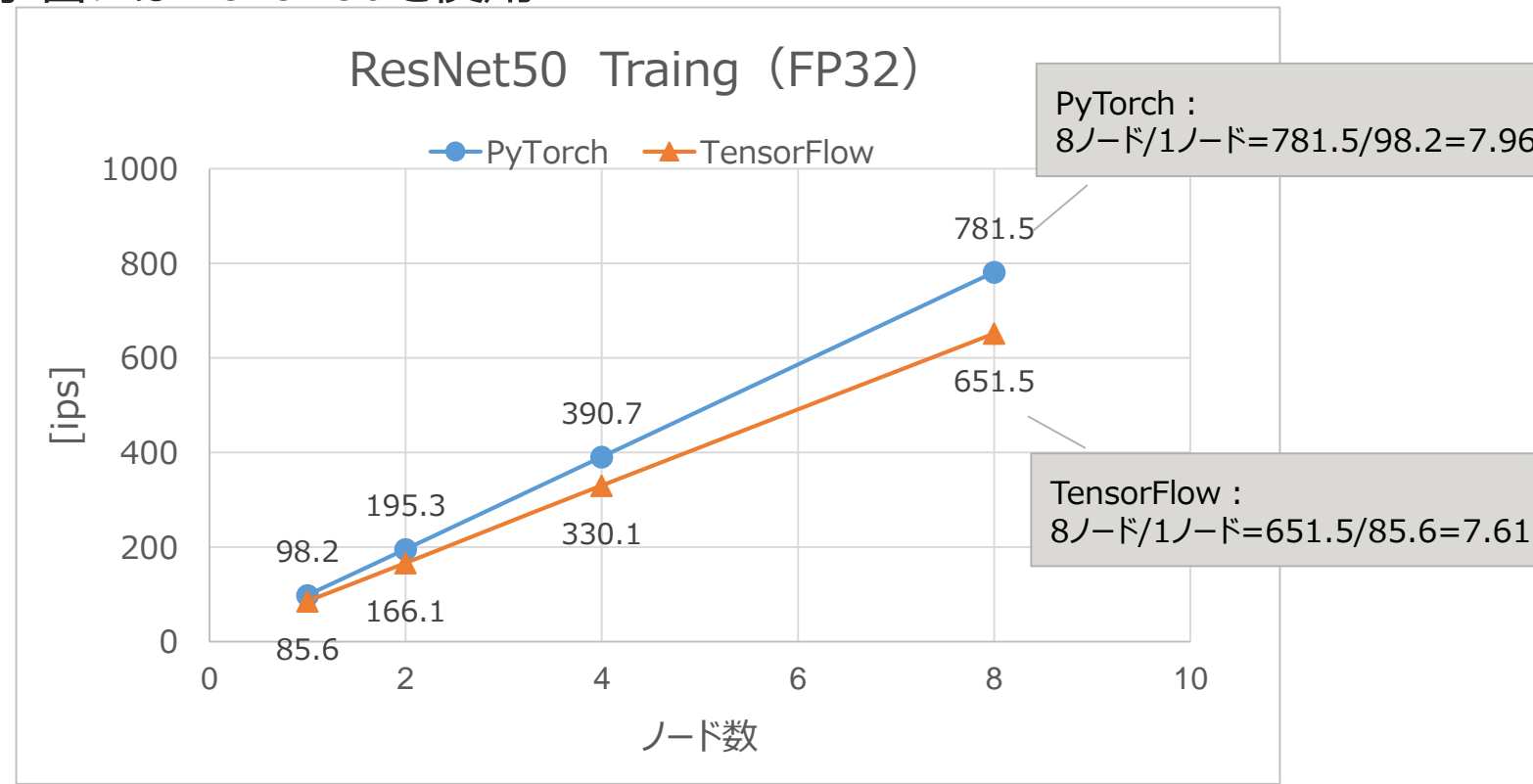
チューニングメモ：

- CMG毎のプロセス割り当てによるNuma制御
- バッチサイズの最適化
- マルチプロセス学習にはHorovodを使用



## ■ マルチノード(8ノード)におけるスケーラビリティ

- 評価環境は前頁と同じ
- ノード間通信にはTofuインターコネクトを使用
- 分散学習にはHorovodを使用



ノード数に比例しスケール

# Chainer on A64FX/富岳

## ● Introduction

近年, Deep Learningによる機械学習が盛んに行われるようになった. これらの計算ではGPUを用いた実用計算や研究が先行しているといえる. しかし富岳を代表とするMassive Parallel Computerでも, GPU同様その**CPU特性や並列性能を生かした多くの計算**が可能と考える.

富岳では, AIの利用推進を目的にAIフレームワーク/ライブラリの導入・最適化を行っている. 2019年に実施したR-CCS/AIP/AISTユーザの利用者アンケートによると, 利用者が多いフレームワークはTensorFlow/Chainer/PyTorchの順であった. 富岳ではこれら3つのフレームワーク利用を想定した環境を提供する予定である.

ここでは, 「京」から「富岳」に向けて機械学習の利活用促進のため実施した, 代表的なフレームワークの1つである**Chainer**の性能チューニングを紹介する.

## ● Chainerの動作特徴

- cProfile+gprof2dotを使い, ChainerでMNISTサンプル問題を学習した時のprofile結果は [Fig.1][Table.1]の通りであった.
  - 10.311[sec]という膨大な実行時間は以下の様に分類できた:
    - Adam optimizer** [adam.py]: 84%①.
    - numpy.dot** [linear.py]: 11%②.
    - Other parts: 5%.

Table.1 Profiler (cProfile) result on the K computer.

| ・ Original Cheiner Ver.4.4.0 profile for MNIST sample (unit=1,000, epoch=20) on the K computer |          |          |         |          |  |
|--|----------|----------|---------|----------|--|
| ncalls   | totttime | percall  | cumtime | percall  | filename:lineno(function)                          |
| ①  | 72000    | 8,466.67 | 0.118   | 8,484.62 | 0.118 optimizers/adam.py:91(update_core_cpu)       |
| ②  | 102000   | 1,137.19 | 0.011   | 1,137.19 | 0.011 {method 'dot' of 'numpy.ndarray' objects}    |
|  | 28000    | 46.51    | 0.002   | 47.46    | 0.002 functions/activation/relu.py:29(forward_cpu) |
|  | 218000   | 36.27    | 0.000   | 1,442.64 | 0.007 function_node.py:201(apply)                  |
|  | 24000    | 30.91    | 0.001   | 31.99    | 0.001 functions/activation/relu.py:96(forward_cpu) |

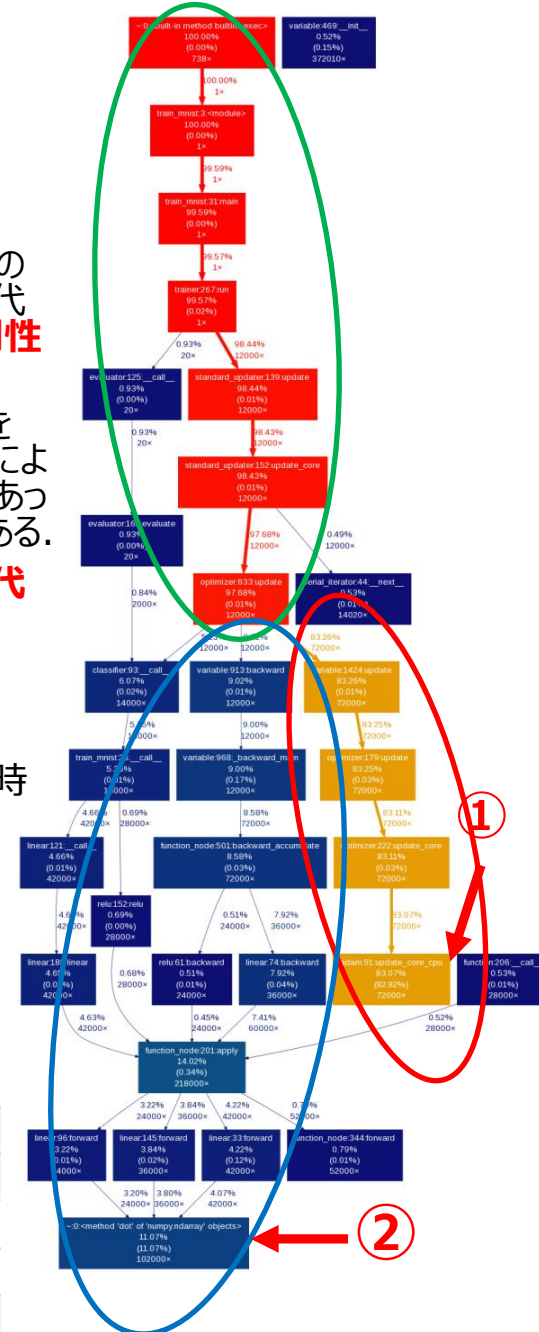
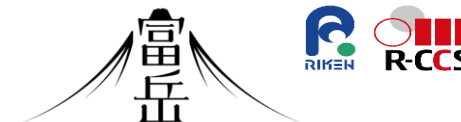


Fig.1 Call graph sample of Chainer on the K computer

# 富岳向けChainerの提供



## ● Chainerの提供

### ● 制限事項

- Chainerはバージョン7をもって開発が終了する。将来的にはPyTorchへの移行は予想されるが、富岳では既存ユーザ向けにこれまでに最適化してきた環境を提供する。
- 提供可能なバージョン: Chainer-4.5.0, ChainerMN-1.3.1
- ImageNet, MNIST問題で使用する機能について単体チューニング済みである。
- 多並列でI/O性能が飽和する現象が見られる。回避策は個別に提示する。

### ● 使い方

- 利用希望者は利用者窓口にお問い合わせの上、富岳での構築済み環境を御使用下さい。
- 準備が整い次第、富岳システムにインストールし、公開予定である。
- 動作異常などのトラブル、性能への要望などは、利用者窓口にお問い合わせ下さい。

### ● 性能 (ImageNet Resnet-50)

- CPU性能 : 57.0ips/CPU, 効率23.4% (I/O無)。
- システム性能 : 177,444ips/sys  
(48racks, I/O込)。

## ● コンテナ環境

### ● Singularity

- 現段階で公開について未定である。利用希望者はお問い合わせ下さい。

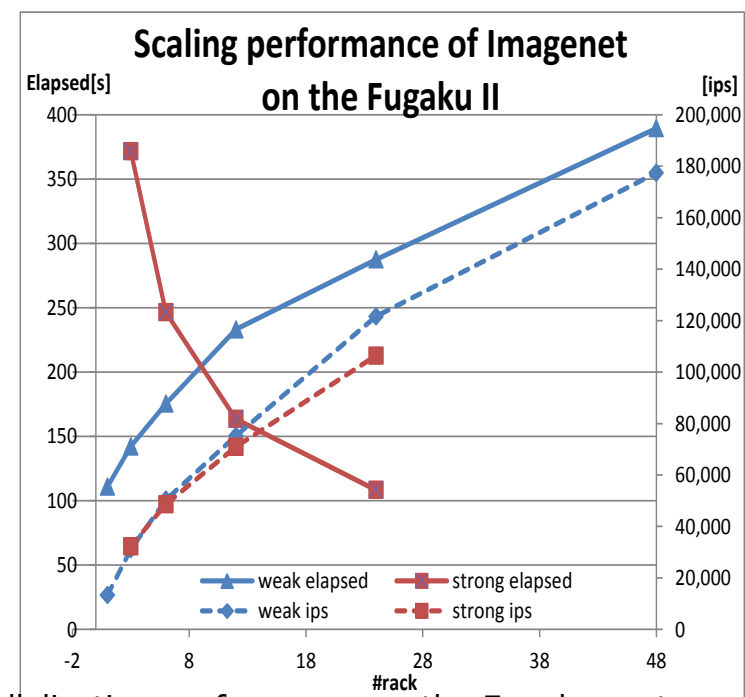


Fig.12 parallelization performance on the Fugaku system



# 富岳Chainer: 環境III(4月)最終性能

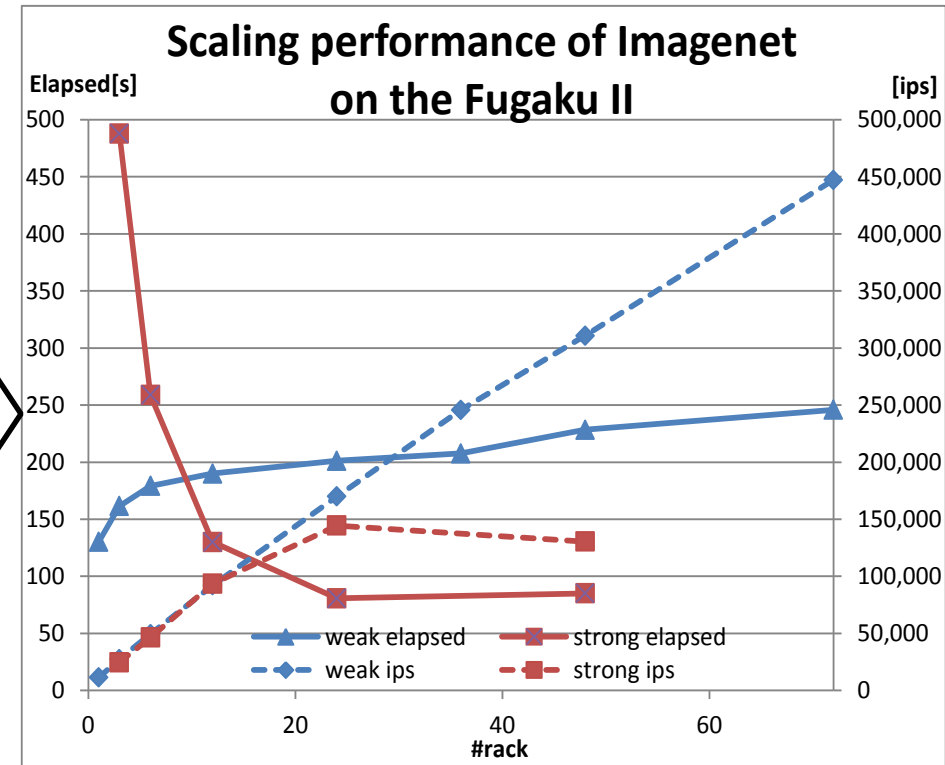
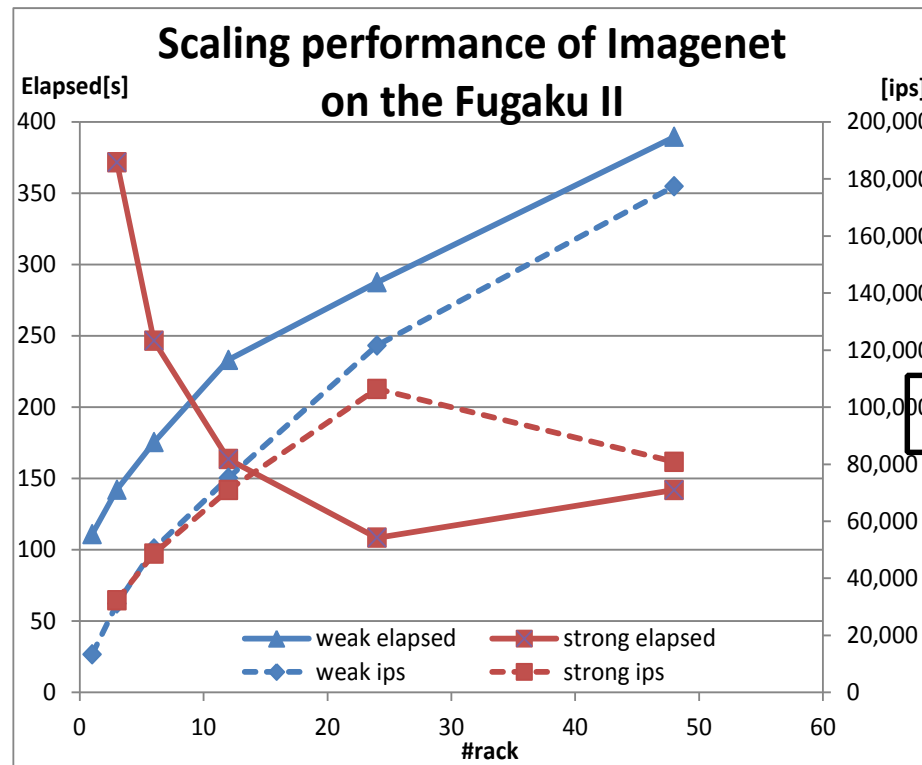


## ● 結果

- **448,048[ips]/72rack**を達成した. JOB時間は910.0[s], 擬似ステージング時間は997.0[s]\*であり, 更に超並列で動く見込みが出来た.

\*今回分散I/Oしていないため第2階層の帯域は1/4である.

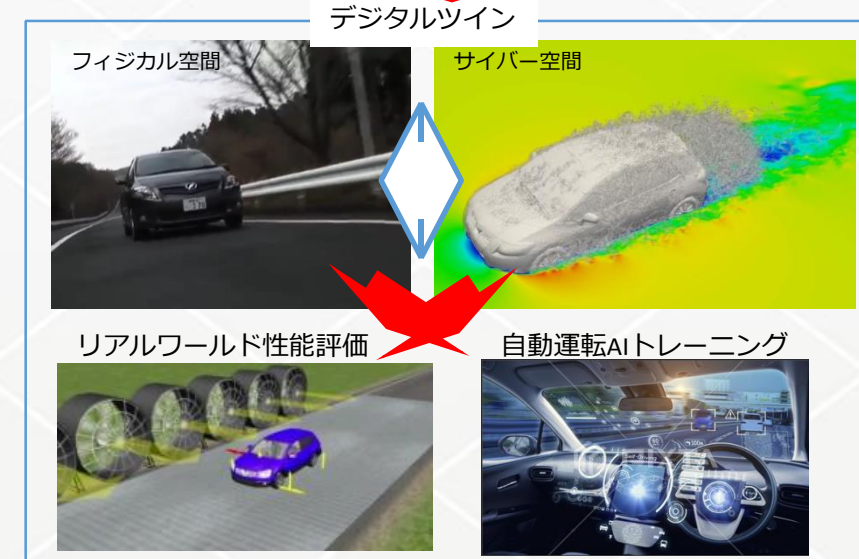
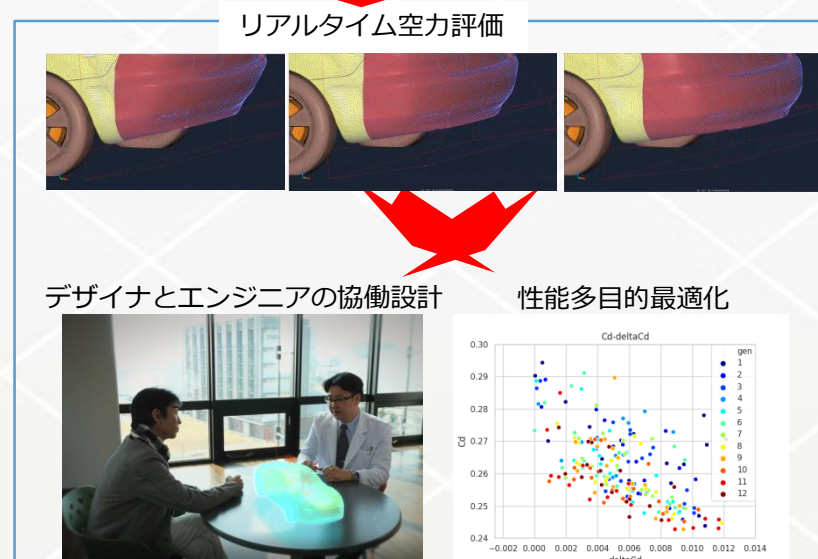
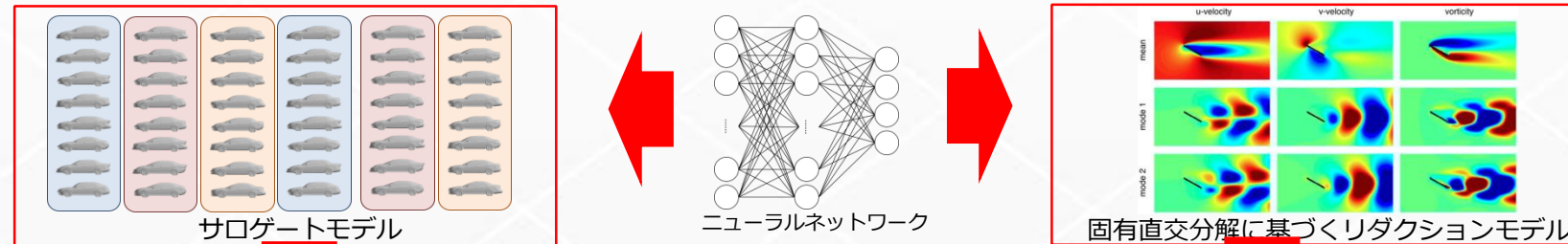
- main処理の**スケーラビリティが大幅に向上した.**



# データ科学とシミュレーションの融合による革新的ものづくり



- 機械学習、深層学習、データ同化、多目的最適化等のデータ科学とHPCシミュレーションとを融合させた新たなものづくり技術の研究開発
- 高精度HPCシミュレーション結果をビッグデータとして機械・深層学習によるAI構築
  - 様々な形状に対して瞬時に性能を評価する**サロゲートモデル**を構築する。これにより**リアルタイム空力評価**が可能となり、デザイナーとエンジニアの協働設計や、性能多目的最適化が可能となる
  - 複雑なシミュレーションを高速に行える**リダクションモデル**を構築する。これにより**デジタルツイン**を実現し、リアルワールド性能評価や、自動運転AIトレーニングの高速化が可能となる

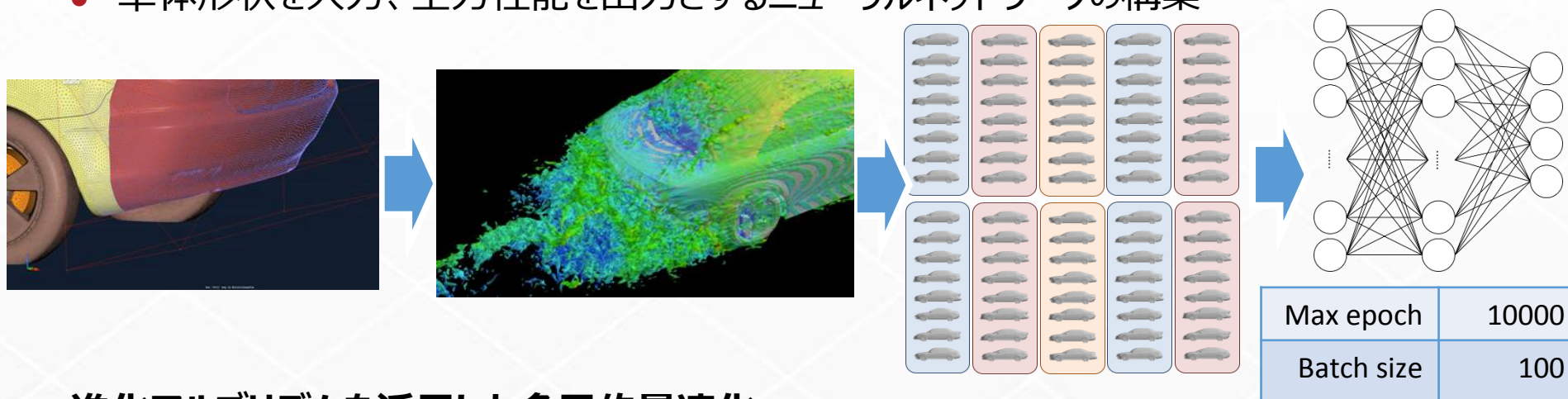


# AI技術を活用した自動車空力多目的最適化



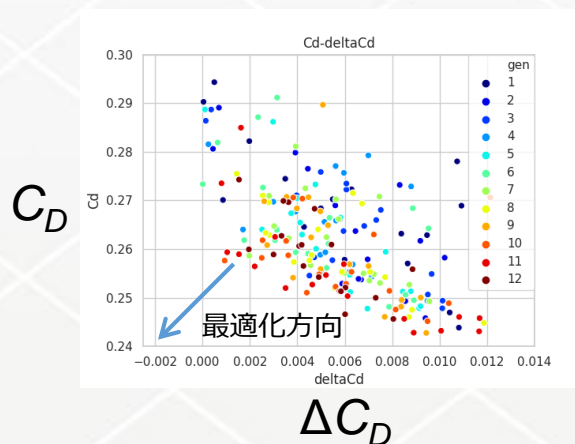
## ● ニューラルネットワークによるサロゲートモデルの構築

- 数百ケースの形状の異なる車体に対する高精度空力シミュレーションの実施
- 車体形状を入力、空力性能を出力とするニューラルネットワークの構築

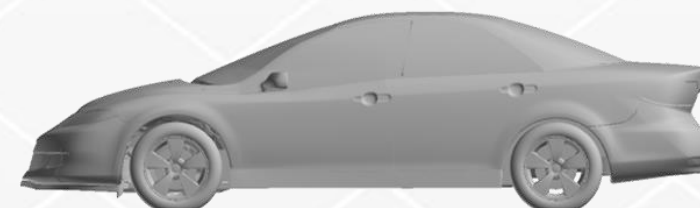


## ● 進化アルゴリズムを活用した多目的最適化

- 性能最適化エンジンにニューラルネットを組み込み低燃費車や高操安性能車を提案



低燃費車

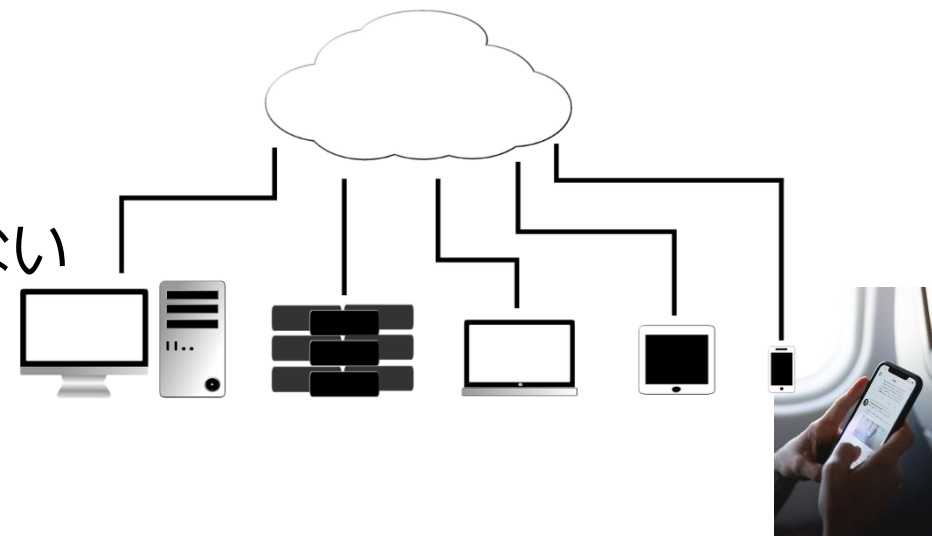


横風安定車



# Society5.0でインターネットは根本的に変わる

- 今までのインターネット：ビデオ配信ネットワーク
- データの向きはIDC=>端末
  - 同じデータを多数回再利用=>記憶データ量は少ない
  - データセンター内のネットワークはプア



- Society5.0、IoT時代のインターネット：IoTではデータ中心から計算中心の時代へ
- データの向きは端末=>IDC
  - 同じデータは無い=>記憶データ量が今より遥かに爆発的に増大
  - どこでも計算、IDC内はスパコンになる



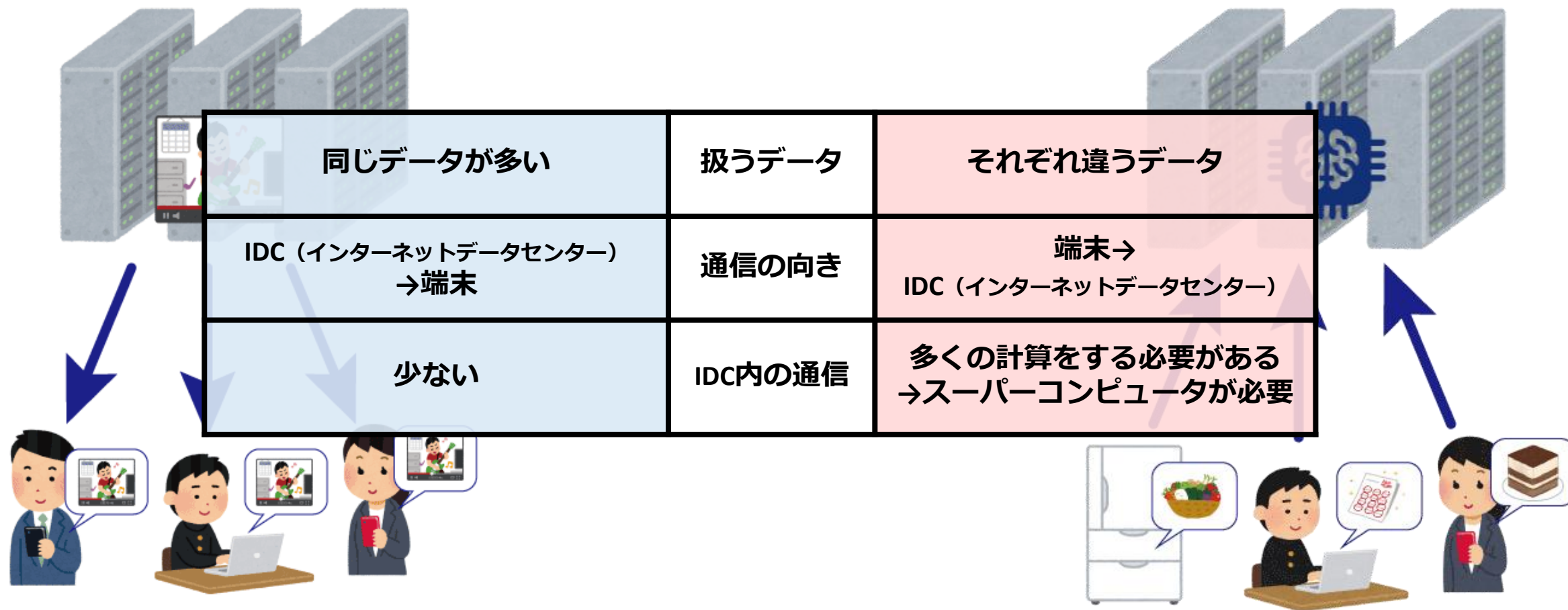
IDC: Internet Data Center



# Society5.0でインターネットはどう変わるのか？

## 現在のインターネット

## Society5.0時代のインターネット

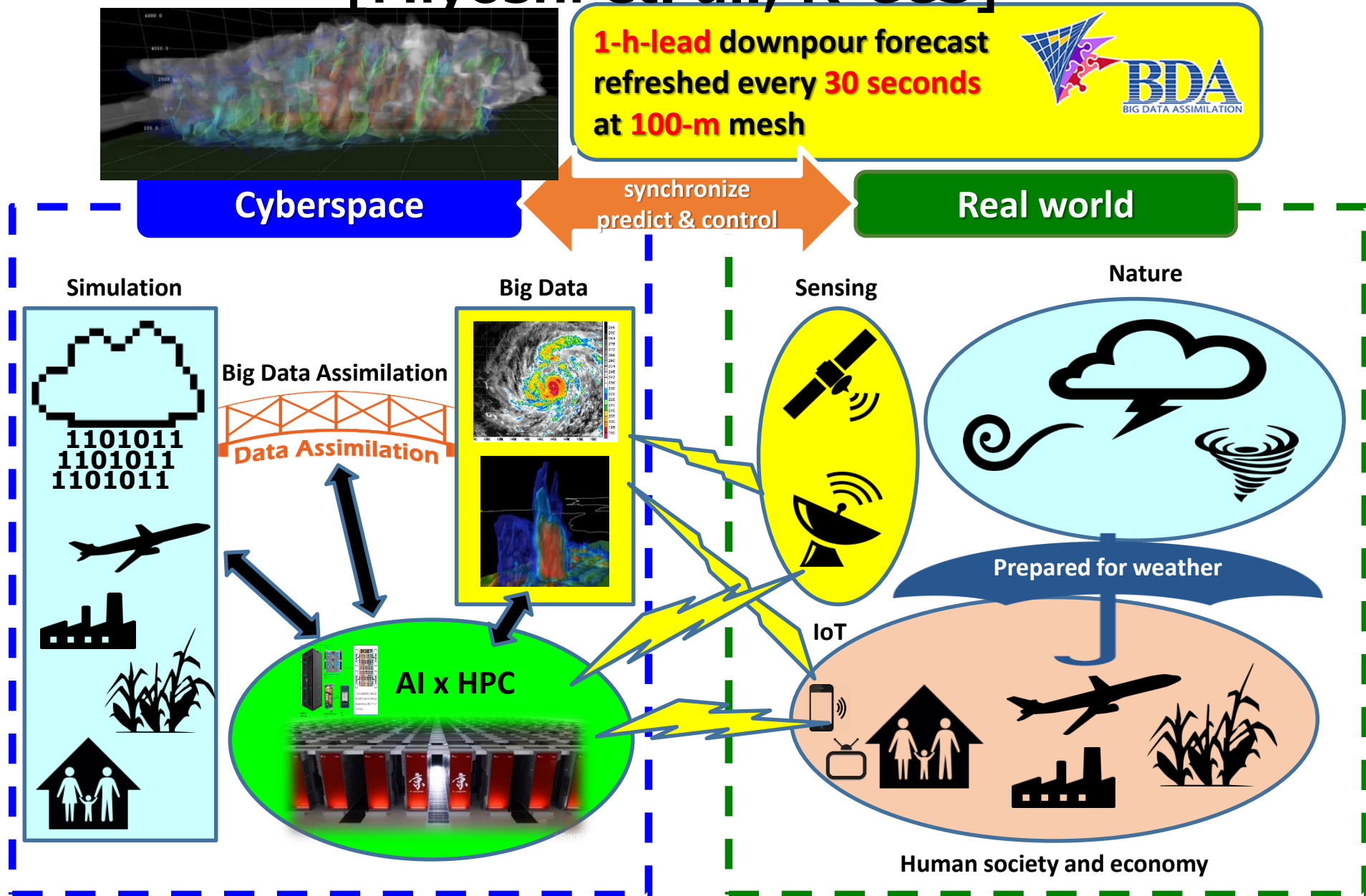


ビデオ配信が通信の90%

データ中心から計算中心の時代へ

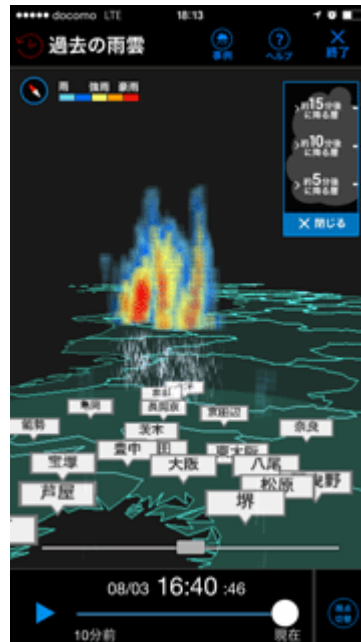
# Revolutionizing Weather Prediction for Tokyo Olympics

## [Miyoshi et. al., R-CCS]

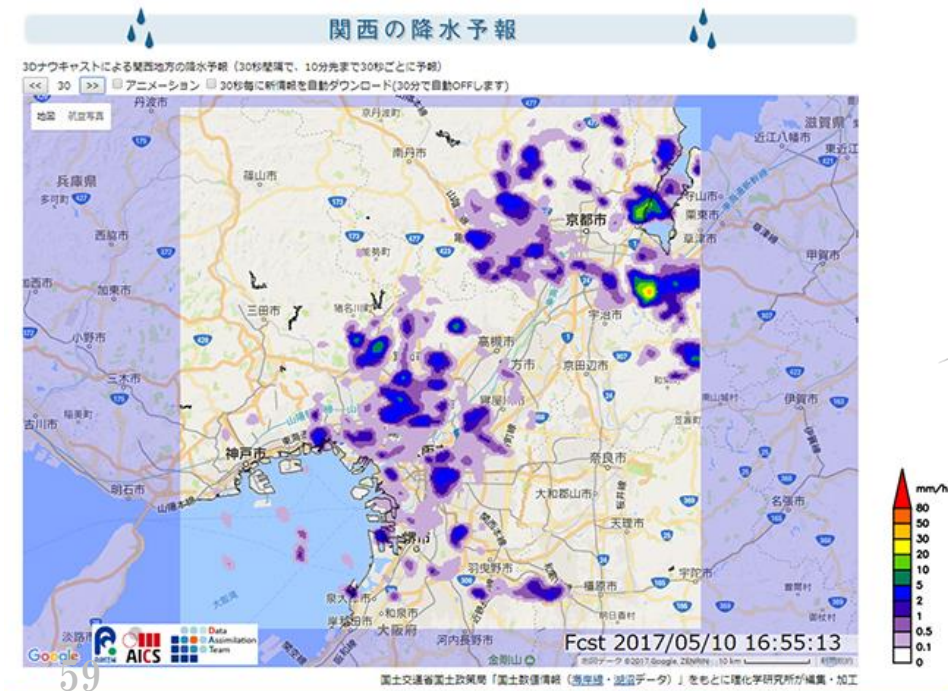


# R-CCS三好ら：AI、ビッグデータとシミュレーションが融合した、リアルタイム気象予報：東京オリンピックでの社会実装実験

- 大阪・神戸のフェーズドアレイ気象レーダを用いた降水短時間予報について、2017年に予報業務許可を取得し、現在までリアルタイムで予報の公開を行っている
- 気象予報士が常駐し、予報を随時確認した上でWebサイト上で配信(平日9時~5時のみ)
- 共同研究契約を結んでいる株式会社エムティーアイが別に予報業務許可を取得し、スマートフォンアプリ「3D雨雲ウォッチ」(2019/9時点でダウンロード数247,000以上)により予報を配信
- 富岳は間に合わないが、東大のスパコンの1/4を用いて東京オリンピックのリアルタイム気象予報を行う予定

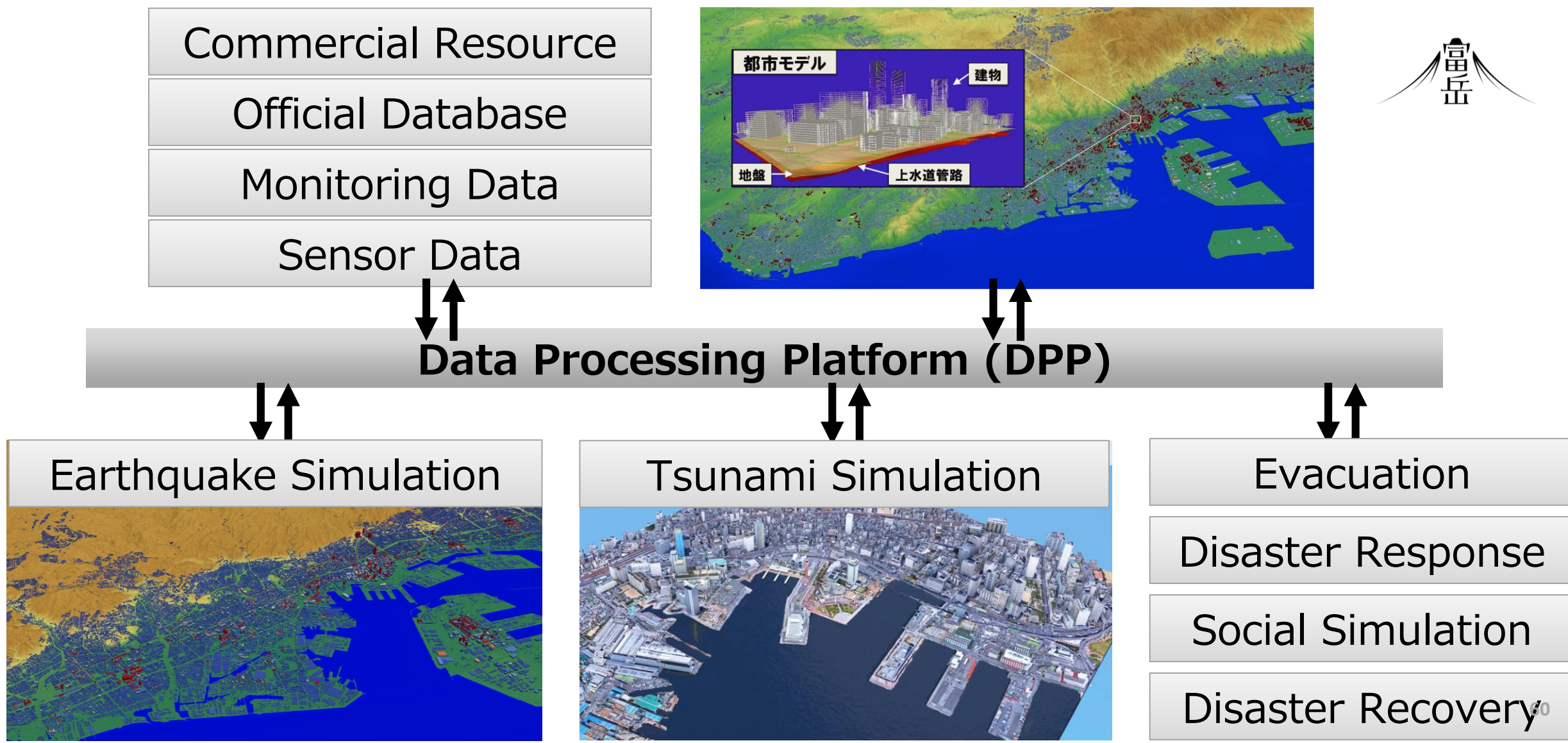


<https://www.mti.co.jp/?p=21823>

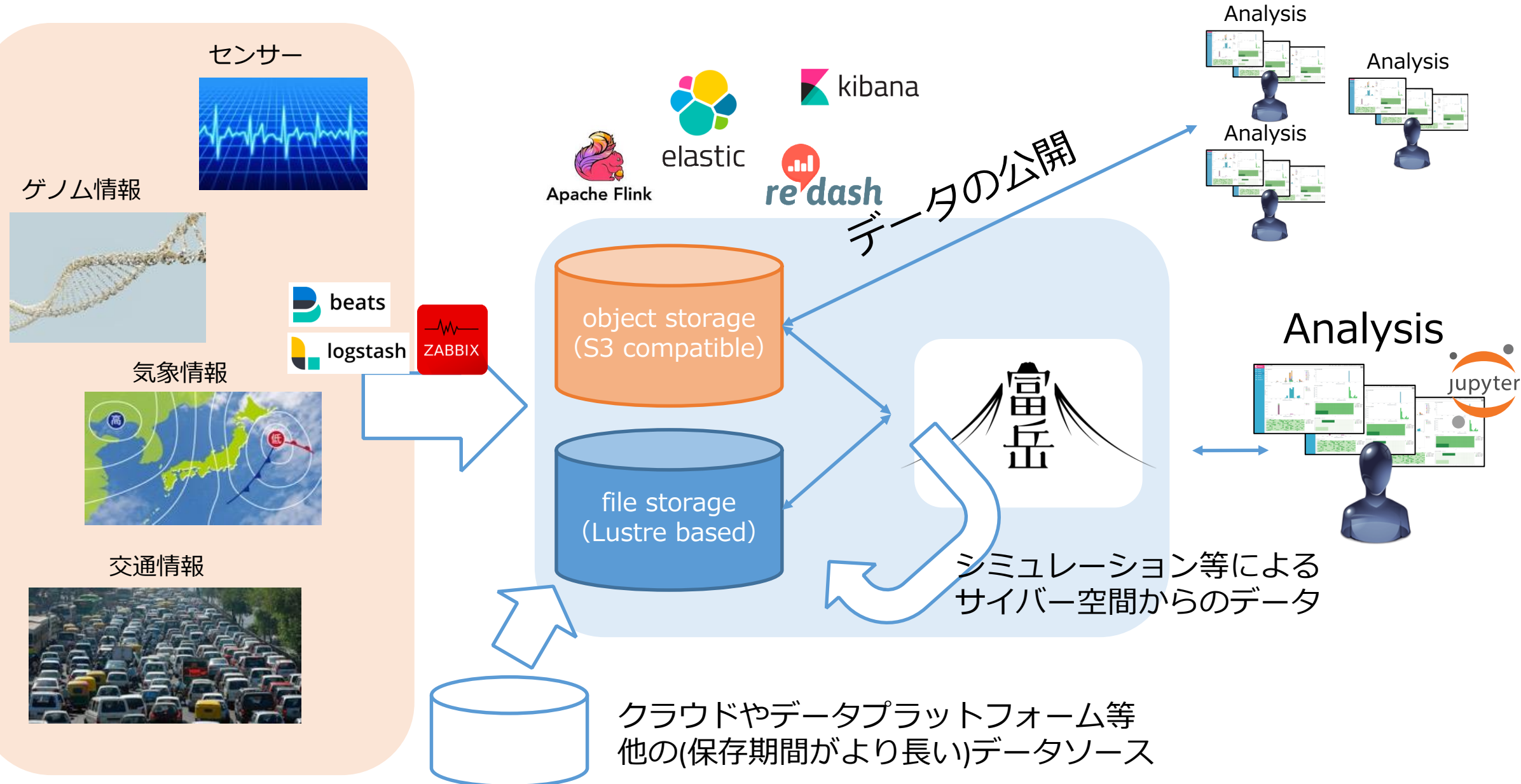




**A variety of data and simulations will be connected by DPP and form a framework**







# 富岳：Society5.0の中核プラットフォームへ

＜政策的位置づけ＞ 総合科学技術・イノベーション会議から文部科学省への指示（2018年11月22日）

- ・「富岳」を利用したSociety5.0実現のためには、ビッグデータの活用において国全体で進めていくことが重要。
- ・関係府省・機関との連携を取りながら、「富岳」利用の仕組みをつくること。

## 理研の取り組み ～内閣府、文科省の協力等をいただきつつ～



### 本格的な産学官協働体制

- 産学協働を産み出す機能を新設
  - ・潜在的ユーザーの掘り起こし
  - ・ユーザーが「富岳」を利活用できる環境整備の実施
- Society5.0への貢献に必須な経団連レベルでの協働構築（経団連、内閣府、文科省、理研にて相談開始）
- 個別研究者ネットワークに基づく産学官協働 自動車用次世代CAEコンソーシアム（2017年設立）

科学的な成果に加え、Society5.0に貢献する成果創出を実現）

### 戦略的国際連携

- 米国・エネルギー省（DOE）と、ポストムーア、AI、量子コンピュータに関する連携に向けて準備中
- 欧州と、富岳テクノロジーの汎用性を活かした連携等を強化中
- ASEANのHPCネットワーク構想と日本の富岳中核HPCIとの連携に向けた「Asia-Hub 構想」の実現に向け、シンガポールの研究機関 A\*STAR等と実務レベルでの協議を実施

世界的拠点化を目指す

### 人材育成など

- Society5.0を支える人材育成データ関連の創造的・高度人材の産業界を含めた育成に貢献
- 社会発信の強化
  - ・「富岳」のコロナ対策利用について、特設ページを設けた情報発信
  - ・記者勉強会を5月15日、6月17日に開催
  - ・6月22日開催のISC2020(バーチャル開催)におけるランキング発表について、国内メディアを通じて積極的に情報発信

イノベーションの基盤たる人材育成と、「富岳」時代の社会発信を目指す

# 「富岳」による新型コロナウイルスへの取り組み

富岳

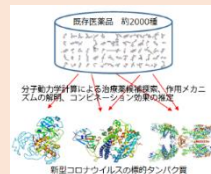


# 新型コロナウイルス対策に関する貢献

## – Society5.0的社会要求に対する迅速な対応 –

### 医学的側面からの研究

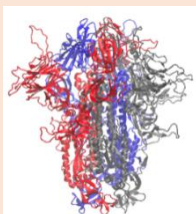
#### 「富岳」による 新型コロナウイルスの治療薬候補同定



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)

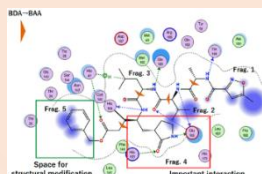
#### 「富岳」を用いた新型コロナウイルス 表面のタンパク質動的構造予測



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)

#### 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

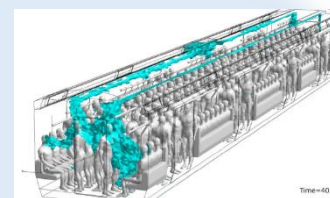


新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算を系統的に実施し、詳細な相互作用解析を行う。

(課題代表者；立教大学 望月 祐志)

#### 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。

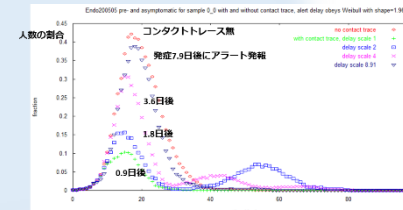


(課題代表者；理化学研究所/神戸大学 坪倉 誠)

### 社会的側面からの研究

#### 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)

理化学研究所 計算科学研究センターは、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

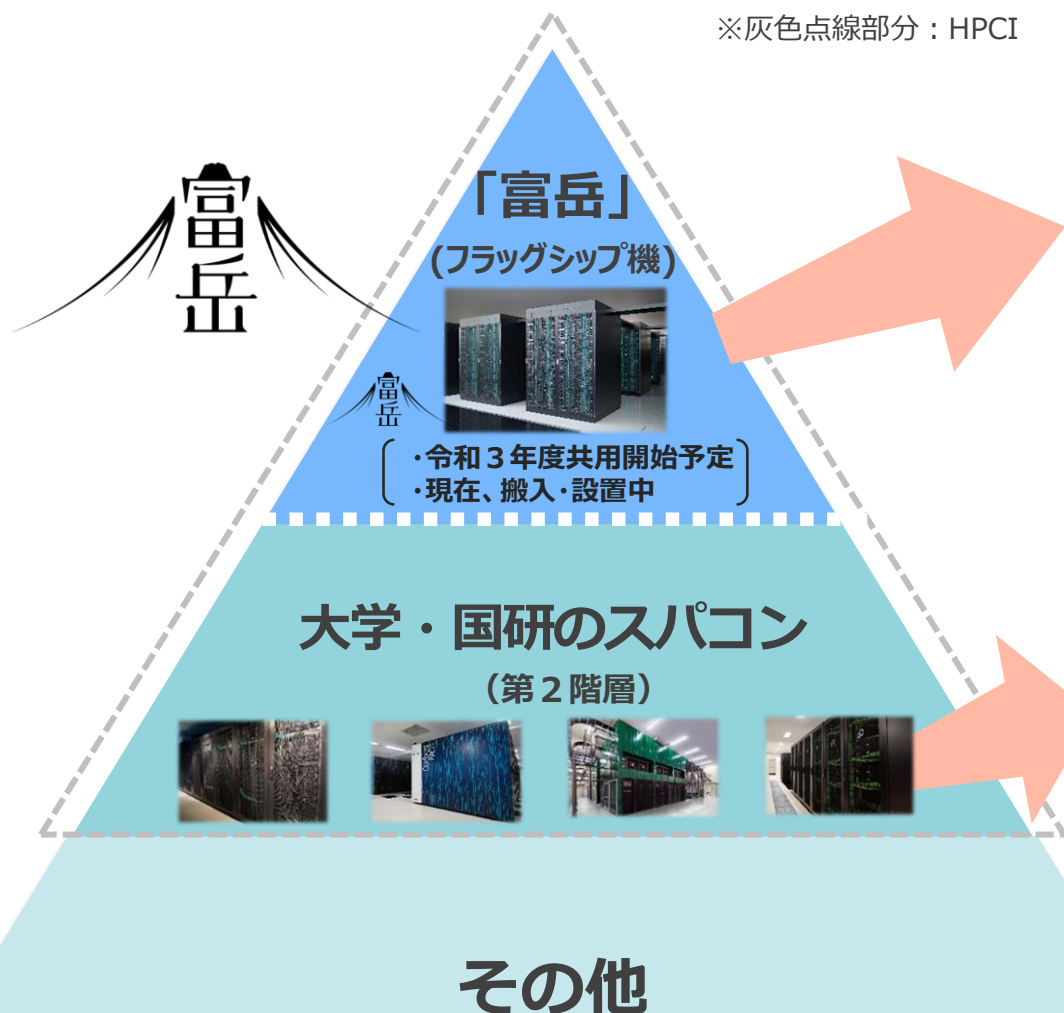


# 新型コロナウイルスに係る研究等へのスパコン利活用スキーム

- ・ スパコンは我が国の科学技術イノベーションの発展を支える重要な計算基盤であり、新型コロナウイルスの研究・対策についても同様
- ・ 令和2年度から試行的利用を開始する「富岳」のほか、大学・国研が有する我が国の計算資源を同研究に対し、積極的に活用

## 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)

※灰色点線部分：HPCI



## 「富岳」

【4/7より課題実施】

- 現時点で提供可能な計算資源を活用
- 研究課題については、**設置・運用法人である理化学研究所と連携**のうえ、**文部科学省にて決定**  
(実施課題) ※課題追加に係る窓口を理研に設置
  - ◆ 新型コロナウイルス治療薬候補同定
  - ◆ 新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測
  - ◆ パンデミック現象及び対策のシミュレーション解析 等

## 大学・国研のスパコン(「富岳」以外)

【4/15から公募開始】

- HPCI構成機関(大学・国研)に対し、計算資源の協力を依頼
- 早急に**臨時公募**および**迅速な審査**を実施し、新型コロナウイルスに係る課題に対し、計算資源を活用
- **4/30、採択された課題(5課題)を発表**  
(採択課題) ※公募は継続中
  - ◆ 新型コロナウイルスのRNA、タンパク質等に関する解析
  - ◆ 新型コロナウイルス増殖阻害化合物の探索 等

# 「富岳」による新型コロナウイルスの治療薬候補同定

理化学研究所 / 京都大学 奥野 恭史

## 実施内容：

現在、既存治療薬の新型コロナウイルスへの効果を確認する臨床試験が国内外で進められている。これらの試験を通じて、一部、薬効を示したなどの報告もあるが、症例数が少ないなど、未だ効果的な治療薬を特定するに至っていない。また、試験されている薬剤も数種類であり、どの薬剤も明確な効果を示すことが見いだされない可能性もありうる。

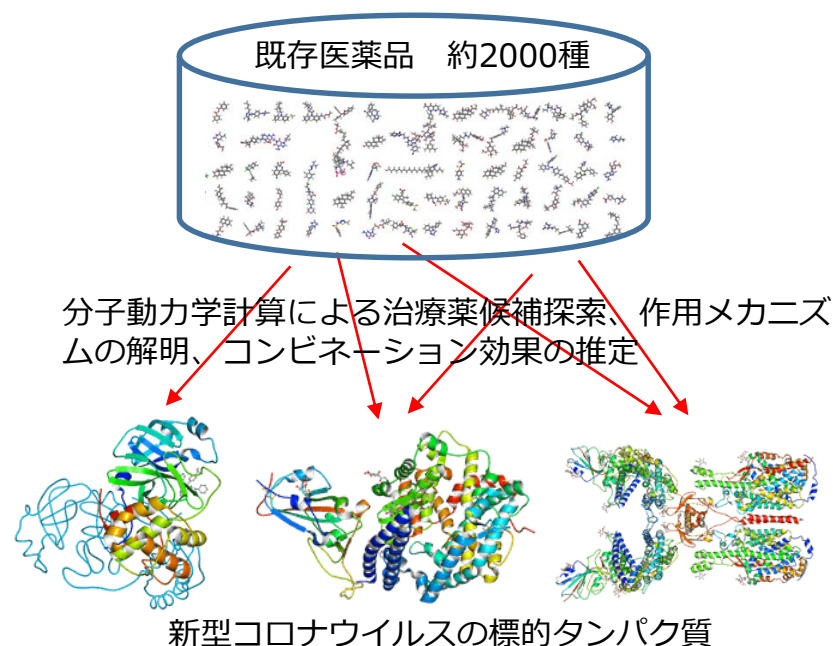
そこで、本研究では、「富岳」を用いた分子動力学計算により、臨床試験で対象にされている既存の抗ウイルス薬に限定せず、約2000種の既存医薬品の中から、新型コロナウイルスの標的タンパク質（プロテアーゼなど）に高い親和性を示す治療薬候補を探索・同定する。

## 期待される成果：

- ・現在、国内外で実施されている臨床試験の抗ウイルス薬に限定せず、約2000種の既存医薬品の中から候補探索を行うため、新たな治療薬候補の発見が期待される。

- ・複数の薬剤のタンパク質への作用を同時に評価できるため、複数の薬剤のコンビネーション効果を推定できる可能性がある。

- ・分子動力学計算により、薬剤と標的タンパク質の作用が分子レベルで明らかになることから、現在、臨床試験がなされている抗ウイルス薬の作用メカニズムの知見を得られる。さらに、これらの知見により、既存医薬品を越える新規な薬剤開発の明確な方針が得られる。



理化学研究所 杉田有治

## 実施内容：

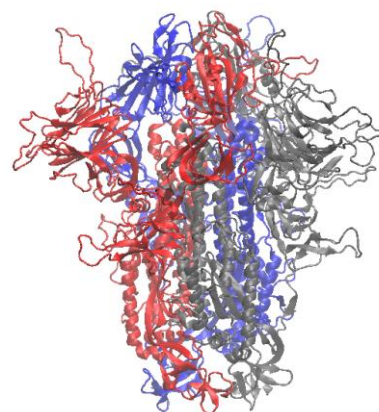
新型コロナウイルス が細胞に侵入する際に、ウィルス表面に存在するタンパク質が細胞表面にあるレセプタータンパク質に認識される。このウィルス侵入の初期過程を阻害する薬剤を開発することは、新型コロナウイルス の治療に役立つと期待される。

本研究では、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。特に、理研で開発している分子動力学ソフトウェアGENESISは、「富岳」に最適化されており、「京」と比較して125倍のアプリケーション性能を持つ。さらに、タンパク質内で注目すべき一部分の運動を加速する手法（gREST法）を「富岳」の利点である並列計算として使うことで、他の手法では実現できない大きな構造変化を予測する。

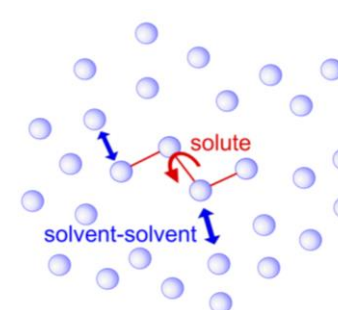


## 期待される成果：

- 実験的には得ることのできないウィルスの動的構造を予測することで、レセプタータンパク質との結合状態を理解する。
- 分子動力学計算で得られた立体構造を用いることで、レセプターとの結合を阻害する薬剤分子開発を促進すると期待される。



ウィルス表面のタンパク質



一部分の運動を加速するgREST法

望月祐志（立教大学）



## ■実施体制と目的

望月祐志(立教大学)が代表統括となり、理論創薬の専門家である田中成典(神戸大学)と福澤薫(星薬科大学)らと密接に連携する。自主開発してきたABINIT-MPプログラムを用い、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い、得られたデータを公開する。

## ■これまでのエビデンス

ABINIT-MPは理論創薬分野で解析ツールとして十数年に渡って使われており、「京」の上では福澤が主催するFMO創薬コンソーシアム(FMODD)活動も展開された。今回の件でも、主要プロテアーゼと阻害剤N3のPDBでの構造[右図参照]公表直後から、名大FX100を用いた計算を行い、一連の解析とChemRxivでの論文公開を一ヶ月で達成した。知見として、阻害剤と相互作用する重要残基群の特定[右下図参照]、と阻害剤の改良指針が得られた。

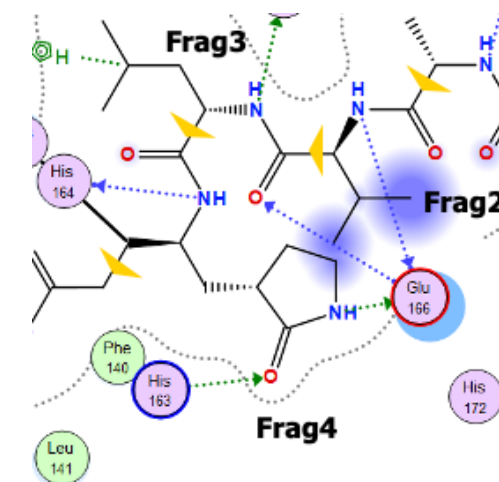
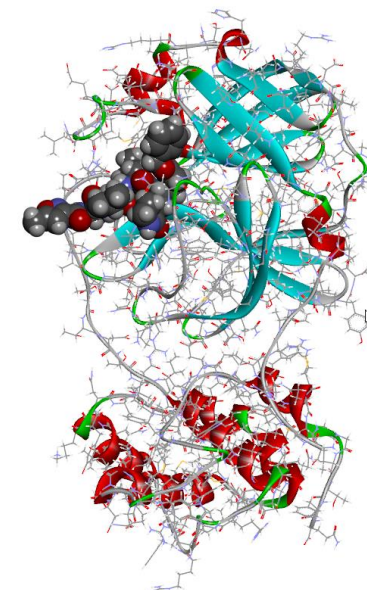
[https://chemrxiv.org/articles/Fragment\\_Molecular\\_Orbital\\_Based\\_Interaction\\_Analyses\\_on\\_COVID-19\\_Main\\_Protease\\_-\\_Inhibitor\\_N3\\_Complex\\_PDB\\_ID\\_6LU7\\_/11988120/1](https://chemrxiv.org/articles/Fragment_Molecular_Orbital_Based_Interaction_Analyses_on_COVID-19_Main_Protease_-_Inhibitor_N3_Complex_PDB_ID_6LU7_/11988120/1)

## ■実施予定内容

①上記のプロテアーゼ等、新型コロナウイルス(SARS-CoV-2/COVID-19)に関連するタンパク質と阻害剤候補群に対する探索的計算と解析(構造ゆらぎ等も考慮)、②類縁のSARSウイルス関係のタンパク質に対する同計算・解析、③重要な計算結果データのFMODB(FMOデータベース)での公開

## ■期待される成果

①阻害剤と残基群の相互作用情報に基づく候補選別に関する補助情報の取得、②新規阻害剤開発に資する基礎情報の演繹、③機械学習等のデータ科学的解析への情報提供





理化学研究所 伊藤 伸泰

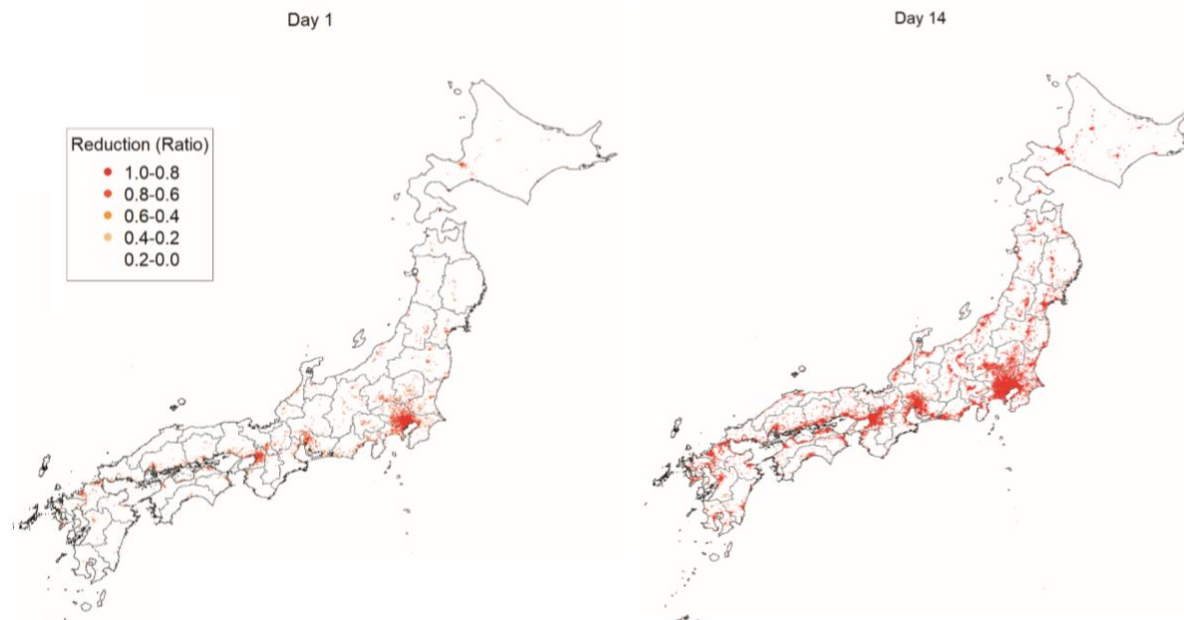
## 実施内容：

今回の新型コロナウイルスの感染伝播に伴い、社会経済への影響が広がっている。その様子を可視化し、影響を分析するビッグデータマイニングが試みられている。これらに加えて本研究では、「富岳」はじめとするスーパーコンピュータを活用し、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。そのために、感染シミュレーション・SNSテキストマイニング・企業活動シミュレーションを、産業技術総合研究所・筑波大学・東京工業大学・京都大学・兵庫県立大学・琉球大学とともに進める。



## 期待される成果：

- ・今後の感染、社会・企業活動、マクロ経済への影響を左右する行動・施策を探り、悪化を招く因子および改善に導く因子の候補を明らかとすることが期待される。
- ・首都圏・関西圏など、地域ごとの感染・社会経済の状況を反映し、複合的な効果を考慮した施策の立案に助することが期待される。
- ・今回の新型コロナウイルスの感染伝播に限らず、大規模な災害・事故とその影響の伝搬を制御し、被害を抑える施策にもつながる。



東京地区をロックダウンした場合に各地の企業活動がどのような影響を被るかについて、予備的なシミュレーション結果。左が1日目、右が14日目の様子。井上（兵庫県立大）による。本研究では、「富岳」を使って全面的なロックアップに限らず、部分的な制約を多様に探索する。

# 室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策

理化学研究所/神戸大学 坪倉 誠



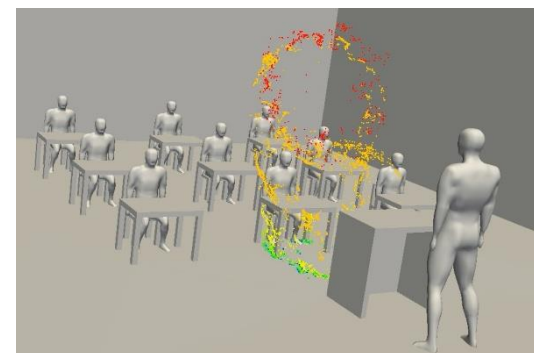
## 実施内容:

ウイルス感染の内、くしゃみ、せき、発話等で発生する飛沫による感染は、飛沫の飛散経路が感染者と非感染者の間の空気の流れや湿度、温度等に大きく依存する。また新型コロナウイルスについては、通常の飛沫感染に加えて飛沫が空気中で微小化したエアロゾルでの感染の可能性も示唆されている。微小飛沫であるエアロゾルはより長時間空気中を漂うことから、飛沫感染リスクの評価と感染予防対策の提言のためには、飛沫の飛散経路を正しく予測し、周囲流れの影響が感染にどのような影響を与えるのかを正しく推定する必要がある。本課題では、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、様々な条件下での感染リスク評価を行った上で、空調、換気、パーティション等を活用した感染リスク低減対策の提案を行う。

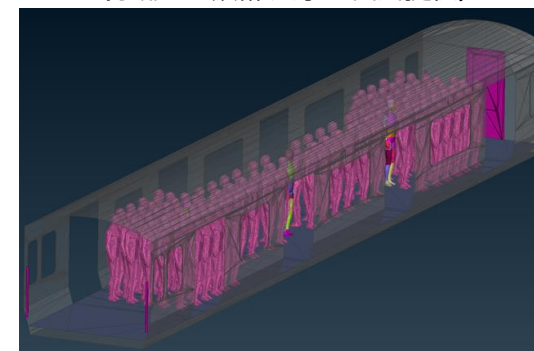
本課題は、理研、京都工芸繊維大、神戸大、大阪大、豊橋技科大、鹿島建設が連携する。理研が開発し「富岳」に実装を進めている超大規模熱流体解析ソフトCUBEを主に用いて、既存の飛沫計算では難しかった、高精度かつ大規模な系でのシミュレーションを行う。

## 期待される成果:

室内環境における感染リスクの定量的評価を行うと共に、窓の開閉や空調の効果的運転条件、さらにはパーティションの配置等による感染リスク低減策を具体的・定量的に示すことで、ウイルス飛沫感染に対してより安全・安心な生活環境を実現する。また、シミュレーション結果を動画とすることで、具体的に飛沫や飛沫核がどの程度の速度でどこまで飛散するのかを視覚的に理解することができ、感染防止に向けた認識や理解を広く普及させることができる。これをもって、我が国の社会経済活動の早期復活に寄与できると期待される。



教室における飛沫飛散シミュレーションの例  
(京都工芸繊維大学 山川提供)

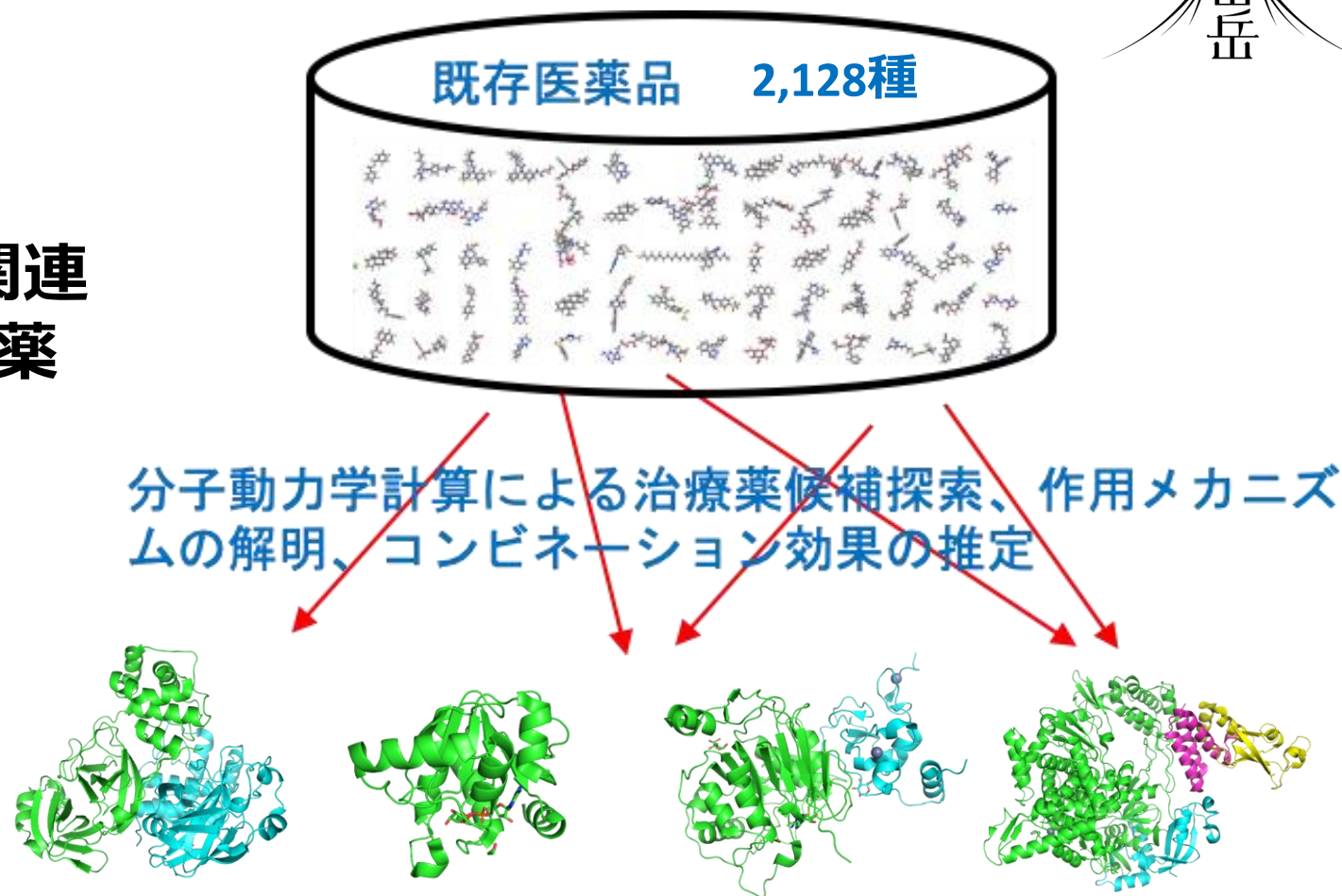


通勤列車モデル



# 「富岳」による新型コロナウイルスの治療薬候補同定

「富岳」を用いた分子シミュレーション  
(分子動力学計算) により、  
現場利用されている2,128種の  
既存医薬品の中から、  
新型コロナウイルスの増殖・感染に関連  
する標的タンパク質に作用する治療薬  
候補を探索する。

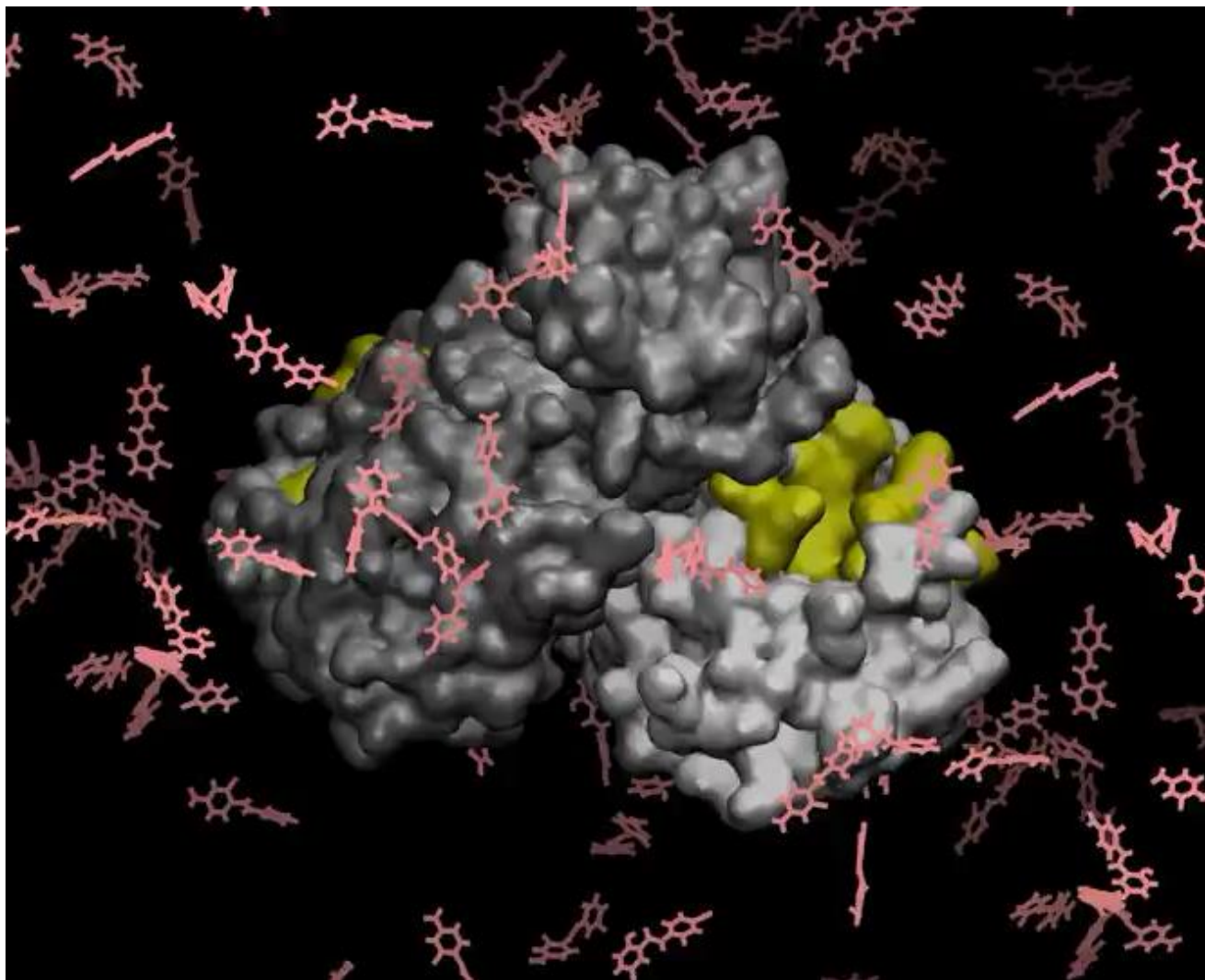


新型コロナウイルスの増殖に関連するタンパク質

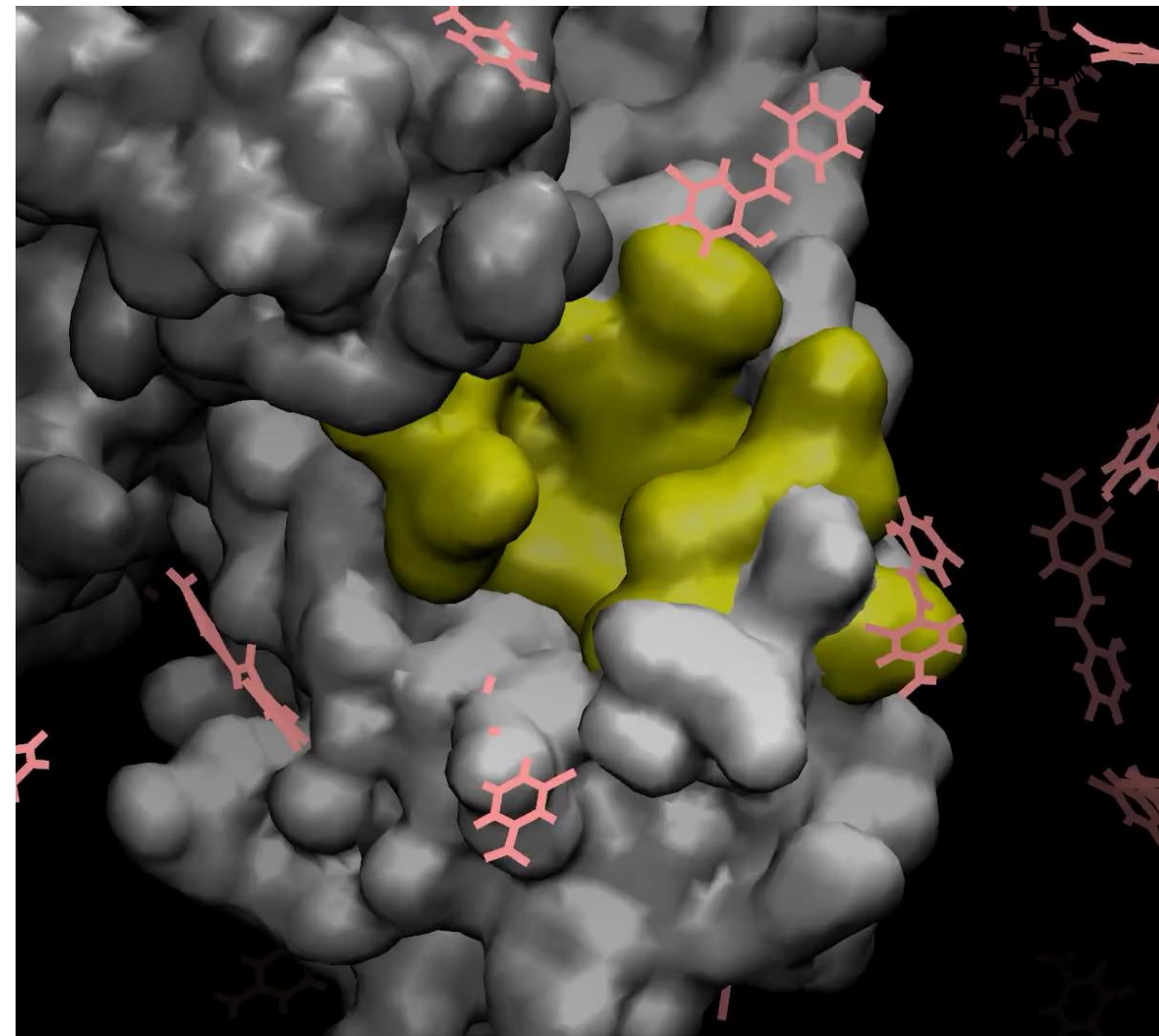


# メインプロテアーゼ（タンパク質）とニクロサミド（薬）との作用の様子

メインプロテアーゼ全体（灰色＋黄色）を表示



活性ポケット（黄色）を拡大表示



ピンク色：ニクロサミド（富岳によって活性ランキング2位で選抜され、海外治験がされている薬剤）<sup>72</sup>



# 富岳による2,128種の薬剤候補ランキング

国内製薬のオリジナル製品。海外での研究報告無し

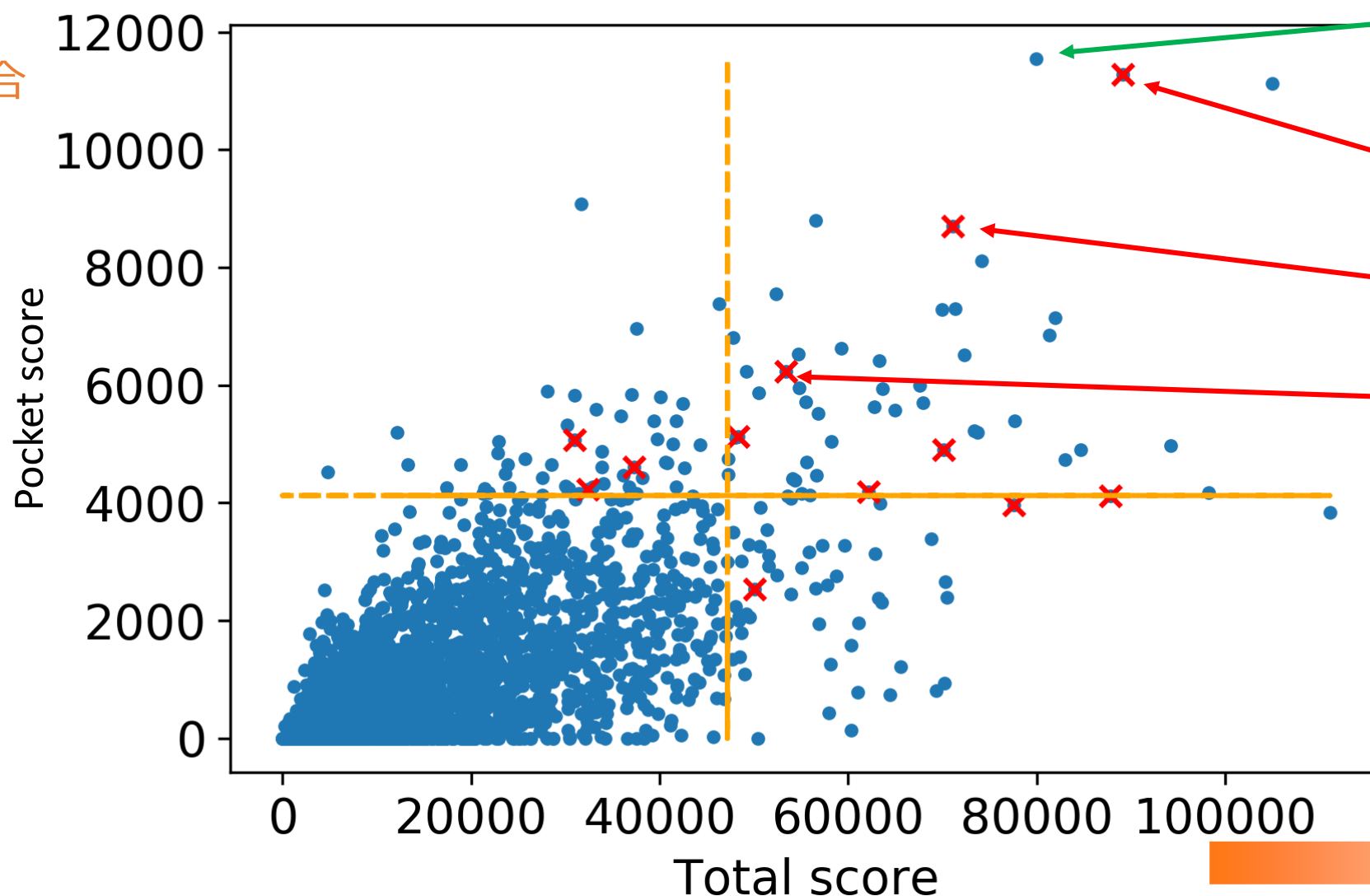
富岳

ニクロサミド

ニタゾキサニド

薬局でも購入可能な国内市販薬

×：臨床研究、治験が実施されている薬剤  
12種



横軸：Total score (タンパク質の表面全体にその薬剤が滞在している時間をスコアにしたもの)

縦軸：Pocket score (活性ポケットにその薬剤が滞在している時間をスコアにしたもの)

オレンジ点線：ランキング上位100個の境界



- 新型コロナの増殖に関係するメインプロテアーゼに作用する薬剤候補が数10種類選択された。
- 選択された候補薬剤のうち、12種の薬剤については海外で臨床研究や治験が実施されており、今回の計算によって選択されてきた候補薬が、有望であることを示唆している。
- 海外で評価されている12薬剤のうち、ニクロサミド（1位）、ニタゾキサニド（2位）は国内未承認であるが、3位の薬剤は国内承認され薬局で販売される医薬品である。これらはレムデシビルよりも効果が高いとの報告もある。
- 富岳での計算結果ランキング1位のものは国内製薬企業のオリジナル製品であり、海外でも新型コロナとの関連性の報告がなく、承認されれば日本発の新型コロナ治療薬の可能性もある。
- 現在、候補薬剤について、国内医療機関と連携し、臨床研究・治験等を準備中。製薬会社との協議も開始。また、理研での細胞実験での検証を行い、適宜、公表する。
- 2128種の薬剤とメインプロテアーゼの結合シミュレーションを行うために、富岳で10日間要した。計算アプリを富岳用にチューンできれば2日程度で完了できると思われる。
- いずれにせよ、数千規模の化合物とタンパク質の作用過程を分子動力学計算レベルで計算した事例は世界で初めてであり、学術的にも高いインパクトがある。

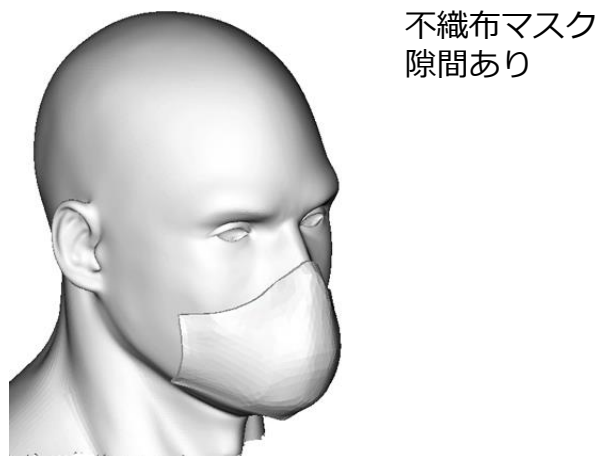
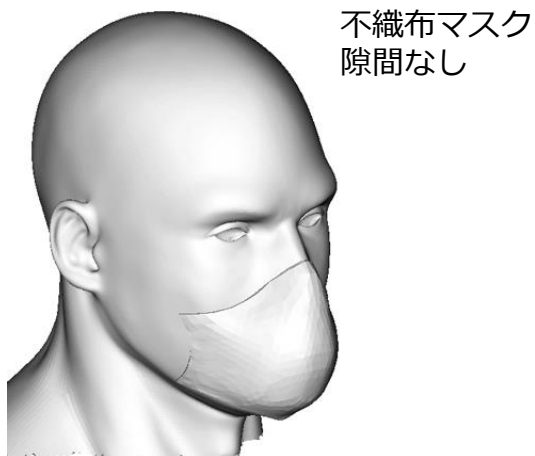
# 室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策



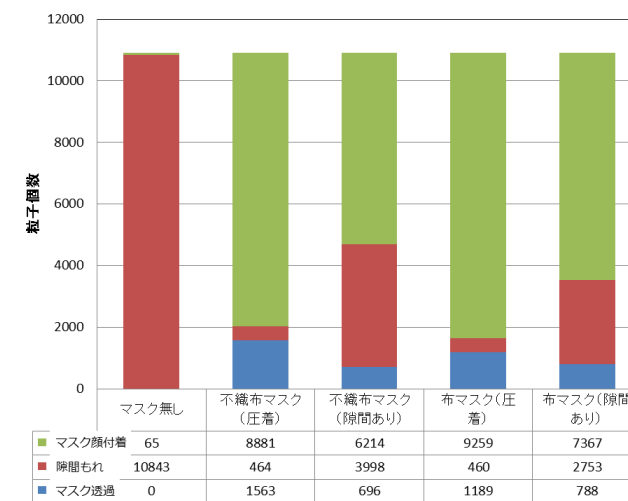
## 概要:

- ウイルス飛沫・エアロゾル感染の予測とその対策提案をシミュレーションを用いて行う。
- 近距離感染の他、オフィス、病室、教室、通勤列車内といった室内環境を想定する。
- 目に見えない飛沫を可視化し、社会に発信することで、飛沫・エアロゾルに対する正しい理解とリスク認知、感染予防の啓発を行う。

## ～咳をした際のマスクの効果について～



- マスクを着用することで、外部に漏れる飛沫量は六分の一程度まで下げることができる
- 顔とマスクを密着させないと、飛沫をブロックする効果は半減してしまう
- 布マスクでも不織布マスクと同等の効果が期待できる
- 隙間からもれる飛沫の大部分は5ミクロン以下のエアロゾル
- エアロゾルに対しては換気等の別の対策が重要



# 室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策

～咳をした際の湿度の効果について～

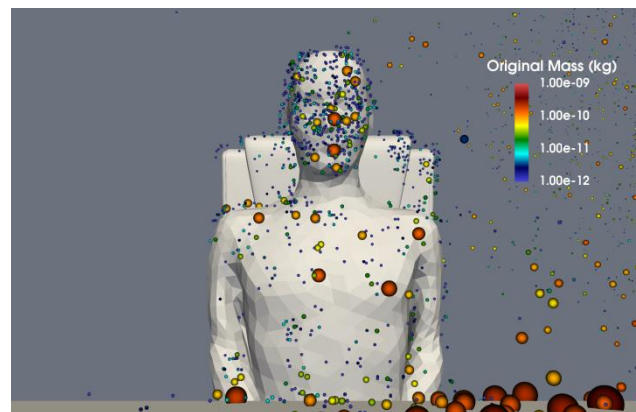
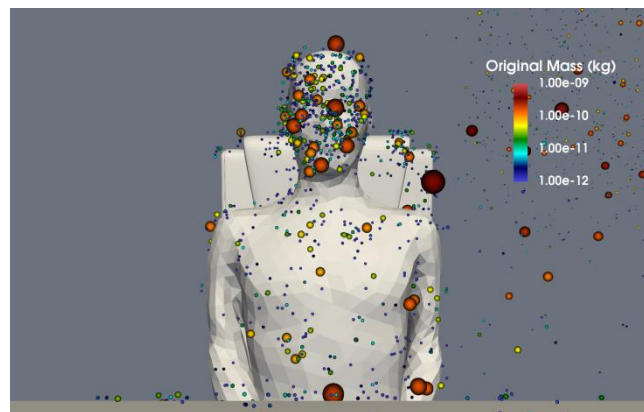
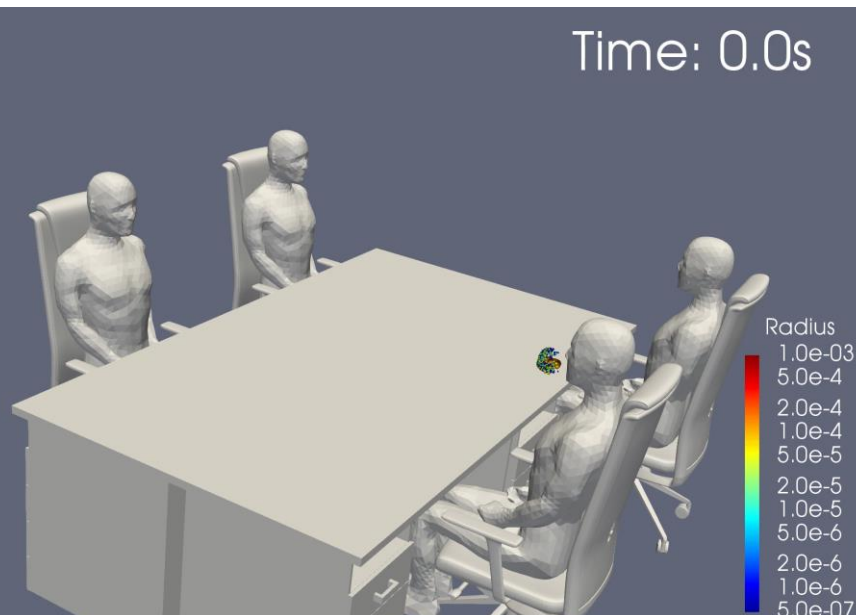
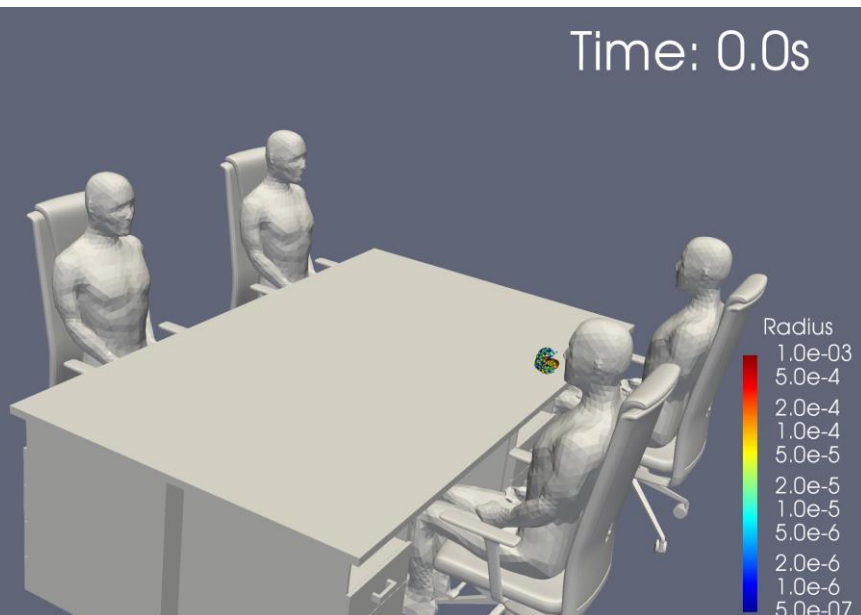


湿度30%

湿度90%

Time: 0.0s

Time: 0.0s

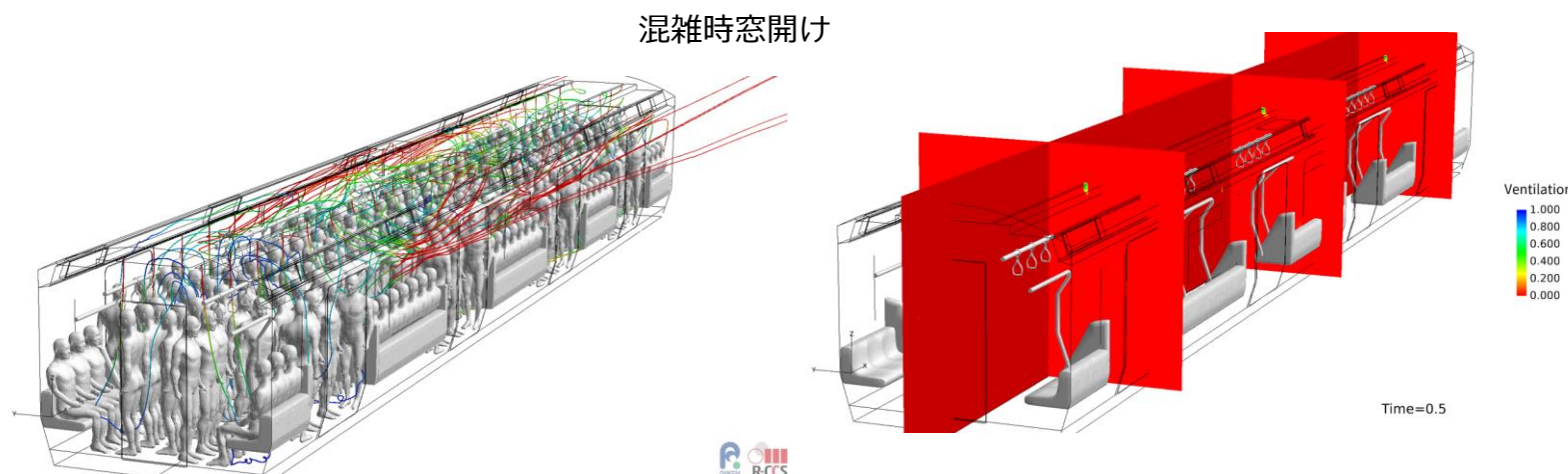
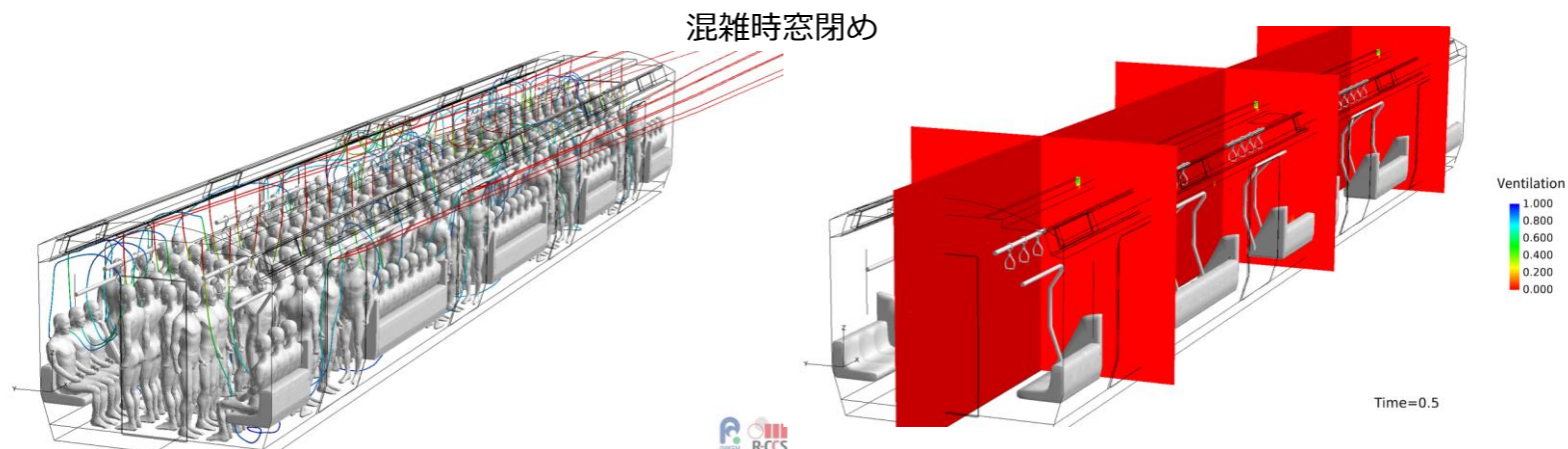


- 湿度は飛沫の蒸発に影響を与える。
- 湿度が高い状態では飛沫は大きいまま、机の上に落下し、接触感染リスクが相対的に高まる。
- 湿度が低い状態では飛沫の微小化が急速に進み、エアロゾル感染リスクが相対的に高まる。
- 季節に応じて様々な感染リスクの相対的重要度が変化する。



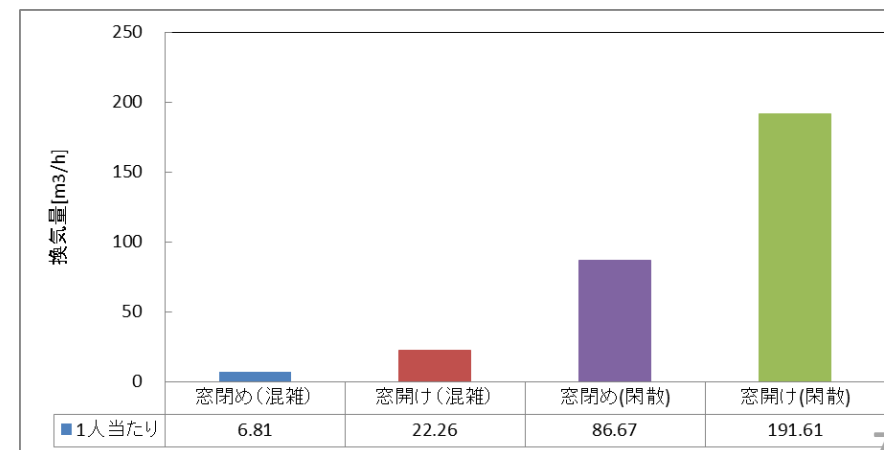
# 室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策

## ～通勤列車内のエアロゾル感染リスク～



- 乗車率150%程度の車内では、乗客一人当たりの換気量は一般オフィスの四分の一程度まで下がってしまう（エアロゾル感染リスク高）。
- 窓を開けて換気することで換気量は3倍程度まで改善する（一般オフィスとほぼ同じ）。
- 混雑した車内では換気に対するむらができ、**場所により相対的リスクが変わる**。感染リスクをできるだけ均等にするためには乗車率を下げる必要がある。

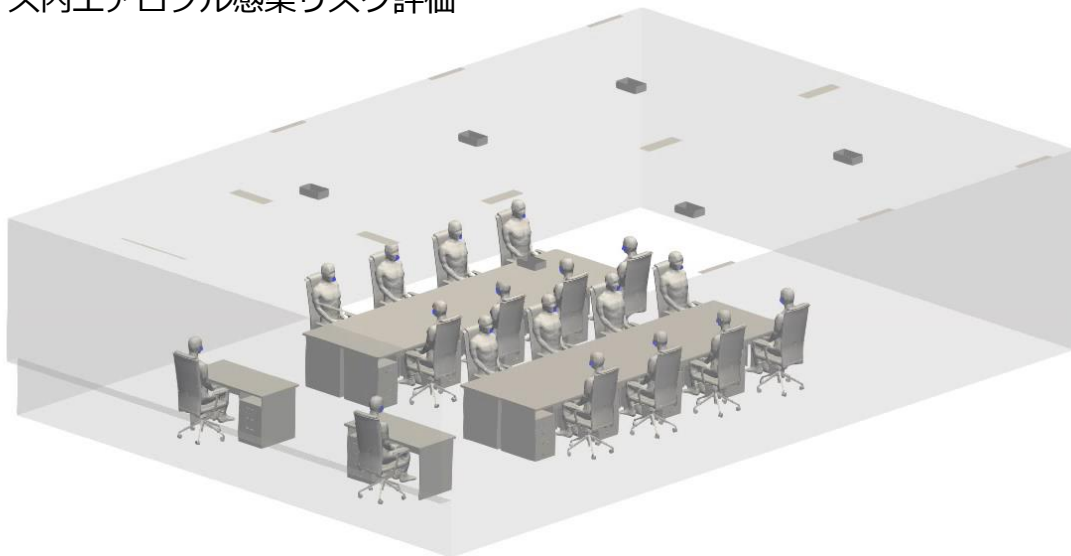
乗客1人当たりの推定換気量



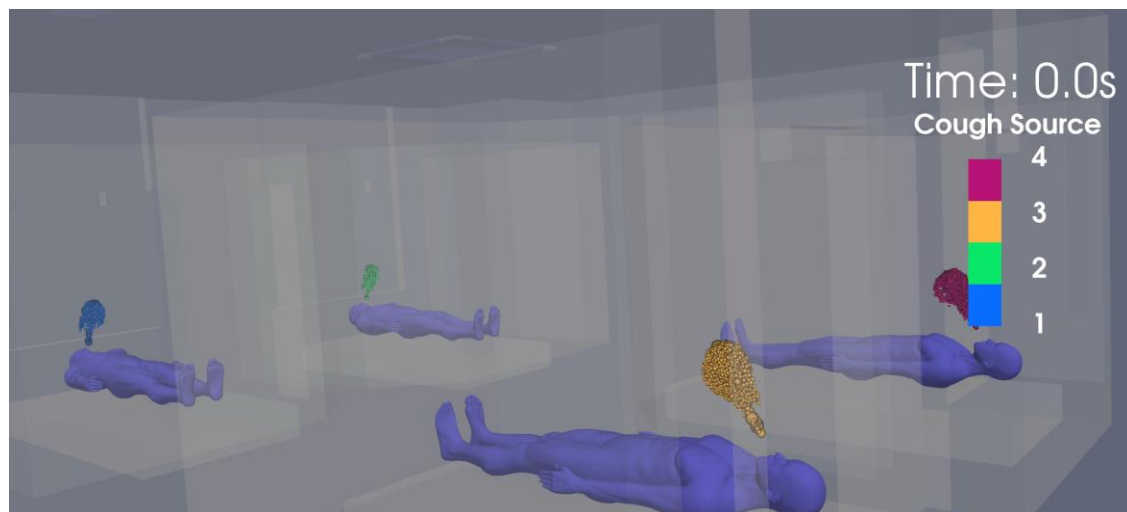
# 室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策

## ～状況に応じたリスク評価～

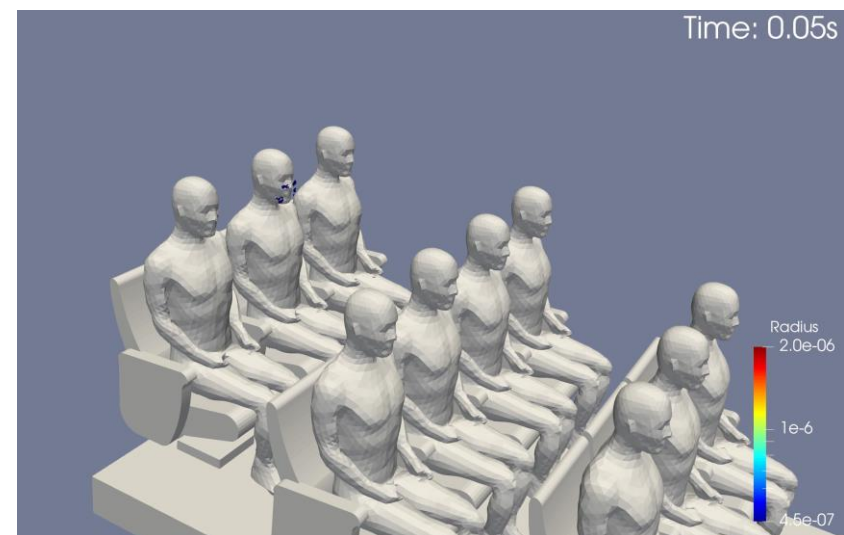
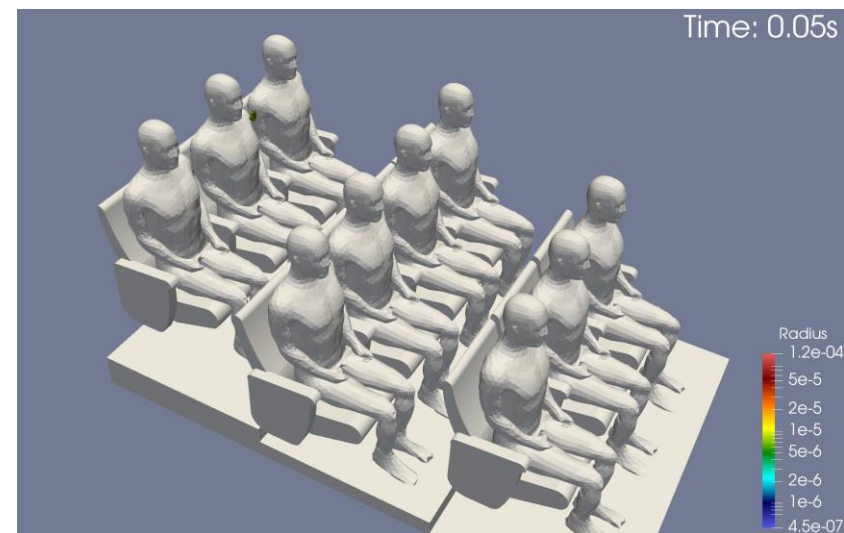
オフィス内エアロゾル感染リスク評価



病室内飛沫飛散予測



コンサートホールにおけるマスク着用効果



# 量子コンピュータ開発でのリーダーシップは富岳が不可欠

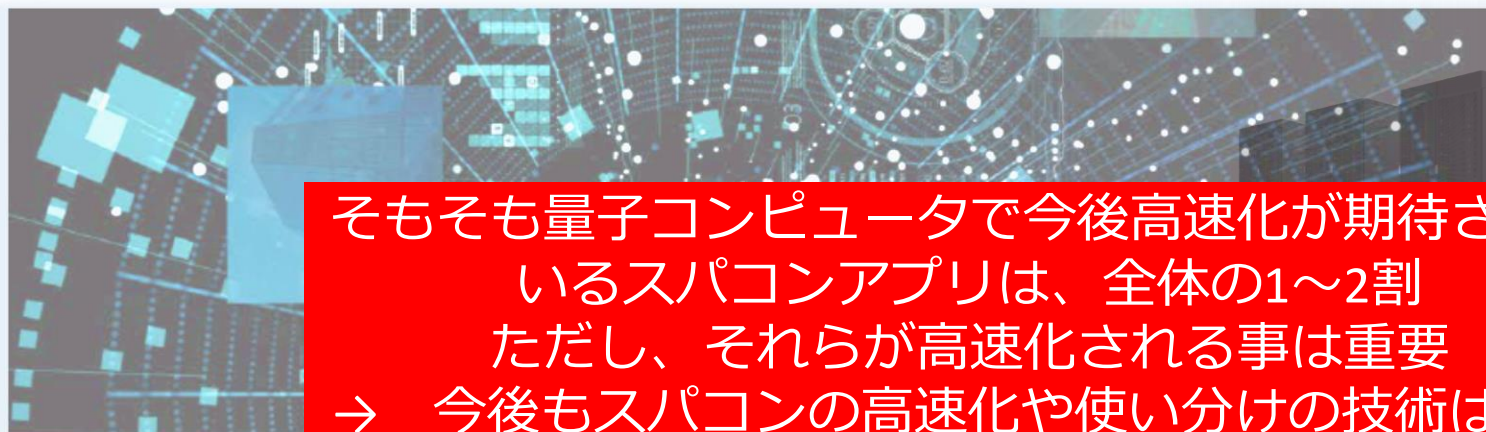


量子コンピュータにスパコン（富岳）は不可欠

- 量子ゲート素子開発のための物理シミュレーション
  - ✓ 多くの素子開発がスパコンのMaterial Informaticsをベースに実施中
- 量子アルゴリズムのシミュレーション
  - ✓ 米国、フランスで実際にスパコン上でシミュレーションを通じ研究中
- 量子超越性を比較・検証するためのHPCI
  - ✓ Google の量子超越性の主張根拠とIBMの反証もスパコンで行われている



量子コンピュータの実現には、トップスパコンの開発と利用が必要



そもそも量子コンピュータで今後高速化が期待されているスパコンアプリは、全体の1~2割  
ただし、それらが高速化される事は重要  
→ 今後もスパコンの高速化や使い分けの技術は必須

