



powered by
FUGAKU

資料1

次世代計算基盤 開発／運用に向けて 理化学研究所の果たすべき役割



理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)
センター長 松岡 聡

2024年4月17日



- シミュレーション、データサイエンスの進展や生成AIに係る技術革新などにより、AIとシミュレーション、さらには自動実験やリアルタイムデータを組合せて科学研究分野で活用する取組の重要性が増しており、**シミュレーションとAI、両者において世界最高水準の性能を達成するフラッグシップシステムを構築することが、社会、産業、科学技術イノベーションの発展の鍵。**
 - ✓ 米国では、エネルギー省の支援によるフロンティアをはじめとするエクサスケールの新たなスーパーコンピュータの開発・整備が進展。
 - ✓ 世界最高水準のスーパーコンピュータにおいては、CPUに加えてGPUなどの加速部（アクセラレーター）を有し、計算の一部を加速部で処理することにより最適化。
- 理化学研究所は、「次世代計算基盤に関する報告書 中間取りまとめ」で示された**次世代計算基盤に求められるフラッグシップシステムに関する提案を踏まえ、シミュレーションとAIとが密に連携して処理が行えるシステムを構築することこそが、我が国の科学技術・イノベーションが世界をリードするために必要不可欠**と認識。
- また、そのシステムはスーパーコンピュータ「富岳」と同様に、**「アプリケーション・ファースト」で整備**されることが必要。

「次世代計算基盤に関する報告書 中間取りまとめ」より抜粋（一部補筆）

- （科学者）コミュニティの試算や産学官の更なる利用の拡大も見越しつつ、（略）、既存の「富岳」ユーザに対しては実行性能として現行の5～10倍以上の計算能力を提供しつつ、AI性能については運用開始時点で世界最高水準（実行性能として少なくとも50EFLOPS以上）の利用環境を提供することを目標として、フラッグシップシステムの開発・整備を行うべき。
- （フラッグシップシステムの開発・整備を行う際には、）今後も自国の技術を中心にスーパーコンピュータを開発・整備する能力を国内に維持し、国内人材育成や産業競争力の維持・発展に資するため、「京」や「富岳」の開発において蓄積してきたCPUの開発及びシステムのインテグレーションに加え、メモリ実装技術の開発をコア技術と位置付けて継続的に開発を行うべきである。また、更なる性能向上や生成AIへの対応を図るため、加速部を導入すべき。また、（略）、最先端のメモリ技術を採用し、利用者にとってさらに魅力的なシステムとなることを期待。
- （略）システムソフトウェア開発においては、アプリケーションやAI等の研究開発のプラットフォームとして、世界で使われている基本的なアプリケーションがこれまで以上に多様かつ円滑に利用できるように設計し、運用開始後も継続してシステムソフトウェアの改善を図るべきである。
- （開発・整備の手法について）（略）時代時代の要請に応じた十分な性能を常に提供し続ける必要が生じている。そのために、フラッグシップの開発・整備においては、
 - ① 「京」から「富岳」への移行時のようなシステムの入替による「端境期」を極力生じさせず、利用環境を維持すること
 - ② 最新の技術動向に対応するために適時・柔軟にシステムを入れ替え又は拡張可能とし、進化し続けるシステムとすること
 - ③ （略）将来の計算資源への対応に大きく貢献し得る技術に関しては、AI技術の次の技術革新を含めた中長期的な視点から技術評価・研究開発を継続し、将来のシステムの入替・拡張の際に反映させること

が重要。

中間取りまとめをふまえて以下の方針でシステムを開発／整備

● 目指す次世代計算基盤の方向性

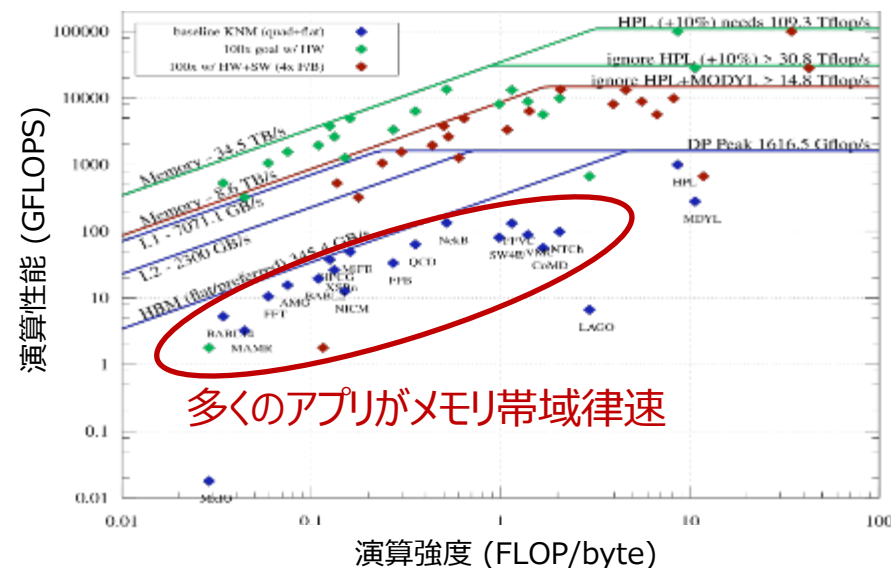
- データ移動の効率化を含めた実効性能重視のアプリケーションファーストなシステム。
- AI-for-Scienceの実現に向けたHPCとAI技術の高度な融合。
- エコシステムへ訴求が可能、かつポスト富岳のみならず広く利用される構成の探求。
- スーパーコンピュータ「富岳」の知見やソフトウェア資産の有効活用と継続的な研究開発。
- 量子コンピューティングとのハイブリッド利用を見据えたプラットフォームの実現。

● 想定するアーキテクチャ／システムソフトウェアの概要

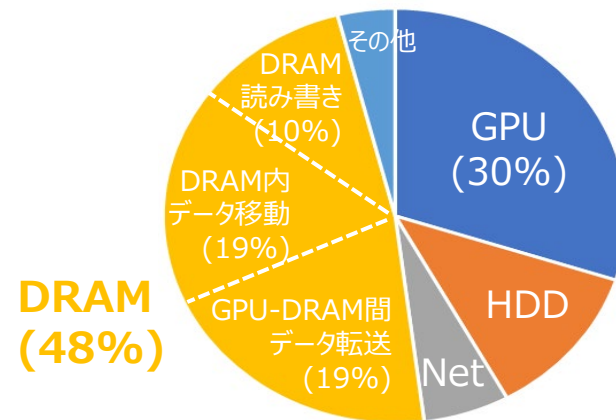
- 国産技術をベースとしたCPUの活用、および世界標準としてのGPUアーキテクチャ等に基づく演算処理加速器の導入。
- プロセッサとメモリの3次元積層など先進的なメモリ技術の積極的な採用。
- 標準規格や既存のエコシステムとの親和性が高いシステム構築。
- 理研で取り組み中の量子HPC連携プラットフォームやTRIP-AGISの発展形としてのシステム整備。

- シミュレーションとAI融合によるサイエンスの進化へ向けて
 - 両ワークロードで世界最高水準の性能を達成しつつ、密に連携して処理が行えるシステムの構築が重要。
 - 多くのHPCアプリやAI推論処理はデータ移動がボトルネック。
- **最先端3次元積層メモリ技術 → データ移動効率化のキー技術**
 - 導入時点で入手可能な最先端3次元積層メモリ技術を利用
 - 実効性能と電力効率の大幅な向上へ。
- **ヘテロジニアス&密結合アーキ**によるワークフロー実行の効率化
 - 国産技術ベースのCPU + GPUアーキ等に基づく演算処理加速。
- **エコシステムを重視しオープン規格を取り入れたシステム構成**
 - 既存のシステムソフトウェア（AIフレームワークやプログラミング環境、ファイルシステム）との互換性を担保。
 - ポスト富岳専用ではなくクラウド等に訴求できるシステムを探求。
- **計算科学ロードマップ / AI-for-Scienceロードマップと足並みをそろえたコデザインによるアーキテクチャ開発を推進**

A64FX上でのルーブリック解析

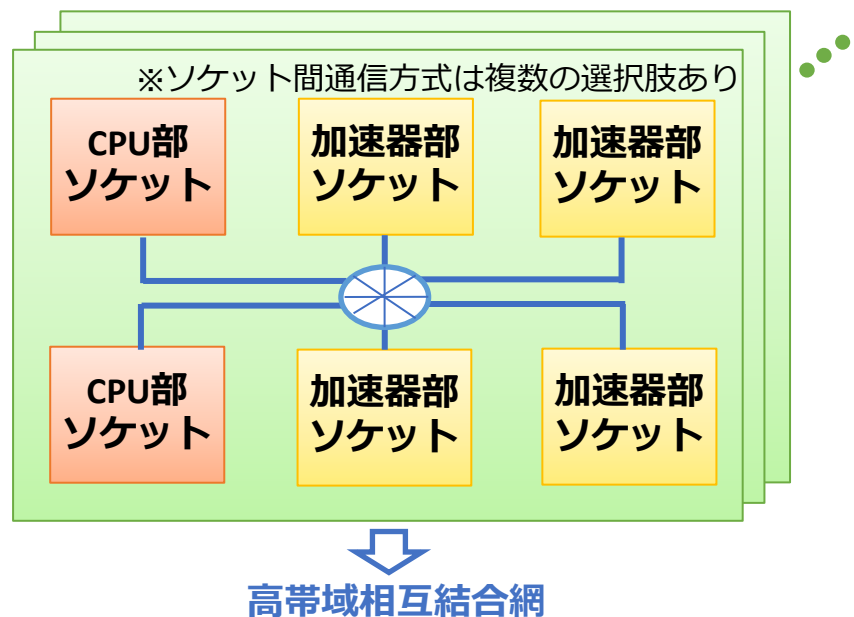


AI時代のGPUサーバの消費電力内訳

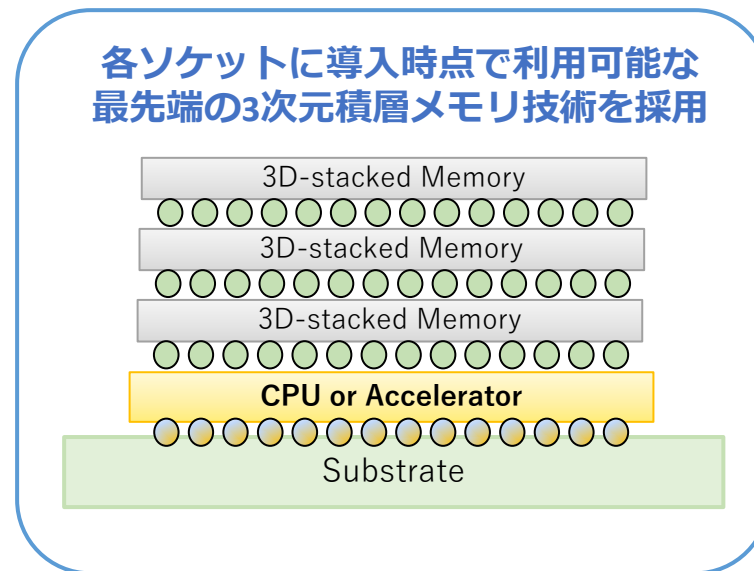


J. Zhao et al., "Optimizing GPU energy efficiency with 3D die-stacking graphics memory and reconfigurable memory interface," in *ACM Trans. Architecture and Code Opt.* vol. 10, Issue 4, pp. 1-25, 2013. を基にAI推論の電力内訳を分析

高帯域&ヘテロジニアスなノードアーキ例



3次元積層メモリ技術例



- CPU & 加速器を搭載する計算ノードを高帯域ネットワークにより数万ノード並列に接続
 - 各計算ノード性能 (ピーク) 想定：200～2000TFLOPS程度 (倍精度)、4～40PFLOPS程度 (AI向け半精度)、40～600TB/s程度 (メモリ帯域)
 - ※ 参考：富岳計算ノード性能 (ピーク)：3.4TFLOPS (倍精度)、13.5TFLOPS (半精度)、1.0TB/s (メモリ帯域)

既存HPCアプリで現行の5～10倍以上の計算能力、50EFLOPS以上のAI実効性能を達成可能なシステムを開発・整備し、シミュレーションとAIの融合により総合的に数十倍のアプリ実行高速化を目指す。

- **理研主導によるソフトウェアの標準化と継続的な発展、さらにクラウドへの展開**
 - バーチャル富岳(クラウドの『富岳』化)の実績を発展させ、クラウド上に次世代計算基盤と同等のソフトウェア環境を展開。
- **「富岳」で開発されたソフトウェア資産、OSS、クラウド技術の有効活用**
 - バーチャル富岳(『富岳』のクラウド化)の機能やインターフェースを継承・拡張をし、富岳から次世代計算基盤へ継続的なアプリケーションサービスを実現。
 - 「富岳」でのOSSを活用したソフトウェア開発・管理実績を継続し、次世代計算基盤のに向けた信頼性の高い次世代ソフトウェアを実現。
- **次世代計算基盤のアーキテクチャを効率よく利用するためのソフトウェア環境**
 - ゴードン・ベル賞受賞アプリケーションの実行を支えたソフトウェア環境の更なる発展により、科学シミュレーションのみならず、AI-for-Science、量子-古典計算やそれらの融合を可能にする最先端のソフトウェア環境の実現。
- **計算科学ロードマップ / AI-for-Science ロードマップに基づき将来必要とされるシステムソフトウェアの移植・新規開発の検討**



システムソフトウェア群

プログラミング環境

数値計算ライブラリ

AIフレームワーク

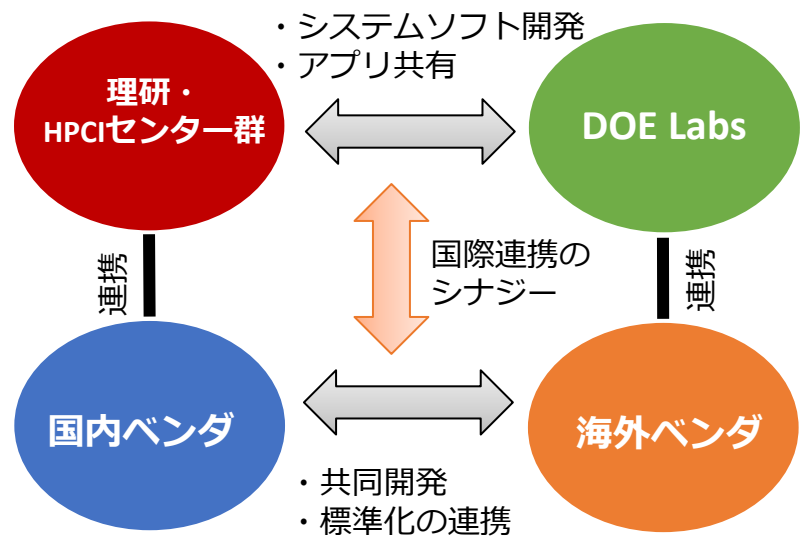
通信ライブラリ

ファイルシステム

スケジューラ

OS・コンテナ

- AIの隆盛によりHPC技術はビジネス・安全保障面で最重要要素の一つになっている
→ 国内で活躍するだけでなく、国際的に通用する人材の育成・確保が急務
- 国内技術・人材と海外技術・人材の連携によるプロジェクト推進
 - 国内のCPU開発技術やシステム構築技術をベースに据えた開発体制の構築
 - 国際連携によりエコシステムに訴求できるハードウェアとシステムソフトウェアの開発を検討
- 文部科学省-米国エネルギー省（DOE）間連携やANL-理研連携の基盤も活用



文科省-DOE連携ワークショップ（2023年2月8日）



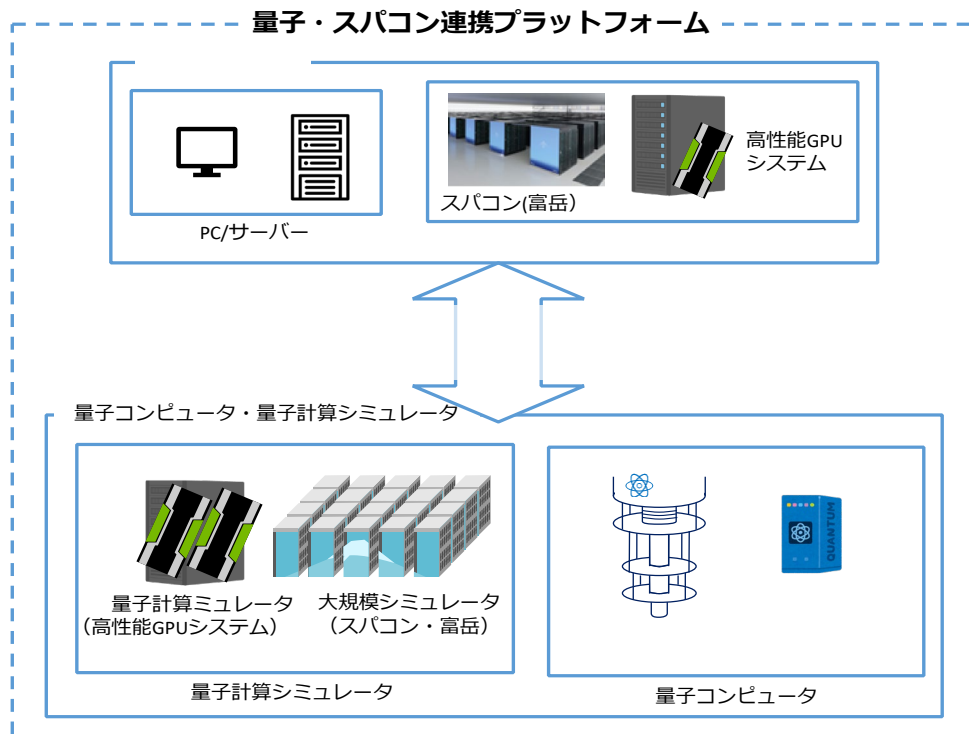
文科省-DOE連携のPAの署名（2024年4月9日）



国内の技術力強化と国際的に通用できる人材強化へ

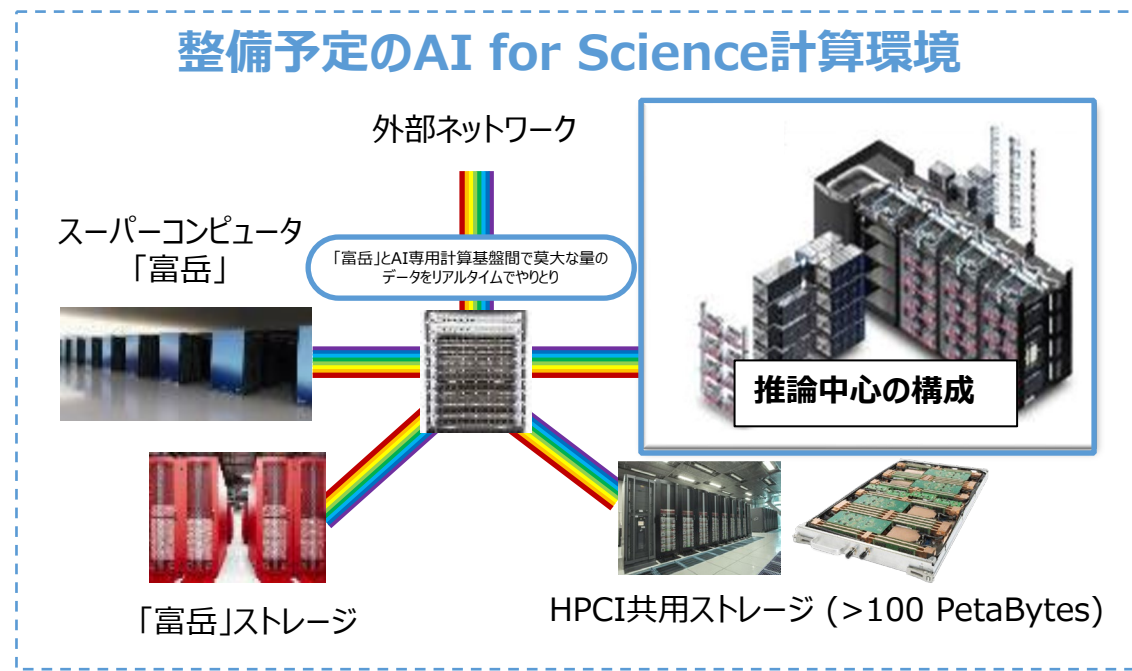
● 量子-HPC連携プラットフォームの構築

- 計算可能領域の拡張を目指すTRIP構想の一環として、R-CCSを中心に、量子コンピュータと「富岳」等HPCを連携させる汎用的なソフトウェアを開発し、「**量子-HPC連携プラットフォーム**」の構築に向けたソフトウェアスタックを開発。2023年度に外部資金を得て研究開発を加速。

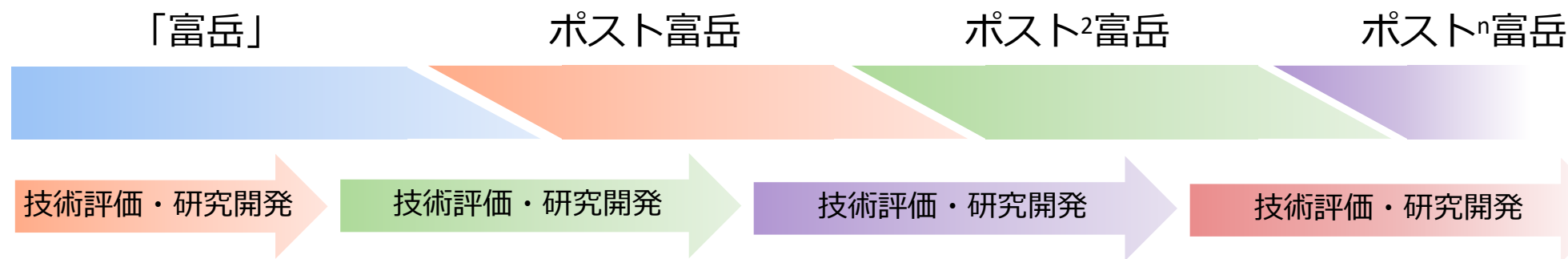


● TRIP-AGIS: 科学研究向け基盤モデルの開発／共用

- 多様な分野の**科学研究の革新**を目指し、科学研究データの追加学習（マルチモーダル化）によりドメイン指向の科学研究向け基盤モデルを開発するプロジェクト。R-CCSは、計算環境の整備・運用、ハードウェア・ソフトウェア開発を主導し「**革新的な計算基盤の開拓**」を推進。



これらの取り組みも発展させつつポスト富岳の開発／整備へ



- ポスト「京」の教訓（計算資源中断による機会損失）を踏まえ 2 システムを一体整備
 - 新旧システムの稼働時期をオーバーラップさせることで、世界最高水準の計算性能と計算資源量の継続的かつ安定的な提供が可能となり、計算科学の研究開発サイクルを途切れなく回すことで成果創出を加速。
 - システム稼働期間を適切に設定することで、将来のニーズの変化や最新の技術動向に柔軟かつ適時に対応。
 - 近接施設での一体整備・運用により、既存の運用体制・施設と共通化できる部分が多く効率化できるほか、最新設備へのアップグレードも容易となり高エネルギー効率かつ低カーボン排出のデータセンタ運用が可能。
 - 技術の評価・研究開発を継続的に実施することで、将来のニーズや最新の技術動向のキャッチアップが可能。

運用技術部門を中心とした先導的な運用の取組み

● 計算システムの運用・開発を持続的に支える組織体制

- 「富岳」運用と並行で「量子HPC連携プラットフォーム」、「AI開発専用計算基盤」の開発体制を確立。
⇒ 次期研究開発と現行運用の併存を支える体制作り・人材育成。

● ソフトウェア持続性の担保

- 「バーチャル富岳」の推進 - 「富岳」成果であるソフトウェアスタックのデファクトスタンダード化、Spackや仮想化技術による流通性確保。
⇒ 複数システム間でのソフトウェア利用環境の統一を可能に。

● エネルギーコストの削減

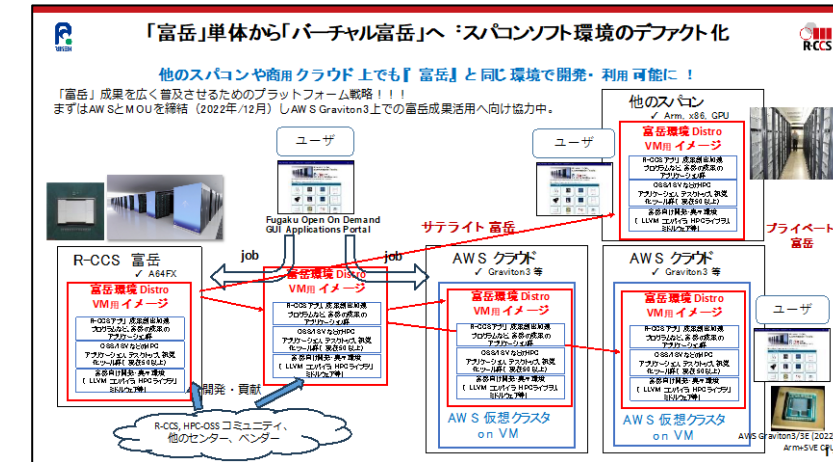
- 2022年度の電力危機を、「富岳」の省電力機構の活用により、利便性を損なわずに克服、2023年度は省電力利用に対するインセンティブを導入し、世界最高レベルの電力効率（ノードあたりの消費電力が100W以下）を達成。
- 冷却・発電設備の運転において電気・ガスを最適に選択し運用コストを低減
⇒ 「京」、「富岳」での省電力運用への継続的に取り組み知見を蓄積。
政府目標であるカーボンニュートラル化への発展を目指す。

● 商用クラウドおよびHPCIシステム群等との連携

- 「富岳」クラウド的利用やHPCI共用ストレージ運用の知見を活用し、外部資源との連携強化を促進。
⇒ 先端的な運用技術の開発・整備をリードし、成果をHPCI全体に広く展開するとともに、大型実験設備や研究データ管理基盤（RDM）等とのデータ連携を促進。



2024年度 R-CCS体制



バーチャル富岳の成果 (例)

「富岳」利用者の利便性向上に資する先端的な運用技術の開発や導入を推進すると共に、それらの成果のHPCIの他センター等への導入に積極的に協力することで、我が国のHPCI及びコミュニティに大きく貢献。

- Spackによるソフトウェアパッケージ管理
- Open OnDemandによる直感的な操作インターフェース
- Grafana等によるシステムモニタリング・可視化
- WHEELによるワークフロー型ジョブ実行
- 現在進行中の技術開発
 - 生成AIを活用した問い合わせ対応システム
 - 複数システムを対象としたメタジョブスケジューリング
 - 大規模データマネジメントシステム

Spack enables Software distribution for HPC

- Spack automates the build and install of scientific software
- Packages are *parameterized*, so that users can easily tweak and tune configurations
- No installation required: clone and go

Complex installs

```
spack install hdf5@1.10.5 cfortran@=0.3.0
spack install hdf5@1.10.5 target=rosetti
spack install hdf5@1.10.5 mpi=mpich@3.2
```

Fugaku OnDemand Dashboard

Welcome to the supercomputer Fugaku

Message of the Day

Information

Fugaku Schedule

WHEEL Workflow

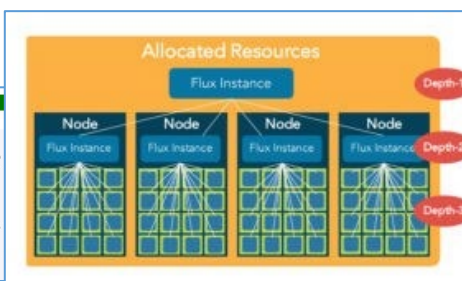
```
graph TD
  solver --> photon
  photon --> visualize
  visualize --> viewer0
```

Fugaku Schedule

Calendar view for April 2024 showing system maintenance and job execution periods.

富岳向けのコードを移植するためには、以下の情報事項を参照してください。

- AMD Xeonでのアプリケーション性能の最適化: 富岳で最新のソフトウェアを移植するには、特定の最適化努力が必要になります。富岳の独自最適化を行う必要がある場合は、富岳のソフトウェア開発ガイドを参照してください。特に、アプリケーションを最適化するための高度な最適化オプションを指定する必要がある場合があります。詳細なガイドについては、富岳のウェブサイト「移植可能なアプリケーションガイドとコミュニケーション」を参照してください。 (FAQ_ID: 20231215.pdf, [Transpilation Guide.pdf](#))
- C++コンパイラのオプション: C++プログラムを移植する場合は、コンパイラオプション「-march=amd64+sse4+sse4.1+sse4.2」を指定する必要があります。これは、富岳のソフトウェア開発ガイドの「移植可能なアプリケーションガイド」の「移植可能なコンパイラオプション」セクションに記述されています。clangモードで1-標準ライブラリの最適化を使用する場合は、富岳のウェブサイト「FAQ」を参照してください。 (FAQ_ID: 20231215.pdf)
- 標準的なコンパイラ: 富岳向けのコードを移植するためには、標準のGNU、Arm位で異なる種類のコンパイラの中で、富岳のコンパイラを使用する必要があります。富岳のウェブサイト「移植可能なアプリケーションガイド」を参照してください。 (FAQ_ID: 20231215.pdf)



AIの台頭により、さらに拡大が見込まれるユーザが活用しやすい、アプリケーションファーストの次世代計算基盤とすることが重要であり、幅広い科学技術・産業分野の研究開発を先導し貢献する視点が重要*。

- R-CCSは、計算科学および計算機科学だけでなく、計算による科学の研究開発に取り組んできており、**HPCIのコミュニティと協業しつつ、計算科学分野での各ドメインにおける橋頭堡として、さまざまな研究成果を創出して**きた。その中で、国内外の研究機関と連携して「富岳」を用いた**成果がゴードン・ベル賞を受賞**（2021,2022）するなど高い成果もあげてきている。
- また、HPCにおけるAIに関する研究開発（**FugakuGPT等**）や、**各種アプリケーションにおけるAIの活用に取り組んで**きており、**それらの成果を発信し**続けている。その一例として、AIとシミュレーションを融合させた革新的な創薬DXプラットフォームを構築し、創薬プロセスの超効率化につなげるべく、官民一体となって推進。
- さらに、「富岳」Society5.0推進拠点を設置し、「富岳」の**成果を「Society5.0」の実現に向けた基盤として社会で広く利活用されるよう社会実装につなげるための取組を推進**。その成果の一つが社会実装への取組も認められ、**2023年度オープンイノベーション大賞 文部科学大臣賞を受賞**。

*中間とりまとめより（抜粋）

計算資源の需要は多様化しており、（略）国内の多様な計算資源需要を 着実に満たすとともに、新たなシステムによる世界最高水準の利用環境の提供を通じ、我が国の計算科学を中心とする様々な科学技術・産業分野の研究開発を先導することを期待。



文部科学大臣賞 分子動力学ソフトウェアGENESISの開発と社会実装 文部科学省

杉田 有治(理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー)、李 秀榮(医薬基盤・健康・栄養研究所 主任研究員)、松崎 健一(株)理研数理 取締役)、小沢拓(株)JSOL 部長)、塩崎 亨(Quantum Simulation Technologies, Inc. 代表取締役CEO)

概要 理化学研究所(理研)を中心としたアカデミックの研究者がソフトウェア開発を行い、そのプロダクトであるソフトウェア「GENESIS」をフリーで公開。さらに産業界がこのソフトウェアを活用する場を提供することで、アカデミックの研究から生まれた最先端科学技術の社会実装を実現。


目的 理研計算科学研究センター(R-CCS)が新規開発した分子動力学ソフトウェア「GENESIS」が「富岳」開発プロジェクトにおいて新型コロナウイルス表面のスパイク蛋白質の動力学計算など世界最先端の基礎研究を実現。フリーソフトとして公開するとともに、アカデミアから産業界まで多様な研究者が集う「GENESISユーザー会」を主宰し、創薬や材料開発への応用を可能とした。

内容 理研R-CCSと理研数理の連携により、研究開発・技術指導は理研が、理研数理が窓口機能を提供することによって、産業界からの個別の問題解決に役立つ技術指導をスムーズに行うことを実現。さらに、理研数理が事務運営を行い、理研が研究紹介を行う「GENESIS ユーザー会」をユーザーと開発者が交流する場として設定した。

効果 新型コロナウイルススパイク蛋白質に関する3本の論文が合計68回引用。「GENESIS ユーザー会」は過去6回の研究会を実施し、参加者は延べ 141 名に及ぶ。GENESIS を利用した商用ソフトウェアが2つ開発され、販売されている。

ポイント!
産業界でも自由に利用できるソフトウェア開発にとどまらず、ライセンスフリー化で民間企業でも産業界上の重要な解析を可能とした点も大きな成果。今後期待される産業界でのスパコン活用の一般化に向けた取組及びスタートアップを活用した社会実装の事例としても評価できる。

まとめ

- 理化学研究所（理研）は、日本で唯一の自然科学の総合研究所として、物理学、工学、化学、数理・情報科学、計算科学、生物学、医科学などに及ぶ広い分野で研究を推進しており、同時に社会に貢献することをミッションとする特定国立研究開発法人である。
 - 理研は、計算科学・計算機科学分野における我が国の中核研究拠点として、計算科学研究センター（R-CCS）を設立し、スーパーコンピュータ「京」及び「富岳」の開発・運用だけでなく、その高度化を進めてきた。さらに、HPCIのコミュニティと協業しつつ、計算科学分野での各ドメインにおける橋頭堡として、アプリケーション・ファーストで我が国の研究開発をリードし、世界に冠する研究成果を上げてきた実績がある。
 - 一方、AIの開発やその活用に不可欠な計算資源を有しているかどうかは、今後の産業、科学技術イノベーションの鍵となっており、理研では、それらの技術を生み出す拠点として2022年度からTRIP（Transformative Research Innovation Platform of RIKEN platforms）構想を打ち立て、量子-HPCハイブリッド基盤など計算可能領域の拡張を進めているほか、2024年度からは「AI for Science」を推進するためのTRIP-AGISを立ち上げた。
 - また、文部科学省にて2022年度から進められている次世代計算基盤に係る調査研究、特にシステム（アーキテクチャ／システムソフトウェア・ライブラリ／アプリケーション）調査をR-CCSが受託し、国内外の企業等とともに報告書を取りまとめている。
- 
- 自らの有する能力、強み、人材、実績を最大限に活かし、国内外の関係機関の協力を得てきた理研が、次世代計算基盤に求められるフラッグシップシステムの開発・運用を担う役割（開発主体）を果たすことが最適であり、我が国の情報科学技術政策と、国立研究開発法人としての取り組みによる相乗効果が期待できる。
 - また、実施主体となれば、国内外の技術を結集したCPU・演算加速器・先端メモリ実装を導入し、高い汎用性とコミュニティの計算資源ニーズに応える性能・機能を合わせ持つ世界的に競争力のあるフラッグシップシステムの開発を推進する。

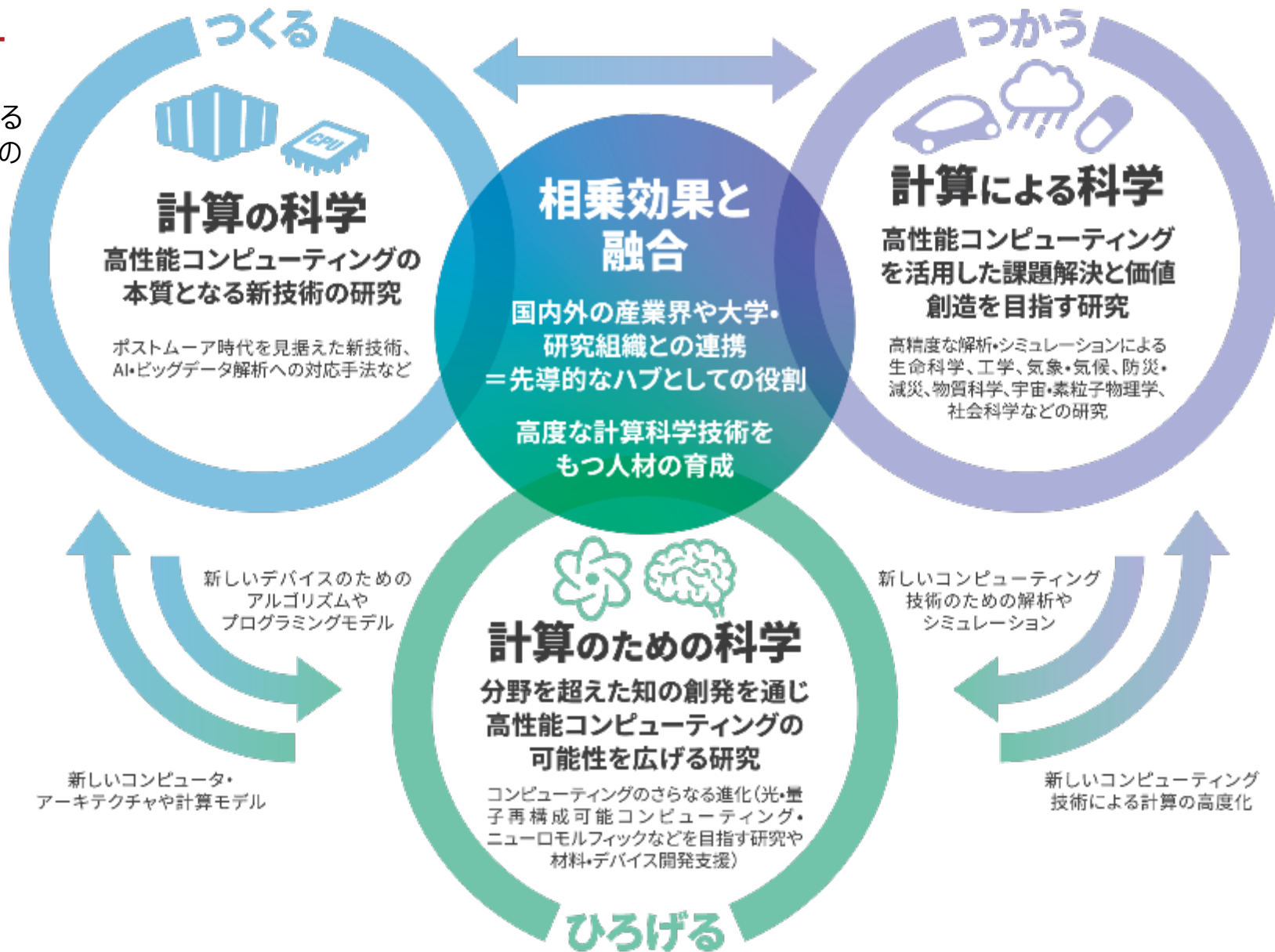
參考資料

「計算の 計算による 計算のための科学」

卓越したサイエンスの創出と、Society5.0実現の要となることを目指して

理研 計算科学研究センター (R-CCS)

理研の13研究センターの一つであると同時に高性能計算科学のトップの国家拠点



2024年度センター組織図

***女性限定PI2名 (TLorUL) 選考中** (17チーム/4部門 (19ユニット))

計算の科学

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

次世代高性能
アーキテクチャ
研究チーム
近藤 正章

高性能ビッグデータ
研究チーム
佐藤 賢斗

高性能人工知能
システム
研究チーム
Mohamed WAHIB

高性能計算モデリング
研究チーム
Jens DOMKE

大規模デジタルツイン
研究チーム
山口 弘純
2024/4/1設置

計算による科学

連続系場の理論
研究チーム
青木 保道

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

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

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

総合防災・減災
研究チーム
大石 哲

HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門

部門長 &
バイオメディカル
計算知能ユニット
奥野 恭史

副部門長 &
創薬化学AI
アプリケーション
ユニット
本間 光貴

分子デザイン
計算知能ユニット
池口 満徳

AI創薬連携基盤
ユニット
奥野 恭史

量子HPC連携プラットフォーム部門

部門長
佐藤 三久

量子HPCソフトウェア
環境開発ユニット
辻 美和子
2024/4/1着任予定

量子計算シミュレーション
技術開発ユニット
伊藤 伸泰

量子HPC
プラットフォーム
運用技術ユニット
三浦 信一

AI for Scienceプラットフォーム部門 (新規設置)

部門長
松岡 聡

AI開発計算環境運用技術
ユニット
三浦 信一

次世代AIデバイス
開発研究ユニット
佐野 健太郎

AI学習最適化
基盤開発ユニット
Mohamed WAHIB

AI学習・推論データ管理基盤
開発ユニット
佐藤 賢斗

生命・医科学アプリ
インターフェース基盤開発ユニット
杉田 有治

材料・物性アプリ
インターフェース基盤開発ユニット
中嶋 隆人

副センター長
中島 研吾
(計算の科学)

センター長
松岡 聡

副センター長
杉田 有治
(計算による科学)
2024/4/1着任

「富岳」 Society 5.0 推進拠点

拠点長
松岡 聡

副センター長 &
拠点長代理
渡辺 康正

コーディネーター
白井 宏樹

運用技術部門

部門長
庄司 文由

副部門長 &
システム運
転技術ユニット
井口 裕次

データ連携
技術ユニット
甲斐 俊彦

施設運
転技術ユニット
三浦 信一

ソフトウェア開
発技術ユニット
村井 均

先端運
用技術ユニット
山本 啓二

2021年度センター組織図 (17チーム/2部門 (9ユニット))

計算の科学



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



高性能人工知能
システム
研究チーム
松岡 聡



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

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

HPC/AI駆動型医薬 プラットフォーム部門



バイオメディカル
計算知能ユニット
奥野 恭史



創薬化学AIアプ
リケーション
ユニット
本間 光貴



分子デザイン計算
知能ユニット
池口 満徳



AI創薬連携基盤
ユニット
奥野 恭史

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
庄司 文由



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

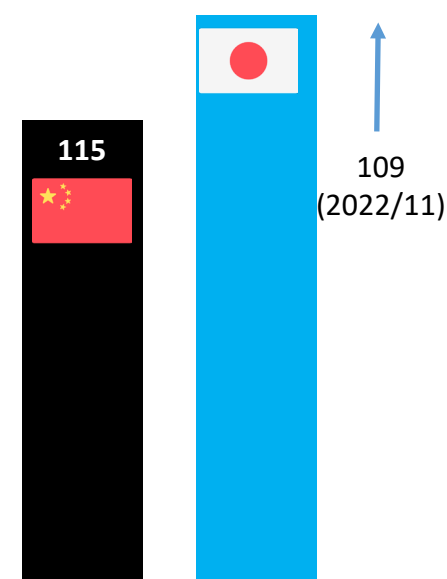
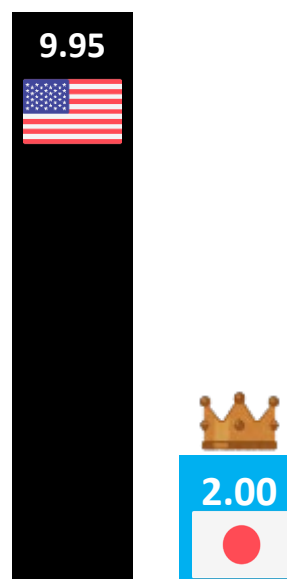
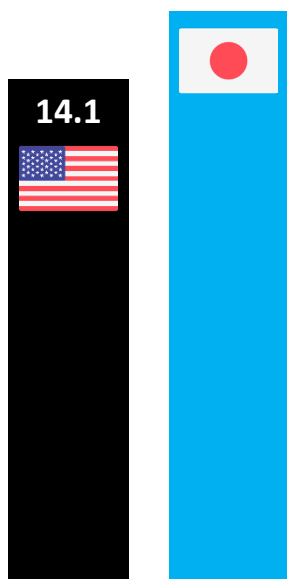
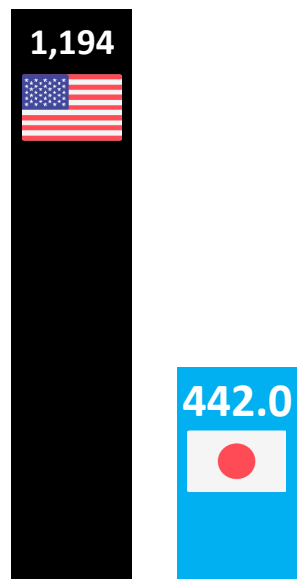
シミュレーション
(クラシック)

シミュレーション
(モダン)

AI
(深層学習)

ビッグデータ
(グラフ処理)

スループット性能
(深層学習)



TOP500
(単位：PFLOPS)

HPCG
(単位：PFLOPS)

HPL-MxP
(単位：EFLOPS)

Graph500
(単位：TTEPS)

ML Perf HPC
(CosmoFlow)
(単位：モデル数/分)

浮動小数点の演算
での性能評価

実際にアプリケーションを
稼働させた性能評価

AI処理での
性能評価

ビッグデータ処理での
性能評価

AI処理の
総合性能評価

初登場から3年半経過も世界最高水準をキープ

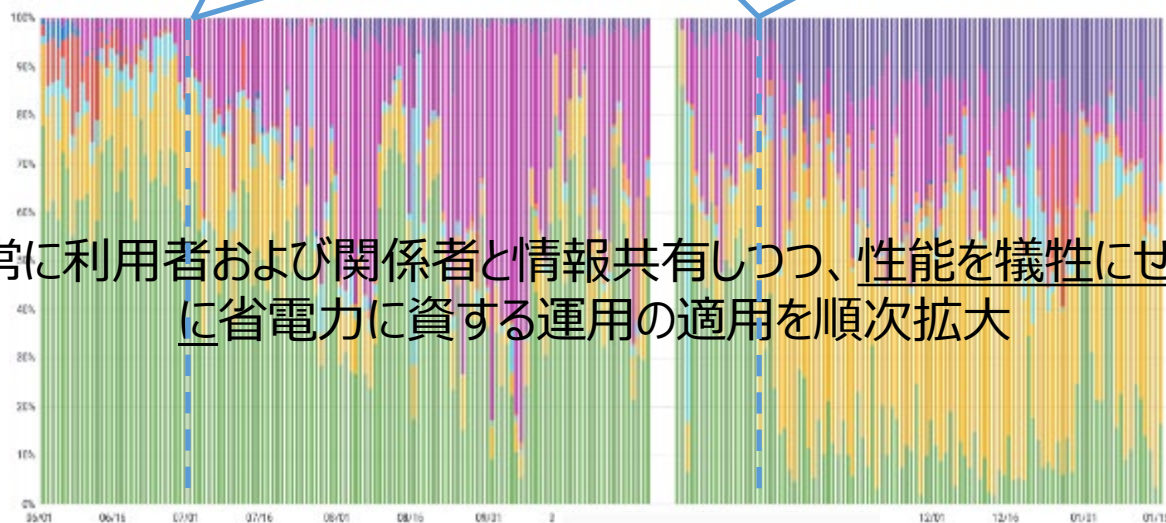
「富岳」の世界トップクラスの省電力化を高め電力危機を克服

- 光熱水費の高騰を受けて、2022年7月28日より「富岳」の約1/3を停止すること（省エネ運転の取組や補正予算の割り当てを受けて、11月8日に終了）、理研に配分された資源量の50%を停止分の補填の一部として拠出すること、省エネに資する機能の積極的な活用を決定し、利用者および関係者と共有。

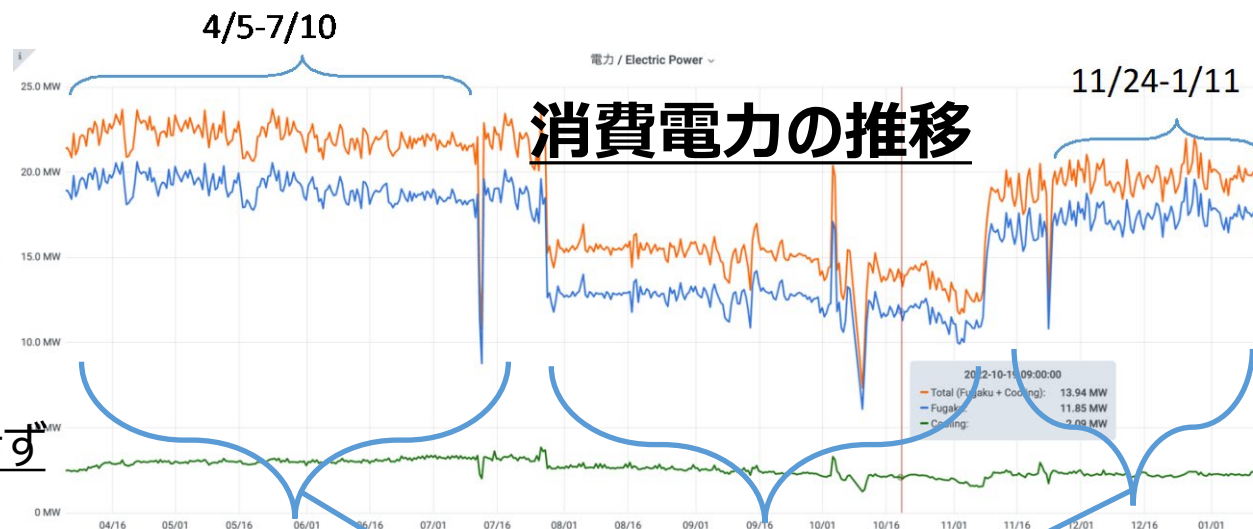
ジョブ実行モードの割合の推移

利用者に対し、省電力に資するジョブ実行のお願い(7/1)

遊休資源の電力カットの適用範囲の拡大(10/27)



0_normal 1_retention 6_boost_eco
6_boost_eco 7_boost_eco_retention



約1/3停止等により約**30%**の省エネ化を達成
(緊急避難的措置)

積極的な省エネ運用の活用により
更に**10~15%**の省エネ化を達成

⇒運用時では世界トップの省電力(**100W/ノード**)

実運用に基づかないGreen500指標は実質的には無意味 21

常に利用者および関係者と情報共有しつつ、性能を犠牲にせず
に省電力に資する運用の適用を順次拡大

これらの取り組みに加え、令和4年度補正予算を組み合わせることで、令和4年度の窮状に対応

R5年度には、省電力運用への協力の度合いに応じて、ユーザにインセンティブを与える運用を開始

ACMゴードン・ベル賞 2021 2022連続受賞

スーパーコンピュータの世界で最も権威ある賞で、スパコン界のアカデミー賞年間最優秀作品賞にもなぞらえる。
評価は、“Technology”、“Performance”、“Science Achieved”の三つの観点から行われる。

2021年ゴードン・ベル賞COVID-19研究特別賞 「富岳」を用いたCOVID-19の飛沫・エアロゾル拡散モデル 感染症疫学のデジタルトランスフォーメーションに初めて成功



2022年ゴードン・ベル賞 「富岳」「Frontier」等を用いたプラズマのレーザー加速器研究 国際連合チームが国際連合スパコン群を活用



[Luca Fedeli](#), [France Boillod-Cerneaux](#), [Thomas Clark](#), [Neil Zaim](#), and [Henri Vincenti](#), (CEA); [Axel Huebl](#), [Kevin Gott](#), [Remi Lehe](#), [Andrew Myers](#), [Weiqun Zhang](#), and [Jean-Luc Vay](#), (Lawrence Berkeley National Laboratory); [Conrad Hillairet](#), (Arm); [Stephan Jaure](#), (ATO S); [Adrien Leblanc](#), (Laboratoire d'Optique Appliquée, ENSTA Paris); [Christelle Piechurski](#), (GENCI); and [Mitsuhsa Sato](#), (RIKEN)

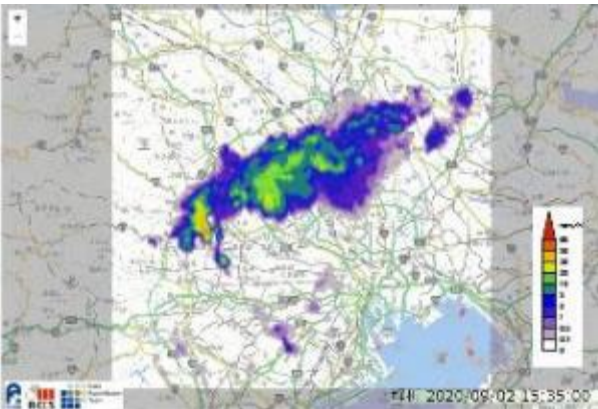
今回ファイナリストも6件中3件が富岳関係⇒ゴードン・ベル賞で受賞者やファイナリストが国際研究チームであり、かつ日本のスパコンを用いるのは史上初

⇒「富岳」およびR-CCSという「基盤」に世界の計算による科学が集約

ファイナリスト
選出!

気候モデリング部門

地球規模の気候危機の解決に向けた革新的な並列コンピューティングの貢献を表彰することを目的として設置。初年度となる2023年は、ファイナリスト3件が選出されている。



予報Web画面のイメージ

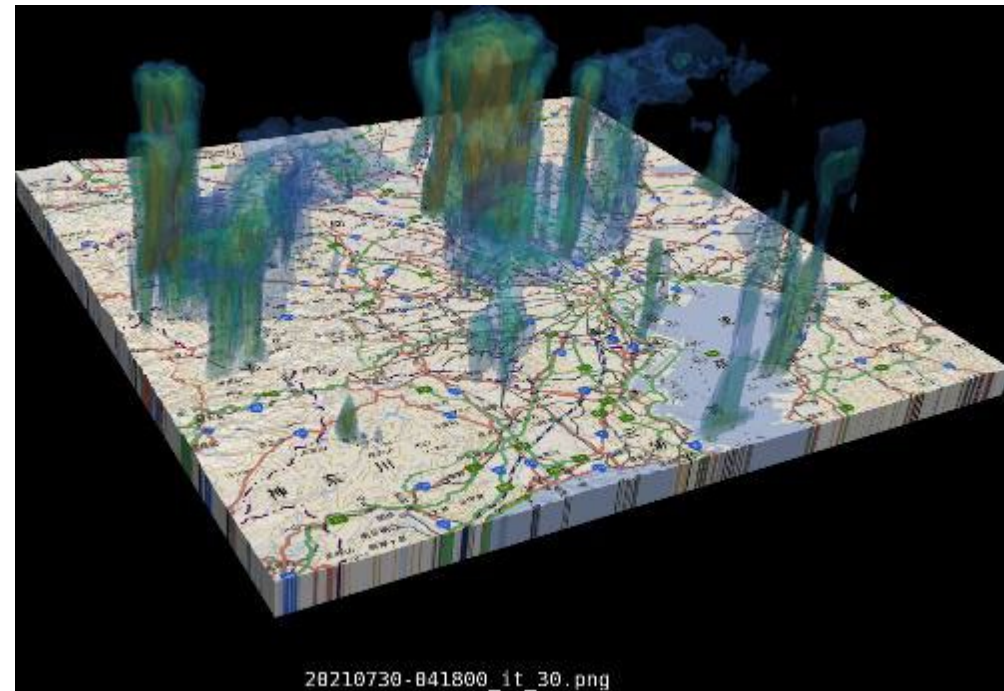
「スーパーコンピュータ「富岳」を用いた東京オリンピック・パラリンピック期間中に実施した、30秒ごとに更新するリアルタイム数値天気予報」

データ同化研究チーム
三好建正チームリーダー

複合系気候科学研究チーム
富田浩文チームリーダー

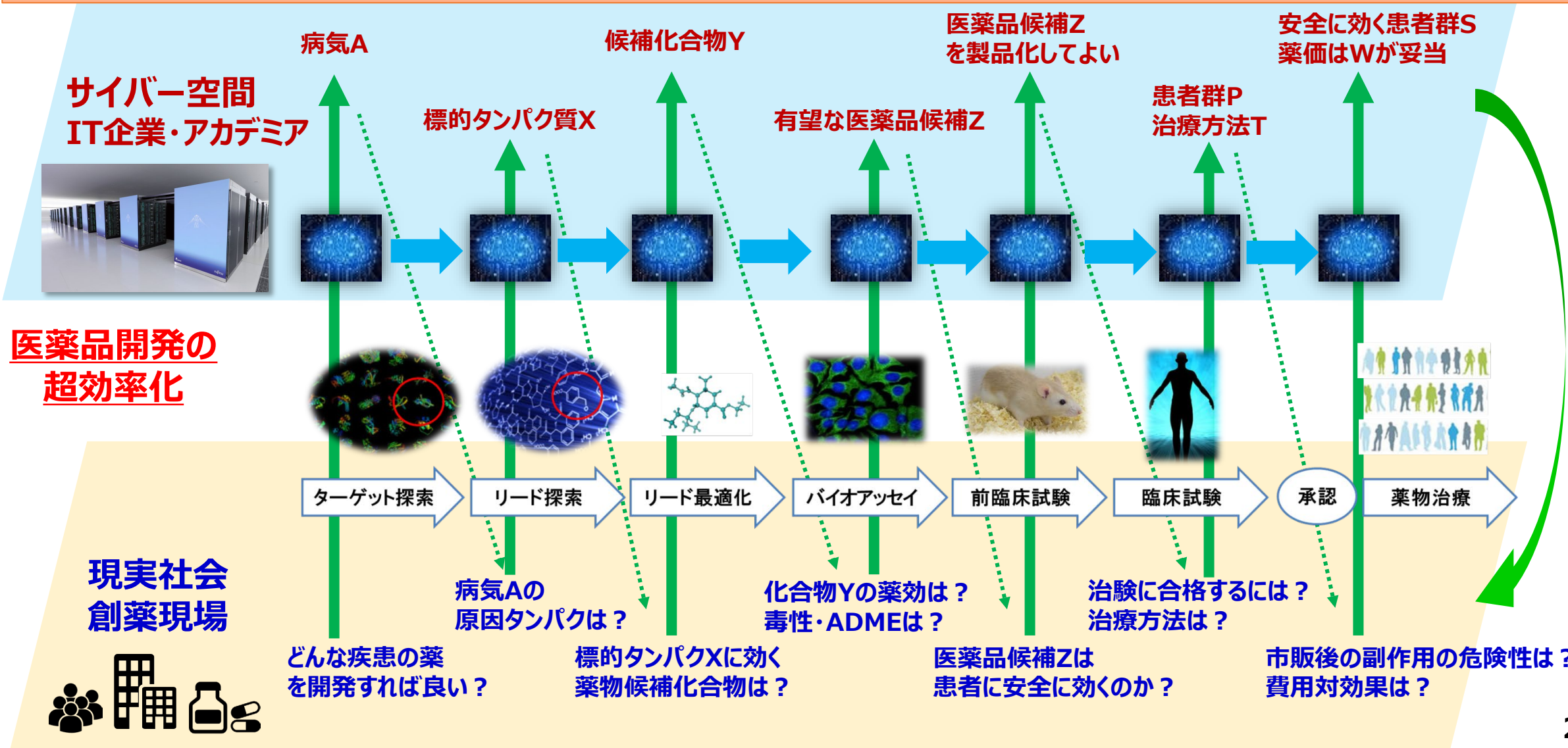
2013年「京」で研究開始
2021年「富岳」で成果発表

本プロジェクトでは、地球規模の気候危機を解決するための一歩として、新しい数値天気予報システムを開発し、500メートル解像度の気象モデルで1,000通りのアンサンブル計算を行った。急速に発達するゲリラ豪雨に対しても30秒ごとの更新の有効性を明らかにし、複雑な気象の解明に向けて高度な計算手法を用いることの価値を証明した。



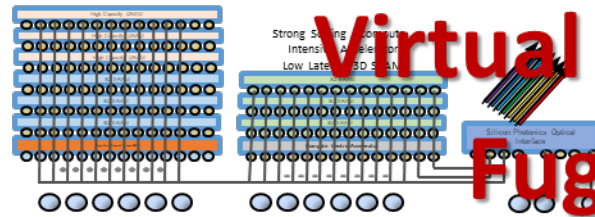
図：2021年7月30日13時18分00秒（日本時間）を初期時刻とする13時33分00秒（15分先）の3次元的な降水分布の予測。色は雨の強さを示す。見やすくするために鉛直方向は3倍に引き延ばしている。国土地理院の地図データを使用した。

「富岳」を基軸として、AIとシミュレーションを融合させた革新的な創薬DXプラットフォームを構築し、創薬プロセスの超効率化を目指す。これにより、新薬やワクチン開発の少人数・低コスト・迅速化を実現する。

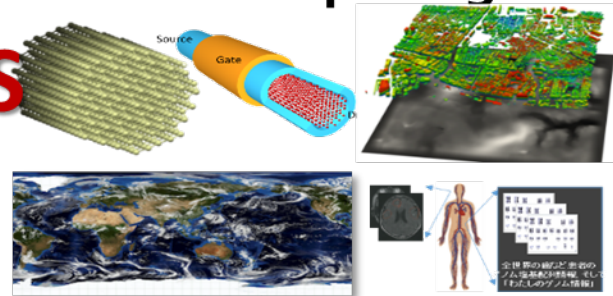


- 高性能計算の科学 Science of High Performance Computing (towards 'Zettascale')

- 高性能計算による科学 Science by High Performance Computing

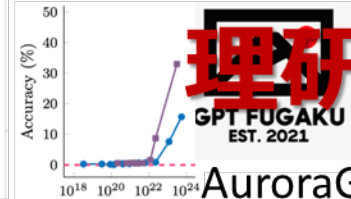
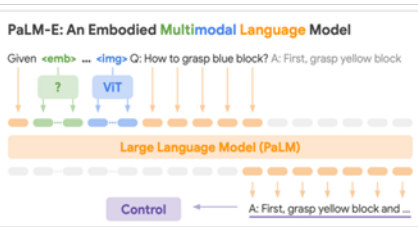
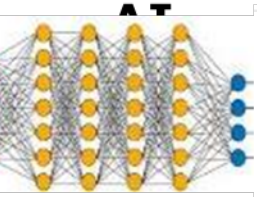


Virtual 富岳 w/AWS
FugakuNEXT

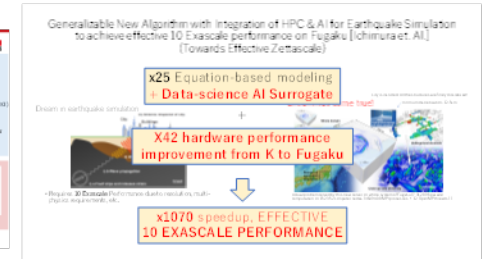
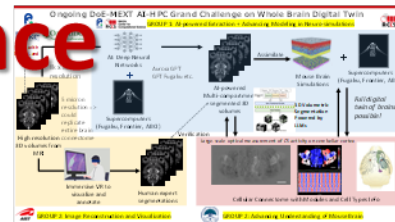


- 高性能AIの科学 Science of High Performance AI

- 高性能AIによる科学 Science by High Performance AI (AI for Science)

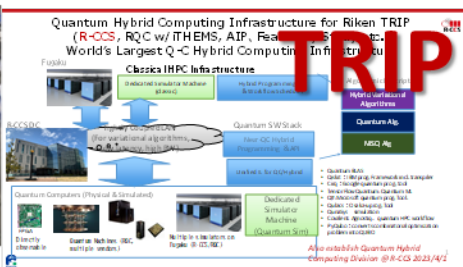


理研 AI for Science
TRIP-AGIS



- 量子-HPCハイブリッド計算の科学 Science of Quantum-HPC Hybrid Computing

- 量子-HPCハイブリッド計算科学による科学 Science by Quantum-HPC Hybrid Computing



TRIP 量子-HPC ハイブリッド
JHPC-Quantum

