

*Notice: This English version, provisional translation by FPCJ,
is not translated in full.

富岳：「アプリケーションファースト」の世界トップス パコンと、その新型コロナウイルスに対する戦い



理化学研究所 計算科学研究センター
センター長 松岡 聡
FPCJ プレゼン 2020年12月03日

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

高い計算性能

富岳

広い応用分野

汎用的なアーキテクチャにもとづいて開発

世界のスーパーコンピュータを凌駕した「富岳」

「アプリケーション・ファースト」の「ムーンショット」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

全て同時達成はムーンショット的困難



- 「富岳」2~3台で日本全体のITの一年分



- コデザインで進められた「富岳」の開発

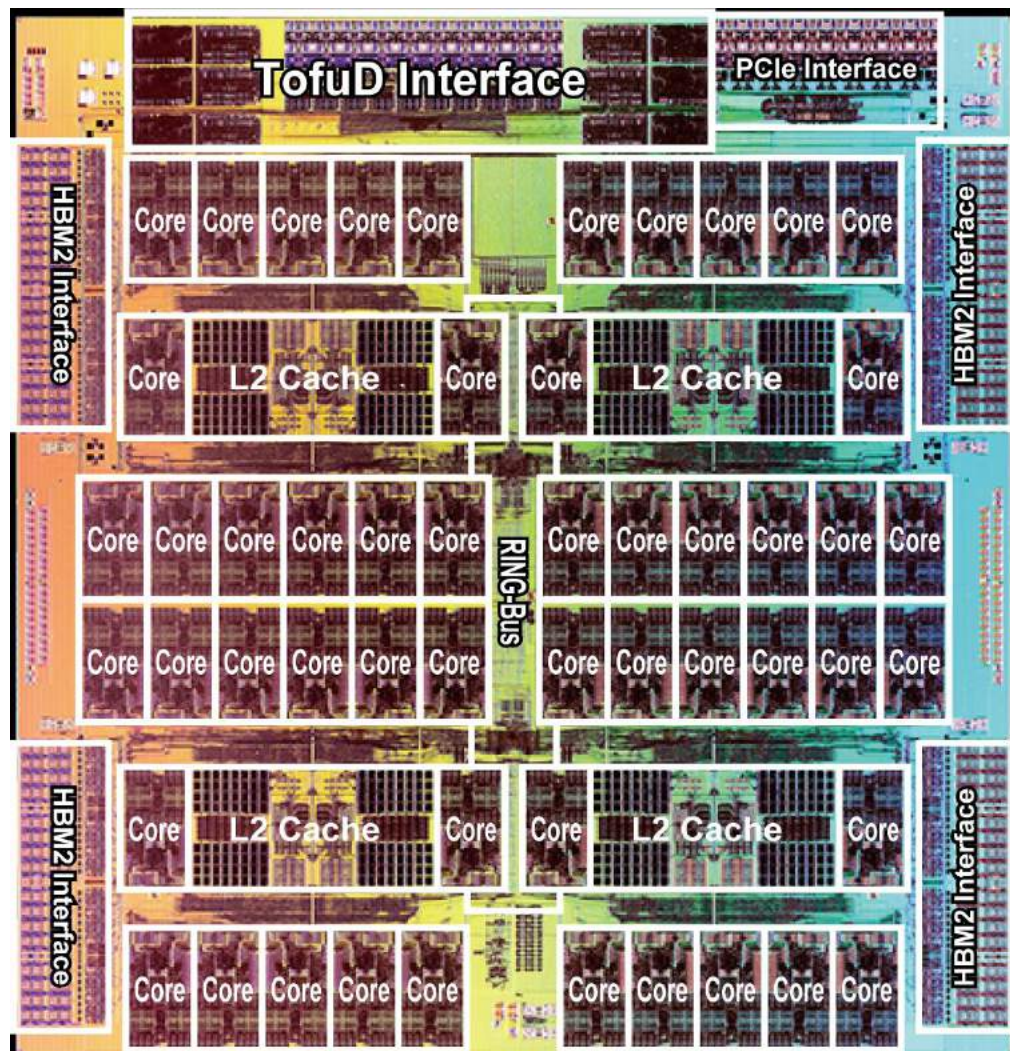


A64FX: 汎用ArmCPU・3倍の性能・1/3の電力・AI/BD機能強化
 富岳: HW性能 40倍に比べ、アプリ性能最大100倍

正式稼働一年間先取り
 富岳「新型コロナウイルス研究・対策」を実現
 汎用性の高さによる迅速なアプリケーション開発

Armベース汎用プロセッサを採用した、最初のハイパフォーマンス・コンピューター

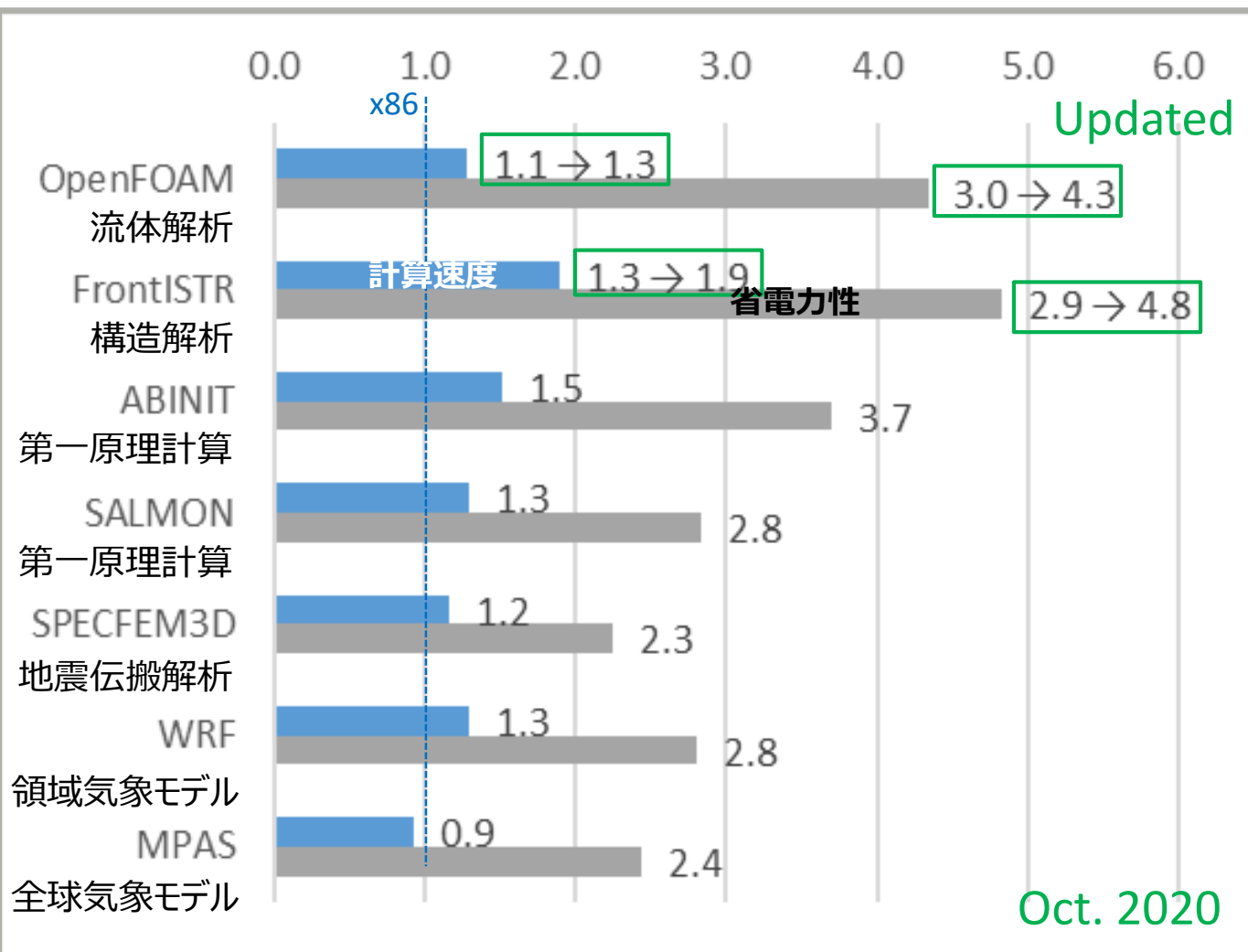
- A64FX CPU : HPC世界最速の汎用プロセッサ



- Arm Aarch64 + SVE: 512bit FP64/32/16, INT32/16/8 のベクトル処理
- 高い演算性能と高い省電力性能を持ち、ビッグデータやAIなどに必要とされるアプリケーションで高い能力を発揮
- クラウドやIoTに使われる可能性を追求、CPU自体を世界標準として推進

A64FXの計算速度と省電力性(OSS実アプリ)

x86 CPU x2に対するA64FX x1の性能倍率



■ 同一コア数での比較で、A64FX*は最新のx86 CPU*と比較して、

- 計算速度で～1.9倍
- 省電力性で～4.8倍

* A64FX: 48コア × 1CPU(2.2GHz)
x86 CPU: 24コア × 2CPU(2.9GHz)

- 高い性能倍率を以下により実現
- HPC向けに強化したマイクロアーキテクチャ
- 省エネルギーを意識した設計と実装
- 最新の7nm FinFET プロセスの採用
- HBM2 によるメモリバンド幅の数倍の増加

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

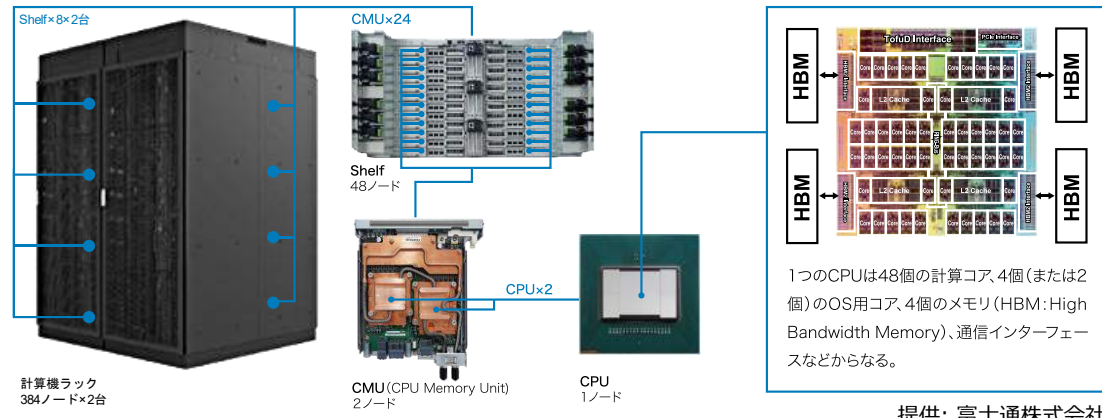
- 通常モード (CPU動作クロック周波数 2GHz)

- 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 エキサ(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
- 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

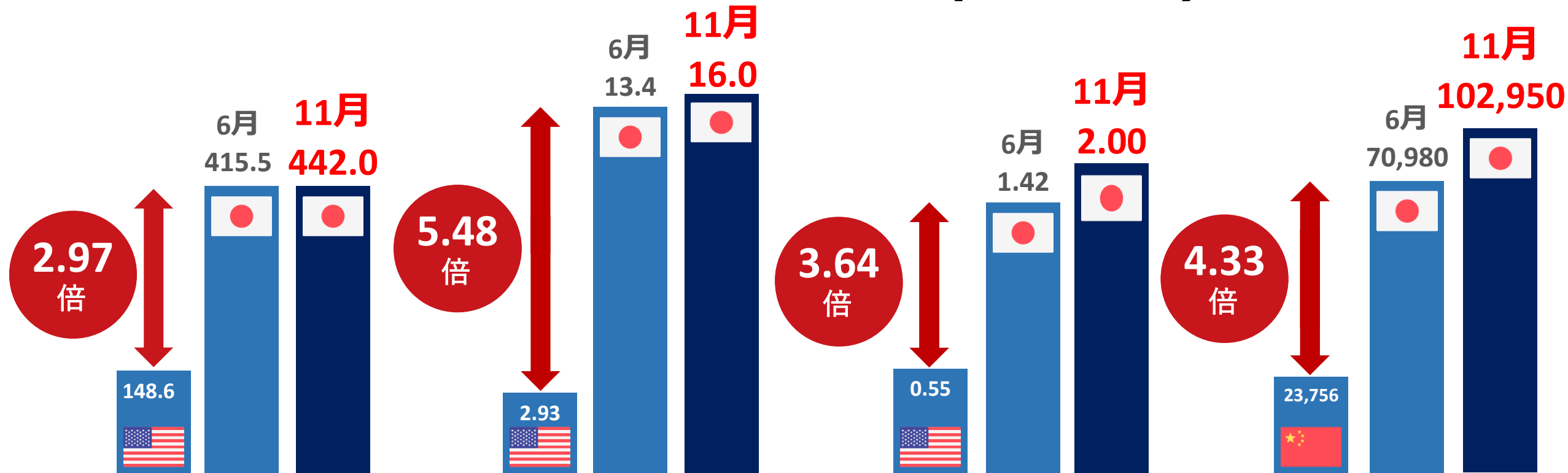
注釈) ここで示した数値は理論最高値であり、実際の速度は各種ベンチマークや、実アプリケーションによって測定される。

- 標準OSディストリビューションの採用
- Armv8 Linux標準とバイナリ互換：
OpenHPC、SPACKなどArm HPCエコシステムが充実、Python/Rubyなどのスクリプト言語で運用性が向上
- オープンソースコミュニティ上で機能開発し取り込み、エコシステムに貢献



Arm、Linuxのオープンソースコミュニティの
活動やコラボレーションによって、多数のアプリやシステムが容易に利用可能

世界初！ベンチマークテスト4部門で同時に1位を獲得(2020/6) 更に全系実行で差を広げる(2020/11)



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

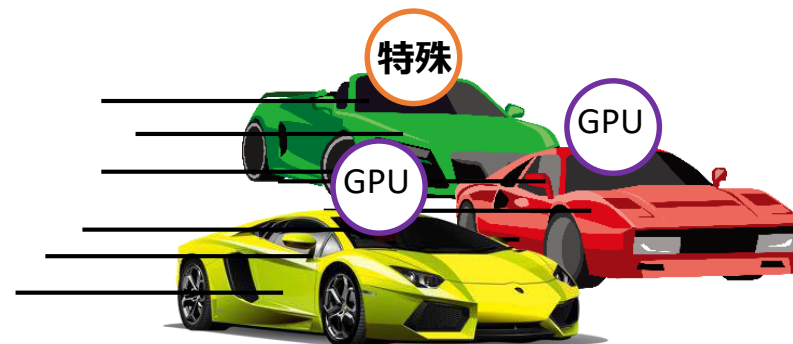
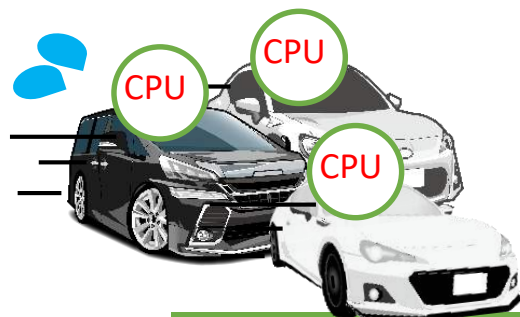
Graph500

(単位: GTEPS)

ビッグデータ処理
での性能評価

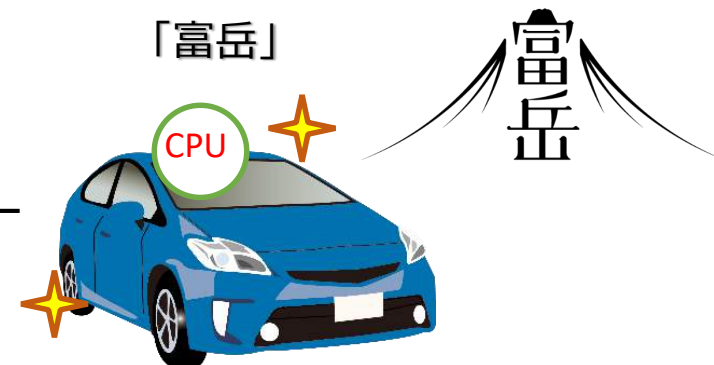
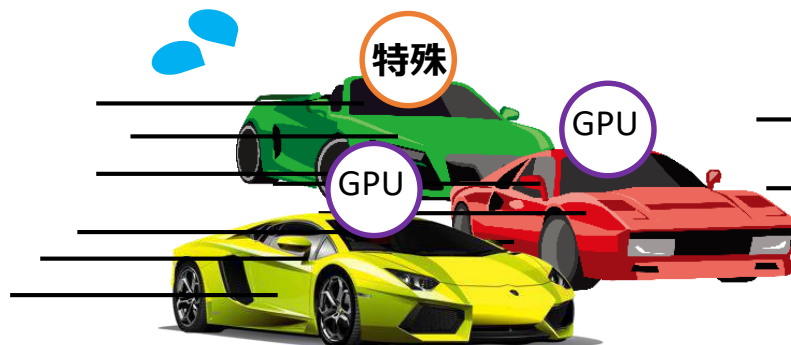
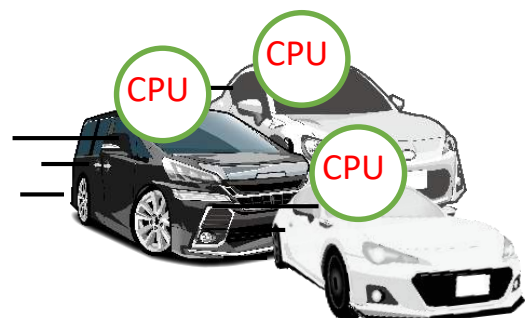
2位に対して、3倍から5.5倍近い性能差を実現

● 最近のスパコンランキング



GPU搭載スパコンや特殊スパコンが上位を独占

● 今回のスパコンランキング



汎用CPU搭載スパコンが圧倒的世界1位に！
「国プロ」としての「ムーンショット」研究開発の成果

なぜ「アプリケーションファースト」なのに、主要スパコン性能ベンチマーク全てで一位が重要なのか？

- 富岳の目的は「ソサエティ5.0」早期実現を含む、国民の関心事に応えるための幅広い分野のアプリを世界トップレベルで加速すること
- それぞれのベンチマークは、一部のアプリをモデル化→もし富岳がその目的通りに設計されていれば、あらゆるベンチマークでトップ性能を示すはず。
- もし富岳が一部ベンチでしかトップ性能が出なければ、設計目的を全く満たしていない→よって、主要スパコンベンチマーク全てで一位が重要



富岳開発目標：「京コンピュータ比で数十倍、最大100倍以上」

社会的・科学的課題（9重点課題）に向けた、アプリケーション性能向上の見込み

健康長寿社会の実現



生体分子システムの
機能制御による
革新的創薬基盤の構築

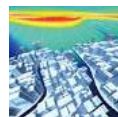
125倍以上
(GENESIS)



個別化・予防医療を
支援する
統合計算生命科学

8倍以上
(Genomon)

防災・環境問題



地震・津波による
複合災害の統合的
予測システムの構築

45倍以上
(GAMERA)



観測ビッグデータを活用した
気象と地球環境の
予測の高度化

120倍以上
(NICAM+ LETKF)

エネルギー問題



エネルギーの高効率な
創出、変換・貯蔵、利用
の新規基盤技術の開発

40倍以上
(NTChem)



革新的クリーン
エネルギーシステムの
実用化

35倍以上
(Adventure)

産業競争力の強化



次世代の産業を支える
新機能デバイス・
高性能材料の創成

30倍以上
(RSDFT)



近未来型ものづくりを
先導する革新的設計・
製造プロセスの開発

25倍以上
(FFB)

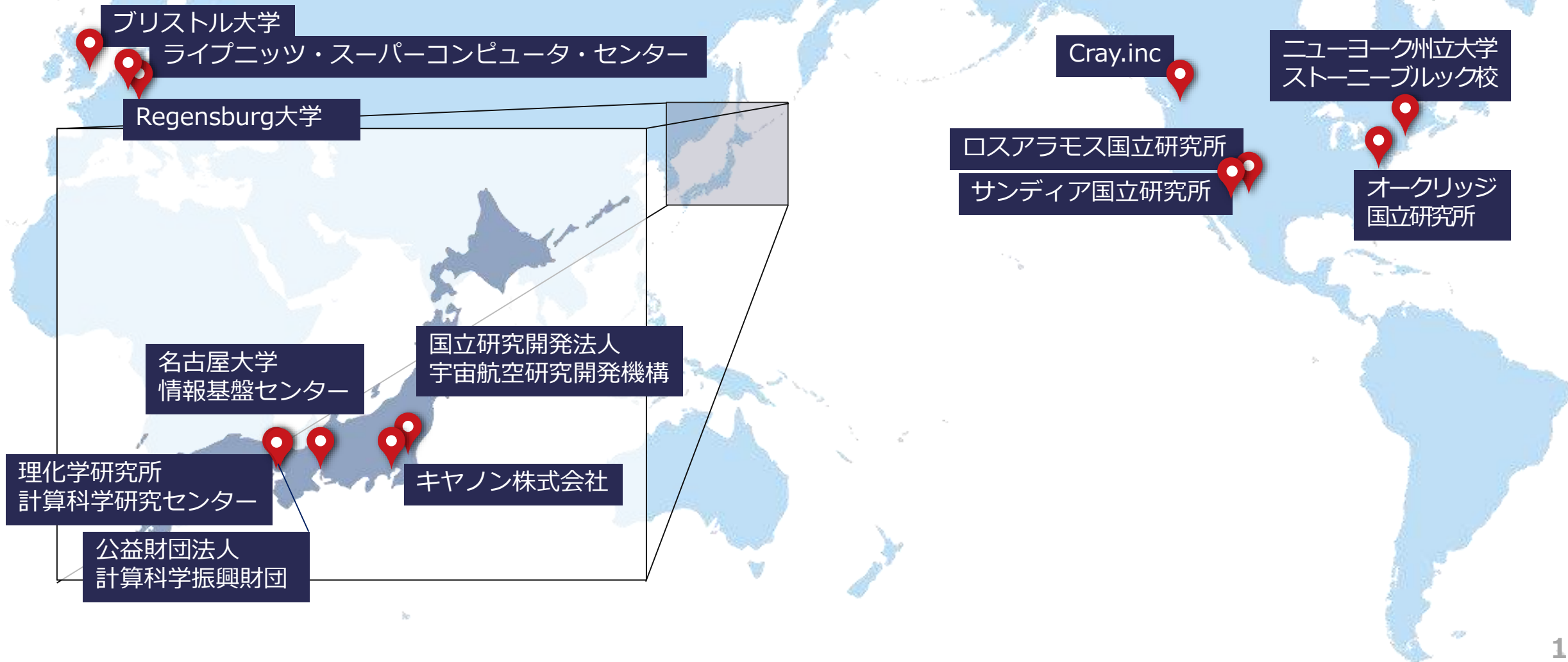
基礎科学の発展



宇宙の基本法則と
進化の解明

25倍以上
(LQCD)

- CPU「A64FX」搭載機が多くの研究機関や企業で採用



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

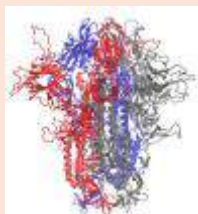
「富岳」による 新型コロナウイルスの治療薬候補同定



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

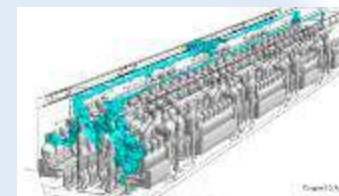


新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算を系統的に実施し、詳細な相互作用解析を行う。

(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。

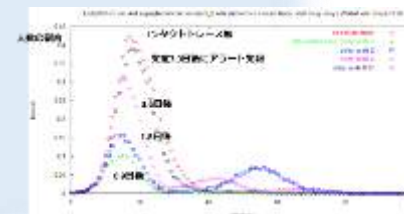


(課題代表者；理化学研究所/神戸大学 坪倉 誠)

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。

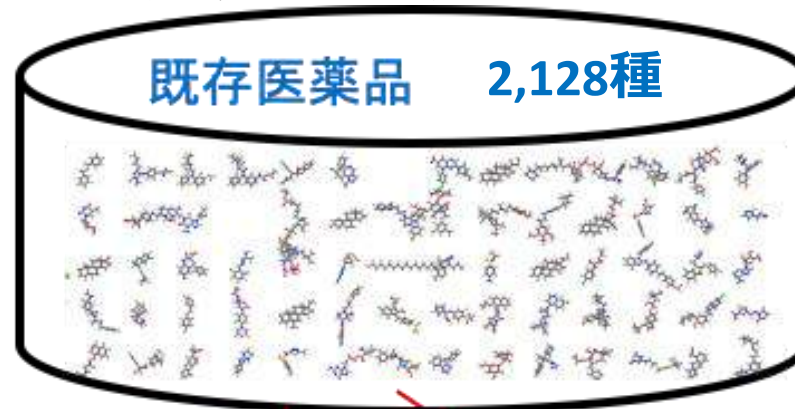
Identifying Candidate Drugs for COVID-19 Treatment Using Fugaku

理化学研究所／京都大学 奥野 恭史

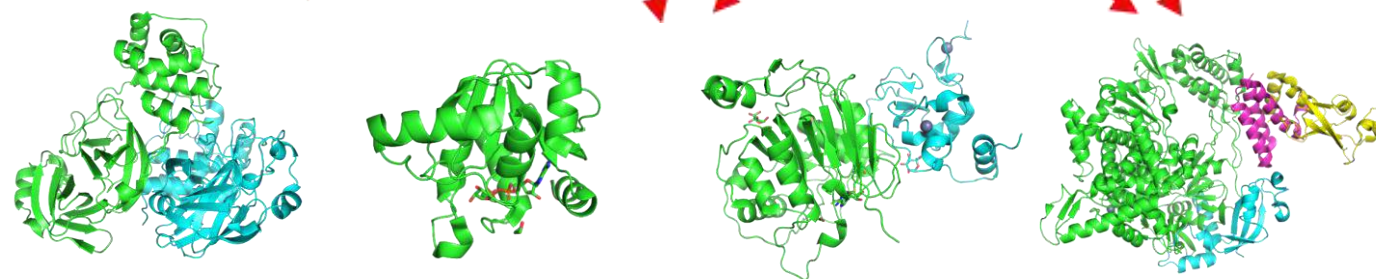
Identifying Candidate Drugs for COVID-19 Treatment Using Fugaku

理化学研究所／京都大学 奥野 恭史

「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。



分子動力学計算による治療薬候補探索、作用メカニズムの解明、コンビネーション効果の推定

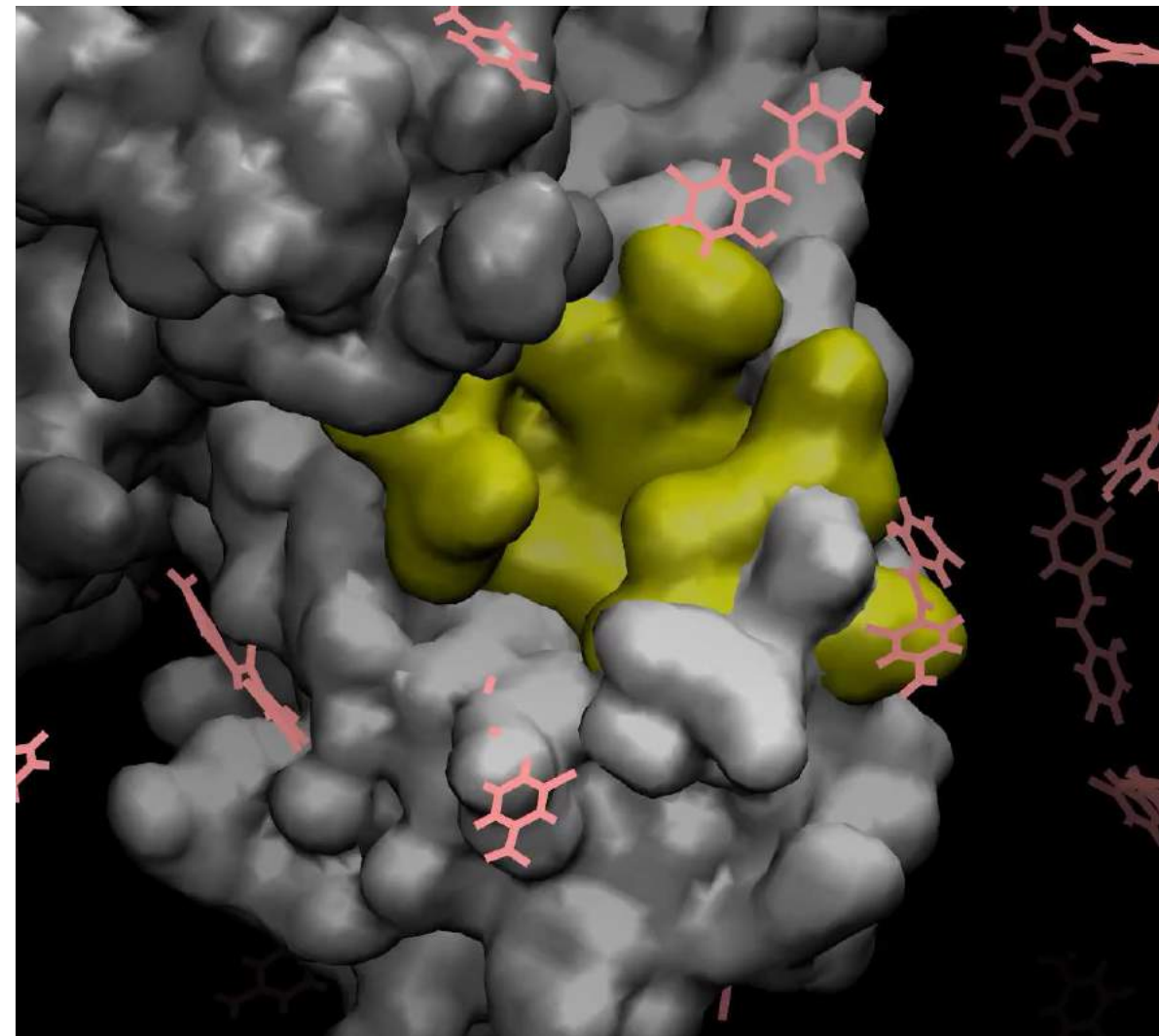
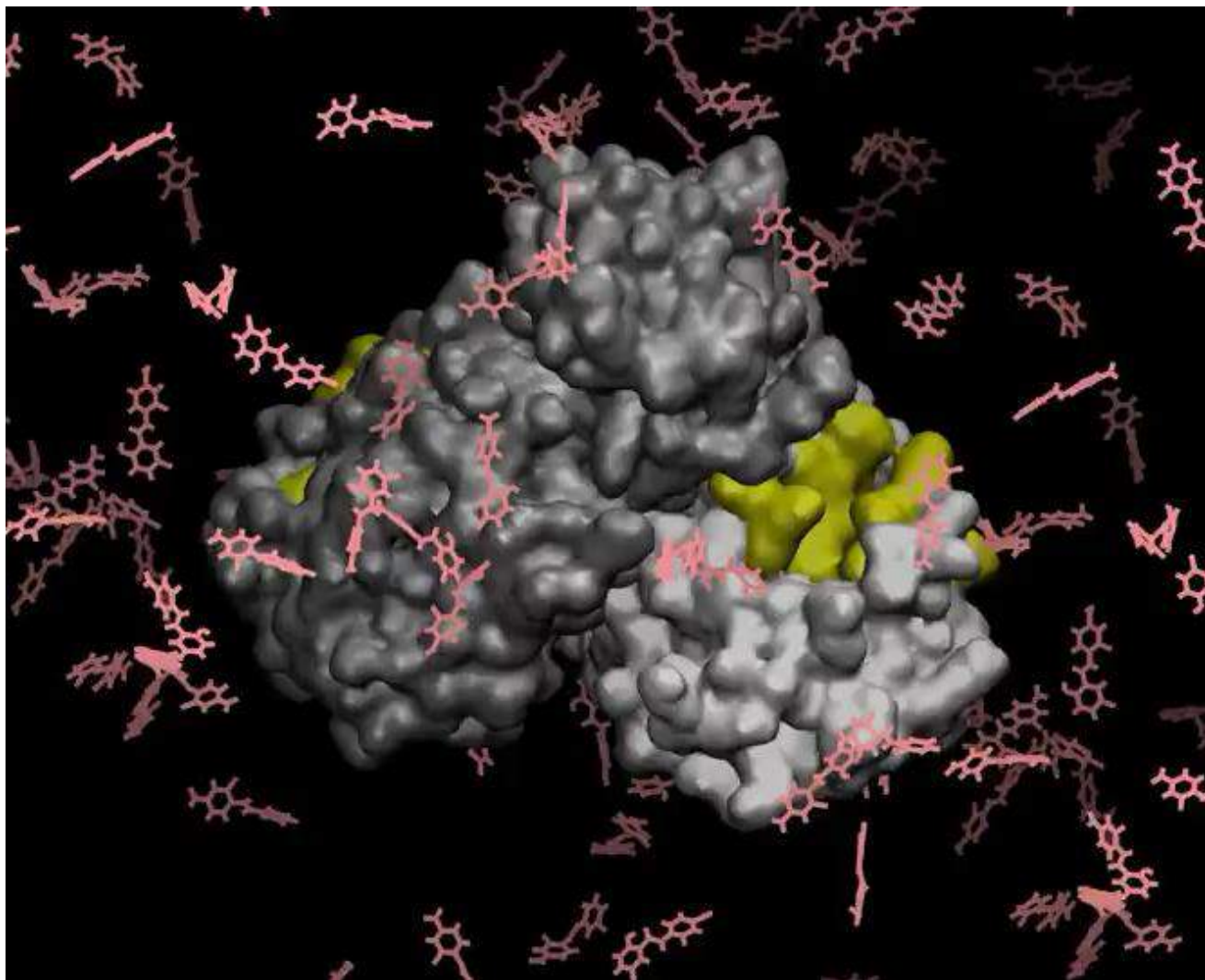


新型コロナウイルスの増殖に関連するタンパク質

Behavior of the Main Protease (Protein) and Niclosamide (Drug)

メインプロテアーゼ全体（灰色+黄色）を表示

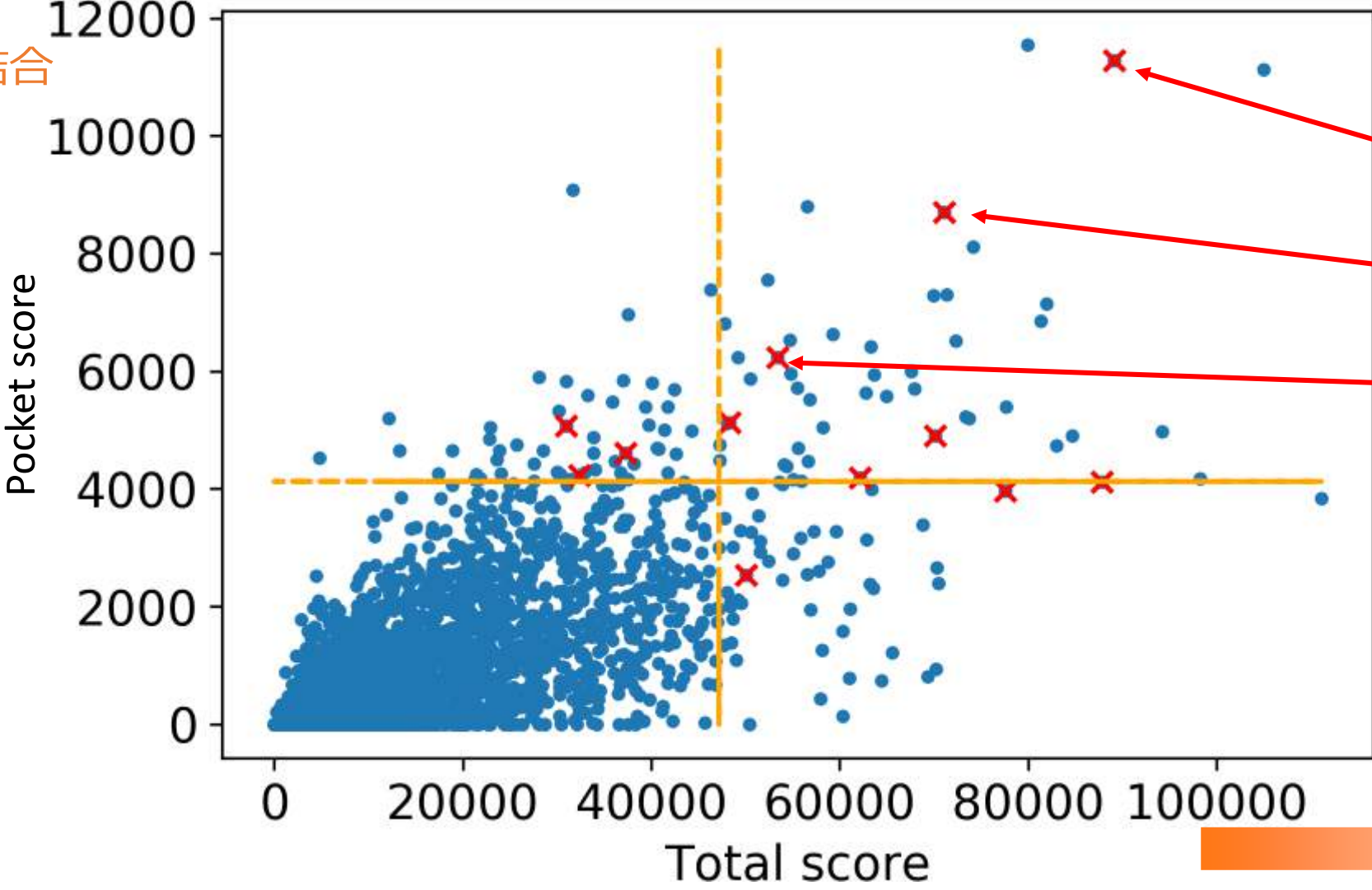
活性ポケット（黄色）を拡大表示



ピンク色：ニコロサミド（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） 16

Ranking of 2,128 Drug Candidates by Fugaku

タンパク質の
ポケットに強く結合



ニクロサミド
ニタゾキサニド
処方箋なしの
市販薬

× : 臨床研究、
治験が実施され
ている薬剤
12種

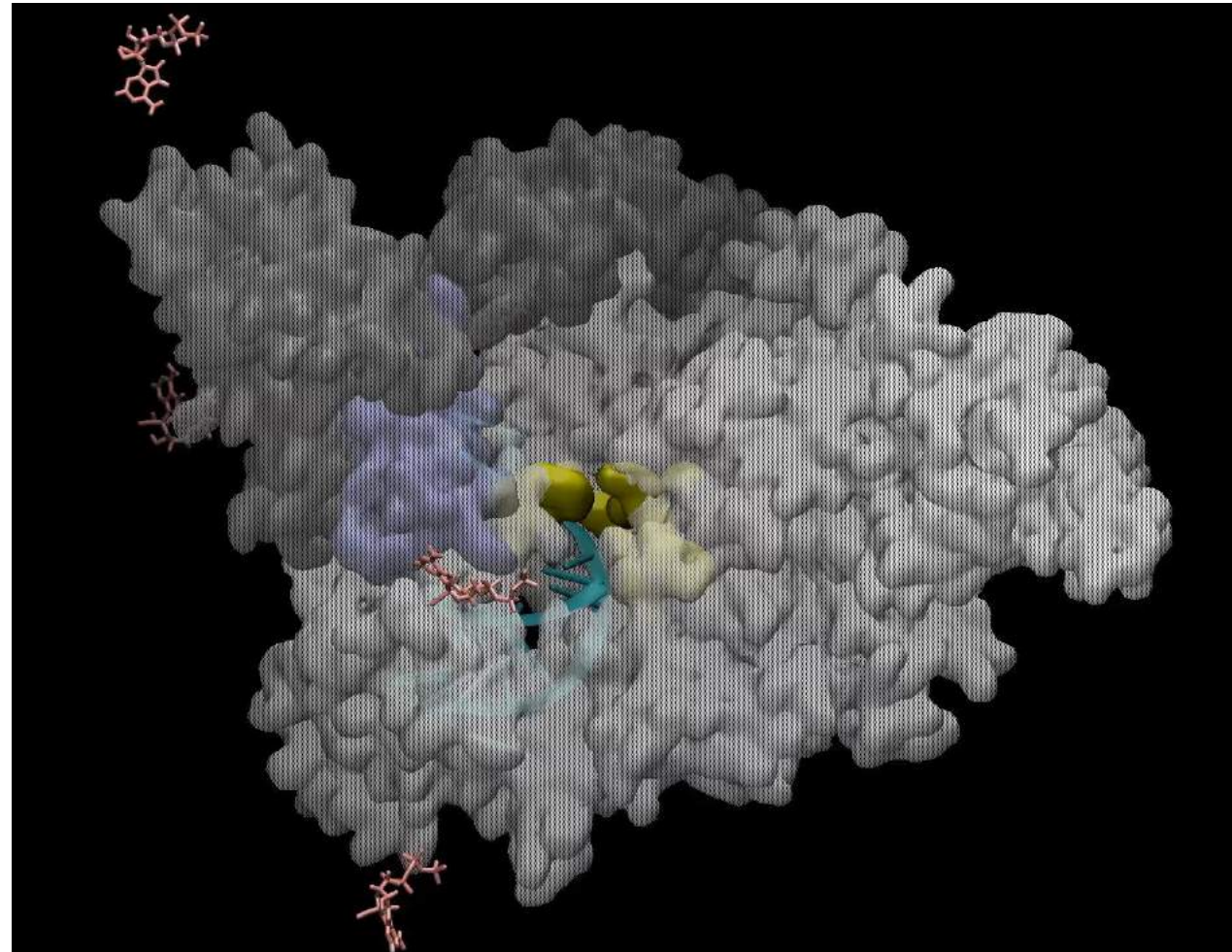
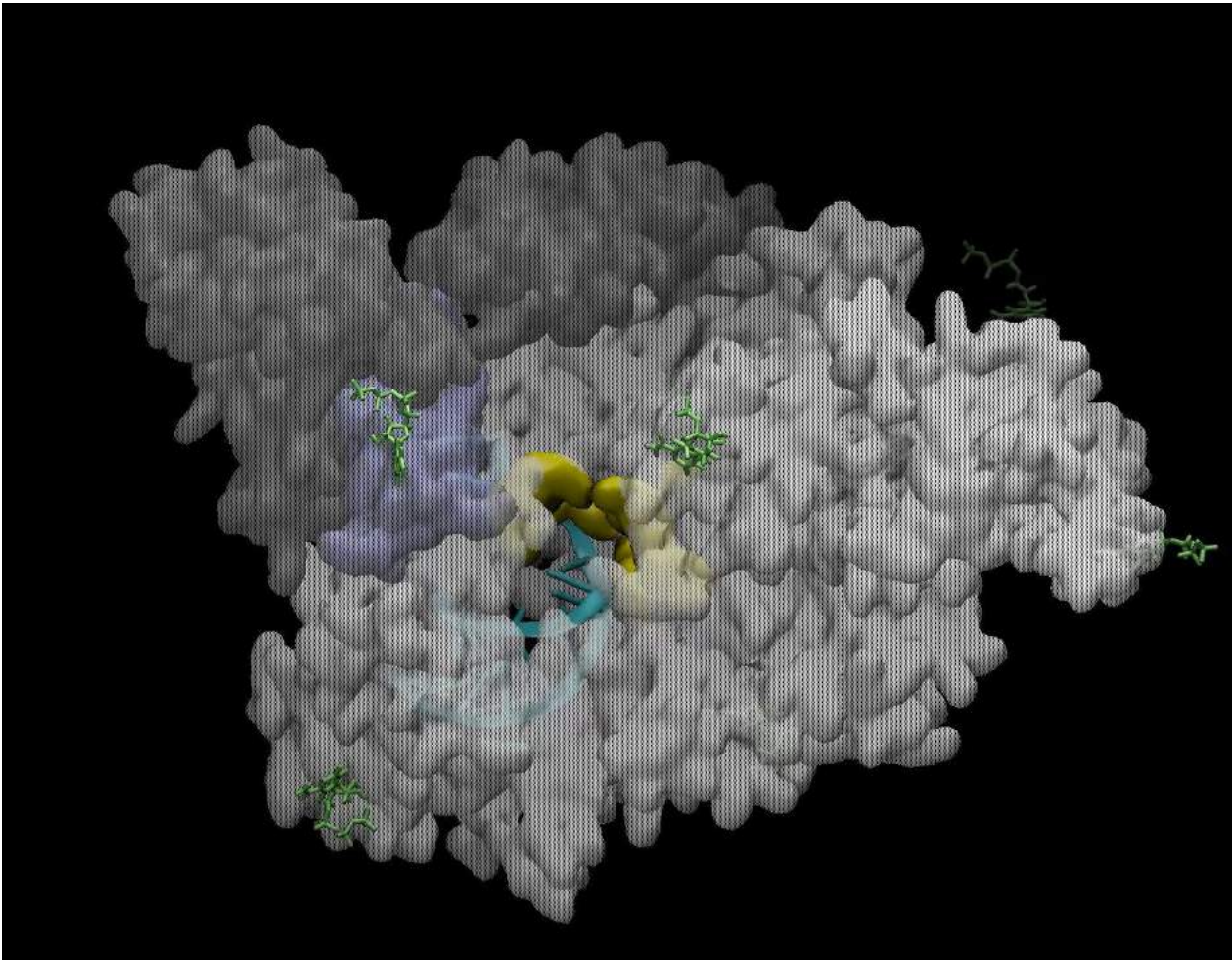
タンパク質全体
に強く結合

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

Behavior of Avigan and Remdisivir with RNA Polymerases (RdRp)

アビガン（緑色）の結合シミュレーション

レミデシブル（桃色）の結合シミュレーション



灰色：標的タンパク質であるRNAポリメラーゼ（RdRp） 黄色：RNAポリメラーゼの活性ポケット 18



Pandemic Phenomena and Responses: Simulation Analyses

理化学研究所 R-CCS 伊藤伸泰

Economic Simulation

実際のサプライチェーンデータ上で
財の供給をシミュレート

縦軸は総付加価値額(GDP)・横軸は日数

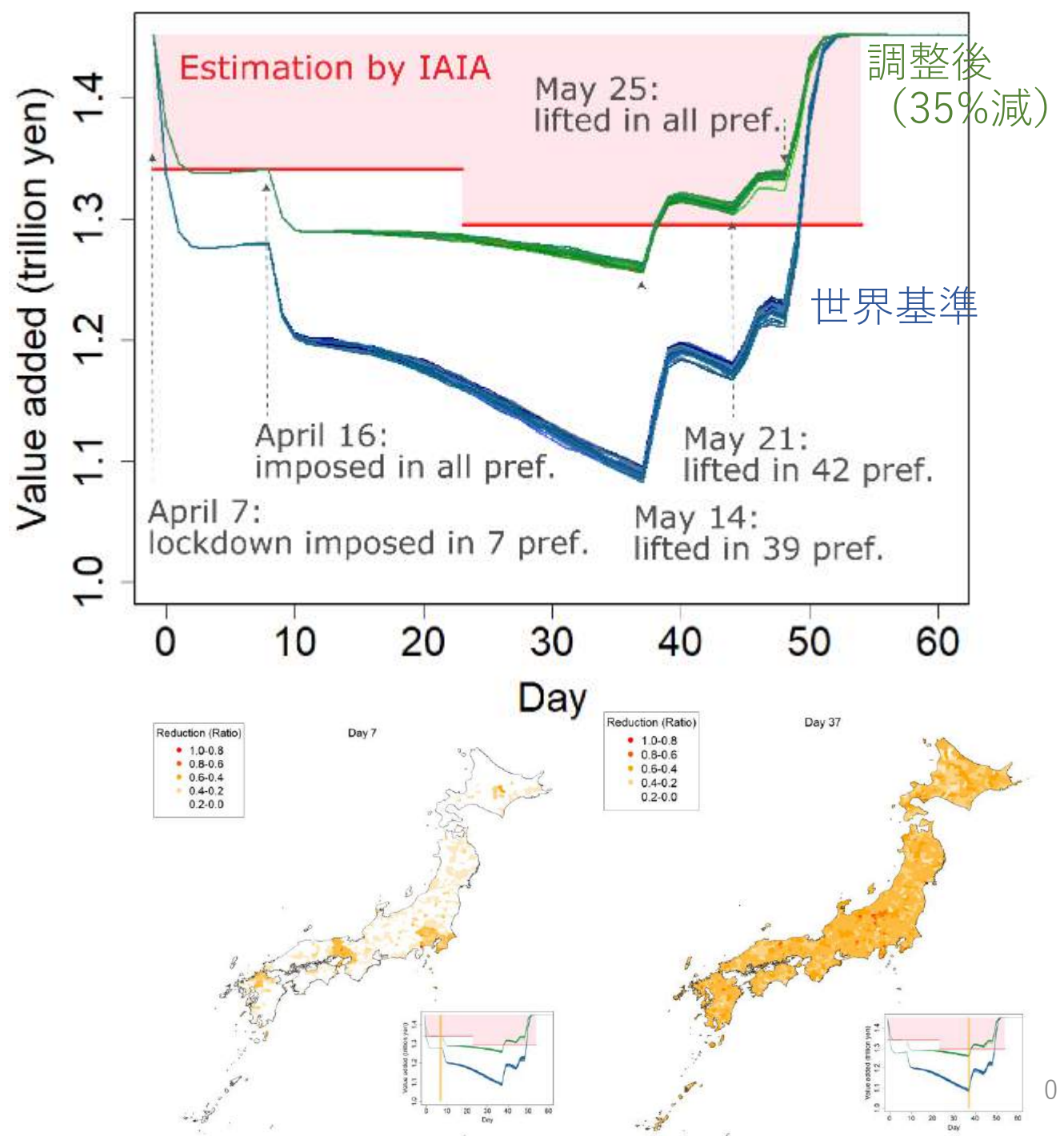
青の線は自粛のタイミングは実際と同じ、自粛
エリアは実際の都道府県としつつ、業種におけ
る（労働者が稼働できないなどによる）生産力
減少を世界基準(Guan et al. 2020 and Bonadio 2020)
にした場合

ピンクの領域は全産業活動指数4・5月に基づ
くGDPの推定減少額

緑の線は上記の世界基準において全産業に同じ
係数を掛けてピンクの領域と緑の線の減少額が
一致するようにシミュレートしたもの

In conclusion, Japan's COVID-19
response was economically 35% more
efficient than the global average

本成果は科研費JP18K04615, JP18H03642による



Estimates for Infection by Aerosol Virus Particles in Indoor Environments, and Countermeasures

理化学研究所／神戸大学 坪倉 誠

Effectiveness of Masks

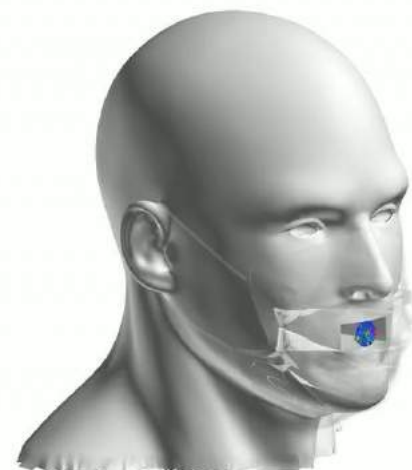
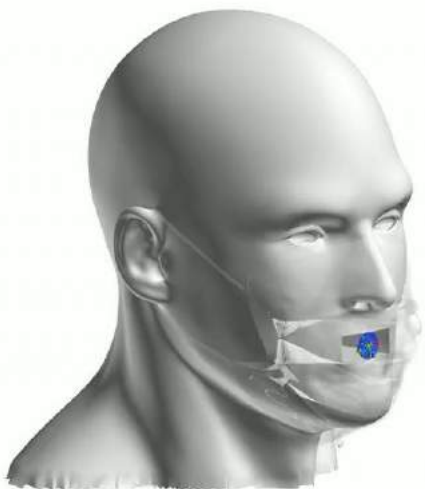
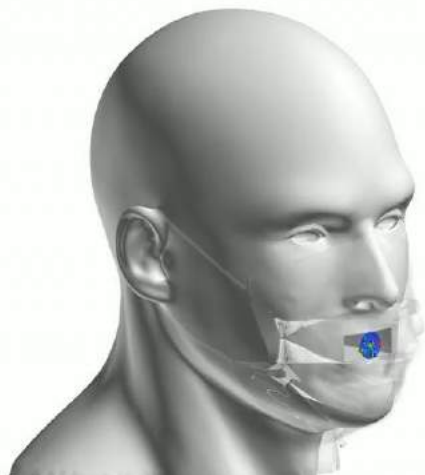
Comparison of Non-Woven Fabric Masks and Handmade Cloth Masks

マスクの素材の違いによる飛沫抑制効果について調べる（鼻まで覆われています）

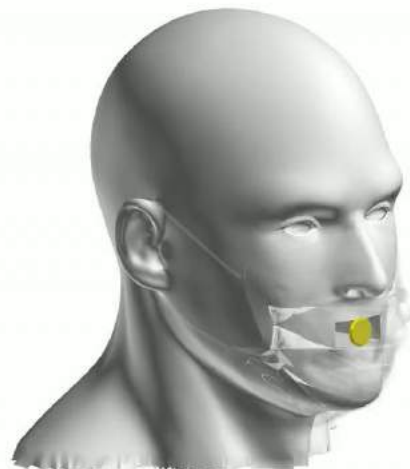
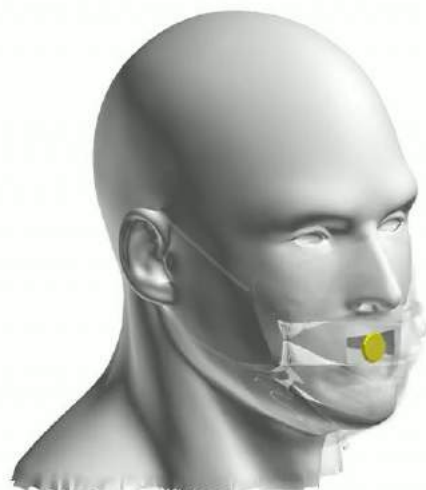
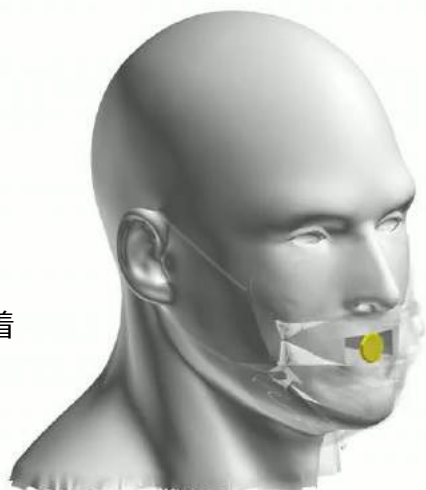
不織布マスク

手作り布マスク（ポリエステル相当）

手作り布マスク（綿相当）



色は粒径

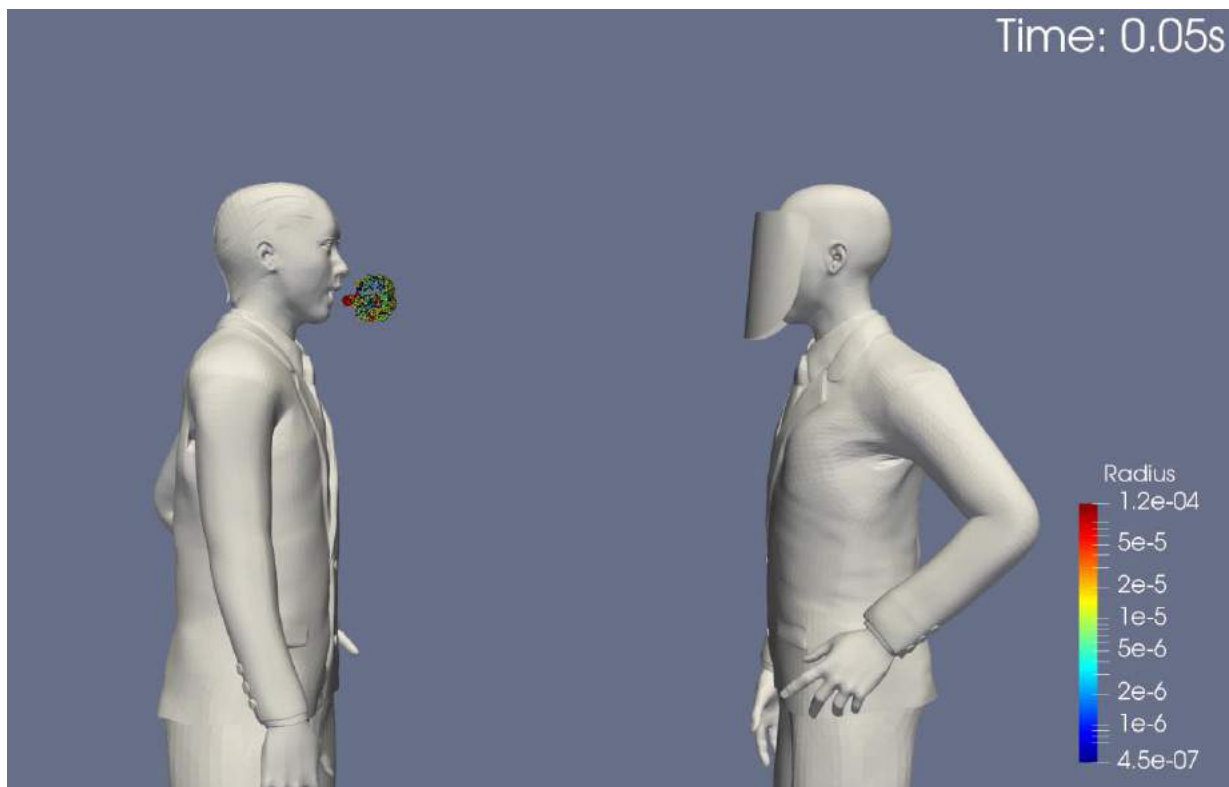


黄：隙間放出
赤：マスク・顔付着
青：マスク透過

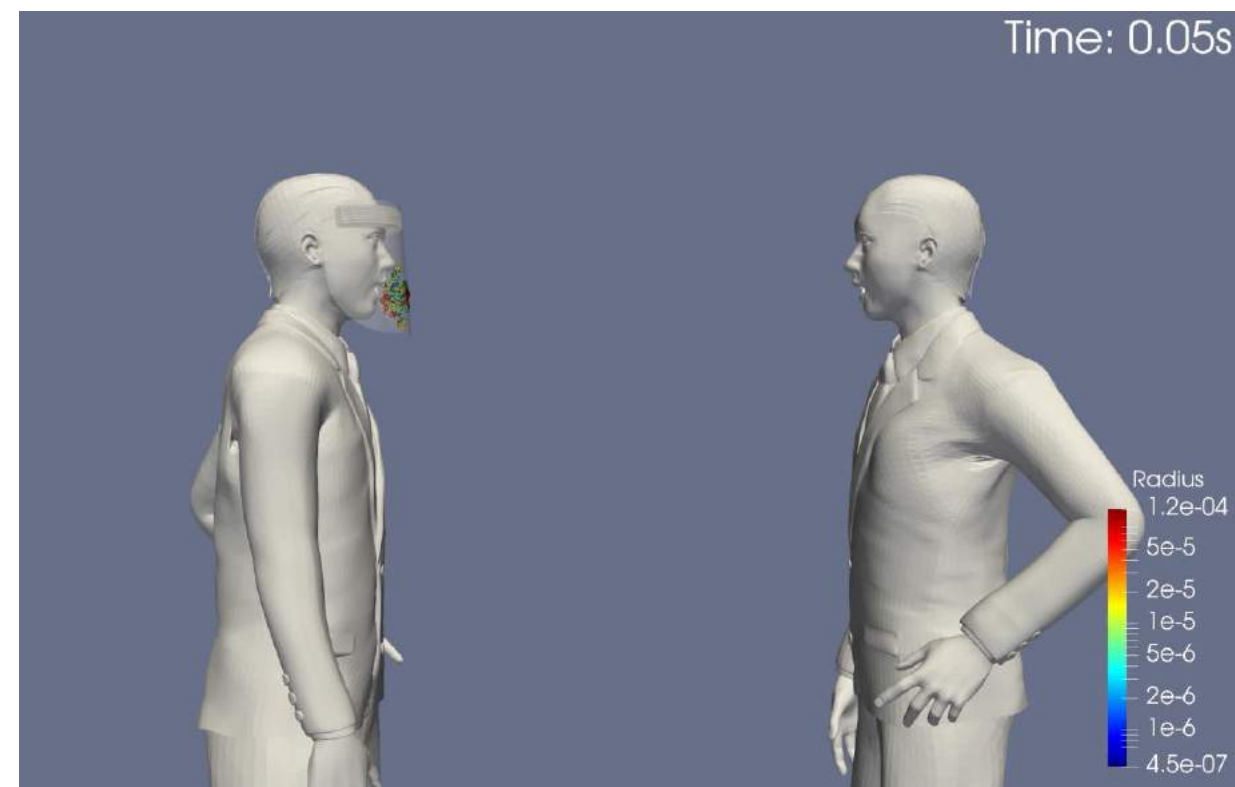
フェースシールドの飛沫防御効果と飛散抑制効果（マスクの代替）はどの程度なのか？

- 咳をした場合で検証
- 鼻と口で同時呼吸を想定.
- 色は飛沫のサイズ（赤：百マイクロン, 青：0.5マイクロン）

感染者からの飛沫を防御する効果



感染している場合の飛沫の飛散を防御する効果（マスクの代替）



吸気時にウイルス飛沫・エアロゾルが体内に侵入するのをどの程度防御できるか？（他者からの感染抑止効果）

- 人の上気道をモデル化，深呼吸時（吸う吐く吸うで6秒）にどの程度の飛沫が上気道に取り込まれるかを評価する。
- 鼻と口で同時呼吸を想定。
- 顔の周りに200ミクロン以下の飛沫を一様に同じ粒径分布で配置
- 色は飛沫のサイズを表す（赤：2百ミクロン，青：1ミクロン）

マスク無し



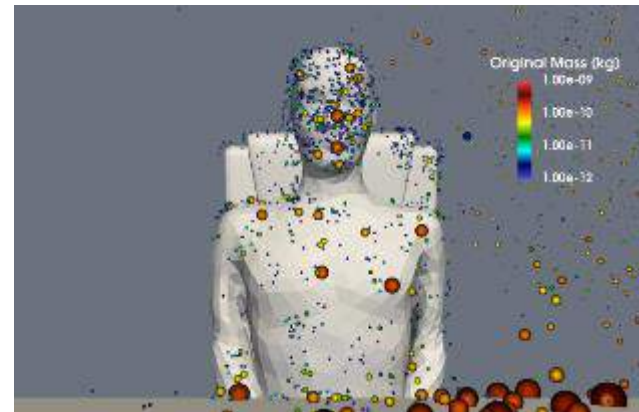
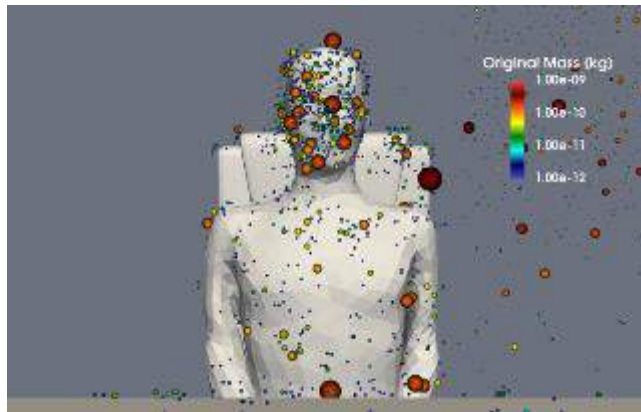
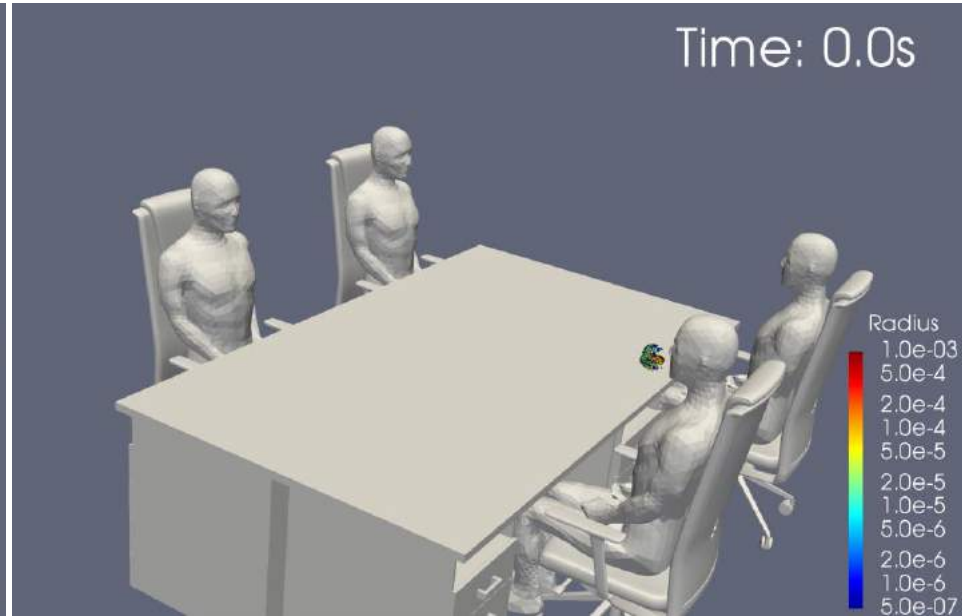
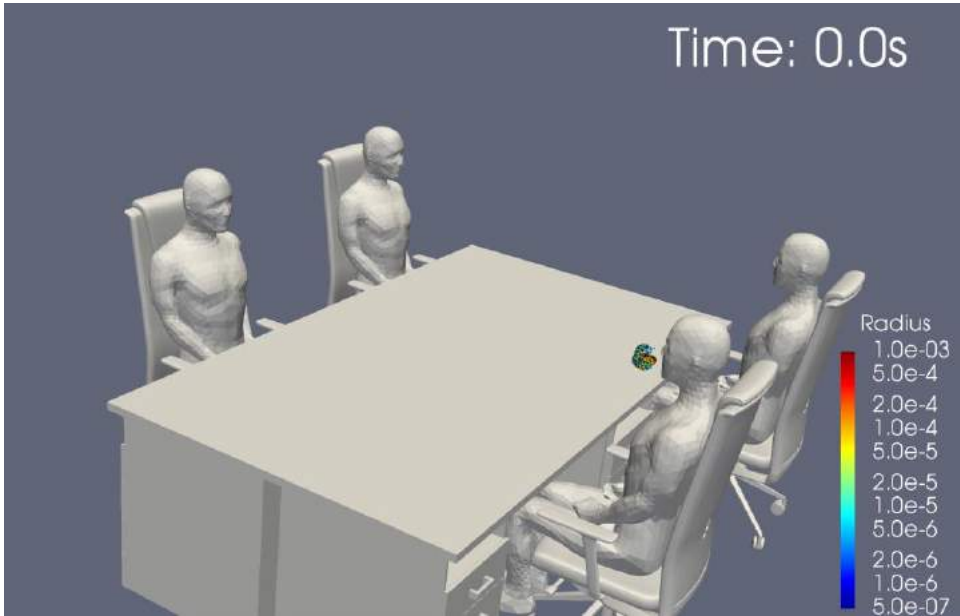
不織布マスク（顔隙間あり）



Estimates for Infection by Aerosol Virus Particles in Indoor Environments, and Countermeasures: The Effect of Humidity When Coughing

湿度30%

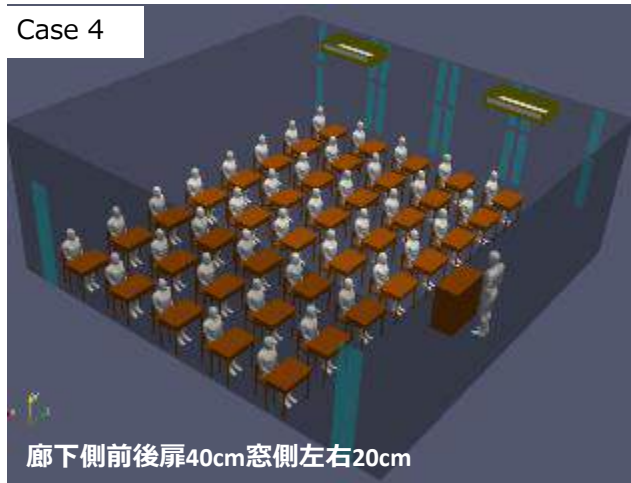
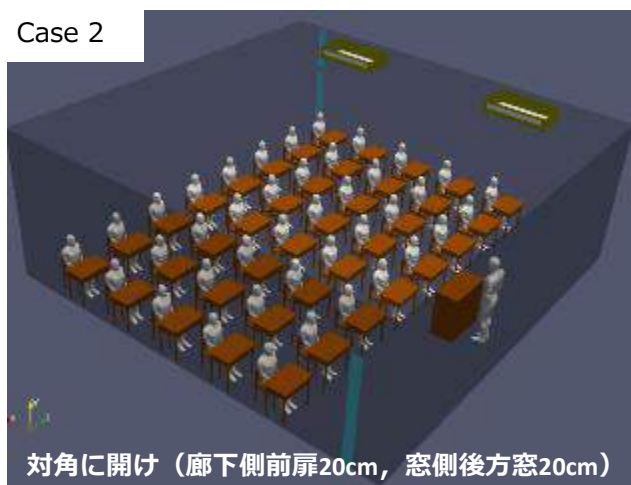
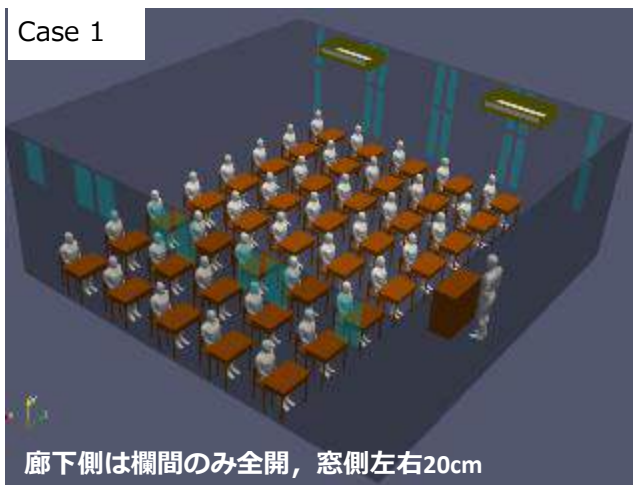
湿度90%



- 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ため、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。

Evaluation of the Effectiveness of Ventilation by Opening Windows

窓から流速1m/sで一様に外気が流入する条件



	流入部面積 (m ²)
Case 1	3.28
Case 2	0.41
Case 3	1.64
Case 4	3.28

窓開け換気の様子



Estimates for Infection by Aerosol Virus Particles, and Countermeasures: Business, Academia, and Government Collaboration

10月13日に合同説明会で発表

ステアリングメンバー



飲食店におけるマウスガードの効果（一般的な形状の検討）

協力メンバー



- ・ 飲食店を活用した対策の実効性の確認
- ・ 飲食用フェイスシールドの開発

+



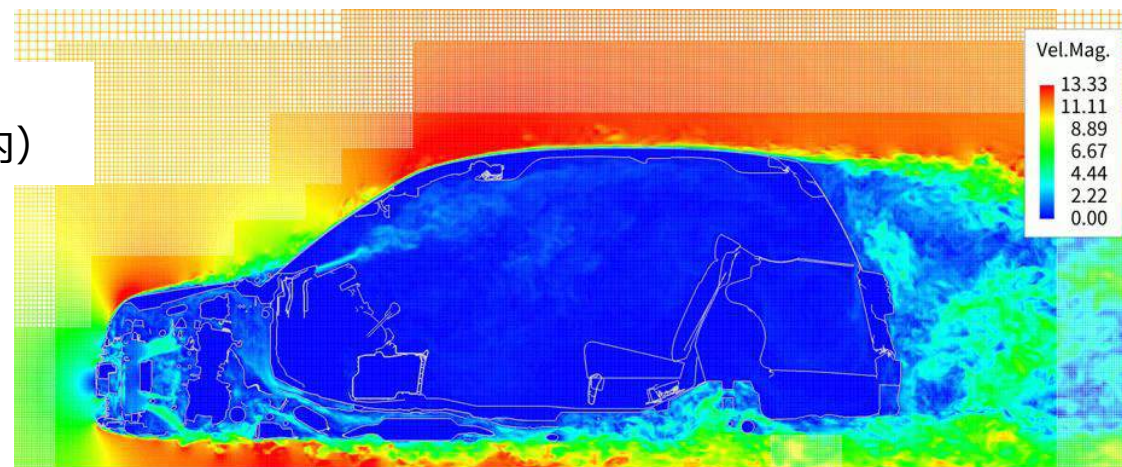
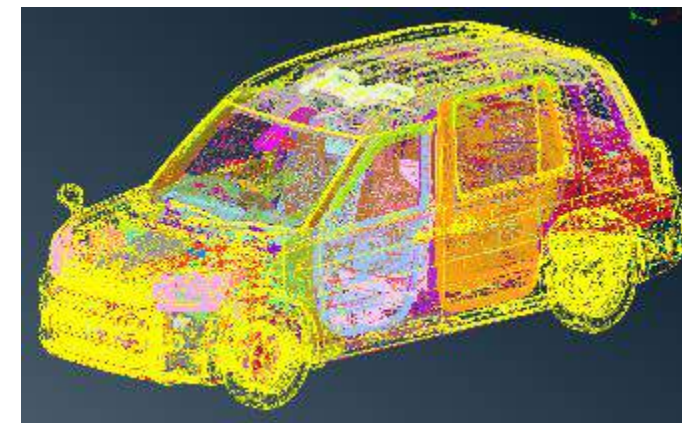
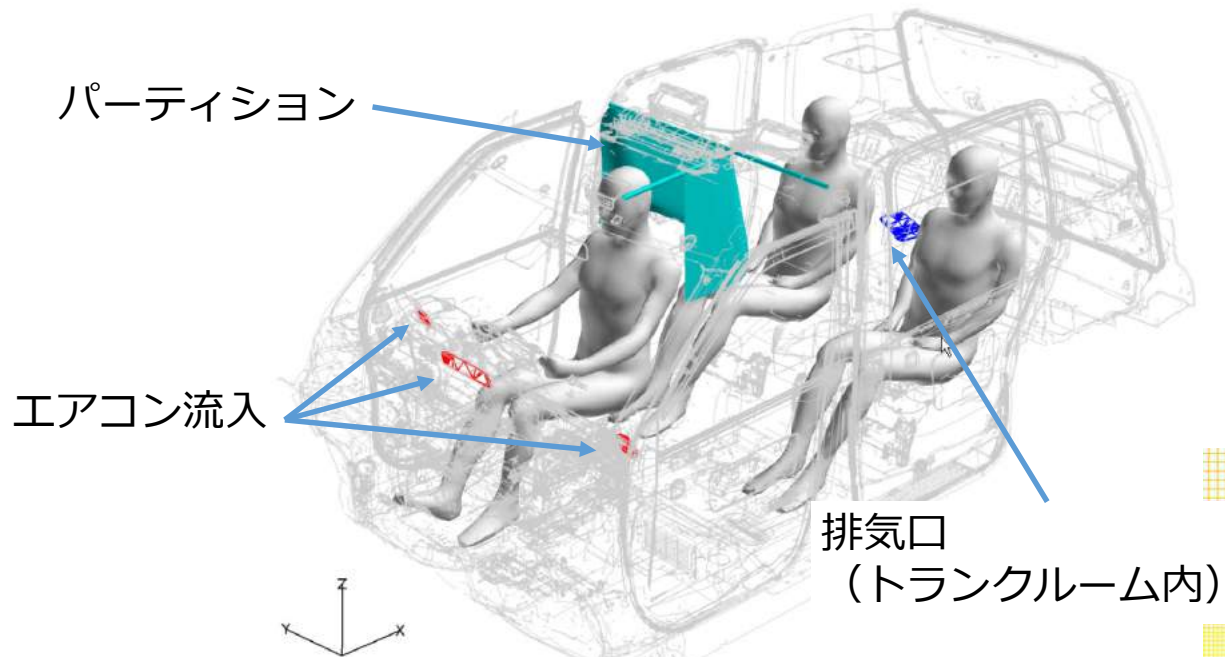
行政との連携



「富岳」を活用した科学的知見をもとに、企業が実効性ある現実の対策を実施する協働取組 = Society5.0実現のための取り組み

タクシー内における感染リスクとその対策は？

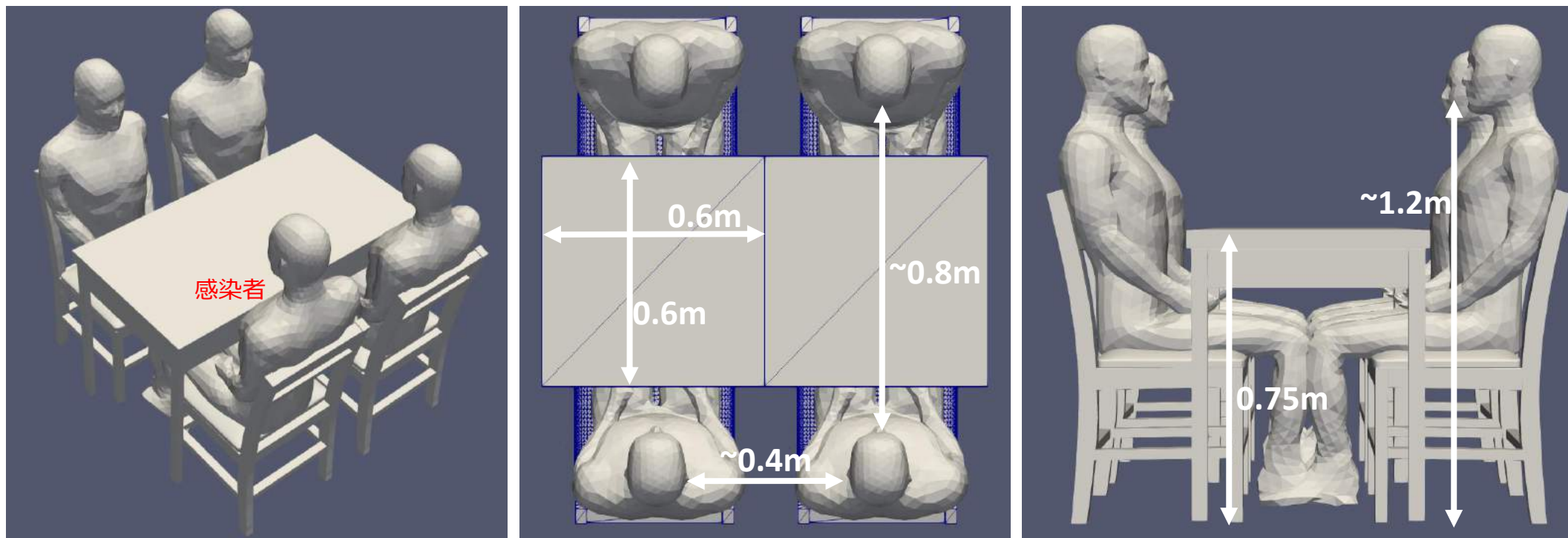
- タクシー内の換気性能の評価と、窓開け、パーティション等による対策の効果について調べる。
- 車速は市街地走行を想定して**時速40キロ**，運転手を含めて**3人乗車**を想定。
- エアコン設定は「**外気導入**」が前提，「通常モード」と「最大モード」の二種類を比較
- 窓は，「窓閉め」，「リア左」，「運転者側」の三か所を想定，いずれも**5cm**開ける



		ユニット数	流量	外部換気 (外気導入モード)	総体積	1時間の換気回数	一人当たりの外部換気量
流入	通常	---	190m ³ /h	190m ³ /h	5m ³	38回	63m ³ /h
	最大	---	380m ³ /h	380m ³ /h		76回	127m ³ /h

人と人が密になる飲食店における感染リスクと、活動再開に向けて有効な対策とは？

- 飲食店では人と人との距離が1m以下になるケースが多く、感染リスクが高まる。
- 1分程度会話をした場合で検証（英語でone, two, three, ..., tenまでを5.5秒で発話し、それを繰り返す）
- 感染者が一名いた場合、座る場所によって到達する飛沫の個数がどの程度変わるかを評価

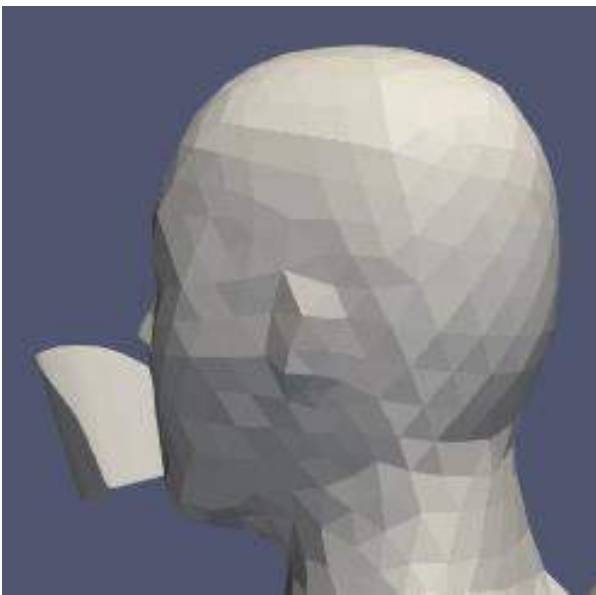


Effectiveness of Mouth Shields in Restaurants (Comparing Shapes)

飲食時の利用を想定した場合、一般的な形状としてどのようなものが有効か？

- 飲食店を想定した四人掛けテーブルで、1分程度会話をした場合で検証

口元のみをカバー



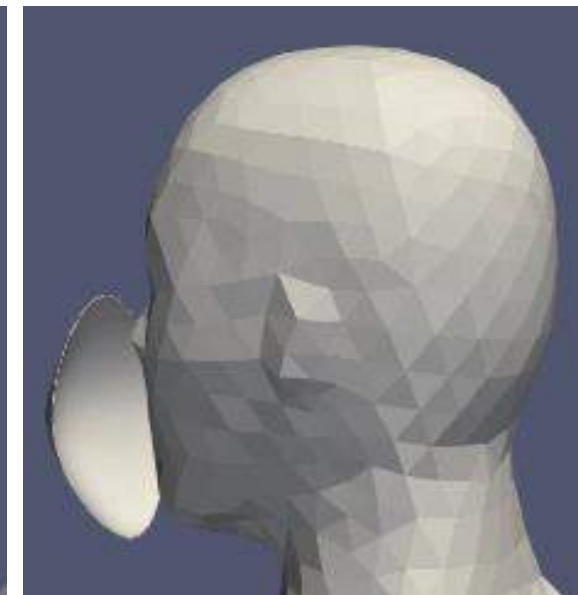
口元と鼻をカバー



顎から鼻までをカバー



顎から鼻までおわん型でカバー



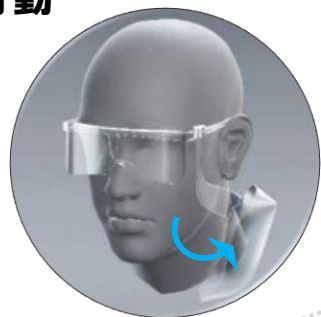
Combining Convenience and Safety

①簡便さ(装着、使用)

メガネタイプの装着方式で
誰でも直感的に、簡単に着脱可能

②飲食のしやすさ

飲食時はワンタッチで
口鼻前のシールドが可動



③表情が見える

フレーム・シールドともに透明素材を採用



④見た目

フレームパーツを極力削減し
見た目に配慮

⑤運用面

シールドパーツは簡単に
着脱が可能

⑥安全性

理化学研究所様の検証をふまえた
シールド構造の検討



※画像はプロトタイプです

引き続き開発を推進、もうすぐ第一段の製品が完成

Exhibited Fugaku Booth at CEATEC 2020 Online: Beginning to Create the Platform for Society 5.0

CEATECは国内最大級のあらゆる産業を網羅する「Society5.0の総合展」。
「富岳」ブースとして、理研は初の出展。幅広い技術的ポテンシャルの紹介と活用の呼びかけ。

出展コンセプト：「富岳」のITはIoTの未来

- 「富岳」のSociety5.0プラットフォーム化のポテンシャル
- 新型コロナウイルス対応研究等ですでに生み出しつつある実績
- 富岳テクノロジーがCPSの実現と日本の競争力の拡大を加速

CEATEC AWARD 総務大臣賞 受賞

サイバーフィジカルシステム（CPS）/IoT社会の進展とSociety5.0の実現に最も寄与すると評価

（富士通と共同受賞）



2020年10月20日CEATEC AWARD表彰式（CEATEC公式ウェブサイト）



CEATEC 2020 ONLINE (<https://www.ceatec.com/>)
2020年10月20日（火）～23日（金）開催 以降オンデマンドで12月31日まで公開