

ポスト「京」の開発状況

理化学研究所 計算科学研究機構
フラッグシップ2020プロジェクト
リーダー 石川裕

- ✓ フラッグシステム2020プロジェクト全体像
- ✓ 開発目標、開発方針
- ✓ 基本設計概要（協調設計）

自己紹介

● 石川 裕 (いしかわ ゆたか)

● 略歴

● 1987年4月～2001年

- 通商産業省電子技術総合研究所

● 1988年～1989年

- 米国カーネギーメロン大学客員研究員

● 1993年～ 2001年

- 新情報処理開発機構出向

通商産業省（現在の経済産業省）主導プロジェクトである「リアルワールドコンピューティングプログラム」を実施した組織

● 2002年1月1日～2014年9月30日

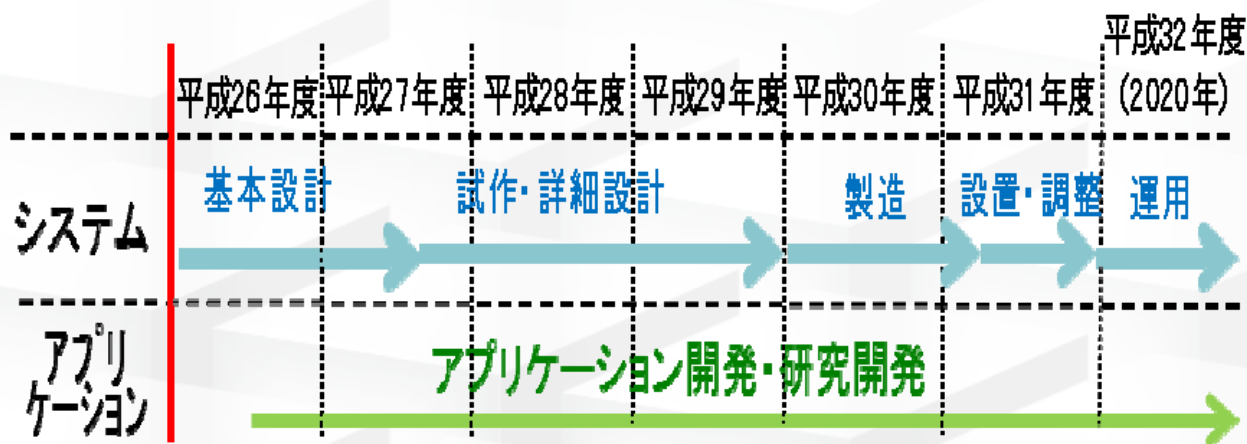
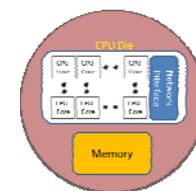
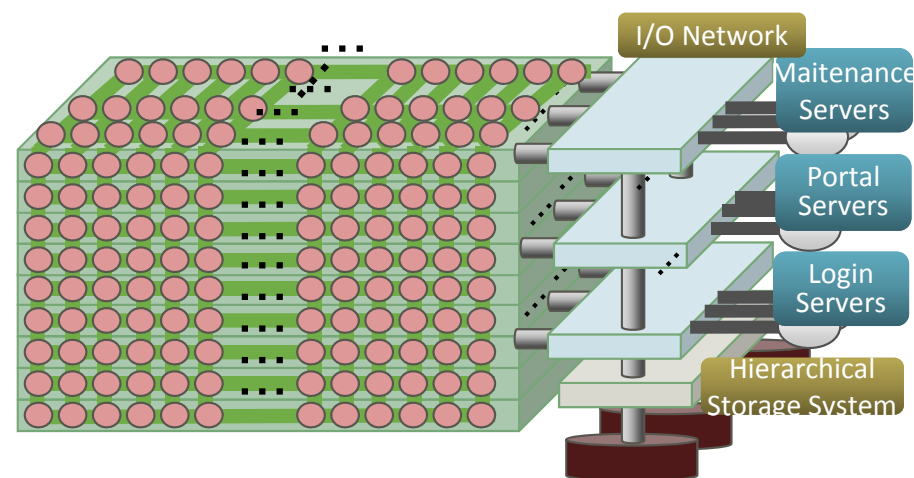
- 東京大学情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻
- 東京大学情報基盤センター長（2010年4月～2014年3月）

● 2010年10月1日～

- 理化学研究所 計算科学研究機構2010年10月1日～2014年9月30日兼務

FLAGSHIP2020プロジェクト概要

- 「京」コンピュータの後継機としてフラッグシップマシン (post K)を開発
 - 理研が富士通とともに開発
- 「京」コンピュータの後継機上で社会的・科学的課題を解決するためのアプリケーションを開発
 - 9重点実施機関による開発

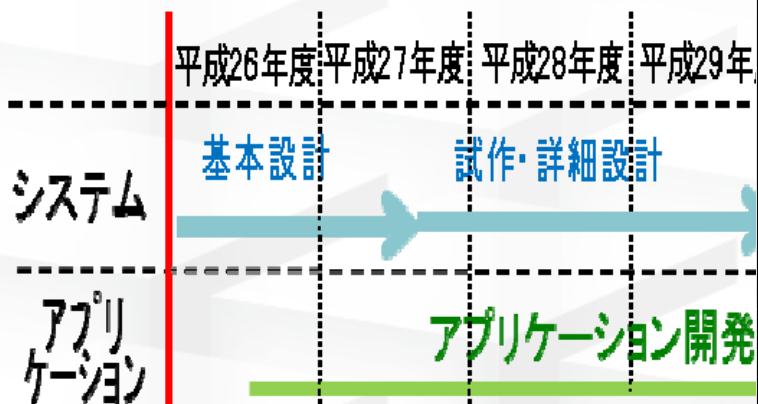


FLAGSHIP2020プロジェクト概要



- 「京」コンピュータの後継機としてポスト K (post K) を開発
 - 理研が富士通とともに開発
- 「京」コンピュータの後継機上で社会課題を解決するためのアプリケーション
 - 9重点実施機関による開発

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	① 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 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までをも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。
防災・環境問題	③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。
	④ 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 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。
カテゴリ	重点課題
エネルギー問題	⑤ 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 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。
産業競争力の強化	⑦ 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 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。
	⑧ 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 製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現する。
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。



世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現

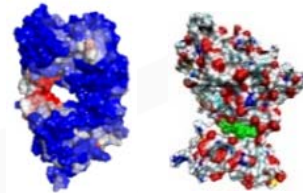
- 最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
- 消費電力：30～40MW（運用時平均30MW(3万kW)）

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現

● 最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能

	「京」で実現	ポスト「京」で目指す成果と社会への貢献例
創薬	はじめて薬剤の候補物質とタンパク質の結びつきやすさをシミュレーションし、単一のタンパク質の機能阻害を考慮した10種類程度の薬候補スクリーニングを実現	薬剤の候補物質と多数のタンパク質からなる生体分子システムの相互作用をシミュレーションし、副作用の原因等も分析が可能になり、有効性の高い創薬が期待される。 → 10年以上、数百億円を要するとされる新薬開発の短縮化。（創薬でよく用いられるシミュレーションで、「京」で約1年の計算が、ポスト「京」では約5日）

標的タンパク質（緑）と薬剤候補化合物（赤）



複数タンパク質への新薬候補物質の作用を解析

ものづくり	従来不可能であった自動車の試作実験（風洞実験）に匹敵する精度での空気抵抗等の予測が可能に	飛行機における実機・実スケールの空カシミュレーションで、現象が複雑でこれまで解析できなかった離着陸時の空力特性・失速・騒音などを高精度な解析の実現を目指す。 → 飛行機の燃費改善や安全性向上に貢献し、実機飛行試験の一部代替
気象	従来不可能であった半日から一日前に、地域レベルの集中豪雨を予測できる可能性を示した	高機能レーダーの観測ビックデータの同化により、「京」では不可能だった甚大災害につながるいわゆるゲリラ豪雨等の高精度な再現が可能となり、30分から数時間前の予測が現実的。 → 気象災害による被害（過去20年間で年平均約5,000億円の経済被害）の低減に貢献

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現

● 最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能

	「京」で実現	ポスト「京」で目指す成果と社会への貢献例
創薬	はじめて薬剤の候補物質とタンパク質の結びつきやすさをシミュレーションし、単一のタンパク質の機能阻害を考慮した10種類程度の薬候補スクリーニングを実現	薬剤の候補物質と多数のタンパク質からなる生体分子システムの相互作用をシミュレーションし、副作用の原因等も分析が可能になり、有効性の高い創薬が期待される。 → 10年以上、数百億円を要するとされる新薬開発の短縮化。(創薬でよく用いられるシミュレーションで、「京」で約1年の計算が、ポスト「京」では約5日)
ものづくり	従来不可能であった自動車の試作実験(風洞実験)に匹敵する精度での空気抵抗等の予測が可能に	飛行機における実機・実スケールの空力シミュレーションで、現象が複雑でこれまで解析できなかった離着陸時の空力特性・失速・騒音などを高精度な解析の実現を目指す。 → 飛行機の燃費改善や安全性向上に貢献し、実機飛行試験の一部代替
気象	従来不可能であった半日から一日前に、地域レベルの集中豪雨を予測できる可能性を示した	高性能レーダーの観測ビッグデータの同化により、「京」では不可能だった甚大災害につながるいわゆるゲリラ豪雨等の高精度な再現が可能となり、30分から数時間前の予測が現実的。 → 気象災害による被害(過去20年間で年平均約5,000億円の経済被害)の低減に貢献

● 消費電力：30~40MW (運用時平均30MW(3万kW))

「京」(10.5PF)の消費電力：12.7 MW(1万2700kW)

PF(ペタフロップス)：一秒間に10の15乗(千兆)回演算

30 MWの世界



パソコン30万台(100W/台)に相当、18PFにしかない

⇒ 「京」の1.7倍の性能

Linpack性能：600億演算/秒(60 Gflops)

動作周波数：3 GHz

主記憶容量：8GB

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現

- 最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能

例：創薬において「京」で約1年かかるのが、ポスト「京」であれば約3日で計算可能

10万原子の系に対して10万薬剤候補化合物のスクリーニングを分子動力学シミュレーション（原子間相互作用に基づいて分子運動を計算する方法）でおこなう場合

- 消費電力：30～40MW（運用時平均30MW(3万kW)）

「京」(10.5PF)の消費電力：12.7 MW(1万2700kW)

PF(ペタフロップス)：一秒間に10の15乗（千兆）回演算

30 MWの世界



パソコン30万台(100W/台)に相当



「京」の100倍

高い電力性能を有する
マシンの開発が必要

Linpack性能：600億演算/秒(60 Gflops)
動作周波数：3 GHz
主記憶容量：8GB

ポスト「京」開発方針

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータを実現するために

- サイエンスドリブン
- コア・アーキテクチャの強化
- TCOの軽減
- 性能拡張性
- 「京」の資産の継承
- 社会が欲するニーズに即応
- システムソフトウェアにおける国際共同研究

ポスト「京」開発方針

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータを実現するために

- サイエンスドリブン
- コア・アーキテクチャの強化
- TCOの軽減
- 性能拡張性
- 「京」の資産の継承
- 社会が欲するニーズに即応
- システムソフトウェアにおける国際共同研究

重点課題を解決するアプリケーション実行が高い電力性能を達成するために

ポスト「京」開発方針

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータを実現するために

- サイエンスドリブン
- コア・アーキテクチャの強化
- **TCOの軽減**
- 性能拡張性
- 「京」の資産の継承
- 社会が欲するニーズに即応
- システムソフトウェアにおける国際共同研究

運用時使用電力軽減、保守費軽減

ポスト「京」開発方針

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータを実現するために

- サイエンスドリブン
- コア・アーキテクチャの強化
- TCOの軽減
- **性能拡張性**
- 「京」の資産の継承
- 社会が欲するニーズに即応
- システムソフトウェアにおける国際共同研究

2020年以降も半導体技術の進展等に応じて効果的・効率的に性能拡張できるシステム

ポスト「京」開発方針

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータを実現するために

- サイエンスドリブン
- コア・アーキテクチャの強化
- TCOの軽減
- 性能拡張性
- 「京」の資産の継承
- 社会が欲するニーズに即応
- システムソフトウェアにおける国際共同研究

開発の効率化のために、「京」で確立された技術・人材・アプリケーション等を最大限活用

ポスト「京」開発方針

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータを実現するために

- サイエンスドリブン
- コア・アーキテクチャの強化
- TCOの軽減
- 性能拡張性
- 「京」の資産の継承
- **社会が欲するニーズに即応**
- システムソフトウェアにおける国際共同研究

システムソフトウェアで提供可能な
ニーズに対応

ポスト「京」開発方針

世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータを実現するために

- サイエンスドリブン
- コア・アーキテクチャの強化
- TCOの軽減
- 性能拡張性
- 「京」の資産の継承
- 社会が欲するニーズに即応
- システムソフトウェアにおける国際共同研究

国際協力による最先端技術および業界標準システムソフトウェア等の開発により、機種依存性を低減させ、ソフトウェアの可搬性を上げる。

● 日米科学技術協力協定 (1988年締結) 

エネルギー等研究開発のための協力に関する実施取極 (文部科学省 (MEXT) -エネルギー省 (DOE) 間) (2013年4月30日締結)

※本実施取極で明記された協力分野 (核融合科学, 高エネルギー物理学, 原子核物理学, 計算機科学, 量子ビーム技術, 基礎エネルギー科学, 生物及び環境科学, その他合意される分野)

スーパーコンピュータに関する協力取極

- 締結日: 2014年6月23日
- 実施主体: DOEアルファ研究所 (米国)、理化学研究所 (日本) 他
- 協力分野: システムソフトウェア
- 取極の主な内容
 - ・ 同取極下での研究協力による研究結果や情報の取り扱いについて明記
 - ・ 取極下で“Committee”を設け、年に一回以上実施し、具体的な協力内容を調整

● 重点実施機関のニーズに基づく基本設計

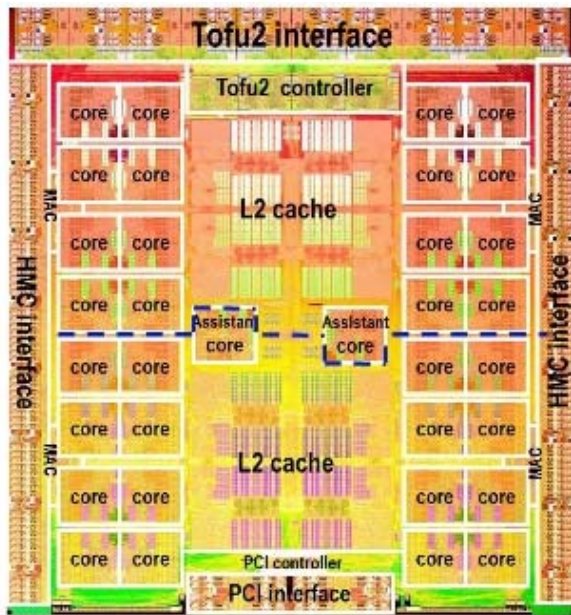
- 社会的・科学的課題および必要とする計算資源量の提供
 - 大規模、精密、長時間発展といった**大規模単一処理**のニーズ
 - 複雑な現象を対象とした課題における**多重ケース処理**のニーズ
 - Big data computing、社会科学シミュレーションのニーズ

● 協調設計 (Co-design)

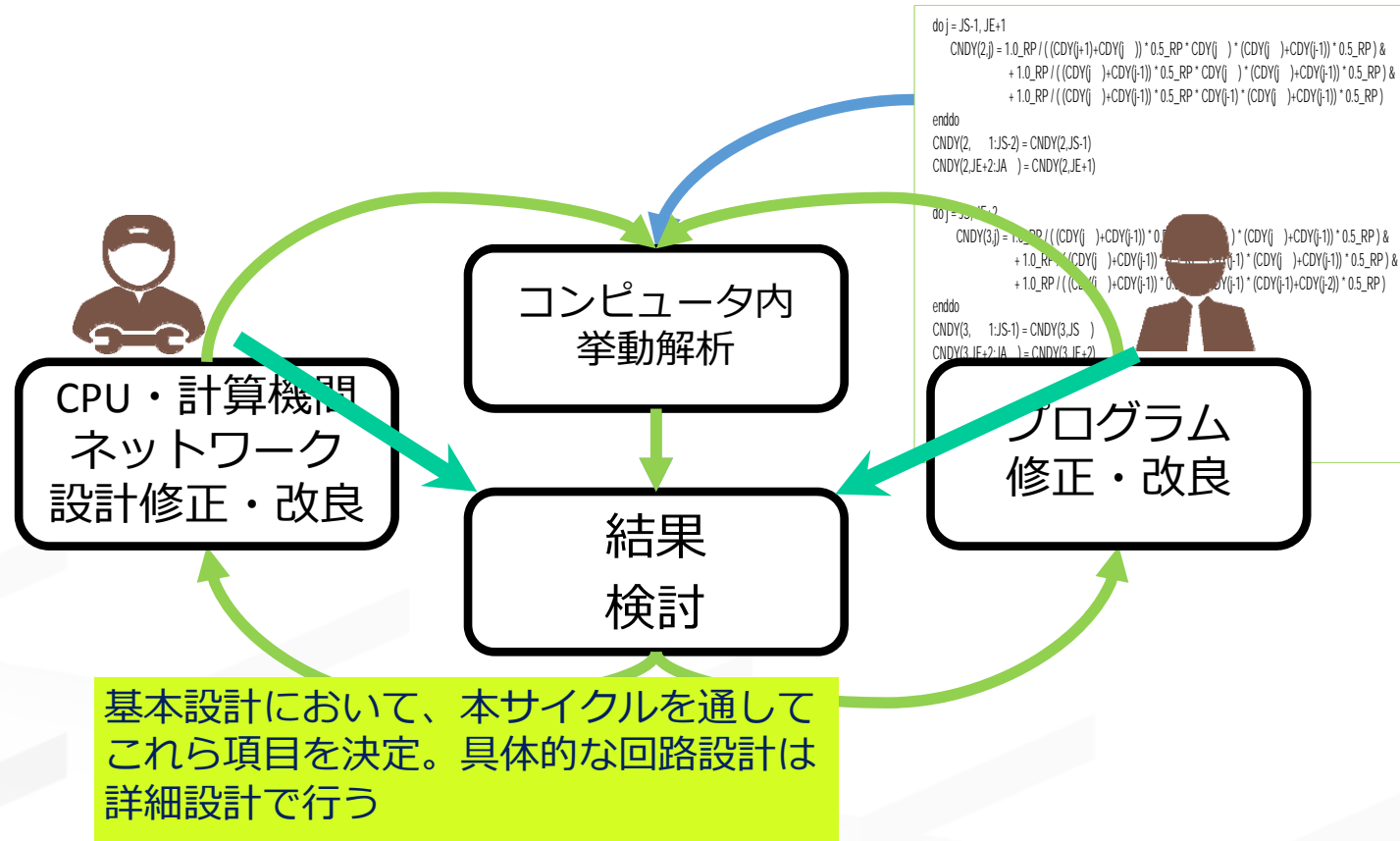
- アプリケーション開発者と計算機システム開発者の協調によりアプリケーションおよびシステムを co-design していく

カテゴリ	重点課題	
	課題名	ターゲットアプリ名
健康長寿社会の実現	① 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	GENESIS
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	Genomon
防災・環境問題	③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	GAMERA
	④ 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	NICAM+LETKF
エネルギー問題	⑤ 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	NTChem
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	Adventure
産業競争力の強化	⑦ 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	RSDFT
	⑧ 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	FFB
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明	LQCD

コデザイン (協調設計) におけるハードウェア設計例



富士通株式会社の最新スパコンFX100のCPU



基本設計において、本サイクルを通してこれら項目を決定。具体的な回路設計は詳細設計で行う

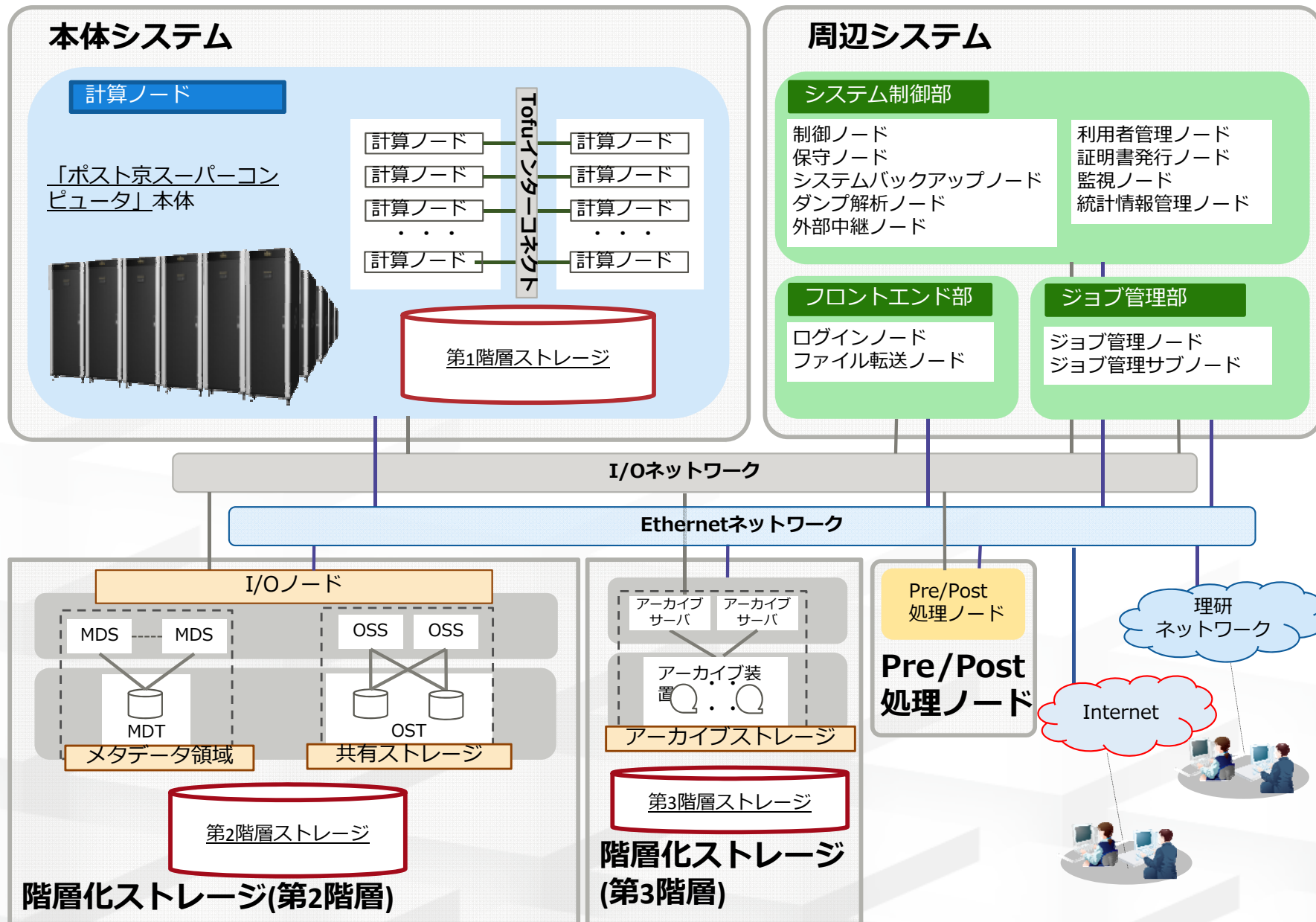
コンピュータの性能を左右する項目例

- ✓ コア数
- ✓ 演算回路数
- ✓ キャッシュ (高速メモリ) 容量
- ✓ データ転送性能
- ✓ メモリ容量
- ✓ コア・メモリ間接続方式
- ✓ 計算機間接続方式

*写真：富士通株式会社提供

*The Icons made by Freepik from www.flaticon.com

システム全体構成



おわりに

- 2016年1月15日より富士通株式会社とともに詳細設計を開始
- 詳細設計における取り組み例
 - CPU論理設計・物理設計、ボード、冷却方式、ラック構成などのハードウェア設計
 - システム構成、運用機能
 - システムソフトウェア（OS、通信ライブラリ、ファイルI/O・ファイルシステム、プログラミング環境、数値計算ライブラリ）の実装方式等

