



理化学研究所 計算科学研究 センター

RIKEN Center for Computational Science

計算の、計算による、計算のための科学

理化学研究所・計算科学研究センター(R-CCS)は、スーパーコンピュータを中心とした高性能な「計算」という事象自身を「計算の科学」として探求し、それによって得られる莫大な計算パワーをさまざまな科学分野の問題解決に適用してそれらの発展に寄与する「計算による科学」を推進し、さらには両者の高度化に貢献する他の科学分野の産物である「計算のための科学」と連携を果たすべく、次世代の「計算科学」の世界トップレベルかつ我が国の中核拠点の研究センターとして活動することを目標としています。

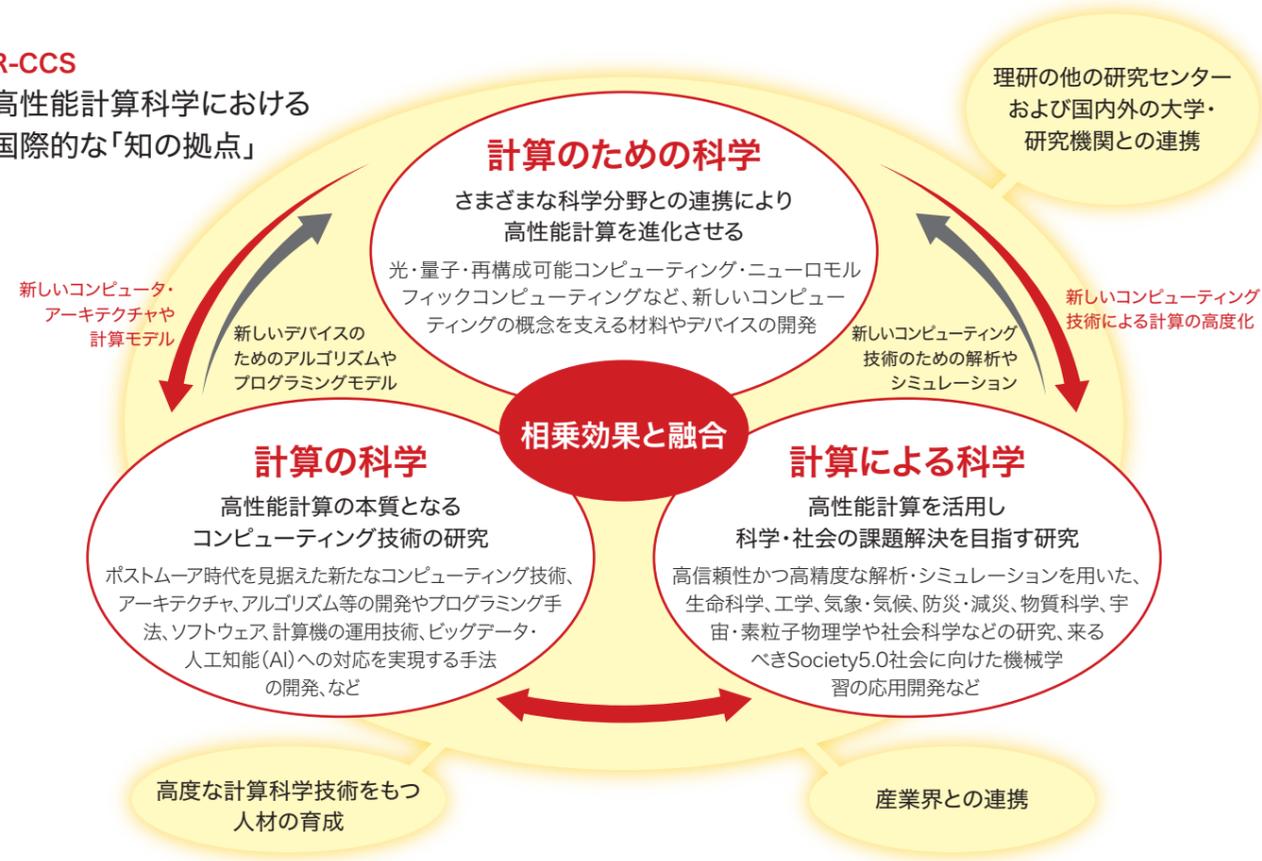
計算科学はさまざまな手法を使って、過去から未来へ、ミクロからマクロへ、世の中の事象を計算として計算機の内部で再現し、人類の重要な問題の解決にチャレンジすることを可能にします。例えば、現象を物理の方程式で表し、それを解くことによって現象を再現する「シミュレーション」、膨大な観測データを分析してその傾向を把握し予測に繋げる「データ科学」、さらにはデータを学習し、高度な推論によって現象の本質を捉える「人工知能」などが挙げられます。スーパーコンピュータは、これら全てを数千倍から数百万倍まで時間・規模ともに加速し、世の中の関心の高い多くの問題の解決に適用され、社会に革新的な進歩をもたらすことが可能です。R-CCSはそれらの最先端の研究を行うことを使命としています。

同時に、スーパーコンピュータの進化のために研究開発される諸々の革新的技術は、IT分野全体を進化させる最先端かつ急先鋒の技術として広い影響力を伴うことが必須であり、特にクラウドコンピューティングからエッジコンピューティングを中心とした世の中のITインフラ全体の進化に広く貢献し、国民生活や経済の向上に役立つことが期待されます。R-CCSはITの進化を担う世界の中心的センターとして、国内外の諸機関と連携し、研究開発を推進していきます。



センター長
松岡 聡

R-CCS 高性能計算科学における 国際的な「知の拠点」



R-CCSの組織



R-CCSの活動

世界トップレベルのスーパーコンピュータの開発

R-CCSは、スーパーコンピュータ「京」に続き、後継機であるスーパーコンピュータ「富岳」の開発・整備を主体となって進めています(詳しくは中面をご覧ください)。

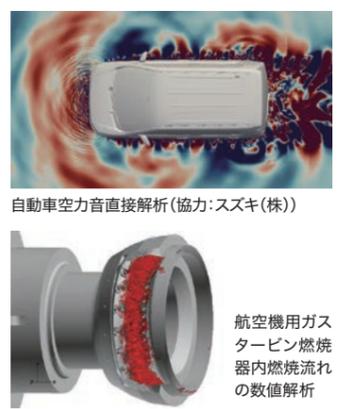
さまざまなソフトウェアの開発

R-CCSの研究チームでは、「富岳」を含む多くのHPCプラットフォームにおいて利用可能なアプリケーション、ライブラリ、プログラミングツールなどを開発しています。

	並列プログラミングの生産性を向上させるためのプログラミング言語。
	固有値計算ソフトウェア。「京」の全計算プロセッサを利用し世界最大規模の固有値計算に成功。
	生体内分子系のための分子動力学ソフトウェア。
	大規模シミュレーションのためのジョブ管理ソフトウェア。
	地球・惑星の気候システムの解析やシミュレーションのための基盤ライブラリ。
	大規模かつ複雑な分子系に対する第一原理量子化学計算のための包括的なソフトウェア。

産業界との連携

「HPCを活用した自動車用次世代CAEコンソーシアム」、「燃焼システム用次世代CAEコンソーシアム」を設立。産学官連携により、R-CCSの研究成果の迅速な産業界実用化と、研究情報等の交換、産業界の課題の共有および解決に向けた連携を図り、次世代ものづくりのフレームワーク構築を目指しています。



人材育成

大学院生、若手研究者、企業技術者等を対象に、高度な計算科学技術を使いこなし、分野横断的な研究開発や産業界における利活用推進に寄与する人材の育成を行っています。国際HPCサマースクールの開催や、国内外を対象としたインターン受け入れなど、充実したプログラムを実施しています。



おもな実績 ※2018年度以降の実績から抜粋

SupercomputingAsia 2019において、松岡センター長がAsia HPC Leadership Awardを受賞。

松岡センター長らの研究グループが、HPCとデータ分析の国際会議であるHiPC2018において、最優秀論文賞を受賞。

市村強客員研究員らによる大規模シミュレーションとAI、最新の計算機構を組み合わせて行われた超高分解能都市地震シミュレーションが、アプリケーション計算技術における世界最高峰の学会賞ゴードン・ベル賞2018ファイナリストにノミネート。

堀敦史研究員らによる、メニーコアCPUにおける第3の並列実行モデルの新たな実装方式の提案がACM HPDC 2018 Best Paper Awardを受賞。

三好建正チームリーダーらによる「ビッグデータ同化によるゲリラ豪雨予測の研究」が、読売テクノロジーフォーラム ゴールド・メダル賞を受賞。

計算機システムの特徴

世界最高水準の汎用的なシステムを実現します。

国際協力により、世界最先端・国際標準となる技術を目指します。

「京」から受け継ぐシミュレーションでの優位性を保つとともに、「富岳」の技術イノベーションにより、ビッグデータやAIへの展開を目指します。

「富岳」の技術イノベーション

- ▷ チップ自身の高演算性能
スケーラブルベクトル拡張 (SVE)、高メモリバンド幅の新アーキテクチャにより、CPUチップ単位で、多くのHPCアプリにおいて従来CPUの数倍の性能。
- ▷ 高い省電力・グリーン性能
「パワープラ」を含む省電力技術の導入により、汎用CPUでは世界トップレベルの高効率。
- ▷ ARM「エコシステム」の充実
年間200億個以上生産されるARMプロセッサの命令セットを採用しているため、クラウド、IoTにも展開が容易。今回の成果であるSVEがグローバルスタンダードとして世界をリード。
- ▷ Society 5.0アプリへの展開
ビッグデータ、AI、セキュリティなどのアプリにおいてGPUと同等またはそれ以上の性能を発揮すると期待。

「京」から「富岳」への進歩

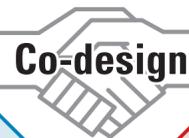
	京	富岳 Fugaku
CPUアーキテクチャ	SPARC64™ VIIIfx	A64FX™ (Arm v8.2-A SVE+富士通拡張)
コア数	8	48
ノードあたりピーク性能 (倍精度)	0.13 TF	2.7 TF+
ラックあたりのノード数	102	384
主記憶容量	16 GiB	32 GiB
メモリバンド幅	64 GB/s	1,024 GB/s
ネットワーク性能	20 GB/s	40.8 GB/s
プロセス技術	45 nm	7 nm FinFET
消費電力	11 MW	30~40 MW (目標性能)

スーパーコンピュータ「富岳」の開発

「富岳」は、社会や科学分野のさまざまな課題を解決すること、Society 5.0の実現に貢献することを大きな目的としています。このため、幅広い分野に応用できるように、計算機システムとアプリケーションの協調的な設計 (Co-design) によって開発を進めています。多くのアプリケーションの中から選ばれた9つの「ターゲットアプリケーション」の特性に合わせてシステムを設計し、さらに、そのシステムに合わせてアプリケーションを最適化することで、アプリケーションの実効性能を最大で「京」の100倍にすることを目標としています。

「計算の科学」

各種アプリケーションの特性を加味したシステム設計、および、それに適したアプリケーションの最適化



「計算による科学」

各種アプリケーションのさまざまな計算上の特性を一般化・特徴化

富岳

世界トップ性能と世界一の広がり両立

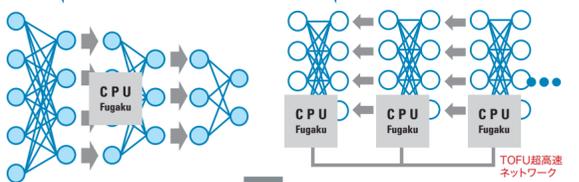
大規模アプリケーションの加速能力が高い
アプリケーションとユーザ層の幅が広い

「富岳」での取り組み

AI、データサイエンス研究

次世代の深層学習によるAIは莫大な計算量を要するため、大規模なスパコンが必要です。「富岳」は、深層学習の中心である「畳み込み演算」の性能が高いCPUが、通信性能のよいネットワークで接続されているため、世界でもトップクラスのAIマシンとして、AIやデータサイエンスの研究に活躍することが期待されます。R-CCSでは、今後充実が望まれるAIアプリケーションの開発に組み、「富岳」の性能を生かしたAI、データサイエンス研究に貢献していきます。

- ① CPUの畳み込み演算性能が高い
- ② ネットワーク通信性能が高く、超並列化が可能



今後の大規模なデータ学習を必要とするAI研究において、「富岳」は世界トップのマシンとなる!

「富岳」での取り組み

シミュレーションとAIの融合

融合には2つの形があります。1つは、「AIによるシミュレーションの加速」です。シミュレーションに必要なパラメータをAIによって探索したり、時間を追うシミュレーションの「続き」をAIにやらせるといったことが可能です。もう1つは、多数のシミュレーション結果をデータとして、AIに「正解」を探してもらう形です。



社会シミュレーションとAI
個人々の行動や特性に基づいてシミュレーションを行い、避難時間や効率との関係性をAIで学習することにより適切な避難計画を提案。

ターゲットアプリケーション

汎用性の高い計算機を目指し、幅広く計算特性を網羅する9つのアプリケーションが選ばれました。R-CCSでは、これらの性能評価と高速化、および新規アルゴリズムや実装手法の開発など、「富岳」で最大の成果を得るための研究に取り組んでいます。

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

重点課題

スーパーコンピュータ「京」の後継機で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題が2014年に選定され、各実施機関が活動を行っています。

カテゴリ	課題名	実施機関	
健康長寿社会の実現	重点課題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	理化学研究所生命機能科学研究センター 他
	重点課題2	個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	東京大学医科学研究所 他
防災・環境問題	重点課題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	東京大学地震研究所 他
	重点課題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	海洋研究開発機構 他
エネルギー問題	重点課題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	自然科学研究機構分子科学研究所 他
	重点課題6	革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	東京大学大学院工学系研究科 他
産業競争力の強化	重点課題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	東京大学物性研究所 他
	重点課題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	東京大学生産技術研究所 他
基礎科学の発展	重点課題9	宇宙の基本法則と進化の解明	筑波大学計算科学研究センター 他

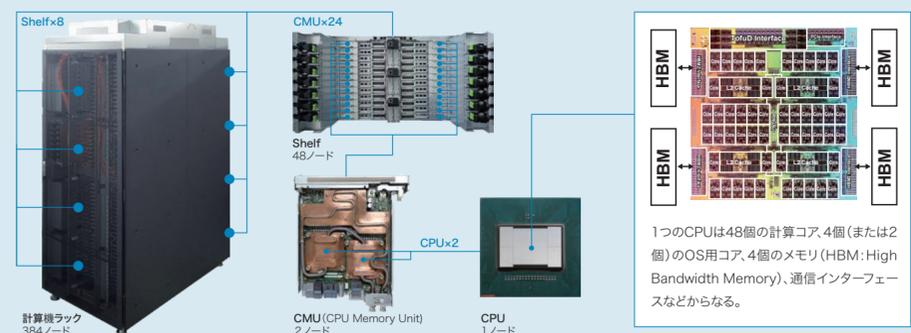
萌芽的課題

「京」の後継機で新たに取り組むチャレンジな課題として2016年に選定され、実現化を検討するための調査研究を行っています。

萌芽的課題1	基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦
萌芽的課題2	複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究
萌芽的課題3	太陽系外惑星 (第二の地球) の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明
萌芽的課題4	思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用

CPUと計算機ラックの構造

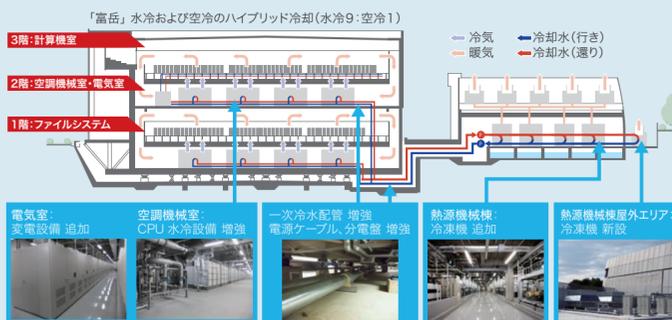
写真は試作機。提供:富士通株式会社



1つのCPUは48個の計算コア、4個 (または2個) のOS用コア、4個のメモリ (HBM: High Bandwidth Memory)、通信インターフェースなどからなる。

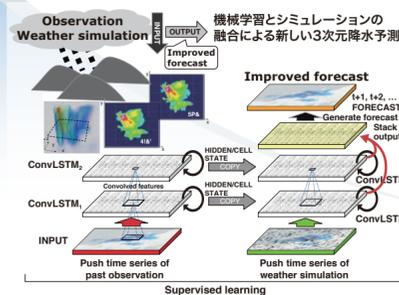
「富岳」を支える施設

「富岳」は「京」の施設や設備を一部再利用して設置されます。「京」に比べて消費電力およびそれに伴う排熱が増大する見込みのため、電気設備や冷却設備などを増強します。コージェネレーション発電施設や特別高圧電源施設は、既存のものを利用します。

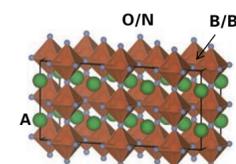


「富岳」での取り組み

シミュレーション

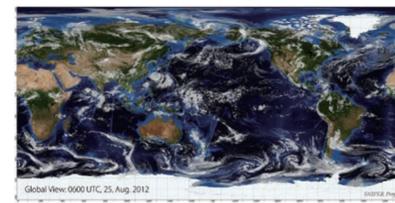


高精度3次元降水予測
最新の機械学習技術により、降水観測データと気象シミュレーションを高度に融合させ、より高精度な3次元降水予測を行う。



AIを利用した材料設計
実験データとシミュレーション結果を合わせたデータベースから、AIによって目的に最適な化合物を選び出す。

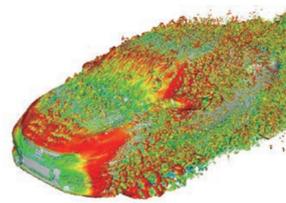
アプリケーションが最大で「京」の100倍の実効性能をもつようになることから、より「高解像度」「長時間」「大規模」「多数のケース」のシミュレーションが可能となります。これらにより、身近な社会的課題の解決から、基礎科学の理解に至る、さまざまなインパクトがもたらされると期待されます。



気象予測を高精度に
全球の気象シミュレーションにより、台風の進路や規模の正確な予測が可能に。



基礎科学の理解
1個の細胞中の全分子の動きを再現し、細胞のメカニズムの解明に貢献。



自動車設計を革新
自動車の空力シミュレーションにより、風洞実験を超えるデータを取得し、自動車設計を効率化。(協力: (株) 本田技術研究所)



理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS) のロゴマーク

3つの四角形はスーパーコンピュータの筐体を表し、R-CCSのイメージカラーである赤系色を使用。2つの円は計算科学と計算機科学を表し、専門性を高めながら交流を通じて新しいブレイクスルーを生み出す研究組織を表現しています。2つめのCの文字はComputational Science / Computer Science (計算科学/計算機科学)の二重の意味を持つため色を変えて強調しています。スーパーコンピュータの開発・運用も含め、さまざまな研究活動を行い発展してゆくR-CCSをイメージしたデザインです。



理化学研究所 計算科学研究センター

〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26

TEL : 078-940-5555 FAX : 078-304-4956

<https://www.r-ccs.riken.jp/>

