（一社）HPCI コンソーシアム／（一財）高度情報科学技術研究機構（RIST） 主催

ポスト「京」の成果創出に向けた意見交換会

日時：2019 年 1 月 31 日（木） 14:00～16:00
場所：TKP 東京駅セントラルカンファレンスセンター・ホール 10A

プログラム

1. 趣旨説明（5分）
   一般社団法人HPCIコンソーシアム 理事長 加藤千幸
2. ポスト「京」の開発計画等について（10分）
   文部科学省研究振興局計算科学技術推進室 室長 坂下鈴鹿
3. ポスト「京」の開発状況について（発表20分：質疑応答10分）
   理化学研究所 R-CCS フラッグシップ 2020 プロジェクト
   プロジェクトリーダー 石川 裕、副プロジェクトリーダー 佐藤三久
4. 「HPCIシステムの今後の運営の在り方に関する調査検討ワーキンググループ」における論点の紹介（10分）
   一般社団法人 HPCI コンソーシアム 副理事長 常行真司
5. ポスト「京」の成果創出に向けたパネルディスカッション（64分）
   [モデレーター]一般社団法人 HPCI コンソーシアム 副理事長 常行真司
   [パネリスト]橋本省二（KEK）、館山佳尚（NIMS）、佐藤正樹（東大大気海洋研）、堀宗朗（東大地震研）、小野謙二（九大）、白井宏樹（アステラス製薬）、伊藤宏幸（産応協/ダイキン）、吉田 亮（統数研）[順不同]
6. 閉会挨拶（1分）
   一般社団法人 HPCI コンソーシアム 副理事長 常行真司

資料

資料1	ポスト「京」の開発計画等について
資料2	これまでの議論の論点（案） ポスト「京」による成果創出と HPCI の継続的発展に向けて
資料3－1	ポスト「京」の開発状況について
資料3－2	アプリケーション開発者向け協力について

以 上

【資料1】

ポスト「京」の開発計画等について

ポスト「京」の成果創出に向けた意見交換会

平成31年1月31日
文部科学省　研究振興局
参事官（情報担当）付　計算科学技術推進室

総合科学技術・イノベーション会議（CSTI）における中間評価結果（概要）

事業概要

世界最高水準のスーパーコンピュータを国として戦略的に開発・整備し、産業競争力強化、安全・安心の国づくり等に貢献する。
2021年～22年の運用開始を目標に、システムとアプリケーションを協調的に開発することにより、成果の早期創出を目指す。

開発目標

・最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
・30～40MW の消費電力（「京」は12.7MW）

【CSTIの評価結果】

※平成30年11月22日のCSTI本会議にて実施
https://www8.cao.go.jp/cstp/siryo/haihui040/haihu-040.html （内閣府サイトへのリンク）

■ システム設計の結果に基づき、製造・設置を遅延なく推進していくことが適当と認められる。

- 第５期科学技術基本計画に位置付けられた Society5.0の実現や、統合イノベーション戦略、未来投資戦略2018及び経団連の提言等において、スーパーコンピュータの整備・共用を推し進めるとされていることから、本事業を進めていく意義・必要性は認められる。
- 中間評価時点において開発目標は達成されているものと認められる。
- 消費電力性能や演算性能等とともにユーザの利便性・使い勝手についても世界最高水準であることから、世界の他のシステムに対して総合力で卓越するものとして評価できる。
- シミュレーションを中心にした計算科学の研究基盤であることに加え、Society5.0に必要なAIやビッグデータ等の分野にも対応していると評価できる。
- 成果報告会や、シンポジウム等により、広く周知し普及を図るとともに、共用開始後の戦略的な利活用に向けた外部有識者による検討を開始している等、ユーザの利便性・使い勝手の良さの向上に努めていると認められる。

＜指摘事項＞
- ✓ 共用開始後の戦略的な利活用の推進に当たって、具体的なあり方について検討する。
- ✓ Society5.0の実現のためには、ビッグデータの活用について総合科学技術・イノベーション会議を軸とするなど国全体で進めていくことが重要であり、本事業を今後進めるに当たって、関係府省庁と横の連携を図りながら利用の仕組みをつくる。
- ✓ 製造段階において、研究開発計画が遅延することになった場合は、遅延状況を確認する。

ポスト「京」の開発

2019年度予算額（案）　：　9,910百万円
（前年度予算額　　：　5,630百万円）
2018年度第２次補正予算額(案)　：　20,860百万円

文部科学省

背景・課題

○　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においては、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、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠

【成長戦略等における記載】（未来投資戦略2018）

○　産学官連携を支え、生産性の飛躍的向上の基盤となる先端的な研究施設・設備の整備・共用やポスト「京」の開発を進める。

事業概要

【事業の目的】

○　我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心の確保につながる最先端の研究基盤として、2021~22年の運用開始を目標に、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を目指す。

【事業の概要】

○　システムとアプリケーションを協調的に開発することにより、世界最高水準の汎用性、最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能を目指す。

○　アプリケーションの対象として、健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の社会的・科学的課題を選定。

○　消費電力：30～40MW（「京」は12.7MW）　○　国費総額：約1,100億円

【システムの特色】

世界最高水準の
- ★消費電力性能
- ★計算能力
- ★ユーザーの利便・使い勝手の良さ
- ★画期的な成果の創出

⇒　総合力のあるスーパーコンピュータ

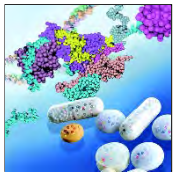
★　総合科学技術・イノベーション会議が平成30年11月22日に実施した中間評価において、「ポスト「京」の製造・設置に向け遅延なく推進していくことが適当」とされた。

理化学研究所
計算科学研究センター
（兵庫県神戸市）

【期待される成果例】

★健康長寿社会の実現

★高速・高精度な創薬シミュレーションの実現による新薬開発加速化

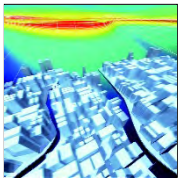


★医療ビッグデータ解析と生体シミュレーションによる病気の早期発見と予防医療の支援実現

★防災・環境問題

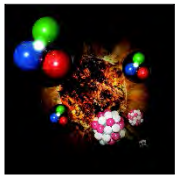
★気象ビッグデータ解析により、竜巻や豪雨を的確に予測

★地震の揺れ・津波の進入・市民の避難経路をメートル単位でシミュレーション



★基礎科学の発展

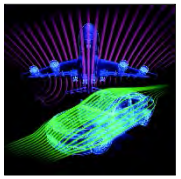
★宇宙でいつどのように物質が創られたのかなど、科学の根源的な問いへの挑戦



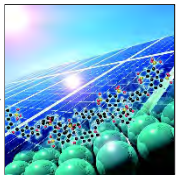
★産業競争力の強化

★次世代産業を支える新デバイスや材料の創成の加速化

★飛行機や自動車の実機試験を一部代替し、開発期間・コストを大幅に削減



★エネルギー問題



★太陽電池や燃料電池の低コスト・高性能化や人工光合成メタンハイドレートからメタン回収を実現

★電気自動車のモーターや発電機のための永久磁石を省レアメタル化で実現

スーパーコンピュータ「京」及び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（HPCI）の運営

2019年度予算額（案）　：　10,123百万円
（前年度予算額　：　12,649百万円）

文部科学省

事業目的

○「京」を中核とし、多様な利用者のニーズに応える革新的な計算環境（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）を構築し、その利用を推進することで、我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化、安全・安心な社会の構築に貢献する。

【成長戦略等における記載】（統合イノベーション戦略）

○ 文部科学省において、大学・研究機関等の先端的な研究施設・設備・機器等の整備・共用を進めつつ、周辺の大学や企業等が研究施設等を相互に活用するためのネットワーク構築を推進

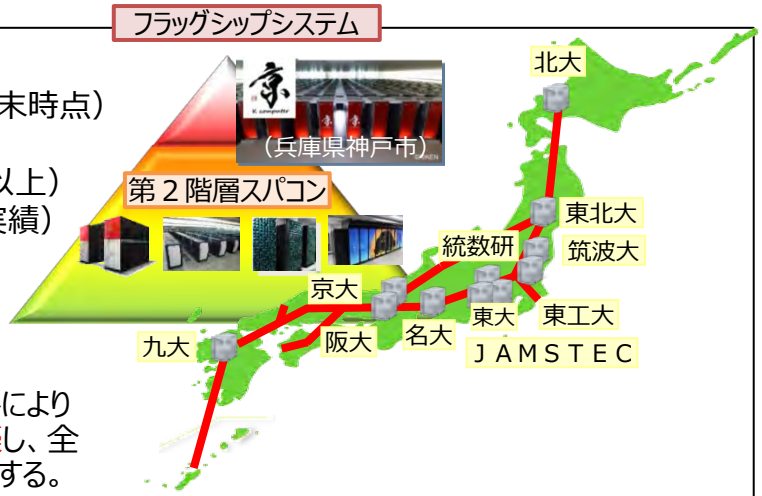
事業概要

１．「京」の運営　8,064百万円（11,176百万円）

○ 平成24年９月末に共用を開始した「京」の運用を着実に進めるとともに、その利用を推進。
※ポスト「京」への円滑な移行のため、2019年度中に「京」の運用を停止する。

①「京」の運営　7,222百万円（10,336百万円）
②「京」の利用促進　842百万円　（840百万円）

「京」の利用実績（平成30年3月末時点）
・利用者　2,300人以上
・全体の3割が産業界（180社以上）
「京」の運転実績（平成29年度実績）
・運転時間　8,222時間
・稼働率　98.0%



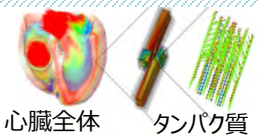
２．HPCIの運営　2,059百万円（1,473百万円）

○「京」を中核として国内の大学等のスパコンを高速ネットワークでつなぎ、利用者が一つのアカウントにより様々なスパコンやストレージを利用できるようにするなど、多様なユーザーニーズに応える環境を構築し、全国のユーザーの利用に供する。特に来年度は「京」の停止も踏まえ、利用可能な計算資源を拡充する。

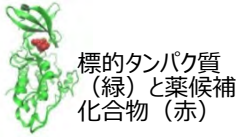
【これまでの成果例】

医療・創薬

心臓の拍動を世界で初めて分子レベルから精密に再現。特定の遺伝子異常と病気との相関性が知られていた肥大型心筋症のメカニズム解明に貢献。

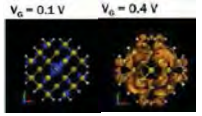


タンパク質の結合の度合いを分子レベルでシミュレーション。新薬候補化合物を選定し、前臨床試験を実施中。製薬メーカー等からなるコンソーシアムによる共同研究を実施（32企業・機関等が参画）。



ものづくり

実際の材料に近い10万原子規模の第一原理計算により、世界初のナノレベル高精度シミュレーションを実現。微細化限界を突破したデバイス設計に道筋（2015年ゴードンベル賞受賞）。



断面の電流密度分布

世界で初めて、空気の流れを忠実に実現し、シミュレーションによる風洞実験の代替を実証。自動車メーカー等からなるコンソーシアムによる共同研究を実施（22企業・機関等が参画）。

自動車の周りの空気の流れ

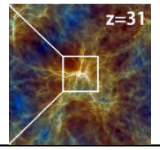
地震・防災・研究

長周期地震動による地表や超高層建築物の詳細な揺れを初めて明らかに。内閣府による「南海トラフ巨大地震及び首都直下地震への対策」に貢献。

地表の揺れの推計結果

宇宙

宇宙の構造形成過程の解明のため、世界最大規模の数兆個のダークマター粒子のシミュレーション（2012年ゴードンベル賞受賞）。



宇宙誕生から１億年後のダークマター空間分布

ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するＷＧ　概要

ポスト「京」の戦略的な利活用を推進するため、HPCI計画推進委員会（平成30年９月４日）において開催を決定。

主旨

・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Soceity5.0においては、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、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠である。

・我が国の科学技術の発展、産業競争力の強化に資するため、イノベーションの創出や国民の安全・安心の確保につながる最先端の研究基盤であるポスト「京」の利活用によって、その成果創出を加速し、成果最大化を実現する必要がある。

検討事項

・ポスト「京」の利活用に係る基本方針並びに推進方策の検討。

・議事録・配布資料については文部科学省WEBサイトに掲載。

http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/shinkou/051/index.htm (文科省サイトへのリンク)

委員一覧(H31.1月現在)

○	合田　憲人	国立情報学研究所・アーキテクチャ科学研究系　教授
	伊藤　宏幸	ダイキン工業株式会社テクノロジー・イノベーションセンター　リサーチ・コーディネーター
	宇川　彰	日本学術振興会世界トップレベル拠点形成推進センター　センター長
	臼井　宏典	プラナスソリューションズ株式会社　代表取締役社長
	梅谷　浩之	トヨタ自動車株式会社ＩＴ革新推進室
	加藤　千幸	東京大学生産技術研究所　教授
	栗原　和枝	東北大学未来科学技術共同研究センター　教授
	白井　宏樹	アステラス製薬株式会社モダリティ研究所　専任理事
	住　明正	東京大学　サステイナビリティ学連携研究機構　特任教授
	田浦　健次朗	東京大学　情報基盤センター　センター長
	高田　章	ロンドン大学　特任教授／(元)ＡＧＣ株式会社先端技術研究所　特任研究員
	辻井　潤一	産業技術総合研究所 人工知能研究センター　産総研フェロー／研究センター長
	常田　佐久	自然科学研究機構国立天文台　理事／台長
	原田　慶恵	大阪大学 蛋白質研究所 教授
	藤井　孝藏	東京理科大学工学部情報工学科　教授
6◎	安浦　寛人	九州大学　理事・副学長

16名　◎：主査、○：主査代理（50音順、敬称略、肩書は当時）

ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するＷＧ　検討状況

第1回　平成30年11月8日(木) 16:00-18:00

• スパコンプロジェクトの総括とポスト「京」の利活用に向けて	事務局・宇川委員
• ポスト「京」システム開発の概要について	R-CCS 松岡センター長
• 「京」及びHPCIの利用実績について	RIST 高津センター長

第2回　平成30年12月18日(火) 15:30-17:30

• 「京」及びHPCIの利用者の声について	RIST 高津センター長
• 内閣府(防災担当)における「京」の利活用について	内閣府(防災担当)　岩村参事官補佐
• ポスト「京」の利活用に関する産業界からの提言について	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会　金澤主査
• 計算創薬の近未来戦略に関する報告書について	理化学研究所　情報システム本部　姫野コーディネータ

第3回　平成31年1月21日(月) 12:30-14:30

• データ科学、AI時代におけるHPCの新展開	理化学研究所　AIP上田副センター長
• HPCによる計算社会科学	産業技術総合研究所　人工知能研究センター　野田総括研究主幹
• 機械学習による分子動力学シミュレーションの高速化	慶應義塾　泰岡教授
• 人工知能とシミュレーション	辻井委員

【資料2】

これまでの議論の論点（案）

ポスト「京」による成果創出とHPCIの継続的発展に向けて

一般社団法人HPCIコンソーシアム　副理事長

常行真司

平成31年1月31日

ポスト「京」の成果創出に向けた意見交換会

於：TKP東京駅セントラルカンファレンスセンター

1. はじめに

- HPCIの初代フラッグシップマシン「京」が間も無くその役目を終え、2021年度中にも次期フラッグシップマシンポスト「京」の運用が開始される予定。

- ポスト「京」による早期成果創出は、ポスト「京」プロジェクトに参加する全てのメンバーの願いであり、責務である。

- ポスト「京」により新たなフェーズに入るHPCIは、計算科学・計算機科学の研究基盤であるばかりでなく、産業の発展や国民の安全・安心につながる重要な社会基盤であり、将来にわたって、その継続的発展と成果創出が望まれる。

- 本報告では、計算科学・計算機科学コミュニティから聴取した意見をもとに、ポスト「京」による早期成果創出と、HPCIの継続的発展のための方策について取りまとめる。

2. HPCIによる成果創出のあり方-1

（1）科学的成果、社会的成果

- HPCIの成果としてまず想定されるのは、HPCIを利用して得られた知見としての科学的成果、あるいは産業応用や災害予測といった社会的成果である。
- 創出された成果は、論文などの学術的な成果による評価だけでなく、実際の製品への貢献など、社会還元の視点から長期的な評価を行うことも必要である。
- 評価にあたっては、実験・観測等により、シミュレーション結果を検証することも重要である。
- HPCIの成果を最大化するためには、長期的展望に立ってアプリ開発計画を立案すべきである。

（2）アプリ開発と社会への普及

- HPCIで開発されたアプリが社会に普及し、実際に役立つことも、HPCIの重要な成果である。論文だけでなく、アプリが実社会でどれだけ役立っているかも評価すべきである。
- 産業界等、実社会での活用を目指したアプリは、開発段階から産学共同体制をとるなど、開発の出口を見据えるべきである。[10]

2. HPCIによる成果創出のあり方-2

（3）IT産業への波及効果

- フラッグシップ計算機の開発やコデザインを通して得られた技術が、IT産業へと波及することもHPCIの大きな成果である。

（4）国民へ向けた成果の説明

- 国民に向けてHPCI成果をわかりやすく伝えるため、継続的な努力が必要である。説明に際しては、計算機から得た直接の成果だけでなく、実際の製品等への貢献についても説明すべきである。

- 専門家による評価の基準と、非専門家（主に納税者）による評価の基準は必ずしも一致せず、両面で成果を説明することが必要である。

3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策－1

（1）重点課題等で開発してきたアプリの利用
～重点課題や萌芽的課題の、成果創出フェーズへの移行

- ポスト「京」においては、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に戦略的に取り組み、我が国の成長に寄与し世界を先導する成果を創出することが期待されている。文科省の「ポスト『京』で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会」（平成26年度5回開催、主査　小宮山　宏）では、9つの重点課題が選定されたほか、新たに取り組むチャレンジングな課題として4つの萌芽的課題が選定された。またこれらの課題実施にあたっては、アプリ開発を行う本格実施フェーズに続き、ポスト「京」を用いる成果創出フェーズを実施する年次計画が立てられた。

- 上記委員会で選定された課題において、ポスト「京」により早期成果創出を図るためには、重点課題等で開発してきたアプリを利用することが最も効率的である。ポスト「京」の運用は当初計画より遅れることとなったが、研究を継続しながら準備を整え、ポスト「京」運用開始と同時にその利活用をすすめるため、重点課題の成果創出フェーズは当初の計画通り2020年度から開始すべきである。

- 成果創出フェーズの実施にあたっては、これまでに得られたアプリケーションの開発成果と現体制の評価を行った上で、産業上の実課題への取り組みも視野に入れつつ、早期成果創出に向けて最適な体制を検討すべきである。

3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策－2

- フラッグシップ計算機停止期間中に成果創出フェーズを開始するに当たっては、ポスト「京」に近い利用環境を研究者に事前に提供する施策（第二階層資源の活用、ポスト「京」のアーリーアクセスプログラムの運用等）が必要である。

3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策－3

（2）トップダウン（重点課題等）とボトムアップ（一般課題）の資源配分の考え方

- ポスト「京」の資源配分にあたっては、着実な成果の期待できる重点課題だけでなく、そこで開発されたアプリを利用して全く新しい課題に取り組む提案や、新規なアプリ開発を伴う一般課題にも、バランスよく資源を配分すべきである。

- 新分野（AI、データサイエンス等）への戦略的な取り組みの必要性、裾野拡大や産業利用促進へのなお一層の取り組みの必要性も勘案し、最適に資源配分していくことが必要である。

- ポスト「京」の多様なユーザを獲得するため、応募・採択の容易な、小規模の一般課題枠（お試し課題）を設け、新規ユーザの利用促進を図ることが望ましい。またポスト「京」アーリーアクセスにおいても、一般課題の利用に配慮すべきである。

3. ポスト「京」による成果の早期創出に向けた方策－4

（3）ポスト「京」の産業利用

- ポスト「京」の運用においては、社会的課題の解決という目的に鑑み、産業利用を推進すべきである。

- 「京」では、成果公開を前提とした無償利用枠である「トライアルユース」、「実証利用」、成果非公開の有償利用枠である「個別利用」、ASP事業を実施中または計画中の企業を対象とした「ASP事業実証利用」という産業利用枠が用意されている。これらを参考に、ポスト「京」でも、柔軟で使いやすい産業利用枠を設置すべきである。

- 複数の企業や大学等からなるコンソーシアムを組織して、産業利用における基盤的なアプリ実証研究を進めるなど、将来的にHCPIの枠を超えたスーパーコンピューティングの産業利用につながる施策を、これまで以上に積極的に推進することも検討すべきである。

4. アプリの普及－1

（1）分野やアプリの特性に応じたアプリ普及の在り方

- 我が国では、ポスト「京」やHPCIなどでの利用を想定して、多くのアプリが開発されている。これら国産アプリの普及、すなわちユーザ増や新たな利活用事例の創出は、それ自体がポスト「京」およびHPCIの成果であると同時に、HPCIの継続的発展を支える大きな力となる。

- 主要アプリの数、利用が想定されるコミュニティの規模、産業利用の有無など、アプリ開発の状況は分野毎に大きな差異がある。アプリ普及は、画一的な手法ではなく、分野の特性に合った手法で進めるべきである。

4. アプリの普及－2

（2）アプリ維持・普及の仕組みと戦略

- アプリ普及については、RIST、FOCUS、R-CCS、一部の重点課題等で努力がなされているものの、いまだに不十分である。ポスト「京」の成果創出フェーズを機に、アプリ普及のための体制づくりを急ぐべきである。

- アプリ開発者が中心となってアプリ普及を進めることは、開発者への負担が大きすぎる。我が国の計算科学研究の国際競争力を高めながら同時にアプリ普及を推進するには、アプリの維持、普及を専門に担う人材の育成、処遇、キャリアパスの確立に尽力すべきである。

- アプリ普及の具体的手段としては、多数の事例を含むわかりやすいウェブサイトの構築、ユーザ視点で行う講習会活動、ワンストップの相談窓口の提供などが考えられる。HPCIを構成する第二階層計算機にアプリをインストールし、すぐに利用できる環境を用意することや、手持ちの計算機に導入するためのツールの開発も有効である。

5. 新規分野の開拓

（1）AI、データ科学分野への取り組み

- HPCIは、新規分野に開かれたインフラである。科学技術の発展や社会的要請に応じて、HPCIに馴染みのない新規分野の研究者をHPCIユーザとして取り込むことは、計算科学とHPCIを活性化させ、その継続的発展をもたらす重要な手段である。

- 特に、Society5.0による超スマート社会実現に向けて、近年発展の著しい人工知能（AI）やデータ科学などの新分野は、今後、計算科学戦略の中に位置づけ、それらのHPCI利用促進に必要な環境整備行うべきである。

（2）新規分野の振興

- 新規分野の振興のためには、「知る→試す→使う」というプロセスをユーザに体験させる環境が必要である。より具体的には、「知る」ためのWEBサイト、「試す」ための講習会活動、「使う」ための導入環境のセットが効果的である。

- 産業利用促進のためには、有償利用制度の充実が必要である。HPCIの実証利用後の受け皿となる民間クラウドとの連携協力も検討すべきである。

6. 将来につながるエコシステムの構築－1

HPCIの継続的な発展をもたらすエコシステムの構築に向け、以下の点について引き続き検討が必要である。

（1）HPCIの体制と役割分担

- HPCIコンソーシアム、理研、登録機関が連携して実施することとなっている成果発信、利用支援、利用者選定、理解増進活動のあり方
- ポスト「京」とその他のHPCI機関との適切な役割分担と有機的な連携のあり方

（2）HPCI向けアプリ開発・普及・利用に向けた人材育成

- 機関や分野を横断した教育体制構築と、その継続的運用

（3）HPCIユーザコミュニティの拡大

- HPCIの情報提供
- 研究者の交流

6. 将来につながるエコシステムの構築－2

（4）フラッグシップ計算機および第二階層計算資源の研究開発と運用の在り方

- アプリの下方展開
- 複数のフラッグシップ計算機整備

（5）ポストムーア時代を意識した次世代スーパーコンピュータの研究開発

- 量子コンピュータなど、次世代のスーパーコンピュータを見据えた基礎・応用研究を実施する体制

【附録】ワーキンググループ委員

委員	伊藤　宏幸	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
委員	佐藤　三久	理化学研究所計算科学研究センター
委員	白井　宏樹	アステラス製薬モダリティ研究所
委員	田浦　健次朗	東京大学情報基盤センター
委員	髙木　周	東京大学大学院工学系研究科
主査代理	高木　亮治	宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所
委員	髙津　英幸	高度情報科学技術研究機構神戸センター
委員	高野　直樹	慶應義塾大学理工学部
主査	常行　真司	東京大学大学院理学系研究科
委員	朴　　泰祐	筑波大学計算科学研究センター

【附録】意見聴取した方々

奥田　基	高度情報科学技術研究機構神戸センター
古宇田　光	東京大学物性研究所
松永　康佑	理化学研究所計算科学研究センター
久保　百司	東北大学金属材料研究所
藤澤　克樹	九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 産総研・東工大 実社会ビッグデータ活用オープン・イノベーションラボラトリ
安井　宏	計算科学振興財団（FOCUS）

【敬称略・順不同・委員を除く】

【附録】審議日程

第1回	2018年9月28日　15:00～17:00
第2回	2018年10月25日　10:00～12:00
第3回	2018年11月21日　10:00～12:00
第4回	2018年12月25日　16:00～18:00
意見交換会	2019年1月31日　14:00～16:00
第5回	2019年2月21日　15:00～17:00【予定】

【資料3－1】

ポスト「京」の開発状況について

理化学研究所計算科学研究センター
フラッグシップ2020プロジェクト

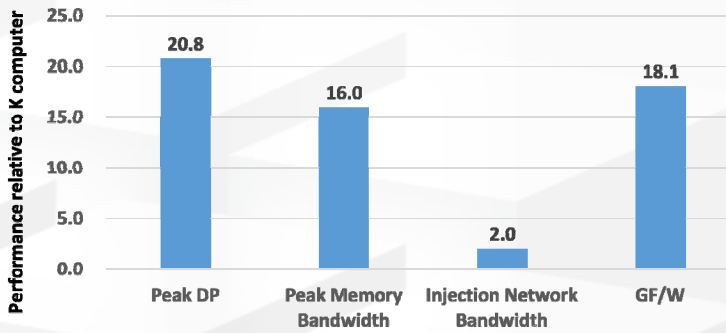
HPCI意見交換会、TKP東京駅セントラルカンファレンスセンター、
2019.1.31

ポスト「京」

- 2018年夏、ポスト「京」の試作機完成、富士通により評価が進められている
- 製造仕様が確定し、今年度末には製造契約締結予定
- ポスト「京」の約10ラックで「京」と同じピーク性能（「京」は864ラック）

X 10 =

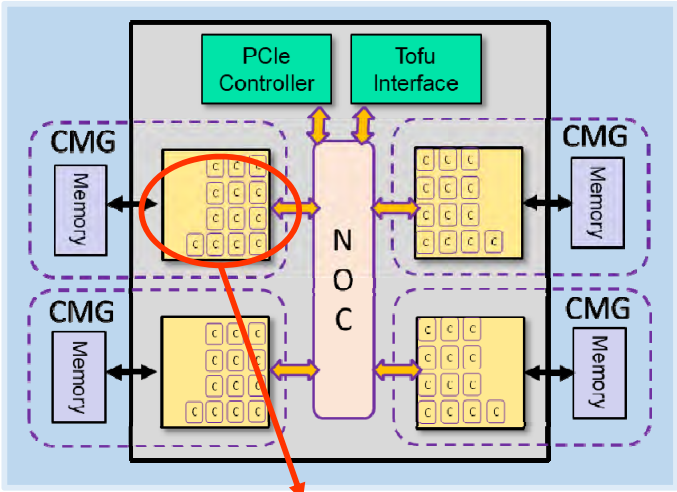
		ポスト「京」	「京」
	CPUアーキテクチャ	A64FX	SPARC64 VIIIfx
ノード当たり	コア数	48	8
	理論倍精度浮動小数点演算性能	2.7 TF 以上	0.13 TF
	主記憶容量	32 GiB	16 GiB
	理論メモリバンド幅	1024 GB/s	64 GB/s
	理論ネットワーク性能	40.8 GB/s	20 GB/s
ラック当たり	ノード数	384	102
	理論倍精度浮動小数点演算性能	約 1PF	約0.013PF
	プロセス技術	7 nm FinFET	45 nm

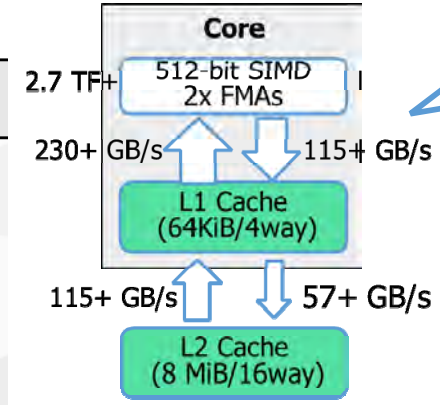


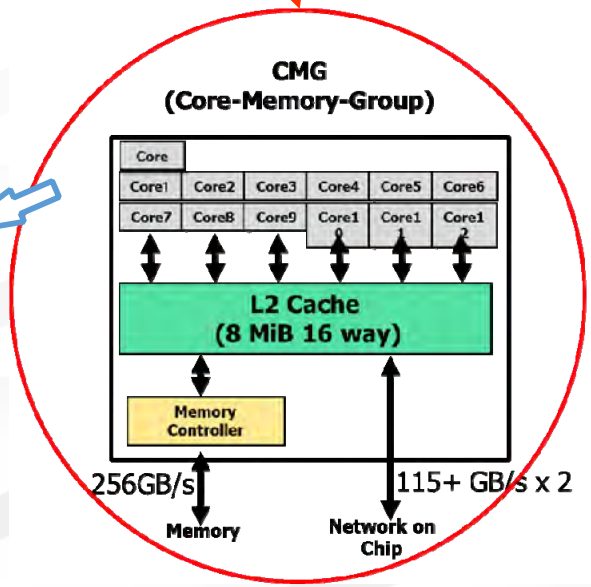
CPU A64FX

Architecture	Armv8.2-A SVE (512 bit SIMD) + Fujitsu Extension
Core	48 cores for compute and 2/4 for OS activities
	DP: 2.7+ TF, SP: 5.4+ TF, HP: 10.8+ TF
Cache	L1D: 64 KiB, 4 way, 230+ GB/s(load), 115+ GB/s (store)
	L2: 8 MiB, 16way, 115+ GB/s (load), 57+ GB/s (store)
Memory	HBM2 32 GiB, 1024 GB/s
Interconnect	TofuD (28 Gbps x 2 lane x 10 port)
I/O	PCIe Gen3 x 16 lane
Technology	7nm FinFET

Courtesy of FUJITSU LIMITED







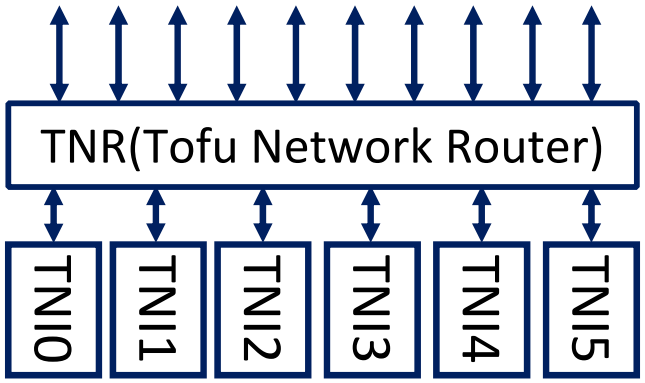
Performance

Stream triad: 830+ GB/s

Dgemm: 2.5+ TF (90+% efficiency)

ref. Toshio Yoshida, "Fujitsu High Performance CPU for the Post-K Computer," IEEE Hot Chips: A Symposium on High Performance Chips, San Jose, August 21, 2018.

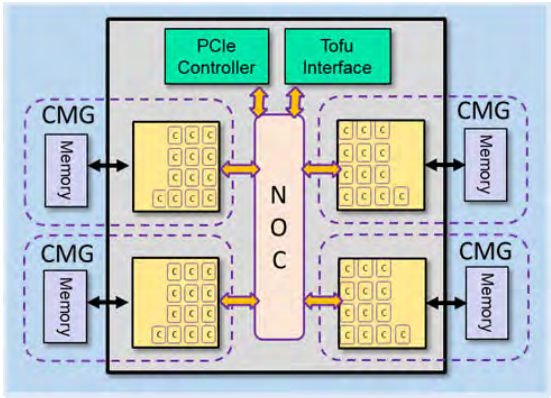
TofuD Interconnect



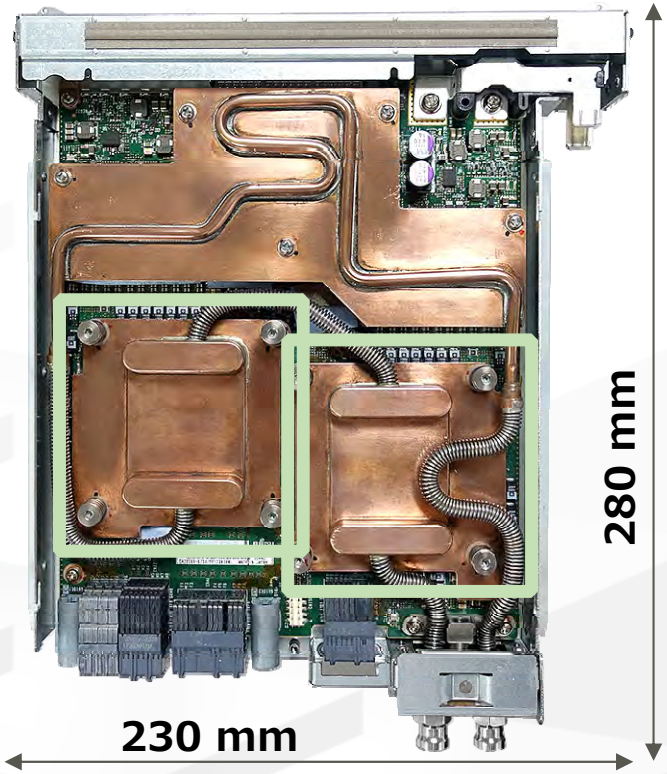
2 lanes x 10 ports

40.8 GB/s
(6.8 GB/s x 6)

TNI: Tofu Network Interface (RDMA engine)



Two compute nodes are implemented on one board



Courtesy of FUJITSU LIMITED

- 6 RDMA Engines
- Hardware barrier support
- Network offloading capability

8B Put latency	**0.49 – 0.54 usec**
1MiB Put throughput	**6.35 GB/s**

rf. Yuichiro Ajima, et al. , “The Tofu Interconnect D,” IEEE Cluster 2018, 2018.

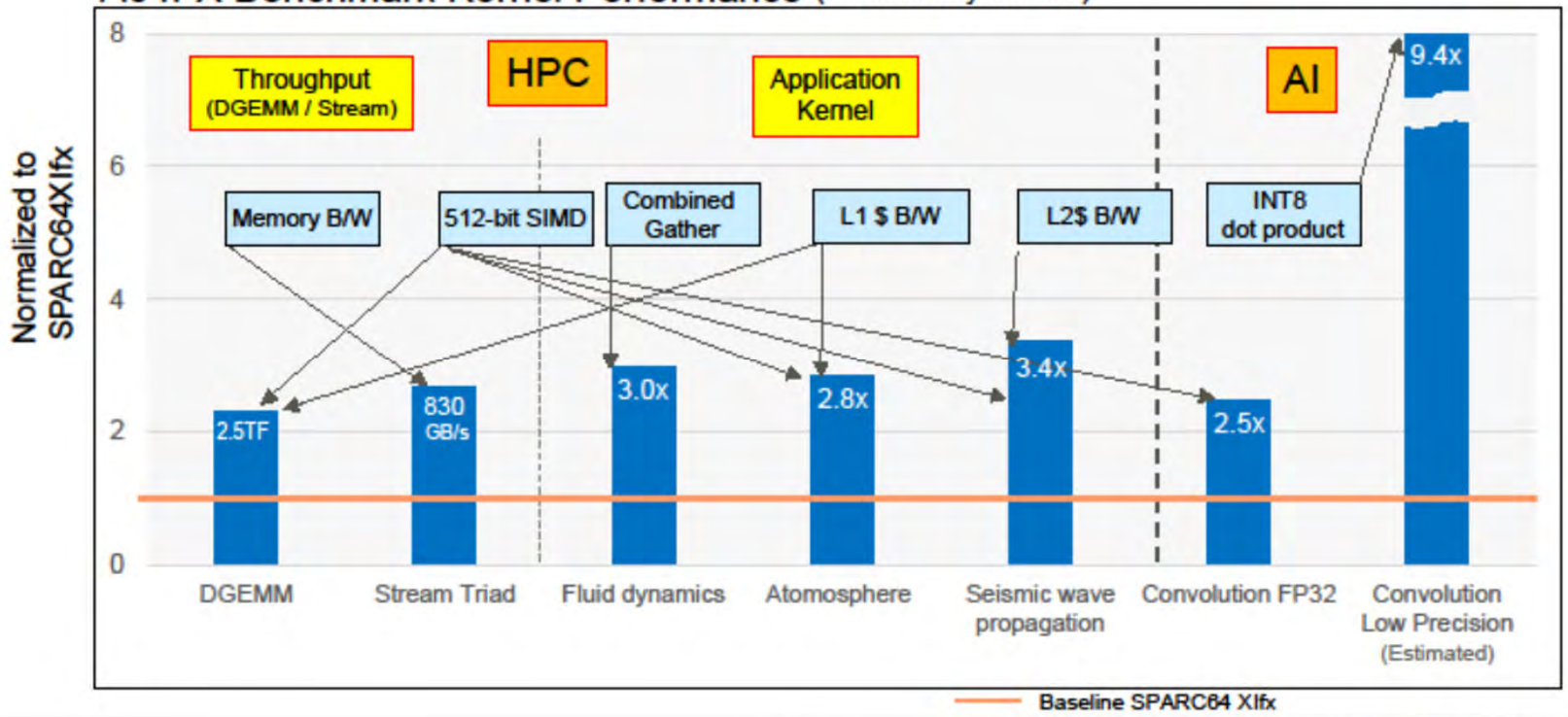
Early Results by Fujitsu

https://www.hotchips.org/archives/2010s/hc30/

Performance

- A64FX boosts performance up by microarchitectural enhancements, 512-bit wide SIMD, HBM2 and process technology
  - > 2.5x faster in HPC benchmark than SPARC64 XIfx (the previous Fujitsu HPC CPU)
    - The results are based on Fujitsu compiler optimized for our microarchitecture and SVE

A64FX Benchmark Kernel Performance (Preliminary results)



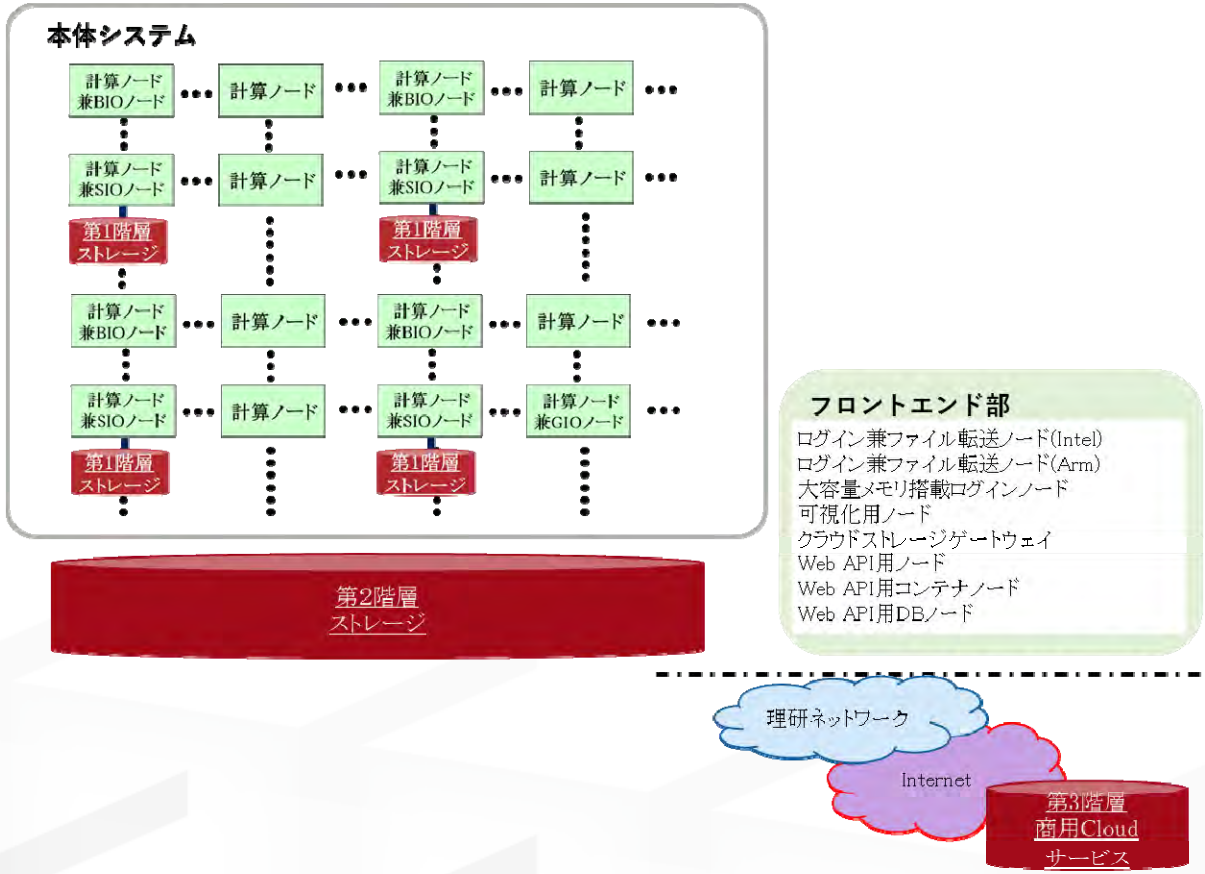
14

All Rights Reserved. Copyright © FUJITSU LIMITED 2018

ref. Toshio Yoshida, "Fujitsu High Performance CPU for the Post-K Computer," IEEE Hot Chips: A Symposium on High Performance Chips, San Jose, August 21, 2018.

ポスト「京」ハードウェア構成概要

- **計算ノードおよび計算兼IOノード（ストレージ、IO、ブート)から構成**
- **３階層ストレージシステム**
  - 第1階層ストレージ
    - 16計算ノード毎に1計算兼ストレージノード
      - 約1.6 TB
    - 提供サービス
      - 第２階層ストレージキャッシュ
      - 一時ストレージ
        - 計算ノード向けローカルファイルシステム
        - ジョブ向け共有ファイルシステム
  - 第2階層ストレージ
    - Lustreベースグローバルファイルシステム
      - 約150PB
  - 3rd Layer
    - ユーザが契約する外部クラウドサービス利用のためのサーバ提供
- **Pre/Post処理**
  - 大容量メモリログインノード（約6TB)
  - 可視化用ノード



ポスト「京」プログラミング環境概要

- **プログラミング言語・コンパイラ (富士通提供)**
  - Fortran2008&Fortran2018サブセット
  - C11&GNU拡張仕様・Clang拡張仕様
  - C++14&C++17サブセット&GNU拡張仕様・Clang拡張仕様
  - OpenMP 4.5 &OpenMP 5.0サブセット
  - Java

さらにGCC, LLVM, Arm社コンパイラも利用可能予定

- **並列拡張言語＆Domain Specific Library (理研提供)**
  - XcalableMP　XcalableMPは筑波大・東大が運用するOakforest-PACS上でも稼働している。
  - FDPS (Framework for Developing Particle Simulator)
- **プロセス・スレッドライブラリ (理研提供)**
  - PiP (Process in Process)

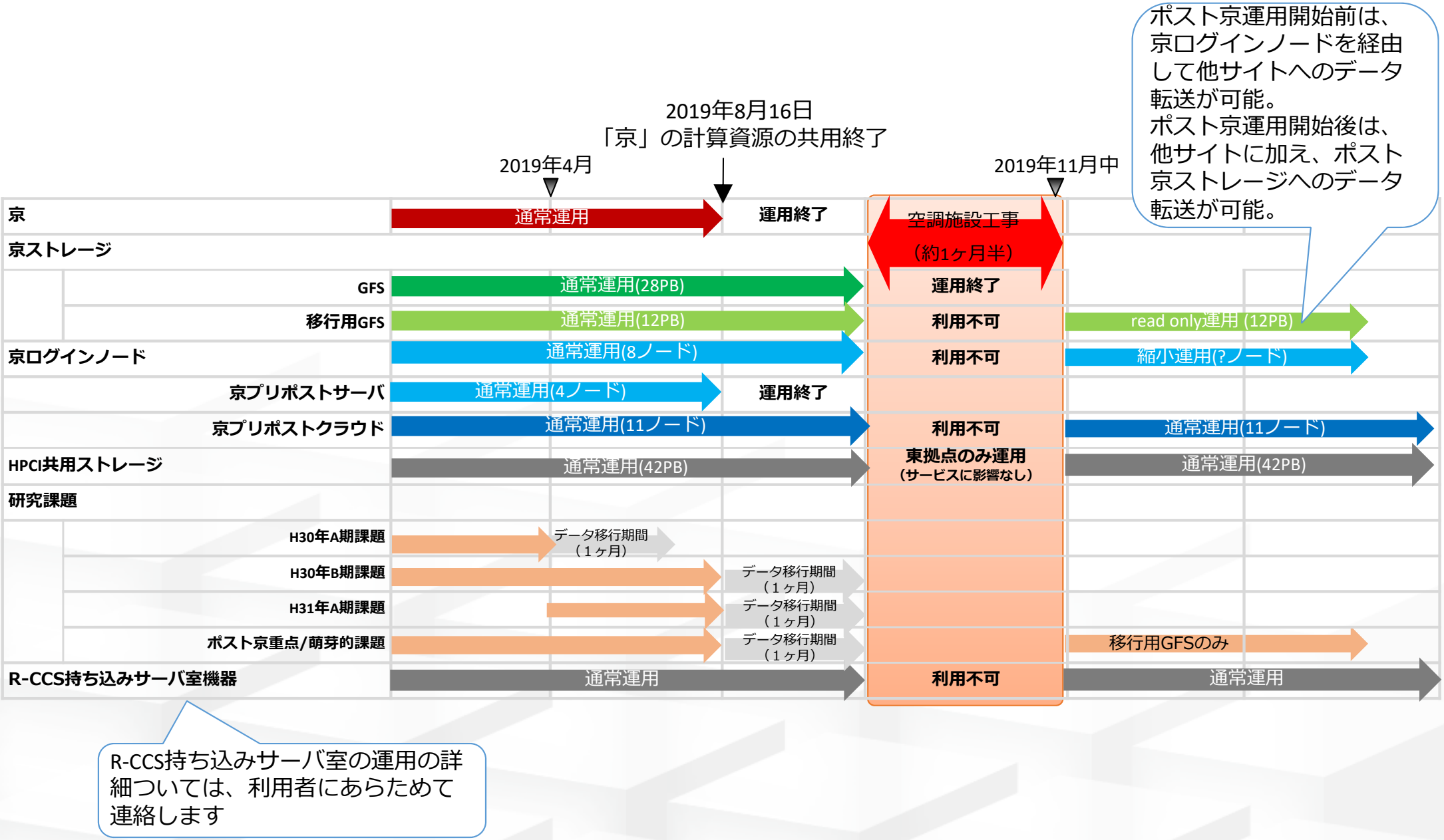
- **スクリプト言語**
  - 採用予定のLinuxディストリビューションで配布される各種スクリプト言語利用可能予定
    - 例：Python+NumPy, SciPy
- **通信ライブラリ**
  - MPI 3.1&MPI4.0サブセット
    - Open MPIベース(富士通提供）、MPICH (理研提供)
  - 低レベル通信ライブラリ
    - uTofu(富士通提供）、LLC(理研提供)
- **ファイルI/Oライブラリ (理研提供)**
  - pnetCDF, DTF, FTAR
- **科学技術計算用ライブラリ**
  - BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, SSL II（富士通提供）
  - EigenEXA, Batched BLAS （理研提供）
- **プログラム開発支援ソフトウェア（富士通提供）**
  - プロファイラ、デバッガ、GUI環境

ポスト「京」その他ソフトウェア概要

- **バッチジョブシステム (富士通提供)**
  - Technical Computing Suite
    - 「京」コンピュータ上のバッチジョブシステムの後継
- **オープンソースライブラリ、ツール、アプリケーション等**
  - Red Hat系 (CentOSもしくはRHEL for Arm, 提供バージョンは現行 Armバージョン以降)ディストリビューションソフトウェアが利用可能
- **計算ノード上OSカーネル**
  - Linux (RHEL系ディストリビューション採用予定)
  - McKernel軽量カーネル (理研提供)
    - OSノイズをなくす、Linuxとは異なるメモリ管理機構によりLinuxよりも豊富なページサイズが選択可能

ユーザはLinux Only実行環境、 Linux + McKernel実行環境を指定できる。
McKernelは筑波大・東大が運用するOakforest-PACS上でも稼働している。

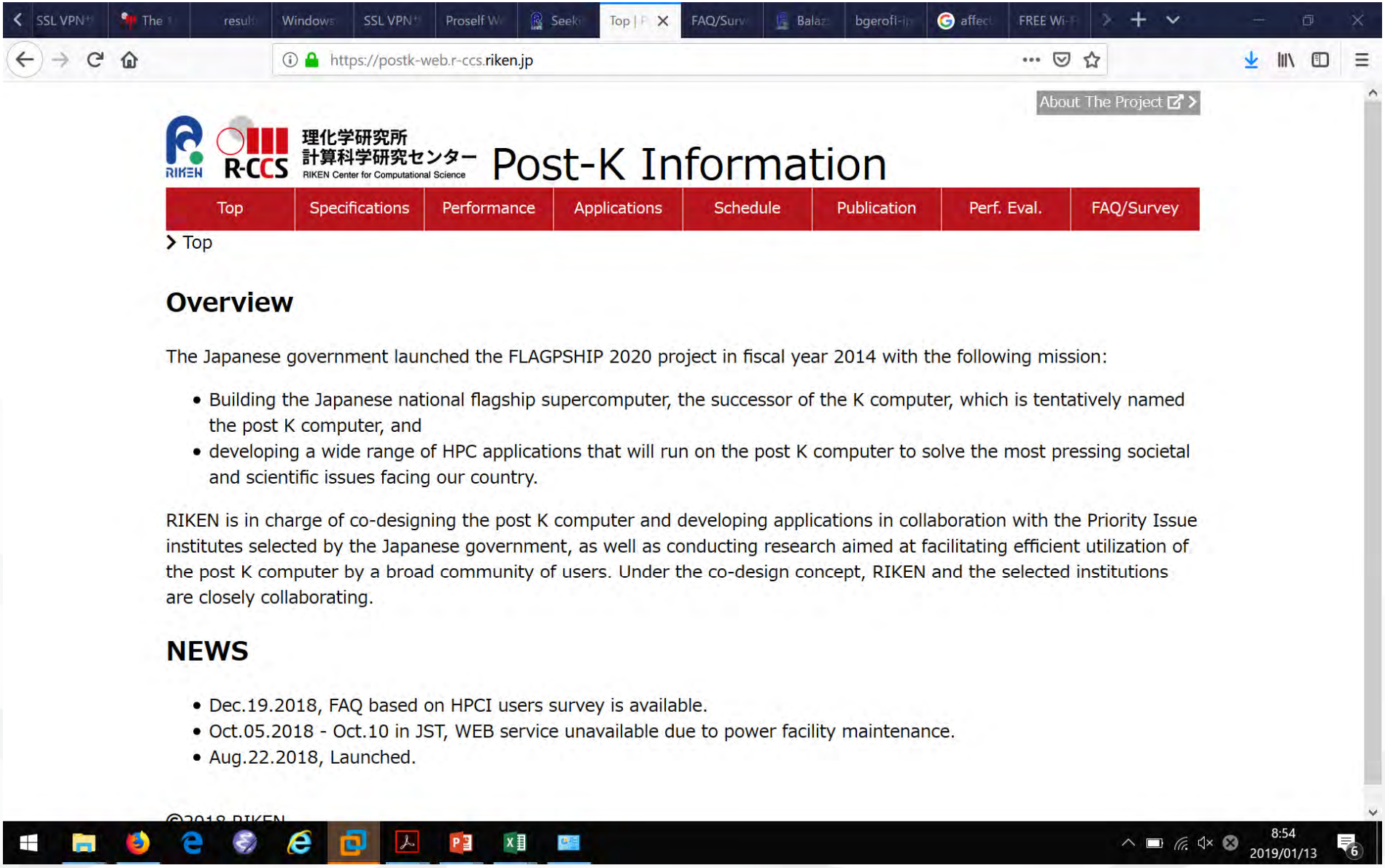
「京」運用スケジュール案



R-CCS持ち込みサーバ室の運用の詳細ついては、利用者にあらためて連絡します

ポスト「京」情報公開WEB

https://postk-web.r-ccs.riken.jp/



【資料3－2】

アプリケーション開発者向け協力について

理化学研究所計算科学研究センター
フラッグシップ2020プロジェクト

HPCI意見交換会、TKP東京駅セントラルカンファレンスセンター、
2019.1.30

アプリケーション開発者向け協力内容

- **ポスト京で、自分のアプリの大まかな性能（小規模並列）の性能を知りたい**
  - FX100でのプロファイル情報からポスト京の性能を推定するツールである、ポスト「京」性能推定ツールを提供します。

- **逐次の小規模なプログラムでもいいので、ポスト京での詳細な性能について知りたい。**
  - サイクルレベルの性能推定ができるpost-Kのシミュレータを提供します。 また、最適化の手法等については、情報を提供します。

- **性能よりも、OSの機能やオープンソースソフトウエア(JavaやPerl, python等を含む）の準備状況について知りたい。**
  - 現時点の状況についての情報を提供するとともに、Armv8-Aのサーバーでの実行環境を提供します。これにより、テスト等が可能です。また、現在すでにポーティングされているオープンソースソフトウエア等の情報についても提供します。

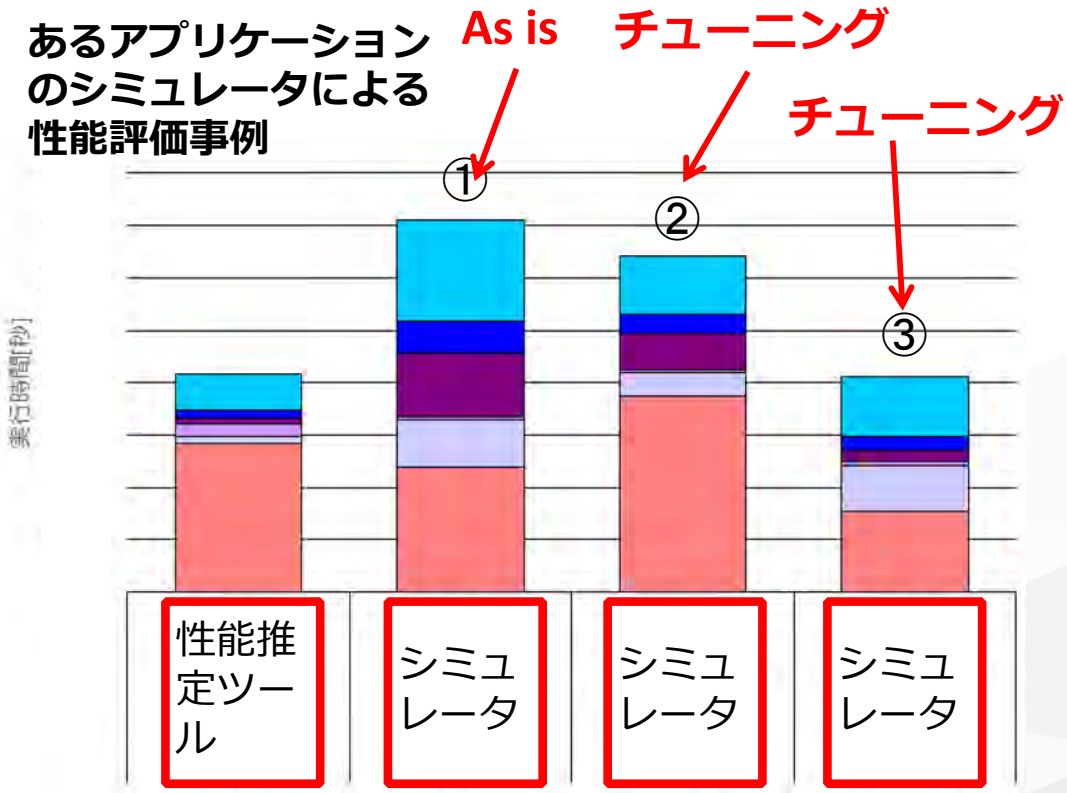
ポスト「京」性能評価環境について

- **理化学研究所では、ポスト「京」向けのアプリケーションの開発に際し、性能改善度の評価や最適化の検討を行いたい方に、ポスト「京」の評価環境を提供します。**
  - 申し込みは、RISTのHPCIのサイトから、お願いします。
- **本評価環境は理研で設置したサーバにログインして利用するもので、以下のツールが利用可能です。**
  - 小規模FX100システムとFX100のプロファイルを用いたポスト「京」性能推定ツール：FX100のプロファイルを用いて、ポスト京での大まかな性能推定が可能
  - 理研が開発したポスト「京」プロセッサ・シミュレータ：小規模なプログラムの１ノードでの性能について、おおよその実行時間、コンパイルオプションによる実行時間の比較、キャッシュミス率や同時命令実行数などの情報が取得でき、最適化のための情報を得ることができます。
  - ポスト「京」向けのコンパイラ
    - 富士通コンパイラ：Fortran2003, C, C++。ポスト京向けの最適化が可能
    - Armコンパイラ：LLVMベースのコンパイラ環境で、Armv8-A + SVE向けのコード生成が可能。C,C++ by Clang, Fortran by Flang
  - Armが開発したSVEエミュレータ：Armサーバー上でSVEの命令をエミュレーションできます。
  - Armサーバー：Thunder X2の計算ノードが12台が常時利用可能です。Arm社製のArmコンパイラや、富士通が開発中のArm向けコンパイラが利用可能です。

ユース・ケース

- 並列プログラムの性能については、通信性能についてモデルにより推定する必要がある。
- 大まかな性能推定をしたい ⇒ 性能推定ツールを利用。但し、正確に行うためには区間に分けて（カーネル切り出し）集計する必要がある。
- 各区間の実際の性能を推定したい ⇒ シミュレータを利用。但し、現実的な時間内でシミュレーションするには、カーネルを切り出し、ループ回数等を調整して、数十msecにする必要がある。
- 性能チューニングをしたい ⇒ 上のシミュレータで実行できるカーネルについて、コードを修正。シミュレーションの繰り返しを行う。
- 短いプログラムの実行時間を知りたい ⇒ 数十msecであれば、シミュレータで直接、実行可能

あるアプリケーションのシミュレータによる性能評価事例



ポスト「京」性能評価環境利用課題の募集について

http://www.hpci-office.jp/pages/other_submission?tab=outline

HPCI High Performance Computing Infrastructure　English　サイト内検索　詳細検索　文字サイズ A A

HPCIについて　利用案内・申請　利用支援　HPCI研究成果　イベント・講習会　広報　利用者向け情報

ホーム > 利用案内・申請 > 課題申請 > ポスト「京」性能評価環境利用課題の募集について

利用案内・申請
- ご利用に当たって
- 課題の種類・計算資源
- 課題申請
- これまでの応募状況分析（定期募集）
- 課題選定の結果

お問合わせは ヘルプデスクまで

課題申請・利用に関する FAQ

HPCI 申請支援システム

HPCI ソフト検索

産業利用推進室　取材記事

ポスト「京」性能評価環境利用課題の募集について

国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター(以下、「センター」という。)及び一般財団法人高度情報科学技術研究機構(以下、「利用支援機関」という。)は、「ポスト「京」性能評価環境」の提供を開始します。
「ポスト「京」性能評価環境」は、ポスト「京」に向けたプログラムの性能評価や最適化の検討を行うため、プログラムの移植、あるいは開発及び最適化の計画を持ったプロジェクト(以下、「課題」という。)に対して、センターが提供するものです。
この「ポスト「京」性能評価環境」を利用する課題の募集は、利用支援機関が行います。
なお、「ポスト「京」性能評価環境」は、ポスト「京」開発担当企業である富士通株式会社(以下、「開発担当企業」という。)の協力を得て作成されています。
本ページでは、「ポスト「京」性能評価環境」の概要と本環境を利用する課題の募集要領、審査合格後の利用手続き、高度化支援の紹介等についてご案内します。

全体の流れ　募集概要　審査結果　利用手続き　高度化支援　終了後の手続き　ポスト「京」性能評価環境とは

▼ 全体の流れ

「ポスト「京」性能評価環境」の利用における応募～利用開始～終了までの主な流れを以下に示します。

利用申請の準備

【課題代表者、課題参加者にて実施】
- HPCI-IDの登録(課題参加者全員が各自で行う。ただし未登録の人のみ)
- 申請要領、誓約書をダウンロードし、内容を確認
- 利用申請書フォーマットをダウンロードし、必要事項を記入