

富岳の挑戦：計算によるイノベーション



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

2023年7月20日

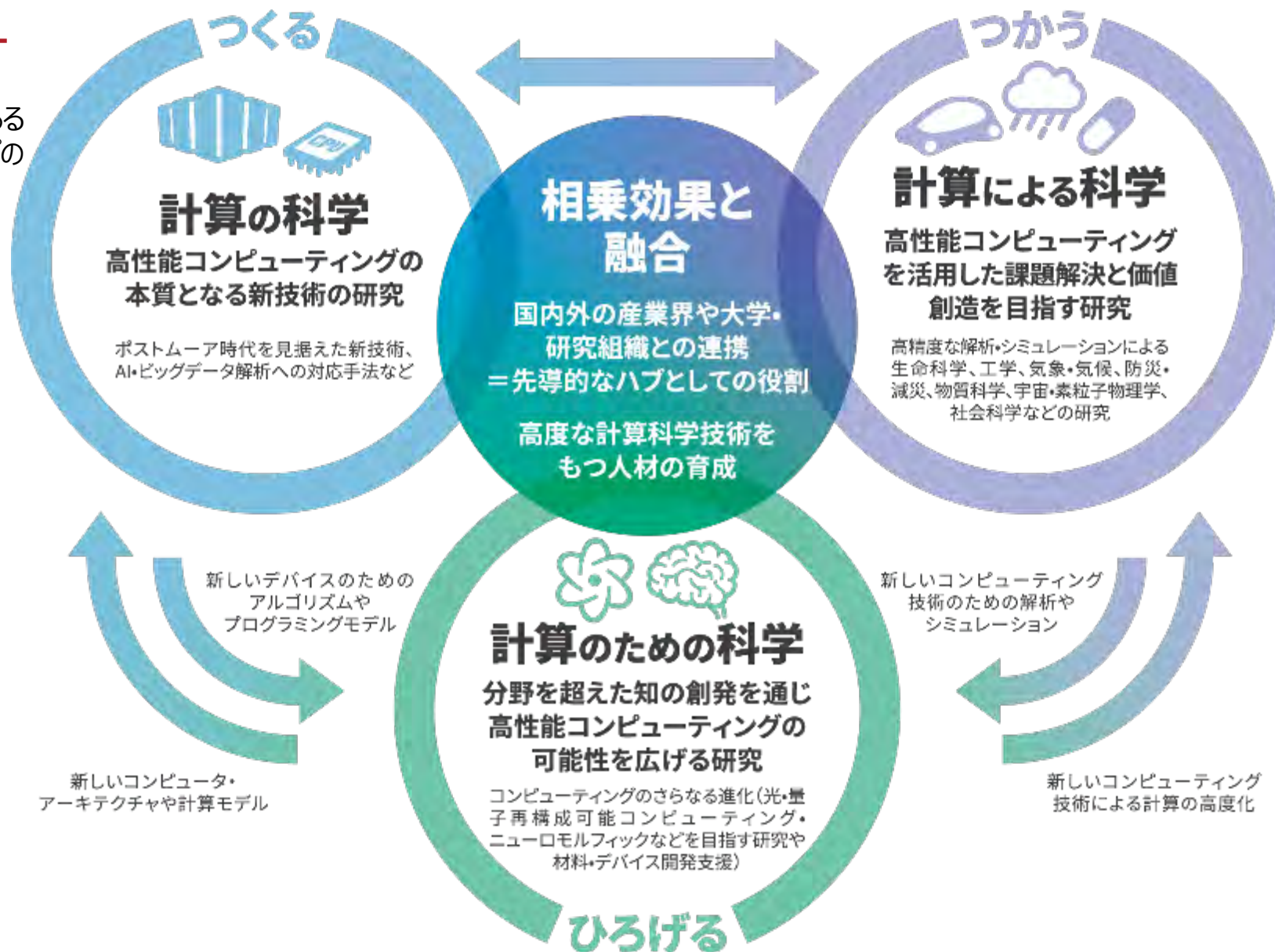
財務省勉強会講演資料

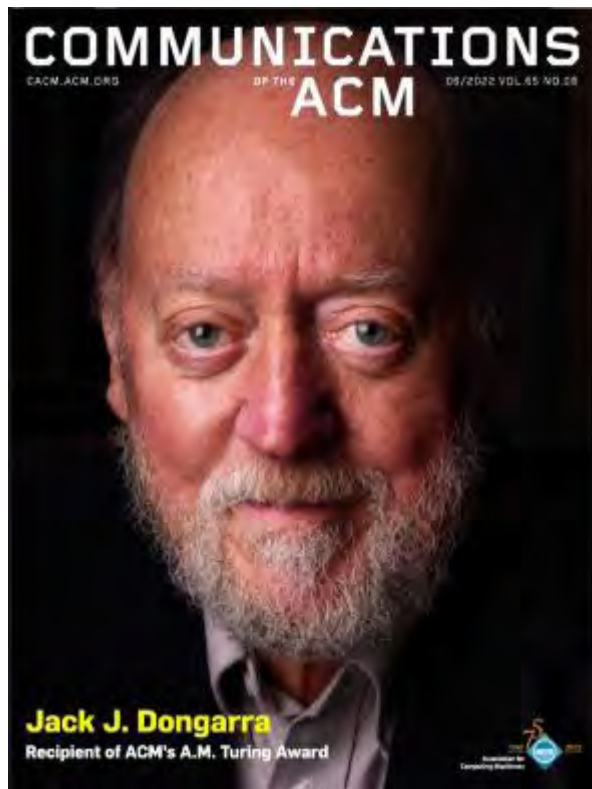
「計算の 計算による 計算のための科学」

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





Jack Dongarra
2021-22 ACM Turing Award
HPC & Numerical Algorithms
“Science of Computing”



Aspect, Clauser & Zeilinger
2022 Nobel Prize in Physics
Quantum Information Science
“Science for Computing”



Syukuro Manabe
2021 Nobel Prize in Physics
Numerical Climate Modeling
“Science by Computing”



副センター長
佐藤 三久
(計算の科学)



センター長
松岡 聡



副センター長
中島 研吾
(計算による科学)

計算の科学



プログラミング環境
研究チーム
佐藤 三久



高性能ビッグデータ
研究チーム
佐藤 賢斗



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
Mohamed WAHIB



大規模並列数値計算
技術研究チーム
今村 俊幸



高性能計算モデリング
研究チーム
Jens DOMKE



次世代高性能
アーキテクチャ
研究チーム
近藤 正章

(新チーム) (公募中)
S5・デジタルツイン研究
2023年度中に設置予定

計算による科学



連続系場の理論
研究チーム
青木 保道



複合系気候科学
研究チーム
富田 浩文



離散事象シミュレ
ーション研究チーム
伊藤 伸泰



複雑現象統一的解法
研究チーム
坪倉 誠



量子系分子科学
研究チーム
中嶋 隆人



データ同化研究チーム
三好 建正



量子系物質科学
研究チーム
柚木 清司



計算構造生物学
研究チーム
Florence TAMA



粒子系生物物理
研究チーム
杉田 有治



総合防災・減災
研究チーム
大石 哲

「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

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&
量子HPCソフトウェア
環境開発ユニット
佐藤 三久



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

運用技術部門



部門長&
利用環境技術ユニット
庄司 文由



副部門長
井口 裕次



施設運転技術ユニット
三浦 信一



システム運転技術
ユニット
宇野 篤也



ソフトウェア
開発技術ユニット
村井 均

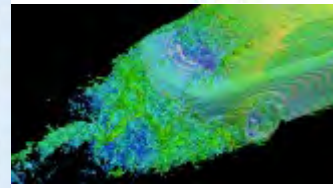
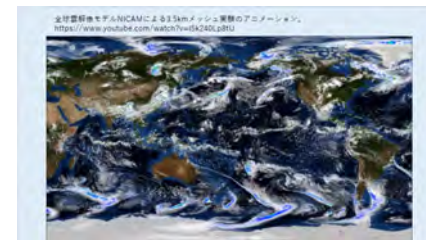
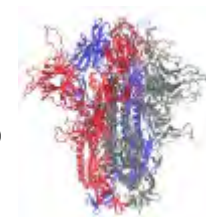


先端運用技術ユニット
山本 啓二

常勤スタッフ+非常勤
研究員+コントラク
ター等を含め400名程度

国家プロジェクトとしてトップスパコンを研究開発する意義

- 米・欧・中による官民をあげた熾烈な研究開発競争 ⇒ 投与される国家資金は5000億～1兆円と、日本の数倍 why?
- 理由1: 民間では賄えないITの最先端を指向するムーンショット的・ハイリスクな研究開発としての政府投資 「創ってナンボ」
 - C.f. アポロ計画、核融合炉、...
 - 富岳も富士通が自らのイニシアティブで開発するのは不可能
- 理由2: 非常に高い二重の投資効果(RoI) 「使ってナンボ」
 - 国家所有の情報インフラとして: 富岳相当の(1100億)スパコン/クラウドを商用調達すると3000億円相当 → 3倍のROI
 - 応用による経済効果: 構築コストと比較して一桁以上のROIが期待できる
 - Society 5.0: SDGs Goalsに向けたDXの中心
 - それがかなうマシン造りが必要 → 「アプリケーションファースト」



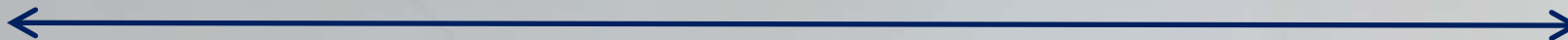
アプリケーションファーストスパコン「富岳」

高い計算性能



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

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

“The Challenge of Fugaku” 「スパコン富岳の挑戦」2022年10月20日出版

文藝春秋 BOOKS

発売情報

イベント

映画化・テレビ化

単行本

文春文庫

新書

電子書籍

ジャンル別

本の話

Google 提供

検索

書籍詳細検索へ



新書

電子書籍版

文春新書

スパコン富岳の挑戦

GAFAなき日本の戦い方

松岡聡

Kindle版もあり

定価： 1,210円（税込）

発売日： 2022年10月20日

ジャンル： ノンフィクション

English version being planned

オンライン書店で購入

ツイート

いいね！ 6

B!ブックマーク 1

LINEで送る

- “アプリケーションファースト”による“ムーンショット”マシン開発に我が国を挙げて**挑戦**！
- 新規開発されたCPU「A64FX」など基幹となる技術を理化学研究所及び富士通、日本全国のスパコン研究者が参加して、**国家プロジェクト**として**高い目標・ハイリスク**開発を推進

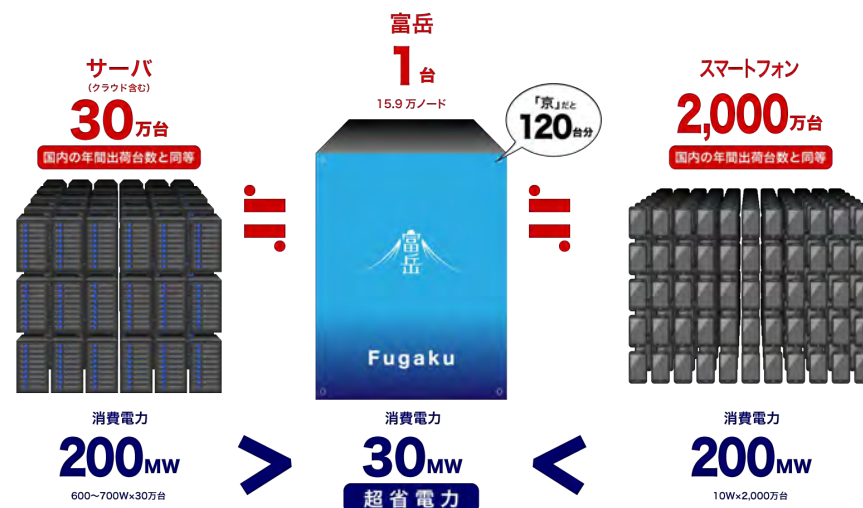
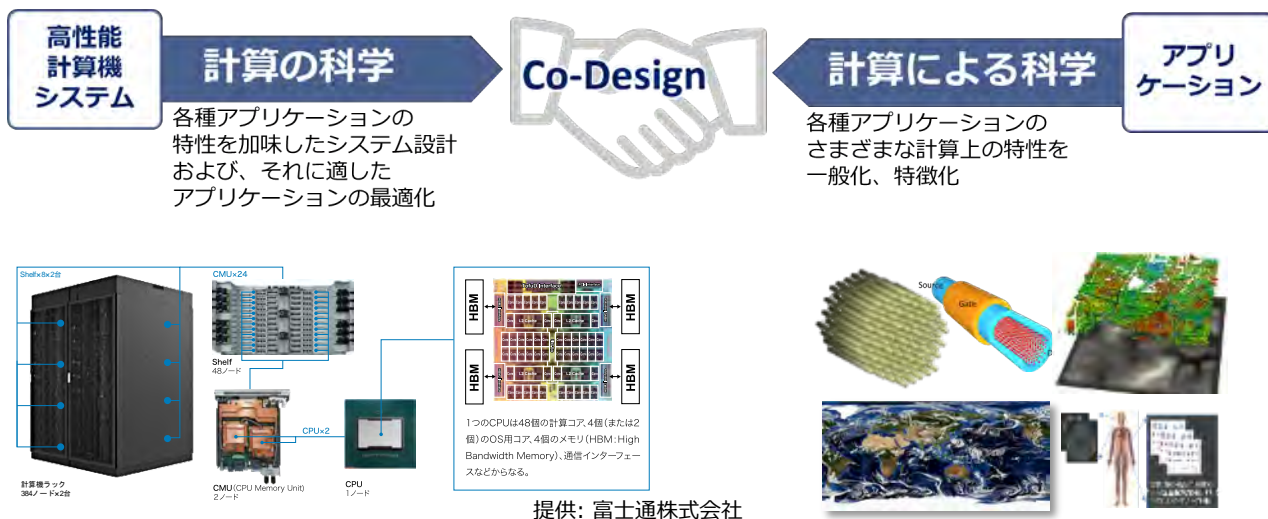


- 従来の米国製トップCPUの**3倍の性能**
- スマホで用いられる汎用Arm CPUの上位互換、**あらゆるソフトに対応(パワポも)**
- シミュレーションと共に**AI強化機能も**

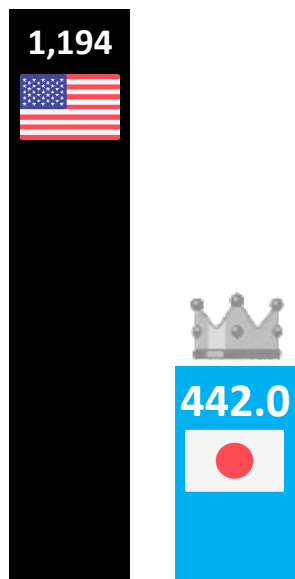
全て同時達成は
ムーンショット的
困難

● コデザインで進められた「富岳」の開発

● 「富岳」2～3台で日本全体のITの1年分



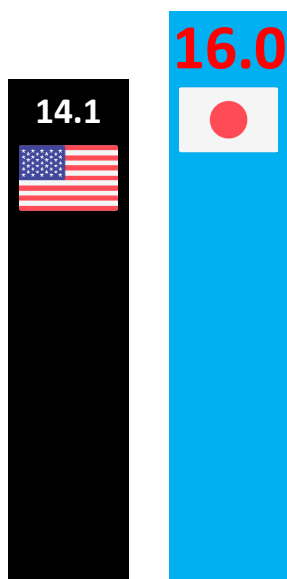
シミュレーション
(クラシック)



TOP500
(単位：PFLOPS)

浮動小数点の演算
での性能評価

シミュレーション
(モダン)



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

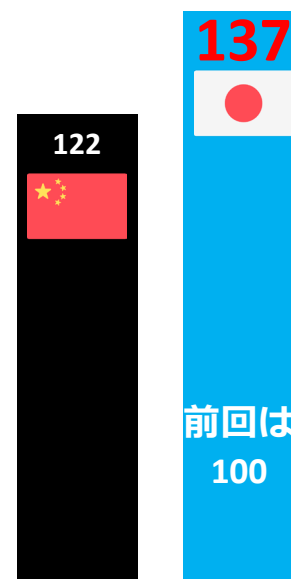
AI
(深層学習)



HPL-MxP
(単位：EFLOPS)

AI処理での
性能評価

ビッグデータ
(グラフ処理)



Graph500
(単位：TTEPS)

ビッグデータ処理での
性能評価

スループット性能
(深層学習)



ML Perf HPC
(CosmoFlow)
(単位：モデル数/分)

AI処理の
総合性能評価

初登場から3年経過も世界最高水準をキープ

Co-Designされたターゲットアプリケーション

富岳開発目標：「実アプリで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

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

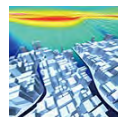
131倍
(GENESIS)



個別化・予防医療を
支援する
統合計算生命科学

23倍
(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

63倍
(GAMERA)

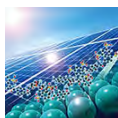


観測ビッグデータを活用した
気象と地球環境の
予測の高度化

127倍
(NICAM+ LETKF)

**平均
70倍**

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

70倍
(NTChem)



革新的クリーン
エネルギーシステムの
実用化

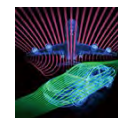
63倍
(Adventure)

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

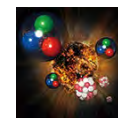
38倍
(RSDFT)



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

51倍
(FFB)

基礎科学の発展



宇宙の基本法則と
進化の解明

38倍
(LQCD)

注：倍率は2021年3月現在

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



坪倉誠チームリーダー
理化学研究所
研究センター
統一的開放研究
学大学院システム
究科教授)



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 Zaïm](#), and [Henri Vincenti](#), (CEA); [Axel Huebl](#), [Kevin Gott](#), [Remi Lehe](#), [Andrew Myers](#), [Wei-qun 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 [Mitsuhisa 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

「富岳」利活用促進の基本方針

第45回文科省HPCI計画推進委員会(2020年12月9日)資料等より引用・加工

□ 計算資源配分の考え方



Society 5.0 推進枠(仮称)*

*: 政策対応枠(枠外)より5%程度をSociety 5.0推進枠(仮称)として検討。

- 一般利用
 - 主としてアカデミアによる利用を想定。
 - 公募により、「富岳」の機能・性能を有効に活用する、幅広い研究課題を科学的見地から審査した上で、採択。
- 産業利用
 - 産業界による利用を想定。
 - 公募により、「富岳」の機能・性能を有効に活用する、幅広い課題を科学的、社会経済的見地から審査した上で、採択。
 - **Society5.0の実現に資する課題を実施する枠（Society5.0推進枠）を設け、2021年9月9日より公募を開始。**
（例：産業界のコンソーシアム、産学連携による利用などを想定）。
- 政策対応
 - **政策的に重要又は緊急と認められる課題（例：感染症対策、気象・防災分野、国が実施する他の研究開発プロジェクトでの利用、計算分野の国際連携に資する利用等）を柔軟に実施。**

注) Society5.0推進枠について、別途の文科省資料にて以下の記載。

「R-CCS はこの取組に積極的に協力する（計算科学的観点からの実現性のチェック等審査への協力。課題実施への参画・協力、課題実施者の支援、運用面のサポート等）」

富岳の15%は各国のトップスパコンに匹敵→更に発展が必要

Society5.0の実現に向けた「富岳」の取組み

Society5.0の実現

大規模スパコンたる「富岳」の優位性を最大限に活かし
複雑な社会問題の全体最適を解くことができるユーザやアプリを増やす

より大規模でより高度な
社会課題を全体最適で解く

大規模でより高度な
課題を解くための道筋

自社プロジェクトや
自社の課題を解く

充実した
ソフトウェア基盤

従来のHPC
ユーザはこちら

ヘルプデスクによる
利用者サポート

「富岳」を使ってみる

ゴール

ゴール

「富岳」コンパチブルな
商用クラウドなど

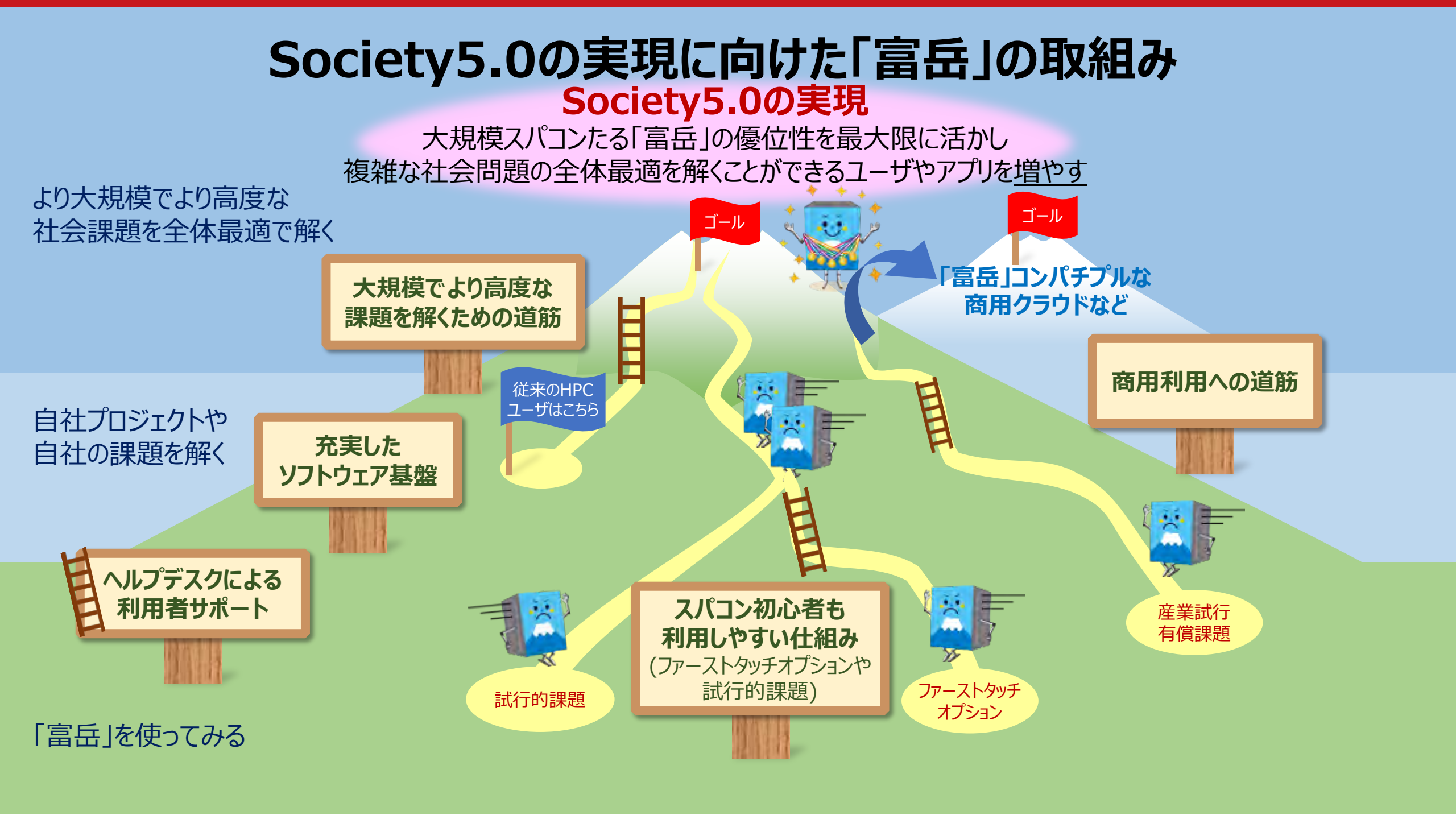
商用利用への道筋

スパコン初心者も
利用しやすい仕組み
(ファーストタッチオプションや
試行的課題)

試行的課題

ファーストタッチ
オプション

産業試行
有償課題



- 富岳は当初目標を大幅に上回る省エネ性能を達成（目標：京の消費電力の2～3倍→実際：京の2～3割増に抑制）
- 省エネは、スパコン運用における最大の課題。→ **令和3年度の運用開始当初から、様々な省エネ策を講じてきた。**
- 富岳の利活用が進み、一般公募の課題数および利用者数が増加し、利用ニーズは高まっている中、**エネルギー価格が高騰し、これまでの省エネ努力だけでは対応できず、約3か月間、1／3のノードを停止。**
（→ R 4 補正措置いただくことで機会損失を最小限に抑えた）

各国の計算センターとも知見を交換しながら、省エネ策を実施
（～R3年度）

○冷却方式に空冷より効率の良い水冷方式を採用

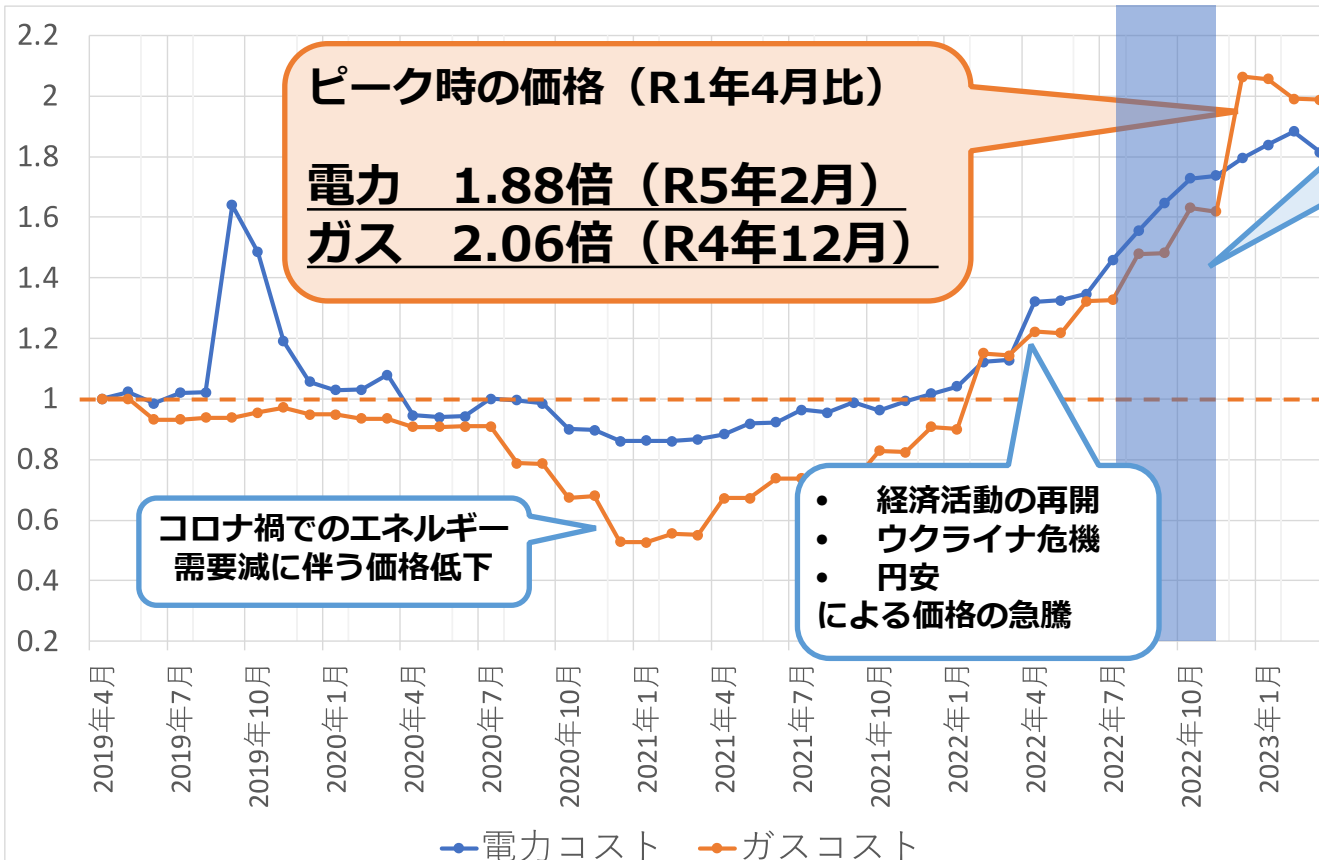
○空調機の稼働台数、稼働モードの最適化による省エネ化

○ガス発電機および吸収式冷凍機の運転最適化

○冷却塔の冷却効率改善

など

エネルギー価格（R1年4月で規格化）



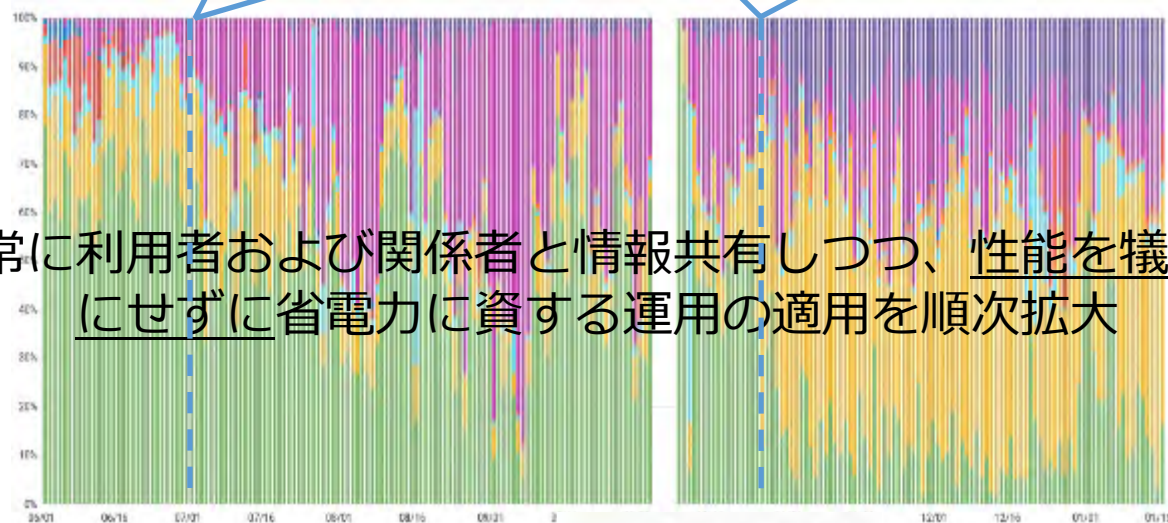
富岳の世界トップクラスの省電力化を更に高め電力危機を克服

- 光熱水費の高騰を受けて、7/28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、11/8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)



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

0_normal → 1_retention → 6_boost_eco
6_boost_eco → 7_boost_eco_retention

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



消費電力の推移

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

富岳のカーボンニュートラル化と省エネ化への取り組み状況

運用コスト削減のみならずカーボンニュートラル化推進中

継続検討案件

推進中案件



太陽光発電 風力発電などの
再生可能エネルギー



電力市場の有効活用

電力の安定化と平坦化のための蓄電池
日中の電力価格差の利用



効率的な自家発電環境の保守

↓ R4 補正予算、R5実施

CGSのオーバーホール
長期運用してきたCGS設備をオーバーホールし、運用の安定化のみならず、発電効率の向上(回復)を目指す。

バイオガス・水素燃料電池

カーボンニュートラルな
電力の供給



計算科学研究センターは世界でも類を見ない大規模なデータセンター (30MW以上)

世界のデータセンターと比較して、立地条件に恵まれない中で、**世界をリードするカーボンニュートラル化のデータセンター環境**を推進

北欧(冷涼な気候・自然エネルギー)
アメリカ(広大な土地)
では、カーボンニュートラル化は容易
→ 不利な条件にも関わらずR-CCSは**世界をリード**

富岳の施設は公的データセンターとしては日本最大

富岳での成果は民間IDCと異なり公開、日本IDC全体のカーボンニュートラル化へ寄与



排熱の有効利用

<https://datacenterfrontier.com/waste-heat-utilization-data-center-industry/>



排熱の供給



効率のよい冷熱



スパコンの省電力化運用

↓ R4実施、R4 補正予算

アイドル時の電力削減
富岳の省電力機能をユーザへの影響なく活用する。(10%削減)

高効率な冷却設備の導入と運用

↓ R4 補正予算 (R5設備増強・R6試験運用開始)

省電力運転の可用性の向上
富岳の電力変動の追従範囲を大きくし、富岳の有する省電力機能を最大限に活用する。(最大10%削減)

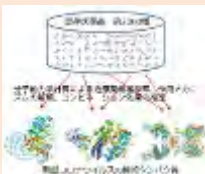
これらの先進的なスパコン運用の取り組みを、**センター間連携等**を通じて広く公開する等して、**国内外のセンター運用のカーボンニュートラル化と省エネ化に積極的に貢献**

新型コロナウイルス対策に関する貢献

「富岳」の性能を活かしたSociety5.0的社会要求に対する他国に無い迅速な対応



「富岳」による 新型コロナウイルスの治療薬候補同定

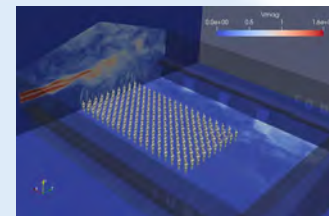


分子動力学計算により、約2000種の既存医薬品の中から、新型コロナウイルスの標的タンパク質に高い親和性を示す治療薬候補を探索・同定する。

(課題代表者；理化学研究所/京都大学 奥野 恭史)

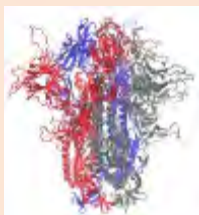
室内環境におけるウイルス飛沫感染の 予測とその対策

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)

「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



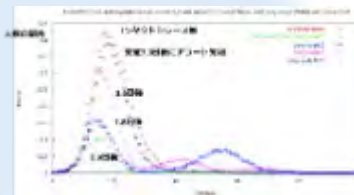
クライオ電子顕微鏡によって解かれたウィルス表面タンパク質の立体構造を初期モデルとして、その立体構造の動きを「富岳」を用いた分子動力学計算で予測する。

(課題代表者；理化学研究所 杉田 有治)

各課題は富岳以外の
トップスパコンの
年間占有に匹敵する規模

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)

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

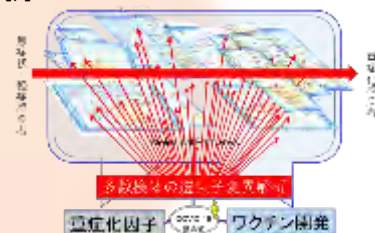


新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算を系統的に実施し、詳細な相互作用解析を行う。

(課題代表者；立教大学 望月 祐志)

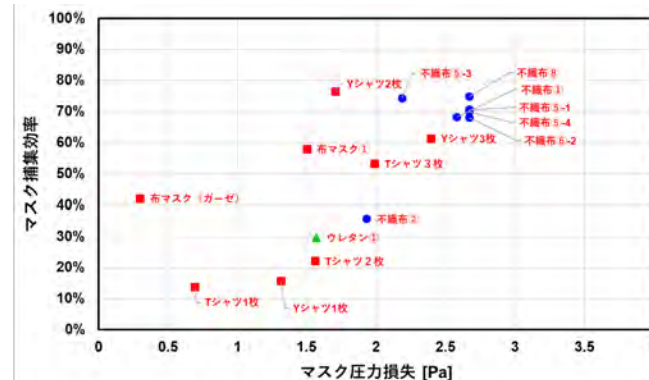
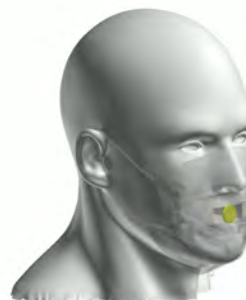
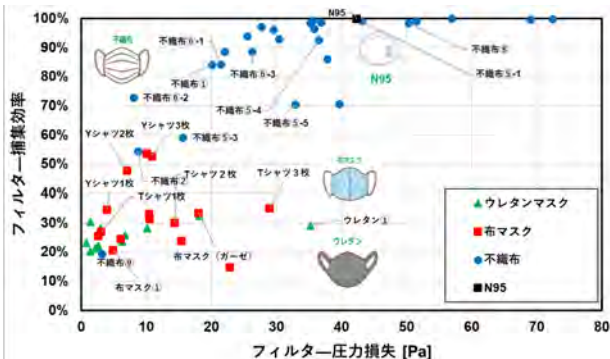
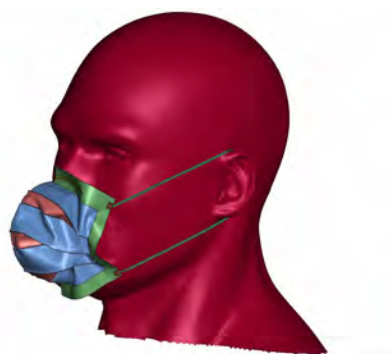
新型コロナウイルス感染症重症化 に関するヒト遺伝子解析

新型コロナウイルスの重症化例および軽症ないし無症状感染例について、全ゲノムシーケンスを用いた解析を実施し、スパコンシミュレーションによる重症化リスク関連遺伝子変異を同定する。

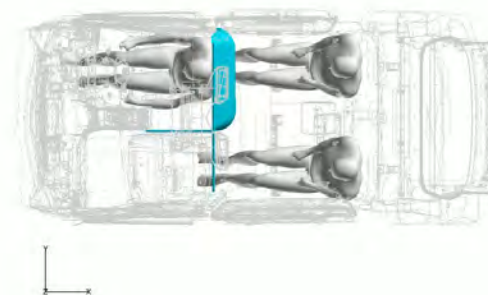
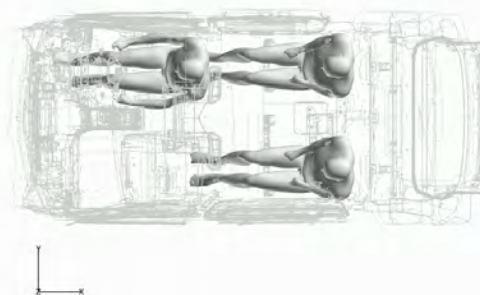
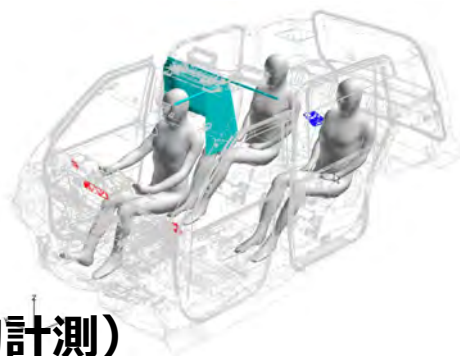
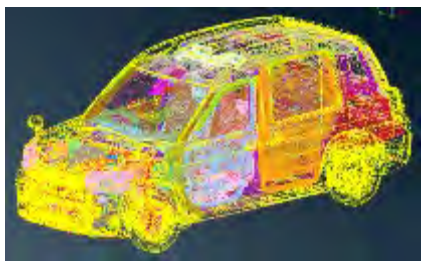


(課題代表者；東京医科歯科大学 宮野 悟)

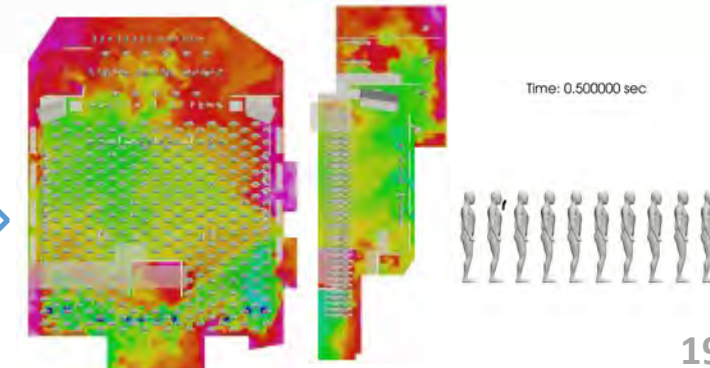
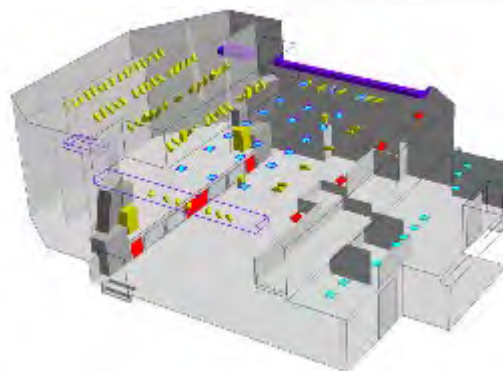
- マスクシミュレーション（シミュレーションによる形状データ自体の作成 + 実験による必要データの計測）



- **公共交通機関での感染リスク評価（CAD形状データの活用）**



- **室内での感染リスク評価（実物計測）**



COVID飛沫感染デジタルツイン：「富岳」による 高精度・高速・多ケース解析

100000

80000

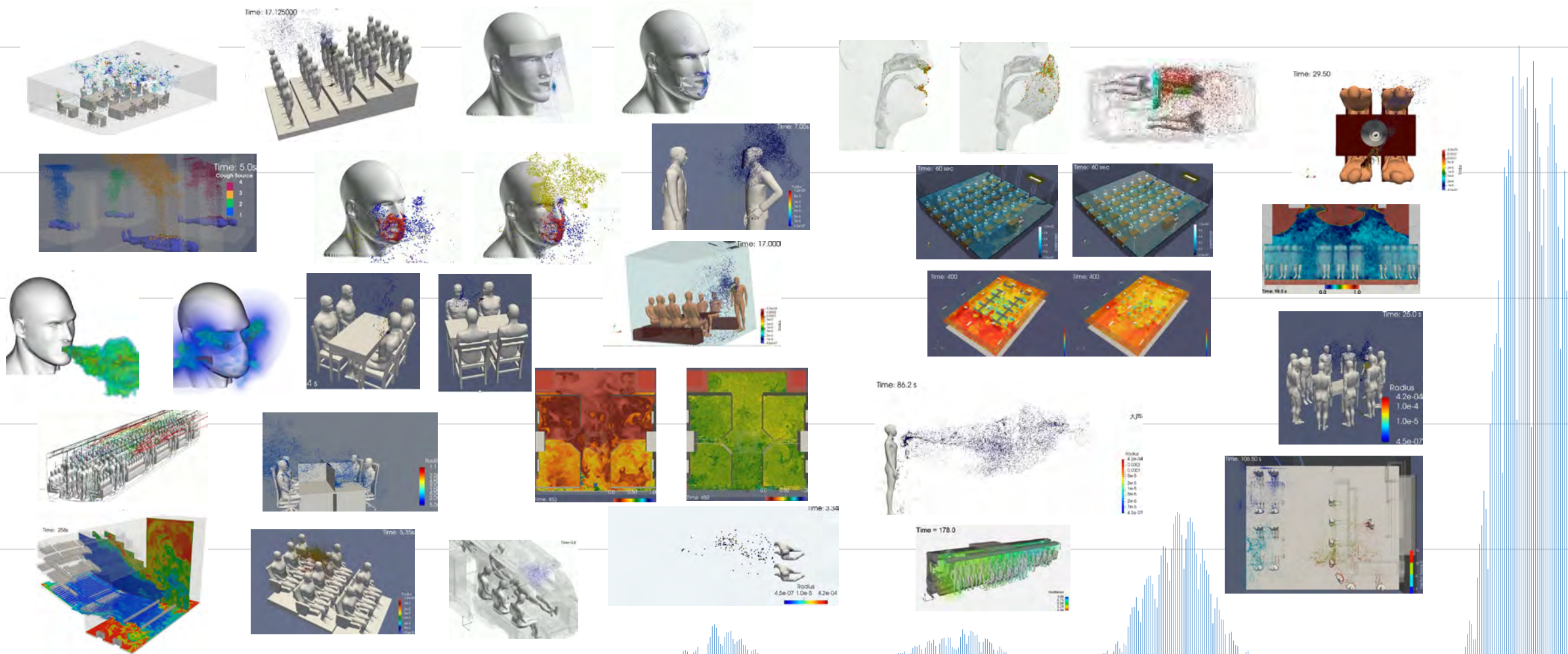
60000

40000

20000

0

2020/1/16 2020/2/16 2020/3/16 2020/4/16 2020/5/16 2020/6/16 2020/7/16 2020/8/16 2020/9/16 2020/10/16 2020/11/16 2020/12/16 2021/1/16 2021/2/16 2021/3/16 2021/4/16 2021/5/16 2021/6/16 2021/7/16 2021/8/16 2021/9/16 2021/10/16 2021/11/16 2021/12/16 2022/1/16 2022/2/16





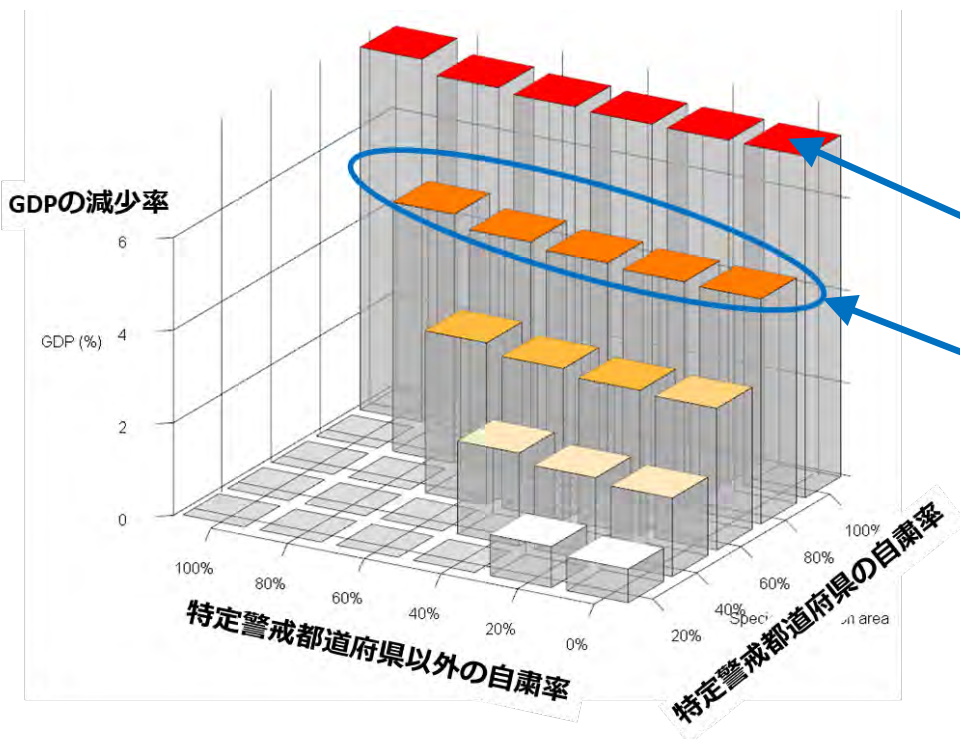
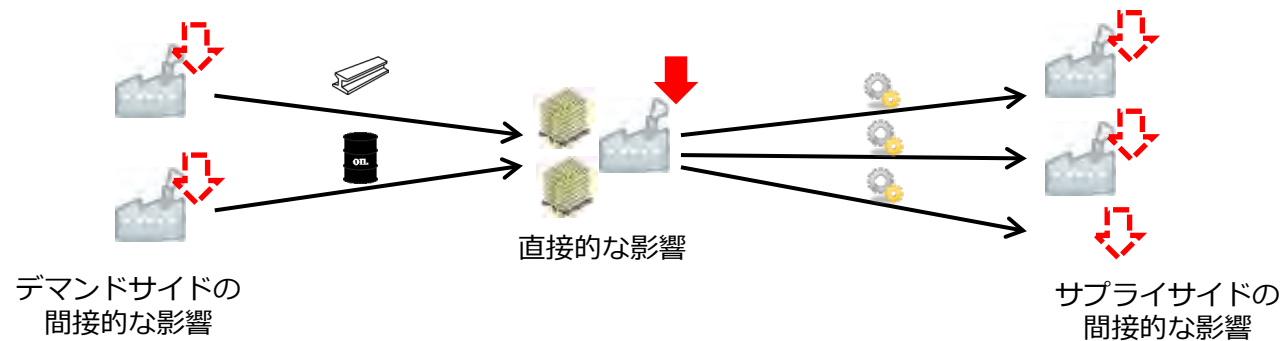
マスコミや政府との協力による社会的な感染予防の啓蒙

Over 300 newspapers, 350 TV broadcasting, 1,000 web news...

- 著作権の都合により掲載しておりません

Contribution to the social awareness of understanding aerosol infection and importance of countermeasures such as face-masks, partitions, social distancing , ventilations and so on.

日本全体での2か月間の経済活動の自粛をした場合、サプライチェーンモデルによるシミュレーションの結果、**GDPがマイナス7.8%になると事前試算**（実際はマイナス7.9%）



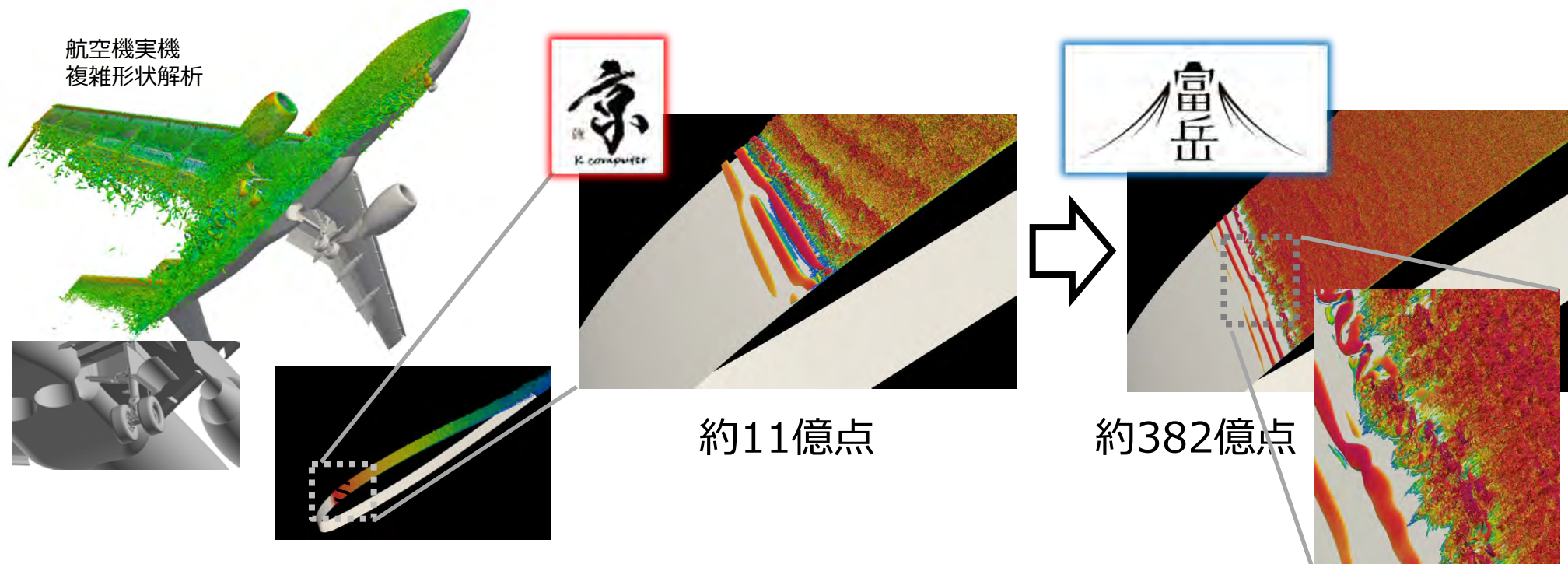
特定警戒都道府県に対する自粛の経済的影響は
その他地域より圧倒的に大きい。

例えば、
その他地域を完全に解除する影響（特定100%・その他0%）より
特定警戒都道府県の自粛の強さを20%下げる
ことのほうが経済的影響は小さくなる（特定80%の列）。

マスクや換気などの対策と併用することで、主要都道府県
単位で自粛が部分的で済んだ我が国のGDPに対する悪影響は、
強い自粛を行った諸外国に対してかなり小さかった

(実施者：東北大学 等)

- 実機フライト試験を代替する新たな民間旅客機的设计開発プロセス技術の実証
- 「富岳」で初めて可能となる高忠実な実機・実飛行条件の解析に挑む



主翼の空気の流れを実飛・行高レイノルズ数で大規模準直接解析に世界で初めて成功

- ✓ 実機フライト試験を世界初スパコン上のシミュレーション・デジタルツインで代替し、民間旅客機的设计開発期間・リスク・コストの抜本的削減を目指す。

「富岳」による光エネルギー変換材料の開発

「京」での材料シミュレーションにより、有機太陽電池と光触媒の新材料設計を実現
この知見をもとに「富岳」を用いた材料シミュレーション・インフォマティクスにより、より高効率な有機太陽電池と光触媒の新材料設計を実現し、産業レベルでの実装へ

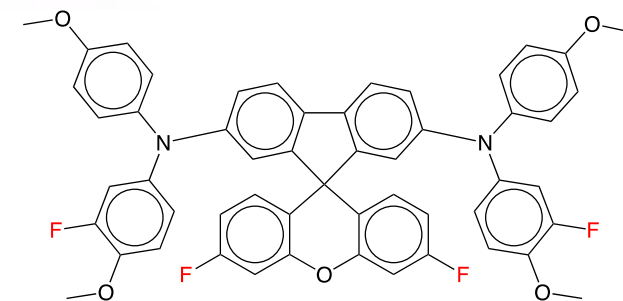
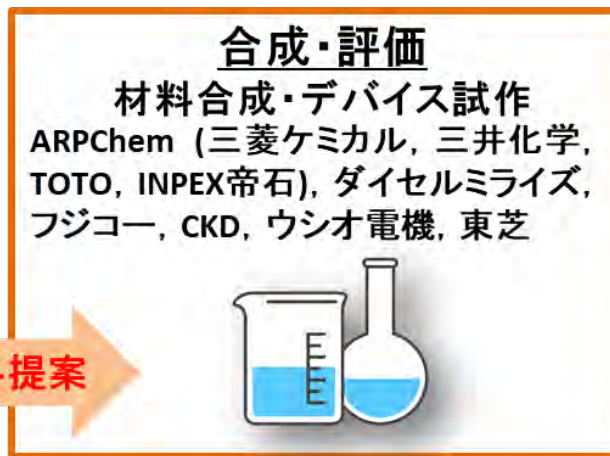


11,025個の化合物から51個の低毒性ペロブスカイト太陽電池を提案

サイバー技術



フィジカル技術



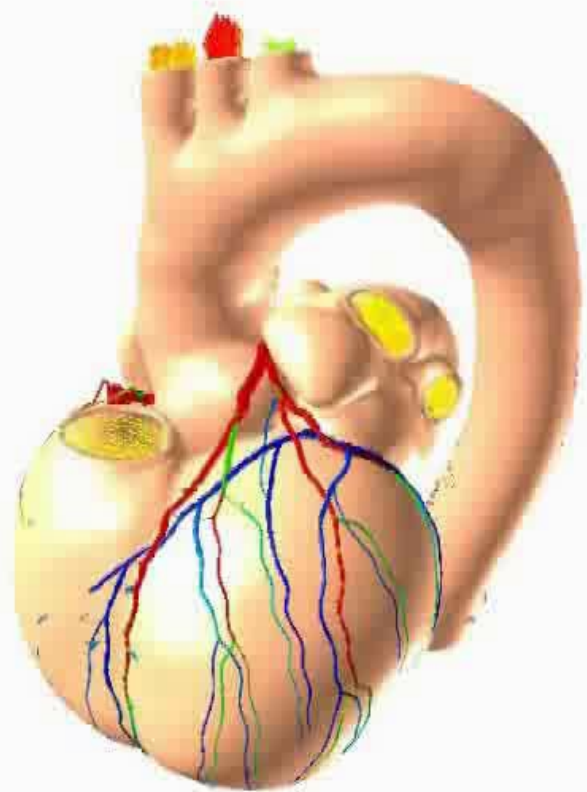
変換効率: 24.4%

高い変換効率を持つ正孔輸送材料を設計

サイバー・フィジカルループ

医療基盤：心臓シミュレータUT-Heart

[久田 俊明ら]

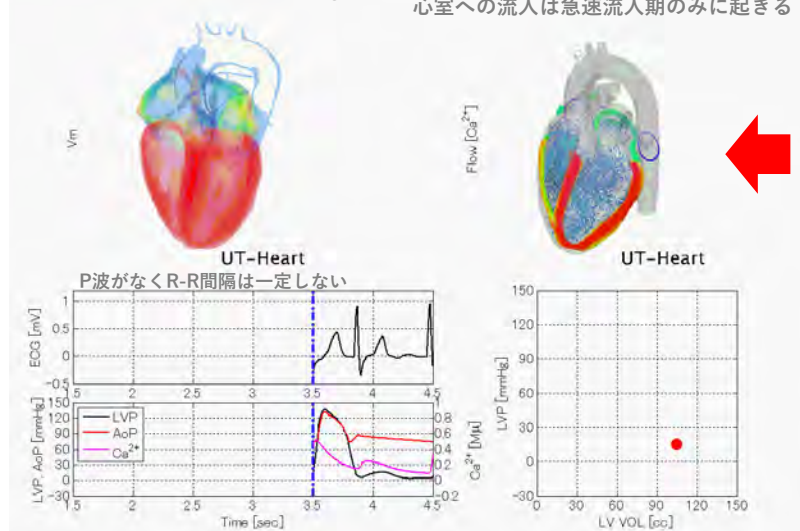


- 約20年前に東京大学で研究開発を開始
- 心臓の生理学的活動をありのままに、
マルチスケール（分子レベルから臓器レベルまで）
マルチフィジックス（固体/流体力学、電気化学）
で再現する世界に類例のないシミュレータ
- そのため計算パワーが必要
→ 「京」と「富岳」で研究が加速
- 現在では(株)UT-Heart研究所が主体となり
臨床医学・創薬・医療機器開発
の分野で実用化研究を推進（以下に応用例を示す）

応用例 1 心房細動のシミュレーション

心房内にはランダムな興奮(re-entry)

心房内のCa濃度は低く細かく振動
心室への流入は急速流入期のみに起きる



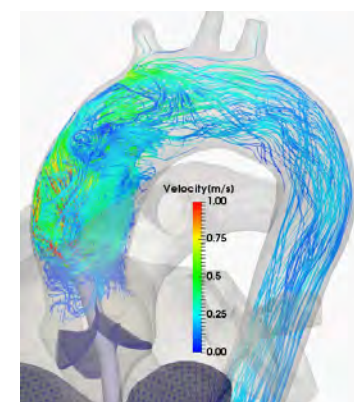
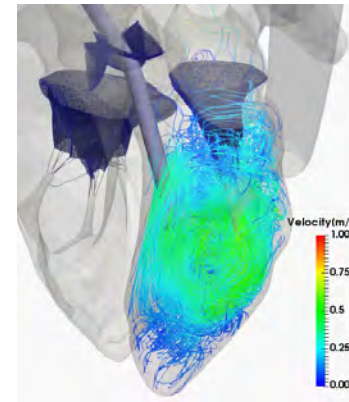
薬剤や治療機器の
効果を計算機上で
自在に試すことが
できる

心室筋のCaチャネルの不活性化中に興奮波が到達⇒Ca放出量↓⇒収縮力↓⇒LV圧↓⇒大動脈弁開かないことがある

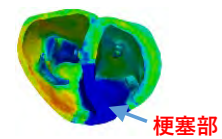
応用例 2 補助循環用ポンプカテーテルIMPELLAの性能評価

左心室内腔の血流

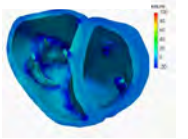
大動脈の血流



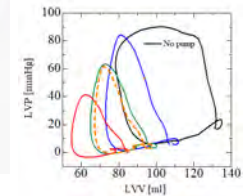
心筋梗塞模擬



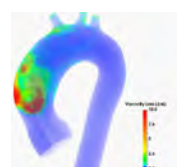
心筋への負荷



圧容積関係



エネルギー損失

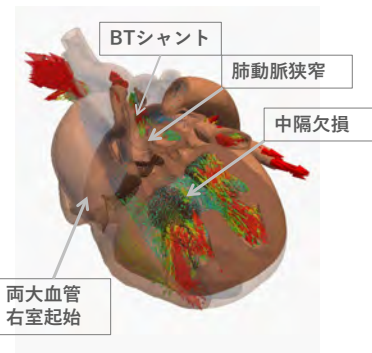


任意の状態の心臓に対し各種医療機器の性能評価を計算機上で行うことが可能

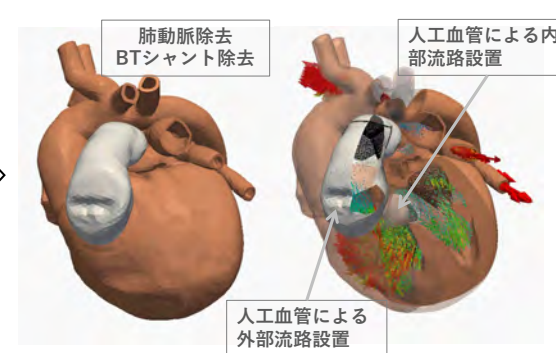
応用例 3 小児先天性心疾患の手術シミュレーション



©UT-Heart Inc.



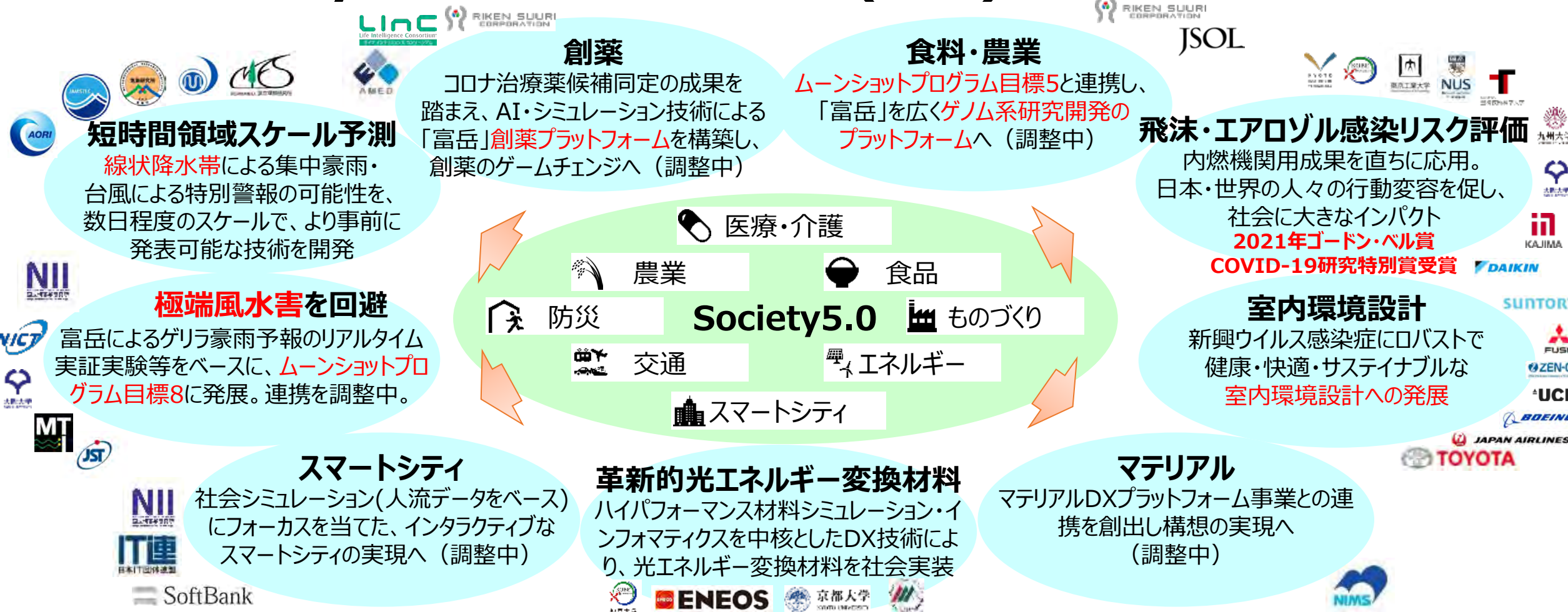
術後の血行
動態予測



各種術式による血行動態の改善を事前に計算機上で予測し、最適な手術を実施

現在、国立循環器病研究センター主導で多施設前向き臨床研究を実施中
次年度は医師主導治験を予定

Society5.0に向けた投資効果(RoI)の具体化・最大化



これら「富岳」デジタルツインでの胎動を大きなムーブメントへと発展

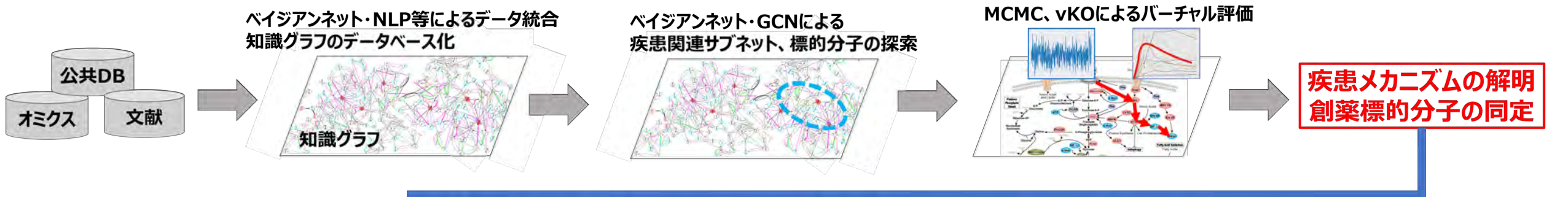
- 理研がハブとして貢献（「富岳」Society5.0推進拠点を2021年4月に設置。ノウハウある機関との協働、民間視点の導入。）
- 一つ一つの取組から技術的・制度的課題を抽出し、解決。あわせて取組事例を発信。取組が取組を呼ぶように。
- 「富岳」デジタルツインを政策を超えた産学官プラットフォームへ。日本IT団体連盟から2022年度政策要望の一つに。

創薬DXプラットフォーム開発（理事長裁量経費と文科省「富岳」Society5.0推進利用課題採択）

- 「創薬ターゲット探索」⇒「リード化合物創出」に至るHPC/AIフローを構築
- 「富岳」を中心に、HPC/AIフローの自動化を図ることで、創薬の超効率化を実現



創薬ターゲット探索：疾患名・患者サンプルデータ等を入力して、疾患メカニズムや標的タンパクを推定するHPC/AIフロー

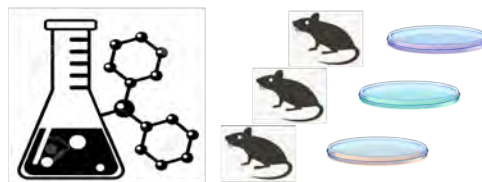


AlphaFoldによる立体構造予測

Dockingによる活性化合物探索

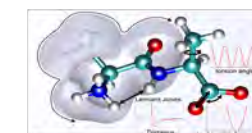
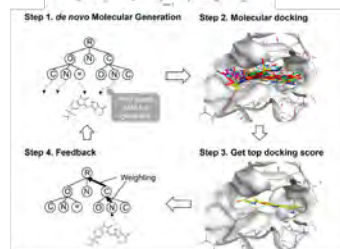
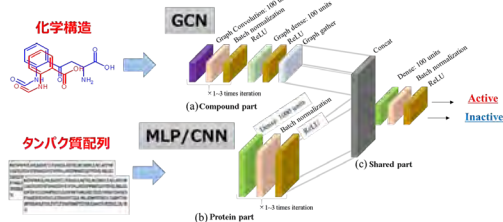
生成モデルによるリード最適化

MDによるバーチャル評価



新規薬剤分子の創出

数十億化合物
ライブラリー



MM・QMによる
物理化学的安定性評価

GCNによる活性・ADMET予測

リード化合物創出：標的タンパク質名を入力して、リード化合物を推定するHPC/AIフロー

- 2020年、内閣府主催 第2回日本オープンイノベーション大賞（厚生労働大臣賞）受賞
- 日本学術会議 第24期学術の大型研究計画に関するマスタープラン（マスタープラン2020）に選定

HPC/AI医薬PF部門

創薬・医療・生命科学

連携

LINC
Life Intelligence Consortium
ライフインテリジェンスコンソーシアム
(80の製薬・IT・アカデミア)

連携

富岳Society5.0推進拠点

シミュレーション

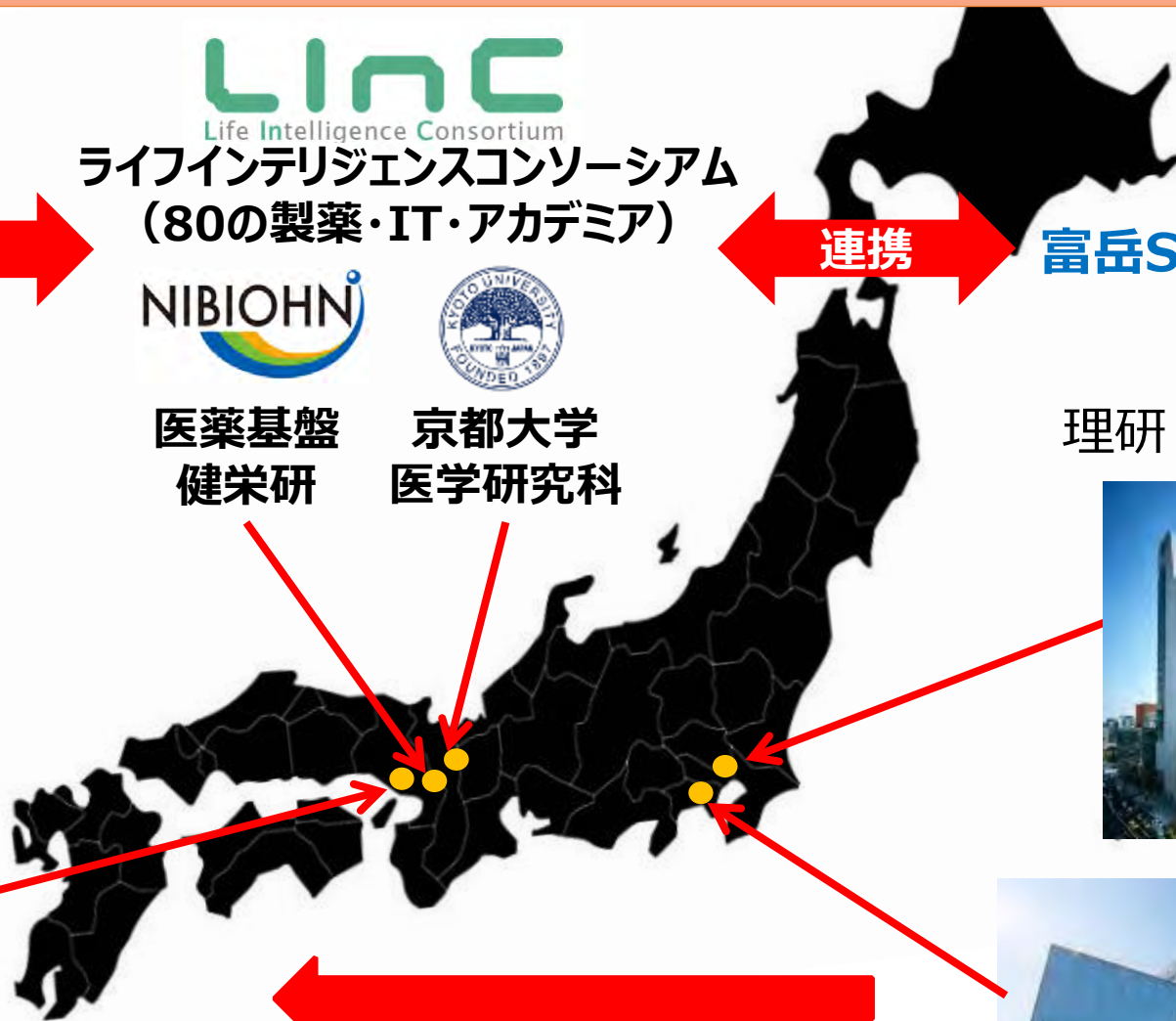
AI



医薬基盤
健栄研

京都大学
医学研究科

理研（日本橋）



理化学研究所 R-CCS

2017年より横浜MIHで開始
2021年に神戸R-CCSに異動

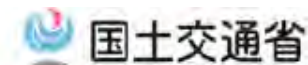


理研（横浜）

AI



i-Constructionの推進と国土交通データプラットフォームの構築



- ICT等の全面的な活用により建設現場の生産性向上を図る「i-Construction」の取組を推進している
- 「i-Construction」の取組で得られる3次元データを活用して、さらに経済活動や自然現象に関するデータと組み合わせることで、「国土交通データプラットフォーム」を構築し、産学官連携によるイノベーションの創出を目指す



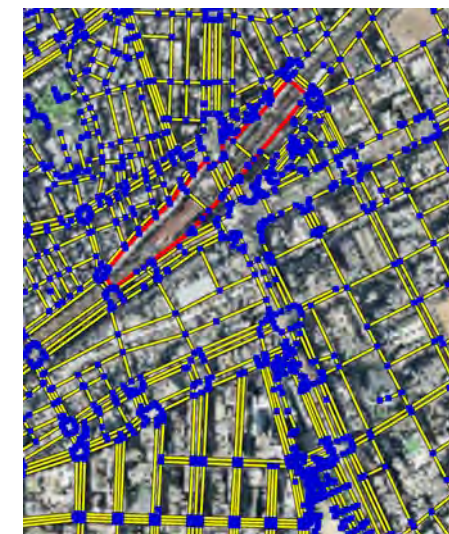
- ◆ **神戸市、NTTドコモ、R-CCSの共同研究契約**を2022年4月に締結
- ◆ 県市COE事業を活用して神戸市の防災や回遊促進の取り組みを支援するため、2022年度は**避難経路や避難時間短縮に向けたシミュレーションを実施**
- ◆ それらの**成果を1月17日にプレスリリース及び動画作成・配信**

■ シナリオ

日付：平日、第二突堤でコンサートがある日または、休日でコンサートがある日
時間帯：日中（三宮周辺の人口が多いため）
災害想定：大阪北部地震のような遠方での災害が発生し三宮駅を通る公共交通（電車）が全て停止

■ パターン

- パターン1
- ・ 第二突堤の1万人が一斉に駅に向かう。背景交通が一斉に駅に向かう。
 - ・ 誘導なし、信号あり
- パターン2
- ・ 第二突堤の1万人がその場に留まる（第二突堤のリンクで留め置く）。背景交通が一斉に駅に向かう
 - ・ 誘導なし、信号あり
 - パターン1と比較して、アリーナの人が移動しないだけでどれくらいの差があるか
- パターン3（時間があれば）
- ・ 第二突堤の1万人が一斉の駅に向かう。背景交通が一斉に駅に向かう。
 - ・ 誘導あり、信号あり
 - パターン1と比較して、太い道を誘導するとどれくらいの差があるか（特に細道の詰まり具合）



政策決定における「富岳」の可能性

「富岳」政策対応枠

府省庁名	実施課題名
令和4年度採択案件	
内閣官房新型コロナウイルス等感染症対策推進室	経済活動と感染拡大防止の両立の実現のための「飛沫シミュレーション」の実施
気象庁情報基盤部数値予報課	豪雨防災、台風防災に資する数値予報モデル開発
内閣府政策統括官(防災担当)付参事官(調査・企画担当)	相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による影響の評価

府省庁名	実施課題名
令和3年度採択案件	
内閣官房新型コロナウイルス等感染症対策推進室	経済活動と感染防止対策の両立の実現のための「飛沫シミュレーション」の実施
環境省	短寿命気候強制因子による気候変動の緩和策に資する定量的評価
内閣府	相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震による被害予測の高度化
気象庁	豪雨防災、台風防災に資する数値予報モデル開発
スポーツ庁	国立競技場における観客の「飛沫シミュレーション」の実施

IT連の政策要望（一部）「産学官デジタルツイン基盤の構築・活用」

（2021年11月12日のIT連理事会より）

- 「富岳」が提供するデジタルツインの場で、産学官が関連技術・インフラを持ち寄っての協働を創出する仕組みを構築
- 科学技術・イノベーション政策、産業政策、情報通信政策、健康・医療政策等で骨太に支援・推進される産学官の取組に、「富岳」とその利用技術や関連最先端研究力を提供する仕組み
- 「富岳」のデジタルツインを国主導でさらに高度化し、産学官の人材育成を推進

スーパーコンピュータによる線状降水帯の予測

発達した積乱雲の連なりで大雨をもたらす「線状降水帯」は、**大きな被害をもたらすリスクの高い気象現象。**

2020年7月には線状降水帯による豪雨で熊本県球磨村では河川の氾濫や土砂崩れ、床上床下浸水など甚大な被害をもたらし、多くの方が亡くなった。

線状降水帯は事前に予測することが極めて困難。

気象庁では線状降水帯予測精度向上を喫緊の課題と位置づけ、2022年6月から開始する線状降水帯予測において、

「富岳」を活用して開発中の予報モデルのリアルタイムシミュレーション実験を実施。

また、**気象庁は2023年3月から**予測精度向上のために現在運用中のスーパーコンピュータの約2倍の計算能力をもつ

「線状降水帯予測スーパーコンピュータ」を稼動開始。

この「線状降水帯予測スーパーコンピュータ」は、

「富岳」の技術を活用した富士通株式会社製

「FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000」で主系と副系の2系統で構成。

今後「富岳」による技術開発の成果及び線状降水帯予測スーパーコンピュータの高い計算能力により、**気象庁の現業予報モデルを順次高度化予定**（高解像度化、予報時間延長（10時間→18時間）など）

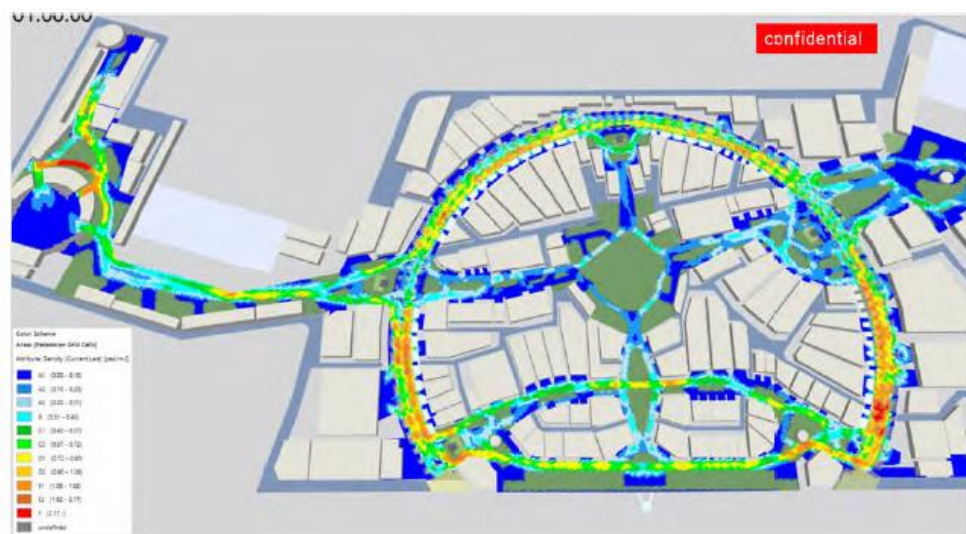


2020年7月の豪雨による熊本県球磨村の様子
引用：<https://www.nippon-foundation.or.jp/journal/2021/61147>

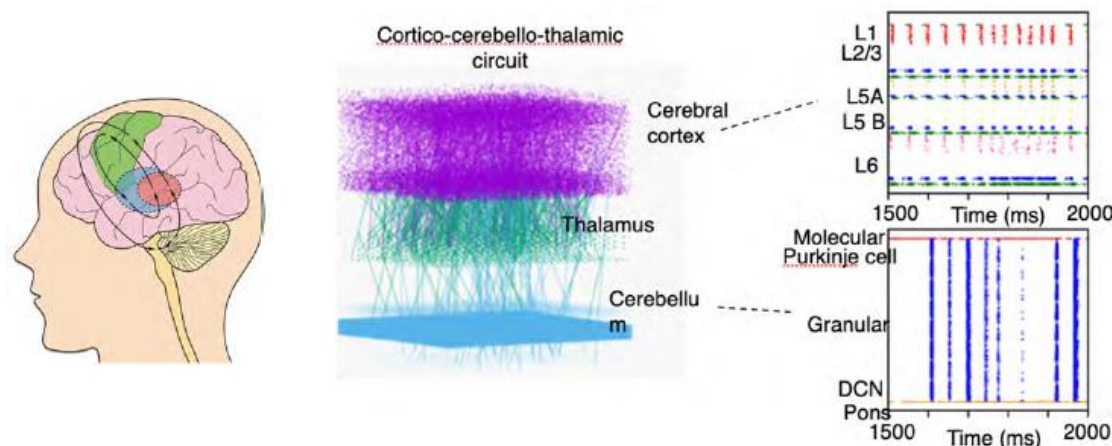


線状降水帯予測スーパーコンピュータ
引用：https://www.jma.go.jp/jma/press/2302/24b/20230224_press.pdf

- ◆万博は「富岳」の価値を社会に示すよい機会と捉え、積極的に検討中
- ◆万博展示に関し、**石黒プロデューサーのパビリオン（ロボット）と全脳シミュレーションとロボットの連携**についても調整中
- ◆**防災科学技術研究所**との連携し、防災DXに向けた研究を推進し、万博をショーケースとして研究協力に向けた意見交換を開始
- ◆**兵庫県万博推進課、三井住友銀行・関西成長戦略室**とも連携を検討中



来場者サービス課提示のアウトプットイメージ



「富岳」成果創出加速プログラム
山崎 匡（電気通信大学）「脳結合データ解析と機能構造推定
に基づくヒトスケール全脳シミュレーション」
の成果より抜粋

2023 Hyperion Report on Fugaku Values

2 years into full production since Mar 2021 (3 years since pre-production)

#1 Research Finding: Fugaku Will Likely Return 68 to 90 Times Its Costs

The Fugaku potential returns are very strong

1. The potential economic value:

- \$15 billion from projects like those that were done on the K system (\$4 billion plus has already been accomplished on 6 projects)
 - \$50 to \$75 billion from keeping Japan from shutting down its economy
 - \$10 to \$22.5 billion for large value industrial projects
 - And a potential of \$22.5 billion or more from addressing important SDG goals
- **For a total of \$102 to \$135 billion in financial value – this represents a return of 68 to 90 times the investment in Fugaku**

#2 Research Finding: Researchers Are pleased with The Design and Operations of Fugaku

The Fugaku potential returns are very strong

2. **The percentage of the researchers that like the Fugaku system design and operations is one of the highest seen in our studies with only a few that aren't pleased with the system design.**
- Most sites around the world typically have only 60% to 75% of the researchers pleased with their system design & approach.

#3 Research Finding: Fugaku Is Focus On High Value SDG's

Fugaku researchers are addressing a broad set of SDG's

Projects in these areas include:

- Disaster prevention, resilience to urban wind disasters and heat islands, wind resistance safety of bridges, realization of Society 5.0, availability of large-scale computers and entry of non-professionals into computation, increased international competitiveness in automobiles/manufacturing, safe behavior criteria for COVID-19, preventing spread of COVID-19, drug discovery, research and development of new materials, new products, fuel cells, efficiency in combustor and furnace design, and the efficiency of large offshore wind power generation.

#4 Research Finding: Fugaku Is Focused On Creating Industrial Economic Growth

By directly supporting industry with a strong outreach program

4. **Fugaku is more focused on supporting industrial growth and helping companies create economic value vs. focusing more heavily on pre-competitive R&D. Riken has a strong industrial outreach program which is more industry-friendly than most other nations.**
- The focus is more directly on increasing Japanese companies' economic growth and competitiveness (and not only on longer term R&D).

「富岳」発のイノベーション展開の加速

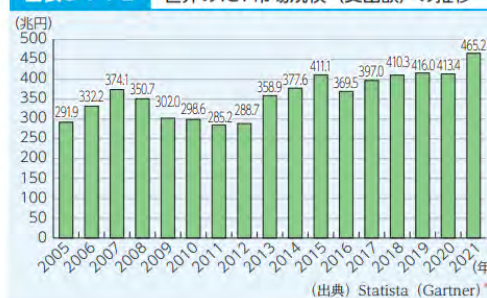
産業のデジタル化、DX化が進展する中、「富岳」及び得られた研究開発成果は、広く活用されることで、イノベーションを起こし、大きな経済効果等につながるポテンシャルを有している

→ 幅広くかつ円滑にイノベーションにつなげるために様々な取組を進めることが重要！

- **世界のICT市場（支出額）**は、スマートフォンやクラウドサービスの普及などにより、**2016年以降増加傾向**で推移しており、**2021年は465.2兆円（前年比12.5%増）**
- 日本の民間ICT市場（ICT投資額）は、＜中略＞2020年度は12兆9,700億円（前年度比0.6%増）であり、2021年度以降、**さらに増加する予測**

（総務省 令和4年版 情報通信白書より）

図表 3-1-1-2 世界のICT市場規模（支出額）の推移^{*3}



図表 3-1-1-3 日本の民間ICT市場規模（ICT投資額）の推移及び予測^{*5}



- 「富岳」には、科学技術分野はもちろんのこと、例えば、**新しい産業プロジェクト（創薬、AIなどの新技術、SDG'sへの取組、感染症対策など）の成果による経済への影響が十兆円を超える規模となる可能性が試算される**といったHyperion社の分析調査^{*}があるなど、**幅広いイノベーションにつながるポテンシャルが見込まれる**
- **経済的な収益を伴わない科学技術革新への波及効果も、「富岳」は世界の有力コンピュータの中で顕著^{*}**
ユーザから、富岳を利用したプロジェクトを科学分野の視点からも高い評価、また、回答者の多くが「富岳」がなければ「プロジェクトは不可能」と回答
 - 「富岳」を利用した評価プロジェクトの27%が、科学的的重要性カテゴリーで最高位と評価
 - 評価プロジェクトの35%が、科学的影響度の高いカテゴリーと評価
 - ユーザーの68%が「富岳」の研究プロジェクトに企業が参加したと回答
 - ユーザーの88%が日本が「国家的フラッグシップ・スーパーコンピュータ」を維持する必要があると回答

^{*}：Hyperion Research社「2022 年度スーパーコンピュータ『富岳』の波及効果に関する分析調査」

Hyperion Research社は、米国エネルギー省の依頼に基づき開発したスパコンの経済影響に関する調査分析手法を使用（HPC 投資を公共部門の非財務的な科学技術革新（研究収益，ROR）および民間部門の財務的投資収益（ROI）に直接関連付けることができるマクロ経済モデルを用い、科学・工学分野の専門家のレビューも踏まえて経済効果を試算）。

今回の調査では1ドルは130円として換算。また、本調査では、産業界とアカデミアの「富岳」ユーザ42名に対するアンケートおよびヒアリング調査を実施。

(2023年MoU締結 AWS & R-CCS) クラウドを通じた富岳の成果の拡張

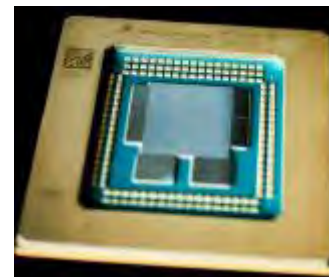
Fujitsu-Riken A64FX HPC
(2018) Arm+SVE CPU



High ISA (Arm+SVE) &
Performance



Compatibility



AWS Graviton3/3E (2022)
Arm+SVE CPU

「富岳のクラウド化」



“Cloud APIs on Fugaku”
富岳がクラウドの一員(既存)
例: s3プロトコルの実装

Amazon EC2
C7g/C7gn instance



「クラウドの富岳化」



“Virtual Fugaku”
富岳のアプリ含むソフトウェア
スタックのAWS上での実現(今回)



Fugaku/FX1000



Riken R-CCS SC

全体が仮想化=>ユーザは適材適所の富岳クラウド環境利用
例：企業は最先端の研究開発は富岳、製品開発はAWS、
研究成果を即時に製品開発に反映可能

「富岳」のクラウド化に加え、クラウドの「富岳」化 (クラウドを通じた「富岳」のハードのみならずソフト・アプリ・サイエンス成果の拡張・普及)

「富岳」のソフトウェアやアプリケーションの成果を商業クラウド上で企業等が開発や実運用で直接利用できるような環境を整えること、いわばクラウドの「富岳」化を目指しAWSとMOUを締結し、「富岳」の機能がクラウド上に仮想的に再現されるソフトウェア環境の構築に向けた研究協力を実施

2023年8月にR-CCSアプリ（GENESISが有力）でまずはSaaS※開始を目指す

※ Software as a Service（サービスとしてのソフトウェア）、インターネット上で使えるインストール不要のソフトウェア、もしくはその提供形態のこと。

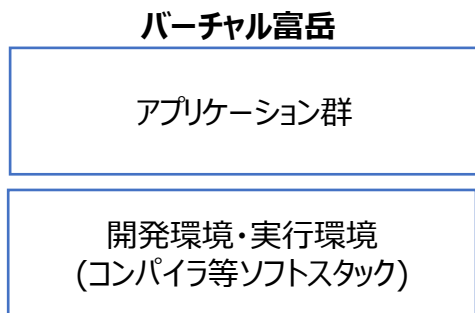
- 「富岳」成果を広く普及させるためのプラットフォーム戦略
- 共通ソフトウェアスタックをクラウド上に実現 → AWS Graviton3上での富岳成果活用
- 「富岳」アプリのAWS移植 + 「富岳」利用状況（SPACKログ） → 「共通」ソフトウェアスタックを定義



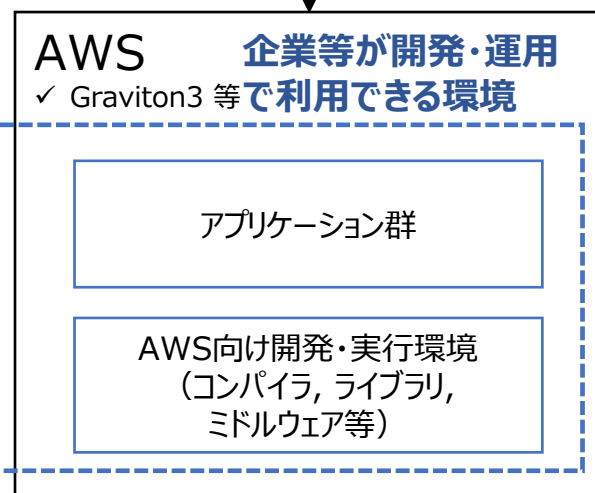
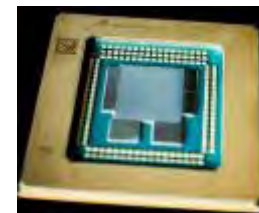
Fujitsu-Riken A64FX HPC (2018)
Arm+SVE CPU



Fugaku OpenOnDemand
GUI Applications Portal

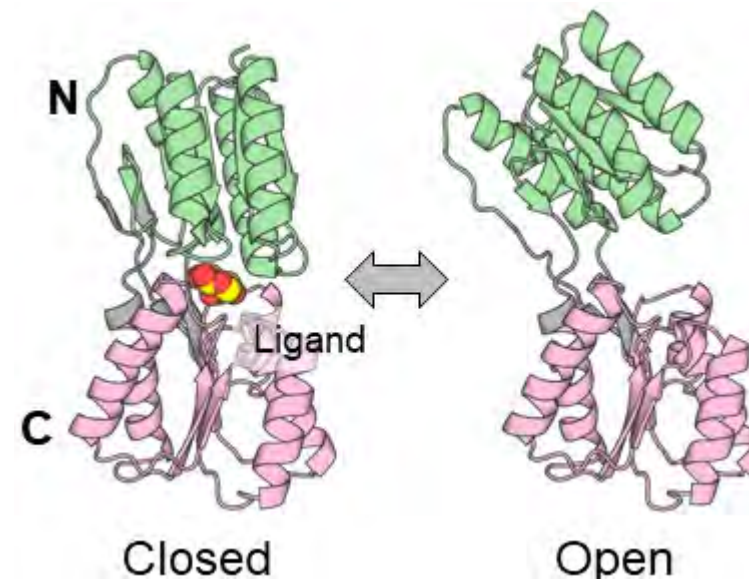
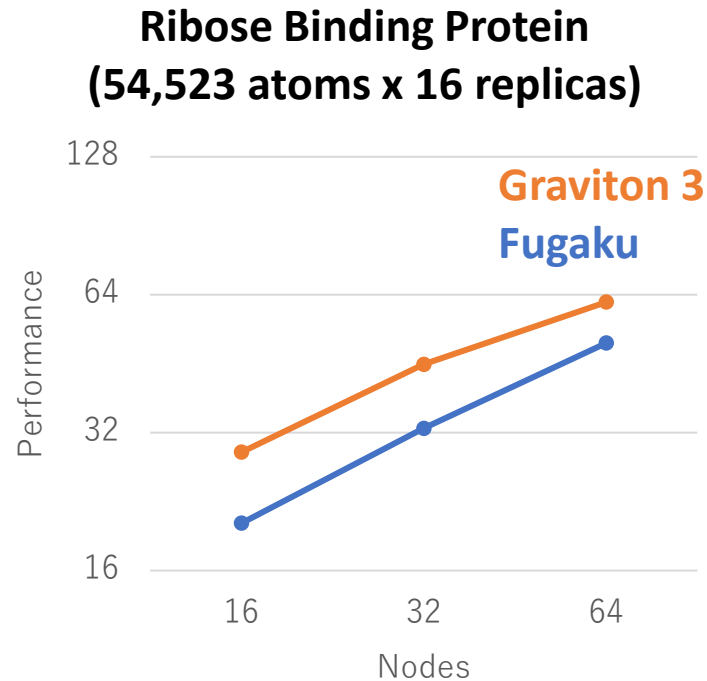


AWS Graviton3/3E (2022)
Arm+SVE CPU



String method in GENESIS (c7g.16xlarge & Fugaku)

- GitHub: <https://github.com/genesis-release-r-ccs/genesis>
- version : 2.1.0
- Benchmark set : Under construction (Same system with <https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cbrt/wp-content/uploads/2022/03/tutorial22-9.1.zip>)

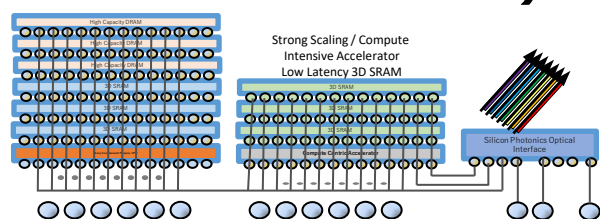


<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cbrt/tutorials2022/tutorial-9-1/>

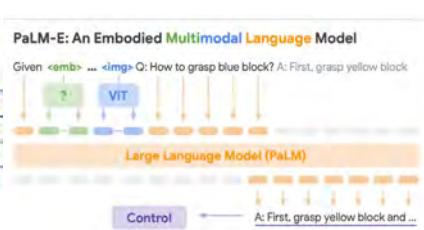
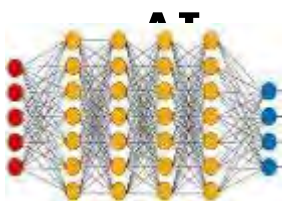
(output is included)

MTS ($\Delta t=2.5\text{fs}$, long interaction 5fs)

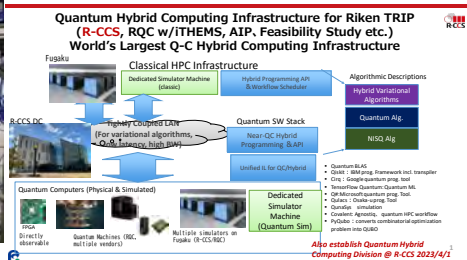
● 高性能計算の科学 Science **of** High Performance Computing (towards 'Zettascale')



● 高性能AIの科学 Science **of** High Performance

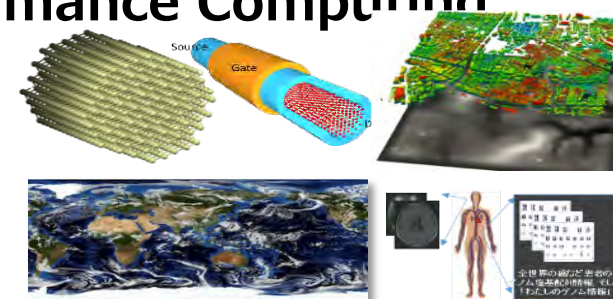


● 量子-HPCハイブリッド計算の科学 Science **of** Quantum-HPC Hybrid Computing

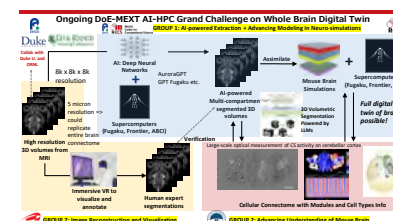


● 高性能計算による科学 Science **by** High Performance Computing

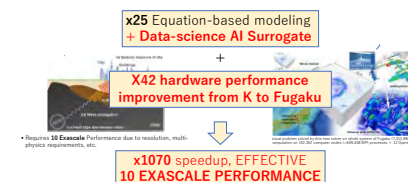
● :



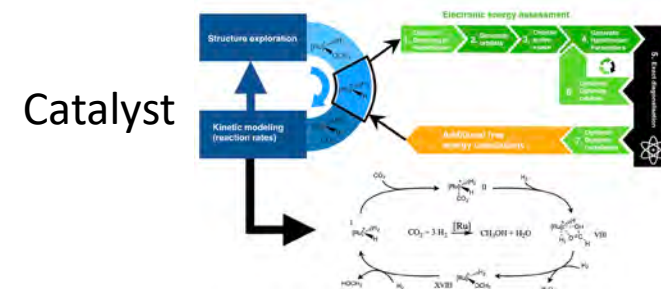
● 高性能AIによる科学 Science **by** High Performance AI (AI for Science)



Generalizable New Algorithm with Integration of HPC & AI for Earthquake Simulation to achieve effective 10 Exascale performance on Fugaku [Ichimura et al.] (Towards Effective Zettascale)



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



AI for Science を巡る動きと富岳

(Science of AI=AI自身の深化研究、とは異なる)

- AI for Scienceは科学の在り方を根本的に変える可能性→物理シミュレーションに加え、莫大なAIの高度学習が必要
- 近年、シミュレーションを模倣するサロゲートAIや、Chat GPTに代表される生成系AI・大規模言語モデルの爆発的進化
今後、それらが言語や画像といった単一情報だけでなく、より人間に近いアウトプットの創出、
多様かつ膨大な情報（マルチモーダル）の同化・活用・同化など、さらに技術が高度化し困難な科学問題の解決へ適用



将来は、**AI for Science**, 特に高度化した**AGI***により、**本質的な科学的な発見とイノベーションの達成が行われるなど、科学分野や産業分野をはじめとするあらゆる分野で大きな変革が進む可能性**

* 汎用人工知能 : Artificial General Intelligence

- 国際的には、**AI for Scienceの研究開発の動きは始まっているが、我が国は遅れている**
(米国DOE：大規模なサロゲート構築や、一兆規模のパラメータの科学分野用の大規模基盤モデル学習を保有するエクサスケールスパコン上で遂行など、次世代のAI基盤モデルの開発プロジェクトをスタート)
- 一方で、**AI基盤モデルの活用等を規制する声**が上がっており、**技術を保有しないと利用に制限がかかる可能性** (EUは域内のAIの利用について、一部を制限または禁止する規制案を発表。)



我が国としてAI for Science技術や基盤を持たないと、**将来、AI分野にとどまらず、科学技術・イノベーション分野全体で、我が国が世界のトップ集団から遅れる！！**
→ **「富岳」を中心としたAI for Science、それが再び戻って Science of AIのテーマにもなる**



DOEレポート

今こそ、AI for Science (AIによる科学)の研究開発の推進が必要 (Science of AI=ピュアなAI自身の深化研究、とは異なる)

我が国の現状

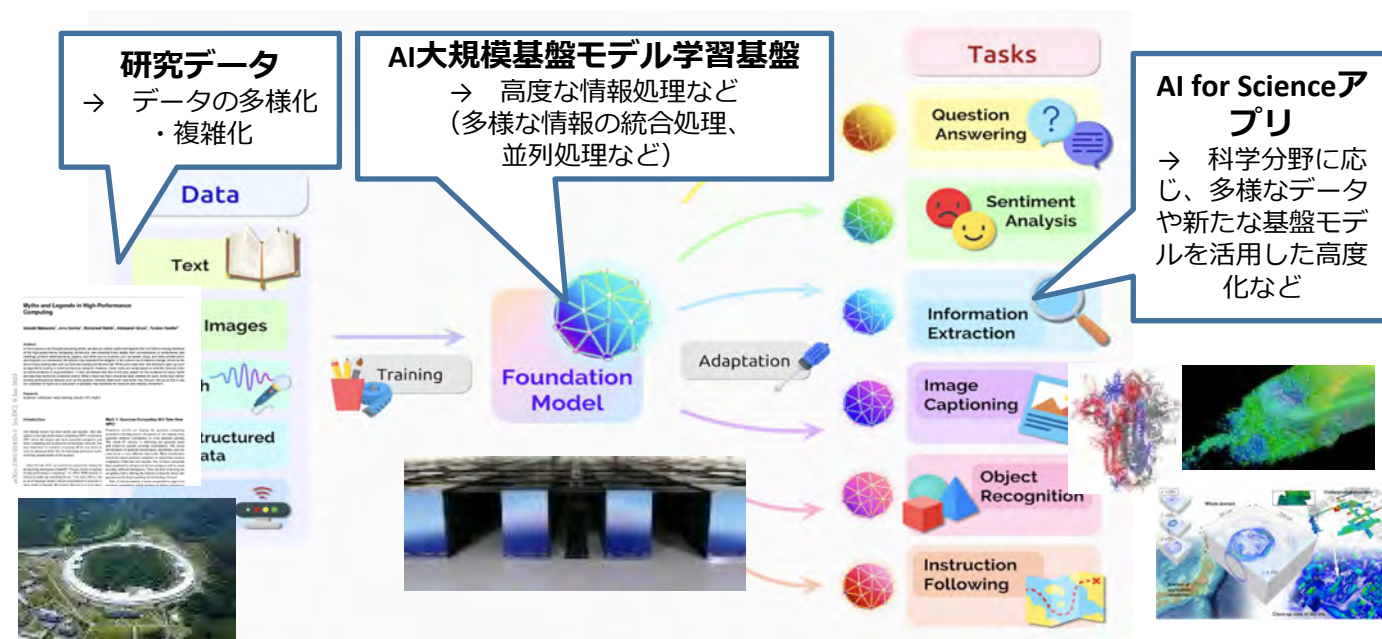
- これまで日本のAI開発では、プロンプトエンジニアリング^{注1}やAPI^{注2}の開発・発展などが主流であり、AI基盤モデルなど開発では出遅れ。
- 一方で、AI大規模基盤モデルの開発に必須となるHPCI技術（スパコン「富岳」やデジタルツイン技術など）については、現状、世界のフロントランナーの一員。また、5月に「富岳」政策対応利用課題で、東京工業大学、理化学研究所をはじめとする6機関・企業で「富岳」を活用した大規模言語モデルのための基盤モデルの構築に向けた研究を採択

注1：プロンプトエンジニアリングとは、言語モデル（LMs）を効率的に使用するためのプロンプトを開発および最適化する技術

注2：API（アプリケーション・プログラミング・インターフェース）とは、ソフトウェアの一部機能を共有する仕組みのことを指し、具体的にいうと、「機能の一部を公開しているソフトウェア」と「公開された機能を使いたいソフトウェア」をつなげるインターフェースのこと。

我が国がAI開発に必要なとなるHPCI技術に強みを持っているうちに、産官学の関係者が連携して、AI for Scienceに活用できる次世代の大規模モデル(サロゲート、言語モデル等)の研究開発に着手することが急務（米国との協力可能性も視野に）

理研TRIPに習い、①研究データ、②AI大規模学習基盤、③AI for Science手法・アプリを連結・連携させた研究開発と、多様化・複雑化するデータ群や情報処理等に対応できる「重いAI」の開発を、「富岳」を活用して取り組むことが鍵！！



理化学研究所は、世界トップレベルのスパコン「富岳」はもちろんのこと、HPCIやAPIをはじめ必要となる多様な技術の研究開発のリソースや国内外の研究ネットワークを有している

→ R-CCSでは、「富岳」開発や利用等で得られた知見を活かして、上記の問題解決に向けて、TRIPプロジェクトなどで中心的な役割を果たす

富岳でのAI for Science 基盤技術・構築研究

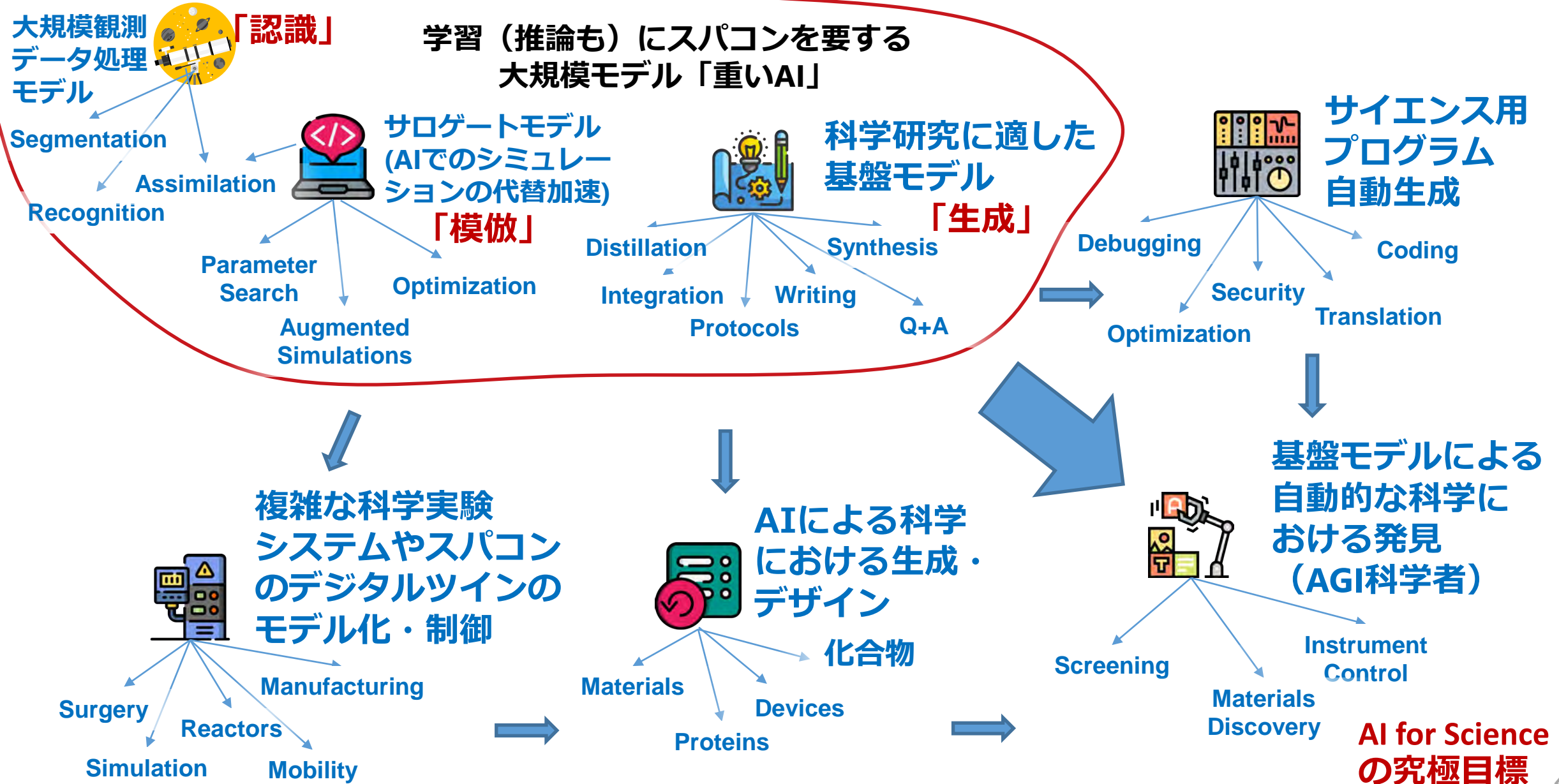
DL4Fugaku (富岳/Arm用深層学習加速ライブラリ)

MLPerfHPC (富岳上の10万ノード規模イェンス学習)

GPT Fugaku 最新の言語基盤モデル学習プロジェクト

富岳でのAI for Science応用研究：AI/HPC創薬基盤、AI・HPC融合の自動車などの工業デザイン最適化、AI・HPC融合でのペロブスカイト太陽電池や高耐熱ポリマーデザイン、等多数

スパコンによるAI for Scienceのイノベーション





Generalizable New Algorithm with Integration of HPC & AI is developed to achieve effective 10 Exascale performance

同様の手法で富岳NEXT世代
ではゼータ(Zetta)スケールを
目指せる



富岳時代：BD・AI・シミュが融合し数百万の候補から高い変換効率を持つ正孔輸送材料を設計



44

Development of NN for High-resolution, Real-Time Tsunami Flood Prediction (Fumihiko Imamura group [1])-Surrogates

- Tsunami simulations to generate training data
 - Training Input data: Tsunami waveform in offshore areas
 - Training Output data: Flooding conditions in coastal areas
- Training an AI model to predict flooding condition in coastal areas from Tsunami wave format in offshore
 - This approach makes it possible to accurately and rapidly obtain detailed flooding forecast before landfall of Tsunami

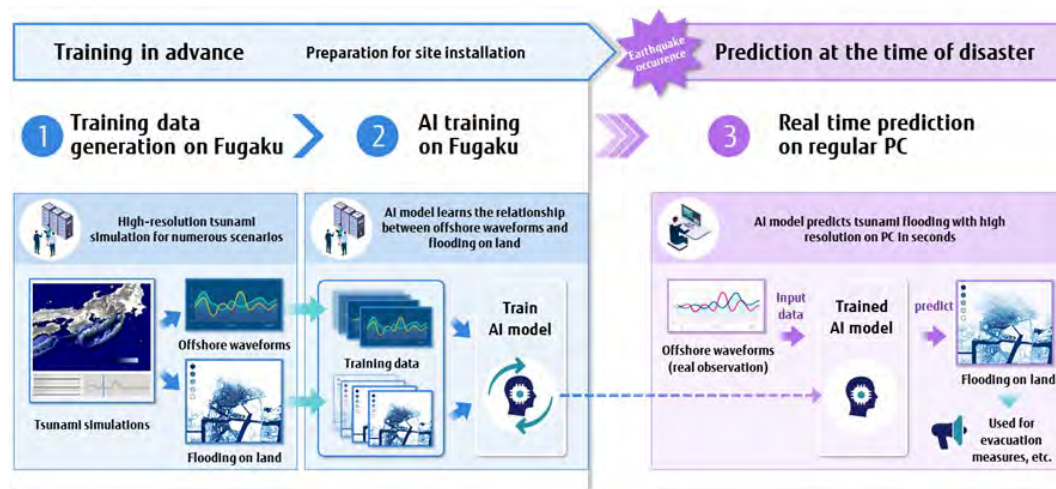


Fig. 1 Overview of tsunami prediction with AI

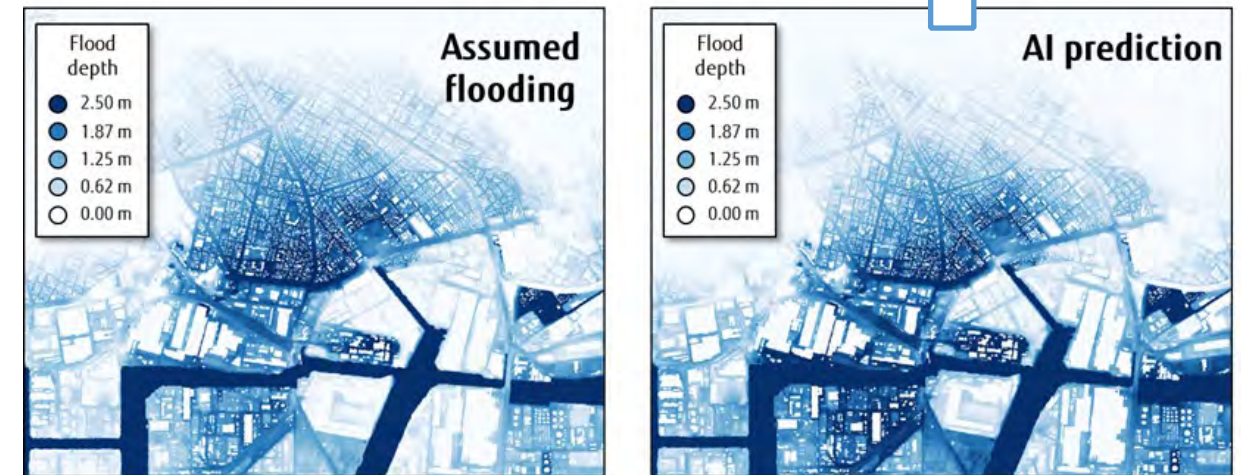


Fig 2. Comparison between anticipated flooding (tsunami source model created by Cabinet Office of Japan with tripled wave heights) of Nankai Trough Megathrust Earthquake and prediction results of newly developed AI

デザインと空力性能の両立が求められる車体外形の設計

- 購買者がクルマに求めること
 - 燃費の良さ・外装デザインがTop10入り



- クルマの“外形”は、双方に影響
 - 空気抵抗 → 燃費
 - 様々な形の特徴 → デザイン

→ 性能両立のための擦り合わせの苦勞



自家用車を持っている 20 歳～69 歳のドライバー 1,000 人に聞いた「クルマ選びとクルマの利用に関する調査 2021」, (株) ホンダアクセス プレスリリース, 2021年3月16日



プロポーション



サーフェストラクチャ (面構成)

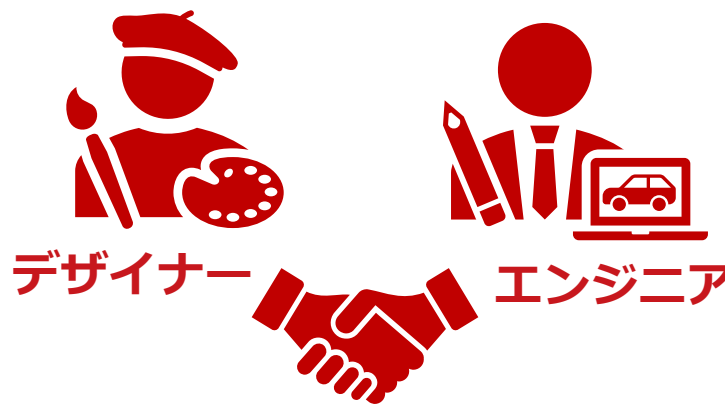


フォルム

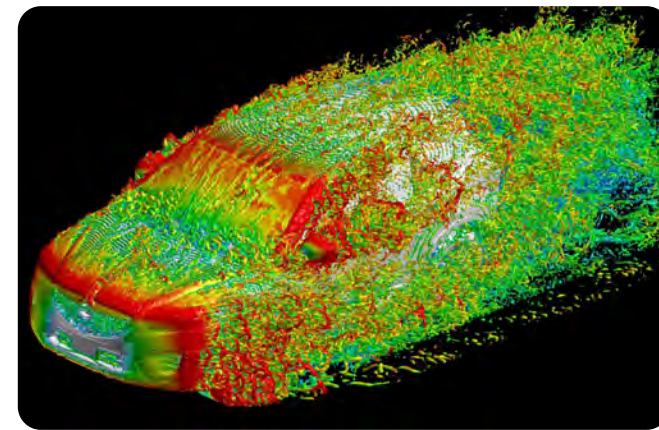


ディテール

車体外装のデザイン要素

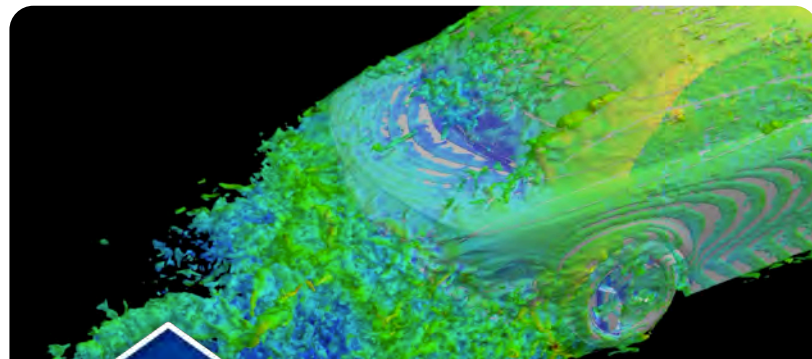


空気抵抗係数 $C_D = \frac{F_D}{\frac{1}{2} \rho U^2 A}$



車体周りの流れ

● デザイン性を考慮した空力最適化フレームワーク



スーパーコンピュータ“富岳”

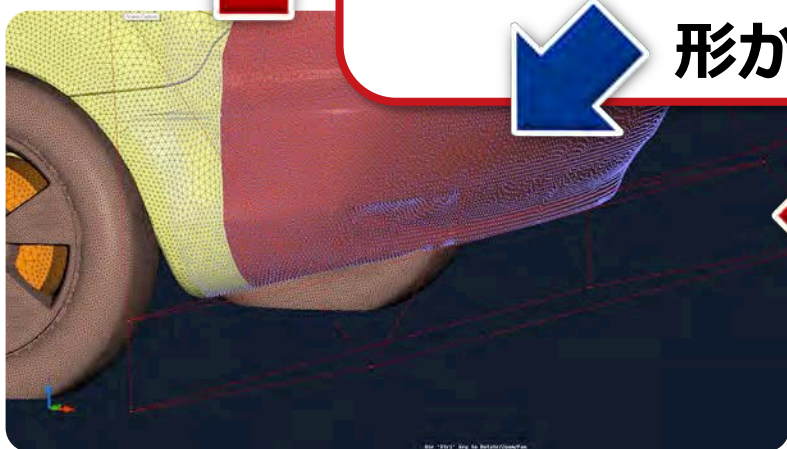
形状データ

超高速な性能予測

AI (機械学習) による予測評価技術の導入

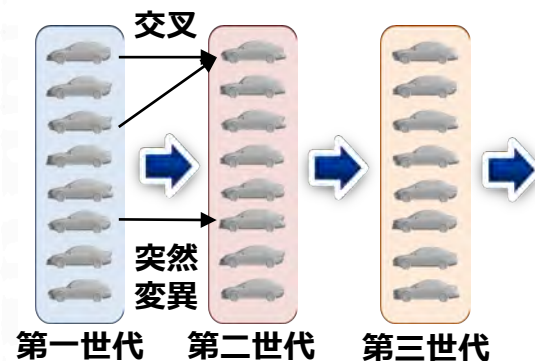
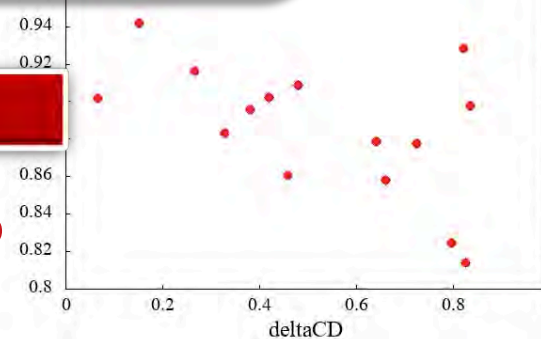
形から受ける印象の評価

空力性能 + デザイン性



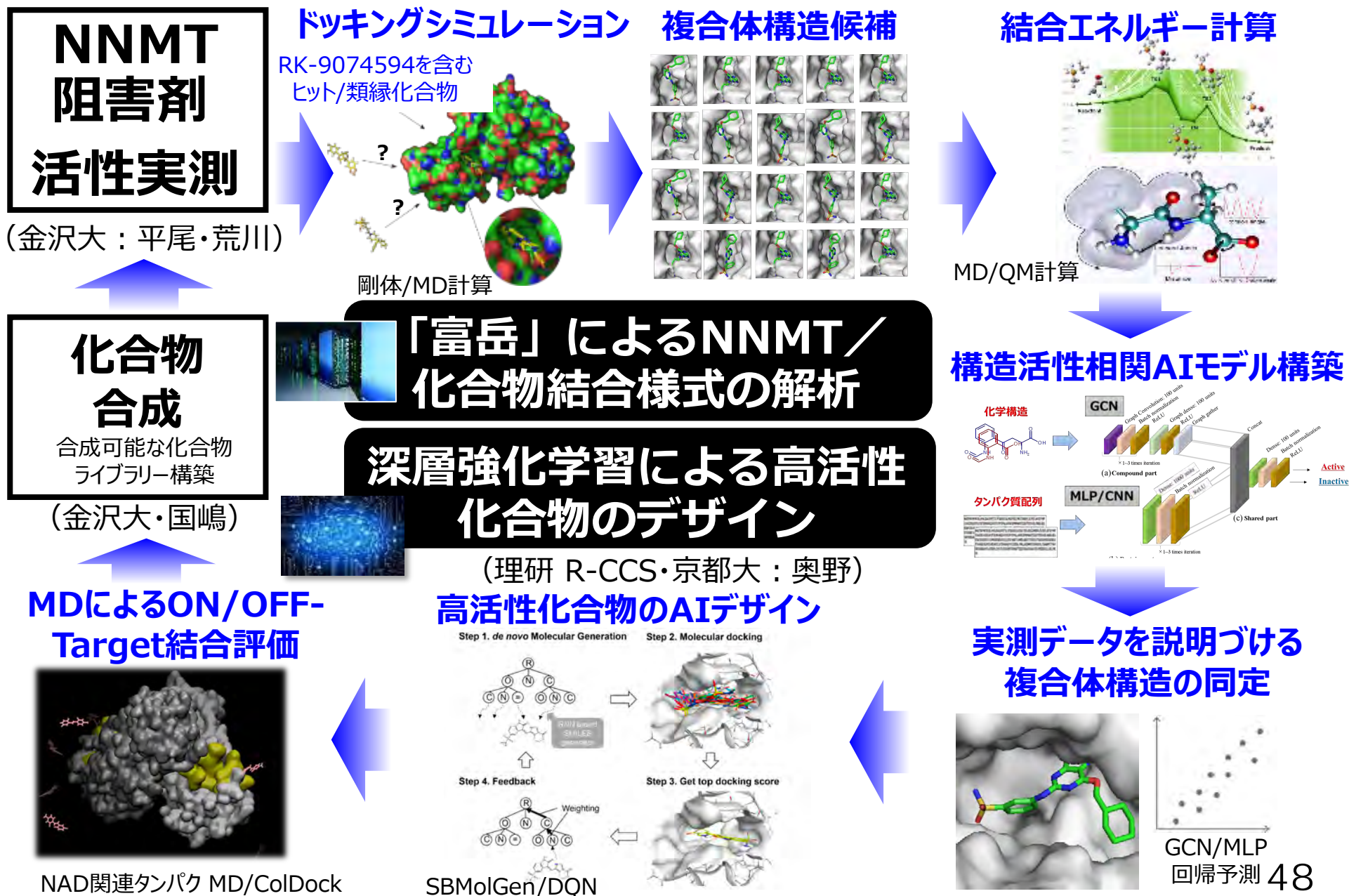
パラメトリックな形状モーフィング

デザイン性に関する
形状パラメータ

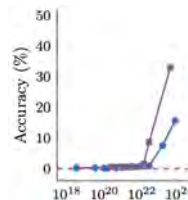


多目的進化アルゴリズム “CHEETAH/R”

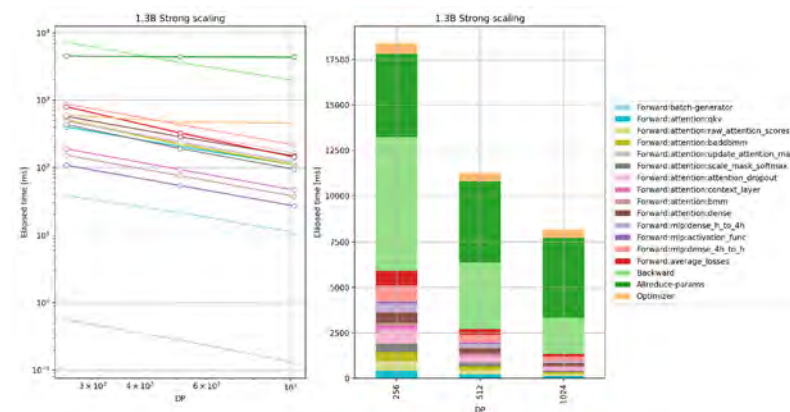
創薬における生成系AI for Science : 「富岳」によるシミュレーション×AI創薬



GPT-Fugaku Team → NLP



Horizontal Scaling



DL4Fugaku Team @R-CCS

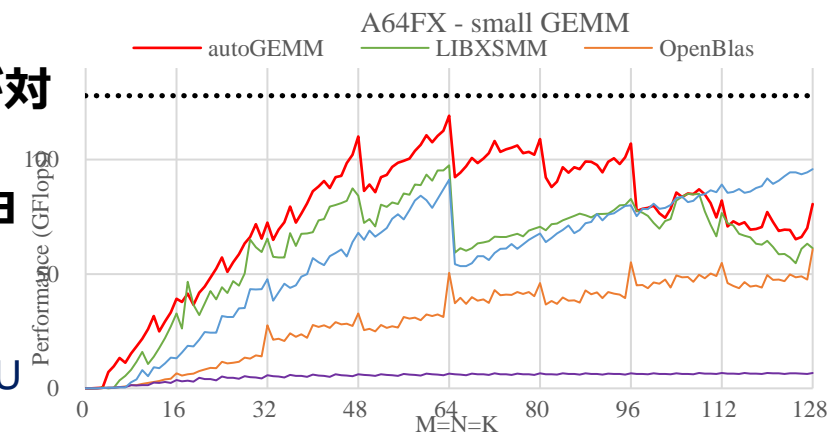
DL4Fugaku Team @ R-CCS



Satoshi Matsuoka

1000万ノード時間級でGPT3.5
相当の学習は可能に

Vertical Scaling



DL4Fugaku Team @LLNL/Fujitsu

DL4Fugaku Team @ LLNL



Fujitsu



→ 「富岳」政策枠で文科省が対応
(富岳のトップシミュレーションの数倍~数十倍の計算量)

And many others in the superteam of Japan and friends..... (Cornell U, Tohoku-U various companies)

大規模LLM学習を可能にするには、スパコンにおける大規模並列のテクノロジーやその経験と、DNN特にTransformer系の大規模並列化固有の問題に対する技術、更には自然言語学習に関する多くの研究上の知見・経験が必要

研究の背景：3次元構造のマルチモーダル生成基盤AI

- 3次元構造の生成AI研究の活発化

- StableDiffusionのような画像生成AIだけでなく、テキストから3次元形状を生成するAIも2022年以降、続々と登場。
- ShapeNet等の3次元形状とテキストのデータセットを、確率的深層生成モデルに学習させたもの。
 - 自然言語・画像・動画に比べて、**3次元形状のデータセットは圧倒的に少ない。**
 - **構造力学的設計に応用可能なデータセットは未だ提案されていない。**



DreamFusion by Google
(2022年9月)



Magic3D by NVIDIA
(2022年9月)



"a corgi wearing a red santa hat"



"a multicolored rainbow pumpkin"



"a 3D printable gear, a single gear 3 inches in diameter and half inch thick"

Magic3D by NVIDIA
(2022年9月)



基盤生成モデルによる次世代BEVの構造最適化[西口ら]

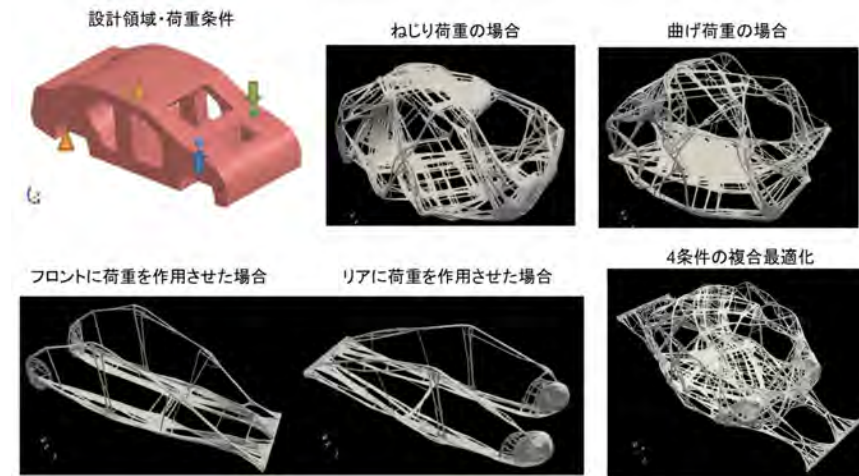
- ギガキャスティングに基づく次世代BEV構造の衝撃
 - SpaceX社の冶金技術（アルミニウム）を活用したTesla社のギガキャスティングの登場により、**従来の50%のコストで車体構造の製造が可能となった。**
 - 2022年、NIOやXPeng等の中国を代表するBEVメーカーに加えてボルボ社も、ギガキャスティングの採用を発表。2023年6月、トヨタ自動車もギガキャスティングの採用を発表。
 - 幾何学的自由度が高い構造設計が可能
 - トポロジー最適化は、線形弾性体かつ微小変形の問題にしか適用できない。つまり、**クラッシュブル・ゾーン（車体前方部・後方部）の最適構造を探索するのは現状では困難。**



テスラのギガキャスティング構造
(アルミニウム)



テスラのギガキャスティング装置
(アルミニウムのダイキャスト装置)



CUBEによる線形トポロジー最適化
(剛性最大化)

LLMベースのAGIによる共同研究者としてのAGI科学者

- 2023年4月のBabyAGIの開発・公開に端を発して、GPTを利用したAGIの開発がOSSコミュニティを中心に急速に進んでいる：BabyAGI, AutoGPT, AgentGPT, GoalGPTなど
 - ゴールを与えるだけで、GPTが自動的にWebなどをサーチ、評価して、新たなゴール生成を繰り返す
- AGI科学者：これを応用し、高度な基盤モデルを用いて、科学の探求プロセスをAIが行う試みがはじまっている。例： **Emergent autonomous scientific research capabilities of large language models**: <https://arxiv.org/abs/2304.03442>
- 例えば、あるテーマに関し、過去の文献を調べ、新たな仮説や理論を立て、スパコンのシミュレーションでそれらを検証し、その結果を評価し、理論を修正して新たなシミュレーションを行う、という一連の人間の科学者が行うプロセスを、基盤モデルがすべて自動化する。その場合、スパコンの単一のシミュレーションではなく、複数の基盤モデルAIが複雑な研究ワークフローにリアルタイムに絡む必要があり、基盤モデルスパコンと物理シミュレーションスパコンは密結合されている必要がある。

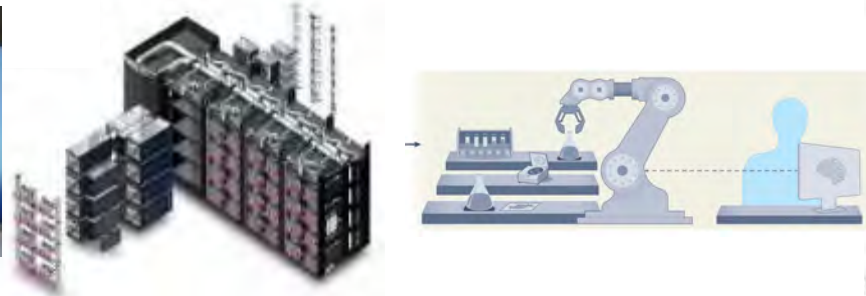


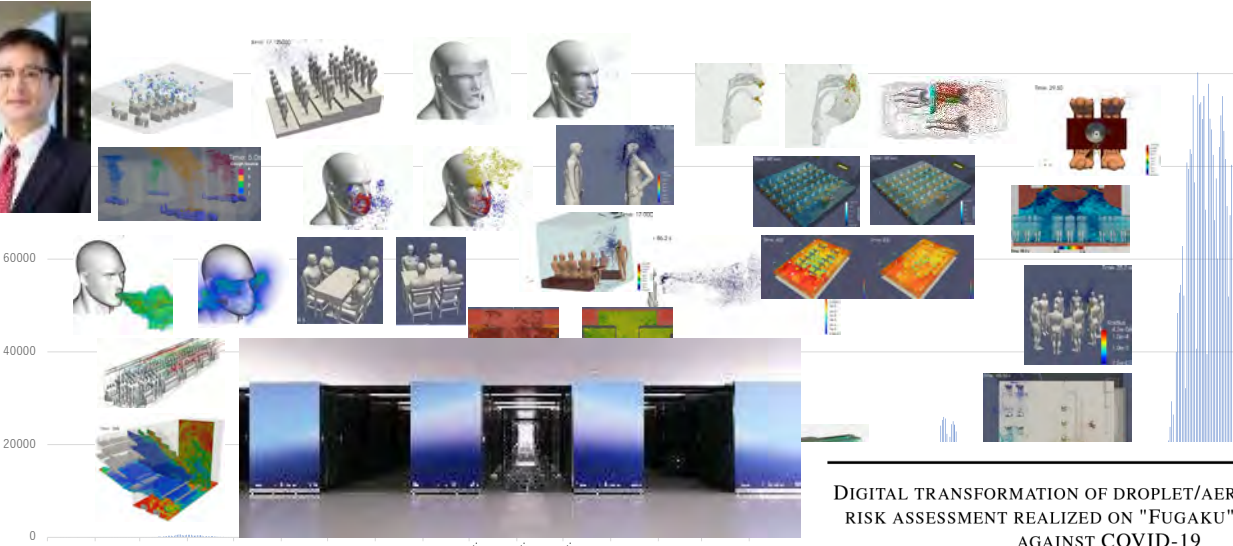
Figure 1. Overview of the system architecture. The Agent is composed of multiple modules that exchange messages. Some of them have access to APIs, the Internet, and Python interpreter.

AGI科学者に向けて：富岳COVID-19飛沫感染シミュレーション研究のChatGPT4による再現 (プロンプトのみによる実験)

COVID飛沫感染デジタルツイン：「富岳」による高精度・高速・多 ケース解析、我が国の感染拡大抑制に大いに貢献

<https://arxiv.org/abs/2110.09769>

注：最初のプリプリントが公開されたのは2021年10月なので、GPT4の学習対象にはなっていない筈



DIGITAL TRANSFORMATION OF DROPLET/AEROSOL INFECTION RISK ASSESSMENT REALIZED ON "FUGAKU" FOR THE FIGHT AGAINST COVID-19

Kazuto Ando* RIKEN Center for Computational Science, Japan kazuto.ando@riken.jp	Rahul Bale* RIKEN Center for Computational Science, Japan rahul.bale@riken.jp
ChungGang Li* RIKEN Center for Computational Science, Japan Kobe University, Japan chung-gang.li@riken.jp	Satoshi Matsuoka* RIKEN Center for Computational Science, Japan Tokyo Institute of Technology, Japan satoshi.matsuoka@riken.jp
Keiji Onishi* RIKEN Center for Computational Science, Japan keiji.onishi@riken.jp	Makoto Tsubokura* RIKEN Center for Computational Science, Japan Kobe University, Japan mtsuko@riken.jp

ABSTRACT

The fastest supercomputer in 2020, Fugaku, has not only achieved digital transformation of epidemiology in allowing end-to-end, detailed quantitative modeling of COVID-19 transmissions for the first time, but also transformed the behavior of the entire Japanese public through its detailed analysis of transmission risks in multitudes of societal situations entailing heavy risks. A novel aerosol simulation methodology was synthesized out of a combination of a new CFD methods meeting industrial demands, CUBE[8], which not only allowed the simulations to scale massively with high resolution required for micrometer virus-containing aerosol particles, but also extremely rapid time-to-solution due to its ability to generate the digital twins representing multitudes of societal situations in minutes not week, attaining true overall application high performance; such simulations have been running for the past 1.5 years on Fugaku, cumulatively consuming top supercomputer-class resources and the result communicated by the media as well as becoming official public policies.

Keywords COVID-19 · Computational fluid dynamics · Building cube method · Immersed boundary method · Dirty CAD · Droplet/Aerosol transmission · societal behavioral change

1 Introduction

1.1 COVID-19 Droplet/Aerosol Infection

COVID-19, initially discovered in Wuhan, China at the end of 2019, quickly spread globally and changed our lives—however, the main question of this unknown virus was its main mode of transmission. In particular, in the early stages of the pandemic, various theories existed, some extrapolated from traditional epidemiological observations, but turning out to be inconsistent; however, some in some cases, non-scientific, and sometimes such information contains from community

研究の目標を与えただけで、飛沫シミュ研究全体のアイデアやプロセスをほぼ再現し、かつ、スパコン用のシミュレーションのプログラムも自動生成

対話結果=> <https://shareg.pt/BW8IG7e>

更に最新のHPCや感染症研究のドメイン知識を入れれば、我々の研究の完全再現が可能であると確信

2021年ACM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

坪倉誠チームリーダー
理化学研究所
計算科学研究センター
複雑現象統一開放
研究チーム
(神戸大学大学院システム情報科学研究科教授)

受賞



AI for Scienceの俯瞰的ロードマップ白書の必要性

富岳(ポスト「京」) アプリケーション Feasibility Study 2012-2013から学ぶ

- <https://cs-forum.github.io/hpci-aplfs/roadmap-2014/>
- 創薬・医療、総合防災、エネルギー、社会経済科学、生命科学、物質科学、ものづくり、基礎物理などのテーマで、5-10年後に(富岳で計算パワーが100倍程度になったら)どのようなブレークスルーがあり、社会貢献をし得るかをコミュニティが執筆

計算科学ロードマップ 概要

～大規模並列計算によるイノベーションの
目指す社会貢献・科学的成果～



平成 26 年 5 月

将来の HPCI システムのあり方の調査研究
「アプリケーション分野」

**同様の分野横断のトップダウン
のAI for Science Feasibility Study
=> 富岳NEXTのFeasibility Study
の体制を直接活用が近道**

今後の計算科学が貢献しうる社会的課題

創薬・医療

画期的創薬・医療技術の創出

従来の研究

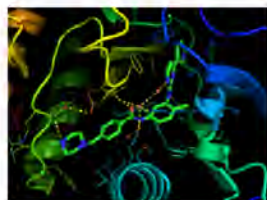
- 小規模なデータ処理
- 個別分野において固有のスケールが進展
- 単純な脳回路等のシミュラブルなモデル

今後の科学計算からのアプローチ

- DNAシーケンサーから得られる大規模データによる遺伝子ネットワーク解析
- 細胞環境下での創薬
- 幅広い時空間にまたがる階層でのモデルの連成
- モデルの大規模化・高精細化
- 詳細な脳神経回路シミュレーションとデータ同化

社会への貢献

- 個人の遺伝情報に基づき患者個々人に最適な治療法を提供するテーラーメイド医療の実現
- 新薬開発の短期化、低コスト化
- 負担が小さい治療の実現による患者の生活の質の向上、早期社会復帰による社会の活性化、医療費の低減



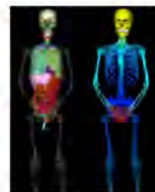
タンパク質と薬の結合



細胞環境下での創薬



臓器の精密シミュレーション(京)



全身スケールシミュレーション

今後のスーパーコンピュータがもたらす莫大な計算能力が、神経系や細胞の詳細なシミュレーション、幅広い時空間にまたがるシミュレーション、そしてそれらのリアルタイムに近いデータ同化などさまざまな面で生命分野の発展に大きく寄与することは間違いなく、ひいては画期的創薬・医療技術創出の重要な科学基盤となり得るものである。

創薬・医療分野において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ (TB)	メモリ帯域 (PB/s)	ストレージ (PB)	計算時間 (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	算術と計算手法	関連技術	備考
個人ゲノム解析	0.0054	0.0001	1.6	0.1	0.7	700000	2700	シーケンスマッピング	がんゲノム解析200,000人分のマッピングおよび変異判定	1人分の解析を1ケースとした。入力データを分割することで、総演算量での実行。前記をまたいだ実行も可能。総演算量中心のため「総演算量」は「Instruction」数とした。総演算量45.96 EFLOPとなる。
遺伝子ネットワーク解析	25	89	0.08	0.016	0.34	1000000	4300000	ベイズネットワーク推定	がんゲノム解析200,000人分のマッピングおよび変異判定	1人分の解析を1ケースとした。入力データを分割することで、総演算量での実行。前記をまたいだ実行も可能。総演算量中心のため「総演算量」は「Instruction」数とした。総演算量45.96 EFLOPとなる。
創薬などMD・自由エネルギー計算	1000	400	0.0001		0.0012	1000000	4300000	全原子分子力学シミュレーション	ケース数: 10万化合物x1000構造最適化(10万構造)	EFLOP: 数億から数千ケース同時に実行することを想定している。実行時に必要となるメモリ量、各ケースの実行の平均実行時間、メモリ量、ロード実行時間を想定。
細胞環境・ウイルス	490	49	0.2	1.2	48	10				
細胞内信号伝達経路シミュレーション	42	100	10	10	240	100				
高精度創薬	0.53	0.14	1	0.001	1	100				
バイオデバイス設計	1.1	0.19	1	0.001	1	100				
血液シミュレーション	400	64	1	1	170	10				
脳神経シミュレーション	380	460	54	64	240	10				
脳神経シミュレーション(ヒト全脳網膜モデル)	8.9	7.6	96	3900	0.28	100	700	単一コンパートメントモデル・シナプス可塑性・通信	1000個ニューロン・ニューロンあたり1万シナプス・10'Setpoint	ネットワークのボトルネックはレイテンシー
脳神経シミュレーション・脳全脳網膜モデル・神経回路パラメータ推定・生体実験とシミュレーションの連成	71	60	0.2	20	28	20	140000	マルチコンパートメント・局所クラシカル・シナプス伝達・通信的アルゴリズム	1000個ニューロン・10'Setpoint・100世代	100MB/5程度の外部との通信も想定

参考: DOEの最新レポート



分野の主要なスパコン上のシミュレーションのアプリケーションプログラムに関し、用いられるアルゴリズム、要求されるシステムのパラメタ(計算性能、メモリ帯域など)、主要なアルゴリズムなどを、フォーマットに従って記載

- **更なるAI-5.0・デジタルツインの高度化・拡大・普及を目指す基盤および技術的礎として**
 - →第一原理シミュレーション・大規模かつ「デジタルツイン」向けの柔軟なAI・リアルタイムを含む大規模データ同化をシームレスに行えるスパコンは？
 - 大規模生成系AIや量子計算との融合も見据える（理研TRIPなど）
- **我が国も関与する最先端のデバイス・パッケージングを前提**
 - 我が国の半導体戦略との整合→他省庁や米国(米国エネルギー省や産業界)との連携
- **ムーア側の減速に伴う、アーキテクチャ・アルゴリズム・ソフトウェアの変化**
 - デジタルツインの種々のシナリオ・ワークフローとの新たなコ・デザイン
- **世界のITプラットフォーム・エコシステムへの技術的訴求**
 - 世界レベルでの主要プレイヤーとのパートナーシップ(Intel, NVIDIA, AMD, HPE, …)
 - 「ベンチマーク一位」「AI(のみ)でリード」などの一点豪華主義傀儡目標は立てない

● 文部科学省「次世代計算基盤に係る調査研究」事業

- 実施期間：令和4～6年度
- 令和5年度予算額：10.2億円
(令和4年度予算額：4.3億円)
- ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤の戦略的整備に向けた調査研究→**実現可能なシステムの選択肢の提示**
 - 要素技術の研究開発（日本で開発する独自技術の特定）
 - 技術課題や制約要因の抽出

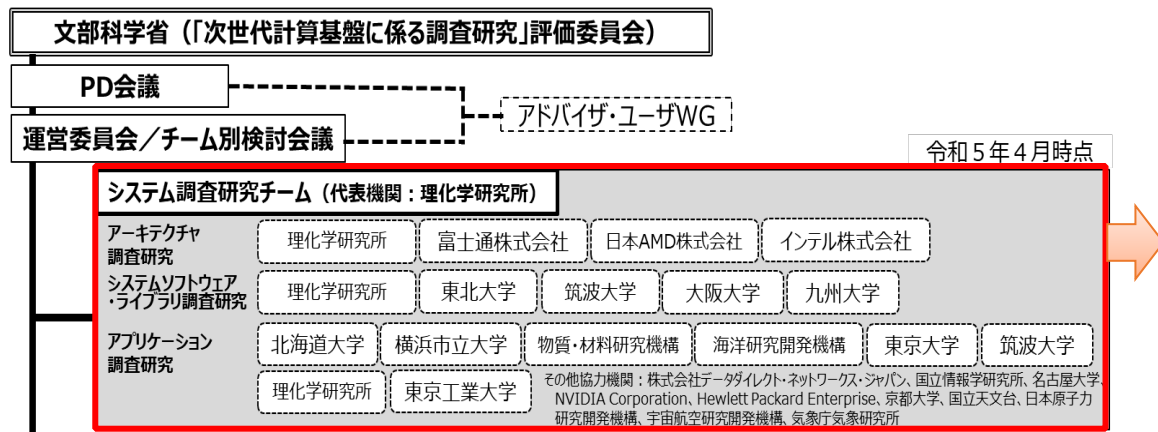
富岳Next スケジュール予測

2020 R2	2021 R3	2022 R4	2023 R5	2024 R6	2025 R7	2026 R8	2027 R9	2028 R10	2029 R11	2030 H12	2031 H12
		公募	調査研究		開発PJ (基本設計)	開発PJ (詳細設計)		開発PJ (製造・設置)			
TSMC N5		TSMC N4	TSMC N3		TSMC N2		TSMC N1.4?				
Intel 10nm		Intel7 (10nm+)	Intel 4	Intel 3	Intel 20A	Intel18A		Intel15A?			

半導体
プロセス
予測

半導体
プロセス
予測

「次世代計算基盤に係る調査研究」実施体制



富岳と異なり、当初から日米の一級のスパコンベンダーが参加→本年度にさらなる追加やDoEとの協業を検討

また、本年度中に、ある程度の候補システム(複数)の初期概要を得るのが目標

取組概要

SDGs・Society5.0の実現に向けた課題解決のためのプラットフォームとして、今後の科学に「研究DX」をもたらす**高度なデジタルツイン実現の基盤**となる汎用性の高い次世代計算基盤実現を目指し、あるべきアーキテクチャやシステムソフトウェア・ライブラリ技術について、アプリとのコデザインを通じた調査研究を行う。

電力制約の下でデータ移動を高度化・効率化する“FLOPS to Byte”指向のシステム構築を、アーキテクチャ開発からアルゴリズム設計、アプリケーション技術に至るまで実践する。

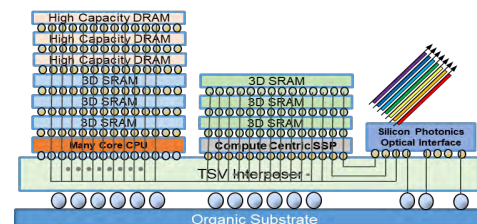
調査研究の現状

アーキテクチャ調査研究

- 複数ベンダーとシステム全体や構成要素の可能性を調査
(三次元積層メモリ技術、チップ間光接続技術など)
 - アーキ候補の抽出、ベンチマーク評価・解析を実施中
- ### システムソフトウェア・ライブラリ調査研究
- 重用システムソフトウェアの富岳へのポータリング評価を計画
(OneAPI, DAOS, Cuda Quantumなど)

アプリケーション調査研究

- アーキ評価可能なベンチマークセットを構築、将来アプリの調査
(将来的なCI/CDベンチマーキング環境構築の準備)



プロセッシングエレメントの要素技術例

Next Generation Scaling is Hard

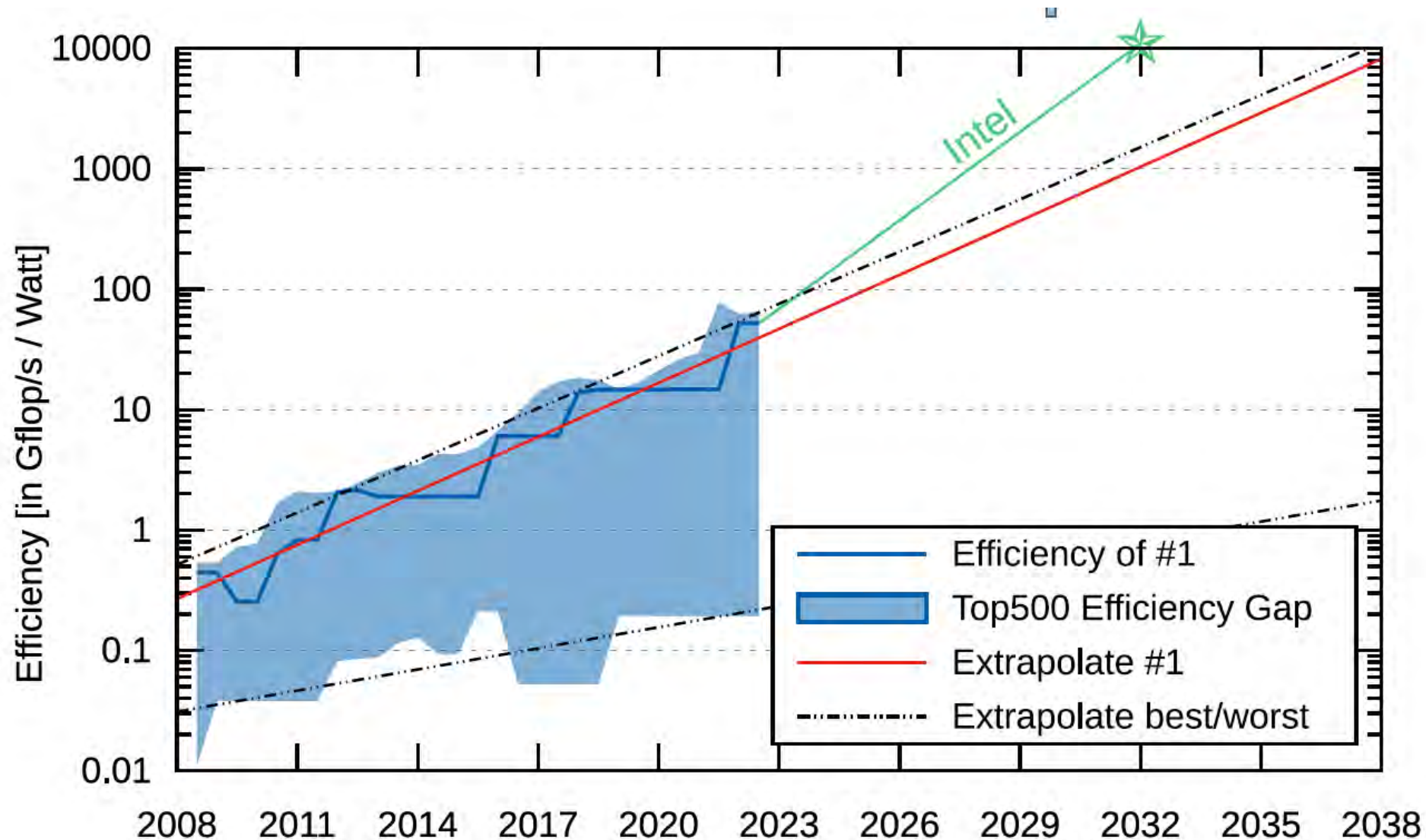
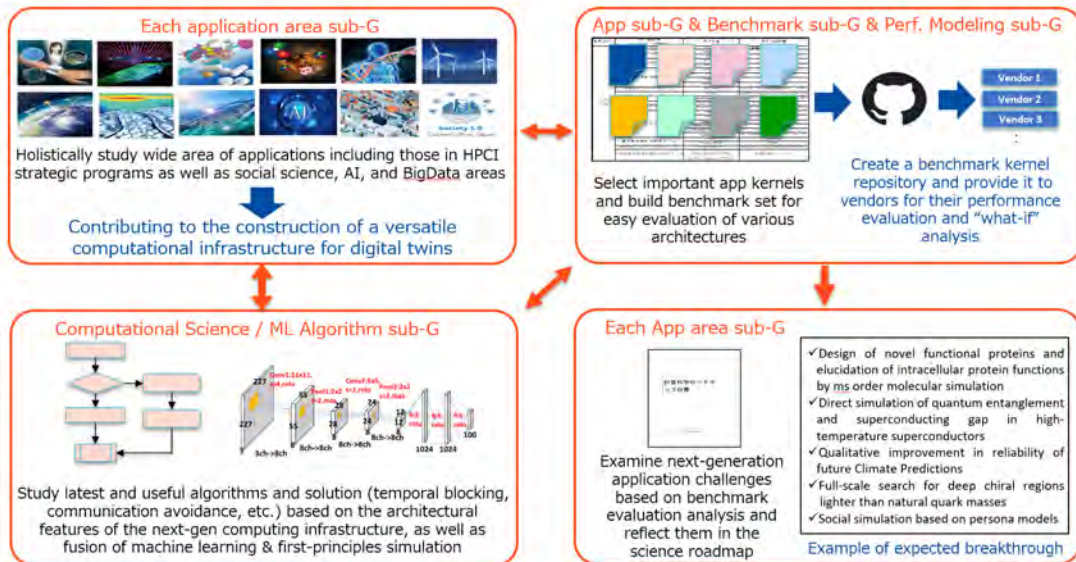


Figure 2. Historical fp64 power efficiency [in $\frac{\text{Gflop/s}}{\text{Watt}}$] extrapolated until 2038 to put Intel's zettaflop/s claims into perspective.

FugakuNEXT Plans – Breakthrough Bandwidth Monster

It's all "Applications First" - Application Research Group



Implementation Approaches for Node Architectures as Bandwidth Monster

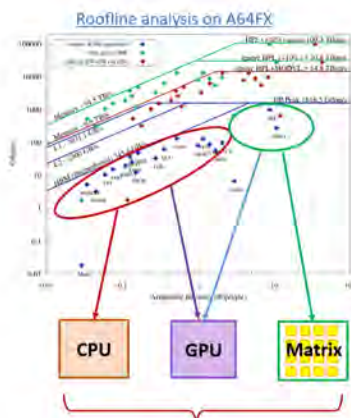
Candidates of packaging technologies

	Low	Technical difficulty	High
	Low	Power efficiency of data movement	High
chip-to-chip connection (chipslets)	Monolithic die (conventional) CPU, Acc, HBM	Chiplet-based (becoming main-stream) CPU/Acc, CPU/Acc, I/O	More aggressive chiplet-based (Future direction) HBM, CPU, Acc, HBM, HBM, Acc, Acc, HBM
3D stacking approaches	2.5D connection (conventional) HBM, CPU/Acc, HBM	3D - Hybrid Bonding (single chip stacked) HBM, CPU/Acc, 3D Memory, HBM	3D implementation (multi chips stacked) HBM, CPU/Acc, 3D Memory, HBM
Optics	AOC (conventional)	Silicon-Photonics - chip-to-chip optical connection (various technology candidates incl. WDM) CPU/Acc, Photo, CPU/Acc	

Key Research Item for Node Architecture Selection

3-D SRAM/DRAM Memory Cube[Kuroda et.al. U-Tokyo] Merits of Sliced Bread Stacking

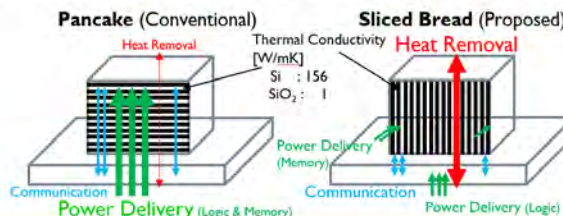
- Needs for a power-efficient compute node
→ Exploration of accelerators
 - Truly useful accelerator for HPC and AI workloads
 - HPC→Memory bound, AI→Compute bound
- Characteristics of current processing element
 - CPU: high generality, low-latency, low compute density
 - GPU (SP): vector processing, mid-high compute density
 - Matrix: dedicated for dense algebra, high compute density (ex. Tensor core, XMM, SME, AMX, TPU, CGRA, ...)
- What to study in node architecture exploration
 - What and how to integrate them
 - Effective memory bandwidth + data movement with high programming productivity



What and how to integrate them?

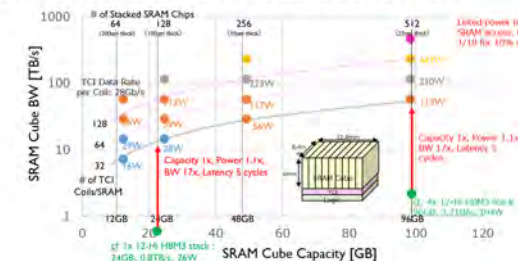
Quantitative benchmarking analyses is necessary

- As # of stacked chips increases, Pancake stacking becomes constrained by heat removal, power delivery, & communication challenges
- Sliced Bread enables more stacking, requires chip edge power delivery & communication



	Pancake (Conventional)	Sliced Bread (Proposed)
Heat Removal	High resistance through SiO ₂ (requires many thermal TSVs)	Good conductivity through Si
Power Delivery	Same path for all chips (requires large logic chip area)	Separate paths to individual chips (requires technology for delivering power from chip edge)
Communication	Bus topology ⇒ large delay, power (can use entire chip area but requires ESD)	Pt2Pt topology ⇒ small delay, power (↑ propagation across chip – ESD delay = lower cost overall)

128-Hi / 512-Hi SRAM Cube replace 1x / 4x 12-Hi HBM3 stack respectively
17x BW & 5-cycle latency at comparable capacity & power vs HBM3

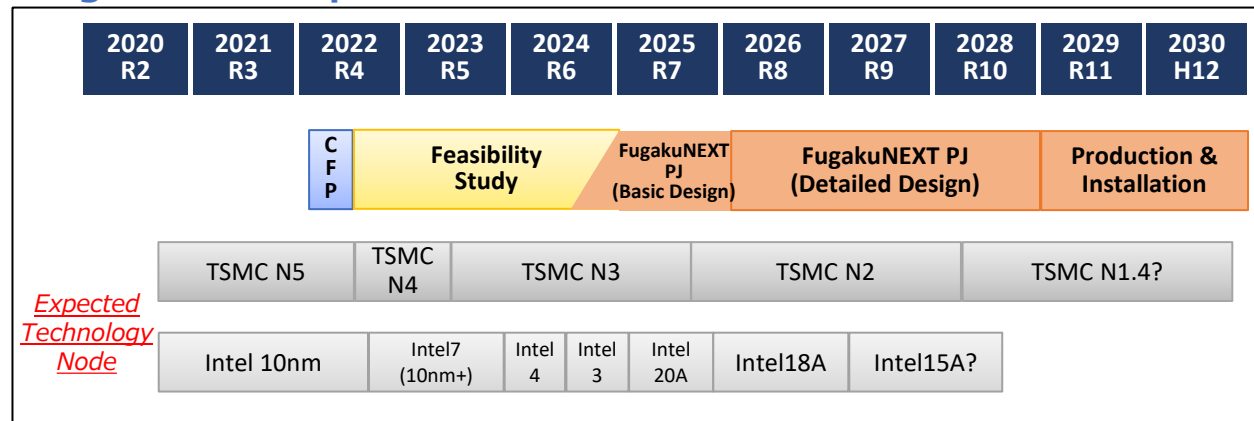


Overview of Feasibility Study for FugakuNEXT

“Feasibility Study for Next-Generation supercomputing infrastructure” by MEXT

- Period: FY2022-FY2024
- Budget: \$755K@FY2024
- Goal: **propose technology/architecture/system candidates for FugakuNEXT**
- Organization: RIKEN with multiple HPC vendors, major Universities, and National Labs in JP

FugakuNext Expected Schedule



Overview of Architecture Research

Arch research group

Coordinator: RIKEN
(GL: Sano)

Subgroup 1

RIKEN BDR
(SGL: Taiji)

Subgroup 2

Fujitsu [Co-I institution]
(SGL: Shinjo)

Subgroup 3

Intel [Co-I institution]
(SGL: Yazawa)

Subgroup 4

AMD [Co-I institution]
(SGL: Yoshida)

Subgroup 5

NVIDIA (Collaborator)
(SGL: Wells)

Subgroup 6

HPE (Collaborator)
(SGL: Negishi)

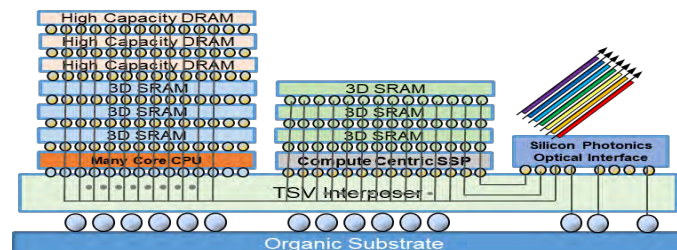
Objective

Investigating technological possibilities, finding what architectures and technologies are best and feasible, and drawing development roadmap

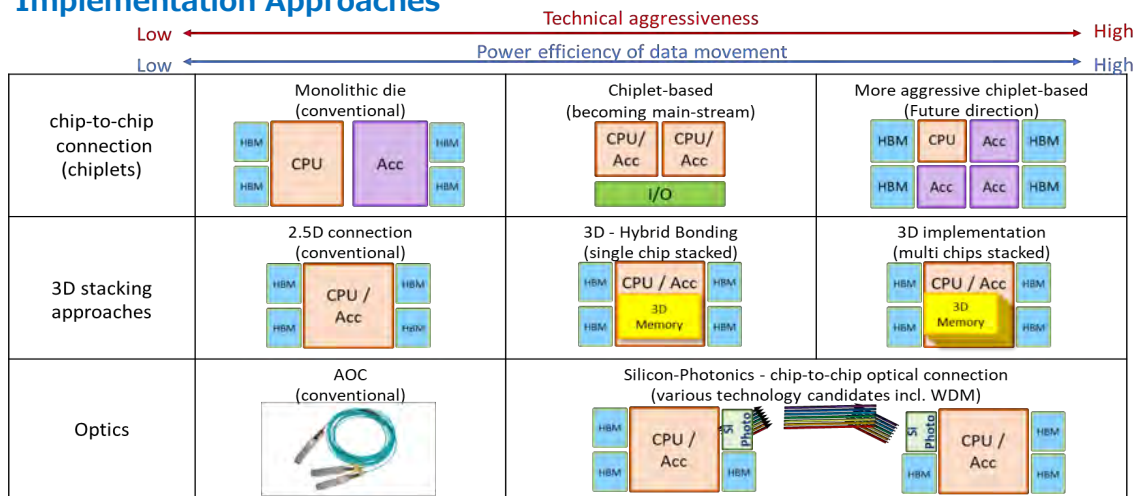
Research items

- **Studying trends in techs & architectures**
 - CMOS, packaging, Si-Photonics, etc.)
 - CPU, GPU, accelerator, memory, etc.
 - Inter connect, I/O, storage, etc.
- **Workload analysis and perf evaluation**
 - Analyze data/loop structure etc.
 - Benchmark evaluation
- **Investigating arch candidates and feasibility**
 - Examine elementary techs and initial arch.

RIKEN's strawman node architecture

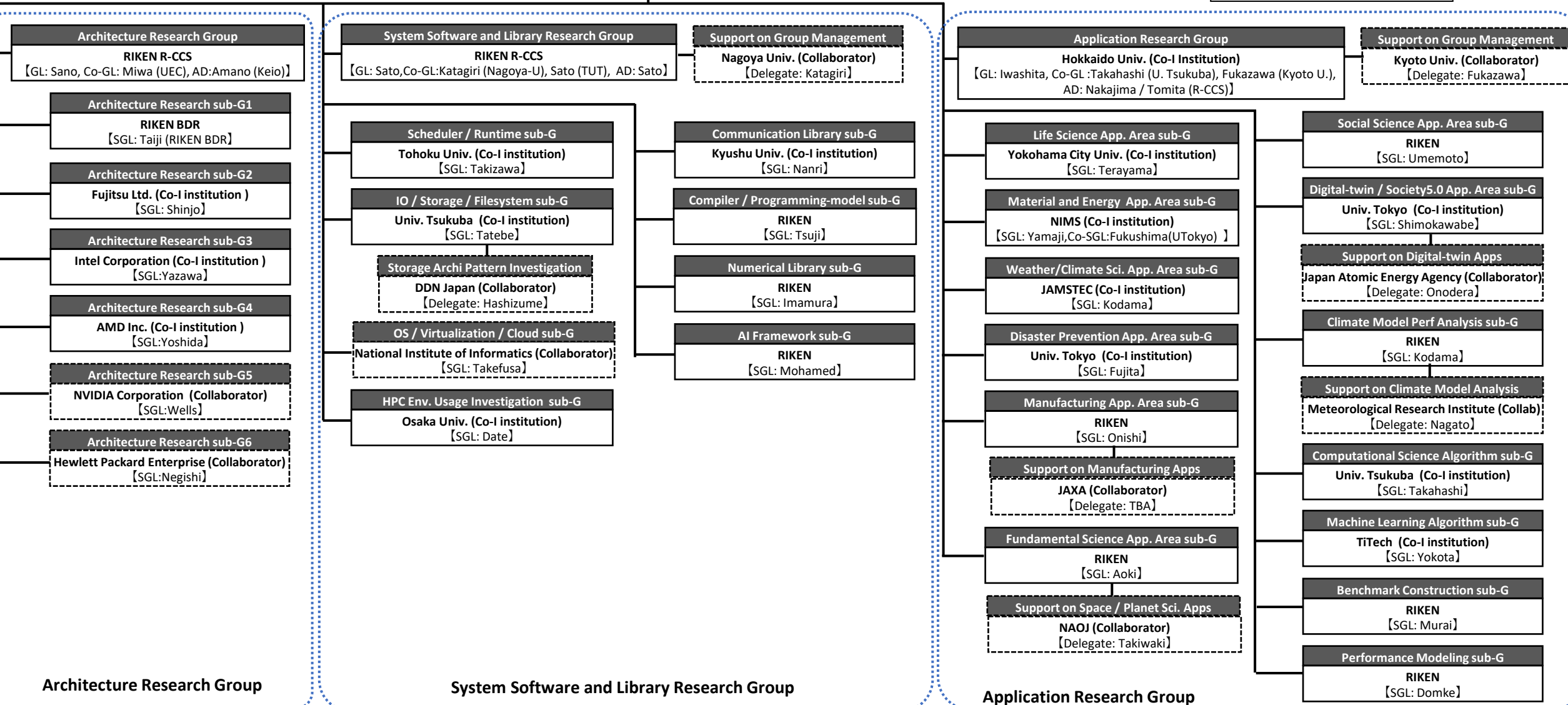


Implementation Approaches



Organization Chart of System Research by RIKEN

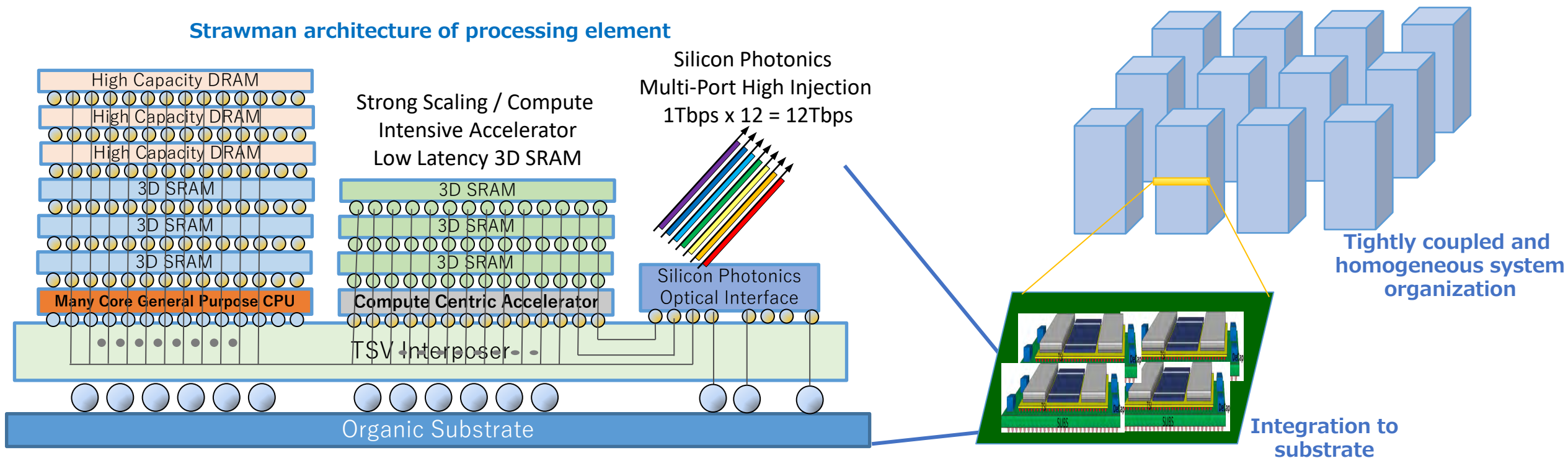
GL: Group Leader
AD: Advisor
SGL: Sub Group Leader



Initial key architectural directions

- Paradigm shift in architecture-algorithm toward “FLOPS to Byte (data movement efficiency)”
- Significant increase in relative memory bandwidth using 3D stacked memory technology
- Silicon photonics to ensure high bandwidth for remote memory accesses
- Ensure execution efficiency in strongly scaled problems with low latency execution, etc.

Strawman architecture of processing element



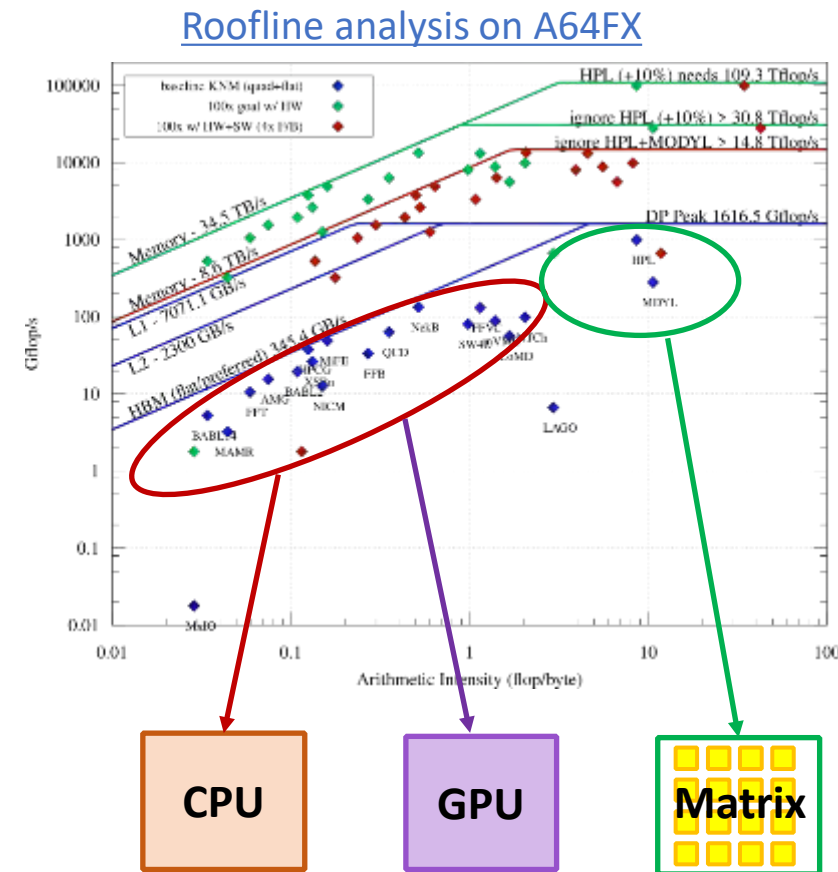
“3D stacked memory” & “Photonics” technologies: Post-Fugaku as a technology driver

Key Research Item for Node Architecture Selection

- Needs for a power-efficient compute node
→ Exploration of accelerators
- Truly useful accelerator for HPC and AI workloads
- HPC→Memory bound, AI→Compute bound
- Characteristics of current processing element
 - CPU: high generality, low-latency, low compute density
 - GPU (SP): vector processing, middle compute density
 - Matrix: dedicated for dense algebra, high compute density (ex. Tensor core, XMM, SME, AMX, TPU, CGRA, ...)
- What to study in node architecture exploration
 - What and how to integrate them
 - Effective memory bandwidth + data movement with high programming productivity

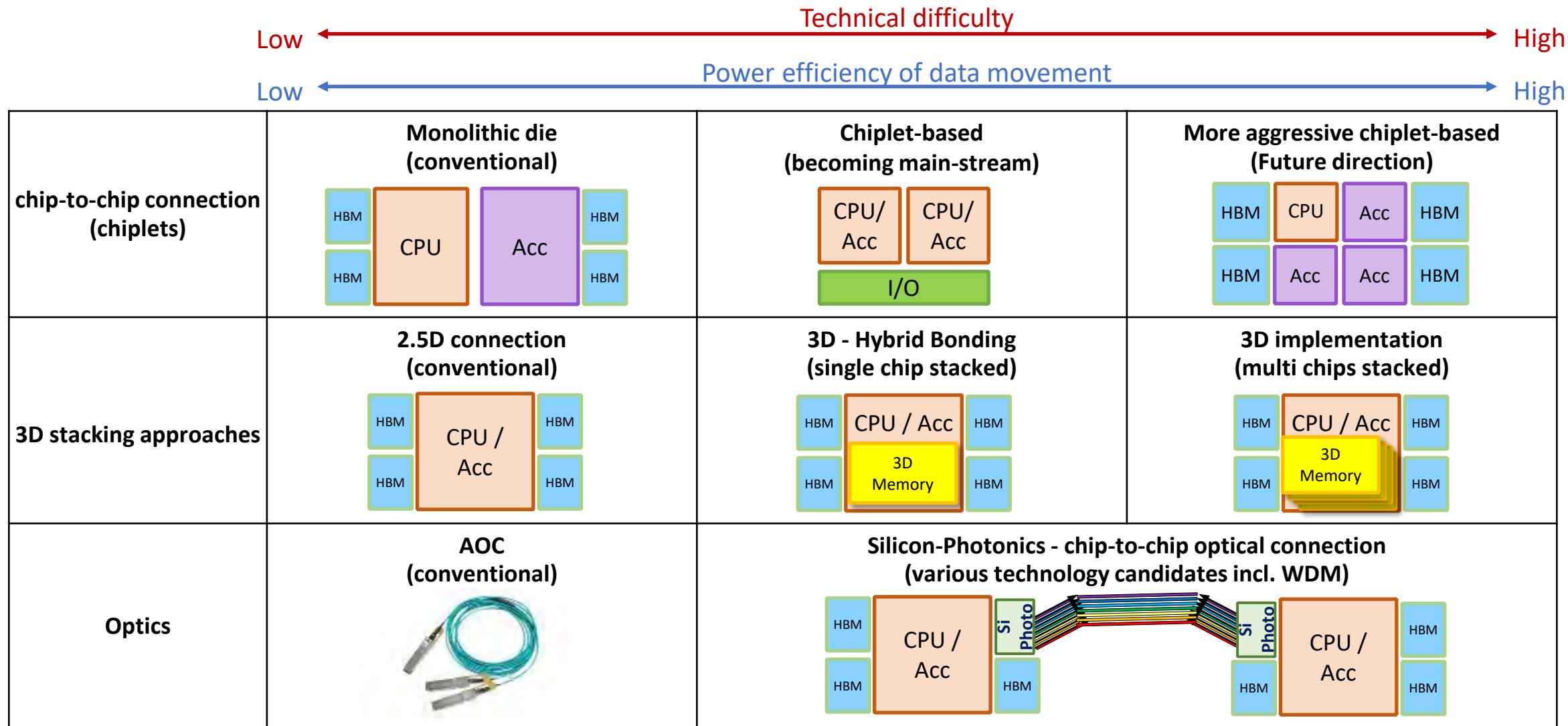


Quantitative benchmarking analyses is necessary



What and how to integrate them?

- Candidates of packaging technologies



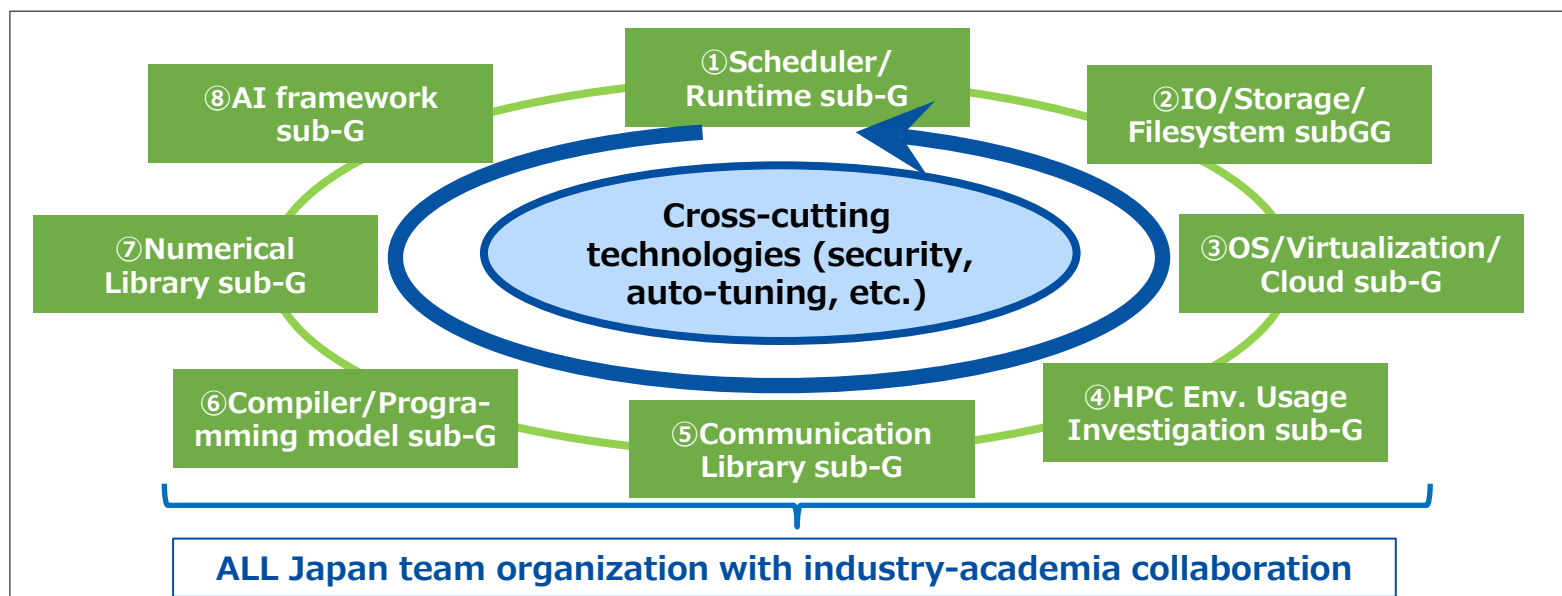
Objective and Overview

● Objective

- Investigate technological trend of system software and draw R&D roadmap based on it

● Research overview

- Item 1: Investigates System Software Trends
 - Study existing system software and future trends in terms of portability, productivity and performance
 - Study current usage status of system software in the HPCI systems and major supercomputing centers in the world
- Item 2: Collects information to decide software development strategies
 - Define strategies for software development (proprietary or open-source software?)
- Item 3: Comparison of similar software
 - Select best software and clarification of alternative software



Survey of system SW trend & draw development roadmap



Examine new system SW areas for industrialization



65

※ムーアの法則：「半導体の集積密度は18か月から24か月で倍増する」という経験則

● 2030へ向けた変遷 (Post-Mooreの入り口)

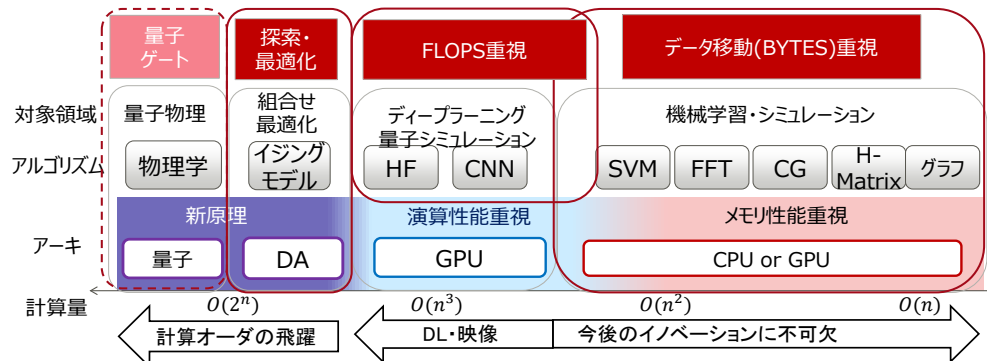
- ・ ムーア則の終焉による、演算性能の進化の終焉
- ・ 新デバイス・パッケージングによるデータ移動コストの革新的削減
- ・ アルゴリズムや利用法の進化による、計算量オーダーの削減(+データ移動の相対的な要求の増加)
- ・ BD/AI/第一原理の融合による、本誌的なデータ中心の流れ

計算の分類(領域)

2022の現状

FUJITSU

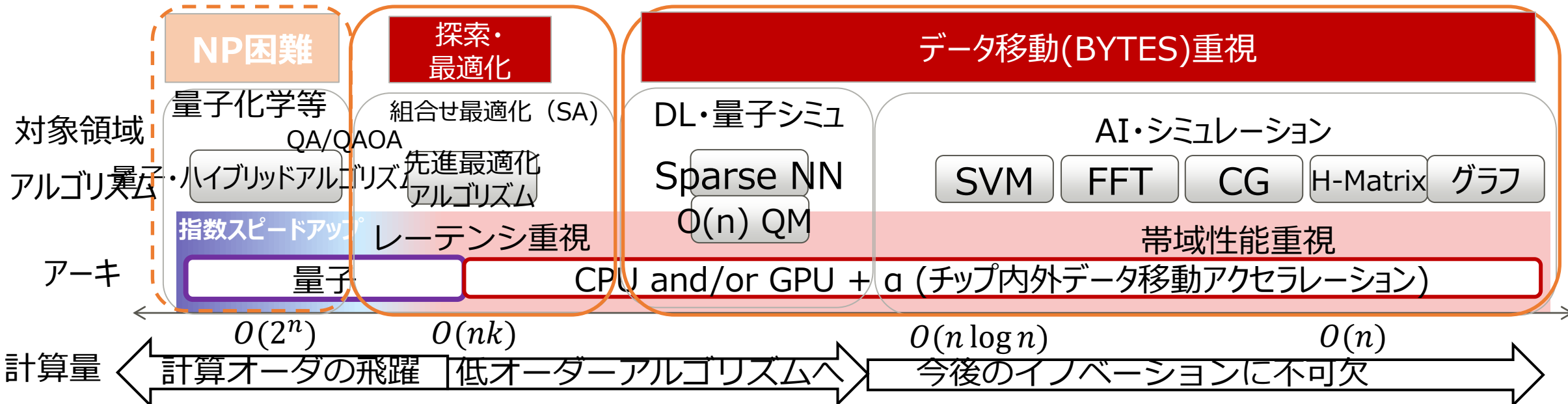
- CPUでのデータ処理におけるノイマンボトルネックの解消が課題に
- ヘテロ・特化型(=汎用CPU+特化)は使いこなしが困難



Copyright 2021 FUJITSU LIMITED

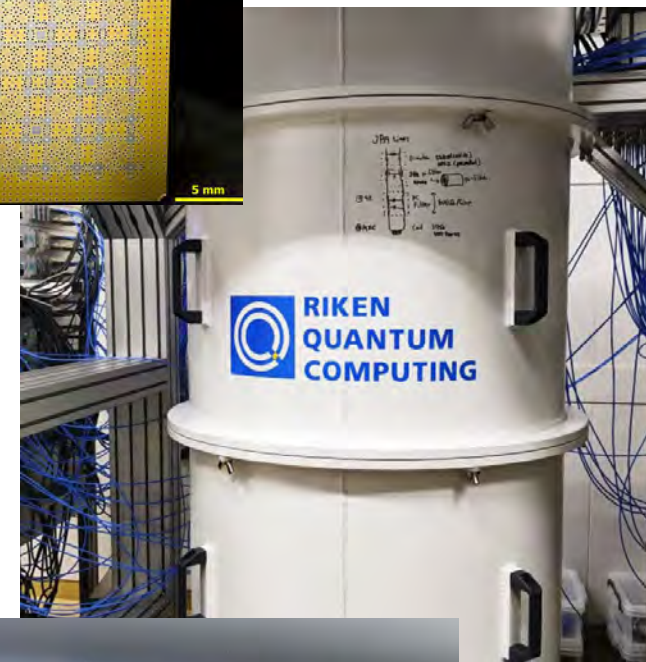
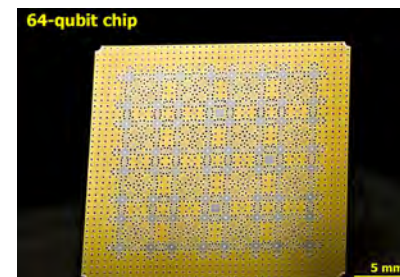
量子の未来(Hybrid)

古典の未来(Fugaku NEXT, FugakuNEXT^2)



理化学研究所における量子コンピュータ研究

- 量子コンピュータ研究センター（RQC）
 - 超電導型量子コンピュータの開発
 - オプティカル量子コンピュータ研究、理論研究のチーム
- 計算科学研究センター（R-CCS）
 - 富岳上を含む量子計算シミュレータの開発・整備
 - 量子・古典ハイブリッド計算システムの開発・整備
 - 富岳の次期システムにおける量子コンピュータ関係の技術検討
- 数理創造プログラム（iTHEMS）
 - 量子コンピュータの理論研究
 - 量子コンピュータの利用
- 革新知能統合研究センター（AIP）
 - 量子AI・最適化の研究



量子コンピュータにスーパーコンピュータ（富岳）は不可欠

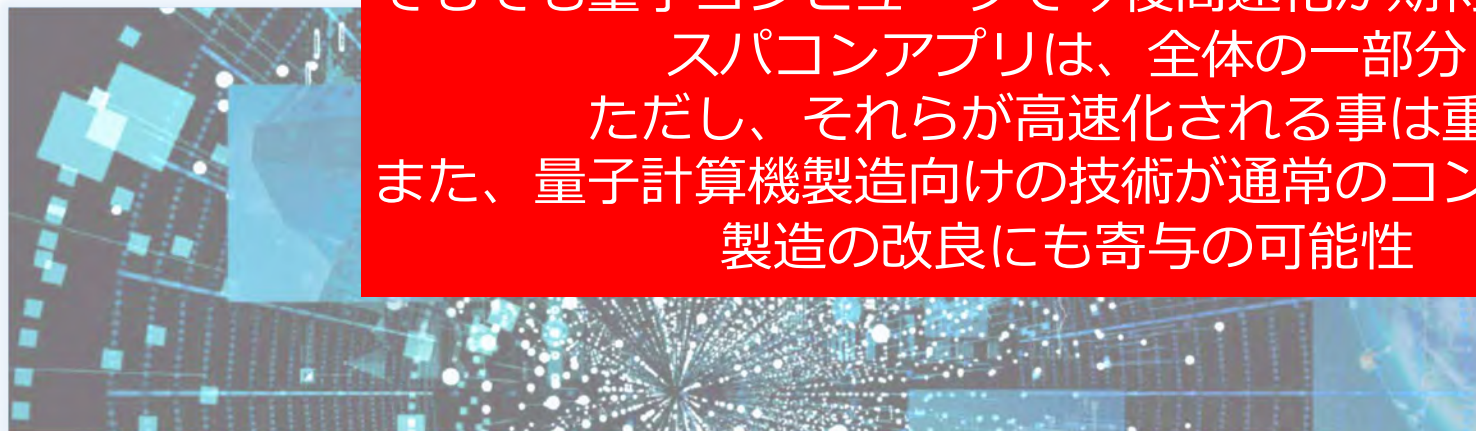


- 量子ゲート素子開発のための物理シミュレーション
 - ✓ 多くの素子開発がスパコンのMaterial Informaticsをベースに実施中
- 量子アルゴリズムのシミュレーション
 - ✓ 米国、フランスで実際にスパコン上でシミュレーションを通じ研究中
- 量子超越性を比較・検証するためのHPCI
 - ✓ Google の量子超越性の主張根拠とIBMの反証もスパコンで行われている



量子コンピュータの実現には、トップ・スパコンの開発と利用が必要

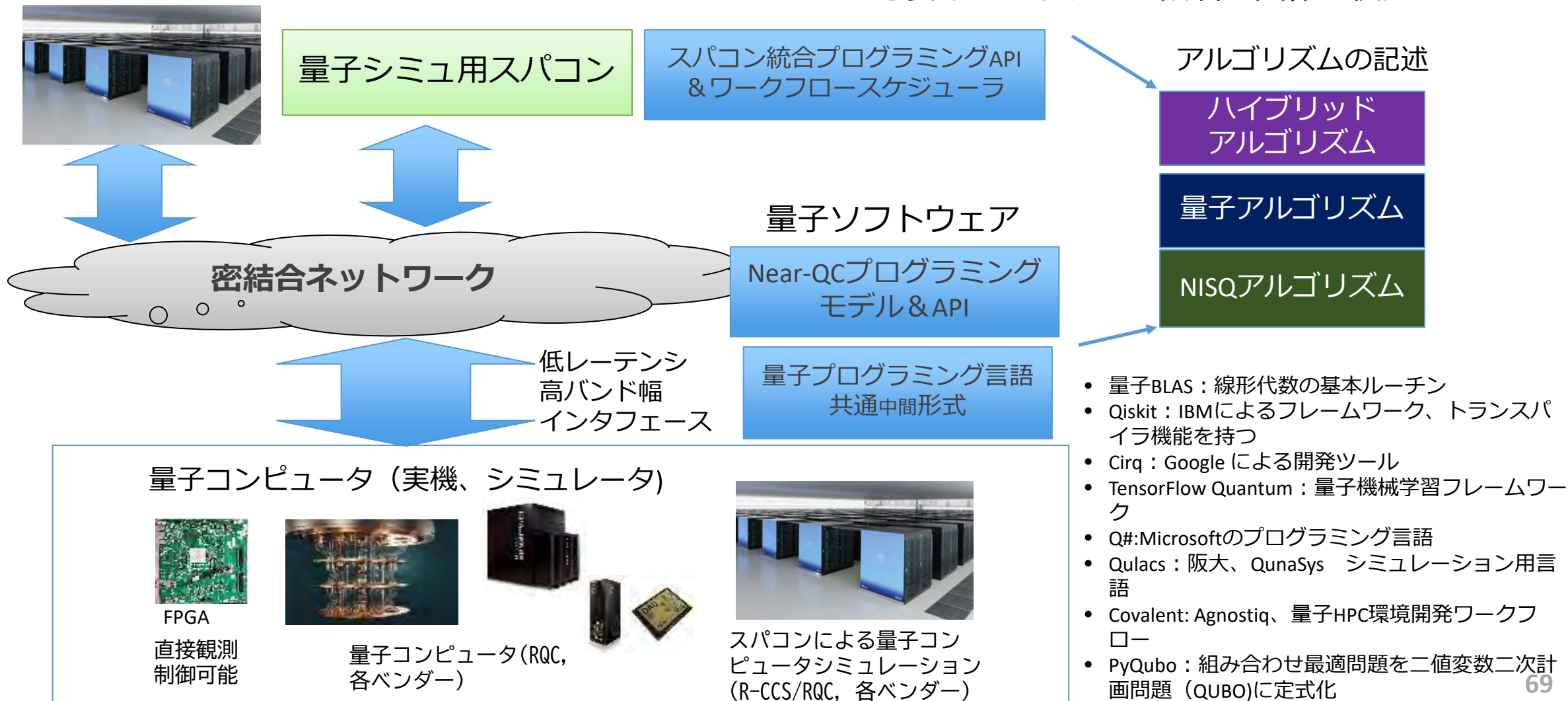
そもそも量子コンピュータで今後高速化が期待されている
スパコンアプリは、全体の一部
ただし、それらが高速化される事は重要
また、量子計算機製造向けの技術が通常のコンピュータの
製造の改良にも寄与の可能性



理研TRIPプロジェクトにおける古典・量子ハイブリッド計算環境 (理研 R-CCS, RQC w/iTHEMS, AIP、他センター、FS新計算原理etc.)

古典スパコン環境

量子スーパーコンピューティングに
必要なソフトウェア階層を試作・検討



- Variational Algorithmで、古典から量子コンピュータやシミュレータを呼び出して実行
- 仕組みとして、RPC（Remote Procedure Call: 遠隔手続き呼び出し）を用いる

