

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 松岡聰

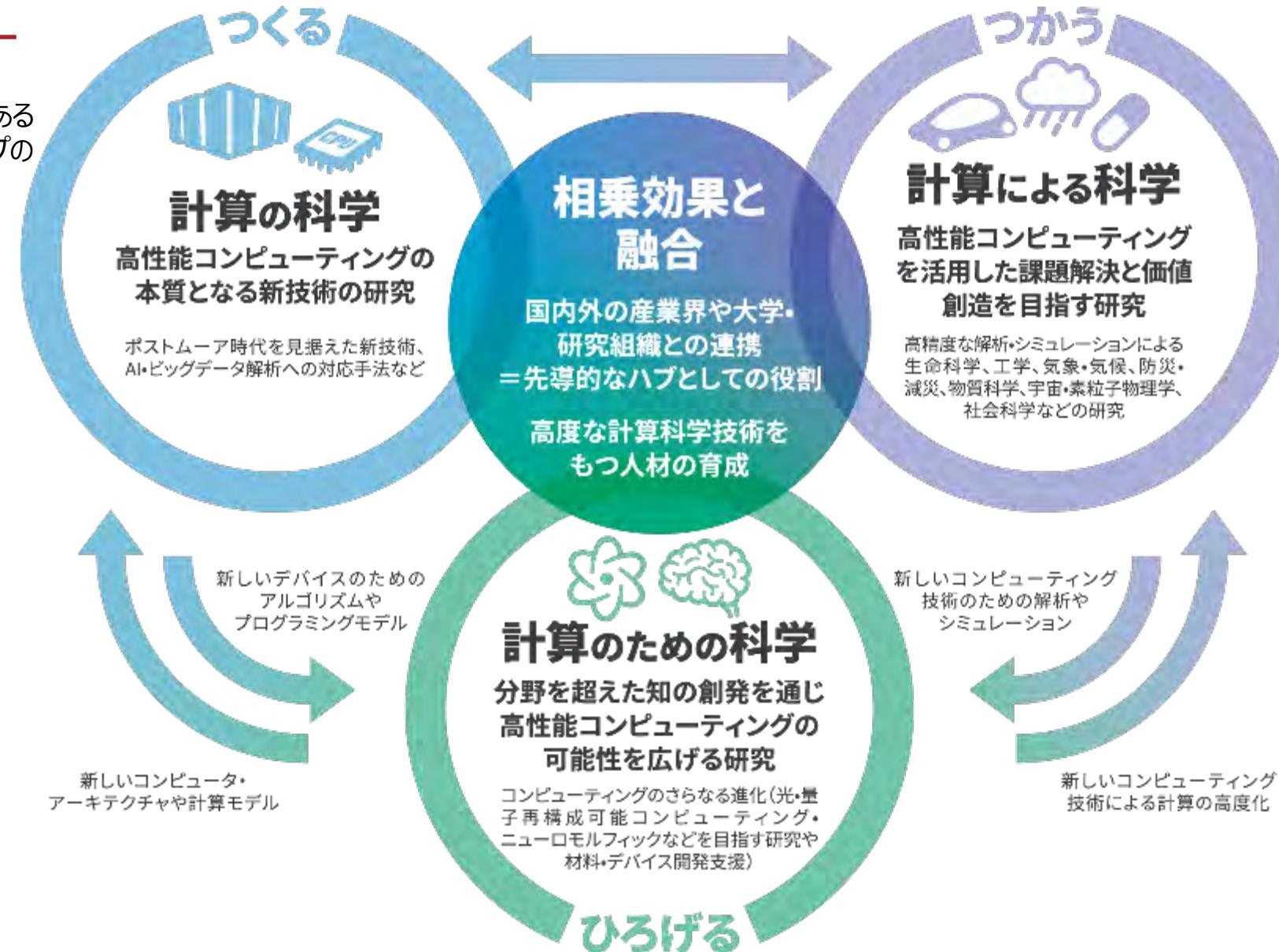
2023年7月20日
財務省勉強会講演資料

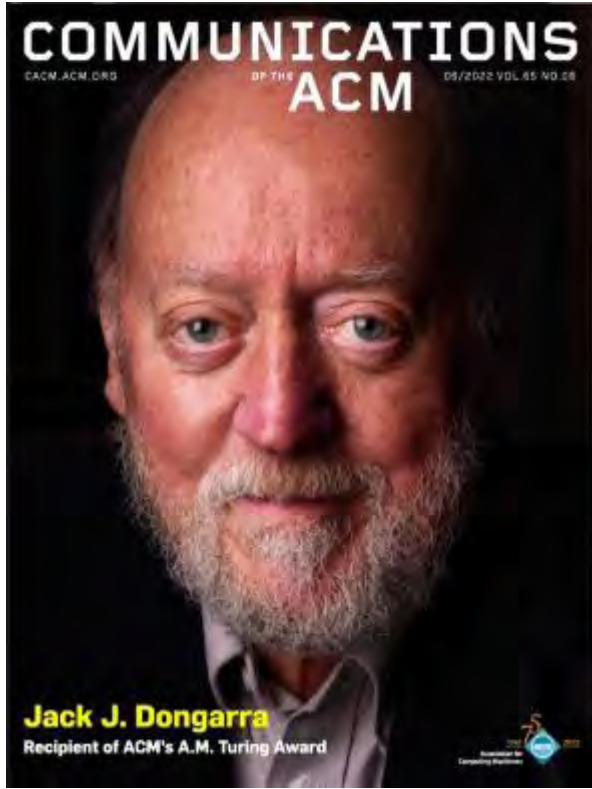
「計算の 計算による 計算のための科学」

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

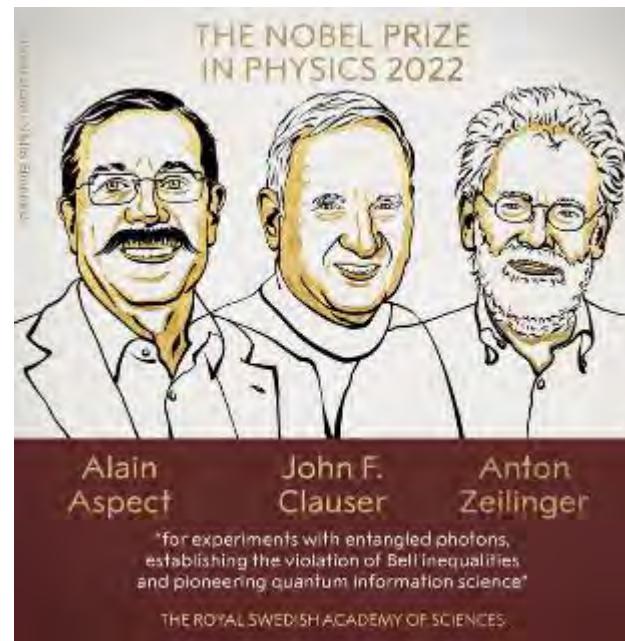




Jack Dongarra
2021-22 ACM Turing Award
HPC & Numerical Algorithms
“Science of Computing”



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 聰



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



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



量子系物質科学
研究チーム
柚木 清司



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

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 恒史



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 恒史

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



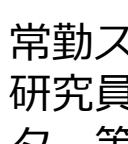
システム運転技術
ユニット
宇野 篤也



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、…

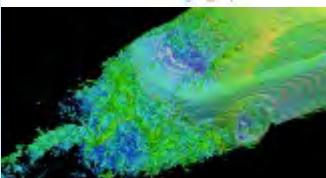
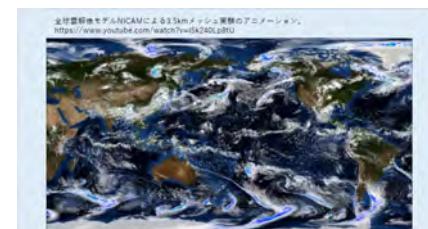
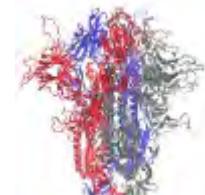
- 富岳も富士通が自らのイニシアティブで開発するのは不可能

- 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



← → 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

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



“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

文春新書
1366**スパコン富岳の挑戦**
GAFAなき日本の戦い方

松岡 聰

世界一のスパコンが
日本の難問を
解決する感染症対策、地球温暖化対策、
地震や豪雨などの
災害対策に威力を発揮巨大プロジェクトの内幕と科学技術の
最先端を「富岳」のリーダーが語る

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 聰

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

Kindle版もあり

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

国家プロジェクトだからこそ世界のスパコンを凌駕した「富岳」

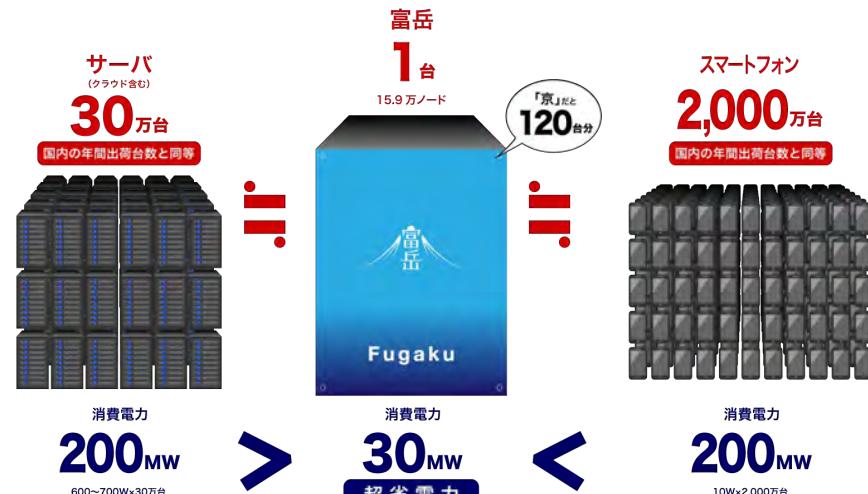
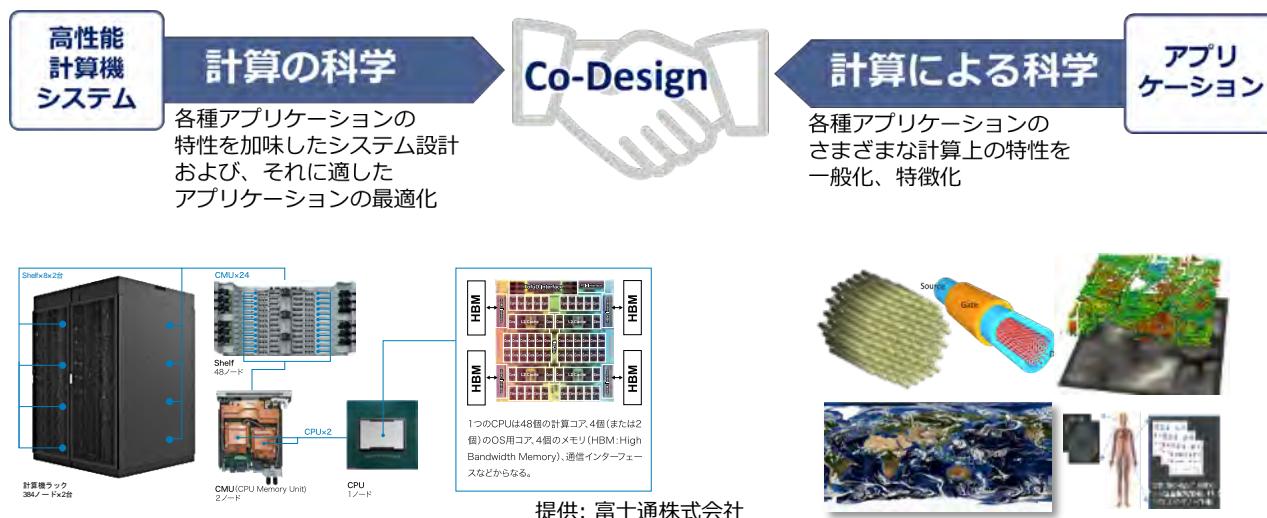
- “アプリケーションファースト”による“ムーンショット”マシン開発に我が国を挙げて挑戦！
- 新規開発されたCPU「A64FX」など基幹となる技術を理化学研究所及び富士通、日本全国のスパコン研究者が参加して、国家プロジェクトとして高い目標・ハイリスク開発を推進



- 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

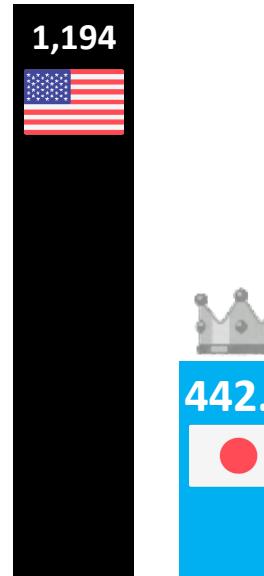
全て同時達成は
ムーンショット的
困難

- 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



世界スパコン性能 4冠・5冠達成 2023/5時点でも2冠を維持

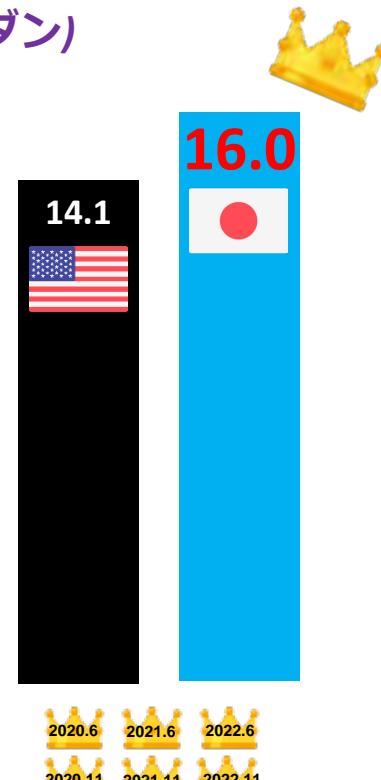
シミュレーション
(クラシック)



TOP500
(単位: PFLOPS)

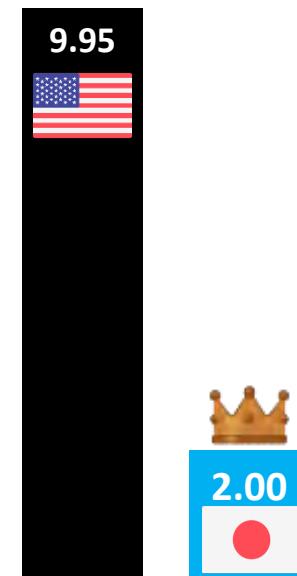
浮動小数点の演算
での性能評価

シミュレーション
(モダン)



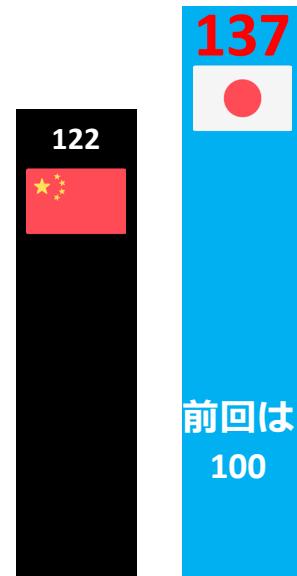
HPCG
(単位: PFLOPS)

AI
(深層学習)



HPL-MxP
(単位: EFLOPS)

ビッグデータ
(グラフ処理)

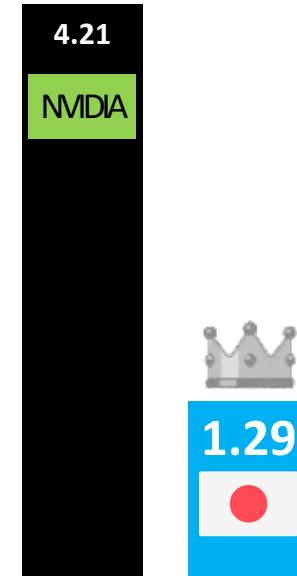


前回は
100

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

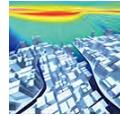
131倍
(GENESIS)



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)



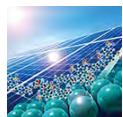
観測ビッグデータを活用した
気象と地球環境の
予測の高度化

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



powered by
FUGAKU

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。

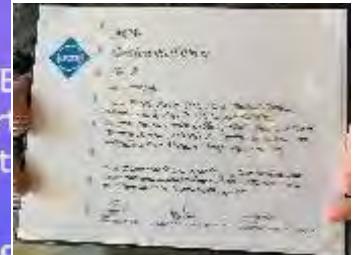
2021年ゴードン・ベル賞COVID-19研究特別賞

「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



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 Zaim](#), and [Henri Vincenti](#), (CEA); [Axel Huebl](#), [Kevin Gott](#), [Remi Lehe](#), [Andrew Myers](#), [Weiqun 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 11

「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、产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

充実した
ソフトウェア基盤

従来のHPC
ユーザはこちら

自社プロジェクトや
自社の課題を解く

ヘルプデスクによる
利用者サポート

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)

商用利用への道筋

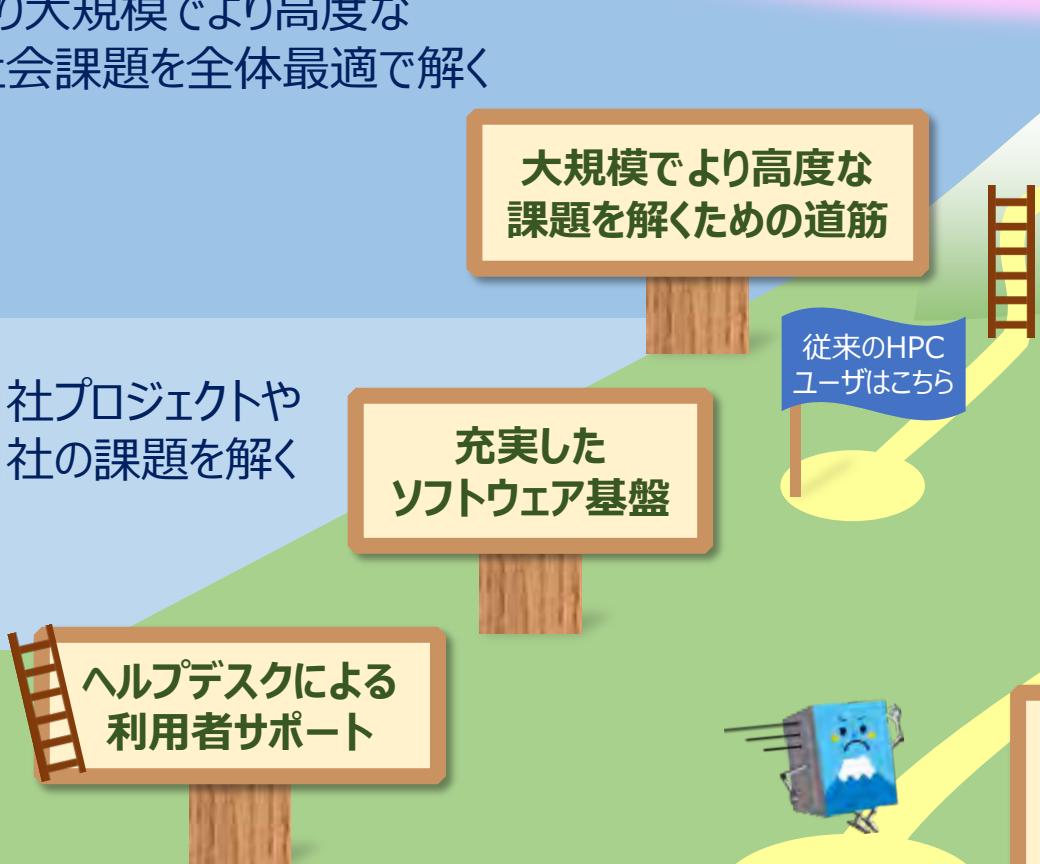
「富岳」コンパチブルな
商用クラウドなど

「富岳」を使ってみる

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



富岳の運用状況 (R3-4年度) (1/2)

- 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。
(→ R4補正措置いただくことで機会損失を最小限に抑えた)

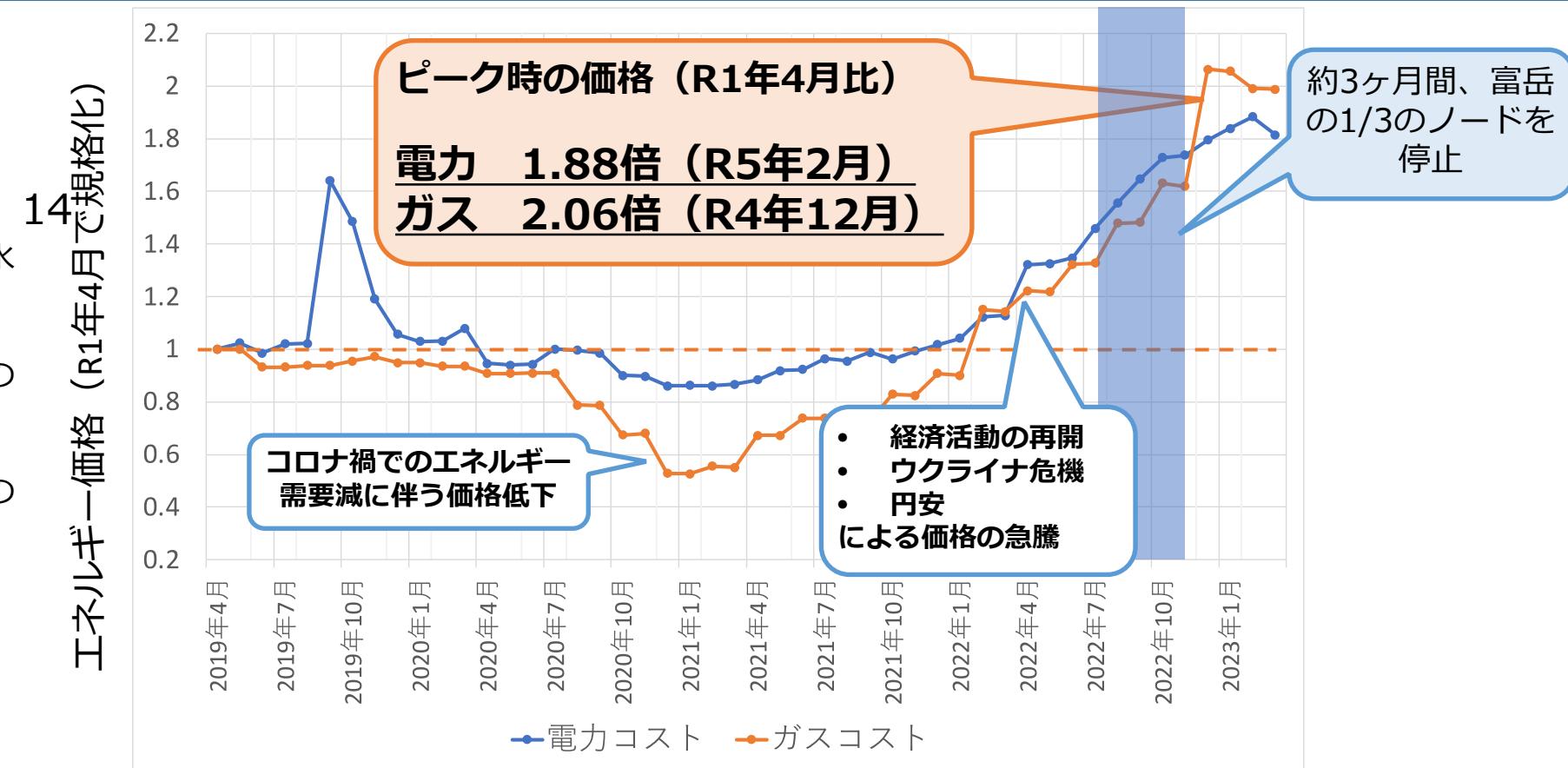
各国の計算センターとも知見を交換しながら、省エネ策を実施
(～R3年度)

○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

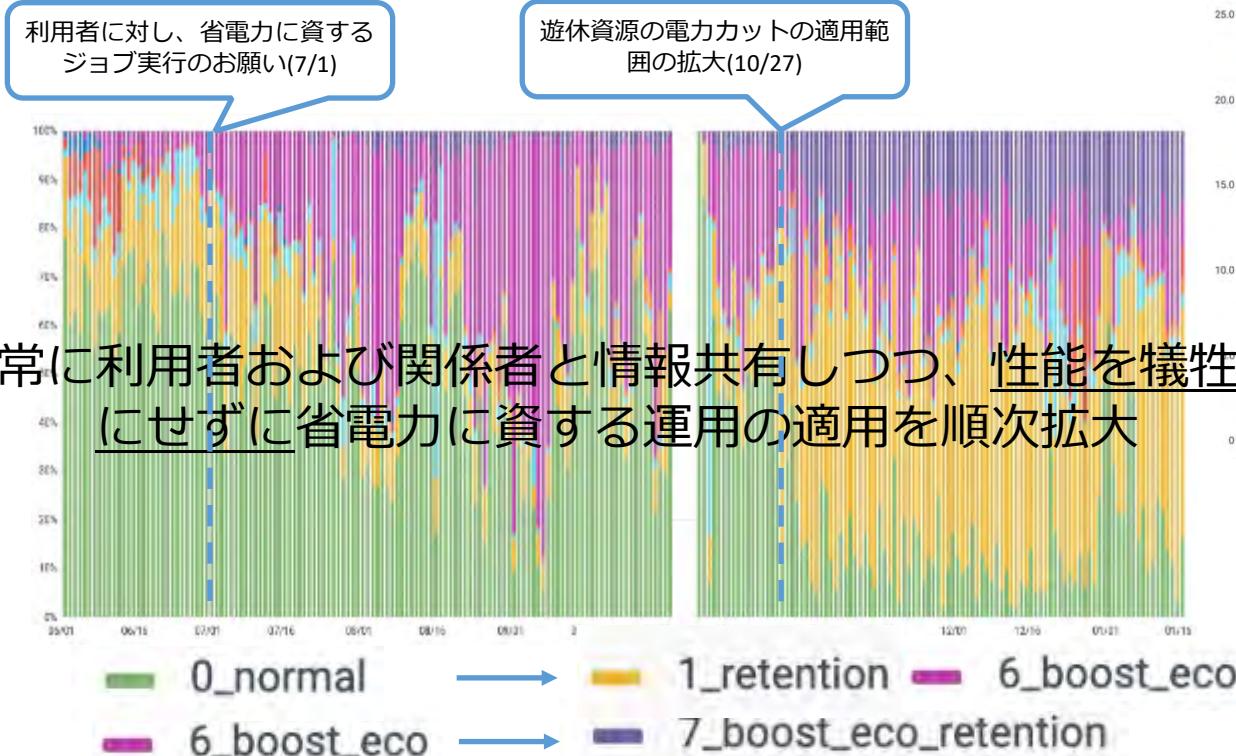
○冷却塔の冷却効率改善
など



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

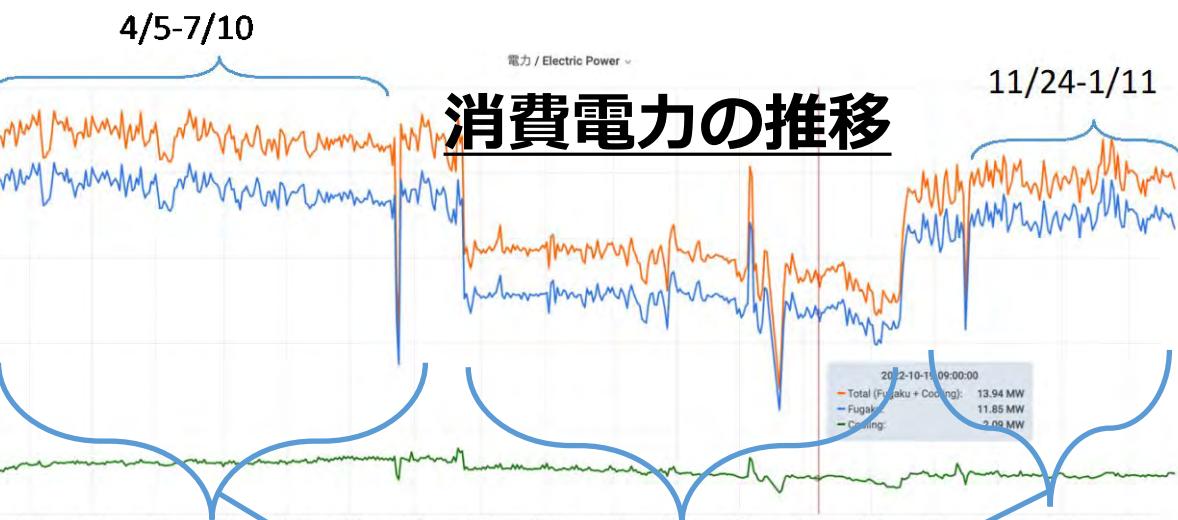
- 光熱水費の高騰を受けて、7/28より富岳の約1/3を停止すること（省エネ運転の取組や補正予算の割り当てを受けて、11/8に終了）、理研に配分された資源量の50%を停止分の補填の一部として拠出すること、省エネに資する機能の積極的な活用を決定し、利用者および関係者と共有

ジョブ実行モードの割合の推移



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



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



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

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。



排熱の有効利用

[https://datacenterfrontier.com/
waste-heat-utilization-data-center-industry/](https://datacenterfrontier.com/waste-heat-utilization-data-center-industry/)

排熱の供給



スパコンの省電力化運用

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)

R4実施、R4 補正予算

効率のよい冷熱



高効率な冷却設備の導入と運用

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)

R4 補正予算 (R5設備増強・R6試験運用開始)

継続検討案件

推進中案件



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

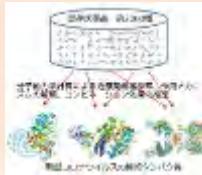
これらの先進的なスパコン運用の取り組みを、センター間連携等を通じて広く公開する等して、国内外のセンター運用のカーボンニュートラル化と省エネ化に積極的に貢献

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

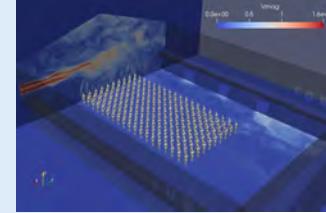


分子動力学計算により、約2000種の既存医薬品の中から、新型コロナウイルスの標的タンパク質に高い親和性を示す治療薬候補を探索・同定する。

(課題代表者；理化学研究所/京都大学 奥野 恒史)

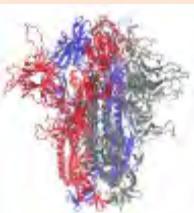
室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策

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イ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**

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

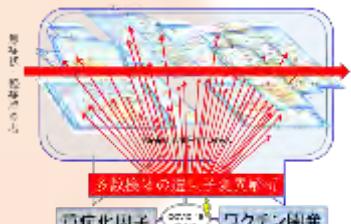


新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算を系統的に実施し、詳細な相互作用解析を行う。

(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、スー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)

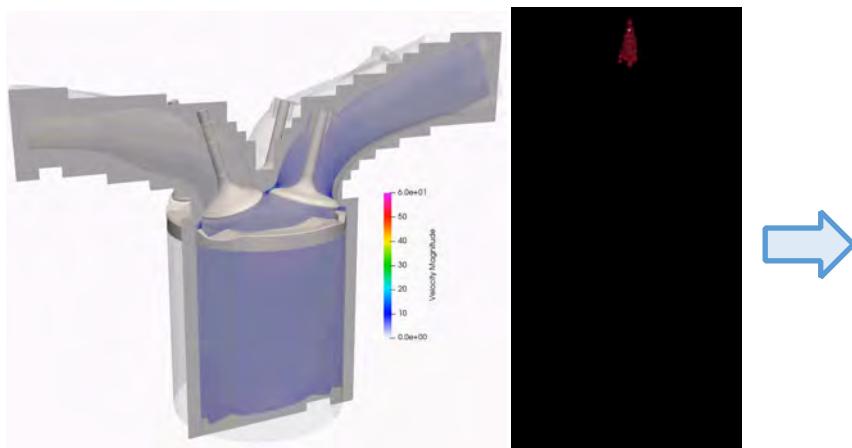
複雑現象統一的解法ソフトウェアCUBE

高速かつ大量にシミュレーションモデルを作成し、スパコン性能を最大限に活用できるソフトウェア

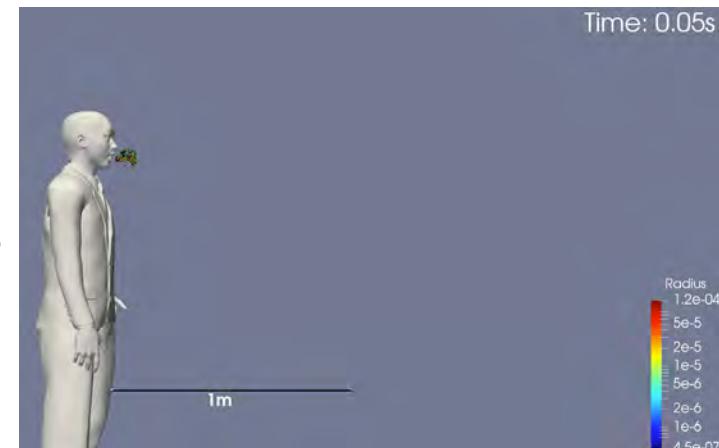
カーボンニュートラル社会と対コロナ飛沫感染シミュレーション

- 2012年より理化学研究所で产学研連携で開発。
- スパコン「京」を活用して、自動車、燃焼システム、建築防災分野で多くの実績。
- 2020年初頭、Society5.0時代のものづくりへ向けて富岳でチューニング中に、新型コロナパンデミックが発生。

「京」による自動車エンジンシミュレーション
と燃料噴霧噴射の様子



「富岳」による
飛沫飛散シミュレーション



HPCを活用した自動車次世代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

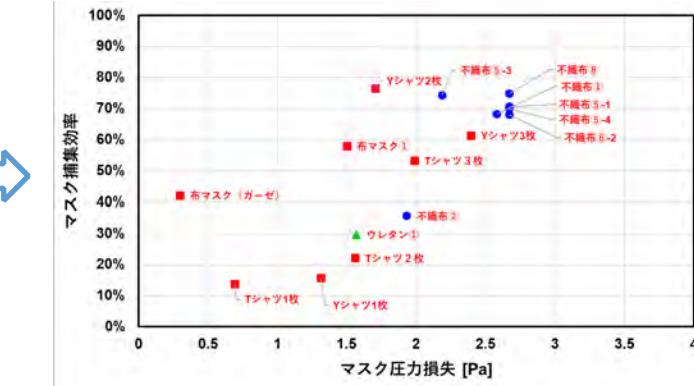
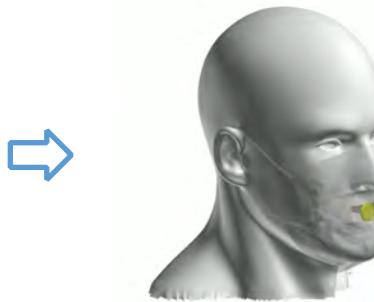
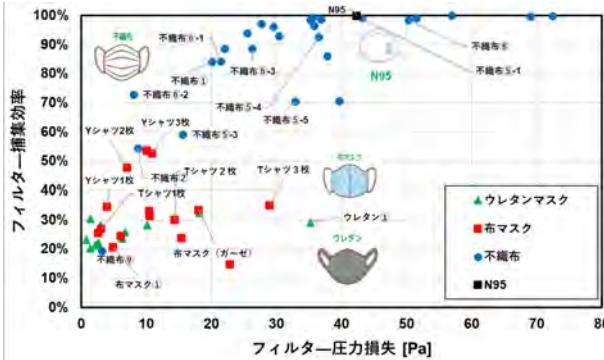


都市・建築CFD コンソーシアム（東京工業大学）

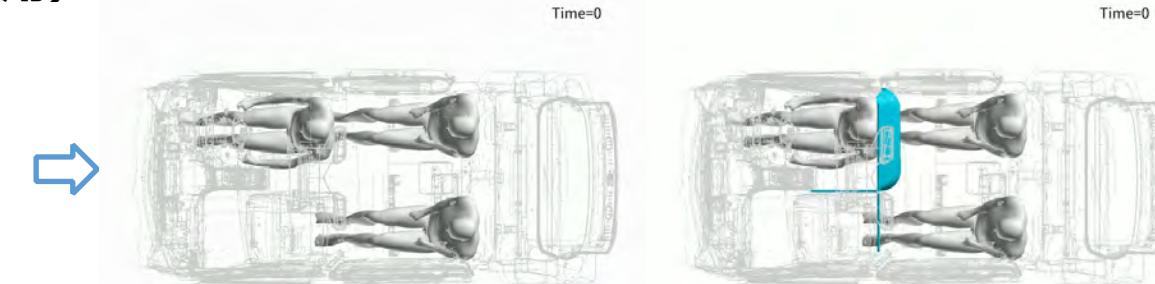
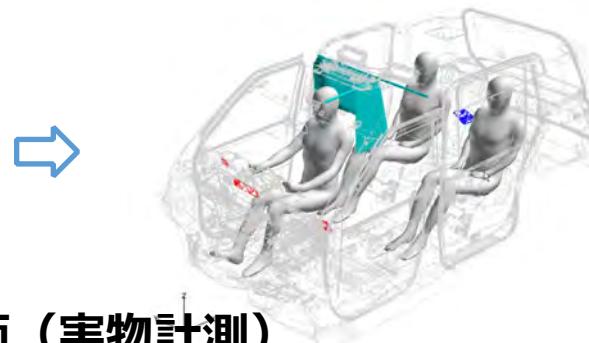
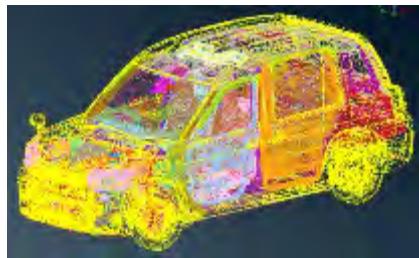


COVID感染症リスク評価: デジタルツインの高速生成技術

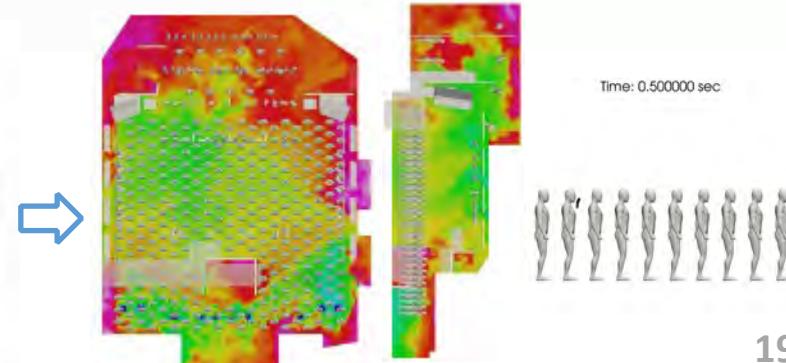
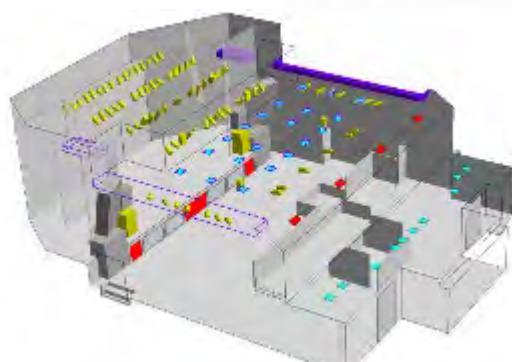
- マスクシミュレーション（シミュレーションによる形状データ自体の作成 + 実験による必要データの計測）



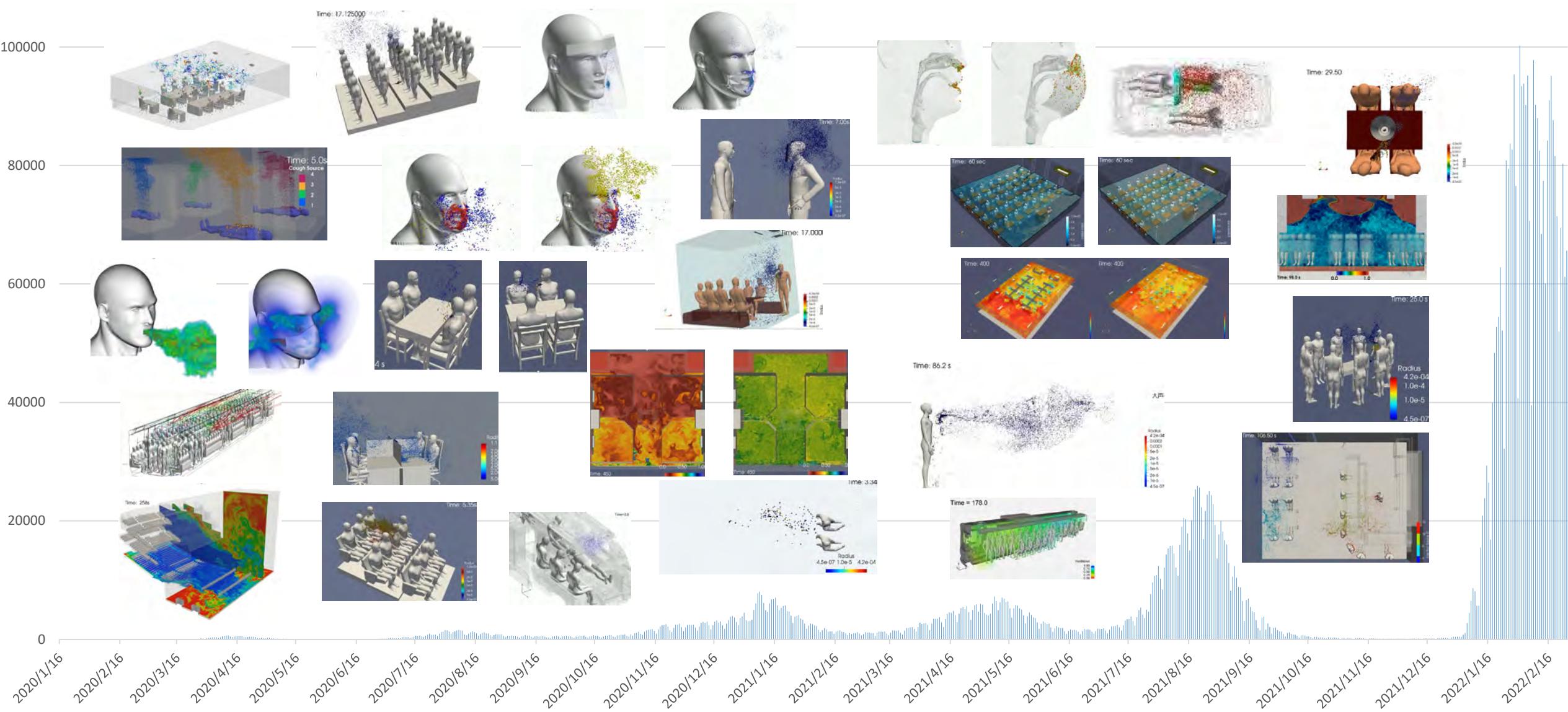
- 公共交通機関での感染リスク評価（CAD形状データの活用）



- 室内での感染リスク評価（实物計測）



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





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

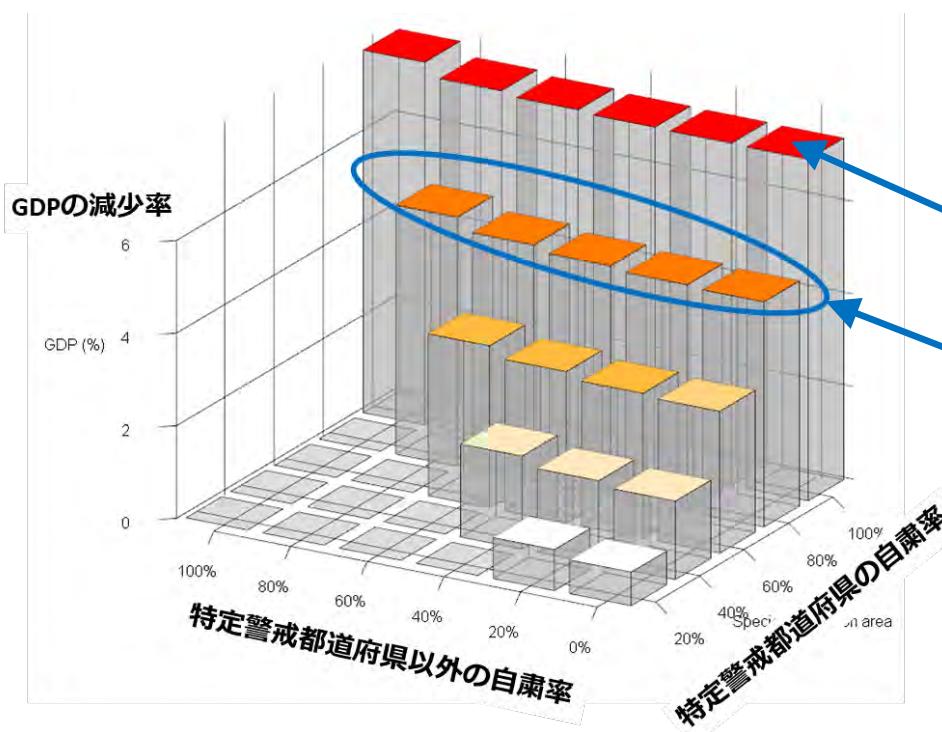
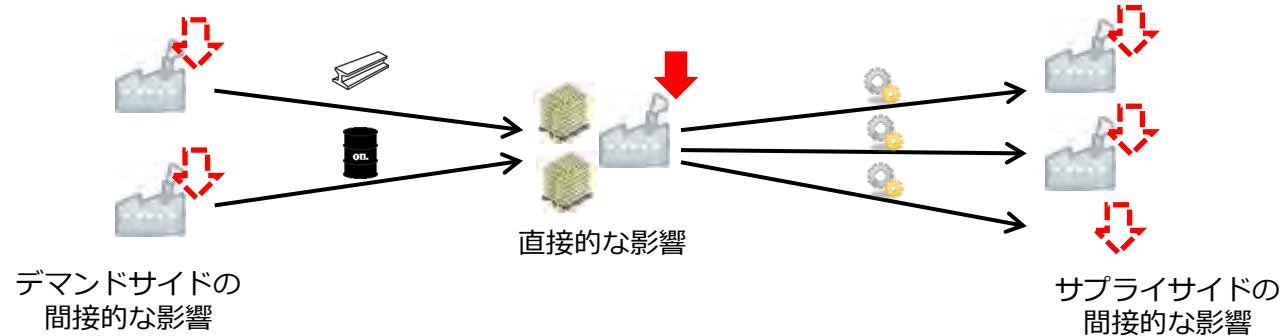
Over 300 newspapers, 350 TV broadcasting, 1,000 web news...

- 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.

富岳でのコロナ自粛による経済への影響シミュレーション

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

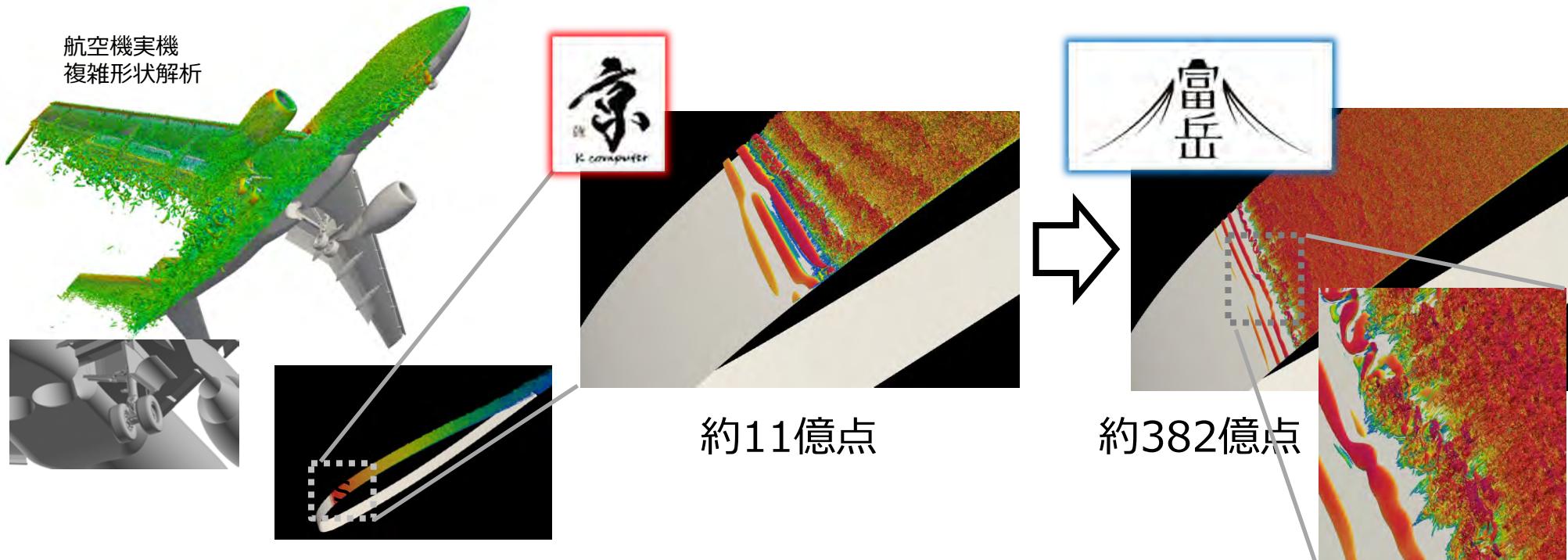


powered by
FUGAKU

「富岳」を活用した航空機の高精度デジタルツインによる近未来型設計

(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の設計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

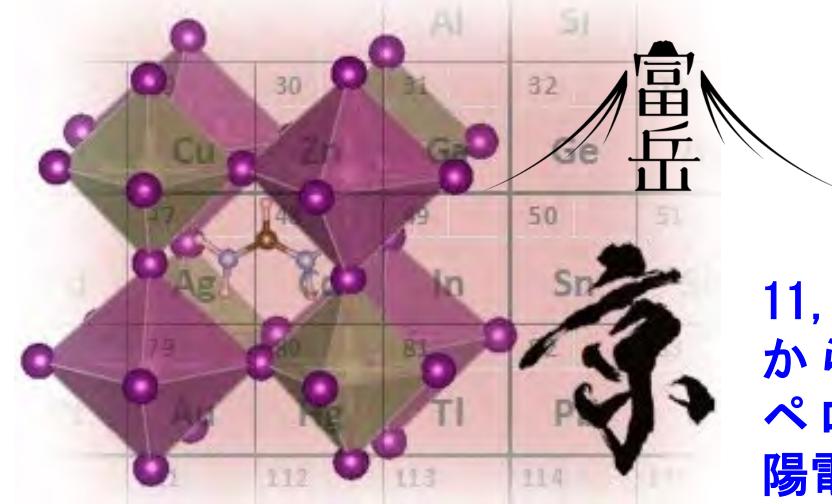


主翼の空気の流れを実飛・行高レイノルズ数で大規模準直接解析に世界で初めて成功

✓ 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、民間旅客機の設計開発期間・リスク・コストの抜本的削減を目指す。

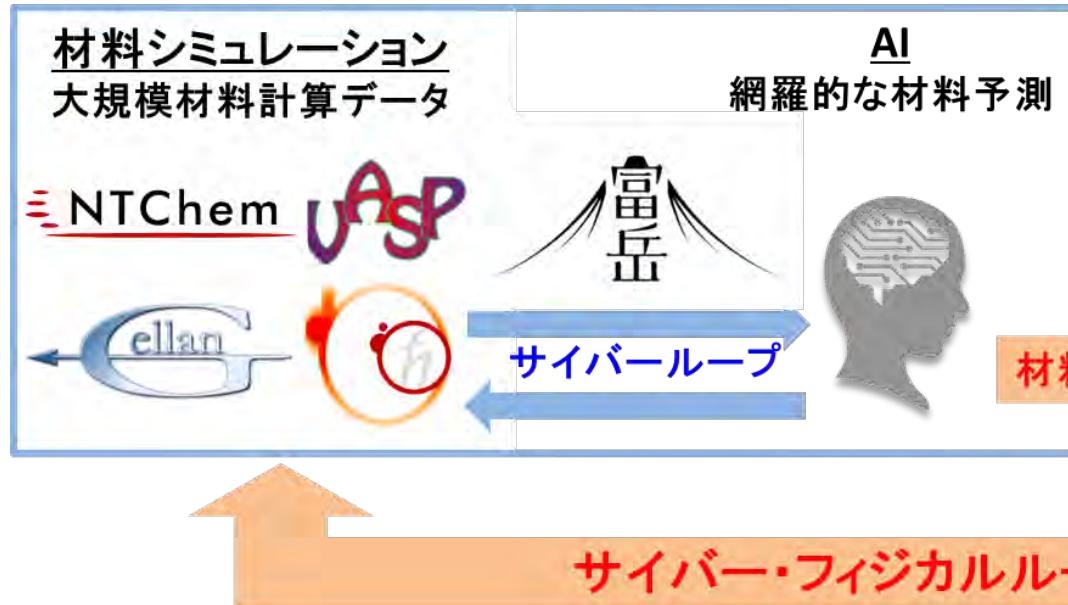
「富岳」による光エネルギー変換材料の開発

「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

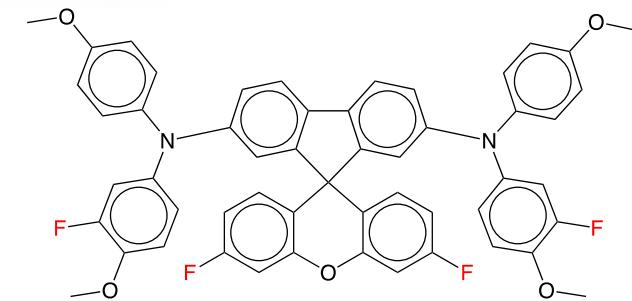


11,025個の化合物
から51個の低毒性
ペロブスカイト太
陽電池を提案

サイバー技術



フィジカル技術

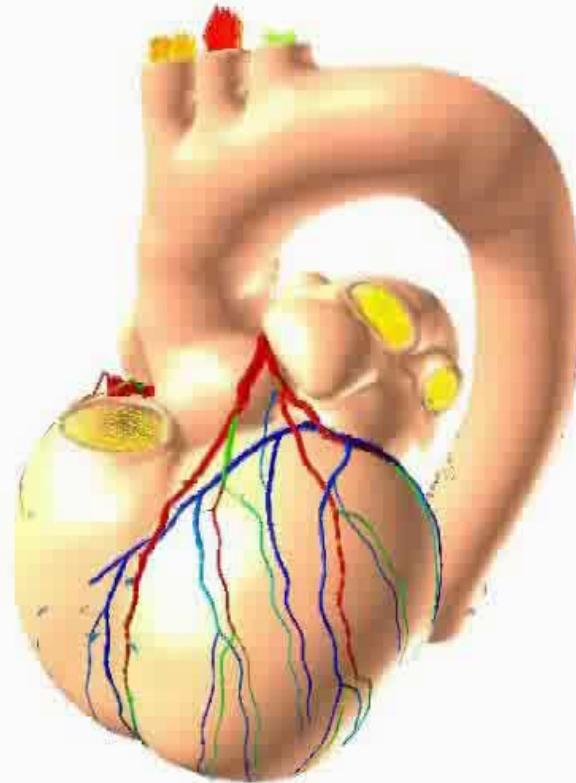


変換効率: 24.4%

高い変換効率を持つ正孔輸送材料を設計

医療基盤：心臓シミュレータUT-Heart

[久田 俊明ら]

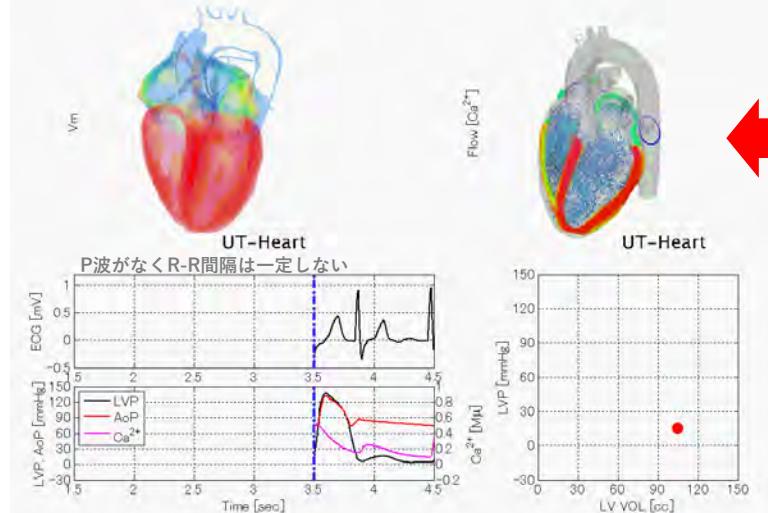


- 約20年前に東京大学で研究開発を開始
- 心臓の生理学的活動をありのままに、
マルチスケール（分子レベルから臓器レベルまで）
マルチフィジックス（固体/流体力学、電気化学）
で再現する世界に類例のないシミュレータ
- そのため計算パワーが必要
→ 「京」と「富岳」で研究が加速
- 現在では(株)UT-Heart研究所が主体となり
臨床医学・創薬・医療機器開発
の分野で実用化研究を推進（以下に応用例を示す）

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)

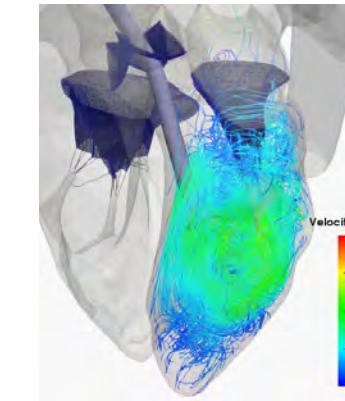
心房内のCa濃度は低く細かく振動
心室への流入は急速流入期のみに起きる



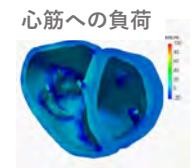
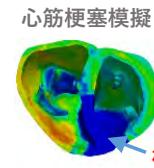
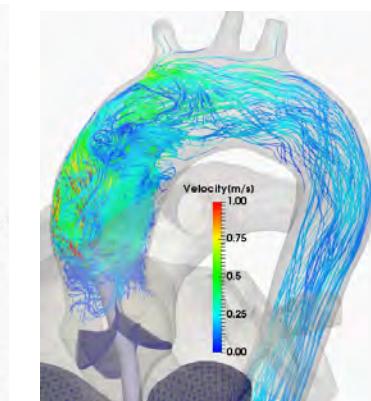
薬剤や治療機器の効果を計算機上で自在に試すことができる

応用例 2 補助循環用ポンプカテーテルIMPELLAの性能評価

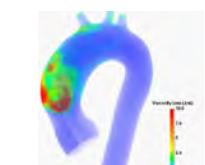
左心室内腔の血流



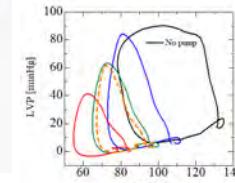
大動脈の血流



心筋への負荷



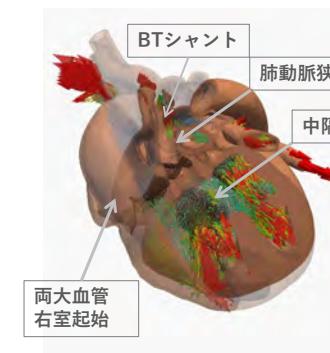
圧容積関係



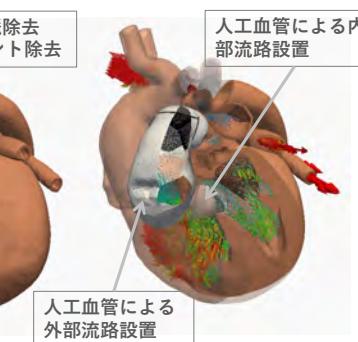
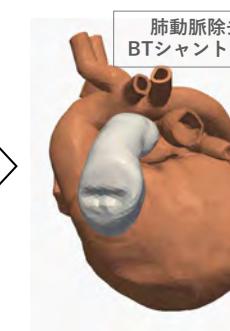
任意の状態の心臓に対し各種医療機器の性能評価を計算機上で行うことが可能

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压↓⇒大動脈弁開かないことがある

応用例 3 小児先天性心疾患の手術シミュレーション



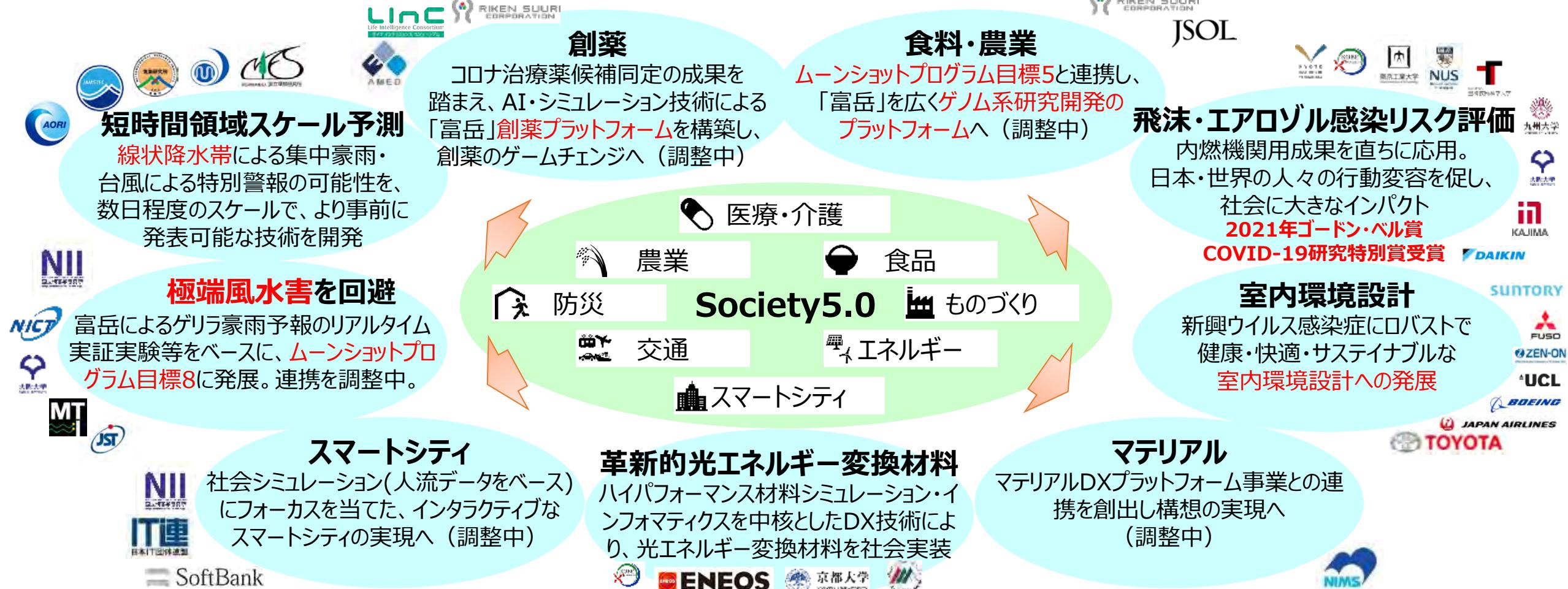
術後の血行動態予測



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へ向けた投資効果(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。

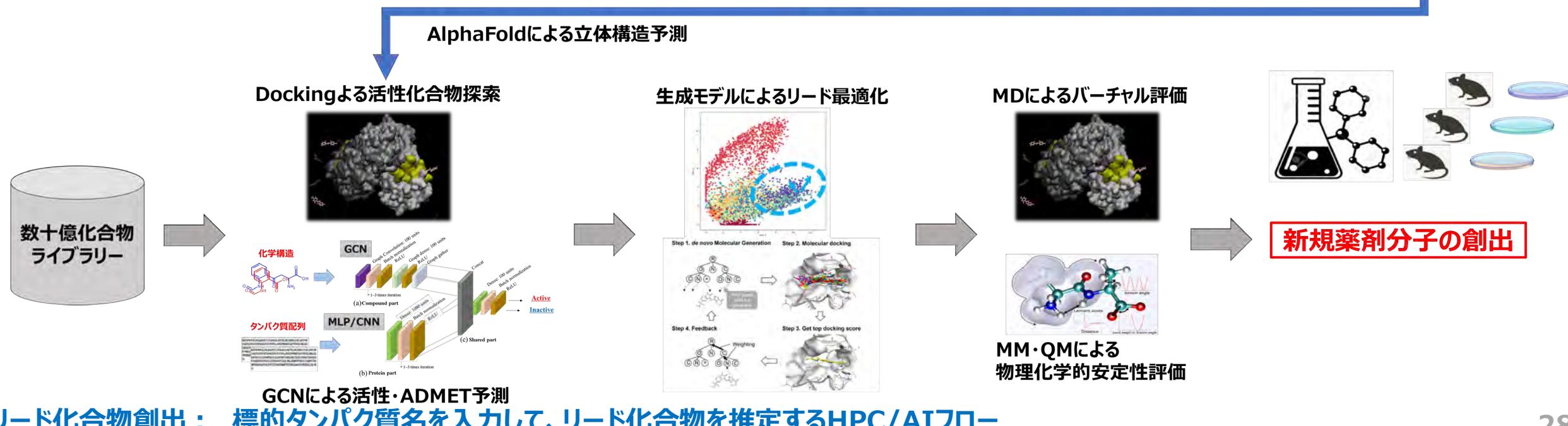
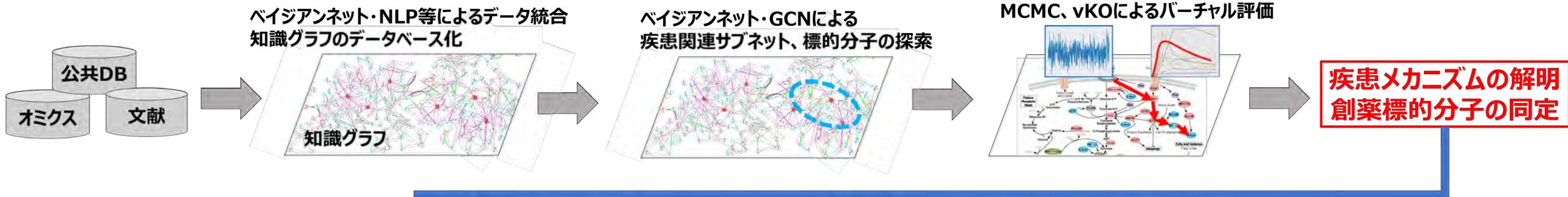
富岳プラットフォームで知識とデータの集約を開始

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



理研・京大・医薬基盤研・LINCによる計算創薬の中心拠点形成（国内外の競争相手の状況や関係）



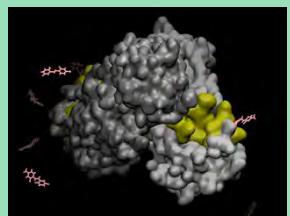
HPC/AI医薬PF部門

- 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



連携

シミュレーション



AI



理化学研究所 R-CCS



連携

富岳Society5.0推進拠点

理研 (日本橋)



AI

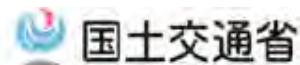


2017年より横浜MIHで開始
2021年に神戸R-CCSに異動



理研 (横浜)

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



取り組み事例その1：神戸市スマートシティ

◆**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**

関連するCOE事業
課題3（大石TL）、課題9（伊藤TL）

■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	府省庁名	実施課題名		
令和4年度採択案件			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	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		
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	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	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）「产学研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、产学研官が関連技術・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・推進される产学研官の取組に、「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、产学研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）



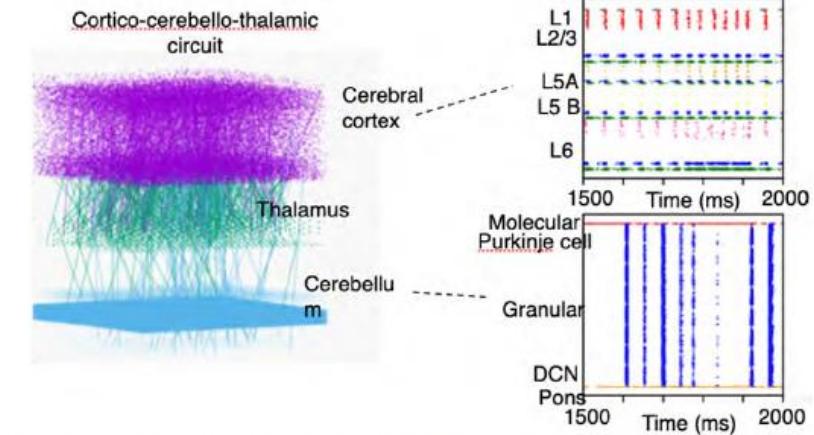
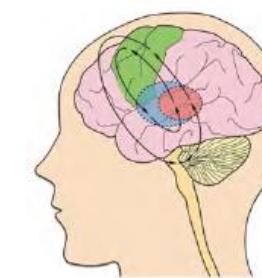
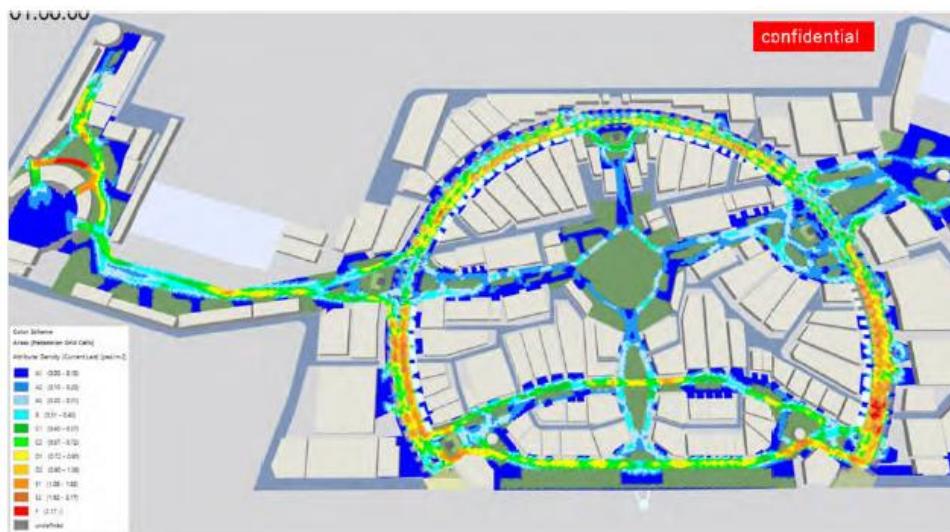
2020年7月の豪雨による熊本県球磨村の様子
引用：<https://www.nippon-foundation.or.jp/journal/2021/61147>



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

取り組み事例：2025年関西万博

- ◆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



「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）



- 「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」を維持することが必要であると回答

* : 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

Fugaku/FX1000



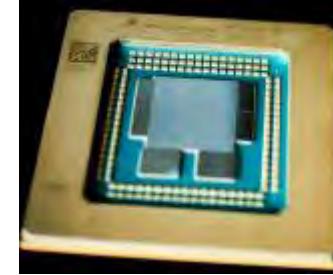
Riken R-CCS SC

「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

「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)



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

Amazon EC2
C7g/C7gn instance



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

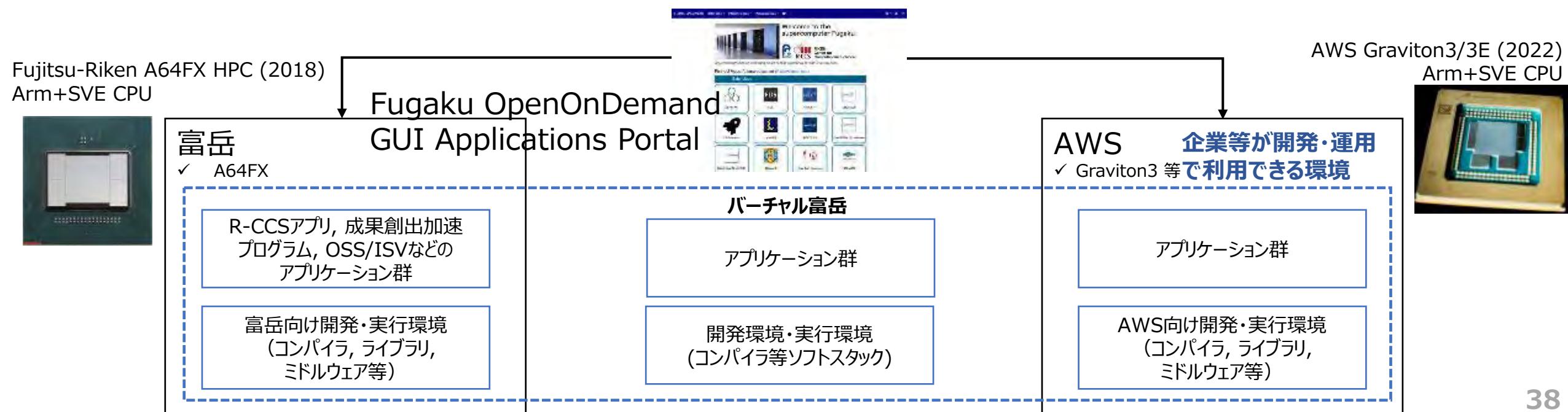
「富岳」のクラウド化に加え、クラウドの「富岳」化 (クラウドを通じた「富岳」のハードのみならずソフト・アプリ・サイエンス成果の拡張・普及)

「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

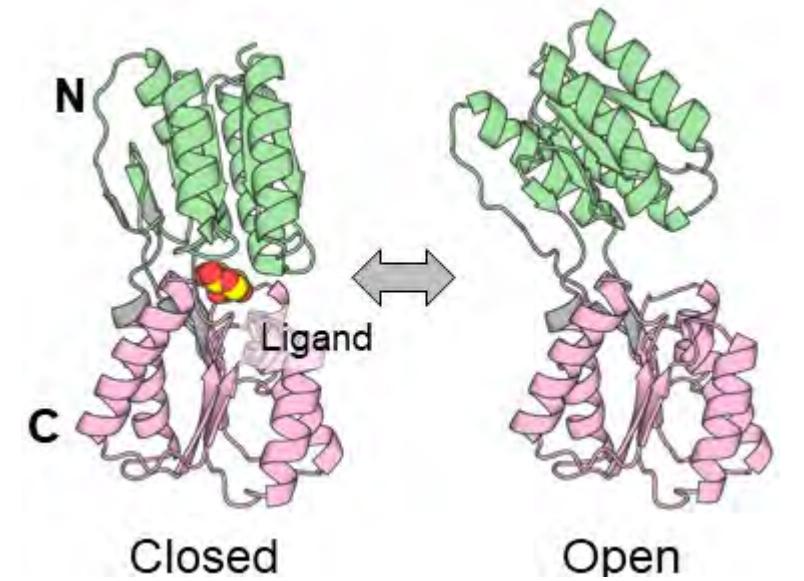
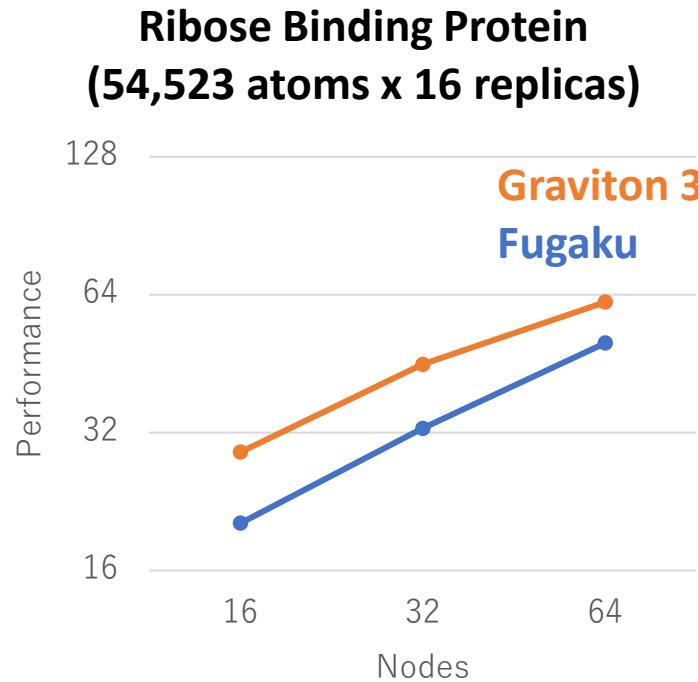
※ Software as a Service (サービスとしてのソフトウェア)、インターネット上で使えるインストール不要のソフトウェア、もしくはその提供形態のこと。

- 「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



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>)

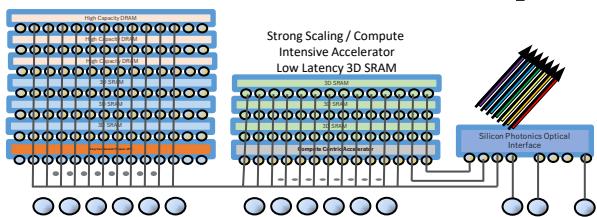


<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cbrt/tutorials2022/tutorial-9-1/>

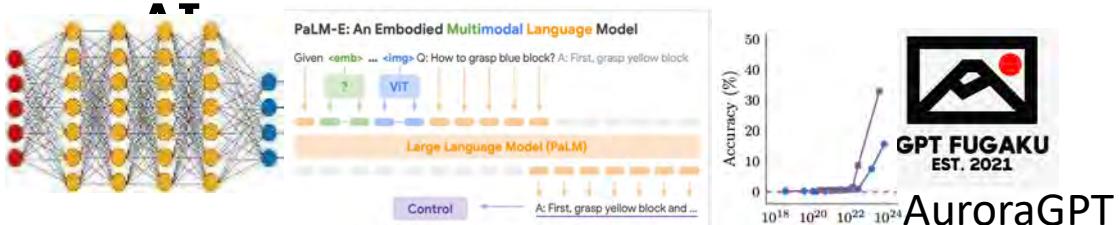
(output is included)

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

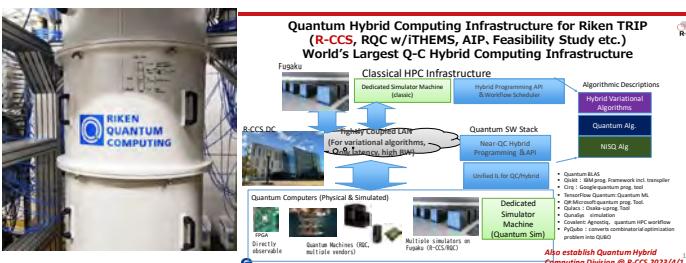
- 高性能計算の科学 Science **of** High Performance Computing (towards ‘Zettascale’)
 - 高性能計算による科学 Science **by** High Performance Computing



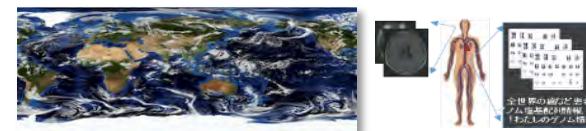
- ## ● 高性能AIの科学 Science of High Performance



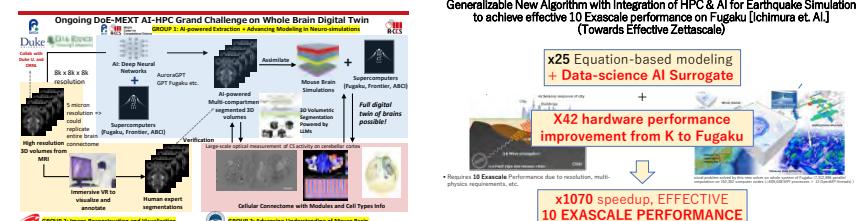
- 量子-HPCハイブリッド計算の科学 Science of Quantum-HPC Hybrid Computing



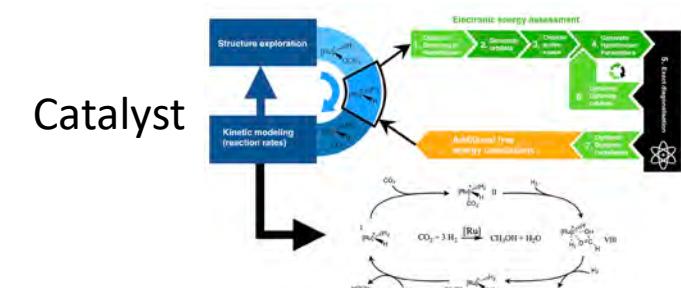
- 高性能計算による科学 **Science by High Performance Computing**



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



- 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



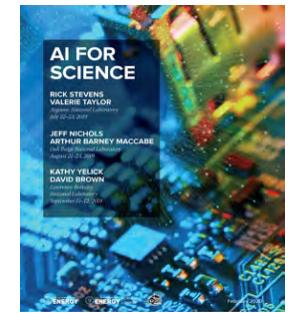
将来は、**AI for Science**、特に高度化したAGI*により、本質的な科学的な発見とイノベーションの達成が行われるなど、
科学分野や産業分野をはじめとするあらゆる分野で大きな変革が進む可能性

*汎用人工知能：Artificial General Intelligence

- 國際的には、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

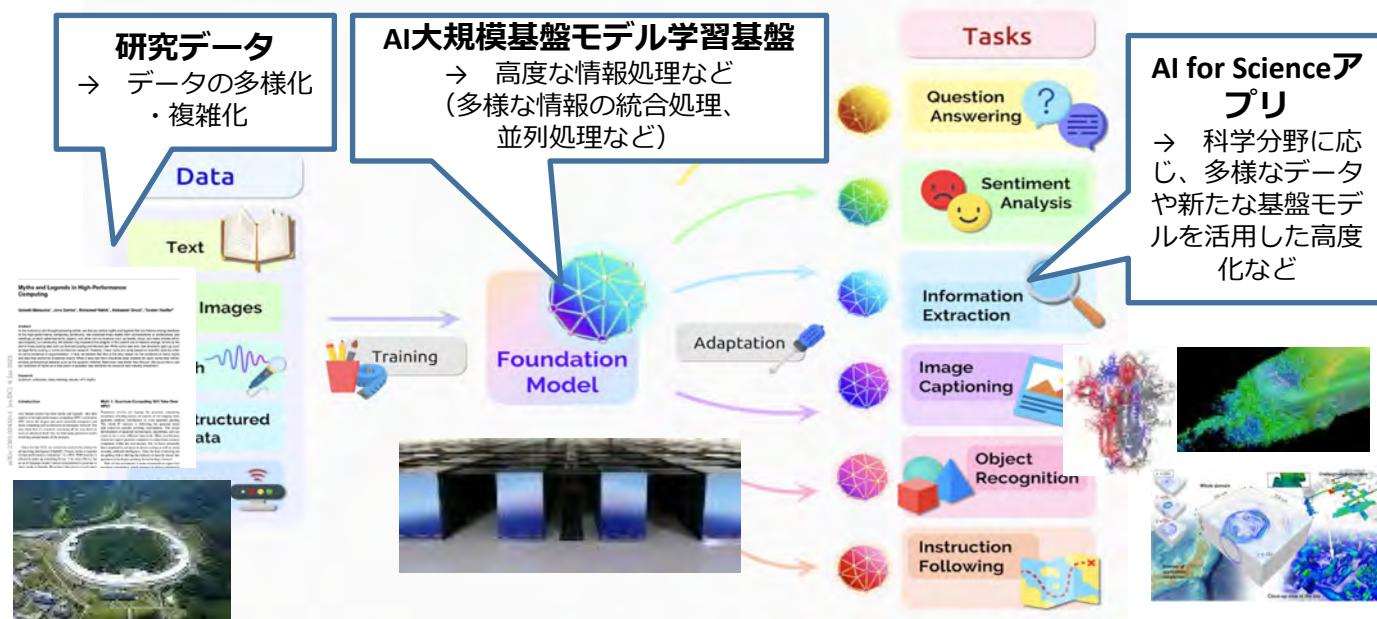
- これまで日本のAI開発では、プロンプトエンジニアリング^{注1}やAPI^{注2}の開発・発展などが主流であり、AI基盤モデルなど開発では出遅れ。
- 一方で、AI大規模基盤モデルの開発に必須となるHPC技術（スパコン「富岳」やデジタルツイン技術など）については、現状、世界のフロントランナーの一員。また、5月に「富岳」政策対応利用課題で、東京工業大学、理化学研究所をはじめとする6機関・企業で「富岳」を活用した大規模言語モデルのための基盤モデルの構築に向けた研究を採択

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開発に必要となるHPC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、HPC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

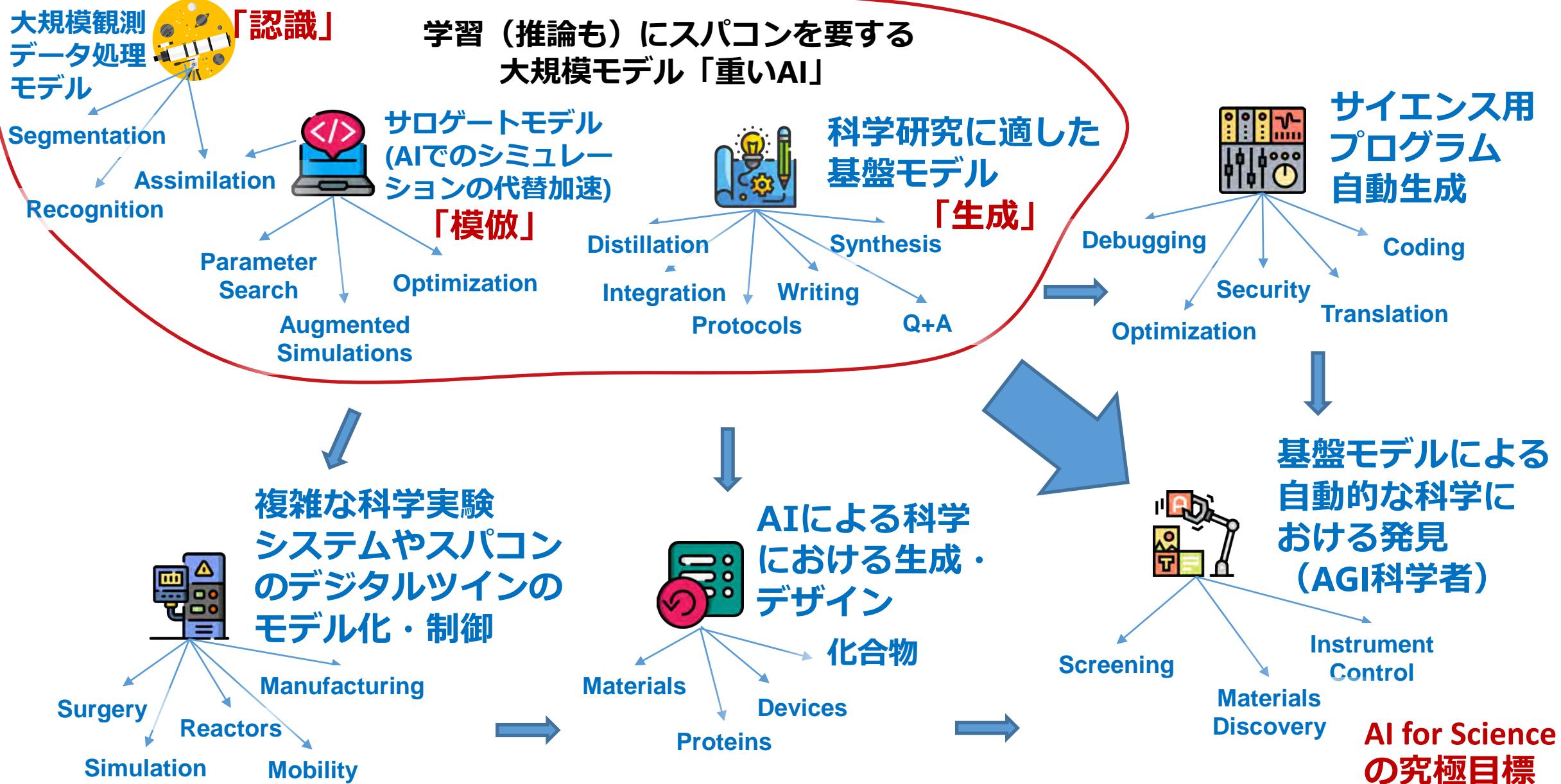
DL4Fugaku (富岳/Arm用深層学習加速ライブラリ)

MLPerfHPC (富岳上の10万ノード規模イエンス学習)

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融合でのペロプロスカイト太陽電池や高耐熱ポリマー設計、等多数

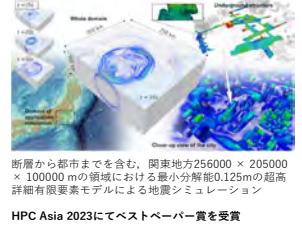
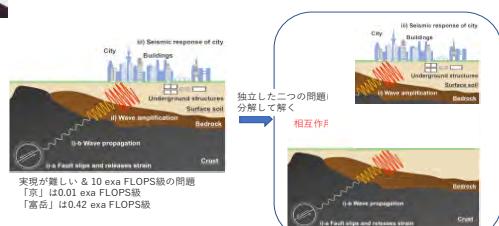
スパコンによるAI for Scienceのイノベーション



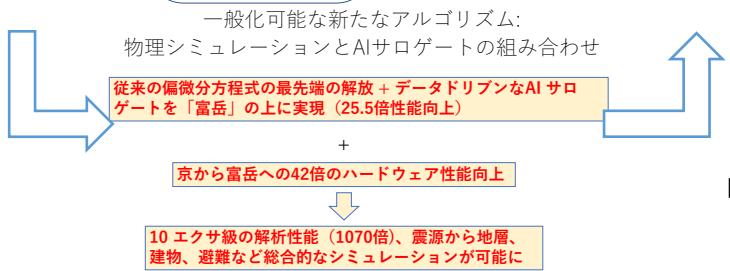


サロゲートと物理シミュレーションの連携による10エクサ級のシミュレーション 市村、藤田ら(東大地震研・理研 R-CCS/AIP)

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



■富岳全系（7,312,896並列）までスケールする超並列計算物理シミュレーションとデータ学習のハイブリッド手法を開発し、断層・都市超高詳細解析を実現
・非構造低次有限要素法によるテラ自由度級大規模非線形動的解析。
・京コンピュータ比1070倍（本手法で25.5倍、京→富岳で42倍）の性能向上
・1兆自由度の問題を19,216兆のデータから学習しながら解く
・この規模・性能の地盤シミュレーションは日本でのみ実現。最近の計算機では性能が出にくい非構造低次有限要素解析において独自技術があるため

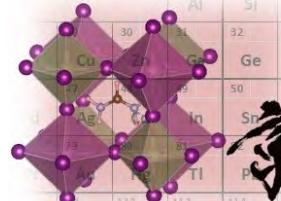


同様の手法で富岳NEXT世代ではゼータ(Zetta)スケールを目指せる

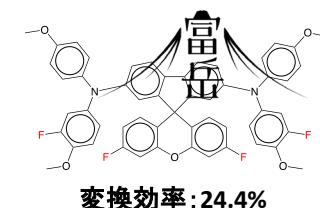


「富岳」による物理シミュとAIサロゲートが融合したペロプスカイト太陽電池材料の開発[中島ら,R-CCS]

「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・とサロゲートAI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



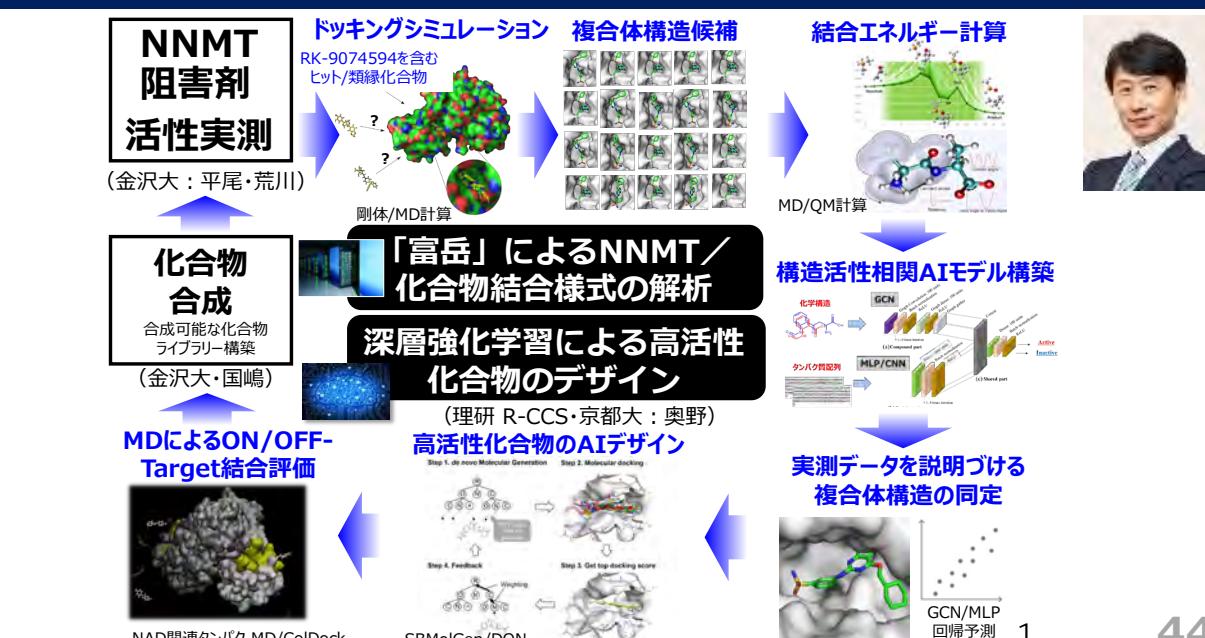
「京」時代：シミュのみで11,025個の化合物から51個の低毒性ペロプスカイト太陽電池を提案



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



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



物理シミュ+サロゲートAI+生成AI：デザイン性を考慮した空力最適化 [坪倉ら・R-CCS]

● デザイン性を考慮した空力最適化フレームワーク

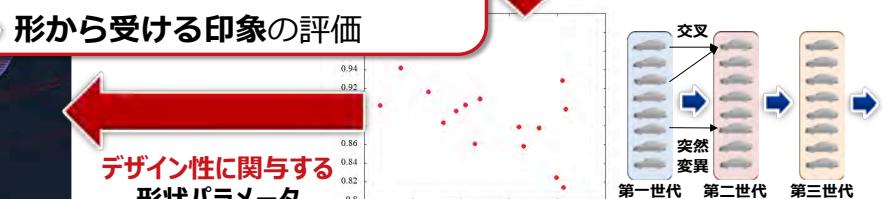


形状データ



AI (機械学習)による予測評価技術の導入

空力性能 + デザイン性



1



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

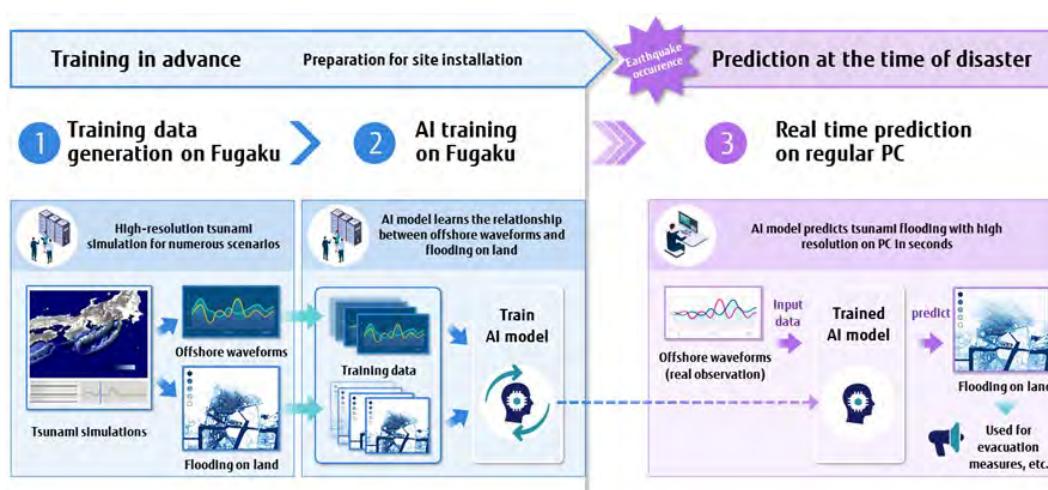


Fig. 1 Overview of tsunami prediction with AI

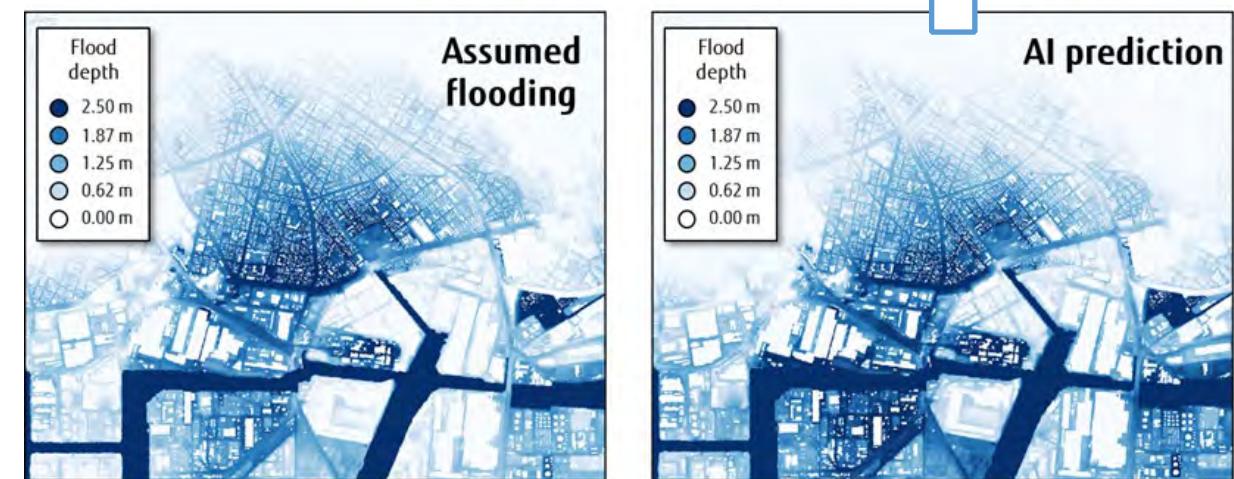


Fig. 2. Comparison between anticipated flooding (tsunami source model created by Cabinet Office of Japan with tripled wave heights) of Nankai Trough Megathrust Earthquake and prediction results of newly developed AI

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労



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

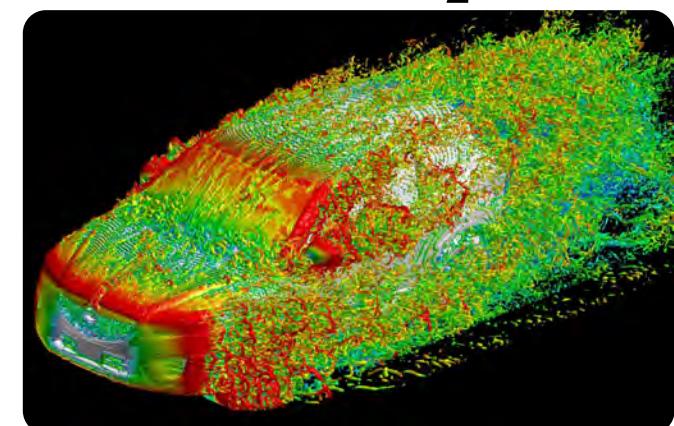
小泉巖, “CX-4のデザイン”, マツダ技報, No.34, 2017.



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

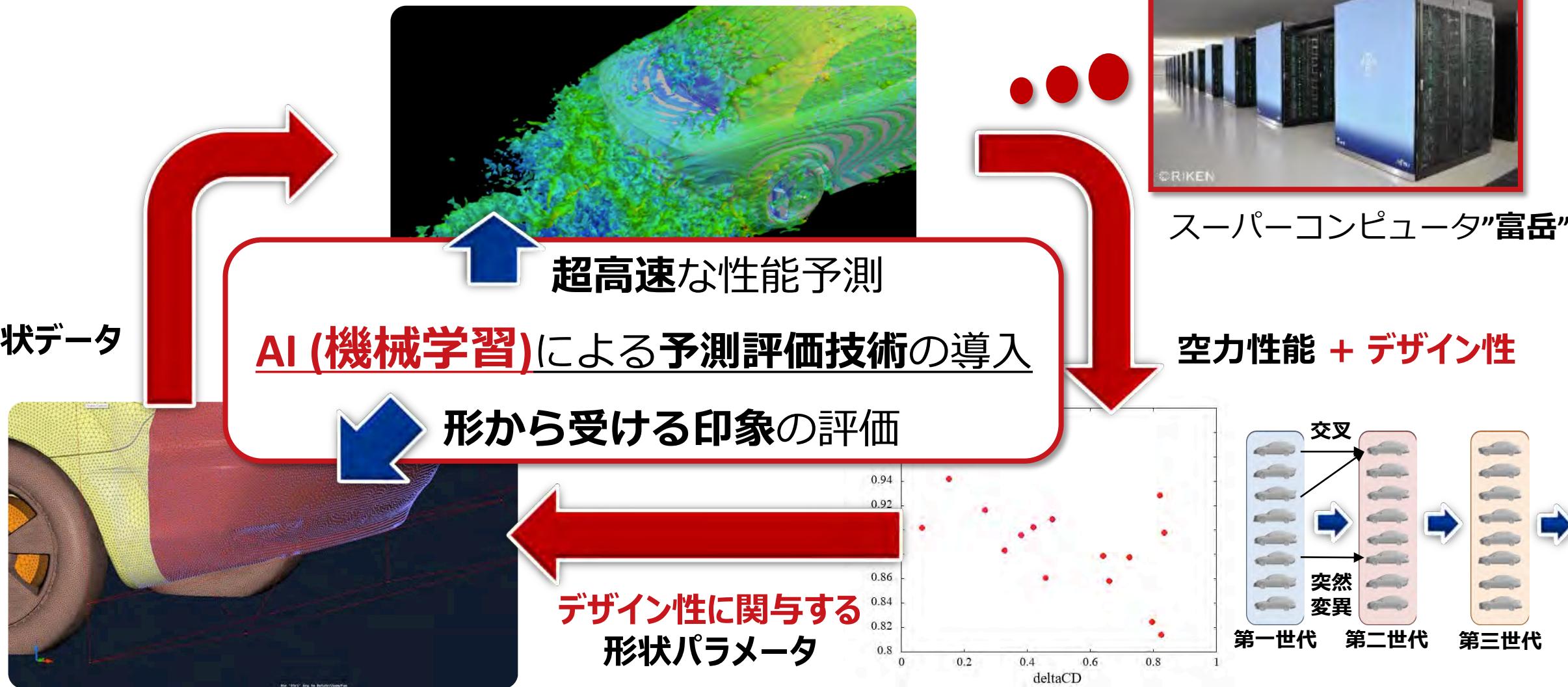


$$\text{空気抵抗係数 } C_D = \frac{F_D}{1/2 \rho U^2 A}$$



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



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

**NNMT
阻害剤
活性実測**

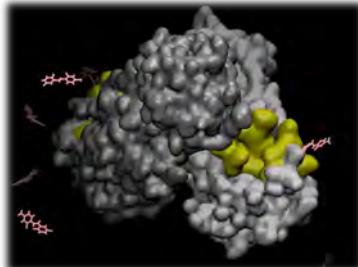
(金沢大：平尾・荒川)

**化合物
合成**

合成可能な化合物
ライブラリー構築

(金沢大・国嶋)

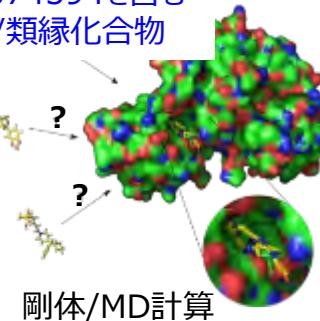
**MDによるON/OFF-
Target結合評価**



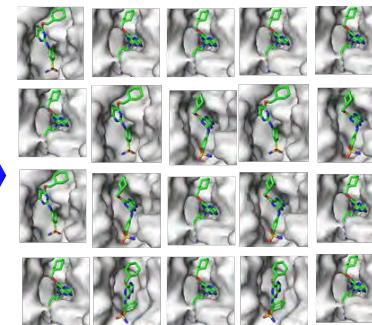
NAD関連タンパク MD/ColDock

**ドッキングシミュレーション
複合体構造候補**

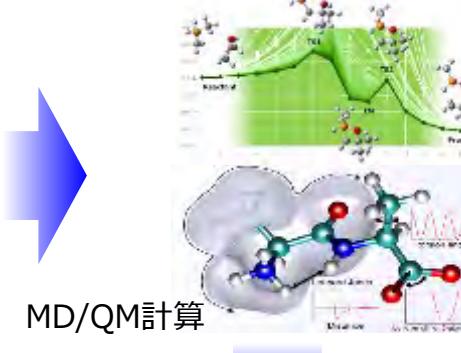
RK-9074594を含む
ヒット/類縁化合物



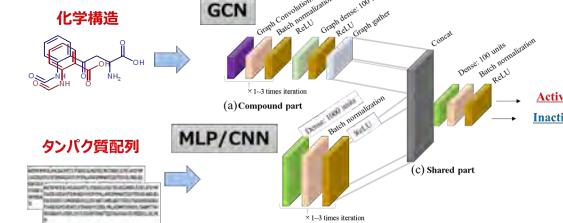
複合体構造候補



結合エネルギー計算



構造活性相関AIモデル構築



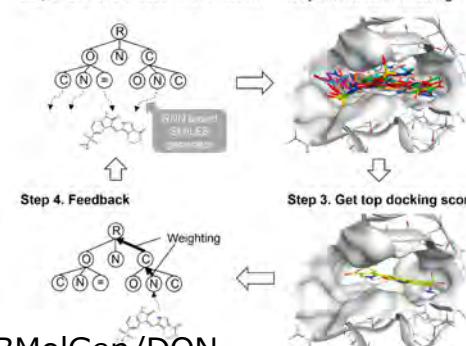
**「富岳」によるNNMT/
化合物結合様式の解析**

**深層強化学習による高活性
化合物のデザイン**

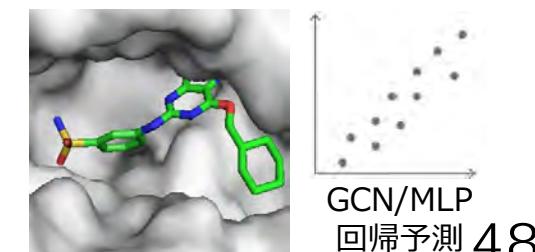
(理研 R-CCS・京都大：奥野)

高活性化合物のAIデザイン

Step 1. de novo Molecular Generation Step 2. Molecular docking



**実測データを説明づける
複合体構造の同定**

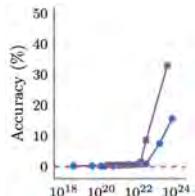


GPT Fugaku:富岳上でLLM学習を大規模に分散スケール

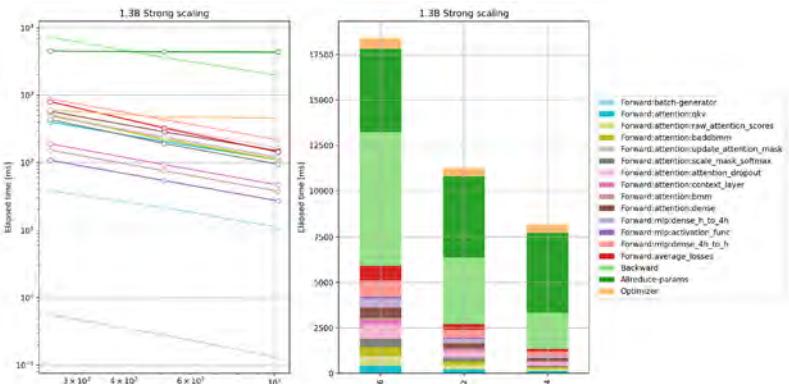
GPT-Fugaku Team



NLP



Horizontal Scaling



DL4Fugaku Team @ R-CCS

DL4Fugaku Team @ R-CCS



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



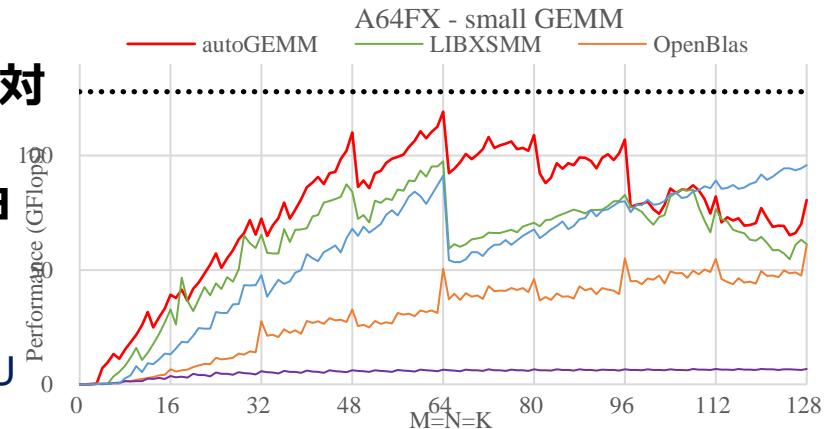
Fujitsu



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

- 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。

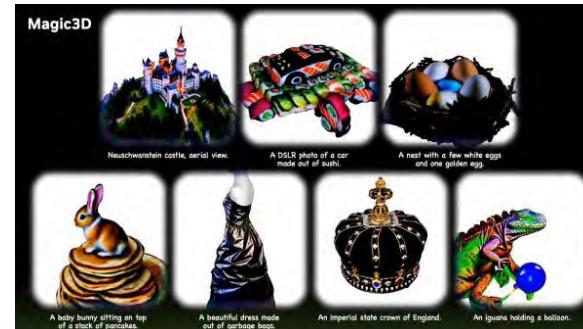
- ShapeNet等の3次元形状とテキストのデータセットを、確率的深層生成モデルに学習させたもの。

- 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)



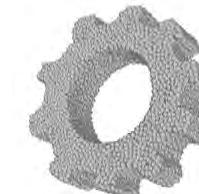
Magic3D by NVIDIA
(2022年9月)



"a corgi wearing a red santa hat"



"a multicolored rainbow pumpkin"



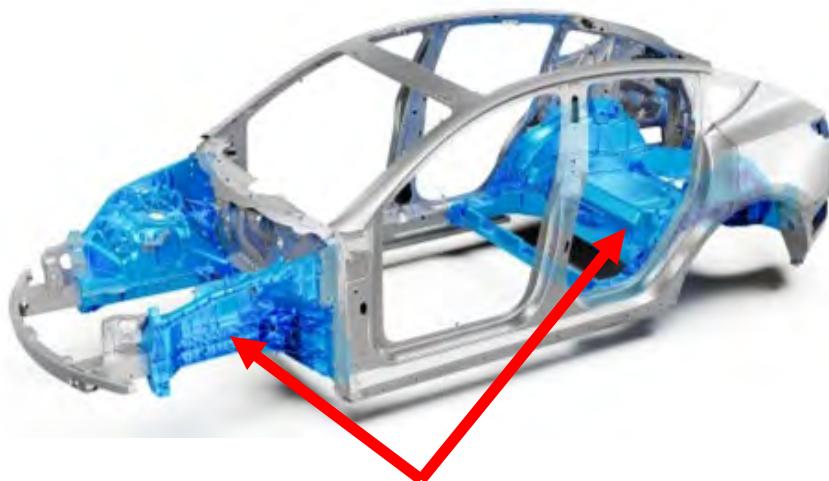
"a 3D printable gear, a single gear 3 inches in diameter and half inch thick"

Magic3D by NVIDIA
(2022年9月)



- ・ ギガキャスティングに基づく次世代BEV構造の衝撃

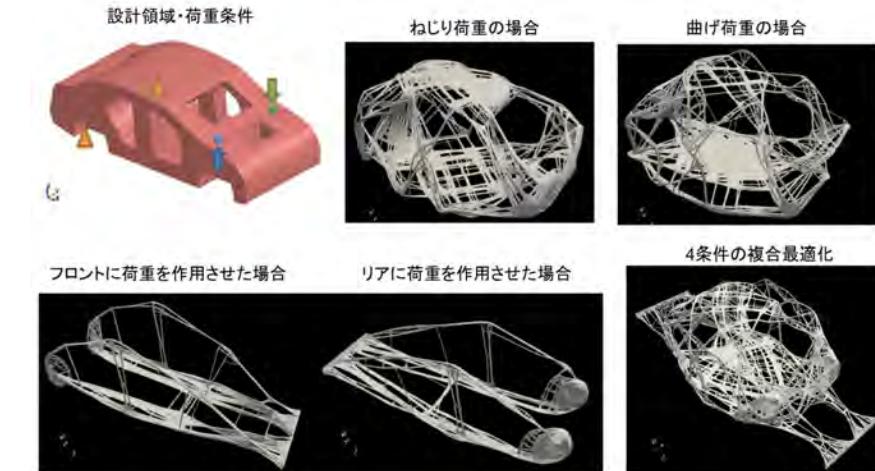
- SpaceX社の冶金技術（アルミニウム）を活用したTesla社のギガキャスティングの登場により、**従来の50%のコストで車体構造の製造が可能となった。**
- 2022年、NIOやXPeng等の中国を代表するBEVメーカーに加えてボルボ社も、ギガキャスティングの採用を発表。2023年6月、トヨタ自動車もギガキャスティングの採用を発表。
- 幾何学的自由度が高い構造設計が可能
 - トポロジー最適化は、線形弾性体かつ微小変形の問題にしか適用できない。つまり、**クラッシュブル・ゾーン（車体前方部・後方部）の最適構造を探索するのは現状では困難。**



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

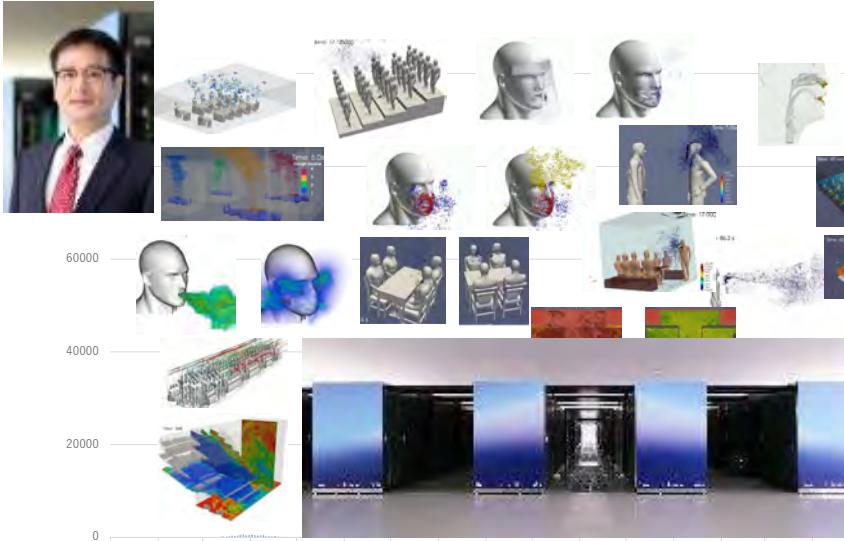
- 2023年4月のBabyAGIの開発・公開に端を発して、GPTを利用したAGIの開発がOSSコミュニティを中心に急速に進んでいる：BabyAGI, AutoGPT, AgentGPT, GoalGPTなど
 - ゴールを与えるだけで、GPTが自動的にWebなどをサーチ、評価して、新たなゴール生成を繰り返す
- AGI科学者：これを応用し、高度な基盤モデルを用いて、科学の探求プロセスをAIが行う試みがはじまっている。例：**Emergent autonomous scientific research capabilities of large language models: <https://arxiv.org/abs/2304.03442>**
- 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



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



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 considerably incorrect even in some cases non-scientific and contentious such information comes from essentially

<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

Model: GPT-4

We are trying to curtail the pandemic similar to COVID-19 with the use of a very powerful supercomputer such as Riken Fugaku. In particular, we would like to make an effective use of its computer power as well as existing portfolio of applications and the sciences it enables, and repurpose them to fight COVID to curtail the transmission while preserving the daily lives of people as much as possible. What are the viable areas of research using such supercomputers to use, and what are the step by step research procedures to be taken to be most effective?

Using a supercomputer like Riken Fugaku to curtail the transmission of a pandemic similar to COVID-19 while preserving the daily lives of people can be approached through various research areas. Here are some viable areas of research and their respective step-by-step procedures:

- Drug discovery and repurposing:
 - Perform molecular dynamics simulations to understand the structure and behavior of the virus and its proteins.
 - Identify potential drug targets by examining the viral proteins and their interactions with human proteins.
 - Screen existing drug databases to identify potential drug candidates that can bind to the target proteins.
 - Simulate the interaction between drug candidates and target proteins to assess their effectiveness.
 - Validate the effectiveness of the selected drug candidates.
- Epidemiological modeling:
 - Collect data on infection rates, transmission dynamics, and mortality.
 - Develop mathematical models to simulate the spread of the virus across different populations and under different conditions.
 - Use the supercomputer to perform large-scale simulations of various intervention strategies, such as social distancing campaigns.
 - Evaluate the effectiveness of these strategies in减轻ing the burden on healthcare systems.

Creating Python code for the entire CFD simulation process is beyond the scope of a single response. However, I can provide you with an outline of how to set up a simple 2D laminar flow simulation using OpenFOAM and Python. For this, we'll use the `pyFoam` library, which is a Python wrapper for OpenFOAM. Make sure you have OpenFOAM and pyFoam installed before proceeding.

1. Import required libraries and set up the case directory:

```
python
# Import os
from PyFoam.Applications.CloneCase import CloneCase
from PyFoam.Applications.Runner import Runner

# Set up the case directory
case_template = "path/to/your/OpenFOAM/case/template" # Replace with the path to your template case
case_directory = "path/to/your/new/simulation" # Replace with the path where you want to clone the case
clone_case = CloneCase(args=[case_template, case_directory])
clone_case.run()
```

2. Modify parameters and boundary conditions using "PyFoam":

```
python
from PyFoam.RunDictionary.ParsedParameterFile import ParsedParameterFile

# Modify transportProperties
transport_properties = ParsedParameterFile(os.path.join(case_directory, "transportProperties"))
transport_properties["nu"] = 1.0e-5 # Set kinematic viscosity (in m^2/s)
transport_properties.writeFile()

# Modify U (velocity) boundary conditions
velocity_boundary_conditions = ParsedParameterFile(os.path.join(case_directory, "velocityBoundaryConditions"))
velocity_boundary_conditions["outlet"]["value"] = "uniform (0 0 0)" # Set outlet velocity
velocity_boundary_conditions.writeFile()

# Modify p (pressure) boundary conditions
pressure_boundary_conditions = ParsedParameterFile(os.path.join(case_directory, "pressureBoundaryConditions"))
pressure_boundary_conditions["outlet"]["value"] = "uniform 0" # Set outlet pressure
pressure_boundary_conditions.writeFile()
```

3. Run the simulation:

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

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

計算科学ロードマップ 概要

- <https://cs-forum.github.io/hpc-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

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ンプルなモデル

画期的創薬・医療技術の創出

今後の科学計算からのアプローチ

- DNAシークエ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人に最適な治療法を提供するテラーメード医療の実現
- 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⁴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い、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。

機能	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ量 バンド幅 (PB/s)	ストレージ量 バンド幅 (PB)	計算時間 /ケース (hour)	ケース数	実行漸進 (EFLOP)	標準と計算手法	問題範囲	備考
個人ゲノム解析	0.0054	0.0001	1.6	0.1	0.7	200000	2700 シーケンスマッピング	がんゲノム解析200万基準分のマッピングおよび変異定	1人分のゲノムを1ケースとした。入力ゲノムを1GB以下とする。細かい位置での実行。収束をまたいた実行可能。整数演算中心のため、既存演算子はInstructionとした。既存動小数点演算量は45.864FLOPとなる。
遺伝子ネットワーク解析	25	89	0.08	0.015	0.34	1000000	ヘテインネットワーク解析 UNI直前の実行	参考 DOEの最新レポート	DOEの最新レポート
創薬などMD・自由エネルギー計算	1000	400	0.0001	0.0012	1000000	4000000 全原子分子運動力学シミュレーション	ゲース数:10万分子合物、10種類の蛋白質/10万原子程	は既存の演算性能を最大限に活用することを想定しているので、実行時間が必要な全メモリ量、各ケースの実行時間は、表の値の数となる。メモリ/ドライブ実行時間は想定していない。	は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。
細胞環境・ウィルス	490	49	0.2	1.2	48	10			は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。
細胞内信号伝達シミュレーション	42	100	10	10	240	100			は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。
高精度創薬	0.83	0.14	1	0.001	1	100			は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。
バイオデバイス設計	1.1	0.19	1	0.001	1	100			は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。
血流シミュレーション	400	64	1	1	170	10			は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。
超音波シミュレーション	380	460	54	64	240	10			は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。
脳神経系シミュレーション(全脳) (ヒト)	※	※	※	3500	0.28	100	700 ハードコンバーメント+モード	1000億ニューロン、ニューロンあたり1万ナップス ※ナップス過信 逆走のアルゴリズム	は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。
脳神経系シミュレーション(ヒト) (全脳) ※詳細モデル・神經回路パラメータ 既定・生成実験とシミュレーションの連携	※	※	※	20	20	140000	マルチコンバーメント+モード ※ナップス過信 逆走のアルゴリズム	1000ニューロン 伝子 100世代 10 ¹⁶ 道	は既存の演算性能を最大限に活用することを想定している。

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

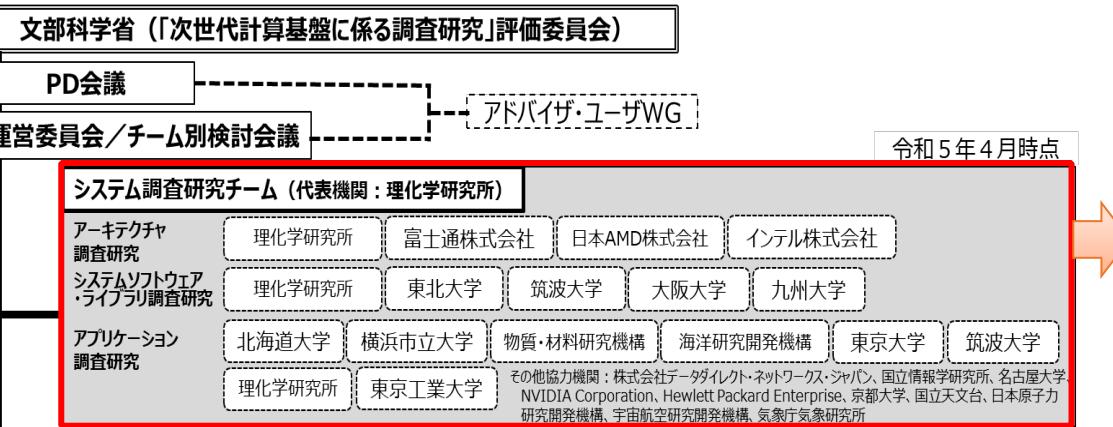
富岳NEXTへ向けて

- **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

「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

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)							
半導体 プロセス 予測	TSMC N5	TSMC N4	TSMC N3	TSMC N2	TSMC N1.4?						
	Intel 10nm	Intel7 (10nm+)	Intel 4	Intel 3	Intel 20A	Intel18A	Intel15A?				

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)

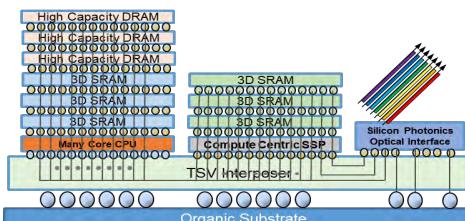
- アーキ候補の抽出、ベンチマーク評価・解析を実施中

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トイング評価を計画
(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ベンチマークリ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

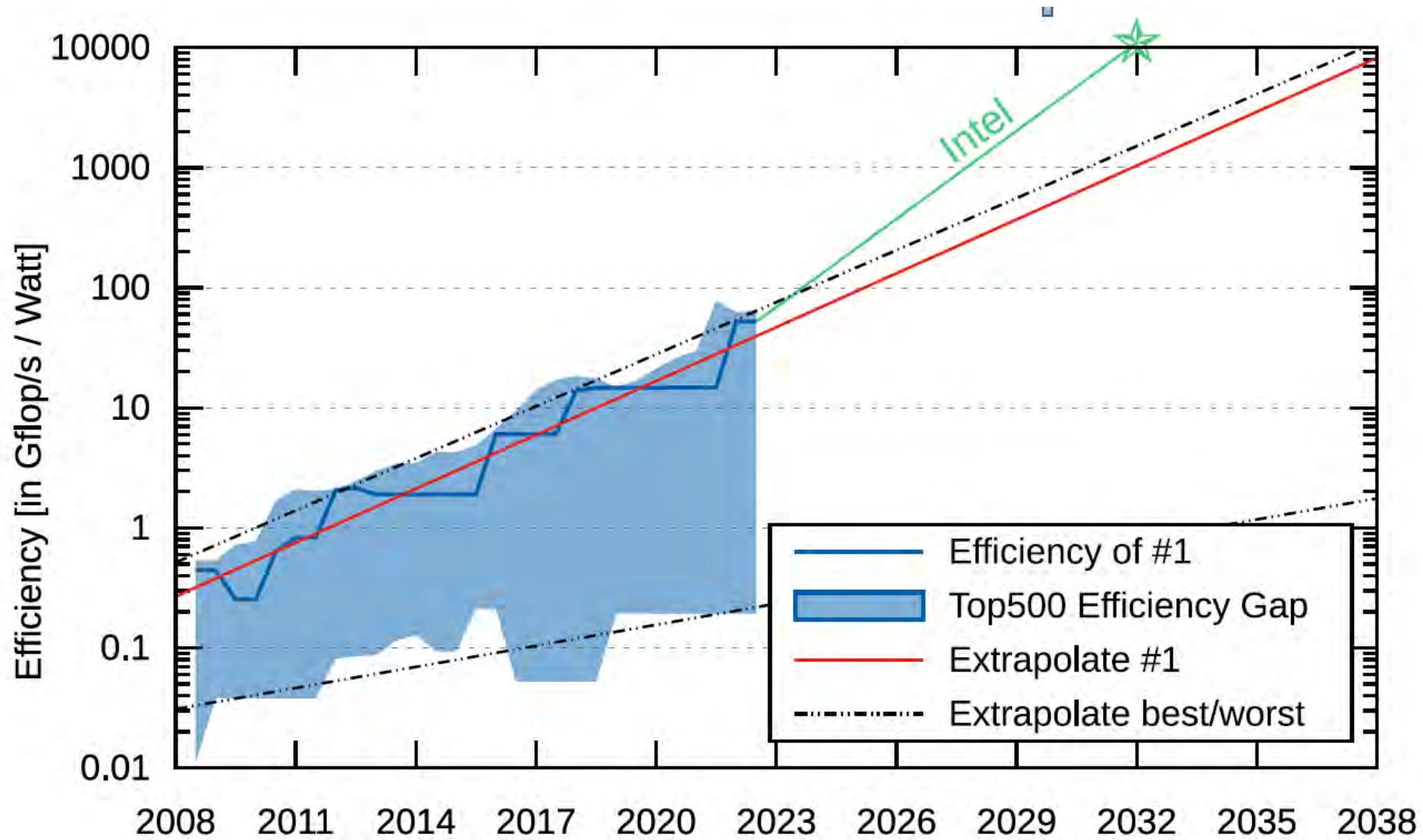
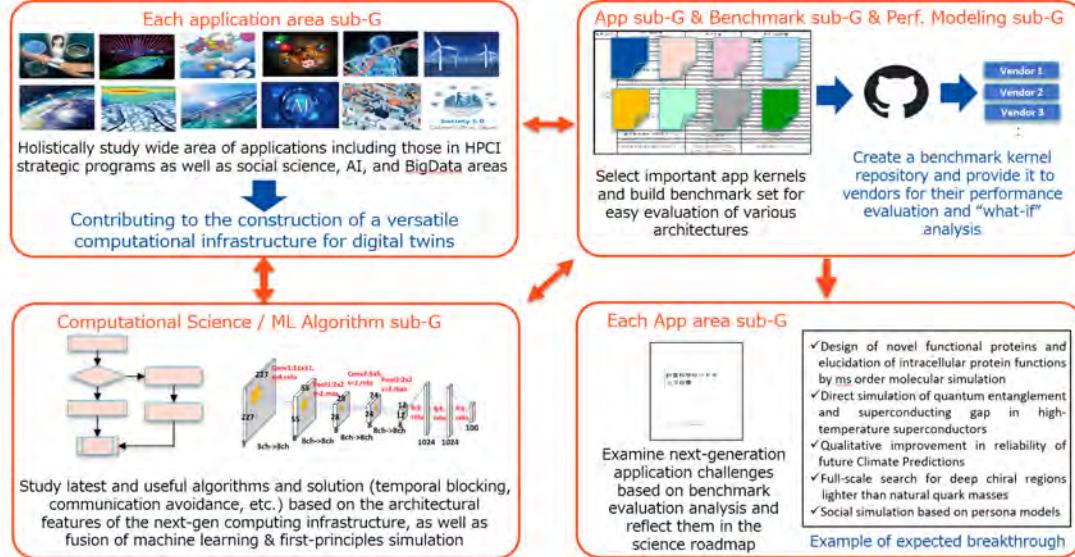


Figure 2. Historical fp64 power efficiency [in $\frac{\text{Gflop/s}}{\text{Watt}}$] extrapolated until 2038 to put Intel's zettaflop/s claims into perspective.

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

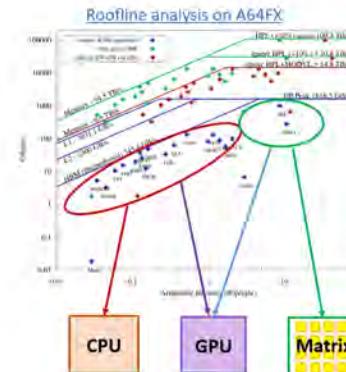
	Technical difficulty	Power efficiency of data movement	
chip-to-chip connection [chiplets]	Low	Low	Monolithic die (conventional)
3D stacking approaches	Medium	Medium	Chiplet-based (becoming main-stream)
Optics	High	High	More aggressive chiplet-based (Future direction)

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, 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



Quantitative benchmarking analyses is necessary



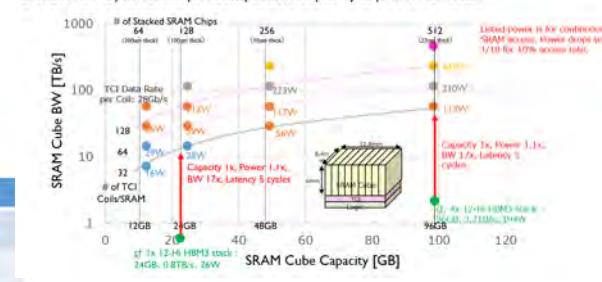
What and how to integrate them?

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

- 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 venders, major Universities, and National Labs in JP

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

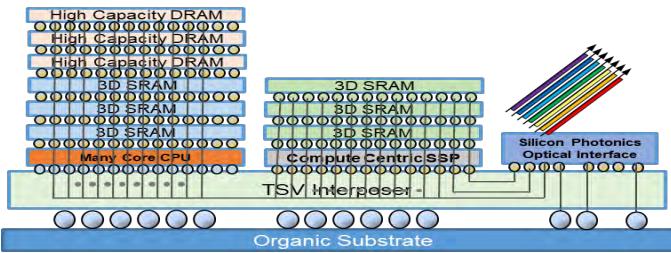
● Investigating arch candidates and feasibility

- Examine elementary techs and initial arch.

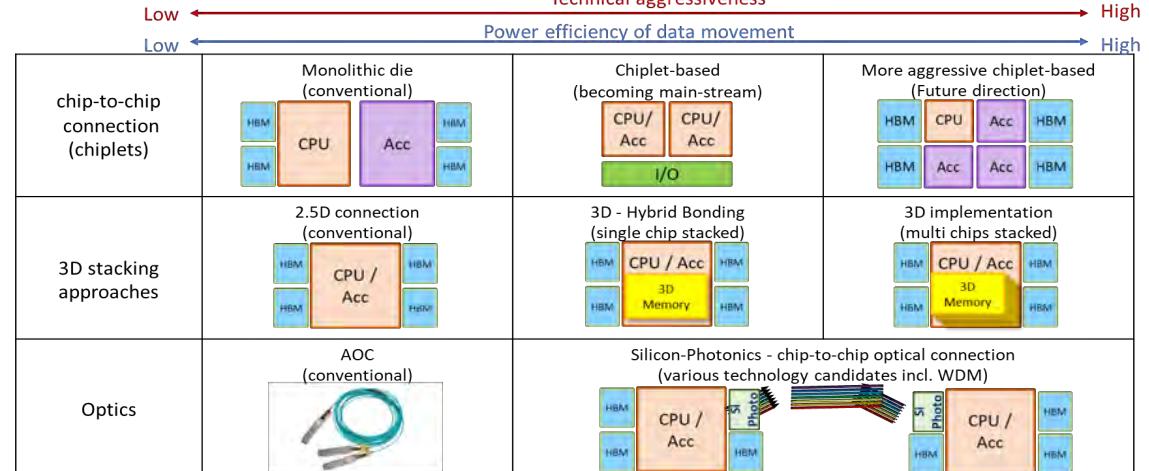
FugakuNext Expected Schedule

2020 R2	2021 R3	2022 R4	2023 R5	2024 R6	2025 R7	2026 R8	2027 R9	2028 R10	2029 R11	2030 H12
C F P		Feasibility Study		FugakuNEXT PJ (Basic Design)		FugakuNEXT PJ (Detailed Design)		Production & Installation		
TSMC N5	TSMC N4	TSMC N3	TSMC N2	TSMC N1.4?						
Intel 10nm	Intel7 (10nm+)	Intel 4	Intel 3	Intel 20A	Intel18A	Intel15A?				
<i>Expected Technology Node</i>										

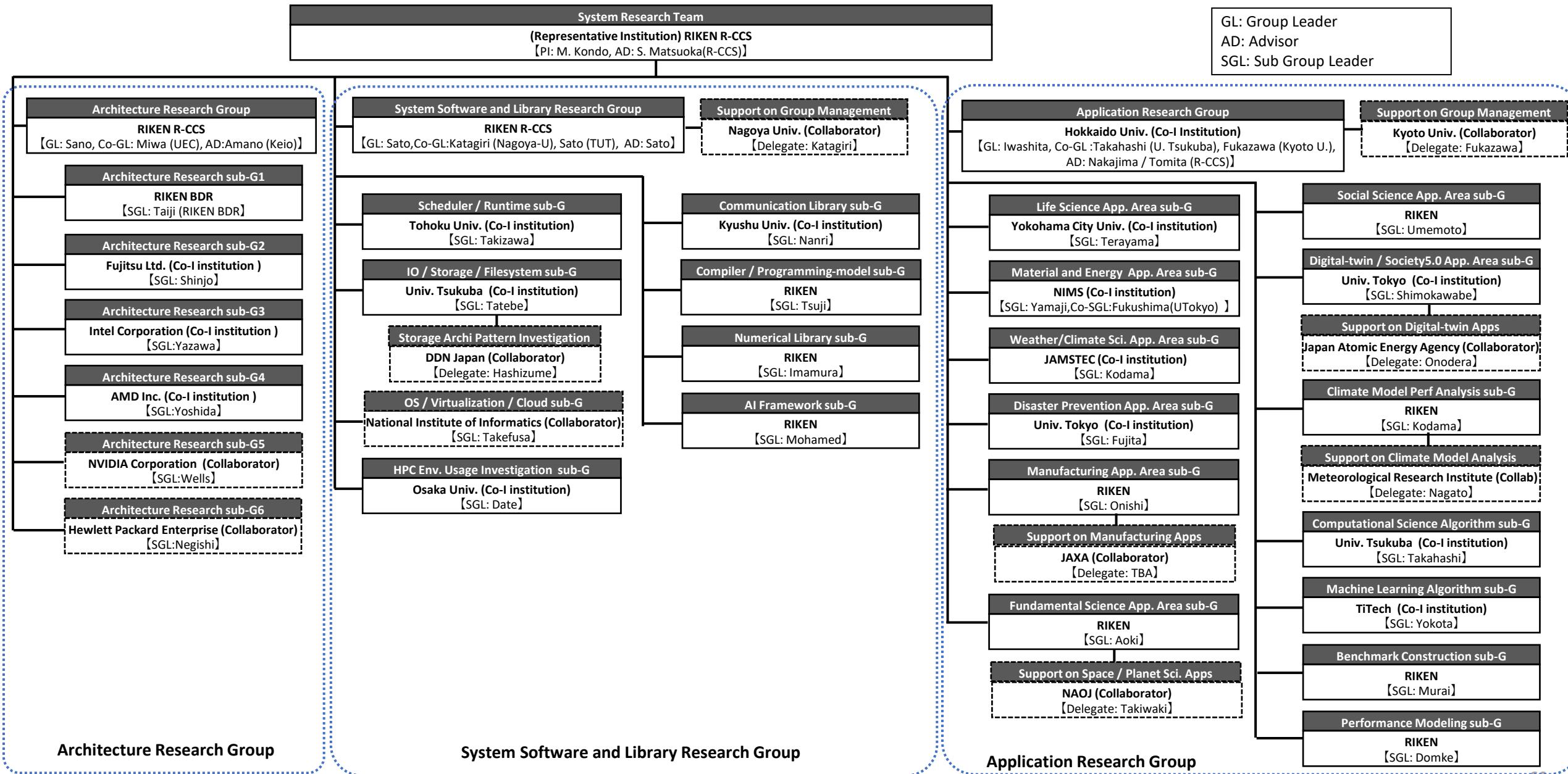
RIKEN’s strawman node architecture



Implementation Approaches

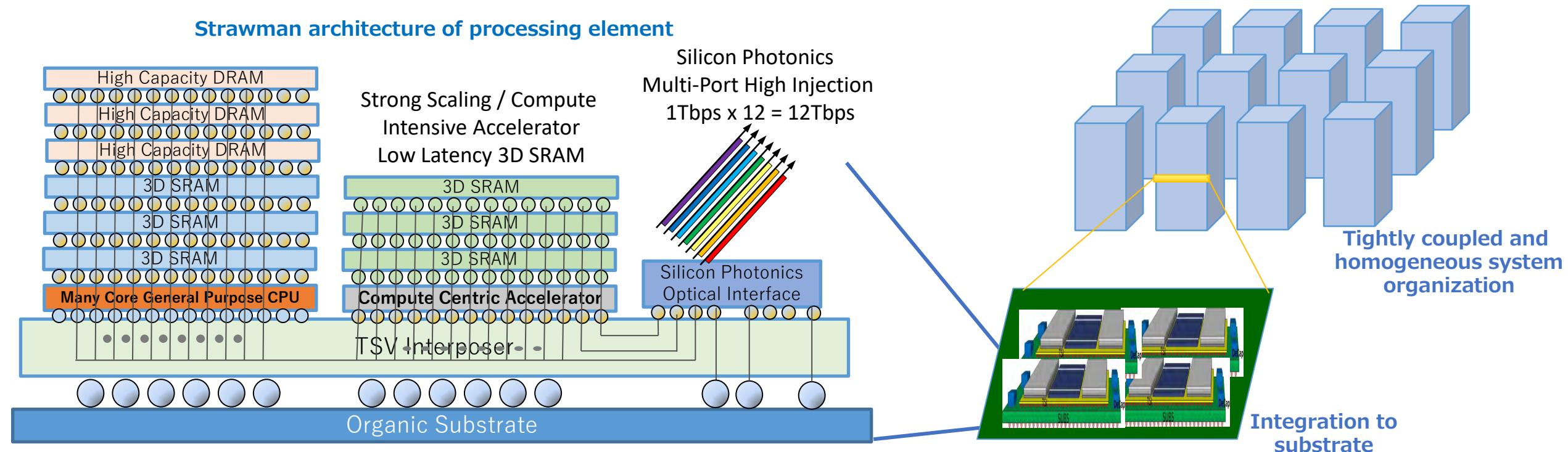


Organization Chart of System Research by RIKEN



- 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.



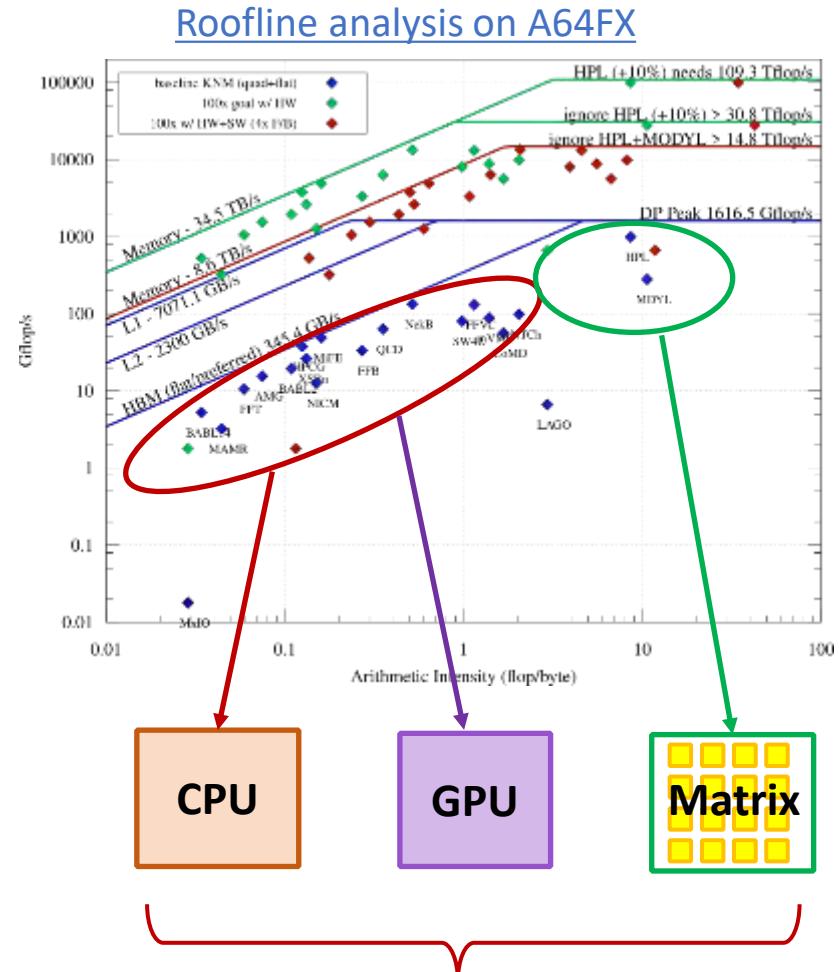
“3D stacked memory” & “Photonics” technologies: Post-Fugaku as a technology driver

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



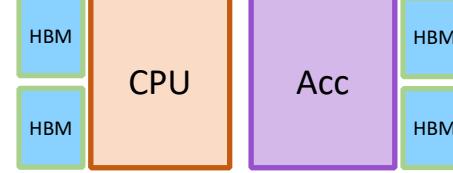
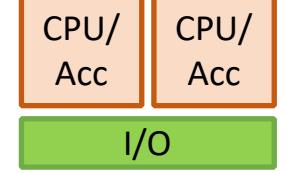
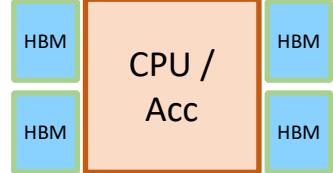
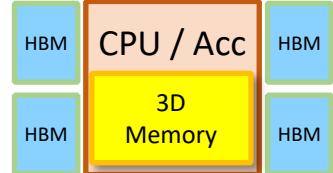
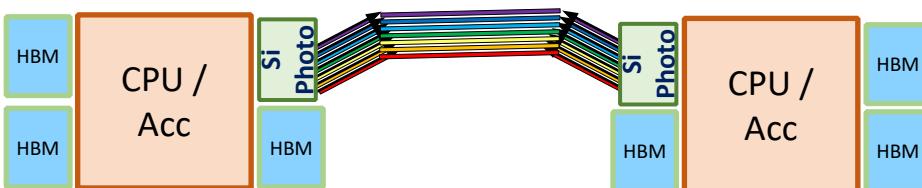
Quantitative benchmarking analyses is necessary



What and how to integrate them?

Implementation Approaches for Node Architectures

- Candidates of packaging technologies

		Technical difficulty	
		Low	High
		Power efficiency of data movement	
chip-to-chip connection (chiplets)	Monolithic die (conventional)		Chiplet-based (becoming main-stream) 
3D stacking approaches	2.5D connection (conventional)		3D - Hybrid Bonding (single chip stacked) 
Optics	AOC (conventional)		Silicon-Photronics - chip-to-chip optical connection (various technology candidates incl. WDM) 

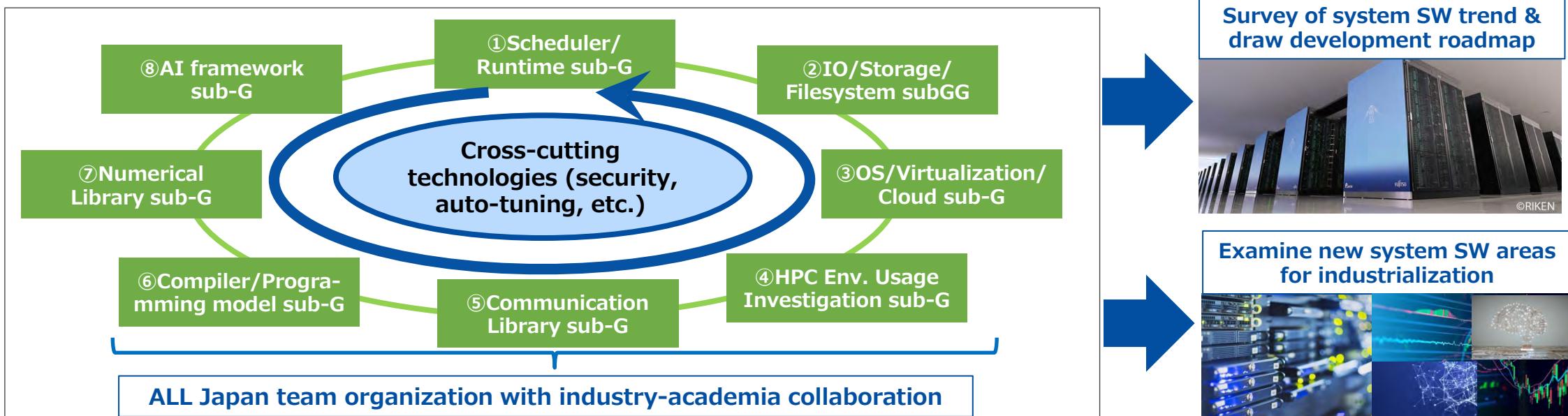
Objective and Overview

• 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



Strategy of Application Research Group

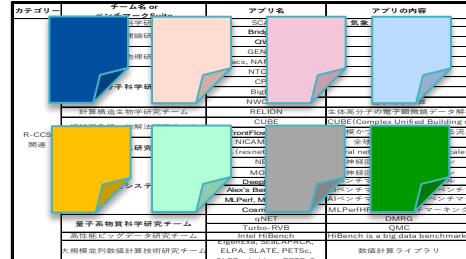
Each application area sub-G



Holistically study wide area of applications including those in HPCI strategic programs as well as social science, AI, and BigData areas

Contributing to the construction of a versatile computational infrastructure for digital twins

App sub-G & Benchmark sub-G & Perf. Modeling sub-G

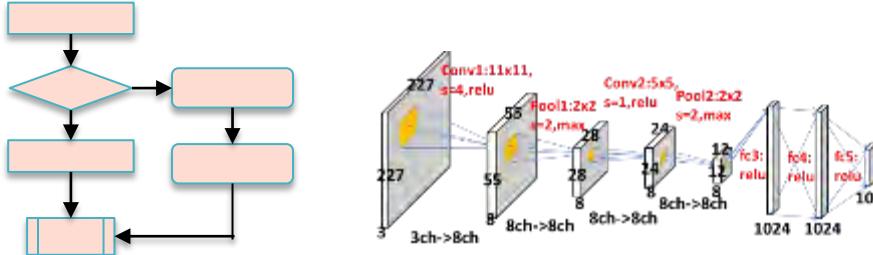


Select important app kernels and build benchmark set for easy evaluation of various architectures



Create a benchmark kernel repository and provide it to vendors for their performance evaluation and "what-if" analysis

Computational Science / ML Algorithm sub-G



Study latest and useful algorithms and solution (temporal blocking, communication avoidance, etc.) based on the architectural features of the next-gen computing infrastructure, as well as fusion of machine learning & first-principles simulation

Each App area sub-G



Examine next-generation application challenges based on benchmark evaluation analysis and reflect them in the science roadmap

- ✓ Design of novel functional proteins and elucidation of intracellular protein functions by ms order molecular simulation
- ✓ Direct simulation of quantum entanglement and superconducting gap in high-temperature superconductors
- ✓ Qualitative improvement in reliability of future Climate Predictions
- ✓ Full-scale search for deep chiral regions lighter than natural quark masses
- ✓ Social simulation based on persona models

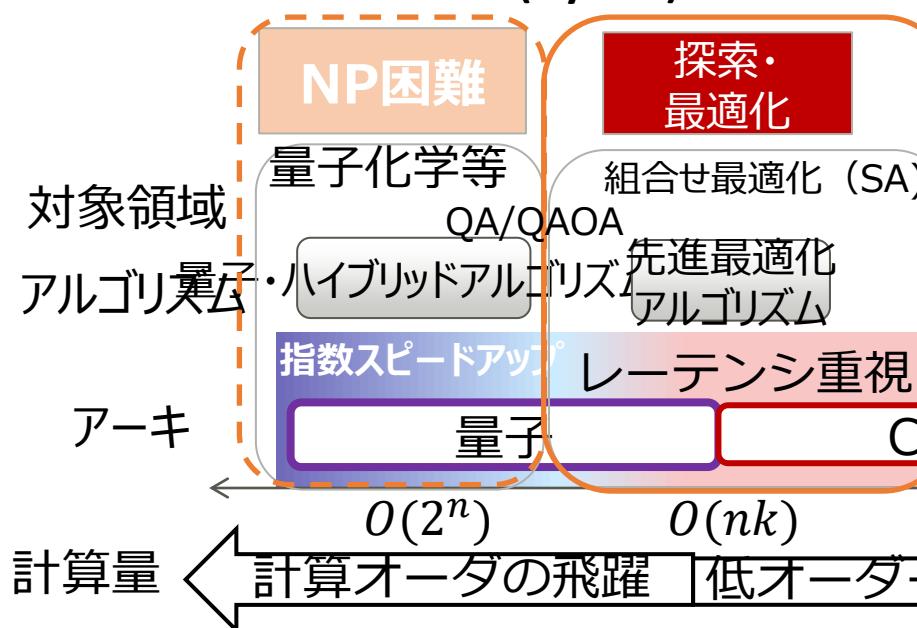
Example of expected breakthrough

※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

量子の未来(Hybrid)



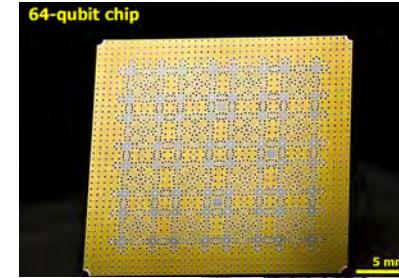
古典の未来(Fugaku NEXT, FugakuNEXT^2)



理化学研究所における量子コンピュータ研究

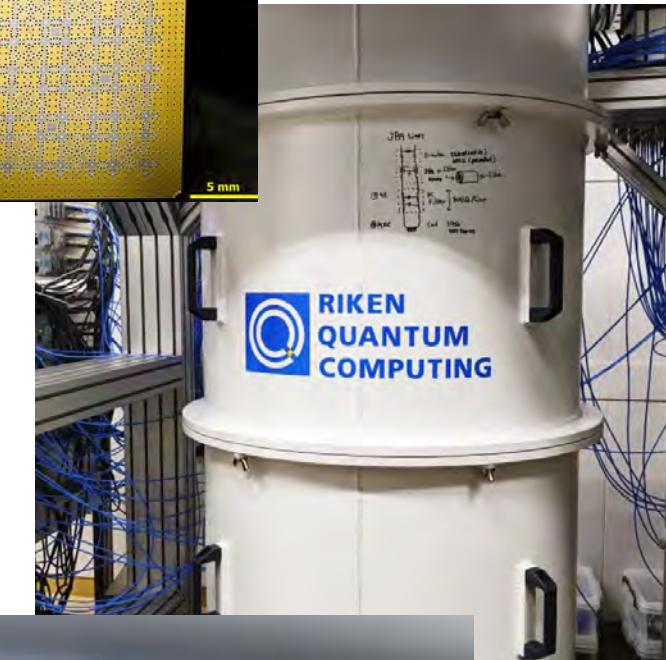
● 量子コンピュータ研究センター (RQC)

- 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

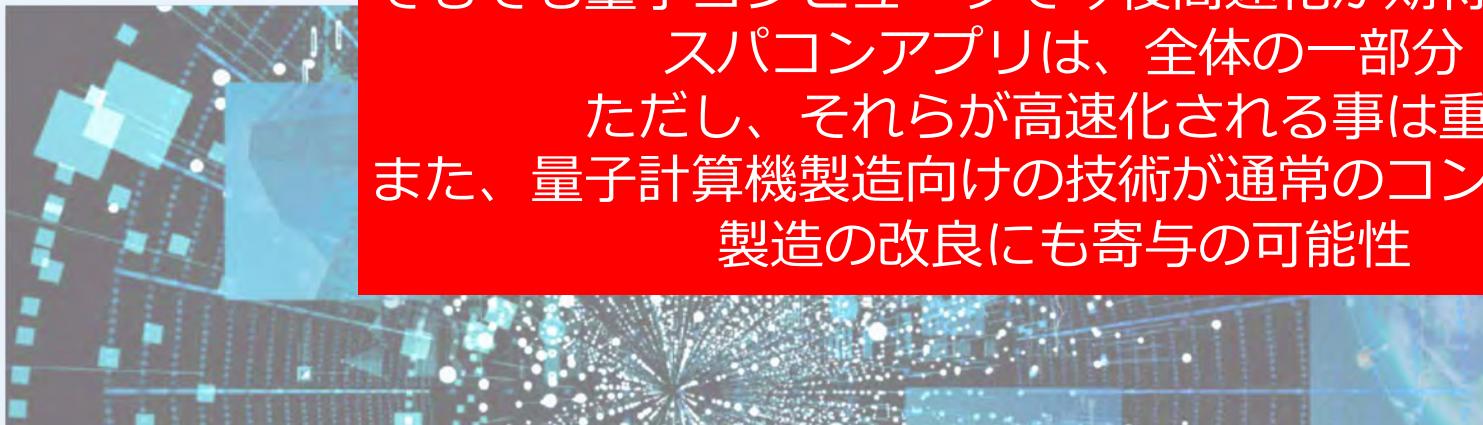


- 量子ゲート素子開発のための物理シミュレーション
 - ✓ 多くの素子開発がスパコンのMaterial Informaticsをベースに実施中
- 量子アルゴリズムのシミュレーション
 - ✓ 米国、フランスで実際にスパコン上でシミュレーションを通じ研究中
- 量子超越性を比較・検証するためのHPC
 - ✓ Google の量子超越性の主張根拠とIBMの反証もスパコンで行われている



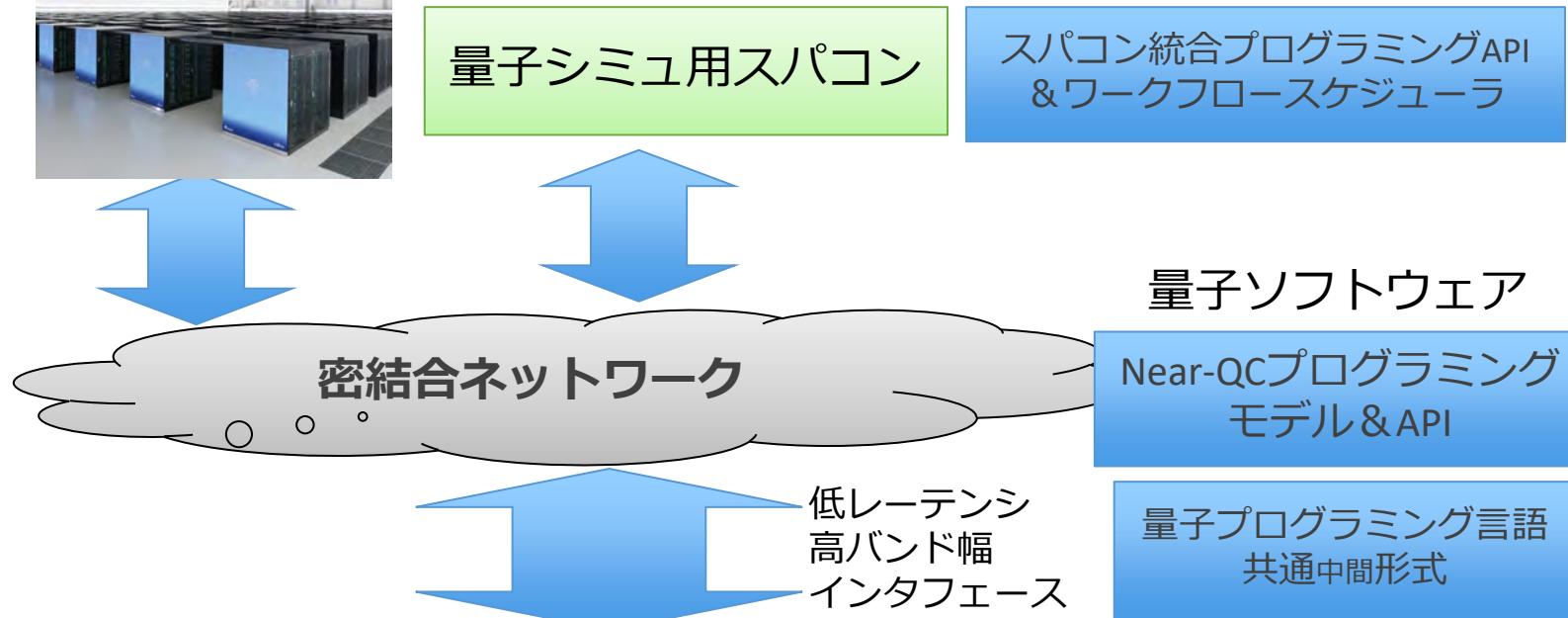
量子コンピュータの実現には、トップ・スパコンの開発と利用が必要

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、全体の一部分
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



量子コンピュータ (実機、シミュレータ)



FPGA

直接観測
制御可能

量子コンピュータ(RQC,
各ベンダー)スパコンによる量子コンピュータシミュレーション
(R-CCS/RQC, 各ベンダー)

- 量子BLAS : 線形代数の基本ルーチン
- Qiskit : IBMによるフレームワーク、トランスペイラ機能を持つ
- Cirq : Google による開発ツール
- TensorFlow Quantum : 量子機械学習フレームワーク
- Q#:Microsoftのプログラミング言語
- Qulacs : 阪大、QuanSys シミュレーション用言語
- Covalent: Agnostiq、量子HPC環境開発ワークフロー
- PyQubo : 組み合わせ最適問題を二値変数二次計画問題 (QUBO)に定式化

- 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

