

理研計算科学研究センター(R-CCS) スーパーコンピュータ「富岳」の概要



理化学研究所 計算科学研究センター
センター長 松岡 聡

2010年ごろから始まったスーパーコンピュータ「富岳」の開発の概要

(フラッグシップ2020プロジェクト開始は2014年から)

計算機システムとアプリケーションの協調的な
開発手法 (Co-design)

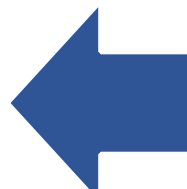
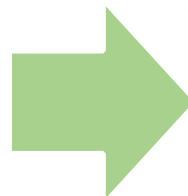
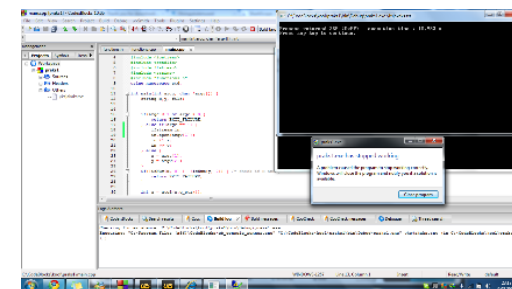
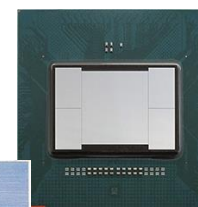
「計算による科学」

「計算の科学」

● **重点9課題** : アプリケーション対象として健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の様々な社会的・科学的課題を選定

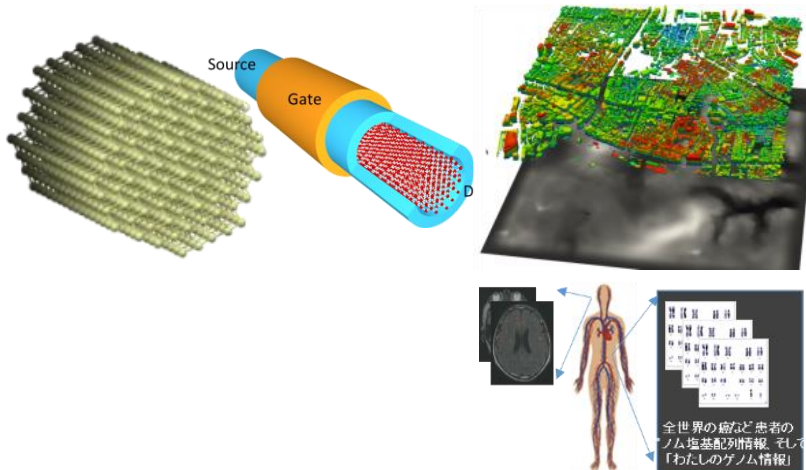


R-CCS 研究所・開発室
開発企業



各種アプリケーションの様々な計算上の特性を一般化・特徴化

各アプリ特性を加味したシステム設計、及びそれに適したアプリの最適化



- 理化学研究所R-CCSと開発企業(富士通)、及び重点課題機関の密な研究開発体制
- 「コ・デザイン」のため各分野から9つの代表的な「ターゲットアプリケーション」の選定
- 京と比較して複数の「ターゲットアプリケーション」で**100倍以上**の性能向上を目標・達成
- 同時にプログラミングを含む使い易さの向上・高い電力性能なども

スーパーコンピュータ「富岳」の技術革新の数々



1. マシン全体として京から受け継ぐ高性能

- ◎ アプリにおける高演算性能：京と比較で最大100倍以上の性能向上
- ◎ 重点・萌芽課題における多くの科学的成果創出の準備・期待
- ◎ 高性能の達成と、容易なプログラミング・高実用性の両立

2. 特筆：開発されたCPU、A64fxの技術イノベーション

- ◎ **汎用CPUとして世界一の圧倒的な高性能**
従来の海外製CPUの最大10倍近い性能
- ◎ **汎用CPUとして世界一の省電力・グリーン性能**
汎用CPUとして圧倒的に世界トップの電力効率
- ◎ **Arm CPU「エコシステム」の頂点となる性能**
年間210億個以上生産されるArmプロセッサの命令セットを採用
グローバルスタンダードの頂点、世界への広範囲な普及
- ◎ **Society 5.0のためのAIなどの為の機能追加**
シミュレーションだけでなく、ビッグデータ、AI、次世代コンピュータセキュリティなどの、Society 5.0の広い分野で高性能を発揮

マシン自身だけでなく
半導体やITのテクノロジー
でも世界をリード



ARM：スマホ等の機器、
車載チップ等で
巨大なエコシステム

A64FX™

Society 5.0への適用 ➡ **シミュレーション・ビッグデータ・AIの加速**

更にクラウド等のインフラ、および技術としても世界に展開普及も

スーパーコンピュータ「富岳」における 世界トップ性能と世界一の広がり

両立した スパコンの理想像

高い大規模アプリケーションの
加速能力とパーパビリティ



幅広い利用形態 (容量・キャパシティ)
幅広いアプリケーション: シミュレーション、データ科学、AI
幅広いユーザ層: アカデミア、企業、クラウドなどへも

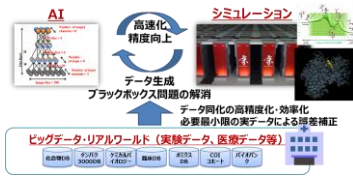
スパコン「富岳」におけるシミュレーションとAIの融合で社会問題の解決へ



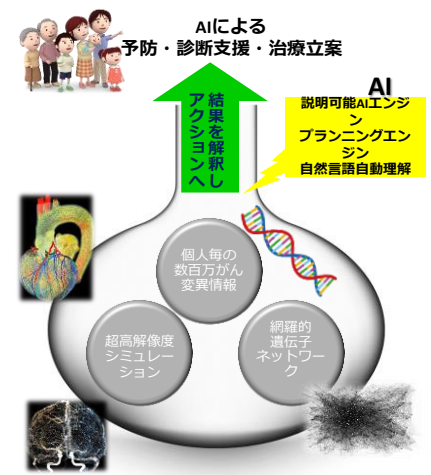
ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI
 <健康長寿社会の実現>

HPCとAIの協調がもたらす分子生命科学・創薬の進化

- <分子シミュレーションの高度化>
 - AIによるMDの計算条件（パラメータ）の効率的探索
 - AIを用いたMD計算結果の解釈
 - MD計算結果のAI学習によるMD過程の自動生成
 - MD×AI×実験の融合によるデータ同化の高精度・効率化
- <AIの弱点の克服>
 - 実験データの代替として、シミュレーション結果をAIの学習に利用（実験データ不足問題の解消）
 - AIの予測結果に合致するシミュレーションモデルからAIの学習過程を外装する（AIのブラックボックス問題の克服）
- <分子シミュレーションの未踏領域への連携>
 - AI力場
 - AIによる化合物構造の自動生成
 - ADMET（薬物動態・毒性）のAI予測
- <産学連携コンソーシアム>
 - 100社以上の製薬・IT企業からなるAI創薬コンソーシアムを設立し、30種の創薬AIを開発中



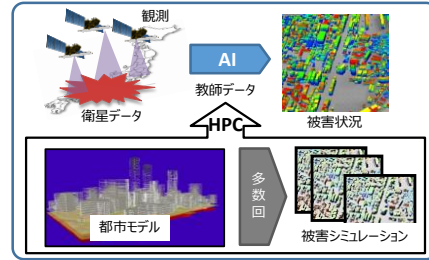
AIパワード個別化・予防医療 —ビッグデータ・シミュレーションBEYOND—



ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI
 <防災・環境問題>

衛星データから被害状況を推定するAI

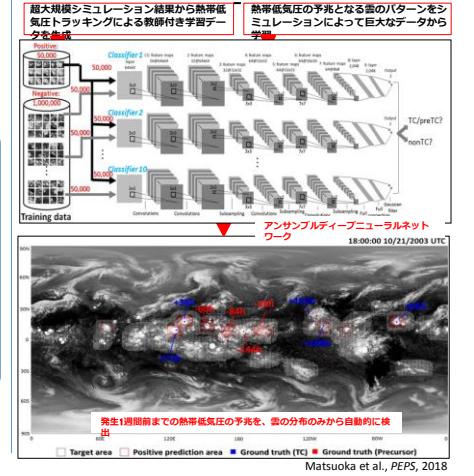
背景：大規模地震・津波災害に対し、効果的な初動体制を敷くためには、衛星コンステレーションを使う広域の被害状況の推定が重要
 方法：HPCの被害シミュレーションを教師データとしたAIを利用することで、多数の衛星データから、被害状況を高精度・高分解能・短時間で推定。



都市毎に超詳細な都市モデルを構築し、地震・津波のHPCシミュレーションを実行。シミュレーション結果を衛星データに変換し、これを「衛星データから被害状況を推定するAI」の教師データを生成。各都市の構造物の特徴を取り込むことで、都市毎にチューンアップしたAIが開発。

ディープラーニングによる台風の予兆検出

—より早く台風の発生を予測し、安全・安心と経済効果に役立てる—



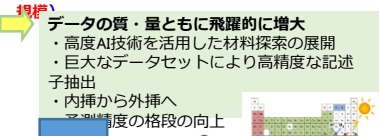
ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI
 <エネルギー問題>

マイクロな視点からのエネルギー関連材料の探索・開発の加速

第一原理・量子化学計算による詳細で大規模な学習用データセット生成

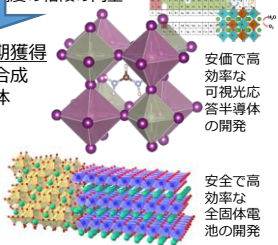
京 x AI：小規模データセット（数万規模）
 → 基本的機械学習技術による材料探索

ポスト京 x AI：詳細で大規模なデータセット（数百万から数千万）
 → 高度AI技術を活用した材料探索の展開

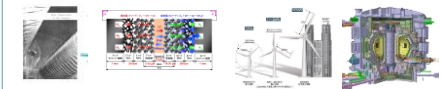


新規材料指針の早期獲得

- 太陽電池、人工光合成
- 可視光応答半導体
- 二次電池
- 固体電解質
- 燃料電池
- 白金代替触媒
- 二酸化炭素
- 吸収液材料



革新的クリーンエネルギーシステム（石炭ガス化炉、燃料電池、洋上風力発電、核融合炉）の実現



種々の部分シミュレーションモデル
 ↓
 HPC（標準計算機）とAI（機械学習等）の連携活用に基づく低自由度モデルのパラROM（Reduced Order Modeling）技術に基づく低自由度高精度モデル構築と、統合シミュレーションへの組み込み

各エネルギーシステムのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション（高自由度デジタルツイン）の構築と実機的设计・運用・保全へのポスト「京」の直接活用

ROMに基づく低自由度高精度モデル構築
 ↓
 HPC（標準計算機）とAI（AIマシン）の連携活用に基づく低自由度モデルのパラメータ同定

HPC（標準計算機）上の各エネルギーシステムの低自由度高精度モデル（低自由度デジタルツイン）を用いた実機的设计最適化、オンライン運用最適化・保全最適化

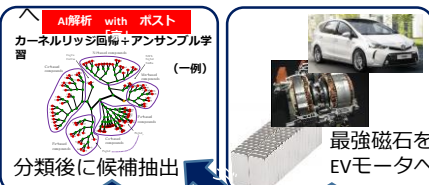
（出典）：HPCI計画推進委員会ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するワーキンググループ（第6回）（名称修正）



ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI
 <産業競争力の強化>

エネルギー消費・創成の主要モータ/発電機用永久磁石の新材料提案

無限の組み合わせから候補材料をAIで抽出
 ⇒物性値計算で候補を絞り込み、実験で検証



広大な材料探索空間：三元系 $A_xB_yC_z$ の場合
 A, B, C：元素100種類
 x, y, z ：0~10程度

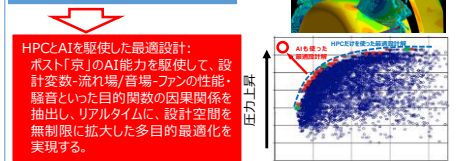


パワー半導体、超伝導、構造材料等でもAI活用

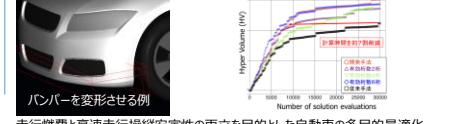
近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

ポスト「京」のHPC能力とAI能力を駆使し、シミュレーションによるものづくりの設計方法を変革し、付加価値の高いものづくりを実現する。

1) 冷却ファンの性能・騒音最適設計の例
 目的：圧力が高く、騒音が小さいファンを設計する
 HPC（のみ）を駆使した最適設計：ポスト「京」のHPC能力を駆使して、多ケースの高精度シミュレーションを短時間に実行し、最適設計解を得る。



2) 自動車の空力最適設計の例
 HPC&AIを駆使した最適設計：ポスト「京」のAI能力を駆使して、設計変数-流れ場/音場-ファンの性能、騒音といった目的関数の因果関係を抽出し、リアルタイムに、設計空間を無制限に拡大した多目的最適化を実現する。



走行燃費と高速走行操縦安定性の両立を目的とした自動車の多目的最適化

