

富岳NEXT：AI for Scienceの高度化に向けた AI・HPC融合プラットフォームの開発へ

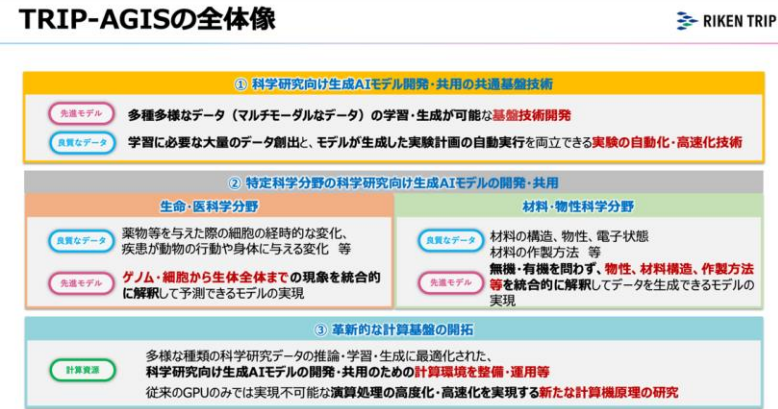
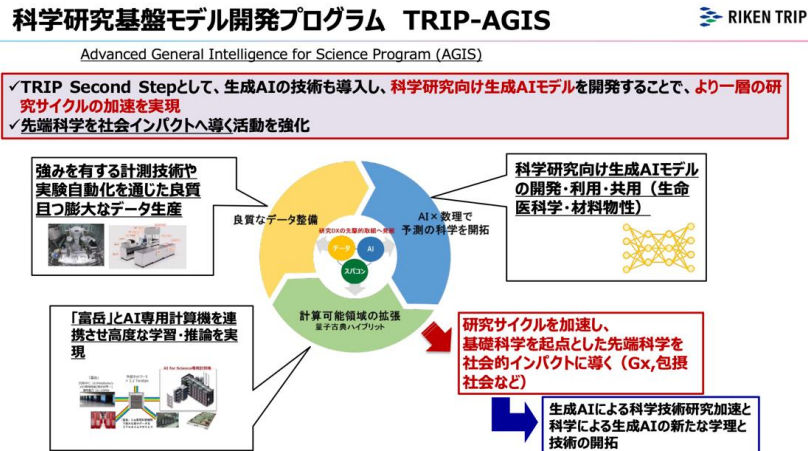
理化学研究所 計算科学研究センター（R-CCS）
次世代計算基盤開発部門 部門長
近藤 正章

AI for Science高度化に向けた計算基盤の要件



理研における AI for Science 推進のための取り組み

- 理研 TRIP-AGISによる AI for Science の実用化 [1]
 - 汎用的な基盤モデルを活用しつつ、科学研究データを系統的に学習させ各分野における科学基盤モデルを開発
 - 科学基盤モデルを活用し、実験自動化技術・シミュレーション技術と組み合わせることで、科学研究の自動化を推進
 - 開発した科学基盤モデルとその利用技術を産学に広く開放することで、多様な分野における科学研究の革新（科学研究サイクルの飛躍的加速、科学研究の探索空間の拡大）を目指します。



[1] 資料：泰地 真弘人, 基調講演「TRIP-AGIS: 理研のAI for Scienceプロジェクト」LLMシンポジウム2024「大規模言語モデルのあるべき姿とは？」(https://llmc.nii.ac.jp/events/llmsymposium20240925_report/)

- DOE-MEXT事業取り決めや理研-アルゴンヌ国立研究所間のMoUに基づくAI for Scienceの国際的連携
 - 基盤モデル、研究データ、アプリ、SW等の相互活用を含めてAI for Scienceの取り組みを強力に推進



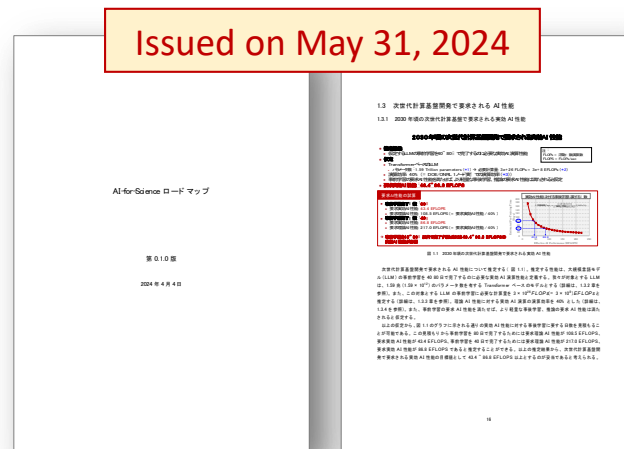
我が国での計算科学およびAI for Science ロードマップ

● 計算科学ロードマップ

- 基盤技術としてのスーパーコンピュータが重要性を増す中で、2011 年、HPCI 計画の推進にあたり国として今後の HPC 研究開発に必要な事項等を検討するため、文部科学省研究振興局長の諮問会議「HPCI 計画推進委員会」のもとに「今後の HPC 技術の研究開発のあり方を検討する WG」(2011-2012) が設置
- その後、「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」」(2013-2014)、「今後のHPCIを使った計算科学発展のための検討会」(2015/01-2017/06)、「HPCIC計算科学フォーラム」(2017/07-)の活動を通じて、継続的な計算科学ロードマップの更新・公開
 - 2012/03「計算科学ロードマップ白書2012」→ 2014/03「計算科学ロードマップ2014」→ 2017/06「計算科学ロードマップ2017」→ 2023/12「計算科学ロードマップ2023」(第0版)

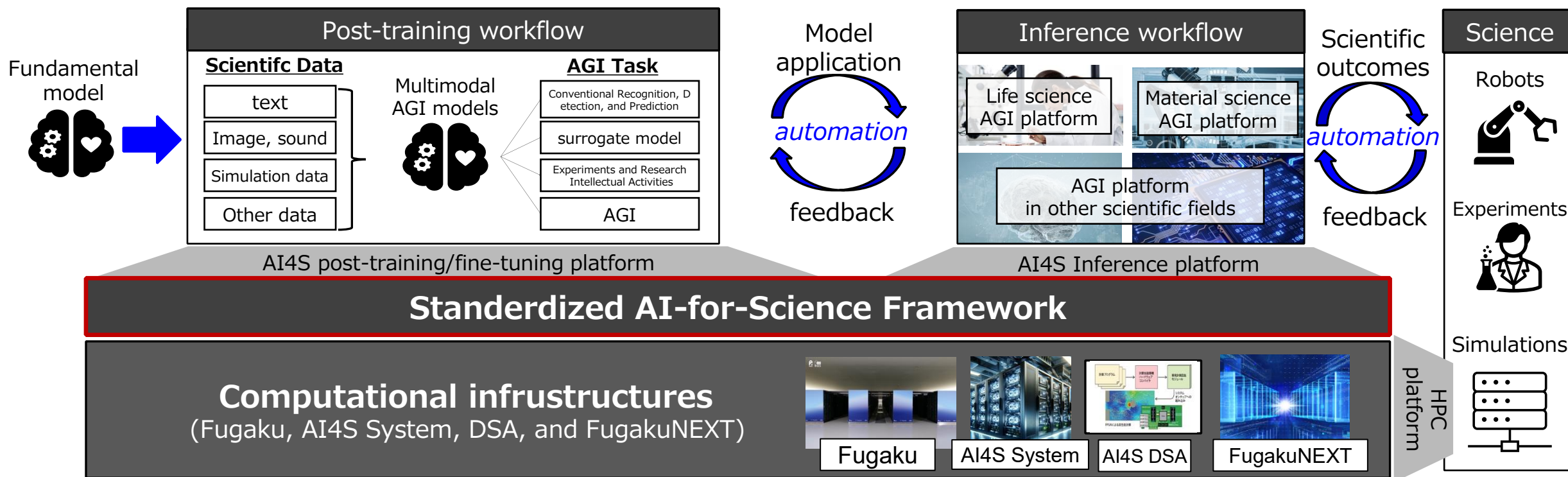
● 計算科学ロードマップ2023 (第1版) において AI for Science ロードマップを追加

- 計算科学ロードマップ2023 (第1版): <https://cs-forum.github.io/> (公開日: 2024年5月31日) [2]
- 第0版の全11分野に加え、同11分野の横串として AI for Science に関するロードマップを追加



世界最高水準の次世代AI・HPC融合プラットフォームの必要性

- データ生成（実験模倣/生成AI/合成データ）、モデル構築（学習）、推論・思考（LLM等）、シミュレーションに至るまでを包括的に支援するワークフロー実行環境が必要
- マルチモーダル、大規模モデル、膨大なトークン数を処理可能なスケーラビリティ
- モデルとシミュレーション間での双方向連携を可能とする柔軟かつ高速データフロー制御



新たなフラッグシップシステムに求められる性能・機能（概要）

「次世代計算基盤に関する報告書 最終取りまとめ」より抜粋（一部補筆）

- （役割） **科学技術分野においてAIを活用する「AI for Science」の取組を通じて、研究サイクルの飛躍的加速や研究探索空間の拡大といった科学研究の革新など、新たな時代を先導し、国際的に卓越した研究成果を創出していくこと。**
- コミュニティの試算や産学官の更なる利用の拡大も見越しつつ、遅くとも2030年頃の稼働を目指し、電力性能の大幅な向上により、既存の「富岳」ユーザに対しては実効性能として現行の5～10倍以上の計算能力を提供しつつ、**AI性能については運用開始時点で世界最高水準（実行性能として少なくとも50EFLOPS以上）の利用環境を提供**することを目標として、フラッグシップシステムの開発・整備を行うべき。
- （フラッグシップシステムの開発・整備を行う際には、）今後も自国の技術を中心にスーパーコンピュータを開発・整備する能力を国内に維持し、国内人材育成や産業競争力の維持・発展に資するため、「京」や「富岳」の開発において蓄積してきたCPUの開発及びシステムのインテグレーションに加え、メモリ実装技術の開発をコア技術と位置付けて継続的に開発を行うべきである。また、更なる性能向上や生成AIへの対応を図るため、加速部を導入するべき。また、（略）、最先端のメモリ技術を採用し、利用者にとってさらに魅力的なシステムとなることを期待。
- システムソフトウェア開発においては、**アプリケーションやAI等の研究開発のプラットフォームとして、世界で使われている基本的なアプリケーションがこれまで以上に多様かつ円滑に利用できるように設計し、運用開始後も継続してシステムソフトウェアの改善を図るべきである。**
- （開発・整備の手法について）（略）時代時代の要請に応じた十分な性能を常に提供し続ける必要が生じている。そのために、フラッグシップの開発・整備においては、
 - ① 「京」から「富岳」への移行時のようなシステムの入替えによる「端境期」を極力生じさせず、利用環境を維持すること
 - ② 最新の技術動向に対応するために適時・柔軟にシステムを入替え又は拡張可能とし、進化し続けるシステムとすること

HPC とAIの融合に向けた「富岳NEXT」開発 プロジェクトの現状紹介



スーパーコンピュータ「京」から「富岳」そして「富岳NEXT」へ

「京」



- 富士通の先端技術を活用し、理研と共同開発した超並列汎用スーパーコンピュータ。ノード間を結ぶ独自のインターコネクト（Tofu）を搭載。
- 世界に先駆け10ペタフロップス（PF）の演算性能を達成。2016年6月、11月、2期連続で計算性能（TOP500）世界一を達成。
- 2012年共用開始。2019年運用終了。



「富岳」



- 理研と富士通とで共同開発。CPUのA64FXは、ARMベースで構築され、スマートフォンなどに使われている命令セットを世界で初めてスーパーコンピュータに拡張（SVE: Scalable Vector Engineを搭載）。
- コデザインを推進し、稼働と同時に成果を創出。特に、試験運用時には、コロナ渦における飛沫シミュレーション等で成果を挙げ、その後もさまざまな社会課題の解決に貢献するキーインフラストラクチャーとして活躍中。
- 2020年6月から4期連続でTOP500などのベンチマークテストで4冠を達成。2021年から共用開始。世界トップレベルの省エネ性能を実現。



「富岳NEXT」

- 理研が中核となり、高性能ARMベースCPUで世界をリードする「**富士通**」と、AI/HPC向けGPUで世界トップシェアを誇る「**NVIDIA**」とで共同開発。AI性能（FP8）で世界初のゼタ（Zetta）スケールの性能を目指す。
- システムソフトウェアを含めたソフトウェア開発は、国際連携によるオープンな体制で実施。ハードウェアとソフトウェア両面において「Made with Japan」のコンセプトで日本の優位性を確保。我が国の情報基盤における重要インフラストラクチャーとして整備。
- 2030年頃、理研神戸地区において運用開始予定。



理化学研究所

次世代スーパーコンピュータ
開発実施本部

計算科学研究機構
(AICS)

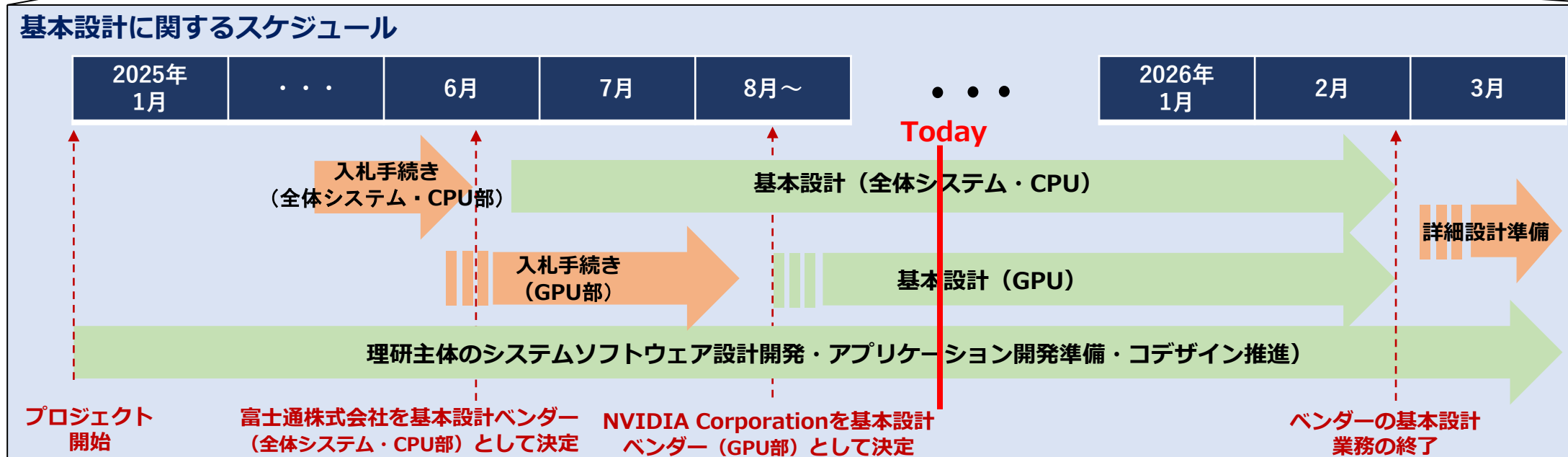
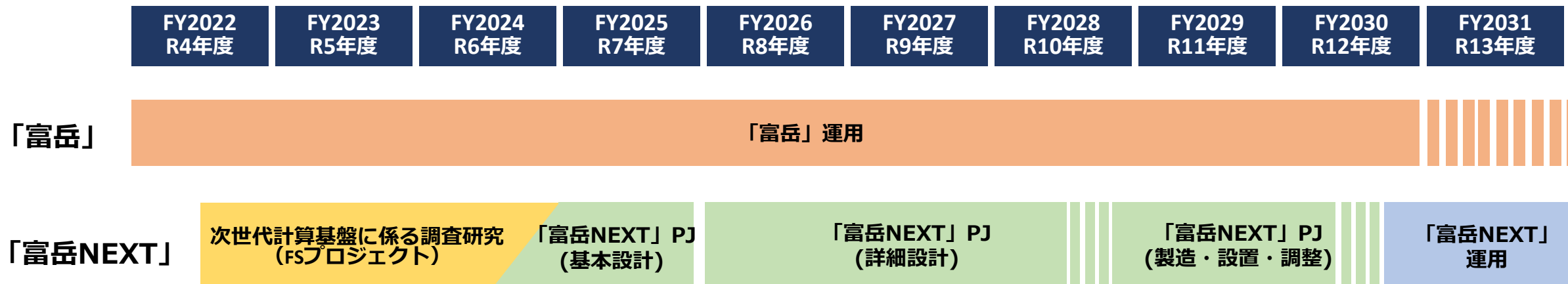
計算科学研究センター
(R-CCS)



理研本部が主導するプロジェクト推進組織から、「京」の稼働に合わせてAICSを設置。AICSを発展させたR-CCSは、計算機科学／計算科学の世界的な拠点（COE）として欧米の機関と比肩する組織へ。

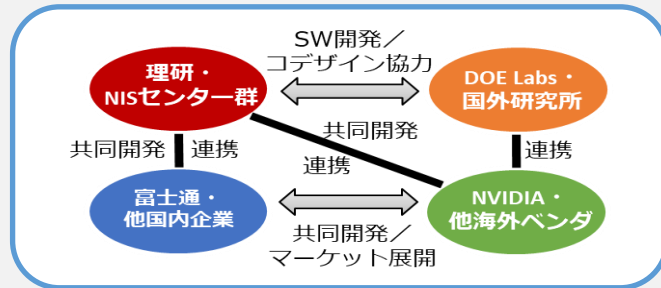
AICS発足時の8チーム、1ユニット、1部門、約150人体制から、R-CCSでは19チーム、5部門、約400名を超える体制へと拡大。

「富岳NEXT」システムの開発・整備の想定スケジュール



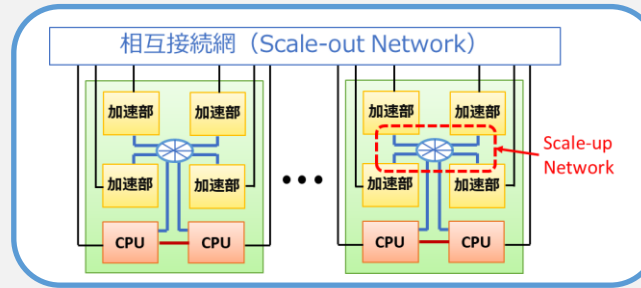
科学技術・産業競争力強化に向けた「富岳NEXT」開発戦略

Made with Japan



- 基本設計ベンダー・他国内外ベンダーとの協調による、訴求力のあるシステム構築と国産技術高度化、グローバルマーケットへの展開、国内半導体産業の振興
- 国際連携でのプロジェクト推進による高度人材の育成、技術革新の加速、情報技術における主権の確保

技術革新



- 高性能CPU-GPUの密結合による広帯域・ヘテロジニアスなノードアーキテクチャ、先進的なメモリ技術等の共同開発
- AI・HPC技術のさらなる発展と、その高度利用による最大100倍程度のアプリケーション実効性能の向上

持続性／継続性

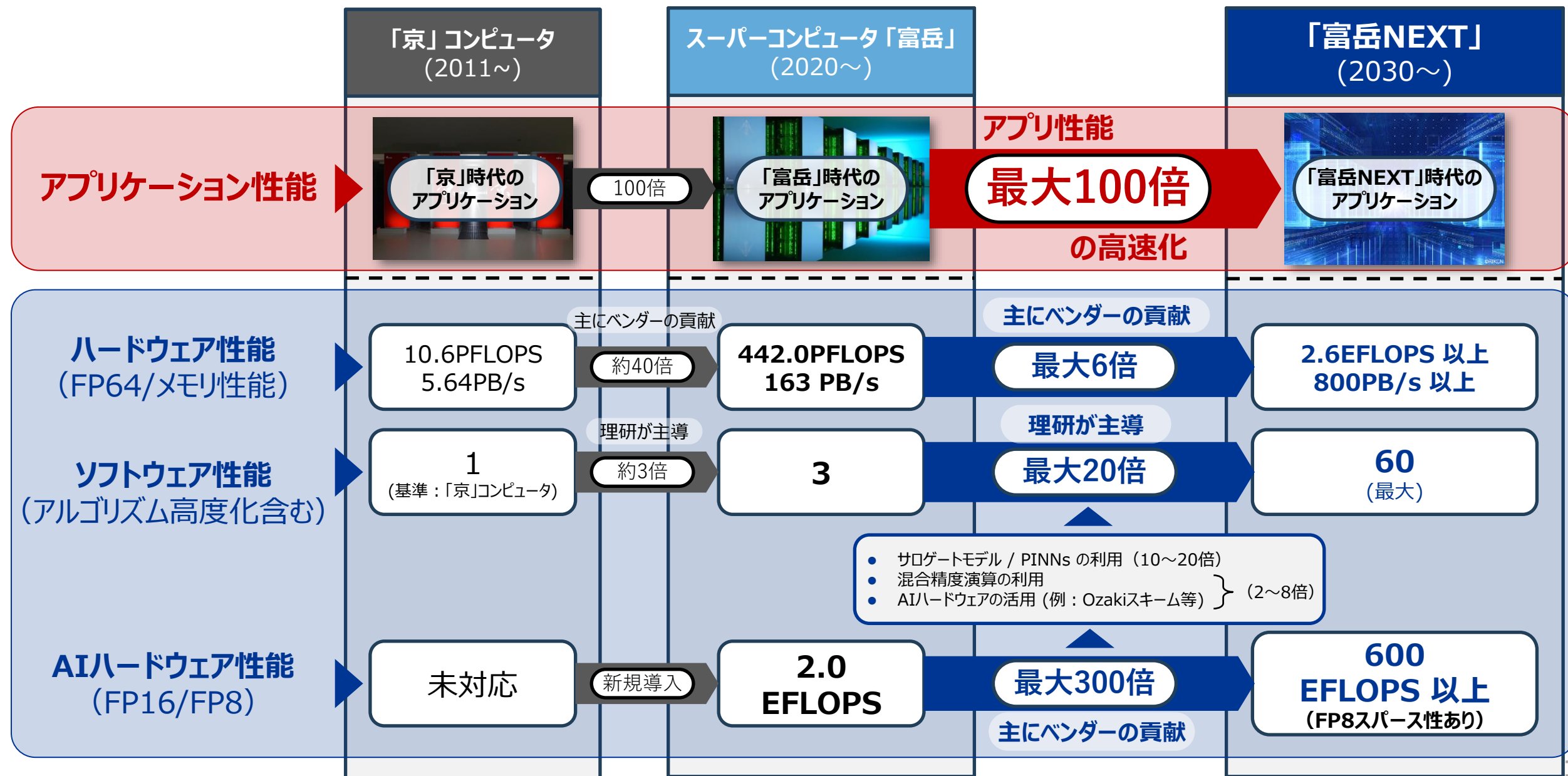


- 標準規格や既存のエコシステムとの親和性が高いシステムの構築（ソフトウェア環境の継続整備）
- 今後の先端システムに合わせたアプリケーションの現代化とそのサポート体制構築
- 「富岳」での取組みを進化させた運用技術の高度化による省エネルギー化の実現

「富岳NEXT」エコシステム構築とそれを利用した我が国の半導体・情報基盤の強化

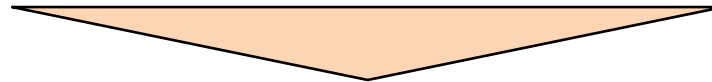
- 次世代AI-HPCプラットフォーム開発による計算可能領域の拡張と「AI for Science」による科学の推進
- 先端的AI技術や計算基盤の開発における日本の主権の確保
- 継続的な先端半導体開発、計算資源確保のロードマップ構築とそれに基づく持続的な研究開発の実施

アプリケーション性能 最大100倍への道



「Made with Japan」による開発体制の意義

- **最高技術の組み合わせによる世界最高水準のシステム開発**
 - 高性能ARMベースCPUで世界をリードする**富士通**が次世代の後継CPUを開発。
 - 世界初となるゼタ（Zetta）スケールAI/HPCシステムの実現
 - AI/HPC向けのGPUと開発環境で世界トップのシェアを誇る**NVIDIA**とも共同開発を実施。
 - その他の関連する企業とも密に連携し、国際連携体制で先端技術の粋を集めたシステムを構築。
- **国際連携によるオープンなソフトウェア開発を「富岳NEXT」プロジェクトの一環で実施**
 - 米国DOEの研究所をはじめとして各国の研究所と協力したソフトウェア・アプリケーション開発を推進。
 - 開発ソフトウェアを世界的なAI/HPCエコシステムの一部として普及させることで、ハードウェアとソフトウェア含む「富岳NEXTシステム」全体を高付加価値。



- 互いの強みを生かすことで、世界的に訴求力のある国産技術の高度化と技術継承
- AI/HPC融合時代における世界標準となる次世代計算基盤の構築
- 三者が協力しハイパースケーラー等への訴求などグローバルなマーケットへ展開を目指す

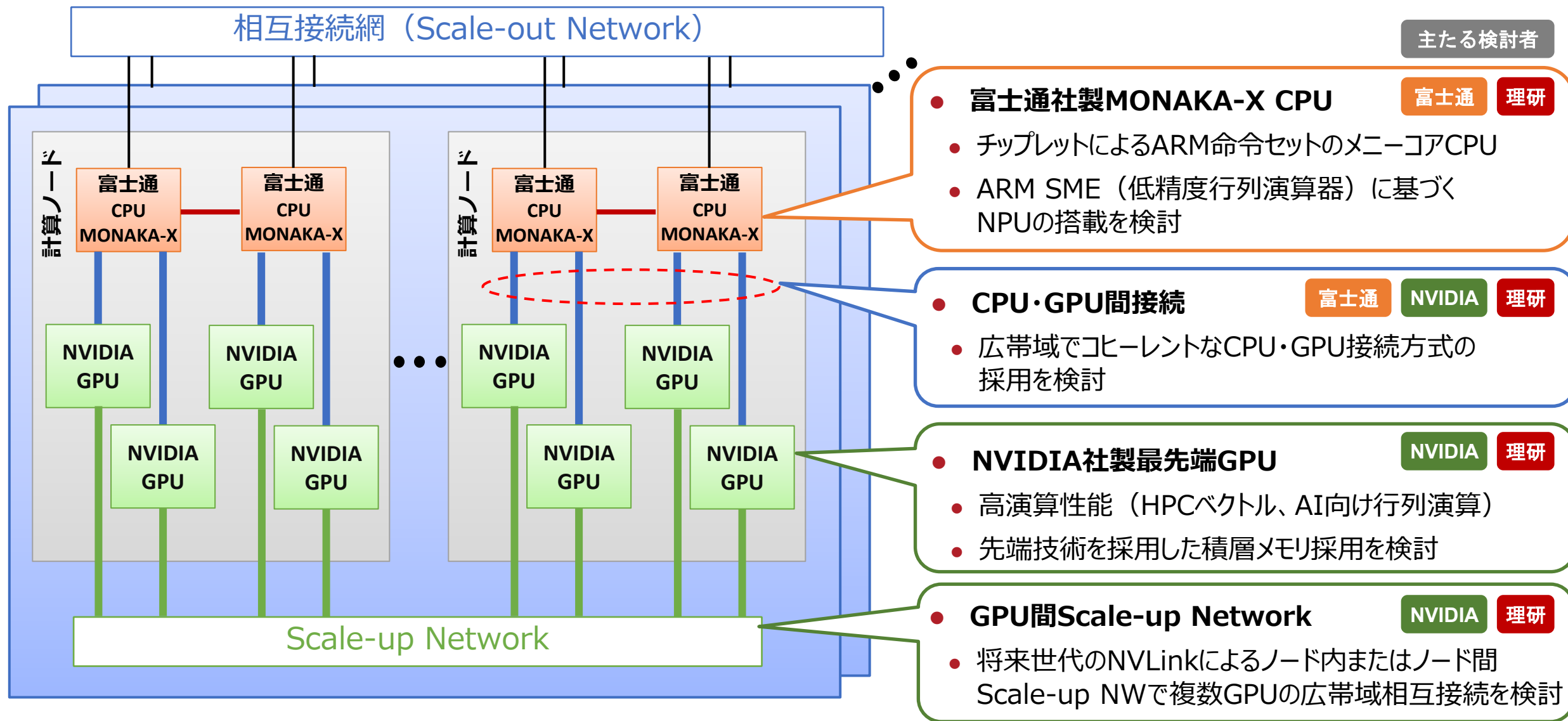
「富岳NEXT」に求められるシステム

- 「次世代計算基盤に関する報告書 最終取りまとめ」で示された性能目標
 - 既存HPCアプリケーションで現行の5～10倍以上の実効計算性能
 - AI処理でゼタ（Zetta） FLOPSスケールのピーク性能を念頭に50EFLOPS以上の実効性能
 - シミュレーションとAIの融合により、総合的に数十倍のアプリケーション高速化を目標

当該性能目標をベースに以下の仕様で開発ベンダーの調達を実施

項目	CPU	加速部	「富岳」	「富岳」 比
合計ノード数	3400ノード以上		158,976	
理論 FP64ベクトル性能	48 PFLOPS以上	2.6 EFLOPS以上	537 PFLOPS	x5.7 以上
理論 FP16/BF16行列演算性能	1.5 EFLOPS以上	150 EFLOPS以上	2.15 EFLOPS	x70.5 以上
理論 FP8行列演算性能	3.0 EFLOPS以上	300 EFLOPS以上	—	
sparsity考慮の 同理論性能	—	600 EFLOPS以上	—	
メインメモリサイズ	10 PiB以上	10 PiB以上	4.85 PiB	x4.1 以上
メインメモリバンド幅	7 PB/s以上	800 PB/s以上	163 PB/s	x4.9 以上
合計消費電力	40 MW以下（計算ノードおよびストレージ）		約30 MW	

「富岳NEXT」システム・アーキテクチャ概要



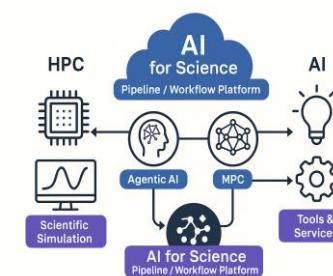
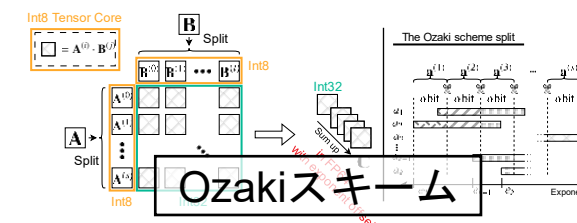
詳細な計算ノードおよびシステム構成は基本設計で決定予定

富士通MONAKA-X+先端NVIDIA GPUが実現するHPC・AI融合 に向けたシステムソフトウェア開発戦略

富士通 MONAKA-X と最先端のNVIDIA GPUのハイブリッド性能を最大限に引き出すため、
理研の主導によるHPC・AIの両面で最適化された統合システムソフトウェアを開発

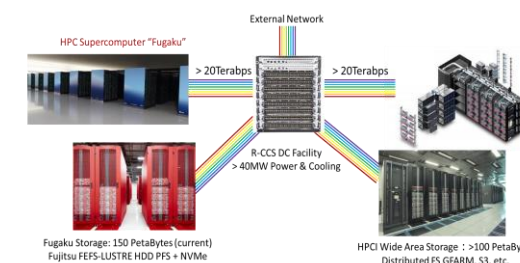
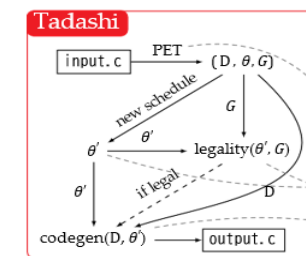
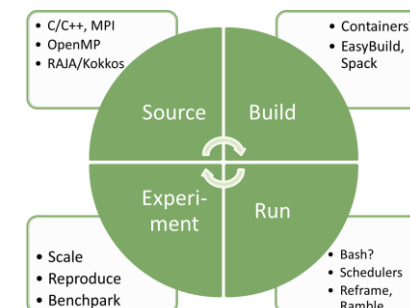
開発予定のシステムソフトウェアの例

- **アプリ開発者が容易に利用できるためのプログラミング環境**
 - OpenMP, OpenACC/Kokkos等の幅広い開発フレームワーク環境への対応
 - HPCとAIワークロードの両方を意識した最適化コンパイラ/ランタイム開発など
- **性能を最大限に引き出すための数値計算ライブラリ・ミドルウェア**
 - OZAKIスキームに基づく高精度演算エミュレーションでCPU/GPUの低精度演算器を活用
 - 混合精度演算を組み合わせた高速・高精度数値計算ライブラリ開発など
- **大規模HPC・AI アプリのスケラブルな実行を可能にする通信ライブラリ**
 - NVLink等を想定したScale-up／Scale-out NWを最大限活用する通信ライブラリの開発
 - 富岳NEXT向け超低レイテンシ・高スループット集団通信の実装など
- **HPC・AIの有機的な融合を可能にするAI関連ソフトウェア**
 - Agentic AI等を活用した科学シミュレーションと各種ツールやサービスの融合など



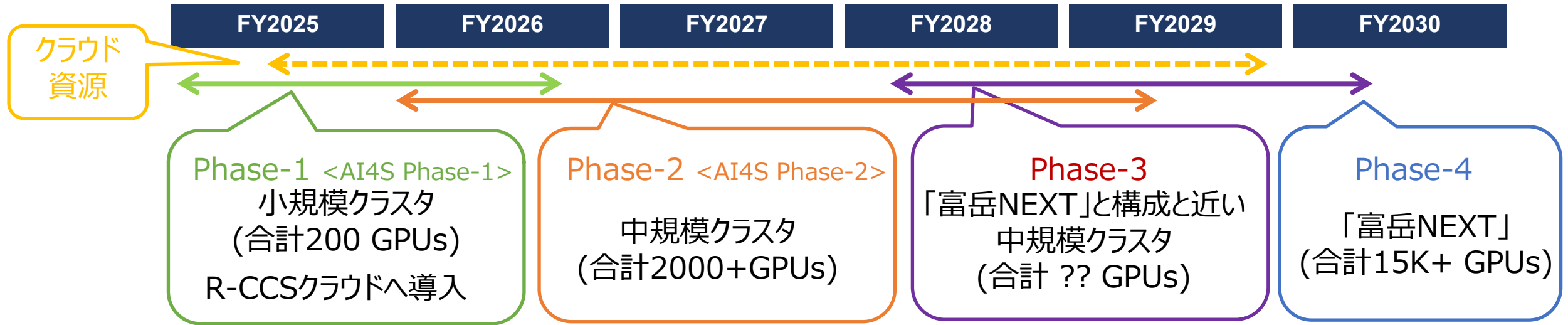
コデザイン戦略および「富岳NEXT」エコシステム形成に向けて

- 幅広いアプリケーションでのコデザインの実施
 - CI/CD/CBフレームワークを用いた多様なアプリでのベンチマーキング
 - DOE/MEXTの枠組みで共同開発したBenchparkも活用
 - 国外のHPC関連研究所にも積極的に情報提供しコデザインを連携
- AI駆動のアプリ開発（コーディング／最適化）
 - R-CCS開発中のコーディング／最適化AIの利用やChatbotを活用
 - エージェントAI対応のHPCアプリ開発
- 「富岳NEXT」テストベッドシステムの構築・提供
 - 「富岳NEXT」に近い構成のシステムをテストベッドとしてユーザに提供
 - NISや「AI for Science」システムを含むGPUシステム／クラウド環境を活用
 - 潜在的な「富岳NEXT」ユーザコミュニティを形成
- バーチャル富岳への開発ソフトウェアの早期展開
 - ソフトウェア検証・高度化と「富岳NEXT」エコシステム拡大へ



ツール等の展開について：今年度は富岳NEXTプロジェクトのアプリチーム内でテストを実施しつつ
来年度以降に幅広く展開していくための体制構築と制度設計を行う

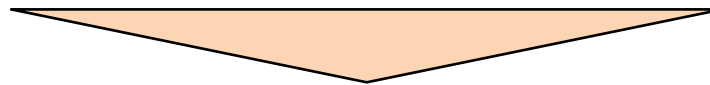
「富岳NEXT」テストベッドの整備計画（案）



- Phase1 (2025年4月) : さまざまなGPUからなる小規模クラスターシステム、「AI for Science」スーパーコンピュータ (AI4Sシステム) のPhase1として導入。バーチャル「富岳」向けのソフトウェア開発ベースとしても活用 (合計約200GPU)
- Phase2 (2025年度末) : AI4SシステムのPhase2と「量子HPC連携プラットフォーム」のGPUシステムを合わせた中規模クラスター (合計約2000GPU) 、CI/CD/CBプラットフォームとしても利用を想定
- Phase 3 (2027年度): 「富岳NEXT」に近いシステム構成を持つ中規模GPUクラスター、開発システムソフトウェアやアプリケーションの評価・検証、CI/CD/CBプラットフォームや運用準備マシンとして利用
- Phase 4 (2030年度) : 「富岳NEXT」システム自身
- (必要に応じて) : 最新GPUやネットワークテストのためNISのシステムやクラウド資源を活用

まとめ：新たなフラッグシップ計算基盤の意義

- **フラッグシップシステムが持つ価値と国家的な重要性**
 - ゼタ（Zetta）スケールの大規模計算環境による計算科学領域での世界的優位性の継続的な確保
 - スケールメリットによる高い導入・運用効率、およびコミュニティ形成の力を生かした裾野の拡大
 - 計算能力が勝負となるAI開発やAI for Scienceでも国内最高計算能力を持つ研究プラットフォームとして活用
- **産業競争力の強化に資する「富岳NEXT」の開発**
 - 富士通と連携しつつ「富岳」のARMアーキテクチャを受け継ぎ、さらなる発展を目指したシステム構築
 - 「AI for Science」や量子コンピュータとの連携を含め、計算による課題解決の先駆的な取り組みを推進
 - 加速部はNVIDIAと連携し、日米共同開発体制のもと、AIの積極的利用も含めて我が国のアプリケーションを現代化し、AI for Scienceを高度化することで成果の社会実装を加速
 - 理研を中核とした「Made with Japan」の開発体制構築と半導体戦略も踏まえたプロジェクト推進



富岳に代表される世界トップレベルの計算資源インフラを持つ日本の強みを発展させ、世界トップのAIベンダーをも惹きつけている富岳NEXTや、DOE研究所との連携を最大限に活用することが我が国の存在感を示しつつAI for Scienceを勝ち筋に繋げる上で極めて重要