柏キャンパス一般公開
2025年10月25日(土) 15:00~ @柏キャンパス第2総合研究棟315

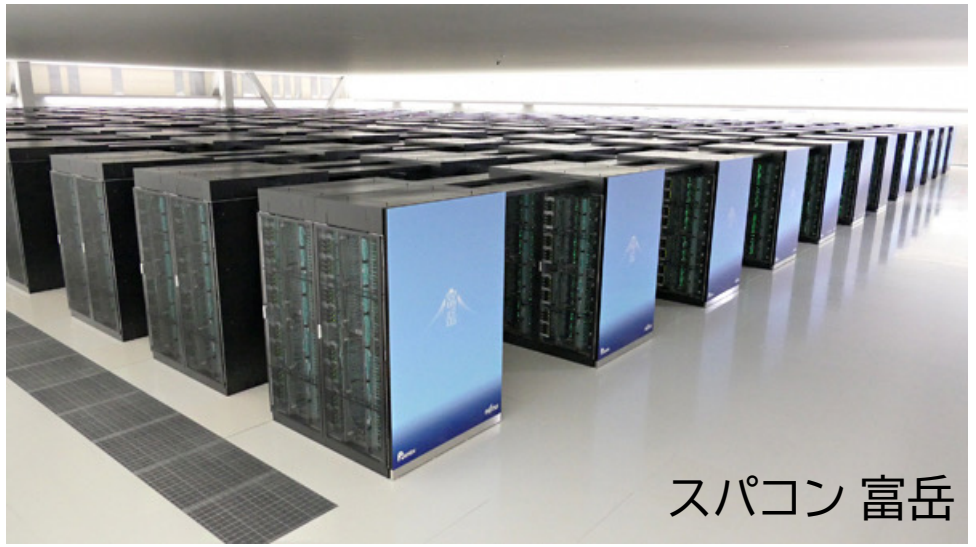
# AIとスパコンが生み出す次世代の科学技術シミュレーション

東京大学　情報基盤センター
スーパーコンピューティング研究部門
塙　敏博

# スーパーコンピュータ(スパコン)とは？

- (本来は)科学技術計算を主目的とする大規模なコンピュータ
  - 一般的なコンピュータに比べて、高性能かつ大規模

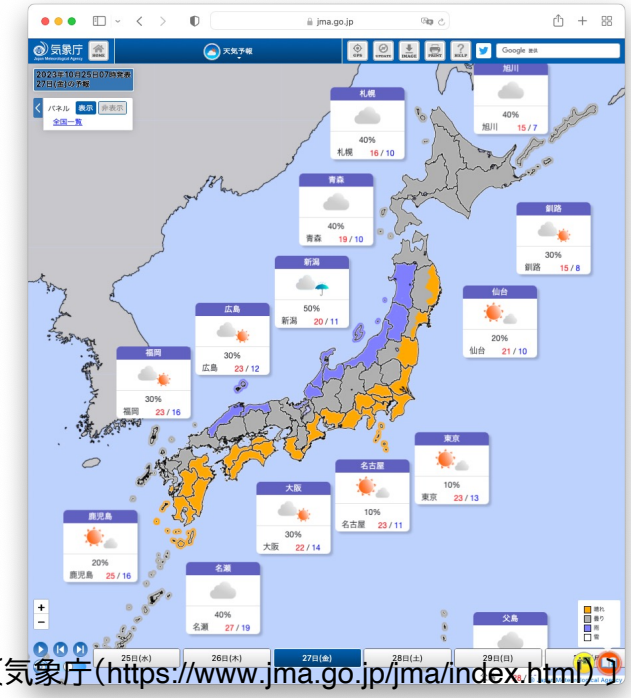
  ➔ ざっくり**数千倍以上**の**規模/性能/容量**
- 大量の複雑な計算を高速かつ**正確に**解くことが求められてきた



スパコン 富岳

# スパコンの活用事例

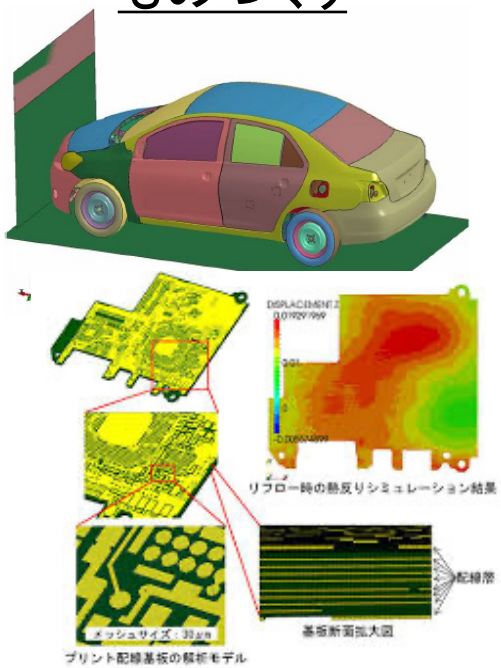
- 大規模/精密、かつ高速に数値シミュレーションを実行できることが求められてきた

気象庁の「天気予報」



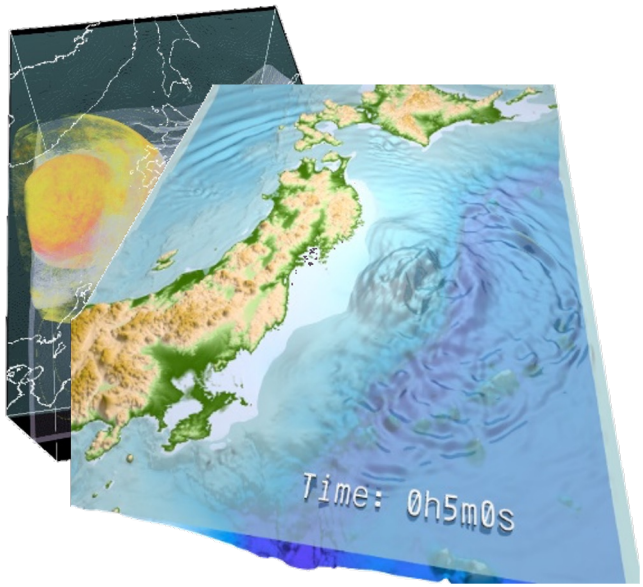

〔気象庁（https://www.jma.go.jp/jma/index.html）〕

ものづくり




〔画像提供：日本自動車工業会（JAMA）〕

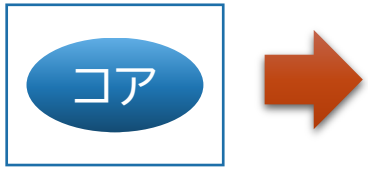
地震シミュレーション



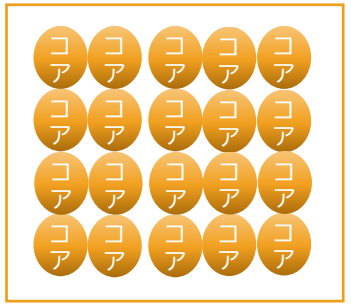

〔画像提供：古村孝志教授・
市村強教授（東大・地震研）〕

# スパコンの速さはどこから来るの？

- プロセッサ (CPU: Central Processing Unit, 中央演算装置)
  - 計算・処理の**中枢**
  - コア数を増やして性能を上げる
    - 1個ずつのコアを速くするのはほぼ限界(20年前)
    - **電気を食うので、コア性能・コア数をやたら上げられない**
- メモリ
  - 処理中のデータやプログラムの置き場(電源を切ると消える)
  - CPUとの間で高速に繋がらないと性能は出ない
    - 例えば96コアにスムーズにデータを届けないといけない




昔



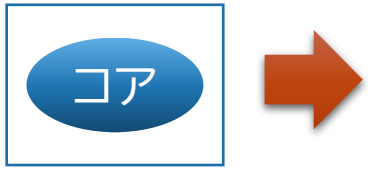
現在: 96コアの製品も使われている

各コンピュータ

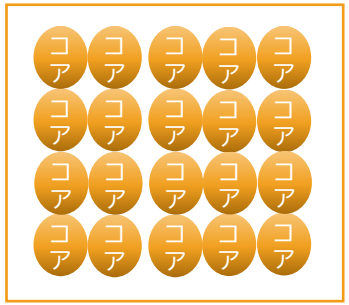
- ネットワーク(インターコネクト)
  - 全体(数千～10数万のコンピュータ群)を束ねて一体のシステムとして動かす
  - 超高速ネットワーク

# GPUのスパコンへの導入（世界的には2009年ごろ~）

- プロセッサ (CPU: Central Processing Unit, 中央演算装置)
  - 計算・処理の**中枢**
  - コア数を増やして性能を上げる
    - 1個ずつのコアを速くするのはほぼ限界(20年前)
    - **電気を食うので、コア性能・コア数をやたら上げられない**

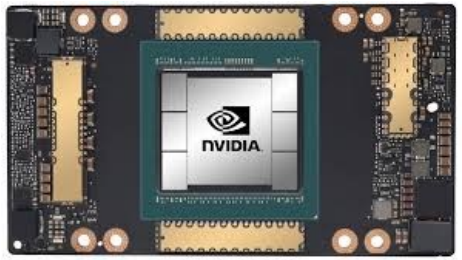


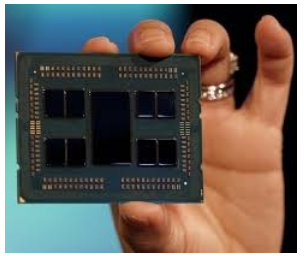

昔



現在: チップ内に96コアの製品も使われている

- **GPU**: Graphics Processing Unit、CPUに対してadd-onする演算装置: **演算加速装置、アクセラレータ**
  - **単純化したコアをたくさん並べる**
    - 例えば64個の演算器をまとめて制御、制御単位(CPUコアのような)=132
      ➔ 演算器は 64*132 = 8,448個
    - これをフルに使えないと性能が出たことにならない
    - **電力効率が良い**
  - x GPU単独では動作できない、プログラミングが複雑



- 最新のスパコンランキング(Top500)の上位**10位のうち9台**はGPU搭載
  - 7位の富岳だけがGPU搭載なし

# 一方AIは、、

- 2012年：画像認識の精度を競う大会 (ILSVRC)で、トロント大学が**深層学習**を使って圧倒的優勝

➔GPUを使って大量の計算を高速化

ここから爆発的なAIブームに突入

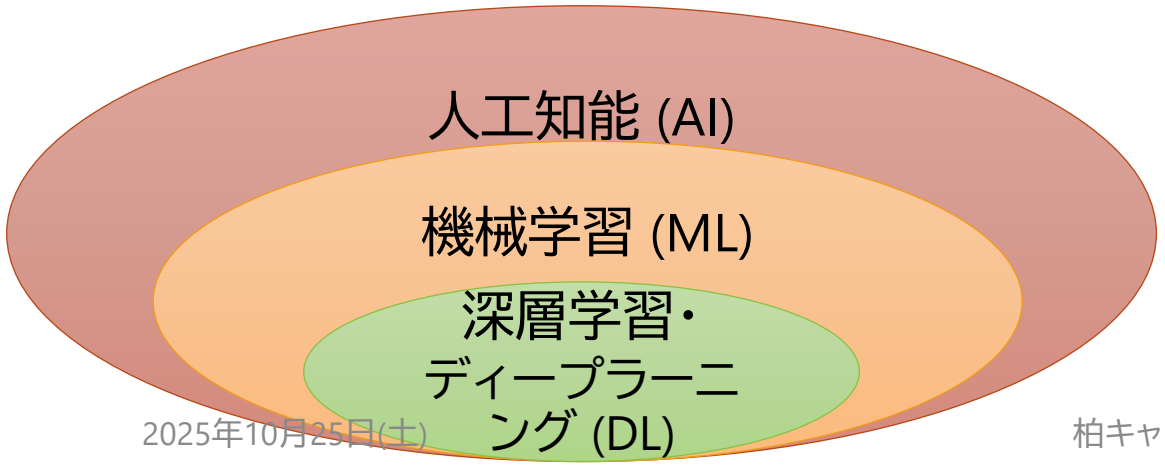

ジェフリー・ヒントン
(当時トロント大教授)
2024年ノーベル物理学賞受賞!!

- GPUの進化：AI技術が牽引
  - 最初は単なる画像処理エンジン
  - ➔ 実数の演算ができる高速な演算加速装置としてスパコンに導入
  - ➔ AI向けの機能が次々に追加

# 人工知能(AI)とは

現代は機械学習を指すことが多い

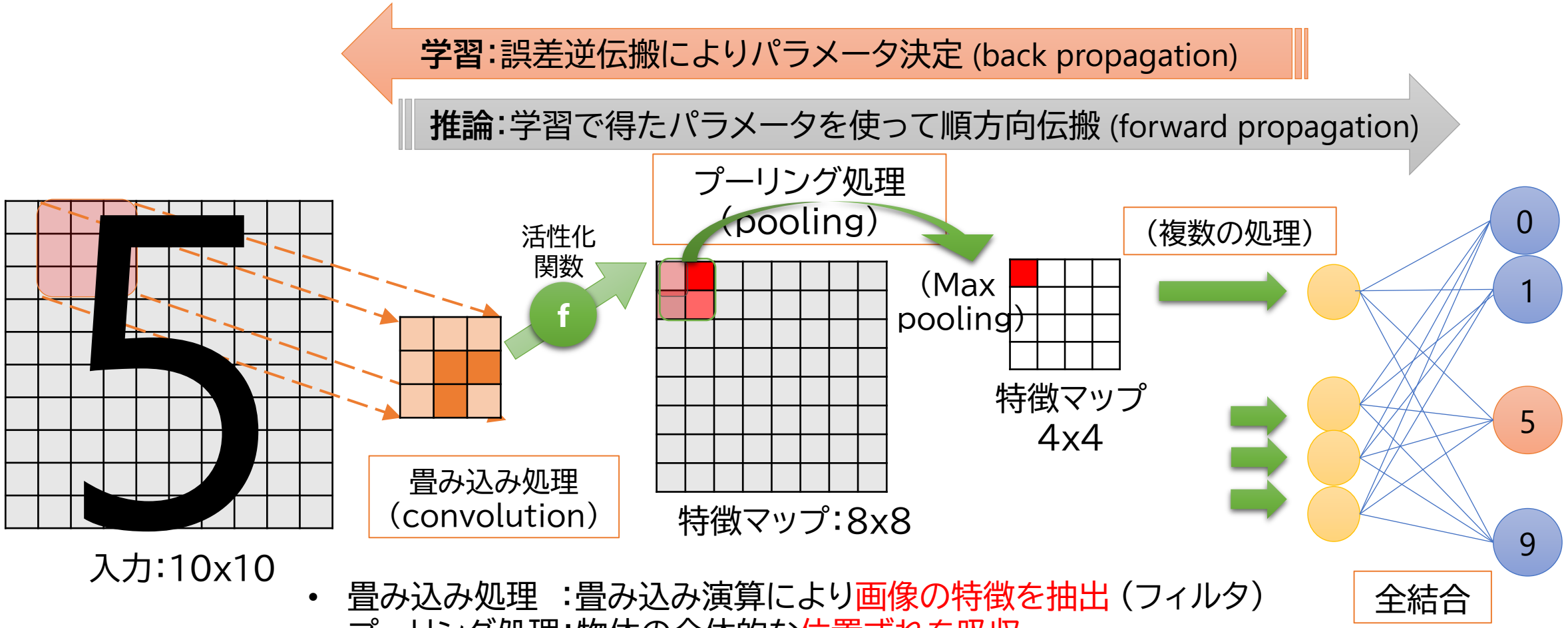
- 機械学習 (ML: Machine Learning)
  - コンピュータで人間の学習に相当する仕組みを実現したもの
- 本来のAIはもっと広い意味




- 深層学習・ディープラーニング (DL: Deep Learning)
  - 多数の層から成るニューラルネットワークを用いて行う機械学習の手法
  - DL技術の進歩が現在の人工知能ブームを支えている

- 生成AI, 大規模言語モデル(LLM)

# CNN（Convolutional Neural Network）の例




- 畳み込み処理　：畳み込み演算により画像の特徴を抽出（フィルタ）
- プーリング処理：物体の全体的な位置ずれを吸収

AI処理の特徴：

- 計算は多少不正確でも正しい結果が得られる
- 決まった形の計算（小さな行列・テンソル演算）が大量に必要

# 生成AI・大規模言語モデル(LLM)

- 鍵になる技術
  - **Transformer**
    - 注目する入力を決める仕組みによって**独立して同時に多数の処理**が可能に

    ➔ GPUを効率よく使えるようになった！
  - **自己教師あり学習**
    - 従来は教師データを別に用意する必要があった
    - データの中から生成モデルによって教師データを作成
      - 例えば「穴埋め問題」を自分で作れば、正解（教師データ）は実はわかっている

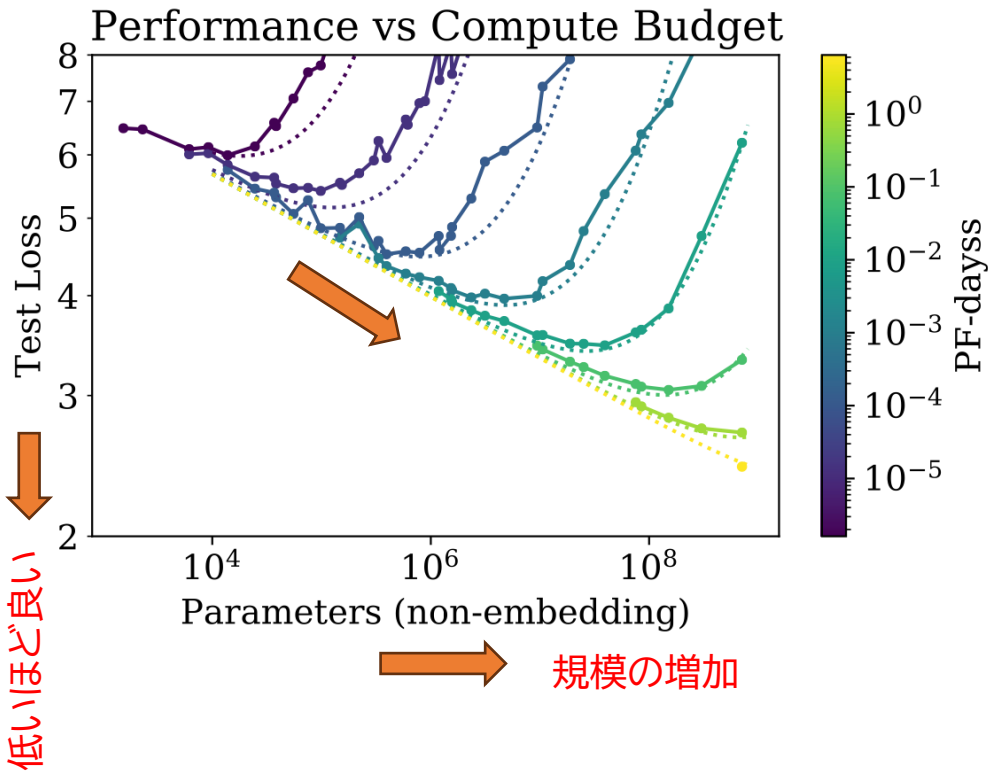
    ➔ 大量のデータセットを扱うことが可能
- 穴埋め問題の例
  - 彼は朝早く起きて、 (1) を飲みながら新聞を読んだ。その後、 (2) に出かけた。

  ➔ **正解候補**: (1) コーヒー　(2) 仕事

# 生成AI・大規模言語モデル(LLM)の問題

- スケーリング則
  - 言語モデルのパラメータ数（＝モデルのサイズ）、データセットのサイズ、トレーニングに使用される計算量が増えるにつれて、誤差＝性能がべき乗則に従って減少する

➔ AIにもスパコンが必要に!!




処理できる計算性能(右のカラーバー)とパラメータ数が多いほど、モデルの性能がよくなる
（合わせてデータセットサイズも増やさないといけない）

J. Kaplan 他(Open AI), Scaling Laws for Neural Language Models, https://arxiv.org/pdf/2001.08361

# AIを支えるGPU

1.34567+5.34723=6.69290

- 科学技術計算：正確さが命

⇔ AI処理：多少雑に計算しても構わない=低精度演算、演算が簡単な分高速

1.0+5.0=6.0

- AI処理を支援するハードウェア
  - テンソルコア、Transformerエンジン、様々な種類の低精度演算
- OpenAIがChatGPTに使った計算資源
  - GPU数：約10,000
  - 数週間の学習 (training)
- 今後のモデル開発には30,000GPUは必要とか

➔まさに**スパコンそのもの、GPU数さえあればいいということものではない、構築・利用技術も重要**

# 例: タンパク質の立体構造予測 Alpha Fold2

2024年ノーベル化学賞:
Demis Hassabis, John M. Jumper
(Google DeepMind)

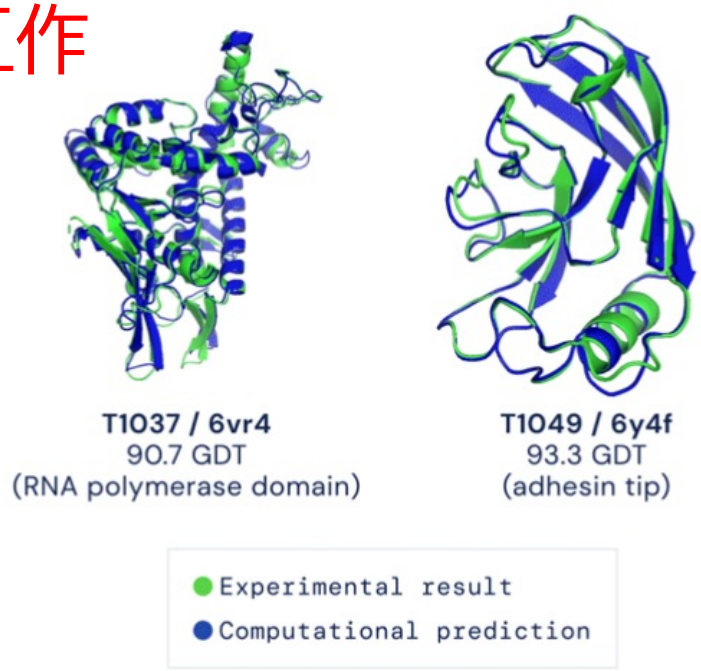
- タンパク質は、どのような配列でできているか、に加えて、立体構造によって、機能や相互作用が決まる
  - 創薬、洗剤、生命の起源解明

従来は

- X線結晶解析、電子顕微鏡等で測定
- 時間をかけてシミュレーションをする

➔AIによる予測

(スパコンでなくてもある程度可能)




新型コロナウィルス中のタンパク質ORF3aの構造を推定、実測とほぼ一致
青: AlphaFoldによる推定
緑:UC Berkeley Brohawn Labによる実測値

# AI for Science, AIによるシミュレーション支援

1. 複雑なシミュレーションは本質的に時間がかかる
   ➔時間を短縮できないか？
   - 時間がかかる理由
     - トライ＆エラー： 形状や構造、割合などを少しずつ変えてシミュレーション、ベストな条件を探す
       - 例：自動車や航空機などの空力解析
     - アンサンブル計算：様々な条件の下でシミュレーション、結果を統計処理
       - 例：天気予報

   ➔効率の良いパラメータをAIで推定、全体で必要なシミュレーション回数を減らす
2. 実験をせずに画期的なものを発見できないか？
   - 過去の実験データなどから全く新しい条件を推定
     - 例：物質材料の探索

# (シミュレーション(計算)+データ+学習)融合

- 東大情報基盤センターでは, 2015年頃から「(S+D+L)融合」の重要性に注目し, それを実現するためのハードウェア, ソフトウェア, アプリケーション, アルゴリズムに関する研究開発を開始
  - BDEC計画(Big Data & Extreme Computing)
  - 「データ+学習」による, より高度な「シミュレーション」

  ➔ 今で言う AI for Science
- 2021年5月に運用を開始した「Wisteria/BDEC-01」は「BDEC計画」の1号機
  - 「計算・データ・学習(S+D+L)」融合を実現する, 世界でも初めてのプラットフォーム
  - Odyssey(シミュレーションノード): 富岳同型機(A64FX)
    - 25.9 PF, 7,680ノード
  - Aquarius(データ学習ノード): GPUクラスタ
    - 7.2 PF, 45ノード


Simulation Nodes
Odyssey
25.9 PF, 7.8 PB/s

Fast File System（FFS）
1.0 PB, 1.0 TB/s

Shared File System（SFS）
25.8 PB, 0.50 TB/s

Data/Learning Nodes
Aquarius
7.20 PF, 578.2 TB/s

計算科学コード

シミュレーション
ノード群，Odyssey

計算結果

観測データ

最適化されたモデル，パラメータ

Wisteria/BDEC-01

機械学習，DDA

データ・学習ノード群
Aquarius

データ同化
データ解析

サーバー
ストレージ
DB
センサー群
他

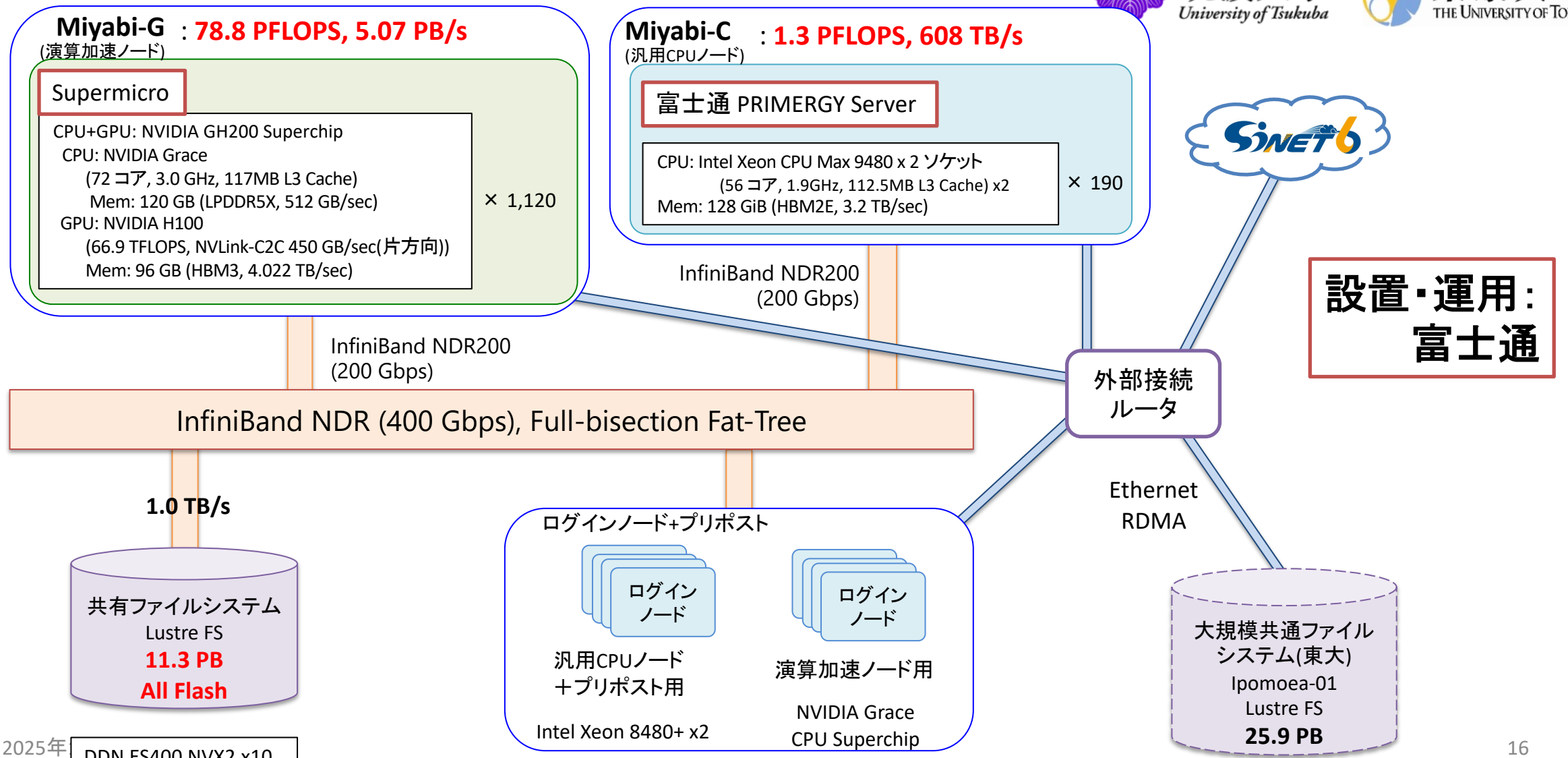
外部ネットワーク

外部
リソース

Wisteria
BDEC-01

# Miyabiの概要 (1/2)
# 2025年1月運用開始

JCAHPC
筑波大学 University of Tsukuba
東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO



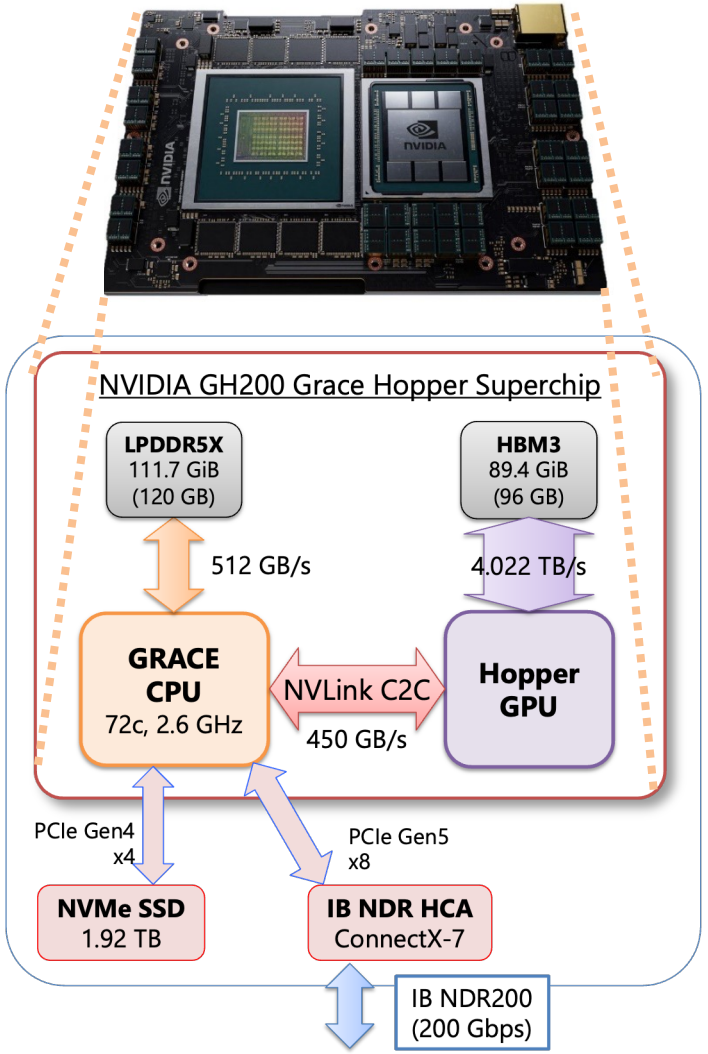



柏キャンパス一般公開

# Miyabi(OFP-II)の概要 (2/2)

JCAHPC
筑波大学 University of Tsukuba
東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO

- **Miyabi-G: 演算加速ノード: NVIDIA GH200**
  - 計算ノード: NVIDIA GH200 Grace-Hopper Superchip
    - Grace: 72c, 3.45 TF, 120 GB, 512 GB/sec (LPDDR5X)
    - H100: 66.9 TF DP-Tensor Core, 96 GB, 4,022 GB/sec (HBM3)
      - CPU-GPU間はキャッシュコヒーレント
    - NVMe SSD for each GPU: 1.9TB, 8.0GB/sec, GPUDirect Storage
  - **合計 (CPU+GPUの合計値)**
    - **1,120 ノード, 78.8 PF, 5.07 PB/sec, IB-NDR 200**
- **Miyabi-C: 汎用CPUノード: Intel Xeon Max 9480 (SPR)**
  - 計算ノード: Intel Xeon Max 9480 (1.9 GHz, 56c) x 2
    - 6.8 TF, 128 GiB, 3,200 GB/sec (HBM2e only)
  - **合計**
    - **190 ノード, 1.3 PF, IB-NDR 200**
    - **372 TB/sec for STREAM Triad (Peak: 608 TB/sec)**

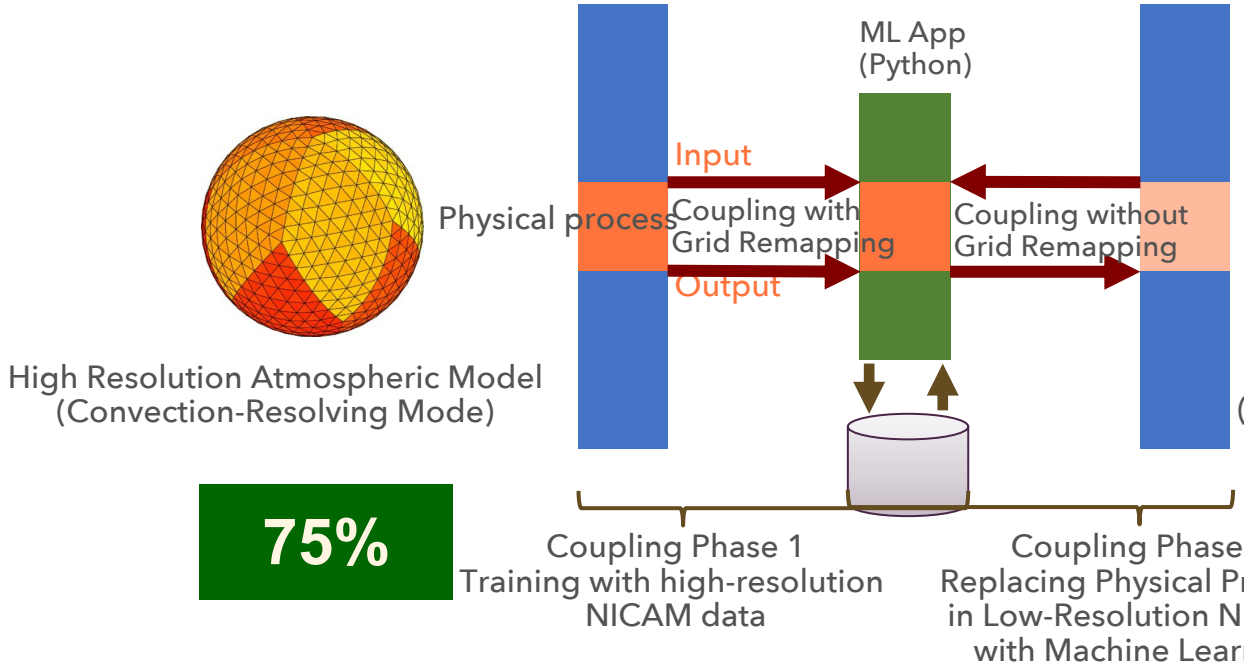


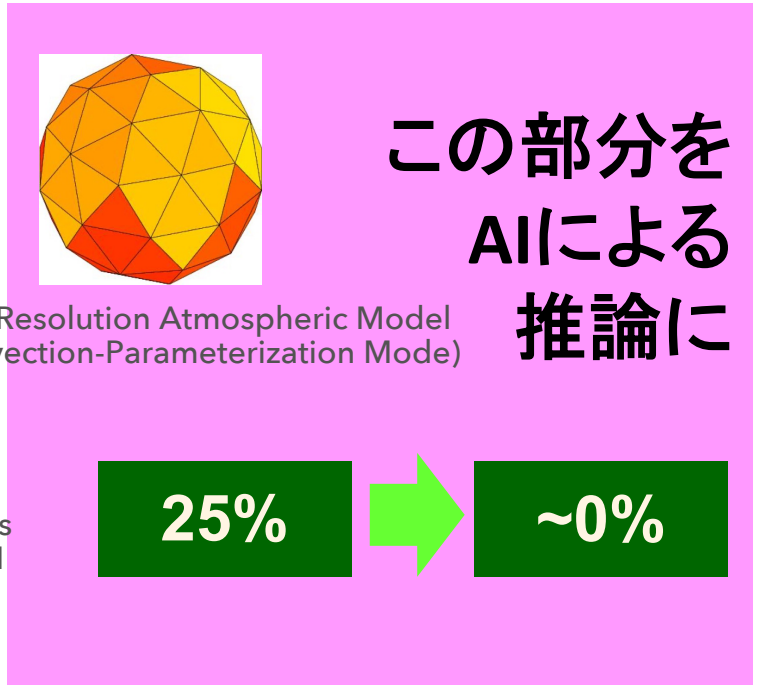
# 「計算＋データ＋学習」融合を支援するライブラリ・実行環境の開発

Hierarchical, Hybrid, Heterogeneous
h3-Open-BDEC
Big Data & Extreme Computing

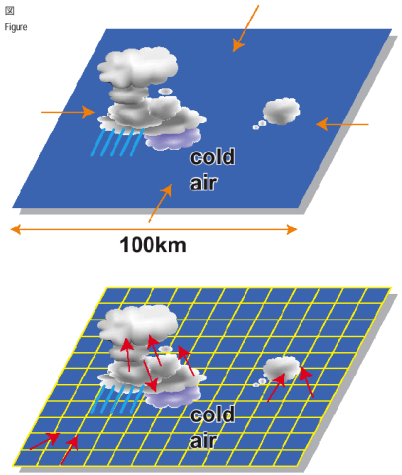
**h3-Open-UTIL/MP (h3o-U/MP)**
+ h3-Open-SYS/WaitIO-Socket

- 異なるモデルのシミュレーションを結合
- シミュレーションと機械学習を結合
- 異なる種類のスパコン同士で通信を可能にする: Odyssey ⇔ Aquarius




粗い計算での
雲生成プロセス



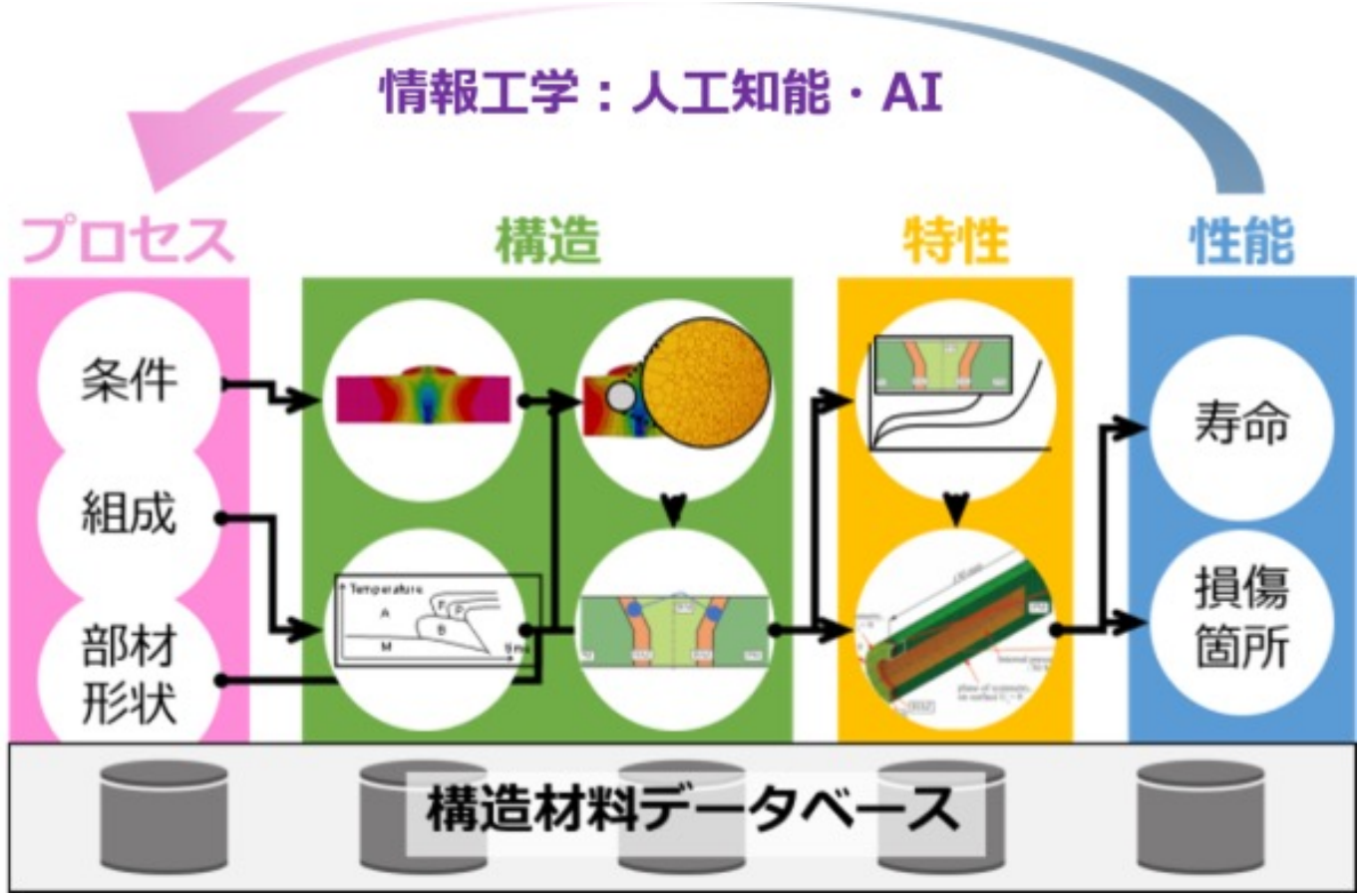

気象コードにおける機械学習との連携〔八代・荒川　2020〕

# 材料開発へのAI活用 (国立物質材料研究機構：NIMS)

- 所望の特性に応じた、
  - 材料の組成、
  - 形状、
  - 製造の条件など、

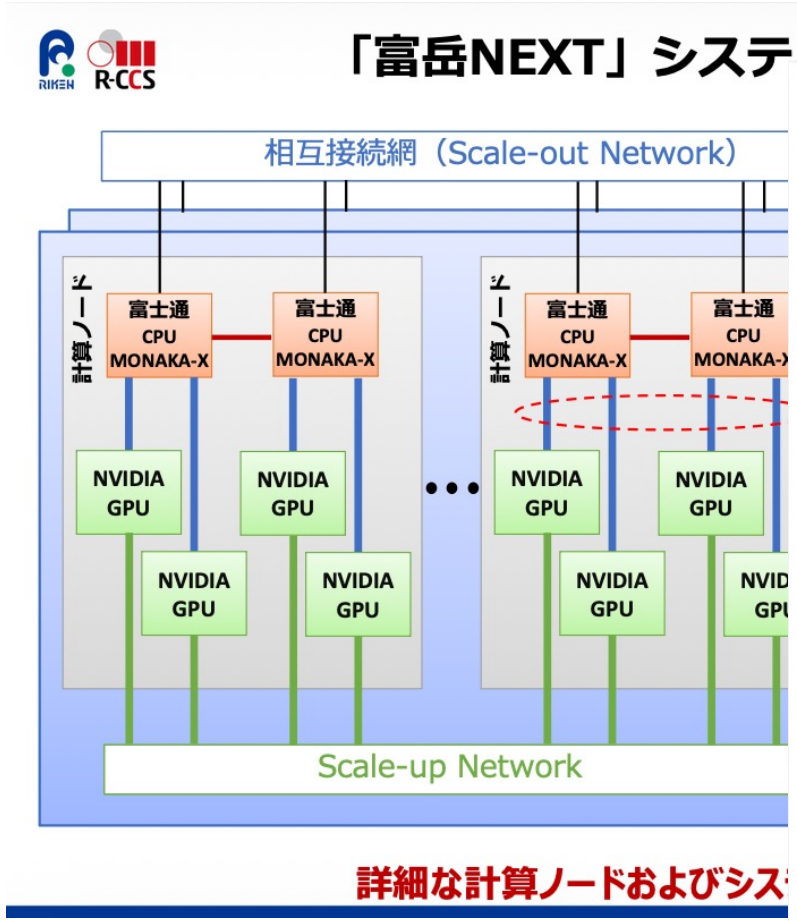
をAIによって推定し候補を提示

- シミュレーション時間の低減
- 実験の効率化




出典：NIMS

# 富岳NEXT@理研



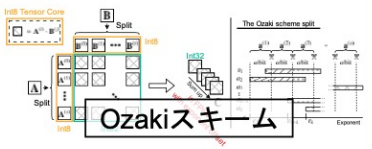

## 富士通 MONAKA-X+先端NVIDIA GPUが実現するHPC･AI融合
## ～ 理研が主導するシステムソフトウェア開発戦略 ～

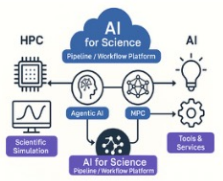
**富士通 MONAKA-X と最先端のNVIDIA GPUのハイブリッド性能を最大限に引き出すため、理研の主導によるHPC･AIの両面で最適化された統合システムソフトウェアを開発**

**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 アプリのスケー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

OpenMP kokkos OpenACC




https://www.r-ccs.riken.jp/wp/wp-content/uploads/2025/08/20250822_FugakuNEXT_pressConf_kondo.pdf

# まとめ

- AI for Scienceによって
  - これまでは簡単に発見できなかったことが見つかる(かもしれない)
  - これまでの全シミュレーション実行時間を1/10 (あるいはもっと)に短縮できる
- Wisteria/BDEC-01は、先進的なAI for Science, AI for HPCを実現する基盤として提供
  - ソフトウェア: h3-Open-BDEC
- 今後も「計算＋データ＋学習」融合 = BDEC プロジェクトを推進
  - Wisteria/BDEC-01 ➔ BDEC-02
- 2025年1月導入の **Miyabi**ではGPUが主力、AI for Scienceを加速
  - JCAHPC: 筑波大学計算科学研究センターとの共同運用