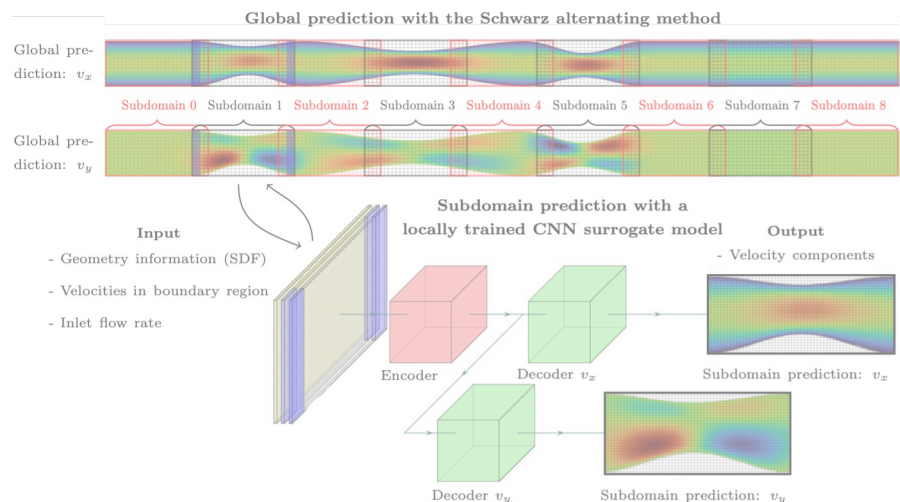


AIサロゲートモデルによる 流体シミュレーション結果予測の取り組み



下川辺 隆史
東京大学

2006-2010

2011-2015

2016-2020

2021-2025

2026-2030

2031-2035

Hitachi SR11000
J1, J2
5.35 TF, 18.8 TF

IBM Power5+

Hitachi
SR8000/MPP
2,073.6 GF

SR8000

AMD Opteron

Hitachi HA8000
T2K Today
140 TF

Hitachi SR16K/M1
Yayoi
54.9 TF

IBM Power7

Intel Xeon Phi

Oakforest-
PACS (Fujitsu)
25.0 PF

Intel CLX

OBCX
(Fujitsu)
6.61 PF

NVIDIA GH200 +
Intel SPR/HBM

Miyabi
80.1 PF

Fujitsu FX10
Oakleaf-FX
1.13 PF

SPACR64 IXfx

Reedbush-U/H/L
(SGI-HPE)
3.36 PF

Wisteria
BDEC-01 Fujitsu
33.1 PF

A64FX,
Intel Icelake-
NVIDIA A100

BDEC-02
150+ PF

S/D/L/I
(AI4S)
140+ PF

Accelerators

Intel BDW +
NVIDIA P100

Ipomoea-01 25PB

Ipomoea-02

mdx I: Data Platform
Fujitsu

mdx I-Next

疑似ベクトル

汎用CPU

加速装置付

ストレージ

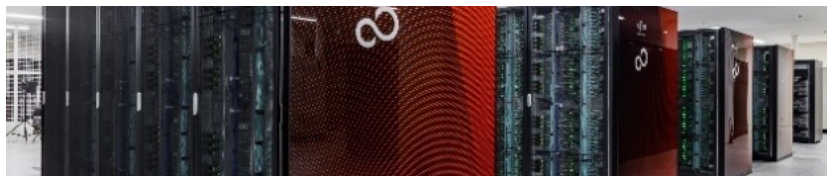
東京大学情報基盤 センターのスパコン

利用者2,600+名, 55%は学外

Wisteria/BDEC-01 と Miyabi

「計算・データ・学習」(S+D+L) 融合を担うスーパーコンピュータ — 東京大学情報基盤センター と JCAHPC

● ● 富士通製



Wisteria/BDEC-01

東京大学情報基盤センター

2021年5月運用開始 ・ 東京大学 柏Ⅱキャンパス

33.1 PFLOPS 総合ピーク倍精度

BDEC 第一弾システム
h3 (Hierarchical・Hybrid・Heterogeneous)

Odyssey

シミュレーションノード群

Fujitsu A64FX (PRIMEHPC FX1000) ・ 7,680ノード / 368,640コア

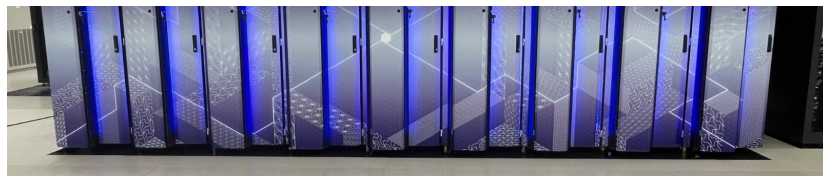
25.9 PF ・ Tofu-D ・ HBM2 240 TiB / 7.8 PB/s

Aquarius

データ・学習ノード群

Intel Xeon Ice Lake ×2 + NVIDIA A100 ×8 / ノード ・ 45ノード (A100 360基)

7.2 PF ・ InfiniBand HDR200 ・ 外部リソース直結



Miyabi (OFP-II)

JCAHPC 運用

2025年1月運用開始 ・ Oakforest-PACS 後継

80.1 PFLOPS 総合ピーク倍精度

国内初のGH200大規模汎用機
国内最大級のクラスタ

Miyabi-G

演算加速ノード群

NVIDIA GH200 Grace Hopper Superchip ×1 / ノード (72c Grace+H100)
・ 1,120ノード

78.8 PF ・ NVLink-C2C ・ InfiniBand NDR200

Miyabi-C

汎用CPUノード群

Intel Xeon CPU Max 9480 ×2 / ノード ・ 190ノード

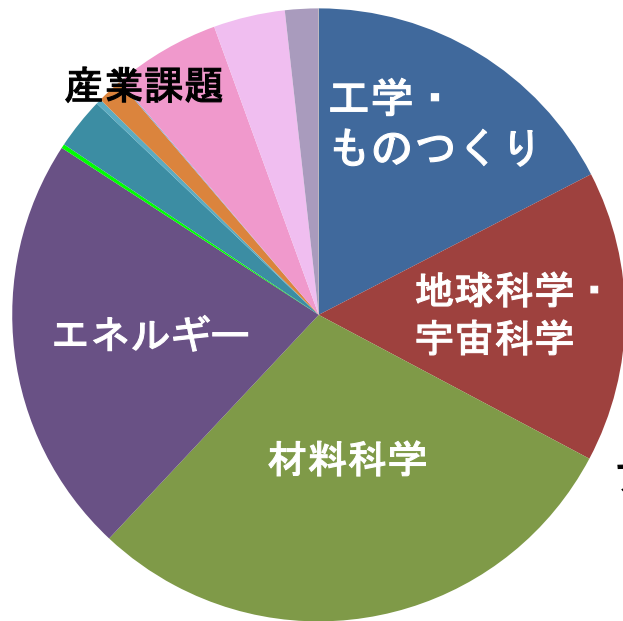
1.3 PF ・ HBM搭載Xeon ・ InfiniBand NDR200

共通する設計思想 **S+D+L** の融合

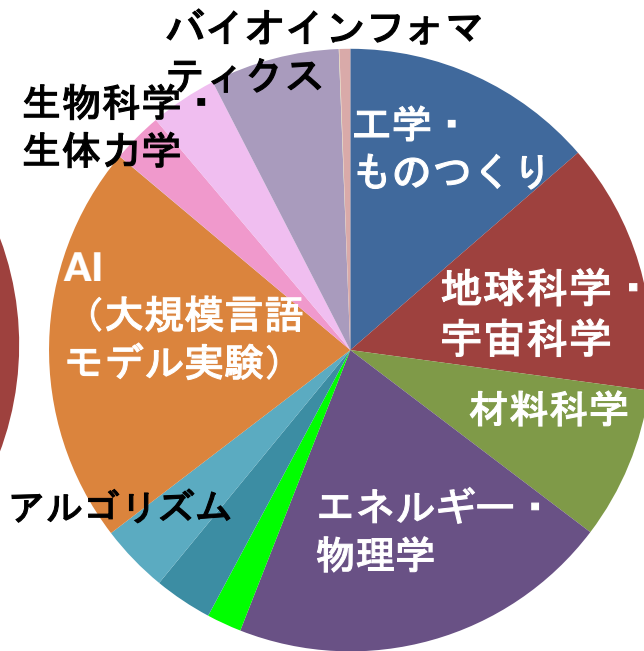
数値シミュレーション × 大規模データ解析 × 機械学習/AI を一体運用 (AI for Science) | 主な利用分野: 気候・防災・地震・津波、材料・創薬、CFD、宇宙、ライフサイエンス

2025年度分野別計算資源利用割合

Miyabi ■汎用CPU, ■GPU



Miyabi-C
Xeon Max



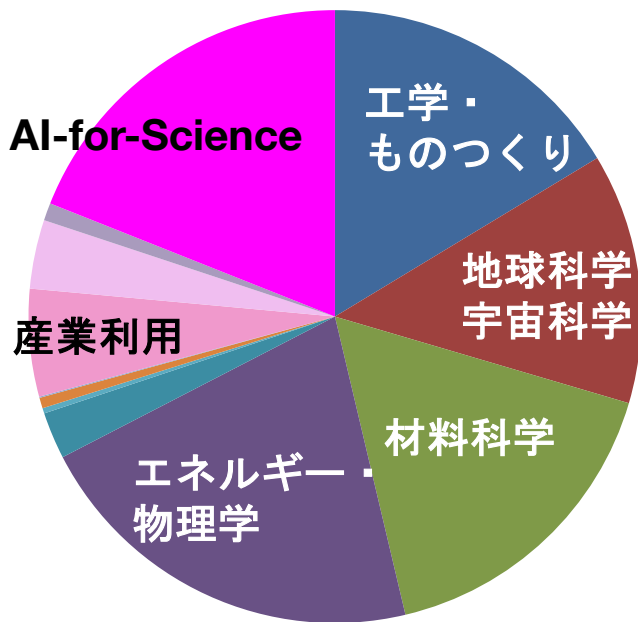
Miyabi-G
GH200
ClimCORE サイトビジット

- 工学・ものづくり
- 地球科学・宇宙科学
- 材料科学
- エネルギー・物理学
- 化学
- 計算機科学
- アルゴリズム
- AI
- 教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス
- 社会科学・経済学
- データ科学・データ同化

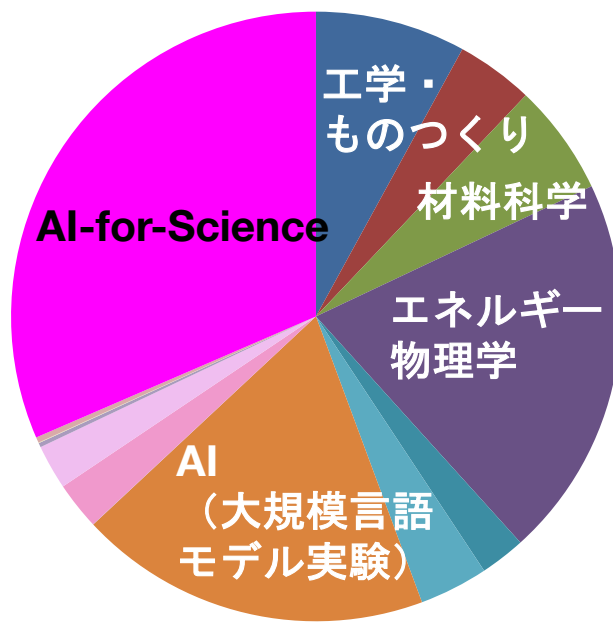
m i y a b i

2025年度分野別計算資源利用割合

Miyabi ■汎用CPU, ■GPU



Miyabi-C
Xeon Max

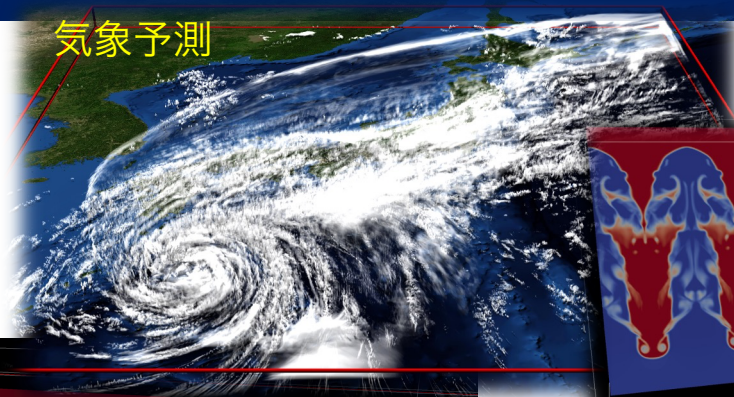


Miyabi-G
GH200
ClimCORE サイトビジット

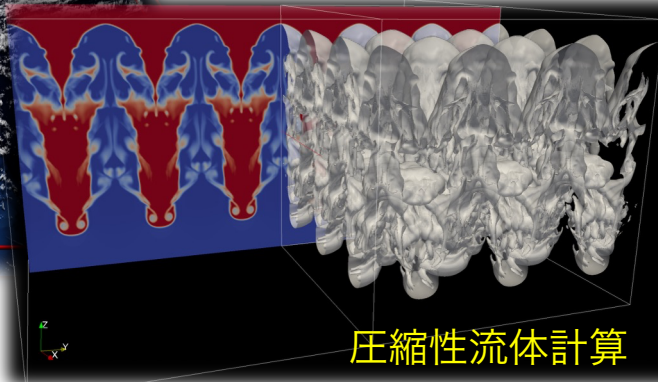
- 工学・ものづくり
- 地球科学・宇宙科学
- 材料科学
- エネルギー・物理学
- 化学
- 計算機科学
- アルゴリズム
- AI
- 教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス
- 社会科学・経済学
- データ科学・データ同化
- AI4S



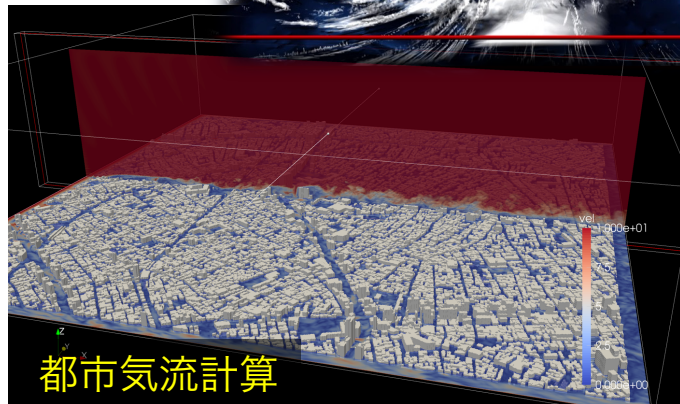
数値流体力学



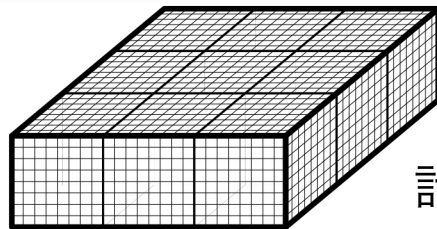
気象予測



圧縮性流体計算



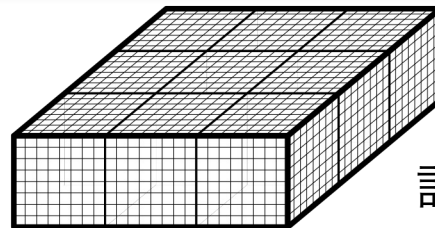
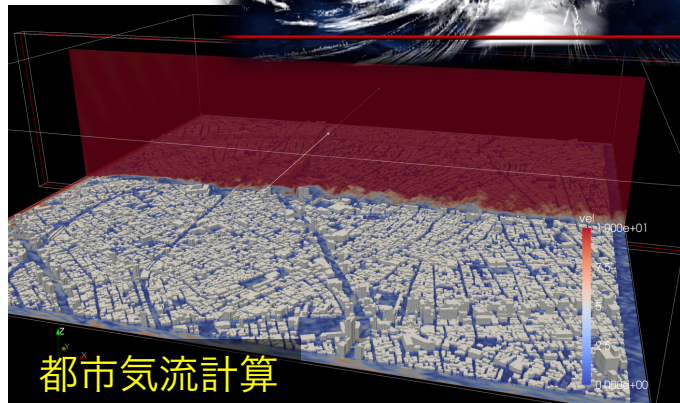
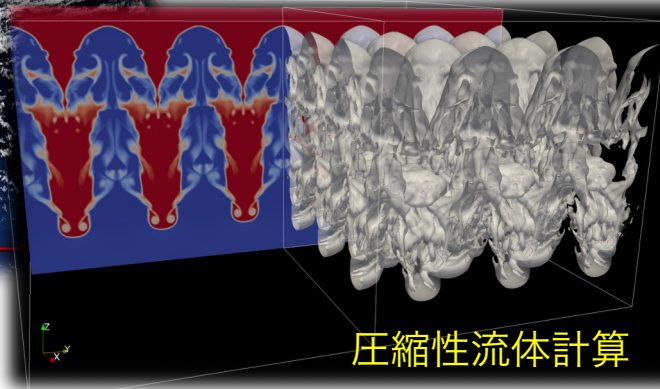
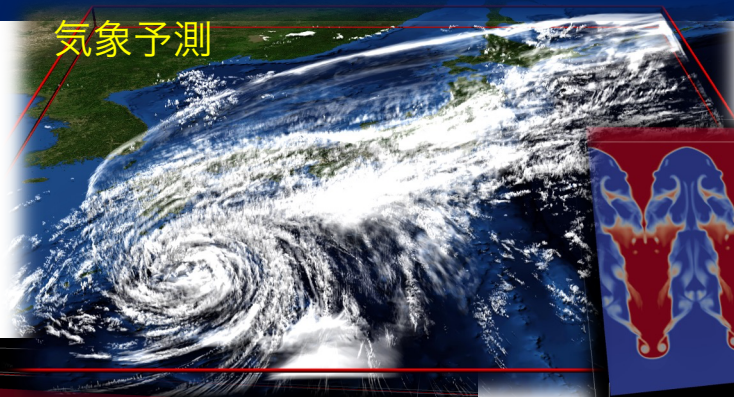
都市気流計算



計算格子

- 数値流体力学（CFD）は高性能計算分野で重要なアプリケーション
- CFDシミュレーションは格子、メッシュ、粒子による大規模計算が必要で、多くの計算時間が必要

数値流体力学



計算格子

■数値流体力学（CFD）は高性能計算分野で重要なアプリケーション

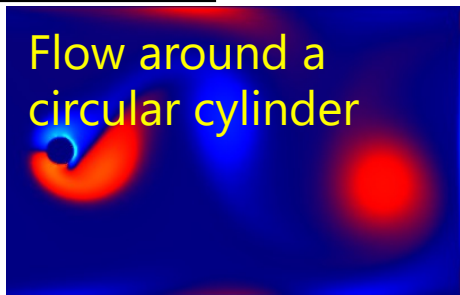
■CFDシミュレーションは格子、メッシュ、粒子による大規模計算が必要で、
多くの計算時間が必要

➡ CFDシミュレーションを高速化

CNNによるCFD シミュレーション結果の高速予測の概要

データセット

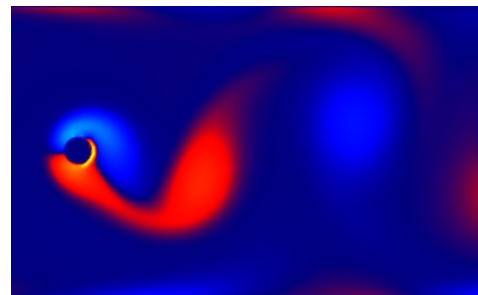
Flow around a
circular cylinder



CFD シミュレーション
(格子ボルツマン法)



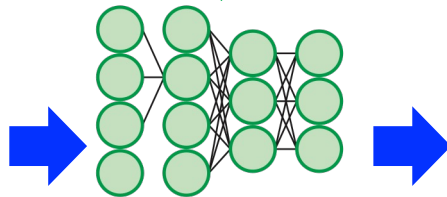
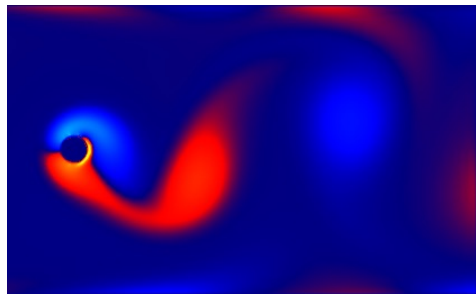
$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) + \Omega_i(x, t)$$
$$\Omega_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t))$$



学習



予測



流れの予測

CNN によるシミュレーション結果の予測

CNNで「高速なシミュレータ」を構築⁸

問題設定とデータセット

■定常流計算（時間変化のない流れ）

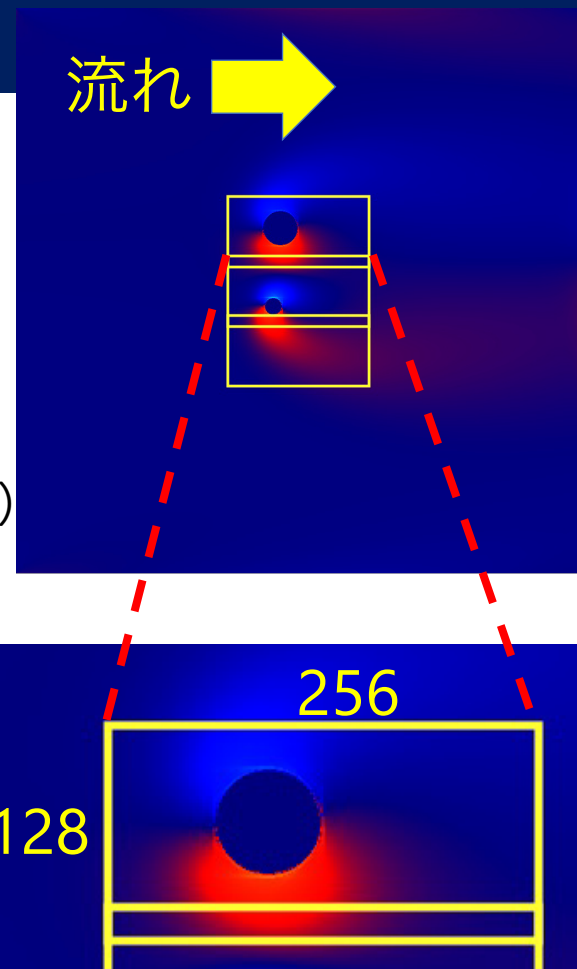
- 計算領域に物体があり、x軸の正方向へ流れる

■格子ボルツマン法

- D2Q9モデル (速度に9変数用いる)
- レイノルズ数 $Re = 20$
- 領域サイズ: 256×128 (1024×1024 から切り出し)
- 6種類の物体:
 - 角柱 (3-7角形)
 - 円柱

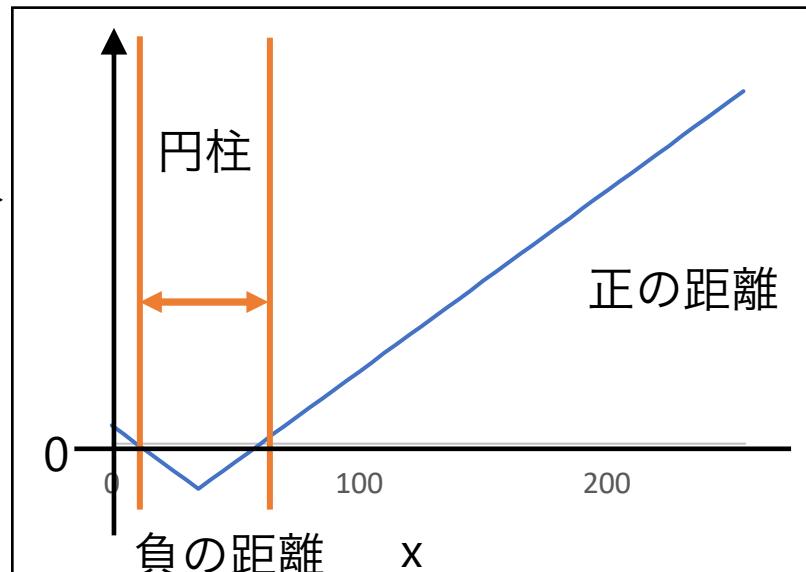
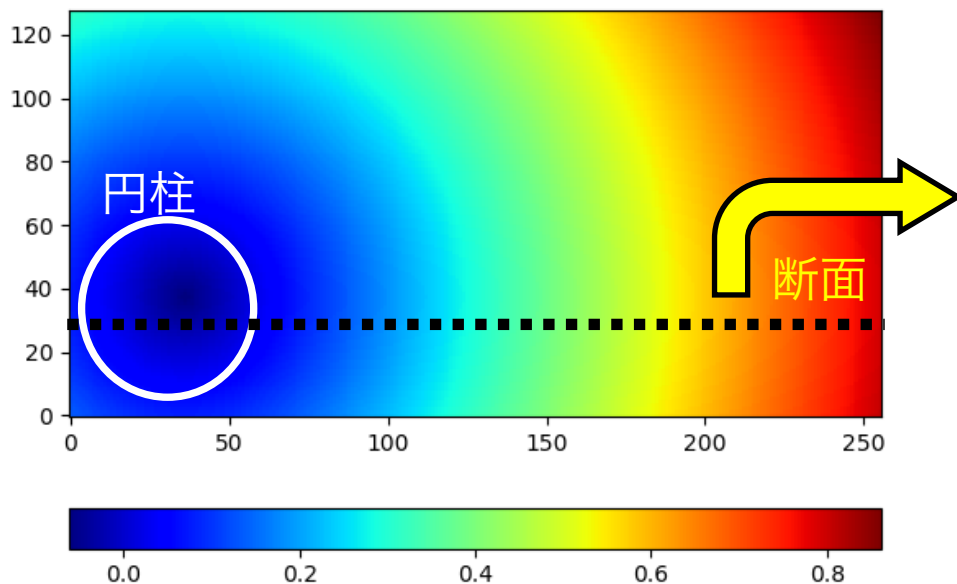
■学習用データサイズ: 256×128 (切り出し)

- 訓練: 14515
- 評価: 1613



符号付き距離関数

- 物体表面を0として、物体外を正の距離、物体内を負の距離で表す。
- 複雑な形状を表現可能で、CNNによる予測で精度向上に有効であることが知られている。

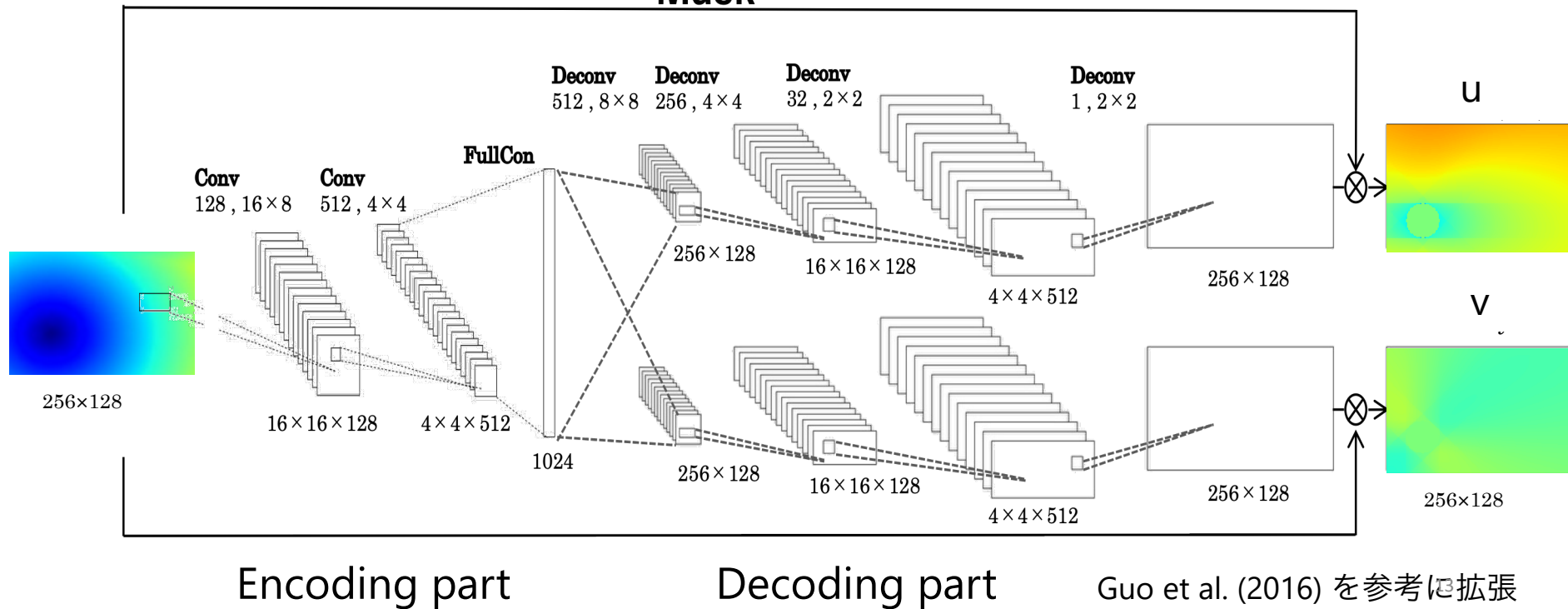


定常流を予測するネットワーク構造

入力:
符号付き距離関数 (物体形状)
境界における流速

出力:
全領域の流速

Mask

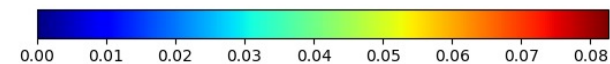
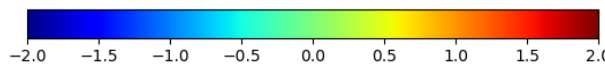
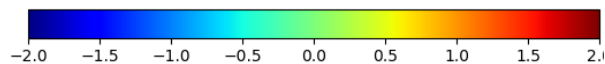
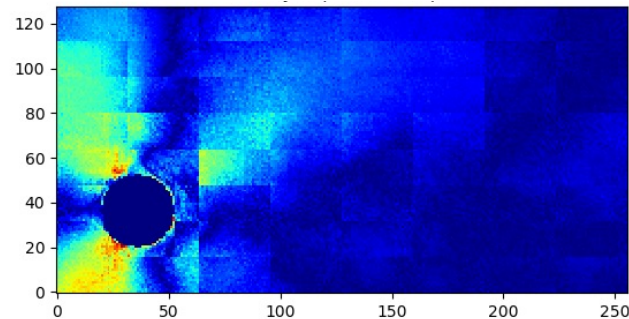
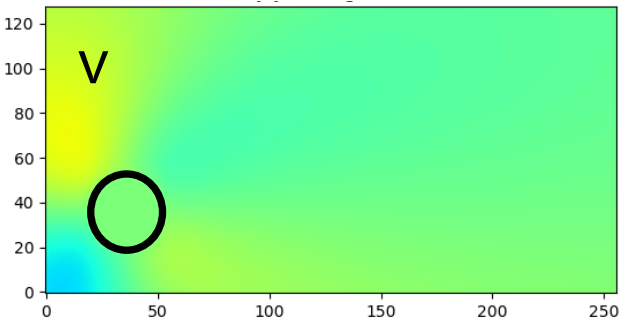
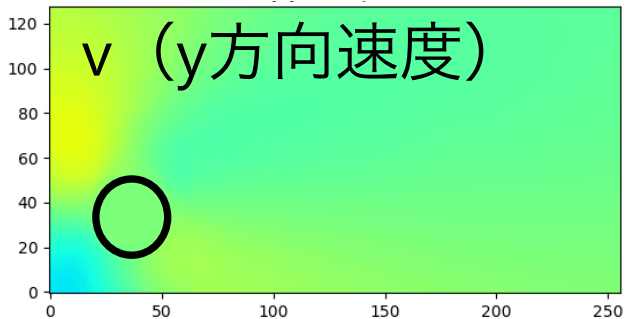
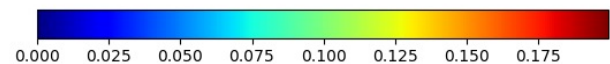
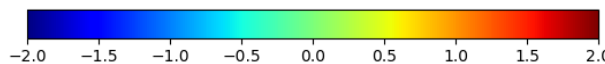
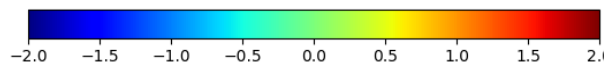
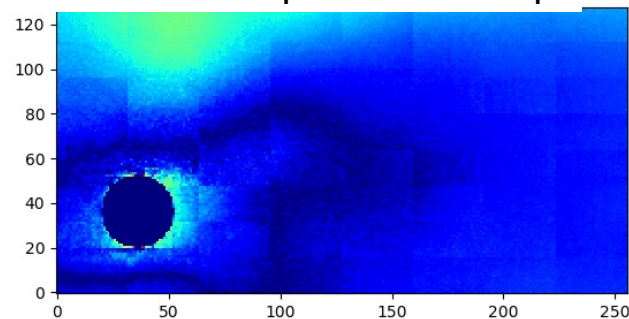
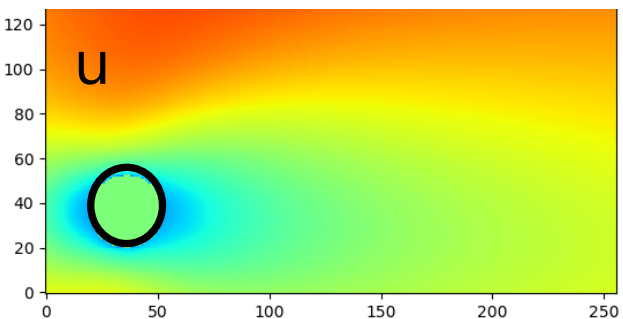
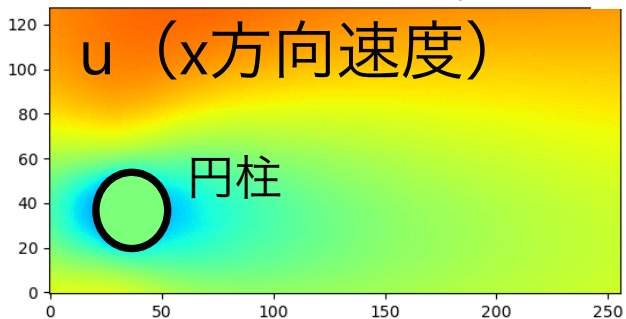


単一領域におけるCNNによる予測

CNN による予測

格子ボルツマン法による結果

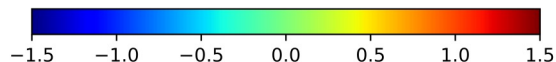
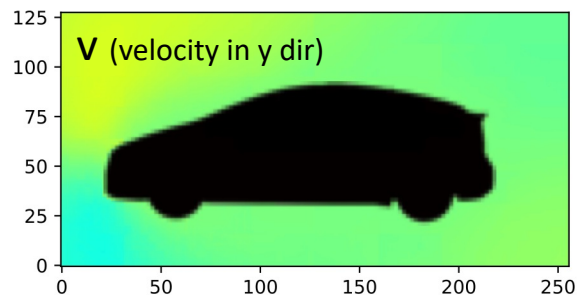
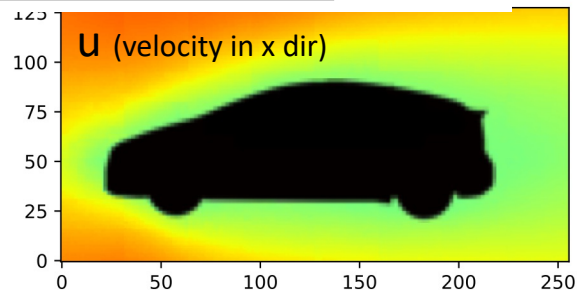
誤差 $\text{Err} = |\text{CNN} - \text{LBM}|$



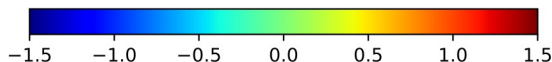
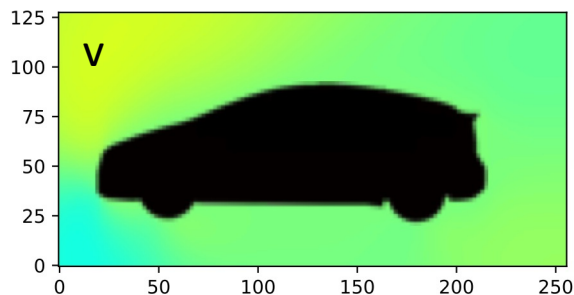
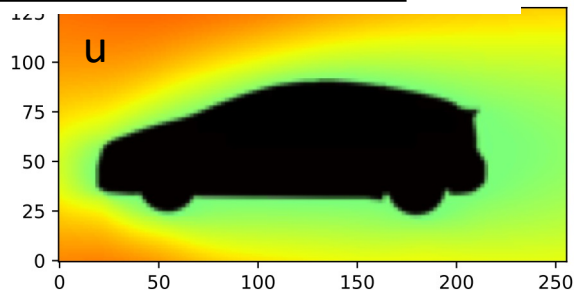
Loss: 7.3×10^{-5}

複雑形状周りの流れの予測

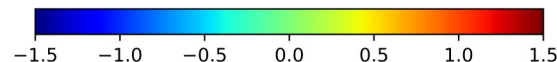
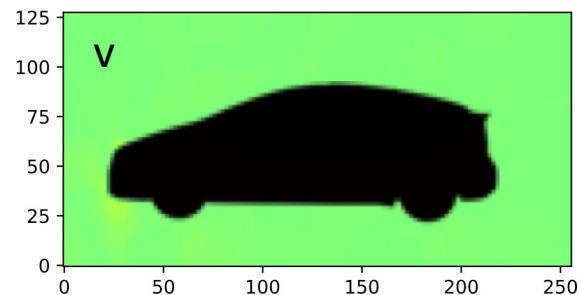
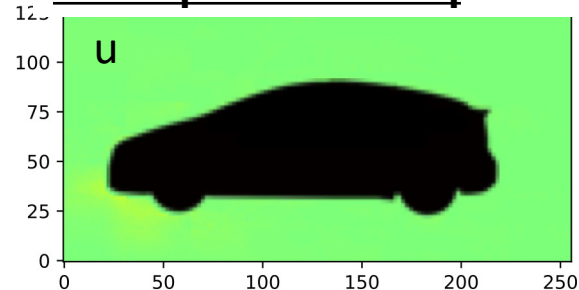
CNN Prediction



LBM Ground truth



Err = |CNN - LBM|

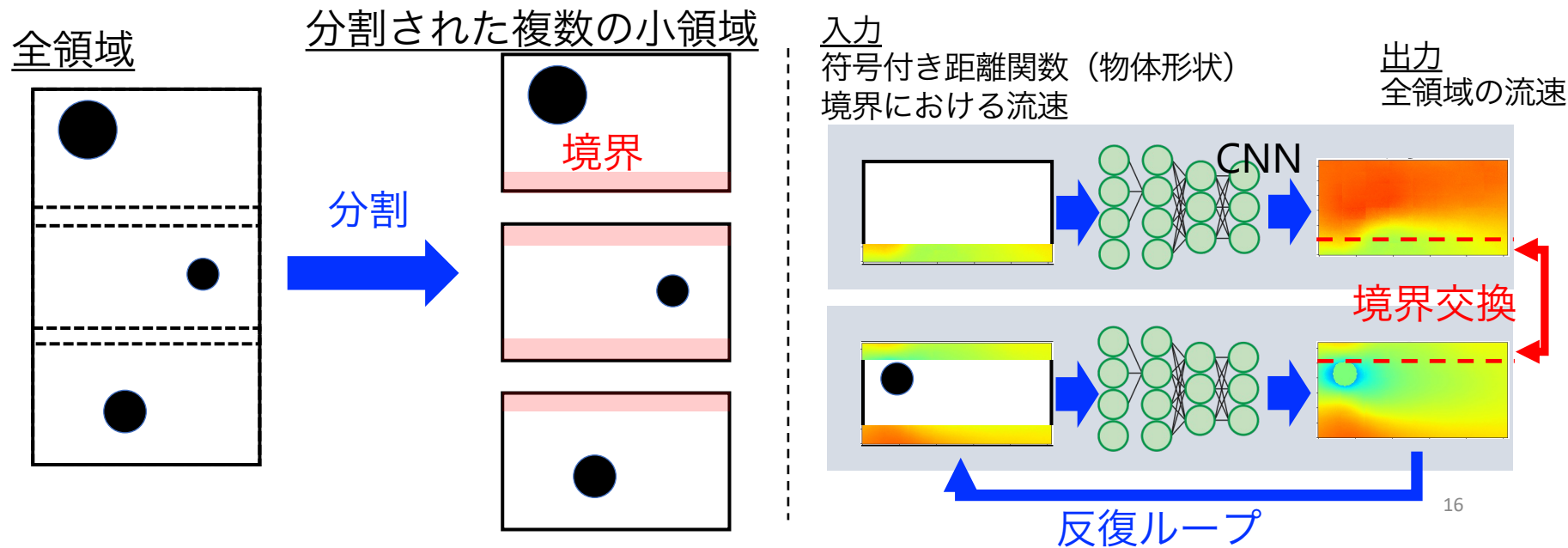


• Computation time... LBM (82,000steps) → 41.1 sec、 CNN prediction → 0.6 sec

⇒ CNNは高精度に高速に予測することが可能

CNNと境界交換による複数領域における予測手法

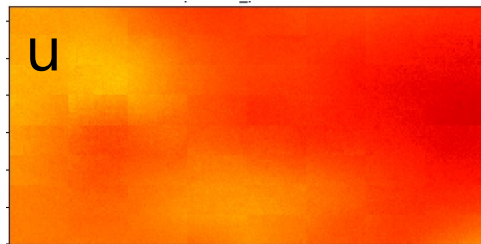
- 単一領域予測：学習に用いた領域サイズの予測しかできない、GPUメモリ容量に制限
- 計算領域を複数小領域に分割し、複数小領域にまたがるシミュレーション結果を予測
 - ・ 単一領域に対し学習したネットワークモデルで各小領域の結果を予測
 - ・ 複数の小領域間で予測値の整合性を保つため、隣接する分割領域間で境界交換し、推論し、予測値が収束するまで、これを繰り返す



複数領域を用いた予測結果

CNN Prediction

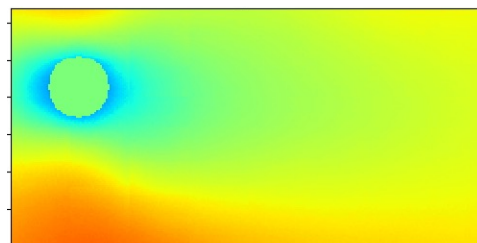
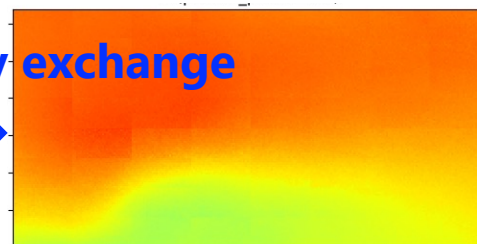
Initial Prediction



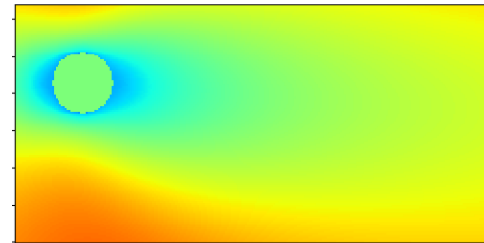
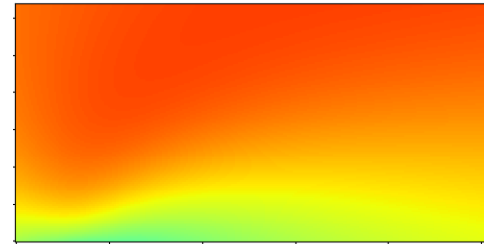
Final (converged)



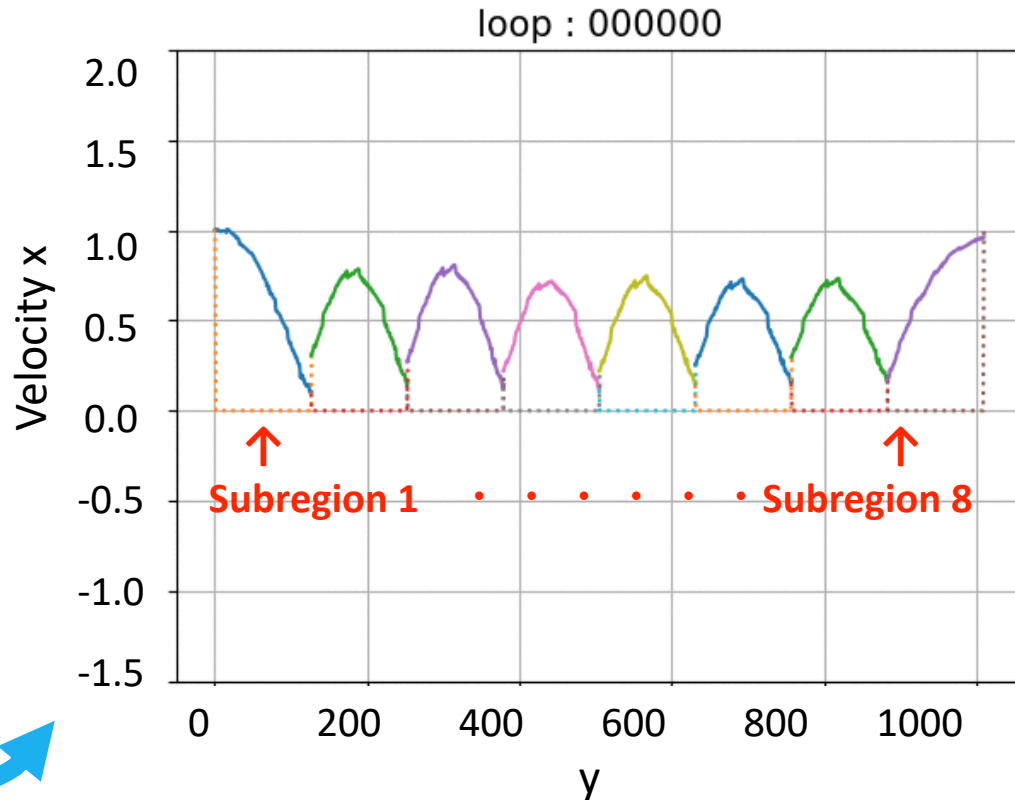
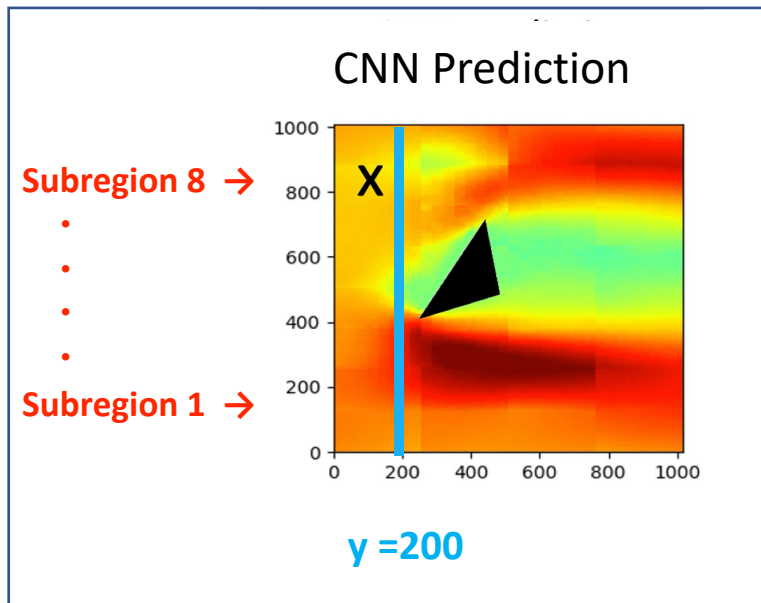
CNN + Boundary exchange



LBM Ground truth

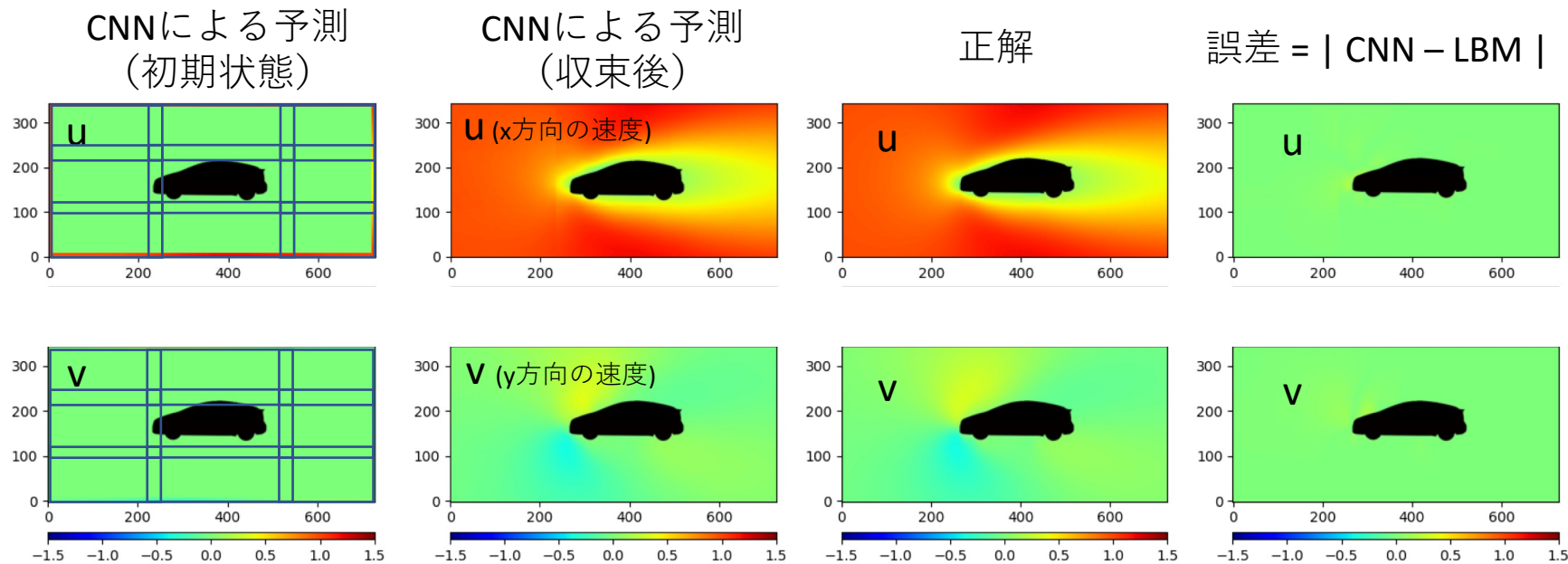


CNNと境界交換による予測の収束の例



断面におけるx方向速度の変化

境界交換による2次元計算の予測結果



予測サイズ : 748x364(分割数9)

平均誤差 : 3.89%

計算時間 : 3.82 s



高速かつ高精度に予測可能

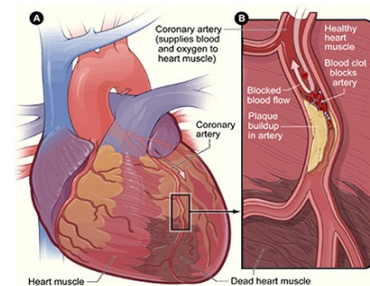
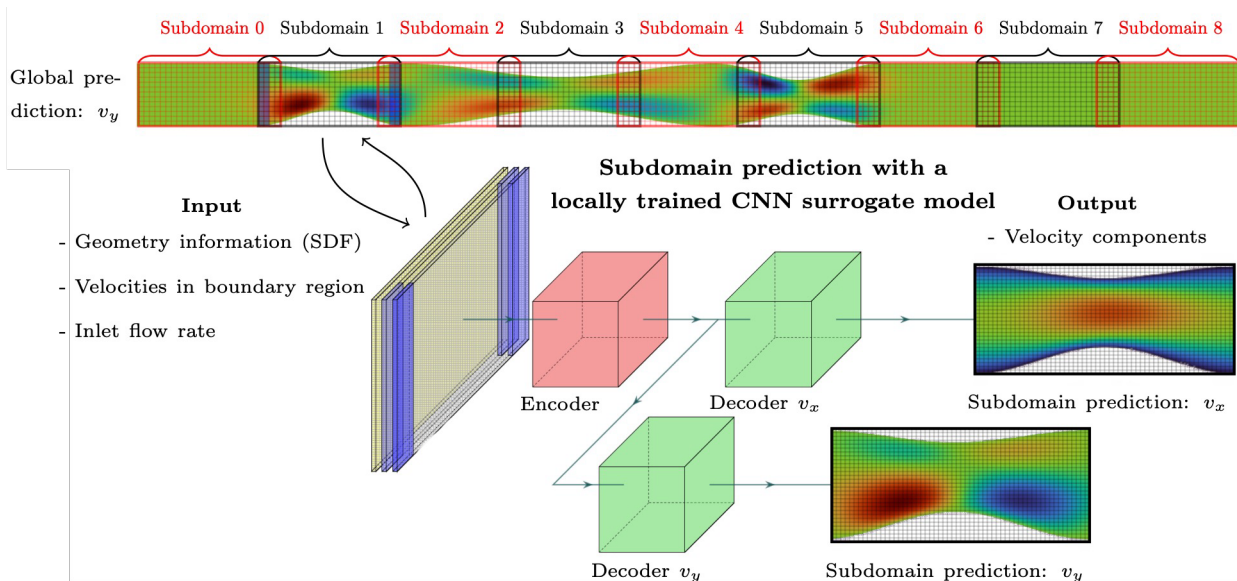
適用事例：ニュートン流体の血流予測

■血流シミュレーションのための代理モデルを高度化

ケルン大学共同研究

■ハード制約付きCNN代理モデル (Hard-Constrained CNN Surrogate Model)

- 入力：血管壁における境界速度値 (= 0)
- 出力：
 - 物理法則を統合し、各断面におけるx方向速度をスケーリング
 - 既知の平均流量を提供することで質量保存則を満たす



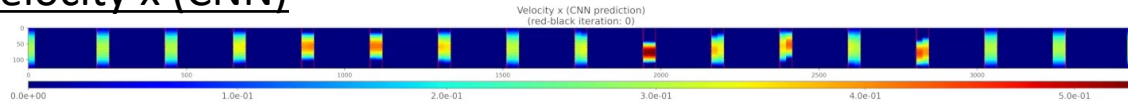
Adapted from
<https://www.drshreshbhagia.com/patient-guide/overview-of-coronary-artery-disease/>

[S. Klaes, A.Klawonn, N.Kubicki, et al.,
SIAM Journal on Scientific Computing,
2026, in press]

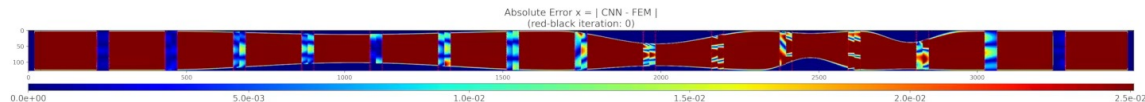
ニュートン流体の血流予測

■ハード制約付きCNN予測の可視化

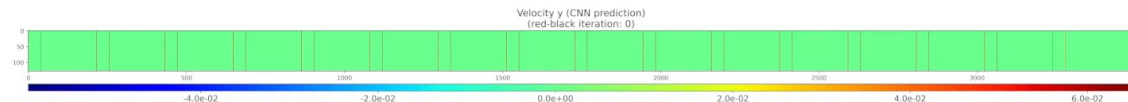
Velocity x (CNN)



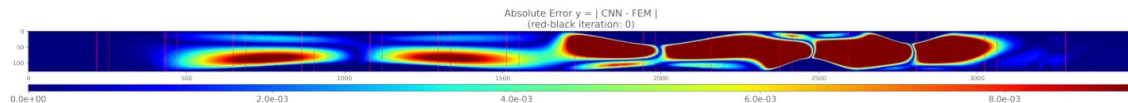
Error x = |CNN - FEM|



Velocity y (CNN)



Error y = |CNN - FEM|



■予測精度

(Global relative error)

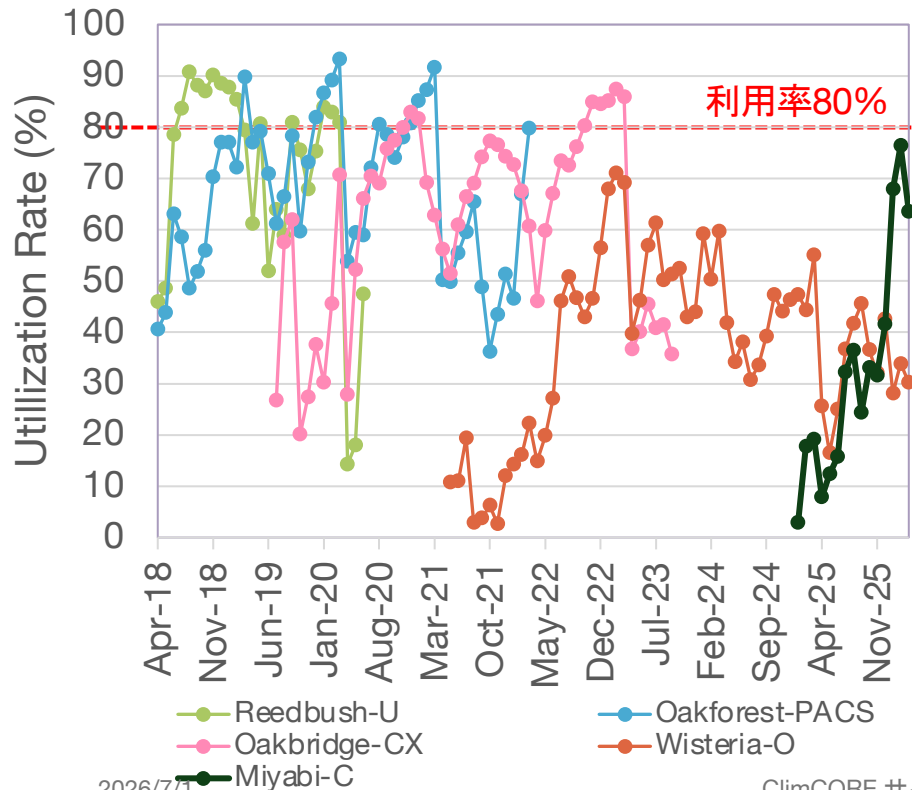
- データ駆動型 (オリジナル)
- ハード制約付きCNN

GRE	≤ 1%	1-5%	5-10%	10-15%	15-20%	≥ 20%
Absolute count (%)	30	723	1	1	0	0
Hard-constrained CNN	(4.0%)	(95.8%)	(0.1%)	(0.1%)	(0.0%)	(0.0%)
Absolute count (%)	0	30	225	269	145	86
Data-driven CNN	(0.0%)	(4.0%)	(29.8%)	(35.6%)	(19.2%)	(11.4%)

[S. Klaes, A.Klawonn, N.Kubicki, et al.,
SIAM Journal on Scientific Computing,
2026, in press]

Miyabiの利用推移(2018年4月～2026年3月)

CPU: Miyabi-C

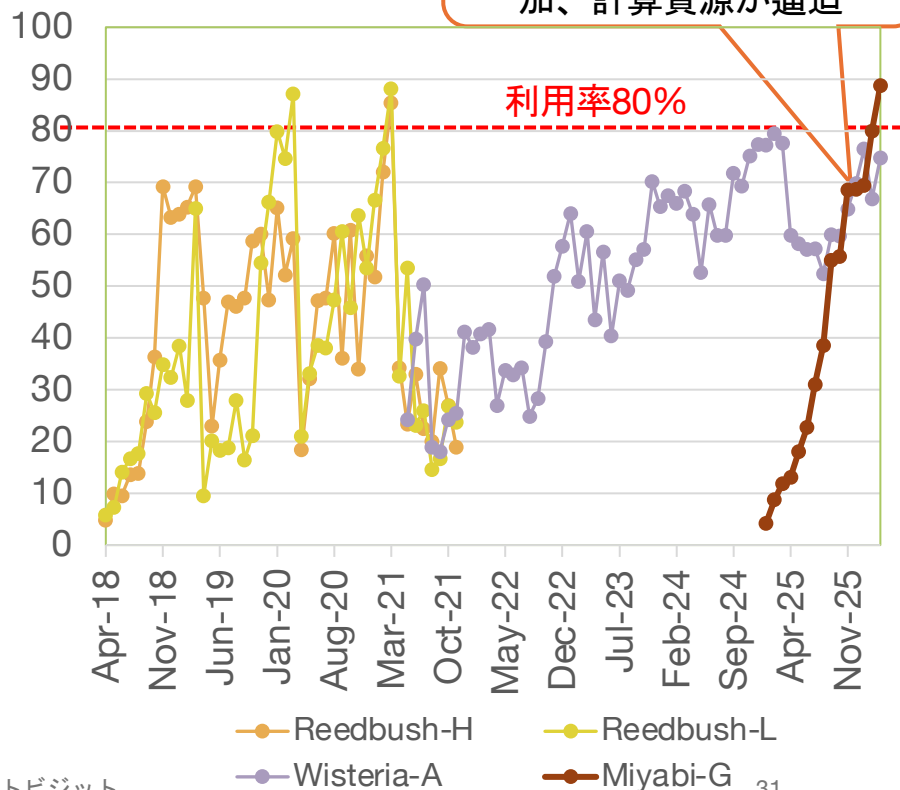


2026/7/1

ClimCORE サイト ビジット

GPU: Miyabi-G

Miyabi-Gでは過去に例がないほど急激に利用が増加、計算資源が逼迫



「計算・データ・学習・推論」融合基盤システム

AI for Science に不可欠な計算資源の戦略的増強

(i) 共用計算資源の大規模増強を図る取組

東京大学 情報基盤センター 事業代表者：千葉 滋 (情報基盤センター長)

https://www.mext.go.jp/b_menu/boshu/detail/mext_00503.html

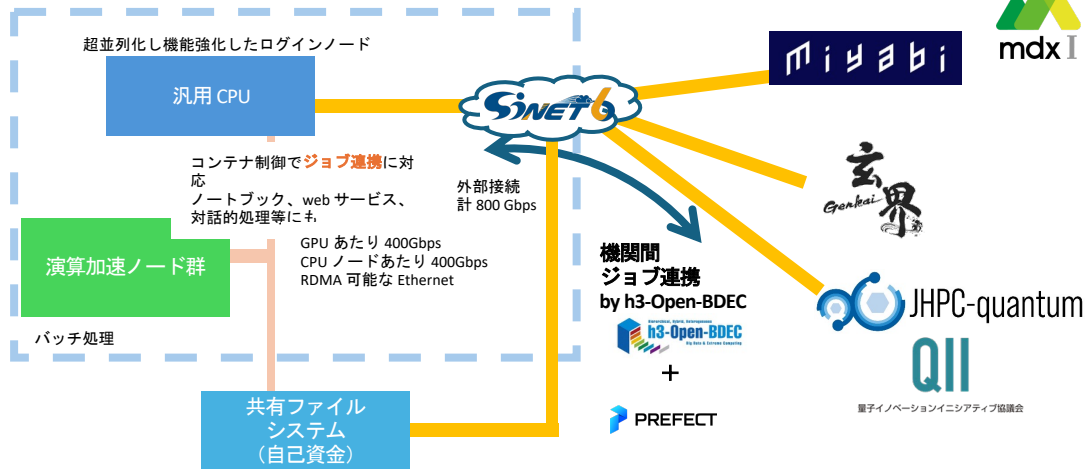
● 提供資源・目標性能 (HPCI向け)

- ・ 資源提供期間 **2027年6月～2033年3月** (5年10か月)
- ・ GPU時間 (目標) **全体の80%以上をHPCIに提供予定**
- ・ 目標演算性能 倍精度 **140 PFLOPS** / AI **25 EFLOPS** 以上

● 事業内容・特色

- ・ **HPCIハブ機能** :
 - ・ 本システムに加え、既存 HPCI 資源 (Miyabi や他機関の資源) や理研 JHPC-quantum や東大 QII の量子計算機等を連携、ひとつに組織化した計算基盤に
- ・ **先進的GPU基盤** :
 - ・ 倍精度演算とAI演算を兼備する高性能GPUを導入
 - ・ Confidential Computingにより機微データ・産業利用に対応
- ・ **Kubernetes+スケジューラ** :
 - ・ バッチに加え、ローカルLLM・AIエージェント・対話的処理にも対応
- ・ **HPC・AI・量子の三位一体** :
 - ・ h3-Open-BDECで機関間ジョブ連携、我が国の米国GENESIS Missionへのキャッチアップに貢献
- ・ **AI法への貢献** :
 - ・ 研究開発の促進、施設の整備・共用、人材育成に寄与

● 整備する計算基盤 — HPCIハブ機能をそなえたGPUシステム



● 運用体制・整備環境

- ・ **柏IIキャンパス スパコン室** :
 - ・ 電源2MW、SINET6に高速接続
- ・ **高温水冷却を自己資金で整備開始** :
 - ・ 運転費用も利用負担金・自己資金等で確保
- ・ **経験豊富な人員** :
 - ・ 教員12・技術13・研究支援12名
- ・ **60年以上の共用実績** :
 - ・ 前身の大型計算機センター時代から

● 利用制度・既存の連携体制

- ・ **HPCI共用/JHPC中核拠点** :
 - ・ 有償一般・企業／無償教育利用
- ・ **HAIRDESC** :
 - ・ AI for Science 担当、中核機関
- ・ **HPCI整備計画調査研究** :
 - ・ 事業の成果を率先して実現予定
- ・ **mdx・JCAHPC Miyabi 連携** :
 - ・ Open OnDemand ポータル整備も強化

まとめ

■深層学習を用いて、流体計算の結果を予測する研究を進めている。

■定常流計算の予測

- CNNと境界交換を用いることで複数領域にまたがる予測を実現
- 複数領域にまたがる予測は、学習に用いるデータの領域サイズやGPUメモリ容量の制限を受けず、大規模な計算領域の予測が可能

■非定常流計算の予測

- GNNを用いることで、時間変化する流れを予測することを確認した。

■「計算・データ・学習・推論」融合基盤システム

- AI for Science 推進
- 2027年6月からHPCI資源提供開始