

# (計算・データ・学習) 融合による革新的 スーパーコンピューティングの新展開

Innovative Supercomputing by Integration of (Simulation/Data/Learning) and Beyond

中島研吾<sup>1,2)</sup>

Kengo Nakajima

1) 博(工) 東京大学・情報基盤センター (〒277-0882 千葉県柏市柏の葉6-2-3, E-mail: nakajima@cc.u-tokyo.ac.jp)

2) 理化学研究所計算科学研究センター

Recently, supercomputing has been changing dramatically. Integration/convergence of Simulation/Data/Learning (S+D+L) is important towards Society 5.0 proposed by Japanese Government, which enables integration of cyber space & physical space. In 2015, we started the BDEC project (Big Data & Extreme Computing) for development of supercomputers and software for integration of (S+D+L). In May 2021, we started operation of the Wisteria/BDEC-01. It is the first BDEC system, which consists of computing nodes for computational science and engineering with A64FX (Odyssey), and those for Data Analytics/AI with NVIDIA A100 GPU's (Aquarius). We also develop a software platform "h3-Open-BDEC" for integration of (S+D+L) on the Wisteria/BDEC-01, which is designed for extracting the maximum performance of the supercomputers with minimum energy consumption focusing on (1) Innovative method for numerical analysis by adaptive precision, accuracy verification and automatic tuning, (2) Hierarchical Data Driven Approach based on machine learning, and (3) Software for heterogeneous systems. Integration of (S+D+L) by h3-Open-BDEC enables significant reduction of computations and power consumption, compared to those by conventional simulations. In this talk, achievements in this project and future perspectives towards the next stage will be described.

**Key Words :** Exascale System, Integration of (Simulation+Data+Learning)

## 1. 背景

世界最高速のスーパーコンピュータ (スパコン) の演算性能は2022年にExa FLOPS (10<sup>18</sup>回/秒の浮動小数点演算) に達した。計算科学が「第三の科学 (The Third Pillar of Science)」と呼ばれるようになって久しいが、近年は様々なデータを活用することにより新しい科学を開拓する試みが始まっている。著者の所属する東京大学情報センターの各システムでは、①工学・ものづくり、②地球科学・宇宙科学、③材料科学が長年にわたり利用時間の合計80%以上を占めてきたが、同センター初のGPU搭載システムとして2017年4月に運用を開始したReedbush-H (データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータシステムGPU搭載ノード群) では人工知能、医療画像処理によるバイオインフォマティクス等、より多様な分野で使用されている。Exa FLOPS級の性能を有するエクサスケールシステムの消費電力量は数10MWに達し、消費電力削減が必須である。ムーアの法則の終焉を控え、ハードウェアのみならず、アルゴリズム・アプリケーションの変革も必要である。Society 5.0はサイバー空間 (仮想空間) とフィジカル空間 (現実空間) を高度に融合させたシステムにより、経済発展と社会的課題の解決を両立する、安全・安心な人間中心の社会であり、その実現にはIoT, AI, ビッグデータ等によるデジタル革新・イノベーションが不可欠である。スーパーコンピューティングは、従来の計算科

学・工学シミュレーションに加えて、データ科学、機械学習等の知見を融合した新しい手法の適用によって、サイバー・フィジカル空間を高度に融合したシステムを形成し、Society 5.0の実現に大きく貢献すると期待される。このような背景のもと、著者等は2015年頃から、「計算+データ+学習 (Simulation+Data+Learning, S+D+L)」融合を実現するプラットフォームとして「計算+データ+学習」融合スーパーコンピュータシステム (通称「BDEC (Big Data & Extreme Computing) システム」) 構築を目指して、様々な研究開発を進めてきた。

## 2. Wisteria/BDEC-01とh3-Open-BDEC

エクサスケール時代のスパコンの能力を最大限活用し、科学的発見を持続的に促進するために、「計算+データ+学習 (S+D+L)」融合による革新的シミュレーション手法を提案し、最小限の計算量・消費電力で融合シミュレーションを実現するための研究開発、ソフトウェア基盤実装を実施する。東大情報基盤センターにおいて、2021年5月に運用を開始した、Wisteria/BDEC-01は、アーキテクチャの異なるシミュレーションノード群 (Odyssey) とデータ・学習ノード群 (Aquarius) を有し、「計算+データ+学習 (S+D+L)」融合により、Society 5.0実現に貢献する (図1)。Odysseyは、「富岳」と同じ富士通社製「FUJITSU Processor A64FX」を7,680基搭載、ピーク性能25.9 PFLOPS, Aquariusにはインテル社製Xeon Ice Lake 90基、NVIDIA社

製GPU（A100 Tensorコア）を360基搭載、ピーク性能7.2 PFLOPSである。Wisteria/BDEC-01は、「S+D+L」融合を目指す世界初のヘテロジニアスなシステムである。

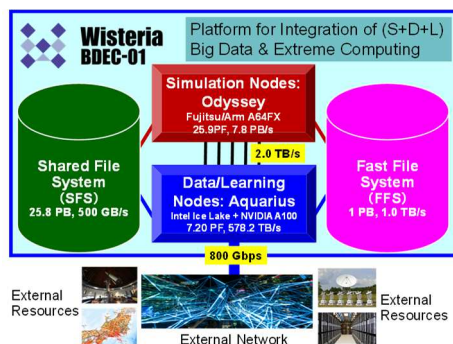


図1 Wisteria/BDEC-01の概要

本研究では、Wisteria/BDEC-01を「S+D+L」融合のプラットフォームと位置付け、スパコンの能力を最大限引き出し、最小の計算量・消費電力での計算実行を実現するために、①変動精度演算・精度保証・自動チューニングによる新計算原理に基づく革新的高性能・高信頼性・省電力数値解法、②機械学習による革新的手法（階層型データ駆動アプローチ）、③ヘテロジニアス環境でのシステムソフトウェア研究開発、の3項目を中心に研究し、革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」を開発する。h3-Open-BDECによる（S+D+L）融合シミュレーションをBDEC上で実施し、有効性を検証する。革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」を構成するh3-Open-MATH（数値アルゴリズム）、h3-Open-VER（精度保証）、h3-Open-AT（自動チューニング）、h3-Open-APP（アプリ開発）、h3-Open-DATA（データ科学）、h3-Open-DDA（データ駆動アプローチ）、h3-Open-UTIL（並列ユーティリティ）、h3-Open-SYS（統合・制御）は、緊密に関連し、以下の3層を構成する：

- ① 「変動精度演算に基づく新計算原理」層（h3-Open-MATH, h3-Open-VER, h3-Open-AT）
- ② 「（計算＋データ＋学習（S+D+L）融合）層（h3-Open-APP, h3-Open-DATA, h3-Open-DDA）
- ③ 「統合・通信・ユーティリティ」層（h3-Open-SYS, h3-Open-UTIL）

エクサスケールシステムにおける高性能数値アルゴリズム実現には、メモリ・ネットワーク階層の深化に対応した通信最適化、省電力・省エネルギーに関する検討が必要である。数値計算による近似的な数値解は様々な計算誤差を含み、計算結果の信頼性の観点から、その正しさを数学的に保証する必要がある。低精度・混合／変動精度使用時、悪条件問題には重要であるが、実問題で現れる大規模疎行列・H行列への応用例はほとんどない。本研究では、「変動精度演算に基づく新計算原理」確立を目指し、高性能アルゴリズム、精度保証、最適精度選択のための自動チューニング手法の研究開発を実施する。シミュレーションに

機械学習を適用して異なるパラメータでの解を予測するデータ駆動アプローチ（Data Driven Approach, DDA）では、多数の計算による教師データ生成が必要である。本研究で提案する階層型DDA（hDDA）は、特徴検知、Model Order Reduction, Uncertainty Quantification, 適応格子等を駆使し、計算量を削減した簡易モデルを機械学習により自動生成し、教師データ生成用モデルとして利用する。

「統合・通信・ユーティリティ」層はWisteria/BDEC-01のようなヘテロジニアスなシステム上で、「S+D+L」融合実現の環境を提供する。h3-Open-BDECはエクサスケール時代のスパコンで「S+D+L」融合を実現する世界初の革新的ソフトウェア基盤であり、計算科学の専門家のみで「S+D+L」融合を容易に実現できる。ソースコード類も含めて一般に公開し、様々な環境で利用できるよう、普及に努める。h3-Open-BDECによる「S+D+L」融合シミュレーションにより、従来手法と同等の正確さを保ち、大幅な計算量・消費電力削減を目指す。

### 3. 計算事例

アンサンブル連成は、アンサンブル計算と連成計算の組み合わせである。本研究では、低解像度大気モデルアンサンブルと高解像度大気モデルの連成計算を実施した（図2）。全球大気モデルNICAMを用い、低解像度側が水平解像度約220kmのモデルを64アンサンブル、高解像度側が水平解像度約14kmの単体モデルを適用した。Wisteria/BDEC-01（Odyssey）によりモデル時間9時間の積分で用いたリソースは19.3ノード時間であった（単精度演算）。高解像度モデルを64アンサンブルで9時間積分した場合の使用リソース2,240ノード時間（倍精度演算）に対して112倍の効率化が達成された。9時間積分ではアンサンブル連成と高解像単体実行で差異はなく、アンサンブル連成で妥当な結果が得られた。

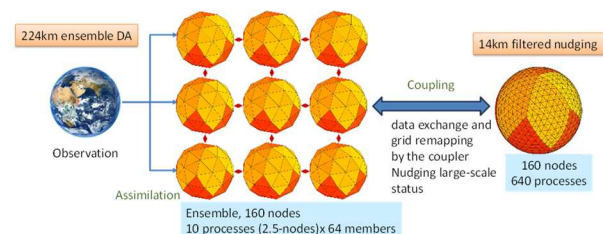


図2 大気モデルアンサンブル連成の模式図 [2]

### 謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金（19H05662, 代表：中島研吾）の助成を受けたものである。

### 参考文献

- [1] <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-Open-BDEC>
- [2] 中島研吾, 住元真司, 八代尚, 荒川隆, 松葉浩也, h3-Open-BDEC: 「計算＋データ＋学習」融合による革新的スーパーコンピューティング, RIMS共同研究（公開型）: 数値解析が開く次世代情報社会～エッジから富岳まで～, 京都大学数理解析研究所（京都, 2022.10