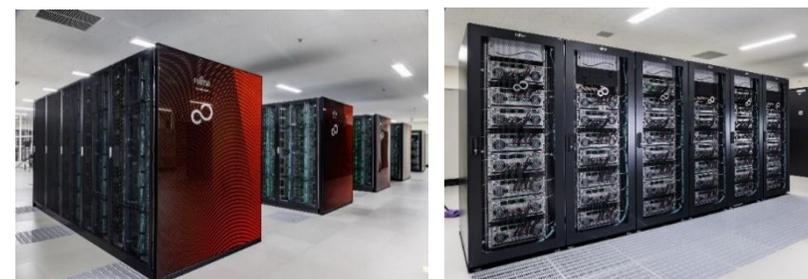




Wisteria/BDEC-01におけるビッグデータとHPC — シミュレーション、データ、学習の融合 —

住元 真司
東京大学 情報基盤センター



講演の概要

- 東京大学情報基盤センターの紹介
- Wisteria/BDEC-01とh3-Open-BDECプロジェクト
- Wisteria/BDEC-01システムにおけるビッグデータとHPC事例

東京大学情報基盤センター



東京大学情報基盤センター
INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO

- 東京大学大型計算機センター（1965年）
- 東京大学情報基盤センター（1999年～）
 - 全国共同利用施設
 - 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 中核拠点（2010年～）
 - 革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI) 構成機関（2010年～）
 - 最先端共同HPC基盤施設（JCAHPC）（2013年～）
 - 筑波大学計算科学研究センター・東大情報基盤センター：OFP
- 2023年6月現在
 - 2式のシステムを運用
 - Oakforest-PACS（OFP）：2022年3月末に運用終了
 - Oakbridge-CX（OBCX）：[2023年9月30日に運用終了予定](#)
 - Wisteria/BDEC-01（「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム）：2021年5月運用開始
 - データ活用社会創成プラットフォーム（mdx）：2021年3月設置



2001-2005

2006-2010

2011-2015

2016-2020

2021-2025

2026-2030

Hitachi SR8000
1,024 GF

Hitachi SR11000
J1, J2
5.35 TF, 18.8 TF

Hitachi SR16K/M1
Yayoi
54.9 TF

Hitachi
SR2201
307.2GF

Hitachi
SR8000/MPP
2,073.6 GF

OBCX
(Fujitsu)
6.61 PF

Hitachi HA8000
T2K Today
140 TF

Oakforest-
PACS (Fujitsu)
25.0 PF

OFP-II
150+ PF

Fujitsu FX10
Oakleaf-FX
1.13 PF

 Wisteria
BDEC-01 Fujitsu
33.1 PF

BDEC-
02
250+ PF

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

Ipomoea-01 25PB

Ipomoea-
03

Ipomoea-02

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

2001-2005

2006-2010

2011-2015

2016-2020

2021-2025

2026-2030

Hitachi SR8000

1.024 PF

SR8000

Hitachi SR11000

J1, J2

IBM Power5+

Hitachi SR16K/M1

Yayoi

IBM Power7

Hitachi SR2201

HARP-1E

Hitachi SR8000/MPP

SR8000

Intel CLX

OBCX (Fujitsu)
6.61 PF

Hitachi HA8000

T2K Today
140 TF

AMD Opteron

Oakforest-PACS (Fujitsu)
1.5 PF

Intel Xeon Phi

OFP-II
150+ PF

Accelerators

疑似ベクトル

汎用CPU

加速装置付

Fujitsu FX10
Oakleaf-FX
1.13 PF

SPACR64 IXfx

Wisteria BDEC-01 Fujitsu
33.1 PF

BDEC-02
250+ PF

A64FX,
Intel Icelake+
NVIDIA A100

Accelerators

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

Intel BDW +
NVIDIA P100

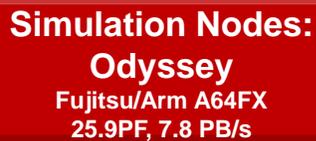
Ipomoea-01 25PB

Ipomoea-03

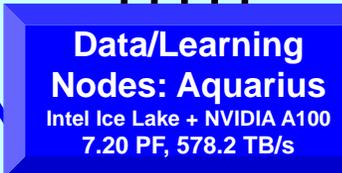
Ipomoea-02



Platform for Integration of (S+D+L)
Big Data & Extreme Computing



2.0 TB/s



800 Gbps



External Resources



External Network



External Resources



Simulation Nodes
(Odyssey)



Data/Learning Nodes
(Aquarius)



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO



東京大学情報基盤センター
INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO

Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))

- 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
- 2016年7月～2021年11月末(引退)
- 東大ITC初のGPUクラスタ, ピーク性能3.36 PF

Oakforest-PACS (OFP) (Fujitsu, Intel Xeon Phi (KNL))

- JCAHPC (筑波大CCS・東大ITC), 2016年10月～2022年3月末(予定)
- 25 PF, #39 in 58th TOP 500 (November 2021)

Oakbridge-CX (OBCX) (Fujitsu, Intel Xeon CLX)

- 2019年7月～2023年9月30日運用終了予定
- 6.61 PF, #110 in 58th TOP500-June 2023 (Plan)



Wisteria/BDEC-01 (Fujitsu)

- シミュレーションノード群 (Odyssey) : A64FX (#17)
- データ・学習ノード群 (Aquarius) : Intel Icelake+NVIDIA A100 (#106)
- 33.1 PF, #13 in 57th TOP 500, 2021年5月14日運用開始
- 「計算・データ・学習(S+D+L)」融合のためのプラットフォーム
- 革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」
(科研費基盤(S) 2019年度～2023年度)



Reedbush



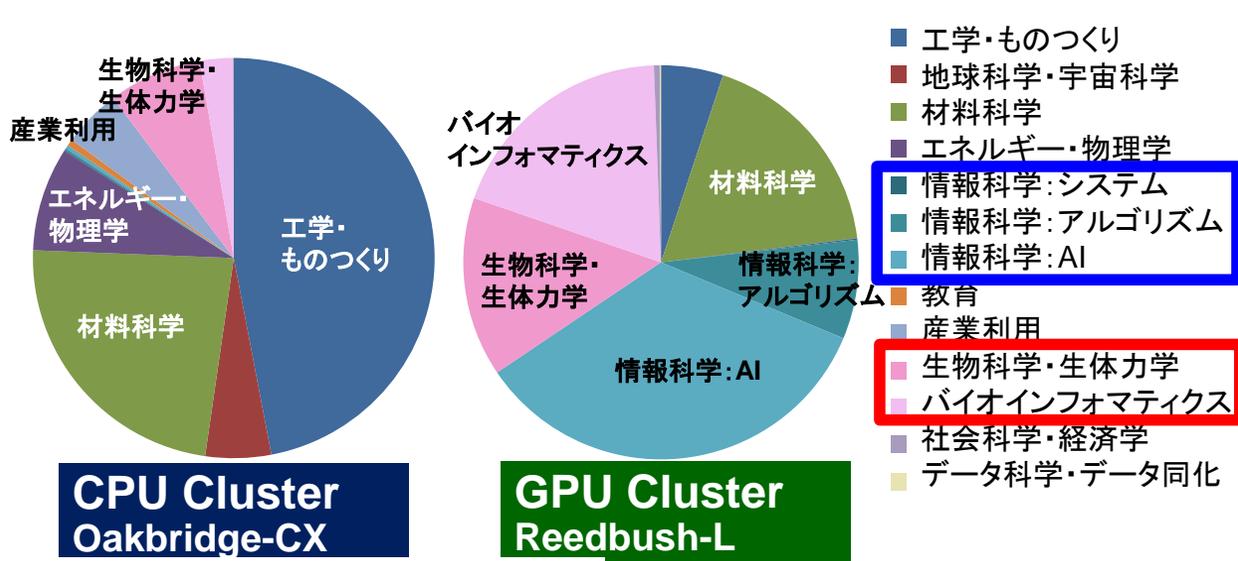
Oakforest-PACS



Oakbridge-CX

Wisteria/BDEC-01と h3-Open-BDECプロジェクト

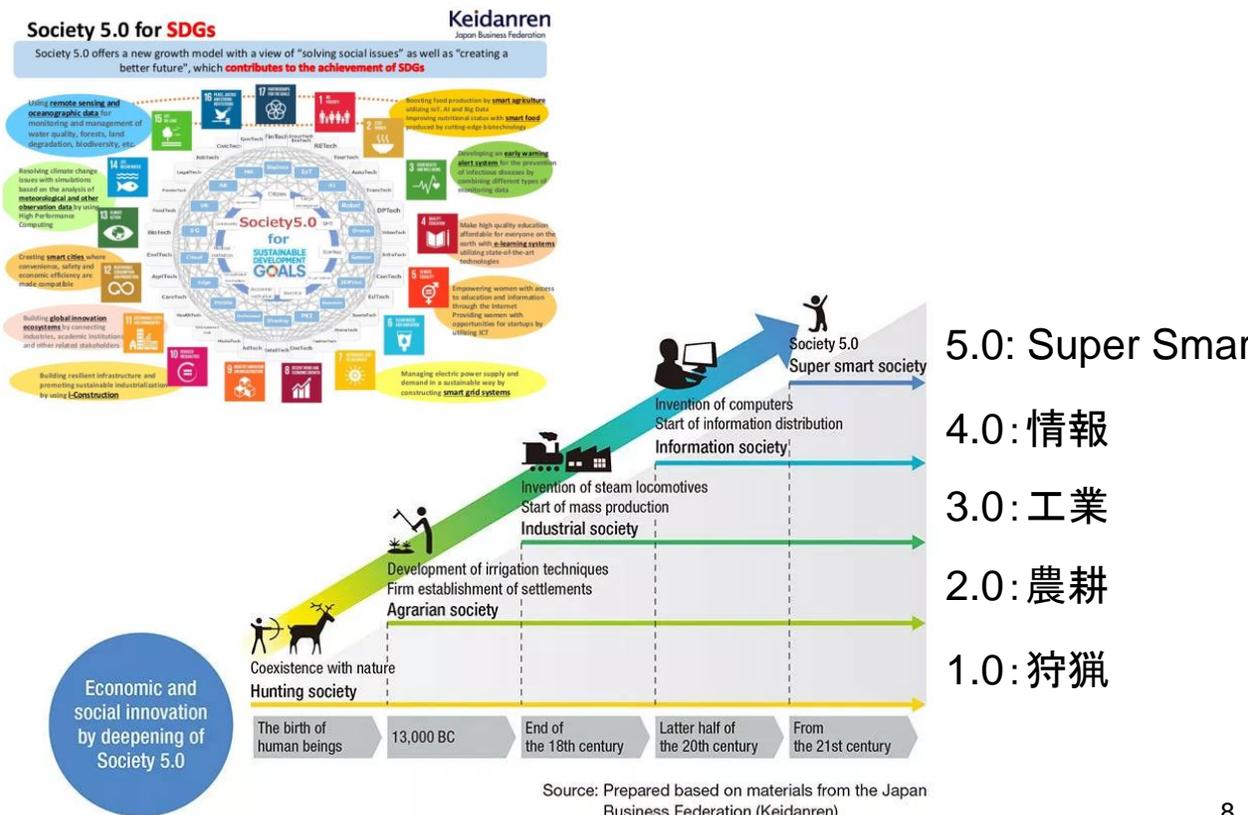
スーパーコンピューティングの今後



- ワークロードの多様化
 - 計算科学, 計算工学: Simulations
 - 大規模データ解析
 - AI, 機械学習

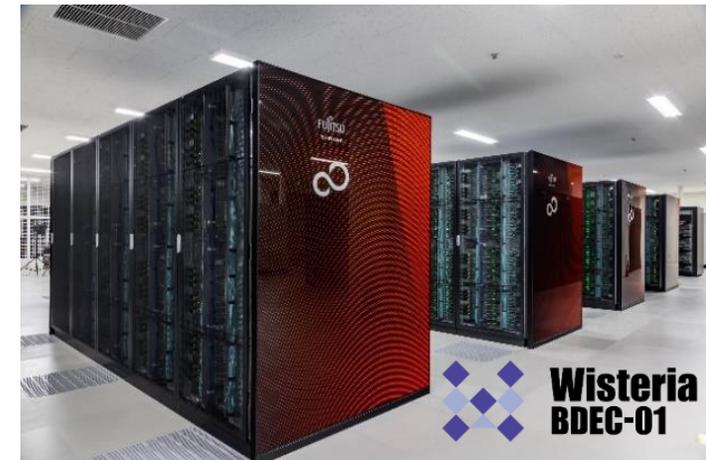
(シミュレーション(計算) + データ + 学習) 融合 ⇒ Society 5.0 実現に有効: Digital Twin

- フィジカル空間とサイバー空間の融合
 - S: シミュレーション(計算) (Simulation)
 - D: データ(Data)
 - L: 学習(Learning)
- Simulation + Data + Learning = S+D+L



(シミュレーション(計算)+データ+学習)融合(S+D+L)

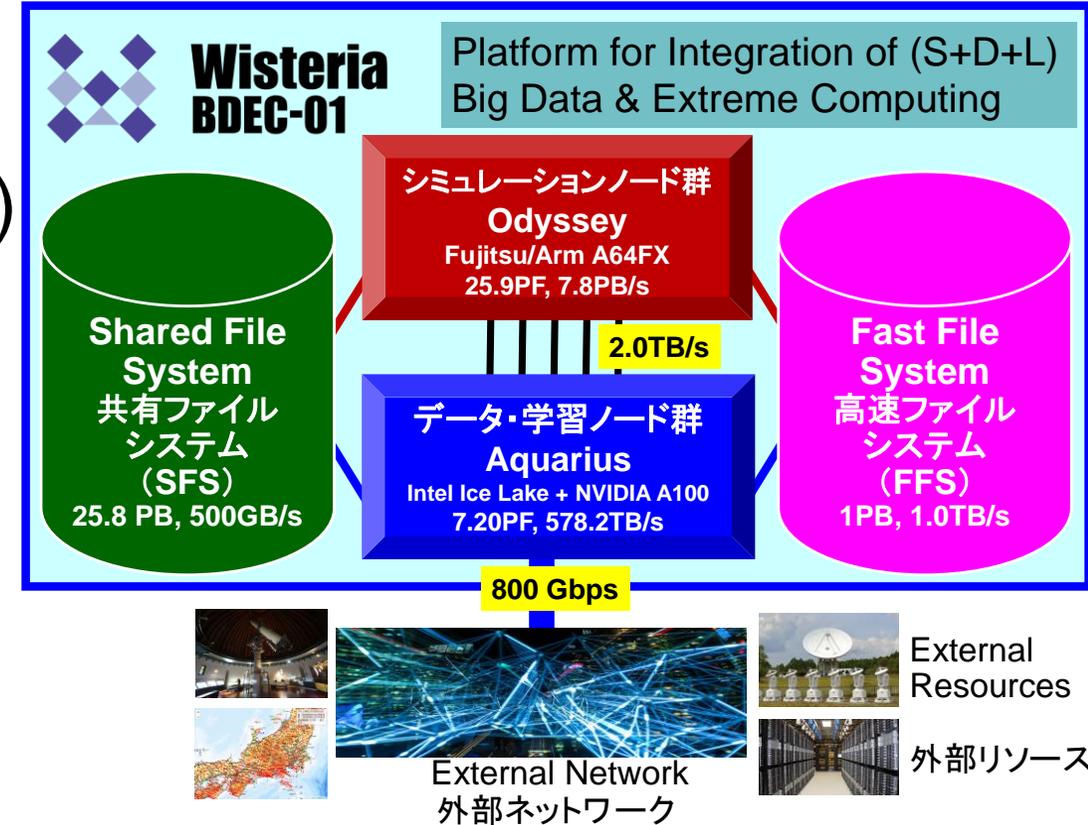
- 東大情報基盤センターでは、2015年頃から「(S+D+L)融合」の重要性に注目し、それを実現するためのハードウェア、ソフトウェア、アプリケーション、アルゴリズムに関する研究開発を開始
 - BDEC計画(Big Data & Extreme Computing)
 - 「データ+学習」による、より高度な「シミュレーション」
 - AI for HPC, AI for Science
 - 地球科学関連では自然な発想(すでに実施されている)
- 2021年5月に運用を開始した「Wisteria/BDEC-01」は「BDEC計画」の1号機
 - Reedbush, Oakbridge-CXは「BDEC」のプロトタイプと位置づけられる
 - 「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



Wisteria/BDEC-01

- 2021年5月14日運用開始
 - 東京大学柏Ⅱキャンパス
- 33.1 PF, 8.38 PB/sec., **富士通製**
 - ~4.5 MVA(空調込み), ~360m²
- Hierarchical, Hybrid, Heterogeneous (h3)
- **2種類のノード群**
 - シミュレーションノード群(S, SIM) : **Odyssey**
 - 従来のスパコン
 - **Fujitsu PRIMEHPC FX1000 (A64FX), 25.9 PF**
 - 7,680ノード(368,640 コア), 20ラック, Tofu-D
 - データ・学習ノード群(D/L, DL) : **Aquarius**
 - データ解析, 機械学習
 - **Intel Xeon Ice Lake + NVIDIA A100, 7.2 PF**
 - 45ノード(Ice Lake:90基, A100:360基), IB-HDR
 - 一部は外部リソース(ストレージ, サーバー, センサーネットワーク他)に直接接続
 - ファイルシステム: 共有(大容量) + 高速

BDEC:「計算・データ・学習(S+D+L)」
融合のためのプラットフォーム
(Big Data & Extreme Computing)



Wisteria
BDEC-01

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

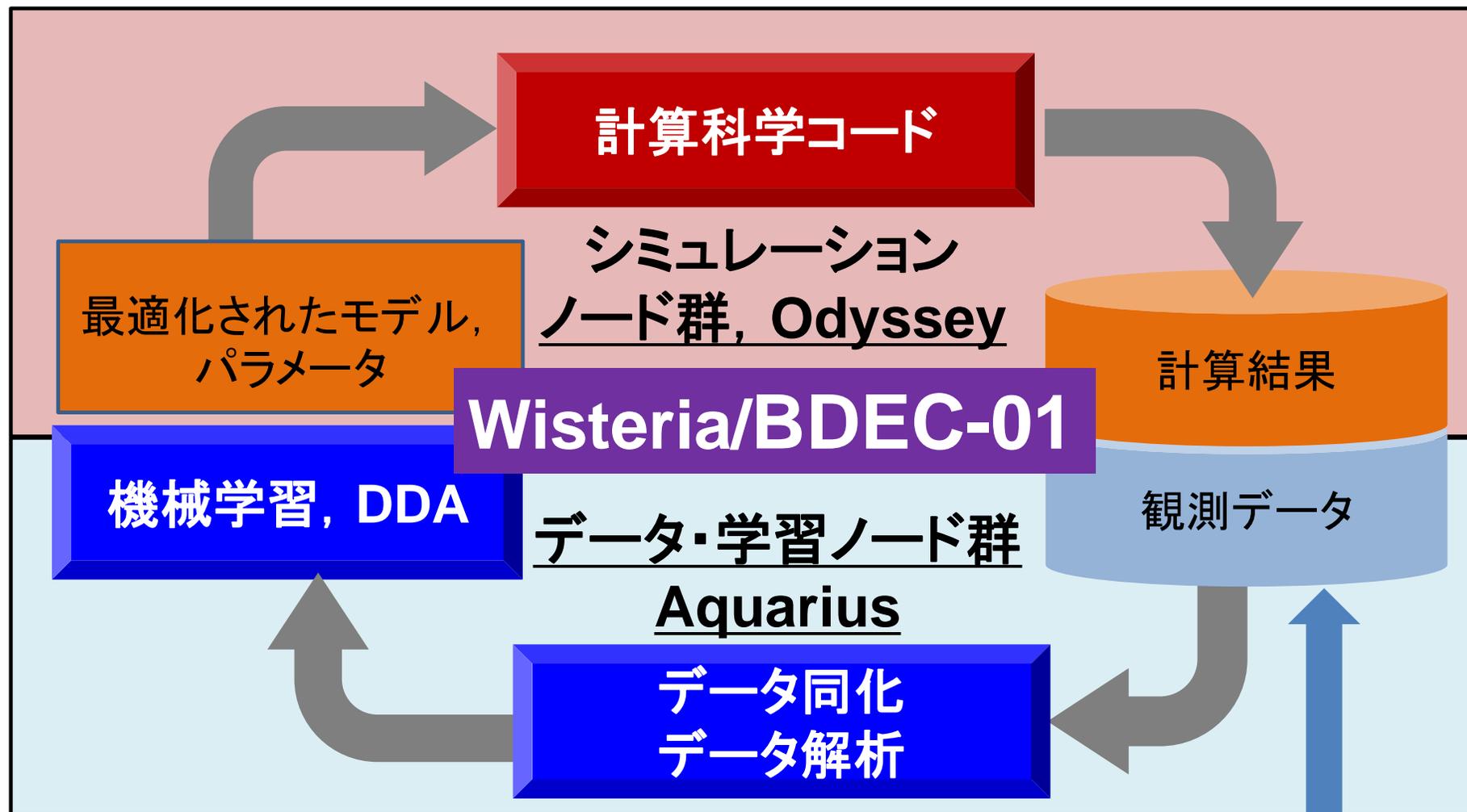
Data/Learning Nodes

Aquarius

7.20 PF, 578.2 TB/s



**Wisteria
BDEC-01**



**シミュレーションのためのモデル・パラ
メータのデータ解析, AI/機械学習によ
る最適化 (S+D+L)**

Wisteria/BDEC-01 Jun. 2023 (ISC23)の諸ランキング

Wisteria/BDEC-01のシミュレーションノード群 (Odyssey) とデータ・学習ノード群 (Aquarius) は別々に測定・申請

System	TOP500	Green500	HPCG	Graph500	HPL-MxP (HPL-AI)
	連立一次方程式 (密行列)	TOP500:消費電力 当たり計算性能	連立一次方程式 (疎行列)	グラフ処理	連立一次方程式 (密行列・混合精度)
Oakbridge-CX	140	92	85	-	-
Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)	25	50	12	6	14
Wisteria/BDEC-01 (Aquarius)	136	32	68	-	-

AI for HPC, AI for Science の実現へ向けて

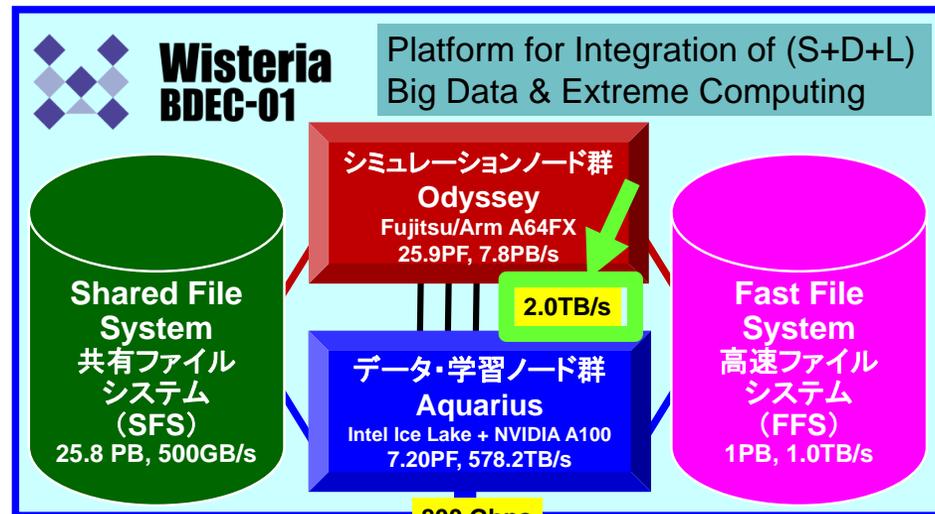


Odyssey-Aquarius連携

- MPIによる通信は不可
 - O-Aを跨いでMPIプログラムは動かない
- Odyssey-Aquarius間はInfiniBand-EDR (2TB/sec)で結合されている

ソフトウェア開発

- 高機能カプラー: h3-Open-UTIL/MP
- O-A間通信: h3-Open-SYS/WaitIO
 - IB-EDR経由 (WaitIO-Socket)
 - 高速ファイルシステム (FFS) 経由連携 (WaitIO-File)



h3-Open-BDEC		
新しい計算原理 数値アルゴリズム・ライブラリ	シミュレーション+データ +学習 (S+D+L) アプリ開発フレームワーク	統合+通信+ ユーティリティ 制御 & ユーティリティ
h3-Open-MATH 高性能・高信頼性・ 混合/変動精度アルゴリズム	h3-Open-APP: Simulation 計算科学アプリケーション	h3-Open-SYS 制御 & 統合
h3-Open-VER 精度保証	h3-Open-DATA: Data データ科学	h3-Open-UTIL 大規模計算向け ユーティリティ群
h3-Open-AT 自動チューニング	h3-Open-DDA: Learning データ駆動・機械学習	



h3-Open-BDEC

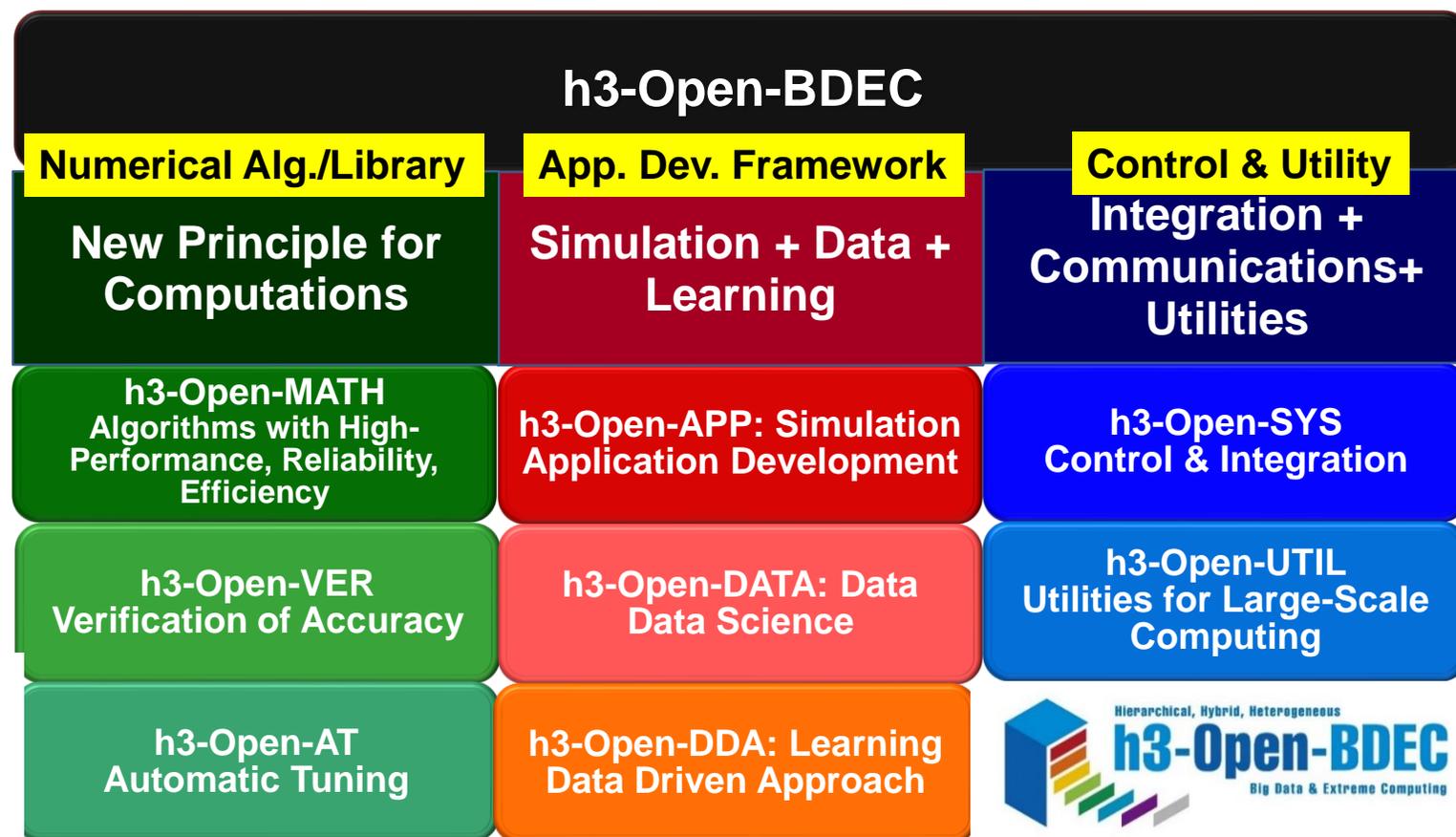
「計算＋データ＋学習」融合を実現する革新的ソフトウェア基盤
 科研費基盤研究(S)(2019年度～23年度, 代表: 中島研吾)

<https://h3-open-bdec.cc.u-tokyo.ac.jp/>

Hierarchical,
Hybrid,
Heterogeneous

Big Data &
Extreme
Computing

- 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数値解法
- ② 階層型データ駆動アプローチ等に基づく革新的機械学習手法
- ③ ヘテロジニアス環境 (e.g. Wisteria/BDEC-01) におけるソフトウェア, ユーティリティ群



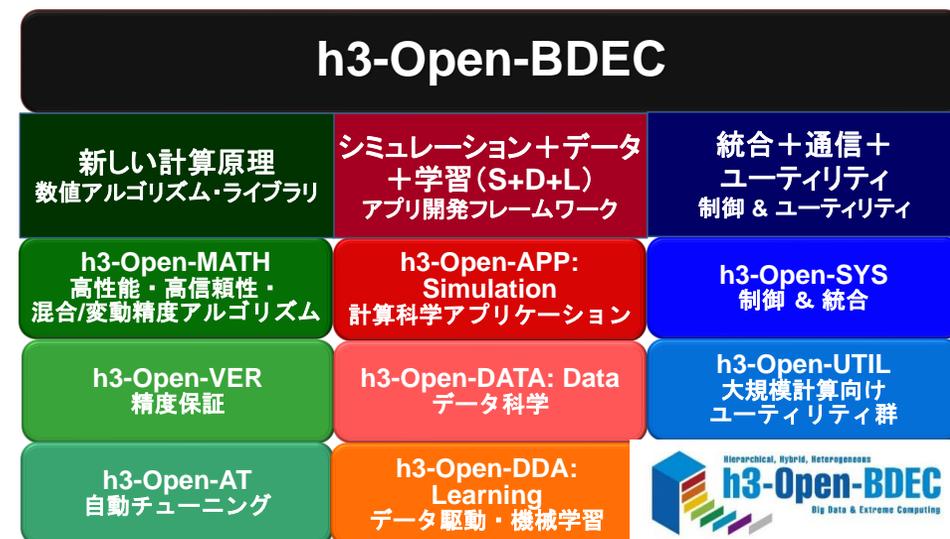
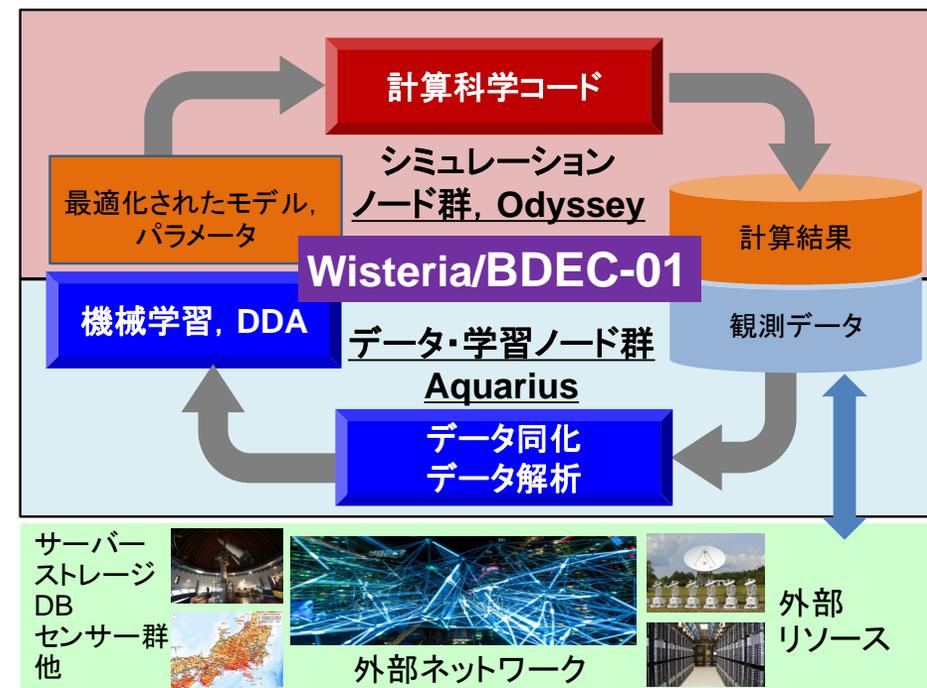
h3-Open-SYS/WaitIO

データ受け渡しライブラリ〔松葉, 2020〕
〔住元他, HPC-181, 2021〕

- ヘテロジニアス環境下での異なるコンポーネント間ファイル経由連携ライブラリとして考案

機能

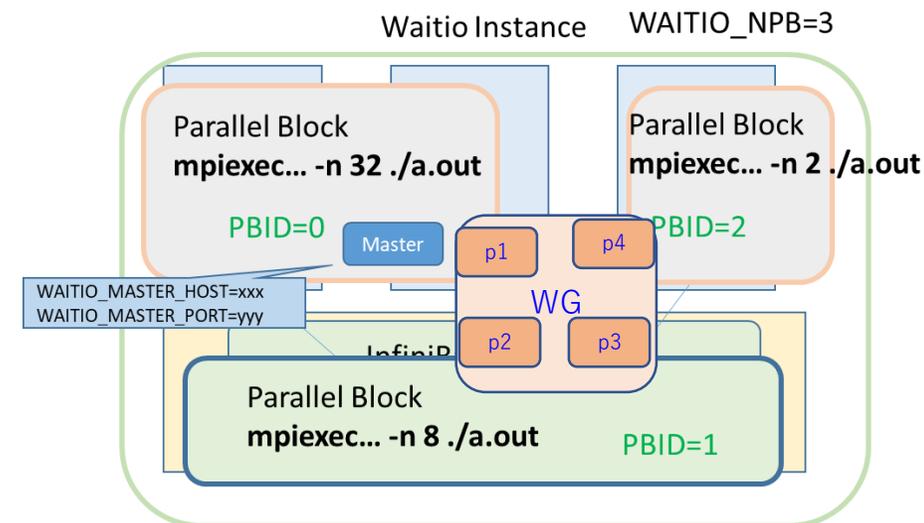
- ✓ Odysseey～Aquarius間連携
 - IB-EDR経由通信 (WaitIO-Socket)
 - ファイル経由 (WaitIO-File)
- ✓ 外部からのデータ取得 (観測データ等)
- ✓ 読み込み・書き出しの同期
- API: C/C++, Fortranから呼び出し可能
 - ✓ MPIライクなインタフェースを提供



API of WaitIO: PB (Parallel Block) == Each Application

- Application is able to select communication processes among PBs

WaitIO API	Description
<code>waitio_isend</code>	Non-Blocking Send
<code>waitio_irecv</code>	Non-Blocking Receive
<code>waitio_wait</code>	Termination of <code>waitio_isend/irecv</code>
<code>waitio_init</code>	Initialization of WaitIO
<code>waitio_get_nprocs</code>	Process # for each PB (Parallel Block)
<code>waitio_create_group</code> <code>waitio_create_group_wranks</code>	Creating communication groups among PB's
<code>waitio_group_rank</code>	Rank ID in the Group
<code>waitio_group_size</code>	Size of Each Group
<code>waitio_pb_size</code>	Size of the Entire PB
<code>waitio_pb_rank</code>	Rank ID of the Entire PB



[Sumimoto et al. 2021]

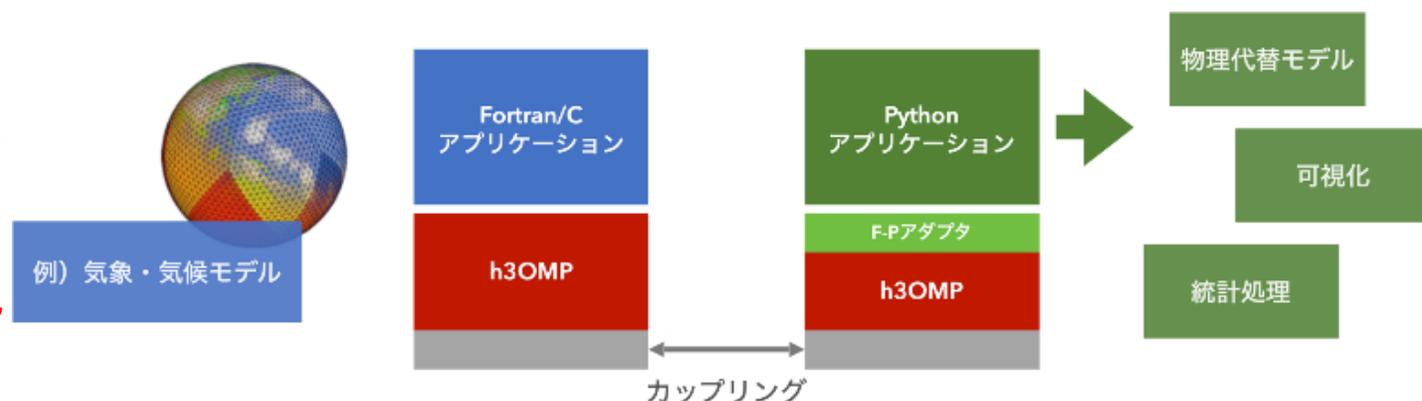
「計算＋データ＋学習」融合を支援する 多機能カプラーh3-Open-UTIL/MP



- 異なる物理モデル連成のアンサンブル実行を支援・統合するための機能
 - MPI通信、時刻同期、格子系間マッピング等の管理機能の他、従来のカプラーには無い、複数の弱連成結合シミュレーションのアンサンブル実行、片側のモデルのみをアンサンブル実行する多対1の弱連成結合が可能
 - スパコン上で、全地球大気海洋連成シミュレーションによって動作検証済み

Fortran/Cコード(物理モデル)とPythonコードの弱連成を実現する機能

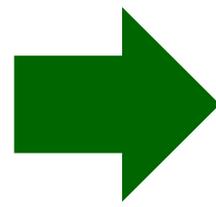
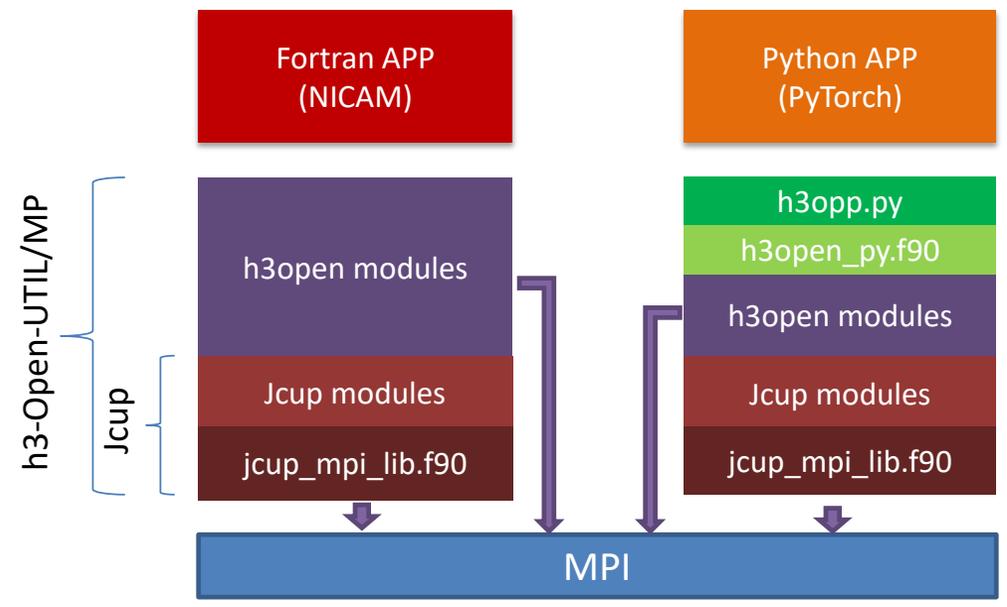
- FortranやCで記述されたプログラム同士の間で計算に限り開発を行ってきたカプラーを、Pythonによって記述されたAI・機械学習、可視化処理系のワークロードから活用できるように機能拡充。



Fortran/CアプリとPythonアプリの連成計算の模式図
〔八代・荒川 2020〕

h3-Open-UTIL/MP・h3-Open-SYS/WaitIO-Socket連携

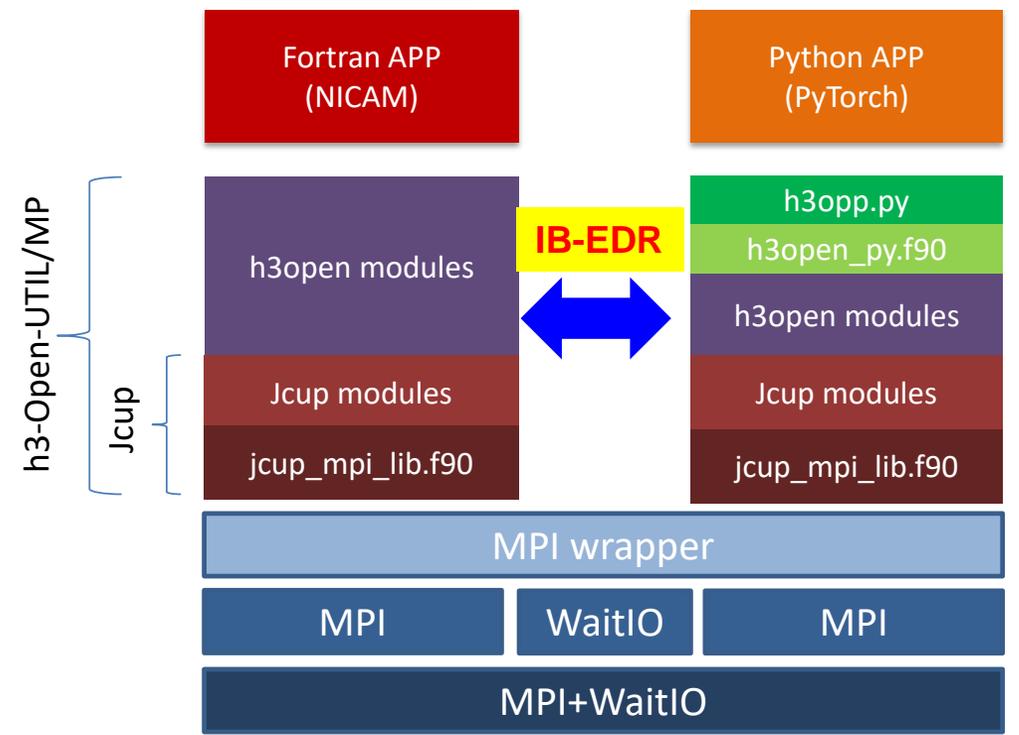
2022年6月から試験利用開始、
2022年11月から一般ユーザへ利用開放



**Wisteria
BDEC-01**

Odyssey

Aquarius



2021年4月 : MPI通信可能な環境を前提

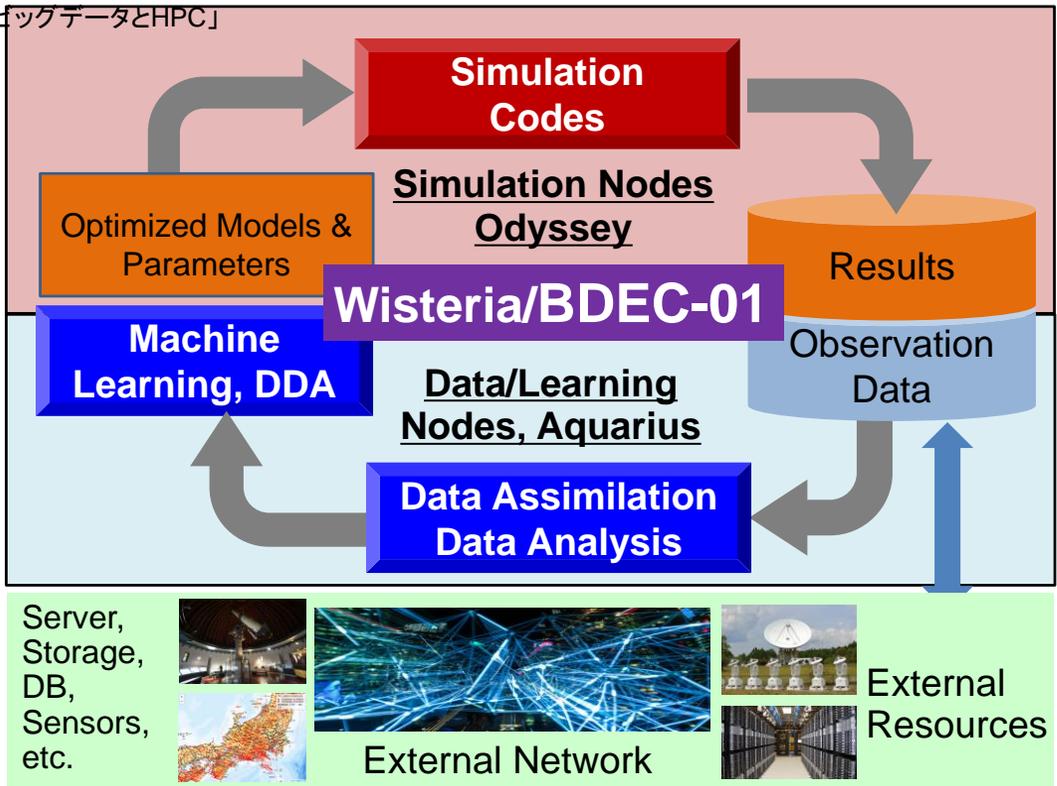
2022年6月- : Coupler + WaitIO

Wisteria/BDEC-01システムにおける ビッグデータとHPC事例

Wisteria/BDEC-01システムにおけるビッグデータとHPC事例

- リアルタイムデータを活用したビッグデータ + HPC事例
 - リアルタイムデータ同化 + 3D強震動シミュレーション融合

- シミュレーションデータを活用したビッグデータ + HPC + AI事例
 - 気候シミュレーションの高精度・高速化
 - 極端気象現象のシミュレーションの予測精度向上
 - 海洋エコシステム予測

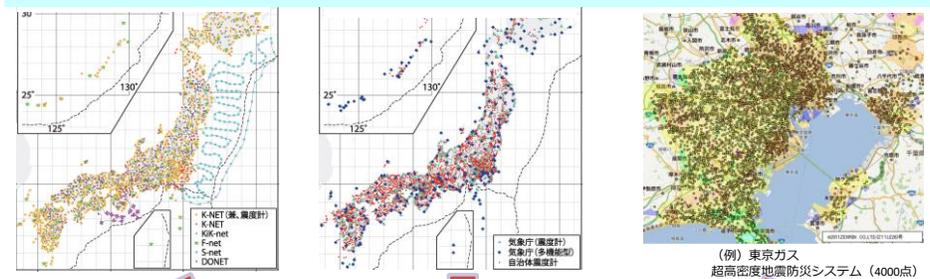


リアルタイムデータ同化 + 3D強震動シミュレーション融合

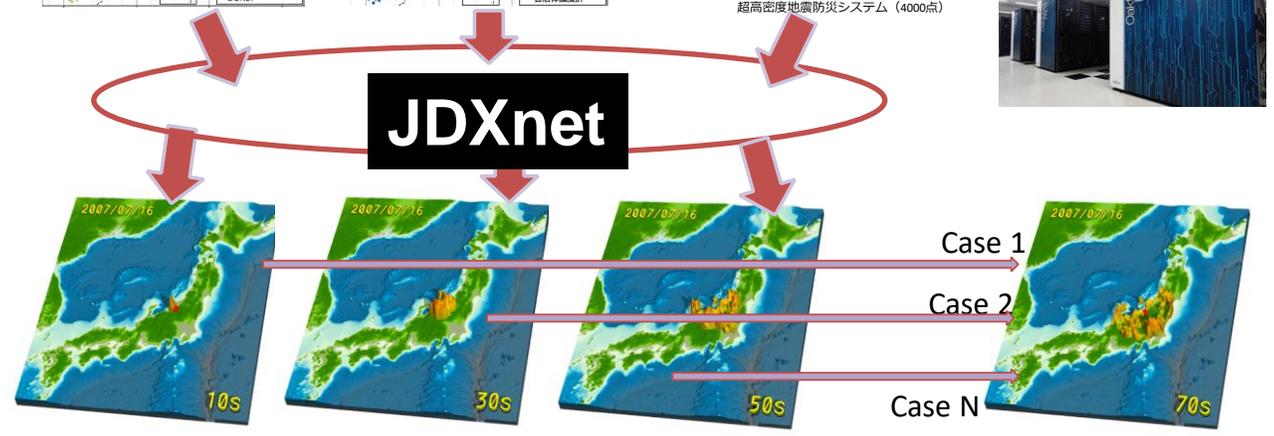
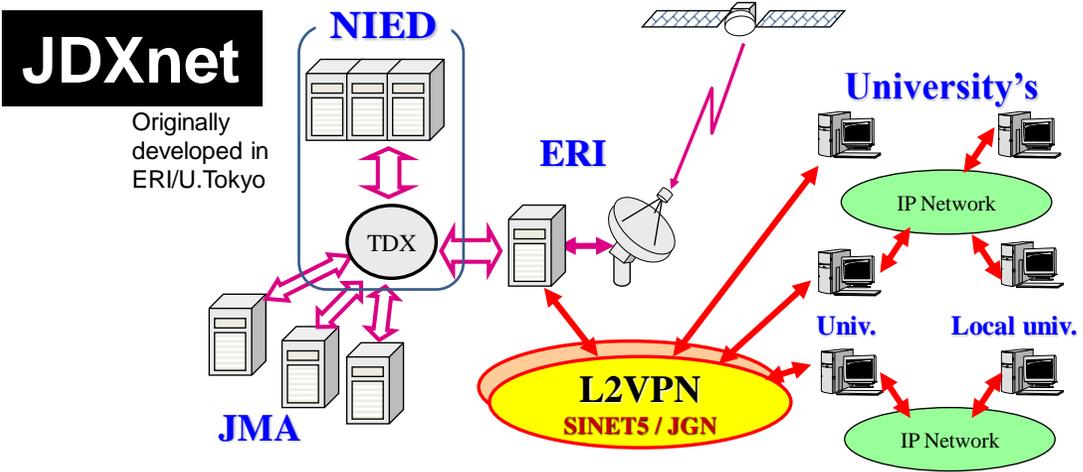
JDXnetによるリアルタイム観測データ活用

事例 1

Observation Network for Earthquake: $O(10^5)$ Points



[c/o Furumura]



Real-Time Data/Simulation Assimilation
Real-Time Update of Underground Model

[c/o Prof. T.Furumura (ERI/U.Tokyo)]

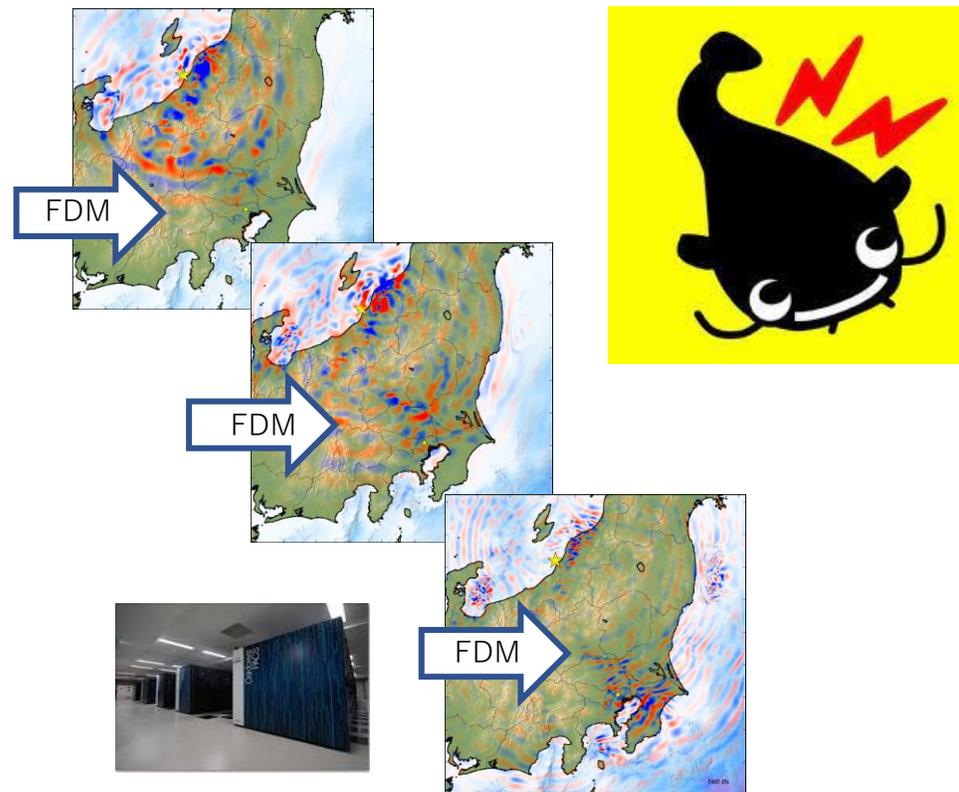
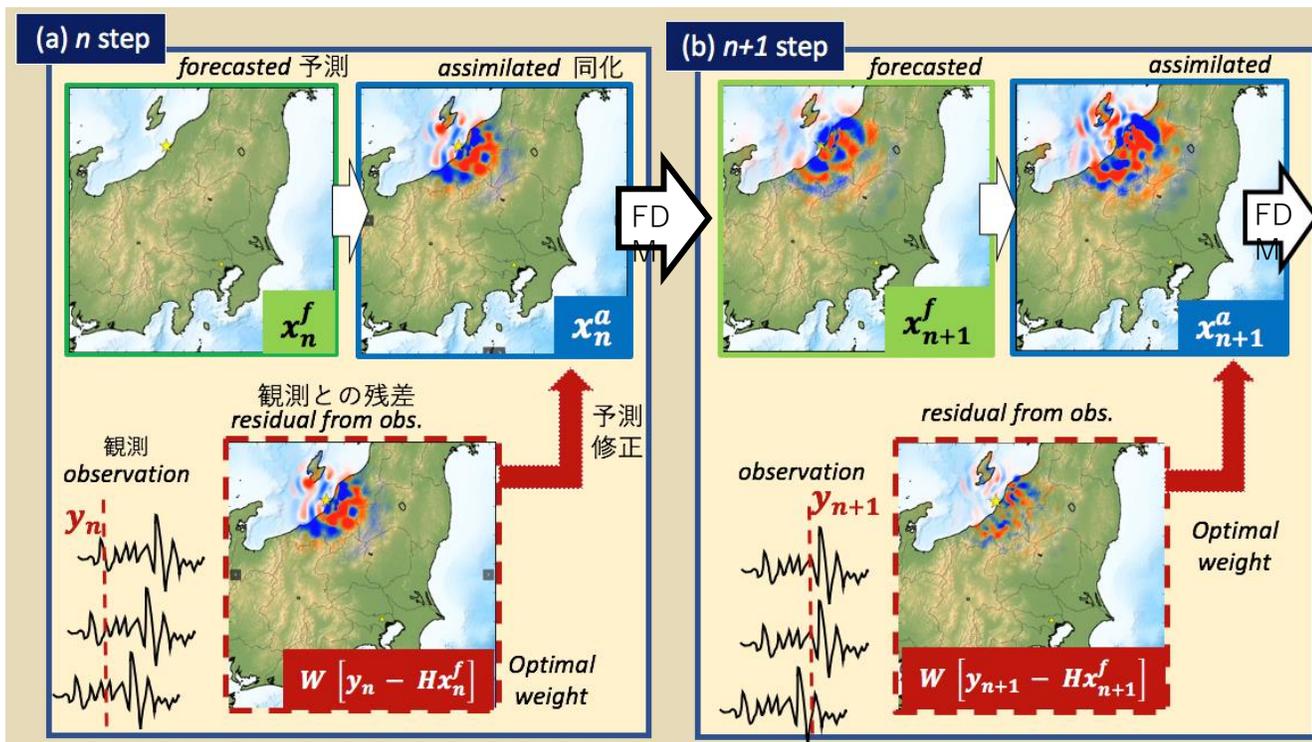
「A+S:同化+シミュレーション」⇒「Pure S:シミュレーション予測」

$$\begin{aligned}
 \text{Assim. Comp.} \quad x_n^a &= x_n^f + W(\overset{\text{Obs.}}{y_n} - \overset{\text{Residual Comp.}}{Hx_n^f}) \\
 \text{Comp.} \quad x_{n+1}^f &= Fx_n^a \quad \text{Assim.} \quad F: \text{Wave Propagation simulation}
 \end{aligned}$$

n : Time Step
 W : Weighting Matrix

(A+S) Assimilation+Simulation

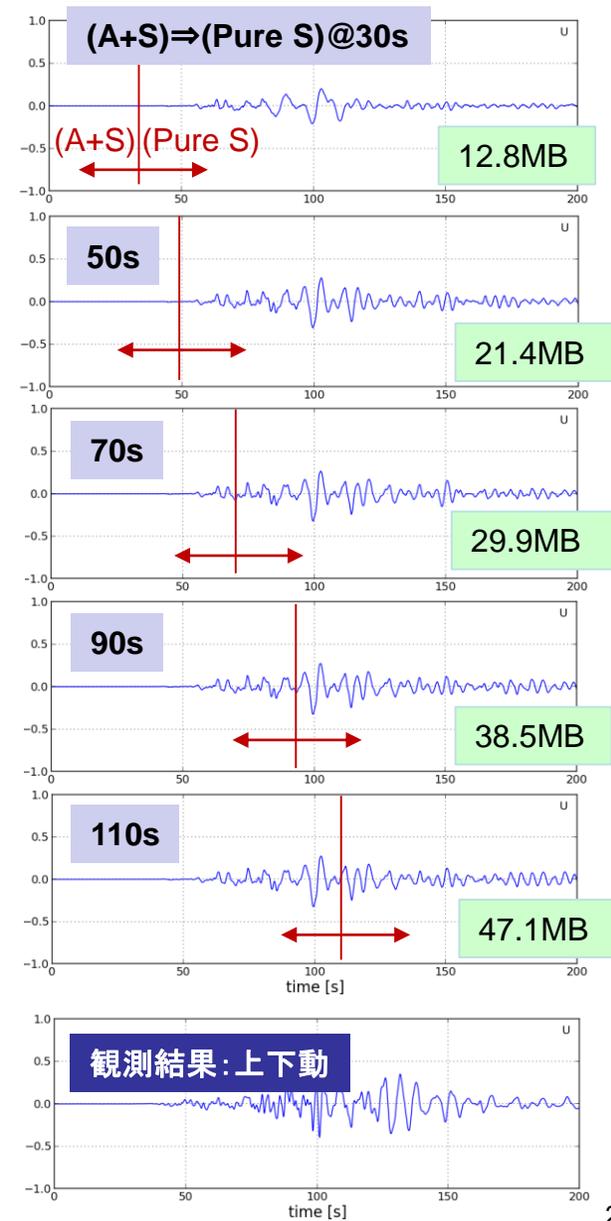
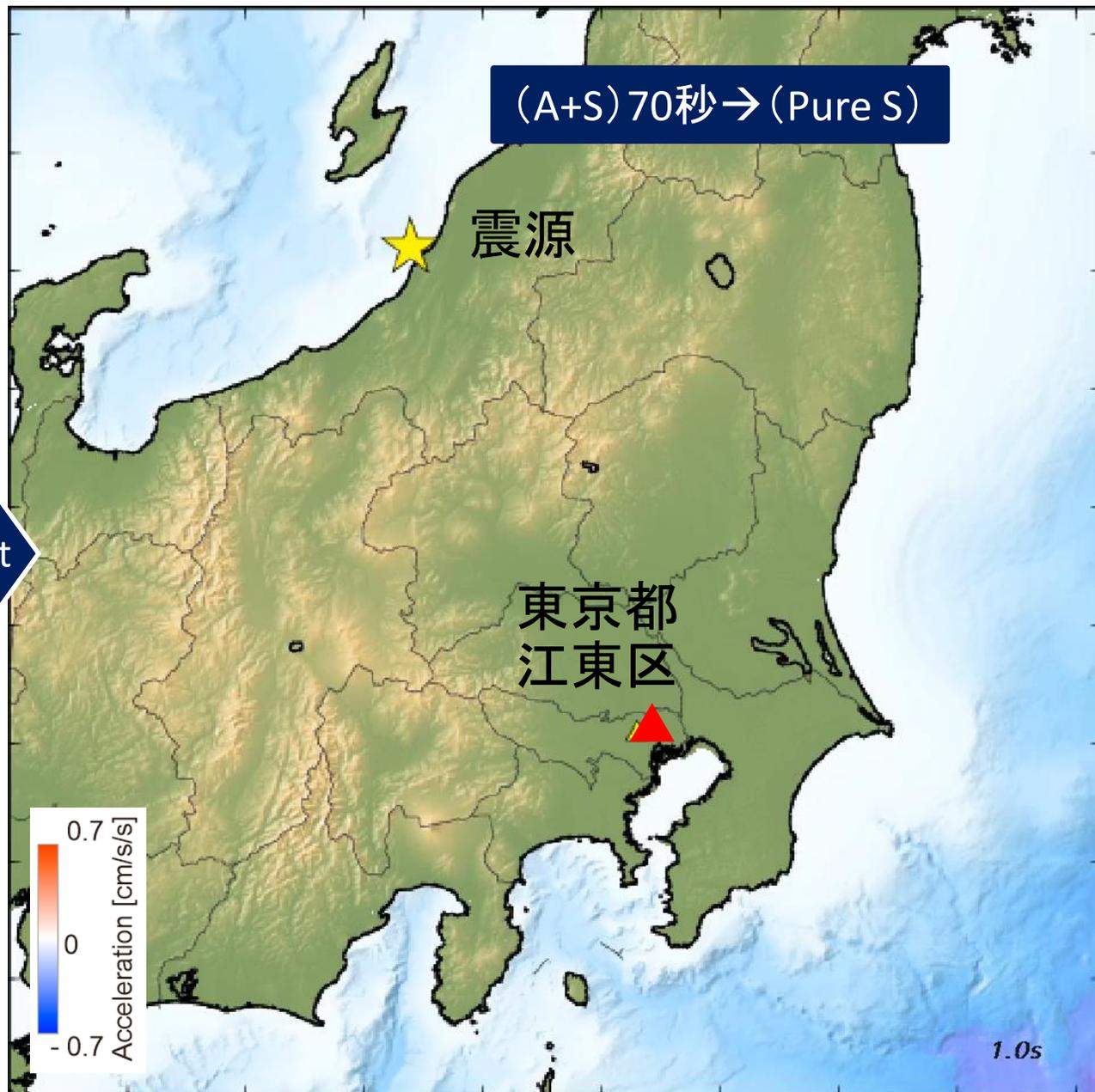
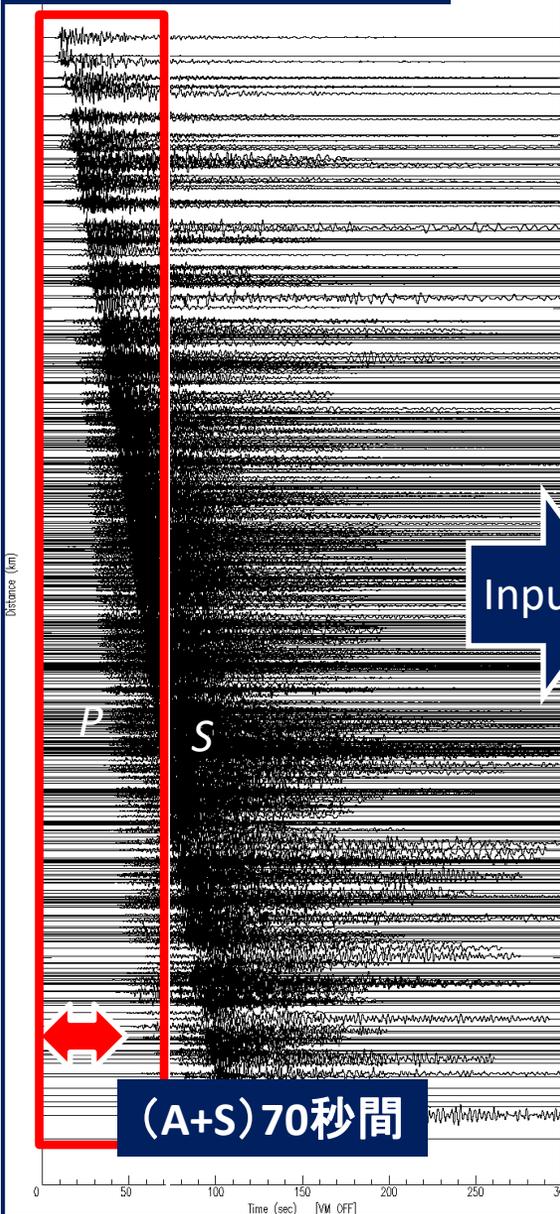
(Pure S) Pure Simulation/Forecast



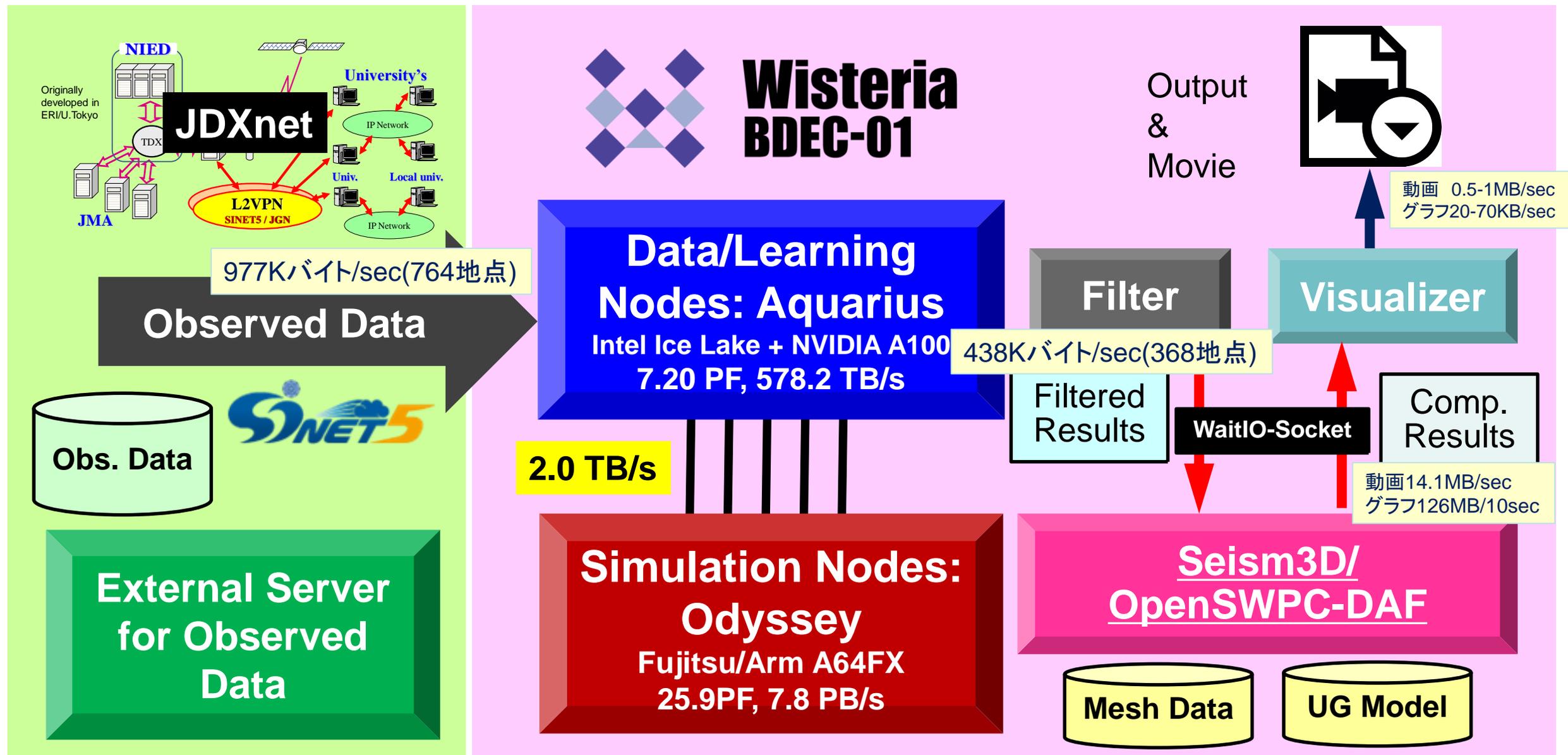
2007年新潟県中越沖地震(Mw=6.6)

東京都江東区 ▲ (N.KOTH)
N 35° 37.0'
E 139° 46.9'

482 K-NET, KiK-net Observation



長周期地震動シミュレーション+観測データ同化



WaitIO-Socketによる通信

[Kasai et al. 2021]

Aquarius: SEND

```

program dmy_filter
<省略: 型宣言等>
call mpi_init (ierr)
call mpi_comm_size (MPI_COMM_WORLD, nprocs, ierr)
call mpi_comm_rank (MPI_COMM_WORLD, myrank, ierr)
call WAITIO_CREATE_UNIVERSE (WAITIO_COMM_UNIVERSE, ierr)

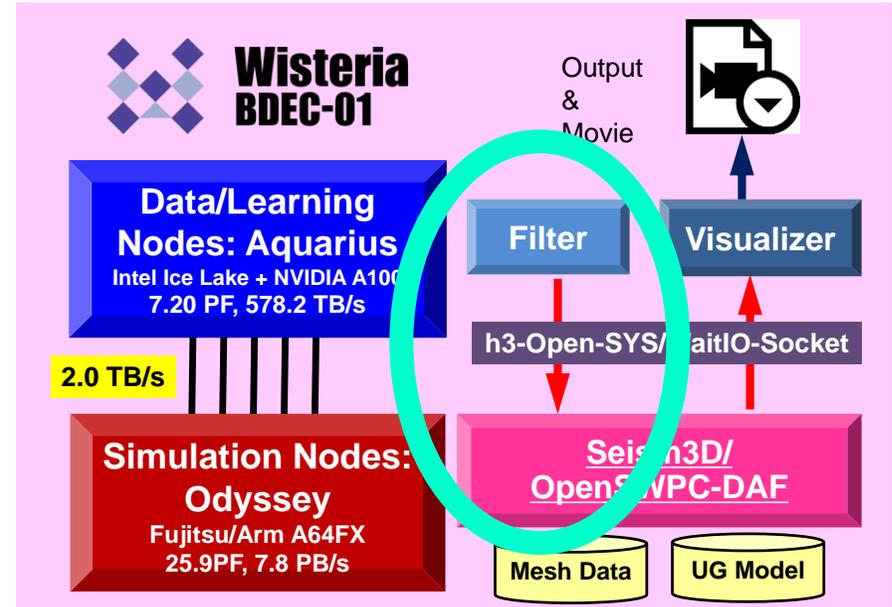
if (myrank==0) then
open(100,file='./obsfile_list.txt', form='formatted', status='old', iostat=ierr)
do i=1,300
<省略: obsデータ読み込み処理>
print *, "Send obs data ....."
call WAITIO_MPI_ISEND (NTMAX1_o, 1, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,1, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,1), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (DT_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,2, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,2), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (NST_o, 1, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,3, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,3), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (AT_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,4, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,4), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (T0_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,5, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,5), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISO_X_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,6, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,6), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISO_Y_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,7, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,7), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISO_Z_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,8, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,8), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISTX_o, NST, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,9, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,9), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISTY_o, NST, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,10, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,10), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISTZ_o, NST, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,11, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,11), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (STC_o, 6*NST, WAITIO_MPI_CHAR, 2,12, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,12), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (VxAll_obs, NST*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,13, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,13), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (VyAll_obs, NST*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,14, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,14), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (VzAll_obs, NST*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,15, WAITIO_COMM_UNIVERSE,req(1,15), ierr)
call WAITIO_MPI_WAITALL (15,req, status, ierr)
call sleep(1)
enddo
close (100)
endif
call WAITIO_FINALIZE (ierr)
call mpi_finalize (ierr)
end
    
```

438Kバイト

Odyssey: RECV

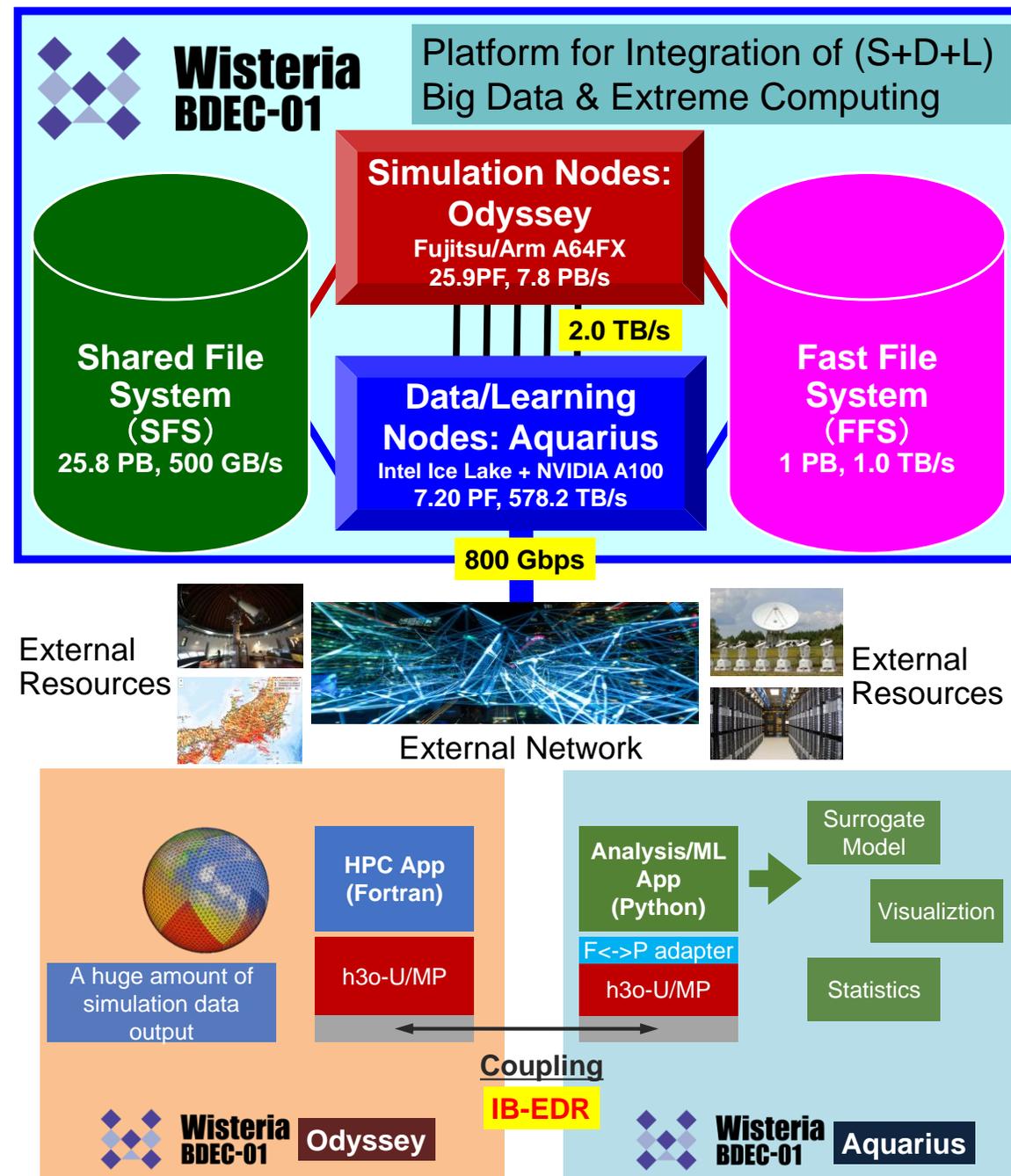
```

call WAITIO_MPI_RECV (NTMAX1_o, 1, WAITIO_MPI_INTEGER, 0,1, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (DT_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 0,2, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (NST_o, 1, WAITIO_MPI_INTEGER, 0,3, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (AT_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 0,4, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (T0_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 0,5, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (ISO_X_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 0,6, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (ISO_Y_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 0,7, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (ISO_Z_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 0,8, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (ISTX_o, NST, WAITIO_MPI_INTEGER, 0,9, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (ISTY_o, NST, WAITIO_MPI_INTEGER, 0,10, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (ISTZ_o, NST, WAITIO_MPI_INTEGER, 0,11, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (STC_o, 6*NST, WAITIO_MPI_CHAR, 0,12, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (VxAll_obs, NST*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 0,13, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (VyAll_obs, NST*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 0,14, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
call WAITIO_MPI_RECV (VzAll_obs, NST*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 0,15, WAITIO_COMM_UNIVERSE,...)
    
```



Odyssey-Aquarius連携

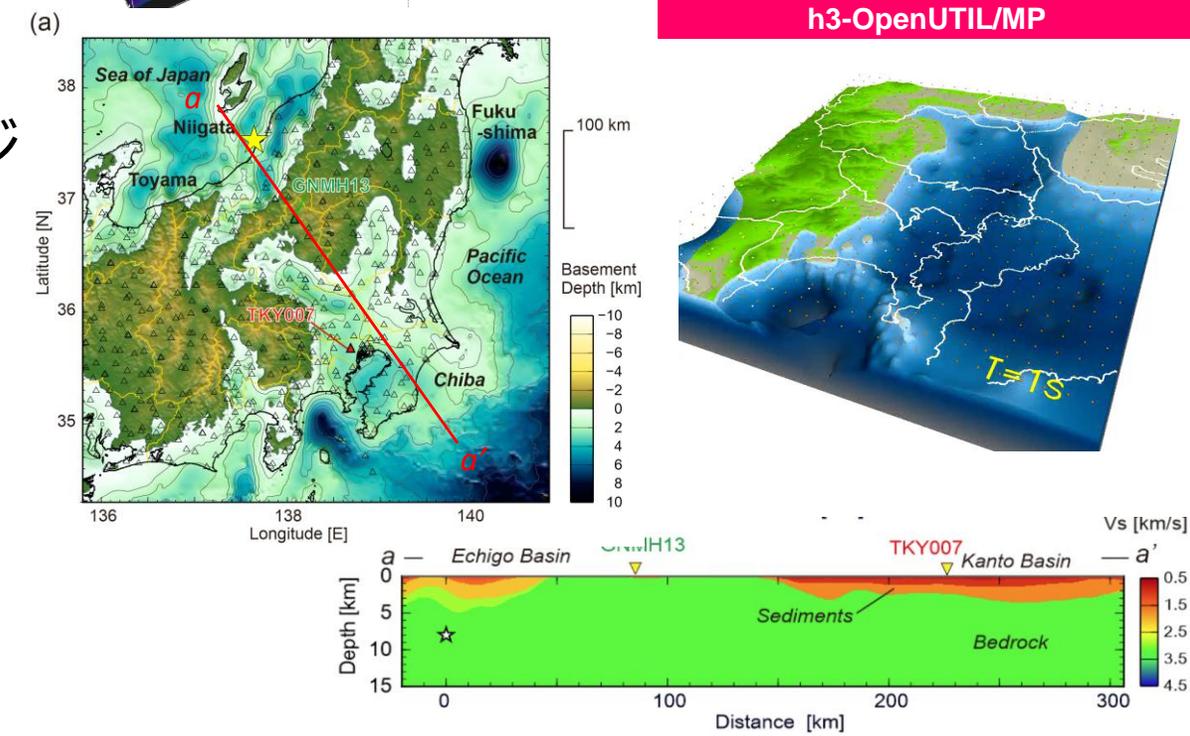
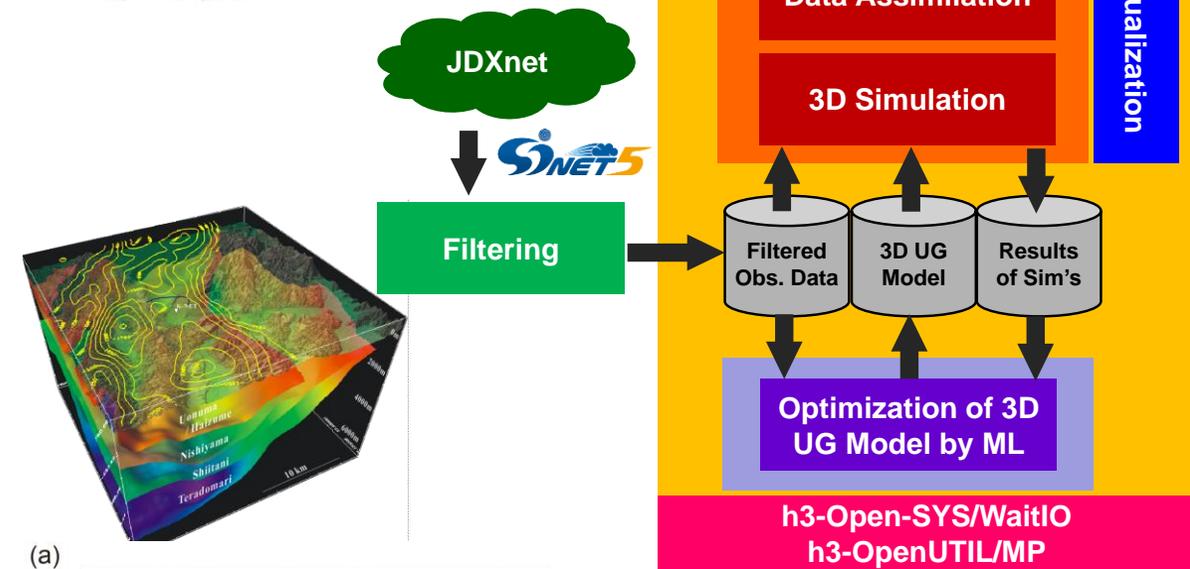
- 総ノード数
 - Odyssey: 7,680ノード, やや空いている
 - Aquarius: 45ノード, 360 GPUs, 混雑
- **Aquariusのうち1ノードを(S+D+L)融合型ワークロード向けにリザーブ**
 - Odyssey, Aquariusそれぞれに対する2つのジョブスクリプトをサブミットする必要がある
 - 両ジョブがリソースを確保⇒実行開始
- **より柔軟な仕組みを整える必要あり**
 - このようなシステム, 運用例は世界的に見ても例がほとんどない



リアルタイム地震シミュレーションの S+D+L 将来の方向性



- リアルタイムデータ観測・同化による地震波伝播の正確な予測
 - 安全な避難のための緊急情報に活用
- 3次元地下モデルの改善への適用
 - 不均一、観察が難しい
 - 地下モデルの構造予測には地震波のインバージョン解析が重要
 - 平常時の小規模地震の解析時にMLを活用し地下構造モデルの改善 (e.g. $M_w < 3.0$)
 - より洗練されたデータ解析メソッドの適用 (e.g. 4DVar: 4次元変分法)



事例2

気候シミュレーションの高精度・高速化

- 気候シミュレーション：大気や海洋だけでなく温室効果ガスの吸収放出や植生、雪や氷など多様な現象をシミュレーション
 - 年単位での長期的なシミュレーションが必要
- 雲の形成：特に複雑で膨大な計算を必要とするプロセス
 - 雲を詳しく表現するには高い解像度が必要
 - 気候のように長期間の積分が必要な計算を、実行することは最先端のスパコンでも困難
- 課題：地球全体の気候シミュレーションでは解像度を落とし、パラメータを含めて簡略化した計算に限定：精度低下
- 解決手法：高解像度の入力値から雲の計算を行い、入力値とシミュレーション結果を教師データとして機械学習により高速化

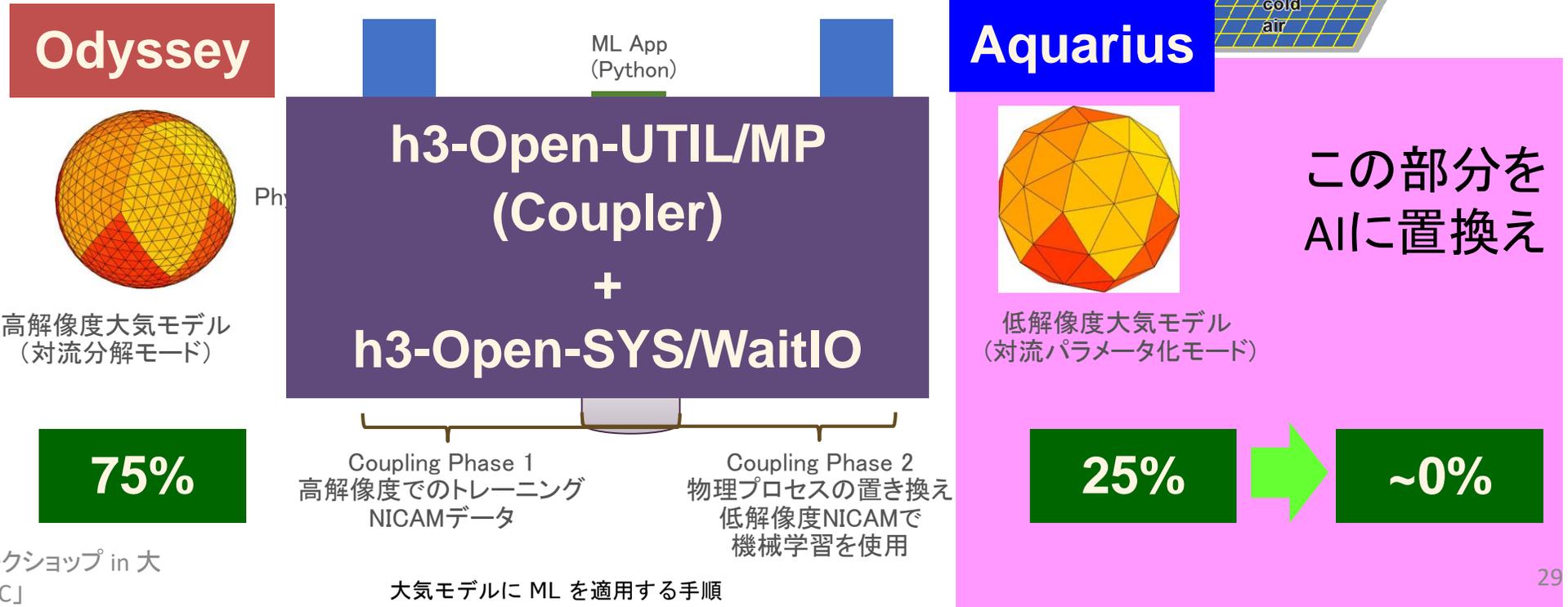
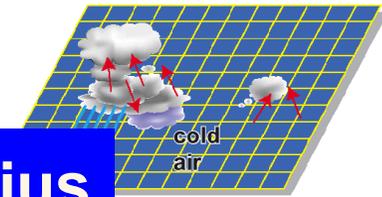
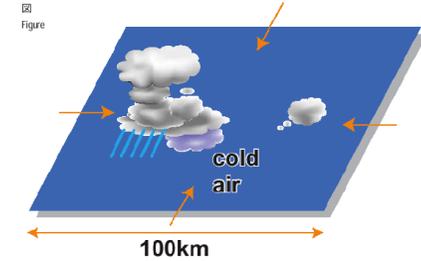


大気とMLのカップリング

[Yashiro (NIES), Arakawa (ClimTech/U.Tokyo)]

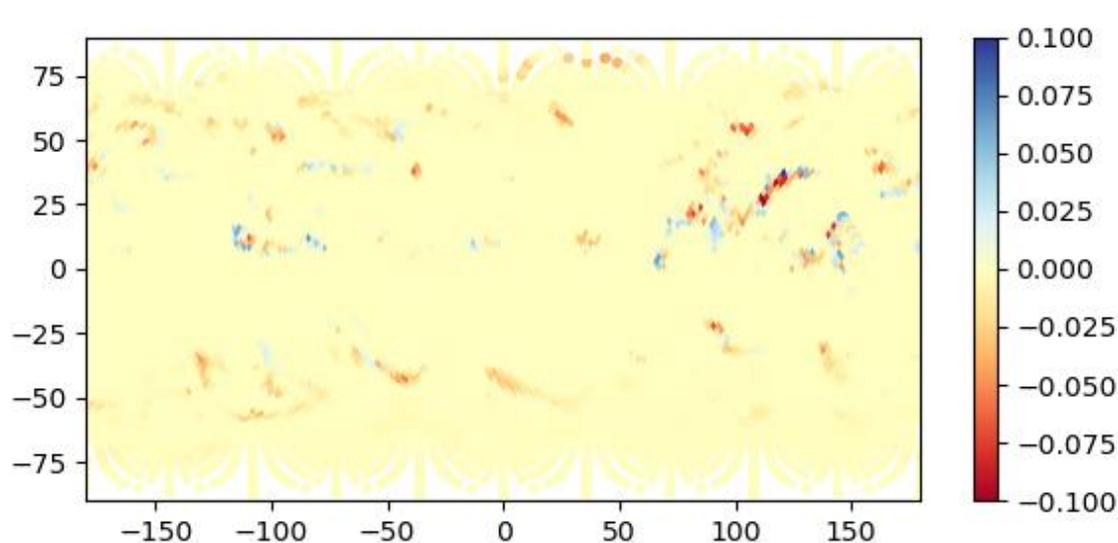
● この実験の動機

- 2種類の大気モデル: 雲の高解像大気 VS 雲のパラメータ化
 - 高解像モデル: 気候シミュレーションに使用するのが困難
 - パラメータ化されたモデル: 多くの前提条件を含有
- 低解像度の雲のプロセス計算を ML に置き換える!

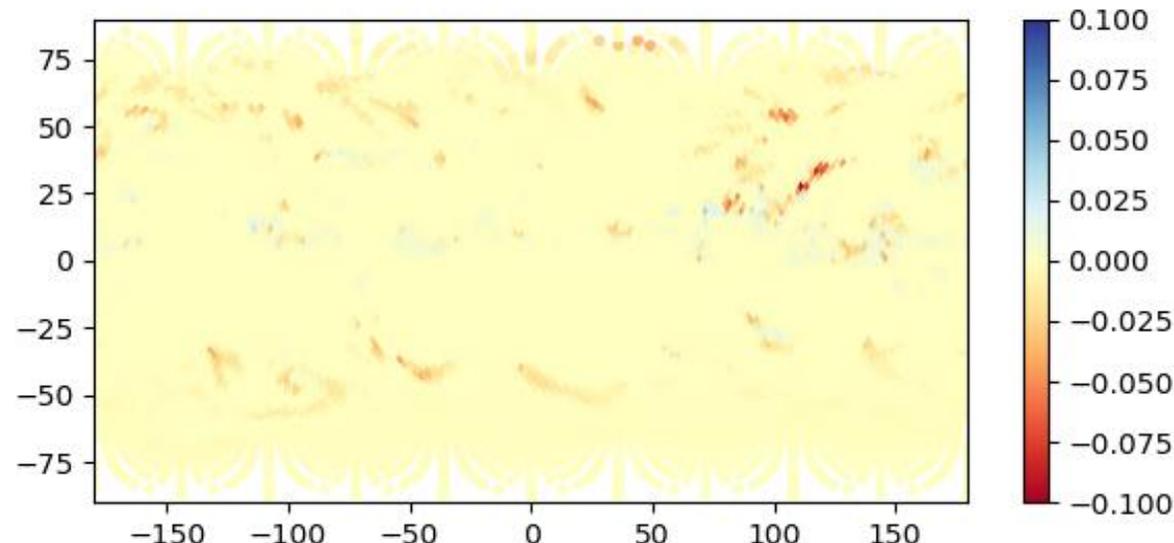


NICAM-AI連成：大気密度の時間変化量比較

- 大気密度の時間変化量についてモデルによる計算値とAIによる再現値
 - 機械学習ライブラリ：PyTorch、学習アルゴリズム：3層MLP
 - 単純アルゴリズムにも関わらず全体的な場の再現性は良好



モデル計算による結果



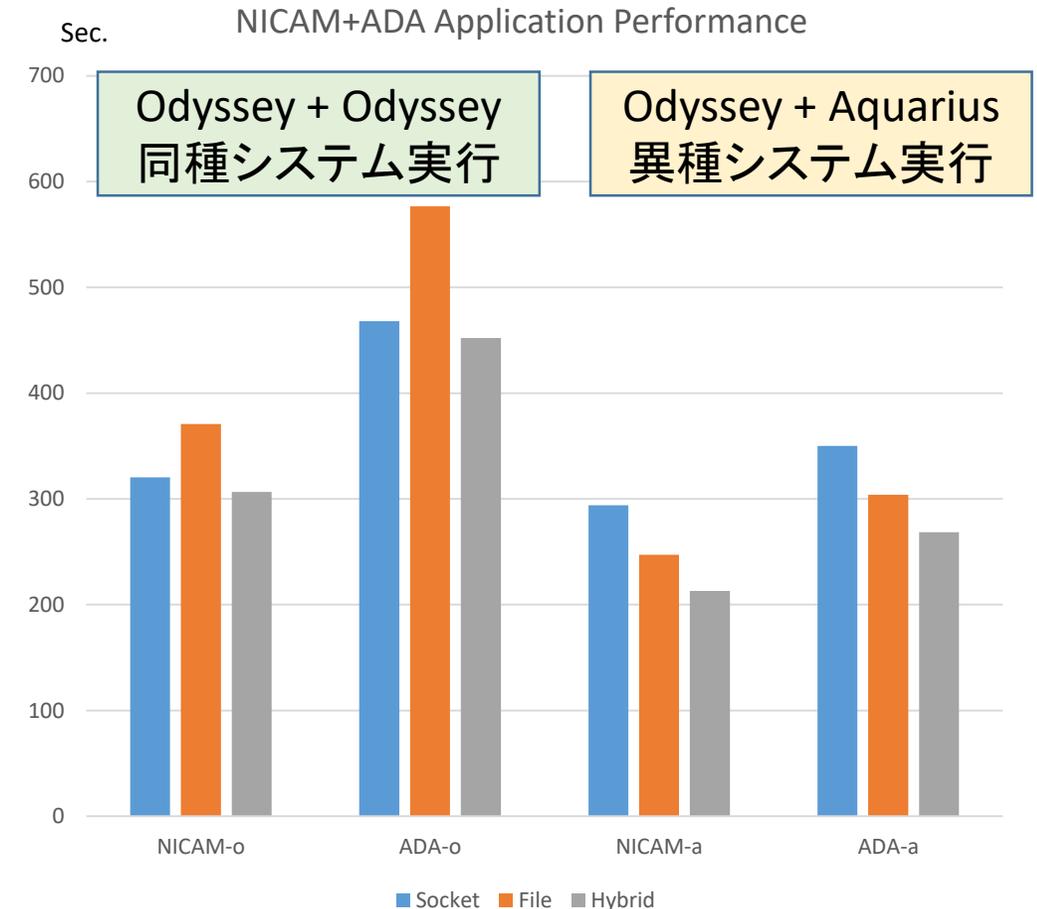
AI学習による再現値

WaitIO : アプリケーション性能比較

- 同じアプリケーションをSocket, File, Hybridで比較
- WaitIO-Hybridが最も高速であった
 - NICAM(1.44倍), ADA(1.68倍)
異種システム実行が高速

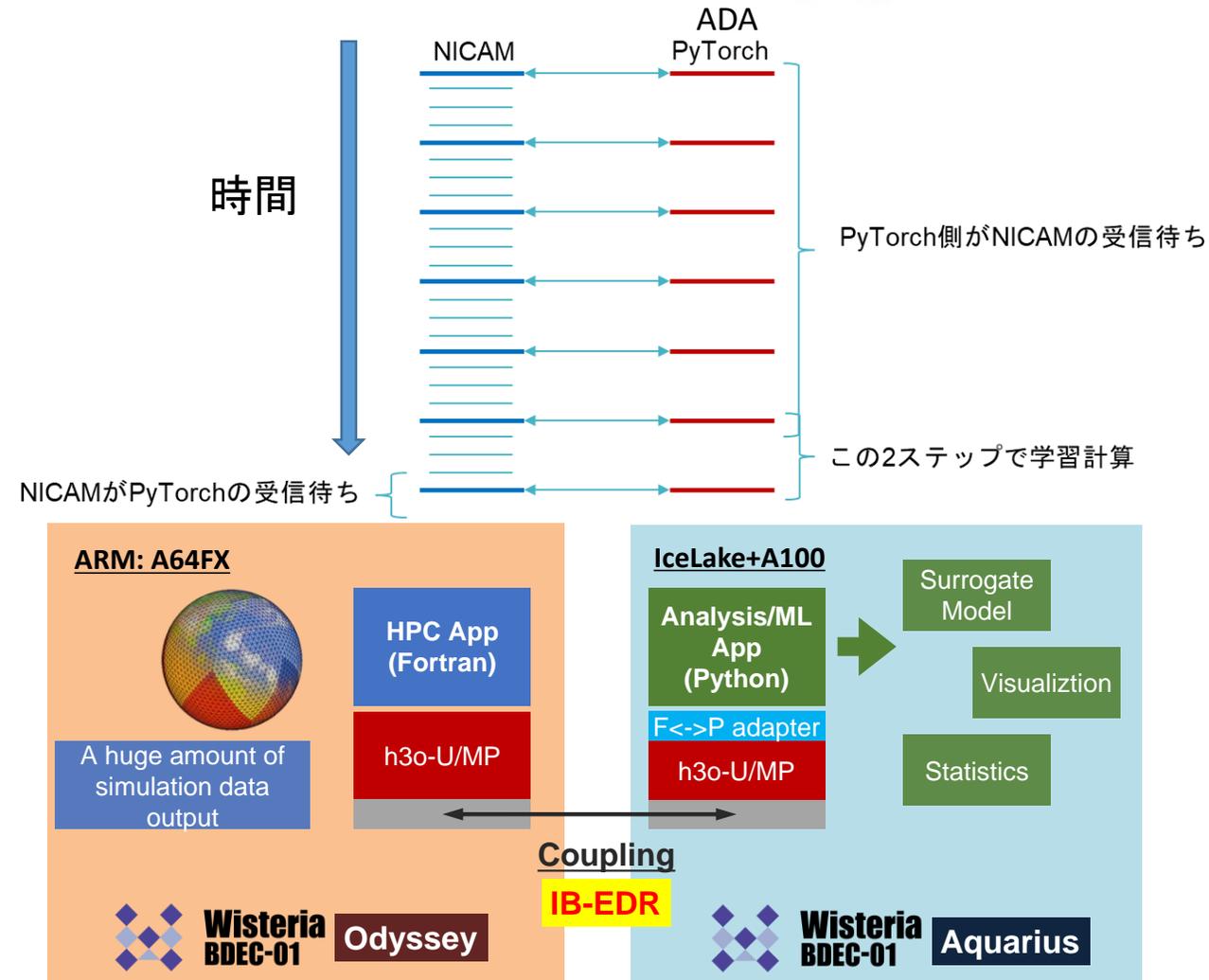
Seconds	NICAM-o	ADA-o	NICAM-a	ADA-a
Socket	320.3	467.9	293.9	350.1
File	370.7	576.6	247.3	303.8
Hybrid	306.5	452.1	213.1	268.4

- 同種実行と異種実行でSocketとFileの性能が逆転しているのはSocketのGIO性能律速による。



NICAM+ADAにおけるデータ転送量

- NICAM: アプリケーション内部時間で6時間分シミュレーション
 - 1時間あたり160プロセスで367MBをADAに通信 (Total: 2569MB)
- ADA : NICAMと同様アプリケーション内部時間で6時間分データ受信
 - 1時間当たり81MBをNICAM 160プロセスに通信
 - 最後の2つのデータについて100エポックのMLを実行 (Total: 567MB)



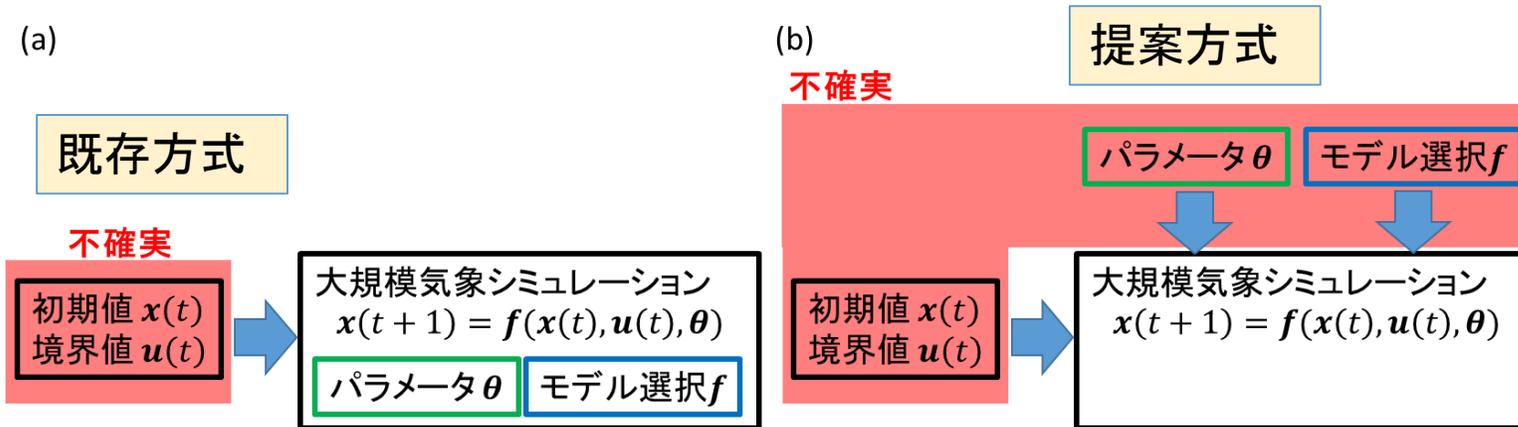
極端気象現象のシミュレーションの予測精度向上

Y. Sawada (U.Tokyo)

事例3

極端気象現象予測における不確実性定量化

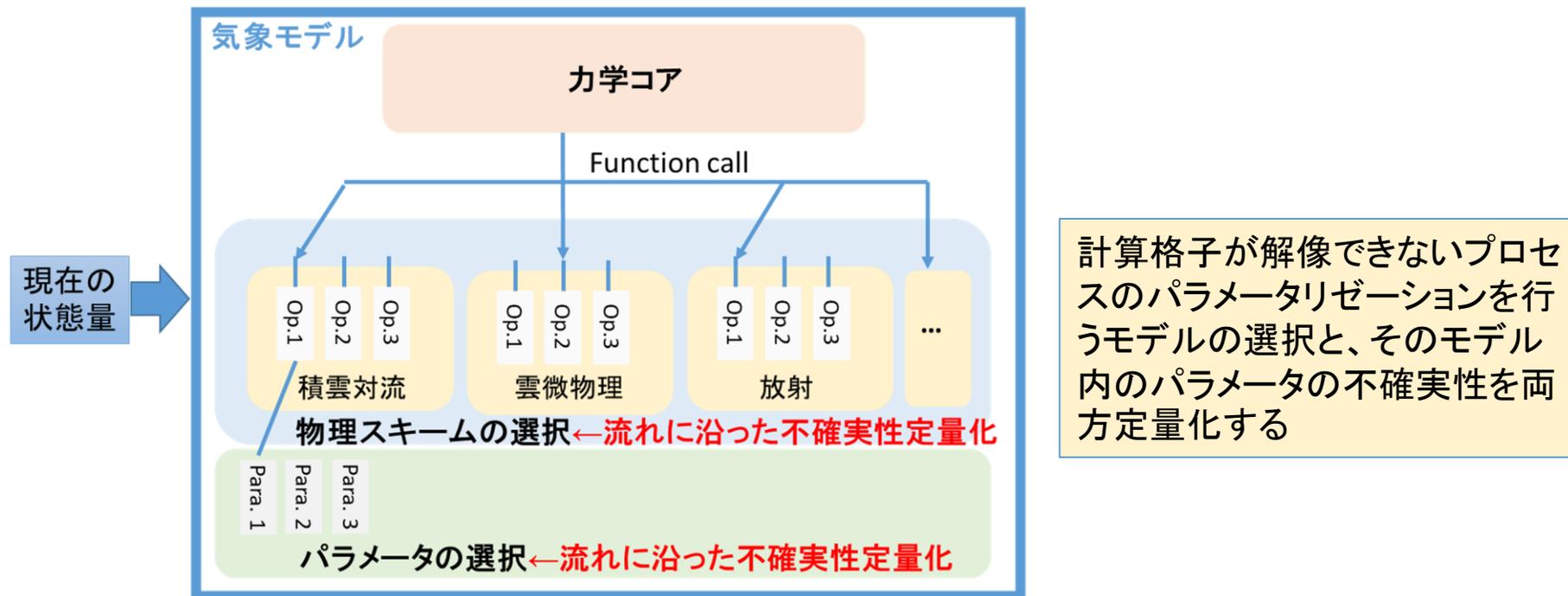
- 地球温暖化に伴う異常気象が深刻さを増す中、ゲリラ豪雨、線状降水帯、台風など気象現象のシミュレーションの予測は容易でなかった
 - 既存の気象シミュレーションは様々な初期値・境界値を設定してシミュレーションを行い。気象の予測を行っていた。このため想定外の異常気象の予測は困難
- 本研究は、初期値・境界値だけではなく、パラメータとモデル選択まで踏みこんで不確実性を定量化することにより予測精度の向上を目指す



JHPCN-jh220020

極端気象シミュレーションの不確実性定量化手法の開発

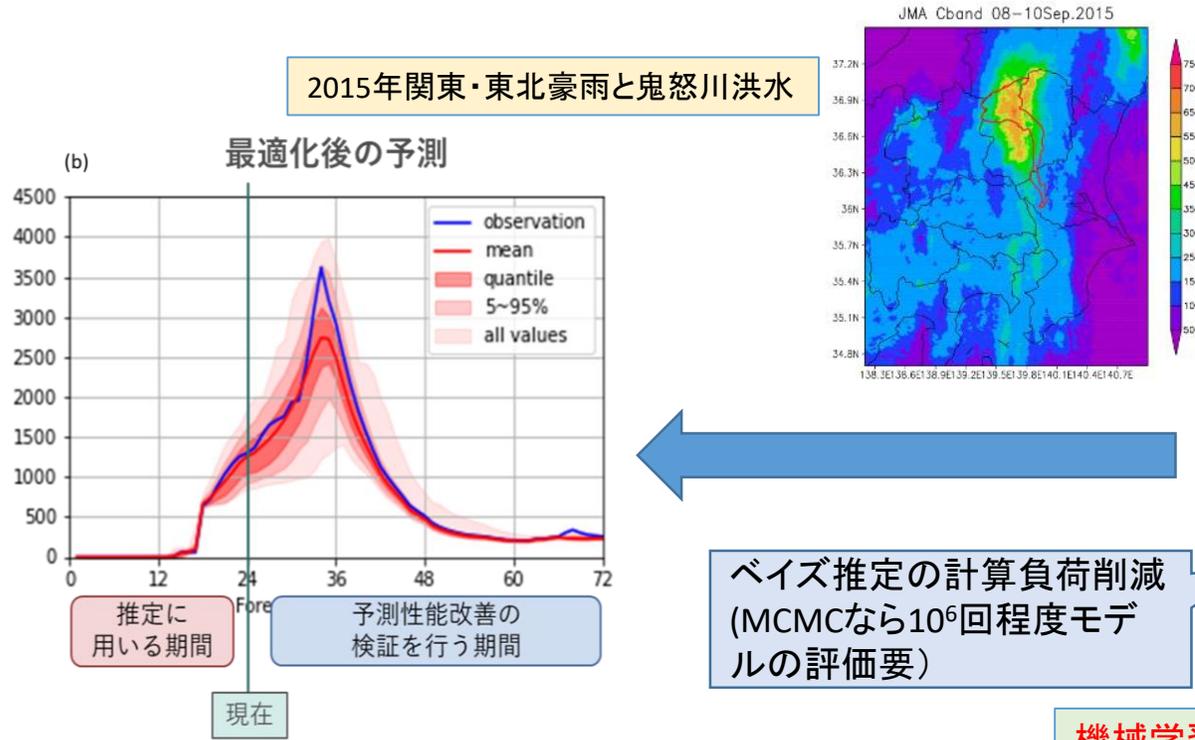
- 目標：予測の不確実性要因の網羅的理解
 - 内在するすべての不確実性を効率よくベイズ推定する方式の開発
- 課題：無限大の組み合わせのシミュレーションをどうやって解くか
 - 超並列で解くとしても限界あり



不確実性定量化手法の概要

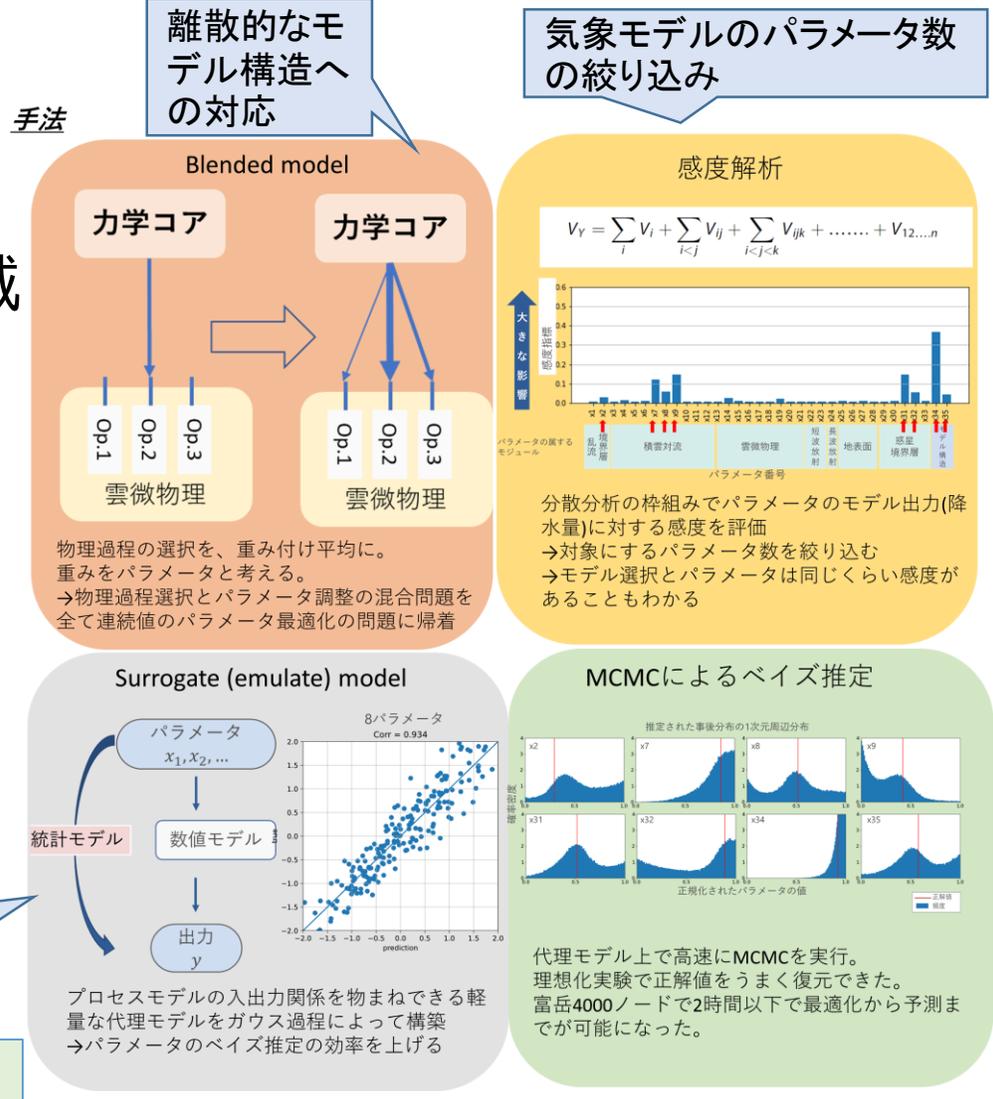
<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh220020>

- 気象モデルとしてはBlended model : 感度解析を行いパラメータ数を削減
- マルコフ・モンテカルロ(MCMC)法を用いてベイズ推定 : Surrogate model(機械学習)採用で計算負荷削減



ベイズ推定の計算負荷削減 (MCMCなら10⁶回程度モデルの評価要)

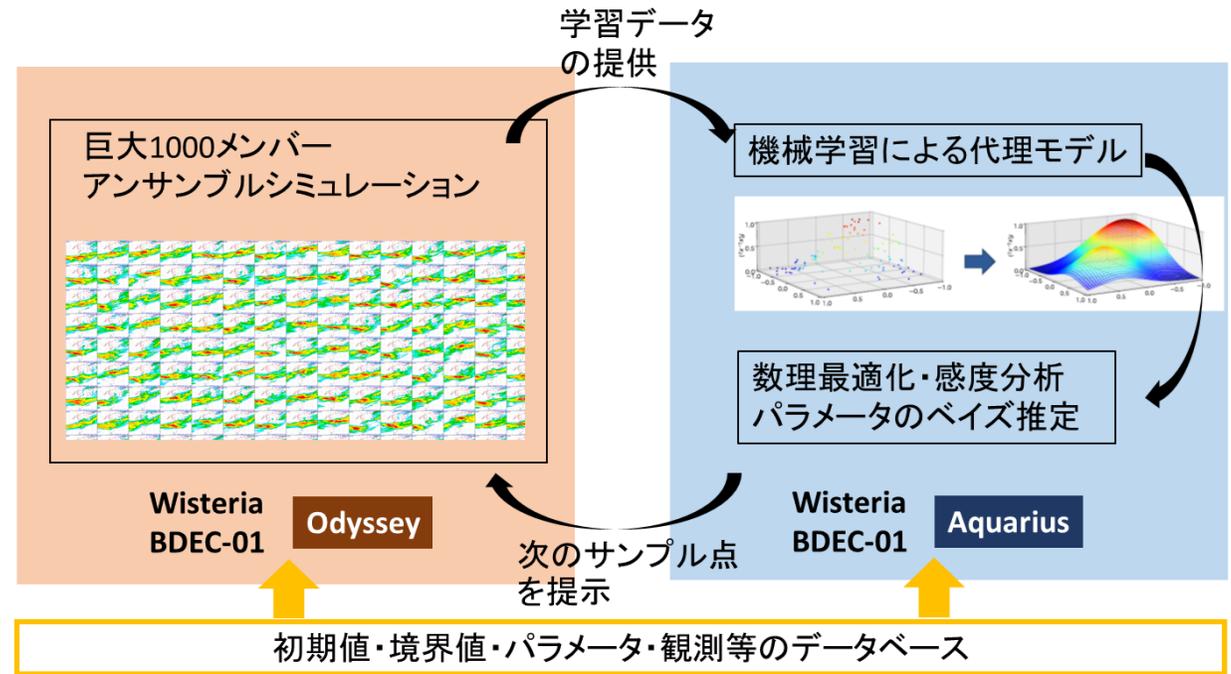
機械学習



Wisteria/BDEC-01上で開発中のシステム

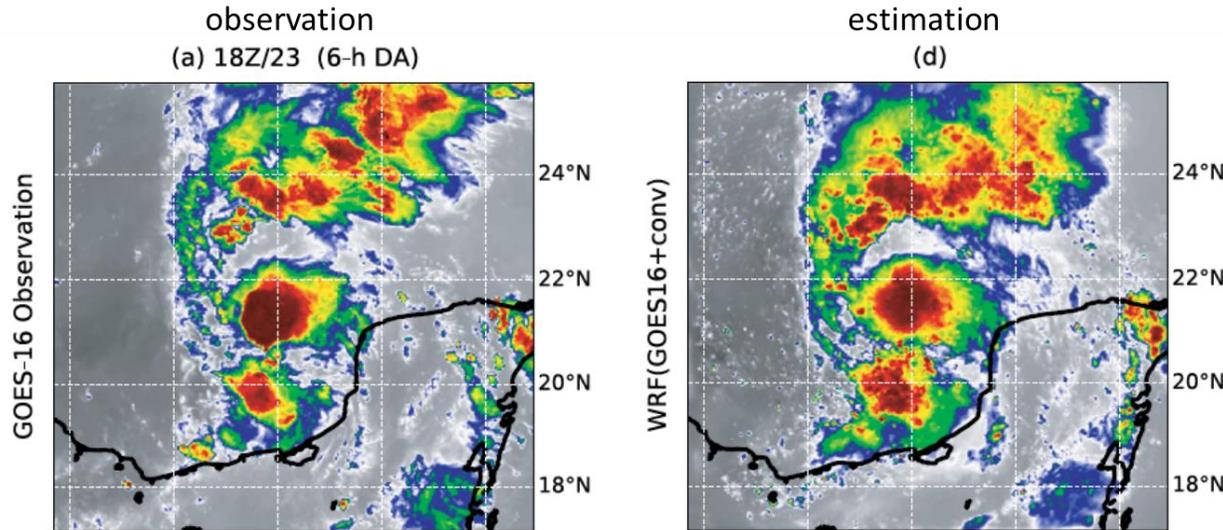
- Odyssey上で1000メンバーアンサンブルシミュレーションを行った結果をAquariusで機械学習によるSurrogate model化、数理最適化・感度分析を連動して評価しパラメータのベイズ推定を行う

Wisteria/BDEC-01の
計算+データ+学習の力を引き出して
リアルタイムにその場その場のシ
ミュレーションに内在する不確実性
の定量化を可能にする！



極端気象現象のデータ同化による更なる高精度化

- シミュレーション結果と最新鋭の静止気象衛星の画像データを用い
データ同化により高精度化



台風アンサンブル再解析/再予報データ

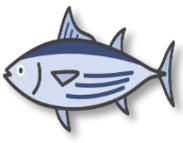
- 台風150個の再解析を60アンサンブル、空間解像度2kmで提供 (画像データ1枚 30MB)
- WRFシミュレーション1メンバーあたり8GB、1台風あたり60アンサンブルでは480GB
- 台風150個では72TBのデータ量
- 全天候静止気象衛星**データ同化**で高品質を実現
- 台風以外の極端気象も視野に入れる
- 全世界の気象コミュニティに向けて共用予定

Wisteria/BDEC-01におけるシミュレーション計画とデータ量

- WRFシミュレーション1メンバーあたり8GB、2日間予測で80メンバーアンサンブルで640GB
- 1メンバーあたりOdyssey 1ノードでCPU時間30分
- 空間解像度2kmのひまわり画像とデータ同化
- 経過によりアンサンブルパターンを変化1週間分くらい評価

世界初! 最新鋭の静止気象衛星の全天候観測とシミュレーションの統合による、アンサンブル情報を付与した台風の再解析/再予報データ
この膨大なデータを解析することで台風予測の不確実性の起源に迫る

Odyssey: 気象シミュレーション(WRF)+Aquarius: データ同化とSurrogate model(機械学習)
h3-Open-SYS/WaitIO+h3-Open-UTIL/MPで 計算+データ+学習を融合



海洋エコシステム予測

JHPCN-jh220055

事例4

沿岸海洋の物理場・化学場・微生物場を予測し将来的に魚群の位置や規模の予測へ

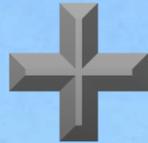
<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh220055>

観測
(理研&東北大)

連続自動観測・
採水データの環境オミクス解析

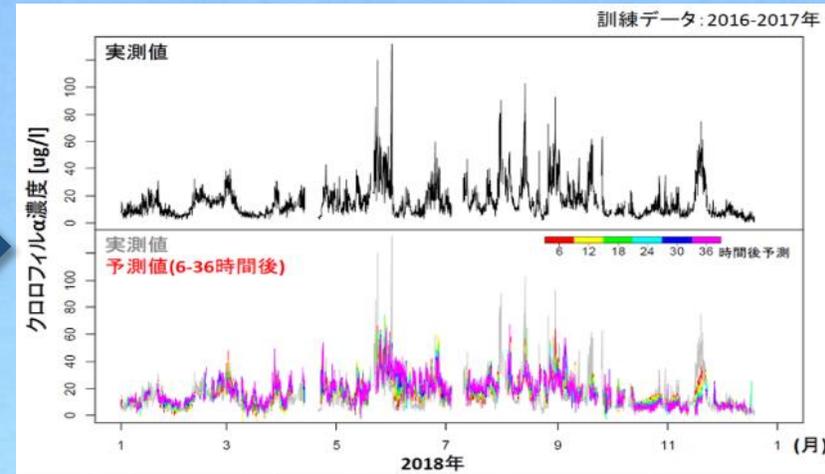
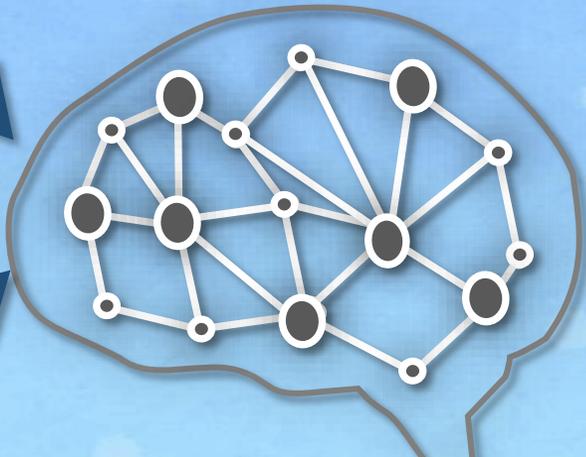
機械学習
(理研&東大)

すでに赤潮予報の高精度化に
ある程度成功！



シミュレーション
(理研&大阪大)

海洋モデル・気象モデル
河川モデル



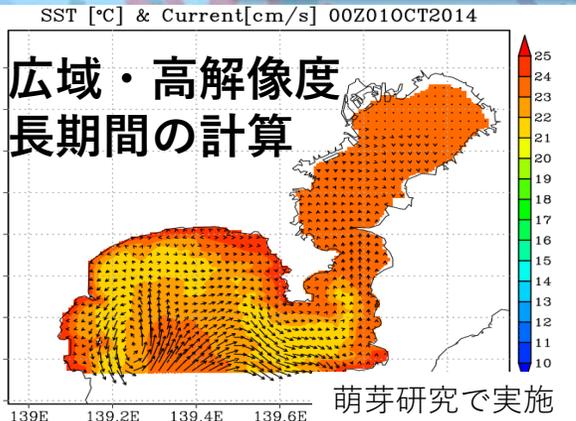
システムの高度化により
魚群の予測を可能とする

沿岸ビッグデータの
機械学習への適用

入出力データの
面的・空間的構造を考慮
(萌芽では観測点のみ)



現代的な生化学モデルでのシミュレーション・データ同化

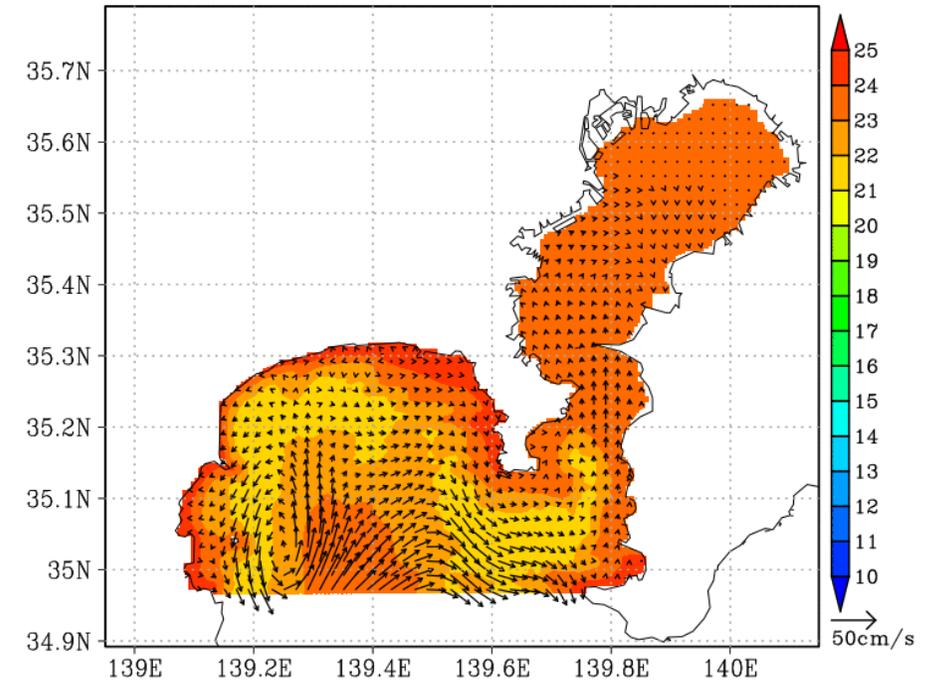
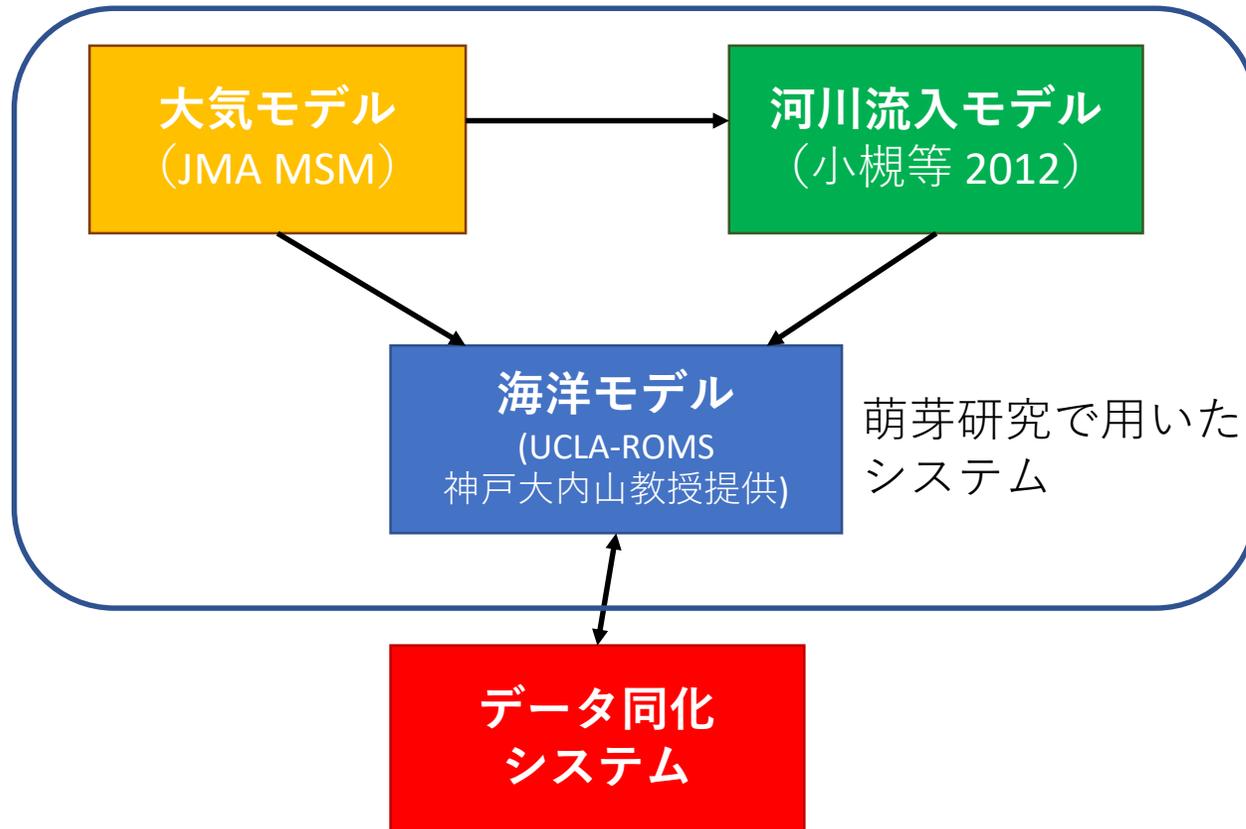


数値シミュレーションシステムの概要

<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh220055>

相模・東京湾での赤潮予測の結果

SST [°C] & Current[cm/s] 00Z010CT2014



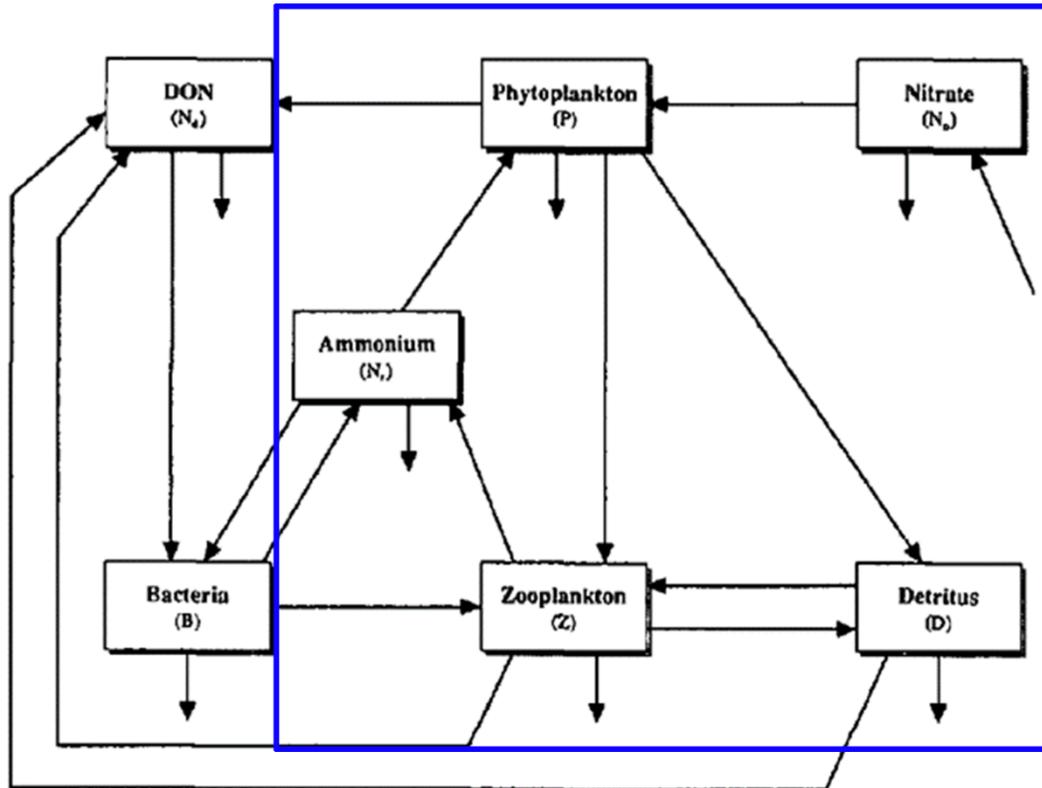
萌芽研究でおおむね妥当なシミュレーション結果が得られている

- データ同化の実施を予定
- シミュレーション部分のフレームワークは萌芽研究と同様だが、内側領域のモデルは変更を検討⇒**大阪大モデル**

海洋微生物・化学モデルの概要

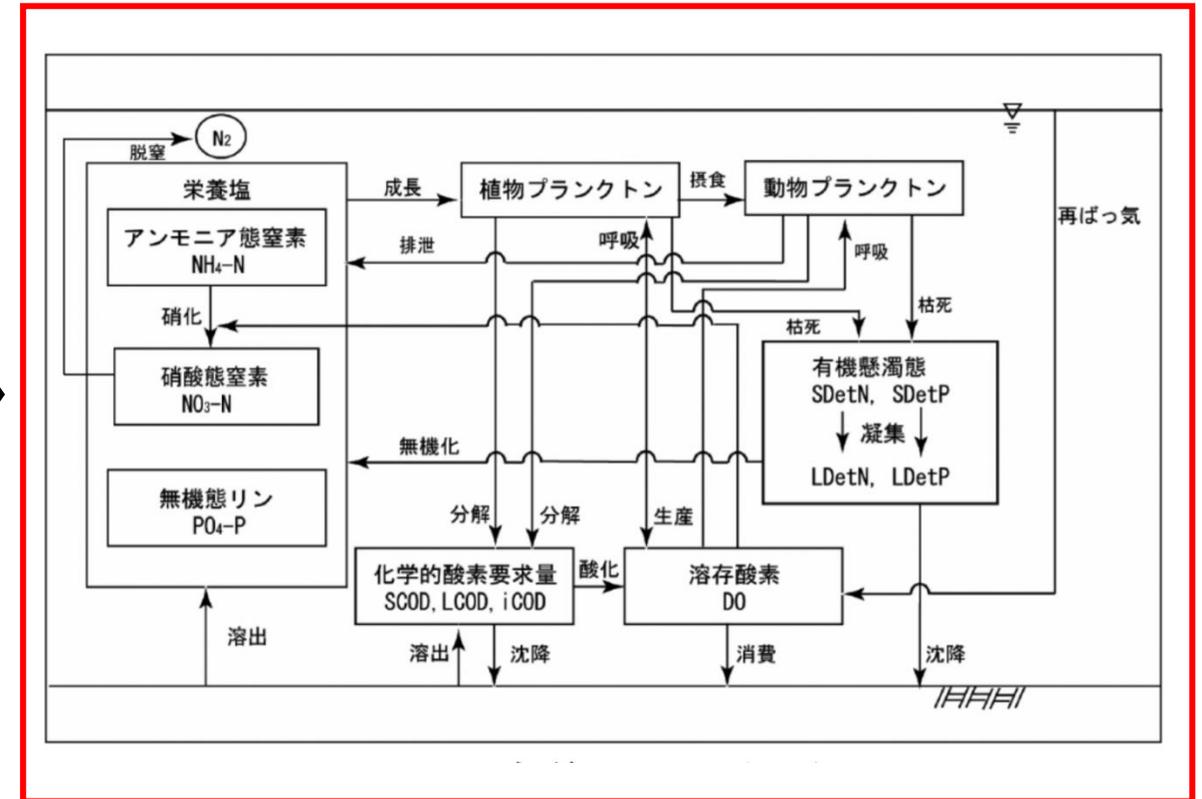
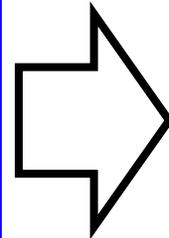
<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh220055>

萌芽研究で利用



(Fasham et al. 1990)

窒素循環のみを考えた
シンプルなモデル



(入江 et al. 2011)

より現代的なモデルの例

機械学習概要

✓ 時系列データの取得

- ・ シミュレーションデータ
- ・ 公共の観測データ
- ・ 表層海水の採水データ
※要12S等の環境DNA抽出作業

✓ データセットの作成

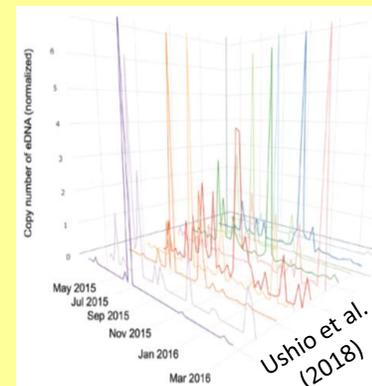
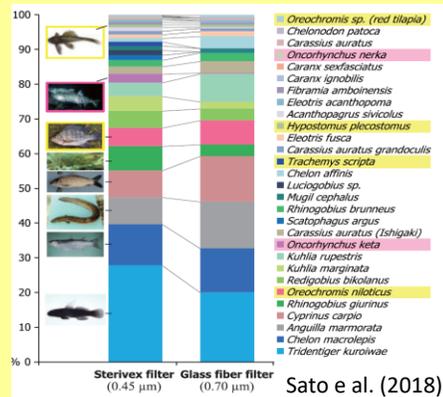
- ・ 欠損データの補完
- ・ 次元削減（データ圧縮）
- ・ 知識ベースによる次元削減
- ・ 重要度抽出

✓ 予測モデル作成 (RNN)

- ・ 結果出力（面データを考慮）
- ・ 転移学習

<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh220055>

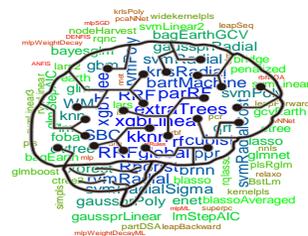
採水データの環境オミクス解析データ



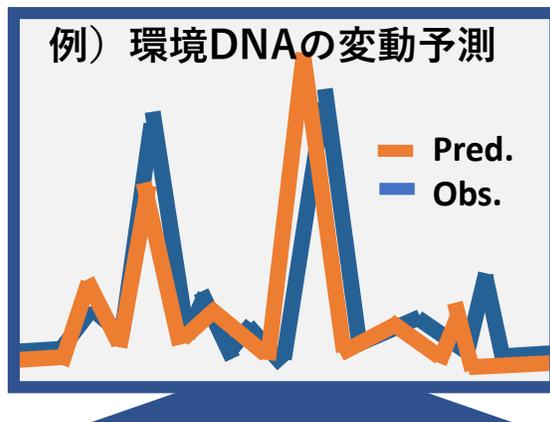
シミュレーションデータ
海洋・気象・河川モデル

その他の観測データ
連続自動観測等

RNNによる 予測モデル作成



例) 環境DNAの変動予測



転移学習



東京大学情報基盤センターの利用制度の紹介

- 一般利用
 - 大学・公共機関に在籍の方（大学院生は代表者としては申し込めません）
 - 電気代相当料金の利用負担金支払いが必要
- 企業利用
 - 企業に在籍の方
 - 利用負担金は一般利用の約1.2倍
 - 書面・ヒアリング審査あり，成果報告（公開）義務あり
- 若手・女性利用
 - 大学・公共機関に在籍の方
 - 4月1日現在40歳以下の若手，または女性，または学生
 - 利用負担金なし
 - 書類審査あり，成果報告義務あり
- 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）への課題申請
- HPCI課題への課題申請

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/>
ご興味を持たれた方ご活用ください

Co-Authors

- Kengo Nakajima, Information Technology Center, University of Tokyo
 - HPC, Management
- Takashi Furumura, Earthquake Research Institute, University of Tokyo
 - Simulations: Seism3D/OpenSWPC-DAF
- Hiroshi Tsuruoka, Earthquake Research Institute, University of Tokyo
 - Observation/Monitoring Network: JDXnet
- Hisashi Yashiro, National Institute for Environmental Studies, Japan
 - Climate, Coupling Utilities
- Shinji Sumimoto, Information Technology Center, The University of Tokyo
 - System Software for Communications on Heterogeneous Environments
- Takashi Arakawa, CliMTech/The University of Tokyo
 - Climate, Coupling Utilities

Contributors

- **Information Technology Center, The University of Tokyo**
 - K. Nakajima, T. Hanawa, T. Arakawa
 - T. Shimokawabe, H. Matsuba
- **Earthquake Research Institute, The University of Tokyo**
 - T. Furumura, H. Tsuruoka
 - T. Ichimura, K. Fujita
 - H. Nagao, S. Ito



- **National Institute of Environmental Studies (NIES)**
 - H. Yashiro
- **Nagoya University**
 - T. Hoshino, M. Kawai
- **Kyushu University**
 - S. Oshima
- **University of Hyogo**
 - H. Shiba
- **Fujitsu**
 - Y. Sakaguchi, S. Sumimoto(2021), Y. Kasai et al.

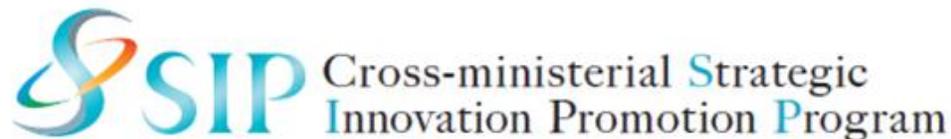


Acknowledgements

- JSPS Grant-in-Aid for Scientific Research (S) (19H05662)
- New Energy & Industrial Technology Development Organization (NEDO): Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program (SIP): Big-Data and AI-Enabled Cyberspace Technologies
- Joint Usage/Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures (JHPCN)
 - jh210022-MDH, jh220029, jh230017 , jh220020 , jh220055



新エネルギー・産業技術総合開発機構
New Energy and Industrial Technology Development Organization



解説記事 : h3-Open-UTIL/MP・ h3-Open-SYS/WaitIO-Socket



- h3-Open-UTIL/MP

- https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL24/No3/13_202205-Wisteria-2.pdf
- <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/files/202207UtilMPfinal.pdf>



- h3-Open-SYS/WaitIO-Socket

- https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL24/No2/10_202203Wisteria-1.pdf
- https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL24/No3/12_202205-Wisteria-1.pdf



まとめ

- Wisteria/BDEC-01とh3-Open-BDEC
 - シミュレーション、データ、学習の融合を目指したシステムとソフトウェア群
- リアルタイムデータを活用したビッグデータ＋HPC事例
 - リアルタイムデータ同化＋3D強震動シミュレーション融合
- シミュレーションデータを活用したビッグデータ＋HPC＋AI事例
 - 気候シミュレーションの高精度・高速化
 - 極端気象現象のシミュレーションの予測精度向上
 - 海洋エコシステム予測

- 今後も世の中に役に立つ実アプリケーションの研究開発を進めていく

Questions?