

Society 5.0 を実現する BDEC システム

中島研吾¹⁾, 埴 敏博¹⁾, 下川辺隆史¹⁾, 坂本龍一¹⁾, 有間英志¹⁾, 星野哲也¹⁾,
伊田明弘¹⁾, 三木洋平¹⁾, 河合直聡¹⁾, 芝 隼人¹⁾

1) 東京大学情報基盤センター

BDEC System for Society 5.0

Kengo Nakajima¹⁾, Toshihiro Hanawa¹⁾, Takashi Shimokawabe¹⁾, Ryuichi Sakamoto¹⁾,
Eishi Arima¹⁾, Tetsuya Hoshino¹⁾, Akihiro Ida¹⁾, Yohei Miki¹⁾, Masatoshi Kawai¹⁾,
Hayato Shiba¹⁾

1) Information Technology Center, The University of Tokyo

概要

スーパーコンピューティングは従来の計算科学シミュレーション中心から、データ科学、機械学習との融合へと移行しつつある。東京大学情報基盤センターにおいて（計算+データ+学習）融合による Society 5.0 の実現を目指すプラットフォームとして整備を進めている BDEC システム (Big Data & Extreme Computing) と関連した取り組みについて紹介する。

1 背景：東大センターの現状

東京大学情報基盤センター [1] (以下「当センター」) は 1965 年に東京大学大型計算機センターとして設立されて以来 50 年余り、全国共同利用施設、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の中核拠点、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) [2] の構成機関として、国内外の産学官の各機関で実施されているスーパーコンピュータを使用した大規模シミュレーションによる計算科学・計算工学の研究の発展に貢献をしてきた。

2020 年 10 月現在、当センターでは 4 式 (Reedbush-H, Reedbush-L, Oakforest-PACS,

Oakbridge-CX) のシステム [1] を運用しており、総利用者数は学内外を合計して約 2,600 名、そのうち 55% は学外利用者である。各システムは、高い計算性能、ユーザーフレンドリなプログラム開発環境、安定した運用が利用者が高く評価されている。

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って更に新しい科学を開拓する試みが始まっている。

当センターのシステムの利用分野では、①工学・ものづくり、②地球科学・宇宙科学、③材料科

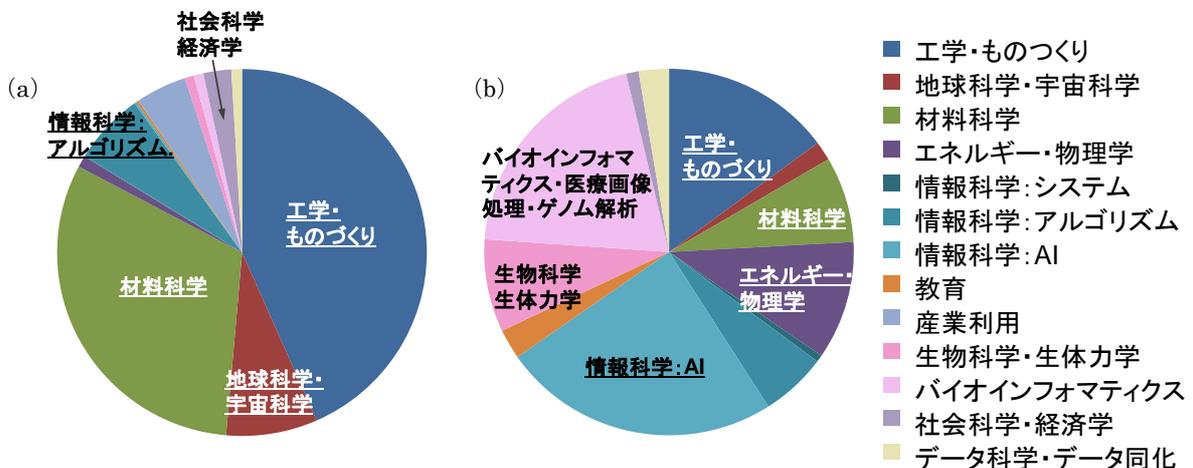


図1 実行ジョブノード時間の分野別比率 (2019年度), (a) Reedbush-U (Intel Xeon/BDW), (b) Reedbush-H (Intel Xeon/BDW + NVIDIA Tesla P100 (ノード当たり 2GPU))

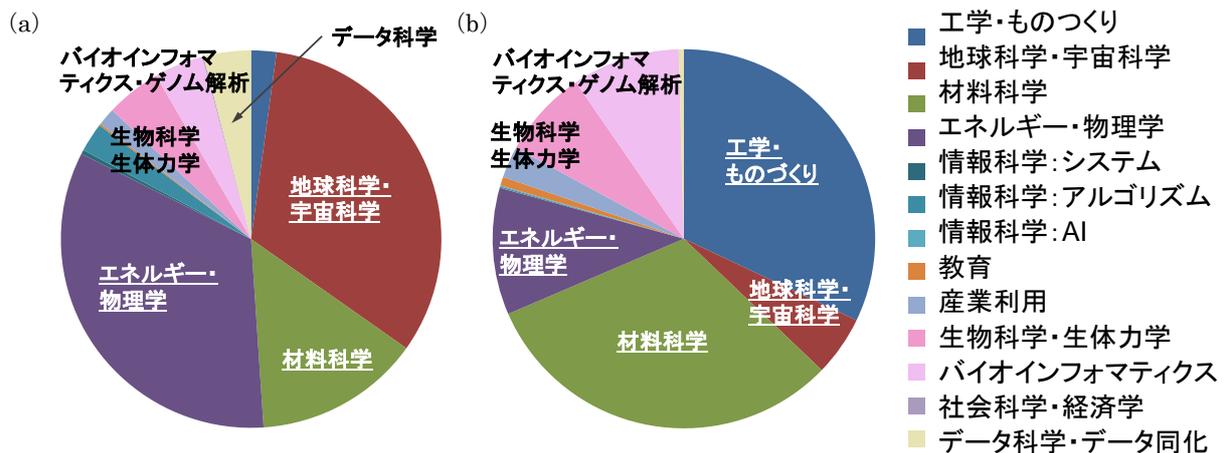


図2 実行ジョブノード時間の分野別比率 (2019年度, OBCX: 2019年10月~2020年8月末), (a) Oakforest-PACS (OFP, Intel Xeon/Phi), (b) Oakbridge-CX (OBCX, Intel Xeon Platinum 8280 (Cascade Lake))

学, が長年にわたって利用時間の合計80%以上を占めてきたが [3], 当センター初の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) は人工知能, 医療画像処理を中心としたバイオインフォマティクスなどより多様な分野で使用されている (図1 (b)).

また, 本来計算科学・計算工学用途を念頭において導入されたOakforest-PACS (OFP), Oakbridge-CX (OBCX) においても図2 (a,b) に示すようにデータ科学, バイオインフォマティクス分野の利用が多い。特にOBCXは全1,368ノードのうち, OBCXは128ノードに高速SSD (ノード当たり容量1.6TB) を搭載しており, OBCXに搭載されたソフトウェアBeeGFS/BeeOND [4] によって合計200TB以上の容量を有する高速ファイルシステムとして利用することも可能あり, またデータ科学関係のソフトウェア群も充実していることから, バイオインフォマティクスを中心としたデータ科学分野の利用が増加しつつある。

2 Society 5.0 と「S+D+L」融合

Society 5.0 とは, 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, 人間中心の社会 (Society) である。狩猟社会 (Society 1.0), 農耕社会 (Society 2.0), 工業社会 (Society 3.0), 情報社会 (Society 4.0) に続く, 新たな社会を指すもので, 第5期科学技術基本計画において我が国が目指すべき未来社会の姿とし

て初めて提唱された [5]。

Society 5.0 の実現にはIoT (Internet of Things), ロボット, AI (人工知能), ビッグデータといった社会の在り方に影響を及ぼすデジタル革新・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・計算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を適用することによって, サイバー空間 (仮想空間) とフィジカル空間 (現実空間) を高度に融合したシステムを形成し, Society 5.0 が目指す人間中心の社会の実現に大きく貢献すると期待される。

海外に目を向けてもアメリカエネルギー省のエクサスケールシステム計画の一つであるAurora/A21 システムのホームページ [6] では「シミュレーション (Simulation) + データ (Data) + 学習 (Learning) (S+D+L)」の融合 (「S+D+L」融合) が謳われている。

3 BDEC システム

当センターでは2015年頃からこのような状況を想定し, 「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 [3]。現在当センターで運用中のReedbush (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月運用開始), Oakbridge-CX (大規模超並列スーパーコンピュータシステム, 同2019年7月) はいずれも「BDEC システム」設計のためのプロトタイプ,

実証システムとしても位置づけられている。

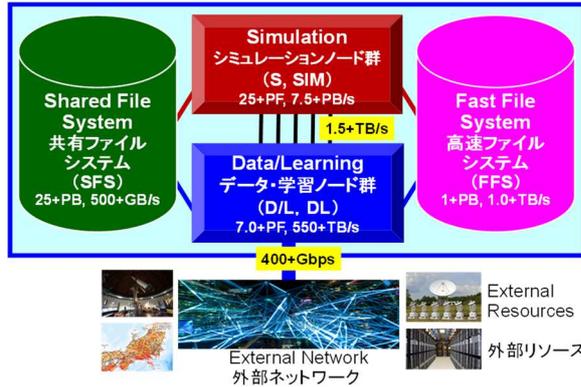


図3 「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム (BDEC, Big Data & Extreme Computing)

BDEC システムは、2021 年 5 月の運用開始を目指し、2020 年 10 月 16 日現在調達が進められている。BDEC は「S+D+L」融合を実現するために、「シミュレーションノード群 (Simulation Nodes (S, SIM))」と「データ・学習ノード群 (Data/Learning Nodes (D/L, DL))」から構成されている。シミュレーションノード群はその名の通り「S+D+L」のうち「S」を担当しており、汎用 CPU から構成されている。データ・学習ノード群は「D+L」を担当する GPU クラスタ (各ノードに 4 基または 8 基の GPU を搭載) であり、一部のノードは SINET 等の外部ネットワークを介して、サーバー、ストレージ、センサーネットワークを含む様々な外部リソースに直接アクセス可能である。データ・学習ノード群は、観測データをリアルタイムに取り込んで解析、シミュレーションに利用することが可能

である。BDEC 全体のピーク演算性能 (倍精度) は 32 PFLOPS 以上を予定しており、そのうち 25 PFLOPS 程度がシミュレーションノード群、7 PFLOPS 程度がデータ・学習ノード群となる予定である。この他、両ノード群からアクセス可能な共有ファイルシステム (25PB 以上)、高速ファイルシステム (1PB 以上) を有している (図 3)。

BDEC システムは東京大学柏 II キャンパスに建設中の「学術高速大容量ネットワーク拠点」に設置される。

4 h3-Open-BDEC

(1) 概要

「計算+データ+学習 (S+D+L)」融合のためには、BDEC のようなこれまでにない革新的なハードウェアが必要であるが、様々なアプリケーション、ワークロードを BDEC 上で開発、実行していくためのソフトウェア群も重要である。当センターでは、「計算+データ+学習」融合のためのプラットフォームである BDEC システム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である階層型データ駆動アプローチ (hDDA, Hierarchical Data Driven Approach)

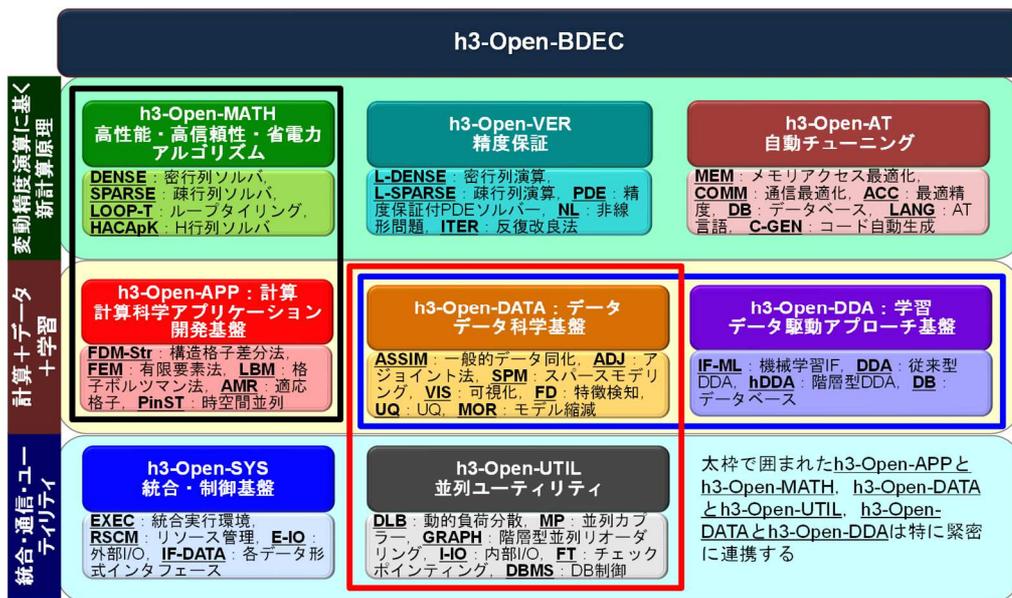


図4 h3-Open-BDEC の概要

の2項目を中心とした研究を推進し、その成果を革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」として整備する(図4)。「h3」はBDECシステムがHierarchical, Hybrid, Heterogeneous(h3)な特徴を持っていることに由来している。また、h3-Open-BDECは、その名称の示す通り、オープンソースとして公開し、BDECシステムのみならず、様々なスパコン上で利用可能とする。

(2) 研究成果

従来、科学技術計算には倍精度浮動小数点演算(FP64)が広く使用されてきたが、近年、単精度(FP32)、半精度(FP16)等による低精度演算を積極的に活用した研究が広く行われている。疎行列を対象とした前処理付き反復法の例では、比較的条件の良い問題では、倍精度を単精度に置き換えることによって、収束までの反復解法は20%程度増加するものの、計算時間は半分程度になる事例が報告されている[8]。計算時間の減少率は、使用計算機、実装方法(疎行列格納法)、問題規模等によって様々であるが、一般に計算時間に比例して消費エネルギー(J値)は減少する。

図5は様々なCPU, GPU(Intel Xeon/Broadwell(Reedbush-U, RBU), Intel Xeon Phi(Oakforest-PACS, OFP), NVIDIA Tesla P100(Reedbush-L, P100)・V100(V100))の1ノードを使用してICCG法の計算時間、消費電力(W)、消費エネルギー(J)を比較したものである[8]。消費エネルギーと計算時間はほぼ正比例していることがわかる。計算時間としては、OFP, OBCX, P100, V100はほぼ拮抗しているが、OBCX, V100がやや速い。OBCXは消費電力(W)、消費エネルギー(J)がOFP, P100, V100の3倍以上である。OFP, P100, V100は消費エネルギー(J)はほぼ等しいが、P100, V100についてはホストのCPUの消費電力、消費エネルギー(アイドル時でも1ノード120W以上)は考慮されていない。P100⇒V100の計算速度向上はMediumで35-40%、Largeで45-60%である。全般的に消費電力(W)はMedium⇒Largeで増加しており、特にOFPでは2倍程度になっている。

h3-Open-BDECでは、低精度演算を積極的に導入することによって、シミュレーションに要する時間、及び消費エネルギーを削減することが可能であるが、機械学習の知見を導入することにより、更に計算時間を短縮することが可能である。h3-Open-BDECでは、パラメータスタディのためのケ

ース数を減らすことにより、全体としての計算量を減少させる階層型データ駆動アプローチ(hDDA)に関する研究を実施している。また、この他、非定常計算において数タイムステップ先の計算結果を機械学習の知見によって予測する方法に関する研究も実施している。二次元の格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM)による非圧縮性流体シミュレーションに現在開発中の手法を適用し、計算結果を正しく予測できる事例が報告されている[9]。

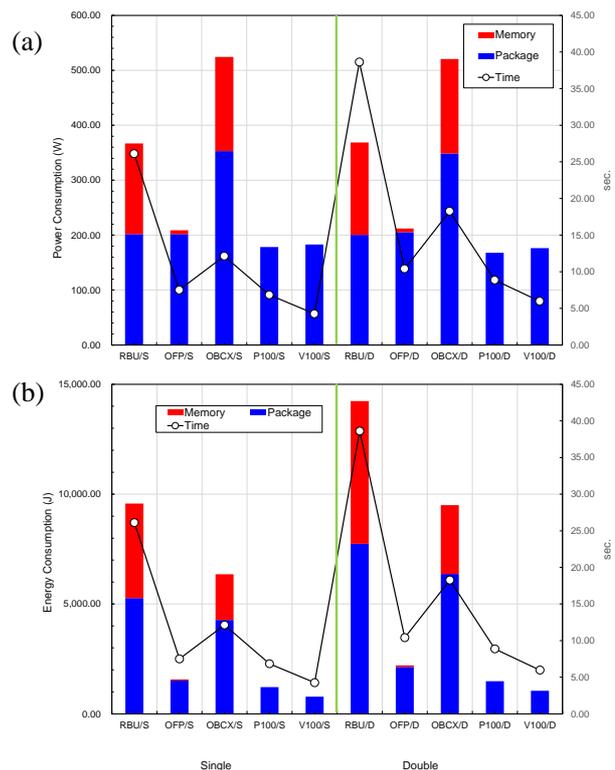


図5 ICCG法の計算時間と(a)消費電力(W)、(b)消費エネルギー(J)、各計算機環境の最適ケース[8]

(3) 利用事例

図6は、BDEC上における「計算+データ+学習(S+D+L)」融合のイメージである。h3-Open-BDECを使用することによって、シミュレーションノード群で計算科学シミュレーションコードを実行し、データ・学習ノード群では外部から取り込んだ観測データや、機械学習による推論等に基づきパラメータを最適化し、更に計算を実施するというサイクルを容易に実現することができ、またパラメータ最適化によって計算時間を全体として短縮できることが期待される。

シミュレーションとデータ科学の融合としては気候・気象シミュレーションとデータ同化の事例

が良く知られているが、当センターでは東京大学地震研究所と協力して、三次元強震動シミュレーションとリアルタイムデータ同化を融合させた新しいシミュレーション手法の開発を実施している（図7）。

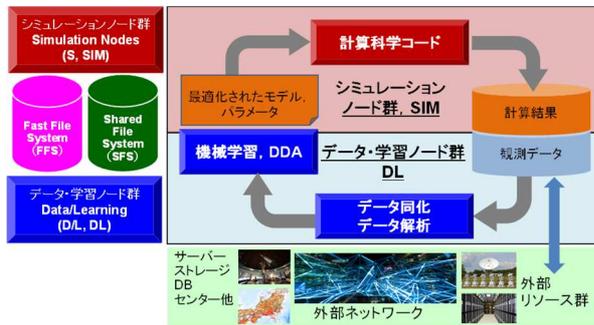


図6 BDECシステムを使用した「計算+データ+学習（S+D+L）」融合

古村孝志教授（東京大学地震研究所）の研究グループは、最適内挿法によるデータ同化と三次元強震動シミュレーションを組み合わせた Seism3D/OpenSWPC-DAF（Data-Assimilation-Based Forecast）の研究開発を実施しており、既に既存の地震観測データファイルを使用して「シミュレ

ーション+データ同化」融合に成功している〔10〕。

本研究では、2019年度からリアルタイム観測データを使用して「シミュレーション+データ同化」融合を実施するためのフレームワークの研究開発を実施している。東大地震研，防災科技研，気象庁によって整備された JDXnc によって，全国 2,000 地点以上，100Hz で計測されている地震観測データをリアルタイムに取得することが可能となっている。当センターでは，2019年度に東大地震研の協力を得て，Oakbridge-CX システム（OBCX）の外部接続ノードを使用して JDXnet から得られる観測データを直接利用可能となっている。

2019年度までに Seism3D/OpenSWPC-DAF に基づき，OBCX 上で，JDXnet から取得した観測データを，Seism3D/OpenSWPC-DAF の入力条件として与えられるようにするためのプロトタイプを整備した。2020年度は2019年度成果をもとに，より実用的でリアルタイム性の高いシステム構築を目指し，現在整備中の並列実行環境 h3-OpenSYS/EXEC のプロトタイプを使用して，Oakbridge-CX 上にシステムの構築を実施している。

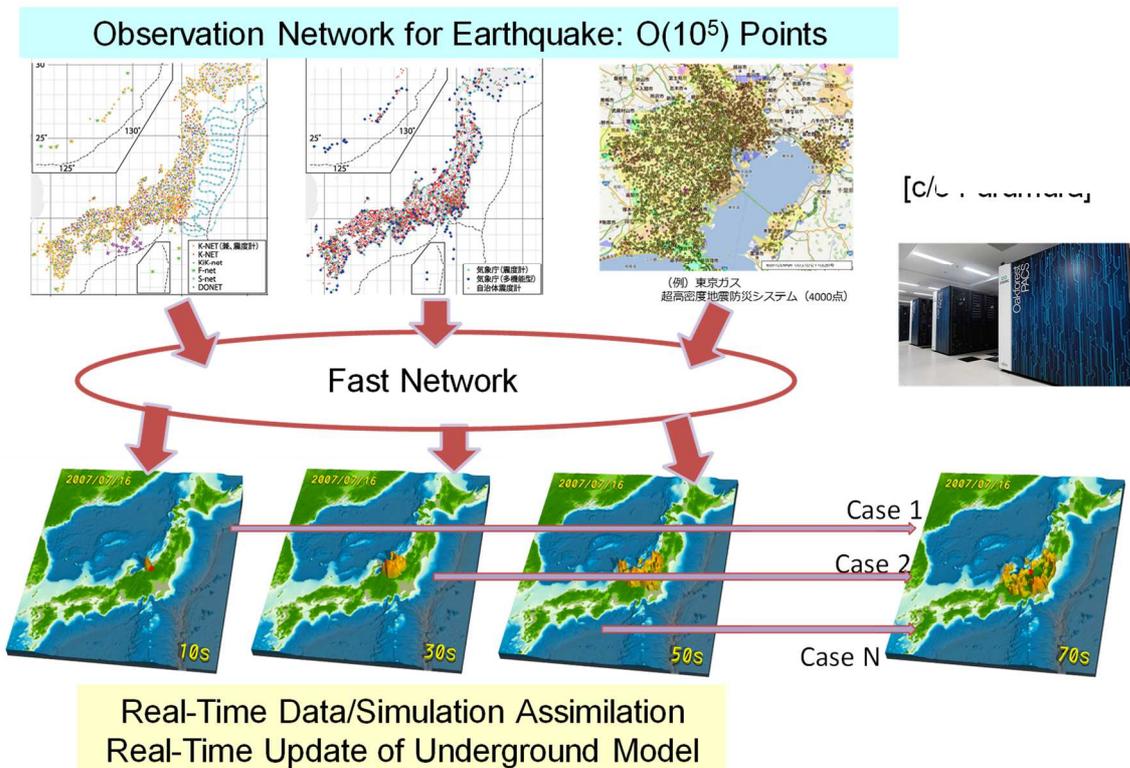


図7 リアルタイムデータ同化と三次元強震動シミュレーションの融合（出展：古村孝志教授（東京大学地震研究所））

5 まとめ

スーパーコンピューティングは従来の計算科学シミュレーション中心から、データ科学、機械学習との融合による新しいスタイルへと移行しつつある。本稿では、BDEC システム、h3-Open-BDEC など、「計算+データ+学習」融合とそれによる Society 5.0 の実現を目指す東京大学情報基盤センターの取り組みについて紹介した。当日の発表では、BDEC システムの導入状況についても併せて紹介する予定である。

参考文献

- [1] 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・スーパーコンピューティングチーム）：
<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/>
- [2] 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）；
<http://www.hpci-office.jp/>
- [3] 中島他，Society 5.0 実現に向けた（計算+データ+学習）融合，AXIES 2019 福岡
- [4] BeeGFS, BeeOND :
<http://www.hpctech.co.jp/hardware/beegfs-beeond.html>
- [5] Society 5.0（内閣府）：
https://www8.cao.go.jp/cstp/society5_0/
- [6] Aurora/A21 System, Argonne National Laboratory: <https://www.anl.gov/topic/aurora>
- [7] h3-Open-BDEC: <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-Open-BD>
- [8] 中島研吾，坂本龍一，星野哲也，有間英志，埴敏博，近藤正章，低精度演算とアプリケーション性能，情報処理学会研究報告（2020-HPC-174-5）（第 174 回 HPC 研究会）
- [9] Shimokawabe, T., Onodera, N., Nakajima, K., Hanawa, T., Mohta, S., Wang, W., Fast Surrogate for Approximating Large-scale CFD Simulations, MS 1603A: Parallel Programming Models, Algorithms and Frameworks for Extreme Computing & Big Data, 7th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM 2019), 2019
- [10] Furumura, T., T. Maeda, and A. Oba, Early Forecast of Long - Period Ground Motions via Data Assimilation of Observed Ground Motions and Wave Propagation Simulations, Geophys. Res. Lett., <https://doi.org/10.1029/2018GL081163>, 2018