

# 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？

- 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**の規模感
- シミュレーションを実行
  - 大量の複雑な計算を高速に正確に解くことが求められる
  - 例: 天気予報

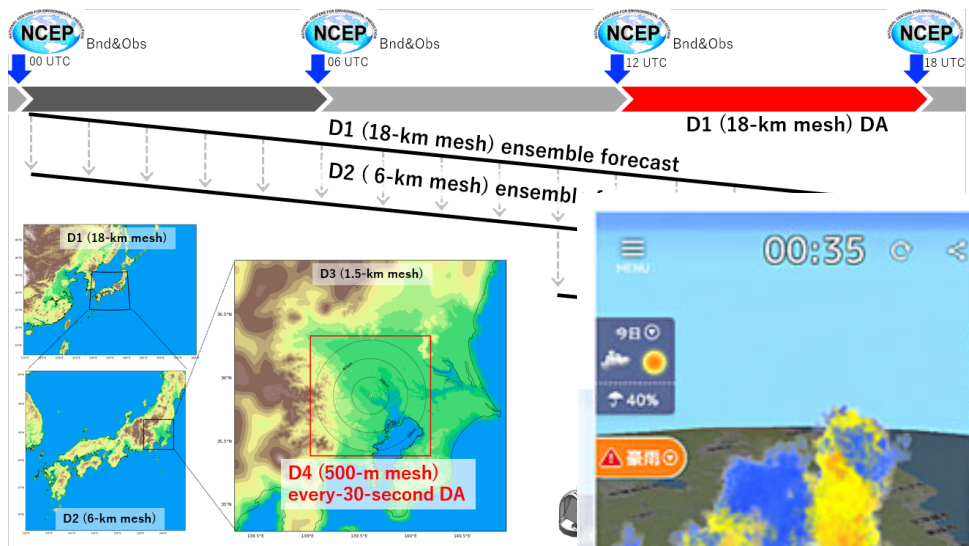


2023年10月28日(日)



柏キャンパス一般公開

# ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験 (理化学研究所)

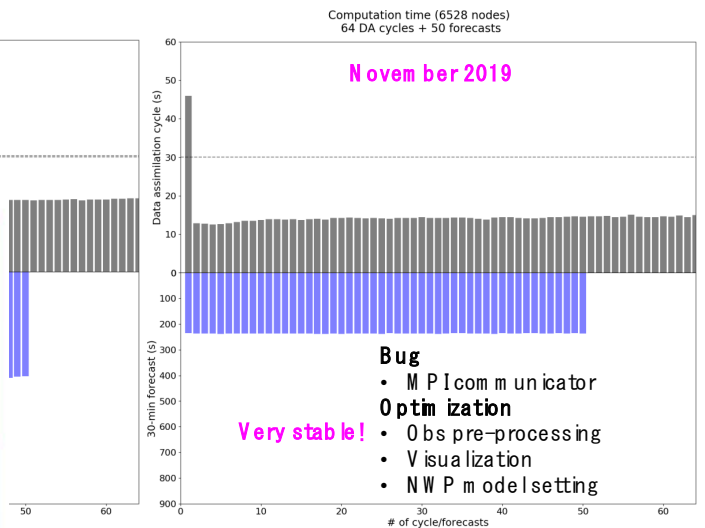
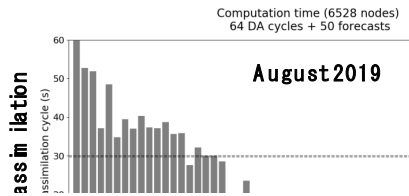


全体のワークフロー

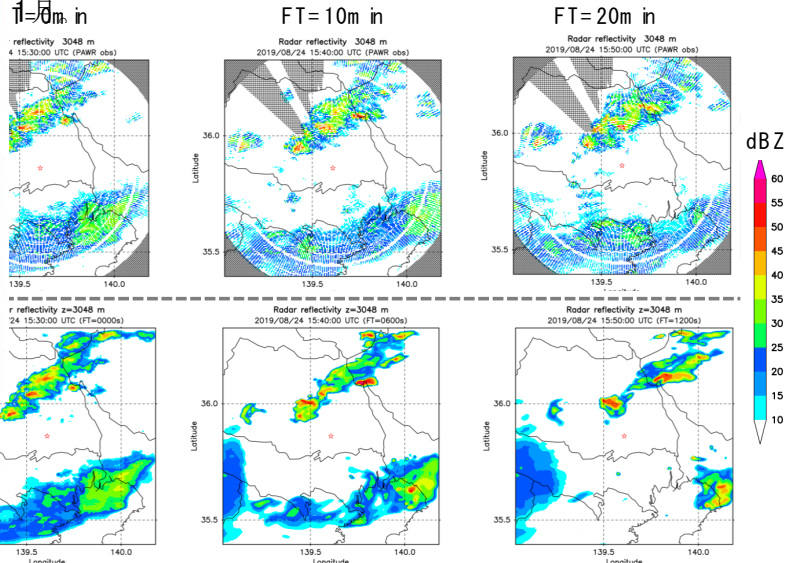


PAWR Obs

SCALE-LETKF Analysis



タ同化、下段は30分予報にかかった時間(秒)。



〔画像提供: 三好建正博士  
(理化学研究所)〕

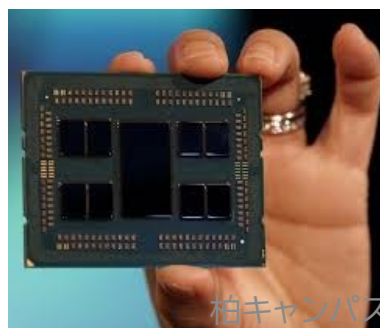
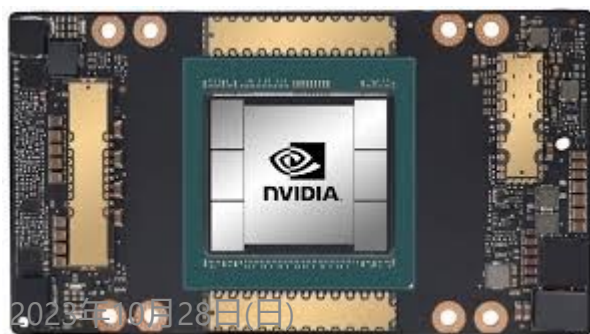
2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる解析で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる予報で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。



# スパコンの速さの源泉： プロセッサ・メモリ・ネットワーク

- CPU (Central Processing Unit, 中央演算装置)
  - 並列計算が基本: PC, スマホも同様
  - 最新スパコンでは 40~100コア程度、それを1~2個
  - マルチコア、メニーコア
- GPU (Graphic Processing Unit)
  - 描画用途⇒高いデータ処理能力を計算に利用
  - 数百のコアを有する「メニーコア」
- メモリ: 三次元積層、高速なデータアクセス
- **マルチコア・メニーコアCPU(+GPU)を  
超高速ネットワークで接続した並列計算機  
(Parallel Computer) = 「スパコン」**
  - 家庭用LANの数百倍, 100Gbps~800Gbps



柏キャンパス一般公開

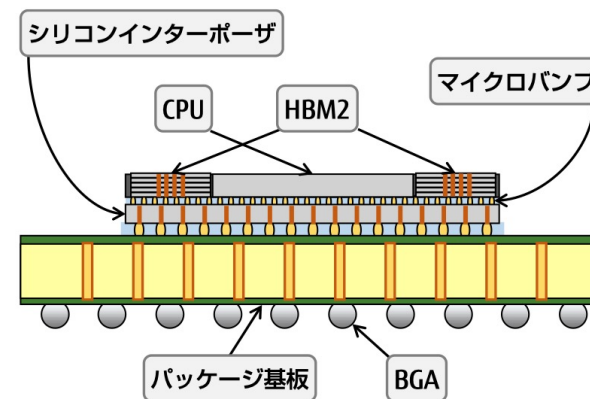
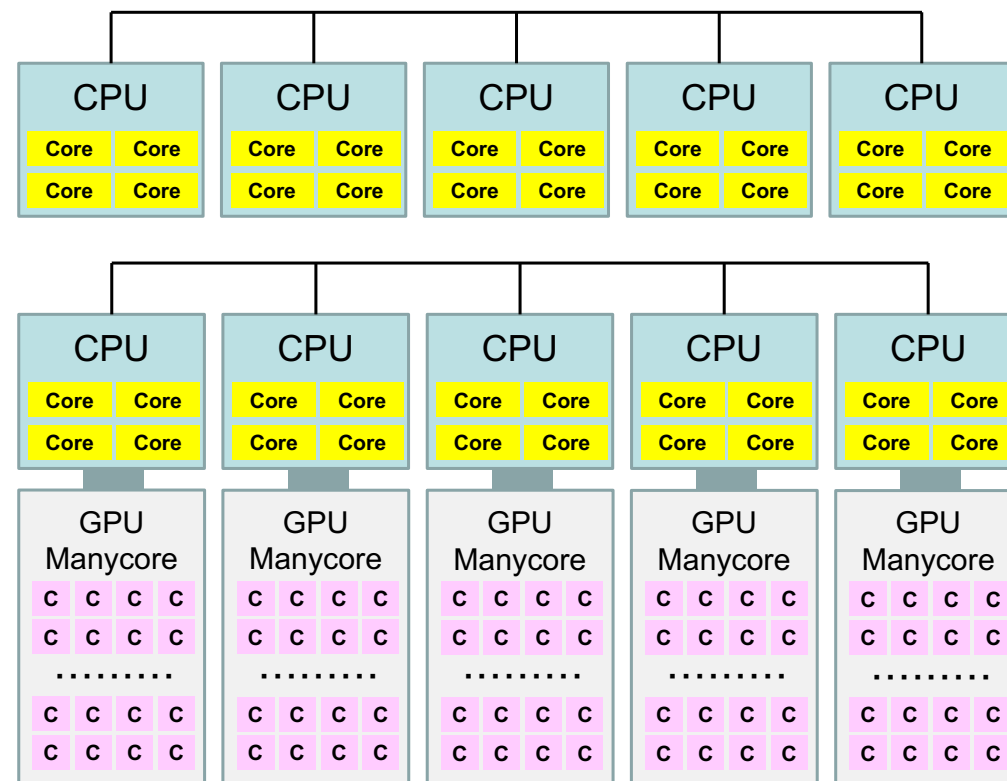
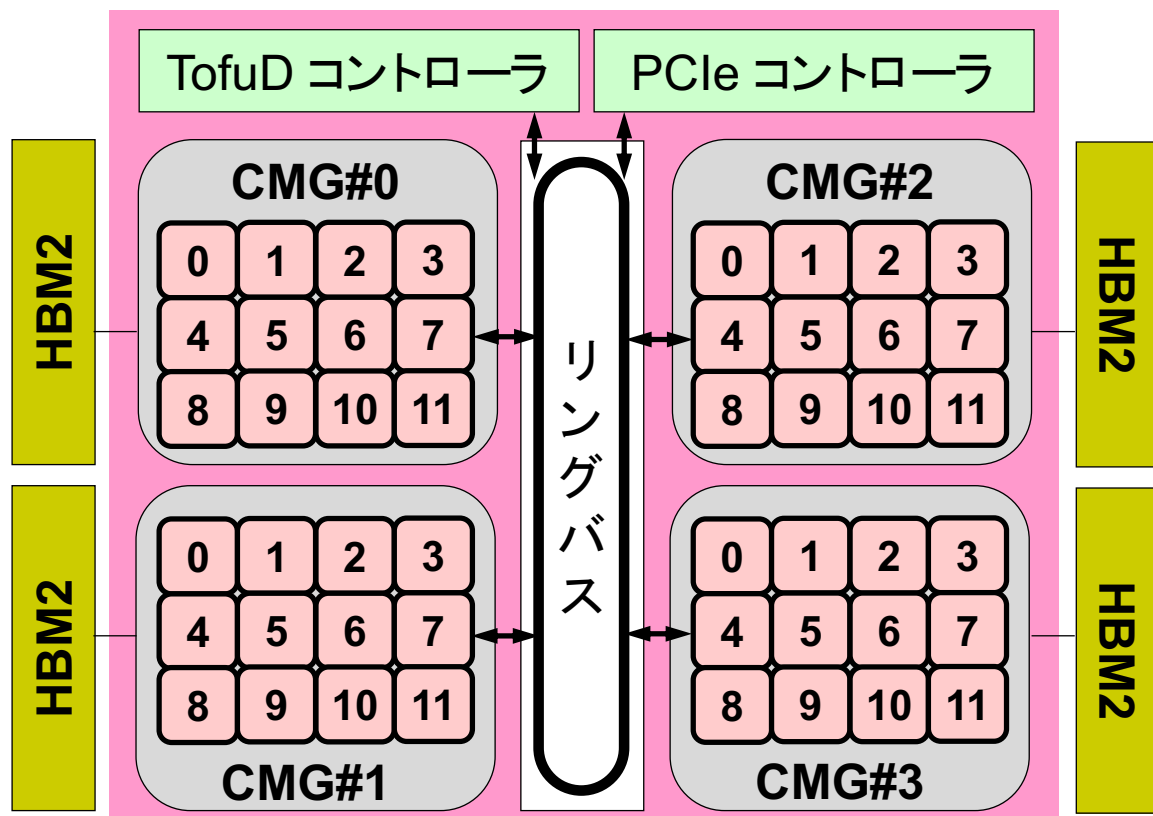


図 12 2.5次元パッケージの構成 (断面模式図)

「whitepaper  
富士通  
PRIMEHPC  
FX1000」  
<https://www.fujitsu.com/downloads/JP/jsuper/primehpc-fx1000-hard-ja.pdf>



# 富岳、Wisteria/BDEC-01に使われている技術



A64FX プロセッサ

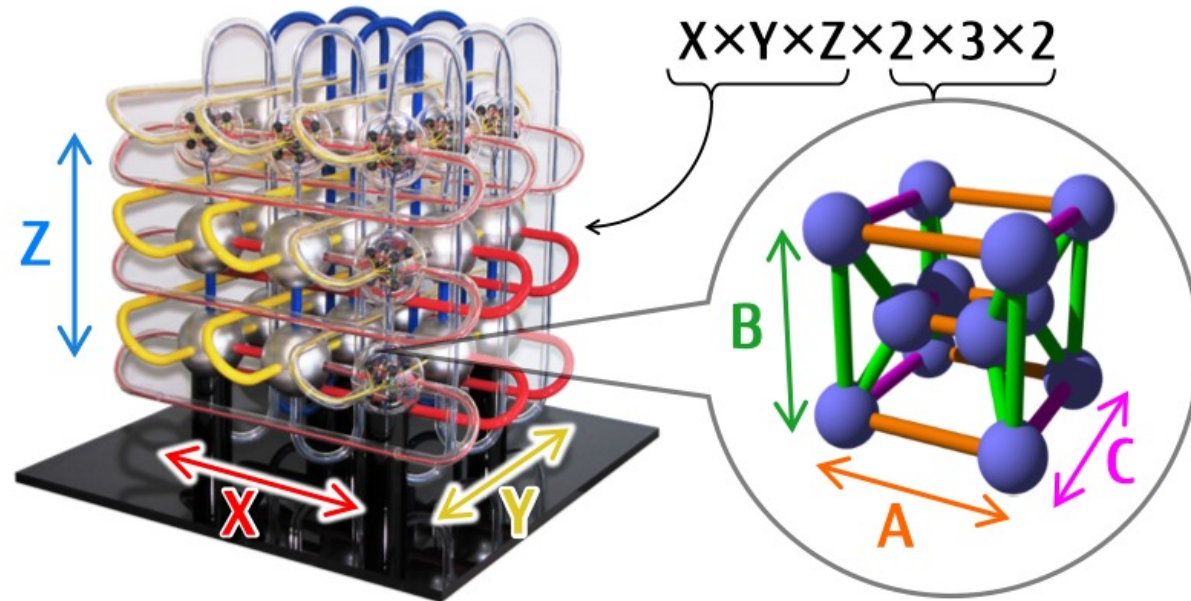


図 13 6次元メッシュ／トーラスのトポロジーモデル

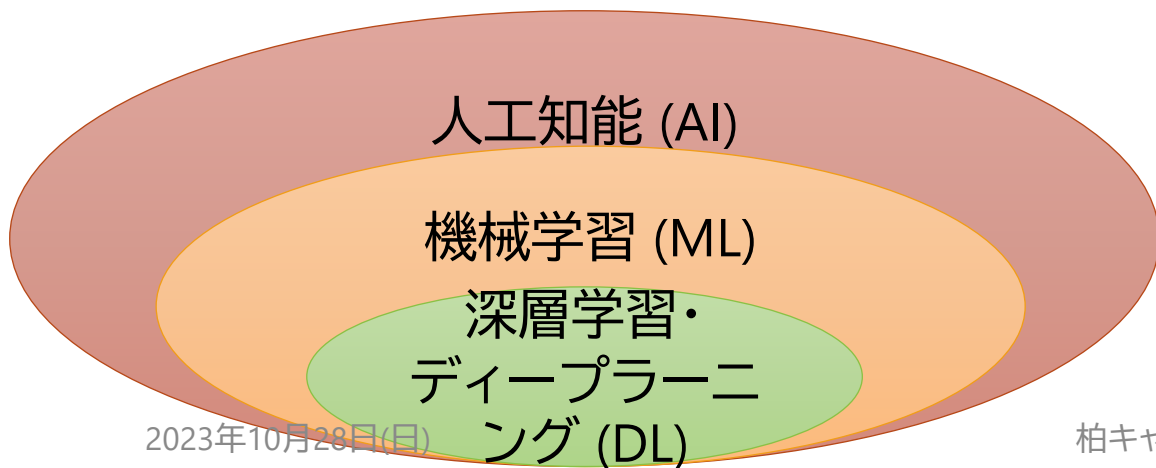
Tofu-D ネットワーク

# 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

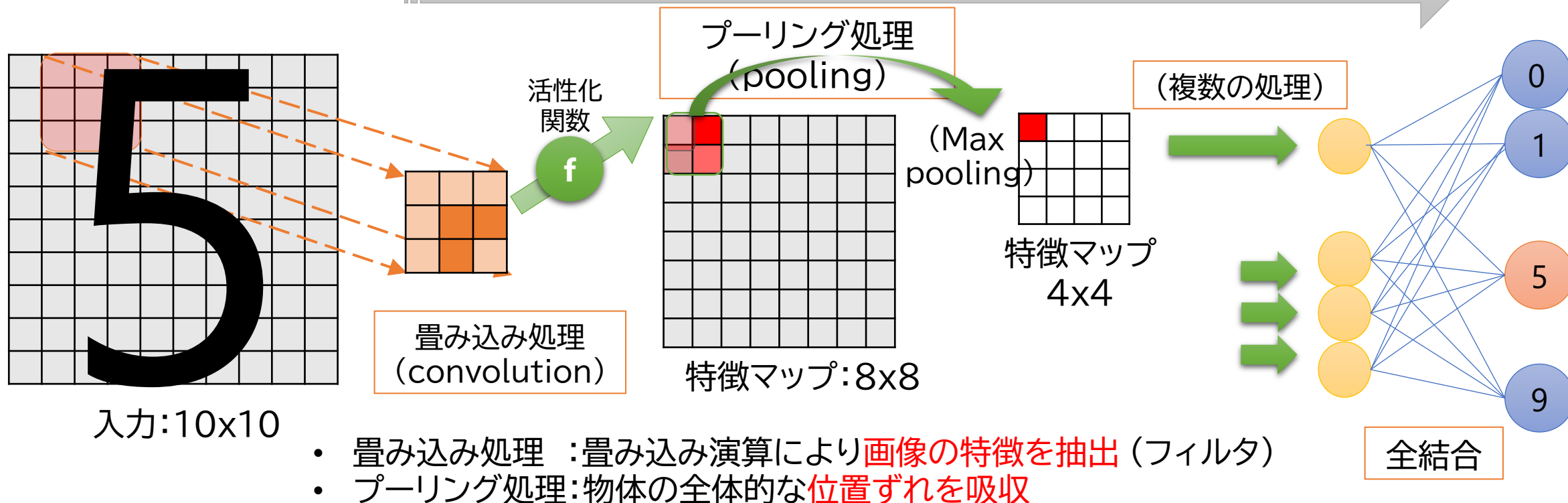
- 深層学習・ディープラーニング (DL: Deep Learning)
    - 多数の層から成るニューラルネットワークを用いて行う機械学習の手法
    - DL技術の進歩が現在の人工知能ブームを支えている
  - 最近ではTransformerというモデルが大流行
- ➔ ChatGPT (Generative Pre-trained Transformer)



# CNN (Convolutional Neural Network)の例

学習: 誤差逆伝搬によりパラメータ決定 (back propagation)

推論: 学習で得たパラメータを使って順方向伝搬 (forward propagation)



## 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) が多い

# AIを支えるGPU

- AI処理を高速に行う工夫
  - 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**
- 米国オークリッジ国立研究所: Frontier 37,632 GPU (世界一のスパコン)
- 産総研: ABCI (AI橋渡しクラウド)
- 富岳でもAIに対応、しかしGPUには敵わない部分も





# 例：タンパク質の立体構造予測 Alpha Fold2

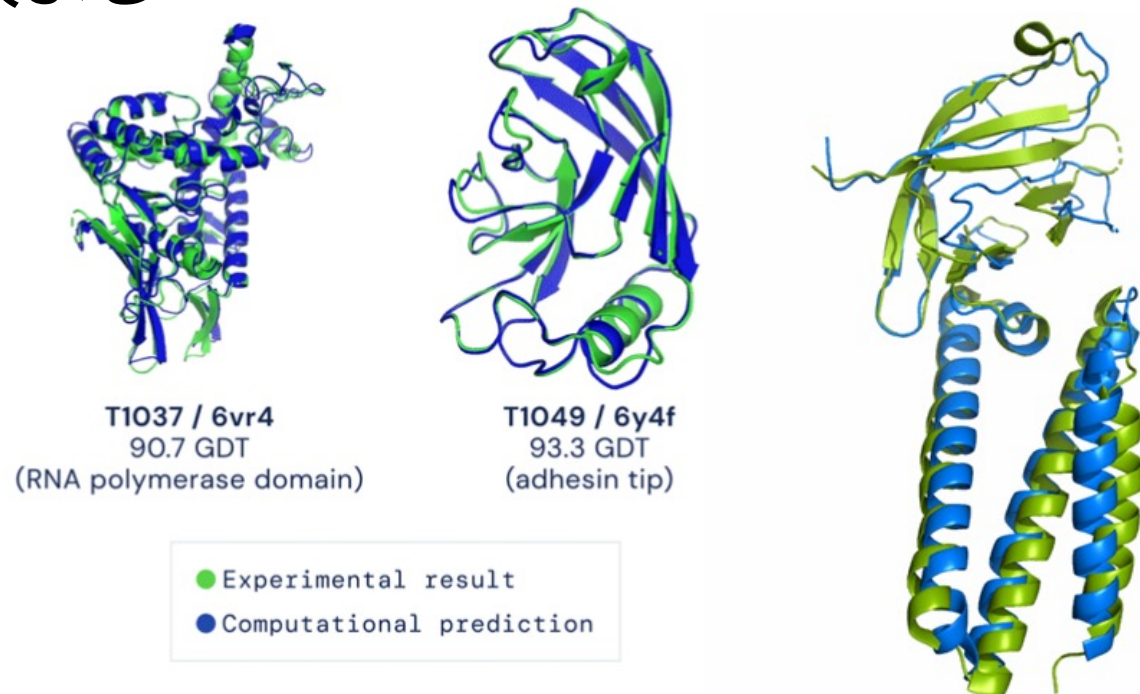
- タンパク質は、どのような配列でできているか、に加えて、立体構造によって、機能や相互作用が決まる
  - 創薬、洗剤、生命の起源解明

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)



新型コロナウイ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

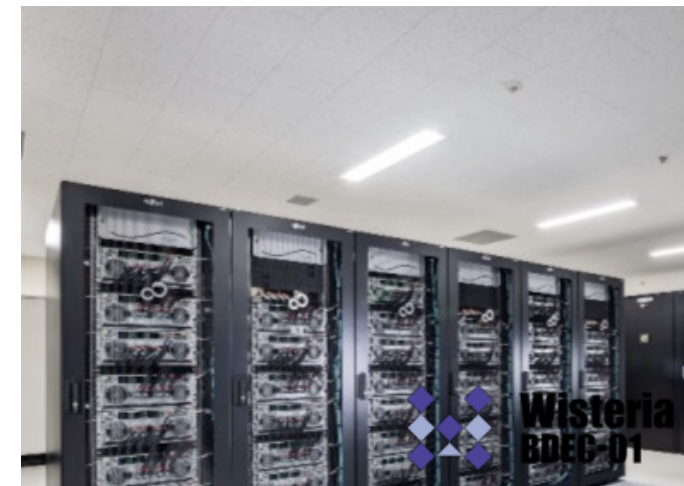
緑: UC Berkeley Brohawn Labによる実測値

# 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

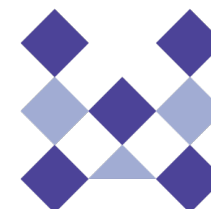
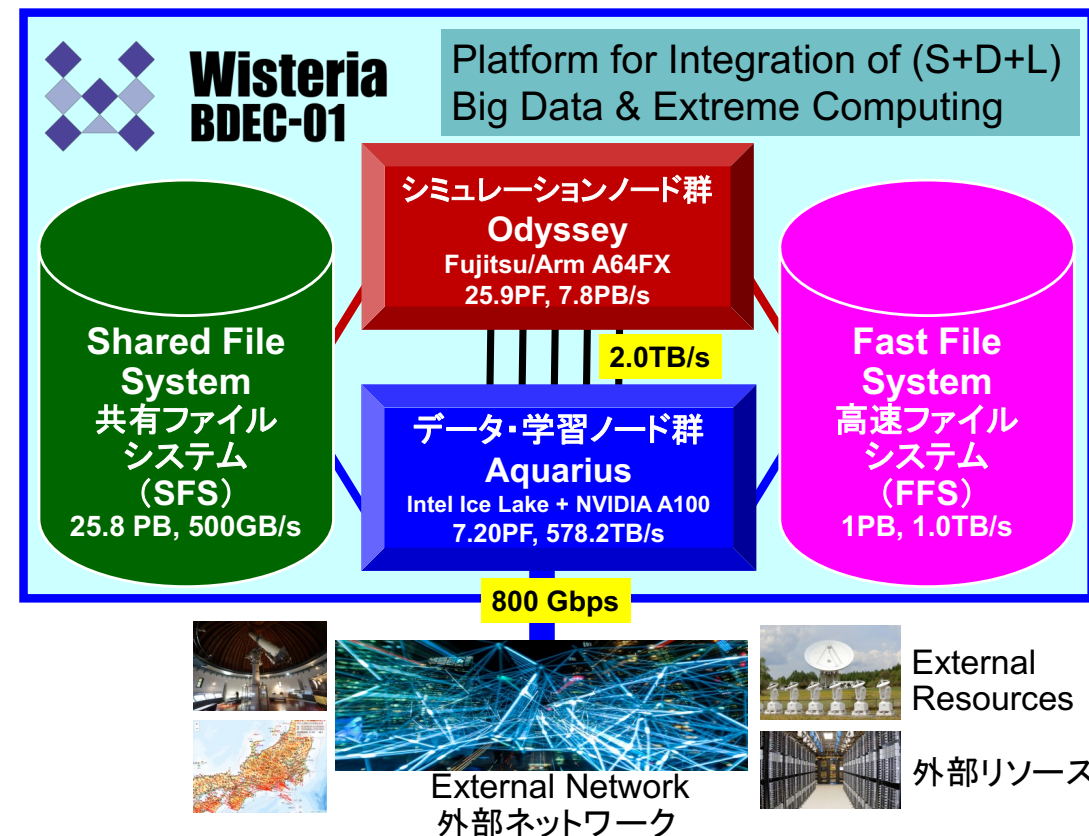
- 東大情報基盤センターでは, 2015年頃から「(S+D+L)融合」の重要性に注目し, それを実現するためのハードウェア, ソフトウェア, アプリケーション, アルゴリズムに関する研究開発を開始
  - BDEC計画(Big Data & Extreme Computing)
  - 「データ+学習」による, より高度な「シミュレーション」
    - AI for HPC
  - 地球科学関連では自然な発想(すでに実施されている)
- 2021年5月に運用を開始した「Wisteria/BDEC-01」は「BDEC計画」の1号機
  - 「計算・データ・学習(S+D+L)」融合を実現する, 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), ~360m<sup>2</sup>
- 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**

2023年10月28日(日)

柏キャンパス一般公開



# 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

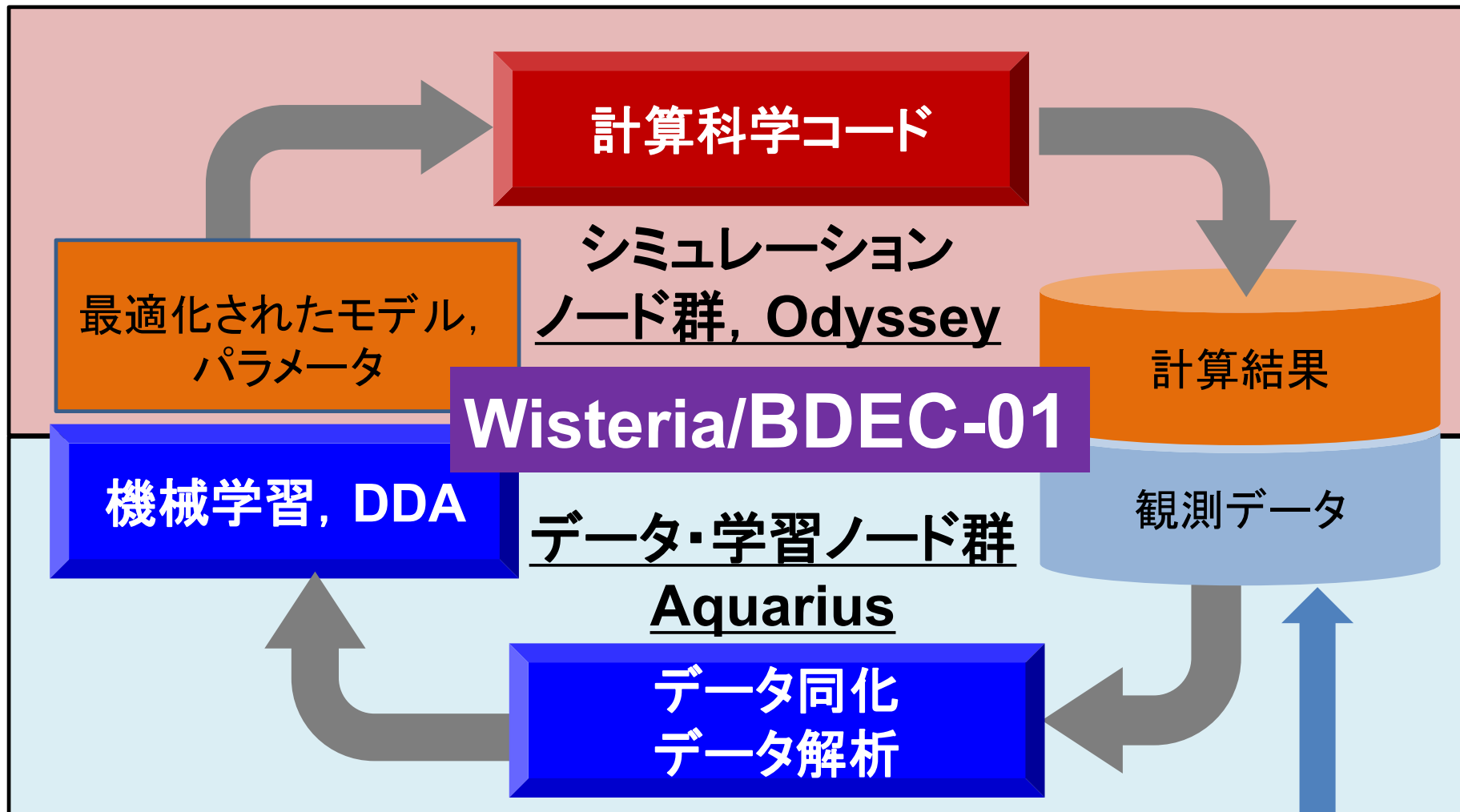
# Data/Learning Nodes Aquarius

7.20 PF, 578.2 TB/s



# Wisteria BDEC-01

2023年10月28日(日)



サーバー  
ストレージ  
DB  
センサー群  
他



柏キャンパス一般公開



外部ネットワーク

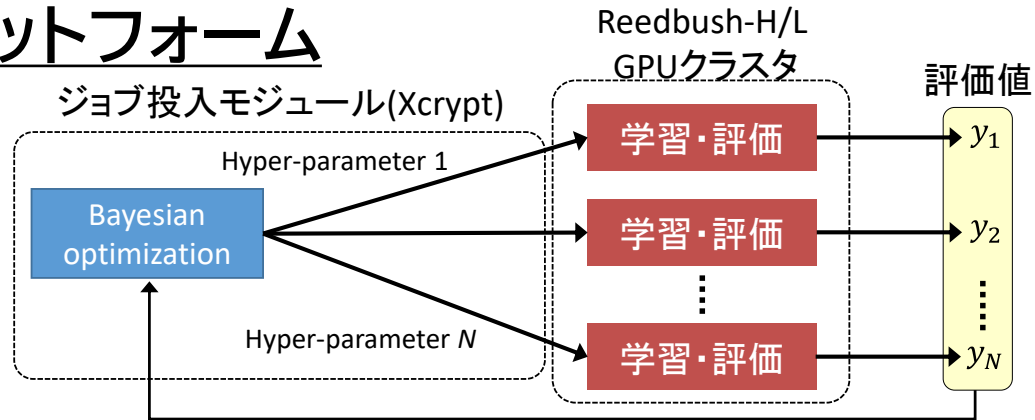


外部  
リソース

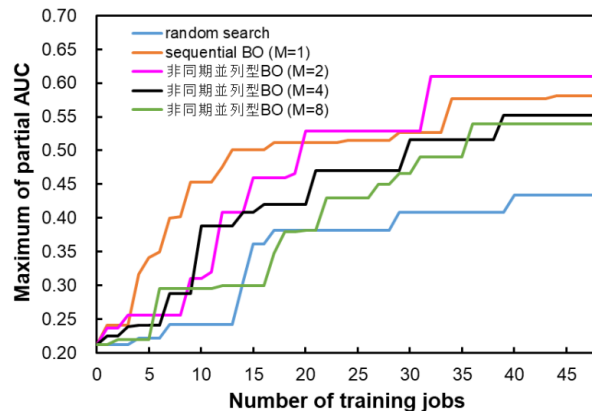
# バイオインフォマティクス：医療画像処理

## 東大病院等

### 深層学習自動チューニングプラットフォーム

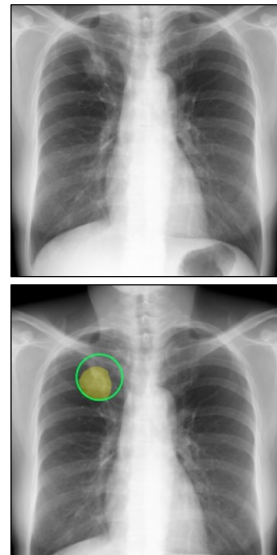


### 胸部X線写真の肺腫瘍検出



学習ジョブ数と評価値(partial AUC)の最大値との関係

2023年10月26日(日)

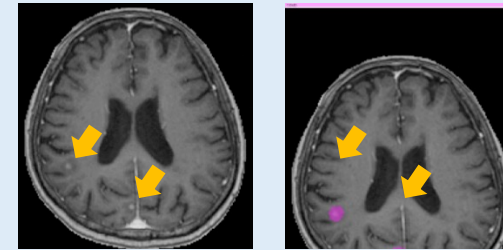


上：元画像、下：検出結果  
(黄、緑丸：病変領域)

### 開発中のソフトウェア

#### 頭部造影MR画像の転移性脳腫瘍検出

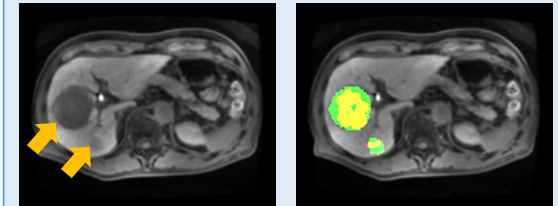
村田, JAMIT2018



検出結果例  
左：元画像、右：検出結果(マゼンダ)

#### 造影MR画像の肝結節性病変検出

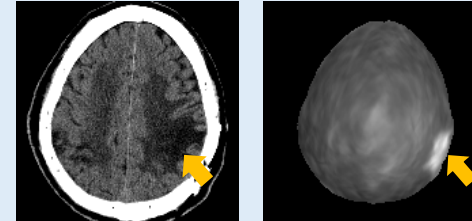
Takenaga T, CARS 2018



検出結果例  
(肝細胞がん、左：元画像、右：検出結果)  
●：検出、●：過検出、●：未検出

#### 頭部救急CT画像の異常検知

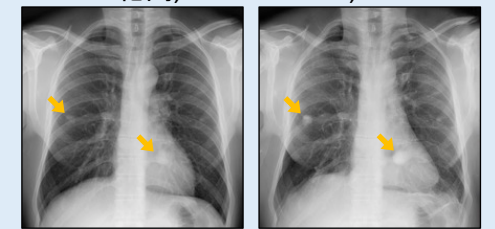
Sato D, SPIE MI 2018



脳梗塞症例  
(左：元画像、右：異常度マップ)

#### 胸部X線画像の異常強調

花岡, MAIAMI 2019, JSAIMI 2020



強調画像例  
(左：元画像、右：強調結果、矢印：肺腫瘍)

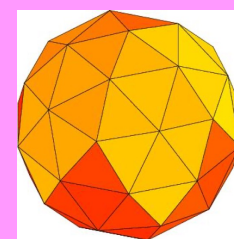
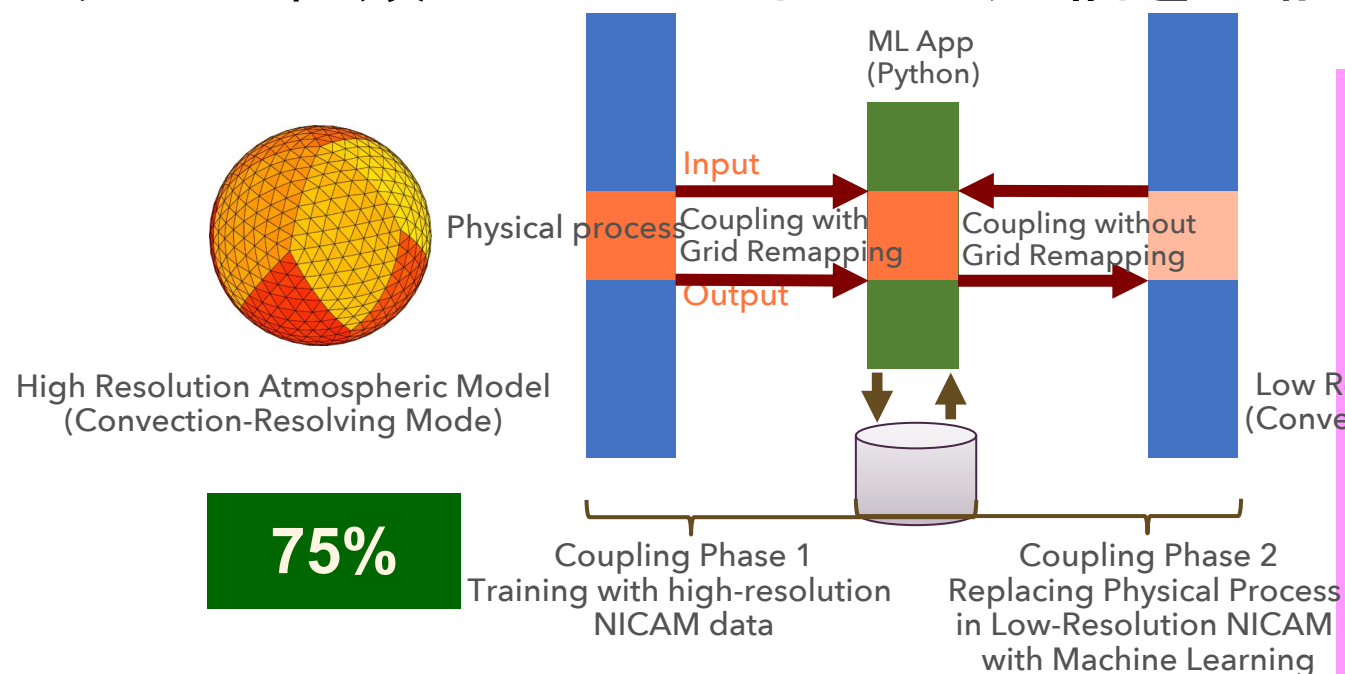
Nomura Y, J Supercomput. 20 Jan 2020 (Epub ahead)

# 「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



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  $\leftrightarrow$  Aquarius



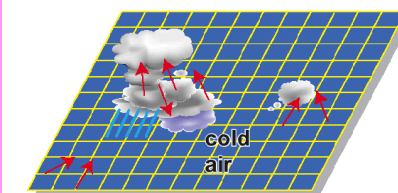
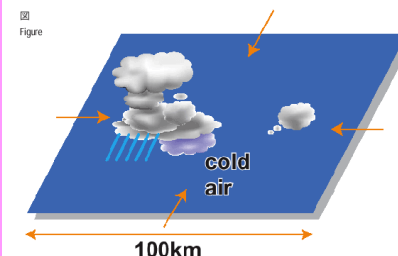
Low Resolution Atmospheric Model (Convection-Parameterization Mode)

この部分を  
AIによる  
推論に

25%

~0%

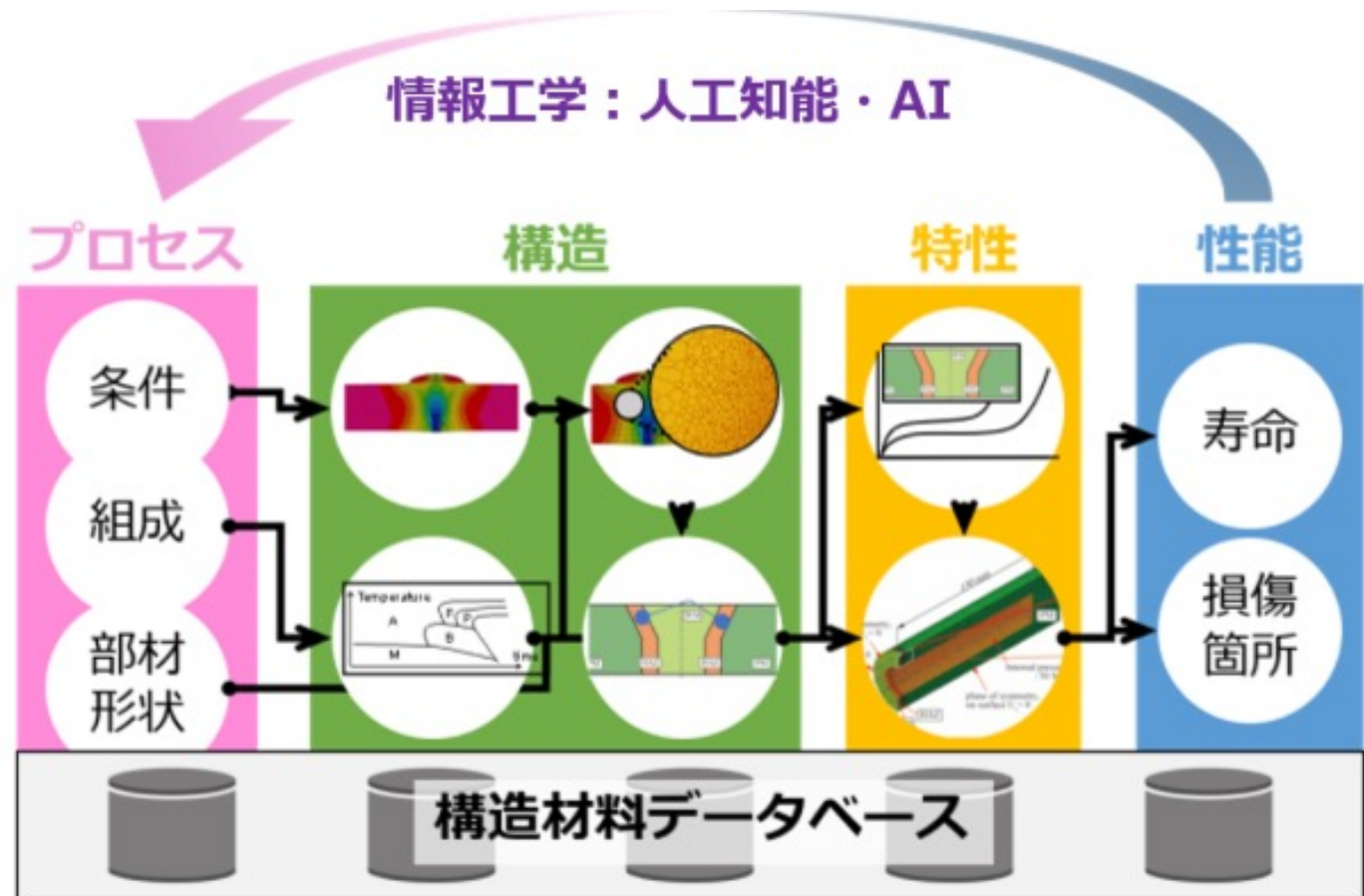
粗い計算での  
雲生成プロセス



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





# まとめ

- **AI for Science, AI for HPC**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**導入予定の **Oakforest-PACS II (仮)**ではGPUが主力、AI for Science, AI for HPCを加速
  - JCAHPC: 筑波大学計算科学研究センターとの共同運用

