

科学研究費助成事業（基盤研究（S））公表用資料  
〔令和3（2021）年度 中間評価用〕

令和元年度採択分  
令和3年3月31日現在

（計算+データ+学習）融合によるエクサスケール時代の  
革新的シミュレーション手法  
Innovative Methods for Scientific Computing in the  
Exascale Era by Integrations of  
(Simulation+Data+Learning)

課題番号：19H05662

中島 研吾 (NAKAJIMA, Kengo)

東京大学・情報基盤センター・教授



研究の概要（4行以内）

エクサスケール時代のスーパーコンピュータによる科学的発見の持続的促進のために、（計算+データ+学習）融合による革新的シミュレーション手法を提案し、ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」として実装する。マルチレベル・マルチフィジックスシミュレーションにおいて、従来手法と同等の正確さを保ち、10倍以上の飛躍的な計算量・消費電力削減を目指す。

研究分野：計算科学，高性能計算

キーワード：スーパーコンピューティング，データ同化，機械学習

1. 研究開始当初の背景

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2021-2023年頃にはExa FLOPS（ $10^{18}$ 回/秒の浮動小数点演算）に達する。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に加えて、データ科学、機械学習等を融合した新しい手法を適用することにより、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 実現に貢献すると期待される。

2. 研究の目的

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）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研究開発を実施する。

3. 研究の方法

東大情報基盤センターに2021年5月導入予定のヘテロジニアスな構成を有するWisteria/BDEC-01を（計算+データ+学習）融合のためのプラットフォームと位置付け、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の2項目を中心に研究し、革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC（図1）」を開発する。

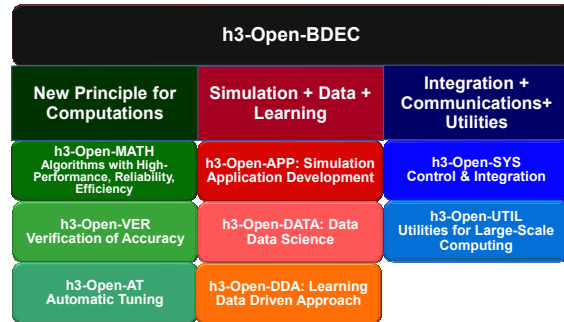


図1 h3-Open-BDEC の概要

4. これまでの成果

2019～2020年度は、革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」の基礎設計、プロトタイプ開発・検証を実施し、Wisteria/BDEC-01の設計に反映させた。それと並行して、高性能数値アルゴリズム、省電力手法、精度保証、自動チューニング、データ解析・データ同化手法、階層型データ駆動アプローチ、統合実行環境、様々な計算科学手法などの関連分野の基礎的な研究開発を実施し、成果は国際会議等で採択され高い評価を得ている。ここでは、代表的な事例として2項目を紹介する。

①機械学習によるシミュレーション高速化

流体シミュレーションの結果を機械学習により予測する手法として、シミュレーションで得られる高精度な結果を、深層学習の畳み込みニューラルネットワークにより予測

する手法を研究した。また、深層学習を援用して従来の数値流体計算の一部を加速する手法の開発を進めた。非定常流体計算の予測では、円柱の周りを流れる流体のシミュレーションに対して、複数の時間ステップの計算結果からそれに続くシミュレーション結果を深層学習で予測する手法を開発した。複数の時間ステップを一つの空間の次元として捉え、Encoder-decoder モデルの深層ニューラルネットワークを利用した。図2では、5つの時間ステップの計算履歴から、その先の時間ステップのデータを予測している。予測には、全ての時間ステップではなく、20ステップに1つのステップを用いて、大幅な高速化を図っている。

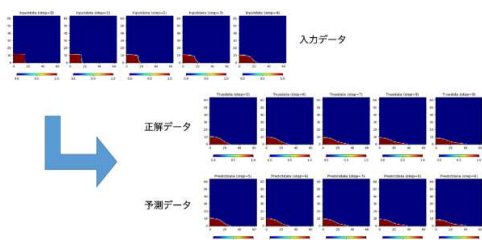


図2 気液非定常流計算における5時間ステップの計算履歴から予測した5時間ステップの結果と正解 [2]

### ② 「計算+データ+学習」融合を支援する多機能カプラー

弱連成カップリングライブラリ (カプラー) である h3-Open-UTIL/MP (h3OMP) は、①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、②Fortran/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を有する。①については、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であり、スーパーコンピュータ上で、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である。②については、これまで Fortran やCで記述されたプログラム同士の連成計算に限って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も活用できるよう機能拡充を実施した (図3)。検証はオフラインで実施したが、NICAM と Pytorch ライブラリの連成を実現できることを示した。

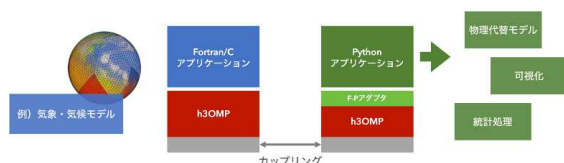


図3 Fortran/C アプリと Python アプリの連成計算の模式図

### 5. 今後の計画

2021年度以降は、基礎的な研究開発を継続して実施し、革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」の更なる高度化を実施するとともに、ソフトウェアを公開し、国内各地のスーパーコンピュータシステムにデプロイすることによって、「計算+データ+学習」融合の推進を図る。①大気海洋連成シミュレーション、②リアルタイムデータ同化+三次元強震動シミュレーション融合、③OpenFOAM 高度化、にターゲットを絞り、「計算+データ+学習」融合による新しいアプリケーションを実現する。更に「デジタルアニーラ」を使用して、量子アニーリングをシミュレーションの高度化に取り入れる手法等、将来へ向けた検討にも着手する。

### 6. これまでの発表論文等 (受賞等も含む)

- [1] 河合直聡, 中島研吾, FP21 及び FP42 を使用した不完全コレスキー分解前処理, 情報処理学会研究報告 (2020-HPC-177-21), 2020
- [2] 長谷川敦, 下川辺隆史, 深層学習による混相流の時間発展シミュレーション結果の予測手法の検討, 情報処理学会研究報告 (2020-HPC-177-4), 2020
- [3] Iwashita, T., Li, S., Fukaya T., Hierarchical block multi-color ordering: a new parallel ordering method for vectorization and parallelization of the sparse triangular solver in the ICCG method, CCF Transactions on High Performance Computing, vol. 2, (2020), pp. 84-97
- [4] Anzaki, R., Ito, S., Nagao, H., Mizumaki, M., Okada, M., Akai, I., Phase prediction method for pattern formation in time-dependent Ginzburg-Landau dynamics for kinetic Ising model without a priori assumptions of domain patterns, Phys. Rev. B, Vol. 103, Issue 9, 094408, doi:10.1103/PhysRevB.103.094408, 2021
- [5] Iwashita, T., Nakajima, K., Shimokawabe, T., Nagao, H., Ogita, T., Katagiri, T., Yashiro, H., Matsuba, H., h3-Open-BDEC: Innovative Software Platform for Scientific Computing in the Exascale Era by Integrations of (Simulation + Data + Learning), Project Poster, ISC-HPC 2020
- [6] Nakajima, K., Gerofi, B., Ishikawa, Y., Horikoshi, M., Parallel Multigrid Methods on Manycore Clusters with IHK/McKernel, IEEE Proceedings of 10th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems in conjunction with SC19 (The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis), 2019

### 7. ホームページ等

<http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-Open-BDEC/>