

【基盤研究(S)】

大区分J



研究課題名 (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

東京大学・情報基盤センター・教授 なかじま けんご
中島 研吾

研究課題番号：19H05662 研究者番号：20376528

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、(計算・データ・学習)融合

【研究の背景・目的】

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 年頃には Exa FLOPS (10¹⁸ 回/秒の浮動小数点演算) に達する。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が必要である。本研究では、エクサスケール時代のスパコンによる科学的発見の持続的促進のために、計算科学にデータ科学、機械学習のアイデアを導入した (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する。

【研究の方法】

東大情報基盤センターに 2021 年度導入予定の BDEC システム (Big Data & Extreme Computing) は、アーキテクチャが異なる計算科学ノード群とデータ・学習ノード群による Hierarchical、Hybrid、Heterogeneous (h3) なシステムである。本研究では、BDEC システムを (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、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」を開発する (図 1)。h3-Open-BDEC による (計算+データ+学習) 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。

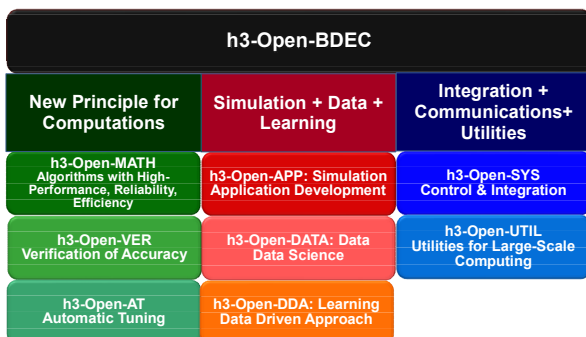


図 1 h3-Open-BDEC の概要

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、計算を繰り返して教師データを生成する必要がある。本研究で提案する階層型 DDA (hDDA) は、特徴検知、MOR (Model Order

Reduction)、UQ (Uncertainty Quantification)、スパースモデリング、適応格子等の諸機能を駆使して、計算量 (メッシュ数、粒子数) 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 (図 2)。

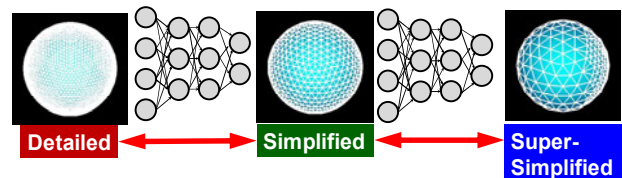


図 2 階層型 DDA による簡易モデル生成

【期待される成果と意義】

h3-Open-BDEC はエクサスケール時代のスパコンで (計算+データ+学習) 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 (計算+データ+学習) 融合を容易に実現できる。ソースコード、マニュアル類も含めて一般に公開し、様々な環境で利用できるように、普及に努める。h3-Open-BDEC 利用による (計算+データ+学習) 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つつ、大幅な計算量・消費電力削減を目指す。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ K. Nakajima, T. Furumura, T. Iwashita, T. Katagiri et al., ppOpen-HPC: Open Source Infrastructure for Development and Execution of Large-Scale Scientific Applications on Post-Peta-Scale Supercomputers with Automatic Tuning (AT), Mathematics for Industry 13, 15-35, Springer, 2015
- ・ K. Fujita, T. Ichimura, K. Nakajima et al., Wave propagation simulation of complex multi-material problems with fast low-order unstructured finite-element meshing and analysis, ACM Proceedings of HPC Asia 2018, 2018 (Best Paper Award)

【研究期間と研究経費】

令和元年度ー令和 5 年度
152,700 千円

【ホームページ等】

<http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-Open-BDEC>
<https://github.com/Post-Peta-Crest/ppOpenHPC>