

2020年度第1回計算科学フォーラム  
2020年11月24日（火）15：00～17：00

# 高性能計算物理シミュレーションと 人工知能の融合の試み -地震シミュレーションを例に-

市村強

東京大学地震研究所計算地球科学研究センター

東京大学工学系研究科社会基盤学専攻

概要：地震問題の中には、対象が巨大かつ高分解能が求められるため大規模物理シミュレーションが必要となるものがある。本講演では、このような大規模物理シミュレーションを可能とするために開発を続けている高性能計算によるマトリクスソルバーを用いた非構造低次有限要素解析とそのシミュレーション能力をさらに高めることを目指した物理シミュレーションと人工知能の融合の試みについて、いくつかのスーパーコンピュータ上で実施した大規模地震シミュレーションとともに紹介する。

# outline

- ポスト「京」重点課題3「地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築」で進められ、また、「『富岳』成果創出加速プログラム：大規模数値シミュレーションによる地震発生から地震動・地盤増幅評価までの統合的予測システムの構築とその社会実装」で現在進められている以下について概説する
- High Performance Computing (HPC) による物理シミュレーションの高度化
- HPC物理シミュレーションの高度化と人工知能の融合へ向けて
  - HPC物理シミュレーションによる人工知能の高度化
  - 人工知能によるHPC物理シミュレーションの高度化
  - 人工知能アーキテクチャー？によるHPC物理シミュレーションの高度化
  - 微分方程式を学習した人工知能によるHPC物理シミュレーションの高度化

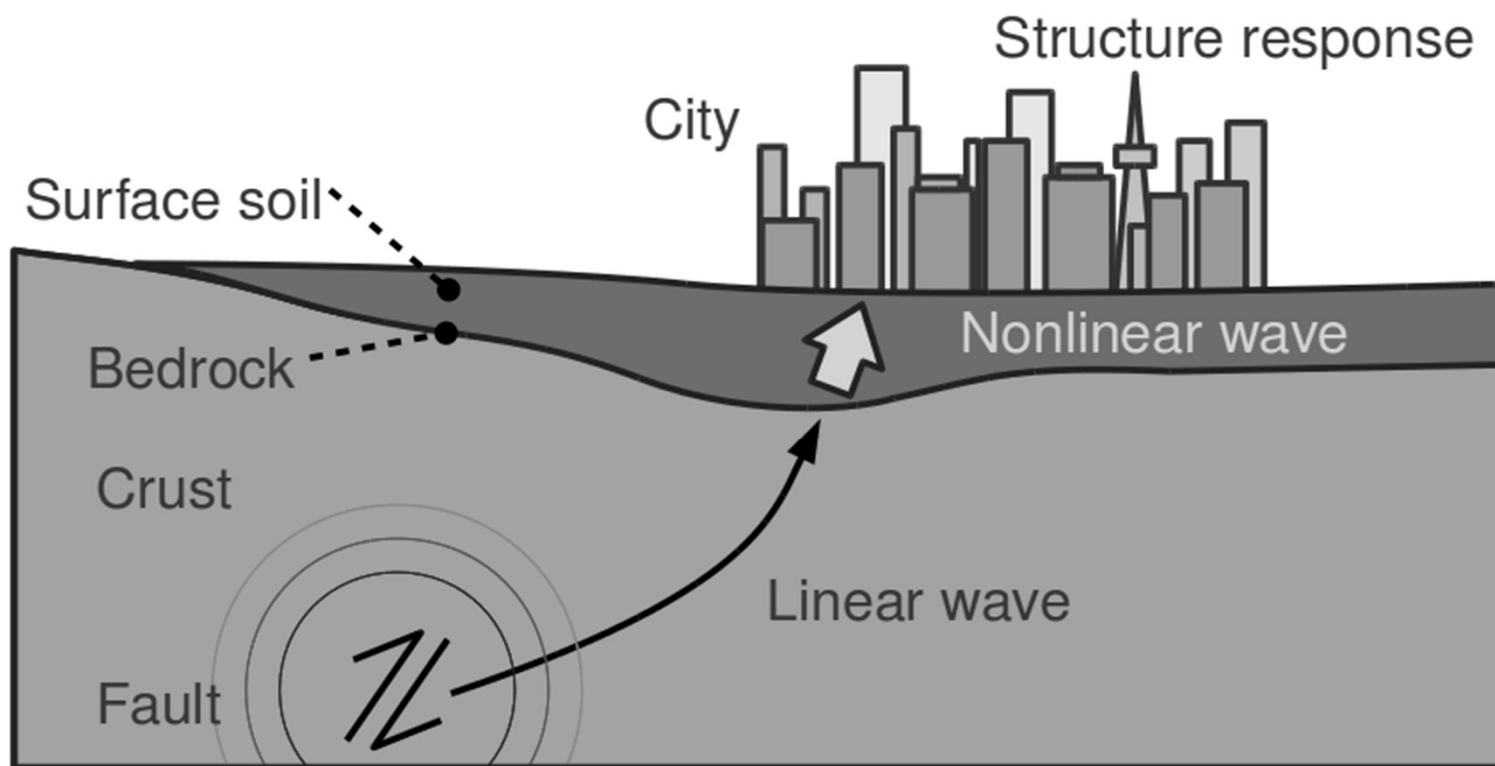
# High Performance Computingによる 物理シミュレーションの高度化

京コンピュータを用いた首都圏の大規模地震シミュレーション

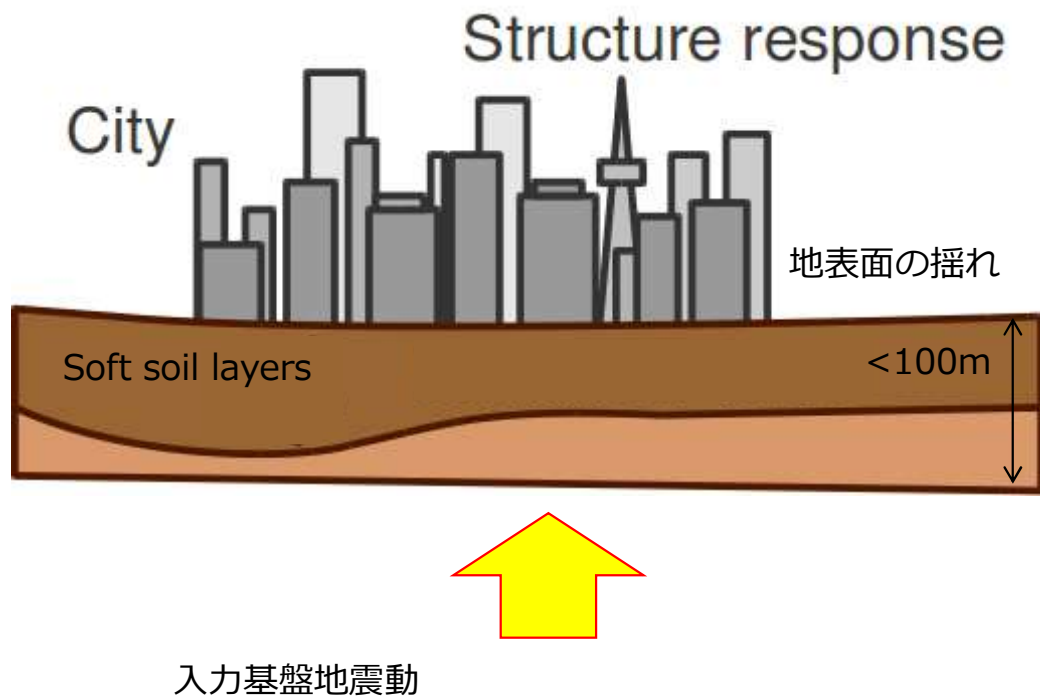
Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Seizo Tanaka, Muneo Hori, Maddegedara Lalith, Yoshihisa Shizawa, and Hiroshi Kobayashi, Physics-based urban earthquake simulation enhanced by 10.7 BlnDOF x 30 K time-step unstructured FE non-linear seismic wave simulation, SC14: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 15-26, 2014.

Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Pher Errol Balde Quinay, Lalith Maddegedara, Muneo Hori, Seizo Tanaka, Yoshihisa Shizawa, Hiroshi Kobayashi and Kazuo Minami, Implicit Nonlinear Wave Simulation with 1.08T DOF and 0.270T Unstructured Finite Elements to Enhance Comprehensive Earthquake Simulation, SC15: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Article No. 4, 2015.

# 解析対象

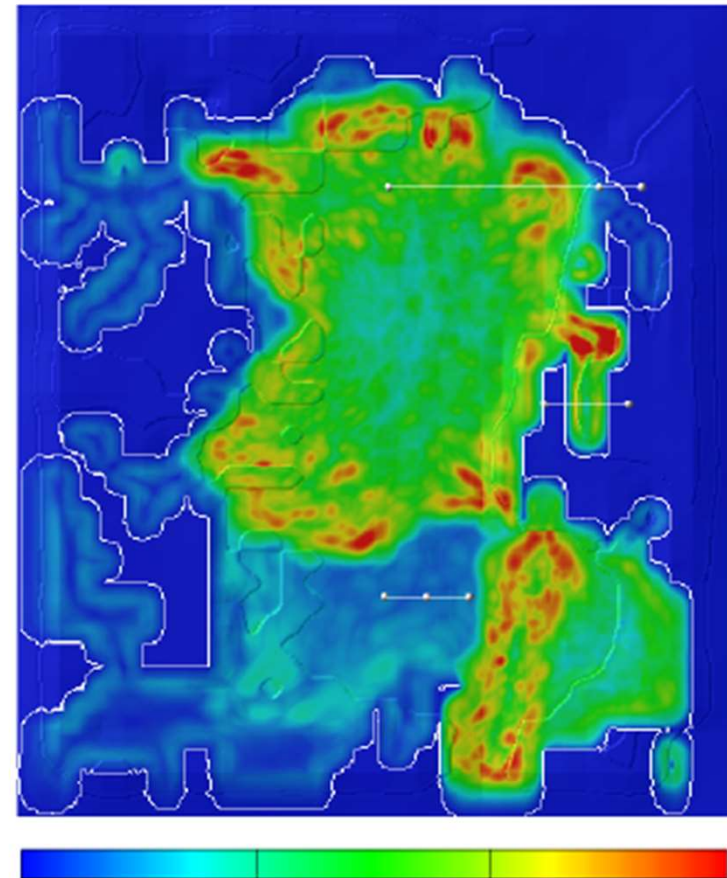
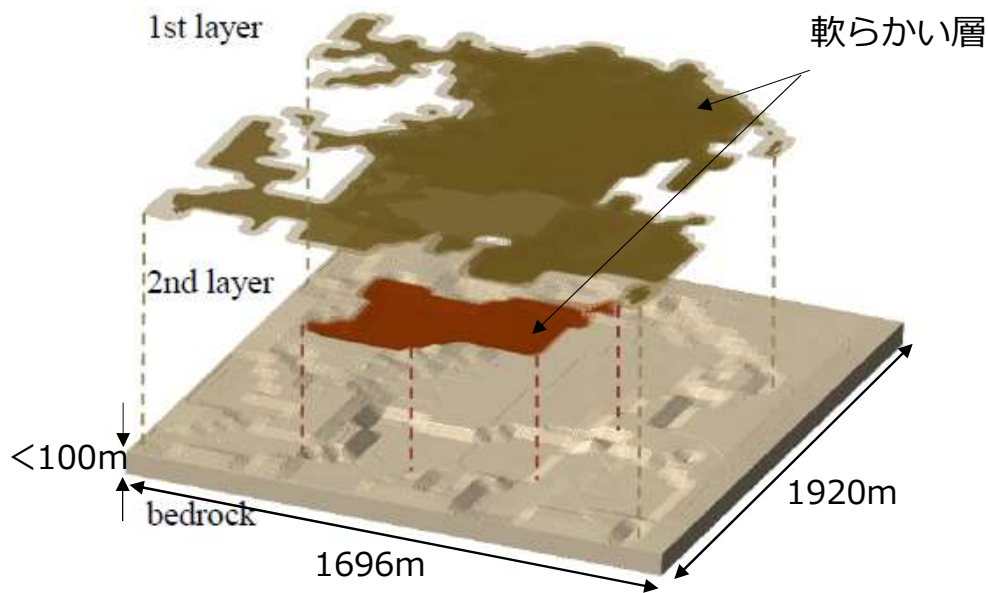


# 背景 1



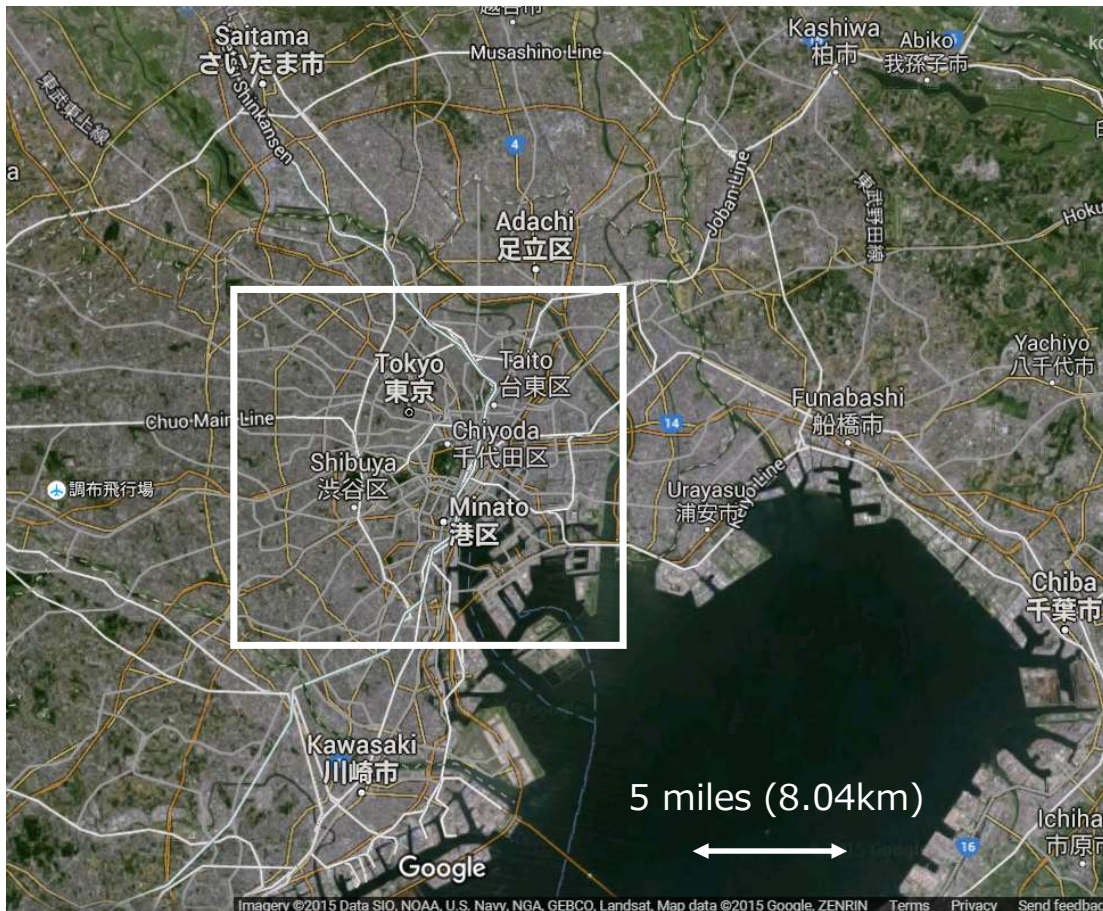
- 地震対策用シナリオ（都市・構造物の被害想定等）構築のためには，地震時の地表面の揺れ分布の情報が面的に必要
- 地震の揺れは場所によって大きく異なる。
  - 地震時に地盤材料は強い非線形性を示す。
  - 特に，ローカルな浅い3D地盤構造が効く（深さ100mくらいまでの軟らかい層）

# 局所的な地盤構造が地震の揺れ分布に効く一例

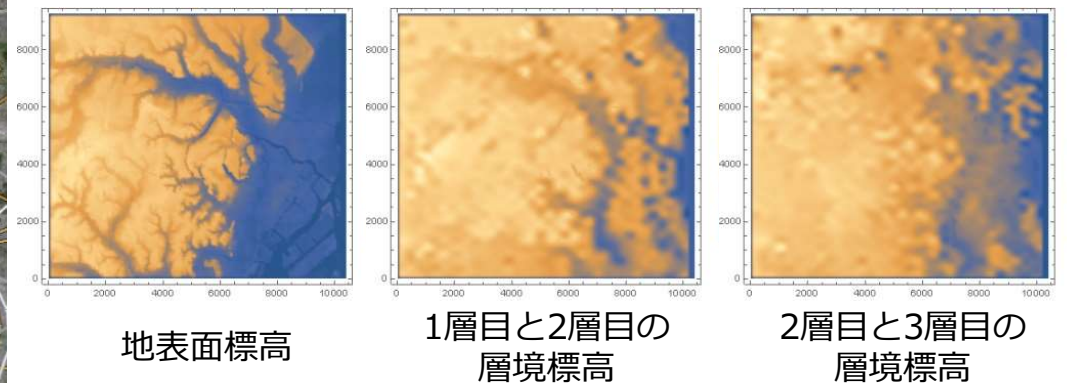


地表面での地面の揺れの強さ分布  
・ <50m程度の分解能で揺れが大きく異なる

# 背景 2



- 10mオーダーの起伏を有する3D地盤構造のデータ整備がすすめられている
- 例えば、左図四角内の地盤構造



全国電子地盤図より作成

# 地盤増幅解析のための非線形有限要素解析

- 低次非構造要素を用いた陰的時間積分非線形波動有限要素解析が必須
  - 地盤構造の幾何形状を正確にモデル化・応力フリーの境界条件を解析的に満足
  - 高い不均質性・強い非線形性を解析
  - 安定性の観点から陰的時間積分が必要

Matrix (components changes every time step)      **Unknown vector (1000億自由度)**

$$\left( \frac{4}{dt^2} \mathbf{M} + \frac{2}{dt} \mathbf{C}^n + \mathbf{K}^n \right) \underline{\delta \mathbf{u}^n} = \underline{\mathbf{F}^n - \mathbf{Q}^{n-1} + \mathbf{C}^n \mathbf{v}^{n-1} + \mathbf{M} \left( \mathbf{a}^{n-1} + \frac{4}{dt} \mathbf{v}^{n-1} \right)}$$

Known vector

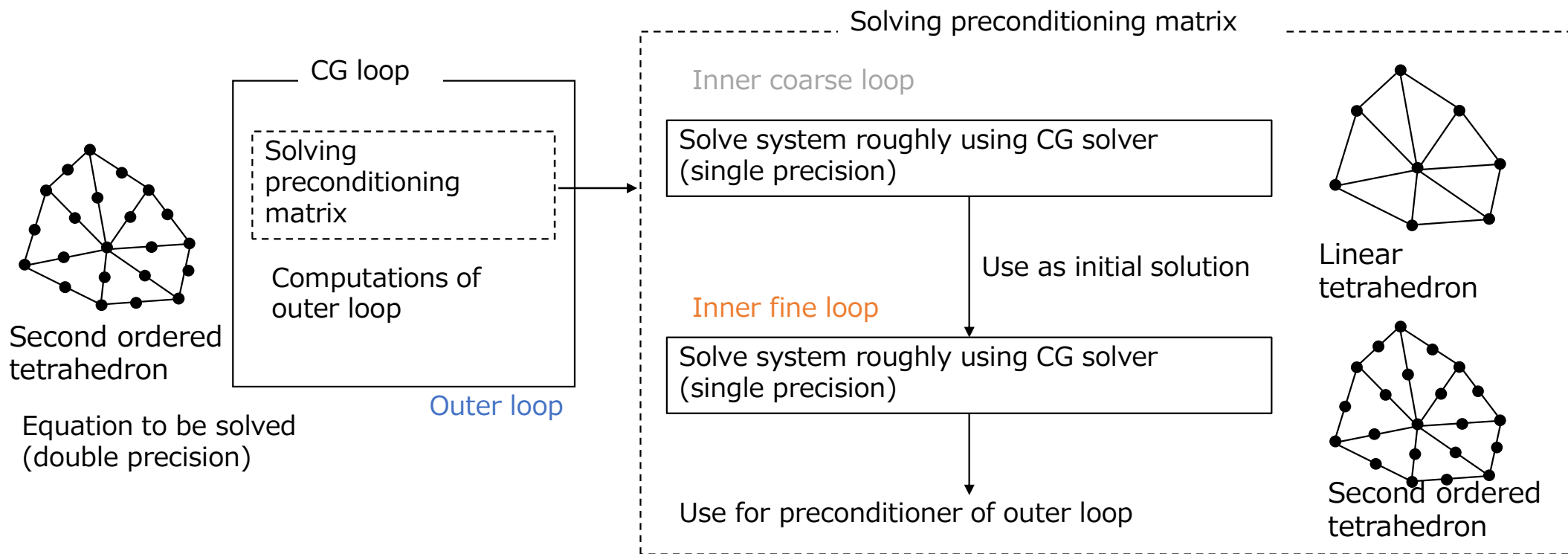
この離散化された非線形波動方程式を6000時間ステップ解く

陽的時間積分に比べ格段に難しい

∴ 方程式を解く必要 & 並列計算のglobal communication



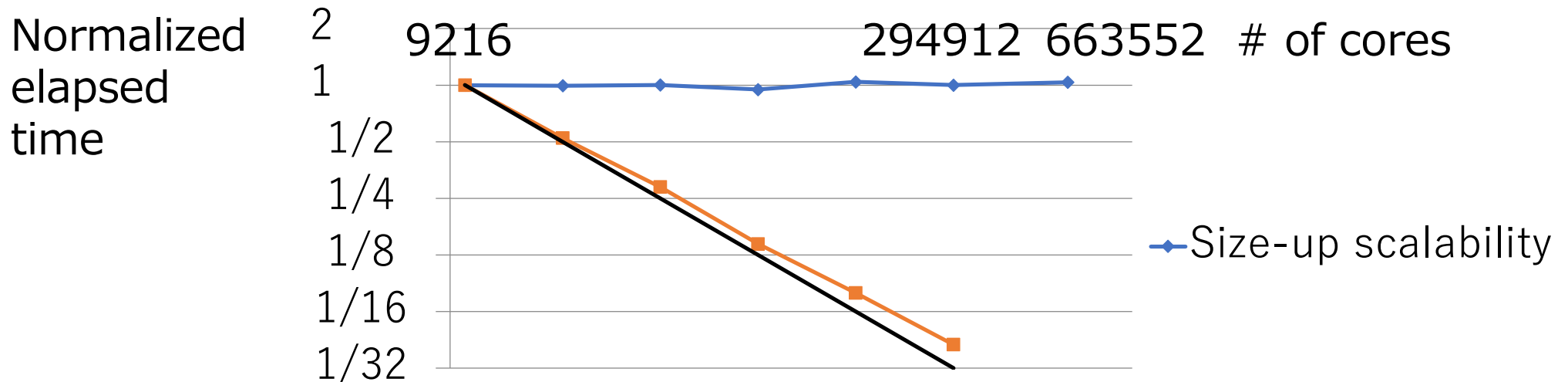
# 大規模有限要素解析手法



- Solve preconditioning matrix roughly to reduce number of CG loops
  - Use multi-grid method to reduce cost of preconditioner
  - Use single precision in preconditioner to reduce computation & communication
- Structuring unstructured mesh
  - Omit costly geometry computation part of unstructured elements

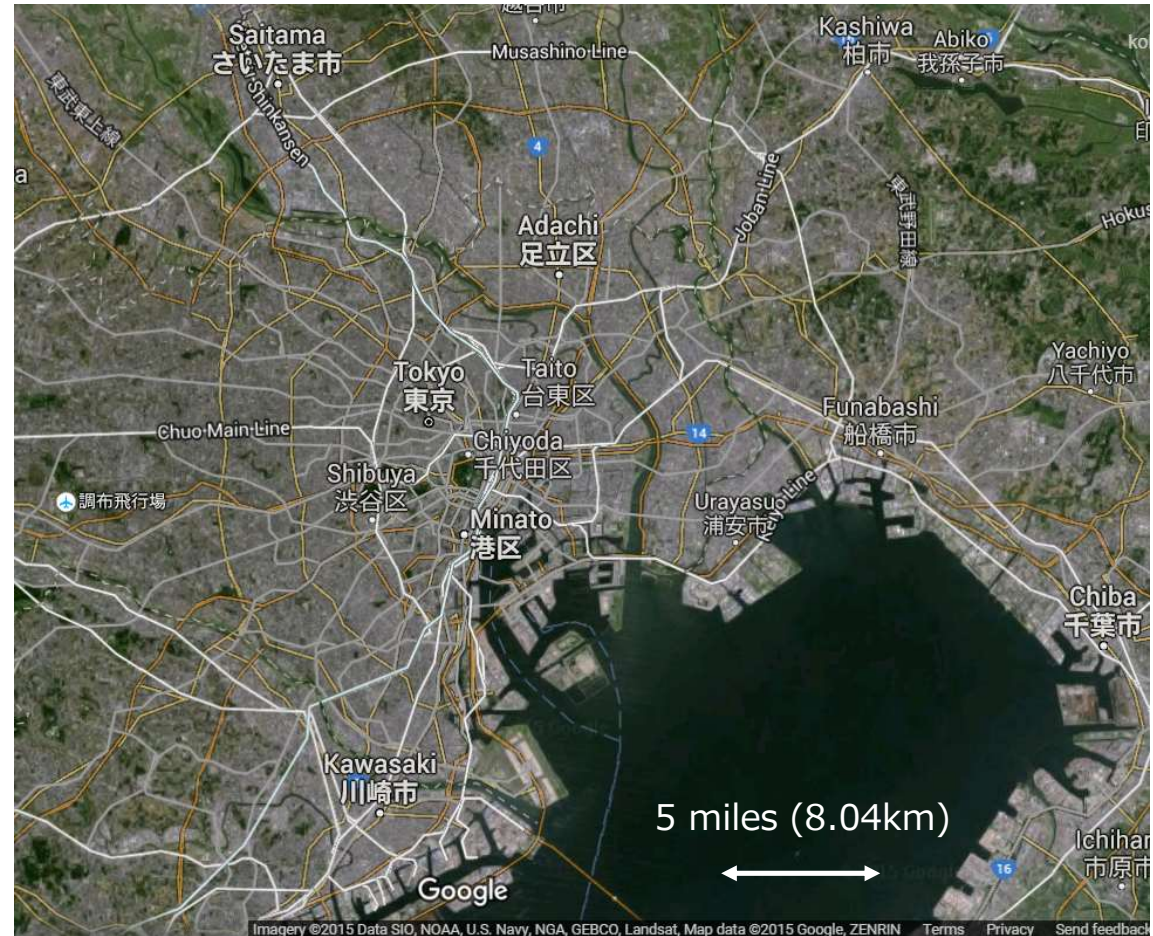
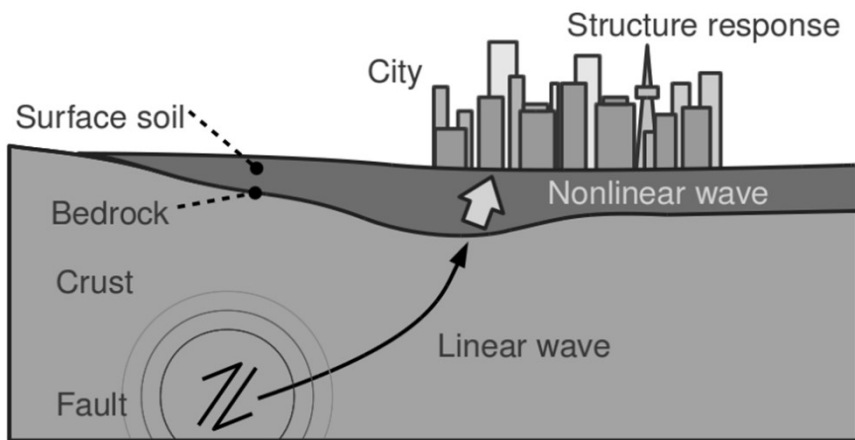
# 大規模有限要素解析手法の効率

- Size-up scalability: **96.6% efficiency** from 9,216 cores to full K computer (663,552 cores)
  - Enables **18.6% of peak (=1.97 PFLOPS) & 1.08 trillion DOF @ full K computer**
  - **8.6 times faster than conventional solver** (CG + Element-by-Element + simple preconditioner (block diagonal Jacobi preconditioner))
- Speed-up scalability: **76% efficiency** for 9,216 → 294,912 cores
- Very good scaling considering non-uniform mesh is partitioned using METIS
  - Similar scalability can be attained for practical problem



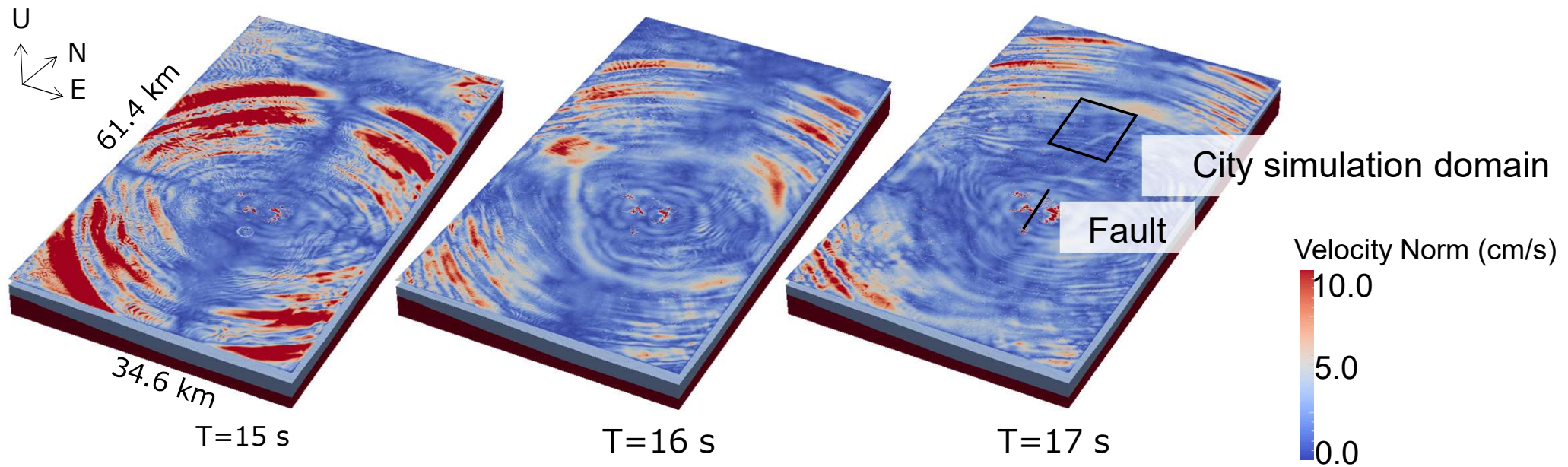
# 断層-都市-社会の一気通貫地震シミュレーション

- 首都圏の山手線内を対象とした仮想首都直下地震のシミュレーション（京コンピュータのmax能力で）



# 断層から地表までの地震動シミュレーション

- 10Hzまで精度保証した非構造有限要素による地震動シミュレーション
  - 18 billion の低次非構造有限要素 & 56 billion 自由度による陰的時間積分



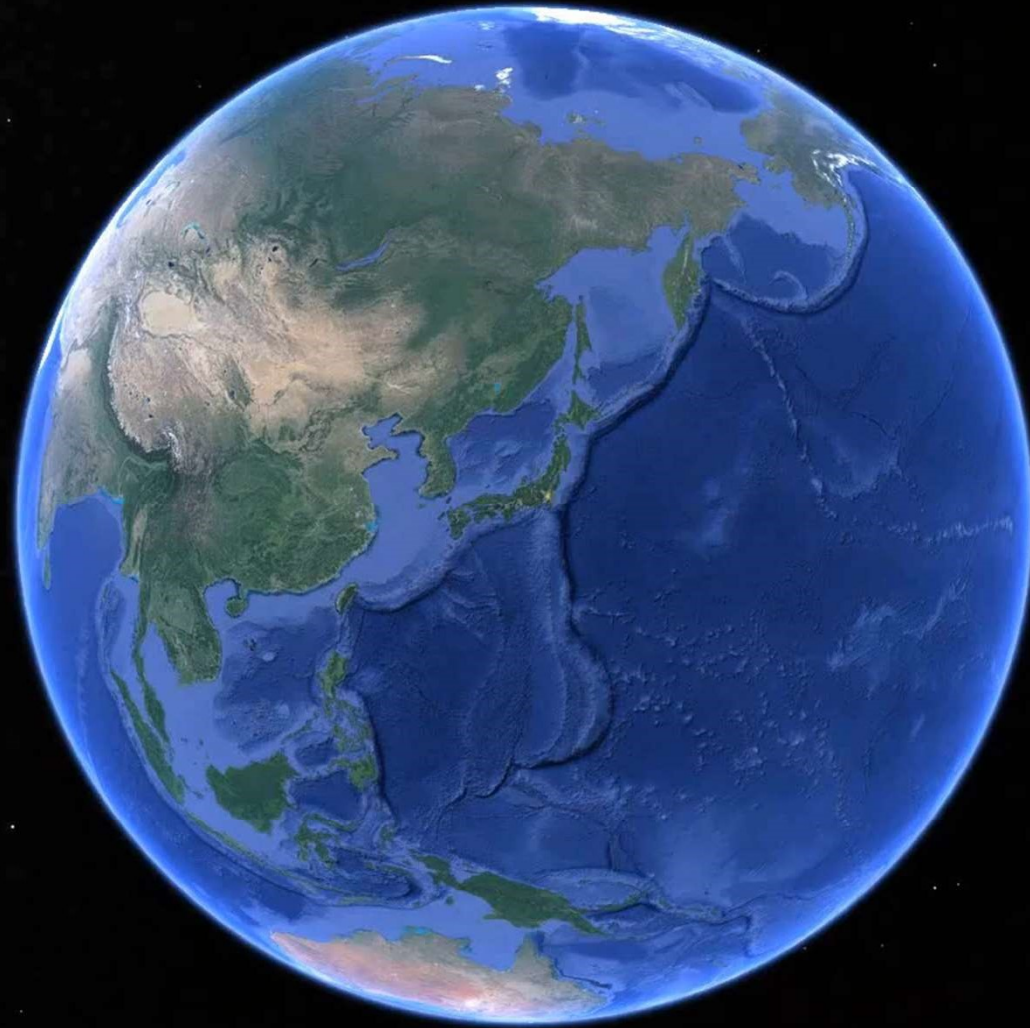


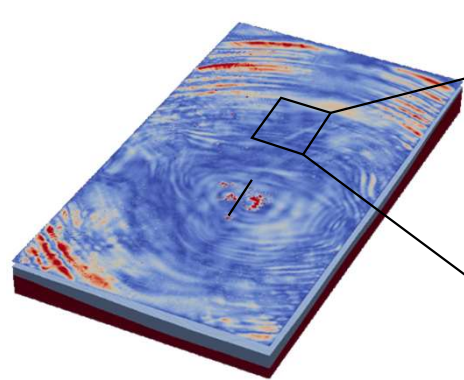
Image Landsat  
Data SIO, NOAA, U.S. Navy, NGA, GEBCO  
Image IBCAO

Google earth

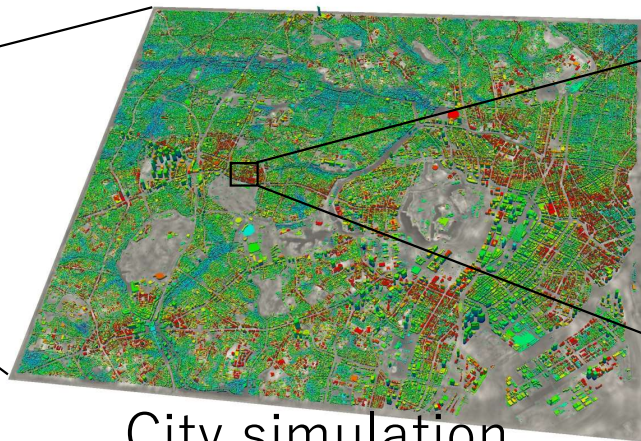


# First ever practical fault-to-city-to-social simulation accomplished

- All phases of earthquake fault-to-city-to-social simulation simulated at state-of-art level
- Enables huge leap in improving reliability of earthquake response estimation
  - HPC can play an essential role for saving lives and society



Fault-to-city simulation

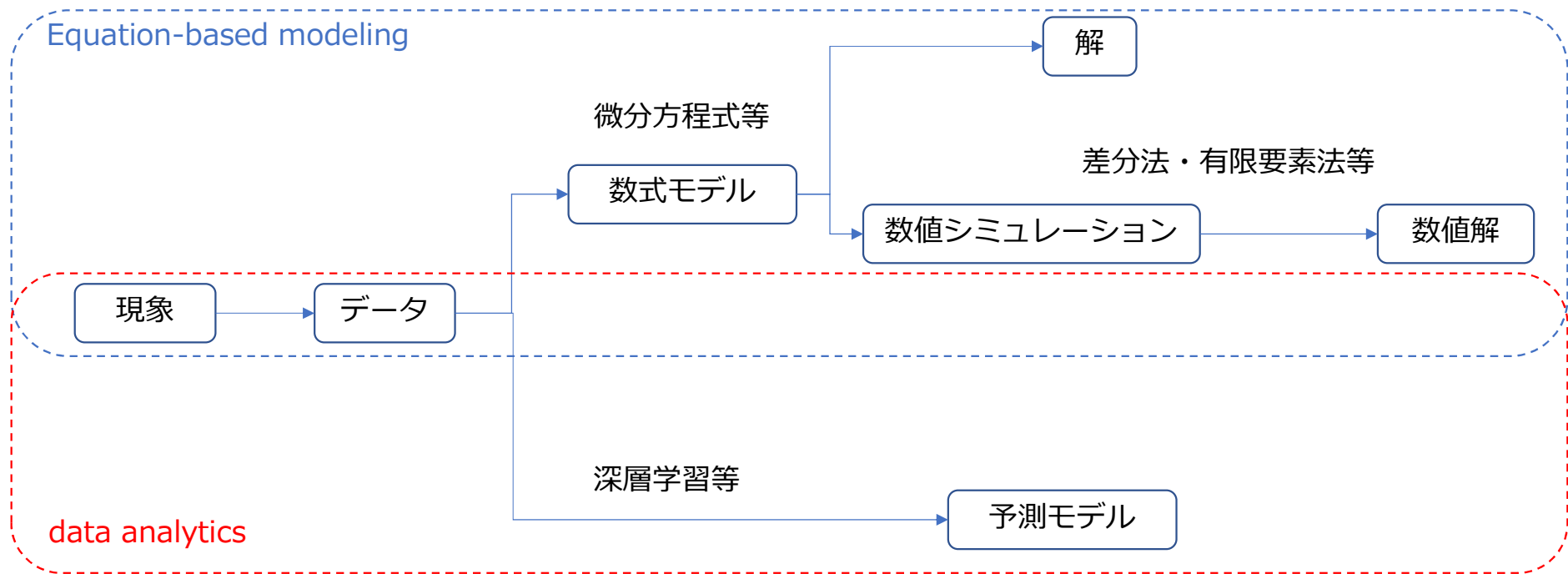


City simulation



Social simulation 18

# Equation-based modelingとdata analytics



Equation-based modelingとdata analyticsの融合により  
より多くの問題が解けるようになる？

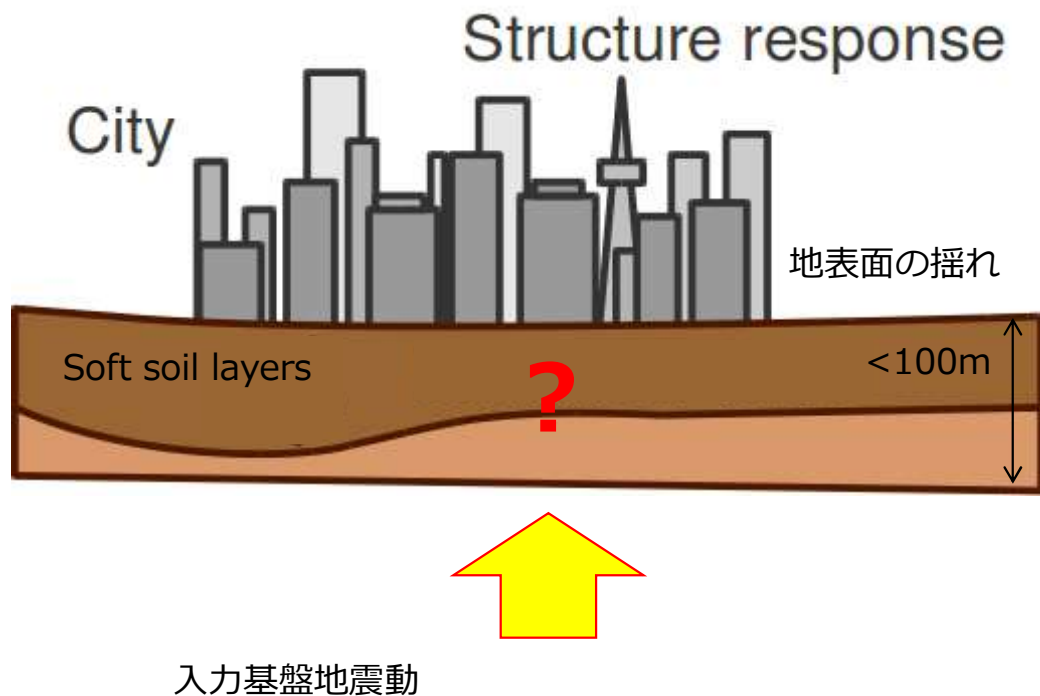


# HPC物理シミュレーションの高度化と人工知能の融合へ向けて

HPC物理シミュレーションによる人工知能の高度化

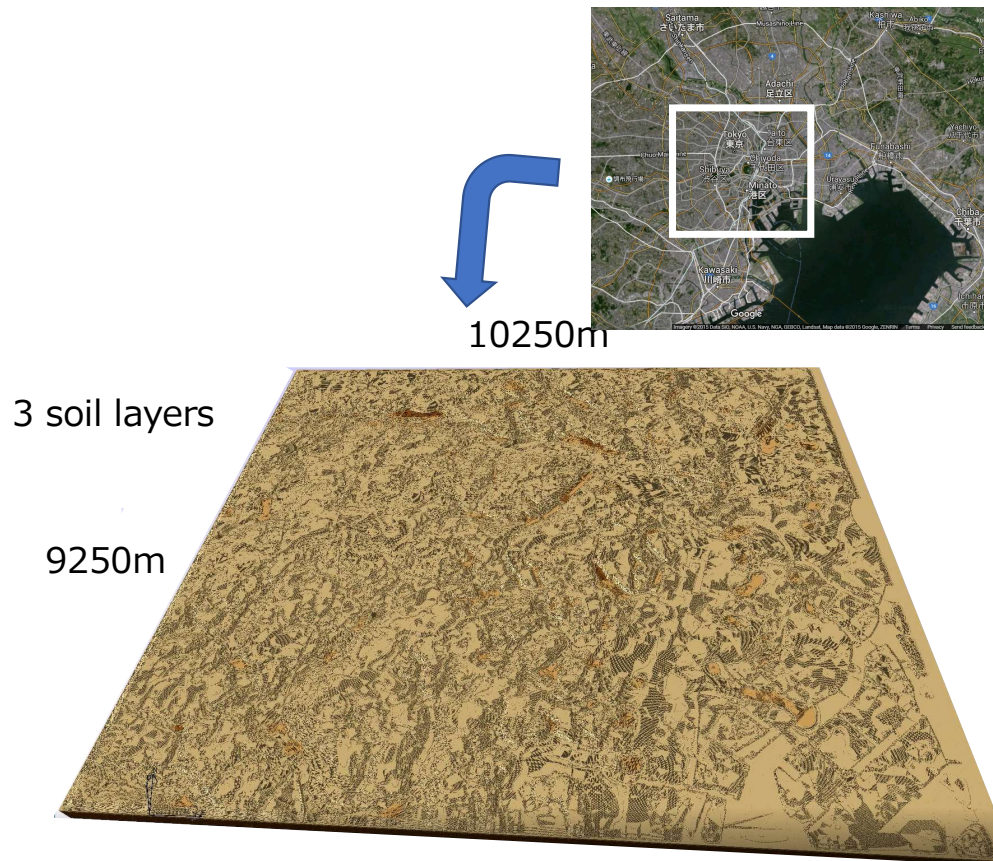
Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Takuma Yamaguchi, Muneo Hori, Maddegedara Lalith, Naonori Ueda, AI with Super-Computed Data for Monte Carlo Earthquake Hazard Classification, SC17: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 2017.

# 地盤構造の曖昧さ



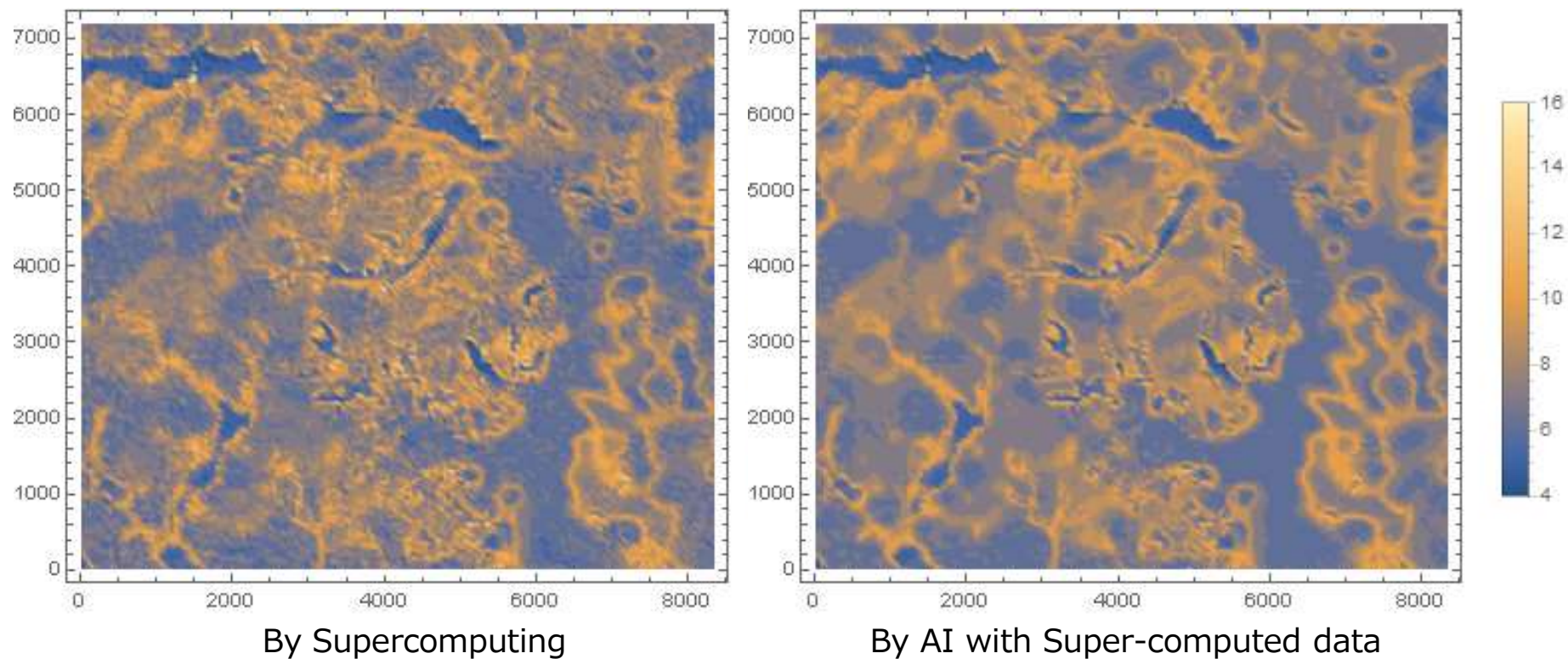
- 地表面は直接計測可能だが、地盤内部は直接計測はできないため、精度があまり高くなく、あいまいさあり。
- あいまいさを考慮するための対処が必要
  - 強い非線形性があるので、一番良いのはモンテカルロシミュレーション（先ほどの解析を1000回実施するか？）

# 超大規模解析による超大規模データ



- 京コンピュータ全系(663552 CPUコア)を使用上限(8時間)用いて実施
  - 最小要素サイズ(非構造四面体二次要素): 1m
  - 1333億自由度で6600時間ステップ
- 情報量:  $1333\text{億自由度} \times \text{倍精度} \times 6600\text{時間ステップ} = 6600\text{TB}$

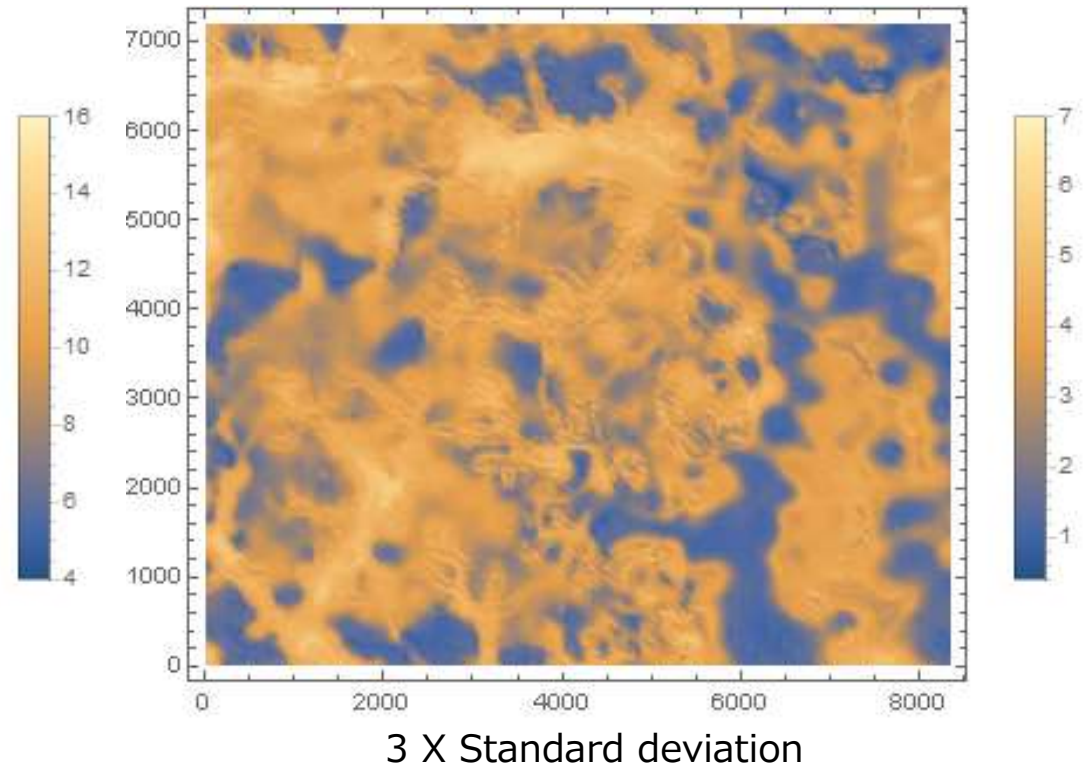
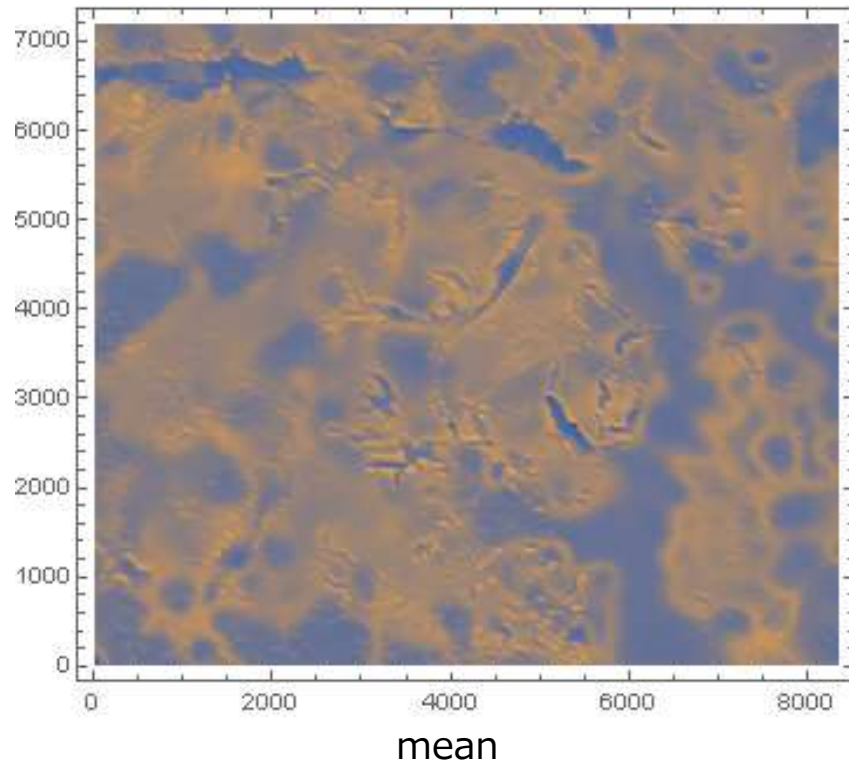
# 地震の揺れマップ 物理シミュレーション vs AI



両者は良く一致している

∴人工知能の正答率が高くなるように学習させる方法論を開発提案したため

# 人工知能+Monte-Carloによる地震の揺れマップ



## 1000 trialsによる曖昧さを考慮した地震の揺れマップ

- 地震の揺れマップに地盤構造のあいまいさが及ぼす影響は場所によって大きく異なる
- meanだけでなく, standard deviationも場所によって大きく異なることがわかる

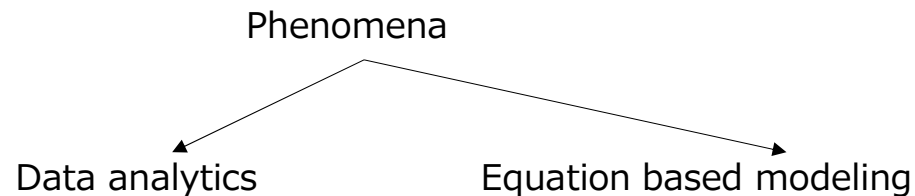
# HPC物理シミュレーションの高度化と人工知能の融合へ向けて

人工知能によるHPC物理シミュレーションの高度化

Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Takuma Yamaguchi, Akira Naruse, Jack C. Wells, Thomas C. Schulthess, Tjerk P. Straatsma, Christopher J. Zimmer, Maxime Martinasso, Kengo Nakajima, Muneo Hori, Lalith Maddeggedara, A Fast Scalable Implicit Solver for Nonlinear Time-Evolution Earthquake City Problem on Low-Ordered Unstructured Finite Elements with Artificial Intelligence and Transprecision Computing, SC18: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Article No. 49, 2018.

# Equation based modeling と data analytics

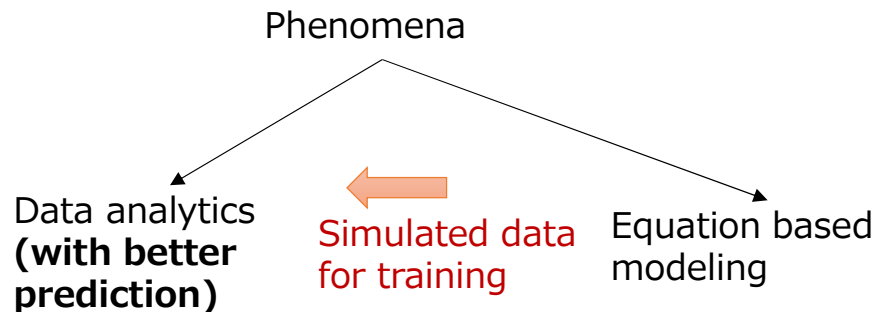
- Equation based modeling
  - 高精度, 解析コスト高
- Data analytics
  - 高速に評価可能, Equation based modelingと比較して精度低



# Equation based modelingとdata analyticsの融合へ

- 第一段階: equation based modelingによって生成されたデータをdata analytics に用いる
  - 大規模なequation based modelingにより膨大な高品質のデータを生成可能
  - 実験が難しい/不可能な現象の疑似観測データを生成
  - 地震の揺れの強度を推定するAIをこの手法で開発した

## SC17



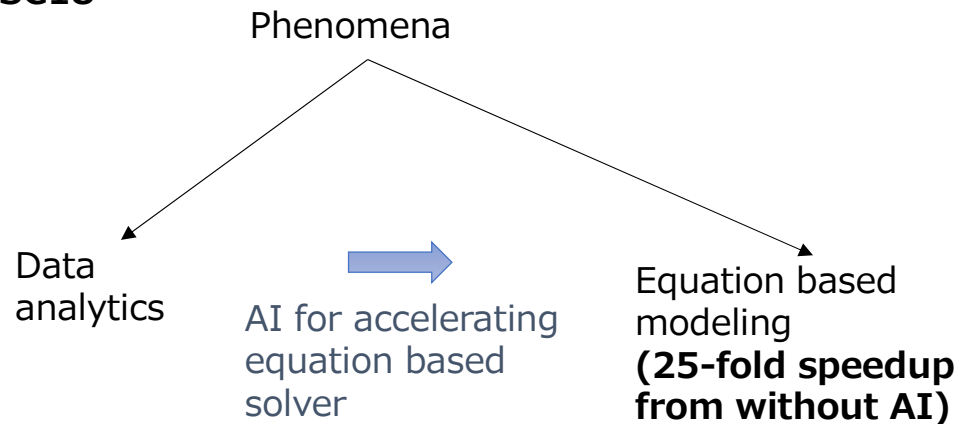
- SC14: equation based modeling
- SC15: equation based modeling
- SC16: equation based modeling
- **SC17: equation based modeling for AI**



# Equation based modelingとdata analyticsの融合へ

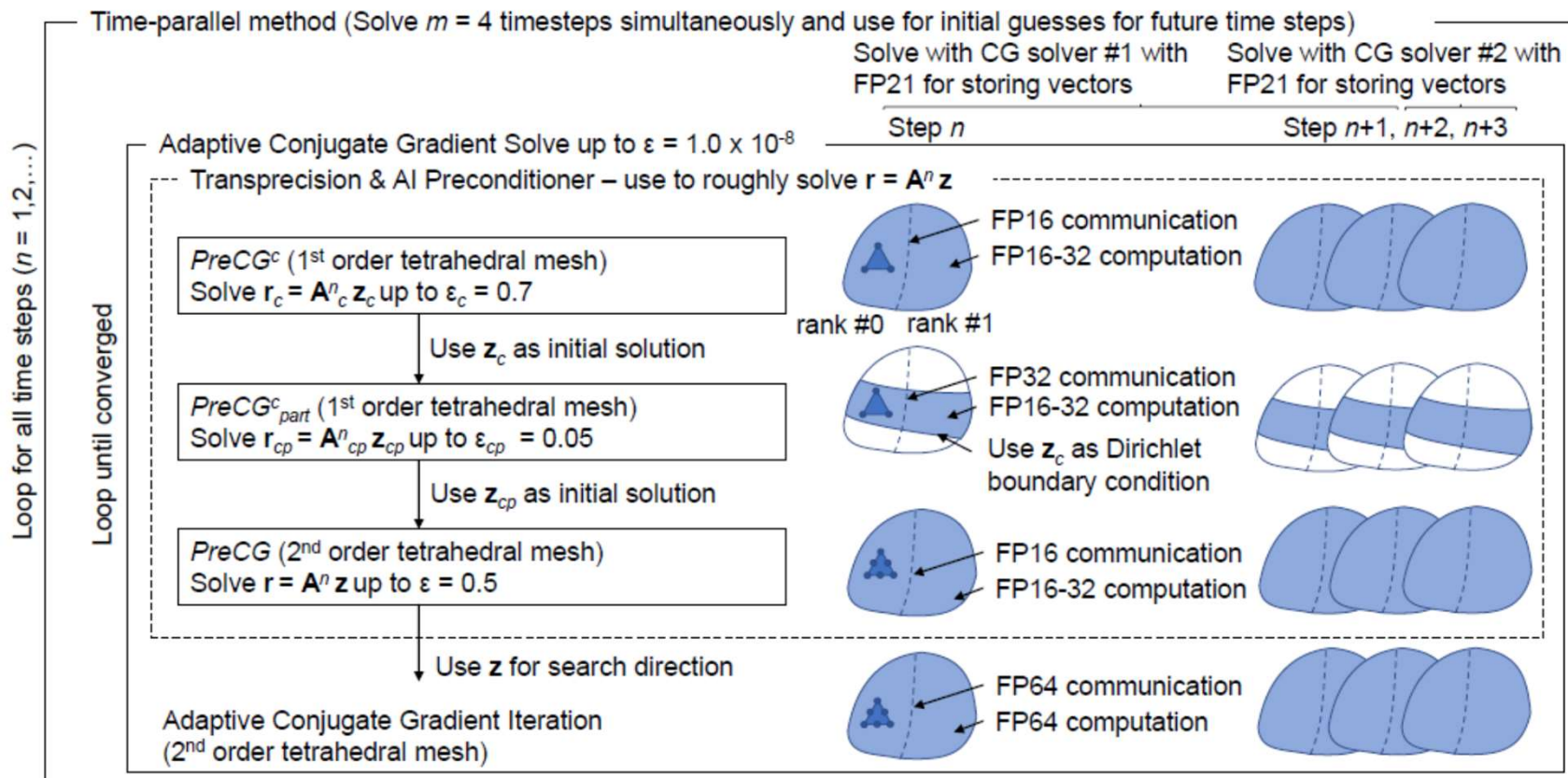
- 第二段階：さらなる融合へ. AIにより equation based modelingを高速化・解析コスト低減へ

SC18



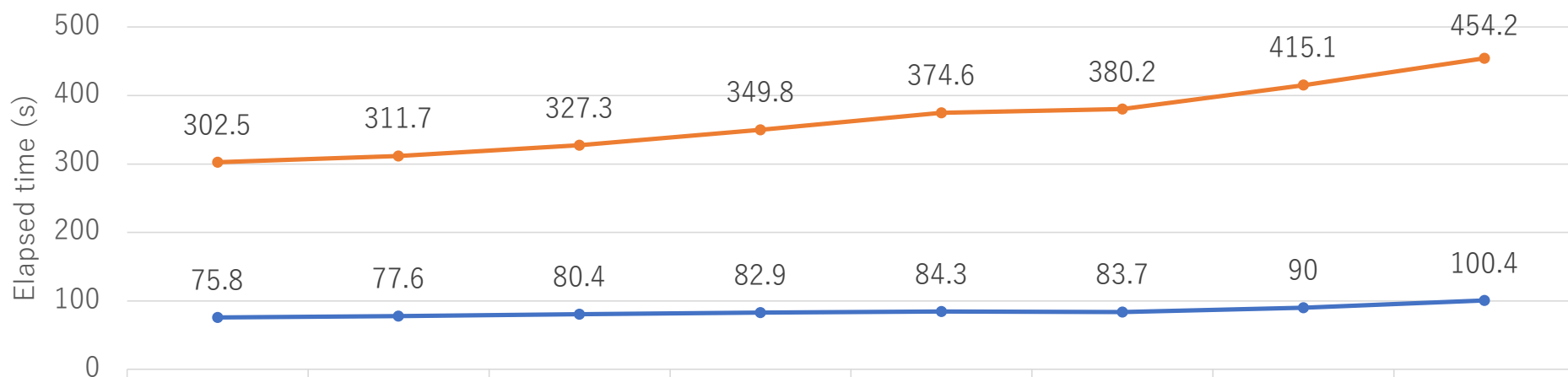
- SC14: equation based modeling
- SC15: equation based modeling
- SC16: equation based modeling
- SC17: equation based modeling for AI
- **SC18: AI for equation based modeling**

# 人工知能により系を学習し，方程式求解を高速化



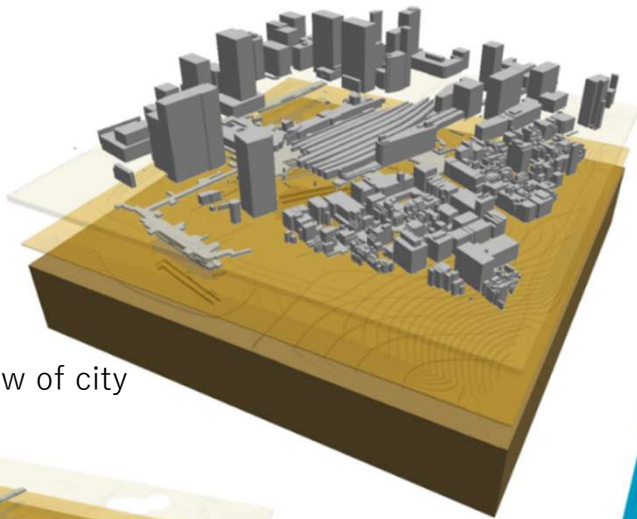
$Ax = f$

# Summit上での性能 (Weak scaling)

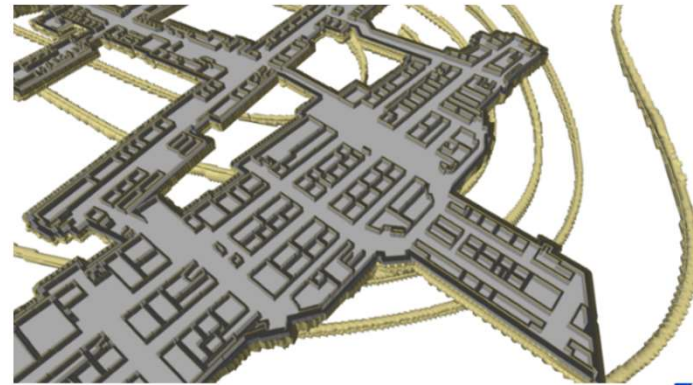


# of GPUs	288	576	1152	2304	4608	6144	12288	24576
# of node	48	96	192	384	768	1024	2048	4196
DOF	$3.5 \times 10^9$	$7 \times 10^9$	$14 \times 10^9$	$28 \times 10^9$	$56 \times 10^9$	$75 \times 10^9$	$151 \times 10^9$	$302 \times 10^9$
SC18's efficiency to FP64 peak	19.5%							14.7%

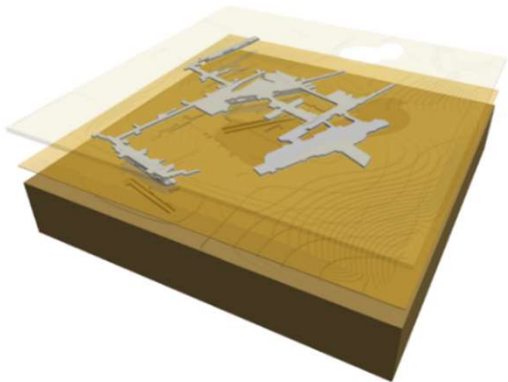
# 人工知能によるHPC物理シミュレーション on Summit



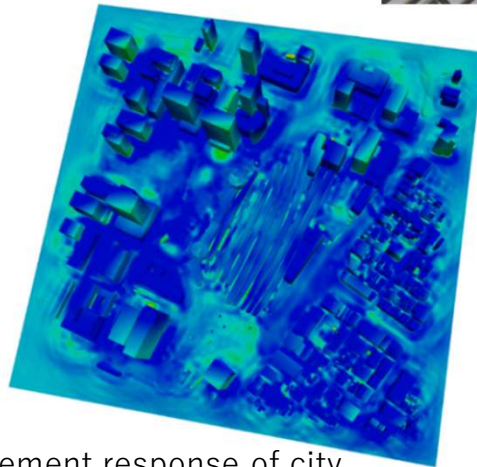
a) Overview of city model



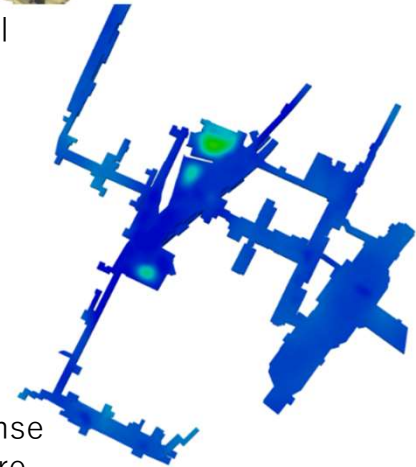
c) Close up view of city model



b) Location of underground structure



d) Displacement response of city



e) Displacement response of underground structure

# HPC物理シミュレーションの高度化と人工知能の融合へ向けて

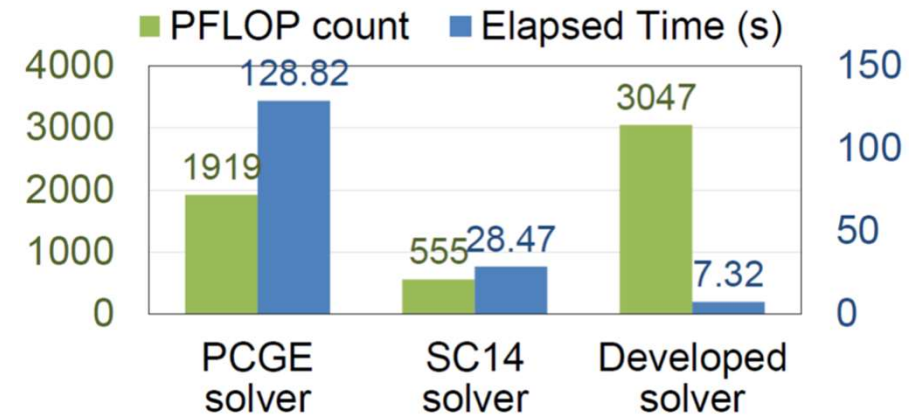
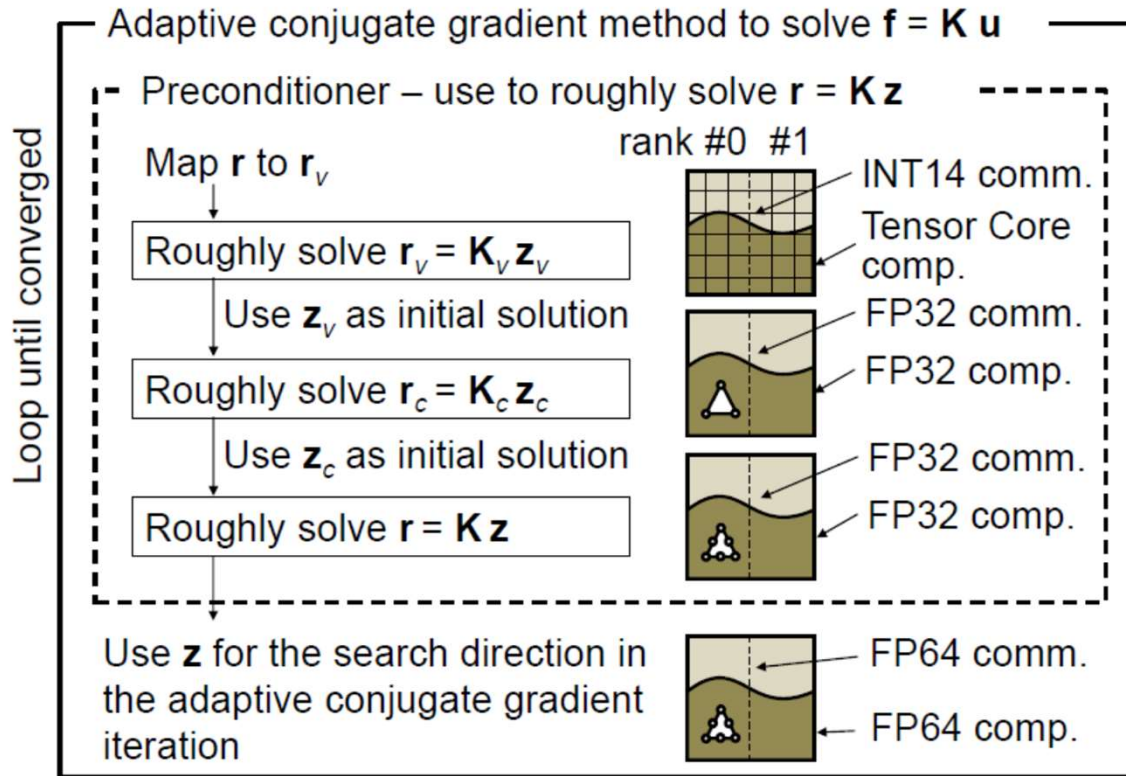
人工知能アーキテクチャー？によるHPC物理シミュレーションの高度化

Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Takuma Yamaguchi, Akira Naruse, Jack C. Wells, C. J. Zimmer, T. P. Straatsma, Takane Hori, Simone Puel, Thorsen W. Becker, Muneo Hori, and Naonori Ueda, 416-PFLOPS Fast Scalable Implicit Solver on Low-Ordered Unstructured Finite Elements Accelerated by 1.10-ExaFLOPS Kernel with Reformulated AI-Like Algorithm: For Equation-Based Earthquake Modeling, SC19: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 2019.

# 人工知能用？アーキテクチャの活用

- 人工知能用？に開発された低精度・高速アクセラレータをHPC物理シミュレーションで活用できないか
  - 例えば， Tensor Core on NVIDIA Volta GPUは， FP64演算に比べて16倍高いpeak FLOPS：FP64 7.8 TFLOPS, Tensor Core 125 TFLOPS
    - 一方で， 低精度演算， 局所性の高い演算である必要
      - 定型の行列積などの制約も．．．
- 人工知能用？アーキテクチャを活用できるように， 従来のHPC物理シミュレーションとは異なる上記の制約にあうアルゴリズムを開発
  - 一見すると非効率？

# Tensor Coreを用いた物理シミュレーション



計算機構を踏まえたアルゴリズム開発により time to solution を改善. Flop count ではなく, 各計算機構での実効Flop count の観点が重要

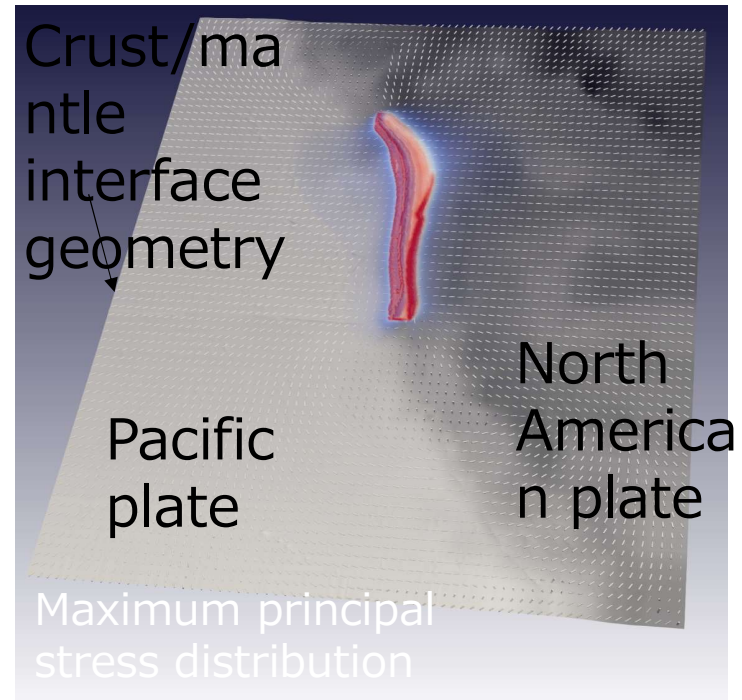
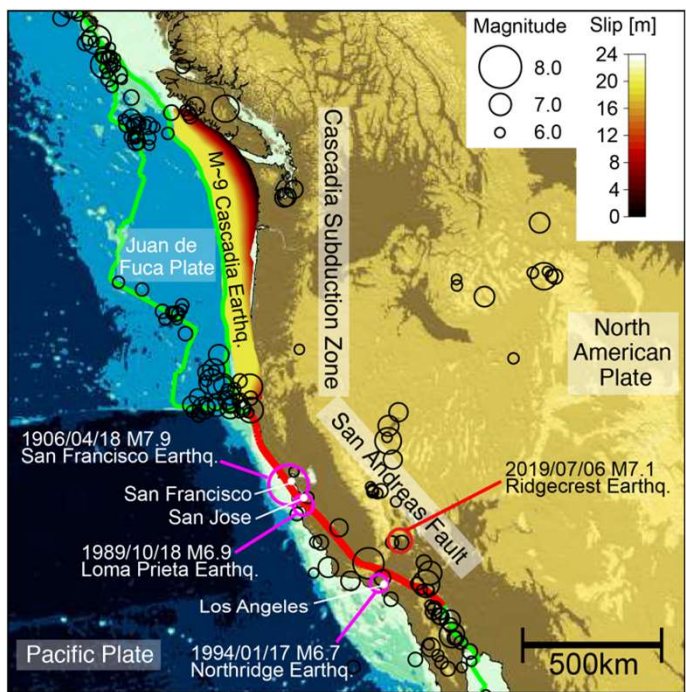
- 地殻変動解析用の地殻モデルを模した  $1.67 \times 10^{12}$  自由度の問題の二層モデルを, Summit 4544 計算ノード (27,264 NVIDIA V100 GPUs) で解析
- 提案手法では演算量が増加 (主に構造格子的演算部). しかし, Tensor Core が行列積を高速化することで, SC14 Solver に比べて 3.89 倍の高速化を実現

前処理部に Tensor Core にあわせて構築した構造格子的演算を導入

- FP16 の  $16 \times 16$  の行列積ベースの演算に再構築
- GPU 内のデータ移動コストに配慮, 低精度通信導入など

# 人工知能アーキテクチャー？によるHPC物理シミュレーション on Summit

- Cascadia沈み込み帯における断層すべりによる地殻変動の解析
  - 1944 km × 2646 km × 480 km 領域の $1.49 \times 10^{10}$  DOF の地殻モデル
  - Summitの162計算ノードを用いて23sで計算可能
    - state-of-the-art solver on Piz Daintと比べて75倍の高速化を実現
    - 416-PFLOPS Fast Scalable Implicit Solver on Low-Ordered Unstructured Finite Elements Accelerated by 1.10-ExaFLOPS Kernel





# HPC物理シミュレーションの高度化と人工知能の融合へ向けて

微分方程式を学習した人工知能によるHPC物理シミュレーションの高度化

Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Lalith Maddeggedara, Naonori Ueda, and Yuma Kikuchi, A Fast Scalable Iterative Implicit Solver with Green's function-based Neural Networks, 2020 IEEE/ACM 11th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (Scala)@SC20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 2020.

# 概要

- Based on the Green's functions that reflect mathematical properties of partial differential equations (PDE), we developed a novel preconditioner using neural networks (NNs) with high accuracy and small computational cost for improving the convergence property of an iterative implicit solver.
- As the dense and uniform computation involved in NNs are more efficient than that of the conventional PDE solver schemes, **we could solve the time evolution of a highly heterogeneous problem in 4.26-fold shorter time compared to a typical PDE solver.** The method is also suitable for use with low-precision arithmetic in NNs as the accuracy of the final solution is guaranteed. The localized property of NNs enable high scalability for solving large problems: **a 5.57 trillion degrees-of-freedom problem was solved with 98.1% weak scalability up to 55,296 Fugaku nodes with 30.3 PFLOPS (16.2% of FP64 peak performance).** This method can be used in various PDE-based simulations and has potential to make broad ripple effects in various fields.

# Green's function-based Neural Networks を用いたimplicit matrix solver

非線形時刻歴発展問題の以下の求解を考える。

$$\mathbf{A}\delta\mathbf{u}^n = \mathbf{f},$$

ここで $\mathbf{A}$ と $\mathbf{f}$ は時刻n-step目に依存して変化する。

一方で, PDE  $L(x)(a(x)) = b(x)$  において,

$$a(x) = \int g(x, s)b(s)dv,$$

$$\text{where } L(g(x, s)) = \delta(s-x).$$

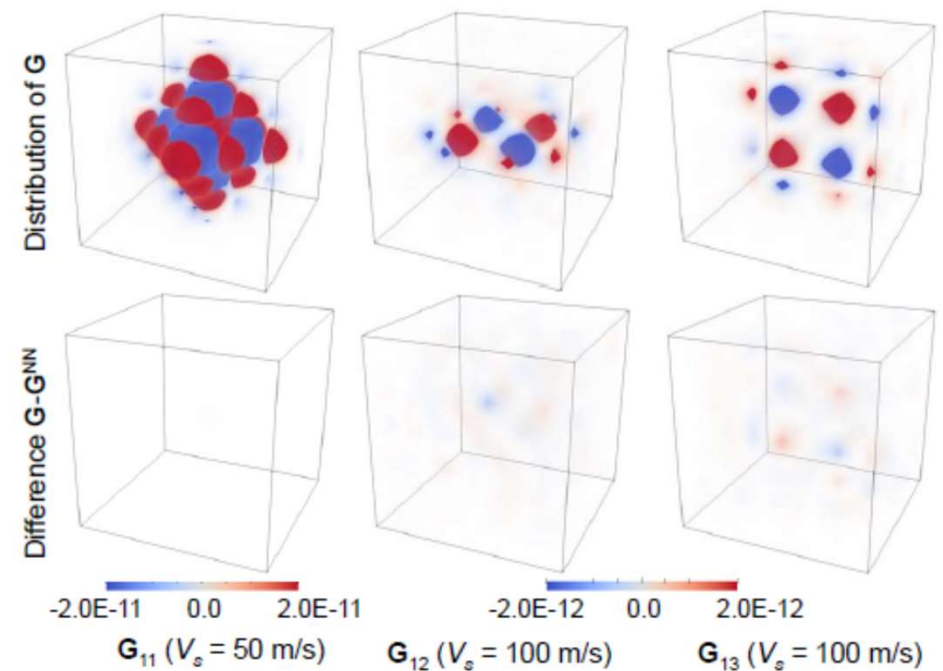
が期待される。ここで, ( $L(x)$ : linear differential operator,  $b(x)$ : known distribution,  $a(x)$ : response of this system,  $x$ : an arbitrary point).

$g(x, s)$ がGreen's functionであり, これを前処理として用いることを考える。

一見良さそうだが,  $g(x, s)$ の計算コストが大きすぎ使えない. . .

$g(x, s)$ をNNを用いて構築することとする

非線形波動場問題のGreen functionと  
Green's function-based Neural Networks



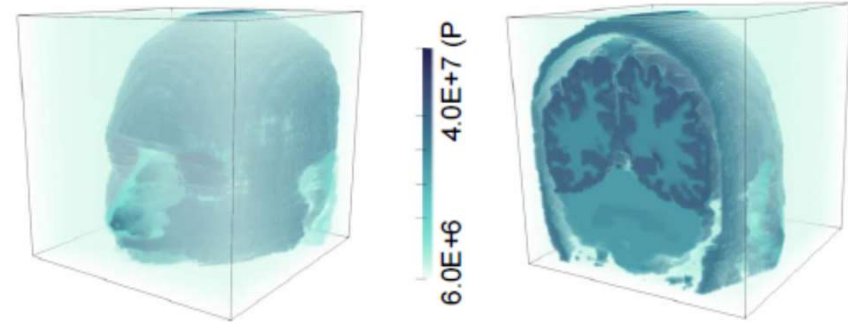
## 一般的なCGの前処理に用いた例

**Algorithm 1** Iterative solver with NN-based preconditioner for solving Eq. (2). Here, GF-based NNs ( $\bar{\mathbf{B}}\bar{\mathbf{r}}$  is the estimation of the solution of equation  $\mathbf{A}\delta\mathbf{u} = \mathbf{f}$  by the NNs) is used in the preconditioner in an adaptive conjugate gradient method. Matrix vector product of  $\mathbf{A}$  and  $\mathbf{A}_p$  are computed by the EBE method.  $(-)$  and  $\epsilon$  indicates single-precision variable and tolerance for relative error. As the GF-based NNs are highly accurate and capable of resolving high frequency modes, high refinement rate is expected in the iterative solution refinement.

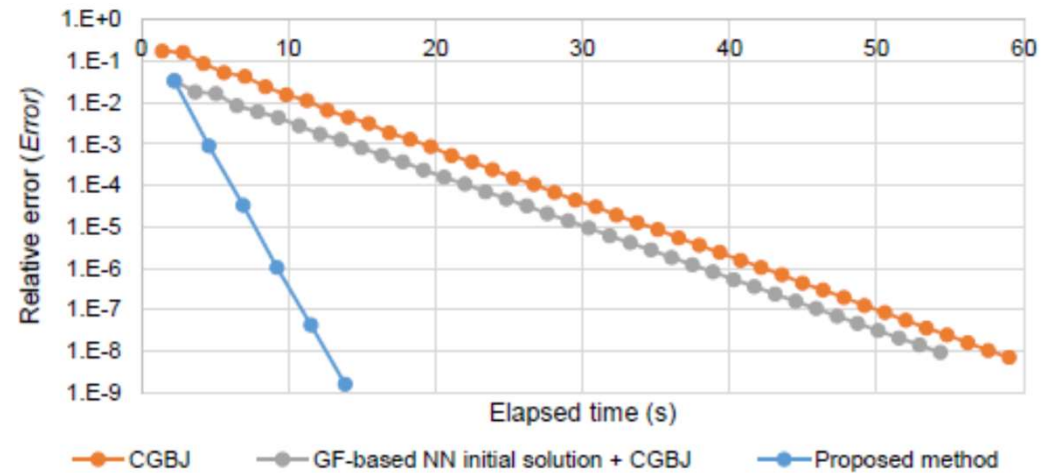
```

1:  $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{f} - \mathbf{A}\delta\mathbf{u}$ 
2:  $\beta \leftarrow 0$ 
3:  $i \leftarrow 1$ 
4: (* outer loop start *)
5: while  $\|\mathbf{r}\|_2 / \|\mathbf{f}\|_2 \geq \epsilon$  do
6:   (* preconditioner start *)
7:    $\bar{\mathbf{r}} \leftarrow \mathbf{r}$ 
8:    $\bar{\mathbf{z}} \leftarrow \bar{\mathbf{B}}\bar{\mathbf{r}}$  (* apply GF-based NNs inside process domain *)
9:    $\bar{\mathbf{z}}_p \leftarrow \bar{\mathbf{A}}_p^{-1}\bar{\mathbf{r}}_p$  (* refine solution near domain boundary and inter-
process boundary using conjugate gradient solver with  $3 \times 3$  block
Jacobi preconditioning up to  $\epsilon_p$  with Dirichlet boundary conditions
with value of  $\bar{\mathbf{z}}$  and initial solution  $\bar{\mathbf{z}}_p = \mathbf{0}$  elsewhere *)
10:   $\mathbf{z} \leftarrow \bar{\mathbf{z}}$  using  $\bar{\mathbf{z}}$  updated with  $\bar{\mathbf{z}}_p$ 
11:  (* preconditioner end *)
12:  if  $i > 1$  then
13:     $\beta \leftarrow (\mathbf{z}, \mathbf{q}) / \rho$ 
14:  end if
15:   $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{z} + \beta\mathbf{p}$ 
16:   $\mathbf{q} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{p}$ 
17:   $\rho \leftarrow (\mathbf{z}, \mathbf{r})$ 
18:   $\alpha \leftarrow \rho / (\mathbf{p}, \mathbf{q})$ 
19:   $\mathbf{q} \leftarrow -\alpha\mathbf{q}$ 
20:   $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r} + \mathbf{q}$ 
21:   $\delta\mathbf{u} \leftarrow \delta\mathbf{u} + \alpha\mathbf{p}$ 
22:   $i \leftarrow i + 1$ 
23: end while
24: (* outer loop end *)

```



Distribution of the Young's modulus of the target head model

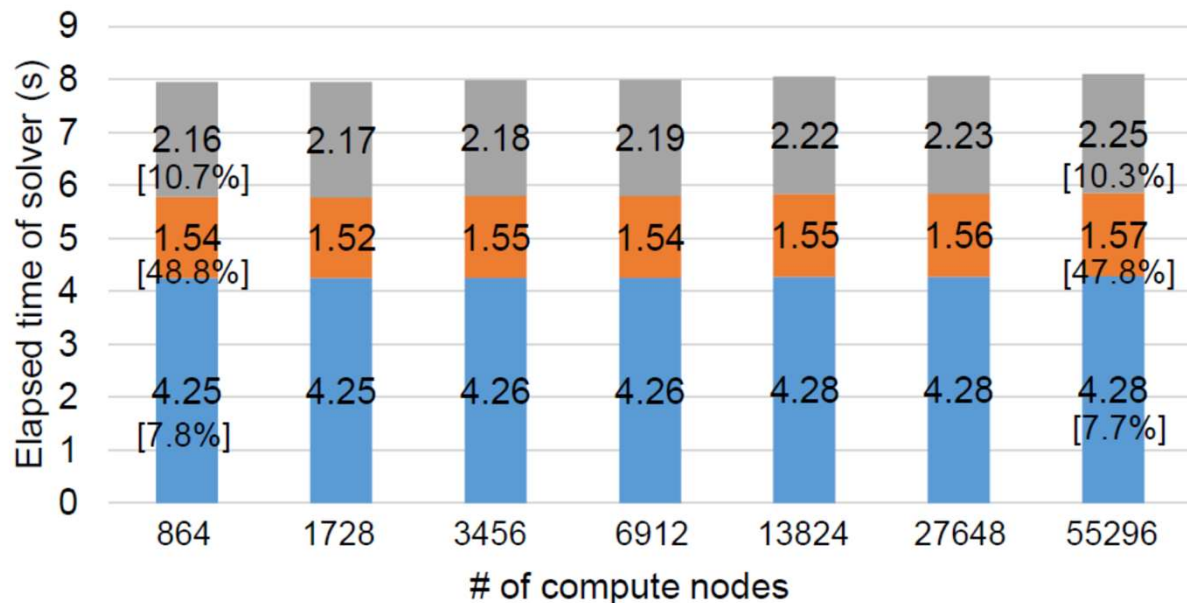


Convergence speeds of solvers for the head model measured on one Oakbridge-CX node. The convergence ratio (ratio of change in relative error per iteration) was greatly improved by the use of the GF-based NNs in each refinement iteration in the proposed method. The simple scheme using GF-based NNs for initial solution of PDE solver scheme (CGBJ) could not utilize this improvement in the convergence ratio.

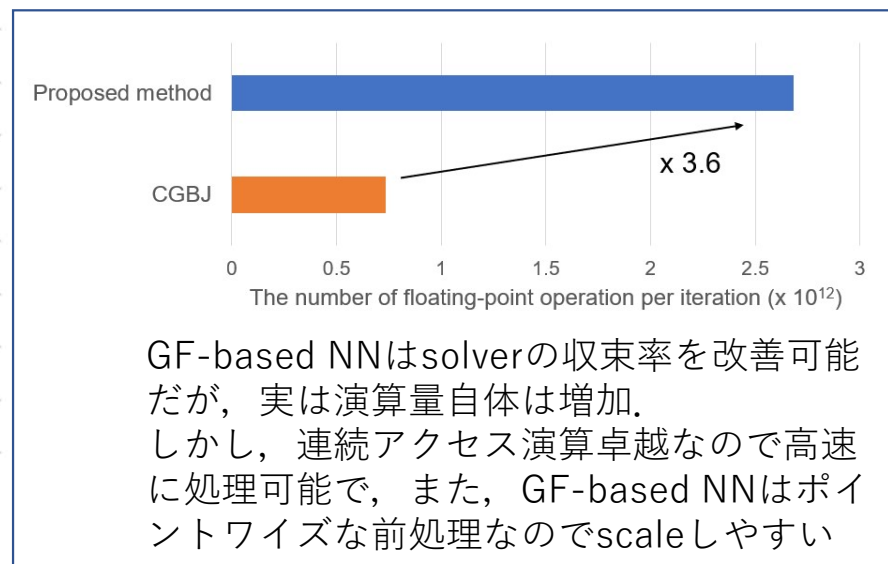
※Numbers in brackets indicate ratio to FP64 peak.

Total time  
[ratio to FP64  
peak FLOPS]

7.95 s	7.94 s	7.98 s	7.99 s	8.05 s	8.06 s	8.10 s
[16.5%]	[16.5%]	[16.4%]	[16.4%]	[16.3%]	[16.2%]	[16.2%]



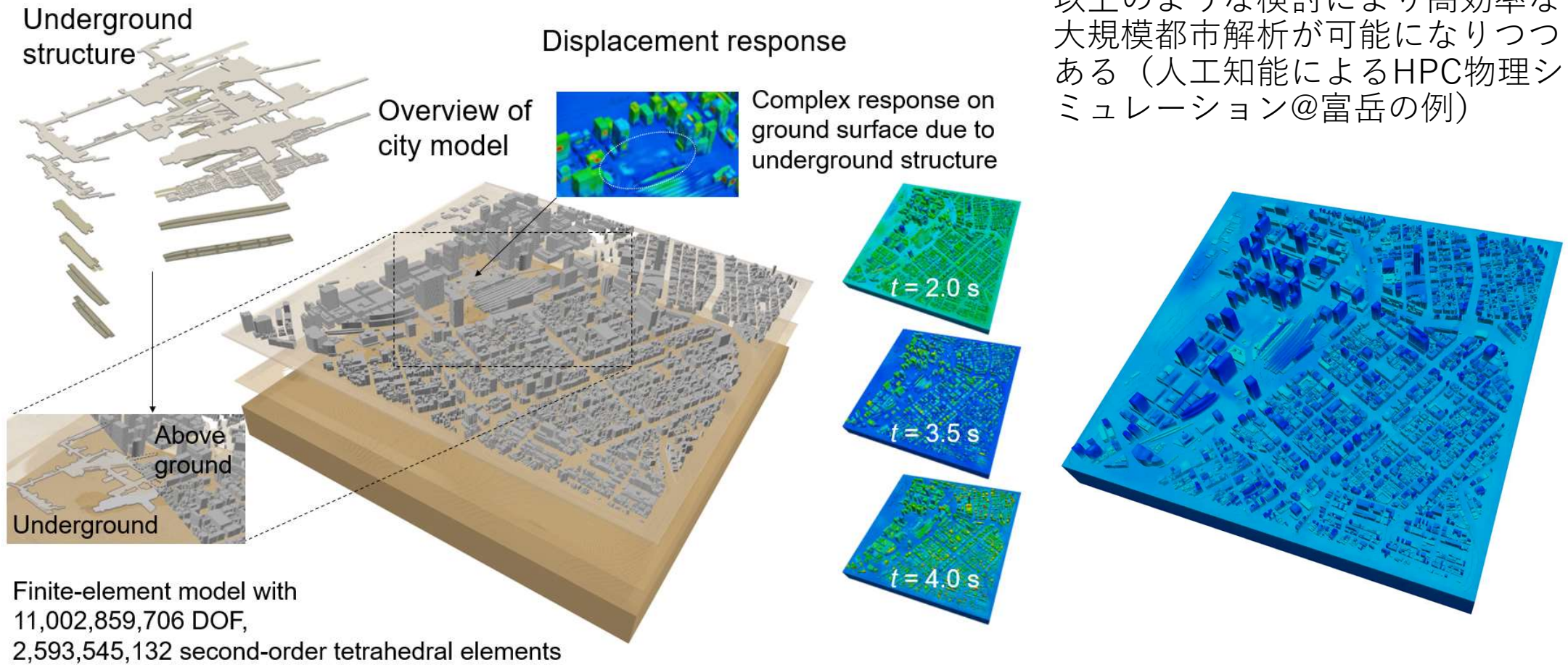
■ other parts of CG loop ■ GF-based NN ■ boundary part update



Weak scaling results of proposed solver on Fugaku: a 5.57 trillion degrees-of-freedom problem was solved with 98.1% weak scalability from 864 up to 55,296 Fugaku nodes with 30.3 PFLOPS (16.2% of FP64 peak performance).

# まとめ

- ポスト「京」重点課題3「地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築」で進められ、また、「『富岳』成果創出加速プログラム：大規模数値シミュレーションによる地震発生から地震動・地盤増幅評価までの統合的予測システムの構築とその社会実装」で現在進められている以下について概説した
  - High Performance Computing (HPC) による物理シミュレーションの高度化
  - HPC物理シミュレーションの高度化と人工知能の融合へ向けて
- 物理シミュレーションと人工知能の融合は他にも様々な方向性が考えられる。さらなる評価手法全体の性能向上が期待される
  - 従来の物理シミュレーションのアルゴリズムを人工知能的に改良
  - Flop countだけではなく、計算機構に沿った実効Flop countの観点からより強力なアルゴリズムを設計が可能に など
- Society 5.0へ向け、IoTや5Gを踏まえた観測と解析の融合（Big Data & Extreme Computingなど）への展開



以上のような検討により高効率な大規模都市解析が可能になりつつある（人工知能によるHPC物理シミュレーション@富岳の例）

Computation example of 11,002,859,706 degrees of freedom; 2,593,545,132 element model of fully coupled ground and aboveground/underground structure earthquake shaking analysis using IRIS on 98,304 CPU cores (2,048 nodes) of Fugaku: The 2 x 2 km domain was modeled with 0.5-m tetrahedral elements with three soil layers; 9323 buildings; and an underground complex with 645 tenants. <sup>44</sup>

# Acknowledgement

- We acknowledge supports from Program for Promoting Researches on the Supercomputer Fugaku (Large-scale numerical simulation of earthquake generation, wave propagation and soil amplification: hp200126) and Post K computer project (Priority Issue 3 - Development of integrated simulation systems for hazards and disasters induced by earthquakes and tsunamis: proposal numbers hp180217, hp190177), and Japan Society for the Promotion of Science (18H05239, 26249066, 25220908, and 17K14719). Our results were obtained using Fugaku and K-computer at Center for Computational Science, RIKEN and Oakbridge-CX at Information Technology Center, The University of Tokyo and the Summit at Oak Ridge Leadership Computing Facility, a US Department of Energy, Office of Science User Facility at Oak Ridge National Laboratory.