



東北大学



# シミュレーション科学とデータ科学の融合

## 高性能計算基盤の開発とそのデータ 科学・計算科学融合型キラーアプリ

**小林広明**  
東北大学

大学院情報科学研究科教授  
総長特別補佐 (デジタル革新担当)  
タフ・サイバーフィジカルAI研究センター  
HPC・計算モジュール研究部門長  
サイバーサイエンスセンター長特別補佐 (HPC担当)

[koba@tohoku.ac.jp](mailto:koba@tohoku.ac.jp)  
2020年7月3日

# 本日の内容

## ★ 高性能計算に関する東北大学の取り組み

- ✓ 高性能計算に関する全国共同利用・共同研究拠点活動
- ✓ スーパーコンピュータの運用と利用支援・共同研究

## ★ 次世代高性能計算基盤の研究開発

- ✓ 量子アニーリングアシスト型次世代高性能計算基盤の開発<sup>1</sup>
- ✓ データ科学・計算機科学融合型次世代アプリケーションの開発<sup>1,2,3</sup>

- 1 文科省次世代領域開発「量子アニーリングアシスト型次世代高性能基盤の開発」
- 2 科研費基盤A「量子アニーリングが拓く高性能材料インフォマティクス基盤の新展開」
- 3 SIP CFRP向け材料インテグレーション(MI)システムの高速度実装と評価

# 全国共同利用型スパコンセンターとしての東北大学の歩み

- ★ 1969年に日本で2番目の全国共同利用型大型計算機センターとして設立
  - 全国の学術研究者に汎用大型計算機を提供
- ★ 1985年よりスーパーコンピュータセンターとして活動
  - 大規模科学計算システムとしてベクトル型のスーパーコンピュータを運用
- ★ 2007年より文科省補助金事業としてコンピュータ資源を産業利用に提供開始
  - 民間企業のスパコン利用支援に着手
- ★ 2008年に情報シナジーセンターからサイバーサイエンスセンターへ改組
  - 2010年より「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」として文科省より認定を受け、2012年よりHPCIに資源提供を開始し、HPCに関する共同利用・共同研究拠点活動を強化



スパコンセンターとしての東北大学の役割



SENAC-1 in 1958



First Computer in 1969



SX-1 in 1985



SX-2 in 1989



SX-3 in 1994



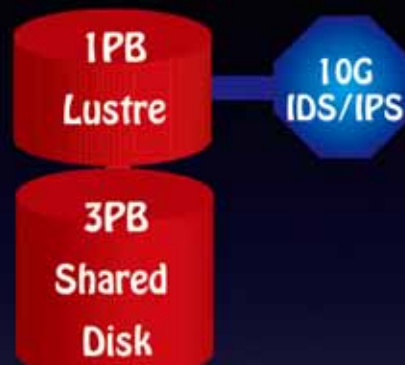
電気代程度の利用料金をご負担していただければ、全国の研究者・技術者・学生の皆さんはすぐにご利用できます。

# 東北大学大規模科学計算システム

全国共同利用型スーパーコンピュータ設備の整備・運用・利用支援



7680x3240  
3D Tiled Display Wall System

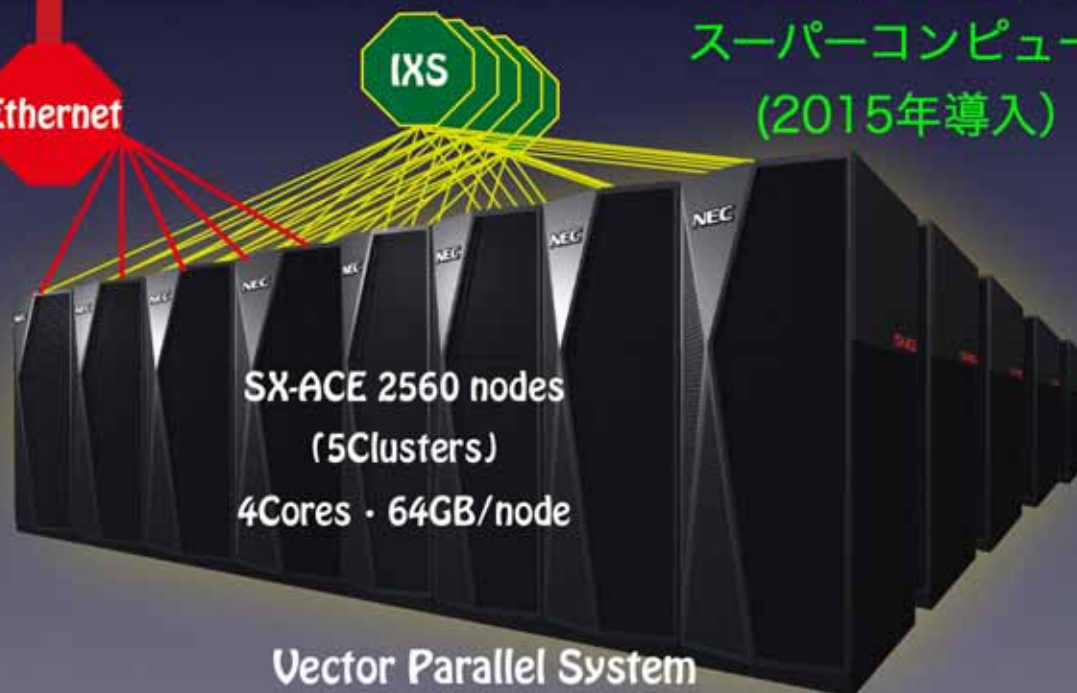


スカラ並列型  
クラスタシステム  
(2014年導入)



Scalar Parallel System  
31.3TFlops, 8.5TB Memory

ベクトル並列型  
スーパーコンピュータ  
(2015年導入)



Vector Parallel System  
707TFlops, 160TB Memory



# リアルタイム津波浸水・被害予測システムの研究開発

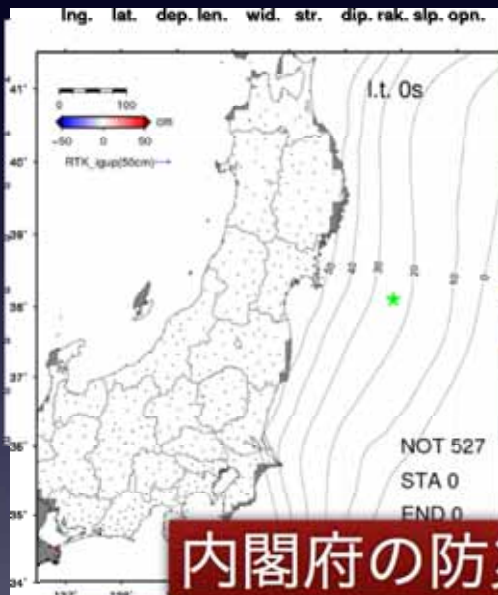
全体で20分以内！

7分程度

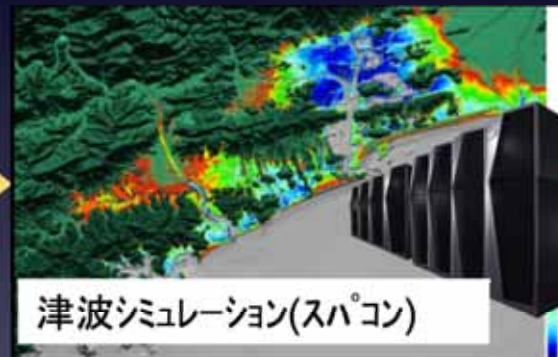
10分以内

4分程度

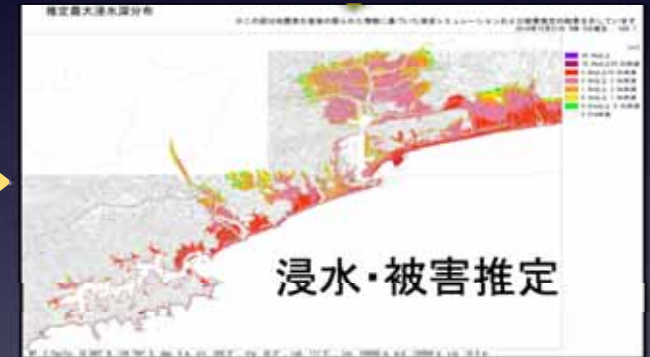
GPSデータによる震源推定



リアルタイム津波被害予測  
シミュレーション



浸水・被害状況の可視化



内閣府の防災システムの一部として現在24/265で実運用中

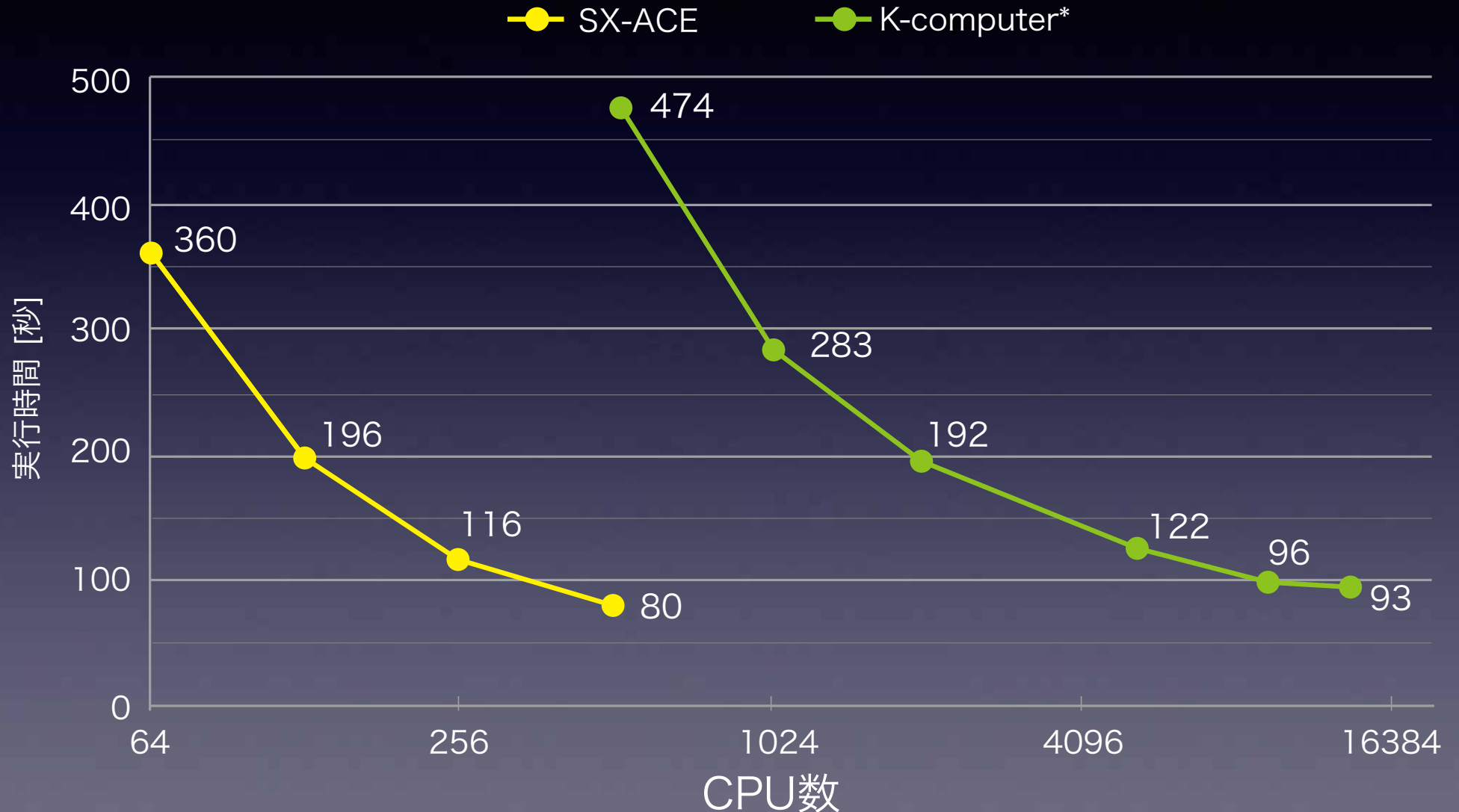
★様々な世界初

- ✓10メートル四方の精度での沿岸都市の津波浸水被害予測
- ✓世界最高クラスのスパコンを活用して、6時間分の津波浸水の様子とその被害予測を10分以内で実現
- ✓GPS計測から、シミュレーション、可視化までを全自動で行い、
- ✓地震発生からトータル20分以内に結果をWebを使ってわかりやすく各自治体へ提供

# ベクトルスパコンはコンパクトに高い性能を発揮

～津波浸水予測プログラムのスケーラビリティ評価～



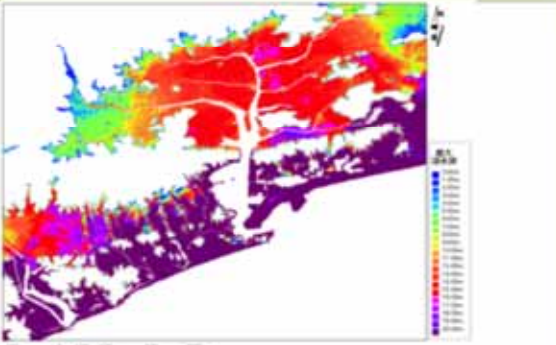
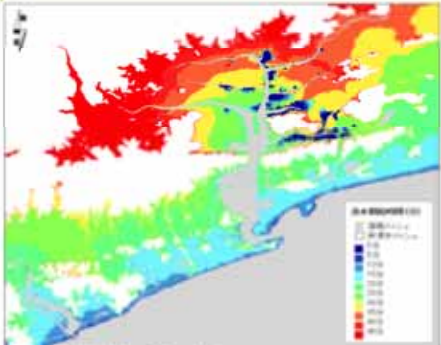
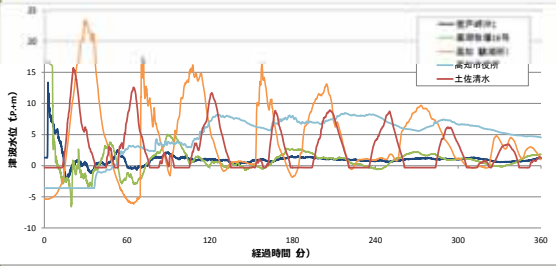
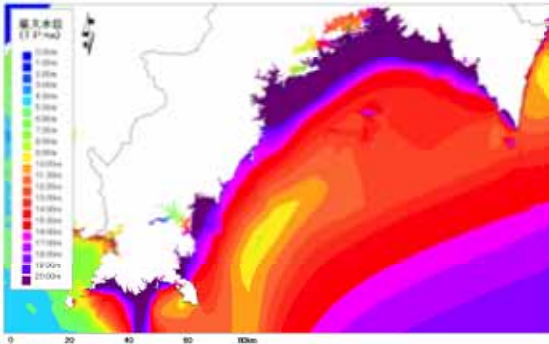
(高知市の例, 2時間分のシミュレーション)



\*Onishi et al. Near-field tsunami inundation forecast using the parallel TUNAMI-N2 model: Application to the 2011 Tohoku-Oki earthquake combined with source inversions, Geophysical Research Letter 42(2), p1083-1091, 2015.

# 津波浸水被害予測結果の可視化

## 提供される情報

優先順位	項目	イメージ	優先順位	項目	イメージ
1	到達時間		4	被害推定	
2	最大浸水深		5	浸水開始時間	
3	水位時系列		6	最大水位	



# 東北大発産学連携ベンチャー企業 RTi-castの立ち上げ

★設立日：2018.3.1

★所在地：仙台市

★主な事業内容

- ・リアルタイム津波浸水・被害推定システムの構築・整備・運用
- ・同システム等を用いた予測情報、計算結果の提供
- ・災害およびその発生に関する研究・開発・教育・普及・啓蒙・コンサルティング

★出資団体

- ・国際航業株式会社
- ・株式会社エイツー
- ・東北大発ベンチャーパートナーズ
- ・日本電気株式会社
- ・他

シミュレーションとデータ科学の融合：  
高性能計算基盤とそのクリアアプリ



# サイバーサイエンスセンターの新システム導入計画

★2020年10月に新システムをサービス開始！

- 総合演算性能1.8Pflop/s
- 愛称募集中!(詳しくは[www.cc.tohoku.ac.jp](http://www.cc.tohoku.ac.jp)へ)

ベクトル型スーパーコンピュータSX-Aurora TSUBASA

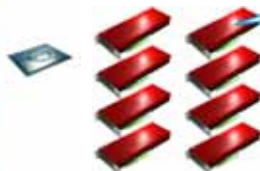


HPCI



NEC SX-Aurora TSUBASA B4000

AMD EPYC 7402P x1  
NEC Vector Engine Type 20B  
NEC Vector Engine Cores x8  
HBM2 Memory Module x6



2年後に20xに強化計画!

ノード間接続ネットワーク(InfiniBand HDR)

InfiniBandスイッチ QM8700



NEC LX 406Rz-2 x68

AMD EPYC 7702P x2



ストレージ DDN SFA7990XE  
実効容量 :2PB

- ユーザーデータ用領域: 2PB(実効)
- メタデータ保存用領域: 15.2TB(実効)
- ScaTeFSファイルシステム



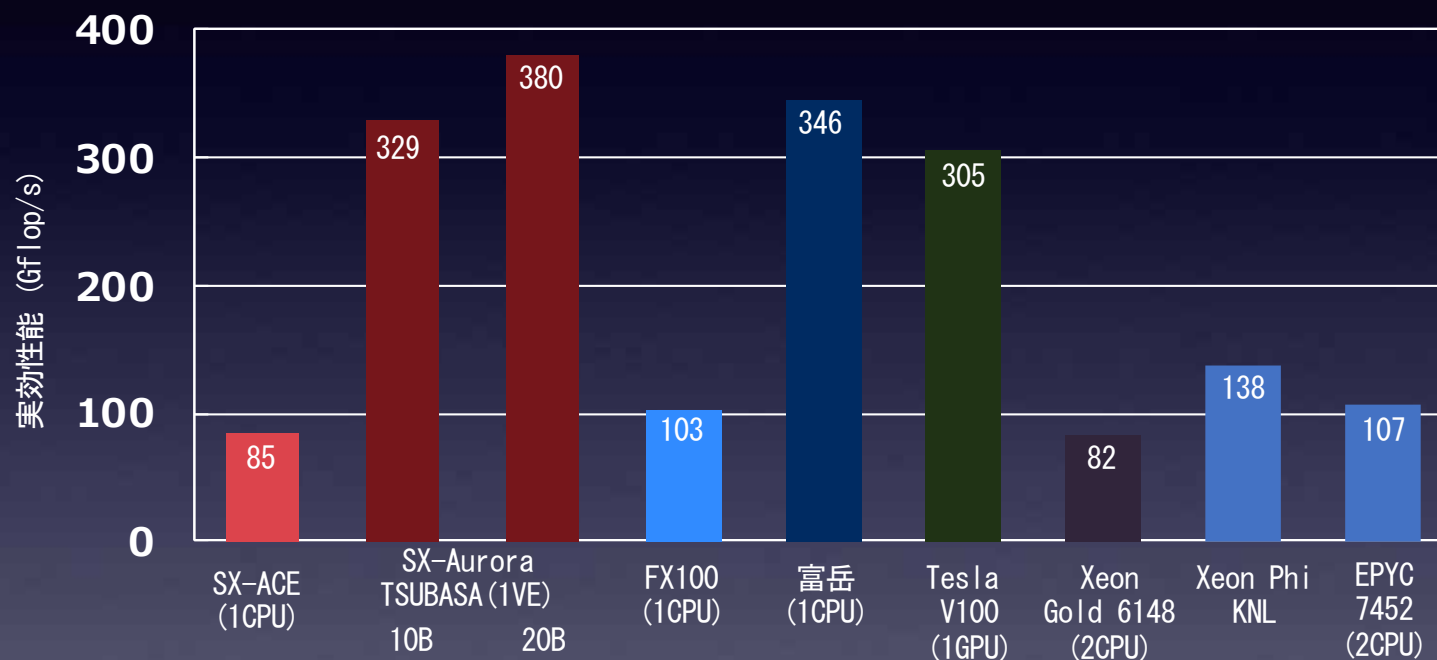
X86並列コンピュータ(AMD EPYC 7720)

シミュレーションとデータ科学の融合:

高性能計算基盤とそのキラーアプリ

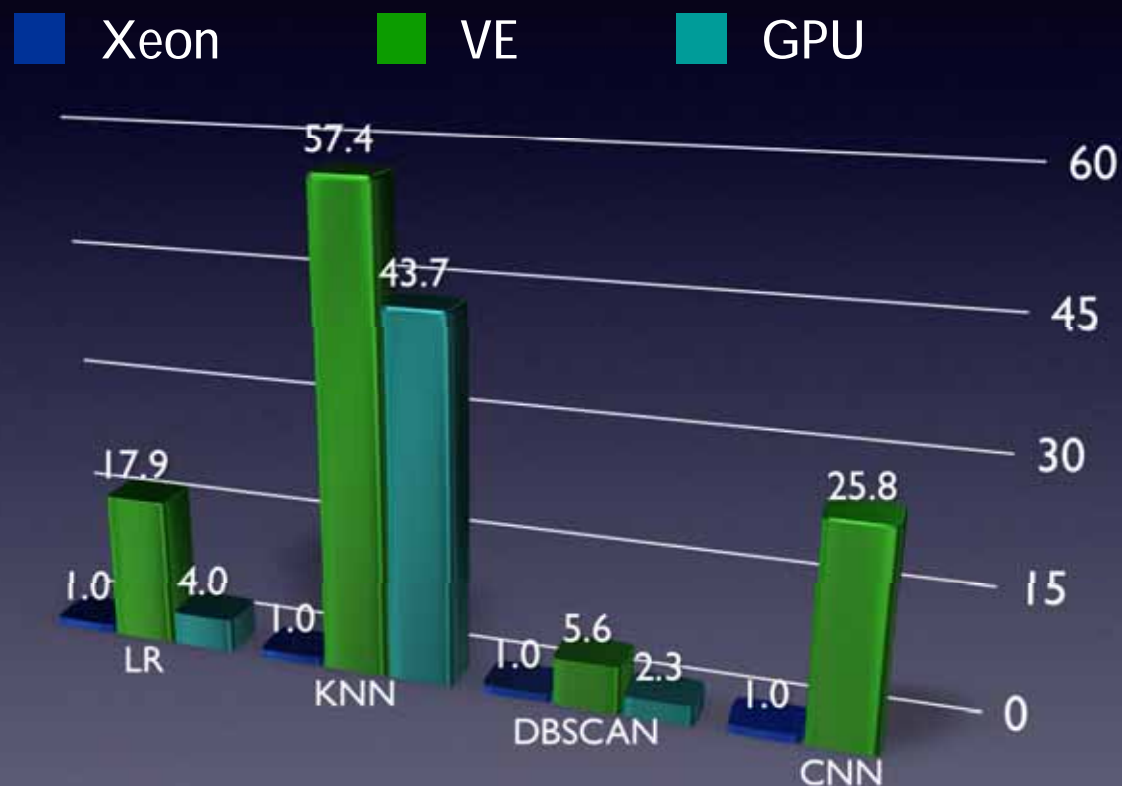
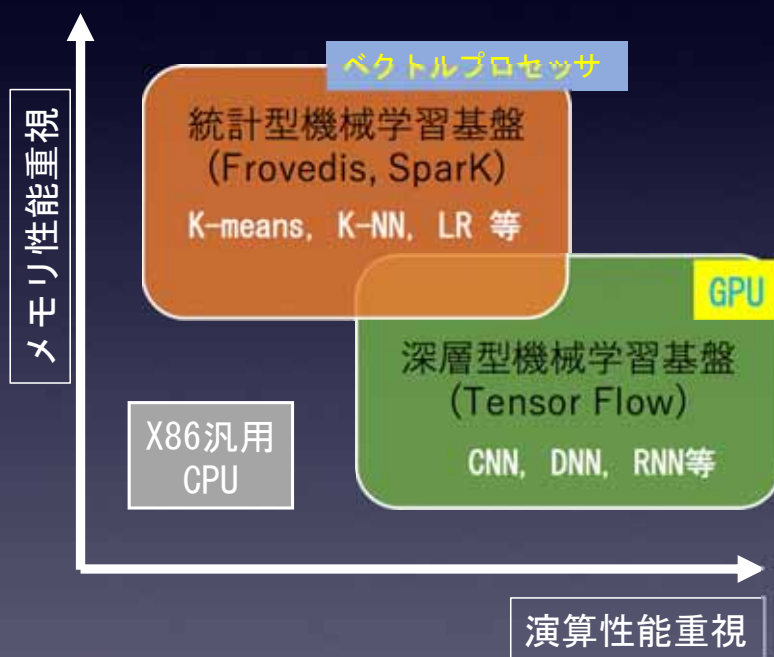
# 高メモリ性能が導き出す SX-Aurora TSUBASAの高いポテンシャル

姫野ベンチマークによる評価



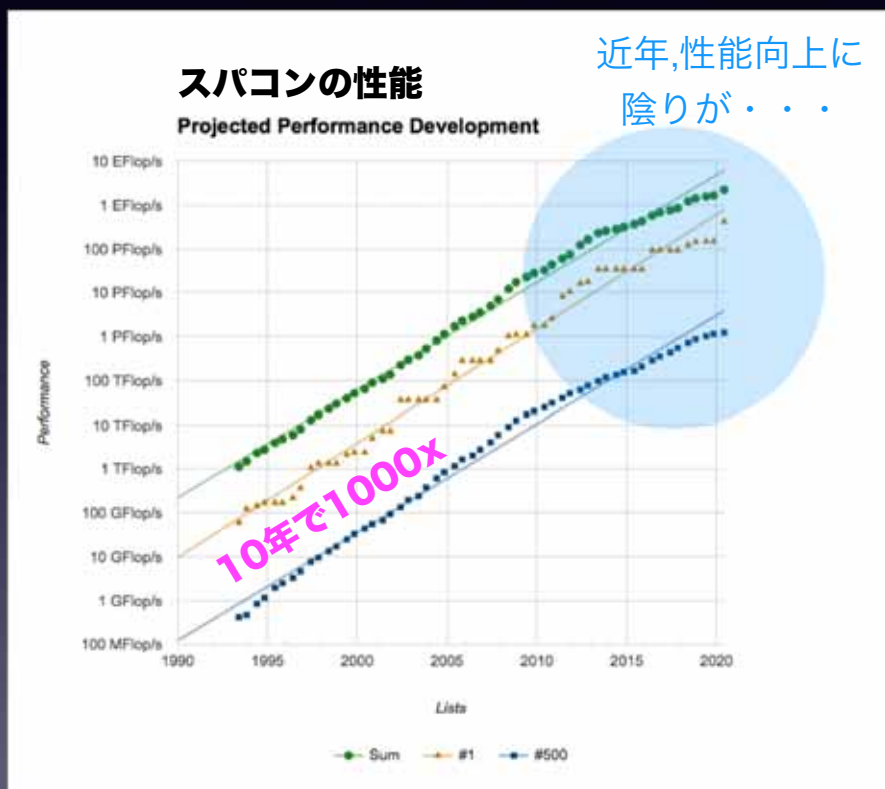
ピーク性能 (Tflop/s)	0.256	2.15	2.45	1.12	2.7	7	3.07	3.456	2.4
メモリ性能 (TB/s)	0.256	1.22	1.53	R:0.240 W:0.240	1.024	0.90	0.256	0.13	0.410

# AI・機械学習・ビッグデータ解析でも力を発揮！

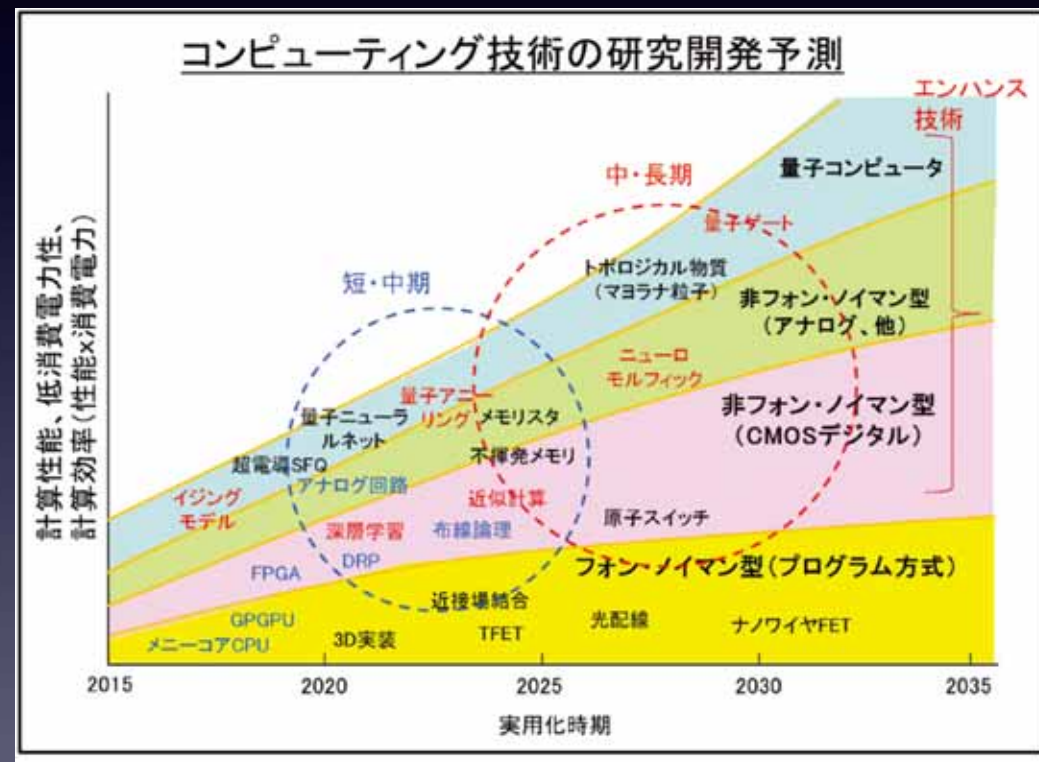


# Mooreの法則の終焉!?

## 新しい情報処理への期待



[www.top500.org](http://www.top500.org)

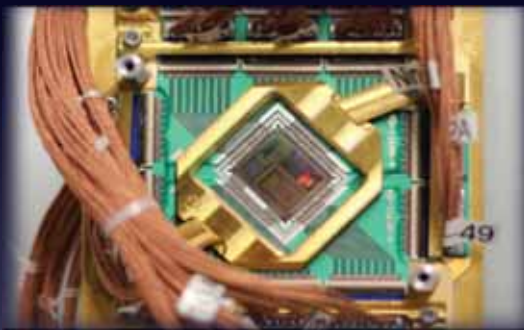


科学技術未来戦略ワークショップ報告書資料より

# 量子アニーリングへの期待: 超高速組み合わせ最適問題専用器

量子アニーリングとは、量子効果（重ね合わせの原理など）を利用したメタヒューリスティックな最適化手法

西森 秀稔教授（東工大・東北大）らが原理を考案し，D-Wave社が実用化に成功

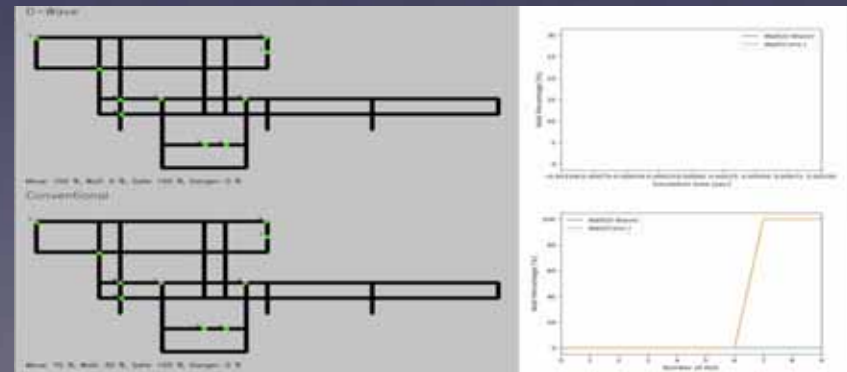
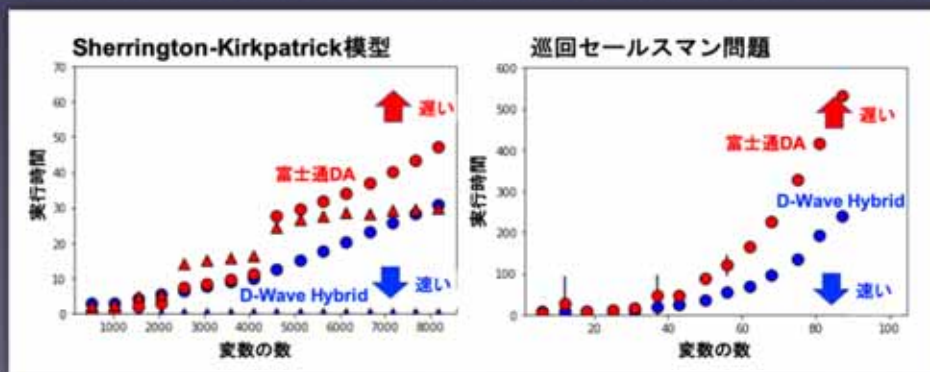


Source: D-Wave Systems



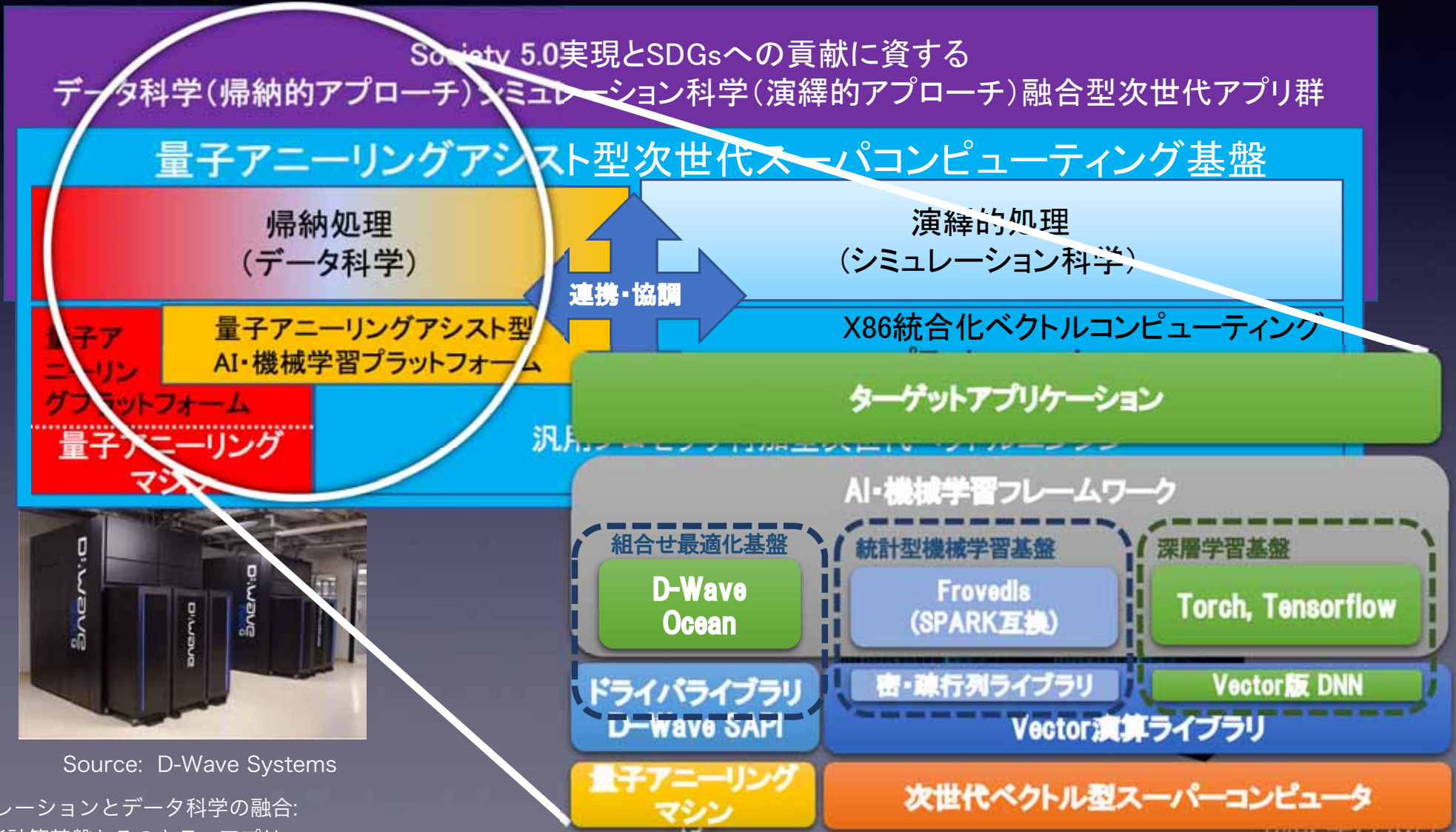
量子ゆらぎ効果を用いた  
最適解の並列探索

経路最適化、ポートフォリオ最適化、工場内の搬送最適化など多くの最適化問題の効率的な解法

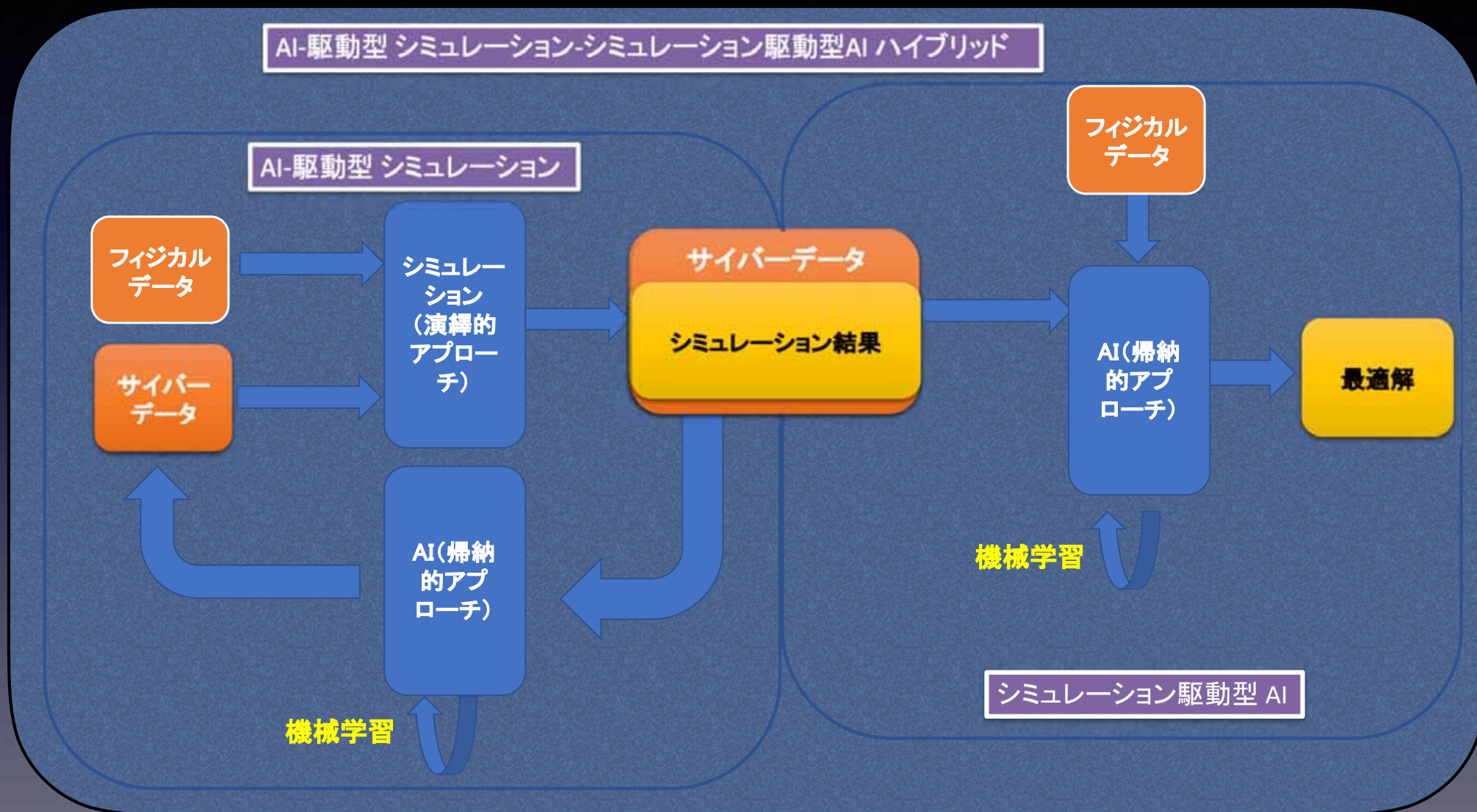


モビリティ領域への応用：工場内搬送用ロボットの運行制御  
大関真之准教授提供

# 量子アニーリングアシスト型次世代高性能計算基盤の研究開発 ～次世代HPCI基盤とデータ科学・計算科学融合型次世代アプリの創出基盤～



# データ科学・シミュレーション科学融合アプリのワークフロー





# 開発アプリケーション紹介1: 数値タービンによる実タービンのデジタルツイン化

数値タービンが実現する高性能で高信頼な次世代タービン開発 (情報科学研究科 山本 悟教授)



発電用ガスタービン

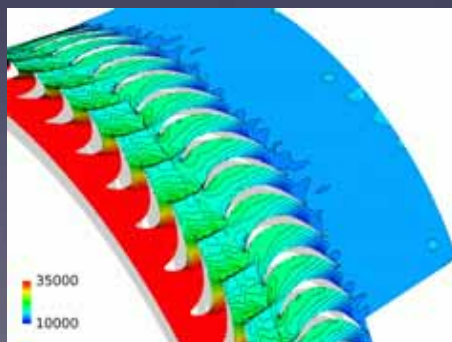


航空機用ガスタービン

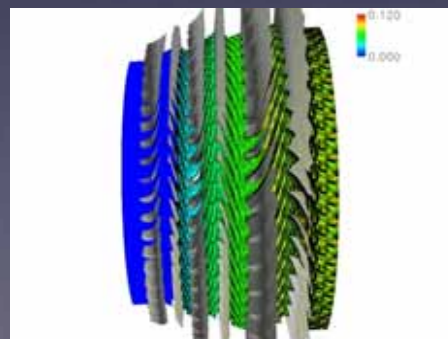


蒸気タービン

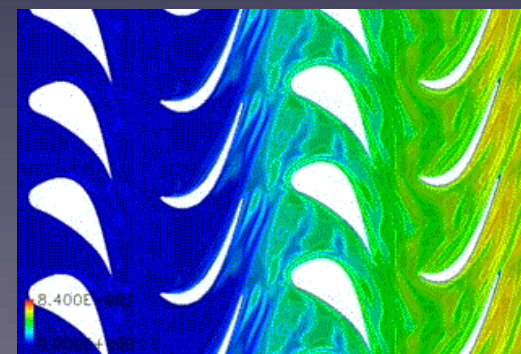
- ★ガスタービンや蒸気タービンを通る現実の流れは、大気環境や蒸気の凝縮などにより、湿りや衝撃波を伴う非定常流れ。高性能で高信頼なタービンを開発するためにはこれらの考慮が不可欠
- ★実機タービンを模擬するためには、衝撃波を伴う湿り空気流れや湿り蒸気流れをまるごと非定常で解析できるアプリが必要
- ✓これが実現できるのは世界で数値タービンのみ



タービン内部に発生する  
非定常衝撃波

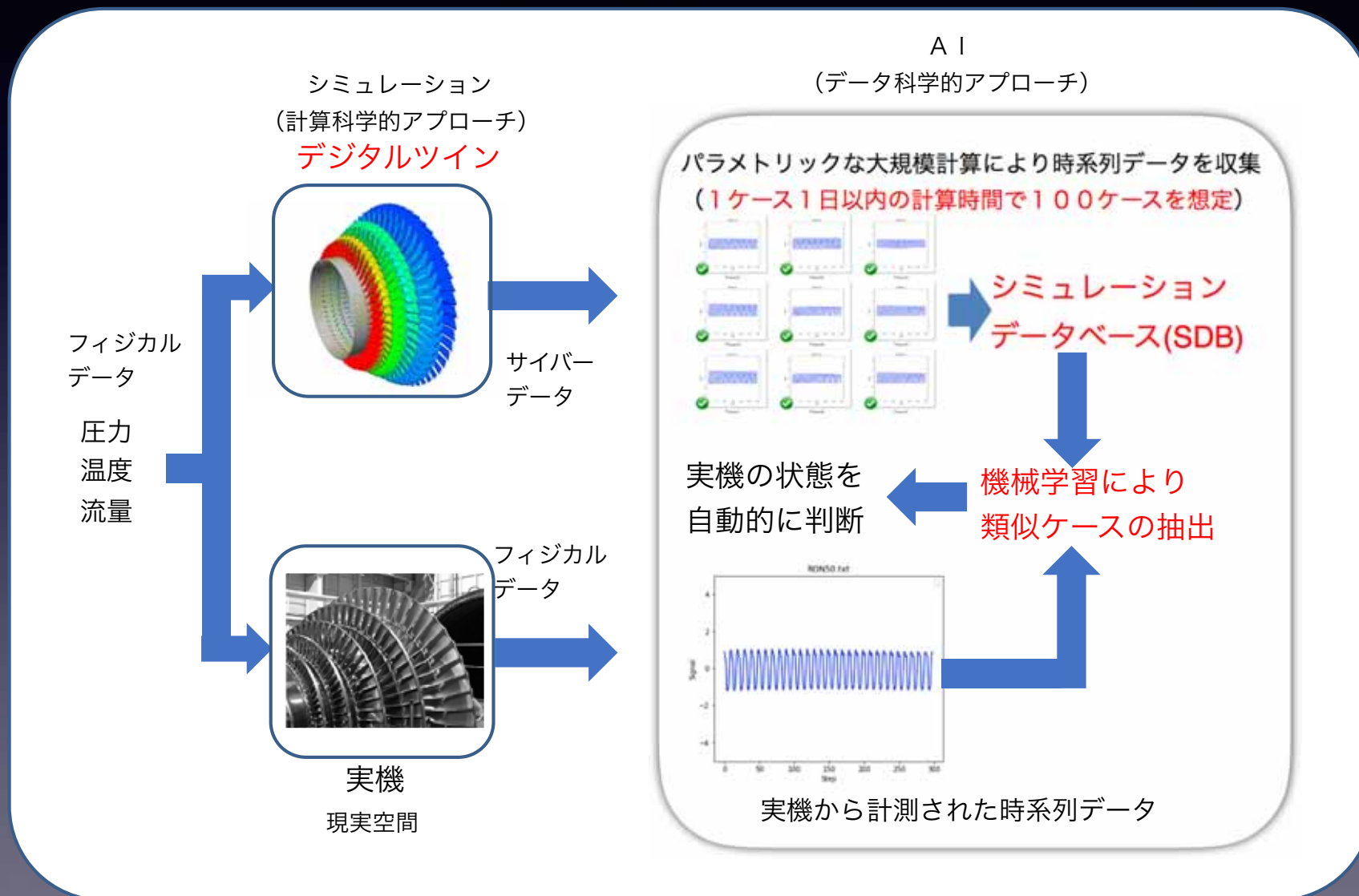


タービンまるごと非定常計算



タービン内部に発生する  
非定常湿り蒸気流れ

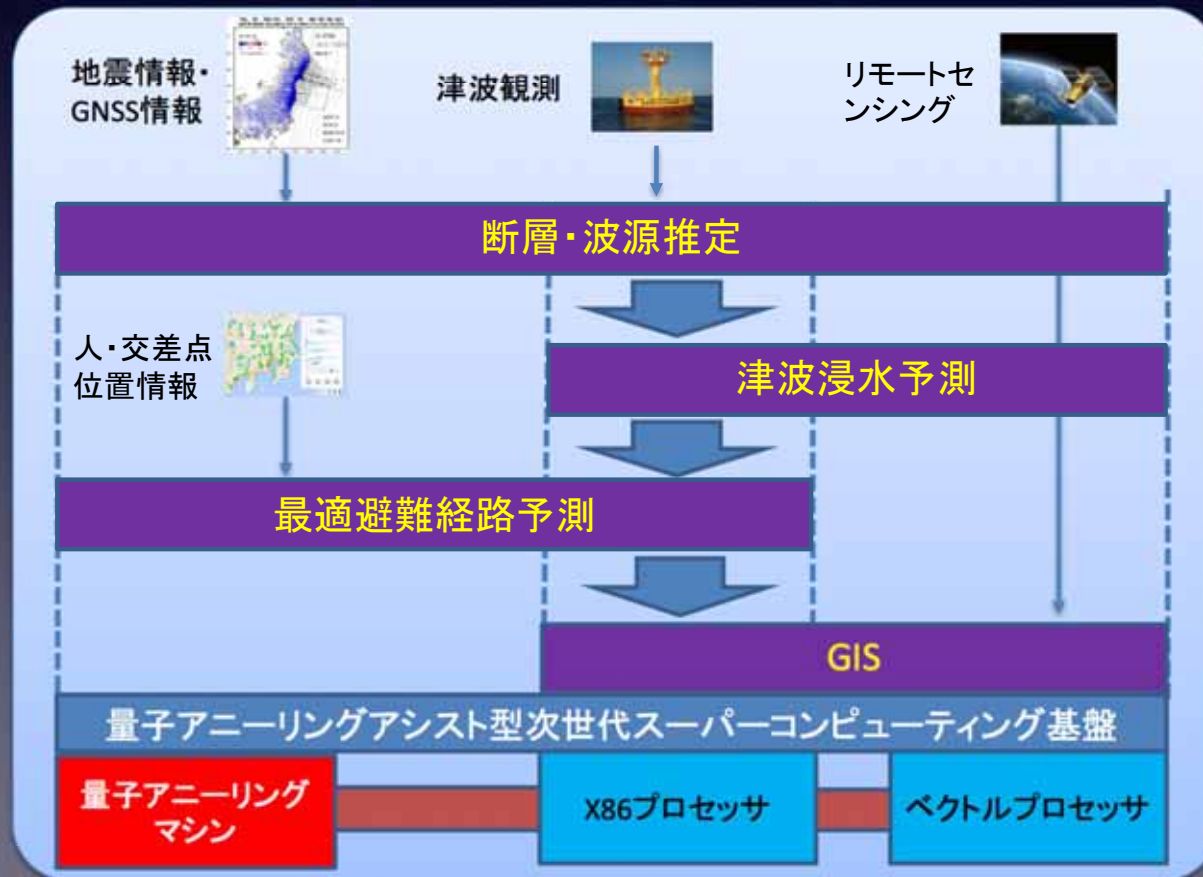
# デジタルツインによる実タービン内部推定



## アプリケーション開発2:

### リアルタイム津波被害推定・最適避難経路即時提示アプリケーションの開発

- ・時々刻々と変化する地震・津波情報からリアルタイムに被害予測・被害情報を発信
- ・データサイエンスの活用による断層推定の信頼性の向上
- ・量子アニーリングを利用したリアルタイム避難誘導システムの研究開発



津波被害推計  
津波被害情報

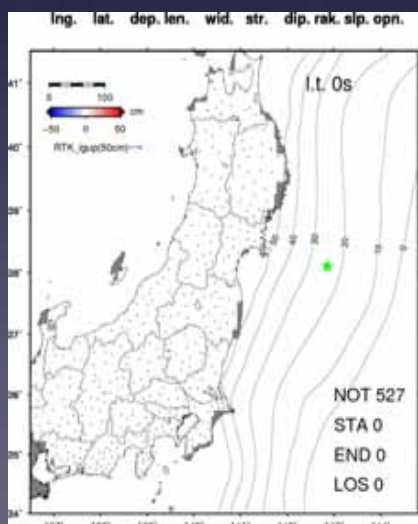
防災情報の発信



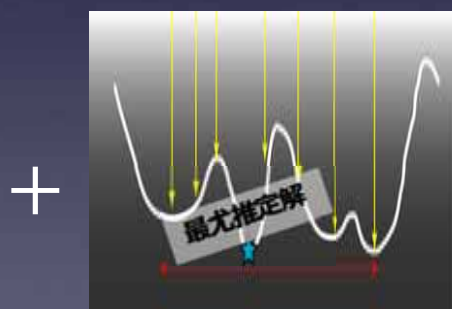
# 震源断層指定の不確実性評価と最悪シナリオによる浸水予測

- ★大規模地震の震源断層は、全地球測位システム（GNSS）の変位データから10分以内に推計
- ★しかし、その推計には不確実性があり、津波浸水被害の最悪シナリオ抽出には、断層の「誤差付き」推定が必要

詳細はこのあとの太田先生のご講演で！

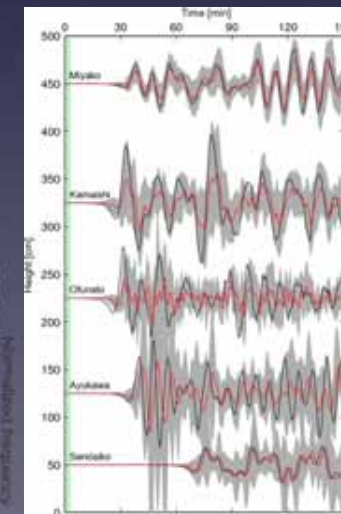
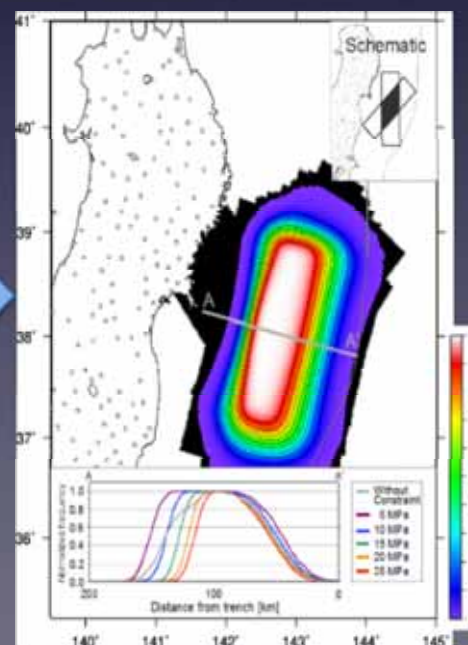


GNNSによる断層推定



データサイエンスによる誤差の把握

不確実性を反映した津波浸水予測



# リアルタイム最適避難経路推定 ～想定外を生き抜く避難計画と生存戦略～

- (1) 想定外の津波に対しても安全な避難場所（生存空間）を提示して生存可能性を高める（リアルタイム津波浸水予測との連携）。
  - (2) 地震・津波の被害状況に応じた避難経路の選択肢が無数に存在する中で、強化学習による有効な経路候補を抽出
  - (3) 人的被害を最小化するという条件（効用最大化）で量子アニーリングによる最適な避難経路や生存条件※を携帯端末の位置情報と連携させてリアルタイムに提示
- ※経路の長短，混雑の有無，津波到達時間，避難場所選択，避難開始時間等

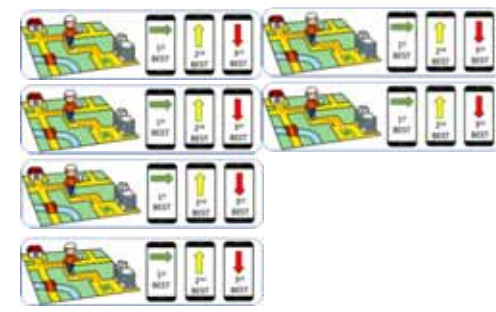
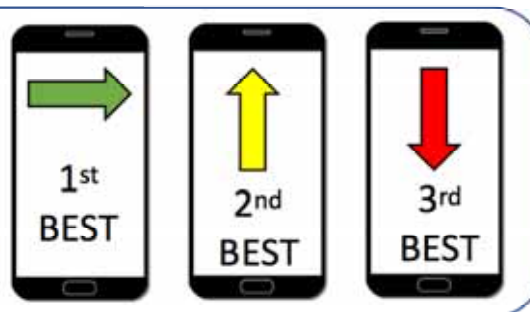


強化学習を取り入れたマルチエージェントシミュレーションによる  
避難経路候補の抽出についてはエリック先生のご講演で！

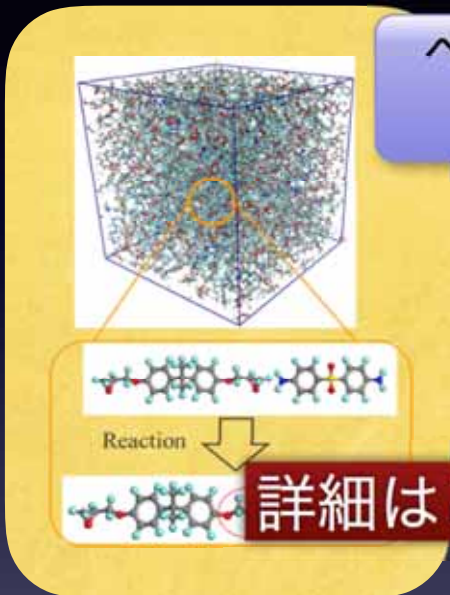
マルチエージェントシミュレーション  
(1)安全な避難場所と生存空間所の提示+(2)強化学習による避難経路候補の抽出

+

量子アニーリングによる組み合わせ最適化問題として定式化。(3)被害を最小化できる最適避難経路を選択



# アプリケーション開発3: ネットワークポリマーインフォマティクスアプリケーションの開発



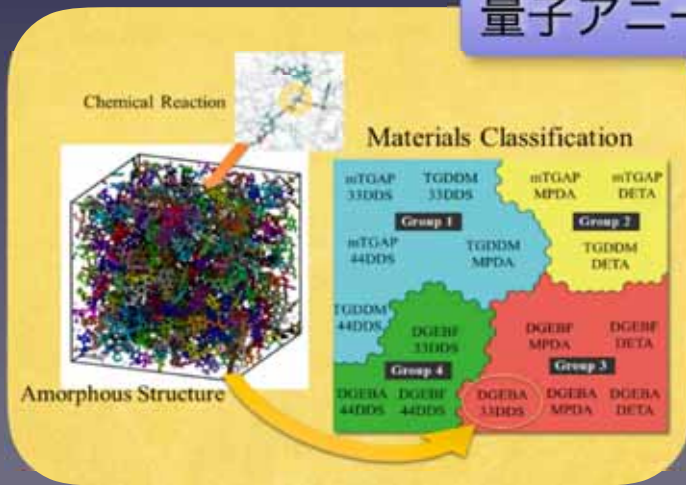
ベクトル型スーパーコンピュータによる  
高性能シミュレーション



- ✓熱硬化性樹脂の架橋ネットワーク形成に関する反応モデルの高度化・高速化
- ✓各種物性データ（機械特性・熱特性）の予測のためのマルチスケールシミュレーションの高速化

詳細はこのあとの菊川先生のご講演で！

量子アニーリングベースの機械学習フレームワーク



- ✓クラスタリング手法を組み合わせた階層的なスクリーニング
- ✓高分子材料の物理的性質に基づく高精度な学習モデルの構築
- ✓最適設計手法（逆問題）による高分子材料候補の提案



## 謝辞



TOHOKU UNIVERSITY

## リアルタイム津波被害推定システム研究会

## ★ 東北大学

- 災害国際研究所 越村俊一教授
- 同 阿部 孝志産学官連携研究員
- 理学研究科 日野亮太教授、
- 同 太田雄策准教授
- サイバーサイエンスセンター 大泉健治専門員



## ★ 国際航業

- 村嶋陽一 (東北大学客員教授)
- 鈴木崇之



## ★ NEC

- 撫佐昭裕 (東北大学客員教授)
- 松岡浩司 (東北大学サイバーサイエンスセンター協力研究員)
- 渡部 修 (東北大学サイバーサイエンスセンター協力研究員)

## ★ NECソリューションイノベータ

- 佐藤 佳彦



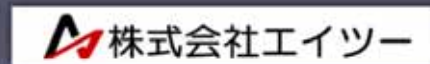
## ★ 大阪大学

- サイバーメディアセンター
- 下条真司センター長・教授
- 伊達進准教授



## ★ エイツアー

- 加地正明



## 東北大学サイバーサイエンスセンター

## 高性能計算技術開発 (NEC) 共同研究部門

- 滝沢寛之 教授
- 撫佐昭裕 客員教授 (NEC)
- 横川三津夫 客員教授 (神戸大学)
- 江川隆輔客員教授 (東京電機大学)
- 百瀬真太郎 客員准教授 (NEC)
- 小松 一彦 特任准教授
- 佐藤雅之 准教授
- 技術系職員
  - 大泉 健治 (専門員)
  - 小野 敏
  - 山下 毅
  - 齋藤 敦子
  - 森谷 友映
  - 佐々木 大輔
- サイバーサイエンスセンター協力研究員
  - 愛野 茂幸 (NEC)
  - 星 宗王 (NEC)
  - 萩原 孝 (NEC)
  - 松岡 浩司 (NEC)
  - 渡部 修 (NEC)
  - 磯部 洋子 (NEC)
  - 政岡 靖久 (NEC)
  - 曾我 隆 (NEC)
  - 藤本 壮也 (NEC)
  - 山口 健太 (NEC)



## MIシステムに関して

- 岡部朋永 教授
- 菊川 豪 准教授

## 数値タービンに関して

- 山本 悟 教授
- 古澤 卓 准教授
- 宮澤 弘法 助教

## 量子アニーリングに関して

- 大関 真之 准教授
- 観山 正道 准教授

シミュレーションとデータ科学の融合:

高性能計算基盤とそのキラーアプリ

- 文科省次世代領域開発「量子アニーリングアシスト型次世代高性能基盤の開発」
- 科研費基盤A「量子アニーリングが拓く高性能材料インフォマティクス基盤の新展開」
- SIP「CFRP向け材料インテグレーション(MI)システムの高速実装と評価」