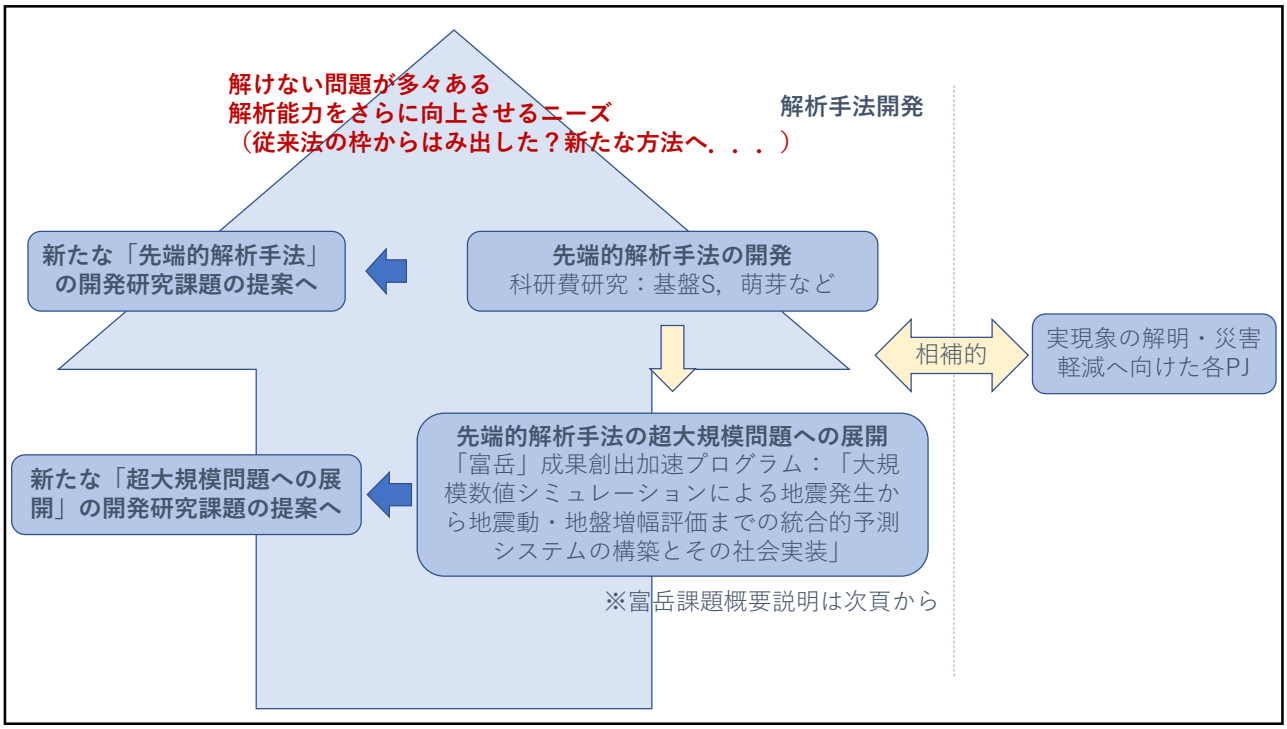
データ・コンピューティングによる高速解析
- 地震シミュレーションを例に

市村強（東京大学・地震研究所）



本課題の位置づけ・最終目標

by courtesy of Dr. Takane Hori

- 「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」
  - 応募領域：②国民の生命・財産を守る取組の強化

国の被害想定のための地震・津波災害予測におけるアプリケーション活用

- 重点課題から開発してきた大規模有限要素を用いた計算コードが、国の被害想定のもとになる長周期地震動計算や津波初期水位計算で用いられるようアプリケーションの改良を国と連携して実施する。
- 建築・土木系企業等が、国の想定と同等の計算ができる仕組みを構築する。

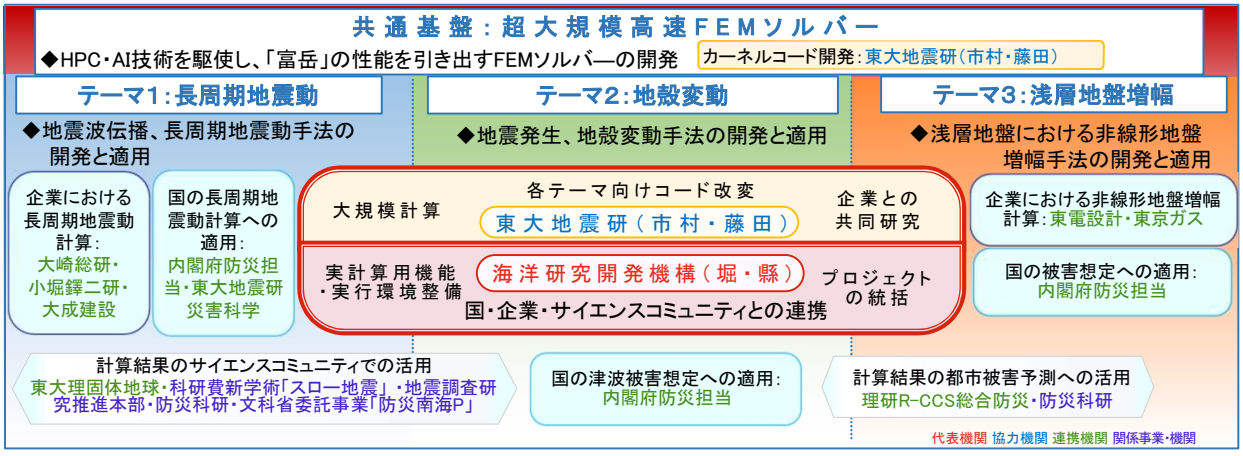
地震に関する災害被害予測のための大規模アプリケーションの開発

- 「富岳」の性能を引き出すように、計算科学・計算機科学の最先端技術を駆使して、地震に関する災害被害予測のための大規模アプリケーションを改良する。

⇨ 地震災害の定量的評価を超大規模計算で実施するための統合的予測システムを構築して、**国の被害想定における地震動・地盤増幅評価の過程に実装し、政策判断や実務等に活用される基礎を築く。**

実施体制・関係機関

by courtesy of Dr. Takane Hori



○代表機関： 海洋研究開発機構（プロジェクト代表：堀高峰）

○協力機関： 東京大学地震研究所（プロジェクト副代表：市村強）

○連携機関： 内閣府（防災担当）、東京大学大学院理学系研究科、理研R-CCS
株式会社 大崎総合研究所、株式会社小堀鐸二研究所、大成建設株式会社、東京ガス株式会社、東電設計株式会社

これまでの成果

by courtesy of
Dr. Takane Hori

国の被害想定のための地震・津波災害予測でのアプリケーション活用

- 「相模トラフ沿いの巨大地震に伴う長周期地震動による被害予測の高度化」内閣府政策統括官（防災担当）の**政策枠**での実施
  - **工学的基盤**での**周期2秒まで**の線形波動場計算を関東周辺域で実施

地震に関する災害被害予測のための大規模アプリケーションの開発

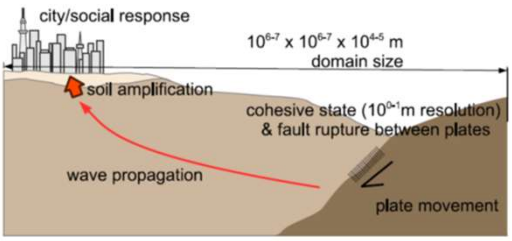
- 関東平野を含む**広域**モデルで、地下深部の地震発生から**構造物**の揺れまでのシームレスな計算を**「富岳」全系**で実施
  - 関東平野周辺から地下＆地上構造物まで**一気通貫の地震動計算**を実現

開発した計算アプリケーション群を実務で活用するための環境整備

- 国の長周期地震動計算と同等のアプリのユーザーインターフェースを整備・改良し、**現実的な地下構造**を対象とした問題に**連携企業**の方々が適用

背景

- データの蓄積により，多くの良好な三次元モデルが提案されてきている（地殻構造モデル，地盤モデル等の理～工スケールで）
- 対象の挙動は，静的/動的，非線形/線形の応答としてモデル化される



理～工の対象とする問題全体像

数理問題の観点からみると，見通しがつきやすい（レングスケールや分解能が違う位で，理と工をそこまで区別する必要はない）

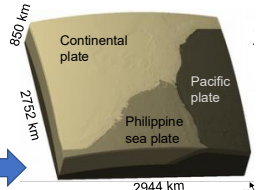
・これらの順・逆解析をする問題に帰着

・問題によって「構成則」や「感覚」は違うが.

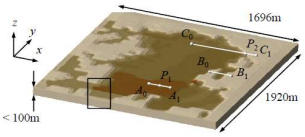
目的

（応力フリーの）境界条件や幾何形状が解に強く影響を及ぼす数理問題なので，有限要素法を使いたい．これが出来れば，理も工も共通の解析基盤にのる？

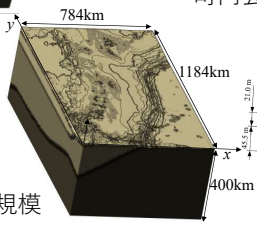
観測データ＋解析
→virtual 地球 on computer



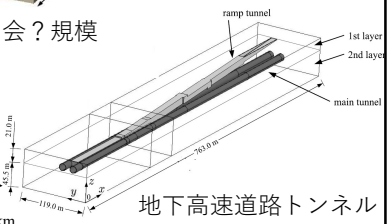
日本列島規模



町内会？規模



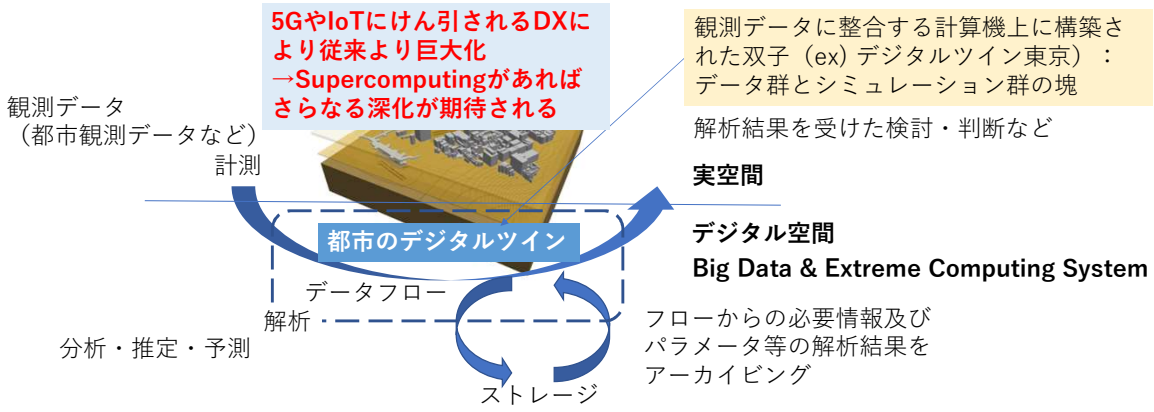
東日本規模



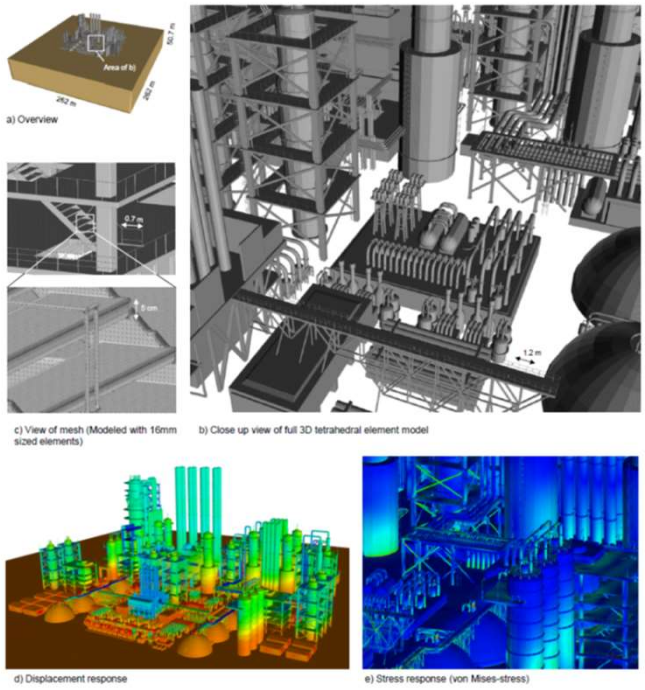
地下高速道路トンネル

理も工も関係なく，観測と解析をスムーズにつなげる
（自分以外の分野も分かりやすくなる）

Society 5.0 のためのBig data & extreme computing



多数の観測機器から得られたデータを蓄積し，**大規模・多種多様なシミュレーションを駆使して**過去・現在・未来を評価可能な都市・社会・地球の次世代デジタルツインによる未来予測・設計制御へ



Seismic structural response analysis with high fidelity model

a) overview of the plant model with surrounding two-layered ground modeled with 11,321,249,889 elements and 49,064,764,344 degrees of freedom; b) close-up; c) complex geometry modeled with 16-mm sized second-order tetrahedral elements; d) displacement response to ground shaking; and e) stress concentration, which can be evaluated for all parts of the model at high-resolution for engineering purposes.

Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Masashi Horikoshi, Larry Meadows, Kengo Nakajima, Takuma Yamaguchi, Kentaro Koyama, Hikaru Inoue, Akira Naruse, Keisuke Katsushima, Muneo Hori, Maddegedara Lalith, A Fast Scalable Implicit Solver with Concentrated Computation for Nonlinear Time-evolution Problems on Low-order Unstructured Finite Elements, IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium, 2018.

9

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 BInDOF 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.

10

地震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
  - 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

「解の収束性確認」の重要さ

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

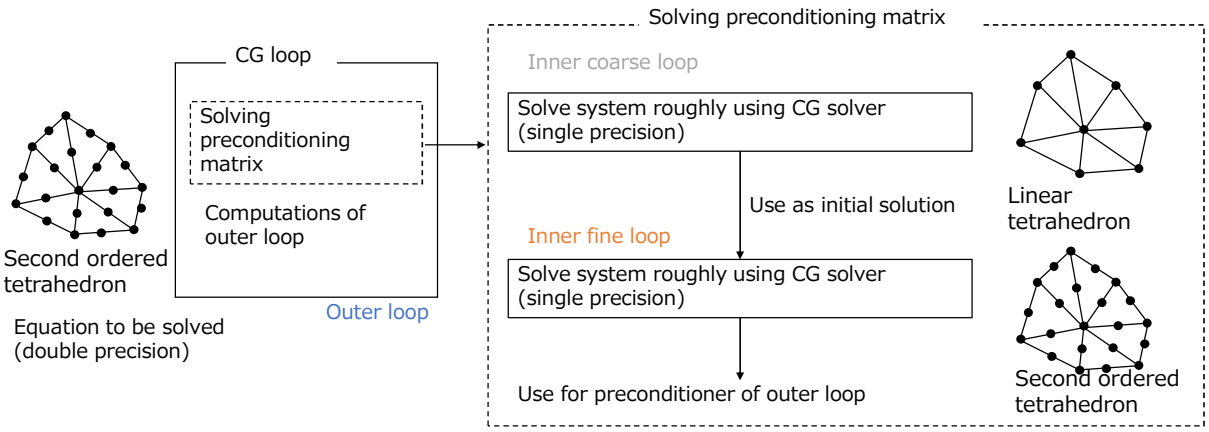
$$\left(\frac{4}{dt^2}\mathbf{M}+\frac{2}{dt}\mathbf{C}^n+\mathbf{K}^n\right)\delta\mathbf{u}^n = \mathbf{F}^n-\mathbf{Q}^{n-1}+\mathbf{C}^n\mathbf{v}^{n-1}+\mathbf{M}\left(\mathbf{a}^{n-1}+\frac{4}{dt}\mathbf{v}^{n-1}\right)$$

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

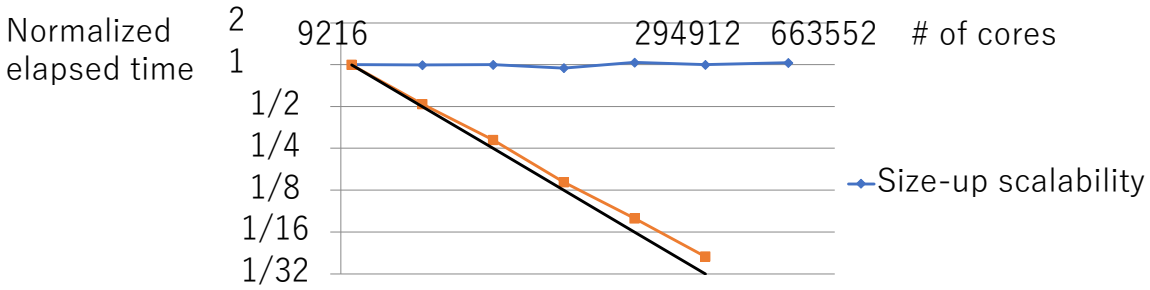
超並列用大規模有限要素解析手法



- 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

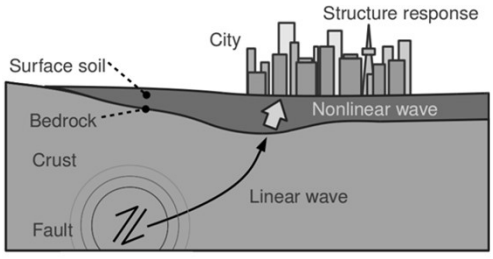
超並列大規模有限要素解析手法の効率 -富岳，京，Summit，OFP等で

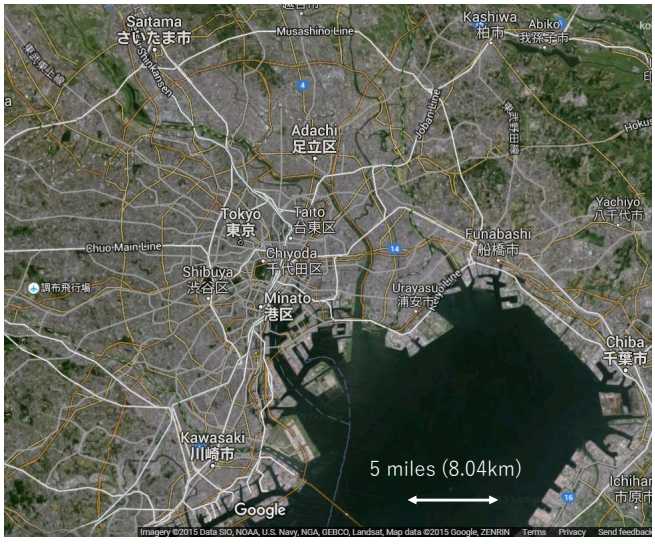
- Size-up scalability: **96.6% efficiency** from 9,216 cores to full K computer (663,552 cores)
  - Enables **18.6% of peak (=1.97 PFLOPS) & 1.08 trillion DOF @ full K computer**
  - **8.6 times faster than conventional solver** (CG + Element-by-Element + simple preconditioner (block diagonal Jacobi 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

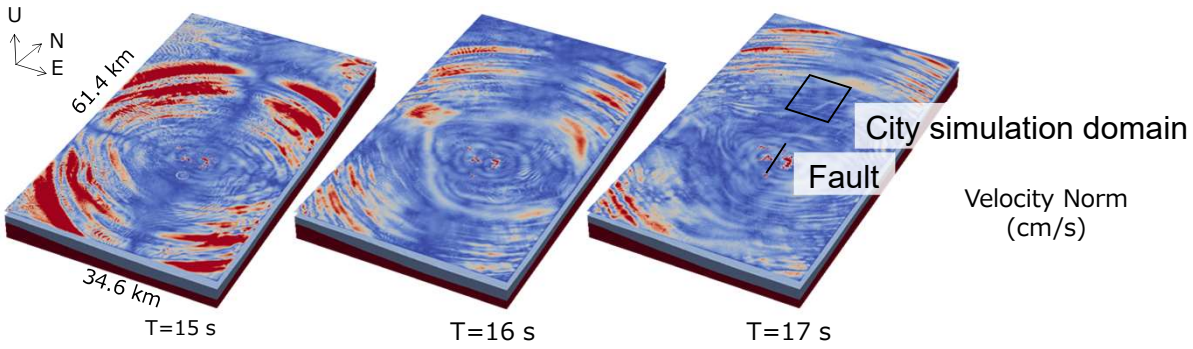
- 首都圏の山手線内を対象とした仮想首都直下地震のシミュレーション（京コンピュータの全力で）





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



データ・コンピューティング：系の性質を反映したデータによるコンピューティングの加速

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 Maddegedara, 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.

Kohei Fujita, Yuma Kikuchi, Tsuyoshi Ichimura, Muneo Hori, Lalith Maddegedara, Naonori Ueda, GPU porting of scalable implicit solver with Green's function-based neural networks by OpenACC, WACCPD 2021: Eighth Workshop on Accelerator Programming using Directives@SC21.

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**A**と**f**は時刻n-step目に依存して変化する．

一方で，PDE　$L(x)(a(x)) = b(x)$ て，

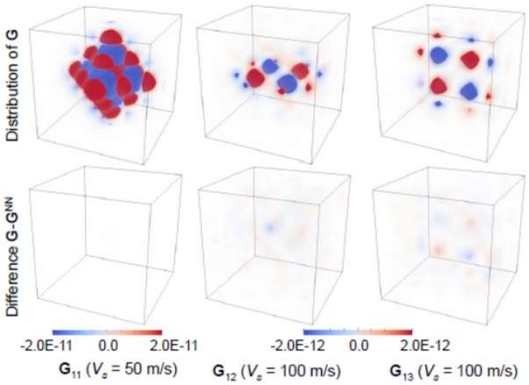
$$a(x) = \int g(x,s)b(s)\mathrm{d}v,$$
$$\text{where } L(g(x,s)) = \delta(s-x).$$

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

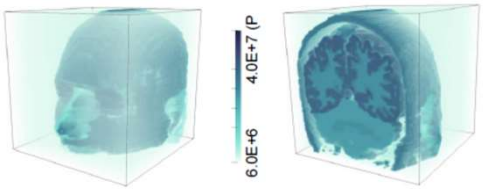
非線形波動場問題のGreen functionと
Green's function-based Neural Networks



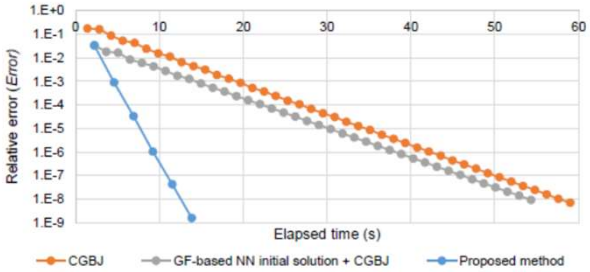
一般的なCGの前処理に用いた例

Algorithm 1 Iterative solver with NN-based preconditioner for solving Eq. (2). Here, GF-based NNs ($\mathbf{B}\tilde{\mathbf{f}}$ 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. $(\tilde{})$ and ϵ 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.

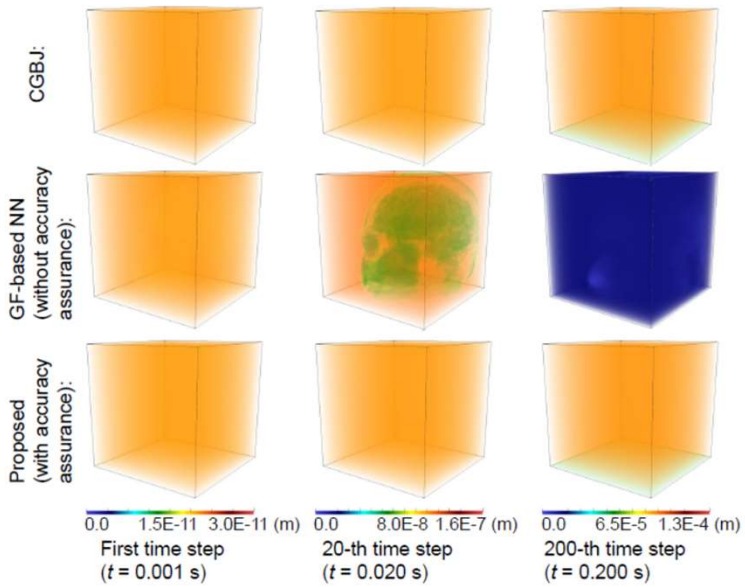
$\mathbf{r} \Leftarrow \mathbf{f} - \mathbf{A}\delta\mathbf{u}$
$\beta \Leftarrow 0$
$i \Leftarrow 1$
(* outer loop start *)
while $\|\mathbf{r}\|_2/\|\mathbf{f}\|_2 \geq \epsilon$ **do**
　(* preconditioner start *)
　$\tilde{\mathbf{r}} \Leftarrow \mathbf{r}$
　$\mathbf{z} \Leftarrow \mathbf{B}\tilde{\mathbf{r}}$ (* apply GF-based NNs inside process domain *)
　$\mathbf{z}_p \Leftarrow \tilde{\mathbf{A}}_p^{-1}\mathbf{r}_p$ (* refine solution near domain boundary and inter-process boundary using conjugate gradient solver with 3×3 block Jacobi preconditioning up to ϵ_p with Dirichlet boundary conditions with value of $\mathbf{z}$ and initial solution $\mathbf{z}_p = 0$ elsewhere *)
　$\mathbf{z} \Leftarrow \mathbf{z}$ using $\mathbf{z}$ updated with $\mathbf{z}_p$
　(* preconditioner end *)
　if $i > 1$ **then**
　　$\beta \Leftarrow (\mathbf{z}, \mathbf{q})/\rho$
　end if
　$\mathbf{p} \Leftarrow \mathbf{z} + \beta\mathbf{p}$
　$\mathbf{q} \Leftarrow \mathbf{A}\mathbf{p}$
　$\rho \Leftarrow (\mathbf{z}, \mathbf{r})$
　$\alpha \Leftarrow \rho/(\mathbf{p}, \mathbf{q})$
　$\mathbf{q} \Leftarrow -\alpha\mathbf{q}$
　$\mathbf{r} \Leftarrow \mathbf{r} + \mathbf{q}$
　$\delta\mathbf{u} \Leftarrow \delta\mathbf{u} + \alpha\mathbf{p}$
　$i \Leftarrow i + 1$
end while
(* outer loop end *)



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



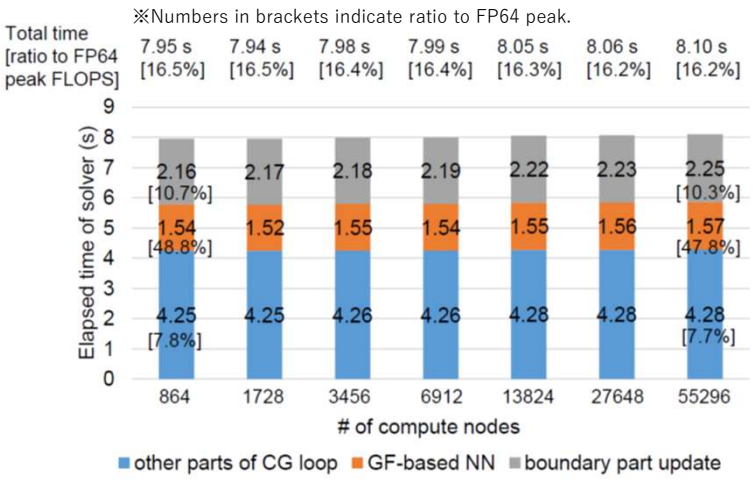
Convergence speeds of solvers for the head model measured on one Oakbridge-CX node. The convergence ratio (ratio of change in relative error per iteration) was greatly improved by the use of the GF-based NNs in each refinement iteration in the proposed method. The simple scheme using GF-based NNs for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



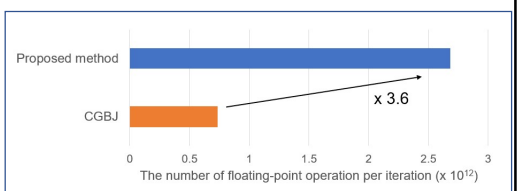
時刻歴解析結果（uの分布）
上段：従来のアプローチ
（ブロックヤコビ＋CG）
中段：人工知能のみによる
求解（NNベースG）
下段：提案手法
（人工知能前処理＋CG）

・高精度な人工知能を構築出来ているが，これだけでは精度が劣化していく
・CGと組み合わせることで，精度劣化なく解析可

・人工知能解析の精度保証をCGにより実現
・人工知能によるCGの高速化
の二つの側面



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).



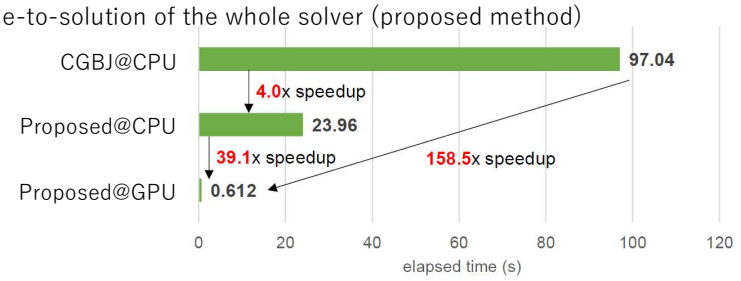
GF-based NNはsolverの収束率を改善可能だが，実は演算量自体は増加.
しかし，連続アクセス演算卓越なので高速に処理可能で，また，GF-based NNはポイントワイズな前処理なのでscaleしやすい

GPU(A100) porting with OpenACC

ABCI A100 1 computer node

		Total Hardware peak
CPU	Intel Xeon Platinum 8360Y (2.40 GHz, 36 Cores) × 2	5.529 TFLOPS
GPU	NVIDIA A100 NVLink × 8	77.6 TFLOPS

Time-to-solution of the whole solver (proposed method)

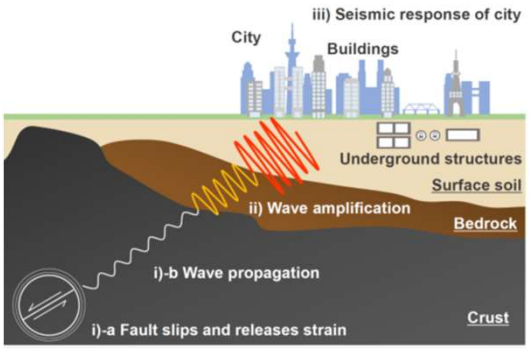


(Fix the problem size to 256 × 256 × 512 elements per GPU)

データ・コンピューティング：系の性質を反映したデータの逐次学習によるコンピューティングの加速

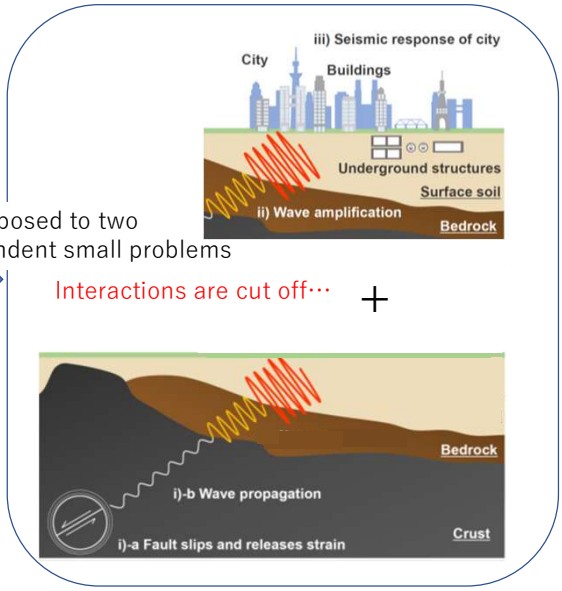
Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Kentaro Koyama, Ryota Kusakabe, Yuma Kikuchi, Takane Hori, Muneo Hori, Lalith Maddegedara, Noriyuki Ohi, Tatsuo Nishiki, Hikaru Inoue, Kazuo Minami, Seiya Nishizawa, Miwako Tsuji, Naonori Ueda, 152K-computer-node parallel scalable implicit solver for dynamic nonlinear earthquake simulation, HPCAsia2022: International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region, 18-29, 2022.

The state-of-the-art solvers@Supercomputing conference



Unprecedented & 10 exa-scale problem

Decomposed to two independent small problems



一般化可能な新たなアルゴリズム:
Integration of HPC & Data-learning is developed!

Equation-based approach + **Data-driven approach**
with High performance computing on Supercomputer

+

京から富岳への42倍のハードウェア性能向上

10 exa-scale の解析性能, Ground-breaking solver!

Equation-based と data-driven approach

- Equation-based approach
  - 低次モードは低コストで構成可能だが，高次モードの構成は高コスト
- Data-driven approach
  - コストと精度は用いるデータサイズによる.
  - 精度保証は一般に難しい
  - 全領域の高次モードの構成は難しいが，小領域ではある程度までは可
- Equation-based と data-driven approachを組み合わせることで効率的に広帯域の解を構成
  - Equation-based は低次モードの構成に，data-driven approachは高次モードの構成に用いて，これを初期解推定とする

Equation-based + data-driven initial solution estimator

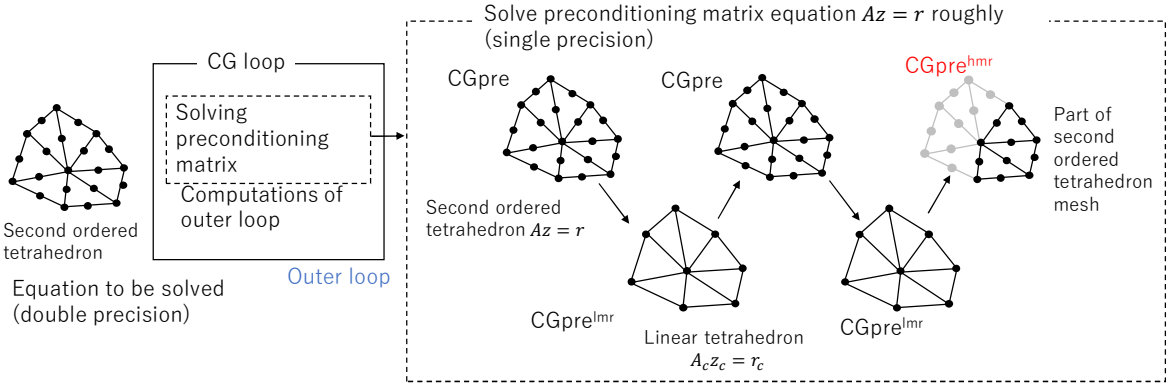
- In dynamic problem
  - Estimate initial solution → solve Ax=f with iterative solver
- Resolves high-order modes prior to iterative solver using results of previous time-steps
  - Time evolution matrix A is estimated as $X^{n-1} = AX^{n-2}$, where $X^{n-1} = [x^{n-1}, x^{n-2}, \ldots, x^{n-s}]$ using previous s steps of $x^n = \delta u^n - \delta u^n_{adam}$
  - Transient low-order modes that deteriorates accuracy of data-driven method is removed using equation-based predictor (δu^n_{adam} by Adams-Bashforth method), and data-driven approach is used to obtain non-transient high-order modes:

$$\delta u^n_{ini} = \delta u^n_{adam} + A\left(\delta u^{n-1} - \delta u^{n-1}_{adam}\right)$$

- Highly scalable on large systems as computation is local without communication
  - Time evolution matrix A can be constructed/evaluated per subdomain internal to MPI process domains

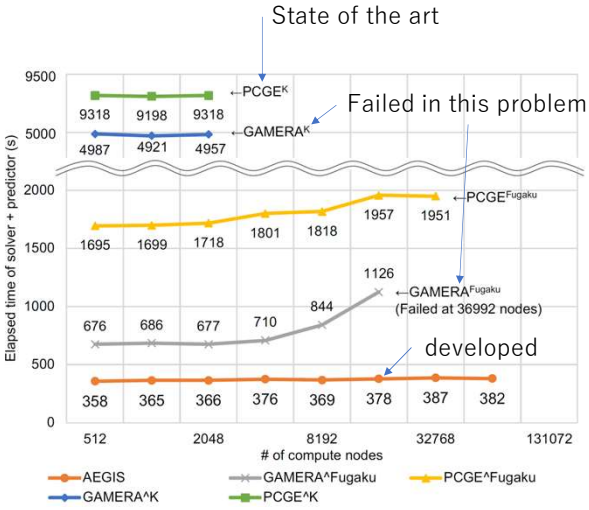
Multi-grid preconditioner

- Most high-order modes resolved with data-driven initial solution predictor; remaining high-order mode errors concentrated in parts with especially poor convergence
- Design W-cycle multi-grid preconditioner that specifically refines high-order modes at parts with poor convergency

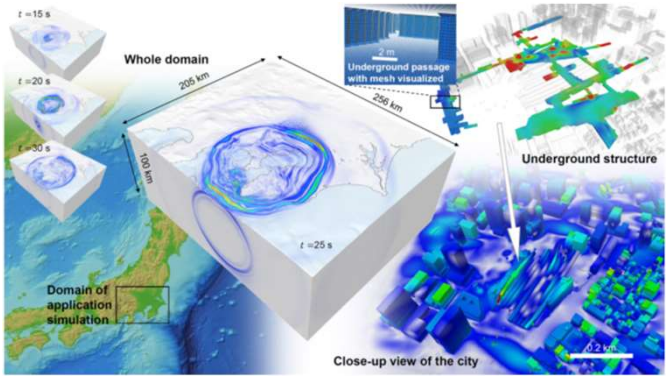


- This new algorithm is applied to earthquake simulation

- The 1,070-fold capability improvement (25.45(=9318/366) X 42) far beyond the state of the art is achieved!
  - Low-order unstructured nonlinear dynamic finite element problem (1.201 trillion DOF) solved by implicit solver
  - 19.216 trillion component dataset generated inside simulation are learned every time-step for improving simulation performance



※全て富岳上での計測



- Three-dimensional low-order unstructured nonlinear finite element analysis of an inland earthquake on a fault-structure model comprising a highly integrated city near a terminal station with soil and crust of Kanto Plain in Japan.
- The application is an ultra-large-scale and ultra-high-fidelity problem: the domain size of the entire model is 256000 × 205000 ×100000 m, discretization size varies from approximately 0.125 to 64 m, the degree of freedom is 324,006,449,076, and the number of second-order tetrahedral elements is 80,540,873,752. Enlarged view shows responses of the city with underground structures.

10 exa-scale capability

- Characteristics of target matrix is not so good…
- analyze up to 9550 time-steps (dt=0.005 sec) on Fugaku
  - With full system (152,352 computer nodes (609,408 MPI processes × 12 OpenMP threads = 7,312,896 parallel computation)) in 0.77 sec per time step

まとめ

- 計算科学
  - 物理シミュレーションの性能向上を目指した従来型のシミュレーションに加え，データとコンピューティングの連成を陽に考慮することで，解析能力を向上しうる可能性
  - 演算の質・計算アーキテクチャの性質を考慮することで，従来とは異なるタイプのアルゴリズム開発の可能性
- 地震シミュレーション
  - 従来難しいとされてきたシミュレーションがいくつか実現され，それに応じたサイエンス的検討の可能性
  - サイエンス側からの新たな計算科学への要請