

「MATLAB」提供開始：「計算・データ・学習」融合、 AI-for-HPC/AI-for-Science の実現へ向けて

中島 研吾
東京大学情報基盤センター

1. MATLAB 導入

いささか旧聞に属するが、当センターでは本年2月25日より MATLAB¹の提供を開始した。Oakbridge-CX² 及び Wisteria/BDEC-01 (Aquarius)³で利用することができる。利用は大学、短大、大学校、高専等の学位を授与する教育機関に所属するいわゆるアカデミックユーザーに限定されており、企業や研究機関に所属の方はご利用できないこと、予めご了承をお願いする次第である。客員研究員等の身分を有する場合は利用可能な場合もあるため、個別にご相談いただきたい (uketsuke(at)cc.u-tokyo.ac.jp 宛て)。

2. Wisteria/BDEC-01・h3-Open-BDEC による「計算・データ・学習」融合、 AI-for-HPC/AI-for-Science の実現

東京大学情報基盤センターで2021年5月に運用を開始した「Wisteria/BDEC-01⁴」は、「シミュレーション (Simulation)・データ (Data)・学習 (Learning) (S+D+L)」融合を目指す BDEC システム構想 (Big Data & Extreme Computing) に基づくシステムの第1号機であり、シミュレーションノード群 (Odyssey) とデータ・学習ノード群 (Aquarius) の2つの計算ノード群を有したシステムである (図1)。シミュレーションノード群 (Odyssey) とデータ・学習ノード群 (Aquarius) は、合計160本の InfiniBand EDR (100Gbps) を用いて2.0TB/秒のネットワークバンド幅で結合されている。また、データ・学習ノード群 (Aquarius) は合計800Gbpsのネットワーク転送速度で外部との通信が可能である。Aquariusの一部のノードは SINET 等の外部ネットワークを介して、サーバー、ストレージ、センサーネットワークを含む様々な外部リソースに直接アクセス可能であり、観測データをリアルタイムに取り込んで解析、シミュレーションに利用することも可能である。

当センターで開発した「ppOpen-HPC (自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境)⁵」, 「h3-Open-BDEC (「計算+データ+学習」融合のための革新的ソフトウェア基盤)⁶」を利用し、高性能なアプリケーションを容易に開発することが可能である。計算科学シミュレーションは多くの場合、非線形な問題を扱うため、多数のパラメータスタディが必要となる。Wisteria/BDEC-01 では、機械学習による最適パラメータ推定を、外部から取り込んだ実験・観測データによる同化と組み合わせ、正確な解をより短時間で求めることを目指している (図2)。h3-Open-BDEC はそのようなアプリケーションの開発を支援する機能とともに、シミュレーションノード群 (Odyssey) とデータ・学習ノード群 (Aquarius) が協調したワーク

¹ <https://jp.mathworks.com/products/matlab.html>

² <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/matlab.php>

³ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/service/matlab.php>

⁴ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/service/>

⁵ <https://github.com/Post-Peta-Crest/ppOpenHPC>

⁶ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/h3-Open-BDEC/>

ロードの実行を支援する機能も提供している [参考文献 1,2]。

これらのソフトウェア (h3-Open-SYS/WaitIO-Socket, h3-Open-UTIL/MP) は 2022 年 6 月から Wisteria/BDEC-01 で利用可能となっており, Odyssey と Aquarius を連携させた実行が可能となっている (図 3, 図 4)。詳細は [参考文献 3-6] をご覧いただきたい。

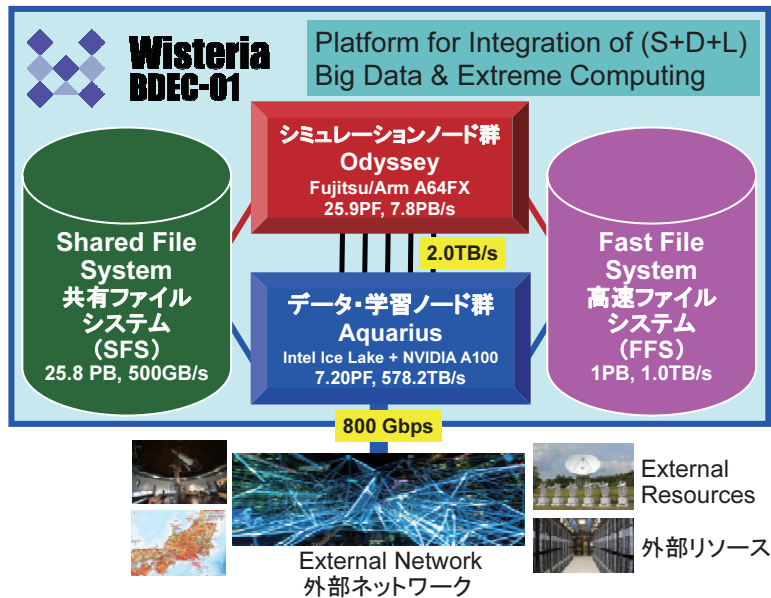


図 1 Wisteria/BDEC-01 の概要

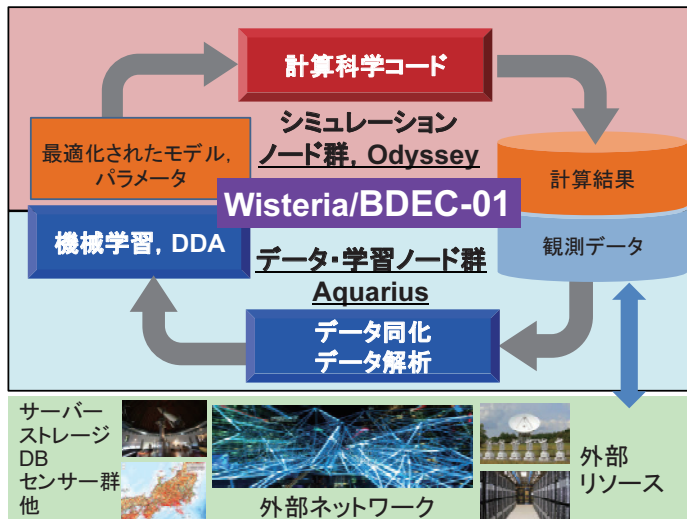


図 2 Wisteria/BDEC-01 利用による「計算・データ・学習」融合のイメージ [1,2]

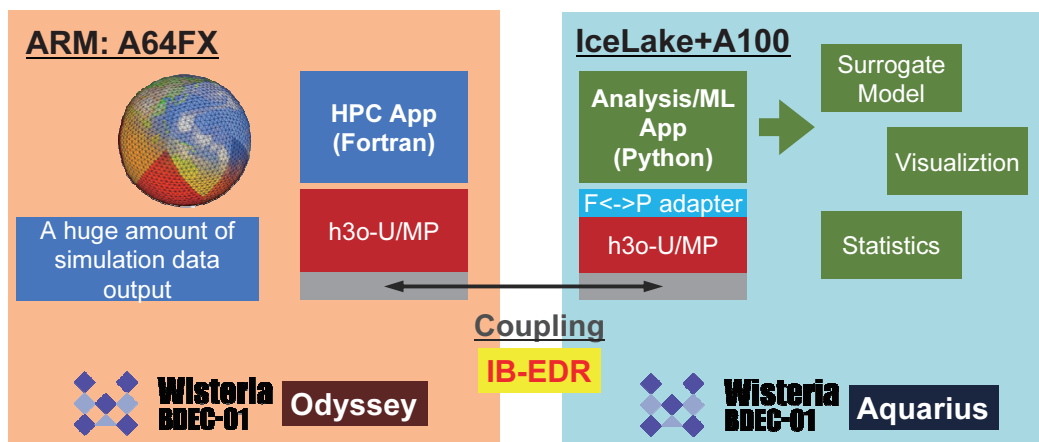


図3 h3-Open-UTIL/MP による，Odyssey（計算科学）・Aquarius（機械学習）連携ワークロードの例 [1,2]

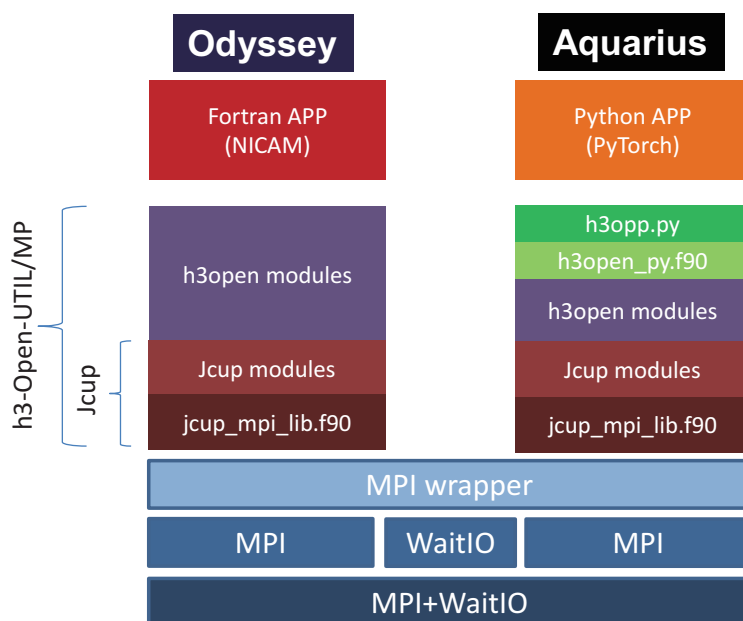


図4 h3-Open-UTIL/MP・h3-Open-SYS/WaitIO-Socket と MPI を併用した異機種間結合プログラムの構成 [1,2]

3. MATLAB への期待

MATLAB は数値計算，データ解析，機械学習などの様々な機能をサポートし，アルゴリズム開発やモデル作成に使用されている。Fortran, C/C++, Python 等で記述したプログラムから呼び出すことができる他，様々な CPU, GPU, それらのクラスタでも使用することが可能である。

当センターの利用者のほとんどは，自作，またはオープンソースのプログラムを実行している。今回の MATLAB 導入にあたっては，このようなユーザーの特性を考慮して，プログラムから MATLAB を呼び出す機能に特に着目した。

MATLAB のデータ解析，機械学習に関連する豊富な機能と，ユーザーの計算科学シミュレーションコードを組み合わせることによって，「計算・データ・学習」融合，

AI-for-HPC/AI-for-Science の実現に資するものと期待している。MATLAB は Odyssey では利用できないものの、前節で紹介した h3-Open-UTIL/MP, h3-Open-SYS/WaitIO-Socket 等の h3-Open-BDEC のソフトウェア群を使用すれば、Odyssey で稼働するプログラムから、MATLAB を呼び出す Aquarius 上のプログラムと連携させることも容易である。また、h3-Open-BDEC は様々な環境で動作するため、MATLAB と組み合わせるソフトウェア及び「計算・データ・学習」融合、AI-for-HPC/AI-for-Science の考え方の普及も実施していく予定である。

当センターでは、2020 年度より萌芽共同研究公募課題「AI for HPC : Society 5.0 実現へ向けた人工知能・データ科学による計算科学の高度化（試行）」⁷を実施している。本年度から随時募集となっているが、特に MATLAB を活用した「計算・データ・学習」融合、AI-for-HPC/AI-for-Science の事例を募集している。ご興味ある方（現ユーザーには限定せず）は、是非 [uketsuke\(at\)cc.u-tokyo.ac.jp](mailto:uketsuke(at)cc.u-tokyo.ac.jp) 宛てご一報いただきたい。

参 考 文 献

- [1] 住元真司, 荒川隆, 坂口吉生, 松葉浩也, 八代尚, 塙敏博, 中島研吾, WaitIO-Socket : 異種システム上の複数 MPI プログラムを結合する通信ライブラリの試作, 情報処理学会研究報告 (2021-HPC-181-7), 2021
- [2] 中島研吾, 古村孝志, 鶴岡弘, 松葉浩也, 坂口吉生, 住元真司, 笠井良浩, 池田輝彦, 八代尚, 荒川 隆, 塙敏博, 観測データ同化による長周期地震動リアルタイム予測へ向けた試み, 情報処理学会研究報告 (2021-HPC-182-08), 2021
- [3] 住元真司, 坂口吉生, 松葉浩也, 中島研吾, Wisteria/BDEC-01 利用事例 (3) データ受け渡しライブラリ h3-Open-SYS/WaitIO (1/2), スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター), Vol.24-2, 2022
https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL24/No2/10_202203Wisteria-1.pdf
- [4] 住元真司, 坂口吉生, 松葉浩也, 中島研吾, Wisteria/BDEC-01 利用事例 (4) データ受け渡しライブラリ h3-Open-SYS/WaitIO (2/2), スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター), Vol.24-3, 2022
https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL24/No3/12_202205-Wisteria-1.pdf
- [5] 荒川 隆, 八代 尚, 中島研吾, Wisteria/BDEC-01 利用事例 (5) マルチプログラム連成ライブラリ h3-Open-UTIL/MP (1/2), スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター), Vol.24-3, 2022
https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/public/VOL24/No3/13_202205-Wisteria-2.pdf
- [6] 荒川 隆, 八代 尚, 住元真司, 中島研吾, Wisteria/BDEC-01 利用事例 (5) マルチプログラム連成ライブラリ h3-Open-UTIL/MP (2/2), スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター), Vol.24-4, 2022 (本号に掲載予定)

⁷ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/exploratory/AIforHPC/>