

# Co-Design of BD/ML/AI with HPC using BD/ML/AI

- for survival of HPC

Acceleration and Scaling of  
BD/ML/AI via HPC and  
Technologies and  
Infrastructures

Large Scale Graphs

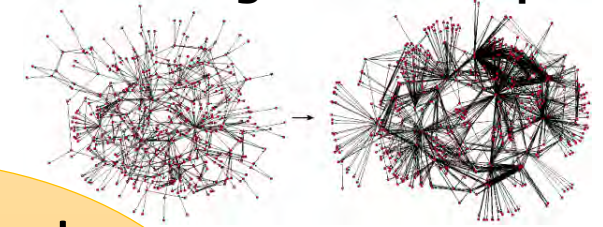
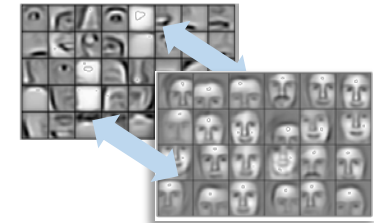
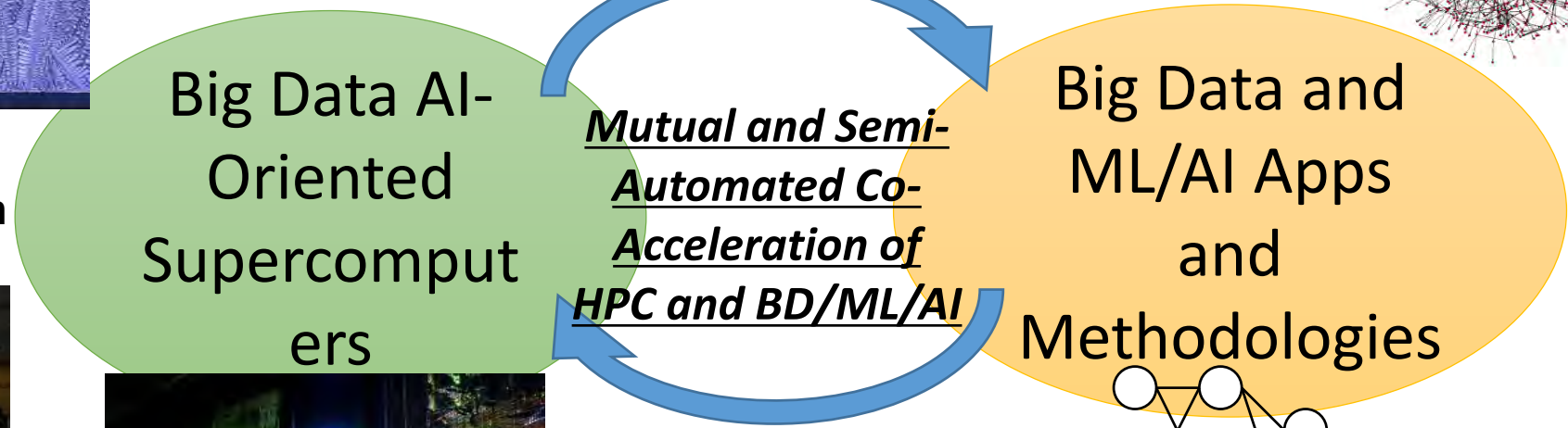
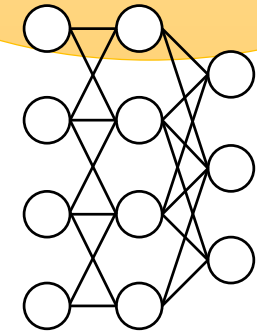


Image and Video



Robots / Drones



**Accelerating Conventional HPC Apps**

**Optimizing System Software and Ops**

**Future Big Data-AI Supercomputer Design**

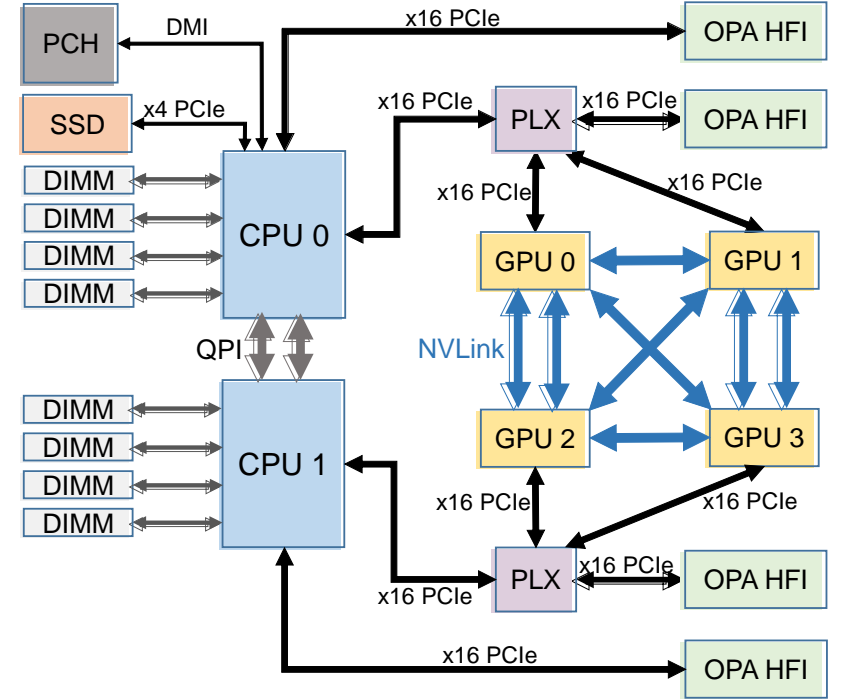
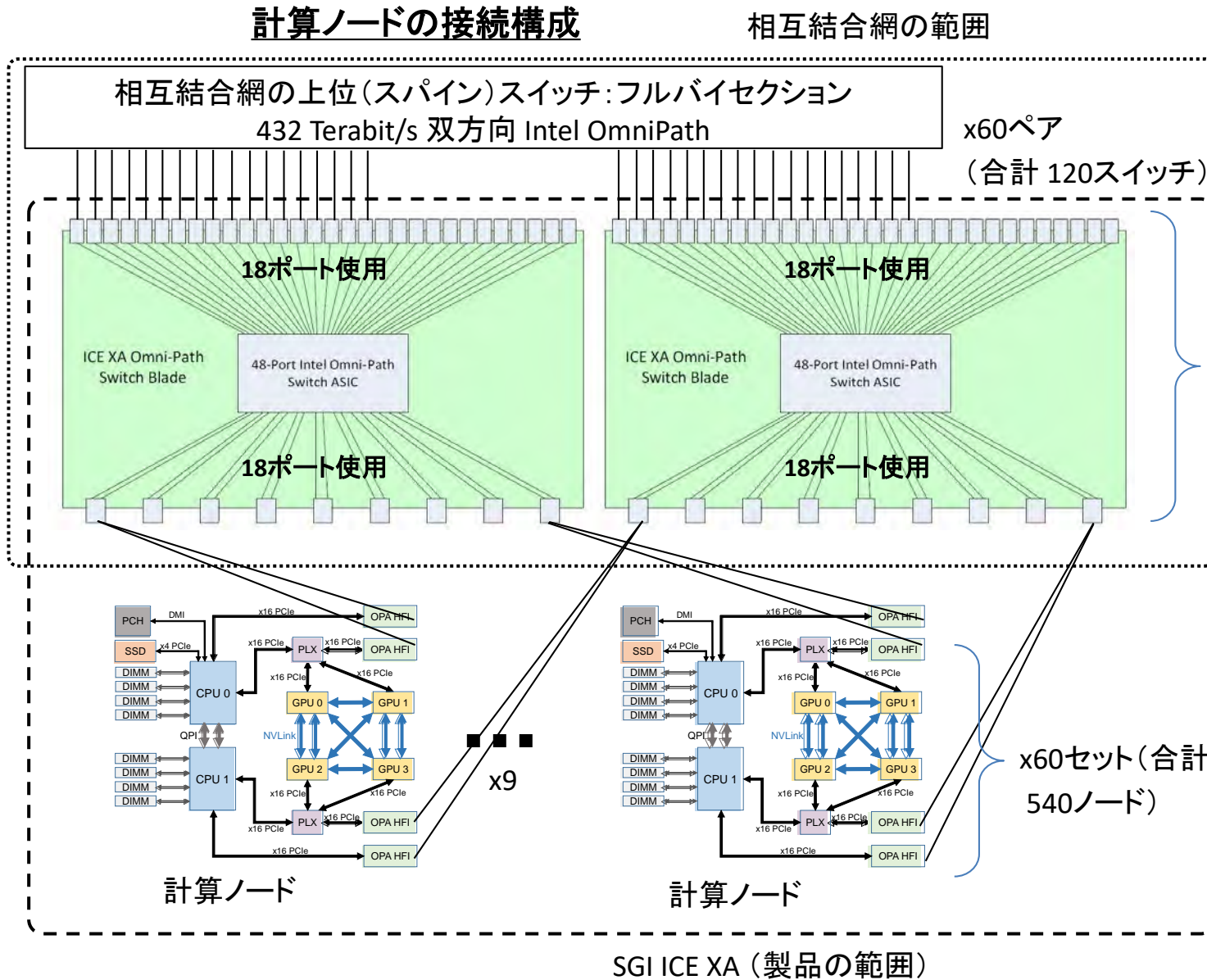


ABCI: World's first and largest open 100 Peta AI-Flops AI Supercomputer, Fall 2017, for co-design

Acceleration  
Scaling, and  
Control of HPC via  
BD/ML/AI and  
future SC designs

# Backup

# TSUBAME3.0 計算ノード(Ⅱ) SGI ICE-XA ベース、ノードはSGI社と東工大GSICの共同設計によるTSUBAME3.0用新設計



## 超高性能な”Fat Node”構成(TSUBAMEの伝統)

- 4 SXM2(NVLink) NVIDIA Pascal P100 GPU
- 高ネットワークバンド幅 – Intel Omnipath ネットワーク 100GBps x 4 = 400Gbps
- 高 I/O バンド幅- Intel 2 TeraByte NVMe
  - システム合計容量1ペタバイト以上、2Terabyte/秒の合算バンド幅
- 高密度・高温水冷ブレード – 1ラックあたり 36 ブレード = 144 GPU + 72 CPU、50-60KW
  - 一般データセンターの10-20倍



**【東工大の強み】ハードウェア構築技術**

- 世界トップクラスの大規模スーパーコンピュータ構築技術, TSUBAME KFC (Kepler Fluid Cooling) などの省電力計算機技術と豊富な運用実績
- 高速深層学習基盤の構築技術, 大規模シミュレーション技術, 統計物理に基づくモデリング技術, 生命情報解析技術

**【産総研の強み】ビッグデータ活用ソフトウェア開発**

- 機械学習などデータ処理用計算機と高性能計算機をつなぐシステム連携技術
- 大規模環境計測データの解析技術, サービス設計技術, 確率モデリング技術, 多次元データ分析と可視化

産総研・東工大 OIL  
実社会ビッグデータの活用基盤の構築

1. ビッグデータ処理オープンプラットフォームの確立

データ処理環境

ビッグデータ処理システム

TSUBAME GPGPU 計算機 次世代 計算機

2. ビッグデータを活用するデータ処理技術の開発

データ処理

確率モデリング データ可視化  
データマイニング シミュレーション

産総研が産業界との連携・開発技術の実用化を主導

企業等	構築したビッグデータ活用基盤の利用を産業界に広く提供し、保有する実社会ビッグデータからの価値創造	自社サービスの向上に利用 ヘルスケア, eコマース	新サービスの創出に利用 プロバイダ, シンクタンク	他企業へ売却 銀行・証券・保険, 不動産, 製造業
-----	--	------------------------------	------------------------------	------------------------------

**ラボ長**  
**東工大 松岡聡 教授**  
 (クロスアポイントメントにより現 産総研 特定フェロー)

**副ラボ長**  
**産総研 小川宏高 研究チーム長**

**運営連絡会**  
 ・産総研 担当領域長  
 ・東工大 担当学院長  
 ・ラボ長、副ラボ長  
 ・各機関の事務担当者, 知財担当者

東工大 大岡山キャンパス(設置場所)

産総研 つくば第1(事務支援)

**実社会HPC班**

**研究課題1:**  
**ビッグデータ処理オープンプラットフォームの確立**  
 (班長: 産総研 高野了成 研究グループ長)

- 東工大  
 松岡聡 教授  
 横田理央 准教授、遠藤敏夫 准教授
- 産総研  
 高野了成 研究グループ長  
 小川宏高 研究チーム長  
 須崎有康主任研究員、広淵崇宏主任研究員  
 谷村勇輔主任研究員、佐藤仁研究員
- その他(予定)  
 ポスドク 2名、テクニカルスタッフ 4名  
 RA 10名(博士 4名、修士 6名)、  
 技術研修生 10名

**データ活用班**  
 研究課題「ビッグデータを活用するデータ処理技術の開発」  
 (班長: 産総研 小川宏高 研究チーム長)

**研究課題2-1: 深層学習処理基盤を用いた大規模環境計測データの解析と応用**

- 東工大 篠田浩一 教授、村田剛志 准教授
- 産総研 小川宏高 研究チーム長、李時旭 主任研究員、中村良介 研究チーム長
- その他(予定) ポスドク 2名、テクニカルスタッフ 4名、技術研修生 25名

**研究課題2-2: 実社会ビッグデータ分析とエージェントモデリングの融合技術研究**

- 東工大 寺野隆雄 教授、小野功 准教授、高安美佐子 准教授、出口弘 教授
- 産総研 本村陽一 首席研究員、櫻井 瑛一 研究員
- その他(予定) ポスドク 3名、テクニカルスタッフ 3名、  
 RA 2名(博士1名、修士1名)、技術研修生 2名 予定

**研究課題2-3: 超次元データからの弁別特徴発見システム開発と実データの応用**

- 東工大 秋山泰 教授、生命理工学研究科 山田拓司 准教授、  
 石田貴士 准教授、大上雅史 助教、関嶋政和 研究ユニットリーダー
- 産総研 瀬々潤 研究チーム長、永田賢二 主任研究員、富井健太郎 研究チーム長
- その他(予定) ポスドク 4名、  
 RA 16名(博士1名、修士15名)、技術研修生 12名、非常勤研究者(他予算) 9名

BD/AI研究資源  
 東工大TSUBAME3/2.5 ➡ **200 AI-FLOPS 以上**  
 産総研ABCI/AAIC



## 研究課題1 「ビッグデータ処理オープンプラットフォームの確立」

## 【研究内容】

産総研が整備するAIクラウド（ABCI）と東工大が有するTSUBAMEなどのスパコン（TSUBAME2.5/3.0）を高速に相互運用するための技術を導入し課題2で開発するビッグデータ解析汎用ツールを搭載する。企業ユーザ利用を促進するためにオープンプラットフォームを形成する。技術仕様やソースコードを公開するオープンプラットフォームとして開発することで、外部からの開発者やサードパーティなどの参入障壁を解消する。

## 研究項目1

高速化・低消費電力化に向けた  
ミドルウェアの研究

- ABCIやTSUBAME3.0のアーキテクチャに基づいてビッグデータ処理に特化した運用技術を最適化するミドルウェアを開発し、高速化・低消費電力化を実現する。

## 開発項目2

効率的かつ簡便なビッグデータ処理を  
支援するツールの開発

- 開発したミドルウェアを利用可能な環境を簡易に構築するために、必要なソフトウェア群を自動的にインストールするソフトウェアスタックを開発する。
- 複数のプロセスを分離可能なコンテナ技術を応用して、安定した実行環境を提供する。

橋渡し

## 【連携が想定される企業】

高速稼働するビッグデータ処理プラットフォームの提供（D社等）  
開発した設計・運用技術のデータセンター運営企業への技術移転（S社等）

研究課題2 ビッグデータを活用するデータ処理技術の開発

研究課題2-1：「深層学習処理基盤を用いた大規模環境計測データの解析と応用」

【研究内容】  
 連続的なデータとして高精度センサ（ドライブレコーダ、監視カメラ、航空機・人工衛星等）から得られる異種・大量な環境計測データからヒトやモノの動きをリアルタイムで状況認識・異常検知の解析を行う手法を研究し汎用ツール・ライブラリを設計・実装・評価する。



橋渡し

【連携が想定される企業】  
 商業施設での人流解析シミュレーション（P社等）  
 自動車メーカー、自動運転技術開発、  
 ドローンメーカー、衛星画像処理（N社等）

研究課題2-2：「実社会ビッグデータ分析とエージェントモデリングの融合技術研究」

【研究内容】  
 社会システムのデータとして数十万人の群衆の挙動などのビッグデータを取り扱うエージェントシミュレーションを高速かつ高性能に実現するための手法を研究し汎用ツール・ライブラリを設計・実装・評価する。



橋渡し

【連携が想定される企業】  
 工員の動きを含む大規模工場操業の効率化（A社等）  
 新サービスや製品設計支援の有効性の事前評価  
 （H社、T社等）

研究課題2-3：「超多次元データからの弁別特徴発見システム開発と実データの応用」

【研究内容】  
 データの自由度（特徴量の次元）が高い超多次元データを2群または多群に弁別するため、特徴量を発見し仮説検定を行うまでの作業を自動化する手法を研究し汎用ツール・ライブラリを設計・実装・評価する。



橋渡し

【連携が想定される企業】  
 創薬関連・製薬企業  
 （T社、A社、E社、D社、F社等）  
 健康食品産業

# Research on Advanced Deep Learning Applications

(Part of JST Extreme Big Data Project 2013-2018)

- **Deep Learning IS HPC!**

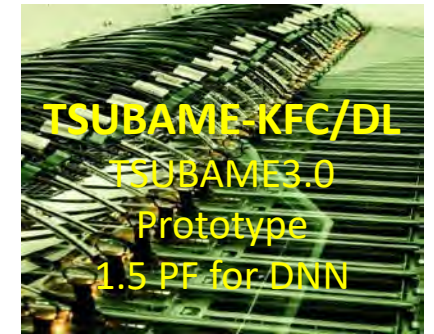
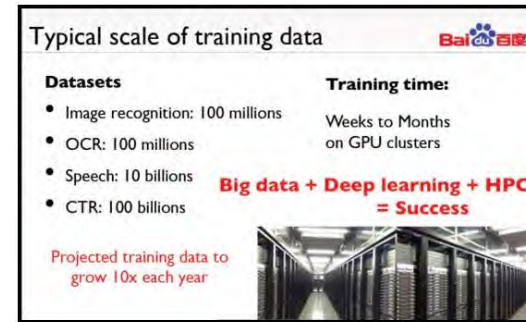
- Training models – mostly dense MatVec
- Data Access for training target data sets
- Sharing updated training parameters in neural networks

- **Goals**

- Accelerate DL applications in EBD architectures ?
  - Extreme-scale Parallelization, Fast Interconnects, Storage I/O, etc.
- Performance bottlenecks of multi-node parallel DL algorithms on current HPC systems ?

- **Current Status**

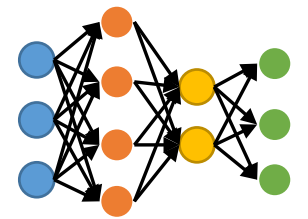
- Official Collaboration w/DENSO IT Lab signed November
- Profiling based bottleneck identification and performance modeling & optimization of a real DL application on TSUBAME
  - Great result, joint paper being prepared for submission
- **> 100 million images, 1500 GPUs (6 Pflops) 1 week grand challenge run**
- **Compete w/Google, MS, Baidu etc. in ILSVRC in ImageNet with shallow network**
  - To fit within smaller platforms e.g. Jetson
  - Got reasonable results, about 10% accuracy with 15-layer CNN
- **Denso Lab continues to run workloads on TSUBAME2.5 and TSUBAME-KFC/DL**
- In talks with other companies, e.g. Yahoo! Japan



Many companies (ex. Baidu, etc.) employ GPU-based Cluster Architectures, similar to TSUBAME2 & KFC

**DENSO**

Real DL Applications



Performance Model

Feed Back





# Research plan

## Small phase: Develop system components

1. Low-rank approximation algorithms for decreasing the computational cost on each node (Yokota G)
2. Fast parallel algorithm to decrease the communication between nodes and optimization by resource scheduling (Matsuoka G, AIST)
3. Fast deep learning algorithm utilizing knowledge structure (Shinoda G)
4. Deep Net compress algorithm for real-time recognition and analysis (Murata G, AIST)

## Large phase: System integration & evaluation

- Real-time operation on the specific terminal devices
- Use data from real applications
  - Argonne National Laboratory and Chicago Univ: Sensor data for smart city
  - Toyota InfoTechnology Center: Drive recorder video
- Open platform
  - APIs and Tools on Clouds, TSUBAME



Smart city sensor

# RWBC-OIL: 2-3 Ultra-High Dimensional Data (UHDD) Group

Developing methods for analyzing UHDD and applying them to real data

Methods to discover features for next

① **Developing an integrated system to analyze UHDD**

Implementation on TSUBAME3.0 and ABCI  
Nagata (AIRC) / Akiyama (TokyoTech)

② **Domain specific dimension reduction**

Tomii (AIST) / Ohue (TokyoTech)

③ **Precise statistical test for UHDD with LAMP**

Sese (AIST) / Ishida (TokyoTech)

A Common Problem in BigData Analysis (e.g., health care, genome and drug discovery) : **Ultra-High Dimension**

e.g., :

Text data ⇒ Genome seq. (4 chars), Amino acid seq. (20 chars) ※*k*-gram stats generates million to billion dims.

Numerical data ⇒ Metabolome (*n* dims), Molecular prop. (hundreds to thousands dim), Protein structure (ten thousands dim)

Categorical data ⇒ Epidemiology data (*n* dim)

Real application and data

**App: Evaluating the developed system with real UHDD**

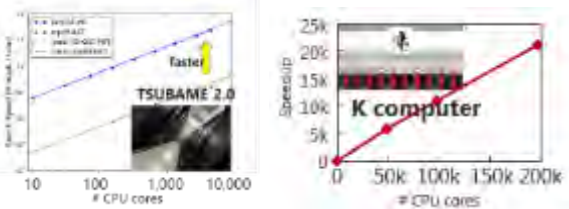
Protein 3D structure data, Health care data analysis, Genome/Meta-genome seq.



# Recent achievements in Akiyama Laboratory

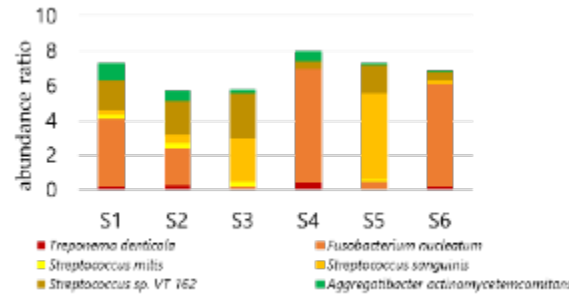
## Genomics

### Ultra-fast Seq. Analysis



- Suzuki et al., *Bioinformatics* (2015)
- Suzuki et al., *PLOS ONE* (2016)

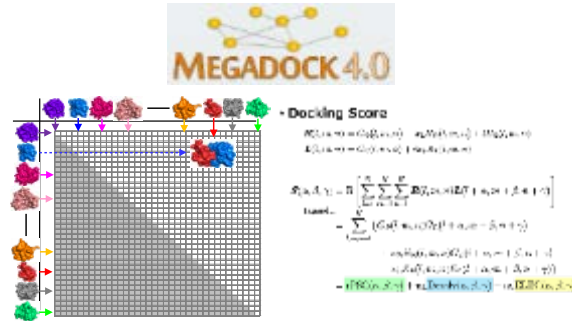
### Oral/Gut Metagenomics



- Yamasawa et al., *IJBMP* (2016)

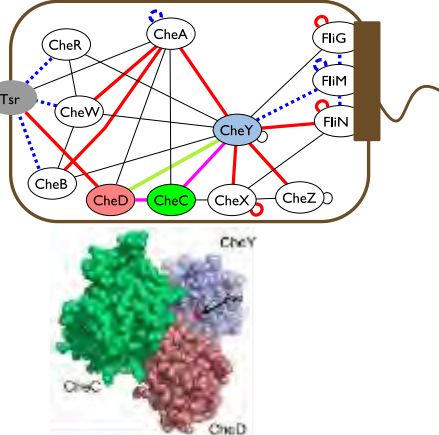
## Protein-Protein Interactions

### Exhaustive PPI Prediction System



- Ohue et al., *Bioinformatics* (2014)

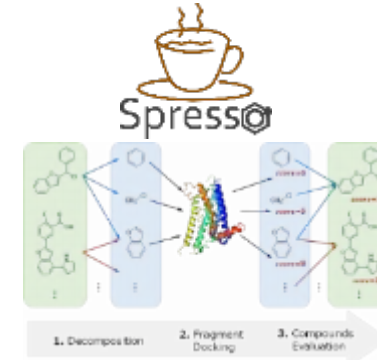
### Pathway Predictions



- Matsuzaki et al., *Protein Pept Lett* (2014)

## Drug Discovery

### Fragment-based Virtual Screening



- Yanagisawa et al., *GIW* (2016)

### Learning-to-Rank VS

Decay ID	Chemical Structure	PK Rank	PK Rank	PK Rank	PK Rank
2016014		100	100	100	100
2016014		100	100	100	100
2016014		100	100	100	100
2016014		100	100	100	100
2016014		100	100	100	100
2016014		100	100	100	100

- Suzuki et al., *AROB2017* (2017)



**Jun Sese**

Leader of Machine Learning Research Team  
AIRC, AIST  
[Bioinformatics, Machine Learning]



**Yutaka Akiyama**

Professor, Dept. of Computer Science, Tokyo Tech [Bioinformatics, Parallel Computing]



**Kentaro Tomii**

Leader of Intelligent Bioinformatics Team  
AIRC, AIST  
[Computational Biology, Drug Discovery]



**Takashi Ishida**

Assoc. Prof., Dept. of Computer Science, Tokyo Tech [Bioinformatics, Biophysics]



**Kenji Nagata**

Senior Researcher of Machine Learning Research Team, AIRC, AIST  
[Machine Learning, Bayesian Inference]



**Masakazu Sekijima**

Assoc. Prof. and Leader of Advanced Computational Drug Discovery Unit, Tokyo Tech [Computational Drug Discovery, Parallel Computing]



**Takuji Yamada**

Assoc. Prof., Dept. of Life Sci.&Tech, Tokyo Tech [Bioinformatics, Meta-Genomics]



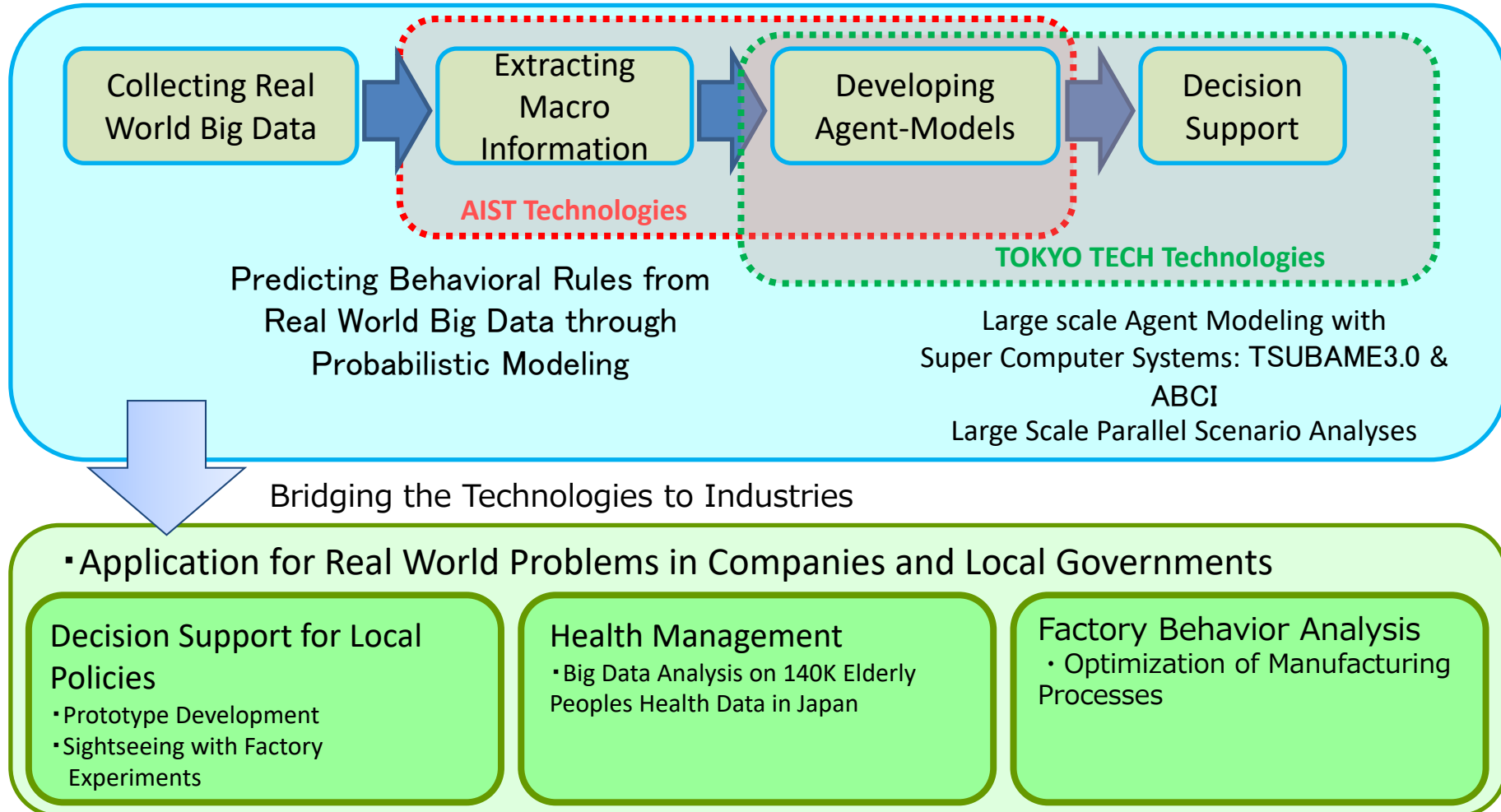
**Masahito Ohue**

Assist. Prof., Dept. of Computer Science, Tokyo Tech [Bioinformatics, Chemo-Informatics]



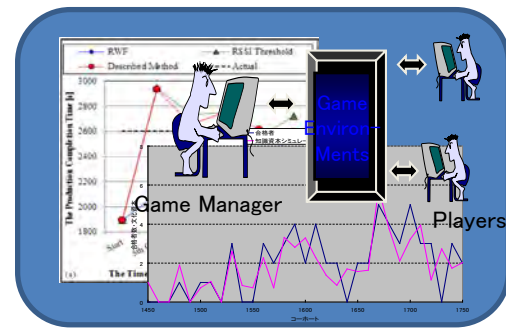
# OIL-RWBC: 2 — 2 : Integration of Real World Big Data Analysis and Agent-Based Modeling

▪ Integrated Framework for Probabilistic Modeling and Agent-Based Simulation

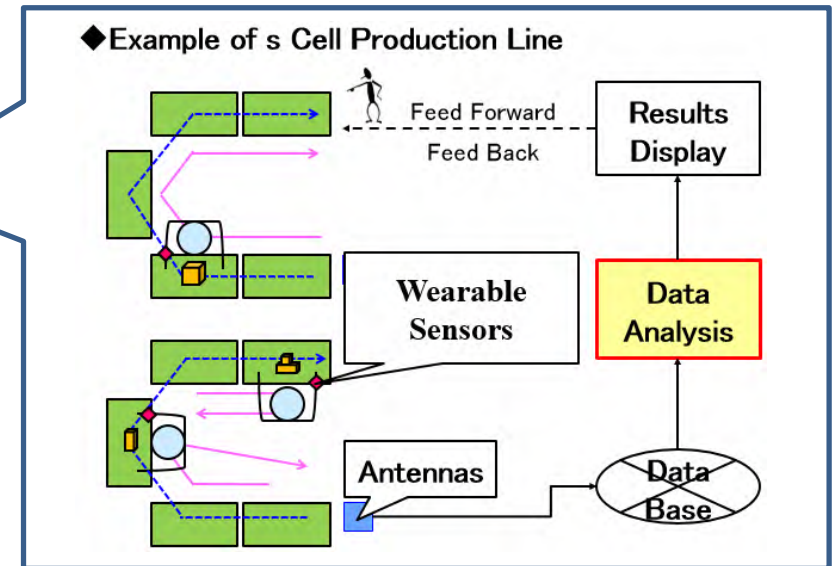


# RWCP-OIL Example: Optimization through Big Data Analysis and Agent Simulation in a Large Scale Manufacturing Firm

- 0) Target Domain: Cell Type Manufacturing Line with Human Robot Mixtures
- 1) Behavioral Data of Workers and Information of Manufacturing Lines → Big Data → Modeling
- 2) Simulation through Agent Based Models → Determination of Optimization Methods
- 3) Integrated Use of Real Time Operation Data and Real Time Simulators



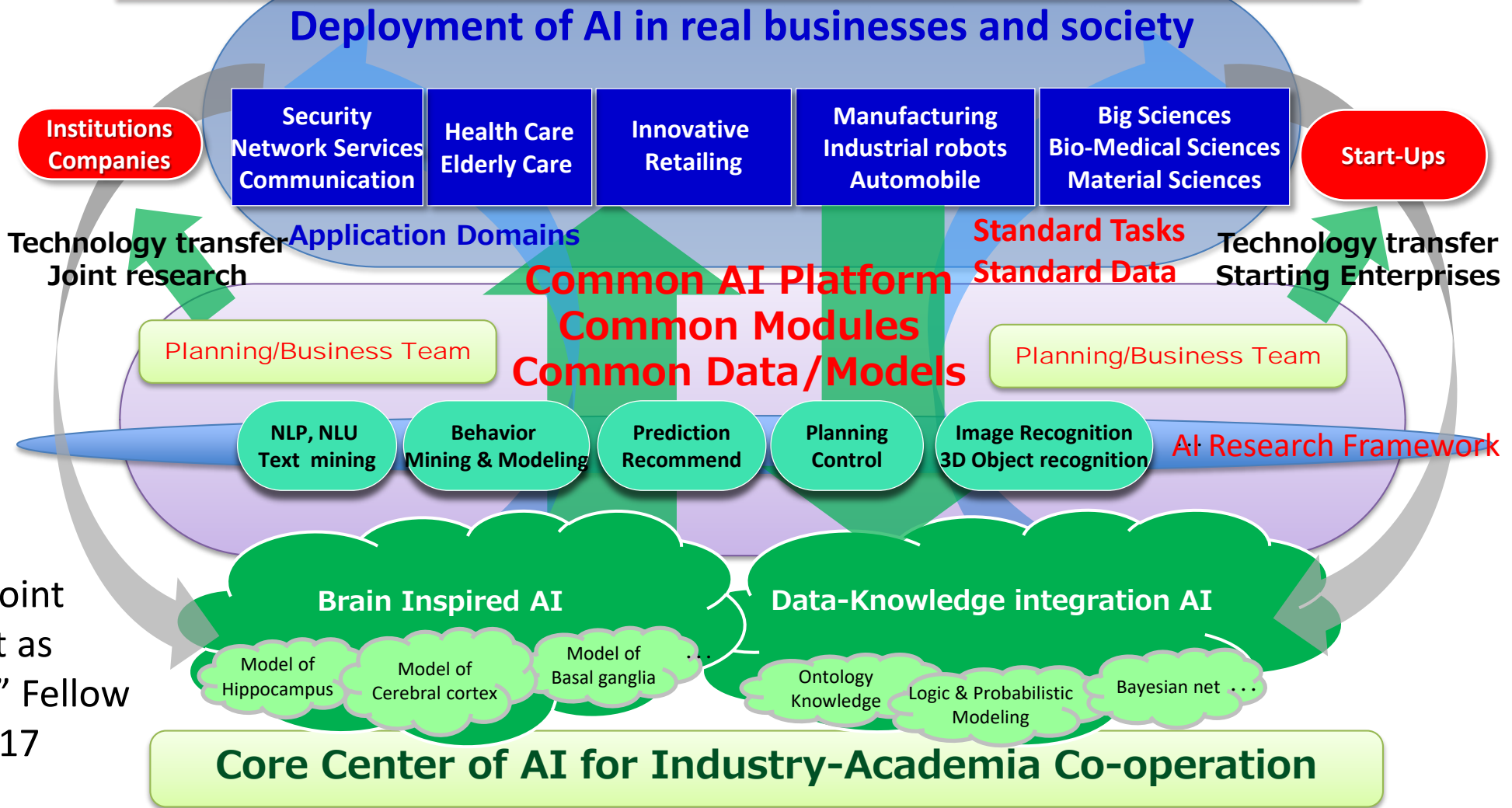
Use of the Framework



# AI Research Center (AIRC), AIST

Now > 300+ FTEs

**Effective Cycles among Research and Deployment of AI**

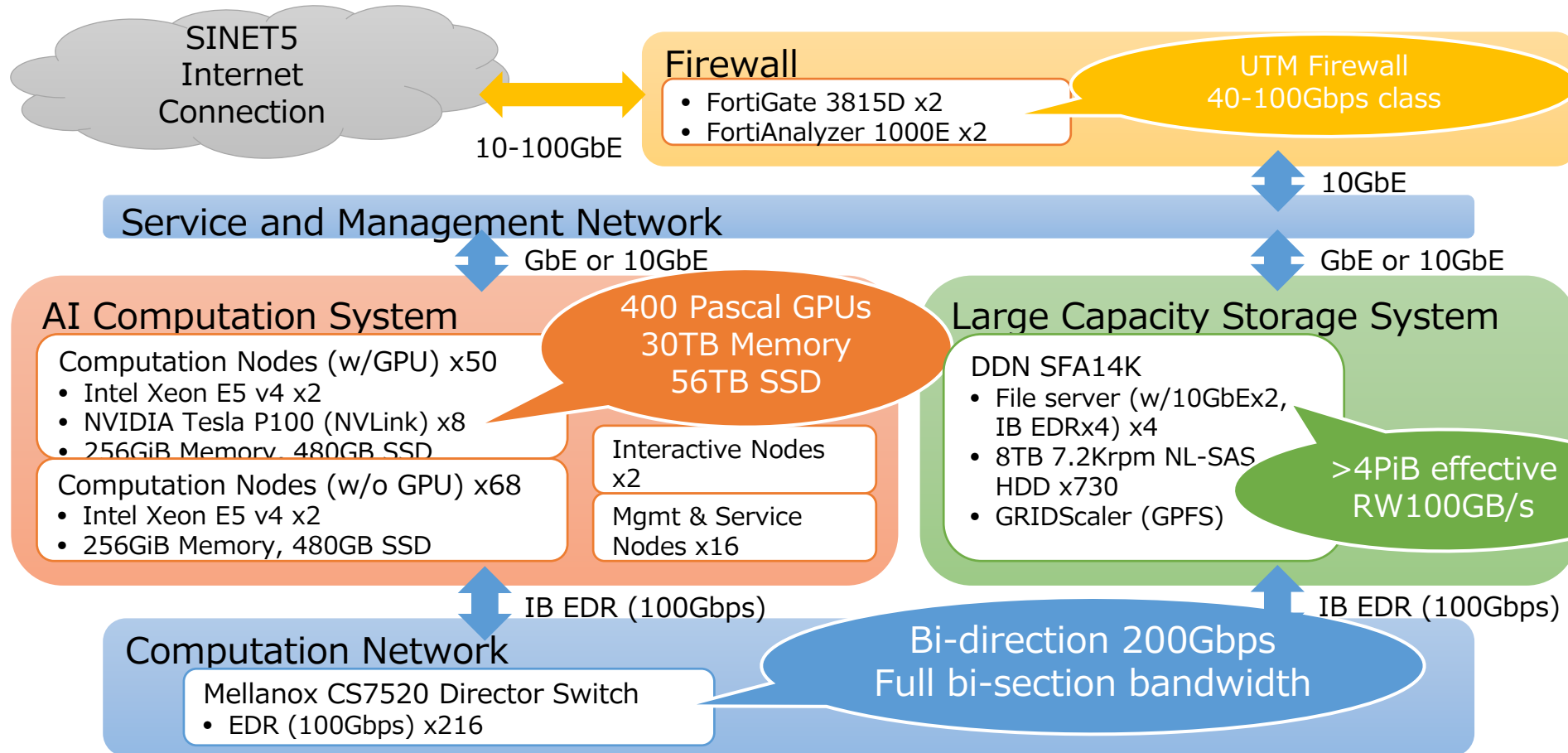


Matsuoka : Joint appointment as “Designated” Fellow since July 2017

# ABCI Prototype: AIST AI Cloud (AAIC)

## March 2017 (System Vendor: NEC)

- **400x NVIDIA Tesla P100s and Infiniband EDR** accelerate various AI workloads including ML (Machine Learning) and DL (Deep Learning).
- Advanced data analytics leveraged by **4PiB shared Big Data Storage and Apache Spark** w/ its ecosystem.



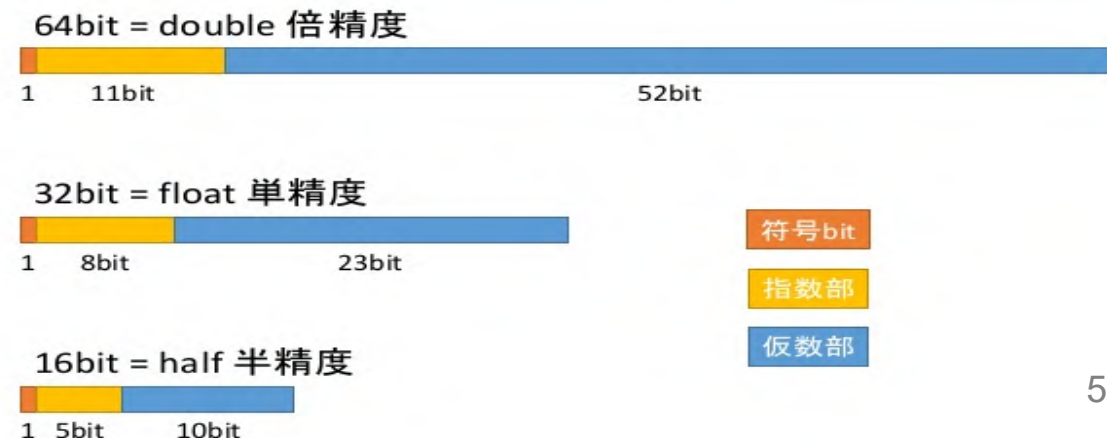


# 浮動小数点: 倍精度、単精度、半精度

(Floating Point Precisions: Double, Single, Half)

- 科学技術や機械学習で使われる「実数」の演算
  - 例小数: 3.1415926...、小さい数字: .000000...0001、大きい数字: 999999...999999999
- その表現法: IEEE 754 浮動小数点規格
  - 倍精度 (double precision): 8バイト、10進で約16ケタ
  - 単精度 (single precision): 4バイト、10進で約7ケタ
  - 半精度 (half precision): 2バイト、10進で約3.3ケタ
- 科学技術計算では、従来は倍精度が重視されてきたが、近年は単精度を利用しての高速化が増加
- 機械学習/AIでは、単精度が主流で、近年は半精度が用いられ始めている

## 浮動小数点数のフォーマット IEEE754

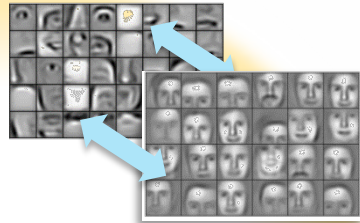


# Estimated Compute Resource Requirements for Deep Learning [Source: Preferred Network Japan Inc.]

To complete the learning phase in one day

P:Peta  
E:Exa  
F:Flops

## Image/Video Recognition



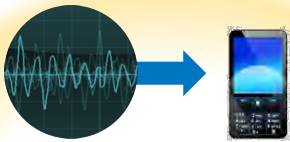
**10P (Image) ~ 10E (Video)** Flops  
学習データ：1億枚の画像 10000クラス分類  
数千ノードで6ヶ月 [Google 2015]

## Bio / Healthcare



**100P ~ 1E** Flops  
一人あたりゲノム解析で約10M個のSNPs  
100万人で100PFlops、1億人で1EFlops

## Image Recognition



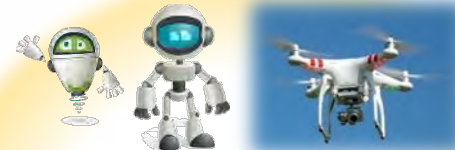
**10P~** Flops  
1万人の5000時間分の音声データ  
人工的に生成された10万時間の  
音声データを基に学習 [Baidu 2015]

## Auto Driving



**1E~100E** Flops  
自動運転車 1台あたり1日 1TB  
10台~1000台, 100日分の走行データの学習

## Robots / Drones



**1E~100E** Flops  
1台あたり年間1TB  
100万台~1億台から得られた  
データで学習する場合

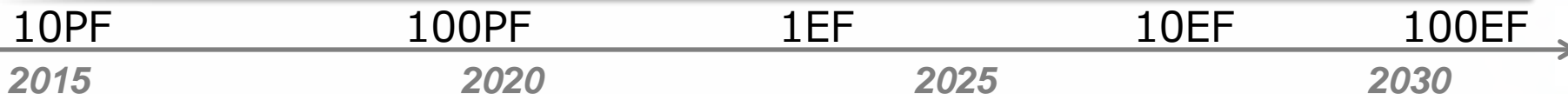
FLOPS (in reduced precision)  
and BYTES



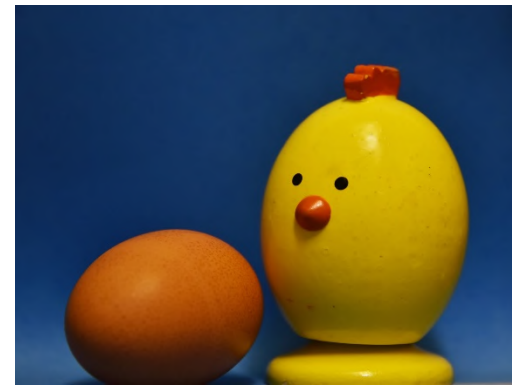
So both are important in the infrastructure

機械学習、深層学習は学習データが大きいほど高精度になる  
現在は人が生み出したデータが対象だが、今後は機械が生み出すデータが対象となる

各種推定値は1GBの学習データに対して1日で学習するためには  
1TFlops必要だとして計算

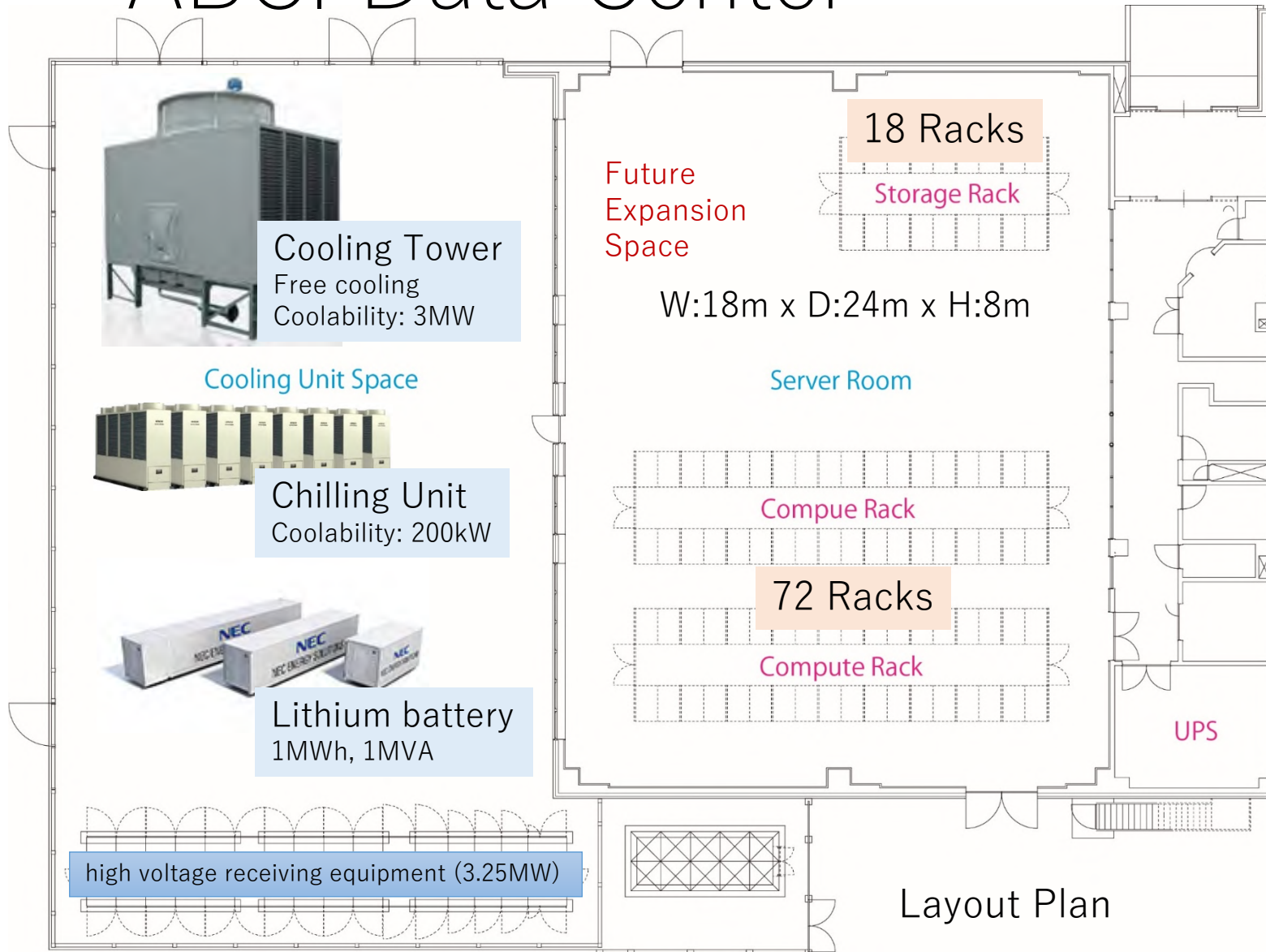


# The “Chicken or Egg Problem” of AI-HPC Infrastructures



- “On Premise” machines in clients => “Can’t invest in big in AI machines unless we forecast good ROI. We don’t have the experience in running on big machines.”
- Public Clouds other than the giants => “Can’t invest big in AI machines unless we forecast good ROI. We are cutthroat.”
- Large scale supercomputer centers => “Can’t invest big in AI machines unless we forecast good ROI. Can’t sacrifice our existing clients and our machines are full”
- Thus the giants dominate, AI technologies, big data, and people stay behind the corporate firewalls...

# ABCI Data Center



- Single Floor, inexpensive build
- Hard concrete floor 2 tonnes/m<sup>2</sup> weight tolerance for racks and cooling pods
- Number of Racks
  - Initial: 90
  - Max: 144
- Power Capacity
  - 3.25 MW (MAX)
- Cooling Capacity
  - 3.2 MW (min in Summer)



Layout Plan



# We are implementing the US AI&BD strategies already

## ...in Japan, at AIRC w/ABCI

- Strategy 5: Develop **shared public datasets and environments for AI training and testing**. The depth, quality, and accuracy of training datasets and resources significantly affect AI performance. Researchers need to develop high quality datasets and environments and enable responsible access to high-quality datasets as well as to testing and training resources.
- Strategy 6: **Measure and evaluate AI technologies through standards and benchmarks**. Essential to advancements in AI are standards, benchmarks, testbeds, and community engagement that guide and evaluate progress in AI. Additional research is needed to develop a broad spectrum of evaluative techniques.

