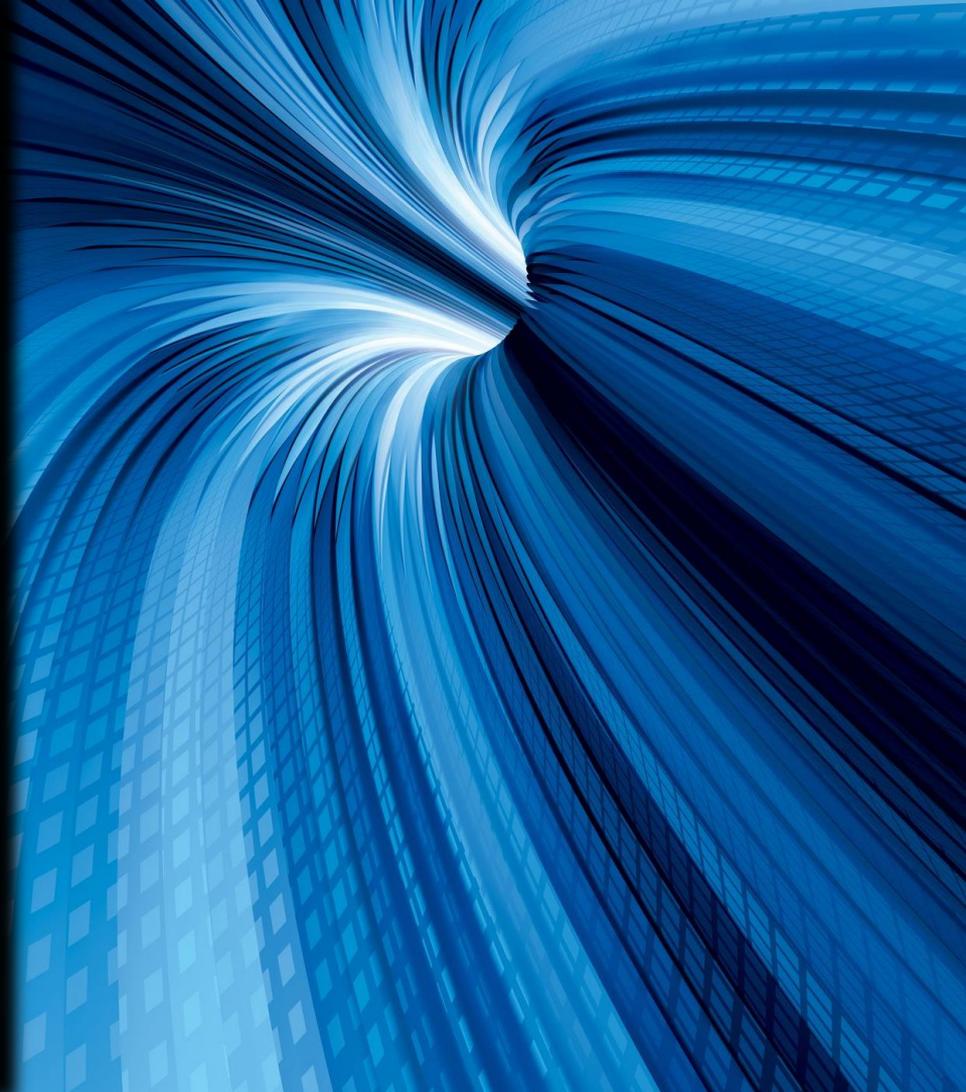


**Не больше, а умнее**

—  
**IBM Bayesian Optimization  
Accelerator (BOA)**

**А. Перевозчиков**

[82189117@ru.ibm.com](mailto:82189117@ru.ibm.com)



# Проблема НРС: нарастающий размер

Увеличиваются требования к ресурсам

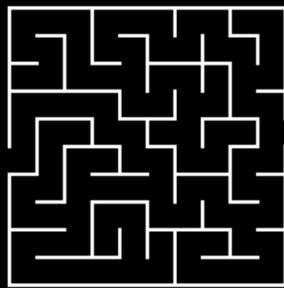
Увеличивается количество параметров

Увеличивается время моделирования

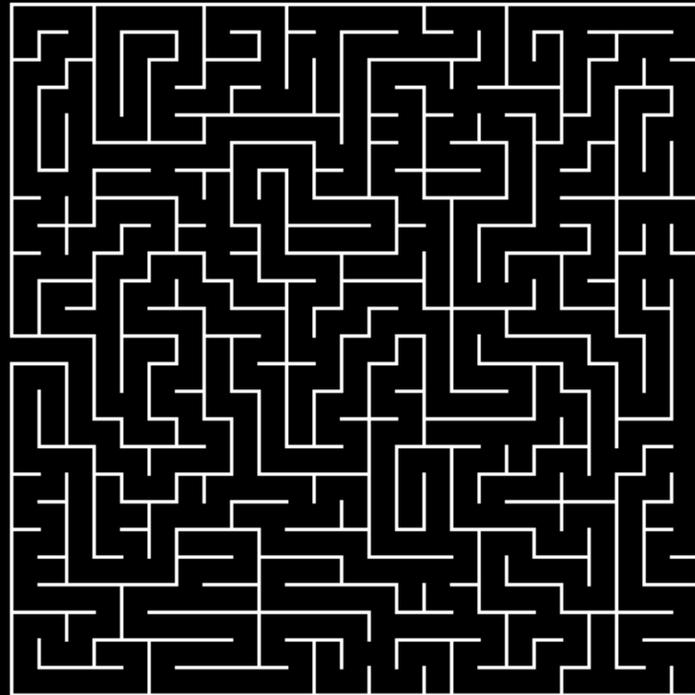
**Пропорционально четвертой степени от увеличения количества параметров**



2010



2015



2020

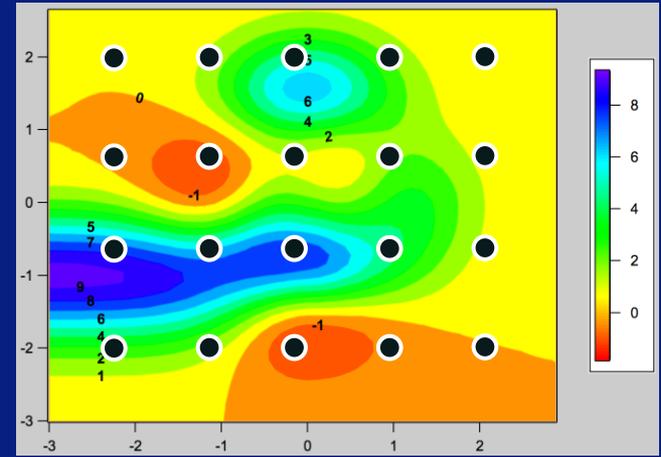
# #1 в списке top500 (на конец года)

Год	Количество ядер	Потребление МВт
2020	7 63x xxx	29.90
2015	3 12x xxx	17.81
2010	186 xxx	4.04
2005	131 xxx	1.43
2000	8 192	

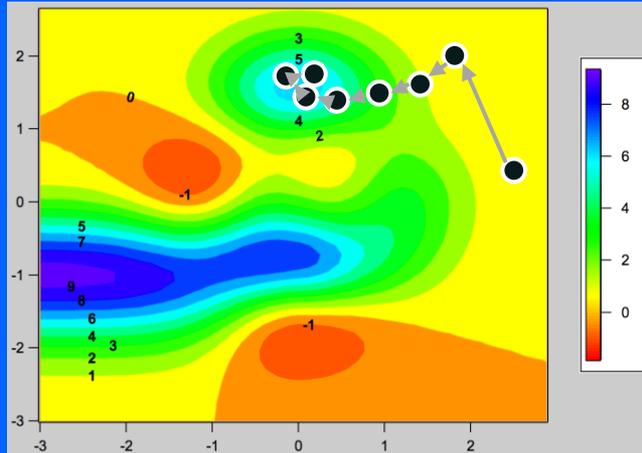
# Как оно сейчас?

Многомерные исследования выполняются неэффективными и необъективными методами

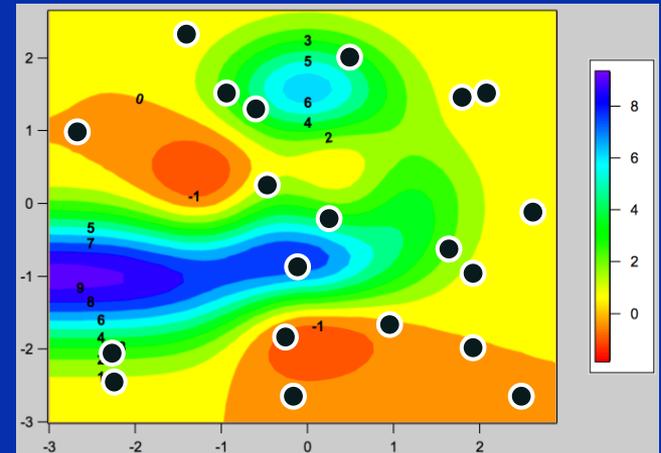
## GRID Search



## STEEPEST DESCENT Search



## RANDOM Search



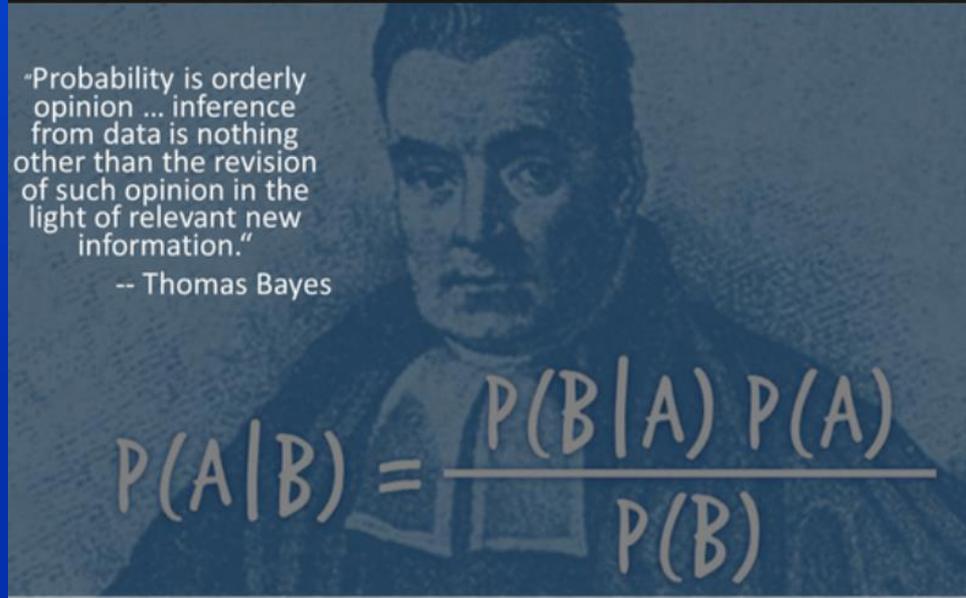
Если вы хотите  
изменить способ  
решения проблемы,  
вы должны сначала  
изменить то, как вы  
о ней думаете



# The IBM Bayesian Optimization Accelerator

- ✓ Передовая Байесовская оптимизация
- ✓ Широкий спектр приложений
- ✓ Предоставляет легкие в использовании API, SDK & GUI

Позволяет создавать *более хорошие* продукты *быстрее* путем нахождения идеального решения при более *низкой стоимости*



"Probability is orderly opinion ... inference from data is nothing other than the revision of such opinion in the light of relevant new information."

-- Thomas Bayes

$$P(A|B) = \frac{P(B|A) P(A)}{P(B)}$$

# Два метода использования ИИ в HPC

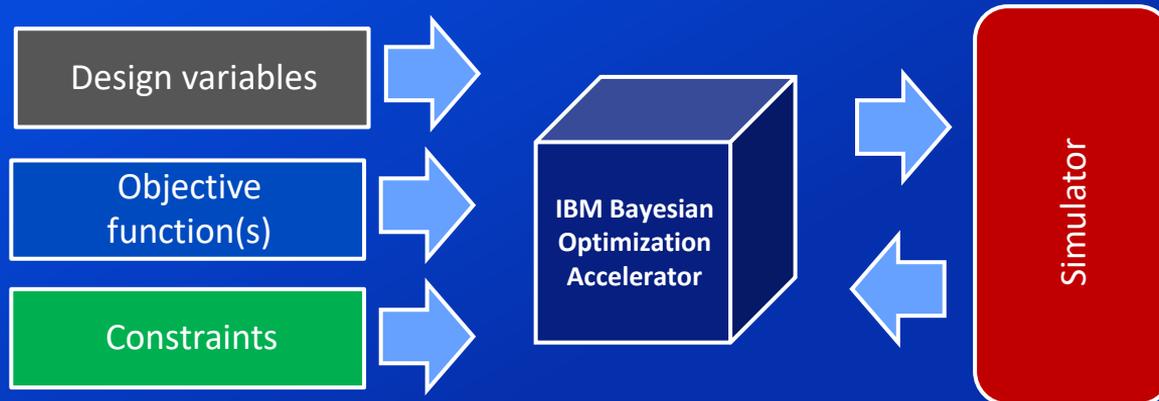


## PRO

- Inference can be 1000x faster than simulation

## CON

- Requires a full validation test suite to assure inference gives usable results
- Requires a library of simulation data



## PRO

- Validated simulator generates results
- Can use surrogate inference when validated

## CON

- Simulation results can take time without a surrogate

# Два метода использования ИИ в HPC

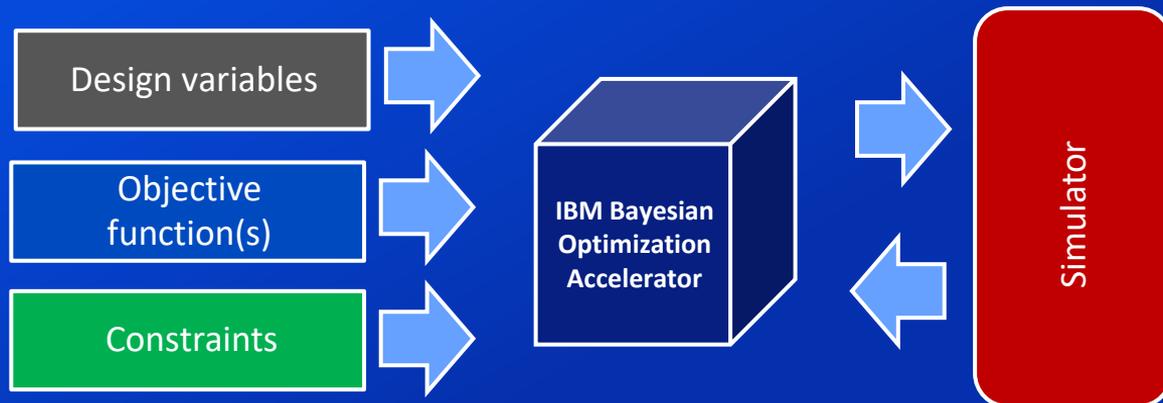


## PRO

- Inference can be 1000x faster than simulation

## CON

- Requires a full validation test suite to assure inference gives usable results
- Requires a library of simulation data



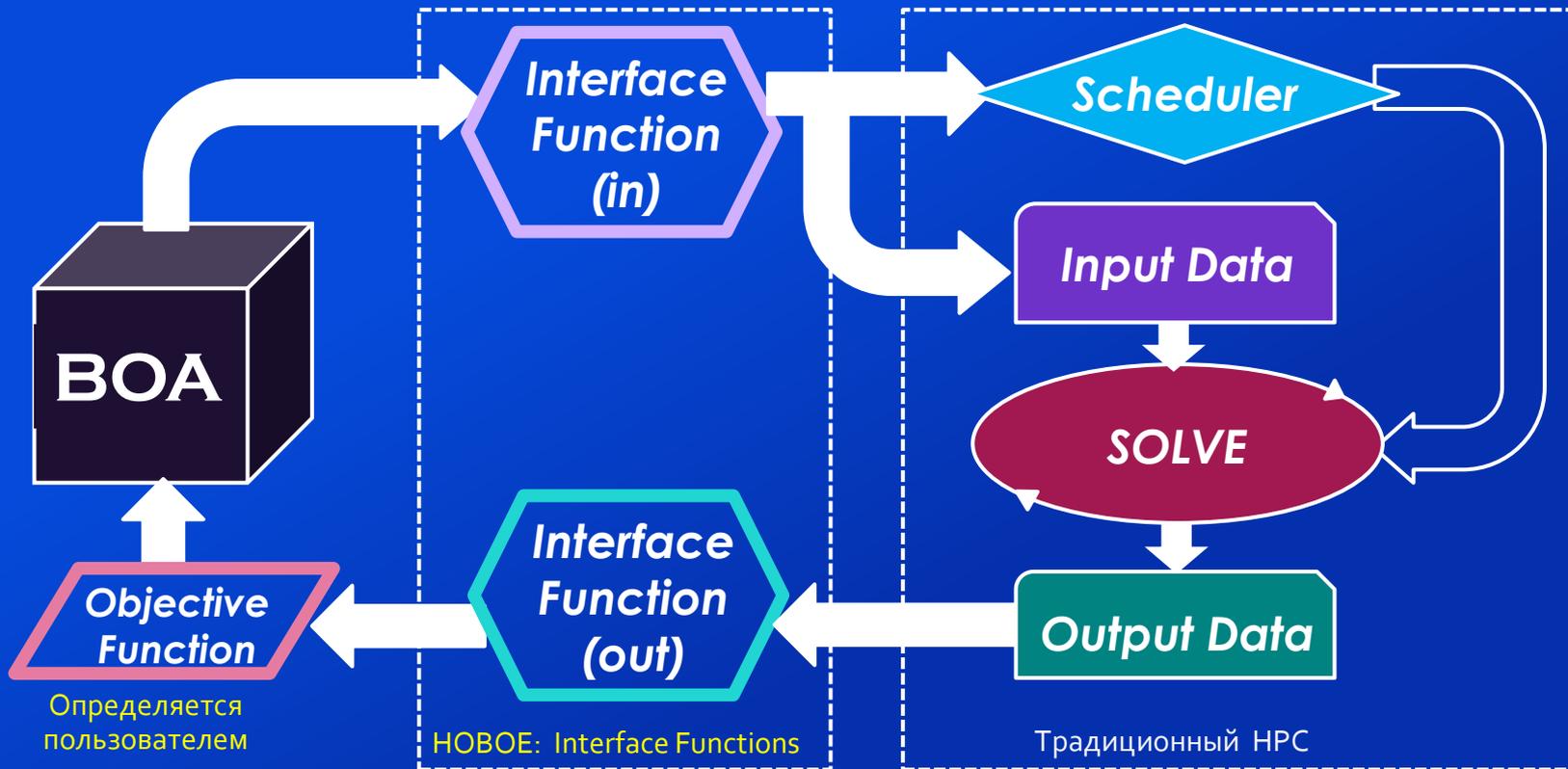
## PRO

- Validated simulator generates results
- Can use surrogate inference when validated

## CON

- Simulation results can take time without a surrogate

# Как это работает



Определяется  
пользователем

HOBOE: Interface Functions

Традиционный HPC

Уникально для каждого  
клиента

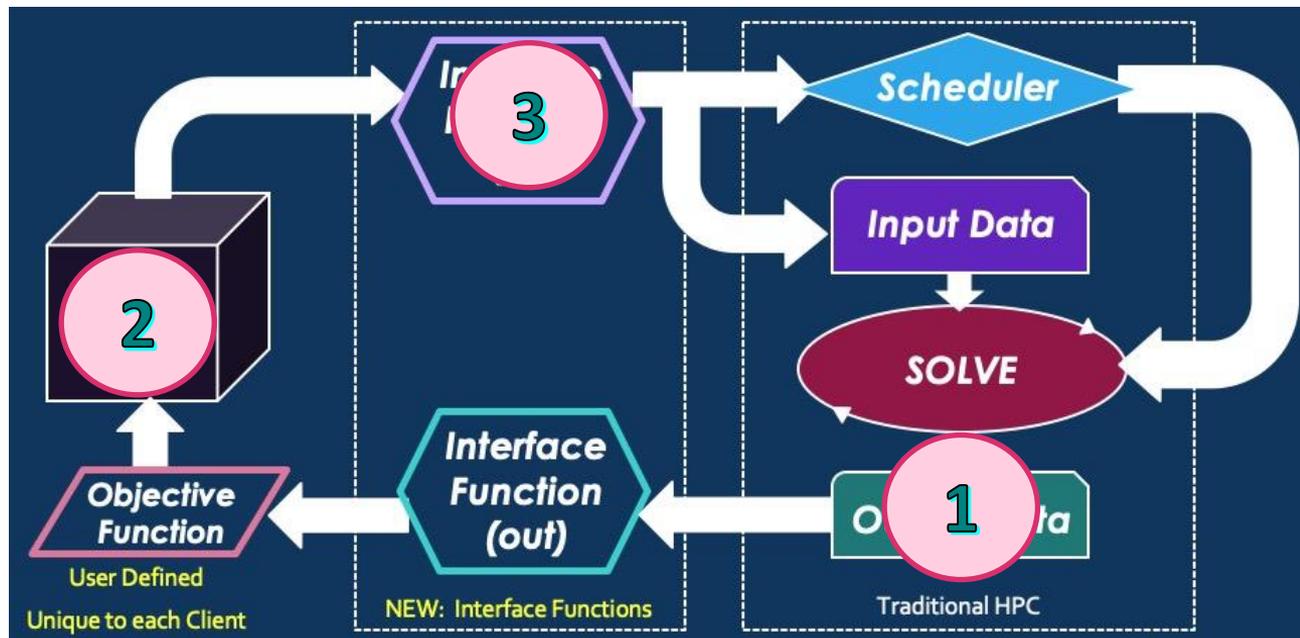
# Применение IBM BOA к организации работы приложения HPC

Плагины IBM BOA **Interface Functions** специфичны для приложений.

*(Interface Functions выполняют три функции используемые при ускорении процесса HPC)*

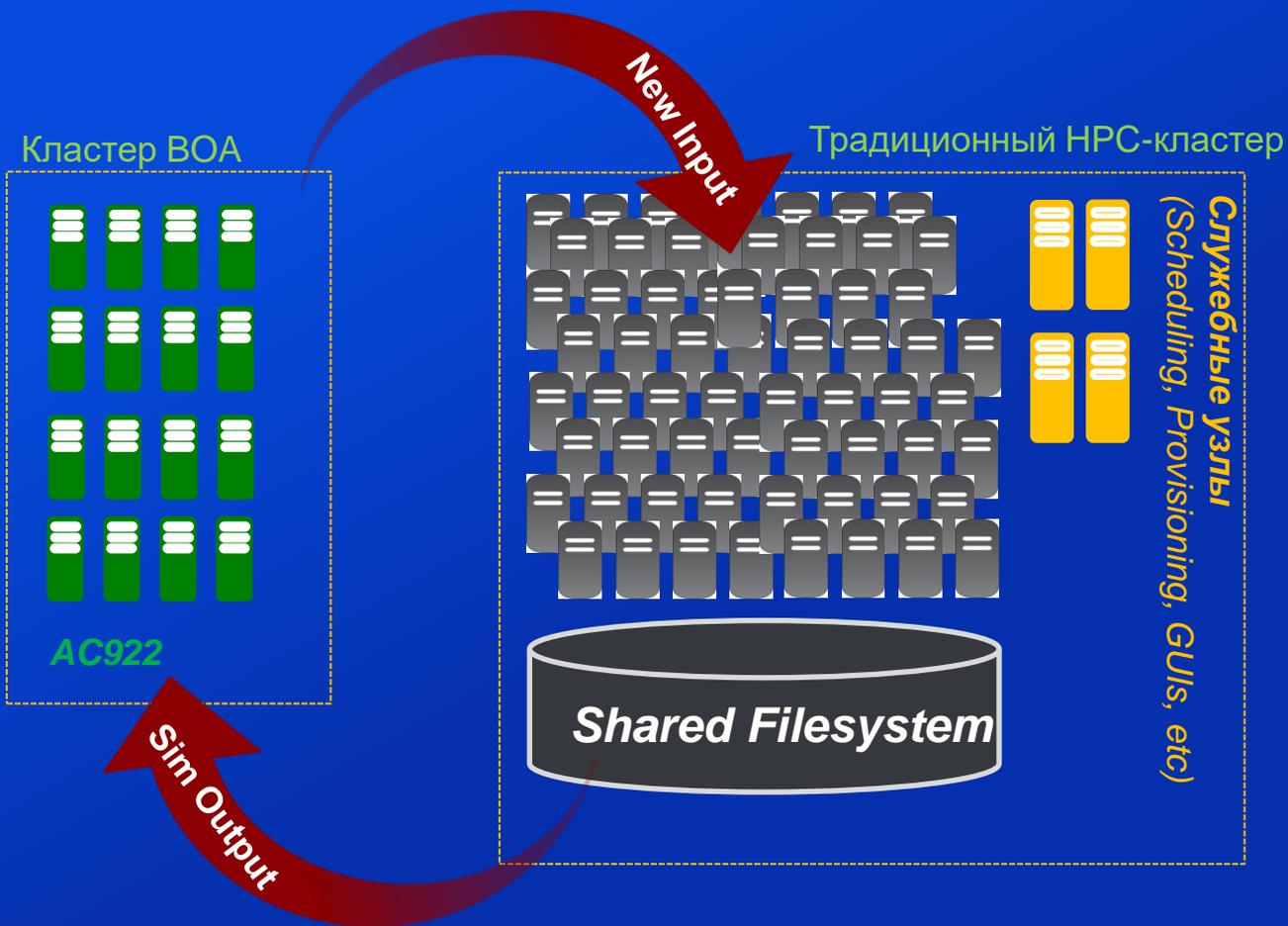
1. Чтение выходных данных работы задания моделирования для вычисления ответа.
2. Создание новых входных данных для следующего задания моделирования.
3. Запуск следующего задания моделирования через планировщик HPC.

## IBM BOA Interface Functions



# Топология ВОА

- Серверы ВОА исполняют только код ВОА
- Располагаются рядом с HPC средой
- Архитектура HPC кластера (x86, ARM, Power, гибрид) не важна
- Большие системы включают много узлов с GPU
- Много пользователей, много кластеров, много моделирований, много ... всего обрабатывает ВОА в параллель
- Explain-ability в реальном времени



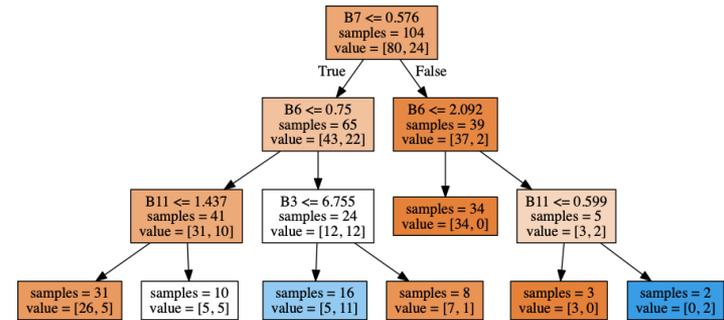
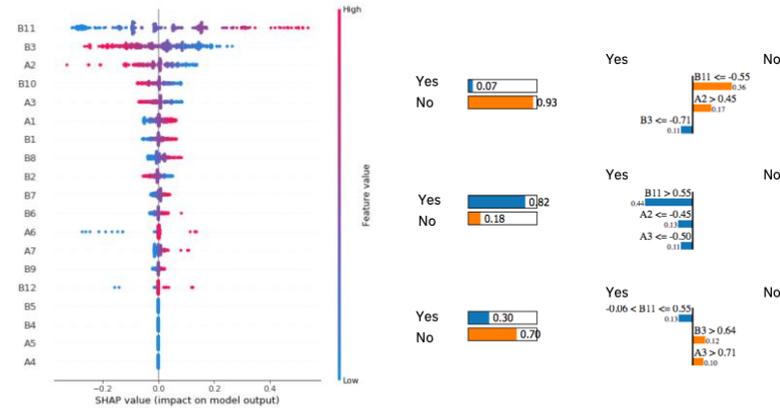
# Объясняемая оптимизация

Когда целевая функция оценивается компьютером, мы можем быть уверены, что будет проведен каждый эксперимент. Когда оценку делают люди было бы очень хорошо объяснить причины каждого выбора данных.

**Особенно в многоцелевых случаях со сложными ограничениями.**

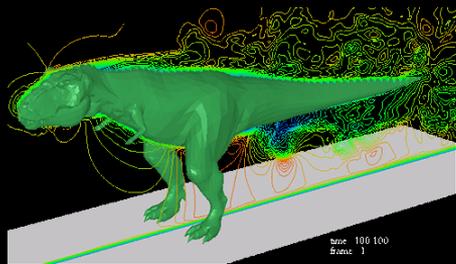
There are several factors we might want to explain:

- 1) Какой параметр положительно влияет на предсказание (т.е. ассоциируется с «хорошестью»)
- 2) Какой параметр отрицательно влияет на предсказание (т.е. ассоциируется с «плохостью»)
- 3) Какой параметр на вариативность предсказания (т.е. ассоциируется с «незнанием»)
- 4) Какие параметры и как влияют на ограничения модели?



# IBM Bayesian Optimization Accelerator

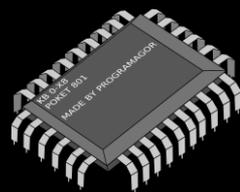
## Примеры



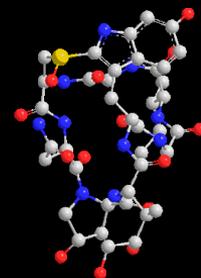
CFD



Drug  
Discovery

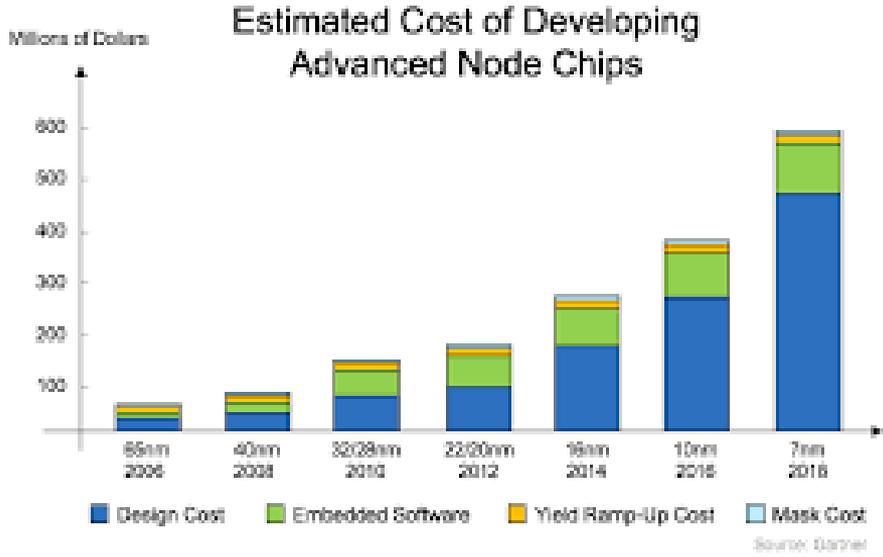


ASIC & PCB  
Design



Molecular  
Dynamics

# Advanced Chip Design Costs growing at unsustainable rate



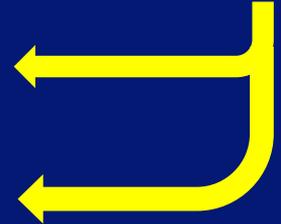
<http://site.ieee.org/rww-2018/files/2018/01/Michael-Thompson-RWW2018-presentation.pdf>

***The majority of the cost is in design***

## Design Cost Contributors

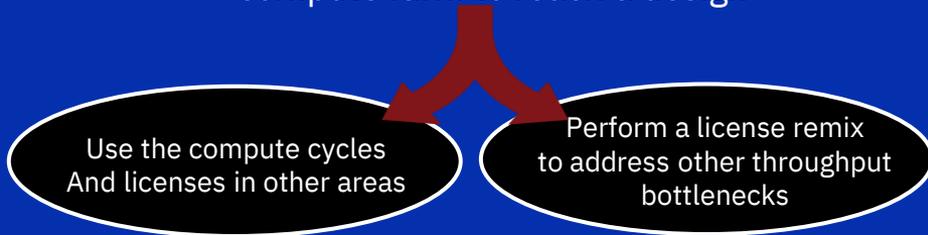
- Engineering Personnel
- Software Licensing
- Compute & storage infrastructure
- Engineering training

IBM BOA  
уменьшает  
СТОИМОСТЬ ЭТИХ  
КОМПОНЕНТ

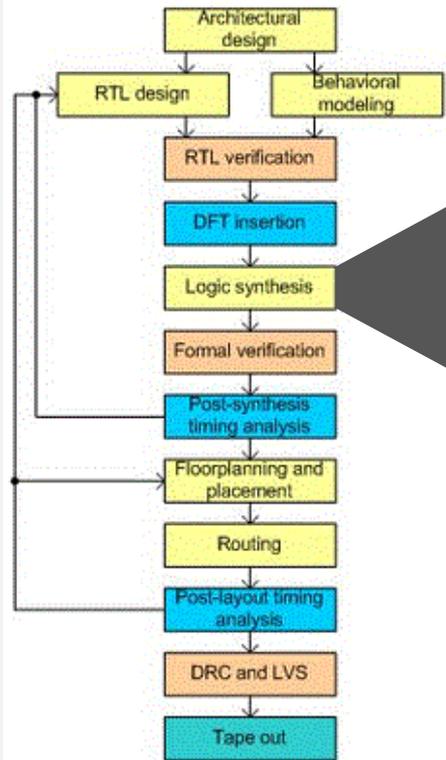


## Optimize your EDA tool spend by using BOA

Reduces the number of jobs required on the compute farm to reach a design



# Accelerating EDA workflows



Taken from:  
<https://wdc65xx.com/asic-design-flow/>

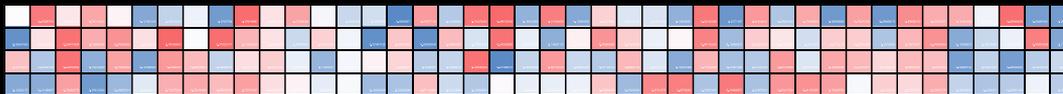
## Standard synthesis workflow

$10^4 - 10^6$  batch jobs, weeks of runtime, repeated when logic errors are found

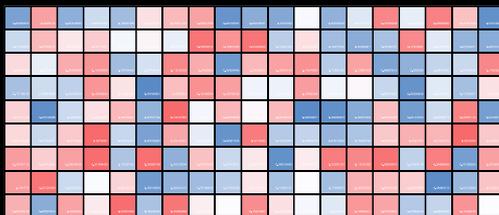


## Bayesian enabled synthesis workflow

$10^2 - 10^4$  batch jobs, hours of runtime, repeated when logic errors are found

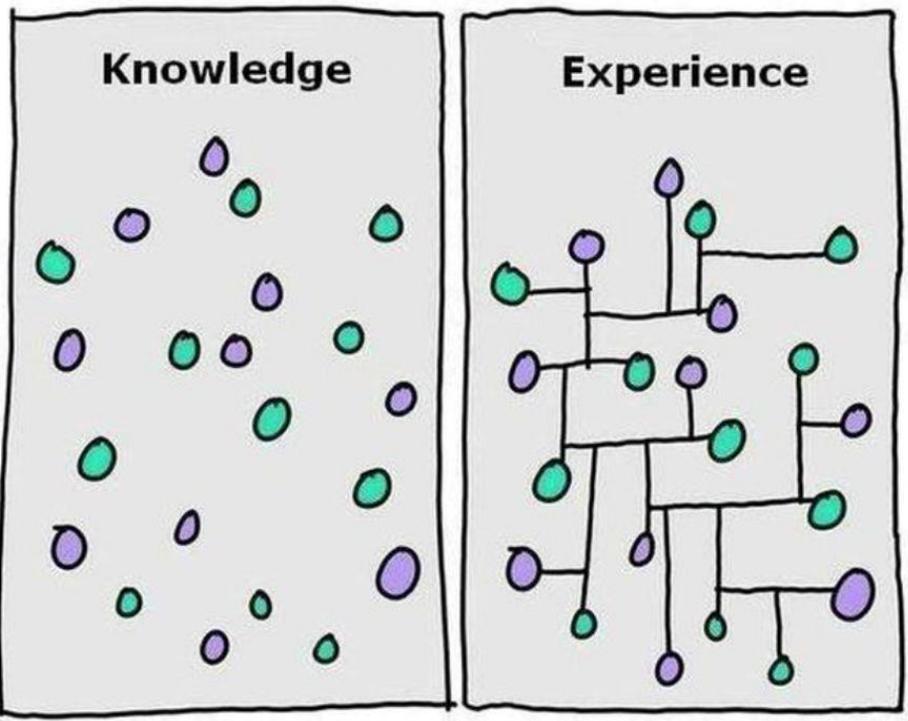


Fewer licenses  
required for less  
time on clusters



Design  
points  
identified  
faster

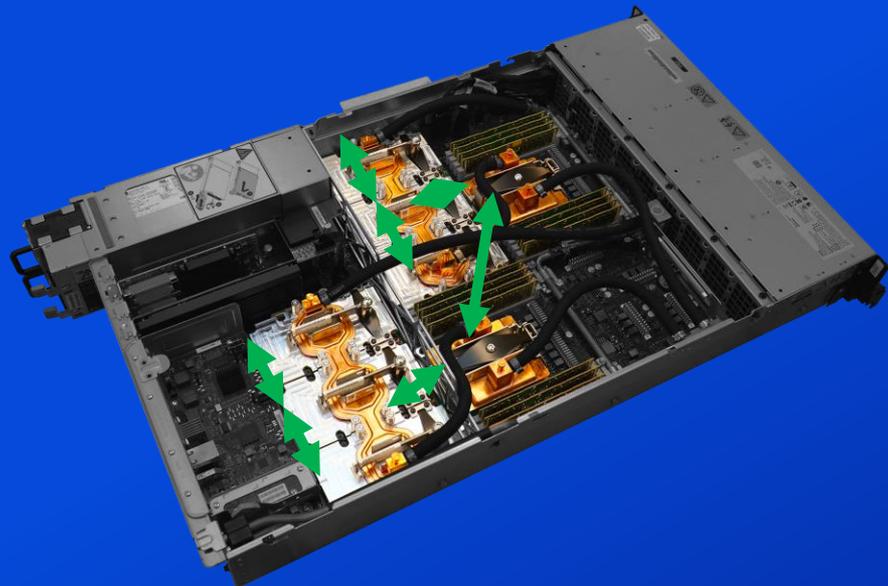
BOTH CASES:  
*Better design points  
identified*



# IBM Experience Applied to signal integrity

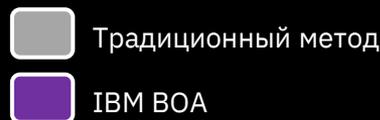
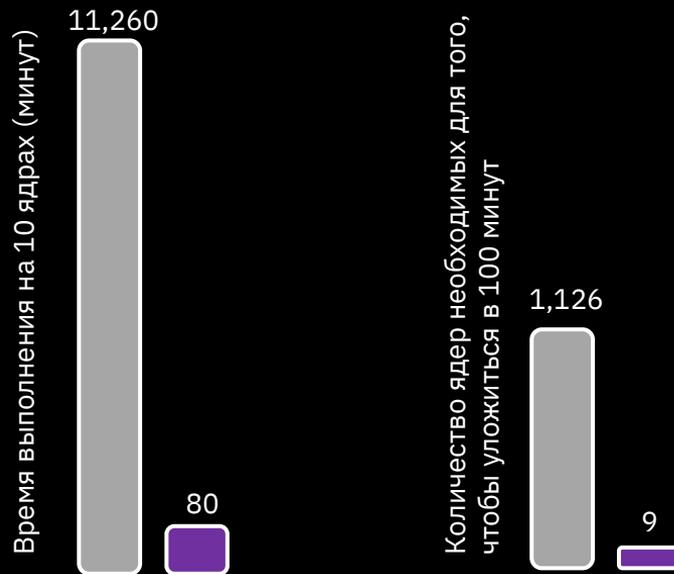
# IBM Power Electronics Design

Пример из реальной жизни  
**Signal Integrity Design for Power10**



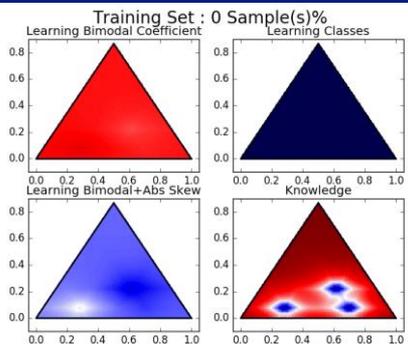
**Цель:** Оптимизация скорости межпроцессорных связей за минимальное время

Метод грубой силы требует провести ~5600 моделирований, каждое из которых занимает ~20 минут (IBM Simulator: HSSCDR)



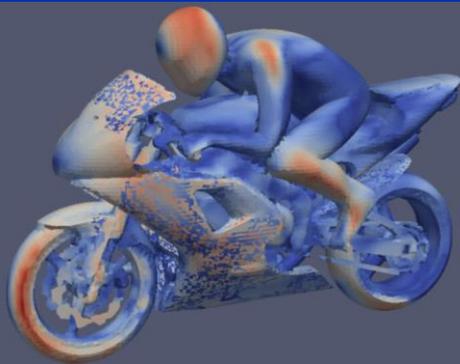
# Real Examples of HUGE Value

## Computational Chemistry



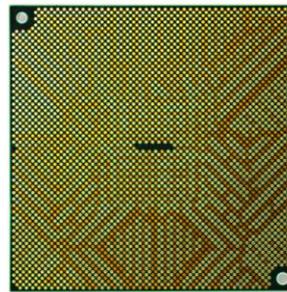
BOA accelerated workflow uses **1/3 of the calculations to achieve 4 orders of magnitude resolution increase**

## Computational Fluid Dynamics



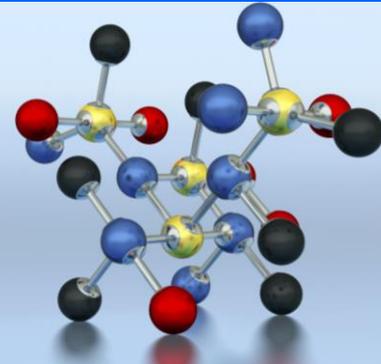
The BOA enabled design process accomplishes in hours what a designer does in weeks

## Chip Design



Orders of magnitude fewer simulations required to minimize jitter for signal integrity on the Power10 server

## Oil & Gas



Carbon sequestration use case where BOA identified an answer 1.5% better in 1/3 the time

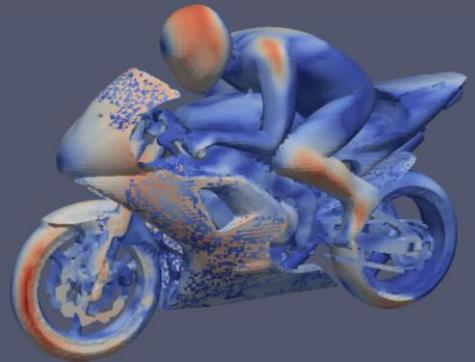
# Задачи автопрома, где БОА может помочь

CFD

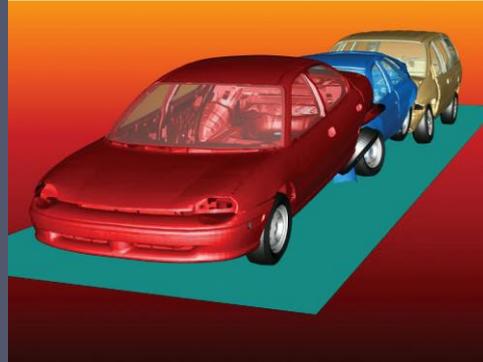
Crash / Safety

NVH

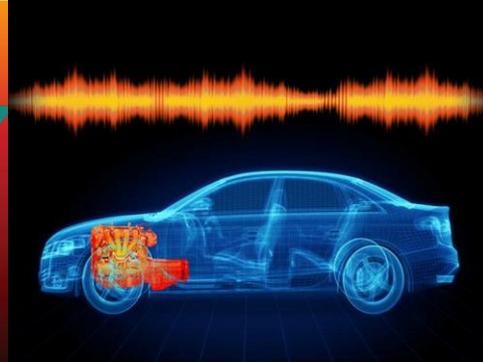
ADAS



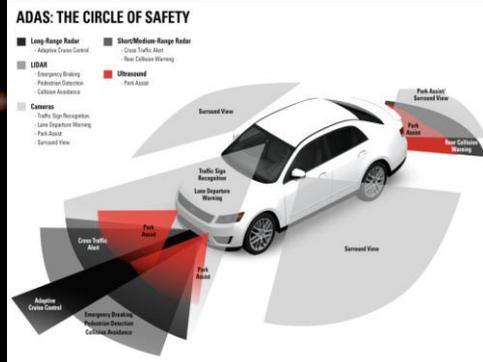
Computational Fluid Dynamics – driving external design for drag, downforce, cooling, combustion, and performance



Often the largest consumer of CPU cycles and engineering time for a commercial vehicle.



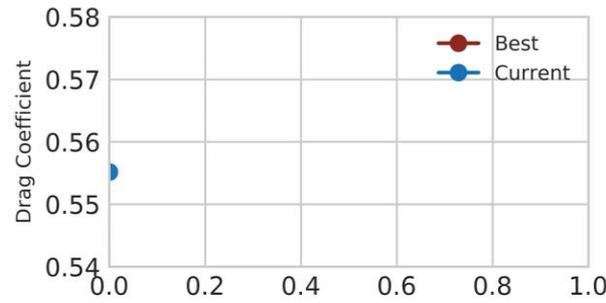
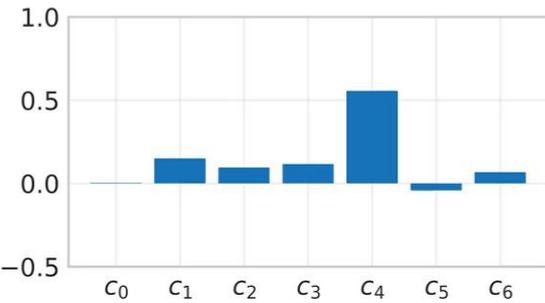
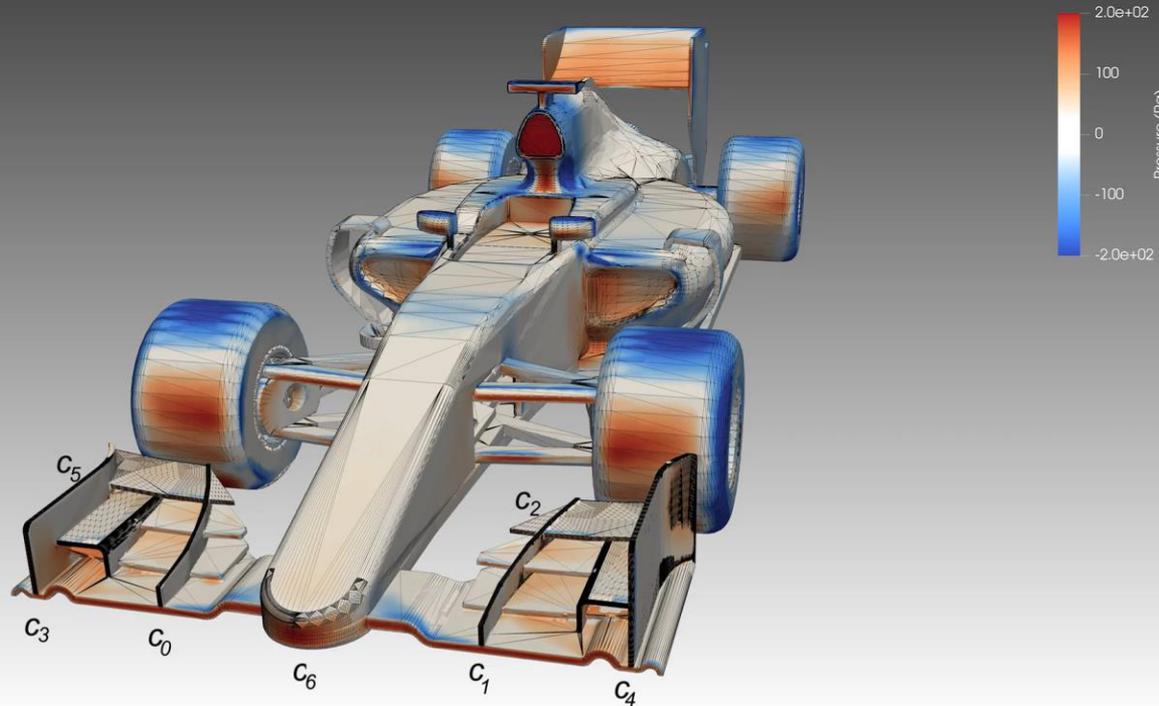
Noise Vibration and Harshness – one of the most demanding analyses coupling structures and fluids.



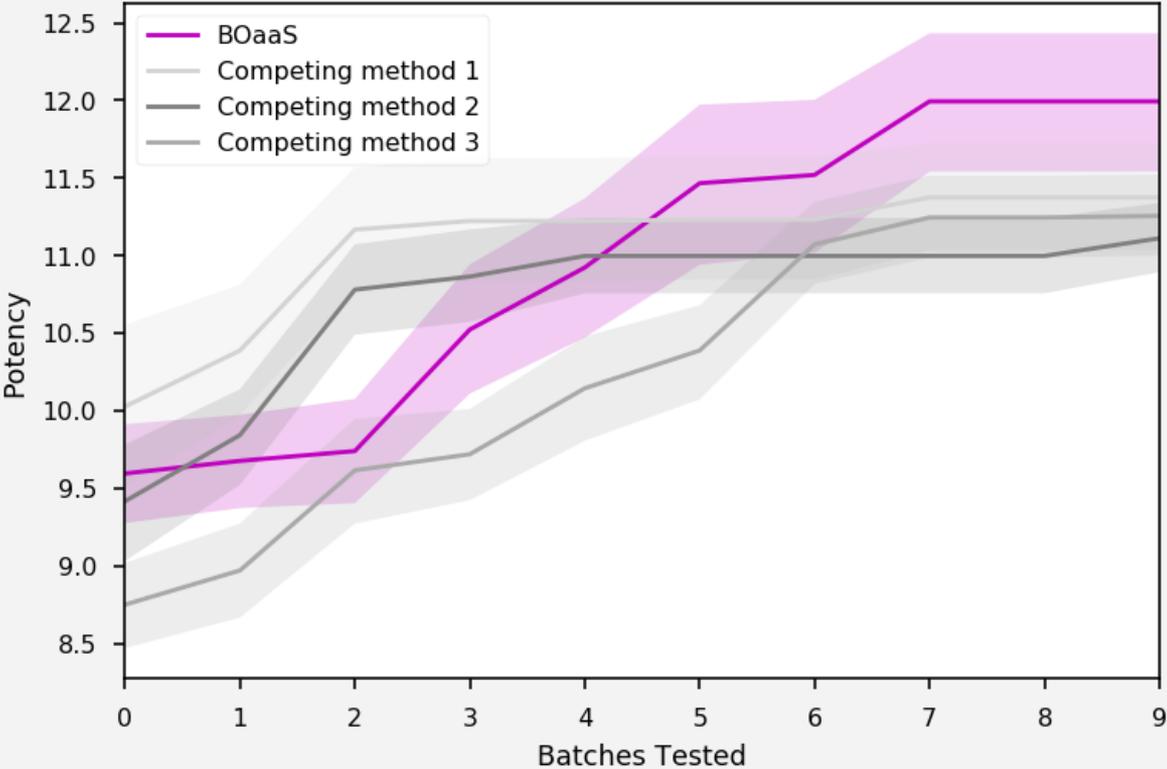
Future: Self driving vehicles employ trained and tested machine learning models which can be tuned faster with BOA

# Formula 1 Racing дизайн конструкции носа

- 7 переменных относящихся к геометрии лопаток крыла
- PyGEM – для геометрического морфинга (деформация произвольной формы)
- OpenFOAM – для поиска оптимума «подъемная сила vs сопротивление потоку» на каждой итерации
- Обычно эта часть дизайна выполняется вручную экспертами по аэродинамике
- Результат – сокращение на порядок времени разработки



# Drug Discovery



Brute force screening  
requires 20,000  
experiments;  
BOA accelerated  
method required ~200

## Некоторые приложения, которым может быть полезен ВОА\*

- ABAQUS
- ANSYS FLUENT
- ANSYS MECHANICAL
- ANSYS HPC
- ANSYS Explicit
- ANSYS Autodyn
- CFD++
- CST Microwave studio
- COMSOL multi-physics
- Eclipse
- HFSS
- **HSSCDR**
- LS-DYNA
- Marc
- MSC Nastran
- **NAMD**
- NEXUS
- **OpenFOAM**
- US3D
- Star-CCM+,
- Sigrity
- tNavigator
- StressCheck

\*Интерфейсные функции обычно могут быть созданы за 3 - 10 дней. Для приложений **синим цветом** они уже есть.

Интерфейсные функции будут выкладываться в ВОА GitHub public community site для поощрения сотрудничества в сообществе ВОА.



# IBM Bayesian Optimization Acceleration в один слайд



- ВОА оптимизирует HPC оптимизируя процесс работы.
- ВОА НЕ изменяет приложение.
- ВОА НЕ изменяет время обсчета отдельного задания.
- ВОА обеспечивает эффективность многопараметрических исследований (100х-1000х параметров).
- ВОА эффективно сокращает количество моделирований необходимых для достижения поставленной цели (10х-100х раз).
- ВОА ОБЪЯСНЯЕТ принятые решения (какие параметры как и на что влияют) в реальном времени и позволяет вмешаться в процесс.



**Спасибо за внимание!**

**Вопросы**