

「京」からポスト「京」へ

～戦略プログラムの成果の実用化とポスト「京」に向けたアプリ開発を推進～

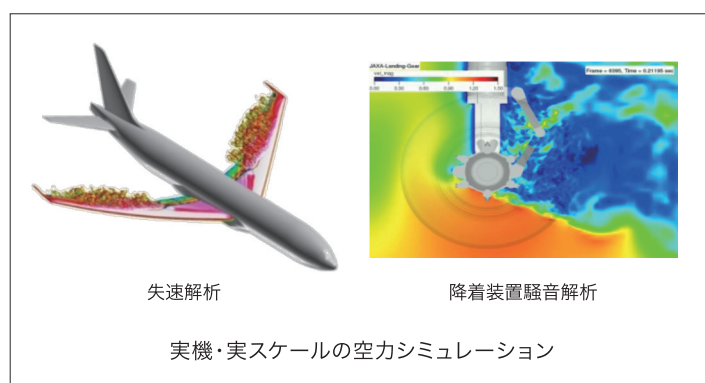
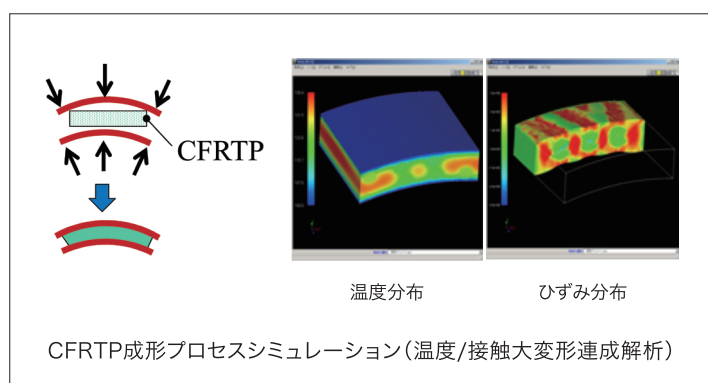
2011年度から本格的に実施してきたHPCI戦略プログラムが本年3月で終了します。この事業は「京」を用いて革新的な成果を創出することと、その普及を含めて、HPCの推進体制を構築することを目的とした事業でした。当センターは、宇宙航空研究開発機構、ならびに日本原子力研究開発機構とネットワーク型の推進体制を組み、この事業の一環として、戦略分野4「次世代ものづくり」を推進してきました。一方、来年度からはポスト「京」に向けたアプリケーションの研究開発が本格的に実施されます。本事業は、ポスト「京」の運用開始(2020年度を予定)を睨み、社会的・科学的に重要な課題(いわゆる重点課題)の解決に資するアプリケーションの研究開発を目的としたものです。当センターでは、重点課題⑧「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」の課題責任者としてこの事

業を推進しています。

HPCI戦略プログラム分野4では、5つの研究開発課題を設定し、「京」の計算機パワーを駆使すれば従来の計算機でできることは質的に異なることが実現できることを実証しました。これらの成果は「第6回分野4次世代ものづくりシンポジウム(最終成果報告会)」(3月23日、24日)において、産業界ユーザーからの発表を中心として報告していただく予定です。今後、ポスト「京」向けのアプリケーションの研究開発と並んで、これらの実証研究の成果の実用化が重要な課題となります。このためには、いくつかの解決すべき課題がありますが、特に、「京」を用いて実証した大規模計算のハードルを下げるのが必須となります。戦略分野4では、設計者や技術者でも比較的手軽にHPCアプリケーションが利用できる環境として、HPC/PF(HPC Platform)を開発し、解

析事例データの整備などを進めてきました。一方、昨年9月に運用を開始した名古屋大学の情報基盤センターのFX100は「京」の約8倍の性能のCPUを搭載しており、また、今年の12月に運用を開始する予定の東大の情報基盤センターの新しいスパコンは「京」の約30倍の性能のCPUが搭載される予定です。戦略プログラムで開発してきた数々のアプリケーションがこれらの次世代のスパコンで相対的な性能(スパコンのピーク性能に対する実効性能の比)を維持できたり、あるいは、それ以上の性能を引き出すことができたりすれば、「京」で実証してきた大規模計算に必要な計算機リソースは一気に数10分の1になり、その実用化を加速することができます。ポスト「京」向けのアプリケーションの開発(重点課題)では、このような観点から、その成果を適宜「京」の成果の実用化にも反映させていくつもりです。

センター長・教授 加藤 千幸

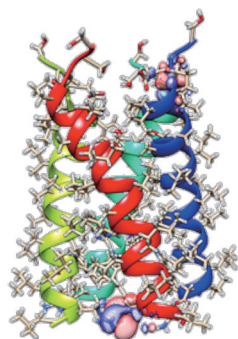
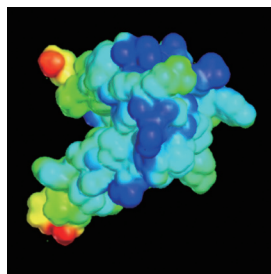


SC15 Report

世界で最も権威のあるスーパーコンピュータ関連の会議であるSC15が、11月14日からテキサス州オースティンのコンベンションセンターで開催されました。この会議の特徴は大規模な展示にあり、今回も300以上の展示ブースが出展し、最先端の技術と研究成果を紹介しました。日本のブースは40程度で全体の7割を占める米国に次ぐ出展数でした。講演発表は数を厳選して行っており、採択されることが名誉となっています。その中であって、理化学研究所の石川氏が招待され「System Software in Post K Supercomputer」と題して講演するなど、ポスト「京」に対する関心の高さが感じられました。またタイムリーな課題に関するパネルディスカッションもこの会議で注目すべきイベントですが、今回は「Post Moore's Law Computing: Digital versus Neuromorphic versus Quantum」と銘打ったパネルディスカッションが行われ、飛躍の必要性が強く主張されました。またTOP500の上位は昨年と変動しないこともあり、次の技術への期待の高まりを感じる会議となりました。

出展報告

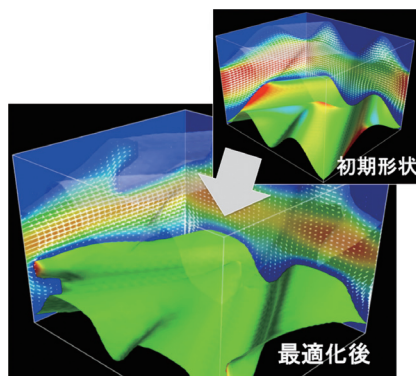
ナノ・バイオ分子特性シミュレータ「ProteinDF」



(左) インスリンタンパク質の静電ポテンシャル
(右) インフルエンザM2タンパク質の分子軌道

大規模分子をターゲットとしたカノニカル分子軌道計算プログラム ProteinDF の普及活動を行いました。ブースでは、複合現実 (Mixed Reality; MR) を用い、3D プリンタで造形した分子模型に対し、ProteinDF によって得られた計算結果を映写するデモ実演を行いました。このデモでは、手のひらで分子模型を自由に回転させると計算結果も追隨して表示されます。分子模型によって低分子と比べたタンパク質の大きさを実感していただくとともに、その大きなタンパク質の量子化学シミュレーションが可能な ProteinDF の革新的な特徴を紹介することができました。SC15 での活動により ProteinDF に関心を持っていただき、実際に GitHub でのソース公開サイトの訪問件数が大幅に増加しました。(平野)

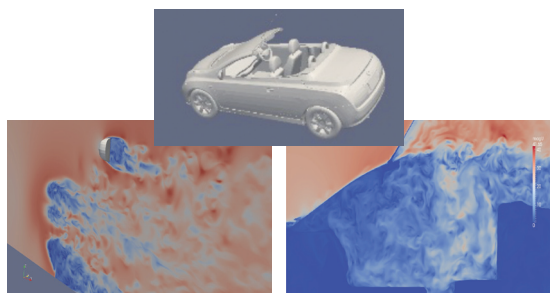
熱流体システムの形状・トポロジー最適化



熱交換器伝熱面の最適化例

近年の計算機能力の発展は目覚ましいものがあり、熱流体シミュレーションによって、与えられた形状や流動条件において生じる現象を精密に再現することが可能となりつつあります。その一方で、熱流体機器の最適設計においては、膨大な数のトライ＆エラーが必要であり、最適な設計パラメータを求めることは極めて困難な課題です。今回の会議では、レベルセット関数を設計変数とし、随伴解析を用いることによって、複雑3次元形状を有する熱交換器の形状最適化例を出展しました。今後は、同手法を FlontFlow 等の当センターで開発されたソフトに実装し、世界最大規模のシミュレーションを用いた熱流体システムの最適化問題に取り組む予定です。(長谷川)

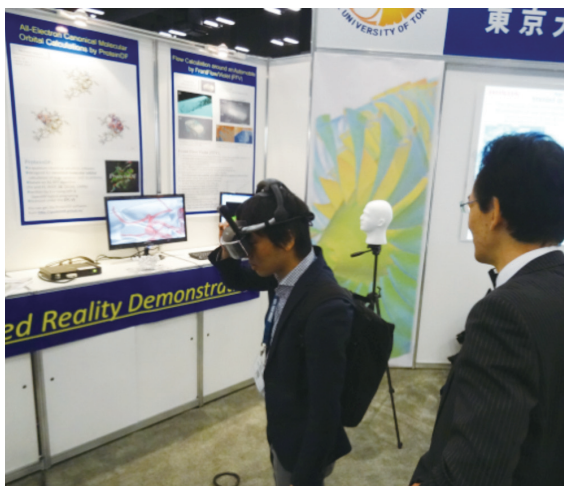
大規模複雑形状熱流体ソルバ「FrontFlow/violet」



自動車内外の瞬時流れ場 (左: ドアミラー、右: 車内)

実設計問題における課題を短期間で解析可能な非圧縮熱流体解析ソルバ FrontFlow/violet (FFV) の単体性能・並列性能結果、および自動車分野での活用事例について MR やポスターを活用した展示を実施し、これまでの成果を発信するとともに、当該分野の研究者や技術者と情報交換を行いました。産業界で格子生成の工数が課題となっていることを再認識し、ロバストかつ高速な自動格子生成が可能な FFV が有力な解となりうることを確信しました。今後も産業界のニーズに答えることを目指し FFV の開発を進めていきます。(鵜沢)

複合現実感によるシミュレーション結果の可視化デモンストレーション



ブースでは、複合現実感 (Mixed Reality, MR) を使用した可視化のデモンストレーション展示を行いました。展示内容としては、FrontFlow/blue (FFB) やFrontFlow/violetによる自動車に関する流体シミュレーション、脳動脈瘤血流シミュレーション、ProteinDFによるタンパク質の計算結果を展示し、多くの方々に体験していただきました。

FFBによるシミュレーションのデモでは、車外の空気の流れと車内のエアコンから出た風の流れを、車内・車外の体験者の好きな位置から自由に観察できます。脳動脈瘤の血流シミュレーションのデモでは、人体モデルに向かって近づくことで頭の中に入り込み、動脈瘤を自由に観察することができます。

MRを体験された方々からは、初めての経験だった、シミュレーションの結果が理解しやすいなど好評を得ることができました。(吉廣)

Gordon Bell Prize

今年のGordon Bell Prizeは、テキサス大学オースティン校のJohann Rudi氏率いる10人のメンバー (Costas Bekas (IBM)、Alessandro Curioni (IBM)、Omar Ghattas (University of Texas at Austin)、Michael Gurnis (California Institute of Technology)、Yves Ineichen (IBM)、Tobin Isaac (University of Texas at Austin)、Cristiano Malossi (IBM)、Johann Rudi (University of Texas at Austin)、Georg Stadler (Courant Institute of Mathematical Sciences)、and Peter W.J. Staar (IBM)) からなるグループに授与されました。受賞課題名は「An Extreme-Scale Implicit Solver for Complex PDEs: Highly Heterogeneous Flow in Earth's Mantle」であり、高速並列陰解法を開発し、50万コアを用いて行った地球内部のマントル流動解析に対するものでした。(吉川)

パネルセッション： Post Moore's Law Computing: Digital versus Neuromorphic versus Quantum

ムーアの法則が破たんした後のコンピューター未来像を議論するパネルセッションが開催されました。モデレーターはGeorge Michalogiannakis氏 (Lawrence Berkeley National Laboratory)、パネラーは(順不同、敬称略) John Shalf (Lawrence Berkeley National Laboratory)、Bob Lucas (University of Southern California)、Jun Sawada (IBM Corporation)、Mattias Troyer (ETH Zurich)、David Donofrio (Lawrence Berkeley National Laboratory)、Shekhar Bokhar (Intel Corporation) でした。カーボン系素子、量子素子、ニューロ素子など次世代を担うと目される技術の現状と可能性を正しく認識し、それぞれの限界を冷静に見定めようとの主旨で議論が行われました。Mooreの法則が破たんしないことを願うしかないというのが現状のようです。(吉川)

SC15 会場風景





大島 まり 教授

予測医療を目指した医用画像と融合した統合シミュレーションシステム

心筋梗塞や脳梗塞などに代表される心疾患および脳循環障害は循環器系疾患として位置づけられており、悪性新生物(がん)に次ぐ日本人の主な死因となっている。そのなかで、脳梗塞は重篤な状態に至る確率が高く、また、寝たきりになる例も多いため、患者本人だけでなく、家族にとっても身体的・経済的な負担が大きい。超高齢社会を迎えた我が国にとって、脳血管障害の予防は医療だけでなく、社会的にも重要な課題といえる。

脳血管障害は動脈硬化症等と密接な関わりが指摘されており、発症防止のため未然に治療を施すことが多い。治療法は外科的手術(頸動脈内膜剥離術)が標準的であるが、ステント留置術などの血管内治療が選択されるようになってきた。血管内治療は低侵襲であるため、入院期間の短縮化や患者の身体的・経済的負担を減らすことができ、また高齢患者へ適用できる等のメリットを持つ。一方、この治療は2008年4月に健康保険適用になった比較的新しい方法であり、再発や脳内出血の誘発などの課題がある。このようなリスクを軽減し、確実かつ迅速な手術のためには、患者ごとの病態に対応して術後の経過を予測し、手術を計画することが重要である。患者個人の病態に対応するには、医用画像と血流解析との融合が有用である。そこで、本研究では図1にまとめられているように医用画像からのモデリングとマルチスケール連成シミュレーションを組み合わせた統合システムを開発することで、血管病変のメカニズムを解明するとともに、術後の血行動態の予測を視野に入れた医療への応用を目指している。

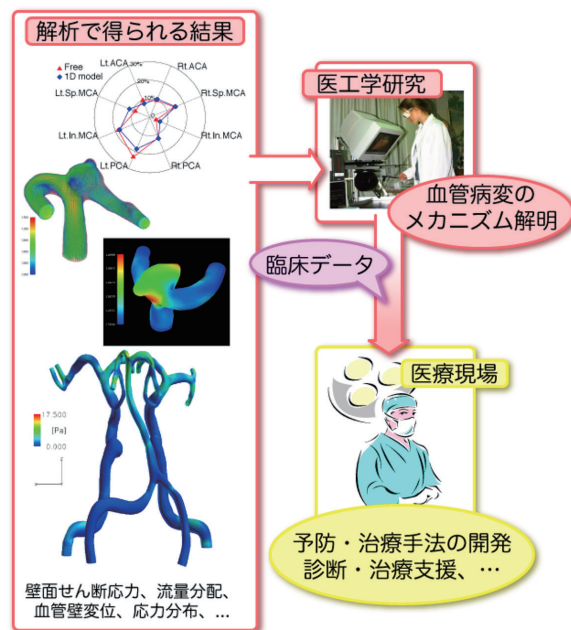


図1: 医用画像と融合した統合シミュレーションの医用への応用

頸動脈ステント手術あるいは脳動脈瘤のコイルリングなど手術後の病態予測を実現するためには、全身循環を考慮する必要がある。人間の血管網は約9万kmにおよび、約25mmから5 μ mの直径の変化を有しており、血管径に応じて流動も変化する。したがって、全身循環のシミュレーションに際しては、マクロな変化とミクロな変化が相互作用している複雑な系を数理モデル化し、効果的に解析するシミュレーション手法の開発が重要な課題となる。本研究では、図2に示されているように、全身循環系のシステムを3次元-1次元-0次元のマルチスケールのアプローチを用いてシミュレーションする部分と、患部などの特定部位を対象とした流体構造連成あるいは物質輸送などによって詳細解析する部分とを組み合わせることで、医療現場で参考となる血行動態に関する情報を得る。また、MRIやCTの医用画像から患者の血管形状をパラメータ化して抽出するとともに、SPECTなどの新しいモダリティを導入することで患者個別に対応できるシミュレーション手法を開発している。さらにデータ同化を円滑に進めて行くために、可視化機能を持つインターフェースを開発することで、医療応用を念頭において手術を模擬したケース・スタディを行うことができるシステムの開発を行っている。

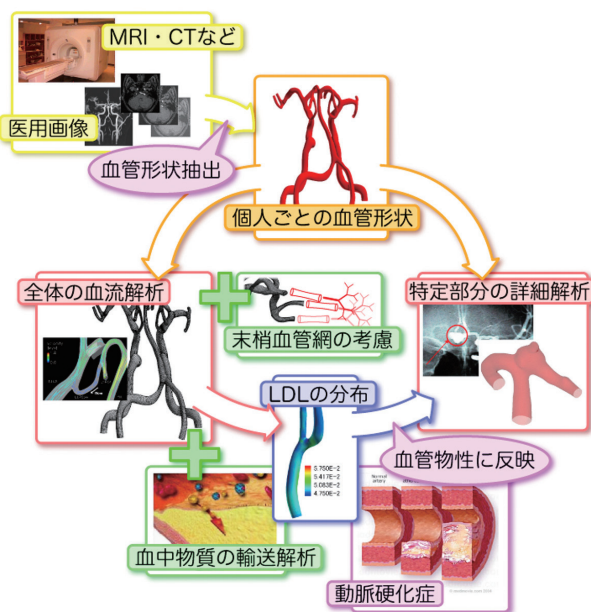


図2: シミュレーションシステムの概要

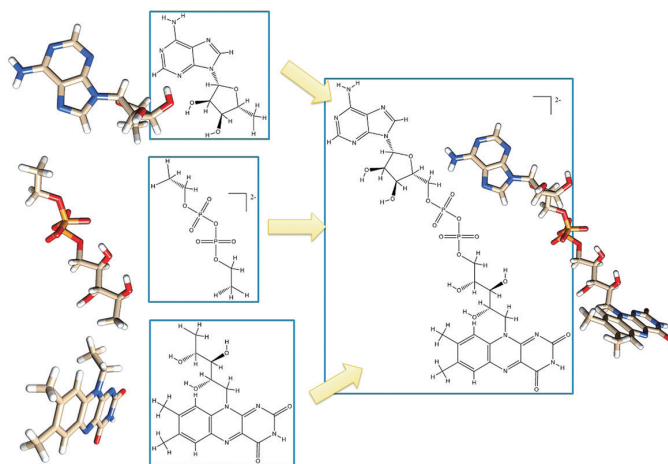


佐藤 文俊 教授



効率的なタンパク質正準分子軌道計算を目指して

現在主流の分散メモリ型超並列計算機に適した、第三世代密度汎関数計算法を開発しました。律速計算を1度だけ行い、SCF繰り返し計算中は高速演算ライブラリが利用できる行列演算のみで電子構造を求める計算法です。また、計算の最適化と共に重要な大規模分子のための初期値問題に関しては、良質の初期値を与える擬カノニカル局在化軌道(QCLO)法を提供してきました。この度、一連の処理をほぼ自動的に行うプログラムQCLObotに改良を加え、ペプチド結合により規則正しく重合したペプチド鎖だけでなく、クロロフィルやフラビンアデニンジヌクレオチド(FAD)のようなヘテロ分子にも対応し、柔軟な計算シナリオを実現できるようになりました。効果的なタンパク質正準分子軌道計算の環境が整いつつあります。これらのプログラムは、GPLライセンスのもとインターネットから入手可能です。

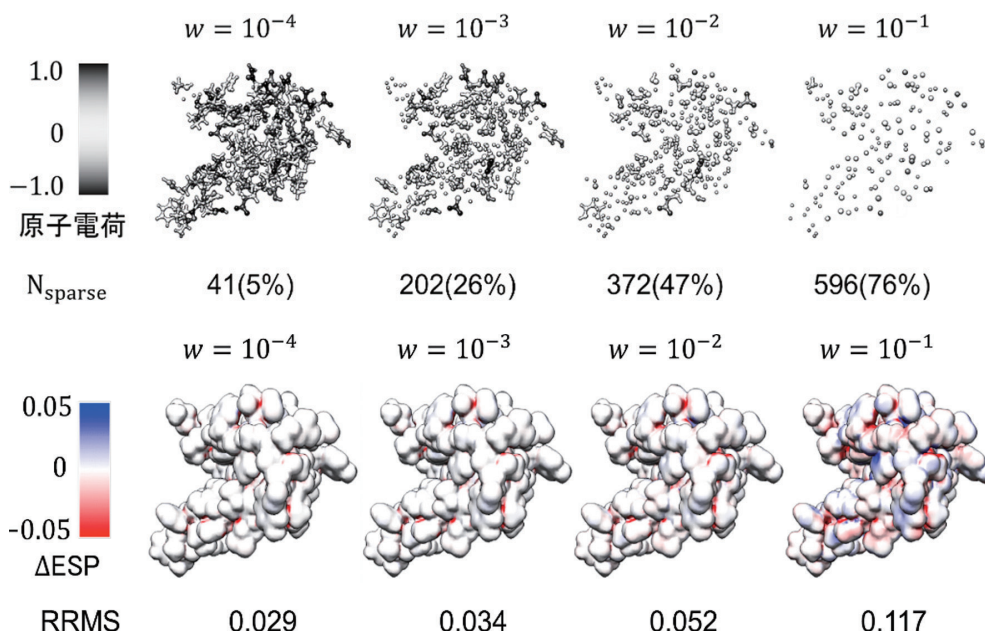


FADのQCLO法計算手順図

線形回帰法を用いたタンパク質の新しい原子電荷登場

古典法によるタンパク質の原子電荷は、アミノ酸残基の静電ポテンシャル(ESP)が再現されるよう最小二乗法でフィッティングされたRESP電荷を組み合わせたものが使用されています。本研究では、タンパク質の正準分子軌道計算と線形回帰法を用いて、タンパク質本来のESP電荷を求めることに成功しました。例えば、分子内部で特異な電荷値が算出されぬよう、最小二乗法の欠点である

過適合を防ぎつつ、タンパク質全体の正しいESPを再現する電荷。また、下図のように多くの電荷を0にしながら、現在のRESP電荷並みの精度を保つ電荷が作成できます。特に後者では、ESP再現に必要な最小限の原子の特徴抽出解析や、百万単位の膨大な候補で大量計算するドッキングシミュレーションの計算量を大幅に削減することが可能となりました。



(上)インスリンのLasso電荷とスパースに推定された原子数。ノン0のみ表示 (下)電荷から求めたESPと正準分子軌道計算から求めたESPとの差分(ESP)とRRMS

AICS一般公開



平成27年10月24日(土)神戸の理化学研究所計算科学研究機構(AICS)にて開催の理化学研究所一般公開(科学の広場)に出展し、「空気の色を見てみよう」と題した子ども向けの浮遊実験と計算を実施しました。ドライヤーの風の力で空中に浮くボールが子供たちの興味を引き付けていました。また、ポスター、電子タッチパネルを展示して研究成果の発表を行いました。

産業メッセ

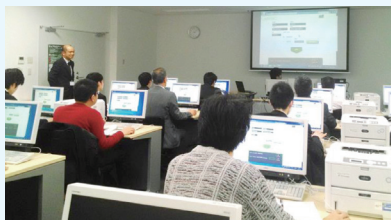
平成27年9月3日(木)・4日(金)の二日間、神戸国際展示場で開催の「国際フロンティア産業メッセ2015」に出展し、研究成果の発表を行いました。出展社数431社、全来場者数29,455名と、過去最大級であった前回はさらに約10%も上回る盛況ぶりでした。センターのブースでは、パネル展示で紹介のマツダの適用例、超伝導リニアの適用例などの、研究内容理解の手助けになるようリニアL0系の1/50モデルやマツダ公式モデルカーを展示し、一般来場者への具体的な説明等に役立てました。



HPC/PFハンズオンセミナー

第6回PHASE/O利用講習会：基礎編

平成28年1月19日(火)神戸のFOCUS実習室にて、初心者を対象としたPHASE/O利用講習会を開催しました。PHASE/Oの機能を紹介するとともに、初心者が考慮すべき理論的背景(パラメータ設定の指針になる)などを説明し、PHASE/Oシステムに含まれるGUIプログラム(PHASE-Viewer)を使用して基礎的な計算例題の実習を行いました。また、HPC/PFを使ってFOCUSスパコン上においても実習を行いました。盛りだくさんの実習内容で参加者には大変好評でした。



第2回 東京ハンズオンセミナー：ABINIT-MP講習会

平成27年12月4日(金)、東大生研セミナー室にてRISTとの共催によるABINIT-MPハンズオンセミナーを開催しました。産学から12名の方にご参加をいただきました。今回の実習では、これまでの創業系だけでなく、ものづくり系の内容も実習に加えると共にHPC/PFとの動作連携も含めましたが、ご好評をいただきました。

スーパーコンピューティング 技術産業応用協議会
第3回HPCものづくりワークショップ 共催

平成27年11月25日(水)東大生研セミナー室にて第5回HPCものづくりワークショップを開催しました。「企業におけるオープンソースプログラム活用事例の紹介」「共通ベンチマーク問題の紹介と解析例/国プロ開発アプリケーションの紹介」、本年度の作業中の「ボックスファンのベンチマークの試験/検証」を討論しました。



イベント案内

第6回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム(最終成果報告会)
— スパコン「京」がひらく科学と社会 —

平成28年3月23日(水)・24日(木)
場 所：東京大学生産技術研究所コンベンションホール

本最終成果報告会では、6年間にわたる研究開発成果や成果普及に対する分野4の特徴的施策のご報告を行うとともに、近未来のものづくりを見据えたHPCのさらなる貢献について議論致します。皆様のご参加お待ちしております。

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/event/event.php?id=75>

計 算 工 学 ナ ビ 今すぐチェック!

Knowledge Base



解析事例データベース
最先端のシミュレーション
ソフトウェアによる、
さまざまな解析事例を収録
<http://www.cenav.org/>

編集後記

革新センターで推進しているHPCI戦略プログラム「分野4次世代ものづくり」のプロジェクトもいよいよ最終期を迎えました。3月末の最終成果報告会での成果発表は大変濃いものになることが予想されます。ポスト「京」重点課題⑧も既に始まっておりますが、まずは、大きな大きな一区切りです。

資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661
FAX : 03-5452-6662
E-mail : office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp
URL : <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>

編集発行

東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター
〒153-8505
東京都目黒区駒場4-6-1