

スパコン「富岳」時代に向けた シミュレーション技術の研究開発を強力に推進

令和最初の年が明け、オリンピックイヤーである2020年を迎えました。スーパーコンピュータ(スパコン)「富岳」は、既に理化学研究所計算科学研究センターに順次搬入・設置が始まっていますが、早ければ約1年後の2021年4月には共用が開始される見込みであり、大きな期待が寄せられています。

本年最初に発行の今回の本ニュースは、昨年9月に開催しました重点課題⑧・重点課題⑥ 第3回HPCものづくり統合ワークショップ(ものづくり統合WS)と、同11月にアメリカ合衆国コロラド州デンバーで開催されたSC19でのCISSの展示の内容を中心に編集しました。

ものづくり統合WSでは、今後のHPCとデータ科学・AIとの関連をテーマに、これからのシミュレーション技術の展開についての議論を行いました。昨年度(2018年9月開催)よりも多くの方にご参加いただき、ものづくりにおけるシミュレーションとデータ科学やAIとの融合に高い感心が持たれていることを強く感じさせられました。上記のとおり、「富岳」の共用も開始されますが、革新的シミュレーション研究センター(Center for Research on Innovative Simulation Software、略称CISS)では、「富岳」を中心としたスパコンを利用した、新時代のシミュレーション技術の在り方を見据えて、今後も活動して参ります。皆様方のご理解とご支援を賜りたく、よろしくお願い申し上げます。

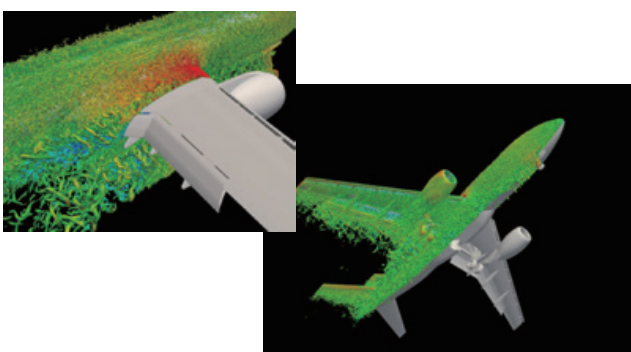
SC19では、理化学研究所のブースにおいて「富岳」に関する展示が行われていました。「富岳」の試作機は、理化学研究所とともに開発を実施している富士通株式会社の沼津工場に設置されていますが、本ニュースレター 3頁にも記載したとおり、A64FX prototypeという名前で、スパコンランキングのTop500にエントリーされています。今回は、36,864コアによる計測で、実効性能比はピーク性能の85%と、「京」よりも低い

値になっていますが、電力性能は16.876 GFlops/Wと非常に高い値をだし、電力性能を競うランキングGreen500では1位を獲得したことに驚かされました。このようにスパコン「富岳」の開発は順調に進んでいます。ものづくりの現場をはじめ、様々なニーズに応えられる、利用しやすいスパコンとなることを期待しています。

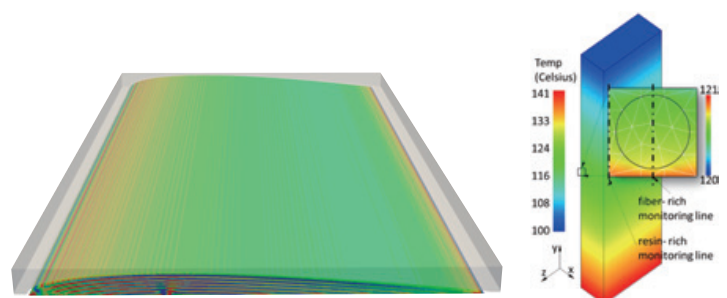
「富岳」で利用されるアプリケーションの開発も順調に進んでいます。CISSが代表機関として推進しているポスト「京」重点課題⑧プロジェクトでは、ものづくり設計と製造プロセスの革新に資するアプリケーションの開発を行っています。このプロジェクトで開発しているアプリケーションの一つ、ターボ機械の性能予測等に利用されるアプリケーションFrontFlow/Blueは、「京」上でのチューニング等により、「京」と比較して25倍以上の性能が得られる見込みを得ており^{*1}、現在「富岳」の試作機を使って、さらなる高速化を図っております。自動車の空力解析などに利用されるアプリケーションCUBE、航空機の空力解析に利用されるアプリケーションFFVHC-ACEや、溶接・プレス解析に利用されるアプリケーションFrontISTRも同様です。高速化されたそれぞれのアプリケーションで何ができるようになるのか(ポスト「京」重点課題⑧成果例は下図参照)、3月16日(月)に開催する第5回ポスト「京」重点課題⑧シンポジウムで報告いたします。このシンポジウムでは、スパコン「富岳」時代のものづくりシミュレーションについて議論する予定です。ポスト「京」重点課題⑧プロジェクトの実施期間も残すところ2ヶ月ばかりとなり、本シンポジウムはプロジェクトの最終成果の報告の機会となります。イベント案内で詳細を紹介しておりますので、ぜひ多くの皆様にご参加いただければと思います。

センター長・教授 加藤千幸

^{*}1 <https://postk-web.r-ccs.riken.jp/perf.html>参照



実機複雑形状に対するテスト計算
(宇宙航空研究開発機構提供)



応力分布

温度分布

ジェットエンジン部品の熱可塑プレス成形
(東京大学生産技術研究所 吉川研究室提供)

ポスト「京」重点課題⑧・重点課題⑥ 「第3回HPCものづくり統合ワークショップ」

世話人：高木亮治 (JAXA) ・ 吉川暢宏 (東大生研)

令和元年9月19日(木)に、本所セミナールームにおいて、文部科学省ポスト「京」重点課題⑧・⑥「第3回HPCものづくり統合ワークショップ」を開催しました。(主催：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、共催：東京大学大学院工学系研究科ポスト「京」重点課題⑥プロジェクト) 当センターでは産業界がこれらのアプリケーションの機能を見極め、設計・開発の現場でアプリケーションを実用化するための助けになるようなワークショップを平成29年度から開催しています。今回で第3回目となる今回のワークショップでは「今後のHPCとデータ科学・AIとの関連について」というテーマで議論しました。

本ワークショップには、民間企業41社からの参加者を含めた95名に参加いただき、また、ワークショップ後の懇談会にも31名に参加いただき、盛会裡に終了しました。



講演後のディスカッション



大西特任助教

A. HPCの現状 セッション

午前中に開催されたセッションAでは、まず、加藤千幸センター長・教授より、現在ポスト「京」重点課題において研究開発を進めている、「富岳」において高性能を発揮できる、ものづくり分野のキラーアプリケーションの開発状況を紹介いただき



加藤センター長・教授

き、1年半後に迫ってきた「富岳」の時代のHPCについて言及するとともに、HPCとデータ科学との融合について展望しました。

その後、キラーアプリケーションの開発の状況を、それぞれの実施者に報告いただきました。具体的には、熱流体解析システム「FrontFlow/blue」の高速化の状況を理化学研究所 南一生活ユニットリーダーより、圧縮性乱流解析プログラム「FFVHC-ACE」の高速化の状況を宇宙航空研究開発機構 高木亮治准教授より、「FFR-REVOCAP-ADVENTURE」並列双方向連成解析の高速化の状況を東京大学 吉村忍教授より、そして、SOFC電極解析の高速化の状況を東京大学 大西順也特任助教より報告いただきました。報告いただいた事例をもとに、HPCの現状について議論しました。



吉村教授



高木准教授

B. 今後のデータ科学・AIとの関連 セッション

午後に開催されたセッションBでは、5名の講演者より、データ科学・AIの方法論に関する研究や具体的な問題への適用事例を紹介いただきました。

名古屋大学 宇治原徹教授より、SiC結晶の成長プロセスの最適化と大口径化に対して、機械学習を用いた試みを紹介いただき、次いで、東北大学 下山幸治准教授より、不確かさの定量的評価を限られた計算資源で効果的に行うための、独自に開発されたデータ科学的アプローチと、航空宇宙分野の空力問題への応用事例を紹介いただきました。そして、東京理科大学 塚原隆裕准教授より、平行平板間乱流を対象にして、粘弾性流体構成方程式の代理モデル構築または物質拡散源推定法の確立を目指した、機械学習の応用研究について紹介いただきました。また、ポスト「京」重点課題の実施者からは、東京大学 内田英明助教より、マルチエージェント交通シミュレーションとディープラーニングの連携活用に関する研究内容を、そして、量子科学技術研究開発機構 本多充上席研究員より、大域的最適化手法と機械学習を組み合わせた核融合プラズマ温度分布予測に関する研究内容を紹介いただきました。

各講演の後には、紹介いただいた内容について活発に議論いただくとともに、午前中のセッションで議論したHPCの現状を踏まえた、今後のHPCとデータ科学・AIとの関連についても議論されました。



講演の様子



内田助教

このワークショップで議論された「今後のHPCとデータ科学・AIとの関連について」は、**計算工学NAVIニュースレター Vol.17**でも特集していますので、あわせて参照ください。
計算工学NAVIニュースレターは以下よりダウンロードできます。

<http://www.cenav.org/nldl/>

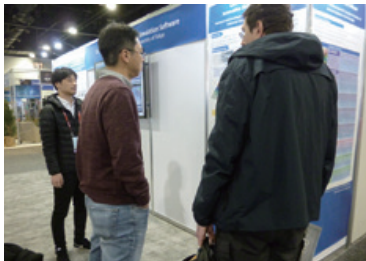


国際会議SC19 (米国デンバー)



世界で最も権威のあるスーパーコンピュータ関連の国際会議であるSC19 (The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis)が、11月18～21日に、アメリカ合衆国コロラド州デンバーにおいて開催されました。

Exhibitsでは、約300の展示ブースにより最先端の技術と研究成果の紹介がありました。今回は各社のAIに関する取組が紹介されており、その潮流を感じられる機会となりました。また、令和元年8月に停止した「京」の次期システムの、スーパーコンピュータ「富岳」(ポスト「京」)の関連では、そのプロトタイプシステムが、SCの開催期間中に発表されるTop500、Green500にランキング(以下を参照)されました。



ブースの様子



Virtual Reality (VR) を利用した
成果の紹介

その中で、我々はExhibitorとして、現在代表機関として実施している「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」重点課題⑧(以下、ポスト「京」重点課題⑧)での取り組み内容を紹介してきました。ポスター展示、ビデオ放映、仮想現実感(Virtual Reality (VR))を利用して、得られた成果の紹介を行いました。多くの方に立ち寄っていただき、また、VRによる可視化の実演は今回も大変好評を得ることができました。

topics

スーパーコンピュータランキングとGordon Bell Prize



Linpackの連立一次方程式の処理速度によるランキング、Top500では、Summit(アメリカ合衆国、148,600.0 TFlops)が1位を獲得し、2019年6月のランキングから、上位に変化はありませんでした。今回のランキングでも、中国(228システム)とアメリカ合衆国(117システム)のシステムが多くランクされており(日本は、この2国に次いで29システム)、また、500位のシステムの性能は1.02PFlops(2019年6月)から1.14 PFlopsに上昇し、Top500にランクされた全てのシステムの性能の合計は1.65 EFlopsになりました。

共役勾配法の処理速度による国際的なランキングHPCGでも、Summit(2,926 TFlops)が1位を獲得しました。こちらは、令和元年8月16日に停止した「京」

が姿を消したほかは、2019年6月のランキングから上位に変化はありませんでした。

省エネのランキングを示すGreen500では、理化学研究所および富士通株式会社で開発されている「富岳」のプロトタイプマシンである、A64FX prototype (Top500は159位)が1位を獲得しました。この他、日本のシステムとしては、2位にNA-1 (Computing / Exascale Inc.、Top500は420位)、6位にAI Bridging Cloud Infrastructure (ABCI) (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)、Top500は8位)、8位にTSUBAME3.0 (GSIC Center, Tokyo Institute of Technology、Top500は23位)がランクされました。

今年のGordon Bell Prizeは、ETH Zurich TeamのAlexandros Nikolaos Ziogas氏ら6名のグループの「A Data-Centric Approach to Extreme-Scale Ab initio Dissipative Quantum Transport Simulations」に授与されました。トランジスタの熱特性の理解に資する、Top500ランキングで第1位を獲得しているSummitを利用した研究です。



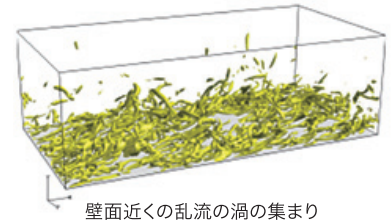
半場 藤弘 教授



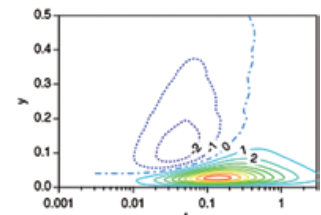
乱流の渦構造の解明

乱流は大小さまざまな渦の集まりからできています。特に固体壁の近くでは小さな渦が多く見られます。乱流研究では、そのような渦の構造や運動を理解し、大規模な流れへの影響を解明することが重要になります。大きな渦はまわりの渦によって抵抗を受けたり引き伸ばされたりして、より小さな渦に変わっていきます。運動エネルギーの観点から考えると、大きな渦から小さな渦へエネルギーが流れているとみなすことができます。

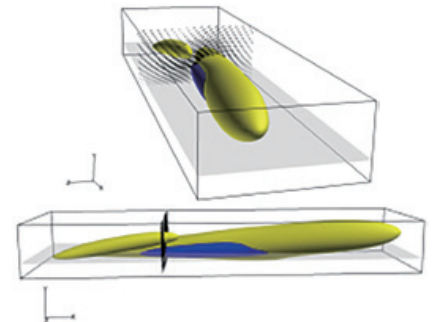
そこで本研究では異なる大きさの渦の間のエネルギーの流れを乱流の数値計算のデータを用いて詳しく解析しました。エネルギーの流れの平均値の分布を見ると、固体壁の近くの一部では通常とは逆向きに小さい渦から大きい渦へエネルギーが流れていることがわかりました。ただし通常の前平均値の分布からでは3次元の渦構造をとらえることができません。そこで、条件付き平均法を導入し、エネルギーの逆流に伴う渦の構造を抽出しました。その結果、壁に沿って主流方向に長い縦渦と、その上流部分に小さな縦渦があることが典型的な3次元構造として明らかになりました。さらに渦度の発展方程式を解析し、実際に自分より小さな渦の働きによって縦渦の回転が駆動されていることが示されました。このような壁面近くの渦の構造や駆動のメカニズムを解明することは、正確な乱流の数値シミュレーションを行うための乱流モデルの開発にも役立つと期待されます。



壁面近くの乱流の渦の集まり



異なる大きさの渦の間のエネルギーの流れ (赤色は逆向きの流れ)

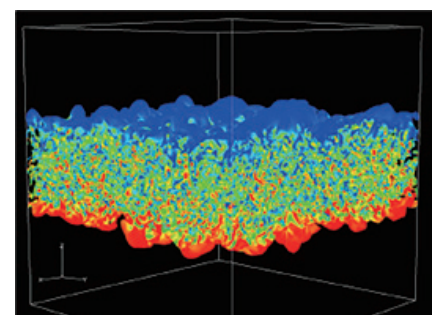
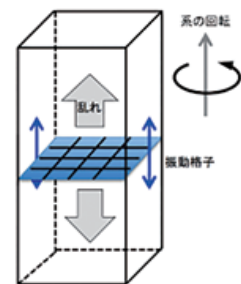


条件付き平均法で抽出された渦構造の拡大図

回転乱流とヘリシティ

天文気象分野の惑星大気の運動や、工学分野のタービンの後流や航空機の翼端渦など、流れの回転や旋回が重要となる乱流が多く見られます。研究室ではこれまで、乱流の回転や旋回において、流れ運動のねじれ度を表すヘリシティ(速度と渦度の内積)が重要な物理量であることに着目し、回転乱流の理解とモデリングに取り組んで来ました。本研究では回転座標系に乗った振動格子乱流における、乱流拡散とヘリシティの関係を数値計算によって解析しました。

直方体の流体領域の中心に格子板を置き上下に振動させると、乱流が生成されて中心から上下の領域に乱れが拡散していきます。通常はゆっくりと上下に広がっていきませんが、この領域全体を右図のように回転させると、回転させない場合に比べて急速に乱れが拡散していくことが知られています。数値解析の結果、この急速な拡散現象には、圧力揺らぎとそれに伴うヘリシティが重要であることがわかりました。そしてヘリシティを用いて、乱れのフラックスの乱流モデルを提案し、現象をよく再現できることを示しました。



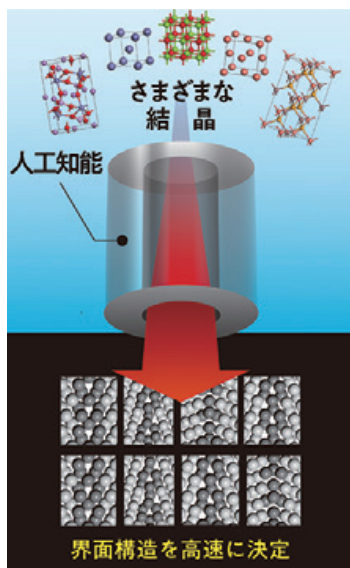
回転系の振動格子乱流の乱れとヘリシティ (赤が正值、青が負値)



溝口 照康 教授

材料中の格子欠陥(界面、表面等)は材料特性に決定的な役割を果たしています。筆者の研究グループでは、シミュレーションとナノ計測、機械学習を活用し、以下のような研究を行っています。

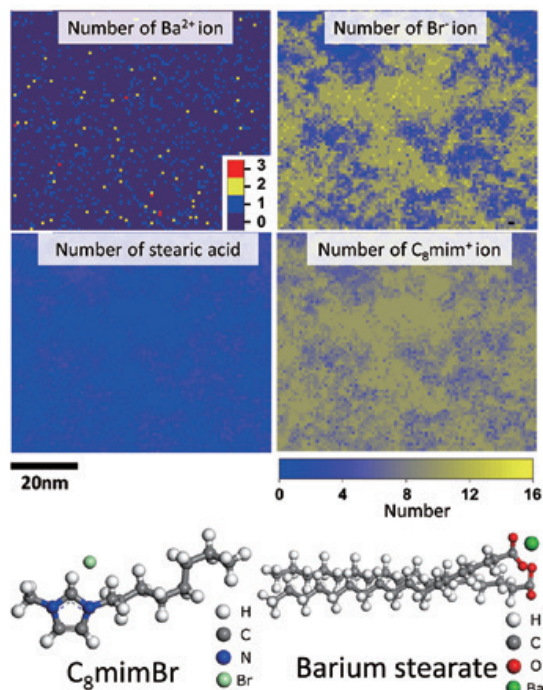
機械学習を利用した高速かつ高精度な界面構造解析



筆者の研究グループでは機械学習を組み合わせた界面構造解析法を開発しています。界面構造決定は多次元空間における最適値(最安定値)探索問題と見なすことができます。情報科学ではこのような膨大な組み合わせから最小・最大値を探索する手法が種々存在しています。我々は仮想スクリーニング、クリギング、転移学習と称される情報科学手法を界面構造解析に利用しました。図1は、仮想スクリーニングを用いた界面構造解析を模式的に示しています。機械学習で構築される予測モデルが人工知能のような役割を果たし、結晶構造のみから界面構造を高速かつ高精度に決定することが可能になります。本手法を用いることで、従来の手法よりも数万倍高速に界面構造を決定することができます。

図1：仮想スクリーニングを用いた界面構造決定の模式図

液体・ガラスの原子分解能定量解析



球面収差補正技術の確立により、結晶材料の原子分解能計測は比較的容易になりました。一方で、液体やガラスのように周期構造を有さない物質の原子分解能解析は進んでおりません。本研究グループではイオン液体やガラス中の原子・分子を定量的に可視化する技術の開発を行っております。図2は、ステアリン酸バリウムをイオン液体(C₈mim-Br)に添加した液体の原子分解能定量マッピングです。それぞれBa²⁺イオン、Br⁻イオン、ステアリン酸分子、C₈mim⁺分子の「数」を定量的に可視化することに成功しました。同マッピングの作成には、液体構造と像強度の精密なシミュレーションが不可欠です。このような原子分解能定量解析により、液体中の不均一構造が形成するメカニズムを明らかにすることができます。

図2：イオン液体の原子・分子定量マッピング

国際フロンティア産業メッセ2019に出展

令和元年9月5日(木)・6日(金)に神戸国際展示場で開催された国際フロンティア産業メッセに(公財)計算科学振興財団、(国研)理化学研究所計算科学研究センター、当センターの3団体連携での出展をしました。当センターでは、ポスト「京」重点課題⑧の概要及び成果等を、ポスター展示や動画の放映を通して紹介しました。

また、シミュレーション結果に触れていただくことを目的として、VR(Virtual Reality)体験コーナーを設け、自動車周りの空気の流れ、脳動脈瘤の血流のシミュレーション結果を多くの方に見ていただきました。200名以上の方に体験いただき、大変盛況でした。

国際フロンティア産業メッセ2019には、522社・団体、542小間の展示があり、2日間で約3万人の来場者がありました。



理化学研究所(R-CCS)一般公開に出展

令和元年11月9日(土)に(国研)理化学研究所 神戸キャンパス一般公開の「スパコン「富岳」でできること、わかること」の展示エリアで、『「富岳」で変わるものづくり』をテーマに出展しました。ポスト「京」重点課題⑧で得られた最新成果を、動画の放映やポスター展示を通して紹介し、立ち寄っていただいた多くの方に、スパコン「富岳」時代のものづくりを感じていただきました。

また、一般の方を対象に、サーキュレータの風を利用して紙風船を飛ばし、空気の流れを体感いただくデモを実施しました。今回も順番待ちができる等、大変盛況で、多くの皆様に体験いただくことができました。



イベント案内

◆◆◆◆ 第5回ポスト「京」重点課題⑧シンポジウム ◆◆◆◆

開催日：令和2年3月16日(月) 10:00~17:20

会場：東京大学生産技術研究所コンベンションホール

本シンポジウムでは、ポスト「京」重点課題⑧を実施してきた5年間にわたって得られた研究開発成果を報告し、そして、それを踏まえて、「京」の時代の数10倍~最大100倍の性能を発揮できるアプリケーションを利用した、スパコン「富岳」時代のものづくりシミュレーションについて議論します。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

PHASE/0 利用講習会 基礎編

PHASE/0



開催日：令和2年2月21日(金) 10:00~17:00

会場：東京大学生産技術研究所セミナー室

駒場リサーチキャンパス公開

開催日：令和2年6月5日(金)・6日(土)

会場：東京大学駒場リサーチキャンパス内生産技術研究所



計 算 工 学 ナ ビ

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/>

今すぐチェック!

編集後記

本ニュースで紹介した理化学研究所一般公開では、「京」の設置されていた部屋を公開していましたが、「京」はすでに撤去されていました。寂しく感じますが、既に「富岳」の搬入が始まっています。CISSでは、引き続き、「富岳」の時代のものづくりに貢献するシミュレーション技術の研究開発を推進していきますので、今後ともよろしくお願いたします。

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