

第3期革新的シミュレーション研究センターの活動も残すところ1年あまり 目標達成に向けて、研究開発および成果の普及活動を展開

4年目の活動を行っている第3期の革新的シミュレーション研究センター（以下、革新センター）が時限を迎えるまで、残すところ1年あまりとなりました。第3期革新センターは、「世界をリードする先端シミュレーションソフトウェアの研究開発」、「研究開発成果の社会への普及」、「シミュレーションソフトウェアを開発・活用できる人材育成のための教育基盤の強化」を目標に掲げ、ものづくり環境の変化に応じた、新たなHPC (High Performance Computing) 利用技術の開発とその実証研究を行ってきました。

この活動の一環として、平成27年度以降連続して、吉川暢宏副センター長・教授は、カーボンニュートラル社会の実現に貢献する高圧水素利用技術に関するプロジェクトに参画してきました。今年度からは新たに、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構の「燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型 産学官連携研究開発事業／水素利用等高度化先端技術開発／機械学習を用いた高圧水素複合容器の最適設計技術に関する理論検討及び実証」プロジェクトに参画しています。このプロジェクトでは、文部科学省のプロジェクト等で開発した、複合材料強度信頼性評価シミュレーター「Front COMP」を利用した、HPC利用技術の実証研究を行うとともに、このHPC利用技術と機械学習手法とを融合させた最適設計技術の研究開発を行っています。詳細は2頁をご覧ください。また、各研究室においても機械学習等のデータ科学手法の研究が実施されています。3頁のTopicsにこのような研究の一例を紹介していますので、参照いただければと思います。

これまで革新センターが中核事業として推進してきた、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムの一つの課題の「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」（略称：「富岳」流体予測革新プロジェクト）の実施期間も、第3期革新センターの設置期間と同様に1年あまりとなっています。このプロジェクトでは、スーパーコンピュータ「富岳」をはじめとした最新鋭のスーパーコンピュータの性能を最大限に引き出せるHPC利用技術の研究開発を行っています。令和3年3月に共用が開始された「富岳」を本格的に利用して、着々と新しい成果が創出されています。得られた成果の詳細については今後紹介させていただきますが、令和3年度の広報活動として、以下のものを実施してきました。令和3年10月22日（金）には、「富岳」成果創出加速プログラムのものでづくり分野の3つの課題との共催で、「第5回HPCものづくり統合ワークショップ」を開催しました。前回は上回る約200名の方にご参加いただき、得られた成果を踏まえて、今後のものづくり分野におけるHPCの利活用の在り方について議論しま

した。また、国際フロンティア産業メッセ2021やSC21にも出展し、産業界の方を含む研究者に向けて、その成果を国内外に発信してきました。その様子は、4頁および5頁をご参照ください。これらのイベントは、新型コロナウイルス感染拡大防止の観点で、オンラインのみになったり、規模等が縮小されたりしましたが、ご参加いただいた方々に最新の成果を紹介する良い機会とすることができました。

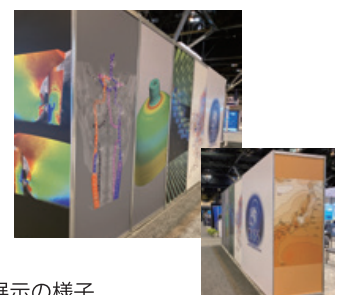
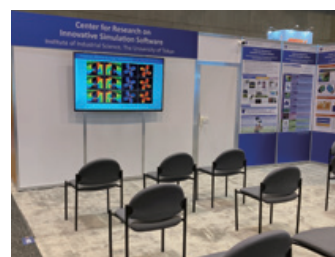
令和4年3月9日（水）には、第2回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウムを開催します。シンポジウムやワークショップなどのイベントは、約2年近くオンラインのみでの開催となっていましたが、新型コロナウイルス感染拡大第5波が収束している状況を受けて、今回はオンサイトとオンラインのハイブリッド形式で開催することを予定しています。詳細は改めてご案内させていただきますが、関係各位には可能な範囲でオンサイトでの議論にご参加いただきたいと思います。

本紙面で紹介したものは第3期革新センターの研究活動の一端ではありますが、上記のように、機械学習を応用した最適化プロセスの効率化など、ものづくり分野の新たなHPC利用技術の研究を推進しているところです。今後も目標達成に向けて、HPC利用技術の研究開発および成果の普及活動を展開してまいります。革新センターの研究活動に、引き続きご理解とご協力をお願い申し上げます。

センター長・教授 加藤千幸



HPCものづくり統合ワークショップでのプレゼンの様子



SC21での展示の様子

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)
 燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型
 産学官連携研究開発事業 / 水素利用等高度化先端技術開発 /



吉川 暢宏 教授

機械学習を用いた高圧水素複合容器の最適設計 技術に関する理論検討及び実証

実施期間：2021～2024年度

カーボンニュートラル実現の牽引役である燃料電池自動車の基幹部品である炭素繊維強化プラスチック (CFRP) 製高圧水素タンクの最適設計手法を株式会社SUPWAT (東京都渋谷区 代表取締役：横山卓也) と共同で開発しています。燃料電池自動車に多用されているタイプ4CFRP製タンクの最適設計の要諦は、金属製口金とプラスチック製ライナーの密着性保持にあります。設計のパラメータが、1)口金形状、2)容器両端のドーム部形状、3)ドーム部を補強するCFRPのワインディング経路など多岐にわたり、同時最適パレート解を探索することが非常に難しい問題構成となっています。これまでは職人的な勘と経験にたより設計パラメータを決めていましたが、より一層の軽量化を求めため機械学習を活用することとしました。設計の基軸は正確な破壊評価シミュレーション手法です。当方の研究室で開発したFrontCOMPにより、炭素繊維束と樹脂を区分するメゾスケールシミュレーションを実施し、正確な破壊強度を予測したうえで、設計パラメータと破裂圧力の関係を学習させた機械学習モデルを構築します。タンクの収納スペース等の設計要件を機械学習モデルに与え最小重量となる最適設計の探索を行います。これまでの経験の延長線上にない最適設計を見出すことで、タンク重量を劇的に削減します。



図1 タイプ4CFRP製容器の口金破損

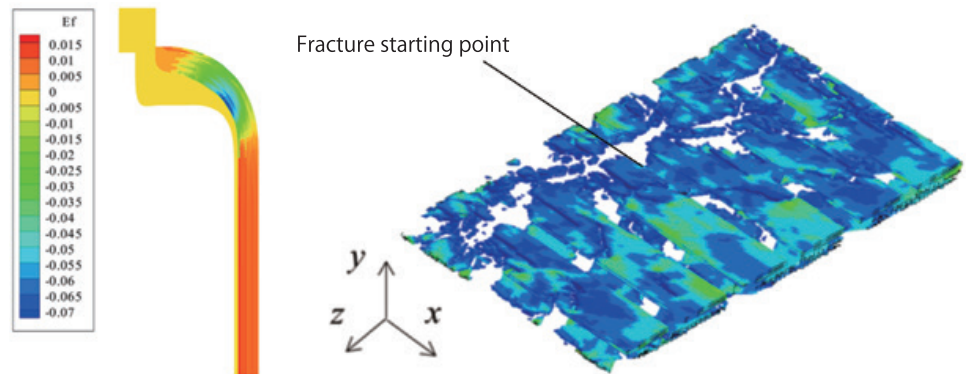


図2 メゾスケールズーミングシミュレーションによる破裂圧力予測

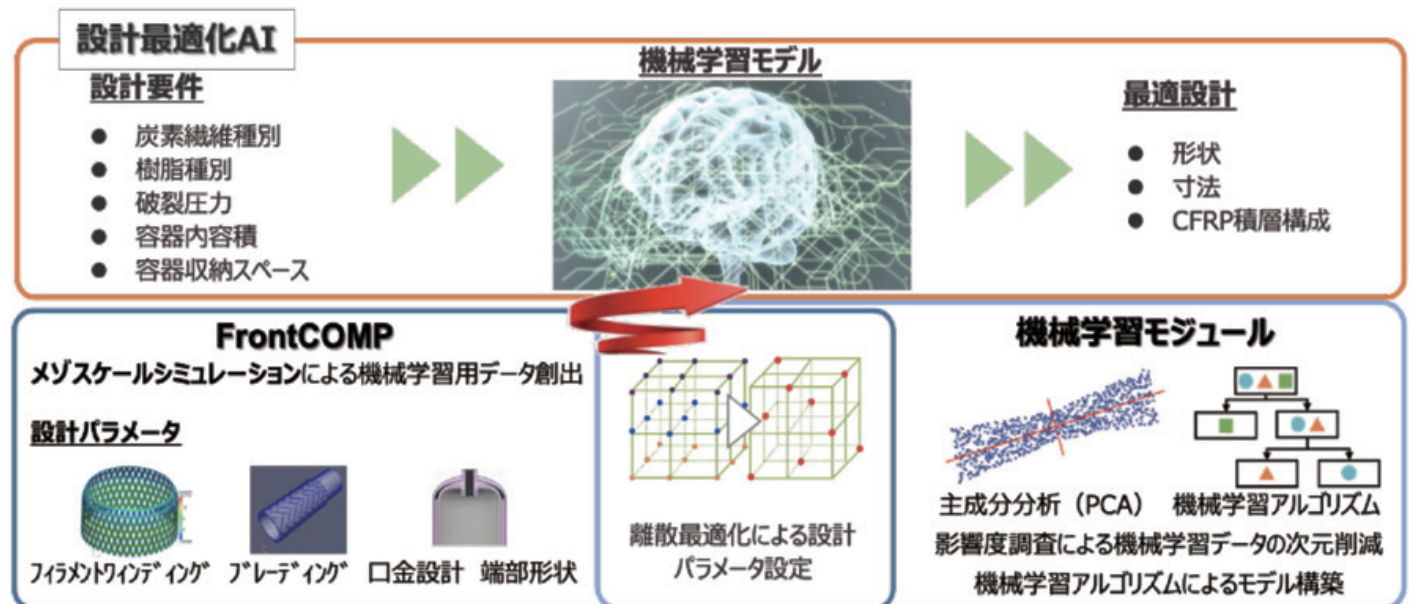


図3 機械学習によりメゾスケールシミュレーション結果を学習し最適設計システムを構築



小野 謙二 客員教授

■ メニーコア向けの低B/F疎行列反復アルゴリズム研究

流体シミュレーションなどに現れる大規模な疎行列を係数にもつ連立一次方程式の求解は、行列・ベクトル積の計算が必要ですが、既存の解法アルゴリズムの要求B/F(演算に対するデータ移動の比率)が大きく、近年の高性能ではあるけれども低B/FのCPUアーキテクチャの性能を引き出せない問題点があります。この研究では、「富岳」でも採用されているメニーコアの計算機において、その性能を引き出せるスレッド・スケラブルな疎行列解法アルゴリズム開発をめざしています。そのアイデアは、方程式を互いに依存関係の無い多数のグループに分け、多数のコアを十分な演算量で動作できるように式変形を行うところにあります。この方法は、Tree Partitioning Reduction (TPR) 法と Parallel Cyclic Reduction (PCR) 法を組み合わせ (PTPR 法)、低B/Fアーキテクチャのコアで重要なL1 キャッシュ上にあるデータの再利用性を高めたものになります。図1はスレッド数に対する性能、図2は方程式の数に対する性能を示しています。既存手法のPCR, TPRに比べると、PTPRはスレッド数、方程式の数(連立一次方程式の大きさ)ともに大きくなるとその性能が向上する特性をもっていることがわかり、メニーコアの性能を引き出せることがわかります。

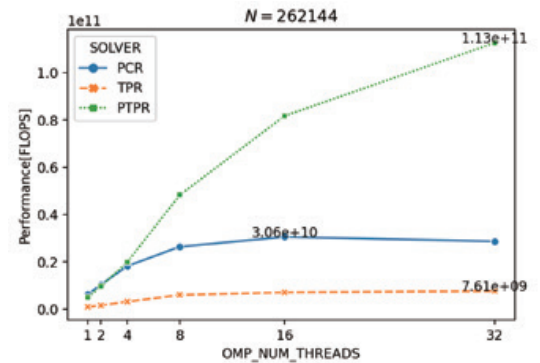


図1 スレッド数と演算性能 [FLOPS]

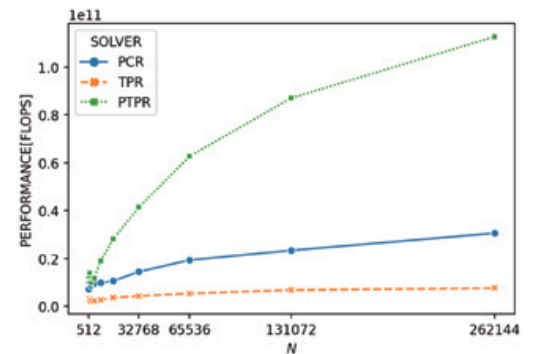


図2 方程式の数Nに対する演算性能 [FLOPS]

■ Equation Discovery

自然科学の研究分野では、現象を表す支配方程式は数理的な解釈と合わせて偏微分方程式の形で記述されます。しかし、支配方程式の形式は多くの実験や観測データと理論的な考察により構築されてきたものであり、その偏微分方程式の形を得るために長い年月を必要としました。例えば、流体科学における混相流の研究領域では、物質の種類と混合状態により対象とする媒質は無限にあるので、方程式に組み込む応力と歪みの関係について明らかとなっていないものも多く、それを明らかにしたいという要求があります。また、社会科学のような支配方程式自体が定義しにくい現象に対しても、その振る舞いを理解する上では近似的にでも支配方程式が得られれば、要因分析や政策立案などに役立ちます。近年のセンサーや計算機の発展とデータ科学手法の進展を背景に、データ駆動型手法が多くの学術分野に展開されています。モデリングの研究においても、データ駆動型のアプローチであるデータから方程式を推定するEquation Discovery研究が注目され、様々な手法が提案されています。我々の研究では、創発的な効果のある遺伝的アルゴリズムを用いて、できるだけ制約のない方程式の形の探索を行い、対象とするデータと照合することにより、そのデータを表す方程式の構造と係数を最適化するアプローチを採っています。この方法は、計算量が多くなりますが、並列化の効率を高くすることができるため、有望な手法の一つとなっています。先進的なシミュレーション活用を有限の計算資源で実施するためには、「高精度かつ低コスト」というトレードオフを解決する技術が必要となります。データから方程式を推定するというデータ駆動型の方法論は、このトレードオフを解決する低計算負荷な代理モデル(サロゲートモデル)を見いだすツールにも利用可能です。

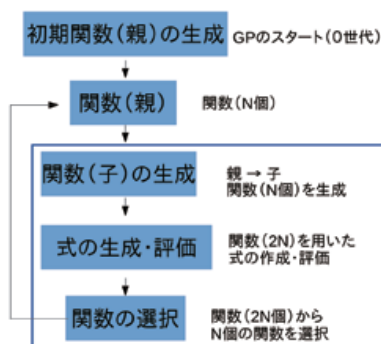


図3 遺伝的アルゴリズム (Genetic Programming, GP) を用いた方程式の探索

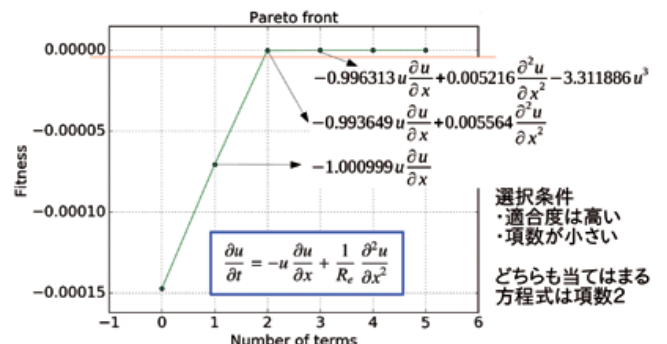


図4 多数の試行の結果から得られた/パレートフロント解と方程式の候補。この場合は、項数2の方程式の形が最適。

国際フロンティア産業メッセ2021への出展

令和3年9月2日(木)～3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2021に出展しました。この出展は、スーパーコンピュータ「富岳」をはじめとしたHPCで利用される技術の産業展開を目的として、(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、(一財)高度情報科学技術研究機構の4団体が連携して出展したものです。

革新センターからは、ポスター展示や動画放映によって、現在推進している「『富岳』成果創出加速プログラム」「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」プロジェクトの実施内容、アプリケーションの開発状況や、最新の成果等を紹介するとともに、これまでに行われている産業界との連携例を紹介しました。

今年も適切な新型コロナウイルス感染症対策を行ったうえでの開催となりましたが、360社・団体、415小間の展示があった国際フロンティア産業メッセ2021には、2日間で約7,000人の来場者があり、革新センターの展示を多くの方に見ていただきました。



「『富岳』成果創出加速プログラム」 第5回HPCものづくり統合ワークショップ

令和3年10月22日(金)に、「『富岳』成果創出加速プログラム」第5回HPCものづくり統合ワークショップを、前回に続き、新型コロナウイルス感染症の拡大状況を鑑みてオンラインにて開催しました。革新センターが主催したこのワークショップは、昨年度に引き続き東京大学大学院工学系研究科「富岳」成果創出加速プログラム「スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用」プロジェクトと東北大学大学院工学研究科「富岳」成果創出加速プログラム「航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究」プロジェクトに共催いただき、そして、今年度からは、新規に採択された(国研)理化学研究所計算科学研究センター「富岳」成果創出加速プログラム「『富岳』が拓く Society 5.0時代のスマートデザイン」プロジェクトにも共催いただいて開催しました。

このワークショップは、今後のものづくり分野におけるHPCの利活用の在り方を展望することを目的として開催したものです。午前のセッション「『富岳』成果創出加速プログラムの最新状況」では、ものづくり分野における「富岳」成果創出加速プログラムの各課題の最新状況を紹介いただき、「富岳」をはじめとした最新鋭スパコンの利用について展望しました。午後のセッション「『富岳』の時代のHPCの産業応用への期待」では、AI・データ科学に関する取り組みを含めた、HPCの利用例等を紹介いただき、午前議論された「富岳」成果創出加速プログラムの各課題の最新状況を踏まえて、「富岳」の時代のHPCの産業応用を展望しました。

民間企業74社からの参加者を含めた192名に参加いただいた本ワークショップは、活発な意見交換が交わされる場となり、盛会裡に終了しました。



▶ 革新センターが現在推進している「富岳」成果創出加速プログラム「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」プロジェクトについては、以下をご参照ください。

<http://www.fugaku-pj.iis.u-tokyo.ac.jp/>

国際会議 SC21

令和3年11月14日(日)～19日(金)に、スーパーコンピュータ関連の、世界で最も権威のある国際会議である、SC21 (The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis) が、アメリカ合衆国ミズーリ州セントルイスにおいて開催されるとともに、ヴァーチャル配信されました。今回の Exhibits では、約170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が、ヴァーチャルのみで展示する機関があり(約30)、また、オンサイトの参加者が例年よりも少なく、新型コロナウイルス感染症拡大の余波が感じられる会議となりました。

その中で、革新センターでは、Exhibits において Exhibitor として出展し、センターの活動の紹介をはじめ、現在代表機関として実施している「『富岳』成果創出加速プログラム」「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」プロジェクトの実施内容や最新の成果等を、ポスター展示や動画放映によって紹介しました。



CISS(革新的シミュレーション研究センター)ブース



◆ Topics ◆

スーパーコンピュータランキング

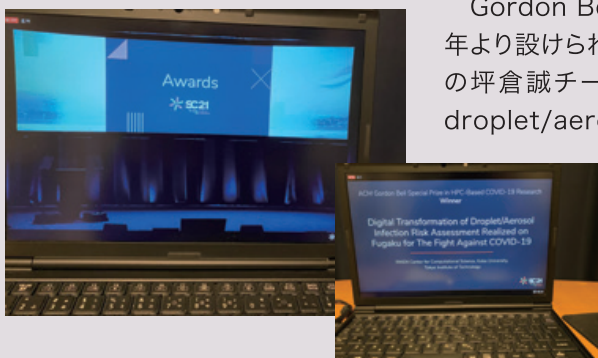
例年SC開催に合わせて発表される、LINPACKの連立一次方程式の処理速度によるランキングTop500では、スーパーコンピュータ「富岳」(日本、442.010 PFLOPS)が、2021年6月に続いて、4期連続1位を獲得しました。このほか、共役勾配法の処理速度による国際的なランキングHPCG(16.00 PFLOPS)、AIの計算などで活用されている単精度や半精度演算器などの能力も加味したランキングHPL-AI(2,004 PFLOPS)、さらには、グラフ解析の性能のランキングGraph500(102,955 GTEPS)でも1位を獲得し、4期連続でスパコンの主要なランキングにおいて4冠を達成しました。

Top500の性能ランキングは、2位がSummit(アメリカ合衆国、148.600 PFLOPS)、3位がSierra(アメリカ合衆国、94.640 PFLOPS)、4位がSunway TaihuLight(中華人民共和国、93.015 PFLOPS)と続き、上位のシステムに変化はありませんでした。

Gordon Bell Prize

今年のGordon Bell Prizeを受賞した研究は、中華人民共和国の国立スーパーコンピュータセンターのYong Liu氏ら14名のグループの「Closing the “quantum supremacy” gap: achieving real-time simulation of a random quantum circuit using a new Sunway supercomputer」でした。これは、膨大な計算時間がかかるため解くことができないとされてきたランダム量子回路のシミュレーションを、短時間で実現できるようにした研究です。なお、「富岳」を用いた成果(筑波大学計算科学研究センターの吉川 耕司氏ら3名のグループの「A 400 Trillion-Grid Vlasov Simulation on Fugaku Supercomputer: Large-Scale Distribution of Cosmic Relic Neutrinos in a Six-Dimensional Phase Space」)が、今年もファイナリストに選出されました。

Gordon Bell Special Prize for HPC-Based COVID-19 Researchが昨年より設けられていますが、今年は、(国研)理化学研究所計算科学研究センターの坪倉誠チームリーダーら6名のグループの「Digital transformation of droplet/aerosol infection risk assessment realized on “Fugaku” for the fight against COVID-19」が受賞しました。これは、「富岳」および東京大学情報基盤センターと筑波大学計算科学研究センターが共同運営する「Oakforest-PACS」を用いて、新型コロナウイルスを含むエアロゾル粒子の拡散のシミュレーションを実施したもので、新型コロナウイルス感染症拡大のリスク評価と対策戦略などに利用された研究です。



タンパク質の正準分子軌道を計算するプログラムProteinDF/QCLObot

開発者 佐藤 文俊 教授・平野 敏行 助教

当研究室では長年にわたり、タンパク質の正準分子軌道を計算するプログラムProteinDF/QCLObotを開発しております。いわゆる化学で標準のガウス型基底関数を用いたハイブリッド密度汎関数法を、解法に近似を用いずに、数千原子の分子系で達成するプログラムです。そのため、全電子エネルギーの他に、数万の(正準)分子軌道とその軌道エネルギーが全て求まることが最大の特長と言えます。本プログラムを使用して、タンパク質の分子軌道は非局所化することや(図1)、古典計算とは異なる静電ポテンシャルを与えること(図2)を明らかにしてきました。

計算アルゴリズムには、業界標準のダイレクト法の他に当研究室で独自に開発したコレスキー分解法が選択できます。後者は重い分子積分計算を1回しか行わないため最速ですが、ノード当たり十分なメモリサイズを持つ計算機システムを要求します。また、交換相関項の計算にグリッドフリー法を選ぶこともできます。これにより、アミノ酸残基、側鎖や主鎖といった任意のサブユニットの間でEnergy density analysis (EDA) 法に基づく相互作用解析を行うことができます。

一方、大規模系で正しく安全に自己無撞着解へ導くためには、精度の高い初期値を構築するしかありません。当研究室では擬カノニカル局在化軌道(QCLO)による初期値作成法を推奨しており、QCLObotはその煩雑な計算処理を支援するプログラムです。これを用いて、計算が安全に収束している様子が分かります(図3)。

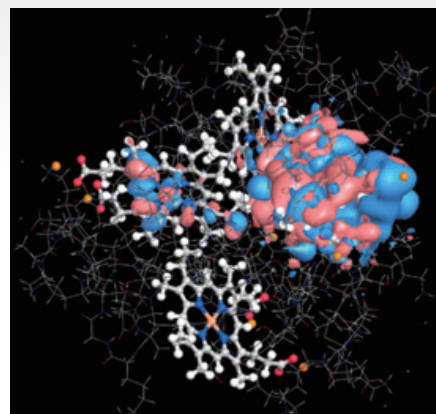
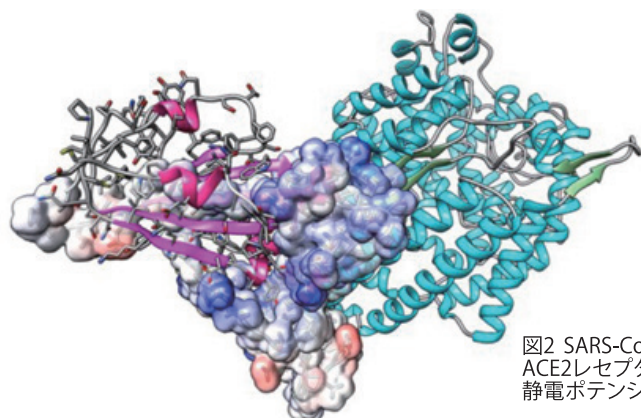
図1 シトクロム c_3 の分子軌道

図2 SARS-CoV-2スパイクタンパク質 ACE2レセプタ結合ドメインの静電ポテンシャル

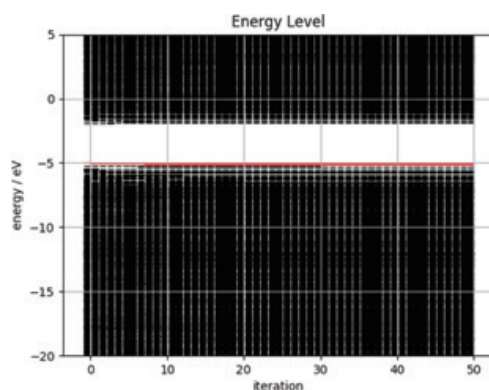


図3 SCF回転数(横軸) vs 軌道エネルギー分布(縦軸) 軌道エネルギーの値一つ一つを横線で描いている。赤色は最高被占軌道。

▶ 全てのプログラムは <https://proteindf.github.io/> にて公開中です。

イベント案内

文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」
「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」プロジェクト
第2回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム

開催日：令和4年3月9日(水) 10:00～17:00



計 算 工 学 ナ ン ン

Knowledge Base 解析事例データベース

今すぐチェック!

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

「富岳」流体予測革新プロジェクトでは、令和3年3月に共有が開始された「富岳」を利用して、様々な成果を創出しています。得られた成果は令和4年3月9日(水)に開催の「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウムでも紹介させていただきます。このシンポジウムはハイブリッド形式での開催として企画していますので、ぜひ多くの方にオンラインでご参加いただき、「富岳」の時代のものづくりシミュレーションについてご議論いただきたいと思います。どうぞよろしくお願いいたします。

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