

ここまで来た
計算科学の鉄鋼への応用

地球シミュレータ

世界最高の計算能力を持つスーパーコンピュータ

いまや、あらゆる科学技術分野の進歩は、コンピュータ抜きには語れない。高性能プロセッサの開発とともにコンピュータはいつそう進歩し、極めて高い計算能力を持つスーパーコンピュータが開発されてきた。これと並行して、コンピュータによる大規模計算に基づく計算科学分野の進歩も目覚ましい。そのすそ野は次第に広がり、鉄鋼を始めとする工学分野でも今後大きな役割を果たすものと期待されている。日本にある地球シミュレータは、現在、世界で最も優れた計算能力を持つスーパーコンピュータとして認められている。開発時に、それまでの常識をはるかに上回る計算能力で、世界のコンピュータ関係者を驚かせた地球シミュレータは、世界一の計算能力を活用し、さまざまな分野の研究に利用され始めている。

見わたすかぎりコンピュータ筐体が並ぶ地球シミュレータ（神奈川県横浜市の独立行政法人海洋研究開発機構 横浜研究所内）

地球環境問題解明にはスーパーコンピュータが不可欠

ほの暗い部屋の中に、どこまでも大きな箱が並んでいる。箱の上では小さな緑のランプが一定のリズムで点滅し、あたかもSF映画のシーンのようだ。これが世界最高の計算能力を持つスーパーコンピュータ、地球シミュレータの外観である。

1995年、気候変動に関する政府間パネル（IPCC）は、人類の活動による地球温暖化がすでに始まっており、このままでは21世紀末には平均気温が1～3.5℃上昇し、海面は50m上昇する、という予測を発表した。

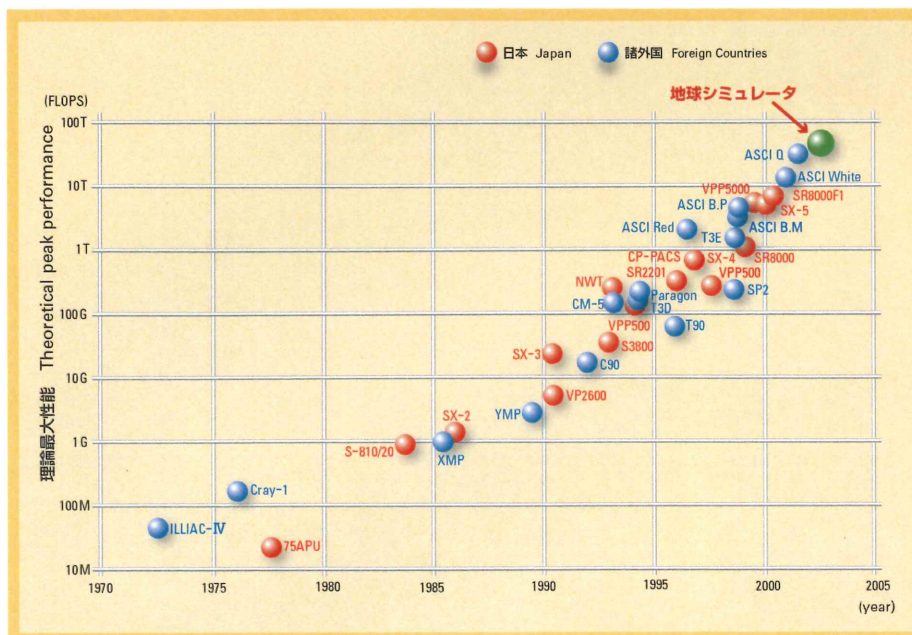
1996年、科学技術庁（現・文部科学省）は、「地球変動予測の実現に向けて」報告書の中で、地球変動の解明と予測のために、地球変動プロセス研究、地球観測及び数値シミュレーションの3つの機能が一体となった、総合的かつ計画的な研究開発を推進すべき、との提言を行った。

地球規模で起こる環境変動や異常気象、地殻変動などは、時間的、空間的な規模が極めて大きく、観測や実験だけでその現象を解明することは難しい。これを解決するために高度なシミュレーション研究が必要であり、これを行うスーパーコンピュータシステムを開発することになったのである。

1997年、宇宙開発事業団（現・宇宙航空研究開発機構）と、動力炉・核燃料開発事業団（現・核燃料サイクル開発機構）の共同プロジェクトとして、「地球シミュレータ」と名付けられたスーパーコンピュータの開発が開始され、地球シミュレータ研究開発センターが設置された。1998年には動力炉・核燃料開発事業団に替わり日本原子力研究所が参加し、1999年からは海洋科学技術センター（現・海洋研究開発機構）が参加した。その後、2000年3月に制作が開始され、2002年2月に完成、同年3月に海洋科学技術センターに新設された地球シミュレータセンターで一元的に運用が開始された。

従来をはるかに超える地球シミュレータの性能

地球シミュレータの開発当時、世界最高レベルのスーパーコンピュータでも地球規模の現象のシミュレーションを行うのに十分な性能を持っていなかった。



■スーパーコンピュータの高性能化の経緯

最初のスーパーコンピュータは1971年に米国イリノイ大学が開発したILLIACIVで、1980年ごろから米国を中心にスーパーコンピュータの開発が本格化した。これを追って日本のメーカーでも開発が始まり、1982～1991年に当時の通商産業省が第5世代コンピュータプロジェクトなど、優れた研究を実施した。

ちなみに、2004年6月発表のTOP500リストによれば、計算能力が1テラフロップスを超えるシステムが続々と登場している。国別の設置数では、米国が圧倒的に多く、続いて英国、ドイツ、日本などが多い。

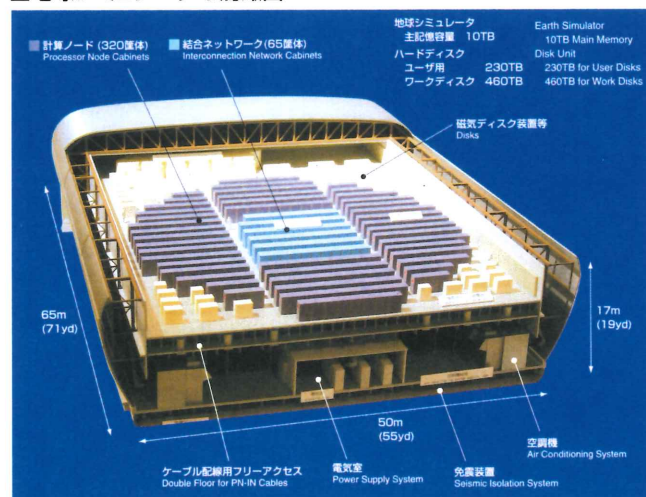
地球規模の現象を把握するにあたり、地球の水平方向(経緯度)を分割する格子の大きさは従来200～300kmだったが、検討の結果、さらに細かい5～10kmを目標とすることになった。このためには、従来に比べ約100倍(経度方向10倍×緯度方向10倍程度)の計算量が必要になる。同様に、鉛直方向、時間経過でも必要な計算量は大きくなる。プロジェクトでは、従来のスーパーコンピュータの数千倍の計算量が必要であるとの結論に達した。

そこで、計算能力の目標は、当時のスーパーコンピュータ(Cray社のC90)が処理できる規模の1,000倍以上とし、実行性能5テラフロップス*、ピーク時演算性能40テラフロップス(実行性能はピーク時性能の14～15%になると予想されるため)、主記憶容量8テラバイト以上に設定され、開発が行われた。

2002年2月末、地球シミュレータは稼働が開始され、性能確認の後、3月に運用が開始された。その2ヵ月後にリンパック・ベンチマークテスト*で35.68テラフロップスの世界記録を達成した。この性能は、2002年当時世界最高のスーパーコンピュータASCI Whiteの約5倍の計算性能に相当した。これは米国のコンピュータ関係者に非常に大きな衝撃を与えた。これを、かつて世界初の人工衛星打ち上げをソ連のスプートニクに先んじられたことになぞらえ、「コンピュートニク」と呼んだほどである。

2002年6月、米国テネシー大学などによる世界のスーパーコンピュータのTOP500ランキングにおいて、地球シミュレータはNo.1に認定された。その後も、最も新しいランキング発表(2004年6月)まで、連続5回その座を守っている。まさに、日本が作った世界最高の「道具」と言っても過言ではないだろう。

■地球シミュレータの鳥瞰図



ベクトル型を採用し、高速処理を実現

地球シミュレータは、多くのコンピュータとその周辺機器で構成される大規模なシステムである。

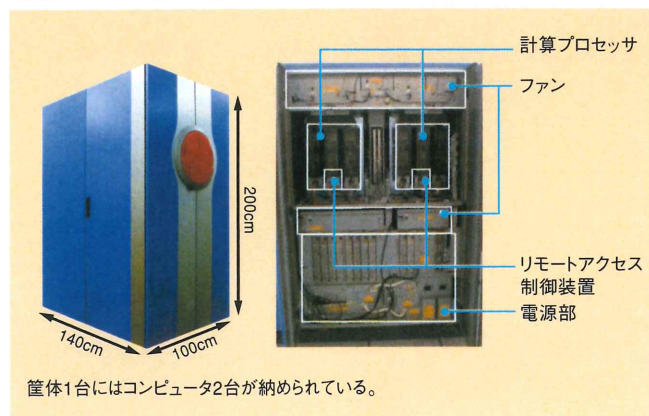
地球シミュレータは、640台のコンピュータ(計算ノードと呼ぶ)と、それらを結合するコンピュータ(結合ネットワークと呼ぶ)で構成されている。これらのコンピュータが結合され、1つのシステムとして機能する分散主記憶型並列計算機システムとなっている。計算ノードは2台ずつ筐体に収納されている。コンピュータ室を上から見ると、320台の計算ノード筐体が規則的に配置され、その中央部に結合ネットワーク筐体が設置されている。それらの

*テラフロップス(Tflops):コンピュータの演算性能を表す単位。テラフロップスは、1秒間に10億回の浮動小数点演算を行う能力を表す。

*リンパック・ベンチマークテスト:世界で最も広く用いられている計算機性能測定テスト。

ここまで来た 計算科学の鉄鋼への応用

計算ノード筐体と内部

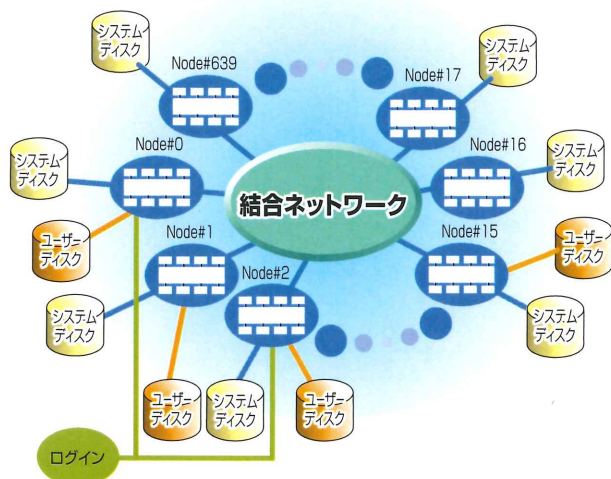


周囲には、ディスク記録装置やテープライブラリ装置が配置されている。

地球シミュレータの特徴として、ベクトル型スーパーコンピュータであることが挙げられる。使用されているベクトル型プロセッサは処理性能が高く、科学技術計算や多数の繰り返し演算を一度に処理するような計算に適しているといわれている。世界のスーパーコンピュータの中には、ベクトル型ではなく汎用のプロセッサを大量に使用するスーパーコンピュータ(スカラ型と呼ばれる)も多い。地球シミュレータでは、高い計算性能を追求して、ベクトル型スーパーコンピュータとしたのである。

また主記憶容量は10テラバイトと極めて大きいこと、双方向12.3ギガバイト/秒の高い性能を持つ結合ネットワークを持つこと、及びプロセッサを超高集積度にし、超小型化することによってノード間転送時間を大きく短縮できるということも大きな特徴である。これらの特徴により、実効性能が極めて高くなった。これは地球シミュレータの大きな強みとなっており、これにより35.86テラフロップス(ピーク時性能比87.5%)を実現している。

地球シミュレータのシステム図



最先端のシステムをどう運用すべきか

地球シミュレータの本格的な運用は、2002年2月末から始まった。運用を実施する独立行政法人海洋研究開発機構・地球シミュレータセンターでは、地球シミュレータの果たすべき役割について、以下の3つを挙げている。

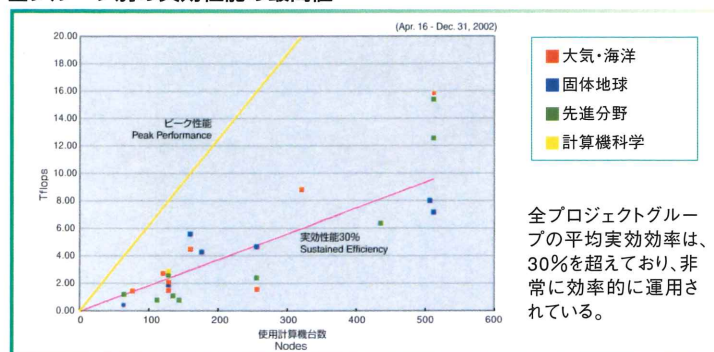
第1は、地球大気・海洋及び地球内部の変動を評価・予測することにより、自然災害から我々の生活を守り、社会の発展に役立てる、それにより人と自然の共生と人類の持続的発展に貢献することである。このため、地球シミュレータを利用して得られた成果は、すべて一般に公開される。また地球シミュレータを利用した研究は、公募により選定され、国内だけでなく海外研究機関との連携も積極的に行っていく方針である。

第2は、地球シミュレータの活用により画期的な成果を上げることが期待できる分野に貢献する役割を果たすことである。一般に、コンピュータシミュレーションの活用が期待される分野の例には、高温高压下の現象、生体実験、新物質、衝突実験など実験することが困難なものや、原子や素粒子など観測が困難なもの、などがある。地球シミュレータ利用の主な目的である大気海洋分野や固体地球分野(地球内部の構造や運動について研究する分野)の研究だけに留まらず、例えばナノテクノロジー研究やバイオテクノロジー研究など、学術、産業のさまざまな分野でも、地球シミュレータが持つ高い計算性能の活用を推進しようとしているのである。

そして第3の役割は、地球シミュレータのハードウェアの特色を最大限活かして、さらに高度なベクトル化並びに並列化ソフトウェアの開発を推進する、ということである。計算科学の進歩は、コンピュータ技術の進歩なしには語れない。スーパーコンピュータの開発競争は世界的に激しく、ポスト地球シミュレータとも言うべき次世代スーパーコンピュータを見据えたコンピュータ技術の開発も、最先端スーパーコンピュータに課せられた大きな課題である。

地球シミュレータという、優れた道具はすでに完成した。しかし、この道具をどのように使い、未来のためにどのように役立てるかは、今後の運用にかかっている。

グループ別の実効性能の最高値

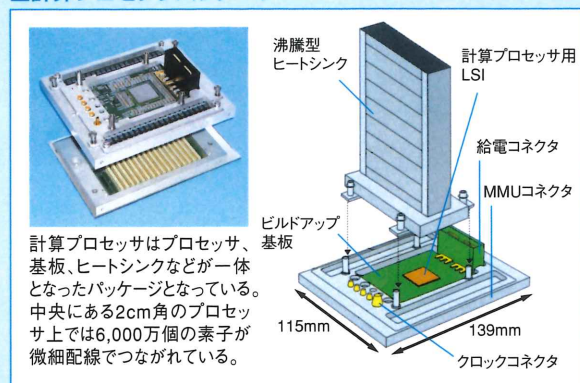


高速処理を支える微細加工技術

地球シミュレータの計算ノード1台の中には、計算処理を行う計算プロセッサ8台が入っている。計算プロセッサ中心部には8ギガフロップスのプロセッサが使われ、この8台のプロセッサが主記憶装置16ギガバイトを共有している。

計算プロセッサの中央にある2cm角の大きさのプロセッサには、高集積化技術が駆使されている。計算能力は世界最高速の8ギ

■計算プロセッサパッケージ



ガフロップスで、これは1秒間に80億回の計算が可能な能力である。また、1つのプロセッサの中には、6,000万個の素子が納められているが、素子と素子をつなぐ配線は最小幅0.15μmで、これは髪の毛の太さ(約80μm)に約530本を配列できる太さである。

またデータ転送においては、プロセッサの高速化を阻害することのないよう、高速なネットワークが作られている。計算ノードを

つなぐ結合ネットワークのデータ転送性能は12.3ギガバイトと広くし、多数の計算ノード間のデータ高速転送を可能としている。

ちなみに使用されているケーブルは、データ転送系81,920本、制御系1,280本、合計83,200本に及び、総延長約2,400km、重量は約140tである。この膨大な量のケーブルが、地球シミュレータ棟の床下に納められている。



コンピュータ室の床下に納められた大量のケーブル

地球シミュレータ棟—高性能を維持する工夫

地球シミュレータが設置されている建物、地球シミュレータ棟(50×65×17m)は、一見、体育館のようなが、ほとんど窓がなく、屋根と壁が一体となった大きな曲面で覆われた外観をしている。ここには、大規模なシステムを守るための数々の工夫が詰まっている。

この建物は、周囲の構造物と固定されていない。地震時に周囲からの影響を受けないためである。床下部には免震積層ゴムを配置し、絶縁している。

建物外壁には、溶融アルミニウムめっき鋼板を使用しており、電磁シールド性能を発揮し外部からの電磁ノイズを防いでいる。また落雷によるシステムの損傷を防ぐため、建物周囲に高さ24mの避雷塔8本を立てている。

地球シミュレータ棟の内部はいわば高床構造になっている。コンピュータ室は高さ1.5mの床の上にあり、床下はコンピュータ間をつなぐケーブルを格納するスペースとなっている。コンピュータ室の床下からは、常時16℃の冷気が室内に向かって吹き上げられており、機器から発生する大量の熱を冷やしている。この冷気が効率よく循環するために、建物の上部が曲面になっている。

コンピュータ室内の照明は、点灯時のノイズがなく、保守をしやすくするため光導管を用いている。光導管は、コンピュータ室の左右をつなぐ長さ44mのライトチュー

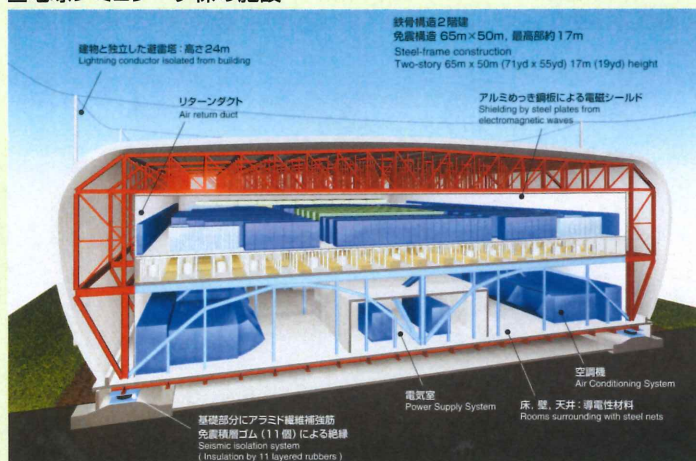
ブ内を通っており、室外の光源を室内に導く方式としている。

細部にわたる1つひとつの工夫を見るにつけ、日本が誇る地球シミュレータを大切に維持し、役立てていきたいという、設計者たちの思いに触れる気がする。



コンピュータ室天井の照明設備

■地球シミュレータ棟の施設



ここまで来た
計算科学の鉄鋼への応用

地球シミュレータが広げる 計算科学の可能性

幅広い分野から選ばれる研究テーマ

地球シミュレータを利用する研究テーマは、地球シミュレータ共同プロジェクトとして公募され、採択されている。共同プロジェクトは、大気・海洋分野、固体地球分野、計算機科学分野、先進・創出分野の4つの分野に分けられている。最初の公募となった2002年度は40件のプロジェクトが採択され、以後毎年度30～40件のプロジェクトが採択されている。

地球シミュレータの優れた計算能力を十分に活用し、地球環境保護や、我々の社会や産業に役立てていくためのアプローチが、多くの研究者によって始められている。

次に、現在までの研究成果の中から、いくつかの例を紹介する。

大気と海洋を1つの環境としてシミュレーションする

従来の地球の大気・海洋分野のシミュレーションの多くは、コンピュータの能力に合わせ、100～500km規模の現象に焦点を当てたものであった。この規模では、積雲の生成や維持、集中豪雨、積乱雲、局所的な吹き出し風など、鉛直方向の速度成分が激しく変化するような現象を厳密に扱うことはできなかった。

地球の気候は、大気と海洋がさまざまに影響を及ぼしあい、また地域の気候は全地球の気候と関連しあい、それらが長い時間をかけて現在の姿になっている。そのため、気候のシステムを解明するには、大気と海洋の相互作用をできるかぎり正確に再現する全地球気候モデルが必要となる。

「地球シミュレータ用・非静力・大気海洋結合モデルの開発」研究(2003、2004年度)では、海と空の相互作用を同時に計算できることに加え、細かい現象をはっきりと再現できる大気・海洋結合モデルを開発した。これにより20kmの格子で見た、100年分の時間の流れを再現するのを、わずか3箇月で完了することができた。

また「ホリスティック気候シミュレーションコード」と呼ばれる地球全体の大気、海洋、大気海洋結合コードの開発を開始している。目標とする解像度は、水平数百～数km、鉛直約100層である。既に、大気や海洋の流れをシミュレーションする過程の導



大気、海洋における現象の時間と空間のスケール。ホリスティック気候シミュレーションコードでは、局所的な現象から大域的、全球スケールの現象までの相互作用をシミュレーションしようとしている。

入と検証をほぼ完了し、台風、ストーム、集中豪雨などの再現に成功している。

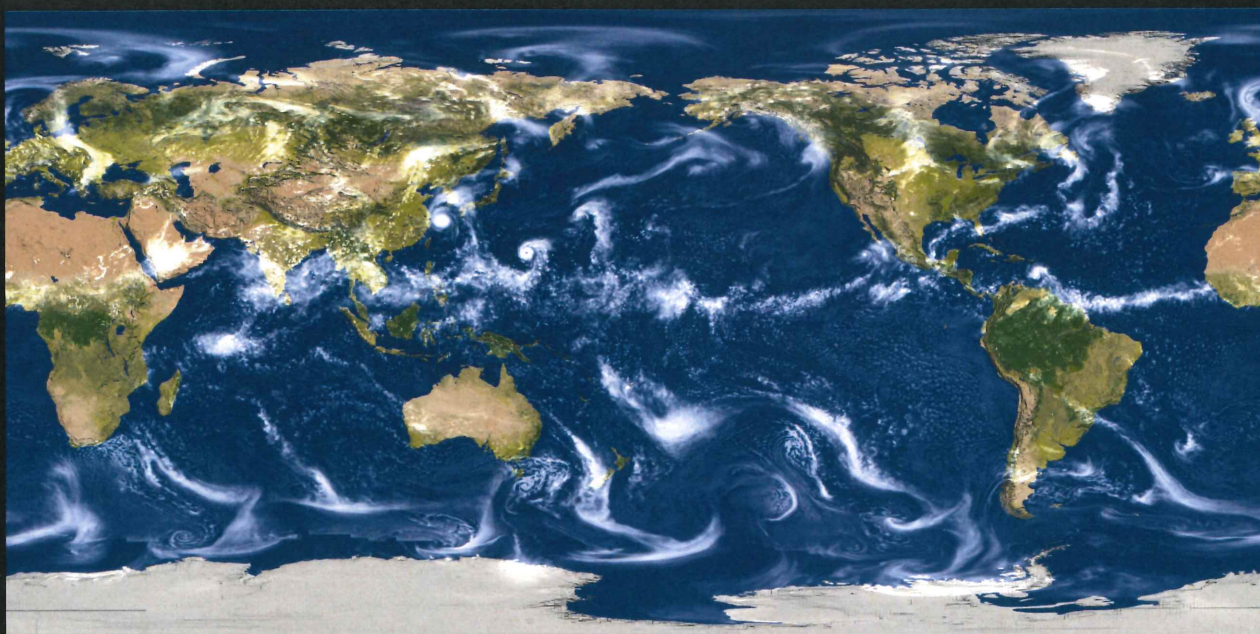
2004年9月、2071～2100年で平均した全地球平均気温は1971～2000年平均に比べ3.0℃上昇*するなど、地球温暖化の見通し計算の結果が発表された(「高分解能大気海洋モデルを用いた地球温暖化予測に関する研究」(2002～2004年度))。また映画「デイ・アフター・トゥモロー」で、地球温暖化で極地の氷が溶け、海洋の熱輸送が止まり、氷河時代を迎えるというストーリーが展開されている。これに対し、今後100年間に地球温暖化が進んだとしても寒冷化の影響は局所的であり、氷河時代にならないという結果が発表されている(「高精度・高分解能気候モデルの開発」研究(2002～2004年度))。

地球内部の対流をとらえる

固体地球分野は、地球内部の現象を研究対象としている。通常的手段では、観測さえ難しいこの分野では、地球シミュレータを用いた研究への期待は大きい。

地球内部には、2種類の大規模な対流運動がある。これは、コア(外核)とマントルである。コア中の液状の鉄が対流運動をしている結果、磁気流体の作用を通じて地球の磁場が作られ

*2100年の二酸化炭素濃度を550ppmとしたモデルの場合



水平解像度10kmの大気モデルによる降雨分布

ている。一方、マントル対流は、地球表面にプレートを形成し、大陸移動や造山活動、地殻変動などを引き起こしている。この2つの対流系はコア・マントル境界面において接触し、影響を及ぼしあっていると考えられている。

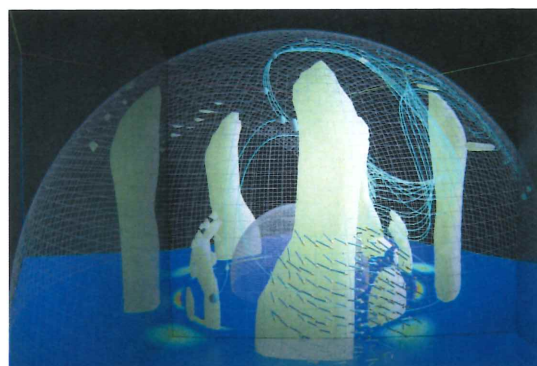
「コア・マントル結合系のダイナミクス」研究(2003、2004年度)では、地球内部全体を一種の2重対流系としてとらえ、多様な固体地球現象を理解するための新しい理論を構築することを目的としている。このためには、コアとマントルという2つの対流系を同時に解くための結合コードが必要となり、地球球面上の新しい格子系である「^{インヤン}陰陽格子」が考案された。野球のボールの皮が球面になるのと同じような形状であり、このような格子法は、これまで航空機などの工学分野では応用されていたが、地球科学では使用されていなかった。

この研究では、陰陽格子を使って、コアとマントルの対流シミュレーションを格段に高速化させることに成功し、コア対流とマントル対流の両方を共通の格子系(陰陽格子)で解くことを可能とした。

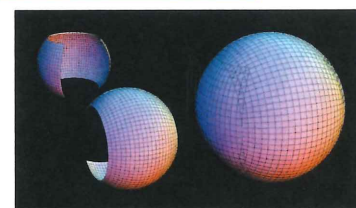
新材料の特性や構造を解明する

新材料開発でも今後、シミュレーションの利用がますます普及すると見られている。共同プロジェクトには各種材料に関する研究も多いが、その中ですでに成果を挙げているものの1つに、カーボンナノチューブのシミュレーションがある。カーボンナノチューブは、世界中で注目されるナノ材料の1つだが、ナノスケールの実験は技術的な難易度が高い。

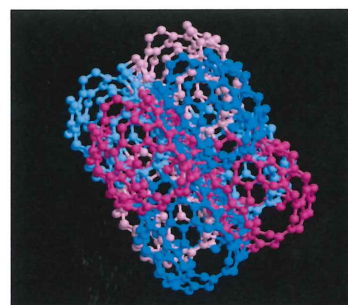
「カーボンナノチューブの特性に関する大規模シミュレーション」研究(2002～2004年度)では、カーボンナノチューブの特性を明ら



地球の深さ3,000mのコアシミュレーション。中央の球は内核と呼ばれる鉄の固まり、その周囲のコア(外核)部分は液状の鉄がゆっくりと対流している。



^{インヤン}陰陽格子。2つの要素格子を組み合わせ、球面全体を覆う格子を構成している。



フラーレンを溶接して作るナノダイヤモンドのスーパージャングルジム構造
(写真提供: (財) 高度情報科学技術研究機構)

かにし、さらに高品質ナノチューブの生成、ナノチューブの改質・加工、新物質創製というシミュレーションを行うことを目的としている。

現在までに、カーボンナノチューブの引っ張り、圧縮、ねじりに対

より実用的な計算科学への道——連結階層シミュレーションの活用

大規模なシミュレーションを行うにはスーパーコンピュータの性能向上が必要であるが、システム規模の拡大やチップの高集積化など、現在の方法では何年か先に限界を迎える可能性が高い。そこで、シミュレーション利用をさらに進めるためには、研究にあったより実用的で、効率のよい方法論を見出す必要がある。

地球シミュレータセンターの佐藤哲也センター長はこう語る。

「これまでの科学では、細かな要素に分解してからそれを積み重ねるという、要素還元的手法が主だった。この方法論で解決できる課題は、もう、そう多く残っていないのではないかな。そこで、新しい科学的な方法としてのシミュレーションに、期待が高まっている。自然界をはじめ、すべての生きているものは変化し続ける。その変化を示す情報は、一様化されたものではなく、階層化されているが、それを生かしたシミュレーション手法を検討している」

例えば、地球上の大気の動きは、空気力学的な方法を用いて10km単位の変化として計算できる。この中の一部分に雲が発生する場合、分子力学的に1mm単位以下の変化に注目することになる。このような、大気の動きというマクロな変化と、雲の発生というミクロな変化を並列に計算し、そのなかから必要最小限の情報を選択、交換することにより、必要なシミュレーションの結果が見出せ



地球環境問題を始め、さまざまな問題を解決する方法として、シミュレーションへの注目が集まっている(写真は地球シミュレータセンター・シンポジウムの様子)。

る。このように、対象のすべてをミクロに分けて計算するのではなく、必要な部分を見極め、組み合わせることにより、実用的で、効率のよいシミュレーションが可能になると考えられている。

現在、地球シミュレータセンターでは、このような考え方を実現する連結階層シミュレーションの研究を開始している。

「シミュレーションは、細かな要素部分だけでなく、それが集まったシステム全体としてどのように動くかを見極めていく必要がある。つまり、複雑な状況を全体としてとらえることが重要になるのだが、これはある意味で東洋的なものの考え方に通じるように思える。欧米に先駆け日本が新しい分野を開拓する可能性も十分にあるのではないかな」(佐藤センター長)

新しい概念を取り入れた連結階層シミュレーションは、シミュレーション技術の応用範囲をさらに拡大する契機となることが期待される。

する機械強度特性シミュレーションを、量子計算による実用スケールで実施し、ダイヤモンドの2倍の強度を持つことが確認されている。

産業分野へのシミュレーションの応用

スーパーコンピュータを利用したシミュレーションは、日本ではまだ認知度が低く、これまで社会的に余り理解されていなかった。地球シミュレーションの誕生により、シミュレーションを産業分野に役立てるための取り組みが始まっている。

2004年6月、地球シミュレータセンターと日本自動車工業会は、地球シミュレータ活用の共同研究契約を結んだ(2004年6月～2006年3月まで)。最初に取り組むのは、自動車の衝突シミュレーションであり、1,000万要素の解析モデルを数時間で解析することを目指している。従来自動車メーカーなどで行われていた衝突シミュレーションは100万要素前後の解析モデルであったのに比べ、高い解析精度が得られるものと期待されている。自動車の衝突試験を行う場合、試験ごとに自動車や人体ダミーなどが必要になる。これをシミュレーションで行えば、コストが低く抑えられ、実験期間短縮が図れる。

この研究では最終的に、自動車一台をまるごとシミュレーションすることを目指している。エンジン内の燃焼の様子といった小さなものから自動車全体の動きまで、すべてを再現することがで

ければ、今までと違った見方で開発、設計、生産などに役立てることができるようになるかもしれない。地球シミュレータセンターの佐藤哲也センター長は、既にそれを可能にする新しい連結階層シミュレータを考案しているという。

同様な考え方で、例えば地震時の建築物の揺れと構造部材の局所的な変形の関わりや、プラント設備の損傷と配管の亀裂の関わりなど、スケールが異なる複数の現象を一体としてシミュレーションすることにより、さまざまな現象の解明につなげることが期待できる。

また材料研究においても、組織形成や特性発現に関わるさまざまな要素を反映したシミュレーションを行い、新材料開発などへの応用に役立てることも可能だろう。地球シミュレータの2004年度研究テーマとしては、カーボンナノチューブや超伝導素子を対象とした研究が採択されている。

古くから、未来を予言するものは、超能力者としてある時は畏れられ、ある時は尊敬される存在だった。見えないものを見る。未来を予測する。シミュレーションの技術は、我々が現実には見えない像を、臨場感とともに再現し、実感させてくれる。高度なコンピュータ技術に支えられたシミュレーション技術は、人間が得た新しい能力の1つといえるだろう。

- 取材協力 独立行政法人海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター
- 取材・文 杉山香里