



日本における スーパーコンピュータ利用

理論、実験と並ぶ第3の科学研究、技術開発の手法として計算科学の重要性がますます高まっている。スーパーコンピュータの性能向上や普及に伴い、従来は生化学や薬学、物理学の分野が中心であったシミュレーションの活用が、材料科学の分野にも広がっている。今回は、日本のスーパーコンピュータの活用について、材料科学分野を中心に紹介する。

世界に先駆けて10PFlopsを達成した日本のスーパーコンピュータ「京」。(写真提供: (独) 理化学研究所)

ますます熾烈になる開発競争

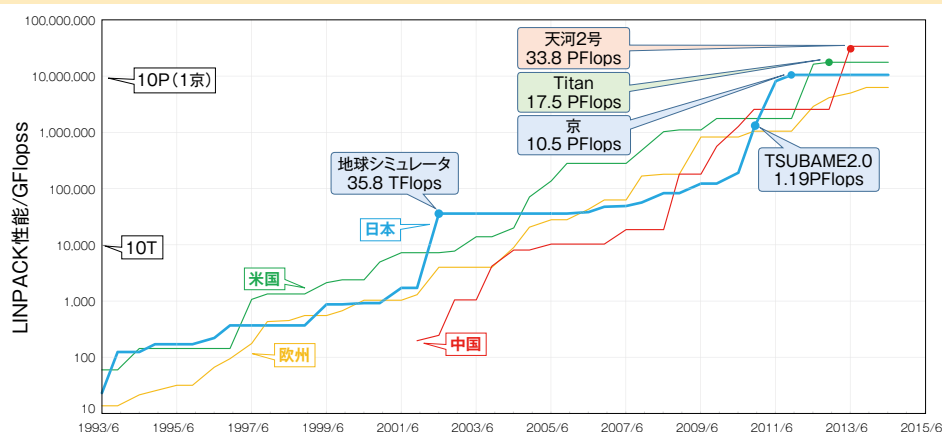
2011年6月、スーパーコンピュータの世界ランキングである「TOP500」において、日本の「京(けい)」が第1位を獲得した。「京」は文部科学省の「次世代スーパーコンピュータプロジェクト」で理化学研究所と富士通(株)により共同で開発され、世界に先駆けて10PFlops(ペタ・フロップス)*1を超える性能を実現した。これは第2位の4倍以上の計算性能であった。「京」には82,944ノード(CPU)の計算ノードと1.27PBのメモリによる超並列計算を実現するために、計算ノード間的高速データ通信接続(インターコネクト)技術や信頼性を高める冷却技術などに

新しい技術が採用された。

2002年6月にTOP500で第1位を獲得し、米国で「スプートニク・ショック」になぞらえて「コンピュートニク」と報道された「地球シミュレータ」の計算能力は約36TFlopsであるので、約10年でおおよそ300倍に性能が向上したことになる。なお、最新(2014年6月)のTOP500ランキングでは中国の「天河2号(33.8 PFlops)」が第1位であり、「京」は4位に後退している。スーパーコンピュータの性能は指数関数的に向上しているが、近年は中国の躍進が目立つ結果になっている。

*1: P(ペタ)は 10^{15} (千兆)を示す接頭辞で10ペタ=1京。Flops(フロップス)は1秒間に行う浮動小数点数演算の回数で、スーパーコンピュータの計算性能を表す指標。

●各国のスーパーコンピュータの計算性能の推移(TOP500ランキングを基に作成)



世界のスーパーコンピュータのランキングであるTOP500の各国別1位の性能の推移を示した。LINPACK(リンパック)はCPUの計算性能を比較するための線形方程式を解くベンチマークテストであるが、実際にスーパーコンピュータを利用する際には、取り扱うデータの規模やデータ転送速度など、そのほかの性能も大きく影響する。



整備が進むスーパーコンピュータの利用環境

高性能化が進むスーパーコンピュータであるが、有効な成果をあげるためには、スーパーコンピュータを活用するための基盤の整備が重要である。スーパーコンピュータの開発は各国が国のプロジェクトとして推進しているが、日本では文部科学省の「次世代スーパーコンピュータプロジェクト」の中核として「京」が開発された。そして、「京」の開発と同時に、スーパーコンピュータの利用を促進するための基盤である「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI: High Performance Computing Infrastructure)」が整備されている。これは「京」と全国9大学が保有するスーパーコンピュータや大規模ストレージ・システムをネットワークで結ぶとともに、これらを1つのユーザーアカウントにより利用できるという新たなシステムである。

国はHPCIにおいて社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野を「戦略分野」として、①生命科学・医療、②新物質・エネルギー創成、③防災・減災に資する地球変動予測、④次世代ものづくり、⑤物質と宇宙の起源と構造の5つの分野を設定し、HPCI戦略プログラムの利用枠として「京」の計算資源の約50%を割り当てている。

HPCI戦略分野の中でも材料科学と密接な関連のある戦略分野2の「新物質・エネルギー創成」には、強相関物質の物性の発現機構の解明や量子化学計算の改善を目指す「第1課題: 新量子相・新物質の基礎科学」、光デバイスやシリコンナノワイヤの実用化につながる「第2課題: 次世代先端デバイス科学」、生体機構を分子レベルで解明する「第3課題: 分子機能と物質変換」、燃料電池やリチウムイオン電池などの化学反応を明らかにし高効率のエネルギー変換を目指す「第4課題: エネルギー変換」、鉄鋼材料のいっそうの強靱化を目指す「第5課題: マルチスケール材料科学」が設定されている。

この5つの戦略課題が設定されている戦略分野2では、東京大学物性研究所 (物性科学) が中心となり、自然科学研究機構分子科学研究所 (分子科学: Theoretical and Computational Chemistry Initiative, TCCI)、東北大学金属材料研究所 (材料科学: Computational Materials Research Initiative, CMRI) を中核拠点として、11の協力機関と計算物質科学に関する大学・研究機関、企業などと連携したネットワーク型組織である「計算科学イニシアティブ (Computational Materials Science Initiative, CMSI)」が構成されている。CMSIは、計算課題の実行だけでなく、新規研究テーマの設定やさまざまな分野振興活動などを行う開かれた組織として運営され、計算物質科学を推進する役割を担っている。

マルチスケールの計算材料科学

創薬や生命科学の分野と比較すると、CMRIが対象とする材料科学におけるマルチスケール計算科学はまだ新しい科学

HPCIおよび京における産業利用のサポート

産業界におけるスーパーコンピュータの利用においては、学術・研究分野とは異なるニーズや課題があるが、HPCIではその点についても配慮されている。

「京」の計算資源の一般利用枠の中には8%程度の産業利用枠が用意されており、研究開発にも迅速で柔軟な対応が求められる産業界が利用しやすい仕組みとなっている。産業利用枠では、企業が必要な計算資源を見極めるなどの利用を想定した「トライアル・ユース」や、成果を非公開とすることが可能な「個別利用 (有償)」などが用意されており、利用申請も随時受け付けている。

さらに、計算科学振興財団 (FOCUS) では産業界のスーパーコンピュータ利用を支援・促進するために「京」の隣接地に「高度計算科学研究支援センター」を開設し、独自のスーパーコンピュータの計算資源を提供しているほか、さまざまな技術支援や産学連携のコーディネートなどを行っている。

2012年9月の共用開始から現在までに、医薬品、材料、建設、機械・自動車、ソフト・ITなど多彩な分野の企業が「京」を利用し、その数はのべ100社以上に達している。

●HPCIシステムを構成する計算資源を提供する機関 (HPCI資源提供機関)



(出典: (一財)高度情報科学技術研究機構のウェブサイトを元に作成)

の一分野という印象があるが、これには理由がある。一般に材料科学で扱う対象は、非平衡性や非線形性、不均一性が強いという特徴があり、局所的な不均一性が全体の特性に大きな影響をおよぼすという例が少なくない。

例えば、合金の強度は原子間結合に由来するが、実材料の強度は粒界や析出物などの内部組織に支配されている。高張力鋼などでは、結晶粒の超微細化による材料の強度向上など、内部組織の制御による性能向上が行われている。しかし、これらは膨大な実験の地道な積み重ねに負うところが大きく、原子間結合力から、内部組織、そして材料強度までを一貫して包括する強力な計算手法の開発は遅れている。また、金属の強度は転位の動きやすさにより決定されるが、 1cm^3 あたりの典型的な転位線の密度は 10^6cm (10km) にもおよぶ。さらに変形や加工によって転位線は 10^{12}cm 程度にまで増殖するといわれ、これは赤道の約250倍の長さに相当する。このような高密度の転位の振る舞いを第一原理から追跡するのは、スーパーコンピュータの限界を超えている。転位の移動の障害となる粒界や非整合界面の性質を計算するだけでも数千から数万原子の



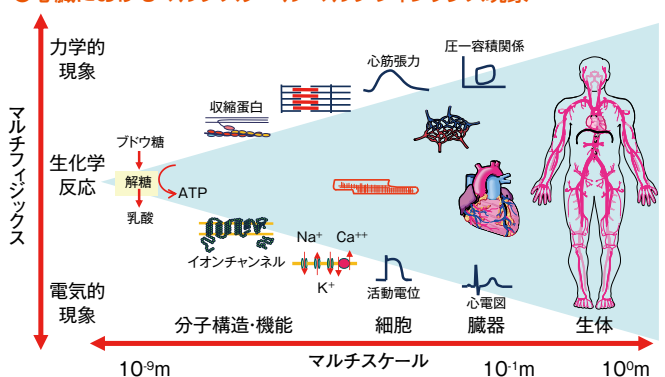
「京」におけるマルチスケール・マルチフィジックスの解析例

マルチフィジックス解析とは、複数の物理現象が連成する問題を解析する手法である。ここではHPCI戦略分野の成果例として「京」を使用した「心臓シミュレータ」を紹介する。

筋肉の運動は生化学反応が基本にあり、微細な電気信号による電氣的興奮（電気現象）が筋線維の収縮（力学現象）を引き起こし、規則的な鼓動を生み出している。また、取り扱うスケールも、数nmレベルのタンパク質分子から、細胞（100 μ mレベル）、組織（mmレベル）、臓器（cmレベル）とマルチスケールにおよんでいる。

これらの各レベルの相互作用を含めて心臓機能全過程をシミュレートしたのが「心臓シミュレータ」である。これにより、生物物理から臨床医学までをひとつながりで取り扱うことができるようになり、今後、臨床への応用が大きく期待されている。

●心臓におけるマルチスケール・マルチフィジックス現象



(資料提供: 東京大学 久田・杉浦・鷲尾・岡田研究室、協力:富士通(株))

状態を計算する必要があり、従来の第一原理手法で計算することは難しかった。

しかし、単一の転位や析出物を第一原理計算の対象とすることは可能となりつつある。「マルチスケール材料科学」では、「京」と最新の計算手法を駆使することで、鉄鋼材料などの金属系材料構造材料の機械的性質を原子・電子レベルから解明し、新たな材料を設計することを目標としている。また、凝固過程の詳細な解析など、プロセスに関するシミュレーションも盛んになりつつある。

発展が期待されている計算材料科学

「京」をはじめとした計算資源やHPCIのような利用基盤が整備され、大きな飛躍が期待されている計算科学であるが、課題も少なくない。

その1つが、ますます熾烈になるスーパーコンピュータの性能向上である。これに対しては、「京」の100倍程度の計算能力を持つ「エクサ²スケール・スーパーコンピュータ」の開発が進められている。現在、世界のスーパーコンピュータ市場は年率7~8%で成長を続けており、Eスケールの時代は2020年頃に到来するといわれている。また、スーパーコンピュータは計算能力向上に伴って莫大な電力を消費するため、計算能力と同時に省エネルギー

性能がこれまで以上に重要な評価要素になっていくであろう。

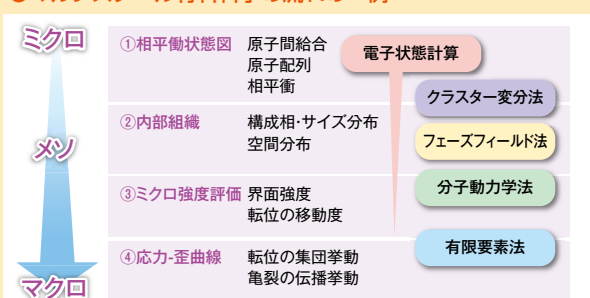
2つめの課題はスーパーコンピュータを活用する人材の育成である。膨大な数のCPUを効率的に利用するためには、課題に適した計算アルゴリズム（計算手法）を採用する必要がある。また、スーパーコンピュータの能力を最大限に引き出すためには、それぞれのハードウェアに適した計算プログラムを組む必要がある。第3の科学の手法としてますます重要になる計算科学の発展のためには、スーパーコンピュータを利用できる専門家、自らプログラミングできる専門家の育成が重要な課題である。CMSI、CMRIの活動でも、人材育成は大きな割合を占めている重要なテーマになっている。

3つめの課題として、CMRIが対象とする材料分野における真のマルチスケール計算科学の実現を挙げることができる。前述の通り、計算材料科学には材料科学固有の問題として理論面の整備・確立が難しいという側面がある。最終的には非線形・非一様・非平衡な材料現象に対して、空間的なマルチスケールだけでなく、時間的なスケールを含めた時空のマルチスケール計算を目指していくことになる。

課題は少なくないが、材料分野の計算科学は大きな発展が期待できる分野であることに疑いがない。今後のシミュレーションを活用した材料科学の大きな飛躍を期待したい。

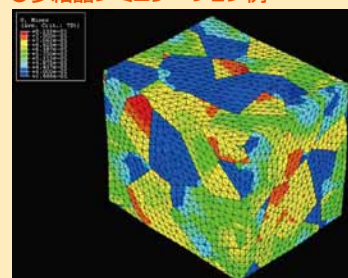
*2: エクサは10¹⁸(100京)を示す接頭辞で、記号「E」で表す。

●マルチスケール材料科学の流れの一例



(出典: 毛利哲雄, 「ハミルトニアンからの材料強度設計」序論」, ふえらむ, Vol.17, No.12, 2012)

●多結晶シミュレーション例



38の結晶粒からなる3次元多結晶組織の応力分布をマルチスケールシミュレーションした例

(資料提供: (独)物質・材料研究機構 元素戦略材料センター 構造材料ユニット 強度設計グループ 渡邊育夢主任研究員)



圧倒的な計算性能と省エネ性能——TSUBAME



GPUの本格活用や新冷却システムの採用など、
独創的な発想から生まれたスーパーコンピュータ「TSUBAME」。
(写真提供:東京工業大学)

GPU採用によるハイブリッド型アーキテクチャ

「京」が開発されるより前の2006年、スーパーコンピュータの開発競争に名乗りを上げたのが、東京工業大学学術国際情報センターが開発したTSUBAMEである。何度かのバージョンアップを経て、2013年9月にはTSUBAME2.5が開発されている。

スーパーコンピュータは、高い計算性能を得るため、大量のCPUと高性能のメモリを備え、これを高速ネットワークでつないでいる。国内初のPFlops・スーパーコンピュータは2010年11月に運用を開始したTSUBAME2.0(2.4PFlops)だが、現在のTSUBAME2.5はそれを上回る5.7 PFlopsの性能を持っている。

TSUBAME2.5の高い計算性能を支えるのは、高性能な計算ノードである。1,400個以上もある計算ノードは、高性能なCPUとGPU(画像処理用演算装置)を組み合わせたハイブリッド型アーキテクチャを持つ。これを初めてスーパーコンピュータに適用したのがTSUBAMEである。GPUの採用は、電力性能の点でも極めて有利である。GPUには、CPUより低い電力で動く単純な演算コアが多数搭載されており、大きな省電力効果が見込めるためである。

巨大化が進む現在のスーパーコンピュータにおいて、電力性能(速度性能値/消費電力)の高さは絶対条件である。TSUBAME2.5は、世界のスーパーコンピュータの電力性能を競うGreen500では世界6位であり、現在開発中の次世代TSUBAME3.0のテストシステムでは、Green500(2013年11月版、2014年6月版)において2期連続で世界1位を達成している。

性能向上で広がった応用範囲

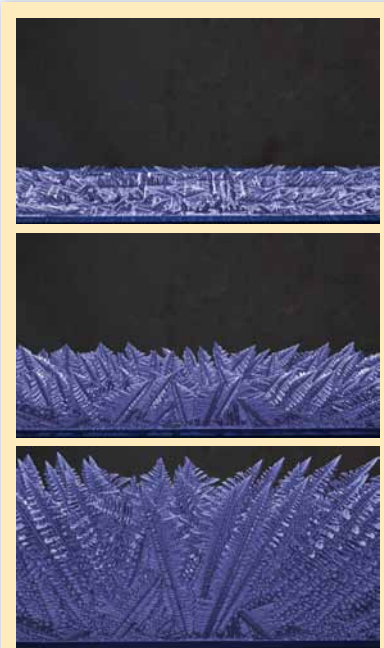
TSUBAMEを活用したシミュレーションの1例として、樹枝状(デンドライト)凝固成長の大規模シミュレーションの研究例を紹介する。

金属材料の強度は、液体から固体へと凝固する過程で決まってくるため、金属組織がどのように凝固するかを予測するシミュレーションは重要である。そこで、TSUBAME2.0を用いて二元合金の一方方向凝固に

おけるデンドライト組織の成長の大規模計算が行われた。従来は難しかった数mmスケールのシミュレーションにより、デンドライト組織が形成される際の相互干渉などによる空間選択のメカニズムを明らかにすることができた。この成果により、2011年、世界のスパコン分野での最高栄誉といわれるACMゴードンベル賞・特別賞(本賞)を受賞した。

さらに性能向上を目指す「みんなのスパコン」TSUBAME

TSUBAMEは、東京工業大学内での利用のほか、他大学や民間企業、研究機関なども利用できる。このうち企業は最近7年間で150社以上が利用しており、利用者全体の2割以上を占めている。の中にはシミュレーションによるナノ材料開発や、計算化学手法による創薬技術開発などの、さまざまな分野の研究が含まれている。このほか、さまざまな新製品開発や、気象や地球環境シミュレーションなど、TSUBAMEの活用範囲はますます広がっている。現在、TSUBAMEはPFlopsの1,000倍というEFlopsの時代を見据えて、さらに計算性能向上と省電力化、冷却性能向上を図っている。



Al-Si合金のデンドライト凝固過程の大規模シミュレーション
(出典: TSUBAME e-Science Journal, SC'11 特集号、
Shimokawabe et al., SC11, 2011)