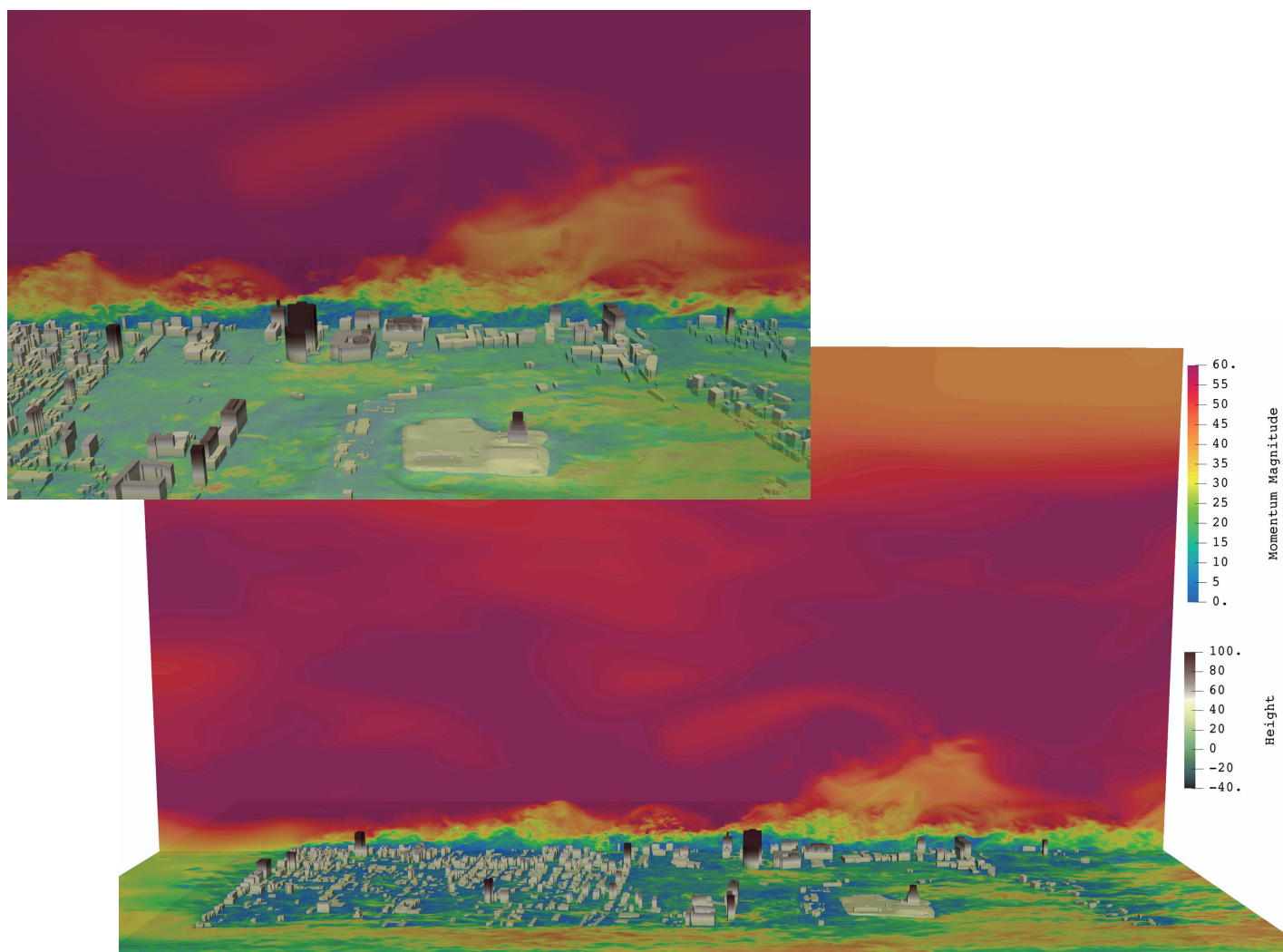


計 算 工 学 ナ ビ

計算工学ナビ・ニュースレター2021年秋号



計算工学ナビ・レポート

- 都市・建築CFDコンソーシアムにおける「富岳」を利用した取り組み 東京工業大学 田村 哲郎
- 「富岳電池課題」の進捗と今後の展望 物質・材料研究機構 館山 佳尚
- FMOプログラム「ABINIT-MP」のA64FXスーパーコンピュータ向け高速化と大規模化
立教大学 望月祐志・国立医薬品食品衛生研究所 中野 達也・計算科学振興財団 坂倉 耕太
- 「PHASE/O」の開発状況と「富岳」での利用の展望 物質・材料研究機構 奈良純・大野隆央

都市・建築 CFD コンソーシアムにおける「富岳」を利用した取り組み

～極端気象災害に対する都市・建築のレジリエンス強化をめざして～



東京工業大学
田村 哲郎 名誉教授

国連の気候変動に関する政府間パネル(IPCC)は、2021年に公表した最新の報告書で、産業革命前からの世界の平均気温の上昇幅が今後20年間で1.5度に達する可能性があるとしています。こうした気温の上昇は、すでに世界各地に熱波や豪雨などの異常気象をもたらしています。日本でも、猛暑による熱中症の増加や豪雨による河川の氾濫や土砂災害、台風の強風被害など、極端気象災害が数多く発生しています。都市・建築CFDコンソーシアムの田村哲郎氏は、「富岳」などのスーパーコンピュータを用いたHPCによる極端気象災害のリスク評価や都市・建築のレジリエンス(復元力)強化をめざした実証研究を推進しています。田村哲郎氏にその取り組みや成果についてお話をうかがいました。

都市・建築の防災課題を明らかにして強靱化を図る

都市・建築CFDコンソーシアムの取り組みについてご説明ください。

これまでには主に建築物の耐風設計における数値流体計算(CFD)適用方法の確立を目的に、産学官の連携によるコンソーシアム形式でソフトウェアの開発とともに実証評価や実用化をめざした研究を行ってきました。ただ、現在では耐風設計だけに限らず、極端気象災害によるリスク評価や都市・建築のレジリエンス強化を目的として研究を推進しています。極端気象現象とは、最近の地球温暖化に伴って起きる極端な気象現象のことです。例えば、最高気温が35°C以上の猛暑日や河川の氾濫や土砂災害をもたらす1時間降水量が50mm以上の強い雨、台風に伴う強風や竜巻などがあげられます。さらに温暖化によって台風が強大化するともいわれており、これまで以上の強風や豪雨も心配されています。そうすると、これまで考えられてきた設

計手法ではカバーしきれない被害が、都市や建築物にもたらされる可能性が出てきます。

そこで、私たちは「富岳」などのスーパーコンピュータを活用して、極端気象下での都市・建築物のシミュレーションを実施することによって被災度を推定したり、実際の被災状況と比較しながらシミュレーションによる推定可能性を検証し、現行の設計指針の妥当性を確認するなど、自然災害のインパクトに対する都市・建築物の持続性や脆弱性の共通認識を醸成しつつ、産業界においては基盤技術の認証制度や法改正にも働きかけていこうとしています。一方、大学・研究機関は、開発した先端シミュレーションソフトの実用化をめざして気象モデルとの連携を進めています。将来的には、サイバー空間における将来の都市の再現と、極端気象現象による極大なインパクトの作用に対する不確実性を踏まえた答えを導き出し、今後の都市・建築物のレジリエンス強化ならびに防災・減災に向けて適切な道筋を創出することをめざしています。

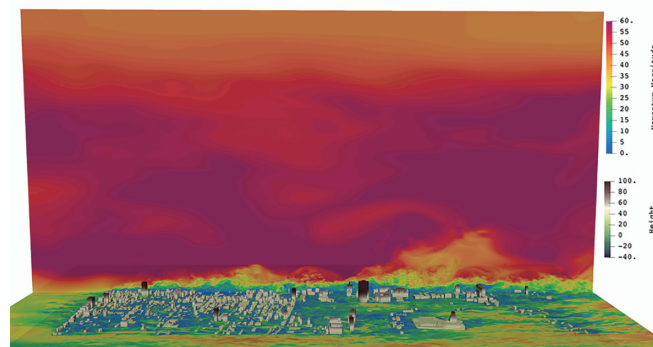
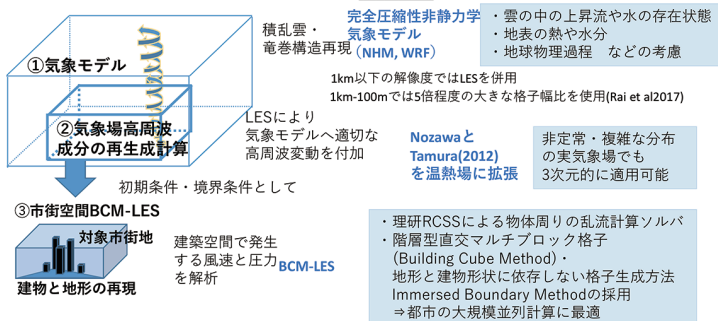
どのような極端気象現象がどのくらいの頻度で起きるのかといった気象に関する予測データは

得られているのですか。

コンソーシアムでは、2014～2019年度に実施されたポスト「京」重点課題④「観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化」との協働により、都市・建築物の強風災害シミュレーション技術を構築し、スーパーコンピュータを用いた耐風や竜巻による建築物の被害推定などを行ってきました。気象データについては、一緒にやらせていただいた気象分野の研究者らが開発した非静力学気象モデルなどを活用しています。こうした気象モデルにより極端気象現象と呼ばれる極大な台風なども再現や予測ができるようになってきました。ただ、気象現象と都市・建築物がどのようににインタラクションするかを推定するのは、非常に難しい解析になります。

かつては、「示された気象場では風速がこれくらいだから建物周りにはこの程度の風が作用するだろう」といったとても甘いコネクティビティでやっていました。しかし、今では得られた時空間データをすべてつなぎ、建物の周りの流れがどうなるのかを的確に予測できるようになっ

計算手法の概略



▲気象モデル・工学LESハイブリッド解析のイメージ

2018年台風21号が日本に襲った際の大阪市中心部における強風の乱流解析結果。気象モデルによって気象擾乱の構造を再現し、得られた気象場から実都市の高解像度LESを実施。

Kawaguchi, M., Tamura, T., Mashiko, W., Application of hybrid meteorological model/engineering LES analysis to very strong typhoon Jebi 2018. In proceedings of the 13th International ERCOFTAC symposium on engineering, turbulence, modelling and measurements (ETMM13), 2021.

▲気象モデル・工学LESハイブリッド解析手法

極端気象の発生と市街地の乱流場、それぞれを正確に取り扱うため、各々の従来モデルで計算。接続の際、耐風性能評価で重要となる気象場の高周波変動の復元を乱流の性質に基づいて実施。

ています。実際には、建物の周りの風の流れは、建物自体も影響して歪められます。あるところはより速い流れになり、あるところでは抑えられて遅くなる、そこまで現象を明らかにしていかなければ防災に役立つシミュレーションは実現しません。これは風だけでなく雨も同じです。例えば豪雨による洪水についても、どの川が氾濫するとどこに洪水が発生してどれだけ浸水するかがシミュレーションされてきましたが、本当なら洪水が建物にどのように作用するのかまで予測することが必要です。そのためには流れてきた濁流と建物とのインタラクションを評価できなければなりません。

私たちとしては、気象モデルによって再現された風・水分・熱などの影響をどんどんダウンスケールさせていき、都市から市街地、建物群へ、一つひとつ追いついていながら実際の建物に及ぼし得るインパクトを推定したい、つまり人間の生活空間に及ぼす景況を評価したいわけです。しかしながら、気象データを都市・建築物とどのようにつなぐかが非常に難しいのです。そこが研究開発の大きな課題でした。

「気象モデル・工学LESハイブリッド解析手法」の構築

気象モデルによる大きなスケールの現象と都市・建築物の周りの小さな現象を的確に結び付けることが必要だったのですね。

建築工学側では、計算負荷を抑えながら複雑な乱流場を高精度にシミュレートするラージ・エディ・シミュレーション (LES: Large-Eddy Simulation) の開発が進められてきました。現状では、建物群を表現した解像度 1m 以下の解析も可能な高分解能モデルとなっています。気象分野でも大気境界層や雲を対象に LES モデルは開発されていますが、気象モデルは最も細か

いメソ気象モデルでも解像度は 1km 程度。建築側の工学系 LES モデルでは、数十 km 四方の解析が限界ですから、そのままでは分解能が大きく異なり、連続した変動性状が捉えられず両者を接続させることはできません。そこで、気象モデルで表された上空の大きなスケールの乱れと、地表近傍で生成される工学的な乱流場、この二つの変動場を再現しながら解いていく手法を構築しました。乱流場のエネルギーを詳しく見ていくと、気象場では低周波数領域 (大きな渦) しか出ませんが、建物周辺の乱流場を理解するにはより高周波数領域 (小さな渦) まで必要ですから、気象場の高周波成分を算出して気象場に足し合わせるというものです。この気象場高周波成分の再生成計算によって、気象場の構造に基づく物理的な高周波変動を速やかに生成することが可能になり、気象現象と都市に流入する乱流場をつなぐことができるようになりました。

ご説明いただいたものが「気象モデル・工学 LES ハイブリッド解析手法」ですね。これにより、台風や竜巻などによる都市・建築物への影響を理解することが可能になったわけですね。

具体的な解析の一例として、2012年5月6日に発生し、茨城県つくば市に大きな被害をもたらした「つくば竜巻」の事例を紹介しておきます。この竜巻については、気象庁気象研究所の益子渉氏が超高解像度数値シミュレーションを実施し、その内部構造などを明らかにしています。もちろん、そこには建築物は入っていません。私たちは、「つくば竜巻」が発生したとき、建築物にどのような影響をもたらすのか、実被害推定なども含め、さまざまな条件下で竜巻の風の影響評価をシミュレーションしました。その結果、平坦な地表と周りに建築物がある場合とで、移動経路や速度が大きく変化することが明らかになりました。例えば、建築物に近づい

たとき、建築物との相互作用により低圧部ができて、竜巻はそこに吸い寄せられるように移動し、そこで停滞するような動きを見せます。その結果、建物に大きなインパクトを与える可能性が生じる、そうしたことも明らかになりました。

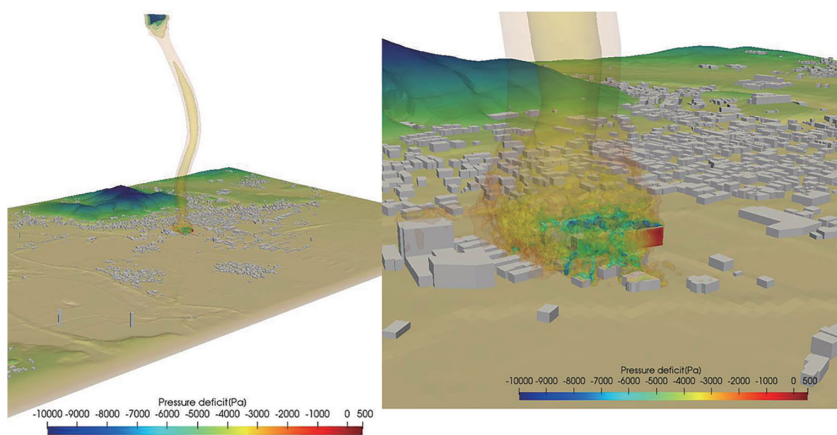
今後は熱波や豪雨についても見ていくことができるようになるのでしょうか。

流体場については LES 手法が確立されており、気温のモデル化も行われています。雨についてはこれからですが、雨の解析も行われており、いずれはドッキングさせることができると考えています。いずれにしても重要なのは、気象場で見えている大き過ぎる現象をより細かいスケールの情報として取り出すかということです。これは風だけでなく雨も同じです。例えば豪雨による洪水についても、どの川が氾濫するとどこに洪水が発生してどれだけ浸水するかは、すでにシミュレーションされていますが、本当なら洪水が建物にどのように作用するのかまで予測することが必要です。そのためには流れてきた濁流と建物とのインタラクションを評価できなければなりません。

変容する都市・建築物の自然擾乱対応の性能設計をめざす

田村先生は、今後、「富岳」を活用してどのような研究を進めていかれるのですか。

建築の世界には、メタボリズム (新陳代謝) によって都市・建築物の形態を、合理性を持たせながら徐々に変容させていくという考え方があります。例えば、東京の渋谷などを見ると、とんでもなく密集しているわけです。高層建築物が次々に建てられています。このような東京市街地に極大台風が襲来したらどのようなリスクがもたらされるか、さらにカーボンニュートラルが求められるなか密集した都市には環境面でどのようなデメリットがあるか、こうしたことを考えたとき、メタボリズムの考え方からすれば、都市は密集から離散の概念によって変化していこうと考えています。そんな未来の変容する都市を想定して、建築物をどのように改変・移動・分散・開放させていけばよいかをシミュレーションによって評価するとともに、将来起こり得る極端気象現象に対する都市・建築物のレジリエンス強化を実現させていきたい。そのために、データサイエンスに基づいたメタボリズム的に変容する都市・建築物モデルをサイバー空間上に再現して都市機能を定量的に理解したり、気象モデルと工学 LES を緻密に融合させることによって、極端気象下での都市・建築物の防災性能予測を向上させるための研究開発を行ってこうとしています。こうした研究開発を通して、自然起源の擾乱の都市・建築物へのインパクト推定技術や高度な性能設計を確立し社会に役立てていきたいと願っています。



▲つくば竜巻 (2012年5月6日 つくば市北条地区における建築物の実被害推定)

M. Kawaguchi, T. Tamura, W. Mashiko, H. Kawai. (2019). Assessment of Tornado-Induced Building Damage Using a Hybrid Meteorological Model/Engineering LES Method: In Case of Tsukuba Tornado in 2012. 10th European Conferences on Severe Storms, Krakow, Poland.

「富岳」成果創出加速プログラム「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」

「富岳電池課題」の進捗と今後の展望



物質・材料研究機構
館山 佳尚 エネルギー・環境材料研究拠点 副拠点長

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムは、「富岳」を用いた成果を早期に創出することを目的として2020年度より19課題が進められています。「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」(富岳電池課題)は、「産業競争力の強化」領域の課題の一つとして選定され、わが国の新規電池材料開発・実用化への貢献とともに、エネルギーに関わる物理・化学・材料科学をつなぐ新しい学問体系の構築を視野に入れながら研究開発が進められています。課題責任者を務める館山佳尚氏に同課題の取り組みについてお話をいただきました。

カーボンニュートラル実現に必要な二次電池・燃料電池

世界の国々がカーボンニュートラルを宣言し、「脱炭素社会」実現に向けた動きが加速しています。「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」(富岳電池課題)が取り組んでおられる研究開発は、まさに日本の産業競争力強化に欠かせない重要な課題ですね。

わが国は2050年までにカーボンニュートラルの実現をめざすことを宣言しています。世界では、EUが2035年ごろにガソリン・ディーゼル新車の販売を禁止すると発表するなど、二酸化炭素排出に厳しい目が向けられています。もちろん二酸化炭素を減らすことは重要ですが、それに伴う安定したエネルギー供給のための技術開発も欠かせません。エネルギー・環境技術の革新による持続可能な社会実現には太陽光発電や風力発電などもありますが、二次電池(エネルギー貯蔵)および燃料電池(エネルギー変換)

の次世代技術の確立と実用化こそが中心的課題であると私たちは考えています。

車載用二次電池の世界シェアを見ると、2013年には日本製品が世界シェアの75%を占めていましたが、その後中国が躍進し、日本のシェアは2割ほどにまで減少してしまいました。原因の一つはコスト競争力といわれますが、開発競争も過酷であり、日本製品の高い安全性や高容量化といった技術的優位性を今後も維持していくためには、研究開発を加速し、新たなブレイクスルーが必須です。こうした先端的技術基盤を発展させて産業競争力を強化することは、日本にとって最重要課題といえます。そのためにもスーパーコンピュータ「富岳」を最大限活用する「富岳電池課題」は、先端的計算・データ材料科学研究により新規電池材料開発・実用化をめざす、まさにカーボンニュートラル実現に貢献できる研究開発テーマなのです。

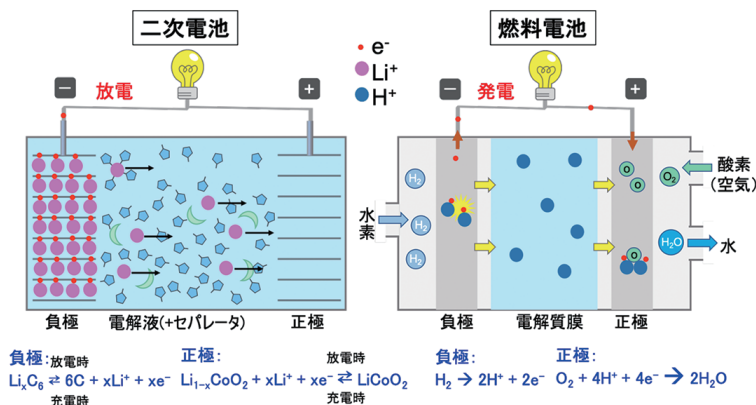
今回の研究課題で、二次電池と燃料電池を組み合わせておられるのはなぜですか。

二次電池(リチウムイオン電池)は正極と負

極の間にある電解液の中をリチウムイオンが移動することによって充電と放電が行われます。燃料電池は酸素極と水素極の間の電解質膜をプロトン(水素イオン)が通過して酸素側に移って水をつくるときに電気エネルギーを取り出す仕組みです。二次電池が電池本体に電気エネルギーを蓄えているのに対して、燃料電池は外部からの燃料供給により電気エネルギーをつくり出す発電装置ですが、電極の間を移動するリチウムイオンとプロトンにより放電と発電が起きる両者の仕組みはとてもよく似ていて、二次電池と燃料電池を一緒に見ていくことで、一方の知識がもう一方にも役立つといった新たなブレイクスルーが生まれるのではないかと考えたわけです。

4つのサブ課題で世界最先端の研究を推進

「富岳電池課題」では、二次電池、燃料電池それぞれが2つのサブ課題に分かれていますね。



▲二次電池と燃料電池の仕組み



▲「富岳」画像提供/理化学研究所

二次電池については、「電解液系次世代二次電池 (A-1)」、「二次電池・全固体電池 (A-2)」、燃料電池については、「燃料電池の電極界面反応 (B-1)」、「燃料電池の電解質膜・プロトン輸送 (B-2)」が設定されています。

二次電池に関しては、材料でサブ課題の1と2を分けています。将来的に重要になってくるのが全固体電池で、これをA-2で扱っています。全固体電池は液体だった電解質を固体にした電池で、液漏れの心配がなく、小型・大容量化が可能、熱や環境変化に強く寿命が長いなどの特性があり、次世代電池の筆頭といわれていますが、硫化物電解質系の全固体電池は界面における化学的・電気化学的不安定性やイオン伝導抵抗の増大が大きな課題になっています。また、酸化物電解質系については硫化物系に比べて電気化学安定性が高いもののイオン伝導度が低いことが重要課題となっています。A-2では、これらの電解質材料の界面の安定性とイオン輸送に関する微視的機構を明らかにすることをめざしています。一方のA-1は、電解液を使用する二次電池を扱い、ナトリウムイオン電池、マグネシウムイオン電池、空気電池（大気中の酸素を正極とする電池）などのポストリチウムイオン電池をまとめています。これらの革新型液系二次電池では、電解液の高性能化・高安全化および電極・電解液界面の高安定化が大きな課題であり、電気化学的安定性が高く燃焼リスクを減らせる高濃度電解液などの革新型電解液の電解液構造や電気化学反応性に関する微視的機構の解明に取り組んでいます。

サブ課題Bは、電極界面反応と電解質膜で分けています。電極 (B-1) については、正極・負極ともに、白金を主成分とする貴金属合金をカーボンブラックに担持した触媒が使用されており、白金の希少性と高価格によるコスト問題、

正極活性が低いことによる内部抵抗の問題、白金の酸性溶液への溶解や負極の一酸化炭素被毒による劣化問題を克服する必要があります。シミュレーションによって電極構造および電極反応の詳細を明らかにし、低白金化と脱白金の観点から研究を進めています。電解質膜 (B-2) では、さらなる高性能化、高耐久性化、薄膜化、コストダウンが実用化や普及に向けた大きな課題になっています。そのため、全原子MDシミュレーションによる高分子電解質膜のプロトンや水素・酸素の輸送係数の予測、力学特性の評価を迅速に行う技術、また燃料電池界面における物質輸送の微視的機構からの高性能電極界面設計技術などの確立を推進しています。

これら4つのサブ課題では、それぞれ世界最先端の研究を推進しつつ、お互いに共通する物理・化学・材料科学の基礎原理や計算・データ科学技術について常に情報交換を行いながら研究を展開しています。また、二次電池・燃料電池の実用化を目標とする国家プロジェクト、電気化学界面シミュレーションコンソーシアムや企業との共同研究などによる産官学の強力な連携体制を構築し、技術移転や成果創出を加速しています。

計算科学が果たす役割はますます重要に

2014～2019年に実施された「ポスト『京』重点課題⑤」のサブ課題Bにおいて、二次電池、燃料電池を対象に電子・分子レベルからの電池シミュレータ構築を推進してこれたと思いますが、「富岳電池課題」はその成果を引き継いだプロジェクトということですか。

その通りです。「ポスト『京』重点課題⑤」

で育成された人材や整備されたアプリ資産、構築された産官学間の連携体制、そして人的ネットワークを総動員して実施されています。現在、「富岳電池課題」で使用している主要なアプリケーションは「富岳電池課題 主要アプリの特徴」に記載しているように第一原理分子力学ソフト「stat-CPMD」、同じく「STATE」、混合MC/MD反応法化学シミュレーションソフト「RedMoon」および古典分子力学ソフト「MODYLAS」などがあります。それぞれ構築してきた機能をより高度化させるとともに「富岳」に向けた最適化を進めています。例えば、「stat-CPMD」では高速フーリエ変換 (FFT) の最適化によって1.3倍の高速化を果たしています。「MODYLAS」では高速多重極展開法 (FMM) 計算や新規通信アルゴリズム (MTD法) により高速化を実現しています。今後は、これまでの基礎研究の成果を踏まえ、応用研究に向けて構築してきたアプリを活用していくことになります。

二次電池、燃料電池開発において、計算・データ材料科学が果たす役割の重要性についてはどのようにお考えですか。

二次電池に関しては、今後解決すべき課題として燃えない電解液の開発、全固体電池の開発などによる安全性の向上や高速充放電の実現などがあります。燃料電池に関しては、劣化反応の抑制や電解質膜の高強度化といった耐久性の向上、反応の高活性化などによる高出力化、脱白金などによる低コスト化などの課題があります。こうした課題を解決していくためには、計算側と実験側の“二刀流”のやり方があり、どちらも重要であることはいうまでもありません。さらにデータサイエンスによる材料提案や微視的機構の解明など計算側の果たす役割はますます重要になっております。私たちのプロジェクトにはインフォマティクス分野で国内第一人者といわれる先生方にも参加していただいています。「富岳」などの計算資源を活用することにより第一原理計算が容易にできるようになり大量のデータが獲得できるようになると、そのなかからどのようにして有効な情報や高い成果を導き出すかが重要になってきます。そこをきちんとやっていくことが、これからの一つの方向だと考えています。さらに先端的な計算によって新しい概念、新しい原理を見つけ出す、そのような計算をやっていくことも求められていると思います。二次電池に関しては電解液・固体電解質の材料設計や界面の微視的機構の解明などが、燃料電池に関しては電極材料設計技術の確立や高分子電解質膜設計技術の確立などが、計算科学の取り組みによって進展することが期待されています。こうした課題の解決に向けて、「富岳」を有効活用していきたいと考えています。

アプリケーション名	機能	特徴
stat-CPMD	第一原理分子力学計算 x 高次並列化	<ul style="list-style-type: none"> 数千原子オーダーのDFT-MDサンプリングの大量実行が可能 自由エネルギー計算・ハイスループット計算共に多数ノード高効率実行が可能 酸化還元電位計算・マルコフニコフ計算の高効率実行が可能
MODYLAS	高並列汎用分子力学シミュレーションソフト	<ul style="list-style-type: none"> 100万原子を超える大規模系の計算に最適 高効率の超並列計算 高分子、バイオ、脂質・界面活性剤等 不均一系、界面系、プロトン移動等 GROMACS互換
STATE	第一原理分子力学プログラム	<ul style="list-style-type: none"> 固体表面・界面での電場・電位制御 レプリカ、k点、バンド、G点のMPI四重並列+ OpenMP並列化による高並列計算
RedMoon	混合モンテカルロ(MC)/分子力学(MD)反応法化学反応シミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> メトロポリス法による非平衡系の確率的分子シミュレーションが可能 化学反応に伴う分子種変化のミクロな取り扱いが可能 QM/MM法(QM:Gaussian)によるエネルギー評価が可能 拡張系の方法に基づいた定電位差印加が可能 100万原子スケールのバルク系、界面系に対応可能
Quantum ESPRESSO (ESM-RISM ver.)	第一原理有効遮蔽媒質法+古典溶液理論によるハイブリッドシミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> 電子系+溶液粒子系に対するグランドカノニカル条件下での定式化 反応系の柔軟なモデリング+電位制御した電気化学反応シミュレーション One-shot計算で統計平均された物理量を効率よく取得
カ場最適化フレームワーク	遺伝的アルゴリズムによるカ場パラメータ最適化	<ul style="list-style-type: none"> VASPと拡張型遺伝的アルゴリズムによるカ場パラメータの最適化が可能 Pythonで実装しており、各種計算エンジンに拡張可能
VASP	密度汎関数理論ベースの第一原理計算の標準的プログラム。Wien大学のKresseらが開発・管理。	

▲富岳電池課題 主要アプリの特徴

FMOプログラム「ABINIT-MP」のA64FX スーパーコンピュータ向け高速化と大規模化



立教大学 理学部
化学科
望月 祐志 教授



国立医薬品食品衛生研究所
生化学部 第四室
中野 達也 室長



計算科学振興財団
人材開発グループ
坂倉 耕太 担当課長

「ABINIT-MP」は、東京大学拠点の複数のプロジェクト等のご支援を受け、20年以上研究開発が続けられているフラグメント分子軌道 (FMO) 計算のためのプログラムで、現在のリリース版は Open Version 1 Revision 22 (以下、Ver. 1 Rev. 22) [1] です。2020年度は、「新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ『富岳』の優先的な試行的利用」の特別プロジェクト [2] のなかで Ver. 1 Rev. 22 を「富岳」の上で使い、「新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算」(代表: 望月) の名目で大規模な FMO 計算を実施し、文献 [3-6] を報告すると共に解説記事や記者発表などの広報活動も行いました。

2021年度は、HPCI 課題 hp210026 「新規感染症のための計算科学的解析環境の整備」(代表: 望月) のなかで新型コロナウイルスに加えてインフルエンザウイルスも対象とし、分子動力学 (MD) シミュレーションで生成された多数の構造サンプルを扱った統計的な相互作用解析を進めています。サンプルの数は数百~1,000 となるため、一構造の FMO 計算を加速することが重要となってきます。こうしたことから、JHPCN 課題 jh210036-NAH 「FMO プログラム ABINIT-MP の高速化と超大規模系への対応」(代表: 望月) も並走させ、「富岳」と同じ A64FX 系である「不老」(名古屋大学情報基盤センター) Type I サブシステムをプラットフォームに「ABINIT-MP」の改良を進めています。また、この JHPCN 課題はサイエンティフィックシステム研究会 (SS研) の活動と連動しています。本稿では、以下に主に高速化の状況をご紹介します。

高速化テストでは試行錯誤的に多くの計算を流すことになるため、粒度を揃えたペプチドモデル AlagGly を使い、計算レベルは利用頻度が高い 2 次摂動 (MP2) としました。図 1 は、Ver. 2 Rev. 22 による FMO-MP2/6-31G* ジョブのコスト分析の結果です (2 ノード実行で 12 スレッド、8 プロセスの条件: 測定は後述の井上グループによる)。「2 電子積分」の生成が全コストの 58% を締め、生成された積分から HF (Hartree-Fock) 計算を行う「リスト作成」(4 つの添字に応じた処理) と「Direct SCF」とで 24% となっています。MP2 計算は、生成された 2 電子積分を 4 回に分けて線形変換する部分がコストを決めますが、DGEMM 処理が可能です [7]。一方、HF は MP2 の前の処理で、特にフラグメントのモノマー段階では自己無撞着電荷 (SCC) 条件 [8] を満たすまで反復され、その間で積分生成が繰り返されます (バッファリング無し条件)。従って、高速化の第一段階の対象は 2 電子積分の生成部分としました。

「ABINIT-MP」の積分コードは小原のアルゴリズム [9] に基づいた自動生成ツール (開発: 中野) で基底関数の軌道の型の組み合わせ毎に作成されています。A64FX では高速化のレシピとして SIMD 化が有効であるため、OCL 指示詞の導入と変数のスカラ化などの作業を {s, p, d} 軌道の 15 個の組み合わせルーチンに対して手動で行いました。この改造によって、6-31G* 基底では 134.5 秒 → 124.5 秒、cc-pVDZ 基底では 306.1 秒 → 254.0 秒にジョブの実行時間が短くなりました (「不老」で測定)。さらに、コンパイルオプションの変更と HF 計算で 2 電子積分のバッファリングのオプションを追加すると、各基底の時

間は 78.3 秒と 165.1 秒にまで低減されましたので、AlagGly の MP2 ジョブの加速としては 2 倍弱です。この暫定改造版を用いて他のタンパク質もテストしていますが、対象が大きくなるとモノマー SCC の反復が全コストの半分以上を占める状況となり、加速効果が低減してしまいます。このため、SCC の反復回数を減らす方を検討しています。

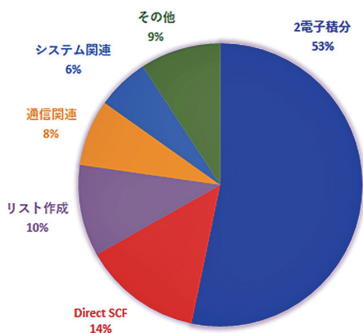
2 電子積分の HF 計算での処理についても高速化を試みています。図 2 は、改良された Fock 行列構築の擬似コードで、積分添字の同値性を if 文で場合分けするのを止め、 $(1/2)^n$ ($n=1,2,3$) の因子を予め乗じ、閾値判断だけでシンプルに寄与の加算を行うようにしています。この改良で 30% 程の加速が得られますので、上記の積分生成の SIMD 化と組み合わせる作業を現在行っています (2021 年 7 月時点)。

最後に大規模化について触れますが、基本的な方針はフラグメント数の自乗的な大きさの配列群の「整理」です。未だ途上段階ですが、インフルエンザウイルスのタンパク質 (PDB ID: 1KEN) の水モデル、1.1 万フラグメントの系の MP2 と 3 次摂動 (MP3) 計算が cc-pVDZ 基底で「不老」の 1 ラック (384 ノード) で完走するのを確認済みです。2021 年度中に 2 万フラグメントの計算を、上述の高速化を施した版で達成する予定です。

「ABINIT-MP」は Ver. 2 系からは機能強化だけでなく、高速化と大規模系への対応を明確に試行して展開することになります。また、機械学習・データ科学による自動解析との親和性も強化されていきます。最初の公式リリース版は Rev. 4 (2021 年夏) です。今後も、「富岳」、「不老」、「Wisteria - Odyssey」(東京大学情報基盤センター) などの A64FX 系はもちろん、HPCI 拠点のスーパーコンピュータでの「ABINIT-MP」のライブラリ提供を続けていきます。

【謝辞】

「ABINIT-MP」Open Ver. 2 系の開発整備は、渡邊啓正氏 (HPC システムズ (株))、奥脇弘次氏 (立教大学) らと進めています。JHPCN 課題では片桐孝洋先生 (名古屋大学) の研究室と連携しています。また、A64FX 上の高速化に関しては SS 研の井上晃氏 (富士通 (株)) のグループに協力いただいていることを記します。



▲図1 FMO-MP2/6-31G* 計算のコスト分析

```
do p=ixi1,ixi2
  do q=ixj1,ixj2
    do r=ixk1,ixk2
      do s=ixl1,ixl2
        ix=ix+1
        val = sint(ix)
        if((abs(val) <= tv)) cycle
        fock(q,p)=fock(q,p)+dc(s,r)*val*2. d0! クーロン項
        fock(s,r)=fock(s,r)+dc(q,p)*val*2. d0
        fock(r,p)=fock(r,p)-dc(q,p)*val*0.5d0! 交換項
        fock(s,p)=fock(s,p)-dc(r,q)*val*0.5d0
        fock(r,q)=fock(r,q)-dc(s,p)*val*0.5d0
        fock(s,q)=fock(s,q)-dc(r,p)*val*0.5d0
      end do
    end do
  end do
end do
```

▲図2 改良された Fock 行列構築の擬似コード

【引用(参考)文献】

- [1] (http://www.cenav.org/abinit-mp-open_ver-1-rev-22/).
- [2] (<https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/topics/fugaku-coronavirus/>).
- [3] R. Hatada et al., Appl. Phys. Expr. 14 (2021) 027003.
- [4] S. Tanaka et al., J. Phys. Chem. B 125 (2021) 6501.
- [5] K. Akisawa et al., RSC Adv. 11 (2021) 3272.
- [6] K. Akisawa et al., Jpn. J. Appl. Phys. 60 (2021) 090901.
- [7] Y. Mochizuki et al., Chem. Phys. Lett. 457 (2008) 396.
- [8] T. Nakano et al., Chem. Phys. Lett. 318 (2000) 614.
- [9] S. Obara et al., J. Chem. Phys. 84 (1986) 3963.

「PHASE/0」の開発状況と「富岳」での利用の展望



国立研究開発法人物質・材料研究機構
奈良 純 主幹研究員



国立研究開発法人物質・材料研究機構
大野 隆央 特別研究員

● PHASE/0の紹介

スーパーコンピュータ「富岳」(以下、「富岳」)が本年4月から本格的に共用が開始されました。われわれは昨年10月～本年3月には本格共用前の「試行的利用課題」枠に参加、及び本年4月～来年3月には「一般課題」枠に参加し、第一原理電子状態計算プログラム「PHASE/0」のチューニングを進めるとともに、水素燃料電池材料の研究を進めています。

「PHASE/0」はHPCI戦略プログラム「分野4次世代ものづくり」、ポスト「京」重点課題⑥「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」において、プログラム開発を進めてきました。これらのプロジェクトが終了した現在も物質・材料研究機構(NIMS)が中心となってプログラムの開発及び物質・材料の研究を進めています。これまでも半導体・構造材料・絶縁体などの研究分野で、大学・民間企業で広く利用されています。

第一原理計算とは、物質・材料の電子状態・原子配置を、経験的データを用いずに基本的な方程式だけを使って求めることを意味します。「PHASE/0」は密度汎関数理論(DFT)という計算手法を基に、金属・絶縁体・半導体といったあらゆる材料に対して第一原理電子状態計算を適用し、高精度かつ大規模にその性質を予測・分析することができるプログラムです。

同じ分野の他のプログラムと比較して「PHASE/0」が特に優れている点は、その強力なスケラビリティです。世界的に見ると同様の機能を持つソフトはいくつかありますが、PCレベルから「富岳」クラスの超並列スパコンにまで対応している無償ソフトはおそらく「PHASE/0」だけだろうと思われます。このように、規模の大きく異なるマシンで同じ操作で使うことのできることは大きなメリットがあります。すなわち、初心者・規模の小さい計算を行う研究者は、1チップレベルのPCを利用し、熟練者・規模の大

きな計算を行う研究者はPCクラスター、大型計算機を利用するというように、全く同じ操作で必要に応じた大きさのマシンの使い分けができるようになっています。スケラビリティに関して数万原子規模の系に対応可能な高並列性能と強スケーリング性能を持つ「PHASE/0」は、革新的な特性を持つ次世代ナノデバイスや環境エネルギー材料などの実現につながる研究開発に活用されています。また、講習会などを行い利用者のスキルアップ(特に初心者)を図るとともに、利用者間の交流として、ポータルサイトの運用、ワークショップの開催などの活動を行っています。「PHASE/0」は現在NIMSよりダウンロードが可能となっており、大学などのアカデミックなユーザーのほか、民間企業の利用も非常に多く、アクティブユーザーは数百人以上います。

● 新機能の追加

「PHASE/0」には、基礎研究やシミュレーションの専門家だけでなく応用研究の現場や実験家ツールとして使えるように、使いやすさや実験解析との比較のしやすさの向上のために、さまざまな計算・解析機能が搭載されています。基本的な計算機能(エネルギー、バンド構造、電荷密度、それらを必要に応じて空間/エネルギーで分解したもの、など)に加え、ここ数年ではさらに以下のような機能を追加しています。ESM(effective screening medium)法、ELNES/XANES解析機能、化学ポテンシャル一定のMD計算、NPT法、加熱・冷却MD計算、原子閉じ込めMD計算、バンドギャップ値を高精度に計算するハイブリッド計算法(SC-DFTなど)、vdW(van der Waals)相互作用の取り扱い、射影バンド・バンドアンフォールディング機能などのバンド解析機能、外部プログラムとの連携(ASE、BoltzTraP、Bader電荷)などです(図1)。さらに、ユーザーの扱いやすさの向

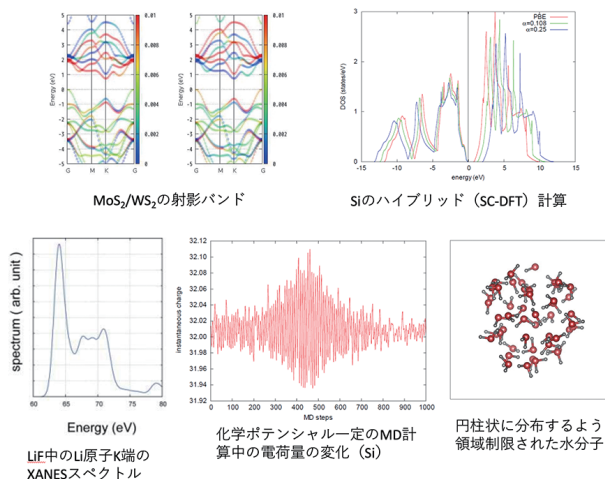
上として、ハンドリングの向上(必須入力項目の削減、入力ファイルチェック機能、解析・描画用ツールの追加など)、入出力原子座標形式の多様化(cif形式対応など)、GUI(PHASE-Viewer)の強化などを行っています。また、対応するプラットフォームの拡大(Intel系Linuxマシンに加え、「富岳」、「NEC SX-Aurora Tsubasa」、WSL、M1-Macへの対応)なども行い、さまざまなマシンで利用できるようになっています。

● 「富岳」での利用

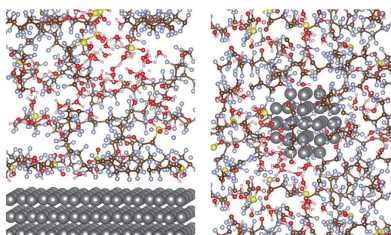
チューニングの基本的な考え方は「京」に似ているため、これまでのチューニングはかなり有効です。MPIを用いたメモリー分散型並列とOpenMP/自動並列を用いた共有メモリー型並列を組み合わせると並列を行っています。「京」と比べてコアあたりのメモリーが小さいことと、ノード内のコア数の大幅な増加のために共有メモリー型並列を強化する必要があります。この改善にはキャッシュチューニングなども有効です。用意されている計算ライブラリはかなり高速に動作するため、部分空間対角化、修正グラムシュミット法による波動関数の規格直交化、波動関数と非局所ポテンシャルの積などにおける行列積などのライブラリを利用している箇所については非常に高い性能が得られています。しかし、そのための前処理・後処理などにはまだ改善の余地が多々あり、ライブラリ利用箇所と前処理・後処理とを合わせて考えて改善を図っていきます。

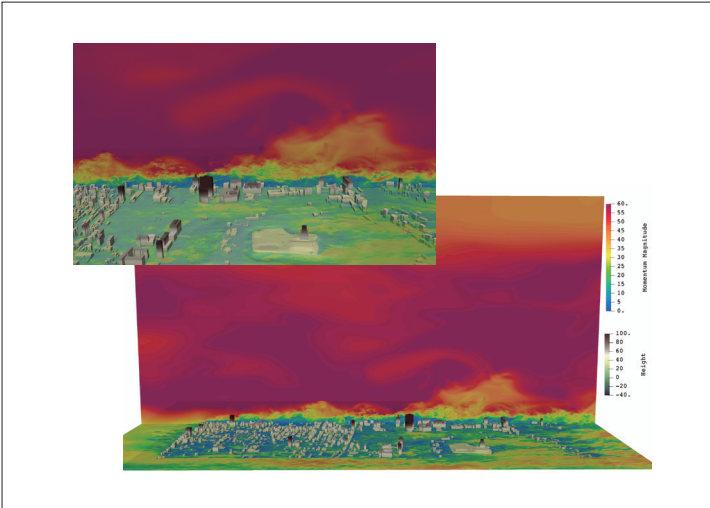
現在、「富岳」を用いて燃料電池の白金触媒近傍における高分子電解質と水の形状の長時間MDシミュレーションを実施しています。触媒形状の違いがプロトンの伝導経路となる水チャンネルの形状に及ぼす影響を調べるため、白金触媒の形状としては平板型とクラスター型の2種類を考慮しています(図2参照)。この構造の作成にはDPD(Dissipative Particle Dynamics)シミュレーション、古典MDシミュレーションを用いています。クラスター型では平板型と異なり突き出た形状の原子が存在します。このような原子は一般に非常に活性が高いことが知られていますが、それが水チャンネル形状・プロトン伝導経路にどのような影響を与えるかを今後明らかにしていく予定です。

◀ 図1
最近搭載された新機能の例



◀ 図2
Pt触媒/高分子電解質/水の界面の構造モデル





今号の表紙

気象モデル・工学LESハイブリッド解析

図は2018年台風21号が日本に来襲した際、大阪市中心部における強風の乱流解析結果である。気象モデルによって台風特有の鉛直風速プロファイル、境界層内のロール渦など気象擾乱の構造を再現し、得られた気象場からカスケード的に生成させた高周波乱流成分を付加した流入風を用いて、不均一な形態を持つ実都市の高解像度LESを実施している。上空と地表付近の乱流場の相互作用により強風特性が得られ、台風の実態に近い条件での建築物の耐風性能の評価を可能にしている。

東京工業大学 名誉教授 **田村哲郎**

参考文献

Kawaguchi, M., Tamura, T., Mashiko, W., Application of hybrid meteorological model/engineering LES analysis to very strong typhoon Jebi 2018. In proceedings of the 13th International ERCOFTAC symposium on engineering, turbulence, modelling and measurements (ETMM13), 2021.

編集後記

スーパーコンピュータ「富岳」は、2021年3月9日に、4月からの予定を前倒しして本格稼働を開始しました。また、6月に開催された「ISC2021」で発表された「TOP500」、「HPCG」などで3期連続の世界第1位を獲得し、本格稼働に華を添えました。「富岳」は、2020年5月に理化学研究所計算科学研究センターへの設置が完了し、システムの調整を進めてきましたが、一方では早期に世界を先導する成果の創出をめざして「新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ『富岳』の優先的な試行的利用」、「『富岳』成果創出加速プログラム」などで利用されてきました。本年度からはさらに多くの課題が選出され、産業競争力強化を推進する研究開発をはじめ、新型コロナウイルス対策、自然災害に対する防災・減災など、幅広いテーマで「富岳」を最大限に活用することが求められています。そこで、今号は、現在「富岳」を利用して進められている研究開発の事例を紹介することにしました。いずれも、今後の優れた成果が期待されています。



計算工学ナビ オフィシャルサイト

本誌のPDF版やソフトウェアライブラリ、ニュースなどのコンテンツを提供しているWebサイトは下記のURLからアクセスできます

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



計算工学ナビ Vol.21

発行日：2021年9月1日

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

office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp