

計

算

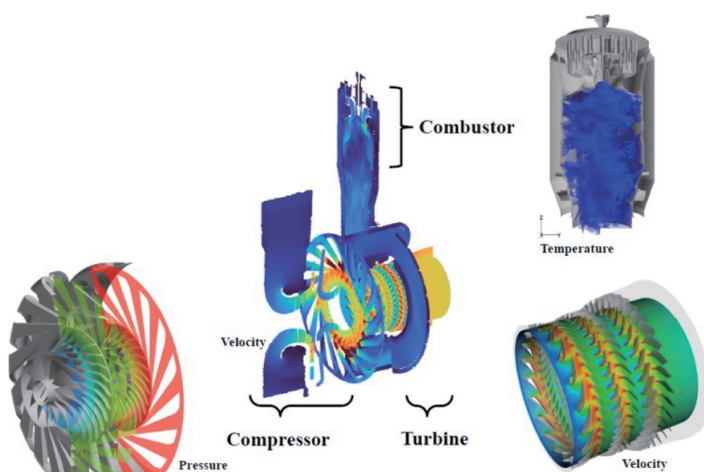
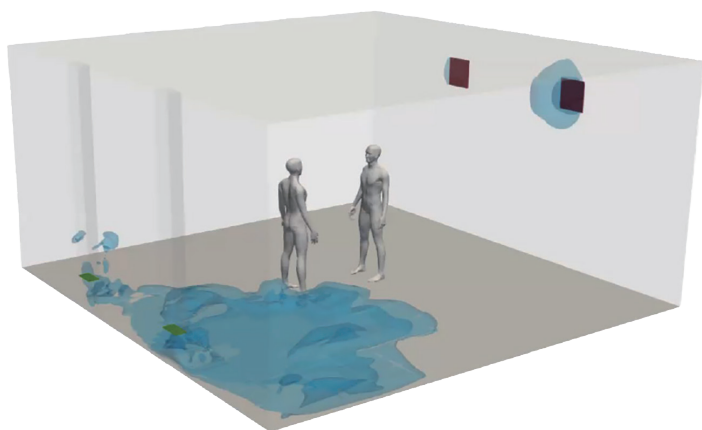
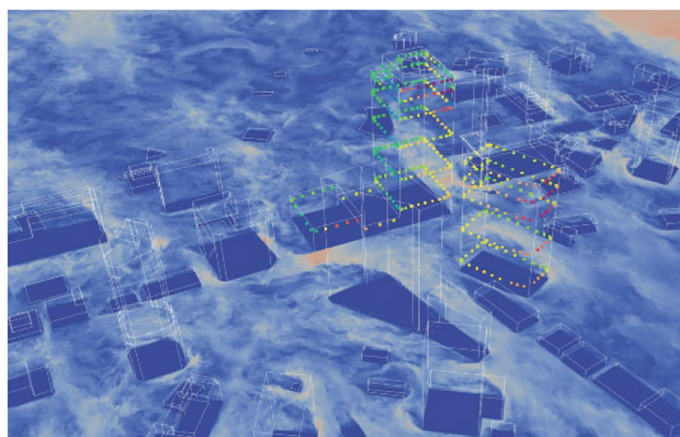
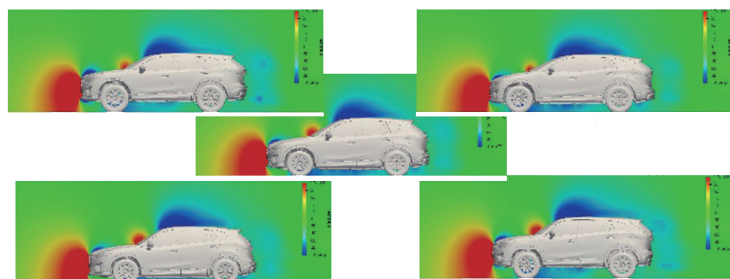
工

学

ナ

ビ

計算工学ナビ・ニュースレター2024年秋号



■計算工学ナビ・特集

「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」
プロジェクトの概要と進捗について 神戸大学／理化学研究所計算科学研究センター 坪倉 誠

「富岳」が拓く Society 5.0時代のスマートデザイン 各サブ課題研究開発成果の概要
広島大学 中島 卓司 横浜国立大学／東京工業大学 田村 哲郎 九州大学 伊藤 一秀 京都大学 黒瀬 良一

■レポート

「富岳」での通信最適化をめざした汎用ランクマップ最適化ツールの開発 理化学研究所計算科学研究センター 黒田 明義
FrontFlow/blueの東北大学サイバーサイエンスセンターAOBA-Sへの展開 日本電気株式会社 加藤 季広

「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」 プロジェクトの概要と進捗について

スーパーコンピュータ「富岳」の特性を十分に活用して科学的・社会的課題解決に直結する成果の早期創出を支援するために、文部科学省は2020年度から「『富岳』成果創出加速プログラム」を実施しています。2024年度時点では、AI・データ科学との融合・連携、社会実装に向けた産業界との連携、次世代を見据えたアプリケーションに繋がる取り組み、基礎科学の新たな展開など、新規成果の創出が期待される研究課題として「健康長寿社会の実現」、「産業競争力の強化」、「防災・減災、環境問題」、「基礎科学の発展、新領域」の4つの領域に20課題が挑戦しています。今回紹介する「『富岳』が拓く Society 5.0時代のスマートデザイン」も、「産業競争力の強化」領域の課題の1つです。この課題の研究開発課題責任者である神戸大学大学院システム情報学研究科（ならびに理化学研究所計算科学研究センター所属）の坪倉 誠教授に、課題のねらいや取り組み、進捗についてお話いただきました。



神戸大学大学院システム情報学研究科/
理化学研究所計算科学研究センター
坪倉 誠 教授/チームリーダー

Society 5.0時代のものづくりと スマートデザイン

「『富岳』が拓く Society 5.0時代のスマートデザイン」の取り組みやねらいについてご説明ください。

はじめに「Society 5.0時代のものづくり」についてお話ししましょう。「Society 5.0」とは、狩猟社会（Society 1.0）、農耕社会（Society 2.0）、工業社会（Society 3.0）、情報社会（Society 4.0）に続く新たな社会であり、わが国がめざすべき未来社会の姿でもあります。第5期科学技術基本計画（2016年1月22日閣議決定）において、「サイバー空間とフィジカル空間を高度に融合させたシステムにより、経済発展と社会的課題の解決を両立する人間中心の社会」として Society 5.0が初めて提唱されました。第5期科学技術基本計画で提示した Society 5.0の概念を具体化し、現実のものとするために、2021年3月26日に閣議決定された第6期科学技術・イノベーション基本計画では、Society 5.0の未来社会像を「持続可能性と強靱性を備え、国民の安全と安心を確保するとともに、一人ひとりが多様な幸せ（well-being）を実現できる社会」と表現しています。Society 5.0では、サイバー空間において、社会のあらゆる要素をデジタルツイン（現実空間のさまざまな情報のデジタルコピーをサイバー空間上に表現する先進技術）として構築し、現実とそっくりな“双子”をサイバー空間上に作り出し、制度やビジネスデザイン、都市や地域の整備などを再構成した上でそれをフィードバックし、街づくりや設計・生産ラインの改善など、フィジカル空間に反映して社会を変革していくことと説明されています。もっとわかりやすく説明すると、研究者たちが自動車の設計など研究開発をしている世界が現実空間、それに対して私たちが「富岳」を活用して新たに構築しようとしている仮想空間があるわけです。科学には、トップダウン型アプローチとボトムアップ型アプローチがあります。トップダウン型は演

繚的にその現象を支配する方程式を解いていきます。つまり理論解析。ボトムアップ型は実験をしてデータをとって、その結果から考える帰納的な手法です。今までこの2つが両輪となって科学技術は進んできましたが、計算機の急速な発達によって、短時間に膨大な量の計算が可能になり、仮想空間が利用可能になってきました。これまでのシミュレーションは、理論解析を仮想空間で行っていて、人間が解けない基礎方程式を計算機が解き、それによって理論的なアプローチのもとに現象を調べてきたわけです。しかし、最近ではデータ科学的なアプローチ、つまりAIが仮想空間で急速に進展してきて、シミュレーションをどんどん流して、集めた膨大なデータを人工知能が読み込む、これが仮想空間のなかで自律的に進んでいくのです。つまり、人間が寝ている間にも、仮想空間のなかで科学がどんどん進んでいく時代になってきているのです。

そんな Society 5.0時代に何をすればよいのかを考えながら、私たちは自動車を対象に、エンジンだけでなくデザイナーも満足するデザイン、つまり燃費がよくてカッコいい自動車の設計をめざしてきました。そこで、私たちはAIによる多目的最適化を進めてきました。デジタルツインにより、現実自動車に走る空間を仮想空間に再現して、そこで性能評価をするわけです。リアルワールド評価は、これまで自動車ができていなければできませんでしたが、いまや設計図の段階で自由に自動車を仮想空間で走らせて性能を予測することが可能になっているのです。こうした自動車を対象とした研究開発をさらに拡張させて、自動車・都市開発・室内環境・燃焼システムという4つの分野で、Society 5.0時代のスマートな設計技術を考えていくのが、このプロジェクトです。

急速に変化する社会に対応したものづくりを実現するには、単なる性能試験の代替としてのシミュレーションを脱却し、新たなデジタルエンジニアリング技術を創生することが急務です。私たちは、「富岳」の性能を十二分に活用できるアプリケーションソフトウェアによる高性能シミュレーションと、多目的最適化・機械学習・データ

同化などのデータ科学を融合させることによりサイバー空間とフィジカル空間を高度に結合させた次世代型設計システムであるスマートデザインを構築しようとしているのです。

プロジェクトにおいて、分野が大きく異なる4つの課題を選ばれたのはなぜですか。

私たちが中心になってこれまでやってきたのは自動車と室内環境です。あとは、スーパーコンピュータ「京」の時代からいろいろな成果を出してこられて、「富岳」でも新しい設計ができそうだというニーズがある分野、さらにはこれまでにつながりのある研究者の方々のなかで、すごく大きなシミュレーションというより、実際の設計をどうしていくのかを考えている先生方に声をかけさせていただきました。サブ課題Aは私たち神戸大学と広島大学、サブ課題Bは横浜国立大学と近畿大学、お茶の水女子大学、サブ課題Cは九州大学と神戸大学、サブ課題Dは京都大学と九州大学が、それぞれ中心になって取り組んでいます。4つのサブ課題のいずれも産学連携のコンソーシアムを組んでいて、密に連携を取りながら進めているのが大きな特徴です。単にシミュレーションを流すだけでなく、コンソーシアムと協議しながら、成果を各産業界でどのように実用化していくかを考え、社会実装までもっていくことをめざしています。

研究開発に活用している基盤ソフトウェアは、主に複雑現象統合シミュレーションフレームワーク CUBE、流体解析ソフトウェア FrontFlow/red の2つです。サブ課題メンバーの多くはソフト開発を行う人々ではないので、4つのサブ課題を束ねるかたちで理化学研究所計算科学研究センターが立ち、ソフトウェアのチューニングや実際の利用に関するサポートを行っています。

プロジェクトの4つのサブ課題

サブ課題Aは、「意匠空間を考慮したAI支援多

目的最適化による自動車空力デザイン」ですね。

性能設計空間と意匠デザイン空間を融合させた新たな空力多目的最適化システムを構築し、実際の自動車空力設計に適用することで、その有用性を実証しようとしています。自動車は大きな1つのシステムで、空力性能はもちろん、強度や衝突安全性、振動・騒音など、いろいろな評価が関わってきますが、忘れてはいけないのがデザインです。いくら性能がよくても、かっこよくなければ売れませんから。しかし、これまでは価値観の異なるエンジニアとデザイナーが同じテーブルで議論することはほとんどなかったわけです。そんな人たちを同じ設計プラットフォームのもとで一緒に協議して作業できるシステムをつくりたいのです。そのために、空力性能とデザイン特性のどちらも最適化するフレームワークの構築をめざしています。

サブ課題Bは、「変容する都市・建築の自然擾乱対応の性能設計」ですね。

データサイエンスにもとづいてメタボリズム（新陳代謝）的に変容する都市・建築モデルをサイバースペース上に再現して、都市・建築の離散的空間での換気性能やグリーンインフラに基づく気温調整機能の定量化、気象モデルと乱流シミュレーションを融合した広範囲の周波数帯の乱流変動の再現、スーパータイフーン、竜巻、豪雨などの極端気象下での都市・建築の挙動を把握することによる防災性能の予測などをめざしています。コンソーシアムを基本として、自然起源の擾乱の都市・建築へのインパクト推定技術による社会貢献にも役立てていきたい考えです。要するに、変容する都市・建築の自然擾乱対応の性能設計について、今までは風洞のなかで評価してきた建物の性能などを、実際の空気の流れや気象を再現して進めていこうとしているわけです。実際の世界をコンピュータ上に再現して性能を評価する、まさにデジタルツインの世界です。

サブ課題Cは、「新興ウイルス感染症にロバストで健康・快適・サステナブルなポストコロナ時代の室内環境設計」ですね。

さまざまな空気感染性汚染物質の生成から室内空気中の輸送動態、さらには体内動態と免疫システム応答・生理反応までを包括的に解析して、可視化する統合的システムを開発し、それを「富岳」に実装しようとしています。サブ課題Aと同様に、最終的には多目的な最適化をめざしています。室内環境は、これまで快適性を重視して設計されてきました。寒過ぎたり暑過ぎたりしない空調の設計がなされてきたわけです。ところが、今回、新型コロナウイルス感染症の感染拡大によって、快適性だけでなく、感染症に対しても強い室内設計が求められました。つまり、2つの目的、快適性と健康を両立させる室内環境設計です。この二つを最適化するような室内環境設計のためのプラットフォームを構築することがこの課題の目的になります。実際には、風の流れが変わると身体に入ってくる飛沫の量なども変化し、体内のどこに付着するかも変わります。そこで、精度を上げるために実際に人の気道を再現し、気道内のどこでウイルスがどう増殖するのかも追えるシミュレーションになっています。

サブ課題Dは、「マルチコンポーネント統合シミュレーションによるカーボンフリーガスタービン設計」ですね。

ガスタービンを構成する圧縮機・燃焼器・タービンを完全に統合して LES (Large Eddy Simulation) で一気に解くという、世界初かつ真のマルチコンポーネント統合シミュレーション技術の開発をめざしています。サブ課題Bと同様にデジタルツインで、仮想空間上に実機を再現しようというものです。それにより、フラッシュバックや燃焼振動などの異常燃焼、窒素酸化物 (NOx)・一酸化炭素 (CO)・すすなどのさまざま

なエミッションの正確な予測にも有用であることを示したい考えです。この統合シミュレーション（サイバースペース）結果から、異常燃焼発生時の物理メカニズムを解明し、さらに異常燃焼の兆候を自動で探知するためのAIセンシング技術を開発することにより、これらの知見・技術が実機（フィジカル空間）の設計や最適操作条件選定に貢献し得ることを実証しようとしています。かつては、燃焼器なら燃焼器の計算しかできませんでした。が、「富岳」を活用して、空気を圧縮して燃焼器に送る圧縮機も、燃焼により力を得るためのタービンも、すべて含めて実機全体に広げた統合シミュレーションをやろうというわけです。

実証段階まで進んだ研究開発

プロジェクトはあと2年ですね。研究開発の進捗状況についてお話しください。

現在はFeasibility Studyといいますが、4つのサブ課題いずれもフレームワークができ上がって、いよいよ実証していこうという段階に入っています。たとえば、サブ課題Aであれば、もう多目的最適化のフレームワークはできていて、設計変数をこうしたら決められるということもわかっていて、昨年度は、それが確実に動くことを確認するために、空気抵抗とデザイン性の2軸だけでやってきたものをさらに軸を増やしたり、最適化もどんどん進めていく方向に動きつつあります。サブ課題Bも着実に進んでいます。サブ課題Cでは、小さなモデル室内を拡張して、実際のオフィスやかつて新型コロナウイルス感染症のクラスターが発生した場を想定して、そこで空調システムがどのように最適化すればどれくらいリスクが下がるかを検証するという段階に移っています。サブ課題Dも全体を統合したシミュレーションがすでに動いています。今後は、さらに解像度を高めていき、より信頼性の高い計算を実施していく段階に入っています。





サブ課題 A 意匠空間を考慮した AI 支援多目的最適化による自動車空力デザイン

広島大学大学院
先進理工系科学研究科 准教授
中島 卓司

サブ課題A「意匠空間を考慮したAI支援多目的最適化による自動車空力デザイン」では、空気抵抗などの力学的性能、すなわち物理的、機能的な価値を考慮するだけではなく、外観の意匠性のように人間が感じる感覚的、精神的な価値についても考慮可能な、新たな空力多目的設計支援システムの構築をめざしています。また、プロジェクト全体の共通基盤の構築のため、スーパーコンピュータ「富岳」におけるニューラルネットワーク処理のチューニングや流れの縮約モデルの構築技術の開発にも取り組んでいます。

サブ課題Aで構築を進める空力多目的設計支援システムでは、車体の形状パラメータを設計変数とするパラメトリックな設計探索技術を用い、基準車体の形状をモーフィングして新たな車体形状を生成、評価します。ここで、意匠特性を考慮した設計探索のため、デザイン的な意図に関わる車体形状を変える形状パラメータを設定します。また、多目的な設計探索には、多目的進化アルゴリズムCHEETAH/Rを使用します。

物理的価値としての目的関数となる車両空力

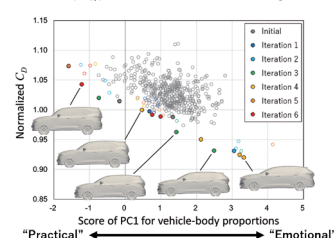
性能は、車両周り乱流場の高精度な数値解析によって評価します。複雑現象統合シミュレーションフレームワークCUBE（理化学研究所にて開発）を使用し、形状変更に伴う解析格子の再生成作業を必要としない利点を活かして、効率的かつ高精度に空力性能を評価します。さらに、進化計算の過程で得た数値解析結果からガウス過程回帰によるサロゲートモデルを構築し、数値解析を行う車体形状を選別することで、計算コストを効率的に削減します。

一方、感覚的な価値に関わる意匠空間の取り扱いについては、特に空力性能にも関わる車体の「形状」の影響に注目し、自動車の外観から人間が受ける印象を調査しながら、意匠空間の数理モデル化を進めています。自動車の意匠を担当するデザイナーの方にも協力いただきながら、自動車の外観が与えられと考えられる「印象」を選定し、車体外観のCG画像を用いたアンケート調査を行って、外観と印象の関係を明らかにしました。また、市販されている多数のSUV車両について車体形状を主成分分析し、車体形状の特徴量を抽出して、印象と関係のある外形形状の特徴も調査しています。

最後に、以上の取り組みの成果として、意匠空間を考慮した空力設計探索のFeasibility Studyの結果を示します（図）。ここでは、市販車の車

体形状の特徴量を車体形状パラメータ（設計変数）とし、現実的な車体形状のバランスを保ちながらパラメトリックな設計探索を行いました。ただし、空力解析の計算コストの制約から探索可能なサンプル数の少なさを考慮し、設計探索のアルゴリズムにはEGO（Efficient Global Optimization）法を使用しています。そして、「空気抵抗を減らす」とことと「実用的な印象（と関連のある形状特徴量）を強調する」ことを2つの目的とする設計探索を行った結果、外観から受ける「実用的」な印象が異なるなかで、それぞれ空気抵抗が最も低い車体群が得られ、構築したフレームワークによる意匠空間を考慮した多目的最適化による自動車空力デザインの実現可能性を確認することができました。

今後は、物理的な価値と感覚的な価値の双方について、目的関数にとる項目を拡大しながら、本フレームワークの実証を進めていくことを考えています。



▲空気抵抗の低減（縦軸下向き）と「実用的」な印象と関連のある形状特性（横軸左向き）を2目的とする自動車空力設計探索の結果



サブ課題 B 変容する都市・建築の自然擾乱対応の性能設計～極端自然事象に対する都市・建築のスマートデザインの展開～

横浜国立大学 客員教授／
東京工業大学 名誉教授
田村 哲郎

◆ 気象スケール・市街地スケールの融合

温暖化に伴い、気象事象における激甚化が進行し、都市あるいは建築物の防災あるいは環境問題を解決するための技術、特に設計手法の目的達成のための先鋭化・洗練化が強く求められています。本課題では、都市あるいは建築に対する不確定性の強い極端気象インパクトを推定し、またその受容を適切に処理する設計技術を提示することを、スーパーコンピュータ「富岳」を活用することで実現することをめざします。

そのために都市・建築の極端気象事象に関するシミュレーション技術を展開します。本課題においては、スケールの大きな現象に対して気象モデルなどを活用し、都市上空での気象擾乱を

生成する一方、都市市街地のより小さいスケールの流れの解析には工学的なLES（Large-Eddy Simulation）を適用します。両者は、独立してシミュレーションが実施されてきましたが、異なるスケール間の接続を円滑に行うことが重要なスキルとなります。スケールに関するフィルタリングを適用することでここでは両スケールの間にある、気象スケールより高波数側の成分を予測し、両者の接続を達成します。その結果、中間スケールにおいてローレル構造あるいは波動的な構造が現れ、都市被覆上での突風構造あるいは建物に作用する風圧のピーク性状を推定します。市街地あるいは建物へ作用するインパクトに対し、気象擾乱込みで変動幅の大きいデータを数値化し、都市・建築物の耐風性能を確保するための洗練された設計法、いわばスマートデザインが実現することになります。なお、小スケールの建築物まわりの空間のモデル化に対しては、建築物の実際の形状を的確に

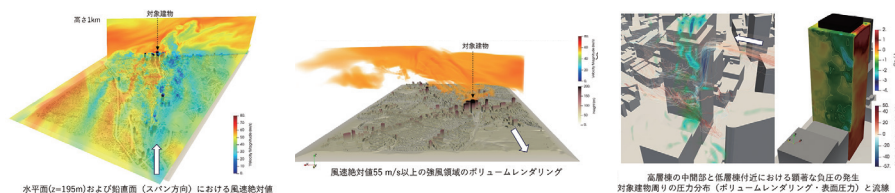
再現する必要があり、ここでは数十cmの解像度を用います。建物の形態を流体力学的に捉えた場合、断面形の後流構造の歪み、隅角部形状による剥離せん断層の非定常変化など、かなり空力特性が鋭敏に変化することが認識されているためです。

◆ 都市・建築スマートデザインでの要件

建物の周囲に設置される壁面、屋根、壁面などの外装材の安全性を検証するためには、建築部材スケールのピーク風圧に対して部材が破壊しないように設計する必要があることから、ピーク風圧の大きさ、変動特性および発生頻度など確率的な挙動を把握しなければなりません。今回のシミュレーションでは、建築物の外装材の安全性を台風などの不確定挙動を確率的に踏まえた上で、構造部材の破壊挙動を予想し、安全性を確保することをめざすもので、極端自然事象に対する都市・建築のスマートデザインを実践するものです。今回のシミュレーションは大スケールの場を対象に、それを構成する小スケールの場も同時に取り扱って風荷重を正確に推定することが不可欠で、DX*の適用によりcapability computingからcapacity computingへ移行し、大サンプルの解析から不確定性の理解の確度が上がり、スマートデザインの高度化が進むものと考えられます。

◆ 解析例～渋谷建築物密集地区～

解析の一例として、東京渋谷地区における高層建物群を対象とし、中央に位置する高層建物とそれを取り囲む高層建物群が干渉して、局所的に発生する過大な負圧に関する解析結果を示します。上流から流れ込んだ流れが、隅角部に



▲極端台風下の高層建物における突風とピーク風圧の発生機構の理解

(M. Kawaguchi and T. Tamura, Ensemble LES Analysis of Gust Occurrence in an Urban Area During Typhoon Hagibis, ECCOMAS2024, Lisbon, June 2024)

触れ、側面に沿って進むとき、剥離せん断層が側方壁面と干渉して円錐渦が隅角部の中途高さから発生し、壁面負圧が上方へ広がるようになります。また、下方の入隅部では、屋根面と壁面に跨るように局所的な渦が形成され、局部負圧がアーチ状に生み出されます。こういった外装材の局部負圧の形成は、上流からの風の

流れ込みの風向と位置により微妙に変化するため、本シミュレーションのような、気象スケールの流れ込みのゆったりとした時間変化とそれに伴う局部負圧の発生挙動を緻密に推定することが求められ、こうした計算結果を用いることにより、建築物の外装材の耐風性能が適切に評価されることになります。

◆おわりに

本課題においては、極端自然事象（台風・突風・豪雨・洪水・猛暑など）の防災・環境問題を考えるには、こういった多重スケールの現象を融合させ、HPC*のもとで不確定性を有する各種物理量を数値化する必要があり、同様な概念の下、スマートデザインを構築し、災害低減をめざすことになります。



◆サブ課題 C 新興ウイルス感染症にロバストで健康・快適・サステイナブルなポストコロナ時代の室内環境設計

九州大学総合理工学研究院
教授
伊藤 一秀

各種の空気感染性汚染物質の生成から室内空気中の輸送動態、さらに体内動態と免疫システム応答・生理反応までを包括的に解析し、可視化する統合的システムの開発とともに、複雑現象統合シミュレーションフレームワークCUBEへの実装を目的としています。最終的に、室内の快適性と感染症に対するロバストネスを両立させる多目的最適化による設計手法の提案をめざしています。

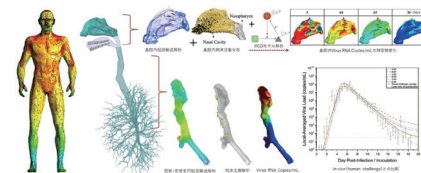
これまで、ボランティアのCT*データを基に鼻腔・口腔から気管支までの上気道モデルと気管から気管支第16分岐（終末細気管支）までの下気道モデルを統合した数値気道モデルの作成、気道内流体解析と粘膜上皮細胞上の粘液輸送解析

の連成解析手法等の統合シミュレーション技術の開発などに取り組んできました。この数値気道モデルを用いて、気道内気流解析に液膜から液滴形成を再現するEulerian Wall Filmモデルを実装し、気道内Lagrange粒子解析と連成解析することで、咳に伴う気道内での飛沫・飛沫核生成と室内環境中への呼出を連続して解析する技術を確立しています。気道粘膜上でのウイルス増殖を予測するためHost Cell Dynamicsモデルを実装することで、気道内でのウイルス含有飛沫の沈着からウイルス増殖（複製）の時間変化を3次元的に可視化する技術の開発に取り組んでいます。

室内環境設計の目的は、居住者であるヒトに快適で健康な空間を提供することにありますので、環境シミュレーションを実施する際に、人体の再現は必須です。本研究では、人体形状と体温調節モデルを再現した数値人体モデルに数値気道モデルを統合することで、汎用的な室内環境シミュレ

ションツールに統合可能な新しい数値人体モデルの開発にも取り組んでいます。

また、室内環境の質(Indoor Environmental Quality)を定量的に評価するための指標作成やその解析方法に関する研究にも取り組んでいます。室内に形成される汚染物質等のスカラ不均一混合場を定量的に評価する新たな換気効率指標(Net Escape Velocity、Net Escape Probability、Transfer Probability)などを提案し、その厳密な定義を示すとともに、(これまで定量評価が困難であった空気感染制御の観点で必要となる)換気設計への実装可能性に関して、地道に取り組みを続けています。



▲病原物質の室内動態から細胞レベルの防御反応機構の複雑現象と統一的に理解・解析し、定量的に可視化する数値人体モデルと室内環境設計システムを開発



◆サブ課題 D マルチコンポーネント統合シミュレーションによるカーボンフリーガスタービン設計

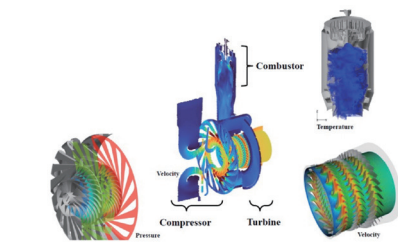
京都大学工学研究科
教授
黒瀬 良一

わが国は、温室効果ガスの排出を2030年度に13年度比で46%削減、2050年までに実質ゼロとすることを宣言しています。将来的には、風力や太陽光などの再生可能エネルギーへの移行が期待されますが、このような再生可能エネルギーは環境に左右される変動電源となり、直接使うには制限と限界があります。そこで、CO₂排出量をゼロとみなせる水素(H₂)やアンモニア(NH₃)を燃料として燃焼させることにより、発電や推進のためのエネルギーを得る方法が期待されています。しかし、水素は燃焼速度が速い(メタンの約5倍)ことによって生じる火炎の逆流(フラッシュバック)や低NO_x化に不可欠な希薄燃焼条件で発生しうる火炎の不安定化と圧力変動の相互作用(燃焼振動)がガスタービンの損傷を引き起こす危険性があること、また、アンモニアは逆に燃焼速度が遅い(メタンの約5分の1)ことによって生じる失火が起りやすくなることから、これらの対策が不可欠であり、その解決が喫緊の課題となっています。このような対策を講じた新しい燃焼器や火炉の設計、最適操作条

件の選定を行う上で、試行錯誤の検討が比較적으로容易で現象理解の助けになるとの理由から、燃焼の数値シミュレーションは有力なツールとなり得えます。しかし、燃焼は極めて複雑な現象であるため、燃焼の素過程についての数値モデルや、燃焼反応に伴う急激な密度変化に適用可能な安定スキームに関する理解や選定が容易でないこと、また、燃焼の数値シミュレーションは計算負荷が極めて高いため、その資源確保と並列計算等、効率的な計算実施に関するノウハウが不可欠であることなどの理由から、その利用は特に産業界において浸透しているとはいえません。

しかし、最近では、「京」や「富岳」のような性能や利便性の両面で優れたスーパーコンピュータの登場により、燃焼数値シミュレーションの利用が産学官で急激に進んできています。また、燃焼の騒音問題の解決に関連した音(圧力変動)との連成や、液体燃料の微粒化・蒸発・沸騰現象など多種多数の複雑な現象を同時に解くマルチフィジクスシミュレーションへの期待も高まっています。さらに、実機全体を解く、いわゆる実機丸ごとシミュレーションは、チャレンジングではあるものの、将来に向けた極めて有望なテーマと考えられています。例えば、ガスタービンは、主に圧縮機・燃焼器・タービンの3つのコンポー

ネントから構成されますが、研究開発段階では、通常、これらは別々に解析・評価されており、ガスタービンとして俯瞰的・統一的な事前評価ができていないといえます。特に、フラッシュバックや燃焼振動は主として燃焼器で発生する非定常かつ不安定な現象ですが、圧縮機やタービンを含めたガスタービン全体の圧力変動や速度変動と密接に連動しながら進展するため、ガスタービン全体としての評価が不可欠です。このような状況から、筆者らは、ガスタービンを構成する圧縮機・燃焼器・タービンを完全に統合してLES*で一気に関く、真のマルチコンポーネント統合シミュレーション技術の開発を進め、すでにその実現に成功しています(図)。今後、詳しい成果を論文や、自身が主催する「燃焼システム用次世代CAEコンソーシアム(<https://www.riken.jp/collab/consortium/cngc/>)」を通して、広く公開していく予定です。



▲ガスタービン統合シミュレーション結果の一例(対象は川崎重工業ガスタービン)

「富岳」での通信最適化をめざした 汎用ランクマップ最適化ツールの開発

理化学研究所計算科学研究センター 技師
黒田 明義

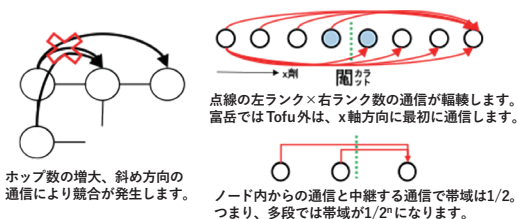


背景

スーパーコンピュータ「富岳」(以下、「富岳」)をはじめとする、ハイパフォーマンスコンピューティングでは、時代とともに向上する演算性能と比べて、相対的に演算器間の通信性能が低くなっています。このためアプリケーションの実行時間に通信時間の占める割合が増加する傾向にあります。私たちは、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にて開発されている有限要素法(以下、「FEM」)アプリケーションである乱流音場解析ソフトウェアFrontFlow/blue(以下、「FFB」)を用いて、「富岳」でランクマップを最適化することで、FEMで用いられる1対1非同期通信などの通信時間の削減をめざしています。

「富岳」での通信の特徴

「富岳」直接網上の通信では、Tofuと呼ばれるノード単位外の通信ホップ数が増えると、輻輳が大きくなり、問題になることがFFBによる通信性能解析でわかってきました。図1の通り、通信輻輳はホップ数の増加並びに斜め方向の通信により発生します。「富岳」では、Tofu単位から外に出る最初の通信方向が物理x軸方向と決め打ちされているため、x軸方向の通信で輻輳が特に多いとされています。リンクを横切る通信量は、リンク両側のノード数の積で増えます。またノード自身は、全体の通信状況を知るすべを持たないため、ローカルに制御します。交通流で例えますと、高速道路ICで渋滞中に合流する際は、ファスナー合流をすると効率が良くとされていますが、「富岳」でも同様の制御がなされています。この機構により、ホップ数 n が1つ増えると中継通信帯域が $1/2$ ずつ減少します。帯域は単純に $1/n$ ではないため、想定より通信時間が増えます。集団通信では、ホップタイミングを同期させることで、一斉にバケツリレーを行い、輻輳を回避しています。これが「富岳」で開発されたMPIライブラリ内のTofu専用アルゴリズムと呼ばれるものです。



▲図1 「富岳」でのノード間通信の特徴

左図: 通信輻輳の発生例 右上図: 多段ホップでの通信輻輳
右下図: 発信バケットと経由バケットの輻輳

ランクマップ最適化ツールの開発

理化学研究所運用技術部門ソフトウェア開発技術ユニットでは、村井均ユニットリーダーのもと、安藤和人、中村宜文、黒田明義の技師3名体制で、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と、協力して、汎用ランクマップ最適化ツールの開発を手がけています(図2)。これは、MPI通信の時系列情報を解析する手段として、汎用のOSSライブラリであるStructural Simulation Toolkit (SST) DUMPI Trace Libraryを用い、得られたランク間通信量テーブルをもとに、最適なランクマップを生成するツールです。すでに試作を終え、「富岳」ユーザ向けに公開を開始しました。また開発コードをGithubで公開し、「富岳」以外のシステムでも通信最適化を行えるよう整備を進めています。

ランクマップ最適化ツールのしくみ

「富岳」での通信性能劣化要因として、ホップ数効果を挙げましたが、通信量が多いランク間のホップ数削減により、通信時間短縮が期待できます。私たちは、ホップ数と通信量で記述された評価関数を用い、最適化することで、通信性能の削減をめざしました。ここで行った工夫をいくつか紹介します。

1. 評価関数

評価関数は、ランク間のホップ数 n と通信量 c で記述されていれば何でも良く、「富岳」の通信特性に合せるのであれば、 $\max(c \cdot 2^{n-1})$ のように書き下すことができます。しかしホップ数の影響を演算数の多い冪乗で計算する必要はなく、また最大値の計算は並列処理が困難で時間がかかります。ここでは単純に $\sum (c \cdot n^2)$ のような評価関数を用いて最適化を行いました。平均値に置き換えることで評価関数はなめらかになり、最適化時間が短くなると期待されますが、評価関数の削減効果と通信時間が必ずしも一致するとは限りません。

2. 最適化処理

最適化手法として、シミュレーテッドアニーリングを用いました。徐冷計算には時間がかかります。ナイーブな実装で3,072プロセス規模の100,000ステップの最適化に40,000秒ほどの時

間がかかり、それ以上のプロセス数の最適化は困難でした。これを回避するために大並列問題では、Tofu単位をまとめて最適化するツールを用意しました。しかし輻輳が多いと予想されるx軸方向の通信を他の軸に置き換えるためには、本手法では実現が困難で、通信時間削減効果は大きくありません。現在、局所的な徐冷と、Tofu単位の大域的な徐冷を組み合わせた最適化ツールの開発中です。

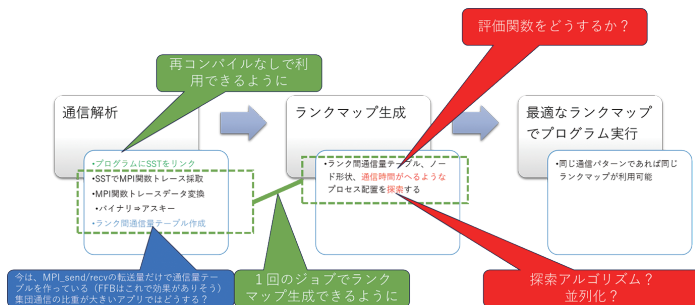
3. 新規アルゴリズム開発

評価関数として、ホップ数で書き下せる関数を用いて最適化を行いました。通信していないリンクを有効活用するという観点では、通信の平滑化を評価関数として取り入れることができ、情報エントロピーを用いた評価関数を考えました。情報エントロピーの計算には、全通信経路を探索し、得られた全リンクの通信量を計算する必要があります。これは中継通信を含む通信量であり、「富岳」ではTNR(Tofu Network Router)カウンタ情報として計測が可能です。経路探索には時間がかかりますが、徐冷回数削減などに向けた新規手法として、また最適化問題に対する新たな取り組みとして有効と考えます。

4. 初期ランクマップ

「富岳」での標準のランクマップは、x-a軸、y-b軸、z-c軸の組み合わせによる3次元トラスです。これは必ずしもFEMの隣接切片領域間の通信に最適な配置とはいえません。通信が隣接ランクのみで行われるのであれば、Tofu内48プロセス単位を意識したMetisによる多段階分割を行い、Tofu内に近くのランクを一筆書きで配置するのが最適に近いランクマップといえます。しかし実際のアプリケーションでは隣接切片領域間だけではなく、遠くの切片領域間でも通信を行います。本ツールを用いると、より安定な配置を探せることが確認できました。最適化対象となる初期ランクマップの工夫により、より短時間で最安定な配置を探し出すことができると考えています。

プロセスあたり50万要素のFFB 3,072プロセスの例では、1ステップの実行時間がオリジナル配置と比べて、0.449秒から0.398秒へと削減できました。このなかには演算時間も含まれ、非同期通信であるため正確な通信時間の分離は困難ですが、通信時間は約0.16秒程度であると見積もられ、30%ほど短縮できたこととなります。現在、他のアプリケーションでの効果についても確認を進めています。理化学研究所では、「富岳」の通信能力を最大限に引き出すツールのさらなる開発を推し進め、ユーザの利便性に資する活動を、今後も引き続き進めて参ります。



▲図2 ランクマップ最適化ツール概念図

FrontFlow/blue の東北大学サイバーサイエンスセンター AOBA-S への展開

日本電気株式会社デジタルプラットフォームビジネスユニット
インフラ・テクノロジーサービス事業部門
HPC統括部 プロフェッショナル
加藤 季広



SX-Aurora TSUBASAシリーズ

SX-Aurora TSUBASAシリーズは、日本電気株式会社（NEC）が40年にわたって開発してきたベクトル型スーパーコンピュータSXシリーズの流れをくむ製品として2018年に出荷が開始されました。

Vector Engine (VE) とよばれるベクトルプロセッサと主記憶をPCI Express (PCIe) カードに搭載し、これをVector Host (VH) とよばれる標準的なx86サーバに接続することによってシステムが構成されます。

通常、GPUやFPGAのようなPCIeカード型のアクセラレータでは、ホスト側で実行されるプログラムの一部分を実行し、全体処理時間の短縮をはかります。一方VEでは、プログラム全体をカード上で実行することができるため、性能ボトルネックとなるPCIeバス上の頻繁なデータ移送が発生しません。アクセラレータ向けの特長なプログラミングは必要なく、Fortran、C/C++のプログラムをSX-Aurora TSUBASA向けコンパイラを用いてコンパイルするのみでプログラムは自動的に最適化され、高速に実行されます。

Vector Engine Type30A

Vector Engine Type30A (VE30A) は、NECが新規に開発した第三世代のVEです。図1にVE30Aプロセッサの主要な諸元および概略ブロック構成を示します。

VE30Aプロセッサでは、前機種VE20Bの2倍となる16個のコアを搭載し、コアへのデータ供給能力を向上させるためにメモリサブシステムを一新しています。主記憶にはHBM2eメモリを6個搭載し、最大で2.45 TB/秒という非常に高いメモリ帯域を実現しました。また、コアと主記憶の経路上にあるキャッシュ階層の見直しもはかりました。レベル1、レベル2キャッシュはそれぞれ容量を倍増、

ラストレベルキャッシュについては容量を従来の16 MBから64 MBに大幅増強しています。さらに、レベル3キャッシュとよばれる2 MB/コアのコア専用大容量キャッシュを新設しました。

AOBA-S

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、2020年10月からスーパーコンピュータAOBAの運用を開始しました。スーパーコンピュータAOBAはサブシステムAOBA-A、サブシステムAOBA-Bの2種類の計算機システムと、ストレージシステム等で構成されます。2023年8月から新しいサブシステムとして、AOBA-Sの運用を開始しました（図2）。

AOBA-Sは、1台のVHと8台のVEが構成単位となるC401-8モデルを採用し、サブシステム全体は504台のVHと4,032台のVEで構成されます。VEとVHを合わせたシステム全体の理論演算性能は、21.05 PFLOPS（倍精度）、総主記憶容量は504 TB、総メモリバンド幅は9.97 PB/秒となります。504台のVHはInfiniBand NDRネットワークで接続され広帯域・低遅延なデータ通信を可能としています。

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、1997年よりユーザアプリケーションの高精度化、大規模化の支援を目的とした高速化支援活動を、1999年より共同研究制度を実施しています。利用者、計算機科学を専門とするセンター教員、技術職員、およびベンダー技術者が連携してアプリケーションの高速化に取り組んでいます。

FrontFlow/blue

FrontFlow/blue (FFB) は非圧縮流体の非定常流動を高精度に予測可能なLarge Eddy Simulation (LES) に基づいた汎用流体解析コードです。形状適合性に優れた有限要素法による離散化を採用し、ファン/ポンプ等の流体機械

や複雑形状周りの非定常乱流解析および流れから発生する騒音の予測が可能です。

FFBにおいて実行時間の多くを占める処理は、メモリバンド幅が実効性能に大きく影響する、いわゆるメモリインテンシブな処理であり、高いメモリバンド幅をもつSX-Aurora TSUBASAが得意とするところです。

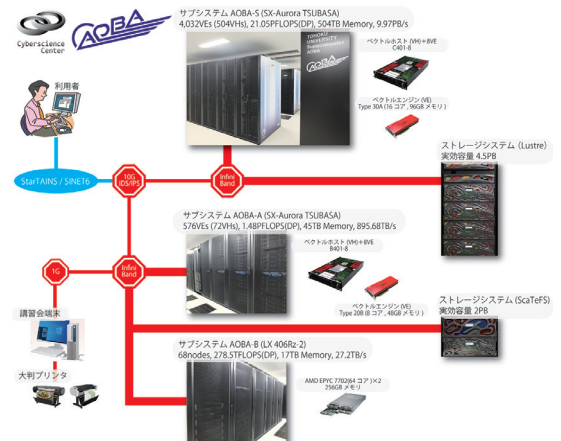
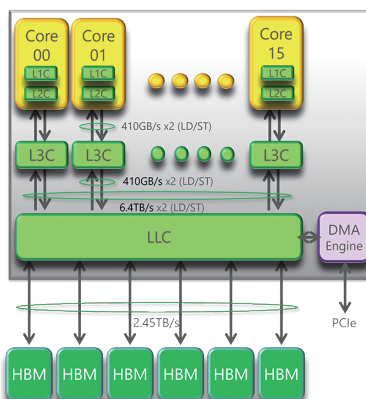
東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センターとNECでは、2018年からFFBのベクトル型計算機向け性能調査、高速化を継続的に進めてきました。

AOBAのような大規模計算機システムにおいて、分散メモリ並列化による大規模な計算を行う際には、個々のプロセッサによる計算処理の性能だけではなく並列性能も重要となります。そのため、計算処理を高速化するためのベクトル長延長、ベクトル化率向上等の施策に加え、共有メモリ並列化（スレッド並列化）とMPI並列化のハイブリッド並列化の適用、MPI通信性能の最適化等、並列性能向上のための施策にも注力してきました。その結果として、1 VEあたりの性能は最大341 GFLOPSとなりました。これはメモリバンド幅から推定される演算性能の55.6%に相当し、FFBが、SX-Aurora TSUBASAの高いメモリバンド幅を十分に生かした演算性能を実現していることを示しています。また、最大2,048 VEまで使用したweak-scaleベンチマークテストでは、並列効率61.7%、総演算性能301 TFLOPSを達成しました。これにより、120億グリッド規模の計算をステップあたり0.82秒で実施できるため、AOBA-S上での実用問題を対象とした大規模LES解析が可能となります。

このようにベクトル型計算機、SX-Aurora TSUBASA向けに高速化されたFFBは、AOBA-Sで利用可能なアプリケーションのひとつとしてインストールされています。通常の企業や研究室の計算機システムでは取り扱えない大量あるいは大規模な問題もAOBA-Sならば取り扱えます。AOBA-Sのご利用をぜひご検討ください。

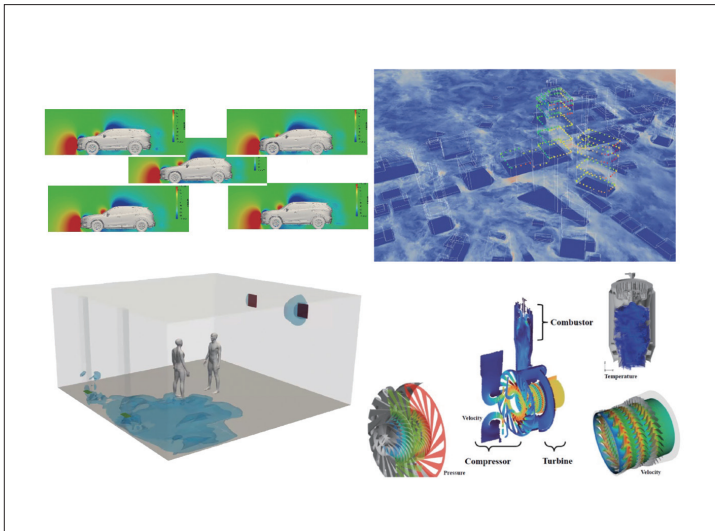
今後も東北大学サイバーサイエンスセンターでは、AOBA-Sで大規模計算を行うことができるアプリケーションを順次増やし、ユーザアプリケーションの高精度化、大規模化の支援を目的とした高速化支援活動を推進していきます。

	VE30A (AOBA-S)	VE20B (AOBA-A)
コア数	16	8
コア理論演算性能	307GF(倍精度) 614GF(単精度)	←
プロセッサ理論演算性能	4.91TF(倍精度) 9.83TF(単精度)	2.45TF(倍精度) 4.91TF(単精度)
L1 cache for scalar	64KB per core (命令/オペランド別)	32KB per core (命令/オペランド別)
L2 cache for scalar	512KB per core	256KB per core
L3 cache	2MB per core SW controllable	N/A
Last level cache	64MB shared	16MB shared
メモリバンド幅	2.45TB/s	1.53TB/s
メモリ容量	96GB	48GB
PCIe	Gen4	Gen3
消費電力(TDP)	< 370W	300W



▲図1 Vector Engine Type30A (VE30A) のプロセッサの主要な諸元および概略ブロック構成

▲図2 東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ、AOBAシステム構成図



今号の表紙

「富岳」が拓く Society 5.0時代のスマートデザイン

激変する社会に対応して、わが国が“ものづくり大国”として国際競争力を維持していくためには、性能試験の代替としてのシミュレーションを脱却し、新たなデジタルエンジニアリング技術を創生することが急務です。「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」では、複雑現象統合シミュレーションフレームワーク CUBE、流体解析ソフトウェア FrontFlow/red というスーパーコンピュータ「富岳」の性能を十二分に活用できるアプリケーションソフトウェアによる高性能大規模シミュレーションと、多目的最適化・機械学習・データ同化などのデータ科学を融合させることで、サイバー空間とフィジカル空間を高度に結合させた次世代デジタル設計システムを構築します。具体的には、わが国の基幹産業分野を構成する自動車・機械・土木・建築分野から、4つの課題（P2～3を参照）を設定し、大学などの研究者と産業界のエンジニアが強力に連携して課題に取り組んでいます。

神戸大学大学院システム情報学研究科 教授／理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー
坪倉 誠

編集後記

文部科学省において2020年度から実施している『富岳』成果創出加速プログラム」では、「健康長寿社会の実現」、「産業競争力の強化」、「防災・減災、環境問題」、「基礎科学の発展、新領域」という4領域が設定され、現在、20の課題が研究開発を行っています。これにより、AI・データ科学との融合・連携、社会実装に向けた産業界との連携、次世代を見据えたアプリケーションに繋がる取り組み、基礎科学の新たな展開など、これまでにない新規成果の創出が期待されています。今号では、2021年より実施している、「産業競争力の強化」領域の課題の1つである『富岳』が拓く Society 5.0時代のスマートデザイン」（研究開発課題責任者：坪倉誠 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授／理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー）に注目し、その概要と現在までの進捗や成果について紹介しています。



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.27

発行日：2024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