

# 次世代スパコンが切り拓く可能性について

スーパーコンピューティングが変革する21世紀のものづくり

理化学研究所 研究主幹 (東京大学教授)  
加藤千幸



# お話しする内容



- 計算機の発達と計算科学シミュレーションの進展
- ものづくり分野におけるシミュレーションへの期待
- シミュレーションの発展の方向性と研究者に期待される役割
- まとめ

# 計算機の発達と計算科学 シミュレーションの進展

# 計算科学シミュレーションとは？



- 全ての物理現象はある法則により決定されている
  - 構造物の運動: ニュートンの運動方程式
  - 空気の流れ: ナビエ・ストークス方程式
  - 電磁気: マクスウェルの方程式
  - 分子の挙動: シュレディンガー方程式
  
- したがって、支配方程式が解ければ全ての物理現象が予測可能
  
- でも、これらの方程式は通常解析的には解くことはできない
  
- そこで、計算機で解ける形の近似方程式を作成し(モデル化)、これを計算して近似解を求めるのが計算科学シミュレーション

計算機の性能向上により、計算科学シミュレーションの  
適用範囲と貢献が飛躍的に拡大することが期待

# 計算機の発達



## ■ 国内最速のコンピュータ

- 1992年:約10GFLOPS (1秒間に10の10乗回の計算を実行可能)

地球シミュレータの稼動開始

- 2002年:40 TFLOPS (1秒間に10の13乗回の計算を実行可能)

次世代スパコンの稼動開始

- 2012年:10 PFLOPS級 (秒間に10の16乗回の計算を実行可能)

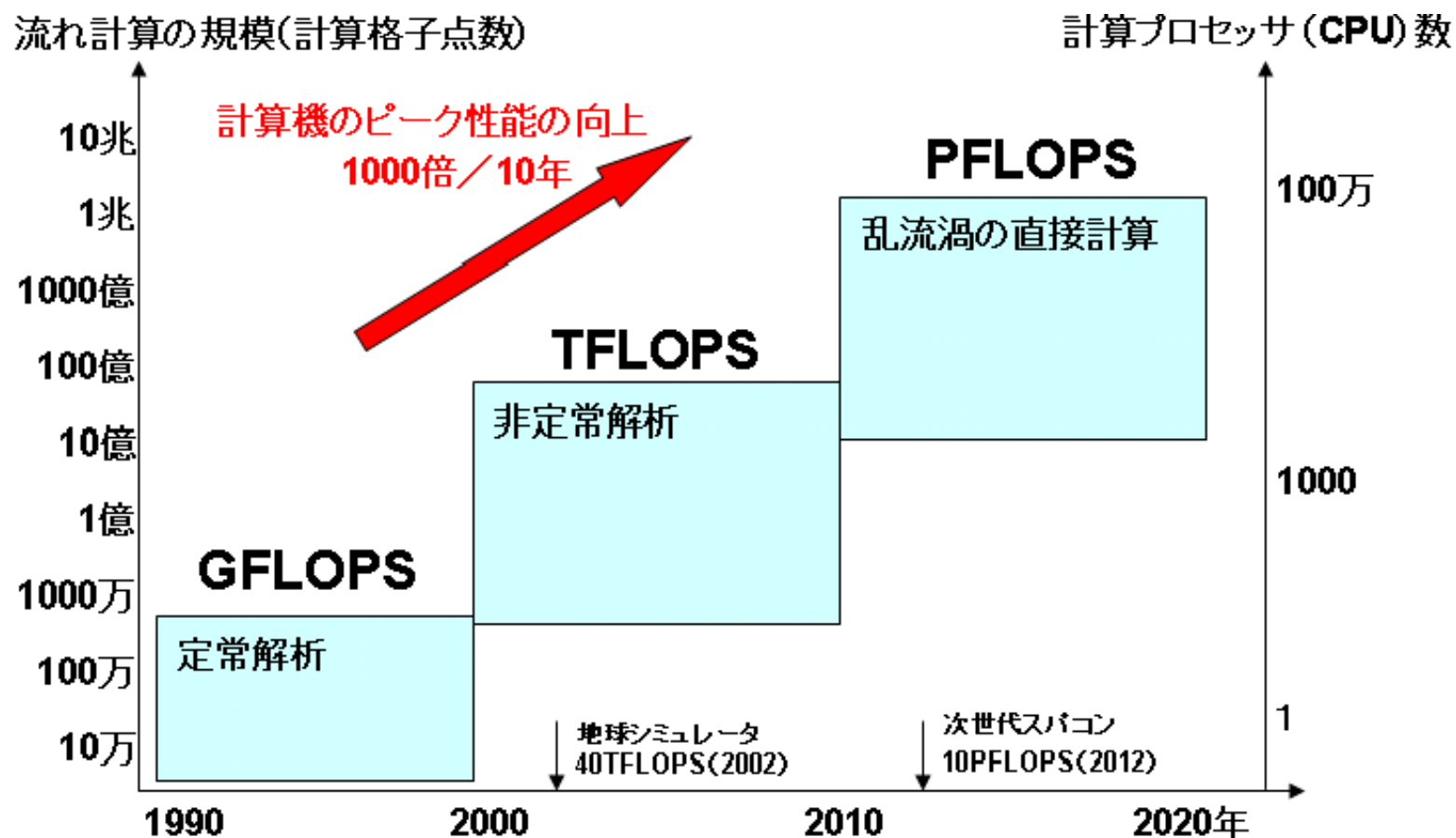
計算機の性能は過去20年間に100万倍に向上

(10年で1000倍というペースで計算機の性能は向上)

# 計算機の発達とシミュレーションの進展例



## ■ 過去20年のCFD(流体の数値解析)の推移と今後の展望



# ものづくり分野における シミュレーションへの期待

# ビジョンを実現するための技術革新(1) ものづくり シミュレーションに期待される貢献



## ■ 現状の課題

- 設計者の経験に基づく最適化→真の最適設計が不可能
- プロトタイプ(試作)による評価→試作費用・試作期間が膨大
- 従来の設計パラメータによる設計→革新的製品が出来ない

## ■ 期待されるブレークスルー技術

- 超高速数値計算の実現による最適設計
- 超大規模連成解析による試作の代替
- 第一原理計算による、性能の飛躍的向上、新規材料等

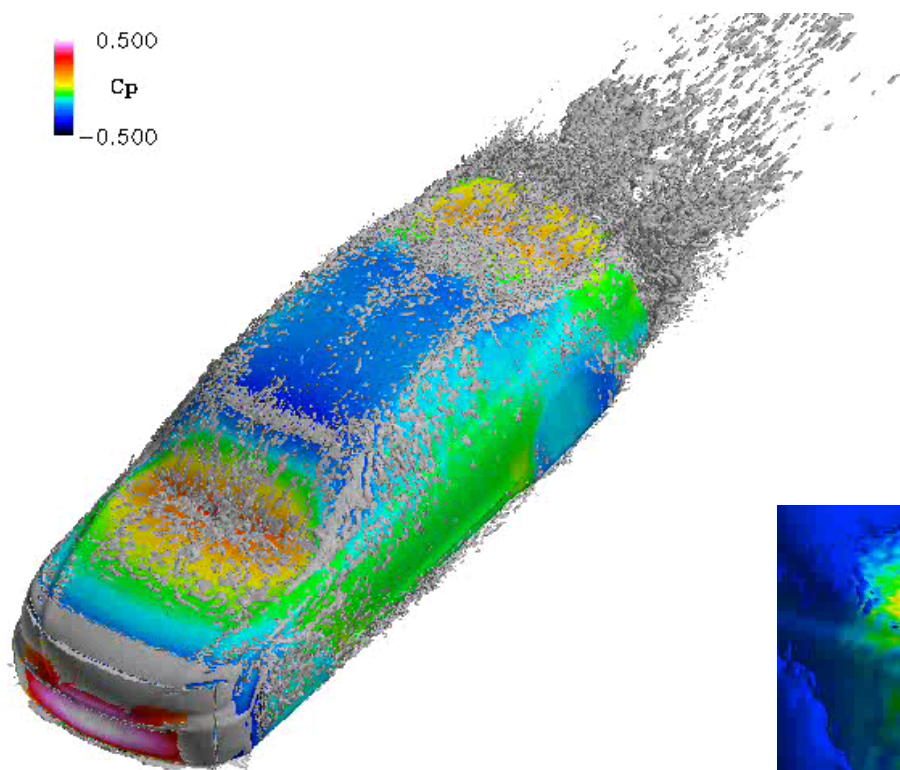


## (1) 空気抵抗の小さい自動車を開発する

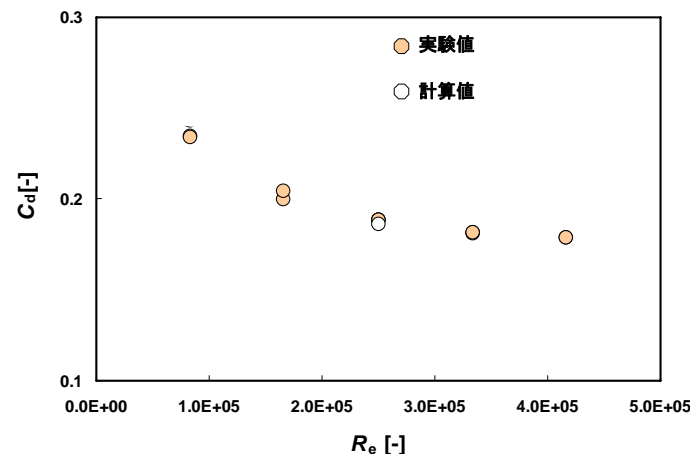
注: 以下の例は現在のスパコンで既の実現できていること。次世代スパコンではこの数100倍詳細な解析や数100分の1の計算時間で解析が実行可能

# 究極の低空気抵抗車の実現

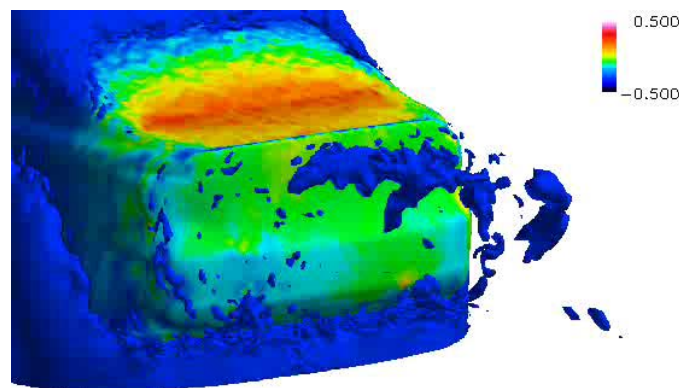
## ■ 乱流の直接数値解析による乱流渦の挙動解明と制御



車両周りの全乱流渦の数値解析



抵抗係数 $C_d$ 予測精度の検証(±1%)



空気抵抗の決定に支配的な渦の同定→渦運動の制御による抵抗低減

(トヨタ自動車(株)との共同開発)

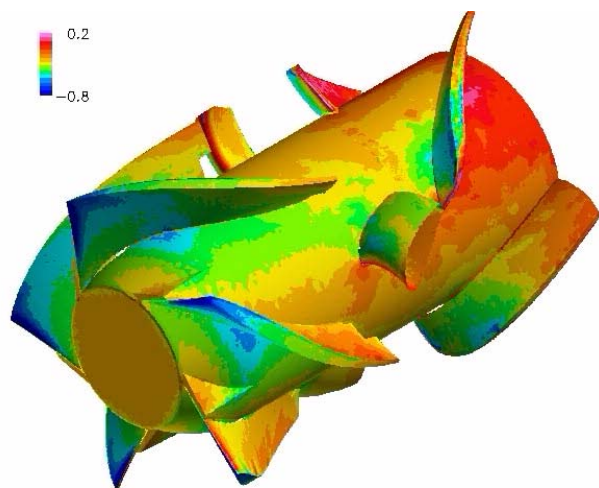
## (2) 音の出ないファンを開発する

# 超低騒音ファンの開発

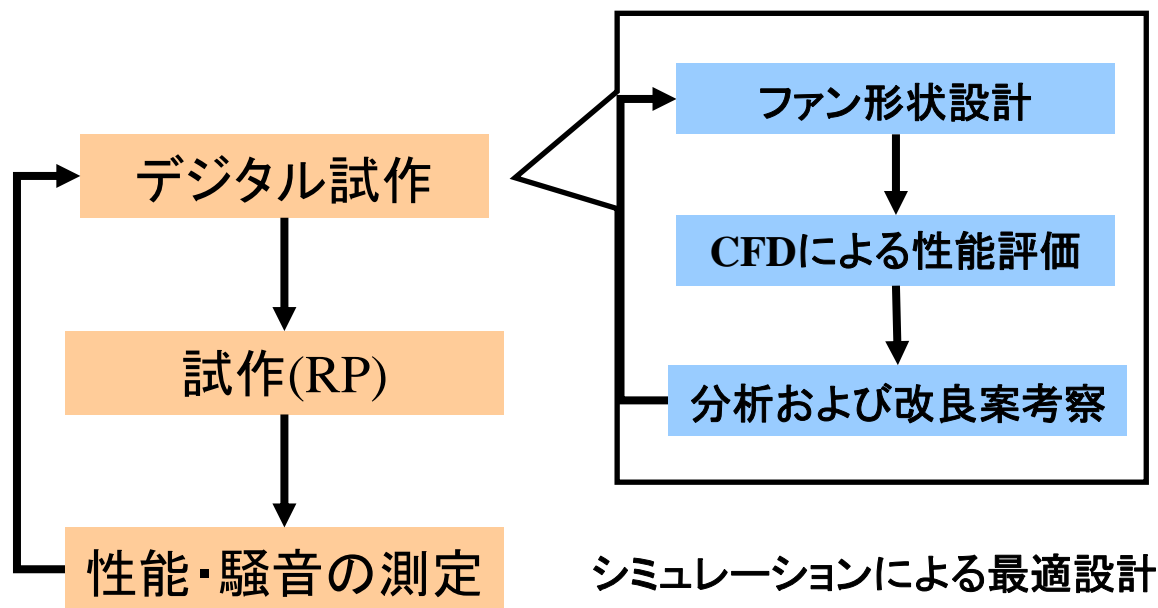


## ■ 背景と目標

- サーバ空冷用の小型化・高回転数化に伴いファン騒音問題が顕在化
- 従来の設計では低騒音化は限界
- シミュレーションによる最適設計により、6dBの低騒音化を実現(目標)



ファン表面圧力のシミュレーション結果



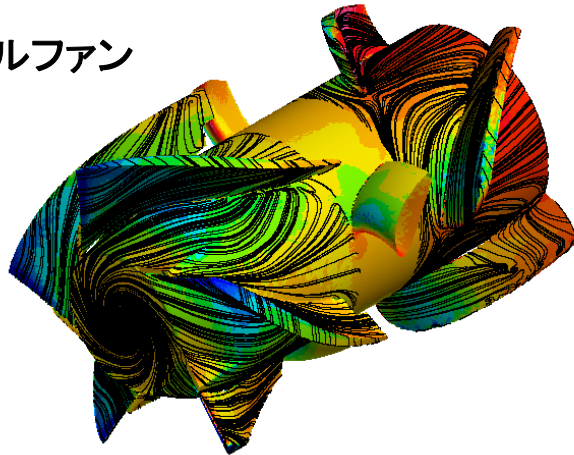
シミュレーションによる最適設計

富士通アドバンステクノロジー(株)、山洋電気(株)との共同開発

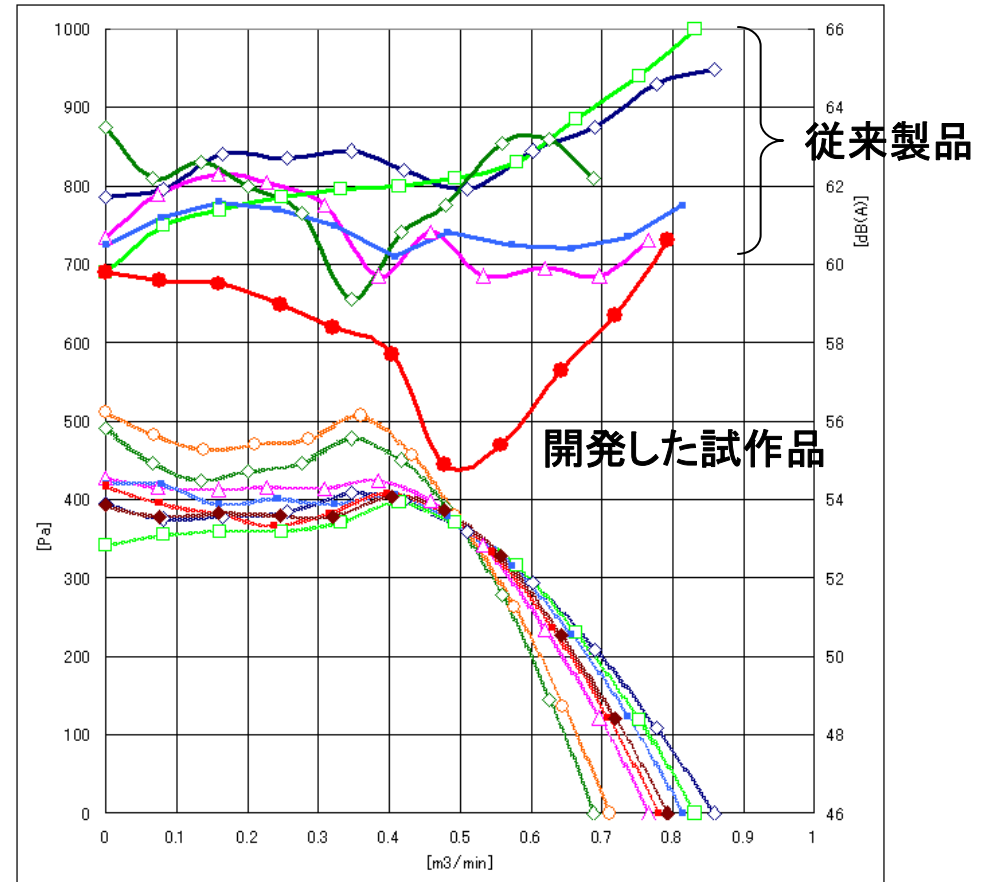
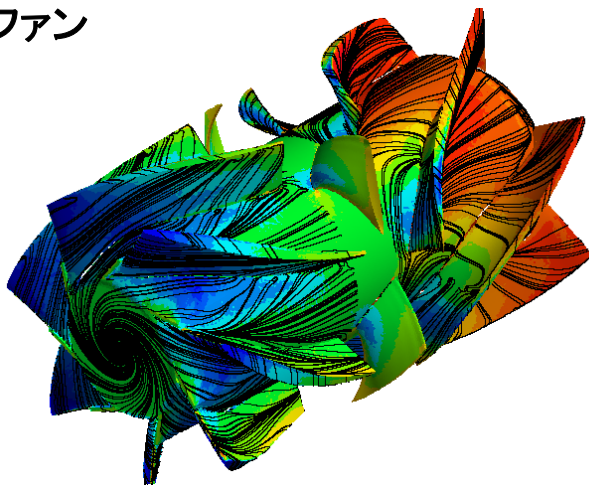
# 最適化ファンの試作結果



オリジナルファン



最適化ファン



風圧と騒音の試験結果

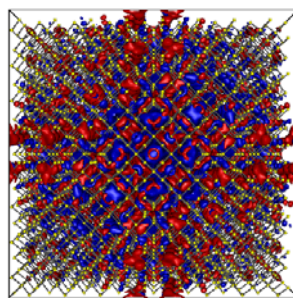
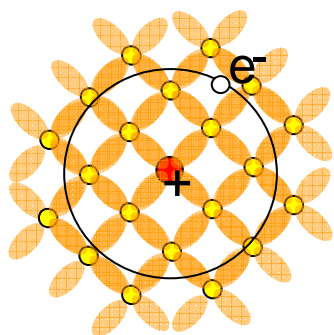
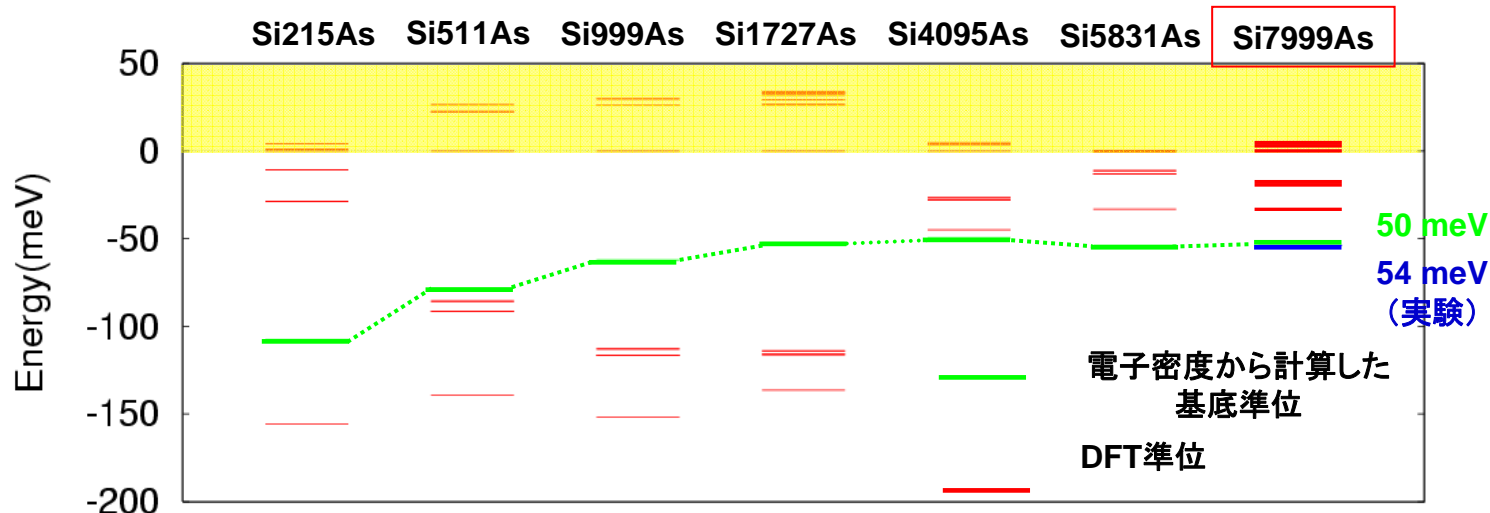
風圧(ファンの性能)を維持し、6dBの低騒音化に達成

## (3) 次世代の材料を開発する

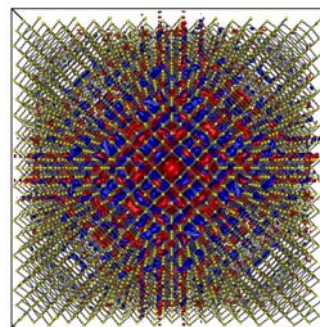
# ナノシミュレーションによる 新材料設計とナノ機能予測



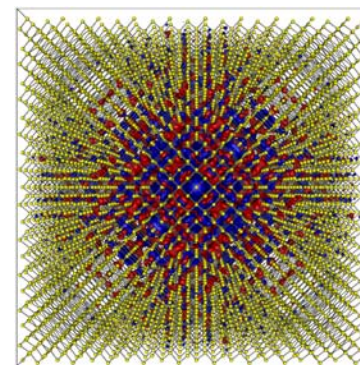
- 1万原子規模の大規模第一原理計算を実現  
→高誘電率材料の探索や半導体レーザーの開発に貢献



Si<sub>4095</sub>As



Si<sub>5831</sub>As



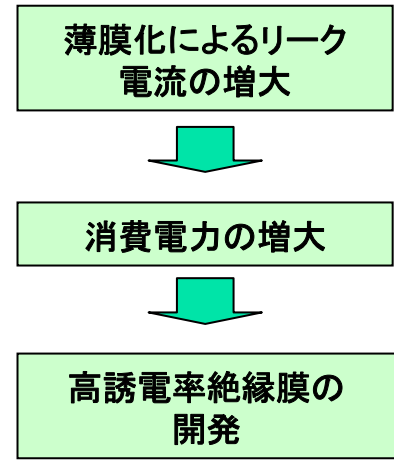
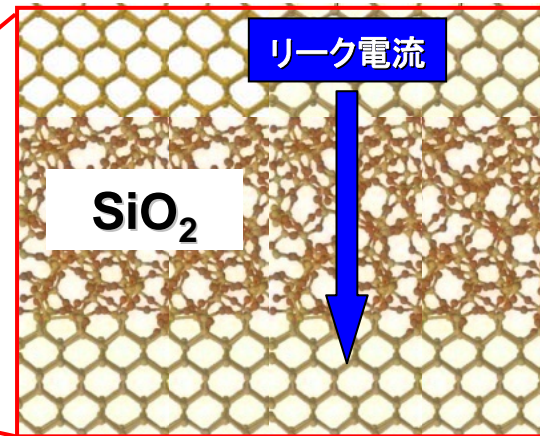
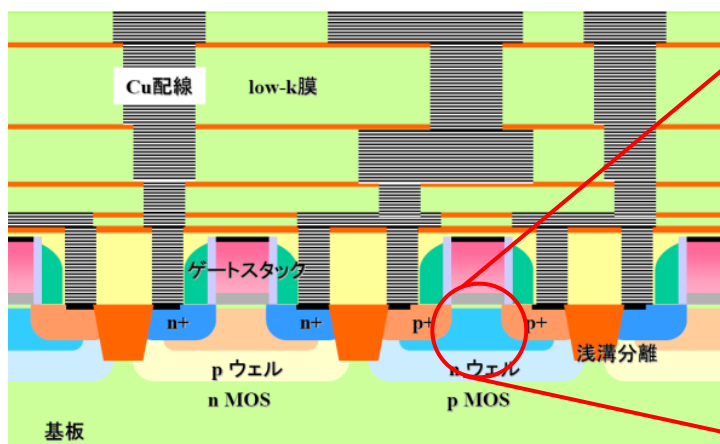
Si<sub>7999</sub>As

1万原子のDFTを実現。次世代スパコンなら10万原子のDFTが可能に！

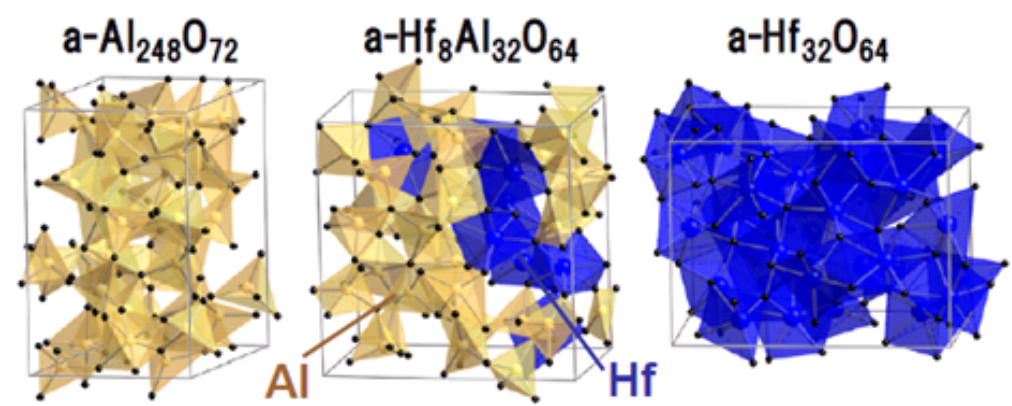
# 次世代Si-CMOSデバイス開発への応用



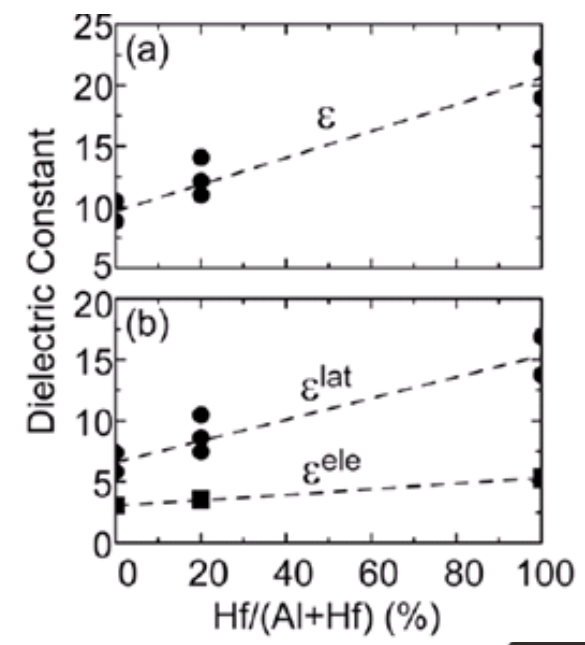
## ■ 次世代Si-COMSデバイスの開発課題



## ■ アモルファスモデル構造と誘電率



Hf量の増加により、誘電率は増大する  
誘電率は格子分極項の寄与が大きい



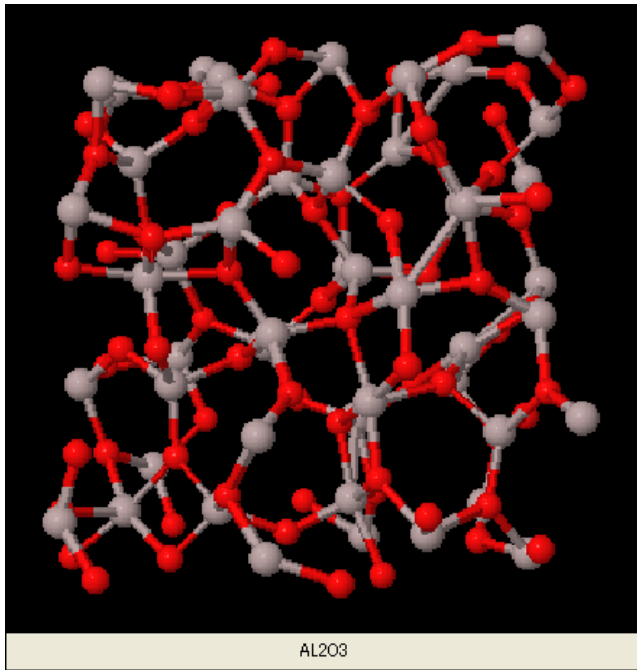


# 種々の物質の誘電率の定量的評価を実現

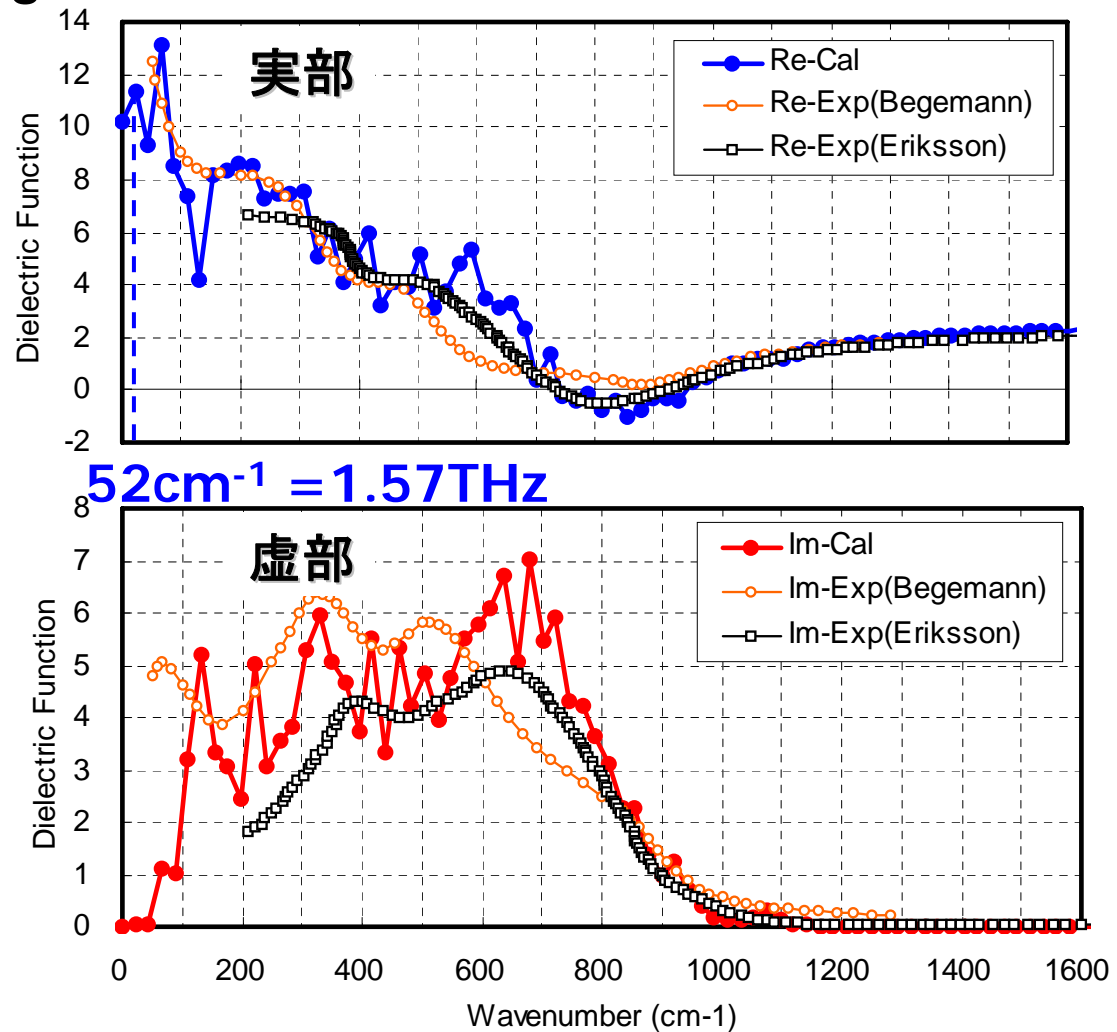
ソフト名・PHASE



## ■ アモルファス $\text{Al}_2\text{O}_3$ の誘電率関数



低イオン振動モードによる  
誘電分散の発現



# 電子＋格子静的誘電率：High-k材料の探索

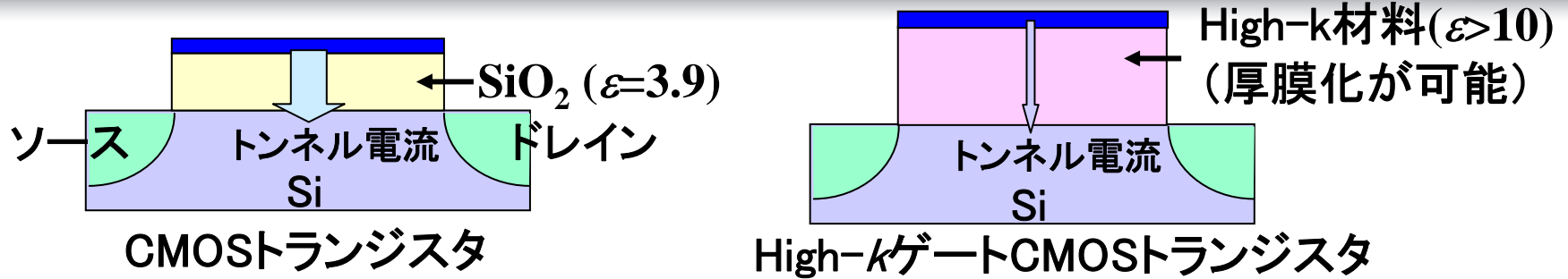


Table: High-k材料誘電率(LDA). 実測値を括弧内に示す.

材料	電子系	格子系	電子＋格子系
<b>結晶</b>			
$\alpha$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.25(3.05)	7.21(6.58)	10.46(9.63)
HfO <sub>2</sub> (monoclinic)	4.74(4~5)	11.24(~11)	15.98(~16)
cubic-CeO <sub>2</sub>	7.5(6)	16.8(17)	24.3(23)
<b>アモルファス</b>			
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.11(2.5~2.8)	7.53(5.5~8.5)	10.64(8.2~11)
HfO <sub>2</sub>	4.96(4 ~ 5)	13.78(11~20)	18.74(16~25)

(株)日立製作所提供

次世代スパコンなら種々の高誘電率材料の高速探索が可能に！

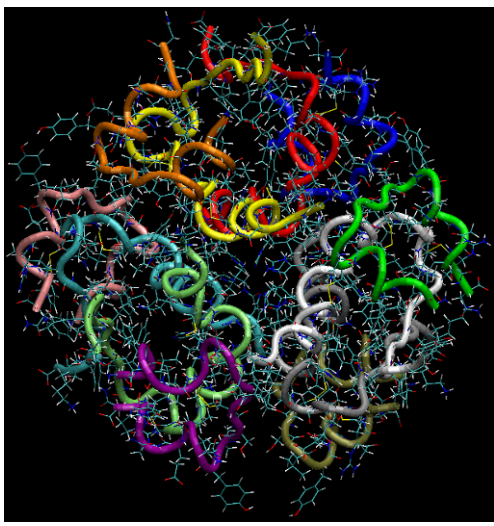
## (4) 良く効く薬を開発する

# インスリン製剤開発への応用



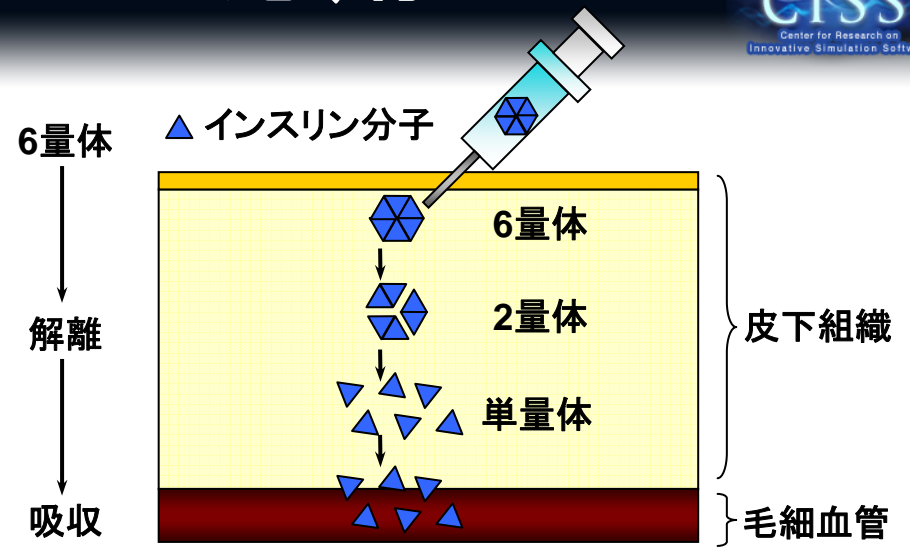
## ■ インスリン製剤

- 糖尿病製剤
- 6量体→2量体→単量体へ解離するステップが薬効律速
- 製剤には天然、速効型、持続型



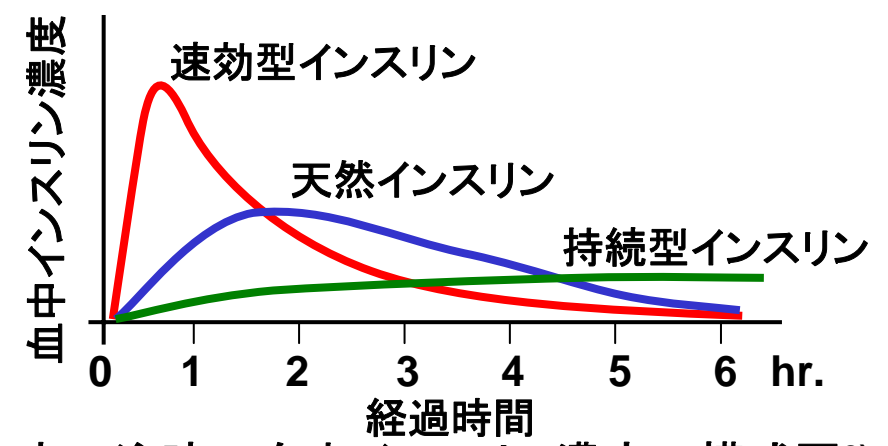
## ■ インスリンの解離を量子化学計算を用いて定量評価したい

- 超々速効型を設計できるか!?



皮下からのインスリン吸収模式図<sup>1)</sup>

1) <http://www.uemura-clinic.com/dmlecture/insulin.htm>

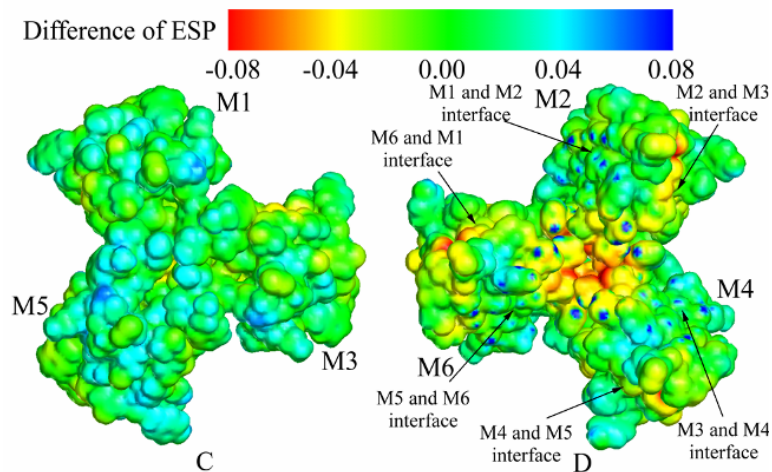
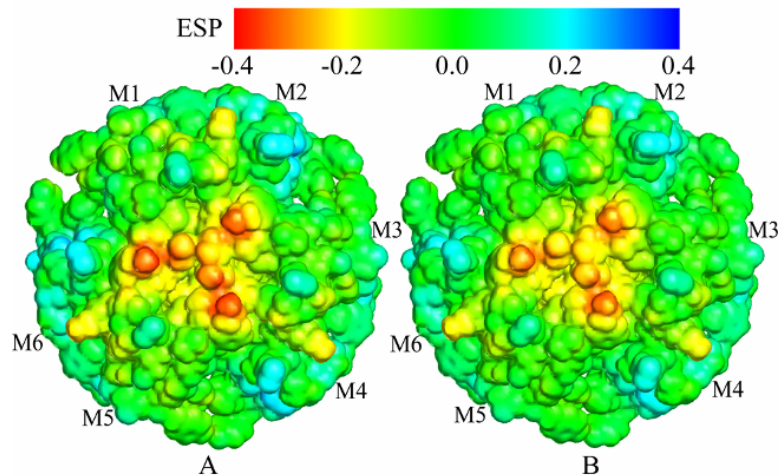


皮下注時の血中インスリン濃度の模式図<sup>2)</sup>

2) 日本臨牀59巻(2001年)11月号.

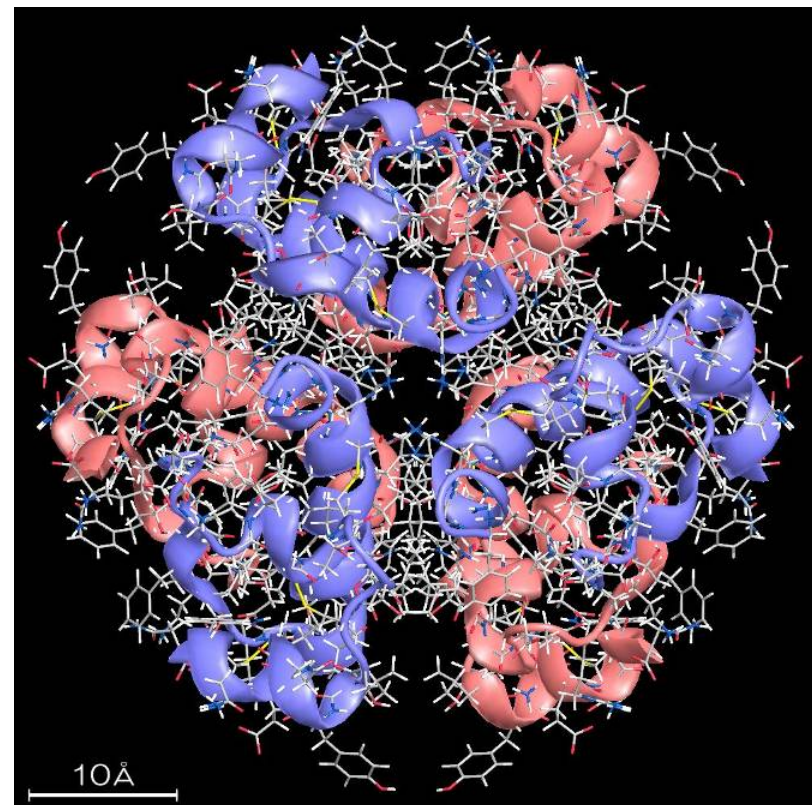
# タンパク質の全電子計算

- 計算の収束性の大幅な改善と完全分散並列化により巨大タンパク質分子の全電子計算を世界で初めて実現！



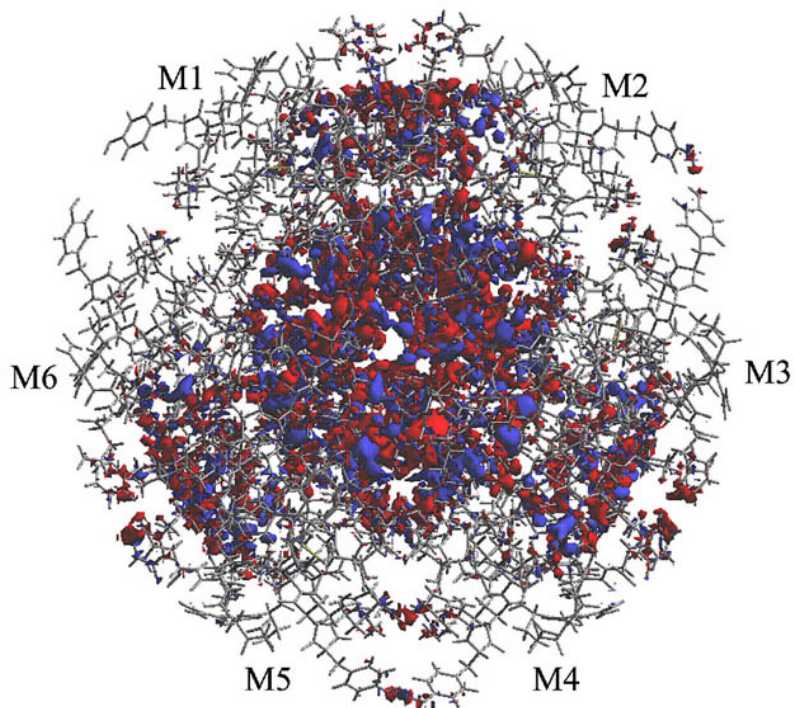
古典計算

全電子計算

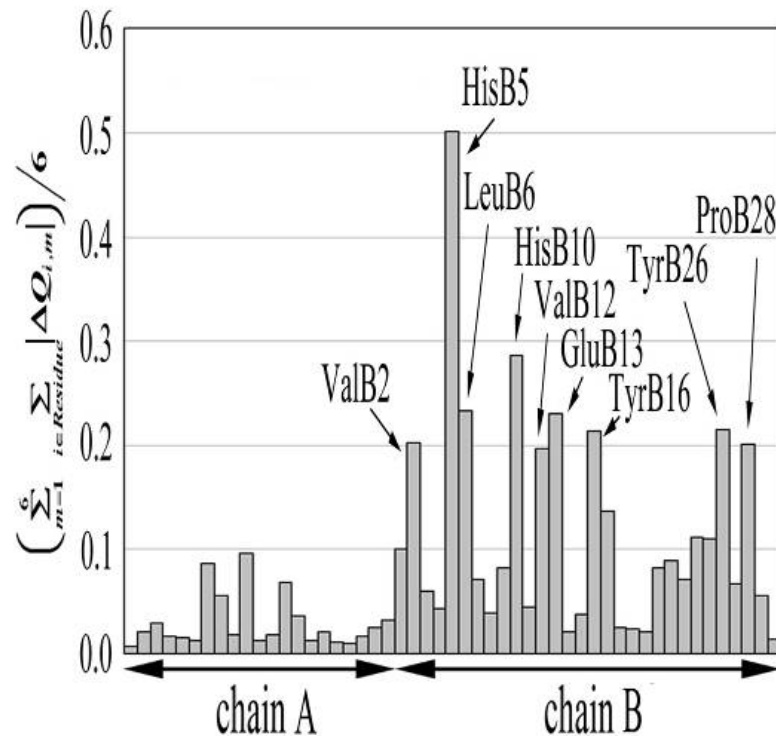


インスリン6量体(300残基)の全電子計算

# クラスタリングメカニズムを電子軌道的に解明



タンパク質の凝集により  
動いた電子の分布



電子が移動したアミノ酸残基

解離エネルギー	本方法	従来法(MM)
E(6量体) – 3x E(2量体)	-450.5	-248.8 kcal/mol
E(2量体) – 2x E(単量体)	-659.7	-507.7 kcal/mol

次世代スパコンを用いて、超即効性のあるインスリン開発に貢献可能

# シミュレーションの発展の方向性と 研究者に期待される役割

# 今後の数値解析の発展



## ■ 超大規模・連成解析の実現

- 現状の流体解析: 2億点程度 (3 TFLOPS)
- 将来の流体解析: 2,000億点程度 (3 PFLOPS)
- 実用的なレベルでの直接計算の実現

→ 数値解析による試作の代替、様々な支配的現象の解明・制御・利用が可能に

## ■ 超高速計算の実現

- 数日・数時間の計算が数分で実現可能に

→ 数値シミュレーションによる本格的な最適化の実現



# 引き続き取り組むべき課題



## ■ 超並列計算の実現

- 10万CPU, 100万コアの計算機の性能を出すには...  
→ 並列化率99.9999%が必要(完全並列, 通信OHが問題)

## ■ 単体(コア)性能の維持

- メモリー CPU間のデータ転送速度の限界(ピーク性能の10%の性能を出すことは容易ではない!)

## ■ 大規模データの処理方法

- データ保存・転送・可視化処理他

## ■ マルチスケール・マルチフィジックスモデルの高度化

- 計算の大規模化に伴い、物理モデルの高度化も必須

# 研究者に期待される役割



- **革新的な数値解析アルゴリズムの研究開発**
  - 超並列計算可能で、かつ、必要データ量が少ない
  - 超大規模・高収束性行列解法
- **種々の分野における物理モデルの高度化**
  - Eg. 燃焼解析モデル、相変化モデル、etc
- **超大規模データの効率的な処理方法の研究開発**
  - クラウド・コンピューティング、グリッド・コンピューティング
  - 大規模可視化処理、他

# まとめ

# 次世代スパコンへの期待と課題



## ■ 次世代スパコンの利用

➤ ものづくり分野の変革への可能性

## ■ 研究者への期待

➤ ものづくり分野の将来ビジョンを産業界と共有し、その実現の鍵を握るキー技術の研究開発(隘路の打破)