

シミュレーションが変える世界

小野, 謙二
九州大学情報基盤研究開発センター : 教授

<https://hdl.handle.net/2324/1812817>

出版情報 : 九州大学大学院システム情報科学府・研究院先端サマーセミナー, 2017, 2017-08-10
バージョン :
権利関係 :

九州大学 先端サマーセミナー 2017

シミュレーションが変える世界

九州大学 情報基盤研究開発センター

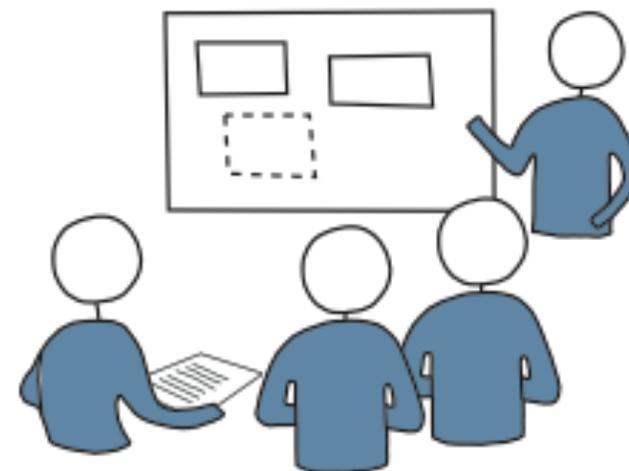
小野謙二



九州大学

今日のはなし

- シミュレーション？
- 過去から未来へ
- シミュレーションが変わる
- 現実世界とのインタラクション



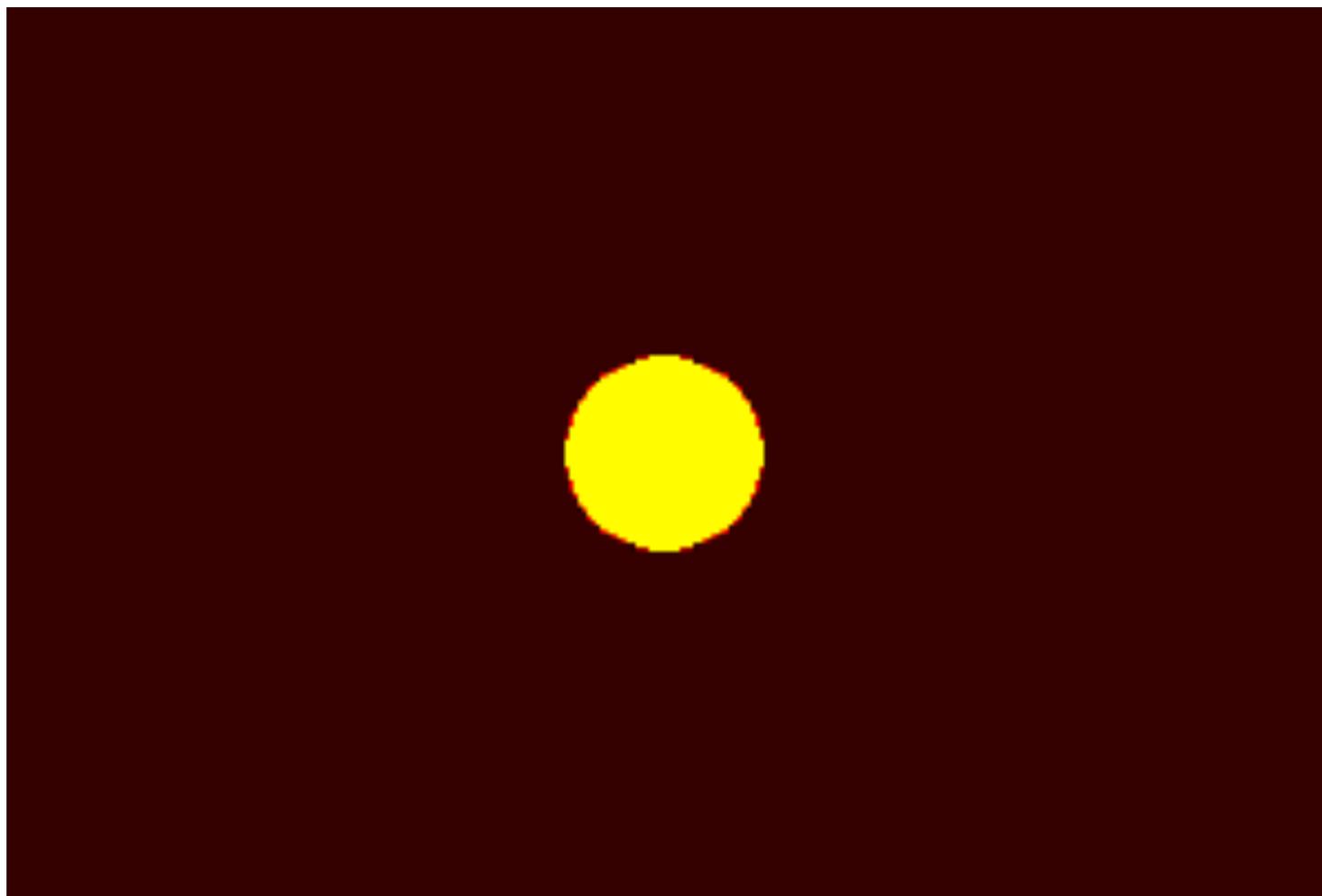
1. シミュレーションとは？

シミュレーションシミュレーション 【simulation】

- 1. ある現象を模擬的に現出すること。** 現実に想定される条件を取り入れて、実際に近い状況をつくり出すこと。模擬実験。「市場の開発を一する」「マーケティング」
- 2. コンピューターなどを使用して模擬的に実験を行うこと。** 実験内容を数式モデルによって組み立て、これをコンピューター処理することによって実際の場合と同じ結果を得ようとするもの。
- 3. サッカーで、反則の一。** 相手チームの選手から反則を受けたかのような演技をして、審判を欺くこと。

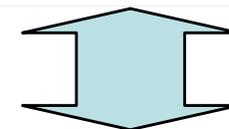
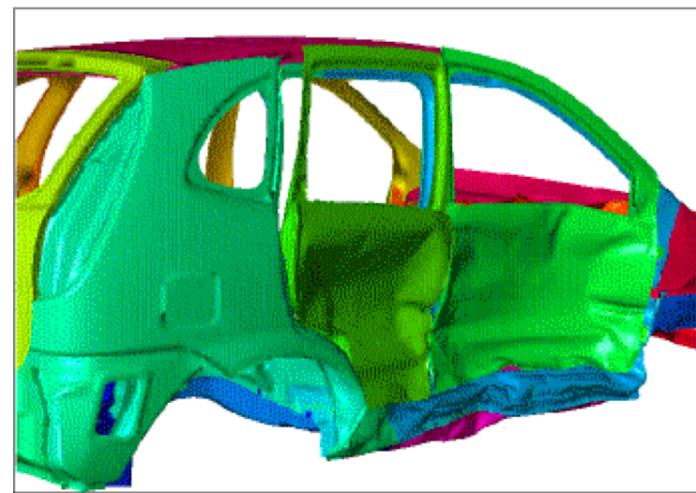
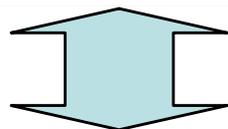
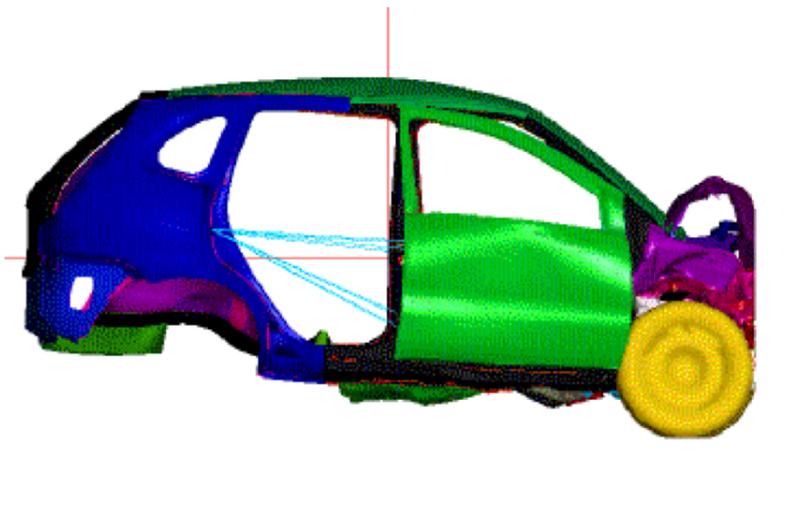
現実には再現できないこと、起こりえないことも評価できる

SL彗星の木星への衝突（想像）

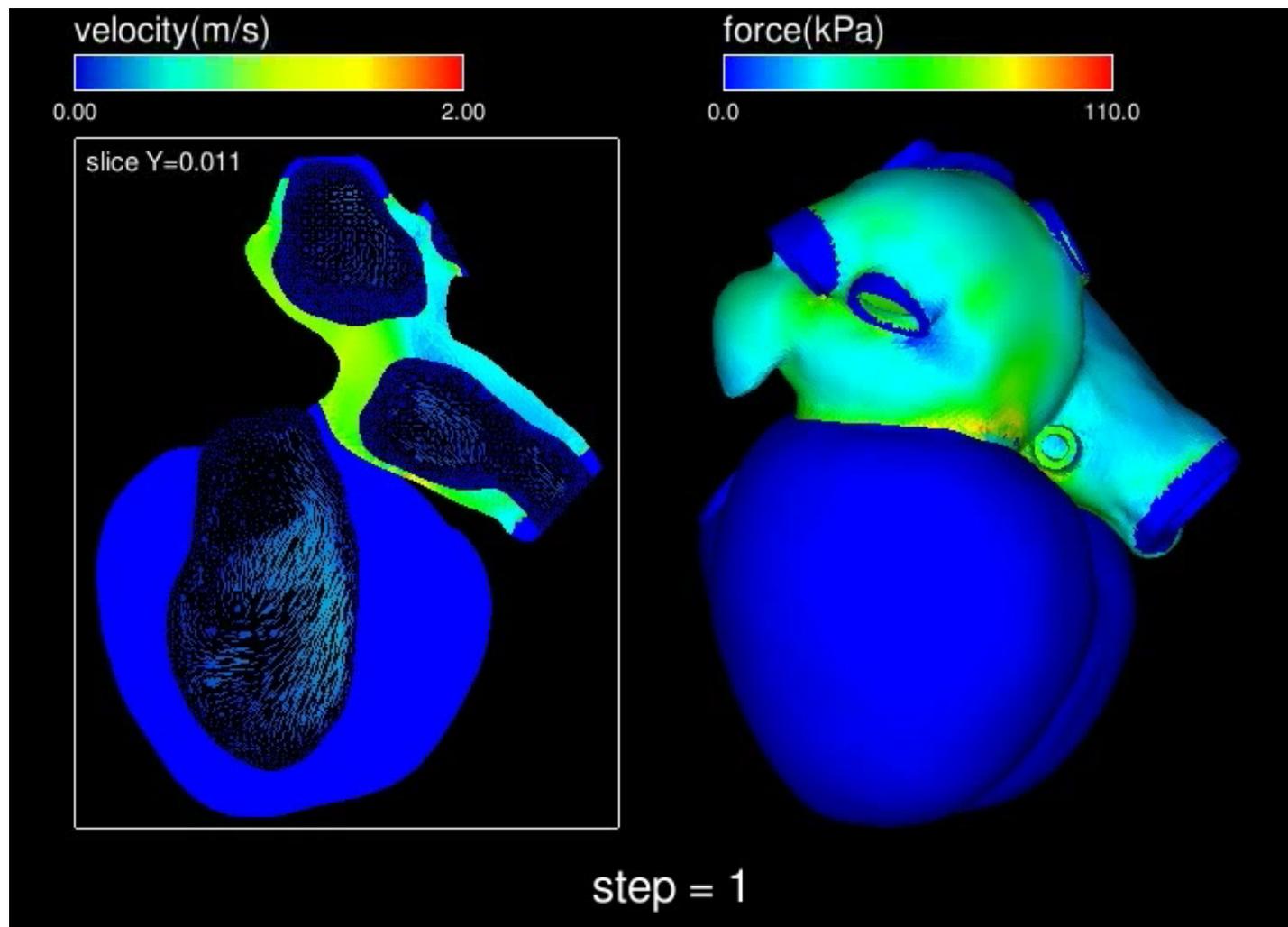


衝突実験の置き換え

日産自動車提供

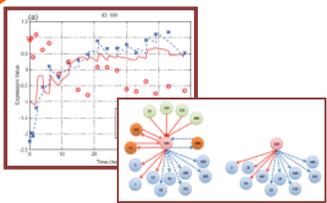
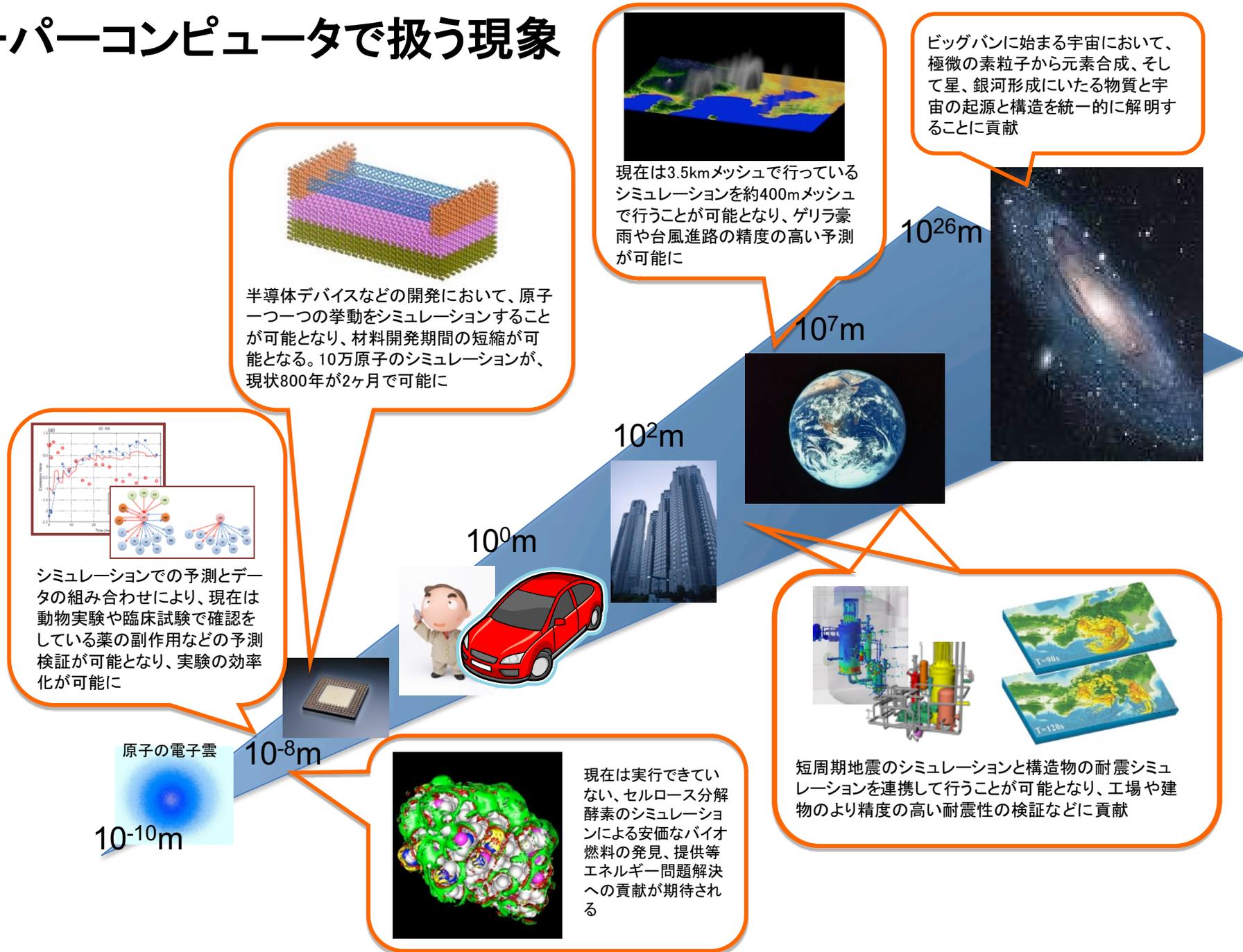


心臓の心拍と血流の様子をシミュレート



久田教授@東京大学

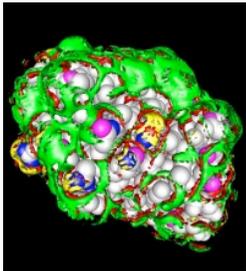
スーパーコンピュータで扱う現象



シミュレーションでの予測とデータの組み合わせにより、現在は動物実験や臨床試験で確認をしている薬の副作用などの予測検証が可能となり、実験の効率化が可能に

半導体デバイスなどの開発において、原子一つ一つの挙動をシミュレーションすることが可能となり、材料開発期間の短縮が可能となる。10万原子のシミュレーションが、現状800年が2ヶ月で可能に

原子の電子雲
 $10^{-10}m$



現在は実行できていない、セルロース分解酵素のシミュレーションによる安価なバイオ燃料の発見、提供等エネルギー問題解決への貢献が期待される



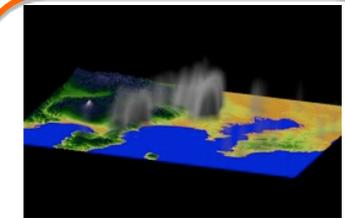
10^0m



10^2m



10^7m

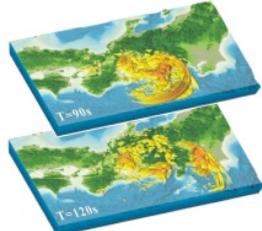
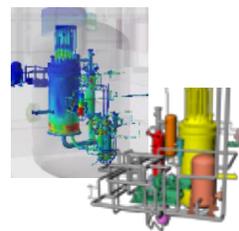


現在は3.5kmメッシュで行っているシミュレーションを約400mメッシュで行うことが可能となり、ゲリラ豪雨や台風進路の精度の高い予測が可能に



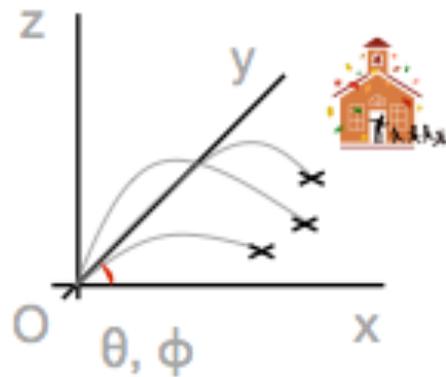
$10^{26}m$

ビッグバンに始まる宇宙において、極微の素粒子から元素合成、そして星、銀河形成にいたる物質と宇宙の起源と構造を統一的に解明することに貢献



短周期地震のシミュレーションと構造物の耐震シミュレーションを連携して行うことが可能となり、工場や建物のより精度の高い耐震性の検証などに貢献

弾道計算



支配方程式

$$\begin{cases} \ddot{y} = -g \\ \ddot{x} = 0 \end{cases}$$

初期条件

$$\begin{cases} t = y = 0, & y = v_0 \sin \theta \\ t = x = 0, & x = v_0 \cos \theta \end{cases}$$

厳密解

$$\begin{cases} y = v_0 t \sin \theta - \frac{1}{2} g t^2 \\ x = v_0 t \cos \theta \end{cases}$$

より精確なモデリング

弾道計算に影響する諸因子

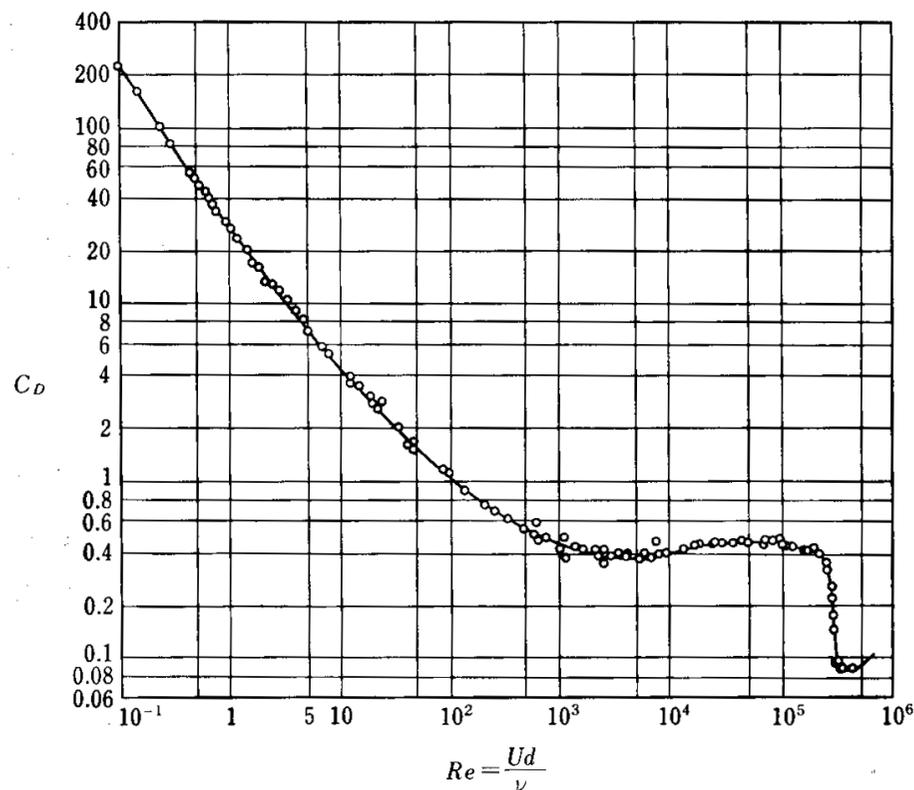
- 弾が球だったら，砲弾型だったら？

物体が受ける力

- 重力
- 空気抵抗
- 自然風の影響
- モーメント
- . . .

モデル方程式はより複雑に

- 常微分 → 偏微分



球の受ける抵抗

流体現象を観察する方法

風洞実験

大きな扇風機で風を起こし、実験対象の挙動を調べる。

流体の支配方程式

Navier-Stokes方程式

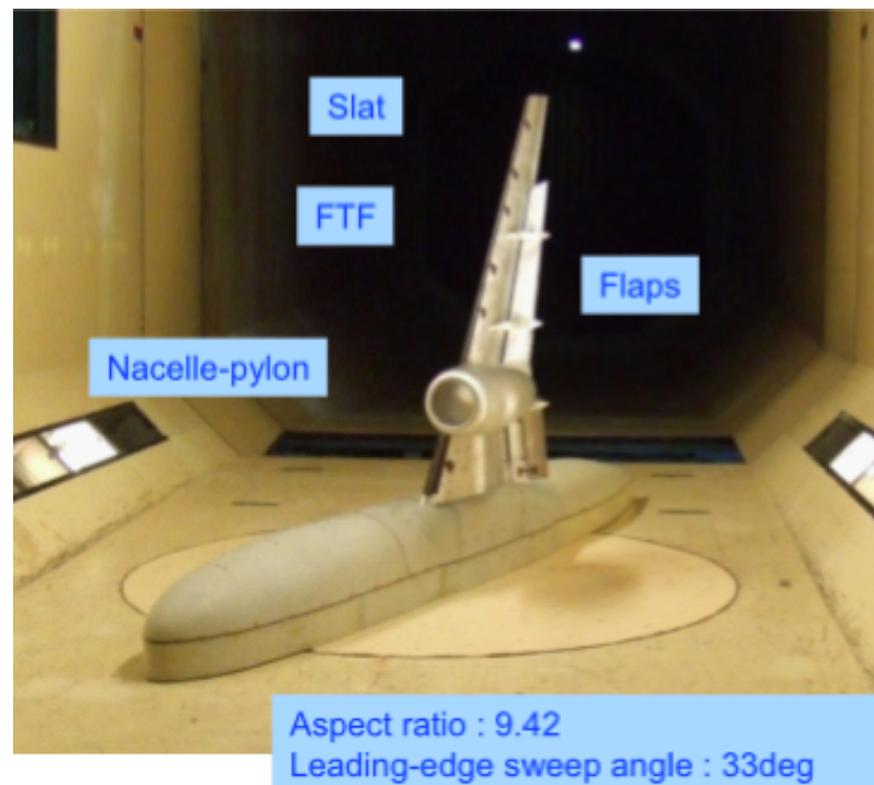
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j + \delta_{ij} p + \tau_{ij}) = f_i$$

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right]$$

理論

方程式が実験の代わり。

気体や熱・物質の移動などの現象は偏微分方程式を用いて記述。



流体の現象を表す方程式

Navier-Stokes方程式

$$\rho' \frac{\partial u_i'}{\partial t'} + \rho' \frac{\partial}{\partial x_j'} \left\{ (u_j' - u_j^{g'}) u_i' \right\} = - \frac{\partial P'}{\partial x_i'} + \frac{\partial}{\partial x_j'} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j'} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i'} \right) \right] - \rho' g \delta_{i3}$$

速度の
時間変化

速度の空間変化

圧力による流
れの発生

粘性による力

重力の
影響など

加速度

力

$$a = f/m$$

より正確な予測のために

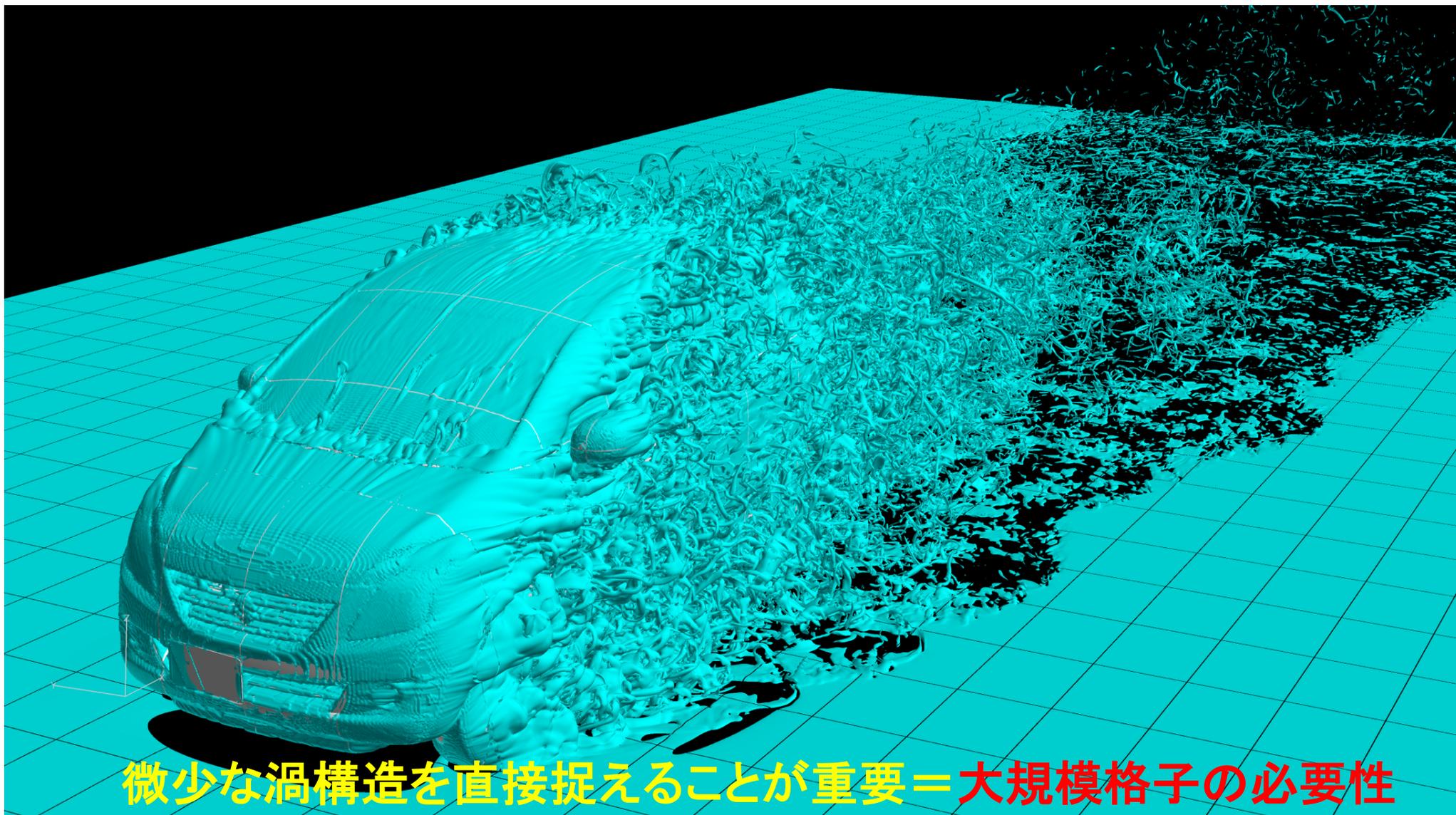
- 格子を細かくしていく
- 時間積分幅を小さく
- 精緻な現象モデル（方程式や経験式）を使う

>> 沢山の計算機が必要になる

>> 計算結果のファイルが沢山！

>> **ものすごいデータ量** >> **数字の塊**

高信頼性計算 > 大規模計算 > データ処理

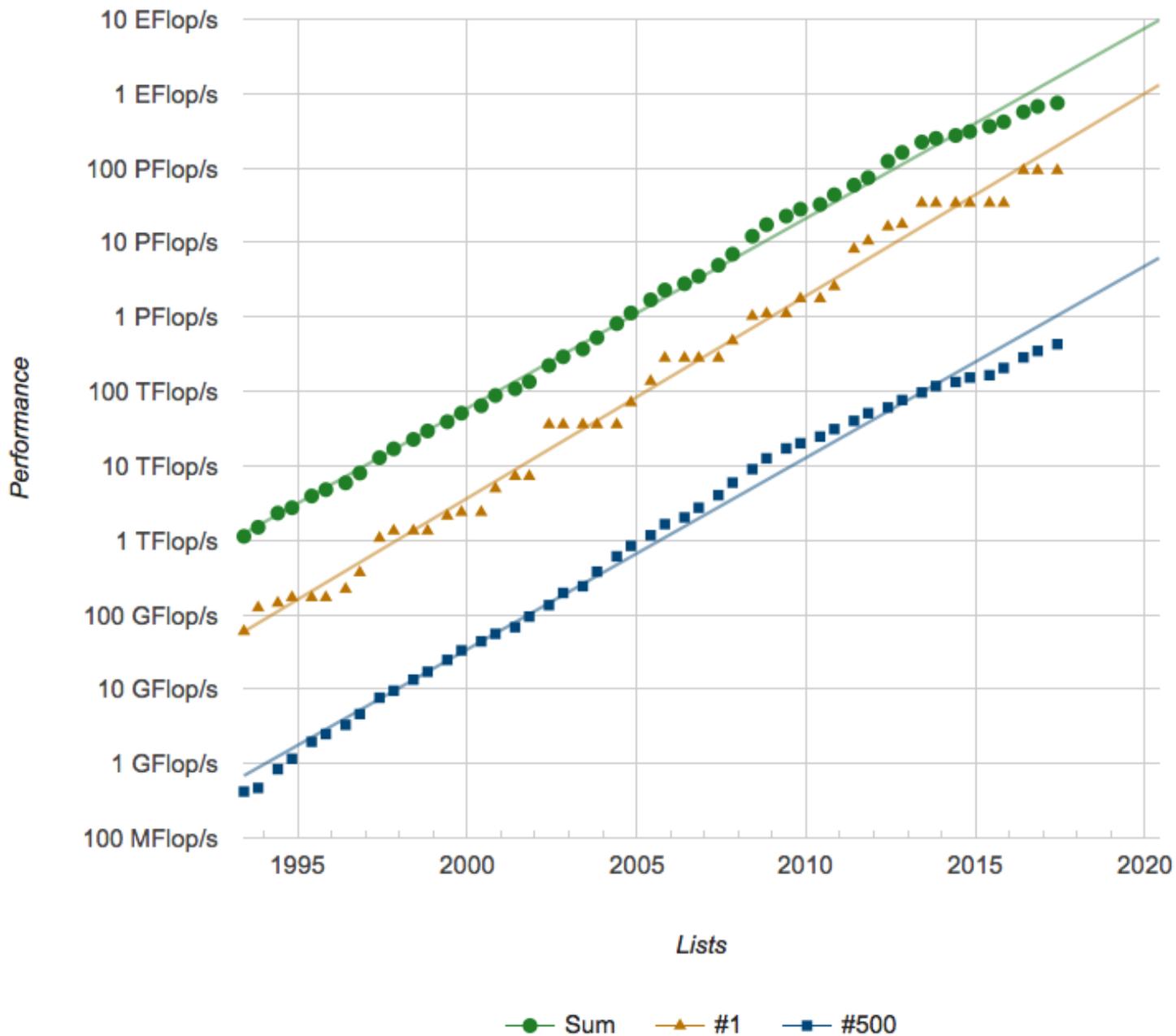


微少な渦構造を直接捉えることが重要 = 大規模格子の必要性

2. 過去から未来へ 計算機の性能

- 計算機の性能 <https://www.top500.org>
- 性能向上
 - アーキテクチャの改善
 - 集積度・動作周波数の向上
 - 同時実行や高密度な命令実行の工夫
 - 並列性の導入

Projected Performance Development



2017/7の
ランキング


Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway (/system/178764), NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi (/site/50623) China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P (/system/177999), NUDT National Super Computer Center in Guangzhou (/site/50365) China	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect, NVIDIA Tesla P100 (/system/177824), Cray Inc. Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) (/site/50422) Switzerland	361,760	19,590.0	25,326.3	2,272.0
4	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x (/system/177975), Cray Inc. DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory (/site/48553) United States	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
5	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom (/system/177556), IBM DOE/NNSA/LLNL (/site/49763) United States	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
6	Cori - Cray XC40, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Aries interconnect (/system/178924), Cray Inc. DOE/SC/LBNL/NERSC (/site/48429) United States	622,336	14,014.7	27,880.7	3,939
7	Oakforest-PACS - PRIMERGY CX1640 M1, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Intel Omni-Path (/system/178932), Fujitsu Joint Center for Advanced High Performance Computing (/site/50673) Japan	556,104	13,554.6	24,913.5	2,718.7
8	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect (/system/177232), Fujitsu RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) (/site/50313) Japan	705,024	10,510.0	11,280.4	12,659.9
9	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom (/system/177718), IBM DOE/SC/Argonne National Laboratory (/site/47347) United States	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
10	Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect (/system/178610), Cray Inc. DOE/NNSA/LANL/SNL (/site/50334) United States	301,056	8,100.9	11,078.9	4,232.6

低消費電力

並列計算機の性能を引き出すためには？

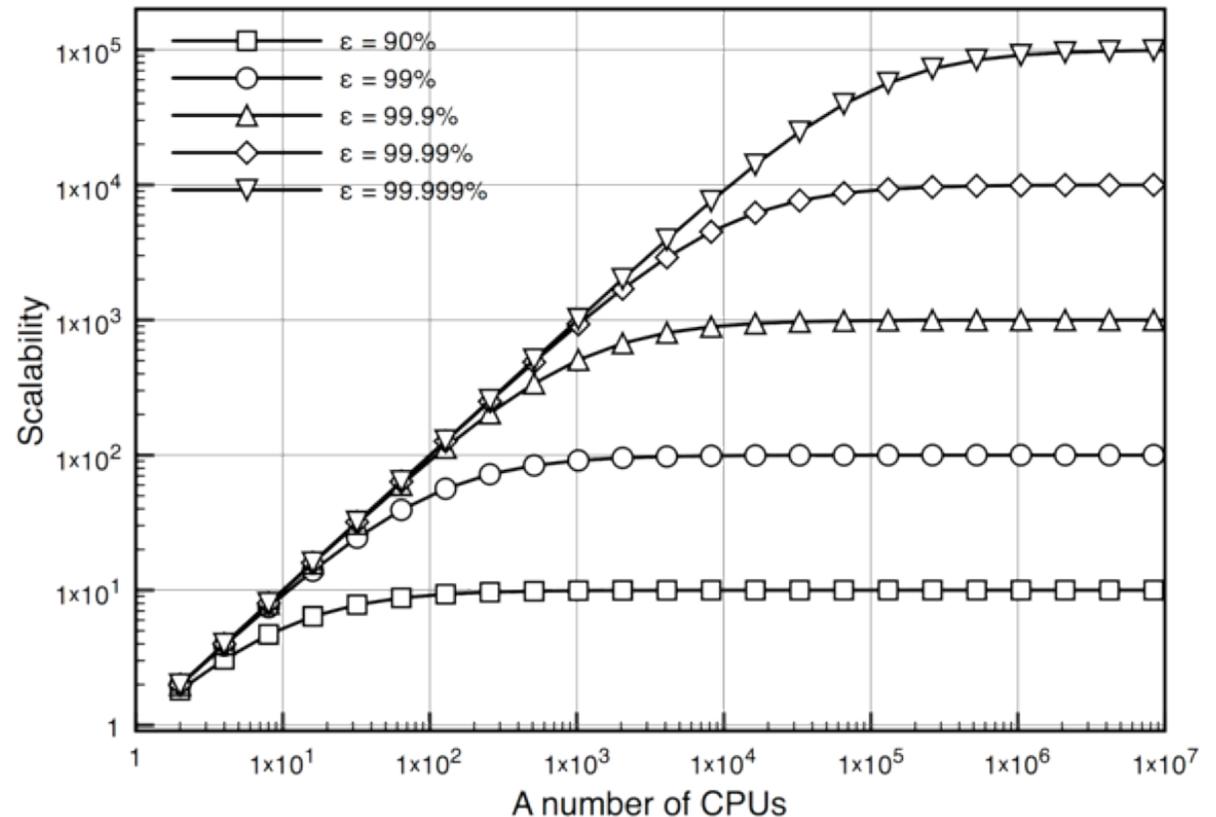
- 重要なポイント

- 単体性能の向上 演算器を休みなく動かす工夫

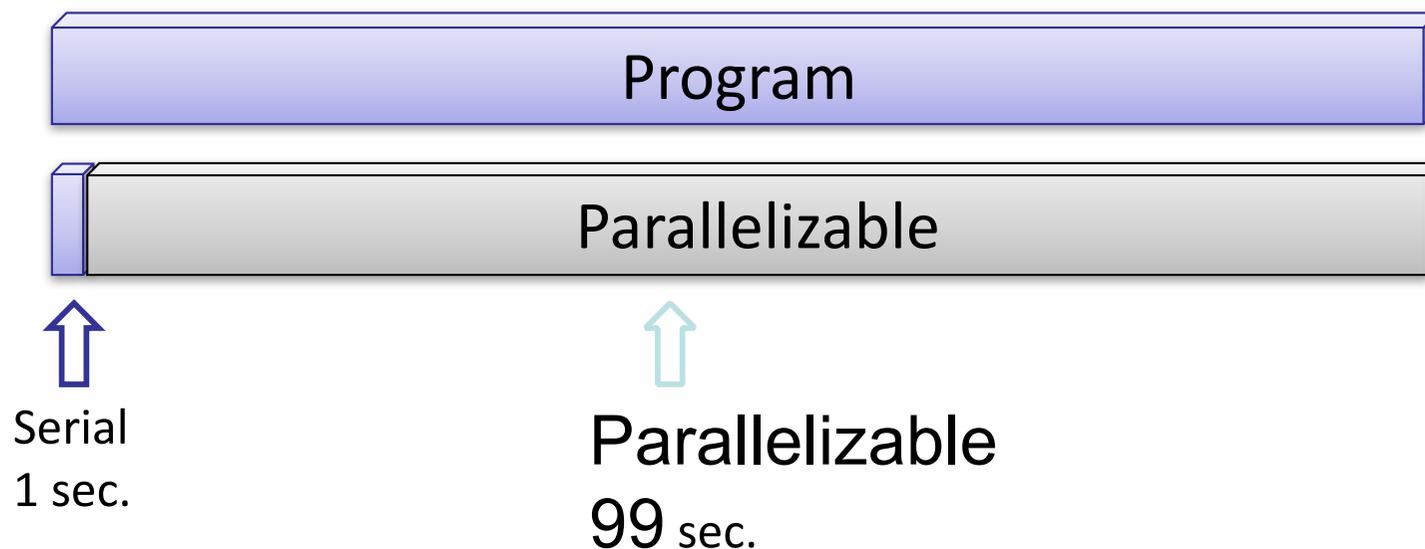
- 並列性能の向上

- アムダールの法則

- 並列性能の上限

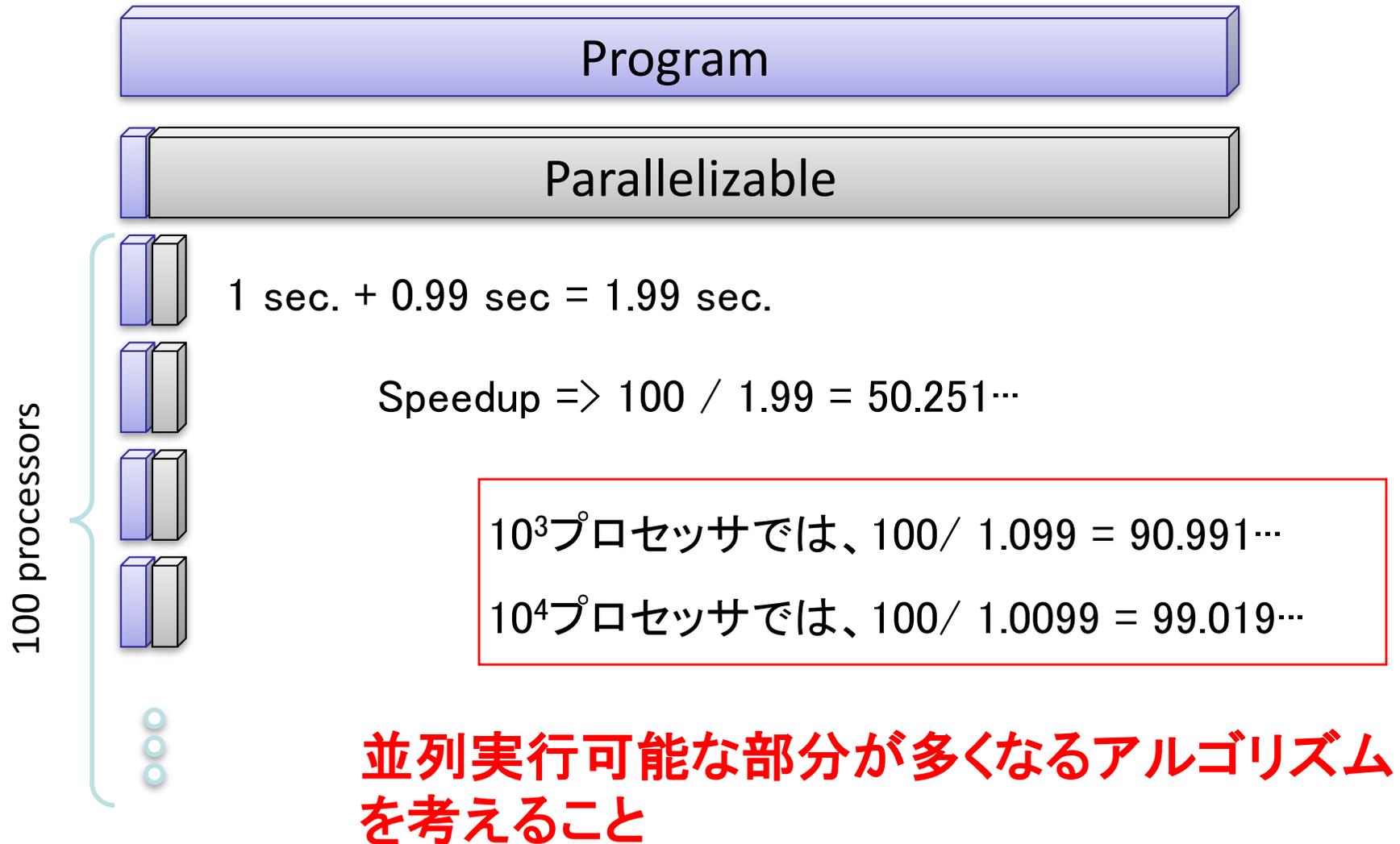


並列処理の効率



並列化できる部分は全体の99%あり、残りの1%は並列化できない。

並列処理の効率



計算機の性能向上による恩恵

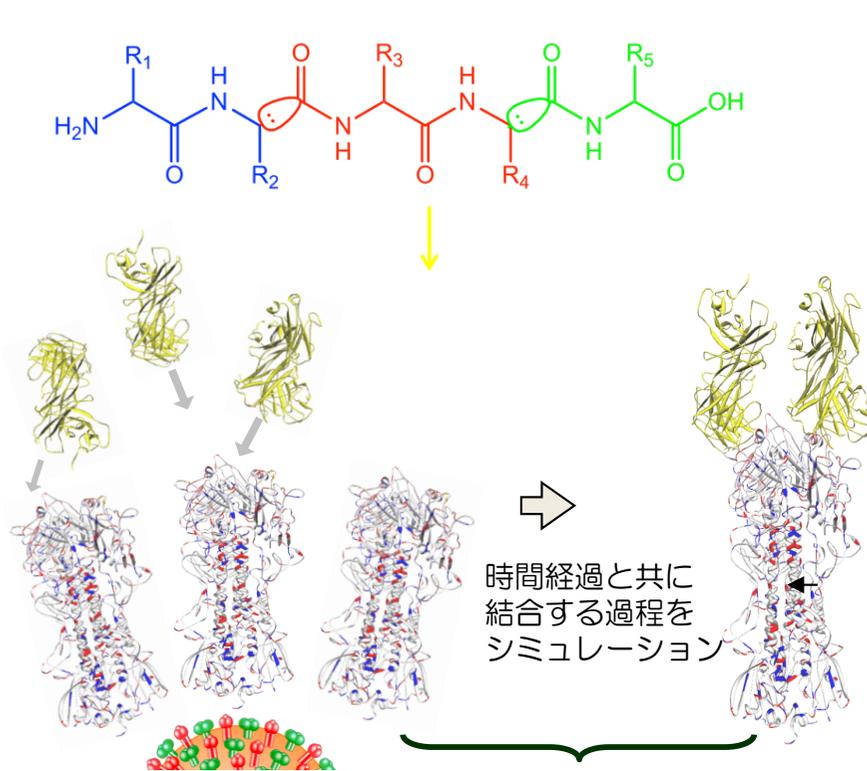
1. 短時間でシミュレーションが終了
 - 設計計算のターンアラウンドを短縮
2. 大規模な計算による高精度な結果が得られる
 - 現象解明に役立つ
3. 複雑な現象を扱うことができる
 - 従来できなかったことがシミュレートできるようになる
4. キャパシティ・コンピューティング
 - 多くのシミュレーションを実施し、得られた多数の計算結果を用いて有用な情報を引き出すアプローチ

3. シミュレーションで変わる

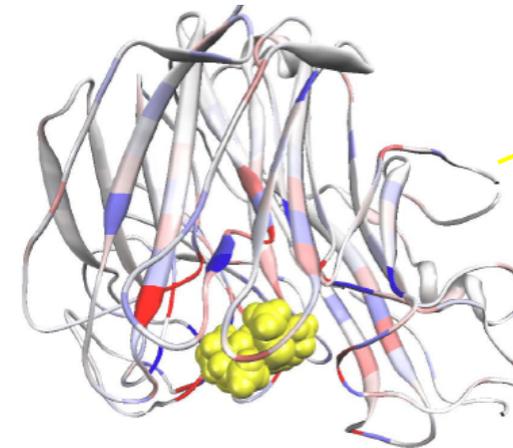
- 創薬
- 材料開発
- ものづくり
- 気象予測

インフルエンザ薬の効果的な設計

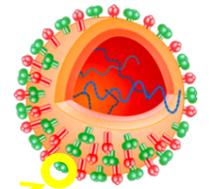
AICS, RIKEN



インフルエンザ表面タンパク質



タミフル



インフルエンザウイルス

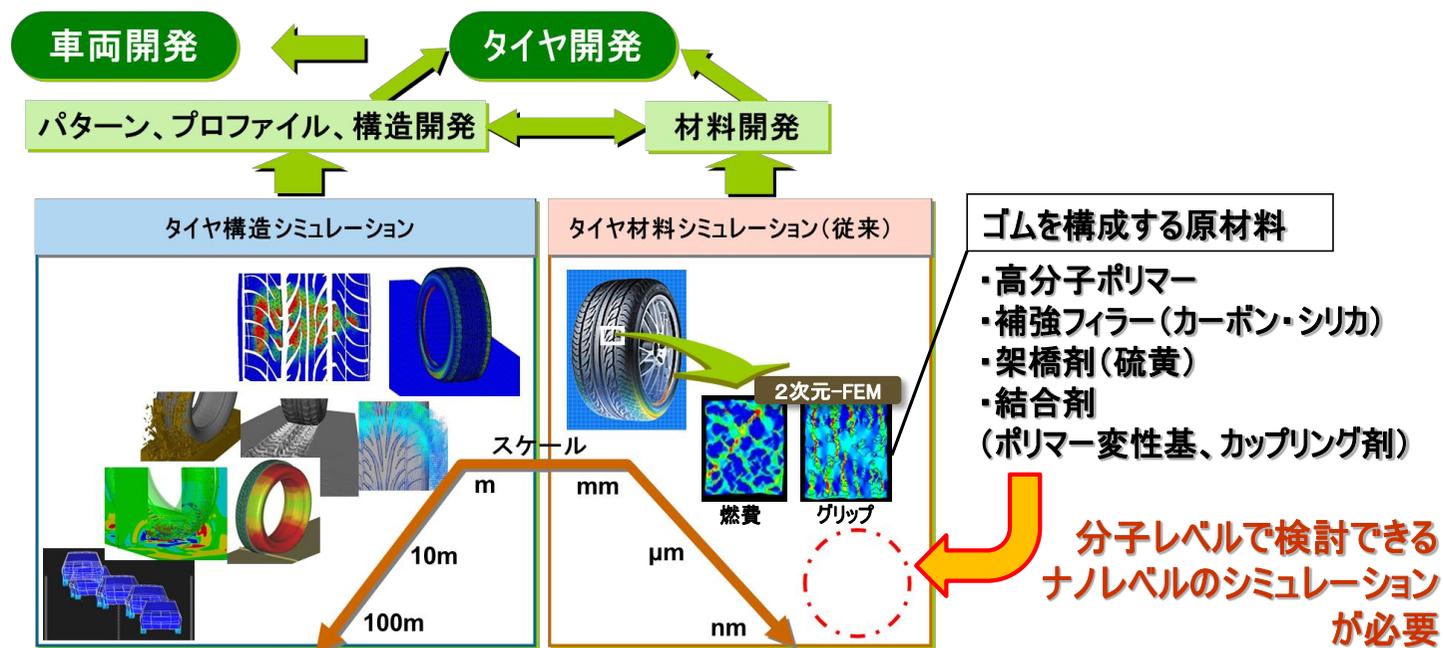
タミフルのインフルエンザウイルスへの結合を評価、より効果的な薬の設計に貢献

タンパク質やDNAなどの大規模分子を断片化し、系全体の物理量を量子力学的に計算

新材料開発 ものづくり

更なる低燃費性・高グリップ性・省資源を実現させるために

低燃費・高グリップ・省資源に対応できる高機能ゴム材料開発が必要
 →ゴム内部のナノの領域を可視化する材料シミュレーションの開発

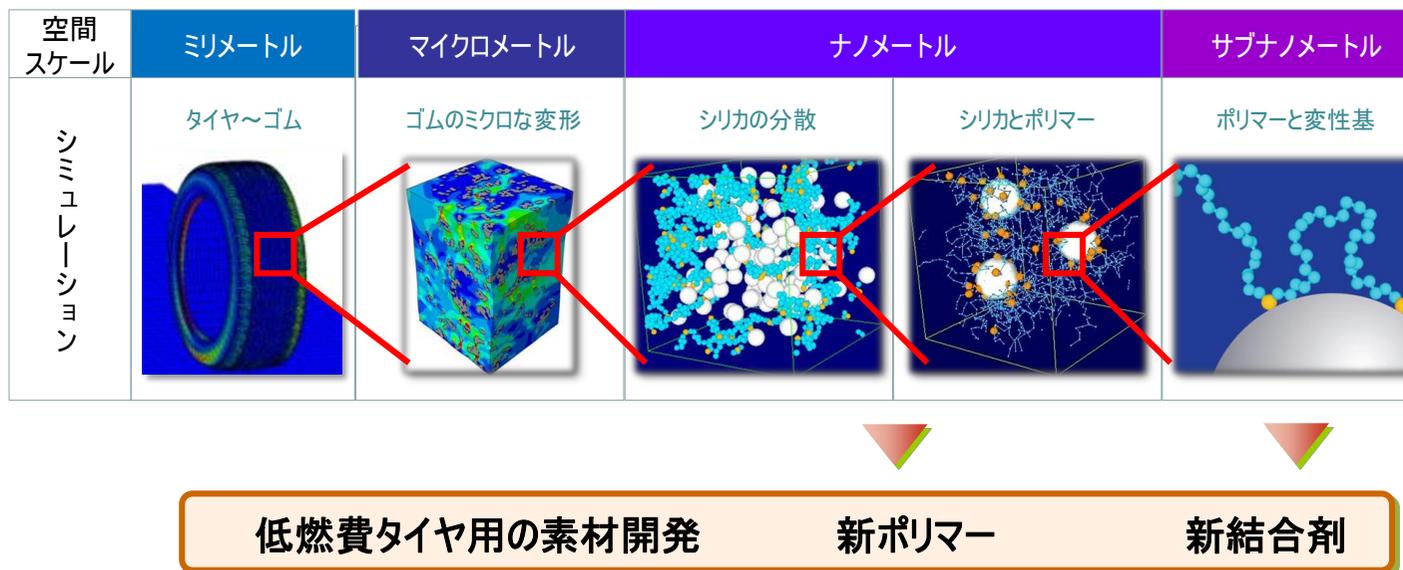


マルチスケールシミュレーション

分子動力学シミュレーションの活用



素材の詳細な情報が扱える分子動力学(MD)法を利用する



気象予測

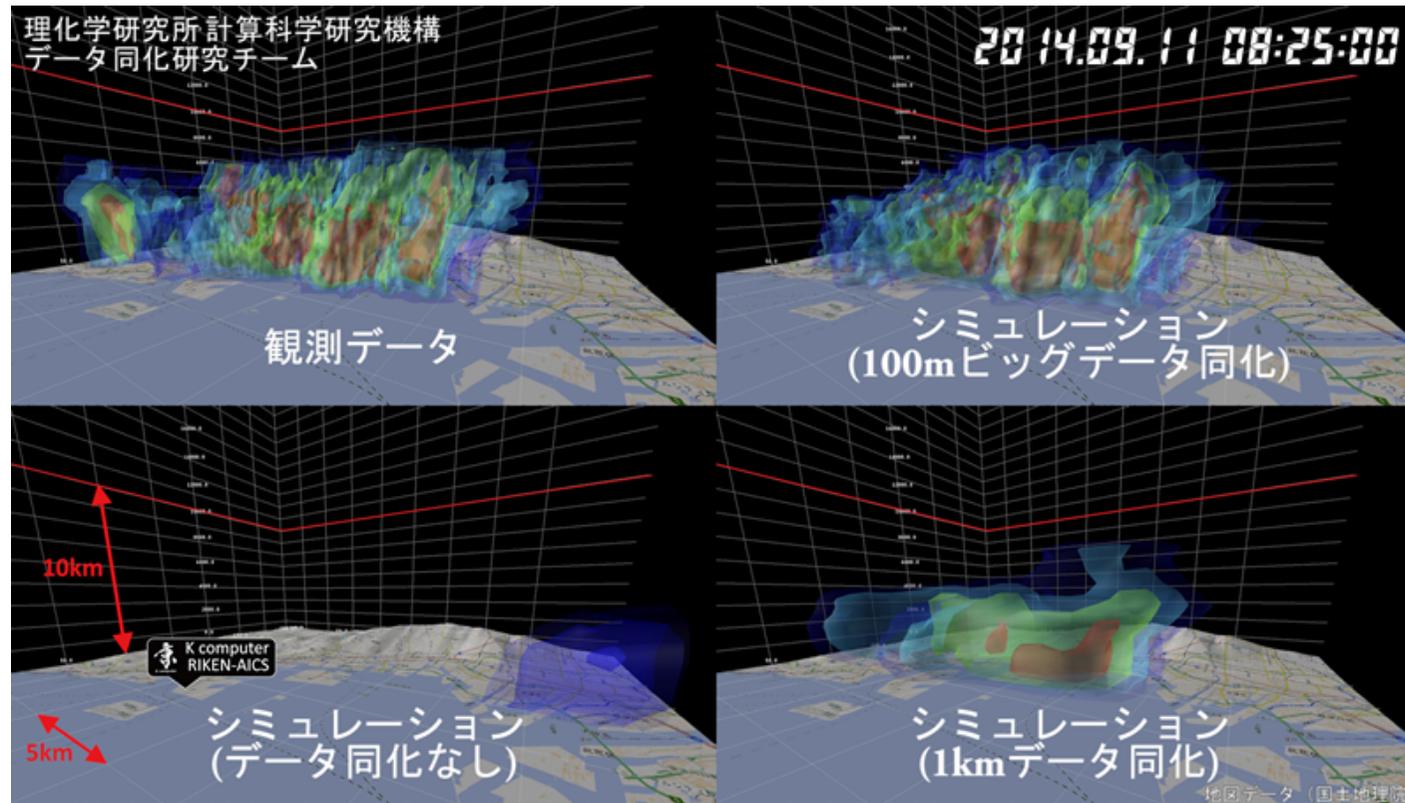


図3 2014年9月11日午前8時25分の神戸市付近における雨雲の分布

解像度100mのビッグデータ同化では、積乱雲内部の微細構造や降水分布が観測データをよく再現している。

解像度1kmのデータ同化では、観測データを再現し切れていない。赤は強い雨、青は弱い雨を表している。

左上：フェーズドアレイ気象レーダの観測データ

左下：データ同化をしないシミュレーション結果

右上：解像度100m、30秒ごとのビッグデータ同化によるシミュレーション結果

右下：解像度1km、30秒ごとのデータ同化によるシミュレーション結果

4. 現実世界とのインタラクション

□ 従来

- シミュレーション結果 ⇒ 間接的に現実世界へフィードバック
- Ex) 車の設計
 - 構造、流体、熱、音振動などのシミュレーション結果は、エンジニアが解釈して設計要件として採り入れる。

□ 今後

- シミュレーション結果を直接現実世界へフィードバック
- 現実世界とサイバー世界の融合 (Cyber-Physical)
- リアルタイム性が要求される

デジタルツインモデル

- 現実世界の状況をサイバースペース上にリアルタイムに再現

Industrial4.0では、工場の管理・制御を対象としている

- GE

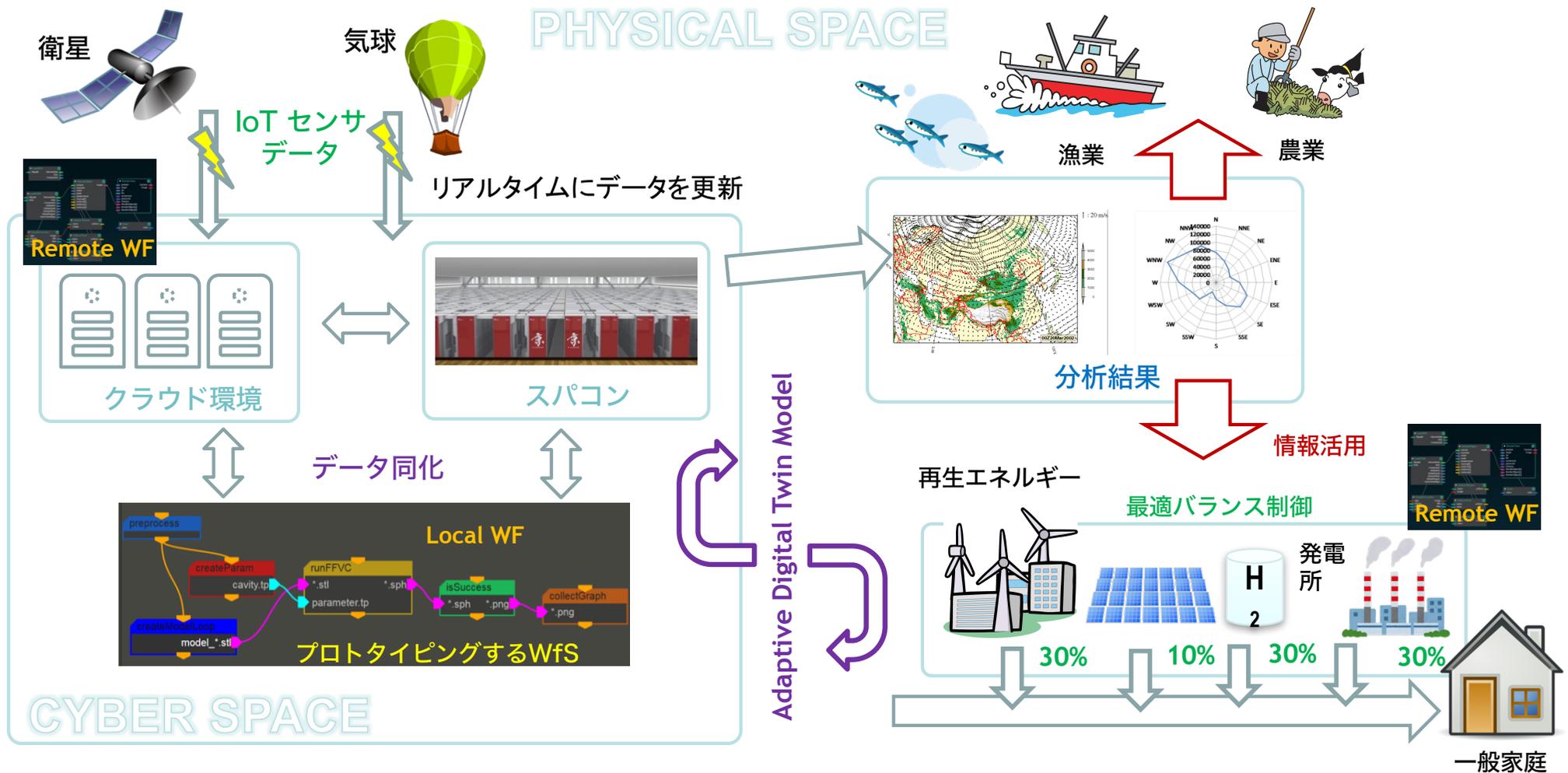
- 飛行機の運航中の飛行・エンジンのデータをIoTセンサで収集、デジタルツインを構築し、オーバーホール時期などを推定

実際の工業製品の使用状況を常に監視し原因を推定することにより、故障予知や機能改善に役立つ

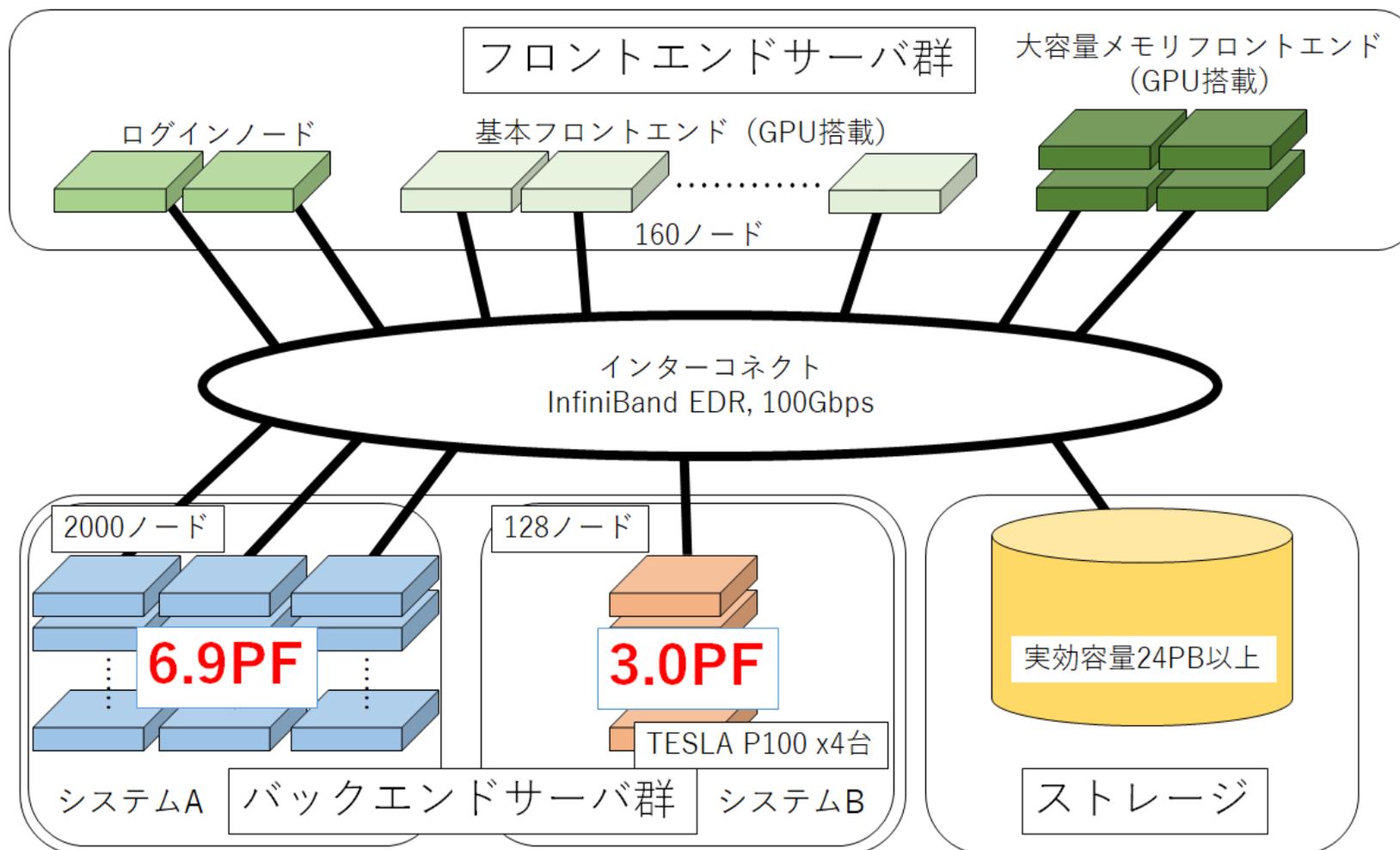
動向

- 経産省「CPSによるデータ駆動型社会の実現」
- JST「未来社会創造事業」
- 第5次科学技術基本計画で打ち出した Society5.0
 - インターネット、人工知能（A I）、ロボット技術などを高度に組み合わせた社会・経済変革の考え方
- Industry 4.0 欧州の動き

エネルギーマネジメント



研究を支えるインフラ 九大の新スパコン



- 総理論演算性能は「京」とほぼ同等
- 画期的なフロントエンドサーバー群とクラウド連携機能
- データサイエンス支援を意図した構成

おわりに

1. シミュレーション？
 2. 過去から未来へ
 3. シミュレーションが変わる
 4. 現実世界とのインタラクション
- 今後、現実世界とサイバースペースの結びつきが強くなる
 - セキュリティがより一層重要になる
 - シミュレーションインフラは、社会問題を解決する手段として進化