

特集号「ペタスケール・シミュレーションの信頼性」

発刊にあたって

中島 研吾

東京大学情報基盤センター

1. はじめに

東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング部門では、隔月で広報誌「スーパーコンピューティングニュース」を発行しているが、この他にも2006年度から年一回の頻度で特集号を発行しており、いずれも好評を博している。

- 2006年度：スーパーコンピューターの拓く世界 ―異分野の研究に触れる―
- 2007年度：コーディングしてみよう！ ―スパコンプログラミングを極める I―

3回目となる2008年度は「ペタスケール・シミュレーションの信頼性」と題して各分野の最先端の研究を実施されている皆様に、様々な視点から大規模シミュレーションの「信頼性」についてご執筆を頂くことを企画した。2006年度は、大規模シミュレーションとそれによって開拓される新しい科学、2007年度はそれを支える基盤技術に着目した。2008年度は、そのような基盤技術のプログラムへの適用方法も含めて、支配方程式・モデリングと現象との整合性、数値的な安定性など様々な「信頼性」に着目した。

2. 背景, 方針

計算機シミュレーションを駆使した「計算科学」が、「理論」、「実験」に続く「第三の科学」と呼ばれるようになって久しい。長い間、計算科学は理論や実験の結果の検証や補間が主たる役割であったが、近年、計算機のハードウェア、ソフトウェア技術の飛躍的な発展と理論面での進展、実験・観測技術の向上、様々なデータの蓄積も相俟って、真の科学としての一步を歩み出そうとしている。

特に日本において、2002年より稼動を開始した「地球シミュレータ」（ピーク性能40TFLOPS）が果たした役割は大きい。地球温暖化、台風の進路予測、地震波動伝播のシミュレーション等、高解像度の大規模モデルを使用して飛躍的に高精度なシミュレーションが可能となった他、様々な現象が複合した大規模マルチフィジックス連成モデルによって複雑な現象のメカニズムの解明も可能となり、「新しい科学」の創成に大きく貢献している。

2012年に完成予定の理化学研究所「次世代スーパーコンピューター」（ピーク性能10PFLOPS）は、バイオテクノロジーを中心とした更に広範囲の分野での成果が期待されてい

る。当情報基盤センターでも 2008 年 6 月より「T2K オープンスパコン」(ピーク性能 140 TFLOPS) が稼動を開始しており、科学技術分野のみならず、大規模テキスト処理、経済物理シミュレーションなど様々な分野での活用が始まっている。

サンディア国立研究所の「ASCI Red」が初めてピーク性能 1 TFLOPS を超えたのは 1996 年末のことであった。それから 10 年あまり、2008 年「Road Runner (ロスアラモス国立研究所)」によって人類はついに「PFLOPS (ペタフロップス)」時代を迎えたが、解決すべき問題はまだまだ多い。これまで、たとえば大規模データの処理、可視化あるいは数十万単位のプロセッサコア間の通信などの問題については様々なところで議論が進められており、研究開発において着実な進歩が見られる。本特集号では、「ペタスケール・シミュレーションの信頼性」と題して、各分野の最先端の研究者の方々に、様々な視点から大規模シミュレーションの「信頼性」についてご執筆を頂いた。

執筆者の方々には以下のような項目を念頭においてご執筆いただくようお願いした：

- 対象となる問題の支配方程式、モデリング手法、適用するアルゴリズム、プログラミング手法、並列化までの一連の流れが分野外の読者にもある程度理解できるよう、特に以下の点に着目して簡単に解説する。
 - 「密行列固有値計算」, 「疎行列ベクトル積」等, 利用する数値計算プロセス
 - 並列化, 大規模化の戦略, 手法
 - 利用しているライブラリ, 外部プログラム等
 - 複数のアプローチが考えられる場合には, 各手法の長所・短所, 現在の手法を使用している理由, メリット
 - 大規模シミュレーションにおける問題点, その解決法, あるいは将来更に大規模になることで生じる可能性のある問題点とその解決法。
- シミュレーションの精度, 信頼性を保証するための様々なアプローチについて解説する。
 - 計算結果の解釈の方法
 - プログラムの正当性, 精度を検証するための方法
 - ・ 適正なメッシュ数, 粒子数などの決定方法, 基準となる考え方
 - ・ 伝統的に実施されてきた方法, 現在実施されている方法
 - ・ 今後実施される可能性のある方法
 - ・ 実験・観測が困難な現象・条件における検証方法
 - ・ 実験・観測結果の検証や補間ではない真の「予測科学」への展望
 - ・ 問題点, モデリングの限界
 - 安定性, 精度, 効率のトレードオフ
 - ・ 数値的な不安定性と対応
 - いわゆる「マルチフィジックス」の導入

- ・ 有効性
 - ・ 現状, 問題点
 - ・ 将来展望
- ハードウェア, コンパイラ, ライブラリ等, 基盤技術分野の研究者, 技術者に求めることについても提言を行う。
- T2K オープンスパコン, 情報基盤センターへの期待についてもコメントする。

3. 概要

本特集号では, 以下の 5 編の記事から構成されている (掲載順) :

- ① 気象・気候変動予測シームレスシミュレーション (高橋桂子 (海洋研究開発機構))
- ② 地震波伝播と強震動の大規模並列 FDM シミュレーション (古村孝志 (東京大学情報学環))
- ③ 密度汎関数法によるタンパク質全電子シミュレーション (佐藤文俊 (東京大学生産技術研究所))
- ④ 有限要素法に基づく第一原理分子動力学法について (土田英二 (産業技術総合研究所))
- ⑤ 粒子法シミュレーションの大規模化と高速化 (越塚誠一 (東京大学工学系研究科))

①, ②, は地球科学分野における事例であり, 「地球シミュレータ」を駆使した大規模計算の他, ②では「T2K オープンスパコン (東大)」との比較についても触れられている。共に, 「格子系」のモデルを使用し, 「計算⇒観測結果との比較⇒モデル改良」というサイクルであり, ①では, 大気海洋結合モデル, 局所的に詳細なモデルを扱うことによって計算結果の観測結果に対する精度が大幅に改善することが示されている。②の扱う範囲は地下空間であり, 大気・海洋と比較して不明な点が多い。異常震域のシミュレーションのように, 地下構造の不均質性を予測しながら計算モデルを構築する必要がある場合もある。

③, ④は共に分子の電子状態を求めるための第一原理シミュレーションであるが, ③では密度汎関数法, ④では「格子系」のモデルの一つである有限要素法が使用されており, それぞれ, 支配方程式, モデル化, 数値アルゴリズムについて詳細に解説されている。有限要素法は連続体力学向けのシミュレーション向けの手法として広く知られているが, 適応格子, 多重格子法など, 連続体力学向けの有限要素法で一般的に使用されている手法がそのまま活用されているのは非常に興味深い。

⑤は, 工学系のシミュレーションであるが, 特に非線形現象の取り扱いに優れている「粒子法」について解説いただいた。差分法, 有限要素法などの「格子法」との比較, 基本的アルゴリズム, 様々な計算事例の他, 物理ベースコンピュータグラフィックスへの適用の他, 大規模化・高速化については, 昨今注目されている GPU (Graphics Processing Unit) に

も触れられている。最後に、シミュレーション結果の信頼性を定量化する方法である Verification and Validation (V&V) について、実際アメリカ (AIAA, ASME) で策定されたガイドラインが簡単に紹介されている。

4. 結言

本特集号は、大規模シミュレーションに取り組んで行こうとする様々な分野の研究者、技術者、学生など幅広い層の読者に役立つものと期待される。シミュレーションプログラムを自ら開発して行こうという人にとってはもちろんであるが、既存プログラムや商用コードを利用してシミュレーションを実施する研究者、技術者にとっても大いに役立つ一冊となることを祈念する。

最後に、多忙な中、本特集号の記事をご執筆いただいた 5 名の著者の皆様（高橋桂子，古村孝志，佐藤文俊，土田英二，越塚誠一（敬称略，掲載順））には篤く御礼申し上げます。