

[JHPCN シンポジウム]

JHPCN 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点

第 13 回シンポジウム報告

滝沢 寛之

東北大学サイバーサイエンスセンター スーパーコンピューティング研究部

今年度の学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)シンポジウムは、新型コロナウイルス(COVID-19)感染拡大防止のため、第12回に引き続き第13回もオンライン開催となりました。7月8日から9日にかけて開催された今年度のシンポジウムでは、実施方法にいくつか変更がなされました。まず、ミュンヘン工科大学のDaniel Rückert 博士による基調講演が行われました。また、新しく運用開始したシステムを紹介するセッションを設け、東北大学のスーパーコンピュータAOBAを含む3システムが紹介されました。さらには、各口頭発表の時間を今までより5分長い20分(発表15分、質疑応答5分)とし、並列セッションとしました。

今回のシンポジウムでは、昨年度採択された52課題のオンライン講演がありました。また、今年度採択された課題49件のオンラインポスター発表に加えて、各構成拠点から推薦された萌芽課題11件のポスター発表、および3件の一般ポスター発表がありました。前回と同様に、Slackを用いた質疑応答の場も提供されました。

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究は、東北大学、北海道大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ8つの共同利用の施設を構成拠点とする「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」が、超大規模数値計算系応用分野、超大規模データ処理系応用分野、超大容量ネットワーク技術分野、およびこれらの技術分野を統合した大規模情報システム関連研究分野、更には分野間に亘る複合分野の研究者らと取り組む学際的な共同利用・共同研究です。

平成22年度から令和3年度の10年間において約450件を超える課題が学際大規模情報基盤共同利用・共同研究として採択されており、そのうち当センターとの共同研究課題は約75件となっております。今年度は、5件が当センターとの共同研究課題として採択されております。本年度採択された課題に関しましては、本報告末尾にポスターを再掲しております。また、今年度採択分も含め、これまでの採択課題に関する情報は以下のURLで公開されております。是非、高性能計算を用いた多岐にわたる共同研究活動をご覧頂ければと存じます。

(JHPCN URL: <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/sympo/13th>).

来年度の学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の研究公募は11月頃に公開予定です。ご興味のあるかたは奮ってご応募ください。また、応募に際しまして当センターの計算機科学を専門とする教員との共同研究の可能性を検討したい、手続き方法が分からない等、本応募に関して不明な点があります場合は、お気軽に当センターまでお問い合わせください。

【JHPCNに関する問い合わせ窓口】 joint_research@cc.tohoku.ac.jp

【令和3年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠における当センターとの共同研究課題】

以下3件の課題は、次ページ以降のポスターをご覧ください。

- ・jh210001-NAH 「日本全土の洪水氾濫被害の将来展望」

研究代表者 風間聡（東北大学）

- ・jh210041-NAH 「熱中症リスク評価シミュレータの開発と応用」

研究代表者 平田晃正（名古屋工業大学）

- ・jh210042-NAH 「GW space-time コードの大規模な有機-金属界面への適用に向けた高効率化」

研究代表者 柳澤将（琉球大学理学部）

以下2件の課題は URL でご参照ください。

- ・jh210009-NAH 「HPC と高速通信技術の融合による大規模データの拠点間転送技術開発と実データを用いたシステム実証試験

<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh210009-MDH>

研究代表者 村田健史（情報通信研究機構・京都大学）

- ・jh210052-NAH 「プロペラ駆動小型無人機的设计検討技法の確立を目指した空力・推進・構造の実機丸ごと統合シミュレーション」

<https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/abstract/jh210052-NAH>

研究代表者 金崎雅博（東京都立大）

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募型共同研究 令和3年度採択課題

jh210001-NAH

風間 聡 (東北大学)

日本全土の洪水氾濫被害の将来展望

Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

13th Symposium

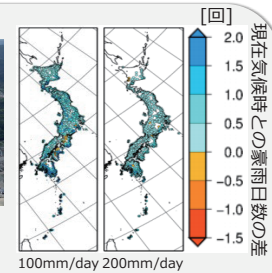


背景・目的

近年、日本各地で洪水被害が多発しており、
気候変動の影響で豪雨の増加が見込まれる
社会の変化によるリスク上昇地域はどこか
⇒ 危険性の発信・効率的な治水投資
複数のシナリオの検討が必須



西日本豪雨 (2018年)



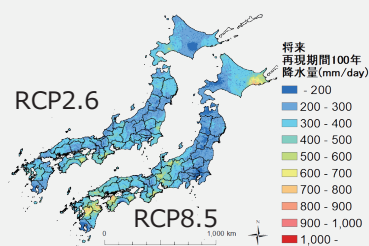
豪雨日数の将来変化 (気象庁)

研究目的：日本全国でのシナリオ（気候や社会環境など）に応じた膨大な組み合わせ洪水氾濫被害推定的高速化・不確実性

洪水氾濫解析

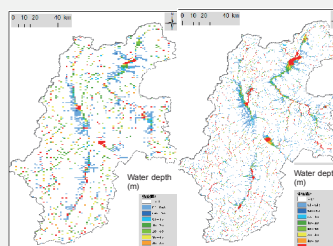
(Yamamotoら, Climatic Change, 165:60)

将来の降水量：全球気候モデル



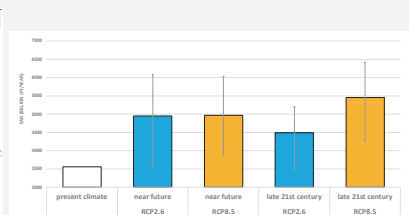
日本各域で再現期間100年洪水を生じさせる日降水量の気候シナリオRCPの違い (2050年時)

高解像度洪水氾濫解析



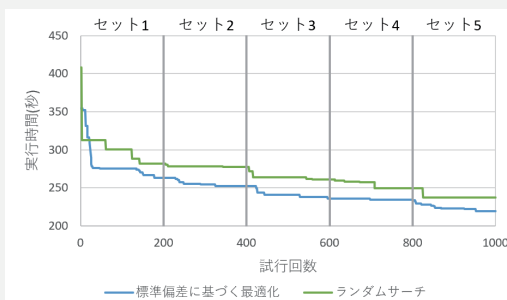
1km解像度 250m解像度
100年確率降雨時の浸水深分布

将来目標期間の被害比較



日本各域での**現在**、**近未来**（2050年頃）、**遠未来**（2100年頃）の洪水被害額の違い

並列化の負荷分散



各プロセスの実行時間の標準偏差を目的関数とし、これを最小化したベイズ最適化とランダムサーチの比較
(石塚ら, 情報処理学会論文誌, 59)

多数の組み合わせ計算

複数計算の効率化・高速化

組み合わせは増える：他の要因

気候シナリオ
RCP2.6
RCP4.5
RCP8.5

将来目標
現在
2050年頃
2100年頃

人口予測
高位
中位
低位

リスク計算：再現期間 5, 10, 30, 50, 100, 200年

162通り



並列化の負荷をベイズ最適化を利用し、高速化をはかる

JHPCN

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第13回シンポジウム

Japan High Performance Computing and Networking plus Large-scale Data Analyzing and Information Systems

2021年7月8日, 9日

WEB CONFERENCE

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究 令和3年度採択課題

jh210041-NAH

平田 晃正(名古屋工業大学)

熱中症リスク評価シミュレータの開発と応用

江川 隆輔、滝沢 寛之(東北大学サイバーサイエンスセンター) 柏 達也、田口 健治(北見工業大学)
堀江 祐圭(日本気象協会) 小寺 紗千子、西村 卓、上松 涼太、三浦 郁亮(名古屋工業大学)

13th Symposium

Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

JHPCN

研究背景と目的

- 熱中症による死者数は増加傾向。死亡例も報告。
- 本研究グループでは日本の夏場などの環境において、熱中症の主な要因である体温上昇、発汗量の解析を実施。
- 解析結果から熱中症のリスク評価を行い、熱中症予防の普及啓発活動に寄与することが目的。

解析手法

- 計算機上にて、様々な環境を模擬した仮想空間に人体モデルを配置、図1に示したフローチャートに従って体温変化や発汗量を計算。
- 温度上昇解析は生体熱輸送方程式を用いる。組織間の熱伝導や体表面から外気への熱伝達に加え、体温上昇に伴う発汗、血流量変化による熱輸送などの熱調整機能(システムバイオロジー)、太陽光吸収による熱発生を考慮し、時間領域有限差分法で逐次計算。

これまでの主な成果

- 2015年からの採択課題により高速化・並列化による準リアルタイム熱中症リスク評価システムを確立。ロードインバランスの解消等により、従来の2倍の解像度を持つ1mmモデルにおいて、3時間の暑熱ばく露における体温変化や発汗量を5.8分で試算可能。
- 温熱調整モデルの高精度化により、年代や出生地の違いによる温度変化を推定可能とした(図2参照)
- 解析結果のデータベース化することで、気象と個人の年代、活動状況を考慮した熱中症リスク評価Webシステムを構築

今年度の研究計画

- 高齢者における太陽光・暑熱の複合ばく露時の体温変化2種類の高齢者モデル(65歳モデル、75歳モデル)を用いて夏場の長期間解析を行い、体温変化、発汗量変化を推定を行う。解析期間は2018-2020年の6-9月とし、実際の気温、湿度、日射量を考慮し、様々な条件における深部温度、発汗量の変化を取得を行っている。
- 熱中症搬送者数をはじめとする統計データと解析結果との連携
高齢者の熱中症に着目し、実際に搬送された患者の搬送時体温と、上記長期間解析により得られた推定深部体温とを比較することで、高齢者の発症が多い、非労作性熱中症の発症メカニズムを検討している。

解析結果・グラフ

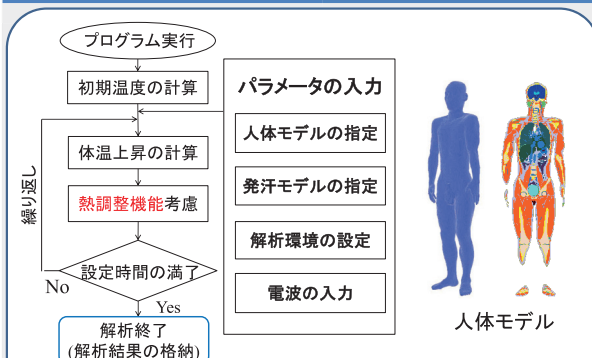


図1. 解析のフローチャート

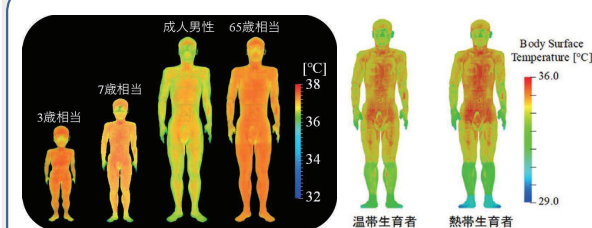


図2. 温熱調整モデルの改良による年代別・出生地別温度分布の再現結果

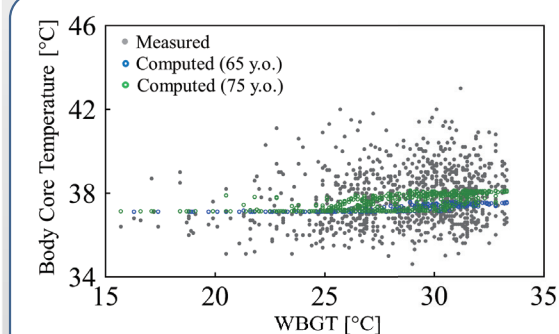


図3. 熱中症搬送者(屋内・高齢者)の搬送時体温と長期間解析による同日時での推定深部体温の比較

- 熱中症搬送者の搬送時の環境での推定体温と実際の測定体温の比較(図3参照)。推定体温にくらべ測定体温が高く、高齢の熱中症搬送者は、発汗量などの体温調整機能が十分でないことが予想される。

JHPCN

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第13回シンポジウム

Japan High Performance Computing and Networking plus Large-scale Data Analyzing and Information Systems

2021年7月9日

ONLINE

jh210042-NAH

13th Symposium JHPCN

柳澤 将 (琉球大学・代表)、滝沢 寛之 (東北大学・副代表)

研究課題名

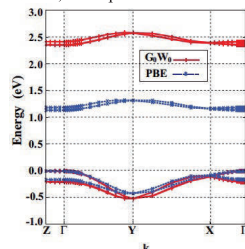
GW space-timeコードの大規模な有機-金属界面への適用に向けた高効率化

1. 研究背景・目的

有機エレクトロニクス材料物質の基礎電子物性の理解

- バンドギャップ・バンド分散の精密予測

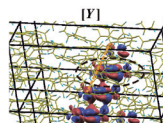
ルブレ単結晶のバンド計算
(GW近似; GW space-time プログラム)



S. Y., Y. Morikawa, and A. Schindlmayr, Phys. Rev. B **88**, 115438 (2013)

有効正孔質量(m_h^*/m_e)

	[T-X]	[T-S]
DFT	1.00	2.15
GW	0.90	1.65
Exp.	0.65 ± 0.1	
Exp.	0.8 ± 0.1	1.9 ± 0.3

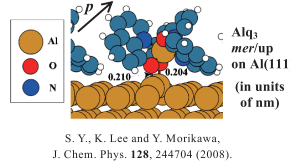


- 有機層と電極金属の界面

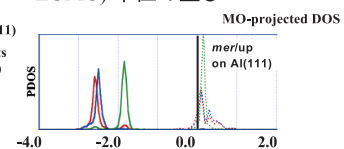
電荷 (正孔・電子) の電極からの注入障壁の形成要因
- 界面での電荷移動、化学結合
- 電子密度分布の再構成

H. Ishii et al., Adv. Mater. **11**, 605 (1999).

金属フェルミ準位と有機層の最高占有・最低非占有(HOMO・LUMO) 準位の並び



S. Y., K. Lee and Y. Morikawa, J. Chem. Phys. **128**, 244704 (2008).



- 結晶構造・分子配置とバンド構造の関係

- S. Y. and I. Hamada, J. Appl. Phys. **121**, 045501 (2017).
- S. Y. and I. Hamada, A Chapter in *Theoretical Chemistry for Advanced Nanomaterials - Functional Analysis by Computation and Experiment* (Springer Nature 2020).

- 有機薄膜表面での電荷注入準位の分子配向依存性

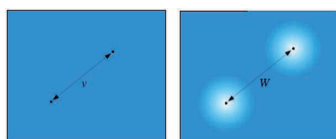
- K. Yamada, S. Y., T. Koganezawa, K. Mase, N. Sato, and H. Yoshida, Phys. Rev. B **97**, 245206 (2018).
- Y. Uemura, S. A. Abd-Rahman, S. Y., and H. Yoshida, Phys. Rev. B **102**, 125302 (2020).

本研究の目的:

有機-金属界面での準位接続の予測の精密化のためにGW近似を適用できるよう、プログラムを大規模並列計算向けに効率化する。

2. 理論

GW近似: 独立粒子模型・平均場近似に対し固体内のクーロン相互作用の遮蔽の効果を取り込む。

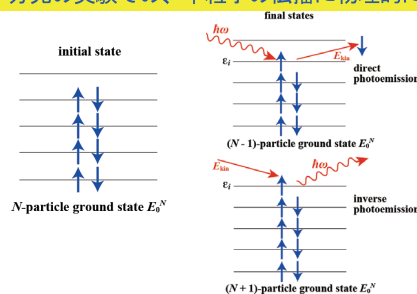


自己エネルギー Σ
 $\Sigma \approx GW$

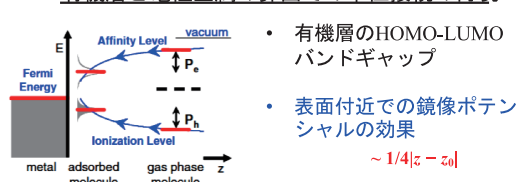
G: 1体グリーン関数

「裸の」クーロン相互作用 V 遮蔽相互作用 W

光電子分光の実験での、準粒子の伝播に物理的に対応



有機層と電極金属の界面での準位接続の再現



J. B. Neaton et al., Phys. Rev. Lett. **97**, 216405 (2006).

3. 計算方法、プログラムの現状、予定

GW space-time 法

M. M. Rieger et al., Comput. Phys. Commun. **117**, 211 (1999).
L. Steinbeck et al., Comput. Phys. Commun. **125**, 105 (2000).
C. Freysoldt et al., Comput. Phys. Commun. **176**, 1 (2007).

$$W(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) = \epsilon^{-1}(\mathbf{G}, \mathbf{G}'; i\omega) v(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$$

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau) = iG(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau)W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\tau)$$

畳み込み積分でなく、積を計算

- 高速フーリエ変換で、計算量が依存する変数を頻りに切り替える: $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ と $(\mathbf{G}, \mathbf{G}')$; $(i\tau)$ と $(i\omega)$; 波数 $\mathbf{k}$ と実格子ベクトル $\mathbf{R}$
- 非局所な複素数の量を計算。必要メモリが大きい。

前年度の実装、応用の状況

- 有機混合膜に適用し、表面の分子に配向した電荷注入準位の形成について知見を得た [Y. Uemura et al., Phys. Rev. B **102**, 125302 (2020)]。
- 表面などの計算のための効率的計算法の実装 (クーロンカットオフ [S. Ismail-Beigi, Phys. Rev. B **73**, 233103 (2006)]) と、有機薄膜の初期計算を実行した。
- ベクトル化率が低い高速フーリエ変換 ($\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{R}$) について、多重フーリエ変換を導入することで、コストの解消・計算時間の短縮に大きな成果が見られた。



今年度の予定

- 他の箇所のベクトル化率の向上。MPI_ALLtoALLv通信のコスト軽減。
- より収束性を高めた計算の達成のために、SX-Aurora上でのメモリの有効利用や、通信のマッピングの向上をはかる。
- コードの、有機分子薄膜表面・スラブモデルへの適用を進め、典型的な有機-金属界面での、鏡像ポテンシャルの効果を考慮した準位接続の再現を目指す。