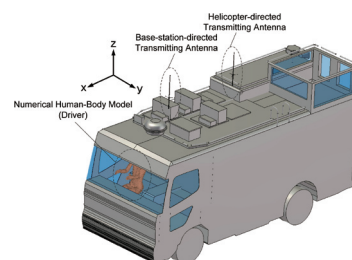
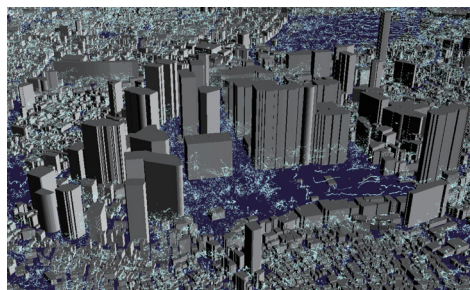


TSUBAME

ESJ.



都市部 10km 四方の 1m 格子を用いた 大規模 LES 気流シミュレーション

Large-scale LES Wind Simulation using Lattice Boltzmann Method
for a 10km x 10km Area in Metropolitan Tokyo

移動中継用 FPU の周波数移行を考慮した 大規模電磁界解析による電磁波曝露の評価

Evaluation of Electromagnetic Wave Exposure by Large-scale Electromagnetic
Field Analysis in Response to the Frequency Migration of Mobile-relay FPUs

大規模 GPU 計算による光合成細菌の 細胞膜システムの全原子シミュレーション

All-Atom Simulation of a Cell Membrane System of Photosynthetic Bacteria
Using Large-Scale GPU Calculation

都市部 10km 四方の 1m 格子を用いた 大規模 LES 気流シミュレーション

小野寺直幸* 青木尊之* 下川辺隆史* 小林宏充**

*東京工業大学 学術国際情報センター **慶應義塾大学 自然科学研究教育センター

都市は高層ビルが立ち並ぶ複雑な構造をしており、詳細な気流を解析するためには高解像度格子による大規模気流シミュレーションが必要となる。格子ボルツマン法は比較的簡単なアルゴリズムで局所的なメモリアクセスを行うため、計算効率および並列化効率が良く大規模計算に適している。都市の気流計算ではレイノルズ数が 100 万を超える乱流状態となるため、ラージエディ・シミュレーション (LES) による乱流モデルを導入する必要がある。従来法ではモデル係数を決定するために広い範囲の平均操作が必要であったが、コヒーレント構造スマゴリンスキー・モデル (CSM) は局所的に決定することができる利点を持つ。本研究では、CSM を初めて格子ボルツマン法に導入し、大規模な気流の LES 計算を始めて可能にした。実際の建物データに基づき、TSUBAME 2.0 の全ノードの GPU を用いて大規模計算を行った。並列計算の大きなオーバーヘッドとなる GPU 間の通信を分割領域内の計算とオーバーラップさせることにより実行性能を 30% 以上向上させることができた。10,080 × 10,240 × 512 格子に対して 4,032 個の GPU を使い、新宿や皇居を含む東京都心部の 10 km 四方のエリアを 1m 格子で計算した。これにより、高層ビル背後の発達した渦によるビル風や幹線道路に沿って流れる「風の道」などを確認することができ、風害などを飛躍的な精度で予測できることが確認できた。

はじめに

1

都市部は高層ビルが密集した複雑な形状をしていて、それらにより気流 (風) は乱流状態となるため、汚染物質などの拡散などを精度良く予測することが難しい。高解像度格子を用いて広範囲に計算する必要があり、大規模計算が不可欠となる。格子ボルツマン法 (LBM: Lattice Boltzmann method) は速度分布関数の時間発展方程式を解くことで、流体運動を記述する手法である。

LBM は単純なアルゴリズムで局所的なメモリアクセスを行うため、複雑物体を含む流れや大規模計算に適している。LBM を用いた大規模計算の例として、SC10 のゴードン・ベル賞を受賞した計算^[1]があげられると共に、複雑物体周りの流動現象についても広く研究されている^{[2][3]}。しかしながら、通常の LBM では高いレイノルズ数の計算は不可能であり、実際の建造物データを用いたレイノルズ数が 100 万オーダーの大規模乱流解析は行われたことがない。乱流の高精度な解析モデルとしてラージエディ・シミュレーション (LES: Large-eddy simulation) が提案されており、LBM に LES を適用することで、高レイノルズ数の乱流解析を安定に行うことが可能となる^[4]。現在広く用いられている LES の乱流モデルとして動的スマゴリンスキー・モデル^{[5][6]}が挙げられるが、モデル定数を決定するために各格子点で広領域の平均操作が必要となり、大規模計算には極めて不向きである。本研究では、モデル定数を局所的に決定できるコヒーレント構造スマゴリンスキー・モデル^[7]を LBM に導入することで大規模な気流の LES 計算を行う。

格子ボルツマン法

2

LBM は連続体として記述される流体に対し、離散化した空間格子点を並進・衝突する仮想的な粒子の集合 (速度分布関数) と仮定し、格子点上の粒子の速度分布関数について時間発展を解く数値計算手法である。空間は等間隔の格子点によって離散化され、粒子は並進運動により 1 タイムステップ後に隣接する格子点上に位置するような速度のみを持つため、補間などによる離散化誤差を含まない。マクロな拡散過程や圧力勾配に対応する衝突過程は、BGK モデル^[8]を用い、粒子分布が単一時間で局所平衡状態へと緩和すると仮定する。ここで、時刻 t 、位置 x において、速度 c_i に対応する粒子の分布関数 $f_i(x, t)$ の時間発展は以下の式で表される。

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) + F_i(x, t). \quad (1)$$

Δt は時間刻み、 τ は緩和時間係数、 $f_i^{eq}(x, t)$ は局所平衡状態における速度分布である。離散的粒子速度に 3 次元 19 速度 (D3Q19) のモデルの場合、粒子速度 c_i は以下の様に表される。

$$c_i = \begin{cases} (0, 0, 0) & i = 0, \\ (\pm c, 0, 0), (0, \pm c, 0), (0, 0, \pm c) & i = 1-6, \\ (\pm c, \pm c, 0), (\pm c, 0, \pm c), (0, \pm c, \pm c) & i = 7-18. \end{cases} \quad (2)$$

また、平衡分布関数は以下の式で表される。

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{3c_i \cdot u}{c^2} + \frac{9(c_i \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right) \quad (3)$$

ρ は密度、 \mathbf{u} は速度である。D3Q19モデルの重み係数 w_i は以下の通りである。

$$w_i = \begin{cases} 1/3 & i = 0, \\ 1/18 & i = 1-6, \\ 1/36 & i = 7-18. \end{cases} \quad (4)$$

衝突過程での緩和時間 τ は動粘性係数を用いて以下の式で表される。

$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{3\nu}{c^2\Delta t}. \quad (5)$$

物体境界の与え方として、粒子を並進運動の出発点に跳ね返す Bounce-Back (BB) 境界条件や、補間関数を用いる事で高次精度化した境界条件^{[9][10]}、物体力により境界を表現する Immersed Boundary Method (IBM)^[11]などが用いられている。本研究では、メモリ参照の局所性が良く高速に計算を行う事が可能な BB 境界条件を採用している。

ラージエディ・シミュレーション

3

LESは格子で解像できる物理量 (GS:grid scale) に対して直接計算を行い、格子解像度以下の成分に対してはサブグリッド・スケール (SGS:sub-grid scale) モデルによりモデル化を行う。渦粘性に基づいた SGS モデルでは、SGS 変動の効果が分子粘性と同様に作用すると仮定し、渦粘性 ν_{SGS} を導入する。

$$\nu_{SGS} = C\bar{\Delta}^2|\bar{S}| \quad (6)$$

ここで C はモデル係数、 $\bar{\Delta}$ はフィルター幅であり、ひずみ速度テンソル \bar{S}_{ij} 、およびひずみ速度テンソルの強さ $|\bar{S}|$ は、

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad |\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}}. \quad (7)$$

と定義される。

3.1 動的スマゴリンスキーモデル

スマゴリンスキー・モデルはモデル係数を定数としたため、SGS 応力が常に散逸的に働き安定に計算を行うことができる利点があるが、モデル係数の決定に経験的な知識が必要なことや、複雑物体に対して正確な渦粘性を導入できないなどの欠点がある。動的スマゴリンスキー・モデル (DSM)^{[5][6]}はモデル係数を流れ場から動的に求めることでそれらの問題点を解決している。DSM はフィルター化された速度場に対して、更にテストフィルターをかける事でモデル係数を決定している。DSM の問題点として、モデル係数の非物理的な値を回避するためのクリッピング操作や、モデル係数を決定するために各格子点で広領域の平均操作が必要になり、大規模計算には極めて不向きである。

3.2 コヒーレント構造スマゴリンスキーモデル

コヒーレント構造スマゴリンスキー・モデル (CSM)^[12]は乱流のコヒーレント構造からモデル係数を決定する手法であり、複雑物体を含む流れ場に対しても高精度に計算を行う事ができる^[7]。モデル係数 C_{CSM} は速度勾配テンソルの第二不変量(Q)と速度勾配テンソルの大きさ(E)から求められるコヒーレント構造関数 F_{CS} により決定される。

$$\begin{aligned} C_{CSM} &= C' |F_{CS}|^{3/2}, \\ F_{CS} &= \frac{Q}{E} \quad (-1 \leq F_{CS} \leq 1), \\ Q &= -\frac{1}{2} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}, \quad E = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)^2. \end{aligned} \quad (8)$$

ここで C' は係数であり、本研究では $C'=1/20$ を用いる。モデル係数は格子点上の物理量の値より求められ、高効率な並列演算処理を行うことができる。

3.3 格子ボルツマン法でのラージエディ・シミュレーションにおける渦粘性の導入

コヒーレント構造スマゴリンスキー・モデルをLBM計算に適用することで、複雑物体を含む高レイノルズ数流れの大規模計算が初めて実行可能となる。乱流モデルを適用したLBMの緩和時間 τ_* は以下の式で表される。

$$\tau_* = \frac{1}{2} + \frac{3\nu_*}{c^2\Delta t}, \quad \nu_* = \nu_0 + \nu_t. \quad (9)$$

都市部 10km 四方の 1m 格子を用いた 大規模 LES 気流シミュレーション

格子ボルツマン法に対する 複数 GPU を用いた並列計算の最適化

4

並列計算で行われるプロセス間の通信の時間を隠蔽するための技法として、計算と通信のオーバーラップ手法が提案されている^{[13][14]}。計算領域を通信に必要な境界部分と中央部分に分割し、中央部分の計算処理と境界部分のデータ通信を同時に行う。境界部分は必要最小限の計算領域を確保し、ホストメモリとデバイスメモリ間のデータ通信は cudaMemcpyAsync 等を、ノード間のデータ通信は MPI の Isend・Irecv 等の非同期通信を採用した。

MPI の領域分割法として、yz 方向に分割を行う 2 次元分割法を採用した。LBM では各方向の速度分布関数のメモリ参照が非対称となるため、物理量が必要な領域のみ MPI 通信を行い、通信量の削減を行った。具体的には、y 方向の MPI 通信として速度分布関数 $f_i = (0, \pm c, 0)$ 、 $(\pm c, \pm c, 0)$ の 6 成分を、z 方向の MPI 通信として速度分布関数 $f_i = (0, 0, \pm c)$ 、 $(\pm c, 0, \pm c)$ の 6 成分を、yz 方向の MPI 通信として速度分布関数 $f_i = (0, \pm c, \pm c)$ と速度 u_i の 7 成分の通信を行った。計算の順序として、まず境界部分のカーネル関数を実行する。その後、中央部分のカーネル関数の命令を発行した後、境界部分の MPI 通信を行うことで、中央部分のカーネル関数と通信のオーバーラップ計算を行う。

TSUBAME2.0 での実行性能測定

5

東京工業大学のスパコン TSUBAME 2.0 は、4,000 個以上の GPU (NVIDIA TESLA M2050) を搭載し、LINPACK ベンチマークにおいて 1.192 PFLOPS を達成している。TSUBAME 2.0 の複数 GPU を用いて計算コードの実行性能測定を行う。

5.1 単体 GPU での実行性能

単体 GPU での計算に対する高速化手法として、SFU (special function unit) を用いた演算の高速化、32bit 版のコンパイラによる配列の index 計算量の削減、LBM の並進・衝突過程のカーネル関数の結合を行った。図 1 にそれらの最適化を行った計算の単精度演算性能、および Improved Roofline Model による上限値を示す。Improved Roofline Model は、1 格子点あたりの演算量 F とデータ参照量 B 、および演算器の Peak Performance (F_{peak}) とメモリバンド幅 (B_{peak}) より以下のように表される。

$$P = \frac{F/B}{F/B + F_{peak}/B_{peak}} F_{peak} \quad (10)$$

本計算では以下のパラメータを用いた。

$$(F_{peak}, B_{peak}) = (1030 GFLOPS, 148 Gbyte/sec),$$
$$(F, B) = (476 FLOPS, 260 Byte),$$
$$(P, F/B) = (214 GFLOPS, 1.83).$$

最適化を行った LBM の単精度実行性能は 198 GFLOPS となり、32bit 版のコンパイラを適用しない結果の 183 GFLOPS に対して 8% の性能向上を達成するとともに、Improved Roofline Model により予測されるピーク性能 (P) に対して 92% と、十分な最適化がなされていることが確認できる。

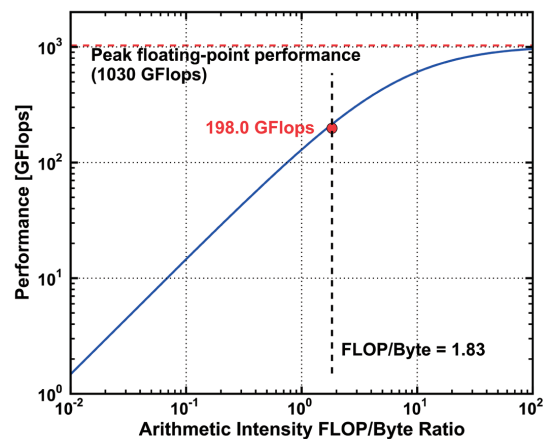


図 1 単体 GPU での実行性能と Improved roofline model.

5.2 複数 GPU を用いた実行性能測定

TSUBAME 2.0 の複数ノード (1 ノードあたり 3 GPU) を用いて性能測定を行う。図 2 と図 3 に実行性能の弱スケーリング、および強スケーリングの結果を示す。横軸は GPU 数、縦軸は単精度実行性能 (TFLOPS) となる。

弱スケーリング計算では、1 GPU あたり $(N1, N2, N3) = (192, 256, 256)$ の格子点数を確保した。計算結果より、この計算サイズに対してはオーバーラップ計算を行うことで通信の隠蔽が可能となり、オーバーラップ無しに比べて 30% 程度の性能向上、および 768 GPU で 115 TFLOP、1,000 GPU で 149 TFLOPS の実行性能が得られた。強スケーリングの結果においても同様に、オーバーラップ計算を行うことにより良いスケーリングが得られ、格子点数 $(N1, N2, N3) = (192, 2048, 2048)$ の 32 GPU を用いた結果に対して、2 倍の 64 GPU では 97%、4 倍の 128 GPU では 87%、8 倍の 256 GPU では 63% の効率を得られた。

以上の結果より、局所的なメモリアクセスが可能な乱流モデルである CSM を LBM に適用することで、動的なメモリアクセス・モデルが必要となる広域での平均操作が不要となり、弱スケーリング、強スケーリング共に良いスケーリングが得られることが明らかになった。

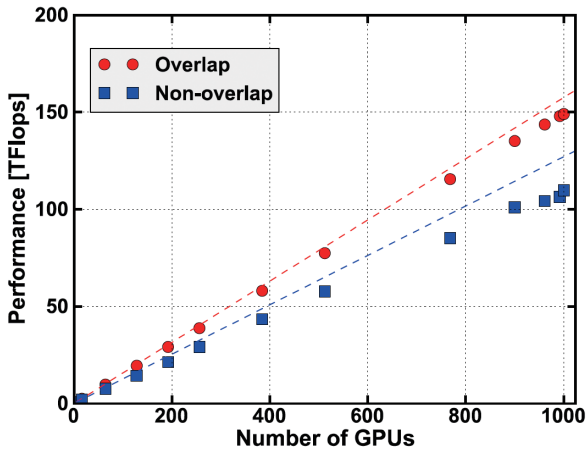


図2 複数GPUでの弱スケーリング実行性能

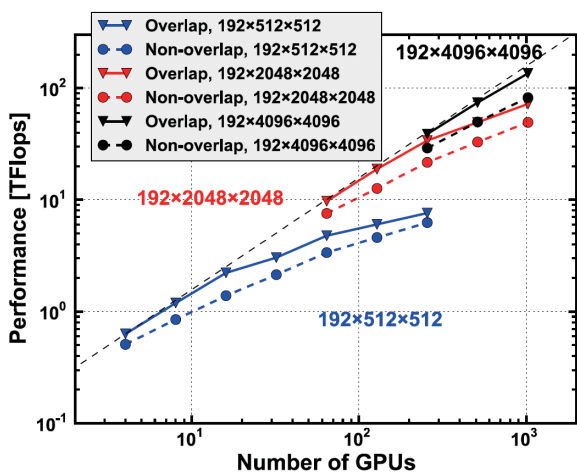


図3 複数GPUでの強スケーリング実行性能

東京都心部の気流計算

6

新宿区、千代田区、中央区、港区、目黒区を含む東京都心部の10km四方のエリアに対し、実際の建造物のデータ((株)パスコ)を基に1m間隔の格子解像度で気流シミュレーションを行った。鉛直方向にも1m間隔で500格子用いている。TSUBAME 2.0の4,032個のGPUを用いて、格子解像度(N1, N2, N3) = (10080, 10240, 512)を設定した。境界条件として、主流方向(南北方向)に流入・流出境界条件、スパン方向(東西方向)に周期境界条件、高さ方向の上面にスリップ境界条件を与えた。流入速度は対数則による速度分布関数 $U_{in} = A \log_{10} z/z_0$ から与え、相対粗度を $z_0 = 2$ 、高さ100mにおいて風速を10m/sと設定した。流入速度、空気の物性値、および代表長さ1mで規格化したレイノルズ数はおよそ 10^6 程度と

なり、乱流モデル無しでは計算が破綻した。

図4に計算した10km四方の地図データ(2012 Google ZENRIN)を示す。東京都心部の主要な地域がほぼ全て含まれている。図5に解析結果のスナップショットを示す。気流を粒子により可視化している。計算結果から高層の建物により非常に広い範囲の気流が影響を受け、図右下の品川駅周辺において気流が激しく乱れていることが確認できる。

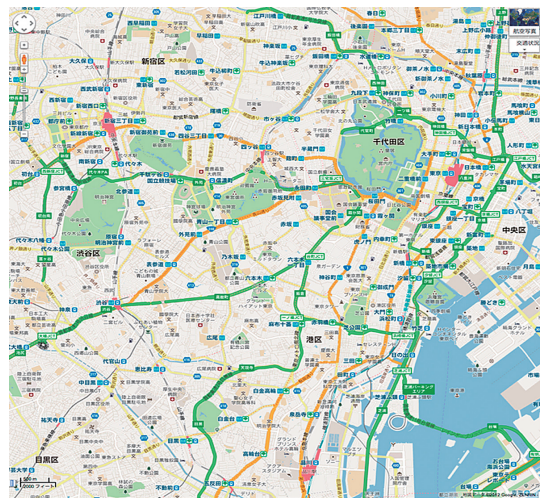


図4 計算対象とした東京都心部の範囲(北が上)

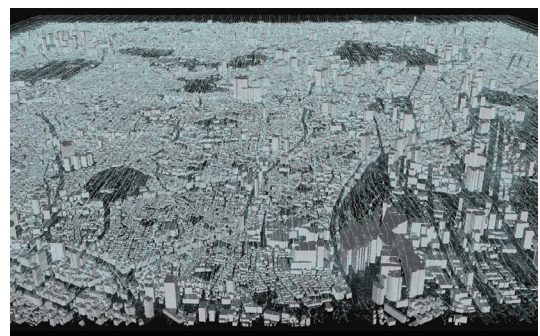


図5 粒子分布を用いた気流のスナップショット(北が上)

10km × 10kmの範囲の計算において、その中の詳細な気流の流れを見るために、新宿都庁前付近(図6の範囲)における高さ25mの速度分布の瞬時値を図7に示す。可視化した領域は格子点数(960 × 640 × 256)であり、青色の領域は建物に相当する。主要道路に沿って風速の強い領域が存在しており、特に計算領域中央部から南方に向かって「風の道」と言われる強い流れ(ビル風)が再現されている。図8に高さ100mの速度分布の瞬時値を示す。高さ100mにおいて、高層ビル間に風速の非常に強い領域が存在しており、高さ25mの風速分布に大きな影響を与えている事が確認できる。高層ビル後方には風速の弱い領域が存在しており、非常に複雑な速度分布が形成されている。

都市部10km四方の1m格子を用いた 大規模LES気流シミュレーション

図9に地図データ(図6)の赤点線上の垂直断面内(高さ256mまで)の速度分布を示す。高層ビルにより、速度の速い風が上空へと押し出されている様子が確認できる。さらに、中央部の高層ビル後方部では風の巻き込みにより、上空と地上付近の空気が混合されている事が確認できる。

図10に都庁周辺の流れ場を粒子により可視化した図を示す。空間上の固定された点から一定時間の間に放出された粒子は流れ場によって移流される。計算結果より、ビル群の後方では粒子の流れ線が乱された複雑な流れが、中央部の建物が無い領域では流れ線がつながった比較的乱れの少ない流れが確認できる。

以上の結果より、実際の建物データを含む大規模都市計算の実行だけでなく、非正常乱流の細かな構造までとらえることのできるLES解析を初めて行うことができた。



図6 新宿都庁前の表示領域(北が上)

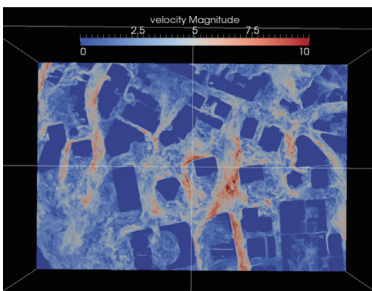


図7 新宿都庁前の水平断面25mの速度分布(m/s)(北が上)

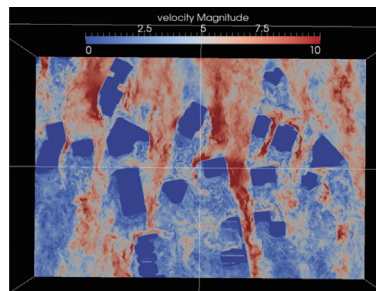


図8 新宿都庁前の高さ100mにおける水平断面の速度分布(m/s)(北が上)

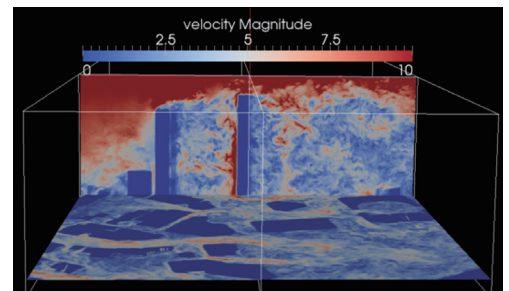


図9 新宿都庁前の垂直断面の速度分布(m/s)(北が左)

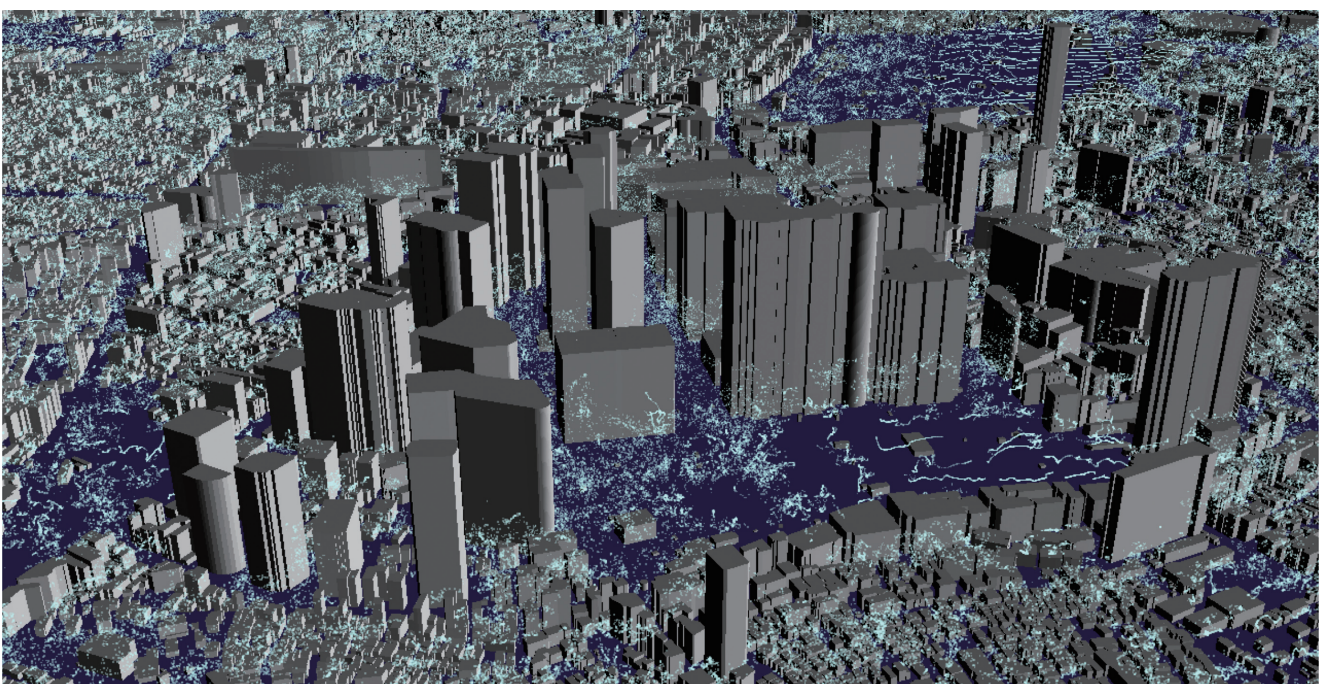


図10 新宿都庁前の粒子分布による詳細な気流表示(北が左)

おわりに

7

本研究では、格子ボルツマン法にコヒーレント構造スモグリンスキー・モデルを適用することで、東京都心部の10km四方のエリアに対し、1m間隔の格子解像度の超大規模気流シミュレーションを行った。TSUBAME 2.0を用いて実行性能測定では、Improved Roofline Modelの92%の単精度実行性能が得られた。複数GPUを用いた計算において、計算と通信のオーバーラップ計算を行う事で、弱スケーリングの結果において768 GPUで115 TFLOPS、1,000 GPUで149 TFLOPSの実行性能が得られた。

東京都心部の10km四方のエリアに対し、実際の建造物のデータを基に1m間隔の格子解像度で詳細な気流シミュレーションを行った計算においては、高層ビル背後の発達した渦によるビル風や幹線道路に沿って流れる「風の道」等を再現した。

以上より、本研究ではモデル定数を局所的に決定できるコヒーレント構造スモグリンスキー・モデルを格子ボルツマン法に導入することに初めて成功し、1m解像度の格子を用いて広範囲の気流の大規模かつ非定常乱流の細かな構造までとらえることのできるLES解析を初めて示すことができた。

謝 辞

本計算はTSUBAMEグランドチャレンジ大規模計算制度の元で平成24年9月に実施させて頂いたもので、学術国際情報センターの方々に深く感謝の意を表す。本研究の一部は科学研究費補助金・基盤研究(B) 課題番号23360046「GPUスパコンによる気液二相流と物体の相互作用の超大規模シミュレーション」、科学技術振興機構CREST「次世代テクノロジーのモデル化・最適化による低消費電力ハイパフォーマンス」および「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」から支援を頂いた。記して謝意を表す。

参考文献

[1] A. Rahimian, I. Lashuk, S. Veerapaneni, A. Chandramowlishwaran, D. Malhotra, L. Moon, R. Sampath, A. Shringarpure, J. Vetter, R. Vuduc, et al. Petascale direct numerical simulation of blood flow on 200k cores and heterogeneous architectures. In Proceedings of the 2010 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, pages 1–11. IEEE Computer Society, 2010.

[2] X. Wang and T. Aoki. Multi-gpu performance of incompressible flow computation by lattice boltzmann method on gpu cluster. *Parallel Computing*, 2011.

[3] M. Bernaschi, M. Fatica, S. Melchionna, S. Succi, and E. Kaxiras.

A flexible high-performance lattice boltzmann gpu code for the simulations of fluid flows in complex geometries. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 22(1):1–14, 2009.

[4] H. Yu, S.S. Girimaji, and L.S. Luo. Dns and les of decaying isotropic turbulence with and without frame rotation using lattice boltzmann method. *Journal of Computational Physics*, 209(2):599–616, 2005.

[5] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W.H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3:1760, 1991.

[6] DK Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 4:633, 1992.

[7] H. Kobayashi, F. Ham, and X. Wu. Application of a local sgs model based on coherent structures to complex geometries. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 29(3), 2008.

[8] Q. Zou and X. He. On pressure and velocity flow boundary conditions and bounceback for the lattice boltzmann bgk model. *Arxiv preprint comp-gas/9611001*, 1996.

[9] X. Yin and J. Zhang. An improved bounce-back scheme for complex boundary conditions in lattice boltzmann method. *Journal of Computational Physics*, 2012.

[10] B. Chun and AJC Ladd. Interpolated boundary condition for lattice boltzmann simulations of flows in narrow gaps. *Physical review E*, 75(6):066705, 2007.

[11] C. Shu, N. Liu, and YT Chew. A novel immersed boundary velocity correction–lattice boltzmann method and its application to simulate flow past a circular cylinder. *Journal of Computational Physics*, 226(2):1607–1622, 2007.

[12] H. Kobayashi. Large eddy simulation of magneto hydrodynamic turbulent channel flows with local subgrid-scale model based on coherent structures. *Physics of Fluids*, 18:045107, 2006.

[13] T. Shimokawabe, T. Aoki, C. Muroi, J. Ishida, K. Kawano, T. Endo, A. Nukada, N. Maruyama, and S. Matsuoka. An 80-fold speedup, 15.0 tflops full gpu acceleration of non-hydrostatic weather model asuca production code. In *High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC)*, 2010 International Conference for, pages 1–11. IEEE, 2010.

[14] T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, T. Endo, A. Yamanaka, N. Maruyama, A. Nukada, and S. Matsuoka. Peta-scale phase-field simulation for dendritic solidification on the tsubame 2.0 supercomputer. In *Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, page 3. ACM, 2011.

移動中継用FPUの周波数移行を考慮した大規模電磁界解析による電磁波曝露の評価

小郷直人* 池田哲臣**

*NHK技術局 **NHK放送技術研究所

移動中継用の700MHz帯FPUはマラソンや駅伝の中継で映像、音声を伝送するために用いられているが、総務省の周波数再編アクションプランにより1.2GHz帯、2.3GHz帯へ周波数を移行することが検討されている。

移行先の周波数は現行の周波数より高くなることから、その伝搬損失を補償するために送信出力を大きくすることを検討している。そのため、送信アンテナの近傍にいるアナウンサーやドライバーの電磁波曝露の影響が懸念されることから、中継車に乗っているアナウンサー、ドライバーを対象に、700MHz帯、1.2GHz帯、2.3GHz帯FPUの運用を考慮して送信アンテナをモデル化し、数値人体モデルを用いて電磁界解析することで人体の比吸収率を解析した。

はじめに

1

現在、マラソンや駅伝などの移動中継では700MHz帯(770–806MHz)の移動中継用FPU^[1]を用いて映像、音声を伝送しているが総務省の周波数再編アクションプランにより、移動中継用FPUの周波数を1.2GHz帯(1.24–1.3GHz)と2.3GHz帯(2.33–2.37GHz)へ周波数を移行することが検討されている^[2]。移行先の周波数では700MHz帯に比べて自由空間損失や回折損失が大きいと、その補償のためにSTTC-MIMO方式の導入^[3]や、現行のFPUよりも送信出力を増大することを検討している。そのため、現行のFPUと比較して送信アンテナ近傍のスタッフへの電磁波曝露量が大きくなる懸念される。

人体への電磁波曝露の影響については、近年の無線設備の利用形態の多様化により電波防護指針^[4]の“一般環境”の適用範囲が広がる傾向にある。たとえば、携帯電話端末のような側頭部に近づけて使用する無線設備だけでなく、空中線と人体との距離が20cm以内となる状態で通常使用する無線設備に対して、SAR(Specific Absorption Rate: 比吸収率)許容値の適用を行うことが検討されている^[5]。電波防護指針では一般環境において、人体局所の任意の10gにわたりSARを平均した10g平均局所SAR^[6]が2[W/kg]以下、全身平均SARが0.08[W/kg]以下となるよう指針値が示されている。

一方、放送事業用などの特殊な無線機器については電波防護指針の“管理環境”の適用範囲と考えられることが一般的である^[7,8]。電波防護指針において管理環境は10g平均局所SARが10[W/kg]以下、全身平均SARが0.4[W/kg]以下と一般環境に対して5倍の指針値が示されている。しかし、FPUの運用においては送信アンテナの近傍にアナウンサーやドライバーが乗車しているため、一般環境で評価する必要があると考えられる。しかし、周波数移行を考慮し、実際にFPUを運用する環境において電磁波曝露について検討された例はない。

さらに、移動中継用FPUの運用を考慮した電磁波曝露について検討する場合、中継車の形状など人体近傍の環境も含めた評価が

必要になることから測定による評価が困難である。したがって、電磁界解析による評価が有効であるが、移動中継車の構造が大きい上、FPUの周波数移行に伴い波長が短くなることから、計算規模が非常に大きくなるため、解析が困難になる課題がある。

本稿では、移動中継用FPUの周波数移行を考慮し、SISO(Single Input Single Output)運用時のFPUによる人体への電磁波曝露量の評価としてSARを計算機シミュレーションで解析し、700MHz帯、1.2GHz帯、2.3GHz帯の周波数帯で比較、評価した。解析においては日本人の成人男性の平均体型を有する数値人体モデルを用いて、中継車屋上に搭載した送信アンテナの近傍にアナウンサーとドライバーが乗車する環境を想定し、人体モデルの姿勢を変形して計算した。特に、1.2GHz帯、2.3GHz帯については解析規模が大きくなり一般的なワークステーションでは解析が困難なため、TSUBAME2.0を用いて解析を行った。

計算モデル

2

2.1 アンテナモデル

図1に本稿において検討に用いる送信用アンテナの2段コーリニアアンテナの構造、図2にアンテナの写真を示す。700MHz帯については、現在、NHKの駅伝やマラソン中継で使用している2段コーリニアアンテナであり^[9]、一般的にこのような構造の送信アンテナが移動中継によく用いられる。1.2GHz帯、2.3GHz帯については700MHz帯とほぼ同じ条件で比較するために同等のアンテナ利得、放射パターンを持つ2段コーリニアアンテナを設計、試作した^[10]。

図1、2の送信アンテナの放射パターンを図3～5に示す。なお、本稿において700MHz帯は800MHz、1.2GHz帯は1.27GHz、2.3GHz帯は2.35GHzを解析対象とした。

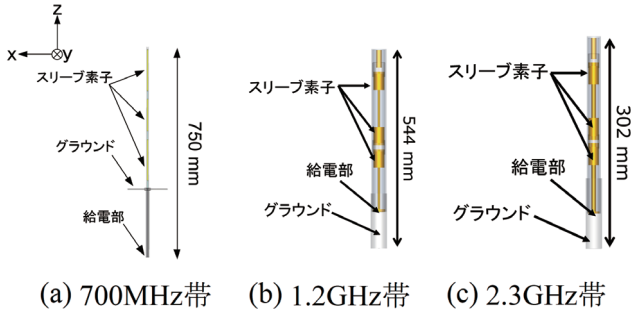


図1 アンテナ構造

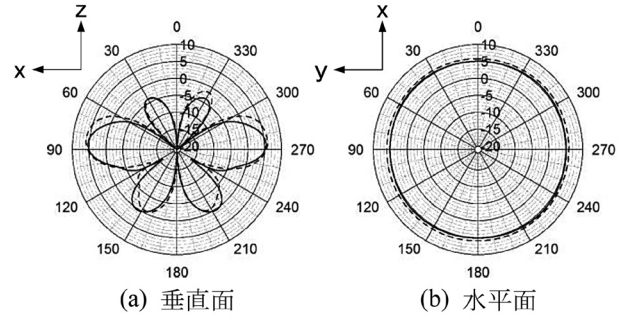


図4 放射パターン (1.2GHz帯:1.27GHz)

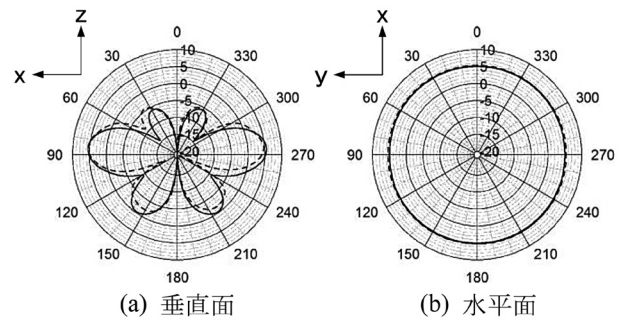


図5 放射パターン (2.3GHz帯:2.35GHz)



図2 試作した送信アンテナ
(左から700MHz帯、1.2GHz帯、2.3GHz帯)

図3～5において、振幅値はアンテナ利得 [dBi] を表し、実線が計算値、破線が測定値を示す。これより、計算モデルと測定値がほぼ一致しており、十分な精度で解析ができています。また、各周波数帯でほぼ同等の放射パターンを有していることが確認できる。

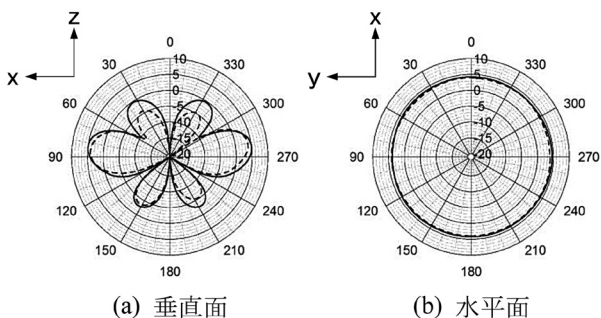


図3 放射パターン (700MHz帯:800MHz)

2.2 数値人体モデル

本稿で用いる数値人体モデルを図6に示す。数値人体モデルは文献^[11]の日本人の成人男性モデルを用い、移動中継用FPUの運用時のアナウンサーとドライバーの姿勢に合わせてFree Form Deformation (FFD)^[12]を用いて変形した。本モデルは51種類の生体組織で構成され、2mmの空間分解能を有するモデルである。

本稿では、数値人体モデルが有する生体組織全ての電気定数を個別に設定して解析をおこなう。それぞれの周波数における生体組織の電気定数の値は文献^[13]を参考にした。

2.3 解析モデル

中継車に搭載された送信アンテナから出た電磁波が、アナウンサー、ドライバーに曝露される状態を実際の運用を考慮して解析

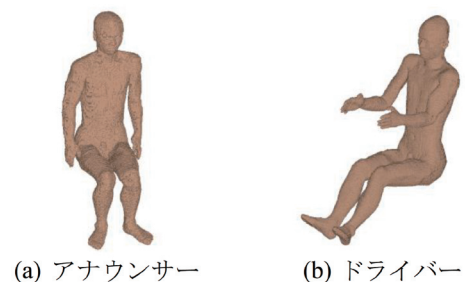


図6 本稿で用いる数値人体モデル

移動中継用FPUの周波数移行を考慮した 大規模電磁界解析による電磁波曝露の評価

するため、NHKが使用している移動中継車「RS-2」(5980×2300×3300mm)をCADモデルから詳細にモデル化した。また、アナウンサー、ドライバーについては図6に示した数値人体モデルを用いた。さらに、中継車の車両形状の影響を評価するため、図7、8から車両を削除した図9、10のモデルについても解析する。図9、10において、アンテナと数値人体モデルの位置関係は図7、8と同一であり、車両形状のみがなくなっている。

図7、9は、中継車後方のアナウンスブースにアナウンサーが座っているモデルで、アンテナはほぼ人体と同じ高さにある。図8、10はドライバーが運転席に座っているモデルである。

送信アンテナには2つあり、地上基地局に向けて送信するアンテナとそこから1.87m後方に設置したヘリに向けて送信するアンテナがある。送信アンテナの設置位置は現在NHKが駅伝やマラソンの中継で運用している位置^[11]とし、どちらも送信出力は同じで常時送信している条件とした。どちらの送信アンテナも周波数に応じて図1に示したアンテナを用いる。なお、図7、9において、人体と地上基地局用送信アンテナの距離は約3.3m、ヘリ用送信アンテナとの距離は約1.4mである。また、図8、10において、人体と地上基地局用送信アンテナの距離は約1.3m、ヘリ用送信アンテナとの距離は約2.5mである。

なお、アンテナの高さは道路交通法で地上から3.8m以下にする必要があるため、地上基地局用送信アンテナ、およびヘリ用送信アンテナの上部先端が地上から3.8mの高さになるように設置することとした。

図7～10のそれぞれの条件で、地上基地局用および、ヘリ用送信アンテナについて各周波数帯について電磁界解析する。なお、電磁界解析、およびSARの計算にはCST社のMW Studio^[14]を用いた。

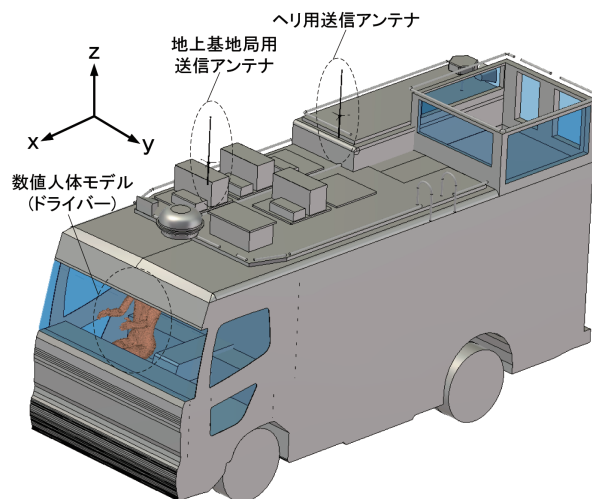


図8 解析モデル(条件B)

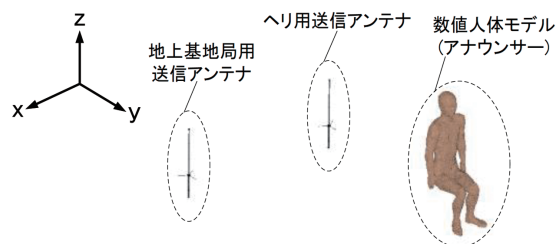


図9 中継車のない解析モデル(条件C)

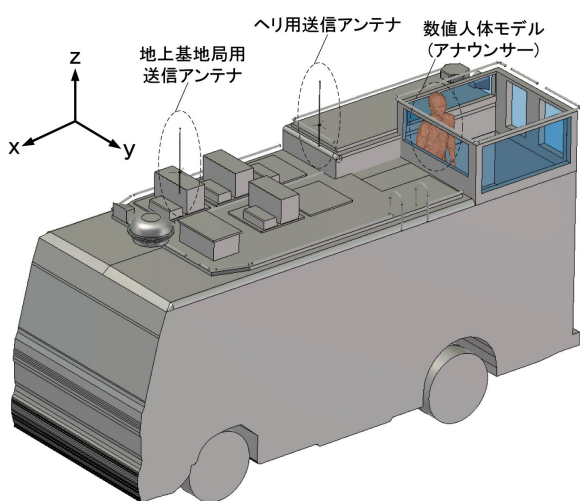


図7 解析モデル(条件A)

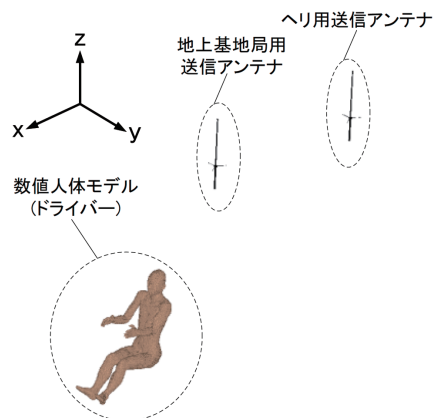


図10 中継車のない解析モデル(条件D)

SARの解析

3

3.1 SARの計算方法

SARについては式(1)が国際的に用いられているため^[15]、本稿でも式(1)に基づいて計算を行う。

$$SAR = \frac{\sigma}{\rho} E^2 \quad [W/kg] \quad (1)$$

ここで、 σ は生体組織の導電率[S/m]、 ρ は生体組織の密度[kg/m³]、 E は電界強度の実効値[V/m]である。なお、SARの評価は、人体局所の任意の10gにわたり平均した10g平均局所SAR^[6]、および全身平均SARで評価する。ここでは、電波防護指針のうち一般環境を対象とする。一般環境では10g平均局所SARの指針値が2[W/kg]以下、全身平均SARの指針値が0.08[W/kg]以下となっている。

3.2 地上基地局用送信アンテナから送信したときのSARの解析

図7～10の条件について、700MHz帯、1.2GHz帯、2.3GHz帯のそれぞれについて、地上基地局用送信アンテナから送信した場合のSARを解析した。各条件での10g平均局所SARの最大値の結果を表1に、全身平均SARの結果を表2に示す。送信出力はそれぞれの周波数帯で使用できる最大値として、700MHz帯は5W、1.2GHz帯は25W、2.3GHz帯は40Wとした。

表1において、周波数で比較すると、1.2GHz帯、2.3GHz帯の方が送信出力が高く、SARもそれに伴って大きくなっていることがわかる。

一方、人体とアンテナの位置関係と車両の有無に関して条件A～Dで比較すると、条件A、CのアナウンサーのSARについては中継車の有無によって大きな違いはどの周波数についてもなかった。これは、アナウンサーの周囲には窓枠などがあるもののほぼ開放された状態になっているため、SARに違いがほとんどなかったと考えられる。それに対して、条件B、DのドライバーのSARについては、車両がある場合は無い場合のSARに比べて1/100程度まで小さくなっている。これはアナウンサーの場合と異なり、車両による遮蔽が大きいためであると考えられる。

次に、表2についてみると、10g平均局所SARと同様の傾向を示しており、ドライバーに関しては車両の遮蔽の影響が大きいことがわかる。

以上のことから、10g平均局所SARについては最大でも0.04[W/kg]以下、全身平均SARについては最大でも0.001[W/kg]以下になることがわかった。

表1 10g平均局所SARの最大値[W/kg](地上基地局用)

解析モデル	800MHz	1.27GHz	2.35GHz
条件A	0.0032	0.018	0.038
条件B	0.000014	0.00048	0.00049
条件C	0.0028	0.012	0.03
条件D	0.0035	0.029	0.042

表2 全身平均SAR[W/kg] (地上基地局用)

解析モデル	800MHz	1.27GHz	2.35GHz
条件A	0.00014	0.00077	0.00075
条件B	0.0000016	0.000021	0.000017
条件C	0.00011	0.00052	0.00043
条件D	0.00011	0.00074	0.0011

3.3 ヘリ用送信アンテナから送信したときのSARの解析

図7～10の条件について、700MHz帯、1.2GHz帯、2.3GHz帯のそれぞれについて、ヘリ送信用送信アンテナから送信した場合のSARを解析した。各条件での10g平均局所SARの最大値の結果を表3に、全身平均SARの結果を表4に示す。送信出力は3.2と同様に、それぞれの周波数帯で使用できる最大値として、700MHz帯は5W、1.2GHz帯は25W、2.3GHz帯は40Wとした。

表3 10g平均局所SARの最大値[W/kg] (ヘリ用)

解析モデル	800MHz	1.27GHz	2.35GHz
条件A	0.0071	0.034	0.023
条件B	0.00013	0.0001	0.000025
条件C	0.0087	0.029	0.036
条件D	0.00021	0.0041	0.0033

表4 全身平均SAR[W/kg] (ヘリ用)

解析モデル	800MHz	1.27GHz	2.35GHz
条件A	0.00021	0.0012	0.0011
条件B	0.0000012	0.0000033	0.000001
条件C	0.00018	0.0011	0.00093
条件D	0.000013	0.0003	0.0002

表3についてみると、条件A、CのアナウンサーのSARについては、地上基地局用送信アンテナよりもヘリ用送信アンテナの方がアナウンサーに近いため、表1の結果よりもSARが全体的に大きいことがわかる。一方、条件B、Dの場合はドライバーから送信アンテナが遠くなるため、10g平均局所SARが小さくなることがわかる。

移動中継用FPUの周波数移行を考慮した 大規模電磁界解析による電磁波曝露の評価

また、中継車の有無によるドライバーのSARへの影響は表1と同様の結果であり、中継車の遮蔽の影響が大きいことがわかった。また、表4より全身平均SARについても表3と同様の傾向であることがわかった。

以上のことから、10g平均局所SARについては最大でも0.04[W/kg]以下、全身平均SARについては最大でも0.001[W/kg]以下になることがわかった。

3.4 考察

現行の700MHz帯のFPUの運用では、地上基地局用送信アンテナとヘリ用送信アンテナから同時に常時送信しているため、同様の運用形態を想定すると、10g平均局所SAR、および全身平均SARはそれぞれの送信アンテナによるSAR値の合計値で評価する必要がある。表5に条件A、Bにおける表1と3の10g平均局所SARの合計値、表6に条件A、Bにおける表2、4の全身平均SARの合計値を示す。

表5 10g平均局所SARの合計値[W/kg]

解析モデル	800MHz	1.27GHz	2.35GHz
条件A	0.01	0.052	0.06
条件B	0.00014	0.00058	0.038

表6 全身平均SARの合計値[W/kg]

解析モデル	800MHz	1.27GHz	2.35GHz
条件A	0.00035	0.002	0.0018
条件B	0.0000028	0.000024	0.00075

表5、6から、ドライバーよりもアナウンサーの方が、10g平均局所SAR、全身平均SARのどちらについても100倍程度大きい、どちらについても電波防護指針の一般環境における指針値よりも大幅に下回ることがわかった。

なお、今回は移動中継車の中にいる技術スタッフや制作スタッフに対する電磁波曝露の検討は行わなかったが、スタッフのいる空間の窓(開口部)はフロントガラスよりも小さいことなどからドライバーのSARよりかなり小さくなっていると予想されるため、電波防護指針の指針値に対して下回ると考えられる。

むすび

4

移動中継用FPUの周波数移行を考慮して、SISO運用時の中継車屋上の送信アンテナ近傍における人体の電磁波曝露量を検討した。

現行の700MHz帯と同様のアンテナ設置、運用をするという想定の下に検討を行った結果、特に1.2GHz帯は送信出力が25W、2.3GHz帯は40Wと非常に大きいこと、また、人体組織の導電率が700MHz帯に比べて大きいことから10g平均局所SAR、および全身平均SARが大きくなることがわかった。しかし、電波防護指針の一般環境における指針値に対しては非常に小さい値であることがわかった。

今後、アンテナの設置位置によるSARの違いや、MIMOにした場合の検討、およびSARの低減手法について検討する予定である。

謝辞

本稿に記載した計算は、文部科学省の先端研究施設共用促進事業の補助をいただき、東京工業大学 学術国際情報センターのスパコンTSUBAME2.0を用いて行った。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] “テレビジョン放送番組素材伝送用可搬型OFDM方式デジタル無線伝送システム,” 社団法人電波産業会, ARIB STD-B33, 1.1版, (Nov.2005)
- [2] 総務省周波数再編アクションプラン(平成23年9月改訂版)
http://www.soumu.go.jp/menu_news/s-news/02kiban09_03000089.html
- [3] 中川孝之, 池田哲臣, “2×2 STTC-MIMO-OFDMシステムの性能改善,” 映像学技報, vol.36, no.10, BCT2012-48, pp.69-72, Feb. 2012.
- [4] 電気通信技術審議会答申, 電波利用における人体防護の在り方, 諮問第89号, 1997.
- [5] “人体側頭部を除く人体に近接して使用する無線機器等に対する比吸収率の測定方法,” 情報通信審議会 諮問第118号, Oct. 2011.
- [6] “IEEE recommended practice for measurements and computations of radio frequency electromagnetic fields with respect to human exposure to such fields, 100 kHz-300 GHz,” IEEE Standard C95.3-2002, 2003.
- [7] 秋元晋平, 菊池悟, 齊藤一幸, 高橋応明, 伊藤公一, “150MHz帯業務用無線端末による胴体内SARの数値人体モデルを用いた解析,” 信学論(B), Vol. J92-B, no.1, pp.304-311, Jan. 2009.
- [8] N. Kogo, T. Ikeda, “Effect of Human Posture on Antenna Performance of Transceiver for Push-to-Talk Communication Line in VHF and UHF Bands,” PIERS2012, p.468, Aug. 2012.

- [9] 小郷直人, 池田哲臣, “700MHz帯移動中継用FPUの運用におけるSARの解析,” 映情学技報, vol.36, no.37, BCT2012-83, pp.25-28, Sep. 2012.
- [10] 小郷直人, 矢田貝昌宏, 村上文弘, 池田哲臣, “びわ湖毎日マラソンの移動中継における伝搬特性の改善,” 映情学技報, vol.36, no.30, BCT2012-70, pp.41-44, Jul. 2012.
- [11] 長岡智明, 櫻井清子, 国枝悦夫, 渡邊聡一, 本間寛之, 鈴木保, 酒本勝之, 小川孝次, “日本人成人男女の平均体型を有する全身数値モデルの開発,” 生体医工学, vol.40, no.4, pp.45-52, Dec. 2002.
- [12] T. Nagaoka, S. Watanabe, “Postured voxel-based human models for electromagnetic dosimetry,” Phys. Med. Biol., 53(24), pp.7047-7061, Dec. 2008.
- [13] <http://transition.fcc.gov/oet/rfsafety/dielectric.html>
- [14] T. Weiland, “RF & Microwave Simulators - From Component to System Design” Proceedings of the European Microwave Week (EUMW 2003), vol.2, pp. 591-596, Oct. 2003.
- [15] “Safety levels with respect to human exposure to radio frequency electromagnetic fields, 3kHz to 300GHz,” ANSI/IEEE Standard C95.1-2005, October 2005.

大規模GPU計算による光合成細菌の細胞膜システムの全原子シミュレーション

関嶋 政和^{*,**} 宇田川 拓郎^{**}

* 東京工業大学・学術国際情報センター ** 東京工業大学・情報理工学研究所・計算工学専攻

紅色光合成細菌において、光合成はchromatophore（色素体）と呼ばれる細胞膜の窪みで行われる。色素体に含まれる膜タンパク質の種類は少なく、光を収集するLH1 アンテナ複合体(LH1)、LH2 アンテナ複合体(LH2)や光反応中心(RC)、そしてbc1複合体などがある。近年、LH1やLH2の活発な自己組織化によって色素体の膜の窪み形状が決められるということが知られている。

本研究では、chromatophoreの自己組織化と膜の形状の決定のメカニズムを原子レベルで理解するために、原子間力顕微鏡によって得られた情報をもとに組み立てたモデルに対し、TSUBAME2.0の700ノードを用いてノード内2CPU、3GPUをフルに使用し分子動力学シミュレーションプログラムを行うことで、アンテナ複合体と反応中心のダイナミクスを求めた。

はじめに

1

植物は、太陽光を浴びると、根から吸収した水と空気中から吸収した二酸化炭素をもとに炭水化物と酸素をはき出しており、この働きが光合成として知られている。すなわち、光エネルギーを化学エネルギーに変換を行っている。太陽から放射されたエネルギーは、太陽定数が1366W/m²であることから地球全体が受け取っているエネルギーは174PWと求めることができる。このうち47%が地表に到達しており、人口光合成により太陽光エネルギーを化学エネルギーとして貯蔵し、必要なときに必要なエネルギーを取り出せる新エネルギー系を構築する研究・開発が進められている^[1,2]。

光合成細菌は、湖沼等の嫌気的な水界に生息している。単一の光化学系をつかった酸素非発生型の光合成を行いATPを合成しており、遺伝子操作の自由度が高く、エネルギー変換機構の基本原理解、光合成の最小ユニット、光合成器官の進化等を解明するための基礎研究に重要である^[3]。

紅色光合成細菌の光捕集系は図1に示すように、光合成は光合成器官クロマトフォア（chromatophore）と呼ばれる細胞膜の窪みで行われる。クロマトフォアに含まれる膜タンパク質の種類は少なく、光を収集するLH1 アンテナ複合体（light harvesting complex 1）、LH2アンテナ複合体（light harvesting complex 2）や光反応中心RC（reaction center）、そしてシトクロムbc1複合体（cytochrome bc 1 complex）などがある。LH2を持たないRhodospirillum (Rsp.) rubrumのような菌種もあるが、全ての紅色細菌にはLH1が存在する^[4]。近年の実験によってLH1やLH2の活発な自己組織化によってクロマトフォアの膜の窪み形状が決められるということが知られてきている。すなわち、これらの膜タンパク質の自己組織化によってどのように膜の形状が変化するかを知ることが、光合成のメカニズムの理解にもつながると考えられる。

本研究では、この自己組織化と膜の形状の決定のメカニズムを原子レベルで理解するために、原子間力顕微鏡によって得られたイメージをもとに組み立てられたモデル^[5,6]をもとに、その分子動力学シミュレーションを行った。このモデルはタンパク質や脂質

膜、周囲の水分子をあわせるとおよそ2000万原子になる巨大な系であり、TSUBAME2.0を用いた大規模な実験により、膜とタンパク質複合体の相互作用の解析が可能になると考えられる。

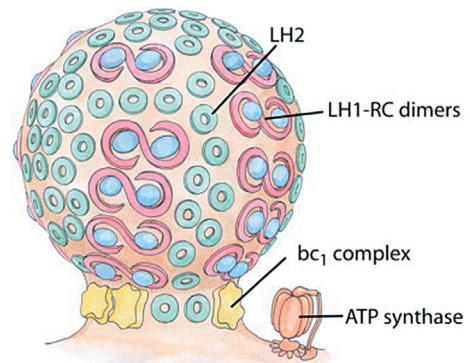


図1 紅色光合成細菌の光捕集複合体と反応中心の模式図^[4]

分子動力学法

2

分子動力学法（Molecular Dynamics: MD）は古典力学に基づき分子の振る舞いを求めるシミュレーション方法である。システムを構成する各原子について、微小時間ごとに周囲の原子との相互作用力を求め、Newtonの運動方程式 $F = ma$ を数値積分法で解き系の時間発展を求める。生体分子を対象にした分子動力学法は分子のダイナミクスの解析、構造最適化、タンパク質の結合部位予測などに応用されている^[7]。

分子動力学法では原子間の相互作用は分子力場を用いて計算される。

$$\begin{aligned}
 U(\mathbf{q}) = & \sum_{bonds} k^b (b - b_0)^2 + \sum_{angles} k^\theta (\theta - \theta_0)^2 + \\
 & \sum_{torsions} V_n [1 + \cos^n(n\phi - \phi_0)] + \\
 & \sum_{i,j \in atoms} \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{r_{ij}^0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_{ij}^0}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \\
 & \sum_{i,j \in atoms} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}
 \end{aligned} \tag{1}$$

式(1)は代表的な力場の1つであるAMBER力場^[8]であり、第一項は化学結合の長さ、第二項は化学結合の角度、第三項は化学結合による二面角、第四項はvan der Waals力、第五項は静電相互作用力を表す。このうちvan der Waals力と静電相互作用力は化学結合によらず離れた原子間に働く力であるため、原子数の2乗で計算量が増加する。実際に多くの場合分子動力学シミュレーションの実行時間の9割以上がこれら2種類の力の評価に費やされる。求めた相互作用力から運動方程式を用いて次のシミュレーションステップでの原子の座標と速度を計算する。分子動力学法で用いられるシミュレーションの時間幅は通常1~2フェムト秒程度の非常に小さい時間である。科学的に意義のある結果を得るためにはナノ秒やマイクロ秒のオーダーの計算が必要となるため、シミュレーションを数百万ステップ以上実行する必要がある。従って、分子動力学法は計算コストが高く、その高速化が強く求められているシミュレーション手法の1つである。

NAMD

3

NAMD^[9]はIllinois大学のTheoretical and Computational Biophysics Groupが公開している分子動力学シミュレーションプログラムである。同大学のParallel Programming Laboratoryで開発されているCharm++^[10]で記述されており、特に巨大分子系のシミュレーションで高い性能を発揮するよう設計されている。NAMDではシミュレーション空間の分割と相互作用力計算の分割によってスケーラビリティを向上させる工夫がなされている。シミュレーションのはじめにシミュレーションの対象となる空間をpatchと呼ばれる単位に分割し、計算を行う各プロセッサに分配する。各プロセッサは分配されたpatchに含まれる原子の座標や速度のデータを扱う。このpatchの大きさはカットオフの距離を考慮し、隣接するpatchのみで化学結合、van der Waals力や静電相互作用力の直接計算部ができるように設定される。このように空間的な局在性を考慮することによって大規模な系に対しても

計算量やプロセス間の通信を低減させることが可能である。

相互作用力の計算は力の種類ごとにcompute objectを定義して行う。化学結合による力を計算するcompute objectでは、計算に必要な原子が属するpatchに基づきその力が計算されるプロセスを1つ決定する。これにより複数patch、複数プロセスにまたがる原子を要する計算を効率的に行い、データの通信量も低減させることが可能である。化学結合によらないvan der Waals力や静電相互作用力の計算が分子動力学法の実行時間の80~90%程度を占める。NAMDではこれらの計算に対してGPUを利用することで計算を高速化させている。NAMDの実装では複数のCPUプロセスが1つのGPUを共有し、そのプロセスが持つ空間内の原子について非結合力の計算を行う。このように非結合力の計算のみにGPUを適用し、複数のCPUプロセスでGPUを共有させることで、計算機の構成に対して柔軟でスケーラビリティの高い実装を行っている。

大規模分子動力学シミュレーションの GPGPU における性能測定

4

本研究ではTSUBAME2.0のノードを700台、GPUを2100台まで使用して、NAMDのベンチマークデータを測定した。対象とした紅色光合成細菌の系はタンパク質、脂質二重膜、溶媒からなる総原子数20,305,122個の系である。使用したNAMD、Charm++のバージョンはそれぞれ2.8、6.3.2である。コンパイルにはgcc version 4.3.4、cuda toolkit 4.0を用いている。測定は4ノードから700ノードまでノード数を増加させ、ノード数の増加に対するNAMDのストロングスケーリングの性能を調べた。また、各ノード数についてGPUをノードあたり0台から3台まで使用するデータの測定も行った。

図2に4ノードから700ノードまでの実行結果を示す。結果はns/day、すなわち1日あたりに進むシミュレーションの秒数で示されている。通常、ノード数やGPUの台数が増加すると、計算量に対してデータ転送や同期のコストが増加することからパフォーマンスが伸びないことが多い。対してNAMDはノード数、GPU数双方の増加に対して700ノード2100GPUまでパフォーマンスの向上をみることができた。スケーリング性能だけではなくGPUの利用によるパフォーマンスの向上も目を見張る。NAMDではGPUを1台利用するだけでも、CPUのみの場合に比べ3倍程度のパフォーマンスの向上がみられる。

大規模GPU計算による光合成細菌の細胞膜システムの全原子シミュレーション

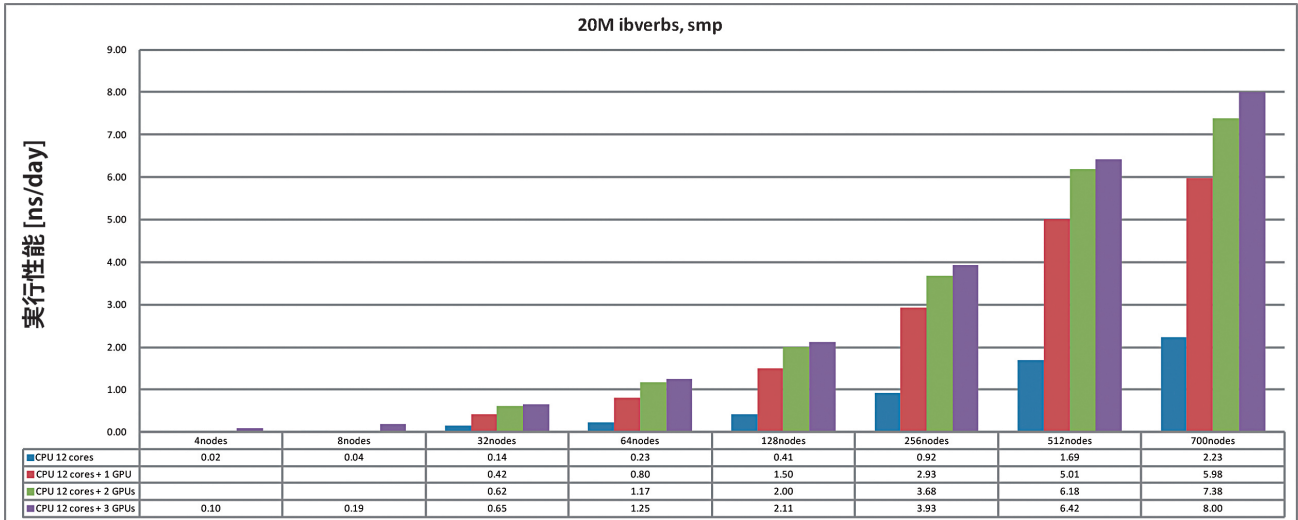


図2 NAMDのパフォーマンスベンチマーク

大規模分子動力学シミュレーションによる光捕集タンパク質の自己組織化過程の解析 5

本研究ではIllinois大学のKlaus Schultenらの研究グループが作成した紅色光合成細菌の分子モデルに対して、TSUBAME2.0の700ノード2100GPUを用いて分子動力学シミュレーションを行った。データのI/Oなどにコストがかかりベンチマークと比較するとパフォーマンスは低下するものの、グランドチャレンジ期間中に合計7ナノ秒のシミュレーションを実行することに成功した。

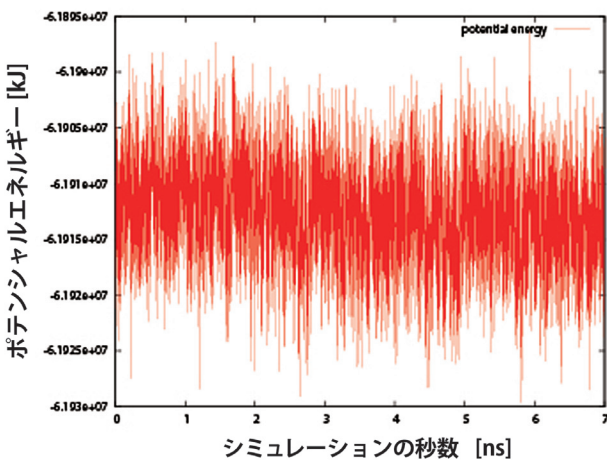


図3 ポテンシャルエネルギーの時間変化

図3に7ナノ秒間の系のポテンシャルエネルギーの変化を示す。ポテンシャルエネルギーは、系が不安定な場合やシミュレーション

がうまくいっていない場合に平均値が大きく変動する。今回の結果では概ね一定の値を保っており安定したシミュレーションを実行できていたと判断することができる。

次に光捕集タンパク質の自己組織化過程についての解析を行った。紅色光合成細菌の光合成の反応過程では反応中心RCに対して光捕集タンパクの自己組織化が起きることが報告されている。本研究では反応中心を持つLH1複合体と反応中心を持たないLH2複合体の重心距離の変化に着目し解析を行った。以降の議論では図4に示すように各LH1複合体、LH2複合体にアルファベット1文字の名前をつけて区別する。A～Z、a～jがLH2複合体に割り振られ、k～qがLH1複合体に割り振られている。

図5は各LH1複合体から、近傍のLH2複合体への距離の時間変化をプロットした図である。この図によると、例えばLH1複合体IとLH2複合体aやLH2複合体Q、LH1複合体pとLH2複合体H、LH1複合体nとLH2複合体Vなどは時間経過とともに重心間距離がゆるやかに縮んでいる傾向がみとれる。特にLH1複合体nとLH2複合体Vの距離が縮んでいるのに対し、LH1複合体kとLH2複合体Vの距離はほぼ一定であり、LH1複合体nとLH2複合体iの距離は増加傾向にあることから、LH1複合体nが引き寄せられていると推察される。

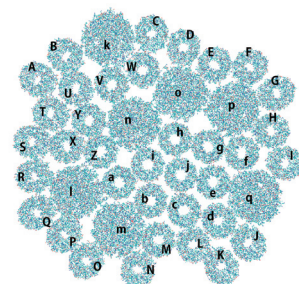


図4 各タンパク質のラベル

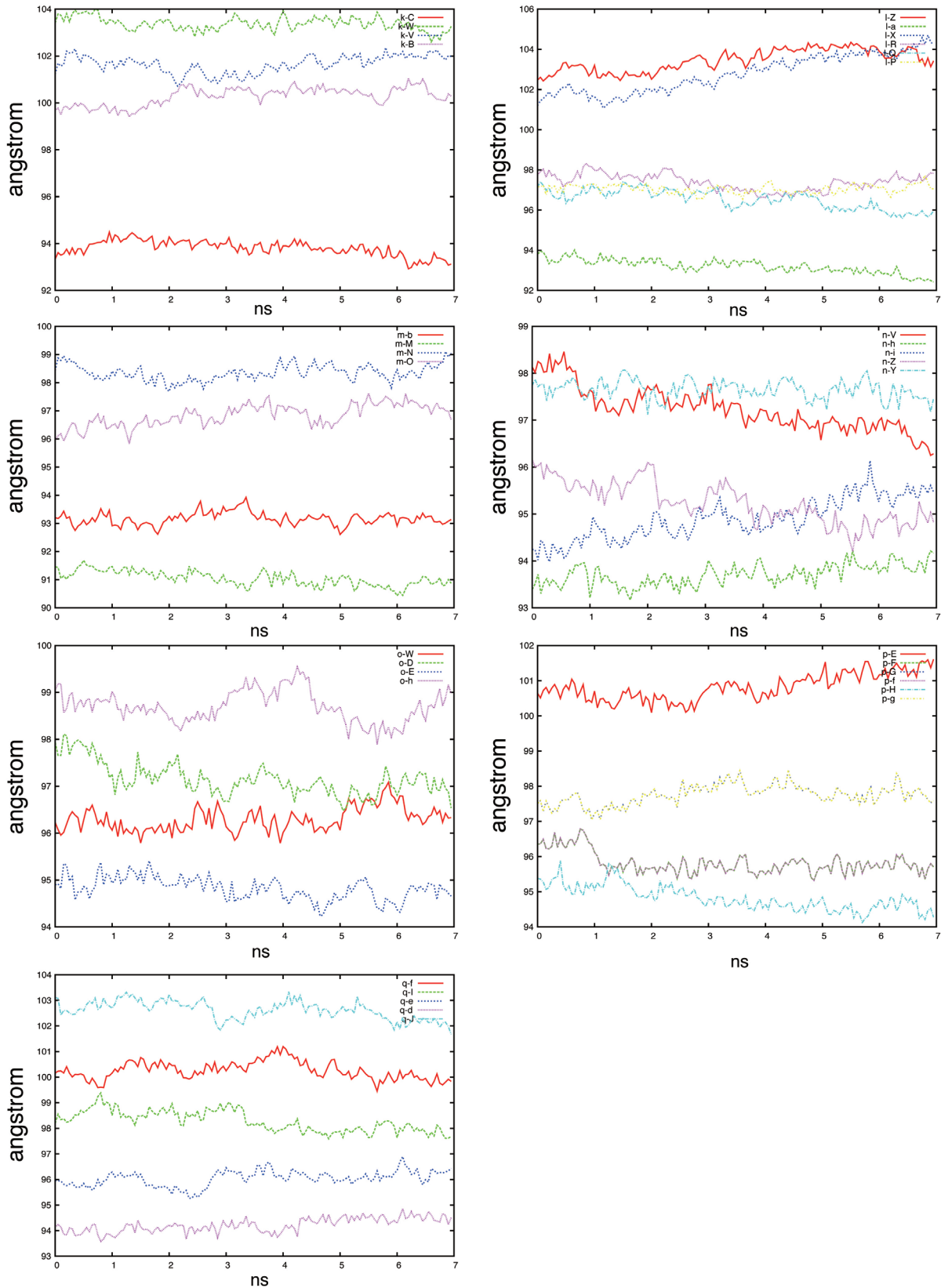


図5 各LH1と近傍のLH2間の距離の推移。縦軸は複合体間の距離で、横軸はシミュレーションでの秒数を表す。

まとめ

6

本研究では、紅色光合成細菌の光捕集複合体と反応中心の大規模な分子モデルに対してTSUBAME2.0の700ノードを用いて分子動力学シミュレーションを行うことで、GPGPUの性能評価とクロマトフォア内のタンパク質の相互作用を解析することを目的とした。分子動力学シミュレーションは数カ月単位で実行されることもあり、系が大きくなるほど長時間の実行時間が必要となる。GPUは比較的安価で導入が可能であり、計算速度の向上が見込めることから、多くの研究者にとって分子動力学シミュレーションに要する時間を短縮させるための選択肢として期待されている。本研究で性能評価に用いた総原子数20,305,122個の系においても、CPUのみでシミュレーションした場合に対し、GPUを用いた場合、128ノードの時に最大5.1倍の高速に実行することが可能であり、700ノードにおいても3.6倍ほど高速に実行が可能であることを示した。また、我々が別に示したように、GPUを用いることでエネルギー消費を抑えることも可能である^[11]。

膜環境中の複数のタンパク質の関与による現象は、従来の小さい分子系のシミュレーションで観測することは難しい。大規模な系を作成し、そのシミュレーションを実行できる計算機環境があって初めて観測することができる現象である。本研究ではGPUで加速されたTSUBAME 2.0の大規模な計算環境を用いることで3日程度の期間に7ナノ秒のシミュレーションを実行し、紅色光合成細菌のタンパク質の自己組織化の過程をシミュレーションすることに成功した。しかし、分子系が大きくなることにより長時間のシミュレーションが必要となる。今回得られた結果も、自己組織化の初期の過程の兆候が見られたが、まだ完全な現象の再現には及ばない。今後さらにシミュレーションを実行し、解析を加えていく必要があると考えられる。

謝辞

本計算はTSUBAMEグランドチャレンジ大規模計算制度・カテゴリ-Bとして平成23年9月に実施させて頂いたもので、学術国際情報センターの方々に深く感謝の意を表す。本研究で用いた紅色光合成細菌の分子モデルはIllinois大学のKlaus Schultenらの研究グループより提供された。

参考文献

- [1] A. Listorti, J. Durrant and J. Barber, Artificial photosynthesis: Solar to fuel, *Nature Materials* 8, pp. 929 - 930 (2009).
- [2] M. W. Kanan and D. G. Nocera, In Situ Formation of an Oxygen-Evolving Catalyst in Neutral Water Containing Phosphate and Co²⁺, *Science* 321, pp. 1072-1075 (2008).
- [3] 塚谷祐介, 浅井智広, 大岡宏造, 緑色硫黄細菌の非循環型の

光合成電子伝達系, *光合成研究* 20, pp.100-106 (2010).

- [4] D.E. Chandler, J. Hsin, C. B. Harrison, J. Gumbart, K. Schulten 95, pp.2822-2836 (2008).
- [5] M. K. Sener, J. Hsin, L. G. Trabuco, E. Villa, P. Qian, C. N. Hunter, and K. Schulten, Structural model and excitonic properties of the dimeric RC-LH1-PufX complex from *Rhodobacter sphaeroides*, *Chemical Physics* 357, pp.188-197, (2009).
- [6] J. Hsin, J. Strümpfer, M. Sener, P. Qian, C. N. Hunter, and K. Schulten. Energy transfer dynamics in an RC-LH1-PufX tubular photosynthetic membrane, *New Journal of Physics* 12, pp. (2010).
- [7] M. Sekijima, C. Motono, S. Yamasaki, K. Kaneko, and Y. Akiyama, Molecular dynamics simulation of dimeric and monomeric forms of human prion protein: Insight into dynamics and properties, *Biophysical Journal* 85, pp.1176-1185 (2003).
- [8] J.W. Ponder and D.A. Case, Force fields for protein simulations, *Advances in Protein Chemistry* 66, pp.27-85 (2003).
- [9] J.C. Phillips, R. Braun, W. Wang, J. Gumbart, E. Tajkhorshid, E. Villa, C. Chipot, R. D. Skeel, L. Kale, and K. Schulten, Scalable molecular dynamics with NAMD, *Journal of Computational Chemistry* 26, pp.1781-1802 (2005).
- [10] L. V. Kale, E. Bohm, C. L. Mendes, T. Wilmarth and G. Zheng, Programming Petascale Applications with Charm++ and AMPI. In *Petascale Computing, Algorithms and Applications*, pp. 421-441, Chapman & Hall / CRC Press, ed D Bader (2004).
- [11] S. Du, T. Udagawa, T. Endo and M. Sekijima, Molecular Dynamics Simulation of a Biomolecule with High Speed, Low Power and Accuracy Using GPU-Accelerated TSUBAME2.0 Supercomputer, *Proceedings of the Asia-Pacific Signal and Information Processing Association Annual Summit and Conference 2011 (APSIPA ASC 2011)*, pp.1-5, 2011

● **TSUBAME e-Science Journal vol.9**

2013年9月9日 東京工業大学 学術国際情報センター発行 ©
ISSN 2185-6028

デザイン・レイアウト：キックアンドパンチ

編集： TSUBAME e-Science Journal 編集室

青木尊之 ピパットポンサー・ティラポン

渡邊寿雄 佐々木淳 仲川愛理

住所： 〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1-E2-6

電話： 03-5734-2085 FAX：03-5734-3198

E-mail： tsubame_j@sim.gsic.titech.ac.jp

URL： <http://www.gsic.titech.ac.jp/>

TSUBAME

vol. 9

TSUBAME 共同利用サービス

『みんなのスパコン』TSUBAME共同利用サービスは、
ピーク性能 5.7PFlops、18000CPUコア、4300GPU搭載
世界トップクラスの東工大のスパコンTSUBAME2.5を
東工大以外の皆さまにご利用いただくための枠組みです。

課題公募する利用区分とカテゴリ

共同利用サービスには、「学術利用」、「産業利用」、「社会貢献利用」の3つの利用区分があり、
さらに「成果公開」と「成果非公開」のカテゴリがあります。
ご利用をご検討の際には、下記までお問い合わせください。

TSUBAME 共同利用とは…

他大学や公的研究機関の研究者の 学術利用 [有償利用]

民間企業の方の 産業利用 [有償・無償利用]

その他の組織による社会的貢献のための 社会貢献利用 [有償利用]

共同利用にて提供する計算資源

共同利用サービスの利用区分・カテゴリ別の利用課金表を下記に示します。TSUBAME
における計算機資源の割振りは口数を単位としており、1口は標準1ノード(12 CPUコア、
3GPU、55.82GBメモリ搭載)の3000時間分(≒約4ヵ月)相当の計算機資源です。
1000 CPUコアを1.5日利用する使い方や、100 GPUを3.75日利用する使い方も可能です。

利用区分	利用者	制度や利用規定等	カテゴリ	利用課金(税抜)※
学術利用	他大学または 研究機関等	共同利用の 利用規定に基づく	成果公開	1口:105,000円
産業利用	民間企業を中心 としたグループ	「先端研究基盤共用・ プラットフォーム形成 事業」に基づく	成果公開	トライアルユース(無償利用) 1口:105,000円
			成果非公開	1口:391,000円
社会貢献利用	非営利団体、 公共団体等	共同利用の 利用規定に基づく	成果公開	1口:105,000円
			成果非公開	1口:391,000円

※ 平成25年度の利用課金です。最新の利用課金については、下記 URL をご参照ください。
<http://www.gsicc.titech.ac.jp/node/58>

産業利用トライアルユース制度 (先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業)

東工大のスパコンTSUBAMEを、より多くの企業の皆さまにご利用いただくため、初めて
TSUBAMEをご利用いただく際に、無償にてご試用いただける制度です。

(文部科学省 先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業による助成)

詳しくは、下記までお問い合わせください。

お問い合わせ

- 東京工業大学 学術国際情報センター 共同利用推進室
 - e-mail kyoyo@gsicc.titech.ac.jp Tel. 03-5734-2085 Fax. 03-5734-3198
- 詳しくは <http://www.gsicc.titech.ac.jp/tsubame/> をご覧ください。