

ものづくりにHPCを活用するためのツールとケーススタディー

計

算

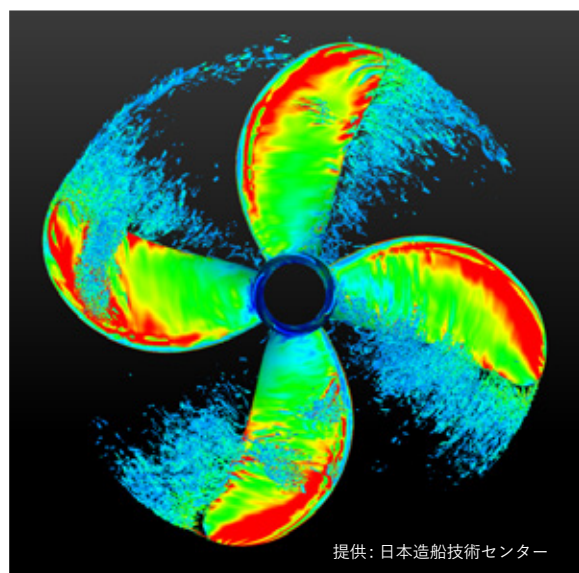
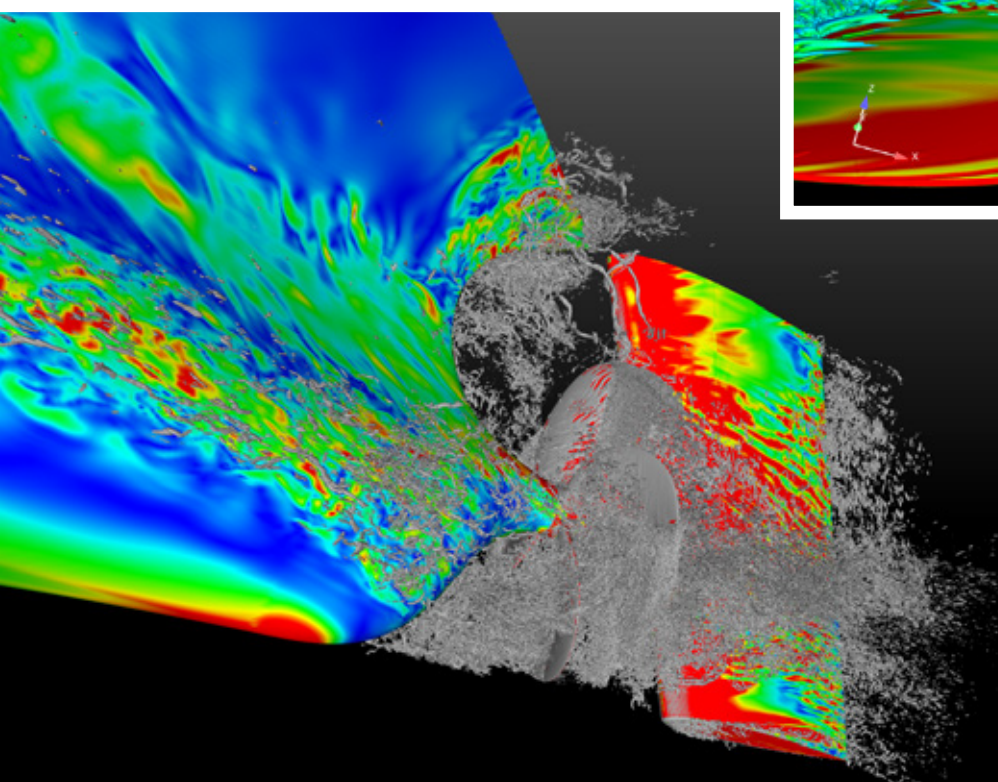
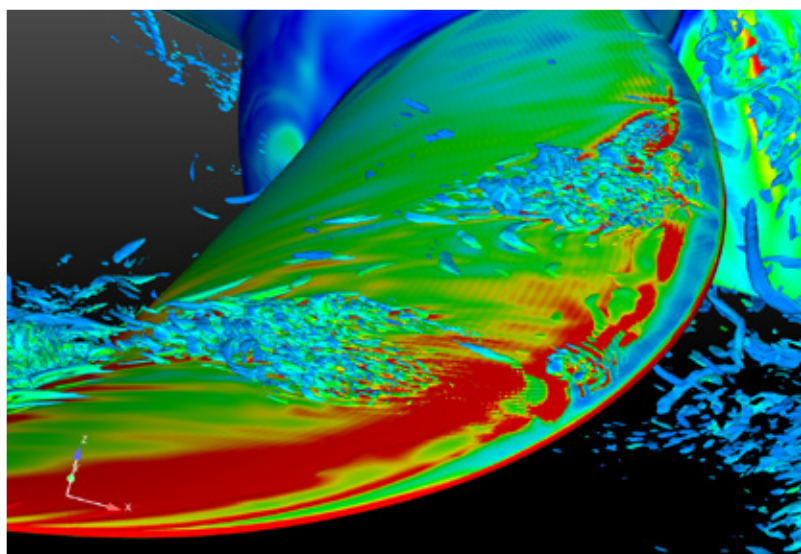
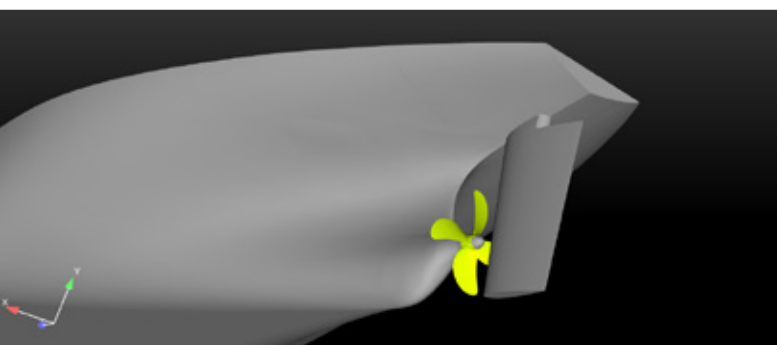
工

学

ナ

ビ

QUARTERLY NEWSLETTER / WINTER 2016



提供: 日本造船技術センター

流体解析ソフトウェア FrontFlow/blue

みずほ情報総研 吉村英人

第一原理電子状態計算プログラム PHASE/0

物質・材料研究機構 山崎隆浩

構造解析ソフトウェア FrontISTR

東京大学 橋本 学

VOL. 9

産業界での普及が進む FrontFlow/blue の現在とこれから

みずほ情報総研は乱流現象の高精度予測を実現する流体解析ソフトウェア FrontFlow/blue (FFB) の開発に2005年から参加し、解析サービスやコンサルティングサービスを通じて、企業のニーズに応えるべく利用と導入のサポートを行ってきました。製品開発の現場に近いポジションで、開発と普及に携わってきた同社サイエンスソリューション部デジタルエンジニアリングチームのチーフコンサルタント 吉村英人氏に FFB の最新の状況と今後の展開について聞きました。



みずほ情報総研株式会社
サイエンスソリューション部
吉村英人

はじめに吉村さんのバックグラウンドを教えてください。

大学時代は河川工学専攻で、川の流れをシミュレーションするために自分で CFD^[1] のコードを組んで計算していました。その関係で弊社に入社し、今年で8年目です。入ってからは汎用の商用ソフトやフリーの OpenFOAM^[2] を使った解析をしたり、自社開発の燃料電池シミュレータに関わったりしてきました。

FFB の開発とコンサルティングに関わるようになったのはこの4～5年くらいのことで、2011年に京が動き出し、それに合わせて開発を加速させるため私も開発に参加しました。

みずほ情報総研は FFB の開発に最初期から関わってきました。その一方で解析サービスや導入コンサルティングという形で産業界に提供する役割も担っています。FFB 以外にも多くのシミュレーションソフトウェアを取り扱っていますが、そのなかで FFB はどう特徴づけられているのでしょうか。

従来の設計開発で使われてきた流体のシミュレーションソフトウェアは、計算コストを抑えるために RANS^[3] という手法を使い、細かい渦をモデル化して取り扱ってきました。それでは、実験で見えるような細かい現象をなかなか把握できないんですね。

FFB は、RANS の代わりに LES^[4] という

計算手法を使って、我々が目にしている現象に近い答えを出すことができます。また、計算の規模が大きくなったとしても、スーパーコンピュータや HPC 環境で高速に動くように設計されているのが特徴です。

FFB だけであらゆるニーズに対応できるということでしょうか？

いいえ。解析の規模が大きくなるとスーパーコンピュータを使ったとしてもそれなりの時間がかかりますし、メッシュを作る難しさがまだ課題として残っています。結局はお客様がどういう課題を抱えているかに尽きるんですね。「あまり細かい現象は知らない、まずざっくりと当たりを付けたい」というのであれば、大規模な LES 解析は向いていません。

現象のメカニズムを詳細に知る必要があるときにこそ FFB は有効です。

たとえば、お客様がある部材を提供していて、それに不具合が起こったとしましょう。その不具合がどういうメカニズムで発生しているのかを把握して、事故の防止や今後の製品開発に繋げる必要があります。そういう状況でこそ LES による大規模解析、つまり FFB を使った解析サービスを提案します。

自社で FFB を使いたいという要望に応える導入サポートも提供していますね。導入は容易ですか？

FFB のライセンスは完全にフリーですので、通常の商用ソフトウェアのような導入時の高額な費用が発生しません。その点はお客様にとって大きなメリットで、我々としても提案しやすい点のひとつですね。

導入時の技術的な難しさについては、お客様の環境によります。インストール後に出てくる問題や要望もあるはずで、そのあたりは我々のコンサルティングサービスを利用していただければ、いろいろとサポートできると思います。

FFB を動かすにはどのくらいのスペックの計算機があればいいのでしょうか？

もちろん解きたい問題によるのですが、たとえばターボ機械の場合、流体を計算するときの格子数は小さく見積もっても1億弱くらいは必要になってきます。1ノードあたり100万格子として128ノード程度。まずそのくらいの規模のコンピュータがあれば計算できるでしょう。

正確な見積もりは扱う問題によって変わりますので相談してください。課題の内容、お使いの計算機、予算などに基づいて、新たなマシンの導入も含めた提案が可能です。

お客様の計算機では対応できない場合は、弊社にも計算機がありますし、FOCUS^[5] や京コンピュータの利用を提案することもできます。

[1] Computational Fluid Dynamics, 数値流体力学

[2] Open source Field Operation And Manipulation, GNU GPL で公開されている C++ ベースの CFD ソフトウェア

[3] Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations, レイノルズ平均を用いるナビエ-ストークス方程式の解法

[4] Large-Eddy Simulation, ラージエディシミュレーション

[5] 公益財団法人 計算科学振興財団 (本誌 Vol.4 参照)

FFBを京で使いたいという企業からの問い合わせは実際にありますか？

ニーズは増えてきています。

感覚的な話にはなりますが、京が動きはじめてから4年が経ち、それだけスーパーコンピュータやHPCに対する関心度は上がってきていると思います。こちらから持ち出さなくても、お客様のほうからスパコンの話題になることが多いのです。

今まで考えていたよりも大規模な計算がより短い時間でできる、それによって今までわからなかった現象が見えるようになる、という情報を目にする機会が皆さん多くなっていると思いますね。計算事例を見て「そういう計算ができるのか、できるのであれば我々もやってみたい」と。

今後、FFBはどんなふうに進歩していく

のでしょうか？

今、京を使うと300億格子規模の計算ができます。ポスト京の時代には1兆格子くらいまで可能になるでしょう。それだけ大規模かつ詳細な現象をシミュレーションできるようにするのが今後の開発方針のひとつです。

もうひとつは、その能力を複数の計算を並行に流すために使ってパラメータスタディーを実現することです。

現在は300億格子規模の計算を1回流すだけですごい体力と計算コストを使っています。将来的にはこれを1回で終わりにするのではなく、同規模のきちんとした計算を複数のケースについて行い、その結果を使って設計の最適化に繋げるのが目標のひとつです。

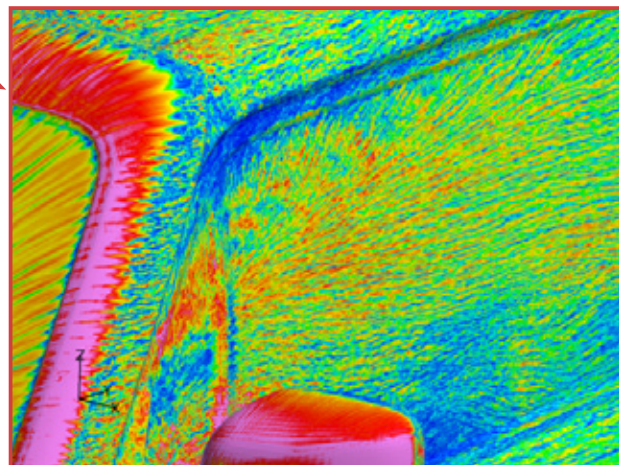
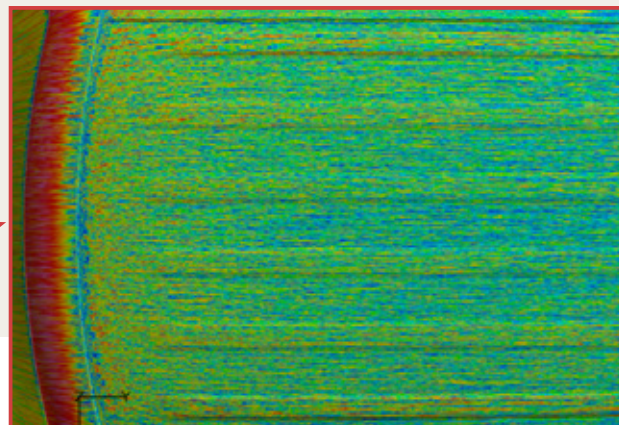
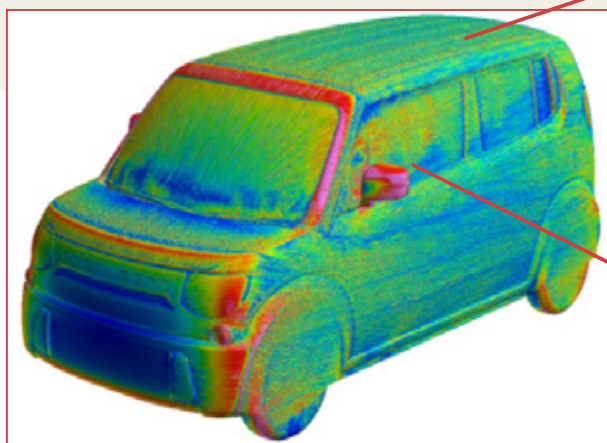
みずほ情報総研はFFBのようなシミュレーションソフトウェア開発のプロジェクトに開発者として参加し、またそれを解析サービスやコンサルティングサービスとしてユーザーに提供しています。システムインテグレーターのこうした取り組み方は一般的なのでしょうか？

私は特徴的だと思っています。我々のように開発とサービスの両方を行っている例はほとんどありません。

弊社は前身の富士総研、芙蓉情報センターの時代から計算科学に強いシンクタンクとして国プロや企業のソフト開発に関わってきました。課題解決に必要であれば、シミュレーションソフトウェアの内製も行ってきました。その経験が現在に引き継がれ、FFBにも活かされています。

〔図1〕 FrontFlow/blueと京を用いて行われた大規模LES解析の例

より快適な自動車を実現するため、設計段階で室内の騒音を予測することが求められている。この解析事例は、高速走行時の空力騒音に着目し、大規模なLES解析を実行してその予測精度を評価するために行われた。100km/hで走行する車体に生じる2kHz以下の振動を予測するために解像度1.5mmの計算格子を生成した。計算には京を使用（計算規模については表1参照）。計算結果は実験データと比較され、高精度な予測が可能であることが示された。画像は車体表面の瞬時温度の絶対値分布を可視化したもの。



〔表1〕 京で行った計算の規模と所要時間

	粗いメッシュによる準備計算	精細なメッシュによる本計算
格子数	8000万	50億
CPU数	1024	3456
ピーク性能 [TFLOPS]	128	432
時間刻み [μ sec]	54.0	10.8
毎ステップ計算時間 [sec]	0.6	9.3
合計計算時間 [hour]	16.7	60

提供：スズキ株式会社

実りの多いシミュレーションを実現する 第一原理電子状態計算プログラム PHASE/0



物質・材料研究機構
理論計算科学ユニット 特別研究員
山崎隆浩

物質・材料研究開発機構が中心となって開発が続けられている PHASE/0 は密度汎関数理論に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理電子状態計算プログラム。全エネルギー、電荷密度分布、電子の状態密度、バンド構造、安定な原子構造などの計算ができます。この記事では、京コンピュータに対する最適化とその応用例、ユーザーサポートの取り組みなどについて紹介します。

前回(本誌 Vol.2) PHASE/0 の状況をうかがってから、およそ2年が経ちました。主にこの2年の間に進められた研究開発について教えてください。

2つ方向性があります。ひとつは並列効率を上げていく方向。京の上で性能を出すために並列効率と単体ノード(単体コア)の効率を上げるチューニングを行いました。京だけでなく他のマシンでも効率は向上しています。幸い、今の時代は、マシンが違っても単体コアに関しては同じようなチューニング手法が使えます。マシンごとに細かいことを考えなくて良くなったんですね。

もうひとつの方向は機能追加です。精度の高い計算をしたいという要望に応えるために新しい機能を加えました。

まず前者の京における性能向上について詳しくお願いします。

3次元のフーリエ変換がネックになっていたんです。大規模な密度汎関数法でフー

リエ変換を使うのは馬鹿げているという話もあるんですが、我々はこれを京の上で効率よく実行することに、理化学研究所 計算科学研究機構と共同で取り組んできました。

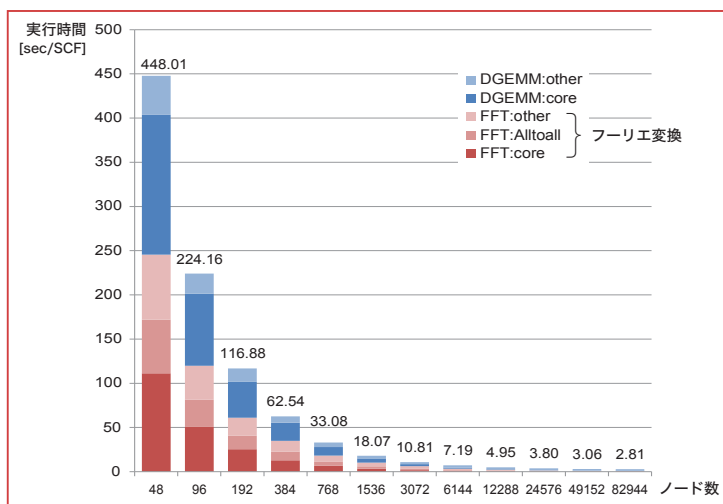
3次元フーリエ変換を行うときに、X軸 Y軸 Z軸を MPI 並列空間の中で、例えば ZXY という配列に置き換える(転置転送)ところが時間のかかる処理なのですが、京のネットワーク構造は6次元のメッシュ/トラス構造になっていて、これをうまく利用することによって並列効率を向上させることができます。つまり、MPI 空間への配置を工夫すると、3次元×3次元の独立した空間が取れ、転置転送するときの経路が短くなるように制御でき、フーリエ変換の処理もボトルネックにならず、計算速度が保たれることがわかりました。

約4,000原子規模のモデルに対し、京のフルノード(約80,000ノード)まで並列数を増やしても計算時間は減っていきます。ここまで並列効率が伸びていくことを示したのは大きいと思います。【図1】

従来、このくらいの原子数の規模の演算で並列効率を出すのはなかなか難しかったのですが、一番需要が多いのはこの規模か、もう少し小さい領域なんですね。産業応用を考えると、数万、数十万原子といった規模の1点計算よりも、数千原子規模までの原子数で第一原理の分子動力学計算を行う方が実りが大きいだろうとわわれは考えています。

チューニングの成果を活用した応用例がいくつか発表されています。ここではシリコンカーバイド(SiC)半導体の例を説明してください。

SiC はエネルギーロスが少ないパワーデバイスの材料として近年盛んに研究されているテーマです。我々が着目したのは、SiC と酸化膜(SiO₂) の界面。ここがどうしても乱れるのです。そうすると電流がうまく流れなくてエネルギーをロスしてしまう。良い界面を作るレシピを世界中が考えています。ここでいうレシピとは、温度や O₂



【図1】 PHASE/0の京コンピュータにおける並列効率

3,848原子のSiC系を対象にセルフコンシステントフィールド(SCF)法の繰り返し計算の1回あたり所要時間を測定した。京のインターコネクト機構を活用したチューニングにより、48ノードからフルノードまで良好な並列処理効率を示している。本文では触れていない行列積の計算(グラフ中DGEMMと示されている領域)にも京の機構を活用したチューニングが施されている。

[1] イベント情報 <https://azuma.nims.go.jp/events>

[2] 使用許諾条件 <https://azuma.nims.go.jp/cms1/downloads/software>

を入れる頻度を制御するウインドウをいかに狭めていくか、あるいはいかに別の分子を添加するかといったことです。

まず、SiC基板とSiO₂の界面に炭素-炭素結合(CCボンド)がいっぱいある構造【図2】から出発して、ここにO₂を持って来たときに何が起こるかを温度の要素を入れた計算で見えています。カーボンが残ると界面特性を悪くするので、きれいに余剰カーボンを排出したい。基本的にCOの形で出るはずなので、どうすればうまくそうなるのかを知るのが計算の目的ですね。

結論はまだ出ていないのですが、反応を律速している要因の候補はいくつか見えてきました。今後、強いスケールアップ性能を持つPHASE/0を使って、ここで説明したもの以外にも、いくつかの界面モデル構造に対して長時間の分子動力学計算を繰り返すことで、より良いレシピの開発に役立つ知見が得られるだろうと考えています。

2つ目の方向性、機能追加についてはどうですか？ バージョンアップのたびに多くの機能追加が行われていますが、直近の代表的な新機能をあげてください。

これまで密度汎関数法という方法では、どうしてもバンドギャップが正しく出ませんでした。改善する手法はあったものの、それを入れると計算が圧倒的に遅くなるという課題があったのです。一方で正しいギャップを求めたいという要望は多かった。

界面の不純物ギャップが話題になることが多いんです。

ギャップ中の順位とオリジンを同定するために精度の高い計算を実現すると同時に、この部分の並列効率の向上と演算量の低減を実現する計算手法を開発しました。これが最近の機能追加では一番大きな所で、PHASE/0の次の公開バージョンで取り込まれる予定です。

PHASE/0チームは利用講習会^[1]という形で顔の見える普及活動を行ってきました。そこでは潜在的なユーザーと直接意見を交換する機会も多かったと思います。今、企業のユーザーはどんな要望を持っているのですか？

反応を見たいという声が多いですね。半導体や金属の表面でどういうことが起きているのかを見たいのだと思います。より具体的には電池の中の原子の拡散反応を知りたいという声もありました。

そういった計算をしたいという欲求は以前からあったはずですが、大規模な計算になるので計算機資源の問題がありました。今でも誰もができるわけではなくて、現状でどこまでできるかを確かめつつ攻め方を考える感じになるでしょう。

次の利用講習会ではHPC/PF(本誌Vol.7参照)と連携する新しいツールの実習がありますね。

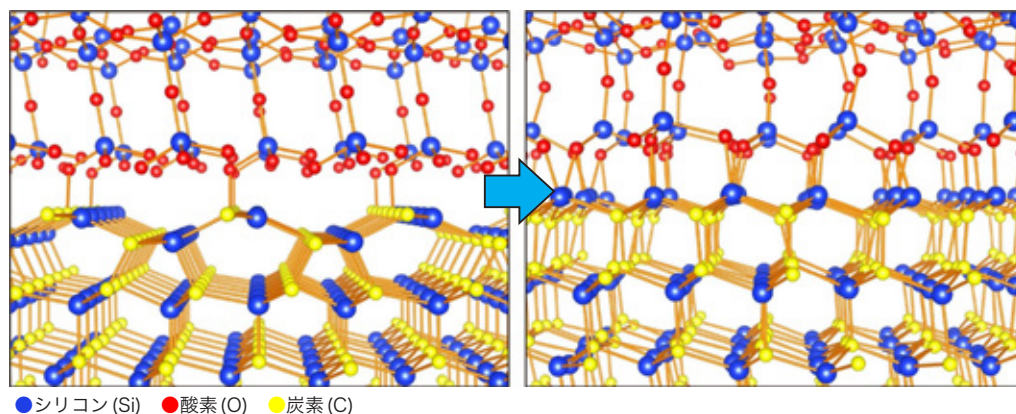
プラチナ表面のCO吸着が最終的な題材ですが、その前に精度を検証するための予備計算を実習に取り入れます。

どういうパラメータで始めれば精度の良い計算ができるかを知るために予備計算は不可欠です。しかし、手間がかかる部分でもあって、講習会では省くこともありました。次回は、新たに開発したパラメータエディタを使って、予備計算におけるパラメータスタディを体験して頂く予定です。

より実践的な講習になるわけですね。最後に今後のPHASE/0について山崎さんの展望を聞かせてください。

高機能が欲しい人に向けてプログラムを開発していきます。大きい計算が必要な人のためにチューニングもしていきます。ただし、大きな規模の計算を大きな計算機でやるだけではなく、成果を得やすい比較的小さな規模での性能を上げていくことにも注力したいと思っています。

そして、誰でも使えるようにしたいですね。そのために参加者を増やしたい。我々はソースを全部公開しているので^[2]、メンテができる人とか、機能追加とかバグ取りができる人に加わってもらえると嬉しいです。



【図2】 SiC半導体の酸化膜形成シミュレーション

理想SiC表面(下側)と結晶性のSiO₂(上側)を重ねて、京を使って理想界面構造を求める計算を行った。この界面構造(左側)に酸素分子を供給して数ピコ秒の有限温度の計算をすることを繰り返すことで新たな知見を得て、最適な成膜レシピを獲得する。

ユーザーと共に成長する オープンソース構造解析ソフト FrontISTR

FrontISTR（フロント・アイスター）は、「FrontISTR研究会」^[1]が中心となって開発が進められている並列有限要素法プログラムです。そのプログラムはオープンソースで公開されており、ユーザーに対するサポートも精力的に行われています。この記事では、研究開発とユーザーサポートの両面でFrontISTRに関わっている東京大学の橋本学講師から最新の成果について聞きました。



東京大学 新領域創成科学研究科
人間環境学専攻
橋本 学 講師

橋本さんはいつ頃からFrontISTRに関わっているのでしょうか？

私が東京大学に来た2011年からです。最初にFrontISTRを使用したのは、東芝、帝京大学、東京大学の共同研究である「高性能タービンブレードの設計に関する研究」でした^[2]。蒸気タービンの低圧ロータの最終段動翼が計算対象でして、流体力が作用する動翼の変形や振動応力を予測するというものです。並列計算には地球シミュレータを使用しています。この共同研究は現在も続いています。

これまでの経験から、FrontISTRをどのように評価するようになりましたか？

FrontISTRは、解析メッシュの規模が大きくなったときに商用ソフトより高い並列性能が得られる線形ソルバーを備えています。それから、商用ソフトの多くは中身がブラックボックスであり、ユーザーサブルーチンによって外側をカスタマイズできたとしても内部を自由にカスタマイズすることは難しいと思います。FrontISTRは、商用ソフトと比べると歴史は浅いですが、商用ソフトのようにユーザーが要望する細かい解析機能までカバーしていません。しかし、ユーザーが直面している問題に対して細かい部分にまで解析機能をカスタマイズできますし、利用する並列計算機に対して線形ソルバー部分をチューニングすることもできます。

【図1】京コンピュータでの大規模解析の例^{[5][6]}

プリント配線基板のリフロー工程で熱により生じる反りを大規模な解析メッシュを使用して解析した。オリジナルのメッシュサイズは30μmである。これに対して2回のリファインを行い、メッシュサイズ7.5μm(約25億要素)の解析モデルを生成した。京コンピュータの8,192ノード(65,536コア)を使用するハイブリッド並列計算を実施した。

ここからはFrontISTR関連プロジェクトの研究成果について聞いていきます。HPCI戦略プログラム分野4『次世代ものづくり』の課題のひとつとして、FrontISTRの反復法ソルバーのハイブリッド並列化^[3]の性能評価が京コンピュータで行われました。

平成24年度に京コンピュータ上で反復法ソルバーの並列性能最適化が行われました。これは、一般財団法人高度情報科学技術研究機構神戸センター利用支援部にご協力いただいたもので、講演論文^[4]や報告書^[5]の形で成果発表されています。

最適化の対象となったのは、反復法ソルバー内で計算負荷が大きい行列ベクトル積と前処理です。演算ループのOpenMP並列化において、行列の非零要素の数を数えて、演算数が均等になるようにブロック分割が行われました。また、京コンピュータには、セクターキャッシュという2次キャッシュを2つの領域に分割してどちらにプログラム変数を格納するかをコーディングレベルで指定できるという機能があります。このセクターキャッシュ機能を使用して、2次キャッシュ

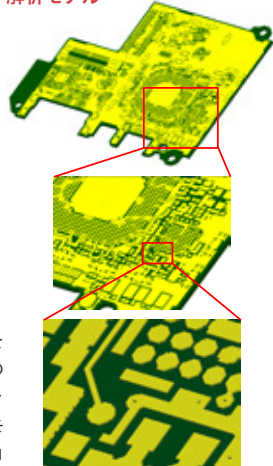
からの参照に対して効率化が行われました。さらに、反復法の前処理のスレッド並列化には、演算の依存性をなくすためにマルチカラーオーダリングが使用されました。

大規模計算に対してハイブリッド並列化の性能評価を行うため、プリント配線基板の熱反り解析が行われました(【図1】参照)。配線基板の反りを解析するには、細かい配線のパターンを忠実にモデル化する必要があります。解析メッシュの規模が小さいと、配線のパターンを表現できなくなってしまう。解析モデルについては、講演論文^[6]をご覧ください。京コンピュータの8,192ノード(65,536コア)を用いて約75億自由度の問題がハイブリッド並列で計算され、大規模構造解析への適応性が実証されました。

ブリヂストンと東京大学の共同研究で行っているフィラー充填ゴムの解析についても教えてください。

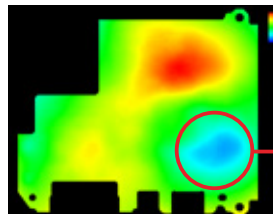
この共同研究も現在継続中のものです。タイヤに利用されているゴム材料はフィラー充填ゴムと呼ばれています。カーボン

解析モデル

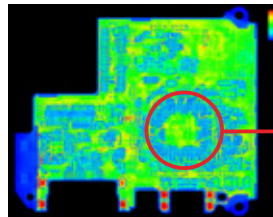


メッシュサイズ 30 μm

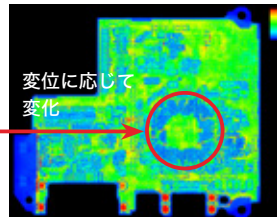
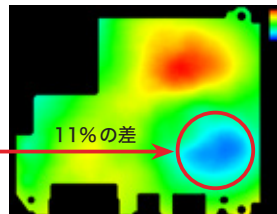
解析結果：Z方向変位



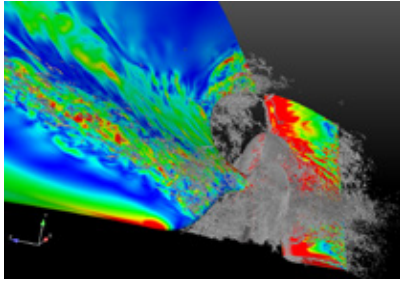
解析結果：ミーゼス応力



(a) リファイン1回 (1億自由度)



(b) リファイン2回 (75億自由度)



今号の表紙

京と FrontFlow/blue を使った大型船舶の推進状態の解析

大型船舶の船型設計に欠かせない、自航試験と呼ばれる、曳航水槽(400m)で船(6m)がプロペラによって推進している状態を計算した結果を表しています。この計算は44億格子を使った世界最大規模の計算で、京コンピュータとFrontFlow/blueを使った次世代の技術と評価されています(COMPIT'15にて最優秀論文賞)。曳航水槽試験と同等な精度が得られるようになれば、船舶設計が革新的に変化すると期待されています。

日本造船技術センター 西川達雄

編集後記

HPCI戦略プログラム分野4『次世代ものづくり』の各プロジェクトは、開発したソフトウェアが産業界で広く活用されるよう、ユーザーサポートに力を入れています。ユーザー会やワークショップといったお互いの顔が見える活動も継続的に行われていて、記事ではそうした事例についても紹介しています。(F)



計算工学ナビ オフィシャルサイト

本誌のPDF版やソフトウェアライブラリ、ニュースなどのコンテンツを提供しているWebサイトは下記のURLからアクセスできます

<http://www.cenav.org/>



計算工学ナビ Vol.9

発行日：2016年1月1日

発行：東京大学生産技術研究所

革新的シミュレーション研究センター

〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1

office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp