

HPCI戦略プログラム「分野4 次世代ものづくり」の最新状況 スーパーコンピュータ「京」を利用した プロダクトランを始動！

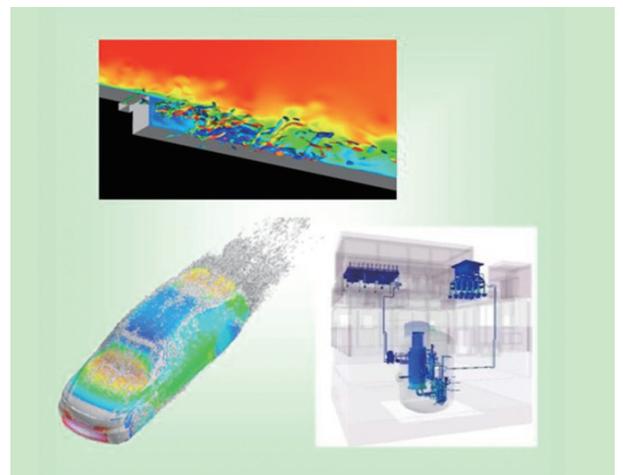
本号では、革新的シミュレーション研究センターが実施している主要な事業の一つであるHPCI戦略プログラム「分野4 次世代ものづくり」の最新状況をご紹介します。

HPCI戦略プログラムは、本年9月に共用を開始した我が国が誇るスーパーコンピュータ「京」を利用した革新的な成果を早期に創出すること、「京」を頂点とした計算科学技術の戦略的推進を図ることを目的として、平成21年度の実施可能性調査、平成22年度の準備研究期間を経て、平成23年度からは本格研究を推進している文部科学省が主管する補助事業です。本事業では5つの戦略分野が設定されていますが、その内の一つが「分野4 次世代ものづくり」です。本センターを代表機関として、

(独)日本原子力研究開発機構(JAEA)と(独)宇宙航空研究開発機構(JAXA)の3研究機関がネットワーク型の研究開発拠点を形成して推進しています。

本分野では5つの研究開発課題を設定し研究開発を推進するとともに、そこで得られた研究成果や計算ノウハウを広く産業界に普及させるために、HPCプラットフォーム(HPC/PF)の構築、HPCの人材育成や需要開拓、ならびに、実証研究の公募事業などを実施しています。

「京」の正式運用はこの9月に開始されたばかりですが、戦略プログラ



ムでは正式運用開始前からプログラムのチューニングなどを鋭意進めていたこともあり、既に「京」を利用した大規模な実証計算の成果も始めているとあります。本号ではそのような最新成果も含めて、「次世代ものづくり」の最新の状況をご紹介します。

センター長・教授 加藤千幸



米国ユタ州ソルトレイクシティで開催されたスーパーコンピュータに関する世界最大の国際会議SC12で招待講演する加藤千幸センター長・教授

研究課題責任者 加藤 千幸 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 センター長・教授

研究開発課題3では、自動車、船舶、ターボ機械、ならびに燃焼・ガス化装置を対象として、乱流の直接シミュレーションを応用することにより、これらの製品の研究開発や設計のあり方を抜本的に変革することを狙って、様々な取り組みの中で、「京」を利用した大規模な応用計算の実証研究を進めています。以下、それぞれの製品に対する研究開発の進捗状況を説明します。

空力・音・熱・車両運動の連成解析による次世代設計システムを開発

責任者 坪倉 誠 北海道大学大学院工学研究院 准教授

自動車空力プロジェクトでは、産学連携コンソーシアム「HPCによる自動車用次世代空力・熱設計システムの研究開発」を組織しました。現在、4つの研究機関と、12の自動車メーカー・サプライヤーが強力に連携して、「京」を有効活用できるシステムの開発と実証に取り組んでいます。またシステムの実証テストを通して、参画メンバー間で先進的な空力設計の基盤となるノウハウを共有することも目標の一つです。

本システムでは、数十億～数百億要素規模の大規模空力・熱解析を実際の設計プロセスに組み込めるよう、プリ処理として階層的データ構造による超大規模格子の高速作成機能を有し、大規模なデータ処理に適した統合インターフェースを構築します。これにより、今までのCAEでは解析が難しかった空力連成問題の予測を可能にします。

(1) 気流・車両運動連成空力解析

通常の風洞実験では予測が難しい大気変動や車体姿勢変化等のリアルワールドを想定した定常空力評価と、

操縦安定性や走行安定性向上のための非定常空力評価を実現します。リアルワールド定常空力では、風洞試作費を削減するための「標準デジタル風洞」を「京」に構築しています。また今まで問題になっていた風洞と実走行との相関問題の解決を目指します。非定常空力では、微小なヨーやピッチ加振時の空力安定性評価を実車で実現するとともに、横風時のドライバーの反応も考慮に入れた運動連成解析システムを構築します。

(2) エンジンルーム・排管系熱害解析

熱交換器通過風による冷却性能予測、エンジンルーム内部品の熱害予測、車体空力と冷却性能のトレードオフ、HVAC/CABIN内熱環境予測等をターゲットに解析システムを構築しています。気流と熱、特に輻射モデル等の超並列解析環境への対応やエンジンルーム内の複雑形状の再現、気流と熱との時

定数の違いの克服が課題となります。

(3) 車室内騒音解析

空力・構造加振・騒音の連成解析を実現することで、車室内騒音の高精度予測を目指しています。これら個別の解析ソルバーの統合インターフェースの構築と、構造振動解析や音響解析のための物性値データのフォーマット化がシステム構築の鍵となります。モデル試験によるベンチマーク、モックアップモデルを用いた基礎検証、実車による実証、と段階的に開発を進めています。

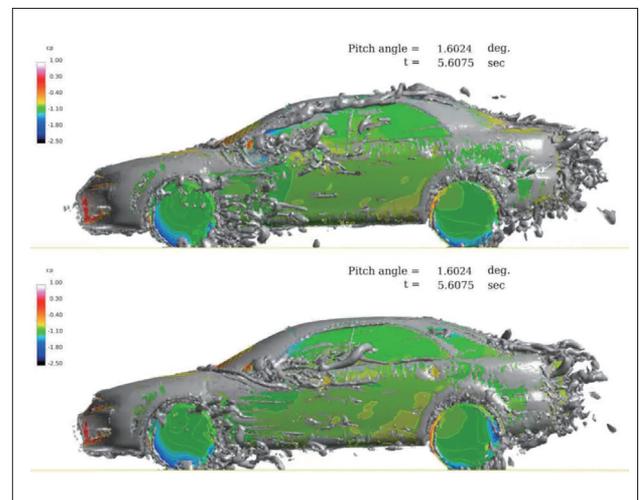


図1. 車体形状変更によるピッチ運動安定性の改善 (上:改善前、下:改善後)

船舶の推進性能予測技術の開発

責任者 加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

財団法人日本造船技術センターと連携・協力して、現在、大型の曳航水槽を用いて実施している推進性能試験を、「京」を利用した大規模計算により置き換えることを目的として実証研究を進めています。これまでに80

億格子を用いた計算を実施し(図2)、船舶の推進抵抗を定量的に予測できる目途が立っており、現在、プロペラ

や造波抵抗なども考慮した計算を実施するための準備を進めております。

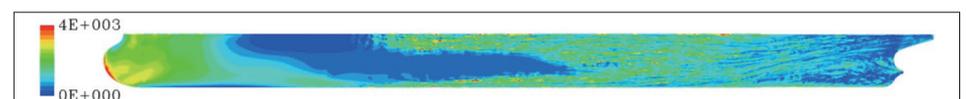


図2. 船体表面の瞬時の温度分布

ターボ機械次世代設計システムの研究開発

責任者 加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

一般社団法人ターボ機械協会の下、「ターボ機械HPCプロジェクト」を発足させ、メーカー 13社ならびに大学等研究機関6機関が連携・協力して、6つの実証研究テーマを設定しています。これらのテーマはターボ機械の不安定現象の予測やファンから発生する流体騒音の予測など、従来の計算機能力では予測が出来なかった現象を対象としています。特にこのプロジェクトでは、単に、「京」を利用した数値シミュレーションによる予測技術を確立するだけでなく、これまで詳細が明らかになっていなかった複雑現象の解明も行います。6つのテーマの内の一つとして、以下、遠心圧縮機のサージ予測の例をご紹介します。

このテーマでは、(独)宇宙航空研究

開発機構で開発された圧縮性流体解析ソフトウェアUPACSに改良を加えることにより、遠心圧縮機のサージ予測を実現することを目指しています。計算ソルバー部の大規模並列計算への対応だけでなく、数十万コアを想定して、計算格子の生成、可視化や計算結果処理などの前後処理部の大規模解析への対応を実施しています。またターボ機械など回転機械の動静翼干渉解析に必要な移動境界接続法に関して、時々刻々と変わる接続データを大規模計算においても効率良く交換するための並列

データ通信モジュールを整備し、蒸気タービンの解析に必要な蒸発・凝縮モデルの導入にも取り組んでいます。現在、移動境界接続法の汎用化がほぼ終了し、試計算による機能検証を実施しています。

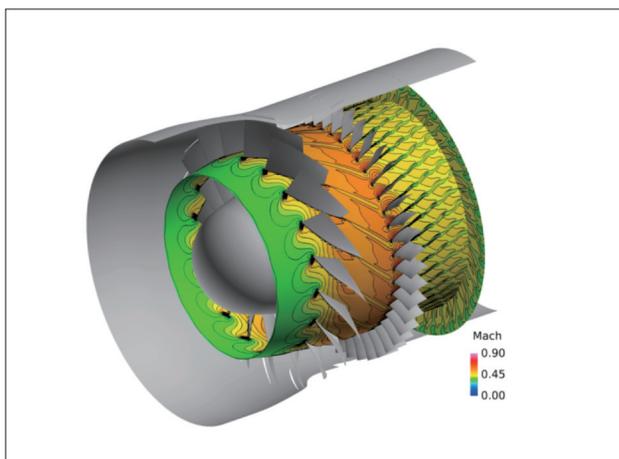


図3. 軸流ファンの解析例(ミッドスパンにおけるマッハ数分布)
(ファン形状は株式会社IHIより提供)

次世代燃焼・ガス化装置設計システムの研究開発

責任者 黒瀬 良一 京都大学大学院工学研究科 准教授

エンジンやボイラをはじめとして様々なエネルギー・輸送機器に利用されている燃焼・ガス化装置の高効率化および低エミッション化が強く求められています。しかし、このような装置の開発および最適操作条件の選定には様々な試験が必要であり、膨大なコストおよび時間がかかっているのが現状です。本研究では、「次世代燃焼・ガス化装置設計システムの研究開発」に関するコンソーシアムを立ち上げて、燃焼・ガス化を扱う装置の設計や最適操作条件の選定を支援するための数値シミュレータの開発およびその信頼性・有用性の検証に関する研究を進めています。具体的には、現象が特に複雑なケロシン等の液体燃料や石炭等の固体燃料の混相燃焼・ガス化を主な対象とし、(1) large-eddy simulation (LES) 法を

ベースに開発した燃焼・ガス化数値シミュレータの超大規模・超並列計算に対する適用性および信頼性の検証、および(2) direct numerical simulation (DNS) による燃焼・ガス化のメカニズムの解明、計算精度の検証のためのデータベースの構築、を進めています。図4は、乱流燃焼モデルとしてフレームレット法を採用したLESを、実際の航空機用ガスタービンエンジン燃焼器を模擬したサブ(1/2)スケールモデル内部の噴霧乱流燃焼場に適用した例を示したものです。燃料は液体のJet-A(航空燃料用ケロシン)とし、蒸発を伴う個々の液滴の挙動をラグランジェ的に解くことにより求められています。また、燃焼に

は、約280化学種、1600反応を考慮しています。計算格子の節点数、セル数はそれぞれ約140万、750万であり、燃料液滴のパーセル数は30万です。実測値との比較から、本LESは、燃焼器内のガス温度およびNO濃度を精度良く予測可能であることが確認できました。現在は、より複雑な形状および様々な燃焼条件下での高精度化、高速化を目指した研究開発を進めています。

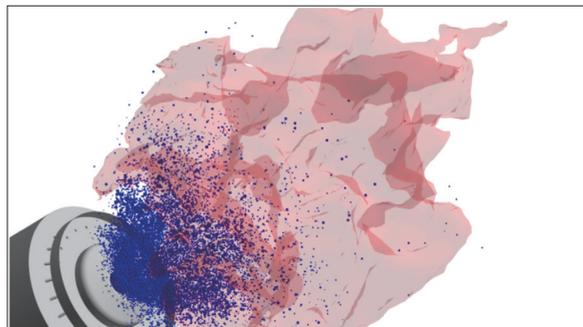


図4. 航空機用ガスタービンエンジン燃焼器
(1/2スケール)内乱流噴霧燃焼場のLES

研究課題責任者
藤井 孝藏 (独)宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 副所長・教授

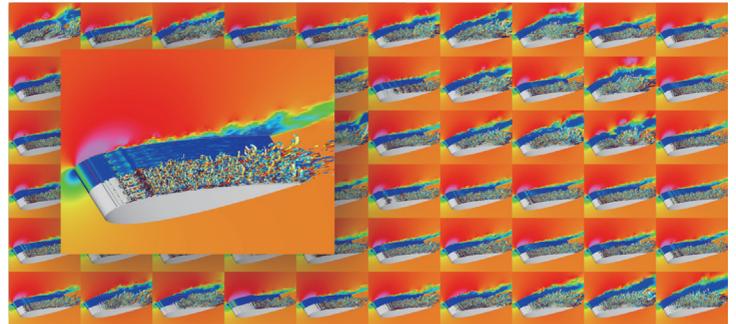
III 形状工夫から流体制御へ — 流体機器の設計革新 —

形状設計が限界に近づいている輸送機器・流体機器の更なる高効率化や低騒音化を目指し、これまでの「形状工夫による流体機器設計」という設計概念を越えた新しい設計概念「マイクロデバイスによる流体制御を前提とした流体機器設計」を提案します。流体の持つ非線形性の難しさを逆手にとる本設計概念の有効性を、「京」を用いた大規模数値シミュレーションによって実証することで新しい流体制御技術の概念を確立し、その実用化に向けた道を示します。本設計概念の実用化は、流体機器の高性能化による省エネルギー化、自然エネルギーの有効利用と効率化、社会(流体)騒音の低減化を格段に向上させる可能

性を有し、その実現は世界に誇る日本のものづくり技術を更に発展させます。

現在、開発した「京」用のソフトウェアを利用して、小型の流体機器に相当する多様な条件下で単純形状に関する流体制御の数値シミュレーションを実施することで、流体制御メカニズムをほぼ解明し、この領域での流体制御マイクロデバイスの設計指針を明らかにしつつあります。今後は、大型や高速の流体機器に対応す

る条件下での流体制御メカニズムを明らかにし、設計の指針を明確にすることで広範な流体機器に対する新しい設計概念の有効性を実証していきます。「京」をはじめとするHPCI利用によって、それなくしては実現できない数値シミュレーションが流体機器設計の革新への道を示します。



様々な条件下での単純翼型まわりの流体制御シミュレーションの結果例 (それぞれの図が各ケースに相当)

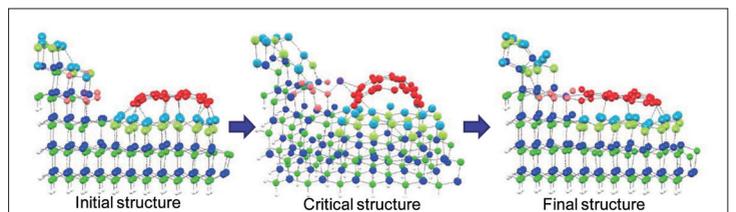
研究課題責任者
大野 隆央 (独)物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット ユニット長

III 第一原理計算によるナノスケール半導体デバイス材料の解析

今年度は、「京」を用いた第一原理計算の高速化のため、ソフトウェアPHASEの性能最適化を行いました。PHASEを使用した大規模系の計算で特に負荷が大きくなるのは、1) Gram-Schmidt直交化等での行列・行列積演算、2) 3次元FFT計算、3) 部分ハミルトニアン行列の対角化の部分ですが、それぞれに対して1) BLASレベル3の使用、2) 全ノード通信を不要にするための多次元並列化、3) ScaLAPACKやEIGENといった高並列対角化ライブラリの導入、のチューニングを施しました。チューニングの結果は良好で、6000原子系/3480ノードの並列計算では、浮動小数点演算ピーク比20%超の効率を得ることができ、強スケーリング性も確認することができま

した。また、PHASEを用いてSiC螺旋転位に関する大規模シミュレーションを実施しました。SiCはワイドギャップ半導体としてパワーデバイスへの応用が期待されていますが、螺旋転位を含む何種類かの欠陥があるためにデバイス特性にばらつきがあります。螺旋転位は特に広範囲に及ぶ欠陥であるため、シミュレーションには大規模系を使用する必要がありますので、計算により螺旋転位の径やバンドギャップへの影響を調べました。最大で20,440原子系を扱いましたが、73,728ノードを使った計算のパフォーマン

スは1.37PFLOPSでした。この計算を通じて、数万原子系の大規模構造緩和が可能になったことが確認できました。さらに、SiC熱分解によるグラフェン成長に関するシミュレーションも実施しました。グラフェンは次世代半導体のチャンネル材料や配線材料として有望視されており、SiCの熱分解はその代表的方法ですが、反応の機構は実験的にはよく分かっていません。そこで、成長粗過程等の抽出のためMD計算を行いました。



SiC熱分解によるグラフェン成長の過程: 第一原理MDシミュレーションの結果

研究開発課題④ 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発

研究課題責任者

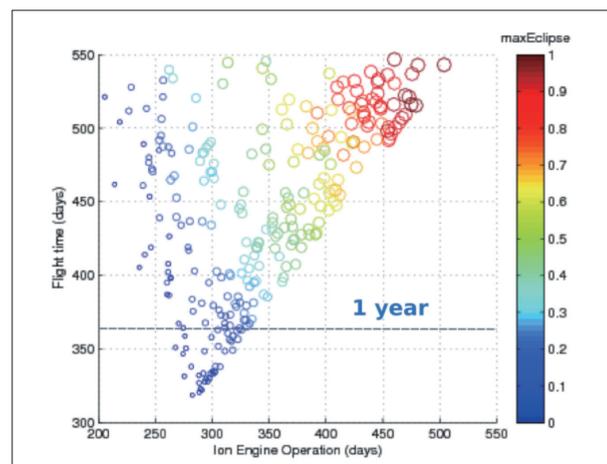
大山 聖 (独)宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授

III 設計を革新する多目的設計探査

多目的設計探査は、多目的設計最適化などにより求められた多目的設計問題の最適解(非劣解)データベースから自己組織化マップや散布図行列などのデータマイニング手法を用いて設計に役立つ知見を抽出する日本発の革新的な設計支援フレームワークです。実際の製品設計プロセスにおいて頻繁に直面する目的関数が4つ以上の大規模多目的設計最適化問題に利用可能な新しい多目的設計探査技術を開発し、研究機関や企業との共同研究によりその有効性を実証します。これにより「京」クラスの計算機資源が企業でも利用可能になってくる2020年代に日本のものづくりを革新することを目指します。

これまでの研究により、従来手法よりも格段に優れた多数目的設計最適化手法を開発し、テスト問題でその有効性を確認しております。得られた非劣解データベースからの設計知見抽出に関しては、測地距離の概念に基づいた新しい可視化手法やインタラクティブな散布図行列可視化ソフトウェアなどに取り組んでいます。また、多目的設計最適化問題のための新しい応答曲面近似法の開発にも取り組んでいます。これらの開発された新しい手法を用いて、深宇宙探査ミッション

DESTINYの軌道設計問題、イプシロンロケットの軌道設計問題、火星探査飛行機の概念設計問題、ロケット射点形状の形状最適化問題などに取り組んでいます。



深宇宙探査ミッションDESTINYの多数目的軌道設計最適化問題(6目的問題)に取り組む、優れた軌道を多数発見

研究開発課題⑤ 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

研究課題責任者

中島 憲宏 (独)日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター 次長

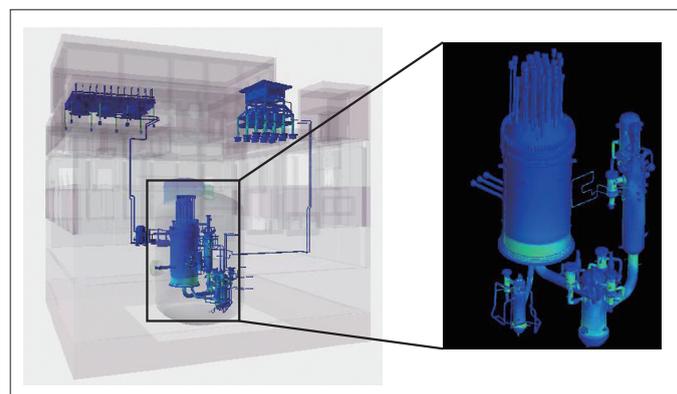
III 実験では困難な大型プラント構造の耐震解析

原子力施設等の大型プラントにおいて設計仕様を上回る地震時における耐震裕度を把握すると共に、一層合理的な耐震設計を行う方法の確立に貢献します。また、安全性と経済性の大幅な向上に資するため、強固な産学官連携体制の下、大型プラントのものづくりで必要とされる、実験では不可能な詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術を研究開発し、開発した技術の機能検証及び有用性の例証をします。「京」の全計算ノード8万CPU(64万コア)を用いた100億自由度規模の構造シミュレーションにおいて同分野での最高水準となる実効性能を達成します(24時間を想定)。また、大型プラント構造の丸ごとシミュレーションを用い

た設計案の分析技術を耐震設計過程に組み込み可能とし、それにより出力された高解像度な結果を設計過程において利用できるようにするために、「京」上に構築された大型プラントの解析結果を耐震裕度分布へ変換し、俯瞰的かつ詳細に、世界で初めて可視化します。

「京」でのプロダクションランでは、ピーク性能に対して14%の実効性能を達成しました。4096ノードでは、対ピーク性能において40%を達成しました。現在、テストランを繰り返し、精度確認や

実験データや観測データ、旧来の標準解析技術による計算結果との比較検証等に取り組んでいます。また、産業界コンソーシアムの立ち上げに取り組むにつつ、現在までに参画協力頂く見込みの機関と、開発技術の仕様検証や例証の予備評価に取り組んでいます。



大型プラント全体規模の丸ごとシミュレーション

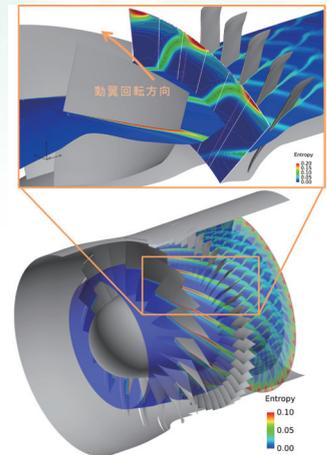
圧縮性流体解析プログラム「UPACS」

高木 亮治 (独)宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授

高速流解析ソフトウェアUPACSの開発

ものづくり分野で重要となるターボ機械、特に軸流圧縮機や遠心圧縮機などの詳細な流れ場解析を、手近なPCクラスターから「京」などの大規模スーパーコンピュータで実施可能な圧縮性流体解析ソフトウェアUPACSの研究・開発を行っています。数十万コアを想定した大規模並列計算への対応として、計算ソルバー部の大規模並列計算への対応だけでなく、計算格子の生成、

可視化など計算結果処理などの前後処理部の大規模解析への対応を実施しています。またターボ機械など回転機械の動静翼干渉解析に必要な移動境界面接続に関して、時々刻々と変わる接続データを大規模計算においても効率良く交換するための並列データ通信モジュールを整備し、蒸気タービンの解析に必要な蒸発・凝縮モデルの導入に取り組んでいます。



移動境界面接続面でのデータ交換の汎用化と効率化を実現(エントロピー分布)
(ファン形状は(株)IHIより提供)

階層型直交格子を用いた実用複雑系流体解析「FrontFlow/violet」

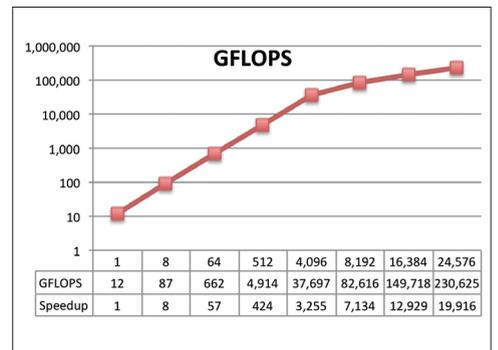
小野 謙二 (独)理化学研究所 計算科学研究機構 可視化技術研究チーム チームリーダー

大規模格子の短時間熱流体解析を実現

FrontFlow/violet (FFV) は三次元非定常の非圧縮性熱流体解析システムで、工業製品設計の現場で活用することを目標としてシステムを構築しています。

特徴の一つは実際の製品形状に対して短時間で格子生成を行えることです。高い信頼性をもつ計算を得るために部分的に細分化可能な階層的な直交格子データ構造を採用し、細かく複雑な形状へ対応するため高精

度に解析できる計算方法を開発しています。次の特徴は、大規模並列計算用にチューニングされている点です。「京」を始めとする超並列機において、実用計算システムとしては例を見ない並列数の増加に見合った性能向上が実現でき、「京」の約1000万ノードを用いて約300億格子の計算を24時間以内で計算できることが実証されています。



FFVの「京」における並列実効性能
99.999%の並列化効率を達成

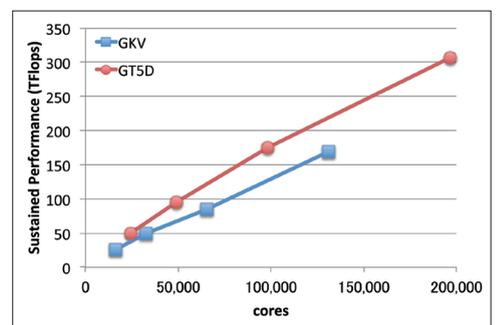
次世代計算科学ソフトウェアの革新的アルゴリズムの創生と核融合プラズマ流体解析への応用

井戸村 泰宏 (独)日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター 研究副主幹

ペタスケール流体解析を実現する先進技術

ペタフロップス級スーパーコンピュータを利用した大規模流体計算を行う上で、行列ソルバー、ノード間通信、データ入出力、可視化等、あらゆる要素技術において革新的アルゴリズムの創生が必要とされています。本課題では次世代ものづくり用ソフトウェアの高度化を支える共通基盤技術の開発を推進し、その有効性を核融合プラズマ流体

解析コードにおいて実証します。これまでに、スーパーコンピュータ「京」上で先進的な反復解法に基づく超並列行列ソルバーの開発、MPIの様々な通信に汎用的に適用できる通信マスク手法等を開発し、核融合プラズマ流体解析コードのスケラビリティを10万コア以上の領域に拡張することに成功しました。



本課題で開発した共通基盤技術を適用した差分法プラズマ流体解析コードGT5D、および、スペクトル法プラズマ流体解析コードGKVのスーパーコンピュータ「京」におけるストロングスケーリング

HPC利用の需要開拓の最新状況

三木 秀明 (財)計算科学振興財団

III HPC/PF搭載ソフトウェアのトライアル利用の促進

平成23年度に関西地域において企業訪問を行い、現在開発中のHPC/PFに搭載されるソフトウェアのうちFrontFlow/blueなど7本を活用して、産業界のHPC利用の潜在需要の開拓や、当該ソフトを利用する上で

の要望等に関するヒアリングを実施しました。

その結果をふまえ、東京大学生産技術研究所・ソフトウェア普及事業

者と連携・役割分担しながら、当該ソフトの利用促進を図っています。平成24年度は、FrontFlow/blueとプリ・ポストソフトの実習セミナーを3回(東京・大阪・神戸)開催し、合計62名の方に参加いただきました。また、当該ソフトのトライアル利用を促進するための環境構築やPRに向け、検討を進めています。



講義をする加藤千幸教授



実習セミナーの様子
(H24.11.8開催 神戸・計算科学振興財団)

開発者教育および利活用人材教育の最新状況

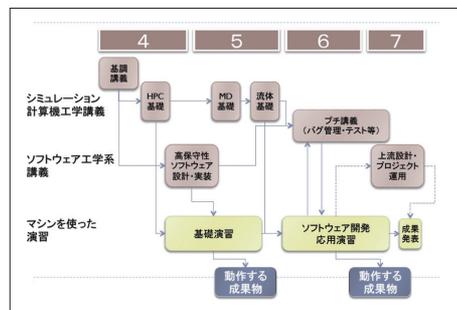
先端的ソフトウェア開発者教育(大学院教育)

佐藤 文俊 東京大学生産技術研究所 教授

III 本格的なスタートから3年目を迎えて

ソフトウェア工学・計算機工学から、チーム制による本格的な科学技術シミュレーションソフトウェア設計・プログラミングまでを一貫的に行う実践的な先端的ソフトウェア開発者教育を東京大学の大学院教育カリキュラムとして推進しています(3時間×14~15回)。内容の濃いスパルタ教育ではありますが、毎年、学生のレベルを鑑みて産学

の講師陣が教育内容を決定しているため、受講者の満足度を高く維持することに成功しています。本年度は、管理系のプログラム保守能力教育よりも、開発プロジェクトの遂行能力に関する教育に重点を置きました。今後も、科学技術シミュレーションに適したソフトウェア工学の確立という大きな目標に向けてカリキュラムを更新し続けます。



実践的シミュレーションソフトウェア開発演習の概略

先端的ソフトウェア利活用人材の育成

村上 英樹 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(ICSCP)

III 世界一の計算パワーをものづくりの現場へ

アプリケーションの利活用ノウハウや最新のハードウェア・ソフトウェアの知識を習得し、企業の研究開発、設計等の場で活躍できる人材を創出するための利用者教育を、初、中、上級に分けたきめ細やかなカリキュラムにより推進しています(HPC産業利用スクール)。ICSCPとCISSは、利用者側が主催するユニークな講習として、これまで

入門、実践等を11回開講し、11月1日(木)には「京」の理解のための特別コースを行い、参加の皆様からは高い評価をいただきました。本年6月29日に最終動作確認を終え完成し試験運用が開始されたスーパーコンピュータ「京」が、9月28日からは産業界向けにも共用が開始され、さらにこの計算機資源の性能をフルに発揮させる国の開発ソフト

ウェアも適宜産業界での利用が可能となります。今後もスクールを開講していく予定ですので、是非この機会に第一歩を踏み出されては如何でしょうか。



HPC産業利用スクール「京」特別コース
(加藤千幸教授の講義後質疑応答風景)

イベント情報

文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」成果報告会を2013年3月28日(木)、29日(金)に開催します。詳細は決まり次第、ご案内いたします。

編集後記

10月に開催された理化学研究所計算科学研究機構 一般公開の分野4の展示では、空気力で紙風船とボールを浮かすミニ実験コーナーを担当者が企画し、多くの来場者の方々が空気の流れの不思議を楽しんでいらっしゃいました。特に、きらきら光る眼で実験している未来の科学者たちの姿がとても印象的でした。次回も分野4の企画に期待したいと思います。



資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661
FAX : 03-5452-6662
E-mail : office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp
URL : http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

編集発行

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