

## 国プロ等開発ソフトウェアの 維持・管理・機能強化事業を展開

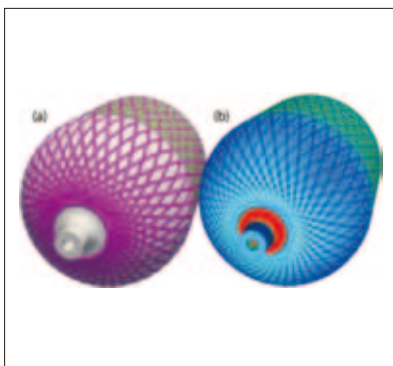
革新的シミュレーション研究センター(以下、CISS)ではこれまで長年にわたり、スパコン「京」も含めた多様な計算機プラットフォームで稼働する先端的な実用アプリケーションソフトウェアの研究開発を実施してきており、また、一昨年(2013)の9月から本格的な運用が開始された「京」を用いて、数々の実証研究を展開しています。さて、このように開発や実証を進めてきた基盤的なアプリケーションソフトウェアの維持管理や、ユーザーニーズや計算機アーキテクチャの進化に対応した、アプリケーションソフトウェアの機能強化も重要な課題となっています。そこで、CISSでは文部科学省「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくり事業の一環として、このような事業を積極的に展開し始めました。

国プロ開発アプリを実際の企業における研究開発や製品開発に適用しようとする場合、市販ソフトウェアなどの性能の比較が重要となります。今回、流体解析ソフトウェアFrontFlow/blue、OpenFOAM、構造解析ソフトウェアFrontISTR、複合材料の評価シミュレーター FrontCOMP、ならびに、バイオ・ナノ系のアプリケーションソフトウェアであるPHASE、ProteinDF、ABINIT-MPの合計7本のアプリケーションソフトウェアに関してベンチマークを実施致しました。本ニュースレターではそれらの概要をご紹介しますが、より詳細な情報は後述の「計算工学ナビ」に掲載してお

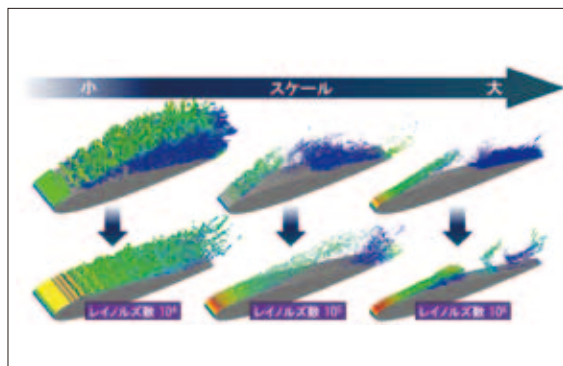
りますので、そちらもご参照ください。

開発したり、ベンチマークをしたり、あるいは実証計算によりその効果を検証したりした基盤的なアプリケーションソフトウェアであっても、何も手を入れないでいけば直ぐに陳腐化してしまい、使い物にはならなくなってしまいます。そこで、前述の事業の一つとして、ユーザーからのニーズの高いものを中心として、アプリケーションの機能強化にも取り組みましたが、その概要も本ニュースレターに記載しております。最後に、このように機能強化をしたり、ベンチマークを実施したりしたソフトウェアをなるべく使い易い形で産業界のユーザーの皆様にご提供するために、「計算工学ナビ」というウェブサイトを昨年の10月に開設しました。ここでは、ベンチマーク結果や計算事例などを検索したり、ダウンロードしたりすることも可能です。さらに、神戸の公益財団法人計算科学振興財団(FOCUS)と連携して、各アプリケーションソフトウェアを対象としたハンズオンセミナーも実施しています。このように、CISSとしては、先端的なアプリケーションソフトウェアの実証研究に加えて、アプリケーションソフトウェアを幅広く産業界のユーザーの皆様にお使いいただくための取り組みも実施しておりますので、皆様方のご理解とご協力を頂ければ幸いです。

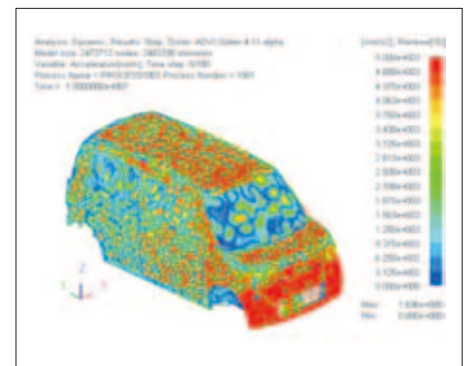
センター長・教授 加藤千幸



(a) アルミライナー / 遷移束 / 樹脂のメソスケール有限要素  
(b) Mises 応力分布



幅広いスケールでの剥離制御メカニズムを解明



1500万自由度の流体構造連成振動解析結果  
(瞬時の振動速度)  
(提供 スズキ株式会社)

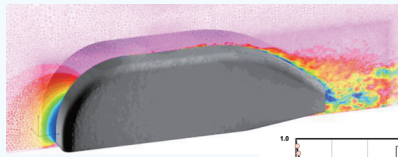
## 主要ソフトウェアのベンチマーク解析

熱流体分野 (FrontFlow/blue、OpenForm)、構造材料分野 (FrontISTR、FrontCOMP)、ナノ分子系分野 (PHASE、ProteinDF、ABINIT-MP) の3分野7本のソフトウェアで実施したV&Vや性能測定のベンチマークの紹介です。

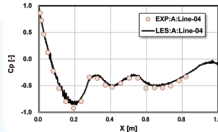
### 熱流体系ソフトウェア

#### FrontFlow/blue

#### 自動車分野における実験値と計算結果の比較



Y=-0.15m断面における  
主流方向速度分布



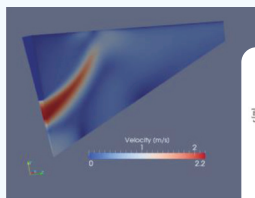
FrontFlow/blue (以下、FFB) による乱流解析では主に六面体が使用されてきたが、ここでは産業界での使用ニーズが高いプリズム・テトラメッシュを用いた乱流の準直接計算のベンチマークとして、簡易車体モデルまわりの空力計算を実施しました。計算格子には車体表面に水平方向1mm、鉛

直方向0.2mmのプリズムメッシュ、その他の領域にテトラメッシュを配置しました。総要素数は約4,000万です。計算結果を実験データ(Cd、Cl、表面圧力データ)と比較し、実験データと概ねよい一致を確認しています。

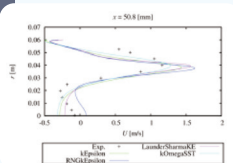
(提供：(公社)自動車技術会)

#### OpenFOAM

#### 建築分野における検証事例



燃焼室モデル内の旋回流の速度分布  
(ERCOFTAC SIG15 Case 9.1)



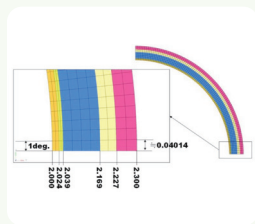
OpenFOAMを用いて、幾つかの事例についてベンチマークテストを行いました。ERCOFTAC SIG15からは、燃焼室モデル内の旋回流の解析、矩形曲管内の発達流れを解析、2次元丘周辺流れ、回転ディスクに垂直に衝突する円形噴流など、また日本建築学会による市街地風環境予測のた

めの流体数値解析ガイドブックから、角柱周辺流れ、単純建物群モデル、街区内に建つ高層建物モデルなどの事例について検証を行い、妥当性の確認を実施しました。検証に用いたパラメータファイルなどは、「計算工学ナビ」(<http://www.cenav.org/kdb/>) から入手可能です。

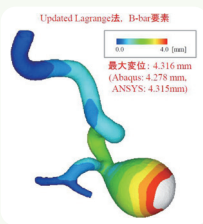
### 構造・材料系ソフトウェア

#### FrontISTR

#### 複合部材モデルによる血管壁の有限変形解析



直管の血管壁モデル  
(5層、直交異方性)



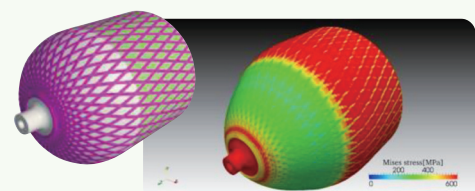
脳動脈瘤を含むモデル  
(単層壁)

顕微鏡画像と医師の解剖学的な知見に基づき、直交異方性を有する5層複合部材モデルにより直管の血管壁モデルを作成しました。内圧を負荷した際の変形解析において、精度と計算効率の面で市販ソフトとの比較を行いました。市販ソフトで実施可能な約100万節点規模においては、

1CPUによる計算時間はほぼ同程度ですが、並列計算を実施することによりFrontISTRの優位性が明らかとなりました。今後、階層的リファインと脳動脈瘤を含むモデル化により、さらに解析精度を向上させてベンチマークを続行する予定です。

#### FrontCOMP

#### 炭素繊維強化プラスチックの強度評価



高圧水素蓄圧器のメソスケール応力解析

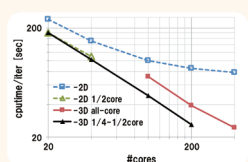
金属シース付CFRP積層板3点曲げ試験と、フィラメントワインディング高圧容器の例題設定にて炭素繊維強化プラスチックの強度評価に関するベンチマーク解析を実施しました。市販ソフトとの比較を通じた性能の実証とともに、並列性能を評価しました。要

素数：約8,500万、節点数：約1,400万となる高圧容器の例題では、市販のソフトウェアでは計算不能となり、「京」での利用を想定して開発したFrontCOMPの有効性および材料強度評価ソフトウェアとしてのポテンシャルの高さを実証できました。

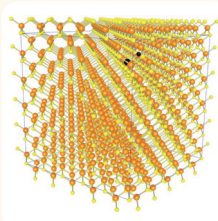
### ナノ系ソフトウェア

#### PHASE

#### ストロングスケーリング測定の実施



上：ISCFあたりの計算時間  
右：4H-SiC結晶1,000原子からSiとC原子を抜き出した(黒球)系



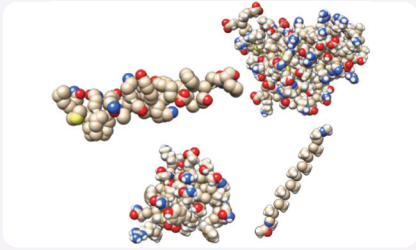
PHASEはスパコン「京」を対象として並列化・高速化チューニングを行ってきました(3D版とよぶ)。3D版はMPI通信経路を局所化するように実装することで2D版よりも並列効率を高めています。さらに、行列ベクトル積演算を行列積演算に変換するようプログラムを高度化しており低B/F値

の計算機でも高効率に計算可能です。1,000原子規模の系を対象に、(公財)計算科学振興財団FOCUSスパコンEシステムで3D版と2D版のストロングスケーリング測定を行いました。3D版は並列数が小さい場合でも予想以上に高効率であることが確認できました。

バイオ系ソフトウェア

ProteinDF

FOCUSへの移植と実証計算



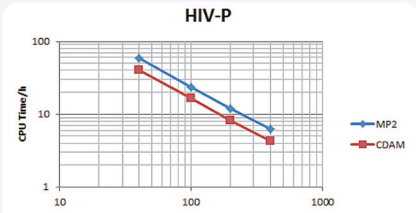
ProteinDF ベンチマークテストに使用した分子

密度汎関数法に基づく大規模分子のためのカノニカル分子軌道計算プログラムProteinDFをFOCUS環境に構築し、既に実装されているdynamic-replica法、distribute法の他、新たに開発されたコレスキー分解(CD)法を用いて、分子サイズを一定のまま計算コア数を変えて計算時間を測定する、

ストロングスケーリング測定を行いました。テストに使用した分子サイズが計算性能に対して不足していたために、期待した並列性能は達成できませんでしたが、数100コアを越えても加速する傾向は見られました。また、新規実装のCD法は飛躍的な計算性能を発揮することも見出しました。

ABINIT-MP

標準のFMO-MP2計算で好スケーリングを観測



HIV-1 プロテアーゼに対するFMO計算時間のコア数依存性 (log-log プロット)

FMOグループで長年開発しているFMOプログラムABINIT-MPについて、Flat MPI並列下でFOCUSスパコン上でベンチマークテストをFMO-MP2/6-31Gレベルで行いました。分子はサイズを変えて4種類ほど取り、コア数は40を基準に100、200、400と変えました。また、MP2

計算での2電子積分をコレスキー分解(CD)して扱う条件でも試みました。ここでは、HIV-1プロテアーゼの例を図に示します。計算時間の低減は線形であり、好ましいスケーリングが得られていることが分かります。

ユーザーリクエストに基づくアップグレード

アプリケーション・ソフトウェアラインナップのうちFrontFlow/blue、FrontISTR、FrontCOMP、REVOCAPの4本のソフトウェアについてユーザー会やセミナー等を通じてエンドユーザーより要望の高い機能強化の概要の紹介です。

ソフトウェア名	機能の改良および追加内容
FrontFlow/blue	<ul style="list-style-type: none"> <li>(1) オーバーセット領域ごとに異なる計算刻みを設定できる局所時間刻み計算機能の追加</li> <li>(2) BCMメッシュツールが作成するメッシュデータの入力機能データインターフェースの拡充</li> <li>(3) キャピテーション計算機能を最新の流れソルバーに追加</li> <li>(4) 流量エラーの小さい新しいオーバーセット計算手法を導入</li> </ul>
FrontCOMP	<ul style="list-style-type: none"> <li>(1) ミドルウェア更新(FrontISTRの機能アップ成果をインプリメント)</li> <li>(2) 動的衝撃解析機能の強化(FrontISTRで強化された項目のインプリメント)</li> <li>(3) 直交異方性モデルに関するバグフィックス(直交異方性材料定数入力に関する検証の実施)</li> <li>(4) 並列効率強化(ソルバーの並列計算効率強化)</li> </ul>
REVOCAP_Coupler	<ul style="list-style-type: none"> <li>(1) 可視化ツールへのインターフェース追加(マッピング結果を可視化プログラムのファイル形式へ出力する機能の追加実装)</li> <li>(2) マッピング情報ログの機能強化(マッピング漏れがわかる情報の出力、最大・最小・平均値などの統計情報の出力機能の追加実装)</li> <li>(3) 単位変換支援機能の追加(ソルバ間で単位系が異なる場合の支援機能の追加実装)</li> </ul>
FrontISTR	<ul style="list-style-type: none"> <li>(1) シェル要素を非線形解析へ適用するためのプログラム改良</li> <li>(2) ひずみ分割による弾塑性クリープ解析機能追加</li> <li>(3) 梁要素における質量マトリックス、回転剛性、応力計算プログラム改良</li> <li>(4) 反復法前処置ILU(0)部分の改良</li> <li>(5) 非定常熱伝導解析、非定常応力解析機能の改良</li> <li>(6) 熱応力解析と熱伝導解析機能の改良</li> <li>(7) 各種非弾性ひずみ成分の出力機能追加</li> </ul>

## 第1回神戸ハンズオン: ABINIT-MP 講習会



3月11日(火)神戸市の高度計算科学研究支援センターにて、「京」と互換性を持つ富士通のFX10(RIST神戸管轄)を使ったABINIT-MPの第1回ハンズオンセミナー

を受講者10名(企業関係は4名)で開催しました。第1回目である今回のセミナーは、ABINIT-MPの機能概要と「京」での性能を紹介した後、BioStation Viewerを使った入力データのセットアップ、計算結果の回収と整理などのワークフローをいくつかの例題で説明すると共に、実際に体験できるプログラムでした。参加された方々には大変高い評価をいただきました。

## HPC産業利用スクール – 実践コース(反応流体) –

HPC産業利用スクールの実践コースは、関係機関の連携協力を得て、企業ニーズの高い反応流体(特に燃焼)シミュレーションに関し、FOCUSスーパーコンピュータを用いた大規模計算への取り組みを行っています。



3月25日(火)、26日(水)の二日間にわたり東京大学生産技術研究所にて開催した今回は、解析デザイン力の習得を目標としており、特に解析対象や制約要件を考慮しながら解析モデルを構築し、解析全体を効果的にマネージメントできるような内容でした。

受講者7名の方々からは有益であるとの評価をいただきました。

## 第5回 クラウドコンピューティング環境に対応した FrontFlow/blue の設計実務セミナー



FFBは多様な解析ニーズに対応するため、異なるメッシュタイプ(六面体、テトラ・プリズム、ボクセル)を用いた乱流の高精度予測をサポートします。このうちテトラ・プリズムメッシュはメッシュ作成が比較的容易である利点があります。

3月28日(金)高度計算科学研究支援センターにて開催された本セミナーでは、テトラ・プリズムメッシュを用いたFFBによる車体空力解析を題材に、メッシュ作成から計算実行、ポスト処理まで、一連の処理を体験していただきました。

## 分野4次世代ものづくり 第1回 統合ワークショップ

「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくりにおける成果普及の一環として第1回統合ワークショップが、以下の3部門に分かれ、3月6日(木)・13日(木)の2日間にわたり、東京大学生産技術研究所にて開催されました。

### ● 流体・伝熱・燃焼 部門

本部門では、開発側および利用者側から、より専門的・技術的な最新成果に関する報告があり、航空宇宙・ターボ機械・自動車・船・燃焼の各産業分野や、コンソーシアムでの成果の分野横断的な情報共有をすることができました。また、産業界からの期待やニーズに関するパネルディスカッションを実施しました。当日は100名(講師15名含む)の参加があり、大変活発な議論が行われ、学術界ならびに産業界との忌憚のない意見交換が行われました。



### ● 材料・構造・信頼性 部門

本部門は、「ものづくり」の屋台骨である材料・構造・信頼性に関わるマイクロ～メゾ～マクロ特性の解析を総合的に紹介し、関連技術を俯瞰するという狙いのもとに設けられました。今回は、次世代電子材料、先進複合材料、大型構造物・大規模製品の特性に関して、「京」を中核とするHPCIの利用成果が報告されました。特に、大規模な材料特性からそれを用いた製品全体の特性までを連続的に解明・評価することを視野に入れた研究の実例紹介もあり、超高性能スーパーコンピュータの利点を生かした活用の実態が明らかになりました。今回の参加人数は、44名(講師9名含む)で、活発な議論が行われました。



### ● 先端アプリ・共通基盤・PF 部門

本部門では、共通基盤部門、流体解析基盤部門、量子化学解析基盤部門から、それぞれ最近の成果について報告され、通常のセミナーやシンポジウムなどよりも細かな議論を通して、研究開発成果の理解を深めていただくことが出来ました。今回は、55名(講師9名含む)の参加があり、ワークショップ後に開催された懇親会でも活発な議論が続きました。



## イベント案内

### シンポジウム

- 第5回分野4次世代ものづくりシンポジウム  
平成26年12月5日(金) 場所: 理化学研究所 計算科学研究機構

### その他関連団体のイベント

- 「未来をひらくスーパーコンピュータ ～「京」からその先へ 限りなき挑戦～」  
平成26年8月23日(土) 場所: 東京 科学技術館
- 国際フロンティア産業メッセ2014  
平成26年9月4日(木)・5日(金) 場所: 神戸国際展示場
- AICS一般公開  
平成26年10月25日(土) 場所: 理化学研究所 計算科学研究機構

今すぐチェック!

## Knowledge Base



解析事例データベース  
最先端のシミュレーションソフトウェアによる、さまざまな解析事例を収録

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

## 編集後記

今回のCISS NEWSでは、これまでに研究開発してきた7つの主要なソフトウェアのベンチマーク解析を中心にお届けしています。先進的な機能を実装した各ソフトウェアは、実験と検証を重ねることで日々進化していますが、今回のベンチマークの結果によりさらにバージョンアップすることが期待されます。

## 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