

Fig. 6-26 A Workflow of sample case using MOEA.

本解析事例には、ユーザがダウンロード可能な解析プロジェクトアーカイブファイルが付属しており、ユーザの手元の HPC/PF ポータル GUI 上で展開し実行することで、再現解析実行が可能となっている。ただし掲載事例は利用計算機資源として FOCUS スパコンを利用しているため、別の計算機資源を利用する場合、設定ファイルの書き換えが必要であるが、多くの場合 HPC/PF ポータル GUI にプリセットされた雛形設定ファイルを元に変更することが可能である。

【自動処理】

PDI サブシステムによるパラメータスタディ機能やワークフロー実行制御の仕組みが整備されたことで、より実用的な解析ワークフローが実現可能となった。特に入力パラメータが少しずつ違う大量の計算が必要なケースにおいて、入力パラメータファイルの自動生成、リモート計算機資源へのファイル自動転送、計算結果データの自動回収、バッチジョブスケジューラの仕様に合わせた大量ジョブの自動投入などの機能を有する HPC/PF システムを利用することにより、解析の本質と関係ないが、しかし大変手間のかかる処理の殆どが自動実行され、ユーザは解析結果の検討・現象理解に注力することが可能となった。

Fig. 6-27 は、FMO 法によるバイオ分子相互作用シミュレータ ABINIT-MP による、粗視化シミュレーション用 χ パラメータ算定を行う大量ジョブ処理ワークフローの処理を図式化したものである。この例の場合、数百～数千通りの計算を行う必要があるが、 χ パラメータ算定に必要なのは各計算結果データ中のごく一部の値のみであり、この値の抽出も HPC/PF ワークフローのポスト処理として計算機資源側で行うことで、ワークフローが終了した時点でユーザの PC に転送されるのは利用者が本当に必要とするデータだけとなり、ファイル転送時間も極短時間で済む。つまり HPC/PF システムを利用することで省力化だけでなく、計算実行から結果の分析検討にかかるターンアラウンドタイムの短縮化も図ることができ、ユーザはより広範囲なパラメータ空間の探査が可能となる。

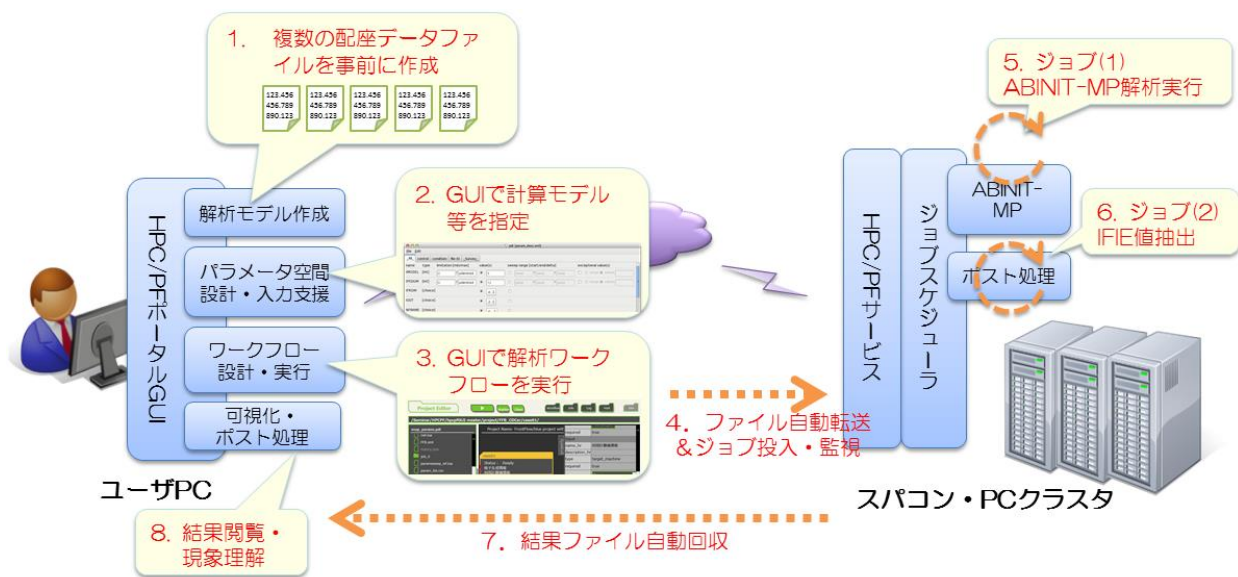


Fig. 6-27 Massive amount job processing for the x parameter computation of coarse grained simulation.

【具体例】

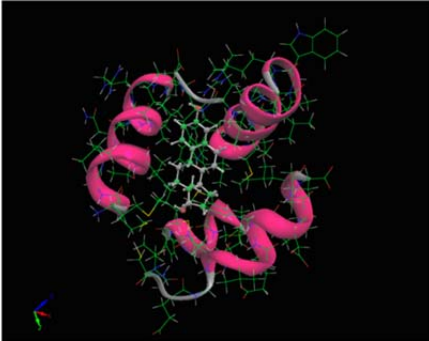
HPC/PF システムを用いた各解析アプリケーションによる具体的成果例を以下に示す。これらは全て分野4アウトリーチサイト「計算工学ナビ」の解析事例データベースで公開中の解析事例であり、各解析事例に付属する HPC/PF 再現実行用プロジェクトアーカイブをダウンロードすることによりユーザ PC 上にインストールした HPC/PF ポータル GUI 上で解析の再現実行が可能である。但し解析実行環境として FOCUS スパコンの利用を想定している。

ABINIT-MP

エストロゲン受容体-リガンド複合体のFMO-MP2計算

- ソフトウェア
ライフサイエンス > フラグメント分子軌道法 > ABINIT-MP
- V&V区分
Verification 検証
- そのほかの分類
HPC/PF再現実行対応事例

概要
HPC/PFシステム上からFMO2-MP2法によるエストロゲン受容体とそのリガンド（エストロゲン：EST）複合体（下図）の全電子計算を実行した。



分子組成：C284H452O76N62S7
フラグメント数：52

使用ソフトウェアモジュール
ABINIT-MP Ver.7

計算条件
FMO2-MP2/G-31G (4793基底)

実行環境
FOCUSスパコンEシステム (Intel Xeon E5-2670 v2 (2.5GHz)x2 CPU)

解析時間
4ノード (80コア) で約30分

詳細説明
以下のステップをHPC/PFシステムGUIから実行可能：
1. 計算パラメータの編集
2. リモートホストへのジョブ投入
3. 計算結果の回収
4. BioStationViewerを用いた可視化

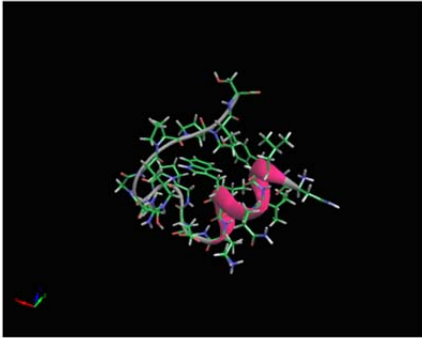
HPC/PF再現実行対応プロジェクトアーカイブ
本解析をHPC/PF解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
ABINITMP_ER50.tar.gz

[更新日] 2015年3月13日
[作成者] akinaga

小規模タンパク質TrpCageのFMO-MP2計算

- ソフトウェア
ライフサイエンス > フラグメント分子軌道法 > ABINIT-MP
- V&V区分
Verification 検証
- そのほかの分類
HPC/PF再現実行対応事例

概要
HPC/PFシステム上からFMO2-MP2法による小規模タンパク質TrpCage（下図）の全電子計算を実行した。



分子組成：C98H150O29N27
フラグメント数：20

使用ソフトウェアモジュール
ABINIT-MP Ver.7

計算条件
FMO2-MP2/G-31G (1686基底)

実行環境
FOCUSスパコンEシステム (Intel Xeon E5-2670 v2 (2.5GHz)x2 CPU)

解析時間
1ノード (20コア) で約13分

詳細説明
以下のステップをHPC/PFシステムGUIから実行可能：
1. 計算パラメータの編集
2. リモートホストへのジョブ投入
3. 計算結果の回収
4. BioStationViewerを用いた可視化

HPC/PF再現実行対応プロジェクトアーカイブ
本解析をHPC/PF解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
ABINITMP_TrpCage.tar.gz

[更新日] 2015年3月12日
[作成者] akinaga

Fig. 6-28 Example cases of ABINIT-MP on HPC/PF environment.

円管内流れの解析

- ソフトウェア
ものづくり > 流体解析 > FrontFlow/blue
- V&V区分
Verification 検証
- その他の分類
HPC/PF再現実行対応事例

概要
FrontFlow/blueを用いた曲りパイプ内部の流れ解析を、HPC/PFシステムから行う。

解析モデル



INLETに流入速度1.0を与える。

使用ソフトウェアモジュール
FrontFlow/blue ver.8

計算格子
六面体要素33,120グリッド

計算条件
マッハ数 0.05
分子粘性係数 1.0e-05
時間刻み 0.06
時間ステップ数 1,000

実行環境
FOCUSスパコンシステム (Intel Xeon E5-2670 v2 (2.5GHz))

解析時間
1ノード20コアで約7分

詳細説明
得られた圧力と流速の分布を下記に示す：



HPC/PF再現実行対応プロジェクト・アーカイブ
本解析をHPC/PF解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
FFB_pipe.tar.gz

[更新日] 2015年3月13日
[作成者] akinaga

車両周り流れ解析

- V&V区分
Verification 検証
- その他の分類
HPC/PF再現実行対応事例

概要
FrontFlow/blueを用いた形状の異なる車両周り流れ解析をHPC/PFシステムを用いて行う。
計算格子は、FXgenを用いて、階層型直交格子を自動作成した。

解析モデル
計算領域全体図を図1に示す。



図1 計算領域全体図

使用ソフトウェアモジュール
FrontFlow/blue ver.43.09.02

計算格子
階層型直交格子 約300万セル
ブロック数 約6000~7000
ブロック当りの計算セル数 8x8x8=512
FXgenに搭載されている車両表面からの距離に応じて格子の粗さを自動的にコントロールする機能を利用している。FXgenにおける主な設定を以下に示す。

1. Octree level Setting
Fine Level = 6
Coarse Level = 2
2. Leaf Block Size (8, 8, 8)

3車両のミッドスパン断面における階層格子図を図2に示す。



図2 3車両のミッドスパン断面における格子分布

計算条件
分子粘性係数 1.0e-04
時間刻み 0.0025及び0.005
時間ステップ数 40,000及び20,000

実行環境
FOCUSスパコンシステム(intel Xeon E5-2670 V2(2.5GHz))

解析時間
8ノード64コアで約36時間及び18時間

詳細説明
3車両においてミッドスパン断面における速度ベクトル分布を図3に示す。



図3 3車両のミッドスパン断面における速度ベクトル分布

HPC/PF再現実行対応プロジェクト・アーカイブ
本解析をHPC/PF解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
CDCar.tarFFB
Fujjura.tarFFB
kouji.tar

[更新日] 2015年9月9日
[作成者] jino

Fig. 6-29 Example cases of FrontFlow/blue on HPC/PF environment.

FrontFlow/red

円柱周りの流れの解析

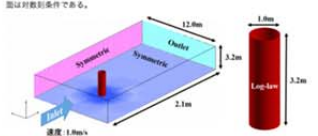
●ソフトウェア
ものづくり → 流体解析 → FFR

●V&V区分
Verification 検証

●そのほかの分類
HPC/PP再現実行対応事例

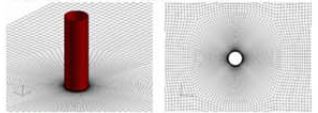
概要
本例題では、円柱周りの流れの解析を行い、円柱後方の流れを確認した。

解析モデル
解析空間内に直径1.0mの円柱モデルを設置した。入口には流入条件として流速1.0m/s、出口には流出条件を設定した。四方の壁には周期境界条件を与えた。円柱の表面は対称条件である。



使用ソフトウェアモジュール
FrontFlow/red-v3.1

計算格子
円柱前後の格子の様子を下図に示す。総要素数はおよそ15万要素である。



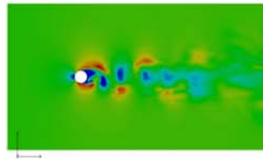
計算条件
乱流モデル: LES Standard Smagorinsky
スモグリンスキー係数: 0.15
対流項離散化: 2次中心差分 90% + 1次風上差分10%
時間積分: アダムスバッシュフォース
時間刻み dt: 5.0E-3

物理条件
密度 $[\text{kg/m}^3]$: 1.0
粘度 $[\text{Pa}\cdot\text{s}]$: 1.0E-4
レイノルズ数: 10,000

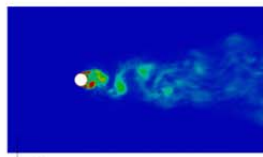
実行環境
CPU: Intel(R) Core(TM) i7-5930K 3.50 GHz
Memory: 32 GB
OS: Ubuntu 14.04 64 bit
並列計算方式: MPI Score 40threads

解析時間
約2時間 (20000ステップ)

詳細説明
下図に流速分布、高度の絶対値を示す。それぞれの図は流れ場が十分発達した状態での瞬時場の可視化である。円柱後方の流れが、円柱から離れるにつれて乱が濃まっているのが確認することが出来た。



流速分布



高度 (絶対値)

HPC/PP再現実行対応プロジェクトアーカイブ
本解析をHPC/PP解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
FFR_cylinder.tar.gz

不具合情報
特になし

参考文献
JSMCEキーストリーズ 流体力学 社団法人日本機械学会 119ページ

問合せ先
Shoya Ota : otashoya@eng.hokudai.ac.jp

[更新日] 2014年11月25日
[作成者] skingae

車体周りの空力解析

●ソフトウェア
ものづくり → 流体解析 → FFR

●V&V区分
Verification 検証

●そのほかの分類
HPC/PP再現実行対応事例

概要
本解析ではテストケースとして、FrontFlow/red-v3.1を用い、乗員自動車模型を対象として、風洞実験を模擬した空力解析をLarge Eddy Simulation (LES) により行った。

解析モデル
解析対象として、ミュンヘン工科大学が自動車会社と共に開発した空力実験用自動車モデルであるDriverAer model^[1]の50%スケールモデルを使用した。この解析モデルの概要を図1および表1に示す。



図1. DriverAer model

表1. DriverAer modelの諸元 (50%スケール)
全長 L: 2.305 m
全高 H: 0.705 m
ホイールベース長 L_{wheel}: 1.260 m
前方投影面積 A: 0.542 m²

使用ソフトウェアモジュール
流体解析コードには、非構造格子有体積法計算コードであるFrontFlow/red-v3.1を用いた。

計算格子
本解析に使用した計算格子について、図2に示す。車体表面は三角形格子により再四面体、解析空間は四面体格子によって分割されている。計算格子の要素数は、およそ100万要素である。



図2. 計算格子 (車体近傍)

計算条件
本解析では作動流体は空気とし、流入条件は58.3[m/s]とした。
乱流モデルには標準スモグリンスキーモデルを使用し、Large Eddy Simulation (LES) によって流体解析を行った。主な解析条件・解析手法を表2に示す。また、解析領域に入れた境界条件を表3に示す。

表2. 解析手法および解析条件

解析手法	解析条件	LES / 標準スモグリンスキーモデル (C _s = 0.15)
乱流モデル	非構造	
圧力場	二次精度中心差分	
空間離散化手法	対流項離散化手法 (使用法)	二次精度風上差分
時間積分	時間積分	オイラー-陽解法
圧力場カップリング		フラクショナルステップ (SMAC)
圧力ポアンソン		不完全コレスキー分解共役勾配法 (ICCG)
時間刻み		dt = 1.0x10 ⁻⁵ sec

表3. 境界条件



図3. 境界条件

図3. 境界条件

実行環境
CPU: Intel(R) Core(TM) i7-5930K
Clock: 3.50 GHz
Memory: 32 GB
OS: Ubuntu 14.04 64 bit

解析時間
上記の実行環境で解析を行ったところ、流体解析時間はおよそ3000step/1hour程度であった。今回の解析では、3000stepの流体解析は実行時間で約3秒間に相当する。

詳細説明
車体表面圧力分布を図4に示し、車両中央断面での流速絶対値の分布、および圧力分布をそれぞれ図5、6に示す。

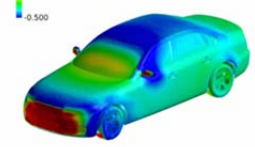


図4. 車体表面圧力分布 (時間平均値)

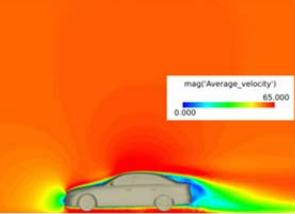


図5. 流速絶対値分布 (y = 0, 時間平均値)

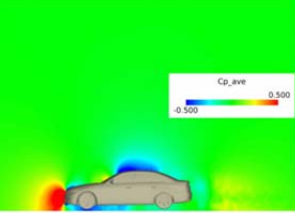


図6. 空圧圧力分布 (y = 0, 時間平均値)

図4-6により、車両周りの流れの分布は概ね良い予測を示したと考えられる。また車両に加わる空気抵抗の計算を行ったところ、本解析での車両のC_d係(空気抵抗係数)は0.289であった。一方で風洞実験では、C_d係は0.253であった。^[2]
風洞実験と今回の解析では、流体条件および計算条件が異なるため詳細な比較はできないが、本解析では車両の空気抵抗係数を良く予測していた。

HPC/PP再現実行対応プロジェクトアーカイブ
本解析をHPC/PP解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
FFR_driverAer.tar.gz

不具合情報
本解析では、用いた計算格子の品質があまり良くはなく、また車両形状に対する格子解像度も低いために、流れ場に数値振動が現れてしまっている。より高精度な解析のために、より高い解像度の計算格子を用いる必要がある。

参考文献
[1] <http://www.aer.mw.tum.de/en/researchgroups/automotive/driver/>
[2] P. Theissen : Unsteady Vehicle Aerodynamics in Gusty Crosswind. PhD Thesis, Technische Universität Muenchen.

問合せ先
Daiki Matsumoto : daiki.matsumoto@eng.hokudai.ac.jp

Fig. 6-30 Example cases of FrontFlow/red on HPC/PP environment.

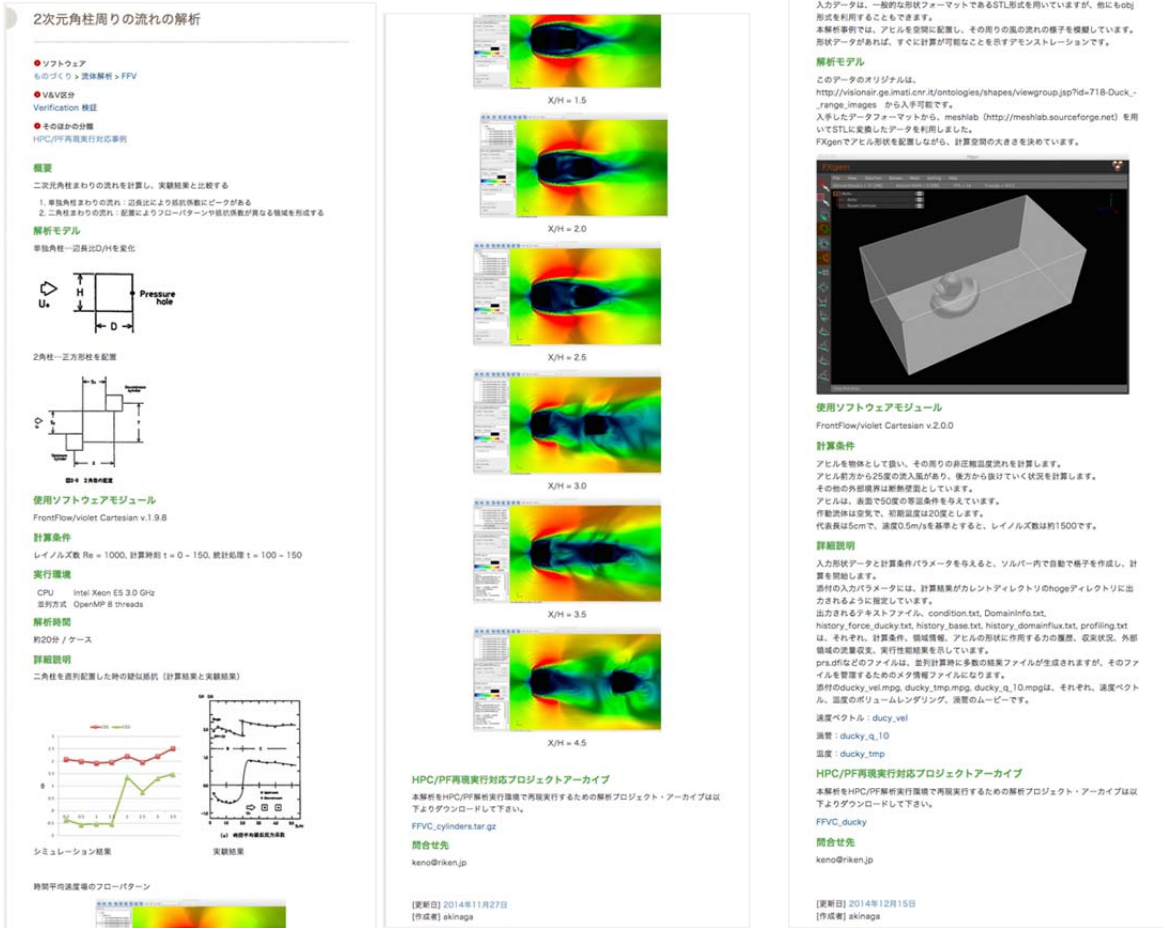


Fig. 6-31 Example cases of FFV-C on HPC/PPF environment.

内圧が作用する脳動脈瘤の静解析

- ソフトウェア
ものづくり > 構造解析 > FrontISTR
- V&V区分
Application 応用
- 関連ソフトウェア
REVOCAP_Refiner > REVOCAP_Refiner Ver.1.1
- そのほかの分類
HPC/PF再現実行対応事例

概要
内圧が作用する脳動脈瘤の静解析。

解析モデル
変形は微小変形を仮定し、材料は線形弾性体で近似する。解析モデルを図1に示す。作用する外力は圧力のみである。Young率は $E = 1,000,000$ Pa、Poisson比は $\nu = 0.49$ である。内腔全体に圧力が与えられる。その圧力の値は $p = 1230.0$ Pa である。

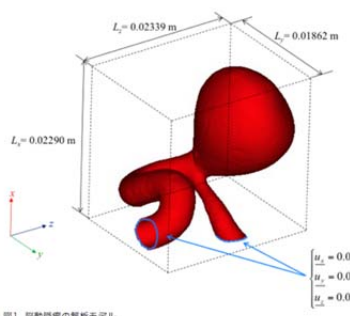


図1 脳動脈瘤の解析モデル

使用ソフトウェアモジュール
FrontISTR Ver. 3.6 (FrontISTR Ver. 4.4と共に配布)

計算格子
解析メッシュを図2に示す。節点数は47,100、要素数は37,483、全自由度数は141,300 である。8節点六面体1次要素 (非適合要素) を使用している。

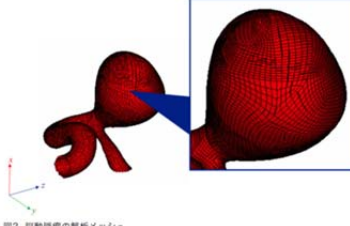


図2 脳動脈瘤の解析メッシュ

計算結果 (メッシュリファインメントなし)
図3にメッシュリファインメントなしの場合の変位の大きさの分布を示す。変位の大きさの最大値は1.900 mmである。また、図4にメッシュリファインメントなしの場合のMises応力分布を示す。Mises応力の最大値は0.1110 MPaである。




図3 メッシュリファインメントなしの場合における脳動脈瘤・血管の変位の大きさの分布

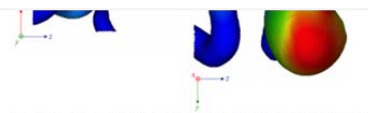


図4 メッシュリファインメントなしの場合における脳動脈瘤・血管のMises応力分布

計算結果 (メッシュリファインメント1回)
メッシュリファインメントを1回行うと、六面体要素は八分割される。図5にメッシュリファインメント1回の場合の変位の大きさの分布を示す。変位の大きさの最大値は2.684 mmである。また、図6にメッシュリファインメント1回の場合のMises応力分布を示す。Mises応力の最大値は0.1174 MPaである。

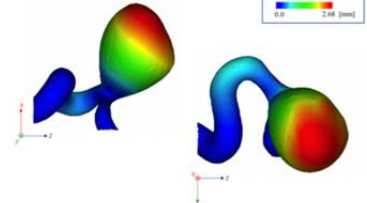


図5 メッシュリファインメント1回の場合における脳動脈瘤・血管の変位の大きさの分布

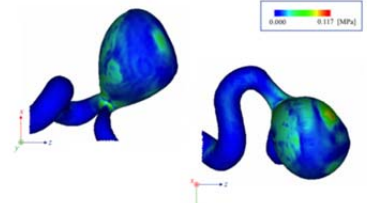


図6 メッシュリファインメント1回の場合における脳動脈瘤・血管のMises応力分布

HPC/PF再現実行対応プロジェクトアーカイブ
本解析をHPC/PF解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
FISTR_aneurysm.tar.gz

不具合情報
特になし

[更新日] 2015年11月4日
[作成者] goto

Fig.6-32 Example case of FrontISTR on HPC/PF environment (1).

建物と地盤の地震応答解析

- ソフトウェア
ものづくり> 構造解析 > Front ISTR
- 解析方法
Application 応用
- その他カテゴリ
HPC/PF再構成実行対応事例

概要

建物と地盤の地震応答解析

解析モデル

実形は微小変形を仮定し、材料は線形弾性体で近似する。解析モデルを図1に示す。建物モデルの寸法は $x = 2.305 \times 10^3 \text{m}$, $y = 1.795 \times 10^3 \text{m}$, $z = 5.500 \times 10^1 \text{m}$ であり、地盤モデルの寸法は $-1.962 \times 10^3 \text{m} \leq x \leq 1.962 \times 10^3 \text{m}$, $0.000 \text{m} \leq y \leq 4.160 \times 10^3 \text{m}$, $-1.119 \times 10^3 \text{m} \leq z \leq 5.500 \times 10^1 \text{m}$ である。図2に境界条件を示す。側面Aと側面Bにおけるz方向変位成分が同じになるようにMPC条件 $u_x = v_x$ が適用される。建物のYoung率は $E = 2.630 \times 10^{10} \text{Pa}$ 、Poisson比は $\nu = 0.200$ 、密度は $\rho = 2.500 \times 10^3 \text{kg/m}^3$ である。地盤の物性値を図3に示す。物性値が深さ方向に分布している。入力される地震波を図4に示す。地震波として、El Centro 1940 NSのアーチ (0.02 sごと、20 sまでのアーチ) の最大加速度を $600 \text{Gal} = 6.0 \text{m/s}^2$ に正規化したものを使用する。作用する外力は時間変化する体積力である (図4参照)。

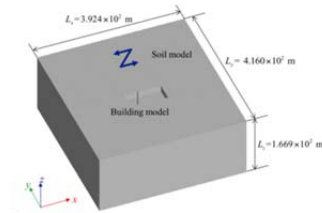


図1 建物と地盤の解析モデル

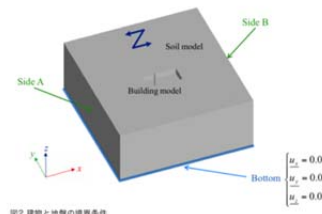


図2 建物と地盤の境界条件

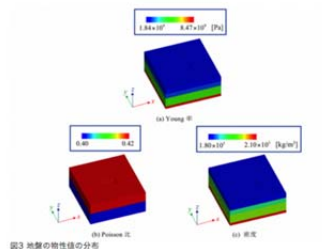
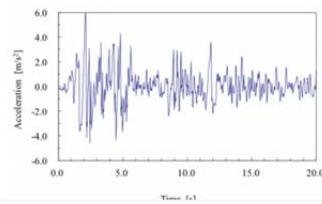


図3 地盤の物性値の分布



解析メッシュを図5に示す。節点数は484,044、要素数は463,302、全自由度数は1,452,153である。8節点六面体1次要素 (非適合要素) と2節点梁要素 (Bernoulli-Euler要素) を使用している。図6における要素の断面図、断面2次モーメント、ねじりモーメントを示す。節点番号217,004での変位ベクトル $[u, v, w]^T$ とその高階の節点での変位ベクトル $[u_i, v_i, w_i]^T$ に対して、建物と地盤の接触境界条件式 $[u, v, w]^T = \alpha [u_i, v_i, w_i]^T$ がMPC条件として与えられる (図6参照)。図7に示されるように、 $21 \times 21 = 440$ 点の境界条件が与えられることになる。

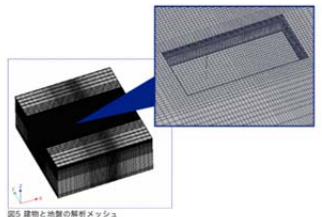


図5 建物と地盤の解析メッシュ

要素番号	断面図	断面2次モーメント	ねじりモーメント
1	76.0 m ²	1.5 × 10 ⁶ m ⁴	100.0 m ⁴
2	80.0 m ²	1.6 × 10 ⁶ m ⁴	100.0 m ⁴
3	90.0 m ²	1.7 × 10 ⁶ m ⁴	100.0 m ⁴
4	200.0 m ²	5.0 × 10 ⁶ m ⁴	100.0 m ⁴
5	200.0 m ²	5.0 × 10 ⁶ m ⁴	100.0 m ⁴

表1 梁要素の断面図、断面2次モーメント、ねじりモーメント

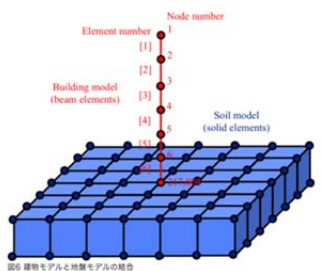


図6 建物モデルと地盤モデルの結合

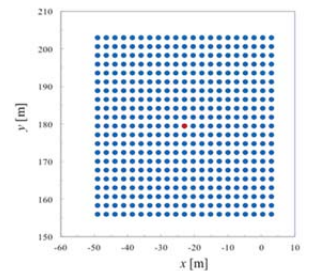


図7 21×21=440点の境界条件 (赤点は節点番号217,004の節点であり、青点は境界条件が与えられる節点である)

計算結果

時間積分法には、Newmark-β法を使用する。Newmark-β法のパラメータとして、 $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.25$ の初期値を使用する。断面に示した減衰を仮定して、 $C = R_0 R_0$ のような減衰マトリクスを用いる。5.0 Hzの振動の減衰比を0.02として、 $R_0 = 0.2 \text{ s}$ (0.02) s と設定する。時間増分は $\Delta t = 5.0 \times 10^{-3} \text{s}$ を用いる。El Centro 1940 NSのアーチは0.02 sごとであるため、アーチの間を線形補間した加速度を体積力として入力する。

建物と地盤の結合部 (節点番号217,004) での変位の時刻歴を図8に示し、速度の時刻歴を図9に示し、加速度の時刻歴を図10に示す。また、建物の先端部 (節点番号1) での変位の時刻歴を図11に示し、速度の時刻歴を図12に示し、加速度の時刻歴を図13に示す。

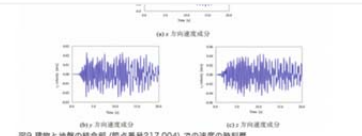
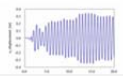


図9 建物と地盤の結合部 (節点番号217,004) での速度の時刻歴

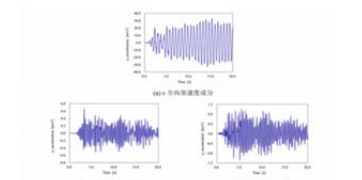


図10 建物と地盤の結合部 (節点番号217,004) での加速度の時刻歴

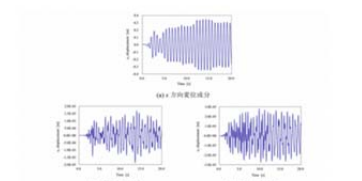


図11 建物の先端部 (節点番号1) での変位の時刻歴

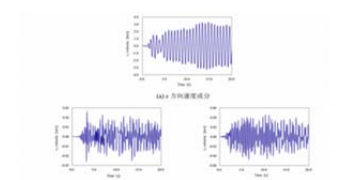


図12 建物の先端部 (節点番号1) での速度の時刻歴

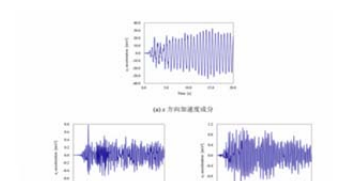


図13 建物の先端部 (節点番号1) での加速度の時刻歴

HPC/PF再構成実行対応プロジェクトアーカイブ

本解析をHPC/PF解析実行環境で再構成するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。

FISTR_seismic.tar.gz

不具合情報

特になし

【更新日】2015年11月6日

【作成者】goto

Fig. 6-33 Example case of FrontISTR on HPC/PF environment (2).

Si(100)表面のc4x2再構成構造

- ソフトウェア
ナノテクノロジー → 第一原理電子状態解析 → PHASE
- V&V区分
Verification 検証
- そのほかの分類
HPC/PF再現実行対応事例

概要
Si(100)表面における原子構造の最適化を行う。用いる単位セルを下記に示す。



使用ソフトウェアモジュール
PHASE/0

計算条件

項目	説明
並列数	20
系の種類	半導体
周期性	3次元
組成	Si80
緊ポテンシャルファイル	Si_ggapbe_nc_01.pp
磁性	なし
カットオフエネルギー	16 Rydberg
k点サンプリング	1x2x1

実行環境
FOCUSスパコンシステム (Intel Xeon E5-2670 v2 (2.5 GHz))

解析時間
1ノード (20コア) にて約1時間

詳細説明
最適化された原子構造 (単位セル) および最安定構造における状態密度図を以下に示す。



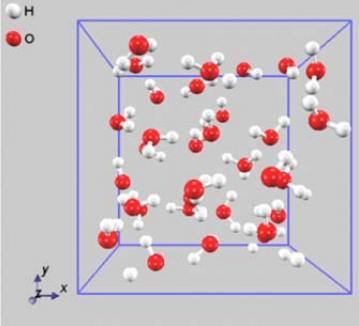

HPC/PF再現実行対応プロジェクトアーカイブ
本解析をHPC/PF解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
PHASE_Si100.tar.gz

[更新日] 2015年3月13日
[作成者] akinaga

水溶液中のヒドロニウムイオンの拡散

- ソフトウェア
ナノテクノロジー → 第一原理電子状態解析 → PHASE
- V&V区分
Verification 検証
- そのほかの分類
HPC/PF再現実行対応事例

概要
水溶液中のヒドロニウムイオンの拡散の第一原理MDシミュレーションを行う。ユニットセルを下記に示す。



使用ソフトウェアモジュール
PHASE/0

計算条件

項目	説明
並列数	80
系の種類	液体
周期性	3次元
組成	(H2O)32H+
緊ポテンシャルファイル	H_ggapbe_nc_01.pp O_ggapbe_us_02.pp
磁性	なし
カットオフエネルギー	25 Rydberg
k点サンプリング	gamma

実行環境
FOCUSスパコンシステム (Intel Xeon E5-2670 v2 (2.5 GHz)x2 CPU)

解析時間
4ノード (80コア) 使用で4時間

詳細説明
以下のリンクから、時間発展のトラジェクトリ動画を再生出来ます。
H3O拡散シミュレーションの動画

HPC/PF再現実行対応プロジェクトアーカイブ
本解析をHPC/PF解析実行環境で再現実行するための解析プロジェクト・アーカイブは以下よりダウンロードして下さい。
PHASE_H3Odiffusion.tar.gz

[更新日] 2015年3月13日
[作成者] akinaga

Fig. 6-34 An Example case of PHASE/0 on HPC/PF environment.

(6-2-2) HPC/PF 向け圧縮性流体解析プログラム UPACS の開発

大規模並列解析を実現するために、MPIを用いたデータ通信部の効率化、領域分割手法の改良、大規模計算格子生成手法の開発、更には「京」向けチューニングと大規模プロセス並列での性能評価を実施した。領域分割手法では計算格子ブロックのプロセスへの割り当て方を改良し、プロセスあたりの格子点数を均等にすることで計算の負荷分散を実現することに加えて、通信データ量が最小となるように割り当てる機能を実現した (Fig.6-35)。大規模計算格子生成に関しては格子の細分化ツールを開発し、粗い計算格子をベースとして自動的に格子を細密度化することで100億点規模の計算格子の作成を実現した (Fig.6-36)。また、「京」上で79,507プロセス並列における並列効率として90%以上を達成した (Fig. 6-37)。

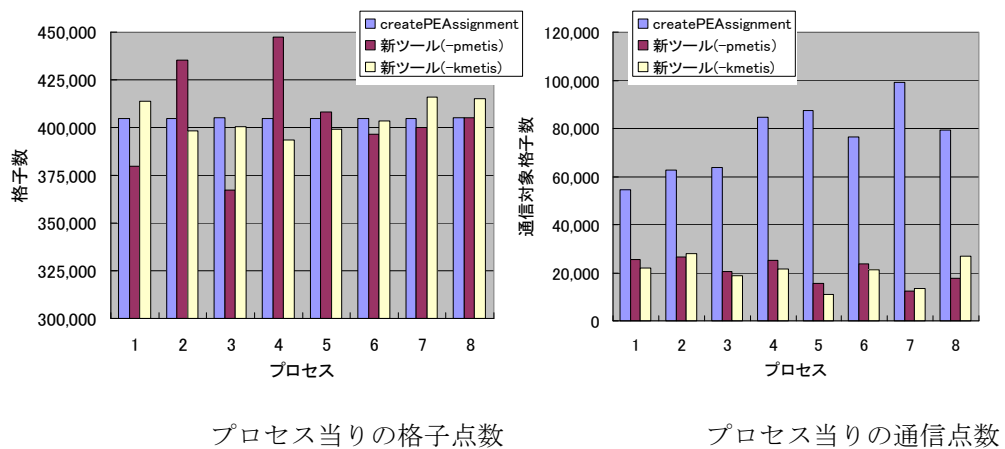


Fig. 6-35 Upgrading of domain decomposition method (block assignment to a process)

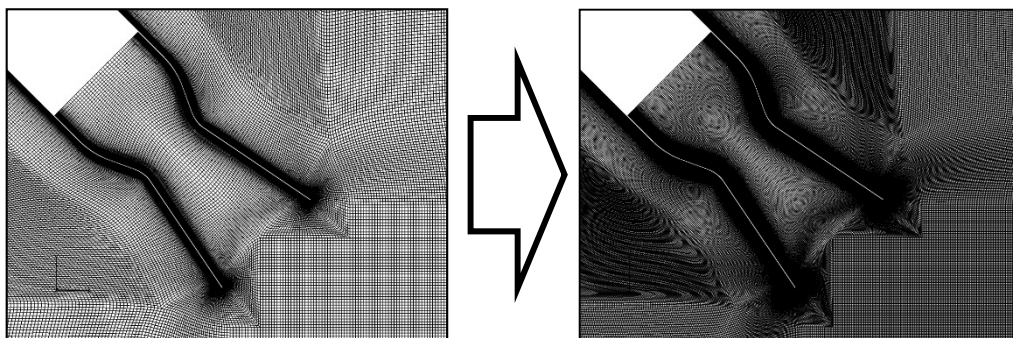


Fig. 6-36 Generation of large scale computational grid (automatic refinement)

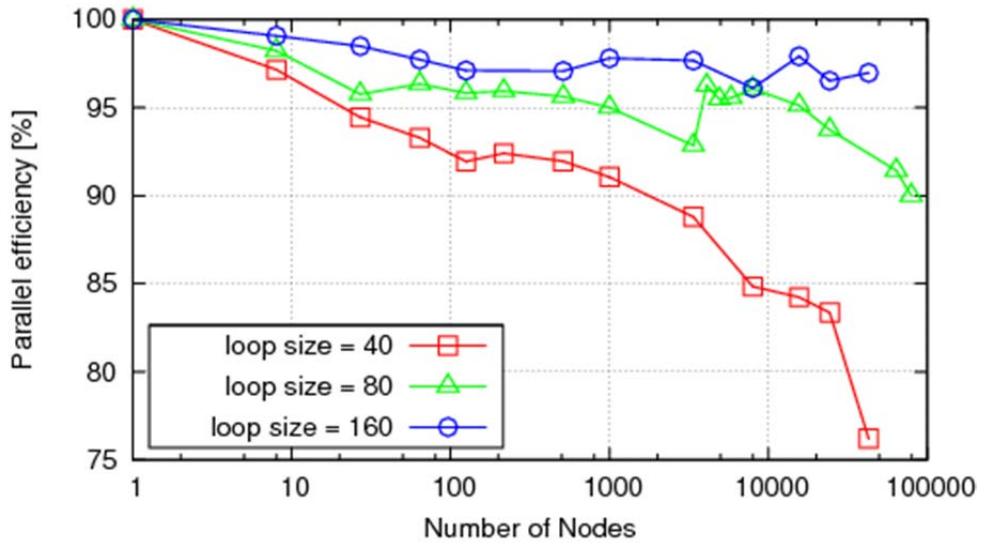


Fig. 6-37 Large scale parallel performance at K-computer

産業界での利用を促進するため、ものづくり分野で重要なターボ要素、特に軸流圧縮機や遠心圧縮機の詳細流れ解析への適用を行うため、動静翼干渉解析に必要な移動境界接続への対応、蒸気タービン解析に必要な湿り蒸気解析への対応、内部流解析で必要となる流量指定亜音速流出境界条件の導入を行った。移動境界接続への対応では計算格子ブロック分割の汎用化 (Fig. 6-38) とデータ通信の効率化を行った。湿り蒸気解析への対応では湿り蒸気の蒸発・凝縮モデルを実装し、基礎的な検証解析 (Fig. 6-39) を実施した。流量指定亜音速流出境界条件では、亜音速ダクト流れ (マッハ数 0.5) の計算に適用して特性 (Fig.6-40) を把握した。移動境界接続への対応と湿り蒸気解析への対応を統合し、蒸気タービンの多段解析を可能とするプログラムを開発した。

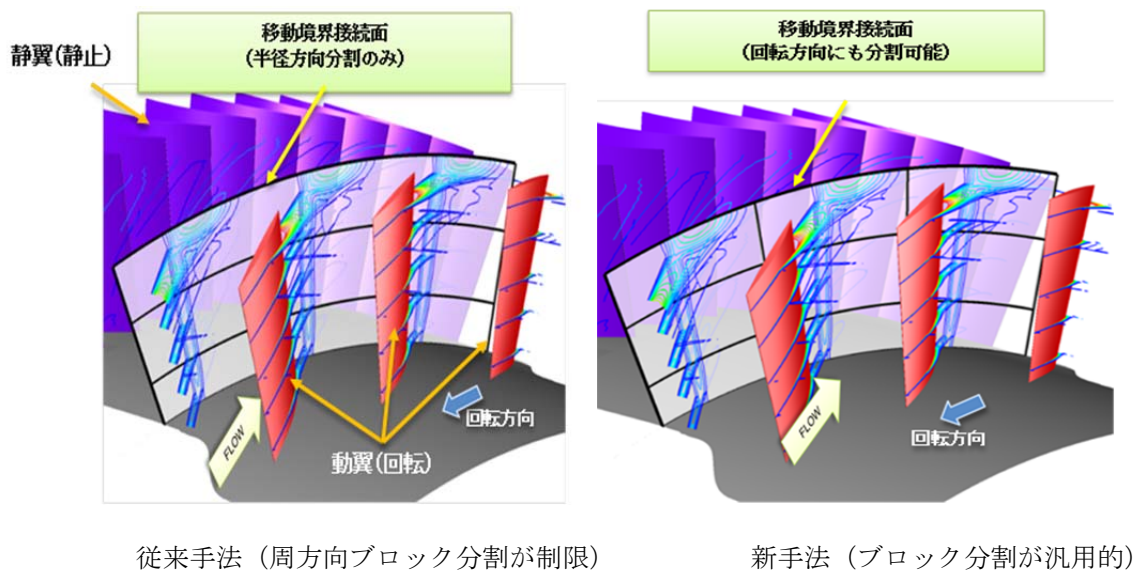


Fig. 6-38 Generalized data transfer for the sliding boundary

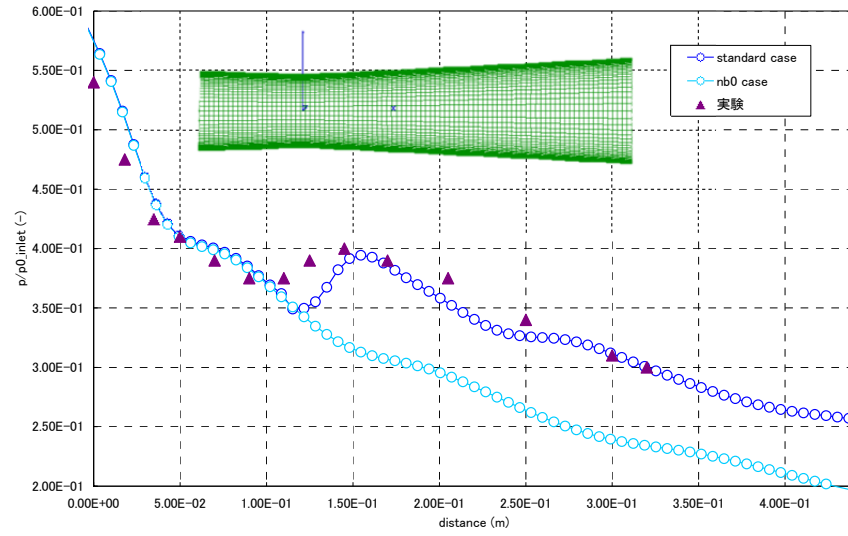


Fig. 6-39 Basic validation analysis of wet steam flow in the Laval nozzle

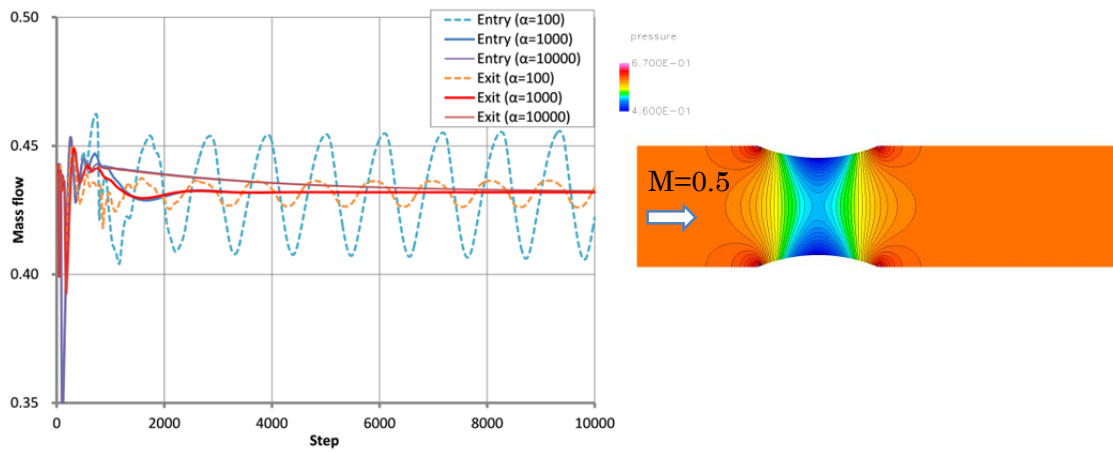


Fig.6-40 Oscillation suppression effect for subsonic duct flow; pressure distributions of converged solution and time history of flow rate at inflow and outflow boundary

(6-2-3) 階層型直交格子を用いた実用複雑系流体解析システム「FFV」の整備

本業務における最終的な目標は、階層格子を用いた実用複雑系流体解析システムの構築と適用である。そのために、平成 23 年度までの業務において、VCAD 技術を援用して直交格子ソルバー機能を高度化し、同時に階層データ構造の管理を行うライブラリを整備してきた。平成 24 年度は、以下の5項目について、作業を実施した。1)直交等間隔格子ソルバーの高度化、2)階層格子ソルバーの開発、3)2 相流解析機能の高度化、4)共通基盤ライブラリの整備、5)検証事例の蓄積。直交等間隔格子ソルバーについては、300 億格子の計算を実施し、大規模な解析を1日で実行できることを確認した。階層格子ソルバーについては、格子生成とプロトタイプソルバーにより複雑形状の計算実行を確認した。

前年度までに開発した直交等間隔格子ソルバーについて、チューニングを進めた。また、自動車空力解析を例として、大規模解析への適用性を検証した。以下に主要な結果を示す。

Fig. 6-41 に FFV-C(直交等間隔格子系)ソルバーの並列性能を示す。最大 82,944 ノードまでの評価を行ったが、十分な並列性能を持つことがわかる。単体性能では、現在のところ 10%程度の性能であるが、コンパイラが改善されると 20%程度まで性能が向上することを確認している。

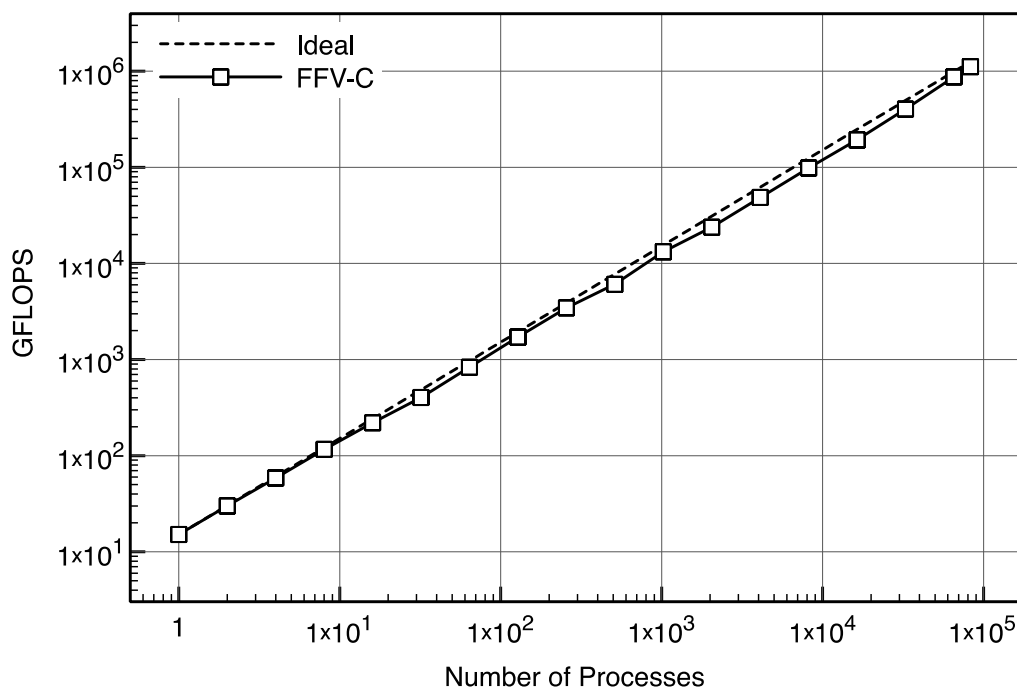


Fig.6-41 Weak scaling performance of FFV-C application

数百億格子規模の実用解析に対する本アプローチの有効性を検証するために、時速 100km の風洞試験を想定した、自動車の空力解析を実施した。シミュレーションで用いた車体データは、実車の形状を近似したものである。データ形式は Stereo Lithography(STL)形式で、ポリゴン数は 1,241 万、データサイズは 3.3GB である。これに対して、流体計算の格子間隔は 4mm とした。このとき、解析領域全体に要する総セル数は約 290 億となった。ただし、流れ場が発達するまでの過渡期については、格子間隔が 16mm の粗い格子を用いた。そして、準定常状態に達した後、格子間隔を 16mm から

8mm、8mm から 4mm へと段階的に細分化した。なお、全てのシミュレーションは京コンピュータの 9,216 ノードを用いて実施した。

シミュレーションによって車体周りの渦構造を可視化した結果を Fig.6-42 に示す。車体周りには大小様々な渦が形成されていることがわかる。また、これらの渦は、車体本体だけでなく、ドアミラーやタイヤハウスからも生成されていることがわかる。ドアミラーやタイヤハウス、床下の形状といった要素は、従来の解析では計算コストの低減のために無視ないしは簡略化されてきた。しかしながら、本結果は、これらの要素が必ずしも無視できないことを示している。一方で、ルーフ後端における境界層の様相が、実験的観測によるものとは異なることも確認されている。この点に関しては、格子間隔の更なる細分化、計算スキームの改善などの検討が必要である。

最後に、本シミュレーションに費やした計算時間について、簡単にまとめておく。本シミュレーションでは、3 段階の格子を用いて実施したが、それぞれの段階における計算時間の総計は約 30 時間であった。なお、この中には、格子生成過程に費やした時間も含まれている。格子生成は 3 段階の各格子において実施する必要があるが、最も格子間隔を細分化した場合でも、約 20 分で完了した。つまり、格子生成に要した時間は最大でも 1 時間であり、これは解析時間全体の 3%程度にすぎない。

以上に示した通り、本ソルバーを用いることで、ドアミラーやタイヤハウス、エンジンルーム内の部品といった車体の詳細な形状を考慮した解析が実現可能である。このことから、将来的には、自動車の車体に作用する空力と、エンジンルームの冷却の間にあるトレードオフ関係など、従来は不可能ないしは非常に困難であった対象の解析が実現できるものと期待される。

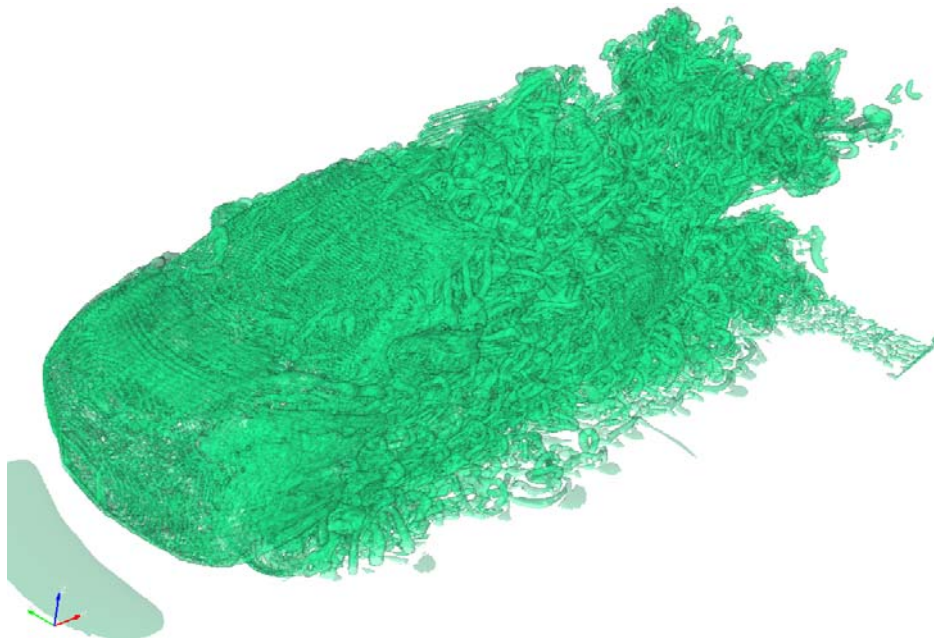


Fig. 6-42 Vortex structure around a vehicle (the 2nd invariant of velocity gradient tensor)

(1) 実用的乱流モデルの実装及び妥当性評価

一般にものづくり分野において、複雑形状周りの高レイノルズ数流れ場に滑りなし条件を課した LES が適用されるケースは未だ限定的な範囲にとどまっている。その理由は、レイノルズ数が大きくなるに従い運動量輸送を主導的に担う縦渦を解像するための膨大な計算格子が壁面近傍の乱流境界層内に必要となるからである。概して境界層を解像する LES に必要とされる計算格子数はレイノルズ数の 1.8 乗と見積もることができるが、レイノルズ数が 10^7 の場合には 10 兆セルもの計算格子が必要となり、これは現時点の最新スーパーコンピュータをもってしても実現不可能な計算規模である。したがって LES を工業的に応用することを前提とする場合には、現時点において壁面境界条件 (LES 壁面モデル) の使用は不可避である。このような背景から、本年度は直交格子系に適した簡便な LES 壁面モデルを開発し FFV-C に実装するとともに、カノニカルな流れを対象にモデルの妥当性評価を実施した。なお、SGS モデルは局所 SGS モデルの一種であるコヒーレント構造スマゴリンスキー (CSM) モデル、及び Wall-adapting local eddy-viscosity (WALE) モデルを採用することとした。本モデルは、流れ場に依存するモデル係数を可能な限り排除することで複雑形状周りの流れ場への適用性が高く、また負の拡散係数を避けるための大域的な平均操作を必要とせず FFV-C 本来の高い並列性能を担保可能であるという特徴を持つ。

本モデルの有効性を確認するために、摩擦レイノルズ数 150 のチャンネル流れを対象に検証を行った。流路の主流方向、壁面鉛直方向、スパン方向をそれぞれ (x、y、z) 方向とすると、流路の大きさは $(Lx^+, Ly^+, Lz^+) = (1200, 300, 600)$ である。無次元格子幅は全方向等間隔の $h^+ = 15$ とし、各方向のセル分割数は $(Nx, Ny, Nz) = (80, 20, 40)$ である。これより壁面からの無次元距離は $y^+_{min} = 7.5$ であり、境界層内に十分な解像度を持つ LES と比較すると壁面鉛直方向に 5 から 10 倍程度粗い格子幅である。Fig.6-43 に主流方向平均速度の計算結果を示す。結果の比較対象として、同一解像度で粘着条件を課した CSM モデルの結果 (CSM、NoSlip)、格子解像度を上げて粘着条件を課した CSM モデルの結果 (CSM、NoSlip (resolved)), Kasagi らのスペクトル法による DNS データベースの結果 (DNS (Kasagi)) を示す。CSM モデルでは、粘性低層に数点の格子点を確保することで乱流のコヒーレント構造が解像可能となり、流れ場の高い予測精度が担保できる。しかし、格子幅をモデルの適用範囲外なほど法外に粗く選ぶとコヒーレント構造が解像できず、壁面第一格子から計算される壁面せん断応力の予測精度が悪化する。一方で、本モデルの計算結果は DNS データベースや境界層内に十分な解像度を持つ LES 結果と同等の予測精度を示すことが分かる。

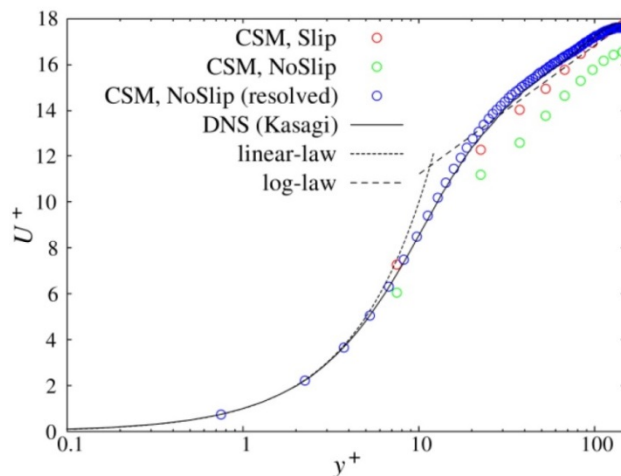


Fig.6-43 Comparison of mean streamwise velocity for channel flow.

Fig.6-44 は、主流方向平均速度に対する壁面鉛直方向無次元格子幅の依存性を示している。壁面第一格子点を粘性低層近傍から対数領域に至るまで幅広く選択しているのにも関わらず、本モデルの結果は DNS データベースと良好に一致することが確認できる。このことは、隘路等の複雑形状に対する本モデルの高い適用可能性を示している。最後にレイノルズ依存性を Fig.6-45 に示す。摩擦レイノルズ数が 650 のケースにおいても本モデルの結果は DNS データベースと良好に一致していることが分かる。

本モデルは従来の LES による計算コストを大幅に削減できる可能性を示しており、本業務において FFV-C による実用解析の将来的な見通しを得ることができた。

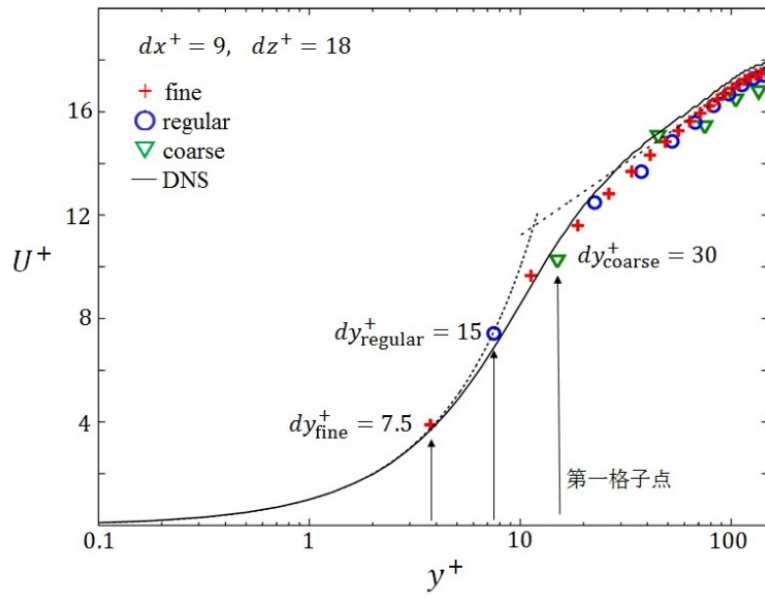


Fig.6-44 Dependence of vertical grid size on mean streamwise velocity.

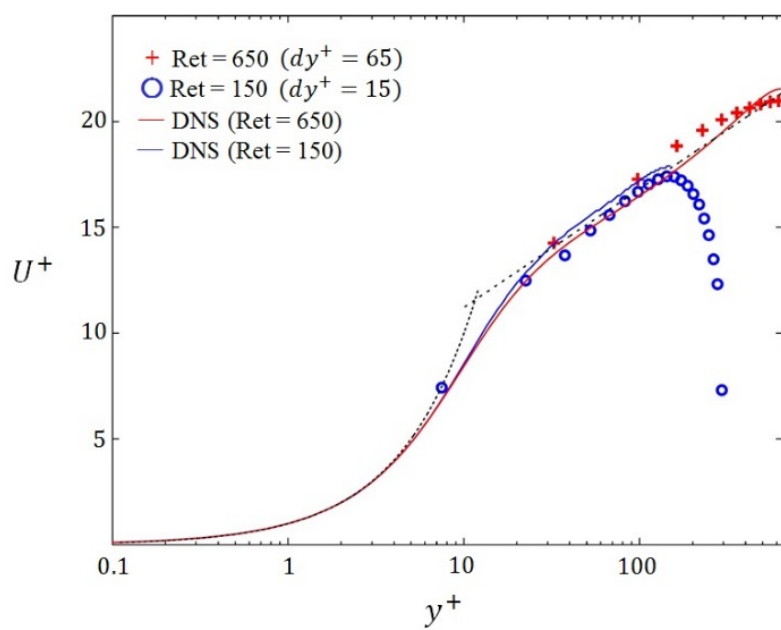


Fig. 6-45 Dependence of Reynolds numbers on mean streamwise velocity.

- [1] http://avr-aics-riken.github.io/ffvc_package
- [2] <https://github.com/avr-aics-riken/FFVC>
- [3] Ono K., "Product Design using Cartesian Mesh Method", Journal of Japan Society of Fluid Mechanics 21 (2002) 16-25.
- [4] 小野謙二, "超大規模熱流体計算のための階層的直交格子生成と車両の熱・空力解析への応用", 第91期日本機械学会流体工学部門講演会, 2013年11月1日, 福岡県.
- [5] 小野謙二, 大西順也, "100億超格子を用いた自動車の大規模流体解析への挑戦", スーパーコンピューティングニュース, 15, Special Issue 1 (2013) pp.59-69.
- [6] Chapman, D.R. "Computational aerodynamics development and outlook", AIAA Journal 17 (12) (1979), pp.1293-1313.
- [7] Kobayashi, H. et al., "Application of a local SGS model based on coherent structures to complex geometries", Int. J. Heat and Fluid Flow 29 (2008), pp.640-653.
- [8] Nicoud F. et al., "Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor", Flow, Turbulence, and Combustion, 62 (1999) 83-200.
- [9] Iwamoto K. et al., "Reynolds Number Effect on Wall Turbulence: Toward Effective Feedback Control", Int. J. Heat and Fluid Flow, 23 (2002) 678-689.
- [10] Uzawa, K. and Ono, K. "Validation of local SGS models implemented in high-performance CFD solver: FFV-C", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference (2015).
- [11] 鶴沢憲, 小野謙二, "壁法則に基づく動的なLES壁面モデルの検討", 第29回数値流体力学シンポジウム, B04-2 (2015).

(6-2-4) 共通基盤技術(核融合)

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効率的に行う上で、超並行列列ソルバー、通信実装、データ入出力、可視化技術等、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る。本業務では「京」において革新的な大規模流体計算技術と遠隔可視化技術を開発し、従来の解析規模を大幅に上回る大規模流体解析を実現した。基盤技術の有効性を $\sim 10^{12}$ 自由度のペタスケール計算を必要とする核融合プラズマ流体解析プログラムへの適用によって実証し、最先端の核融合プラズマ乱流輸送研究に活用した。基盤技術を論文やオープンソースソフトウェアとして公開することによって分野内外で成果の共有を図った。以下に成果の詳細を示す。

(1) 「京」における大規模流体計算技術の開発

並列化効率を向上する上で通信と計算の同時処理による通信マスクが有効であるが、その実装手法は各環境の通信ハードウェアや非同期通信ライブラリ等に依存しており、適用範囲も1対1通信に限られていた。この問題を解決するために、通信マスクの汎用的な実装手法を「京」において開発した。具体的には、8 コアから構成される「京」において 1 コアを通信処理に割り当てる通信スレッドをOpenMPによって実装する方法を確立した(Fig.6-46)。この手法は通信処理のオーバーヘッドをコア数分の1に削減できることから、「京」のみならず、FX10 等より多くのコアを搭載した環境において、より大きなコスト削減が可能となる。本手法の通信スレッドは標準的なMPIとOpenMPのみで実装されており、「京」以外の環境でも利用可能である。また、通信スレッドは非同期1対1通信のみならず同期通信や集団通信にも適用可能であるため極めて汎用性が高い。

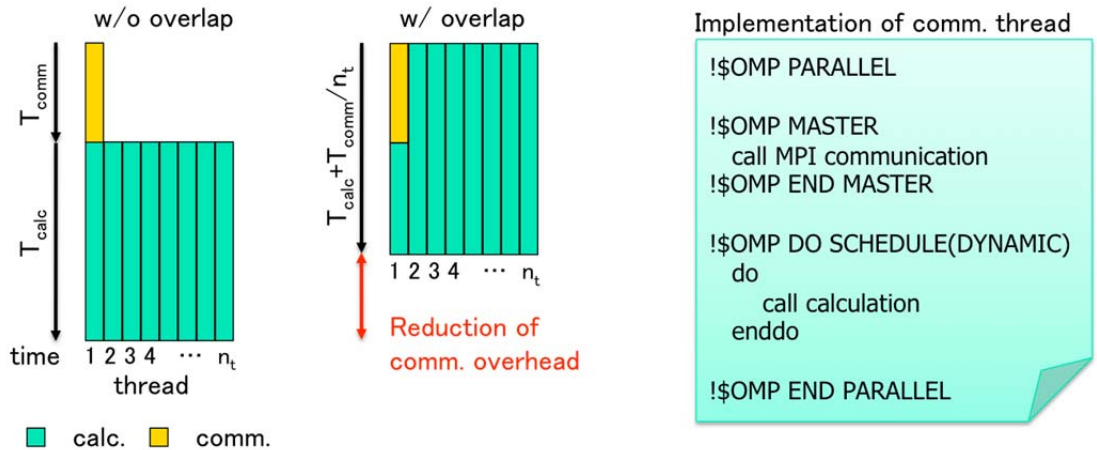


Fig.6-46 Communication overlap technique using communication threads. By processing communication and computation simultaneously, communication overheads are ideally reduced by $1/n_t$, where n_t is the number of threads per MPI process. This technique is universally applicable to non-blocking, blocking and collective MPI communications.

10 万コアを超える大規模流体計算を効率的に行うことを目的として、核融合プラズマ流体解析プログラムをベースとして3次元以上の高次元領域分割による並列化、および、Tofu ネットワークに対するプロセスマッピング手法や集団通信の最適化の検討を実施した。具体的には、差分乱流コードGT5D、スペクトル乱流コードGKVという2種類の核融合プラズマ流体解析プログラムにおける領域分割を従来の3次元領域分割から4次元以上の高次元領域分割に拡張し、100万コアレベルの超並列計算に耐える並列化モデルを構築した(Fig.6-47)。さらに、Tofu ネットワークにおいて「京」専用集団通信アルゴリズムを有効化するプロセスマッピング手法を開発することにより、大規模流体解析のスケラビリティを飛躍的に向上した。

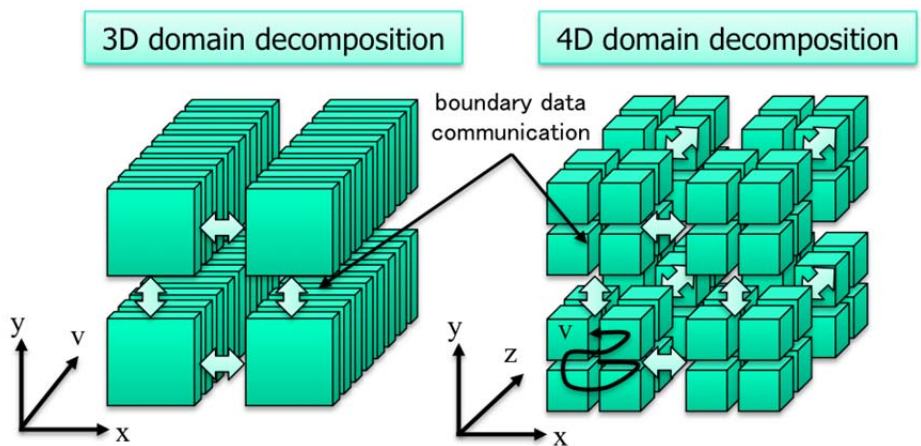


Fig.6-47 Multi-dimensional domain decomposition models. By extending the domain decomposition from 3D to 4D, the sizes of MPI communicators in each axis is suppressed and the ratio of computation (volume) to communication (surface) is improved.

上記大規模流体計算技術を差分乱流コードGT5D、スペクトル乱流コードGKVという2種類の核融合プラズマ流体プログラムに適用した。具体的には、GT5Dでは差分-陰解法の反復法ソルバーの行列ベクトル積(差分演算)における袖領域通信や異なる対称性をもつ演算子間での並列化軸の転置通信に通信マスク手法を適用した。一方、GKVでは並列化多次元FFTにおいてボトルネックとなる転置通信をFFT演算処理と同時に実行する通信マスク手法を開発した。これに加えて、L1 キャ

ッシュ、L2 キャッシュそれぞれについての最適化技術を開発することによって、対ピーク性能比～10%程度で「京」全系に至る強スケーリングを達成した (Fig.6-48)。以上の開発技術を論文等 (原著論文 4 編、解説 2 編) で公表し、SC13 Best Poster Award および学会賞等 (3 件) を受賞した。

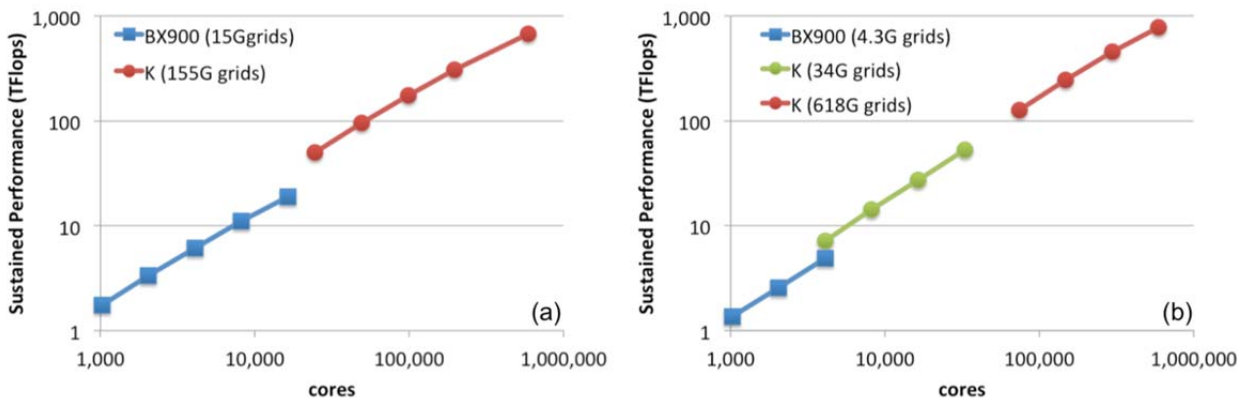


Fig.6-48 Strong scaling of (a) the finite difference plasma turbulence code GT5D and (b) the spectral plasma turbulence code GKV on the K-computer (SPARC64VIIIfx/Tofu interconnect) and the BX900 (Nehalem-EP/InfinibandQDR).

(2) 「京」における遠隔可視化システムの開発

粒子ベースボリュームレンダリング (PBVR) のクライアント・サーバ型分散並列可視化モデルを開発した。PBVR は物理量に依存して色と不透明度を与える点の集合としてスカラーボリュームデータを表現する手法であり、(i)構造格子、非構造格子を問わず汎用的に利用可能、(ii)粒子生成のモンテカルロ処理の並列度が高い、(iii)可視化する画素数によって決まる粒子データサイズはボリュームデータよりかなり小さく膨大なボリュームデータの情報を効果的に圧縮できるという特徴がある。この特徴を利用して(i)スパコン上のサーバによる超並列処理によって粒子データを生成し、(ii)サイズの小さい粒子データをスパコンから遠隔地のユーザ PC に転送、さらに、(iii)ユーザ PC 上でグラフィックカードを活用して粒子データの対話的なレンダリングを行うというクライアント・サーバ型の分散並列可視化モデルを構築した (Fig.6-49)。これにより、「京」のストレージ上の大規模データを転送することなく、遠隔地から直接解析する手法が確立した。

上記の分散並列可視化モデルを「京」において実装し、遠隔可視化システム PBVR を開発した。PBVR の開発にあたっては、(i)「京」のストレージ環境に適したデータ入出力形式の構築、(ii)「京」における超並列処理を実現するマスター・スレーブ方式の動的負荷分散モデルの実装、および、(iii)「京」向けに開発された高性能擬似乱数生成ルーチン KMATH_RANDOM [http://www.aics.riken.jp/labs/lpnctr/KMATH_RANDOM.html]の導入を進め、1024 プロセスまで並列化効率 90%以上となる強スケーリングを達成した。さらに、開発システムのものづくり分野における活用に向けて、(i)ボリュームレンダリング以外の断面、等値面等の汎用可視化機能強化、(ii)ものづくり分野の主要データ形式へのデータインターフェース対応、(iii)サーバプログラムの BX900、FX10、Linux クラスタ等への移植、および、クライアントプログラムの Linux、Windows、Mac への移植によるマルチプラットフォーム環境対応を進め、システムをオープンソースソフトウェア (<http://ccse.jaea.go.jp/ja/download/software.html>)として公開した。上記の開発技術を論文等 (原著論文 3 件) で公表し、学会賞等 (2 件) を受賞した。また、可視化分野でアジア最大の国際会議 SigGraphAsia2015 ではチュートリアルに採択され、国内外のユーザ向けにハンズオンセミナーを実施した。

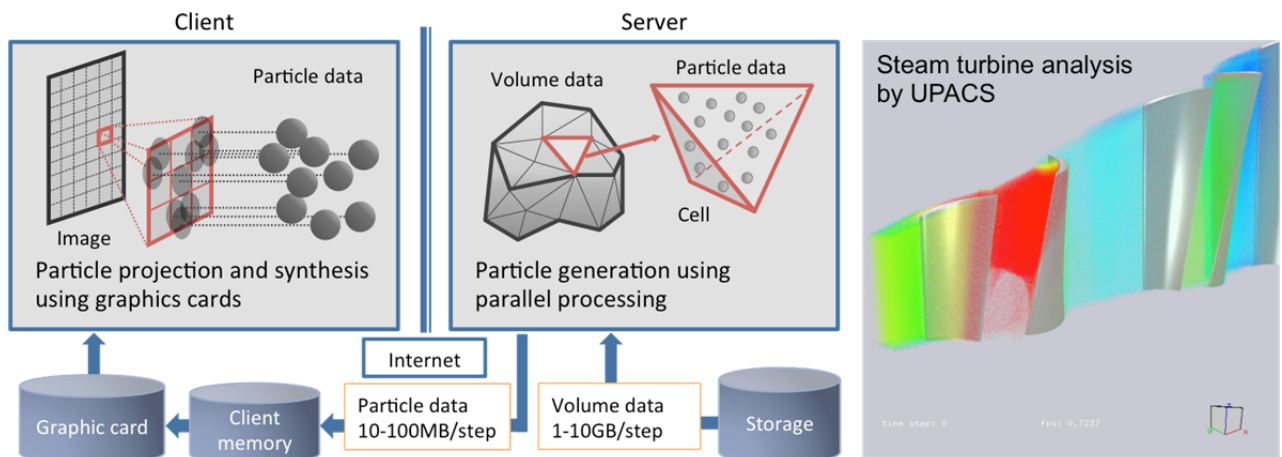


Fig.6-49 Left shows client-server processing in the remote visualization system based on the Particle Based Volume Rendering (PBVR). Right shows a volume-rendering image of PLOT3D data generated by the UPACS code. The image shows flow velocity along a high stagnation pressure region in a steam turbine.

(3) プラズマ流体解析への適用と機能実証

「京」一般利用課題との連携により、開発した基盤技術を「京」におけるプラズマ流体解析に適用し、その有効性を実証した。特に、平成 24 年度「京」一般利用課題「核融合プラズマの乱流シミュレーション」では約 400 万ノード時間/ショットという従来の解析規模を大幅に上回るペタスケール計算によって、(i)ITER 規模の大域的イオン乱流計算によるイオン熱輸送の装置サイズスケールリング解明、および、(ii)イオン-電子マルチスケール乱流計算におけるスケール間相互作用と電子熱輸送機構の解明という世界初の成果が得られた (Fig.6-50)。

次世代の核融合実験炉 ITER は既存実験装置に比べて装置半径で数倍、炉心体積で一桁以上大きい装置となるため、炉心プラズマ性能を評価する上で装置サイズに対するプラズマ乱流輸送のスケールリングが重要な因子の一つと考えられている。ITER 規模に至る装置サイズスケールリングを既存実験装置で試験することは難しく、シミュレーションに大きな期待が寄せられているが、計算コストが装置サイズの 4 乗 (3 次元空間格子数×時間ステップ数) に比例して増大するため、従来のスーパーコンピュータで ITER 規模のシミュレーションを実施することは困難であった。そこで、本基盤技術を適用することにより、ITER 規模に至る装置サイズスケールリングのシミュレーションをはじめて実現した。この結果、L モードと呼ばれる基本的な運転方式の炉心プラズマでは、炉心プラズマの温度分布は乱流場を励起する微視的不安定性の臨界温度勾配パラメータに強く拘束されるため、炉心体積が増大して核融合出力が増大しても炉心温度の上昇は限定的であり、閉じ込め性能が劣化する傾向にあることがわかった。

ITER の核燃焼プラズマでは核反応生成アルファ粒子が主に電子を加熱するため、電子熱輸送の評価が重要な問題となっている。電子熱輸送を決定する電子乱流はイオン軌道半径 (~5mm) からそれより質量比の平方根 (水素に対して ~1/50) だけ小さい電子軌道半径 (~0.1mm) に至る広範な波数領域にスペクトルが分布しており、本質的にマルチスケール問題となっている。しかしながら従来の研究では計算コストの問題によりイオンスケールと電子スケールのスペクトルのスケール分離を仮定してそれぞれを独立に解析していたため、これらのスペクトル間の相互作用があまりよくわかっていなかった。そこで、本基盤技術を適用することにより、従来の約 10 万倍 (~ 50^3) の分解能のマ

ルチスケール電子乱流計算を世界で初めて実現した。この結果、従来は電子熱輸送に主要な寄与があると考えられてきた電子スケール乱流がイオンスケール乱流によって抑制されるというスケール間相互作用が明らかになった。

これ以外にも、本基盤技術は LHD (NIFS) や JT-60 (JAEA) の実験データ解析等に活用された。これらの成果は Physical Review Letters 誌や IAEA 核融合エネルギー会議等の論文 (原著論文 14 編) で公表されており、学会賞等 (6 件) を受賞した。

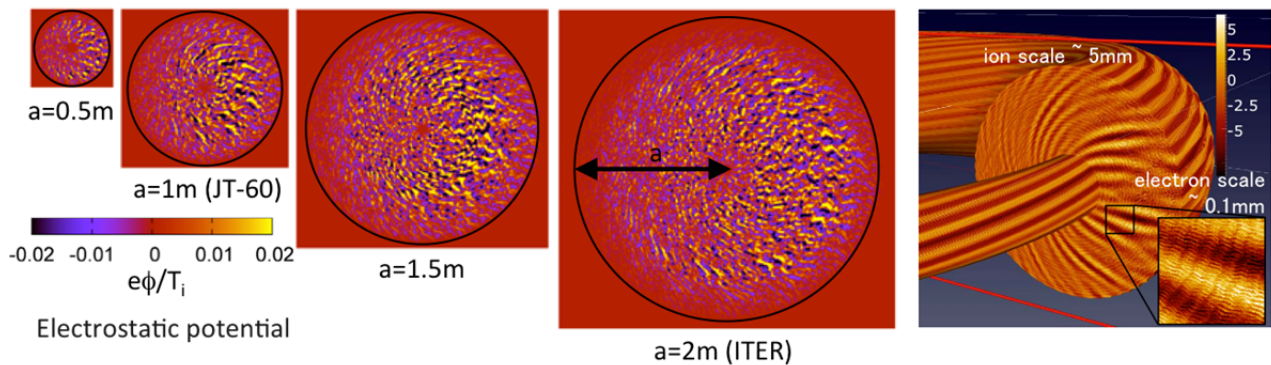


Fig.6-50 Peta-scale plasma simulations are enabled via the developed computing techniques. Left shows plasma size scan of global ion turbulence simulations, in which the computational cost is increased by $\propto a^4 \sim 256x$. Right shows the ion/electron multi-scale turbulence simulation, which requires $\sim 50^3 \sim 10^5x$ higher resolution compared with the conventional single scale turbulence simulation.

(6-2-5) 並列 FEM 構造解析ソフト「FrontISTR」高度化の検討

(1) 反復法ソルバーのハイブリッド並列化とその並列性能評価

領域分割に基づく MPI 並列性能は、コアあたりの計算規模を適切に設定することにより充分良好な weak scale を発揮できることが既にわかっている。ここでは、全体解析時間の 90~95% 以上を占める反復法ソルバーのスレッド並列化に取り組んだ。具体的には、反復法ソルバー内の繰り返し計算ループすべてに対して OpenMP によるスレッド並列化コーディングを行った。依存性のある前処理部分については、あらかじめマルチカラーオーダリングを実施した。なお、有限要素法などの非構造格子解法では、疎行列・ベクトル積において不連続なメモリアクセスが発生する、という共通した課題がある。係数行列は連続アドレスに格納され、しかもソルバーの反復あたりに参照される頻度は 1 回である。一方、ベクトルは複数回参照され、繰り返し計算ループにおいて飛びアクセスとなる。この部分の演算性能を向上させるために、「京」の CPU に実装されているセクターキャッシュ機能を利用した。セクターキャッシュ機能は、2 次キャッシュを二つの領域に分割し、一つの領域にどのプログラム変数を格納するかをコーディングで指定できるものである。FrontISTR では、設定可能な最大値をベクトル変数に割り当てることにした。これにより、「京」では 1 ノードあたり約 24 万節点の変位ベクトルが 2 次キャッシュに格納される (Fig.6-51, Fig.6-52)。さらに、大規模モデルに対してハイブリッド並列性能を評価した。解析対象となる樹脂、配線銅、銅ペーストで構成されたプリント配線基板の形状を Fig.6-53 に示す。Table 6-3 に示すメッシュ規模について解析を実施し、並列演算性能を検討した。最大の解析規模は約 25 億節点 (75 億自由度) であり、細部のメッシュ辺長は $7.5 \mu\text{m}$ である。解析は並列方式の比較を含めて行い、Table 6-4 に示す実行性能の計測結果が得られた。1 回のリファインによりメッシュ規模は 8 倍となるため、リファインごとに並列数を 8 倍とし、1 プロセスごとの処

理規模は同一となるようにしている。CG法の反復回数はリファインするごとに約2倍となることが経験的に得られており、その傾向と一致する。仕事率は、反復法ソルバーにおける(全体時間-通信時間)/全体時間であり、領域分割の状況や並列数に影響される。フラットMPIでは、浮動小数点演算の対ピーク性能比は4.2%~5.0%であった。一方、ハイブリッド並列方式の対ピーク性能比がかなり低い。今回の解析では、プロセスあたりの節点数がセクターキャッシュ容量を超えるため、フラットMPIと同等の対ピーク性能比が予想されたがそれよりも低い。これは、計算負荷が最も高くセクターキャッシュ機能を適用した疎行列・ベクトル積ルーチンの処理に異常な時間がかかるプロセスがごく少数存在する現象が発生しているためである。このごく少数のプロセスの影響を受け、全体として通信待ちが発生し、仕事率が低下している。この原因がプログラムによるものかハードウェアによるものかは現状不明である。REVOCAP_PrePostを用いてポスト処理した結果をFig.6-54に示す。FrontISTRのハイブリッド並列機能による10億~100億メッシュの大規模解析能力を検証するとともに、プリ・ポスト処理を含めた大規模構造解析への適応性を実証することができた。

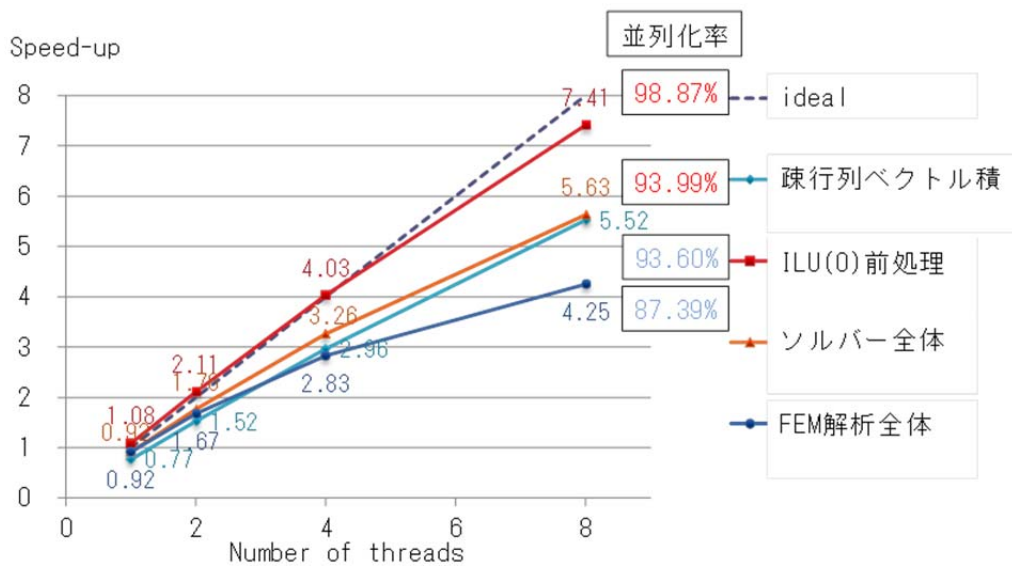


Fig. 6-51 Single-CPU (thread parallel) performances

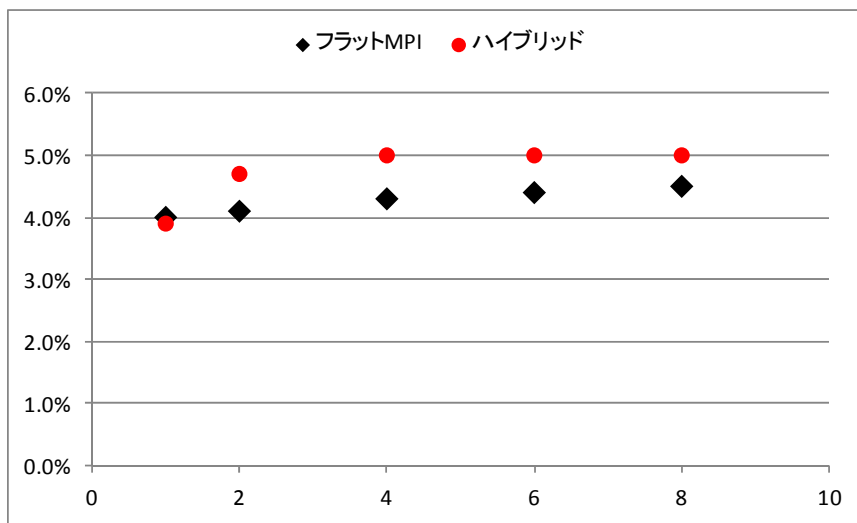


Fig. 6-52 To-peak performances of Flat-MPI and Hybrid

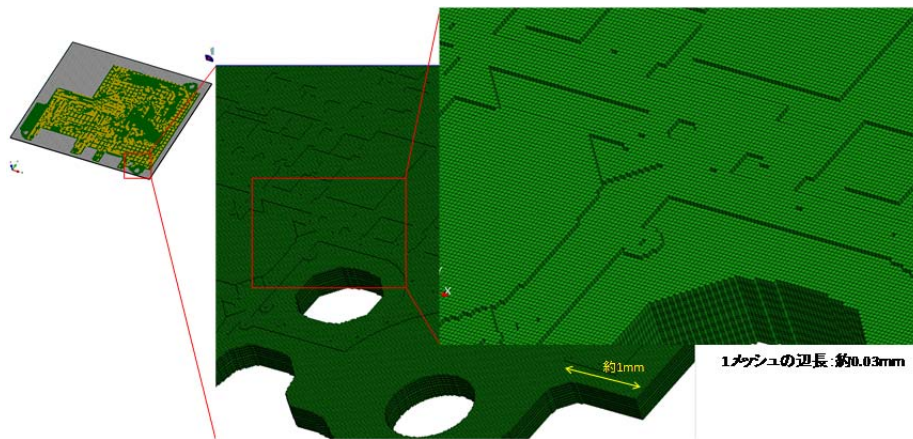


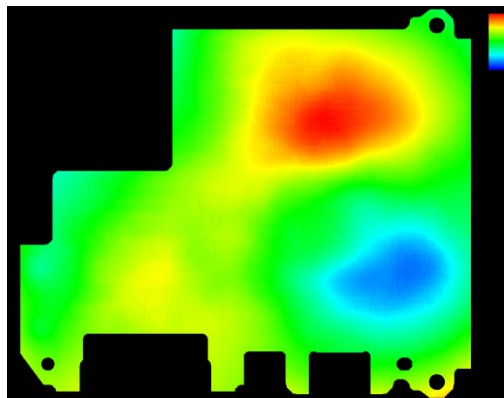
Fig. 6-53 Printed circuit board model (voxel mesh)

Table 6-3 Analysis meshes

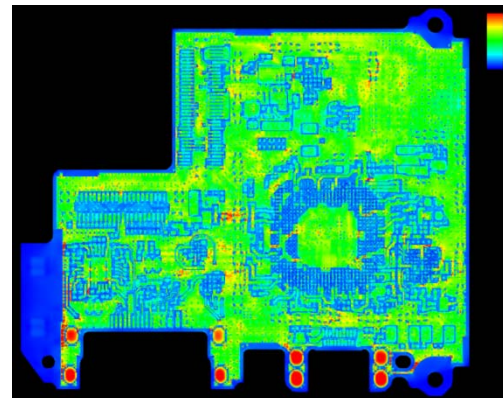
	要素数	節点数
オリジナル	38,689,706	41,044,244
リファイン1回	309,517,648	318,932,409
リファイン2回	2,476,141,184	2,513,793,437

Table 6-4 Numerical results of Flat-MPI and Hybrid

Refine	ノード数	コア数	並列方式	計算時間	反復回数	仕事率	対 Peak 比
0	128	1024	Flat MPI	3.8h	374,373	74.7%	4.7%
			Hybrid	4.5h	374,373	57.6%	3.3%
1	1024	8192	Flat MPI	5.7h	775,834	88.0%	5.0%
			Hybrid	8.6h	771,788	60.3%	3.3%
2	8192	65536	Flat MPI	13.7h	1,616,318	82.6%	4.2%
			Hybrid	21.7h	1,594,693	50.3%	—



(a) u_z -displacement



(b) Mises stress

Fig.6-54 Displacement and von Mises stress distributions (2,513,793,437 nodes, 2,476,141,184 elements and 7,541,380,311 DOFs).

(2) 多点拘束条件付き構造解析における反復法ソルバーの収束性評価

FrontISTR 普及と維持・発展を目指して、開発プロジェクトの終了後も継続的に機能拡張や、共同研究などでカスタマイズ化した内容の取り込み、ユーザーから要望機能の実装、不具合の修正、を実施している。その一環として、アセンブリ構造解析に不可欠な多点拘束条件処理に注目し、既の実装されているペナルティ法、および、陰的自由度消去法である MPC-CG 法における、疎行列反復法ソルバーの収束性に関する課題を解決するため、これらの手法と比較して反復法ソルバーの収束性に優れたアルゴリズムを開発した。

多点拘束条件を含む問題における反復法ソルバーの収束性を評価するため、単純形状モデルを用いる。要素タイプは六面体 1 次要素であり、節点数 7,932,500、要素数 7,745,536、多点拘束条件数 132,153 である。反復法線形ソルバーの収束性に影響の少ない多点拘束条件処理手法として、新たに陽的自由度消去法を実装した[1]。陽的自由度消去法では、スレーブ自由度の消去に伴い、全体剛性行列の非ゼロプロフィールが変化し、行列ベクトル積における通信パターンも変化する。これに対応するため、領域分割の段階で、自由度消去後の非ゼロプロフィールを考慮した通信テーブルの作成を行うこととした。この実装により、BILU(2)前処理を用いた場合、従来の MPC-CG 法と比較して反復回数を約半減することに成功した(Fig.6-55)。

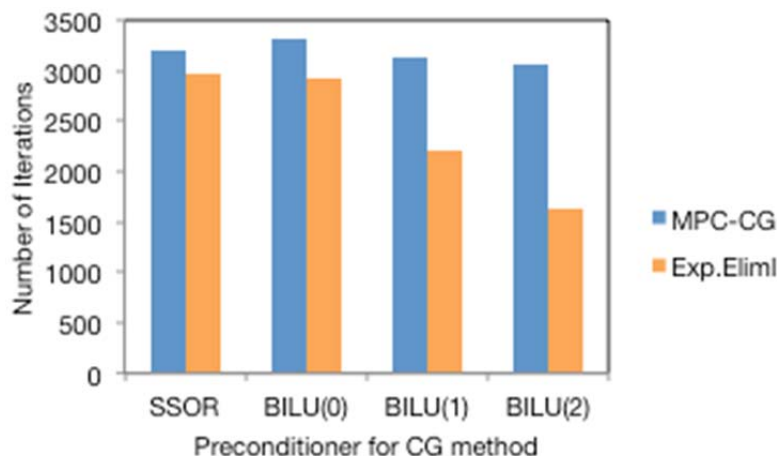


Fig.6-55 Number of iterations of preconditioned CG methods with MPC-CG and explicit elimination

既に産業界で広く実施されている構造解析の分野では、対象問題ごとに複雑で多様な解析機能を用いることが多い。京を用いて実機問題に取り組むには、機能の汎用性と演算効率の両面を維持することが重要である。本研究では、アセンブリ構造解析に不可欠な多点拘束条件処理に伴う反復法線形ソルバーの収束性の課題を解決し、SSOR, BILU(0), BILU(1), BILU(2)の各前処理を用いた際に、反復法線形ソルバーの収束性改善効果が確実に得られることが確認された。なお、今回実装した多点拘束条件処理手法は、線形ソルバーと完全に独立しているため、任意の前処理(SSOR, 対角スケールリング, BILU(0), BILU(1), BILU(2))および反復解法(CG法、BiCGSTAB法、GMRES法、GPBiCG法)と組み合わせて利用することが可能である。

接触解析はアセンブリ構造解析と同様に需要が高い問題である。自重とトルクを負荷されて転動する車輪の接触動解析および接触摩擦力を伝達する複合材ベルト解析に対する検証を実施している。接触解析では反復法線形ソルバーの収束性が問題となっていて、現状では直接法線形ソルバーが主に用いられている。大規模問題においては反復法線形ソルバーの適用が不可欠であり、さらなる収束性改善が課題である。

(3) HPC/PF を利用した FrontISTR 解析セミナーの準備・開催

平成 27 年 11 月に東京大学生産技術研究所において、解析実行環境 HPC/PF を利用した解析セミナーを実施した。このセミナーでは、HPC/PF によって、ポストを含めた FrontISTR による一連の解析作業が FOCUS スパコン上で簡単にできることを体験できる。具体的には、内圧が作用する脳動脈瘤の静解析の並列実行、建物と地盤の地震応答解析の並列実行、PDI によるパラメータ設定、並列性能の検討などを行った。9 機関(大学・公的機関 5、民間企業 4)から 16 名が参加した。

サンプル例題として、静的応力解析と動的応答解析の例題を準備した。

・内圧が作用する脳動脈瘤の静解析

変形は微小変形を仮定し、材料は線形弾性体で近似する。作用する外力は圧力のみであり、内壁全体に圧力が与えられる。8 節点六面体 1 次要素 (B-bar 要素) を使用している。Mises 応力の分布を Fig.6-56 に示す。

・建物と地盤の地震応答解析

変形は微小変形を仮定し、材料は線形弾性体で近似する。側面における z 方向変位成分が同じになるように MPC 条件が適用される。地盤の物性値は深さ方向に分布している。入力される地震波として作用する外力は時間変化する体積力である。8 節点六面体 1 次要素 (非適合要素) と 2 節点梁要素 (Bernoulli-Euler 梁要素) を使用している (Fig.6-56)。建物と地盤の剛体拘束条件式が MPC 条件として適用される。梁の先端での変位の x 方向時刻歴を Fig.6-57 に示す。

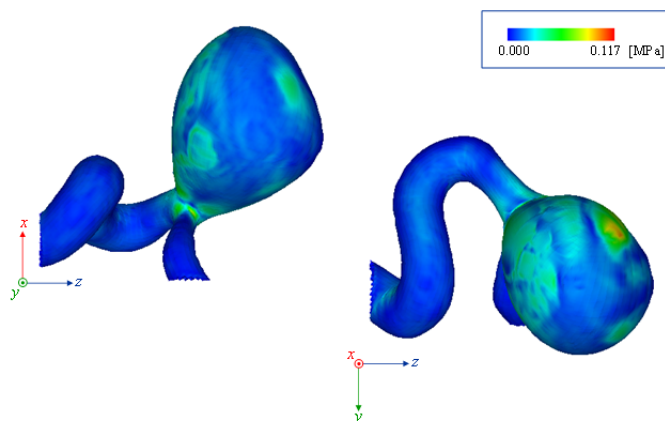


Fig.6-56 Mises stress distributions of an aneurysm model

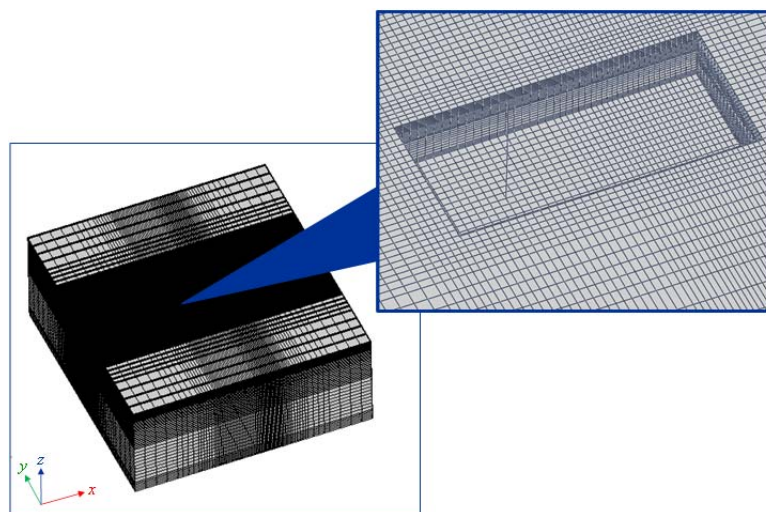


Fig.6-57 Finite elements for a soil-structure interaction model