

Fig.6-58 Time history of the displacement at the leading edge

参考文献

- [1] 後藤和哉、橋本学、奥田洋司、日本シミュレーション学会論文誌、7-1. 1-9 (2015).

(6-2-6) 「FrontCOMP」の高度化

水素ステーション用蓄圧器の設計においては、100 MPa クラスの圧力サイクルに対する長期信頼性を確保しつつ、普及のための低コスト化も求められる状況となっている。その解決のために、これまでの試作と破壊試験を繰り返す試行錯誤的設計を脱却する有力な手法として、炭素繊維束と樹脂を明確に区分するメゾスケールモデルに基づき[1]、大規模シミュレーションを援用した高精度の応力・ひずみ評価が有効である。容器コストの主要部分を占める炭素繊維量を限界まで減らすため、ヘリカル巻き交差部分の局所応力上昇の確かな評価が必須である。繊維束と樹脂を区別したメゾスケールシミュレーションの適用可能性を実証するため、FrontCOMP の高度化を行い、成果を広く公開した。

(1) ソフトウェアの高度化

FrontCOMP ユーザー会で取りまとめた要望に基づき、下記 4 点の機能強化を行った。

- 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
- 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
- 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
- 4) 並列効率強化: ソルバーの並列計算効率強化

(2) 燃料電池自動車用高圧水素容器の最適設計

胴部外径 160 mm、ボス外径 40 mm、全長 500 mm のライナーに対して、最適なフィラメントワインディング経路を探索するとの設定で最適設計を行った。ヘリカル巻 1 層を施すとし、巻き経路は測地線をたどらせてボスで折り返すとの条件より決定した。ライナーの全表面を覆うために、ヘリカル繊維束を 48 往復巻くこととした。容器中心軸まわりの経度差を種々設定し、フィラメントワインディング経路にバリエーションを与えた。Fig.6-59 は経度差を 270 度と設定した場合の繊維束経路を示している。繊維束を 4 往復巻き、第 5 往復目の繊維束が第 1 経路に隣接するよう巻くことを 12 回繰り返して 48 回往復の経路となる。経度差の違いにより生じるフィラメントワインディング経路の違いを Fig.6-60 に

示す。繊維束の横断面を矩形とし、幅を 10 mm、厚さを 0.5 mm と設定した。交差部分で外側巻き経路を振幅 0.3 mm の正弦波関数にそって巻き経路を立体化させた。ヘリカル層の厚さを 1.3 mm と設定して樹脂表面モデルを作製した。繊維束、樹脂ともに四面体要素により分割した。総要素数は約 4200 万、総節点数は約 690 万となった。

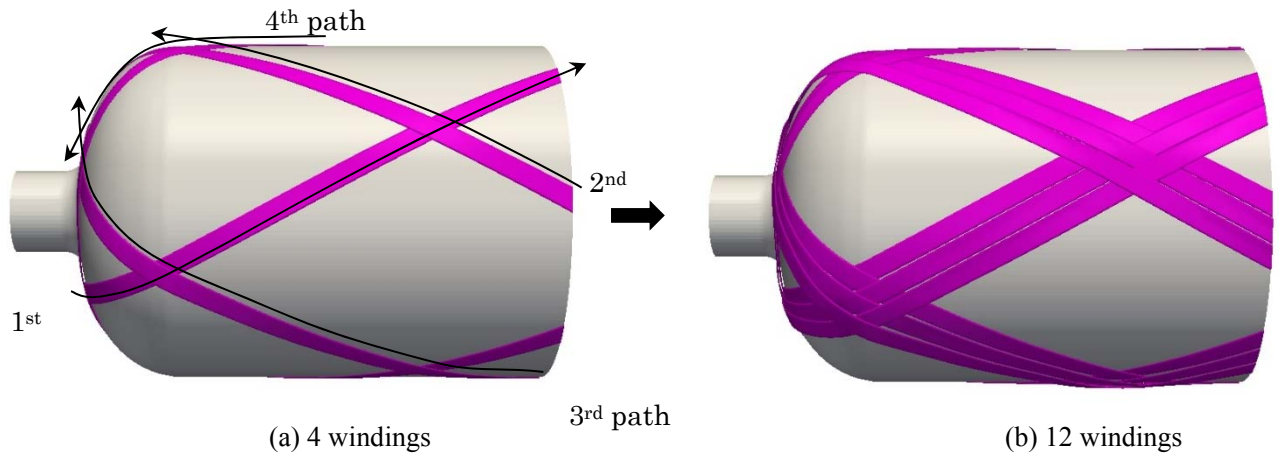


Fig. 6-59 Helical fiber bundle

繊維束は直交異方性体とし、繊維方向のヤング率を 128 GPa [2], 繊維直交方向のヤング率を 14.4 GPa, せん断弾性係数を 4.37 GPa, 繊維方向の引張に関するポアソン比を 0.33, 繊維直交方向の引張に関するポアソン比を 0.46 と設定した。ライナーのヤング率を 68.3 GPa [3], ポアソン比を 0.3, バルブのヤング率を 200 GPa, ポアソン比を 0.3, 樹脂のヤング率を 3.74 GPa, ポアソン比を 0.41 と設定した。ノード数を 32 ノード(512 コア)と設定して弾性解析を行った結果、CPU 時間は 6.5 時間となった。

内圧 10 MPa において繊維束に発生する繊維方向ひずみの分布を Fig.6-60 に示す。フィラメントワインディング経路の違いにより、繊維束に発生する最大ひずみが 10% 程度増減することがわかった。

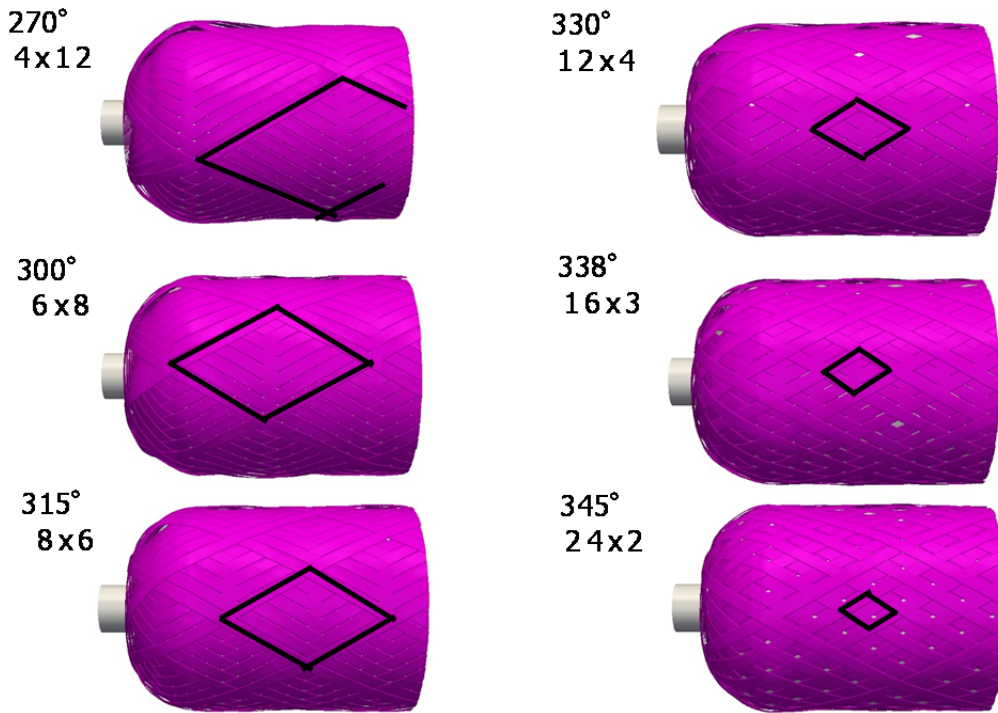


Fig.6-60 Variation of filament winding paths

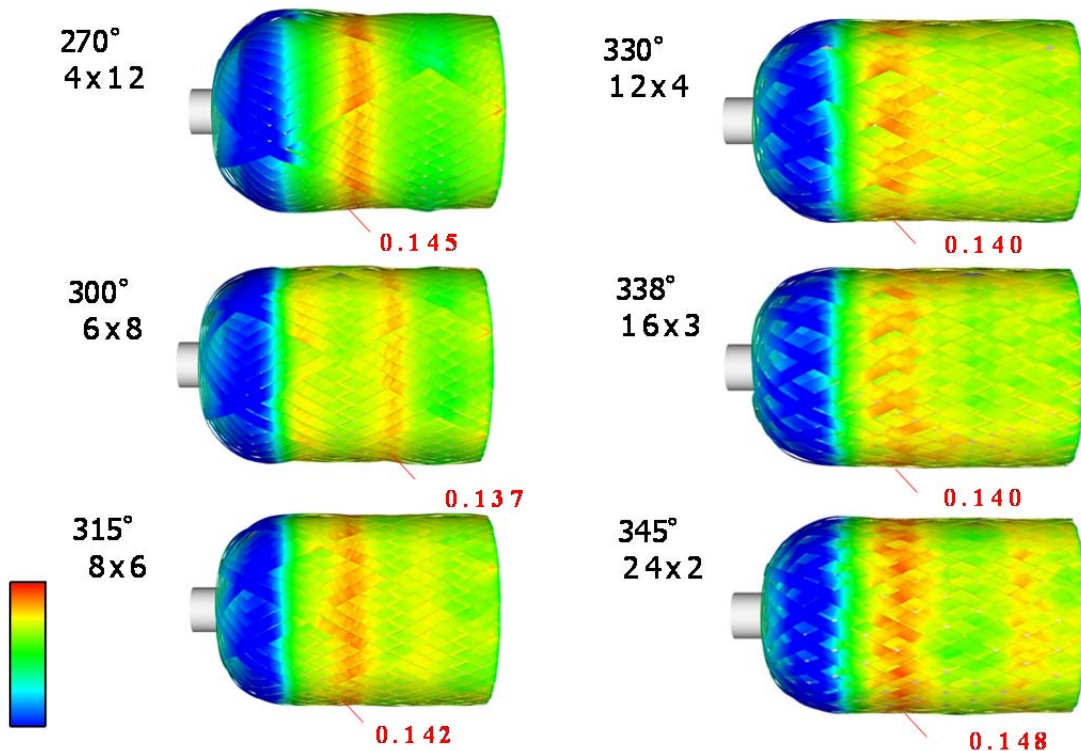


Fig. 6-61 Variation of maximum strain in fiber bundle

参考文献

- [1] 針谷耕太, 吉川暢宏, 山中忠佳, 青野昌弘, 岡田直樹: 炭素繊維強化プラスチック製高圧容器の合理的設計のためのメソスケールシミュレーション, 構造物の安全性および信頼性 Vol.8 JCROSSAR2015 論文集, 2015 年.
- [2] 東レ, トレカ系製品カタログ, <http://www.torayca.com/>.
- [3] 日本アルミニウム協会, アルミニウム材料データベース, <http://www.aluminum.or.jp/index.html>.

(6-2-7) バイオ分子シミュレータ「ABINIT-MP」高度化の検討

フラグメント分子軌道(FMO)法[1]のための 100%自主開発プログラムである ABINIT-MP[2]は、電子相関機能の導入を 2004 年に行って以来、機能の拡充と高速化が図られてきた。実際の FMO 計算では入力データのセットアップがかなり煩雑であること、また計算結果も膨大となることから可視化インターフェース(GUI)を備えた支援ソフトが望まれるが、ABINIT-MP では BioStation Viewer として併せて整備してきたことは、機能の多様さでは優れる GAMESS に対するアドバンテージとなっており、利用者に好意的に受け入れられている。こうしたことを背景に、体制構築の 5 年間の研究開発では以下の基本方針で進めた。

- ① 国産のフラグメント分子軌道(FMO)プログラム ABINIT-MP の開発/管理体制の保持
- ② インテル系(Xeon)と NEC 系(SX)に加え、「京」と FX-10 などの富士通系サーバへの新規対応
- ③ ABINIT-MP の既利用者の維持 (創薬系コンソーシアム、「京」利用と連携)
- ④ ものづくり系や一般の化学工業系の新規利用者の開拓 (ナノバイオ、高分子の問題のデモ)
- ⑤ 普及と広報活動

①は活動の根幹であり、項目としては、(i) MP2 エネルギー微分による部分構造最適化の改良、(ii) MP2 電子密度の生成と X 線測定電子密度との直接比較機能の実装(BioStation Viewer 利用)、(iii) ポアソンボルツマン誘電分極型モデル(PB)による水和エネルギー補正、(iv) コレスキー分解(CD)による HF と MP2 計算の高速化(エネルギーは FMO4 まで、エネルギー微分は FMO2 まで)、などが挙げられる。これらは、ABINIT-MP Ver.7 としてリリースされている。

(ii)の例として、クランビンの電子密度の実験値(左)と FMO-MP2/6-31G*の計算値(右)との比較を以下に示す。

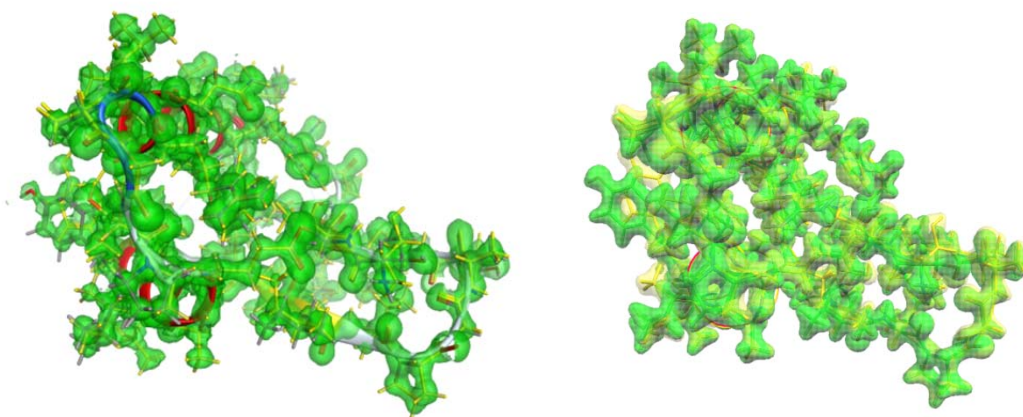


Fig. 6-62 Electron density of Crambin: X-ray (left) and FMO-computed (right)

実験は 2 つのコンフォーマーを含むが、計算でもそれを踏まえて可視化しているが、再現性が良いことが確認される。この技術は、構造最適化と連携させることも可能であり、SPring-8 や KEK などの放射光施設での X 線測定・構造決定の実験に対する支援ツールとして ABINIT-MP を使っていただくことも可能となった。

(iii) の PB 水和モデルは以前より利用者の方からリクエストを頂いていた件である。薬剤分子(リガンド)が標的タンパク質と結合する際には水の溶媒和・脱溶媒和を考慮することが本来は望ましく、リガンドと結合部位周囲のアミノ酸算基との相互作用も影響を受けていると思われる。下図は女性ホルモンの受容体(ER)モデルの PB 水和を HF レベルで評価した結果である。

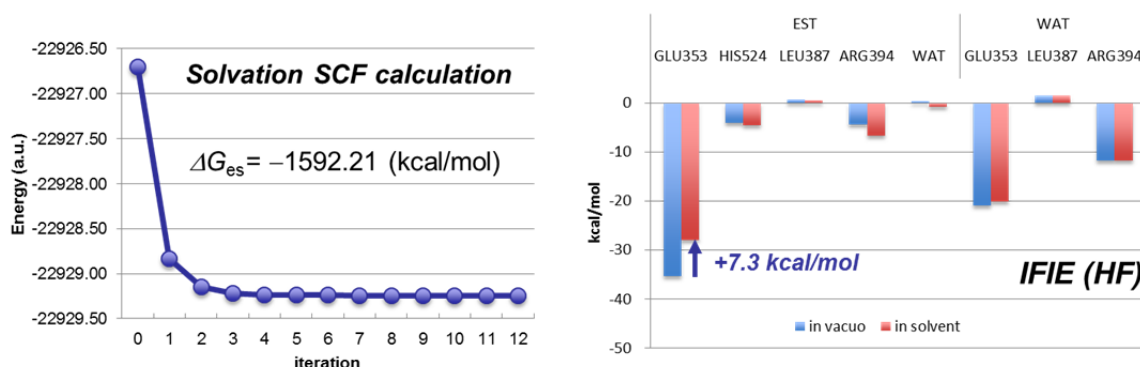


Fig. 6-63 FMO-HF(PB) results of Estrogen Receptor model: energy convergence (left) and interaction energy about Estrogen and water in pharmacophore (right)

誘電分極が自己無撞着的に収束するまで実用的には 5 回の反復で足りること(左)、相互作用エネルギーでは最大で 7kcal/molほどの差が出ていること(右)が分かる。

(iv) の CD では、4 つの基底関数添字を持つ 2 電子積分を $(pq, rs) \approx \sum_l L_{l,pq} L_{l,rs}$ のように分解する。ここで、展開基底 l は基底関数の積として必要精度に応じて省略する(Full CD)[3]。さらに、基底関数積を 1 中心に限る近似もオプションと出来る(1C CD)。CD 化によって、MP2 計算は DGEMM による行列積演算が支配的となるが、HF でもクーロン項が DDOT と DAXPY で、交換項が DGEMM で処理できるようになる(ただし閾値判断は使えなくなる)。「京」での CD の効果については後で示す。

平成 26 年度からは博士研究員が不在となったため、ABINIT-MP/BioStation の管理・デバッグ体制については、担当者(望月)自らがデバッグのためのテストやベンチマークを行い、SE 諸氏とやり取りしながら、なんとか維持することができた。幸い、ポスト「京」のプロジェクトの課題 6 の中に ABINIT-MP は残していただけだったので、今後も改良と普及の両面を進めていく。

②については、「京」での DGEMM 処理の高速性を活かして CD を活かした改良・チューニングを進めてきたことを中間報告書の段階で記している。平成 25 年度はベンチマークも系統的に行った。Table6-5 は HIV-1 プロテアーゼ(198 残基)とリガンドが結合した総計 203 フラグメントの系に対する 204 ノードでの FMO-MP2 計算の結果で、CD によって実効効率が顕著に上がっているのが分かる。

Basis set	TEI treatment	Time (Min)	Eff. (%)
HIV-1 Protease + Lopinavir (204 frag.) @ 204 nodes			
6-31G	Regular	31.9	1.85
	CD/MP2&HF	18.8	7.78
	1C-CD/MP2&HF	14.8	3.74
6-31G*	Regular	74.5	2.67
	CD/MP2&HF	44.0	17.54
	1C-CD/MP2&HF	29.4	8.30
cc-pVDZ	Regular	161.3	2.69
	CD/MP2&HF	80.4	17.47
	1C-CD/MP2&HF	58.3	8.02

Table 6-5 FMO-MP2 Benchmark results of HIV-1 protease on K-computer

また、ABINIT-MP 独自の 4 体フラグメント展開[4]についても FMO4-MP2/6-31G 計算が 6000 ノード 128 分で終了する (Full CD で効率 11%)。また、さらに大きいインフルエンザウィルスの HA 抗原-抗体モデル (921 残基) での FMO 計算にも成功しており、利用頻度の高い MP2 計算については「京」の上でも及第レベルの性能が出ると判断された。これを受けて、平成 25 年度の末に「京」の共用ライブラリとして ABINIT-MP Ver.6+ を登録した。なお、ABINIT-MP の「京」での最多ノードでの FMO4 計算は 12504 ノードで効率 6% を記録している (対象はインフルエンザウィルスの NA+リガンド)。

③での大きな成果は、開発関係者と連動した「FMO 創薬コンソーシアム」の立ち上げと運用である (代表者: 福澤薫 (日大))。コンソーシアムのメンバーは、製薬企業 13 社、IT 企業 1 社、8 アカデミア機関であり、平成 27 年度の HPCI 研究課題の「京」産業利用枠「HPCI を活用した FMO 創薬プラットフォームの構築 (課題番号: hp150160)」の採択を受けて平成 27 年 4 月から本格的に活動を行っている。ここでは、上述した「京」でライブラリが利活用されており、ABINIT-MP/BioStatio Viewer による実用的な創薬手法の開発が展開されている。

④では、ナノバイオ系ものづくり分野への応用展開を先ず進めたが、ここでは FMO4-MP2 法[4]がキーとなった[2]。実事例としては、シリカ表面と人造ペプチド (RKLPDA 配列)[5]とヒドロキシアパタイトと人造ペプチド (ESQES 配列)[6]の詳細解析がある。いずれも世界的にも先例のない計算であり、プレス発表も行い、日経系メディアなどで取り上げられた (平成 25 年 4 月と平成 27 年 5 月)。

ナノバイオとは別に一般の化学工学系の問題を意識して高分子類のモデリングについても端緒を付けることができた。一例は、粗視化シミュレーションで用いられる有効相互作用パラメータ (χ 値 [7]) の FMO 計算による算定であり、これがポスト「京」の課題 6 での取り組みにも繋がっている。旧来は古典力場に基づいて評価されていたが分極や電荷移動などが大きな系では信頼性が低下する問題があったが、FMO は量子計算なので問題なく適用可能である。下図左はニトロベンゼン+ヘキサンの χ パラメータ (右) で、この系は古典の扱い (二種) でも良好であるため比較対象としたが、FMO による値はよく対応していることが分かる。下図右は、この計算で用いた三つの対での構造スナップショットの例 (1 がヘキサン、2 がニトロベンゼンのラベル) で、こうした配置を数千~万の数だけ準備して同種の FMO 計算を行う必要があり、これらの結果を温度毎にモンテカルロ法に基づいて統計的に加算処理して最終的な χ 値セットを得る。

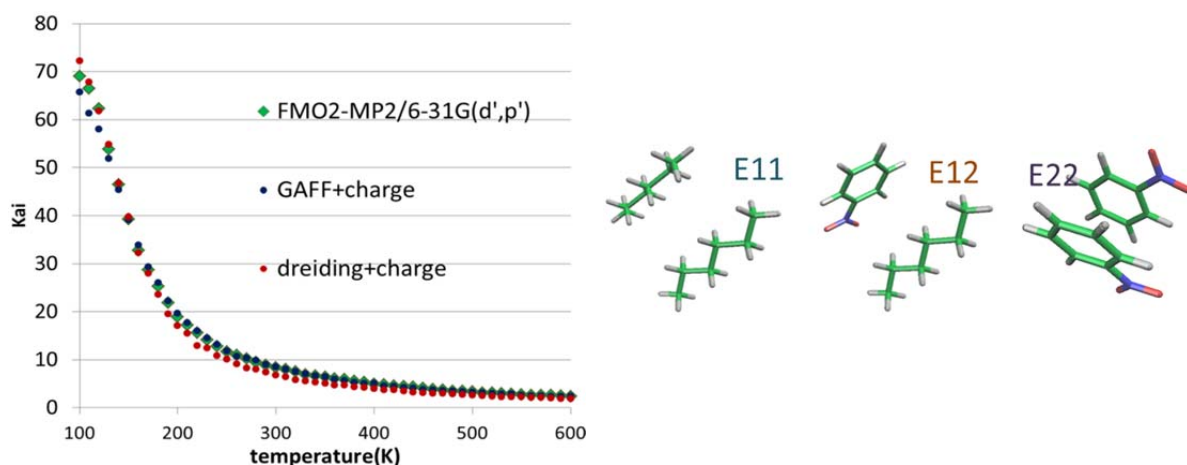


Fig. 6-64 FMO-based Chi-parameter evaluation of hexane-nitrobenzene binary system: Chi plot (left) and snap shot structures of three combinations (right)

こうした χ パラメータ算定に必要な一連のFMO計算は「統計ジョブ」としてスクリプトを都度毎に準備してサーバで流すことも可能ではあるが、能率的ではないばかりか、いくつかのジョブが途中で異常終了した場合のリカバリーも煩雑である。そこで、HPC/PF環境を利用させていただくことになった。ABINIT-MP対応のシステムの実装は平成27年秋にHPC/PFグループによって終了し、利用者は手元のPCからFOCUSなどのスパコンに「統計ジョブ」を自動投入して、要約結果を回収することができるようになっている。このシステムは、むろんポスト「京」のプロジェクトの中でも活用させていただく予定である。

最後に⑤について述べる。既述の福澤氏による「FMO 創薬コンソーシアム」による産業界への普及効果は、今後も大きいと期待される。この一方、むしろABINIT-MPをソースコードとして共有し、機能強化とデバッグを継続的に進めていくコンソーシアムの設立も、担当者(望月)が中心になって地道に進めてきて、平成27年度の末に立ち上がる予定となった(本格的な展開はポスト「京」の活動の中で行われる)。

ABINIT-MPとBioStation Viewerの使い方を(主に)初心者を対象に実践的に解説・紹介するハンズオンセミナーは、RISTと共済してFX-10をプラットフォームとして利用させていただき、神戸FOCUS(平成26年3月)、東京RIST(平成26年8月)、生産研(平成27年12月)の三回実施し、総計で27名の参加者を擁したが、そのうち企業関係の方は11名であった。特に、第三回目はものづくり系の例題も用意し、HPC/PFの利用まで体験していただけた(下にスナップを示す)。今後も、ハンズオンセミナーは積極的に開催していきたい。



Fig. 6-65 Snapshots of ABINIT-MP Hands-on seminar at IIS (2014, Winter)

参考文献

- [1] K. Kitaura et al.; Chem. Phys. Lett., 313, 701-706 (1999).
- [2] S. Tanaka et al.; Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 10310-10344.
- [3] Y. Okiyama et al.; Chem. Phys. Lett., 490, 84-89 (2010).
- [4] T. Nakano et al.; Chem. Phys. Lett., 523, 128-133 (2012).
- [5] Y. Okiyama et al.; Chem. Phys. Lett., 566, 25-31 (2013).
- [6] K. Kato et al.; Chem. Phys. Lett., 629, 58-64 (2015).
- [7] C. F. Fan et al.; Macromolecules, 25, 3667-3676 (1992).

(6-2-9) 利用者層の拡大

(1) アウトリーチ活動

本戦略プロジェクトの研究開発内容のアウトリーチを主な目的として、計算工学ナビ (<http://www.cenav.org>) のウェブサイト構築と運用について検討を実施した。このサイトは「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」をキャッチコピーとして、幅広いユーザに研究成果をアピールするため、硬軟な情報を盛り込み適時コンテンツをアップデートしている。各種レポートや計算工学に関連する話題、開発ソフトウェアのリリース、知識データベースなどのコンテンツを提供する。特に、知識データベースは、開発ソフトのショーケース的な役割と同時に、利用事例のアーカイブとしての機能も果たす。

【中間評価までの成果】

事例データベース

解析事例データベースは、分野4アウトリーチを目的としたウェブサイト「計算工学ナビ」のコンテンツとして一般公開している。平成25年度末時点での事例件数の一覧を Table 6-6 に示す。

Table 6-6 Summary of KDB Contents.

分野	ソフトウェア名	件数
ものづくり	ADVENTURECluster Solver	4
	FrontISTR	28
	FrontFlow/blue	28
	FrontFlow/violet	13
	FrontCOMP	9
	OpenFOAM	16
ナノテクノロジー	PHASE	61
ライフサイエンス	ABINIT-MP	13
	ProteinDF	20
合計		192

アウトリーチサイト

戦略分野4のアウトリーチ活動としてウェブサイト「計算工学ナビ (<http://www.cenav.org>)」を開発、運用している。平成25年度までに以下の施策を実施し、主に産業界にむけた成果の広報をはかった。

1. 季刊ニュースレターの発行
産業界の意思決定層、設計解析実務者を対象としたニュースレターを発行した。冊子媒体は分野4シンポジウム等イベントでの配布を行った。
2. 解析事例データベースの公開
分野4関連アプリの基礎的解析事例およびそのアプリの特性を表すような特徴的な解析事例を紹介するコンテンツをデータベースに掲載し、公開した。各アプリごとの掲載件数は上述の通り。
3. ソフトウェアライブラリの公開
分野4関連アプリを紹介するコンテンツを作成、公開した。対象アプリ一覧を Table 6-7 に示す。

Table6-7 Summary of Software libraries.

分野	ソフトウェア名
ものづくり	FrontISTR
	FrontFlow/blue
	FrontFlow/violet Cartesian
	FrontWorkBench
	FrontCOMP
	REVOCAP
ナノテクノロジー	PHASE
ライフサイエンス	ABINIT-MP
	ProteinDF

【中間評価以降の成果】

計算工学ナビ

アウトリーチサイト「計算工学ナビ」について、平成26年度以降の実施作業および成果について以下に述べる。

1. 季刊ニュースレターの発行
平成26年度は計3号 (Vol.4,5,6) を発行し、平成27年度は平成27年12月末現在で計2号 (Vol.7,8) を発行済みである。平成27年度中に Vol.9, Vol.10 を発行予定である。なお、発行済みニュースレターについては PDF 形式で計算工学ナビのサイトからダウンロード可能である。
2. 一般向けコンテンツの充実
IoT 系ものづくりで人気のワンボード PC「Raspberry Pi」を16台クラスタリングし、PHASE/0 を動作させる、という内容の読み物コンテンツを平成26年12月より平成27年3月まで、計4回に分けて掲載した。本コンテンツは連載開始当初より SNS で話題となり、これまで当サイトがリーチし得なかった読者層を獲得することが出来、サイトアクセス数増加に貢献した。たんに本コンテンツのアクセス数が増加しただけでなく、解析事例データベースへのアクセスも同時に増加しており、本コンテンツを目的にサイトに訪問した多くのユーザが分野4アプリの解析事例にも興味を示し、本事業の認知度向上に一定の成果があったと考えられる。
3. ソフトウェア・ライブラリの充実
ソフトウェアライブラリに新規ソフトウェア情報を追加した。解析アプリだけでなく、周辺ソフトウ

エアも掲載対象とした。平成27年12月末現在のソフトウェア一覧を Table 6-8 に示す。

Table 6-8 Summary of Software libraries.

分野	ソフトウェア名
ものづくり	FrontISTR
	FrontFlow/blue
	FrontFlow/violet Cartesian
	FrontWorkBench
	FrontCOMP
	REVOCAP
ナノテクノロジー	PHASE
ライフサイエンス	ABINIT-MP
	ProteinDF
ユーティリティ	CIOLib
	TextParser
	Historyplot

これらの施策実施、および後述する事例データベースの拡充により、アウトリーチサイトのアクセス数は飛躍的に増加し、平成27年12月末時点において、総ページビュー数:163,214、総ユニークユーザ数:37,819 を獲得した。(Fig. 6-65)

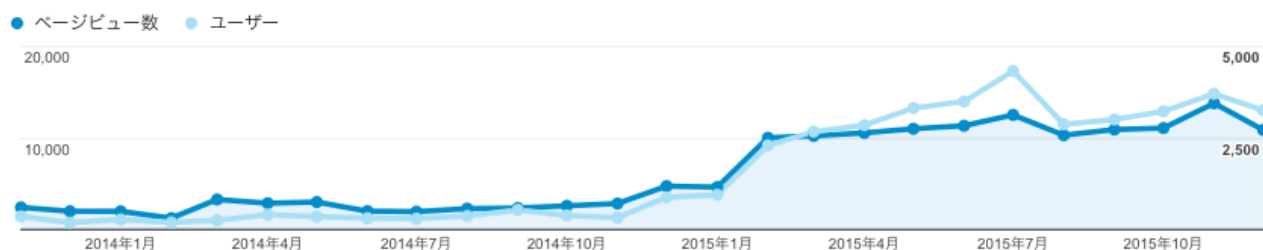


Fig. 6-65 Site Access Statistics (Nov.2013 – Dec.2015)

事例データベース

アウトリーチサイト「計算工学ナビ」搭載された解析事例データベースについて、平成26年度以降の実施作業および成果について以下に述べる。

1. 「京」利用先導的事例の掲載

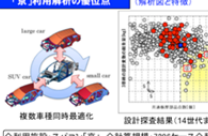
産業界の経営層等、シミュレーションの非専門家からの要望により、「京」による解析成果をわかりやすい形でまとめたコンテンツを掲載した。コンテンツの一覧を Table 6-9 に、コンテンツ例を Fig. 6-66 に示す。

Table 6-9 A List of Advanced Cases using K-Computer.

タイトル(解析テーマ)	利用アプリ
フラグメント分子軌道法(FMO)計算によるモデリング	ABINIT-MP
高圧水素ステーション用蓄圧器の最適設計	FrontCOMP
流体計算並列化技術開発とプラズマ流体解析への応用	GT5D, GKV
燃焼器内噴霧燃焼の数値解析(LES)	FFR
FFVによるRapid FOA	FFV
自動車車体回りの大規模空力解析	FFR
複数の車体構造の同時設計探査	CHEETAH
ロケット射点の空力音響多目的設計探査	CHEETAH, LANS3D
輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化	LANS3D
回転流体機器への流体制御性能評価解析	LANS3D
SiC ゲート絶縁膜の構造解析	PHASE
グラフェン成長プロセスの実成長温度解析	PHASE

分野4 次世代ものづくり ◆「京」利用先導的事例◆

● 解析テーマ: 複数の車体構造の同時設計探査 ● 研究開発者: 大山聖 (JAXA), 小平剛央 (マツダ), 自動車工業会, 富士通

「成果」の具体的な内容		「効果」の具体的な内容	
<p>「京」利用解析の位置 (解析図と特徴)</p>  <p>● 3車種×4モード×608設計 = 720688の衝突計算を京を用いて短期間で実施することで、3車種の車体重量が軽量化かつ共通部品点数も低減率を達成することが可能になった。</p> <p>● 軽量化を分析することで軽量化および部品共通化のトレードオフに関する知見が得られた。</p> <p>◎利用施設: スパコン/京 ◎計算規模: 7298ケース◎利用ソフト: Cheetah, LS-DYNA</p>	<p>プロセスイノベーション (対象プロセスと時間、コスト等の効果)</p> <ul style="list-style-type: none"> 衝突性能も考慮した複数の車種・重量最小化と部品共通化の同時設計が可能となった。 得られた結果を分析することで、重量最小化と部品共通化の間のトレードオフに関する情報を引き出すことが可能なデータ分析技術が得られた。 	<p>プロダクトイノベーション (対象プロダクトとイノベーションの内容)</p> <ul style="list-style-type: none"> 基本設計よりも車両重量を軽量化し、かつ、共通部品点数も増加することができる設計があることがわかった。 車両構造の重量最小化と部品共通化のトレードオフに関する情報が得られた。 	<p>その他のメリット (産業利用上のその他の効果)</p> <p>「多目的設計探査」は、多目的設計最適化問題の最適解を求め、その結果を分析することで設計者に役立つ知見(目的関数間のトレードオフや設計パラメータの感度など)を抽出する手法であるが、この手法が衝突計算を必要とする設計問題にも適用可能になった。</p>
<p>成果物のスタイル (具体的なソフトウェア/技術の形とユーザーへの提供方法)</p> <ul style="list-style-type: none"> 効率的な多目的設計最適化手法(CHEETAH)はHPCプラットフォームのラインナップの1つとして公開予定 非劣解データベースから設計に役立つ知見を抽出するためのソフトウェア群 (OSP, ADVICE, およびSTV)はウェブサイトで公開中 http://lab.eng.iss.jaxa.jp/monozukuri/mode/ <p>◎利用施設: マツダ社内スパコン ◎計算規模: 数千ケース◎利用ソフト: LS-DYNA, Nastran, modelFRONTIER</p>			

分野4 次世代ものづくり ◆「京」利用先導的事例◆

● 解析テーマ: グラフェン成長プロセスの実成長温度解析 ● 研究開発者: 大野隆夫 (物質・材料研究機構)

「成果」の具体的な内容		「効果」の具体的な内容	
<p>「京」利用解析の位置 (解析図と特徴)</p>  <p>● 高度な設計対応により、大規模、長時間のシミュレーションが可能となる設計最適化を実現</p> <p>● これにより、グラフェン成長の実成長温度(1000°C)での高精度な第一原理ダイナミクスシミュレーションが可能</p> <p>◎利用施設: スパコン/京 ◎計算規模: 数10万MDステップ ◎利用ソフト: PHASE/京</p>	<p>プロセスイノベーション (対象プロセスと時間、コスト等の効果)</p> <ul style="list-style-type: none"> 「try and error」によるグラフェン成長プロセス(CVD法、SiC熱分解法等)を最適化するには、プロセス制御因子の高精度な影響評価が不可欠。 従来の絶対精度での解析ではなく、実成長温度での第一原理ダイナミクスシミュレーションを実施し、グラフェン成長過程の電子レベル解析を実現。 成長プロセス制御因子の高精度な影響評価に基づき、支配因子の特定と効率的な最適化が可能とし、高品質グラフェン合成が実現。 	<p>プロダクトイノベーション (対象プロダクトとイノベーションの内容)</p> <ul style="list-style-type: none"> グラフェン等の新材料を次世代半導体デバイスに活用するには、新規材料のナノ構造、積層構造等のデバイス構造の制御された形成とデバイス特性への影響評価が必要。 大規模解析の実現により、グラフェン等の新材料の特性、異質ガス効果等の制御因子の影響評価を実現。 グラフェンと金属、絶縁体等の積層構造における伝導特性の第一原理解析により最適デバイス構造の探索が可能。 	<p>その他のメリット (産業利用上のその他の効果)</p> <ul style="list-style-type: none"> 充実した機能解析(電気伝導、反応解析、実験解析等) 数万原子規模の高に対応可能な高い計算性能 幅広い計算機プラットフォーム(ノートPC、PCクラスタから、スパコン)で実行可能 付属GPUと支援スクリプトにより、簡単に実行が可能
<p>成果物のスタイル (具体的なソフトウェア/技術の形とユーザーへの提供方法)</p> <ul style="list-style-type: none"> PHASE System ホームサイト及び計算工学ナビからソースコードで公開 充実マニュアル、チュートリアルが豊富 商用ライセンスの取得も可能 プログラム利用講習会、ワークショップ等を定期的に開催 <p>◎利用施設: NIMSスパコン ◎計算規模: 数10ケース構造種別 ◎利用ソフト: PHASE/京</p>			

Fig. 6-66 Samples of Advanced case using K-Computer.

2. HPC/PF 再現実行対応事例の掲載

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な事例を掲載した。平成27年12月末現在のソフトウェア種別毎の HPC/PF 再現実行対応事例数一覧を Table 6-10 に示す。

Table 6-10 Summary of KDB Contents using HPC/PF environment.

分野	ソフトウェア名	件数
ものづくり	ADVENTURECluster Solver	2
	FrontISTR	2
	FrontFlow/blue	2
	FrontFlow/red	2
	FrontFlow/violet	3
	CHEETAH	1
ナノテクノロジー	PHASE	2
ライフサイエンス	ABINIT-MP	2

最後に平成27年12月末現在のソフトウェア種別毎の全掲載事例数一覧を Table 6-11 に示す。

Table 6-11 Summary of KDB Contents.

分野	ソフトウェア名	件数
ものづくり	ADVENTURECluster Solver	4
	FrontISTR	33
	FrontFlow/blue	32
	FrontFlow/violet	17
	FrontFlow/red HPC	4
	FrontCOMP	10
	LANS3D	3
	GKV	2
	GT5D	2
	OpenFOAM	17
	CHEETAH	3
ナノテクノロジー	PHASE	65
ライフサイエンス	ABINIT-MP	16
	ProteinDF	21
合計		229

(2) HPC 利用者層の拡大

計算科学振興財団(FOCUS)では、平成 20 年の設立以来、産業界の HPC 利用促進に関する諸事業の実施や、産業界専用のエントリースパコン「FOCUS スパコン」の制度設計に産業界ニーズを反映させるため、業種や HPC 活用状況、企業規模等に関わらず、様々な企業を積極的に訪問してきた。平成 20 年度からの3年間で、延べ 249 社 450 回の訪問実績を有する。

これらの実績をふまえ、FOCUS との関係性を有する企業群の中で、製造業を中心とし HPC を既に活用している企業や HPC 利用ニーズを潜在的に有する企業で、かつ関西地域に研究所や事業所等が所在する企業を対象として 50 社の企業訪問を実施し、戦略分野4の HPC シミュレーションソフトウェアの潜在需要の開拓と利用者拡大に向けて課題抽出を実施した。

企業の設計現場の状況

企業の設計現場では、手持ちの業務で多忙のため、新たなソフトウェアについて、一から勉強する時間はない状況である。そのため、現場の設計者に新たなソフトウェアを使ってもらうためには、産業界にとっての様々なハードル(インストール作業、プリ・ポスト、利用サポート、講習会、マニュアルなど)を徹底的に下げることが求められる。

インストール作業

産業界が HPC シミュレーションソフトウェアに興味を持ち、試しに使ってみようとしても、インストールの手間によりためらう場合や、うまくインストールできずにあきらめる場合が見受けられる。そのため、インストールプログラムを作成して、簡単に環境構築ができるようにすることが重要である。特に、社内での使用が難しいユーザーは個人的に調べていることが多く、より重要なファクターとなる。

汎用プリ・ポストとの連携

プリ・ポスト処理についても、企業が現在使用しているソフトウェアから新たなものに移行することは非常に抵抗が大きいので、産業界でよく使われている商用のプリ・ポストとソルバーを連携させることが重要である。これにより、ソルバーを試しに使用する場合にも、企業がすでに持っているモデルを活用でき、新たにモデルを作成することや、操作を覚えることが不要となる。

利用サポート

基本的な事項を含め、企業の設計者が分からないことに対応できるシステムが必要である。問題が発生した際には、電話・メールなどによる質問に対して、翌日には回答するスピード感が求められる。当該ソフトウェアについては、産業界が求めるレベルのサポートがないという認識が広まっているので、このようなサポート体制の存在を示すことがソフトウェア利用の普及には効果的であると考えられる。

現実的には、インターネットを中心としたユーザーコミュニティを立ち上げ、ユーザー間での情報交換を促すことが望ましい。ソフトウェアについてよく知っているパワーユーザーがボランティアで回答する体制が理想だが、当初はソフトウェアの開発スタッフ(ベンダー)が対応する必要があると考える。

体験できる講習会

ソフトウェアの機能を紹介するセミナーを求める声もあるが、入力データからメッシュを作成し、計

算してポスト処理を行うまでの一連の流れを実演・実習形式の講習会で、試しに体験したいという声も多い。講習会のマニュアルも簡単なチュートリアル程度にして、実績や実例を豊富に提示することが求められている。産業界でより広く興味を持ってもらうなら、Windows ベースからのスタートが望ましい。

産業界にとって、このような講習会は新たなソフトウェアを自社で使えるかどうかを調査する場であり、費用をかけて参加することは難しいので、「無料」が基本である。

トライアル利用の提供

産業界の HPC シミュレーションソフトウェアを活用した HPC 利用の促進には、当該ソフトウェアを気軽に試せる環境の提供が必要であり、産業界専用の FOCUS スパコンに当該ソフトウェアのトライアル利用の環境を構築することで、試用の意欲を向上させる効果が見込まれる。

上記の利用者課題抽出を受け以下の施策を開始した。

次の HPC シミュレーションソフトウェアを活用した HPC 利用の促進を行うため、FOCUS スパコンを活用して、当該ソフトウェアのトライアル利用の環境を構築し、当該ソフトウェアの潜在需要のある企業に対してトライアル利用を促進するため、FOCUS において、産業界のユーザーの視点に配慮したトライアル利用のパンフレット及びホームページ作成し、HPC シミュレーションソフトウェアの利用講習会の開催、トライアル利用を促進するための諸施策を実施した。

利用講習会の実施

	開催日	会場	参加者数
第一回	: 平成 24 年 7 月 13 日	大阪国際会議場(大阪市)	21名
第二回	: 平成 24 年 8 月 22 日	東京大学生産技術研究所(東京都)	19名
第三回	: 平成 24 年 11 月 8 日	計算科学振興財団(神戸市)	22名
第四回	: 平成 25 年 12 月 10 日	計算科学振興財団(神戸市)	22名
第五回	: 平成 26 年 3 月 28 日	計算科学振興財団(神戸市)	13名
第六回	: 平成 27 年 4 月 3 日	計算科学振興財団(神戸市)	15名

主催: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

共催:財団法人 計算科学振興財団、株式会社ヴァイナス

協力:みずほ情報総研株式会社

(6-3) 人材育成

(6-3-1) 開発者教育

大学院教育による先端ソフト開発人材の育成を行う。演習は東大工学科の新演習として立ち上げた。内容は、「チーム制によるシミュレーションソフトウェア開発教育」、「ソフトウェア工学教育と HPC 教育(おもに前者に比重)」、「ソフトウェア工学の作法と HPC の技術を実践的に両立させる訓練」、「産業界の講師による実践的な講義・演習」、「東大情基センターFX10 システムの利用」である。課題の実施項目は、演習内容の構築、演習を行うための周辺機器・ソフト構築、ドキュメント作成、大学院教育、次年度のための振り返りと反省ポイントの洗い出しであり、これらのループを繰り返すことによって、本課題を達成した。同時に、これまでに得られた経験を教科書として基礎編を出版(平成 26 年 4 月)、さらに参考書として応用編を上梓(平成 27 年 11 月)し、これらを基に、他大学や企業におけるシミュレーションソフトウェア開発者人材育成を目指した、共通教育演習ベース作成に成功した。

以上のように、本人材育成では、科学技術シミュレーションの開発に特化した、まったく新しい開発者教育演習の構築、ならびに、京の縮小版である FX10 を利用したプログラム開発者教育に成功した。

参考:

- ・居駒幹夫, “講義紹介: 実践的シミュレーションソフトウェア開発演習”, 東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティング ニュース, Vol.14, No.6, 2012 年 11 月
- ・佐藤文俊, 加藤千幸編, “ソフトウェア開発入門: シミュレーションソフト設計理論からプロジェクト管理まで”, 東大出版, 2014 年 4 月
- ・佐藤文俊, 加藤千幸編, “ソフトウェア開発実践: 科学技術シミュレーションソフトの設計”, 東大出版, 2015 年 11 月

(6-3-2) 利用者教育

利用者側が主催企画するユニークな講習として、これまで、講義形式の 3 回の入門コースと、全員が数百コアの大規模並列を演習する実践コースを流体、構造、ナノ各2回ずつ実施しましたが、いずれも良好な評価が得られました。当初の目的でもあった企業技術者の大規模計算への距離感を縮める効果がありましたが、一方で、スーパーコンピュータ「京」に関連して他機関が開催する講習会等の機会が増加してきていることもあり、産業界ユーザーの視点に立った講習・内容の更なる充実を図るステージとなりました。折しも、平成 24 年 11 月からは産業界にも「京」の共用が開始されましたので、「京」に特化した入門教育コースとし、企業における担当者並びに関心を持っている方の疑問に応える形式で進め、「京」とは何か、何が変わるか、「京」の「ものづくり」への効用、「京」で使えるソフトは何か、リスクは何か、「京」を取り巻く環境 HPCI の展開等、受講者が社内で前もって質問を回収、受講者が社内へ持ち帰って伝承となれるような、グループ単位での積極的な討議を行えるコースを企画実施中である。最先端の実務研究者と企業研究者のディスカッションの場を提供する本試みは、受講者より好評であった(Fig.6-67)。

No.	年度	スクール名	開催日	場所<連携>	参加人数
1	平成 21 年度	入門コース(流体・構造)	2009/6/11	東京大学生産技術研究所 <CISS>	38名
2		実践コース(流体)	2009/10/15-16	東京大学生産技術研究所 <CISS>	20名
3		実践コース(構造)	2009/12/10-11	東京大学生産技術研究所 <CISS>	16名
4	平成 22 年度	入門コース(流体・構造) -関西-	2010/5/18	大阪中之島センタービル <FOCUS>	20名
5		実践コース(流体)	2010/07/16-17	東京大学生産技術研究所 <CISS>	11名
6		サマースクール	2011/09/24-25	(株)IHI技術研究所 <CISS>	8名
		先端コース	2011/02/01から 3ヵ月	東京大学生産技術研究所 <CISS>	申し込みなし
7		実践コース(ナノテク)	2011/03/09-10	東京大学生産技術研究所 <CISS>	8名
8	平成 23 年度	入門コース(流体・構造) -関西-	2010/6/30	:計算科学センター(神戸) <FOCUS>	12名
9		実践コース(構造)	2011/01/30-31	東京大学生産技術研究所 <CISS>	8名
10		実践コース(ナノテク) 東京大学物性研究所とのコラボ /産総研との連携	2011/02/07-08	東京大学柏キャンパス <東京大学物性研究所>	8名
11	平成 24 年度	「京」特別入門コース	2012/11/1	東京大学生産技術研究所 <CISS>	30名
12		実践コース(流体) 日本機械学会CFDスクールとの コラボ	2012/12/05-06	:計算科学センター(神戸) -日本機械学会/FOCUS-	23名
13	平成 25 年度	オータムスクール13 企業におけるHPC戦略立案	2013/10/18-19	多摩永山情報教育センター <CISS/CMSI>	15名
14		「京」特別コース 実行委員会とコラボ	2014/1/15	東京大学生産技術研究所 <CISS/RIST>	22名
15		実践コース(反応流体) -実施企画外部委託-	2014/3/25-26	東京大学生産技術研究所 <CISS/FOCUS/NuFD>	7名
16	平成 26 年度	オータムスクール14 企画委員/実行委員の合同合宿 <産応協ビジョンの提案>	2014/09/18-19	多摩永山情報教育センター <CISS>	23名
17	平成 27 年度	サマースクール15 -OpenFOAMを使ってみよう!- <講義&実習>	2015/09/11-12	マホロバ・マインズ三浦 <CISS/FOCUS/RIST>	28名
					合計297名

Fig.6-67 School of Industrial Use of HPC's planned courses

(6-4) 人的ネットワークの形成

ものづくりの抜本的革新に対して影響の大きい設計・生産プロセスに焦点をあて、HPC を駆使した新しいシミュレーションシステムの内容等につき議論する機会を設ける。総花的でなく、産業分野や技術分野を特定した議論を適宜開催することにより、その分野に直接関係する研究者・技術者間の相互理解の促進と連携・協力体制の強化・拡大を図った。

また、成果公開の強化策として下期より分野4 統合ワークショップ、HPC ものづくりワークショップ、アウトリーチセミナーに最新の成果を発表を行った。

イベント名	実施中 ／新規	連携 ／単独	開催時期(場所)
●「京」コンピューターシンポジウム (各分野の代表的成果の発表)	実施中	連携 (分野間)	5～6月 (神戸/東京)
●次世代ものづくりシンポジウム (分野4の代表的成果発表、ポスト京パネル討論等)	実施中	単独	12月 (神戸)
●分野4統合ワークショップ (技術部門別成果発表・専門的討論) (1) 流体・伝熱・燃焼 部門 当該課題サブテーマ+その他テーマ (2) 材料・構造・信頼性 部門 当該課題サブテーマ+その他テーマ (3) 先端アプリ・共通基盤・PF 部門 技術分野別アプリ、アルゴリズム、HPC/PF等	新規	連携 (産業界)	3月、2日間 (東京中心)
●HPCものづくりワークショップ (HPC対応アプリベンチマーク等の情報交換) <small>産業界で注目度が増しつつある国プロ成果を中心とするオープンソースソフトウェアを対象にして、その特徴を正確に把握するためのベンチマークを実施。産業界側での評価(ニーズに基づく)を重視する。</small>	新規	連携 (産応協)	2回程度／年 初回11/29(東京)
●アウトリーチセミナー (比較的若手の研究者、技術者、学生を対象にした分野4の日常研究活動・成果の情報共有と形式的でない自由関連なディスカッション) ・分野4成果の分野内外との情報共有、有効活用促進 ・開発中の技術・ソフトウェアのレビュー、意見のフィードバック等	新規	連携 (分野間 +産業界)	1回程度／2ヶ月 (AICS中心)

Fig. 6-68 Schedule of symposiums and workshops

シンポジウム、ワークショップ等の開催状況を以下に示す。

Table 6-12 List of Symposiums and Workshops for HPC

(中間評価まで)

開催日	内容	参加者数
H23.12.9 H24.12.7	「分野4次世代ものづくり」シンポジウム(第2回～第3回) (理化学研究所 計算科学研究機構 セミナー室)	274
H23.11.25 H24.10.29	NIMS ナノシミュレーションワークショップ(第1回～第2回) (学術総合センター(竹橋))	120
H24.7.13 H24.8.22 H24.11.8	クラウドコンピュータ環境に対応した FrontFlow/blue の設計実務セミナー (第1回～第3回) (大阪国際会議場、東京大学生産技術研究所、計算科学振興財団)	62
H24.12.16-17	実問題のための多目的設計探査ワークショップ 2012 (ホテルマロウド軽井沢)	50
H25.3.25	FrontISTR 研究会(第1回) (東京大学生産技術研究所)	51
H24(4回) H25(1回)	原子力計算科学セミナー(第5回～第9回) (東京大学 柏キャンパス)	90

(中間評価以降)

開催日	内容	参加者数
H25.12.6 H26.12.5	「分野4次世代ものづくり」シンポジウム(第4回～第5回) (理化学研究所 計算科学研究機構 セミナー室)	275
H26.3.6 H26.3.13 H27.3.11	分野4統合ワークショップ(第1回～第2回)「流体・伝熱・燃焼」部門、「材料・構造・信頼性」部門、「先端アプリ・共通基盤・PF」部門 (東京大学生産技術研究所 大会議室)	446
H25.11.29 H26.5.21 H26.12.19 H27.7.7 H27.11.25	HPCものづくりワークショップ(第1回～第5回) (東京大学生産技術研究所 大会議室)	110
H25.9.2 H26.9.29 H27.11.27	NIMS ナノシミュレーションワークショップ(第3回～第5回) (学術総合センター 中会議場)	223
H25.12.10 H26.3.28 H27.4.3	クラウドコンピュータ環境に対応した FrontFlow/blue の設計実務セミナー (第4回～第6回) (高度計算科学研究支援センター 実習室)	50
H26.3.11	神戸ハンズオン:ABINIT-MP 講習会(第1回) (高度計算科学研究支援センター 実習室)	10
H26.8.7	東京ハンズオン:ABINIT-MP 講習会(第1回) (高度情報科学技術研究機構 東京事務所 神戸 AP)	5
H26(3回) H27(3回)	PHASE/0 利用講習会(第1回～第6回) (東京大学生産技術研究所 中セミナー室4、高度計算科学研究支援センター 実習室)	109
H26.9.5	平成26年度 ProteinDF 利用講習会 (東京大学生産技術研究所 中セミナー室2)	13
H26.12.1	第1回 HPC/PF ハンズオンセミナー (高度計算科学研究支援センター 実習室)	9
H25(9回) H26(7回) H27(7回)	FrontISTR 研究会(第2回～第24回) (東京大学生産技術研究所、埼玉県産業技術総合センター、東京大学本郷キャンパス、東京大学 柏キャンパス)	599
H27.9.11	HPC/PF を利用した FrontFlow/blue 解析セミナー (高度計算科学研究支援センター 実習室)	16
H27.11.6	HPC/PF を利用した FrontISTR 解析セミナー (東京大学生産技術研究所 中セミナー室3)	16
H27.12.4	HPC/PF 東京ハンズオン:ABINIT-MP 講習会(第1回) (東京大学生産技術研究所 中セミナー室5)	12

開催日	内容	参加者数
H28.1.19	HPC/PF PHASE/0 利用講習会(第1回) (高度計算科学研究支援センター 実習室)	14
H27.11.6	UPACS(蒸気タービンの解析)講習会 (早稲田大学 西早稲田キャンパス)	13
H26(2回) H27(1回)	日本機械学会流体力学部門 A-TS 05-24 研究会 「プラズマアクチュエータ研究会」(第1回～第3回)	180
H25(5回) H26(3回)	原子力計算科学セミナー(第10回～第17回) (東京大学 柏キャンパス)	145
H27.12.1	課題5成果可視化報告会 (TKP 新宿カンファレンスセンター)	15

連携して行ったシンポジウム、研究会等の開催状況を以下に示す。

Table 6-13 List of Symposiums and Workshops for HPC

開催日	内容
H23.6.22	第2回 HPCI 戦略プログラム 5 分野合同研究交流会 (理化学研究所 計算科学研究機構 講堂)
H23.10.3	第3回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会 (理化学研究所 計算科学研究機構 講堂)
H24.6.14-15	京コンピュータ・シンポジウム 2012 および第2回戦略プログラム 5 分野合同ワークショップ (神戸大学 統合研究拠点コンベンションホール)
H24.7.10	第4回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会 (理化学研究所 計算科学研究機構 講堂)
H25.5.13	京コンピュータシンポジウム 2013 (イイノカンファレンスセンター4階)
H26.8.23-24	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 (科学技術館 展示・イベントホール)
H26.10.31	第1回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 (高度情報科学技術研究機構)
H27.1.29	シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」 (よみうり大手町ホール 小ホール)

(6-5) 分野を超えた取組の推進

他分野との連携として、分野3と大型重要構造物の耐震シミュレーションと分野3の地震シミュレーションの連携方策について意見交換するとともに、双方の研究開発状況を報告し、進捗の確認をしている。そのための耐震課題連絡会議を設置し、平成23年9月30日、平成23年10月13日、平成24年9月3日、平成25年6月24日に実施した。

また、分野を超えた取り組みとして、特に、大規模データと可視化処理について理研 AICS 可視化技術研究チームと協働で、可視化処理を進めている。これまで、大規模データの管理手法と 300 億

格子の計算結果の可視化などをトライアル的に実施した。今後、AICS で提供される京の上で動作する可視化ツールを利用する予定である。

(6-6) プロジェクトの総合的推進

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は、独立行政法人 日本原子力研究開発機構、独立行政法人 宇宙航空研究開発機構とのネットワーク型組織の代表機関として、協力体制強化を図るため、3機関事務局会議ならびに3機関代表による幹事会議(運営会議)を設けて意思疎通の円滑化を図るとともに分野内連携推進施策の効率的な策定・実施を牽引している。平成24年度までは、「京」を核としたHPCIの利活用による成果創出の支援に注力したが、平成25年度以降は成果のとりまとめと、アウトリーチ活動に重点を移し、ものづくり産業を中心とする社会への最先端スパコン利用成果のPRと理解を深める活動を活発化している。

なお、平成 28 年度 2 月 1 日現在の学術成果等の実績一覧を以下に示す。

Table 6-14 Total amount of release

	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度	合計
学会発表						
国内	54	135	162	106	64	520
海外	41	62	74	564	51	284
学術論文						
国内	6	10	24	14	11	65
海外	3	11	37	20	30	99
招待講演						
国内	11	13	34	15	14	87
海外	9	9	13	8	12	51
新聞・マスコミ						
国内	25	13	14	4	9	65
海外	0	0	0	0	0	0

計算科学技術推進体制の構築の強化

計算科学技術による画期的な科学的成果並びに社会的課題の解決に資する成果の早期創出という喫緊の課題に対応するため、特定高速電子計算機施設の性能をより一層活用して分野4の貢献を強化できる以下の項目を追加して実施した。

(1) 広範にわたるものづくりの革新を加速するための主要ソフトウェア機能強化

a) ユーザーニーズに対応するための普及サポート用アウトリーチサイトを構築

ものづくり分野においては、シミュレータ単体のみでは十分な設計支援はできないので、シミュレータの周辺技術も含めて開発・機能提供していく必要がある。既開発のシミュレータと今後追加するシミュレータ群を統合的に扱い、プリポストシステムやデータベースシステムを始めとする周辺プログラム群をサブシステムとして組み合わせた HPC/PF (High Performance Computing Platform) システムを構築し、高度なシミュレータ群による迅速な問題解決のサービス提供を目指して、研究開発を進めている。この HPC/PF システムは、神戸に設置された「京」をはじめ、大学の情報基盤センターや汎用クラウドリソース、小規模なプライベートクラスタなど多様な計算機環境での稼働を想定している。

上述の HPC/PF システムを用いて計算した結果を有効活用するため、解析事例やノウハウなどを提供する事例データベースや情報提供機能を併せ持つ、アウトリーチサイトの設計と構築を実施した (Fig.6-69)。

主に以下に示すコンテンツを提供した。

- 1) ニュースレター (Fig.6-70)
- 2) ソフトウェアライブラリ (Fig.6-71)
- 3) 解析事例データベース (Fig.6-72)



Fig. 6-69 Appearance of top page at CENAV



Fig. 6-70 News letter Vol.1



Fig. 6-71 Menu page of software library



Fig. 6-72 Menu of data base page

b) トライアル環境の整備、アプリ利用セミナーの開催

平成 23・24 年度に実施した実証研究課題公募事業では合計 8 課題を採択したが、多くの課題が共同研究を基にした応募課題であり、まだまだ産業界の一般利用者がスーパーコンピュータを利用することが難しい状況にある可能性が高いことが判明した。そこで平成 25 年度以降は実証研究課題公募事業を発展的に解消し、課題公募事業よりも応募・利用しやすい「先端ソフトウェアのトライアル利用」事業への移行を計画した。

トライアル利用は、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)環境で利用可能な先端ソフトウェアである CISS ソフトウェア群に興味を持った利用者が、計算機とソフトウェア等のシミュレーション解析の環境一式の提供を受け、試用できる制度である。公益財団法人計算科学振興財団(FOCUS)から革新的シミュレーション研究センターが借り受けている FOCUS スパコンの資源の一部を利用してシミュレーション解析を試用でき、利用するソフトウェアによっては、前処理から解析、後処理に至る一連の流れが FOCUS スパコンを利用して試用可能となる。

本業務では、平成 24 年度に FOCUS スパコンに構築した流体・構造解析分野の CISS ソフトウェア群のトライアル利用環境に、他分野にも対応するためのソフトウェアを充実させる環境整備を実施する。環境整備時には、利用者から要望のあるソフトウェアの性能指標提示のためのベンチマークも実施する。また、CISS ソフトウェアの利用方法を初歩から学べるアプリ利用セミナーを開催し、トライアル利用事業につながる利用者の開拓を目指す。

本業務では、CISS ソフトウェア群のうち、ナノ・バイオ分野のソフトウェアである PHASE、ABINIT-MP、ProteinDF について FOCUS スパコンへのインストールと環境の整備を実施した。インストールしたソフトウェアに対し、ソフトウェアの性能指標を示すためのベンチマークを合わせて実施した。これらのベンチマーク結果に関しては、利用者が容易に参照できるように、計算工学ナビへの情報登録も実施した。

アプリ利用セミナーは、バイオ分野のソフトウェア ABINIT-MP のハンズオンセミナーを開催した。セミナー当日は 12 名の参加者が、入力データの作成からシミュレーションの実施、計算結果の GUI での表示・解析を行い、ABINIT-MP の使用方法を学んだ。

c) 熱流体分野、構造材料分野、ナノ分子分野のソフトウェアのベンチマーク

1) 熱流体分野のソフトウェアベンチマーク(建築)

シミュレーションを利用して工業製品の設計を行う産業界のユーザーの利便性を向上するため、よく利用されるシミュレータについて、その計算事例をアウトリーチサイト内の知識データベースに蓄積する。これにより、シミュレータの利用ガイドラインや計算精度、計算能力など、参考になる情報を提供する。ここでは、産業界でも利用が広まりつつある OpenFOAM について、その計算事例を整備した。

市街地風環境予測ベンチマークテスト[1]の 6 ケースと ERCOFTAC (European Research Community on Flow, Turbulence And Combustion) SIG15 (Turbulence Modeling SIG) ベンチマークテスト[2] の 10 ケースに対して、OpenFOAM を用いて定常 RANS モデル解析を行い、計算条件や結果等の計算事例を計算工学ナビの解析事例データベースに掲載した。また、ベンチマークテストの解析と実測値との比較プロットを自動実行できるケースファイルを GitHub レポジトリ[3]に整備した。

(i) 市街地風環境予測ベンチマークテスト

日本建築学会の流体数値計算による風環境評価ガイドライン作成 WG が作成した風環境の CFD 解析検証用データベースでは、Fig.6-73 に示した 6 ケースの市街地風環境の実測と各種商用・自作コードによる計算結果との比較を網羅的に行っており、WG の WEB ページ[1]において各種データが公開されている。本業務では全 6 ケースの市街地風環境ベンチマークテストに対して OpenFOAM を用いた RANS モデル定常解析を行い、実測値や他の CFD 解析結果と比較したところ、OpenFOAM の解析精度は他の CFD 解析結果[1]とほぼ同様であることを確認した。

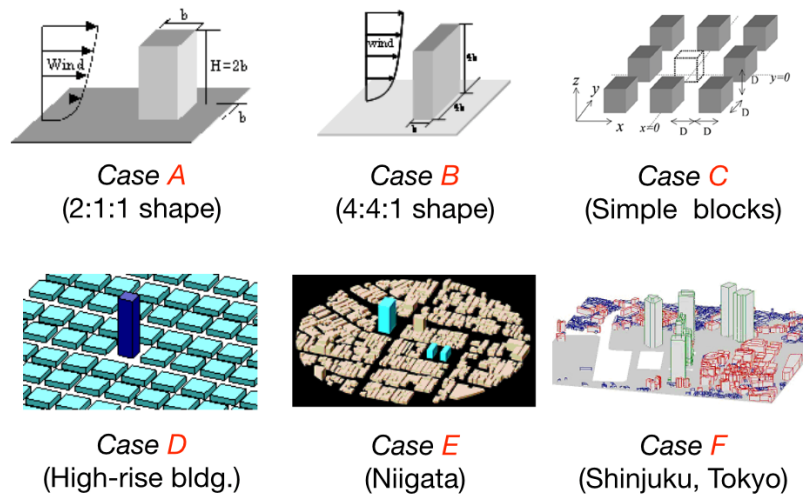


Fig. 6-73 Benchmark test cases of pedestrian wind environment around building [1]

(ii) ERCOFTAC SIG15 ベンチマークテスト

ERCOFTAC の SIG15 は乱流モデルに関するワークショップでの成果を通じて、基礎的で工学的な流れ場に関し数多くの系統的なベンチマークテストケースを整備し、ERCOFTAC の WEB ページ[2]で公開している。本業務ではこのうち Fig.6-74 に示した 10 ケースのベンチマークテストに対して OpenFOAM の RANS モデル定常解析を行い、風洞実験値もしくは DNS 解析結果と比較した。定常 RANS 解析であるため、Flow over an axisymmetric 3D hill(case 11.2)など流入風や障害物後流の渦放出における非定常性の再現が重要となる流れ場については、解析結果が実測値と大きく乖離したが、その他のケースでは概ね実験値と良い対応を示した。また OpenFOAM の解析精度は SIG15 グループによる他の RANS モデル解析結果とほぼ同様であることを確認した。

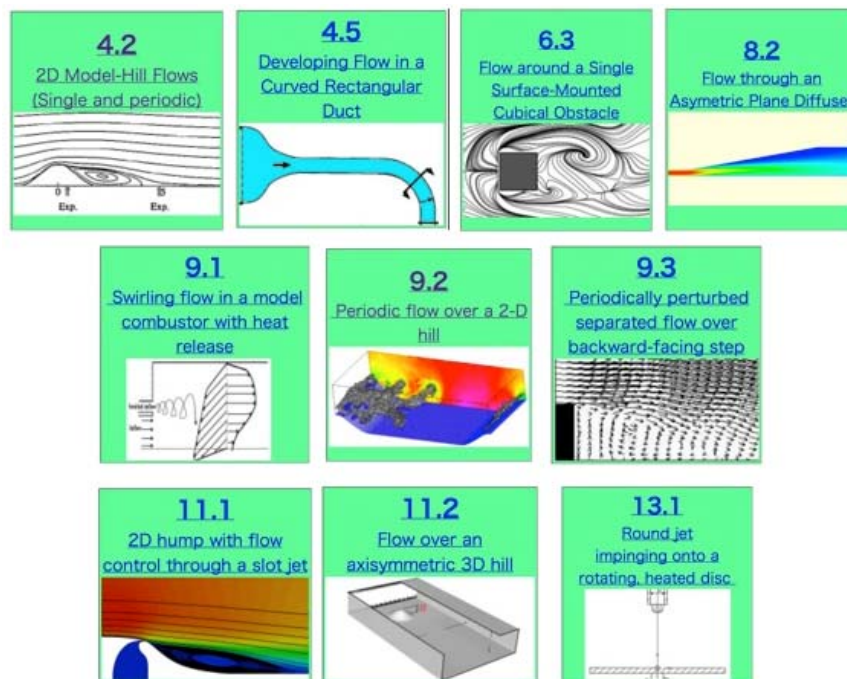


Fig. 6-74 Benchmark test cases of ERCOFTAC SIG15 [2]

[1] 市街地風環境予測のための流体数値解析ガイドブック –ガイドラインと検証用データベース,
URL:<http://www.aij.or.jp/jpn/publish/cfdguide/index.htm>

[2] ERCOFTAC SIG15 Test Case Database,

URL:http://www.ercofac.org/fileadmin/user_upload/bigfiles/sig15/database/

[3] Public repository maintained by the V&V (Verification and Validation) committee in the OpenCAE society of Japan, URL:<https://github.com/opencae/VandV>

2) 熱流体分野のソフトウェアベンチマーク(自動車)

FrontFlow/blue(以下、FFB)の特長は壁面近傍の微小な渦のダイナミクスを直接計算することにより乱流現象を精度よく予測できることにある。これまでのFFBによる乱流解析では主に六面体要素が適用されており、これらの解析において乱流の高精度予測が実証されてきた。六面体要素は、品質のよい計算格子が作成できれば高精度な解析ができる利点があるが、作成されるメッシュデータの品質およびそのために費やされる時間は、メッシュデータ作成者の技術やノウハウに大きく依存するため、設計現場における流体解析業務では、容易かつ自動にメッシュ作成が実行できるプリズム・テトラメッシュの使用ニーズが高い。

これをうけ、プリズム・テトラメッシュによる乱流の準直接計算の工学応用を実現するため、その準備段階として、レイノルズ数 $2.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^6$ の平板乱流境界層のベンチマークテストを実施し、適切な解像度の計算格子を適用すれば、乱流境界層を精度よく計算できることを確認している。本業務では、テトラ・プリズムメッシュを用いた乱流計算の応用事例として、簡易車体モデルを対象とした空力計算ベンチマークテストを実施し、その精度を検証した。なお、本ベンチマークテストは、自動車技術会より提示いただいた形状データおよび実験データを用いて実施した。

Fig.6-75 に示す簡易車体モデル(寸法 長さ1100mm、幅320mm、高さ340mm、主流速度30m/s)を対象に車体モデルまわりのLES解析を実施した。本ベンチマークテストでは、オリジナル形状および車体後方部にスポイラーを付けた形状の2形状に対して解析を実施し、実験で捉えられる両者の差異を予測できるかを検証する。

解像度は水平方向に1mm、鉛直方向に0.2mmとし、全体の要素数は約4,000万である。FFBのrefine機能を用いて本計算格子を2回refineすれば、格子解像度は壁座標で、水平方向で16、鉛直方向で3となり、境界層内の渦のダイナミクスを直接計算する(full-resolved)LES解析が可能となる。本ベンチマークテストでは、Re数を1/4小さくすることにより要素数4,000万のオリジナルメッシュを用いたLES解析を実施した。

Fig.6-76 に流れ場の可視化結果としてスポイラーなしのケースの表面圧力分布(グレースケール)およびY=-0.15m断面における主流方向速度分布を示す。

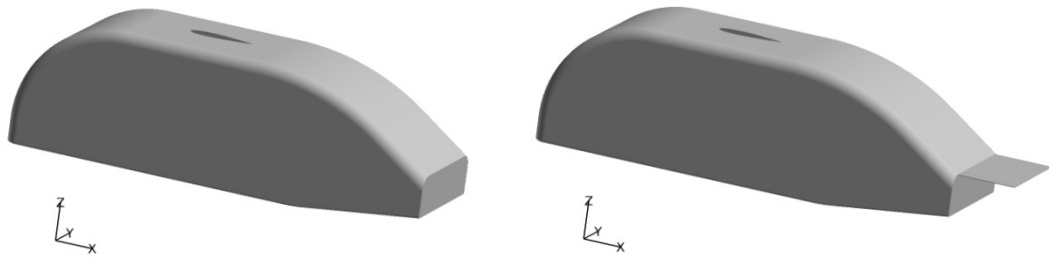


Fig.6-75 Computational model (left: without spoiler, right: with spoiler)

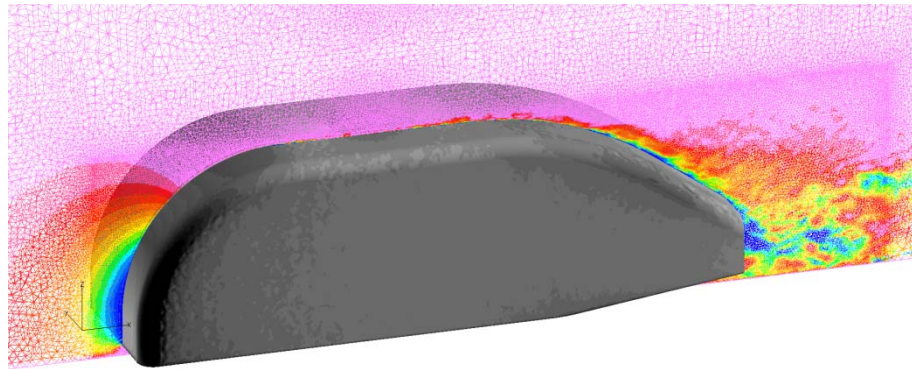


Fig.6-76 Pressure distribution on the surface and streamwise velocity distribution on the cross section of $y=0.15\text{m}$

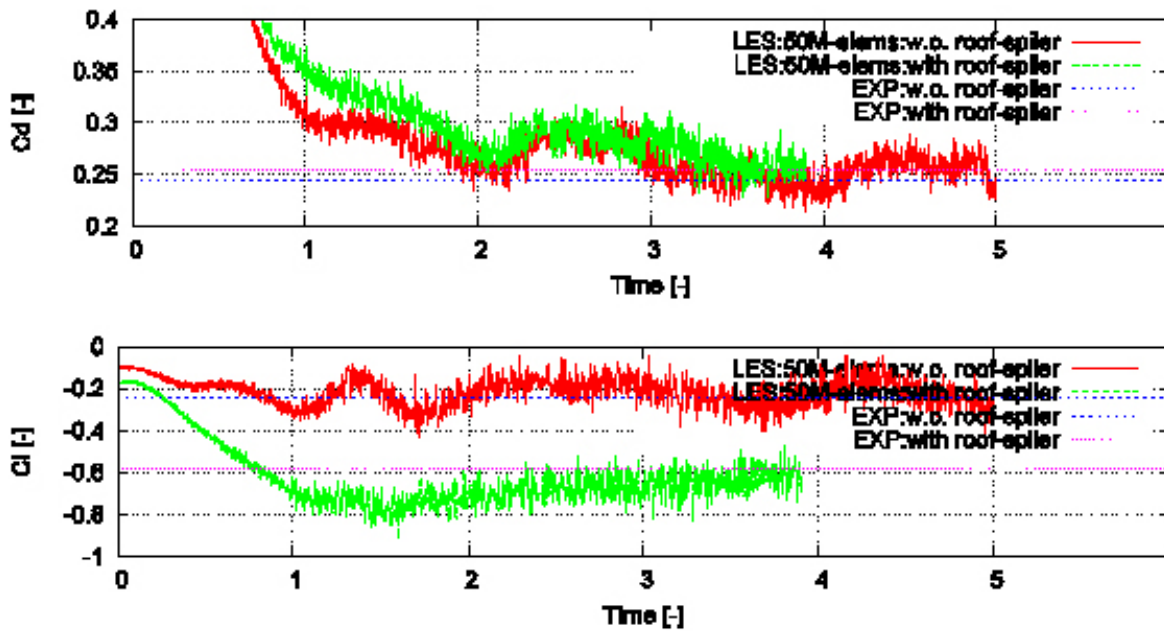


Fig.6-77 Time series of C_d and C_l

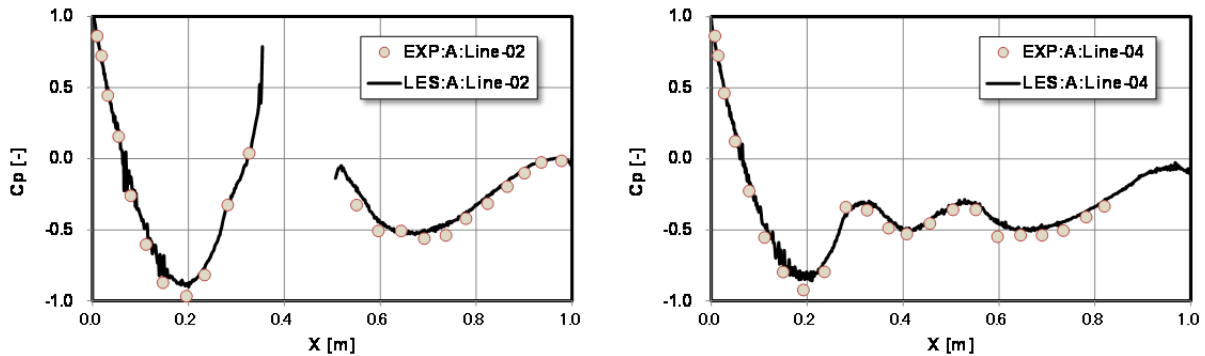


Fig.6-78 Comparisons of pressure coefficients on the model surface in the case without spoiler, [left: mid-span ($y=0$) cross section, right: $y=0.08$ cross-section]

3) 構造材料分野のソフトウェアベンチマーク(FrontISTR)

本ベンチマークの目的は、FrontISTR のユーザーらとベンチマーク解析データや計算結果の情報を共有し、既存の商用コードによる解析やユーザーによるベンチマーク参加を通じて、FrontISTR の大規模並列性能と非線形構造解析機能の検証をより進めることである。また、必要に応じて FrontISTR の効率化や機能改善につなげるための知見を得ることである。具体的には、ベンチマーク問題として、『脳動脈瘤を含む血管系の複合部材モデルの有限変形解析』に取り組む。主な、作業内容は、① 有限要素モデルの作成、② FrontISTR による解析、③ 並列解析性能評価を含めた解析結果の整理、既存の商用コードとの比較、である。

FrontISTR および商用プログラム(Abaqus 6.12.1)によって、材料に直交異方性を考慮した血管モデルの静的線形応力解析を実施した。計算結果の一致は良好であり、また、1CPU での計算時間は同程度であった。FrontISTR の並列性能については、今回の計算規模では 8 コア並列程度まで良好に上昇し、今後、より詳細な大規模解析モデルにおける並列演算性能への期待が明らかとなった。また、機能改善要求、商用プログラムと計算時間を比較する際の注意点、などについての知見が得られた。

(i) 有限要素モデルの作成

以前に実施された予備解析(均質等方の簡易モデル、Fig.6-79)において高い応力が生じている部位周辺組織について、可視化された 2 次元画像と医師の解剖学的な知見から血管壁(Fig.6-80 および Fig.6-81 を参照)の複合部材モデルを作成した。

解析対象の最終目標は、脳動脈瘤を含む血管系、血管直径:約 4mm、血管の長さ:80mm、節点数は中規模(100 万~数百万点、研究室レベルの PC クラスタで解析が可能な規模)、大規模(約 5,000 万点、FOCUS スパコンでの解析を前提)の 2 ケースであった。しかしながら、複合部材としてのモデル化、要素物性データの生成(主軸方向の定義)と、FrontISTR で新たに顕在化バグへの対応に時間を要したため、直管の長さ 4mm モデルと 40mm モデルを作成し、ベンチマークに供した。

Fig.6-82 は、(a)40mmモデル、(b)4mm モデル、(c)リファイナ使用時のメッシュ、(d)血管断面、の様子である。血管壁は直交異方性を有する 5 層で構成されている。

<p>Fig.6-79 Finite strain analysis of cerebral aneurysm system: an example of preliminary analysis of a simplified model by FrontISTR</p>	<p>Fig.6-80 Structure of arterial wall (from K.Hayashi, "Biomechanics", p.73, orona Publishing, 2000.)</p>	<p>Fig.6-81 Photomicrograph of cross section of cerebral artery (dye processing), (from Dr.Asano, Teikyo University, private communication)</p>
<p>(a) 40mm モデル 947,583 節点, 864,000 要素, 六面体 1 次非適合要素</p>	<p>(b) 4 mm モデル 95,823 節点, 86,400 要素, 六面体 1 次非適合要素</p>	<p>(c) (b)を 1 回リファイン 728,525 節点, 691,200 要素</p>
<p>(d) section</p>		
<p>Fig.6-82 Mesh for straight arterial wall</p>		

(ii) 商用プログラムおよび FrontISTR による解析

当初予定していた境界条件は、血管両端を固定支持、血管内圧として心臓拍動に対応する変動圧力、血管外側は定常な脳圧の負荷、であった。ここでの直管モデルに対しては、一定内圧 0.01235 [MPa]、側面は対称条件、のもとで、直交異方性を考慮した弾性静解析を行った。弾性係数の詳細は割愛する。Fig.6-83 に商用プログラム (Abaqus) と比較し、血管断面内の変位分布を示す。両者は良好に一致している。



Fig.6-83 Contor of displacements on a crosssection of artery

実施した計算ケースは以下の通り。

<Abaqus>

- ・4mm モデル／40mm モデル
- ・反復法ソルバ／直接法ソルバ(ソルバに関する詳細は不明)
- ・逐次／並列(並列化に関する詳細は不明)

<FrontISTR>

- ・4mm モデル／40mm モデル／リファイナモデル(4mm モデルを 1 回リファイン)
- ・反復法ソルバ(IC(0)+CG、Diag+CG)／直接法ソルバ(MUMPS)
- ・逐次／並列(MPI 領域分割)

(iii) 並列解析性能評価を含めた解析結果の整理、既存の商用コードとの比較

① 比較における注意点

解析結果や計算時間を比較する際には、以下のような点に注意する必要がある。

- ・変位からひずみや応力を計算して可視化するためのアルゴリズムの違い。とくに、異材界面、領域端部など。
- ・時間を比較するときの、対象とする処理内容の違い。例えば、データの読み込み・書き出し時間、線形ソルバーとそれ以外の前処理部分の内訳、ソルバーアルゴリズムの違い、収束判定条件の違い、(今回の直管形状の場合は)円筒座標系と直交座標系、異方性材料データの入力方法、など。

② 反復法ソルバーを用いたときの計算時間の比較

Fig.6-84 の表は、Abaqus による計算時間であり、欄外に記載した数字は比較対照した FrontISTR の計算時間である。表の上段は 40mm モデル、下段は 4mm モデルである。また、表の左半分は直交座標系、右半分は円筒座標系による解析である。それぞれ、並列数を変化させている。Abaqus では「何も出力しない」ようにオプション設定をして計算時間を計測した。FrontISTR には円筒座標系の定式化に基づく解析機能はない。結果を簡単にまとめる:

- ・逐次計算のとき、FrontISTR は Abaqus よりもやや速い。40mm モデルでは(A)923sec, (F)880sec、4mm モデルでは(A)69sec, (F)37.5sec
- ・並列計算のとき、FrontISTR は 8 並列程度までは良好にスケールする。Abaqus の加速率は良いとは言えない。

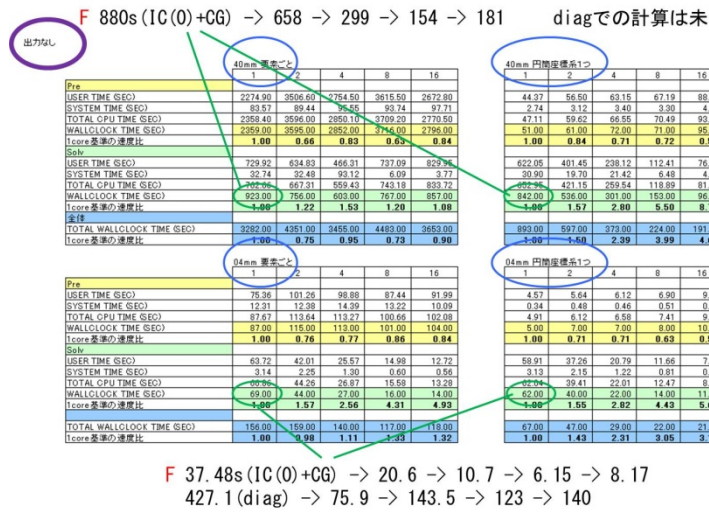


Fig.6-84 Comparison of computational time when using iterative solvers

③ 直接法ソルバーを用いたときの計算時間の比較

同様に、直接法ソルバーを用いたときの結果を Fig.6-85 に示す。結果を簡単にまとめる：

- ・逐次計算のとき、FrontISTR は Abaqus よりもやや速い。40mm モデルでは(A)1,025sec, (F)800sec、4mm モデルでは(A)61sec, (F)52.7sec
- ・並列計算のとき、FrontISTR (MUMPS)は 4 並列程度までは何とかスケールするが、反復法に比べ加速率は良いとは言えない。
- ・Abaqus では、円筒座標系を用いると並列計算の加速率が良い。

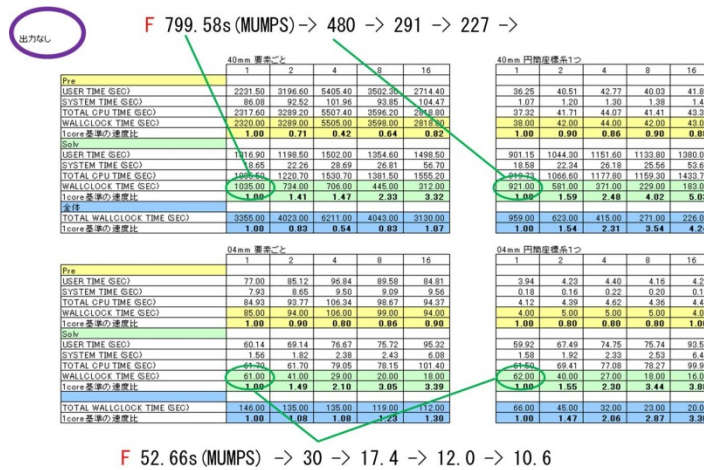


Fig.6-85 Comparison of computational time when using direct solvers

4) 構造材料分野のソフトウェアベンチマーク(FrontCOMP)

実機解析性能実証の一つとして、炭素繊維強化プラスチックの強度評価に関する、以下の 2 つのモデルについて計算を実施したベンチマーク解析を実施し、実問題の実行可能性を実証するとともに、必要となる計算資源の見積もり評価を求めた。

ケース1: 金属シース付CFRP積層板 3点曲げ試験

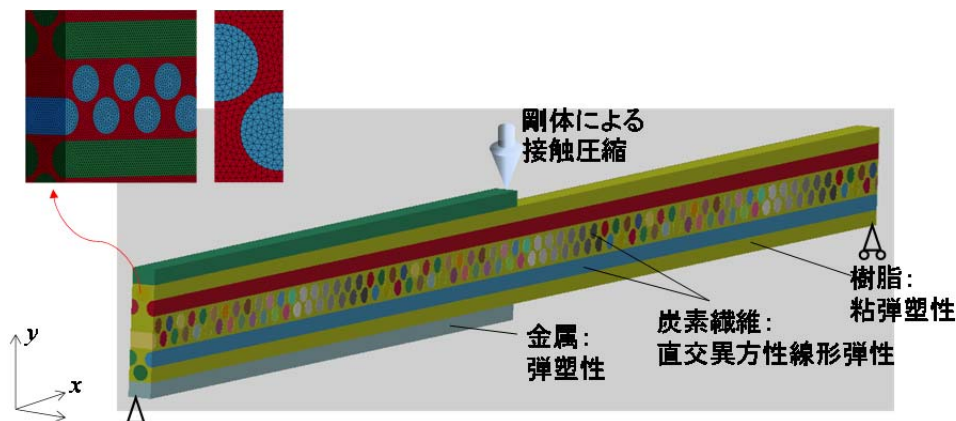


Fig. 6-86 Three point bending test simulation of CFRP layered plate with metallic sheath

Fig.6-86 に示す 3 点曲げ問題について、幾何学的非線形性を考慮した静解析および動解析を FrontCOMP および LS-DYNA を用いて FX-10 上で計算し結果を比較した。コア数を変えて 3 通りの計算を実施し並列性能まで評価した。各材料の要素タイプと材料モデルは下表のとおりである。
要素数:約 1500 万、節点数:約 250 万である。

	要素タイプ	材料モデル
金属	6 面体 1 次	線形弾性体
炭素繊維	4 面体 1 次	直交異方性線形弾性 (ダメージ有)
樹脂	4 面体 1 次	等方性弾性体 (ダメージ有)

ケース2:フィラメントワインディング高圧容器

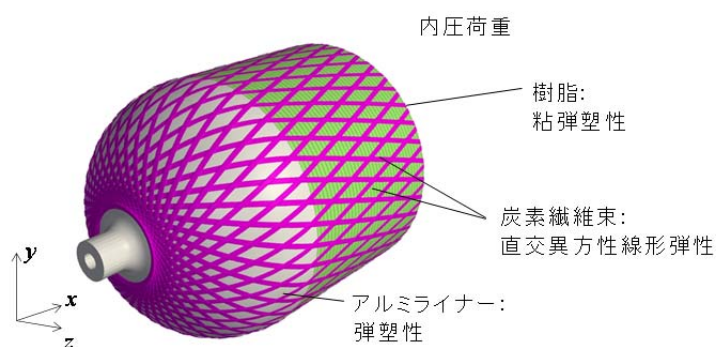


Fig. 6-87 High pressure vessel by filament winding

Fig.6-87 に示す内圧を受けるフィラメントワインディング高圧容器について、幾何学的非線形性を考慮した静解析を FrontCOMP および LS-DYNA を用いて FX-10 上で計算し結果を比較する。コア数を変えて 3

通りの計算を実施し並列性能まで評価する。各材料の要素タイプと材料モデルは下表のとおりである。要素数:約 8500 万、節点数:約 1400 万である。

	要素タイプ	材料モデル
アルミライナー	4 面体 1 次	弾性体
炭素繊維	4 面体 1 次	直交異方性線形弾性
樹脂	4 面体 1 次	弾塑性体

成果の内容

ケース1:金属シース付CFRP積層板 3 点曲げ試験

FrontCOMPとLS-DYNAで明らかに異なる解析結果となった。LS-DYNAのバグ存在の可能性もあり、引き続き検討を行っている。また、並列性能評価結果は Fig.6-88 となった。

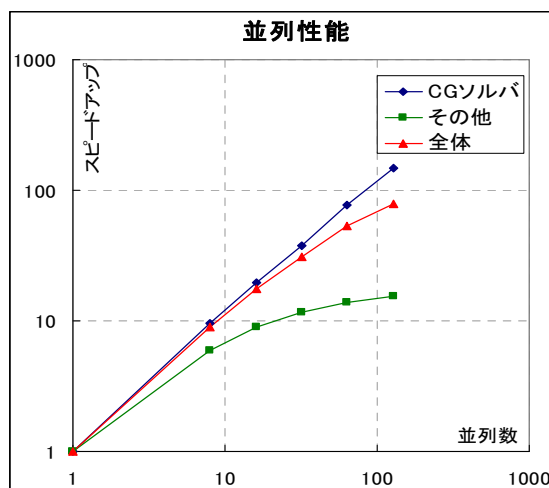


Fig.6-88 Parallelized efficiency

ケース2:フィラメントワインディング高圧容器

この規模の計算はLS-DYNAでは実施不可能であった。FrontCOMPを用いて行った応力評価の1例を Fig.6-89 に示す。

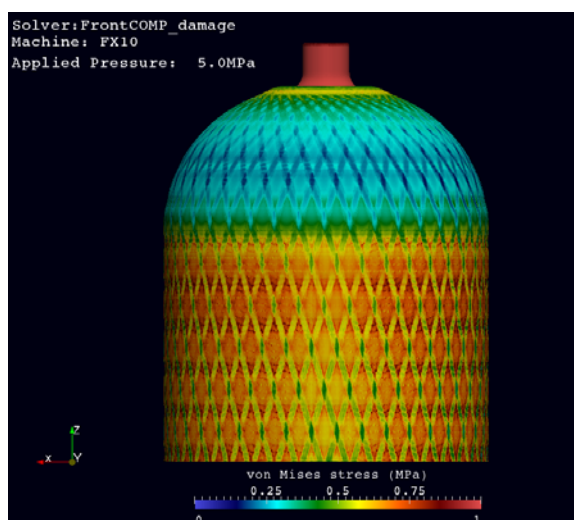


Fig.6-89 Mises stress distribution

5) ナノ分子分野のソフトウェアベンチマーク(PHASE、ProteinDF、ABINIT-MP)

(i) PHASE

(公財)計算科学振興財団 FOCUS スパコンに、PHASE の大規模並列計算機向け3軸分割版(3D版)と既存の2軸分割版(2D版)をインストールし、20ノード(400コア)までの並列規模でベンチマークテストを行った。3D版は小さな並列規模であっても2D版より高速であった。

PHASE に対しては、80,000ノード規模の京計算機を対象として並列化・高速化チューニングを行ってきた。既存の版は並列化軸がk点とバンドの二つであるので2D版と呼ぶことにし、これに対して京計算機用にチューニングした版は並列化軸がk点、バンド、平面波基底の3つあることから3D版と呼ぶことにする。3D版はMPI通信経路を局所化するように実装することで並列効率を高めている。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ある。またMPIとスレッドのハイブリッド並列がなされており、計算対象の系と計算機規模に応じて、MPI並列とスレッド並列の比、3つの分割軸の分割比を調整することで効率的な計算が可能になる。PHASEの2D版と3D版のふたつを計算科学振興財団 FOCUS スパコンシステムのEシステムにインストールした。いずれの版のプログラムも様々な並列条件に対して正常動作することが確認できた。コンパイルはインテルコンパイラを用い、FFTに関してはMKLライブラリのfftwラッパーをつくりlibfftw3xf_intel.aをPHASE2D版、3D版それぞれにリンクした。

PHASEの採用している計算手法は、対象とする系の原子数 N に対して演算数が $O(N^3)$ に比例して増大するという特徴がある。このことと、一般利用者の半導体材料や電池材料などを対象とする計算需要の大部分は数千原子規模までであるということから、計算機規模に応じた対象系の単純な規模拡大はのぞみにくい(つまり弱スケーリングより強スケーリング効率がより重要)と考え、1,000原子規模の系で、400コア(Eシステムでは20ノード)までを使ったベンチマークを行った。Fig.6-90にその結果を示す。4H-SiC結晶に欠陥を作った998原子からなる構造を用意し、k点は Γ 点を探って、SCF計算を10回行い、1SCFあたりの計算時間を測定した。3D版は2D版に対してメモリ消費量が大きいため、1ノードおよび2ノードでは全コアを用いた計算ができなかった。200コアまでは1/4あるいは1/2のコアを用いた測定も行った。3D版のバンド分割数と平面波分割数は、その比が1:2に近いものをMPI並列数に応じて設定した。①既存の2D版は、コア数が400に達すると計算効率が飽和するのに対し、3D版は400コアでも計算効率が向上している。400コアでは3D版が2D版の3倍以上速い。②2D版、3D版いずれも全コアを用いるより半分あるいは1/4のコアを用いた方が2割から3割速い。これは、コアあたりのキャッシュが増えたことが原因として考えられる。③グラフは全てフラットMPIで実行した結果である。ハイブリッド並列可能な3D版はこの計算規模、並列規模ではハイブリッド化することによる効果はほとんどなかった。ただし、100, 200, 400コアと並列数が増えるに従って、スレッド並列化の効果が出てきて、400コアではスレッド並列数2にしたとき、フラットMPIよりもわずかに(0.3秒)高速であった。これより並列数が大きくなるに従いスレッド並列の効果が見れてくると予想できる。

このように、京計算機用に高度化した PHASE の 3D 版は、比較的小規模なクラスター計算機で用いても高効率な計算ができることを確認した。

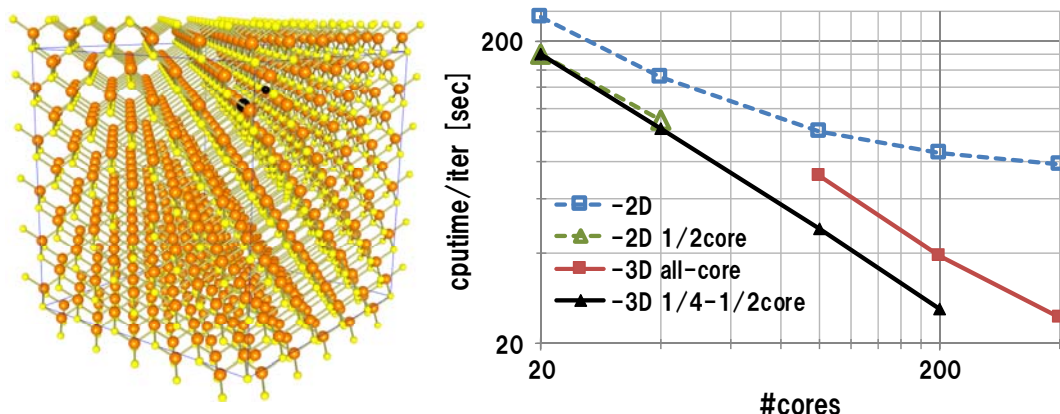


Fig.6-90 (Left) An Si-C defect structure in a 1,000-atom-4H-SiC unit-cell. Yellow and orange balls are C and Si atoms, respectively. Black balls are removed atom sites. (Right) A graph of measured elapsed CPU times per SCF for various numbers of cores with using the PHASE 2D and 3D versions.

(ii) ProteinDF

(公財)計算科学振興財団 FOCUS スパコンシステムに対し、最新版 ProteinDF ソースコードを用いて、ポーティング・インストール作業を行った。FOCUS スパコンシステムでは、MPI/OpenMP を用いたハイブリッド並列を利用することができ、また計算環境に適した LAPACK/ScaLAPACK ライブラリを利用することができる。FOCUS スパコンシステムで最適な ProteinDF 動作環境を構築するとともに、各種ベンチマークテストを実施した。

ProteinDF には、すべての MPI プロセスが同じ行列要素を保持し、タスクを動的に均等配分する dynamic-replica 法と、大規模行列を MPI プロセスに分割保持し、それに応じてタスクを分配する distribute 法が実装されている。最新の ProteinDF では、これらに加えてコレスキー分解法に基づいた第 3 世代密度汎関数計算法が実装されている。第 3 世代密度汎関数計算法は、計算精度を数学的に厳密に指定できるコレスキー分解を、4 中心 2 電子反発積分や 4 中心重なり積分といった分子積分を保持するスーパーマトリックスに適用する方法である。SCF 繰り返し計算の前に 1 度だけ計算コストの高い分子積分を行い、SCF 繰り返し計算中はあらかじめ求めてあったコレスキーベクトルを用いて、行列演算のみでクーロン項や Fock 交換項を求める方法である。加えて、dual-basis によるグリッドフリー交換相関項計算法により解析的に、かつ SCF 繰り返し計算中はこれも行列演算のみで交換相関項を求めることが可能になった。グリッドフリー法のシミュレーション精度を dual-basis 法を用いることで改善している。このように第 3 世代密度汎関数計算法は、SCF 繰り返し計算中は行列演算のみで電子状態を求めることができる。分散メモリ型並列計算機を用いて大規模分子の電子状態計算を行う場合、大規模行列を各計算ノードで分散保持する必要がある。分散保持された大規模行列演算には ScaLAPACK のような高速数値演算ライブラリが利用できるため、第 3 世代密度汎関数計算法は分散メモリ型並列計算機を用いて大規模分子電子状態計算に適している。FOCUS スパコンはこの分散メモリ型並列計算機に相当する。