

[報 告]

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第3回シンポジウム 平成22年度先端的大規模計算利用サービス成果報告会 報告

江川隆輔

スーパーコンピューティング研究部

平成23年7月14日、15日の両日、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第3回シンポジウム、および平成22年度先端的大規模計算利用サービス成果報告会が、東京品川The Grand Hallにおいて開催されました。

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究は、東北大学、北海道大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ8つの共同利用の施設を構成拠点とする「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」が、超大規模数値計算系応用分野、超大規模データ処理系応用分野、超大容量ネットワーク技術分野、およびこれらの技術分野を統合した大規模情報システム関連研究分野、更には分野間に亘る複合分野の研究者らと取り組む学際的な共同利用・共同研究です。この取り組みにより我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展が大いに期待されております。平成22年度は37件、平成23年度には39件の課題が学際大規模情報基盤共同利用・共同研究として採択されており、そのうち当センターとの共同研究課題は、平成22年度4件、平成23年度は6件ありました。

また、先端的大規模計算利用サービスは、平成19年度から文部科学省の委託事業として開始され、各大学が開発した応用ソフトウェア(シミュレーションソフトウェア等)と各大学が有する国内有数のスーパーコンピュータをそれらの利用支援サービスと一体化して民間企業に提供するものです。当センターでも、本サービスを通して多数の企業と共同研究に取り組んできました。今回の成果報告会では、当センターのスーパーコンピュータを用いた、三菱航空機株式会社による国内初の小型ジェット旅客機設計に関する成果発表が行われました。本サービスは、平成23年度をもって文部科学省の先端的研究施設共用促進事業から、各大学の自主事業に移行しました。当センターでも自主事業として、民間企業の方々が当センターの計算資源を利用できる制度を整えております。興味のある方はセンターのホームページをご覧ください。

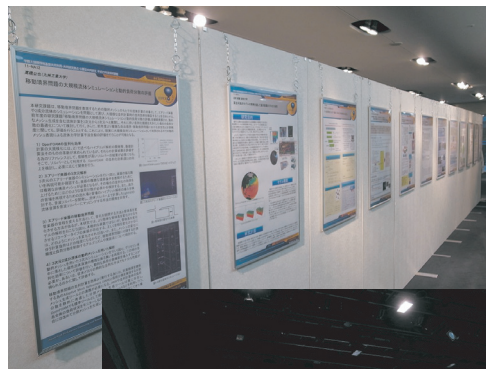
本シンポジウム、成果報告会では、各研究課題の成果発表、ポスター発表を通して積極的な議論が交わされたばかりでなく、拠点および拠点を構成する各センターにおけるそれぞれの共同研究への取り組みを確認することができました。本報告では、今年度の東北大学との共同研究として採択された課題のうち以下に示す課題と、現在民間利用制度を通して当センターを利用している課題のポスターを転載致します。来年度も引き続き、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の研究公募行う予定であります。ご興味のあるかたは奮ってご応募ください。

【平成23年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠における当センターとの共同研究課題】

- ・ 炭化水素系燃料の超音速乱流燃焼の数値シミュレーション
研究代表者 滝田謙一 (東北大学)
- ・ 次世代ペタスケールCFD のアルゴリズム研究
研究代表者 中橋和博 (東北大学)
- ・ マルチパラメータサーベイ型シミュレーションを支えるシステム化技術に関する研究
研究代表者 奥田洋司 (東京大学)
- ・ 計測融合オペレーション実現のための大規模計算機空気冷却風速場の実時間解析
研究代表者 松岡浩(理化学研究所)
- ・ 学術グリッド基盤の構築・運用技術に関する研究
研究代表者 合田憲人(国立情報学研究所)

【先端的大規模計算利用サービス 東北大学利用課題】

- ・ 民間航空機空力弾性設計へのCFD解析技術の適用 三菱航空機株式会社



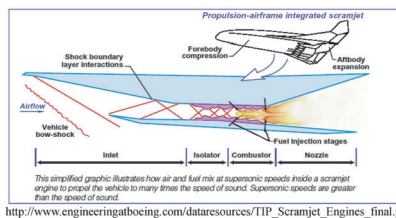
炭化水素系燃料の超音速乱流燃焼の数値シミュレーション



● 研究の背景と目的

スクラムジェットエンジン(超音速燃焼ラムジェットエンジン)

極超音速飛行時に大気を吸い込み、超音速のまま燃焼室内で噴射した燃料と混合・燃焼させることで推力を発生する。大気を酸化剤として用いるため、従来のロケットエンジンに比べてはるかに高い輸送効率で大量のペイロードを運ぶことができる。スクラムジェットエンジンの最大の技術課題は超音速流中での迅速な燃料の混合、着火・燃焼技術の確立であるが、このためには超音速乱流燃焼メカニズムを把握することが重要となる。しかしながら、超音速燃焼実験設備は大規模にならざるを得ず、実験回数や取得データ数が限られるため、実験データのみから超音速燃焼メカニズムの把握は困難である。



各燃料の詳細反応機構

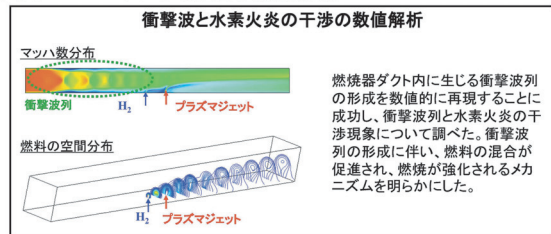
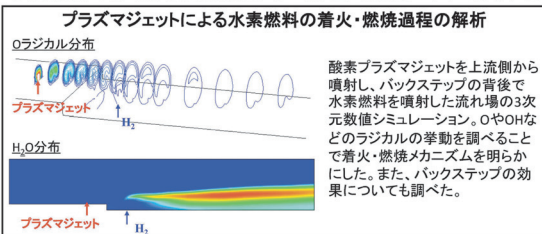
- 水素 (H_2): 化学種数10程度、素反応数30程度
- メタン (CH_4): 化学種数20以上、素反応数100以上
- エチレン (C_2H_4): 化学種数30以上、素反応数200以上

以上の理由で、スクラムジェットエンジン開発には数値シミュレーションが不可欠である。スクラムジェット燃焼器の数値シミュレーションは乱流や衝撃波を精度良く捉えることに加えて、着火・燃焼を解析するために多数の化学種の素反応機構や輸送過程を考慮する必要がある。特に、実用的な燃料である炭化水素系燃料の超音速燃焼を解析できるコードの開発が強く望まれる。しかしながら、炭化水素系燃料の詳細反応機構の解析には膨大な化学種および素反応数を考慮しなければならないため、未だ実現していない。

本研究の目的は、計算コードの並列化や化学反応計算の最適化により、膨大な計算量を必要とする炭化水素系燃料の超音速乱流燃焼の数値シミュレーションを実現し、その詳細な着火・燃焼メカニズムを解明することである。

● これまでの研究例

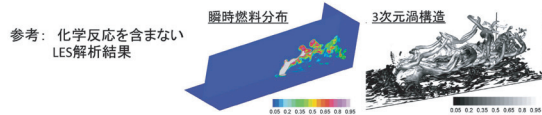
水素燃料の詳細反応機構および2方程式乱流モデルを導入した3次元RANSコードによる超音速燃焼解析

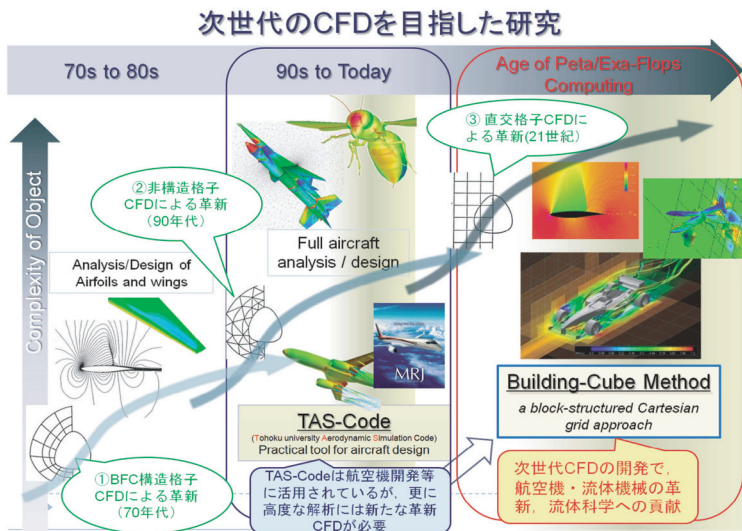


● 研究計画

- ① **水素燃焼反応コードのチューニングによる最適化**
既存の水素燃焼反応(9化学種33素反応)を含むコードを並列化することで高速化し、また、反応計算アルゴリズムを最適化する。
- ② **炭化水素系燃料へのコードの拡張**
まずは、炭化水素系燃料の中で最も分子量の小さいメタンの詳細反応機構(18化学種101素反応)をコードに組み込む。続いて、スクラムジェットエンジンの燃料として実用的なエチレンの反応機構の導入を試みる。

- ③ **窒素の反応の導入**
窒素の反応も導入することで、窒素の解離やNOxの影響まで考慮したより正確な現象の再現を可能にする。
- ④ **LES法の導入**
LES法の導入により乱流の大規模構造等の非定常解析を可能にし、より深い現象の解明を行う。



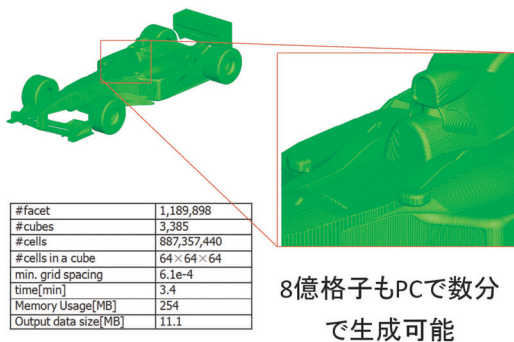


Building-Cube Method
(直交格子積み上げ法)

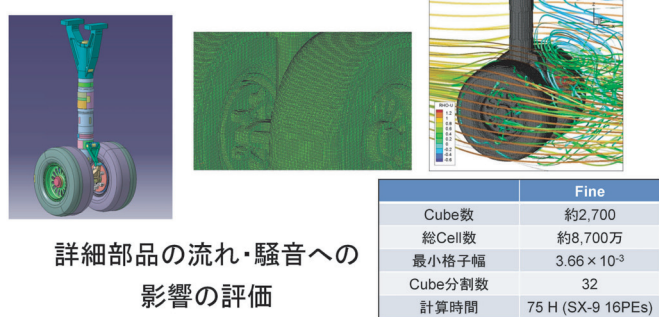
特長

- ◆ 等間隔直交格子法を基礎とした手法
- ◆ 高速・ロバストなメッシュ作成
- ◆ 多数の小領域“Cube”による領域分割
- ◆ 全てのCubeで等価な計算負荷
- ◆ 高解像度解法を容易に構築可能
- ◆ 簡易なデータ構造とアルゴリズム
- ◆ 大規模データの圧縮

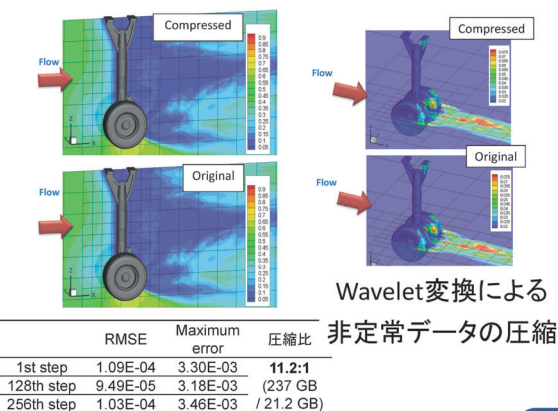
■ 大規模格子生成



■ 大規模流体・音響解析



■ 大規模データ圧縮



平成23年度開発目標

- 流体ソルバーの高速化・実用化に関する研究開発を引き続き行うと共に、大規模スカラー並列計算機を用いて流体ソルバーのペタスケール化を図る
- ペタフロップス級流体計算を可能とする流体ソルバーのアルゴリズム(東北・工, 農工)
 - データ圧縮法を用いた転送時間の短縮に関する研究と大規模データのリモート可視化(東北・工, 農工)
 - 大容量のオンチップキャッシュを考慮したベクトル化技術(東北・サイバー)
 - ペタスケール向けの超並列化技術(東北・サイバー, 名古屋・情基)
 - 広域ベクトル連携計算基盤用ソフトウェア, データ共有技術(東北・サイバー, 大阪・メディア)

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究 平成23年度採択課題

3rd Symposium

Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

11-MD04

研究代表者氏名(所属) 奥田洋司(東京大学人工物工学研究センター)

研究課題名: マルチパラメータサーベイ型シミュレーションを支えるシステム化技術に関する研究



マルチパラメータサーベイ型シミュレーションの特徴

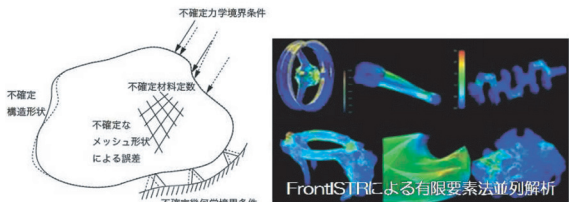
- 不確実性の考慮、多目的設計、計算結果の特性分類等の大規模分散シミュレーション
- メッシュ生成、計算の実行計画、統計処理、可視化処理等の多段階かつ試行錯誤的な手続き
- 多様なソフトウェアや計算機環境の混在

本研究の目的

マルチパラメータサーベイ型のシミュレーションにおける数値計算、データ処理、情報システム関連処理を支援する統合クラウドシステムを開発し、研究者の負担を軽減すると共に、ヒューマンエラー低減化と研究開発の品質、継承性の向上に資する。

内容

- 大学等で開発、公開されているアプリおよび計算センターで導入されている市販アプリを中心に、プリ・ポスト処理を含めた統合的なWebポータル化、SaaS化を行う。
- 複数拠点にまたがるネットワーク上においてシステムを構築する。
- これらアプリの環境設定や利用方法、利用手順を効率的に支援できる『マルチパラメータサーベイ型シミュレーション用統合クラウドシステム』を構築する。



振動確率有限要素法の並列分散環境への適用
 - 物性値、形状等の不確実性を確率変数として扱う
 - 確率変数 (N個) を期待値まわりでテイラー展開
 - N個の方程式系を解く

図1 マルチパラメータサーベイ型シミュレーションの例：不確実性を考慮した構造設計、使用アプリケーション FrontSTR

拠点・運用アプリケーションの種別(2011年度)

- 北大 : NASTRAN, ANSYS, FLUENT
- 東北大 : 航空、伝熱沸騰
- 東大 : FrontSTR(構造)、FaSTAR(流体)
- 東工大 : 他大学の各種ソフトウェア
- 名大 : FaSTAR(流体)、LS-DYNA, StarCCM
- 京都 : KVS(可視化)、伝熱沸騰
- 阪大 : FrontFlowBlue (流体)
- 九大 : 回転系流体

具体的な計算実施内は、「不確実性を考慮した構造設計」、「実風洞装置と同レベルのデータ生産性、品質を有する数値風洞」、「沸騰などの発生型気液混合流の動態予測」、「実生体の複雑な形状をそのまま取り入れた構造、流体等の物理計算」など

研究計画

- 2011年度
- 1) 東北大、東工大、九大を加え、8拠点に共同研究者の各種アプリケーションを拡大・整備する。
 - 2) RCMシステムソフトウェア(*)を用いて、8大学のアプリケーションを統合的にSaaS化する。
 - 3) 実利用を進めつつ、学際領域=異分野領域間においてアプリケーションの相互利用および活発な意見交換を行う場を設け、学際研究の促進を図る。
 - 4) テスト利用者による課題の抽出、客観的な評価を行う。
- (*)RCM : R&D Chain Management System Software

- 2012年度以降
- システム連携機能の強化
 最適化エンジンやデータマイニング処理の連携実績およびそれら機能のインテリジェント化を進める。
- 個別研究の推進
 各アプリに基づく研究テーマの推進に必要な機能追加、支援を実施し、実用段階でのハードルを技術面でクリアする。

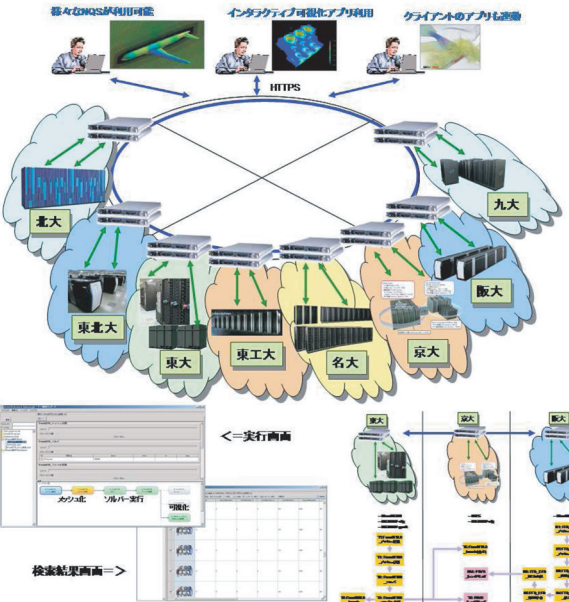


図2 『マルチパラメータサーベイ型シミュレーション用統合クラウドシステム』概念図

期待される効果

- 大学や研究機関で開発、公開されているアプリの普及が飛躍的に向上する。また、実験研究、広くは民間における研究開発全般にも大きく貢献する。
- 解析結果が自動的にデータベース化される機構を開発することで、結果の再参照を通じた研究開発の信頼性と継承性の向上が期待される。

JHPCN

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第3回シンポジウム

Japan High Performance Computing and Networking plus Large-scale Data Analyzing and Information Systems

2011年7月14日, 15日

THE GRAND HALL (品川)

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募型共同研究 平成23年度採択課題

3rd Symposium

11-MD05

Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

松岡 浩(理化学研究所計算科学研究機構)

計測融合オペレーション実現のための 大規模計算機空気冷却風速場の実時間解析



——計測融合オペレーションによる「計算機と冷却空調電源系にやさしい過渡変化の創出」をめざして——

メンバー:

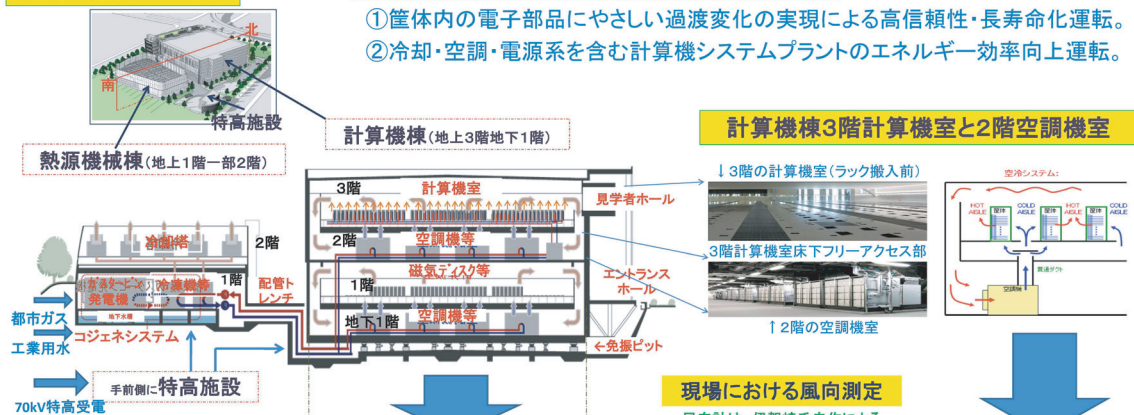
松岡 浩(理研)、横川 三津夫(理研)、峯尾 真一(理研)、瀧塚 博之(理研)、伊賀崎 誠(理研)、渡辺 正(原子力機構)、板倉 憲一(海洋機構)、
福田 正大(計算科学振興財団)、菊池 範子(カストシステム/東北大)、
小林 広明(東北大)、江川 隆輔(東北大)、竹村 治雄(阪大)、菊池 誠(阪大)、東田 学(阪大)、青柳 睦(九大)、高見 利也(九大)、小林 泰三(九大)

研究目的及び具体的な達成目標

格子ガス法超並列計算手法により、大規模計算機空気冷却風速場の実時間シミュレーションの実現性を示す。

- ①“京コンピュータ”施設を対象にNS方程式手法との比較計算を行い、定常状態シミュレーションの妥当性を確認。
- ②異なる定常状態間の過渡変化を実時間計算できる計算機能力が容易に確保可能な規模であることを試算。
- ③計算機センターの異常時対応オペレーションのため上記計算機能力の広域連携環境による確保法を検討。

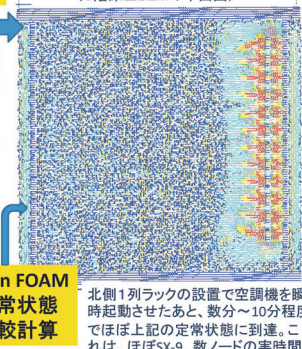
施設の南北断面図



現場における風速・温度測定



格子ガス法3次元計算 (3階床上1.2mの平面図)

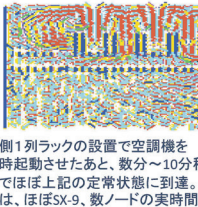


現場における風向測定

風向計は、伊賀崎氏自作による

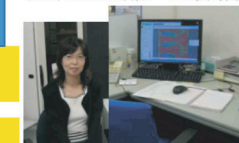


格子ガス法3次元計算 (ラック位置での2,3階立面図)



格子ガス法過渡変化シミュレーション

スパコンの広域連携環境によるシミュレーション実験(拠点との協力)



“計測融合オペレーション”の必要性

ペタフロップスを超える超並列高速計算機システムでは、通常数10メガワット以上の巨大な発熱を伴うばかりでなく、その発熱分布は広範囲に広がり、計算機システムのジョブスケジューラによる計算ノードの割当て・解除、各種プログラムのエラー発生、計算機ハードウェアの故障のほか、これらに伴う筐体ファン自動オンオフや、故障の修理保守後の起動、さらには、計算機システムの冷却・空調・電源系におけるトラブル発生で予測できない急速な形状変化をする。他方、従来型の冷却制御は、液冷システム、空冷システムともに、計算機冷却場の入口温度と入口流量を確保し、各筐体では、温度や湿度がある制限値を超えた場合に電源オフにすることで計算ボード等の電子装置の保護を行っている。今後の大規模計算機システムにおいては、上述のとおり、異常な急速過渡変化の過程が多様化するため、従来の制御方式では、定格温度や定格湿度から大きなオーバーシュートやアンダーシュートが生じる可能性が高い。これらは、制限値に達すれば、稼働率の低下、達しない場合でも、電子部品の信頼性や寿命の低下を招く。このため、各種センサー情報とシミュレーションから過渡変化の全体像を的確に把握し、冷却システムの制御を適応的に実行する“計測融合オペレーション”を可能にする技術の構築がきわめて重要!

JHPCN

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第3回シンポジウム

Japan High Performance Computing and Networking plus Large-scale Data Analyzing and Information Systems

2011年7月14日, 15日

THE GRAND HALL (品川)

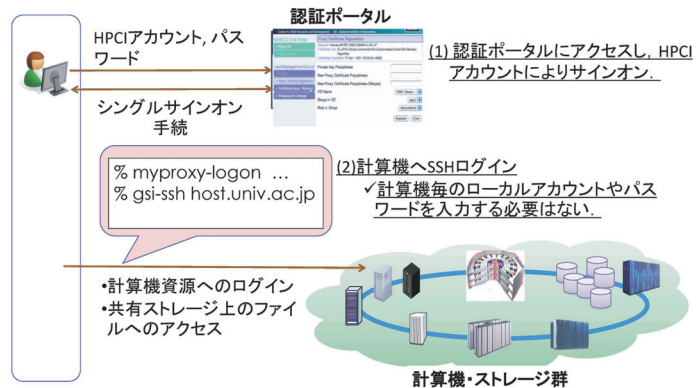


■目的

ネットワーク上に分散した様々な研究データを融合して処理することにより、未知の問題解決や科学的発見を行う新たな研究手法(e-サイエンス)が注目されている。e-サイエンスを実現するためには、ネットワーク上に分散した様々なデータを連携し、かつ高性能計算機群を用いてこれらのデータを高速に処理するためのグリッド基盤が必要となる。本研究では、我が国におけるe-サイエンスを活用した研究を促進することを旨とし、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点に設置された計算機、およびこれらを接続する学術情報ネットワークであるSINET4から構成される実用的なグリッド基盤を構築・運用するための技術に関する研究を行う。平成23年度は特に認証基盤に焦点をあて、平成22年度までに行った研究の成果を活用し、本格的なグリッド認証基盤運用に向けた実証実験を行う。また、本研究の成果を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)の詳細仕様策定に活用する。

■目標とする認証基盤

- ✓ Grid Security Infrastructure (GSI)による計算機群へのシングルサインオンの実現。(ユーザは、認証ポータルにアクセスしてサインオンするだけで、計算機群へSSHログインできる。)
- ✓ Shibboleth認証連携技術による情報基盤センター認証連携の実現。(ユーザは、どこか一つの情報基盤センターにアカウントを持てばよい。)

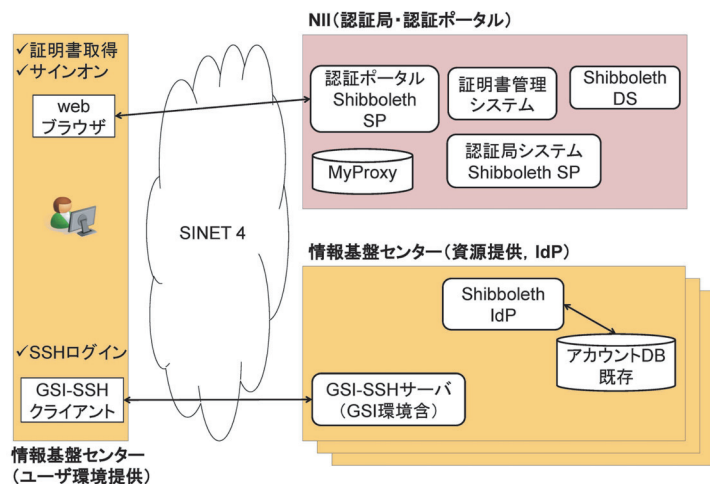


■計画

- ✓ NIIおよび9大学情報基盤センターからなる認証基盤テストベッド構築。
- ✓ テストベッドの運用性およびスケラビリティに関する検証(HPCIを想定した実証実験)

■参加機関

北海道大学, 東北大学, 筑波大学, 東京大学, 東京工業大学, 名古屋大学, 京都大学, 大阪大学, 九州大学, 国立情報学研究所



三菱航空機株式会社

先端的大規模計算利用サービス

民間航空機空力弾性設計へのCFD解析技術の適用

成果

- 三菱リージョナルジェット(MRJ)の設計に高精度CFDソルバーを利用した航空機全機形態の大規模フラッタ解析を適用。(東北大学SX-9を利用)
- 飛行安全上重要となる遷音速フラッタ特性を高い精度で解析予測することが可能となり、より踏み込んだ軽量化設計を実現。

□ フラッタとは？

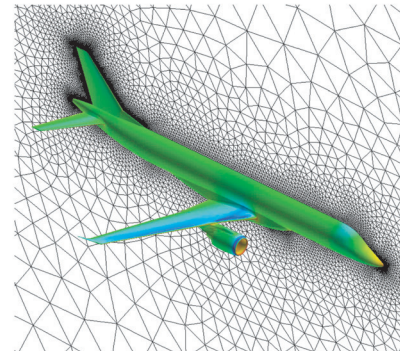
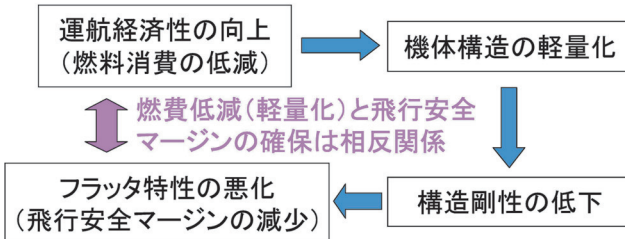
- 飛行中の柔軟構造体に作用する3つの力(空気力、慣性力、弾性復元力)が連成して起こる自励振動現象。
- フラッタ発生による航空機事故は過去多数報告されており、15%マージンを含めた運用領域内でフラッタ振動が起きないことを解析・風洞試験・飛行試験で証明する必要あり。



三菱リージョナルジェット(MRJ)

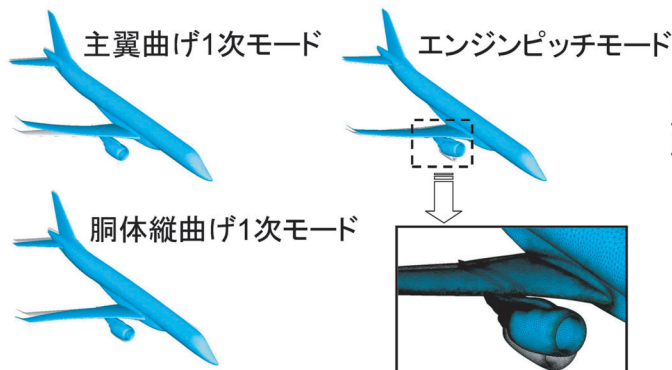
<http://www.mrj-japan.com/j/>

□ 高精度フラッタ解析の重要性

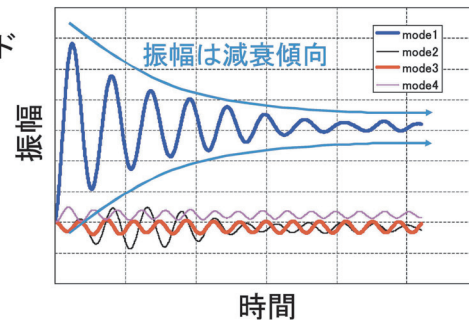


解析格子と定常圧力分布

「飛行安全の確保」と「軽量化設計」の両立には、精度の高いフラッタ解析技術が求められる。



全機形態 主要振動モード形状



飛行中の振動変位履歴

全機形態 CFDフラッタ解析結果