［報 告］

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第6回シンポジウム報告

江川隆輔
スーパーコンピューティング研究部

この時期に恒例の行事となりました学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第6回シンポジウムが，平成26年7月10日，11日の両日，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から25年度にかけて，164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，22件ありました．平成26年度は34件の採択課題のうち，6件が当センターとの共同研究として採択されております．

本シンポジウムでは，昨年度採択された44件に及ぶ研究課題の成果発表，および今年度採択された34件の研究課題の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おります（申請受付開始：平成26年10月1日（水），申請受付締切：平成26年11月6日（木）17:00（JST），押印済申請書の郵送期限　11月13日（木））．ご興味のあるかたは奮ってご応募ください．また，応募に際して不明な点などありますす場合は，お気軽に当センターまでお問い合わせください．

【平成26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】

大規模データ系のVR可視化解析を効率化する多階層精度圧縮数値記録(JHPCN-DF)の実用化研究
研究代表者　萩田克美（防衛大学校）

スパコンとインタークラウドの連携による大規模分散設計探査フレームワークの構築

研究代表者　棟朝雅晴（北海道大学）

次世代ペタスケールCFDのアルゴリズム研究

研究代表者　佐々木大輔（金沢工業大学）

高分子流体計算の並列効率向上と3D可視化

研究代表者　村島隆浩（東北大学）

機械工学分野におけるシミュレーション科学の新展開

研究代表者　滝沢寛之（東北大学）

直接数値シミュレーションの早期実用化を目指した整数型格子ボルツマン法による非熱流体過渡変化解析

研究代表者　渡辺正（福井大学）

図１　会場の様子

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26年度採択課題
jh140004-NA02

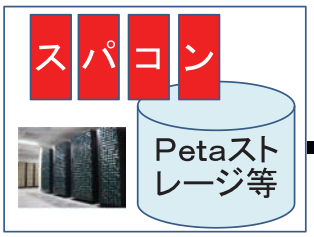
6th Symposium
Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

萩田　克美(防衛大学校)

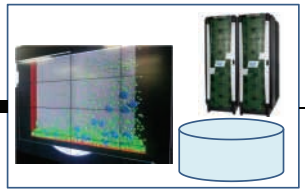
大規模データ系のVR可視化解析を効率化する多階層精度圧縮数値記録(JHPCN-DF)の実用化研究

大規模可視化でのデータ問題

データサイズを小さくして、VR可視化を可能にしたい。



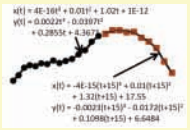
手元に近いほど、回線も細く、ディスクも小さい。



TOKI圧縮（不可逆圧縮）

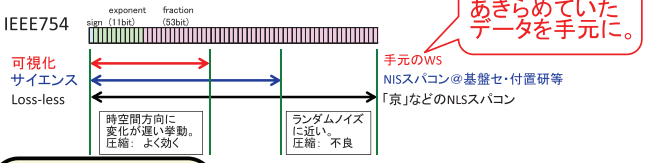
「Time Order, Kinetic, and Irreversible」

滑らかな粒子軌道を多項式で表現する。



多階層精度圧縮数値記録（JHPCN-DF）

Jointed Hierarchical Precision Compression Number - Data Format
HDF-5での階層分割記録

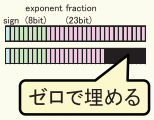


- HDF5における類似の方法
  - N-bit Filterを利用する。
    特定ビット以外を削る。
  - Offset-Scale Filterを利用する。
    Relative error < 5*(D-scale_factor+1))
    2べきでのscaleは、実装されていない。
- JHPCN-DFの特徴（優位として狙う点）
  - 小数点以下の規定値で分ける。**精度復元**できる。

実装例

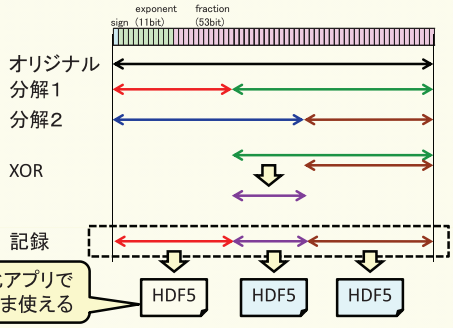
```
union fi32{
float f;
int i32;
};
 union fi32 fival;
 double logallo=log(allowerr)/log(2.0);
```

```
fival.f=fval0;
fival1.f=fval1;
 ixval=(fival1.i32 ^ fival.i32);
```



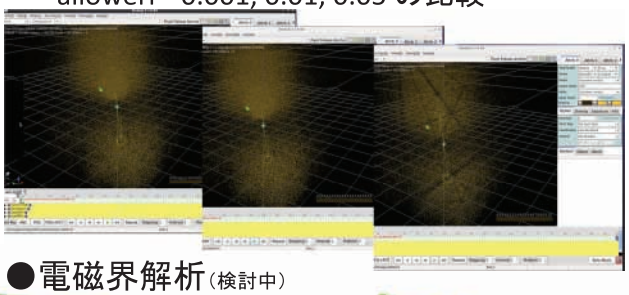

```
fval=frexp(fval0,&ival);
ival2=(int)(-logallo+ival-1);
sval=(int)(23-ival2+1);
if(sval>23) sval=23;
do {
sval--;
fival.f=fval0;
fival.i32=(fival.i32 >> sval);
fival.i32=(fival.i32 << sval);
fval1=fival.f;
} while ((fval1-fval0)*(fval1-fval0)>allowerr*allowerr);
```

- プラズマPIC（単精度記録）
  - 全体　318.5MB
  - 上位　113.7MB / 37.9MB
  - 下位　233.5MB / 268.2MB
- ※allowerr=0.001 / 0.01
- ※倍精度の全体は2.1倍

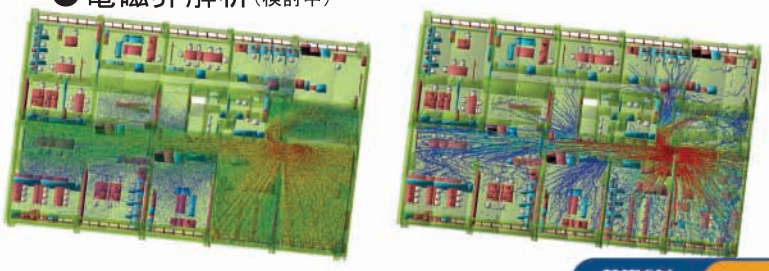


可視化事例での実証検証

●プラズマPICシミュレーション
allowerr =0.001, 0.01, 0.05 の比較



●電磁界解析（検討中）



●有限要素法計算　112万個の倍精度実数(8byte)

①倍精度（gzip圧縮）　：　8.3MB
②Allowerr=1.0e-6　：　3.3MB　※評価に十分な精度
③Allowerr=1.0e-3　：　1.3MB　※可視化に十分な精度

今後と展望

- ツールや利用提案文書の整備を進める。
  - HDFgroupへの宣伝と連携
- より多くの事例について、実用化検証する。
  - 流体系のデータ　（東北大江川先生）
  - 一億粒子の紛体計算の時系列データ　（東工大青木先生）
  - 気候／気象系のデータ　（RIST　井上主任研究員）
  - フェーズドアレイ気象レーダのデータ　（阪大　下條先生
    NICT　村田先生）

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26年度採択課題
14-IS02
6th Symposium
Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures
JHPCN

棟朝雅晴（北海道大学）

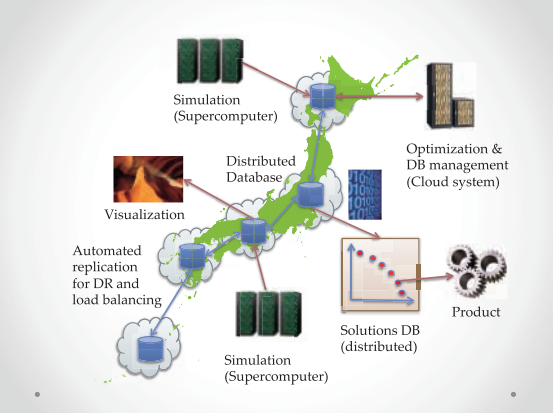
スパコンとインタークラウドの連携による大規模分散設計探査フレームワークの構築

スパコンとクラウドシステムを連携させた、最適設計のフレームワーク、システムを構築

- シミュレーションを各拠点のスパコンで実行
- 全国規模で実現されたスケーラブルな分散データベース上で入出力パラメータを管理
- スケーラブルなオブジェクトストレージ上でシミュレーションにおいて生成される付随的な情報を管理
- 多目的設計探査を実現する多点探索による最適化エンジンをクラウド上で並列分散実行
- 可視化システムとも連携し、設計者との密なインタラクションを実現

研究の背景および方針

- スパコンとクラウドからなる「インタークラウド」を最大限活用する
- 大規模なパラメータサーベイなど「最適設計」を支援する環境を整備
- 規模の経済やネットワークを生かす「スケーラブル」なシステム整備
- 現実の設計問題を解決する「多目的設計探査」システムの開発
- ユーザインターフェイスや設計者間の情報共有など人的側面も考慮

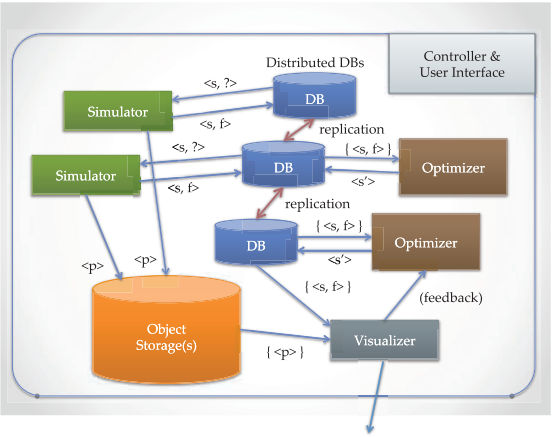


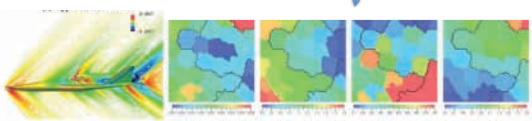
多目的設計探査

- 航空宇宙関連分野での大規模かつ複雑な設計問題を解決
  → 多目的最適化問題：$f^* = \max_s \text{or} \min_s f(s)$：パレート解の探索、解析
- データマイニングや機械学習の活用
- パレート最適解などの情報可視化

システム設計：構成要素

1) シミュレータ・・・入力パラメータ列 <s> → 評価値 <f>、付加情報 <p>
2) 最適化エンジン・・・過去の探索履歴 {<s>} → 次の探索候補 <s'>
3) 可視化システム・・・解情報、付加情報の可視化
4) a) 解情報データベース・・・パラメータ列、評価値の保存
   b) 付加情報ストレージ・・・シミュレーション付加情報の保存
5) 管理制御システム・・・全体の制御およびユーザインターフェイス





Chiba, et. el. : "Design-Informatics Approach Applicable to Real-World Problem", Journal of Aircraft (2010)

システム実装の概要

北海道大学データサイエンス統合クラウドストレージを中心に構築
・L+サーバ x 1台 (10 core, 1TB) : CloudStackによる制御（仮想マシン）
　2) 最適化エンジン： 多目的進化計算を並列実装
　4-a) 解情報データベース：Apache Cassandraを複数ノードで実行
　5) 管理制御システム：ポータルシステム＋全体制御
・Amazon S3互換ストレージ (1TB)
　4-b) 付加情報ストレージ：オブジェクトストレージで直接管理、制御システムと連携
・大阪大学可視化システム
　3) 可視化システム：解情報データベース、付加情報ストレージと連携した可視化実行
・2Lサーバ x 1台 (20 core, 1TB) : 物理サーバ + 各拠点のスーパーコンピュータ（北大等）
　1) シミュレータ実行環境：管理制御システムと連携し、入力パラメータ列から評価値等を出力
システム制御：WebサービスAPI（REST）による制御 → API設計および制御処理の詳細化

研究参加大学
・北海道大学（統括、クラウド、分散DB）
・北海道科学大学（シミュレーション、最適化）
・東北大学（シミュレーション、可視化）
・お茶の水女子大学（可視化）
・北見工業大学（クラウド、分散DB）
・室蘭工業大学（最適化）
・首都大学東京（シミュレーション）
利用拠点：
北海道大学、東北大学、大阪大学、九州大学

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26年度採択課題
jh140020-NA11

佐々木大輔(金沢工業大学)

次世代ペタスケールCFDのアルゴリズム研究

6th Symposium
Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures
JHPCN

研究背景及び目的

- 大規模並列計算機の性能をフルに活用できる次世代CFD の実用化を目指す.
- 航空機をはじめとする流体機械の高性能化と環境適合化が実現できる革新的な設計を可能にする.

90年代～現在 → 超並列計算機時代

非構造格子法
（市販ソルバー）
・航空機全機形状の解析・設計

Building-Cube法によるブレイクスルー

TASによる解析（東北大開発）

直交格子法による革新
・実機形状の詳細解析
・航空機の革新設計

今年度の研究及び研究体制

数値流体力学の研究グループ（金沢工大，東北大・工，東海大，JAXA，理研）及び計算機科学の研究グループ（東北大・サイバー，名大・情報基盤）による共同研究・開発体制

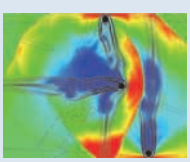
- ペタスケール向けの超並列化技術開発
- ペタフロップス級高解像度流体計算のアルゴリズム開発
- 多分野連成や大規模流体解析などの応用工学問題への適用
- 可視化システムの連携技術の構築

計算機: 東北大・名古屋大・九州大学

大規模並列計算の実用化に向けた技術開発

- 音響解析ソルバーのMPI化の実施（今年度に検証・最適化）
- データに不整合のあるCADを用いた自動車空力解析
- 多数移動物体解析用の圧縮性大規模LESの開発

自動車周りの流れ場例（協力：スズキ（株））
（Onishi, K. et al., AIAA Paper 2013-2713）

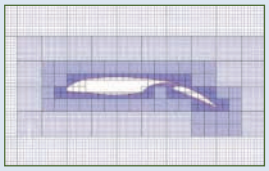


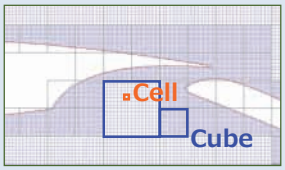
超音速ですれ違う3円柱周りの瞬時密度場
（Takahashi S. et al., J. Appl. Math., 2014）

計算手法

Building-Cube法 (ブロック型直交格子法)

- 等間隔直交格子法に基づく手法
- 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
- 高速ロバストな格子生成
- 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



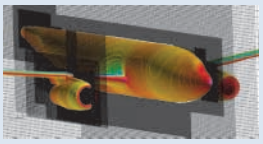


計算領域はCubeに分割され，各Cube内に同数のCellが生成される

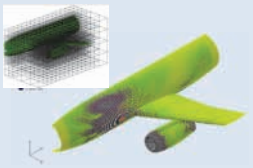
F1の格子（8億点格子）
（最小格子幅は実車サイズで約3mm）

大規模並列解析による革新設計

- 流体解析と音響解析のカップリングによる大規模空力騒音解析の実現
（流体音響連成解析）



航空機全機モデルの流体解析



航空機全機モデルの
ファン騒音の音響伝播解析

従来と形状の異なる低騒音航空機の設計

Over-The-Wing-mounted 形態

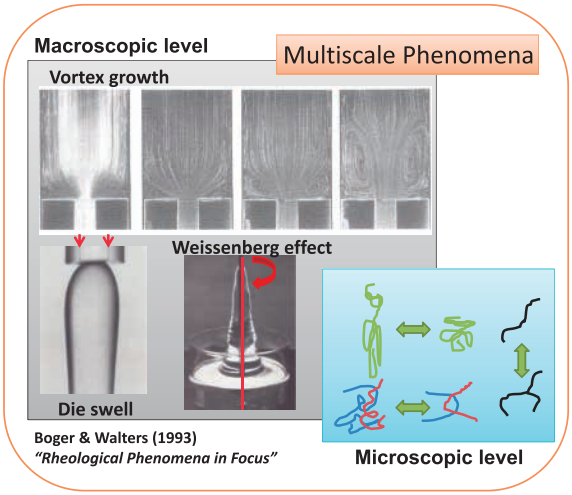
Hybrid Wing Body形態

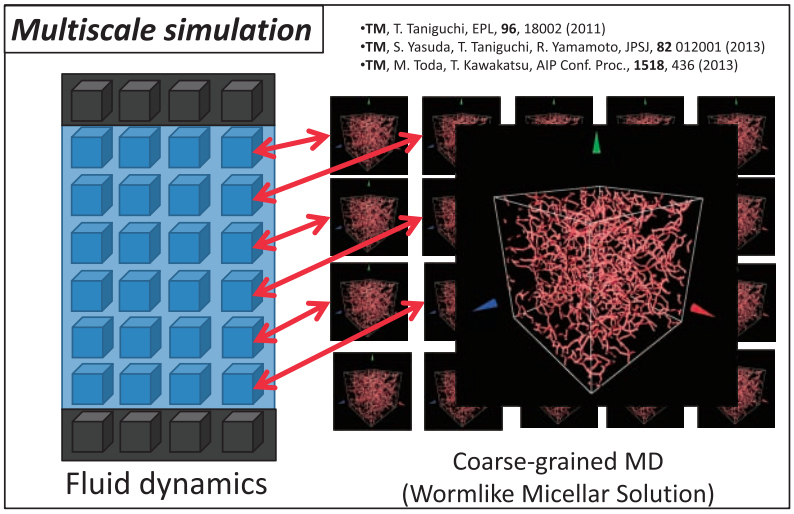
学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募型共同研究 平成26年度採択課題
14-NA22
6th Symposium
Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures
JHPCN

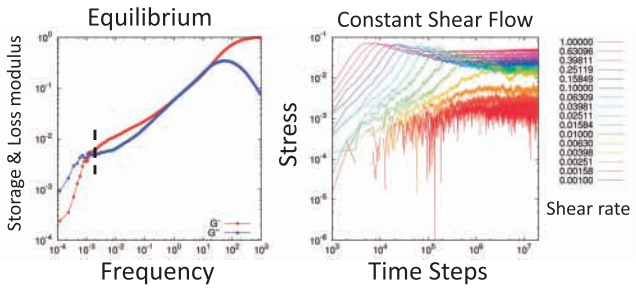
村島　隆浩（東北大学大学院理学研究科）

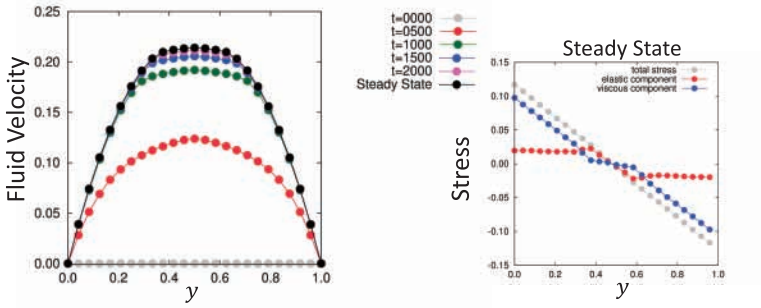
高分子流体計算の並列効率向上と3D可視化

課題参加メンバー：江川隆輔（東北大）、萩田克美（防衛大）、戸田昌利（産総研）









Multiscale Simulation可視化の課題

分子スケールの可視化を行いたいが大規模なために
時系列データを保存し、解析することが困難

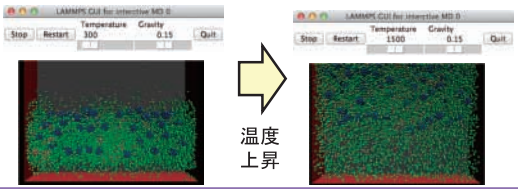
シミュレーション実行中のデータにアクセスし、
解析が行えれば必要なデータのみ取り出すことが可能

- Interactiveな命令実装による
双方向データアクセス
- タイルドディスプレイ表示による全体把握と
3D立体視による直観的な空間把握

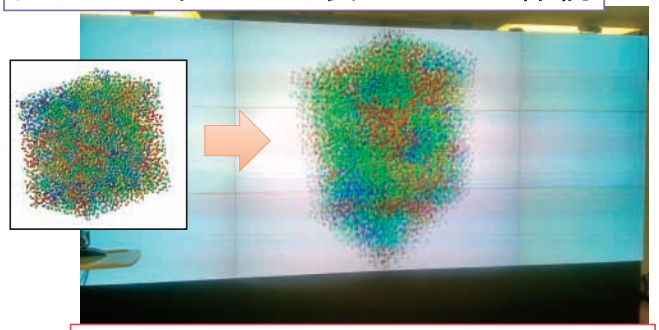
Interactive MD

LAMMPS, VMDの連携によるInteractive MDの事例

- 重力下の粒子（単一粒子とC60型の大きな粒子）の系
- GUIで、「温度」と「重力」を、interactiveに設定。



タイルドディスプレイ表示＆3D立体視



3D立体視@東北大学サイバーサイエンスセンター

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26年度採択課題
jh140038-NA21

滝沢寛之（東北大学大学院情報科学研究科）

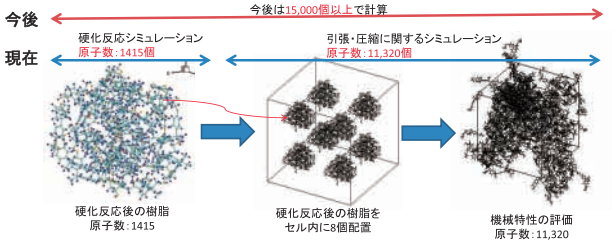
機械工学分野におけるシミュレーション科学の新展開

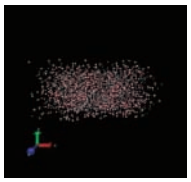
研究目的 機械工学分野では様々な数値シミュレーション技術が研究されているにもかかわらず、そのソフトウェア開発技術やスーパーコンピューター利用技術が共有されているとは言い難い。また、スーパーコンピューターの利用技術は近年ますます高度化しており、機械工学分野の研究者がスーパーコンピューターの演算能力を引き出すために要する労力は年々増大している。本研究の目的は、現在上記の理由からスーパーコンピューターの本格的な利用に至っていない**機械工学分野の先進的・萌芽的な数値シミュレーションを対象とし、スーパーコンピューターを有効利用した場合の性能向上とさらなる高度化・高性能化に必要な課題を明確にする**ことである。

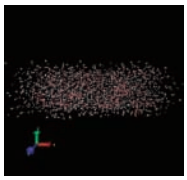
研究計画 平成25年度に得られた指針に基づいて、引き続き平成26年度には共同研究者らのプログラムの高速化を支援し、これまでは研究室レベルのパソコンの計算能力や容量の制約により実行困難であった規模のシミュレーションを実現することを目指す。また、平成26年度には東北大学サイバーサイエンスセンターのSX-9システムが新システムに更新される予定であることから、新システムが利用可能となり次第、上記プログラムの新システム向けに最適化も行う予定である。既存のシステムよりも大幅に高性能な新システムを活用することにより、より高度で高速なシミュレーションが可能となり、機械工学分野での優れた成果を期待できる。さらに、計算機工学の観点からも、新しいシステム向けの実践的かつ実用的な高速化手法を実アプリケーションに基づいて探ることが可能であり、その後の新システム活用のための有用な知見が得られることを大いに期待できる。

複合材料の破壊に関するマルチスケールシミュレーション

炭素繊維強化プラスチック(CFRP)は軽量かつ高強度という優れた機械特性を有することから航空宇宙機器に使用されている。特に航空宇宙分野に適用されるCFRPにおいてはマトリクス樹脂にエポキシ樹脂が用いられている。CFRPの機械特性にはマトリクス樹脂の機械特性が影響するため、最近では分子シミュレーションを用いたマトリクス樹脂の開発が注目されている。本研究では、分子シミュレーションを用いて硬化反応シミュレーションおよび引張シミュレーションを行うことにより、エポキシ樹脂の機械特性を調査する。分子シミュレーションは、大規模系（分子数が多い）であるほど高精度であるが、その反面一般的なパソコンでは計算時間がかかることが課題である。そこで、本研究ではスーパーコンピューターSX-9を用いて、大規模系で分子シミュレーションを行いエポキシ樹脂の機械特性を調査している。現在、オープンソースコードのLAMMPSに加えてオリジナルのエポキシ樹脂分子シミュレーションプログラムを開発中であり、主剤、硬化剤およびそれらの配合比が硬化特性に与える影響を分子シミュレーションにより調査している。




引張シミュレーション前


引張シミュレーション後

バイパス遷移過程の解明のための数値流体シミュレーション

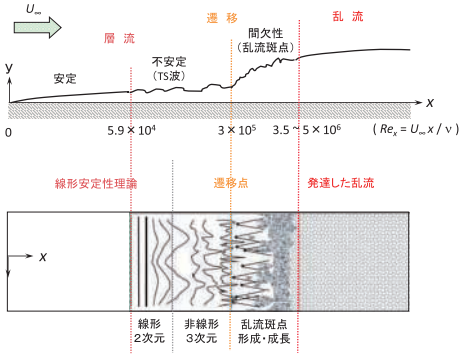
本研究の目的は、境界層遷移及び乱流素過程の動力学明らかにすることにある。乱流が示す強い混合・拡散能力や高い熱伝達性能といった特徴的な性質は、乱流中に存在する大小様々な渦の不規則で乱雑な運動によって、単位時間当たりの運動量や熱の輸送量が極めて高い状態に保たれているお蔭である。すなわち、乱流遷移を含む乱流現象を解明するためには、渦の動力学に対する深い理解が求められる。

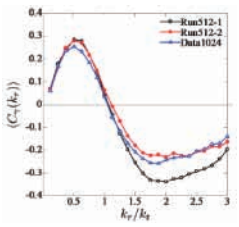
境界層遷移

バイパス遷移が起こる際に現れるストリーク構造とこれらが発達して形成される局所的な乱流領域（乱流斑点）の関係に着目し、人為的に発生させた低速のストリークに対して壁面から噴流を吹くことで流れ場がどのように変化するのかについて調べ、乱流斑点が生成しやすい"外部刺激"の条件について探っている。

乱流素過程

スーパーコンピューターを利用して大規模乱流の直接数値計算（DNS）データの解析を進めた。乱流の統計理論は、低波数のエネルギー保有領域と高波数のエネルギー散逸領域の影響が無視できる慣性小領域についてのみ成立する。このような乱流の普遍的な統計量を議論するためには少なくとも1,0243個以上の格子解像度が必要となり、パソコンレベルではもはや扱いきれないため、スーパーコンピューターの有効活用が求められている。





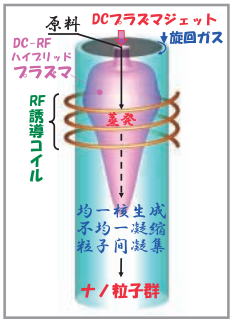
渦のスケールと伸長速度

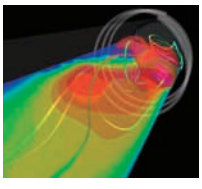
プラズマによるナノ粒子創製プロセス

右図に示すように、プラズマ流を用いたナノ粒子創製プロセスは、原料を瞬時に蒸発させることから始まる。原料の蒸気は移流によりプラズマ末端部へと運ばれ、そこで温度降下に伴う飽和蒸気圧の急激な減少により、過飽和状態に陥る。この状態は不安定であるため原料は気体の状態を保てず、分子は衝突しあい核を形成し（均一核生成）、その核に蒸気が凝縮する（不均一凝縮）ことで、ナノメートルスケールの粒子が成長する。これがナノ粒子生成の基本的な機構であるが、加えてナノ粒子同士の衝突・合体（粒子間凝集）も粒子成長過程に寄与する。プラズマ流は、以上のプロセスを一つのステップで実現できるため、効率的なナノ粒子量産システムとみなすことができる。

しかし、プラズマ流は強い発光を伴う高温の電磁熱流体であり、また原料の蒸発過程やナノ粒子の形成過程はわずか数ミリ秒の間に完了してしまうため、実測による定量評価は困難を極める。さらにプラズマプロセスにおけるナノ粒子群形成過程の詳細なメカニズムは依然として解明されていないため、求められる粒径や組成を持つナノ粒子を創製するためにはエンジニアの経験に頼らざるを得ず、加えて莫大な時間とコストを要することも問題となっている。

現在、プラズマトーチ内の３次元流動現象が明らかになりつつある。本研究によって得られた熱流動場の代表的な瞬間像を右に示す。今後は、非定常３次元的に流動するプラズマ場におけるナノ粒子群の集団成長および輸送現象の反応非平衡性も組み込んだ、より高度な数理モデルおよび計算コードを開発していく予定であり、さらなる高性能なスーパーコンピューターが必要である。

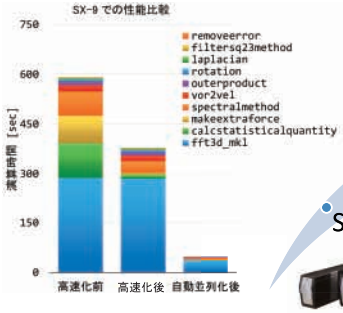




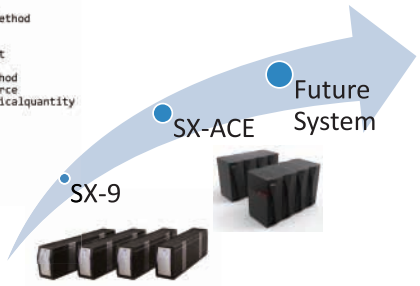
下流側から見た熱流動場

機械工学分野の萌芽的シミュレーションの高速化支援

スーパーコンピューター利用技術の高度化により、機械工学分野におけるシミュレーション科学のさらなる発展には、構成拠点に所属する計算機科学分野の研究グループ、研究者の協力が必要不可欠である。本研究では、先進的あるいは萌芽的な手法に基づく数値シミュレーションを対象としており、本研究を遂行することによってスーパーコンピューターの本格利用につながることを大いに期待できる。



乱流シミュレーションの高速化支援



新世代システムへの移植支援

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26年度採択課題
jh140047-NA27

渡辺　正（福井大学）

直接数値シミュレーションの早期実用化を目指した整数型格子ボルツマン法による非熱流体過渡変化解析

研究目的

“整数型格子ボルツマン法”による500億格子点規模の非熱流体過渡変化解析に関する性能評価を行い、工学設計等において実用的な直接数値シミュレーション（DNS）を早期に実現する観点から、本手法の優位性を示す。

研究の意義

整数型格子ボルツマン法は、「各格子点の物理状態を少ない情報量（ビット数）で記述でき、かつ、1格子点あたりの状態情報の更新（時間発展計算）を狭いビット幅（1ビット幅）で超並列に行うことができるため、高密度な格子点計算にむく」という特徴をもつ。また、大規模並列計算でも計算効率が低下しにくいセルオートマトン的な計算であるため、将来的には、工学設計において、他の手法より早期に実用的なDNSを実現できると期待できる。本研究の意義は、その方向に向けた第1歩として、一般的には注目度が高くない本手法の優位性を示すことにある。

研究計画

（研究グループ：渡辺正、松岡浩、大木慎一、板倉憲一、菊池範子＋東北大学拠点より、小林広明、江川隆輔）

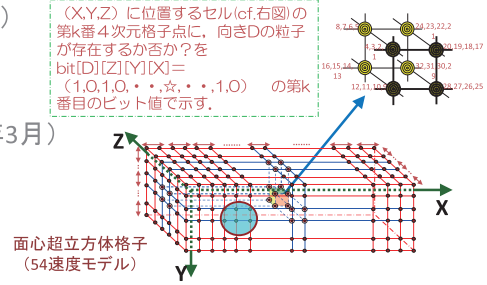
①東北大学SX-9による流体シミュレーションコードの改良（H26年4月～9月）
　計算効率の向上、高レイノルズ数事象のシミュレーション機能の付加

②新規導入SX-ACEによる過渡変化解析の性能評価（H26年10月～27年3月）
　数億格子点規模での現行コードによる試計算の実行
　⇒計算効率向上のための改良⇒500億格子点規模での性能評価

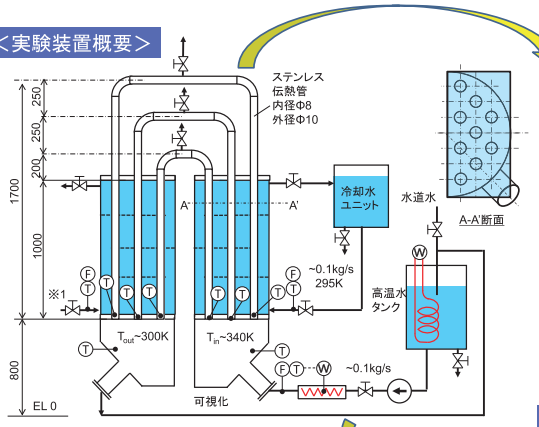
③原子力流動解析分野への応用計算に関する事例研究（H26年4月～27年3月）
　原子炉冷却系統の一部を模擬した実験装置をベースにして；
　⇒FLUENTとRELAP5による連成流動シミュレーションの実行
　⇒整数型格子ボルツマン法による流動シミュレーションとの比較

１格子点１ビット幅でセルごとに一括記述

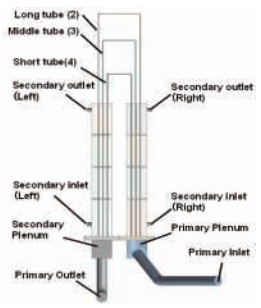
各格子点での仮想粒子の存在状態を記述する配列：
（X,Y,Z）に位置するセル(cf.右図)の第k番４次元格子点に，向きDの粒子が存在するか否か？をbit[D][Z][Y][X]=（1,0,1,0,・・,☆,・・,1,0）　の第k番目のビット値で示す．



＜実験装置概要＞



FLUENT14.0入力モデル



仮想粒子が格子点間を並進・逆進と衝突

時刻Tに格子点位置（X,Y,Z,R）に存在し速度（⊿X,⊿Y,⊿Z,⊿R）をもつ仮想粒子の動きは，

1．仮想粒子の並進・逆進

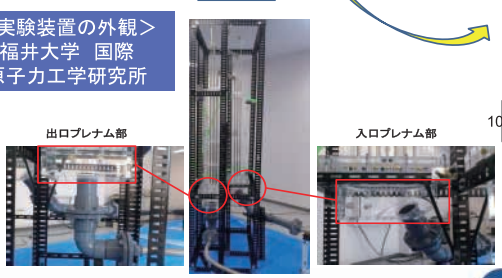
行き先格子点位置（X+⊿X,Y+⊿Y,Z+⊿Z,R+⊿R）が流体であれば，時刻T+1に行き先格子点位置で同じ速度をもつ．また，行き先格子点位置が固体であれば，時刻T+1に，同じ格子点位置で各成分が反転した速度（-⊿X,-⊿Y,-⊿Z,-⊿R）をもつ．

2．仮想粒子の衝突による進行向きの変更

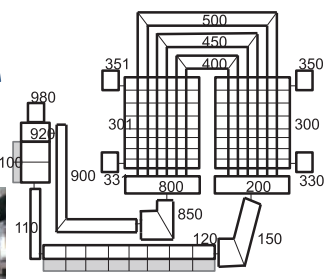
○保存則：　衝突前後で，①粒子数と②各成分ごとの運動量（4成分）と③エネルギが保存．

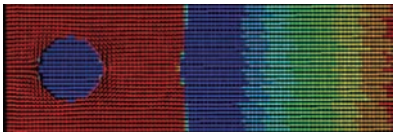
○排他律：　同じ格子点位置では，同じ速度をもつ仮想粒子は，２個以上存在できない．

＜実験装置の外観＞
福井大学　国際
原子力工学研究所



RELAP5/MOD3.3入力モデル



SX-9の４ノード（64CPU）による500億格子点規模の計算実施例

静止した流体中におかれた無限長円柱に垂直な方向に流体が動き出したときに生じる円柱後流の過渡変化をシミュレーションした．12288×4096×1024≒515億格子点の計算結果を疎視化して96×32×8の速度ベクトルを求めており、下図は、Z軸に垂直なある断面における5952時刻ステップ目のスナップショットで、双子渦発生以前の段階である．