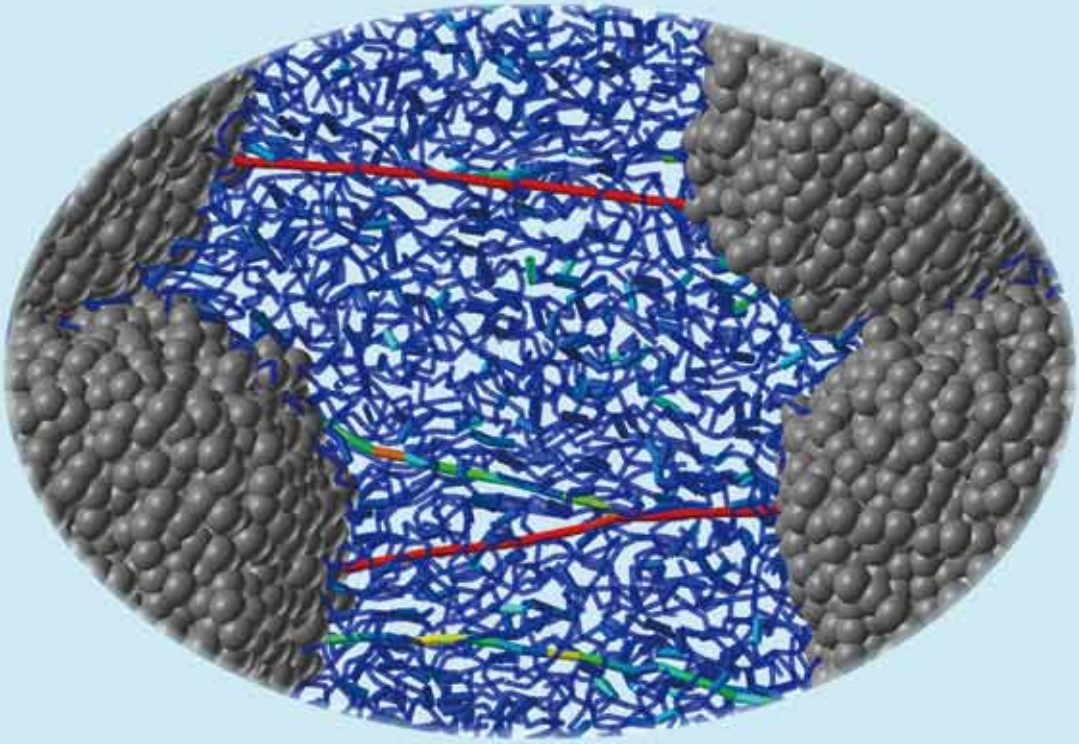
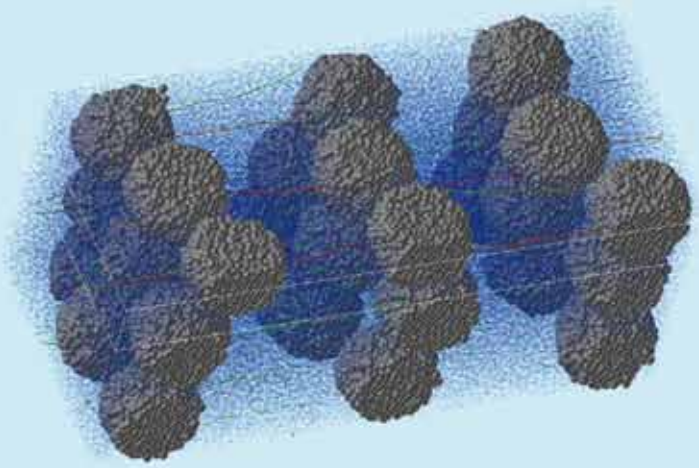
HOKKAIDO UNIVERSITY

iiC-HPC

北海道大学情報基盤センター大型計算機システムニュース

High Performance Computing System Information Initiative Center





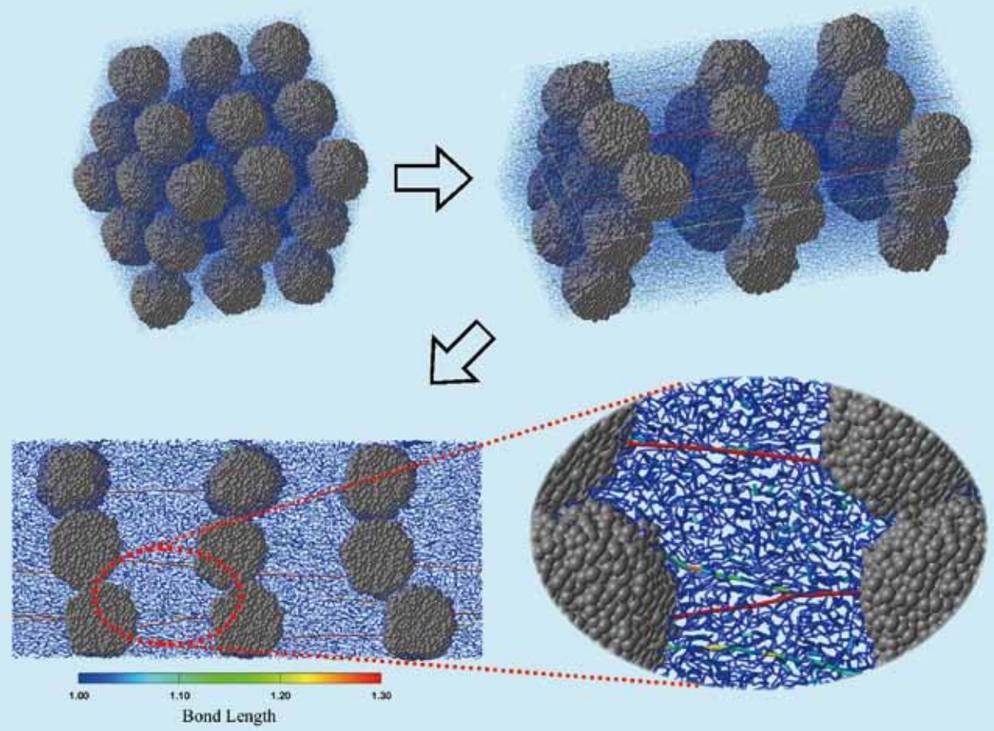
［特集］

車両開発と ゴム材料シミュレーション

VOL. 20
Jan. 2011

表紙 CG の解説

High Performance Computing System



ゴム材料は変形速度や振幅によってその特性が変化するなど、大変複雑な挙動を示します。こうしたゴムの挙動を体系立てて理解するためには、分子レベルのゴムのダイナミクスを観察することが有効であると考え、分子動力学法によるアプローチを行っています。

上図は粗視化分子動力学法（ビーズ-スプリングモデル）によるゴムの一軸伸張計算の結果を示しています。左上の計算モデル初期状態では、カーボンブラックやシリカなどのナノ粒子を想定した27個のフィラー（黒色）が均一に配置されており、その周りの空間は、網目構造を形成したひも状の高分子鎖（架橋ゴム：青色）で満たされています。フィラーはその近傍の架橋ゴムを引力によって吸着し、さらにその一部と強固に結合しています。

右上の伸張計算の結果をみると、フィラーの間隔が不均一になっていることが分かります。これは、特定のフィラー同士が架橋ゴムを介して結合していることにより、フィラーの動きが制限されたためです。左下のようにモデル中のある層を抜き出すと、赤く表示された高分子鎖が平面内で伸びて張力を出している様子が観察できます。

トヨタテクニカルディベロップメント株式会社が、文部科学省・研究開発施設共用等促進費補助金（先端研究施設共用促進事業）「先端的大規模計算利用サービス」平成22年度トライアルユースの支援により、北海道大学情報基盤センター大型計算機システムおよび並列版OCTA/COGNACを利用して解析した結果です。
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22年度）「粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の計算機科学的高度化検討」の成果およびAVS/Express（R）を利用して可視化しています。
AVS/Expressは米国Advanced Visual Systems社の登録商標です。

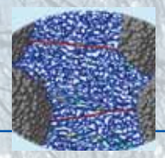
情報基盤センター大型計算機システムニュース
High Performance Computing System
Information Initiative Center

われわれは、スパコンの現在を考えます。

iiC-HPC

Contents

表紙CGの解説 2



3 情報基盤センター大型計算機システムニュース
目　次

特集　《インタビュー》
「車両開発とゴム材料シミュレーション」
●トヨタテクニカルディベロップメント株式会社
竹本毅、木村陽介、佐藤正俊
4-9

10-13 スパコン・アカデミー
第16回
「複素非対称疎行列向け反復解法の効果」
●株式会社日立超LSIシステムズ　猪貝 光祥
●株式会社日立製作所　櫻井 隆雄

連載
スパコン可視化道場
●番外編 9
「AVS/Expressを利用した等値面のセグメンテーション」
14-15

16-19 スパコンInfo
●学際大規模計算機システムの調達について
●並列版OCTA/COGNAC2010が利用できるようになりました
●平成22年度センター公募型共同研究の採択結果
●第1回社会人のためのシミュレーションスクールに協力しました
●HPCIコンソーシアム構成機関に決定しました
●お知らせと今後の予定
●SC10報告

Interview with TTDC

ハイブリッドシステムの設計・開発・評価にも、様々な部分で関わっている。

トヨタテクニカルディベロップメント株式会社

竹本毅氏、木村陽介氏、佐藤正俊氏 インタビュー

車両開発とゴム材料シミュレ ーション

粗視化分子動力学法でゴム特性を明らかにし、車両開発に繋げる。
トヨタテクニカルディベロップメントは独自技術の集積によって、トヨタ自動車の量産車開発に貢献しています。

車両開発は知の集積であり、多くのアイデアと安心・安全のための技術が凝縮されています。常に、機能性と快適性を追求するための努力が行われています。スパコンは強力なツールとして、車両開発や研究開発の推進に役立っています。

――御社の概要について説明していただけますでしょうか。

竹本　トヨタテクニカルディベロップメント（TTDC）は、トヨタ自動車の開発パートナーとして主に量産車開発を手掛けており、従業員数6,000名を超える日本でも数少ない車両開発のプロ集団です。具体的な事業内容は、車両の設計や電子制御関連製品の開発、実験や数値計算による車両性能評価など、実際の車両開発に携わる領域から、それらの車両開発を支援するための、各種計測技術の開発や、特許など知的財産の調査業務まで、多種多様にわたっています。弊社のモットーは機能のプロフェッショナルです。まだ歴史が浅く若い会社ですので、より強固なプロ集団となるべく、学び、考える姿勢を大切にしており、先行的な技術開発にも積極的に取り組んでいます。

我々は、車両を計算機上で評価して設計に役立てるというCAE（Computer Aided Engineering:計算機支援エンジニアリング）を専門に扱う部門に所属しており、本日は、その内容を中心に紹介させていただきます。

――部品メーカーとの違いは何ですか。

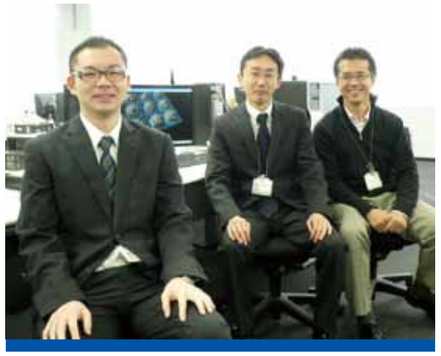
竹本　自動車は数多くの部品を組み合わせて構成されています。部品メーカーは、個々の部品開発を担当されています。対して、我々TTDCが主業務とする車両開発は、車として目標とする性能を発揮するように、部品をバランス良く組み合わせていくことが仕事になります。単純に良い部品を組み合わせれば、良い車ができるとは限りません。当然ですが、コストも意識しなければなりません。また、車両開発には強度、振動、安全、燃費など背反する高い開発目標が課されます。それらの目標を如何に高い次元で成立させるか、というのが車両開発の難しさであり、醍醐味でもあります。TTDCは、こうした車両開発に特化した会社であり、これだけ大きな集団は国内では稀だと思います。

PROFILE

竹本　毅
Takeshi TAKEMOTO
トヨタテクニカルディベロップメント株式会社
第1CAE技術部 第12解析室 室長

木村陽介
Yosuke KIMURA
トヨタテクニカルディベロップメント株式会社
第1CAE技術部 第12解析室 グループリーダー

佐藤正俊
Masatoshi SATO
トヨタテクニカルディベロップメント株式会社
第1CAE技術部 第12解析室



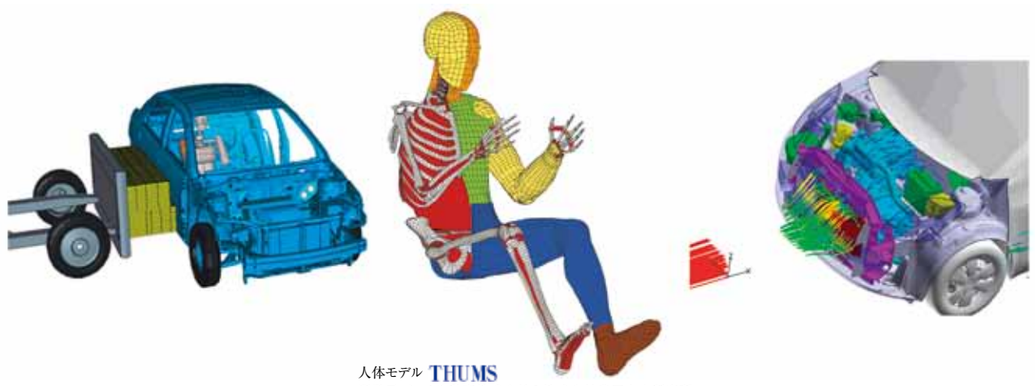
左から　佐藤氏、木村氏、竹本氏

――今回、文部科学省の先端的大規模計算利用サービスに応募され、本センターのスーパーコンピュータを利用されている訳ですが、まずは車両開発におけるコンピュータの利用についてお聞かせ下さい。

木村　現在の車両開発には、コンピュータを使った数値シミュレーションは非常に大きなウエートを占めています。数値シミュレーションを行うことで、試作車を使った試験の回数を減らすことができますので、開発期間の短縮やコストの削減につながります。さらに、数値シミュレーションを行うことによって、試験では測ることのできないものも数値として確認することができます。

例えば、衝突試験を一回行えば、試作車は当然壊れます。車内の空間を広げるために形状を少し変えようと思えば、試作車をもう一度作って、また衝突試験をすることになります。一方で数値シミュレーションであれば、衝突によって車両がつぶれていく過程を様々な角度から分析したり、力の集中状態などを確認したりすることができます。さらに、シミュレーション結果を分析した後、計算モデルの形状を変更して、すぐに再計算することができます。衝突時に生じる人への傷害の程度も、もちろん実際の人で試験を行うわけにはいきません。数値シミュレーションで骨に働く力を計算することによって、経験的に分かっている傷害の程度の関係を踏まえて、より傷害の程度が小さくなるような車両形状やバンパー形状を提案します。エンジンルーム内の空気の流れというのも、冷却効率の観点で評価を行うのですが、試験で測ることが難しい例の一つですね。

これらはほんの一例ですが、様々な現象を対象として数値シミュレーションが行われています。さらに我々は、数値シミュレーション技術の開発を、幅広く継続的に行っています。その一環で、先端的大規模計算利用サービスで提供されている北大のスパコンを利用させていただいています。



車両開発を担う数値シミュレーション

――北大スパコンでは、粗視化分子動力学法に基づく応用ソフトウエアである並列版OCTA/COGNACをご利用いただいていますね… 利用の背景や、先端的大規模計算利用サービスに応募された経緯などをお聞かせ下さい。

木村　はい、OCTA/COGNACを使って、ゴムに代表される高分子材料の特性を計算しています。高分子材料、中でもゴムは非常に複雑な挙動を示し、例えば使用温度や変形の大きさ、変形速度によって硬さが異なったり、2回目以降の変形では初回の変形よりも柔らかくなっていたりします。こうしたゴムの挙動の全てを統一的に材料構成則でモデル化して、有限要素法等の計算手法で再現するのは容易でありません。現状の数値シミュレーションでは、部品の（変形の大きさ等の）使用環境をあらかじめ把握しておき、その範囲内で適切なモデル化を行っています。また、以前から使われている既存のゴム材料に対しては、ある程度特性が分かっていますし、計算のノウハウも蓄積されています。そのため、そのゴムで作られた、例えばエンジンマウントやサスペンションブッシュのような部品は実用上問題のない精度で計算することができています。

一方で、最近ではナノテクノロジーの進歩や環境負荷に対する意識の向上から、高機能特性を持つゴムや、植物繊維を混ぜて石油由来の原料を減らしたプラスチックのような新しい高分子材料が数多く開発され実用化されています。こうした新材料それぞれに対して材料試験を繰り返し、その材料特性を正確に把握したり、計算のノウハウを蓄積したりするのは大変なコストと時間がかかります。新材料の機械特性を正確かつ簡易に把握したいのですが、そのためには特性の発現メカニズムを理解する必要があります。多くの高分子材料はその名のとおり、ひも状に長く重合した高分子とフィラー（充填材）が主要な成分のため、高分子材料の特性を調べるためには分子動力学によるシミュレーションが有効であると考えてOCTA/COGNACを利用しています。

現在はゴムの分子動力学モデルを作成しゴムの分子構造やフィラーの大きさ等のミクロな材料構造が機械特性に及ぼす影響を調べていますが、ゴムを高分子鎖の集合体としてモデル化すると自由度が多く計算コストも非常に高くなります。最初は、フィラーの数を少なくした小規模なモデルを作成し、弊社で保有するPCクラスタやワークステーションで計算を行っていました。しかし、小規模モデルでは実際のゴム挙動の全てを再現することができず、多くのフィラーの入った大規模モデルの解析を避けて通ることができないと思うようになりました。このような技術開発の段階で高額のスパコンを導入することは難しいのですが、それでも大規模な計算機を使いたいと思っていたところ、先端的大規模計算利用サービスの利用企業募集を見ました。いろいろ調べてみると、北海道大学でOCTA/COGNACの並列版が使えると。で、「おっ、これは」と思い、応募に至りました。

――ゴムや樹脂のような高分子材料は、車全体を考えるとどの程度含まれているのですか?

竹本　質量比で10%程度でしょうか。燃費を良くするためには、車の軽量化が最も効果的ですので、この割合が増えていくことは確実です。特にゴムは、サスペンションですとかエンジンマウントといった、乗り心地や車両の動きを制御するための重要なところに使われています。ただ、完全にゴムの特性を把握できているのかというと、経験的に理解して使っているという部分も多々あるのです。そのため、現状では、それなりの性能は得られるのですけれども、さらに微妙なチューニングを行おうとすると、いろいろと苦労もある訳でして…

――目に見えないところのゴムが重要…

竹本　はい、そうです。目に見えないところばかりでなく、皆さんが良くご存知のタイヤもゴム製品です。タイヤは車と地面の唯一の接点です。ですから、「走る・曲がる・止まる」といった車の基本的な挙動ばかりでなく、乗り心地にも重要な役割を果たしています。タイヤの挙動を加味した上でサスペンションの設計や評価を進めていくのですが、やはりここでもゴムの特性というのがポイントになりますね。ゴムが分かればゴムをもっと上手に使いこなせる、そうすれば車をもっと良くできるという思いが強いですし、できるはずだと思っています。さらに樹脂製品も同じ高分子材

料ですので、ゴムの材料特性を数値シミュレーションによって評価するという技術は、高分子材料全般に応用が可能であると考えています。

タイヤとフロントサスペンション
ゴムの特性は「走る・曲がる・止まる」といった性能や、乗り心地に大きく影響する。

――このような研究は、どれぐらい前から検討されているのですか?

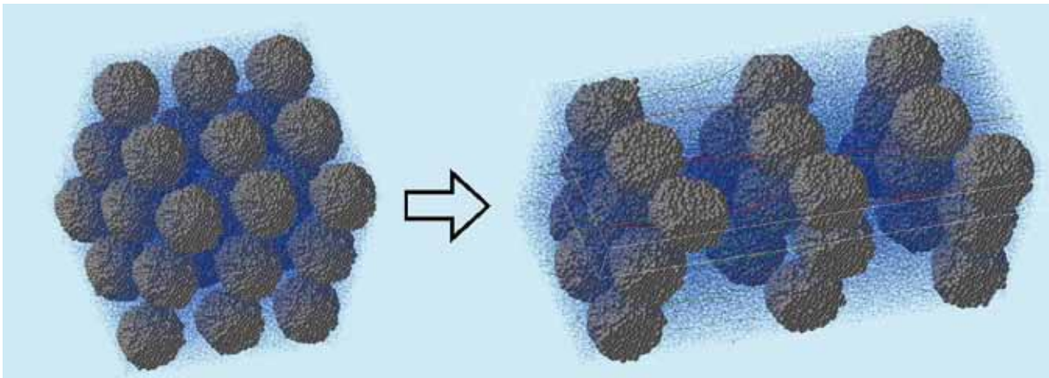
木村　ゴム材料が使われた部材をどうやって計算して評価すればよいのか、という課題については、弊社でもかなり以前から検討を続けています。微小振幅など、ざっくりと線形ばねで評価すれば良い場合もありますし、非線形で評価しなければいけない場合もあります。非線形特性といっても様々なモデル化方法がありますし…。高分子鎖とフィラーといったような材料の分子構造を意識したゴムのマルチスケール計算を始めたのは、ここ2～3年の話ですが、車両開発を進める上で複雑な動きをするゴムの特性を正しく把握したいというのが我々の想いです。

――どのようなアプローチで検討されているのですか?

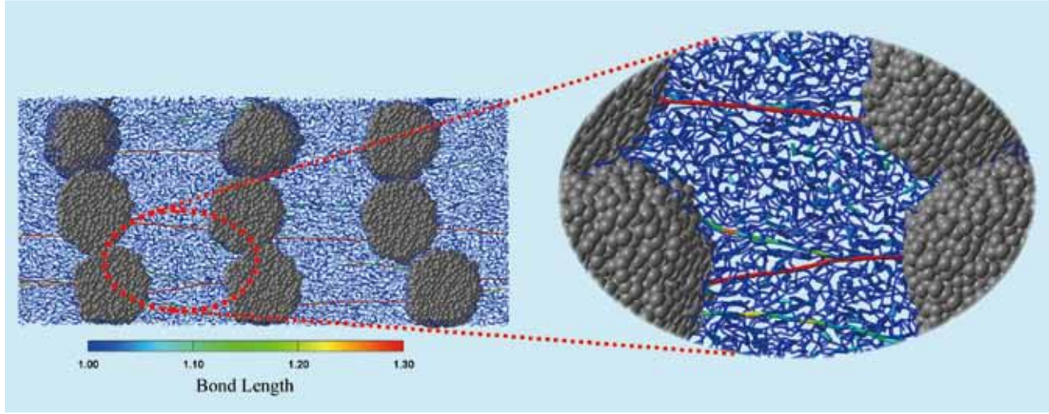
佐藤　分子動力学の中でも粗視化分子動力学法という手法を用いています。この手法では高分子鎖を剛体的なビーズがバネでひも状につながっているモデルで表現します。1つのビーズは数個のモノマー、すなわち数十個程度の原子を表しています。ゴム材料のミクロ構造を、高分子鎖モデルとビーズの塊で表現したフィラーでモデル化しました。この計算モデルは、例えば一般的に知られているような、フィラーを入れたときに剛性やヒステリシスロスが上昇するなどの傾向を正しく表現できることを確認しています。次に、粗視化分子動力学モデルで観察することができるミクロレベルの動きが、ゴム全体で見たときの静的な特性や動的な特性とどのように対応するのか、という関係を明らかにしていこうと考えています。このようなアプローチによって、複雑なゴムの機械特性の発現メカニズムを理解することができると考えています。

発現メカニズムさえ理解できてしまえば、現状では試験片を用いた数多くの緻密な材料試験とCAE解析者の豊富な経験が必要であったゴムの計算モデルのパラメータ決定が、数回のピンポイントの試験結果から材料全体の特性が把握できたり、理論に基づいた材料特性の決定ができたりするのではないかと期待しています。

それだけではなく、例えばエンジンマウントで使うゴム材料を、ある周波数帯では今より剛性を上げて、違う周波数帯では逆に今より下げたいとか、車両開発の立場から見たときの材料特性に対する要求性能が、材料構造のレベルで実現可能かどうか判断できるようになるのではないかと考えています。



解析事例 フィラーを27個含むゴムの一軸伸張計算



高分子鎖によって、フィラーの動きが制限されている様子が確認できる。

――これまでの研究成果についてお話しください。

佐藤　はじめにスパコンを使って、どれぐらいの計算規模のモデルであれば、どれぐらいの時間で計算が終わるのかを把握しました。弊社のワークステーションですと、現実的な計算時間を考えるとフィラーを3つ入れたモデル規模の検討が限界です。実際のゴムは、多くのフィラーが集まって構造を作っていて、その構造が崩れたりすることによって変形の大きい場合と小さい場合で物性が変わるのではないかと言われています。まだ解明できていない部分が多いのですが…このような現象は規模の小さな計算モデルでは確認できません。一方、スパコンであれば現実的な時間で計算が終わる27個のフィラーが入ったモデルを使えば、このような現象が計算によって確認できるのではないかと想像しています。具体的には27個のフィラーが均一に分散しているケースと、3個ずつのフィラーのコロニーが9個、あるいは9個のコロニーが3個という具合にフィラーの凝縮したケースを計算してみようと考えています。

27個のフィラーが均一に分散したモデルの一軸伸張計算では、高分子鎖の影響によってフィラーの動きが制限されて、フィラーの間隔が不均一になることが観察できました。これは小規模モデルでは観測できない大変興味深い現象です。AVS/Expressという描画ソフトを使って大規模な計算結果を可視化しているのですが、フィラーとフィラーを結ぶような高分子鎖が存在し、フィラーの動きを制限している様子が見られます。

――北大のスパコンセンターを利用してみて、その感想をお聞かせ願えますか。

竹本　今後、我々の検討を進めていく上では、計算モデルや計算条件を変えながら、いろいろなアイデアを確認していく必要があります。そういったアイデアを、大規模なモデルから小規模なモデルまで自由に計算できる環境、すなわちソフトウエアでありハードウエアが使えるというのは、非常に有り難いことです。ですから、われわれも現状やっているような基礎的な検討は極力オープンにして、皆さんで議論させていただきたいと考えています。そういった議論の中で、例えば高分子材料の特性はこの手法で計算すればいいというノウハウが蓄積できれば、最終的に日本のものづくりが進歩すると思います。産官学の連携といった意味でも、今回のような先端的大規模計算利用サービスで提供される環境は非常に意義のあるものだと思います。

――是非スパコンをご活用いただければと思います。
今日は、楽しいお話をどうもありがとうございました。

トヨタテクニカルディベロップメント株式会社 本社（愛知県豊田市）
ほかに、名古屋、裾野、新宿、横浜、札幌、福岡にオフィスがある。

知って得する!!

第16回 スパコンアカデミー

複素非対称疎行列向け反復解法の効果

株式会社日立超 LSI システムズ　猪貝 光祥
株式会社日立製作所　櫻井 隆雄

数値シミュレーションに欠かせない道具として連立一次方程式を解く行列ソルバーがあります。その計算手法には大きく分けると直接解法と反復解法とからなります。直接解法はガウス消去法に基づくLU分解を使用しますが、特に疎行列に対してはグラフ理論を利用したマルチフロンタル法が広く使われています。一方、反復解法はCG (Conjugate Gradient) 法に代表されるように近似解を初期値として収束計算を伴う解法群を指します。今回はこの反復解法の中で電磁場解析、音響解析、量子計算などの応用分野で使われる複素非対称疎行列向け解法について述べたいと思います。

直接解法 vs. 反復解法

解きたい問題があったときどのような行列ソルバーを使えばよいか。この答は簡単には決まらないと思います。解きたい問題の性質、規模、行列構造、数値的特性などによって適切な解法は変わります。例えば精度重視、悪条件 (ill-condition) 問題には直接解法を、性能（計算時間）およびメモリ量重視には反復解法をという住み分けがなされていましたが、ここ数年で状況は変わりつつあります。特に疎行列向けソルバーでは直接解法と反復解法の適用境界が重複するようになってきています。例えば直接解法では解けないが反復解法では解ける問題も多く存在します。また反復解法にすることでメモリ使用量が1/10以下になり、より大規模な問題が解析可能になる場合もあります。

最近のソルバー開発の流れについて少しまとめておきます。直接解法は精度安定化のためのpivotingをいかに効率的に行うかが課題になっています。fill-in削減のためのオーダリングで得られた非ゼロ構造をいかに崩さずにpivotingを行うか、すなわちpivot選択の制約と性能（演算量）・精度のトレードオフがアルゴリズムを構築する上での大きな技術課題になっています。このため多くの事例では解の反復改良など反復解法的なステップを取り入れた解の品質確保が行われています。一方、反復法はより悪条件の問題を解くために、fill-inを許容するILUT前処理行列や近似逆行列などより直接解法に近づくアプローチによって適用範囲の拡大が進められています。

主な反復解法の系統について

反復解法といってもその種類は数多くあります。図1に反復解法の中でも広く使われているsubspace法の系統図をまとめます。1952年にCG法が発表されて以来Krylov部分空間法の解法は多数発表されています。反復解法の歴史はスーパーコンピュータの歴史と呼応して発展しています。さらに反復解法にとっては欠かせない前処理手法と合わせるとKrylov部分空間法に絞っても100種類以上のレパートリーになります。特に今回着目している複素非対称行列向けの解法にはCGNE, COCR, COCGSTAB, GMRESなどがあります。また別のアプローチとして複素行列を実部虚部に分離し実数版の解法を使用することも可能です。

これらの解法が対象とする問題に適合するかどうかの答は簡単ではないことは冒頭にも述べました。これは行列データの構造や数値データなどのいわゆる外的特性だけでは判別できず、条件数や固有値分布、あるいは内在する境界条件などの内的特性と密接な関係があります。種々の解法を試行して最良な解法を探すことが遠回りのようですが現実的なアプローチと言えます。

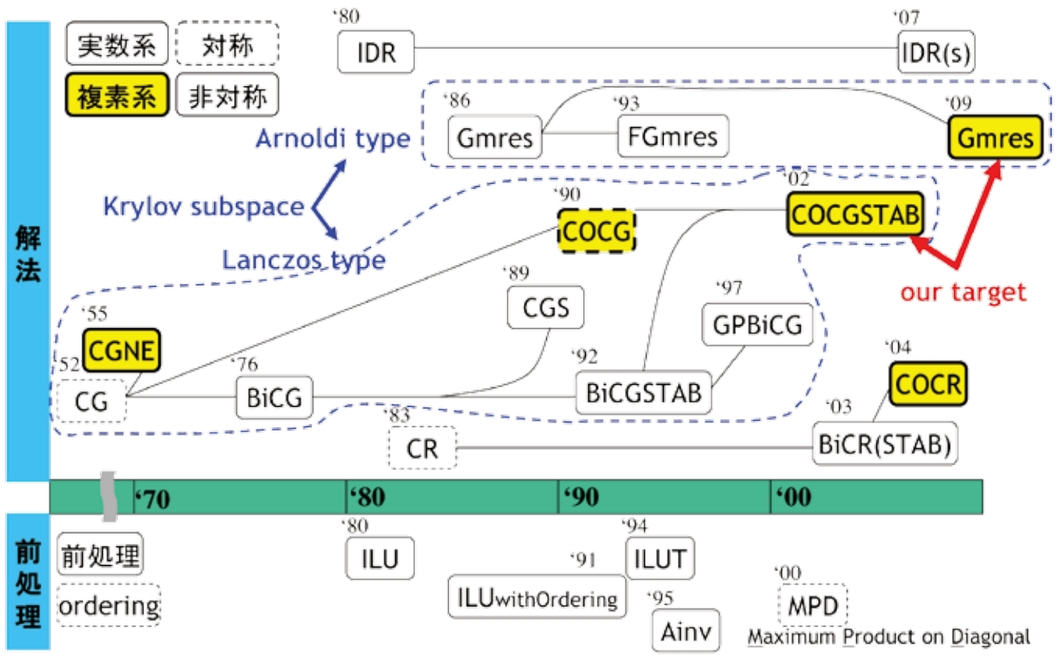


図1. 主な反復解法の系統

代表的な複素疎行列向け反復解法

ここでは比較的最近のGMRES (Generalized Minimal RESidual) 法 とCOCGSTAB (COmplex Conjugate Gradient STABilized) 法について実数版アルゴリズムと複素数版アルゴリズムの違いをまとめます。アルゴリズム自体は数多くの教科書や文献に記載されていますので、簡単に相違点のみ紹介します。

【1】GMRES法

GMRES法で注意すべき点は、複素空間での内積（x,y）がKrylov部分空間へ射影したときも保証しなければならないことです。具体的には実数版ではArnoldi stepで直交行列を使って上Hessenberg行列を解くのに対して、複素数版ではユニタリ行列を使って上Hessenberg行列を解けばよいことになります。

【2】COCGSTAB法

COCGSTAB法は複素対称COCGを積型解法（複素非対称）に拡張した解法に位置づけられます。Lanczos-stepにおける実空間での双共役条件（Bi-Conjugate）を複素共役条件（Complex-Conjugate）に置き換えればよいことになります。

また、前処理行列として代表的なILU、ILUTなども自然な複素拡張で作成可能です。

適用性

いくつかのサンプル複素行列を使って反復解法の効果を実験します。表1に使用するUniversity of Florida Sparse Matrix Collection (http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/) から入手した直接解法向けの複素行列を示します。

ソルバーとしては次の5種類を用意します。また前処理には全ての非ゼロ要素を更新するILU (0) とfill-inを許容するILUT (p,τ) の2種類を用意します。

(1) 複素版GMRES法
(2) COCGSTAB法
(3) 実数版GMRES法
(4) BiCGSTAB法
(5) 直接解法（マルチフロンタル法）

まず、反復解法の収束特性を表2に示します。表中の○、△、×はそれぞれ収束、停留、未収束（発散を含む）を示しています。要求精度は解の相対残差ノルムが1.0e-8以下で収束判定を行っています。表中の上段はソルバーに与えたパラメータを示しています。mがGMRESのリスタート周期、pがILUT許容fill-in数です。下段は収束状況で収束した場合（○）の数字は反復回数（リスタート回数）を示しています。停留した場合（△）は停留したときの相対残差ノルムを示します。#5、7は全てのケースで収束が確認できますが、例えば#3のwaveguideは複素版ソルバーでは収束しますが実数版では未収束となります。逆に#7のvfemでは実数版のILU (0)-GMRES (300) のみが収束し、他は停留します。また#6、#10は今回の反復解法では収束しないケースです。

表3はAMD opteron (4core) を使ったときの計算時間を直接解法（マルチフロンタル法）と比較したものです。直接解法は全て解けていますが、#1、#2、#5、#9の行列に対しては直接解法よりも反復解法の方が高速となります。今回の10種類の行列で計算スピードを比較すると反復解法の4勝6敗という成績になります。表4はメモリ使用量の比較ですが反復解法は直接解法に比べるとメモリ使用量は非常に少なくて済むという利点があり、反復解法が適用できるのであれば、より大規模な問題が解析できる可能性があると言えます。

	matrix statistics	structures pattern	structures value	n	nz	nz/n	field
1	qc2534	sym	unsym	2,534	463,360	182.9	electromagnetics
2	aft02	sym	unsym	8,184	127,762	15.6	acoustics
3	waveguide3D	sym	unsym	21,036	303,468	14.4	electromagnetics
4	ABACUS_shell_ld	sym	unsym	23,412	218,484	9.3	model reduction
5	kim1	unsym	unsym	38,415	933,195	24.3	2D/3D problem
6	femfilter	sym	unsym	74,062	1,731,206	23.4	electromagnetics
7	vfem	sym	unsym	93,476	1,434,636	15.3	electromagnetics
8	mono_500Hz	sym	unsym	169,410	5,036,288	29.7	acoustics
9	kim2	unsym	unsym	456,976	11,330,020	24.8	2D/3D problem
10	fem_hifreq_circuit	unsym	unsym	491,100	20,239,237	41.2	electromagnetics

表1. 使用する複素行列一覧（Florida Sparse Matrix Collection）

○収束（反復回数）
△停留
×発散

	parameters	Iterative Solver: complex ver. GMRES ILU(0)	complex ver. GMRES ILUT	complex ver. COCGSTAB ILU(0)	complex ver. COCGSTAB ILUT	real ver. 2×2 blocked GMRES ILU(0)	real ver. 2×2 blocked GMRES ILUT	real ver. 2×2 blocked BiCGSTAB ILU(0)	real ver. 2×2 blocked BiCGSTAB ILUT
1	qc2534	m=150	m=40,p=40		p=40	m=160	m=80,p=80		p=160
		1.0e-5 △	○2	○336	○50	1.0e-5 △	1.0e-2 △	1.0e-2 △	○22
2	aft02	m=40	m=180,p=5		p=10	m=160	m=80,p=5 p大で発散		p=20 p大で発散
		○1	○2	1.0e-3 △	1.0e-3 △	1.0e-5 △	1.0e-4 △	×	1.0e-0 △
3	waveguide3D	m=120	m=120,p=40		p=5	m=120	m=40,p=80		p=20
		1.0e-2 △	×	○2608	1.0e-1 △	1.0e-3 △	1.0e-0 △	1.0e-1 △	×
4	ABACUS_shell_ld	m=120	m=20,p=40		p=20	m=160	m=40,p=20		p=20
		○33	○2	○320	○32	○16	○8	×	○218
5	kim1	m=5	m=5,p=5		p=5	m=10	m=5,p=20		p=10
		○3	○3	○5	○8	○1	○1	○5	○9
6	femfilter	m=160	m=20,p=20		p=20	m=160	m=20,P=20		p=20
		1.0e-1 stag	×	×	×	1.0e-2 stag	×	×	×
7	vfem	m=120	m=40,p=1		p=20	m=300	m=300,p=1		p=1
		1.0e-8 △	1.0e-7 △	1.0e-7 △	×	○132	1.9e-8 △	2.0e-7 △	8.0e-8 △
8	mono_500Hz	m=100	m=100,p=10		p=10	m=100	m=100,p=10		p=10
		×	×	○3110	×	4.0e-1 △	1.0e-0 △	×	×
9	kim2	m=15	m=15,p=10		p=10	m=15	m=15,p=10		p=20
		○1	○1	○6	○5	○1	○11	○6	○9
10	fem_hifreq_circuit	m=100	m=100,p=10		p=10	m=100	p=10		p=10
		×	×	×	×	×	×	×	×

表2. 各反復解法の収束特性

running on opteron 2.0GHz 4SMP
△:Stagnation, × :Diverged

fastest in Iterative solver
win Iterative solver
win direct solver

	CPU[sec] 4SMP	Iterative Solver: complex ver. GMRES ILU(0)	complex ver. GMRES ILUT	complex ver. COCGSTAB ILU(0)	complex ver. COCGSTAB ILUT	real ver. 2×2 blocked GMRES ILU(0)	real ver. 2×2 blocked GMRES ILUT	real ver. 2×2 blocked BiCGSTAB ILU(0)	real ver. 2×2 blocked BiCGSTAB ILUT	direct solver (Multifrontal) 1SMP time [sec]	direct solver (Multifrontal) 4SMP time [sec]
1	qc2534	△	8.64	7.20	0.99	△	△	△	3.63	2.5	1.7
2	aft02	0.34	90.00	△	△	△	△	×	△	1.3	0.7
3	waveguide3D	△	×	79.90	△	△	△	△	×	3.4	2.4
4	ABACUS_shell_ld	375.00	1.71	6.39	2.17	479.40	11.03	×	14.96	1.8	1.4
5	kim1	0.66	0.34	0.47	1.04	0.76	0.76	1.05	2.36	7.1	4.1
6	femfilter	△	△	×	×	△	△	×	△	55.9	19.3
7	vfem	△	△	△	△	8355.00	△	△	△	76.5	24.8
8	mono_500Hz	×	×	1217.30	×	△	△	×	×	457.8	143.5
9	kim2	8.64	7.50	7.60	16.10	14.27	88.91	14.70	65.40	231.5	79.2
10	fem_hifreq_circuit	×	×	×	×	×	×	×	×	904.5	272.8

表3. 計算時間

	required memory	iter mem. [Gbyte]	direct mem. [Gbyte]	direct / iter
1	qc2534	0.009	0.029	3.1
2	aft02	0.008	0.017	2.0
3	waveguide3D	0.008	0.082	10.9
4	ABACUS_shell_ld	0.006	0.041	6.3
5	kim1	0.020	0.182	9.2
6	femfilter	0.037	0.627	16.9
7	vfem	0.035	0.840	24.1
8	mono_500Hz	0.102	2.749	26.9
9	kim2	0.240	3.049	12.7
10	fem_hifreq_circuit	0.387	6.863	17.7

表4. メモリ使用量

まとめ

複素非対称行列向けの反復解法の効果について、Krylov部分空間系を複素拡張したGMRES法とCOCGSTAB法について直接解法向けのサンプル行列を使った収束性評価を行いました。直接解法は安定解法でありますが、前処理行列との組合せによって反復解法も十分適用できること、反復法が速度的に優る問題もあることを示しました。今回の内容に関して貴重なコメントを頂いた北海道大学の大宮学教授、北見工業大学の辻寧英准教授に深謝いたします。

スパコン可視化道場

3次元可視化システムAVS/Express利用講習会で紹介された可視化手法を実践する第2回目です。今回は、等値面のセグメンテーションと題して、等値面表示結果を要素ごとに分割し、色などのプロパティを指定する方法を説明します。

番外編 9 AVS/Expressを利用した等値面のセグメンテーション

等値面表示

可視化モジュール**isosurface**などを利用して、同一の値を有する解析点を含む表面を形成するのが等値面表示です。解析空間内部に複数の波源が存在する場合、可視化結果の回転や拡大・縮小を行っていると、波源を区別することができなくなることがしばしばあります。このような場合、波源ごとに異なる色として、可視化結果の回転など視点の変更を行ったとしても注目している波源を即座に見つけ出せるようにしたいものです。しかし、モジュール**isosurface**は等値面をすべて同じ色で表示します。等値面ごとに色などのプロパティを変更するために、STL (Stereo Lithography) フォーマットを介したMGF (MicroAVS Geometry ASCII Format) ファイルを利用する方法があります。その方法について、以下に示します。

例題として、空間分解能10㎜の50×50×50セルから構成される3次元空間内部に同一特性を有する3つの波源があると仮定します。波源の寸法は1セル分であり、3つの座標成分をすべて含み、周波数2480 MHzの正弦波で励振します。本センターで開発を行っている電磁界解析ソフトウエア*Jet* FDTDで解析空間内部の電界強度分布を求め、その等値面を表示したのが図1です。同図の可視化結果を得るために利用したモジュール構成を図2に示します。モジュール**isosurface**を利用することで、解析空間内部の格子点上の電界強度値データから容易に等値面を表示させることができます。図1から分かるように、等値面要素は4つあり、すべて同じ色です。ここでは、4つの構成要素を分離（セグメンテーション）して、それぞれ別々のオブジェクトとして扱えるようにします。

図1. 電界強度分布による等値面表示結果

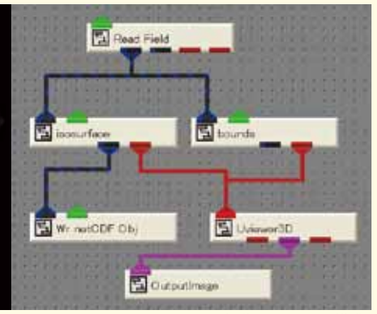


図2. 可視化モジュールの構成

STLフォーマットへの変換

図2に示すように、等値面表示をnetCDFobjフォーマットで出力します。次に、コンバータを利用してSTLフォーマットに変換します。入力データファイル名を**efd.dat**として、netCDFobjフォーマットで保存するファイル名を**efd.nc**とします。コンバータ**netCDF2STL.exe**を起動し、出力先のSTLフォーマットファイル名を**efd.stl**とします。図3はコンバータのダイアログと変換結果の可視化結果を示しています。このコンバータはAVS/Expressを利用して作成されています。

STLフォーマットでは、構造物表面を三角形の集合として記述します。図4は作成されたファイル**efd.stl**をSTLビューア（Hira3Dviewerなど）でワイヤフレーム表示した結果です。要素表面が多数の三角形で構成されていることが分かります。ここまでは、単一オブジェクトに4つの要素が含まれています。次に、それら4つの要素を独立した4つのオブジェクトに変換します。

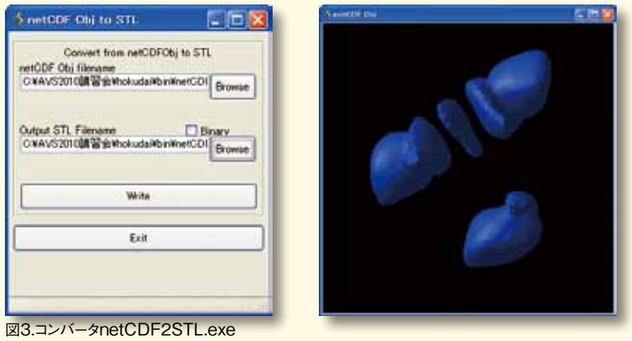


図3.コンバータnetCDF2STL.exe
左図が入出力ファイル指定ダイアログ、右図が変換結果表示

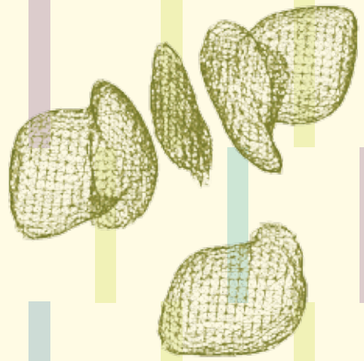


図4. STLフォーマットファイルのワイヤフレーム表示

セグメンテーション

次に、STLフォーマットデータをMGFファイルデータに変換します。そのために、コマンド**stl2mgfm.exe**を使用します。実行方法は下記のとおりです。

```
> stl2mgfm.exe efd.stl efd.mgf
```

コマンド**stl2mgfm.exe**の第1引数は入力ファイル名、第2引数は出力ファイル名です。コマンド**stl2mgfm.exe**の実行結果をリスト1に示します。表示結果から、4要素から構成されていて、ポリゴン（三角形）総数が11,148であることが分かります。

```
 > stl2mgfm.exe efd.stl efd.mgf
 file open efd.stl
 file open efd.mgf
 solid AVS/Express STL Facet File

  ## endsolid AVS/Express STL

  Polygon number : 11148
 file open efd.stl
 solid AVS/Express STL Facet File
Label number : 508
0 : num = 2396
1 : num = 3336
2 : num = 1960
3 : num = 3456

 >
```

リスト1. stl2mgfm.exeの実行結果表示例

セグメンテーション結果の表示

変換結果データファイル**efd.mgf**を表示させるために、可視化モジュール**Read_MGF**を利用します。このモジュールはKGTライブラリに含まれています。図5は3Dビューアを示しています。ビューア右下のボタン`Select Object..`を押すことで、左側中央に示されるダイアログが表示されます。4つのオブジェクト**label0000x_s000xxxx**が選択可能になっていますので、それらを順に選択して**Property**を変更します。図5では表示色を個別に指定しました。

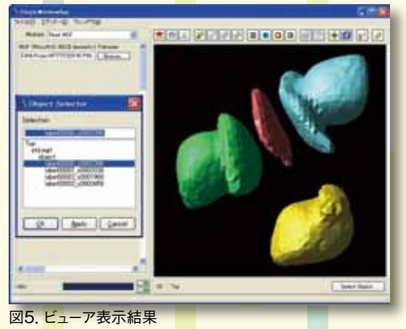


図5. ビューア表示結果

まとめ

等値面表示において、単一オブジェクトのセグメンテーションを行うことで複数オブジェクトに分割し、結果として得られた要素ごとにプロパティを変更する方法を示しました。重要なのは、2つのコンバータ**netCDF2STL.exe**および**stl2mgfm.exe**の利用と、STLフォーマットを介してMGFファイルに変換することです。これらフォーマットはすべて三角形要素を利用してオブジェクトを表現しているため、相互変換が比較的容易です。AVS/Expressと組み合わせてご利用下さい。

スパコンinfo.　ご存じですか？ スパコンは　北海道の共有インフラです。

学際大規模計算機システムの調達について

次期大型計算機システムである学際大規模計算機システムについて、平成23年10月4日㈫からのサービス開始に向け準備を進めています。システムは、大規模超高速計算システム（現有スーパーコンピュータに対応）とクラウドシステム（現有アプリケーションサーバ、ホスティングサーバ、プロジェクトサーバ等に相当）、これらのシステムと連携するファイルシステムやネットワークシステム等から構成されています。特に、クラウドシステムは、2,000以上のバーチャルマシン（仮想サーバ）が実行可能で、このうち200台以上でHA (High Availability) 構成による二重化を行います。

学際大規模計算機システムの導入に当たり、空調設備および電源設備等の工事を行います。このため、平成23年7月から9月までスーパーコンピュータ、アプリケーションサーバ、ファイルシステム等のサービスを停止する予定です。ユーザの皆様方にはご不便をおかけしますが、ご協力をお願いします。

並列版OCTA/COGNAC2010が利用できるようになりました

平成22年8月に最新バージョンが公開されたOCTA/COGNAC2010について、スーパーコンピュータHITACHI SR11000への移植ならびに並列化を行い、利用サービスを実施しています。ユーザからの要望に応え性能プロファイル（gprof）が取得可能な実行オブジェクトを用意しています。実行オブジェクトは、スパコン用ファイルシステムの下記ディレクトリで公開しています。

/opt/common/octa/cognac711/bin

平成22年度センター公募型共同研究の採択結果

平成22年度センター公募型共同研究の募集を平成22年7月20日から8月31日まで行い、27課題の応募がありました。慎重な審議の結果、すべての課題を採択することが決定され、平成22年10月から共同研究を開始しました。特に、大規模計算機シミュレーション（研究領域A1）では10課題が採択され、スパコン等の最先端設備を利用した大規模高速処理を目的とする研究が実施されています。この他に、大規模問題解決の基盤技術、大規模データ科学、ネットワークとクラウド技術、デジタルコンテンツおよび教育情報メディアの研究領域での共同研究が行われています。

第1回社会人のためのシミュレーションスクールに協力しました

神戸大学、兵庫県および計算科学振興財団が主催する「第1回社会人のためのシミュレーションスクール」が、平成22年10月25日㈪から29日㈮の5日間にわたって、神戸ポートアイランドにあるニチイ学館で実施されました。本センター大規模計算システム研究部門　大宮教授は、26日㈫開催「電磁界シミュレーション」において本センターで開発を行っている *Jet* FDTDを利用した高周波電磁界モデルの超高速・高精度シミュレーションについて講義を行いました。民間企業研究者による次世代スパコンの有効活用を目指した高度シミュレーション技術について、今後も利用者の拡大とスキルアップならびにスパコン人材養成に協力していく所存です。詳細については、下記ホームページをご参照ください。

http://www.org.kobe-u.ac.jp/tecs/index.html

HPCIコンソーシアム構成機関に決定しました

本センターは、次世代スーパーコンピュータを中核として、次世代スーパーコンピュータと国内のスーパーコンピュータをネットワークで結び、世界最高水準の成果創出と成果の社会還元を推進する研究開発基盤となる「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）」の構成を主導する準備段階におけるコンソーシアム構成機関の計算資源提供機関として、平成22年7月に文部科学省の決定を受けました。詳細については、下記ホームページをご参照ください。

http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/22/07/1295992.htm

お知らせと今後の予定

■JHPCNシンポジウム（第2回）の開催について

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）第2回シンポジウムを下記のとおり開催します。本センターとの共同研究6課題を含む37課題の研究発表が予定されています。

日時／平成23年1月12日（水）13:00～18:15
　　13日（木）10:00～17:55
場所／独立行政法人 理化学研究所
　　計算科学研究機構（神戸ポートアイランド）
ホームページ／
　　http://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/

■平成23年度JHPCN公募型共同研究の課題募集について

平成23年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）公募型共同研究について、募集要項が公表され、下記のとおり共同研究課題を募集しています。グランドチャレンジ的な研究課題について、ふるってご応募くださるようお願いします。

募　集　期　間／平成23年1月7日㈮から2月10日㈭
共同研究開始／平成23年4月1日㈫
ホームページ／http://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/offer.html

■平成23年度センター公募型共同研究の課題募集について

これまで2年間にわたって実施してきたセンター公募型共同研究は、毎年応募件数が増加しています。皆様方の研究活動により一層資するため、平成23年度公募について下記のとおり予定していますので、研究課題をご提案くださるようお願いします。

募　集　期　間／平成23年2月1日㈫から3月10日㈭
共同研究開始／平成23年5月2日㈪
ホームページ／http://www.iic.hokudai.ac.jp/kyodo_kenkyu/kyodo_kenkyu1.html

平成21年度研究成果報告書および平成23年度公募要領等の情報を提供しています。

SC10報告

大規模計算システム研究部門　棟朝雅晴

SC10はIEEE（The Institute of Electrical and Electronics Engineers）とACM（Association of Computing Machinery）という情報系における2大学会の共催による、スーパーコンピューティングに関する世界最大規模の学会、展示会であり、今年は米国ルイジアナ州ニューオリンズにて開催された。

会議全体の参加者は一万人以上であり、通常の学会としての講演やチュートリアルなどのイベントに加えて、スパコン関連企業、ネットワーク関連企業、スパコンセンター、研究所、大学などさまざまな組織によるブース展示がその大きな割合を占めている。

学会としては、スーパーコンピューティングに関連する論文発表、ポスター発表に加えて、14のワークショップ、BoF（Birds of a Feather）と呼ばれるそれぞれの分野ごとの会議が63、チュートリアルが33開催され、関連分野に関する様々な研究の情報が集まり、活発な情報交換がなされている。今回の会議の主要テーマとして選ばれたのは、(1) Climate simulation（気候シミュレーション）、(2) Heterogeneous computing（異なったアーキテクチャの混在によるコンピューティング）、(3) Data intensive computing（データ集約型コンピューティング）の3つのテーマであるが、それ以外にも様々な技術分野、応用分野に関する研究発表が行われている。

また、本会議は、スパコンのランキングであるTOP500（http://www.top500.org/）が発表される場としても有名である。TOP500はヨーロッパで毎年6月開催されるISC（International Supercomputing Conference）と、毎年11月に開催されるSCにおいて発表され、LINPACKベンチマークに基づく性能ランキングを世界のスパコンについて行うものである。今回公表されたTOP500においては、中国のスパコンが第1位を獲得したことが話題となっていた。また、それも含めて上位5つのスーパーコンピュータのうち、3つがGPGPU（General Purpose Graphic Processing Unit）と呼ばれるグラフィックス用途のボードをアクセラレータとして用いていることでも話題となっており、会議の主要テーマの一つにHeterogeneous Computingがあげられていることからも、その重要性が伺われる。日本からも東京工業大学のTSUBAME2.0がGPGPUを採用しており、今回第4位の地位を獲得している。

本会議の特徴は、大規模なブース展示にあり、その展示会場の面積は386,000square feet=36,000㎡であり、札幌ドームのアリーナ面積が約14,000㎡であることと比較するとその会場の大きさが分かる。会場には、300以上の企業、研究所、大学などの組織がブース展示を行っており、例を挙げると以下の通りとなる。

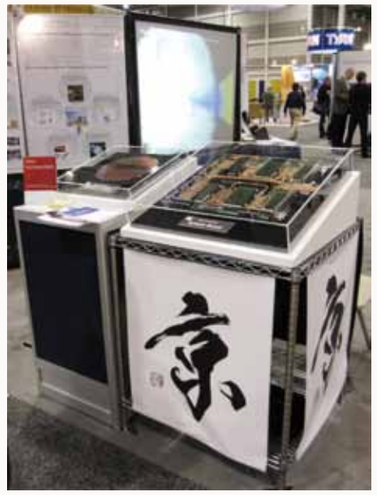
●スパコン関連ベンダー：IBM、SGI、富士通、日立など
●IT関連ベンダー：Microsoft、DELL、Intel、NVIDIAなど
●ネットワーク関連ベンダー：CISCO, Brocadeなど
●各種ベンチャー企業：多数の企業あり
●米国スパコンセンター：NCSA, OakRidgeなど
●米国の大学：Illinois, Purdue, Indianaなど数多く
●欧州研究所：ドイツ、フランス、スペインなど
●アジア研究所：台湾、韓国、サウジアラビアなど
●日本研究所：理研、産総研、原研、NII、JAXAなど
●日本の大学：東大、京大、東工大、阪大、東北大、北大、九大、筑波大、北陸先端大、奈良先端大、同志社大、関西大など

ブース展示会場の様子

ここ2、3年の傾向として、GPGPUに関する展示が人気を集めている。その開発フレームワークであるCUDAを提唱し、普及を図っているNVIDIAが活発にブース展示活動を行っており、それを採用したスパコンであるTSUBAME2.0を発表した東工大のブースが、日本関係の中では最も人気を博していた。

ブース展示において、今回注目すべきものとして、次世代のトップを目指したスパコンの展示があげられ、日本において開発中の10 Peta flops級の次世代スパコン「京」については、理研および富士通のブースにおいて、その実機のラック、ボード、ネットワーク、及びCPUの展示が行われており、注目を集めていた。

また、米国において、20Peta flopsを目指したSequoiaで採用予定のBlueGene/Qに関する展示が、IBMのブースにおいて行われており、世界一を目指した激しい競争の一端を伺うことができた。


次世代スパコン「京」の展示

さらに近年はMicrosoftやDELL、HP、さらには台湾のマザーボードメーカなど、一般のIT企業がスパコンに力を入れ始め、クラスタ型の大規模並列計算によるエントリーレベルのスパコンの構築が数多くの企業、大学、研究所で行われているところである。

本会議はスパコンがメインではあるが、それを支える技術としてネットワークにも力を入れており、InfiniBandなどの超高速スイッチを開発するベンダーや、CISCOなど一般のネットワークベンダーも展示に力を入れている。ブース展示会場へは、会議専用の超高速実験ネットワークSCinetが構築され、ベンダー側の協力のもと、多くのボランティアスタッフにより、100Giga-bit Ethernetなどの最新技術も駆使し、総帯域幅が300Gbpsを超える世界で最高速のネットワークが用意されている。

企業以外では、米国及び欧州の主要なスパコンセンターはすべてブース展示を行っており、研究活動の宣伝および情報交換の拠点として重要な位置づけを担っている。

また、最近では日本を含むアジアからの展示が増えつつあり、台湾、韓国、中国はもとより、今年からはサウジアラビアの研究所がブース展示を始めたことが注目される。

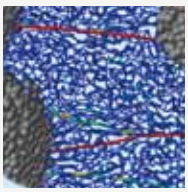
日本関係のブースでは、最も大規模なものは産総研であり、スパコン、グリッド、クラウドなどに関する様々な研究テーマの紹介を行っていた。情報基盤センター関係では、東大、京大、阪大、九大など主要な大学がブース展示を行い、その研究に関する宣伝活動を活発に行っていた。

北海道大学情報基盤センターにおいては、2008年よりブース展示を行っており、サイズとしては10feet×10feet（約3m）の最小サイズながら、センター関連研究室所属の大学院生などの協力も得つつ、今回はシミュレーション関係、アルゴリズム関係、GPGPU関係など、センターにおいて推進されている各種の研究プロジェクトに関するポスター展示、およびビデオ映像などを交えた展示を行い、世界各国の企業関係、研究所関係、大学関係者のべ135名の来訪をいただくことができ、さまざまなテーマについて有益な情報交換を行うことができた。

SC10にご興味をお持ちの方は、以下の会議ホームページをご覧ください。様々な情報を得ることができます。

http://sc10.supercomputing.org/

北海道大学情報基盤センターのブースにて



●メールマガジン講読のご案内

本センター大型計算機システムに関するさまざまなお知らせ（運用予定、利用講習会、講演会案内、トピックス）、また、利用法に関するヒントをメールマガジンでお届けしています。メールマガジンを講読されるためには登録が必要です。下記ホームページで登録または削除を受け付けています。本センターの利用登録の有無に関わらず、メールマガジンの講読が可能（無料）ですので、この機会に是非登録されてはいかがでしょうか。
メールマガジンの登録または削除　http://mag.hucc.hokudai.ac.jp/

●スパコンのための情報サービス一覧

情報サービス	内　　容
利用者受付	スパコン利用のための登録・総合情報 TEL 011-706-2951
利用講習会	使い方・プログラム講習 http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/kosyu/kosyukai.html
利用者相談室	プログラム相談 http://www.hucc.hokudai.ac.jp/support.html TEL 011-706-2952
メルマガ情報	さまざまなスパコン情報の速報 http://mag.hucc.hokudai.ac.jp/
技術情報	スパコンの使い方・技術情報 http://www.hucc.hokudai.ac.jp/20060105new_hop.html
iiC-HPC	大型計算機システムニュース、その他ダウンロード http://www.hucc.hokudai.ac.jp/koho_syuppan.html 大型計算機システムニュース郵送申し込み http://www.hucc.hokudai.ac.jp/~a10019/iic-HPC/

●編集後記

世界を牽引するわが国の車両開発において、ソフトマターのシミュレーションが重要であることを研究者が明らかにしてくれました。現在、スーパーコンピュータを利用して、微小な領域の、一瞬の物理現象を捉えることに成功しています。研究開発が進展することで、車はより安全・安心な快適空間を提供してくれると、わが国の技術力の高さと共に確信することができました。

●次号の特集予告

本センター公募型共同研究(平成22年度)で、地元企業との産学連携へのスーパーコンピュータの活用を計画している道内4高専の取り組みについて、共同研究代表者にインタビューを行います。どんな戦略をもってスーパーコンピュータの利活用を計画されているのか、本センターへの期待を含めてお話を伺います。

●本誌へのご意見をお聞かせください。

連絡先：kyodo@iic.hokudai.ac.jp
北海道大学企画部情報基盤課共同利用・共同研究担当
TEL 011-706-2956 FAX 011-706-3460
iiC-HPCニュースはインターネットからダウンロード可能です。
URL　http://www.hucc.hokudai.ac.jp/koho_syuppan.html

iiC-HPC第20号
編集・発行：北海道大学情報基盤センター共同利用・共同研究委員会システム利用専門委員会

●情報基盤センター	棟朝雅晴	●メディア・コミュニケーション研究院	長野　督
●情報基盤センター	大宮　学	●公共政策学連携研究部	萩原　亨
●情報基盤センター	田邉　鉄	●北見工業大学	桜井　宏
●文学研究科	樽本英樹	●企画部情報基盤課	伊藤和彦
●理学研究院	見延庄士郎	●企画部情報基盤課	上窪　功
●農学研究院	谷　宏	●企画部情報基盤課	折野神恵

2011年1月発行　　印刷：正文舎印刷株式会社　TEL011-811-7151