

研究報告

東京大学情報基盤センターSR8000 利用報告書

講義名： 東京大学工学部 システム創成学科 シミュレーションコース
平成15年度 基礎プロジェクト1 (3年夏学期)
テーマH『超並列コンピュータを用いた複雑構造物の変形シミュレーション』

担当教官： 奥田洋司 okuda@race.u-tokyo.ac.jp
東京大学人工物工学研究センター デジタル価値工学研究部門
兼担学部：工学部システム創成学科シミュレーションコース

報告書提出日：平成16年9月17日

報告書提出者：奥田洋司 okuda@race.u-tokyo.ac.jp
東京大学人工物工学研究センター デジタル価値工学研究部門
兼担学部：工学部システム創成学科シミュレーションコース

1. はじめに

東京大学情報基盤センターの支援を受け、平成 15 夏学期に東京大学工学部システム創成学科シミュレーションコースの演習「基礎プロジェクト1(3年生) テーマ H『超並列コンピュータを用いた複雑構造物の変形シミュレーション』」が実施された。この演習は平成 13 年度より行っており、本年度で3年目となる。演習では、SR8000 を用いた並列有限要素解析を通じて HPC を実感する、モデリングから可視化までの一連の CAE (Computer-Aided Engineering) プロセスを体験する、シミュレーションを実現している力学、近似理論、数値計算法、計算機利用技術の基礎を学ぶ、等を目的としている[1]。

本演習の位置付けや HPC 教育の必要性に関する筆者の考え方、演習内容、等については、平成 13, 14 年度の報告書として、スーパーコンピューティングニュース[2][3]にも詳しく述べている。なお、本演習は、システム創成学科で実践している PBL (プロジェクト・ベースド・ラーニング、システム創成学科のカリキュラムでは「プロジェクト」と称する)を中心としたカリキュラムの一環として行われたものである。システム創成学科では、科学技術の専門分化によるいわゆるタコ壺化に陥ることなく、領域を越えた幅広い「知」を創造しこれを総合的に捕らえることができる人材の育成を目指している。「プロジェクト」はこれを実現するための方法として、平成 13 年度の学科創設時に従来型のインプット重視の講義体系を抜本的に見直して作り上げられたもので、学会[4,5]や新聞[6]、大手予備校の情報誌[7]などでも紹介されている。

2. 実施方法

2.1 演習内容の概略

図1はあらかじめ学生に示されたシラバスである。このテーマの履修者は12名(本テーマを含め同時に3つのプロジェクトテーマが実施されており、学生はそのどれかひとつを選択)であり、3名ずつの4チーム編成とした。具体的な内容は以下のようなものである：

- ・産業界における HPC の現状を学ぶ。
- ・構造信頼性を検討しようと思う問題をなるべく実際的な条件で各チームが設定する。
- ・CAD、並列有限要素解析、ビジュアライゼーション等のソフトウェアを使いこなす。
- ・モデリング(形状/境界条件/要素分割など)、計算効率、解析結果に基づく構造健全性評価、などの側面からシミュレーション結果を討論する。

講義の回数としては7回(7週)割り当てられている。講義時間の殆どはグループごとの演習やコンサルティングに費やされたが、期間中、学生は課題をこなすためにカリキュラム上の時間帯(13:00~17:30)以外にかなりの時間を割くことが要求された。なお、図1のシラバスに書かれた「毎回の内容」は、演習の進み具合に応じてかなり変更された。

3年夏学期ということもあり、学生はそれまでにC言語、数値計算、Windows、Unix、コンパイルなどの基礎的な知識を身に付けてはいるものの、CAD、有限要素法、要素分割、境界条件の設定、構造解析、流体解析、ビジュアライゼーション、並列解析、MPI、バッチ処理といったCAEやHPCの個別技術に関する知識や経験はゼロに近い。また、ネットワーク環境についても、殆どの学生はメールやWEBなどには日常的にアクセスしているのみであった。したがって、演習を実施するにあたっては、課題自体に関する事柄に加え、ソフト、ハードの環境を使いこなすためのドキュメント整備、コンサルティングに多くの時間を割いた。謝辞にもあるように、関係各方面からの支援も頂いた。ただし、この分野の常であるが、計算

機環境に関する知識がずばぬけて豊富な学生が数人おり、彼らの存在は演習を進める上で大変貴重であった。

名 称	超並列コンピュータを用いた複雑構造物の変形シミュレーション		
担当者	奥 田 洋 司 助教授		
学 期	3年夏学期 後半	時 間	水曜日 3～5限 (13:00～17:30)
場 所	本郷	Homepage	http://garlic.q.t.u-tokyo.ac.jp/~okuda/lecture/
目 的	超並列コンピュータやクラスタコンピュータを駆使して実験や理論的アプローチが困難な問題を解明するための大規模で複雑な計算を行う様子を、ハイパフォーマンス・コンピューティング(HPC)という。HPCは、産業機械、自動車、航空、船舶、土木、建築、原子力、電気電子など様々な理工学分野において、先端的な技術開発のために必須の技術となりつつある。本演習では構造解析分野に注目し、実機構造物や機械部品のCADによるモデリング、並列有限要素解析ソフトウェアと並列コンピュータを用いた変形・応力計算、さらにビジュアライゼーションツールによる計算結果の可視化まで、一連のHPCプロセスを体験する。これによって、科学技術シミュレーションの威力と限界を理解する。		
Keyword	超並列コンピュータ、CAD、有限要素法、構造解析、ビジュアライゼーション		
実施方法	3～4名で1チームを構成する。産業界におけるHPCの現状を学んだ後に、構造信頼性を検討しようと思う問題をなるべく実際の条件で各チームが設定する。CAD、並列有限要素解析、ビジュアライゼーションのソフトウェアは提供されたものを用いる。モデリング(形状/境界条件/要素分割など)、計算効率、解析結果に基づく構造健全性評価、などの側面からシミュレーション結果を討論する。		
日 程 (詳細内容)	第1回 概要説明、班分け、講義「産業界におけるHPCの現状」 第2回 例題設定、ソフトウェア環境、計算機環境の説明 第3回 モデリング 第4回 解析と可視化 第5回 成果発表の準備 第6回 成果発表と討論 第7週 予備日		
教 材	使用予定のソフトウェア： 3次元ソリッドモデラ、メッシュジェネレータ、並列有限要素解析ソフトウェア「GeoFEM」、ビジュアライゼーション・ソフトウェア 参考文献： 矢川・関東・奥田，現代工学の基礎 計算力学，岩波書店 日本機械学会編，固体力学におけるコンピュータアナリシス，コロナ社 川井・岸（共編），機械のため有限要素法入門，オーム社 その他、資料を適宜配布する。		
成績評価	出席と成果発表での出来、討論への参加意欲により行う。		
受講者へのメッセージ	本演習では、各種のソフトウェアを使いこなし、かつ世界最大級のコンピュータを利用することで、HPCの実際や産業界での設計開発プロセスの一端が体験できます。演習ではソフトウェアをブラックボックス的に使いますが、シミュレーション結果を見たときに、そこに用いられている力学や近似理論についても大いに興味を持って欲しいと思います。		

図1 シラバス

2.2 ハードウェア環境・講義形態

演習では後で述べるように様々なソフトウェアを用いたが、並列有限要素解析には、東京大学情報基盤センターとシステム創成学科シミュレーションコースとの申し合わせのもとに HITACHI SR8000/MPP の専用キュー（1 ノード）を使わせて頂いた。本コースの学生は全員ノートパソコンを貸与されており、Windows 環境で動くソフトウェアに関してはこのノートパソコンを用いた。

シミュレーションコースの講義室には無線 LAN が敷設されており、それを利用して講義や演習に必要な資料の提供、データ配信、情報交換などはすべてネットワーク経由で行った。各種のドキュメントも講義の進行に従って HTML 化し[2]、講義の時間中も、教官、学生ともにノート PC に向き合うというスタイルで行われた。

2.3 ソフトウェア環境

本プロジェクトでは、モデリングから並列解析を経て可視化までの一連の CAE プロセスを体験するために、表 1 に示すような応用ソフトウェアを用いた。概ね、演習で利用する順番に並べてある。できる限りライセンスフリーの環境を選んでいる。また、演習の目的に鑑み、個々のソフトウェアは「使いこなせる」ものであれば良いとし、理論やプログラミングについては後回しに位置付けている。

表 1 用いた応用ソフトウェア

	用途・機能	名称	OS	開発元
1	3次元形状作成	GMMSolid	Win	ACROVA 社製
2	自動要素分割	KSWAD	Win	クボタ社製
3	自動要素分割	GRID3D-UNST	Unix	原研 CCSE (フリー)
4	要素の可視化・境界条件の設定	GPPView	Win/Unix	東大・RIST (フリー)
5	領域分割	PartGeoFEM	Unix	東大・RIST (フリー)
6	並列有限要素解析	GeoFEM Ver.4.0	Unix	東大・RIST (フリー)
7	解析結果の可視化	MicroAVS	Win	ケイ・ジー・ティー社製
8	並列解析結果の1領域への結合	Merge	Unix	東大・RIST (フリー)

3. 演習の状況紹介

第1回 (5月28日)

< 諸準備 >

- ・顔合わせ、グループ分け、メールアドレス調査、写真撮影、一般的注意

< 配布資料 >

- ・計算力学とは、大規模計算力学
- ・コンピュータアーキテクチャ
- ・CASOW (<http://fair.ks.suwa.tus.ac.jp/casow/>)

< イントロダクション >

- ・プロジェクト概要、目標、進め方の説明
 - ・「一連の CAE (Computer Aided Engineering) プロセス」とは
- < 課題 1 (5 月 28 日 提示、6 月 4 日 締切) >
- ・WEB 経由で以下のソフトウェアの情報を収集し、機能を調査せよ。GeoFEM, NASTRAN, ABAQUS, FINAS, FEMAP, ADVENTURE。

第 2 回 (6 月 4 日)

< 演習 >

- ・CASOW (WEB アプリケーション) を使って、GeoFEM を用いた有限要素解析を実施。

第 3 回 (6 月 11 日)

< ツール、データの配布 >

- ・ssh 対応通信ソフト (TeraTerm と ttssh)
- ・サンプルメッシュデータ (GeoFEM の例題集、ボルト)
- ・GeoFEM 実行バイナリ
- ・可視化ソフト
- ・メッシュ表示・境界条件設定ツール (GPPView)

< SR8000-MPP への登録 >

- ・初期パスワード配布
- ・newuer で入って初期登録、その後、パスワード変更
- ・SR 利用に際しての注意

< GeoFEM のデータ構造の説明 >

- ・GeoFEM の WEB にあるオンラインチュートリアルを参考に。
(http://geofem.tokyo.rist.or.jp/tutorial/mesh_tutorial/index.html)

第 4 回 (6 月 18 日)

< PC と SR 間のデータ転送方法 >

- ・IE を使って ftp する方法
- ・WinSCP を使って ftp する方法

< SR8000 上での GeoFEM の実行デモ >

- ・入力データ (in.0 と control) の説明 (ボルトのデータを使ってデモ)
- ・出力データの説明 (変位、応力)
- ・「GeoFEM のインストール、入力データ、SR 上でのテストラン」のページを参照。SR ではスクリプトを作成し mpp-s からバッチジョブを投入。
- ・ボルトの解析結果サンプル

< MicroAVS、GPPView による可視化デモ >

- ・GeoFEM の計算結果は MicroAVS の UCD フォーマットで出力される。拡張子は .inp
- ・GPPView データの拡張子は .fem

< 3 次元 CAD によるモデリングについて >

- ・ GMMSolid を各グループに配布、利用方法の説明
- ・ GMMSolid に IGES2 出力機能を追加するパッチが必要。トップページから入手。
- ・ JAERI-MESH について（サンプルメッシュの入手、GeoFEM フォーマットへの変換実行バイナリ、など）

< SR8000 上でのサンプル実行（各自） >

- ・ データは、ボルトをはじめ example 以下にあるデータの 1 領域のもの。

< 課題 2（6 月 18 日提示、6 月 24 日締切） >

（ 1 ） CASOW のモニターレポート（バグ、使い勝手）

（ 2 ） SR 上で GeoFEM のサンプルデータ（ボルトを含む）を計算実行（1 領域データでよい）し、結果を MicroAVS で可視化する。少なくとも、ボルトとカーボンブロックの 2 種類。レポートには、一連の処理の流れを自分なりに再度まとめ、解析結果については、図を適宜貼り付ける。応力分布、変形図は必ず示すこと。トップページに図をキャプチャーするツールのダウンロード先が紹介されている。

（ 3 ） GMMSolid の基本的な操作をマスターする。まずは、プリミティブの集合演算で簡単な形状を作成でき、そのデータを IGES2 フォーマットで出力できるようになること。レポートには、作成した図を掲載すること。

第 5 回（6 月 25 日）

< モデリングから可視化までの一連の流れ >

< 配布資料 >

- ・ 有限要素解析の実際に関する参考資料
- ・ GeoFEM 解説記事
- ・ GeoFEM 関連論文

< JAERI-MESH >

- ・ JAERI-MESH の実行バイナリとマニュアルの配布
- ・ JAERI-MESH の利用の仕方について（以下の 2 通り）
 - 原研サンプルメッシュの入手と GeoFEM フォーマットへの変換
 - GMMSolid で作成した IGES2 データの、JAERI-MESH による自動要素分割

< 境界条件の設定 >

- ・ in.0（境界条件データ部分）の説明
- ・ control（境界条件データ部分、物性値設定、ソルバ選択など）の説明
- ・ GPPView を用いた作業
- ・ 境界条件、物性値を変えてみる。

< SR8000 上でのサンプル実行（各自） >

- ・ GMMSolid で作成した簡単な問題について、自動要素分割、境界条件設定、オンラインチュートリアルでのメッシュチェック、SR での解析、可視化。

< 各グループの例題決定 >

< 課題 3（6 月 25 日提示、7 月 2 日締切） >

（ 1 ） 参考資料（資料 3,4）を読み、有限要素解析の一連の流れを理解する。これについては、読むだけでよい。

（ 2 ） 資料 5,6,8 やオンラインチュートリアル、static_incar のマニュアルを参考に、in.0 および control についてまとめる。具体的に、ボルトの例題を取り上げて解説する。

(3) ボルトの例題について、以下のように境界条件を変更して解析を実施し、その結果を報告する。

ケース1：先端を固定、ナット部にねじりの変位を与える。

ケース2：先端を固定、ナット部にねじりの変位を与え、かつ、ボルトに曲げの外力を負荷する。

(4) ボルトの例題について物性値を変更して解析を実施し、その結果を報告する。課題(3)の両ケースについてヤング率を変更して、結果の相違を考察する。

(5) 各自がこれから作成する例題の構想(形状と境界条件、何を評価したいか?)

第6回(7月2日)

<配布資料>

- ・1次元の有限要素法
- ・2次元の有限要素法

<1PEの計算から並列計算へ>

- ・パーティショニング(PartGeoFEM)(GeoFEMでは「領域数=PE数」が前提)
- ・可視化(解析結果の1領域への結合、ucd1)
- ・並列実行のためのバッチジョブスクリプト
- ・ボルトの例題による並列解析のデモ(課題3(2)で調査した「bolt.xのデータ構造」の確認を含む)

<SR8000上でのサンプル実行(各自)(課題4の一部を含む)>

- ・ボルトの例題を、領域数を変えて並列解析を実施、計算時間のモニター。
- ・ボルトの並列解析結果を可視化。部分領域ごと(並列計算の場合)/全体領域(1領域計算の場合)の両方で。
- ・JAERI-MESHのページから以下に指定されたメッシュを取り寄せ、並列解析を実施する。

グループ1	チャッキングコレット	グループ2	部品A
グループ3	ソケット	グループ4	リンク

<各自の解析モデル作成状況の確認>

<課題4(7月2日提示、7月9日締切)>

(1) 配布したトリケラトプスのGeoFEMデータ(トップページからダウンロード、tri.0とtri_control)について、境界条件を変更し、並列解析を実施した結果をレポートする。レポートには少なくとも以下の内容を含むこと:

- ・境界条件、物性値。いずれも単位系に注意する。
- ・メッシュ図
- ・変形図
- ・ミーゼス応力分布図

(2) JAERI-MESHのページから指定のメッシュを取り寄せ、境界条件を設定し、並列解析を実施した結果をレポートする。レポートには少なくとも以下の内容を含むこと:

- ・境界条件(どこかを拘束(固定)、どこかに荷重を負荷)、物性値。いずれも単位系に注意する。
- ・メッシュ図
- ・変形図
- ・ミーゼス応力分布図

- ・ミーゼス応力の最大値を、この例題の材料の降伏応力と比較して考察する。
- ・余裕があれば、境界条件を変えてみて、最大応力発生箇所がどのように変わるかをみってみる。

(3) 各自の解析モデルについて、CADモデル作成およびメッシュ生成を行った結果をレポートする。

第7回(7月9日)(最終回)

<おわりに>

- ・総括
- ・さらに学んでほしいこと
- ・後処理

(1)GMM-Solidの返却

(2)各種データの提出

<課題5(7月9日提示、7月31日締切)>

(1) 各自作成したモデルについて、並列解析を実施する。その結果について、構造強度的観点、および並列計算における演算性能の観点、の2点から考察を行う。

問題設定について、以下の点は最低限明らかにしておく。

- ・CADモデル作成にあたって前提としている近似(構造の単純化など)。モデル作成の要領。
- ・境界条件(拘束条件や荷重条件)、物性値。いずれも単位系に注意する。
- ・CADモデルの図
- ・節点数、要素数、メッシュ図
- ・解析で何を明らかにしようとしているのか? 最大応力か? 変形やひずみの最大値か? など

計算は同じメッシュに対して、PE数(領域分割数)を少なくとも1、2、4、8の4通りで実施する(もちろん答えは同じはず)。その結果から、横軸にPE数、縦軸に $T1/Tn$ ($T1$ は1PEでの計算時間、 Tn は n PEでの計算時間)をとったグラフを作成し、PE数を増やすにつれて、リニアスピードアップからどの程度、効率が下がるのかを調査する。同じCADモデルに対して、小規模(節点数:千~万)、大規模(節点数:数十万~百万)と2種類メッシュを作成し上記の並列化による高速化にどのように影響するかを調査する。

計算結果の説明には少なくとも以下のものを含めること

- ・変形図
- ・ミーゼス応力分布図

構造強度的観点からは

- ・変形量や応力値から、構造信頼性について考察する。
- ・余裕があれば、境界条件を変えてみて、同様の考察を行う。

(2) SR8000の利用にあたってのモニターレポート。(箇条書き)

(3) 本プロジェクト課題についての感想。(箇条書き)

(4) 提出した各種データファイルの簡単な説明。ファイル名、内容、など。

4 . 学生レポートより

4 . 1 3次元形状モデリング、メッシュジェネレーション、パーティショニング

各自の興味に基づいて構造解析（3次元静的弾性解析）の対象、境界条件を決めると、まずはGMMSolidを用いて、プリミティブ（primitive, 直方体や円柱などの基本的な立体要素）の集合演算によりモデル作成を行う。図2にCADモデルの例を示す。昨年度までの経験から、メッシュ分割に負担のかからないような形状モデリングを予め指導した。

次に、プリミティブの集まりであったCADデータを、番号付けされた節点（node）と要素（element）からなるモデルに変換し、有限要素解析（ここでは構造解析）のためのデータを作成する。日本原子力研究所計算科学推進センター（CCSE）のGRID3D-UNSTを用いて作成した。ただし、GRID3D-UNSTにも様々なバグがあり、モニターとして貢献することができた。

境界条件データの作成は、GPPView（メッシュ表示ツール）の機能を用いて行う。すなわち、面や点の情報を抽出し、エディタ経由で上記の要素データに加えることにより、完成したフォーマットの有限要素法の入力データを作成する。また、GPPViewを用いて、メッシュデータを様々な方向から眺め、確認する。

これまでの手続きで作成されたデータは、1領域からなる通常の有限要素解析の入力データである。並列解析を行うGeoFEMでは、 n 個のPE（Processing Element、プロセッサ）を用いて並列計算する際、解析領域を n 個にパーティショニング（領域分割）し、各部分領域の計算を各PEに担わせる。パーティショニングでは、1領域の入力データをPartGeoFEMに通すことで、並列計算用に分割して複数の入力データが作成される。

ここまでに並列解析のためのデータが準備できたことになる。以下に、いくつかの事例を紹介する。

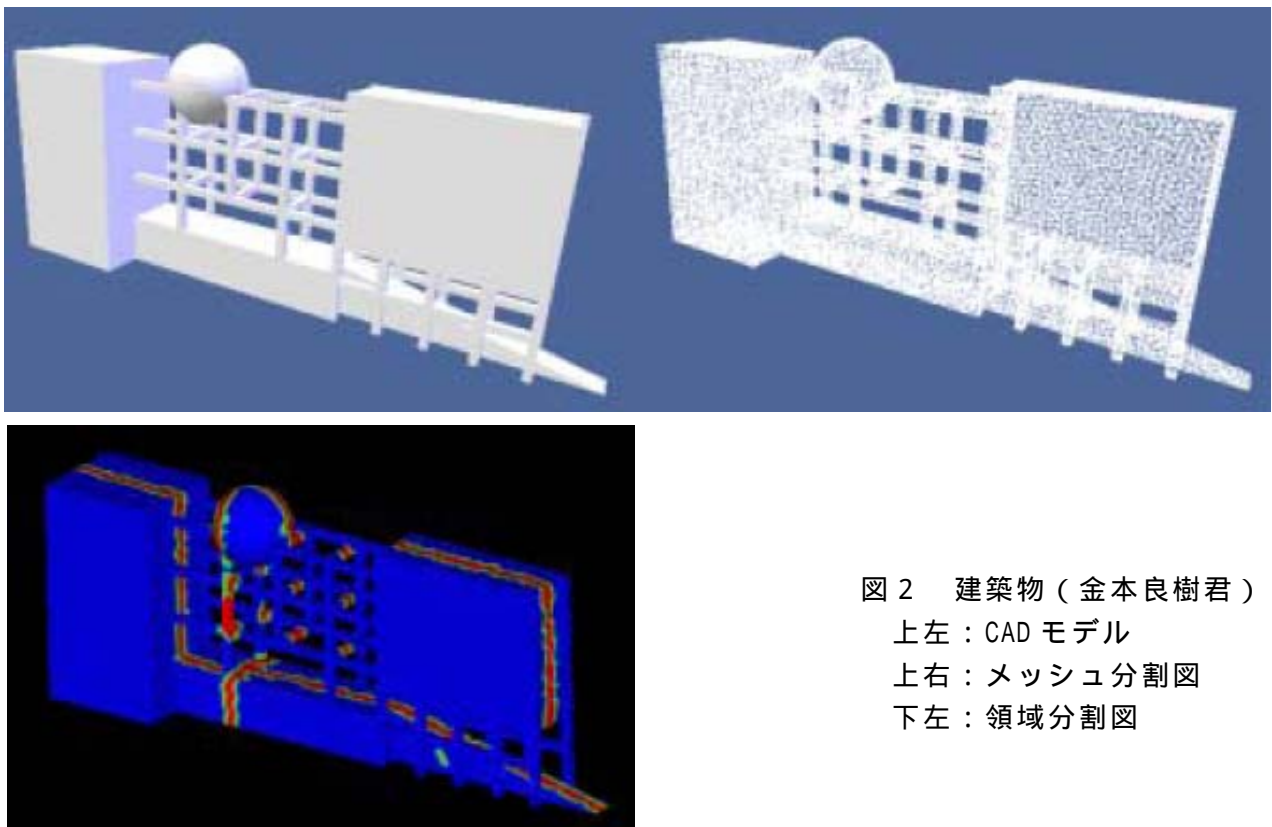


図2 建築物（金本良樹君）

上左：CADモデル

上右：メッシュ分割図

下左：領域分割図

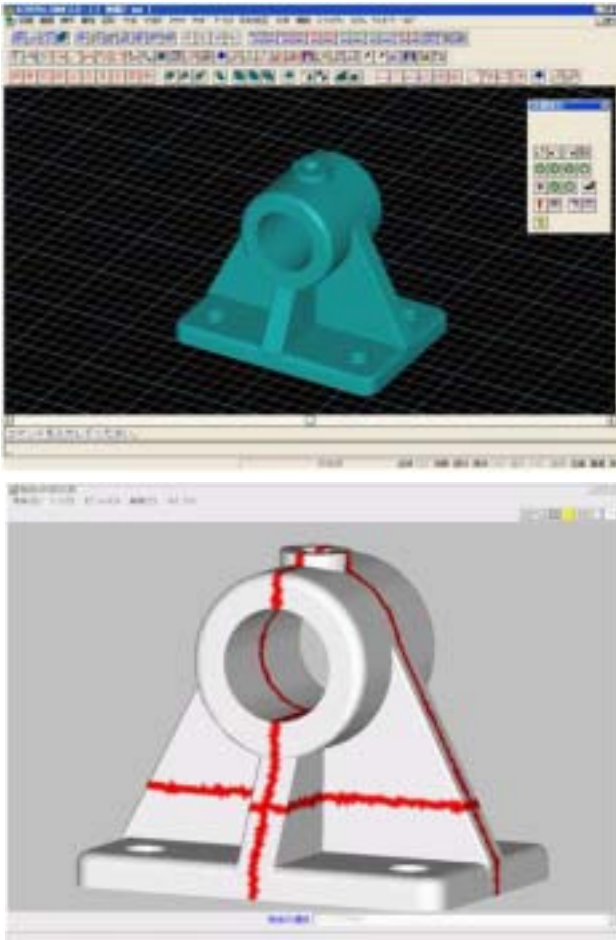


図3 軸受け（佐藤陽平君）

上左：CADモデル
 上右：メッシュ分割図
 下左：領域分割図

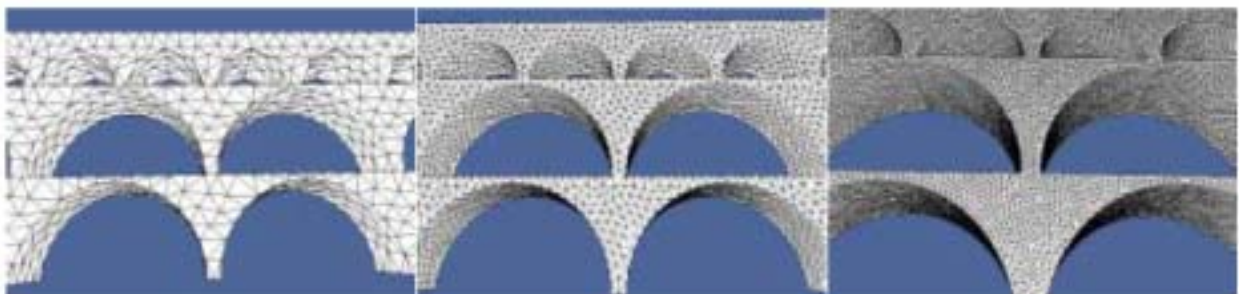
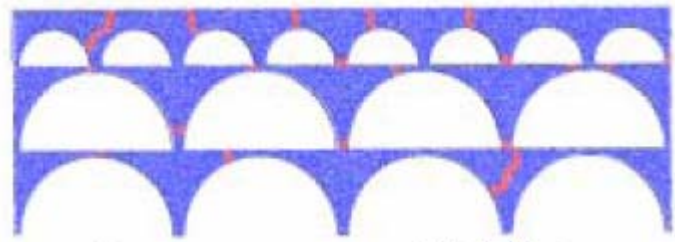


図4 ポン・デュ・ガール水道橋（梅城崇師君）

上左：ガール水道橋、上右：8領域への分割、下：メッシュ分割（要素数：3K, 30K, 300K）

4.2 有限要素解析、解析結果の可視化、並列計算

時間を要する GeoFEM のコンパイル作業は省略し、コンパイル済みの実行モジュールを予め用意し提供した。各学生はそれぞれの設定した問題と、教官がメッシュを与えた問題について並列有限要素解析に取り組んだ。GeoFEM の計算結果は可視化ツール AVS の UCD 形式で出力される。MicroAVS は筆者の研究室に導入されているライセンス版 2 本の他に、ノート PC では体験版を用いた。並列解析結果は各部分領域ごとに、もしくは統合ツール merge を用いて 1 領域データに変換して MicroAVS で表示する。可視化後の画像データはさらに加工してレポートに貼り込んだり、アニメーションを作成することを推奨した。最後に、学生レポートからいくつかの事例を紹介する。

5. おわりに

平成 13 年度、14 年度に引き続き、平成 15 年度においても、CAD モデリング、SR8000 での並列 GeoFEM 計算、可視化まで一連の CAE プロセスを実行するプロジェクトを実施した。3 年目を迎えてようやく演習の実施も手際よくなり、学生にとっては大変であったと思うが、多くのレポート課題をこなすことができた。とくに並列有限要素解析の実施において情報基盤センターの SR8000 による並列計算の体験を積ませることができたのは大変有意義であった。

謝辞

本プロジェクトの遂行にあたりまして、東京大学情報基盤センターより SR8000-MPP の利用環境を試験的に提供して頂きました。同センタースーパーコンピューティング部門の金田康正教授より有益なアドバイスと本プロジェクト実施への励ましを頂きました。日本原子力研究所計算科学推進センター (CCSE) より四面体要素による要素分割データを提供して頂きました。高度情報科学技術研究機構 (RIST) の GeoFEM 開発チームより様々なドキュメントの提供、アドバイスを頂きました。この場をお借りして皆様にお礼申し上げます。

参考文献

- [1] 講義 WEB ページ http://garlic.q.t.u-tokyo.ac.jp/~okuda/lecture_H15/index.html
- [2] 奥田洋司, 東京大学情報基盤センター SR8000 を用いた HPC 教育への取り組み, 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.3, No.6, pp.26-42, 2001.
- [3] 奥田洋司, 東京大学情報基盤センター SR8000 利用報告書, 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.5, No.4, pp.20-29, 2003.
- [4] 吉村忍, 奥田洋司, 東京大学システム創成学科シミュレーションコースにおける CAE・HPC 教育, 計算工学, Vol.7, No.2, pp.470-475, 2002.
- [5] 奥田洋司, JAERI-MESH と GeoFEM を用いた HPC 教育への取り組み, 第 1 回 CCSE ワークショップ-JAERI-MESH の現状と将来-, pp.19-29, 2002.
- [6] 日刊工業新聞 (H16.3.18 付)
- [7] (奥田洋司), 変わり始めた大学教育 PART2, Guideline 河合塾全国進学情報センター, 2003, 11 月, pp.26-29, 2003.

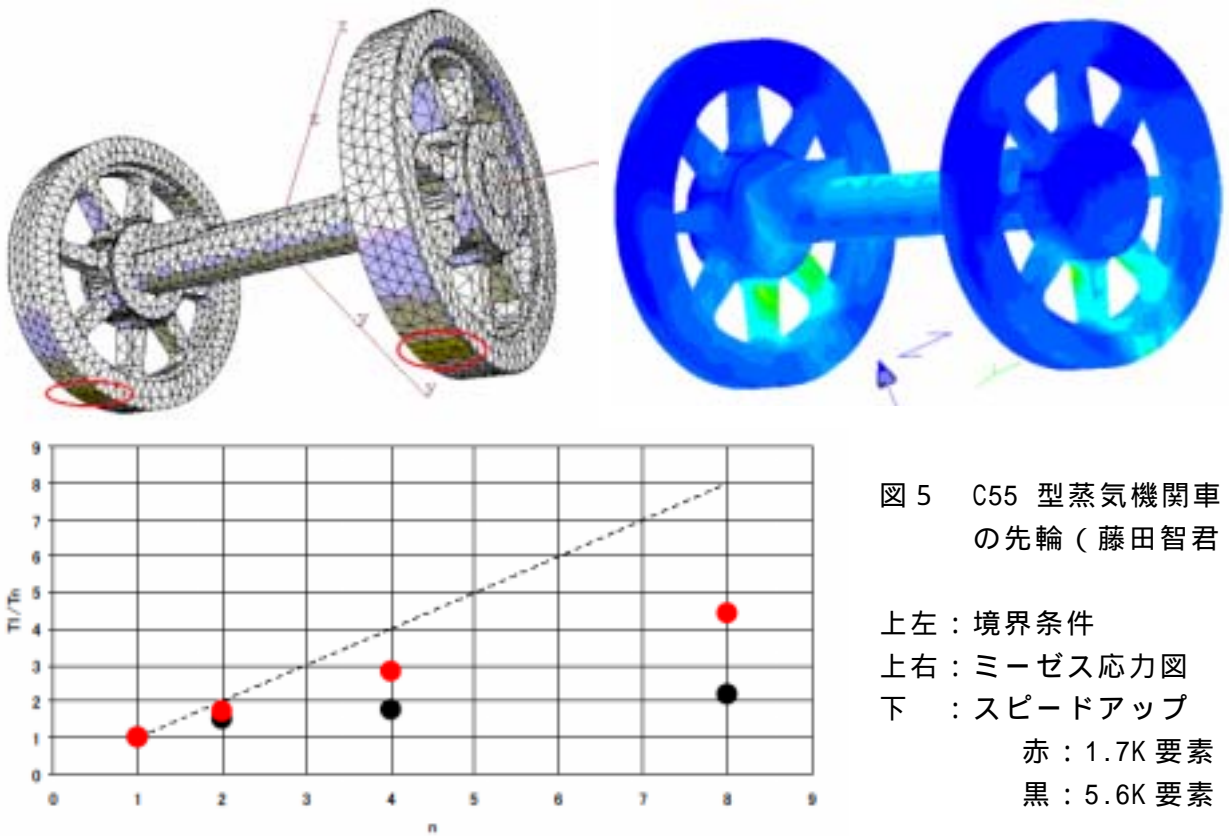


図5 C55型蒸気機関車の先輪(藤田智君)

上左: 境界条件
 上右: ミーゼス応力図
 下: スピードアップ
 赤: 1.7K 要素
 黒: 5.6K 要素

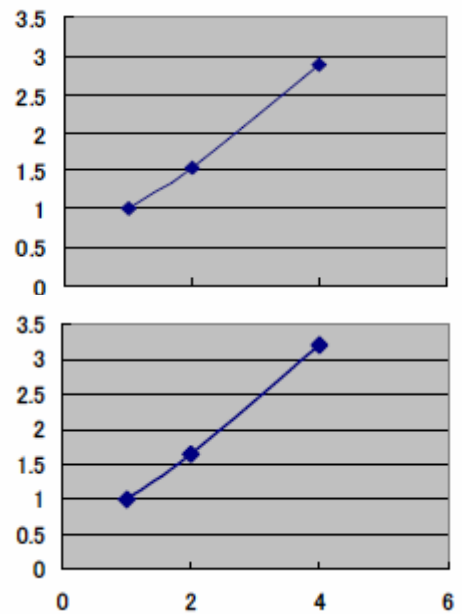
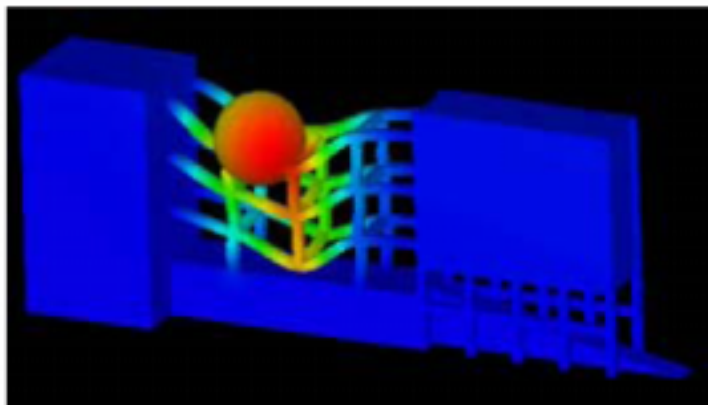


図6 建築物(金本良樹君)
 左: 変形図(10,000倍表示) 右: スピードアップ(上: 10K 要素、下: 100K 要素)

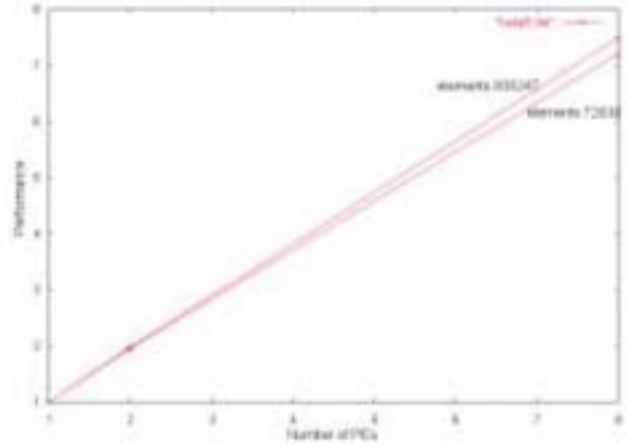
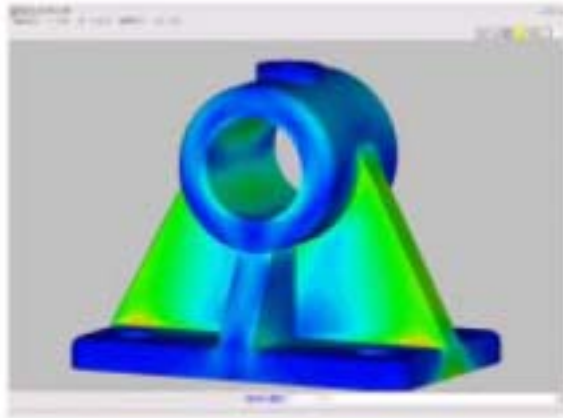


図7 軸受け (佐藤陽平君)
 左：ミーゼス応力図、右：スピードアップ (上：70K 要素、下：800K 要素)

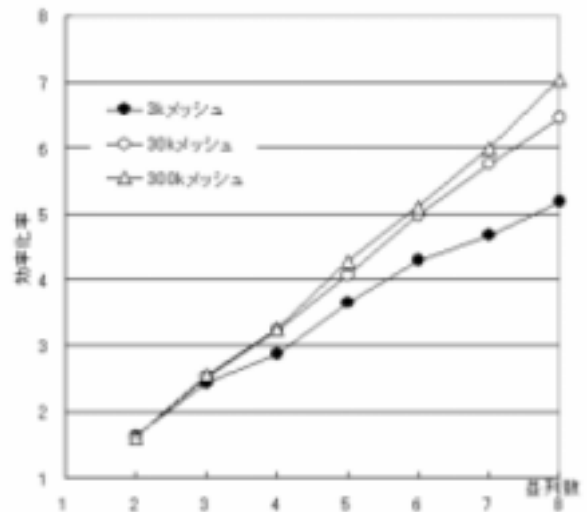
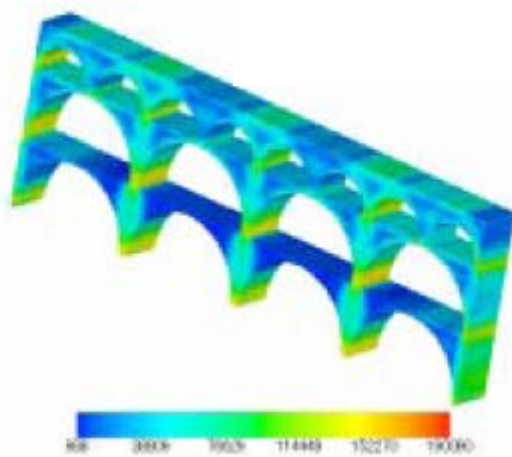


図8 ポン・デュ・ガール水道橋 (梅城崇師君)
 左：ミーゼス応力図、右：スピードアップ (300k 要素、 30k、 3k 要素)