

スーパーコンピューティング・サービスの概要

主任研究員 松澤 邦裕

アドバンスソフト株式会社のスーパーコンピューティング・サービス活用セミナー
2015年8月27日（木）開催
アドバンスソフト株式会社

スーパーコンピューティング・サービスの概要

アドバンスソフト株式会社のご紹介

アドバンスソフト株式会社 会社概要

アドバンスソフト株式会社はシミュレーションや関連ソフトウェア開発を中心とした計算科学技術の専門企業として、2002年4月に設立されました。当社は、産業の基盤技術である計算科学技術を中心としたデジタルエンジニアリング技術において、世界をリードする企業になることを目指しています。

名称 アドバンスソフト株式会社

英文名 AdvanceSoft Corporation

本社 〒101-0062

東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地

新お茶の水ビルディング17階西

TEL:03-6826-3976 FAX:03-5283-6580

URL <http://www.advancesoft.jp>

設立 2002年(平成14年)4月24日

資本金 3,724 万円

従業員数 76 名

役員

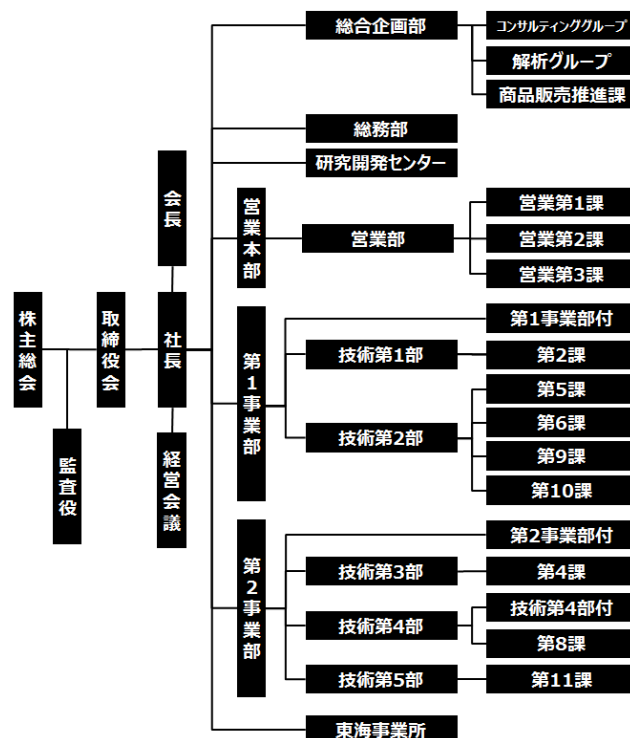
代表取締役会長 小池 秀耀

代表取締役社長 松原 聖

専務取締役 三橋 利玄

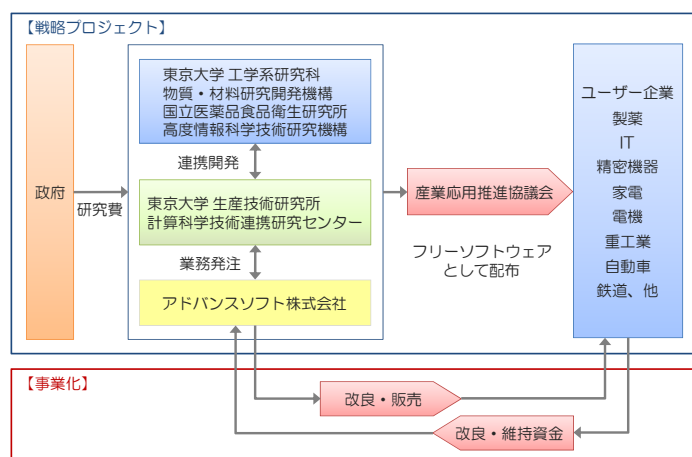
取締役 田崎 好重

監査役 平林 寛治

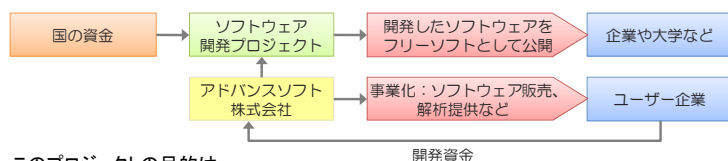


Copyright ©2015 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

国家プロジェクトとアドバンスソフトの設立



研究開発成果の事業化



このプロジェクトの目的は

- ①複雑・大規模な世界水準の戦略的基盤ソフトウェアを開発し公開する
- ②戦略ソフトを開発できるトップレベルの人材を世界最先端のソフトウェア開発を通じて育成する
- ③戦略的基盤ソフトウェア開発の大学と企業の連携による研究拠点の構築をする
- ④アドバンスソフトによる開発したソフトウェアの事業化と持続的な改良をする

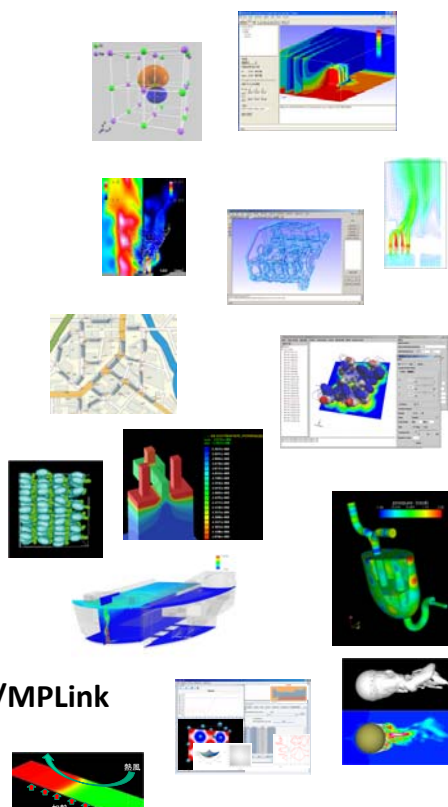
文部科学省はわが国の計算科学技術の振興目的として戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクトと革新的シミュレーション・ソフトウェア開発プロジェクトを2002年～2007年の6年間実施しました。このプロジェクトは、総額約70億円のわが国最大のソフトウェア開発プロジェクトであり、東京大学 生産技術研究所を中核とした「学」と「産」のアドバンスソフト(株)の強力な産学官連携により推進されました。

アドバンスソフト(株)はこのプロジェクトを推進し、世界最高水準のソフトウェアを開発するとともに、その成果を事業化することを目的として設立されました。

Copyright ©2015 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

アドバンスソフトが開発販売するソフトウェアパッケージ

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE
汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP
流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red
気液二相流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP
構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR
管路系解析ソフトウェア Advance/FrontNetシリーズ
フラグメント分子軌道法計算ソフトウェア ADBS
3次元デバイスシミュレータ Advance/DESSERT
音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise
都市安全・環境シミュレータ Advance/EVESAYFA
ソフトマテリアル統合シミュレータ Advance/OCTA
大規模固有値ソルバー Advance/NextNVH
非定常渦電流解析プログラム Advance/MAGNETIC
高速流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/FOCUS
材料設計統合システム
塗布シミュレータ
シミュレーション連携(連成解析)ソフトウェア Advance/MPLink
2次電池CADシステム Advance/ABaS
LSI設計用CADシステム Advance/TCAD(開発中)



スーパーコンピューティング・サービスの概要

スーパーコンピューティング・サービス

スーパーコンピュータと対応ソフトの一覧

● 日本を代表するフラッグシップのスーパーコンピュータ

- ・スーパーコンピュータ「京」
※利用申請先: 一般財団法人高度情報科学技術研究機構様
- ・地球シミュレータ(大規模共有メモリスistem SGI UV2000)
※利用申請先: 国立研究開発法人海洋研究開発機構様

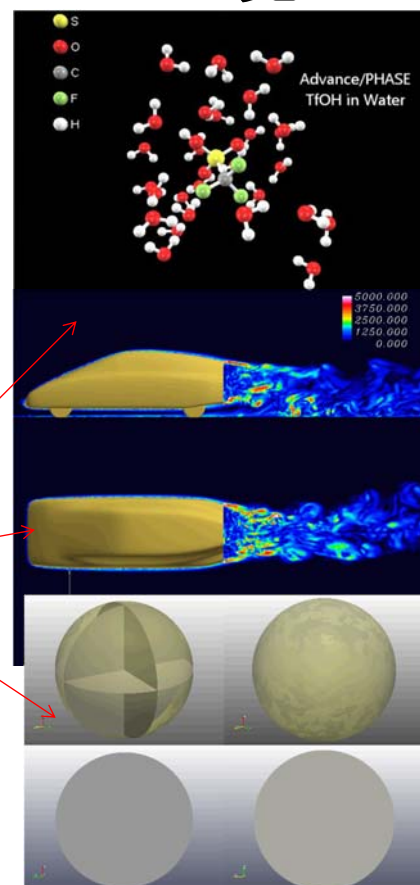
・スーパーコンピュータを最大限に活かせるソフトウェアを開発

・第一原理計算ソフトウェア	Advance/PHASE
・流体解析ソフトウェア	Advance/FrontFlow/red
・構造解析ソフトウェア	Advance/FrontSTR
・音響解析ソフトウェア	Advance/FrontNoise
・気液二相流解析ソフトウェア	Advance/FrontFlow/MP (※1)
・3次元デバイスシミュレータ	Advance/DESSERT (※2)

※1: スーパーコンピュータ「京」のみ提供

※2: 地球シミュレータ(大規模共有メモリスistem SGI UV2000)のみ提供

Copyright ©2015 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.



7

スーパーコンピューティング・サービスの概要

対応するスーパーコンピュータのご紹介

スーパーコンピュータ「京」

計算ノード	CPU	SPARC64™ VIIIfx 2GHz
	CPU性能	128 GF (16 GF x 8 cores)
	メモリ容量	16 GB
筐体の数		864
ノードの数		82,944
ネットワーク		Tofu インターコネクト (6D Mesh/Torus)
ピーク性能		10.62 PF
メモリ容量		1.26 PB
ファイルシステム		Fujitsu Exabyte File System (FEFS)
ストレージ		30 PB



Top500 2011年6月と11月に世界1位
Graph500 2014年6月と2015年7月に世界1位
HPCG 2014年11月と2015年7月に世界2位

「京」— プロセッサのスピード、
メモリ、通信のバランスがとれた
スーパーコンピュータ

地球シミュレータ (国立研究開発法人海洋研究開発機構様)

<http://www.advancesoft.jp/>



EARTH SIMULATOR

Top English お問い合わせ アクセス CEIST

Google カスタム検索

システムの概要

- ハードウェア
- ソフトウェア
- 施設
- 周辺システム
- 大規模共有メモリシステム (SGI UV 2000)
- 共用可視化サーバ (SGI UV 20)

ハードウェア

地球シミュレータは、NEC社製のスーパーコンピュータSX-ACEで構成される、世界最大規模の分散メモリ型ベクトル並列計算機です。総計5120ノードの計算ノードを有し、各計算ノードは1基のCPU(4コア)と64GBのメモリを搭載しています。

システム利用

- 公募課題による利用
- 文部科学省等の推進事業による利用
- 機構課題による利用
- 産業界等からの利用

システム運用状況

- 計算資源配分

アウトリーチ

- 研究成果
- 刊行物
- ギャラリー

ユーザーサポート

- 以前のシステム
- 地球シミュレータ(初代)
- 地球シミュレータ(ES2)

計算ノード

CPU数	1
コア数	4
演算性能 (コア当たり)	64 GFLOPS
メモリ容量	64 GB
メモリバンド幅	256 GB/s

システム

総ノード数	5120
総CPU数	5120
総コア数	20480
総合演算性能	1.3 PFLOPS
総メモリ容量	320 TB
総メモリバンド幅	1.3 PB/s

大規模共有メモリシステム SGI UV2000

- ご協力: 国立研究開発法人海洋研究開発機構 様
- 地球シミュレータに付属する大規模共有メモリシステム
- スーパーコンピューティング・サービスの対象



ハードウェア	SGI UV2000
CPU	Intel Xeon E5-4650 v2
ノード数	1
CPU数	256
コア数	10 cores/CPU
メモリ容量	32 TB
演算性能	49.152 TFLOPS

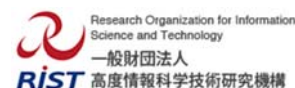


スーパーコンピューティング・サービスの概要

対応するソフトウェアのご紹介(概略)

⇒ 以後の動作検証と性能評価を行った環境

- 「京」と互換性をもつアーキテクチャ
- ご協力：一般財団法人高度情報科学技術研究機構 様
- 「産業利用推進のための「京」用シミュレーションソフトウェアの整備に関する共同研究」での動作検証と性能評価



FUJITSU PRIMEHPC FX10

ハードウェア	FUJITSU PRIMEHPC FX10
CPU	SPARC64 IXfx
ノード数	48
CPU数	1 CPU/node
コア数	16 cores/CPU
メモリ容量	32 GB/node
演算性能	211.2 GFLOPS/node



FUJITSU PRIMEHPC FX10

画像は <http://www.fujitsu.com/jp/products/computing/servers/supercomputer/primehpc-fx10/> より

Copyright ©2015 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

13

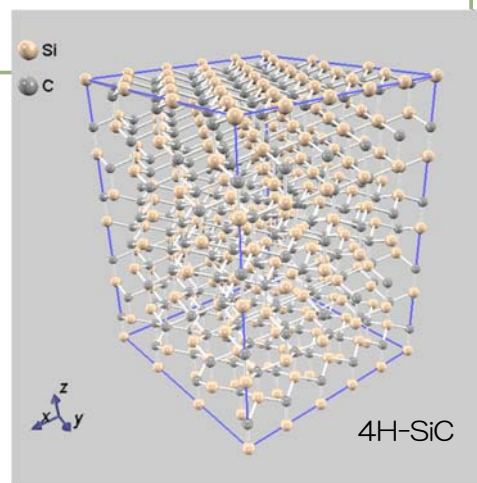
第一原理計算 Advance/PHASE

◎ 第一原理計算とは

実験結果などの経験的なパラメータを用いない第一原理 (first principles) による計算法。電子間、原子核間、および電子・原子核間のクーロン相互作用から、量子力学の基本法則である電子状態理論を使って電子分布を計算する。

◎ 事例①：半導体 4H-SiC のバンド計算

- ✓ 計算内容: SCF + Force + Stress
- ✓ 平面波数: 36237
- ✓ バンド数: 1442
- ✓ k点: 2 x 2 x 2 (monk), 計4点
- ✓ 原子数: 480
- ✓ 射影演算子数: 2880

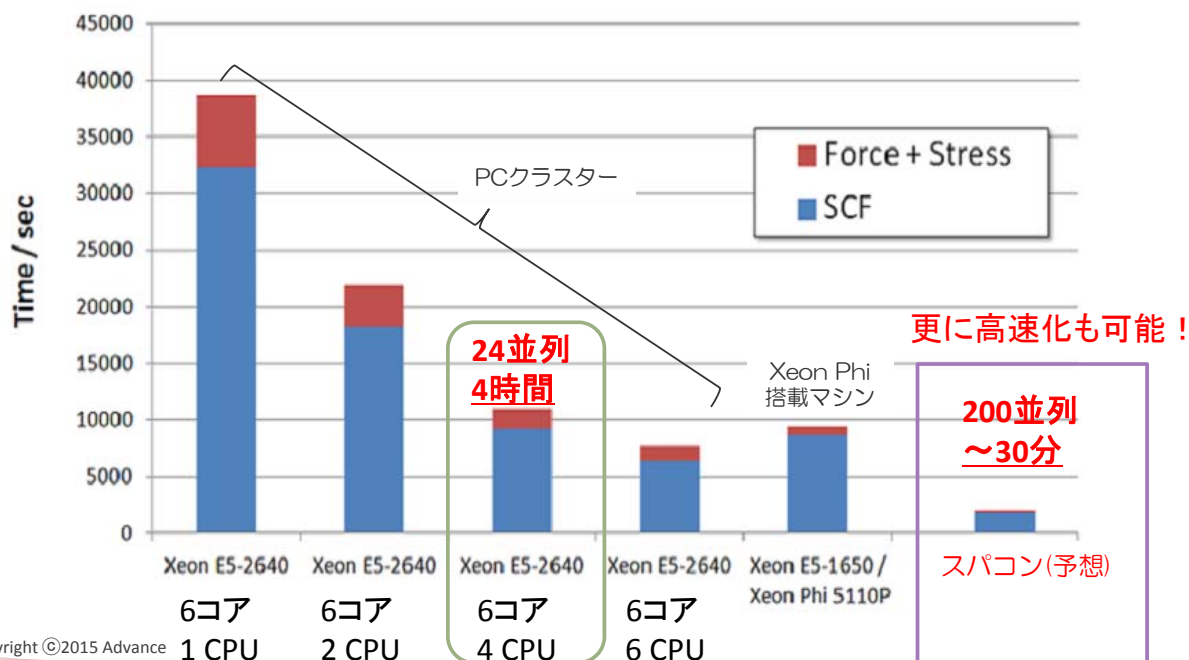


⇒ 計算時間 平均的なPCクラスタ(6コア × 4CPU) 約4時間

計算時間の短縮

マシン詳細

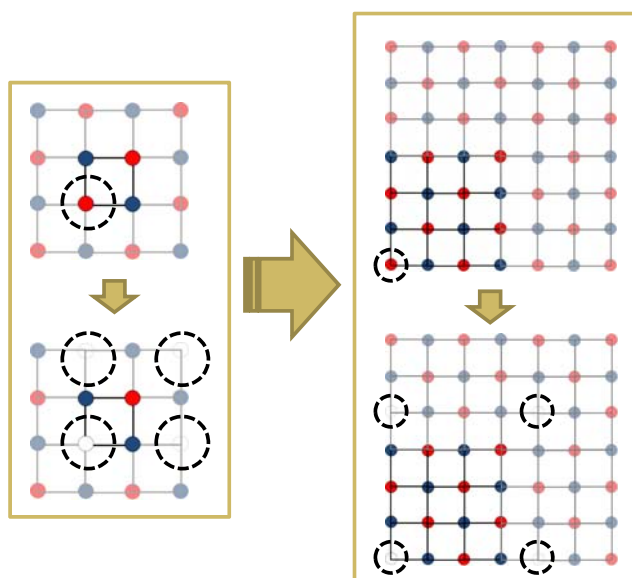
1. PCクラスター (Xeon E5-2640, 2.5GHz, **6 core**)
2. Xeon Phi搭載マシン (Xeon E5-1650, 3.2GHz, **6core** / Xeon Phi 5110P, 1.1GHz, **60 core**)
3. 海洋研究開発機構様 SGI UV2000 (Xeon E5-4650v2(2.4GHz, **10 core**)



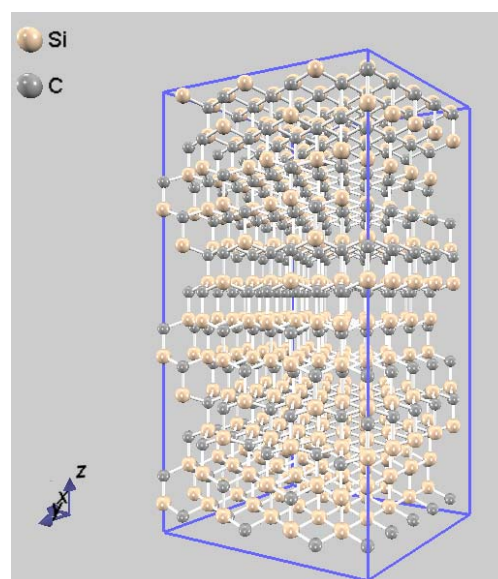
15

複雑な問題：結晶欠陥の第一原理計算

- 隣接セルの欠陥同士の影響を排除



- 原子数：480 ⇒ 720 (2.3~17倍)
- 第一原理計算： N^m ($m=2\sim7$) で計算量増加

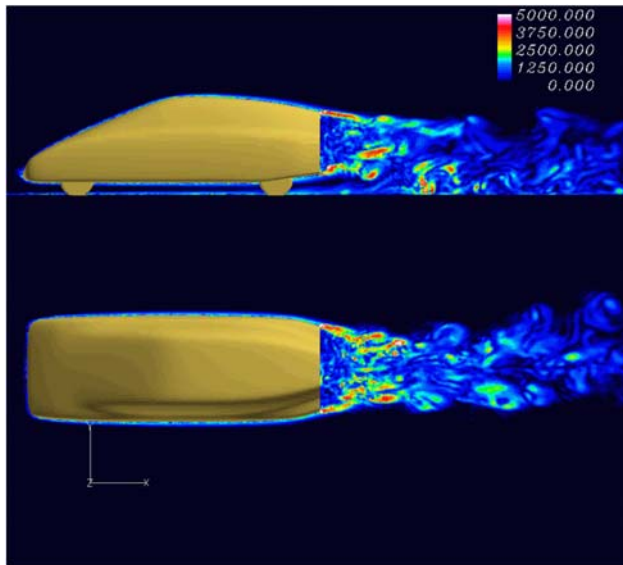


構造最適化を含めた全計算時間

- 一般的なPCクラスター : 1週間以上
- スーパーコンピュータ : 1日以内

流体解析 Advance/FrontFlow/red

車体(Ahmed Body)背後の壁面圧力の解析

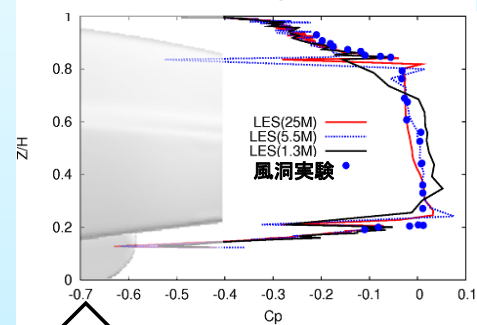


ご提供:
東京大学 生産技術研究所 様
革新的シミュレーションプロジェクト

モデル名	要素数	節点数
Ahmed Body	7,638,219	1,505,423
Refine1	75,448,584	11,771,974
Refine2	488,846,016	92,978,866

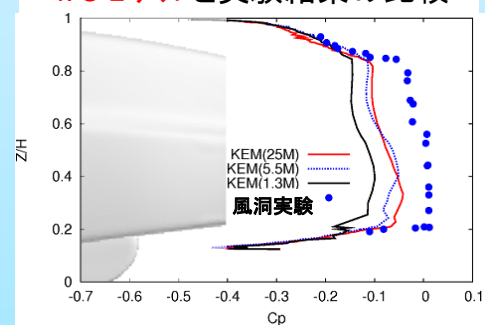
Copyright ©2015 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

LESと実験結果の比較



異なるモデルの結果

k-εモデルと実験結果の比較



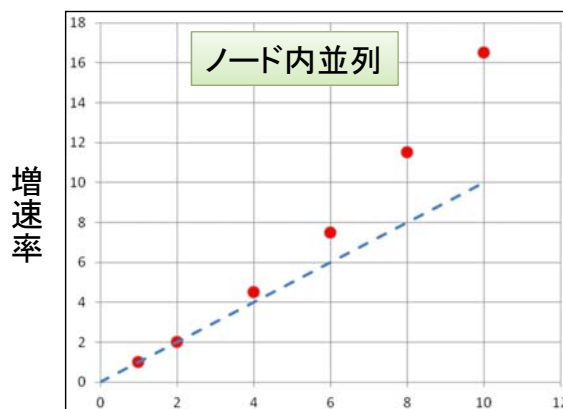
17

スーパーコンピュータでの性能評価

国立研究開発法人 海洋研究開発機構 様

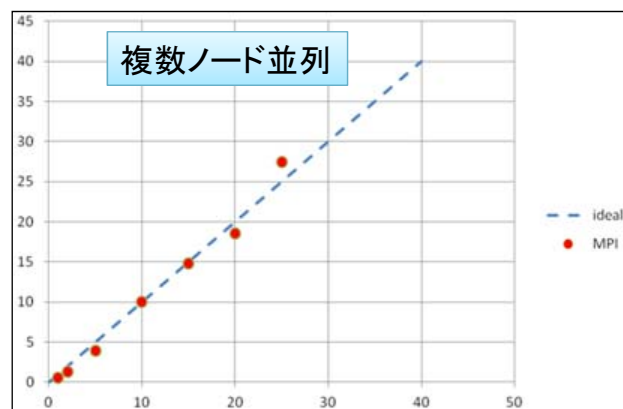
地球シミュレータ(大規模共有メモリシステム SGI UV2000)上で実証試験

Ahmedモデル 150万節点



コア数(最大10)

Refine1モデル 1177万節点



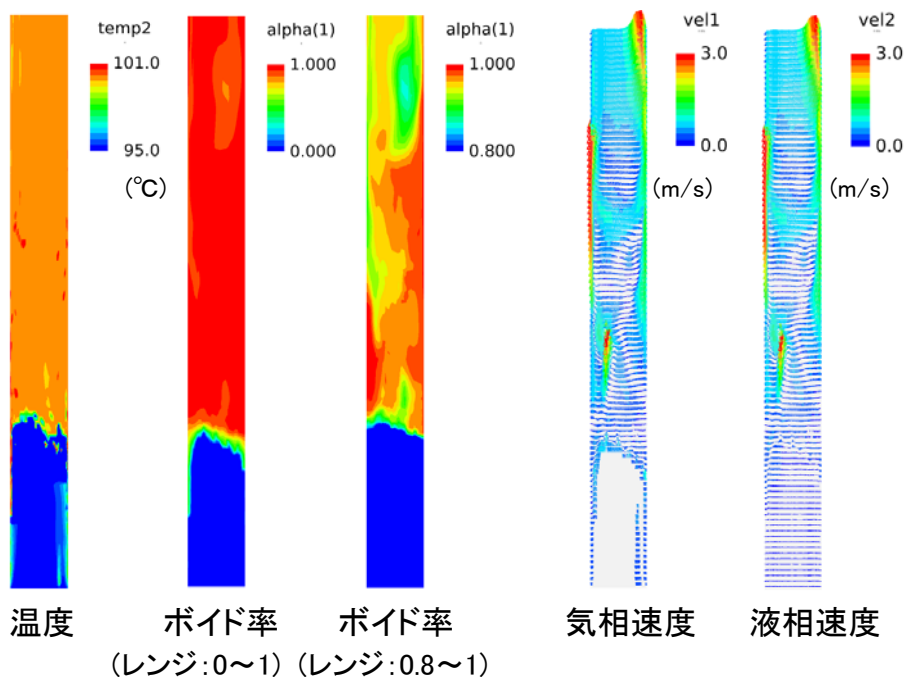
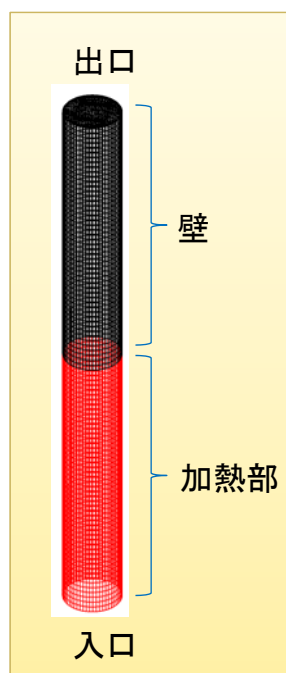
ノード数(10コア/ノード)

大規模問題の対し、並列性能を十分活用できることが期待できる。

気液二相流解析 Advance/FrontFlow/MP

事例③: 沸騰解析

(30秒後の瞬時値)



気相速度はボイド率が1E-5以上の場所で表示

構造音響連成解析

構造解析 Advance/ForntSTR

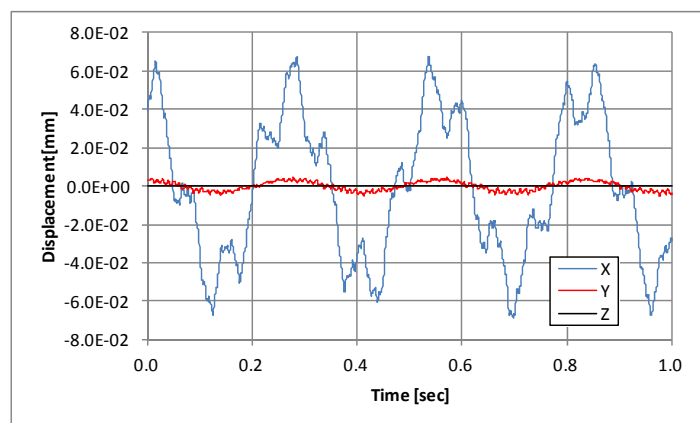
音叉を叩くモデル(構造音響連成解析)

節点数:10447 要素数:6030

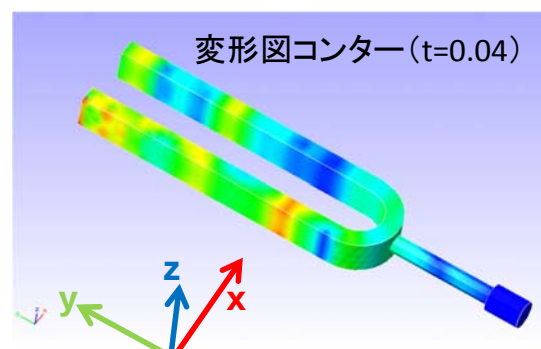
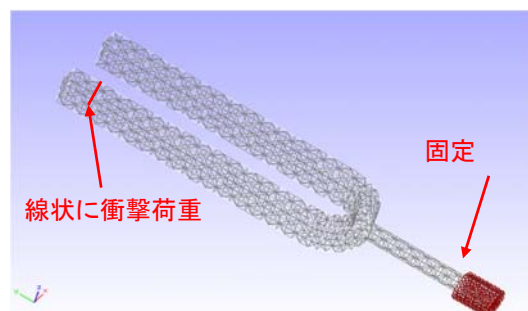
材質:鋼

Newmark-β法 $\Delta t=0.0004(s)$

0.0~5.0(s)間解析し、4.0~5.0(s)を利用



表面節点上の時刻歴応答

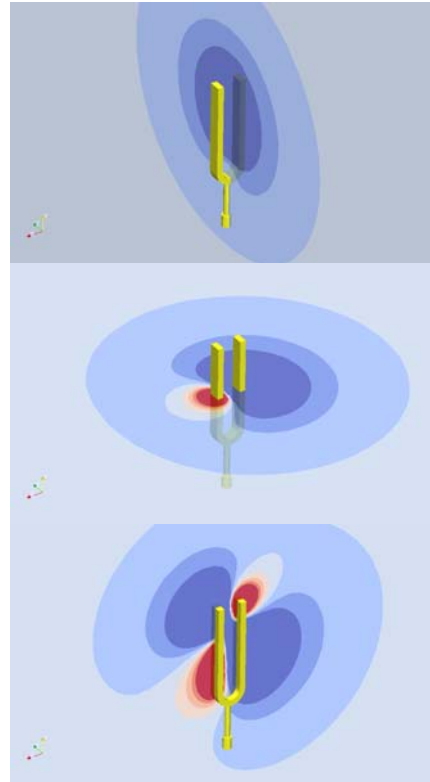
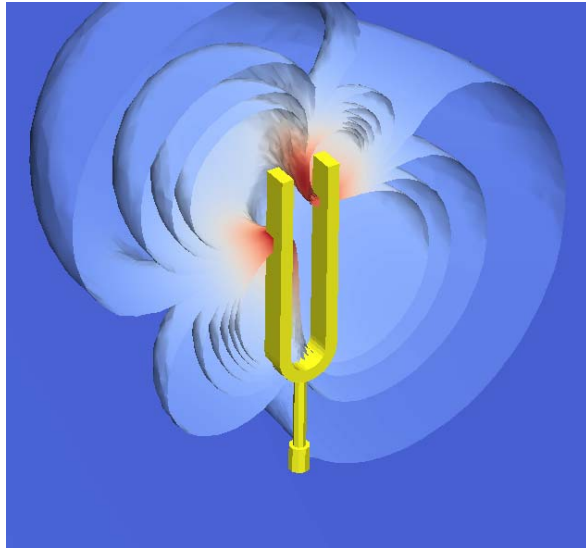


音響解析 Advance/FrontNoise

音叉を叩くモデル(構造音響連成解析)

- 100Hzの音伝播解析結果

音響速度ポテンシャル



X方向断面

Y方向断面

Z方向断面

アドバンスソフト株式会社からの情報提供

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中

HP

<http://www.facebook.com/advancesoft.jp>

<http://www.youtube.com/user/advancesoft>



謝辞

- 一般財団法人高度情報科学研究機構（以下、RIST）と「産業利用推進のための「京」用シミュレーションソフトウェアの整備に関する共同研究」を実施致しました。実施期間中は、RISTが所有する利用支援用スパコンFX10を利用させて頂き、また定例会議等において多くの有用なアドバイスを頂いたことを心より感謝致します。
- 国立研究開発法人海洋研究開発機構（以下、JAMSTEC）が実施した文部科学省先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業のもと、平成27年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラムへの利用課題「大規模共有メモリシステムにおける大規模シミュレーションの可能性の検討」が申請受理され、地球シミュレータ（大規模共有メモリシステム UV2000）を利用させて頂き、多くの知見が得られたこと、また多くの有用なアドバイスを頂いたことを心より感謝致します。

備考

- Advance/PHASE、Advance/FrontFlow/red、Advance/FrontSTRIは、東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターが実施した文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト、および、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトの成果（ソフトウェア）をアドバンスソフト株式会社が商品化したものです。アドバンスソフトはこれらのプロジェクトに参加し、ソフトウェアの開発を担当しましたが、その成果を独自に改良して商用パッケージソフトウェアとし、販売保守を行っております。
- Advance/FrontFlow/MPIは、東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターが実施した文部科学省のソフトウェアの研究開発プロジェクトの成果である流体解析ソフトウェアFrontFlow/redを基に、アドバンスソフト株式会社が独自に研究開発した気液二相流ソフトウェアです。