

計算科学分野のオープンソース・ソリューション

Open Source Solutions in the Field of Computational Science

オープンソースは従来、オペレーティング・システムやデータベース等、システムの基盤を担うコンポーネントに多く活用されてきたが、近年、計算科学分野に特化した高度なソフトウェアにおいても機能が充実し品質の高いものが容易に入手できるようになってきている。流体解析プラットフォーム **OpenFOAM** はその一つであり、学術分野のみならず産業界においても本格的な利用が進んでいる。

㈱日立東日本ソリューションズ（以下、日立 TO）では **OpenFOAM** に関連するソリューションを実施しており、ソルバ開発、周辺ツールの作成、プログラムの高速化において実績を有している。本報告では、その事例を紹介すると共に、今後 **OpenFOAM** のみならず計算科学分野においてオープンソースを活用したビジネスを展開するための戦略を述べる。

安達 齊	Adachi Hitoshi
江口 義之	Eguchi Yoshiyuki
木村 和幸	Kimura Kazuyuki
工藤 孝	Kudou Takashi

1. はじめに

近年、知識や技術のオープン化の流れは加速度的に速まり、あらゆる分野で組織や業態の枠組みを越えた異業種融合による研究開発、ビジネスが推進されている。その背景として、高速・大容量のネットワーク・インフラが整備され、全世界のあらゆる組織、個人の参加による世界共有の知識が、アクセス可能な形で形成されている状況がある。このように知識や技術、ノウハウを外部から導入できる環境が整うことによって、例えば、大規模な研究開発投資をせずとも大企業に対抗しうるイノベーションを容易に実現することが可能となってきた。¹⁾

自動車、電力プラント、モータ、新機能材料、創薬等、ものづくりの研究開発においては、強力な計算機パワーを活用したコンピュータ・シミュレーションによる研究開発が盛んに行われている。この計算科学分野では、流体解析、構造解析、分子動力学を始めとして、高度な専門知識に基づく高機能な商用ソフトウェアを少数のソフトウェア・ベンダが提供する寡占状態が続いてきた。これにはソフトウェア開発が困難であること、販売本数が限定され商業ベースで採算に載せることが難しく参入障壁が高いという背景があった。しかし近年、独自開発或

いは商用のソフトウェアの利用を中止し、コストパフォーマンスの高いオープンソース・ソフトウェアに切替える例が増えている。オープンソースは独自のコミュニティを形成しながら組織の垣根を越えた協働関係を形成する古くて新しいフレームワークである。オープンソース活用の流れは、ユーザ側からみれば、低コストなソフトウェア調達、高品質な知識やノウハウの即時創出・獲得が容易になる一方、ソリューションを提供するベンダにとっては、従来のビジネスモデルの変革を迫られる事態となりつつある。ベンダが保有するリソースと社外環境とのマッチングを実現するビジネスモデルを開発することにより、新たなビジネス機会を獲得できるチャンスになっている。

流体解析プラットフォーム **OpenFOAM**²⁾ は、オープンソースでありながら既存のソフトウェアに引けをとらない機能、パフォーマンスを備え、学術分野のみならず産業界での利用が急速に進んでいる。日立 TO は従来より計算科学分野でのビジネスを展開している。その一環として、2006 年度から **OpenFOAM** に関連する顧客システムの開発に参画し、現在まで継続してソリューションを推進してきている。

2. 計算科学分野のオープンソースの動向

1970 年代末にカリフォルニア大学バークレー校が中心となって BSD UNIX 等のソフトウェア無償配布が始まった。大型汎用コンピュータが全盛であった時代は商用のベンダ開発ソフトウェアが主流であったが、1990 年代にパーソナル・コンピュータの普及に伴いオープンソースという概念が生まれ、Linux(オペレーティング・システム)の登場を契機に Apache(Web サーバ)、MySQL(データベース)等、システムの基盤を担うツール類においてオープンソースの活用が主流となってきた。近年は、どのシステム構築ベンダもこれらのオープンソース・ソフトウェアを必要不可欠なものとして取扱い、充実したソリューションを提供している。³⁾

一方、計算科学分野を見ると、流体解析、構造解析、分子動力学、量子化学等の領域において、次に示す少数の商用ソフトウェアが高いシェアを占め、デファクト・スタンダードに近い位置付けで利用されるという状況が続いてきた。

- ・流体解析 :Fluent, STAR-CD など
- ・構造解析 :ANSYS, ABAQUS, LS-DYNA など
- ・分子動力学 :AMBER, CHARMM など
- ・量子化学 :Gaussian, MOPAC など

この背景には、それぞれのパッケージが専門性の高い知識・ノウハウに基づいて開発され、容易に類似のものを開発することが出来ない事情がある。ところが、昨今のオープンソースの流れに加え、C++などのオブジェクト指向による部品化の促進により、計算科学分野でも高い完成度を持ったオープンソースが出現してきている。

計算科学分野のオープンソース・ソフトウェアは、国家プロジェクトの成果として無償提供されているもの、大学等の研究機関が研究成果を無償公開しているもの、特定のベンダが提供しているもの、等がある。代表的なオープンソース・ソフトウェアを以下に示す。

- ・流体解析 :Front Flow, OpenFOAM など
- ・分子動力学, 量子化学 :ABINIT, GAMESS, ProteinDF, OCTA など

計算科学分野でのコンピュータ・シミュレーションは

通常、プリプロセス(モデリング、計算メッシュ生成など)、ソルバによる求解、ポストプロセス(計算結果の可視化、分析など)という一連のステージを試行錯誤的な研究サイクルで繰り返す。各ステージ間でのインタフェースには任意性があるので、ステージ毎に別々のアプリケーションを使用するよりも全体として一つの統合されたアプリケーションとなっている方が望ましい。また、次々に考案される解析手法への対応やデータ処理のためのツール開発、大規模な計算を短時間で実行するための高速化技術、モデリングから計算結果の解析を含む CAE(Computer Aided Engineering)解析支援等、さまざまな技術的課題が存在する。これらの課題に対応するためには、次のような技術領域が必要になると考えられる。

- (1) 統合プラットフォーム構築のためのシステム開発
- (2) 新たな解析手法に対応できる数値プログラミング
- (3) プログラム並列化によるソルバ実行の高速化
- (4) モデリング、メッシュ生成、解析等の CAE 解析

ユーザにとって、計算科学分野のオープンソースを活用するに当たっては上記技術領域が必要となっている。一方で、これらは技術的な敷居が高く、ユーザにとっては、サポートが受けられない、品質が保証されない、カスタマイズが困難等のデメリットがある。しかしながら、ソフトウェア・ベンダにとっては、これまでのような有償でのパッケージ販売によるビジネスモデルから、オープンソース活用によるソリューションを提供するというビジネスモデルへの転換を図り、ユーザにとってのデメリットを解決することが一つのビジネスチャンスになっているといえる。

3. OpenFOAM について

3.1 概要

OpenFOAM は、OpenCFD 社が開発し GNU の General Public License のもとで、オープンソースとして配布されている流体解析用のソフトウェアである。熱伝導を含む複雑な流体の流れから、固体力学や電磁力学、そして経済の支配方程式までさまざまな現象をシミュレーションでき、オープンソースの特徴とその汎用性から、多くのユーザが存在する。

OpenFOAM は「アプリケーション」と呼ばれる実行モジュールを作成するために必要な C++ライブラリ群

である。連続体力学の特典の問題を解くソルバ群と、データ操作を含むユーティリティ群に大別できる。OpenFOAM の特長の一つとして、各種手法や物理方程式、プログラミング手法を用いて、ユーザが独自に新たなアプリケーションを作成できる点が挙げられる。

OpenFOAM の全体構成を図 1 に示す。インタフェースを含む各種プリ・ポスト処理用のユーティリティ群と標準ライブラリ、ユーザ・アプリケーションよりなるソルバ群により構成されている。2009 年 9 月現在、バージョン 1.6 が公開されている。

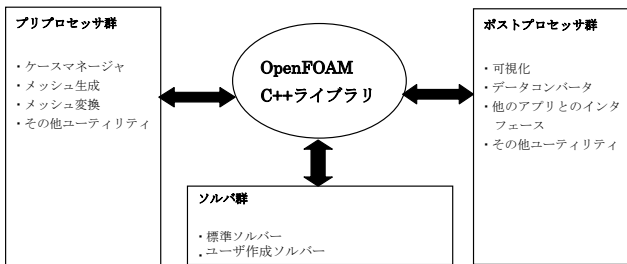


図 1 OpenFOAM の全体構成

3.2 他のソフトウェアとの比較

流体解析分野の主な商用ソフトウェアについて、OpenFOAM との比較を表 1 に示す。

表 1. 流体解析分野のソフトウェア比較

項番	ソフトウェア	ライセンス形態	CFD 計算機能 (*1)	モデリングツール	メッシュ生成ツール	ポストプロセッサ, 可視化
1	Fluent	有償	◎	◎	◎	◎
2	STAR-CD	有償	◎	◎	◎	◎
3	OpenFOAM	無償	◎	×	◎(*2)	○

◎ 機能を備えている

○ 外部ツールを使用して機能を実現

× 機能なし

(*1) 非圧縮性・圧縮性流体, DNS・RANS・LES モデル, 多層流モデル, 燃焼モデル

(*2) 6 面体のみ

このように、OpenFOAM はモデリング等の一部機能を除き商用ソフトウェアとほぼ同等の解析機能を持つ。

4. OpenFOAM のソリューション事例

日立 TO では、OpenFOAM に対するカスタマイズとして、新規ソルバの開発、ソルバの組み込み、周辺ツールの作成及びプログラムの高速化を実施してきた。図 2 に、各ソリューションの位置付けを図 1 と対比して示す。

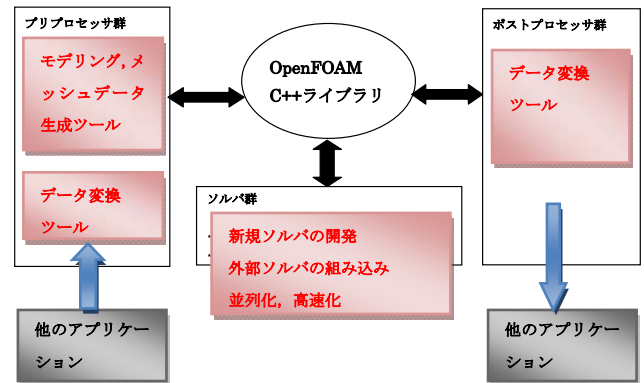


図 2 OpenFOAM ソリューション

以下に個々の事例について説明する。

4.1 新規ソルバの開発

OpenFOAM が備えるソルバに加え、ユーザが独自の新規ソルバを作成して C++ライブラリに追加することが出来る。

OpenFOAM が備える C++クラスライブラリのインタフェースを使って次のようにプログラムを記述することが出来る。例えば、偏微分方程式:

$$\partial \rho U / \partial t + \nabla \cdot \phi U - \nabla \cdot \mu \nabla U = -\nabla p$$

は、次のように記述できる。

```

solve
(
    fvm::ddt(rho, U)
    + fvm::div(phi, U)
    - fvm::laplacian(mu, U)
    ==
    - fvc::grad(p)
);
    
```

この OpenFOAM 独自の C++クラスライブラリを用いて、化学反応や輻射計算の新規ソルバを 3 種類開発した。最新の計算手法に素早く対応して新規ソルバを開発することによってユーザのニーズに応えていきたい。

4.2 ソルバの組み込み

OpenFOAM に組み込まれていない別のアプリケーションをサブルーチン化して OpenFOAM のライブラリの一つとして組み込む作業を実施した。OpenFOAM のライブラリとすることにより、従来と同一のインタフェースで新規機能を利用することが可能となる。また他のソルバと組み合わせて計算を実施する場合にサブルーチンのインタフェースだけを記述すればよく、ソルバ間でのデータ変換を実施する必要がなくなり、ユーザにとっての利便性が向上する。

本件では、Fortran 或いは C, C++ で記述された 3 種類の外部ソルバの組み込みを実施した。このようなソルバの組み込みにより、OpenFOAM 上での外部ソルバの活用を促進していきたい。

4.3 周辺ツールの作成

OpenFOAM のソルバの入力は、ガスや流体の物性値や解析対象の物体の形状やメッシュデータ等、多種類のデータを準備する必要がある。ユーザがこれらのデータを取り揃えることは手間のかかる作業である。時には、他のアプリケーションが計算した結果を変換して OpenFOAM のソルバで別の種類の計算をする場合もあり、アプリケーション間でのデータ変換が必要となる。変換を自動化するツールを整備することにより、人手に頼っていたデータ生成やデータ変換作業の工程において、作業工数の削減が可能となる。本件では、以下のツール群を新規に開発し、作業の最適化を実施した。

① モデリング、メッシュデータ生成ツール

GUI からパラメータを入力し、他のデータ処理ツールと連携して OpenFOAM のメッシュデータを生成する。

② データ変換ツール(プリプロセッサ)

他のアプリケーションからデータを入力し、OpenFOAM のメッシュデータを生成する。

③ データ変換ツール(ポストプロセッサ)

OpenFOAM の出力データを他のアプリケーション用のデータに変換する。

このような周辺ツールを提供することで、顧客の研究サイクルを加速させていきたい。

4.4 高速化

OpenFOAM で作成したアプリケーションは、逐次実

行の他に MPI (Message Passing Interface:メッセージ通信の標準規格) を使って並列実行できる。解析場を CPU の数に合わせて領域分割して並列実行する。並列処理に用いる MPI の実装として、パブリック・ドメインの MPICH⁴⁾の他、各ベンダ固有の MPI 実装を適用できる。領域分割による並列化は OpenFOAM の設計の基盤であり、低レベルのコードに組み込まれているため、一般にソルバは、特別な並列仕様のコーディングをしなくても開発することができる。

しかし、ユーザの計算機環境、対象としている問題によってはチューニングが必要となる場合がある。特に CPU 数の多い並列計算では、安定かつ高速な CPU 間の通信が効率向上に重要である。そこで、次の観点からプログラムを最適化し高速化を図った。

- ① 高速な通信プロトコル(Infiniband)を適用できる通信ライブラリの適用
- ② OpenFOAM の行列ライブラリのチューニング
- ③ 領域分割方法の最適化

OpenFOAM の並列計算では、領域分割ユーティリティ decomposePar を使用して計算領域をプロセス数で分割する前処理が必要である。decomposePar のアルゴリズムは、simple 法と METIS 法があり、これらの手法やパラメータのチューニングを実施した。

性能改善の一例として、Infiniband を適用した通信ライブラリを使用した場合の性能改善効果を図 3 に示す。

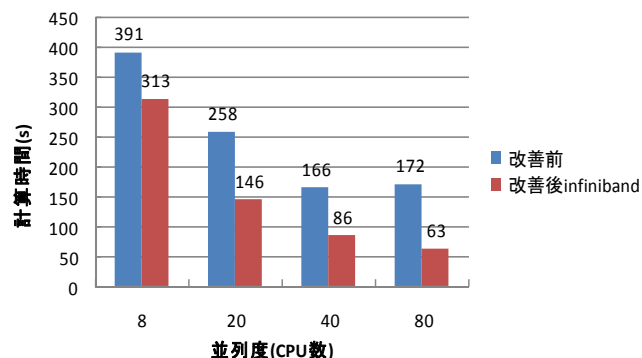


図 3 MPI ライブラリの性能改善例(測定条件 simple 法)

MPI 並列数が多くなると、Remote Direct Memory Access によるメモリアクセス最適化の効果により 2 倍以上の性能改善効果が得られている。

5. オープンソース・ビジネスへの取組み

今後、計算科学分野においてオープンソース・ソリューションを進めていくための戦略を述べる。

5.1 日立 TO の保有する技術力

日立 TO は計算科学分野で次の技術力を有している。

(1) 利用環境

国家プロジェクトに参画し、ネットワーク上に分散している多数の計算機を利用した解析作業を、計算機を意識せずシームレスに実施する環境や、計算リソースの効率的な利用を可能とするグリッド・ソフトウェアの開発を実施してきた。これらの実績を踏まえ、コンピュータ・シミュレーションの上流から下流までの業務を統合化するシステム開発を担うことができる。

(2) 数値計算プログラミング

ソルバの開発、行列解法ライブラリの開発、量子計算プログラムの開発、分子動力学分野の可視化ツールの開発等、数値計算プログラミングに関する幅広い実績がある。先進的アルゴリズムの採用、マルチスケール/マルチフィジックス現象の解析を可能とする連成計算などの高度なシミュレーション・プログラムの開発、周辺ツールの開発を担うことができる。

(3) プログラム並列化、高速化

HPC(High Performance Computing)分野においてスーパーコンピュータ、PC クラスタ、GPGPU 等、多彩なハードウェアに対応したプログラムの高速化、並列化に関する技術・ノウハウを有している。この技術とオープンソース活用のノウハウを融合することにより、他社とは一線を画したソリューションを提案できる。

(4) CAE 解析支援

国立研究機関や民間企業の研究所において、研究者の解析業務を側面から支援する業務を推進している。研究者にとって負担の大きいモデリング、メッシュ生成において広い経験を有する。このように、研究業務の上流から下流まで幅広く CAE 解析支援を行うことができる。

5.2 オープンソース・ビジネスへの取組み

上記の保有技術を総合的にソリューションとして提供し顧客満足度を高めるため、次の施策を実施している。

(1) ソリューション窓口の設置、メニュー化

(2) 各オープンソース・ソフトウェアのワーキング・グループへの参画による情報収集

(3) 大学/研究機関との共同研究、国家プロジェクトへの参画を通じた技術、知識の獲得と体系化

(4) 他のソリューション・ベンダとの協業

上記取組みを通じて若手技術者の育成を図り、顧客満足度の高いオープンソース・ソリューションを提供する。

5.3 オープンソース・ソリューションの課題

次の課題を認識している。

(1) プログラムの品質の見極めが困難である。

(2) 十分なサポートを提供するために必要な情報が得られず、初期投資が膨らみ、ソリューション提供後のサポートが不十分になる危険性がある。

(3) ライセンスが有償化される可能性がある。

このような課題に対して、コミュニティへの参画を始めとする情報収集に努め、フィールド調査の実施、社内サポート体制の確立等の施策を実施する。

6. おわりに

オープンソース・ソリューションへの取り組みについて報告した。今後、ますます増大すると見込まれるオープンソース・ソリューションにおいて、積極的にビジネスを展開していく。

参考文献

- 1) オープンイノベーション：ヘンリー・チェスブロウ、PRTM 監訳、英治出版(2008)
- 2) <http://www.open CFD.co.uk/openfoam/index.html>
- 3) イノベーションを加速するオープンソフトウェア：相原健一他、静岡学術出版(2008)
- 4) <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/mpi ch1/>



安達 齊 1986 年入社
公共ソリューション本部
先端技術第二グループ
計算科学ソリューションの提供
adachi@hitachi-to.co.jp



江口 義之 1990 年入社
公共ソリューション本部
先端技術第二グループ
計算科学ソリューションの提供
eguchi@hitachi-to.co.jp



木村 和幸 1988 年入社
公共ソリューション本部
先端技術第二グループ
計算科学ソリューションの提供
kimura@hitachi-to.co.jp



工藤 孝 1990 年入社
営業本部
ソリューション営業第 2 グループ
計算科学ソリューションの拡販
takashik@hitachi-to.co.jp