

## 次世代スパコンの戦略プログラムの実施可能性調査機関として採択 ～ものづくり分野におけるHPC(ハイパフォーマンスコンピューティング)を強力に牽引～

昨年末の事業仕分けやその後のマスコミ報道等で一躍有名になったので多くの方がご存知かと思いますが、現在、兵庫県神戸市で次世代スーパーコンピュータの開発が進められています。

このコンピュータは10ペタ・フロップス級のピーク性能を有し、世の中は正にテラ・フロップスからペタ・フロップス時代に入っつつあります。(\*)

このような計算機性能の飛躍的な向上を背景として、先端シミュレーションを活用した、ものづくり分野における変革に大きな期待が集まっています。

一方、文部科学省では次世代スパコンの戦略的利活用を推進するために、5つの重点分野(戦略分野)とそれ

ぞれの分野を中核となって牽引する代表機関を先日決定し、当センターは、ものづくり分野の中核機関として採択され、(独)日本原子力研究開発機構、(独)宇宙航空研究開発機構とともに、当該分野推進のための具体策の検討を進めております。

ものづくり分野でHPCの利用を本格的に推進するためには、高度で実用的なソフトウェアの研究開発に加えて、開発したソフトウェアの利用環境の整備、ユーザー企業とタイトに連携したソフトウェアの有効性の実証、産業界におけるHPCの牽引者の育成など、これまでセンターが行ってきた事業をより強力かつ多角的に推進する必要がある

と認識しております。

関係各位には是非、このような当センターの活動にご理解とご協力をいただきたく、お願い申し上げます。

(\*)：テラ・フロップスは1秒間に10の12乗の演算を実行する能力、ペタ・フロップスは1秒間に10の15乗の演算を実行する計算能力であり、テラ・フロップスからペタ・フロップスになるということは計算速度が1,000倍速くなることを意味する。

### 「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト各チームの最新トピックス

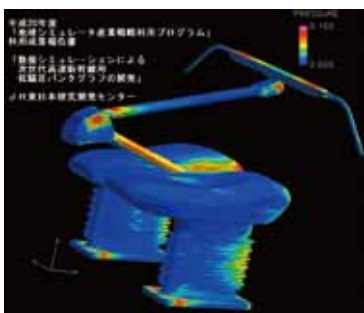


fig 1

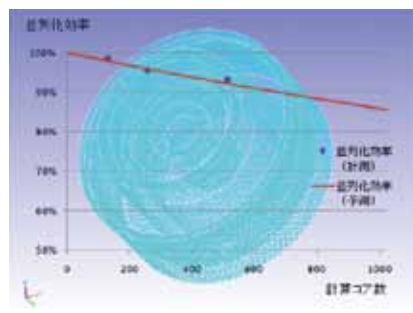


fig 2

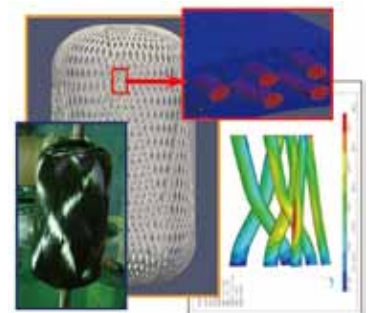


fig 3

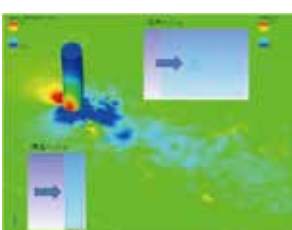


fig 4

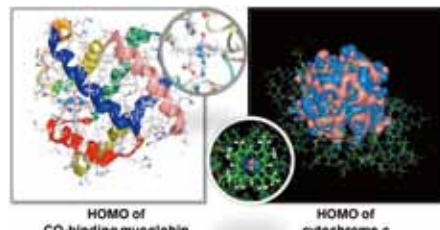


fig 5

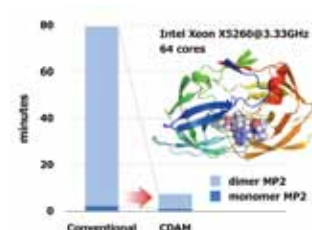


fig 6

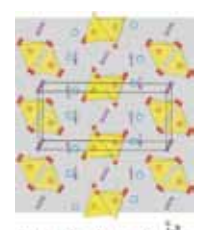


fig 7

## 大規模アセンブリ構造対応熱流体解析ソルバーの研究開発

本研究開発では、ソフトウェアの汎用性を向上させるためマルチ要素タイプをサポートする FEM 流れソルバーを開発しています。これにより、複雑形状を含む解析におけるメッシュ作成の簡易化や予測精度向上が期待できます。複雑形状への適用事例として、パンタグラフ周り流れ解析の結果を図に示します。本ケースでは、マルチ要素機能を使用しておりませんが、マルチ要素機能導入により予測精度向

上が期待できます。上記機能に加え、高速化技術、Refiner による大規模解析技術、連成解析技術を開発しており、これらの機能を統合し次期 FrontFlow/blue (ver.6.0) として公開する予定です。

(冒頭の図は平成 20 年度「地球シミュレータ産業戦略利用プログラム」利用成果報告書「数値シミュレーションセンターによる次世代高速新幹線用低騒音パンタグラフの開発」JR 東日本研究センター) **fig 1**

## 大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバーの研究開発

大規模解析のフィジビリティ評価を今回行いました。HA8000 クラスタシステム (T2K) 上での約 1.5 億自由度の応力解析により実行時間を計測し、計測結果からアムダールの法則による並列化率を求め、並列化効率(=T1/(Tn×n))を予測しました。計測上限の 128

プロセッサ / 512 コア (実行時間は 58 分) において 92% の高い並列化効率を維持しています。この結果より、現時点でも 1 万 PE 程度の HPC 環境において 50% の並列化効率を確保できると予測されます。 **fig 2**

## 複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発

現在、複合材料強度信頼性評価シミュレーターの主要部を完成させ、燃料電池自動車用高圧水素容器の実証解析を行っています。冒頭の図は燃料電池自動車用高圧水素容器のメゾスケール損傷解析で、容器ライナーの形状と炭素繊維配向に関する設計仕様から、フィ

ラメントワインディングの経路を定めて、炭素繊維と樹脂を区別したメゾスケール有限要素モデルを作成し、詳細な損傷評価を行っています。試験片を用いた実験から適切なメゾスケール損傷則を得て、容器の破損メカニズムの解明に取り組んでいます。 **fig 3**

## 大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーターの研究開発

本研究開発では、大規模マルチ力学解析用の実用ソフトウェア開発を進めています。今回は、流体・構造連成の基本的な検証計算を実施しました。一様流中に置かれた円柱周りの流れ解析を行い、その表面圧力分布による円柱の応力解析を行うものです。カルマン渦によ

る表面圧力変動により、円柱が流れと直角方向に振動する現象を再現できました。本計算ではモデル計算として、円柱の固有振動数がカルマン渦の周期に一致するように円柱の材料特性を調整しました。 **fig 4**

## バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発

当チームでは、世界最大のカノニカル分子軌道計算ができる密度汎関数法プログラム ProteinDF システムをベースに高品位分子特性解析システムの研究開発を行っています。巻頭の図はミオグロビン (Mb) とシトクロム (Cyt) c の最高被占分子軌道の比較です。主成分

は共に鉄の d 軌道ですが、その割合と広がりは全く異なります。同じヘムタンパク質でも、酸素の運搬・貯蔵が役割の Mb と電子伝達が役割の Cyt では電子状態が異なることを示す、ProteinDF ならではの結果です。 **fig 5**

## バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発

FMO 法は低スケリングの計算法ですが、タンパク質の構造ゆらぎを統計的に解析したり、自由エネルギーの評価を行うためには複数構造のサンプリングを行う必要があり、さらなる高速化が求められています。計算コストの中では、2 電子反発積分の生成と縮約処理が大きな比重を占めているため、精度を保持したまま如何に効率よく近似的に扱うかがポイントとなります。今回、私たちはコレスキー分解

(CDAM) を用いて MP2 計算を劇的に加速することに成功しました。図は、HIV-1 プロテアーゼとロピナビルの複合体を FMO-MP2/6-31G 計算で行った場合のタイミングで、10 倍以上も処理時間が速くなっていることがわかります。今後も速度向上を図りつつ HF 計算やエネルギー微分計算にも CDAM を導入していく予定です。 **fig 6**

## 量子機能解析ソルバー・ナノデバイスシミュレーターの研究開発

遷移金属酸化物のように、d 軌道間のクーロン相互作用が大きく、かつ遷移金属のバンド幅が小さい物質では、電子相関の取り込みが不十分なため、通常の密度汎関数法の範囲では、実験値のバンドギャップを正確に再現できない場合があります。そのため、第一原理擬ポテンシャル電子状態計算プログラム (PHASE) に、電子相関を高

精度に取り扱う手法として DFT+U 法を導入し、遷移金属酸化物 LiCoPO4 等の電子相関の強い物質に関する誘電応答解析を行う手法を実装し、その精度を検証しました(冒頭の図は、リチウム 2 次電池正極材料 LiCoPO4 の原子構造)。 **fig 7**

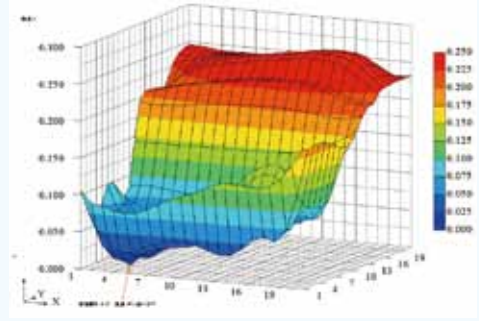
今号では CISS メンバーである石田義洋特任教授、そして平成 21 年度より協力教員として参加いただいている、高田章客員教授、半場藤弘教授、梅野宜崇准教授の各研究室の研究内容をご紹介します。

石田義洋特任教授

専門分野：建築都市環境工学



「センシング情報を用いた応答係数法に基づく環境影響物質の発生源同定法」を行なっています。本研究では、空調された室内で環境影響物質が発生したときに、設置したセンサの観測濃度から、応答係数法により発生源位置と発生量を同定する手法を開発しています。応答係数は CFD により算出します。図は発生源を含む平面の無次元残差の分布です。無次元残差が 0 となるセルが発生源になります。全ての平面について図のような計算を実施して発生源を同定します。セル中心から汚染質が発生する場合は、精度よく発生量を同定することができます。



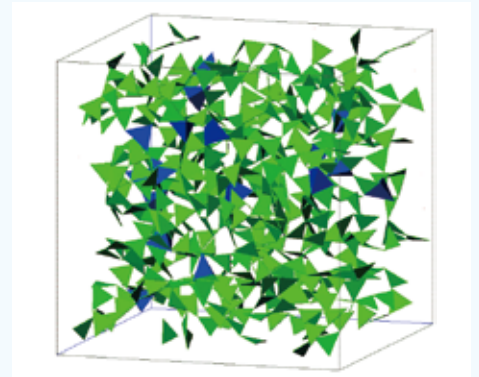
セル探索による残差分布(k=7平面)

高田章客員教授

専門分野：高次材料計算物質科学



2009 年 1 月 1 日の着任以来、高次モデリング客員部門の研究室として高次材料の計算物質科学、特にガラス材料の新規構造・新規物性に関するシミュレーションの研究を行っています。最近の研究成果としては熱力学的な観点からランダムな原子構造を識別できる秩序パラメータを提案することができました。また一部の田中肇教授、4部の井上博之教授と共同でガラス中の相分離現象の研究も進めています。



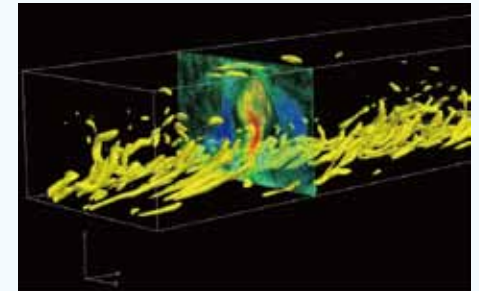
B2O3-SiO2 系ガラスの構造 (青い四面体：SiO4、緑の三角形：B2O3)

半場藤弘教授

専門分野：流体物理学



流体シミュレーションソフトウェアの基盤技術としての乱流モデリングと計算法の開発を行っています。流体の基礎方程式に基づく理論解析と基本的な流れ場の大規模数値シミュレーションにより、乱流の統計的性質や物理機構を解明し乱流モデルを改良することによって、より大規模で高速な流れに適用できる流体計算法の開発を目指しています。また複雑流体の一例として、液体金属やプラズマ気体などの電導性流体の乱流の研究を行っています。



回転チャンネル乱流の渦の等値面と速度ベクトル

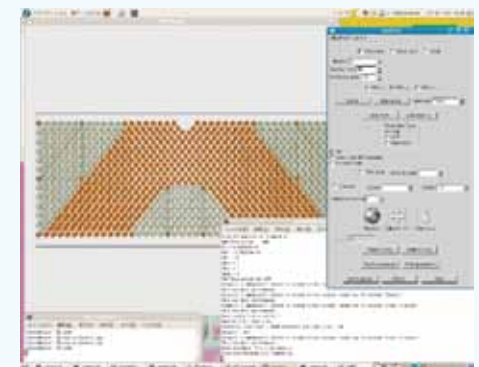
梅野宜崇准教授

専門分野：計算材料力学物性



転位発生などの原子レベルの不安定変形メカニズムを明らかにする試みとして、系に含まれる原子の全自由度を考慮したダイナミカルマトリクスの固有値解析から変形モードを抽出する研究を行っています。

大規模系に対応するため、準連続体近似 (Quasi-Continuum) 法を導入して固有値・変形モード解析を効率的に行うことのできるソフトウェアを開発しています。



Quasi-Continuum 法を導入した原子レベル不安定変形モード解析ソフトウェア

## 第1回HPC産業スクール実践コース開講報告

2009年10月15日、16日の両日、東京大学生産技術研究所にて、第1回HPC産業利用スクール実践コースA(流体)が開催されました。東京大学生産技術研究所の山出協力研究員による、大規模流体解析における解析デザインの講義の後、参加者の方々はFrontFlow/Blueを用いた演習をT2K(トータル1024Core)にて実行して頂きました。

12月10日、11日の両日には、同所にて、第1回HPC産業利用スクール実践コースB(構造)を開催しました。実践コースB(構造)も、実践コースA(流体)と同様に、解析デザイン力の習得を重点に開催されました。アドバンスソフト(株)の末光氏他によ

る、大規模構造解析における解析デザインの講義の後、参加者の方々はFrontSTRを用いた演習をT2K(512Core)にて実行して頂きました。

両コースとも、講習後のアンケート結果では概

ね良好な評価が得られており、当初の目的であった企業技術者の大規模計算への距離感を縮める効果があったのではないかと考えております。



実践コースの様子(右:流体、左:構造)

## イベント案内

### 文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」 第2回統合ワークショップ —イノベーションPJ 6月にβバージョン公開—

平成20年度から5年間の予定でスタートした「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトは、2年目までに予定したコア部分の機能に関する研究開発がほぼ終了し、本年6月にはその成果を実装したβバージョンを公開する運びとなりました。そこで、下記日程・プログラムによるワークショップを開催し、広範なユーザの皆様へ、公開するβバージョンとその実証として実施した(あるいは計画中の)解析事例をご紹介します。今回は産業界等の第一線でご活躍中の皆様から、利用に当たっての問題を中心に忌憚りの無いご意見・ご要望をいただけることを特に期待しております。年度末でご多忙な折かと思いますが、多くの方々のご参加をお待ちしております。

開催日時 平成22年3月2日(火) 13:30～16:15(量子バイオ)  
16:15～17:30(ナノデバイス)  
平成22年3月10日(水) 13:00～18:00(次世代ものづくり)

場所 東京大学生産技術研究所 中セミナー室1(An401-402)

主催 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター、  
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

#### 1日目 平成22年3月2日(火)

##### 量子バイオ・ナノデバイスシミュレーションシステム

##### 量子バイオシミュレーションシステムの研究開発

バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発  
ソフトウェア「ProteinDF」

バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発  
ソフトウェア「BioStation」

##### ナノデバイスシミュレーションシステムの研究開発

量子機能解析ソルバー、ナノデバイスシミュレーターの研究開発  
ソフトウェア「PHASE-SYSTEM」

#### 2日目 平成22年3月10日(水)

##### 次世代ものづくりシミュレーションシステム

大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーターの研究開発  
ソフトウェア「REVOCAP」

大規模アセンブリ構造対応熱流体解析ソルバーの研究開発  
ソフトウェア「FrontFlow/blue」

大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバーの研究開発  
ソフトウェア「FrontISTR」

複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発  
ソフトウェア「FrontCOMP」

#### 編集後記

寒さに耐えているうち平成21年度も残すところあと僅か、PJも無事2年目を終えようとしています。4者で実施しているHPC産業利用スクールは、講習参加者のグループディスカッションが好評で、参加の企業技術者の方々は、大規模計算への距離感を縮め、PJは、アプリポスト等の改善要望を得ることができました。このようにものづくりの第一線でご活躍中の皆様からの忌憚りの無いご意見は、PJの「本当に設計者が使えるソフトウェア」開発につながっています。昨年に引き続き3月の統合ワークショップでの産学の熱いセッションを期待しております。

#### 資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661

FAX : 03-5452-6662

E-mail : office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

URL : http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

#### 編集発行

東京大学生産技術研究所  
革新的シミュレーション研究センター  
〒153-8505  
東京都目黒区駒場4-6-1