



## 「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 プロトタイプ・ソフトウェア研究開発を完了、本年6月にβバージョン公開



本センターが中核拠点となって一昨年の10月から推進している、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」プロジェクトでは、当初の開発スケジュールどおり、2年目までにソフトウェアの基幹部分に関する基本設計・詳細設計ならびにプロトタイプ・ソフトウェアの研究開発がほぼ完了し、本年6月にはそれらの成果を実装したβバージョンを公開する運びとなりました。公開するプログラムは、(財)高度情報科学技術研究機構や(独)理化学研究所の計算機の専門家チームとも連

携した開発を実施することにより、皆様の周りにあるPCクラスターから、10万CPU規模(100万コア)の次世代スパコンに至るまでさまざまな計算機プラットフォーム上でスケーラブルな並列性能が発揮できるように設計されており、種々のプラットフォーム上で高い実効性能が達成されています。また、開発したソフトウェアの活用が真にイノベーション創出に繋がるように、数々の高度な機能を実装するとともに、広範な外部ソフトウェアとのデータインターフェースや統合的なユーザーインターフェースを装備するなど、ユーザーの使い勝手の向上も特に重視して開発を進めて来たものです。

先日、3月2日(火)と3月10日(水)の2日間にわたりβバージョンの概要をご紹介

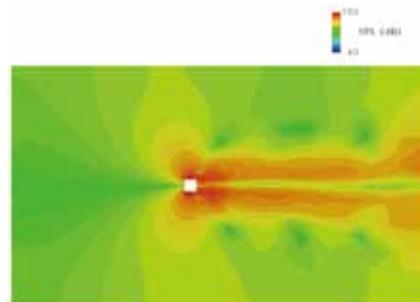
する目的で開催した、第2回統合ワークショップには産業界の第一線で活躍中の専門家の方など、延べ、202人にご参加いただき、本ソフトウェアに対する期待の高さを再認識した次第です。前記のプロジェクトは残り約3年間ですが、今後は開発したソフトウェアを実際の製品開発・研究開発の現場でご使用いただき、ソフトウェアの産業利用上の効果を実証する取り組みを本格化させていくとともに、その過程で得られた「現場からの声」をこれからのソフトウェアの研究開発にフィードバックしていく所存です。今後とも本センターの諸活動にご理解とご協力を頂ければ幸いです。

センター長・イノベーションプロジェクト  
研究代表 加藤 千幸

## 「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」プロジェクト平成21年度の成果

### 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、PCクラスターからスパコンまで多様なマシンで高速に動作する流体音響解析システム FrontFlow/blueを開発しています。平成21年度はシステムにおけるコア機能開発を実施しました。具体的な開発項目としては、混合要素対応流れソルバー、流れソルバーの高速化、大規模音響解析ソルバー(図1:検証計算の一例)、Refinerインターフェース、連成解析インターフェースが挙げられます。これらの要素技術はFFBシステムとして統合され、2010年6月にFFB ver.6.0として公開予定です。



角柱まわり流れから発生する空力騒音の解析

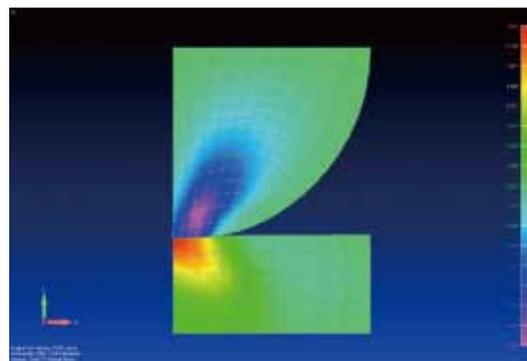


統合インターフェース プロトタイプ

また、ものづくり関連の解析システムの操作性向上に向けて、統合ユーザーインターフェースの開発も進めています。図2にプロトタイプの画面構成を示します。本インターフェースを介して、流体解析、構造解析、音響解析およびこれらの連成解析を容易に実行できる環境が実現します。

## 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

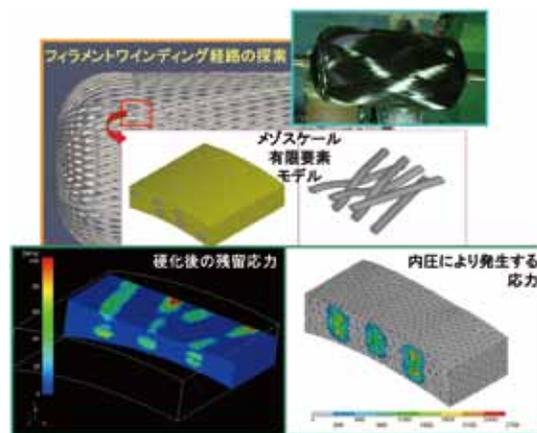
本研究開発では、実際の製品の形態であるアセンブリ構造のまるごと解析を実現する構造解析システムについて、平成20年度の基本設計に基づき、平成21年度は詳細設計と実装および検証計算を行いました。階層型アセンブリデータ構造に対応する有限要素解析基盤HEC-MWでは、メッシュ細分化ツール(REVOCAP\_Refiner)の組み込みと階層型データ構造を利用した幾何学的マルチグリッド法の導入を特徴としています。構造解析アプリケーションであるFrontISTRでは、接触解析機能を開発するとともに、これまでの材料・幾何学的非線形解析機能を強化しました。接触解析機能では、微小すべり/有限すべり、摩擦あり/なしのさまざまな接触状態に対応しています。材料非線形解析機能では、超弾性および弾塑性の各種構成式に対応しています。幾何学的非線形解析機能では、Updated Lagrange法の導入により、大ひずみ大変形の構造解析が可能となっています。



ヘルツ接触問題の解析例(変形後のせん断応力分布)

## 複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発

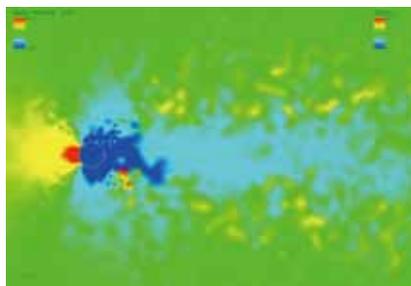
平成21年度は、複合材料強度信頼性評価シミュレーターの主要部である、炭素繊維束に関する賦型プロセスシミュレーター、樹脂に関する硬化シミュレーター、成型後の製品に関する損傷発展シミュレーションシステムを完成させ、燃料電池自動車用FRP製高圧水素容器の実証解析を実施しました。炭素繊維束と樹脂を明確に区別するメソスケールモデルを機軸とするため、まず容器ライナーの形状と炭素繊維配向に関する設計仕様から、フィラメントワインディングの経路を定めて詳細に三次元デジタルデータ化しました。このデジタルデータを基に、炭素繊維と樹脂境界での整合性を保持しつつ、メソスケール有限要素モデルを作成しました。本モデルを用いて、硬化プロセスでの温度およびひずみの変化を解析し、成形後の残留応力を求めるとともに、内圧と温度変化による応力解析を行い、破裂に関する損傷評価を行いました。実容器の破裂試験結果と照合して、フィラメントワインディング容器の強度発現機構解明に関する有益な知見が得られています。



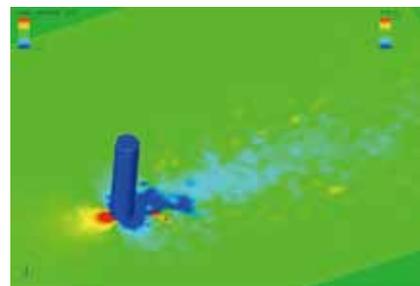
燃料電池自動車用FRP製高圧水素容器のメソスケール損傷解析

## 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

本研究開発では平成21年度、マルチ力学エンジン REVOCAP\_Coupler、プレポストREVOCAP\_PrePostおよびモデル細分モジュールREVOCAP\_Refinerの初期公開バージョン開発および連成結合テストを行いました。REVOCAP\_Coupler、REVOCAP\_Refiner はマルチ要素に対応しています。REVOCAP\_PrePost は連成



円柱モデルによる流体構造連成解析結合テストの計算結果

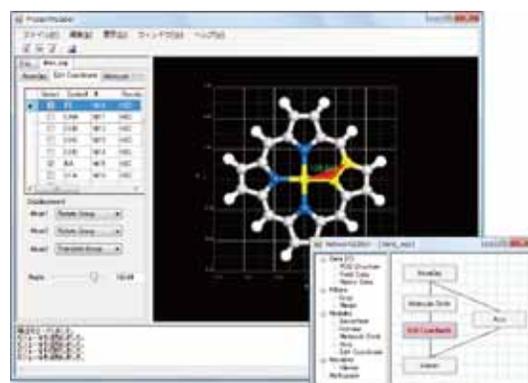


解析のプレ処理、およびADVENTURE SolidとREVOCAP\_Magneticのプレ処理に対応しています。REVOCAP\_Coupler、REVOCAP\_PrePostでは平成22年度に向けて領域型連成の設計も行いました。

また流体解析ソルバー FrontFlow/blue および構造解析ソルバー FrontISTRによる流体・構造連成解析の結合テストを実施し、マルチ要素対応とモデル細分を組み込んだ大規模アセンブリ構造に対応する連成解析の機能検証を行いました。

## バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発

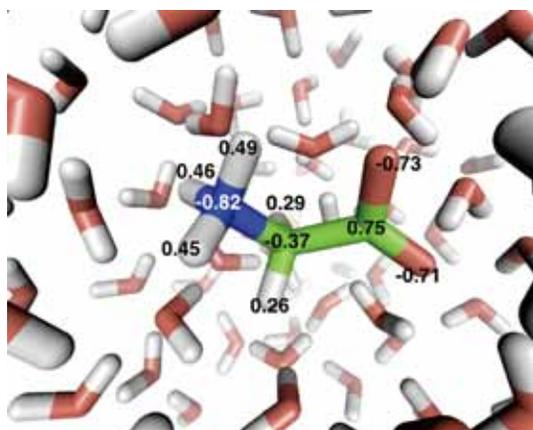
本研究開発では、世界最大のカノニカル分子軌道計算ができる密度汎関数法プログラムProteinDFをベースに高品位分子特性解析システムの研究開発を行っています。平成21年度は、(a)分光学的物性シミュレーション、(b)タンパク質とナノ分子の統合シミュレーション、(c)IRC計算、(d)タンパク質波動関数データベース配信の各機能における、 $\beta$ 版公開に向けた作業を行いました。図は、本システムの統合GUIであるProteinEditorの新しいインターフェース、ProteinModelerのスナップショットで、本年度の主要な成果の一つです。このように、構造表示、物理量表示に加えて、分子モデリング(構造編集)機能がサポートされます。モデリングはモジュール群を組み合わせて自分流にカスタマイズすることもできます(図右下)。自由度が高く、細かい指示が与えられる計算構造作成環境を提供することが目的です。編集機能の多機能化、操作性の向上は逐次行っていきます。是非お試しください、完成に向けて忌憚のないご意見をお寄せ下さい。



ProteinModelerの $\beta$ 版スナップショット

## バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発

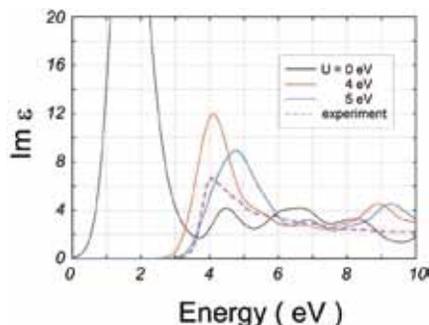
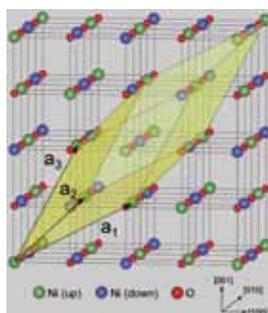
ファーマコフォアでのリガンド-残基間相互作用エネルギーの解析は創薬分野でのFMO応用計算で多用されています。対象系の構造は、PDBのデータを基に力場ベースのモデリングで調製されることが通例ですが、力場パラメータによって解析結果が影響を受ける難点がありました。そこで本研究開発では、ファーマコフォアの構造を直接最適化することを目指し、並列化FMO-MP2エネルギー微分のプログラムを開発しました。これにより特に、 $\pi\pi$ やCH/ $\pi$ といった弱い安定化相互作用の議論を系統的に行えるようになりますと期待できます。さらに、タンパク質の揺動を扱う分子動力学(FMO-MD)計算に応用することも可能です。図は130個の水で水和された両性イオン状態のグリシンをFMO-MDでシミュレーションしたスナップショットです(産業技術総合研究所の古明地勇人氏との共同研究)。1ステップあたりの時間は、16コアのPCクラスターでMP2が4分、HFが3分ですのでHFと比べてのコスト増は十分低く抑えられています。図には、最近開発した自然密度解析法(NPA)による正味電荷も示されています。



FMO-MDでシミュレーションしたグリシンのスナップショット  
(産業技術総合研究所の古明地勇人氏との共同研究)

## 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

本研究開発では、次世代ナノデバイスの機能解析や革新的機能ナノデバイスの創成を実現するために、ナノデバイスの構造・機能を量子論的に高精度に解析・予測する計算手法を研究開発し、高度な計算機環境を駆使するシミュレーションシステムの構築を目指しています。平成21年度は、(1)基本ソフトウェアPHASEへの遷移金属酸化物などの強相関電子系に適したDFT+U法による電子・格子誘電率の解析機能の実装(図)などによる第一原理電子状態解析の高機能化・高度化、(2)外場への電子応答や励起ダイナミクスを解析する時間依存密度汎関数法(TDDFT)のプロトタイプ開発などによる電子ダイナミクスの高精度解析、(3)Blue moon法による自由エネルギー計算の実装、反応経路を効率的に探索するメタダイナミクス法のプロトタイプ開発等による原子ダイナミクスの高精度解析などの研究開発を実施し、シミュレーションシステムの構築を進めました。



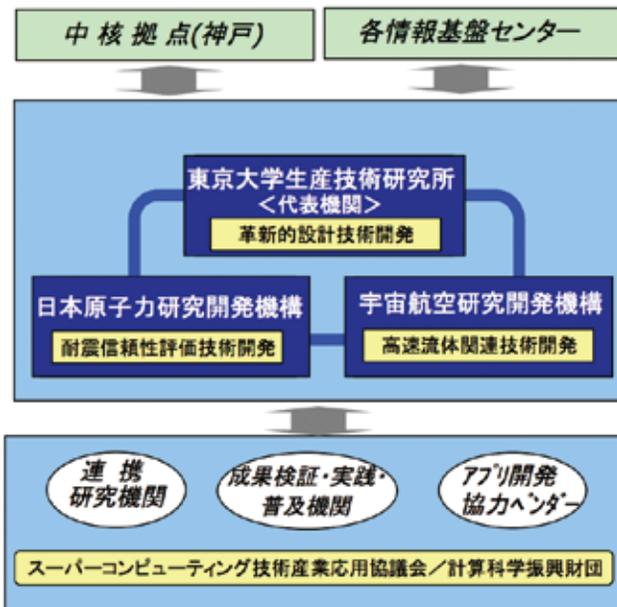
NiOの電子誘電率：反強磁性NiOの結晶構造(左図)、電子誘電率の虚部(右図)

## 文部科学省「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」次世代ものづくり分野 FS実施機関の状況

本研究センターは、(独)日本原子力研究開発機構ならびに(独)宇宙航空研究開発機構と連携して、文部科学省「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」の次世代ものづくり分野の実施可能性調査研究(FS)を進めております。

研究開発課題は、ものづくりプロセスの変革あるいは革新的製品の創出が可能であること、次世代スパコンで初めて実現できる、またその準備ができていること、成果がものづくり現場で実用化される具体的な計画があること、さらには分野全体への波及効果が大きいことなどを要件として課題を選定しました。平成21年度、各課題の実施可能性調査を行い、緊急性、社会的なインパクトの大きさなども考慮して重点化を進めます。

さらに本分野では、ものづくりを広範にわたって支えている中堅・中小企業層のHPC(High Performance Computing)への参入を促進し、我が国ものづくり産業全体の抜本的な国際優位性強化に貢献することをめざしています。このため中核となる次世代スパコンと大学の情報基盤センター等のスパコンをシームレスにつないだHPC計算機利用環境を形成するとともに、それらに柔軟に対応できるアプリケーションソフトウェアの整備を行います。同時に、HPC利用層の拡大に向けた取り組みとして、HPC産業利用スクール等の人材育成プログラムを強力に推進します。



体制図

## 第2回統合ワークショップ報告

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」プロジェクトでは、来年6月にβバージョン公開を予定しており、3月2日、10日の両日、ソフトウェア紹介を目的に「第2回統合ワークショップ」を実施しました。

3月2日は、量子バイオ・ナノデバイス分野合同で開催し、ProteinDF、BioStation、PHASE-SYSTEMの各ソフトウェアの内容紹介に加え、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会バイオワーキンググループ参加企業より実際の活用事例の紹介をいただくなど、今後の研究開発につながる充実したワークショップとなりました。

3月10日は、ものづくり分野の流体、構造、材料、マルチ力学の4テーマで行い、定員を大きく上回る参加があり産業界からの期待の大きさがうかがえました。最後の全体質疑応答ではリーダーの方々を壇上に、いかにして開発ソフトウェアを製品開発・研究開発の現場で使えるものにするか、定刻を大幅に超える白熱した議論がなされました。今回ワークショップでいただいた現場からの貴重なご意見は、実用面でのソフトウェア機能増強に活かしていければと考えております。



### 編集後記

イノベーションプロジェクトが開始して早2年。第2回統合ワークショップも盛況のうちに幕を閉じました。現在センターでは年報の制作中で、間もなく完成予定です。ニュースでも研究成果の概要を紹介しておりますが、詳細はこちらをご期待いただければと思います。なお、来年度も変わらずのご支援を宜しくお願い申し上げます。

### 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