



「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 世界最先端・実用的ソフトウェアβバージョン公開

3月に発行した本ニュース前号でもご紹介したとおり、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」プロジェクトで開発を進めている、ものづくり分野のシミュレーションソフトウェア16本を6月1日よりウェブ上に公開いたしました。本号の内容は、公開した各ソフトウェアのご紹介が中心となっています。今回公開したソフトウェアはβバージョンですが、今後、多くの皆様に実際のものづくりの現場でご使用いただき、そのような中で出された様々なご意見も反映させながら今後のソフトウェアの研究開発を進めることにより、プロジェクトの残り3年以内に各ソフトウェアの機能と使い勝手、ならびに計算速度・計算精度

の向上を図っていく予定です。ところで、最近の計算機の性能向上は専ら演算コア数の増大によりもたらされています。たとえば、神戸で建設が進んでいる次世代スーパーコンピュータは8万以上のCPU、64万以上の演算コアから構成される予定です。産業界で直ちにこのような超大規模計算を実施することは不可能ですが、今でも数千コアを用いた計算は十分に可能ですし、数年後には数万コアを用いた実用計算も可能になるものと期待されています。このような計算機パワーをフルに引き出すことができれば、ものづくりの現場におけるシミュレーションの活用の仕方、さらにはものづくりのあり方自体を抜本的に変革できる可能性があります。イノベーションプロジェクトでは、産業

界と何回にも及ぶ議論を経て、ものづくりのあり方に変革をもたらすことを究極的な目標にしてソフトウェアの研究開発を進めており、開発しているソフトウェアは手許のPCクラスターから次世代スーパコンに至るまで様々な計算機環境でスケーラブルな高速計算が実現できるように設計・実装されています。また、単に大規模な計算が高速に実現できるだけではなく、真にイノベーションに資するよう、精度や使いがっての向上や高度な機能の実現などにさまざまな工夫を凝らして開発を進めております。是非、この機会に多くの皆様に公開したソフトウェアをお使いいただき、忌憚の無いご意見を戴きたく、お願い申し上げます。

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

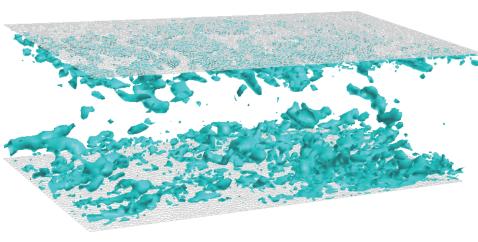


fig.1 乱流予測精度の検証計算(チャネル内乱流)

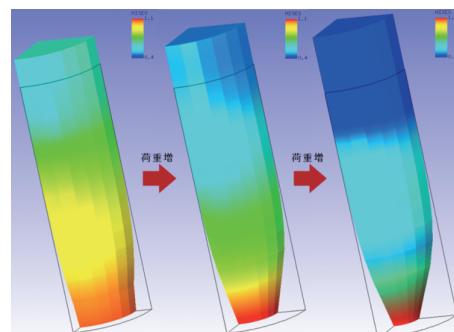


fig.2 塑性変形のステップ解析例(Necking Cylinder)

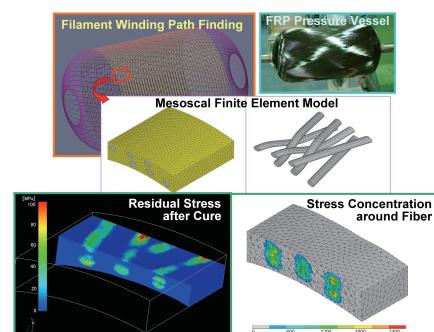


fig.3 燃料電池自動車用FRP製高圧水素容器の
メソスケール損傷解析

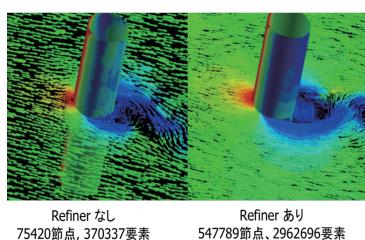


fig.4 REVOCAP_Refinerを利用したFrontFlow/blue
による細分化したモデルの解析

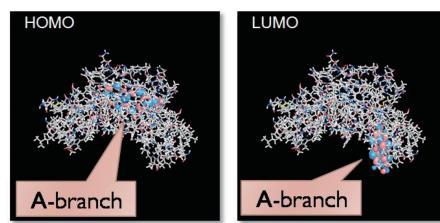


fig.5 光合成反応中心スペシャルペアを含む
6つの色素周辺タンパク質のB3LYP全電子計算

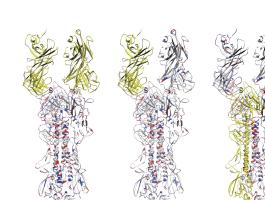


fig.6 MP3レベルで求めた相互
作用エネルギー分布の可視化

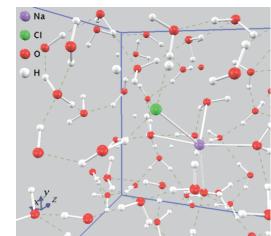
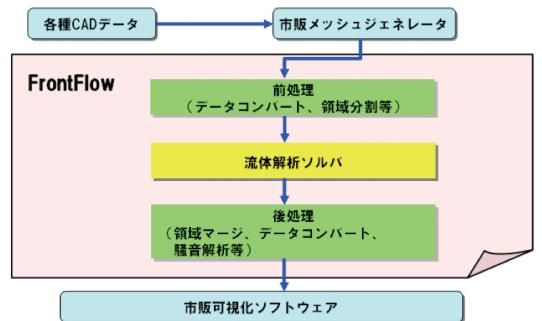


fig.7 水中のNaCl解離反応

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

公開ソフトウェア FrontFlow / blue Ver.6.1

特徴と新機能 FFB 開発チームでは、100 万コア規模の計算機リソースを用いた 1,000 億点規模の大規模解析を視野にいれ開発を進めてきました。解析対象の複雑化や大規模化に対応するための要素技術として、マルチ要素対応、メッシュ自動細分機能(Refiner)のインターフェース、コアルーチンの高速化技術を開発しました。本バージョン(FFB6.1)では、これらの技術を実装した新流れソルバーを公開します。このソルバーの活用により、メッシュ作成のための作業負荷が軽減されるとともに、大規模解析のスムーズな実行が可能になります。また、新ソルバーでは、メモリの動的アロケーション機能や計算途中でのストップ機能を実装し操作性の向上を図っております。これに加え、従来のソフトウェアでは困難であった大規模音響解析を実現する音響解析ソルバーを開発しました。現状で数千万メッシュの解析を実現しており、最終的には 10 億点規模の解析を目指しております。FFB6.1 ではこの音響解析ソルバーのプロトタイプも公開します。[fig. 1](#)

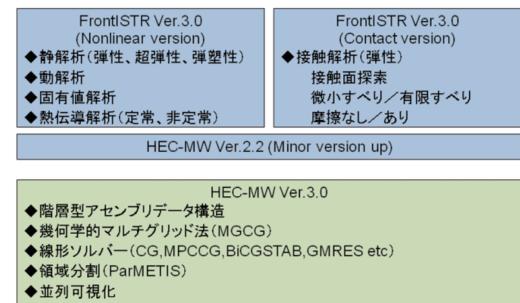


FrontFlow システム構成

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

公開ソフトウェア FrontISTR Ver.3.0 (Nonliner version, Contact version) HEC-MW Ver.3.0

特徴と新機能 今回公開する HEC-MW は有限要素法による解析ソフトウェアを開発するためのフレームワークを提供します。本バージョンでは、アセンブリ構造のまるごと解析を実現するための階層型アセンブリデータ構造を新たに実装し、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 は、Nonliner version と Contact version に分けて提供します。Nonliner version は、超弾性および弾塑性の各種構成式に対応しています。これらの構成式と Total Lagrange 法および Updated Lagrange 法による幾何学的非線形解析機能を組み合わせることにより、大ひずみ大変形の構造解析が可能となっています。Contact version 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での接触解析に対応しています。なお、これらの 3 つのソフトウェアの統合は平成 22 年度に予定しています。[fig. 2](#)



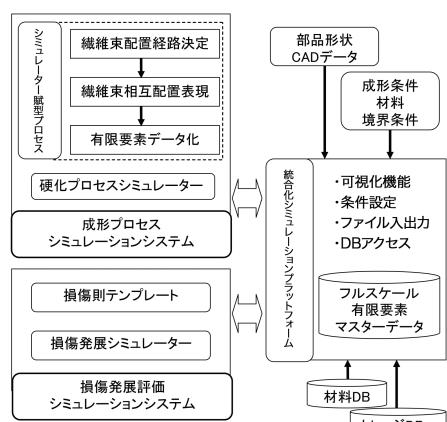
FrontISTR, HEC-MW システム構成

複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発

公開ソフトウェア FrontCOMP_mold Ver.1.0, FrontCOMP_cure Ver.1.0, FrontCOMP_damage Ver.1.0,

特徴と新機能 FrontCOMP は、Resin Transfer Molding や Filament Winding により成形され、炭素繊維の重なり構造が強度を大きく左右すると考えられている炭素繊維強化複合部材に関して、的確な強度信頼性評価を行なうためのソフトウェアシステムです。最大の特徴は、炭素繊維束と樹脂の複合システムとしての材料を、複合則等により連続体化して解析するのではなく、それぞれ個別に有限要素モデル化するメソスケールモデルを機軸とすることにあります。その枠組みにより、樹脂単独、繊維束単独の強度試験と、シミュレーション結果を統合した新たな強度評価の方法論を構築することができます。βバージョンでは、成形プロセスシミュレーションシステムと損傷発展評価シミュレーションシステムを開発します。成形プロセスシミュレーションシステムは、プリプロセッサーにあたる

(1) 賦型プロセスシミュレーターと (2) 硬化プロセスシミュレーターからなり、有限要素データ作成から樹脂硬化後の残留ひずみ解析まで実行します。損傷発展評価シミュレーションシステムでは、メソスケールモデルに適合する損傷則をテンプレートとして準備し、樹脂の損傷発展と炭素繊維束の最終破断シミュレーションを実行します。[fig. 3](#)

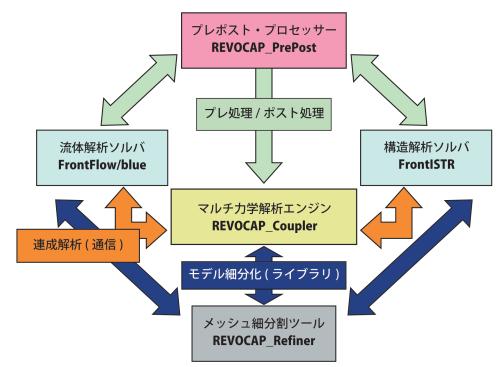


FrontCOMP システム構成

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

公開ソフトウェア REVOCAP_Coupler Ver.1.3, REVOCAP_PrePost Ver.1.4, REVOCAP_Refiner Ver.0.4

特徴と新機能 REVOCAP_Coupler は、MPI 並列環境で異なる単一力学現象ソフトウェア間における連成界面 / 領域のメッシュトポロジーの違いを考慮して節点間における変換則を求め、物理量の補間を行うことで弱連成解析の補助を行うプログラム群です。モデル細分化モジュール REVOCAP_Refiner を組み込むことで、細分化を行ったメッシュにおける連成解析も可能です。REVOCAP_PrePost は大規模アセンブリ構造に対応したマルチ力学解析用のプレポストプロセッサーです。REVOCAP_Coupler による FrontISTR と FrontFlow/blue の流体・構造マルチ力学解析のためのプレ処理に対応しています。イノベーションプロジェクトのソルバ群 FrontISTR、FrontFlow/blue に加え、ADVENTURE_Solid および REVOCAP_Magnetic のソルバ単体用のプレポスト処理にも対応しています。REVOCAP_Refiner は並列環境下でモデルを細分化するためのモジュールです。本研究開発からはモジュール単体として公開しますが、FrontISTR および FrontFlow/blue にも組み込まれています。fig 4

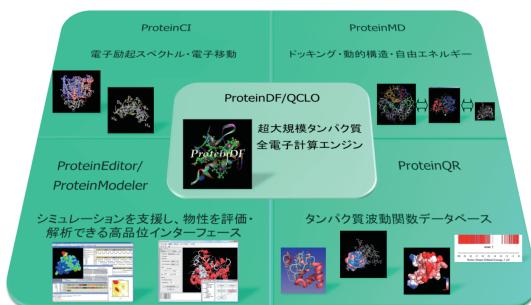


REVOCAP システム構成

バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発

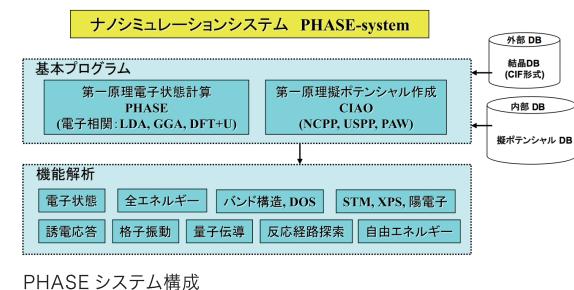
公開ソフトウェア ProteinDF System 2010

特徴と新機能 本研究開発では、アミノ酸残基とヘテロ分子で同程度の定量性を持ち、タンパク質をありのまま扱う量子化学計算による解析手段として、ProteinDF システムを開発しています。密度汎関数法による全電子カノニカル波動関数計算を行う汎用性から、タンパク質のみならず機能性高分子も取り扱える計算能力があり、ナノスケールものづくりに貢献できると思われます。本公開ソフトウェアは、実用的なプリ・ポスト処理機能を追加しつつ、本システムをバイオ・ナノ分子特性シミュレーションシステムとして発展させたβバージョンです。具体的には、大規模クラスタ分子において、量子化学計算の標準である B3LYP と vdW 相互作用を組み込んだ DFT+D 計算が高速に行えるようになりました。また、芳香族化合物の励起状態計算も高精度に求めることができる Grimme の DFT-CIS 法のプロトタイプ版をつけました。さらに、本システムの統合 GUI も機能強化し、分子モデリング機能とそれに伴う CTFfile のサポート、ならびに IRC 計算機能として先行して Gaussian の入出力が使用できます。fig 5



公開ソフトウェア PHASE Ver.9.00, UVSOR Ver.3.30,
PHASE-Viewer Ver.3.20, ASCOT Ver.4.10

特徴と新機能 次世代半導体ナノデバイスや環境・エネルギー関連デバイスなどの革新的機能デバイスの創成を支援するために、ナノデバイスの構造・機能を量子論的に高精度に解析・予測するシミュレーションシステムPHASEを研究開発しています。今回の公開版では、電子相関の解析を高度化することにより、従来記述が難しかった遷移金属酸化物など、革新的機能デバイスの要素物質の電子状態や誘電応答を高精度に解析する機能や、原子ダイナミクスを解析する機能を強化し、化学反応における自由エネルギー変化を解析する機能などを提供します。PHASEは高い並列性能を有するプログラムであり、地球シミュレーターや並列スカラー計算機等の計算機環境において高い実行性能を実現します。今後、電子移動や触媒反応などの解析能力を高めるために、電子・原子ダイナミクス解析の更なる機能強化、多重並列化による超並列計算機環境への対応などを図り、ナノ物質の構造・物性に関する大規模・高精度な第一原理計算ソフトウェアとしての高度化を推し進めます。[fig 7](#)



PHASE システム構成

イベント情報**| シンポジウムのご案内**

本センターが中核拠点となって平成 20 年 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ソフトウェアの研究開発」プロジェクトでは、本年 6 月にプロジェクトでの約 2 年間の研究成果を実装したβバージョンを公開する運びとなりました。今回のシンポジウムでは、βバージョンの内容と実証解析例の具体的な紹介を行います。一方、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」(戦略分野 4)では、本センターは、平成 21 年度、実施可能性調査(FS)の中核機関として採択されました。本シンポジウムではその結果を踏まえ、次世代スパコンと国内スパコン(独法、大学等)をネットワークで結ぶ、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)を戦略的に活用した、先端的ものづくり設計システムの将来像をテーマに議論を進めます。今回は二日間にわたり、それぞれの事業の意義と取り組み内容についてジョイントシンポジウムを開催いたします。

開催日時	平成 22 年 7 月 29 日(木) 10:00 ~ 18:30 平成 22 年 7 月 30 日(金) 10:00 ~ 18:00	共催	(独)日本原子力研究開発機構、(独)宇宙航空研究開発機構(全て予定)
場所	東京大学生産技術研究所	後援	日本学術会議、(独)海洋研究開発機構、(独)理化学研究所、 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、 (財)計算科学振興財団(全て予定)
主催	URL: http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/		

1日目 平成 22 年 7 月 29 日(木)**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****第1回「次世代ものづくり」(戦略分野4)シンポジウム**

テーマ：“21世紀のものづくりを変革するHPCインフラの戦略的活用”

概要：

次世代スパコンを頂点とする我が国のHPC環境を戦略的に活用することにより可能となる、次世代の先進的なものづくり設計プロセスの実現に関し、各界有識者による提言・議論を行います。

2日目 平成 22 年 7 月 30 日(金)**文部科学省 次世代IT基盤構築のための研究開発****第2回「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」プロジェクトシンポジウム**

テーマ：“実用的先端シミュレーションソフトウェアの開発と普及体制の新展開”

概要：

PCクラスターからスパコンに至る広範囲のインフラに柔軟に対応可能で産業イノベーション創出を牽引するシミュレーションソフトウェアの開発状況を紹介するとともに、今後の新しい普及体制についての提案・議論を行います。

編集後記

イノベーションプロジェクトも 3 年目に入りました。前半は 6 月に開発ソフトウェアのβバージョン公開、同月 4, 5 日の生研公開、7 月 29, 30 日のイノベーションPJ、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」(戦略分野 4)のジョイントシンポジウムと行事が目白押しとなっております。多数の皆さまの参加をお待ち申し上げております。

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