



## イノベーションプロジェクトも残すところ2年余り。 最後の仕上げに向けて全力投球。

平成20年10月にスタートしたイノベーションソフトプロジェクトも、プロジェクト開始後2年余りが経過し、残すところ2年余りとなりました。昨年6月には本プロジェクトで開発予定の主要な機能を盛り込んだβバージョンのソフトウェア17本をHP上に公開しましたが、現在はさらなる機能強化やユーザー使い勝手の向上に図るべく、どのチームも精力的な取り組みを続けています。また、来年11月から本格運用を開始する予定の次世代スパコン「京」の利用も念頭に、超並列化や最適化を進めています。たとえば、流体解析ソフトFFB、バイオ分子相互作用シミュレーター ABINIT-MP、バイオ・ナノ分子特性解析ソフト ProteinDF、および、ナノ材料・ナノデバイス機能解析ソフト

PHASEシステムでは、すでに、8,000コア(現状の国内最大規模の計算機)を用いても十分高い並列性能・実効性能が得られております。これらの成果の詳細は来る2月24日(木)、25日(金)の二日間にわたり開催する第3回ワークショップ(本文4頁目参照)で皆様に紹介する予定です。

さて、来年度からの2年間では、ユーザーインターフェースやデータインターフェースの強化などソフトウェアの完成度を高めるとともに、1ペタフロップス級のスパコンを用いて、10万コア規模の先進的な実証計算を実施する予定であり、現在、そのための予備計算などを進めています。たとえば、ものづくり系チームでは連携して、自動車の空力・振動・音響連成解析を実現し、開発中のソフトウェ

アが自動車の空力設計の変革に寄与するということを実証することを計画しております。どのチームも来年度以降このような本格的な実証計算を実施する予定であり、また計算結果は解析事例集として纏め、大規模解析が容易に実行できる環境も同時に整備していく予定です。言うまでもなく、実証計算を実施するためにはユーザー、特に、産業界の皆様のご協力が必須です。本プロジェクトの仕上げに向けて、引き続きご支援・ご協力を頂きたく、お願い申し上げます。



加藤 千幸

東京大学教授 生産技術研究所  
革新的シミュレーション研究センター  
イノベーションプロジェクト 研究代表

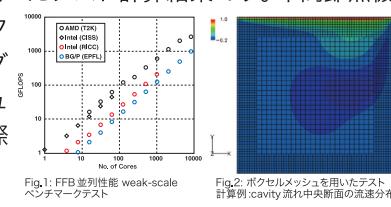
### 「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト 2011年の抱負

#### 山出 吉伸 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



流体グループで開発を進めているFrontFlow/blue(FFB)は、①最先端のスパコンでも高速に動作し、超大規模高精度LES計算が可能であり、かつ、②設計現場でも手軽に利用できる実用的な流体解析システムであることを特長としています。本年度は、先進的ソフトとしての取り組みとして、次世代スパコン「京」での動作を念頭にいれ、1万コア規模の計算機を用いて10億グリッド規模のベンチマークテストを実施しました(Fig.1)。「京」では数十万コアを使用し、1,000億グリッド規模の解析を実施する予定ですが、そこでも充分高

い並列性能が実現できる目途が得られています。また、汎用性向上のため、定常RANS解析機能、熱輸送解析機能、音響解析機能、ファンモデル、ポーラスメディア、中間節点機能等の機能拡充を行いました。Fig.2は中間節点機能を用いたテスト計算結果です。中間節点機能を活用することにより、ボクセルメッシュ、スライディングメッシュ、局所refineメッシュに対応でき、メッシュ作成の際の自由度が大幅に向かいます。

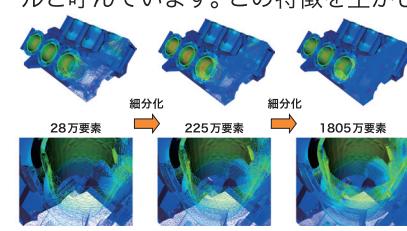


#### 竹田 育 大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバーの研究開発



私たちのグループは、ものづくりシミュレーションの一つとして構造解析ソフトウェアFrontISTRの開発を行ってきました。このソフトウェアの特徴は、大規模並列、部品を組み立てるかのようにメッシュデータを接合するアセンブル機能、およびネストされた非構造格子にあります。その上でエンドユーザーから要求される非線形構造解析としての機能開発を行っております。FrontISTRをソフトウェアから見た場合に市販構造解析ソフトと大きく違う点は、解析コードに共通すると思われる部分を分離してライブラリー・

プログラムとし、FEMなどの解析アルゴリズム部分をアプリケーション・プログラムとして記述している点にあります。前者をMWと呼び、後者を解析モジュールと呼んでいます。この特徴を生かしてMWはユーザーによるコード開発にも利用されるような利便性、解析モジュールはエンドユーザーから求められる解析機能の充実を計って行きます。



## 吉川 暢宏

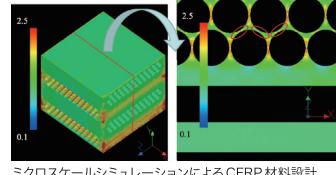
複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発



## ソフトウェアで原理解明

成人日の日経新聞に「光ディスクの記録原理を SPring-8 とスパコンシミュレーションで解明」との記事が掲載されておりました。あれだけ普及している光ディスクの記録原理が未解明であったのかと驚かれた方も多いのではないかと思います。人類は、道具を手にして以来、材料の破壊と劣化を予測することに向き合わされておりましたが、すべてを把握した上でのづくりが進められているわけではなく、程度の差はある経験則による近似が必要となっています。炭素

繊維強化複合材料は、数千年の歴史を誇る鋼に比べれば新種の材料で、如何なる方法論で経験則を蓄積すればよいか自体が課題となっている材料です。その破壊メカニズムを正確に理解するために開発したソフトウェアがFrontCOMPです。身近で使われているながら設計に必要な原理究明が遅れているこの材料について、実験・計測と一緒にながら、そのメカニズム解明の一翼を担うべく開発を進めいくつもりです。



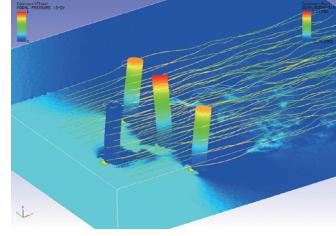
## 徳永 健一

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



マルチ力学チームでは、イノベーションプロジェクトで開発された流体解析、構造解析プログラムを組み合わせた大規模アセンブリ構造対応のマルチ力学解析を行うために、カプラ、プレポスト、リファイナの開発と例題の解析を行っています。それぞれの解析プログラムの開発チームと連携を取りながら、基本的な機能の検証を終え、性能評価や実証解析に進みつつある状況です。スーパーコンピュータなどの大規模並列計算機環境も身近な存在となり、エネルギー分野や輸送機器分野などマルチ力学解析のニーズは

増えつつあり、大規模なマルチ力学解析への期待がますます高まっていることを実感しています。産業界で実際に利用されてものづくりに貢献できるようなシステムの開発を目指して、残り2年のプロジェクト期間でマルチ力学チーム一丸となって全力を尽くして完成度を上げていきたいと考えております。今後もご支援よろしくお願い致します。



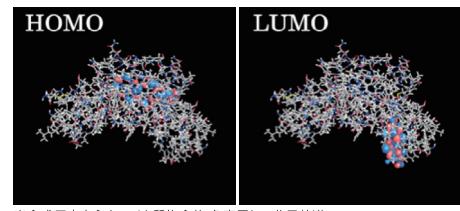
## 平野 敏行

バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発



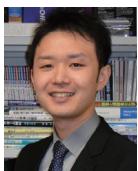
巨大分子を扱うことのできる超並列量子化学計算プログラム ProteinDF も、着実に機能追加を行い、バージョンアップを重ねてきました。GPU や次世代スパコンなどのハードウェアも充実し、このようなハードウェアで高速に並列計算するソフトウェアが開発されることで、以前は不可能だったシミュレーションが可能になりつつあります。図は現在挑戦中の光合成反応中心タンパク質複合体の計算結果(分子軌道図)の一部です。実験では直接観察することのできない分子軌道を可視化することができます。イノベー

ションプロジェクトではさらに、IR・ラマンやNMRなどの分光学的データをシミュレーションする機能が追加されます。実験結果とシミュレーションとが直接比較できるようになり、応用範囲が広がります。実験とシミュレーション、それを相補的に利用し、効率良く研究開発できる環境の構築を目指しています。



## 塙本 貴志

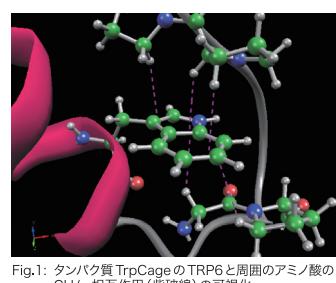
バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発



BioStation Viewer はフラグメント分子軌道(FMO)法に基づくバイオ分子相互作用シミュレーター ABINIT-MP の専用 GUI として開発され、フラグメント分割やフラグメント間相互作用エネルギー(IFIE) の可視化など FMO 法に特化した機能が実装されました。

また、今年度は、CH/πやπ/πなどの相互作用を解析できるプログラム CHPI を導入し、これらの相互作用を可視化できるようにしました (Fig.1)。これに ABINIT-MP の FILM (Fragment Interaction

analysis based on Local MP2) を組み合わせることにより、2つの方法で複合的に分子間相互作用が理解できると期待できます。今後も分子間相互作用の解析のための機能を充実させていき、より多くのユーザーに使ってもらえるようなシミュレーションシステムの構築を目指しています。



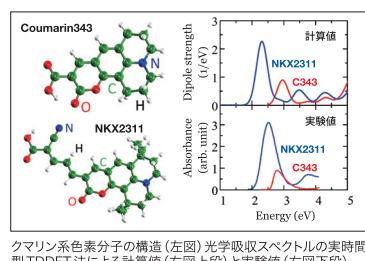
## 糀田 浩義

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



ナノデバイス開発の分野では、半導体デバイス用の新規材料探索や、エネルギー変換デバイスの高効率化のための材料設計など、元素資源やエネルギー問題にも直接関係した重要な研究開発が進められています。ナノグループでは、そのようなデバイス開発支援のツール構築を目的として、様々な材料の物性機能を予測解析することが可能なシミュレーション・ソフトウェアの研究開発を実施しています。量子論に基づく非経験的電子状態計算手法を基本技術として、時間依存密度汎関数法などの先進的な理論手法を取り入れたソ

フトウェアを開発し、色素増感太陽電池などの次世代デバイス材料に対するシミュレーション解析を実行してきました。私たちは、光学・電気・磁気特性など様々な物性予測機能を備えた高精度なシミュレーション・ソフトウェアの開発、および実用材料に対する実証計算をさらに進め、ナノデバイス分野における技術革新に貢献することを目指します。



文部科学省 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)の構築  
グランドチャレンジアプリケーションの開発

## 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

分子スケール研究開発チーム分担リーダー：佐藤 文俊  
臓器全身スケール研究開発チーム分担リーダー：大島 まり

世界最高性能の10 PFlops(ペタフロップス)を目指し開発が進められている次世代スーパーコンピュータシステムは、2010年7月にその名称が「京(けい、K computer)」に決定され、9月に全体の1%弱に相当する8台の筐体が兵庫県神戸市の計算科学研究機構に設置されました。

ライフサイエンス分野のグランドチャレンジ研究開発課題、次世代生命体統合プロジェクトでは、この「京」を最大限に活用できるよう、各種計算科学理論・方法論の確立と、それらに基づくソフトウェアの開発を行っています。本センターからは、佐藤文俊教授と大島まり教授が参画しています。佐藤分担メンバーは、大規模量子化学計算によるタンパク質反応シミュレーションソフトウェアの研究開発を推進しています。本年度は、1)「京」の特徴を活かすためのプログラム改変を行い、ファイルI/Oの大幅低減と分散ディスクI/Oへの対応、分散行列によるOpenMP + MPIによるマルチスレッド非同期通信処理の実装、バッファリングによる動的並列計算の効率化等を行いました。加えて、2)大規模計算の精度を保証するための高速かつ精密な数値積分計算法の研究、3)自由エネル

ギー計算に関する研究、さらに、4)大規模タンパク質では当然となる複数の活性中心を持つ複雑なタンパク質全電子計算法の研究(Fig.1)を行いました。大島分担メンバーは、臓器全身スケールに関する研究開発チームに属し、医用画像と全身循環系血流ネットワークを統合したマルチスケールシミュレーションの研究開発を推進しています。本年度は、1)脳循環系の血流解析と1次元全身解析の統合、2)流体構造連成解析プログラムの開発、3)流体構造連成解析と1次元全身解析の統合の3つの内容に取組みました。

Fig.2に総頸動脈の3次元血流解析と1次元-0次元のマルチスケールシミュレーションの結果を示します。

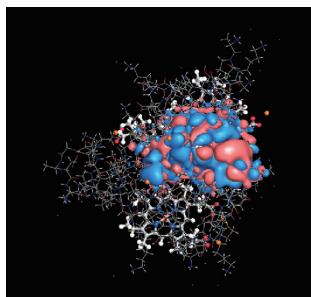


Fig.1: ProteinDFによる計算事例：  
B3LYP汎関数によるシクロロムc3のHOMO

一方、従来の開発側視点に立ったこれら「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの研究開発」プロジェクトは、利用者側視点に進化・発展させた「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)の構築」へと転換期を迎えました。ワーキンググループに加藤千幸センター長が就任、本所はユーザコミュニティ機関に認定されました。

以上のように、2012年の本格稼働に向かって各プロジェクトが進行しています。

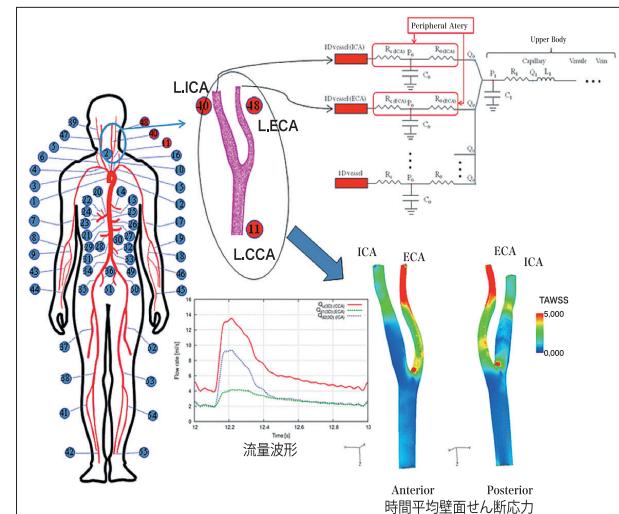


Fig.2: 3次元血流解析と全身循環を考慮した境界条件のモデリングと解析結果

文部科学省「安全・安心科学技術プロジェクト」

## 有害危険物質の拡散被害予測と減災対策研究

研究代表者：加藤 信介

本プロジェクトは、平成19年8月1日からスタートし、平成19、20年度の2年間で、各々が別プロジェクトで開発した屋内拡散予測技術、屋外拡散予測技術および避難誘導のための災害情報共有技術を統合的に活用したシステムの開発を行いました。最終年度となる平成21年度には、開発システムの有効性を自治体の各種NBC対処訓練で実証しました。例として、東京都と内閣官房が共同実施した大規模テロ対処訓練においては、訓練半年前のシナリオ作成段階から文部科学省安全安心プロ

ジェクトチームとして参加し、拡散予測および避難誘導シミュレーション結果を示し、より現実的な訓練シナリオの作成に協力しました。また、研究成果の一つとして、初期対応者がテロ発生時の対処行動を、より的確に実施するために必要となる知識を提供することを目的とした初期対応者用DVDを、本研究で開発した屋内・屋外拡散予測システムおよび避難誘導支援システムの計算結果および実証試験結果を収録することで作成しました。プロジェクト終了後も、このDVDを初期対応者機関に

配布する他、講演会での成果報告を通して本研究成果の積極的な公開と普及を展開しています。



ガス拡散の可視化写真(初期対応者用DVDに収録)

## 国際フロンティア産業メッセ2010 出展報告

2010年9月9日(木)・10日(金)、神戸国際展示場(神戸ポートアイランド)において国際フロンティア産業メッセ2010が開催され、当センターは、パネル展示およびデモ展示の他に、奥田洋司教授による「最先端シミュレーションによるものづくりの変革」と題したプレゼンテーションを行い、最新のアプリケーションソフトウェアの活用とその研究成果を、多くの方々にご覧いただきました。



## 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3回 統合ワークショップ

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、コア部分の機能に関する研究開発がほぼ終了し、その成果を実装したβバージョンを平成22年6月に公開しました。そこで、このたび下記日程・プログラムによるワークショップを開催し、広範なユーザーの皆様に公開したβバージョンを利用し実証を実施している(あるいは計画中の)解析事例をご紹介することと致しました。今回は産業界等の第一線でご活躍中の皆様からの利用に当たっての問題を中心とする忌憚の無いご意見・ご要望をいただけることを特に期待しています。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

場所：東京大学生産技術研究所 大会議室(An301)

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

共催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(ICSCP)

参加費：無料

定員：100名

お申込み：  
最新情報は <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/riss/>

## プログラム

平成23年2月24日(木) 13:30～18:00

### 量子バイオ・ナノデバイスシミュレーションシステム

#### I. 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」

「バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発」

#### II. 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」

#### III. 大規模量子計算全体討論

平成23年2月25日(金) 13:00～18:30

### 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」

「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」

「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」

「複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発」

## HPC産業利用スクール開講のお知らせ 参加者募集中

詳しくは、<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>

### 先端コース

かつて経験したことのない大規模並列計算による  
個別課題対応型ソリューションスクール！

#### HPC産業利用スクール先端コースにお勧めの方

- ・産業目的で大規模計算が必要と考えられる課題(流体、構造、ナノ)をお持ちの方
- ・PC等で解析を行ってきたが、現象がうまく表現できないとお困りの方
- ・小規模計算を行ってきたが、超並列計算との違いが知りたい方
- ・並列計算機導入に際し、その可能性と有効性を知りたい方
- ・国プロ超並列ソフトの試験利用、導入等を考えている方
- ・大規模シミュレーションに関して大学研究機関との共同研究を考えている方
- ・次世代スパコン“京”を業務に活かしてみたいと考えている方

募集  
要綱

実施期間：2011年2月1日(火)よりスタート、開始より3ヶ月間  
(講義の他に必要に応じて個人指導をいたします。)  
場所：東京大学生産技術研究所 連携研究棟(CCR棟)  
応募条件：HPC産業利用スクール実践コース受講修了者または、次のいずれかのアプリケーション使用経験者；FrontFlow/blue またはred, FrontISTR, REVOCAP, PHASE 等のイノベーションソフト  
定員：10名  
受講料：100,000円(参加者1名あたり、但しICSCP会員は80,000円)

### ナノテクコース

新しいソフトウェアによるナノシミュレーションを体験し  
来るべき数千コア、数万コアの世界を垣間見るチャンス！

#### HPC産業利用スクール：第1回ナノテクコースプログラム概要

- ・本スクールの趣旨説明(ナノシミュレーション概論、産業界での利活用事例)
- ・PHASE紹介と例題による演習、より進んだ使い方
- ・QMAs紹介と例題による演習、より進んだ使い方
- ・OpenMX紹介と例題による演習、より進んだ使い方
- ・1,000コア級計算機(T2K)を使った各自の課題による実習と講師陣を交えた結果の吟味

※受講申込者には事前にやってみたい課題(原子数十原子規模)をお知らせください。可能な限り実習時の課題として取り上げます。

募集  
要綱

開催日時：2011年3月9日(水)、10日(木) 10:00～17:00  
場所：東京大学生産技術研究所 中セミナー室5(As313-314)  
講師：PHASE：大野隆央(物質材料研究機構)、  
山崎章浩(東京大学生産技術研究所)他  
QMAs：石橋章子、香山正憲(産業技術総合研究所)他  
OpenMX：尾崎恭助(北陸先端科学技術大学院大学)他  
定員：20名  
受講料：40,000円(参加者1名あたり)

## 編集後記

2011年の新年号では、イノベPJ各チームより2011年の抱負をお寄せいただきました。ソフトウェアに対する熱い思いが伝わり、ますます飛躍の年となる予感がしています。今年もプロジェクトの最新情報などを皆様にお届けしていきますので、ご支援・ご協力のほどよろしくお願ひいたします。

## 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