



## ハイパフォーマンス・コンピューティングの 本格的な産業利用の魁

ハイパフォーマンス・コンピューティング(High Performance Computing、HPC)という言葉は1990年頃から学会で盛んに使われていますが、現在、産業界で行われるシミュレーションは高々16コアや64コア程度の計算であり、ごく一部の先端的企業を除いてはHPCという言葉はいわば無縁のもののように思われています。この理由としては、現在の高速計算機の性能を有効に発揮できるアプリケーション・ソフトウェアがほとんどないこと、企業が手軽に利用することができる高速計算機環境がないことに加えて、HPCを利用するによる、産業上の効果が未知だったことなどが挙げられます。

そのような状況の中、本研究センターでは平成20年10月から、文部科学省「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」プロジェクトを牽引し、ものづくり分野と関連性が高い7つのテーマ

において、数コア程度のPCクラスターから100万並列規模の超並列計算機までスケーラブルに性能を発揮できる、アプリケーション・ソフトウェアの開発を進めて参りましたが、これらのソフトウェアの開発がほぼ終了しました。このプロジェクトの残された期間はあと2年間ですが、産業界と連携して、開発したソフトウェアの利用効果の実証を進める予定です。また本センターは、文部科学省HPCI(ハイ・パフォーマンス・コンピューティング・インフラ)戦略プログラム「次世代ものづくり」分野の代表機関として、HPCの戦略的利用を推進するための数々の具体策を企画して参りましたが、それらの準備もほぼ整い、来年度からは本格実施に移行します。たとえば、HPCを活用したシミュレーションの実力や効果を比較的手軽に検証するためのテストベッド環境の構築を進めており、その一環として、この3月には本センターに約500コア(理論性能

約5テラ・フロップス)の計算機を導入しました。平成23年度中には約2,000コア、ピーク性能約20テラ・フロップスの計算機システムに拡張し、イノベーションプロジェクトで開発したアプリケーション・ソフトウェア等をインストールし、公募等を経て産業界の皆様に自由にお使い頂く予定です。また、平成23年度からは、自動車メーカー、ターボ機械メーカーなど20社余りにご参画いただき、HPCを活用した次世代の設計システムの構築に目的とした产学連携コンソーシアム・プロジェクトも展開します。

このように、産業界でもHPCを利用できる環境は着実に整備されつつあり、また、HPCを利用しようという機運も急速に高まっています。より多くの企業の方にこのような活動を知っていただき、かつ、ご参画いただきたく、本ニュースレターをお届け致しました。

センター長 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 現在公開しているソフトウェア

分野	テーマ	代表システム名	主な公開ソフトウェア
次世代ものづくり	大規模アセンブリ構造対応熱流体解析ソルバー	FrontFlow	FrontFlow/blue-Ver.6.1
	大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバー	FrontISTR HEC-MW	FrontISTR Ver.3.0 HEC-MW Ver.3.0
	複合材料強度信頼性評価シミュレーター	FrontCOMP	FrontCOMP_mold ver.1.0 FrontCOMP_cure ver.1.0 FrontCOMP_damage ver.1.0
	大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーター	REVOCAP	REVOCAP_Coupler ver.1.3 REVOCAP_PrePost Ver.1.4.03 REVOCAP_Refiner Ver.0.4
ナノデバイス	量子機能解析ソルバー・ナノデバイスシミュレーター	PHASE SYSTEM	PHASE Ver.9.00 UVSOR ver.3.30 PHASE-Viewer Ver.3.20 ASCOT ver.4.10
量子バイオ	バイオ・ナノ分子特性シミュレーター	ProteinDF	ProteinDF System 1.4.2 ProteinDF Ver.2010.0 ProteinMD Ver.1.0 ProteinEditor/ProteinModeler Ver.2010.0
	バイオ分子相互作用シミュレーター	BioStation	BioStation Viewer 13.00-b010 ABINIT-MP Ver.4.3

## 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

## 汎用的機能と超大規模(1000億グリッド)解析機能を具備した流体解析システムが完成!

テーマリーダー: 加藤 千幸  
代表システム名: FrontFlow

本グループでは、ものづくり現場の多様なニーズに応えるために、今年度、解析機能拡充に注力しました。具体的には、RANS・定常解析機能、音響解析機能、固体熱伝導連成を含めた熱解析機能、ファンモデル、ポーラスモデル等の機能拡充および検証を実施しました。図はHVACから発生する騒音の予測結果です。実験値と比較した結果、良好に一致することを確認しております。また、メッシュ作成の簡易化を実現するためボクセルメッシュを用いた計算機能を実装するとともに、ボクセルメッシュ作成ツール(VCAD, snappy Hex Mesh)とのデータインターフェースを開発しました。機能拡充に加え、最大100万コア規模の計算リソースを用いて1000億グリッドの解析を実現するための大規模解析技術を開発しております。本年度は1万コア規模のリソースを用いて約20億グリッドのベンチマークを実施し、1万並列までの並列性能に問題がないことを確認しました。プロジェクトも3年目の終わりを迎えますが、システムの主要部分に関しては開発が終了しております。来年度からは実証解析を加速する予定です。

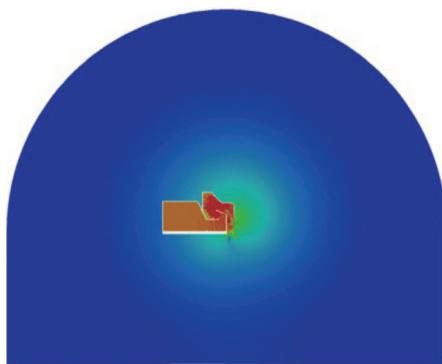


Fig. 1 HVAC モデルから発生する騒音の予測結果

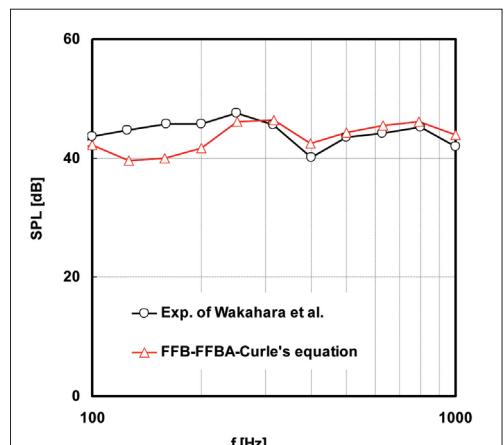


Fig. 2 HVAC モデルから発生する騒音の比較 (データ提供: 株式会社テンソー)

## 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

## 大規模並列解析におけるアセンブリ製品の非線形解析を充実化

テーマリーダー: 奥田 洋司  
代表システム名: FrontISTR

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21年度に公開したFrontISTR Ver.3.0およびHEC-MW Ver.3.0の改良と機能拡充を平成22年度に行いました。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、境界条件処理の機能拡充を行い、構造解析アプリケーションであるFrontISTRとの結合を実施しました。また、マルチコアの大規模スパコンにおける並列性能を向上するためにハイブリッド並列(マルチプロセス・マルチスレッド)の検証を行いました。FrontISTRの接触解析では、新たにLagrange乗数法による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との統合を行いました。FrontISTRの材料・幾何学的非線形解析では、材料特性として熱弾塑性・超弾性・クリープを拡充するとともに、すべての材料非線形に対応した動的解析機能を開発しました。これらの開発ソフトウェアを利用し、平成23年度から本格的に取り組む大規模実証解析に向けて、開発ソフトウェアの適用性検証も開始しています。

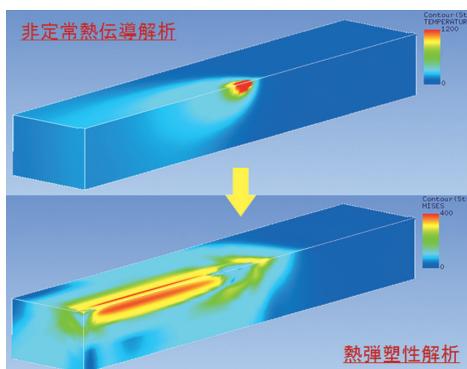


Fig.1 溶接残留応力の解析例

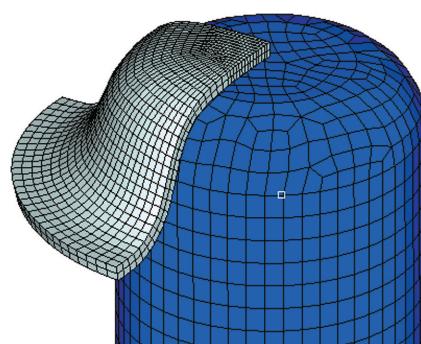


Fig.2 プレス加工の接触解析例

## メゾスケールパラメータの最適化で FRP製品の超軽量設計を実現

フィラメントワインディングなど、繊維束で補強材を構成し成形されるFRP部材について、繊維束と樹脂を明確に区別するメゾスケールモデルを機軸とするシミュレーションにより、強度評価を的確に行い、飛躍的な軽量化を進めるためのシステムです。昨年度までに完了した基本ソフトウエ

アを機動的に運用し、大規模実用計算を可能にするため、統合シミュレーションプラットフォームの開発を行い、重要な実証例題であるFRP製高圧水素容器の破裂シミュレーションに着手しました。厚肉のFRP容器では、数日間かけてワインディングと樹脂硬化を繰り返すなど、製法の制約も多く、繊維束のワインディング経路、トウプリブレグや開織といった繊維束の性状、樹脂の強度や剛性、樹脂硬化時の温度昇降スケジュールなど、メゾスケールモデル化により顕在化できるパラメータが最終強度を大きく左右します。その経験的知見をシミュレーションにより検証することで、設計の合理化を進めることができます。経験則の延長では到達が困難なレベルまで軽量化が行えると考えています。

テーマリーダー：吉川 輝宏  
代表システム名：FrontCOMP

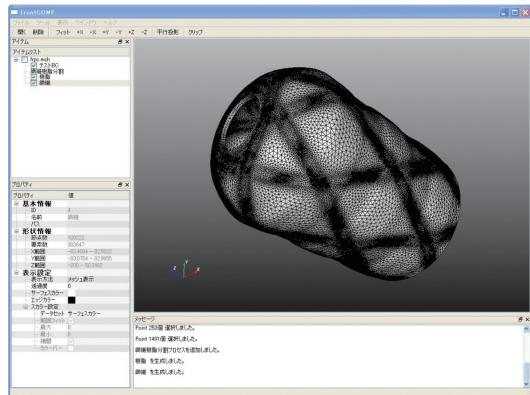


Fig.1 統合インターフェイス上でFRP製高圧水素容器のメッシュ生成

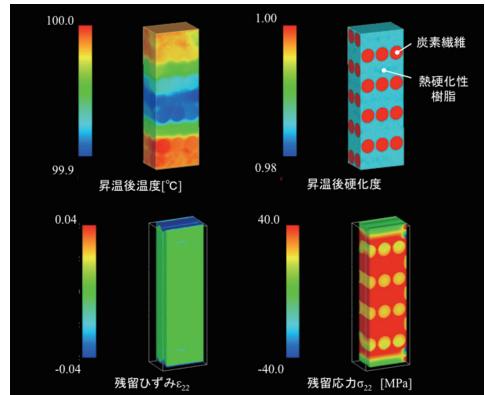


Fig.2 FRP積層板の樹脂硬化シミュレーション

## 次世代スパコンでの連成解析を視野に 性能評価を実施

テーマリーダー：吉村 忍  
代表システム名：REVOCAP

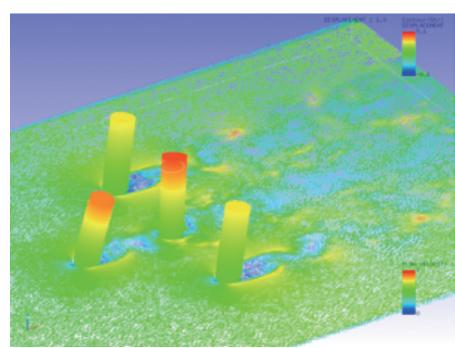


Fig.1 検証問題：4本円柱の流体構造連成解析

イノベーションプロジェクトも3年目に入り、実用性の検証段階に入りました。マルチ力学チームでは、今年度、流体解析ソルバー FrontFlow/blueと構造解析ソルバー FrontISTRを用いた流体構造連成解析についてT2K環境における計算時間・マッピング時間・通信時間・並列化効率を測定し、性能評価を行いました。連成解析を実行する際の適切なリソースの割り当て方法に関する有用な知見を得たと同時に、プロジェクトで開発しているソルバー・モジュールの課題も明確になりました。

検証用の問題として4本円柱の問題を使ってきま

ましたが、来年度からは実証解析として行う解析例題も徐々に検討を始めています。興味がある問題をお持ちの方は是非一緒に実証解析を進めたいと思いますのでご連絡ください。マルチ力学エンジン REVOCAP\_Coupler、プレポストREVOCAP\_PrePost、モデル細分化モジュールREVOCAP\_Refinerもそれぞれ領域間連成、アセンブリモデル作成、形状適合など大規模アセンブリ構造対応のマルチ力学解析を実現するための機能を備えてきました。プロジェクト残り2年でさらにシステムの完成度を上げていきたいと思います。

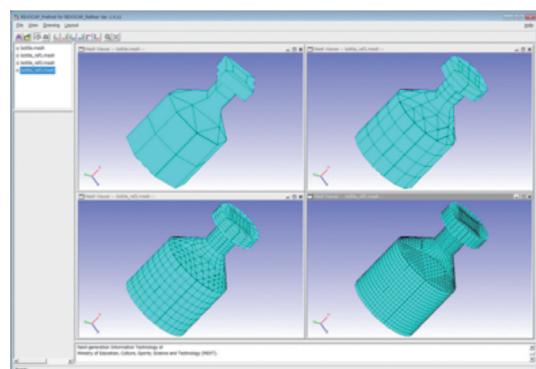


Fig.2 REVOCAP\_Refiner の形状適合機能の例

## 次世代ものづくりシミュレーションシステム統合インターフェースの研究開発

## 次世代ものづくりシステムのためのシミュレーション統合インターフェース

統合インターフェースは、次世代ものづくりシミュレーションシステムである流体解析、構造解析、音響解析の各ソルバーを統合して扱うことができるシミュレーションプラットフォームです。

製品性能の高度な予測技術により、ものづくり設計の向上を図ることを実現するシミュレーションシステムは、従来解析技術者のための解析ツールとして位置づけられてきましたが、統合インターフェースを通して操作することで、設計者が使用する設計ツールとなり、より直接的に設計プロセスに貢献するものとなることが期待できます。

統合インターフェースは、操作性の良さとともに、データの自動管理、前処理、後処理時に必要となる外部ソフトウェア（メッシュや可視化ソフト）との接続、音声ガイド、ヘルプ機能、ジョブモニター、実行ジョブ管理機能、リモートマシン対応機能といった、ユーザの利便性に配慮した様々な特徴を備えております。ものづくりシミュレーションシステムに求められる高度な操作性を実現し、ものづくり設計に関わる多くのユーザの役に立つことを目指しているのが、シミュレーションシステム統合インターフェースです。

テーマリーダー：加藤 千幸  
代表システム名：FrontWorkBench

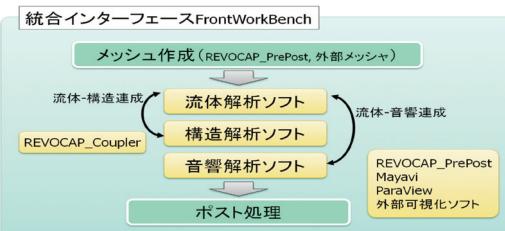


Fig.1 統合インターフェースFrontWorkBenchの概念図

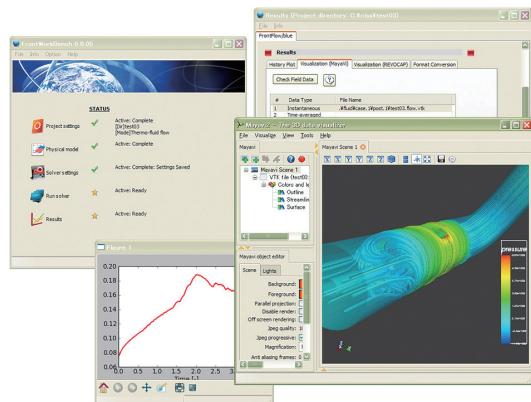


Fig.2 統合インターフェースFrontWorkBenchでの解析実行例

## 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支援環境構築へ向けたPHASEの高速・高機能化

テーマリーダー：大野 隆央  
代表システム名：PHASE SYSTEM



私たちは、量子論に基づいた非経験的な電子状態計算手法を基盤技術とすることにより、新規・代替材料の探索や物性機能予測が可能な高精度シミュレーション・ソフトウェアの開発を実施しています。本システムは、新たに先端的な電子状態精密解法や熱力学的解析法などの様々な予測性の高い機能の導入が進み、システム中枢部の高速化・最適化も大幅に進展するなど、最新性・正確性やユーザビリティの向上に関する重要な成果を得ました。また、実時間電子ダイナミクス解析機能は、時間依存密度汎関数理論を基礎とし、有機色素・分子系の光吸収スペクトルや単純金属の光学スペクトルなどの実測値を十分に良く再現する結果を得ました。この機能は、光励起による電子・原子の実時間挙動解析機能へと拡張し、エネルギー変換デバイス材料の解析などに応用することを目指しています。次世代ナノデバイス開発の支援ツール構築・実用化を目標に、ナノデバイス材料に対する試験・実証計算を推進し、本システムの信頼性・安定性の向上や適用範囲拡大へ向けた研究開発を進めています。

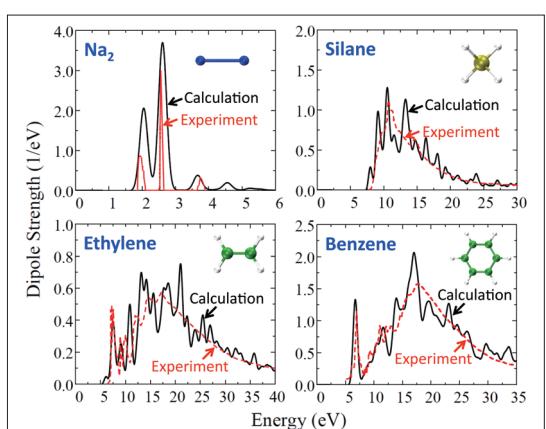


Fig.1 実時間電子ダイナミクス計算：分子系の光学スペクトル

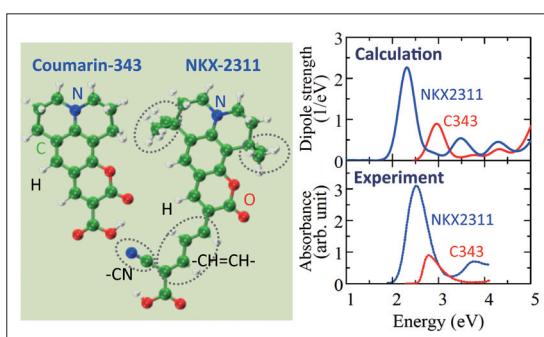


Fig.2 実時間電子ダイナミクス計算：クマリン系色素分子の光学スペクトル

## バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発

## 高速エネルギー微分計算ルーチン登場、研究開発順調

テーマリーダー：佐藤 文俊  
代表システム名：ProteinDF

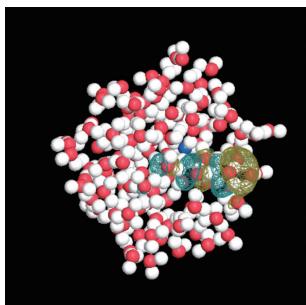


Fig.1 NH<sub>4</sub><sup>+</sup>と125H<sub>2</sub>Oからなるクラスタの密度汎関数法によるボルン・オッペンハイマー分子動力学のスナップショット

一般に、分子特性は分子に外場を与えて観測される応答です。理論では、これらは全エネルギーの原子核座標などの内部要因や電場や磁場などの外部要因による展開の微分係数と関係付けられます。そのため、巨大分子がターゲットである当グループの「バイオ・ナノ分子特性シミュレーター」にとって、高速なエネルギー微分計算ルーチンは全機能の要です。今年度はこの計算ルーチンが整備されました。これにより、分子特性計算の巨大系への対応のみならず、密度汎関数法による巨大分子の(部分)構造最適化や

ボルン・オッペンハイマー分子動力学計算が実行できるようになりました。その他の研究開発も順調で、分散力や長距離交換相互作用の補正を考慮した汎関数の実装、NMR磁気遮蔽テンソル計算機能の実装と一般化学分子によるテスト、分子モデリングソフトウェアProteinModelerのリファクタリングによるコンポーネント化とProteinDFとのコード共有化を実施しました。今後も、全機能をさらにブラッシュアップしつつ、これらを用いたより実践的な事例研究を遂行する予定です。

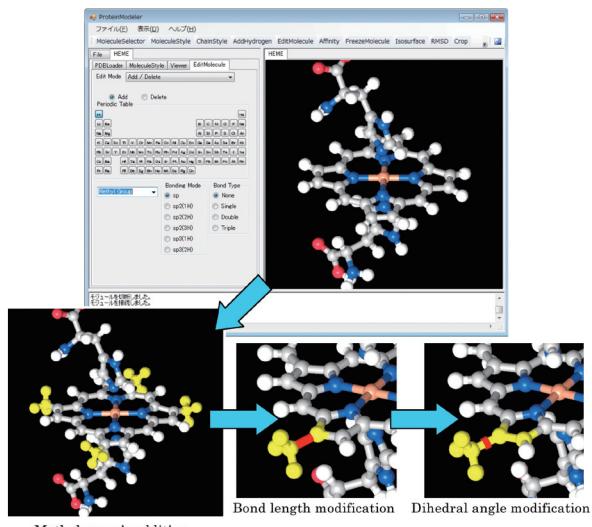


Fig.2 分子モデリングソフトウェアProteinModelerのスナップショット

## バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発

## FMO-MP2法に基づく部分構造最適化やCH/π相互作用解析機能などを開発

テーマリーダー：中野 達也  
代表システム名：BioStation



本年度は計算エンジンの拡張として、MP2エネルギー勾配計算エンジンの開発、コレスキー分解(CD)法に基づいた二電子積分の高速化、多層FMO法の改良、Counterpoise法に基づいたBSSE補正の組み込み、局在化分子軌道に基づいた電子密度解析法の開発を行いました。その結果、MP2法に基づいた部分構造最適化が可能になり、今後、生体系分子で重要な役割を持つvan der Walls力を考慮し、かつ第一原理的にタンパク質のファーマホコア部分の構造を最適化するなどの応用が期待できます。また、計算エンジンの高速化として、連続多重極展開(CMM)に基づくdimer-es近似計算ルーチンの作成とベクトル化作業、コレスキー分解に基づくFMO-HF及びFMO-MP2計算のSMP並列化による高速化作業を行い、大規模な計算もより現実的な時間で実行できるようになりました。可視化・解析手法及びユーザーインターフェースに関しては、複合ジョブによる高精度エネルギー解析機能の作成、BSSE補正計算のための入力指定機能の作成、CHPI連携機能の作成(Fig.1)、入力ファイル編集機能の作成、グリッドデータ作成プログラムcpf2denの改良を行いました(Fig.2)。

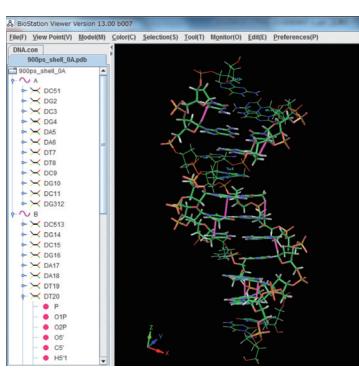


Fig.1 BioStation Viewerで可視化させたDNA二重鎖のCH/π相互作用(紫線)

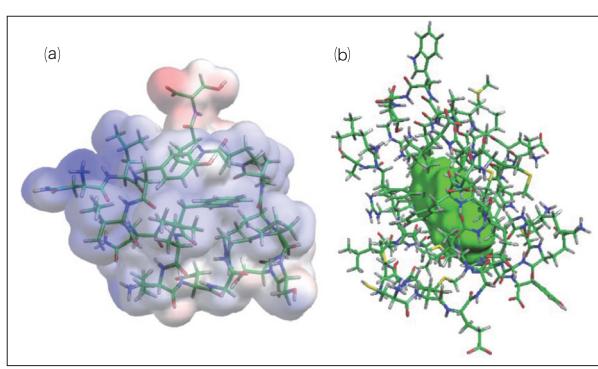


Fig.2 グリッドデータ作成プログラムcpf2denで出力した(a)TrpCageの静電ポテンシャルマップと(b)エストロゲン受容体モデル中のエストロゲンの等電子密度面

## HPC産業利用スクール ナノテクコースの開講報告

スーパーコンピューティング産業応用協議会、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、東京大学情報基盤センター、計算物質科学イニシアティブの四者は、産業界においてイノベーションの担い手となる人材を育成するため、HPC(High Performance Computing)技術を習得できる機会としてHPC産業利用スクールを開講しています。HPC産業利用スクールは、平成21年度から開講し、「入門」「流体」「構造」コースを進めてきましたが、今回、初めて「ナノテクコース」を2011年3月9日、10日の両日、東京大学生産技術研究所にて開講しました。特にスケラビリティーや解析機能に優れた材料物性の高精度計算手法である三つのオープンソフトウェアPHASE、QMAS、OpenMXを取り上げ、それぞれの開発者が直接その紹介を行うとともに、受講者にはそれぞれの課題を実習頂きました。アンケート結果では、全体としての満足度が高く、特に評価されたことは、参加者ひとりひとりそれぞれに対する、講師による充実したよりきめ細かな指導ができたことでした。この結果に基づき、さらに受講者の要望に応えたコースを次年度以降開催していく予定です。



## 第3回 統合ワークショップ報告

平成23年2月24日(量子バイオ・ナノデバイス)、25日(次世代ものづくり)と2日間にわたり、「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を開催いたしました。

今回のワークショップは、延べ200名余りの多くの方にご参加いただき、プロジェクトの最新状況の報告と、いままでに実証しているまたは計画している事例を紹介し、現在公開しているβバージョンソフトウェアの利用にあたっての問題などを中心に活発な討論を行いました。ご参加の方々からは、充実したサポート体制、事例データの蓄積などのご要望をいただきました。皆様からの貴重なご意見・ご要望を活かして、さらなるソフトウェアの機能向上を目指していくと考えております。



## イベント案内

### キャンパス公開2011(生研公開)の開催

《開催日》平成23年6月3日(金)、4日(土)

本センターは「京速コンピュータ時代の先端的シミュレーション技術」と題して、京速コンピュータ「京」にも対応できる先端的シミュレーションソフトウェアならびに、それらを利用した実証事例についてご紹介します。多くの方々のご来場をお待ちしております。

### 第3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の開催

《開催日》平成23年7月14日(木)、15日(金) 《開催場所》東京大学生産技術研究所 コンベンションホール

詳しいプログラムは、決まり次第ご案内いたします。

#### 編集後記

このたびの東北地方太平洋沖地震により、被災された皆さんに心よりお見舞い申し上げます。このような状況での発刊となりますので、革新センターでは、今後も皆様のお役に立てるよう研究開発に取り組んで参りたいと考えております。

本号では、イノベーションプロジェクトの各チームの成果を中心に報告いたします。ご覧いただければ幸いです。

#### 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