



「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 シンポジウムを開催

平成23年7月14日(木)、15日(金)の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回シンポジウムを、東京大学生産技術研究所コンベンションホールにて開催しました。約170機関等から延べ489名の方々が参加され、盛会裏に終了いたしました。



奥田 基氏

1日目 7月14日(木)

－基調講演と先端事例研究報告－

大変暑い日でしたが、会場のコンベンションホールはほぼ満席となりました。文部科学省大臣官房審議官(研究振興局担当)戸渡速志氏のご挨拶に始まり、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会運営委員会副委員長小林敏雄氏(日本自動車研究所副理事長・研究所長)からのご挨拶の後、富士通株式会社テクニカルコンピューティングソリューション事業本部エグゼクティブアーキテクト奥

田基氏による基調講演が行われました。6月にTop500のランキングで世界一となった京速^{けいそく}コンピュータ^{けい}「京」の話や、今後のシミュレーションソフトのあるべき姿などについて大変興味深い講演内容でした。

その後、加藤千幸教授からはプロジェクトの開発状況と今後の展開について、また、各チームのリーダーからは開発ソフトウェアの現況と先端事例についての

報告が行われました。

残り2年間のプロジェクト期間で、ソフトウェアの実証と産業界への普及をどのように進めるのか、またプロジェクト終了後は開発したソフトウェアをどのように維持・発展させるかなども言及され、講演後活発な意見交換がなされました。



加藤千幸プロジェクト代表



会場の様子

2日目 7月15日(金)

—ソフトウェア利活用状況報告会—

企業等で実際にソフトウェアをお使いいただいている方々から、ソフトウェア別に活用事例の紹介があり、その利点や改良すべき点などが報告されました。

まず、「量子・バイオ分野」では、九州大学の千葉氏から ProteinDF を用いた一酸化炭素ミオグロビンの電子状態計算について、本研究所の平野助教から、ProteinDF を利用した光合成反応中心タンパク質の全電子計算について報告され、ABINIT-MP の事例としては、CHPI 研究所の西尾先生からプロリンというアミノ酸の解析が報告されました。

次に「ナノデバイス分野」からは、次世

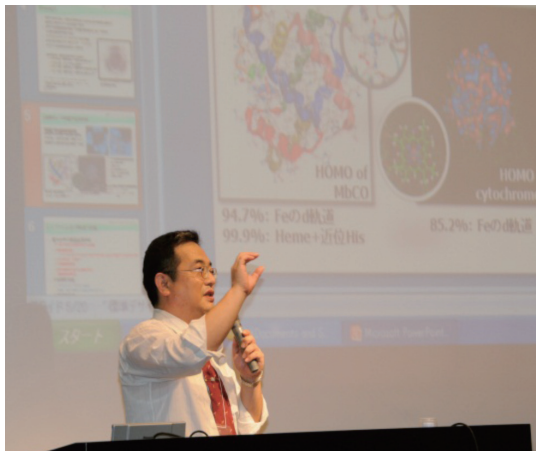
代ナノデバイスの代表格であるような CMOS デバイスに代表されるシリコンデバイスでのソフトウェア PHASE の活用事例を、株式会社富士通研究所の山崎氏と株式会社日立製作所の小林氏から、それぞれ1例ずつ紹介され、会場の皆様から大きな関心が寄せられました。

午後は、「次世代ものづくり分野」の8事例が紹介されました。流体解析ソフト FFB については、ターボファン(株式会社日立製作所の岩瀬氏)とサイクロンセパレータの粒子の分離メカニズム(コニカミノルタテクノロジーズ株式会社の秋山氏)の事例が報告されました。

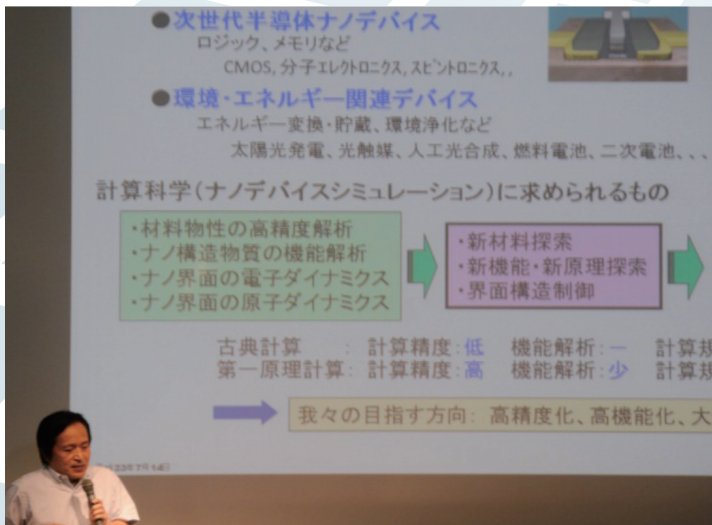
また、車輪レールについての解析(鉄道総合研究所の高垣氏)や溶接シミュレーション(株式会社IHIの福重氏)、蒸気タービン(株式会社東芝の渋川氏)には構造解析ソフト FrontISTR が利用されていることが紹介されました。FRP 材料に関連するシミュレーションソフトウェア

FrontCOMP の事例としては、压力容器(JX 日鉱日石エネルギー株式会社の松本氏)と陽子加速器(高エネルギー加速器研究機構の森田氏)の事例が紹介され、ものづくり分野全体を結合するソフトウェア REVOCAP は、流れ場の中に置かれた円柱の振動解析(株式会社先端力学シミュレーション研究所の西村氏)に利用されていることが紹介されました。いずれの事例についても参加者の方々からは高い関心が寄せられました。

最後にプロジェクト代表の加藤千幸教授から、「今後は産業界の皆様にも実用的レベルで使っていただけるような利用技術を開発し、設計プロセスの中に取り込んで成果を出していきたい。産業界の皆様には共同研究やコンソーシアムなど様々な機会を捉えて我々が開発してきたソフトウェアを是非ご利用いただきたい。」という話があり、プロジェクトの終盤に向けて、開発者側と利用者側の協力の重要性をアピールされてシンポジウムを締めくくられました。



量子・バイオグループ



ナノデバイスグループ



次世代ものづくりグループ

見えてきた先端シミュレーションの実力

— 何が見えてきたのか —

FrontFlow/blue

公開ソフトウェア  FrontFlow/blue、FrontFlow/blue-ACOUSTICS、FrontWorkBench

特徴的機能 乱流現象を高精度に予測し、「京」からPCクラスまで多様な環境で高速に動作できる。また、大規模な流体音響連成解析機能も備え、従来の解析方法では難しかった低周波も含めて音のスペクトルを定量的に予測できる。

今後の展開 超大規模データ処理を簡易化し、ユーザーフレンドリーなソフトウェアにする。

FrontISTR

公開ソフトウェア  FrontISTR、HEC-MW

特徴的機能 階層メッシュの細分化がより容易に自動作成できるようになり、大規模で複雑な構造も丸ごと計算できる。ハイブリッド並列化機能を備え実用的な問題に適用できるように様々な解析機能が実装されている。数千コアまでの計算では効率性が確保できる。

今後の展開 スパコン拠点を利用したアプリの統合クラウド化を目指す。

FrontCOMP

公開ソフトウェア  FrontCOMP_mold、FrontCOMP_cure、FrontCOMP_damage

特徴的機能 メゾスケールモデルを用いてFRP材料の強度を解析する。樹脂を硬化させるプロセスを評価できるため、初期欠陥を含めた破壊現象をきちんとフォローすることができ、的確な強度評価ができるので、合理的な設計指針が出せる。

今後の展開 CFRP材料の最適設計。

REVOCAP

公開ソフトウェア  REVOCAP_Coupler、REVOCAP_PrePost、REVOCAP_Refiner

特徴的機能 複数の部品から構成される実製品の丸ごとのマルチ力学シミュレーションをする。小規模メッシュ入力で大規模高精度解析を効率的に行えるRefiner、超並列ソルバー同士を柔軟に接続できるCoupler、これらを支えるPrePostがある。

今後の展開 簡易モデルを使った実験結果との比較を行い、実機のシミュレーションが実際に使えることを確認していく。

ProteinDF

公開ソフトウェア  ProteinDF System 2011

特徴的機能 密度汎関数法でタンパク質の全電子計算が可能で、超並列化に対応している。数百残基クラスの計算が可能。エネルギーの勾配計算と化学反応の過程をシミュレーションすることで、実験で得られるデータと直接比較できる。

今後の展開 将来はタンパク質や酵素の設計に使うことが可能となることを目指す。

ABINIT-MP

公開ソフトウェア  BioStation Viewer、ABINIT-MP

特徴的機能 高速なMP2の計算エンジンが組み込まれているため、生体分子のMP2計算が実用化できた。さらに進んだ3次の摂動も計算できるようになっている。OpenMPとMPIのハイブリッド並列化されており、計算のカーネル部分はDGEMMで書かれているので、「京」でも性能を発揮できる見込み。計算コストの高い高精度のエネルギー計算方法とほぼ同等な値を得ることができる。

今後の展開 GUI環境の整備。

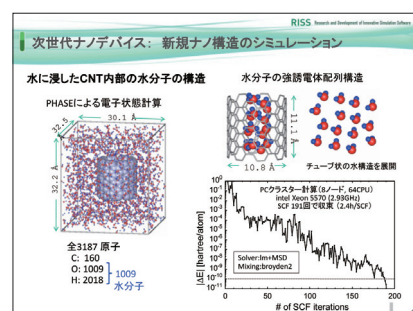
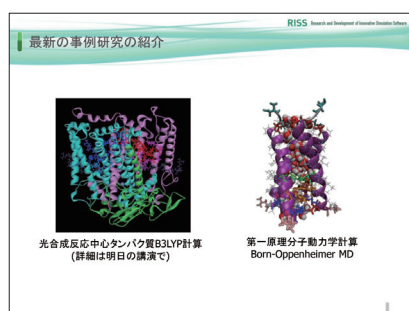
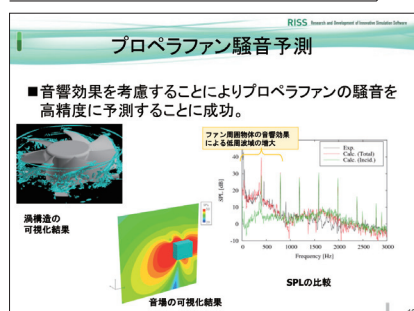
PHASE

公開ソフトウェア  PHASE、UVSOR、ASCOT

特徴的機能 あらゆる材料を高精度に解析するための、DFT理論に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の電子状態解析ソフトウェア。電子状態計算の高度化により材料探索能力が向上し、高い並列性能を備えているため、大規模計算が可能。

今後の展開 解析データや基礎的な解析事例などを集めてデータベースとともに公開していく。

■ 先端事例紹介を予稿集より抜粋



公開ソフトウェアのダウンロード件数 78,000 件を突破!

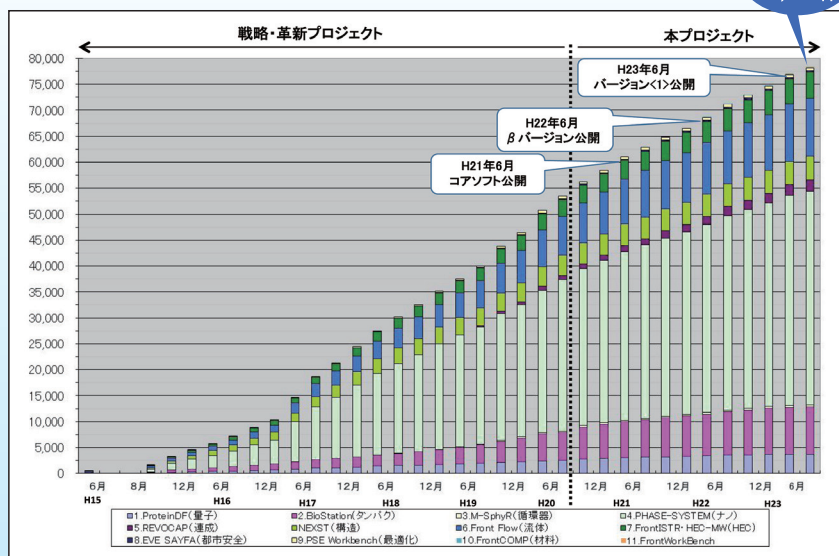
(2011年9月5日現在)

フリーウェアの
ダウンロード件数
78,458件

「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」で開発したβバージョンのソフトウェアを、その後さらに機能を充実させ、今年6月に合計17本のソフトウェアバージョン<1>を公開しました。公開以来のダウンロード累積件数は順調に増加し、現在78,000件を上回る状況となっています。

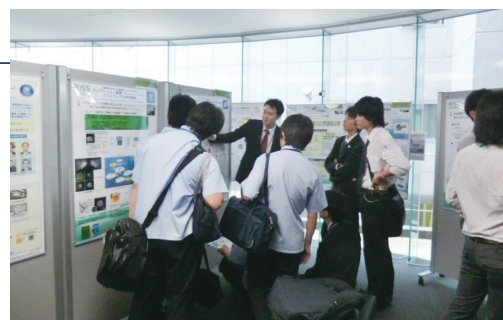
<http://www.ciss.u-tokyo.ac.jp/dl/>

からダウンロードできますので、最先端のソフトウェアをどうぞご活用ください。



駒場リサーチキャンパス公開の開催報告

6月3日(金)・4日(土)、「駒場リサーチキャンパス公開」が開催され、本センターも笠岡ラウンジで、『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、プロジェクトの研究成果などを、動画とパネルで展示しました。約182名の皆様にご来場いただき、なかでも「京」を紹介した動画が、多くの高校生の関心を集めていました。また、同時に実施した高機能シミュレーションソフトウェアの無料技術コンサルティングも好評のうちに終了しました。



熱心に説明を聞く高校生

HPC 産業利用スクール 入門コース<関西>の開講報告

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(ICSCP)、計算科学振興財団(FOCUS)、革新的シミュレーション研究センター(CISS)の3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に、HPC(High Performance Computing)技術を習得できる機会として、関西地区では2回目のHPC産業利用スクール入門コース<関西>を6月30日、計算科学センタービル(計算科学振興財団セミナー室)にて開催しました。3年間の経験を踏まえて本企画ならではのスクールを実施することができ、12名の参加者からは、高い満足度を示すアンケート結果を得ることができました。本コースの講師陣は、「京」で使用できる超並列計算ソフトの開発担当者である東京大学加藤先生、奥田先生、山出先生が担当しました。最新の情報を含んだHPCの現状把握と産業利用の可能性等の解説は、より身近で興味深い内容となっており、参加者ひとりひとりに対するきめ細かな指導もできたことが、好評につながったと思われます。また今回は、開講直前に世界スパコン性能ランキングTOP500でNo.1になった「京」(建設中)並びにFOCUSスパコンの見学もでき、竣工したばかりの綺麗な教室での講義は、和やかな雰囲気で行うことができました。今後は、さらに受講者の要望に応えたコースを企画していく予定です。



(ICSCP 村上英樹(新日本製鐵株))

計算科学研究機構伊藤氏(左)と「京」の説明を聞く受講生

編集後記

神戸の計算科学センタービル内にCISSの活動拠点が新設され、9月7日には(財)計算科学振興財団との共同記者会見を行いました。この記者会見の様子は次回ご報告します。また、ますます身近になってきた京速コンピュータを利用したソフトウェアが、産業界でどのように有効に利用されているか、ご紹介していけたらと思っております。

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