

## イノベーションプロジェクトの最終年度を迎えて

平成20年10月に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もいよいよ最終年度を迎えます。そこで、この最終年度に実施することをご説明し、皆様の更なるご理解・ご支援をいただきたいと思います。3点あります。

まず1点目として、ソフトウェアの研究開発はほぼ終了していますので、現在は開発したソフトウェアを活用することにより本当にものづくりプロセスの革新ができるということを証明すべく、様々な製品を対象として実証研究を進めています。特に、来年度から神戸の「京」(理化学研究所と富士通が共同開発している、世界最速のスーパーコンピュータ)が本格稼働します。別途推進している戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」とも密接な連携を図りながら、HPC(High Performance Computing)の真価を示していきた

いと思っています。

2点目は各ソフトウェアの完成度を高めることです。現在、各ソフトウェアの評価を第三者に委託しており、その結果を受けて、マニュアルやインターフェースなどを改善するとともに、英文マニュアルに関しても最終年度中に整備を完了する予定です。また、実証研究の結果を事例集として纏めて、様々なノウハウを再利用できるような仕組みも構築しています。

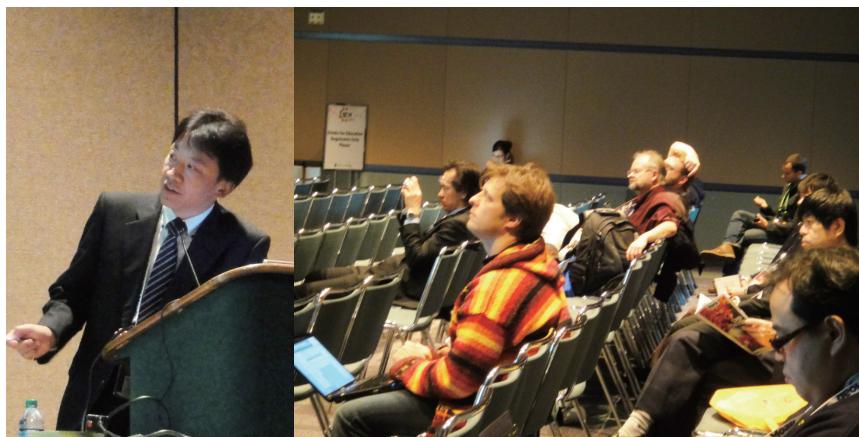
最後の点が、ソフトウェアの自立です。イノベーションプロジェクトは、「大学等のシーズを最大限活用することにより、強力な産学連携体制の下、ものづくりプロセスを抜本的に変革できるようなシミュレーション・ソフトウェアを研究開発し、産業界に普及させる。」という目標を掲げて推進してきました。したがって、研究開発したソフトウェアがプロジェクト終了後も末永く産業界で

使われるようにならなければプロジェクトは成功したとは言えません。各ソフトウェアからは実証研究の成果が出始めていますが、まだ各ソフトウェアが自立できる目途は立っていません。

ソフトウェアが自立するための条件を考えてみると、ソフトウェアに利用価値があることは勿論ですが、それに加えて、研究機関がソフトウェアの開発を継続していること、開発したソフトウェアを利用した事業が展開されていること、さらに、産業界ユーザーがソフトウェアを試用するのに必要な様々な情報が共有される環境が構築されていることが重要だと思っています。その意味では、ソフトウェア毎に、研究機関、ソフトウェア事業者、ならびに産業界ユーザーから構成されるコミュニティを形成していくことが重要だと認識しています。最終年度はこの形成に向けた活動も積極的に推進する予定です。



SC展示ブース前



Exhibitor Forum

# 海外に向けてアピール — SC11 Seattle に出展参加 —

11月12～18日の1週間、米国シアトルの Washington State Convention CenterにおいてSC11が開催され、本センターでは、Exhibitionブースにおいて、「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」の研究成果をポスターや動画などで展示しました。人工物工学研究セン

ターの奥田洋司教授をはじめ各ソフトウェア開発チームから7名のメンバーが参加し、ソフトウェアの紹介や、研究交流など、実りのある展示活動を行いました。また、Exhibitor Forumにおいては加藤千幸プロジェクト代表により“Petascale Innovative Simulation Software for Manufacturing

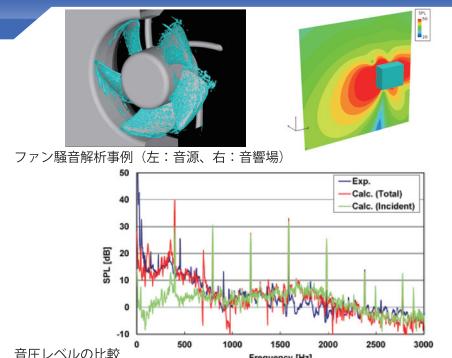
/Quantum Bio/Nano Device Systems”と題したソフトウェアの最新トピックスと今後の展開などについての講演がなされました。各チームの担当者からは当日の出展内容についてのご報告をいただき、奥田先生からは参加レポートをいただきました。

## ■ 出展報告

### 大規模アセンブリ構造対応熱流体解析ソルバー「FrontFlow/blue」

欧州・アジアのメーカーの方から、流体・構造等のものづくり分野では、より高度で詳細な解析を実現するための大規模計算に対応したオープンソースソフトウェアを探しているとの声を聞きました。また、ISVベンダー開発者と議論する機会もあり、大規模解析の技術開発という点に

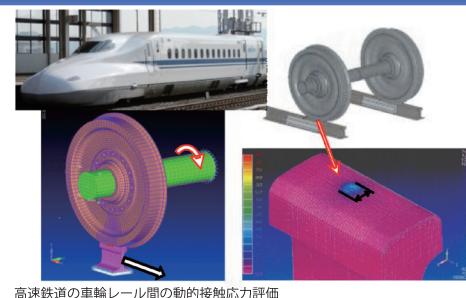
関しては本プロジェクトの取り組みが一步リードしているように思われました。現在、開発しているソフトウェアが、世界のユーザーにどのように映っているのかを確認しました。今後もソフトウェアの特長が最大限に活かされる実証に取り組んでいきます。  
(山出吉伸)



### 大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバー「FrontISTR」

並列構造解析オープンソフトウェア FrontISTR の並列演算性能と非線形解析機能、産業界での応用事例について展示説明を実施し、普及活動、当該分野の情報交換を行いました。特に、ポストペタ～エクサスケールのハードウェアやプログラミング

モデルについての最新の知見が得られました。FrontISTRにおけるハイブリッド並列化戦略に反映させていきます。また、産業界におけるHPCの重要性も再認識され、今後もFrontISTRの水平展開を推進致します。  
(奥田洋司)



### 複合材料強度信頼性評価シミュレーター「FrontCOMP」

炭素繊維強化プラスチック(FRP)の将来性と材料設計の重要性をアピールし、HPC共通の課題である結果の画像表示や、クラウドコンピューティングを活用したソフトウェア公開について情報交換を行いました。また、FRP製高圧水素容器の世界的主要

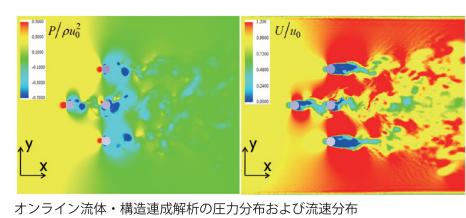
メーカーであるリンカーン社を訪問し、FrontCOMPの機能を紹介するとともに、強度評価に関して強力なツールとなることを確認しました。クラウドサービスを活用した普及策については、今後詳細を検討していきます。  
(吉川暢宏)



### 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」

各種並列計算機環境で大規模連成解析を実現させたマルチ力学シミュレーター REVOCAP の普及活動を行いました。それそれが大規模問題を解析できるソルバを複数組み合わせることで、大規模かつ複雑な現象を解析できるアプリケーションである

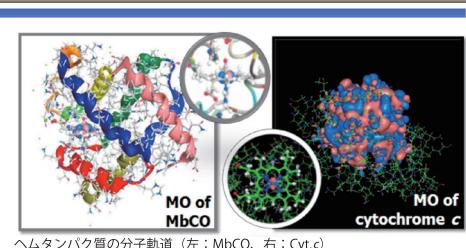
点をアピールしました。また、HPC分野のハードウェア開発者や線形代数ライブラリ開発者がアプリケーション分野の解析対象問題に強い興味を持っていることが分かり、異なる立場から情報交換を行いました。  
(遊佐泰紀)



### バイオ・ナノ分子特性シミュレーター「ProteinDF」

密度汎関数法に基づくタンパク質全電子分子軌道計算プログラム ProteinDFについて、開発状況ならびに実証課題の報告を行いました。システム開発者・研究者との議論の中で、多様なスパコンだけでなくクラウド

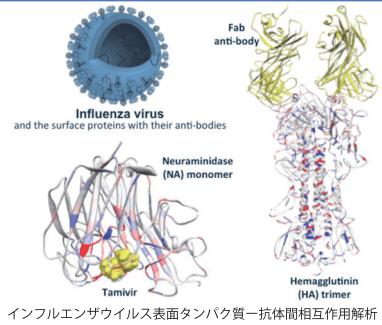
環境での整備も必要であることを痛感しました。今後、国際的な観点から開発したソフトウェアをさらに広めるべく、ドキュメントの英語化などを推し進めていきたいと考えています。  
(平野敏行)



## バイオ分子相互作用シミュレーター「BioStation」

フラグメント分子軌道(FMO)法に基づく計算および解析統合環境であるBioStationの最近の進歩について現状と課題の報告を行いました。FMO計算に興味を持つ研究者と有用な議論をして、特にインフルエンザウイルスを研究している実験研究者からはフ

ラグメントベースによる相互作用解析に対して強い関心を示していただくことが出来ました。また全体を通してGPGPU技術の関心の高さが伺えました。これらの知見を今後の開発および実証計算の参考にしたいと考えています。  
(沖山佳生)

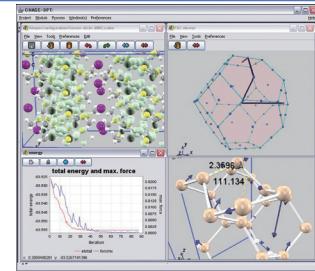


インフルエンザウイルス表面タンパク質-抗体間相互作用解析

## 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」

第一原理電子状態計算ソフトウェアPHASEの研究開発内容を宣伝・説明しました。会場では超並列計算機関連の出展・講演が多数あり、高効率な並列計算を得意とする本ソフトウェアの有用性を再確認しました。一方で広く一般向けに並列

計算環境を安価で提供している企業の方との意見交換も行い、広範なユーザーに普及する環境があること、またその活用には今後マニュアルやユーザビリティの更なる向上が必要であることを確認しました。  
(小野裕己)

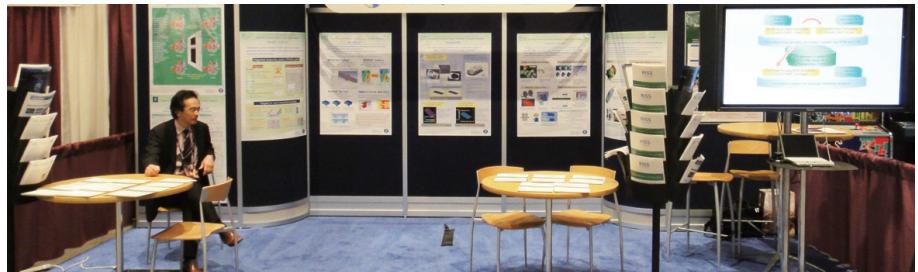


付属 GUI ソフトウェアを使った結果解析の例

## SC11レポート 人工物工学研究センター教授 奥田洋司

### 日本の「京」が世界1位に

TOP500で世界1位は日本の「京」コンピュータ(理研)。世界2位は中国の天河(Tianhe-1A)。TOP10は1位が10PF, 2位が2PF, 3~10位は1PF台。1年でだいたい性能が2倍になっており、今のペースだとTOP1が1Exaになるのは2020年位と予想される。プロセッサは、Xeonシリーズが7割位を占め、あとはOpteron, PowerPC, POWER, ShenWei。総コア数は「京」が70万コアで圧倒的に大きい。Cores/Processorは、「京」は8でかなり大きい。性能が高いシステムほどCore/Processorが大きい傾向がある。Acceleratorは主にGPUでNvidiaが多い。電力消費量は、京が極めて大きく13MW。50位以下のシステムはどれも1MW以下。エネルギー効率は、Cellを用いたシステムとBlueGene/Qが飛び抜けて良い(他のシステムの10倍位)。京も悪くない。



展示ブースの吉川先生

### ■今年の注目点

#### 1. Gordon-Bell Prize

Gordon-Bell賞(the Sustained Performance Prize)(シリコンナノワイヤのDFT計算) First-principles Calculations of Electron States of a Silicon Nanowire with 100,000 Atoms on the K computer, Y.Hasegawa et al.

Gordon-Bell賞(the Scalability/Time to Solution Prize)(金属の樹状結晶成長のシミュレーション) Peta-scale Phase-Field Simulation for Dendritic Solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer, T.Shimokawabe et al.

以下の3報のFinalistに対しても“Honorable Mentions”が与えられた。  
(電子回路のナノ構造のシミュレーション) Atomistic Nanoelectronic Device Engineering with Sustained Performances up to 1.44 PFlop/s, M.Luisier et al.  
(血流シミュレーション・流体とMDの連成) Petaflop Biofluidics Simulations on a Two Million-Core System, M.Bernaschi et al.  
(血流シミュレーション・流体とMDの連成) A New Computational Paradigm in Multiscale Simulations: Application to Brain Blood Flow, L.Grinberg et al.

#### 2. Technical session

密行列演算 Optimizing Symmetric Dense Matrix-Vector Multiplication on GPUs, R. Nath et al.(密行列の操作のうち、行列ベクトル積をCUDAで高速化。自動チューニングも用いているが、うまくいかない場合もある。)

スパコンのアーキテクチャ予想 Using the TOP500 to Trace and Project Technology and Architecture Trends, P.M.Kogge et al. (TOP500から今後のスパコンのアーキテクチャを予想する。動作クロックは2004年以降一定。ソケット数は10,000位で一定になっており、コアの数が増えている。最終的な並列度は2000年頃から指數関数的に上昇している。電力総量は増え、Energy per Flopは指數関数的に減少している。結論として、エネルギー効率が大事で、Mixed Architectureだけが(コア数をかせぐ事で)エクサスケールに行けると思われる。)



来場者と奥田先生

**Hybrid並列(MPI+Pthread)で分子動力学 Enabling and Scaling Bio-molecular Simulations of 100 Million Atoms on Petascale Machines with a Multicore-Optimized Message-driven Runtime, C.Meit et al. (Hybrid並列(MPI+Pthread)でMDのコードを書いた。ファイルを分散して読み書きする事が必要。MPI I/Oではうまくいかなかったので分散I/Oを実装した。)**

**通信衝突の回避 Parallelization Design for Multi-core Platforms in Density Matrix Renormalization Group toward 2-D Quantum Strongly-correlated Systems, S.Yamada et al.,**(高温超伝導物質の設計のためにハバードモデルの計算を行ない、行列対角化の部分を並列化した。通信が衝突するので、ノードをいくつかのグループに分け、衝突が起りにくいように工夫した。)

### 3. GPU

全体的な話題として消費電力の低減化が大きく取り上げられていた。ポストペタ~エクサスケールの時代において増大する電力消費量をどのようにして低減するかが大きな課題であり、解決策の一つとして電力効率に優れたGPUが挙げられていた。また、Hybrid並列、GPU等のアクセラレータなどによって複雑化するアーキテクチャをユーザーに意識させずに利用させるためのライブラリ、ミドルウェア等に関する発表も見られた。

### 4. DOE plan to Exascale

2018年にExascaleに到達するように準備を進めている。今後のスーパコンの大きな問題は、使用電力の総量であり、エネルギー効率が鍵である。

### 5. Graph500

LINPACKだけではなく、新しいベンチマークによってシステムの性能を測る試み。2010年に始まって、最初は9システム。今回3回目で50システムが参加した。

### 6. Keynote speech by Jen-Hsun Huang (NVIDIA)

GPUの活用について。今のCPUは実際の計算に使われている電力は数%に過ぎず、命令スケーリングとデータ移動に残りが使われている。単純なメニーコアの集合体であるGPU等のアクセラレータをうまく活用する事でエネルギー効率を良くする事ができる。

### 7. BoF “Open Petascale Libraries”

ペタスケールで用いられるオープンソースライブラリの開発。Hybrid MPI/OpenMPで開発している。密行列演算にPLASMA、DPLASMA。疎行列ソルバ、アダプティブメッシュ生成用のライブラリとしてPETSc、PRAGMaTIC。高速フーリエ変換ライブラリとしてFFTE。次のウェブサイトで公開中  
<http://www.openpetascale.org/>

### 8. BoF “Critically Missing Pieces in Heterogeneous Accelerator Computing”

Exaスケールでは非常に大量のジョブが走る事になるためスケジューリングが重要。GPU対応のライブラリがあまりない事も問題。今後は自動チューニングが重要になる。



「京」見学の風景

## HPCI戦略プログラム分野4次世代ものづくり 第2回シンポジウムの開催報告

12月9日(金)、神戸の(独)理化学研究所計算科学研究機構セミナー室において  
「『京』で実現、夢を形に、感動を社会に!」と題してシンポジウムを開催しました。

この分野で掲げる先導的研究課題の実像とそれらの成果を産業界に普及する仕組みについてご紹介し、ご参加いただいた方々から今後の研究開発に有意義なご意見を頂戴するなど、盛会裏に終了いたしました。また、休憩時間に行いました11月のTOP500で世界第1位を獲得した「京」の見学も大変好評でした。

### 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4回 統合ワークショップ**

#### プログラム

平成24年3月9日(金) 13:00-17:15

#### 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」

平成24年3月15日(木) 13:00-17:30

#### 次世代ものづくりシミュレーションシステム

- 「複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発」
- 「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」
- 「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」
- 「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」

### 編集後記

イノベーションPJとしては初めて出展したSC11が無事に終了し、ほっとしたのつかの間、神戸で開催したシンポジウムの準備に追われましたが、間近で見た「京」の迫力には、圧倒され感動すら覚えました。イノベーションPJも残すところ1年となり、ラストスパートをかけていきたいと思っています。

### 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