

イノベーションプロジェクトの平成23年度とりまとめ

平成23年度は本プロジェクトの4年目に当たり、イノベーション創出の基盤となるソフトウェアとしての必要な機能の実装を完成させるとともに、それを実例題で検証することが全体的な目標でした。

昨年6月には平成20年度からの3年間で研究開発された機能を有するソフトウェア17本を、バージョン<1>としてインターネット上で一斉に公開しました。ダウンロード件数は3月現在で総計83,530件に上っています。最近では国内のみならず海外の潜在ユーザーの関心も高まっており、英語版マニュアルの要望が多く寄せられ、作成を進めています。さらに、実証研究の解析結果の説明やプロセスの詳細情報等を含めたデータベース化も進められ

ています。これはそれぞれのソフトウェアの特徴について、正確に理解できる手段として大変有用なものになると考へています。

また、ソフトウェアの研究開発を担っている各チームでは、精力的に技術開発とソフトウェアへの実装を進め、産業界の皆様と連携した実証研究を行いました。その結果、2～3ページに記されていますような成果を得るに至りました。実証研究を実施する途上において見いだされた問題点についても鋭意改良が成され、その成果は解析結果とともに、3月9日と15日に開催された統合ワークショップにおいて紹介しました。平成23年度に機能増強・改良されたソフトウェアは今年6月にバージョン<2>として公開する予定です。

昨年世界一となったスペコン「京」を頂点とする高性能スペコンの相次ぐ出現に加えて、クラウドコンピューティングのエンジニアリング分野への広がりにより計算機利用環境には世界的なパラダイムシフトが生じています。このことは極めて高度な解析作業を一部の専門家に限らず多くの技術者が自ら実行できる時代を迎えてることを物語っています。このような状況にあって、本プロジェクト発足当初から目標に掲げていた先端的でありながらも完成度が高く実用的なソフトウェアは必ずや戦力になるものと考えています。最終仕上げとなる来年度を迎えるにあたり、産業界をはじめとする関係各位の益々のご支援・ご協力を賜りたくお願い申し上げます。

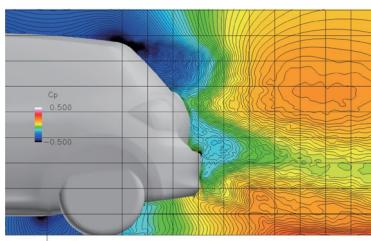


Fig.1 車体まわり流れ計算(4億グリッド)：トヨタ提供

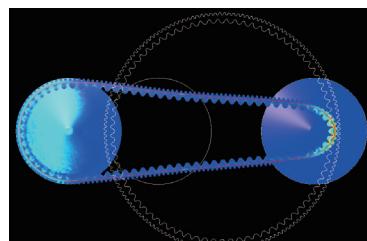


Fig.2 複合材料伝動ベルトの接触解析結果の一例

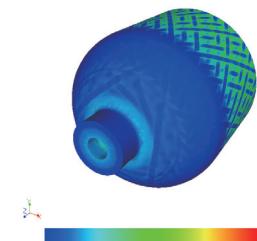


Fig.3 CFRP製高压水素容器のワインディングパターン最適化



Fig.4 多段の翼列振動シミュレーション：翼周り流れの圧力分布

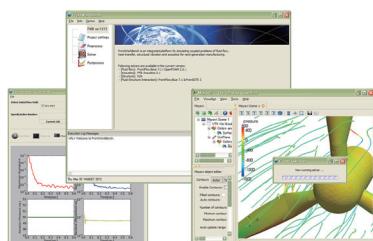


Fig.5 統合インターフェースFrontWorkBenchでの解析実行例

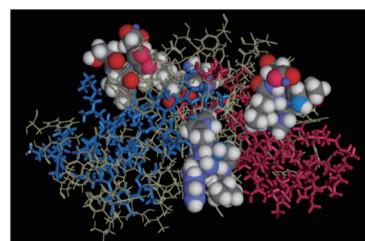


Fig.6 色素分子と相互作用の大きかったアミノ酸残基。色素分子をstickモデル、注目すべきアミノ酸残基をballモデルで表示した。

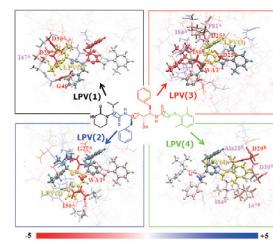


Fig.7 FMO4-MP2によるHIV-1プロテアーゼとロビナビルとの相互作用解析の可視化

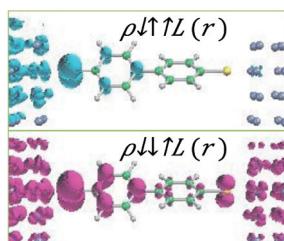


Fig.8 ビフェニル分子/ニッケル電極架橋系の左電極から流れ込む電子の密度分布のスピントン依存性。上向きスピントン(上図)に比べて下向き(下図)のほうが右電極により透過している。

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熱流体解析ソルバー

FrontFlow/blue,FrontFlow/blue-ACOUSTICS

来年度の「京」の本格稼動で最大1,000億規模の実証解析を実現するためのソフトウェアの整備とその実証を実施しました。ソフトウェアの整備に関しては、大規模解析の基盤技術として、グリッドの局所リファイン機能、大規模ボクセル計算機能、IDRマトリックスソルバーの実装・検証を実施しました。また、スライディングメッシュ計算機能、ALE計算機能を実装し、ソフトウェアの汎用性向上、適用範囲の拡大を図っております。開発したソフトウェアを活用し、数千コアの計算リソースおよび数億～10億規模のグリッドを用いた実証解析が、車体、船舶、ターボ機械等の分野で進みつつあります。これらの実証解析テーマを加速させ、数百億グリッド規模の解析により、計測データに匹敵する予測精度およびものづくりにおける高精度乱流予測技術の有用性を実証していきます。(Fig.1)



大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバー

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22年度に公開したFrontISTR Ver.4.0およびHEC-MW Ver.4.0の改良と機能拡充を行うとともに、産業界のニーズに基づく実証解析を開始しました。実証解析には、「船体ブロック溶接の残留応力評価」、「複合材料伝動ベルトの接触挙動評価」、「高速鉄道のレール・車輪間の接触挙動評価」、「電子機器の構造信頼性評価」の4つのテーマがあります。



改良・拡充では、実証解析に必要なFrontISTRの機能として、接触動解析機能、トラス要素、ばね境界条件、移動熱源入力機能、応力負荷状態下での固有値解析機能などを整備しました。

また、HEC-MWでは、「京」上での大規模アセンブリ構造解析に向けて、マルチグリッドソルバーの改良、ハイブリッド並列化、大規模I/O機能の整備などに取り組みました。これにより、FrontISTRの実用性を向上するとともに、最終年度の大規模実証解析に向けた準備を進めることができました。(Fig.2)

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

FrontWorkBench

流体(FrontFlow/blue)、構造(FrontISTR)、音響解析(FrontFlow/blue-ACOUSTICS)の各ソルバーの単独実行を始め、流体-構造連成解析、流体-音響連成解析をFrontWorkBench上で行うことができます。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介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できることが期待されます。最新バージョンでは、動作可能ソルバーの拡充が行われ、また超並列計算用のクラスタマシンからの起動ができるようになりました。(Fig.5)

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は、連成解析の補助プログラムで、分離反復解法による連成解析に対応します。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_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CAD形

状適合機能に対応します。本年度の事例研究は、多段の翼列振動シミュレーションを実施し、翼周りの流れをFrontFlow/blue、翼の振動解析をFrontISTRによる解析を行いました。また自動車室内騒音のマルチ力学シミュレーションを実施し、モデル外部の気流をFrontFlow/blue、車体振動解析を構造解析ソフトウェア、車室内音響解析をFrontFlow/blue-ACOUSTICSによる解析を行いました。REVOCAP_Couplerを用いて車体外表面の圧力分布と、車室内表面の加速度分布を変換します。今後もさらに解析ニーズに適応した大規模・高精度な実証解析を行っていきます。(Fig.4)

複合材料強度信頼性評価 シミュレーター

FrontCOMP



航空機で先行したCFRP材料の活用を、自動車をはじめとする輸送機器の一次構造部材へ展開するための要諦は、成形の加工性と

サブテーマの成果報告

量子バイオシミュレーションシステム

バイオ・ナノ分子特性シミュレーター

ProteinDF

本サブテーマでは、巨大カノニカル分子軌道計算ができる密度汎関数法プログラム ProteinDF システムをベースにした高品位分子特性解析システムを研究開発しております。着実に機能強化ならびにバージョンアップを重ねています。今年度は、本システムを用いて、(1)光合成反応中心タンパク質の全電子計算、(2)タンパク質の核磁気共鳴化学シフト計算、(3)ヘムタンパク質の反応解析、(4)プロトンチャネルのボルン・オッペンハイマー分子動力学計算、の各種事例研究を開始しました。さらに、ソフトウェアの更なる完成度・実用性向上を図るため、(5)共通基盤機能も強化しました。Fig.6は、光合成反応中心タンパク質の色素分子と相互作用の大きかったアミノ酸残基を示したものです。電子移動反応には、スペシャルペア周りだけでなくアクセサリタンパク質のアミノ酸残基も強く影響を及ぼしていることが分かりました。実験とシミュレーション、それぞれを相補的に利用して、効率良くバイオ・ナノ分子の研究開発ができる環境の構築に向けて努力しています。(Fig.6)



バイオ分子相互作用シミュレーター

BioStation

ABINIT-MP/Bio Station は 純国産のFMO計算プログラムと統合インターフェース環境として長年に渡っ



て開発が進められており、創薬の研究開発の支援ツールとして一定の評価を得るに至っています。こうした中、平成23年度は、リガンドを官能基・機能部位毎に分割し、応じてタンパク質側のアミノ酸残基も主鎖と側鎖に分割することで、FBDD(フラグメントベースのドラッグデザイン)に求められる高解像度の相互作用解析を可能とする4体補正を含むFMO4計算をMP2レベルで実装しました。4体までの計算はコスト高となります。コレスキーフィルタリングによる分解の援用によって加速することが可能です。FMO4計算の他に、FMO-MP2部分構造最適化(通常の2体補正)も出来るようになり、X線やNMRによる実験構造のリファインも行えるようになりました。また、連続媒体系水和系のポツソン・ボルツマンモデルによるFMO-PB、並びに水素結合ネットワークの軌道レベルでの解析を行えるCAFIの整備も進んでいます。(Fig.7)

ナノデバイスシミュレーションシステム

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

電子が持つスピンを工学的に利用したナノスケールデバイスの可能性が検討されています。このようなスピントロニクスデバイスとして、スピントルブやスピンドルフィルター機能が期待される非磁性分子が磁性電極に挟まれた系が考えられ、その伝導特性の研究が行われています。そこで、例としてビフェニルジチオール分子がニッケル表面に挟まれた系を考え、量子伝導特性プログラムASCOT(「ナノデバイスシミュレーションシステムPHASE-SYSTEM」のプログラムの一つ)を用いて、スピントルブやスピンドルフィルター機能について議論しました。対象とした系は単純であるためそれら機



能の効率はよくはありませんでしたが、磁性電極と結合することによって誘起される分子のスピン分極が機能発現に大きく関わっていることがわかりました。この結果から、分子と電極間の結合がより弱くなる系を設計することによって、機能の効率はよくなりると期待できることがわかりました。(Fig.8)

経済性向上にあります。高信頼性を保持しながら、どこまでコストダウンが見込めるかを定量的に評価するために、メゾスケールシミュレーション技術が有効です。平成23年度は、炭素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複合材料強度信頼性評価シミュレーターを活用し、燃料電池自動車の普及に不可欠な高圧水素スタンド用のCFRP製容器に関して、信頼性と製造コストのトレードオフ問題を解決するための実証的解析を行いました。これまでほとんど製造実績のない極厚の容器をフィラメントワインディングで製造するにあたり、製造効率を上げようすれば必然的に樹脂欠陥が増大します。硬化プロセスの高速化や、繊維束のメゾパラメータ変更により、どの程度の強度低下が見込まれるかをシミュレーションにより明らかにしました。(Fig.3)

第4回統合ワークショップ開催報告



ご挨拶をする加藤千幸センター長

今回で4回目となる統合ワークショップが、平成24年3月9日（量子バイオ・ナノデバイス）、15日（次世代ものづくり）の2日間にわたり開催されました。開発予定機能の実装がほぼ終了している各ソフトウェアの最新の実証事例研究とユーザー会／コミュニティーの構想についてのご報告をいたしました。また、利用ユーザー様から、それぞれのソフトウェアを用いた最近の活用事例をご紹介いただきました。延べ200名余りの方が参加され、盛会裏に終了いたしました。皆様からの貴重なご意見・ご要望を今後の活動に活かしていきたいと考えております。



会場風景

会場風景

HPC産業利用スクール実践コース開催報告

平成21年度から計7回実施してきたHPC産業利用スクールは、東日本大震災に伴うCPU不足や計画停電等の懸念から、本年度は入門コース1回（計算科学センタービル／神戸）と下記の実践コース2回の開催となりました。

【第5回実践コース（構造解析）】



構造解析としては2回目となる実践コースを、2012年1月30日、31日に、東京大学生産技術研究所にて実施いたしました。本コースでは、東京大学人

工物工学研究センターの奥田教授とアドバンスソフト株式会社の末光氏、徳永氏に講師をお願いし、大規模構造解析における解析デザインの講義の後、FrontISTRを用いた演習を行

いました。受講者は8名で、2人1組のグループ毎に演習用の端末が用意され、全員が数百コア（CX1000）の大並列計算を実行することができました。受講者全員が数値解析経験者であり、計算実行から結果考察、グループ討議、発表まで、非常に円滑に進められました。講習後のアンケートでも大半の方が、内容は、有益で丁度良いレベルとの評価をいただきました。



【第6回実践コース（ナノテク）】

ナノテクコースとしては2回目となる実践コースを、2012年2月7日、8日に、東京大学物性研究所（柏キャンパス）で実施いたしました。講師陣は、渡辺教授（東大物性研）、岩田教授（東大）、北浦教授（神大）、田中教授（神大）、大野教授（NIMS）、影島氏（NTT）でした。

参加者8名は、全員が経験者、大半が高レベルの解析者で、それぞれが課題を持ち寄って、RSDFTとMP2-FMOによる演習を行う形となり、参加者全員より十分満足との評価を頂きました。

（村上 英樹 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会）

革新センターの最新情報

課題募集中

HPCI戦略プログラム「分野4次世代ものづくり」実証研究課題公募事業

平成24年度課題募集を開始しました。詳しくは <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/> をご覧下さい。

キャンパス公開2012（生研公開） <開催日> 平成24年6月1日（金）、2日（土）

本センターは、「計算機環境のパラダイムシフトに連動した先進的シミュレーション技術」と題して、先進的シミュレーション技術と利活用基盤の開発状況についてご紹介します。

第4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」シンポジウム

<開催日> 平成24年7月5日（木）、6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（An棟2階）

詳しいプログラムは、決まり次第ご案内いたします。



生研の桜

編集後記

今年の冬は例年になく寒い日が続き、一日も早い桜の開花が待たれます。生研の桜の写真は、昨年、事務局から撮った景色です。毎年見事な桜が咲き誇り、私達の目を楽しませてくれます。これからも機会があれば心和む風景を皆様にお届けでき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