

本格的なペタフロップス時代が到来、 センターの真価が問われる

本年9月末から、ピーク性能10ペタフロップスを超えるスーパーコンピュータ「京」の本格運用が開始される予定であり、先日、利用研究課題の公募が行われています。この4月には東大の情報基盤センターに、新たにピーク性能1ペタフロップスのスパコンFX10が設置されましたが、「京」を頂点として、全国の情報基盤センターや独立行政法人の主要なスパコンをより使い易い形でユーザーに提供するために、HPCI (High Performance Computing Infrastructure) の整備も整いつつあります。また、この4月に設立された一般社団法人HPCIコンソーシアムの第1回総会が、40を超える参加機関(調整

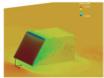
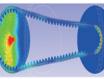
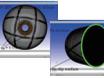
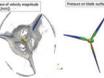
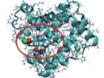
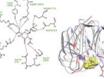
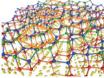
中を含む)からの多くの出席者を得て、当所の大会議室で盛大に開催されました。6月14日、15日には、京コンピュータ・シンポジウム2012および第2回戦略プログラム5分野合同ワークショップが神戸で開催されます。正に、ペタフロップス時代が到来し、世の中の機運も非常に盛り上がっているとともに、大きな期待が寄せられていると感じています。

本センターでは、ものづくり分野における、先端かつ実用的なシミュレーションソフトウェアの研究開発(イノベーションプロジェクト)、このようなソフトウェアを駆使した、革新的な成果の創出・計算科学技術推進体制の

構築(戦略プログラム)を推進するとともに、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会や財団法人計算科学振興財団などとも密接に連携することにより、開発したソフトウェアの普及や利用者人材の育成にも注力してきました。ハードウェア、ソフトウェア、ならびに、利用環境が整いつつあります。本センターは来年3月に改組する予定です。本年度中に是非、世の中が目を見張るような成果を創出し、弾みをつけた形で新センターの活動に繋がっていきたくと考えております。引き続き、関係各位のご理解とご支援を賜りたく、お願い申し上げます。

センター長・教授 加藤千幸

■ イノベーションプロジェクトで公開しているソフトウェア

グループ	テーマ	代表システム名	公開ソフトウェア (H24.6)
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.7.2 FrontFlow/blue-ACOUSTICS Ver.2.2
	 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.4.1 HEC-MW Ver.4.1
	 複合材料強度信頼性評価シミュレーター	FrontCOMP	FrontCOMP_mold Ver.3.0 FrontCOMP_cure Ver.3.0 FrontCOMP_damage Ver.3.0
	 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.1.6 REVOCAP_PrePost Ver.1.6 REVOCAP_Refiner Ver.1.1
	 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	FrontWorkBench Ver.2.0
量子バイオ	 バイオ・ナノ分子特性シミュレーター	ProteinDF	ProteinDF System 2012
	 バイオ分子相互作用シミュレーター	BioStation	ABINIT-MP Ver.5.0 BioStation Viewer Ver.13.01
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.11.00 UVSOR Ver.3.42 CIAO ver.3.00

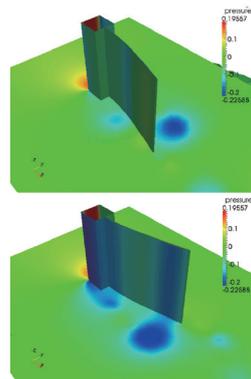
※上記ソフトウェアの概要と研究実例を掲載したソフトウェアリーフレットは <http://www.iis.u-tokyo.ac.jp/publication/leaflet.html#softwarebase> よりダウンロードできます。

大規模アセンブリ構造対応熱流体解析ソルバー

1,000億規模の実用問題解析に対応するシステムが完成

FrontFlow/blue開発チームでは、京速コンピュータ「京」の本格稼動に備えて、1,000億規模の解析を可能とするシステムの開発を進めています。昨年度は、収束性に優れたIDRマトリックスソルバー、局所Refine機能、大規模ボクセルハンドリング機能およびALE計算機能(図)の実装・検証を行いました。これらの機

能により、およそ数十万コアを用いた1,000億規模の解析を、より実用的な問題に適用することが可能となりました。今年度は、「京」を中心とした大規模計算リソース(数千コア~数十万コア)を活用し、自動車、船舶、ターボ機械、高速車両等の分野においてFFBの有用性を実証する解析を実施していく予定です。



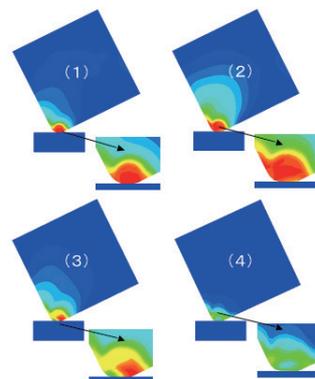
ALE機能検証計算：フィン付き角柱まわり流れの流体構造連成解析フィン表面の圧力分布

大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバー

実践的な機能拡充により、実用性がさらに向上

FrontISTR開発チームでは、接触動解析、トラス要素、ばね境界条件、移動熱源入力、応力負荷状態下での固有値解析などの機能拡充を行い、本ソフトウェアの実用性がさらに向上しました。また、REVOCAP_Refinerの形状適合機能に対応し、曲面形状をメッシュ細分化する場合の解析精度が大きく向上

しました。このソフトウェアを用いて、企業ニーズに基づく「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」などの実証解析を進めています。



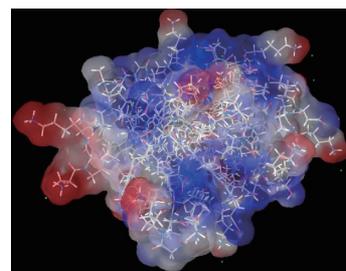
模擬携帯電話ケースの落下衝撃解析

バイオ・ナノ分子特性シミュレーター

分散メモリ型並列計算機への正式対応

ProteinDF System 2012には、京速コンピュータ「京」をはじめとする、ノードあたりのメモリが少ない分散メモリ型並列計算機において、本来、巨大なメモリを必要とする大規模カノニカル分子軌道計算が実行できる方式として、コレスキー分解法を実装しました。これをリリースします。現在、 α 版

のポルン・オープンハイマー型分子力学計算や部分構造最適化計算、分光学的物理量計算の諸機能も順次リリースします。リファクタリングされたGUIはユーザがカスタマイズできるツールとして使用できます。タンパク質のみならず、ナノ分子を素材とする基礎・応用理論研究に有用となるでしょう。



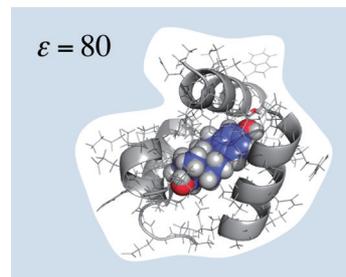
シトクロムc₃の静電ポテンシャル

バイオ分子相互作用シミュレーター

タンパク質-リガンド系における水和効果の考慮が可能に

ABINIT-MP/BioStationはFMO計算および解析プログラムとして開発が進められ、タンパク質-リガンド系をはじめとする生体分子システム内の詳細な相互作用メカニズムを明らかにしてきました。一方で、より現実的な生体内の水和状態をシミュレートするため、ポアソン・ボルツマン方程式に基づく

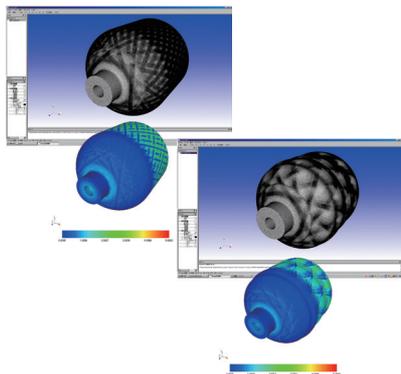
連続溶媒モデルとの連携を行い、溶媒和効果を伴う相互作用エネルギーの評価を可能にしました。また、水素結合相互作用の詳細な軌道解析を行うCAFIの実装と併せて、実用性を重視した機能拡張が行われています。



タンパク質-リガンド系に対する水和効果

複合材料強度信頼性評価シミュレーター

CFRP 材料の信頼性／軽量性／経済性のトリロジーを解決



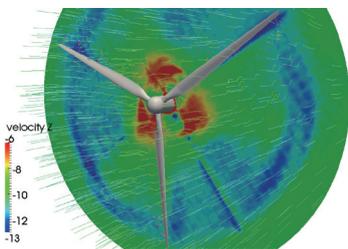
高圧水素容器のワインディングパターンの最適化

FrontCOMPは、炭素繊維束の形状と配置を正確に表現し樹脂部分を明確に区分するメゾスケール有限要素モデルを機軸とした確度の高い強度信頼性解析を行うためのシミュレーションソフトウェアで、1) 賦型プロセス、2) 硬化プロセス、3) 損傷発展について、強度要求を満たしながらメゾスケール

パラメーターの直接的最適化が可能です。水素社会を支える重要なインフラであるスタンド用蓄圧器の開発では、繊維束の配置や断面寸法、硬化スケジュールや樹脂の特性などの最適化を行う強力なツールとなることが期待されています。

大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーター

自由自在なマルチ力学シミュレーター



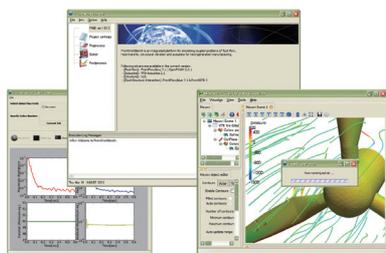
発電用風車翼の流体-構造連成解析

REVOCAP開発チームでは本年度、マルチ力学解析エンジン REVOCAP_Coupler、プレポストREVOCAP_PrePostおよびモデル細分モジュールREVOCAP_Refinerの開発および事例研究を実施しました。REVOCAP_Couplerは、連成解析の補助プログラムです。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す。CAD形状適合機能に対応します。事例研究として、発電用風車翼の流体-構造連成解析、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ました。

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

超並列大規模解析用統合プラットフォーム



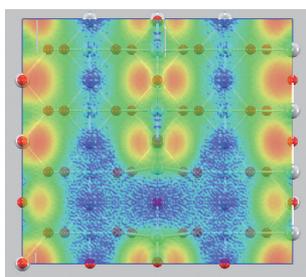
FrontWorkBenchによる超並列大規模流体解析の例

FrontWorkBenchは、熱流体、構造、音響の各ソルバーの実行を行うことができ、流体-構造連成、流体-音響連成の実行にも対応しています。操作に関するヘルプや音声ガイドの機能を備え、ジョブ管理を効率化するための実行ジョブの履歴保持、ソルバーの実行状況を可視化するジョブモニター、グラ

フ描画や可視化を行うポスト処理ツールを備えています。商用外部ソフトウェアのデータコンバータを持ち、メッシュや可視化ツールとの接続にも対応しています。計算サーバ上で起動して解析実行が可能であり、データハンドリングの煩雑さ、設定の複雑さ等の障害を避けることができます。

量子機能解析ソルバー・ナノデバイスシミュレーター

第一原理に基づく原子レベルの材料シミュレーター



酸素欠損のあるTiO₂表面のSTM像

PHASE-SYSTEMでは、ハイブリッド汎関数やファンデルワールス相互作用など、電子相関に関わる高度な機能の実装を行い、今まで以上に、強い電子相関系に対する定量的な計算が可能になりました。また、電子相関のより簡便な計算手法であるDFT+U法は通常のDFT法の欠点を補う手法ですが、計算時に収

束性が悪くなる傾向がありましたが、この問題点を新たに導入した解法により大幅に改善することができました。磁性を持つ系に関して、ウルトラソフト法よりも優れた手法であるとされるPAW法に対しても、検証計算や不具合修正などを遂行し、PHASEに組み込まれたPAW法をより成熟させました。

駒場リサーチキャンパス公開2012の開催報告



説明をする加藤千幸センター長

6月1日(金)・2日(土)、「駒場リサーチキャンパス公開2012」が開催され、本センターは笠岡ラウンジで『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、超並列コンピュータやクラウドコンピューティングの台頭という大きなパラダイムシフトに対応できる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した。本年は、動画と電子パネル、タッチパネル

などを使用しながら、各プロジェクトの研究成果をご説明しました。ご参加の皆様からは、「より視覚的・直感的にシミュレーションを体験できて分かりやすい」などの評価をいただき、盛会裏に終了いたしました。



会場風景

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 シンポジウム

申込み受付中

テーマ 計算機環境のパラダイムシフトに呼応した先端シミュレーションによる産業イノベーションの加速

4回目となる本シンポジウムでは、日本発の世界をリードするソフトウェアの実現をめざして研究開発を行ってきた、バイオ、ナノを含む広い意味でのものづくり分野のイノベーション創出に貢献する基盤ソフトウェアの研究開発成果を実装したソフトウェアの内容と実証解析事例を、開発者と産業界の代表的ユーザーの皆様より紹介いたします。

多くの皆様のご参加をお待ちしております。

開催日時 2012年 7月5日(木) 10:00～17:00
2012年 7月6日(金) 10:00～17:30

会場 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)

主催 東京大学生産技術研究所

後援 (独)理化学研究所、(独)海洋研究開発機構、(財)計算科学振興財団
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

参加費：無料

定員：250名

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

●プログラム

1日目

講演

「イノベーションソフトプロジェクトの最新成果と今後の展開」

加藤 千幸 プロジェクト代表 東京大学生産技術研究所 教授

セッション1：ナノデバイスシミュレーション分野

「量子機能解析ソルバー・ナノデバイスシミュレーター」

大野 隆央 物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット ユニット長

セッション2：量子バイオシミュレーション分野

「バイオ・ナノ分子特性シミュレーター」

佐藤 文俊 東京大学生産技術研究所 教授

「バイオ分子相互作用シミュレーター」

望月 祐志 立教大学理学部 教授

2日目

セッション3：次世代ものづくりシミュレーション分野

「複合材料強度信頼性評価シミュレーター」

吉川 暢宏 東京大学生産技術研究所 教授

「大規模アセンブリ構造対応熱流体解析ソルバー」

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

「大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバー」

奥田 洋司 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

「大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーター」

吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科 教授

編集後記

キャンパス公開では、初めてタッチパネルと電子パネルを使用した展示を行いました。多くの高校生からは、タッチパネルでの操作は楽しく、シミュレーションにも興味をもった、などの声をいただき、苦勞も報われました。これからも新しい試みに取り組んで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