

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」シンポジウム開催報告

実用的価値の高いソフトウェアとしての 完成度向上を目指して

平成24年7月5日(木)、6日(金)の2日間にわたり第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。

今回のシンポジウムでは、「京」を中心とする計算機環境にも対応可能な先端的シミュレーションソフトウェアの研究成果とそのソフトウェアの完成度向上を目指して企業との連携により実施した解析事例を、開発者及び産業界の代表的ユーザーの方々からご紹介いただきました。延べ456名の方々に参加され、盛会裏に終了しました。

今回のシンポジウムは中埜良昭本所所長の主催者挨拶に始まり、文部科学省 下間康行研究振興局情報課長ならびに富士通株式会社 天野吉和常勤監査役のお二人からご挨拶をいただきました。引き続き行われた本プロジェクトの研究代表 加藤千幸教授の講演では、6月に公開した最終バージョンの完成度向上と各ソフトウェアの普及に向けた取り組みとして、ユーザー会の組織化とサポート体制の充実、マニュアルの整備、実務体験セミナー開催などが紹介され、「プロジェクト終了後には本センターが中心となってソフトウェアの維持管理を継続していくので、ユーザーの皆様は安心して、これらのソフトウェアをご利用ください」と講演を締めくくられました。



本所 中埜良昭所長

その後、各ソフトウェアの最新研究成果の発表と実証解析事例の紹介に移り、ナノデバイスシミュレーションシステム研究開発グループ、量子バイオシミュレーションシステム研究開発グループ、次世代ものづくりシミュレーションシステム研究開発グループの3グループが成果の発表や事例紹介を行いました。

詳しい内容は近日発行予定の講演集でご覧いただけます。



文部科学省 下間康行情報課長



会場風景

研究開発グループ別 実証解析事例の紹介

7月5日(木)

ナノデバイスシミュレーション

PHASE-SYSTEM 第一原理電子状態計算ソフトウェアPHASEの半導体デバイスに関する解析事例として、SiC表面上グラフェンの構造安定性評価(本所小野特任研究員)、半導体デバイス材料研究への応用(NTT物性科学基礎研究所影島氏)、シリコン中の原子空孔(金沢大学齋藤教授)が紹介されました。

量子バイオシミュレーション

ProteinDF 密度汎関数法に基づく大規模全電子カノニカル分子軌道計算プログラムProteinDFを用いた解析事例として紹介されたのは、甘味タンパク質の電子状態計算(岡山理科大学直島教授)でした。また、本所の平野助教からはProteinDFのオープンソース化について報告されました。

ABINIT-MP/BioStation FMO計算プログラムABINIT-MP/BioStationの解析事例として、4体補正FMO法計算の先導的応用事例(みずほ情報総研株式会社福澤氏)とリガンド-タンパク質相互作用解析(キッセイ薬品工業株式会社小沢氏)が紹介され、神戸大学の田中教授はFMO法の今後の展開について述べられました。



物質・材料研究機構 大野隆央ユニット長



本所 佐藤文俊教授

7月6日(金)

次世代ものづくりシミュレーション



研究代表 加藤千幸教授

FrontFlow/blue 100万コアクラスの計算リソース、1000億規模の計算格子を用いた乱流の直接計算を実現するためのツールとして開発が進められてきたFrontFlow/blueを使用した解析事例として、空調用ファンにおける空力騒音の計算(株式会社日立製作所岩瀬氏)と大型油槽船のスケールモデルまわりのLES解析(財団法人日本造船技術センター西川氏)が紹介されました。

FrontISTR 材料・幾何学的・境界非線形機能が実装され、様々な産業応用問題に適用されているFrontISTRを利用した解析事例としては、車輪の高速回転の解析(公益財団法人鉄道総合技術研究所高垣氏)とモバイルフレームの落下衝突・プレス成型・ディスクブレーキ制御についての解析(株式会社先端力学シミュレーション研究所中岡氏)が紹介されました。

FrontCOMP 樹脂特性や炭素繊維束に関わるメゾスケールパラメータの最適化まで可能なFrontCOMPを利用した解析事例として紹介されたのは、水素ステーション用大型CFRP蓄圧器の開発(JX日鉱日石エネルギー株式会社岡崎氏)とメゾスケールモデルによるCFRPの損傷解析(株式会社IHI福重氏)でした。

REVOCAP 超並列計算機環境でも対応可能で自由自在なマルチ力学解析が行え、実機アセンブリ構造をまるごと対象とした解析の実現を目指しているREVOCAPシステムを使用した解析事例としては、自動車車室内振動騒音解析(スズキ株式会社飯田氏)と風車翼の流体-構造連成解析(株式会社先端力学シミュレーション研究所鶴飼氏)が紹介されました。



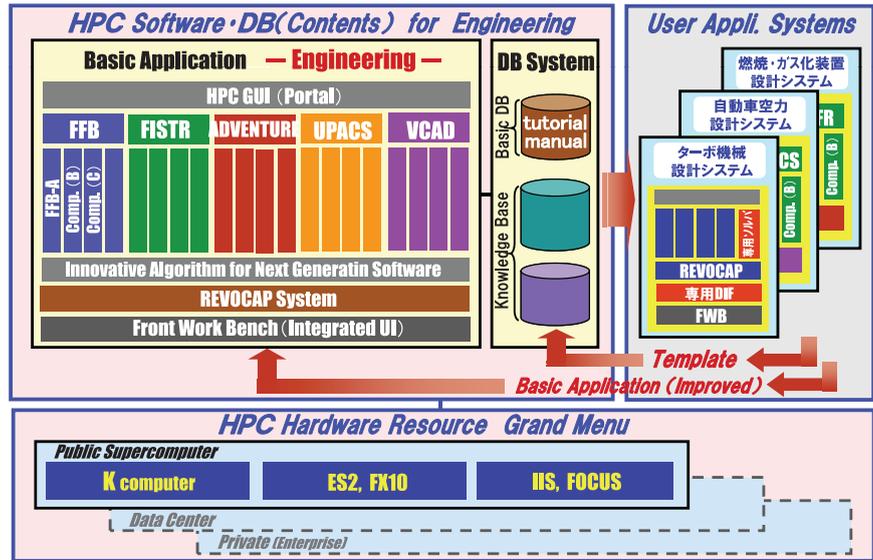
実証事例の展示

「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくり

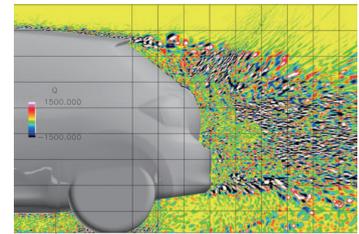
「京」の優先課題にイノベーションプロジェクトの成果を活用した研究課題が採択

平成 24 年度内または平成 25 年度早期に、「京」の能力を最大限利用しなければできない大規模計算であり、かつ画期的な科学的成果または社会的課題の解決に資する成果が上げられる優先課題が公募されました。

それに対して、本センターが中心となって提案した「乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発」が採択されました。自動車、船舶、ならびにエネルギー変換機械（ターボ機械）を対象として、コンソーシアムの参画企業から風洞実験データなどの検証データを提供してもらい、直接シミュレーションの設計適用可能性を実証します。風洞実験や種々の試験を完全にシミュレーションで代替することが可能となることに加えて、ミクロな乱流渦の制御による性能が向上することにより、試作費用の大幅削減、設計技術の向上、高信頼性製品の開発に貢献できることが期待されています。



大規模なものづくりシミュレーションの推進を支援する HPC/PF 環境



車両挙動を解明する全乱流渦のシミュレーション（トヨタ自動車提供）

数十～数百 TEOLOPS スパコンを利用した実証課題公募事業 7 件を採択

ものづくり現場で、実際にシミュレーションの利用を考えている方は年々増加しています。その中で、これまでに開発してきた先端ソフトウェアを数十～数百 TEOLOPS のスパコン上で実行することで産業界実問題に適用していくことが HPCI 戦略プログラムの重要な役割だと考えています。そこで、産業界で計算機シミュレーションの実施を考えている方々に、実際にスパコンを利用いただき、ハイパフォーマンス・コンピューティング (HPC) 技術の習得とともに、ものづくり現場で役に立つかどうかの検証を行ってもらい、スパコンの本格利用のきっかけにいただくために、実証研究課題公募事業を実施しています。

平成 24 年度の実証研究課題公募では 8 件の応募があり、厳正な審査の結果 7 件の課題を採択し、スパコンの課題利用が開始されています。

■ 課題応募数と採択数 (件)

	応募数	採択数
平成 23 年度	3	2
平成 24 年度	8 (うち 2 件が継続課題)	7 (うち 2 件が継続課題)

■ 利用している計算機と課題数 (件)

	FOCUS スパコン	CISS クラスタ型 スパコン	東大・情報基盤 センター FX10
平成 23 年度	2	—	—
平成 24 年度	3	1	3

クラウドコンピューティング環境を利用した FrontFlow/blue の設計実務セミナーを開催



加藤千幸センター長

イノベーションプロジェクトも最終年度に入っており、プロジェクト終了時点までに、①実施中の実証計算を完遂させ、産業上の利用効果を明確にすること、②マニュアルやインターフェースなども含めて、ソフトウェアの完成度を出来る限り高めること、③各ソフトウェアの普及の道筋を明確にし、プロジェクト終了後は自立的に普及が進展するようにしておくこと、が現下の最大の課題となっています。そのような状況の中、株式会社ヴァイナス、みずほ情報総研株式会社、ならびに財団法人計算科学振興財団に多大なご協力をいただき、7月13日(金)に大阪国際会議場でFrontFlow/blue(以下、FFB)の設計実務セミナーを開催いたしました。本セミナーでは FOCUS スパコン上で合計48ノード(576コア)を使い、

実際の設計業務への適用を想定して小型ファンモデルを題材に、メッシュ生成から、非定常流れ解析、音響解析、解析結果の可視化まで、クラウドコンピューティング環境を利用したCFD設計実務の一連の作業を体験してもらいました。今回のFFBのセミナーは大変好評で、参加申し込みが定員をはるかにオーバーしてしまったため、急遽、8月22日(水)に東京でセミナーを追加開催いたしました。

本センターでは今後もイノベーションプロジェクトで開発してきたソフトウェアを対象として、このようなセミナーを定期的に開催していく予定です。多くの皆様にご参加いただければ幸いです。



セミナー風景

イベントスケジュール

国際フロンティア産業メッセ 2012

日程 平成24年9月6日(木)・7日(金)

会場 神戸国際展示場2号館 神戸ポートアイランド

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2012

開催日時 平成24年10月29日(月) 9:30~16:30

会場 学術総合センター(竹橋)2F 中会議場

詳しくは、<https://azuma.nims.go.jp/events/nsws2012> をご覧ください。

SC12

日程 平成24年11月10日(土)~16日(金)

場所 米国ソルトレイクシティ

文部科学省 HPCI 戦略プログラム 第3回「分野4 次世代ものづくり」シンポジウム — “京” で始まる次世代の価値創造 —

本年9月末からスパコン「京」の本格運用が開始され、いよいよ「ものづくり」の新しい価値の創造に向けて、具体的な活動がスタートすることになります。

今回のシンポジウムでは、次世代ものづくり分野で掲げる先導的研究課題の「京」本格利用の状況と HPC 普及に対する取り組みをご紹介します。ペタ・フロップス～エクサスケールの時代におけるシミュレーションの活用についてお考えいただく機会を提供すると同時に、今後の研究開発に対するご助言・ご提言をいただくことを大きな目的としています。多くの皆様のご参加をお待ちしております。

開催日時 平成24年 12月7日(金) 10:30~17:30

会場 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 6F 講堂

主催 東京大学生産技術研究所、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構

参加費：無料

定員：120名

<お申込み・最新情報>

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

編集後記

暑期中開催したイノベPJシンポジウムが無事終了し、ホッと一息つきつつも、様々な行事が目白押しの後半戦に向けて、助走態勢に入っています。右の写真は、生研内にある疾走する人の銅像です。後半戦もこのようなスピード感をもって取り組んでいけた



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