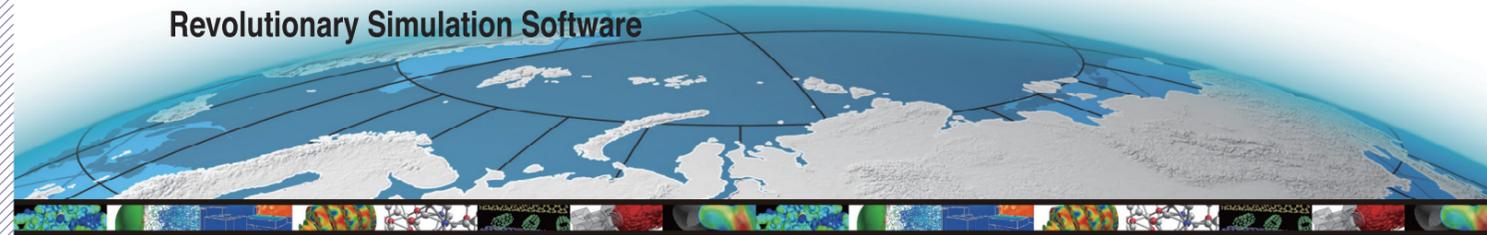


RSS21 NEWS VOL.2

Revolutionary Simulation Software



最先端シミュレーションソフトウェアの開発を加速

革新ソフトプロジェクトで新たに拡充した3テーマのソフトウェア開発も着実に進行

「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトは半年が経過し、それぞれのテーマのソフトウェア開発を強力に推進しております。本プロジェクトでは前号でご紹介しましたように、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトで開発を進めて参りました分野に加えて、より広く皆様方のお役に立てるように、「器官・組織・細胞のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション」「革新的汎用連成シミュレーション」「都市の安全・環境シミュレーション」の3つのテーマを新たに追加し推進しております。器官・組織・細胞のシミュレーションでは、心臓・動脈血管や抹消血管などで生じている輸送・交換現象をモデル化しシミュレーションすることにより、心疾患や脳血管障害などの血管病変による疾患発生のメカニズムに関する理解を深め、これらの治療に生かしていくことを目的としており

ます。革新的汎用連成シミュレーションシステムでは流体、構造、伝熱、電磁気、騒音などの大規模な連成シミュレーションをさまざまな並列計算機環境で簡単に実施できるシミュレーションシステムを開発し、次世代のデジタルエンジニアリングの基盤を構築することを目指しております。都市の安全・環境シミュレーションでは、大規模な地下街や超高層ビルなどにおいてテロや火災が発生した場合のシミュレーションを可能とし、都市の環境・安全性を正確に予知・評価できるシミュレータを開発することにより、都市の安全や環境の維持に貢献することを目的としております。

関係各位のご尽力とご理解により、お陰様で本プロジェクトは平成18年度の概算要求において総合科学技術会議から最高のS評価を受けましたが、産業界や実社会でより役立つシミュレーションシステムを開発するために、関係各位からの忌憚のないご意見、アドバイスなどを頂ければ幸いです。

RSS21「戦略的革新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 成果目標

グループ	サブテーマ	代表名 (コアプログラム)	研究開発ソフトウェアの特徴
			革新的 / 先進的機能
生命現象	創薬・バイオ新基盤技術開発へ向けたタンパク質反応全電子シミュレーション	ProteinDF	● 世界最大規模(1,000 残基)のタンパク質全電子計算 ● タンパク質解明に寄与する多機能統合計算
	タンパク質・化学物質相互作用マルチスケールシミュレーション	BioStation (ABINIT-MP)	● FMO法(非経験的フラグメント分子軌道法)による巨大分子系の解析 ● タンパク質-化学物質相互作用統合解析・可視化
	器官・組織・細胞マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション	M-SPhyr (Front Flow/FSI)	● モデル変形、パラメータ算出機能を有する医用画像処理 ● 循環器系の、流体-構造連成を含む統合解析
マルチスケール連成	ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション	CHASE-3PT (PHASE)	● ナノ材料のマルチスケール多機能統合解析・設計支援環境 ● 地球シミュレータ環境下超大規模ナノ特性解析
	革新的汎用連成シミュレーション	REVOCAP (仮称)	● 並列環境対応の汎用弱連成解析用エンジン(カプラー等) ● 複雑形状対応メッシュング及び複数現象表示ポスト機能
	マルチフィジックス流体シミュレーション	Front Flow	● LES(Large Eddy Simulation)による大規模・高精度・高速解析 ● 乱流起因の多様な複合現象(燃焼、混相、騒音等)の解析
環境・都市	ハイエンド計算ミドルウェア援用構造解析システムによる汎用連成シミュレーション	HEC-MW (Front STR)	● FEM 解析、ソルバー、可視化等の並列解析用ライブラリ群 ● 大規模並列処理機能活用の複雑構造物の高精度・高速解析
	都市の安全・環境シミュレーション	EVE SAFA	● 高精度3次元モデル/1次元ネットワーク / 避難モデル統合解析 ● 消火、移流拡散、延焼モデルを中核とする大規模LES解析
共通基盤	全体系最適化シミュレーション・プラットフォーム	PSE Workbench	● 戦略的革新シミュレーションソフトウェアで開発したソフトウェア群の統合プラットフォーム
	地球シミュレータ用ソフトウェアの高速最適化	—	● ナノシミュレーションソフト(PHASE)の地球シミュレータ対応高度並列化

● ワークショップ報告

“革新ソフト”第1回ワークショップ「生命現象シミュレーション」を開催

10月28日、東京大学生産技術研究所新棟大会議室において、「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトにおける第1回目のワークショップ「生命現象シミュレーション」が開催されました。

発足4ヶ月に満たない時期にも関わらず、定員100名を上回る参加者が集い、本研究開発テーマへの関心の高さが伺えるものとなりました。一般講演としての生体構造に基づく野心的なシミュレーションソフトウェア群の研究開発計画紹介に始まり、理化学研究所の姫野龍太郎情報基盤センター長によるペタ超級スーパーコンピュータの取り組みに関するホットな特別講演まで、活発な質問や意見が交わされました。

講演集を御希望の方は事務局にお問い合わせ下さい。



● スーパーコンピューティング技術産業応用協議会の設立総会・記念講演会のご案内

「研究グリッド産業応用協議会」と「戦略的基盤ソフトウェア産業応用推進協議会」が統合、新たに「スーパーコンピューティング技術産業応用協議会」が発足し、設立総会・記念講演会が下記の通り開催されます。

ご希望の方はどなたでも出席出来ますので、皆様お誘いあわせの上ご参加下さい。

[日時] 17年12月15日(木) 13:20-18:15
[場所] 東京大学生産技術研究所 コンベンションホール
[総会・記念講演] 柘植総合科学技術会議議員ほか
懇親会:有 会費:2千円
詳細は協議会事務局までお問い合わせ下さい。
(社)電子情報技術産業協会(樋口)
TEL:03-3518-6434, k-higuchi@jeita.or.jp

● 産業応用推進協議会

月	委員会	普及WG	試算・施策WG
9			ナノ(9/9) バイオ(9/2)
10		Front-STR(pSAN)(10/21) FrontFlow/blue(10/27)	ナノ(10/12) 流体構造(10/28)
11	運営小委員会(11/21)	FrontFlow/red(11/22)	ナノ(11/17)
12	統合総会	PHASE(予定)	ナノ バイオ
1		BioStation(予定)	ナノ 流体構造
2	運営小委員会	ProteinDF(予定)	ナノ
3			ナノ バイオ 流体構造

協議会会員が増え続けています。10月だけで3機関が新規加入、他の数機関からも加入の問い合わせをいただいております。また、試算・実証WGのナノ分野で4名、流体構造分野では5名の新規参加者がありました。

10月からは好評をいただいている普及セミナーも始まり、中身の濃い活動が活発になってきております。

まだ未加入の方は是非ご参加下さい。

編集後記

本号では“革新ソフト”プロジェクトに新たに加わったサブテーマの研究内容や社会的効果を中心に紹介、編集致しました。いずれも重要な領域を扱っているものばかりで、その成果が大いに期待されています。あの厳しい暑さはどこへやら、朝夕はめっきりと冷え込む今日この頃ですが、風邪など召しませぬようご自愛下さい。

資料請求お問い合わせ先

TEL: 03-5452-6661 FAX: 03-5452-6662 E-mail: office@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp URL: http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/
編集発行: 東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター 〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1 TEL: 03-5452-6661 FAX: 03-5452-6662 E-mail: office@rss21.iis.u-tokyo.ac.jp

生命現象シミュレーション

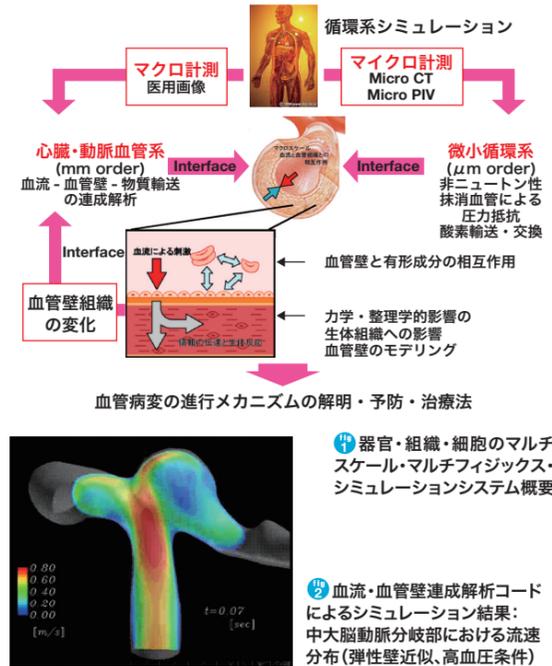
器官・組織・細胞のマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションシステム

目的 今後増加が予想される心疾患や脳血管障害などの血管病変による疾患の血管病変のメカニズムを理解し、シミュレーション・システムを構築して治療や予防に役立てていく。

研究内容 ④のようなシステムのシミュレータを開発。まず、病変部位を有する血管にも適応可能な、血管表面形状を作成するプログラムを開発。このプログラムでは広範囲な3次元血流解析を1次元解析モジュールとリンクさせることで、より現実に近いシミュレーションが可能になる。さらに血流・血管壁・物質輸送の連成シミュレーションを試みたり、微小循環や細胞・組織の動態変化解析モジュールを組み入れていく。各モジュールの統合で一連のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションを実行するシステムとなる。

期待効果 血管病変を対象に異なるスケールやフィジックスの相互作用を考慮したシミュレーション技術を確認し、シミュレータを開発することで血管病変の予防・治療へ貢献する。

推進状況 ②は実際の患者さんの症例をもとにしたシミュレーション例である。より現実的なシミュレーションツールとなるよう研究・開発を進めている。



都市の安全・環境シミュレーション

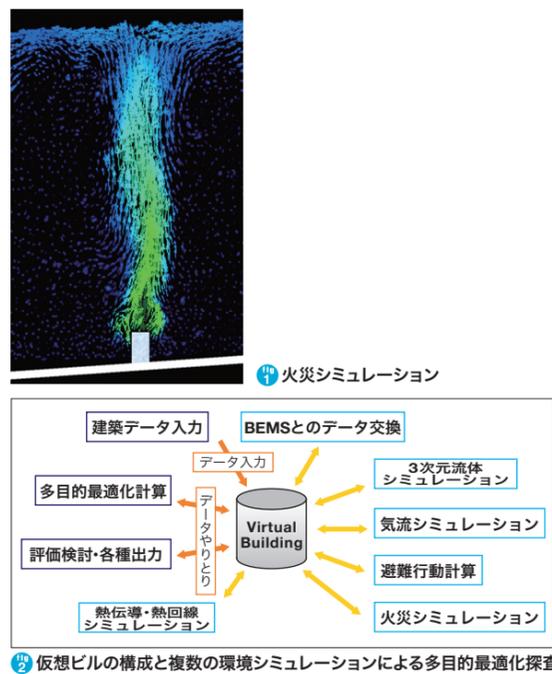
仮想ビルディングデータベースシステムに基づいた高精度都市環境安全シミュレータ

目的 複雑な空気流通経路を持つ大規模な地下街や超高層ビルなどにおいて、テロや火災が発生した場合、防災設備の作動条件の違いにより大規模な災害に発展する危険性が增大している。これらの災害を防止あるいは低減するためには、信頼性、ロバスト性を考慮した上での適切な防災設備の設置が不可欠である。本研究では、仮想ビルに基づいた環境・安全を正確に予知し評価できるシミュレータを開発する。

研究内容 仮想ビルの研究開発、仮想ビルに基づいたテロ対策として人間の活動空間およびこれを支える空気流通空間における健康影響危険物質と、火災対策として煙の移流拡散および延焼シミュレータの研究開発と危険時の避難誘導最適設計システムの研究開発を行う。

期待効果 初期消火・延焼防止設備・避難経路等の設計を高度化し被害を飛躍的に低減することが可能となり、安全・安心な社会の実現に寄与する。

推進状況 2005年8月より、基本設計書の作成、ネットワークモデルと3次元モデルの連成と仮想ビルの研究開発を進めている。



革新的汎用連成シミュレーション

大規模な複合現象を精度良く容易に解ける連成解析シミュレーションシステム

目的 現実の現象はほとんどが本質的に連成現象(異なる現象が相互関連する複合現象)であるため、革新的汎用連成シミュレーションシステムの開発においては、大規模モデルを用いて単一現象を解析する並列ソフトウェア(ソルバ)を効率的に統合化し、様々な並列環境で高精度の連成解析を可能とするシステム(④)の開発を目的とする。

革新汎用連成解析シミュレーションシステムは以下のプログラム群から構成される。

(1) 連成解析エンジン

連成解析エンジンは各単一現象ソルバの物理量を相互に接続する。また、各ソルバで異なるメッシュ形状に対応するとともに、各ソルバ間で異なる時間ステップ幅にも対応できるようにする。様々な並列環境での動作を前提としている。

④中の連成解析エンジン部分(薄紫色の囲内)について詳細なフローを示したのが②である。この図のように各ソルバの境界条件に他のソルバの結果を入力しながら収束計算をすることで、たとえば表面境界層形成が大きな影響を及ぼす熱伝達問題の詳細解析にもより強い連成問題にも十分な精度を保証できる。

(2) 汎用連成解析プリ・ポスト

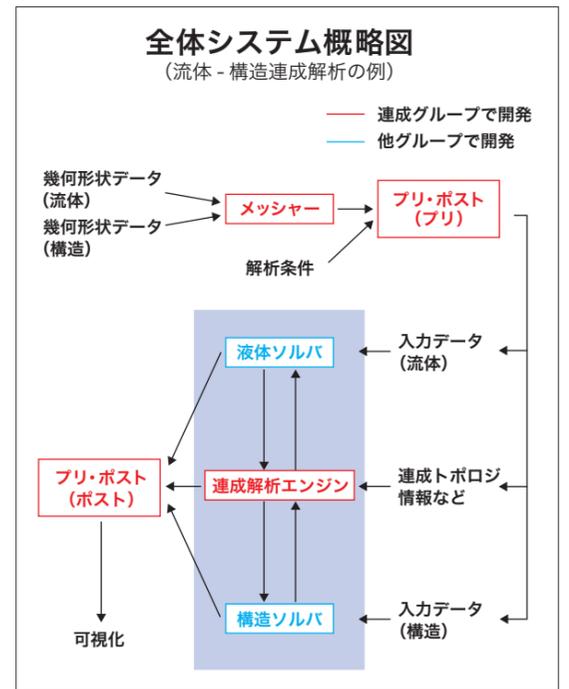
単一ソルバのメッシュ生成・解析条件設定だけでなく、連成境界条件の設定・複数現象の重ね合わせ表示を行うツール群を整備する。

(3) 電磁場解析システム

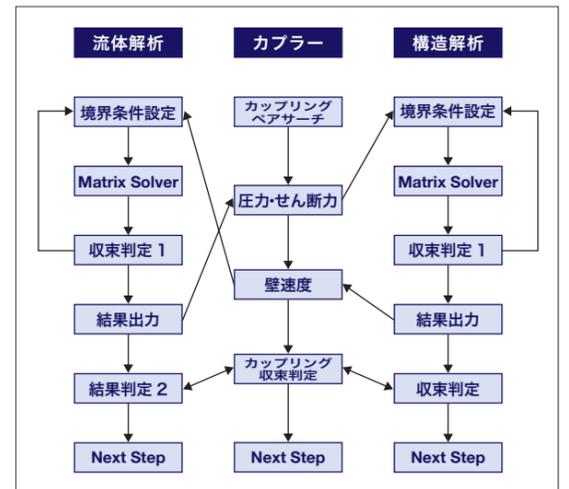
ADVENTURE プロジェクトで開発された並列電磁場解析コード ADVENTURE_Magnetic に、高速化・省メモリの機能および非定常解析機能を追加開発し、非線形静磁場解析、非定常渦電流解析機能を有した並列計算が可能な電磁場解析ソフトを開発する。

期待効果 研究機関や製造業の協力を得て、これまで解析が困難であった大規模かつ実用的連成問題を複数個ターゲットとして選択し、開発した連成解析システムを用いて実際に解くことにより、システムの実証を行う。

推進状況 各モジュールの基本設計が終了し、順次開発を進めている。ガスタービン翼の熱解析などの実証計算の準備を開始した。



④ 全体システム概略図



② 連成解析エンジンの詳細フロー

2005年度シンポジウム・ワークショップ等開催予定

主催：東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター

月	日	名称：文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「革新的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	開催場所
12	12	「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」ワークショップ(第2回)...共通基盤	東京大学生産技術研究所 大会議室
2	23	「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」ワークショップ(第3回)...都市の安全・環境	東京大学生産技術研究所 コンベンションホール
	28	「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」ワークショップ(第4回)...マルチスケール連成シミュレーション	東京大学生産技術研究所 コンベンションホール