

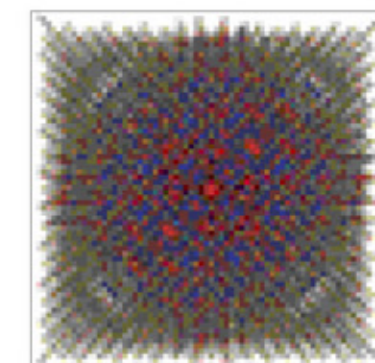
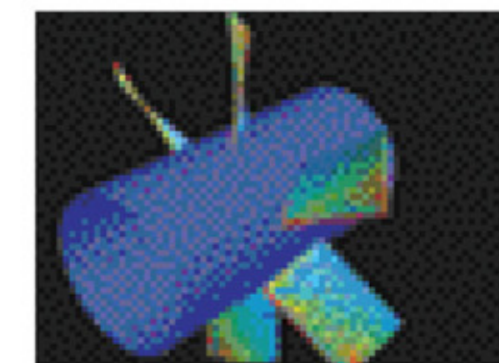
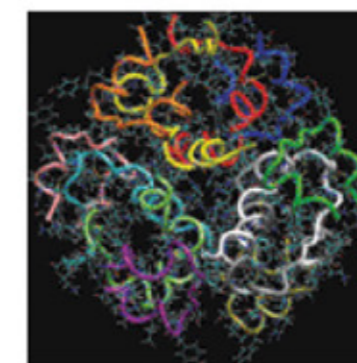


「革新プロジェクトが順調に進展」

平成17年度から開始された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順調に推移。初年度成果は6月に公開予定

次世代の産業競争力の強化や科学技術の発展に資するために、生命現象のシミュレーション、マルチスケール連成解析、都市の安全・環境シミュレーションならびに、共通基盤の4つの分野に関して革新的なシミュレーションソフトウェアを研究開発し、強力な産学官連携体制により、開発したソフトウェアの有効性を実証し、普及を推進することを目的として平成17年7月からスタートした革新プロジェクトは開始後9ヶ月が経過しました。革新プロジェクトとして新たに加わった研究テーマに関しても、開発するプログラムの基本設計が終了し、来年度から本格的な開発に入ろうとしています。また、戦略プロジェクトの成果を引き次いで、さらに高機能化・汎用化を進めているテーマについては、すでに一部実証解析も進めています。今号は平成17年度の各チームの代表的な成果を掲載しておりますが、現在年報も作成中ですので、

こちららぜひ参照していただければ幸いです。また、今年度は革新プロジェクトと地球シミュレータセンターとの共同プロジェクトで地球シミュレータを用いた超大規模解析の実現にも注力し、PHASEを用いた5,000原子の第一原理計算、FrontFlow/redを用いた2億メッシュ規模のフォーミュラカーの非定常空力解析を実現すると共に、ABINIT-MPを地球シミュレータ用に並列化・高速化し、128ノードの大規模計算が可能になるように最適化を実施しました。これらの成果は本年6月に一般公開致しますので、是非、ダウンロードしてご使用頂き、ユーザの皆様方からの忌憚のないコメントを頂ければ幸いです。一方、本年度は革新プロジェクト初年度にあたり、研究開発内容のご紹介とユーザの皆様からのご意見を拜聴する目的で、4回のワークショップを開催しました。そこで既存ソフトの不満点や革新プロへの要望(ガイダンス機能、連成解析の有効性、ソルバ機能の更なる拡充など)が明らかにされました。来年度は本格的なソフトウェアの開発と実証を行います。上記の貴重なご意見、ご指摘を踏まえて研究開発を拡充・加速する計画です。是非ご期待下さい。



ワークショップ報告

戦略プロジェクトに引き続き
革新プロジェクトでも活発に開催

第2回ワークショップ「共通基盤」

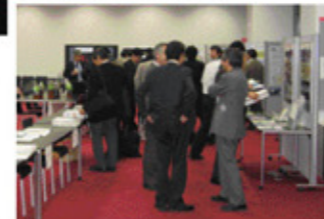
平成17年12月12日、東京大学生産技術研究所大会議室において“革新ソフト”プロジェクト第2回目のワークショップ「共通基盤」が開催され、サブテーマである全体系最適化シミュレーションプラットフォームとハイエンド計算ミドルウェアの研究成果が報告されました。またNAREGIプロジェクトの最新の話題を国立情報学研究所リサーチグリッド連携研究センター客

員教授の宇佐美仁英先生に特別講演していただきました。参加者70名は超え、熱心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までお問い合わせください。



第3回ワークショップ「都市の安全・環境シミュレーション」

平成18年2月23日、東京大学生産技術研究所コンベンションホールにおいて“都市の安全・環境シミュレーション 第3回ワークショップ”を開催し、多くの方々にお越しいただきました。パネルディスカッション



・平成17年度(9月以降)の活動状況

月	委員会	普及WG	試算・実証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(12/15)	PHASE(12/9)	ナノ(12/9) バイオ(12/15)
1	運営小委員会(1/20)		ナノ(1/18) 流体・構造(1/17)
2	運営委員会(部会)(2/21)	UVSOR/ASCOT(2/24)	ナノ(2/15)
3	運営小委員会(3/3)		ナノ(3/22) バイオ(3/16) 流体・構造(3/15)

先端ソフトウェア 産業応用部会

12月15日より産業応用推進協議会が研究グリッド産業応用協議会と統合し、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スタートしました。旧「戦略的基盤ソフトウェア産業応用推進協議会」はほぼそのままの形で「先端ソフトウェア産業応用部会」に移行いたしました。ますます内容の充実した活動をしてゆく所存でございますので、引き続きご支援のほどよろしくお願い申し上げます。

編集後記

革新プロジェクトが開始されて9ヶ月。現在、年報の制作中で、間もなく完成予定です。ニュースでは各サブテーマの一端の紹介しか出来ませんが、平成17年度の研究成果をまとめておりますのでこちらも楽しみにお待ちください。なお、来年度も変わらずの応援よろしく願いいたします。

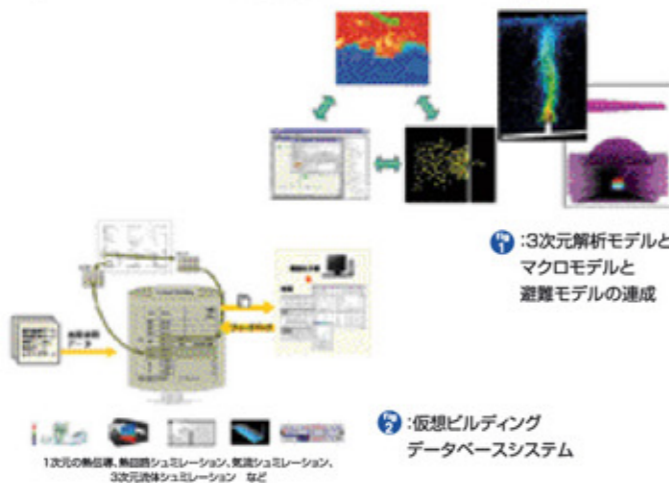
資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661 FAX : 03-5452-6662
E-mail : office@rss21.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@fssis.iis.u-tokyo.ac.jp

ためには、計算時間の短縮化を図ることが重要です。そのために平成17年度は「全体システム基本設計/ソフトウェア仕様ターゲットの策定・ヒアリング調査/基本モデル検証例題の選定・新規開発3モデルの基本検討並びに研究開発を行いました。具体的には(1)社会ニーズを捕らえた開発目標を定めるため、消防関係、建築防災関係、建築設計関係の各専門家のヒアリングを実施しました。(2)火災時における煙流動の基本的流動である自由ブルームと科技博C1館球形ドーム状展示室の実大火災をLESに基づく高精度な3次元解析で計算し、検証を行いました(4)。(3)建物内の空気流動解析に関する基本部分の研究開発を行い、また既存のネットワークモデルを用いた建物内の危険物質輸送に関する検証計算を実施しま

した。(4)仮想ビルディングデータベースに基づく最適建築設計システムについて、基本構想を研究しました(4)。



THEMA 04 共通基盤技術

全体系最適化シミュレーション

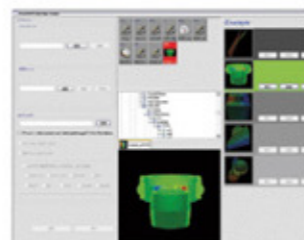
開発・設計者の試行錯誤を支援する、直感的な機能と操作性を持つGUIを開発!

PSE Workbenchは、試行錯誤を伴うマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーション解析において、直感的GUIによるユーザの思考を妨げないスムーズな操作性の提供を目指しています。平成17年度は、PSE Workbenchをクライアント・サーバ型に改良、実行時間の長い計算や複数ユーザによるデータの共通利用などに向けた開発を行いました。また、スパコン用GUIの試作を行い(4)、戦略・革新プロジェクトで開発されているシミュレーションソフトウェア群のいくつかを実装し(4)、GUI

上から操作できるようにしました。今後は、デジタルエンジニアリング実現に向けた機能を開発し、実際の開発・設計現場の作業効率化に貢献します。



4 :スパコン用GUIのトップ画面



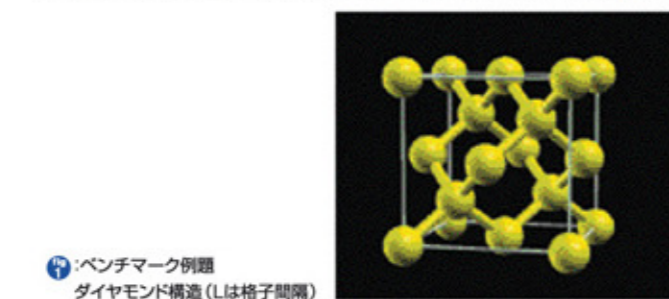
4 :実装したFrontSTRの操作画面

地球シミュレータ用ソフトウェアの高速最適化

高度なシミュレーション・ソフトウェアを
高速かつ効率良く走らせる「技」を開発!

革新プロジェクトにおいて開発中のナノシミュレーションソフトウェアPHASEに対し高速最適化技術を適用、演算性能を約4~7倍にまで向上させました。また、応用シミュレーションにおけるユーザの「解への到達時間の短縮化」を実現する方法等を明らかにしました。具体的には、PHASEに対し(1)最適な並列化効率の向上 (2)ベクトル化率の向上 (3)10ノード以上の中大規模ノード利用数拡大に向けた演算性能のチューニング (4)アルゴリズム改良及び高速化等を施しました。また、(5)

オリジナルコードと高速最適化コードとが齟齬無く合致することを確認し、ダイヤモンドの最適化構造を求める試算等で物理的な妥当な結果が得られることを確認しました(4)。



4 :ベンチマーク例題
ダイヤモンド構造(Lは格子間隔)

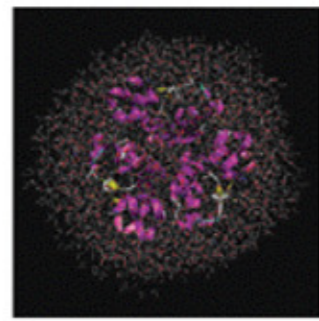
THEMA 01 生命現象シミュレーション

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

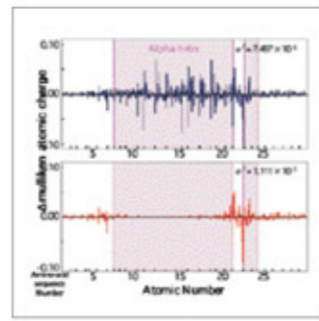
ProteinDFで、数百残基クラスのタンパク質全電子計算を極めて安全に解くことが可能に!

Generalized Born近似によるモデル溶媒中での最適化を採用することで、PDB構造に近く重みの無い計算構造を得ることができました。また、溶媒の水分子とイオンを分子力学的に取り込むことにより適切な電子状態が得られることがわかりました(①)。収束法も立体構造に基づく新手法へと改善しました。②従来の方法と新手法の初期値と収束値の電荷の違いを示しています。新手法を採用したピンクの領域はほとんど差がなくなりました。さらに並列化率の向上により、③世界最大の全電子計算SCF1回転をItanium2 32CPUで14時間19分から7時間52分へと短縮することが出来ました。これらの成果はタンパク

質の全電子シミュレーション実用化への重要な礎となるものです。



①:306残基インスリン6量体の計算構造



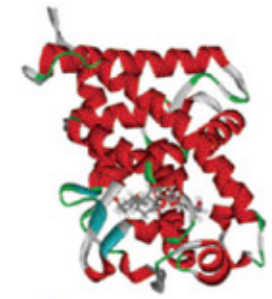
②:グルカゴンの初期値と収束値の電荷の差。上は従来の方法、下は新しい方法。ピンク色の領域が新手法を採用した領域。

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

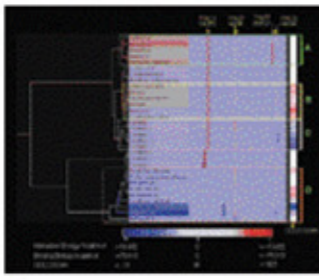
地球シミュレータによるタンパク質の電子状態計算が実用的に!

非経験的フラグメント分子軌道(FMO)法プログラムABINIT-MPを地球シミュレータへ移植し、ベクトル化・並列化のチューニングを行った結果、ポリグリシン160残基のFMO-HF/STO-3G計算でベクトル化率98.2%、並列化率99.9%、実効フロップス値1.3TFLOPSを達成しました。ビタミンD受容体タンパク質(①)のFMO-MP2/6-31G計算を64ノードで行うと、計算時間3.3時間となりました。これにより電子相関を考慮したタンパク質の電子状態計算が実用化され、地球シミュレータ利用の創薬への道が開かれました。また、受容体タンパク質と複数リガンドの相互作用のクラスター解析を行うVISualized Cluster AN

Alysis of protein-ligand interaction:VISCANAを開発し(②)、バーチャルリガンドスクリーニングや受容体の機能解析に応用が期待されます。



①:ビタミンD受容体タンパク質とリガンドの複合体構造



②:VISCANAによりエストロゲン受容体と31種類のリガンドを解析した例

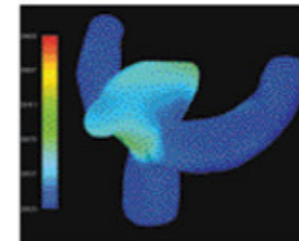
器官・組織・細胞マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション

循環器総合シミュレータM-SphyR Circulationの初期バージョンを開発!

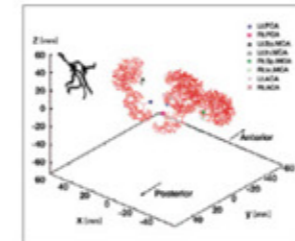
脳血管障害などの循環器系疾患は血管の病変で起こる。そこで血管の病変に着目し、器官から組織、細胞の力学的・生理学的な応答を組み入れたマルチスケール/マルチフィジックス・シミュレータを開発している。M-SphyR Circulationは医用画像より

血管形状を抽出し、表面形状をモデル化するプログラムMedical Imageと、FrontFlow/BloodおよびFrontFlow/FSIの2つのメインプログラムから構成されます。FrontFlow/Bloodはマイクロスケールの血管を含むマルチスケール大規模な血流解析に、一方のFrontFlow/FSIは血流-血管壁の相互作用などのマルチフィジックスな連成問題を主眼においています。その他、物質移動、

動的境界条件の導出、マルチスケール、生体の変性など、生体に特有な現象はサブシステムとしてadd-inされます。本年度の開発は主に二つ。(1)マクロには血管壁モデルに超弾性体モデルを組み込み、材料・幾何学的非線形性を考慮できるように改良(①)。(2)ミクロには、解剖学的知見、及び血管の最適構造原理から導出した規則に則り、末梢血管網モデルを構築(②)。末梢血管部分の0次元と1次元による血流解析と大規模3次元血流解析を統合したマルチスケール連成解析が可能となりました。



①:中大脳動脈瘤・血管壁にかかるMises応力(血管壁を弾性体(Mooney-Rivlin体)とした場合)



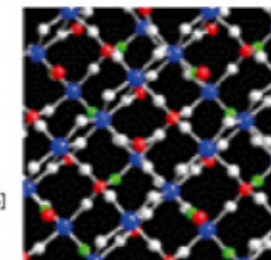
②:抹消血管のネットワークを考慮した脳血管網

THEMA 02 マルチスケール連成シミュレーション

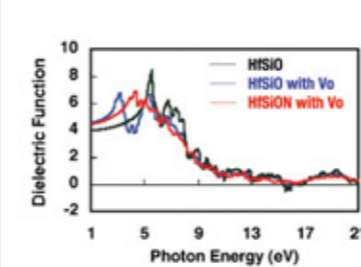
ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション

PHASE/UVSORにより次世代ゲート絶縁膜材料(窒化ハフニウムシリケート)の電子状態と誘電率を解析!

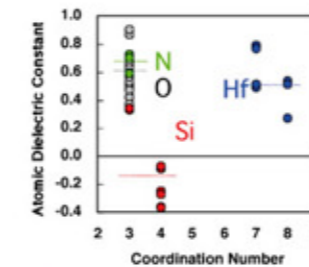
次世代トランジスタでは、微細化に伴い増大するゲート電極とSi基板間のトンネル電流を抑制するため、ゲート絶縁膜に高い比誘電率を有するhigh-k材料を用いる必要があります。現在最も有望なHigh-k材料である窒化ハフニウムシリケート(HfSiON)の電子状態と誘電率をPHASE/UVSORにより計算し、電子状態と誘電率に及ぼす窒素の効果を原子レベルで解析しました。その結果、電子および格子系誘電率を増大させること(①~③)や、窒素原子はトンネル電流を増大させる酸素空孔順位を消滅させることがわかりました。HfSiONは、優れた熱的安定性に加え、high-k材料として優れた電気特性・誘電特性を持つ材料であると言えます。



①:HfSiON [Hf/(Hf+Al)]=50%, N=9%]のモデル構造(赤:Si, 青:Hf, 白:O, 緑:N)



②:電子誘電率への窒素と酸素空孔(VO)の影響

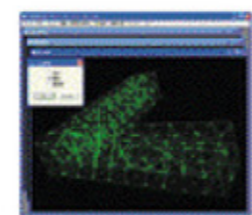


③:格子誘電率への原子寄与(HfSiONモデル)

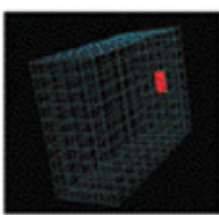
革新的汎用連成シミュレーション

複数分野の解析を融合させた統合連成解析環境REVOCAPシステムの基本設計・要素開発を実施!

本サブテーマではマルチフィジックス解析を対象とするREVOCAPシステムを開発してきました。REVOCAP_Mesh(①)はIGESデータからのメッシュ作成機能および境界条件、物性値の入力などのプリプロセッサ、REVOCAP_Visualは結果の可視化ツールとしてのポストプロセッサとして開発されています。REVOCAP_Coupler(②)は、ソルバー間の連成物理量のカップリングにより連成解析エンジンとして動作します。その他、並列計算機能を持つ電磁場解析ソフトREVOCAP_Magnetic、動的陽解法ソフトREVOCAP_Impactもこのサブテーマで開発しています。複数の実証問題の解析を通して、連成解析システムの完成を目指しています。

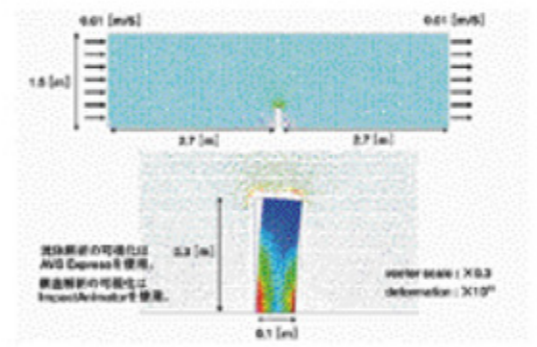


ワイヤーフレーム表示例



境界条件設定パッチ表示例

①:REVOCAP_Mesh表示例



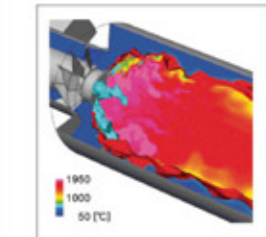
②:REVOCAP_Coupler解析例

マルチフィジックス流体シミュレーション

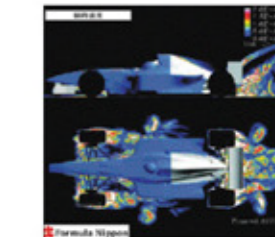
燃焼、混相流、化学反応、輻射を伴う流れの連成解析を高速かつ高精度に実現!

FrontFlow/redは非定常な乱流現象を精度よく扱う手法であるラーゼ・エディ・シミュレーション(LES)をベースに開発され、マルチフィジックスな連成問題の実用的シミュレーションを実現するソフトウェアです。これまで燃焼器内部の火炎挙動予測(①)、フォーミュラカーの大規模空力解析(②)、合流管路流れ等の分野で実績があります。過酷な設計開発環境を強いられる産業界での実用に耐えうる計算科学ソフトウェアの実現に向けて、パソコンからスーパーコンピュータ(東大SR11000、地球シミュレータなど)までシームレスに対応できるスケーラビリティを確立することにより、分散メモリ数百以上のノードを用い、1億以上の非構造格

子で効率的な並列解析も実現しました。今後、連成計算機能をより強化し、混相流と輻射に関する大規模実証計算も開始する予定です。



①:Flemelet-LESモデルによる燃焼器燃焼火炎の実証例(温度コンタ図)



②:フォーミュラカーの空力特性評価解析。約1億2千万要素、解析には地球シミュレータ上で100ノード/800CPUを利用した。96.4%のベクトル化率(並列化率99.88%)を達成した。図は瞬時の速度分布を示す

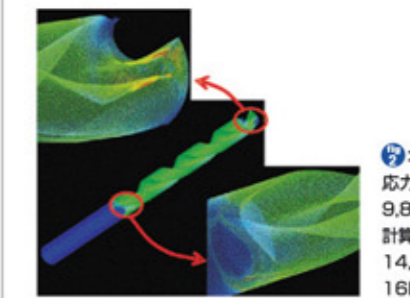
ハイエンド計算ミドルウェア(HEC-MW) 援用構造シミュレーション

170万節点をPC4台で応力解析、汎用プリのデータ/並列Windows/大規模分散ノード環境をサポート!

並列構造解析ソフトウェアFrontSTR(フロントスター)は、大規模分散ノード環境への対応を考慮した有限要素解析ミドルウェアHEC-MWを用いて開発され、分散メモリ数百以上のノード数でも効率的な並列解析が可能です。ソリッドおよびシェル要素による弾性静解析・動解析、弾塑性解析、固有値解析、熱伝導解析の諸機能を有し、汎用プリ、ポストFEMAPのニュートラルデータや汎用可視化ソフトAVSのUCDデータをサポートします(①、②)。また、LinuxおよびWindowsのPCクラスタ環境、スパコン等での動作が確認されています。今後、並列直接法、非線形解析、アセンブリ解析などの諸機能が強化され、革新的汎用連成シミュレーションシステムの構造解析エンジンのひとつとして利用されます。



①:ポンプの固有値解析(311,580節点、1,368,583要素) 計算時間(Xeonクラスタ4PE):固有値2時間15分(30次まで)、後処理3時間(6分x30次)



②:ストレートシャンドルの応力解析(1,706,262節点、9,895,566要素) 計算時間(Xeonクラスタ4PE):固有値2時間14,871 / BPE: 7,366 / 16PE: 4,090(sec)

THEMA 03 都市の安全・環境シミュレーション

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実現へ!

本サブテーマでは、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の狭域市街地で生物化学(BC)兵器テロや火災が発生した場合に災害を防止あるいは低減するため

に利用できるシミュレータの研究開発を行っています。開発する主要機能は仮想ビルディングデータベースシステム、健康影響危険物質の移流拡散、煙の移流拡散および延焼シミュレータ、危険時の避難誘導最適設計です。環境・安全工学者や消防関係者が日常業務としてシミュレータを利用できるようにする