

RSS 21 NEWS VOL.6

Revolutionary Simulation Software

「地球シミュレータ共同プロジェクト」 参加による2年目の成果が出揃う

従来の計算機環境・ソフトでは不可能だった実社会の
複雑・大規模な現象が次々と解明へ！
革新PJ成果の、実用ソフトとしての有効性が実証される

革新プロジェクトで開発中のソフトウェアは、PC(クラスター)~ハイエンドスパコンまでの幅広いハード環境に対して適用可能で、かつ実用的であることを特徴としています。本プロジェクトの一環として参加している「地球シミュレータ共同プロジェクト」では、特にハイエンドコンピュータ環境におけるソフトウェアの実用性・有効性を検証することを目的に推進し、今年度は2年目に当たります。今年度のねらいは、ものづくりイノベーション力の強化や健康・快適な生活の実現という社会的課題の解決に貢献できる新しい知見の創出をめざして次の3分野、5テーマを採り上げて推進して来ました。

(1)デジタルエンジニアリング分野(フォーミュラカーの非定常空力解析 / 流体騒音解析 / 大規模産業機械の高

精度構造解析)、(2)ライフサイエンス分野(タンパク質の大規模解析)、(3)ナノテクノロジー分野(新材料特性解析)。

従来のコンピュータ環境・ソフトウェアで成し得なかった主な成果として、高速車の動的姿勢変化に伴う非定常空力特性、ファンから発生される乱流騒音発生メカニズム、光受容体タンパク質の励起状態、などに関する解析が実現でき、上記の社会的課題克服のベースになる有用な知見が得られつつあります。本誌にそれらの具体的内容を紹介しています。このように、革新プロジェクトで開発するソフトウェアは、地球シミュレータを始めとするハイエンドコンピュータ環境においても極めて実用性の高いものであることが実証されました。

01 フォーミュラカーの非定常空力解析～定常空力から非定常空力評価へ～

非定常空力特性の 高精度予測にメド！

従来の風洞実験では予測が困難な急な風向や車両姿勢変化に伴う非定常空力を、大規模LES解析により予測する手法を開発しています。本年度は、フォーミュラニッポン利用車体のLOLA B03/51の解析を行い、風洞実験値と比較して車両に

作用するダウンフォースを1%程度の誤差で予測することに成功しました。また、非定常空力評価に向けて、非定常特性に大きな影響を与える車両周りの乱流渦挙動の再現性について詳細な検討を行いました。この分野で高い計測実績を有するマツダ(株)にご協力頂くことで、市販4輪車を対象にFrontFlow/redによる大規

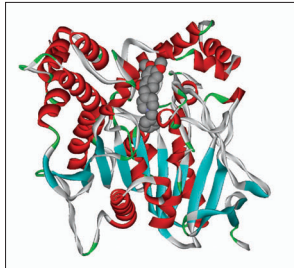
模LES解析を行い、その有用性を確認しました。

02 タンパク質の超高速 大規模電子状態解析

500残基を超えるタンパク質の 電子相関を考慮した電子状態計算が実用的に!

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グループとエーザイ株式会社は共同で、フラグメント分子軌道(FMO)法プログラムABINIT-MPを用い、抗アルツハイマー型認知症薬のターゲットとして重要なアセチルコリンエステラーゼとアリセプト(一般名:ドネペジル)の相互作用解析を行いました。地球シミュレータ128ノード(1024プロセッサ)を用い、532残基+アリセプト(原子数:8,409,原子軌道数:46,831)のFMO-MP2/6-31G計算を3.0時間で実行し、van der Waals相互作用などいくつかの重要な相互作用が示唆されました。これは、地球シミュレータを用いた500残基を超えるタンパク質の電子相関を考慮した電子状態計算の有用性と実用性を示しており、創薬分野にも大きく貢献することが期待されます。

アセチルコリンエステラーゼ-アリセプト複合体構造(PDB ID: 1EVE, CPKモデルがアリセプト)



03 大規模産業機械 の精度構造解析

1億自由度の応力解析 / Windows ノートクラスタ解析!

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構造解析ソフトウェアです。並列FEMミドルウェアHEC-MWを用いて開発されており、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ています。図1は1億自由度ポンプモデルの自重解析結果です。この解析は、Itanium2(1.4GHz)のLinux PCクラスタを32PE使用し約27時間(CG反復 約1万回)で実施されました。データ構造が局所化されているため、1億自由度という問題規模にもかかわらず、総メモリ120GBという比較的少ないメモリ容量での解析が可能となっています。図2はWindows ノートクラスタによる解析の様子です。省スペース性、Dual Coreや有線/無線LANのサポートなどの特長を生かすことによりオフィス環境でのHPCが実現できます。

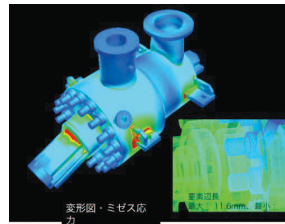


図1 1億自由度ポンプモデルの自重解析(36,728,129節点、26,289,770要素、四面体2次要素)

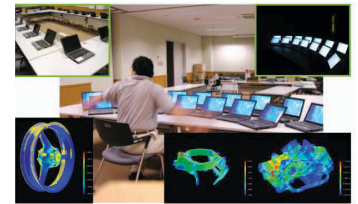
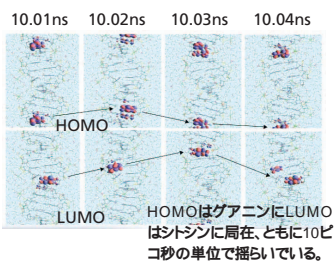


図2 WinノートPCクラスタによるFrontSTR並列計算

04 DNAの電気伝導 機構の解明に向けて

DNA利用のバイオ素子の可能性を探る!

第一原理電子状態解析プログラムPHASEを用いて水中DNAの電子状態を解析しました。GC-10塩基対からなるDNAが水2000分子中にある系を考慮しました。古典MD計算を実行して、10ピコ秒毎の水中DNA構造を複数サンプリングして、電子状態計算を行いました。その結果、(1)真性DNAは3eV程度のエネルギー・ギャップをもつワイド・ギャップ半導体で常温では電気伝導を示さないこと、(2)HOMOはグアニンに、LUMOはシトシンに局在し、ともに10ピコ秒の単位で揺らいでいること、(3)ドーピングや光励起などでキャリアを発生させれば、伝導性を持つ可能性があること、(4)キャリアの速度は1,000cm/sec程度であること、などを明らかにしました。この結果は、DNAをナノサイズ導体として利用する可能性を示しており、DNAの自己組織化などの優れた特性と組み合わせることにより、次世代新機能バイオ素子への展開が期待されます。



05 マルチフィジックス流体 シミュレーション

軸流ファンから発生する騒音の高精度予測を実現!

FrontFlow/Blue(FFB)は乱流を精度良く解析できるラージ・エディ・シミュレーション(LES)に基づく流体解析ソフトウェアであり、主な適用分野として、乱流騒音の予測が挙げられます。本研究開発では、軸流ファンから発生する騒音を予測するため流体音響連成解析を実施しました。連成解析では、はじめに音源であるファン動翼表面の圧力変動を予測するため、ファン内部の流れ解析を、FFBにより実施し、その後音響解析を実施します。予測した騒音スペクトルを実験値と比較した結果、よく一致することが確認できました(図1)。このようなシミュレーションでは、音源と音場の因果関係を明らかにすることにより(図2)、騒音発生メカニズムの解明や主要な音源の特定が可能です。今後、この予測技術がファンの低騒音設計に貢献できると期待されます。(日立製作所との共同研究)

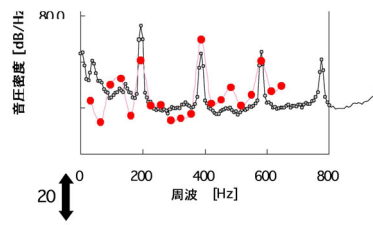


図1 騒音スペクトルの実験値との比較



図2 19.4 [Hz]における音源と音場

NEDO技術開発事業 にてFrontFlowの応用成果

固体高分子燃料電池の技術課題であるガス拡散層のフラッディング現象の予測・制御に向けて大規模2相・反応流動シミュレーションを実現する

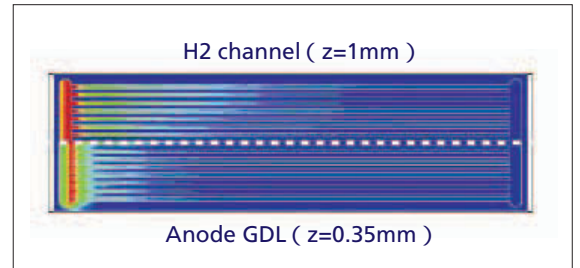


図 1 PEFC単層モデルのH2分布(上:アノード流路、下:GDL層)

FrontFlowを基盤に固体高分子燃料電池シミュレータの開発

本プロジェクト成果である次世代流体解析システムFrontFlowを基盤として、NEDO技術開発事業公募研究「固体高分子形燃料電池の流動・物質拡散数値シミュレーションの研究開発」(大島教授・北海道大学)において、固体高分子形燃料

電池(PEFC)内部の熱流動、電場、化学反応を連成した実機3次元モデルの大規模複合シミュレーションを可能とする流動解析ソフトウェアが開発された。今後は、特にPEFCの重要な技術課題であるガス拡散層のフラッディング現象の予測・制御に向けて、多孔質ガス拡散層のマイクロ構造を考慮した2相流動シミュレーション

モデルやその効率的な数値解析手法の開発を進めるとともに、実機セルを用いた実証実験との比較検証を充実して燃料電池実用化に有用な数値シミュレーション技術の確立を図る。また、開発したソフトウェアの実用化も目指しており、ご関心の企業、大学などからの参加協力を期待している。(大島伸行)

アドバンスソフト(株):研究成果を事業化(第2回)

アドバンスソフト(株)は、「革新的ソフトウェア開発プロジェクト」にその開始時より参加、ソフトの開発と共に、その成果を事業化して、プロジェクト終了後も一般のユーザの皆様安心して使って戴ける様、責任を持って継続的な保守・改良を担当しています。現在では着実に成果を上げつつあり、文部科学省等関係先からも高い評価と期待が寄せられています。

I 次世代流体解析ソフト Front Flow

アドバンスソフト(株)では、プロジェクトの成果をもとに実用的ソフトウェアパッケージとして、販売を開始しています。本号より数回に亘り、その主なソフトウェア群をご紹介します。Advance / FrontFlowは、LESによる高精度な乱流解析、大規模解析に対応した流体解析用ソフトウェアパッケージです。これには燃焼・化学反応予測を得意とする、(red)と、水力機械の性能評価予測を得意とする(blue)の2種類があり、各々豊富な計算事例を備え、産業界で実用に供せられています。アドバンスソフトの商用ソフトは、プロジェクト開発ソフトをベースに、よりユーザーフレンド

リーな周辺機能を追加するとともに利用上の各種サービスも提供しています。図1:解析事例1)

II アドバンスソフトフェア開催のお知らせ

革新プロジェクトは平成19年度でいよいよ終了となります。アドバンスソフト(株)はプロジェクトの成果の事業化を担う企業として、広く社会にご紹介、ご理解を頂く為、当社の事業方針等をご紹介します。「アドバンスソフトフェア」を、本年7月に開催致します。本フェアでは、評論家:田原総一郎氏の講演や最新のソフトウェアのデモ展示等懇親会も計画しております。是非ご参加下さいませようご案内致します。

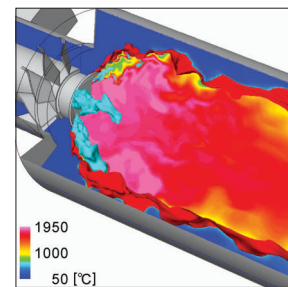


図1:ガスタービン燃焼器非定常解析(三菱重工業株式会社様、北海道大学大島研究室様 提供)

アドバンスソフトフェア

日時 / 場所
2007年7月6日(金)丸の内マイプラザ(明治生命館)
内容
「ソフトウェアパッケージ」デモ表示
特別講演「田原総一郎」懇親会など
(プログラム内容は予定で、変更になる場合もありますのでご了承ください。)

H18年度シンポジウム・ワークショップの報告

第5回ワークショップ報告 「生命現象シミュレーション」

平成18年10月27日、東京大学生産技術研究所大会議室において、第5回ワークショップ「生命現象シミュレーション」が開催され、サブテーマである器官・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、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、及びタンパク質-化学物質相互作用マルチスケールシミュレーションの研究成果が報告されました。またCHPI Instituteの西尾元宏先生をお招きして特別講演を行いました。参加者は100名を超え、実験系の方からも熱心な質問や意見が交わされました。

第6回ワークショップ報告「共通基盤」

平成18年12月26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」プロジェクトの第6回目のワークショップ「共通基盤」が開催され、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モデルウェアについて研究成果が報告されました。特別講演では、デスクサイドスーパーコンピュータについて、同志社大学工学部助教授/知的財産センター副所長の廣安知之先生から、昨今のHPCの動向や、Windows HPCコンソーシアムの活動内容

についてのご説明がありました。大雨にも関わらず、70名を超える方々にご参加頂き、活発な質問や意見が交わされました。



第5回特別講演者西尾元宏氏



第6回会場の様子

スパコン産業協議会 シンポジウムを開催

スーパーコンピュータ技術産業用協議会(加盟163機関)は12月15日、東大生研コンベンションホールで、東大生研計算科学技術連携研究センター他の協賛を受け、シンポジウムを開催しました。協議会の活動報告、小柳工学院大学教授の記念講演の後、産学代表者による「スーパーコンピューティング技術に産業界が求めるもの」と題したパネル討論が行われ、シミュレーション技術

の必要性、今後の発展への期待などについて活発な議論が行われました。懇親会では、文科省、理研等の来賓挨拶もあり和やかな交流が行われました。



図1 中村道治共同委員長挨拶



図2 小柳義夫教授記念講演



図3 パネル討論

H18年度シンポジウム・ワークショップ開催予定

2	26	「革新的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8回) - 都市の安全・環境 -	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	東京大学生産技術研究所 コンベンションホール
---	----	---	-----------------------------------	---------------------------

編集後記

新年明けましておめでとうございます。今年の冬は昨年的大雪に比べ格段に雪は少なく、大変過ごしやすい日々です。しかし毎日のテレビでは残酷な事件が次々に報道され、目を覆うばかりです。日本に明るい未来はないのかと心配しきります。革新プロジェクトのメンバーは現在、今年度成果の取りまとめに大忙しの状況です。今号より、革新プロジェクトで開発されたソフトウェアを多くの方々に使っていただけるように記事を組みましたのでよろしくお願いいたします。

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