

RSS₂₁ NEWS VOL.7

Revolutionary Simulation Software

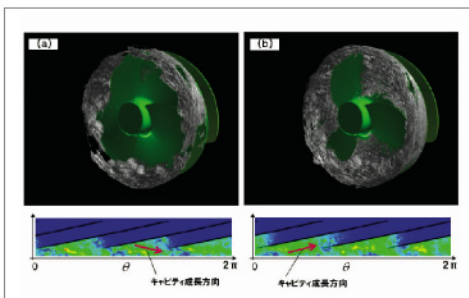
2年目の主要成果が出揃う 最終年度に向け、さらに推進を加速

各チームは主要機能のソフトウェアの開発を終了し、本格的な実証解析を実施中。最終年度はソフトウェアの完成と成果の普及に注力

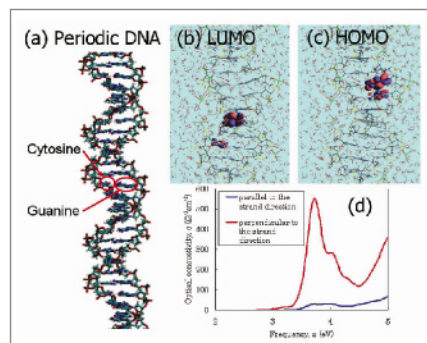
革新プロジェクトも2年目を終了し、あと1年を残すのみとなりましたが、ソフトウェアの研究開発は、総じて予定どおり、あるいは、予定を上回るペースで進捗しております。戦略プロジェクトから継続しているテーマに関しては、ソフトウェアの主要部分の開発はほぼ終了しており、革新プロジェクトから研究開発に着手したテーマに関しても、ソフトウェアの中核部分の開発は終了しております。各チームでは計算のさらなる高機能化・高速化などに取り組むと同時に、産業界と強力に連携し、ソフトウェアの革新性・有効性を示すための種々の実証解析に取り組んでおります。特に、本年度はプロジェクトで開発している代表的なソフトウェアに対して、地球シミュレータを用いた大規模な実証解析を数多く実施し、従来の解析では得られなかったような種々の知見が革新ソフトを使用することによ

り得られることが実証されました。

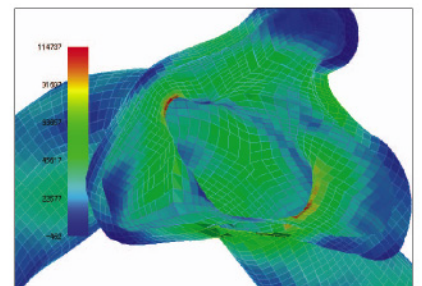
さて、本プロジェクトも来年度はいよいよ最終年度を迎えます。来年度は成果の普及により一層注力する所存です。具体的には、開発したソフトウェアの徹底的なテストの実施、マニュアル類などドキュメント類の整備・改良、他の市販ソフトウェアとのインターフェースやユーザインターフェースの整備・改良などをとおして、汎用ソフトウェアとしての完成度を高めるとともに、強力な産学官連携体制の下、さらに多くのの実証解析を実施し、引き続き、ソフトウェアの革新性・実用性を示していくつもりです。これらの成果は、本年7月に開催を予定している、第2回シンポジウムなどの機会を利用して、広く世の中にアピールするとともに、分野毎のソフトウェア利活用の実践的事例集として取り纏め、出版する予定です。これらの取り組みに対して、来年度も引き続き、関係各位のご理解をご協力を賜りたく、お願い申し上げます。



①:インデューサのキャピテーション流れの解析



②:水中におけるDNAの電子状態と光伝導特性



③:血流・血管壁連成解析から得た脳動脈瘤の血管壁における応力分布

平成18年度主な研究成果

Thema

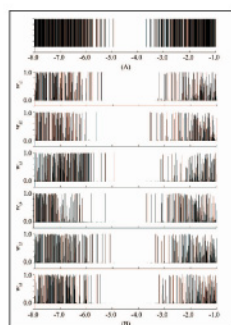
01

生命現象シミュレーション

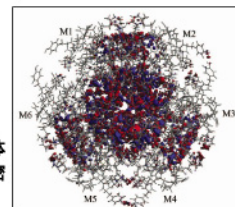
創薬・バイオ新基盤技術開発へ
に向けたタンパク質反応全電子
シミュレーション306残基インスリン6量体の
詳細な電子構造が明らかになる

糖尿病の治療にはインスリン注射がよく用いられますが、6量体、2量体が安定となり、注射をしてから薬効のある単量体へと解離して効くまでに時間がかかってしまいます。当グループはインスリン6量体の詳細な電子構造を解析することに成功し、タンパク質凝集に伴う分子軌道の複雑な非局在性を明らかにしました(④)。タンパク質の電子は海のように豊潤で、構造が安定になるよう広い範囲から電子が移動しています(⑤)。最も大きな割合を占めるクーロンエネルギーも大幅に変わります。実際、6量体から3つの2量体

に解離するのに必要なエネルギーは本方法では450.5 kcal/mol、古典論では248.8 kcal/mol、2量体から2つの単量体に解離する場合はそれぞれ659.7、507.7 kcal/molと見積もられました。古典論は解離エネルギーをだいぶ過小評価しており、インスリンの解離を正しく解析できないでしょう。本解析によって単量体が安定な超々即効性のインスリンが設計できるかもしれません。



④:6量体(A)と単量体の
軌道エネルギー分布
(B縦軸は局在度)



⑤:6量体と単量体
モデルの電子密
度分布の差

タンパク質・化学物質相互作用
マルチスケール
シミュレーション製薬企業への普及進む FMO-MP2法による
分散力計算の有用性が明らかに

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では、平成18年度は次のような開発を行い、実用化へ向けて大きく前進しました。

フラグメント分子軌道(FMO)法プログラムABINIT-MPを用い、地球シミュレータ512ノード(4096プロセッサ)使用し、ベクトル化率97.68%、並列化率99.98%、実効性能5.1TFLOPSを達成しました。また、赤色蛍光タンパク質(DsRed)のMLFMO-CIS(D)法による高精度励起状態計算(RSS21 NEWS VOL. 5)や、アセチルコリンエステラーゼのFMO-MP2計算(RSS21 NEWS VOL. 6)

を行い、地球シミュレータを用いたタンパク質の大規模電子状態解析の実用性を示しました。

アルゴリズムの改良によるFMO計算の効率向上と、バッファー領域を導入した部分構造最適化法の開発を行いました。また、QM(FMO)/MM(XUFF)法へ向けたExtended Universal Force Field(XUFF)の改良、及び統合実効環境BioStation Launcherの改良を行いました。

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 先端ソフトウェア産業応用部会 試計算・実証WG(バイオ分野)では、共通の実証課題に取り組み、ソフトウェアの有用性の検証、及びノウハウの共有を行っており、創薬の現場におけるFMO-MP2法による分散力計算の有用性が明らかになっています。また、キッセイ薬品工業株式会社/キッセイコムテック株式会社から、SPRING-8を用いて解析されたタンパク質-阻害剤複合体のFMO法による解析が、日本薬学会第127年会(S15-3)で発表される予定です。

器官・組織・細胞マルチスケール
・マルチフィジクス
・シミュレーション

循環器総合シミュレータ

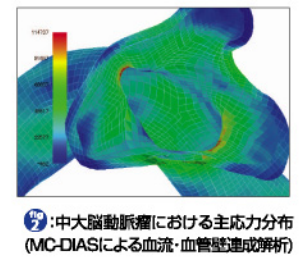
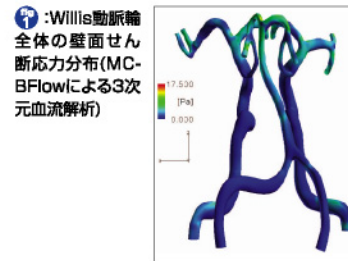
M-SphyR Circulationの主要コンポーネントが完成

脳血管障害をはじめとする循環系疾患は、血管病変によって引き起こされ、発症・進行には血流の力学的・生理学的作用が重要とされます。本プロジェクトでは、器官から組織、細胞と異なるスケール

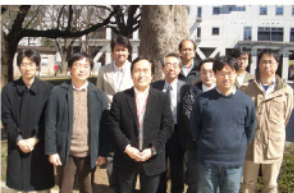
ルにわたる様々なメカニズムの現象を解析するため、循環器マルチスケール/マルチフィジックス・シミュレータM-SphyR Circulationを開発しています。

M-SphyR Circulationは医用画像から血管表面形状を3次元的にモデル化するMC-Modeling、血管内の血流状態を3次元的に解析するMC-BFlow、血管と血流の相互作用を解析するMC-DIASの3つの主要プログラムから構成されています。さらに末梢血管網の影響を模擬する1次元・0次元解析モデルや血流による物質輸送解析モジュールを実装し、マルチスケール/マルチフィジックス解析を実現しました。

本年度は①1次元・0次元解析モジュール、物質輸送解析モジュールの実装、②ALE有限要素法、強連成FSI、GMRESソルバーの実装、③GUI等ソフトウェア全般の改善、を行いました。



Thema 02 マルチスケール連成シミュレーション

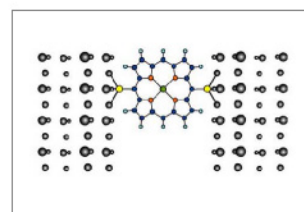


ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション

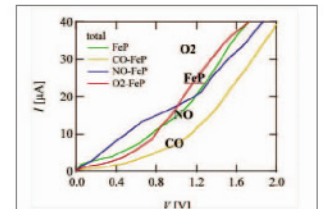
ナノ物質の電気伝導特性の解析すすむ —分子機能デバイスの可能性を探る—

有機分子は典型的なナノ物質であり半導体と大きく異なる新規な電子物性を有します。無機・有機複合体等の形態で有機分子の構造・配置をナノ領域で制御・創成すれば、その新規な物性を機能化し複合化できる可能性があり、分子エレクトロニクス、太陽電池等の様々なデバイス応用の道が拓かれます。鉄ポルフィリン分子は重要な生体分子であり、分子中央にある鉄原子は分子認識、

特異性等の重要な働きを有しています。我々は、量子伝導解析プログラムASCOTを用いて金電極に挟まれた鉄ポルフィリン分子の伝導特性を解析し、CO, NO, O₂等の2原子分子が鉄原子に吸着すると電流・電圧特性に大きな変化が現れることを明らかにしました。この結果は有機分子を利用した吸着分子識別の可能性を示唆するものです。今後、量子伝導解析プログラムを用いた分子機能デバイス探索への展開が期待されます。



①: 金属極に挟まれた鉄ポルフィリン分子



②: 鉄ポルフィリン分子の電流・電圧特性、及び吸着分子 (CO, NO, O₂分子) に対する依存性。



革新的汎用連成解析シミュレーション

大規模並列計算を前提とした分離型解法による 連成解析システムREVOCAPを開発

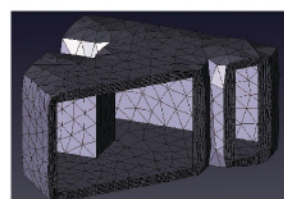
本サブグループではREVOCAPシステムとして、以下のソフトを開発しています。

REVOCAP_MeshおよびREVOCAP_Visualは、CADデータからのメッシュ作成から結果の可視化までの一貫した処理が可能な連成解析用プレポストプロセッサで、今年度は新たに、流体解析用のメッシュ(④:三角柱要素)に対応しました。

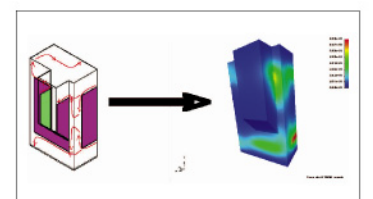
REVOCAP_Couplerは、FrontFlow、FrontSTR等の大規模並列計算ソルバを接続し、分離型アルゴリズムにより大規模な並列の

連成解析を実現するためのソフトウェア及び通信ライブラリ群、インタフェースモデラから構成されています。ソルバおよびカプラー間ではソケット間通信を採用することにより、プロセス間通信の効率化を図っています。REVOCAP_Magneticは大規模並列磁場解析ソルバであり、今年度は新たに永久磁石解析機能と大規模解析機能が追加されました。計算の一例を⑤に示します。

また、実践的課題をターゲットとしてREVOCAPシステムの実証を進めています。



④: REVOCAP_Meshによる境界層メッシュ作成例



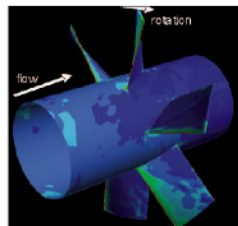
⑤: REVOCAP_Magneticによる解析例 (渦電流の影響による温度分布)

マルチフィジックス 流体シミュレーション

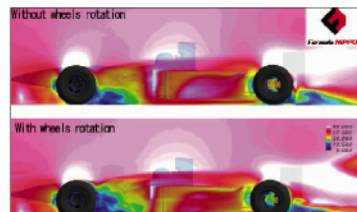
ファン空力騒音やフォーミュラカー 空力の高精度予測を実現

ものづくりの設計現場では、流体を含む様々なマルチフィジックス現象の予測技術が求められています。本研究グループでは、マルチフィジックス現象を高精度かつ高速に解析する流体解析ソフトウェアFrontFlowを開発しました。FrontFlowは設計現場において、高精度予測が求められる騒音、振動、反応、熱輸送、混相流等のマルチフィジックス現象の解析機能を提供します。FrontFlowを実際の製品に適用した例を図①、②に示します。ファン空力騒音解析(①)では、騒音スペクトルの定量予測や主要な音源の特定が

可能であることが示されました。フォーミュラカー空力解析(②)では、タイヤの回転や車両と路面との相対速度を考慮することで、より実車走行時に近い物理条件を与え、高精度な空力予測を実現しました。本研究グループでは、自動車、電機、航空宇宙、重工業等の産業技術の向上に寄与する成果を挙げています。ものづくりの設計現場ではマルチフィジックス現象の高精度予測に対するニーズが今後も拡大すると予想され、FrontFlowのさらなる普及を目指します。



① :ファン空力騒音の音源分布予測
結果:日立製作所との共同研究



② :フォーミュラカー空力解析(上:タイヤ回転なし、下:タイヤの回転あり)

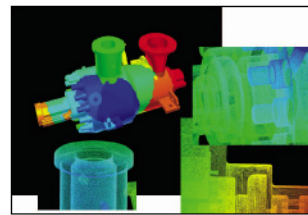
ハイエンド計算ミドルウェア (HEC-MW) 援用構造シミュレーション

詳細な解析による新しい現象の解明を目指した構造 解析プログラムFrontSTRの1億自由度の計算を実現

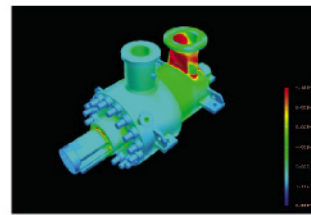
本プロジェクトにおいて開発する構造解析プログラムFrontSTRの行列ソルバーは、平成10年から14年に実施された科学技術振興調整費「高精度の地球変動予測のための並列ソフトウェアに関する研究」の成果の1つであるGeoFEMプログラムのものをベースとして、その機能の高度化をめざしているが、平成18年度の活動にて、数値的不安定性を調査し、前処理改良とベクトル化を強化した行列ソルバーを開発しました。これをFrontSTRに組み込み、実際に1億を超える自由度のモデルで計算しその高速性を確認しています。今後更に行列解法を繰り返し行うような解析(非線形

解析、固有値解析)に適合するプログラムを開発し、そして現在の商用プログラムでは解析できない規模の解析を行う予定です。(例:圧力ポンプの固有値計算、ゴム材の非線形解析)。地球シミュレータでのチューニングも実施しており、通常マシンより30倍の高速化が可能です。

一方、平成18年度に実施したFrontSTRの機能拡張により、アセンブリ解析機能、材料非線形解析機能を実装しました。今後それらの機能を用いた実機レベルでの大規模実証計算を行うことにより産業界における有用性を示していく予定です。



③ :36,728,129点の四面体2次要素メッシュ



④ :並列可視化プログラムによる解析結果(応力コンター図)

Thema

03 都市の安全・環境シミュレーション

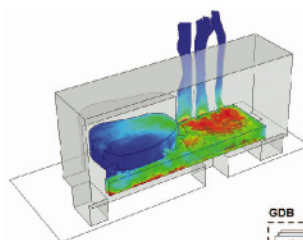
都市の安全・環境 シミュレーション

都市の安全・環境シミュレータ EVE SAYFAの機能強化を実現

都市の安全・環境グループでは、火災や生物化学兵器テロが発生した場合に災害を防止あるいは低減するためのシミュレーションの研究開発を行っています。

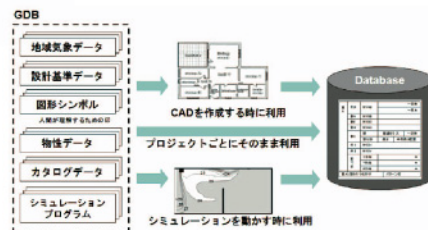
今年度は、(1)オブジェクト指向のCADソフトを用いた仮想ビルディングデータベースシステムの構築、1次元及び3次元モデ

ルをコントロールする方法に関する研究開発を行い、(2) 昨年度に開発した空気流動計算に追加する機能、熱・火災解析に対する2層ゾーンモデル、3次元モデルとの連成解析モデルに関する研究開発を行い、(3) 煤の効果を含む放射計算、消火モデルで使用する液滴追跡計算、熱分解モデル、シャッター開閉、ガラスや壁の燃え抜け、マクロモデルと連成してLESの流入変動風の生成に関する研究開発を行い、(4) 既存の避難モデルの導入検討を行いました。また、基本的実証例題による機能検証と大規模な実証計算の準備を行いました。



④: LESによる高精度3D火災シミュレーション

④: 仮想ビルディングデータベースシステム



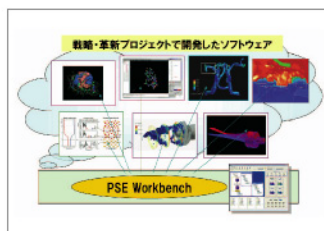
Thema 04 共通基盤技術

全体系最適化シミュレーションプラットフォーム

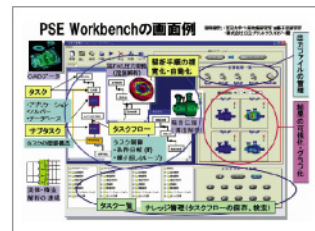
大規模シミュレーションソフトウェアを最適に選択して、目標とする解析を実現する環境を開発

PSE Workbenchは、戦略・革新プロジェクトで開発された大規模シミュレーションソフトウェアを最適に選択することで、目標とするシミュレーションを実行できる環境を提供しています(④)。解析のプロセスを可視化したタスクフローにより、試行錯誤により得られたノウハウを保存・再利用でき、テンプレートとして活用することができます(④)。今年度の開発成果としてシミュレーション過程で使われるデータや変数をパラメタとして利用できる最適化機能と、モ

デルエディタを持つ制御系機能により、シミュレーションを動的に制御することも可能になりました。また、PSE Workbenchと様々なソフトウェアを組み合わせた統合システムを、効率よく開発するためにプラグイン機能を備えました。今後は、実証例題を通じて、実際の開発・設計現場における作業の効率化に貢献するために、機能や操作性の更なる充実を目指しています。



④: 戦略・革新ソフト実装したPSEWorkbench



④: タスクフローを使った騒音解析の例

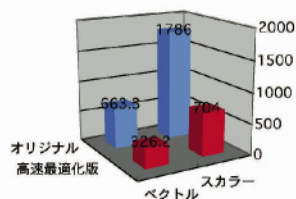
平成18年度地球シミュレータ用ソフトウェアの高速最適化

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

高速最適化グループでは、ハイエンドコンピューティングの効果的な利用と高度な計算科学の発達のために、戦略的革新ソフトウェア群に対し、ハイエンドコンピュータ環境に適合、且つ高速にシミュレーションを駆動させるための高速最適化、および、ユーザの解への到達時間を短縮する共通基盤的なソフトウェア技術の研究を行っています。18年度は、乱流シミュレーション・ソフトウェア「FrontFlow」に対して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、(1) コードのプログラミングの思想を変えることによるロードとスト

ア処理の削減と要素のリオーダリング法の組み合わせ、(2) ロードストアと演算比の改善とロードの効率化、(3) バンクコンフリクトの解消です。これらの手法の開発により、スカラーマシンとベクトルマシンについて完全に同一のプログラミングを採用でき演算性能を2倍以上に拡大しました。

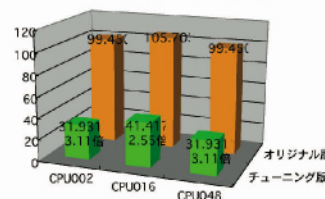
性能向上(主要オプション: 除解)



	スカラー	ベクトル
オリジナル	1786	663.3
高速最適化版	704	326.2

④: 単体性能向上結果

並列性能向上(スカラーマシン)



	CPU002	CPU016	CPU048
チューニング版	31,931.4	41,417.7	31,931.4
オリジナル版	99,450.9	105,703.9	99,450.9

④: 並列性能向上結果(スカラーマシン)

ワークショップ報告

第7回マルチスケール 連成シミュレーション ワークショップ

平成19年1月24日、「革新ソフト」プロジェクト第7回目のワークショップ「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」が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開催されました。このワークショップでは、ナノシミュレーションの他、流体解析、構造解析、磁場解析、およびマルチフィジクス連成解析といった広範なテーマについてご報告させていただきました。空気も乾燥し、体感温度も低い中、多数の方にご参加いただき、ありがとうございました。産業界からの注目の高いテーマが中心であることから、ワークショップ最後の質疑応答では、当初設定の時間が足りなくなるほどの活発な質問やご意見をいただきました。



第8回都市の安全・環境 シミュレーション ワークショップ

平成19年2月26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、「RSS21プロジェクト 第8回 ワークショップ(都市の安全・環境シミュレーション)」が開催されました。まず、スイスのAlois Schaelin博士と消防庁の山田常圭先生からそれぞれヨーロッパと日本におけるCFDを活用した火災安全評価の特別講演がなされました。その後、これまでの研究開発成果が報告され、貴重なご意見、ご指導を頂くことができ、大変有意義なワークショップとなりました。100名を超える方々にお越し頂き、多くの方々に関心を寄せて頂いていることを強く実感することができました。



地球シミュレーター 利用報告会

平成19年1月26日、27日、海洋研究機構横浜研究所三好記念講堂で、「地球シミュレーター利用報告会」が開催され、「共同プロジェクト」参加による成果が加藤千幸プロジェクトリーダーにより報告されました。全48件の共同利用成果発表が終日行われる中、15分という大変限られた時間での発表でしたが、本プロジェクトで開発した世界トップレベルのソフトウェアが地球シミュレーター上に良好に移植され、十分な性能を発揮することが示され、地球シミュレーターを用いた大規模解析の有用性の実例が紹介されました。共同プロジェクト2年目となる本年度はサブテーマごとに産業界各方面との連携が進み、実用レベルでその有用性が示されていることが、共同利用課題選定委員や計画推進委員の先生方から高い評価を受けると共に、今後のさらなる発展を期待されているという印象を受けました。

第2回「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」 シンポジウム開催のお知らせ

7月12日(木)～13日(金)の二日間(会場: 生研)、第2回「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」シンポジウムを開催いたします。基調講演は評論家の立花隆氏、招待講演はものづくりへ貢献する

シミュレーション、防災に関する安全安心シミュレーション、創業に貢献するシミュレーションなどに関して、産業界の現場からのご講演を予定しております。また2日目には、各サブテーマの成果発表、利用者側から

の実証例題に関する報告など盛りだくさんに準備しております。詳細が決まりましたらホームページにてお知らせ致しますので、ご予約おき下さるようお願いいたします。

編集後記

今号は今年度の主な成果をまとめたものです。また各サブテーマ毎のメンバーの写真を掲載しましたが、事務局よりの急なお願のため写真に間に合わなかった方もいらっしゃいます。ご容赦ください。120名を超える多数のメンバーでソフトウェアの開発・実用化にむけて取り組んでおりますので今後共ご指導・ご支援よろしくお願致します。

■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繫研究センター
〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1