

## ● 成果報告会

## “戦略ソフト”プロジェクト成果報告会を盛大に開催

さる、7月29日東京大学生産技術研究所主催で、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト成果報告会が開催されました。文部科学省ITプログラムの一環として2002年度より5ヶ年計画で開始されたプロジェクトは、前倒しに成果を達成し、4年目を迎えた今年度で終了します。本プロジェクトでは、世界最高水準の実用的シミュレーション・ソフトウェアの開発を進めており、一般社会からも高い注目を受けております。

成果報告会は、前田所長の主催者挨拶にはじまり、文部科学省研究振興局の松川課長の挨拶では、「文部科学省は、将来のスーパーコンピュータの展開を視野にいれて取り組むため、平成17年度から開始した“革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発”でも、本プロジェクトで成果をあげた東京大学生産技術研究所を拠点として開始した。」と述べられました。引き続き、3年間のプロジェクトの成果について、各グループリーダーより詳細な報告がありました。

最後に、加藤研究代表から3年間の総括が報告されました。その中で、「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトは、戦略ソフトプロジェクトの成果を継承し、それを発展させるとともに、他のプロジェクトとも連携し、日本の計算科学の発展に貢献していくと締めくくりました。

参加機関は219機関、299名の参加者を迎え盛会のうちに終了しました。



## ● 2005年度シンポジウム・ワークショップ等開催予定

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	主催	開催場所
9	26~28	「次世代スーパーコンピュータとシミュレーションの革新」計算科学技術シンポジウム	A	御殿山ヒルズ ホテルラフォーレ 御殿山ホール
10	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1回)…生命現象シミュレーション	B	東京大学生産技術研究所 大会議室
11	12~18	SC105 展示参加		米国 シアトル
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	B	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	B	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)…マルチスケール連携シミュレーション	B	東京大学生産技術研究所 コンベンションホール

※ A=主催:国立情報学研究所 共催:文部科学省 B=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

## ● 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		pSAN(F-STR)	ナノ 流体・構造(10/28)
11	運営小委員会		ナノ バイオ
12			ナノ 流体・構造
1			ナノ
2	運営小委員会		ナノ 流体・構造
3			ナノ バイオ

戦略的基盤ソフトウェア産業応用推進協議会は、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトのみならず、「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトについても、強固な連携を維持し、新たに開発されるソフトウェアへの応用を強力に推進してまいります。計算・実証WGは、月1回のペースで開催し、また、普及WGでは、公開された最新版ソフトウェアを主にした入門的セミナーの開催も予定しています。

会員募集を随時受付けております。趣旨に賛同いただきご参加下さるよう御願いたします。

申込、お問合せは事務局 (consortium@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp) までお願い致します。

## 編集後記

次世代IT基盤構築のための研究開発プログラムの「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトが6月1日からスタートしました。名前がちょっとややこしいですが、前プロジェクトの成果をもとにさらに新しいテーマ、切り口で研究を開始しました。サブテーマが10、参加人員は120名をこえる大所帯となりましたが、チームワークよく活発な研究開発が進められております。随時成果を発表していきますのでご支援のほどよろしくお願い致します。

## 資料請求お問合わせ先

TEL: 03-5452-6661 FAX: 03-5452-6662 E-mail: office@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp URL: http://www.fsis.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

# RSS<sub>21</sub> NEWS VOL.1

Revolutionary Simulation Software

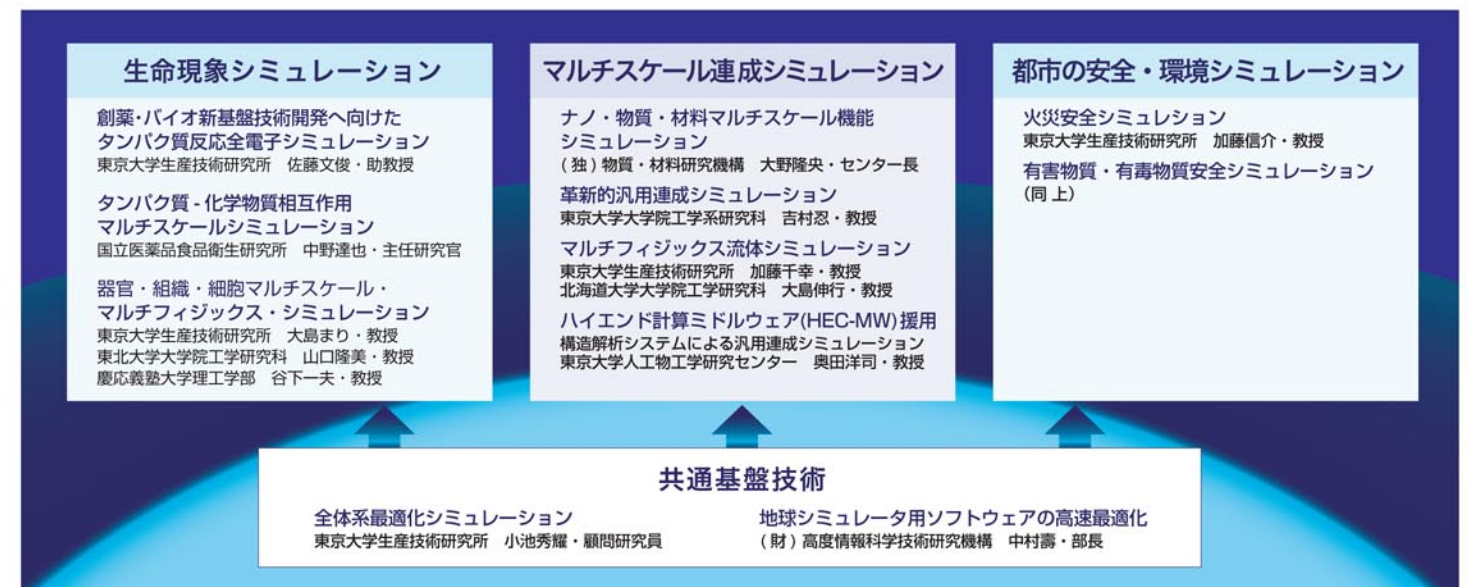
## “革新ソフト”プロジェクトがスタート

## 世界最高水準のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションソフトの開発および普及・事業化を目指して

計算科学は理論・実験に次ぐ第三の方法として、バイオ、ナノ、デジタルエンジニアリングなどの多くの学術・技術分野において今後益々発展するとともに、産業競争力の維持・強化のための重要な共通技術基盤となることが期待されています。このような状況の中、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発プログラムの一環として2005年度から新たに開始された「戦略的革新シミュレーション・ソフトウェアの研究開発」プロジェクトでは、東京大学生産技術研究所が中核拠点となり、2002年度から推進してきた「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの成果をさらに発展させ、マルチスケール・マルチフィジックス現象のシミュレーション技術を核にした、以下の分野における基盤的ソフトウェアの研究開発を推進します。I. 生命現象シミュレーション、II. マルチスケール連成シミュレーション、III. 都市の安全・環境シミュレーション、IV. 共通基盤ソフトウェア(超高速演算ライブラリおよび最適化プラットフォーム)。

特に、「戦略的革新シミュレーション・ソフトウェアの研究開発」プロジェクトでは、産業界や一般社会的の強い要請に応えるべく、「人の循環器系のシミュレーション」、「都市の火災や有毒物質の拡散シミュレーション」ならびに「連成物理現象のシミュレーション」を新たな研究テーマに加えてプロジェクトを推進します。

本プロジェクトの推進にあたっては、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を中核拠点として、総勢120名を超える第一線の計算科学研究者が本プロジェクトに参画し、最先端の実用的シミュレーション・ソフトウェアの開発を実施しています。また、産業界での使用に供する実用的シミュレーション・ソフトウェアの開発にあたっては、製品開発に対するソフトウェアの有効性を実証することが極めて重要です。本プロジェクトでは「戦略的基盤ソフトウェア産業応用推進協議会」を通じた強力な産学官連携体制により、この実証研究を進めております。本プロジェクトでは皆様方からの忌憚りの無いご意見を真摯に受け止め、今後とも開かれた形の研究開発を目指す所存でございますので、ご理解とご支援を頂きたく、よろしくお願ひ申し上げます。



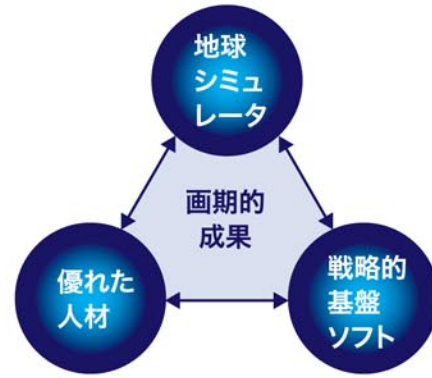
# 「地球シミュレータ共同プロジェクト」に参画

世界最高レベルの、ソフト「戦略ソフト」とハード「地球シミュレータ」が融合へ

## 共同プロジェクトの概要

平成17年度の地球シミュレータ共同プロジェクトにおいて、東大生研計算科学技術連携研究センターから提案のテーマ(代表名: 戦略的基盤ソフトウェアの開発)が採択された。これにより、ソフトとハードの世界最高レベルの技術が融合されることになり、IT分野における我が国の科学技術政策の総合成果が目に見える形で世界に公表できるものとして多大の期待が集まっている。

本共同プロジェクトの取組みは、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発プログラムの一環として平成17年度よりスタートした「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトの最重要施策の一つに位置付けられるもので、次世代産業の革新を担う基本技術3サブテーマと共通基盤技術1サブテーマを設けて推進される。



## 推進体制

**Main Theme**  
**戦略的基盤ソフトウェアの開発**  
 責任者: 東大生研 加藤千幸 教授

<p><b>Sub Theme</b>  <b>フォーミュラーカーの空力評価・設計</b>                  主査: 電通大/坪倉誠 助教授</p> <p>電通大、東大生研、北大、理科大                  JARI、アドバンスソフト                  合計: 10名</p>	<p><b>Sub Theme</b>  <b>タンパク質の大規模電子状態の究明</b>                  主査: 衛研/中野達也 主任研究官</p> <p>国立医薬品食品衛生研究所                  東工大、立教大、アドバンスソフト                  MHIR、NECソフト 合計: 13名</p>	<p><b>Sub Theme</b>  <b>次世代半導体デバイス表面・界面反応の解析</b>                  主査: 物材研/大野隆央センター長</p> <p>(独)物質・材料研究機構、東大生研、東大物性研、金沢大、慶応大、理科大、アドバンスソフト、NEC                  合計: 22名</p>	<p><b>Sub Theme</b>  <b>高速最適化基盤技術</b>                  主査: RIST/中村壽 部長</p> <p>(財)高度情報科学技術研究機構                  合計: 8名</p>
---	--	--	---

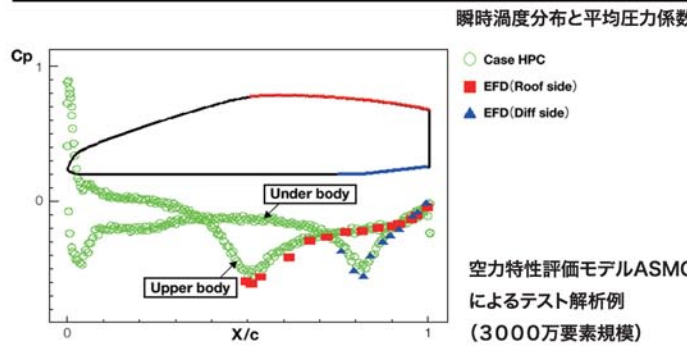
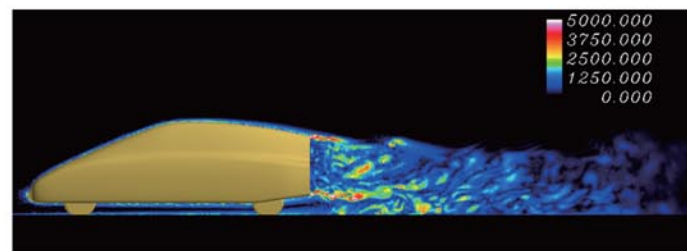
## フォーミュラーカーの空力評価・設計

**目的** 国内産業界で最も過酷な設計開発要件であるフォーミュラーカーの空力特性評価を対象とした、億要素規模の非定常LES解析を実現する。

**研究内容** 次世代流体解析ソフト(FrontFlow)のHPC最適化と空力特性評価に有効な乱流モデル開発を主眼とした全車体周りの流体解析を行う。

**期待効果** 究極の、解析対象・ソフト・ハードの融合による空力予測技術のブレークスルーが実現され、実用的なHPC技術の産業界への移転が可能となる。

**推進状況** 2005年8月より、32ノード(256CPU)を使用したASMO形状によるテスト解析を進めている。



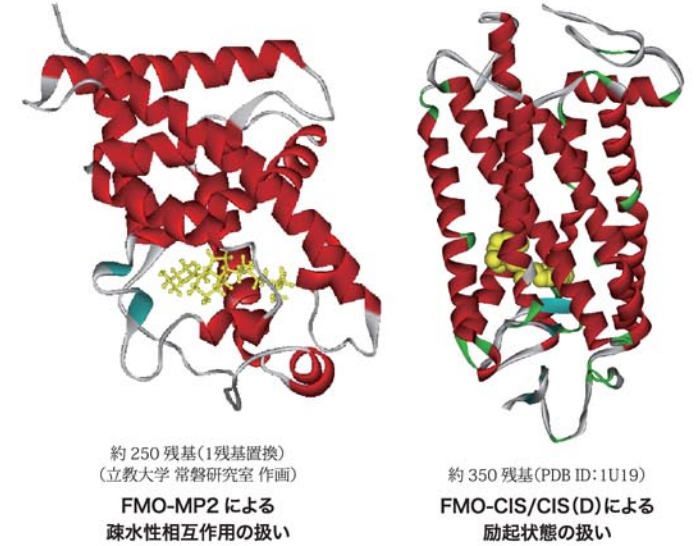
## タンパク質の大規模電子状態の究明

**目的** 数百残基(世界最大規模)のタンパク質の電子状態計算を行い、量子シミュレーションによるタンパク質の機能究明を実現する。

**研究内容** フラグメント分子軌道(FMO)-MP2法によるビタミンD受容体と医薬品候補化合物の相互作用解析及びFMO-CIS(D)法によるロドプシンの励起状態計算を行う。

**期待効果** SPring-8等で構造解析されたタンパク質の量子シミュレーションによる機能解析が実用化され、医薬品分子設計等が飛躍的に加速される。

**推進状況** 2005年9月より32ノード(256CPU)を用いた計算を実行予定である。また、CIS(D)については現在プロトタイプが稼働している。



## 次世代半導体デバイス表面・界面反応の解析

**目的** ドナーやアクセプタなど半導体中の浅い不純物準位の構造、とくにバレー分裂効果を明らかにする。

**研究内容** Si中のAsドナー準位の濃度依存性(濃度0.1%, 0.05%, 0.02%)、帯電効果(D-準位)、ならびに不純物元素依存性(Pドープ)の解析を行う。

**期待効果** 浅い不純物準位の世界初の第一原理計算により、固体物理の教科書に引用(確実)されるとともに、Natureの採択も可能性がある。また、バレー分裂を利用したテラヘルツ波デバイスの実現へ貢献できる。

**推進状況** 2005年9月より、300ノードをもちいたSi5000個中にAs原子1個を含む系の計算を開始した。

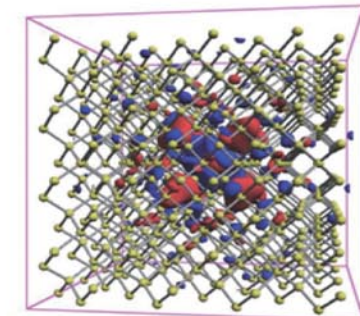


図1. ドナー準位の波動関数

ベクトル化率	99.4%
並列化率 (64ノードでの実行値との比較)	99.94%
性能比	64%

表1. 128ノード1728原子系での実測値

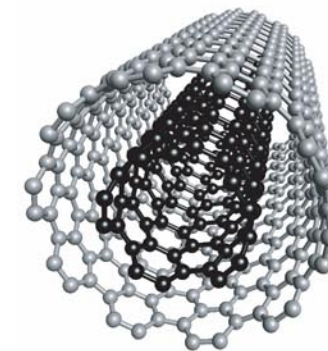
## 高速最適化基盤技術

**目的** ハイエンドコンピュータの効果的な利用を目指し、革新ソフトウェア群を高速最適化する技術開発を行う。

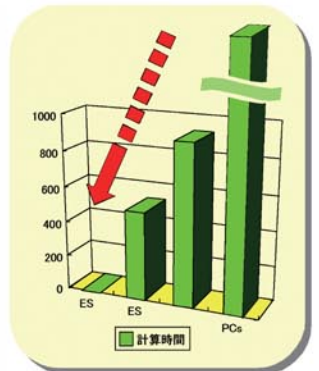
**研究内容** PHASEなど革新ソフトウェア群を並列化及びベクトル化し、地球シミュレータに適合させ、高速に駆動させる技術を開発する。

**期待効果** 大規模シミュレーションが速くなるため、短時間で幅広い解の探索ができるなど、課題の解決を合理的に行えるようになる。

**推進状況** 2005年9月より、PHASEの動解析部分を中心にES100ノード以上の大規模シミュレーション用高速最適化を進めている。



ベンチマーク例題  
 カーボンナノチューブの原子間距離決定問題により最適化過程をチェック



計算時間の短縮を図る