

計算科学シミュレーションによる 21世紀のものづくりプロセスの变革

東京大学生産技術研究所 副所長・教授
革新的シミュレーション研究センター長 加藤千幸



Center for Research on
Innovative Simulation Software

講演内容



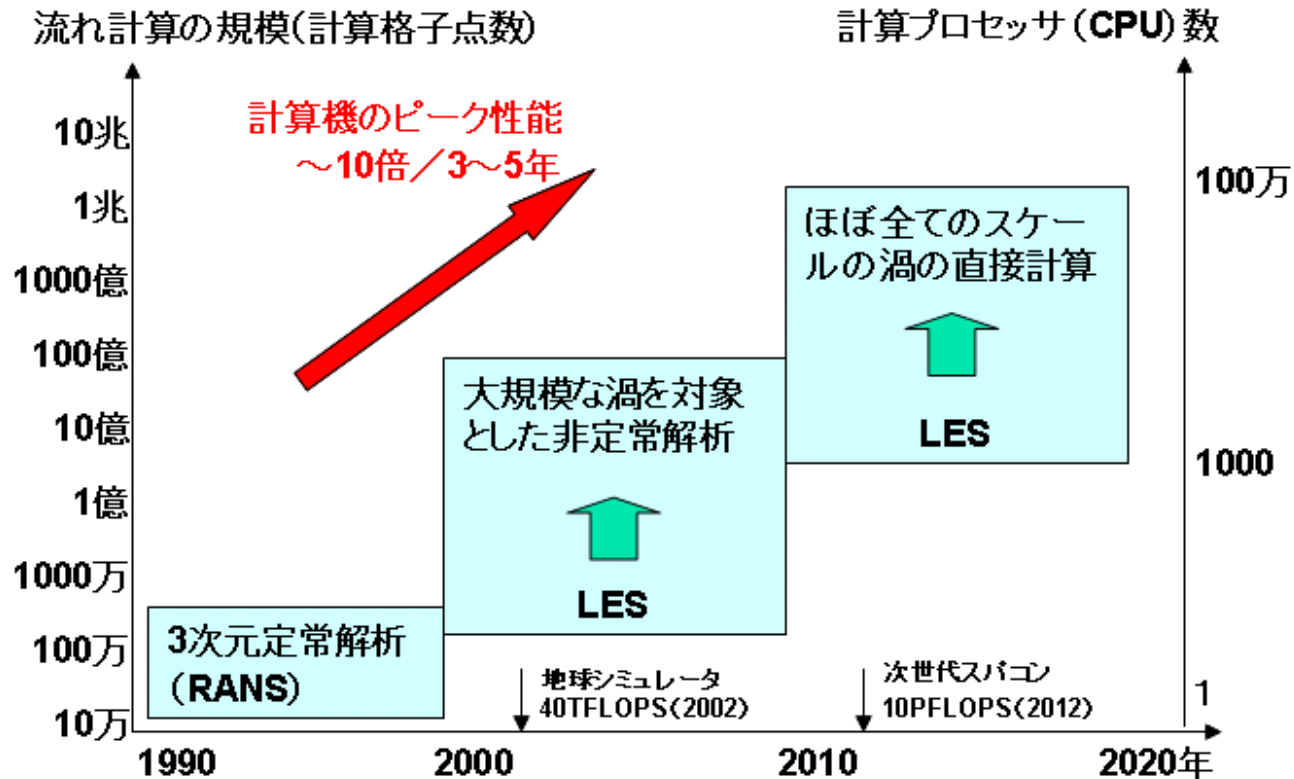
- 計算科学シミュレーションの動向とアプリケーションソフトウェア開発の重要性
- 開発したソフトウェアとその実証
- 成果の総括と今後の展開

計算科学シミュレーションの動向と アプリケーションソフトウェア開発の重要性

計算機性能の向上と数値解析の高度化



■ 5～10年後には予測精度が飛躍的に向上(流れの数値解析の例)



- ・2020年には100万CPU, 1000億計算格子を用いた, 直接計算が実用化
- ・燃烧, 混相流, 流体連成振動, 流体騒音などの連成解析が実用化
- ・本格的な数値試作が実現

国産ソフト開発の必要性



■ 計算科学シミュレーション

- 実験の再現だけでなく、新現象の発見も期待
- 現象の発見・解明・予測に基づく対象の最適化が可能
- **21世紀の学術・技術の重要基盤**

■ 産業界で使用されている主要なソフトウェア

- NASTRAN(構造解析), FLUENT(流体解析), Gaussian(量子化学計算)
→何れも欧米製

■ 我が国の計算科学シミュレーションの研究

- 大学の基礎研究→方法論, 計算モデル, 計算手法の提示
- 汎用ソフトとしては普及せず(ソフトウェアの完成度の不足、実証の欠如)

国家の基幹技術として、次世代の計算科学の基盤となるアプリケーション・ソフトウェアの開発が必要

「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトの推進



■ 目的

- 実用的な最先端計算科学シミュレーション・ソフトウェアの開発・普及

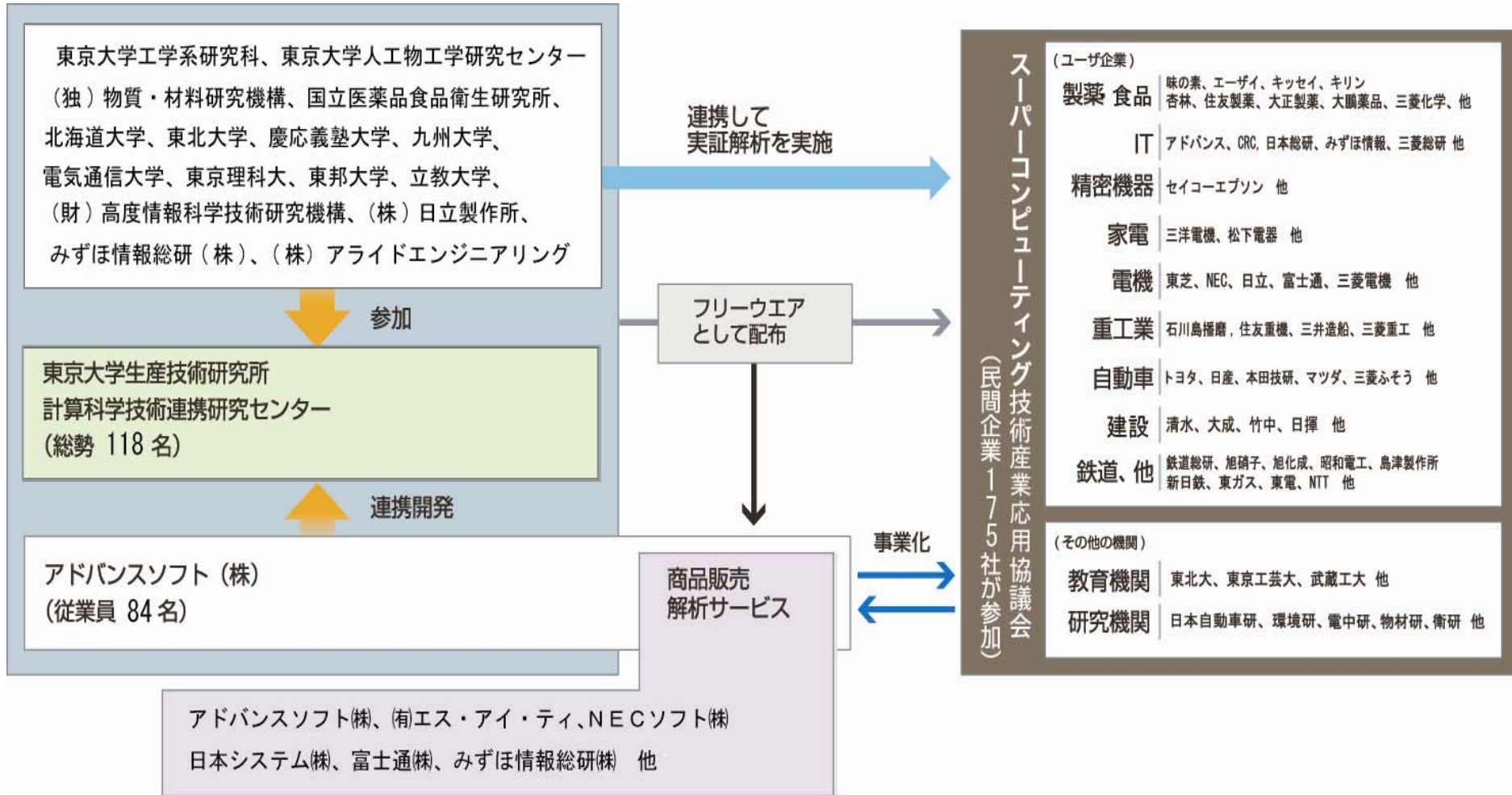
■ 対象分野

- 生命現象のシミュレーション
- ナノシミュレーション
- エンジニアリング分野
- 都市の環境・安全シミュレーション

■ 概要

- 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
- 事業期間:2005年～2007年(3年間)
- 事業規模:約32億円/3年, 研究員120名×3年
- 中核拠点: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

研究開発体制



開発したソフトウェアとその実証

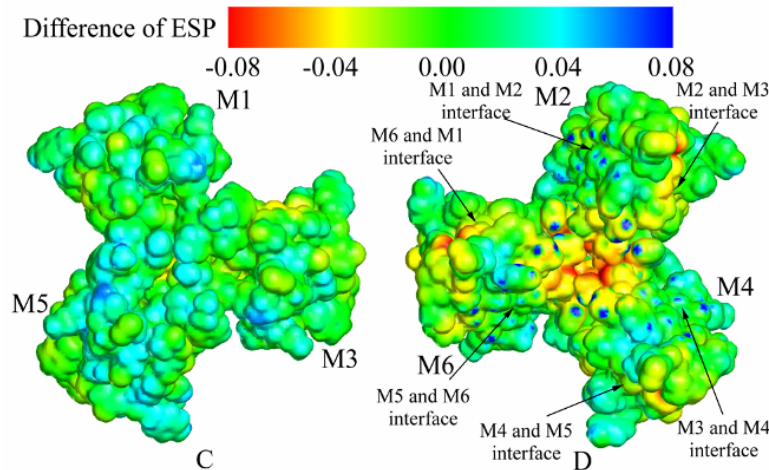
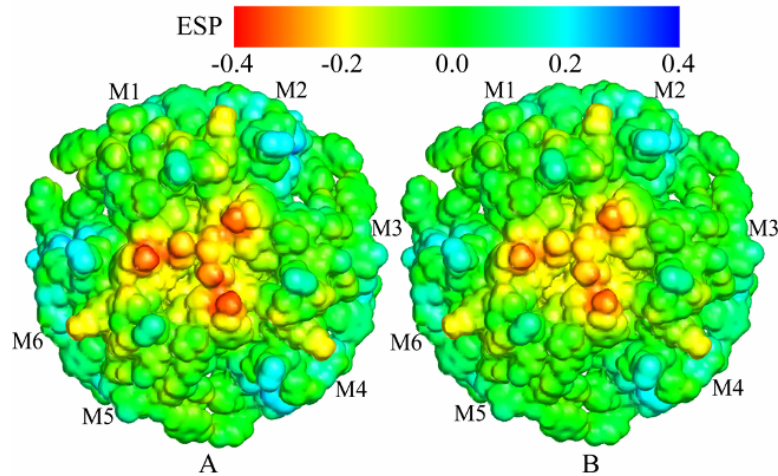
ライフサイエンス分野

タンパク質の全電子計算

ソフト名: ProteinDF

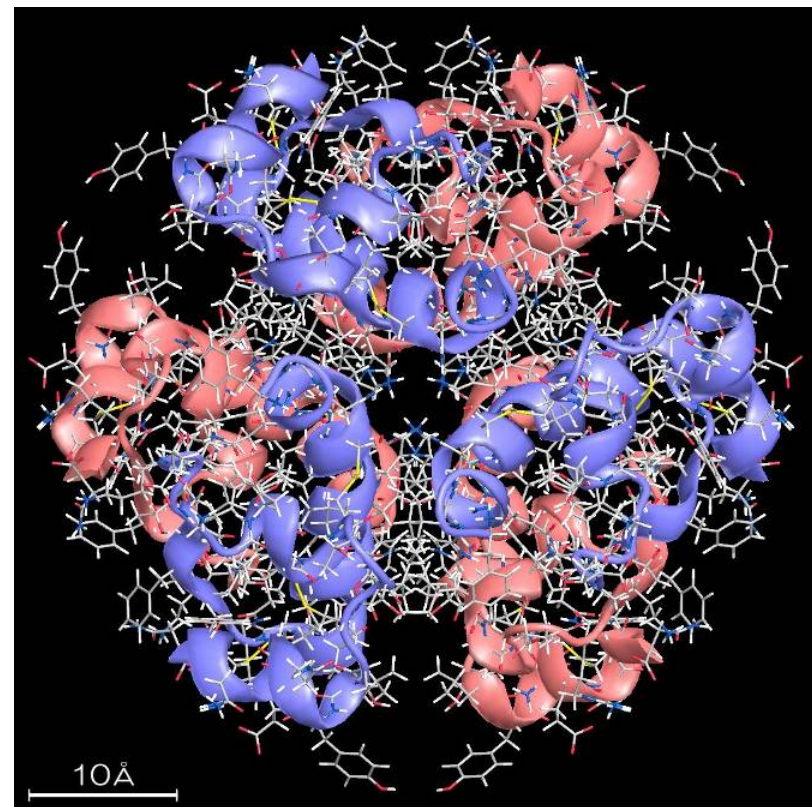


- 計算の収束性の大幅な改善と完全分散並列化により巨大タンパク質分子の全電子計算を世界で初めて実現！



古典計算

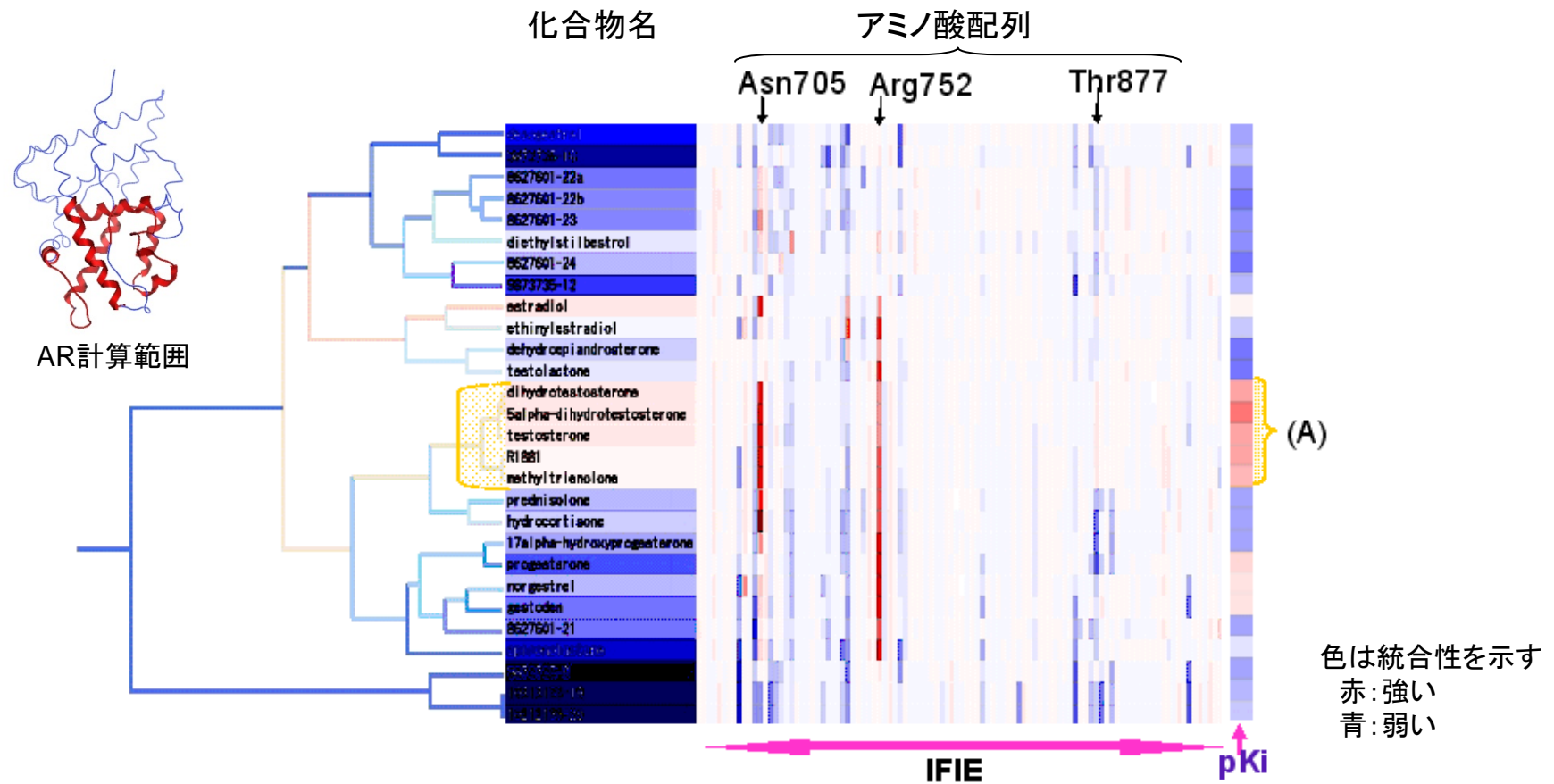
全電子計算



インスリン6量体(300残基)の全電子計算

タンパク質－医薬品候補物質相互作用解析

- 標的タンパク質と医薬品候補化合物との結合性を評価
→ 創薬の高精度スクリーニングに活用！

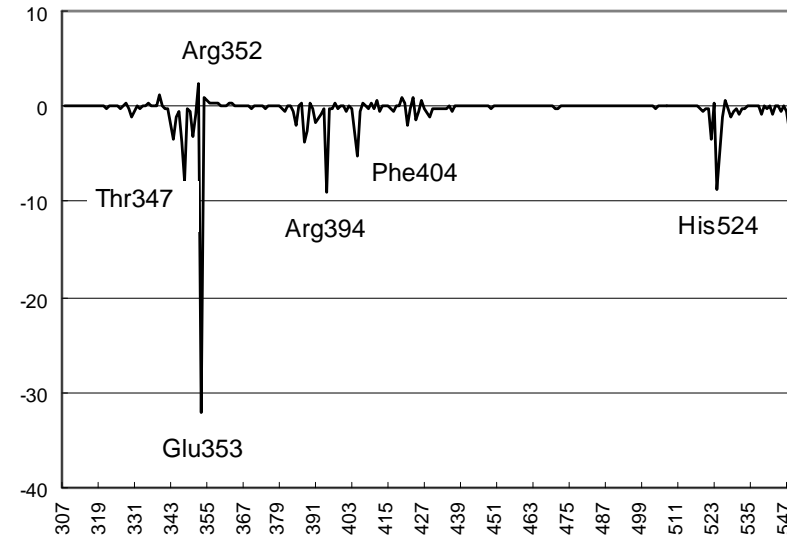
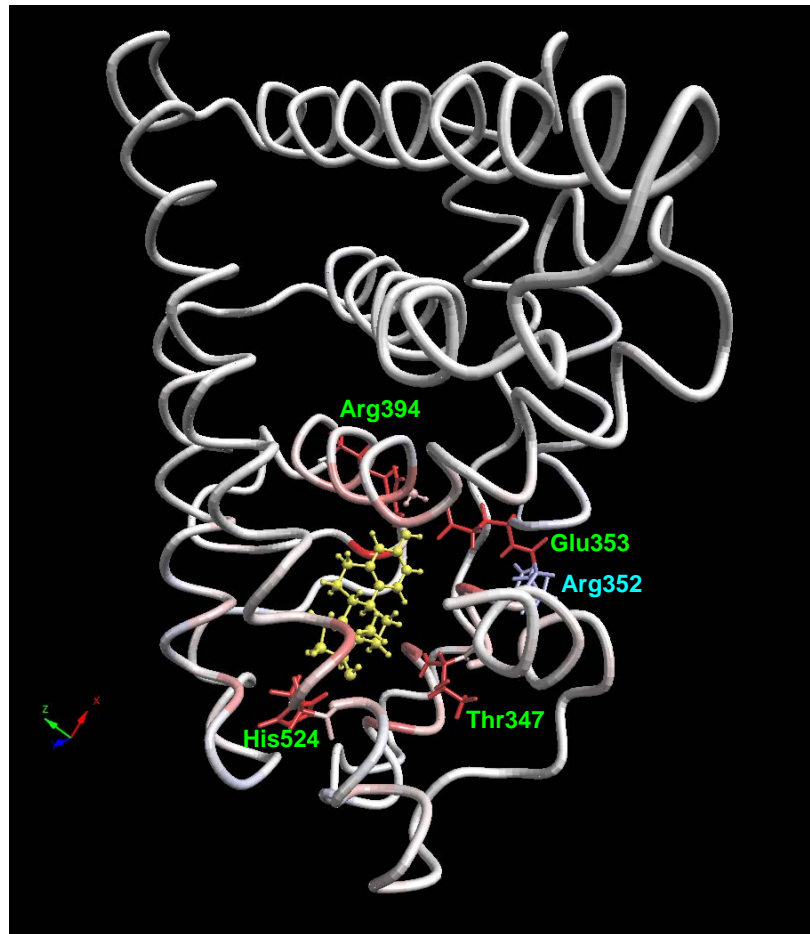


ソフト名: ABINIT-MP



エストロゲン受容体のFMO-MP2計算

- 結合エネルギーを電子相関を考慮し高速・高精度に予測可能

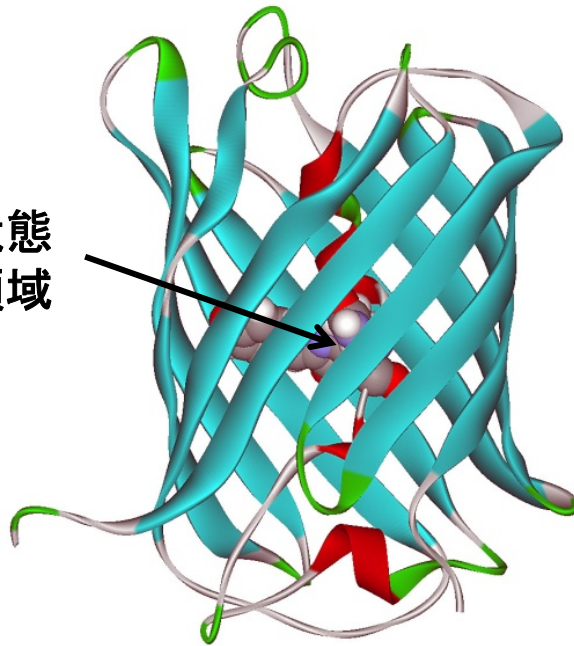


MP2法による電子相関を考慮した電子密度が、Dual Opteron 2.0GHz x 32 nodesで100.7時間！

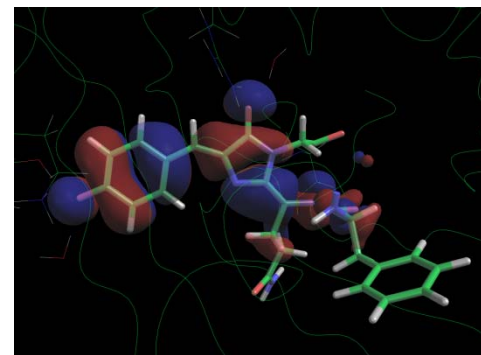
タンパク質の高精度励起状態計算

- 改良CIS(D)により極めて高精度な励起エネルギー計算を実現
(東工大櫻井研共同研究)

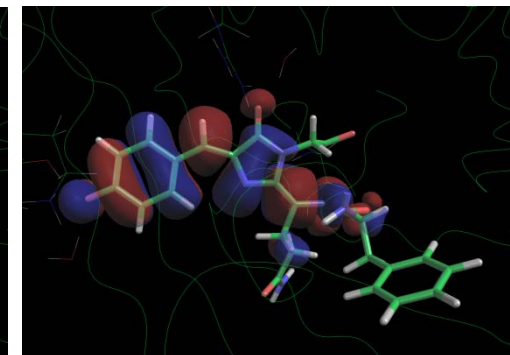
励起状態
計算領域



DsRed(サンゴ由来赤色蛍光タンパク質)の多層FMOによる励起状態計算



“空孔”自然軌道 (1.08)



“粒子”自然軌道 (0.92)

残基数: 220, 原子数: 3553

	CIS(D)法	改良CIS(D)法	実験値
励起エネルギー	2.30eV	2.22eV	2.22eV

高分子物質の励起エネルギー決定メカニズムの解明が可能に

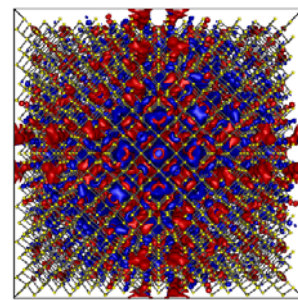
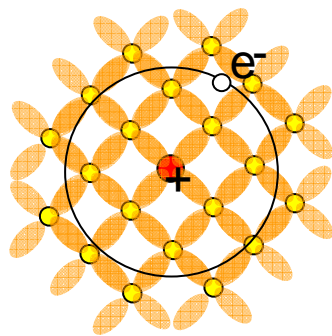
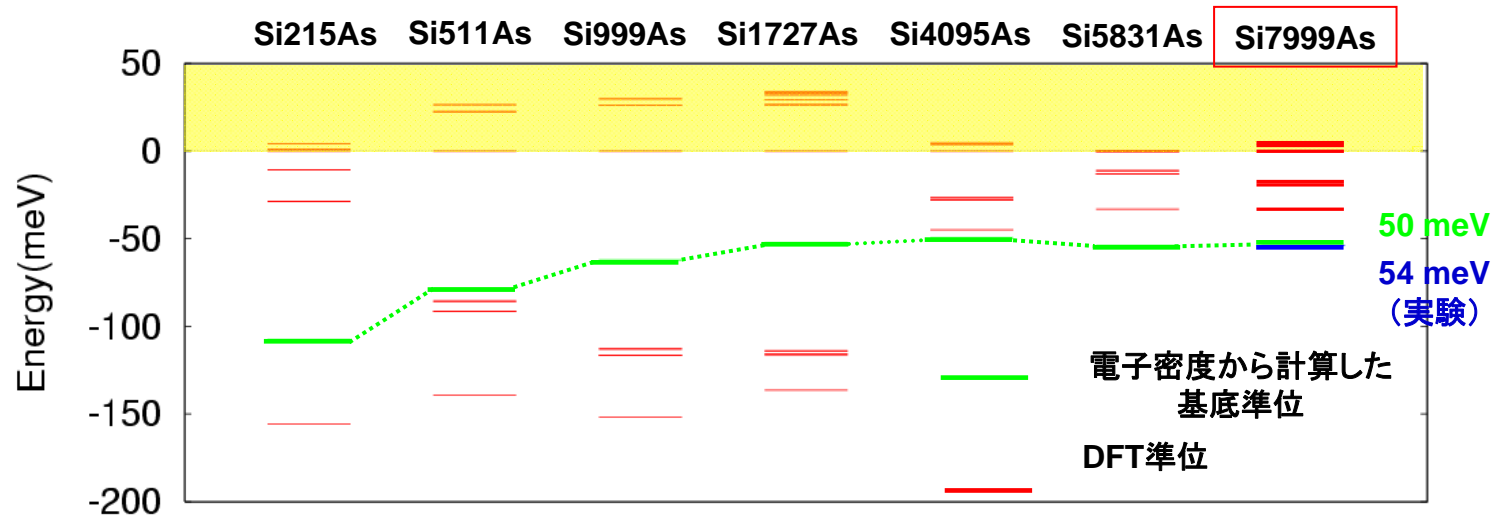
物質・材料分野

ナノシミュレーションによる 新材料設計とナノ機能予測

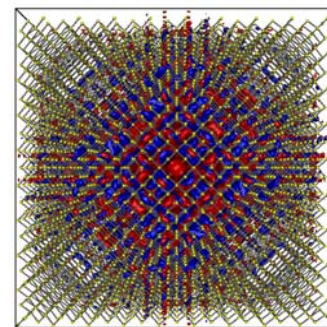
ソフト名: PHASE



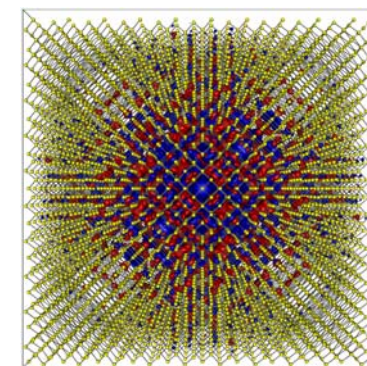
- 1万原子規模の大規模第一原理計算を実現
→ 高誘電率材料の探索や半導体レーザーの開発に貢献



Si₄₀₉₅As



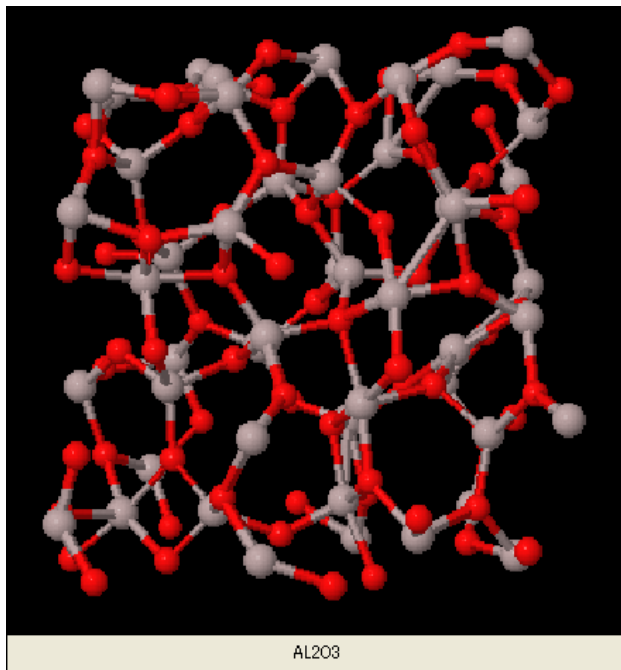
Si₅₈₃₁As



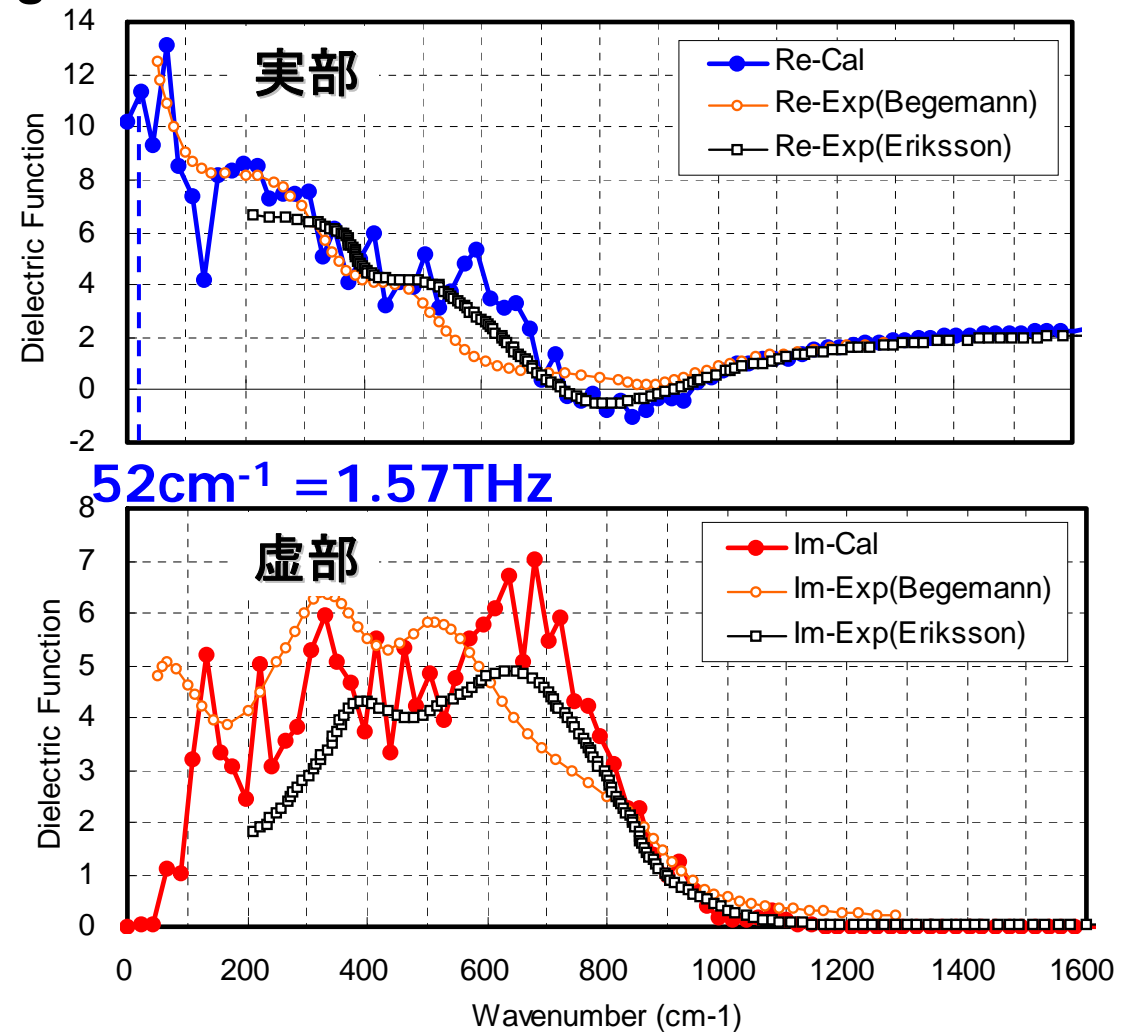
Si₇₉₉₉As

種々の物質の誘電率の定量的評価を実現

■ アモルファス Al_2O_3 の誘電率関数

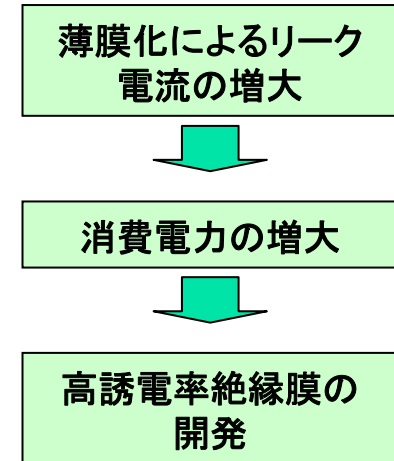
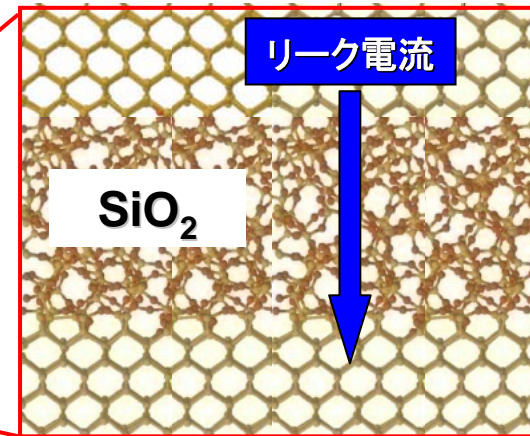
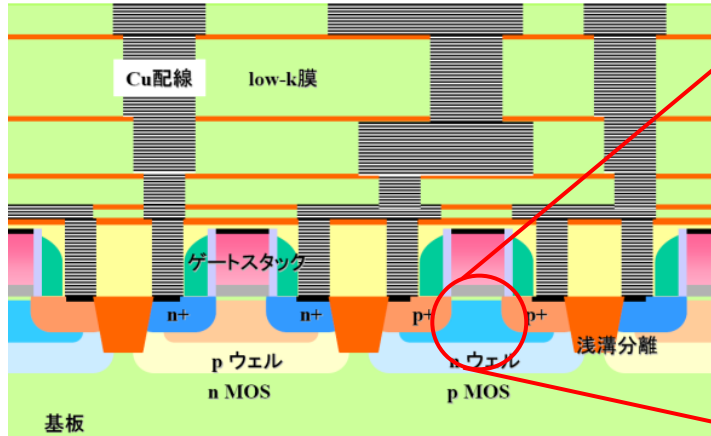


低イオン振動モードによる
誘電分散の発現

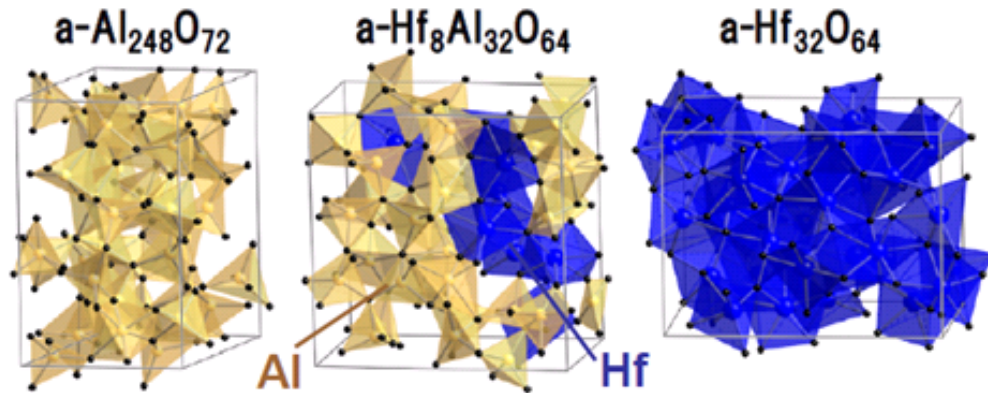


次世代Si-CMOSデバイス開発への応用

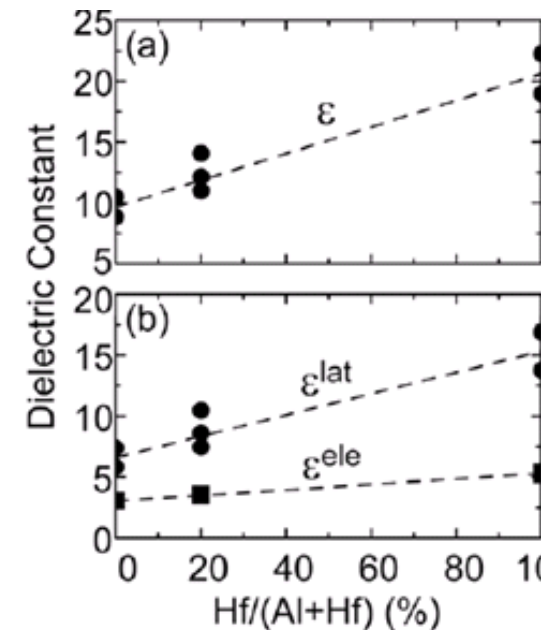
■ 次世代Si-COMSデバイスの開発課題



■ アモルファスモデル構造と誘電率



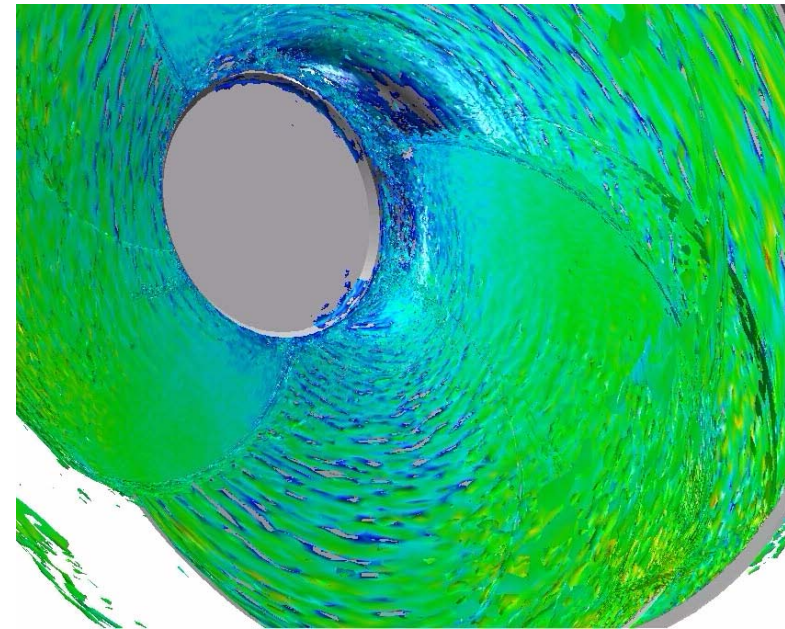
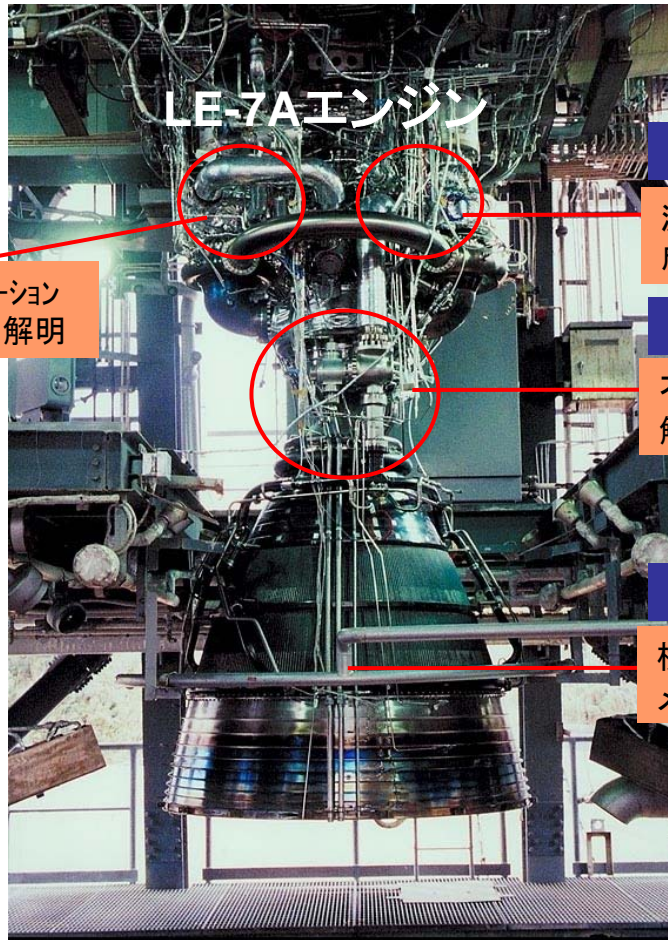
Hf量の増加により、誘電率は増大する
誘電率は格子分極項の寄与が大きい



エンジニアリング分野

インデューサポンプのキャビテーション流れ解析

■非定常キャビテーション現象の予測・解明によりロケットエンジンの信頼性向上に貢献



動翼表面の乱流境界層も含めた
キャビテーション解析

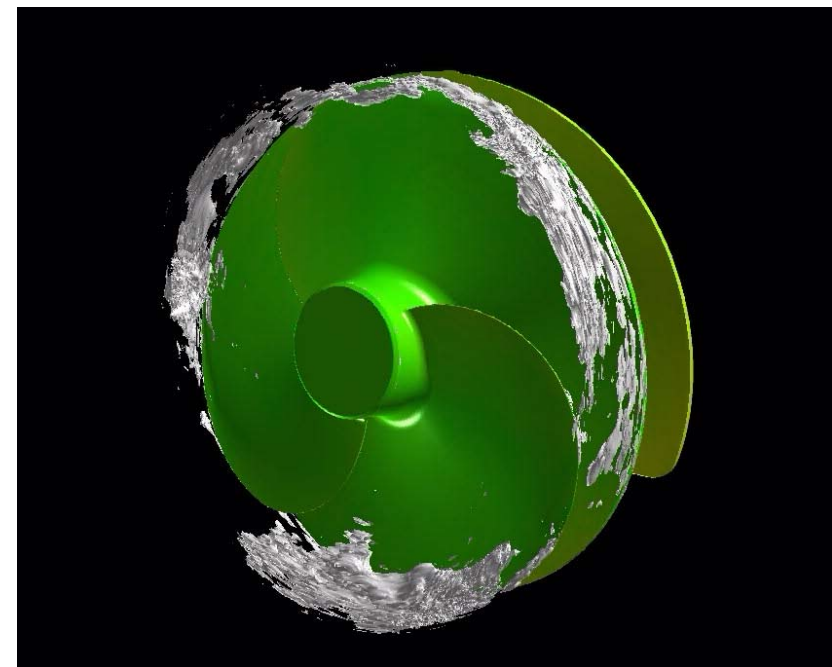
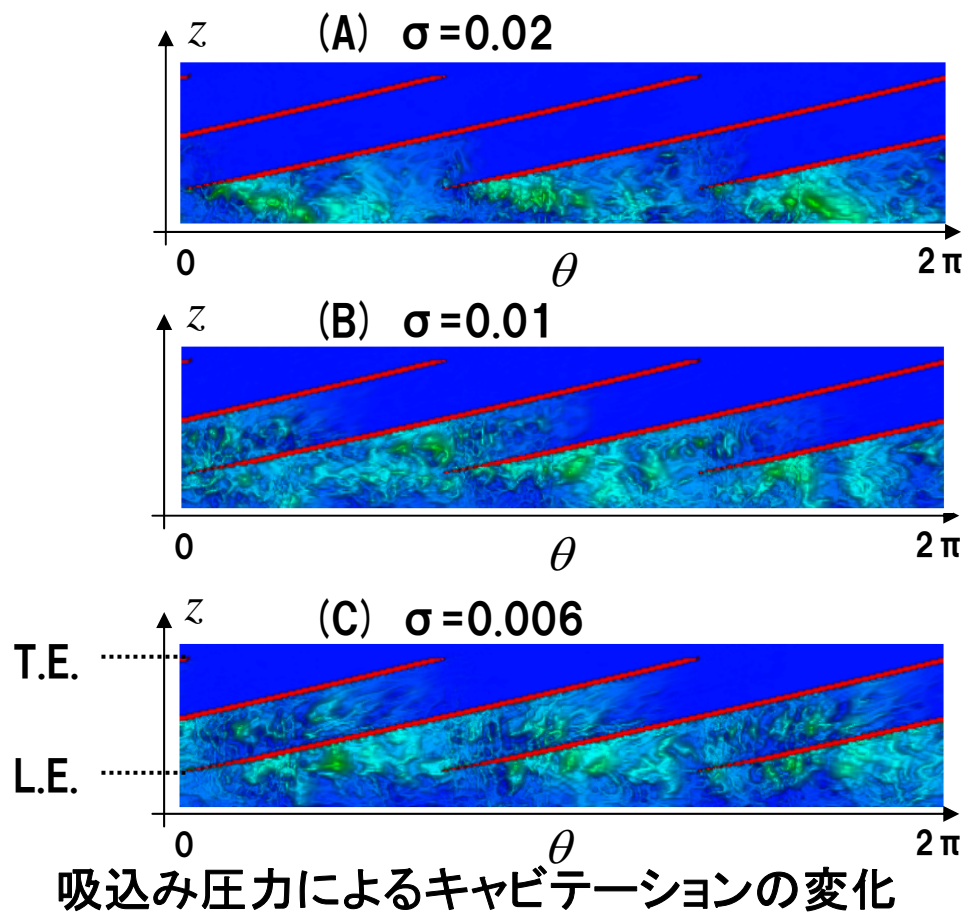
ロケットエンジンの開発課題

宇宙航空研究開発機構との共同研究

インデューサポンプのキャビテーション流れ解析



■非定常キャビテーション現象の予測・解明によりロケットエンジンの信頼性向上に貢献



キャビテーションの非定常変動

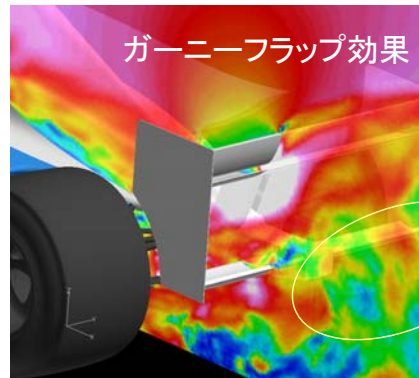
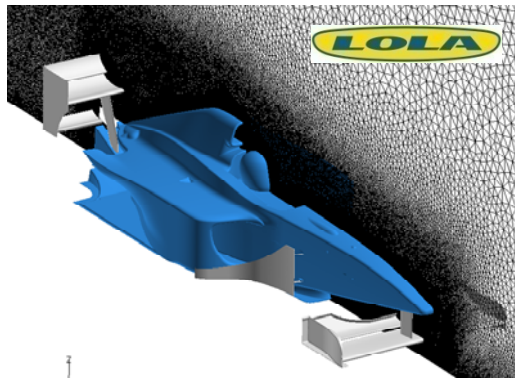
H II -Bのロケットエンジンの設計に適用中

車両の非定常空力解析

ソフト名: FrontFlow/Red



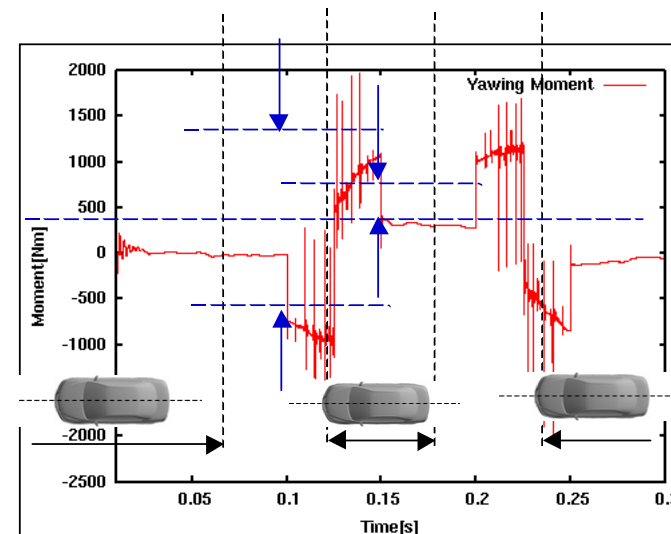
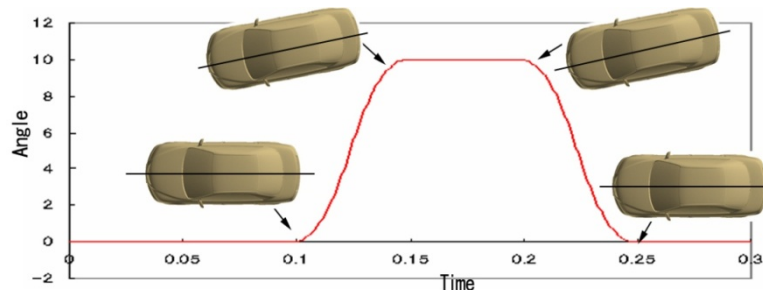
■フォーミュラカーの空力解析



	present LES		Wind tunnel
Cd	1.00 (incl. wheels)	0.56 (excl. wheels)	0.91 (incl. wheels)
Cl	-1.68 (incl. wheels)	-1.95 (excl. wheels)	-1.93 (excl. wheels)

抗力・揚力の高精度予測を実現

■車両に作用する非定常空力解析



Yawing Moment (Z-axis)

カーブ時の空力性能予測が可能

ソフト名: FrontSTR



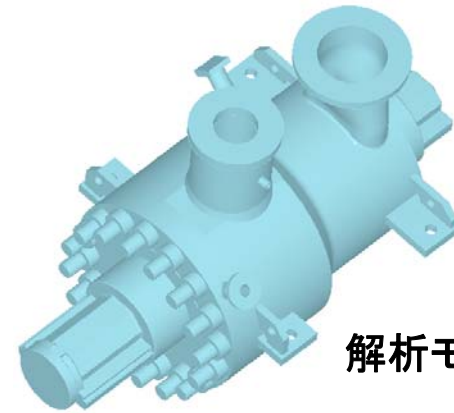
超大規模解析対応構造解析ソフトウェア

■高い並列実行性能を引き出すことに成功

- ✓並列化率:99.989%
- ✓ベクトル化率:98.8%
- ✓対ピーク性能:40~50%

2.6億節点モデルの静解析時間

CPU数	計算時間
512	3.423
1,024	1.807

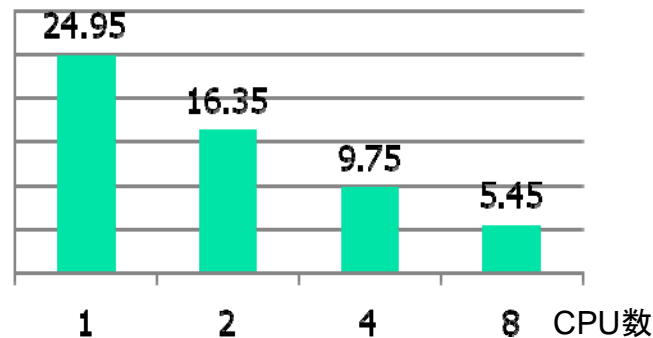


解析モデル

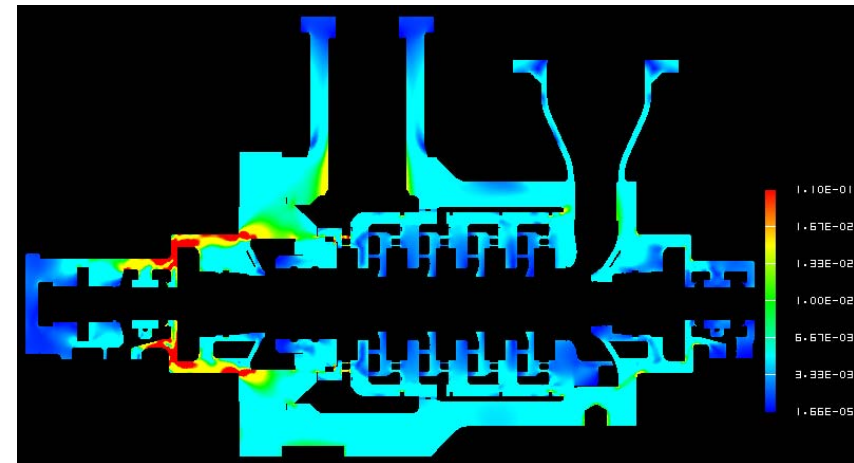
■並列直接法ソルバーの開発

- ✓扁平要素、固有値解析、動解析などに威力を発揮

計算時間



並列計算による高速化の例



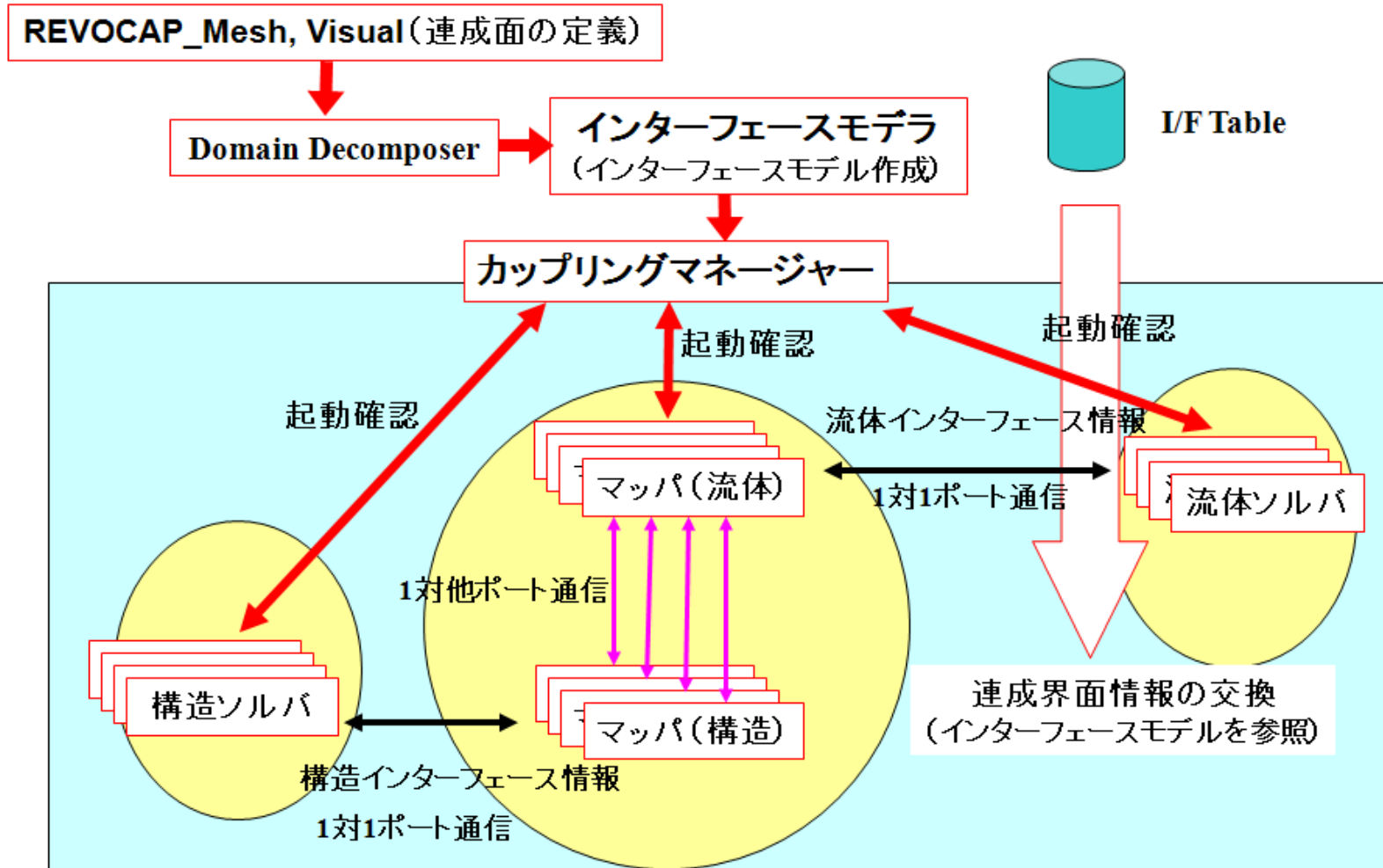
ミゼス応力分布

産業用ポンプの自重解析例
(3,800万節点、1.1億自由度)

(株)日立プラントテクノロジーとの共同研究

次世代連成解析システムの開発

- 多様な並列処理環境で各ソルバの同時実行を実現
→ 実機レベルの大規模連成解析により潜在的問題を顕在化



成果の総括と今後の展開

プロジェクト成果の総括



- 次世代の産業・科学の基盤となる先端の実用ソフトウェアを開発
 - 26本のソフトウェア(最終バージョン)をウェブ上に公開
 - ソフトウェアのダウンロード件数4万5千件以上

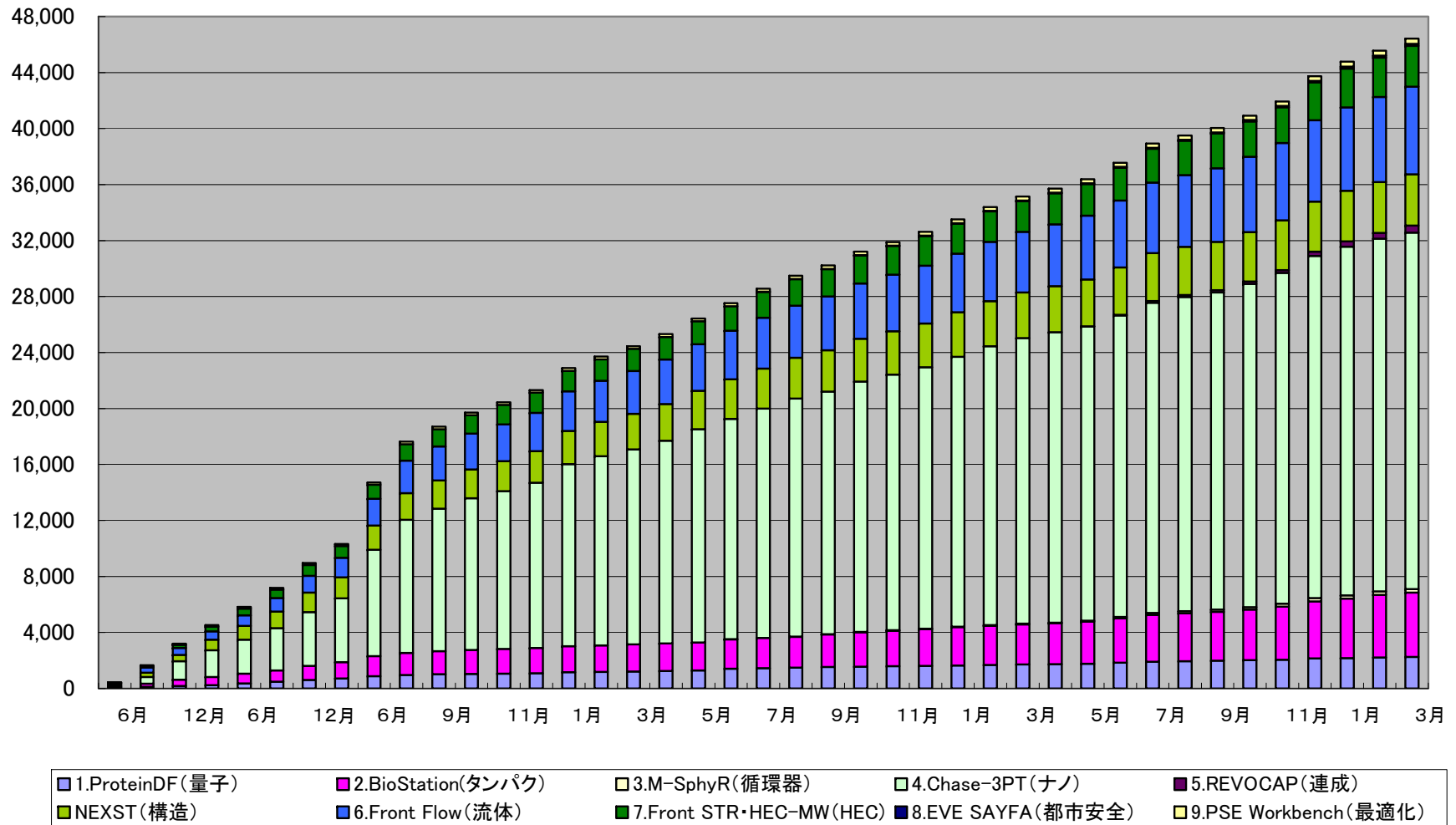
- 先端の実用ソフトウェアの開発-実証-普及体制を確立
 - 東京大学生産技術研究所を中核拠点とした連携体制を確立
 - スーパーコンピューティング技術産業応用協議会と連携した実証解析・普及活動の展開
 - シンポジウム開催2回(延べ1359人参加), WS・セミナー開催28回(延べ1533人)
 - 記者会見2回開催, 13紙に掲載, 解説書13刊発行
 - ベンチャー企業の育成と商用ライセンスの付与(延べ16社)による事業化(販売ソフト180本以上)

- 先端の実用ソフトウェアの開発・利活用をする人材を育成
 - 56名のポスドクが先端の実用ソフト開発に参画
 - 27名が大学の教授・准教授に(内, 海外の大学6名)
 - 29名が民間企業・研究機関等に
 - その他, 共同研究により, 先端の実用ソフトを利活用する多くの人材を育成

公開ソフトウェアのダウンロード件数の推移



■ 総ダウンロード件数: 4万6千件以上



数千CPUで高速に稼働する先端的 アプリケーションソフトウェアを開発



解析分野	ソフトウェア名	ノード数	CPU数	並列化率	ベクトル化率	実行性能 (Tflops)
流体解析	FrontFlow/ Red	100	800	99.86%	97.63%	0.593
流体解析	FrontFlow/ Blue	600	4,800	99.998%	98.68%	7.8
構造解析	FrontSTR	128	1,024	99.99%	99.8%	4.3
タンパク質 解析	BioStation/ ABINIT-MP	512	4,096	99.98%	97.68%	5.1
ナノシミュ レーション	PHASE	384	3,072	99.98%	99.5%	13.5

今後の展開



■ 革新的シミュレーション研究センター(CISS)を中核拠点として、ものづくりプロセスの革新を推進

- プロジェクトの成果物(ソフトウェア)の維持・管理・改良を承継
- ものづくり・安全安心分野における国内の連携拠点として活動

The collage features several key areas of research:

- ナノテクノロジー (Nanotechnology):**
 - 物質設計 (Material Design): カーボンナノチューブ (Carbon Nanotubes)
 - 酵素・触媒反応 (Enzyme/Catalytic Reaction): 酵素・触媒反応 (Enzyme/Catalytic Reaction)
- 防災 (Disaster Prevention):**
 - 津波被害予測 (Tsunami Damage Prediction): 提供: 東北大学 (Provided by Tohoku University)
 - 雲の解析 (Cloud Analysis): 提供: 気象研究所 (Provided by the Meteorological Research Institute)
- 地球環境 (Earth Environment):**
 - エルニーニョ現象の影響予測 (Prediction of El Niño Impact): 提供: (独)海洋研究開発機構 (Provided by the Institute of Oceanographic Research)
- ライフサイエンス (Life Sciences):**
 - 人間丸ごと解析 (Whole-body Human Analysis): 創業解析 (Startup Analysis)
 - 提供: 東京大学・理化学研究所 (Provided by the University of Tokyo and RIKEN)
- 次世代スーパーコンピュータ (Next-Generation Supercomputer):**
 - 提供: 理化学研究所 (Provided by RIKEN)
- 天文・宇宙物理 (Astronomy/Cosmology):**
 - 銀河形成解明 (Galaxy Formation Explanation): 提供: 筑波化学研究所 (Provided by the Tsukuba Institute of Chemistry)
 - 惑星形成解明 (Planet Formation Explanation): 提供: 国立天文台 (Provided by the National Astronomical Observatory of Japan)
 - オーロラ発生解明 (Aurora Occurrence Explanation): 提供: (独)海洋研究開発機構 (Provided by the Institute of Oceanographic Research)
- ものづくり・安全安心分野 (Manufacturing/Safety and Security):**
 - Includes a Formula 1 car simulation (Formula Nippon).
 - Includes a complex molecular simulation with labels like M2, M1, M4, M5, M6, M3, M4, M5, M6, M6, M4 and M5 interface, M3 and M4 interface.
 - Includes a flow visualization around a structure labeled L1, PC, L1, CA, BA.

謝辞



東京大学工学系研究科, 東京大学人工物工学研究センター
国立医薬品食品衛生研究所, (独)物質・材料研究機構,
(財)高度情報科学技術研究機構,
慶応義塾大学, 東北大学, 北海道大学, 立教大学, 東邦大学,
九州大学, 東京理科大学, 電気通信大学,

アドバンスソフト(株), みずほ情報総研(株),
(株)アライドエンジニアリング, (株)日立製作所

(独)海洋研究開発機構, (独)宇宙航空研究開発機構, (独)理化学研究所,
東京大学情報基盤センター

その他, 実証解析にご協力頂いた, 多くの企業・研究機関