

# ターゲット・アプリケーション 説明資料

# ターゲット・アプリケーション一覧

1. 巨大タンパク質系の第一原理分子動力学計算 (ProteinDF)
2. タンパク質立体構造の予測 (SimFold)
3. 血流解析シミュレーション (MC-Bflow)
4. オーダーメイド医療実現のための統計的有意差の検証 (MLTest)
5. 遺伝子発現実験データからの遺伝子ネットワークの推定 (GNISC)
6. タンパク質・薬物ドッキングシミュレーション (sievgene/myPresto)
7. 高並列汎用分子動力学計算ソフトウェア (Modylas)
8. FMO分子軌道法計算 (GAMESS)
9. 粗視化分子動力学計算 (Octa)
10. 実空間第一原理分子動力学計算 (RSDFT)
11. 平面波展開第一原理分子動力学解析 (PHASE)
12. 溶液内タンパク質の電子状態の3D-RISM/FMO法による解析 (RISM/3D-RISM)
13. 天体の起源を探る超大規模重力多体シミュレーション (NINJA/ASURA)
14. 格子QCDシミュレーションによる素粒子・原子核研究 (LatticeQCD)
15. 地震波伝播・強震動シミュレーション (Seism3D)
16. 全球雲解像大気大循環モデル (NICAM)
17. 超高解像度海洋大循環モデル (COCO)
18. 有限要素法による構造計算 (FrontSTR)
19. 有限差分法によるキャビテーション流れの非定常計算 (Cavitation)
20. 航空・宇宙機解析における圧縮性流体計算 (LANS)
21. Large Eddy Simulation (LES)に基づく非定常流体解析 (FrontFlow/Blue)

分野名: ライフ

# 巨大タンパク質系の第一原理分子動力学計算

■ プログラム名: ProteinDF

■ 開発

□ 東京大学情報基盤センター・生研 助教授 佐藤文俊

■ 概要

- 複雑かつ大規模・高精度が要求されるタンパク質の全電子を密度汎関数法に基づきカノニカル軌道で計算する。
- 励起状態・電子移動・化学反応をシミュレートするため、これまでの基底状態計算に加えて、励起状態も含めた第一原理分子動力学計算を実行する。

■ アルゴリズム

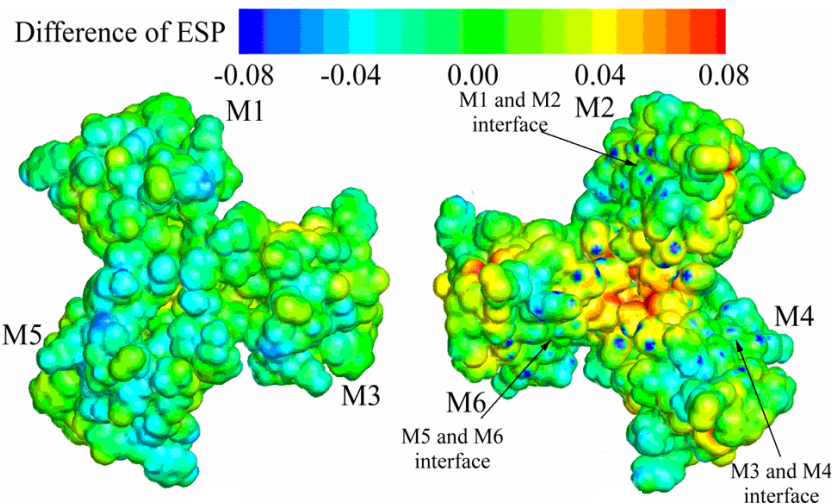
- 基底状態計算: 分子積分・交換相関積分・行列演算のSCF計算(カノニカル)。計算量は軌道数の3乗に依存。
- 励起状態計算(開発中)。上記+AOダイレクトアルゴリズム。計算量は軌道数の5乗に依存。
- C++
- 行列演算の並列化はライブラリ使用。交換相関積分は原子分割法。分子積分はRTアルゴリズム+シェルタイプ分類均等分割法。全てMPIを使用。

■ 現状での計算規模

- 306 残基、27,000 軌道、基底状態計算(世界最大)
- Altix3700(64 CPU)で実行、300 GFlops
- メモリ容量 256 GB、ディスク容量 1 TB

■ 次世代スパコンでの計算規模

- ほぼ全てのタンパク質に対応するため計算規模を3倍に
- 基底状態だけでなく、励起状態のダイナミクスを解析
- メモリ容量 10 PB、ディスク容量 10 PB(励起状態)



インスリン6量体静電ポテンシャルの古典計算との差

■ どのようなことが期待されるか？

- 創薬の信頼性の高い基礎研究のみならず、医薬品開発の高品位化および高効率化、ならびに次世代の医薬品研究開発モデルの創成といった応用に貢献できる。
- 方法特許やビジネスモデル特許などを含め欧米に対する優位性を実現できる。
- 触媒、分子素子、環境物質などへの応用も大いに期待できる。

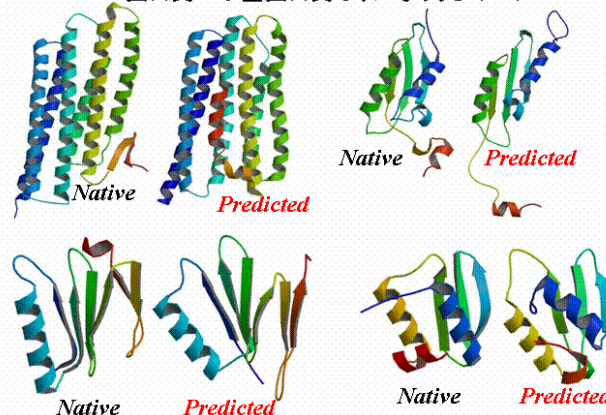
分野名: ライフ

# タンパク質立体構造の予測

- プログラム名: SimFold
- 開発
  - 神戸大学理学部 助教授 高田彰二
- 概要
  - 構造未知タンパク質のアミノ酸配列情報をもとに、擬似フォールディングシミュレーションによってタンパク質立体構造予測を行う。
- アルゴリズム
  - 知識ベースのエネルギー関数 SimFold
  - 知識ベースのフラグメントアセンブリモンテカルロ法
  - 拡張アンサンブル法
  - FORTRAN77
- 現状での計算規模
  - 粗視化モデルでアミノ酸120残基程度まで
  - 累積で 40 億モンテカルロステップ程度
  - 使用メモリ量 1 GB、ディスク容量 1 GB
- 次世代スパコンでの計算規模
  - 粗視化モデルでアミノ酸 300 残基程度まで
  - 原子モデルでアミノ酸 120 残基程度まで
  - 必要なモンテカルロステップは未知

SimFoldによるタンパク質構造予測例

各蛋白質で、左が実験構造、右が予測構造  
 $\alpha$ 蛋白質 & 小型蛋白質は、かなりうまくいく



- どんないことが期待されるか？
  - 「たんぱく3000」などの構造情報を直接利用して、構造未知タンパク質の3次元構造を擬似フォールディングシミュレーションにより決定することができる。
  - 高精度タンパク質モデリングは、構造ベースの創薬研究のコアバイオインフォマティクス技術の一つである。その技術の確立によって、ハイスループットなリード化合物のスクリーニングが可能になる。

分野名: ライフ

# 血流解析シミュレーション

■ プログラム名: MC-BFlow

■ 開発

□ 東京大学生産技術研究所 教授 大島まり

■ 概要

□ 複雑な 3 次元構造を持つ脳動脈網全体を対象とし、血管病変の発生・進行に重要な壁面せん断応力など血行動態の解析を行う。血流による物質輸送の解析。

□ MRIなどの医用画像から抽出・構築した血管形状モデルを使用し、個々の患者に対して解析を実行する。

■ アルゴリズム

□ 有限体積法

□ Fortran90および MPI(領域分割法)

■ 現状での計算規模

□ Willis動脈輪全体で18~23万要素程度

□ 直径 2~3 mm以下の血管は 1 次元・0 次元モデルで近似

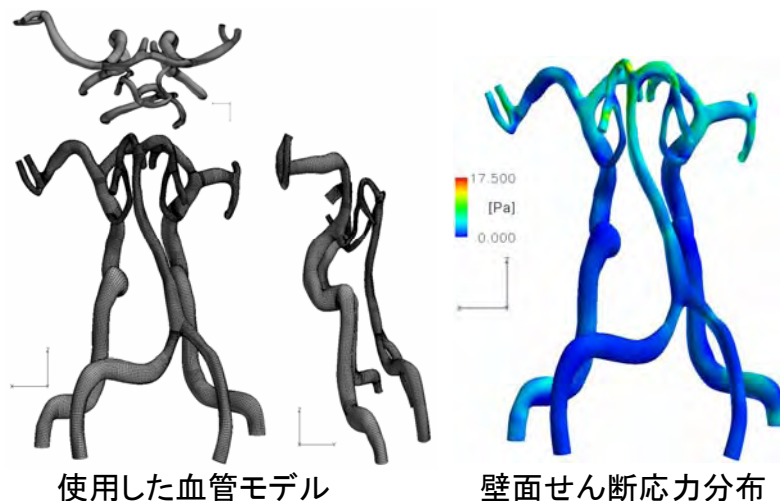
□ メモリ容量 4 GB、ディスク容量 10 GB

■ 次世代スパコンでの計算規模

□ Willis動脈輪全体で 5000万~1 億要素以上

□ 直径 1~2 mmの血管網についても 3 次元解析を実行

□ メモリ容量 1 TB以上、ディスク容量 3 TB以上



■ どのようなことが期待されるか？

□ 血管疾患の発生・進行には血管形状・血流の影響が指摘されている。今後増加が見込まれる血管疾患、特に脳血管疾患について数値解析を行い、発生・進行のメカニズムを解明、予防や治療法の開発に貢献する。

□ 脳動脈瘤破裂に伴うくも膜下出血は特に危険性が高いとされているが、動脈瘤に対する手術リスクも高い。数値シミュレーションに基づく動脈瘤の破裂危険性の予測により治療効果の向上に役立つ

分野名: ライフ

# オーダーメイド医療実現のための 統計的有意差の検証

■ プログラム名: MLTest

■ 開発

□ 東京女子医科大学 教授 鎌谷直之

■ 概要

□ 集団のハプロタイプ頻度をもとに、二つのグループにハプロタイプを分配する各々のパターンの生成確率を計算。

□ 第一種過誤率を厳密に計算。

■ アルゴリズム

□ 確率論に基づき、各パターンの生成確率を算出

□ C および MPI

□ 各分配パターンの生成確率を各ノードで並列計算

■ 現状での計算規模

□ ハプロタイプ本数 5 本

□ グループの人数はそれぞれ 50人

□ Xeon 3.0GHz × 128 CPUで 1 日

■ 次世代スパコンでの計算規模

□ 実際の疾患関連遺伝子探索研究で行われているサイズで計算

□ グループの人数は 100~1000 人

$$P = \left[ \sum_{k_1=0}^{2n} \sum_{k_2=0}^{2n-k_1} \dots \sum_{k_k=0}^{2n-k_1-k_2-\dots-k_{k-1}} \binom{2n}{k_1} \binom{2n-k_1}{k_2} \dots \binom{2n-k_1-k_2-\dots-k_{k-1}}{k_k} \right. \\ \left. \times h_1^{k_1} h_2^{k_2} \dots h_{k-1}^{k_{k-1}} h_k^{k_k} \right] \\ \times \left[ \sum_{k_1=0}^{2m} \sum_{k_2=0}^{2m-k_1} \dots \sum_{k_k=0}^{2m-k_1-k_2-\dots-k_{k-1}} \binom{2m}{k_1} \binom{2m-k_1}{k_2} \dots \binom{2m-k_1-k_2-\dots-k_{k-1}}{k_k} \right. \\ \left. \times h_1^{k_1} h_2^{k_2} \dots h_{k-1}^{k_{k-1}} h_k^{k_k} \right] \\ \times f(h_1, h_2, \dots, h_k)$$

厳密な第一種過誤率

■ どんないことが期待されるか？

□ 第一種過誤率を正確に算出することによる、疾患関連遺伝子発見の促進・精度向上

□ 個人の遺伝子型により、薬剤の副作用のある・なしなどを確率として判断するオーダーメイド医療を実現



分野名: ライフ

# 遺伝子発現実験データからの遺伝子ネットワークの推定

■ プログラム名: GNISC

■ 開発

□ 鳥取大学工学部 助教授 木村周平

■ 概要

- DNA マイクロアレイによって計測される遺伝子発現量から、実際の細胞内の遺伝子間相互作用を推定
- 遺伝子ネットワーク同定問題を連立微分方程式モデルのパラメータ推定問題に帰着

■ アルゴリズム

- 遺伝子ネットワーク問題を遺伝子毎の部分問題に分割
- C++ および MPI

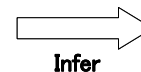
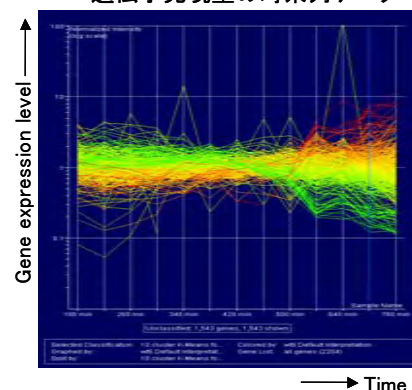
■ 現状での計算規模

- 30 遺伝子の遺伝子ネットワーク同定
- 12 GFlops(PCクラスタ;PentiumIII × 32 CPU)
- メモリ容量 100 MB、ディスク容量 10 MB

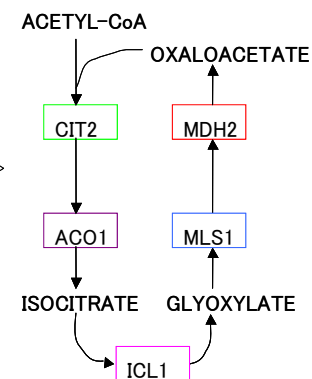
■ 次世代スパコンでの計算規模

- 1000 遺伝子の遺伝子ネットワーク同定
- 部分問題数は約 33 倍、各部分問題の探索次元数も約33倍。総計算量は 33000 倍程度
- メモリ容量量 3 TB、ディスク容量 300 GB

遺伝子発現量の時系列データ



遺伝子ネットワークモデル



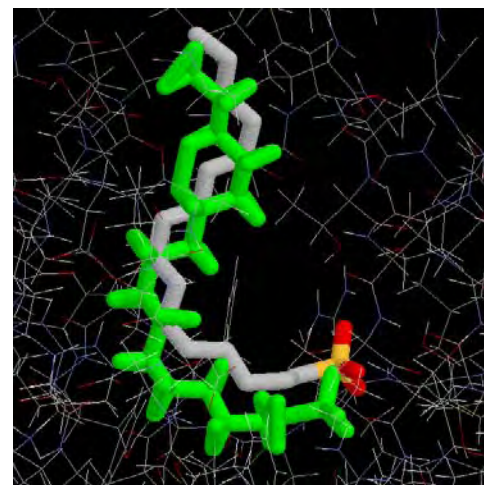
■ どんないことが期待されるか？

- 細胞内では数千～数万の遺伝子が相互作用しており、生命現象を理解するには同程度の規模を扱うことのできるネットワーク同定手法が不可欠。
- 同定された遺伝子ネットワークモデルは数値シミュレーションを通して創薬のための標的遺伝子の決定や、遺伝子機能の解明に利用することが出来る。

分野名: ライフ

# タンパク質・薬物ドッキングシミュレーション

- プログラム名: sievgene/myPresto
- 開発
  - 産業技術総合研究所・生物情報解析研究センター  
研究員 福西快文、JBiC他
  - 大阪大学蛋白質研究所 教授 中村春木
- 概要
  - 数百万の市販化合物を次々に医薬標的タンパク質に対してドッキングし、複合体構造とその結合エネルギーを予測することで、医薬品候補物質の探索を行う。
  - タンパク質と化合物の相互作用を疎水性相互作用やクーロン力などを表現する古典的力場で求める。
- アルゴリズム
  - タンパク質と化合物の複合体構造探索を、大局的探索は幾何学ハッシング法、局所探索は最急勾配法で行う(相互作用計算はグリッドポテンシャルを利用)。
    - Fortran90による逐次計算
- 現状での計算規模
  - グリッドポテンシャルの格子点数 60x60x60
  - 100 万化合物 x 100 標的タンパク質(逐次計算)
  - メモリ容量 0.2 GB(1ノード)、ディスク容量 0.5 TB
- 次世代スパコンでの計算規模
  - 1ドッキングあたり 30 倍(10-15%の精度向上)、ドッキング数(化合物数)を 100 倍、計 3000 倍
  - メモリ容量 1 TB、ディスク容量 50 TB



タンパク質受容体ポケットに結合する低分子リガンドの予測構造(緑色)と実験による構造(CPKカラー)

- どんなことが期待されるか？
  - 全市販化合物を対象とし、1000 種程度の代表的なタンパク質を扱うためには、100 倍の計算規模を要し、精度を 10-15 %向上するには1ドッキング当たり 30 倍の計算量が必要。
  - 計算されたデータは、標的タンパク質の 3 次元構造が既知の場合の医薬品探索から、膜タンパク質のように立体構造が未知の標的の場合の医薬品探索にも利用され、ランダムスクリーニング実験による医薬品探索よりも数十倍の効率をあげて、実験の効率化・開発時間短縮を行う。



分野名: ナノ

# 高並列汎用分子動力学計算ソフトウェア

■ プログラム名: Modylas

■ 開発

- 分子科学研究所 教授 岡崎進  
(NAREGI プロジェクトにて大規模化)

■ 概要

- 任意の分子系に対する汎用の大規模分子動力学計算プログラム。
- 自由エネルギー計算をはじめとして、ナノサイエンスに必要な多様な計算に対応。

■ アルゴリズム

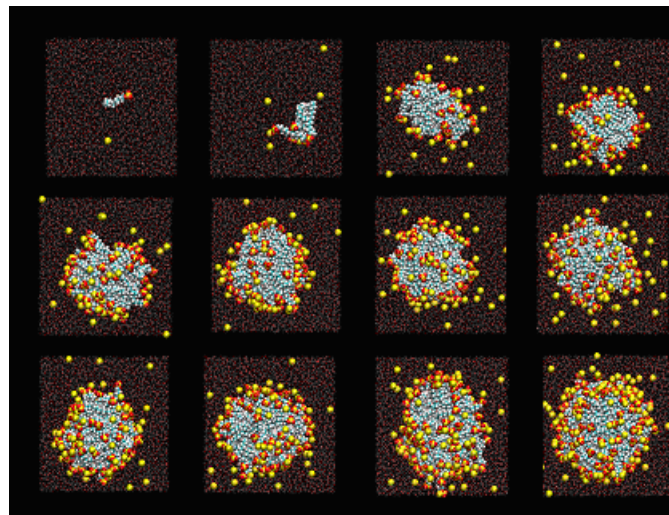
- 長距離相互作用計算には Particle Mesh Ewald 法、Ewald 法、Tree 法から選択
- 現時点では、領域分割と粒子分割を併用
- アンサンブルは、NVE、NVT、NPT(斜方セル含む)から選択
- SHAKE 法、RATTLE 法、ROLL 法による拘束の動力学が可能
- 時間発展には RESPA法を使用

■ 現状での計算規模

- PME法: 100 万原子 2 s/step (3 TFlops、512 CPU)
- Tree法: 1000 万原子 20 s/step (5 TFlops、800 CPU)

■ 次世代スパコンでの計算規模

- 高度な並列化により、それぞれの計算手法で数百倍から千倍程度の長時間ダイナミクスを実現
- メモリ容量は現状程度



水中のミセル生成の分子動力学シミュレーション

■ どのようなことが期待されるか？

- ウイルス(溶媒を含めると約 1000 万原子)の全原子計算や、リポソーム(数十万原子)の長時間計算が可能となる。
- 計算科学によるウイルスの分子科学やドラッグデリバリシステムのナノプロセスの解明が原子レベルで可能となり、人類にとって極めて重要な情報を得ることが期待される。

分野名: ナノ

# FMO分子軌道法計算

■ プログラム名: GAMESS/FMO

■ 開発

□ 産業技術総合研究所 北浦和夫、D.G. Fedorov他

■ 概要

- タンパク質等の巨大分子の電子状態を求める。
- 対象分子を小さなフラグメントに分割し、各フラグメント及びフラグメント対に対して分子軌道計算を行い、全体のエネルギーを求める。

■ アルゴリズム

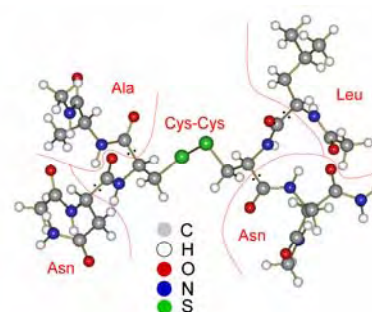
- Hartree-Fock 法等による量子化学計算
- 主に FORTRAN77、一部 C
- MPI による並列計算

■ 現状での計算規模

- 1フラグメントの平均基底数 300 程度
- フラグメント数 500 程度
- PC (Xeon 3GHz dual) 48 ノードで約 5~6 日
- メモリ容量 500 MB (プロセス毎)、ディスク容量 300MB (ノード毎)

■ 次世代スパコンでの計算規模

- フラグメント数を 20000 程度まで拡張したい。
- 100 CPU X 10000 ノードの場合の予測時間は約60h。
- メモリ容量 6 GB (プロセス毎)、ディスク容量 15 GB (ノード毎)



フラグメント分割法



タンパク質の電子構造

■ どんなことが期待されるか？

- 1フラグメント当たりの平均原子数を 30~40 とすると 20000 フラグメントでは 60 ~ 80 万原子のタンパク質の電子状態計算を行うことができる。
- 水溶液中のタンパク質のモデルとして周りに現実的な数の水分子を配置することも可能になり、生体内の分子の詳細な電子状態計算結果を利用して、薬品開発のためのスクリーニングなどをより高精度に行うことが出来るようになる。

分野名: ナノ

# 粗視化分子動力学計算

■ プログラム名: Octa

■ 開発

- 高機能材料設計プラットフォームの開発プロジェクト研究員 旭化成 青柳岳司

■ 概要

- 高分子、ソフトマテリアル、ナノハイブリッド材料設計を目的とする
- Octa システムのエンジンのひとつとして開発され、他の階層のシミュレータと組み合わせたマルチスケールシミュレーションが可能

■ アルゴリズム

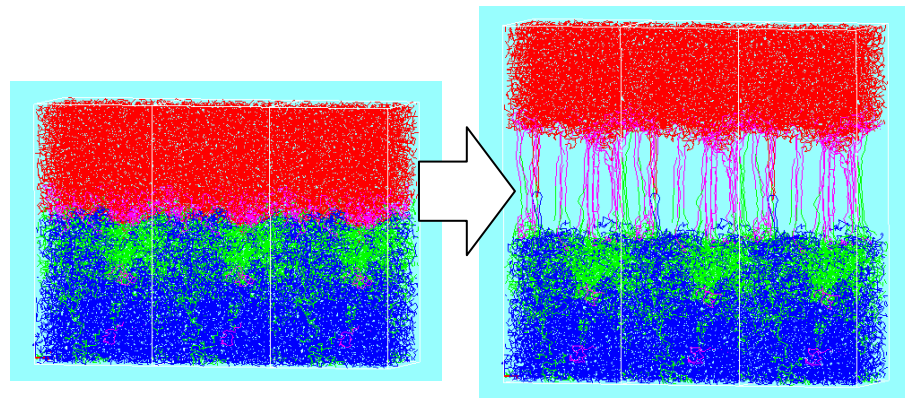
- C++ によるコーディング
- NVT、NPT、NVE等各種のアンサンブルに対応
- 任意の鎖構造のシミュレーションに対応
- 伸張、ずりなど構造変形のシミュレーションに対応
- 散逸粒子動力学法などの粗視化モデルに対応

■ 現状での計算規模

- パソコンレベルで最大 10 万粒子程度
- スパコンレベルで最大 100 万粒子程度

■ 次世代スパコンでの計算規模

- 1億粒子系



高分子材料の接合面の剥離

■ どんなことが期待されるか？

- nmオーダーから $\mu\text{m}$ オーダーまでのスケールを分子描像で扱うことが可能になり、分子の階層と連続体の階層とを自然につなぐことができる。
- 分子描像に基づいたナノ構造形成過程のリアルタイムシミュレーションが実行できる。
- ナノ構造をもつ高分子材料の物性予測および材料設計が可能となる。

分野名: ナノ

# 実空間第一原理分子動力学計算

■ プログラム名: RSDFT

■ 開発

□ 筑波大学計算科学研究センター研究員 岩田潤一

■ 概要

- ナノスケールでの量子論的諸現象を、第一原理に立脚して解明し、新機能を有するナノ物質・構造を予測
- 密度汎関数法の基本方程式を実空間差分法によって解き、構造安定性、電子構造、ダイナミクスを解明
- 高いベクトル機実効性能(単一 CPU でピーク比 70%以上)と超並列機へのフィーザビリティ

■ アルゴリズム

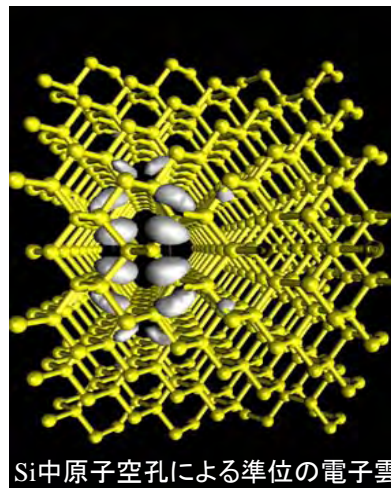
- 実空間高次差分法と時間軸 Verlet 法
- 電子自由度、イオン自由度に対する再帰的エネルギー極小化
- Fortran90

■ 現状での計算規模

- Si 1,728 原子高精度量子論的計算: 筑波大学 PACS-CS 並列機 64 ノード(ピーク性能 358 GFLOPS)で実効 235 GFLOPS、メモリ容量 96 GB

■ 次世代スパコンでの計算規模

- Si 46,656原子(10 nm<sup>3</sup>)量子論的計算: メモリ容量 27 TB



■ どのようなことが期待されるか?

- ポストスケーリング・Siテクノロジーでの材料探索を、本シミュレーション手法による量子的コンビナトリアル手法で促進
- 次世代テクノロジーをブーストする新機能物質の探索
- 量子論に立脚したものづくりの指導原理を確立
- ナノおよびバイオ物質を共通の量子論的基盤で取り扱うことによる学際的学問分野を創出



分野名: ナノ

# 平面波展開第一原理分子動力学解析

■ プログラム名: PHASE

■ 開発

- 革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発
- 独立行政法人物質・材料研究機構 計算科学センター センター長 大野隆央

■ 概要

- 第一原理に基づき物質の電子状態を求める。
- 電子論に基づき物質の構造と物性を解析する。

■ アルゴリズム

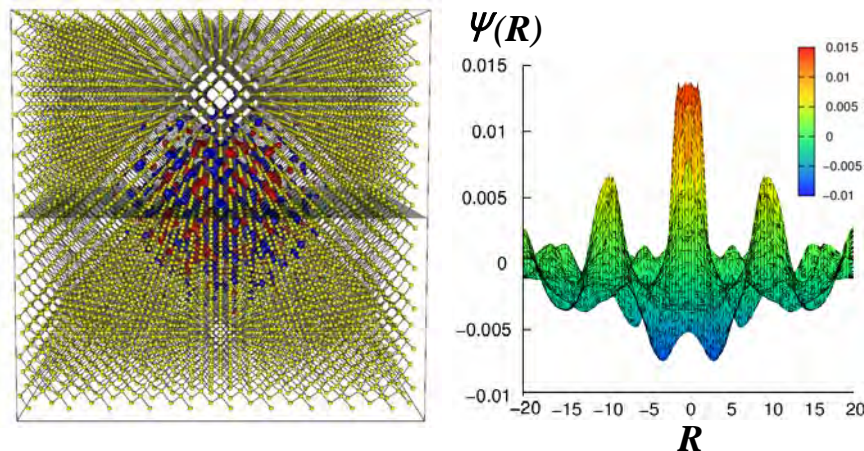
- 密度汎関数法
- 平面波基底関数系
- 第一原理擬ポテンシャル法
- Fortran90 と C言語
- MPIを用いた並列計算

■ 現状での計算規模

- 5832 原子スーパーセルによるシリコン中 As ドナー準位の解析
- 地球シミュレータ 384 ノードで実効 13.6 TFLOPS
- 使用メモリ容量 3.1 TB、ディスク容量 0.2 TB

■ 次世代スパコンでの計算規模

- 5 万原子程度
- メモリ容量 50 TB、ディスク容量 2 TB



Si中のAsドナーの基底状態の波動関数

■ どんなことが期待されるか？

- ポスト 35 nm世代ナノデバイスの量子論に基づく動作解析により、スケーリング限界を破る非シリコン系デバイスの探索を行う。
- 垂直磁気記録の第一原理解析により、1Tbit/inch<sup>2</sup>を越える高密度磁気記録を達成する。
- 酵素と DNA、RNA の反応解析により、複製、損傷修復のメカニズムを明らかにし、遺伝子レベルでの治療に寄与する。



分野名: ナノ

# 溶液内タンパク質の電子状態の 3D-RISM/FMO法による解析

■ プログラム名: RISM/3D-RISM

■ 開発

□ 自然科学研究機構分子科学研究所 教授 平田文男

■ 概要

□ 酵素反応を考えるには反応関与物質の電子状態、溶媒和構造、および自由エネルギーを求めることが必要。

□ 溶液内の蛋白質の全電子状態計算

□ 溶液分布を求める統計力学手法(3D-RISM)と大規模分子の量子化学計算アルゴリズム(FMO)との連成計算

■ アルゴリズム

□ FORTRAN77/90

□ 3D-RISM: 3次元高速フーリエ変換の並列化

□ FMO: 蛋白質を2~3残基のフラグメントに分割し、各フラグメントごとに並列計算

■ 現状での計算規模

□ 3D-RISM 格子点数 512x512x512x2

□ 蛋白質サイズ: 250 残基(3千原子・3万基底)

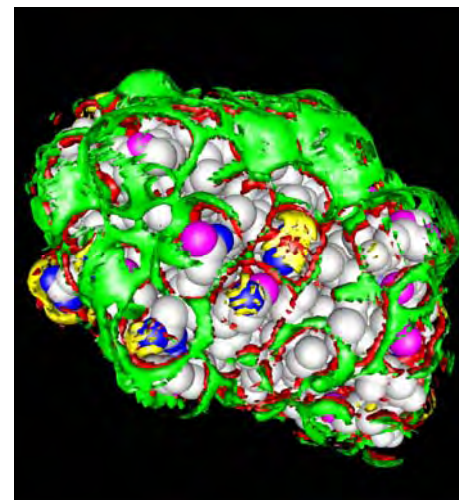
□ メモリ容量 60 GB(一点計算)

■ 次世代スパコンでの計算規模

□ 3D-RISM 格子点数 1024x1024x1024x4

□ 蛋白質サイズ: 1000 残基(1万原子・10万基底)

□ メモリ容量 600 GB(酵素反応座標上の各点での計算)



リゾチーム周りの水とイオンの分布

■ どんなことが期待されるか?

□ 3D-RISM/FMOにより酵素反応の詳細を第一原理的に明らかにする。

□ 効率の良い反応条件の選定や、新規反応経路の発見を目指す。

□ 蛋白質のミュータントについても酵素反応を予測することで、反応効率の高い新型酵素の開発に発展させる。

分野名：物理・天文

# 天体の起源を探る超大規模重力多体

## シミュレーション

■ プログラム名：NINJA/ASURA

■ 開発

- 国立天文台 研究員 斎藤貴之
- 東京大学 大学院生(博士課程) 似鳥啓吾 他

■ 概要

- 宇宙初期の密度ゆらぎから重力不安定性によって構造が成長して銀河が形成される過程や、微惑星が衝突・合体して地球のような惑星が形成される過程を粒子や粒子・ガスの複合シミュレーションで計算する。

■ アルゴリズム

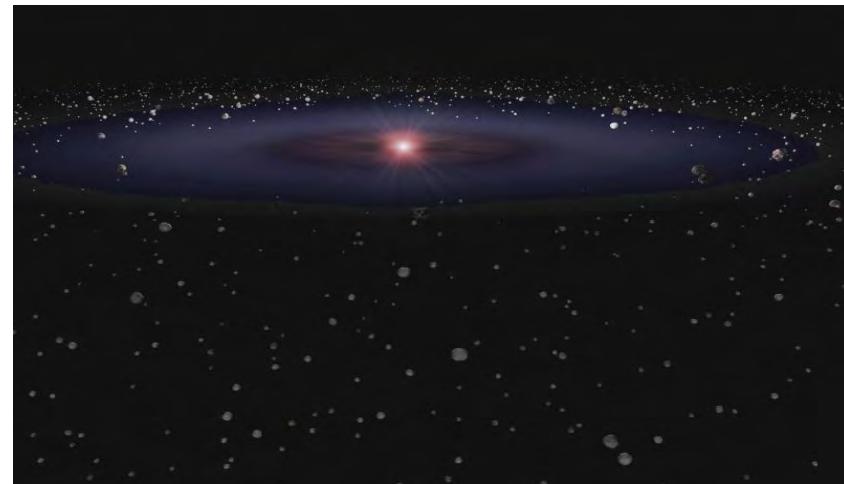
- 直接計算、ツリー法、SPH 法、独立時間等の複合スキーム。並列化は領域分割、2次元スキームなど

■ 現状での計算規模

- 銀河形成では最大 100 万粒子、惑星形成では最大 10 万粒子

■ 次世代スパコンでの計算規模

- 銀河形成では1億粒子以上、惑星形成では 100 万粒子以上。計算時間リミットのためメモリ、ディスク要求は小さい。



惑星形成過程のシミュレーション  
(計算開始から約 10 万年後の状態)

■ どんなことが期待されるか？

- 銀河形成シミュレーションでは、これまで分解できていなかったひとつひとつの星形成領域を分解することで、初めて観測と直接比較できるようなシミュレーションが可能となり、銀河形成の理解に革新をもたらす。惑星形成では、惑星の種類、質量、軌道の分布などの惑星系の基本構造が、原始惑星系円盤のどのような物理量によって決定されるかを明らかにし、惑星系の多様性の起源を解明する。

分野名: 物理・天文

# 格子QCDシミュレーションによる素粒子・原子核研究

■ プログラム名: LatticeQCD

■ 開発

- 筑波大学 助教授 吉江友照他
- 広島大学理学研究科 助教授 石川健一他

■ 概要

- 基本粒子クォークおよびグルオンの基本法則である量子色力学(QCD)を4次元時空格子上に定式化した格子QCDにより、素粒子の強い相互作用の第一原理計算を行う。

■ アルゴリズム

- モンテカルロ法およびCG法
- 4次元時空格子の2次元分割および3次元分割
- Fortran90 および MPI

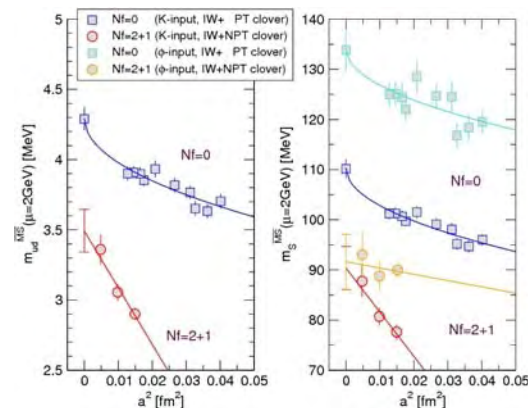
■ 現状での計算規模

- 格子点数 28x28x28x56、総演算量 1.7 Tflops・year、生成データ総量 4.1 TByte
- 地球シミュレータ 14 ノードで実効 412 Gflops、使用メモリ 7.5 GByte

■ 次世代スパコンでの計算規模

- Wilson-clover クォーク作用の場合は格子点数 100x100x100x200、カイラルクォーク作用の場合は格子点数 50x50x50x100

u-クォーク, dクォークの平均質量(左)及びsクォーク質量(右)の計算例。横軸は格子間隔の二乗



■ どのようなことが期待されるか?

- 「素粒子標準模型」が確立されて、物質・反物質のアンバランス(CP対称性の破れ)など、クォーク・レプトンのレベルでの基本相互作用が解明される。
- 2兆度以上の超高温や超高密度で出現が予想されるクォークとグルオンのプラズマ状態の物理特性が解明され、宇宙誕生ビッグバン直後の物質の状態が明らかにされる。
- クォーク・グルオンから陽子・中性子、さらに原子核への組成の仕組みが明らかになり、宇宙の成り立ちの基礎となる物理が解明される。

分野名:地球科学

# 地震波伝播・強震動シミュレーション

■ プログラム名: Seism3D

■ 開発

□ 東京大学地震研究所 助教授 古村孝志

■ 概要

□ 複雑で不均質な地下構造を地震波が伝わり、地表に強い揺れを作り出す過程を数値計算により評価し、地面の揺れを求める。

□ 地震波動の伝播を、運動方程式、応力-歪みの構成方程式の2つの差分法計算により陽的に求める。

■ アルゴリズム

□ 差分計算は時間2次、空間16次精度

□ FORTRAN77

□ 領域分割は1次元(鉛直方向)。ノード内は OpenMP、ノード間通信には MPI を用いた並列計算

■ 現状での計算規模

□ 格子点数  $2048 \times 1024 \times 1024$

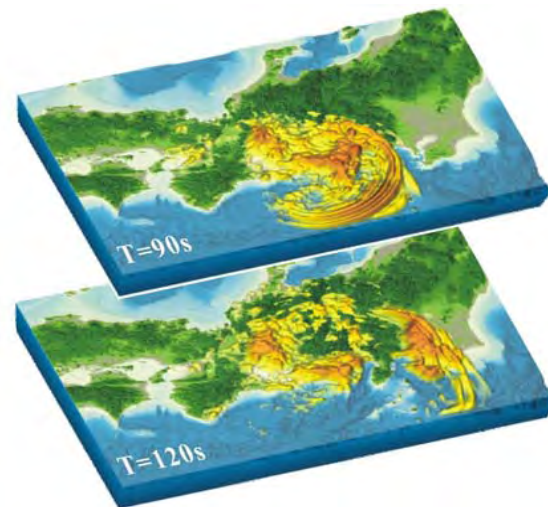
□ 地球シミュレータ 240 ノードで実効 6.1 TFLOPS

□ メモリ容量 740 GB、ディスク容量 0.1 TB

■ 次世代スパコンでの計算規模

□ 分解能 5 倍(格子点数  $5 \times 5 \times 5 = 125$  倍、1次元分割なのでノードあたり計算量は 25 倍)

□ メモリ容量 92.5 TB、ディスク容量 12.5 TB



想定東海地震の強い揺れ(地球シミュレータ計算)

■ どんなことが期待されるか?

□ 木造家屋から超高層ビルなどの多様な人工建造物の揺れに対応した広帯域の強震動の予測を実現し、地震防災への実用化が期待される。

□ 計算した地震波形は、大地震時の震度の予測だけでなく、個々の建物被害の予測まで適用範囲が広がり、地震に強い社会基盤とビルの設計等に直接生かされる。



分野名:地球科学

# 全球雲解像大気大循環モデル

■ プログラム名: NICAM

■ 開発

- 東京大学 助教授 佐藤正樹
- 海洋研究開発機構 研究員 富田浩文

■ 概要

- 正 20 面体を分割した格子と、近似のない方程式形(非静力学方程式系)を採用。
- 全球雲解像モデル(メッシュサイズ数km以下)。
- 積雲パラメタリゼーションによらない解析。

■ アルゴリズム

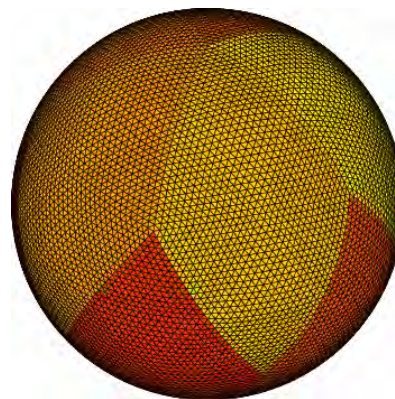
- 正 20 面体分割格子による2次元領域分割。
- 水平伝播する音波は時間分割で陽的に、鉛直伝播する音波は陰的に解析。
- 並列計算はMPIを利用。

■ 現状での計算規模

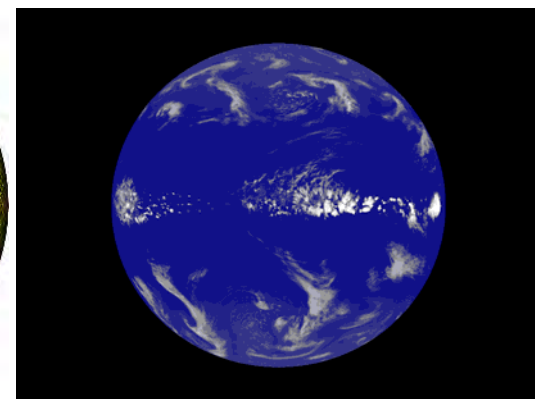
- 格子点数 2048x2048x54x10、メッシュサイズ 3.5km
- 地球シミュレータ 320 ノードで実効性能 7.7 TFLOPS、メモリ 4.8 TB

■ 次世代スパコンでの計算規模

- 格子間隔 400 m。格子点数は水平方向に 8x8 倍、鉛直方向に 2 倍、時間方向に 1/8 倍。計算時間を数日とする。
- 現行の 3.5 kmメッシュモデルで 10 年積分。



正20面体格子



3.5kmメッシュ全球雲解像モデルによる水惑星実験の雲画像

■ どんなことが期待されるか?

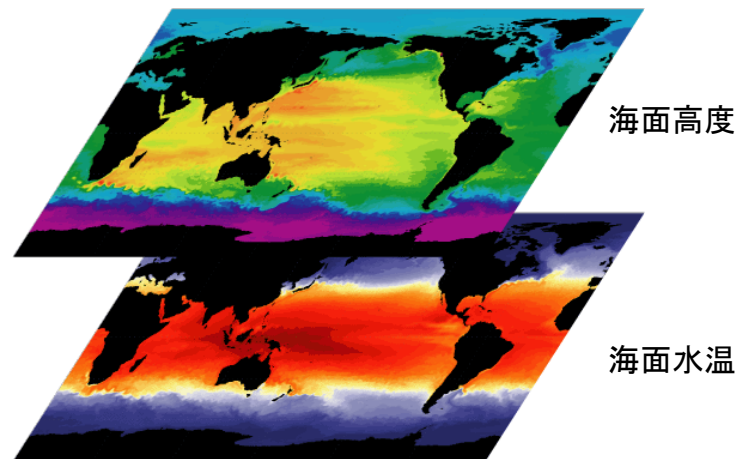
- 雲に関する任意性の少ない、より精度の高い気候予測が可能になる。
- 縦横の格子間隔とも 400 m均一の解像度により、背の高い積雲(高さ 10 km)から浅い層積雲(高さ 1 km)までの雲を直接計算。
- 超高解像度のkmスケールでの全球シミュレーション結果により、気候変動に伴う台風や集中豪雨など極端現象の予測情報を提供。



分野名:地球科学

# 超高解像度海洋大循環モデル

- プログラム名:COCO
- 開発
  - 東京大学気候システム研究センター 助教授 羽角博康
- 概要
  - 全海洋を超高解像度で表現し、全球規模の海洋大循環と局所的な海況変動を同時に詳細に再現。
  - 海洋中の生物・化学過程も表現し、海洋物質循環や水産資源のシミュレーションにも適用。
- アルゴリズム
  - 有限差分法により離散化。輸送計算は時間2次・空間3次の精度。
  - 水平2次元で領域分割。MPIによる並列計算。
- 現状での計算規模
  - 格子点数 1280×912×48 で 100 年規模の計算
  - 地球シミュレータ 76 ノードで実効 1.4 TFLOPS
  - メモリ容量 10 GB、ディスク容量 5 TB
- 次世代スパコンでの計算規模
  - 変数(扱う生物・化学種)を数倍、空間格子点数を 100 倍程度に増加
  - メモリ容量 10 TB、ディスク容量 1 PB



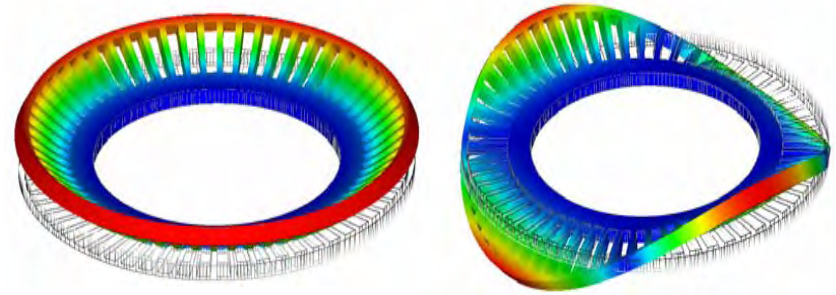
高解像度海洋大循環モデルでシミュレートした海面高度および海面水温

- どんなことが期待されるか？
  - 海流とその変動を正しく表現することにより、地球温暖化を中心とした気候変化をより高い精度で予測することが可能となる。
  - さらに高解像度の沿岸海洋モデルなどとリンクすることにより、地球温暖化などの気候変化が海洋を通して人間・社会に及ぼす影響(高潮、水産資源変化など)を信頼性高く評価することが可能となる。

分野名:工学

# 有限要素法による構造計算

- プログラム名:FrontSTR
- 開発
  - RSS21、HEC-MWチーム(東京大学、東大生研)
- 概要
  - 有限要素法による構造解析プログラム(静解析、非線形解析、動解析、熱伝導解析)
  - 計算機プラットフォームの性能を引き出すためのミドルウェアへの対応(Windowsマシンを用いた並列計算などにも対応)。
  - 並列可視化機能
- アルゴリズム
  - 3次元シェル、ソリッド要素、1次、2次要素
  - 線形方程式解法(反復解法、直接解法)
  - 領域分割(Metisによるグラフ分割)
- 現状での計算規模
  - 線形静解析(3000万節点、64 CPU、5時間)
  - 固有値(30万節点、4 CPU、6時間)
- 次世代スパコンでの計算規模
  - モデル規模、1億点以上
  - 線形静解析、固有値解析、非線形解析
  - 最適化、連成計算の大規模解析



タービンローターの固有値解析

- どのようなことが期待されるか？
  - 詳細な解析により未知の現象が見い出される(現状の解析より3次元方向にそれぞれ10倍程度の細かさを可能にする)。
  - 大規模モデルおよび詳細なモデルを用いた、最適化や連成解析の繰り返し解析計算において、計算時間が大幅に短縮される。

分野名:工学

# 有限差分法によるキャビテーション流れの 非定常計算

■ プログラム名: Cavitation

■ 開発

- 東京大学工学系研究科 教授 松本洋一郎
- 理化学研究所 研究員 沖田浩平

■ 概要

- キャビテーションは液体中に存在する微小気泡核が相変化を伴って急激に膨張、収縮、崩壊する現象であり、液体と気体が混ざった非常に複雑な流れ場を形成する。この現象をキャビテーションモデルおよび乱流モデルを含む基礎方程式群によって表現する。

■ アルゴリズム

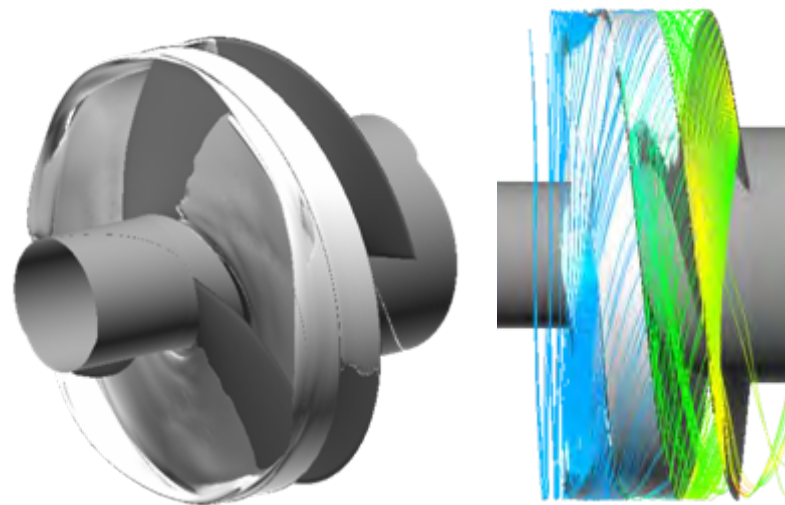
- 非圧縮性流れのFractional Step法に準じた時間積分
- Fortran言語、領域分割による共有・分散メモリ並列

■ 現状での計算規模

- 約 300 万格子点の計算でメモリ 容量12 GB、ディスク容量 2 TB
- 実効性能 60 GFLOPS(NEC SX-6 24CPU利用)

■ 次世代スパコンでの計算規模

- 格子点数 1000 倍および時間解像度 10 倍により、計 1 万倍の計算量
- メモリ容量 12 TB、ディスク容量 2 PB



インデューサに発生するキャビテーション流れの様子

協力: IHI

■ どんないことが期待されるか？

- キャビテーションは、流体機械や配管システムにおいて、不安定現象や構造物の材料損傷を引き起こす。現状では、キャビテーション気泡群の崩壊によって生じる材料損傷の予測はできていないが、メソスケールの気泡群の挙動および乱流渦との干渉を考慮した高い時空間解像度の計算によって、高精度な予測が可能となることが期待される。

分野名:工学

# 航空・宇宙機解析における圧縮性 流体計算

■ プログラム名: LANS

■ 開発

□ 宇宙航空研究開発機構 教授 藤井孝藏

■ 概要

□ 航空・宇宙機全機周りで発生する乱流遷移の予測と遷移に至る流れメカニズムの解明を行う。

□ 粘性圧縮性流体の運動方程式を解く。

■ アルゴリズム

□ 時間 2 次空間 6 次の精度、境界適合座標系

□ FORTRAN77/90

□ MPI 並列

■ 現状での計算規模

□ 格子点数  $150 \times 100 \times 200$

□ ISAS SX-6、1ノードで 3 GFlops

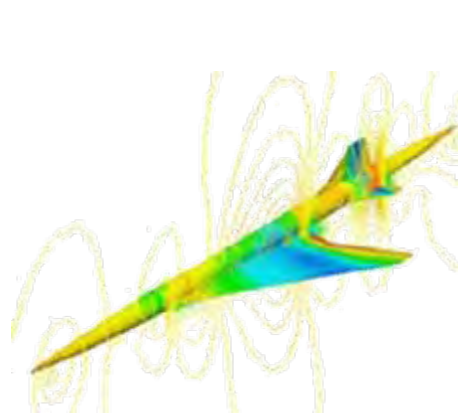
□ メモリ容量 3 GB、ディスク容量 208 GB(非定常データ)

■ 次世代スパコンでの計算規模

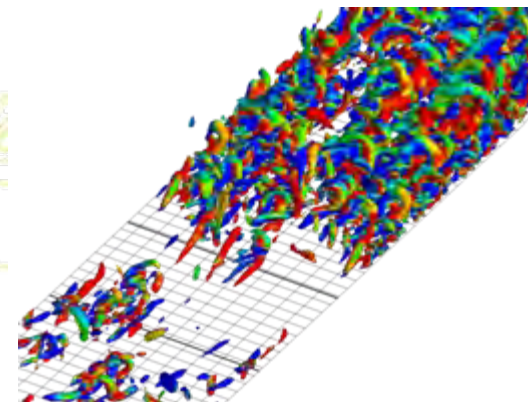
□ 格子点数  $5000 \times 5000 \times 1000$

□ 格子点数が約 8000 倍で、計算量も約 8000 倍

□ 使用メモリ量 24 TB, 使用ディスク容量 1.6 PB



小型超音速実験機まわりの  
圧力分布



乱流に遷移する渦構造の発達

■ どんなことが期待されるか？

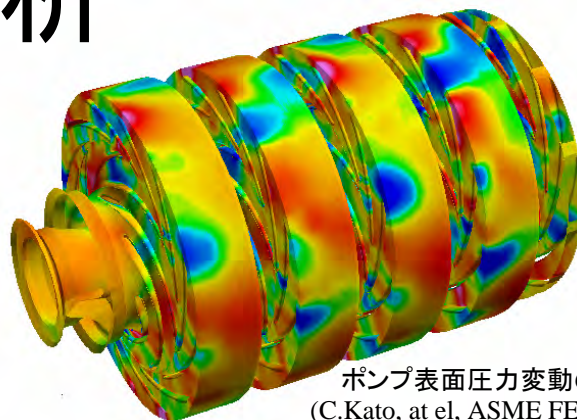
□ 実機形態での胴体と翼等が干渉した際に起こる、翼面上や胴体部における乱流遷移の定量的な予測とその流れメカニズムを解明することが期待される。

□ 乱流遷移現象の予測と解明に基づいた乱流制御技術等とのカップリングにより、現行機や将来的な航空・宇宙機における大幅な空力特性の改善や、飛行時の緊急操作時の事象予測、概念設計に活かされる。(実作業への期待)



分野名:工学

# Large Eddy Simulation (LES)に 基づく非定常流体解析



ポンプ表面圧力変動の予測結果  
(C.Kato, et al, ASME FEDSM2005-77312)

- プログラム名: FrontFlow/Blue
- 開発
  - 東京大学生産技術研究所 教授 加藤千幸
- 概要
  - 乱流現象の高精度予測が可能である Large Eddy Simulation に基づく流体解析コード。
  - 主に乱流騒音およびターボ機械内部流れの解析。
- アルゴリズム
  - 時間・空間ともに 2 次精度をもつ有限要素法
  - オーバーセット法によるマルチフレーム機能
  - 領域分割による並列処理
- 現状での計算規模
  - 要素数: 5億 ( $5 \times 10^8$ ) 要素 (六面体)
  - 地球シミュレータ480 ノードで実効性能 4.6 TFLOPS
  - メモリ容量 2.0 TB、ディスク容量 1.0 TB
- 次世代スパコンでの計算規模
  - 要素数: 1兆 ( $10^{12}$ ) 要素 (六面体)
  - 現状の 2,000 倍程度計算規模
  - メモリ容量 4.0 PB、ディスク容量 2.0 PB

## ■ どんなことが期待されるか？

- ほとんどの種類の流体機械中の流れ場に対し、直接的な乱流解析が可能となる。これにより、実用計算において格子解像度に依存しない高精度な乱流現象の予測が実現される。
- 流体騒音の予測精度や、ターボ機械内部の非定常現象 (例えばキャビテーションや非定常流体力) の予測精度が飛躍的に向上する。この結果、乱流現象の理解に基づく高度な設計技術に貢献することができる。