



次世代IT基盤構築のための研究開発

イノベーション創出の基盤となる

シミュレーションソフトウェアの研究開発

研究開発課題:「イノベーション基盤シミュレーション
ソフトウェアの研究開発」
事後評価報告

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

報告内容

研究開発の概要と目標

研究開発体制

研究開発成果

成果の広報・普及状況

人材育成

研究開発の概要と目標

プロジェクト全体の成果目標と研究計画

成果目標

- ・産業イノベーション創出の基盤となる、世界最先端の複雑・大規模シミュレーションソフトウェアを研究開発し、産学官連携体制によりその普及を行う

研究開発の概要

- ・大学等研究機関保有のシーズソフトウェアを基に、産業界のニーズに直接応用可能なソフトウェアを開発
- ・革新的高速化・超並列化手法の研究開発により、10万CPU(100万コア)規模の次世代スパコンにも対応
- ・計算精度の検証に留まることなく、産業上の利用効果(ブレイクスルー術)を実証

開発期間と研究計画

- ・平成20年10月～平成25年3月(4年6ヶ月)
- ・平成22年6月までにプロトタイプソフトウェアを開発・公開
- ・平成23年度、24年度に産業上の利用効果を実証、ソフトウェアの改良

研究開発の背景と研究開発戦略

研究開発戦略(独創性、勝つための戦略)

革新的なシーズソフトウェアの活用(戦略、革新、クレスト等)

産業界との協議による、徹底的なニーズとシーズのマッチング

(開発テーマ選定、ソフトウェア仕様策定、実証研究→フィードバック)

次世代スパコンプロジェクトとの連携による、ソフトウェアの高速化、超並列化の実施

大規模データを設計者が容易に扱えるためのIF機能の抜本的強化

プロトタイプ早期開発による、設計現場でのソフトウェアの使い込み(2年間でβバージョン公開)

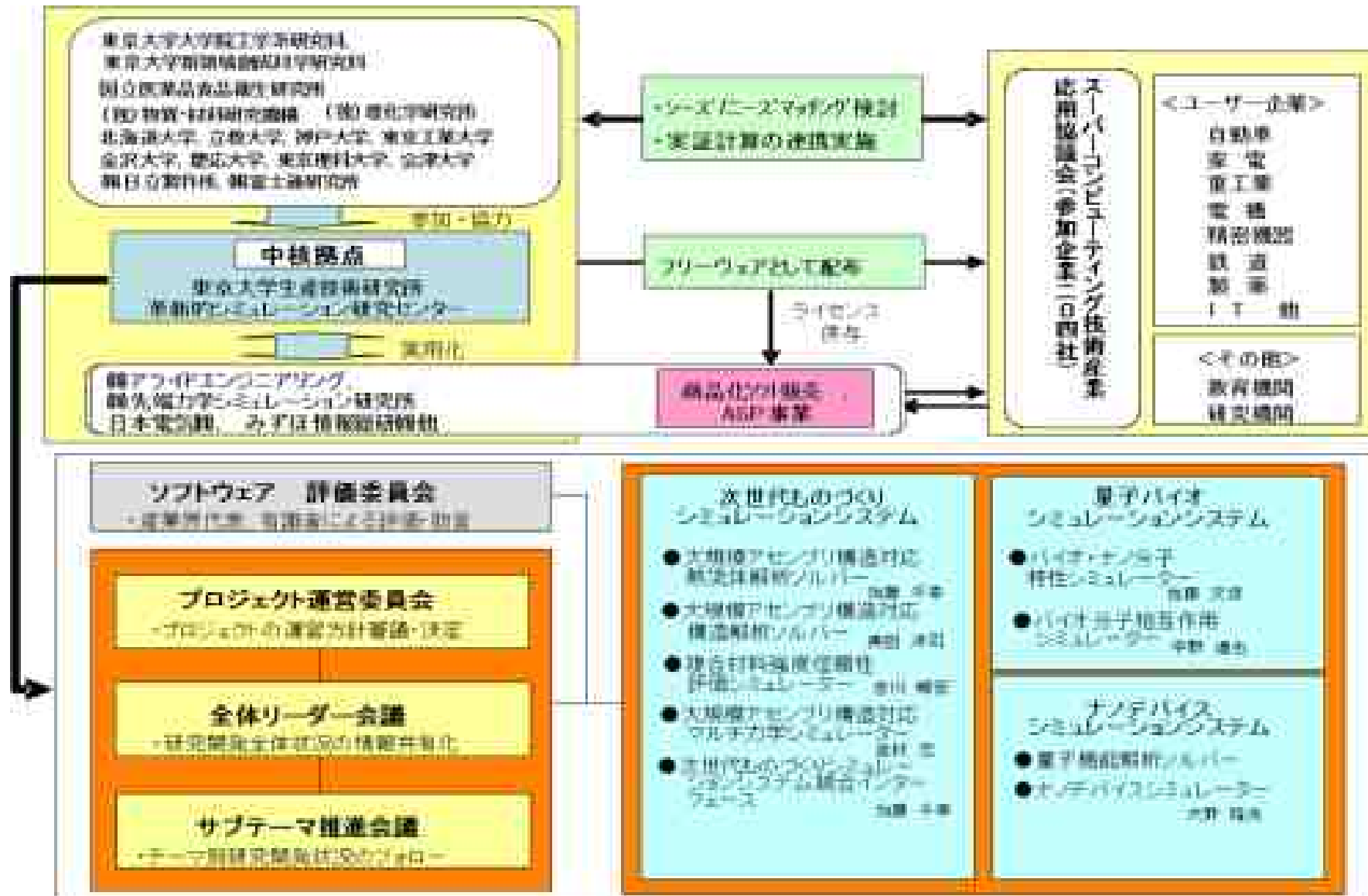
ソフトウェア毎の自立的展開策の策定と実践

ものづくり分野のHPCシミュレーションを強力に牽引

研究開発体制

プロジェクトの実施体制

■ 研究者：68名、事業費：総額約23億円



推進体制

種 別	役 割	開催頻度	委員 / メンバー
プロジェクト 運営委員会	<ul style="list-style-type: none"> 基本方針、資源配分決定 PJ全体の運営・統括 	1回/2～3月	委員：天野PO 有信、小林、中埜、野城、安田(有識者) 上田、矢野(産業界) 加藤、吉村、佐藤、大野、畑田(PJ)
商用権許諾 審査委員会	<ul style="list-style-type: none"> 商用ライセンス可否判定 	適宜	上記委員が兼任
同審査WG	<ul style="list-style-type: none"> 上記案策定・答申 	適宜	PJ代表：加藤、知財委員会：畑田
全 体 リーダー会議	<ul style="list-style-type: none"> PJ全体方針・施策の 周知徹底・情報交換 	1回/3月	<ul style="list-style-type: none"> リーダー・サブリーダー以上全員 事務・管理G
サブテーマ 推進会議	<ul style="list-style-type: none"> 各サブテーマ毎の スケジュール・成果管理 	1回/ サブテーマ・月	<ul style="list-style-type: none"> 各サブテーマ/リーダー・サブリーダー + α 管理G
知的財産権 検討委員会	<ul style="list-style-type: none"> PJ成果物の知財関連 ルールの決定・変更 	適宜	<ul style="list-style-type: none"> PJ代表 各サブテーマリーダー
計算機 管理委員会	<ul style="list-style-type: none"> ネットワ-ク・リソース 配分の審議・決定 	適宜	<ul style="list-style-type: none"> 各サブテーマ計算機担当委員
広報委員会	<ul style="list-style-type: none"> PJ成果のPR活動戦略 策定・実行 (シンポ、W/S、NEWS、プレス発表等) 	適宜	<ul style="list-style-type: none"> web-WG、NEWS-WG その他、各行事対応WG(必要により設置)
ソフトウェア 評価委員会	<ul style="list-style-type: none"> 外部有識者、産業界代表 による評価・助言 	適宜	<ul style="list-style-type: none"> シミュレーション、産業イノベーション関係に 造詣の深い外部委員を選定・委嘱

実用化評価委員会

■ 目的

開発するシミュレーションソフトウェアについて、イノベーション創出に資するソフトウェアとしての目標仕様・研究開発内容に関する的確性・達成度の観点から内部ソフトウェア評価委員会を設け評価を平成21年度に実施した。

■ 開催方法

分野別に評価委員会を3回(ものづくり分野、量子バイオ分野、ナノデバイス分野)に分けて開催

■ 評価者

- ・ものづくり分野 (産業界)3名、(学識経験者)2名 計5名
- ・量子バイオ分野 (産業界)2名、(学識経験者)2名 計4名
- ・ナノデバイス分野(産業界)2名、(学識経験者)2名 計4名

■ 評価結果

ソフトウェアの利便性向上に更なる配慮が必要。例えば、ユーザーインターフェースの開発や事例集などのデータベースの充実が期待される。

内部評価委員会

■ 目的

評価の主たる視点・目的は、開発した各ソフトウェアが既存ソフト対して特に優位とする機能の確認とそれをベースとした今後の産業イノベーションへの貢献内容やソフトウェアの継続的发展施策について見究め、本プロジェクトの成果が発展的に社会に貢献するための指針を得ることとする。

■ 開催方法

平成25年5月2日にテーマリーダーの説明と質疑応答を各テーマ20分で実施

■ 評価者

- ・プロジェクトオフィサー 1名
- ・プロジェクト運営委員 5名、ソフトウェア別産業界委員 5名

■ 評価結果

ソフトウェアの革新性、普及状況ともに委員間での意見の相違はあるものの、全体的には一定の高い評価が成されたと判断する。

研究開発成果

公開したソフトウェア一覧

[] 次世代ものづくりシミュレーションシステムの研究開発

ソフトウェア名	目標	開発した機能	普及の状況
FrontFlow/blue 大規模アセンブリ構造 対応熱流体解析ソル バー	風洞試験、水槽試験、ループ試験などの 流体関連製品の試作試験を代替え。 実機製品の非定常熱流体現象の高精度 な予測の実現 ファン、送風機、自動車などから発生する 流体音の定量的予測を実現する。	1000億規模の大規模解析 乱流の準直接計算による乱 流現象の高精度予測	ターボ機械コンソ、自動車コンソの実 証計算を通じ、業界毎にユーザー拡大。 実務体験セミナーの実施やトライア ル利用環境の提供 HPCI戦略プログラムのアプリ維持・ 管理拠点の管理アプリに登録・普及。
FrontISTR 大規模アセンブリ構造 対応 構造解析ソルバー	実用的な非線形構造解析機能と、大規 模・並列・プログラマビリティに関する先進 性、の両面を備えたプログラム アセンブリ構造、流体・構造連成など、複 雑な実機製品の高精度な性能予測やメカニ ズムの解明 CAE現場での解析規模の拡 大、定量的予測精度の向上	階層データ構造による大規 模連成計算 マルチグリッド型反復解法に よる高速化 反復法ソルバ対応MPC機能 非線形、接触解析機能	FrontISTR研究会を発足。活動は、 セミナー開催、WEBへの資料・デー タのアーカイブ等。 新規ユーザーの獲得、継続的開発 を奥田研究室中心で生研CISS、産学 協会の協賛アクティビティで運営
FrontCOMP 複合材料強度信頼性評 価 シミュレーター	製造プロセスとマイクロ・メゾスケール構造に まで立ち入った炭素繊維強化プラスチック 機器設計の高度化を可能とするシミュレー ションソフトウェアの開発	炭素繊維束詳細モデル 樹脂硬化時残留ひずみ評価 熱/動荷重負荷による損傷 発展のマイクロスケール評価	HPCユーザー会FrontCOMP分科会 において講習会等実施
REVOCAP 大規模アセンブリ構造 対応 マルチ力学シミュレータ	次世代スパコンなどの超並列計算機環 境でも対応可能で自由自在なマルチ力学 解析が行えるシミュレータ(REVOCAP)を開 発し、実機アセンブリ構造を丸ごと対象とし た解析を実現	Refiner対応したマルチ力学 カップラ Refinerに渡す前段階(1億 DOF)程度対応プリポスト 大規模並列計算のための Refiner	REVOCAP_PrePostはFrontISTR分 科会の中で、FrontISTRから利用する ソフトとして普及 REVOCAP_RefinerはFrontFlow分科 会、FrontISTR分科会のなかで、それ ぞれFrontFlow、FrontISTRから利用す るソフトウェアとして普及。

公開したソフトウェア一覧(続き)

[] 量子バイオシミュレーションシステムの研究開発

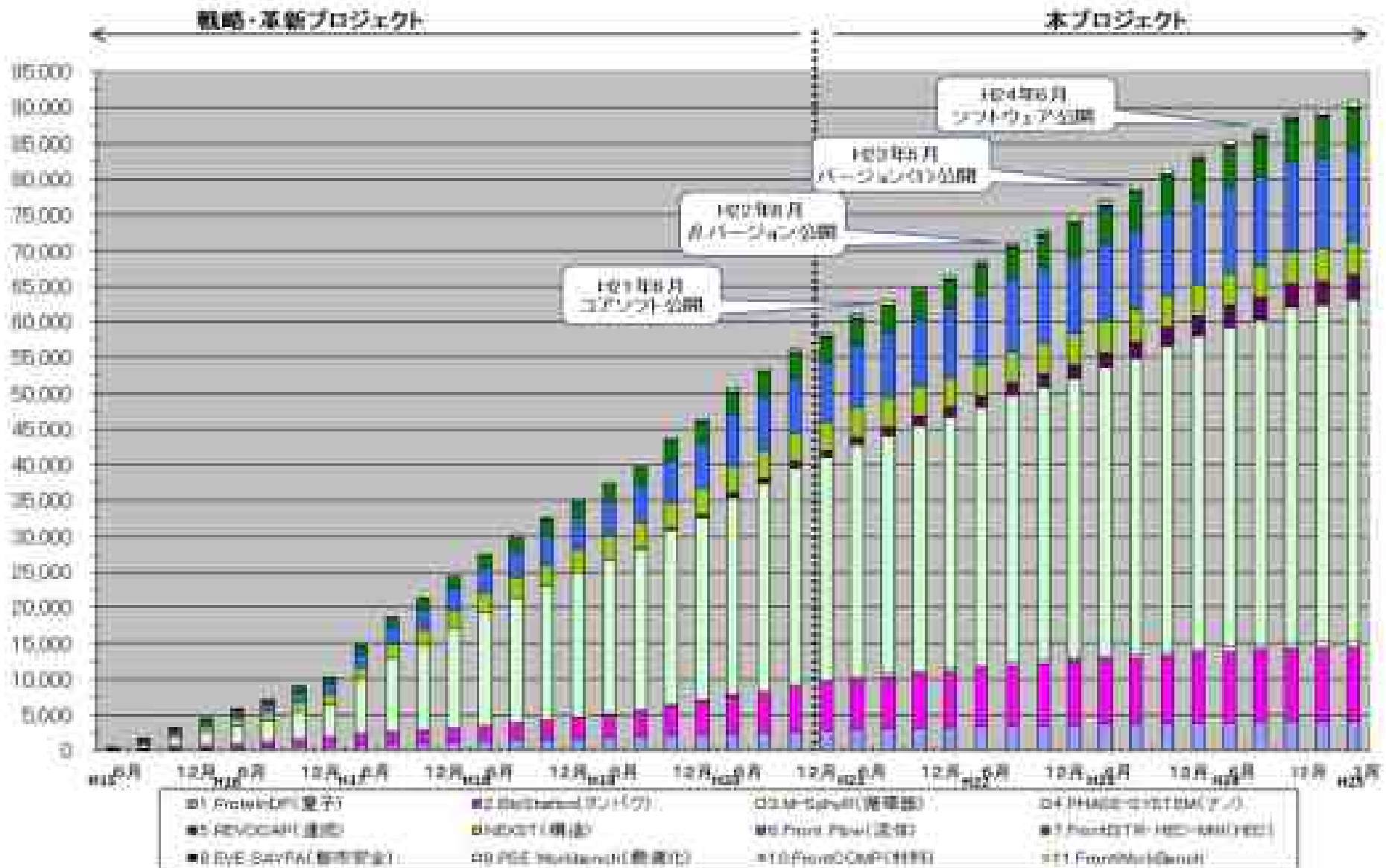
ソフトウェア名	目標	開発した機能	普及の状況
ProteinDF バイオ・ナノ分子特性シミュレーター	1000残基規模のタンパク質の標準DFTカノニカル分子軌道計算プログラムの開発。タンパク質の構造・機能といった化学的な性能の高精度な予測。高速エネルギー勾配計算を搭載し、タンパク質の量子動力学計算、精密物理量計算が可能。	タンパク質の物理量解析 タンパク質以外の大規模分子シミュレーション	バイオWGやCISSと連携した、WS、体験セミナーの実施やトライアル利用環境の提供。 パートナー企業との連携、普及。
ABINIT-MP BioStation Viewer バイオ分子相互作用シミュレーター	タンパク質と医薬品分子(リガンド)との定量的かつ詳細な相互作用解析をFMO法に基づく全量子論的計算で行えるシステムを構築。 複合的な高度並列化により、PCクラスター～スパコンで(ベクトル機も可)スケラブルな処理が可能	FMO法に基づいた高精度な相互作用解析 数千プロセッサを超えるベクトルおよびスカラー並列計算機を利用した超大規模計算が可能	バイオWGなどを通じて利用者のフォローの方針。製薬以外の化学系の企業にも利用を拡大するように学会やWSなどでアピール。

[] ナノデバイスシミュレーションシステムの研究開発

ソフトウェア名	目標	開発した機能	普及の状況
PHASE-SYSTEM 量子機能解析ソルバー、 ナノデバイスシミュレーター	ナノ構造物質の構造・物性を高精度に解析する第一原理プログラムを開発、実デバイスのナノ構造・ナノ界面で発現する機能の解析能力を向上、半導体デバイス、エネルギー変換デバイス等の開発における材料設計指針の構築に貢献。	Refinerにも対応したマルチ力学カップラ Refinerに渡す前段階(1億DOF)程度のプリ処理が行えるプリポスト 大規模並列計算のためのRefiner	ユーザー会の運営、Workshop・利用セミナーの定期的開催、ポータルサイトでの情報共有等「高効率電子デバイス材料研究コンソ」の実証計算を通し、産業界に普及。 HPCI戦略プログラムのアプリ維持・管理拠点で管理アプリに登録・普及。

公開したソフトウェアのダウンロード件数

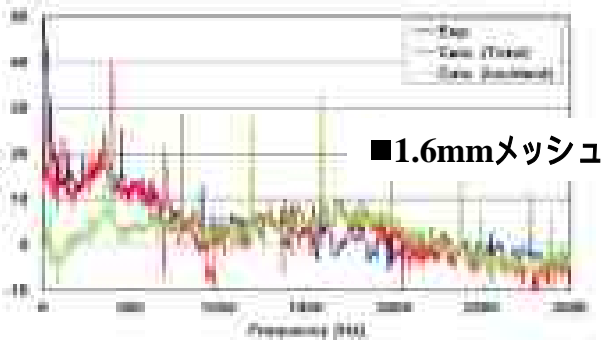
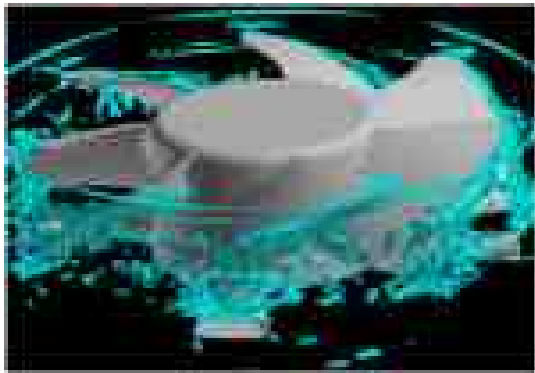
9万1千件以上(平成25年3月末現在)



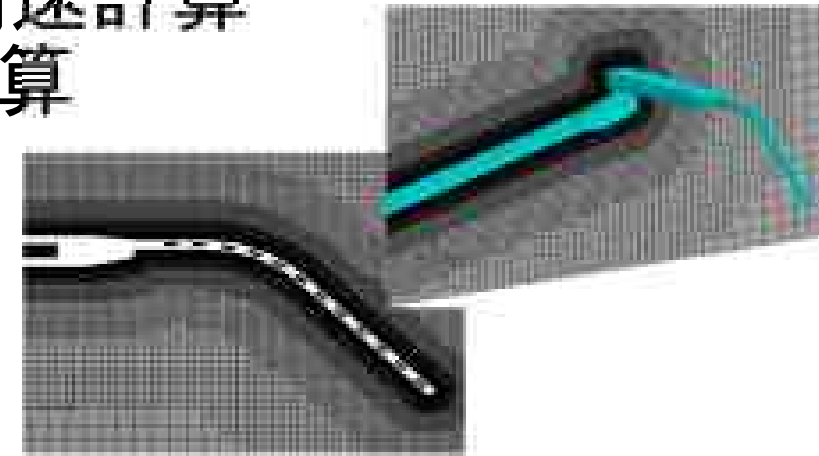
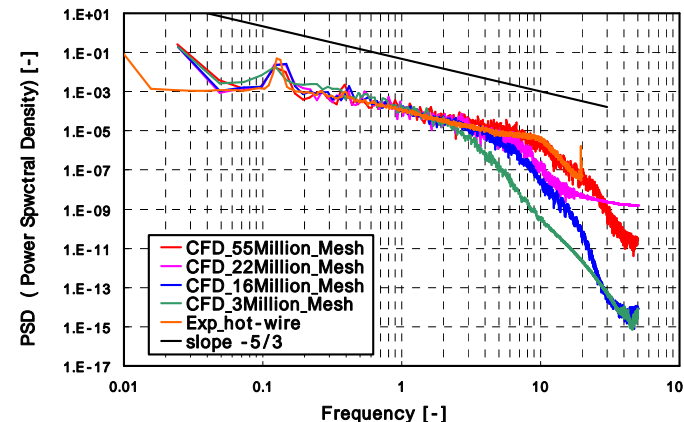
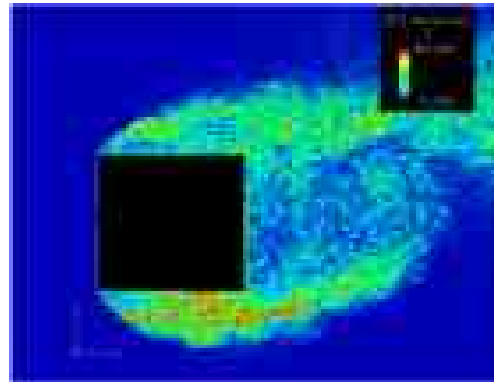
FrontFlow / blue

FFBの特長

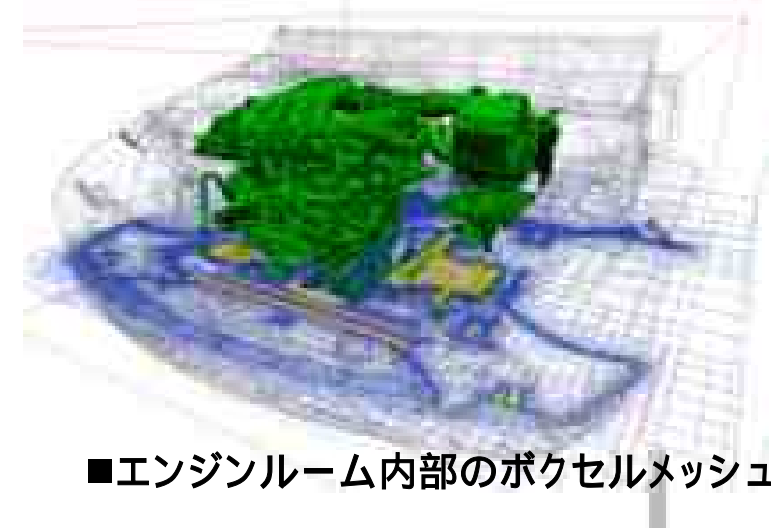
- 1,000億格子による乱流直接計算
- 計算格子の完全自動作成・自動細分化
- 高い並列化効率と実行性能による高速計算
- 数値粘性フリーな安定で高精度な計算



■ ファン騒音の予測



■ 新幹線パンタグラフまわりのボクセルメッシュ

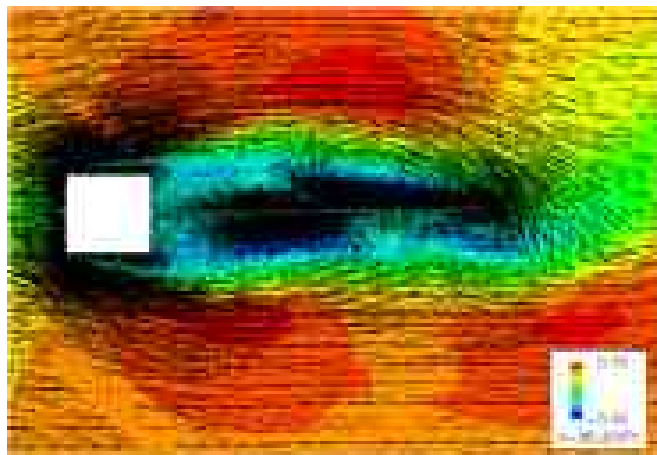


■ エンジンルーム内部のボクセルメッシュ

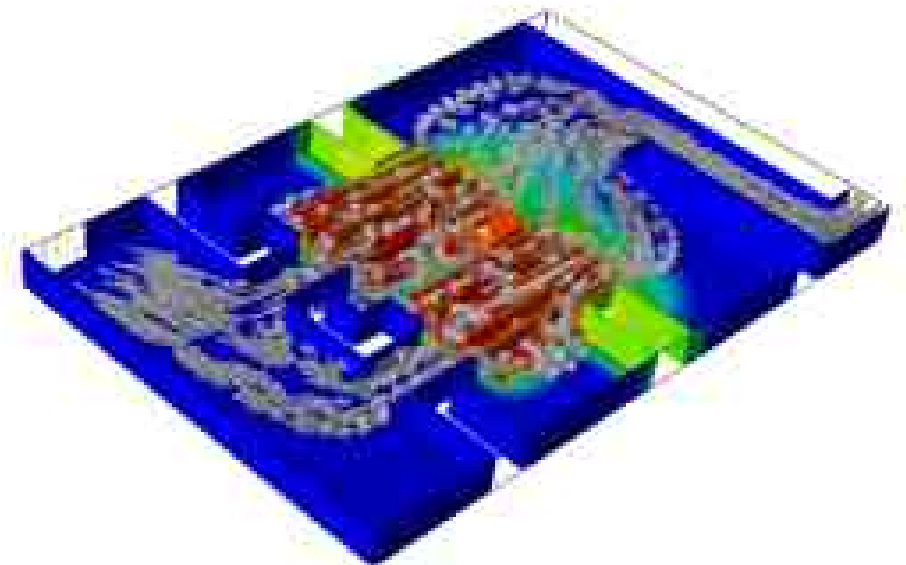
FFBの主要解析機能 1/2：一般機能

非圧縮流体解析システムがカバーすべき機能をサポート

- 乱流解析: LES (SSM、DSM)、DES、RANS(SA)
- オーバーセットメッシュ・スライディングメッシュにより、流体機械に適用可能
- 熱流体解析機能 (固体内熱伝導、自然対流)
- キャビテーション解析機能 (均質媒体モデル)
- ALE法による流体構造連成解析
- VOF法による混相流解析機能



■フィンつき角柱まわり流れの流体構造連成解析



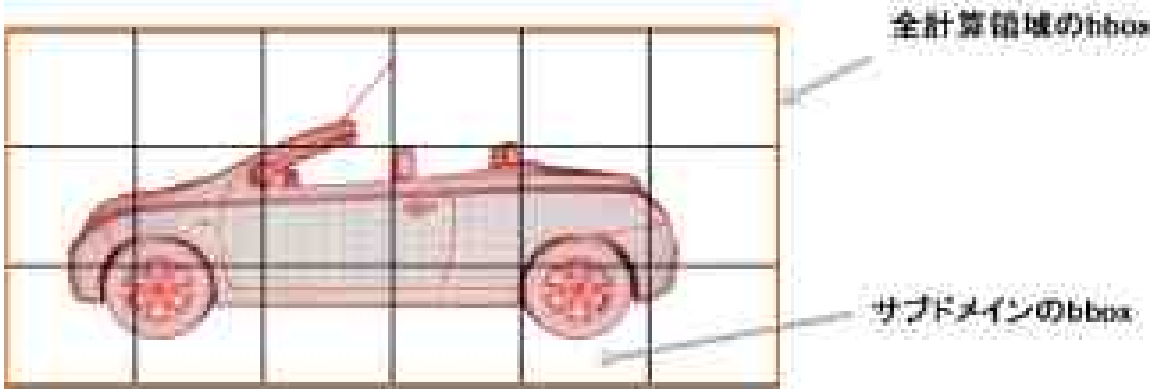
■簡易サーバモデル内熱流動解析

FFBの主要解析機能 2/2：大規模解析技術

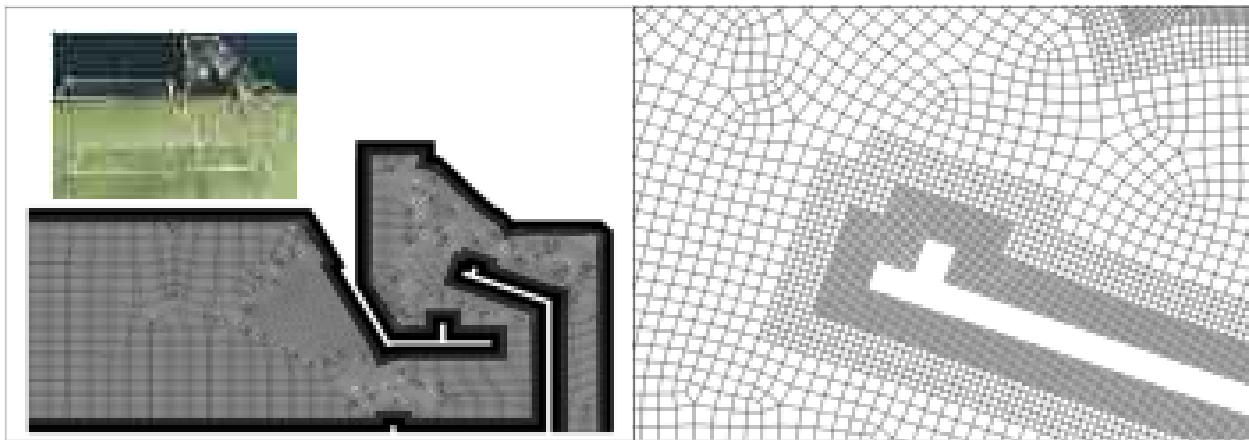
100万コア、1000億グリッドの大規模解析を実現

- スカラマシン向け高速動作技術
 - MPI並列、スレッド並列のハイブリッド対応
 - ピーク性能比 4~8%
 - 高い並列化効率
- 規模の制約をうけない大規模メッシュ技術
 - メッシュ自動細分化機能(計算実行中)
 - ボクセルメッシュ自動生成機能(計算実行中)
- 収束性の優れるIDRマトリックスソルバー
- FWB(ユーザーIF)のガイド機能により、大規模解析を容易に実行することが可能

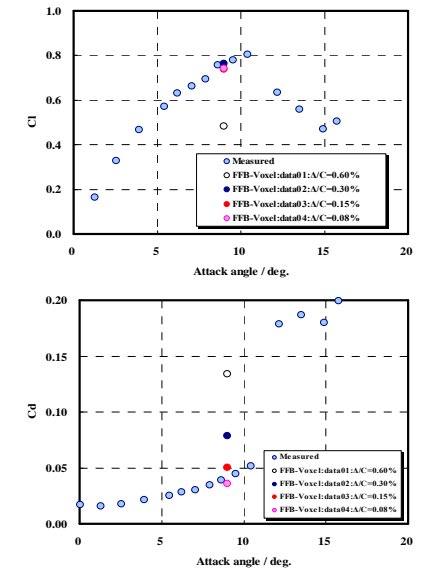
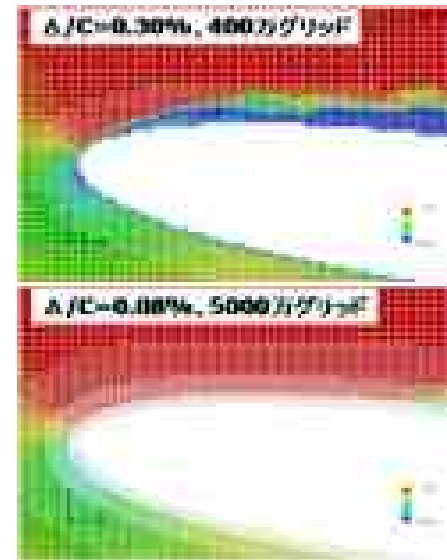
1000億グリッド規模の乱流直接計算を実現する大規模解析技術



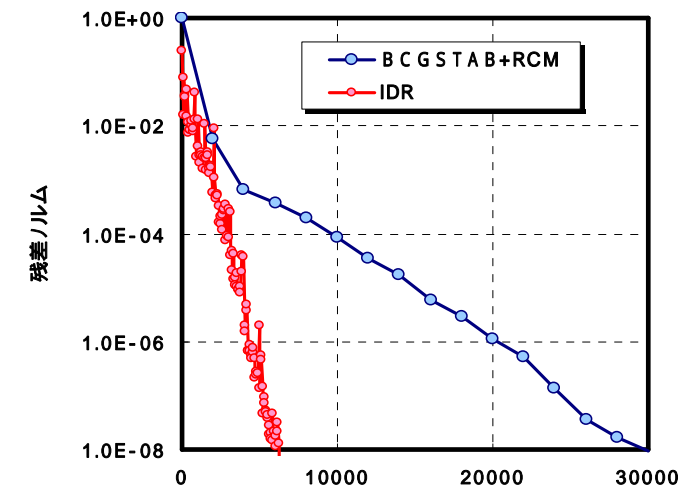
ボクセルメッシュ作成ツールとのデータI.F.
(計算直前に形状データよりメッシュを自動作成する機能をサポート)



計算実行中にメッシュを局所的に自動細分化



ボクセルメッシュ計算機能
(2次元翼NACA0012の空力性能予測)



IDRマトリックスソルバーによる収束性の向上
(音響解析における残差履歴)

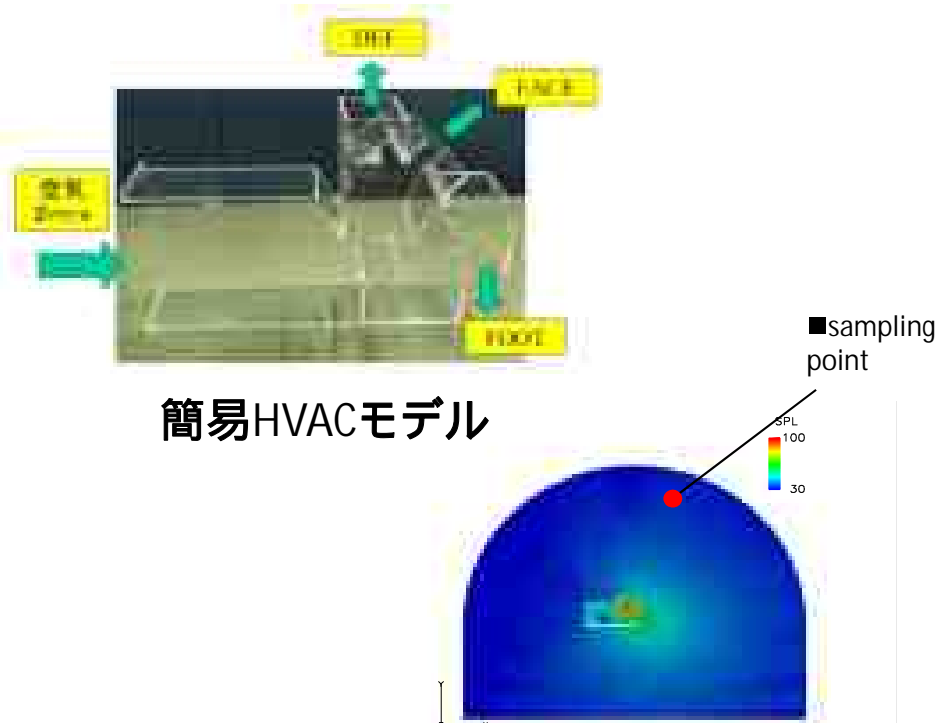
音響解析システム FFB-A

【特長】

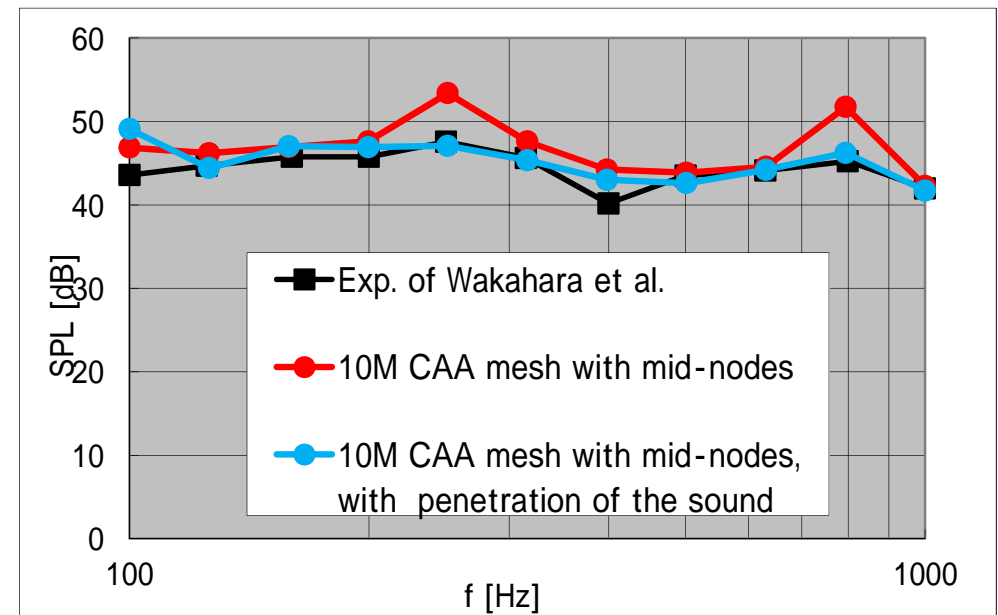
- ・ 周波数領域におけるヘルムホルツ方程式ソルバー
- ・ 10億グリッド規模の大規模音響解析をサポート
- ・ 多様なメッシュタイプをサポート(六面体、四面体、三角柱、ピラミッド、ボクセルメッシュ)
- ・ 流体音響連成解析機能(流体:FFB, 音響:FFB-A)
- ・ 音源データとして、渦音源、表面圧力変動、点音源をサポート

【解析事例】

簡易HVACモデルから発生する空力騒音の予測

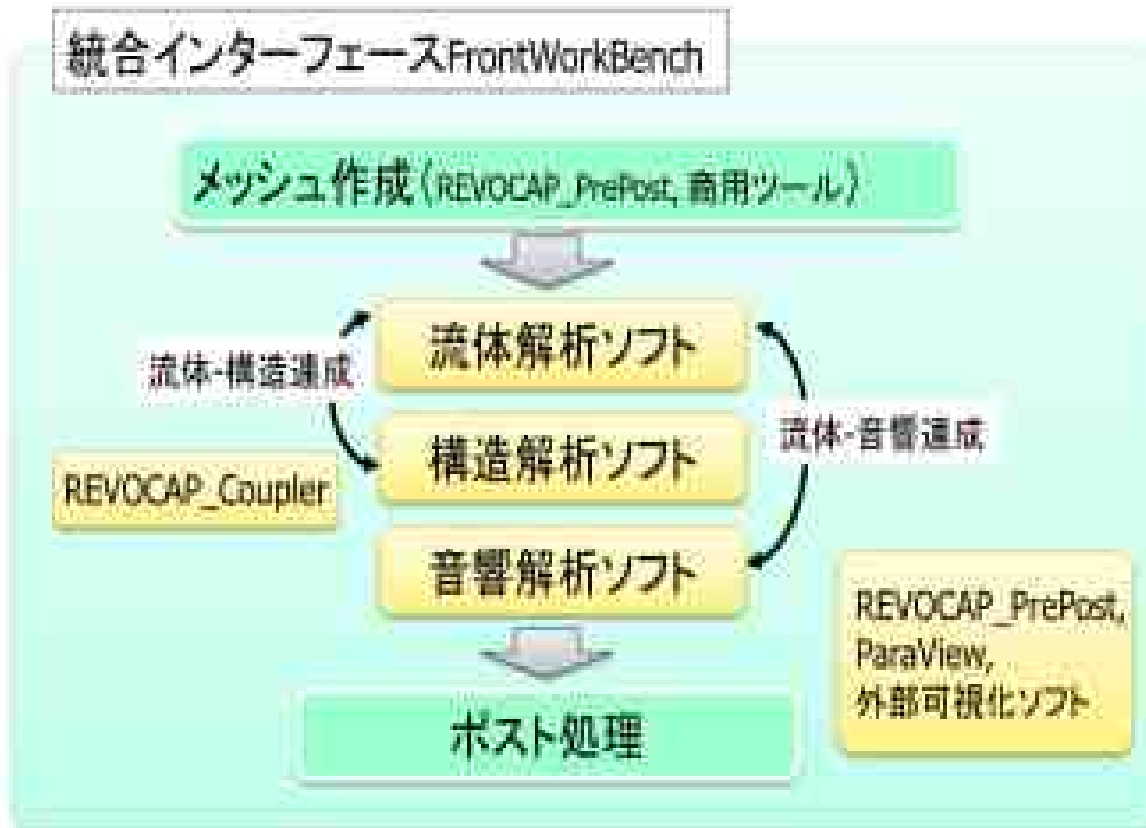


計算された音響場の可視化結果(836Hz)



音圧レベル((1/3オクターブバンド)の比較)

統合ユーザーインターフェース FrontWorkBench



FWBでの解析処理の流れ

- 次世代ものづくりシミュレーションシステムを統合化
 - FFB, FISTR, FFB-Acoustics, REVOCAP連成システムを用いた一連の解析を実行
- 設計者が使える設計ツール
 - データの自動管理等、ユーザの利便性を考慮
- 商用を含めた外部ツールと連携
 - 外部メッシュや可視化ツールとのデータインターフェース
- 業界毎に特化した機能
 - 流体機械の性能評価ツール、連成解析用ツールのような専用ツール化

統合ユーザーインターフェース FrontWorkBench

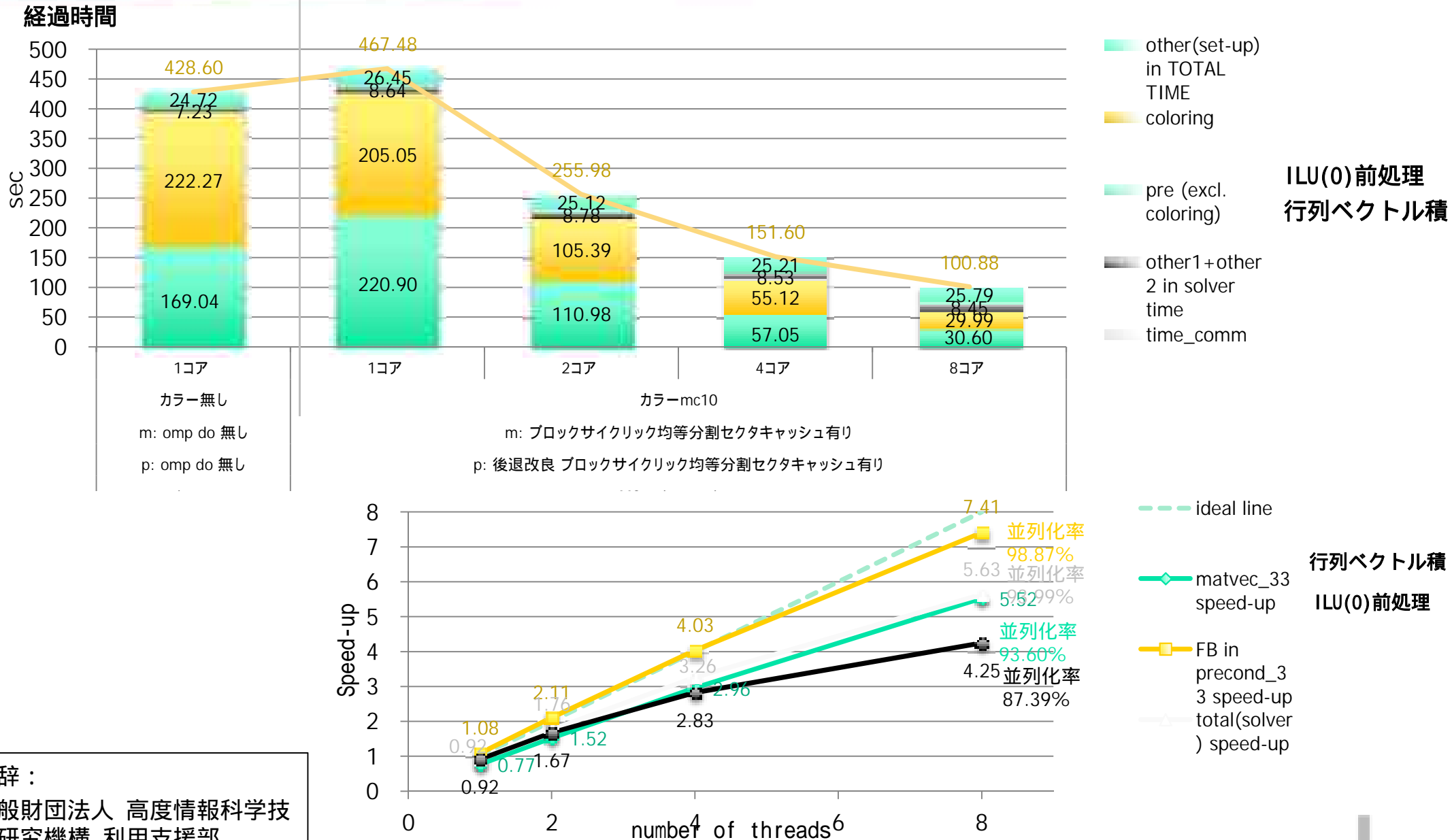


FWB実行イメージ

- 単独解析, 連成解析の実行
 - FFB, FISTR, FFB-Acoustics, 流体-構造、流体-音響連成
- データ管理
 - プロジェクト単位でのデータの自動管理
- 解析支援
 - 実行ジョブの履歴保持, ジョブモニター, ポスト処理
 - ヘルプ機能の充実、音声ガイド
- リモートマシン対応
 - リモートマシン(Linuxクラスタ)での起動が可能
 - 外部マシンでのジョブ実行のためのファイル転送準備機能

FrontISTR

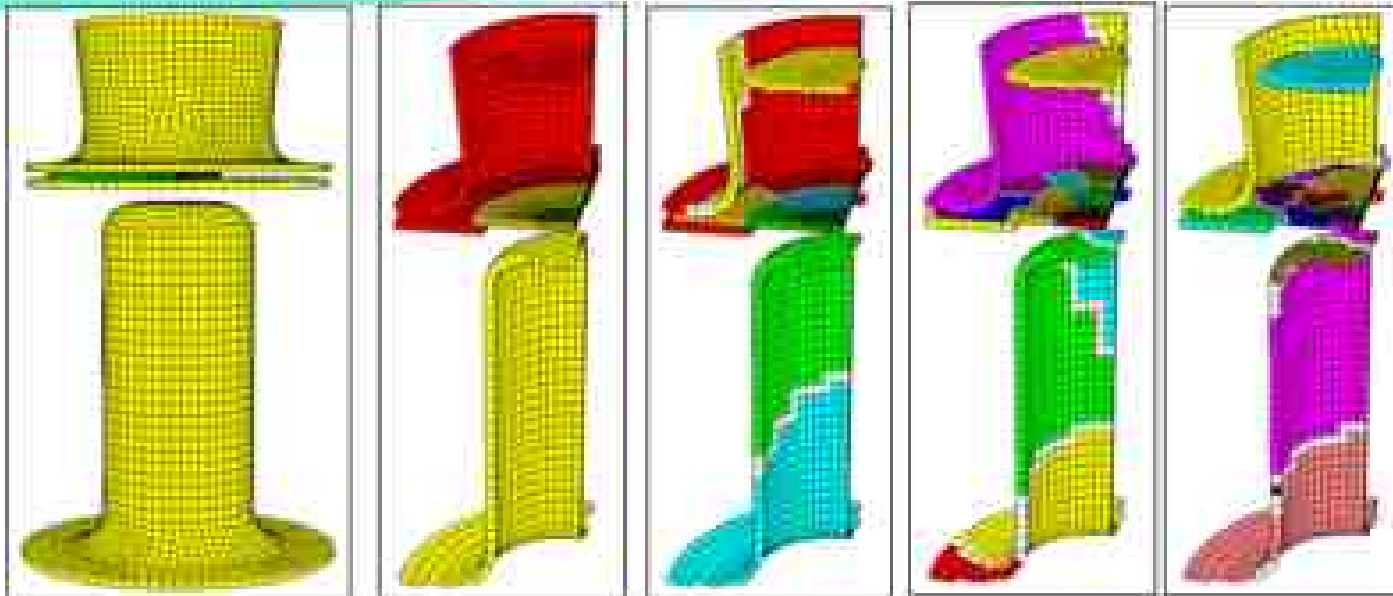
FrontISTR ホットスポット部 京におけるスレッド (CPU単体) 性能



謝辞：
一般財団法人 高度情報科学技術
研究機構 利用支援部

主なH24年度新規開発機能

並列接触解析機能の拡充



2領域

4領域

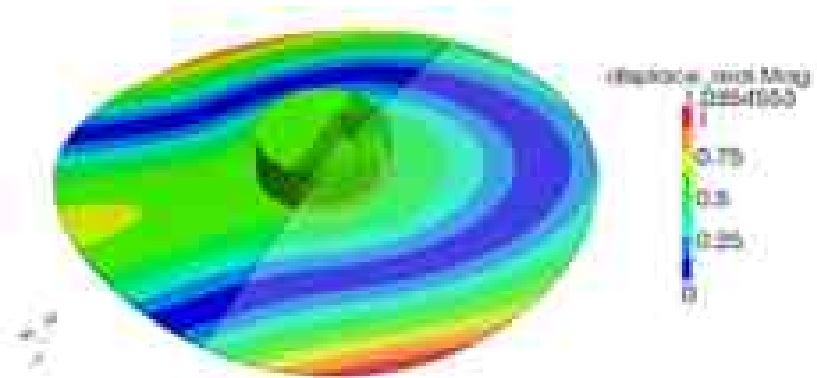
8領域

16領域

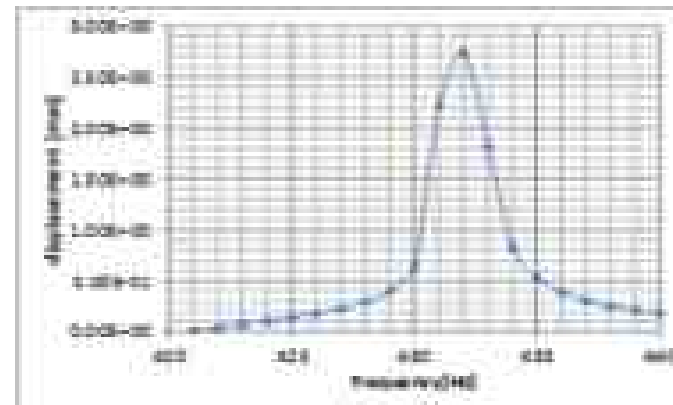
より一般的な接触状態の領域分割に対応した接触解析が可能となった

円筒絞りプレス成形解析（静的接触解析、弾塑性材料を含む材料非線形問題）

周波数応答解析機能



変位コンター



周波数応答

圧電素子の周波数応答解析、430Hzの加振

プリント配線基板熱反り解析

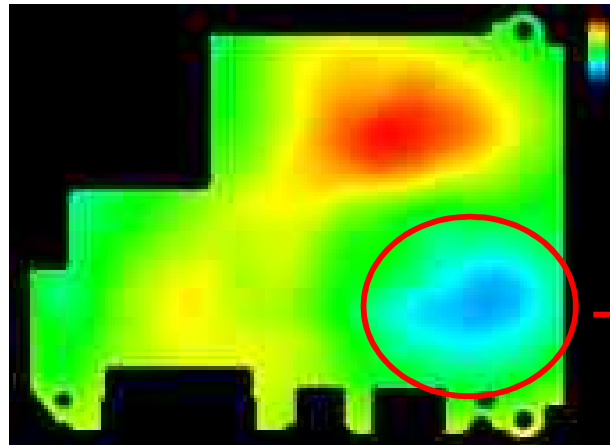
- REVOCAP_Refinerを使用し、25億節点の解析を「京」で実施
- 並列数：65,536コア 実行時間：13.7h FLOPS対ピーク性能比：4.2%

オリジナル

要素数：38,689,706 節点数：41,044,244

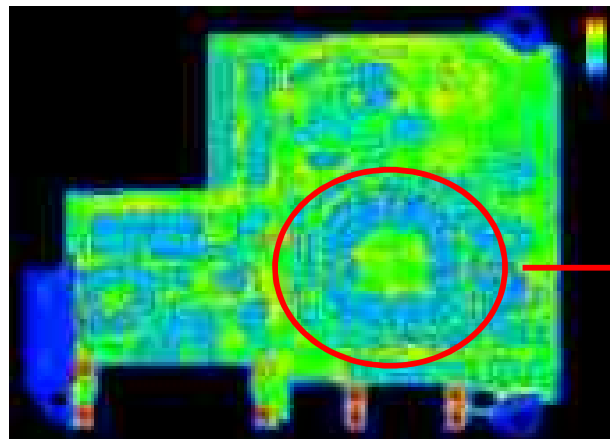
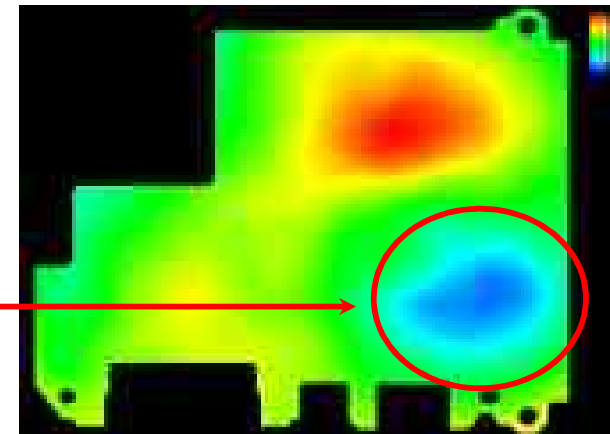
2回リファイン (最小メッシュ 7.5 μ m)

要素数：2,476,141,184 節点数：2,513,793,437



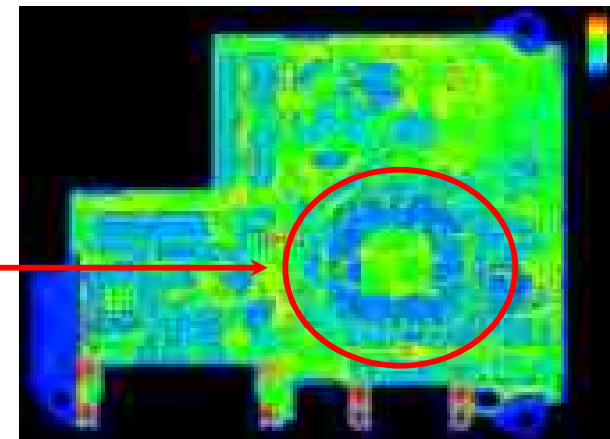
z方向変位

11%大きい



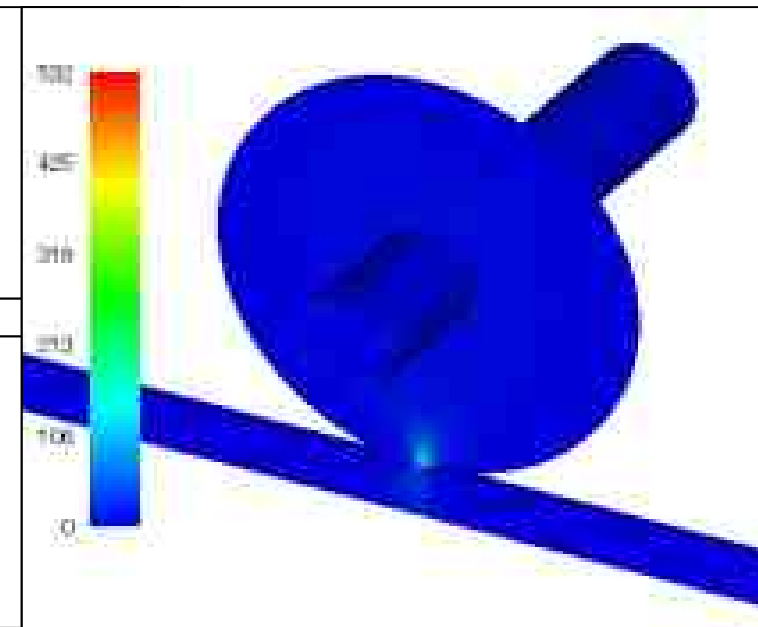
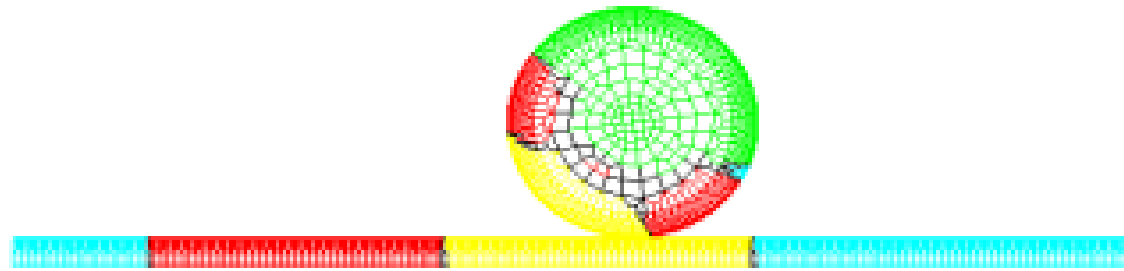
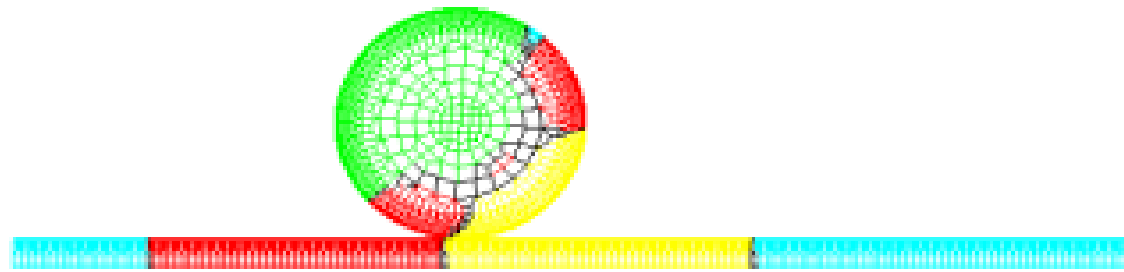
ミーゼス応力

変位に応じて高い



車輪・レールの転がり動的接触解析

- 目的: 車輪・レール間での動的な接触状態の変化による磨耗、損傷、亀裂など固有の破壊現象のメカニズム解明
- 分散並列環境における接触解析機能の適用性を実証



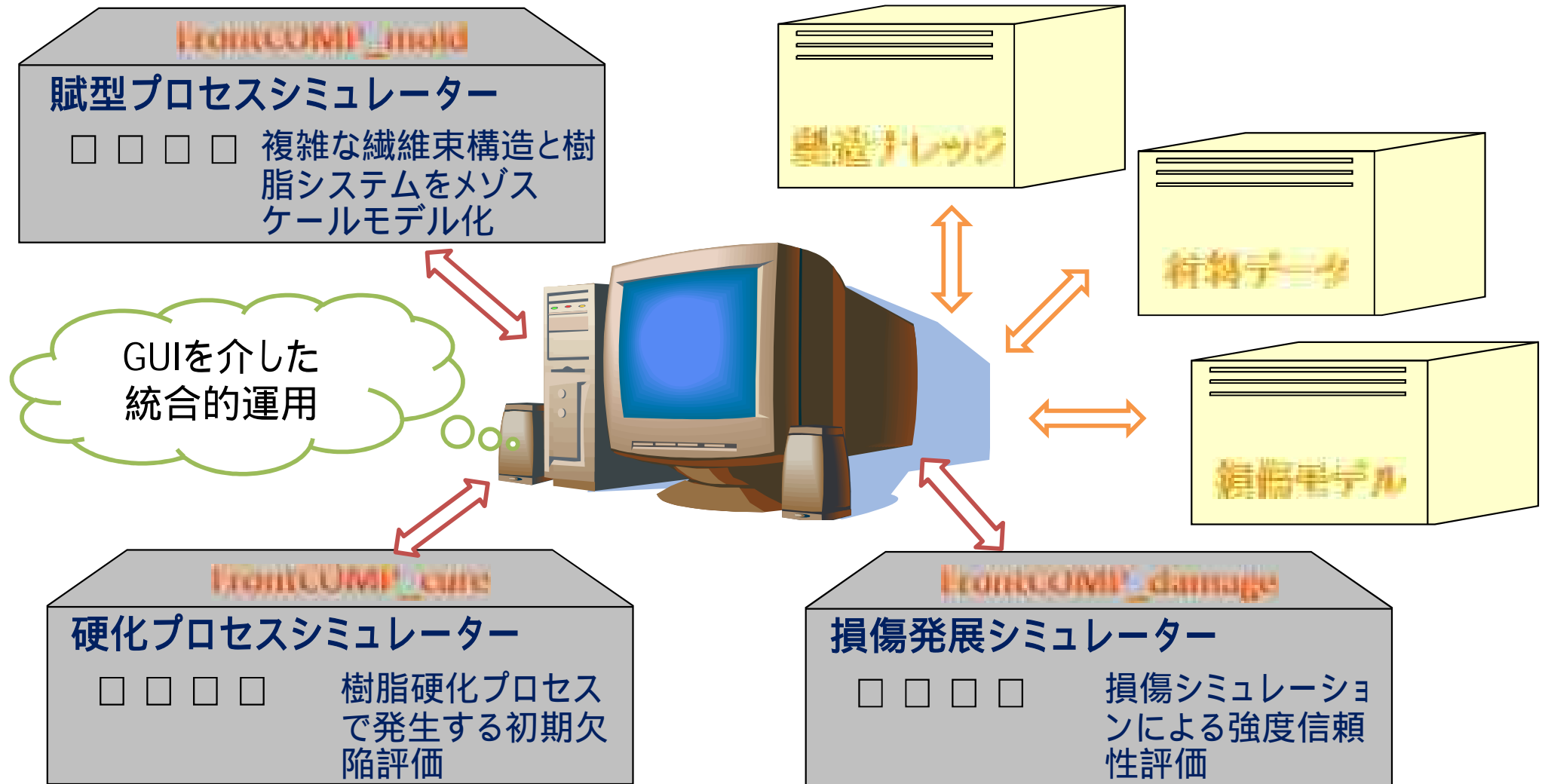
領域分割された状態で回転接触する車輪・レール

ミーゼス応力分布

- ・ 静止状態から約250Km/hまで安定した加速（特許：キャタピラメッシュ機能）
- ・ 良好なロードバランス
- ・ レール表面不整、実モデル、など地球シミュレータで解析実施中

FrontCOMP

FrontCOMPの構成



高度な信頼性評価に基づく 製造プロセスまで含めた
炭素繊維強化プラスチック (FRP) の最適設計！

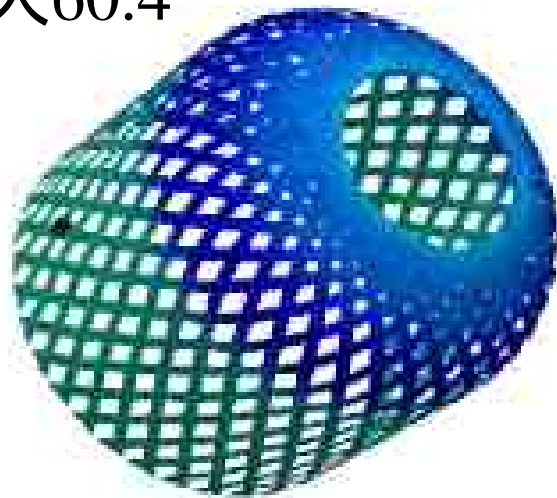
トウプリプレグの適用性評価



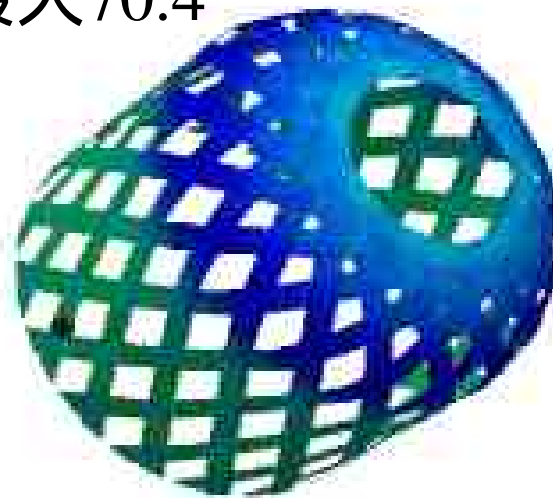
最大60.4

最大70.4

最大77.7



Model A

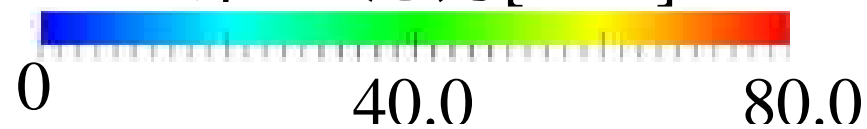


Model B

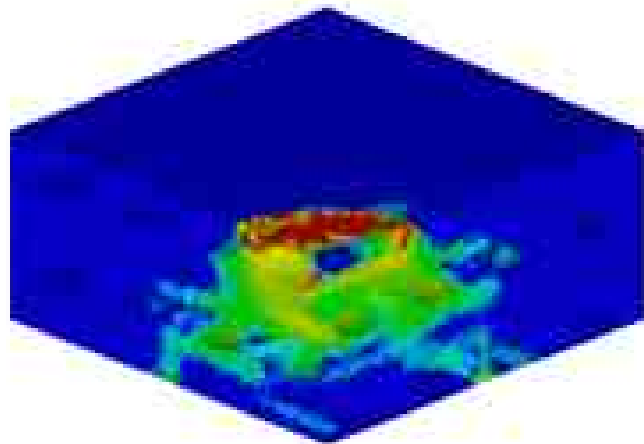
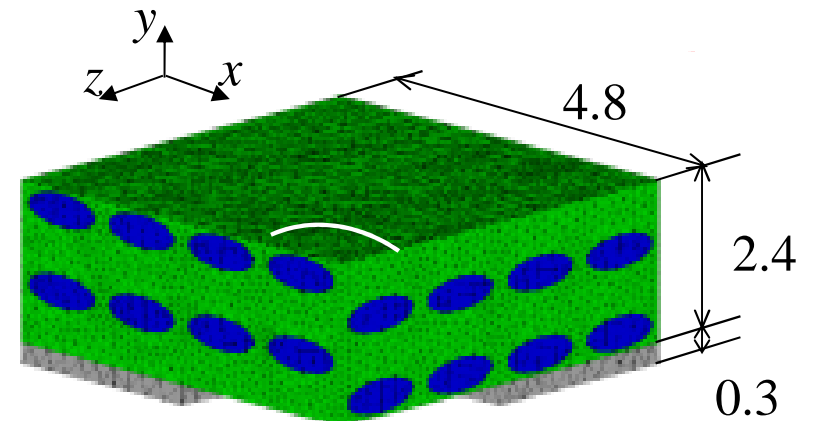
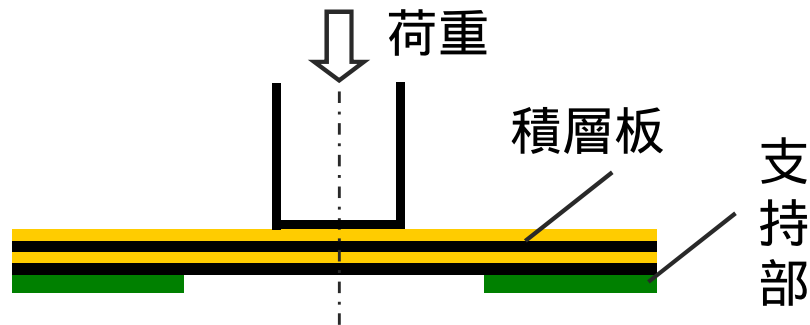


Model C

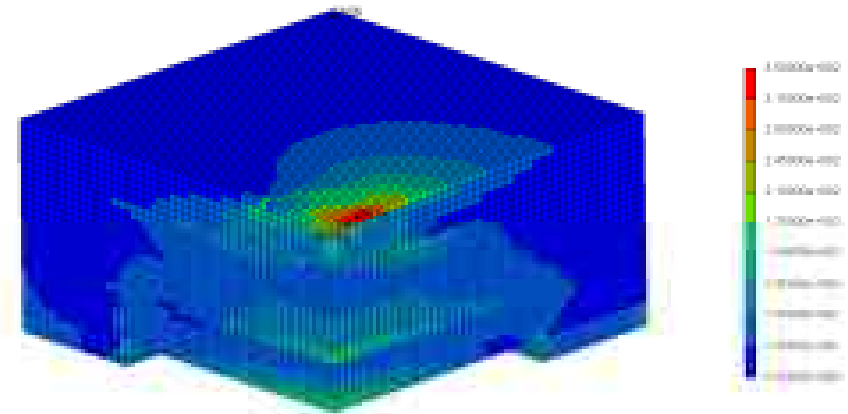
第1主応力[MPa]



面外荷重による層間損傷発展の評価

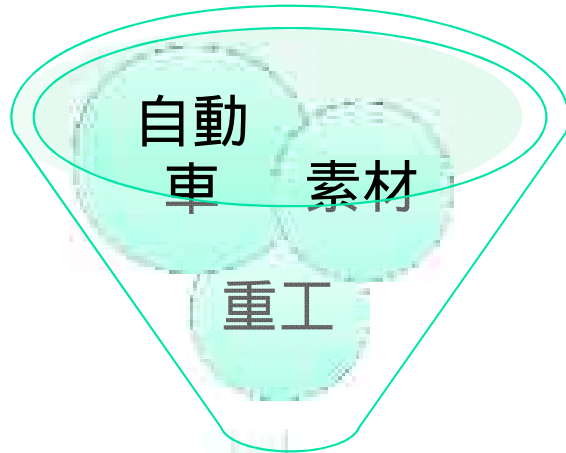


メソスケールモデルにより
評価された樹脂損傷



連続体モデルでは
界面に損傷が集中

ユーザー会を中核とする開発から普及への展開



ソフトウェア開発:
東大, ASTOM

仕様策定
基本性能決定
フィージビリティ
スタディ

ソルバー基本
性能検証
モデル妥当性
評価
ユーザーイン
ターフェイス
機能検討

検証例題提示
実験データ
提供



ユーザー会参加企業

IHI, トヨタ自動車, 日産自動車,
本田技術研究所, 豊田自動織機,
東レ, 三菱レイヨン, 三菱化学,
三菱樹脂, 昭和高分子, クラレ,
帝人エンジニアリング, サムテック,
丸八, ムラテック,
JX日鉱日石エネルギー,
日機装技術研究所,
沖プリントドサーキット,