

平成20年度 地球シミュレータ利用報告会


「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」

プロジェクト責任者 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



CISS
Center for Research on
Innovative Simulation Software

プロジェクトの目的



3分野の代表的ソフトウェアをESIに移植

地球シミュレータ共同プロジェクト

- ①ものづくり分野
- ②ライフサイエンス分野
- ③ナノテクノロジー分野

有用性を実証

地球シミュレータへ移植したソフトウェアの内容と特徴

分野	テーマ名	ソフトウェア名	ソフトウェアの特徴・内容	世界レベルの位置づけ
ものづくり	フォーミュラカーを対象とした世界最大規模のLES乱流解析による非定常空力評価	FrontFlow/red	非構造有限体積法に基づく大規模非定常乱流解析ソフト、燃焼・反応流や自動車空力解析で多くの実績がある。	自動車の非定常空力予測でトップレベル
	ターボ機械内部流れの乱流現象の高精度予測 LESによるタービン翼列まわりの流れ解析および熱伝達係数予測	FrontFlow/blue	・乱流現象の高精度予測が特長。 ターボ機械の内部解析に多くの実績があり、ターボ機械内部の非定常現象(騒音、乱流熱伝達等)を精度良く予測することができる。	乱流騒音・ターボ機械内部の非定常流れの予測精度に関して世界でトップレベル
ライフサイエンス	非経験的フラグメント分子軌道法によるタンパク質の超高速大規模電子状態計算	BioStation/ ABINIT-MP	・フラグメント分子軌道(FMO)法に基づいた超高速大規模電子状態計算。 ・バイオ分子相互作用の解析・可視化。	世界最大規模のFMO-MP2計算が可能
ナノテクノロジー	次世代デバイス開発のためナノテクノロジーの創出	PHASE	・密度汎関数理論に基づく平面波基底ポテンシャル電子状態計算ソフト。 ・大規模第一原理シミュレーションによる原子レベルでのナノ物質の構造・反応解析が可能。	・1万原子からなるナノ構造の電子状態の大規模計算 ・生体高分子(DNA)の電子構造と物性の予測

研究開発のロードマップ

分野	平成17年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度
ものづくり	1. フォーミュラカーを対象とした世界最大規模のLES乱流解析による非定常空力評価			
	ソフトウェアのHPC最適化による倍重要規模LES空力解析の実現	産業界との連携による手法の検証と高精度化	車両姿勢変化に伴う非定常空力評価の実現	自然環境の再現による非定常空力評価と熱環境評価への展開
	ファン音源の高精度予測	ファン騒音の高精度予測、並列性能向上	斜流ポンプの水力性能の高精度予測、単体性能向上	斜流ポンプ不安定特性のメカニズム解明
ライフサイエンス	2. ターボ機械内部流れの乱流現象の高精度予測			
	LESによるタービン翼列まわりの流れ解析および熱伝達係数予測	熱輸送解析機能の実装と検証(18年から開始)	タービン翼熱伝達の予測	タービン翼熱伝達と高精度化
ナノテクノロジー	3. LESによるタービン翼列まわりの流れ解析および熱伝達係数予測			
	非経験的フラグメント分子軌道法によるタンパク質の超高速大規模電子状態計算	・128ノード限定解除 ・核内受容体の解析	・512ノード限定解除 ・励起状態計算	・MP2計算高速化 ・アリエットの解析
ナノテクノロジー	4. 非経験的フラグメント分子軌道法によるタンパク質の超高速大規模電子状態計算			
	次世代デバイス開発のためナノテクノロジーの創出	8000原子系の大規模第一原理電子状態計算(384ノード利用)	・1万原子系の大規模第一原理電子状態計算(512ノード利用) ・DNAの物性解析。	・シリコンナノ構造の物性解析 ・生体高分子(DNA)と分子・固体との反応解析

利用ソフトと地球シミュレータ用チューニング状況

分野	テーマ名	利用ソフトウェア	利用ノード数	並列化率	ベクトル化率	ピーク性能 (Tflops)
ものづくり	フォーミュラカーを対象とした世界最大規模のLES乱流解析による非定常空力評価	FrontFlow/red	100	99.86%	97.63%	0.593
	ターボ機械内部流れの乱流現象の高精度予測 LESによるタービン翼列まわりの流れ解析および熱伝達係数予測	FrontFlow/blue	500	99.985%	98.95%	4.8
サイエンス	非経験的フラグメント分子軌道法によるタンパク質の超高速大規模電子状態計算	BioStation/ABINIT-MP	512	99.98%	97.68%	5.1
テクノロジー	次世代デバイス開発のためナノテクノロジーの創出	PHASE	512	99.98%	99.75%	16.2

ものづくり分野- (1)

フォーミュラカーを対象とした世界最大規模のLES乱流解析による非定常空力評価

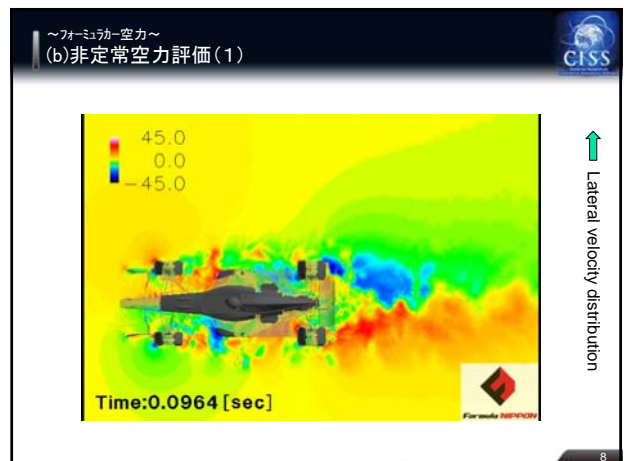
最も過酷な車両設計要件の一つであるフォーミュラカーを対象とし、世界最大規模・高精度・非定常空力の予測を実現する。

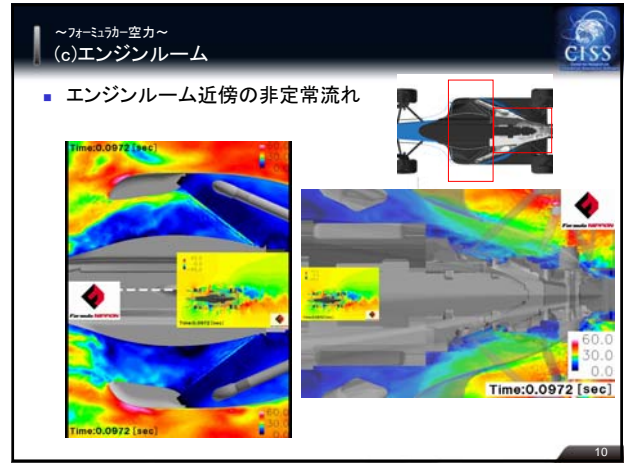
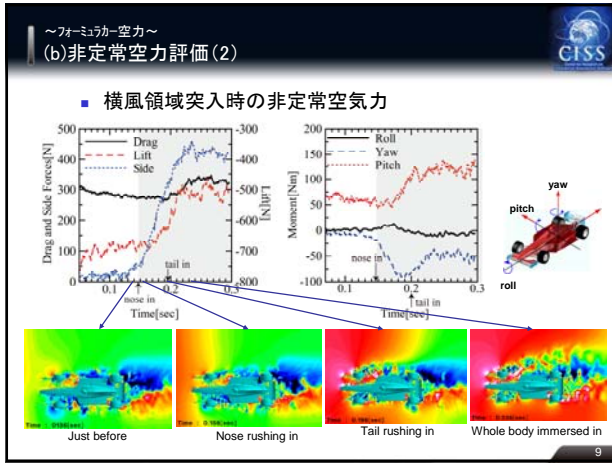
～フォーミュラカー空力～
研究開発内容

- 平成20年度実施項目
 - 自然風のガスト変動特性として突風を想定し、車体に対する風向ヨー角を0度から30度程度まで動的に変化させる数値モデルを開発する。
 - 開発したモデルをフォーミュラカーに適用し、突風に車体に作用する非定常空力特性を見積もる
 - 上記の非定常状態におけるラジエータ通風特性やエンジンルーム内通風特性を評価することでエンジンルーム熱環境評価に対する指針を得る。
- 平成20年度成果
 - 自然風のガスト変動特性として突風を想定し、車体に対する風向ヨー角を0度から30度程度まで動的に変化させる数値モデルを開発した。
 - 風洞実験では予測が困難であった自然風下での車体に作用する非定常空力予測の実現
 - ラジエータモデルを導入し、自然風下での通風特性やエンジンルーム内通風特性を評価することでエンジンルーム熱環境評価に対する指針を得た。

↓

風洞実験に替わる新たな空力評価システムとしてHPC-LESの有用性を実証





ものづくり分野 - (2)

騒音発生メカニズムの解明ならびに主要な音源の特定による低騒音設計技術の確立

現象解明が困難なターボ機械内部の非定常現象(例えば、音源、振動、流体力)をLES解析により高精度に予測

11

～ターボ機械内部流れ解析～
研究開発内容

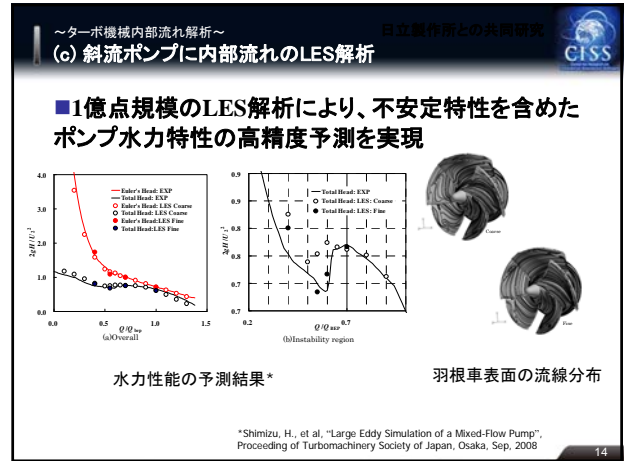
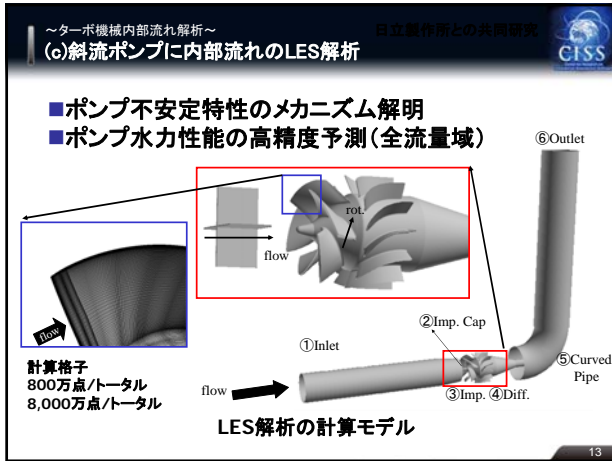
■ 平成20年度実施項目

- (a) 1億点規模のポンプ内部流れ解析
- (b) ポンプ内部流れ場の詳細分析 (特に不安定発生時)

■ 平成20年度成果

- (a) ポンプ流れ解析により、全流量域にわたり、水力特性を高精度に予測できることを確認した。
- (b) 不安定特性が生じる内部流れ場の特徴的流れ構造の抽出
- (c) ポンプ内部流れ解析で得た知見、(不安定特性が生じる流れ場の特長)を論文にまとめ学会で講演した(ターボ機械協会 9月大阪)。

12



ライフサイエンス分野 CISS

非経験的フラグメント分子軌道法による
タンパク質の超高速大規模電子状態計算

創薬ターゲットとしての酵素タンパク質の相互作用解析および光受容体タンパク質の励起状態計算の実用性を実証する。

15

~タンパク質大規模電子状態計算~ 研究開発内容 CISS

- 平成20年度実施項目
 - (a) 改良されたMP2計算エンジンを用いたインフルエンザウイルス抗原-抗体タンパク質複合体のFMO-MP2計算
 - (b) 水溶液中タンパク質のFMO計算へ向けた改良
- 平成20年度成果
 - (a) インフルエンザウイルス ヘマグルチニン(HA)タンパク質(抗原)と抗体Fabフラグメントの複合体のFMO-MP2/6-31G計算による相互作用解析が**512ノードを用い53.4分!**
 - (b) 水分子を含めたFMO計算を行うためのフラグメント数による制限の解消(地球シミュレータを用いたベンチマークは実施中)

地球シミュレータを用いたタンパク質の電子状態計算の実用性を実証

平成20年11月21日 16

インフルエンザウイルス抗原-抗体タンパク質複合体のFMO-MP2計算 (1/2)

インフルエンザウイルス ヘマグルチニン(HA)タンパク質(抗原)と抗体 Fabフラグメントの複合体
 ⇒ 抗原: HA1(緑)、HA2(赤)
 抗体: H鎖(ピンク)、L鎖(黄)

世界最大のFMO-MP2/6-31G計算
 ⇒ 921残基、14,086原子、78,390基底

地球シミュレータ512ノード(4,096プロセッサ)でのベンチマークタイミング
 ⇒ 53.4分!

Y. Mochizuki, K. Yamashita, T. Murase, T. Nakano, K. Fukuzawa, K. Takematsu, H. Watanabe, S. Tanaka, *Chem. Phys. Lett.* 457, 396-403 (2008).

インフルエンザウイルス模式図

17

インフルエンザウイルス抗原-抗体タンパク質複合体のFMO-MP2計算 (2/2)

Timing data of influenza HA antigen-antibody @ FMO-MP2/6-31G

VPU@ES	Time (s)	Accel.	TFLOPS	Effic. (%)	Rel. cost
FMO-MP2					
1024	10084.6		1.19	14.5	2.42
2048	5486.2	1.84	2.19	13.3	2.57
3072	3927.1	2.57	3.06	12.4	2.56
4096	3204.4	3.15	3.75	11.5	2.66
FMO-HF					
1024	4164.9		1.36	16.6	
2048	2131.7	1.95	2.67	16.3	
3072	1533.5	2.72	3.72	15.2	
4096	1205.9	3.45	4.75	14.5	

HF計算の約2.7倍の計算時間でMP2計算が可能
 MP2-IFIEによって抗原-抗体反応の様相を詳細に解析予定(JST-CREST@神戸大)
 ⇒ 新型鳥インフルエンザウイルスの変異予測に貢献も!

18

ナノテクノロジー分野

次世代デバイス開発のため
 ナノテクノロジーの創出

次世代CMOSデバイス開発に向けたシリコン・ナノテクノロジーの研究およびナノバイオデバイス開発に向けたDNA物性の研究を実施する。

19

~新材料シミュレーション~
 研究開発内容

■ 平成20年度実施項目

- 次世代CMOSデバイス開発を支援するためのシリコンナノ構造(バルク原子空孔、表面環状構造)の物性解析。
- ナノバイオデバイス開発の指針を示すためのDNAと無機物質(金属錯体、固体表面)との反応解析。

■ 平成20年度成果

- シリコン原子空孔の大規模第一原理シミュレーションにより高対称性単原子空孔の存在を完全否定した。
- シリコン(110)表面に現れる環状ナノ構造のシミュレーションを行い、提案されているモデル構造以外可能性を提案した。
- DNAに結合する金属錯体の水和現象やDNA結合過程の解析を可能にする第一原理分子動力学計算手法(メタ・ダイナミクス法)を実装し、検証計算を実施した。
- 銅(110)表面上におけるアデニン自己組織化反応の解析を行った。また、鎖状DNAの固体表面上での反応解析を正確に行うために、半経験的方法により一般化勾配近似では欠落しているファンデルワールス力を取り入れた。

20

～新材料シミュレーション～
シリコンナノ構造の物性解析

■ Si(110)表面環状構造 および Si中原子空孔

- Si(110)は移動度の高い面方位。次世代CMOS候補。欠陥のない絶縁膜界面形成が課題。
- Si(110)清浄表面構造の解明 → 酸化過程のシミュレーション → 界面構造形成機構

既存モデルの構造緩和と模擬STM像の作成

5員環 模擬STM像 Ad-Si

五員環がSTM実験像に比べて小さい

新規構造モデルの探索

- Si中原子空孔は酸化過程と添加物拡散を決定する重要な因子
- 超音波測定などの新観測手段により見つかった原子空孔の正体を明らかに(大規模計算が必要)

単原子空孔まわりの原子緩和

単原子空孔の生成エネルギー

超音波測定から予測される高対称欠陥構造

低対称欠陥構造

電荷・原子構造埋め込み法により、計算時間を短縮

低濃度化につれ、単原子空孔は低対称化

複原子空孔構造の探索が必要

平成20年11月21日 21

～新材料シミュレーション～
DNAの反応解析

■ Cu(110)表面上のアデニンの自己組織化

単分子吸着構造

水素結合によるダイマー化

ダイマー吸着構造

STM像(実験)

モデルダイマー構造

チェーン構造モデル

模擬STM像

模擬STM像

STM像(実験)

ファンデルワールスカの導入 → DNA塩基対間距離を再現

A-T stacking

Thymine

Adenine

3.34 Å

メタ・ダイナミクス法の実験 → 希な化学反応の解析が可能になった

シクロブテンの開環反応(300K)

シクロブテン

cis体

trans体

白金錯体ジスチレンの水和現象

Pi配位のOとClの配位数の時間変化

平成20年11月21日 22

平成20年度全体まとめ

■ 4年間にわたる地球シミュレータ共同利用プロジェクトでの研究開発結果、ものづくり、ライフサイエンス、およびナノテクノロジーの3分野において、革新プロジェクト(略称)で開発したシミュレーションソフトウェアが、地球シミュレータ上で十分な性能を発揮できることを確認するとともに、実用ソフトウェアとしての有効性を実証した。

■ 実社会の代表的な問題として、自動車の姿勢変化時の非定常空力の予測、産業用ポンプの不安定特性メカニズムの解明、医薬品-タンパク質相互作用の超高速解析、次世代デバイス材料の大規模ナノ特性解析等を世界に先がけて実施し、実験が困難な現象の予測や産業イノベーションの実現に貢献できることを実証した。

平成20年11月21日 23