

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

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長
小林 敏雄

戦略的基盤ソフトウェア開発

◆実施内容

我が国の基礎的レベルにある科学技術計算基盤ソフトウェアに対し重点投資を行い、新技術分野において国際競争力を確保するために不可欠な戦略的基盤ソフトウェアを開発。

◆次世代量子化学計算

- ◆タンパク質—化学物質相互作用解析
- ◆ナノシミュレーション・システム
- ◆次世代流体解析システム
- ◆次世代構造解析システム
- ◆HPCミドルウェア
- ◆統合プラットフォーム

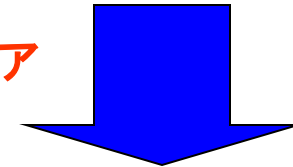
試行錯誤から科学に基づく研究開発，設計へ

例：医薬品開発

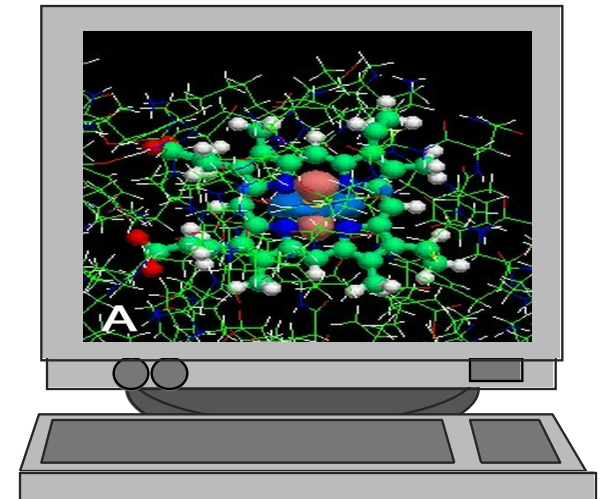


経験と感に基づく
じゅうたん爆撃的
探索

戦略的ソフトウェア
の開発



シミュレーション
に基づく効率的
医薬品の設計



高度コンピューティング用戦略ソフトウェアに関する我が国の現状

- ・基礎研究では欧米と互角
- ・実用ソフトウェアでは大きく遅れを取っている
- ・我が国の産業界で使用されている戦略的ソフトウェアはほとんど全て欧米製(表1参照)

- ・原因は、国の実証ソフトウェア開発の欠如
- ・基礎研究が実用につながらない

- ・我が国のソフトウェア開発能力が急激に低下
- ・人材の減少
- ・マーケットがないため企業は撤退

◆米国には戦略がある(図1)

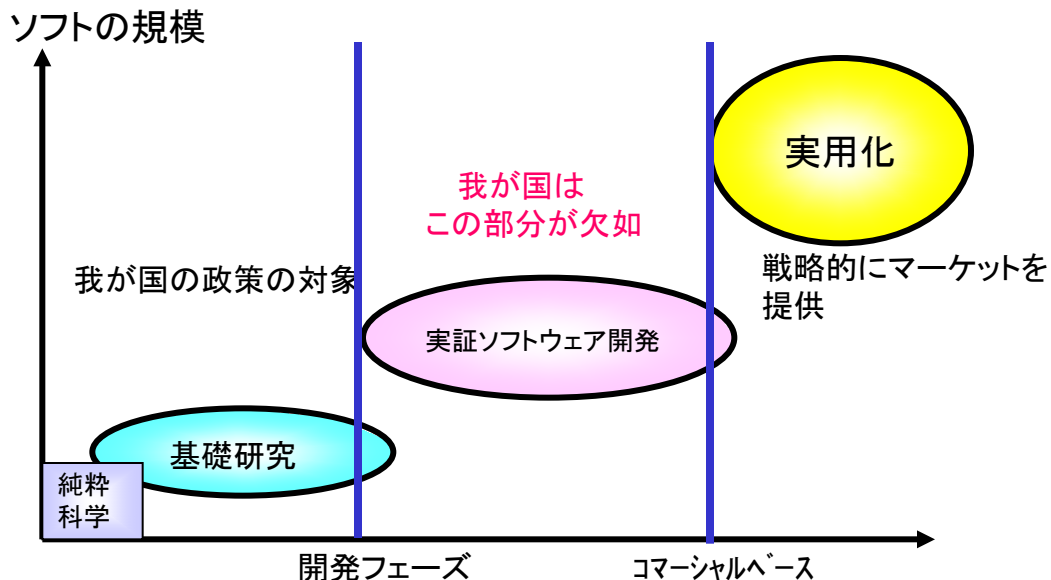


図1 ソフトウェア開発戦略

表1 戦略的ソフトウェアの例

ソフトウェア名	開発機関	ソフトウェアの内容
NASTRAN	NASA	汎用構造解析ソフトウェア
TCAD システム	スタンフォード大学	半導体 CAD システム
GAUSSIAN	カーネギーメロン大学等	分子軌道法の汎用ソフトウェア
SPICE	カリフォルニア大学	回路シミュレータ
Phoenix	インペリアルカレッジ	汎用流体解析ソフトウェア
α -FLOW	日本、共同組合	汎用流体解析ソフトウェア
CHEMKIN III	サンディア国立研究所	燃焼解析ソフトウェア

有力な科学技術計算用大規模ソフトウェアの大半は国家プロジェクトや大学での実証レベルの研究開発をベースに、ベンチャー企業により事業化されている

わが国における戦略的ソ基盤ソフトウェア開発の必要性

◆計算科学技術の重要性

- ・産業競争力の最重要ファクターの一つ
- ・科学技術の共通基盤技術
- ・先端的情報技術を牽引

◆産業基盤技術として、わが国は自前で戦略的ソフトウェアを持つ必要がある

- ・先端的な開発、研究ではカスタマイズが必要
- ・使いこなすには、ソフトウェアの内部を知っている必要がある
- ・自前で持たないと最先端のものは常に使用できない



競争力低下

◆先端的ソフトウェア開発力が急速に低下（人材が減少）

- ・緊急の課題

◆計算科学技術が新しい段階に入っており、巻き返しのチャンス

- ・並列計算・分散処理の新しいパラダイム(ネットワーク、数千台のCPU)
- ・大規模・複雑プログラムの開発手法、新しいソフトウェア・アーキテクチャ
- ・統合システム
- ・マルチスケール、マルチフィジクス・・・リアリスティックな統合解析
- ・データマイニング
- ・知識の共有化、有機的結合

戦略的基盤ソフトウェア開発の対費用効果

経済効果

民間需要創出効果	1.44兆円／年（2010年）
雇用創出効果	19,000人（2010年） 誘発雇用増は含まず。
①民間投資需要（累計）	100億円×8年間＝800億円（2010年まで）
②投資から誘発される雇用（累計）	800億円／0.15億円＝5300人（2010年まで）
③民間消費需要（年間）	1.44兆円（2010年）
④消費から直接派生する雇用（年間）	19,000人
⑤その他の重要な経済効果	バイオ、ナノテクノロジー分野などで我が国がシェアを確保するための基盤技術。10%のシェア増大に寄与すると仮定すると、バイオ分野だけで30兆円／年（2025年）の経済効果が見込まれる。

開発したソフトの活用例

次世代LSIの開発を加速

タンパク質の機能構造解析高度化。
特許確保に貢献

クリーンで燃焼効率の良いエンジンの開発

糖尿病、がん、などの医薬品の開発を加速

大規模構造物の高精度計算

我が国の高度コンピューティング
用戦略的基盤ソフトウェア
開発・保守体制の構築

戦略的基盤ソフトウェアの開発

- ・次世代量子科学計算
- ・タンパク質－化学物質相互作用解析
- ・ナノシミュレーション・システム
- ・次世代流体解析システム
- ・次世代構造解析システム

戦略的基盤ソフトウェアの開発事業

戦略的基盤ソフトウェア開発の概要(その1)

世界水準の戦略的基盤ソフトウェアを開発すると共に、我が国の高度コンピューティング(HPC)用ソフトウェア開発・保守体制の確立を目標とする。本プロジェクトの達成目標は以下の通りである。

◆重点4分野をカバーする複雑・大規模な世界水準の戦略的基盤ソフトウェアを開発し公開する。

・総ステップ数は100万ステップ規模

◆戦略ソフトを開発できるトップレベルの人材を世界最先端のソフトウェア開発を通じて育成する。

・博士10人以上、トップクラスの大規模ソフトウェア開発プロジェクトマネージャー 5人以上、戦略的ソフトウェア開発技術者・研究者 100名以上)

戦略的基盤ソフトウェア開発の概要(その2)

◆HPC用戦略的基盤ソフトウェア開発の大学と企業の連携による研究拠点の構築

・東京大学生産技術研究所に民間企業と連携して計算科学技術連携研究センターを設立、集中して本プロジェクトを実施。我が国のHPC用ソフトウェア開発の研究拠点を構築する。

◆我が国のHPC戦略基盤ソフトウェア開発を担えるベンチャー会社の設立

・先端的ソフトウェアは事業化され、絶えず改良・メンテナンスを継続しないと、デファクトスタンダードにならない。本プロジェクト終了後の事業化も目指し、(株)ゼクシス、(株)富士総合研究所、(株)日立製作所などが、ベンチャー会社を設立し、計算科学技術連携研究センターと連携して本プロジェクトを実施する。

研究開発体制

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

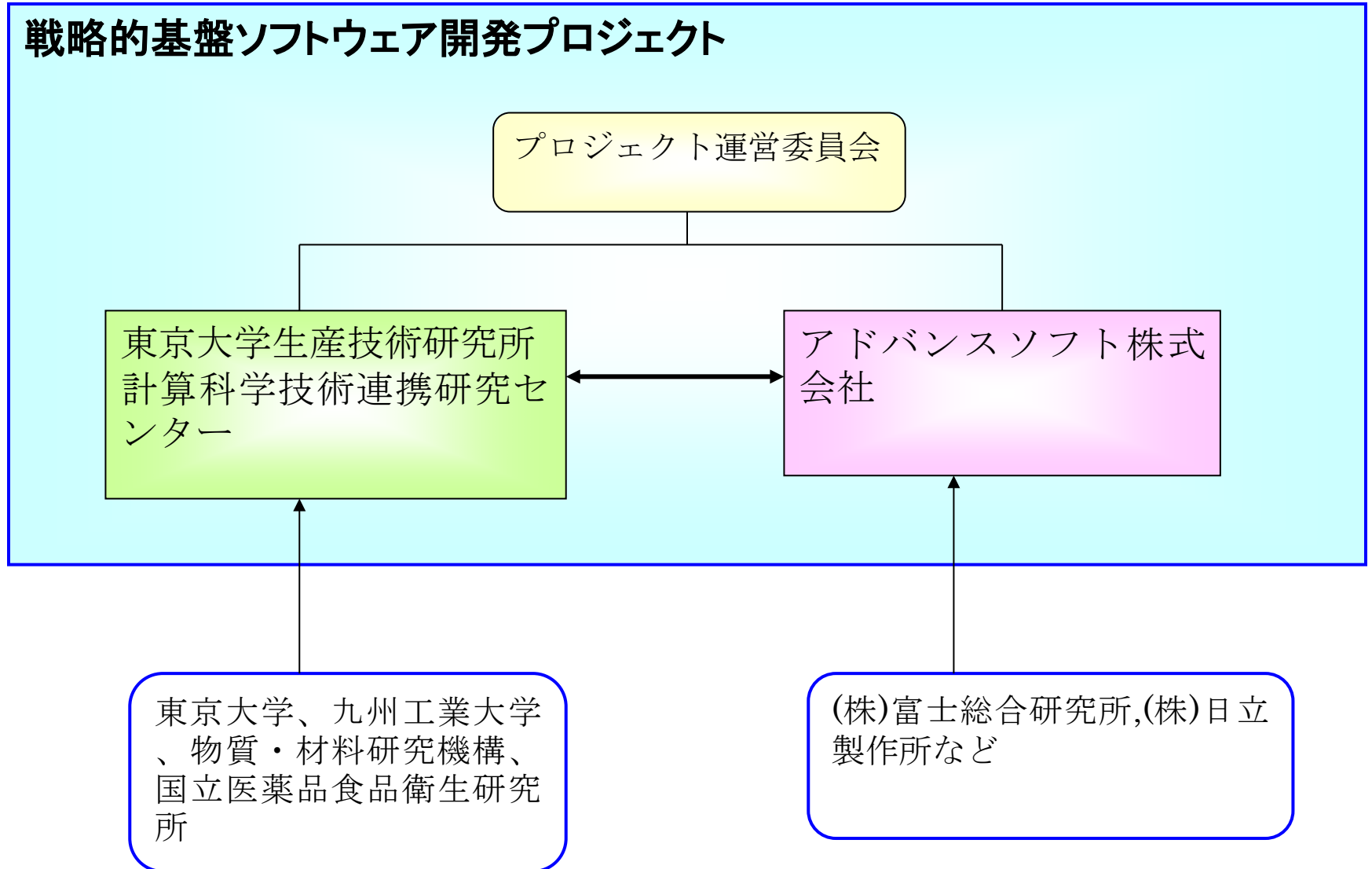
プロジェクト運営委員会

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

アドバンスソフト株式会社

東京大学、九州工業大学、
物質・材料研究機構、
国立医薬品食品衛生研究所

(株)富士総合研究所、(株)日立
製作所など



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

センター長 小林敏雄 東京大学 生産技術研究所 教授

運営委員会

- ・ 山本良一 (生産技術研究所 教授)
- ・ 谷口伸行 (同上 助教授)
- ・ 加藤千幸 (同上 助教授)
- ・ 大島まり (同上 助教授)

事務局

研究員

- ・ 山本良一 (東京大学 生産技術研究所 教授)
- ・ 矢川元基 (東京大学大学院 教授)
- ・ 吉村忍 (東京大学大学院 教授)
- ・ 大島まり (東京大学 生産技術研究所 助教授)
- ・ 加藤千幸 (東京大学 生産技術研究所 助教授)
- ・ 奥田洋司 (東京大学大学院 助教授)
- ・ 大野隆央 ((独) 物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター 副センター長)
- ・ 中田琴子 (国立医薬品食品衛生研究所 化学物質情報部 第2室 室長)
- ・ 中野達也 (国立医薬品食品衛生研究所 化学物質情報部 第2室 主任研究官)
- ・ 都築浩一 ((株) 日立製作所 機械研究所 第1部 部長)
- ・ 中村 壽 ((財) 高度情報科学技術研究機構 計算科学技術第2部 部長)
- ・ 松原 聖 ((株) 富士総合研究所 計算科学技術研究センター長)
- ・ 柏木 浩 (九州工業大学情報工学部 教授)
- ・ 谷口伸行 (東大 生産技術研究所 助教授)
- ・ 佐藤文俊 (九州工業大学情報工学部 助手)

1

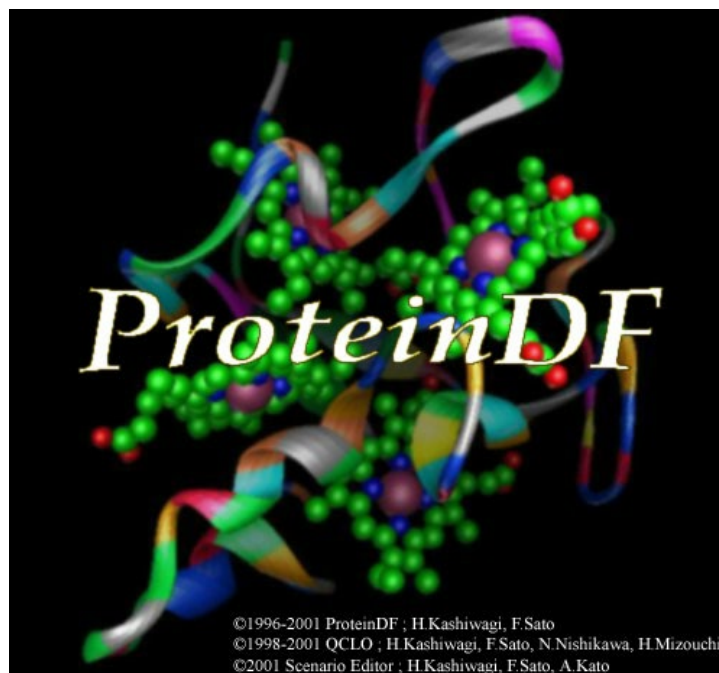
プロジェクト運営委員

委員長 小林 敏雄（東京大学 教授）
矢川元基（東京大学 教授）
山本良一（東京大学 教授）
村上周三（慶応大学 教授）
上甲和郎（アドバンスソフト副社長）
小池秀耀（アドバンスソフト副社長）

ソフトウェア・システムの概要

分野	サブシステム	サブシステムの概要
バイオ	次世代量子化学計算サブシステム	1000残基規模のタンパク質の電子分布を計算可能なソフトウェアを開発。100残基規模のタンパク質の全電子分布データベースを構築。タンパク質の機能・構造解析を加速。
	タンパク質－化学物質相互作用解析サブシステム	タンパク質と医薬品や環境ホルモンなどとの相互作用を量子化学的に解析するシステムを開発。糖尿病、高血圧、がんなどの治療薬の開発を加速。
物質・ナノ	ナノシミュレーション・サブシステム	分子の運動や構造の量子力学のシミュレーション・システムを開発。次世代LSIの開発などナノテクノロジーを加速
環境	次世代流体解析サブシステム	燃焼などの複雑流体の解析システム。クリーンで燃焼効率の良い燃焼器、自動車のエンジンなどの開発を実現。
防災	次世代構造解析サブシステム	並列コンピュータを駆使した、次世代構造解析システム。大規模構造物の高精度な計算や流体－構造解析などが可能
情報	統合プラットフォーム	複雑・大規模なソフトウェア・システムを統合化するプラットフォームを開発。複雑・大規模ソフトウェア・システムのアーキテクチャを確立する。
	HPCミドルウェア	非構造格子の開発基盤（並列処理ライブラリーなど）を開発する。

次世代量子化学計算システム



九州工業大学

佐藤 文俊

九州工業大学名誉教授

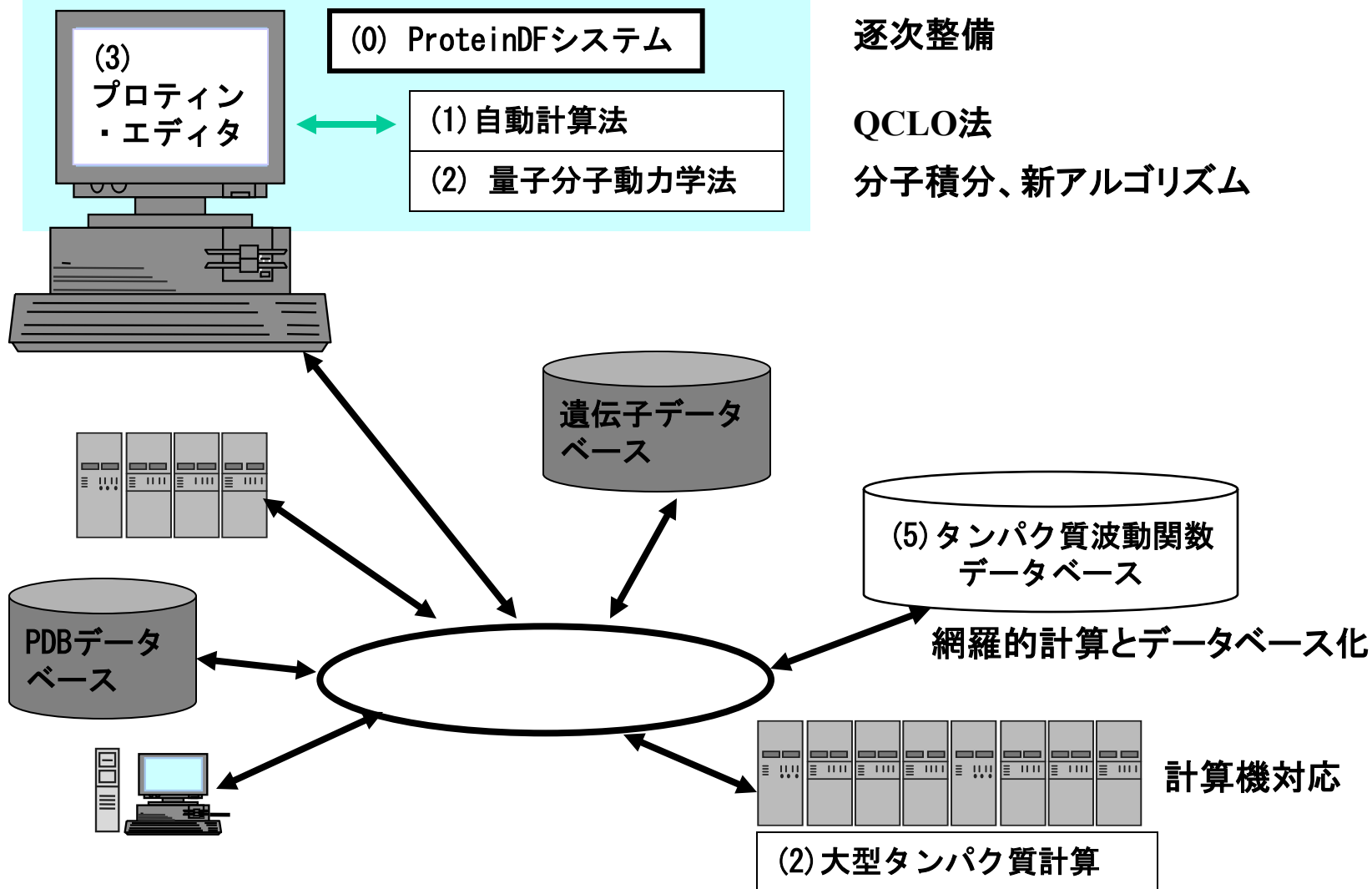
柏木 浩

目的および目標

- タンパク質の量子化学計算用基盤ソフトウェアを開発する。
- 100残基規模の重要なタンパク質100種類程度で全電子計算または構造最適化計算を実施する。
- 高精度のタンパク質電子状態と立体構造のデータベースを構築する。
- タンパク質の精密な量子分子動力学計算を実現する。
- 1000残基程度のタンパク質の全電子計算を実現する。
- 上記を実現する実用的な量子化学計算ソフトを開発する。

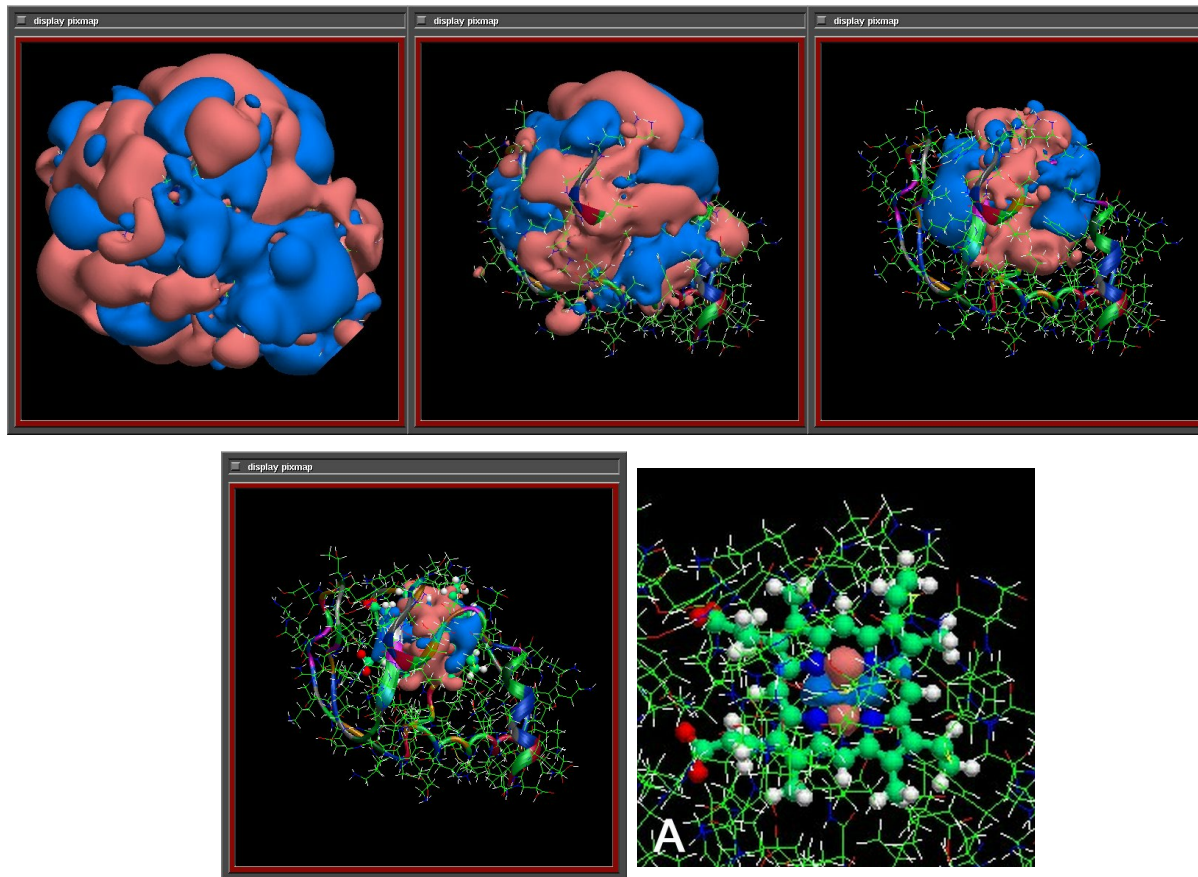
ProteinDFシステム構成図と開発内容

統括環境



ProteinDF による金属タンパク質の全電子計算

F. Sato, T. Yoshihiro, M. Era, H. Kashiwagi, *Chem. Phys. Lett.* **341** (2001) 645-651.



シトクロム *c* の HOMO (3293 番目の MO; $\varepsilon = -3.48$ eV)

Surface values: 0.000005, 0.00005, 0.0005,
0.005, 0.05

ただし、(A) 0.05 ではスケールを倍にして描いている。

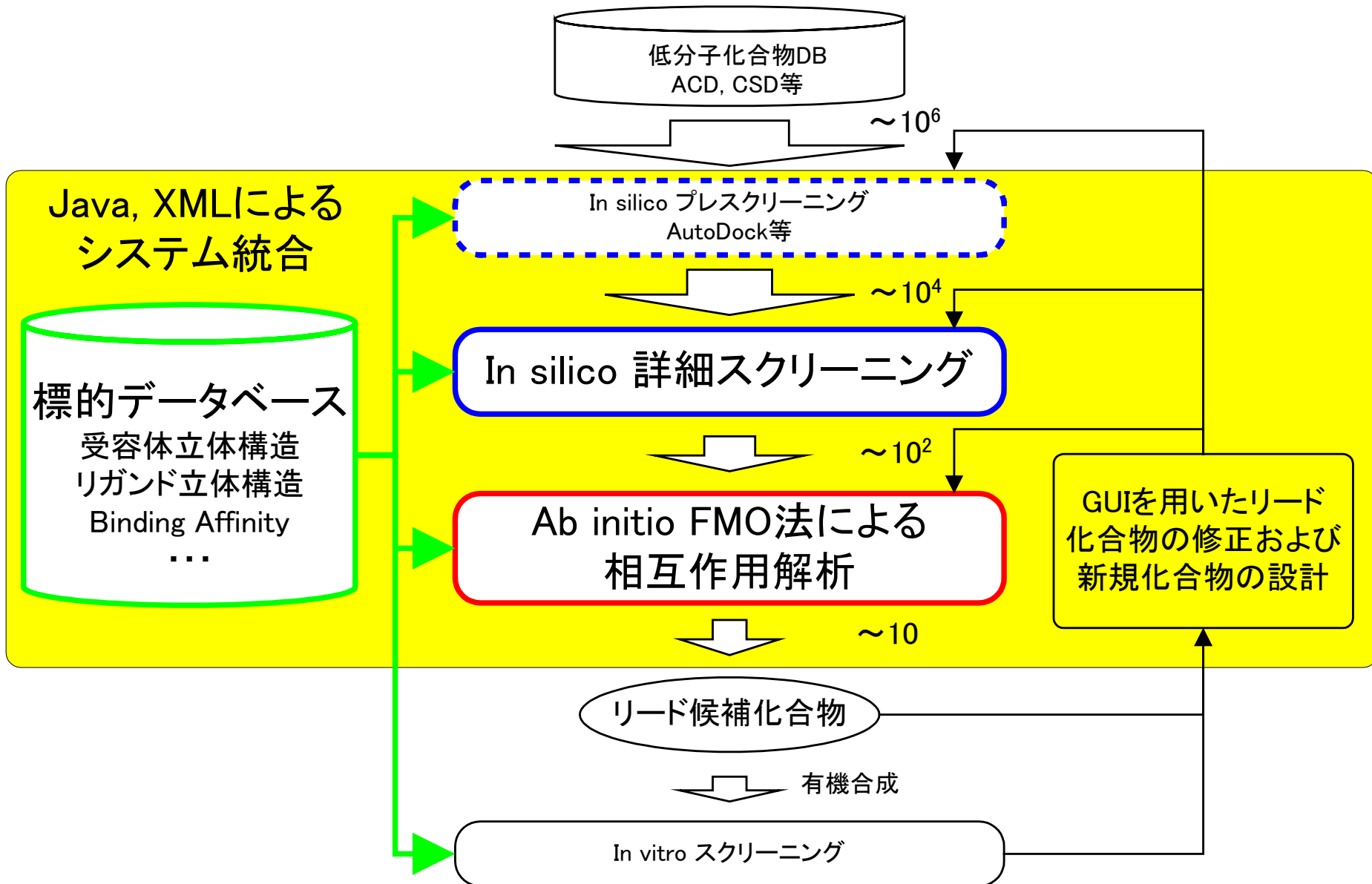
蛋白質—化学物質相互作用解析システム



エストロゲン受容体とリガンドの結合体

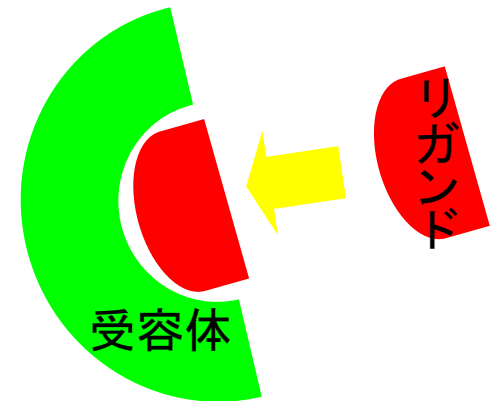
- ・ 国立医薬品食品衛生研究所 中野達也
- 国立医薬品食品衛生研究所 中田琴子
- (株) 富士総合研究所 佐藤智之

タンパク質－化学物質相互作用解析システム



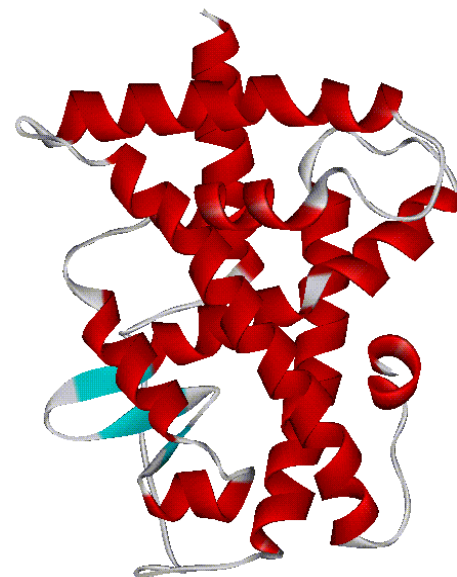
In silico 詳細スクリーニング

1. 分子間相互作用解析に使用可能な力場 (Force Field) の開発
 - ・ 静電相互作用の計算には修正電荷平衡法 (MQEq法) を採用
 - ・ 結合の伸縮、結合角の変化、ねじれ、van der Waals相互作用にはUniversal Force Field (UFF) を修正したものを採用
2. 結合状態探索システムの開発
 - ・ 温度並列シミュレーティッドアニーリング法 (レプリカ交換法) を採用
3. Ab initio FM0計算から得られる高精度のエネルギーや電荷分布に関する情報をフィードバックすることにより、スクリーニングの高精度化が可能



Ab initio FMO法による相互作用解析

- 分子をフラグメントに分割し、フラグメントとフラグメントペアの計算から分子全体のエネルギーや電子密度を計算する方法
- 分子全体を一度に扱う必要がないため、計算機資源が少なくてもよい (Pentium III x8で、約240残基のタンパク質のFMO-HF/STO-3G計算が約56時間)
- フラグメントおよびフラグメントペアの計算は独立して行うことが可能なため並列化が容易 (上記の計算がHITACHI SR8000 256プロセッサで約4時間)
- リガンドの結合エネルギー $\Delta E = E_{\text{Complex}} - E_{\text{Receptor}} - E_{\text{Ligand}}$ から結合性を予測
- <http://molddb.nihs.go.jp/abinitmp/>



標的データベース

Retrieve Drug Target Database - Netscape

File Edit View Go Communicator Help

Drug Target DB 240

Drug	JAN/USP	Efficacy	Target molecule	R/E	cell	Ago/Antago
Progesterone		osteoporosis	progesterone receptor	NR	in	Agonist
Alendronate Sodium Hydrochloride		osteoporosis	bone resorption		out	Antagonist
Pamidronate		osteoporosis	bone resorption		out	Antagonist
Estradiol			estrogen receptor	R	in	
Estradiol Benzoate			estrogen receptor	R	in	
Estradiol Dipropionate			estrogen receptor	R	in	
Estradiol Valerate			estrogen receptor	R	in	
Estriol			estrogen receptor	R	in	
Estriol Benzoate Diacetate			estrogen receptor	R	in	
Estriol Tripropionate			estrogen receptor	R	in	
Metformin Hydrochloride		Diabetes	insulin receptor and signalling ?			
Insulin		Diabetes	insulin receptor	R	out	Agonist

Document: Done

AGIS Database: Receptor DB - Netscape

File Edit View Go Communicator Help

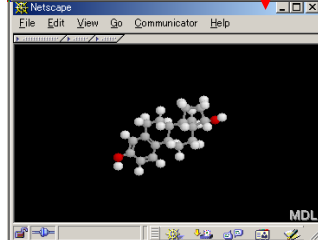
Database: [Receptor DB](#)

[Receptor Database]

Receptor : **ESTROGEN RECEPTOR (ER) (short form) - HUMAN**

PIR	ORHUE [PIR ref PIR seq St 2D-pred]	AC	A94284
		Seq_No	595
		DNA_Binding	185-245
		LG_Binding	300-595 Binding_Name
SP	ESR1_HUMAN [SP ref SP seq St 2D-pred]	AC	P03372
		Seq_No	595
		DNA_Binding	185-245
		LG_Binding	311-551 Binding_Name
MView	ESR1-h [MulSeq]	Seq_No	76
PDB	1HCP [PDB ref St 3D-image]	PDB_Seql	1HCP
		Ovl_Site	2-76 PIR
			SP
	3ERD [PDB ref St 3D-image]	PDB_Seql	3ERD
		Seq_No	261
		Ovl_Site	4-261 PIR
			SP
		Seq_No	261
		Ovl_Site	4-261 PIR
			SP
GB	HUMERMCF [GB ref GB seq]	AC	M12674
		Seq_No	2092
	HSERR [GB ref GB seq]	AC	X03635
		Seq_No	6450
GDB	119120 [GDB ref]	Symbol	ESR1
		Map_Positio	6q25.1
SNP	ESR1 [snp]		
Drug	Estradiol Benzoate [drug]		
CSNDB	ER-alpha [Signaling]		
TRANSF	T00261 [Transfac]		
BADB	ER alpha [BindAff]		

Document: Done



Netscape

File Edit View Go Communicator Help

Binding Affinity Database Query Results

This database is developed by bioinformatics group of [NIMS](#). Any comments should be sent to taka@nims.go.jp.

[Explanation for Database Fields Names](#), [New Search](#)

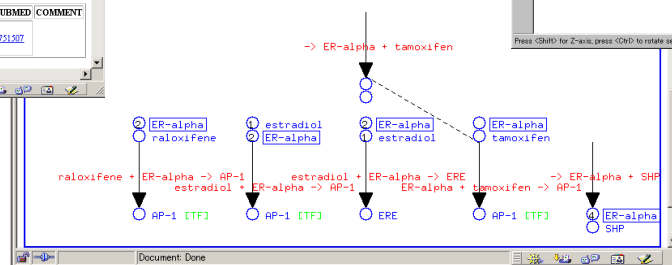
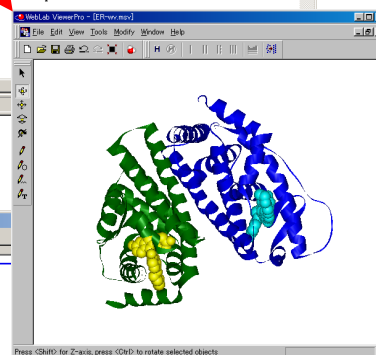
Competitive Binding Experiments

RECEPTOR	CHEMICAL SPECIES	CELL	REACTION	METHOD	ENDMOL	MEASUREMENT	UNIT	SIGN	VALUE	SIGN	ERROR	CAL.
ER alpha	tamoxifen	human	nuclear extract	solid-phase ligand binding	E2	RBA	%		4			
ER beta	tamoxifen	human	nuclear extract	solid-phase ligand binding	E2	RBA	%		3			

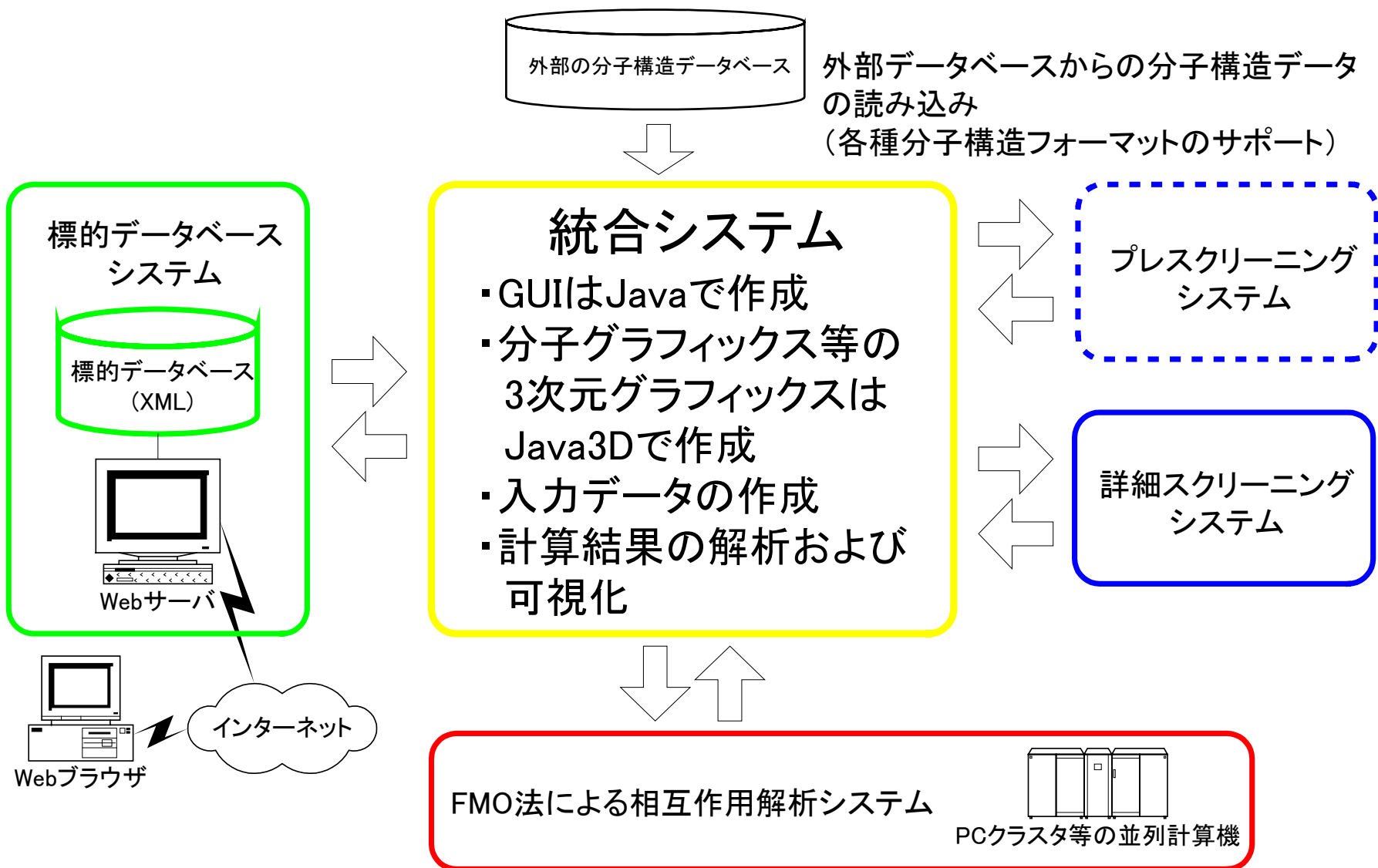
Papers for Competitive Binding Experiments

REF	AUTHOR	TITLE	JOURNAL	YEAR	VOL	PAGE	PAGE	PUBMED	COMMENT
9026	Kasper OJ, Lemmen JG, Carlson B, Canton JC, Safe SH, Shang TT, Burg B, Gustafsson JDB	Interaction of estrogenic chemicals and phytoestrogens with estrogen receptor beta	Endocrinology	1998	139	4252	4263	9721502	

Document: Done



Java, XMLによるシステム統合



ナノシミュレーション・システム

物質・材料研究機構

大野隆央

ナノシミュレーション・システム開発

量子力学に基づき、次世代半導体ナノデバイスに必要な材料探索、
ナノスケールで発現する物性予測・機能設計を行う

問題設定

ナノ構造は？

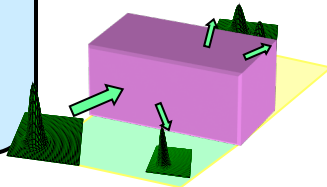
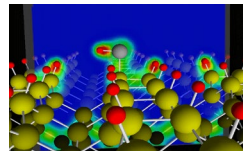
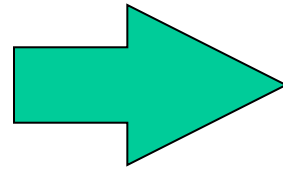
ナノ構造の形成プロセス
ヘテロ界面構造の不均一性
ナノ構造の電子状態

高・低誘電体の材料は？

バルク材料の特性
ナノ薄膜の特性
金属酸化物の物性

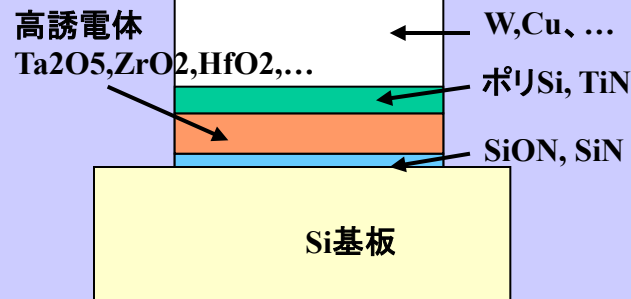
ナノ構造の電気伝導は？

誘電体界面の伝導
キャリア伝導散乱
ナノ構造のスピン伝導

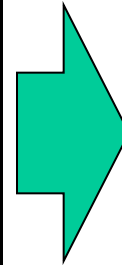
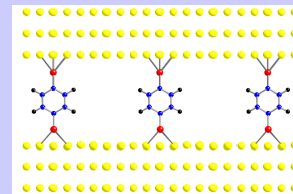


物性予測と機能設計

次世代Siナノデバイス (極微細MOS構造モデル)



分子デバイス



ナノデバイス
作製・設計
技術の確立

解析手法

第一原理電子状態解析
構造解析 (構造探索)
誘電特性解析
伝導特性解析

データベース

数値解析DB
材料物性DB
ナノ構造DB
ナノ構造特性DB

情報交換
解析結果
実証実験

次世代デバイス作製

MIRAIプロジェクト

70-50 nm

次世代流体解析システム

東京大学生産技術研究所

小林敏雄・谷口伸行

加藤千幸・大島まり

Simulation of Combustion flows

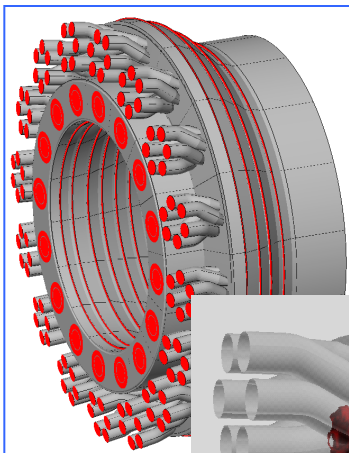
Structural design

Structural analysis

- Stress / vibration
- Thermal striping

Sound analysis

- Noise / instability



Turbulent mixing

Turbulence model

- Swirl / Recirculation
- Heat / Mass flux

連成スケール
モデル

Flame dynamics

Flame propagation

- Premix / Diffusion flame
- Emission / Blow out

ミクロスケール
モデル

Chemical reaction

Reaction model

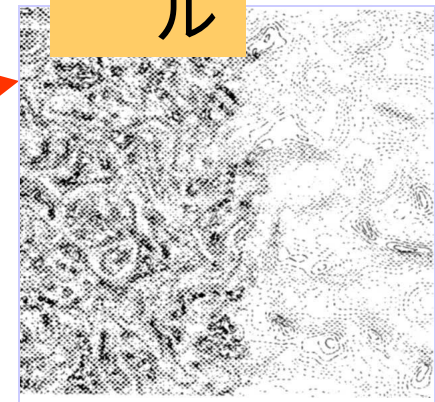
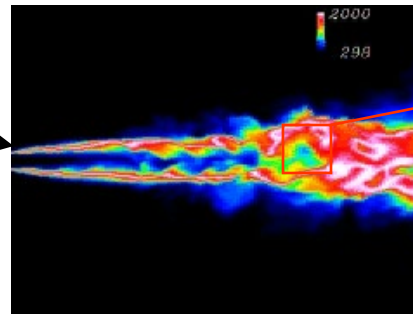
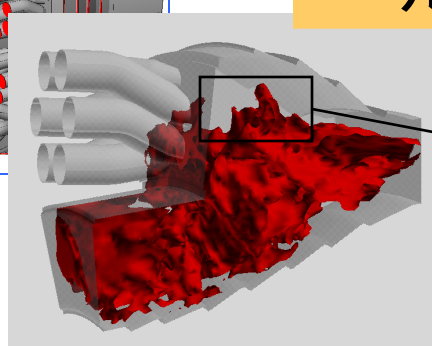
- Rarefied combustion
- Alternative fuels

Chemical
element reaction

10^3

1

LES



NO
OH
CO
:
:

乱流予測の戦略

- DNS

- 厳密な乱流シミュレーション
- サイエンス→未知現象の予測

	Model Dependency	Grid Dependency	Computer Load
DNS	None	Essential	<u>Very Large</u>
LES	Small	<u>Large</u>	Large
RANS	<u>Large</u>	Small	Small

- RANS(レイノルズ平均モデル)

- マクロな平均量で評価
- 平均場解析法の普及



RANSの対象

定常流れ、実験データベースの活用
形状設計におけるケーススタディ

- LES

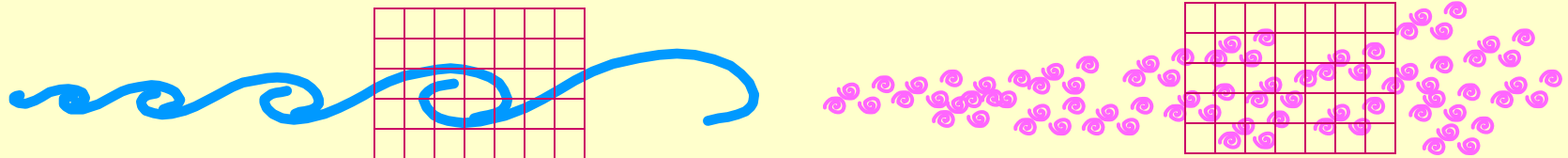
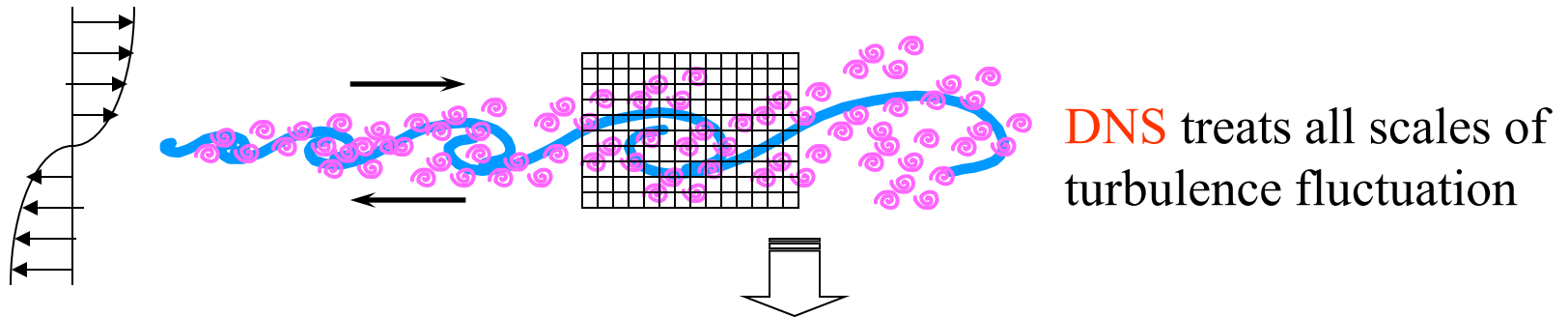
- 時間・空間変動を直接的に解析
- モデル定数少ない妥当な近似



LESの対象

不均一、非定常な現象
適切な統計平均モデルがない

Large Eddy Simulation



Grid Scale component
(resolved by computation grid)

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j^2} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_{ij}}$$

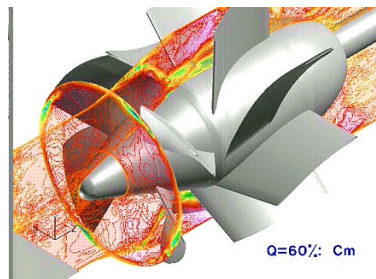
Sub-Grid Scale component
(approximated by turbulence model)

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$$

複合連成問題

住環境

ターボマシン

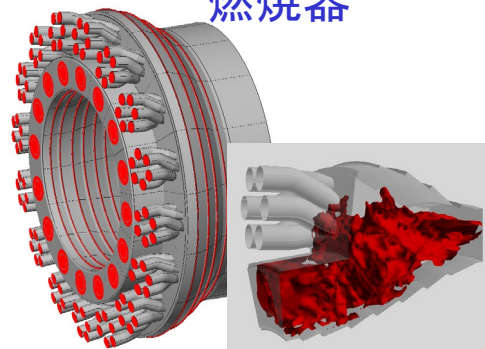


Q=60% Cm

エンジン
シリンダ



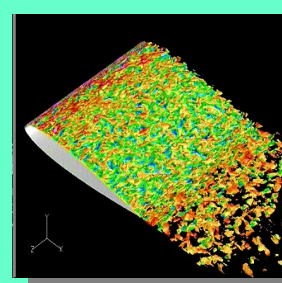
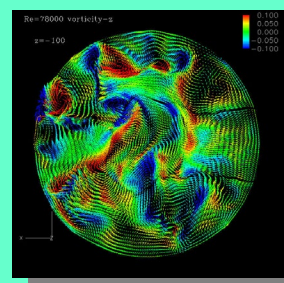
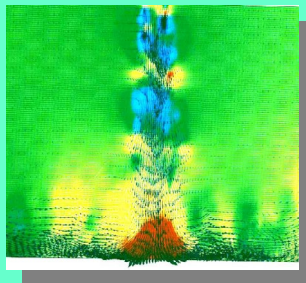
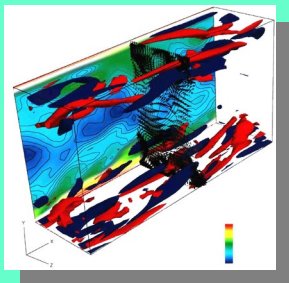
燃焼器



データ変換ツール (格子接合、統計量、モード解析、、、)

流体解析ソルバー (基礎検証、連成検証、汎用応用)

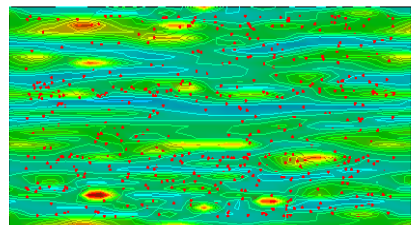
ユニット化された
LES解析コード



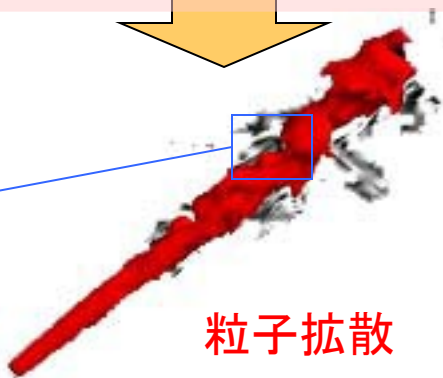
Lagrangeanソルバー (流線追跡、界面追跡、物体座標格

→、、、)

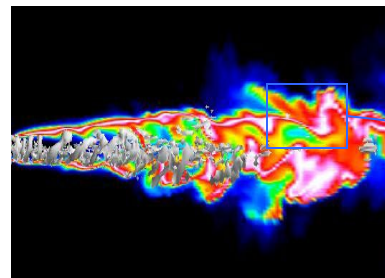
の物理モデル
マイクロスケール



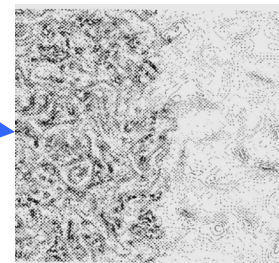
粒子混相流



粒子拡散



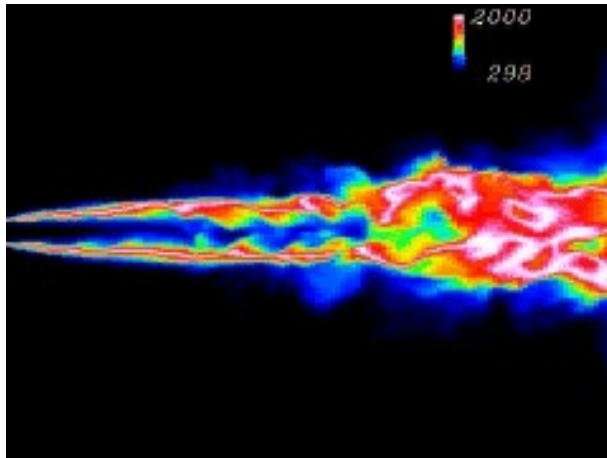
拡散火炎



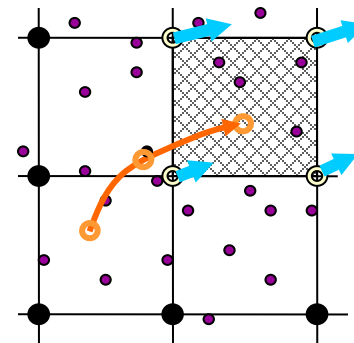
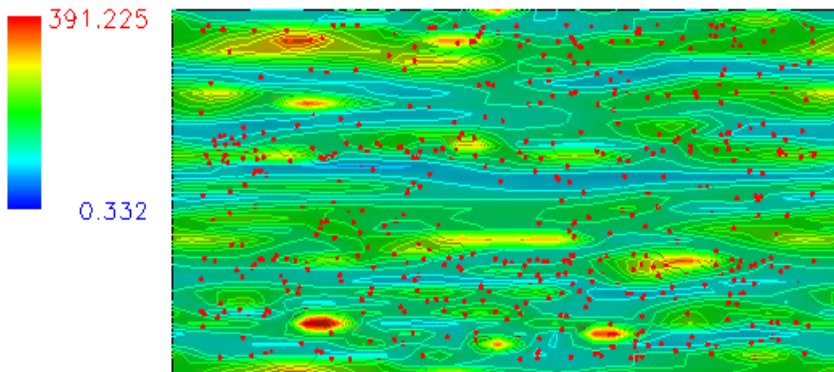
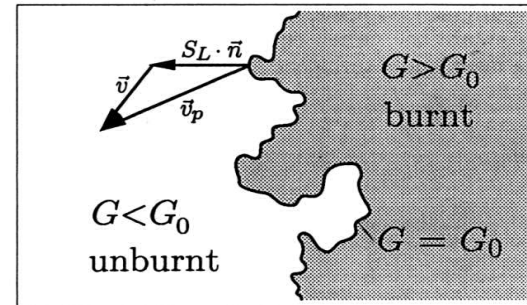
燃焼素反応モデル

ミクروسケールモデル

—Lagrangean解析による連成—

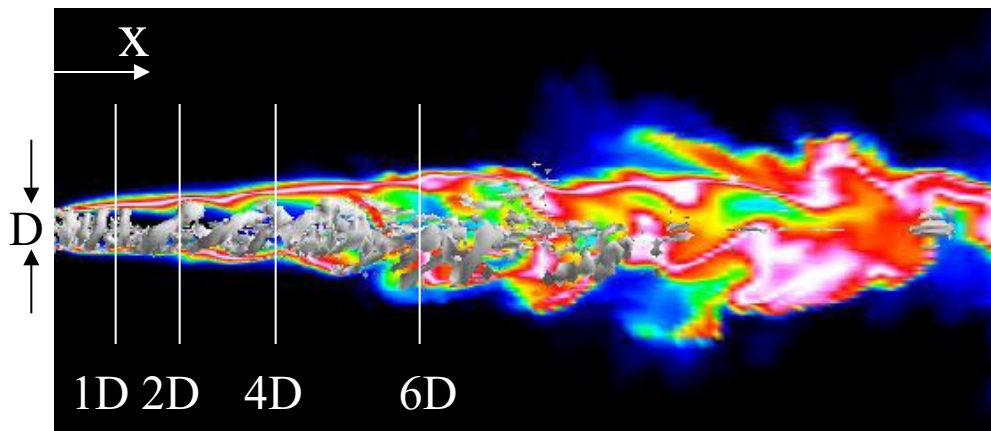


flameletアプローチによる
予混合火炎面の解析モデル

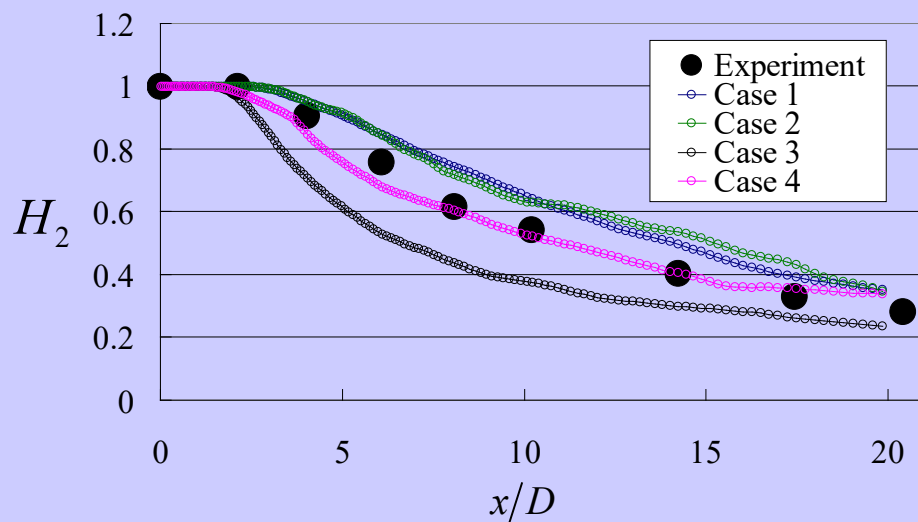


Lagrangean粒子
シミュレーション
モデル

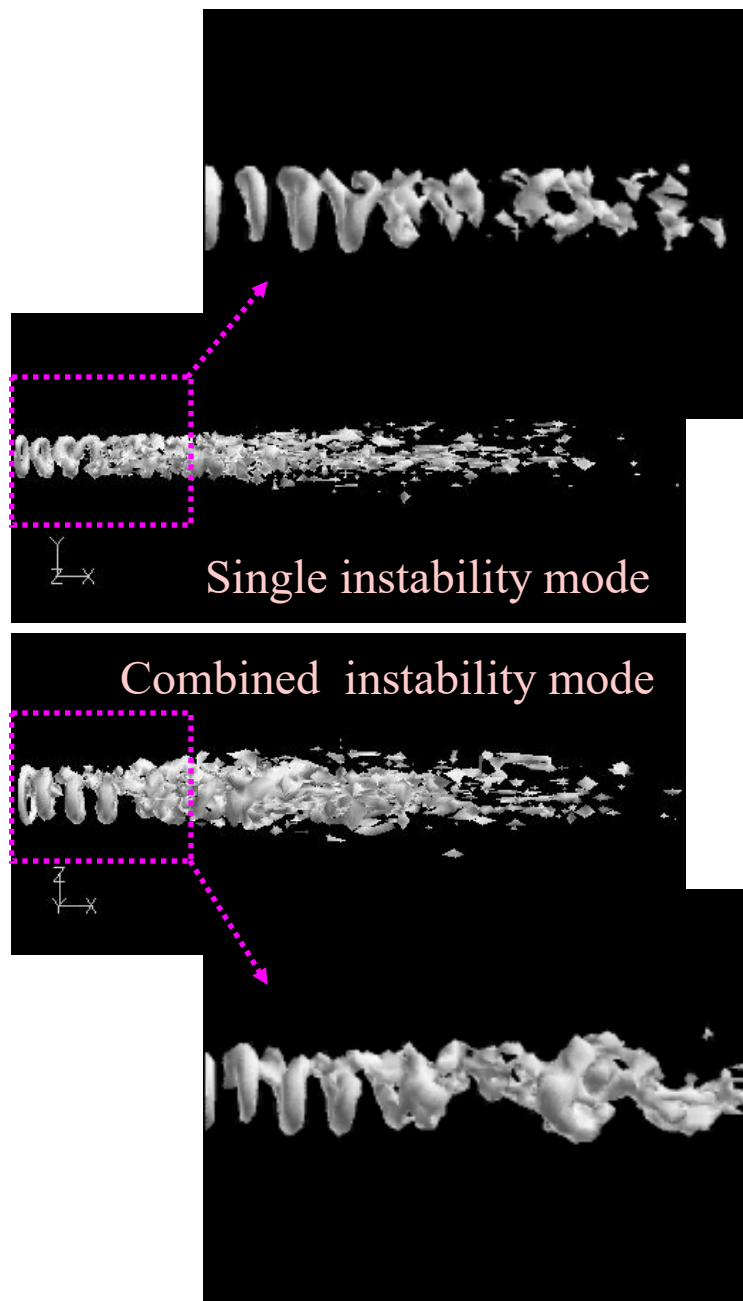
水素拡散バーナ火炎のLES



Spectral distributions of cold jet ($Re=4240$)



Normalized hydrogen concentration

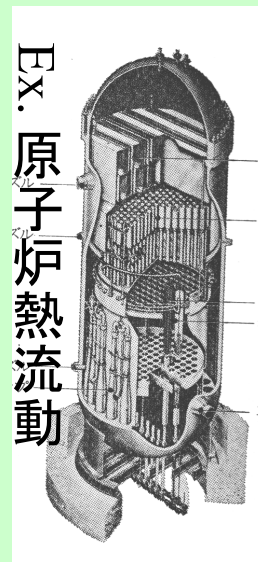


流入擾乱モードによる流れの変化

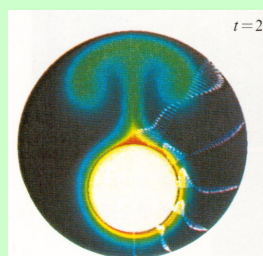
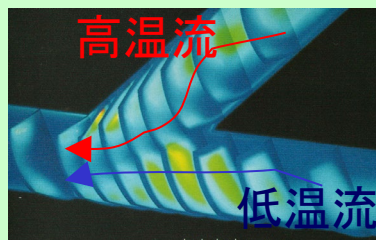
流体力に起因する応力評価

乱流・渦に起因する非定常応力

Ex. 原子炉熱流動



非定常流動特性



浮力ブルーム

複雑系の
大規模数値解析



疲労設計

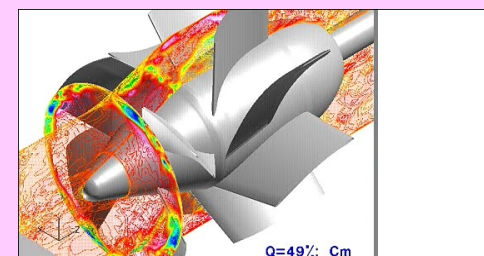
流体励起振動

流体音の
予測

Ex. パンタグラフ碍子の
流れと音源解析



サージング
挙動の予測

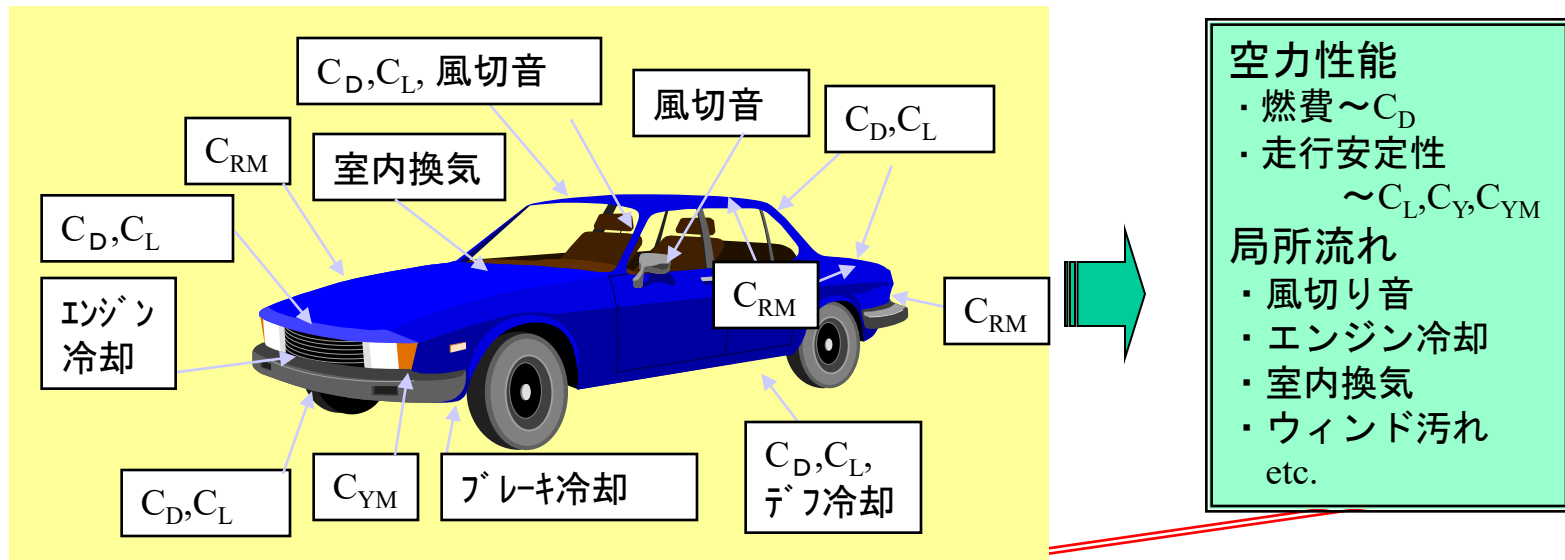


Ex. ポンプ流れの
非定常流体解析

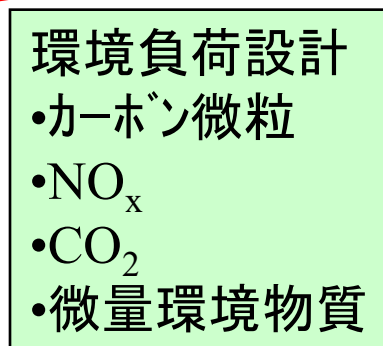
実用化の主な対象

- ・ **熱エネルギー流動**
 - 自動車のCAE設計開発
 - 高効率・低NO_x 燃焼器の設計
 - 人間を考慮した建物温熱環境
- ・ **流体騒音／流体振動**
 - 車両空力騒音
 - 建物構造物周囲の風環境
 - ターボ機械の非定常流体力
- ・ **Functional Fluids（機能性流体）**
 - 血流、高分子流
 - 電磁流体、プラズマ流
 - 気泡流、スプレー流れ、粒子混相流

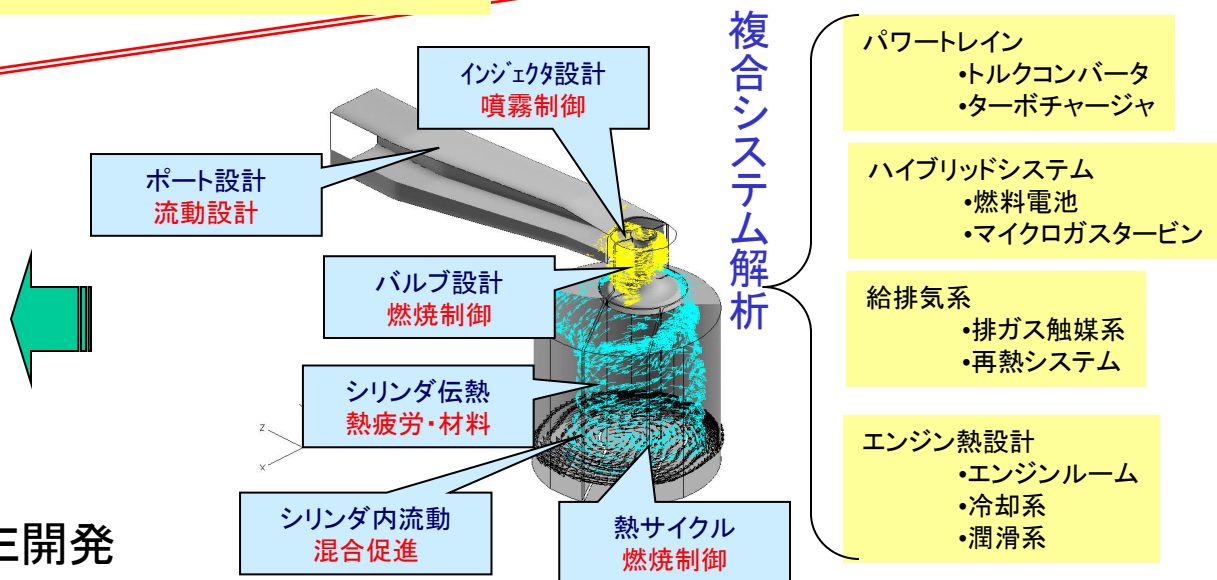
自動車設計におけるCFD応用



空力CAE設計

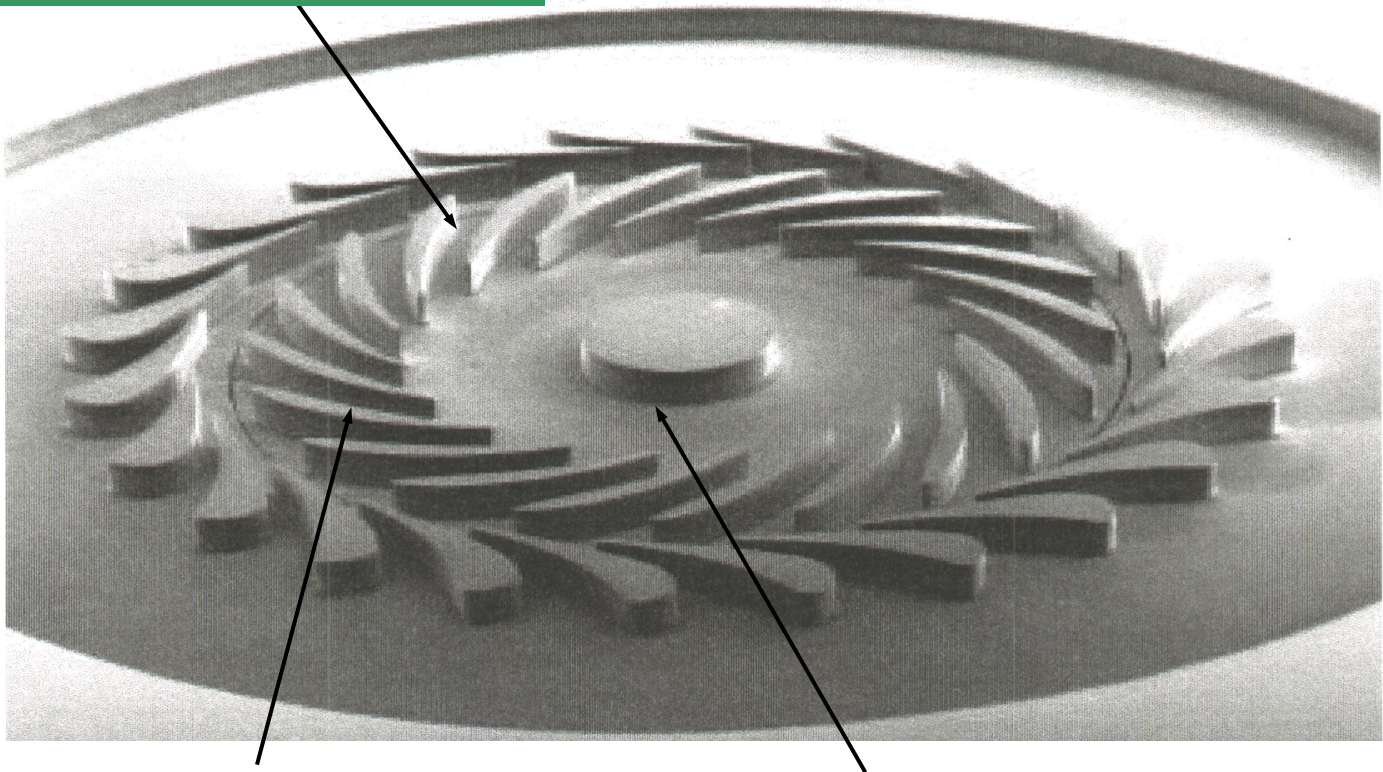


クリーンエンジンCAE開発



超小型ガスタービンシステムの開発

圧縮性LES解析→空力設計

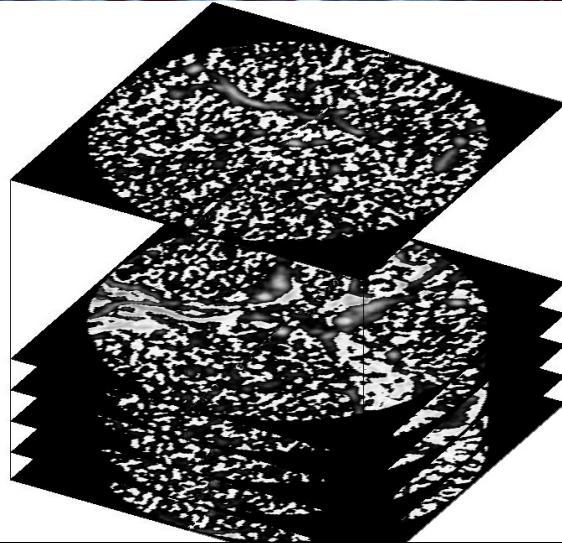


熱・応力連成解析→強度設計

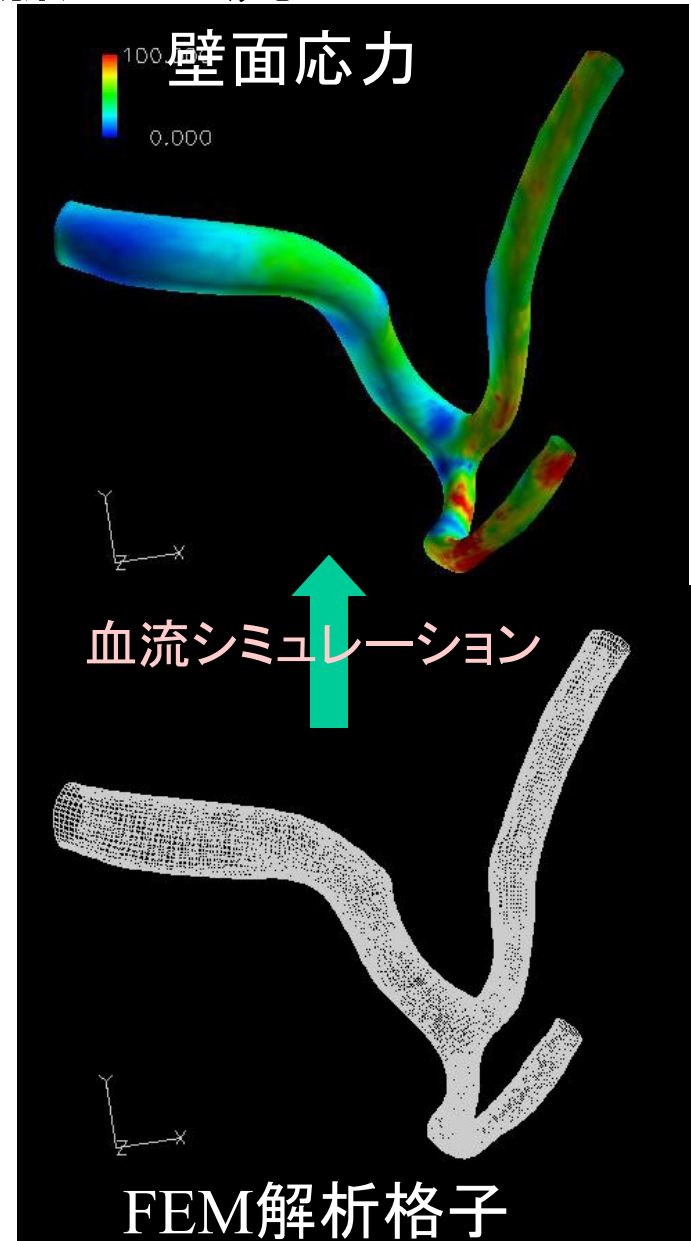
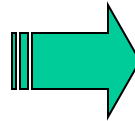
排気騒音解析→低騒音化設計

Medical Image を用いた脳内動脈の血流シミュレーション

Cerebral Angiography (x-ray)



Horizontal Slices of CT



壁面応力

血流シミュレーション

FEM解析格子

2002年1月25日

次世代構造解析ソフトウェアの開発

～超大規模自在計算力学を目指して～

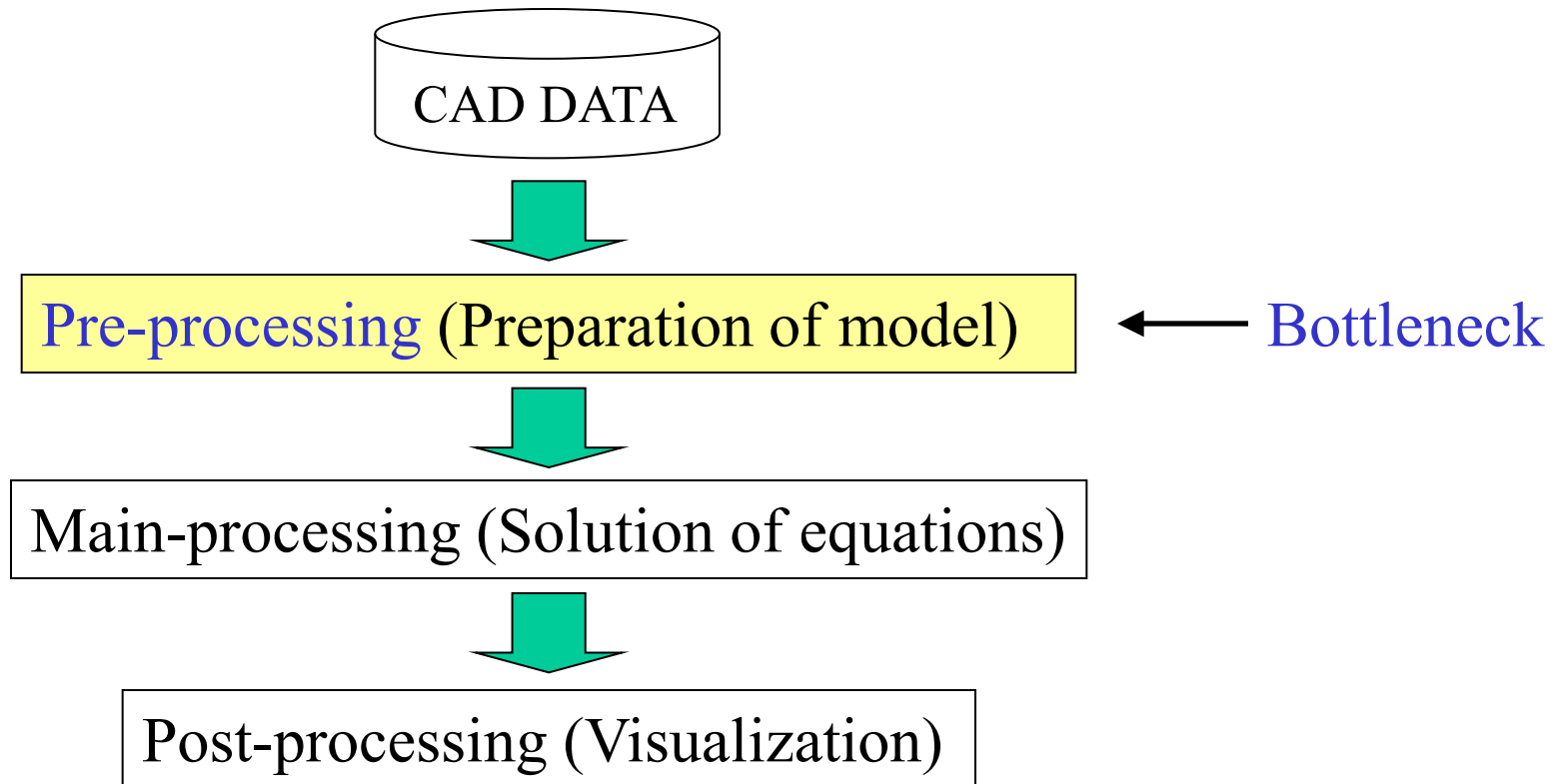
東京大学大学院 工学系研究科

システム量子工学専攻

矢川元基

研究の背景 (I)

- 大規模計算力学において、深刻なボトルネックとなっているのは、CADデータから計算機が扱える離散化モデルを得る部分である。(プリプロセッシング)



研究の背景(II)

次世代の計算力学システムが解決すべき課題

- 丸ごと詳細解析機能 ($10^7 - 10^8$ 自由度以上)
- 数百～数千、数万の超並列環境で高い並列処理性能
- 多様な並列分散環境への移植性の容易さ
- 単一現象の解析ばかりでなく、構造一流体などの各種連成解析や、設計解析を並列分散環境で自由自在に何でも思うようにあやつれること

次世代構造解析ソフトの目標

- 知りたい空間現象があればそれをただちに誰にでもシミュレーションしてみせること;

落としたコップの割れる様子、無数の枯れ葉の舞い落ちる様子、より速い水泳法、世界貿易センタービルへの飛行機衝突の様子、音のしない水洗トイレ、原発配管の水素爆発破壊、大地震による高速道路の横倒し崩壊、……

結論

- とにかく解きたい問題があれば必ず解けるという状態をつくる。現在は解ける問題を解いているに過ぎない。
- 将来の利用者はほとんどの場合解析ソフトが要るのではなく結果があればよいということに答えるべき。

ハードウェアに依存しないHPCグリッドウェアの開発

背景とこれまでの我が国の取り組み

背景

- ・これまで先端的科学技術計算コードはハードウェアに応じて個別的に最適化されている。
- ・グリッド向けのミドルウェアは下位のライブラリに留まっており、コード開発や連成解析のサポートをするに至っていない。
- ・米国のIT²や欧州のISTにおいて、様々な計算機環境の効率を最大限引き出せる科学技術計算コードを容易に構築できるような開発基盤を整備することが謳われている。

我が国の水準

- ・下位の通信ライブラリや並列化言語などは世界水準にあるが、グリッド環境を見据えたコード開発支援のミドルウェア研究は米国に比べて立ち遅れている。
- ・科学技術計算コードの開発効率が悪く、その人材も不足している。

開発内容

目標

- ・東京大学工学部、RISTで研究開発した地球シミュレータ向けの並列プラットフォームを拡張し、グリッド環境下のハードウェアに依存せず最適な科学技術計算コードを構築できるHPCミドルウェアを開発する。
- ・戦略ソフト全プロジェクトのソフトウェアをサポートし、それらの最適パフォーマンス抽出に資する。

第Iフェーズの目標: ~3年

- 各種戦略ソフトの科学技術計算処理パターン抽出
- ミドルウェア開発および実装、公開
- 1,000ステップコードの実現

第IIフェーズの目標: ~2年

- 最適化および連成アプリ開発
- コーディング期間を10分の1に短縮
- 戦略ソフト全般の実装

内容

- ・有限要素法, 有限差分法, スペクトル法, 分子動力学法, 連成等の計算処理パターン抽出と創出
- ・グリッド環境のハード依存部分をカバーするミドルウェアの機能設計および実装
- ・ミドルウェア上における高度化: 実例演習
- ・戦略ソフト全般の計算コード構築へのミドルウェアの適用

期待される効果

- ◆ ローエンドからハイエンドまで様々な計算機環境において、科学技術計算コードの新規開発が効率化・高信頼性化され、また既存コード資産の有効利用を図ることができる。

- ◆ 戦略ソフトプロジェクトで開発される各種フロンティアソフトウェアのパフォーマンスを、様々な計算機環境最大限に引き出せる。その結果、プロジェクト終了後の市場展開に直接的に利用できる。

- ◆ 設計開発の効率化や製品の品質向上により基盤産業の競争力が強化される。

- ◆ ハイエンド計算機のハード・ソフト市場と先端基礎研究の相乗的發展により、技術的・経済的国際競争力の強化を図ることができる。

奥田洋司 東京大学大学院
中村 壽 (財) 高度情報科学
技術研究機構

統合プラットフォーム

株式会社 富士総合研究所
計算科学技術研究センター
小池 秀耀 西川 宜孝 松原聖
koike@star.fuji-ric.co.jp
nisikawa@star.fuji-ric.co.jp
matsubar@star.fuji-ric.co.jp

◆ P S E の必要性

計算科学技術は飛躍的発展期にあるが、ハードウェアの進歩や情報技術の蓄積を生かし、技術革新を実現する為には、当面、次のような技術的課題を克服する必要に迫られている。

◆タスク並列処理技術の確立

◆ネットワーク上で複数のソフトウェアを統合化し、より複雑で大規模な問題を解決するソフトウェアを構築する技術の確立

◆マルチスケール、マルチフィジックスといった多原理統合型シミュレーション技術の確立

◆PSEに要求される機能

- ①ネットワーク上に分散したコンピューティング資源(ソフトウェア、データ)を、統合化して、より高度なソフトウェア・システムを開発するための機能
- ②多数のソフトウェアやデータベースを駆使した解析を、正確に再現するための機能。すなわち、解析手順、使用するソフトウェア、データ、計算結果、中間の計算結果、計算条件などを保存し、解析を正確に再現できる機能
- ③コンピュータネットワーク上のコンピューティング資源に自由にアクセスできる分散処理機能
- ④巨大なデータをネットワーク上で効率よく蓄積、管理し、必要に応じて、必要なデータを取り出せる機能
- ⑤ビジュアライゼーションなどの革新的ヒューマン・インターフェイス
- ⑥タスク並列処理ソフトウェアの開発ツール
- ⑦大規模シミュレーションをリアルタイムで対話的に制御するステアリング機能
- ⑧上記の機能をユーザーが自由に駆使できるワークベンチ

NASA: Information Power Grid (IPG)

• NASA: Information Power Grid (IPG)

• Grid Architecture

– Problem Solving Environments

– Applications

– Application Oriented Middleware Systems

– Grid Common Service

– Local Service / Resource

– Internet

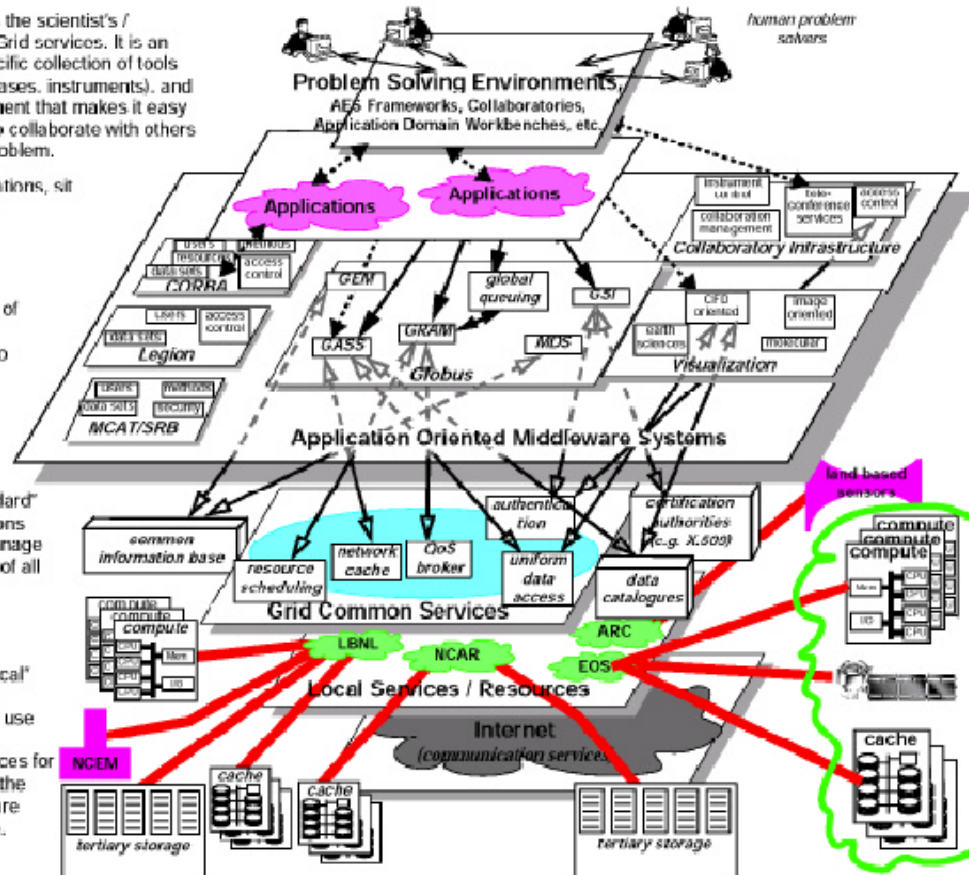
The PSE layer provides the scientist's / engineer's interface to Grid services. It is an application domain-specific collection of tools (e.g. simulations, databases, instruments), and a "workbench" environment that makes it easy to use those tools and to collaborate with others working on the same problem.

Applications, e.g. simulations, sit below the PSE and use middleware services.

The middleware layer provides different styles of service interfaces for application developers to access the basic Grid services.

Grid services are "standard" interfaces for the functions needed to build and manage distributed applications of all sorts.

Most "resources" are "local" and will have their own resource managers and use policies. It is the use mechanisms and interfaces for the local resources that the Grid common services are intended to homogenize.



Grid Architecture

出典: <http://www.nas.nasa.gov>

5. タスクフローを中心としたPSE

Problem Solving Environment (PSE)

PSEの構成

ワークベンチ

コンテンツ / リソース

ワークベンチの主な機能

タスクフロー

タスク並列シミュレータ（タスク並列プログラミングツール）

ステアリングシステム

データフロー管理（データ管理・保存・転送）

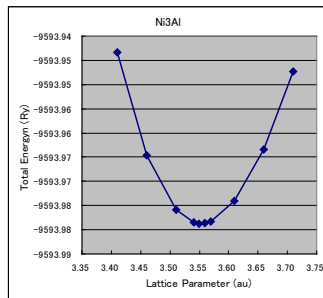
コラボレーション・インフラストラクチャ

その他

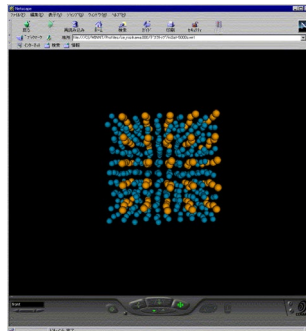
大規模、複雑な問題解決のための統合シミュレーション環境

Example of Materials Design using VE System

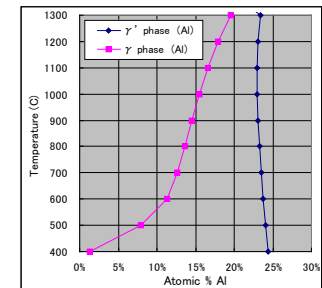
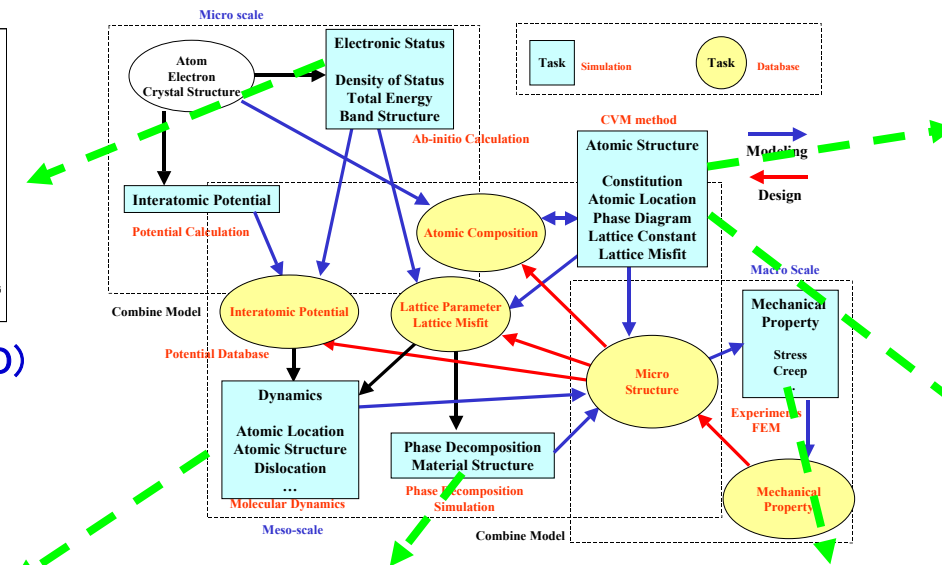
- Example of Taskflow for High-temperature SuperAlloy Design



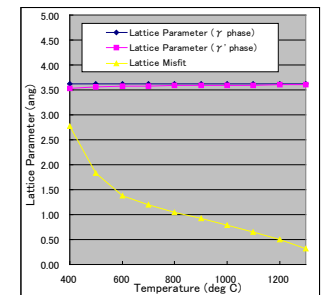
Total Energy (LMT0)



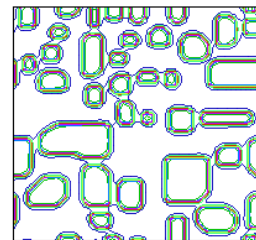
Microstructure (MD)



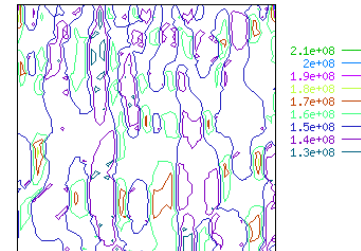
Phase Diagram (CVM)



Lattice Misfit (CVM)

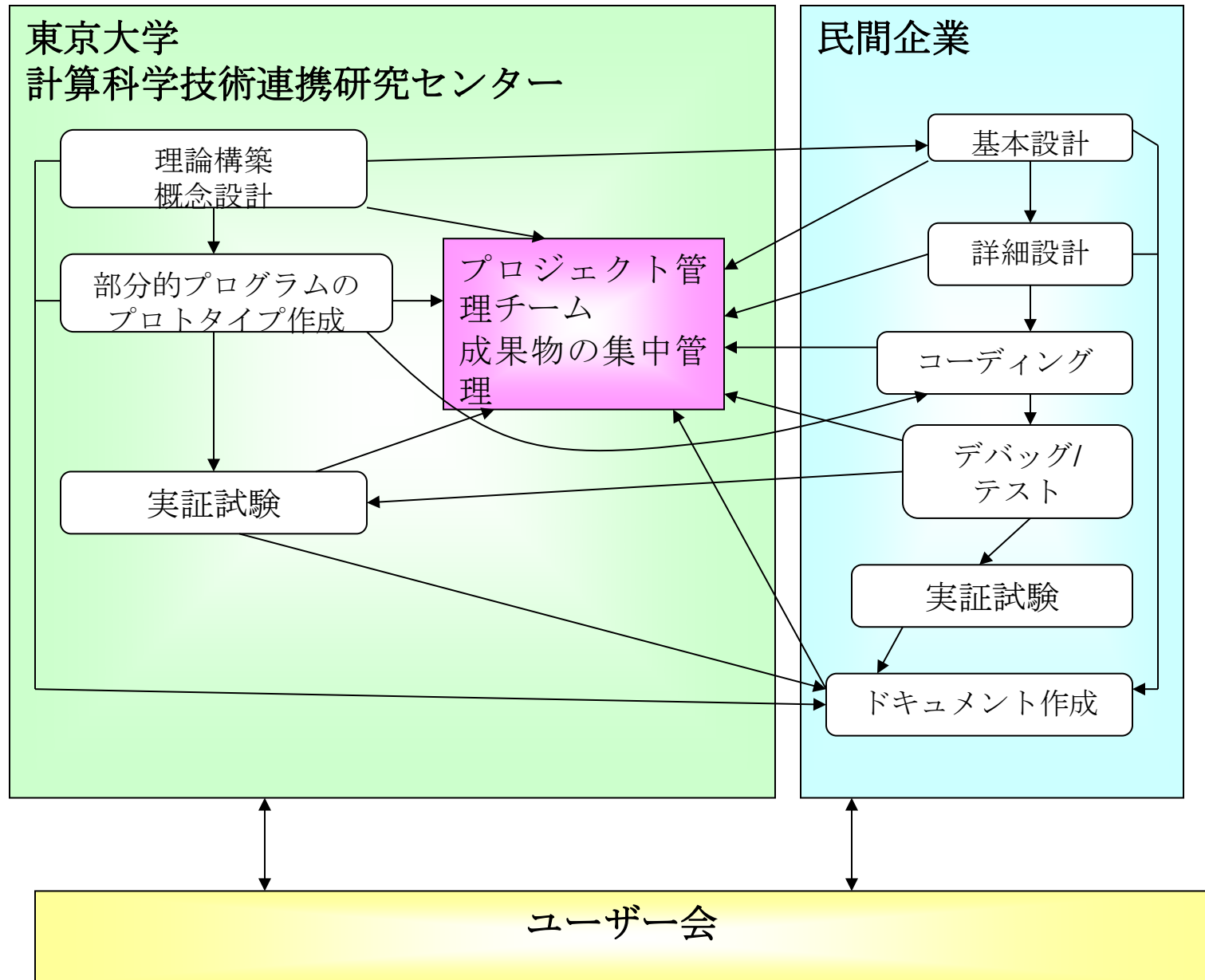


Phase Decomposition



Stress Distribution (FEM)

プロジェクト管理



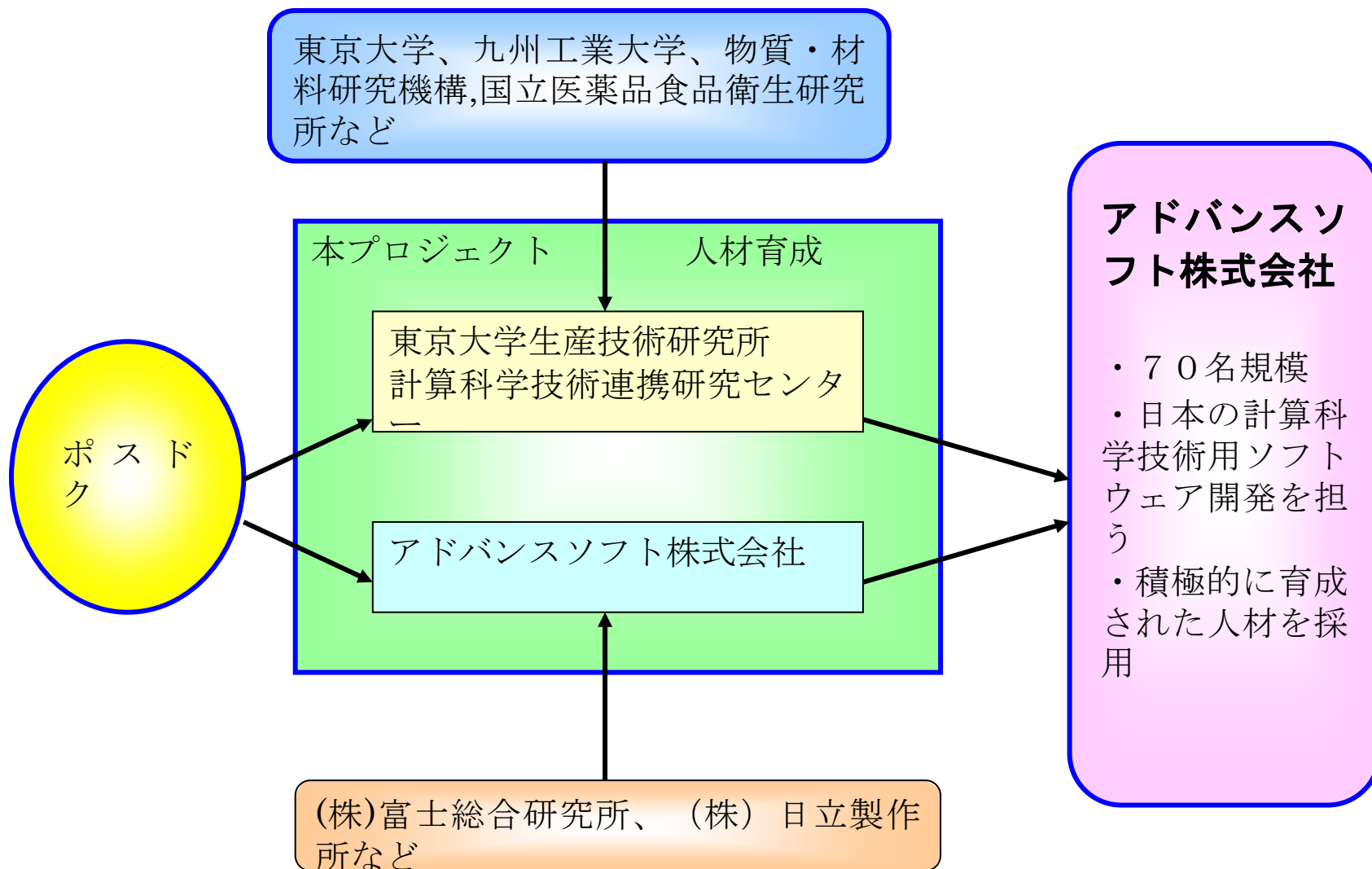
研究成果

◆本プロジェクトでは、研究成果をフリーソフトウェアとして公開し、世界に広く普及させ、デファクトスタンダードの地位を確立することを目指す。

◆同時に、本プロジェクトを推進するために設立したベンチャー会社 アドバンスソフト株式会社は、本プロジェクト終了後も独自に、ソフトウェアの改良・普及を事業として、継続して実施する(有料)。事業化により、継続的改良が可能となり、**事業化 → 開発資金の獲得 → 継続的改良** という正のフィードバックを確立する。

◆また、アドバンスソフト株式会社は、本事業終了後、本事業で育成した人材を採用し事業を継続・発展させていく。これにより、雇用を確保し(5年後の70名程度を予定)、我が国の計算科学技術用ソフトウェア開発・保守体制の確立に貢献する。

人材育成



研究開発成果の事業化

