

RSS₂₁ NEWS VOL.4

Revolutionary Simulation Software

7月27、28日“革新ソフト”第1回シンポジウム開催

2年目を迎え、いよいよ完成に向けて加速中の「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトは、最新成果の報告と今後の展望を議論する場として第1回シンポジウムを開催します。

■ 第1日目(7月27日): — 21世紀の社会・産業へのシミュレーションの新しい役割・貢献を議論 —

第1日目は、各界を代表する方々をお招きし、21世紀のシミュレーションに期待される役割について議論します。基調講演では、「知識の構造化」で著名な東京大学の小宮山宏総長より「動け！日本発21世紀のシミュレーション技術」と題し、課題先進国日本に対するシミュレーション技術の貢献についてご講演いただきます。招待講演では、総合科学技術会議の柘植綾夫議員、トヨタ自動車(株)の天野吉和執行役常務、文部科学省研究振興局の渡辺貞研究振興官より、今後のシミュレーション技術への期待や最先端スーパーコンピュータプロジェクト(略)についてご講演いただきます。続くパネルディスカッションでは、「21世紀を切り拓くシミュレーション技術」と題し、各界リーダー6名をお招きして議論していただきます。日本の今後のシミュレーション技術を考える極めて有意義な機会になると思いますので、ご興味をお持ちの

多数の皆様のご来場をお待ち申し上げます。

■ 第2日目(7月28日): — 革新的ソフトウェアの最新成果の報告並びに今後の展開を議論 —

“革新ソフト”プロジェクト(略)は安心・安全な社会の構築や新しい産業の創生などに直接貢献できる先進的なソフトウェアの開発・実用化をめざしており、地球シミュレータの利用による世界初の計算結果を得るなどすでに数々の成果が得られています。第2日目は、成果報告と今後の開発計画を紹介し、ご意見を承ります。今回は、生命現象、ナノテクノロジー、都市の安全・環境、統合連成の4つの分野に分け、それぞれの全体取り組み状況の紹介と、全10テーマに細分して詳細な開発状況の報告を行います。最近のトピックスとしては、たんぱく質と医薬品候補物質の相互作用解析がわずか3時間余りで実現できたこと、世界最大規模の6,000原子レベルのナノ特性計算が可能になったこと、さらにフォーミュラーカーの丸ごと空力特性解析を初めて実現したことなどがあります。それらの最新状況を詳しく報告するとともに、他の新しい取り組みを含め、本プロジェクトの全貌を紹介します。サイエンスからインダストリーにわたる各分野・各業務でご活躍中の皆様多数のご参加を期待致します。



東京大学総長
小宮山 宏



総合科学技術会議議員
柘植 綾夫



トヨタ自動車(株)執行役常務
天野 吉和



文部科学省研究振興官
渡辺 貞

地球シミュレータの広範囲な産業分野での活用を加速!

地球シミュレータに移植したソフトウェアによりフォーミュラカーの空力特性の高精度な予測やナノ、バイオ分野での新たな現象の究明を実現。さらに、高精度騒音解析、大規模構造解析の2テーマを加えて、産業界のニーズに幅広く対応中。

“革新ソフト”プロジェクトでは、重要施策の1つとして、地球シミュレータ共同プロジェクトに参加しています。平成17年度は複合現象流体シミュレーション「FrontFlow」、タンパク質・医薬品候補化合物相互作用シミュレーション「ABINIT-MP」、ナノ現象統合シミュレーション「PHASE」で、新たな現象を解明し産業界における利用の期待が高まりました。平成18年度は、さらに、高精度騒音解析、大規模構造解析を加えることにより地球シミュレータの産業利用に対する広範な貢献が見込まれています。

複合現象流体シミュレーション「FrontFlow」

機械、宇宙、車両、電機等の基幹産業分野の設計現場において、製品の複数のパラメータ(例えば、効率、信頼性、騒音、振動等)を設計段階で統合的に扱うことが可能となり、安心・安全な製品開発・生産に多大な貢献が期待されるとともに、試作・試験の大幅な削減が可能になります。

フォーミュラカーにおいては実走行時の現象を高精度に予測することが可能となり、今までの風洞実験に代わる革新的なものづくりプロセスの実現に貢献できます。一方、近年ファンの小型化・高速化に伴い、ファン騒音の問題が顕在化しており、この低減が社会的な課題となっています。そこで、平成18年度は、ファン騒音の定量予測を実現することをテーマに追加し、社会ニーズに対応します。ファン騒音を高精度に予測するためには、翼面に発達する乱流境界層を解像する必要がありますが、世界的にも、このような乱流境界層を解像するような大規模な解析例はまれです。したがって、これが成功すれば、学術的にも革新的な成果になると予想されます。

タンパク質・医薬品候補化合物相互作用シミュレーション「ABINIT-MP」

抗糖尿病薬を始め肥満など生活習慣病治療薬は社会的に開発が強く望まれています。そのターゲット受容体として注目されているペルオキシゾーム増殖応答性受容体 γ (PPAR γ)や(立教大学共同研究)、さらに抗アルツハイマー型認知症薬のターゲットとして重要なアセチルコリンエステラーゼについて(医薬品メーカ共同研究)本格的な化合物との相互作用解析が始まりましたが、その成果の社会からの期待はきわめて大きいものがあります。

ナノ現象統合シミュレーション「PHASE」

実験に頼らずに次世代ナノデバイスの物性を解明するために必要な6,000原子規模の第一原理計算が約100時間(従来の大型計算機では約10年)で可能になり、次世代半導体デバイス開発を現実に近い近づけることができました。平成18年度はさらに、最適化された「PHASE」を利用して、自己組織化プロセスをより一般的な材料合成プロセスとして発展させることを視野に自己組織化の解析を実施します。

大規模構造シミュレーション「FrontSTR」

前処理を改良した行列ソルバーを開発することにより、線形弾性解析に留まらず、行列を繰り返し解くような解析(非線形解析、固有値解析)に適合するプログラムを開発します。現在の商用プログラムでは解析できない規模の解析を地球シミュレータを利用して実施します。(1億点を超える規模、例:圧力ポンプの固有値計算、ゴム材の非線形解析を対象とします。)

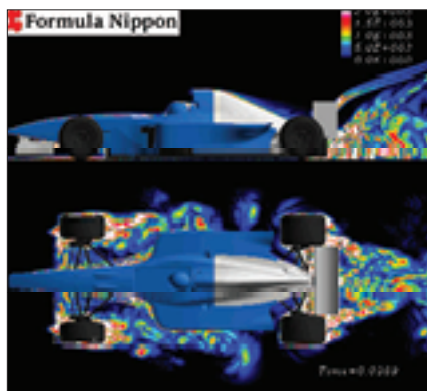


Fig. 1: フォーミュラカー周りの空気流動状況

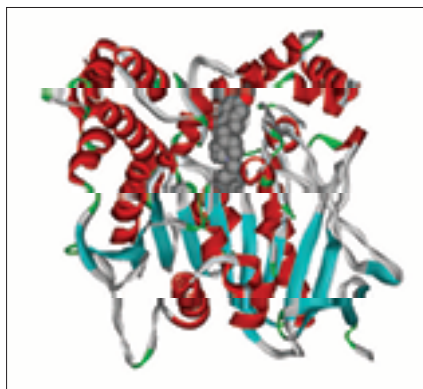


Fig. 2: アセチルコリンエステラーゼ(PDB ID: 1EVE, 532残基)

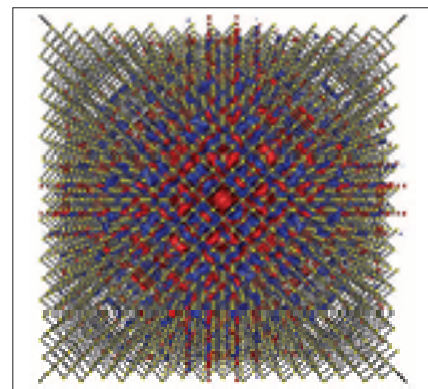


Fig. 3: Si結晶中のAs不純物状態

ソフト開発の最新成果をプレス発表

“21世紀の科学技術を牽引する革新的シミュレーションソフトウェアを開発”

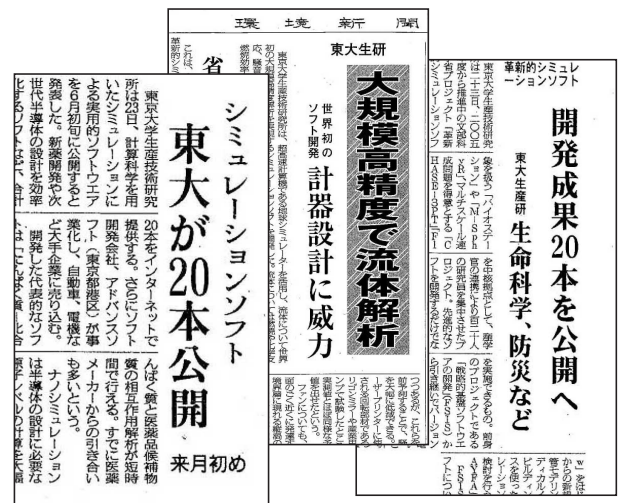
5月23日臨時生研記者会見を行い、プロジェクトの研究成果を発表しました。出席者は12社15名にのぼり、記者からの質問も活発に行われ、日経産業新聞、日刊工業新聞、化学工業日報、環境新聞、科学新聞などに掲載されました。また、特集号の取り組みなどの話も進んでおります。会見の概要を以下に記します。

計算科学技術連携研究センターは6月初旬に、計算科学による21世紀の社会・産業への新しい貢献をめざした、革新的な機能を有するソフトウェア20本を一挙に公開しました。これらのソフトウェアは文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「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（H17年度～19年度予定）の最新成果であり、特に、日本が誇る超高速計算機、地球シミュレータを駆使した世界初の大規模高精度解析を実現し、従来のソフトウェア・計算規模では不可能だった数々の未解明の現象を明らかにされました。

文部科学省による本プロジェクトは、ライフサイエンス、次世代エンジニアリング、都市の安全・環境を主な対象としており、将来の安心・安全な社会の構築や新しい産業の創生に直接貢献できる革新的・先進的なソフトウェアの開発をめざしています。初年度に当たる平成17年度は、特に地球シミュレータを駆使し、これまで不可能だったタンパク質と医薬品候補物質の相互作用解析がわずか3.3時間で可能に



なり、新薬開発プロセスの飛躍的効率向上に貢献できる道を開いたこと、ナノデバイスの設計に必要な6,000原子レベルの計算が100時間（従来大型計算機では約10年）で可能になり、バイオ素子等次世代デバイス開発の夢を現実に近づけたこと、フォーミュラーカーに代表される高速車の安定走行を支配する空気流動の詳細を世界で初めて明らかにし、安全・省エネ・低騒音等、人、社会、環境にやさしい未来車の設計に不可欠の情報を得たことなど、将来の社会・産業の発展に多大な貢献が期待できる多くの知見が見出されました。なお、発表内容の詳細はホームページ <http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp>に掲載しておりますので参照ください。



「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 平成18年6月公開ソフトウェア

サブテーマ	システムの特徴 革新的／先進的機能	公開ソフトウェア (H18)	公開ソフトウェア概要
創薬・バイオ新基盤技術開発へ向けたタンパク質反応全電子シミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> 世界最大規模のタンパク質全電子計算 タンパク質解明に寄与する多機能統合計算 	ProteinDF System 1.0	ProteinDFとプロテイン・エディタを融合させたタンパク質の量子化学計算システム
		ProteinDF Ver 1.0	密度汎関数法によるタンパク質の精密な電子状態計算プログラム
		ProteinEditor Ver 1.0	分子グラフィックス、計算実行支援および計算結果の解析
		ProteinMD Ver 0.9	生体分子の分子動力学計算
タンパク質-化学物質相互作用マルチスケールシミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> タンパク質-化学物質(医薬品候補物質)相互作用統合解析・可視化 FMO法(非経験的フラグメント分子軌道法)による巨大分子系の解析 	ABINIT-MP Ver. 3.0	FMO法を実装した量子化学計算プログラム
		BioStation Dock Ver. 1.1	レプリカ交換法とXUFFを用いたタンパク質-リガンドドッキングシステム
		BioStation Viewer Ver. 6.00	ABINIT-MP計算結果の可視化・解析
		BioStation Launcher Ver. 1.3	サブシステムへGUIを提供する統合システム
		KiBank	タンパク質-低分子間の結合親和性実験データを収集したデータベース
器官・組織・細胞マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> モデル変形、パラメータ算出機能を有する医用画像処理 循環器系の、病変メカニズム解明のための統合解析 	Medical Image Ver.1.0	医用画像(CT,MRI画像)を用いた、血管3次元表面データの構築
ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> ナノ材料のマルチスケール多機能統合解析・設計支援環境 地球シミュレータ環境下超大規模ナノ特性解析 	PHASE Ver. 5.00	擬ポテンシャル法に基づく第一原理バンド計算
		UVSOR Ver. 2.00	第一原理擬ポテンシャル法に基づく電子系及び格子系の誘電応答解析
		CHASE-3PT Ver. 2.00	ナノシミュレーションソフトウェアの操作を支援する統合環境
マルチフィジックス流体シミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> 乱流起因の多様な複合現象(燃焼、混相、騒音等)の解析 LES(Large Eddy Simulation)による大規模・高精度・高速解析 	FrontFlow/blue Ver.4.0	LES法を基礎とする非定常現象の直接的解析による、非圧縮性流体の非定常流動の高精度予測
		FrontFlow/red Ver.2.8a	LES法を基礎とする非定常現象の直接的解析による、燃焼流の数値予測
ハイエンド計算ミドルウェア援用構造解析システムによる汎用連成シミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> 大規模並列処理機能活用の複雑構造物の高精度・高速解析 FEM解析、ソルバ、可視化等の並列解析用ライブラリ群 	hecmw-PC-Cluster Ver.1.00	有限要素法などの典型的なプロセスをハードウェアごとに最適化した開発支援ライブラリ
		FrontSTR Ver.1.00	HEC-MWを用いた大規模並列有限要素法構造解析プログラム
		FrontSTR for WIN Ver.1.00	FrontSTRのWindows用バイナリ
都市の安全・環境シミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> 避難モデル統合解析 消火、移流拡散、延焼モデルを中心とする大規模統合解析 	EVE SAYFA Ver.1.00	LESに基づく高精度な3次元解析モデル
全体系最適化シミュレーション・プラットフォーム	<ul style="list-style-type: none"> 革新的シミュレーションソフトウェアで開発したソフトウェア群の統合プラットフォーム 	PSE Workbench 4.0	マルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションを支援する統合プラットフォーム



6月1日～3日生研公開開催

例年開催される生研公開においてプロジェクトはC棟笹岡ラウンジでパネル、タッチパネル、デモ等行いました。1日には加藤代表の講演も行われ、多数の来客がありました。昨年と違ったのは、○○チームの話が聞きたいなど目的のはっきりした方がよく見受けられたことです。

編集後記

ソフトウェア20本の公開を6月に行いちょっと一息です。ぜひ、ダウンロードし、お使い下さるようお願いいたします。シンポジウムは各界のVIPの方がご講演くださいますので、奮ってご参加ください。

資料請求お問い合わせ先

TEL:03-5452-6661 FAX:03-5452-6662 E-mail:office@rss21.iis.u-tokyo.ac.jp
URL:<http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/>

編集発行: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
〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1