

FSIS NEWS

Frontier Simulation Software for Industrial Science

10

NUMBER

ソフトの基幹部分が完成、実証計算が着々と進む

第3回シンポジウム開催 来る12月8日、9日

「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトも3年目の後期を迎え、ソフトの基幹部分の開発はほぼ完了し、現在は、開発ソフトの実用性を評価するための実証計算を積極的に展開しております。実証解析の具体例は来る第3回シンポジウムで報告予定です。

産業界への貢献と今後の期待を議論

平成14年から5ヵ年計画で、世界水準の実用的な計算科学シミュレーション・ソフトウェアの開発とその普及を目的に推進しております本プロジェクトも3年目の後期を迎えております。ソフト開発に関しては、これまでに基幹部分はほぼ完成し、現在はソフトの改良、高度化やユーザインターフェースの整備などを進めております。これまでに開発したソフトウェア合計44本はホームページ上に公開し^①、ユーザの皆様方からダウンロード頂いた件数は8,000件に届こうとしております。^②しかしながら、ソフトウェアを真に役立てていただくためには、ユーザの皆様方にご自分の問題に対して適用していただき、ソフトの実用性を評価していただくことが必須であると考えております。

このような背景のもと、この度のシンポジウムの主なテーマは産業界等での実問題に対する戦略ソフトの貢献並びに今後の期待についてであります。初日は我が国を

代表する計算科学研究者や産業界代表者による現状分析と今後の展望が議論され、2日目は有力企業での適用例を元にした戦略ソフトの産業界への貢献と期待が議論されます。研究開発や設計製造業務でのイノベーションをお望みの多数の皆様のご参加をお待ち申し上げます。

産業応用推進協議会を中心に実証計算を展開中

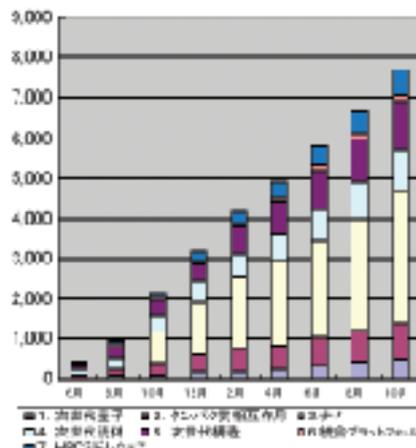
本プロジェクトでは、昨年9月に設立されました戦略ソフト産業応用推進協議会のワーキンググループ活動を中心に、ソフトウェアの普及セミナーを開催すると共に、これらの試算・実証計算を積極的に展開・支援しております。

本ニュースレターでは、これらの試算・実証計算の状況を中心にご紹介致します。なお、産業応用推進協議会では試算をやってみたいという希望をお持ちの産業界の皆様のご参加を常時受付けております。是非積極的なご提案を御願致します。

http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/

グループ名 「代表的なソフトウェア名」	公開ソフトウェア	
	名称	機能
次世代量子化学計算 「ProteinDF」 UP	ProteinDF システムβ版	大規模タンパク質の量子化学計算統合システム
タンパク質・化学物質相互作用解析 「BioStation」 UP	BioStation	非経験的FMO法による相互作用解析システム
ナノシミュレーション 「CHASE-3PT」 NEW	UVSOR CAMUS FXZIX	誘電応答解析プログラム ハイブリッド計算プログラム オーダタイトバインディング計算プログラム
次世代流体解析 「FrontFlow」 UP	FrontFlow/blue FrontFlow/red	ターボ機械・流体音解析 燃焼・混相流解析
次世代構造解析 「NEXST」	NEXST-FMM NEXST-MPS-Solid NEXST-Impact (他3)	3Dメッシュ生成 3D粒子法弾性体/動解析 3D並列動解析
統合プラットフォーム 「RINDOW」	PSEワークベンチ	タスクフロー概念の実現
HPCモデルウェア 「HPC-MW」	hpc-mw-solver-test (他3)	PCクラスター用ライブラリ

^① 公開ソフトウェア 2004年6月までに38本公開 2004年12月/6本公開



^② ソフトウェアダウンロード数

インスリン6量体の全電子計算達成

量子論に基づく新しい製薬設計の道

次世代量子化学計算グループでは、ProteinDFでインスリン6量体の全電子波動関数計算に成功し自身を持つ世界記録を大幅に更新しました。

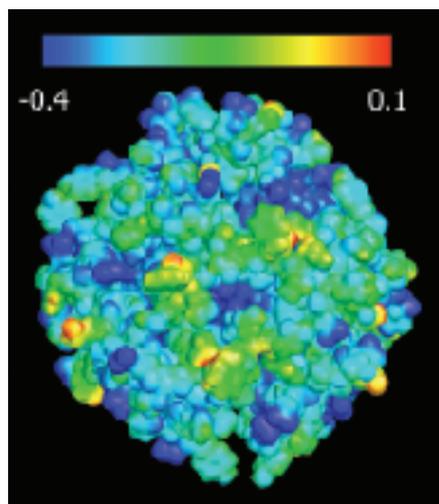
ProteinDFシステムで新たなステージへ

全電子計算に成功した分子は306残基の対称性なしのインスリン6量体(4,716原子、18,552電子、26,766軌道)で、SGI社Altix3700の32CPU(理論ピーク性能166GFlops)を使用して達成しました¹⁾。この計算はこれまで当グループが持つ世界記録を軌道数で3倍も更新するものです。

糖尿病の代表的な治療法に、インスリン製剤の注射による強化インスリン法があります。しかし、インスリンは製薬中で6量体を作ってしまう、薬効のある単量体に解離するまで、つまり注射してから効くまでに時間がかかっています。最近の遺伝子工学および医学製造技術の発展により、自己組織化能力の弱い速効型のインスリンアナログ製剤が登場していますが、従来の古典法に基づく設計方法と比較して、ProteinDFのように正確な物理量を与える量子化学計算を使用すればさらに効率の良い製剤が設計できる可能性がでてきました。実際、当然ながら計算結果は古典法と有意に異なるのです。

このような成果を見てもわかるとおり、タンパク質の電子状態計算が

実用化の域に突入しつつあります。ProteinDFシステムは製薬設計を新たなステージへと誘うでしょう。この新しい創薬基盤技術が確立すれば、バイオ産業や特許等に対する社会的・経済的波及効果は計り知れません。



¹⁾ インスリン6量体の静電ポテンシャル

燃焼反応流れ解析の統合システムを開発

燃焼反応流れに対する産業界の幅広いニーズに応える

素反応解析から乱流火炎、火災シミュレーションまでを統合し、半導体デバイスや光ケーブルの素材製造プロセスなどの複雑な反応流れにも応用が期待される。

統合的な解析システムとして FrontFlow/red を開発

燃焼流れは、流れと化学反応と熱力学とが複雑に連成する現象であり、家庭用バーナから、エンジンやガスタービンの設計、防災まで様々な工学分野に広く応用されているが、その予測シミュレーションは未だ困難な課題として挙げられる。

次世代流体解析グループでは、複雑で多様な燃焼流れに対して、それを律速する現象に適合するマルチスケールモデルを導入した統合的な解析システムとしてFrontFlow/redを開発した。本システムでは、化学反応の詳細スケールには素反応解析を、乱流火炎ダイナミクスにはラージ・エディ・シミュレーション(LES)と火炎片(flamelet)モデル

を、また大域的な熱力学スケールにはレイノルズ平均モデルと渦消散反応モデルをそれぞれ適用することができ、燃焼反応流れに対する産業界の幅広いニーズに応える。

また、Frontflow/redは、層流~乱流、非圧縮性~圧縮性を含む広い速度範囲をカバーして高精度な非定常流れ解析を実現できるよう設計されており、従来、燃焼流れ設計に重要であるにも関わらず予測困難であった多くの問題^{※1}などに対して適用が可能となる。また、半導体デバイスや光ケーブルの素材製造プロセスなどの複雑な反応流れに応用も期待される。

※1 燃焼振動や火炎不安定などを伴う非定常現象や、NOxやダイオキシン生成に関わるとされる局所火炎構造予測

産業界での試計算が活発化!

新たに9テーマで試計算実証が開始されました。

産業応用推進協議会のWGには、20を超える試計算実証のテーマ提案がありました。各WG会議や、流体構造WGに所属する燃焼・反応、流体力、騒音、構造の4つの分科会において、戦略ソフトのプロジェクトリーダーによるテーマのヒアリング・討議を行い、新たに右表に9テーマが、実施されております。

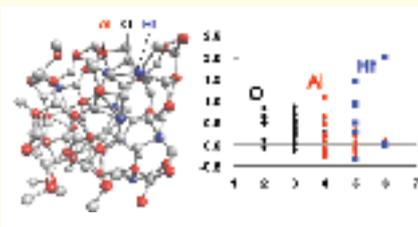
テーマ名称「対象ソフトウェア」	実施部門	成果・期待効果
タンパク質と化合物の結合エネルギーの計算「ABINIT-MP, ProteinDF」	大正製薬(株)	設計薬物化合物の活性値予測
金属酵素と阻害剤の複合体の計算「ABINIT-MP」	キッセイ薬品工業(株)	金属酵素阻害剤の効率的な分子設計
次世代ゲート絶縁膜の高誘電体材料解析「PHASE」	(独)物質・材料研究機構	次世代Siデバイス開発の効率化
バーナー炎流れの非定常解析「FrontFlow/red」	電気化学工業(株)	バーナーの最適設計 反応炉の効率化、低Nox化
プラズマCVDシミュレーション「FrontFlow/red」	三菱重工業(株)	成膜シミュレーション技術の開発 半導体製造装置などの研究開発効率化
ダクトの騒音解析「FrontFlow/blue」	(株)デンソー	カーエアコンの騒音予測、低減設計 送風システムの低騒音設計
プロペラファン流体・構造連成解析「FrontFlow/blue」	三菱電機(株)	プロペラファンの変形・寿命予測、最適設計
物体周りの剥離流れ「FrontFlow/red」	(株)本田技術研究所	車両空力設計 YAW特性、横風特性予測
ペーン付きバンド内流れ「FrontFlow/red」	(株)電業社機械製作所	管路(発電、用水、原子力など)の安全設計、疲労予測

代表事例の紹介

ナノ解析システムによるCMOSゲート絶縁膜材料の誘電応答解析

非晶質絶縁膜材料の誘電率予測

次世代半導体デバイス材料のひとつとして期待される非晶質ハフニウムアルミネートのナノシミュレーション解析を進めている。誘電率とハフニウム元素含有率の関係を求め、母体物質中でどのような環境にあるハフニウム元素が大きな誘電率を導くのかを解析した。

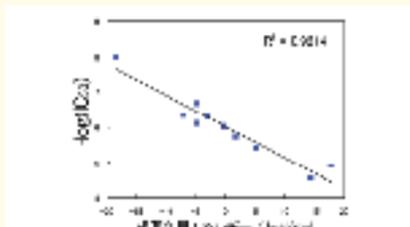


誘電応答の解析例。非晶質ハフニウムアルミネートの構造(左)と各原子の格子誘電率への寄与(右)

精密なドラッグデザインが!

ABINIT-MPによるFMO計算の実用化

キッセイ薬品工業(株)における事例
Spring-8で解析した約270残基のタンパク質と阻害剤との結合性について、Pentium4 4CPUのPCクラスタを用いてFMO-HF/STO-3G計算(計算時間約15h)による解析を行い、実験値と非常に高い相関($R^2=0.96$)が得られた。



FMO計算による相互作用エネルギーと実験値(IC_{50})との相関

剥離の影響を高精度に予測する!

物体まわりの剥離流

物体に対して風が角度をなして当る場合、物体に働く諸流体力の角度 α に対する特性は、物体の形状によりかなり異なる。車両の場合、この特性はその空力性能に大きく影響を与えると考えられる。ここでは横に置いた円柱に対する特性を実験結果と比較する事により計算精度の検証を行う。計算手法としてLESを用いる事で、従来手法(RANS)に対し物体表面の剥離した流れの計算精度の改善が期待される。

(株)本田技術研究所 朝霞研究所



Fig 1 計算機メッシュモデル

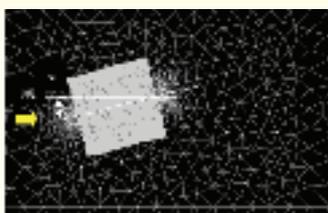
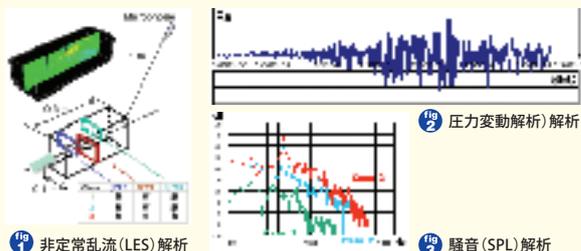


Fig 2 風の向きと計算モデル

カーエアコンから騒音を予測する開発が!

騒音を予測する

(株)デンソーでは、カーエアコンの低騒音化技術開発の一環として、送風騒音に着目して、流体騒音予測技術を開発中であるが、これまで実機で実験検証する以外に有効な解析手法がなかった。ここに次世代流体解析グループが開発したFrontFlow/blueを使って流体解析し、得られた圧力変動から、騒音をかなりの高精度で予測できそうな結果を出しつつある。これにより、送風システムの低騒音設計が可能になることを期待している。



SC2004に参加

11月6日～12日、年に一度ハイパフォーマンスコンピューティングおよびネットワーク技術分野の世界第一線の研究者・エンジニアが集う伝統的な国際会議スーパーコンピューティング(SC)



2004がアメリカ、ペンシルバニア州ピッツバーグで開催されました。今年度、本プロジェクトはブース出展のみならずポスター発表にも採択され、プロジェクトの紹介と世界最大規模の計算結果の報告を行いました。大勢の見学者が訪れ、大盛況のうちに幕を閉じました。

先生紹介

9月1日付けで本プロジェクトの一員に加えていただきました。産学両面の経験を生かして、プロジェクト成功のために少しでもお役に立てるよう努力をしたいと思っております。どうぞよろしくお願いいたします。



計算科学技術連携研究センター
特任教授 寺坂 晴夫

FrontFlowのセミナーに多数参加

平成16年6月23日にFrontFlow/red、10月8日にFrontFlow/blueのセミナーを開催し、あわせて、26機関、35名が参加いたしました。参加機関(順不同)は、以下のとおりです。三井化学、デンソー、東北大、東京ガス、大塚商会、三洋電機、松下電器、ダイキン、NEC、鉄道総研、本田技研、三菱ふそう、横河電機、ジャトコ、三井造船、エクセディ、電業社、東芝、セイコーインスツルメント、菱明技研、出光興産、三菱重工、日立電線、日産、トヨタコム、三菱電機。セミナー当日実施したアンケートにより、初歩者にもわかりやすかった・日本語で使えるのが良い・ソルバーの機能は申し分ない、など、好評でしたが、一方、マニュアルの充実を図って欲しい・プリ/ポストをもっと整備して欲しい・一般の設計者が容易に使えるようにテンプレートが欲しい、など、設計/開発の現場での使いやすさの要求もありました。また、具体的な解析例の展示会を実施して欲しい・理論などの勉強会に参加したいといったさらに突っ込んだ要望もありました。

プロジェクトではセミナーで頂きました貴重なコメントを今後のソフト開発に活かしていきたいと考えております。



FrontFlow/red のセミナー



FrontFlow/blue のセミナー

ワークショップ・シンポジウム開催予定

2004	12月	第3回戦略的基盤ソフトウェアの開発シンポジウム
2005	1月	第22回ワークショップ「次世代流体解析」
	2月	第23回ワークショップ「ナノシミュレーション」

編集後記

本号で10号というきりのよい号を発行する運びとなりました。本号は、シンポジウムの概要をお知らせしています。ご興味をもたれた方は今からでも遅くありませんのでお申込み下さい。さて、今までに10号を発行し各方面にお送りしておりますが皆様のお役に立っているのか編集を携わっているものとして気になるところです。送付拒否の連絡がないので安心しておりますが引き続きプロジェクトの最新の情報などお知らせいたしますのでご期待下さい。

資料請求お問合わせ先

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