

# FSIS NEWS

Frontier Simulation Software for Industrial Science

# 11

NUMBER

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

## 平成16年度成果報のとりまとめ・公開準備中

「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトは3年を経過しました。このたび平成16年度の研究開発成果をとりまとめました。これまでの成果と同様に平成16年度の成果は平成17年6月に公開ソフトなどとして公表予定です。

### 第3回シンポジウムが盛会の内に終了

第3回「戦略的基盤ソフトウェアの開発」シンポジウムが、平成16年12月8、9日の2日間にわたり開催されました。初日のパネルディスカッションでは、「日本のシミュレーション技術戦略」について活発な議論が行われ、また2日目にはプロジェクトの開発状況が多数の実証計算事例とともに報告されました。このなかには、日立インダストリイズ、三菱重工業など産業界側からの発表もあり、開発ソフトが着実に浸透し、その実用性が認知されてきていることを強く印象づけるものとなりました。(詳細は4ページ)

### ダウンロード件数が1万件に

平成15年6月の公開以来、戦略的基盤ソフトウェア(現在38本件)のダウンロード件数は順調に増加し、わずか1年半あまりで1万件を突破しそうな勢いです。これは、本プロジェクトに寄せる皆様方の強い関心と期待を反映したものと大変うれしく受け止めるとともに、その期待に

こたえるべく、よりいっそうの成果普及を進めてまいる所存です。本年度も多数の成果が得られており、本年6月頃には、新たな機能が付加された最新バージョンソフトの公開も予定しております。ユーザーの皆様方にはぜひ一度、これらの開発ソフトをダウンロードしてその機能や性能をご評価いただきたいと思っております。

### 協議会において主要なソフトのセミナーが一巡

産業応用推進協議会の普及WGでは、協議会参加企業の設計・開発・研究者を対象として、それぞれのテーマごとにインストールや使用方法に関するチュートリアルセミナーを実施しています。これまでに、次世代量子化学計算ソフト ProteinDF、タンパク質・化学物質相互作用解析ソフト ABINIT-MP、ナノシミュレーションソフト PHASE、次世代流体解析ソフト FrontFlow/red、FrontFlow/blue、HPC ミドルウェアの構造解析ソフト pSAN および次世代構造解析ソフト NEXST-Impact と、計6回のセミナーを開催いたしました。これで、本プロジェクトの主要なソフトのセミナーが一巡したことになります。開発担当者が講師になり、1回あたり10人から20人程度の少人数でパソコンを使用した実習形式で集中的に行っていますので、参加者からは好評を頂いております。このようなセミナーをこれからも継続していきますので、多数の皆様参加をお待ちしております。



プロジェクトメンバー (2005.2)

## ナノシミュレーショングループ

## 擬ポテンシャル・データベースが完成

ガソリンが無ければ車は走らないのと同じで、CHASE-3PT システムの要のソフト PHASE も擬ポテンシャルが無ければ動きません。そのため各元素の擬ポテンシャルを用意することがとても重要となります。公開中のソフト CIAO (Code for Investigating Atomic Orbitals) を用いて、この度、ついに原子番号 1 番の H から 118 番の Uuo までの全元素に対しての擬ポテンシャル・データベース<sup>1)</sup>を完成させることができました。

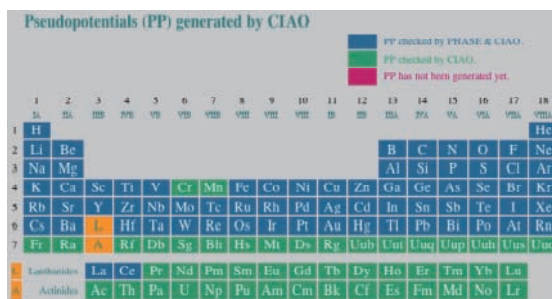
擬ポテンシャルとは簡単に言えば価電子の感じるポテンシャルを柔らかくしたものです。柔らかくしたことから「擬」という言葉がついています。具体的な作成手順は、まず密度汎関数法のもとで原子の全電子ポテンシャルを計算し、これを擬ポテンシャルに変換します。この変換の自由度がとても多いことが問題を難しくしていて、高品質なものを作成するためには、知識、経験、忍耐などが必要となります。品質の検査は、CIAO と PHASE の 2 段階で行いました。もし検査結果が不満足なものであれば、最初に戻り別のパラメータで作成しなおす、という地道な作業を幾度となく繰り返しました。このような過程を経て、めでたく

データベースが完成したわけです。

全元素の擬ポテンシャルを作り終えて「よくもこんなに多数で多彩な元素を自然は創ったものだな」というのが私の率直な感想です。今回、公開するデータベース\*1には擬ポテンシャルに加えて原子の全電子状態や結晶

のバンド構造などの情報も載せていますので多くの方に活用していただけるものと期待します。

(岡本 政邦)



<sup>1)</sup> 擬ポテンシャル・データベース

原子番号 1 番～ 118 番の全元素に対する擬ポテンシャルを用意することができました。擬ポテンシャルの PHASE と CIAO による検査の段階を色分けで表示しています。青色は両方の検査を終了したもの、緑色は CIAO の検査を終了したが PHASE の検査は未終了のものを表しています。(2005 年 2 月 10 日現在)

\*1 <http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/result/software/>

## 低騒音設計に新たな道

FrontFlow/blueにより  
流体騒音スペクトルの高精度な予測を実現

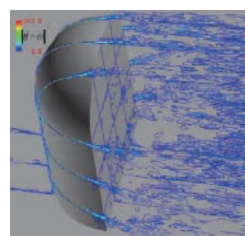
流体から発生する騒音を FrontFlow/blue を用いて高精度に予測できるようになりました。機器の低騒音設計のための新たな道が開かれようとしています。

プロペラファン、自動車、新幹線など多くの製品において、流れから発生する騒音である流体騒音の低減は重要な課題です。これは、機器の高速化にともない、流体騒音が急減に増大する性質があるからです。

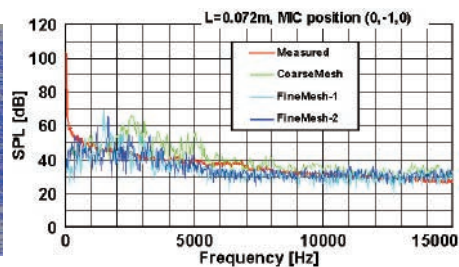
このような低騒音化の課題に対して、従来は主として経験的な手法により対応してきましたが、さらなる低騒音化を図るためにも、騒音予測ツールの開発が切望されていました。次世代流体解析グループでは、Large Eddy Simulation に基づく高精度な非定常流れ解析により、実用的な計算時間で流体騒音の予測を実現しました。図はドアミラー周りに流れを FrontFlow/blue により解析し、非定常の渦構造<sup>1)</sup>と発生する騒音スペクトル<sup>2)</sup>を予測したものです。実験値と比較して、騒音スペクトルの定量的な予測が実現されていることがわかります。また、このようなシミュレーションにより、単に騒音スペクトルを予測するだけでなく、騒音の発生に寄与している、主要な渦構造を調べることができ

ますので、騒音低減のための直接的なヒントを得ることができます。

現在、音響解析ソフトと組み合わせることにより、ダクトにおける音の反射や屈折なども扱えるようにすることと、プロペラファンなどの流体機械に対しても騒音スペクトルの定量的な予測を実現すべく、プログラムの開発・改良を進めています。同時に、より実用的な予測ツールとするために、計算時間の一層の短縮にも注力しております。(加藤 千幸)



<sup>1)</sup> 自動車用ドアミラー周りの流れの LES 解析結果



<sup>2)</sup> 騒音スペクトルの予測

## 次世代構造解析グループ

# 500万自由度の非線形解析を1時間で

物体周りの流れ解析および振動解析との連成によって磁気浮上列車の起動時ならびに定格走行時の気流特性・振動特性をシミュレート

磁場解析、流れ解析、振動解析の弱連成システム開発の一環として有限要素法を用いた1プロセッサ用の磁場解析モジュールであるNEXST\_Magneticを開発している。本モジュールは物体周りの流れ解析および振動解析との連成によって磁気浮上列車の起動時ならびに定格走行時の気流特性・振動特性をシミュレートすることを1つの具体的な目標としている。

NEXST\_Magneticは現在、非線形静磁場解析と非定常渦電流解析の2つの3次元解析機能とこれらの機能による解析結果をもとにした電磁力評価の機能をもっている。非線形静磁場解析では定式化に磁気ベクトルポテンシャル  $A$  を未知関数とする  $A$  法を用い、非線形反復手法としてNewton法とPicardの逐次近似法の2つの手法を用いることができる。また連立1次方程式の解法として加速係数つき不完全Cholesky分解を前処理とするCG (ICCG)法を用いている。非定常渦電流解析では定式化に磁気ベクトルポテンシャル  $A$  と電気スカラーポテンシャル  $\phi$  を未知関数とする  $A$ - $\phi$ 法、または  $A$  を未知関数とする  $A$ 法を用いることができる。またこの機能でも連立1次方程式の解法として加速係数つきICCG法を用いている。電磁力評価機能では電磁力の評価法に節点力法を採用している。

本モジュールではそれぞれの機能で500万自由度以上の解析が可能であることを確認して

いる。たとえば非線形静磁場解析機能ではTEAM Workshop Problem 20 (Fig. 1)の600万自由度モデルの解析をパーソナルコンピュータ (Pentium 4 3.2 GHz, Memory 2GB, Linux)を用いて1時間20分ほどで行っている (Fig. 2) (金山 寛)

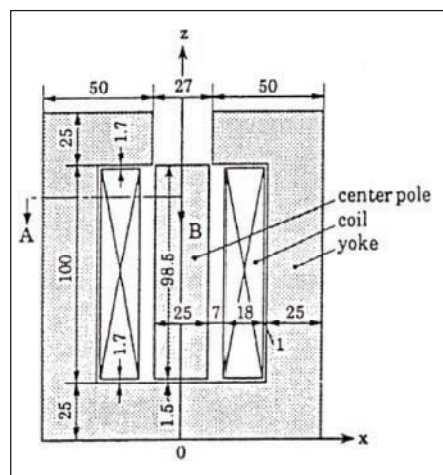


Fig. 1 TEAM Workshop Problem 20

DOF	#of iteration Newton method	CPU Time [s]	Memory [MB]
1,088,170	4	443	377
2,053,046	4	998	711
3,044,356	4	1,527	1,055
4,043,265	4	2,189	1,401
4,043,265	4	3,445	1,733
6,014,219	4	4,924	1,886

Fig. 2 非線形静磁場解析機能での計算

使用計算機: Pentium 4 3.2 GHz, Memory 2GB

## 生体の光エネルギー利用メカニズム解明に貢献

# タンパク質の励起状態計算が実用的に

多層化フラグメント分子軌道 (MLFMO) 法に基づいた CIS 法による励起状態計算

タンパク質-化学物質相互作用解析グループと統合プラットフォームグループは共同で、多層化フラグメント分子軌道 (MultiLayer Fragment Molecular Orbital, MLFMO) 法と、MLFMO法を利用した Configuration Interaction Singles (CIS) 法の開発及び ABINIT-MP への実装を行い、光活性黄色タンパク質 (Photoactive Yellow Protein, PYP; 残基数 125) のタンパク質全体を考慮した励起エネルギーの計算を行った。計算時間は、6-31G 基底関数を用い、Xeon 32 CPU の PC クラスタを使用して 15.3 時間であった。これは、タンパク質の励起状態計算が実用段階に入ったことを示しており、光合成や視覚といった生体の光エネルギー利用メカニズムの解明のために大きく貢献することが期待される。(中野 達也・望月 祐志)

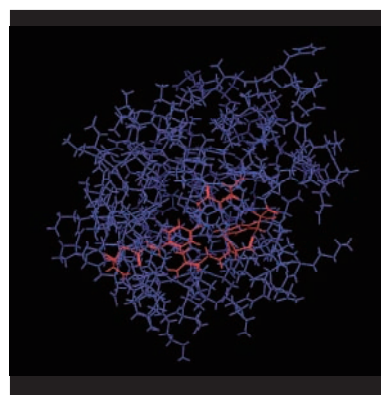


Fig. 1 PYP の光活性中心 (赤色で表示)。MLFMO 法では、光活性中心を CIS 法で、その外側を HF 法で計算する。

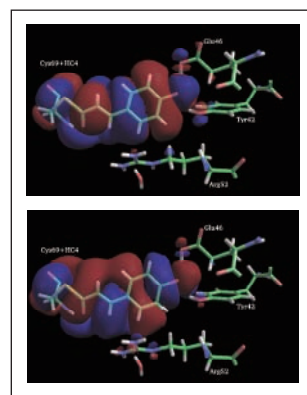


Fig. 2 光活性中心の“空孔”自然軌道 (上) と“粒子”自然軌道 (下)。空孔軌道から粒子軌道へ電子が励起している。

## シミュレーション技術における産学官連携への期待

### 第3回「戦略的基盤ソフトウェアの開発」シンポジウム報告

第3回「戦略的基盤ソフトウェアの開発」シンポジウムが経団連ホールにて2004年12月8、9日に延べ599名のご参加を得て開催された。今回は、プロジェクトの成果報告とともにシミュレーション技術の「戦略」を議論する場として、「バイオ・ナノテクノロジー」、「基幹産業の戦略ソフトウェア」の2つの戦略テーマに対する本プロジェクトの成果と産業界への応用事例、3件の招待講演ではシミュレーション技術の他方面への展開がそれぞれ紹介された。また、パネルディスカッション「日本のシミュレーション技術戦略」では小林敏雄氏((財)日本自動車研究所)司会により、6名のパネリストが大学研究から産業応用に至るシミュレーション技術の様々な課題を議論し、本プロジェクトの目指す産学官連携の重要性を認識させるご意見も多く述べられた。詳細は本シンポジウム講演集と映像DVD(2005年3月発行予定)をご覧ください。(問い合わせはFSIS事務局)



Fig.1 挨拶をされる、文部科学省情報課三浦春政課長



Fig.2 パネルディスカッション「日本のシミュレーション技術戦略」の様子

#### 関連製品紹介

### アドバンスソフトがセミナー開催

アドバンスソフト株式会社は、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトに参画ソフトウェアの開発を行っています。このたび、この開発成果を基にして、独自に、実用化のための機能追加および改良を行い、商用のパッケージソフトとして、販売/出荷を開始しております。あわせて、パッケージソフトの機能、使い方、サポート等に関するセミナーを下記の要領で実施しております。

セミナーへの多数のご参加をお待ち申し上げます。  
なお、本セミナーに関するお問合せは以下に願います。

\*ご連絡先:アドバンスソフト株式会社営業室

TEL:03-5366-1870 FAX:03-5366-1871

E-mail:office@advancesoft.jp

〒160-0017 東京都新宿区左門町 16-2 日本生命四谷ビル4 F

日程	セミナー	場所
2005年3月29日	第1回 Advance/pSANセミナー	私学会館財団法人分室 (東京都千代田区)
4月中旬	第2回 Advance/PHASEセミナー	
5月中旬	第2回 Advance/FrontFlowセミナー	
6月中旬	第2回 Advance/ProteinDF+BioStationセミナー	
6月中旬	第2回 Advance/pSANセミナー	
7月中旬	第3回 Advance/PHASEセミナー	
8月中旬	第3回 Advance/FrontFlowセミナー	
8月中旬	第3回 Advance/ProteinDF+BioStationセミナー	
9月中旬	第3回 Advance/pSANセミナー	

#### 編集後記

本プロジェクトも3年が経過し、本号にもご紹介したように、これまでに数多くの成果が得られています。これらの成果は必ず皆様のお役に立つものと信じておりますので、詳細情報等ご希望の皆様は是非下記問い合わせ先にご連絡下さい。次号からは新しい年度に入りますが、本NEWSも皆様方にとってより有用でタイミングの良い内容とすべく一層工夫を凝らしてまいります。ご意見・ご助言を歓迎致します。

#### 資料請求お問い合わせ先

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/