

FSIS NEWS

Frontier Simulation Software for Industrial Science

12

NUMBER

世界をリードする日本発の 戦略的基盤ソフトウェアのラインアップが完成

**6月初旬に、3年間にわたる活動
成果である戦略的基盤ソフト
ウェアの最新版 14本が公開さ
れます。**

2002年5月にスタートした文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトは、3年が経ち多くの成果が得られました。これまでに公開したソフトウェアは42本に及び、ダウンロード数も10,000件を突破しています。産業応用推進協議会の試算・実証WGでは、これらのソフトウェアを用いた解析が多数試みられており、既にその一部では極めて有用な計算結果が得られています。本年6月には、新たに14本の戦略的基盤ソフトウェアが公開される運びになりました。

6月に公開されるソフトウェア (<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/result/software/>) は、タンパク質の精密な機能解明が可能な世界発の量子化学計算プログラム、医薬品開発等に飛躍的效果をもたらすタンパク質-化学物質相互作用解析プログラム、次世代ナノデバイス開発手段の決め手となるナノシミュレーションプログラム、産業界の高機能・高信頼製品開発、コスト・スピードの大幅な改善をする流体、構造解析プログラムなどであり、実用的ソフトウェアとしては世界でも類のない特徴を多くもっています。

これらのソフトウェアは、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を中核拠点とし、国立医薬品食品衛生研究所、(独)物質・材料研究機構、(財)高度情報科学技術研究機構などから第一線の研究者、総勢100名以上が結集し、開発を進めてきた「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト活動の3年間にわたる総合成果であり、これで世界をリードする日本発の戦略

的基盤ソフトウェアのラインアップがひとまず完成したことになります。

生研記者会見が開催される

これを期して、5月11日(水)、朝日新聞社、日本経済新聞社など6社を集めて記者会見を行い、3年間にわたるプロジェクトの総合報告を兼ねて最新のソフトウェアに関する発表をいたしました。会見の場では、プロジェクトの概要に続き、バイオ、ナノ、デジタルエンジニアリング各分野における代表的なソフトウェアについて詳細な説明が行われました。それらの成果については記者の大いなる注目を集めることとなり、会見終了後も記者達から質問がくりひろげられました。



成果の総括

各グループが先進的ソフトウェアを開発、有用性を実証

「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトは、産学官連携の仕組みをフルに活用して挑戦的な取組みを展開してきました。その結果、次世代を担う科学技術の重点分野をカバーする基盤的ソフトウェアのラインアップが完成し、以下の例に紹介しますように極めて高度かつ有用な実証計算の成果も創出することができました。まず量子化学—タンパク分野では、血糖値のすみやかな改善に対して極めて社会的期待が大きい超即効性のインスリン製剤の設計に、「Protein DF」が貢献できることを実証しました。

また、ナノシミュレーション分野では、次世代半導体素子開発の決め手となる誘電体の特性解明に、「PHASE」が威力を発揮することを

実証しました。

一方、流体・構造解析分野では、次世代デジタルエンジニアリングのキーとして熱望されている、大規模製品の丸ごと連成解析を実現し、従来困難だった製品の静音設計等が現実のものとなることを実証しました。この解析では、流体解析ソフト「FrontFlow」を地球シミュレータ環境上で稼働させたのをはじめ、構造解析、ミドルウェア、統合プラットフォーム関連ソフトウェアを総動員し、世界でも例を見ない規模での統合シミュレーションを実現させました。

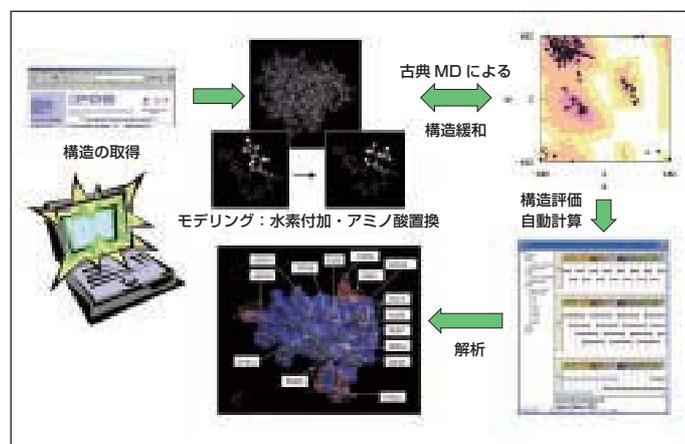
以下に、3年間に渡って展開された本プロジェクトを構成する7つのサブグループの研究開発成果を紹介します。

次世代量子化学計算

世界初のタンパク質全電子計算を実現

タンパク質の構造改変、全電子計算、結果解析が行えるユニークなソフトウェアが登場

当グループでは密度汎関数法によるタンパク質の精密な全電子計算が実行できるProteinDFシステムを公開しました。アミノ酸置換などの構造改変、全電子計算、結果の解析に至る一連の操作を行うことができます。100残基規模のタンパク質ならば数百GFLOPS級の計算サーバを用いて、1~2日で計算できる世界的に極めてユニークなソフトウェアです。現在、精力的にタンパク質波動関数データを計算・収集しており近日CDにて公開します。タンパク質の電子が作り出す世界をご堪能下さい。また、FSISニュースの10号で報告しましたが、306残基のインスリン6分子のチャンピオン全電子計算を達成しました。インスリンは糖尿病の薬ですが、効くまでに時間がかかります。この原因が究明できれば、打てばすぐ効くインスリンの設計ができるようになります。次は化学反応を追跡するシミュレーションや、電子伝達、光励起反応を解析する励起状態計算の実現です。これにより、量子化学計算に基づく精密でまったく新しい創薬・バイオテクノロジー基盤が構築できます。(佐藤文俊)



ProteinDF システムを使用したタンパク質全電子計算の典型例

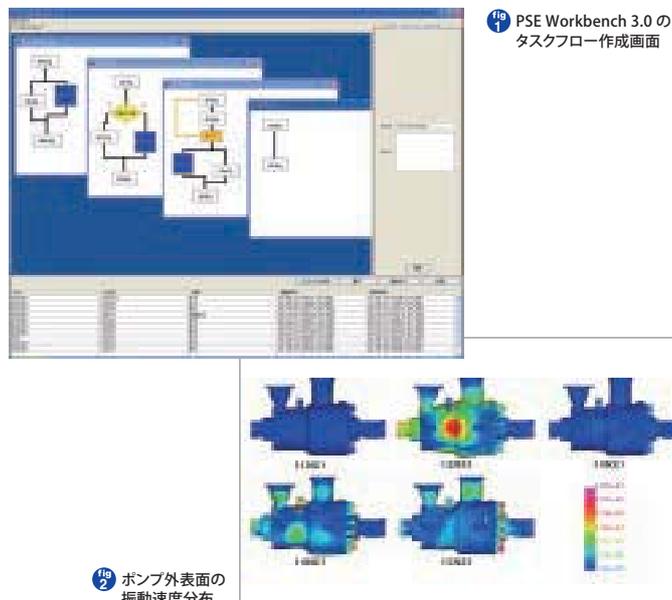
統合プラットフォーム

複雑で高度なプロの計算手順の 再利用を容易に

ネットワーク上に分散したリソースを有機的に統合し、大規模複雑な解析を実現する PSE

統合プラットフォーム PSE Workbench は、様々なソフトウェアやデータベース等を駆使した複雑大規模ソフトウェアを統合した解析のためのプラットフォームです。④ PSE Workbench により実証例題「火力発電所ボイラー給水ポンプ(BFP)の低騒音設計」では、全体の解析過程を分かり易く構築し、視覚化することができました。

実証例題は、BFP の騒音の予測と発生源の解明を目的として、株式会社日立インダストリイズと共同研究で実施し、特に次世代流体解析グループで開発した FrontFlow/blue、次世代構造グループで開発した NEXST_Impact、HPC-MW グループで開発した HPC-MW を利用したデータ変換用カップラの 3 つのソフトウェアを利用しました。結果として、従来の解析では予測できなかった振動成分まで実験と一致し、また各振動成分に対して、振動の制御が必要な部分が特定できました。⑤ この成果により、低騒音設計への反映が可能となりました。(小池秀耀)



HPC ミドルウェア

PCでの手軽な並列アプリ開発を可能に

30万自由度の構造解析が2~3分で完了。Windowsでの並列アプリ開発も強力に支援

HPC-MW は、さまざまなハイエンド計算機環境において最適化された、並列有限要素法による大規模シミュレーションコードの効率的な開発を可能とするミドルウェア群です。データ入出力、領域分割、可視化、線形ソルバー、有限要素処理などの機能をサポートしています。例えば、HPC-MW を活用することにより、1週間程度で既存の固有値解析プログラムを並列化することが可能となりました。また、HPC-MW をベースに並列構造解析プログラム pSAN-hpcmw を開発しました。ソリッド要素およびシェル要素により、熱、変形・応力、固有値問題を解くことができます。

```

program simple_job
use hpcmw
implicit none
type :: hpcmw_job_desc, :: hpcmw_job
type :: hpcmw_job_desc ::= (hpcmw_job)
character(len=:, kind=:), parameter :: name = "simple_job"
call hpcmw_init
call hpcmw_get_desc(name, job_desc)
! 固有値解析プログラムの並列化
call hpcmw_solve_3d(job_desc, hpcmw_job)
call hpcmw_finalize
end program simple_job
  
```

④ HPC-MW の利用イメージ

Linux 環境でも Windows 環境でも動作し、反復ソルバーを並列で使用することも、直接法ソルバーを利用することも可能です。30万自由度程度の問題では約2~3分で計算が完了し、計算結果は HPC-MW で提供する可視化ソフトウェアで容易に可視化することができます。(奥田洋司)



次世代流体解析

産業界のニーズに応えるLES解析を実現

流れに起因する複雑現象の解析を一挙に

非定常流れ場の高精度な解析が可能である Large Eddy Simulation (LES) に基づく汎用流体解析ソフトウェア FrontFlow を開発しました。

FrontFlow はベクトル・スカラー計算機において高速に動作する2つの並列計算コードで構成されています。これによりターボ機械内部流れや原子炉配管などの大規模な非定常現象や、乱流音、燃焼反応流れ、噴霧流れなど複雑な乱流場の高精度な解析が可能となりました。多段ポンプ内部流れの大規模 LES 解析^{Fig.1}では内部流れによる圧力脈動および流体・構造・音響連成計算による放出音の定量予測を実現し、ドアミラーから発生する乱流音を解析した例^{Fig.2}でも音圧スペクトルの定量的な予測が確認されています。また、実用ガスタービン燃焼器内の LES 流れ解析による非定常火炎挙動の予測^{Fig.3}やバーナ燃焼流れの素反応解析^{Fig.4}などの実証検証も進められています。今後、LES 解析技術をベースにさらに本格的な連成解析技術を開発し、産業界のニーズに応えるツールにしていきます。(加藤千幸)



Fig.1 遠心ポンプ表面の圧力変動成分



Fig.2 ドアミラー乱流音解析



Fig.3 燃焼器内の火炎挙動予測



Fig.4 磁場下の燃焼バーナ流れ素反応解析

次世代構造解析

超大規模構造解析が実用に

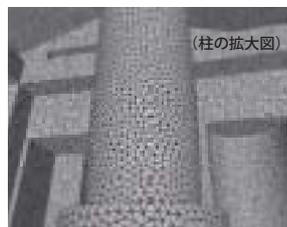
複雑大規模構造解析を高速に処理する NEXST システムを開発

次世代構造解析グループでは、数億自由度の大規模構造解析を実用にする、従来法では困難であった複雑な現象を解けるようにすること等を目標に掲げ、NEXST システムの開発を行ってきました。これにより、節点ベース格子生成法、高精度四面体要素 GNTet4、粒子法に基づく構造解析手法など次代を担う多くの有力な研究成果が得られました。また、これらの手法を実装した並列格子生成モジュール NEXST_FMM、動弾性解析ソルバ NEXST_Impact、人体など柔構造物への応用が期待される粒子法ソルバ NEXST_MPS、電磁場・構造連成解析ソルバ NEXST_Magnetic などを開発しました。本年6月には新たに3本プログラムの公開を予定しており、これまでに公開したものを含めると合計8本のプログラムとプリ・ソルバ・ポストを統合した2つの構造解析システムがそろうことになります。(寺坂晴夫)

Fig.1 NEXST_FMM で生成したバンテオン寺院の大規模メッシュ(約1800万節点、約1.2億要素)



(全体図)



(柱の拡大図)



Fig.2 NEXST_Impact による携帯電話の落下衝撃解析

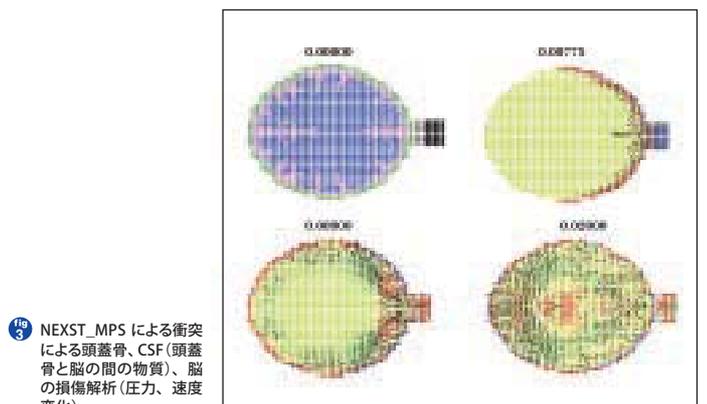


Fig.3 NEXST_MPS による衝突による頭蓋骨、CSF(頭蓋骨と脳の間物質)、脳の損傷解析(圧力、速度変化)

タンパク質－化学物質相互作用解析

量子論に基づいた医薬品等の分子設計現実に

タンパク質－化学物質相互作用解析システム BioStation を開発し、医薬品開発に重要なタンパク質へ適用

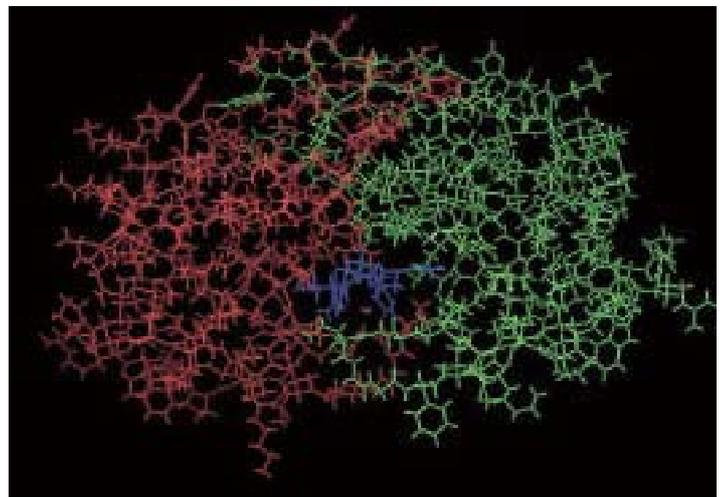
タンパク質－化学物質相互作用解析グループでは、次の4つのサブシステムから構成される、タンパク質－化学物質相互作用解析システム BioStationを開発・公開しました。¹⁾

また、エストロゲン受容体タンパク質、HIV-1 プロテアーゼ²⁾等の医薬品の標的として重要なタンパク質について ABINIT-MP を用いた量子論に基づいた解析を行い、古典的な力場計算からは得られない電荷移動等について解析することができました。また、ABINIT-MP については、産業界での応用(実証計算)も進んでいます。

SPring-8 に象徴される実験技術の進歩により、医薬品の標的となるタンパク質の立体構造の解析は急速に進展していますが、得られた立体構造を元に医薬品分子を設計する技術に関しては、未だ経験的ポテンシャル関数(力場)やスコア関数を用いた解析が主流であり、研究者の要求にできていないのが現状です。ABINIT-MP を用いた解析から、タンパク質と化学物質の相互作用については、van der Waals 相互作用や疎水性相互作用が重要であり、電子相関を考慮することが必須であることが明らかになっています。BioStation を用いることで、分子設計の現場で要求される精度でタンパク質と化学物質の相互作用を解析することが可能になり、効率的な医薬品分子設計に大きく貢献することが期待されます。(中野達也)

- | |
|---|
| 1) In silico詳細スクリーニング (BioStation Dock) |
| 2) 非経験的フラグメント分子軌道(ab initio FMO)法による相互作用解析 (ABINIT-MP) |
| 3) 標的データベース (KiBank) |
| 4) Javaによる可視化と統合 (BioStation Viewer及びBioStation Launcher) |

¹⁾ タンパク質－化学物質相互作用解析システム BioStation



²⁾ HIV-1 プロテアーゼ(赤・緑)と阻害剤(ロビナビル、青)の複合体の FMO-MP2/6-31G 計算(統合プラットフォームグループとの共同研究。原子数 3,225、原子軌道数 17,423。Intel dual Xeon (3.06GHz)×32 ノード、メモリ 2GB/CPU、ネットワーク 1000Base-T の PC クラスで 14.3 時間。)

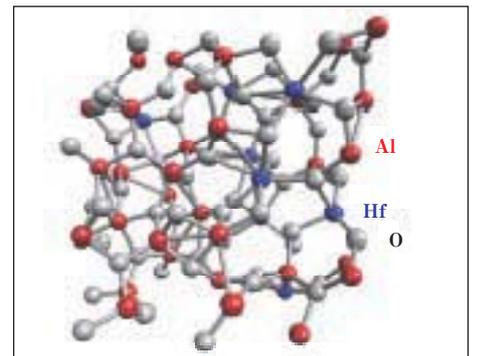
ナノシミュレーション

次世代半導体材料のナノスケール物性予測可能に

次世代半導体デバイス開発を支援する量子力学に基づく第一原理的解析システム CHASE-3PT を開発

当グループでは次世代半導体デバイスやナノデバイスの開発に必要な材料の設計、ナノスケール領域で発現する物性の予測や機能の設計を行うためのシステム CHASE-3PT を開発しました。このシステムの中核は、密度汎関数理論に基づく第一原理擬ポテンシャル法プログラム PHASE です。PHASE はこの分野で世界水準の性能・機能を有しています。この PHASE に加えて、格子の基準振動解析、電子系・格子系の誘電応答解析、走査型トンネル電子顕微鏡 (STM) 像解析などの多くの機能を開発しました。開発した CHASE-3PT を用いて、次世代半導体デバイス開発において重要な高誘電体材料である、非晶質アルミナやハフニウムアルミネートなどの解析を行いソフトウェアの有用性を実証しました。PHASE 計算に必要な原子番号 1 番から 118 番の全元素に対する

擬ポテンシャル・データベースも完成・公開し、今後、ナノプロセス解析、誘電体物性解析、ナノ構造・機能解析など、ナノテクノロジーを支援するシステムとして活用していただけるものと期待しています。(大野隆央)



¹⁾ 次世代高誘電率絶縁膜の候補である非晶質ハフニウムアルミネートの原子構造

戦略的基盤ソフトウェアの開発目標達成！ 充実したソフトウェアの数々が実用化へ！

「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの7グループのソフトウェアについて、2002年度～2004年度の3年間の開発成果が、この度、集大成され、それらの最新バージョンが2005年6月に公開されます。

分野	システム名	システムの特徴/利用分野	2005年6月公開ソフトウェア
バイオ	次世代量子化学計算 [Protein DF]	・密度汎関数法によるタンパク質の精密な電子分布の計算が可能。 ・100残基規模タンパク質の高速計算（1日～2日）によるタンパク質の機能・構造の解明。	[ProteinDF] ：大規模タンパク質の機能・構造高速解析システム
	タンパク質・化学物質相互作用解析 [BioStation]	・タンパク質と、医薬品、環境ホルモンなどの相互作用を量子化学的に解析。 ・糖尿病、高血圧、ガンなどの治療薬の開発を支援。	[BioStation ver.2.1] ：タンパク質-化学物質相互作用統合解析システム
ナノ	ナノシミュレーション [CHASE-3PT]	・分子原子の運動および構造の量子力学的シミュレーションが可能。 ・次世代LSIの開発等ナノテクノロジーの開発を支援。	[CAMUS]：ハイブリッド法プログラム [UVSOR]：誘電率解析プログラム [CHASER-3PT]：統合環境プログラム [ASCOT]：伝導特性計算プログラム
環境・防災	次世代流体解析 [Front Flow]	・騒音発生機構の解明、燃焼などの複雑現象の解明が可能。 ・低騒音機器や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支援。	[FrontFlow-blue version 3.0] ：次世代流体解析システム [FrontFlow-red version 2,5] ：次世代流体解析システム
	次世代構造解析 [NEXST]	・並列コンピュータを駆使した構造解析が可能。 ・大規模構造物等の高精度計算を実現。	[NEXST_Impact] ：動的陽解法コード [NEXST_Magnetic] ：3次元有限要素法磁場解析コード [NEXST_MPS] ：3次元MPS法構造解析コード
情報	統合プラットフォーム [RINDOW]	・複数の大規模なソフトウェアを統合するプラットフォーム。 ・複雑かつ大規模なソフトウェアシステムの構築を実現。	[PSE Workbench 3.0] ：統合プラットフォーム
	HPCミドルウェア [HPC-MW]	・さまざまな計算機環境において高パフォーマンスを発揮できるFEMプログラムの開発基盤。（並列処理ライブラリ等）	[pSAN-hpcmw] ：並列静的弾性プログラム [HPC-MW] ：ハイエンド科学技術計算用ミドルウェア

■お詫び

前号、FSIS NEWS No.11 の3ページにて誤った箇所がありました。お詫びと訂正を申し上げます。

- 「タンパク質の励起状態計算が実用的に」の著者名

訂正前：佐藤文俊 → 訂正後：中野達也、望月祐志

編集後記

本プロジェクトは2002年にスタートし、丸3年が経過しました。

当初5年間の予定でしたが、前倒しで本プロジェクトの実質的な研究開発活動は今年度で終了することになりました。今回、6月のソフトウェア(世界をリードする最新バージョン)公開に向け生研記者会見を行いました。6社の出席があり、会見終了後も記者からの熱心な質問が相次ぎました。産業界での利用も徐々に増えてきていますが、実用に資する計算科学技術用ソフトウェアの開発に一層努力していこうと思っている日々です。それにしても、毎日がめまぐるしく、充実した日々を送っております。

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/