

● 産学の注目を集める戦略ソフトプロジェクト ソフト開発の成果が着実に上がり始める

加藤 千幸 プロジェクト代表 東京大学教授
 生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター長

「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトは、文部科学省ITプログラムの一環として2002年度から5ヶ年計画でスタートし、世界水準の実証ソフトウェアの開発を目指しており、この3月で2年目が終了します。この間、文部科学省をはじめ関係機関のご支援の下で本プロジェクトは種々の体制強化を図りながら、ソフトウェアの開発を進めてきました。このFSISNEWSでは現時点で、これまでにどのようなソフトウェアを開発し成果を上げたか、またその普及に向けてどのような施策を行っているかをご報告し、皆様方の一層のご支援・ご協力をお願いする次第です。

本プロジェクトの目的は産業技術の基盤になる実証ソフトウェアを開発し、我国産業の国際競争力強化に貢献することです。具体的には(1)世界水準の実証ソフトウェアの開発・公開、(2)開発人材の育成、(3)開発拠点の形成、(4)継続的に開発を担うベンチャー会社の設立、を目標に掲げ、最終的には開発したソフトウェアをデファクトスタンダード化されることを狙っております。

ソフトウェア開発に関しては、先ず基本計画、それに基づき詳細設計を行い、5ヶ年で合計50本のソフトウェアを開発・公開する予定です。2003年度は、ソフトウェアのコーディングを終え、基礎検証を行い、合計22本のソフトウェアをホームページ上に公開しました。それらは累計3500件を上回るダウンロードがなされるなど、産業界に高い関心を集めています。公開したソフトウェアを使って、例えばABINIT-MPではSARS新薬の効率的開発、ProteinDFでは地球シミュレータで巨大タンパク質のシミュレーションを実現させたり、流体・構造連成解析ではこれまでは難しかった丸ごと解析に適用してポンプの低騒音化を(株)日立製作所と、又別のあるテーマでは三菱重工業(株)など多くの企業と協力して実証試験を積極的に進め、着実な成果を上げています。

また、実用化評価委員会を設置し、今後のソフトウェア開発に反映させるために、各分野の専門家の方々により、開発したソフトに対して、機能、使い勝手、具体的な普及方法まで含めて、幅広い観点から助言をいただきました。

一方、ソフトウェア開発人材の育成に関しては、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の研究者及びアドバンスソフト(株)等の技術者が協力して、本プロジェクトのソフトウェア開発を担当し、合計100名規模のトップレベルのソフトウェア開発技術者を育成するという目標達成に向けて布石を打ち、着実に目標を達成しつつあります。

最後に、開発・公開されたソフトウェアを広く産業界に普及させることを目的として、産業応用推進協議会が昨年半ばに設立されました。本協議会には現在100社以上のご参加をいただいておりますが、公開ソフトウェアのインストールや使用方法に関するセミナーを実施するなど、ソフトウェアの普及に向け具体的な活動を行なっています。

グループ名 「代表ソフトウェア名」	公開ソフトウェア	
	名称	機能
次世代量子化学計算 「Protein DF」	Protein DF	大規模タンパク質の量子化学計算
タンパク質・化学物質相互作用解析 「ABINIT-MP BioStation」	ABINIT-MP BioStation Viewer (他2)	非経験的FMO法による相互作用解析・可視化(正式版)
ナノシミュレーション 「CHASE-3PT」	PHASE (他2)	第一原理擬ポテンシャルバンド計算
次世代流体解析 「FrontFlow」	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 (他1)	タスクフロー概念の実現
HPCミドルウェア 「HPC-MW」	hpc-mw-solver-tes(他1)	PCクラスタ用ライブラリ

④ 公開ソフトウェア一覧

●「戦略的基盤ソフトウェアの開発」第2回シンポジウムを盛大に開催

12月3、4日、経団連会館ホールにおいて、東京大学生産技術研究所主催、日本学術会議、日本経済団体連合会、東京大学国際・産学共同研究センター等の後援で、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」第2回シンポジウムが盛大に開催されました。文部科学省ITプログラムの一環としての本プロジェクトは発足後1年半を経過し、開発ソフトの公開等順調な進展で学内外でも注目され、理解が深まってきていることもあり、参加機関数は215機関、700名を上回る参加者が集い、講演では熱心な質疑がなされ熱気に溢れて、成功裏に終了しました。

最初に挨拶に立たれた文部科学省研究振興局の三浦課長は、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト発足の背景について紹介されました。日本の国際競争力向上のためには、2006年度までに世界最先端の計算科学技術を産学官共同して開発し、その成果を産業界に普及させることが不可欠です。そのために、東京大学生産技術研究所を核として、本プロジェクト推進の為に新設したベンチャー企業のアドバンスソフト(株)を初めとする産学官の研究機関と連携して、本プログラムの開発の成果を広く産業界に普及させ、我が国の科学技術・産業競争力の強化に寄与することを期待している、と述べられました。

また産業界からの代表として、産業応用推進協議会の柘植共同議長より挨拶がなされました。柘植氏は、本プロジェク

トは良いソフトを開発するだけでは不十分で、産業界に実際に応用され、役立ってこそ初めて成果と言えるので、産業界側の応用推進活動を産業応用推進協議会が担い連携して行く、と述べられました。

招待講演では、産業技術総合研究所の吉川理事長より、「シミュレーションの将来」について、また評論家の立花隆氏から「21世紀の計算科学技術に期待するもの」の演題で興味ある講演がなされました。

一般講演では、プロジェクトの代表的な4分野の成果発表の他、各産業界における計算科学の有識者によるパネルディスカッションで、日本の計算科学技術の将来について実態に即した討論が行なわれました。

尚、詳細内容の講演集については、事務局にお問合せ下さい。



fig 1 文部科学省 三浦 課長(左)
柘植 推進協議会共同議長(右)



fig 2 立花 隆氏



fig 3 西尾 生産技術研究所長(左)
小林 日本自動車研究所長(右)

● 注目を集める公開ソフトウェア

詳細は
WEBへ

12月に12本追加され累計22本が公開中 ダウンロードも3500件を超える大人気

プロジェクトが開発しているソフトウェアは、昨年6月に初めて公開されて以降、9月・12月と順次追加公開され、現在7グループ合計22本がホームページで公開され、ダウンロードで試用されるようになっていきます。

ダウンロード件数も月々増加し、3500件を超える件数を数え、産業界や研究所・大学等で広く試用され話題となっており、ワークショップやユーザー会等でもその

使用法の補足説明が行なわれています。

戦略的基盤ソフトウェア産業応用推進協議会の戦略ソフト普及ワーキンググループでは、公開ソフトウェアの使い方のセミナーを実施しておりアドバンスソフト(株)は有償でフォローアップサポートサービスを行っています。

公開ソフトの詳細は、プロジェクトのホームページをご参照下さい。

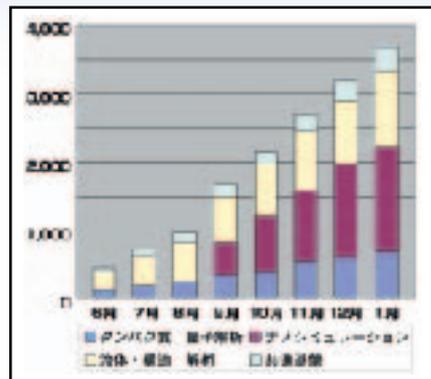


fig 1 ダウンロード件数推移

実規模ボイラー給水ポンプの流力詳細解析に初めて成功

- 騒音発生メカニズムの解明に大きく前進（続報） -

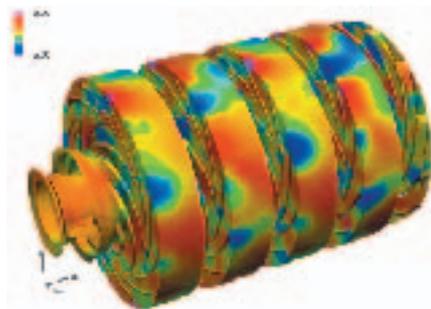
実証解析の一環として、株式会社日立インダストリズ(HIC)殿との共同研究で火力発電所用ボイラー給水ポンプ(BFP)の低騒音設計を目的としたシミュレーションを実施しています。モデル化では、一番ポイントとなるBFP内部流体と構造における音の発生と伝播を対象とします。本解析が成功すれば、ポンプ配管や本体から環境への音の伝播解明も可能になります。

まず、BFPのCADデータで必要な解析対象の部分を決定し、精度や処理時間を

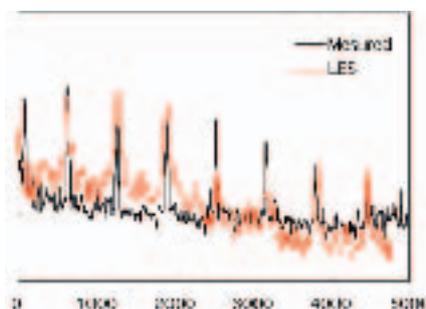
考慮して、流体と構造の格子を作成します。内部流体の解析は5000万要素となる複雑大規模解析であり、「Front Flow」により解析しました^①。ここで得た圧力変動を境界条件として、「NEXST Impact」で構造の音の伝播を解析し^②、「Front Flow」と「NEXST Impact」の格子間のデータ交換は、「HPC-MW-coupler」を利用しています。これらの解析手続きをワークベンチ「pseWB」上を実現して、複雑な解析の手順やそのノウハウを蓄積

します。現在、解析結果評価の第一段階として、内部流体の振動スペクトルをHIC殿の実験結果との比較を行っており、良好な結果を得ました^③。引き続き流体構造連成解析全体の評価を実施し、BFPの騒音伝播機構の解明や騒音軽減のための対策の提案を行います。この成果を、他分野の問題解決にも適用することで、本プロジェクトの成果が今後広く産業界で利用されることが期待できます。

印は本プロジェクトで開発したソフトウェアです。



① ポンプ内部流体（ポンプケーシング内側）の圧力分布



② ポンプ内部流体の振動スペクトルの解析結果と実験との比較



③ ポンプケーシング表面における音の伝播

●次世代構造解析グループ

携帯電話の落下試験を不要にするシミュレーション

次世代構造解析グループでは、今年1月に3本のソフトをリリースしましたが、そのうちNEXST_System_Impactのソルバである、NEXST_Impactをご紹介します。

NEXST_Impactはメッシュ生成～解析条件設定～解析～可視化をカバーするフリーメッシュ法構造解析システムの動解析を担うソルバとして開発しました。このプログラムは陽解法による線形動弾性解析ソルバであり剛体の壁との接触機能も有しています。NEXSTシステムの他のモジュールと連携することで、複雑形状のメッシュ分割から大規模並列解析、動解析結果のムービー

作成を行うことが可能です。

計算対象の一つとして、精密機器の落下・衝撃解析が考えられます。実際の製品には、使用環境から落下・衝撃に対する耐久性が求められますが、製品サイズが小さい、実装密度が高い等の条件から、落下試験における計測、内部の状態の把握が困難です。そのため、仕様検討は設計者の経験に頼るところが大きくなっており、大規模シミュレーションへの期待が高まっています。

①は、携帯電話のケースをモデル化し、NEXST_FMMで作成したメッシュを使用した落下衝撃解析の例です。下の面が床

に衝突した衝撃により応力波が伝わる様子を要素数約1200万、節点数約240万、Hitachi SR8000の64CPUで5万ステップ（実時間で約0.16秒）の解析を僅か58分程で解析しました。電話内部の構造モデル及び機能の拡充によって実機の設計支援シミュレーションツールとして活用することが可能となります。



① 携帯電話の落下衝撃解析

戦略ソフトウェアユーザ会

戦略ソフトのグループではユーザ会が活動中です。

「量子化学計算: ProteinDF」「タンパク質・化学物質相互作用解析: ABINIT-MP」「次世代流体解析: 次世代流体解析研究会」「ナノシミュレーション: CHASE-3PT」の4ユーザ会は活動中で、次世代構造解析グループは、設立準備中です。

ナノシミュレーションは2月10日CHASE-3PTを設立、次世代量子化学計算は、2月13日、ワークショップ後に第3回ProteinDFを開催しました。各ユーザ会の詳細につきましてはホームページのグループのユーザ会をご参照下さい。



fig 1 ProteinDFユーザ会

プロジェクト活動報告

産業応用推進協議会

運営委員会・運営小委員会の下に、戦略ソフト普及WG、実証試験検討WG、戦略ソフト評価WG、シミュレーション技術WGの4つのワーキンググループが設置され、具体的な活動に入りました。特に普及WGでは、早速2月27日、3月13日に戦略ソフトの使い方の普及セミナーを実施する等活発な活動を開始しました。

尚2月に当協議会のホームページが開設されました。

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/promconf/> をご参照下さい。



fig 2 応用推進協議会WGセミナー

ワークショップ開催

- ・2004年1月20日 第14回WS(次世代流体解析・構造解析・統合プラットフォーム)
- ・2004年2月10日 第15回WS(ナノシミュレーション)
- ・2004年2月13日 第16回WS(次世代量子化学計算)

応用推進協議会戦略ソフト普及セミナー開催

- ・2004年2月27日 第1回セミナー(ABINIT-MP)
- ・2004年3月12日 第2回セミナー(PHASE)



fig 3 ワークショップ会場風景

ワークショップ・シンポジウム開催予定

詳細日程等は今後順次WEB等でお知らせします。

2004	5月27日	「産業応用推進協議会」総会
	5月	「産業応用推進協議会第3回セミナー(次世代量子化学計算)」
	6月	「生研公開」(3,4日)「ソフトウェア公開」
	6月	第17回ワークショップ「タンパク質 化学物質相互作用解析」
	6月	「産業応用推進協議会第4回セミナー(流体解析)」
	8月	第18回ワークショップ「統合プラットフォーム」
	9月	第19回ワークショップ「次世代量子化学計算」
	10月	第20回ワークショップ「HPC」
	11月	第21回ワークショップ「次世代構造解析」
	11月6~12日	「Super Computing 2004展」出展(アメリカ)
	12月8,9日	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」

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/