

●折り返しの3年目がスタート 15年度に開発したソフトウェア13本を6月に公開予定

2002年度から5カ年計画でスタートした本プロジェクトも2年目が終了し、プロジェクトは間もなく折り返しのタイミングを迎えようとしています。また、今年7月には中間評価が実施される予定です。ソフトウェア開発や実証計算は順調に進捗しており、今後の最大の課題は開発したソフトウェアを産業界に普及させていくことです。

本ニュースレターでは今月公開予定のソフトウェアに関するトピックスを中心にご報告申し上げますが、本プロジェクトに対して、皆様方より一層のご理解とご支援を賜りたく、お願い申し上げます。

本プロジェクトは次世代の産業競争力の強化に寄与する世界最高水準の実用的シミュレーション・ソフトウェアを産官学の英知を結集して開発し、それを産業界に普及させることまでを目標に掲げて推進しているものですが、ソフトウェアの開発に関しては、予定を上回るペースで順調に進んでいます。開発したソフトウェアを昨年6月からホームページ上に公開しておりますが、ほぼ一年が経過した今年5月現在、ソフトウェアのダウンロード件数は5,000件を上回っております^{fig 1}。このように本プロジェクトで開発したソフトウェアはユーザの皆様から極めて高い関心を集めています。また、本年6月には新たな成果を加えたバージョンアップ版を公開する予定です。

さて、開発したソフトウェアを産業界に普及させるためには、実際の問題に対するソフトウェアの実用性の高さを証明するとともに、普及の障害となり得る要因を極力排除することが重要です。まず、ソフトウェアの実用性の高さを証明するために、本プロジェクトでは、(株)日立製作所、三菱重工業(株)、北里大学など、さまざまな企業、研究機関と連携して実証解析を進めており、火力発電プラント用の給水ポン

プの流体・構造・騒音連成解析などで着実な成果が上がり始めております。

また、ソフトウェアの普及を妨げる要因を極力排除するために、本プロジェクトでは、ユーザ会を通じた普及活動や各開発者が個別に進めている産学共同研究に加えて、昨年9月に産業応用推進協議会を発足させ、無料セミナーやベンチマークテストの共同実施など、ソフトウェアの普及活動を積極的に展開しております。

今後とも、皆様のご支援とご協力をお願いする次第です。

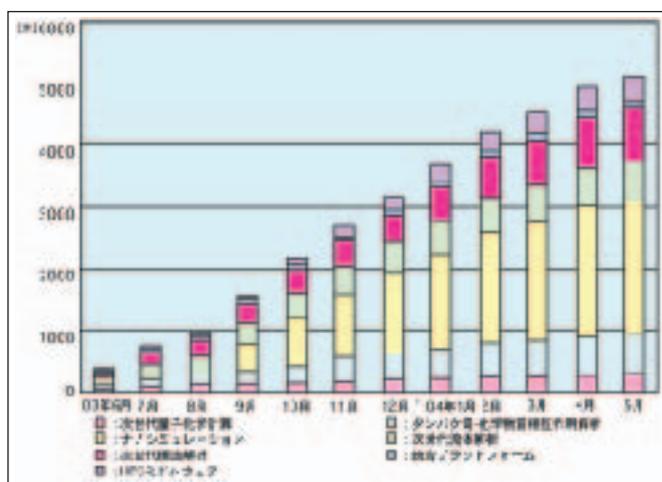


fig 1 公開ソフトウェアのダウンロード件数の推移

100残基の全電子計算が1日で可能に

- タンパク質の精密計算時代の到来目前 -

次世代量子化学計算グループでは、密度汎関数法によるタンパク質の全電子波動関数を計算するソフトウェアProteinDFを汎用計算機システムに適用して、大幅な計算高速化を達成しました。

今回使用した計算機はSGI社Altix3700(64CPU,理論ピーク性能256GFLOPS)で、102残基8,878軌道のインスリン2量体^{Fig.19}が1日、131残基11,909軌道のインターロイキンが2日で自動的に計算できます。

ProteinDFは2000年に世界で初めて104残基のヘムタンパク質シトクロムc(9,600軌道)の計算に成功しました。このとき、ワークステーションクラスタを使用して2ヶ月、計算達成までの試行錯誤を入れると実に2年もかかっていました。今回の成果は単に計算機が速くなっただけではなく、本プロジェクトにおける新アルゴリズム開発やチューニングによる高速化、安全に計算達成に導く方法の開発が順調に進んでいる証拠といえるでしょう。

インスリンは糖尿病の薬として有名です。ProteinDFと従来使用されてきた古典計算とは結果が有意に異なります。遺伝子操作した一連のインスリンアナログの計算も

計画しており、これらの結果から優れた能力を持つ薬剤の精密設計が期待できます。もし、この設計手段が確立されれば、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。

タンパク質の精密計算は直ぐ手の届くところにあります。是非とも、より多くの皆様にタンパク質の理論・応用研究に参加していただきたいと考えております。

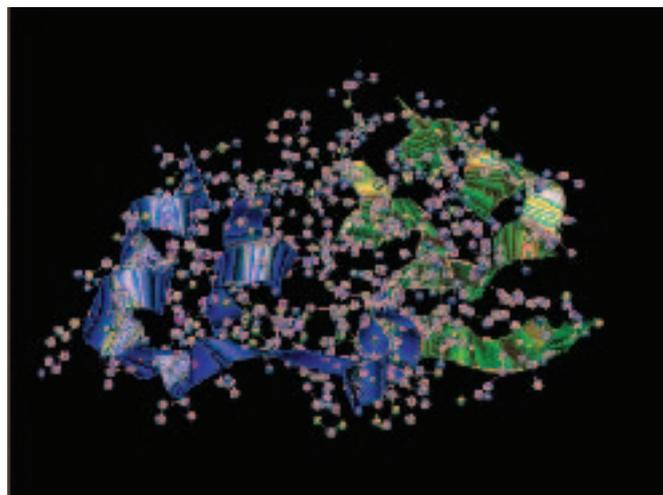


Fig.19 インスリン2量体の構造

ABINIT-MPによる電子相関を考慮した生体系の電子状態計算

タンパク質において重要な水素結合とvan der Waals相互作用を精度よく計算するためには、電子相関を考慮することが必須です。「タンパク質-化学物質相互作用解析」グループは、フラグメント分子軌道法に基づき、2次の摂動展開によって電子相関を導入する高速な計算法(FMO-MP2法)を開発し、ABINIT-MPに実装しました。1024個の水分子から成るクラスター^{Fig.20}、リゾチーム(約130残基のタンパク質)、HIV-1プロテアーゼ複合体(200残基)等でのベンチマーク結果は良好で、プロテアーゼのMP2エネルギー計算はPCクラスターでも14時間でできます。電子相関を考慮したタンパク質の電子状態計算が実用的な計算時間で可能になったことは、応用上大きな成果です。

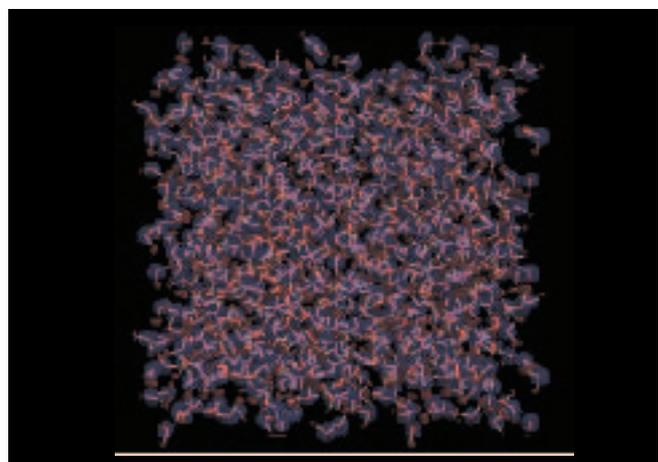


Fig.20 6-31G基底による1024分子の水クラスターのHF-MP2差分電子密度。PCクラスター(Xeon 3.06GHz 60CPU)で、ターンアラウンド時間は約400秒。

● 注目を集める戦略ソフト、平成15年度成果公開! 高まる産学官からの期待

昨年6月の初公開以来、ソフトウェアのダウンロード件数は5,000件を超え(5月23日現在)、産学官問わず幅広い分野で注目を集め試用されています。また6月には平成15年度の成果として6つのグループが公開ソフトウェアのバージョンアップを予定しており、実用化に向け着実な歩みを進めています。今後、これらソフトウェアの完成度を高めていくためにも、是非多くのユーザの皆様のご意見ご要望をお聞かせいただきますようお願い致します。

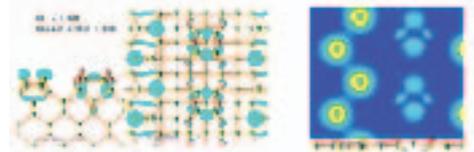
グループ名 【代表ソフトウェア名】	公開ソフトウェア	
	名称	機能
次世代量子化学計算 【Protein DF】	Protein DF	大規模タンパク質の量子化学計算
タンパク質・化学物質相互作用解析 【ABINIT-MP BioStation】	ABINIT-MP BioStation Viewer	非経験的FMO法による相互作用解析・可視化
ナノシミュレーション 【CHASE-3PT】	PHASE (他2)	第一原理凝ポテンシャルバンド計算
次世代流体解析 【FrontFlow】	FrontFlow-blue FrontFlow-red	ターボ機械・流体音解析 燃焼・混相流解析
次世代構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

公開ソフトウェア一覧 (UP はバージョンアップ予定のグループ)

公開ソフトウェアの紹介(関連記事2面に)

● ナノシミュレーショングループ

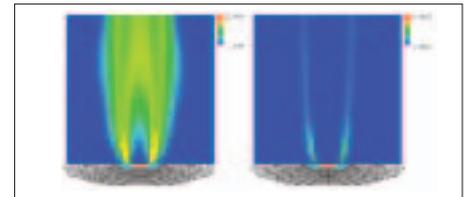
今回新しく公開する機能は「走査型トンネル電子顕微鏡(STM)への応用」と「格子の基準振動解析」です。前者は第一原理シミュレーターPHASEの出力する波動関数を用いて、バイアス電圧に依存したSTM像を計算する機能^②。後者は結晶の対称性を満たす格子基準振動を与える機能です。



② 酸化されたシリコン(001)表面のSTM像
【左】原子構造と等電子密度面。黄色の球はシリコン原子、赤色の球は酸素原子。
【右】STM像。高い方のダイマー原子は明るく見えるが、酸素原子は最も突出している原子でも明るく見えないことがわかる。

● 次世代流体解析グループ

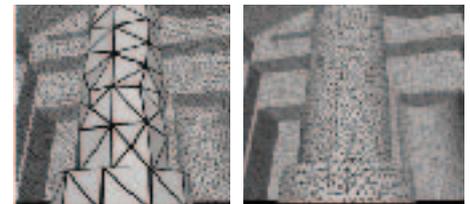
乱流燃焼解析ソフトウェアFrontFlow-Redは、燃焼反応に詳細化学反応モデルを適用することで、燃焼場における中間生成物(OHなど)の挙動を把握することが可能となりました。^③は水素・酸素の拡散火炎の数値解析例で、同軸噴流型バーナーの内管から水素、外管から酸素を流しています。



③ 水素・酸素の拡散火炎の数値解析
【左】火炎形状の概観として、温度分布を示す。
【右】水素と酸素が混合する領域においてOH密度が高くなっており、燃焼反応が活発であることが分かる。

● 次世代構造解析グループ

1月に公開したNEXST-FMMでは、並列メッシュ生成を実現、部分的リメッシュも可能です。また、1億以上の要素作成が1台のPCで可能という特徴もあります。^④



④ NEXST-FMMでのメッシュ生成例
【左】従来のメッシュ(50万メッシュ) 【右】1億2千万メッシュ

● 統合プラットフォームグループ

タスクフローをもとにした計算機資源の統合で複雑かつ大規模な問題を解決する環境を提供するソフトウェアを公開しています。既存の公開機能に加え、今回はタスク制御機能(条件タスク機能、繰り返しタスク機能、ステアリング機能^⑤は画面例)を公開します。本機能で、より複雑なタスクフローを実装することが可能となります。



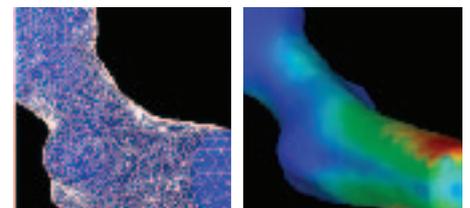
⑤ タスクを制御する機能を含む利用例

● HPCミドルウェアグループ

有限要素法の共通基盤となる下記のようなプロセスについて、最適化したライブラリ群を公開します。

- 1.データ入出力
- 2.メッシュ関連ユーティリティ
- 3.並列可視化
- 4.並列行列ソルバー

また、上記コンポーネントを組み合わせ、更に構造解析の要素技術も加えて一連の解析コードpSANを開発しました^⑥。計算の妥当性ととも、並列性能を確認し公開します。



⑥ pSANによる解析例(骨の応力解析、45131節点)
【左】初期メッシュ 【右】応力分布図

ベストプレゼンテーション賞受賞

次世代流体解析グループの伊藤裕一氏・山田英助氏・谷口伸行助教授・小林敏雄名誉教授が、日本燃焼学会より「第41回燃焼シンポジウムベストプレゼンテーション賞」を受賞しました。^{fig 1}

受賞項目	「メタノール乱流噴霧燃焼のLES」
受賞日	2003年12月4日

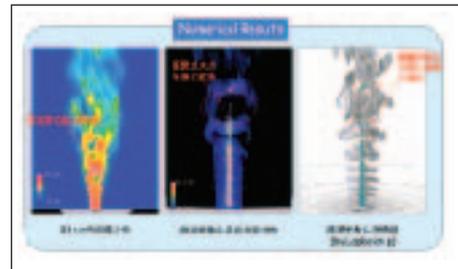


fig 1 受賞ポスターの一部

プロジェクト活動報告

戦略ソフト応用協議会WG活動が本格始動

普及WG

- ・2004年3月12日「PHASE」セミナー開催 ^{fig 2}
- ・2004年5月21日「ProteinDF」セミナー開催

試算・実証WG

- ・バイオ分野 WGメンバー11社発足、テーマアンケート実施
- ・ナノ分野 WGコアメンバー5社発足、ベンチマーク検討開始
- ・流体・構造分野 アンケート実施、試算・実証課題検討開始

シミュレーション技術発展施策WG

調査報告書作成立案(方針・メンバー/執筆分担)
 「最新デジタルエンジニアリング」講演・検討会実施 ^{fig 3}



fig 2 「PHASE」セミナー風景



fig 3 「最新デジタルエンジニアリング」講演・検討会風景

戦略ソフト応用協議会第2回運営委員会及び第2回総会開催

2004年5月27日に第2回運営委員会開催し、平成15年度活動実績報告及び平成16年度活動方針案を審議し承認されました。引き続き第2回総会を開催しました。

ワークショップ・シンポジウム開催予定

詳細日程が決まりました。

2004	6月3,4日	「生研公開」
	6月25日	「産業応用推進協議会 第4回セミナー(流体解析)」
	7月9日	「戦略的基盤ソフトウェアの開発」ワークショップ(第17回) [タンパク質-化学物質相互作用解析]
	7月中旬	中間報告 公開報告会(予定)
	8月26日	「戦略的基盤ソフトウェアの開発」ワークショップ(第18回) [統合プラットフォーム]
	9月17日	「戦略的基盤ソフトウェアの開発」ワークショップ(第19回) [次世代量子化学計算]
	10月21日	「戦略的基盤ソフトウェアの開発」ワークショップ(第20回) [HPCミドルウェア]
	11月2日	「戦略的基盤ソフトウェアの開発」ワークショップ(第21回) [次世代構造解析]
	11月6~12日	「Super Computing 2004展」出展(アメリカ)
2005	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
	1月27日	「戦略的基盤ソフトウェアの開発」ワークショップ(第22回) [次世代流体解析]
	2月15日	「戦略的基盤ソフトウェアの開発」ワークショップ(第23回) [ナノシミュレーション]

資料請求お問い合わせ先 東京大学生産技術研究所 計算化学技術連携センター 〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1
 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/