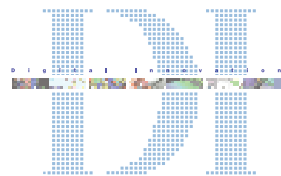


FSIS NEWS

Frontier Simulation Software for Industrial Science



2004.Sep

9

NUMBER

5カ年計画もいよいよ後半戦

プロジェクト中間成果報告会開催される

2002年度にスタートした本プロジェクトも、折返し地点まで来ました。そこで、今号では、7月に行われた中間報告会の模様をお伝えします。

世界最高水準のシミュレーションソフトを開発!

去る7月16日に、文部科学省情報課による中間成果報告会が開催されました。本報告会は、科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会 情報科学技術委員会の第14回委員会として、一般の方にもオープンな形で開催されました。¹⁹ 内容としては、ITプログラムの8つの研究開発課題について、事前に提出した自己点検報告書に基づいて、それぞれの研究課題の代表者から20分間程度プロジェクトの中間成果について報告が行われた後、情報科学技術委員により10分間程度の質疑応答が行われました。

本プロジェクトのプレゼンテーションでは、大学の研究室レベルのシミュレーション・ソフト開発ではなく、世界最高水準の実用的シミュレーション・ソフトの開発を進めていること、ソフトのダウンロード件数はこれまでに5,000件を超えている実績からおわかりのように、開発したソフトは社会から高い注目を集めていること¹⁹、開発したソフトの普及のために、産業応用推進協議会を

中心としてさまざまな活動を推進していること、タンパク質の量子計算や流体・構造・騒音の連成解析などで顕著な成果が得られていることなどを中心に報告を行いました。

プロジェクトへの反応

これに対して情報科学技術委員からは、「シミュレーションを設計に反映させるためには、設計データとの連動が必須であるが、どのように取り組んでいるのか」、「日本国内のユーザーだけを対象にするのではなく、グローバルに展開していくことが必要である」、「分野横断的に必要とする共通な部分および可視化の部分などは、計算機科学、ソフトウェアエンジニアリング、数学を専門とする人々と一緒に開発を進めることが重要である」などさまざまな貴重なご質問、ご意見をいただきました。正式な評価はまだ発表されておりませんが、本プロジェクトに関しては、高い評価をいただくことができました。



¹⁹ 活気にみちた会場

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 【Protein DF】	Protein DF UP	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 UP	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) UP	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 UP	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) UP	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 UP	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) UP	PCクラス用ライブラリ

²⁰ 公開ソフトウェア一覧

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

薬品設計の定量化にも貢献!

用途にあわせて自由自在! 大活躍のPSE

統合プラットフォームグループから、今回初めての紹介となるトピックスが届いています。さっそくご紹介しましょう!

超高速のMP2相関計算エンジンを開発

PSE統合プラットフォームグループの中での量子化学のコード開発は、既存ソフトウェアに不足する機能を補完することをポリシーとして進めています。具体的には、Hartree-Fock近似を超えて電子相関を導入することにより精度を高めたり、励起状態の取扱いが可能となるエンジンの開発に注力しています。

今回、MP2振動展開による相関計算を、高度な並列化によって超高速に処理できるエンジンを独自アルゴリズムに基づいて開発し、タンバ

ク質相互作用グループで開発中のフラグメント分子軌道システム ABINIT-MPに提供しました。

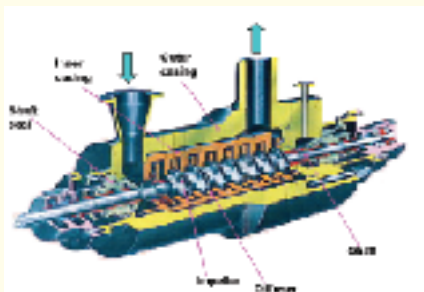
これにより、HIV-1プロテアーゼと抗ウイルス薬の複合体のMP2計算が64台のXeonクラスターを使ってわずか半日でできるようになりました。これは、現在のところ世界で最大規模の相関計算です。新薬開発の作業で、候補分子を絞りこんでいくスクリーニングでは、計算の高速性と共に結果の定量性がますます求められるようになっており、本エンジンは両方の要求を満たすものと言えます。(望月 祐志)

騒音軽減策のシミュレーションが可能に!

高速・多段ポンプの騒音発生機構の解析

PSE統合プラットフォームの実証解析の一環として、火力発電所用ボイラー給水ポンプ(BFP) ^{Fig 1} の低騒音設計を目的としたシミュレーションを実施しました。本解析では、BFPの内部流体から発生する圧力変動を、次世代流体解析グループで開発したFront Flow-Blueで解析し、流体解析として得られた圧力変動を境界条件として、次世代構造グループで開発したNEXST-Impactを用いてBFP本体の音の伝播解析を行います。

本解析は流体3620万要素、構造132万要素となる大規模解析です。現在、内部流体の圧力脈動スペクトルと構造外側の振動結果を(株)日立インダストリーズ殿の実験結果と比較しており、良好な結果を得られています。^{Fig 2} 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。(植木 平八)



^{Fig 1} ボイラー給水ポンプ(株式会社日立インダストリーズより)



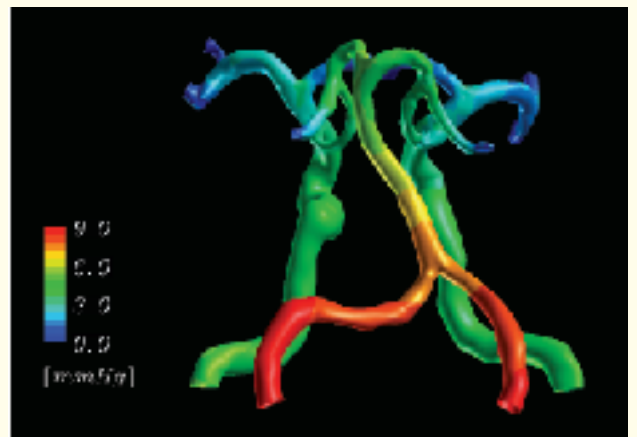
^{Fig 2} ポンプ外表面振動の解析結果

血管病変のリスク予測を可能にする数値シミュレーション

脳血管ネットワークの血流解析

近年、脳動脈瘤をはじめとする血管障害の発症や進行に、壁面せん断応力などの血流が血管に及ぼす流体力が寄与していることが指摘されています。そのため、患者の血流の状態を知ることが、病変の要因解明と危険性予測に有効であると考えられますが、患者に負担をかけずに血流を詳細に計測することは困難であることは否めません。

そこで、医用画像から抽出した血管形状を利用した、数値解析による病変の危険性予測に期待が寄せられています。そのような数値解析においては「血管モデル作成」「血流数値解析」「流体力の可視化」など、さまざまな手順が複数のコンピュータ上で複数のソフトウェアを用いて実行されているので、PSEを利用した統合的な解析システムを構築することで、より効率的かつ容易な数値解析の実行が可能となります。(鳥井 亮)



^{Fig 3} 脈動ピーク時における脳血管ネットワークの圧力分布(人体の背面からの視点)。図中下方が心臓側であり、下方の四端より血流が流入。

ナノシミュレーショングループ

次世代半導体素子開発を加速

アモルファス高誘電体材料の誘電応答の解析

誘電体材料の高精度な物性予測を可能にする解析システム

次世代CMOSトランジスタのゲート絶縁膜としてSiO₂に替わる高誘電体材料の開発は急務であり、現在、Al₂O₃、HfO₂等のアモルファス誘電体が盛んに研究されています。

ナノグループでは、高誘電体材料の探索を支援する解析システムを開発し、アモルファス誘電体の特性を第一原理に基づいて評価することを可能にしました。今回、アモルファスAl₂O₃を計算機上で作成しその特性を評価しました。アモルファスAl₂O₃はイオン結晶的な性格を示し、価電子帯を作る電子は酸素原子の周りに局在します。得られた誘電率はSiO₂に比べて大きく、実験値をよく再現します。この大きな誘電率は主に格子振動による寄与であり、どのような環境の原子が誘電率に大きく寄与するかなどを詳細に解析することができます。

我々の誘電応答解析システムは、誘電体材料の物性を高精度に予測でき、誘電体材料の探索や物性解析など次世代半導体素子開発に必要な実験的負担を大きく軽減するものと期待されます。(畠田 浩義)

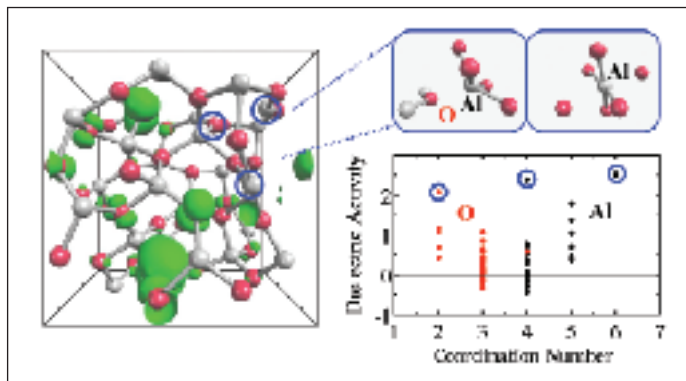


Fig. 1 アモルファスAl₂O₃の誘電応答解析: 価電子帯上部の電子波動関数(左図)と各原子の誘電応答への寄与(右図). 誘電応答の大きなO原子とAl原子を青丸で囲んである。

HPCミドルウェアグループ

手近なPCで大規模構造解析計算が可能に!

pSAN-HPCMWによる大規模固有値解析

PCで30万自由度の計算が、約2~3分で完了。HPC-MWソフトウェアとその開発経過を報告

HPC-MWの目的は、手近なPCのような計算機で大規模計算プログラムの開発を可能にし、さらに並列/ベクトル計算機への移植を容易にするものです。たとえば、シリアルな固有値解析プログラムを並列マシンに移植する際、HPC-MWを用いることにより作業は効率化され、1週間程度の工数で行うことができました。

現在、この固有値解析プログラムにより、2次元、3次元の解析ができ、要素としては、ソリッド、シェル要素の使用が可能です。環境は、LinuxとWindowsのどちらも可です。行列ソルバーは反復法、直接法から選ぶことができ、反復法行列ソルバーは並列化されており、極めて大規模な解析が可能です。一方、条件の悪い問題については、直接法行列ソルバーを用いることにより安定に計算することができます。

30万自由度程度の計算は手近なPCなどでも2~3分程度で終了します。計算結果はHPC-MWライブラリで提供する可視化プログラムにより、描画して確認できます。(荒川 貴道)

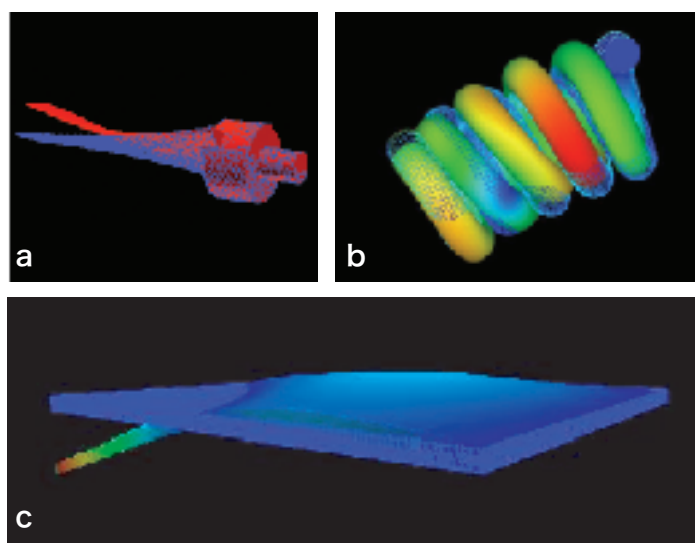


Fig. 2 HPC-MW Lanczos大規模固有値解法を使用して固有周波数解析から得られたモデル変形解析結果 (a) タービンブレード (b)ばね (c) 両面ともに圧縮された四角形のプレート(原型および変形とも可視化)

TOPICS

CBI学会においてポスター優秀賞、奨励賞受賞

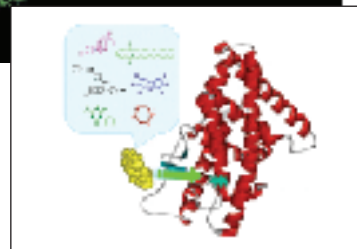
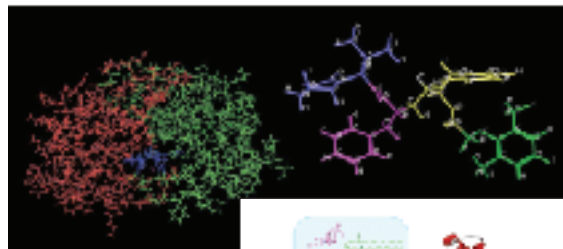
情報計算科学生物学会(CBI学会)の2004年大会にて、本プロジェクト:タンパク質-化学物質相互作用解析グループメンバーにポスター優秀賞と奨励賞が授与されました。

■ 優秀賞

望月祐志、Implementation of MP2-correlation engine into ABINIT-MP/FMO program and demonstrative applications

■ 奨励賞

佐藤智之、BioStation Dock:Application of protein-ligand docking to screen compounds(2)



18 受賞ポスターの内容の一部

REPORT

実用化評価委員会開催される

プロジェクトの目標達成に向け、実用レベルの評価をいただくため平成16年度も「実用化評価委員会」の8名の委員により、6月24日、8月3日に委員会を開催し、貴重な助言を多数いただき、今後の取り組みに対する大きな指針となりました。18



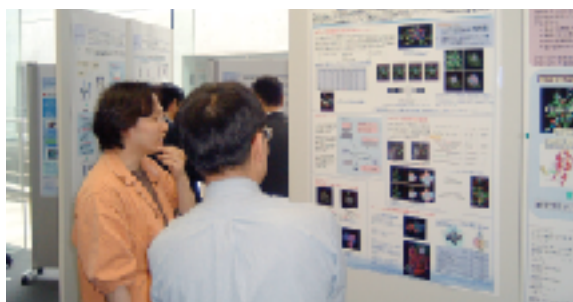
18 実用化委員会

ワークショップ開催のお知らせ

7月9日より各グループのワークショップが開催されています。このうち第19回次世代量子化学計算グループ主催のワークショップ(9/17)では300残基の全電子計算と数十残基の構造最適化の新しい事例が発表される予定です。

東大生研の一般公開に出展

6月3日、4日に開催した生研公開では、プロジェクト用のブースにポスターが展示され、三次元表示装置やタッチパネルを利用したデモンストレーションが行われました。300名を超える訪問者と研究者との間では熱のこもった質疑応答が行なわれ、充実した2日間でした。19



19 生産技術研究所公開

ワークショップ・シンポジウム開催予定

2004	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」
	10月8日	産業応用推進協議会 第5回セミナー「流体解析」
	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」

編集後記

今回のFSISニュースNo.9号より編集のお手伝いを外部の専門家にお願いし、開発しているソフトのよりわかりやすい、親しみやすい紹介ができるようにしました。プロジェクトは折り返し点の3年目を迎えましたが、開発メンバーはお互いの顔にもなじんできて切磋琢磨して研究開発に励んでいます。事務局は8月に入り実用化評価委員の方々からの本当に丁寧な資料の提出をいただきましたのでその整理や12月のシンポジウムの準備等に追われております。それにしても今年の猛暑はシミュレーションでできなかったのでしょうか。

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/

FSIS NEWS 2004.Sep

編集発行: 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 〒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