

「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト始動!!

革新的シミュレーション研究センターが中核となり、文部科学省「次世代IT基盤構築のための研究開発」における研究開発課題公募に提出していた「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトが審査の結果採択されました。プロジェクト期間は、2005年10月1日から2012年度までの約5年間です。

10月1日のプロジェクト開始当日には、キックオフ会を開催し、各サブテーマリーダーが研究開発計画を発表、プロジェクト全体での意思統一を図りました。キックオフ会後の懇親会では、プロジェクトメンバーが積極的な親睦を図り、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」(2002-2005年度)、「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」(2007-2007年度)プロジェクトの成功に続くべく、本プロジェクトもスタートしています。

本プロジェクトは、産業イノベーションに寄与する、我が国独自のシミュレーションソフトウェアの研究開発とその普

及を目標に掲げ、特にシミュレーション技術の貢献が大きい、開発・設計業務に係るプロセスイノベーション(新しい開発・設計方式の創出)とプロダクトそのもののイノベーション(新しい商品・品質の創出)の実現をするべく、これらのイノベーション創出の基盤となる独創的なソフトウェアの研究開発を進めていきます。

本プロジェクトの実施体制は、革新的シミュレーション研究センターを中核拠点とし、東京大学大学院工学系研究科、東京大学人工物工学研究センター、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、総勢70名以上の研究者を集集して集中開発方式を採る。また、これに加えて、ソフトウェアメーカーも開発に参画し、革新センターを中心に研究開発された成果に基づき、実用ソフトウェアやユーザーインターフェイスの開発を主に担当する。一方、産業界の代表的組織であるスーパーコンピューティング技術産業応用協議会との間で、開発ソフトウ

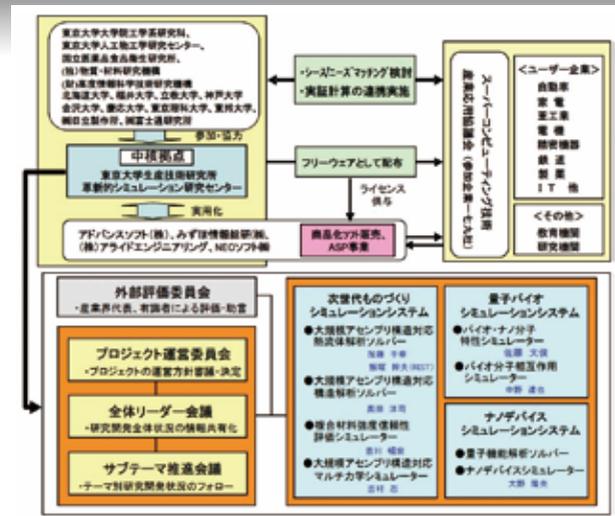
アの仕様に関する協議や実証計算に関して緊密な連携を図りながら研究開発を実施します。対象とする産業分野は、我が国の産業の長期的発展における中核となる分野とし、ものづくり産業、バイオ産業、ナノ産業の3分野を採り上げます。

一方、ハイエンド計算機は飛躍的な性能向上が図られており、2011年からの稼働が予定されている次世代スーパーコンピュータをはじめとする大規模超並列計算機の産業界での戦力化が進んでいます。このような現状を踏まえ、中核となるコアソルバーに関しては、数万CPU以上の計算機で性能を最大限に発揮できるよう、超並列計算機対応の革新的性能向上に関する研究開発を実施していきます。

今後、上記の研究機関以外でも、(独)海洋研究開発機構、(独)宇宙航空研究開発機構、(独)理化学研究所、各大学の情報基盤センターとも密接な連携をとりながら共にイノベーション創出に資するソフトウェア開発とその普及に努めたいと考えていますので、関係各位の一層のご理解とご協力をお願いいたします。



— イノベーションソフトウェアプロジェクト



イノベーションプロジェクト実施体制

本プロジェクトの実施体制は左図に示すとおりですが、特に産業界との連携を重視した諸行事を実施いたします。具体的には、シンポジウム、セミナーなどの普及に対する施策は産協協（略）との共催とし、実施効果の拡大を図っていきます。

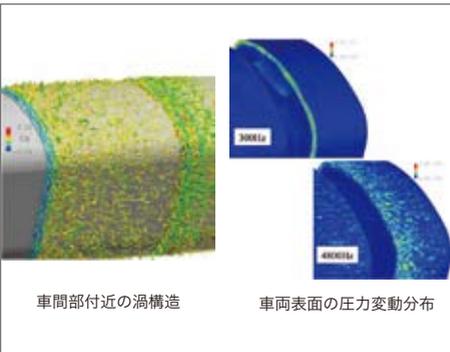


10/1 キックオフ会

1 大規模アセンブリ構造対応流体解析ソルバーの研究開発



加藤 千幸
東京大学生産技術研究所
副所長 教授



車両車間部から発生する空力騒音の解析
(参考文献：Inter-noise 2007 講演論文)

サブテーマでは、ものづくり関連の基幹産業（例えば、重工業、車両、電機、航空、精密機器等）におけるイノベーション創出に資するため、次世代の流体解析システムを開発します。本開発では、「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトにおいて開発された FrontFlow をベースに、PC クラスタから次世代のスパコン（10 PFLOPS 級）まで広範囲のマシンアーキテクチャにおいて高速に動作し、かつ、他グループが開発するソルバーとの連成解析機能をサポートする流体解析システムを開発します。スパコンを用いた解析では、1000 億点規模の解析を実現する予定です。これにより、製品中の非定常な流れ現象（例えば、空力騒音、機械内部の圧力変動、乱流熱輸送等）の予測精度が飛躍的に向上します。また、これまでの FrontFlow は、主に製品のコンポーネ

ントレベルの評価を行ってきましたが、本開発において、1000 億点規模の解析が実現されれば、アセンブリ大規模構造の評価（製品まるごとシミュレーション）が可能となります。①予測精度の飛躍的向上、および②製品まるごとシミュレーションの実現により、製品開発のコスト削減、期間短縮および新製品開発に貢献したいと考えております。

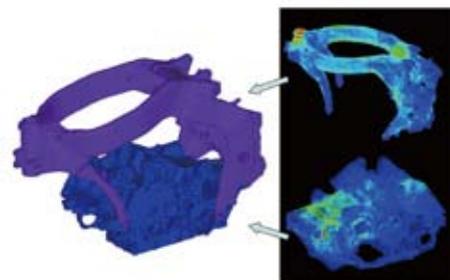
さらに、プリ・ポストを含めた流体解析にかかわるユーザ負担を低減するユーザインターフェースを拡充することにより、現場の設計者が使える流体解析システムの開発を予定しております。

最後に、本開発の成功のためには、多くのユーザ様からのご支援、ご指摘が必須と考えております。今後ともよろしくお願いいたします。

2 大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバーの研究開発



奥田 洋司
東京大学人工物工学研究センター
教授



アセンブリ構造の応力解析(イメージ)

「次世代ものづくりシミュレーションシステムの研究開発」のサブテーマとして、「大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバーの研究開発」を実施します。この研究開発の成果により、複数の部品から構成される大規模なアセンブリ構造体を“まるごと解析”できるシステムが実現します。本構造解析システムは PC クラスタから次世代スパコンの超並列計算環境にも対応可能なシステムです。先の「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトで開発された FrontSTR をベースとして、“まるごと解析”とともに非線形解析、接触解析など解析ニーズの高い高度な解析機能を充実、発展させ、イノベーション創出に寄与できる構造解析システムの実現を目指します。

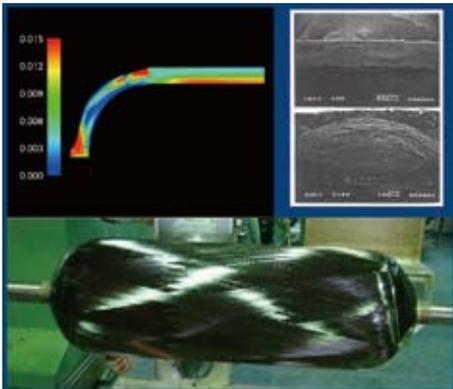
本システムでは、階層型メッシュデータと階層型アルゴリズムを用いることにより、既存の構造解析システムでは実行が不可能であった最大 100 億自由度の規模の解析を想定しています。これにより超並列計算機の進歩と性能を十分に活用できる次世代解析システムが実現します。さらに、サブテーマ「大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレータの研究開発」と連携することで、設計の初期段階での製品プロトタイプモデルの検証を高精度かつ高速にシミュレーションすることが可能となり、イノベーションの創出と大幅な設計プロセス改善の実現が期待されます。

次世代ものづくりシミュレーションシステムの研究開発

3 複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発



吉川 暢宏
東京大学生産技術研究所
教授



炭素繊維強化プラスチック材料

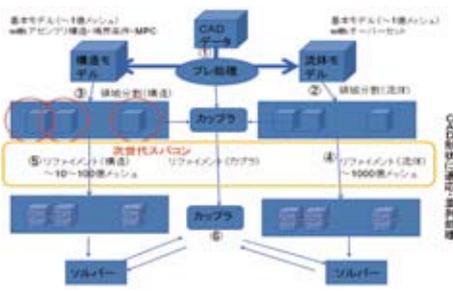
日本のものづくり力を躍進させるためには、高機能材料の活用が大きな役割を果たすと思われます。近年、金属材料に替わって、炭素繊維強化プラスチックに期待が寄せられ、航空機、自動車など、軽量化が製品価値に直結する機器で、活用が進んでいます。わが国の素材メーカーが炭素繊維市場の大きなシェアを占めていることを勘案すれば、「ものづくり力」を躍進させるため、炭素繊維強化プラスチック材料の活用を促す、基盤的シミュレーションソフトウェア開発を行なうことが有効であると思われる。炭素繊維強化プラスチック材料を活用する難しさは、強度信頼性評価の方法が未整備であることにありました。炭素繊維の束をプラスチックで固めた、いわばマイクロ構造としての複合材料が、どのよ

うに強度を発揮するのか、そのメカニズムにまで立ち入った評価をすることが難しかったわけです。その解決のために、今回のプロジェクトでは、炭素繊維強化プラスチック材料の製造プロセス、すなわち、ミクロスケールでの繊維配置とプラスチックの硬化プロセスまで立ち入った評価を可能とするための、シミュレーションソフトウェア開発を行います。シミュレーションを活用する実証例題の一つとして、炭素繊維束をプラスチック容器あるいはアルミ合金容器に巻きつけて補強した、燃料電池自動車用の高圧水素容器の設計問題を取り上げる予定です。

4 大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーターの研究開発



吉村 忍
東京大学大学院工学系研究科
教授



階層型データによる次世代スパコン対応処理

これまで、ものづくりの現場では、複数の部品から構成される大規模なアセンブリ構造体を連成解析できるシステムがありませんでした。このため、解析は構成要素に対して流体・構造・磁場単体で行われており、精度的に不十分なものでした。そこで本サブテーマでは、PC クラスタから次世代スパコンなどの超並列計算機にも対応可能な大規模アセンブリ構造体マルチ力学シミュレータ、REVOCAPを開発します。

REVOCAPは「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト等で開発した大規模並列シミュレータ (FrontFlow、FrontSTR、REVOCAP_Magnetic) およびそれらを統合した連成解析システム (REVOCAP_Coupler、Mesh、Visual) の機能を拡張・発展させることにより、開発します。

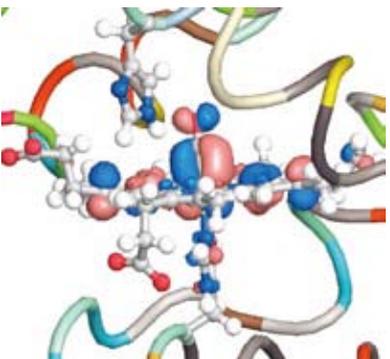
このREVOCAPは、数10TFLOPS級の超並列計算機環境では、流体解析1億DOF、構造解析1億DOF、磁場解析1億DOFの多様な連成解析を実現し、次世代スパコン上では、流体解析1000億DOF、構造解析100億DOFの連成解析を実現可能とします。

実機アセンブリ構造の連成解析を、設計の初期段階にフロントローディングすることにより、実機全体の課題の早期抽出・早期対応が可能となります。その結果、ものづくりのプロセスイノベーションが実現するとともに、革新的製品(プロダクトイノベーション)の創出を強力に牽引することが可能となります。

5 バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発



佐藤 文俊
東京大学生産技術研究所
教授



配位子が結合したヘムタンパク質(金属タンパク質)の分子軌道の例

これまで当サブテーマは、密度汎関数法に基づく世界最大のタンパク質カノニカル分子軌道計算ができるProteinDFシステムを開発し、数100残基規模のタンパク質全電子の分子軌道やエネルギー、原子電荷などが計算できる革新的なシステムを公開してきました。本プロジェクトでは、これをベースに、産学のイノベーション創出の基盤に資するシステムへと進化を遂げるべく、先端応用分野を視野に入れた研究開発を行います。具体的には、a) 実験とのより直截的な比較や解析が行えるよう、分光学的物性をはじめとする種々の重要な物性計算機能を開発します。これにより、実験と理論が密接不可分となる環境の整備を加速します。また、b) バイオ・ナノ融合新素材ものづくりに貢献すべく、巨大カノ

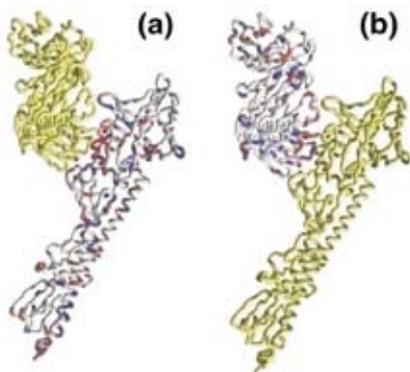
ニカル分子軌道法ならではのタンパク質と機能性ナノ分子の統合シミュレーション機能を開発します。さらに、c) これまでの金属タンパク質全電子計算の経験を発展させて、薬物代謝の主役P450水酸化酵素の解析方法を開発します。従来の経験的な方法とは異なる、第一原理に基づく基盤を提供することが目的です。最後に、d) これらの系で得られた結果を広く活用・再利用していただくために、膨大なタンパク質波動関数のデータベースを配信する方法を研究開発します。本研究開発は、本格的なバーチャル分子生物学実験室構築への大きなステップとなるでしょう。

6 バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発



中野 達也

国立医薬品食品衛生研究所
主任研究官



FMO-MP2/6-31G 計算によるインフルエンザウイルス抗原-抗体の相互作用解析 (a) 抗体→抗原, (b) 抗原→抗体

創薬における医薬品の分子設計においては、医薬品の標的となるタンパク質に、より選択的に、より強く結合する化合物をデザインするかが重要な鍵となります。これまでドラッグデザインには、主に古典力場や経験的なスコア関数を用いたドッキングシミュレーションが用いられてきましたが、近年、フラグメント分子軌道 (fragment molecular orbital; FMO) 法を用いた、タンパク質の量子化学計算に基づいたドラッグデザインへの期待が高まっています。当グループでは、「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」および「フラグメント分子軌道法による生体分子計算システムの開発」プロジェクト等で開発された ABINIT-MP/BioStation システムをベースに、FMO 法に基づいた創薬にお

けるプロセスイノベーションに貢献するバイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発を行います。

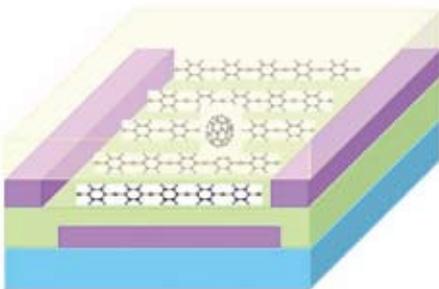
具体的には、(1)「FMO 法に基づいた量子化学計算エンジンの拡張・高速化」「(2) 超大規模並列計算機およびマルチコア PC クラスタへの対応」「(3) FMO 法に基づいた可視化・解析手法」の開発により、PC クラスタから T2K および地球シミュレータのようなベクトル型並列計算機、さらには数万コア以上の次世代スパコンへ対応しました。量子化学計算の専門家でなくても利用できる実用的な分子間相互作用解析システムを提供します。

7 量子機能解析ソルバー・ナノデバイスシミュレーターの研究開発



大野 隆央

(独)物質・材料研究機構
計算科学センター長



次世代ナノデバイス構造の例(有機分子や C60 等も利用)

半導体デバイスに代表されるナノデバイスは、我が国の産業競争力の基礎と位置づけられます。半導体デバイスにおいては、今後、ナノメートル領域に至る極限的な微細化を追求して更なる高性能化・高集積化を推し進めるとともに、酸化物、磁性体、有機物、ナノチューブなどの新規材料の利用、スピン・光などの新原理の導入など、様々な材料や概念を融合して機能を多様化する方向が模索されています。このような高機能次世代ナノデバイスを設計・開発するためには、従来型の経験的シミュレーションに代わって、パラメータを用いずに物質の構造・機能を高精度に解析できる量子論に基づいた解析技術が不可欠なツールとなります。本サブテーマでは、極限的微小化ナノデバイスの機能解析、革新的機能ナノ

デバイス構造の創成を実現するために、ナノデバイスの構造・機能を量子論的に高精度に解析・予測する計算手法・アルゴリズムの研究開発を行い、高度な計算機環境を駆使するシミュレーションシステムの構築を目指します。具体的には、第一原理電子状態解析の高機能化・高度化、原子・電子ダイナミクスの高精度解析、大規模第一原理解析などの研究開発を実施します。これにより、次世代半導体ナノデバイスをはじめ、有機デバイスなどの複合デバイス、太陽電池などの新機能エネルギー変換デバイスなどに関する材料探索、機能解析・予測を可能なものとし、ナノデバイス分野におけるイノベーション創出に貢献できるものと期待します。

イベントスケジュール

2009	3月	「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトとスーパーコンピューティング技術産業応用協議会との共催によるワークショップの開催(予定) ・次世代ものづくりシミュレーションシステムの研究開発 ・量子バイオシミュレーションシステムの研究開発 ・ナノデバイスシミュレーションシステムの研究開発
	7月	「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトシンポジウムの開催(予定)

イノベーションソフトPJ-産協連絡会議 (仮称)

第1回イノベーションソフトPJ説明会が開催されました。

日時：平成20年10月22日 午後3時～
場所：東大生研

産協協から大勢の方が参加され、イノベーションソフト PJ の説明の後、活発な議論や要望等が行われました。今後連携を強化し、試計算、実証計算を積み上げ、実用に資するソフトウェアの実現に協力し合うことになりました。



編集後記

CISS NEWS 第1号の発行です。今回は新たにスタートしたイノベーションソフトPJの特集ですが、革新センターにおいて取り組んでいきます色々なプロジェクト情報も随時お伝えしようと考えておりますので、ご支援よろしくお願いたします。

資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661
FAX : 03-5452-6662
E-mail : office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp
URL : http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

編集発行

東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター
〒153-8505
東京都目黒区駒場4-6-1