



センター発足後一年間が経過して

～大型研究開発プロジェクトもスタートし事業は順調に展開、
今後は人材育成とものづくり分野のシミュレーションを戦略的に推進～



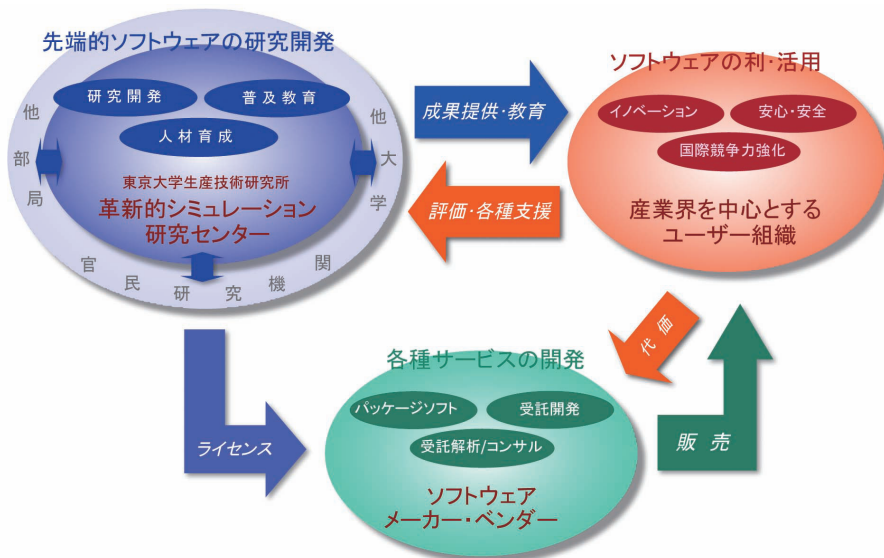
センター長 加藤 千幸

昨年1月に本センターが発足してから1年余りが経過しました。この間、昨年7月28日に当所のコンベンションホールで開催された設立

記念シンポジウム・記念式典には、内閣府、文部科学省、産業界、大学等研究機関などから337名余りの方にご出席をいただき、センターのミッションや事業計画を内外にご説明させていただくとともに、ご出席の方々からセンターに対する熱い期待をお寄せいただき、本センターは順調な門出を切ることができました。さらに、昨年9月には、文部科学省の大型研究開発プロジェクト次世代IT基盤構築のための研究開発「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」（平成20年度から24年度まで、事業総額25億円）が本センターを中核拠点としてスタートしました。このプロジェクトでは、産業イノベーションの

創出に寄与する、先端かつ実用的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的としており、本プロジェクトで開発するソフトウェアは、現在神戸で開発が進められている次世代スーパーコンピュータの中核的なアプリケーション・ソフトウェアとなることも期待されています。本センターに関連する大型研究プロジェクトとしては、それ以外にも、加藤信介教授が安全・安心科学技術プロジェクト「有害危険物質の拡散被害予測と減災対策研究」を研究代表として推進しており、また、大島まり教授ならびに佐藤文俊教授は、理学研究所が進めている最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用「次世代生命体統合シミュレーションの研究開発」に分担者として参画しています。このように、センターのミッションのひとつである、先端シミュレーションソフトウェアの研究開発とその普及は順調に遂行されつつありますが、今後、本センターとしては、計算科学シミュレーション分野の人材育成に特に注力していきたいと考えております。ますます高度化・専門化する計算科学

シミュレーション分野の人材育成は国家的急務となっております。本センターとしては、来年度から本学大学院工学系研究科の講義として、佐藤文俊教授が「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」を新たに開講する予定です。本講義では、2、3名のチーム制の実習を中心として、計算科学ソフトウェアの設計やプログラミングに関する実践的な教育を展開する予定です。一方、産業界における先端シミュレーションの牽引役である「スーパーコンピューティング技術産業応用協議会」と連携して、やはり来年度から「HPC (High Performance Computing) 産業利用スクール」を立ち上げる予定です。このスクールでは、HPC 入門講座から始まり、実際に地球シミュレーターや情報基盤センターのT2K 計算機を利用し、数千CPUの大規模並列計算により、製品開発上の課題解決をはかる実践コースまでを開講する予定です。現在、次世代スーパーコンピュータの利活用を促進するための戦略的利用分野の検討が文部科学省で進められています。本センターとしても、理化学研究所、海洋研究開発機構、情報基盤センター、宇宙航空研究開発機構、高度情報科学技術研究機構など多くの研究機関との連携をより強固なものとするとともに、センター内部の教員間のインテグレーションを強化することにより、都市・建築・ライフサイエンスも含めた、広義のものづくり分野における、計算科学シミュレーションの発展に寄与していきたいと考えております。来年度からは新たに、第1部（基礎系部門）の半場藤弘准教授、ならびに梅野宜崇准教授にも協力教員として本センターのメンバーにお加わりいただけることになっており、さらにセンターの活動を加速したいと考えております。関係各位には引き続きセンターの諸活動へのご理解とご支援をいただきたく、お願い申し上げます。



若手メンバー発 2009年の抱負

本プロジェクトは、革新的シミュレーション研究センターを中核として総勢 70 名以上の研究者を結集し、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普及を 5 年間の予定で実施しています。CISS NEWS 第 2 号では、新年はじめての号ということで気持ちも新たに、その中核を担う若手メンバーを中心に、サブテーマごとに研究テーマとイノベーションプロジェクトへの今年の抱負をお聞きしました。また大学時代では何を専攻され、そのことがどのように今の研究に結びついているかも、併せてお寄せいただきました。

山出 吉伸 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



さまざまなマシンアーキテクチャで高速に動作し、使いやすいユーザインターフェースのソフトウェア開発を目指す

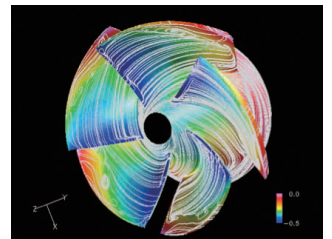
今回のプロジェクトでは、数値流体力学からの視点も重要ですが、普及には“さまざまなマシンアーキテクチャで高速に動作するコードの開発”が不可欠で、ハードウェアに近い計算科学一般も研究対象となり“開発コスト・メンテナンスコストの最小化”

や“使いやすいユーザインターフェース”というソフトウェア工学からの視点も併せて研究開発しています。実証では、多様な現象を取り扱うため、空力騒音、流体機械内部流れ、乱流熱輸送、キャピテーション等に取り組んでいます。

FrontFlow/blue (FFB) による予測に基づく知見が、製品に反映されているの

を目の前にすると大変励みになります。製品への適用事例では FFB よりも多数の実績をもつ市販ソフトも存在していますが、今後は FFB の製品適用事例を加速度的に増やしていきたいです。そのためにも、ユーザの皆様との連携をいっそう強め、“こんな解析がしたい”、“こんな機能がほしい”等の声を汲み上げていけたらと思います。

学生の時も流体解析から、オーロラが“何故、どのようなメカニズムで発生するのか？”を研究していました。実際にカナダのイェローナイフまで見に行ったこともあります。解析の対象は、“昔は宇宙空間”、“今は機械のまわり”と、異なりますが、学生時代に培ったものは



斜流ポンプ内部流れ解析

後藤 和哉 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



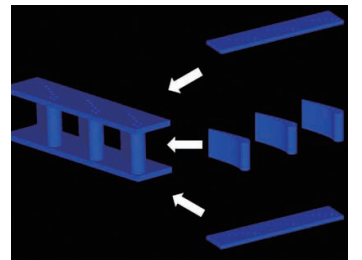
ユーザーに使いやすく、開発者に維持・拡張がしやすいソフトウェアの実現に向けて

私たちのグループは、本プロジェクトで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構造物を“まるごと解析”できるシステムの実現を目指しています。また、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

の実現を目指しています。そのなかで、私が担当するのはシステム全体の基盤となる部分で、さまざまなデータの管理や、並列処理、計算の高速化等に関わる機能が含まれます。今回、大幅な機能拡張を行うこととし、基本設計を行っています。私としては、ただ目標とする機能を実現するばかりでなく、ソフトウェアとして質の高いもの、つまり、ユーザーにとって使いやすく、

開発者にとって維持・拡張がしやすいものを作りたい、と考えています。そのためにも、設計が非常に重要なので、今年はこのことを念頭において取り組みたいと考えています。

私は大学時代、東京大学工学部システム量子工学科にて、原子力関連の幅広い分野について学びました。卒論は放射線検出器の信号処理に関する研究、修士課程は同じ専攻の別の研究室でシェル構造物の有限要素解析に関する研究をしました。今の研究は、修士時代の研究の延長線にあると思います。



アセンブリ構造の解析イメージ：部品レベルの解析から、構造物レベルの大規模解析へ。

吉川 暢宏 複合材料強度信頼性評価シミュレーター研究開発



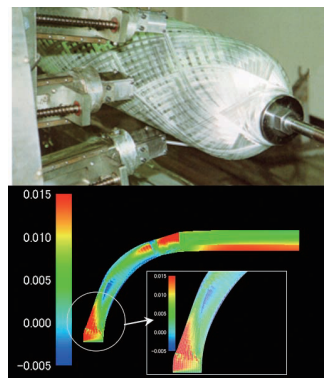
炭素繊維強化プラスチック材料の評価シミュレーションで、日本の「ものづくり力」を躍進させる

固体の有限要素シミュレーションは連続体力学に基づいて定式化されていますが、実際には、高機能材料になるほど非連続性が顕著になります。航空機や自動車などで、軽量化のために利用されている、炭素繊維強化プラスチックは複合材料の代表例で

す。たとえば、燃料電池用の高圧水素容器は写真に示すように炭素繊維を巻きつけるフィラメントワインディングという方法により製造されます。これまでは計算機能力の観点から、繊維の配置を詳細にモデル化することは難しく、下図に示すように複合則により平均的な連続体として既往の有限要素シミュレーションを適用していましたが、その限界を超えて精度の高い信頼性

評価を行なうための研究開発を行なっています。

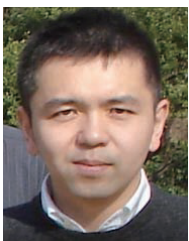
次世代スパコンなど、将来的な計算機能力の向上を考慮すれば、炭素繊維とプラスチックの構成を詳細に表した有限要素モデルを用いるシミュレーションも現実味を帯びてきました。樹脂の硬化プロセスまで立ち入ったシミュレーションで、精度の高い信頼性評価が行なえると考えています。今年には将来的な複合材料強度評価のありかたを描きつつ、その基礎となるシミュレーションプログラムを開発したいと考えています。



炭素繊維強化プラスチック材料

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グループ

古野 一裕 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

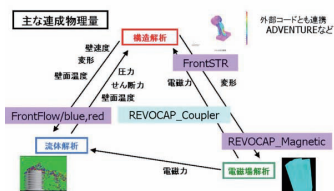


解析と実験のコラボレーション経験を活かして、実験だけでは捉えきれない複合現象をシミュレーションで明らかに

マルチ力学解析とは、いわゆる流体・構造の連成解析のことを言い、これまでは実際の現象を解析する際、構造解析、流体解析と分けて、単体のソルバで個別に解析することが一般的でしたが、最近は、より精度が求められ、単体で個別現象というより、複合現象を解くことが求められています。その複合現象を解くために、製品全体構造の統合評価が可能な大規模マルチ力学解析用ソフトウェア REVOCAP を開発しています。中でも私は主にその実証計算を行っています。前回の革新プロジェクトで連成解析を行うベースができたので、本プロジェクトでは REVOCAP システムを発展させ、これまで実験ではとらえきれなかった現象を解析によって明らかにできればと考

えています。単にマルチ力学解析ができて解析に時間がかかったり、操作が難しかったりするとユーザーの負担も大きくなるので、いかに今まで出来なかった解析を手軽に簡単に行えるかを考え、使いやすく、コストのかからない大規模マルチ力学解析のシステムの開発を目指しています。

私は大学時代、金沢大学の山田敏郎先生の下で構造解析を学びました。市販の構造解析ソフトを使って熱応力の解析を主に行っていました。山田先生の研究室は民間企業との共同研究が盛んでいつも企業の方と一緒に実験を行い、解析結果との比較をして議論を行っていました。市販ソフトを使った経験が今回の開発には活かされています。



平野 敏行 バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発

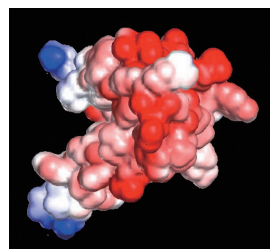


学生時代の実験経験をシミュレーションに活かし、世界中に ProteinDF の名を轟かせる

金属を含むタンパク質の物性、機能や反応性をシミュレーションする ProteinDF を中心としたタンパク質シミュレーターシステムの開発のほか、シミュレーション手法の開発、その実証計算を行っています。ProteinDF は密度汎関数法とよばれる手法に基づき、高精度にタンパク質などの巨大分子の電子の状態を計算できます。実験とシミュレーションを相補的に活用することで、副作用のない薬剤設計や人工光合成の実現、環境にやさしい新素材の開発など、医療・エネルギー・環境などの分野で研究が飛躍的に進歩すると確信しています。タンパク質のシミュレーションは世界中の研究者が注目しています。ProteinDF は非常に優秀な、今後が期待されるソフトウェアです。

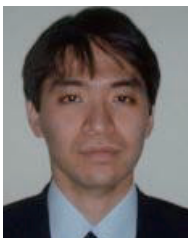
今年は計算化学分野の国際会議が数々開催される当たり年なので、日本発のソフトとして、世界中に ProteinDF の名を轟かせるためにも、医薬、エネルギーなど様々な分野で注目されている幾つかのタンパク質について、ProteinDF を使った実証計算・シミュレーションを成し遂げるつもりです。

私は大学時代、金属と有機物からなる大きな分子である金属錯体に興味を持ち、合成・反応の研究を行っていました。ここで計算化学に触れ、実験屋の立場からシミュレーションの実用性・有益性に衝撃を覚えました。学生時代の実験経験を、シミュレーションに活かしたいと考えています。



インスリンの全電子シミュレーションから得られた静電ポテンシャル：等電子密度面 (0.001e / Bohr³) 上に -0.2 (赤) から +0.2 (青) までの静電ポテンシャルをマッピングした。

日野 理 バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発



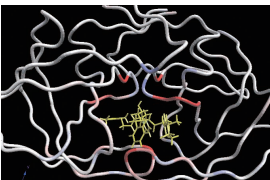
大学院時代に「さまよった」結果、身に付いた知識が、今回のプロジェクトに結びついている

今年度、私に与えられた課題は、BioStation システムの量子化学計算エンジンに、密度汎関数理論 (Density Functional Theory : DFT) と RI (Resolution of Identity) 法を導入する際、基盤となる分子積分計算モジュールの作成です。前者は、主として計算精度、後者は主として計算速度を向上させます。

BioStation は、量子力学を用いて、膨大な数の医薬候補となる化学物質と、人体に含まれる生体分子 (タンパク質や DNA など) の相互作用の大きさを計算し、どの部分がどの程度の大きさで“くっつく”のかを視覚化します。この情報は、医薬候補となる化学物質の設計に極めて有用です。今年の目標は、来年度以降、本格的に開発を開始するために必要な基本モジュールの作成です。これらのモジュールのクオリティーは、今後のプロジェクトの成否の重要な要素となるの

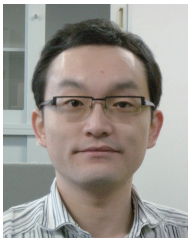
で、気を抜かず、できるだけ良いものに仕上げようと考えています。今後は自分でも課題やテーマを見出して、プロジェクトに参加して行きたいと考えています。

私は早稲田大学政治経済学部卒業後、会社への就職を経て、同理工学部物理学科に学士入学し、中性子散乱を用いた固体物性の研究を行い、修士号取得後は、総合研究大学院大学数物科学研究科機能分子科学専攻に入学、量子化学における分子相関理論を研究テーマに学位を取得しました。その後博士研究員として、フロリダ大学で3年間、コーネル大学で1年間、自分で方法論を考え、計算機プログラムをコーディングする機会を得て、量子化学研究を行いました。比較的短時間で BioStation に馴染めたのは、この経験に負うところが大きかったと考えています。



抗エイズウイルス薬ロビナビル(中央黄色部分)と、エイズウイルスが自己複製のために必要な酵素=HIV-1 プロテアーゼ(チューブ状部分)との相互作用の大きさ(赤:引力的、青:反発的)を視覚化した図。色が濃いほど、相互作用は大きい。ロビナビルは、HIV-1 プロテアーゼの働きを遮断し、エイズウイルスの増殖を妨げる。

甲賀 淳一郎 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



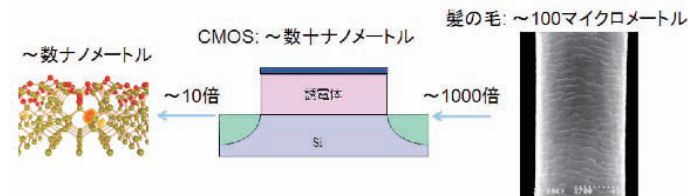
パソコンや PC クラスタを利用したシミュレーションから、大型計算機を利用した大規模なものまで、汎用性の高いソフトウェアを目指して

原子、分子レベルのコンピューターシミュレーションを行うことによって、物質の様々な性質をナノメートルオーダーの視点から明らかにすることのできる、PHASE というソフトウェアの開発を主に行っています。新規材料やデバイス開発にお使いいただけることを期待しています。パソコンや PC クラスタを利用した手軽なシミュレーションから、地球シミュレーターのような大型計算機を利用した大規模なシミュレーションまで実行可能な、汎用性の高いソフトウェアです。

これまでの「戦略的基盤ソフトウェアの開発」から「革新的シミュレーションソフ

トウェアの研究開発」に続き、今回のプロジェクトにも携わることができ、大変恵まれた環境にあるものと考えています。このような滅多にない機会を無駄にするわけにはいかないので、広く、長く使っていただけるソフトウェアの開発を行うべく、より一層の努力をし、自分がすべきことをしっかりとやっていきたいと考えています。

大学時代は、おもに物性物理学やコンピューターシミュレーションの勉強をしていました。当時得た知識は今の仕事に必要なものなので、結びついていると思います。



スーパーコンピューティング技術産業応用協議会との新たな連携活動

「イノベーションソフトプロジェクト」(以下、本プロジェクト)では前身の「革新ソフトプロジェクト」(いずれも略称)の時と同様に、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(数値シミュレーションソフト評価普及部会、先端ソフトウェア応用分科会)(以下、産応協)と連携した諸活動を展開致します。本プロジェクトは特に、産業イノベーションに資するソフトウェアの開発・普及がメインのテーマになっていますので、産業界との連携活動を益々強化することにより、開発するシミュレーションソフトの速やかな普及促進を図ることになりました。すなわち、従来プロジェクト側主体で企画・実施して来たシンポジウム・ワークショップ、産応協側主体で進められて来たワーキンググループ活動、両者共催のセミナーなどを、原則として全て両者の共催に致します。

本年度に実施した連携強化による活動の第一番目に挙げられる内容は、本プロジェクトの提案に際して行われた、ソフトウェアシーズ

と産業界のマッチングを取るための作業です(平成20年7月18日)。産応協側によるアンケート調査などを通じた産業界のとりまとめ結果と、プロジェクト側による有カソフトウェアシーズ(従来の国プロ成果中心)候補選定結果をつき合わせることで、真に先端的かつ実用的なソフトウェアを開発するためのソフトウェアシーズの絞込みと機能・性能の目標仕様を明確にすることができました。

連携強化行事の二つ目は、産応協—イノベーションソフトプロジェクト共同による、本プロジェクト立ち上げのための連絡会議の開催です(平成20年10月22日)。本会議では、特に、開発するソフトウェアの産業利用上の効果を明確にする際に重要となる実証テーマの選定に際して産業界側の積極的協力を求めるものであり、以後ワーキンググループ活動内容の一つとして継続的に議論して行くことになりました。

連携した活動に関して今年度残されている行事として、統合ワークショップを開催します。

イベント案内

第1回 統合ワークショップ <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/riss>

—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—

共催：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、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

平成20年度から5年間の予定でスタートした「イノベーションソフトプロジェクト」(略称)は、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会とも連携したソフトウェアの仕様検討ならびに基本設計が順調に進められ、いよいよプロトタイプソフトウェアの開発が始められるフェーズにあります。そこで、これまでの

検討状況を報告し、改めて広く産業界を中心としたユーザからの意見・要望を吸収する機会を設けることにより、目標である産業イノベーションに資するソフトウェアの機能の確認・新規掘り起こしを行い、研究開発の的確な目標の設定と加速を図るためワークショップを3分野、3日間で開催致します。

総合ワークショップスケジュール(予定)

1-1 ナノデバイス 3月12日(木) 東京大学生産技術研究所 大会議室(An-301) 13:30~17:00

講演

「ナノシミュレーションの実情とイノベーションソフトウェアへの期待」	ナノWG副主査 伊藤 聡
「ナノデバイスイノベーション基盤ソフトウェア開発構想と基本設計」	ナノデバイスシミュレーター：リーダ 大野 隆央 他

パネルディスカッション 一会場参加者を交えて

1-2 ものづくり 3月16日(月)：東京大学生産技術研究所 大会議室(An-301) 13:30~17:20

講演

「ものづくりシミュレーションの実情とイノベーションソフトウェアへの期待」	流体・構造WG副主査 富松 重行
「ものづくりイノベーション基盤ソフトウェア開発構想と基本設計」	大規模アセンブリ構造対応熱流体解析ソルバー：リーダ 加藤 千幸 大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバー：リーダ 奥田 洋司 複合材料強度信頼性評価シミュレーター：リーダ 吉川 暢宏 大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーター：リーダ 吉村 忍 他

パネルディスカッション 一会場参加者を交えて

1-3 量子バイオ 3月17日(火)：東京大学生産技術研究所 大会議室(An-301) 13:30~17:20

講演

「創薬シミュレーションの実情とイノベーションソフトウェアへの期待」	バイオWG主査 小沢 知永
「創薬イノベーション基盤ソフトウェア開発構想と基本設計」	バイオ・ナノ分子特性シミュレーター：リーダ 佐藤 文俊 バイオ分子相互作用シミュレーター：リーダ 中野 達也 他

パネルディスカッション 一会場参加者を交えて

編集後記

CISS NEWS 第2号は2009年新年号ということで、巻頭では、センターの展望を加藤千幸センター長から、イノベーションソフトPJからは、若手メンバーを中心に新年の抱負をお寄せいただきました。年度末まであまり日がありませんが、推進会議における研究の進捗状況のチェックが厳しく行われており、全力をあげて各チームとも取り組んでいます。成果をご期待下さい。

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