

## “イノベーション基盤ソフト”の基本設計が完了 2年目に入り、ソフトウェアのプロトタイプの開発が本格的にスタート

平成 20 年 10 月 1 日からスタートした「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(文部科学省「次世代 IT 基盤構築のための研究開発」)は、初年度の目標であるソフトウェアの基本設計と、核となる要素技術開発を予定通り終了させ、2年目に入りました。

本プロジェクトは、産業イノベーションに資する我が国独自のシミュレーションソフトウェアの開発とその普及を目標に掲げ、ものづくりプロセスのイノベーションとプロダクトそのもののイノベーションを創出するための基盤となるシミュレーションソフトウェアの実現をめざしてスタートしています。特に、産業界で早期に利活用

できるソフトウェアの開発を重要な目標としており、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会との連携を強化した取り組みを行っております。具体的には、同協議会のワーキンググループ活動やワークショップ、シンポジウムなどの施策を基本的に協議会とプロジェクトの共催とすることにより、開発するソフトウェアの目標仕様などについて両者の合意を形成しながら進めています。

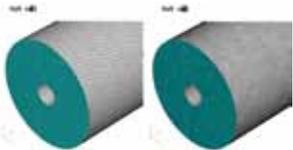
昨年度末(3月12日、16日、17日)に実施した3つのグループ別の統合ワークショップでは、まず協議会側によるソフトウェア利活用状況の報告と本プロジェクトへの期待が述べられたあと、プロジェクト側のソフトウェア基本設計の概

要が紹介され、最後にパネルディスカッションの形で両者の意見交換がされました。今回の統合ワークショップでは、特にソフトウェアを利活用する第一線の研究者、技術者に参加戴いたため会場の参加者からも極めて具体的な質疑応答が成され、大変意義深い催しとなりました。

今年度はソフトウェアプロトタイプの開発が行われ、それをベースとした本プロジェクトとしての初期バージョンの公開を3年目の平成22年度に一齐に実施する予定です。なお、それに先駆けて本プロジェクトで採用されたシーズソフトウェアのバージョンアップ版については、この6月に8本を公開する予定です(3ページ目に概要記載)。

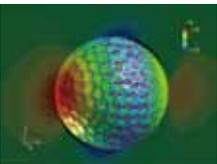
### プロジェクト初年度 各チームの成果報告

#### 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



Refiner のテスト計算例

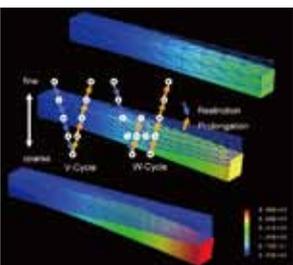
本研究開発では、乱流現象の高精度予測により、ものづくり設計への貢献を目的とする流体解析システム FrontFlow を開発します。システムの特長のひとつとして、多様なマシンアーキテクチャにおいて高速に動作することがあげられます。本プロジェクトでは、上記の既存技術に加え、流れソルバーにメッシュ再分割機能(Refiner)を実装することにより、最大で、1000億点規模の解析を実現する予定です。また、ユーザの作業負担を極力小さくするユーザインターフェースの開発に取り組んでおります。



FrontFlow による解析事例：  
ゴルフボールまわり流れ解析(住友ゴム工業提供)

昨年度は、システムを構成する要素技術(流れソルバーの高速化、混合要素タイプ対応ソルバー、システムインターフェース、ユーザインターフェース)に関する研究開発を実施し、そのプロトタイプを作成しました。今年度は、これらの要素技術を組み合わせ、次期バージョンの流体解析システムのプロトタイプを作成します。これと同時に普及活動にも力を注ぎたいと考えております。

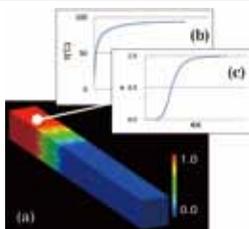
#### 大規模アセンブリ構造対応構造解析ソルバーの研究開発



階層型細分化機能のプロトタイプを組み込んだテスト結果

本研究開発では、実際の製品の形態であるアセンブリ構造のまるごと解析を実現する構造解析システムについて、昨年度は仕様検討と基本設計を行いました。また、「マルチ力学シミュレーターの研究開発」に対応するための基本設計も行いました。具体的には、構造解析ソルバー FrontSTR の高度化を実現するために、幾何学的非線形と材料特性非線形への対応、および接触解析機能について機能拡張を行ないました。大規模化については、10億~100億メッシュを想定し、マルチ力学シミュレーターで採用される階層型細分化メッシュモデルへの対応を図ります。これらの高度化・大規模化を実用とするために、FrontSTR のベースとなっている構造解析基盤ソフトウェア HEC-MW について、データ構造を全面的に見直すとともに計算アルゴリズムの改良を検討し、テストモデルでは大幅に計算時間を短縮できることを確認しています。

## 複合材料強度信頼性評価シミュレーターの研究開発

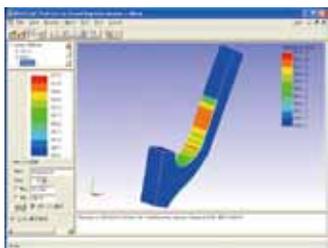


樹脂の温度と硬化度解析：  
(a) 定常状態での硬化度分布  
(b) 温度時刻歴  
(c) 硬化度時刻歴

今年度は複合材料強度信頼性評価シミュレーターの主要部である、炭素繊維成形、樹脂の含浸・硬化プロセス後の初期欠陥評価シミュレーターの開発に着手しました。本シミュレーターは Resin Transfer Molding (RTM)法を想定し、賦形プロセス、含浸プロセスおよび硬化プロセスから成り立つ成形プロセスを連成解析するシミュレーションシステムです。

プロトタイプを作成した硬化プロセスシミュレーターは、(i) 硬化による発熱を含む熱伝導解析機能、(ii) 温度変化と相変化により発生するひずみ解析機能および (iii) 樹脂流動によるひずみ緩和解析機能を備えています。硬化度を変数とすることで、温度により決定される樹脂の流動部分と固化部分の滑らかな区別が可能となります。図に示す柱状領域の解析により、硬化度解析シミュレーターの基本性能を確認しました。

## 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

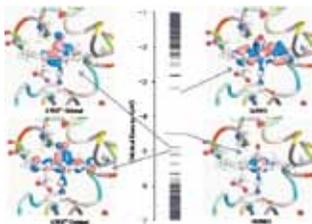


流体解析結果ファイルコンター表示

本研究開発では昨年度、大規模アセンブリ構造・マルチ力学対応プレポスト REVOCAP\_PrePost および大規模並列計算のためのモデル細分モジュール REVOCAP\_Refiner の基本設計およびプロトタイプの開発を行いました。

REVOCAP\_PrePost は次世代ものづくりシミュレーションシステムで使用されるソルバーに対応するプレポストです。昨年度は基本設計の大幅な見直しを行い FrontSTR、FrontFlow/blue 各ソルバー単体のプレポストを開発いたしました。REVOCAP\_Refiner は解析モデル細分ツールです。領域分割後のモデルを、それぞれのソルバーが計算ノードごとに細分するため、領域分割ツールに依存することなくモデルの細分を行うことができます。今年度はプロトタイプを作成し、各ソルバーとともにテストを開始しています。

## バイオ・ナノ分子特性シミュレーターの研究開発



MbCO の全電子計算による軌道エネルギー分布と HOMO-LUMO 近傍の分子軌道

本プロジェクトでは、世界最大のカノニカル分子軌道計算ができる密度汎関数法プログラム ProteinDF システムをベースに高品位分子特性解析システムの研究開発を行います。具体的には、(a) 分光学的物性シミュレーション機能、(b) タンパク質とナノ分子の統合シミュレーション機能、(c) IRC 計算機能、(d) タンパク質波動関数データベース配信機能が挙げられます。昨年度の成果は、B3LYP 法による全電子計算性能の向上、一酸化炭素結合型ミオグロビン (MbCO) の全電子計算達成 (図) とそのモデル系における CO の伸縮振動 (赤外吸収スペクトル) 計算、全電子波動関数から見積もる静電ポテンシャルの計算高速化、さらに新システム構築とシームレス化に向けた重要な改造と野心的な新機能として、それぞれ共通データ・アルゴリズムクラスとモデリング機能クラス的设计と GUI の基本骨格の実装を行いました。

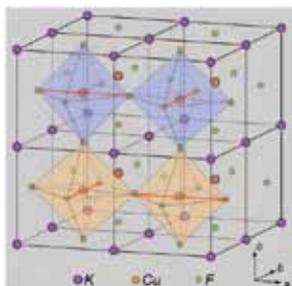
## バイオ分子相互作用シミュレーターの研究開発



BioStation Viewer による分子間相互作用のエネルギーの可視化例

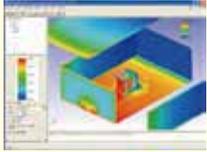
本研究開発では、a) フラグメント分子軌道 (FMO) 法に基づいた量子化学計算エンジンの拡張・高速化、b) 超大規模並列計算機およびマルチコア PC クラスタへの対応、c) FMO 法に基づいた可視化・解析手法の三つを柱に開発を行っています。昨年度は、a) については、MP2 エネルギー勾配計算エンジン、密度汎関数理論 (DFT) 計算エンジン、RI (resolution of the identity) 法計算ルーチンの開発を行いました。また、FMO 法に基づいた QM/MM 法の基礎となる extended universal force field (XUFF) の第 1 バージョンを開発しました。b) については、d 軌道関数を含む積分ルーチンのベクトル化を行い、地球シミュレータ等のベクトル並列型計算機における計算精度の向上を可能にしました。c) については、BioStation Viewer の表示機能を中心に改良を行いました。

## 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



PHASE による強相関電子系の第一原理計算

KCuF<sub>3</sub> は、ヤーンテラーイオンである Cu 原子を含むため、F 原子が協調的に変位した歪んだ構造をとることが知られています。この際、F 原子間の距離には長短が生じ、最短の距離は図の赤線のように、隣接するセル間で異なる方向にならびます。これにより、電子状態においても、占有される Cu の 3d 軌道 (eg 軌道) の向きが、セル間で異なるようになります。このような軌道整列とともに、低温領域では c 軸方向に反強磁性秩序を形成することが知られています。さて、Cu の 3d 軌道は局在性が強いいため、電子相関が極めて強く、このような状況を記述する手法として DFT+U 法が提案されています。我々は、この手法を第一原理基盤ソフト PHASE に組み込み、各種強磁気秩序状態間のエネルギー比較、ならびに構造最適化を行えるようにしました。実際に上記 KCuF<sub>3</sub> 系に適用して、ヤーンテラー歪み及び軌道整列状態が正しく表現されることを確認しました。

公開ソフトウェア	特徴
<b>FrontFlow/blue ver.5.3</b>	<p>昨年度は、開発中の混合要素ソルバー (FFB ver.6.0 として、2010 年公開予定) への実装を目的とし、様々なマシンアーキテクチャにおけるコード高速技術に関し、基礎検証を実施しました。この検証では、メモリ上でのデータ構造、データのアクセス形態、演算回数、ロード / 演算比、ソフトウェア開発・メンテナンスコスト等の様々な要因を詳細かつ総合的に分析し、次期バージョンにおけるコアルーチンを設計しました。FFB の最新版 (ver.5.3) では、これらの成果の一部を、既存の四面体ソルバー (les3ct) に実装し、公開します。これまで実施したテスト計算においては、3 ~ 4 倍の高速化が確認されており、公開するソルバーにおいても同様の高速化が期待できます。</p>
<b>REVOCAP_PrePost Ver.1.0</b> 	<p>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チームでは、今年度大規模アセンブリ構造・マルチ力学対応プレポスト REVOCAP_PrePost を公開します。REVOCAP_PrePost は革新プロジェクトで開発した REVOCAP_Visual、REVOCAP_Mesh を改良したものです。今年度のバージョンでは基本設計を見直し、FrontSTR、FrontFlow/blue 単体のプレポストを公開します。Windows だけでなく、Linux 上でも REVOCAP_PrePost を使用できるようになりました。また、境界条件編集機能の改良、インタラクティブなポスト処理の追加、メッシュ品質のレポート機能追加など、ユーザーフレンドリーネスの一層の向上を目指した機能の追加を行いました。</p>
<b>ProteinDF / QCLD Ver.2009.0</b> <b>ProteinEditor Ver.2009.0</b> 	<p>本システムの今年度バージョン・アップ公開版では、RI (resolution-of-identity) 法に基づく B3LYP 法によるタンパク質波動関数計算性能を大幅に向上させました。Harris 汎関数による初期値作成も組み込み、これまで以上に高速かつ安定に本格的なタンパク質 B3LYP 全電子波動関数計算が達成できます。これにとまない、RI-HF 法計算機能も追加しました。今後、長距離補正や経験的分散も導入する予定です。また、統合インターフェース ProteinEditor の操作性向上と機能強化も図りました。詳しくは、ダウンロードサイトのバージョン・アップ項目一覧をご覧ください。なお、ProteinEditor を PowerPoint へ埋め込むための機能も逐次公開します。是非、インタラクティブなプレゼンにもご使用ください。</p>
<b>ABINIT-MP Ver. 4.20</b> <b>BioStation Viewer Ver. 10.00</b>	<p>今年度の公開は、イノベーションソフトが開始されて半年ということで、シーズとなった革新ソフトで開発された ABINIT-MP および BioStation Viewer のバグ修正が中心となっています。ABINIT-MP については、修正電荷平衡 (MQEq) 法に基づいた可変電荷を用いた XUFF が利用可能となっています。XUFF は UFF と比較して水素結合の精度が向上しています。また、BioStation Viewer については、solid ribbon 表示や二次構造のカラー表示等、表示機能を中心に改良が行われています。FMO-MP2 法による構造最適化、FMO-DFT 法、QM (FMO)/MM(XUFF) 法といった主要開発機能については、来年度以降にβ版を公開する予定です。</p>
<b>PHASE Ver. 8.0</b> <b>ASCOT Ver. 4.0</b>	<p>PHASE は、密度汎関数法 (DFT 法) に基づく第一原理電子状態解析と基礎物性解析のためのプログラムです。PHASE は、ほとんどの物質の電子状態・基礎物性を高精度に解析・予測します。DFT 法で通常導入される局所密度近似は、酸化物等の電子相関が強い系に対しては不十分であり、正確な電子状態が得られないことがあります。今年度の公開ソフトウェアでは、電子相関を高精度に解析することが可能な DFT+U 法を導入し、強相関電子系に対する解析・予測能力を向上させています。また、拘束条件付き分子動力学法や熱力学積分法による有限温度解析等の原子ダイナミクス解析の機能を拡充しました。今後さらに、時間依存 DFT 法による高精度な電子ダイナミクス解析、化学反応経路探索や自由エネルギー解析等の原子ダイナミクス解析の機能強化を図っていきます。</p>

## 第1回 統合ワークショップ報告

平成 21 年 3 月 12 日 (ナノデバイス)、16 日 (次世代ものづくり)、17 日 (量子バイオ) と、3 日間にわたり開催した第 1 回統合ワークショップでは、産業界、大学等の研究機関などから、3 日間で延べ 187 名余りの方にご参加いただき、盛況のうちに終了いたしました。

イノベーションソフトプロジェクト (略称) は、ソフトウェアの仕様検討と基本設計を終え、今後本格的にソフトウェアの開発が始まります。今回のワークショップでは、産業界イノベーションに結びつくソフトウェアを実現するべく、発表者 (パネラー) と会場が一体となった白熱した議論が行われました。

全体討議で挙げられた主な内容は、まずナノデバイス分野では、

シミュレーションの精度、材料開発の時間短縮、材料 DB 化、インターフェースなどについてであり、続いて次世代ものづくり分野では、計算の精度を上げるための考え方、本プロジェクトで開発する技術の範囲、イノベーションソフトに期待する事に関してでありました。また、最終日の量子バイオ分野では、既存ソフトとの使い分け、利活用促進のための方策、人材育成に関する議論などがありました。

今後これらの討議内容を反映させたソフトウェアのプロトタイプの開発が進められ、来年度 (3 年目) に初期バージョンの公開が行われる予定になっています。

文部科学省 次世代 IT 基盤構築のための研究開発

第1回「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」シンポジウム

—ものづくりを変革する  
シミュレーション技術の挑戦—

高品質製品の創出を得意技としてきた我が国のものづくりは、今後科学に立脚したアプローチとの融合により更なる進化を遂げることが期待されています。中でもシミュレーション技術はそのための基幹技術として、従来の概念を超えた新しい役割を果たすことが求められております。本シンポジウムでは、次世代のものづくりを牽引するためのシミュレーション技術の新たな挑戦課題について展望いたします。

**開催日時** 平成 21 年 7 月 30 日 (木) 10:00 ~ 18:30  
平成 21 年 7 月 31 日 (金) 10:00 ~ 17:30  
**場所** 東京大学生産技術研究所 コンベンションホール (An 棟 2 階)  
**主催** 東京大学生産技術研究所

1 日目

講演

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の開発状況と今後の展開

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

招待講演

自動車産業イノベーションへ向けてのシミュレーション技術の期待 (仮題)

先端 LSI 開発におけるシミュレーションの重要性  
大路 謙 (株)半導体先端テクノロジーズ 取締役第 1 研究部長

バイオ産業イノベーションへ向けてのシミュレーション技術の期待

西島 和三 持田製薬(株)医薬開発本部 主事 / 東北大学 未来科学技術共同研究センター 客員教授

パネルディスカッション

司会 加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

次世代ものづくりを牽引するシミュレーション技術の新たな役割とは?

パネリスト  
大路 謙 (株)半導体先端テクノロジーズ 取締役第 1 研究部長  
白鳥 正樹 横浜国立大学 特任教授 (予定)  
西島 和三 持田製薬(株)医薬開発本部 主事 / 東北大学 未来科学技術共同研究センター 客員教授

2 日目

量子バイオシミュレーションシステムの研究開発グループ

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

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

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会  
バイオ WG 活動の状況と実証計算の取組み

ナノデバイスシミュレーションシステムの研究開発グループ

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

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会  
ナノ WG 活動の状況と実証計算の取組み

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

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 教授

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

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

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

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会  
流体・構造 WG 活動の状況と実証計算の取組み

「HPC(High Performance Computing)産業利用スクール」開講に向けて

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、革新的シミュレーション研究センター、東京大学情報基盤センター、海洋研究開発機構は共同で「HPC(High Performance Computing)産業利用スクール」入門コースを平成 21 年 6 月 11 日 (木) に開講致します。産業界で長年シミュレーション業務に携わってきたエキスパートとセンターの先生方が何度も議論を重ねた結果、今までに無

いカリキュラムを企画しました。詳細はまもなくご案内を差し上げる予定です。HPC のものづくりへの応用事例を知りたい方、社内でもっと応用展開を考えている方、次代を担う若手技術者を育てたいと考えている方はぜひ「HPC 産業スクール」へのご参加をご検討ください。

	1. 入門コース	2. 実践コース	3. 先端コース	4. 次世代スパコンコース
種別	講義中心	実習中心	居室占有・自課題解決	(今後開講予定)
対象者	初級者	中級者	中上級者	
内容	流体 / 構造力学理論、プログラム概要学習とオープンソース HPC 体験	革新ソフトを用いた大規模並列計算の実践体験	自前課題の解決を HPC 環境で実施、外部計算リソースの利用	
受講期間	1 ~ 2 日	2 日	1 単位 (2 週間)	

編集後記

イノベーションソフト PJ は初年度、ソフトウェアの要素技術の開発と基本設計を終了し、2 年目に入りました。5 月の生研公開、6 月にはシーズソフトウェアの公開、7 月はシンポジウム開催と、皆さまに成果をご報告するイベントが続いております。また、6 月からは HPC 産業利用スクールを開講し、センターの目指すところであるシミュレーションソフトウェアを開発・利活用する人材の育成活動を一層充実していきます。これらのお知らせは CISS NEWS でも随時掲載していきますので、ご活用ください。

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