



## 日本のものづくりに真の革新を巻き起こすために

### ～設立より順調に推移、これからの1年半が本当の勝負～

革新的シミュレーション研究センターは、先端的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、ならびに次代を担うシミュレーション人材の育成を目的として、昨年1月に生産技術研究所付属の教育・研究施設として設置され、1年半余りが経過しました。本センターはその前身にあたる、計算科学技術連携研究センター時代のものも含め、これまで7年余りの間、国内の主要な研究機関との強力な連携体制の下、一貫して前記の目的を達成するための大型国家プロジェクトを推進してきました。始めは、2002年度から2005年度に掛けて「戦略的基盤ソフトウェアの開発」（事業費約36億円）を推進し、引き続き、2005年度から2007年度に掛けて「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」（事業費約32億円）を推進してきま

した。また、昨年10月からは新たに、「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」（2008年度から2012年度、予定事業費約25億円）をやはり中核拠点として推進しております。昨年7月のセンター設立シンポジウムや今年の7月に開催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研究開発第1回シンポジウムには、産業界・大学・行政など諸機関から500名以上の方にご参加頂き、本センターに対する期待の大きさを肌で感じました。

さて、このように本センターはこれまでの約2年間は、その前身の時に蓄えた「慣性」もあったので比較的順調に推移してきましたが、センターの真価が問われるのは正にこれからの1年半だと思っております。ご存知のように、現在神戸では地球シミュレーターの250倍の演算性能を有する次

世代スーパーコンピュータの開発が進められておりますし、このスパコンを中核とした、研究開発の戦略的推進を狙った事業である、次世代スパコン戦略分野プログラムも先日文部科学省から公募され、生研や本センターが密接に関係する「次世代ものづくり」も主要分野の一つとして選定されています。今後、産業界や研究機関とより一層連携を強化し、日本のものづくりに本当に変革を巻き起こすことができるかどうか、当センターに問われていることだと認識しております。引き続き、関係諸機関とも連携を強化しながら、また、このようなコミュニティを拡大していき、上記の命題に対して答えを出していきたいと考えておりますので、皆様のご理解とご協力を宜しくお願い申し上げます。

センター長・教授 加藤千幸

### 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」シンポジウムを開催



研究代表 加藤千幸教授

今回のシンポジウムは、「ものづくりを変革するシミュレーション技術の挑戦」をメインテーマに、これからのシミュレーションの新しい役割について議論する場といたしました。「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」プロジェクトは、バイオ、ナノ分野における先端的な技術開発とその応用を包含した形での次世代のものづくりに焦点を当てています。それには従来の役割を超えたシミュレーションの新しい貢献が必須であり、その方向を見極めることが今回のシンポジウムの大きなテーマでした。

本シンポジウムは、7月30、31日の2日間にわたり開催され、文部科学省をはじめ各界から延べ502名の方々のご参加を得て、会場とも活発な議論が展開され盛会のうちに終了することができました。ご参加の方々には、企業の現場でご活躍されている方が多く、産業界でのシミュレーション技術への関心の高さをうかがわせる結果となりました。本シンポジウムのご報告を、30日の午前中の司会をされた畑田敏夫特任教授、午後の佐藤文俊教授、31日司会の吉川暢宏教授からお寄せいただきました。順にご紹介します。 [次ページへ](#)

7 前ページから 初日、野城智也生研所長による主催者挨拶に続いて、文部科学省研究振興局舟橋徹情報課長、(株)日立製作所中村道治取締役(プログラムオフィサー)、大正製薬(株)北村一泰取締役(スーパーコンピューティング技術産業応用協議会副委員長)より、それぞれのお立場で本プロジェクトに対する大いなる期待と激励をいただきました。続いて、本プロジェクトの研究代表である加藤千幸教授よりこのプロジェクトがめざす新しい狙いと研究開発の概要につき紹介があり、参加者の皆様から大変な注目を集めました。



トヨタ自動車(株) 岡本一雄代表取締役副会長

その後招待講演に入り、まず始めにトヨタ自動車(株)の岡本一雄代表取締役副会長より、自動車産業におけるシミュレーションの実態と今後の期待について具体的な事例をもとにした極めて興味深いお話があり、会場から多くの質問が飛び出しました(畑田)。



会場の様子

続いて午後は、ナノ産業分野から(株)半導体先端テクノロジーズの 大路謙取締役部長、バイオ産業分野から持田製薬(株)の西島和三専任主事による招待講演が行われ、それぞれ半導体プロセスと医薬品開発の観点からシミュレーションの重要性が熱く語られました。休憩を挿んでもなお熱気冷めやらぬ中、本日の招待講演者の方々に加え、学の立場から横浜国立大学の白鳥正樹特任教授、大阪大学蛋白質研究所の中村春木センター長もお迎えして、プロジェクト代表の加藤教授による司会のもと、次世代ものづくりを牽引するシミュレーション技術についてパネルディスカッションが行われました。多くの貴重な意見が提示されるとともに、パネリストと会場が一体となって定刻を大幅に上回る議論が展開され、新しいシミュレーション技術への期待の高さがうかがえました(佐藤)。

2 日目は、今回のプロジェクトの推進役であるバイオ、ナノ、次世代ものづくり分野のリーダーの方々より、研究開発を実施中のソフトウェア内容をご紹介いただき、それに絡めてスーパーコンピューティング技術産業応用協議会ワーキンググループ代表の皆様から今後の活動と、それぞれのテーマに関して産業界側からの期待、またその普及に向けてプロジェクトと連携してどのような取り組みをしているかお話いただきました。



1日目午後のパネルディスカッション

シミュレーション技術における進化の一側面を端的に述べれば、「目的が手段になった」ということではないかと思えます。このシミュレーションソフトウェアで「どのような問題が解決されるのか」との問いかけが会場からなされるにつけ、過去においてはプロジェクトの目的であったプログラム開発も、いよいよ手段と目されるまでになったとの感懐を持ちました。手段として洗練するためには、「やってみせる」のではなく、「やりたくさせる」必要があります。そのための仕組みづくりが、今後は重要になるであろうとの思いを強くしました(吉川)。



パネル展示

最後に、加藤千幸教授より閉会の挨拶があり、二日間の日程が締め括られました。「我々は計算科学において、ここ数年で確実にパラダイムシフトが起こるということを想定しており、今回のシンポジウムでは、そのパラダイムシフトを起こすためのソフトウェアの研究開発の具体例を示してきました。しかし、本当の意味でのパラダイムシフトの実現ということを考えると、当然ソフトウェアを作る技術、使う技術、そういったものの全部をひっくるめて考えていかないと本当の意味でのパラダイムシフトは起こりません。まずは産学、そして官が連携して、2年後、あるいは5年後にどう世界を構築していくのか、共通のビジョンを持つことが必要になってきます。そして、そのビジョンの実現は、議論を重ね、その結果出てきた障壁一つ一つを解決していきはじめて可能になると考えております。」

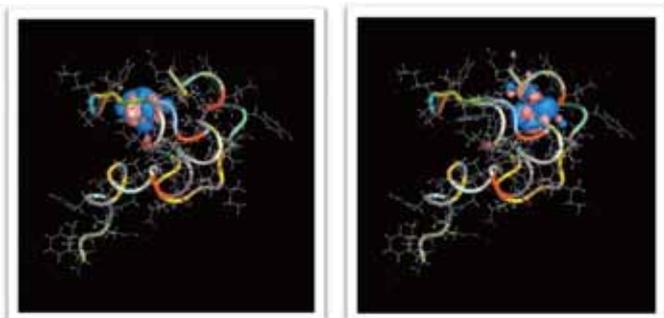
文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト

次世代計算科学研究開発プログラム

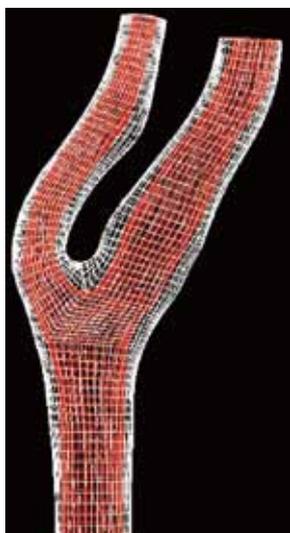
## 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

分子スケール研究開発チームメンバー 佐藤 文俊

臓器全身スケール研究開発チームメンバー 大島 まり



ProteinDF による計算事例：B3LYP 汎関数によるインスリンのHOMO(左)とLUMO(右)



血管内腔と血管壁の形状モデル

本センターでは、これまで以上に専門的な知識や技術が不可欠となった超高速計算機利用のための先進的シミュレーションソフトウェアの開発を行っており、文部科学省が進める「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおいても、本センターから分子スケール研究開発チームと臓器全身スケール研究開発チームに、佐藤文俊教授と大島まり教授が参画しています。

分子スケール研究開発チームでは、生命活動の分子基盤であるタンパク質などの生体高分子が生体内で担っている機能をシミュレーションによって捉え分子生物学・細胞生

物学の課題を解明し、さらには新たな薬剤開発の基盤創出につなげることを目的として、次世代スーパーコンピュータにおいて、大規模量子力学(quantum mechanics, QM) 計算を駆使してタンパク質の化学反応をシミュレーション(電子移動、励起状態ダイナミクスなど)するソフトウェアの研究開発を推進しています。今年度は、次世代スパコンを想定したProteinDFの高速化と計算試行を行い、実際に2500超並列計算を達成しました。また、タンパク質のダイナミクス、超巨大自己無撞着場(self-consistent field, SCF) 初期値作成、計算フロントエンドに関する研究も行いました。

臓器全身スケール研究開発チームでは、脳血管系、特に総頸動脈の動脈硬化症を中心に、シミュレーションプログラムの開発を行っています。具体的には、医用画像を用いて血管壁を含めた血管形状のモデリング手法の開発、および血流-血管壁の相互作用を考慮した流体構造連成解析手法の開発を行っています。今年度は、末梢血管や静脈などの血管のサイズや組織の影響をモデル化し、3次元の流体構造連成解析と1次元-0次元解析を組み合わせることにより、循環器系全体のマルチスケール解析を進めていく予定です。

文部科学省「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

研究代表者 加藤 信介

平成19年8月1日からスタートした「有害危険物質の拡散被害予測と減災対策研究」(文部科学省「安全・安心科学技術プロジェクト」)は、屋内拡散予測技術、屋外拡散予測技術および避難誘導のための災害情報共有技術を統合的に活用したシステムの開発を予定通り終了させ、3年目に入りました。本技術は、システムの稼働に必要な多くの入力要素を予めデータベース化しておくことで、実際のシステムの稼働時には、最小限の入力と計算のみで実行できます。そのためPCでも使用可能となり、大型計算機を有さない自治体等でも汎用的に利用が可能になりました。また、従来の経験的、統計的な予測技術と異なり、物理的モデルに基づくものであり、飛躍的な精度向上と汎用性を確保しています。

本研究は、開発技術が有事における減災対策の立案支援や、防災訓練におけるシナリオ策定のツールとして広く活用されることを目指しており、政府および自治体のプロジェクト運営への参加により社会的要望に即した研究として展開しています。

## 第1回ソフトウェア評価委員会を開催

「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」プロジェクトでは、今年度はいよいよソフトウェアの詳細設計とプロトタイプの開発を実施します。このタイミングにおいては、ソフトウェアの開発内容がプロジェクトの狙いである先端的かつ実用的なものになっているかどうかに関して、きちんと評価を行って改善すべきところがあるかどうかを明確にすることが大変重要になります。そこで、3分野を代表する有識者とユーザーの皆様から成るソフトウェア評価委員会（4～5名/分野）を設置して客観的な評価を行っていただくことになりました。すでに7月に第1回の評価委員会を実施して各分野のヒアリングを行い、各委員の皆様から大変貴重なご指摘をいただくことができました。評価結果は今後プロジェクトの運営委員会で報告され、今後の研究開発計画に反映していくこととなります。

## HPC産業利用スクール

### 10月15,16日 HPC 産業利用スクール実践コース開催 参加者募集中 1000 コアレベルの大規模計算を実践する初の試み！超並列計算の威力を体感！

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、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、東京大学情報基盤センター、独立行政法人海洋研究開発機構の四者は、産業界において次のイノベーションの担い手となる人材を育成するため、HPC 産業利用スクールを開校しました。6月11日には「HPC 産業利用スクール入門コース」を開催し、ものづくり現場における流体・構造解析に関する HPC 技術に焦点をあて、「HPC 技術の最新の動向」、「HPC 技術でものづくり設計がどのように変わるか?」、「HPC 技術導入のためのノウハウ」を紹介させていただきました。スクールには定員の40名を超える申し込みをいただき、多くの方に参加いただきました。

10月15日、16日には「HPC 産業利用スクール実践コースA(流体分野)」を開催します。本コースでは、グループにわかれ、メッシュ作成、他の講習会では経験出来ない大型並列計算機(東大 T2K を予定)を用いた大規模並列計算の実行、結果分析まで、一連の解析作業を実践していただき、与えられた計算環境(解析ターゲット、ハードウェア、ソフトウェア、時間)に応じて、解析をプランニングし効率的に実行するノウハウを習得する事を主眼としています。

#### 申し込み・問い合わせ

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会  
〒101-0065 東京都千代田区西神田 3-2-1 千代田ファーストビル南館 7階  
社団法人 電子情報技術産業協会内  
電話：03-5275-7260 FAX：03-5212-8122 Email：a-sei@jeita.or.jp



## 大学院講義「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」開講

### 佐藤文俊教授、加藤千幸教授他、産業界の講師による講義と 東大情報基盤センター HA8000 クラスタシステムを利用した実践的演習

近年、計算機システムの能力は日進月歩で向上し、大学・研究機関・産業界の連携による、計算科学(シミュレーション)ソフトウェアの利用者と開発者への系統的教育、そして人材を継続的に確保する仕組み構築の重要性が謳われていますが、その開発教育は極めて少ないのが現状です。高速なシミュレーションソフトウェアの構築には計算機工学に基づく HPC 教育が、数万～数10万ラインにもおよぶソフトウェアの開発には複数人によるチーム開発の訓練が必須となります。分かり易く保守管理が容易で移植性・拡張性の高いコード、および性能を出すためのコード(必ずしも前者と一致しない)を両立させる基本技術です。そこで、平成21年度冬学期より本学工学系研究科機械工学専攻の新しい演習として、ソフトウェア工学・計算機工学の講義ならびにチーム制による本格的なシミュレーションソフトウェアの設計・プログラミングによる一貫実習を行う実践的なシミュレーションソフトウェアの開発者教育を開講いたします。

#### 編集後記

今回の CISS ニュースは、第1回シンポジウム報告と併せて現在の活動状況をお届けいたします。こうしてみると実に多岐にわたる活動が同時に進んでおり、今後もこの場でお知らせやご報告することが増えていきそうな予感です。このニュースですが今回のシンポジウムでも予想外に多くの方に会場でお手に取っていただき、嬉しい限りでした。CISS ニュースは、これからも更に充実させていく予定でありますので、忌憚ない感想・要望などをお寄せいただければと思います。

#### 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