

「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」

RSS₂₁ NEWS VOL.5

Revolutionary Simulation Software

「革新ソフト」プロジェクトの 第1回シンポジウムが盛会裏に開催 今後ソフトウェアの普及活動を本格化

ソフトウェア完成度向上への取組みと普及促進にむけての諸施策の具体化を急ぐ

7月に開催したシンポジウムでは革新プロジェクトで開発しているソフトウェアへ多大な関心と期待が寄せられていることがわかりましたが、今後はこの成果をいかに一般社会に普及し、ご活用いただくかが大きな目標になります。普及促進活動は本プロジェクトの大きな施策の一つになっています。今年度の最大の目標は、この革新プロジェクトで開発を予定しているソフトウェアの基幹部分をすべて完成させることですが、同時に徹底した機能検証を行うことを通して、ソフトウェア完成



パネルディスカッションの様子

度の向上を期すとともに、産業界の実問題を対象とした本格的な実証計算を開始致します。すなわち、先進的ソフトウェアを安心して使っていただくために必要なプロセスの実施と、有用な情報の開示を行います。

一方、普及に対する取組みとして下記を計画しています。
(1) ワークショップでの講演・広報活動（今年度より）
通常の研究開発状況の報告に加えて、フリーウェア公開計画、ビジネスベースでの継続的サポート計画につき報告を行います。

(2) シンポジウムでの講演・広報活動（来年度）

(3) 革新ソフトウェア・フェア（仮名）開催支援（適宜）



パネラーの方々



第2会場



コンベンションホール



小宮山東大総長の基調講演

文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発

第1回「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」シンポジウム開催される

7月27,28の2日間に渡り、第1回の革新プロジェクトのシンポジウムを開催しました。延べ676名の方々にご参加いただき、コンベンションホールには入りきれず、ホワイトエに第2会場を急遽用意し、大型モニターを通しての聴講となりました。

1日目は小宮山宏東大総長の基調講演、柘植綾夫総合科学技術会議議員、天野吉和トヨタ自動車執行役常務、渡辺貞文科省研究振興官の方々の招待講演、さらに、

パネルディスカッションと革新プロジェクトの今後の発展に向けて極めて貴重なかつ建設的なご意見をいただくことが出来ました。参加者のアンケート結果を見ましても80%近くの方が満足されました。

2日目はプロジェクトの大きなグループ1.生命現象シミュレーション2.ナノシミュレーション3.都市の安全・環境シミュレーション4.統合連成シミュレーション

のセッションに分け、最新の研究成果を発表するとともに、今後の取組の報告を行いました。会場からは多数の質問もいただき、盛会のうちに終了することが出来ました。今回のシンポジウムは、生研を中核拠点とする産学官連携の本プロジェクトが社会から益々大きな関心を集めていることと、その成果に対して多大な期待が寄せられていることを改めて認識する機会となりました。

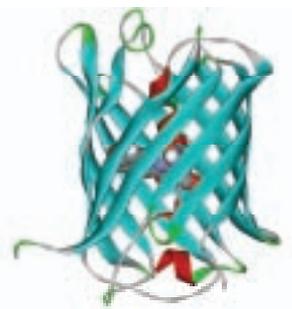
*TOPICS

1 タンパク質の励起状態計算がより高精度に

—多層化フラグメント分子軌道 (MLFMO) 法に基づいたCIS (D) 法による高精度励起状態計算—

タンパク質-化学物質相互作用マルチスケールシミュレーショングループと立教大学は共同で、多層化フラグメント分子軌道 (MLFMO) 法とCIS法に軌道緩和エネルギーとMP2基底状態との差分相関エネルギーを補正するCIS (D) 法の開発及びABINIT-MPへの実装を行い、赤色蛍光タンパク質 (蛍光ラベルとして重要なGFP類緑タンパク質, RFP:残基数220) のタンパク質全体を考慮した高精度励起エネルギー計算を行った。MLFMO-CIS (D) /6-31G*計算による励起エネ

ルギーは2.30eV (実験値: 2.22eV)、発光エネルギーは2.21eV (実験値: 2.13eV) で実験値と極めてよく一致した。また、地球シミュレータ128ノード (1024プロセッサ) 上で、6-31G基底関数を用いた試行計算は3.0時間であった。これは、PCクラスだけでなく地球シミュレータを用いたタンパク質の高精度励起状態計算が、変異株群のスクリーンをも可能とする実用段階に入ったことを示しており、光タンパク質の機能解析に大きく貢献することが期待される。(中野 達也・望月 祐志)



¹⁹:RFP(PDB ID: 1ZGO)のモデル表示(カゴの中のCPKモデルが光活性中心)

2 フォーミュラーカーの高精度空力特性予測を実証

—風洞実験値とのずれ1%程度—

	present LES	wind tunnel
Cd (drag) (incl. wheels)	1.00	0.91
Cl (lift) (excl. wheels)	-1.95	-1.93



Z=0.05



Z=0.10

地球シミュレータ (ES) 上で次世代流体解析ソフトFrontFlow/Redを最適化し、フォーミュラー (LOLA B03/51, 2003~2005年フォーミュラニッポン利用車体) を対象とした1億2千万要素規模の非定常LESによる空力解析を行った。表は車両に作用する抗力 (drag) 及び揚力 (lift) 係数の、風洞実験値との比較を示している。特にダウンフォース (揚力) の予測について、風洞実験値とのずれは1%程度であり、この種の定常空

力予測において、ES等のスパコンを利用したHPC-LESが高い有用性を有していることが判る。図に、フロントタイヤ後方に発生する非定常乱流の可視化図を示す。フロントタイヤ後流は車両全体の空力特性に大きな影響を与えるのみならず、サイドポーン内のラジエータ冷却特性にも大きな影響を与えることが知られており、LESを用いることでその非定常特性の詳細が捕らえられているのが判る。(坪倉 誠)

アドバンスソフト(株):研究成果を事業化

アドバンスソフト(株)は「革新的プロジェクト」に参加し、ソフトウェアの開発を行うとともに、研究成果の事業化、ソフトの継続的な保守・改良を行っています。

1 アドバンスソフトの誕生

アドバンスソフト(株)は、「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」(以下、革新プロジェクト)の前身である文部科学省のITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの為に2002年に日立製作所、富士総合研究所(当時)、ゼクシスなどにより設立された計算科学技術用ソフトウェアの専門企業です。同社はプロジェクトでソフトの開発・整備を担当するとともに、プロジェクト終了後も開発されたソフトを商用化し、販売・保守・改良を継続して行っています。

2 パッケージソフトの商用化

アドバンスソフト(株)では、すでにプロジェクトの成果を商品パッケージとして販売を開始しており、今年度で80本のソフトウェアの販売を見込んでいます。現在販売している主なソフトウェアは次のとおりです。

- 次世代流体解析ソフトAdvance/FrontFlow
- ナノ材料第一原理計算パッケージAdvance/PHASE
- タンパク質-化学物質相互作用解析システムAdvance/BioStation
- タンパク質量子化学計算ソフトAdvance/ProteinDF
- 次世代構造解析ソフトAdvance/FrontSTR

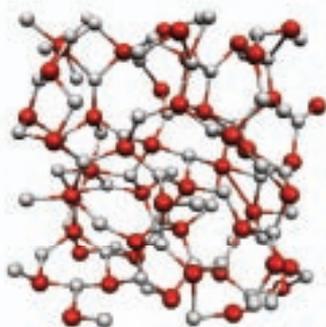
3 アドバンスソフトフェア等での商用化・実用化PR

プロジェクトの成果ソフト普及、販売のため、アドバンスソフトはソフト紹介セミナーの実施、ソフト販売、サポートの提供、関連書籍出版等積極的に商用化に取り組んでいます。詳しくは<http://www.advancesoft.jp/>をご覧ください。

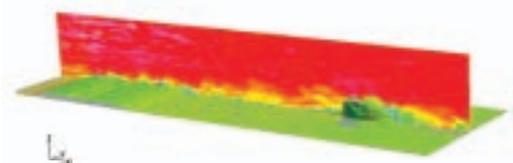
2007年6月には戦略/革新プロジェクトで開発したシミュレーションソフトの事業化やユーザー使用実績の紹介等を広くPRするため、アドバンスソフト社主催の「シミュレーションソフトウェア2007」の開催を計画しています。

4 商用化ソフトによる解析の具体例

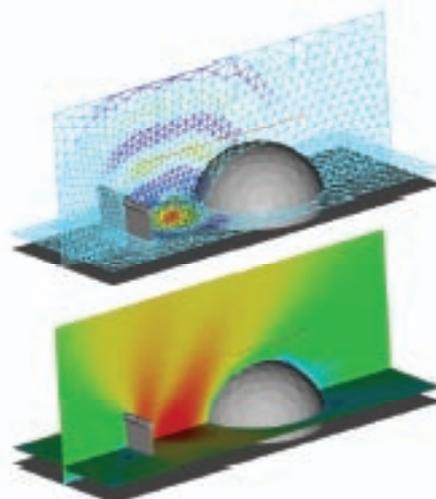
(1) 高誘電体 アモルファス Al_2O_3 の構造と誘電率：アモルファス構造は経験的分子動力学で得られた結果をAdvance/PHASEを用いて最適化。誘電率は10~13の範囲にあることがわかりました。



(2) Advance/FrontFlowによる大気乱流境界層の計算。ラージエディ・モデルを用いました。ヒートアイランドや大気汚染の正確な3次元解析が可能になりました。



(3) Advance/FrontNoiseによる流体騒音解析。乱流による騒音源と音響の連成計算ができます。ファンやポンプなどの流れに起因する騒音が一貫して計算できるようになりました。



商用化ライセンスについて

本革新プロジェクトでは、前身の戦略プロジェクトと同様に、公開ソフトウェアの商用化を希望する企業には、プロジェクトで定める一定の条件をクリアしていることを前提に商用化ライセンスを付与する制度を設けています。これは、プロジェクト終了後もビジネススペースで持続的な普及促進が図られることを意図して設けられた本プロジェクトならではの仕組みです。

本年度（平成18年度）は8月21日に申込が締め切れ、審査の結果5社が認可になりました。戦略プロジェクトでの認可企業を含めると、今までに、アドバンスソフト（株）をはじめ、総計8社がライセンスを付与されておりすでにビジネススペースでの普及活動が行われています。そのビジネスモデルは、パッケージ販売、ソフトウェア受託開発、解析業務の請負等多岐に

わたっており、ユーザの幅広いニーズに応えるべく工夫されています。特に、解析の専門家でない一般の技術者の方であっても、本プロジェクトで開発している先端のソフトウェアを容易に利用できるよう柔軟なサービスが用意されていますので、日頃いろいろ課題をお持ちの技術者の方々には朗報かと思えます。気軽にコンタクトしていただくことをお勧めします。

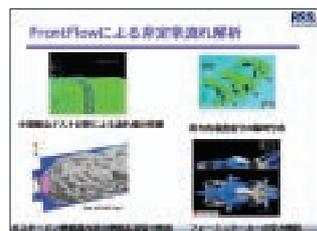
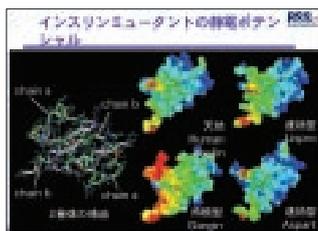
H18年度シンポジウム・ワークショップ開催予定

月	日	開催内容	主催	開催場所
10	27	「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ワークショップ（第5回）－生命現象シミュレーション－	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	東京大学生産技術研究所 大会議室
11	11 ～17	SC'06 出展		米国 フロリダ
12	15	第2回スーパーコンピューティング技術産業 応用協議会シンポジウム	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 コンベンションホール
	26	「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」 ワークショップ（第6回）－共通基盤－	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	東京大学生産技術研究所 大会議室
1	24	「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」 ワークショップ（第7回）－マルチスケール連成シミュレーション－	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	東京大学生産技術研究所 コンベンションホール
2	26	「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」 ワークショップ（第8回）－都市の安全・環境－	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	東京大学生産技術研究所 コンベンションホール

編集後記

革新プロジェクトは2年目の中間が過ぎました。ソフトウェアの公開、シンポジウムも盛会に終了し、まもなくシンポジウムの講演集を発行します。発行まで少しおまちください。後半戦は、ワークショップを4回開催いたします。ワークショップでは最新の研究成果の発表、特別講演、ユーザー支援体制についての講演が行われます。奮って参加下さい。

シンポジウム講演集より抜粋



■ 資料請求お問い合わせ先

TEL: 03-5452-6661 FAX: 03-5452-6662 E-mail: office@rss21.iis.u-tokyo.ac.jp URL: http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/

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