

「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.8

Revolutionary Simulation Software

「革新プロジェクト」のソフトウェア・ラインアップが完成

6月に一斉公開、7月にはシンポジウムを開催し、社会・産業イノベーションへの貢献につき紹介します

2年間に渡って推進してきました「革新プロジェクト」(4グループ、10サブテーマ)の最新の研究開発成果を盛り込んだソフトウェア全23本が完成しました(右表)。これらのソフトウェアは、学術・社会・産業の広い分野において、従来のシミュレーション技術の限界を打ち破る大規模・高精度解析機能を有する点と、PC(クラスター)からハイエンドスパコンまでの幅広いハード環境で利用できる点を主な特徴としています。すでに利用面においても、新薬候補物質の効率的探求、次世代超小型電子デバイス実現のためのナノ物質特性評価、高速回転流体機械の騒音発生メカニズムの詳細解明、公共建築物内災害シミュレーションなどの実問題への適用を通して、新規の知見が次々と見出されており、実用性・有用性の高さが実証されつつあります。これらのソフトウェアは、6月初旬に本プロジェクトのホームページよりフリーウェアとして一般公開致しますので、多くの皆様のご活用を期待致します。また、7月12~13日には2回目のシンポジウムを開催し、ソフトウェアの内容や活用例に関する詳細な報告を致しますので、各界の多くの皆様のご参加をお待ち致します。

	公開ソフトウェア	研究開発ソフトウェアの特徴
		革新的/先進的機能
生命現象	 ProteinEditor Ver. 1.2 ProteinDF Ver.1.2 ProteinDF System Ver.1.2 ProteinMD Ver.1.0	<ul style="list-style-type: none"> 世界最大規模のタンパク質全電子計算 タンパク質解明に寄与する多機能統合計算
	 ABINIT-MP Ver. 4.0 BioStation Launcher Ver. 1.4	<ul style="list-style-type: none"> FMO法(非経験的フラグメント分子軌道法)による巨大分子系の解析 タンパク質-化学物質相互作用統合解析・可視化
	 MC-DIAS Ver.1.0 MC-Bflow Ver.1.0 MC-GUI Ver.1.0	<ul style="list-style-type: none"> モデル変形、パラメータ算出機能を有する医用画像処理 循環器系の、流体-構造連成を含む統合解析 三次元血流解析 グラフィカルユーザインターフェース環境
マルチスケール連成	 PHASE Ver.6.0 CHASE-3PT Ver.3.0 UVSOR Ver. 3.0	<ul style="list-style-type: none"> ナノ材料のマルチスケール多機能統合解析・設計支援環境 地球シミュレータ環境下超大規模ナノ特性解析
	 REVOCAP_Coupler Ver.1.0 REVOCAP_Mesh Ver.1.0 REVOCAP_Visual Ver.1.0 REVOCAP_Magnetic Ver.0.2b	<ul style="list-style-type: none"> 並列環境対応の汎用弱連成解析用エンジン(カブラ等) 複雑形状対応メッシュング及び複数現象表示ポスト機能 大規模並列磁場解析
	 FrontFlow-blue Ver.5.0 FrontFlow-red Ver.3.0	<ul style="list-style-type: none"> LES(Large Eddy Simulation)による大規模・高精度・高速解析 乱流起因の多様な複合現象(燃焼、混相、騒音等)の解析
都市・環境	 FrontSTR Ver.2.0 FrontSTR for WIN Ver.2.0 hecmw-PC-Cluster Ver.1.2	<ul style="list-style-type: none"> FEM解析、ソルバ、可視化等の並列解析用ライブラリ群 大規模並列処理機能活用の複雑構造物の高精度・高速解析
	 EVE SAYFA Ver.1.1	<ul style="list-style-type: none"> 高精度3次元モデル/1次元ネットワーク/避難モデル統合解析 消火、移流拡散、延焼モデルを中核とする大規模LES解析
共通基盤	 PSE Workbench Ver.5.0	<ul style="list-style-type: none"> 革新的シミュレーションソフトウェアで開発したソフトウェア群の統合プラットフォーム

公開ソフトウェア

生命現象グループ

創薬・バイオ新基盤技術 開発へ向けたタンパク質 反応全電子シミュレーション

アミノ酸残基とヘテロ分子で同程度の定量性を持ち、タンパク質をありのまま扱う密度汎関数計算システムProteinDFを公開します。本公開版では、計算エンジンに以下の新機能を追加しました。一つは

高度な分子積分計算の並列化と行列演算ライブラリScaLAPACKの活用による並列性能の向上です。行列を分散配置することにより、メモリ非共有型の並列クラスタでも大規模タンパク質が計算可能となりました。またAndersonの収束加速法を実装し、SCF計算回数を大幅に減らすことに成功しました。さらに、SVWNなどの局所密度近似汎関数に加え、一般化学分子計算

の業界標準となっているB3LYPハイブリッド汎関数を新たに実装しました。局所密度近似汎関数よりも高い計算コストが要求されますが、B3LYPによるタンパク質全電子計算が可能となった意義は大きいと考えております。その他にも、統合環境の整備 (P) やソルバの性能向上といった様々な工夫により実用性が高く、最先端の計算が容易に達成できるシステムとなりました。

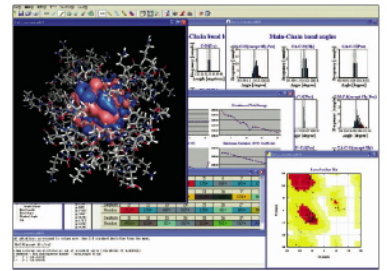


Fig. 1: ProteinEditorのスナップショット

生命現象グループ

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

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システムBioStationは、タンパク質と化学物質との相互作用を量子化学計算に基づいて解析し、創薬

等の分子設計や化合物探索の効率化を目標に開発を行っているシステムです。非経験的フラグメント分子軌道 (FMO) 法プログラムABINIT-MP、その計算結果を可視化・解析するBioStation Viewerを中心に、医薬品などの開発の標的となるタンパク質や低分子化合物のデータを収集したデータベースKiBank、これらを統合す

るBioStation Launcherから構成され、PCクラスタから地球シミュレータまで、幅広い計算環境で利用できます。6月には、部分構造最適化、多層FMO (MLFMO) -MP2計算などを強化したABINIT-MP Ver. 4.0、ローカル/リモート実行機能を強化したBioStation Launcher Ver. 1を含むBioStation Ver. 4.0を公開します。

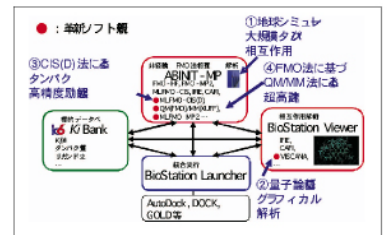


Fig. 1: BioStationシステム構成図

生命現象グループ

器官・組織・細胞マルチスケール マルチフィジックス シミュレーション

血管病変の発症・進行には血行力学的因子が影響を与えていると考えられ、このメカニズム解明に役立つべく、マルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーション・システム "M-SPhyR Circulation" を開発・公開しています。

本システムは主要な3つのプログラムと複数のアドインモジュールで構成されています。MC-Modelingは医用画像から血管表面形状を抽出するプログラムで、患者個人の形状に基づく解析を可能としました。MC-BFlowは3次元血流解析プログラムで、脳動脈全体などの大規模血流解析を実行します。MC-DIASは血流・血管壁連成解析プログラムで、動脈瘤などの特定箇所を対象に解析を行います。

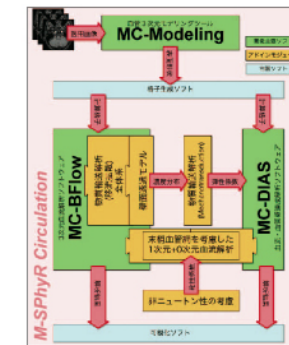


Fig. 1: M-SPhyR Circulation システム概要図

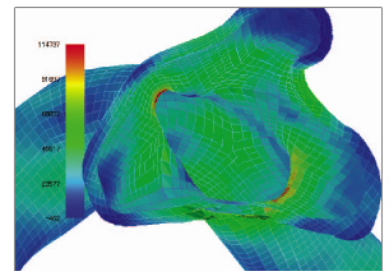


Fig. 2: MC-DIASによる中大脳動脈瘤の流体構造連成解析例

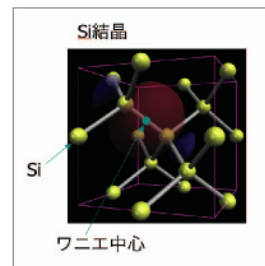
マルチスケール連成グループ

ナノ・物質・材料 マルチスケール機能 シミュレーション

ナノ物質の構造・機能を高精度に効率的に解析するために、シミュレーション・システムに様々な有効な解析機能や制御機能を取り入れています。誘電応答解析ソフトUVSORでは、誘電関数、

2次非線形光学感受率に加え、物質の3次非線形光学感受率 $\chi(3)$ を第一原理法により予測する機能を導入しました。この機能は光コンピュータ論理素子用 $\chi(3)$ 材料の理論設計に有効です。第一原理電子状態計算ソフトPHASEでは、化学結合的な視点から現象を理解することに役立つワニエ関数を導入しました。これら開発するソフトウェア群は、

CHASE-3PTというユーザーインターフェースで制御されます。



各種材料の3次非線形光学感受率 (xxxx成分, 単位: 10^{12} esu) 実測値及び文献理論値を比較のため示す。

材料	UVSOR 3.00	文献値	実測値
Si	21.471	48°	24±14
Ge	633.449	2060°	400±200
GaAs	13.275	80° 69.5°	39
SiO ₂ (α-quartz)	0.00324	48°	0.0095

a 経路のサイトバインディング法による結果 (Phys. Rev. B, vol.41, p.1542(1990)).
b LDA擬ポテンシャル法による結果 (Phys. Rev. B, vol.45, p.873(1992))

マルチスケール連成グループ

革新的汎用連成 シミュレーション

新たに革新的汎用連成シミュレーション・システム (REVOCAP) のプログラムソース等を公開しました。REVOCAPシステムは、連成ケーブル REVOCAP_Coupler 連成

解析プレポスト REVOCAP_Mesh および REVOCAP_Visual 磁場解析ソルバ REVOCAP_Magnetic で構成されています。REVOCAP_Mesh および REVOCAP_Visual は、

流体 (FrontFlow)、構造 (FrontSTR)、磁場ソルバ (REVOCAP_Magnetic) のプレ処理の他に、連成カップリング領域の設定ができるようになっています。また、変形図、

コンタ (P)、断面、ベクトル表示などのポスト処理機能を有しています。REVOCAP_Coupleにより提供されるライブラリにより各ソルバは連成物理量をソケット間通信するため、より高速・大規模な連成解

析に対応可能です。さらに、REVOCAP_Magnetiは並列計算機能により32CPUのPCクラスタを用いて、節点数11,798,360の問題を2,898秒で計算する実績を得ました。

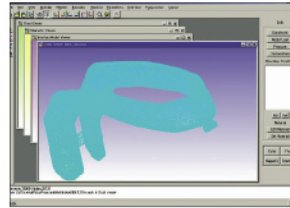


Fig 1: REVOCAP_Meshによるメッシング結果 REVOCAP_Visualで可視化

マルチスケール連成グループ マルチフィジクス 流体シミュレーション

マルチフィジクス流体解析グループでは、FrontFlow/Red ver.3.0 (FFR.ver.3.0) および FrontFlow/Blue.ver.5.0 (FFB ver.5.0) を公開します。FFR ver.3.0では、LES-FLAMELET

モデル、ダイナミクスマゴリンスキーモデル、輻射モデル (P)、粒子追跡モデルを新たに実装しています。FFB ver.5.0では、DES解析機能および熱輸送解析機能を新たに実装しています。また、四面体コードを用いたオーバーセット計算機能も実装し、四面体計算格子を用いた実用的な解析も可能になりました (P)。

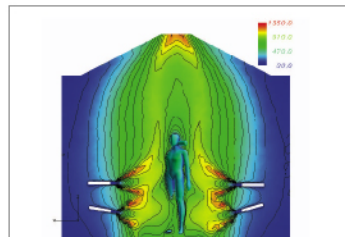


Fig 1: マネキン人体表面の熱流束解析 (総務省消防庁消防大学校 消防研究センター 提供)

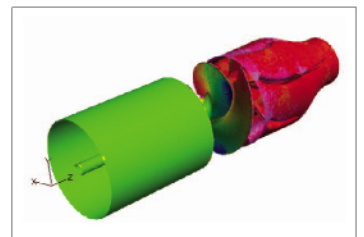


Fig 2: 斜流ポンプ内部流れ解析 (本田技術研究所 提供)

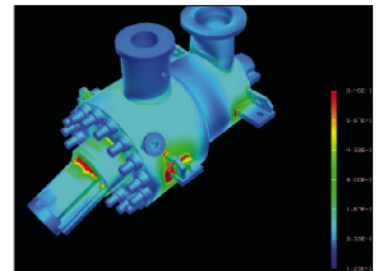
マルチスケール連成グループ ハイエンド計算ミドルウェア (HEC-MW) 援用構造解析 システムによる汎用連成 シミュレーション

FrontSTRは標準的な構造解析機能 (静解析、動解析、固有値解析、熱伝導解析) を有しています。そしてこのソフトウェアの最も大きな特徴は、大規模なモデルの

解析を短時間に行うことです。既存の市販コードでは解析できないような大規模の問題を解析するために、並列計算機などハイエンドな計算環境を効率的に利用できるよう設計されています。その高速計算を得るための基盤となっている技術がハイエンド計算ミドルウェア (HEC-MW) です。即ち、有限要素法などのシミュレーションプログラムにおいては、行列計算、メッシュ操作、可視化

など共通基盤となる処理が多くあります。そこでHEC-MWでは、そうした共通基盤処理部分をさまざまなハイエンド計算機環境において最適化し、シミュレーションプログラムから容易かつ有効に利用できるように目指したものです。このHEC-MWも合わせて当グループの成果物です。平成18年度の活動において1億自由度を上回る大規模なモデルの実証計算を行い、また地球シミュ

レータなどNLS (ナショナル・リーディング・スパコン) での有効な実行性能も得ています。



都市の安全・環境グループ 都市の安全・環境 シミュレーション

EVE SAYFAは、地下街と狭域市街地の環境・安全を予知するためのシミュレーション・ソフトウェアであり、EVE SAYFA/VBEVE SAYFA/1DEVE SAYFA/3という3つのソフトウェアから構成さ

れています。公開する機能は、(1) EVE SAYFA/VBEは建築・環境統合データベースシステム、EVE SAYFA/1D及びEVE SAYFA/3のコントロール、(2) EVE SAYFA/1DEは2層ゾーンモデルによる火災計算、(3) EVE SAYFA/3DEはLES、放射、熱境界条件 (熱分解モデル)、燃え抜け、シャッター開閉についてであります。

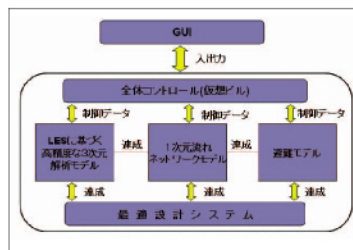


Fig 1: システム構成図

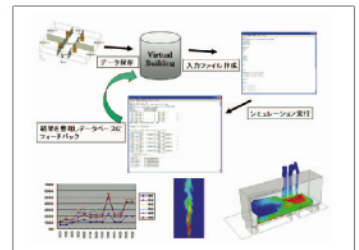


Fig 2: EVE SAYFA

共通基盤グループ 全体系最適化 シミュレーション・ プラットフォーム

PSE Workbenchは、様々なソフトウェアを駆使する大規模解析を最適に実現する方法を提供し、

その解析手順や結果データなどを管理・再利用できるシミュレーション支援環境です。6月公開では、シミュレーション過程に登場するデータや変数をパラメータとして利用できる最適化機能や制御系機能を加えました。また統合システムを効率よく開発するために、GUIプラグイン機能を備えました。

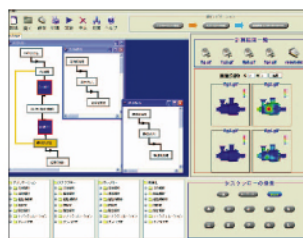


Fig 1: 解析プロセスを可視化できるタスクフローにより、試行錯誤から得られたノウハウの保存・再利用ができる。

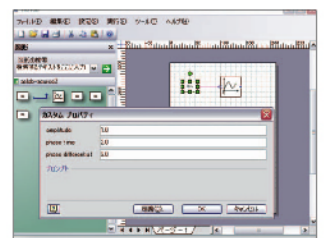


Fig 2: 制御系機能は、モデルエディタを持ち、シミュレーションを動的に制御できる。

アドバンスソフトウェアを主催!

イノベーションを支える先端ソフトウェアのご紹介

「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ソフトウェアの更なる改良、商用化を担当するアドバンスソフト(株)は、その活動を広く社会にご紹介するフェアを開催致します。

月日：2007年7月6日(金)
場所：東京丸の内 マイプラザ
会費：無料

平成19年度は「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトは最終年になりますが、アドバンスソフト(株)は今後もプロジェクトの成果の保守・改良・実用化を積極的に推進致します。

本フェアでは講演の他、懇親会では軽食・飲み物等もご用意し、開発ソフトウェアのデモ展示等もご覧頂きながらごゆっくりとご歓談いただけます。

是非ご参加下さい。

お申込みは、弊社ホームページの参加申込欄よりお申込み下さい。

<http://www.advancesoft.jp/event/entry20070706/>

革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発

第2回 SYMPOSIUM

シンポジウム



評論家・ジャーナリスト
田原 総一郎



(財)日本自動車研究所 所長
小林 敏雄



アドバンスソフト(株) 代表取締役社長
小池 秀輝

デモ展示

12:30~19:00 ソフトウェアパッケージのデモ展示

講演会

14:00~14:05 開会

14:05~14:15 来賓ご挨拶 加藤千幸 東京大学生産技術研究所 教授
計算科学技術連携研究センター長

14:15~15:15 田原総一郎 評論家・ジャーナリスト「時代をよむ」

15:15~15:30 休憩

15:30~16:15 小林敏雄 財団法人日本自動車研究所 所長
「数値的基礎ソフトウェア開発プロジェクトの意義とその成果」

16:15~16:45 小池秀輝 アドバンスソフト(株) 代表取締役社長
「アドバンスソフト(株)の現状と将来ビジョン」

懇親会

17:00~19:00 懇親会 軽食・飲料、ソフトウェアのデモ展示をご用意しております。
懇談会だけのご参加も歓迎いたします。

DAY1 7月12日(木)

10:00~10:20 挨拶

- ▶ 主催者
- ▶ 文部科学省
- ▶ プログラムオフィサー
- ▶ スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 共同委員長

10:20~11:10 日本のイノベーションを牽引する計算科学技術への期待

立花 隆 評論家

11:10~11:50 革新的な実用ソフトウェアの研究開発状況と今後の展開

11:50~12:20 国産・革新的ソフトウェアの商用化と普及への戦略

12:10~13:30 休憩 (デモ、パネル展示)

13:30~14:10 ものづくりの革新へ貢献するシミュレーション技術の現状と課題

笠 俊司 石川島播磨重工業株式会社 解析技術部 部長

14:10~14:50 大都市における地震火災被害軽減とシミュレーション技術の課題

関沢 愛 東京大学工学部都市工学科 客員教授
徳島県消防庁消防大学校 消防研究センター 火災調査部長

14:50~15:30 創業に貢献するシミュレーション技術

中馬 寛 徳島大学大学院ヘルスバイオサイエンス研究部 教授

15:30~15:45 コーヒーブレイク

15:45~17:30 イノベーションと計算科学技術

- 司会 小林 敏雄 財団法人日本自動車研究所 副理事長・研究所長
- 中馬 寛 徳島大学大学院ヘルスバイオサイエンス研究部 教授
- パネリスト 笠 俊司 石川島播磨重工業株式会社 解析技術部 部長
- 田口 康 理化学研究所 スーパーコンピュータ開発実施本部 プロジェクトディレクター
- 加藤 信介 東京大学生産技術研究所 教授

15:45~17:30 懇親会

DAY2 7月13日(金)

10:00~10:05 主催者挨拶

10:05~12:05 生命現象シミュレーション グループ

- ▶ 創薬・バイオ新基盤技術開発へ向けたタンパク質反応全電子シミュレーション
- ▶ タンパク質-化学物質相互作用のマルチスケールシミュレーション
- ▶ 器官・組織・細胞マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション
- ▶ 密度汎関数法によるタンパク質電子状態解析プログラム
- ▶ FMOの創薬研究への応用

12:05~13:00 休憩 (デモ、パネル展示)

13:00~14:00 ナノシミュレーション グループ

- ▶ 次世代ナノデバイス開発のためのマルチスケール機能シミュレーション
- ▶ 次世代ナノデバイス開発への応用 - 誘電材料探索 -

14:00~15:00 都市の安全・環境シミュレーション グループ

- ▶ 都市の安全・環境シミュレーション
- ▶ 都市の安全・環境シミュレーション適用事例

15:00~15:15 コーヒーブレイク

15:15~17:30 統合連成シミュレーション グループ

- ▶ 流体コードFrontFlow/Blue, Reの性能と産業応用事例
- ▶ 構造コードFrontSTRの性能と産業応用事例
- ▶ 磁場コードREVOCAP Magnetiの性能と産業応用事例
- ▶ 連成システムREVOCARの性能と実証計算
- ▶ 全体系最適化シミュレーション・プラットフォームの産業応用事例

17:30 閉会

編集後記

平成19年度はプロジェクトもいよいよ最終年度となりました。前半は6月の生研公開、ソフトの公開、7月12、13日のシンポジウムと行事が色々あります。多数の参加をお待ちします。後半は例年通りワークショップ等を新企画で開催予定です。案内をお待ち下さい。

【資料請求お問い合わせ先】

TEL:03-5452-6661 FAX:03-5452-6662

E-mail:office@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