

## 21世紀の科学技術を牽引する革新的シミュレーションソフトウェアを開発

文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発

「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

<< 地球シミュレータを駆使し、未解明の複雑現象が次々と明らかに！！ >>

東京大学生産技術研究所は6月初旬に、計算科学による21世紀の社会・産業への新しい貢献をめざした、革新的な機能を有するソフトウェア20本(表1)を一挙に公開します。これらのソフトウェアは文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「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(H17年度~19年度予定)の最新成果であり、特に、日本が誇る超高速計算機、地球シミュレータを駆使した世界初の大規模高精度解析を実現し、従来のソフトウェア・計算規模では不可能だった数々の未解明の現象が明らかにされました。

文部科学省による本プロジェクトは、ライフサイエンス、次世代エンジニアリング、都市の安全・環境を主な対象としており、将来の安心・安全な社会の構築や新しい産業の創生に直接貢献できる、革新的・先進的なソフトウェアの開発をめざしています。初年度に当たる平成17年度は、特に地球シミュレータを駆使し、これまで不可能だったタンパク質と医薬品候補物質の相互作用解析がわずか3.3時間で可能になり、新薬開発プロセスの飛躍的効率向上に貢献できる道を開いたこと、ナノデバイスの設計に必要な5,000原子レベルの計算が100時間(従来大型計算機では約10年)で可能になり、バイオ素子等次世代デバイス開発の夢を現実に近づけたこと、フォーミュラーカーに代表される高速車の安定走行を支配する空気流動の詳細が世界で初めて明らかにされ、安全・省エネ・低騒音等、人、社会、環境にやさしい未来車の設計に不可欠の情報を得たことなど、将来の社会・産業の発展に多大な貢献が期待できる多くの知見が見出されました。

「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、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を中核拠点とし、産学連携により、日本を代表する計算科学用ソフトウェア研究者総勢約120名が結集し研究開発に当たっています。本プロジェクトの成果はインターネットにより公開する一方、商用ライセンスを付与された企業(アドバンスソフト(株)等)が事業化することにより、一般への普及を継続的に図っていく仕組みになっています(図1)。また、図2に示すように、文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトのソフトウェアのダウンロード件数はわずか2年半あまりで25,000件を突破しており、このプロジェクトの成果に大きな注目と期待が集まっていることが分かります。今回の会見では、6月に公開する20本のソフトウェアのうち、代表的なものの5本について紹介いたします。

< 本件連絡先 >

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長・教授 加藤 千幸  
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事務局  
電話：03-5452-6661 ファックス：03-5452-6662  
メールアドレス：office@rss21.iis.u-tokyo.ac.jp

表1 「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  
平成18年6月公開ソフトウェア

グループ	サブテーマ	代表システム名	システムの特徴	公開ソフトウェア(H18)
			革新的/先進的機能	
生命現象	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	ProteinDF	<ul style="list-style-type: none"> <li>世界最大規模(1,000残基)のタンパク質全電子計算</li> <li>タンパク質解明に寄与する多機能 統合計算</li> </ul>	ProteinDF System 1.0
				ProteinDF Ver 1.0
				ProteinEditor Ver 1.0
				ProteinMD Ver 0.9
	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	BioStation	<ul style="list-style-type: none"> <li>タンパク質-化学物質(医薬品候補物質)相互作用 統合解析・可視化</li> <li>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</li> </ul>	ABINIT-MP ver. 3.0
				BioStation Dock ver. 1.1
				BioStation Viewer ver. 6.00
				BioStation Launcher ver. 1.3
	KiBank			
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	M-SphyR	<ul style="list-style-type: none"> <li>モデル変形、パラメータ算出機能を有する医用画像処理</li> <li>循環器系の、病変メカニズム解明のための統合解析</li> </ul>	Medical Image Ver.1.0	
マルチスケール連成	ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション	CHASE-3PT	<ul style="list-style-type: none"> <li>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</li> <li>地球シミュレータ環境下超大規模ナノ特性解析</li> </ul>	PHASE ver. 5.00
				UVSOR ver. 2.00
				CHASE-3PT ver. 2.00
	マルチフィジックス流体シミュレーション	Front Flow	<ul style="list-style-type: none"> <li>乱流起因の多様な複合現象(燃焼、混相、騒音等)の解析</li> <li>LES(Large Eddy Simulation)による大規模・高精度・高速解析</li> </ul>	FrontFlow/blue Ver.4.0
				FrontFlow/red Ver.2.8a
	ハイエンド計算ミドルウェア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	Front STR HEC-MW	<ul style="list-style-type: none"> <li>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</li> <li>FEM解析、ソルバ、可視化等の並列解析用ライブラリ群</li> </ul>	hecmw-PC-Cluster ver.1.00
				FrontSTR ver.1.00
				FrontSTR for WIN ver.1.00
	都市の安全・環境	都市の安全・環境シミュレーション	EVE SAYFA	<ul style="list-style-type: none"> <li>避難モデル統合解析</li> <li>消火、移流拡散、延焼モデルを中心とする大規模統合解析</li> </ul>
共通基盤	全体系最適化シミュレーション・プラットフォーム	PSE Workbench	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	PSE Workbench 4.0

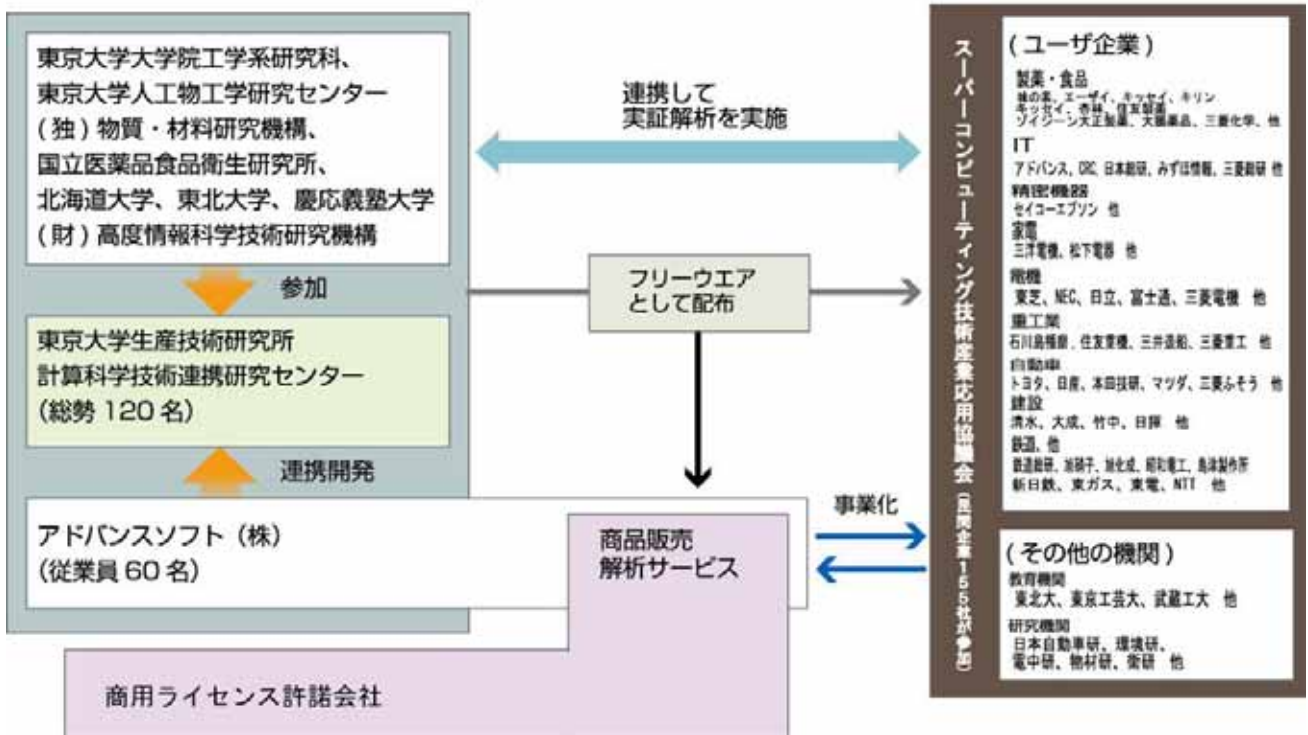


図1 革新プロジェクトの実施体制

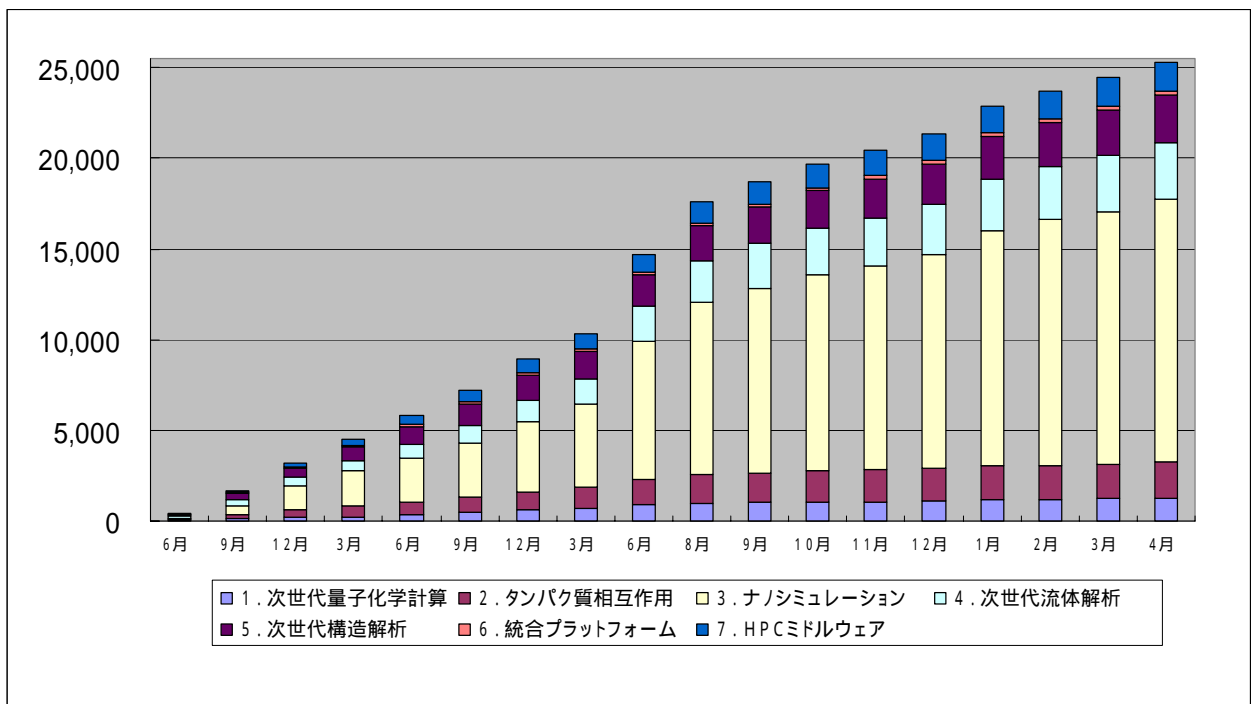


図2 「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト公開ソフトウェアのダウンロード件数

複合現象対応流体シミュレーション「FrontFlow」  
燃焼、化学反応、騒音等の複雑な現象を高精度に予測  
文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発  
「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

### ソフトウェアの特徴

工業製品の性能や安全性を支配する大きな要因の一つである「流体」の特性を解明するための、世界でも例を見ない大規模・高速・多機能ソフトウェアの開発に成功しました。すでに、ターボ機械内部流れ解析、反応流れ解析、フォーミュラーカー走行時の空気流動等、産業界を支える中核的製品分野で、従来不明確だった流れ現象が次々と明らかにされ、その実用性・有用性が実証されました。

### 適用事例

#### 1. ファン騒音解析(図1):

計算による騒音の高精度予測は従来不可能であった翼面ごく近傍に発達する境界層に現れる縦渦の構造が世界で初めて確認でき、モノを作る前の騒音予測設計にメドをつけました。

#### 2. ロケットエンジンポンプ流れ解析(図2):

ロケットエンジンポンプ内の装置における蒸気(キャビテーション)の発生が予測でき、今後のロケットエンジンポンプの安全設計に不可欠の情報が得られました。

#### 3. ガスタービン燃焼器乱流燃焼場解析(図3):

ガスタービン燃焼器の乱流燃焼場の解析により燃焼効率向上設計への多大な貢献が期待できる見通しを得ました。

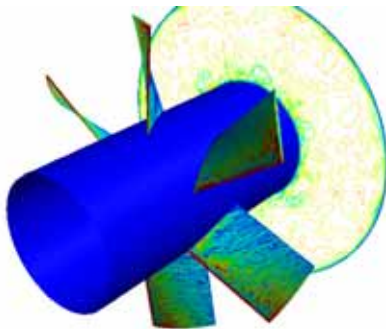


図1 軸流ファン動翼周りの解析

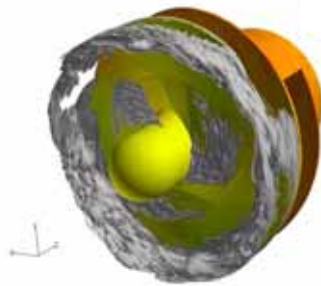


図2 ロケットエンジン内部流れ解析

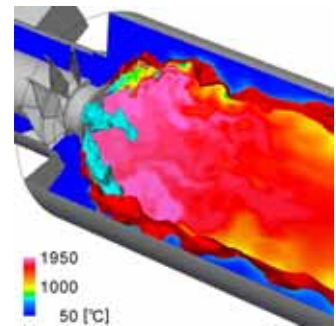


図3 燃焼器内部流れ解析

#### 4. フォーミュラーカー空力予測(図4)

フォーミュラーカーに代表される高速車両の実走行時現象予測が高精度で可能となり、今までの風洞実験に代わる、革新的なものづくりプロセスの実現に貢献できます。

### 社会への波及効果

機械、宇宙、車両、電機等の基幹産業分野の設計現場において、試験レスの現象解明が可能になります。これにより、製品の複数のパラメータ(例えば、効率、信頼性、騒音、振動等)を設計段階で統合的に扱うことが可能となり、安心・安全な製品開発・生産に多大な貢献が期待されます。

## 今後の展開

ファン騒音の定量予測、車両実走行時(急ハンドル、コーナリング等)の空力特性予測、ターボ機械内部の流体・構造連成解析\*等の実用問題で FrontFlow の有効性を実証していくとともに、熱・構造・磁場等との連成解析機能を強化し、適用範囲を拡張していきます。

(注)連成解析:実問題で生じる複数の物理現象を同時に解析する手法

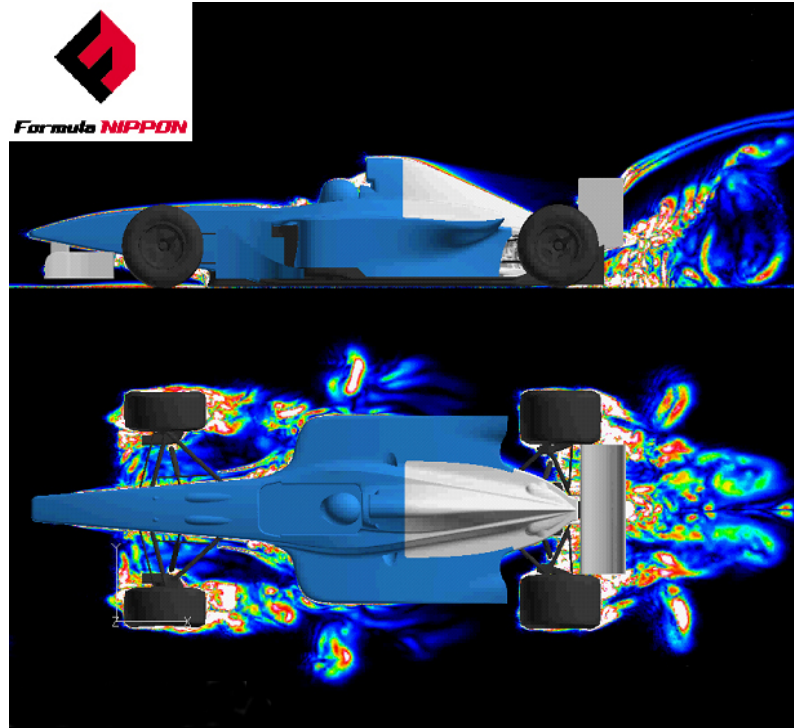


図4 . フォーミュラカー (LOLA B03/51) 周りの瞬時空気流れ構造

## 添付資料 - 2

### タンパク質・医薬品候補化合物相互作用シミュレーション「ABINIT-MP」

- 地球シミュレータ利用により医薬品有力候補化合物の迅速な設計が可能に -

文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発

「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

#### ソフトウェアの特徴

地球シミュレータ用に最適化した ABINIT-MP(非経験的フラグメント分子軌道(FMO)法プログラム)を利用し、地球シミュレータを駆使したタンパク質の電子状態計算の実用化を行いました。その結果、ポリグリシン 160 残基の FMO-HF/STO-3G 計算において、1.3 TFlops の高速性能を実現しました。

#### ビタミンD受容体タンパク質への適用

ビタミン D 受容体タンパク質(図 1)の FMO-HF/STO-3G 計算を 64 ノードで行ったところ、計算時間は 3.3 時間でした。これは、タンパク質の電子状態計算としては世界最高速で、医薬品候補化合物の設計実務に十分利用できるレベルになりました。

これまで、タンパク質の解析は主に PC クラスタを用いて行われてきましたが、地球シミュレータを用いることで、計算時間を大幅に短縮でき((例)1 週間の計算は、1 時間で可能)、医薬品の作用メカニズムの解析や、新規医薬品の設計の効率化に大きく貢献することが期待されます。



図 1 ビタミン D 受容体タンパク質と医薬品候補化合物の複合体構造

#### 社会への波及効果

社会的に広く開発が望まれている、抗糖尿病薬を始め肥満など生活習慣病治療薬のターゲット受容体として注目されているペルオキシゾーム増殖応答性受容体- $\gamma$  (PPAR- $\gamma$ )について(立教大学と共同)、更に抗アルツハイマー型認知症薬のターゲットとして重要なアセチルコリンエステラーゼについて(医薬品メーカーと共同)も解析を進めており、その成果の社会的インパクトはきわめて大きいものがあります。

#### 今後の展開

将来は医薬品候補化合物の ADMET(吸収・分布・代謝・排泄・毒性)の予測に対しても、本ソフトウェアを適用することにより、非臨床試験プロセスでの著しい効率向上への貢献をめざします。

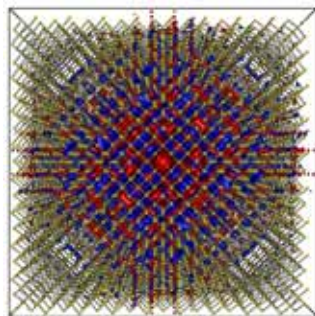
**ナノ現象統合シミュレーション「PHASE」**  
**産業応用への道を拓く 5,000 原子規模の解析を実現**  
**文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発**  
**「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト**

**ソフトウェアの特徴**

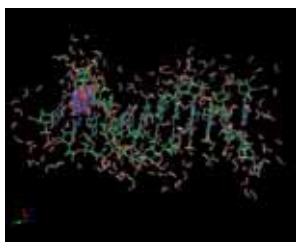
大規模・高精度な第一原理計算\*を可能とするソフトウェア PHASE を開発しました。PHASE は、高い並列性能とベクトル性能を有するプログラムであり、超高速計算機である地球シミュレータにおいて 13.6 TFlops の高速性能を実現しました。

**不純物混入半導体への適用**

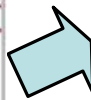
次世代半導体ナノデバイス開発のためには、デバイスを構成する様々な薄膜や表面・界面の構造、添加する不純物の状態等を原子レベルで制御することが不可欠であり、その解析には大規模な第一原理計算が必要となります。しかし、従来、第一原理計算は大型計算機を用いても 500 原子程度が限界でした。今回、シリコン基板中の n 型不純物に関して、地球シミュレータを利用した 5,832 原子の計算に世界で初めて成功しました。この結果は、第一原理解析のチャンピオンデータです。



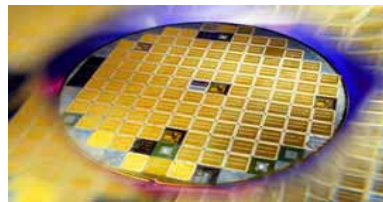
Si 結晶中の As 不純物



DNA 構造と電子状態



マイクロメトリックシミュレーションへ  
ナノ材料探索 次世代デバイス開発のための



次世代 LSI 設計



燃料電池設計

**社会への波及効果**

実験に頼らずに次世代ナノデバイスの物性を解明するために必要な 5,000 原子規模の第一原理計算が約 100 時間(従来大型計算機では約 10 年)で可能になり、次世代半導体ナノデバイス開発を現実に近づけたものであり、産業界への多大な貢献が期待されます。

**今後の展開**

PHASE は無機材料だけでなく、タンパク質のような生体高分子にも適用可能です。バイオ素子まで含めた次世代デバイスへの適用を視野に入れた高度化と高性能化を押し進め、バイオ・ナノテクノロジー分野の進展の牽引を行います。

(注) 第一原理計算: 原子核と電子の数だけを与えて物質構造や電子状態を求める計算手法

## 循環器系総合シミュレーション「M-SphyR Circulation」

- 脳血管障害・心疾患等の治療・予防の決め手となる血管病変メカニズムの解明へ -

文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発

「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

### システム開発の背景

心臓疾患、脳血管疾患は日本人の死因第2、3位を占めており、血管病変の発症・進行メカニズム解明は重要な課題です。器官・組織・細胞レベルに着目した統合解析システムを構築しています。

### ソフトウェアの特徴機能(開発目標)

M-SphyR Circulation は、循環器系シミュレーションに必要な複数の要素を有機的に統合したシステムです。(図1)

(1) Medical Image: MRI や X 線 CT などの断層画像を基に、血管の3次元表面形状を構築しました。

(2) FrontFlow/Blood: 医用画像から得られた大規模な3次元血管モデルを用いた大規模血流解析を実行します。末梢血管網の1次元解析や物質輸送解析との接続が可能です。

(3) FrontFlow/FSI: 血流-血管壁連成解析を行いました。血管壁材料モデルに超弾性体を使用しています。

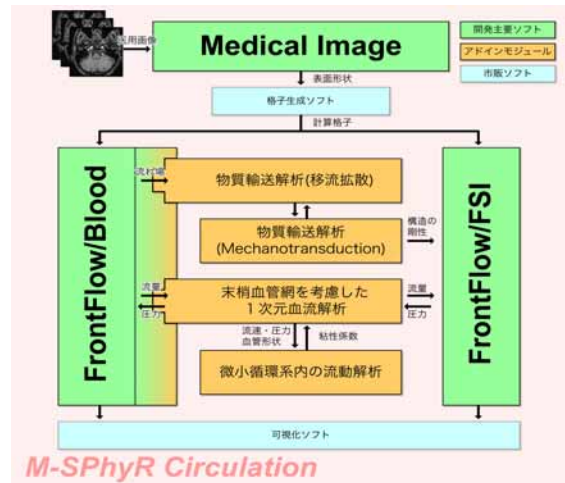
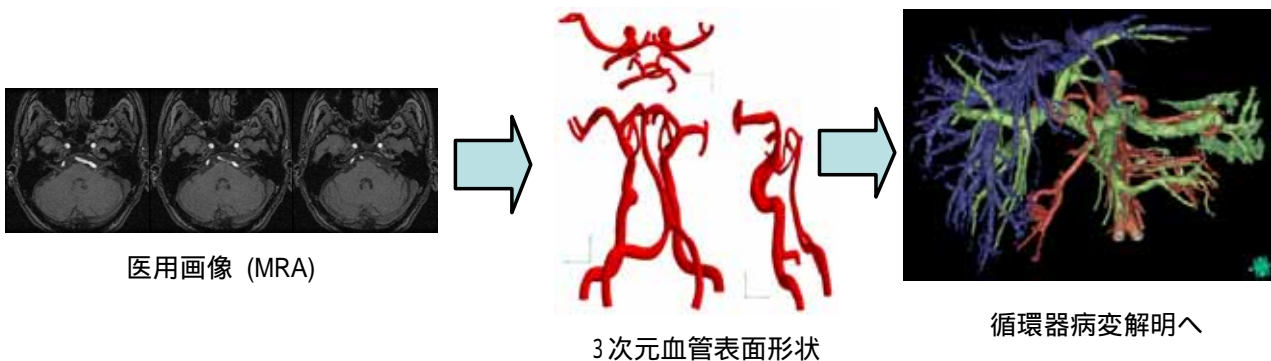


図1 M-SphyR Circulation システム概要

### 将来展開

今後は医療現場において病変解明への利用が期待されます。



医用画像 (MRA)

3次元血管表面形状

循環器病変解明へ



都市環境・安全シミュレーション「EVE SAYFA」  
- 都市活動空間の最適安全設計・予知・評価を統合的に実現へ -  
文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発  
「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

システム開発の背景

都市における活動空間の防災設備や避難誘導設備の挙動、あるいは火災による建物性状の変化、さらに既存の安全性能評価システムや最適化システムとを連成した統合シミュレーションシステムの開発により、建物の防災設計の信頼性、頑強性を飛躍的に向上させます。

ソフトウェアの特徴機能(開発目標)

本システムは大きく次の4つの主要機能によって構成されます。

(1) 仮想ビルディングデータベースシステム

本システムは地下街や建物の複雑なデータの入力を支援するものであり、効率的な環境・安全設計を行うことができます。

(2) 健康影響危険物質の移流拡散ソフトウェア

高精度な3次元解析モデルと1次元ネットワークモデルを連成させることによって計算効率を上げた健康影響危険物質の流動拡散ソフトウェアです。

(3) 煙の流動拡散および延焼ソフトウェア

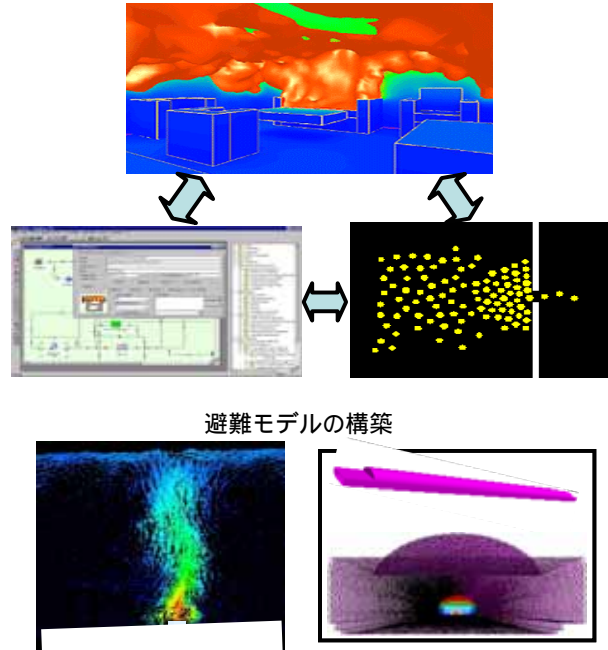
空気流通空間における火災時の煙流動拡散ソフトウェアのです。

(4) 危険時の避難誘導最適設計システム

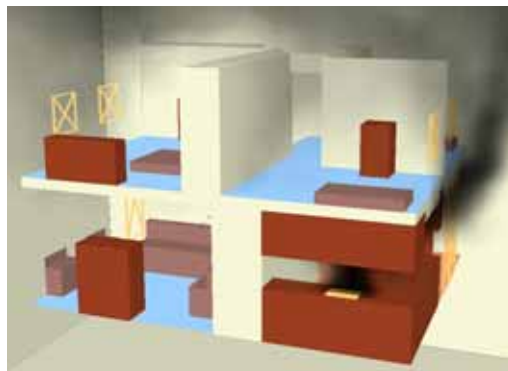
火災時の放射が人の避難行動に与える影響を考慮した移動モデルを研究開発し、最適手法と連成して最適な避難経路を決定します。

将来展開

速やかに避難経路を決定し、安全な場所に誘導できるようになります。



火災現象の詳細解析



屋内煙拡散状況



避難誘導経路策定