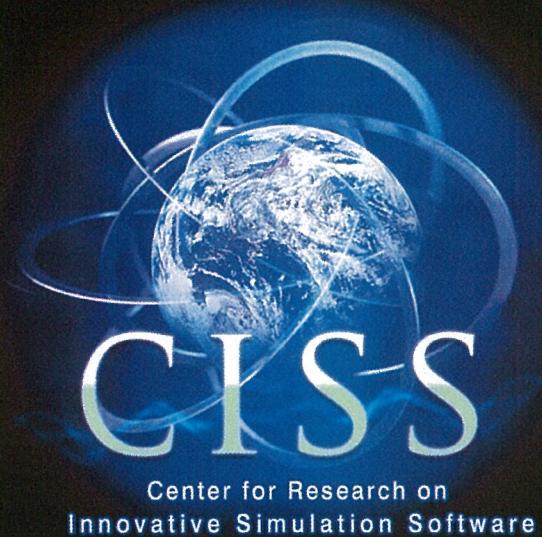


東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター神戸拠点の紹介



革新的シミュレーション研究センター 神戸拠点



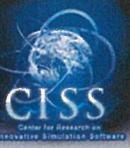
目 標

京で利用可能かつ、ものづくり分野全体をカバーする先端的シミュレーションソフトウェアのラインナップを産業界専用スパコン「FOCUSスパコン」に整備し、産業界への共用を促進する。

特 色

- **FOCUSと連携したHPC利用者層の需要開拓事業**
 - ✓ 訪問ヒアリング等による需要開拓と成功事例の発信
 - ✓ 潜在需要の開拓により、小規模シミュレーションに取り組む企業群から実証例題を取得
- **先端的シミュレーションソフトウェアの実証研究課題公募事業**
 - ✓ 実証例題を超並列計算対応の国プロ開発ソフトウェア向けに最適化
- **先端的シミュレーションソフトウェア利活用人材育成事業**
 - ✓ ソフトウェア普及事業者との連携によるソフトウェアの利用支援サービスを提供
 - ✓ ソフトウェア普及事業者によるソフトウェア利用講習会を定期的に開催
- **HPCユーザ会によるソフトウェアの普及活動**
 - ✓ 普及に不可欠な機能情報等を開発元へ報告
 - ✓ 成果の公開：作業効率化や経費削減等の効果を定量的に説明

革新的シミュレーション研究センター(平成20年1月1日設立)



目標

世界をリードする先端的シミュレーション・ソフトウェアの研究開発、研究開発成果の社会への普及、並びにシミュレーション・ソフトウェアを開発・利活用する人材育成のための教育・研究基盤の強化

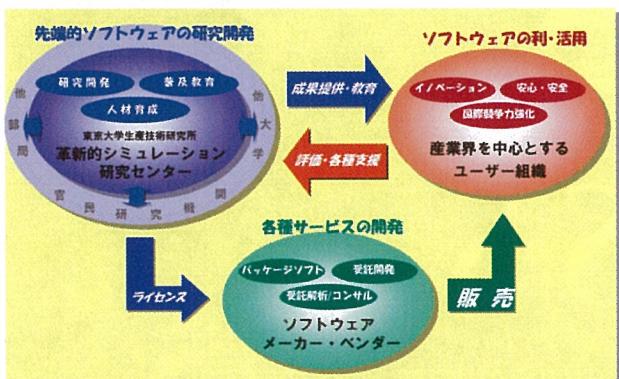
特色

京連コンピュータ「京」を中心とする世界最高速のスーパーコンピュータからP-Cラスター・レベルまでの広範な計算機環境をカバーする先端的で実用的なシミュレーション・ソフトウェアの研究開発ならびに成果の普及活動を総合的に担うユニークな活動拠点であり、本分野において我が国が世界をリードするために重要な役割を果たす。

主要研究テーマ

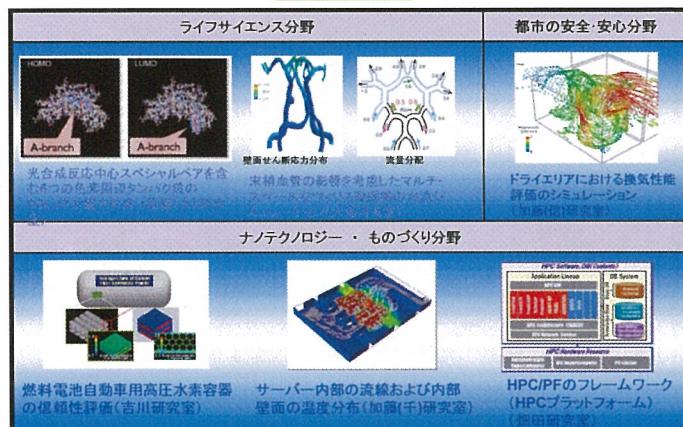
- ①量子化学計算に基づく大規模たんぱく質の反応解析の実現
- ②人体内の血流や血管壁との相互作用解析に基づく、動脈瘤や動脈硬化症などの発症、進行の予測
- ③第一原理計算によるナノデバイスの特性予測
- ④工学的ものづくり分野においてイノベーション創出基盤となり得る、統合連成解析ソフトウェアの開発
- ⑤都市の防災、安全を実現するための計算科学に立脚した、都市安全シミュレーション・ソフトウェアの研究開発

共同利用・共同研究体制



平成23年9月6日

研究内容



3

推進・参加プロジェクト



研究開発分野

ライフサイエンス

ナノテクノロジー

ものづくり

都市安全

■ HPCI戦略プログラム(2009~2015) “分野4:次世代ものづくり”

● 概要

革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラを駆使することにより、“次世代ものづくり”分野の飛躍的発展に寄与する。

代表機関

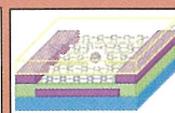
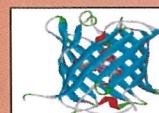
■ イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト(2008~2012)

● 概要

バイオ、ナノを含む広義のものづくり分野を対象とし、我が国の産業イノベーションに資する世界最先端・実用的ソフトウェアの研究開発・普及・促進・人材育成。

● 参加機関

東京大学生産技術研究所、同大学院工学研究科、同人工物工学研究センター、(独)物質材料研究機構、国立医薬品食品衛生研究所、北海道大学、東北大学、慶應義塾大学、九州大学、電気通信大学、立教大学、(財)高度情報科学技術研究機構、アドバンスソフト(株)、他



■ 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(2005~2007)

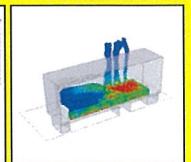
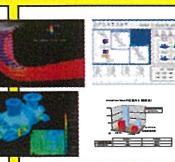
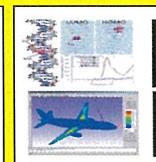
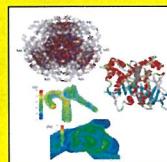
● 概要

21世紀の科学技術の飛躍的進展のカギとなる、世界をリードする実用的ソフトウェアの研究開発・普及・人材育成

● 参加機関

東京大学生産技術研究所、同大学院工学研究科、同人工物工学研究センター、(独)物質材料研究機構、国立医薬品食品衛生研究所、北海道大学、東北大学、慶應義塾大学、九州大学、電気通信大学、立教大学、(財)高度情報科学技術研究機構、アドバンスソフト(株)、他

中核拠点



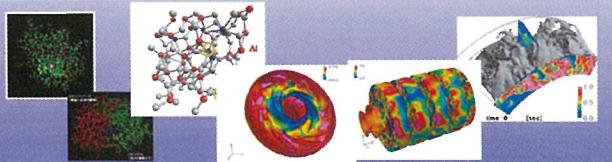
■ 戦略的基盤ソフトウェアの開発(2002~2005)

● 概要

世界最高水準の実用的な計算科学シミュレーション・ソフトウェアの開発・普及

● 参加機関

東京大学生産技術研究所、同大学院工学研究科、同人工物工学研究センター、(独)物質材料研究機構、国立医薬品食品衛生研究所、慶應義塾大学、九州大学、電気通信大学、立教大学、(財)高度情報科学技術研究機構、アドバンスソフト(株)、他



分子構造、反応条件、時間変化等によるシミュレーション結果

3

公開ソフトウェアの一覧



[I] 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

テーマ名	ソフトウェア名	特徴(独創的・優位機能)
大規模アセンブリ構造対応 熱流体解析ソルバー	FrontFlow/blue	◎1000億規模の大規模解析 ◎乱流の準直接計算による乱流現象の高精度予測
大規模アセンブリ構造対応 構造解析ソルバー	FrontISTR HEC-MW	◎階層データ構造による大規模連成計算 ◎マルチグリッド型反復解法による高速化 ◎反復法ソルバー対応MPC機能 ◎非線形、接触解析機能
複合材料強度信頼性評価 シミュレーター	FrontCOMP	◎炭素繊維束の詳細モデル ◎樹脂硬化時の残留ひずみ評価 ◎熱/動荷重負荷による損傷発展のミクロスケール評価
大規模アセンブリ構造対応 マルチ力学シミュレーター	REVOCAP	◎Refinerにも対応したマルチ力学カップラ ◎Refinerに渡す前段階(1億DOF)程度のプリ処理が行えるプリポスト ◎大規模並列計算のためのRefiner

[II] 量子バイオシミュレーションシステムの研究開発

テーマ名	ソフトウェア名	特徴(独創的・優位機能)
バイオ・ナノ分子特性 シミュレーター	ProteinDF	◎タンパク質の物理量解析 ◎タンパク質以外の大規模分子シミュレーション
バイオ・ナノ分子特性 シミュレーター	ABINIT-MP BioStation Viewer	◎FMO法に基づいた高精度な相互作用解析 ◎数千プロセッサを超えるベクトルおよびスカラー並列計算機を利用した超大規模計算が可能

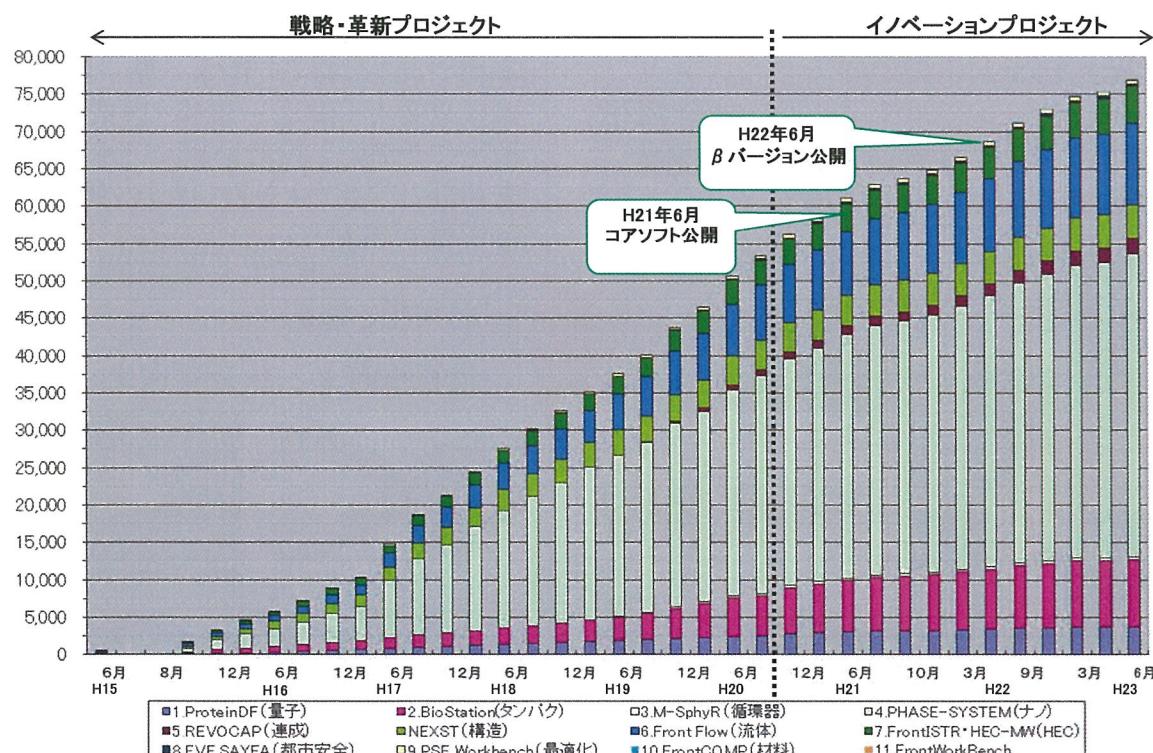
[III] ナノデバイスシミュレーションシステムの研究開発

テーマ名	ソフトウェア名	特徴(独創的・優位機能)
量子機能解析ソルバー・ ナノデバイスシミュレーター	PHASE-SYSTEM	◎高精度な電子相関解析高度な擬ポテンシャルへの対応 ワニア関数による高機能解析 ◎時間依存DFTによる高精度な電子ダイナミクス解析 ◎拘束条件付きMD法、熱力学積分法による有限温度解析

平成23年9月6日

5

公開ソフトウェアのダウンロード件数: 77,074件



平成23年9月6日

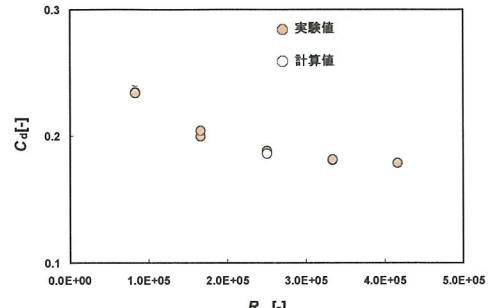
6

究極の低空気抵抗車の実現



乱流の直接数値解析による 乱流渦の挙動解明と制御 (トヨタ自動車(株)との共同開発)

画像印刷不可



抵抗係数CD予測精度の検証($\pm 1\%$)

画像印刷不可

車両周りの全乱流渦の数値解析

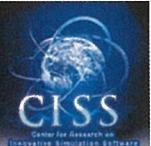
数億点規模のCFDはもはや設計業務に適用可能！(1～2ラックのPCクラスタで計算可能)

平成23年9月6日

空気抵抗の決定に支配的な渦の同定
→ 渦運動の制御による抵抗低減

7

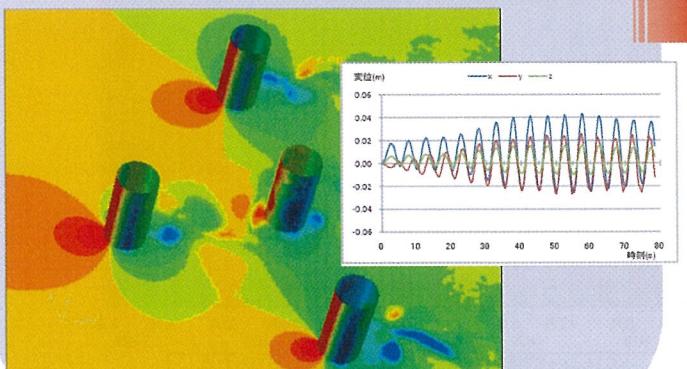
大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーター 「REVOCAP」



先進的機能実証計算例

(FrontFlow/blue+REVOCAP_Coupler+FrontISTR)+REVOCAP_Refinerの結合解析
乱流場のカスケード配列円柱群の流体構造連成振動シミュレーション

特徴：1000億流体メッシュと100億構造メッシュによる超並列連成解析を実現する



可能となる解析対象

実機で起こり得る「流体－熱－構造」連成現象や「磁場－構造」連成現象を精密に把握し、設計段階で正確に考慮可能となる ⇒ ものづくりの発想の自由度が広がり、高性能と高信頼性と高い経済性を両立した革新的なものづくりが実現される

信頼性向上

効率向上・CO₂低減



宇宙・輸送分野／ロケットエンジン等の熱－構造－流体連成機器の丸ごとマルチ力学解析

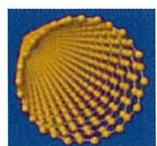
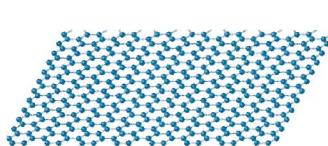
エネルギー分野／高効率発電用ガスタービン等高速回転機器の熱－流体－構造連成解析

平成23年9月6日

8

炭素系ナノ材料

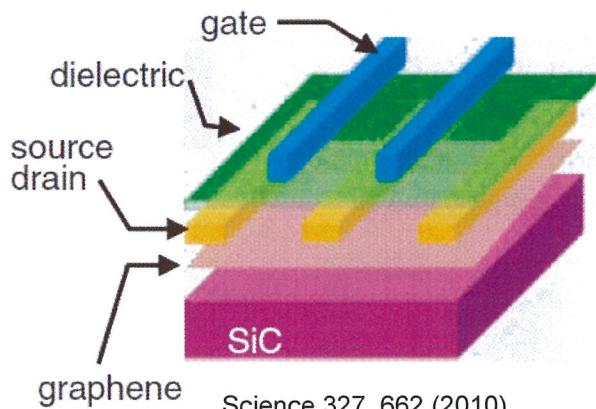
- ・CNT、グラフェン
- ・優れた電気特性(移動度: Siの1000倍など)
- ・CMOSのチャネル、配線への応用の可能性
- ・低電圧動作CMOS-FET実現のキー材料



グラフェン

CNT

100-GHz グラフェン・トランジスタ



高品質なカーボンナノ材料
の作製技術が重要！

次世代ナノデバイス：炭素系ナノ材料のシミュレーション

グラフェンの作製方法

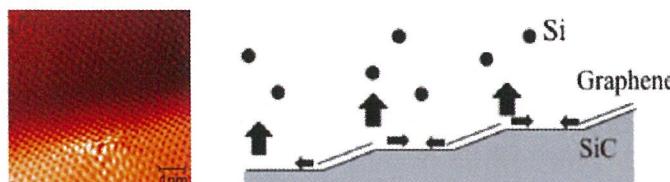
剥離法

- ・HOPG(高配向熱分解黒鉛)からの剥離
- ・熱成長法(エピタキシャル成長)
 - ・CVD成長: 金属触媒上でのCVD成長
 - ・SiC熱脱離: Si脱離による過剰C原子からの成長

SiC熱脱離

- ・簡便な作製が可能(加熱プロセスのみ)
- ・ウェハレベルの作製が可能
- ・膜厚均一性の制御が困難などの問題点
- ・成長機構の原子レベルでの知見が必要

SiC熱脱離(1400 °C)

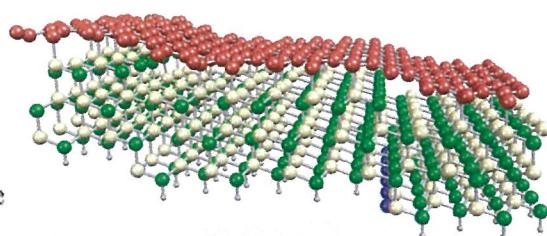


グラフェン成長機構の解析

- ・古典MD法: 大規模計算は可能だが、計算精度(ボンド形成等)に問題
- ・第一原理MD法: 高精度だが、大規模解析が困難

高精度で大規模な
第一原理MD計算を
可能に

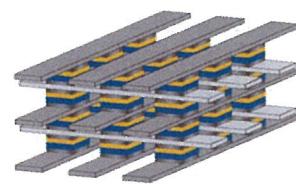
ステップSiC(0001)表面上の グラフェンの第一原理MD計算



グラフェン成長機構の
解明と最適化

酸化物は重要なデバイス材料

- ・ナノエレクトロニクス分野：トランジスター材料、メモリ材料、、
(HfO_2 , ZnO_2 , TiO_2 , NiO , ,)
- ・環境・エネルギー分野：電池材料、触媒材料、、
(TiO_2 , WO_3 , LiCoO_2 , LiFePO_4 , CeO_2 , ,)



抵抗メモリ(ReRAM)
(TiO_2/Pt 界面等)

高効率化・高機能化のイノベーション実現のために、酸化物、及びその表面・界面の現象の理解が必要

- ・界面構造、分子吸着、不純物
- ・界面での電子励起、電子移動、イオン拡散、化学反応



太陽電池

PHASEによる酸化物の解析(環境エネルギー分野)

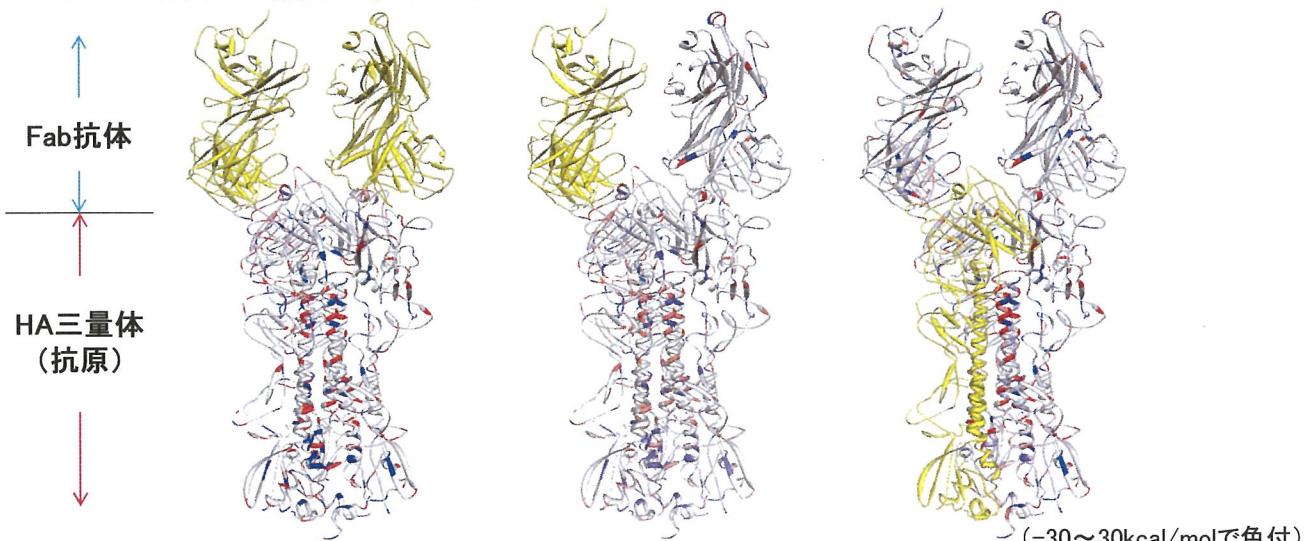
- ・界面反応： TiO_2 /水界面での水分解(光触媒)
- ・光学特性：色素吸着 TiO_2 表面での光吸收(太陽電池)



平成23年9月6日

11

FMO法による創薬解析ソフト：BioStation



左図：赤色のアミノ酸残基 ⇒抗体と引力的な相互作用
青色のアミノ酸残基 ⇒抗体と反発的な相互作用

赤色のアミノ酸残基が突然変異を起こせば抗体圧から逃れることができる
⇒ウイルス変異の予測、ワクチン開発へ

中・右図：

単量体間の相互作用解析 ⇒三量体としての機能の理解に役立つ

平成23年9月6日

12

新型インフルエンザの感染メカニズムとシアル酸認識

Fukuzawa, Omagari, Nakajima, Nobusawa and Tanaka, Protein & Peptide Lett., 18, 530 (2011).



3種類のH1N1ウイルスについて、HAと α 2-6糖鎖との結合性を解析

HA1 1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	11 DTLICIGYHANNSTDVTLEKNTVTHSVNLLEDOSHNGKLCLRGIAPLQLGKCNIAGW DTLCIGYHANNSTDVTLEKNTVTHSVNLLEDOSHNGKLCLRGIAPLQLGKCNIAGW DTLCIGYHANNSTDVTLEKNTVTHSVNLLEDOSHNGKLCLRGIAPLQLGKCNIAGW	69 *****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:
1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	124 LLGNPECDCPILLPVRWSYI VETPNSENGICYPQDFIDYEELREQLSSVSSFERFEIFPKE LLGNPECDCILLTVSSWSYI VETNSNDGTCYPQDFIDYEELREQLSSVSSFERFEIFPKT ILGNPECESLSTASSWSYI VETPSSDNGTCYPQDFIDYEELREQLSSVSSFERFEIFPKT	*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:
1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	183 SSWPNHHTNTN-GVTAACSHEGKSSYRNLILTEKEGSYPLKNNSYNNKGKEVLVLWGIIH SSWPNHHTTRGVTAACPYAGASSFYRNLLWLVKGGNSYPKLSKSYYNNKGKEVLVLWGIIH SSWPNHDSNKVGTAACPHAGAKSFYKNLTLWVKGGNSYPKLSKSYYNDKGKEVLVLWGIIH	*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:
1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	243 HPPNSKEQNLYQNEAVSAYVVTNSYNNRRFTPEIAERPVVRDAGRMNYYWTLLPKGDITI HPPTSTDQQLSYNADAYVSVGSSKYDRRTPEIAARPVVRGQAGRMMNYYWTLLPEGDITI HPSTSADQQLSYNADTYVFVGSSRYSKKPKPEIAIRPKVVRDQGRMMNYYWTLLVEPGDKI	*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:
1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	302 IFEANGNLAPMYAFALLRRGFGSGI IITNSMASHECNTKCOTPLGAISNSLPPYQNIHPVTI TFAETGNLVPARYAFLANLRGSSGI IITSDAVPHDCTOKTCOTPHGAINSSLPFQNIPVTI TFAETGNLVPARYAFLAMERBAGSGI IISDTPVHBCNTTCOTPDKAINTSLPFQNIPVTI	*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:*****:
1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	361 GECPKYVRSAKLRLMVTGLRNIPAR GECPKYVKSSTKLRMATTGLRNIPAR GCKPKYVKSSTKLRLATGLRNIPAR	*:*****:*****:*****:*****: ·保存残基 ·類似性の強い残基 ·類似性の弱い残基
HA2 1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	60 GLFGAIAGFIEGGWTGMIDGWYGYHHONEQGSGYAADQKSTQNAINGITNKVNSVIEKMN GLFGAIAGFIEGGWTGLIDGWYGYHHONEQGSGYAADQKSTQNAIDGITNKVNSVIEKMN GLFGAIAGFIEGGWTGMIDGWYGYHHONEQGSGYAADLKSTONAIIDEITNKVNSVIEKMN	*****:*****:*****:*****:*****:*****:
1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	120 IQFTAVGKEFNKLERMENLNKVKDDGFLDWTYNAELLVLLNERLTDHFDSNVKNLYE IQFTAVGKEFNKLERMENLNKVKDDGFLDWTYNAELLVLLNERLTDHFDSNVKNLYE IQFTAVGKEFNHLEKREINLNKVKDDGFLDWTYNAELLVLLNERLTDHFDSNVKNLYE	*****:*****:*****:*****:*****:*****:
1934human 1930swine 2009/H1N1pdm	186 KVSQLKNNAKEI GNGCFEFYHKCDNECMESVRNGTYDYP KARSOLRNNAKEI GNGCFEFYHKCDACMECSVRNGTYDYP KVSQLKNNAKEI GNGCFEFYHKCDNTCMESVKNGTYDYP	*:*****:*****:*****:*****:*****:

平成23年9月6日

13

新型ヒトウイルス(2009/H1N1pdm):

A/California/04/2009

ブタウイルス(1930swine):

A/swine/Iowa/1930

旧型ヒトウイルス(1934human):

A/Puerto Rico/8/1934

α -2-6糖鎖:

Sia1-Gal2-GlcNAc3-Gal4-GlcNAc5 (5单糖)

Sia1-Gal2-GlcNAc3 (3单糖)

新型インフルエンザ2009H1N1/pdmのFMO計算



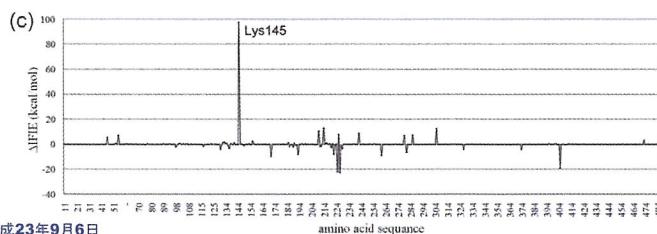
➤ HAと α 2-6糖鎖との結合エネルギー [FMO-MP2/6-31G*]

	1930-swine	2009/H1N1pdm	1934-human
ΔE	-234.4 ^a	-284.2 ^a	-154.7 ^b
IFIE	-263.1	-328.7	-204.8

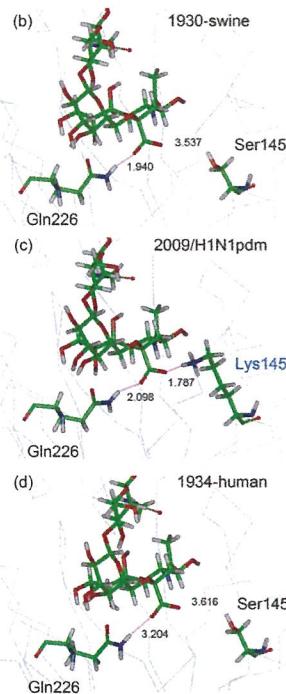
2009/H1N1pdmの結合が最も強い

➤ レセプターとHA各残基のIFIE

1930-swine residue	IFIE	2009/H1N1pdm residue	IFIE	Δ IFIE
Ser145	-2.08	Lys145	-99.46	97.4
Thr214	0.16	Lys214	-12.77	12.9
Glu305	6.20	Lys305	-6.39	12.6
Asp210	10.59	Ser210	0.05	10.5
Lys405	-9.66	Glu405	9.14	-18.8
Gly225	4.94	Asp225	26.76	-21.8
Ala227	-1.97	Glu227	20.48	-22.4

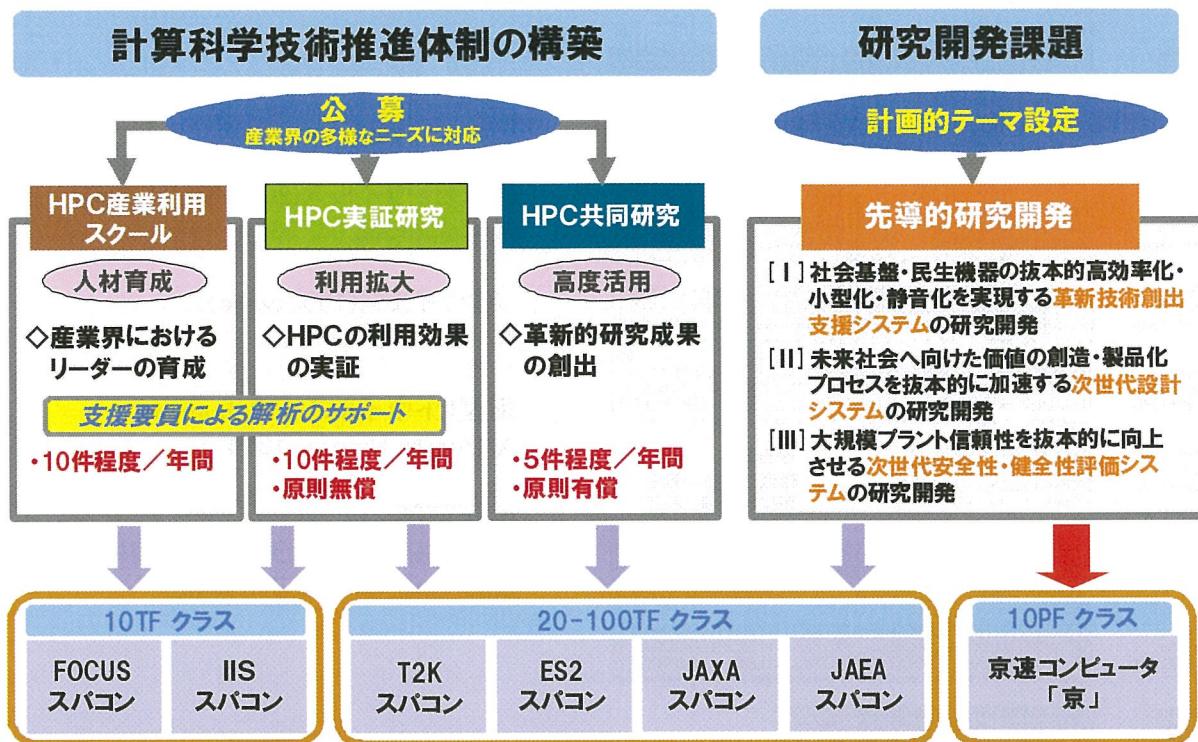


平成23年9月6日



Ser145Lys変異によって強い
水素結合/イオン対相互作用を得る

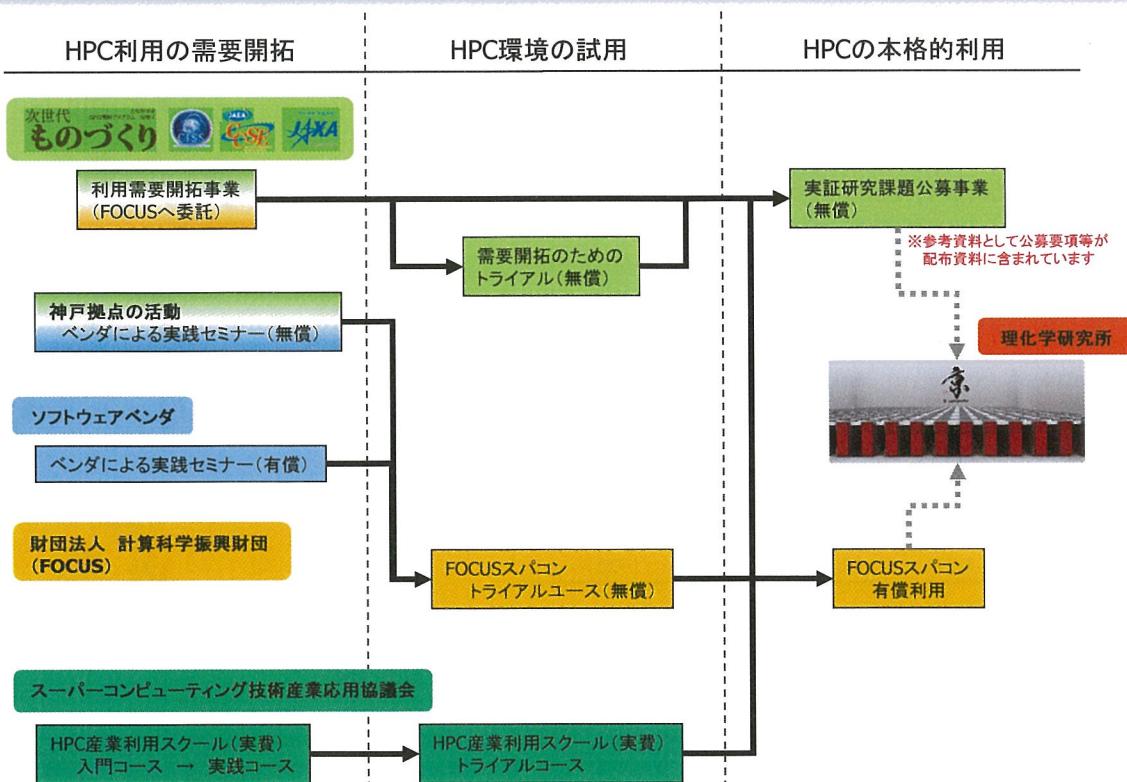
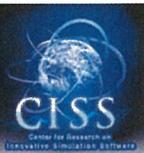
14



平成23年9月6日

15

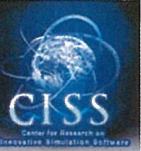
試用制度を活用した利用者層の拡大



平成23年9月6日

16

■ 需要開拓トライアル期間中のソフトウェアベンダのサポート(予定)



- 基本はメールによる質疑応答
- 本来のサポートは有償(5千円／回程度)だが、事業からのサポート等でトライアル利用企業は実質無償

- ✓ FOCUSスパコンにおける計算実行方法
- ✓ ソフトウェアの入力データの設定方法
- ✓ ソフトウェアの入力データ・出力データの内容説明
- ✓ ソフトウェアが提供するデータインターフェース(コンバータ)に関する説明
- ✓ ソフトウェアに実装されている機能・モデルの内容説明

- 計算・解析コンサルティングやミーティングなどは別途有償で対応

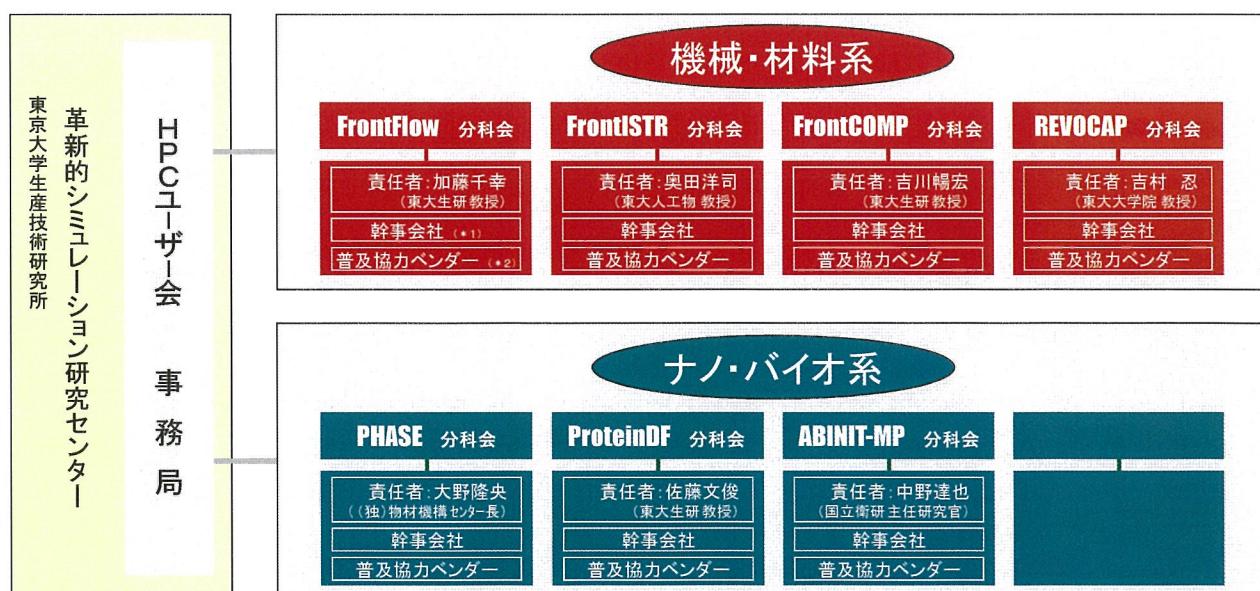
平成23年9月6日

17

■ HPCユーザ会によるソフトウェアの普及(計画中)



HPCユーザ会を組織し、継続した自立的開発・普及体制の構築を目指す。



(*1) 幹事会社:

開発元の支援により先導的課題を実施し、ユーザー会で紹介。ユーザー会を牽引。

(*2) 普及協力ベンダー:

開発元に協力して会員のコンサルを担当。会員のビジネスニーズには主体的に対応。

平成23年9月6日