

タイトル「戦略的基盤ソフトウェアの公開」

概要

東京大学生産技術研究所(西尾茂文所長)は、文部科学省 IT プログラムの一環として 2002 年度からスタートした世界水準の実用ソフトウェアの開発を目指す、「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの昨年度の研究開発成果として、バイオ・ナノ分野を中心とした、最先端シミュレーションソフトウェアを 6 月初旬に一般公開する。

タンパク質の構造を分子軌道から計算したり、空気の流れや騒音などを基礎方程式から直接予測したりする、計算科学シミュレーションは次世代の産業基盤技術としてその実用化に大きな期待が集まっている。上記の「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトは、昨年度から 5 ヵ年計画でスタートしたものであり、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(センター長 加藤千幸 東京大学教授)が開発拠点となり、東京大学大学院工学系研究科、国立医薬品食品衛生研究所、独立行政法人物質・材料研究機構、高度情報科学技術研究機構、アドバンスソフト株式会社などとの産学官連携により、次世代量子化学計算、タンパク質・化学物質相互作用解析、ナノシミュレーション、次世代流体解析、次世代構造解析の 5 つの物理化学シミュレーションソフトウェアと、それらの大規模計算を将来のコンピュータ・ネットワーク環境で効果的に運用するための基盤情報技術として、統合プラットフォーム、HPC<sup>注</sup>ミドルウェアの実証開発を進めている。今般、2002 年度開発を完了した部分について、ソフトウェアのソースコードを一般公開する。

今後も年間 10 本程度の新規ソフトウェアの開発、公開を行うとともに、開発したソフトウェアを実際の製品設計・開発に広く適用し、その実証を進めていく。

担当者

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 加藤千幸(かとうちさち)

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事務局  
〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1  
TEL: 03-5452-6661 FAX: 03-5452-6662  
E-mail: [office@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp](mailto:office@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp)

HPC: High Performance Computing の略。スーパーコンピュータなどの超高速計算機を使ったシミュレーションを指す。

グループ名	ソフトウェア名	機能特徴
次世代量子化学計算システム 添付資料 1	代表名 <b>「ProteinDF」</b> 14 年度分公開ソフト [ProteinDF-QCLO]	様々な反応を行うタンパク質の電子の振る舞いを、半導体と同じ高精度で予測可能なソフトウェア。世界で初めて金属を持つタンパク質を丸ごと計算し、医薬、触媒、分子素子などの精密設計に通じるタンパク質の研究に役立つシミュレーション機能を充実させている。
タンパク質 - 化学物質相互作用解析システム 添付資料 2	代表名 <b>「ABINIT-MP BioStation」</b> 14 年度分公開ソフト [ABINIT-MP] [BioStation Viewer]	非経験的フラグメント分子軌道(ab initio FMO)法に基づいた、タンパク質 - 化学物質間の相互作用エネルギーを高精度で予測する世界初のシステム。医薬品等の効率的な分子設計を可能にする、ポストゲノム時代のタンパク質機能解析のためのキラアプリケーションとなる。
ナノシミュレーションシステム	代表名 <b>「CHASE-3PT」</b> 14 年度分公開ソフト [PHASE]	第一原理を主体とした最先端の固体物性計算手法により、ナノ材料プロセス、誘電体物性、量子伝導等ナノスケールの物理現象を総合的に解析出来る。シミュレーション結果のグラフィック表示機能等の総合環境 GUI を有する世界トップクラスのシステム。
次世代流体解析システム 添付資料 3	代表名 <b>「Front Flow」</b> 14 年度分公開ソフト [Front Flow - blue] [Front Flow - red]	乱流は工学設計では避けられない対象であり、その予測は大変重要である。乱れを直接的に扱うラージ・エディ・シミュレーション(LES)法を基礎とし、特に回転機械等の流体干渉や流体音の予測、及び燃焼や粒子等を含む複雑乱流の予測を対象とするプログラム。これまで不可能であった 1 億点規模の大規模計算が可能となる。
次世代構造解析システム	代表名 <b>「NEXST」</b> 14 年度分公開ソフト [NEXST]	「フリーメッシュ法」、「粒子法」、有限要素法各々の利点を生かして構造物の破壊・変形や強度の計算が出来る。はひび割れ現象を並列計算、は従来困難であった変形物体の飛散現象解析、は 1 億個もの未知数を持つ大規模・複雑構造の解析に適するソフトウェア。
統合プラットフォーム	代表名 <b>「RINDOW」</b> 14 年度分公開ソフト [PSE ワークベンチ]	大規模・複雑計算は、ハードウェアの進歩で実現されたが、ソフトウェア開発技術はハードに追いつかない。統合プラットフォームはこの課題を解決するソフトウェアで、一つの問題をタスクと定義し、その組み合わせと実行順序をタスクフローで記述したものである。本システムで大規模・複雑計算が出来、タスクフロー保存で計算再現が可能。また設計ノウハウをタスクフローとして蓄積することも出来る。
HPC ミドルウェア	代表名 <b>「HPC-MW」</b> 14 年度分公開ソフト [HPC - MW]	「HPC ミドルウェア (HPC-MW)」は、PC クラスからスーパーコンピュータ「Grid」環境も含めて様々なハイエンド計算機環境において、並列 I/O、並列可視化、大規模疎行列ソルバー、適応格子、動的負荷分散、連成カップリング等の機能サポートで、最適化された有限要素法による大規模シミュレーションコードの効率的な開発を可能とするミドルウェア群で、ユーザーによるコーディング量を数千ステップと従来の十分の一と大幅に減少できる。

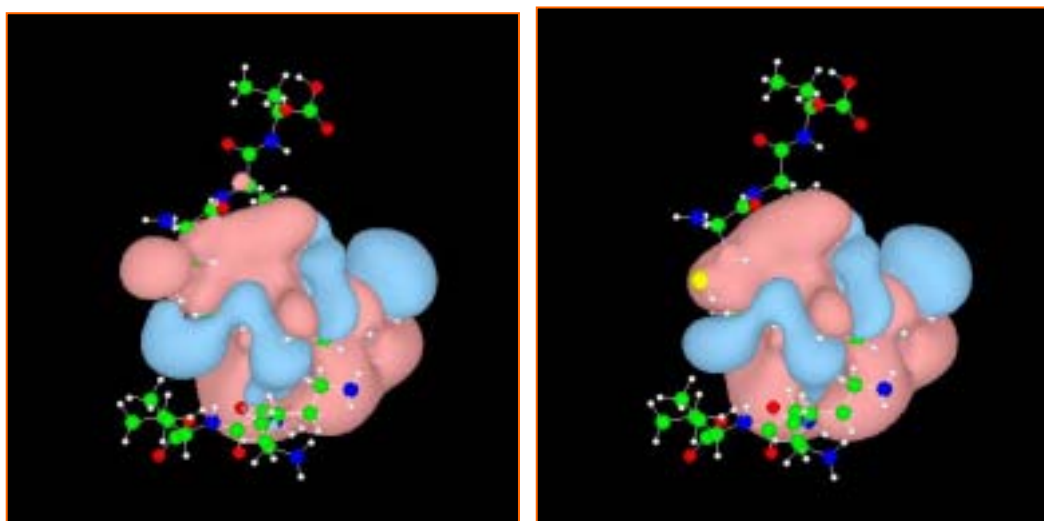
文部科学省 IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」  
次世代量子化学計算システム「*ProteinDF, QCLO, Scenario Editor*」  
複雑な金属タンパク質の電子の振る舞いを予測するプログラム

次世代量子化学計算システムでは、本システムの骨格である ProteinDF、ならびにその計算をサポートする QCLO（擬カノニカル局在化軌道）計算プログラムを公開する。これらの計算のためのグラフィカル・ユーザ・インターフェースである Scenario Editor も併せて公開する。

ProteinDF は密度汎関数法による大規模量子化学計算プログラムで、様々な反応を行う金属タンパク質の電子の振る舞いを、高い精度で予測することができる。104 個のアミノ酸とヘム（鉄ポルフィリン）が結合したタンパク質シトクロム *c*（1,738 個の原子、6,586 個の電子を持っている）を世界で初めて丸ごと計算した実績がある。

QCLO は、ProteinDF によるタンパク質の精密計算をサポートするために、新たに開発したプログラムである。実は、タンパク質のサイズが大きくなればなるほど、また計算が精密になればなるほど、金属タンパク質の電子の振る舞いを正しく計算することが困難となる。いまだに、金属タンパク質を丸ごと扱った密度汎関数法計算は、前述のシトクロム *c* 以外は報告されていない。これを例に取ると、数十億個の中間データを専門家が一つ一つ解析しながら何十回も計算ルートを修正し、達成までに約 2 年の歳月がかかっている。このままでは、今後いくらコンピュータが高速になっても、汎用的に金属タンパク質の反応解析を行うことは不可能である。そこで、当グループは、全分子の計算よりも遥かに少ない計算量で、大変よく似た結果を与えるよう工夫した QCLO（下図）を計算するプログラムを開発した。QCLO から計算を出発すれば、安全に全分子の計算を達成できるし、QCLO 自体を最終結果として代用してもほとんど遜色がない。

また、QCLO 計算や ProteinDF 計算を、計算者がコンピュータグラフィックスを用いて、滑らかに実行するためのプログラム Scenario Editor も併せて公開する。以上の成果は、今後多くの計算者が、自由にタンパク質の精密なシミュレーションを行うのに不可欠な基盤となるであろう。



ヘム（鉄ポルフィリン）錯体の鉄が主成分の分子軌道  
（左）全分子計算                      （右）QCLO 計算

## タンパク質 化学物質相互作用解析システム「ABINIT-MP BioStation」

## 第一原理に基づいたタンパク質 - 化学物質間の相互作用解析可能な世界初のプログラム

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」プロジェクトの平成 14 年度の開発成果として、タンパク質 - 化学物質相互作用解析システム「ABINIT-MP BioStation」（略称 BioStation）の中核である分子間相互作用解析プログラム (ABINIT-MP) および解析・表示プログラム (BioStation Viewer) を公開する。

分子間相互作用解析プログラム (ABINIT-MP) は、タンパク質と医薬品のような低分子化合物との結合性を第一原理（量子力学）に基づいて高精度で予測し、分子を効率よく設計することを可能にする。ABINIT-MP は PC クラスタからスーパーコンピュータまで幅広い並列計算環境で使用でき、数百残基のタンパク質と低分子化合物の相互作用を数時間から数日で計算できる。また既存のプログラムでは不可能であったアミノ酸残基同士やアミノ酸残基と低分子化合物など原子集団間の相互作用を計算できることが特徴である。解析・表示プログラム (BioStation Viewer) は、計算結果の解析をコンピュータグラフィクスを用いて行うことができ、Java および Java3D が稼動するパソコンやワークステーション上で利用できる。これらのプログラムを利用することで、タンパク質が分子を認識するメカニズムの解明に役立つだけでなく、医薬品などの開発にも有用な情報を得ることが期待できる。現在 ABINIT-MP を用いて、SARS ウイルスのタンパク質分解酵素阻害剤の *in silico* スクリーニングを行っている。

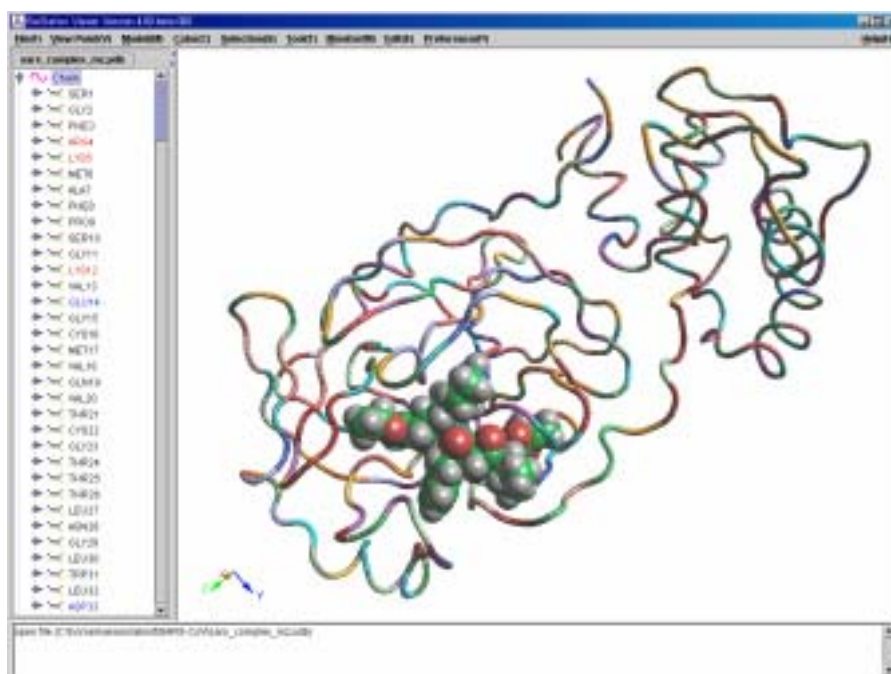


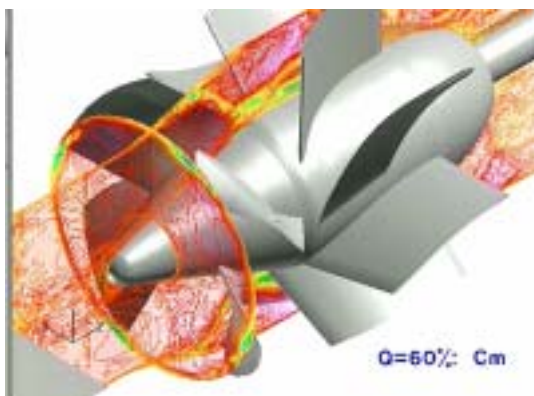
図 1. 北里大学薬学部梅山研究室により開発された PDFAMS によって得られたモデリング構造と阻害剤候補化合物とのドッキング構造。このような構造を元に ABINIT-MP による相互作用解析を行い、活性の高い化合物を絞り込む。



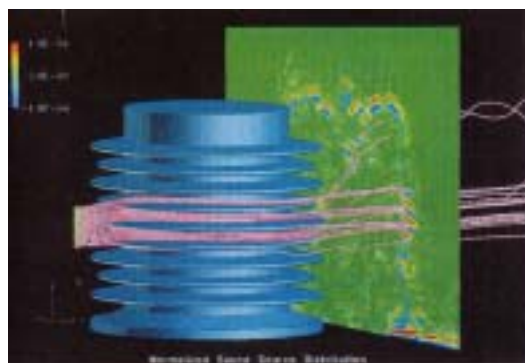
## 次世代流体解析システム「Front Flow」

- 高品質の乱流予測によってデジタルデザインが初めて実現する -

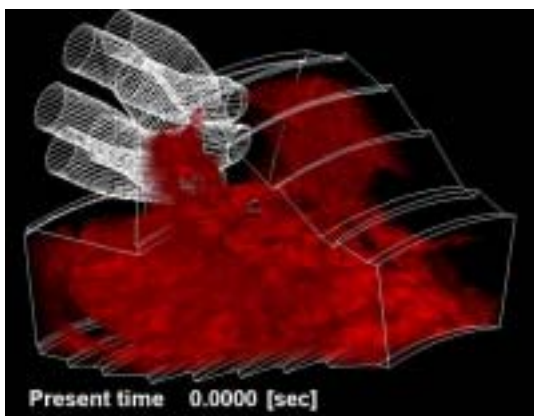
「乱流」(乱れた流れ)は、身の回りの水や空気の流れにも見られるありふれた現象ですが、工学設計において大変重要でかつ予測の困難な課題です。本プロジェクトで開発される**次世代流体解析システム**では、乱流の非定常で複雑な動きを正確に予測する方法として近年注目されている**ラージ・エディ・シミュレーション (LES)**を実用化します。そのためには、大規模な数値計算を効率よく実行することが必要で、その中心となる解析プログラム**Front Flow**を公開します。これは、近将来の並列コンピュータ環境で1億格子点相当の非定常数値計算を実用的な時間で実現することにより、機器開発においてCADデータと同程度の解像精度をもった流れ場の予測と先行設計が可能となることを狙っています。また、従来は予測設計の困難であった複雑な工学問題、特に、環境問題において多くの応用ニーズがあるエンジンや燃焼流れの詳細解析や、車両・ターボ機械・建築構造などに重要な流体音や流れと構造干渉などの数値予測が実用化されます。



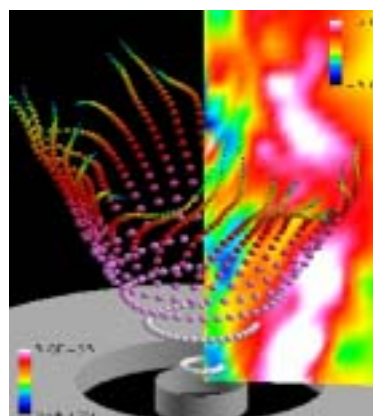
ポンプ流れの非定常干渉と騒音予測



新幹線パンタグラフの騒音低減



航空機ガスタービン燃焼器の火炎変動の予測



スプレー燃焼流れの解析例