

わが国の産業界における計算科学技術用ソフトウェア活用の現状

小池 秀耀*

The Status of Computational Science Software Using in Japanese Industry

Hideaki Koike*

1. はじめに

本論に入る前に、まず、わが国の産業界における計算科学技術用ソフトウェア活用の現状について見ておこう。わが国の産業界は計算科学技術用ソフトウェアを世界で最も活用している国の1つである。後で述べるようにナノからマクロに至るまで様々なソフトウェアが産業界で活用されている。しかしながら、活用されているソフトウェアの大部分は欧米製である。特に基幹となる構造解析、流体解析、量子化学計算等の戦略的基盤ソフトウェアは欧米製一色である。この現状はわが国の産業界にとって憂慮すべき問題である。計算科学技術用ソフトウェアは様々な科学的、技術的知見の集合であり戦略的基盤ソフトウェアを欧米に抑えられるということは将来わが国の技術開発の障害になる可能性がある。

子科学)に分けて収録している。ナノ・バイオ(物性科学)では、主に第一原理計算や量子モンテカルロ、無機・ポリマーを対象にした分子動力学計算を行うアプリケーションを取り上げた。その一方で、ナノ・バイオ(分子科学)では、生体分子向けの分子動力学、分子軌道法による量子化学計算を主に取り上げている。流体分野では、汎用数値流体解析コードの中から主なものを取り上げている。この表でナノ・バイオ・流体で利用されているソフトウェアの概要が把握できるはずである。

1.1. わが国の産業界で使用されているソフトウェア

アドバンスソフト株式会社は2008年に産業界で使用されている計算科学技術用ソフトウェアについて調査を行った。少し古くなるが大筋は変わらないのでこの調査結果を紹介する。

産業界では多くのソフトウェアが使用されているが、ナノ・バイオ・流体(数値流体解析)のそれぞれの分野において、販売されているアプリケーションの中心または主要なものを選択した。これを表1に示す。市販のソフトウェアは何らかの形で、産業界で利用されている。ナノ分野、バイオ分野の両方で広く使われているアプリケーション(例: Gaussian)も存在するため、両分野をナノ・バイオ(物性科学)およびナノ・バイオ(分

*アドバンスソフト株式会社 代表取締役社長

Representative director president, AdvanceSoft Corporation

表 1 産業界で活用されているアプリケーションソフト一覧

計算科学分野	ソフトウェア名	計算手法
ナノ・バイオ (物性科学)	CASTEP	擬ポテンシャル法第一原理バンド計算
	DACAPO	
	PHASE	
	VASP	
	CPMD	
	ABINIT	
	WIEN2k	LAPW 法第一原理バンド計算
	ABCAP	
	HiLAPW2002	
	MACHIKANEYAMA2000	KKR 法第一原理バンド計算
	SIESTA	原子基底第一原理計算
	OpenMX	数値局在基底法
	LAMMPS	古典分子動力学
	Material Explorer	
	OCTA	メゾスケールシミュレータ
	Amber9	汎用分子動力学
	CHARMM	
	GROMOS	
	TINKER	
	IMPACT	
ナノ・バイオ (分子科学)	PRESTO	並列分子動力学
	COSMOS	
	PEACH	
	NAMD	フラグメント分子軌道法
	ABINIT-MP	
	GAMESS(GAMESS-US)	汎用量子化学計算
	GAMESS(GAMESS-UK)	
	Gaussian	
	JAGUAR	
	HONDO	
	NWCHEM	
	Q-CHEM	
	DMol	数値基底分子軌道法
	MOPAC2006	半経験的分子軌道法
	ProteinDF	密度汎関数法/分子軌道法
	ADF	
	JAMOL	分子軌道法
流体	STAR-CD	有限体積法
	FLUENT	
	PHONICS	
	SCRYU	
	ANSYS CFX	
	FrontFlow/red	
	PowerFLOW	格子ボルツマン法
	FrontFlow/blue	有限要素法

表 2 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	CASTEP
開発元・開発責任者	CASTEP Developers Group
ソフトウェア概要	CASTEP は、平面波基底関数、擬ポテンシャル、密度汎関数法に基づく第一原理計算コードであり、物性定数や、化学反応などミクロの世界の現象を解析できる。CASTEP は、カー・パリネロ高速アルゴリズムに基づき、始め Cambridge 大 Payne 教授のグループによって開発され、1999 年から CASTEP Developers Group(CDG)が開発を継続している。Accelrys 社が CASTEP の販売権を得ており、汎用第一原理材料解析コードとして世界的に流通している。イギリス国内の公的研究機関であればソースコードを入手することができる。
適用対象	CASTEP は、 (1) 固体の電子のおよび機械的性質 (2) 表面・界面の性質 (3) 光学的性質 (4) 誘電関数（電子系、格子系） (5) 格子振動 (6) 化学反応 (7) 触媒反応
機能・特徴	CASTEP には、以下のような解析機能が備えられている。 ・触媒に及ぼす合金化の効果 ・窒素不純物を用いたカーボンナノチューブの特製制御 ・酸化によるシリコン・ナノドットの光学特性変化 ・酸化物の相図の計算 ・Pd と Al の α -Al ₂ O ₃ (001) 表面への蒸着による触媒能の変化
出典	CDG ホームページ： http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/castep/index.html Accelrys 社 ホームページ： http://www.accelrys.com/products/mstudio/modeling/quantumandcatalysis/index.html

表 3 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	DACAPO
開発元・開発責任者	Denmark 工科大
ソフトウェア概要	DACAPO は、密度汎関数法を用いた平面波・擬ポテンシャル法第一原理電子構造計算プログラムである。擬ポテンシャルとしては Vanderbilt 型のウルトラソフト型擬ポテンシャルが搭載されている。DACAPO は Denmark 工科大において実施されている CAMP Open Software Project(CAMPOS)の中で開発された原子スケールシミュレーションプログラムのひとつで、GPL*ライセンスのもとに自由に利用することができる。
適用対象	DACAPO は、 (1) 固体の電子状態と構造最適化 (2) 弾性定数などの機械的物理定数 (3) 光学特性 (4) 電子系、格子系誘電率 (5) 化学反応・触媒反応 などの材料特性解析に適用できる。
機能・特徴	DACAPO には、以下のような解析機能が備えられている。 ・ 固体の全エネルギーとバンド構造 ・ 全状態密度と部分状態密度 ・ ストレス・テンソルと弾性定数 ・ スピン分極計算 ・ 表面構造（再構成）と表面化学反応 ・ 格子振動 ・ Nudged Elastic Band 法による反応経路探索 ・ 最大局在化ワニア関数
出典	CAMPOS ホームページ： http://dcwww.camp.dtu.dk/campos/Dacapo/

*GPL：GNU General Public License, フリーソフトウェアのライセンス規約。詳細は、GNU Project ホームページ（URL：<http://www.gnu.org/>）に記載されている。

表 4 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	PHASE
開発元・開発責任者	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、文部科学省 IT プログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト、大野隆央 独立行政法人 物質・材料研究機構 計算科学センター長、宇田毅 氏 アドバンスソフト株式会社
ソフトウェア概要	PHASE は、密度汎関数法を用いた平面波・擬ポテンシャル法第一原理電子構造計算プログラムで、世界的な評価を得ている CASTEP、VASP と同等の機能を備えている。すなわち、精度の高い電子状態計算と、その結果を利用した弾性定数や誘電率などの物性定数の計算、また、構造最適化や、第一原理分子動力学計算が可能である。また、高い並列化率とベクトル化率を実現しており、8,000 原子の第一原理計算を地球シミュレータ上で達成した記録を持っている。PHASE は、東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページを通じて非営利目的の範囲で一般に無償で公開されており、アドバンスソフト株式会社はその商用版である Advance/PHASE を販売している。
適用対象	PHASE は、 (1) 固体の電子状態と構造最適化 (2) 弾性定数などの機械的物性定数 (3) 光学特性 (4) 電子系、格子系誘電率 (5) 化学反応・触媒反応 (6) 自由エネルギー など電気伝導を除いたほとんどの材料特性解析に適用できる。
機能・特徴	PHASE には、以下のような解析機能が備えられている。 ・ k 点、バンド 2 軸並列化機能 ・ 固体の全エネルギーとバンド構造 ・ 全状態密度と部分状態密度 ・ ストレス・テンソルと弾性定数 ・ スピン分極計算 ・ 表面構造（再構成）と表面化学反応 ・ 格子振動 ・ ボルン有効電荷と格子誘電率 ・ 格子振動による有限温度でのエントロピーと自由エネルギー
出典	東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページ： http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/index.html アドバンスソフト株式会社 ホームページ： http://www.advancesoft.jp/

表 5 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	VASP
開発元・ 開発責任者	VASP Group、Hafner 教授
ソフトウェア概要	VASP は、密度汎関数法を用いた平面波・擬ポテンシャル法第一原理電子構造計算プログラムである。その特長は精度の高い構造最適化計算と、第一原理分子動力学計算にある。標準的第一原理ソフトウェアでは Vanderbilt 型のウルトラソフト型擬ポテンシャルが採用されているのに対し、VASP では Bloechl による PAW(Projector-augmented-wave)型擬ポテンシャルが採用されている。CASTEP と並んで世界的に流通している汎用第一原理計算で、無償で公開されていないが、Materials Design 社が商用版を開発している。日本国内では菱化システム株式会社がパッケージを販売している。
適用対象	VASP は、 (1) 固体の電子状態と構造最適化 (2) 弾性定数などの機械的物理定数 (3) 光学特性 (4) 電子系、格子系誘電率 (5) 化学反応・触媒反応 (6) 自由エネルギー など電気伝導を除いたほとんどの材料特性解析に適用できる。
機能・特徴	VASP には、以下のような解析機能が備えられている。 ・固体の全エネルギーとバンド構造 ・全状態密度と部分状態密度 ・ストレス・テンソルと弾性定数 ・スピン分極計算 ・表面構造（再構成）と表面化学反応 ・格子振動 ・ボルン有効電荷と格子誘電率 ・格子振動による有限温度でのエントロピーと自由エネルギー
出典	VASP Group ホームページ：http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/ 株式会社菱化システム ホームページ： http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/medea/engine.html

表 6 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	CPMD
開発元・開発責任者	IBM 社, Max Planck 研究所, J.Hutter 氏
ソフトウェア概要	カー・パリネロ アルゴリズムに基づく、平面波基底、擬ポテンシャル、密度汎関数法による標準的第一原理計算コード。Car と Parrinello によるオリジナル版を IBM 社の J. Hutter が書き直したコードを基に多くの研究者が改良に寄与してきた。コピーライトは IBM 社と Max Planck 研究所が保有しているが、非営利目的の場合には自由にダウンロードできる。
適用対象	CPMD は、 (1) 固体の電子のおよび機械的性質 (2) 表面・界面の性質 (3) 光学的性質 (4) 誘電関数（電子系、格子系） (5) 格子振動 (6) 化学反応 (7) 触媒反応 分野の解析に適用される。
機能・特徴	CPMD には以下のような解析機能が備えられている。 ・ノルム保存型とウルトラソフト型の 2 種類の擬ポテンシャル ・構造最適化、局所ミニマム ・分子動力学：エネルギー一定、温度一定、圧力一定 ・応答関数 ・励起状態（時間依存 DFT） ・メタ・ダイナミクスによる反応解析
出典	CPMD ホームページ： http://www.cpmd.org/

表 7 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	ABINIT
開発元・開発責任者	ABINIT Group、X. Gonze 教授
ソフトウェア概要	ABINIT は、CASTEP, VASP と同じく、平面波基底、擬ポテンシャル、密度汎関数法による標準的第一原理計算コードであるが、GPL ライセンスのもと、無償で利用できるという利点がある。
適用対象	ABINIT は、 (1) 固体の電子のおよび機械的性質 (2) 表面・界面の性質 (3) 光学的性質 (4) 誘電関数（電子系、格子系） (5) 格子振動 (6) 化学反応 (7) 触媒反応 分野の解析に適用される。
機能・特徴	ABINIT には以下のような解析機能が備えられている。 ・ノルム保存型とウルトラソフト型の 2 種類の擬ポテンシャル ・構造最適化、局所ミニマム ・分子動力学：エネルギー一定、温度一定、圧力一定 ・応答関数 ・励起状態（時間依存 DFT および GW 法の 2 種類） ・メタ・ダイナミクスによる反応解析 ・ボルン有効電荷 ・誘電関数
出典	ABINIT Group ホームページ： http://www.abinit.org/about/

表 8 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	WIEN2k
開発元・開発責任者	Vienna 工科大、P. Blaha 教授, K. Schwarz 教授 他
ソフトウェア概要	WIEN2k は、密度汎関数法を用いた LAPW 法第一原理電子構造計算プログラムである。多くの第一原理プログラムが擬ポテンシャルを採用しているのに対し、フル・ポテンシャル（生のクーロン）を採用している点に WIEN2k の特長がある。このため、擬ポテンシャル法では扱えない内殻電子の絡む化学シフト, EXAFS, XANES などの解析が可能である。WIEN2k の商用版はないが、開発元と直接契約を結ぶことにより、4,000 ユーロ（一般）で利用できる。
適用対象	WIEN2k は、 (1) 固体の全エネルギーとバンド構造 (2) 構造最適化と分子動力学 (3) スピン分極 (4) 格子振動 (5) X-線放出と吸収（EXAFS, XANES） (6) 電子線エネルギー損失（EELS） などの材料特性解析に適用できる。
機能・特徴	WIEN2k には、以下のような解析機能が備えられている。 ・金属酸化物における酸素欠損 ・電子・格子相互作用 ・電場勾配の温度依存性 ・金属不純物のハイパーファイン定数 ・重金属（Am など）の 5f 軌道の電子状態 ・層状構造を持つ金属のフル・ポテンシャル解析 ・化合物半導体の内部応力解析 ・金属酸化物の電子線エネルギー損失スペクトル
出典	WIEN2k ホームページ： http://www.wien2k.at/index.html

表 9 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	SIESTA
開発元・開発責任者	Madrid 大、Cambridge 大、J.M.Soler 教授、E. Artacho 教授 他
ソフトウェア概要	SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) は原子関数を基底関数とし、ノルム保存型の擬ポテンシャルと密度汎関数に基づく第一原理計算プログラムで、固体の電子状態一般の解析を可能とする汎用プログラムである。公的研究機関に対しては、無償で配布がなされているが、企業に対してのライセンスは Nanotech 社が販売を行っている。
適用対象	SIESTA は、CASTEP, VASP, STATE などの固体用第一原理汎用ソフトウェアが平面波を基底関数としているのに対し、原子関数を基底関数としているため、高速計算が可能で、通常のクラスタマシンでも ～1,000 原子の計算が可能である。同時に精度的には、平面波展開に比べ一歩を譲る。
機能・特徴	SIESTA には以下のような解析機能が備えられている。 ・全エネルギー ・原子に働く力 ・ストレス・テンソル ・双極子モーメント ・原子軌道とマリケン電荷 ・電荷分布 ・格子緩和 ・定温分子動力学（Nose 法） ・ユニットセルの変形を考慮したダイナミクス（パリネロ-ラーマン法） ・スピン分極効果 ・局所状態密度 ・バンド構造
出典	SIESTA ホームページ： http://www.uam.es/departamentos/ciencias/fismateriac/siesta/ Nanotech 社 ホームページ： http://www.nanotec.es/

表 10 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	LAMMPS
開発元・開発責任者	Sandia 国立研究所, Lawrence Livermore 国立研究所、及び 3 つの民間企業（Cray 社, Bristol Myers Squibb 社, DuPont 社）
ソフトウェア概要	Sandia 国立研究所のホームページにて GPL ライセンスのもとで一般に無償で公開されている汎用古典分子動力学コード。大規模分子動力学計算が可能であり、MPI ライブラリーによる並列化もなされている。ソルバーのみの提供であり、分子モデリングには他のソフトが必要。
適用対象	・ ナノワイヤー ・ ナノチップ ・ 液滴 ・ 銅の結晶粒界におけるずり運動 ・ 枝上高分子の構造 ・ 金属の凝固 ・ 脂質膜の自己組織化 ・ 高分子の引張 など
機能・特徴	・ MPI ライブラリおよび空間分割法による並列計算 ・ 原子、高分子、生体、粒とその混合系の取り扱いが可能。 ・ 利用可能なポテンシャル形として、2 体ポテンシャル（Lennard-Jones, Coulombic, Buckingham, Morse, Yukawa, frictional granular, Debye, soft, DPD, class 2 (COMPASS), tabulated, metal potentials: embedded atom method (EAM, Finnis/Sinclair), MEAM)、3 体ポテンシャル（Stillinger-Weber, Tersoff, MEAM）、混合ポテンシャル、結合ポテンシャル（harmonic, FENE, Morse, nonlinear, class 2 (COMPASS), quartic (breakable), hybrid）、結合変角ポテンシャル（harmonic, CHARMM, cosine, cosine/squared, class 2 (COMPASS), hybrid）、2 面角ポテンシャル（harmonic, CHARMM, multi/harmonic, helix, class 2 (COMPASS), hybrid）がある。 ・ クーロン相互作用の計算法：Ewald 法, PPPM 法 ・ NVE, NVT, NPT, NPH アンサンブルのほか、ブラウン動力学、エネルギー最小化、 ・ rRESPA 法、SHAKE を実装
出典	LAMMPS ホームページ： http://lammps.sandia.gov/index.html

表 11 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	Material Explorer
開発元・開発責任者	富士通株式会社
ソフトウェア概要	このプログラムは、分子動力学のソルバー部分と分子モデリングおよび可視化環境が統合されたひとつのパッケージとして提供されており、原子・分子の集合体や結晶構造を簡単な操作でモデリングし、定温定圧下で分子動力学シミュレーションを行い、各種物理量のグラフ表示、材料の三次元挙動の表示、各種解析を行うことができる。また、結晶から表面・界面までを原子・分子レベルで取り扱うことが可能。開発は、富士通株式会社が行っており、ライセンスも同社から販売されている。
適用対象	クラスター、液晶、溶液、高分子、金属、セラミックス、半導体 結晶成長、表面吸着、表面損傷 固体・液体・気体、純物質・混合物、表面・界面・粒界
機能・特徴	・モデリング機能 ・構造緩和：近接原子分子の構造緩和、モンテカルロ法による構造緩和 ・ポテンシャル： 【二体力】 Lennard-Jones, Born-Mayer-Huggins, Johnson, Morse, Miller, ZBL, AMBER(parm94), UFF(non-Bonding) 【三体力】 Stillinger-Weber, Keating, Tersoff, Justo, Marks, KKY 【多体力】 Finnis-Sinclair, Long Range Finnis-Sinclair, Yang-Johnson, Rosato-Guillopie-Legrand, Voter-Chen, Oh-Johnson, TB, Grujicic-Zhou, GEAM, Ackland, Justo, Marks ・動力学モデル：ポテンシャルモデル、拘束モデル、剛体モデル、ユナイテッドアトムモデル ・アンサンブル：NEV、NTV、NPH、NTP ・応力・電場・磁場・重力場・球内拘束場の印加（設定のグラフィックス表示） ・熱伝導率計算（セラミックス）：非平衡分子動力学法による手法
出典	富士通株式会社ホームページ： http://venus.netlaboratory.com/me4/index.html

表 12 ナノ・バイオ（物性科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	OCTA
開発元・開発責任者	経済産業省・NEDO「高機能材料設計プラットフォームの開発」プロジェクト, OCTA 管理委員会(http://octa.jp), 土井正男 名古屋大学教授(現東京大学)
ソフトウェア概要	このソフトウェアは、ソフトマテリアルに対する統合的なシミュレータであり、経済産業省・NEDO「高機能材料設計プラットフォームの開発」プロジェクトによって開発され、現在 OCTA 管理委員会のもとで一般に無償で公開されている。このソフトウェアの特色は、空間スケールごとに異なる計算理論に基づいた複数のプログラムで構成されていることで、それぞれのプログラムはひとつのプラットフォームで統合化されている。この統合化のため、特別にユーザ定義フォーマットの仕様が作られている。OCTA の商用版は、株式会社日本総研ソリューションズとアドバンスソフト株式会社より販売されている。
適用対象	これまでに適用された主な事例は次の通り： 分子材料の剛性、スピンコーティング、ソフトアクチュエータ、マイクロリアクタチップ、テーパードポリマーのモルフォロジー、3 成分高分子系のモルフォロジー、反応誘起相分離、結晶ラメラの変形、表面のモルフォロジー、トリブロックコポリマーのモルフォロジー、線形および星形高分子のレオロジー、絡み合い高分子、ナノレオロジーなど。
機能・特徴	OCTA は、主に次の 4 つのエンジンで構成される。 COGNAC：汎用粗視化分子動力学シミュレータ。Full-atomistic モデルから united-atom, Gay-Berne, bead-spring モデルまで様々な粗視化レベルの分子動力学計算が行えることが特徴。利用できる熱力学アンサンブルは、NVE, NVT, NPH, NPT と豊富で、ずり流動を加えた非平衡計算も可能。さらに、動力学として、一般のニュートン方程式のほかに、散逸粒子動力学、Langevin ダイナミクスも備えており、幅広い応用範囲を持つ。 PASTA：レピュテーション理論に基づいたレオロジーシミュレータ。複数の変形様式に対応しており、また高分子の分子量分布を計算に取り込むことができる。 SUSHI：動的平均場理論に基づいたシミュレータ。ブロック共重合体のミクロ相分離構造の静的構造や動的構造変化が計算できる。また、任意の高分子分岐構造を取り込むことが可能であり、固体壁への高分子の吸着も計算が可能である。計算には、自己無撞着場法が使われるため、同じ手法を使った異なるコードよりも精度の高い計算が可能である。 MUFFIN：多層構造シミュレータ。OCTA の中でもっともサイズの大きなスケールの現象を扱う。このプログラムは、核となる内部のソルバー部分を共通としつつも、異なる支配方程式に対応しており、それぞれの方程式ごとに見かけ上、異なるプログラムが数多く提供されている。このシミュレータでは、マクロ相分離構造や、多層構造をもった線形弾性、電解質の流動などが計算できる。
出典	OCTA 管理委員会ホームページ： http://octa.jp 株式会社日本総研ソリューションズ ホームページ： http://www.jri-sol.co.jp/ アドバンスソフト株式会社 ホームページ： http://www.advancesoft.jp/

表 13 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	AMBER
開発元・開発責任者	Scripps 研究所, D.Case 氏
ソフトウェア概要	AMBER は、California 大の Kollman 教授らのグループによって生体分子のために開発された、モデリングおよび分子力学と動力学計算シミュレーションプログラムのパッケージである。現在は Scripps 研究所の D.Case を中心に開発が続けられ、バージョン 9 が提供されている。機能としては、溶媒水分子の配置や電荷のフィッティングを行うビルダーモジュールなどのプログラムが多数用意されている。また、NMR リファインメントの実行や、解析ツールを用いて動力学計算のトラジェクトリ解析を行うことが可能である。AMBER は独自の有用性の高いパラメータを持ち、近年このプログラムを用いた論文が多数報告されている。有償による提供のみであるが、公的研究機関に対しては比較的安価に販売がなされている。日本ではコンフレックス株式会社が販売を行っている。
適用対象	主に生体分子をターゲットとしたシミュレーションソフトウェアである。主な適用例を以下にあげる。 構造リファインメント ホールディングシミュレーション 溶媒効果 自由エネルギー計算 静電ポテンシャル解析、遷移状態計算
機能・特徴	力場：ff99, ff02, ff03, gaff 等、多彩な力場を持っている。主に生体分子に最適化されている。また、United-Atom 力場、AMOEBA 分極性ポテンシャル、経験的な原子価結合モデルがサポートされている。 溶媒効果：新しい非結合相互作用のルーチンや explicit モデルでの自由エネルギー計算から導出された最適化された原子の空洞・静電ポテンシャル等がサポートされている。 自由エネルギー計算：Jarzynski 等式を利用して、非平衡の"targeted"あるいは"pulling"シミュレーションから、自由エネルギーを予測することができる。QM/MM シミュレーション：気相・仮想溶媒中(GB)・周期境界条件(PME)シミュレーションに QM/MM 手法を適用することができる。 レプリカ交換法：通常のレプリカ交換法の改良が行われている。さらに、実際の溶媒を配置する大きな系で必要な、レプリカの数軽減をするための、ハイブリッド溶媒モデルを使用する方法がサポートされている。
出典	AMBER ホームページ： http://amber.scripps.edu/ コンフレックス株式会社 ホームページ： http://www.conflex.co.jp/prod_amber.html

表 14 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	CHARMM
開発元・開発責任者	CHARMM Development Project, M.Karplus 教授
ソフトウェア概要	CHARMM (Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics) は、巨大分子の分子力学計算、分子動力学計算、モンテカルロ計算が行えるプログラムであり、Harvard 大の Karplus 教授とそのグループおよび共同研究者を含む CHARMM Development Project によって開発と維持が行われている。現在のバージョンは c33b2 であり、アカデミックユーザは、CHARMM Development Project とコンタクトを取ることによって CHARMM を入手できる。商用化版は Accelrys 社から販売されている。
適用対象	CHARMM は、分子系の振る舞いと構造をモデリングする汎用的でフレキシブルなアプリケーションであり、単一の有機分子から溶媒に置かれた大きなオリゴマー蛋白質までの豊富な系の計算が可能である。また、エネルギー最小化・分子動力学計算・振動解析に対して経験的なエネルギー関数を用いることによって、単純なペプチドのコンフォメーションから大きな蛋白質の動的な屈曲運動までの広範囲な分子特性の計算ができる。さらに、酵素・基質もしくは受容体・リガンド結合相互作用のような構造活性相関の分子間の問題を扱うことができ、それらの結果は、CHARMM の拡張解析機能を用いて包括的に解釈することができる。
機能・特徴	・ 1 階、2 階微分の両方を用いた 6 つのエネルギー最小化法 ・ CHARMM に搭載されている分子力場によって分子動力学計算 ・ 分子全体もしくは、その部分系に対しての計算。 ・ 振動解析（基準振動と振動数、強度）計算。 ・ 結晶構造、確率と溶媒効果、相関関数、自由エネルギー計算など
出典	CHARMM Development Project ホームページ： http://www.charmm.org/ http://yuri.harvard.edu/

表 15 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	GROMOS
開発元・開発責任者	Zurich 工科大
ソフトウェア概要	GROMOS は生体分子向けに開発された汎用分子動力学計算プログラムであり、その目的として、次の 3 つが挙げられる。 分子動力学、確率的動力学および経路積分手法による溶媒、結晶状態に含まれる任意分子の計算、任意分子のエネルギー最小化、実験もしくはコンピュータ・シミュレーションによって得られたコンフォメーション解析。 これらのシミュレーションでは、文献によって精度が示されている GROMOS の分子力場を利用できる。GROMOS は、有償による販売のみであるが、公的研究機関に対しては比較的安価に提供されている。
適用対象	最近のバージョンによる主な応用例は以下の通り。 ・様々な環境（水、メタノール、クロロフォルム、DMSO、無極性溶媒、結晶）による分子のコンフォメーションの依存性 ・熱力学的積分法、摂動法、外挿による様々な分子複合体の間の自由エネルギー差の評価による相対的な結合定数の計算 ・アミノ酸の酵素もしくは DNA の基質対の変更に伴うエネルギー・構造変化の予測 ・NMR に基づいた時間平均距離と J 値拘束を含んだ制限分子動力学計算による 3 次元分子構造の導出 ・実験的に実現不可能な環境での温度・圧力条件における物質特性の予測
機能・特徴	・真空、結晶、水溶液などの溶媒におけるエネルギー最小化、分子動力学計算（定温、定圧、定積） ・分子系の量子力学的平衡特性の経路積分手法による研究 ・安定なコンフォメーションの探索を行う複数の手法を装備 ・twin-range 法、Poisson-Boltzmann 反応場力によって近似された静電力による長距離力の扱いが可能 ・分子系の拘束を行う特殊な力の導入が可能 ・分子系の様々な状態における自由エネルギー差の計算を行う豊富な手法 ・Cray、Silicon Graphics 社の計算機上で活用できるベクトル化・並列化された非結合相互作用のルーチンを利用可能 ・構造解析、粒子軌跡の様々な解析
出典	GROMOS ホームページ： http://www.igc.ethz.ch/gromos/

表 16 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	TINKER
開発元・開発責任者	Washington 大, J.W.Ponder 助教授
ソフトウェア概要	TINKER は、生体高分子向けの分子力学・分子動力学計算のための分子モデリングソフトウェアであり、AMBER や CHARMM、Alinger MM や OPLS、Liam Dang の分極関数のほかに独自の AMOERA 力場のパラメータセットに対応している。ソフトウェアは、Linux, MacOS, Windows 版が TINKER のホームページから無償で配布されている。
適用対象	生体高分子の分子力学、分子動力学計算
機能・特徴	・シーケンスからのタンパク質、核酸のビルド ・エネルギー最小化と構造最適化 ・構造内におけるエネルギー分布の解析 ・分子動力学、確率的動力学 ・スケジュールされた冷却過程を含むシミュレーテッドアニーリング ・基準振動、振動数の解析 ・コンフォメーションの探索、大域的最適化 ・遷移状態座標とコンフォメーションの経路 ・結晶データへのエネルギーパラメータのフィッティング ・対計量を伴う distance geometry ・分子体積と表面積 ・構造変異による自由エネルギー変化 ・ポテンシャルの平滑化に基づく先進的なアルゴリズム
出典	TINKER ホームページ： http://dasher.wustl.edu/tinker/

表 17 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	NAMD
開発元・開発責任者	Illinois 大, J.Phillips 氏
ソフトウェア概要	NAMD は、大規模な生体分子の高効率なシミュレーションのために設計された並列分子動力学コードであり、現在 Illinois 大の J.Phillips を中心に開発が続けられ、2002 年の Gordon Bell 賞を受賞している。並列化には、Charm++オブジェクトを利用しており、数百のプロセッサを持つハイエンドなプラットフォームから、数十のプロセッサを持つ一般的なクラスタマシン上で動作させることができる。普及している分子グラフィックスプログラム VMD を使ってシミュレーションのセットアップと軌道解析が行え、AMBER,CHARMM,XPLOR とファイル互換性がある。NAMD は、非商用的利用の範囲であればソースコードとともに無償で入手でき、様々な計算機環境に適したバイナリーも提供されている。
適用対象	応用例 ・ナノ細孔における独立した DNA 分子の電氣的感知 ・イオンの流れを減少させるナノ細孔と DNA の相互作用 ・転座に対する電圧閾値のスケーリング ・二本鎖 DNA の転座における溶質 pH の影響 ・一本鎖 DNA の転座 など
機能・特徴	・無償での配布 ・12 のポピュラーな計算機環境へのバイナリーの提供 ・X-PLOR, CHARMM, AMBER, GROMACS 入力データの読み込み ・高度な共役勾配法の実装 ・定温・定圧動力学計算 ・シンプレクティック多重時間刻み法 ・周期境界条件の下での Particle Mesh Ewald 法による静電ポテンシャルの計算 ・1000 プロセッサ上での 300,000 を超える原子数の計算を記録 など
出典	Illinois 大 Theoretical and Computational Biophysics Group ホームページ： http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/

表 18 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	ABINIT-MP
開発元・開発責任者	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、文部科学省 IT プログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト、中野達也 氏 国立医薬品食品衛生研究所
ソフトウェア概要	非経験的フラグメント分子軌道法(FMO)を実装した分子軌道法ソフトウェアである。タンパク質などの生体高分子や低分子、それらの複合体など従来の量子化学計算ソフトウェアでは不可能であった巨大分子系を対象とする。この方法では、分子（系）をフラグメントと呼ばれる小さな原子団に分割し、フラグメントモノマーやダイマーの分子軌道計算を行い、その結果を適切に加え合わせることで、元の分子（系）の全エネルギーや分子間相互作用、そのほかの物理量を精度よく高速に計算することが可能である。計算法は、多体摂動論、密度汎関数法に基づいた拡張が研究されている。フラグメント間相互作用エネルギーが得られることが実用上特に有用である。計算結果を図示する解析用ツールが付属する。ABINIT-MP は、東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページを通じて非営利目的の範囲で一般に無償で公開されており、アドバンスソフト株式会社はこれに機能を追加した商用版 Advance/BioStation を販売している。
適用対象	タンパク質、DNA などの生体高分子、有機低分子、およびこれらの複合体、を計算対象としている（ただし、遷移金属などを含む計算は除く）。フラグメント間相互作用エネルギーが解析できるため、受容体-リガンド間相互作用解析、リガンド探索、受容体-リガンド結合能予測・評価、分子設計などに適用できる。構造最適化により、構造の探索、X 線構造解析などで得られた構造の最適化も行うことができる。
機能・特徴	量子計算機能 ・計算法：制限つき閉殻 HF 法、FMO-HF 法、MP2 法、FMO-MP2 法、多層化 FMO 法 ・基底：STO-3G, 6-31G, 6-31G*, 6-31G**, 6-31++G** ・構造最適化：BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno 法)、CG (conjugate gradient 法、共役勾配法) ・フラグメント自動分割機能：タンパク質、DNA ・主な計算結果：全エネルギー、フラグメント分子軌道とそのエネルギーレベル、電子密度分布、分子の周囲の静電ポテンシャルおよび電場解析用ツールの機能（図示機能） ・フラグメント間相互作用：フラグメント対フラグメント、フラグメントグループ対フラグメント、グループ対グループ。フラグメント相互作用パターンによるリガンドをクラスタリング。
出典	東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページ： http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/index.html アドバンスソフト株式会社 ホームページ： http://www.advancesoft.jp/

表 19 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	GAMESS (GAMESS-US)
開発元・開発責任者	Iowa 州立大、M.Gordon 教授
ソフトウェア概要	GAMESS は、非経験的量子化学計算を行うプログラムである。GAMESS にはアメリカ Iowa 州立大が管理する GAMESS-US とイギリス National Resource for Computational Chemistry (NRCC) が管理する GAMESS-UK が存在するので注意が必要である。両者は GAMESS 開発を始めた M.Dupuis が 1981 年に NRCC に GAMESS のソースコードを提供してから分岐し、現在では異なるプログラムと考えてよい。通常 GAMESS と言えば、GAMESS-US を指すので、ここでもそれを踏襲する。GAMESS では、Hartree-Fock 理論、密度汎関数理論、多体摂動論、CASSCF 理論、GVB 理論、結合クラスター理論、および CI 理論などの様々な量子化学理論に基づいた分子シミュレーションが可能である。GAMESS 開発グループは、多年にわたり公的研究資金を獲得し続け、多数のポスドク、客員研究員を動員してプログラム開発を行っている。GAMESS の最大の特色は、多機能なプログラムであるにも拘らず、あらゆる個人、企業、研究室が無償でその提供を受けることができる点である。このことは、日本を含め世界中に開発協力者を有し、その品質を維持することができる理由でもある。
適用対象	GAMESS によるシミュレーションが最も適当なのは、原子数が数十個程度の、いわゆる低分子である。その理由は非経験的量子化学理論の多くで、分子の大きさの 4 乗から 6 乗に比例して計算量が増加するためである。QM/MM によるバイオマテリアルのシミュレーションも可能である。溶媒効果を取り入れた計算もできる。最近盛んに研究が行われている、種々の linear scaling 法を採用し、既存の量子化学理論の適用範囲も拡大しつつある。特筆すべきはフラグメント分子軌道(FMO)法が実装されていることである。これによって、100 残基規模のタンパク質の量子化学計算が日常的に可能になっている。
機能・特徴	GAMESS を用いると、構造最適化、遷移状態計算、多様な分光学的物理量が計算可能である。2003 年に NMR スペクトルに関する物理量も計算可能になり、応用範囲が広がった。GAMESS の特徴は、豊富な配置間相互作用計算法が実装されていることである。これにより、低分子の電子構造を非常に詳しく調べることができる。密度汎関数理論による励起状態計算(時間依存密度汎関数理論)は実装されていないが、近日公開予定である。既に述べたように、GAMESS には FMO 法が実装されており、タンパク質のような巨大分子の第一原理シミュレーションが可能である。GAMESS の並列化は、独自の ddickick というプログラムによって制御される。Linux/Unix のみならず、MacOS、(Cygwin 等のエミュレータを用いれば)Windows 上でも並列計算が可能である。ボランティアの作成した簡易 GUI を除けば、実用的な GUI は存在しない。
出典	GAMMES ホームページ： http://www.msg.ameslab.gov/, http://www.cfs.dl.ac.uk/gamess-uk/

表 20 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	Gaussian
開発元・開発責任者	Gaussian 社
ソフトウェア概要	Gaussian は、非経験的量子化学計算を行うプログラムである。Gaussian の開発を始めた J.A.Pople は、計算化学の普及に貢献したことで 1998 年にノーベル賞を受賞している。Gaussian では、Hartree-Fock 理論、密度汎関数理論、多体摂動論、CASSCF 理論、GVB 理論、結合クラスター理論、および SAC/SAC-CI 理論などの様々な量子化学理論に基づいた分子シミュレーションが可能である。Gaussian 社は、多くの大学の研究グループと協力関係にあり、その研究成果を Gaussian に反映させている。Gaussian は、開発元から有償で販売されている。
適用対象	Gaussian によるシミュレーションが最も適当なのは、原子数が数十個程度の、いわゆる低分子である。その理由は非経験的量子化学理論の多くで、分子の大きさの 4 乗から 6 乗に比例して計算量が増加するためである。しかし、最新版の Gaussian03 では、周期系の計算理論と QM/MM が追加されたので、ナノおよびバイオマテリアルのシミュレーションも可能になった。溶媒効果を取り入れた計算もできる。また、最近盛んに研究が行われている、種々の linear scaling 法を採用し、既存の量子化学理論の適用範囲も拡大しつつある。
機能・特徴	Gaussian の最大の特徴は、構造最適化、遷移状態計算、およびほとんど全ての分光学的物理量が計算可能な点にある。特に密度汎関数理論を用いると、比較的短時間で計算結果を得ることが可能である。既に述べたように、Gaussian03 では、分子力学とのハイブリッドである QM/MM 理論が拡張されたことによって、タンパク質のような巨大分子のシミュレーションも可能である。量子化学的に計算された力場による分子動力学シミュレーションもサポートされたので、時間発展ダイナミクスを行うことも可能となった。計算能率の向上のためには欠かせなくなった並列化であるが、Linda という別売りのプログラムを購入することで、Gaussian の Linux/Unix 上での並列計算が可能である。しかし、Gaussian の並列化はそれほど徹底されておらず、多ノードでの並列計算を行うことには適さない。プログラム制御のための GUI としては、別売りの GaussView がある。Windows と MacOS にのみ対応している。分子のグラフィカルなビルド、PDB データの読み込み、水素付加、アミノ酸の付加および変更などが可能。計算オプションのメニューからの選択が可能で、計算結果をアニメーションで示すこともできる。
出典	Gaussian 社 ホームページ： http://www.gaussian.com

表 21 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	MOPAC
開発元・開発責任者	Stewart Computational Chemistry 社, J.Stewart 氏
ソフトウェア概要	MOPAC は、J.Stewart らが開発を行っている様々な分子系に対する物性予測、構造解析および化学反応の研究のための汎用半経験的分子軌道計算プログラムである。半経験ハミルトニアンとしては、MNDO、MINDO/3、AM1 および PM3 が備わっており、中性分子、ラジカル、イオンおよびポリマーに対して、振動スペクトル、熱力学量、同位体置換効果、力の定数を計算する。また励起状態計算を行い、紫外・可視スペクトルを求めることができる。QM/MM 法の適用も可能である。現在 MOPAC2007 が Stewart Computational Chemistry 社のホームページを通じて、公的研究機関には無償で配布されている。日本では、富士通株式会社が MOPAC2006 の販売を行っている。
適用対象	主な適用対象を以下にあげる。 ・開殻系分子の電子スペクトル計算 ・QM/MM 法に基づくタンパク質の電子スペクトル計算 その他、様々な分子系に対して、 ・構造最適化計算 ・基準振動解析計算 ・静電ポテンシャル計算 ・COSMO 計算 などが可能である。
機能・特徴	・ MNDO、MINDO/3、AM1、PM3 の半経験的ハミルトニアンを用いる分子軌道計算 ・ RHF および UHF 計算 ・ 大規模配置間相互作用計算 ・ SCF 一点計算 ・ 分子構造最適化 ・ エネルギー勾配の極小化 ・ 遷移状態決定 ・ 反応経路計算 ・ 力の定数計算 ・ 基準座標解析 ・ 熱力学量計算 ・ 共有結合次数計算 ・ σ、π 型結合解析 ・ 動的および固有反応座標計算
出典	Stewart Computational Chemistry 社ホームページ： http://openmopac.net/MOPAC2007.html 富士通株式会社ホームページ： http://venus.netlaboratory.com/mopac2006/

表 22 ナノ・バイオ（分子科学）分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	ProteinDF
開発元・開発責任者	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、文部科学省 IT プログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト、佐藤文俊 東京大学助教授
ソフトウェア概要	ProteinDF は、100 残基規模のタンパク質に対して、全電子計算を実行することができる世界唯一のソフトウェアである。QM/MM のような分子の分断をしないので、分子の分断由来の不正確性が排除され、非常に精密な計算を行うことが可能である。特に 10kcal/mol 程度の自由エネルギー変化で生体内において機能を発揮するタンパク質を計算対象としている。ProteinDF は、東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページを通じて非営利目的の範囲で一般に無償で公開されており、アドバンスソフト株式会社はその商用版である Advance/ProteinDF を販売している。
適用対象	ProteinDF は 100 残基規模のタンパク質を計算対象とする。以下の解析を行う。 分子軌道エネルギー HOMO-LUMO ギャップ 分子軌道の等値面表示 マリケン電荷表示 表面上の静電ポテンシャル計算 現在、306 残基（4728 原子、26790 軌道）の全電子計算が達成されている。また金属タンパク質では、ヘム鉄を有する 104 残基のタンパク質であるシトクロム c（9600 軌道）
機能・特徴	以下の機能・特長を持っている。 ・タンパク質の全電子カノニカル波動関数計算ができる Gauss 型基底関数を用いた密度汎関数法プログラム ・大規模な分子系、金属タンパク質の計算に適化 ・制限付き閉殻 KS 法、非制限開殻 KS 法 ・damping 法、diis 法、level-shift 法 ・基底関数のデフォルトは split valence このような大規模計算を困難なく実行できるように、以下の機能をサポートしている。 ・水素付加 ・構造妥当性評価 ・良い初期値を作成する QCLO 法プログラムをサポート
出典	東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページ： http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/index.html アドバンスソフト株式会社 ホームページ： http://www.advancesoft.jp/

表 23 流体分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	STAR-CD
開発元・開発責任者	CD-adapco 社
ソフトウェア概要	STAR-CD は、非構造格子 3 次元熱流体解析コードで、解析対象は単純な熱流れ解析から、混相流、燃焼、回転機器、流体騒音、移動境界など多岐に渡り、解析メッシュ作成機能としてもサーフェスメッシュャー、サーフェスラッパー、ポリウムメッシュャーなどを標準機能として提供するほか、CAD との親和性を高めた、CAD の中で STAR-CD を利用するアドオン環境も用意されている。STAR-CD の開発と販売は CD-adapco 社が行っており、日本における代理店は株式会社シーディー・アダプコ・ジャパンである。
適用対象	STAR-CD の適用対象としては以下が挙げられる。 ・固体熱伝導や輻射／太陽輻射を含んだ熱問題 ・様々なタイプの混相流問題 ・化学反応／燃焼問題 ・回転機器問題 ・流体騒音問題 ・移動境界問題
機能・特徴	STAR-CD は以下のような物理モデル、機能を有する。 ・定常／非定常（陰解法、クランクニコルソン） ・層流／乱流 ・非圧縮性／圧縮性 ・非ニュートン流体 ・多孔質媒体（ポーラスメディア、ポーラスパッフル） ・熱連成（等方性/非等方性固体熱伝導、固体/流体間の熱伝達、輻射、ガス輻射） ・ラグランジェ混相流（分裂モデル、衝突合体モデル、壁面衝突モデル、液膜モデル） ・オイラー混相流（浮力モデル、仮想質量モデル、固体粒子応力モデル、流動床モデル） ・自由表面（熱移動、質量移動、沸騰モデル、圧縮性考慮） ・キャビテーションモデル（Barotropic モデル、BTF モデル、Rayleigh モデル） ・燃焼、微粉炭燃焼を含む化学反応 ・着火モデル、ノッキングモデル、NO_x モデル、Soot モデル ・移動境界（スライディングメッシュ、セルの追加／削除） ・シングルリファレンスフレーム、マルチリファレンスフレーム（陽解法および陰解法） ・空間差分スキーム（1 次風上、2 次風上、MARS、中心差分、SFCD、QUICK） ・最新の領域分割型 HPC パラレル計算技術による並列計算機能
出典	CD-adapco 社ホームページ： http://www.cd-adapco.com/ 株式会社シーディー・アダプコ・ジャパン ホームページ： http://www.cdaj.co.jp/product/000000starsuite/s000000starcd/index.html

表 24 流体分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	FLUENT
開発元・開発責任者	Fluent 社
ソフトウェア概要	FLUENT は、非圧縮性（低亜音速から低圧縮性（遷音速）、高圧縮性（超音速、極超音速）におよぶ複雑な流れに適用可能な汎用熱流体解析ソフトウェアである。マルチグリッド法により収束精度を高めたソルバーが、広範な速度領域において最適な計算効率で高精度の解を提供する。また、層流、乱流、伝熱、化学反応、混相流などの豊富な物理モデルと非構造格子による柔軟性や、解適合格子等のメッシュ最適化機能を備えており、様々な流れを正確に予測することができる。FLUENT は Fluent 社が開発・販売を行っており、日本では、フルーエント・アジアパシフィック株式会社が販売を行っている。
適用対象	FLUENT ではさまざまなタイプの流れや熱伝達および物質移動のモデル化が可能で、幅広い分野に適用でき、航空機、自動車、攪拌、発電・環境、ターボ機械、ポリマー、鉄鋼、石油・ガス、半導体、建築・空調、ガラス、バイオメディカル、化学プロセス、電気・電子機器といった分野で多数の実績を持つ。
機能・特徴	FLUENT では非構造格子で離散化した質量、運動量、熱、化学種に関する支配方程式を解く。豊富な物理モデルを搭載しており高度なカスタマイズも可能である。主な機能は以下の通りである。 ・ 定常/非定常流 ・ あらゆる速度域に対応 ・ 非粘性流、層流、乱流 ・ ニュートン流体、非ニュートン流体 ・ 強制/自然/混合対流を含む熱伝達、固体/流体連成熱伝達、ふく射 ・ 化学種の混合/反応 ・ 自由表面流/混相流モデル ・ 分散相のラグランジュ式追跡計算、融解／凝固を対象とした相変化モデル、非等方浸透性、慣性抵抗、固体熱伝導、空隙率を考慮した速度、多孔質面圧力ジャンプ条件を含む多孔質モデル ・ 移動物体周りの流れをモデル化するダイナミックメッシュ機能 ・ 複数基準座標系およびスライディングメッシュ ・ 動静翼相互作用をモデル化する接続境界面モデル ・ 流体騒音予測のための音響モデル ・ 物性値のデータベース
出典	Fluent 社ホームページ：http://www.fluent.com/ フルーエント・アジアパシフィック株式会社ホームページ： http://www.fluent.co.jp/

表 25 流体分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	PHOENICS
開発元・開発責任者	CHAM 社
ソフトウェア概要	PHOENICS は構造格子 3 次元熱流体解析コードで、プリ・ポストも装備されている。形状定義や CAD からのデータ読み込み、メッシュ作成、解析条件設定などのプリ処理から、解析後の温度分布図・圧力コンター・速度ベクトルなどの結果表示などのポスト処理が可能である。また、ソルバーは初期値、物性値、境界条件、その他多くの関数を組み込んでいるが、ユーザ自身でカスタマイズを行い、専用の計算モジュールを作成することが可能である。PHOENICS の開発・販売は開発元が行っており、東京支店も開設されている。
適用対象	PHOENICS の適用対象としては以下が挙げられる。 ・ 建築、土木 ・ 自動車 ・ 航空宇宙 ・ 化学、燃焼 ・ 防災 ・ 溶融炉 ・ 環境 ・ 電気、電子 ・ 原子力 ・ 海洋 ・ 医療
機能・特徴	PHOENICS は以下のような物理モデル、機能を有する。 ・ 緩和係数の自動設定機能 ・ 計算途中の収束履歴及びモニター点での変数の値をリアルタイム表示 ・ 有限体積法を使用 ・ 対流項は 1 次風上、ハイブリッド法、高次風上から選択可能 ・ 圧力と速度の結合には Simple 法を改良した Simplest 法を使用 ・ 連立方程式はストーン法、共役勾配法、Jacobi の点順法等から選択可能 ・ 2 相流解析には IPSA 法やパーティクルトラッキング、代数スリップモデルを使用 ・ 境界層流れや噴流の解析では計算機資源や計算時間を節約できる放物型計算機能また、プリプロセッサは以下の特徴を有する。 ・ 画面にものを置く感覚で形状データを作成可能 ・ CAD データからのデータ取り込み ・ 構造格子を用いており、メッシュ設定は短時間で可能 ・ 計算格子が規則的に並ぶ構造格子のため、物理モデルを取り込みやすい ・ Cut-Cell 手法を用いており、1 つの格子の中で、流体、固体を自動認識可能 ・ 形状データの作成だけでなく細かい境界条件も取り込むことが可能
出典	CHAM 社ホームページ：http://www.phoenics.co.jp

表 26 流体分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	SCRYU
開発元・開発責任者	株式会社ソフトウェアクレイドル
ソフトウェア概要	SCRYU は形状を忠実に再現できる非構造格子を採用し、かつ使い勝手を重視した三次元熱流体解析システムである。計算は、流れと熱（伝導・伝達・放射）のほか、粒子追跡や自由表面、ファンなどの回転体を扱う移動メッシュなど、主に自動車、機械分野に必要な機能を備えている。また、オートメッシュ機能や条件設定ウィザードなど、従来の汎用流体解析ソフトウェアにありがちな煩雑さを極力排除したシステムとなっている。SCRYU の開発と販売は株式会社ソフトウェアクレイドルが行っている。
適用対象	SCRYU の適用対象としては以下が挙げられる。 ・ 自動車の空力 ・ 自動車部品 ・ ファン、タービン ・ ポンプ ・ 攪拌槽 ・ 放熱部品
機能・特徴	SCRYU は以下のような物理モデル、機能を有する。 ・ 完全不連続接合 ・ ALE(移動境界、回転境界) ・ 圧縮性/非圧縮性流体 ・ 周期境界 ・ 解適合格子 ・ ユーザ関数 ・ 定常/非定常 ・ 層流/乱流 ・ 非ニュートン流体 ・ 固体/流体の熱解析 ・ 熱(伝導、対流、放射-VF 法-) ・ 拡散 ・ 多種流体 ・ ファンモデル ・ 粒子追跡 ・ 化学反応 ・ 沸騰熱伝達 ・ 放射フラックス法 また、プリプロセッサは以下の特徴を有する。 ・ CAD インターフェース ・ 形状（メッシュ）データインターフェース ・ 自動格子作成 ・ プリズム層挿入 ・ 境界条件設定 ・ 操作手順管理機能(History)
出典	株式会社ソフトウェアクレイドル ホームページ： http://www.cradle.co.jp/

表 27 流体分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	ANSYS CFX
開発元・開発責任者	ANSYS 社
ソフトウェア概要	ANSYS CFX は汎用有限体積法熱流体解析ソフトウェアであり、一般的な流体の流れや熱伝達（固体の共役熱伝導含む）をはじめとして、様々な流体工学問題に適用可能である。 また、使い易さ、ロバスト性、計算精度に定評があり、ANSYS との連携により、流体－構造連成解析が可能である。ANSYS CFX は ANSYS 社が開発と販売を行っており、日本ではアンシス株式会社とサイバネットシステム株式会社が販売を行っている。
適用対象	ANSYS CFX の適用対象としては以下が挙げられる。 ・ 航空宇宙 ・ 自動車 ・ 回転機械 ・ 化学プロセス－石油化学 ・ 火災－安全 ・ 医療 ・ 発電 ・ 海洋
機能・特徴	ANSYS CFX は以下のような特徴があり、 ・ 連成マルチグリッドリニアソルバー（ソルバーテクノロジー） ・ 不連続メッシュを接続するための使い易いインターフェース機能 ・ 高効率を実現した並列処理機能 ・ 高機能なプリ・ポスト機能 ・ 複数座標系（回転モジュール）、多相流、燃焼・反応、輻射など、広範囲な物理モデルに対応している 以下の物理モデルを有する。 ・ インポート可能なメッシュフォーマット ・ 定常／非定常 ・ 層流／乱流 ・ 圧縮性／非圧縮性 ・ 伝熱／断熱 ・ 運動エネルギー効果 ・ 流体抵抗 ・ 化学種 ・ メッシュモーフィング機能 ・ インターフェース機能 ・ 乱流モデル ・ 複数座標系 ・ 多相流 ・ 燃焼・反応 ・ 輻射 また、ANSYS との連携により、流体－構造連成解析が可能
出典	ANSYS 社ホームページ：http://www.ansys.com/ アンシス株式会社ホームページ：http://ansys.jp/index.html サイバネットシステム株式会社 ホームページ： http://www.cybernet.co.jp/ansys/product/ansys/cfx/

表 28 流体分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	FrontFlow/red	
開発元・開発責任者	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、文部科学省 IT プログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト、大島伸行 北海道大学教授、張会来 氏 アドバンスソフト株式会社	
ソフトウェア概要	FrontFlow/red は非定常流動を高精度に予測可能な LES(Large Eddy Simulation)に基づいた乱流燃焼解析コードである。SIMPLE 法に基づく陰解法を採用し、圧縮性流体解析および低マッハ数近似を施した非圧縮性流体解析が可能である。FrontFlow/red は、東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページを通じて非営利目的の範囲で一般に無償で公開されており、アドバンスソフト株式会社はその商用版である Advance/FrontFlow/red を販売している。	
適用対象	質量、運動量、エネルギー、化学種の各保存方程式および状態方程式の五つの式が基礎方程式として構成されており、空間の離散化は有限体積法に従っている。対応メッシュは三次元の任意の境界形状に対応して、六面体、三角柱、四角錐および四面体の要素が混在するメッシュを取り扱うことが可能である。また、乱流モデルとしては、RANS(Reynolds Averaged Navier-Stokes)または LES モデルが選択でき、用途に応じた乱流解析が可能である。なお、モデルなし(DNS)の選択も可能である。また、燃焼に関する化学反応モデルはアレニウスの式による総括反応、素反応モデルにより化学種の生成速度を求めることが可能であり、非定常燃焼流れの LES が可能である。この他、流体音響やキャビテーション流れなど様々な形態を対象とした解析が可能である。	
機能・特徴	項目	機能
	解析機能	定常／非定常／非圧縮性／圧縮性／低マッハ数近似／強制対流／自然対流／固体の熱伝導
	乱流モデル	LES (Smagorinsky モデル、Dynamic SGS モデル)／DNS／低レイノルズ数 $k-\varepsilon$ モデル／高レイノルズ数 $k-\varepsilon$ モデル
	燃焼・化学反応	素反応／渦消散／総括反応
	メッシュ形状	6 面体／4 面体／3 角柱／4 角錐／これらのハイブリッド
	メッシュ移動	スライディングメッシュ機能
	離散化	セル節点型有限体積法
	アルゴリズム	SMAC／SIMPLE／Rhie-Chow 法による圧力振動の抑制／Muzaferija の手法による拡散項の精度向上
	時間積分	Euler 陽解法／Euler 陰解法／2 次精度 Crank-Nicolson 法／2 次精度 Adams-Bashforth 法／3 次精度 Adams-Moulton 法／4 次精度 Runge-Kutta 陽解法
出典	東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページ： http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/index.html アドバンスソフト株式会社(http://www.advancesoft.jp/)資料	

表 29 流体分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	PowerFLOW
開発元・開発責任者	Exa 社
ソフトウェア概要	PowerFLOW は、格子ボルツマン法（Lattice Boltzmann Method, LBM）を用いた流体解析コードである。LBM は、統計力学に基づく数値流体シミュレーション法であり、連続体である流体をメゾスケールの仮想的な粒子の集合体と仮定し、粒子が繰り返す衝突と併進を通して、マクロスケールでの流動現象を創発的に再現する。LBM は、非圧縮性流れ解析の並列計算による効率の良い並列化、複雑な形状を有する固体表面境界条件の適用の容易さ等の利点を持つ。空間メッシュの生成が不必要なため短時間で解析モデルを作成できることと、大規模 PC クラスタによる非定常解析に適していることが大きな特徴である。
適用対象	PowerFLOW の主なアプリケーション分野は以下の通りである。 自動車産業 車両全体の外部抗力、揚力等の空力解析 音源の解明及びサイドミラー、アンテナ、ガラスオフセット等の空力騒音解析 ダクト、エンジン・ルーム等の冷却解析 冷暖房空調設備における伝熱流動解析 エレクトロニクス産業 システム、基盤及びチップレベルの冷却設計 冷却フィン及びヒートシンク設計 航空宇宙分野における空力及び空力騒音解析
機能・特徴	PowerFLOW には、以下のシミュレーション機能がある。 低レイノルズ数問題に対しては、DNS（Direct Numerical Simulation）を使用 高レイノルズ数問題に対しては、VLES（Very Large Eddy Simulation）を使用 外部空力及び外部空力騒音解析機能 熱混合／対流解析及び重力／浮力解析機能 ボクセルで構成される立方体グリッド及びボクセルと表面ファセットの交点（サーフェル）を自動的に生成する機能 シミュレーション機能は 512 プロセッサまで線形に向上することが特徴
出典	Exa 社 ホームページ： http://www.exa.com/

表 30 流体分野アプリケーションソフトウェア

ソフトウェア名	FrontFlow/blue	
開発元・開発責任者	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、文部科学省 IT プログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト、加藤千幸 東京大学教授	
ソフトウェア概要	FrontFlow/blue は非圧縮流体の非定常流動を高精度に予測可能な LES(Large Eddy Simulation)に基づいた三次元汎用流体解析コードである。FrontFlow/blue は、東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページを通じて非営利目的の範囲で一般に無償で公開されており、アドバンスソフト株式会社はその商用版である Advance/FrontFlow/blue を販売している。	
適用対象	形状適合性に優れた有限要素法による離散化を採用し、ファン/ポンプ等の流体機械や 複雑形状周りの非定常乱流解析および流れから発生する騒音の予測が可能である。さらに、均質媒体とキャビテーション発生モデル項によるキャビテーション流れの解析をオプションとして実装しており、翼周りのキャビテーションクラウド放出などの解析も可能である。	
機能・特徴	FrontFlow/blue には以下のような解析機能が備えられている。	
	項目	機能
	乱流の扱い	LES (Smagorinsky モデル、Dynamic SGS モデル) / DNS
	メッシュ形状	8 節点 6 面体
	離散化	上流化有限要素法
	アルゴリズム	ABMAC 法 / Fractional-Step 法
	時間積分	Euler 陽解法
	移流項の離散化スキーム	Normal Galerkin type / Streamline upwind Petrov type / Time-accurate streamline upwind type
	乱流音	Lighthill-Curl モデル
	並列計算	領域分割法による並列計算
	メッシュ作成	GRIDGEN 等の市販ソフトを利用
	可視化	FIELDVIEW/AVS/MicroAVS 等の市販ソフトを利用
	動作環境	HI-UX/MPP(Ver.03.07)/IRIX(Ver.6.4、6.5)/SUPER-UX (地球シミュレータ) /Linux(Ver.2.4.19)で動作確認
出典	東京大学生産技術研究所「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」ホームページ： http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/index.html アドバンスソフト株式会社 ホームページ： http://www.advancesoft.jp/	