

## 戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

小池 秀耀\*

Development of Frontier Simulation Software  
for Industrial Science Project

Hideaki Koike\*

## 1. はじめに

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクトは、わが国のソフトウェア開発プロジェクトで、特筆すべきプロジェクトである。まず第1に純粋のソフトウェア開発プロジェクトとしては、その規模が最大級であることである。継続プロジェクトを含めると6年間で約70億円の国費が投入されており、プロジェクトへの参加人数は述べ100人を超える。第2にその開発するソフトウェアの範囲の広さである。流体、構造、電磁気、バイオ、ナノの分野をカバーしており、連続体力学、電磁気学、量子力学といった、自然界の基本となる運動方程式を全てカバーするソフトウェアの開発を目指していることである。これらのソフトウェアは科学技術計算の基盤となるソフトウェアであり、ここを抑えられると、その他の科学技術計算用ソフトウェアの開発が極めて難しくなる。その意味で「戦略的基盤ソフトウェア」と呼んだのである。これらのソフトウェアは欧米に大きく遅れをとっており、産業界の大部分は欧米製のソフトウェアを使用している現状がある。さらに第3の理由として、このプロジェクトの画期的な点は、研究成果を産業界に普及させるためのモデルの構築を目指した点にある。すなわち、ベンチャー企業による事業化、実用的ソフトウェアを開発できる人材の育成も目指していた。わが国において、計算科学技術用ソフトウェアを開発する企業、ソフトウェアを開発できる人材が急激に減少して

\*アドバンスソフト株式会社 代表取締役社長  
Representative director president, AdvanceSoft Corporation

いる状況を考えると、この第3の理由は極めて重要である。

筆者は2002年にこの「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」を京都大学で開かれた会合で紹介したことがあったが、終了後、京都駅まである高名な研究者とタクシーで一緒に帰ったが、その時「戦艦大和のようなプロジェクトですね」とその人が言った事を今も忘れられない。とっさに、筆者は「戦艦大和のようにならないようにしなければ・・・」と答えたが、その人がどのような思いで「戦艦大和」と言ったのかはわからない。46センチ主砲と最強の装甲を備えた時代遅れの無用の長物、あるいは、日本が敗戦する直前に沖縄に特攻出撃しあえなく撃沈された戦艦、そんな光景が「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」に重なったものである。

## 2. プロジェクトの発端

さて、戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクトの発端は新エネルギー・産業技術総合開発機構より「並列コンパイラ適用例に関する調査研究」(高度コンピューティング用戦略的ソフトウェア開発プログラム調査)を当時の株式会社富士総合研究所が委託を受けたことにある。そのときの提案書を図2.1に示す。

この調査を実施するため小林敏雄 東京大学生産技術研究所教授(当時)を委員長とする委員会を組織し、調査結果をとりまとめ、わが国の高度シミュレーションソフトウェア開発計画を提言した。この提案では、わが国の産業界で使用されているシミュレーションソフトウェア

の大部分は欧米製であり、この状況を放置することはわが国の科学技術、産業競争力にとって憂慮すべき事態であり、早急に国家プロジェクト

トとして基盤的シミュレーションソフトウェアを開発し、それを保守発展させる体制の構築が必要であると指摘した。

平成 12 年 10 月 6 日

プロジェクトに関するミニ調査提案

株式会社 富士総合研究所 計算科学技術研究センター

小池 秀耀

1. 提案プログラム名：

高度コンピューティング用戦略的ソフトウェアの研究開発プログラム

2. 契約予定先：株式会社 富士総合研究所 計算科学技術研究センター

3. 背景・目的

3.1 背景

高度コンピューティング関連技術の重要性については「国家産業技術戦略」においても指摘されている通りである。この分野において、わが国はハードウェアに関しては世界最先端の技術水準にあるが、シミュレーション用ソフトウェアに関しては、欧米に大きく後れを取っているのみならず、インド、台湾等のアジア諸国にも後れを取りつつある現状にある。シミュレーション用ソフトウェアに関して普及している実用的ソフトウェアで、わが国発のものはほとんどない。近年、シミュレーション用ソフトウェアの開発能力に関して、欧米とわが国の格差はさらに急速に拡大している。高度コンピューティングは科学技術、産業競争力の基盤技術であり、このような状況を放置することはできない。

3.2 目的

以下の目的のもとに調査を実施する。21 世紀のリーディング産業分野における基盤的シミュレーション用ソフトウェア（以下、戦略的ソフトウェア）を開発し、世界に発信する。また、本プログラム（高度コンピューティング用戦略的ソフトウェアの研究開発プログラム）を通じてシミュレーション用ソフトウェア開発技術者の育成、高度なソフトウェア開発企業を育成し、世界トップ水準のシミュレーション用ソフトウェア開発体制をわが国に確立する。

本ミニ調査の目的は、上記の「高度コンピューティング用戦略的ソフトウェアの研究開発プログラム」を実施するために必要な事項について調査することにある。

4. 内容

シミュレーション用ソフトウェアの開発において、わが国が欧米に大きく立ち後れている原因は、実用的ソフトウェアの開発戦略に問題があることが指摘されている。米国では図 1 に示すように、基礎研究から商品化までを国がシームレスに支援する研究開発戦略が存在する。わが国の場合、基礎研究に国の資金が投入され、戦略的ソフトウェア開発の部分への支援が欠落している。シミュレーション用ソフトウェアは基盤技術として極めて重要ではあるが、市場は小さく、基礎研究をベースに市販のソフトウェアを民間企業が開発することは経済的困難であると同時に、戦略的ソフトウェアの開発にはさまざまな専門家の協力が必要であり、1 研究機関、1 企業で開発することは困難である。このような現状はわが国における実用レベルのシミュレーション用ソフトウェア開発の機会がないことを意味し、大規模な戦略ソフトウェア開発を実施できる人材、企業が育成されない主要な要因となっている。コンピューターの性能向上に伴い、さまざまなシミュレーションが可能となりつつあるが、これに伴い実用的シミュレーション用ソフトウェアもますます複雑・大規模になっている。このようなソ

ソフトウェアを開発する機会がない現状を放置するならば、シミュレーション用ソフトウェアの開発能力に関してわが国は決定的な後れを取ることは必至である。このような現状を打破するには、国家プロジェクトとして、21世紀をリードする産業技術、科学技術分野の戦略的ソフトウェアを一挙に開発するプロジェクトを実施し、欧米をキャッチアップする必要がある。今が、このようなプロジェクトを実施できる最後のチャンスと思われる。現状を放置するならば、人材をはじめとした開発能力の点で欧米をキャッチアップすることは不可能となると考えられる。

提案者らは、戦略的ソフトウェアの開発の体制、戦略的ソフトウェア（テーマ）の候補等について、いくつかの研究会を組織し検討を行ってきた。

本ミニ調査では、今までの研究をベースに、以下の点を検討し、「高度コンピューティング用戦略的ソフトウェアの研究開発プログラム」の提案書を作成する。

- ① 戦略的ソフトウェア開発の重要性
- ② 国内外の動向
- ③ 戦略的ソフトウェアの開発戦略
- ④ 戦略的ソフトウェアの候補
- ⑤ 戦略的ソフトウェアの開発体制

#### 5. 調査方法

調査方法は以下の通りである。

- ①すでに組織している研究会（疲労シミュレーション研究会、次世代流体解析研究会、並列生物情報処理イニシアティブ、ナノスケール・デバイス検討会、仮想実験技術研究会）等において、検討を行う。特に、個別のテーマについて具体的に検討する。
- ②インターネット、文献などにより国内外の動向を調査する。
- ③シミュレーション用ソフトウェアに関する重要人物に聞き取り調査を行う。
- ④株式会社 富士総合研究所内に、高性能コンピューティング関係の専門家による委員会を設け検討を行う。

#### 6. 国の「産業技術戦略」での位置づけ

「産業技術戦略」の「情報通信産業技術戦略」は次のように指摘している「研究開発や設計・製造の場面においては、実験や試作というプロセスが多く、コンピューター上のシミュレーションで代替することが可能となる。また、研究に必要な情報の入手についても、情報通信ネットワークにより世界上に存在する研究成果を瞬時に呼び出すことを可能とする。このような情報通信技術は、わが国の産業活動の発展にとって不可欠なものである。」また、「②高度コンピューティング関連技術」の「b. シミュレーション技術」において次のように指摘している「コンピューター・シミュレーションは、自然科学、エンジニアリング、社会科学など多様な分野における複雑な問題を安価で高速かつ安全に解決できる手法である。各研究開発分野からのニーズに応じていくためには、より現実に近い現象をコンピューター上で実現していくためのシミュレーション技術およびそのシミュレーション結果をユーザーが理解しやすい形で提供していくための技術が必要となる。」「大規模ソフトウェア開発の経験を有する人材等、企業の最新のニーズに適応した人材を大学が供給できていないという指摘がある」さらに共通基盤技術としてソフトウェア技術の課題を次のように指摘している。

- ソフトウェア分野の技術水準の抜本的向上によるわが国からの独創的なソフトウェア・コンテンツの発信
- ソフトウェア・オブジェクト技術、コンポーネント技術等によるソフトウェア開発の生産性の抜本的な向上、品質向上

本提案の「高度コンピューティング用戦略的ソフトウェアの研究開発プログラム」は「産業技術戦略」が指摘する上記の課題の解決に直結するものである。

7. その他

7.1 通商産業省類似プロジェクトとの違い

シミュレーション用ソフトウェア開発を目的としたプロジェクトは、特定分野に関して極少数行われているに過ぎず、本提案のように、シミュレーション用ソフトウェアに関して欧米をキャッチアップし、わが国のソフトウェア開発技術水準、ソフトウェア開発体制、ソフトウェア蓄積の面において世界トップレベルに引き上げようというプロジェクトは存在しない。

7.2 他省庁類似プロジェクトとの違い

IPAにおいて、ソフトウェア開発プロジェクトが多数行われているが、シミュレーション用ソフトウェア開発の比率はごくわずかである。また、プロジェクトの内容も基礎研究と市販ソフトウェア開発に偏っており、戦略的ソフトウェア開発に関してはほとんど行われていない。他省庁における高度コンピューティング関連プロジェクトもハードウェア（ネットワークを含む）と基礎研究領域のソフトウェア開発に集中している。他省庁においても、本提案のように、シミュレーション用ソフトウェアに関して欧米をキャッチアップし、わが国のソフトウェア開発技術水準、ソフトウェア開発体制、ソフトウェア蓄積の面において世界トップレベルに引き上げようというプロジェクトは存在しない。

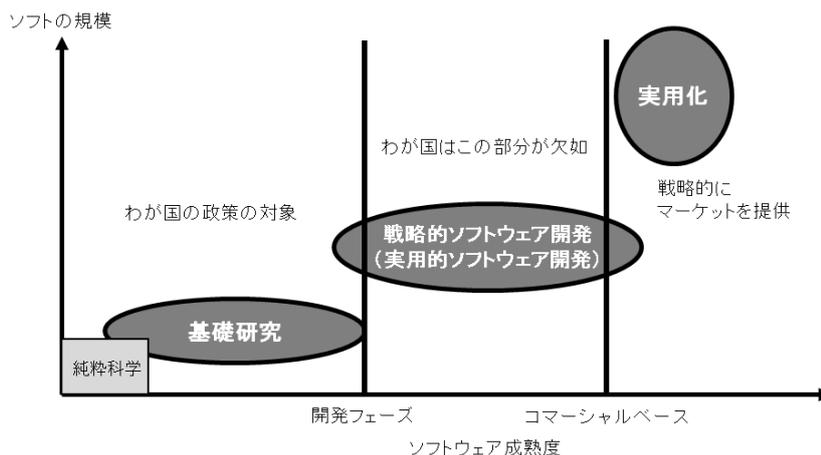


図 1 米国のソフトウェア開発戦略

図 2.1 提案書

この提案は新エネルギー・産業技術総合技術開発機構のプロジェクトとして実現することはなかったが、翌 2001 年に文部科学省 情報課の篠崎資志氏が文部科学省のプロジェクトとして取り上げ、その実現のために尽力され、2002 年に「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」として実現することとなった。

3. 戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクトの提案

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクトの

事業期間は、2002 年～2004 年（3 年間）、予算は総額約 40 億円、研究員 170 名×3 年である。後継プロジェクトの革新的シミュレーションソフトウェア開発プロジェクトの事業期間は 2005 年～2007 年（3 年間）で事業規模は約 30 億円、研究員 120 名×3 年である。合計 6 年間、約 70 億円プロジェクトであり、わが国のシミュレーション用ソフト開発プロジェクトとしては最大規模である。いずれのプロジェクトも東京大学 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て、強力な産学官連携

により推進した。産業界としては本プロジェクトのために新たに設立されたアドバンスソフトウェア株式会社が参加した。「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」の応募書の要約を以下に示す。

### ITプログラム 応募書 要約

- (1) 研究開発課題名：戦略的基盤ソフトウェアの開発
- (2) 代表機関・組織：東京大学 生産技術研究所
- (3) 研究開発代表者氏名・所属部署：小林 敏雄 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
- (4) 研究開発の概要
 

世界水準の戦略的基盤ソフトウェアを開発すると共に、わが国の高度コンピューティング(HPC)用ソフトウェア開発・保守体制の確立を目標とする。本プロジェクトの達成目標は以下の通りである。

  - ①重点4分野をカバーする複雑・大規模な世界水準の戦略的基盤ソフトウェア(表1)を開発し公開する。(総ステップ数は100万ステップ規模)
  - ②戦略ソフトを開発できるトップレベルの人材を世界最先端のソフトウェア開発を通じて育成する。(博士10人以上、トップクラスの大規模ソフトウェア開発プロジェクトマネージャー5人以上、戦略的ソフトウェア開発技術者・研究者100名以上)
  - ③HPC用戦略的基盤ソフトウェア開発の大学と企業の連携による研究拠点の構築  
東京大学 生産技術研究所に民間企業と連携して計算科学技術連携研究センターを設立、集中して本プロジェクトを実施。わが国のHPC用ソフトウェア開発の研究拠点を構築する。
  - ④わが国のHPC戦略基盤ソフトウェア開発を担えるベンチャー会社の設立  
先端的ソフトウェアは事業化され、絶えず改良・メンテナンスを継続できないと、デファクトスタンダードにならない。本プロジェクト終了後の事業化も目指し、株式会社 富士総合研究所、株式会社 日立製作所などが、ベンチャー会社を設立し、計算科学技術連携研究センターと連携して本プロジェクトを実施する。

表1 ソフトウェア・システムの概要

分野	サブシステム	サブシステムの概要
バイオ	次世代量子化学計算サブシステム	1000 残基規模のタンパク質の電子分布を計算可能なソフトウェアを開発。また 100 残基規模のタンパク質の全電子分布データベースを構築。タンパク質の機能・構造解析を加速。
	タンパク質-化学物質相互作用解析サブシステム	タンパク質と医薬品や環境ホルモンなどとの相互作用を量子化学的に解析するシステムを開発。糖尿病、高血圧、がんなどの治療薬の開発を加速。
物質・ナノ	ナノシミュレーション・サブシステム	分子原子の運動や構造の量子力学のシミュレーション・システムを開発。次世代 LSI の開発などナノテクノロジーを加速。
環境	次世代流体解析サブシステム	燃焼などの複雑流体の解析システム。クリーンで燃焼効率のよい燃焼器、自動車のエンジンなどの開発を実現。
防災	次世代構造解析サブシステム	並列コンピューターを駆使した、次世代構造解析システム。大規模構造物の高精度な計算や流体-構造解析などが可能
情報	統合プラットフォーム	複雑・大規模なソフトウェア・システムをネットワーク上で統合化するプラットフォーム (PSE : Problem Solving Environment) を開発。複雑・大規模ソフトウェア・システムのアーキテクチャを確立する。
	HPC ミドルウェア	非構造格子の開発基盤 (並列処理ライブラリーなど) を開発する。

(注) なお、後継プロジェクトの「革新的シミュレーションソフトウェア開発プロジェクト」では次の2テーマが追加された。

分野	サブシステム	サブシステムの概要
生命現象	器官・組織・細胞マルチスケール・マルチフィジックス	モデル変形、パラメータ算出機能を有する医用画像処理と循環器系の流体-構造連成を含む統合解析
マルチスケール連成	革新的汎用連成シミュレーション	並列環境対応の汎用弱連成解析用エンジンと複雑形状対応メッシュ作成及び複数現象表示機能
都市の安全・環境	都市の安全・環境シミュレーション	高精度3次元モデル/1次元ネットワーク/非難モデルの統合解析と消化、移流拡散、延焼モデルを中核とする大規模LES解析

(5) 研究開発実施体制

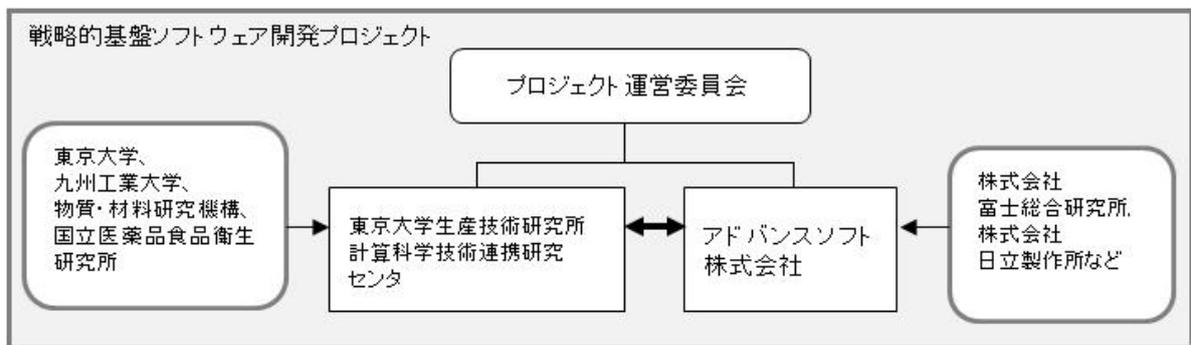


図1 研究開発実施体制

本プロジェクトは東京大学 生産技術研究所の計算科学技術連携研究センターで集中して実施する。計算科学技術連携研究センターは全国の大学、国立機関、民間企業の優れた研究者をメンバーとしている（現在15名）。また、株式会社 富士総合研究所と株式会社 日立製作所などは、アドバンスソフト株式会社を平成14年5月1日に設立する予定である。アドバンスソフト株式会社には株式会社 富士総合研究所と株式会社 日立製作所から25名程度のトップクラスの技術者が出向する。計算科学技術連携研究センターとアドバンスソフト株式会社は連携して、本プロジェクトを推進する。経理処理は東京大学 生産技術研究所 事務部が一括して執行する。

(6) 研究成果

本プロジェクトでは、研究成果をフリーソフトウェアとして公開し、世界に広く普及させ、デファクトスタンダードの地位を確立することを目指す。同時に、本プロジェクトを推進するために設立したベンチャー会社 アドバンスソフト株式会社は、本プロジェクト終了後も独自に、ソフトウェアの改良・普及を事業として、継続して実施する（有料）。事業化により、継続的改良が可能となり、**事業化 → 開発資金の獲得 → 継続的改良** という正のフィードバックを確立する。また、アドバンスソフト株式会社は、本事業終了後、本事業で育成した人材を採用し事業を継続・発展させていく。これにより、雇用を確保し（5年後の70名程度を予定）、わが国の計算科学技術用ソフトウェア開発・保守体制の確立に貢献する。

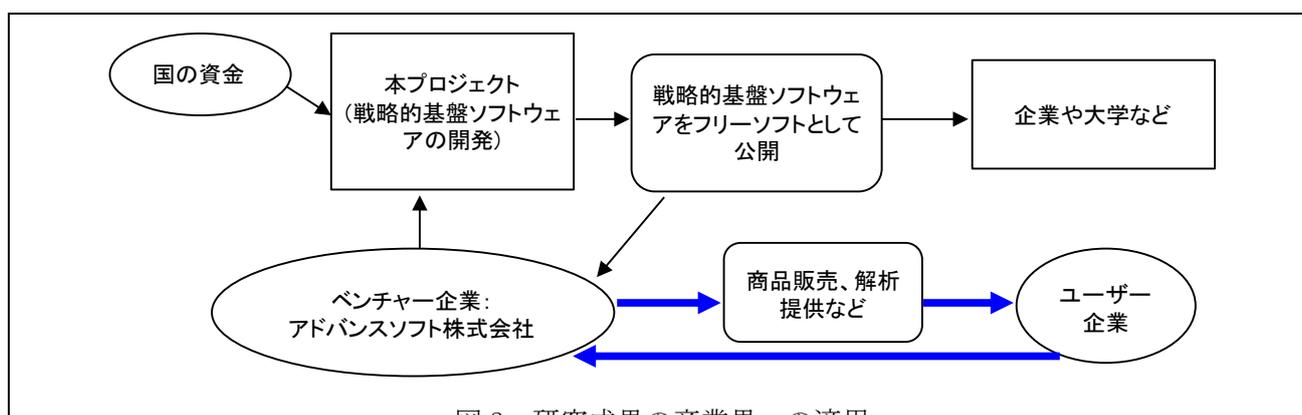


図 2 研究成果の産業界への適用

#### (7) 産業界との関係

本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と、株式会社 富士総合研究所、株式会社 日立製作所などが5月1日に設立する予定の計算科学技術用ソフトウェア開発の専門会社 アドバンスソフト株式会社が連携して推進する。

#### (8) 他プロジェクトとの連携協力

他プロジェクトとの連携は、特に考えていない。

#### (9) 研究人材の活用

本プロジェクトにおける人材育成は、わが国の計算科学技術用ソフトウェア開発を支える、大規模で複雑な実用ソフトウェア開発の中核技術者／研究者の育成を目標とする。常時40～50名程度のポストドクを採用し、トップクラスの研究者、技術者とともに計算科学技術用ソフトウェアの開発を推進する。5年間で延べ100名以上の戦略的ソフトウェア開発技術者を育成する。また、大学院博士課程の研究者も本プロジェクトに積極的に参加させ、5年間で10名以上の博士を育成する。さらに、トップクラスの大規模ソフトウェア開発プロジェクトマネージャー（数十万行のソフトウェアのデザインと開発プロジェクトの管理ができる技術者）を5人以上育成する。ポストドクは計算科学技術連携研究センターで一括して採用し、適切な研究チームに配属する。チーム間の移動、連携研究センターとアドバンスソフト株式会社との間の移動も適宜実施し、実用的な大規模ソフトウェアを開発できる優れた人材を育成する。本プロジェクトを推進するアドバンスソフト株式会社は、計算科学技術用ソフトウェア開発の事業を積極的に展開し、5年後には、70名規模の計算科学技術用ソフトウェア開発の専門会社に発展する計画である。本プロジェクトで育成された優れた人材を積極的に採用し、わが国の計算科学技術用ソフトウェア開発を担う。

図 3.1 応募書の要約

## 4. プロジェクトの目標

このプロジェクトの特徴はきわめて戦略的であることである。すなわち、このプロジェクトは単に優れたソフトウェアを開発することのみを目的としておらず、わが国のシミュレーション用ソフトウェアの開発、保守体制の確立を目的としており、達成目標は以下の通りである。

- ①重点4分野をカバーする複雑・大規模な世界水準の戦略的基盤ソフトウェアを開発し公開する。（総ステップ数は100万ステップ規模）
- ②戦略ソフトを開発できるトップレベルの人材を世界最先端のソフトウェア開発を通じて育成する。（博士10人以上、トップクラスの

大規模ソフトウェア開発プロジェクトマネージャー 5人以上、戦略的ソフトウェア開発技術者・研究者 100人以上)

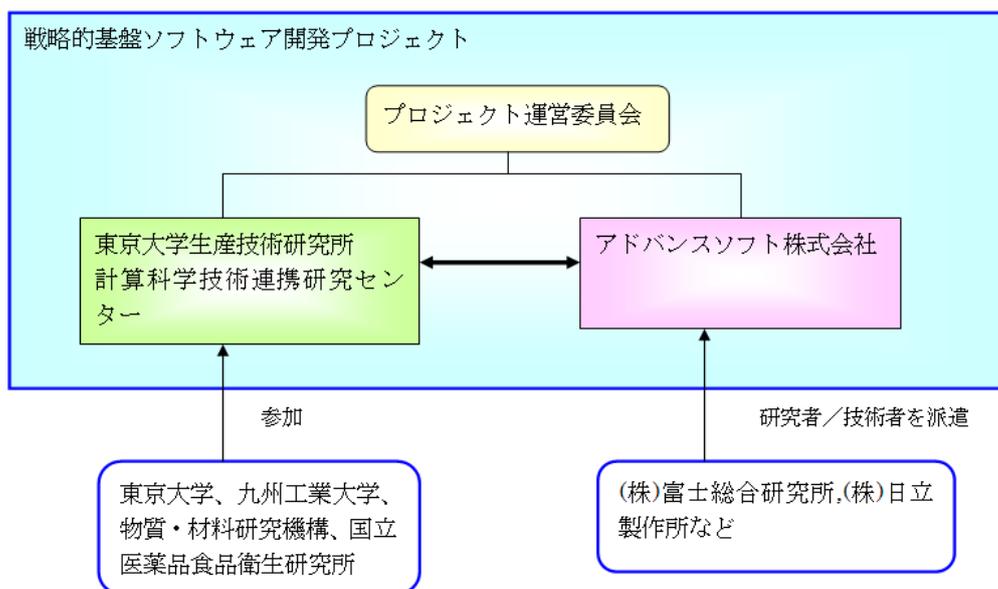
- ③HPC用戦略的基盤ソフトウェア開発の大学と企業の連携による研究拠点の構築  
 東京大学 生産技術研究所に民間企業と連携して計算科学技術連携研究センターを設立、集中して本プロジェクトを実施。わが国のHPC用ソフトウェア開発の研究拠点を構築する。
- ④わが国のHPC戦略基盤ソフトウェア開発を担えるベンチャー会社の設立  
 先端的ソフトウェアは事業化され、絶えず改良・メンテナンスを継続できないと、デファクトスタンダードにならない。本プロジェクト終了後の事業化も目指し、株式会社 富士総合研究所、株式会社 日立製作所などが、ベンチャー会社（アドバンスソフト株式会社）を設立し、計算科学技術連携研究センターと連携して本プロジェクトを実施する。

すべきものであるが、その研究成果を実用的ソフトウェアとしてまとめあげ第三者にリリースする部分は民間企業の組織・運営のほうが適している。本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と株式会社富士総合研究所、株式会社日立製作所などが5月1日に設立した計算科学技術用ソフトウェア開発の専門会社 アドバンスソフト株式会社が連携して推進した。

本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で、原則として集中方式で実施する。このため、株式会社富士総合研究所、株式会社日立製作所などは、新たにアドバンスソフト株式会社を設立し、本プロジェクトを推進するのに必要な研究者、技術者をアドバンスソフト株式会社に出向させる。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とアドバンスソフト株式会社は一体となって、本プロジェクトを推進する。

5. 開発体制

戦略的基盤ソフトウェアを開発することは大学や民間企業が単独で実施することは困難である。なぜなら、先端的な研究開発は大学が実施



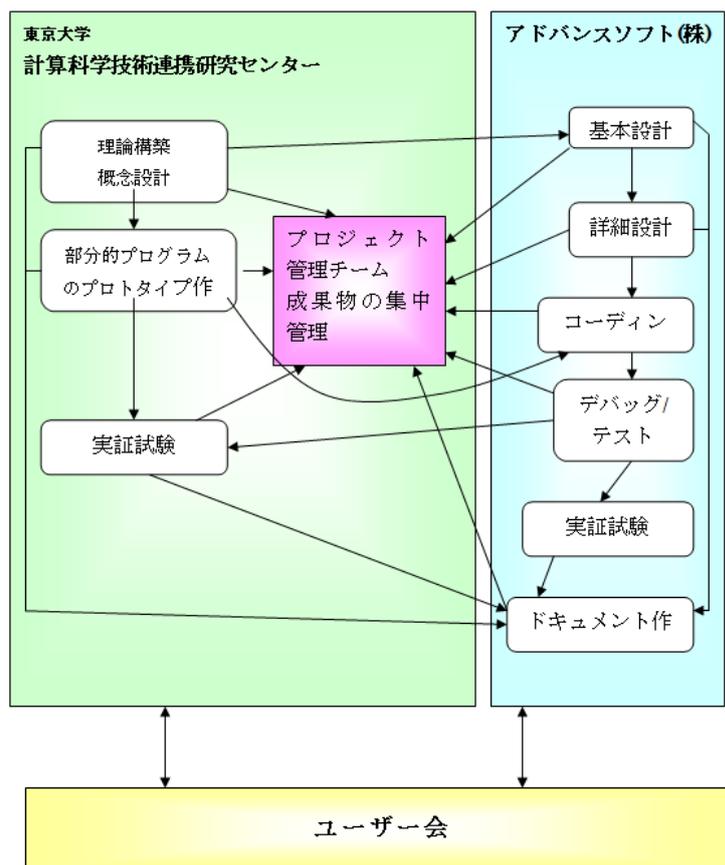


図 5.1 大学等の研究機関と民間企業との役割分担

### 5.1. 大学等の研究機関と民間企業との役割分担

役割の分担は以下のとおりである。

◆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

- ・ 理論的研究
- ・ 概念設計
- ・ 部分的プログラムのプロトタイプ作成
- ・ 基本設計 その1 (部分的プログラム)
- ・ 実証試験 その1 (論文ベース)
- ・ プロジェクト管理

◆アドバンスソフト株式会社

- ・ 基本設計 その2 (全体の設計)
- ・ 詳細設計
- ・ コーディング
- ・ デバッグ

- ・ 試験

- ・ 実証試験 その2 (実用問題)
- ・ マニュアル作成
- ・ プロジェクトの事務局業務

### 6. 研究開発実施体制図

本プロジェクトは東京大学生産技術研究所に研究者・技術者が結集し、一体となって開発を進める。大学、公的研究機関の研究者は計算科学技術連携研究センターに結集し、民間企業の研究者・技術者は原則としてアドバンスソフト株式会社に結集する。プロジェクトの推進はプロジェクト運営委員会を中心に推進する。図 6.1、図 6.2 下記にプロジェクト発足当時の組織図を示す。ただし、プロジェクトが進展するに伴い運営委員は大幅に変化した。

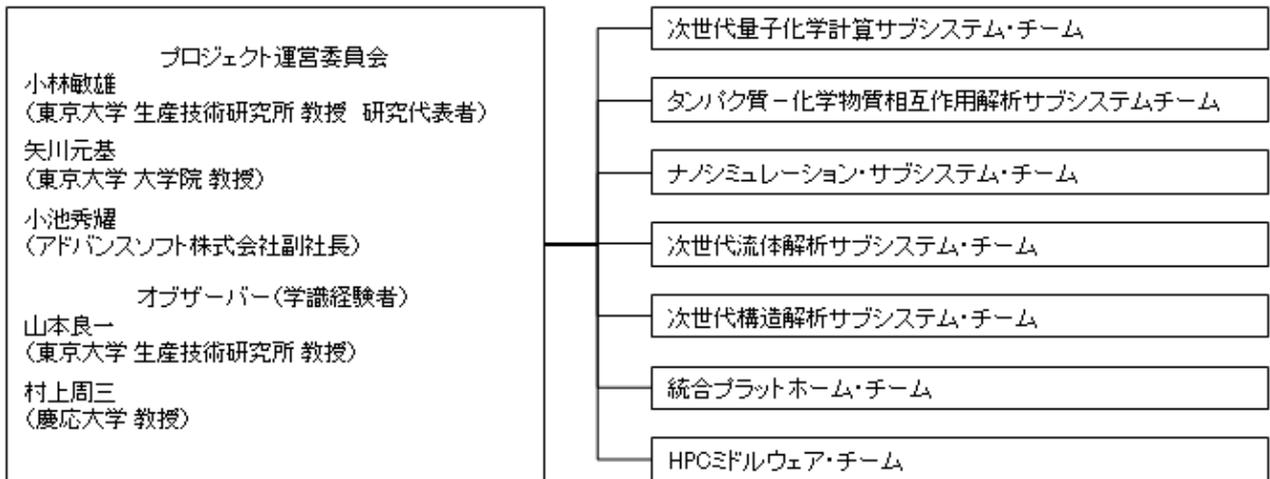


図 6.1 研究開発実施体制図

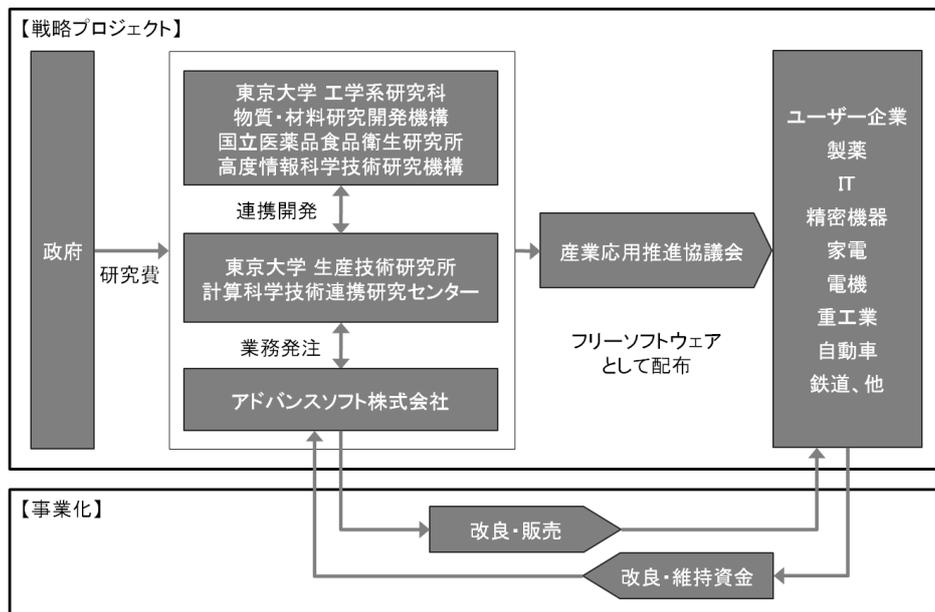


図 6.2 研究開発実施体制・研究成果の産業界への適用

## 7. ソフトウェアの普及

このプロジェクトは東京大学 生産技術研究所の計算科学技術連携研究センターで集中して実施した。計算科学技術連携研究センターは全国の大学、国立機関、民間企業の優れた研究者をメンバーとしている。また、計算科学技術連携研究センターとアドバンスソフト株式会社が連携して、本プロジェクトを推進した。また、このプロジェクトの成果を産業に応用することを目的とした「戦略的基盤ソフトウェア産業応用推進協議会」が設立され、研究成果の活用を図っている。

開発されたソフトウェアはフリーソフトウェアとして公開されており、東京大学生産技術研

究所のホームページから、誰でも無料でダウンロードできる。また、アドバンスソフト株式会社は公開されたソフトウェアの商用化を行い、販売を行うとともに、継続的な改良・保守を行っている。

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

## 非経験的フラグメント分子軌道計算プログラム BioStation

長谷川 浩司\*

### *Ab initio* Fragment Molecular Orbital Calculation Package BioStation

Koji Hasegawa\*

#### 1. BioStation の概要と開発体制

BioStation は、非経験的フラグメント分子軌道(FMO : Fragment Molecular Orbital)法による量子化学計算プログラムである。アドバンスソフト株式会社は文部科学省・東京大学「戦略的基盤ソフトウェアの開発プロジェクト (2003~2005年)」「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発 (2006~2008年)」の

BioStation の開発プロジェクトに参加した。また、これを商用化し販売・保守を行うとともに改良整備を行っている。これらのプロジェクトでは、タンパク質-化学物質間に作用する分子相互作用 (図 1 参照) を量子化学的に調べるための解析システムとして BioStation を開発している。適用分野は、受容体とリガンドとの結合能の評価、スクリーニングの最終段の選別、受容体とリガンド間相互作用による分子分類、タンパク質・リガンドの分子設計、ミュレーション・官能基置換による結合能の変化予測などである。主にタンパク質の基礎研究や創薬研究開発におけるスクリーニングツールとして使われることを想定している。

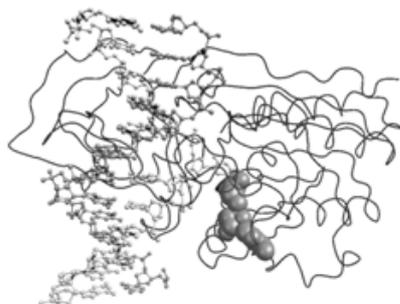


図 1 タンパク質に結合する化学物質

#### 2. フラグメント分子軌道(FMO)法の概要

FMO 法[1,2]は、京都大学 北浦和夫教授によって提唱された量子化学理論である。分子系を小さな原子グループ(フラグメント)へ分割し、フラグメント対する量子化学計算より、分子系全体のエネルギーを高精度に求める手法である。Hartree-Fock (HF) 近似による量子化学計算 (HF 計算) の計算負荷は、単純計算で分子系の基底関数の 4 乗に比例する。数十原子からなる小分子では基底関数の数はたかだか 1000 程度である。一方、タンパク質のような巨大な分子になると総原子数は数万となり、基底関数の数は数万~数十万規模となる。基底関数との差が 10 倍になると、HF レベルでは単純に  $10^4=1$  万倍計算時間が増える (実際のスケールリングはもう少し小さい)。従って、1 時間で終わった小分子の量子化学計算はタンパク質になると約 1 年となり、現実的に実行することは不可能である。もちろん、基底関数の数が増えるということは、二電子積分等の量子化学計算過程で蓄えておくべきデータが莫大に増加することを意味する。従って、タンパク質を丸ごと量子化学計算しようとする、データを蓄えておくメモリの容量が足りずプログラム自身が動作しない。このようなことを真面目に実行しようとするれば、それ専用の新しい仕組みが必要である。そこで、PC クラスターのような比較的成本の低い計算機で容易く量子化学計算ができる程度の大きさ

(数十原子規模) のフラグメントに分子系を分割し、個々のフラグメントの量子化学計算から精度の高いエネルギーを求めれば、計算コストのオーダーは丸ごと計算するよりも劇的に小さ

\*アドバンスソフト株式会社 技術第 2 部  
2<sup>nd</sup> Technical Division, AdvanceSoft  
Corporation

くなる。これが FMO 法のアイデアである (図 2 参照)。

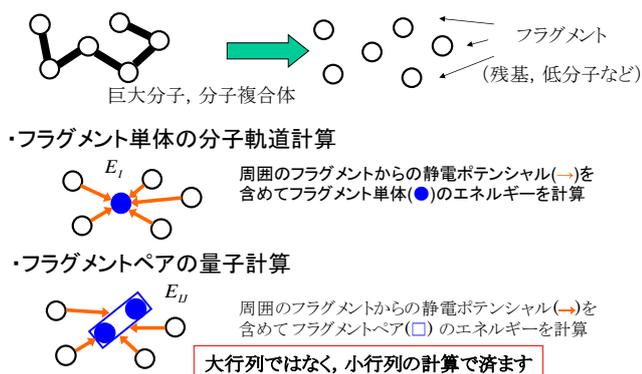


図 2 FMO 法の理論概要

FMO 法に基づく  $N$  個のフラグメントで構成される分子系全体のエネルギー  $E$  は、各フラグメントのエネルギーの総和と多体間相互作用エネルギーの級数展開による補正項によって表現される。2 体間相互作用エネルギーまででエネルギーを評価する FMO 法は FMO2 レベルと呼ばれ、次のように評価される：

$$E = \sum_{I=1}^N E'_I + \sum_{I=1}^N \sum_{J>I} \Delta E'_{IJ} \quad (1)$$

ここで、 $E'_I$  は環境静電ポテンシャルを考慮した  $I$  番目のフラグメントのエネルギーで、孤立したフラグメント  $I$  に対するエネルギー  $E_I$  と  $I$  番目フラグメント周辺からの静電ポテンシャル  $V_I$  (環境静電ポテンシャル) [3] を用いて、

$$E'_I = E_I - V_I \quad (2)$$

と表現される。また、 $\Delta E'_{IJ}$  はそれぞれ、 $I$  と  $J$  番目フラグメントから構成されるダイマーフラグメントの 2 体間相互作用エネルギーフラグメント  $I$  と  $J$  との 2 体間相互作用エネルギー  $\Delta E'_{IJ}$  は、

$$\Delta E'_{IJ} = E'_{IJ} - E'_I - E'_J + \text{Tr}(\Delta P^{IJ} V^{IJ}) \quad (3)$$

と表される。ここで、 $E'_{IJ}$  は  $I$  と  $J$  番目フラグメントからなるダイマーフラグメントの環境静電ポテンシャルを考慮した電子エネルギーであり、 $\Delta P^{IJ}$  と  $V^{IJ}$  はそれぞれ  $IJ$  ダイマーフラグメントの電子密度差行列 [1-3] と環境静電ポテンシャルである。2 体間相互作用エネルギー項は巨大

分子系のようなフラグメントが多い系になると、ダイマーの数も飛躍的に増加するため、2 体間相互作用エネルギーの計算はモノマーよりも遙かに時間がかかる。そこで距離的にある程度離れたフラグメントのダイマーについては、ダイマーの電子密度行列  $P^{IJ}$  がモノマーの電子密度  $P^I$  と  $P^J$  の直和表現

$$P^{IJ} \approx P^I \oplus P^J \quad (4)$$

で近似できるものとし、ダイマー間をクーロン相互作用近似する (dimer-es 近似)。この近似導入によりダイマー計算の負荷が大きく下がり、FMO 計算時間が実用的なレベルまで短くなる。

FMO 計算では分子内の共有結合した  $sp^3$  炭素原子をフラグメント分割の基点 (BDA, Bond Detached Atom) に、分子内フラグメント分割できる [2]。BDA での炭素原子の混成軌道の一つと核電荷を隣のフラグメントへ割振る射影演算子を Hartree-Fock-Roothaan 方程式に導入すると、共有結合したフラグメント同士の分子軌道を個々に局在化できるので個々のフラグメントで量子化学計算が可能となる。BDA に利用する分子軌道としてはエタン分子の自然局在化軌道を用いる。これにより、タンパク質のようなポリペプチド鎖や DNA・糖鎖・高分子などをフラグメント単位に細かく分割することが可能となる (図 3 参照)。これにより巨大分子丸ごとの FMO 計算が実用となっている。

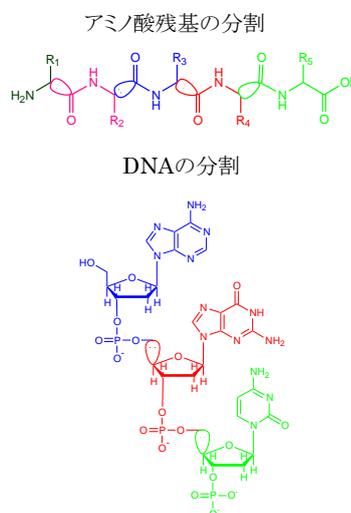


図 3 BioStation におけるフラグメント分割 FMO 計算の大きな強みは、式(1)・(4)に表れ

る 2 体間相互作用エネルギー  $\Delta E'_{IJ}$  である。これは、I と J フラグメント間の相互作用エネルギーの表現であるが、この式には分子系全体からの環境静電ポテンシャルの効果も含まれている。従って、この値は分子系に実際に存在する場合の I と J フラグメント間の相互作用エネルギー (IFIE, Inter-Fragment Interaction Energy) と解釈でき、この量は分子相互作用解析に活用できる。

### 3. BioStation の構成と機能概要

BioStation は、計算エンジンである ABINIT-MP プログラムと可視化ソフトウェア BioStation Viewer から構成されている。アドバンスソフト株式会社では計算エンジン ABINIT-MP のモジュール開発を主に担当した。ABINIT-MP の主要な計算機能を表 1 に示す。

表 1 BioStation/ABINIT-MP の主な計算機能

計算レベル	HF・MP2・DFT・XUFF(MM)
計算可能な物理量	フラグメント間相互作用エネルギー・全エネルギー・分子軌道・部分電荷・電子密度分布・静電ポテンシャルなど
自動フラグメント分割	タンパク質・DNA 鎖 (低分子は手動でフラグメント分割も可能)
入力出力ファイル形式	PDB・MDLMOL 形式など

BioStation における計算レベルと計算時間の比較を図 4 に示す。BioStation によるタンパク質の FMO 計算は、FMO-MP2/6-31G レベルが一般に推奨される。FMO-HF/STO-3G レベルは FMO-MP2 レベルと比べると計算精度が落ちるが短時間で計算が終了するため、構造モデルの妥当性をチェックし、相互作用エネルギーの大ざっぱな傾向を調べるために活用できる。

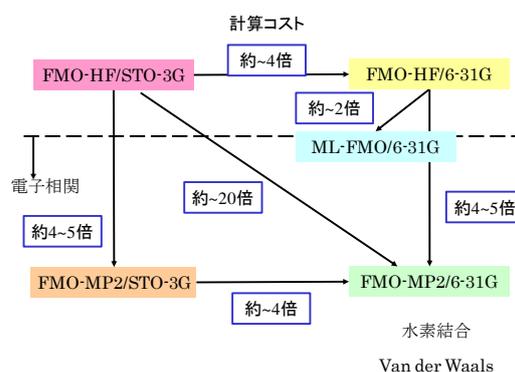


図 4 FMO 計算における計算レベルと計算コストの比較

BioStation 開発プロジェクトを振り返ると、プロジェクト当初は HF レベルの計算のみ可能であったが、エストロゲン受容体をターゲットにして、FMO-HF/STO-3G 計算によるエンタルピックな結合エネルギーとリガンド結合親和力の実測値との良好な相関が示され、FMO 計算の有用性が実証された[5]。

タンパク質と化学物質との相互作用形態は、クーロン相互作用や双極子相互作用のような電荷や電荷の分極に由来する相互作用だけでなく、水素結合やファン・デル・ワールス力など分散力を起因とする弱い相互作用が重要な役割を演じる状況も生体内では数多く見られる。このような弱い相互作用を記述するためには、HF 計算では精度的に不十分であることが知られており、このような場合に対応するには、電子相関が考慮された計算が必須で、MP2(2 次の Møller-Plesset 摂動法)レベルの計算が最低限必要とされる。高速な MP2 計算モジュールが BioStation に組み込まれている[6]。MP2 モジュール開発当時の計算機能力は現在に比べればかなり低いものであったが、開発された高速な MP2 計算モジュールにより、タンパク質の FMO-MP2 計算が研究室レベルの PC クラスタを用いて実用的な時間内で計算できるようになった。これにより、水素結合や CH/π 相互作用のような生体分子間の相互作用や構造安定性を理解する上で重要な因子が高精度に解析できるようになり、生体分子の相互作用を解析するツールとして、実用上の大きな前進があったと言

える。その後のプロジェクトでは、XUFF (eXtended Universal Force Field)、密度波関数理論(DFT)、FMO-QM/MM等、数多くの計算モジュールが開発された。XUFF分子力場は電荷平衡法による可変部分電荷であり、原子の電荷移動の効果を含めることができる点でAMBERなどの固定部分電荷の古典力場に比べて優れている。XUFFとFMO計算と組み合わせることで、安価で高精度なFMO計算が期待できる。このように、BioStationは開発プロジェクトを経て大きく計算機能が強化され、基礎研究成果も多く公表され、タンパク質-化学物質の相互作用を量子化学計算レベルで解析するツールとして今も発展している。量子化学計算によるタンパク質と化学物質との相互作用解析は、古典力場による分子力場計算に比べると計算の難易度は決して低くはないが、経験的なパラメータに依存しないという点で、大きなメリットがある。今後は、タンパク質基礎研究や創薬研究開発などへの実用的なツールとして幅広く活用されていくことが期待される。

## 参考文献

- [1] K. Kitaura, E. Ikeo, T. Asada, T. Nakano and M. Uebayasi, Chem. Phys. Lett. 313, 701 (1999)
- [2] T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, Y. Akiyama, M. Uebayasi and K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 318, 614 (2000)
- [3] T. Nakano, T. Kaminuma, T. Sato, K. Fukuzawa, Y. Akiyama, M. Uebayasi and K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 351, 475 (2002).
- [4] 中野達也, 谷森奏一郎, 加藤昭史, 小池上繁, 雨宮克樹, 福澤薫, フラグメント分子軌道法入門- ABNIT-MP によるタンパク質の非経験的量子化学計算-, アドバンスソフト (2004)
- [5] K. Fukuzawa, K. Kitaura, K. Nakata, T. Kaminuma, and T. Nakano, Pure Appl. Chem. 75, 240 (2003)
- [6] Y. Mochizuki, S. Koikegami, T. Nakano, S. Amari, and K. Kitaura, Chem. Phys. Lett. 396, 473 (2004)

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

## 第一原理バンド計算ソフトウェア PHASE

宇田 毅\* 甲賀 淳一朗\*\*

### Development of the First Principles Calculation Simulator PHASE

Tsuyoshi Uda\* and Junichiro Koga\*\*

#### 1. はじめに

PHASE[1,2]の原形は、1992年に発足した経済産業省（当時は通産省）プロジェクト「アトムテクノロジーの開発研究」において開発されたVDBである。VDBは文部科学省プロジェクト「戦略的基盤ソフトウェアの開発」に引き継がれ、PHASEとして発展していった。現在は、同省の「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」プロジェクトの支援のもとに最終段階の開発が進められている。当プロジェクトは2013年3月終了の予定で、省間にわたって進められたPHASEの開発はひとまず終了する。

ここでは、20年に及ぶPHASE開発の歴史と、外国産第一原理シミュレーターとの比較について紹介する。また、今後のPHASEの展望についても述べる。

#### 2. PHASE の開発

##### 2.1. アトムテクノロジーの開発研究（1992～2002）

クリントン元米大統領がナノテクノロジーの重要性を説いたのは2000年1月21日のことである。アトムテクノロジーの開発研究プロジェクト（以下アトムPJと略す）が発足したのは、それより8年前、狙うところはナノテクノロジーより一桁小さいアトムテクノロジー、と先見性に満ちたプロジェクトであったと言えよう。アトムPJは経済産業省（発足当初は通商産業省）の主導のPJ

ではあったが、基礎研究部門に重点がおかれていた。当時、諸外国から日本に対する基礎研究ただ乗り論をかわすためもあったと思われる。アトムPJでは第一原理シミュレーターの開発をミッションとする理論グループが認可されていた。第一原理計算の重要性が認められた最初の国家プロジェクトでもあった。アトムPJのもう一つの特徴は産官学のequal partnershipに基づく強い連携が目されていたことである。プロジェクトリーダーには産から丸山英一氏（日立製作所）、実験グループサブリーダーには官から田中一宜氏（電総研、現産業技術応用研究所）、理論グループサブリーダーには学から寺倉清之氏（東大物性研究所）が招聘された。

アトムPJでの第一原理シミュレーターの開発目的は、全エネルギー、原子に働く力、分子動力学など基本的物性定数が精密に計算できることである。そのために、ソルバー、擬ポテンシャル、DFT汎関数の検討を行った。ソルバーとして、Car-Parrinello法、最急降下法（steepest descent）、RMM法(Residual minimization)の検討以外に、ImMSD(line minimization modified steepest descent)と名付けた簡単で有効な解法を開発した。擬ポテンシャルではノルム保存型に加えて、Vanderbiltによる超軟型ポテンシャルを用いることにした。これによって、ボロン、酸素、窒素などの第一周期元素や、鉄、コバルト、ニッケルなどの3d元素の計算が可能になった。また、汎関数ではGGA(generalized gradient approximation)汎関数を搭載した。これにより、LDA(local density approximation)では凝集エネルギーが大きく、原子間距離が短めに評価され

\*アドバンスソフト株式会社 第1事業部  
Computational Science and Engineering Division  
I, AdvanceSoft Corporation

\*\*アドバンスソフト株式会社 技術第2部  
2<sup>nd</sup> Technical Division, AdvanceSoft Corporation

ていた欠陥が改良された。

以上、VDB は純国産の第一原理計算シミュレーターとして産声をあげたが、先行する CASTEP には水をあけられていた。ちなみに、VASP は CASTEP を土台に新たな開発が始められた時期である。また、森川良忠氏(大阪大学)の開発した STATE も VDB を原形としている。

## 2.2. 戦略的基盤ソフトウェアの開発(2002~2005)

科学技術分野で使用されているソフトウェアのほとんどが海外製品であることに強い危機意識をもった文部科学省は国産のシミュレーションソフトウェアを育成すべく戦略的基盤ソフトウェアの開発プロジェクト(以下基盤 PJ と略す)を発足させた。拠点を東京大学生産技術研究所におき、初代プロジェクトリーダーは小林敏雄東大教授(現自動車研究所長)である。また、ナノグループのリーダーは物質・材料研究機構の大野隆史氏が務めることになった。基盤 PJ では開発されたソフトウェアが実際に産業界で応用されることが強く求められていた。このような目的に応じるよう、ナノチームでは VDB をベースに、堅牢性、使いやすさ、高速性、多機能をもつ第一原理計算ソフトウェアの開発に取り組むことになった。プログラム名は新たに PHASE とすることになった。PHASE は Program for High Performance Atomic-scale Simulation Engine の略である。

使い勝手の向上という観点から最初に取り組んだのは GUI (PHASE Viewer) の作成である。PHASE Viewer には初期構造作成支援、計算途中結果のリアルタイム表示、電荷密度や状態密度などの計算結果のグラフィック表示などの機能が実装されている。

高速性の向上については、k 点、バンド数の 2 軸に対する並列計算を可能にした。PHASE の並列化効率是他の汎用第一原理計算ソフトウェアに比べても優れている。実際、地球シミュレーター上での計算では 1 万原子系の解析を 512 ノード (4096 CPU) を用いて 49% の効率を達成した。ちなみに、この結果は SC07 においてゴードン・

ベル賞にノミネートされている。

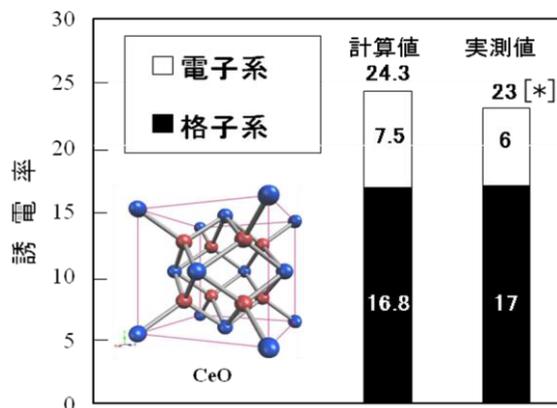
機能的には誘電関数計算の開発を行った。とくに高誘電率 (hi-k) 材料、低誘電率 (low-k) 材料の開発というニーズに応じるために格子誘電関数解析に重点をおいた。また、ウルトラソフト型の擬ポテンシャルの完備のため、原子番号 1~118 番の元素までのデータ・ベースの作成を完了した。

その他、対称性の自動探索ルーチンを実装した。

## 2.3. 戦略的革新シミュレーションソフトウェアの開発 (2005~2007)

基盤 PJ に続いて、文部科学省は戦略的革新シミュレーションソフトウェアの開発プロジェクト(以下革新 PJ と略す)を発足させた。体制はほぼ基盤 PJ と同じであるが、プロジェクトリーダーが小林敏雄教授から加藤千幸東大教授に交代となった。

ナノグループでは基盤 PJ から引き続き、誘電関数解析ルーチンの実装を行った。図 1 に CeO<sub>2</sub> の誘電率解析結果を示す。



[\*] N. I. Santha et al., J. Am. Ceram. Soc. 87 (2004) 1233.

図 1 CeO<sub>2</sub> の誘電率

格子誘電率(黒)の寄与が電子誘電率(白)より大。

格子誘電率の計算には振動数、ボルン電荷の計算が必要になる。これらの計算ルーチンを応用することにより、ピエゾ定数、ヘルムホルツ自由エネルギーの計算も可能になった。

革新 PJ で新たに開発した機能に DFT+U 法がある。DFT+U とは遷移金属酸化物のような強い局在性をもつ原子が含まれる場合、本来ギャップ

が生じるにもかかわらず、DFT 計算ではギャップがつぶれてしまう現象を改良するために採用される方法である。

その他の新機能としては拘束条件付き分子動力学(MD)がある。従来のエネルギー一定、温度一定の MD 以外に、温度制御を空間指定することができるようにした。この機能は、分子が固体表面で反応して結晶成長するような場合のシミュレーションに有用である。表面温度は、化学反応による吸熱・発熱とその散逸によって決定されるべきで、あらかじめ温度制御を掛ける方法は現実と異なる。また、拘束条件付き構造緩和法として、剛体緩和法を開発した。安定な高分子が固体表面に吸着される場合、各原子に働く力を個別に計算して構造緩和を行うと多大な計算時間が必要になる。そこで、分子を剛体とみなし、分子に働く合力とトルクから位置と角度に関する大まかな吸着構造を知ることができる。

#### 2.4. 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(2008~現在)

2008 年より 革新 PJ は、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(イノベ PJ と略す)に受け継がれ現在にいたっている。イノベ PJ では以下の開発を行ってきた。

化学反応関係では経路探索法として NEB (Nudged Elastic Band) 法を実装した。図 2 に水(H<sub>2</sub>O)と三酸化硫黄(SO<sub>3</sub>) から硫酸(H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) が生成されるとき反応経路(上段)と対応するエネルギー(下段)を示す。生成エネルギーは 9.2 kcal/mol, 障壁エネルギーは 27.8 kcal/mol と実測値を良く再現する。その他、化学反応に関し、Blue Moon 法と Meta-Dynamic 法を実装した。

電子系エネルギーの高精度化では、ファンデルワールス(vdW)力、ハイブリッド汎関数、TDDFT(time dependent DFT) 機能を搭載した。vdW が必須になる材料はグラファイト、DNA などである。とくにグラファイトでは GGA を用いると層間結合力が弱くグラフェンに分解してしまう。導入した vdW 汎関数を用いるとグラファイトの層間距離が良く再現される。また、DNA

の構造を再現するためにも DFT の計算だけでは不十分で、塩基間の結合に vdW 相互作用が必要になる。

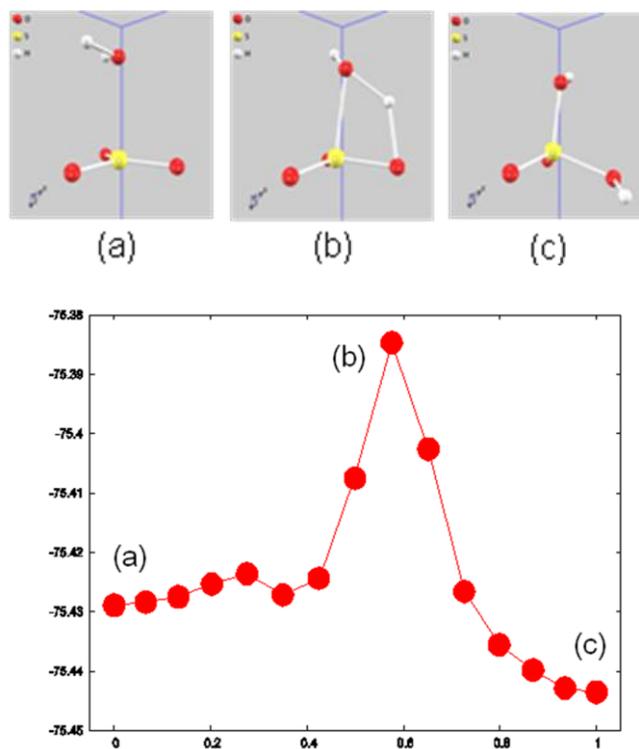


図2 NEB法による水と3酸化硫黄から硫酸が生成される過程:13個のレプリカを使用

エネルギー・ギャップの改良として、ハイブリッド汎関数と TDDFT(Time Dependent DFT)を導入した。ハイブリッド法とは DFT 汎関数に厳密交換項を混ぜ合わせることで、ギャップを再現する方法である。図 3 にハイブリッド法によるシリコンの状態密度を示す。DFT 計算によるバンドギャップ 0.56eV が実測値に近い 1.2eV に改善されている。

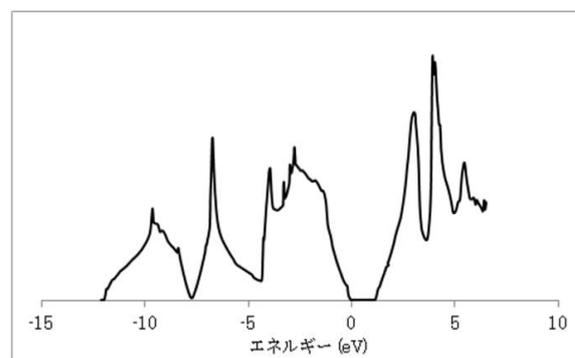


図3 ハイブリッド法による Si の状態密度

一方、TDDFT では、原子挙動の時間発展を追う

だけでなく、ギャップの評価にも応用される。例えば、電子系に衝撃ポテンシャルを与えた後の緩和過程にはギャップに対応する振動モードが含まれているからである。

### 3. 外国製シミュレーターとの比較

国家プロジェクトの目的は、国産の科学技術シミュレーターが外国製シミュレーターに追いつき、産業界に広く活用されるまでに育つことである。PHASE がその目的にどれだけ応えられたかを外国製第一原理計算シミュレーターと比較することで検証しよう。ここでは CASTEP (英国), VASP (オーストリア) を対象とする[3],[4]。そのほかにも優れた第一原理シミュレーターはいくつか開発されているが、サポート体制も整備されていることを条件として、上記2つのシミュレーターを取り上げた。20年前に第一原理計算シミュレーターと言えば CASTEP だけであった。VASP は CASTEP を土台に開発されたものであるが、最近では、むしろ VASP の方の評価が高いようである。

そこで、差し障りのない範囲で VASP と PHASE との比較を行うことにする。第2節で紹介したように、PHASE の機能も国家プロジェクトの支援のもとに十分充実してきており、機能的には VASP とほぼ同等といえることができる。また、「遅い」という風評のあった計算時間の点でも最新版(ver. 10.01)では多くの問題に対して、VASP と遜色ないとの評価を得つつある。例外はハイブリッド計算で、PHASE での計算時間は VASP に比べ1桁以上であることが顕在化している。ハイブリッド計算の1桁以上の高速化が PHASE に課された課題である。

一方、並列化の点では PHASE が優位に立っている。とくに、これまでの k 点、バンド数の2軸並列に G ベクトル並列を加えた3軸並列の開発がほぼ終了した段階にある。3軸並列は「京」コンピュータの効率的利用を目的として、独立行政法人理化学研究所の指導のもとに株式会社 富士通が担当したものである。

### 4. 産業応用

アドバンスソフト社は PHASE の開発初期からプロジェクトに参加し、また販売ライセンス権を得て、商用版 Advance/PHASE[5]を開発し、その販売・普及に取り組んできた。表1に Advance/PHASE を利用して行われたテーマと分野・業種を示す。表1に示したように、Advance/PHASE は、幅広い分野に適用されている。また、ソフトウェア販売数も年間40ライセンスを数えるようになっている。

表1 Advance/PHASE の産業応用

テーマ	分野・業種
仕事関数	半導体、研究機関
SiC/SiO <sub>2</sub> 界面構造	自動車
触媒反応	自動車、研究機関
リチウム電池材料	自動車、化学
水素貯蔵合金	研究機関
Na/H <sub>2</sub> O 反応	原子力
表面構造	研究機関
表面・界面反応	化学
合金の相図	分析機器
AFM、STM	分析機器、研究機関
XPS、UPS	分析機器、研究機関

### 5. 将来展望

イノベPJは2013年3月に終了する。プロジェクト終了後のソフトウェアの改良とメンテナンスはライセンス権を得たベンダーに委ねることが文科省の構想である。ソフトウェアの販売とそれを利用した解析サービスによって、改良とメンテナンス費用が捻出されなければこの構想は機能しない。PHASE に関してはこの構想の実現性は高い。少なくとも、アドバンスソフト株式会社は PHASE の活用による利潤を改良とメンテナンスに投入してゆく所存である。

#### 参考アクセスサイト

- [1] <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/dl/index.php>
- [2] [https://azuma.nims.go.jp/cms/news/copy\\_of\\_fs8wee](https://azuma.nims.go.jp/cms/news/copy_of_fs8wee)
- [3] <http://www.castep.org/>
- [4] <http://www.vasp.at/>
- [5] <http://www.advancesoft.jp/>

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

## 流体解析ソフトウェア FrontFlow/red

杉中 隆史\*

### FrontFlow/red

Takafumi Suginaka\*

#### 1. FrontFlow/red の概要

本プログラムは、乱流モデルの基本モデルとしてラージ・エディ・シミュレーション (LES) を採用して、高レイノルズ数で低マッハ数 (非圧縮性流れ) の乱流現象を主な解析対象としている。

産業界で一般的に使用されている  $k-\varepsilon$  モデルなどの時間平均モデル (RANS) は、多くのモデル定数を簡単な実験結果に合うように決めている。そのため、旋回流や浮力などにより 1 方向に強い流れが生じて乱流が非等方的になると、RANS の計算値は実測値と差異が大きくなる問題がある。

一方、LES はメッシュで解像できるスケールの渦変動は直接解析して、メッシュで解像できないスケールの渦変動はサブグリッド応力としてモデル化する。LES はメッシュサイズを小さくするにつれてダイレクトシミュレーションに近づくモデルであり、乱流が非等方的になる場合でも乱流現象を良く再現できることが知られている。

そのため本プログラムは、基本設計段階から LES による計算を実用化することを目的として開発が進められてきた。

開発したプログラムの機能一覧を表 1 に示す。

#### 2. FrontFlow/red の検証計算

平成 14 年度から平成 19 年度までのプロジェクト期間中に、本ソフトウェアで以下の検証計算を行い、本ソフトウェアの有効性を確認している [2]~[7]。

- ・バックステップ流れの計算
- ・チャンネル流の計算
- ・水素拡散火炎の素反応計算
- ・T 字型配管内の熱流動計算
- ・サーマルキャビティ内の自然対流計算
- ・0 次元の反応計算
- ・球状火炎伝播計算
- ・層流拡散バーナーの計算
- ・平行平板間乱流の計算
- ・キャビティ内の熱輻射計算
- ・傾斜密閉容器内の輻射-熱伝導と対流の連成計算
- ・圧力依存性詳細反応の計算
- ・粒子追跡法の基本検証計算
- ・ベクトル計算機用にベクトル化チューニング検証計算
- ・地球シミュレータによるフォーミュラーカー周りの流動計算

ここでは、計算結果の詳細については省略する。

\*アドバンスソフト株式会社 技術第 3 部

3<sup>rd</sup> Technical Division, AdvanceSoft Corporation

表 2 FrontFlow/red の機能一覧[1]

項目		機能
流れの状態		<ul style="list-style-type: none"> <li>密度変化を伴う多成分低 Mach 数の化学反応を含む流れ</li> <li>非圧縮性流体、圧縮性流体、低 Mach 数近似圧縮性流体</li> </ul>
座標系		<ul style="list-style-type: none"> <li>3次元 Descartes 座標系</li> </ul>
基礎方程式		<ul style="list-style-type: none"> <li>混合気体の質量保存方程式</li> <li>混合気体の運動量保存方程式</li> <li>混合気体のエネルギー方程式</li> <li>化学種の質量保存方程式 (非圧縮性流体のとき、passive scalar の輸送方程式)</li> <li>状態方程式 (非圧縮性流体でないとき)</li> </ul>
乱流モデル		<ul style="list-style-type: none"> <li>渦粘性一定、標準 <math>k-\varepsilon</math> モデル、LES (標準 Smagrinisky モデル)</li> </ul>
境界条件	流速	<ul style="list-style-type: none"> <li>流入境界、流出境界、no-slip 境界、free-slip 境界、壁法則境界</li> </ul>
	温度	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dirichlet 境界、Neumann 境界、熱伝達係数</li> </ul>
	化学種質量分率	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dirichlet 境界、Neumann 境界、物質移動係数</li> </ul>
	$k, \varepsilon$	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dirichlet 境界、Neumann 境界、壁法則境界</li> </ul>
離散化		<ul style="list-style-type: none"> <li>有限体積法</li> </ul>
セル形状		<ul style="list-style-type: none"> <li>6面体(hexahedron)、3角柱(prism)、4角錐(pyramid)、4面体(tetrahedron)およびその併用</li> </ul>
アルゴリズム		<ul style="list-style-type: none"> <li>SMAC 法</li> <li>節点中心法</li> <li>Rhie-Chow 法による圧力振動の抑制</li> </ul>
時間積分		<ul style="list-style-type: none"> <li>Euler 陽解法</li> <li>Euler 陰解法</li> <li>クランク・ニコルソン法</li> <li>2次精度 Adams-Bashforth 法</li> <li>3次精度 Adams-Moulton 法</li> <li>ルンゲ・クッタ法</li> </ul>
移流項の離散化スキーム		<ul style="list-style-type: none"> <li>1次精度風上差分</li> <li>2次精度風上差分</li> <li>2次精度風上差分 + リミタ (TVD 法)</li> <li>2次精度中心差分</li> <li>3次精度風上差分 + リミタ (TVD 法)</li> </ul>
行列解法		<ul style="list-style-type: none"> <li>ICCG 法 (圧力のポアソン方程式)</li> <li>Bi-CGSTAB 法 (圧力のポアソン方程式以外)</li> </ul>
熱連成解析		<ul style="list-style-type: none"> <li>流体 - 固体熱連成</li> <li>固体内部に複数の材質</li> </ul>

データ変換		<ul style="list-style-type: none"> <li>・ Gridgen*<sup>1</sup> ( FIELDVIEW ) -&gt; FrontFlow/red</li> <li>・ FrontFlow/red -&gt; FIELDVIEW*<sup>2</sup> 変換</li> <li>・ FrontFlow/red -&gt; FIELDVIEW ( ASCII ) 変換</li> <li>・ FrontFlow/red -&gt; AVS*<sup>3</sup> 変換</li> </ul>
入力ファイル	Gridgen	・ FIELDVIEW Unstructured ファイル
出力ファイル	FIELDVIEW	・ FIELDVIEW Unstructured ファイル
	AVS/MicroAVS	・ 3次元非構造データ ( *.inp ) ファイル
セル形状	FIELDVIEW	・ 6面体(hexahedron)、3角柱(prism)、4角錐(pyramid)、4面体(tetrahedron)およびその併用
並列計算		・ 対応
容量制限		・ ソフト側に制限なし

\*<sup>1</sup> 流体解析/数値解析用メッシュジェネレータ Gridgen は、米国 Pointwise 社の商標または登録商標である。

\*<sup>2</sup> 流体解析用インテリジェントポストプロセッサ FIELDVIEW は、米国 Intelligent Light 社の商標または登録商標である。URL:<http://www.vinas.com/jp/index.html>

\*<sup>3</sup> 汎用可視化ソフトウェア AVS は、米国 Advanced Visual Systems 社の商標または登録商標である。URL : <http://www.kgt.co.jp>

### 3. FrontFlow/red の開発

FrontFlow/red は平成 14 年度から平成 19 年度までの 6 年間、東京大学 生産技術研究所 助教授 現在 北海道大学 大島伸行教授をリーダーとして、大学とアドバンスソフト株式会社が連携して開発した流体解析ソフトウェアである。開発したソフトウェアはフリーソフトウェアとして公開されていて、誰もが利用することができる[8]。アドバンスソフト株式会社はプロジェクト終了後も FrontFlow/red の改良を続け、将来も改良を精力的に続けていく。そして、FrontFlow/red が国内の科学技術の革命的進歩に貢献できるようにすることがアドバンスソフト株式会社の役割と考えている。

#### 参考文献

- [1] 平成 19 年度戦略的革新シミュレーションソフトウェアの作成：“マルチフジックス流体シミュレーション 基本設計書”，アドバンスソフト株式会社(2007)
- [2] 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」：“プロトタイプ・ソフトウェアの検査報告書”，アドバンスソフト株式会社(2002)

会社(2002)

- [3] 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」：“プロトタイプ・ソフトウェアの検査報告書”，アドバンスソフト株式会社(2003)
- [4] 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」：“プロトタイプ・ソフトウェアの検査報告書”，アドバンスソフト株式会社(2004)
- [5] 平成 17 年度戦略的革新シミュレーションソフトウェアの作成：“マルチフジックス流体シミュレーション 検査報告書”，アドバンスソフト株式会社(2005)
- [6] 平成 18 年度戦略的革新シミュレーションソフトウェアの作成：“マルチフジックス流体シミュレーション 検査報告書”，アドバンスソフト株式会社(2006)
- [7] 平成 19 年度戦略的革新シミュレーションソフトウェアの作成：“マルチフジックス流体シミュレーション 検査報告書”，アドバンスソフト株式会社(2007)
- [8] [http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/theme/multi/fluid/fluid\\_softwareinfo.html](http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/theme/multi/fluid/fluid_softwareinfo.html)

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

## 構造解析ソフトウェア FrontSTR

末光 啓二\*

## FrontSTR

Keiji Suemitsu\*

## 1. 開発経緯

2008年3月に「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」の最終成果物のひとつとして公開された大規模並列有限要素法構造解析プログラム FrontSTR は、地球シミュレータプロジェクト（1998～2003年度）において開発された GeoFEM[1]を「戦略的基盤ソフトウェアの研究開発」に引き継ぎ、開発および整備が進められた。

「戦略的基盤ソフトウェアの研究開発」

（2002～2004年度）では、大規模並列有限要素法シミュレーションで必要となる共通基盤をハイエンド計算 HPC ミドルウェアとして開発するとともに、HPC ミドルウェアを検証するための構造解析コード pSAN-hpcmw が作成された[2]。

「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」（2005～2007年度）では、pSAN-hpcmw をベースとして新規機能の開発および機能拡充を行い FrontISTR として発展させた。また、共通基盤機能を拡充さらにより汎用化し、HEC-MW にとりまとめられた[3]。併せて、地球シミュレータ等の大規模並列計算機を使用する実証計算に取り組みられた。

## 2. FrontSTR の概要

### 2.1. 開発の基本方針

GeoFEM の開発が開始された当時、地球シミュレータの建設が始まり、また並列コンピュー

タや PC クラスターの普及とともに、有限要素法の並列化事例が報告されるようになっていた。しかしながら、急速な進歩を続けるハードウェアを有効に活用するアプリケーションは未発展の状況であった。この状況を打破するために、当初から以下の基本方針で開発に臨み、これは現在も引き継がれている。

#### (1) 大規模並列分散環境への対応

有限要素法ソルバーとしての直接法の並列化は従来から取り組まれていたが、大規模並列処理では指数関数的にメモリが増大し、限界があることが指摘されていた。そこで、解析対象を領域分割し、各々のプロセッサが分割した領域を担当しながら、協調的に求解を行う並列反復法を基本解法とした。

また、協調的分散処理を行うための通信方式としては、既に標準化が進められていた MPI (Message Passing Interface) を採用した。

#### (2) さまざまな計算機への対応

PC の性能が飛躍的に向上し、科学技術計算にも PC が使われるようになってきた。一方、地球シミュレータ等の大規模並列スパコンが多く計画され、また民間では PC クラスターが普及を始めていた。これらのさまざまなアーキテクチャの計算機にひとつのソースコードで一様に対応できるソフトウェアを目指した。

#### (3) HEC-MW 上での構築

さまざまな計算機への対応を実現するために、ハードウェアのアーキテクチャなどに係る処理

\*アドバンスソフト株式会社 第1事業部  
Computational Science and Engineering  
Division I, AdvanceSoft Corporation

はすべて HEC-MW に隠蔽し、また共通的な科学計算ライブラリを取り揃えることにより、有限要素法アプリケーション開発の容易性、対応するアプリケーションの多様化を図った。

## 2.2. ソフトウェア構造

上記の基本方針に基づいて開発された FrontSTR のソフトウェア構造を図 1 に示す。

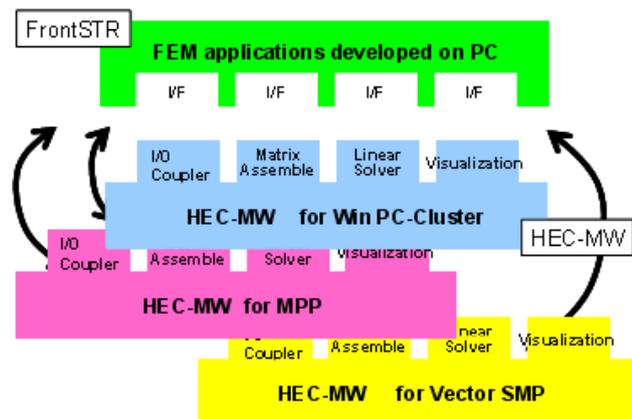


図 1 FrontSTR のソフトウェア構造[2]

## 2.3. HEC-MW の機能

有限要素法共通基盤ミドルウェア HEC-MW の主な機能を以下に示す。

- ・ 全体制御データ、メッシュデータの入力
- ・ 領域分割
- ・ 剛性行列非ゼロ成分の圧縮格納
- ・ 行列ベクトル積、ベクトル内積
- ・ 領域間通信
- ・ ソルバー（反復法、直接法）
- ・ 多点拘束（MPC）によるアセンブリ構造
- ・ 解析結果データ、リスタートデータの出力
- ・ 可視化

HEC-MW の核のひとつである領域分割にはミネソタ大学で開発された METIS[4]を用いている。領域分割の一例を図 2 に示す。

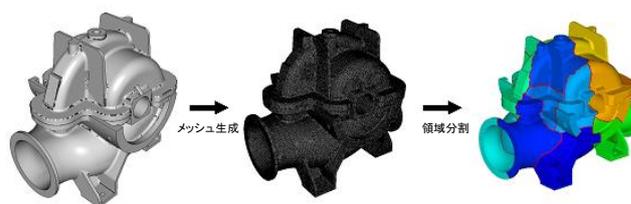


図 2 領域分割の一例

## 2.4. FrontSTR の機能

大規模並列有限要素法構造解析プログラム

FrontSTR の主な機能を以下に示す。

- ・ 線形静解析
- ・ 非線形静解析（Total Lagrange 法、弾塑性性）
- ・ 線形動解析
- ・ 固有値解析
- ・ 熱伝導解析（定常、非定常）

なお、非線形解析については後継となる「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」において、大幅な機能拡張が行われ、以下のような解析が可能となっている。

- ・ 幾何学的非線形（Updated Lagrange 法）
- ・ 材料非線形（弾塑性性、超弾性、粘弾性、粘塑性、熱依存性）
- ・ 境界非線形（接触）
- ・ 非線形動解析

実証計算で行われた大規模並列解析の一例を図 3 に示す。

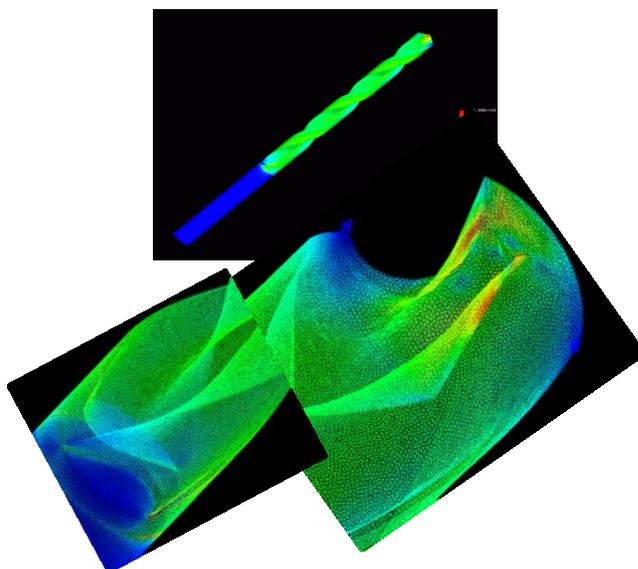


図 3 大規模並列解析の一例（ドリル）

### 3. 開発体制

「戦略的基盤ソフトウェアの研究開発」および「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」における FrontSTR の開発は、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が中核となり、各大学、公的機関、民間企業の協力体制の下で推進された。

研究グループのリーダーは東京大学 奥田 洋司教授である。

### 4. おわりに

本稿の著者は、現在「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」に携わっているが、「戦略的基盤ソフトウェアの研究開発」および「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」には参加しておらず、当時の資料を基に本稿をまとめたことを付記する。

### 参考文献

- [1] GeoFEM プロジェクト WEB サイト  
<http://geofem.tokyo.rist.or.jp>
- [2] HPC-MW プロジェクト WEB サイト  
<http://hpcm.w.tokyo.rist.or.jp>
- [3] 革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発 WEB サイト  
<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/>
- [4] METIS WEB サイト  
<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis>

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

## 都市の安全・環境シミュレーション・システム EVE SAYFA

浜野 明千宏\* 杉中 隆史\*\* 吉岡 逸夫\*\*\*

### A High-Precision urban environment and safety simulator :EVE SAYFA

Achihiro Hamano\* Takafumi Suginaka\*\* and Itsuo Yoshioka\*\*\*

#### 1. EVE SAYFA の概要

戦略的革新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の一環として、2005 年度から 2007 年度にかけて、安全・安心な社会の実現に資する都市の安全・環境シミュレーション・システム EVE SAYFA (Enhanced Virtual Environment Simulator for Aimed and Yielded Fatal Accident) の研究開発を行った [1][2][3]。研究プロジェクトリーダーは東京大学 生産技術研究所 加藤信介教授であり、東京大学 生産技術研究所とアドバンスソフト株式会社が共同して開発を行った。

このシミュレータは、複雑な空気流通経路を持つ大規模な地下街や超高層ビルなどの狭域市街地で生物化学(BC)兵器テロや火災が発生した場合に災害を防止あるいは低減するために利用できる。

EVE SAYFA は、(1)1 次元ネットワーク解析モデル、(2)LES に基づく高精度な 3 次元解析モデル、(3)仮想ビルディング・データベースで構成される。

EVE SAYFA の概略システム構成を図 1 に示す。また、図 2 と図 3 に、本システムの主要解析機能である 1 次元ネットワーク解析モデルと 3 次元解析モデルの機能概要を示す。

\*アドバンスソフト株式会社 第 2 事業部  
Computational Science and Engineering  
Division , AdvanceSoft Corporation

\*\*アドバンスソフト株式会社 技術第 3 部  
3<sup>rd</sup> Technical Division, AdvanceSoft Corporation

\*\*\*アドバンスソフト株式会社 技術第 4 部  
4<sup>th</sup> Technical Division, AdvanceSoft Corporation

#### 2. EVE SAYFA の主要機能

EVE SAYFA が実装している主な機能を以下に示す。

##### (1) 1 次元ネットワーク解析モデル

- (a) 2 層ゾーンモデル (火災、煙流動性状)
- (b) 建物内の空気流動解析に関する機能
- (c) 3 次元解析モデルとの連成機能

##### (2) LES に基づく高精度 3 次元解析モデル

- (a) 健康影響危険物質および煙の移流拡散に適応した LES
- (b) 煤の生成を評価できる化学反応モデル
- (c) 熱境界条件モデル
- (d) 煤の効果を含むガス放射伝熱の数値解析手法
- (e) 熱感知器、煙感知器のモデル
- (f) 防火シャッターの開閉
- (g) 2 層ゾーンモデルと連成した LES の流入変動風の生成
- (h) 混合分率燃焼モデル

##### (3) 仮想ビルディング・データベースの機能整備

- (a) 1 次元ネットワーク解析モデルとの連成
- (b) 3 次元解析モデルとの連成
- (c) 建築・環境統合データベースによる最適建築設計システム
- (d) オブジェクト指向の CAD ソフトを用いた仮想ビル構築

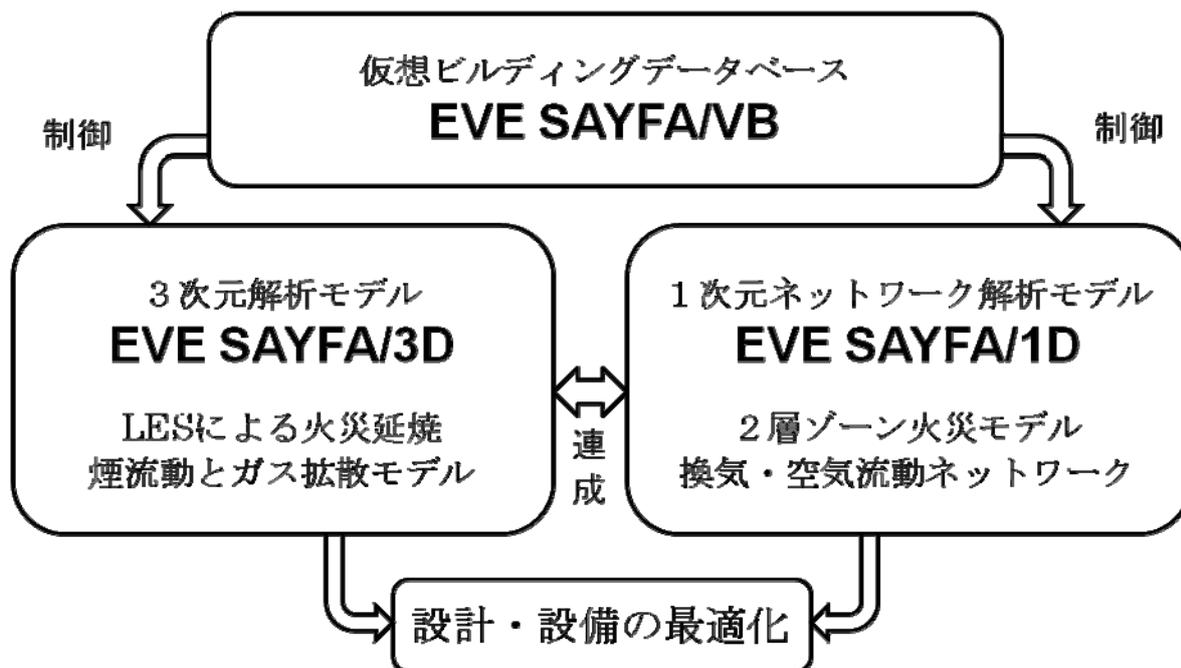


図 1 EVE SAYFA のシステム構成

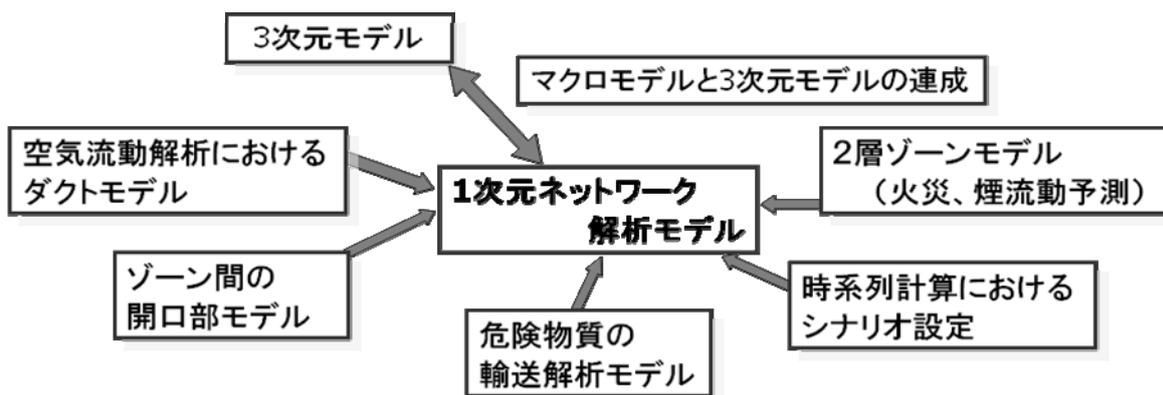


図 2 1次元ネットワーク解析モデル

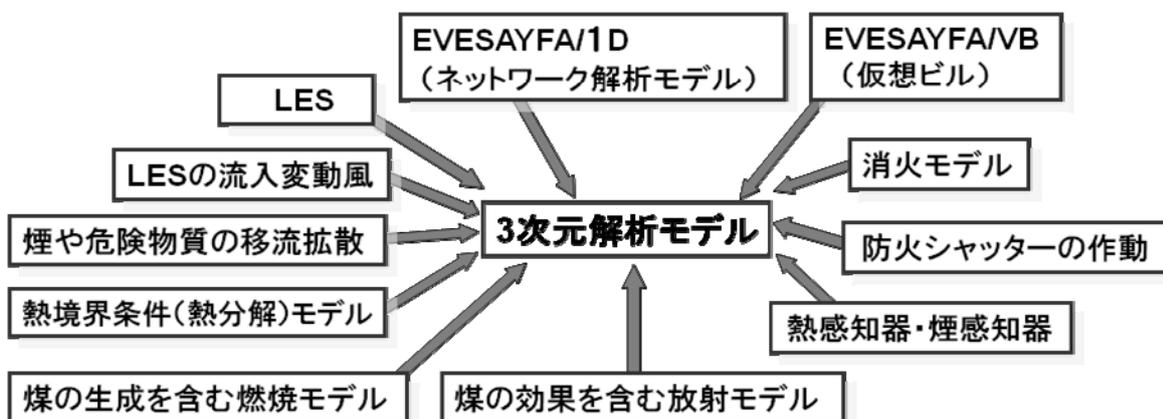


図 3 3次元解析モデル

#### (4) 全体のコントロール

- (a) 1次元および3次元解析モデルのコントロール
- (b) データ入力のためのGUI、可視化システム

これらの機能整備にあたり、モデルの研究については東京大学生産技術研究所が、実用化に向けた開発についてはアドバンスソフト株式会社を中心となってプロジェクトを推進した。

### 3. EVE SAYFA の応用分野

EVE SAYFA は、大規模な地下街や超高層ビルに限らず通常の建物における火災、空調、伝熱の計算にも応用可能である。アドバンスソフト株式会社は、東京大学生産技術研究所、三菱重工業株式会社、産業技術総合研究所と共同で、文部科学省 安全・安心科学技術プロジェクトの1つである「有害危険物質の拡散被害予測と減災対策研究」に参画した[4]。このプロジェクトの成果として、有事に際して国および自治体が、住民を安全な地域まで迅速に誘導させる避難誘導計画を効率的に立案できるよう支援するシステムを開発した。これは、EVE SAYFA をベースとした屋内拡散予測システムのほか、屋外拡散予測システムおよび避難シミュレータを連携させたものである。このシステムは、実際に複数の自治体のNBCテロ対処訓練において利用されるなど、実社会の具体的なニーズに対応可能なものとして活用されている。

さらに、このシステムを利用し、実際にテロが発生した場合に起こりうる有毒ガスの拡散現象の特徴と避難時の注意点を収録した「初期対応者用DVD」を作成し、プロジェクト終了後も初期対応者機関に配布するほか、講演会での成果報告を通して研究成果の公開と普及を図っている。

### 4. EVE SAYFA の開発に携わって

本稿の最後に、EVE SAYFA の開発に携わった関係者の所感を述べる。

建築物火災や防災など、各分野の専門家のヒ

アリングを実施し、以下に挙げる有用な意見が得られた。

- (a) 火災や避難では不確定要素が多いため、シナリオに応じてシミュレーションが途中で再開できる仕組みを入れる必要がある。
- (b) 壁の熱容量、燃えぬけの扱い、燃料支配か換気支配か、窓の割れ方、隙間の扱いなど、どこまで考慮するかは検討課題がある。
- (c) 建物データをコンピュータにいかにか簡単に入力するかが問題である。
- (d) 避難モデルについては、個々の逃げ方は千差万別で、避難にかかる時間が1、2分なのか、10分のオーダーなのかが分かれば良い場合がほとんどである。
- (e) 日本では2層ゾーンモデルで評価が通るため多用される。実務によっては、分のオーダーで計算結果が出ないと使えない。
- (f) これまで空調と防災の設備は別々に扱われてきたが、兼用排煙が増えていることもあり、一緒に考慮する必要がある。

これらのヒアリングは実用ソフトウェアが実装すべき要件を整理するために有益であった。

また、消防関係、建築防災関係、建築設計関係の専門家よりなる委員会組織（アドバイザリーボード）を設立して、開発段階で貴重な助言を得た。

3章で述べた安全・安心プロジェクトへの適応では、屋内拡散予測システムの検証のため、民間のビルを対象に無害化したガスを用いた拡散実験を行った。また、NBCテロ対処訓練においては、仮想的なテロシナリオを策定し、大規模公共施設におけるシミュレーションを実施した。これらの作業においては、建造物の詳細な構造図、とりわけ換気・空調系の情報は関係者以外に知られぬよう、その取扱いに細心の注意が必要であった。それと同時に、研究の成果のアウトリーチが求められるため、情報公開の方法に腐心した。テロ対処訓練担当者から訓練用シナリオの策定を求められることもあり、大規模公共施設を利用した際に、どのようなテロ

攻撃が最も効果的か真剣に考えていることもあった。

### 参考文献

- [1] <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/theme/city/environment/index.html> , (2012年3月15日アクセス)
- [2] 奈良昌則,加藤信介,黄弘,朱晟偉:“ 火災シミュレータ EVE SAYFA による火災炎の数値解析と精度の検証 - 浮力プルームの LES 解析 - ”, 日本建築学会大会学術講演梗概集 , (2006)
- [3] 奈良昌則,加藤信介,黄弘:“ 都市安全・環境シミュレータ EVE SAYFA による火災炎の数値解析と精度の検証 - 各種火災プルームの LES 解析 - ”, 日本建築学会大会学術講演梗概集 , (2007)
- [4] <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/safety/> , (2012年3月15日アクセス)

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

## 生体内マルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションシステム開発 プロジェクトの概要と今後の課題

秋村 友香\*

### Outline and Future Tasks of The Project, "Multi-Scale Multi-Physics Simulation System Development in The Human Body"

Yuka Akimura\*

#### 1. プロジェクトの概要

日本人の3大死因は悪性新生物、心疾患、脳血管疾患といわれる。

数値シミュレーションの力を医療に活かす活気的なプロジェクトの第一歩として、2002年から「戦略的基盤ソフトウェアの開発プロジェクト」、続いて2005年から「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」の国家プロジェクトの中の1テーマとして、「人の個体差に応じた創薬の開発などに資する生命現象シミュレーション」が採用された。

その中でもわれわれが参加したのは「器官・組織・細胞マルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションシステム」の開発プロジェクトである[1]。研究リーダーは、東京大学 生産技術研究所の大島 まり教授である。プログラムの作成は主として筆者をはじめとしたアドバンスソフト株式会社の社員が担当した。

このプロジェクトのミッションは、血管病変の発症・進行メカニズムを解明し、予防・治療法の開発に役立てるために必要な数値計算手法を構築し、それをソフトウェアとして整備することであった。図 1 に本システムの概要をまとめる。

生体を取り扱う上では、器官、組織、細胞の異なるスケールの現象と、力学的、生化学的、生理学的なメカニズムを同時に取り扱う必要がある、本プロジェクトではこれに取り組んだ。

\*アドバンスソフト株式会社 技術第4部

4<sup>th</sup> Technical Division, AdvanceSoft Corporation

#### 2. プロジェクトの成果物

本プロジェクトによって得られた成果物を図2にまとめる。

3次元血流・血管壁連成解析モジュールは、脳動にかかる応力を計算できるものである。血の流れは3次元流体解析によって解析され、瘤近辺の乱流の解析を行う。血管壁は血流の情報を入力として構造解析を行っている。

1次元血流解析モジュールは、人体の全身の動脈計算を行ったり、脳内のウィリス動脈輪の計算を行ったりすることができる[2]。血流形状や血管の柔らかさを入力パラメータとして、血流量分配や、心臓の脈動に伴う圧力波形を知ることができる。

末梢血管抵抗モデルは、微小血管系での非線形性を再現することができる。

血球モデルでは、流体的な考え方では扱うことができない微小血管系の解析を、粒子法を用いて実現する。これにより、血栓の形成や破壊などの様子を知ることができる。

以上のモデルを使用することにより、生体内の血球、血流、血管壁のマルチスケール・マルチフィジクスのシミュレーションを行うことができる。

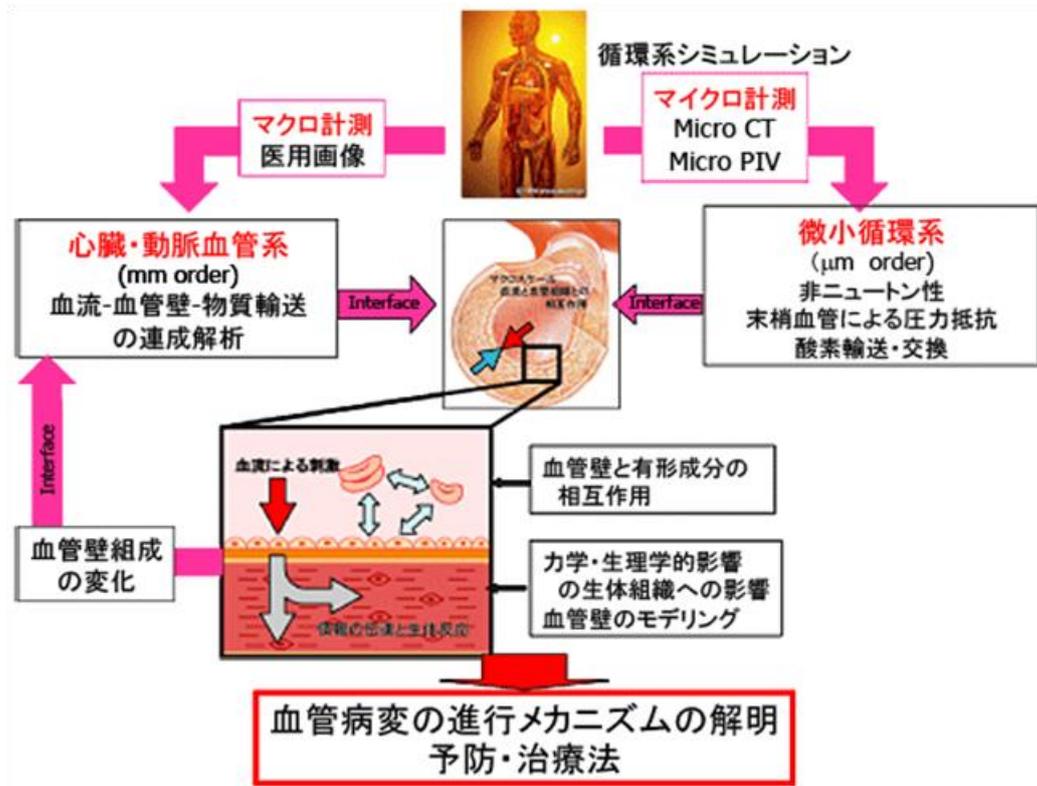


図 1 器官・組織・細胞のマルチスケール・マルチフィジクス・シミュレーションシステム概要[1]

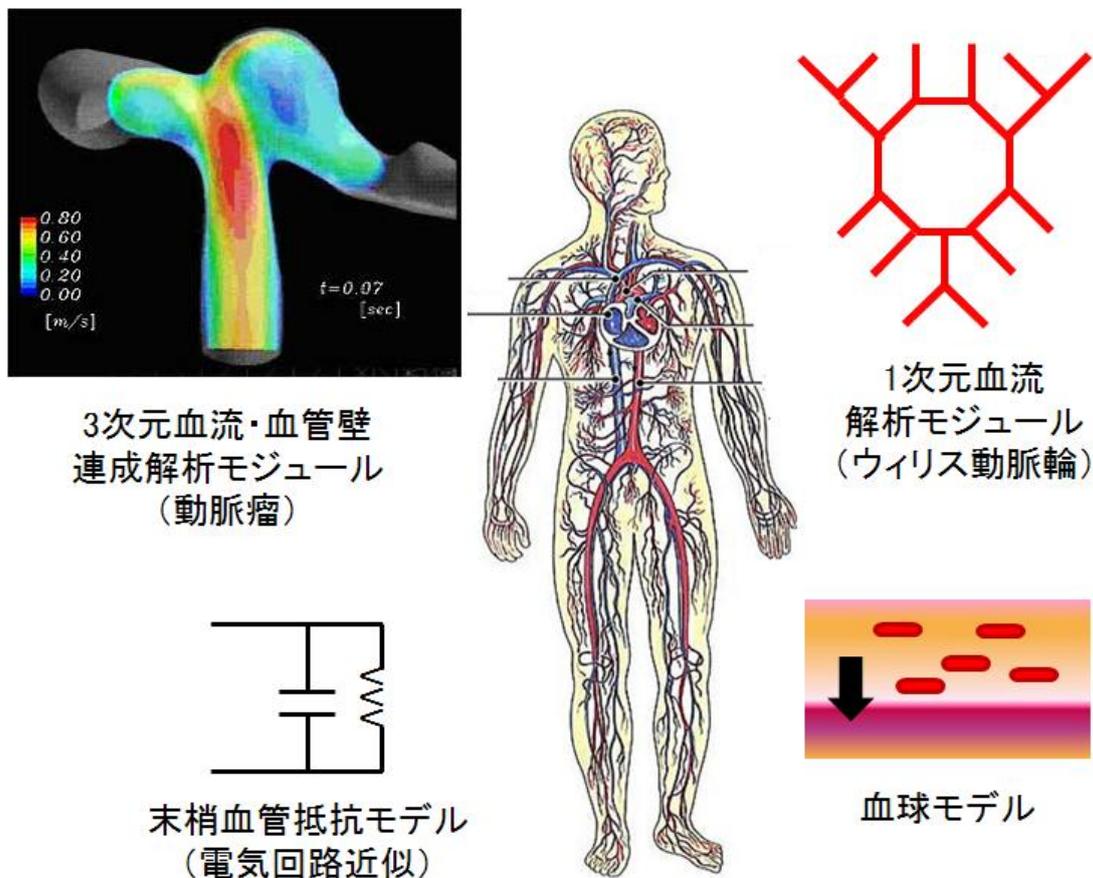


図 2 血流プロジェクトで開発したモデル

(真ん中の人体図は <http://www10.ocn.ne.jp/~kissho/jintai.htm> より引用)

### 3. 開発を行って (今後の課題)

本プロジェクトでは目標である器官・組織・細胞マルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションシステムの構築に成功した。ただし、生体のシミュレーションを医療現場で活用するには解決すべき次のような課題がある。

- ①年齢、性別、生まれつきの血管欠損などの個体差をシミュレーションではどう扱うか
- ②医療現場では数分以内に診断結果を得る必要がある
- ③システムは数値計算の専門家でない人が数値計算を行えるだけのロバスト性を有する必要がある

①は3次元流体解析を行う上で必要なメッシュ作成の作業をどのように効率化するかに関わってくる。

②は計算の高速化やデータベースを利用したシステム構築により実現可能と考えられる。ただし個人の病変データ等のデータベースを作成するには、個人情報保護法などの障害もあり困難が予測される。

③はわれわれ開発側がもっとユーザーのニーズに立って努力することにより、実現可能である。ただし、ロバスト性の向上にはGUIのユーザーフレンドリー性を向上させ、ソルバーを作りこむことに手間暇をかけることが必要であり、このような作業の重要性をもっと認識して支援する体制が必要であると考えられる。

#### 参考文献

- [1] <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/theme/life/organ/index.html>
- [2] Y. Akimura, Takeshi Unemura, Shigehumi Tokuda and Marie Ohshima, "Numerical study of the cerebral arterial circle of Willis with an angiostenosis or occlusion", Third Asian Pacific Conference on Biomechanics(2007)

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

## 統合プラットフォーム PSEの開発

小池 秀耀\*

# Platform of Problem Solving Environment in Frontier Simulation Software for Industrial Science

Hideaki Koike\*

### 1. PSE (Problem Solving Environment) とは

コンピュータやネットワークの発達により、設計や研究開発で利用するソフトウェアやデータベースの規模、数、複雑性が幾何級数的に増加している。このような現状に対応するためには、プロセスの自動化、統合化、最適化のためのシステムの開発が緊急の課題となっている。一方、ソフトウェアを開発する側からすれば、現在要求されている複雑・大規模なシステムを最初から開発することは不可能となっており、既存のソフトウェアを部品としてより複雑なシステムを構築するための環境を構築することが緊急の課題となっている。PSEはこの要求にこたえるために開発されたシステムである。既存のハードウェア、ソフトウェアとの階層関係を図1に示す。また、PSEの機能を表1と図2に示す。

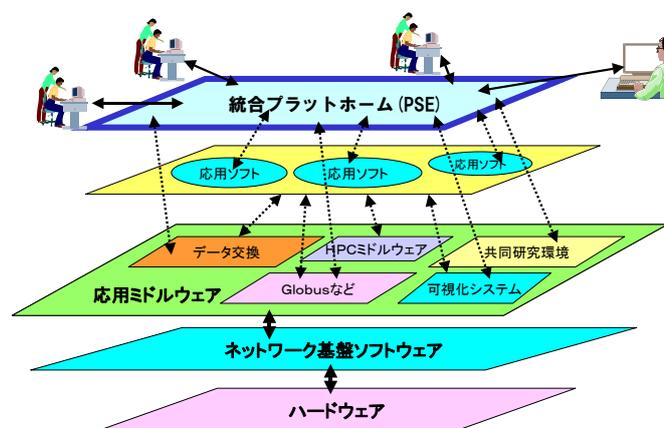


図1 PSEと既存のハードウェア、ソフトウェアとの階層関係

\*アドバンスソフト株式会社 代表取締役社長  
Representative director president, AdvanceSoft Corporation

PSEの中心となる機能は「タスクフロー」である。「タスクフロー」は、

- ① ネットワーク上に分散したコンピューティング資源（ソフトウェア、データ）を、統合化して、より高度で複雑なソフトウェア・システムを開発するための機能
- ② 多数のソフトウェアやデータベースを駆使した解析を、正確に再現するための機能。すなわち、解析手順、使用するソフトウェア、データ、計算結果、中間の計算結果、計算条件などを保存し、解析を正確に再現できる機能

を実現するものである。設計や研究開発では一連の処理（タスク）をある手順に従って実施することにより問題を解決する。タスクではシミュレーションやデータベースが活用される。このタスクの定義と、一連のタスクの作業手順（タスクのつながり）を定義したものが「タスクフロー」である。PSEのタスクの定義においては、そのタスクで使用するシミュレーション・ソフトウェアやデータベースなどを定義することが可能である。当然ながら、ここで定義するソフトウェアやデータベースは、ネットワーク上に用意されていなければならない。タスクフローをまず記述し、タスクフローに従って解析作業を進める。この場合、中間結果の保存やタスク間のデータの受け渡しは「タスクフロー・システム」がサポートする。タスクフローの変更は自由に可能であり、タスクフローをセーブしておくこともできる。過去のタスクフローをテンプレートとして用いることも可能である。また、

タスクには解析のノウハウを記述することも可能であり、実用的な知識ベースとしてタスクフローを利用することも可能である。タスクフローにより、ネットワーク上に分散したコンピューティング資源（ソフトウェア、データ）を、統合化して、より高度なソフトウェア・システムを開発する事が可能となる。すなわち、タスクフローは既存のプログラムやデータベースを部品として、より複雑で高度なシステムを構築するハイレベル言語である。既存のソフトウェアやデータベースはタスクフローから見た場合、

タスクフローが実現する大規模システムの部品である。またタスクフローにより、多数のソフトウェアやデータベースを、駆使した解析を正確に再現することが可能となる。タスクフローには解析手順、使用するソフトウェア、データ、計算結果、中間の計算結果、計算条件などが保存されている、タスクフローをセーブしておくことにより、解析を正確に再現することが可能となる。図3にPSEのメイン画面の例を示す。

表1 PSEの機能一覧

項目	内容
タスク	アプリケーションやデータベースとの接続などをタスクとして定義することができる。また、ファイルの転送機能も含まれる。
サブタスク	タスクフローを階層化するタスクである。タスクと同様に扱われる。
コネクション	タスク同士を接続することができ、タスクフローを形成させる。タスクフロー実行時の連続動作の指標となる。
フロー制御	タスクと同様に扱われる条件判定タスク（IF文）と、タスクフローの繰り返し（Do-Loop文）制御がある。条件判定タスクは、あるファイルから数値を取り込み、予め設定されていた条件文から true か false を判定する。繰り返し制御は、繰り返し毎に、あるファイルへ変数を書き込むことができ、他のタスクがそれを利用することができる。
ファイルへの保存と読み込み	フォーマットはXML形式を採用した。テンプレートとしての再利用が考えられ、修正コストを最小限に抑えることができる。
タスクフロー実行とモニタ	ローカルおよびホストでタスクを実行する機能である。また、タスクフローを連続実行する機能がある。実行の状況をモニタする機能がある。また、実行ログを管理する機能がある。

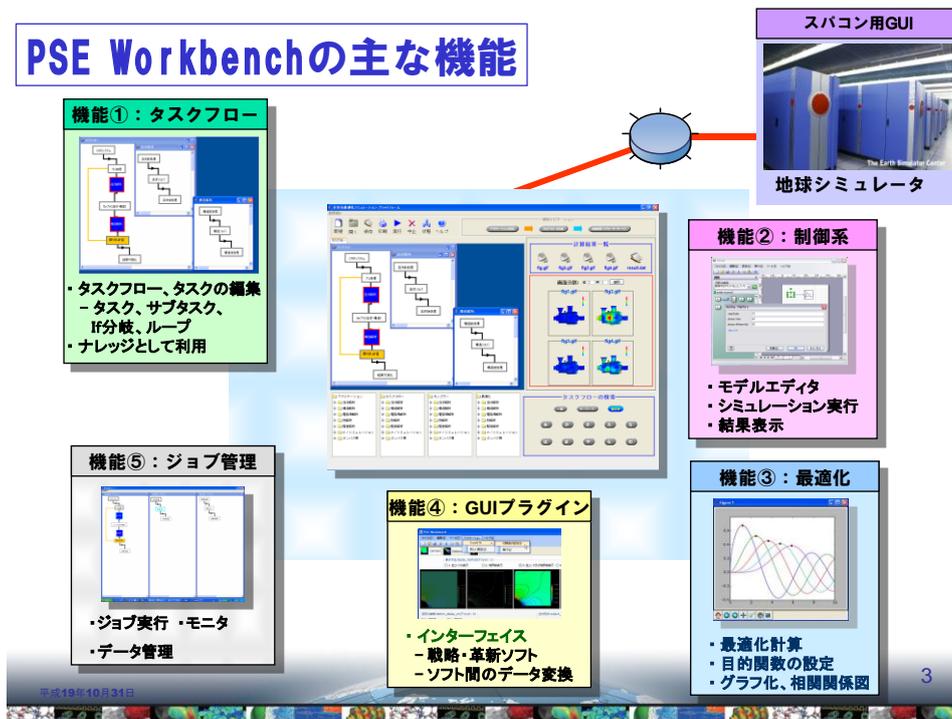


図 2 PSE の機能

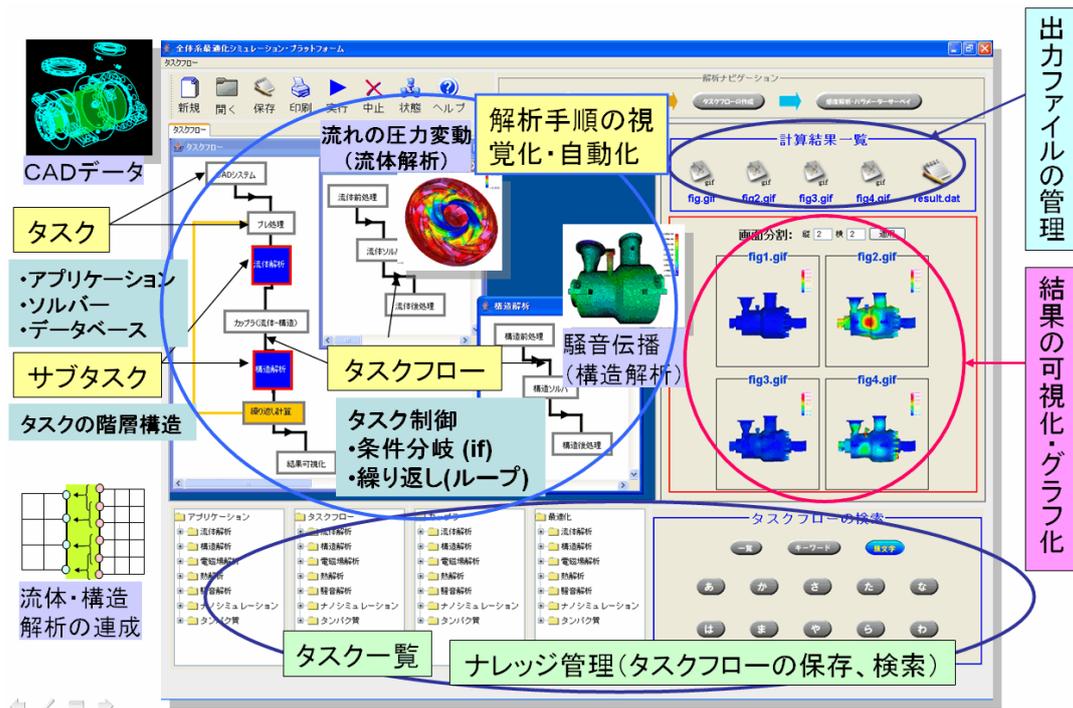


図 3 PSE のメイン画面の例

## 2. 開発体制

「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」における PSE の開発はアドバンスソフト株式会社の小池秀耀と松澤邦裕が行った。