

表 1

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」

開発ソフトウェア概要

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	代表名 「ProteinDF」 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	代表名 「ABINIT-MP BioStation」 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ー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 「CHASE-3PT」 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	代表名 「Front Flow」 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 「NEXST」 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。 はびひ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 「RINDOW」 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、その組合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 「HPC-MW」 14 年度分公開ソフト [HPC - MW]	「HPC ミドルウェア (HPC-MW)」は、PC クラスタ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。