

国プロによる先端ソフトの開発経緯



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”

代表機関

● 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。

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)

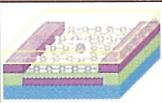
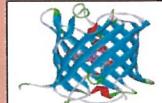
中核拠点

● 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、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)

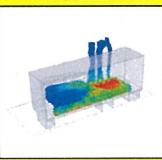
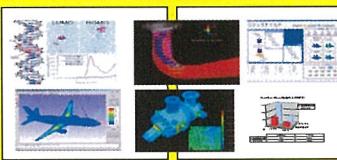
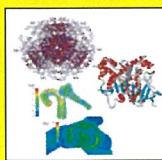
中核拠点

● 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、鹿児島大学、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



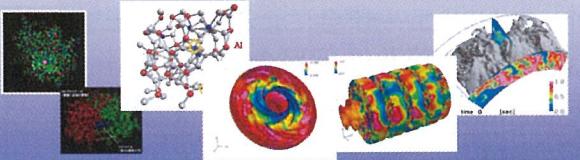
戦略的基盤ソフトウェアの開発(2002~2005)

● 概要

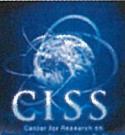
世界最高水準の実用的な計算科学シミュレーション・ソフトウェアの開発・普及

● 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、鹿児島大学、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



公開中の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 ◎反復法ソルバーに対応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

活動概要

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

もう少し簡単に説明すると

- 企業の人に対するスパコンに興味を持つてもらう活動を展開
- 「京」でも使える先端ソフトをFOCUSスパコンに整備
- ソフトの使い方の講習会を実施支援
- (使い方が分かったところで)トライアル利用制度(利用者支援あり)
- 「京」へのステップアップの公募(実証研究課題)