

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
(A) 次世代ナノ情報機能・材料					
① 次世代ナノ複合材料					
中核 アプリ	1	実空間第一原理ナノ物質 シミュレータ (HP-RSDFT)	押山 淳 (東大院工)	次世代超並列アーキテクチャ計算機上でパフォーマンスを発揮する、大規模原子群の電子状態量子論的計算のための、実空間差分法に基づく密度汎関数法計算アプリケーション。特徴的な長さスケールが数ナノメートル以下の原子群の原子構造・電子状態の量子論的計算が可能である。	
	2	QMAS (Quantum MAterials Simulator)	石橋 章司 (産総研)	QMAS(Quantum MAterials Simulator)は、平面波基底・Projector Augmented-Wave(PAW)法・密度汎関数理論を用い、物質の電子状態・各種物性値を効率よく高精度に計算できるツール。一般的な構造最適化・電子状態計算機能に加え、静電場下の電子状態、原子スケール誘電率分布、エネルギー・応力分布、陽電子状態・消滅パラメータ、などの特徴的な計算機能を有する。	
	3	連続変位クラスター変分 計算プログラム (GDCVM)	毛利 哲夫 (北大院工)	合金の相平衡・相転移の計算において格子の局所緩和(原子の局所変位)の導入が重要な課題である。特に原子サイズが大きく異なる系を対象にする場合には、局所緩和の効果が顕在化されてくる。従来のクラスター変分法では、局所緩和を導入すると結晶の対称性が格子点ごとに変化するために、エントロピー公式が正当化されなくなる。連続変位クラスター変分法プログラムは広範な合金系を対象にして、局所緩和を相平衡計算に組み込むプログラムである。	
	4	オーダーN 量子伝導プロ グラム	小林 伸彦 (筑波大院数理 物質)	計算時間が原子数Nに比例する独自のオーダーN量子伝導計算プログラム。ナノスケールからミクロンスケールまでの系の電気伝導を取り扱い、バルスティック領域から準バルスティック領域、拡散領域での伝導特性解析を行う。フォノン散乱効果・不純物散乱効果を取り入れ、平均自由行程、移動度、位相緩和長、およびその温度依存性などの解析ができる。既に8,000万原子系を量子力学的に扱う量子伝導計算の実証に成功している。	

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
付加機能ソフト	5	量子モンテカルロ計算(強相関電子系) (QMC_strong_correlated_electron_system)	那須 奎一郎 (KEK物構研)	低次元ハバードおよび拡張ハバードモデルの熱平衡状態(有限温度)を離散的Hubbard-Stratonovich 変換に基づく経路積分と量子モンテカルロ(QMC)法を組み合わせ、種々の重要な物理量の計算を行う。動的相関を計算する際に低温で生じる数値誤差は4倍精度のQDR展開を用いることで抑えているので、高温から低温に至る状態変化を系統的に計算することが可能である。例えば、温度変化による金属-モット絶縁体転移に伴う種々の相関関数の変化を調べることが可能である。	
	6	ナノ物質および固体表面での光励起キャリアダイナミクスと高速化学反応(FPSEID)	杉野 修 (東大物性研)	時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づいたシミュレーションを行い、時間に依存する外場がかかっているときの電子系の応答を求めるためのプログラムを提供する。本プログラムでは実時間のシミュレーションから電子系の応答を求めることができるため、非摂動的に強い外場にも対応する。Ehrenfestダイナミクスで原子核の運動も扱う事ができる。なお、これらの理論の適用限界等には十分に留意してから利用することが強く望まれる。	
	7	実時間・実空間TDDFTコード	矢花 一浩 (筑波大計算科学研究センター)	周期系(結晶)に対して振動外場を与えたときの線形および非線形応答、及びフォノン励起を調べるソフトウェアである。双極近似のもとで磁場の影響を無視し、時間依存コーン・シャム方程式と分極に対する結合した方程式を同時に解き進める。周期系に働く一様外場をベクトルポテンシャルで表現することにより、ブロッホ関数の時間変化を計算していることが本プログラムの特徴である。パルスレーザーを誘電体に照射する際に生じるコヒーレントフォノンの生成や、光絶縁破壊などの計算に威力を発揮する。	
	8	OpenMX	尾崎 泰助 (北陸先端大院先端融合領域)	擬ポテンシャル法と数値局在基底に基づく第一原理電子状態計算プログラム。GNU-GPLの規約に則り、 http://www.openmx-square.org より一般公開している。クリロフ部分空間法に基づくオーダ(N)法が実装されており、並列計算機上で大規模分子動力学計算が可能である。またスピン軌道相互作用を含めたノンコリニア磁性の取り扱いや非平衡グリーン関数法に基づく電気伝導計算も実装されており、ナノスケールマテリアルの量子シミュレーターとして、多くの研究者に活用されている。	
	9	TOMBO(全電子混合基底法)	川添 良幸 (東北大金研)	本プログラムは、超微細構造定数の精密算定や高速原子衝突のシミュレーションなどの擬ポテンシャルと平面波展開による通常の第一原理計算プログラムでは実行困難な処理が可能である。NAREGI上でのTOMBOは東北大学金属材料研究所計算材料学センターのシステム上で現在稼働中であり、遠隔利用も可能となっている。我が国で最初のGW計算と全電子法を生かしたTDDFT計算が可能である。	

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
	10	FMO-LCMO	常行 真司 (東大院理/物性研)	フラグメント分子軌道法(FMO)の出力ファイル(HF法もしくはDFTで計算された各フラグメントの1電子軌道データ)を利用して、巨大分子全系の1電子エネルギースペクトルと波動関数を簡便かつ高精度に計算する。現状ではGAMESS版FMOにのみ対応している。	
	11	M2TD	吉本 芳英 (鳥取大工)	Multiorder Multithermal法とThermodynamic Downfolding法によって物質の構造相変化のシミュレーションを第一原理計算の精度を最大限保存して行う。Multicanonical法を基礎とし相転移温度をまたがって広い温度範囲の物性を一度に予測する。原子構造のトポロジーを使わなくて良いので、融解などトポロジーが壊れる場合を扱える点に特徴がある。	
②次世代ナノ電子材料					
中核アプリ	12	動的密度行列繰り込み群法 (Dynamical_DMRG)	遠山 貴巳 (京大基研)	電子の強い相関効果に起因する光照射量子現象を解明するため、動的に拡張された密度行列繰り込み群法を用いて低次元強相関電子系の線形および非線形光学応答感受率の並列計算を実行する。また光照射により作られた励起状態の時間発展を同手法で計算し、その緩和過程のシミュレーションを行う。	
	13	電子格子系時間発展計算プログラム (Time_evolution_in_electron-lattice_systems)	米満 賢治 (分子研)	短時間の光照射により物質の電子状態が巨視的あるいは非線型に変化する動的挙動を、格子自由度と結合した遍歴電子モデルに基づいて計算する。電子相関の強さや格子/分子振動の量子性に応じて、異なる近似を用いる。分子性物質に特有な電子格子相互作用に由来する構造変化や秩序化/融解過程、光照射により導入された荷電体と格子/分子振動の相互作用による干渉や緩和過程を求める。	
	14	実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェア (Numerical_simulation_of_Keldysh_Green_function)	永長 直人 (東大)	ナノスケールの非平衡電子状態に対して空間依存したKeldyshグリーン関数を、不純物散乱やリード線の効果等を自己エネルギーとして取り入れ、ダイソン方程式を解いて自己無撞着に求める。Rashba型スピン軌道相互作用をもつ2次元電子系に対し、電荷密度・電流密度および標準的な定義におけるスピン密度・スピン流密度などを計算する。	
付加機能ソフト	15	変分モンテカルロ法 (VMC)	小形 正男 (東大院理)	このソフトでは、変分関数としての波動関数を仮定し、その変分エネルギーをモンテカルロ法によって統計誤差を除き正確に評価するものである。また最適化された波動関数を用いて種々の物理量の計算をモンテカルロ法によって行う。	

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
↑	16	磁性半導体中の磁気相関 (LDA-QMC)	前川 禎通 (原子力機構)	磁性不純物を含む、半導体や金属中の電子状態を求める。不純物間のスピン相関を求めるために、量子モンテカルロ法を用いる。計算中に必要になるバンド構造などの物質に依存した情報は、密度汎関数法を利用した第一原理計算を用いて求める。	
	17	不規則系コンダクタンス (Quantum_conductance_of_disordered_systems)	井上 順一郎 (名大院工)	原子配列の乱れや構造乱れを有する系のコンダクタンスを計算するため、任意の大きさの有限系に、半無限のリード線を二つ付けたものを用意する。この系に対し、線形応答理論とリカーシーブグリーン関数法を用いて、コンダクタンスを実空間でシミュレートする。この結果から、簡単なスケールリング則を用いて電気伝導度を見積もることができる。	
	18	有限要素法によるスピン蓄積の解析 (spin-accu-FEM)	市村雅彦 (日立基礎研)	拡散伝導領域におけるスピン蓄積、スピン流の解析を求めるため、有限要素法を用いる。ナノメートルからサブミクロンサイズのデバイスに対し、出力電圧(電気化学ポテンシャル)を見積もる。	
③次世代ナノ磁性材料					
中核アプリ	19	大規模並列量子モンテカルロ法 (ALPS/looper)	藤堂 眞治 (東大物性研)	ナノ磁性体などの量子格子モデルのシミュレーションのための量子モンテカルロ法のアプリケーションパッケージ。手法としては並列化された連続虚時間ループクラスターアルゴリズムを用いている。必要に応じて、厳密対角化法などの他の手法を用いることも可能。格子構造、相互作用などはXMLを用いて柔軟に指定できる。	
	20	電子スピン共鳴解析ソフト (quantum-dynamics-simulator)	宮下 精二 (東大院理)	分子の形状や磁気相互作用を入力することで、磁場掃引に対する誘起磁化曲線や、線幅まで含めた電子スピン共鳴の吸収線形を出力する。以下の部分からなる。静的磁化曲線 ハミルトニアンに対角化、動的磁化曲線 量子ダイナミクス(散逸なし)、量子マスター方程式(散逸あり)、複素アドミッタンス(幅なし: ハミルトニアンに対角化を用いて久保公式を直接計算する)、複素アドミッタンス(幅あり: 量子マスター方程式を用いて久保公式を直接計算する。)	

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
付加機能ソフト	21	オーダーN遮蔽グリーン関数法コード (MachikaneyamaScreen)	赤井 久純 (阪大院理)	本ソフトウェアは、サブミクロン厚さの薄膜の電子状態を第一原理にもとづいてシミュレートするプログラムコードである。層数Nに対して計算量が線形に増えるオーダーN遮蔽KKR法であるため、大規模な系に対しても現実的な時間での計算が可能である。金属/半導体界面、GMRおよびTMR構造等デバイスに用いられる複雑な薄膜も扱うことができる。希土類、遷移金属元素をはじめ任意の原子種を対象とする。	
	22	McDMFT	常次 宏一 (東大物性研)	磁性体の電子状態および磁気的性質を強相関効果に起因した量子揺らぎ・熱揺らぎを取り入れた方法により計算する。第一原理計算により決定したモデル格子系のホッピングパラメータ・クーロン相互作用の入力に対して、局所自己エネルギー補正を取り入れた電子グリーン関数を経由し、頂点補正を含むスピン相関関数を出力する。自己エネルギーと頂点関数は、動的平均場理論およびクラスタ動的平均場理論を用いて計算する。	
	23	DSQSS	川島 直輝 (東大物性研)	連続虚数時間向き付きループアルゴリズムに基づく量子モンテカルロ法によって離散空間上で定義された量子多体問題を解くためのプログラム。単位格子の情報、2体相互作用ハミルトニアン行列要素などを入力ファイルとして広い範囲のモデルに対応。たとえば、次元、格子の1辺の長さ、相互作用の異方性、スピンの大きさ、磁場の大きさ、温度などのパラメータを任意にとって、XXZハイゼンベルクモデルの計算を行うことが可能である。また、ボーズ系のシミュレーションも可能。	
(B) 次世代ナノ生体物質					
中核アプリ	24	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト (modylas)	岡崎 進 (名大院工)	任意の分子集合体に対する高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトである。長距離力を含めてナノ分野、バイオ分野における分子動力学計算に必要な計算手法のほとんどを備えている。NANO-IGNITIONと連携。10万~100万、また1000万原子系の巨大システムや自由エネルギー計算にも対応している。	
	25	高速量子化学計算ソフト (FMO-MP2)	北浦 和夫 (産総研)	高速化した電子相関計算プログラムにより、ab initio分子軌道法の高速度・高精度計算が可能であると同時に、フラグメント分子軌道(FMO)法プログラムによる大規模分子・分子集合系の計算が可能である。これらのプログラムは、アイオワ州立大学のM.S.Gordon教授グループが開発・公開しているGAMESSに組み込んで公開している。	次世代エネルギーと共同開発

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
付加 機能 ソフト	26	REM	岡本 祐幸 (名大院理)	既存の様々なシミュレーションプログラムによるシミュレーションに、状態サンプリング効率を高める機能を付加するアプリケーションである。既存のシミュレーションプログラムに、大規模並列環境を利用したレプリカ交換法を適用することにより、幅広い状態空間探索を可能にする。本プログラムではこの効率的なサンプリングを実現するレプリカ交換法を普段各ユーザが用いている既存のシミュレーションプログラムに適用する。	
	27	エントロピー力の統計力学 理論解析ソフトウェア (E-Force)	木下 正弘 (京大エネルギー 理工学研)	複雑な形状を有する非常に大きな溶質の近傍に存在する他の大きな溶質に対して、溶媒分子の並進移動に起因して形成されるエントロピックポテンシャル場の空間分布を計算する。その場合、両溶質の幾何学的特性および溶媒-溶媒間の全相関関数が入力として使用される。生体系において極めて重要な役割を果たすと考えられる溶媒の並進エントロピー効果を解析するための統計力学理論解析プログラムである。	
	28	PIMD	三浦 伸一 (金沢大理工)	経路積分法に基づき原子・分子集団の有限温度での性質を量子力学的に計算する。プログラムでは、経路のゆらぎを効率的にサンプルするための一般化座標を採用し、自由度の大域的なアップデートが可能である分子動力学法によりシミュレーションを実行する。また、原子核間の相互作用は電子構造をあらわに解く第一原理計算のプログラムと連携して行う。	
	29	Trajan	斉藤 真司 (分子研)	分子動力学法、モンテカルロ法、量子化学計算などで得られたデータから、揺らぎや構造情報を得る事を目的とする生物物理、理論化学分野における解析、データ処理のためのライブラリ群である。特にタンパク質などの生体内分子におけるシミュレーションから得られたデータ解析(例えば、距離や二面角などの構造情報や揺らぎや時間相関関数などの動的情報)、データ処理に特化した機能を持つ。	
	30	ermod	松林 伸幸 (京大化研)	溶媒和自由エネルギーの計算を行う。問題とする溶液系と参照溶媒系の分子シミュレーションから、溶質-溶媒相互作用エネルギーの分布関数を構成し、エネルギー表示法による自由エネルギー解析を行う。ミセル・脂質膜・タンパク質のような局所不均一系の取り扱いも可能で、イオン液体・超臨界流体のような新規反応場にも対応。種々のMDおよびMCプログラムソフトと連携できる。MDまたはMCソフトへの組込みと出カトラジェクトリ解析の両方に対応。QM/MM手法とも連携可能。	次世代エネルギーと共通

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
	31	高精度自由エネルギー計算:CPOL	三上 益弘 (産総研)	高精度自由エネルギー計算:CPOLは、分子膜系のように高密度から低密度までの様々な密度領域が存在する非均一系における低分子溶質の自由エネルギーを高精度かつ高速に計算するプログラムである。特に水分子の膜透過の問題において有用であり、高密度領域(水領域)ではOverlapping法を、低密度領域(膜領域)にはCavity Insertion Widom(CIW)法をそれぞれ使用することで、高速・高精度の自由エネルギー障壁の計算を可能とする。本サブルーチンは、分子シミュレーションパッケージ:MPDynに組み込んで使用する。	
(C)次世代エネルギー					
中核 アプリ	32	高速3D-RISM	平田 文男 (分子研)	液体の統計力学理論に基づき蛋白質などナノ分子の水和構造や水和自由エネルギーを計算するプログラム。分布関数(相関関数)に関する積分方程式を解くために、フーリエ変換を多用する。そのため、高速フーリエ変換(FFT)の速度が重要である。	
	23	高速量子化学計算ソフト(FMO-MP2)	永瀬 茂 (分子研)	高速化した電子相関計算プログラムにより、ab initio分子軌道法の高速度・高精度計算が可能であると同時に、フラグメント分子軌道(FMO)法プログラムによる大規模分子・分子集合系の計算が可能である。これらのプログラムは、アイオワ州立大学のM.S.Gordon教授グループが開発・公開しているGAMESSに組み込んで公開している。	次世代ナノ生体と共同開発
	33	DC: 分割統治量子化学計算プログラム	中井 浩巳 (早大理工)	Divide-and-Conquer(DC)法に基づき、大規模系の高精度量子化学計算を可能にするソフトウェア。SCF計算(HF, DFT)のほか、高精度なpost-SCF計算[MP2, CCSD, CCSD(T)など]が実行可能であり、構造最適化や分子動力学計算、励起状態計算、動的平衡率の算定も行える。 また、本ソフトウェアは、電子の波動関数に加えて原子核の波動関数も同時に求めるNOMO計算プログラムと、非経験的分子動力学シミュレーションの高速化プログラム「LIMO/LSMO」を内包しており、原子核の量子効果を効果的に取り込むことや、高速な分子動力学計算も可能である。	

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
付加 機能 ソフト	34	Etrans	藪下 聡 (慶応大理工)	分子の内部転換や分子間の励起移動および電子移動の速度を定量的に予測、解析するには、非断熱結合要素や大規模系振動運動のFranck-Condon因子の計算が必要である。他の中核アプリプログラムなどを利用して計算できる分子構造や電子構造に関する情報から、非断熱結合要素や分子振動に関する物性値を評価し、それを基にして第一原理に則った形で、励起エネルギー移動速度および電子移動速度の評価を行う。	
	35	PIQUANDY	信定 克幸 (分子研)	数～十数ナノメートル程度のナノ構造体におけるレーザー光誘起電子ダイナミクスを計算するための時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間電子ダイナミクスシミュレーションソフトウェア	
	36	多参照電子状態計算法 (Multireference_Electronic_Simulator)	柳井 毅 (分子研)	孤立分子系に対する多参照電子状態を記述するための量子化学計算を実行するためのプログラム。	
	37	多核金属含有分子用GSO プログラム (q-x)	奥村 光隆 (阪大院理)	Broken SymmetryなDFT,及びHF法等の量子化学計算により、電子状態とJ,D,E値といった磁氣的相互作用に関係する物性量の算出を行う。	
	38	3D-RISM/MD	平田 文男 (分子研)	3D-RISM理論で求めた自由エネルギー曲面上で蛋白質の疑似ダイナミクスを行なう方法論	
	39	3D-RISM-SCF	平田 文男 (分子研)	3D-RISM理論と各種量子化学計算を結合するプログラム。3D-RISMプログラムは古典力学に基づいているため、量子化学から出て来る電子構造を古典的な電荷に翻訳することが必要である。本プログラムはこの翻訳を高速かつ高精度で実行する。	
	28	ermod	松林 伸幸 (京大化研)	溶媒和自由エネルギーの計算を行う。問題とする溶液系と参照溶媒系の分子シミュレーションから、溶質-溶媒相互作用エネルギーの分布関数を構成し、エネルギー表示法による自由エネルギー解析を行う。ミセル・脂質膜・タンパク質のような局所不均一系の取り扱いも可能で、イオン液体・超臨界流体のような新規反応場にも対応。種々のMDおよびMCプログラムソフトと連携できる。MDまたはMCソフトへの組込みと出力トラジェクトリ解析の両方に対応。QM/MM手法とも連携可能。	次世代ナノ生体と共通

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
	40	Calnos	森田 明弘 (東北大院理)	可視-赤外の界面和周波発生(SFG)分光スペクトルを分子動力学シミュレーションに基づいて計算し、界面構造を解析するプログラム。通常のスペクトル解析に用いられるようなバンドフィッティングを必要とせず、分子物性のみに基づく非経験的なスペクトル計算が可能である。計算には界面を構成する分子のモデリングが別途必要である。現在のところ、水溶液界面のO-H伸縮振動領域の振動スペクトルの解析に対応しており、今後有機分子のC-H伸縮領域をサポートする予定である。	
	41	Tullyの古典軌道ホップ法プログラム(TSH)	南部 伸孝 (上智大理工)	非断熱遷移過程を扱うにあたり、TullyのSurface-Hopping法のもと、非断熱遷移過程を厳密に取扱うことができるZhu-Nakamura理論を用い古典軌道計算を実施するプログラムである。	
	42	SO-SC-CI	江原 正博 (分子研)	固体表面上における触媒反応や光電子過程を研究する上で、金属原子の相対論的効果を考慮することは、定性的な描像を得る上でも重要である。本プログラムは、相対論効果のうちスピン軌道相互作用を計算するものであり、電子相関理論で得られた波動関数に対してスピン軌道相互作用を計算する。	
	43	MWDYN	関野 秀男 (豊橋技科大院工)	量子(電子)・古典(核)混合系の第一原理シミュレーションでは空間の厳密表現が重要である。特に非断熱領域での核・電子のダイナミクスを厳密に論ずるには完全基底による空間記述がクリティカルとなる。 量子化学計算で近平衡状態物性値算定の完全基底計算を実現している、多重解像度多重ウェーブレット(MRMW)基底による分子の電子・核非断熱ダイナミクスシミュレーションを行う。	
	44	OpenFMO	稲富雄一(九州大学)、真木淳(九州先端科学技術研究所)、高見利也(九州大学)、青柳睦(九州大学)	FMO理論に基づく、高性能な分子軌道計算プログラムであり、数万ノードから成る超並列計算機システムにおいて大規模な分子系を効率よく取り扱う目的で、プログラム構成上に次のような特徴を持つ。(a)演算粒度の細かな二電子積分計算と、フラグメント単位の粗粒度計算という2階層の並列性に関して、それぞれの動的な負荷分散を考慮した実装を行っている。(b)前項の后者については耐障害性を考慮している(平成22年度時点では開発途上)、(c)特別な通信ミドルウェアを使わず、標準的なMPI片方向通信を有効に活用した実装を採用している。	

文部科学省
「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(HPCI)の構築」
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

公開予定プログラム一覧

2010年10月20日
次世代ナノ統合

種類	No.	プログラム名	代表者氏名 (所属機関名)	プログラムの概要	備考
(D) 共通					
連携 ツール	45	NANO-IGNITION	水谷 文保 (分子研)	中核アプリや付加機能ソフトの入力として用いるナノスケールの原子、分子の複雑な配置を発生させ、またポテンシャルパラメータ等を自動的に割り当てる GUI 形式の入力生成ツールである。	
	46	GIANT	水谷 文保 (分子研)	GIANT (General Inter-Application Translator) は、任意のアプリ間で汎用的なデータ変換機能を提供する。アプリ毎にテンプレートファイルを作成し、アプリ間の変換ルールはリレーションシップファイルを定義することで、変換を実現する。特に次世代スパコン環境上で、高速なアプリ連成を実現するために密結合環境の開発も行っている。	