

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要

完成された次世代
スーパーコンピュータ
でシミュレート

次世代ナノ情報機能・材料

次世代ナノ生体物質

次世代エネルギー

グランドチャレンジの3課題

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

- ナノ分野グランドチャレンジをカバー
- ナノ分野計算科学の学術基盤の形成
- 電子・原子・分子から出発した最先端の理論・方法論
- 高度並列化アルゴリズム、ソフトウェア
- 任意のソフトの任意な結合・連成

連携ツール

NANO-IGNITION

GIANT

密結合環境（仮称）

主な付加機能ソフト

量子マスター方程式

厳密対角化

磁気応答関数

動的平均場法

ループアルゴリズム

電子格子系時間発展計算

乱雑速度場法

第一原理量子輸送計算

量子伝導シミュレーション

非平衡グリーン関数

スピン流解析

マルチカノニカル法

レプリカ交換法

電子伝導、機能評価

効率的サンプリング

熱力学積分法

粒子挿入法

エネルギー表示法

摂動法

overlapping distribution法

経路積分法

量子古典混合法

自己組織化・分子認識

プロトン移動

溶媒和自由エネルギー計算

二次のMøller-Plesset摂動法

配置間相互作用法

非線形分光理論

一般化ランジェバンダイナミクス

フラグメント分子軌道法

Surface-Hopping法

電子移動反応

酵素・触媒反応

中核アプリケーション ● 方法論開発・超並列化によりベタフロップス級性能を実現

実空間第一原理
ナノ物質
シミュレータ

動的密度行列
繰り込み群法

大規模並列量子
モンテカルロ法

高並列汎用
分子動力学
シミュレーションソフト

RISM/3D-RISM

高速量子化学計算
ソフト

責任者：押山 淳
(東大院工)

特徴的な長さスケールが 10nm 以下の素子を利用した次世代エレクトロニクスデバイス開発をめざす。そのため、10 万原子を量子力学的に扱える電子状態計算プログラムと効率的位相空間探索プログラムからなる、第一原理ナノ物質シミュレータを構築する。

責任者：遠山 貴己
(京大基礎物理解研)

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。

責任者：藤堂 眞治
(東大院工)

ナノ磁性体や電子系などの量子格子モデルのシミュレーションのためのライブラリとアプリケーションのパッケージ。並列化された量子モンテカルロ法を中心に、他にも厳密対角化法などのアルゴリズムの中から最適なものを選びシミュレーションを実行する。格子構造、相互作用などは XML を用いて柔軟に指定できる。

責任者：岡崎 進
(分子研/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。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る。NANO-IGNITION と連携。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する。

責任者：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と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、数学ライブラリの高速フーリエ変換 (FFT) を活用する。

責任者：永瀬 茂
(分子研)
北浦 和夫
(産総研/京大院薬)

電子状態を正しく記述するための電子相関を取り込んだ大規模量子化学並列計算を精度高く高速に実行できるようにする。超巨大分子の量子化学計算を実現するために、FMO 法の高速並列化と分子力学との融合法を開発する。

本プロジェクトで目指すシミュレーションソフトウェア(平成18年度～23年度)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・ 次世代ナノアプリケーション連携ツール

ナノサイエンス分野の広い領域にまたがった、6本の中核アプリケーションと多数の性格の異なるソフトウェアの集合体。共通基盤的で専門知識を必要としないものと、高度に専門的で開発者と連絡を取り合う必要があるものがある。さらにソフトウェアの連携を補助するためのツールとして NANO-IGNITION※¹ や GIANT※² を含む。連携ツール等を用いたアプリケーションの組み合わせにより、様々なニーズに対応できる。

※1 NANO-IGNITION

多様なソフトウェアを実行する際に入力する初期データを自動的に生成し、指定した形式で出力する。

※2 GIANT、密結合環境（仮称）

複数アプリケーションによる連成・連携シミュレーションを実現するため、データ形式の変換を行う。

6つの中核アプリケーションと付加機能ソフトを、連携ツール“GIANT”を用いて任意に組み合わせることにより、次世代スーパーコンピュータで機能・性能を発揮できるソフトウェア群

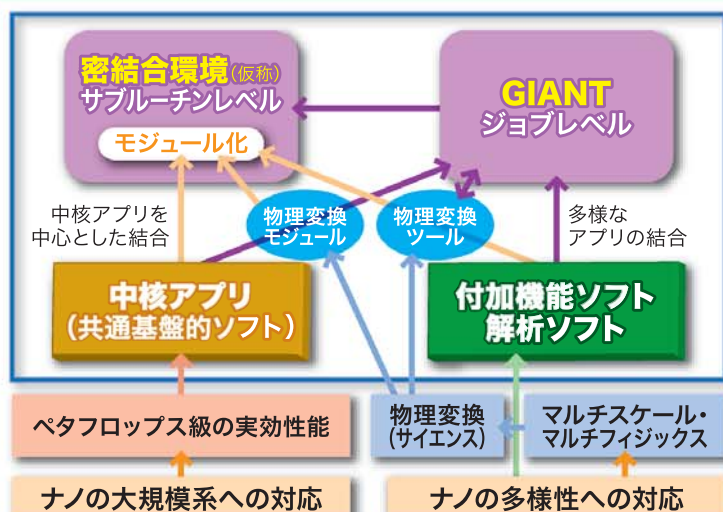
これらを活用

グランドチャレンジ課題を
解決する

ナノ統合ソフトウェアの階層性



アプリケーション間の連携



ナノ統合アプリケーションポータル『PAL』ソフトウェア情報の公開

<http://pal.ims.ac.jp/>

