

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア一覧(全46本)

(次世代ナノ情報機能・材料)

研究グループ名、種類	No.	プログラム名	開発責任者
(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	押山 淳
付加機能ソフト	2	QMAS (Quantum MAterials Simulator)	石橋 章司
	3	連続変位クラスター変分計算プログラム	毛利 哲夫
	4	オーダーN 量子伝導プログラム	小林 伸彦
	5	量子モンテカルロ計算(強相関電子系)	那須 奎一郎
	6	ナノ物質および固体表面での光励起キャリアーダイナミクスと高速化学反応	杉野 修
	7	実時間・実空間TDDFTコード	矢花 一浩
	8	OpenMX	尾崎 泰助
	9	TOMBO(全電子混合基底法)	川添 良幸
	10	FMO-LCMO	常行 真司
	11	M2TD	吉本 芳英
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	遠山 貴巳
付加機能ソフト	13	電子格子系時間発展計算プログラム	米満 賢治
	14	実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェア	永長 直人
	15	変分モンテカルロ法	小形 正男
	16	磁性半導体中の磁気相関	前川 禎通
	17	不規則系コンダクタンス	井上 順一郎
	18	有限要素法によるスピン蓄積の解析	市村 雅彦
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	藤堂 眞治
付加機能ソフト	20	電子スピン共鳴解析ソフト	宮下 精二
	21	オーダーN遮蔽グリーン関数法コード	赤井 久純
	22	McDMFT	常次 宏一
	23	DSQSS	川島 直輝

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア一覧(全46本)

(次世代ナノ生体材料、次世代エネルギー、共通)

研究グループ名、種類	No.	プログラム名	開発責任者
(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	岡崎 進
	25	高速量子化学計算ソフト	北浦 和夫
付加機能ソフト	26	REM	岡本 祐幸
	27	エントロピー力の統計力学理論解析ソフトウェア	木下 正弘
	28	PIMD	三浦 伸一
	29	Trajan	斉藤 真司
	30	ermod	松林 伸幸
	31	高精度自由エネルギー計算:CPOL	三上 益弘
	(C) 次世代エネルギー		
中核アプリ	32	高速3D-RISM	平田 文男
	25	高速量子化学計算ソフト	永瀬 茂
付加機能ソフト	33	DC: 分割統治量子化学計算プログラム	中井 浩巳
	34	Etrans	藪下 聡
	35	PIQUANDY	信定 克幸
	36	多参照電子状態計算法	柳井 毅
	37	多核金属含有分子用GSOプログラム	奥村 光隆
	38	3D-RISM/MD	平田 文男
	39	3D-RISM-SCF	平田 文男
	30	ermod	松林 伸幸
	40	Calnos	森田 明弘
	41	半古典分子動力学プログラム(SCMD)	南部 伸孝
	42	SO-SC-CI	江原 正博
	43	MWDYN	関野 秀男
	44	OpenFMO	青柳 睦
(D) 共通			
連携ツール	45	NANO-IGNITION	水谷 文保
	46	GIANT	水谷 文保

「次世代生命体統合シミュレーション ソフトウェアの研究開発」において開発されたソフトウェア (全31本)

	ソフトウェア名称	説明
分子 (8)	Platypus-MM/CG	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法開発の基盤となるクラスライブラリ
	Platypus-REIN	レプリカ交換分子動力学計算インターフェイス
	MARBLE	全原子分子動力学計算
	CafeMol	粗視化モデル計算
	ProteinDF	密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算
	Platypus-QM/MM-FE	ハイブリッドQM/MM反応自由エネルギー計算
	Platypus-QM	量子化学計算
	Platypus-QM/MM	量子化学計算/分子動力学計算
細胞	RICS	細胞シミュレーションプラットフォーム
臓器 全身 (4)	ZZ-EFSI	全身ボクセルシミュレーション(ボクセル構造流体連成解析プログラム)
	ZZ-DOSE	重粒子線治療シミュレーション
	HIFU	低侵襲治療シミュレーション(ボクセル超音波伝播プログラム)
	UTHeart	マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション

	ソフトウェア名称	説明
データ 解析 融合 (9)	ParaHaplo	ハプロタイプ関連解析に於ける統計検定を行うためのソフトウェア
	NGS analyzer	次世代シーケンス解析プログラム
	ExRAT	拡張RAT法による2SNP組合せの全ゲノム関連解析ソフトウェア
	SiGN-BN (SiGN)	大規模遺伝子制御ネットワーク推定プログラム
	SiGN-L1 (L1GN)	再帰的正則化法による生体内分子の大規模ネットワーク推定プログラム
	SiGN-SSM (SSM)	状態空間モデルによる時系列データからの遺伝子ネットワーク推定プログラム
	SBiP (※)	データ解析融合プラットフォーム
	LiSDAS	生命体データ同化プログラム
	MEGADOCK	網羅的タンパク質ドッキング解析プログラム
	脳神経 (5)	NEST
CMDN		Cortical Microcircuit Developed on NEST
VSM		全視覚系モデルによる視覚情報処理の解析(視覚系シミュレーションのための共有プラットフォーム)
NeuroMorphoKit		神経細胞形態シミュレーションキット
IOSSIM		昆虫嗅覚系全脳シミュレータ
基盤 (4)	cppmd	大規模並列用MDコアプログラム
	LSV (※)	分散並列大規模データ可視化システム
	SPHERE (※)	アプリケーションミドルウェア
	VLSVL (※)	大規模仮想化合物ライブラリ

(※)は、フロントエンドや可視化など直接「京」で稼働させることを前提としていないソフト

「京」の共用の枠組み

国(文部科学省): 特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に基づく
共用の促進に関する基本的な方針の策定

提言

実施計画の認可

実施計画・業務規程の認可

理化学研究所(設置者・実施主体)
[計算科学研究機構(神戸)]

(法定業務)

- 「京」の開発
- 施設の建設・維持管理
- 超高速電子計算機の供用

連携

「京」【共用施設】



登録施設利用促進機関(登録機関)
[高度情報科学技術研究機構]

(法定業務)

- 利用者選定業務
- 利用支援業務
(情報の提供、相談等の援助 等)

23年10月に選定
24年4月から業務開始

理研、登録機関、コンソーシアム
三位一体の連携により
広範な分野での活用を促進

HPCIコンソーシアム

計算資源提供機関やユーザーコミュニティ機関等

HPCIの整備・運用や、
計算科学技術振興に関わる意見を
幅広く集約し提言

提言

利用の
応募

戦略機関につい
ては、優先的に利
用枠を確保

公正な課題選
定、情報提供、
研究相談、技
術指導等

利用者のニーズ

戦略機関(社会が期待する画期的な成果創出のため、「京」を中核とするHPCIの重点的・戦略的な利用)

利用者(大学、独立行政法人、産業界等、基礎研究から産業利用まで幅広い利用)