

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要

概要	アプリケーション群
次世代ナノ情報機能・材料	
<p>実空間密度汎関数法、密度行列繰り込み群法や量子・古典モンテカルロ法を中心とした計算手法に基づき、次世代ナノ情報機能・材料の探索、設計を可能とするアプリケーション群。 (中核アプリ3本、付加機能ソフト20本)</p>	<p>中核アプリ:HP-RSDFT、DDMRG、ALPS/looper 付加機能ソフト:QMAS、連続変位クラスター変分計算プログラム、オーダーN量子伝導プログラム、量子モンテカルロ計算、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、実時間・実空間TDDFTコード、OpenMX、TOMBO、FMO-LCMO、M2TD、電子格子系時間発展計算プログラム、実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェア、変分モンテカルロ法、磁性半導体中の磁気相関、不規則系コンダクタンス、有限要素法によるスピン蓄積の解析、電子スピン共鳴解析ソフト、オーダーN遮蔽グリーン関数法コード、McDMFT、DSQSS</p>
次世代ナノ生体物質	
<p>ナノスケールの生体物質に対して、自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化、また動的な振る舞いをシミュレーションできるアプリケーション群。 (中核アプリ2本、付加機能ソフト6本)</p>	<p>中核アプリ:MODYLAS、FMO/MP2 付加機能ソフト:REM、エントロピー力の統計力学理論解析ソフトウェア、PIMD、Trajan、ermod、CPOL</p>
次世代エネルギー	
<p>高精度・大規模量子化学計算、統計力学計算を中軸として、高効率の触媒・酵素の設計をシミュレーションできるアプリケーション群。 (中核アプリ1本、付加機能ソフト12本)</p>	<p>中核アプリ:3D-RISM 付加機能ソフト:DC、Etrans、PIQUANDY、多参照電子状態計算法、多核金属含有分子用GSOプログラム、3D-RISM/MD、3D-RISM-SCF、Calnos、SCMD、SO-SC-CI、MWDYN、OpenFMO</p>
共通（連携ツール）	
<p>中核アプリと付加機能ソフトをシームレスに連結するためのツール群。(2本)</p>	<p>NANO-IGNITION、GIANT</p>

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

## ●中核アプリケーション

	アプリケーション名	概要
次世代ナノ情報機能・材料		
	実空間第一原理ナノ物質シミュレータ HP-RSDFT	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のデバイス開発をめざすための、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。
	動的密度行列繰り込み群法 DDMRG	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。
	大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper	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。
次世代ナノ生体物質		
	高並列汎用分子動力学シミュレーション MODYLAS	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ている。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。
	高速量子化学計算ソフト FMO/MP2	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。電子状態を正しく記述するための電子相関を取り組んだ大規模量子化学並列計算を高精度・高速に実行可能。
次世代エネルギー		
	液体の統計力学理論計算 3D-RISM	液体の統計力学理論に基づきタンパク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ため、高速フーリエ変換(FFT)の高並列化を実現。

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

## ●付加機能ソフト

	アプリケーション名	概要
次世代ナノ情報機能・材料		
	QMAS	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。
	連続変位クラスター変分計算プログラム	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。
	オーダーN量子伝導プログラム	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。ナノスケールからマイクロスケールまでの系の電気伝導を取り扱い、バリスティック領域から準バリスティック領域、拡散領域での伝導特性解析を行う。
	量子モンテカルロ計算（強相関電子系）	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)法を組みあわせてシミュレートし、種々の重要な物理量の計算を行う。
	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	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。
	実時間・実空間TDDFTコード	周期系（結晶）に対して振動外場を与えた時の線形および非線形応答、およびフォノン励起を調べるソフトウェア。
	OpenMX	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。
	TOMBO（全電子混合基底法）	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
	FMO-LCMO	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。

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

## ●付加機能ソフト

	アプリケーション名	概要
次世代ナノ情報機能・材料 (つづき)		
	M2TD	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。
	電子格子系時間発展計算プログラム	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模型に基づいて計算。
	実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェア	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。
	変分モンテカルロ法	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。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。
	磁性半導体中の磁気相関	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。
	不規則系コンダクタンス	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。
	有限要素法によるスピン蓄積の解析	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。
	電子スピン共鳴解析ソフト	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。

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

## ●付加機能ソフト

	アプリケーション名	概要
次世代ナノ情報機能・材料 (つづき)		
	オーダーN遮蔽グリーン関数法コード	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。
	McDMFT	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。
	DSQSS	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。
次世代ナノ生体物質		
	REM	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。
	エントロピー力の統計力学理論解析ソフトウェア	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。
	PIMD	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。
	Trajan	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。
	ermod	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。
	高精度自由エネルギー計算：CPOL	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。

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

## ●付加機能ソフト

	アプリケーション名	概要
次世代エネルギー		
	DC：分割統治量子化学計算プログラム	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。
	Etrans	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。
	PIQUANDY	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。
	多参照電子状態計算法	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。
	多核金属含有分子用GSOプログラム	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。
	3D-RISM/MD	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う。
	3D-RISM-SCF	3D-RISM理論と各種量子化学計算を結合するプログラム。
	Calnos	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。
	半古典分子動力学プログラム (SCMD)	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。
	SO-SC-CI	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。

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

## ●付加機能ソフト

	アプリケーション名	概要
次世代エネルギー (つづき)		
	MWDYN	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。
	OpenFMO	FMO理論に基づく、高性能な分子軌道計算プログラムで、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。
共通 (連携ツール)		
	NANO-IGNITION	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。
	GIANT	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。

# 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの概要

	概要	アプリケーション群
分子スケール		
	タンパク質系のマルチスケールシミュレーションを実現するため、3つの階層のソフトウェア(QM、MM、CG)とそれらの階層を接続するソフトウェア(QM/MM、MM/CG)から構成されるアプリケーション群。(8本)	Platypus-MM/CG、Platypus-REIN、MARBLE、CafeMol、ProteinDF、Platypus-QM/MM-FE、Platypus-QM、Platypus-QM/MM
細胞スケール		
	細胞内に存在するオルガネラなどの不均一な場を有する細胞モデル中において、代謝や物質の移動等の現象を統一的に記述し、細胞内の時空間シミュレーションを実現するアプリケーション。(1本)	RICS
臓器全身スケール		
	病態の予測や治療法の検討のために、細胞スケール・分子スケールの効果を取り入れたマルチスケール生体力学シミュレーションを行うアプリケーション群。(4本)	ZZ-EFSI、ZZ-DOSE、ZZ-HIFU、UT-Heart
データ解析融合		
	ゲノムと疾患の間にあるシステムと薬剤応答を、ゲノムデータ解析や遺伝子ネットワーク解析等から解明するためのアプリケーション群。(9本)	ParaHaplo、NGSanalyzer、ExRAT、SiGN-BN(SiGN)、SiGN-L1(L1GN)、SiGN-SSM(SSM)、SBiP、LiSDAS、MEGADOCK
脳神経系		
	神経細胞、局所回路レベルでその動態をシミュレーションで再現するアプリケーション群。(5本)	NEST、CMDN、VSM、NeuroMorphoKit、IOSSIM
生命体基盤		
	高並列分子動力学計算コアソフトウェアや可視化等の基盤ソフトウェア群。(4本)	cppmd、LSV、SPHERE、VLSVL



# 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

	アプリケーション名	概要
分子スケール		
	MM/CGプログラム 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。タンパク質や核酸、薬剤など生体分子を計算対象とする。反応の時間スケールが遅い(ミリ秒～秒)ために、通常のMDでは追跡が困難な、生体分子同士の相互作用やこれに伴う立体構造変化過程の再現を目的とする。
	レプリカ交換分子動力学計算 Platypus-REIN	構造変化予測、自由エネルギー計算等を効率良く行なう為のプログラム。多次元レプリカ交換分子動力学計算を行なう。「京」に対応したMarbleを分子動力学計算に用いるが、その他のプログラムにも対応可。
	全原子分子動力学計算 MARBLE	タンパク質や核酸など生体分子の立体構造で、水素まで含んだ全原子モデルを解く。
	粗視化モデル計算 CafeMol	粗視化分子モデル計算により大規模生体分子の長時間シミュレーションを行う。
	タンパク質全電子波動関数計算 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。複雑かつ大規模・高精度が要求されるタンパク質の全電子を密度汎関数法に基づきカノニカル軌道で計算する。励起状態も含めた第一原理分子動力学計算が可能。
	QM/MM反応自由エネルギー計算 Platypus-QM/MM-FE	量子化学的手法(QM)と分子力場法(MM)のハイブリッドであるQM/MM法により、生体分子内の反応基質分子の自由エネルギー最適構造の決定及び反応性解析を行う。
	量子科学計算 Platypus-QM	分子軌道法および密度汎関数理論(DFT)を用いたタンパク質等分子系の全電子第一原理計算を行う。
	量子化学計算/分子動力学計算 Platypus-QM/MM	電子状態の効果を分子動力学に取り込むことで酵素反応機構などの生体高分子の精密解析を行う。

# 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

アプリケーション名	概要
<b>細胞スケール</b>	
細胞シミュレーションプラットフォーム RICS	細胞内の生化学反応、濃度勾配による物質の拡散、膜機能(チャネル、ポンプ、受容体)を連成して、細胞の複雑な構造と場を考慮したシミュレーションが可能なシステム。
<b>臓器全身スケール</b>	
全身ボクセルシミュレーション ZZ-EFSI	ボクセル構造流体連成解析プログラム。構造と流体の連成解析を行う。医療応用に向け、やわらかな人体の解析および予測を行う。
重粒子線治療シミュレーション ZZ-DOSE	治療用重粒子線による人体中の空間線量分布を、ボクセルデータに対してモンテカルロ法を用いて計算する。新開発の領域分割モンテカルロ法を用いることで、巨大なボクセルデータの取り扱いを可能にしている。
超音波治療シミュレーション ZZ-HIFU	ボクセル超音波伝播プログラム。超音波を集束させ、焦点で加熱によって腫瘍を焼灼する治療法(High Intensity Focused Ultrasound : HIFU)において、治療機器から照射された超音波が体内を伝播する過程をシミュレーション。
心臓シミュレーション UT-Heart	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。内部構造まで再現した心筋細胞モデル(マイクロモデル)を心臓モデル(マクロモデル)の各有限要素に割り当て、均質化法に基づき両者を連成させ同時に解く。

# 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

	アプリケーション名	概要
データ解析融合		
	ハプロタイプ関連解析統計検定 ParaHaplo	ヒトのゲノム全体にわたる遺伝的な相違点を、患者群とコントロール群で比較することにより、疾患の遺伝的原因を探るための統計検定計算。
	次世代シーケンス解析 NGS analyzer	次世代シーケンサーの出力データを高速に解析し、ヒト個人間の遺伝的差異やがんゲノムの突然変異を高い正確さで同定する。
	全ゲノム関連解析 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。遺伝子間相互作用が発症リスクを変化させる疾患関連遺伝子の組合せを全ゲノムで探索する。2SNP間の全組合せを超並列に行う方法と、SNP間の連鎖不平衡(相関)も考慮した、より精密な方法の2種類を実装。前者で全組合せをスクリーニングし、後者で経験的p値を求める手順を想定。
	大規模遺伝子ネットワーク推定 SiGN-BN (SiGN)	大規模遺伝子制御ネットワーク推定プログラム。細胞内分子の発現制御システム(遺伝子ネットワーク)のモデル化・予測を行う超並列計算機用ソフトウェア群。
	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。
	データ解析融合プラットフォーム SBiP (※)	データ解析融合プラットフォームで開発した技術とプログラムのうち、特にSiGN、LiSDASを解析パイプラインのコンポーネントとしてユーザが簡単に利用できる高機能GUIを備えたソフトウェアプラットフォームをユーザに提供。「京」に用意されているジョブスケジューリングシステムと連携し、「京」上で各解析パイプラインの処理の一部を実行し、その結果については、SBiPの視覚化コンポーネント群を用いて可視化し保存することが可能。
	生命体データ同化プログラム LiSDAS	生体内分子の計測データを参照値として与えることで、シミュレーションの再現性・予測力を改善するためのパラメータチューニングやモデルの改良を自動で行う。
	網羅的タンパク質ドッキング解析 MEGADOCK	タンパク質間相互作用予測について、タンパク質立体構造情報から、表面形状相補性と静電相互作用に基づく単純化した評価モデルを新規に提案。FFTを用いて計算量を大きく減じ、大規模並列計算機上で効率的な並列計算が可能。

(※)フロントエンドでの利用や可視化用途のソフトウェア

# 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの概要(各アプリ)

アプリケーション名		概要
脳神経系		
局所神経回路シミュレーション NEST		単純な神経細胞モデルから出発し、実際の脳の活動を説明。
皮質局所回路シミュレーション CMDN		Cortical Microcircuit Developed on NEST。6層構造を持つ皮質局所回路がどのようにして情報処理を実現しているか明らかにする生理実験データに基づく大規模シミュレーション。
視覚情報処理の解析 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)。計算対象は、機能、細胞、イオン電流の各レベルで記述された眼球運動(脳幹)、眼光学、網膜、皮質の数理モデルで構成された視覚系、また、共有フォーマットによるモデル統合ならびにシミュレーションライブラリ。
神経細胞形態シミュレーション NeuroMorphoKit		神経細胞におけるマルチフィジックス(骨格系、細胞膜、細胞内分子の反応拡散)を統合的にシミュレーションするためのソフトウェアプラットフォーム。
昆虫嗅覚系全脳シミュレーション IOSSIM		昆虫の感覚から行動までの神経回路の情報処理を、個々の神経形態を考慮したマルチコンパートメントモデルを用いて仮想3次元空間内でリアルタイムシミュレーションを行う。
生命体基盤		
大規模並列用MDコアプログラム cppmd		高並列に特化した高速な古典分子動力学計算。
分散並列大規模データ可視化システム LSV (※)		大規模シミュレーションの結果を分散並列して可視化。リモート可視化、スタンドアロン可視化、インタラクティブ可視化、バッチ可視化など様々な利用形態に対応する並列可視化アプリケーション。
統合開発環境 SPHERE (※)		アプリケーションミドルウェア。連続体力学シミュレーションコードの開発・運用を促進する統合開発環境。離散化手法は直交格子系および非直交格子系の双方を対象とする。
大規模仮想化合物ライブラリ VLSVL (※)		創薬スクリーニングのための大規模バーチャルライブラリを提供。

(※)フロントエンドでの利用や可視化用途のソフトウェア