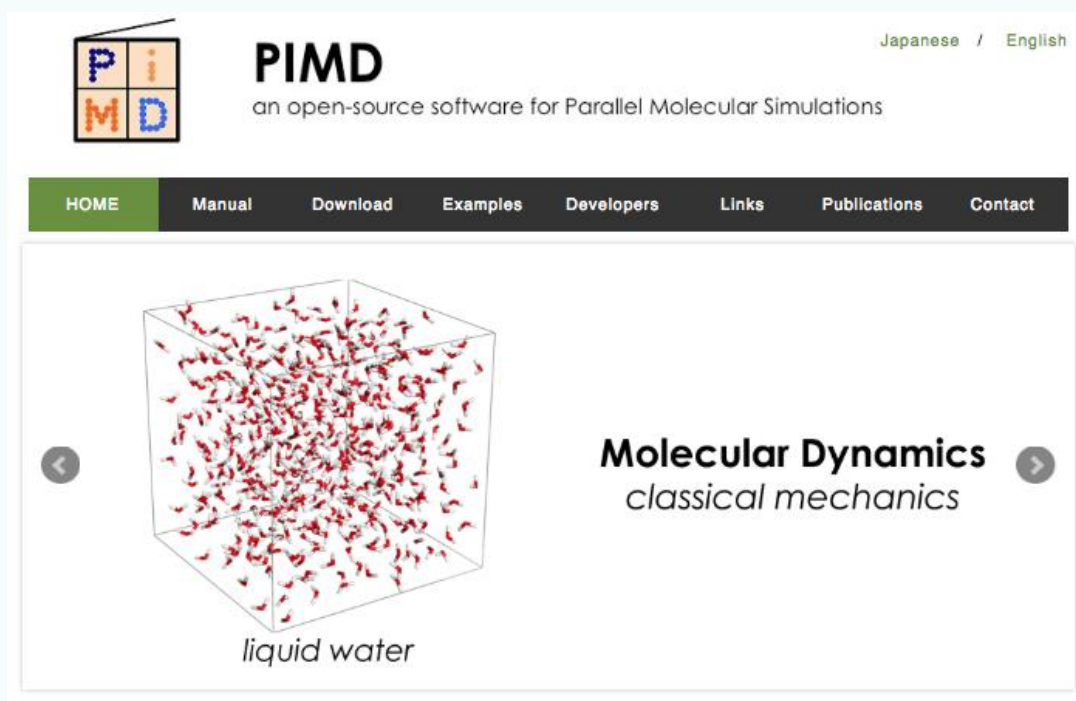


多様な分子シミュレーションを並列計算できる「PIMD」

- 多様な並列分子シミュレーションに対応
- 充実したマニュアル
- 50件を超える国際論文誌で利用

キーワード：スーパーコンピューター、高速化、並列化

- 古典・第一原理分子動力学法、経路積分法、レプリカ交換法、メタダイナミクス法、ストリング法、QM/MM法、サーフェスホッピング法など多様な手法をサポート。
- 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法により、機械学習ポテンシャルを作成可能。
- 分子構造（レプリカ）と力場（断熱ポテンシャル）の間での階層的な並列化により、高速かつ高効率な計算が可能。
- Apache 2.0 License の範囲で、無償でダウンロードし、利用可能。



技術のステージ



実用化開発

関連業種

学術・開発研究機関

利用分野

化学、物理学、物質科学における分子シミュレーション、第一原理計算

知財・関連技術情報

並列分子シミュレーションコード「PIMD」
(<https://ccse.jaea.go.jp/software/PIMD/index.jp.html>)

技術の詳細

