



データ取得API

ツール

クラスシステム

クラウドシステム

利用案内

参考情報

ツール

- ▶ 第一原理電子構造自動計算システム
- ▶ nap (Nagoya Atomistic-simulation Package)
- ▶ 化合物予測アプリ
- ▶ 比熱容量予測アプリ
- ▶ APIツール

関連リンク

- ▶ MateriApps
- ▶ 朱鷺の杜Wiki - 機械学習

[ホーム](#) > [ツール](#) > [nap \(Nagoya Atomistic-simulation Package\)](#)



nap (Nagoya Atomistic-simulation Package)

概要

- 古典分子動力学プログラムのためのプログラムパッケージで以下を含みます。

pmd	領域分割型並列化可能な分子動力学プログラム
fitpot	ニューラル・ネットワーク型力場およびモース型などいくつかの力場パラメータの最適化プログラム
nappy	前/後処理のためのpythonスクリプト群

- pmdおよびfitpotにはFortranを、nappyにはPythonを使用しています。

動作環境

- macOS or Linux OS
- OpenMPI
- Python 2.x

ダウンロード

- nap: Nagoya Atomistic-simulation Package: [Github](#)
- [マニュアルウェブサイト \(英語版のみ\)](#)

ライセンス

本ソフトウェアはMITライセンスに従って公開しています。

問い合わせ先

本ツールに関する事項は、下記へお願いいたします。

名古屋工業大学 大学院工学研究科
物理工学専攻
小林 亮

E-mail: kobayashi.ryo@nitech.ac.jp ([=] → [@])

