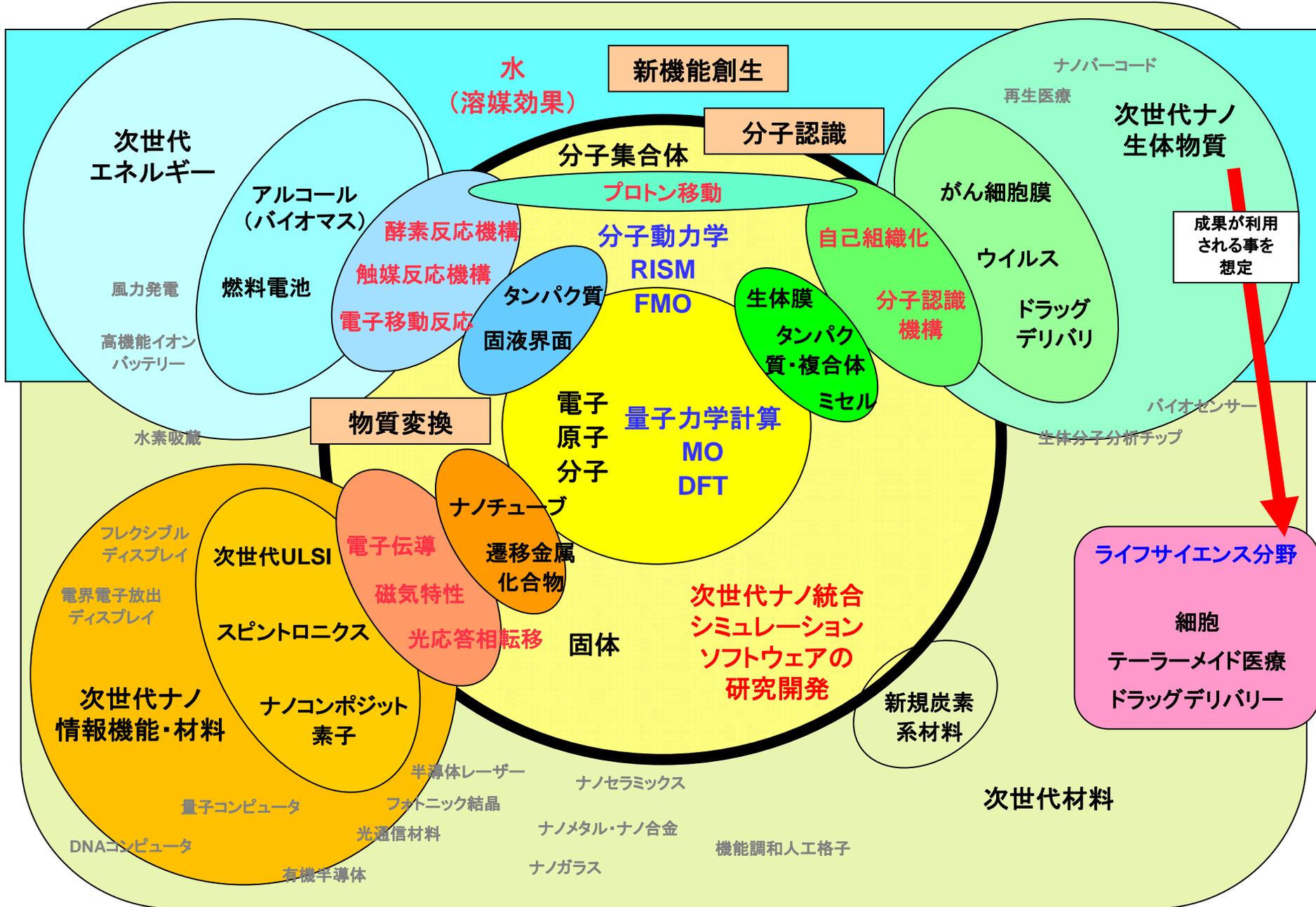


ナノサイエンス分野における 計算科学の研究開発の現状

- ・次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
- ・CREST
「マルチスケール・マルチフィジックス」
- ・科研費特定領域研究
「実在系の分子理論」
「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発と応用」

ナノ分野グランドチャレンジ領域の俯瞰と関連



次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 — 豊かな未来社会に貢献するナノ分野グランドチャレンジ —

目的

ペタスケールのシミュレーション技術により、ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性を解明し、予測することのできる計算科学理論・方法論を確立し、ソフトウェアの開発を行う。これにより、ナノテクノロジー・材料分野はもとより、ライフサイエンス分野やエネルギー分野等との融合領域において、飛躍知の発見・発明にとどまらず、産業力の強化につなげることを目的とする

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

ナノ物質内の電子制御をシミュレートできる方法論を確立する。

(2) 次世代ナノ生体物質

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トできる方法論を確立する。

(3) 次世代エネルギー

高効率の触媒・酵素の設計ができる方法論を確立する。

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

ナノサイエンス
グランドチャレンジ研究

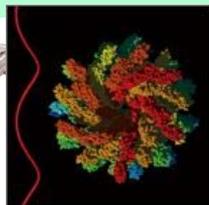
次世代ナノ統合シミュレーションソフトの開発

実験、産業との連携
人材育成

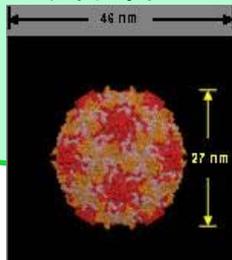
次世代ナノ生体物質

医療・創薬・DDSナノ基盤

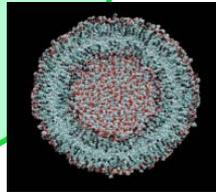
- ・ウイルス
- ・細胞膜
- ・DDSナノキャリアー
- ・タンパク質制御



ペン毛繊維



ポリオウイルス



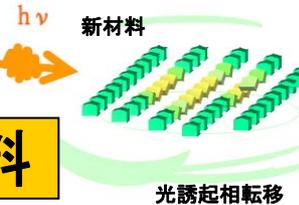
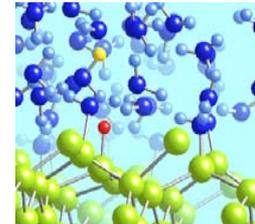
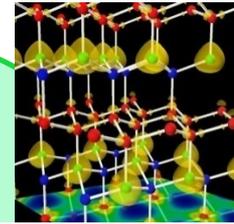
リボソーム



- ・非線形光学素子
- ・ナノ量子デバイス
- ・スピントロニクス
- ・超高密度記録デバイス
- ・複合電子デバイス

高速、高機能、省エネルギー電子デバイス

次世代情報機能・材料



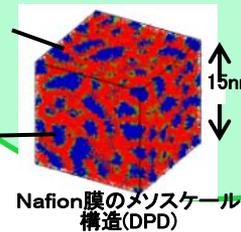
固体表面

磁気特性

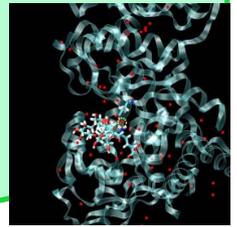
次世代エネルギー

クリーンエネルギー

- ・太陽エネルギー固定
- ・アルコール燃料
- ・燃料電池
- ・電気エネルギー保存



Nafion膜のメソスケール構造(DPD)



セルロース分解酵素



次世代スパコン
(建屋予想図)

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課題

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

- ・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

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

- ・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・達成

連携ツール

疎結合GIANT

IGNITION

密結合GIANT

主な付加機能ソフト

電子伝導、機能評価

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

光応答相転移

電子格子系時間発展計算

乱雑速度場法

磁気特性

厳密対角化

量子マスター方程式

磁気応答関数

動的平均場法

ループアルゴリズム

自己組織化・分子認識
(自由エネルギー計算)

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

プロトン移動(量子化)

経路積分法

量子古典混合法

電子移動反応 酵素・触媒反応

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

一般化ランジェバンダイナミクス

非線形分光理論

フラグメント分子軌道法

Surface-Hopping法

効率的サンプリング

マルチカノニカル法

レプリカ交換法

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

中核アプリケーション

方法論開発・超並列化によりペタフロップス級性能を実現

中核アプリケーションの開発

中核アプリケーション名	責任者氏名	概要
実空間第一原理 ナノ物質シミュレータ	押山 淳	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。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。
動的密度行列 繰り込み群法	遠山 貴巳	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	藤堂 眞治	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。
高並列汎用 分子動力学 シミュレーションソフト	岡崎 進	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。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している。
RISM/3D-RISM	平田 文男	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。そのため、高速フーリエ変換(FFT)の速度が重要である。
高速量子化学 計算ソフト	永瀬 茂	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。

ペタフロップス級の実効性能の実現

平成20年度 中核アプリ開発計画

中核アプリ名	責任者	開発内容
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山	(1) MPI による、実空間セル並列とバンド並列の多層並列の有効性の検討と、対応プログラム開発。 (2) Open MP によるノード内スレッド間並列の有効性検討。
動的密度繰り込み群法	遠山	(1)線形応答感受率プログラムチューニング (2)その他・最適化
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂	業務委託: アプリケーションの逐次処理部、ループ認識処理部の並列化効率の改善
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトmodylas	岡崎	(1)単体性演算能のチューニング ・条件分岐の除去 ・配列データの並び替え ・演算量の削減 (2)高並列化のチューニング ・通信量の削減 ・3次元隣接通信の採用
RISM/3D-RISM	平田	(1)3次元FFTの2次元分割対応版3D-RISMコード開発(筑波佐藤グループとの共同開発) (2)細部のチューニング(メモリ分散、IOの見直しなど) (3)T2Kによる大規模スパコンでの運用テスト
高速量子化学計算ソフト	永瀬北浦	(1)データ転送量の削減 ・電子密度行列の転送量を削減するための改良 ・T2Kによる性能測定 (2)細部のチューニング
中核アプリの大規模並列化支援	佐藤	中核アプリ6本に対し、並列性および性能の詳細な解析を行い、必要に応じてモデルや数値計算アルゴリズムの改善などの支援。具体的には既存の大規模システムでプログラムを実行し、定量的な評価とアルゴリズムの検討・改善の支援を進める。なお、具体的なプログラムへの変更については担当のメーカーと打ち合わせをしつつ進める。 また、同時にマルチコアプロセッサの利用等の次世代スパコン利用に必要な並列化の方法についても検討する。
開発環境 (T2K)		

実験研究者、企業研究者との連携

連続研究会の開催

☆連続研究会の実績・予定(スケジュール確定分)

11/21	第1回	『陽電子を用いた半導体材料の評価』
12/10	第2回	『元素戦略の化学』『ナノクラスターの化学』
12/12	第3回	『新しい概念に基づく熱電材料とその物理』
12/27-28	第4回	『DDSナノキャリア(リポソームを中心として)』
01/06	第5回	『ウイルスの分子科学』
01/29	第6回	『超分子、分子素子、分子発光の化学』『バイオマスの化学』
01/29	第7回	『DDSナノキャリア(脂質膜、タンパク質、高分子ミセルを中心として)』
02/10	第8回	『膜、ミセル(ソフト複雑系の分子科学)』
02/16-17	第9回	『タンパク質機能(チャンネル、分子認識)』
03/09	第10回	『燃料電池』
03/13-14	第11回	『エタノール製造、バイオマス(酵素反応)』

☆スケジュール調整中のテーマ

表面ナノ構造の自己形成、ナノ構造体の電気伝導、タンパク質制御(フォールディング、創薬)
分子エレクトロニクス、光エネルギー変換の化学

アプリケーション実証研究の開始

☆平成20年度 2～3課題を先行実施

☆平成21年度 本格的に展開

分子ナノサイエンス戦略分野

理論・計算分子科学コミュニティ

—30年を超える活動の歴史と1000名規模の研究者—

- ・計算科学研究センター共同利用
30年以上の歴史、利用者数は約150グループ、550名
- ・日本化学会理論化学・情報化学・計算化学ディビジョン
登録者数は約500名
- ・理論化学研究会
主催する理論化学討論会は第10回を数え、参加者数約200名
- ・分子シミュレーション研究会
主催する分子シミュレーション討論会は第20回を数え、参加者数約200名
- ・分子科学会
主催する分子科学討論会は分子構造総合討論会を経て40年以上の歴史、参加者数は約1200名。(4セッションのうち1セッションが理論、計算)
- ・溶液化学研究会
主催する溶液化学シンポジウムは第30回を数え、参加者数約200名
- ・化学反応討論会
第23回を数え、参加者数約150名
- ・日本コンピュータ化学会
会員数約650名
- ・生物物理学会
主催する年会は第50回を数え、参加者数約2000名、うち理論、計算科学分野で約100名



- ・次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの開発
- ・科研費特定領域研究 「実在系の分子理論」
- ・CREST 「マルチスケール・マルチフィジックス」

分子が作るナノの世界

ナノスケールの分子系に特有な化学的、物理的性質の発現
新たな機能の創出

分子

ナノ空間の電子状態を操る

化学結合
多様な電子状態、物質系

大きな量子効果
化学的機能の発現

分子集合体

ナノスケールの構造を操る

構造形成・自己組織化
やわらかく多様な構造

形成された構造による
機能の発現

分子が作る界面・表面

特殊な環境を操る

多様な不均一系
液液、気液、固気、固液界面
固液気三相界面

バルクにない特性の発現



計算科学

量子化学

分子シミュレーション

化学統計力学

反応動力学