

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

- ナノ分野グランドチャレンジ -

分子科学研究所
平田文男

2007年12月20日
ナノ統合拠点

何故、ナノサイエンスが計算科学にとって挑戦的か？

ミクロ
($10^{-11} \sim 10^{-8}$ M)

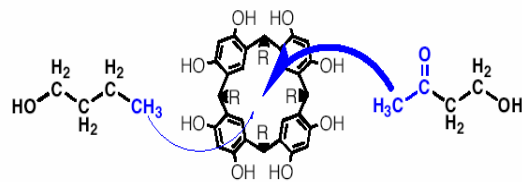
ナノ
($10^{-9} \sim 10^{-6}$ M)

マクロ
($10^{-6} \sim M$)

電子、原子、分子

巨大分子
分子集合体

目に見える
物質



量子力学
力学

統計力学

熱力学、弾性体力学
流体力学、電磁気学

実際の問題(デバイスなど)ではこれらの全空間領域および時間領域をカバーする方法論が必要。

現在のコンピュータの最高性能： ~ 300テラ

次世代スパコンの期待される性能： ~ 10ペタ

確かに早くなるが、たかだか、100倍程度

一方、実際のナノの問題は単にサイズや時間スケールの点だけから見ても、はるかに大きい。同時に、量子力学から熱力学(連続体力学)までの多くの階層の物理を含む。

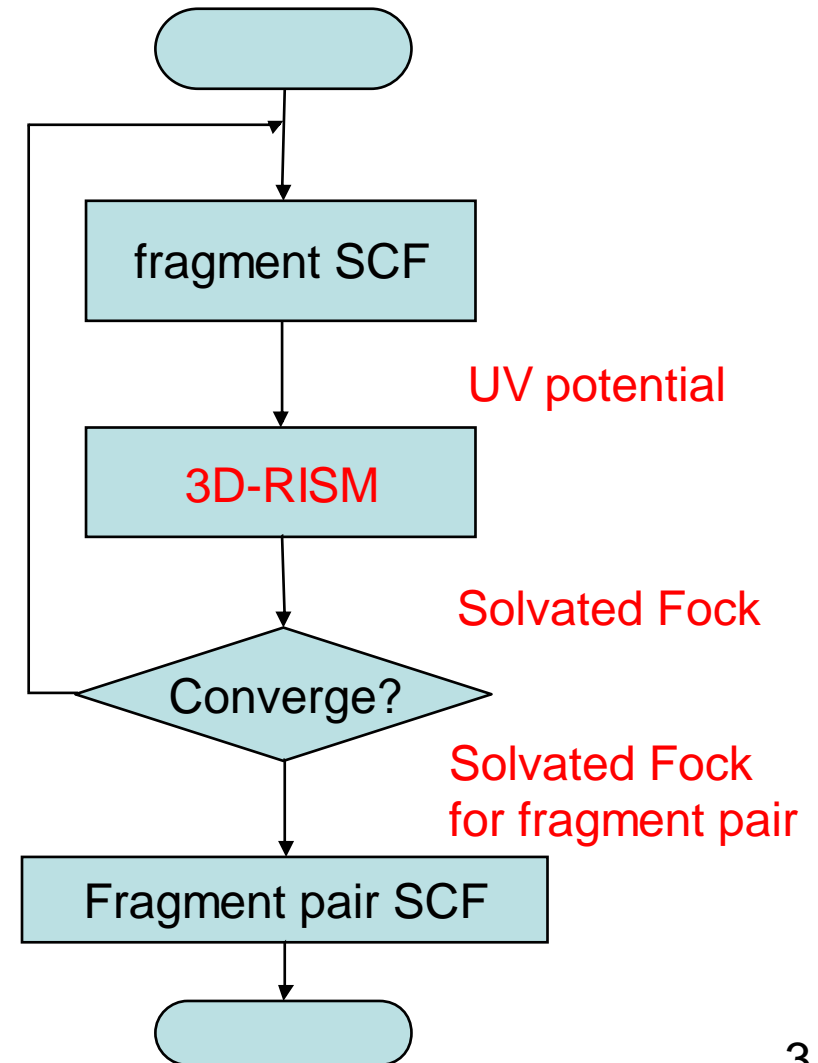
従来の理論、方法論、計算プログラムをそのまま適用したのでは太刀打ちできない。

- ・個々の要素となる理論・方法論(量子力学、統計力学、分子シミュレーション)とプログラムの高度化(超並列化)
- ・それらの理論・方法論を組み合わせるマルチスケール・マルチフィジックス方法論の開発

マルチスケール・マルチフィジックス計算の例

3D-RISM-FMO

- 3D-RISMとFMOの連成計算
 - 溶質の電子状態と溶媒分布を自己無撞着に計算
- ボトルネック
 - Solvated Fock及びelectro-static potential
容易に並列化可能
 - FMO
 - 3D-RISM 3D-FFT
- 非並列ではFMOとSolvated Fock(及びpotential)が圧倒的に負荷が高いが、並列効率が良いので高速化が期待できる



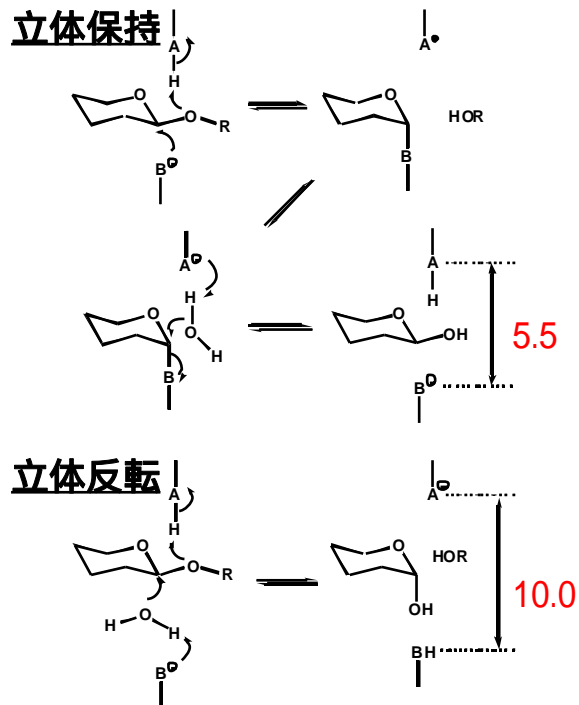
何故、計算科学が必要か？

実験では解明できないことがわかる。
実験の予測ができる。
スクリーニング(実験条件の絞り出し)。
実験結果のReasoning.

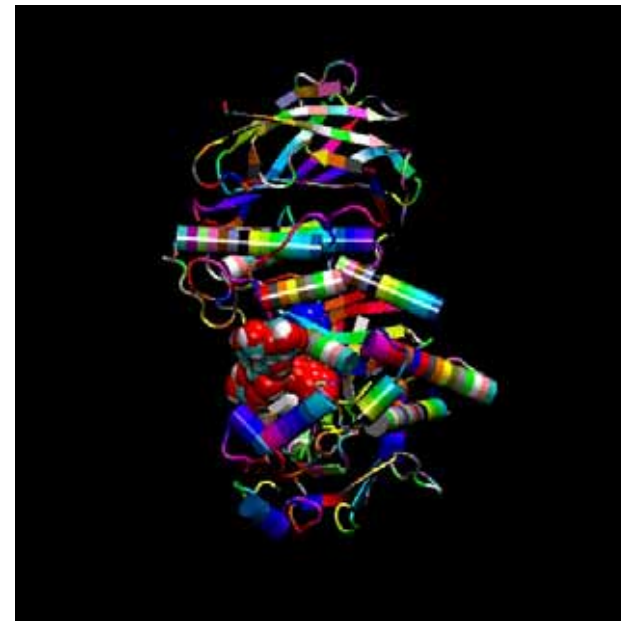
Cellulose decomposition
reaction (hydrolysis)

“Water is one of the substrates.”

Models proposed by X-ray



Position of water at in the reaction pocket is
crucial. (It can not be seen by X-ray.)



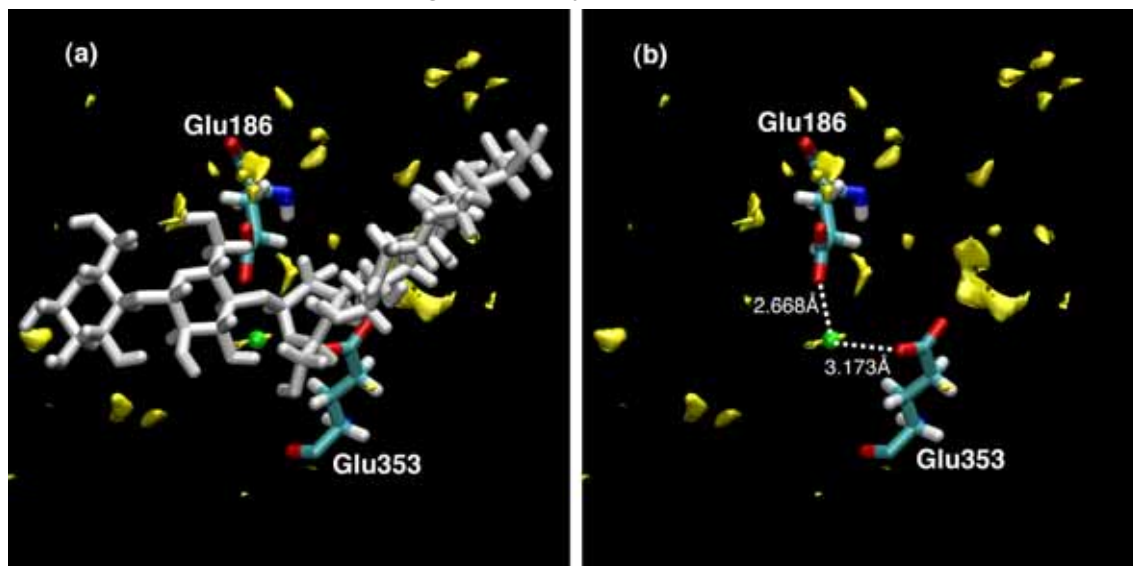
Cellulase : GH44

Cel44A catalytic module of CelJ (Cel9D-Cel44A)
from Clostridium thermocellum

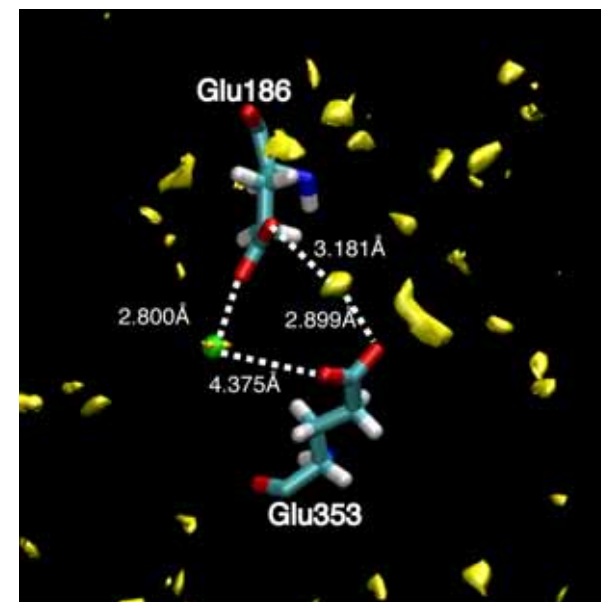
提供 (三重大学: 苅田修一准教授)

Water molecules in the protein-cellulose complex detected by the 3D-RISM method

Isosurface representation of the three-dimensional(3D) distribution function of oxygen of H₂O inside the cleft, which consists of amino acid residues of Cell44A and around the substrate. These surfaces show the area where the distribution function, $g(r)$, is greater than 8. The green point denotes the position which has the strongest peak of 3D-distribution function within hydrogen-bonding distance of glycosidic oxygen. Glu186 and Glu353 are the catalytic residues of Cell44A. (a) The white licorice structure shows the cellohexaose recognized by Cell44A.

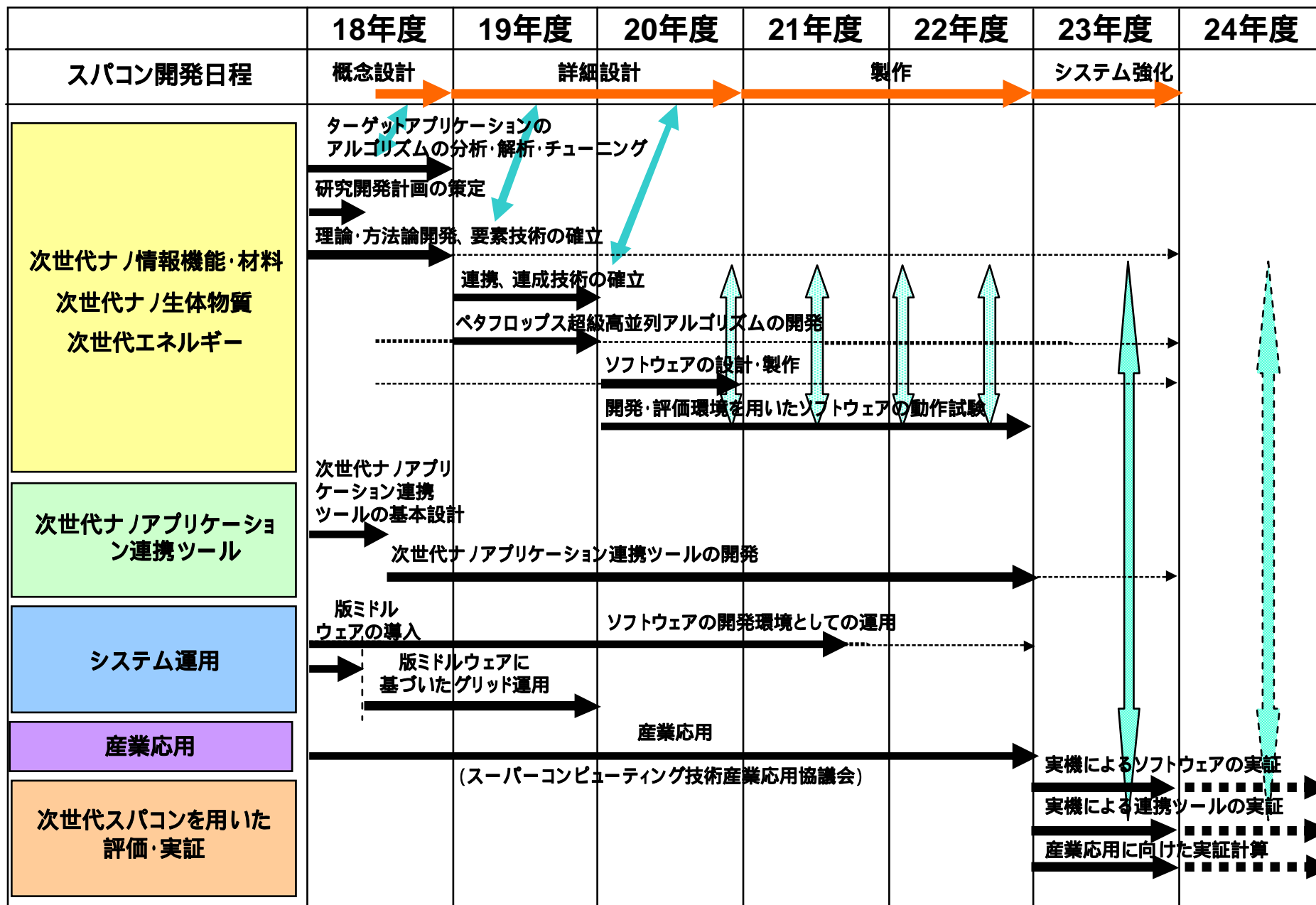


Reaction Intermediate !!!



Isosurface representation of the three-dimensional(3D)-distribution function of oxygen of H₂O around and inside the cleft, which consists of amino acid residues of Cell44A. These surfaces show the area where the distribution function, $g(r)$, is greater than 8. Glu186 and Glu353 are the catalytic residues of Cell44A. The green point denotes the position which has the strongest peak of 3D-distribution function within hydrogen-bonding distance of glycosidic oxygen.

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究計画



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



次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

連携ツール
GIANT, IGNITION

- ・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
- ・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・連成

付加機能ソフト

フェイズ・フィールド法

量子非線形応答

熱力学的積分法

自由エネルギー

化学反応

量子伝導

強相関効果

量子古典混合近似

エネルギー表示法

フラグメントMO法

非平衡状態

経路積分法

自己組織化

粗視化モデル

非断熱遷移

オーダーN

量子モンテカルロ法

拡張アンサンブル法

分子認識

励起状態

密度汎関数法

厳密対角化法

モンテカルロ法

溶媒効果

相対論的CI計算

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

文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 ナノ分野グランドチャレンジ研究開発
中核アプリケーションの概要

ナノ統合拠点
 2007.12.20

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 (筑波大)	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。 10万原子系を扱える電子状態計算と効率的位相空間探索プログラム。
動的密度行列 繰り込み群法	遠山 貴巳 (京大基研)	電子の強い相関効果に起因する光照射量子現象の解明。 動的に拡張された密度行列繰り込み群法。
大規模並列量子 モンテカルロ法	藤堂 眞治 (東大物性研)	ナノ磁性体や電子系などの量子格子模型のシミュレーション。 並列化された量子モンテカルロ法、厳密対角化法などのプログラム。
高並列汎用 分子動力学 シミュレーションソフト	岡崎 進 (分子研)	1000万原子系の巨大システムや自由エネルギーの計算。 長距離力を考慮した高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト。
RISM/3D-RISM	平田 文男 (分子研)	蛋白質などナノ分子の水和構造や水和自由エネルギーの計算。 分子の分布関数に関する積分方程式理論。
高速量子化学 計算ソフト	永瀬 茂 (分子研) 北浦 和夫 (産総研)	電子相関を取り組んだ超巨大分子の電子状態計算。 FMO法に基づいた高精度高速大規模量子化学並列計算。

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

文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 ナノ分野グランドチャレンジ研究開発
中核アプリケーションの計画と課題(解決すべき問題点)

中核アプリケーション名		責任者	
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ		氏名	所属・部局・職
		押山 淳	筑波大学・計算科学研究センター・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	<ul style="list-style-type: none"> ●実空間格子上での密度汎関数理論計算(RSDFT)の定式化とコード開発。 ●その並列計算機上でインプリメンテーション。 		
平成19年度	<ul style="list-style-type: none"> ●RSDFTの並列計算機(当面は筑波大学設置PACS-CS)上での演算・通信の最適化。 ●位相空間探索手法であるMeta・Dynamics(MeD)法とCar-Parrinell型分子動力学(CPMD)法の結合 		
平成20年度	<ul style="list-style-type: none"> ●PACS-CS上 512-1024 node(ピーク性能3-7 TFOPS)でのRSDFTによる10,000原子全エネルギー電子構造計算の実行 ●Med+CPMD法の実空間化(実空間格子上計算)の定式化とコード開発、および並列計算機上でのインプリメンテーションと最適化 		
平成21年度	<ul style="list-style-type: none"> ●RSDFTに基づく機能シミュレーションツールの開発整備:電子応答、コンダクタンス、キャパシタンス、分散力記述等。 ●実空間MeD+CPMDによる$10^{**2} - 10^{**3}$個原子群に対する10-100 psec MD計算の実行(想定マシン=並列10TFLOPS超マシン) 		
平成22年度	<ul style="list-style-type: none"> ●RSDFT、実空間CPMD+MeD(RSCPMD-MeD)、およびQM/MMハイブリッドの並列機上での高速化、整備による、ナノ機能シミュレーションの統合化 		
平成23年度 ~ 24年度	<ul style="list-style-type: none"> ●22年度統合化システムの強化 		

文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 ナノ分野グランドチャレンジ研究開発
中核アプリケーションの計画と課題(解決すべき問題点)

中核アプリケーション名		責任者	
動的密度行列繰り込み群法		氏名	所属・部局・職
		遠山 貴巳	京都大学・基礎物理学研究所・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	強相関電子系の光励起状態を理解するには電子間相互作用とともに電子格子相互作用を取り入れる必要がある。動的密度行列繰り込み群法に電子格子相互作用を取り入れるアルゴリズムの開発と線形光学応答感受率計算のためのプログラム改良を行った。		
平成19年度	低次元強相関電子系に存在する様々なタイプの電子格子相互作用を取り入れた動的密度行列繰り込み群法の並列アルゴリズム開発と、それをを用いた線形光学応答感受率計算プログラムの開発のほか、光励起状態の緩和過程を追う時間発展プログラムの並列アルゴリズムを開発する。		
平成20年度	電子間相互作用と電子格子相互作用を取り込んだ非線形光学応答感受率計算の超並列アルゴリズムの開発を行う。その際、計算結果の収束性を向上させるよう工夫する。時間発展プログラムの開発を継続する。開発・評価環境を用いて線形応答感受率プログラムの動作試験を行う。		
平成21年度	非線形光学応答感受率計算アルゴリズムの最適化を図るとともに、時間発展プログラムのアルゴリズムの改良を行い、緩和現象を効率よく記述できるような超並列プログラムを作成する。開発・評価環境を用いて両者のプログラムの動作試験を実施する。		
平成22年度	開発・評価環境を用いた動作試験から得られた問題点を克服するため、非線形光学応答感受率計算や緩和過程計算の並列アルゴリズムやプログラムの改良を進める。		
平成23年度 ～24年度	実機による線形・非線形光学応答感受率計算や緩和過程計算を実施する。		

文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 ナノ分野グランドチャレンジ研究開発
中核アプリケーションの計画と課題(解決すべき問題点)

中核アプリケーション名		責任者	
大規模並列量子モンテカルロ法		氏名	所属・部局・職
		藤堂 眞治	東京大学・大学院工学研究科・講師
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	多重並列スケジューラの開発、長距離相互作用系に対するオーダーNモンテカルロ法の開発、擬一次元量子系に対するシミュレーション手法の開発		
平成19年度	オーダーN法の量子系への拡張、格子自由度との結合のある系に対する量子モンテカルロ法の開発、XML入出力フォーマットライブラリの整備、マルチプラットフォームGUIの整備		
平成20年度	量子モンテカルロ法のシミュレーションエンジンの製作、多重並列スケジューラのGridミドルウェア(GridRPC、GridMPI)対応、波数空間モンテカルロ法の開発、拡張アンサンブル法との連携		
平成21年度	量子モンテカルロ法のシミュレーションエンジンの並列化と性能評価、最大エントロピー法エンジンの開発と製作、長距離相互作用系・格子自由度のある系に対する並列モンテカルロ法の実装		
平成22年度	開発・評価環境を用いたアプリケーション全体の動作試験、予備実証計算、実機動作にむけたチューニング、アプリケーション連携ツールによる連携の実証		
平成23年度 ~ 24年度	実機によるソフトウェアの検証、実証計算の実施		

文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 ナノ分野グランドチャレンジ研究開発
中核アプリケーションの計画と課題(解決すべき問題点)

中核アプリケーション名		責任者	
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト (modylas)		氏名	所属・部局・職
		岡崎 進	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	FFTの利用が不可避であり、これまで現実的には不可能であった周期境界条件下での1000万原子オーダーの大規模系に対する長距離力の計算に対し、多極子展開法を利用したアルゴリズム開発を行い、次世代スパコンで取り扱い可能な水準での効率的計算法を確立した。具体的には、開発したアルゴリズムに基づいた実ソフトウェアを作成し、十分な精度で正しい計算がおこなわれていることを確認した。		
平成19年度	上記の方法に基づくと、クーロン相互作用系に対しても実質的に完全領域分割化が可能となる。そこで、これまでに開発してきている現有ソフトに対して上述のアルゴリズムを適用し、相互作用計算の完全領域分割化を行い、超並列計算を可能とする。		
平成20年度	拘束の動力学、微分法的式の数値解等、相互作用計算以外の部分に対しても超並列化を実現し、基本構造として次世代スパコンにおいて所定の性能が実現可能なソフトウェアの開発を行う。		
平成21年度	次世代スパコンの仕様に最適化されたチューニングを行い、実性能としての所定の計算性能の実現を目指す。同時に、熱力学積分法等に基づいた自由エネルギー計算など、付加機能の充実をはかる。		
平成22年度	チューニングを継続実施するとともに、試作機を用いて実性能の評価を行う。また、入出力部分の整備、ソフトのサブルーチン化による整理等、実用ソフトウェアとしての周辺整備を行う。さらには、試作機を用いてウイルスカプシドの全原子計算の予備計算を開始する。		
平成23年度 ～24年度	次世代スパコンを用いて、ウイルスカプシドや細胞膜、DDSミセル等のナノ生体物質に対して大規模分子動力学計算を実行し、所定の実性能の達成に対する評価を行うとともに、グランドチャレンジとしてのナノサイエンス研究を進める。		

文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 ナノ分野グランドチャレンジ研究開発
中核アプリケーションの計画と課題(解決すべき問題点)

中核アプリケーション名		責任者	
RISM/3D-RISM		氏名	所属・部局・職
		平田 文男	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	分子認識問題に3次元RISM理論を適用可能とし、構造が決まった蛋白質による水およびイオンの認識を解いた。		
平成19年度	構造が揺らいでいる蛋白質による分子認識(induced fit)を記述するための方法論を構築する。このために、溶液中の蛋白質の構造空間を動的に探索するブラウニアンダイナミクスの手法を開発する。		
平成20年度	前年度に開発した方法をいくつかの蛋白質による分子認識(induced fit)問題に適用し、方法論の有効性を確認する。		
平成21年度	3次元RISMとFMOを組み合わせた手法により酵素(蛋白質)の活性部位に認識された基質分子の電子状態を記述するための方法論を構築する。		
平成22年度	前年度までに開発した方法論を簡単な酵素反応に適用し、方法論の有効性を実証する。		
平成23年度 ~ 24年度	前年度までの研究総括を行い、開発した方法論をセルロース分解酵素反応に展開するための問題点を検討する。		

文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト
 ナノ分野グランドチャレンジ研究開発
中核アプリケーションの計画と課題(解決すべき問題点)

中核アプリケーション名		責任者	
高速量子化学計算ソフト		氏名	所属・部局・職
		永瀬 茂	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	MP2法のエネルギー微分計算の高速並列化を行った。FMO-TDDFT法と並列計算法を開発して巨大分子の励起状態計算を可能にした。		
平成19年度	ラプラス変換MP2法とSCS-MP2法の並列化を行う。高精度計算のために、CSFに基づいた量子モンテカルロ法(CSF-QMC)を開発を始める。また、FMOスキームによるCI法とEOM-CC法を開発する。		
平成20年度	CSF-QMC計算の並列化アルゴリズムを開発する。ラプラス変換MP2法による周期境界条件を用いたエネルギー計算を可能にする。FMO法を拡張して、周期境界条件による電子状態計算を可能にする。		
平成21年度	CSF-QMC計算の高速並列化を行う。マルチレイヤFMO(MFMO)法を基盤とした分子力学との融合法(MFMO/MM)の開発を始める。		
平成22年度	MFMO/MMの高速化をはかり、水和タンパク質などの巨大分子系の分子動力学シミュレーションを可能にする。		
平成23年度 ～24年度	開発された量子化学計算ソフトの応用研究より、アルゴリズムとプログラムと総合的チューニングを行い、超並列計算の効率向上を図る		

中核アプリ高度化年次計画

2007年12月4日 ナノ統合拠点

テーマ	18年度	19年度	20年度	21年度	22年度	23年度
中核アプリ高度化		現時点での中核アプリ6本に対し、概念設計仕様に沿ってプログラム実行時の調査を行い、ボトルネック等課題の抽出を行う。これに基づいて、詳細設計作業中の理研開発実施本部開発グループとの連携の下、系統的にまた共通数学ライブラリとして解決を目指す部分と、アプリ側でアルゴリズム的に解決を目指す部分とを切り分け、課題を明確化する。	中核アプリ6本に対し、前年度に明確化された課題を解決し得るアルゴリズム開発を、ピンポイント的に行う。同時に、詳細設計を前提としながら、既存の開発環境の並列度程度で動作するプロトタイプを設計し、開発を行う。	プロトタイプソフトに対し、開発環境を用いた動作試験・評価を行いつつ、改良を行う。	ソフトウェアの評価・改良を引き続き行う。また、試作されたCPU単体での実行や少数のCPUを用いた並列計算の調査を行い、実機における最適化条件等の検討を行う。	試作機または実機を用いてさらに最適化を進め、ペタフロップス級の実効性能を実現する。
(参考) 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	ペタフロップス超スーパーコンピュータの性能が発揮できる方法論や計算アルゴリズム等の開発に着手した。	方法論開発における、平成18年度成果を発展させる。それとともに、ペタフロップス超スーパーコンピューティングを実現する高並列アルゴリズムの研究開発を行う。	平成19年度までに研究開発した要素技術をベースにシミュレーションソフトウェアのプロトタイプ開発を行う。	プロトタイプソフトの動作試験・評価を行いつつ、改良を行う。	ソフトウェアの評価・改良を行うとともに産業応用に向けた実証計算に着手する。	試作機又は実機を用いて、ペタフロップス級の実効性能を実証してゆく。

付加機能ソフト・次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ複合材料(その1)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 ナノ 複合材料 (その1)	寺倉 清之		高効率大規模電子状態計算手法の開発	ナノ材料の一つの特徴は、そのスケールによる量子効果である。10万原子系をまるごと量子力学的に扱うことを目指して、高効率の大規模電子状態計算の手法を開発する。超並列計算、オーダーN計算が重要なキーワードである。こうした目標に向けて開発してきたOpenMX, FEMTECK, CONQUESTなどのプログラムを足場にする。
		尾崎泰助	OpenMX	ナノスケールの物質群の物性計算のための大規模密度汎関数計算コード (詳細 http://staff.aist.go.jp/t-ozaki/)
		土田英二	FEMTECK	有限要素法を基底関数として利用し、大規模な第一原理分子動力学シミュレーションを行う。計算の対象としては主に分子性液体や水溶液などの系を扱っている。
	石橋 章司		材料における界面とナノスケール格子欠陥の構造と物性	機能材料・構造材料の性能を最も大きく左右する因子の1つである界面・ナノスケール格子欠陥について、必要なツールとなる第一原理電子状態・分子動力学計算プログラムの開発・整備を行ないながら、構造予測と性能決定機構の解明を進める。また、これらについての基本的な物性パラメータを求め、他グループで進められる粗視化モデルの構築に資する。
		石橋章司	QMAS (Quantum MAterials Simulator)の一部	現状で数百原子までの系を取り扱う事ができるPAW法+平面波基底を用いた高精度第一原理電子構造計算プログラム。点欠陥の安定構造・電子状態・各種分光スペクトル計算が実行できる。
	毛利 哲夫		合金材料の内部組織形成と材料特性に関するマルチスケール解析	合金材料のマクロな特性は、ミクロな領域にある電子・原子の挙動に端を発するものの、メソスケールの内部組織といわれる析出物や格子欠陥の集合体、異相界面の存在に大きく支配される。材料特性の予測・設計のためには、ミクロスケールからの内部組織の形成過程の理解と、組織とマクロ特性との相関を明らかにすることが重要であり、広い時空スケールを包括する効果的なマルチスケール計算の実行が必須である。
	押山 淳		ナノ構造構成要素と複合系の機能	炭素からなるフラレンやナノチューブ、あるいはBNナノチューブなどのナノスケール構造体はナノテクノロジーの基盤材料として注目されている。これらの構造物の複合体が持つ新しい物性や機能の可能性を探索する。特に、電子デバイスへの応用を目指して、電気伝導特性の解析は重要な課題である。これらの解析のための手法の開発とプログラム開発を進めている。
		押山淳	実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	特徴的な長さスケールが10 nm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の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。
		小林伸彦	未定	ナノデバイスに向けたナノスケール系の量子伝導計算。密度汎関数理論に基づいた第一原理計算により電子輸送特性を解析する。

*各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ複合材料(その2)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 ナノ 複合材料 (その2)	常行 真司		第一原理計算によるナノスケール構造体の探索	複雑な未知の構造の理論予測の手法を確立し、新しいナノ情報材料の理論設計と実現を目指す。第一原理電子状態計算理論と拡張アンサンブルを用いた位相空間探索法を組み合わせることによって、物質の化学組成からその結晶構造、表面界面構造、格子欠陥構造、超微粒子、薄膜の安定性などを予測する。
	那須 奎一郎		可視光誘起グラファイト-ダイヤモンド相転移の大規模数値シミュレーション	この世にありふれた煤に過ぎないグラファイトに、僅か数個の可視レーザー光を照射するだけで、高価な宝石であるダイヤモンドに変換することが出来ると云う実験的方法が、最近、阪大産研の谷村等により提案され、その真価が問われている。この状況に鑑み、本研究では、隣接する2枚のグラファイト層間に、可視光を照射し、層間で正負の電荷移動励起を発生させた場合を想定し、之が核となってダイヤモンドが生成していく過程を、大規模数値計算によってシミュレートする。他に、多電子系での二体相互作用を一体に還元し、量子モンテ・カルロ法で近似なしの計算を行う方法も開発している。
	吉凱 (Ji Kai)		電子・Phonon結合系の量子モンテカルロ計算	固体内で伝導電子とphonon(格子振動)結合した系における一体、及び二体グリーン関数を近似なしに数値的に計算するプログラム。電子数は100個以下で、中性子散乱スペクトル、光電子スペクトル、光吸収スペクトルの計算が可能
	杉野 修		ナノ物質や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	ナノ物質への光照射や荷電粒子の衝突によって電子を励起すると、温度の制御ではできなかったような新しい反応が起こることがある。電子励起を制御することによる、新規の物質の合成や反応の制御はナノテクにおいても今後の重要な課題である。主として時間依存の密度汎関数法を用いて、電子励起状態の時間変化を追跡する手法を整備し、物質合成や反応制御における新しい方法を提案する。
	矢花一浩		未定	時間依存密度汎関数法に基づき、分子や固体内の多電子ダイナミクスを非経験的に記述する。実空間法を用いており、孤立系・周期系とも扱うことができる。光吸収、円二色性、誘電関数などの線形光応答に関する計算や、強レーザー場中にある物質や、イオンと物質の衝突で起こる電子ダイナミクスなどの記述に用いることができる。
	宮本良之、杉野 修、館山佳尚		FPSEID (エフプサイディーと読みます) First-Principles Simulation tool for Electron Ion Dynamics	時間依存密度汎関数理論に基づき、凝集系の電子励起のもとでの高速運動(光化学反応、励起キャリアダイナミクス等)を、恣意的パラメータなく計算する。平面波基底、FFTを利用し、計算は電子の波動関数ごとに並列化されている。オリジナルコードはf77、MPIで書かれている。

* 各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ複合材料(その3)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 ナノ 複合材料 (その3)	川添 良幸		拡散量子モンテカルロ法による分子の 安定性の厳密計算	ナノ材料のような大規模系の計算の殆どは密度汎関数法に基づいている。しかし、そこでの近似が誤った構造予測をする例も知られるようになった。電子相関を正確に取り入れ、計算負荷が系の大きさに対して、従来の量子化学計算よりも緩やかな増加で抑えられる拡散量子モンテカルロ法を利用して、ナノ材料の電子物性の正確な予測を可能にする。この手法はまた、並列計算に適している。
	川添良幸		TOMBO (TOhoku Mixed Basis Orbitals ab initio program package)	通常の平面波と擬ポテンシャルによる第一原理計算のレベルを超え、全電子を扱う定式化を行い、その広域分散処理をITBL及びNAREGIを基盤として構築した。既に広域分散処理を分子研、原研、物性研、金研のスパコンを連携することによって実施し、ナノテク用新物質設計に寄与している。今後、より実用的なナノ物質に対する適用に拡張する予定である。

* 各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ電子材料(その1)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 ナノ 電子材料 (その1)	前川 禎通		ナノスピントロニクスデバイスの指 針探索	微視的模型に基づき、ナノ構造磁性体の電子構造の計算、およびこれらの物質依存性を明らかにし、さらに、数 値シミュレーションを用いてナノスピントロニクスデバイスのための指針を探索する。
	遠山 貴巳		強く相互作用する電子系を用いた光学 デバイスの設計指針の構築	電子間に働く強いクーロン斥力相互作用が起源となった絶縁体は、通常の半導体や絶縁体とは異なった巨大な 非線形光学応答や高速緩和を示し新規光学素子として期待されている。各原子当り1個または複数個の軌道 を持ちその内部の電子間斥力を取り入れた微視的模型の光学応答や、その基盤となる電子状態を、多体電子系 に有効な計算手法を駆使して求め、新規光学素子の設計指針を構築する。
		遠山貴己	動的密度行列繰り込み群法	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。
	米満 賢治		光照射による集団的な電子運動のモデ ル計算	分子あたり軌道を1個ないし数個考え、電子の各軌道に対する占有状態を離散的に扱い、相互作用の強さは実 験などから決めたパラメータとして取り入れる微視的模型において、光照射または電場下で、構造変化とともに多 電子の状態が時間発展し、条件によっては伝導性、誘電性、磁性などの巨視的な性質の変化を伴って相転移す る非平衡挙動を計算する。
		米満賢治	なし	電子格子模型の時間発展を計算するプログラム。光を振動電場として取り入れる。平均場または厳密な多電子 の波動関数を扱う。
	永長 直人		ナノスケールの電子・光状態を用いた 機能設計の理論	ナノスケール構造下における強相関電子波 / 電磁波の干渉効果とそれがもたらす新しい機能を、計算機を駆使 することで明らかにする。例えば、光の経路が微小な結晶の歪によって100万倍にも増幅されてずれる現象な ど、干渉効果の感性による新奇な現象の開拓を行なう。
	小形 正男		線状または面状に限られた空間で、お 互いに強く相互作用する電子の特異な 振舞い	量子細線や半導体界面、高温超伝導など低次元での電子系は特異な振舞いをする。とくに電荷の自由度とスピ ンの自由度はミクロスケールで非常に特異な振舞いをしていると考えられている。これらの自由度をうまくコント ロールするために、いろいろな状況下での興味ある状態を理解するために数値計算を用いて調べる。
	田村 浩之		量子ドット列におけるバンドエンジニア リングと電子物性制御	半導体量子ドットを並べて結合させることによって強磁性を顕現させ、ゲート電極でオンオフできるデバイスの理 論提案を行っている。計算シミュレーションを行うことによって、実際の量子ドット列デバイスでどのように強磁性が 発生するか、光との相互作用はどうなるかなどを予言する。

* 各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ電子材料(その2)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 ナノ 電子材料 (その2)	井上 順一郎		微小金属接合体の電気伝導特性の数値シミュレーション	異種金属を組合せて作製された金属多層膜, ナノメートル厚さの絶縁体を2つの強磁性金属ではさんだ強磁性トンネル接合, 強磁性金属と半導体とを組合せた多層膜等における電気伝導度の数値シミュレーションを行い, その特性を明らかにする。特に磁場を加えることによる電気抵抗の変化に着目し, デバイスへの応用の可能性を探る。
	市村 雅彦		スピン流を用いた新規デバイス創製のためのプログラム開発	磁性体に電流を流すと, 同時に上向き/下向きのスピンの流れも起こる。このスピンの流れを効率的に行うことにより磁化状態を制御できる。強磁性体/非磁性体の材料選択, 接合界面の抵抗率の適切な選択により, 効率的スピンの流れを探索し, デバイス開発のための指針を得る。
		市村雅彦	なし	非局所測定系におけるスピン流の空間分布を有限要素法により求めるプログラム。強磁性体/非磁性体の材料選択, 接合の抵抗率を適切に選択することにより効率的なスピン流の生成, 吸出しの探索を行う。

* 各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ磁性材料(その1)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者	ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 ナノ 磁性材料 (その1)	高山 一	ナノサイズ磁性粒子が配列された系の 磁気的性質	標記の系の磁気的性質は、構成ナノ磁性粒子の形状に応じた磁気異方性エネルギーに加えて、粒子のもつ磁気モーメント間に働く磁気双極子相互作用で決まる。これまでに十分な解析のなかった後者の効果を、その磁気的異方性と長距離性、および熱ゆらぎ効果を正しく取り込んだMD法(およびMC法)を駆使した大規模シミュレーションで解明する。
	常行 真司	自己組織化を用いたナノ磁性材料	銅の表面に窒素原子を吸着させると、5ナノメートル四方の島状に吸着し、その島が表面で規則的に整列する。その上に鉄やコバルトを蒸着すると、ナノ粒子が規則的に並んだ構造ができることが知られている。このように自発的に組織が形成されることを自己組織化と言う。本研究では、電子状態理論と弾性論的シミュレーションを用いて、自己組織化が起こる理由を解明し、組織の制御方法をさぐる。
		常行真司	表面弾性格子グリーン関数
	宮下 精二	分子内部での磁気構造の解析	少数個の磁性分子からなる分子磁性体における離散エネルギー準位にもとづく特異な量子ダイナミクスが最近観測可能となっており、新しい量子状態制御の舞台として近年注目されている。そのでの超微細構造相互作用やジャロチンスキー・守谷相互作用など磁化がよい量子状態でない場合の低エネルギー状態を正確に求める方法の開発をおこなう。
		宮下精二	量子マスター方程式
	赤井 久純	高機能ナノ磁性体の創成に向けた計 算機マテリアルデザイン	MRAMやGMR、TMRヘッドなどのスピントロニクス材料となる高機能ナノ磁性体を量子力学のもとづく理論計算にもとづいてデザインする。対象は、金属、金属間化合物、半導体を用いたナノ構造である。
	藤堂 眞治	磁性現象における格子変形の効果	磁性体の相転移・臨界現象における熱ゆらぎや量子ゆらぎの効果は、世界線量子モンテカルロ法と呼ばれる手法により極めて効率的に計算することが可能となってきた。本研究では、さらに格子のゆがみや動的なゆらぎ、スピンを担う電子そのものの自由度も取り入れることのできるハイブリッドな計算手法を開発する。
藤堂眞治		ALPS	ナノ磁性体や電子系などの量子格子模型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。興味のある系/物理量に応じて、量子モンテカルロ法、厳密対角化法、などの中から最適なアルゴリズムを選びシミュレーションを実行できる。格子構造、相互作用などはXMLを用いて柔軟に指定できる。

*各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ磁性材料(その2)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 ナノ 磁性材料 (その2)	常次 宏一		磁性体における新しい量子的秩序の数値計算	遷移金属や希土類元素化合物における、さまざまな磁氣的秩序の性質を数値的に研究する。磁性を担う電子のスピンの自由度は電子の自由度、電荷や波動関数の軌道自由度、さらには格子歪みなどと強く結合している。これらの自由度と結合して現れる複合秩序や、低温で量子効果の結果現れる新しいタイプの量子液体相の性質を数値的に研究する。
	川島 直輝		磁性体における新しいスピン間相互作用とその量子物性	近年、ナノ加工技術の進歩や光格子などの技術の進歩によって通常物質では実現できなかったタイプの量子多体系がパラメータコントロール可能な形で実現されてきている。われわれは其中で量子磁性体が示すスピンバイエルズ転移や、新しい磁気秩序相であるスピンネマティック相などについて、量子モンテカルロ法を用いた物性予測を行っている。

*各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代ナノ生体物質(その1)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者	ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
	次世代 ナノ 生体物質 (その1)	岡崎 進	ナノスケール分子集合体の分子動力学 計算
岡崎進		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。IGNITIONと連携。10万～100万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。
北浦 和夫		量子化学計算による蛋白質-リガンド 結合エネルギーの計算	蛋白質を丸ごと量子化学計算できる方法(フラグメント分子軌道法、FMO法)を開発した。連続誘電体モデル(PCM)による溶媒効果を含めたFMO計算も可能となった。この方法を応用して、蛋白質とリガンドの結合エネルギーを高精度で計算できる方法を開発する。FMO法は、蛋白質とリガンドの相互作用エネルギーを各アミノ酸残基の寄与に分割できるため、ドラッグデザインのために有用な知見が得られるものと期待される。
北浦和夫, D.G. Fedorov		FMO(GAMESSに登録)	アイオワ大学のGordon教授らによって開発され無料で公開されている量子化学計算プログラムであるGAMESSに、フラグメント分子軌道法(FMO)とその高効率並列計算の仕組みを付加したもので、数千から数万原子からなる蛋白質など巨大分子のハートリー・フォック法および高精度電子相関理論による計算が可能である。このプログラムは、GAMESSの公式サイト http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/ から入手できる。
岡本 祐幸		拡張アンサンブル法による分子シミュ レーション	エネルギー極小状態に留まってしまうという従来のシミュレーション手法の難点を克服する拡張アンサンブル法による分子シミュレーション法を開発している。これによって、生体高分子の立体構造予測や自由エネルギー計算を精度良く実行できるようにすることを目指している。
木下 正弘		斬新な蛋白質立体構造予測法の開発	従来の概念にとらわれない独自の自由エネルギー関数を構築し、蛋白質の数多くの候補構造の中から、自由エネルギー関数最低の構造を高速で選び出すことができる手法を開発しつつある。今後、バイオインフォマティクスの手法と統合すれば、アミノ酸配列から立体構造を予測できる実践的なツールを開発することができるかもしれない。
木下正弘		なし	蛋白質の数多くの候補構造の中から、独自に構築した自由エネルギー関数に最低値を与える構造を選び出す。バイオインフォマティクスの手法と統合すれば、任意のアミノ酸配列に対して立体構造を予測可能とするツールが出来る。

* 各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代ナノ生体物質(その2)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 ナノ 生体物質 (その2)	田中 秀樹		ナノチューブ中の水、水溶液の性質の 予測	準二次元空間における計算機シミュレーションを行い、そこでの水の構造と新たな結晶形の可能性を調べる。また、制約空間のパラメータ変化による相挙動について詳細に検討する。ナノチューブ中の水と疎水分子の複合氷チューブの物性について、種々の外部条件や疎水分子への依存性について明らかにする。特に、グランドカニカルモンテカルロシミュレーションと統計力学的な理論により、疎水分子の占有率と氷の安定性の関係を調べる。
	甲賀 研一郎		なし	分子動力学計算、モンテカルロ法から得られた構造・時間相関関数を解析するためのツール。
	斉藤 真司		生体系の化学反応と構造揺らぎの解 析	我々は、生体高分子の化学反応や液体のダイナミクスの解析、また、凝縮系のダイナミクスを効率良く解析する理論的手法の開発を行っている。とくに、本研究課題では、癌の発現とも関係の深いGTP結合タンパク質Rasの加水分解反応の反応機構、構造揺らぎの影響などの解析を進めている。
	小林千草		なし	分子動力学計算、モンテカルロ法から得られたトラジェクトリを解析するためのツール。
	三上 益弘		細胞膜(脂質二重膜)における有機分子 の透過機構の研究	癌細胞の増殖を防ぐ代表的な薬剤は、細胞膜を透過し細胞質に入った後、核酸と相互作用し、その増殖作用を阻害する。このようなドラッグデリバリーにおいて、細胞膜(脂質二重膜)における有機分子の透過機構の解明は重要な課題である。本研究では、大規模な分子動力学シミュレーションを行い、この透過機構を解明する。
	三上益弘		高精度高速自由エネルギー計算プログ ラム	低分子が分子膜を透過する時の自由エネルギープロファイルを高精度高速に計算する。脂質二重膜、高分子電解質膜などの分子膜に適用可能である。また、NEV, NTV, NTPの各アンサンブルでのシミュレーションが可能である。
	北尾 彰朗		既知ナノ生体物質の機能メカニズム解 明	蛋白質などの生体高分子の集合体である立体構造既知のナノ生体物質の機能のメカニズムを解明することを目指すため、スーパーコンピュータを駆使した大規模生体分子動力学法によって立体構造ダイナミクスをシミュレーションする。
	北尾彰朗		なし	生体超分子の大規模分子動力学シミュレーション

* 各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代エネルギー(その1)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 エネルギー (その1)	平田 文男		3次元RISM理論	3次元RISM理論と他の物理化学手法を結合し、下記のナノ現象を解明するマルチスケール・マルチフィジックス計算科学方法論を構築する。(1)酵素反応解析法(FMO法と結合)(2)イオンチャネルおよび溶液内リボソーム形成を追跡する方法(液体ダイナミクス理論と結合)(3)スーパーキャパシタの電気二重層および容量を計算する手法(REPLICA理論と結合)
		平田文男	RISM/3D-RISM	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。
		中井 浩巳	固体触媒の励起過程を取り扱う理論的手法の開発と酸化チタン系への応用	本研究では、まず固体表面の効率的なモデル化のために、本研究者によって開発されたエネルギー密度解析(EDA)を用いて、固体表面吸着における表面-分子間相互作用を評価する。また、周期境界条件(PBC)計算のボトルネックであった長距離Hartree-Fock(HF)交換相互作用を遮蔽したハイブリッド汎関数を酸化チタン結晶に適用し、その計算コストと精度を評価する。次に、大規模クラスター・大規模ユニットセルが取り扱えるように、新しい電子状態計算手法の開発を行う。まず、大規模系の電子状態計算に電子相関の効果を取り込むために、DC-MP2法を開発する。さらに、さまざまなタイプの励起エネルギーを精度良く記述できるCVR-B3LYP汎関数を開発する。
		藪下 聡	励起エネルギーの移動速度および電子移動速度に関する理論研究	励起移動速度や電子移動速度は、本質的に非断熱課程である。自由度の小さな系で、断熱状態と透熱状態に基づいて、これらの速度を計算し、その描像依存性を調べる。非断熱行列要素や遷移双極子モーメントの計算プログラムを完成しこれらの計算に用いる。当面は分子振動など原子核の運動自由度は凍結して考察するが、一般に分子振動の効果は無視できないので、それを含めるための検討も行う。
		信定 克幸	レーザーパルス光照射により誘起される電子ダイナミクスの理論計算	ナノメートルサイズの分子や半導体ナノ構造物質にレーザーパルス光を照射すると、非線形光学応答、電流やスピン流の発生、磁気的性質発現等の電子やスピンの重要な電子ダイナミクスを誘起することが出来る。通常このような分子やナノ構造物質は、電極、溶媒、金属表面等の環境と相互作用しており、注目する分子や物質と環境との間で起こる電子エネルギーの散逸を考慮に入れた電子ダイナミクスの計算を行う必要がある。この研究課題では、散逸系電子ダイナミクスの数値計算的解析を行い、新規材料物性に繋がる基礎的知見を得ることを目的とする。
		信定克幸、 安池智一	OCM (Open - System Cluster Model)	電子数の揺らぎを考慮に入れた表面吸着分子を扱うためのクラスターモデル計算

*各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代エネルギー(その2)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者	ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 エネルギー (その2)	中原 勝	統計力学とMDの結合による溶液系の自由エネルギー解析	溶液系における溶媒和自由エネルギーの計算を行う。問題とする溶液系および参照溶媒系のMDトラジェクトリから、溶質-溶媒相互作用エネルギーの分布関数を構成し、エネルギー表示の溶液理論によって、近似的に溶媒和自由エネルギーを評価する。ミセルや二分子膜のような局所不均一系の取り扱いも可能である。
	松林伸幸	なし	MDプログラムによって生成されたトラジェクトリを読み込み、エネルギー分布関数を経て、エネルギー表示法によって、溶媒和自由エネルギーを計算する。入力フォーマットについては、柔軟な対応が可能。
	永瀬 茂	大きい分子の量子化学計算の開発と応用	基本物理定数のみからすべてを求めるabinitio分子軌道法に代表される量子化学計算は、分子の構造、機能、反応等を根源から解き明かすためのもっとも正当で最強な方法である。大きい分子でも精度の高い量子化学計算を高速に実行できる分子理論、計算法、並列アルゴリズム等を開発して応用研究につなげる。
	石村和也	なし	無料で公開されている量子化学計算プログラムGAMESSを基にした、高速かつ並列化効率の良い二次の摂動(MP2)法のソフトウェア。現状の密度汎関数(DFT)法では取り扱えない、非共有結合を含む大規模分子の計算を行うことができる。
	森田 明弘	界面和周波発生分光の理論と計算	可視-赤外の和周波振動分光を、ab initio分子モデリングと分子シミュレーションをもとに第一原理的に計算し、解析する理論的方法論を開発する。界面和周波発生に対する理解を深めるとともに、従来の経験的な解釈を超えた分子レベルの界面解析手法を提供することを目的とする。
	森田明弘	Cahn	界面和周波振動分光のスペクトルを、ab initio分子モデルと分子動力学シミュレーションを用いて第一原理的に計算する。現在のところ分子モデルとして水溶性界面にのみ対応しているが、今後拡張の予定である。
	南部 伸孝	量子現象を利用した物質の機能発現と反応制御	分子の世界を支配する量子力学が、分子の特異性や機能に直接現れることがある。その一つが非断熱現象である。例えば、視覚の初期過程であるレチナル分子の光異性化反応や光デバイス等への応用が期待されるフォトクロミック分子の反応において認識されている。本課題では、この現象を応用し、物質の機能発現と反応制御の実現を目指す。具体的には、カーボンナノチューブを用いた水素吸蔵の提案などを行う。
	南部伸孝 石田俊正 中村宏樹	なし	量子効果(非断熱トンネル現象)を考慮した分子動力学計算を行うプログラム

* 各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

付加機能ソフト・次世代エネルギー(その3)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・2006年度版

分担研究代表者		ソフトウェア 相談窓口	研究課題名 ソフトウェア名称	研究概要 ソフトウェアの概要
次世代 エネルギー (その3)	兵頭 志明		ナノスケール構造に基づくマクロ特性解析のための階層シミュレーション技術の実現	一般の実用材料はナノスケールのオーダーでも複雑に構成されており、単結晶のようなマクロにみて均質に扱えるものはむしろ希である。このような材料を設計していくためには原子・分子レベルでの物質の特徴と同時にナノスケールでの不均一構造とマクロスケールでの特性を予測できる理論が必須であり、それらの関連性を予測できることが重要である。本研究課題ではそのような「階層シミュレーション」実現に向けた研究を実施している。
	榊 茂好		金属錯体を利用した効率的な合成反応の予測を目指した理論的研究	金属錯体を利用した多くの有機合成反応が報告されているが、反応機構や律速過程など反応の効率向上のために必要な知見が乏しい場合が多い。本研究では、代表的な金属錯体を用いた合成反応の理論的研究を行い、反応機構や律速過程、それらを支配する因子を明らかにし、効率的な合成反応を確立するための理論的な知見を得ると共に、新しい反応開発に必要な予測を試みる。このような効率的な反応設計と制御は、ひいてはエネルギーを節約した省エネルギー生産過程の開発につながるものである。
	加藤 重樹		溶液、生体系でのエネルギー移動についての理論的研究	溶液内やタンパク質場における分子内、分子間のエネルギー移動は、凝縮系での化学反応や光化学・物理過程を調べる上で重要である。本研究では、分子の電子状態および統計力学的手法にもとづいて、励起分子の失活過程や電子・プロトン移動過程を調べる。
	青柳 睦		高度連成シミュレーションによる凝縮系界面の電子構造とダイナミクス	電極における動的過程をマイクロレベルから解析するための新しい連成シミュレーション手法を確立する。特に溶媒効果を取り入れた固液界面における化学反応の解析を行うため、固体電子論、分子軌道理論、RISM理論をそれぞれ固体、吸着分子、溶媒に連成適用し、複合系の電子構造および古典ダイナミクス手法の開発を目指す。また計算コードの中で共通に利用される高演算負荷数値計算カーネル部を次世代のベタスケール計算機用に超並列化するためのアルゴリズムの研究開発を行う。

* 各研究グループにおける従来の研究成果及び他プロジェクトにおける成果を活用しているソフトウェアも含む。

連携ツール(IGNITIONとGIANT)について

◆IGNITION MO, MD、固体電子論計算等、中核アプリ等の
初期入力データの生成

入出力、実行の利便性の確保

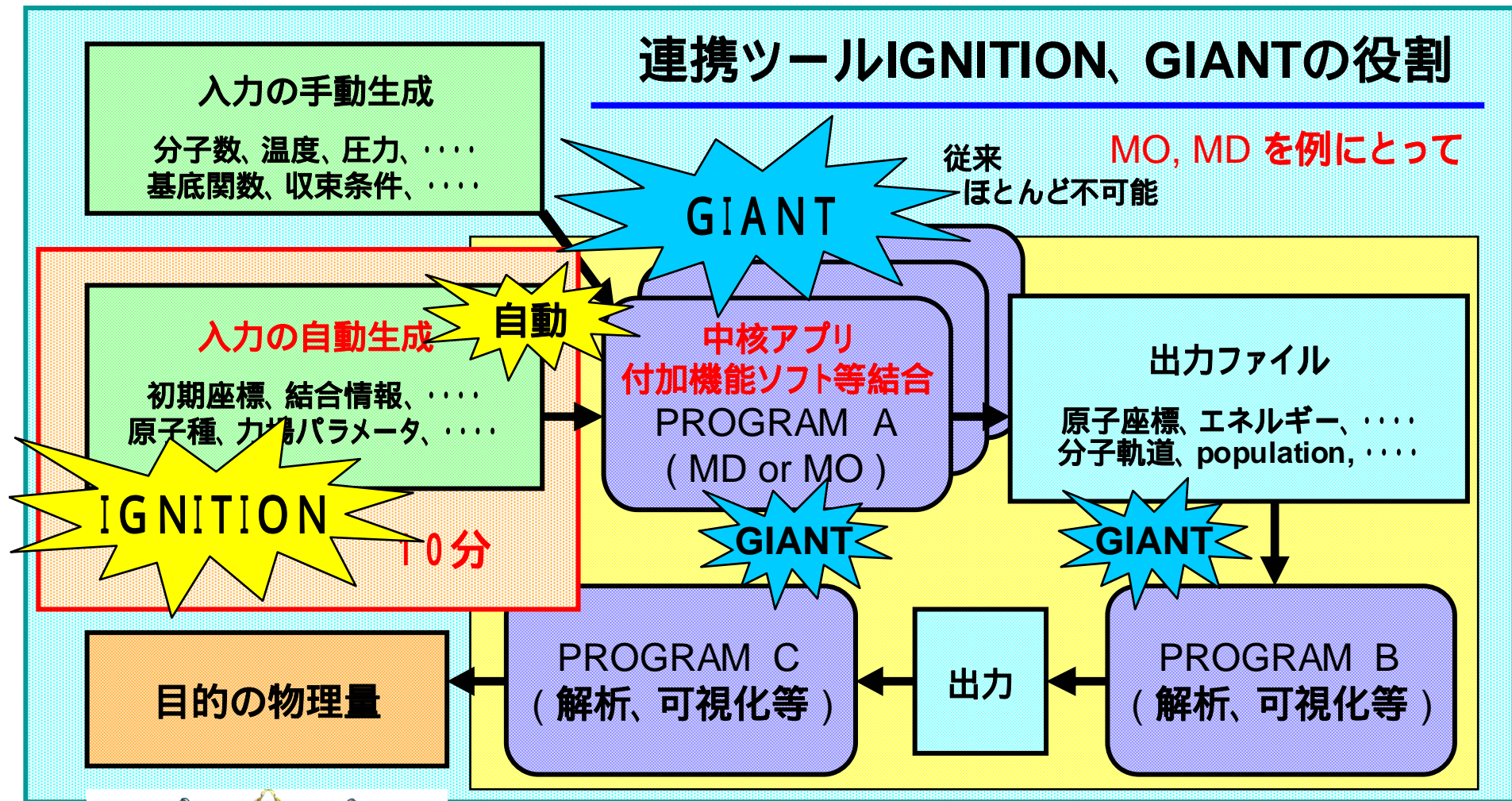
- 計算条件の手動入力の簡易化
- 複雑な構造情報の自動生成
- 多様なユーザレベルに対応
- freeware、市販ソフトの活用

◆GIANT アプリケーション間データ変換ツール

多様な計算需要への効率的対応

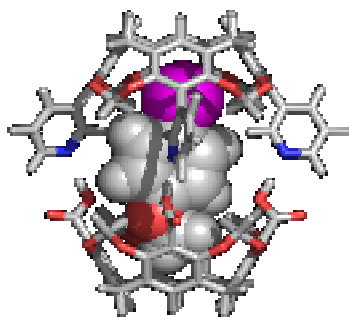
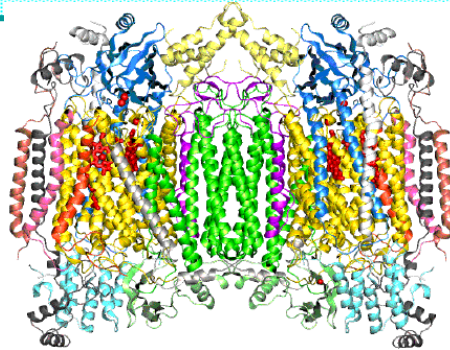
- 任意のソフト(中核アプリ、付加機能ソフト)の任意な結合が
容易に実行可
- バイナリー市販プログラムも組み込み可
- 計算結果の可視化、解析の自動化

連携ツールIGNITION、GIANTの役割



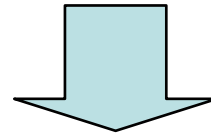
従来 MO, MD を例にとって
ほとんど不可能

入力の手動生成
解析条件等



入力の手動生成
解析条件等

中核アプリと付加機能ソフトを連携ツールで任意に結合して
3つのグランドチャレンジ課題を解決する。



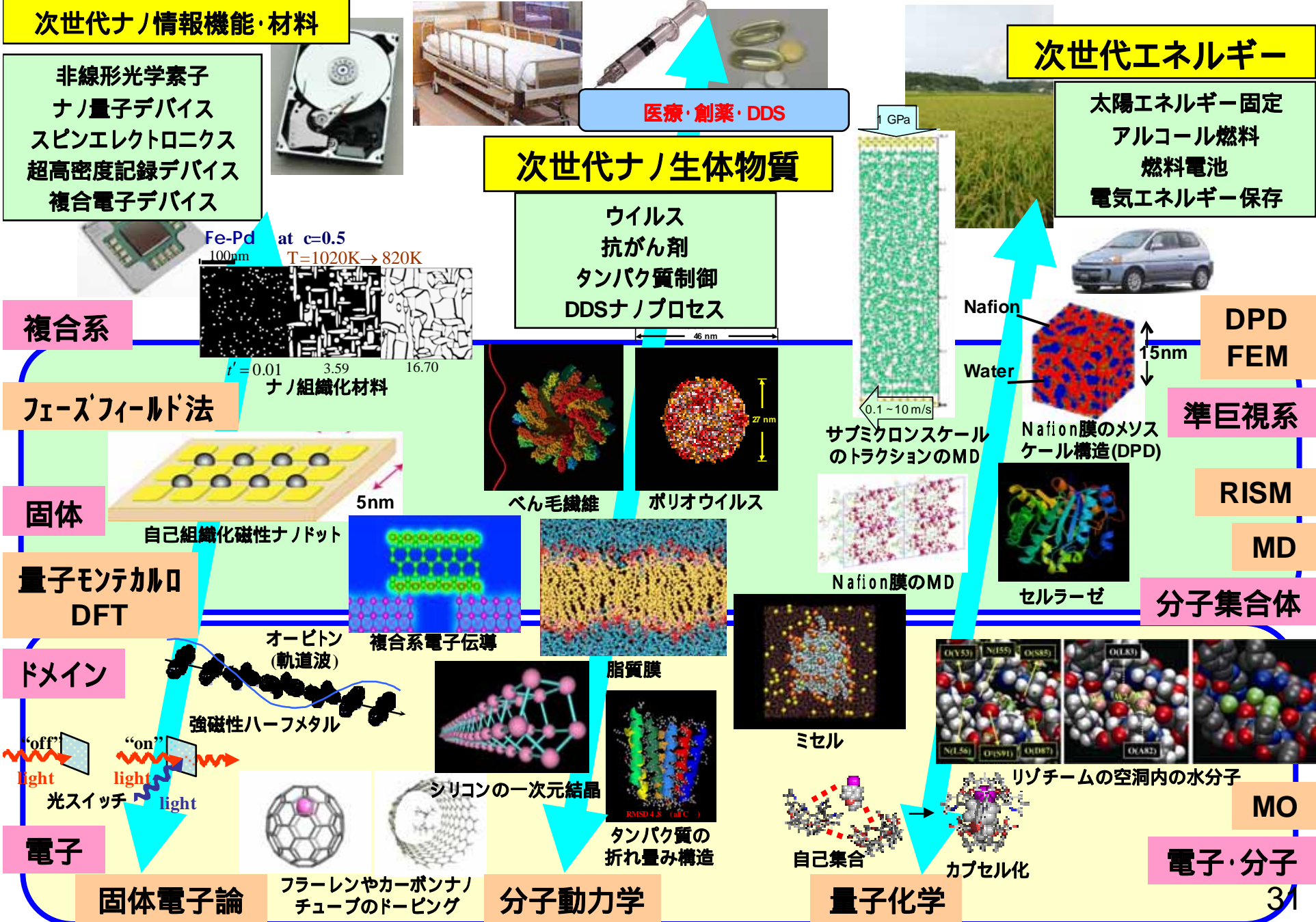
ナノ分野グランドチャレンジ課題

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

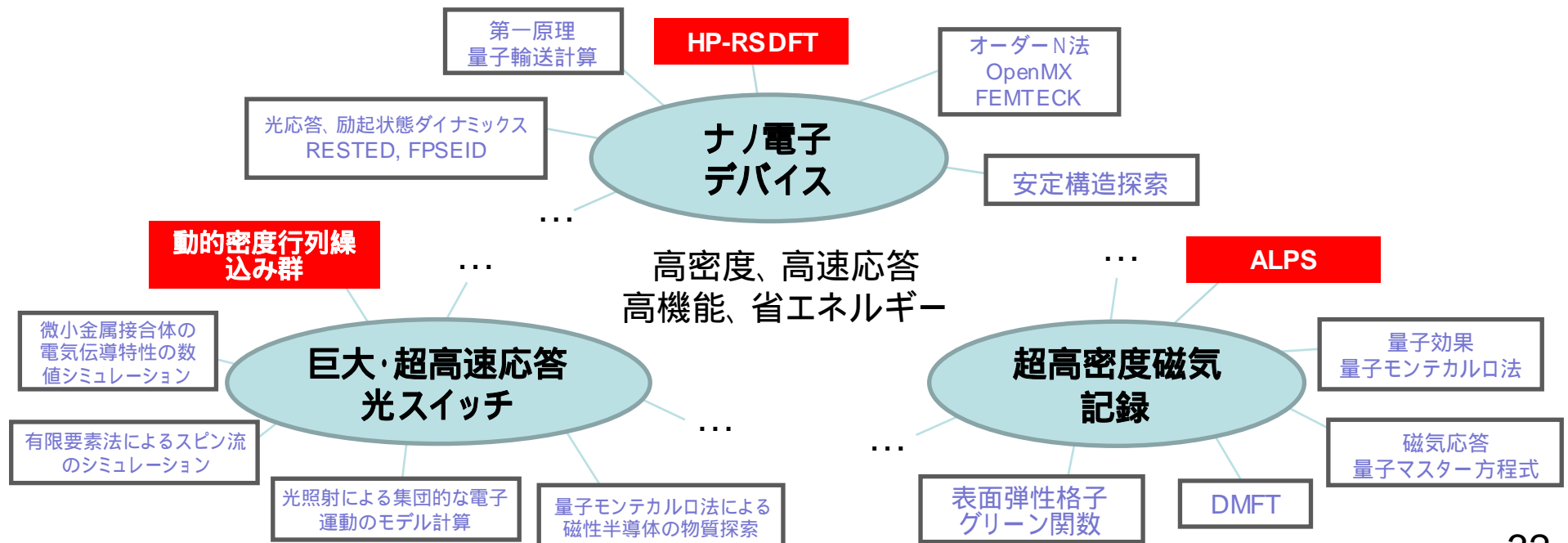
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発(俯瞰図)



次世代ナノ情報機能・材料 研究概要

CMOSの次の世代のナノテクノロジーまで見据えた、さらなる高密度実装を目指した新規電子デバイスや巨大・超高速応答光スイッチ、超高密度磁気記録の基礎となる理論・計算科学方法論の確立を目指す。

- ナノテクノロジーを利用した電子デバイスの高速、高機能化
- 超低消費電力デバイスの実現
- 巨大応答をもつ高機能デバイスの開発
- 超高速光スイッチによる「オール光ネットワーク」への道筋
- 超高密度磁気デバイスの開発
- 磁気デバイスのダイナミクスの解明



次世代ナノ生体物質 研究概要

ナノスケールの生体物質の分子科学

- ・生命システムの要素基盤、ナノ基盤の構築
- ・全電子、全原子シミュレーション
- ・生命が利用するナノ物質
- ・DDS等への応用
- ・方法論の確立

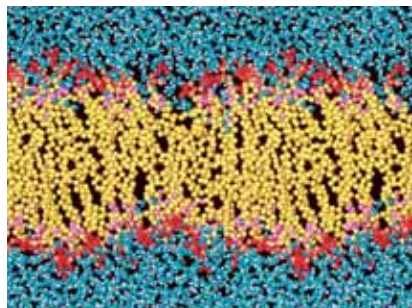
溶媒・水

物質科学

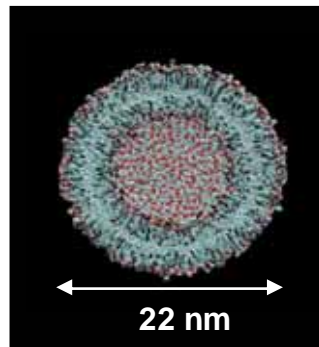
タンパク質

脂質膜

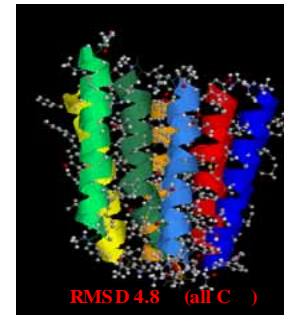
1. タンパク質高度シミュレーション新規方法論
2. イオンチャンネルの分子過程
3. ウイルスの分子科学
4. 細胞膜の分子科学
5. ナノ生体物質輸送(DDSのナノ過程)
6. 新規ナノ生体物質の創生と利用



平面脂質膜



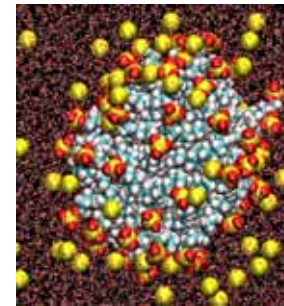
リボソーム



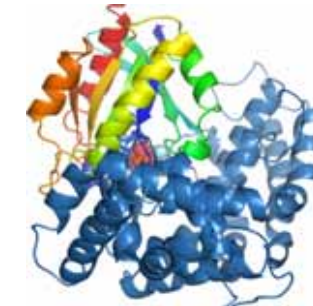
タンパク質の構造予測



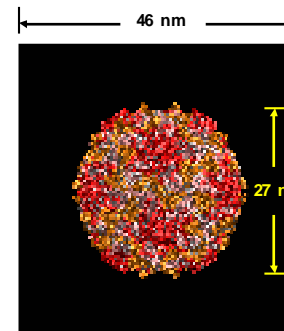
タンパク質の全電子計算



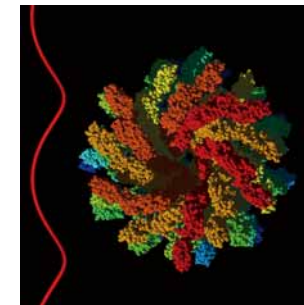
球状ミセル



タンパク質複合体



ウイルス

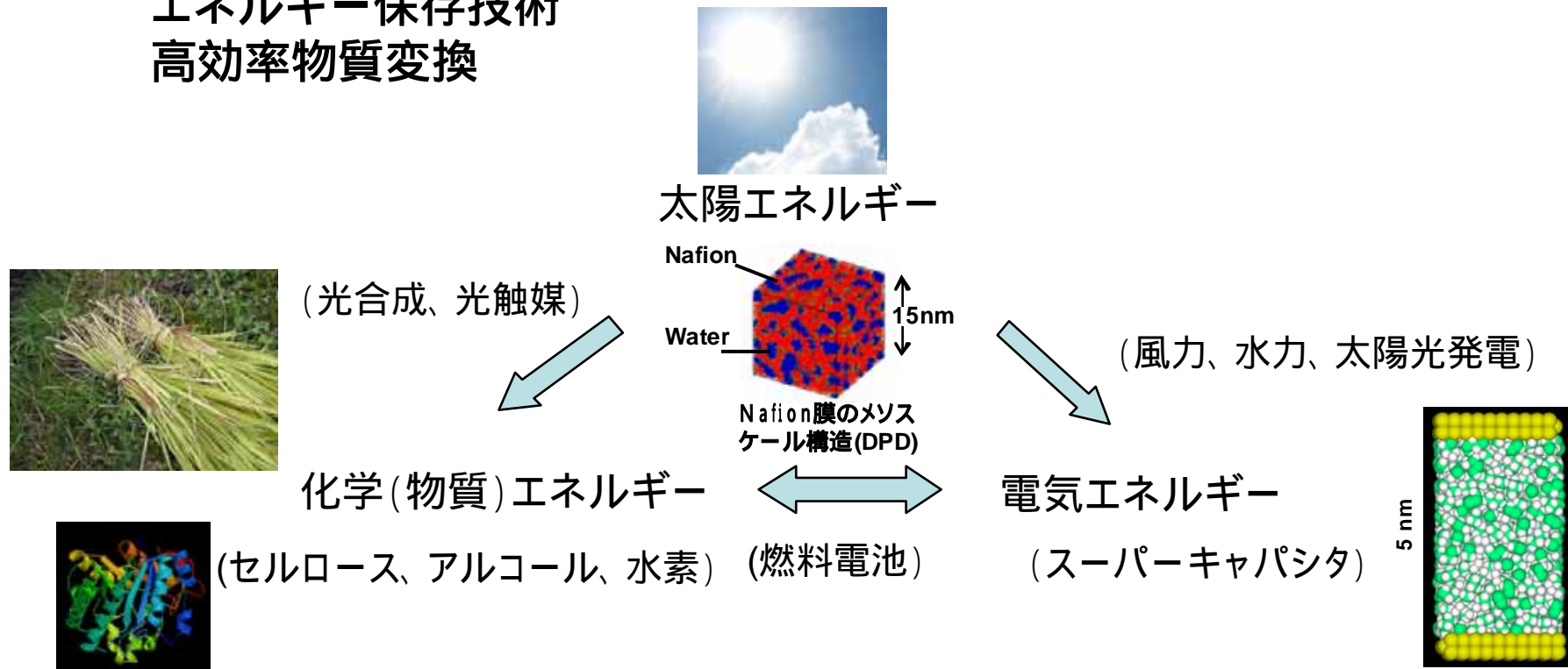


べん毛繊維

次世代エネルギー 研究概要

化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、変換、利用、貯蔵技術の基礎となる理論・計算科学方法論の確立を目指す。

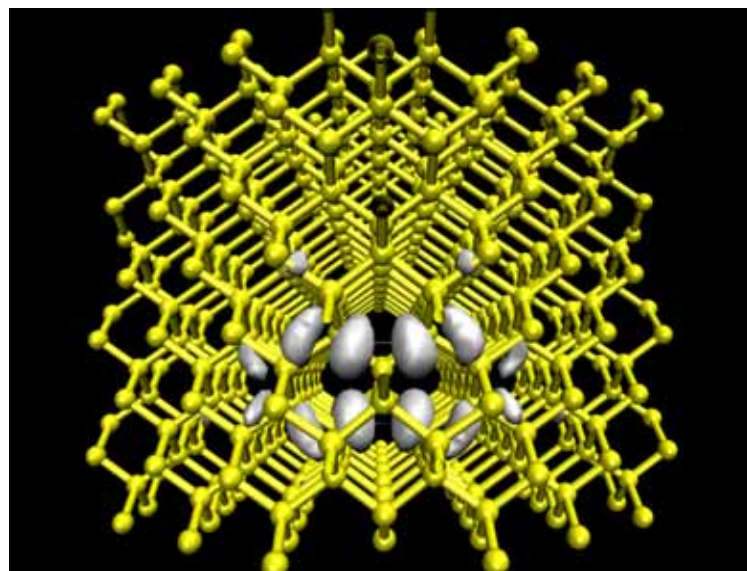
化石燃料からの脱却を目指すアルコール燃料サイクルの確立
光触媒による太陽エネルギーの固定
光合成による太陽エネルギーの固定
燃料電池の作動原理における分子過程の解明
エネルギー保存技術
高効率物質変換



次世代ナノ情報機能・材料の進捗状況

H19年6月時点

大規模第一原理計算：
実空間差分法を用いた計算例

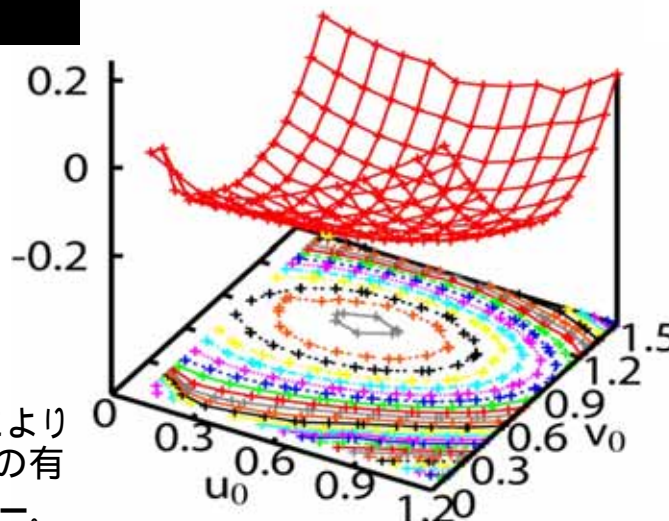


実空間差分法による電子状態並列計算の結果。Siの複原子空孔での深い電子準位の波動関数。

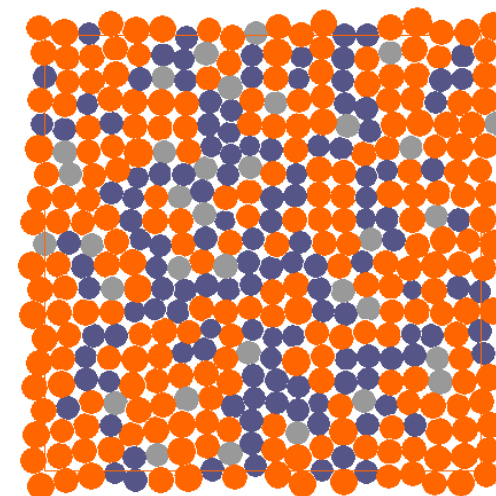
密度行列繰り込み群法により計算したバンド充填率1/4の有機塩の励起状態エネルギー。

動的密度行列繰り込み群プログラムによる計算例

(0200) excited state



モンテカルロ法による計算例



大きさが変化する分子磁性体のモンテカルロ計算。オレンジ色の大きな分子は非磁性、小さな分子は上向き(紺色)または下向き(灰色)の磁気モーメントを持って、1次元的に配列。

次世代ナノ生体物質の進捗状況

H19年6月時点

ソフトウェアの開発

分子研・岡崎

1000万原子系のMD計算
1PFlopsの実効性能が目標

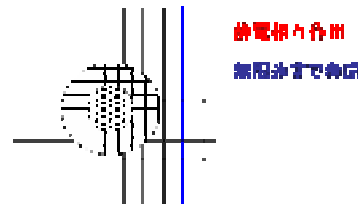
高並列汎用MD計算ソフト **nmodylas**

- 非並列化
 - ・完全領域分割化
 - ・多階層分割
- 多核子展開法
 - ・FMM法
 - ・円形境界条件

計算例

- ほぼ最適なLwald法 -8.12725489U
- FMM法 -8.127275771

分子系間・周期境界条件



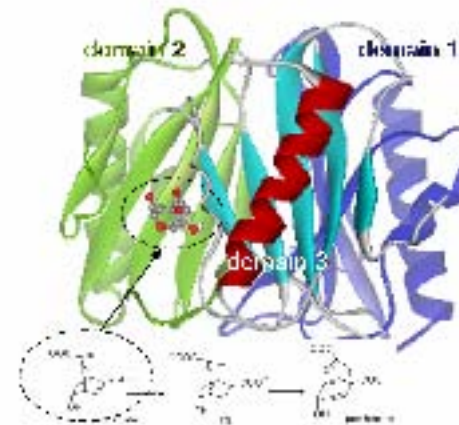
多核子-多核子相互作用に対するLwald法

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N | \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j |^{-1} \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N G_p(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_p} e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_q}$$

計算例 1

産総研・北浦

水和効果を取り込んだコリスレートミューターゼの全電子計算



FMO計算
約5,600原子系の
全電子計算

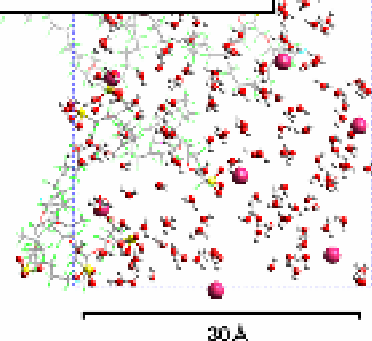
計算例 2

東レ・茂本

Nafion膜のナノ構造形成

膜のシミュレーションの応用

ランダム初期構造

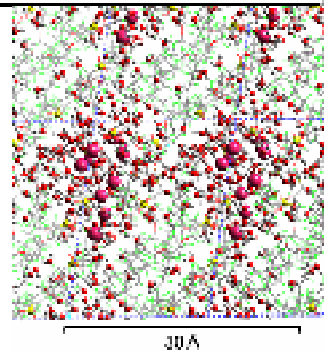


電荷可変
MD



最適化QEq
パラメータ

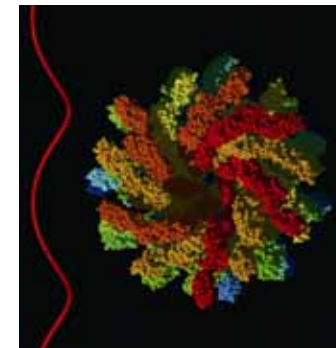
ナノ相分離構造を再現



計算例 3

東大・北尾

細菌べん毛繊維の分子動力学計算



240万原子系
20 ns

べん毛の運動を解明
・超らせん構造転移
・エネルギー変化が小

次世代エネルギーの進捗状況

H19年6月時点

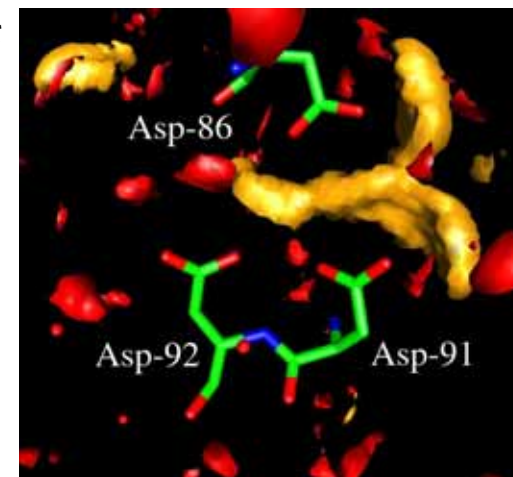
(1) 次世代スパコンプロジェクトの概念設計に資するため、ターゲットアプリ(3D-RISM、高速量子化学ソフト)を提案

(2) グランドチャレンジ中核ソフトの設定をおこない、開発に着手した。

(3) グランドチャレンジ課題に沿った研究においていくつかの科学的成果を挙げた。(その例を図示)

3D-RISM理論により、蛋白質の選択的イオン認識を計算

(酵素反応におけるもっとも本質的なプロセスである「分子認識」問題を解決する見通しを与えた。)

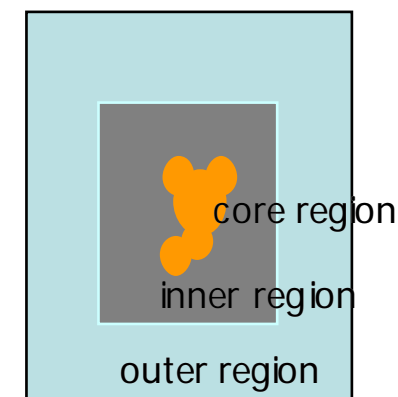


射影演算子法に基づき溶媒を粗視化したMDシミュレーションの方法論を提案
(酵素反応における蛋白質骨格のダイナミクスを実現)

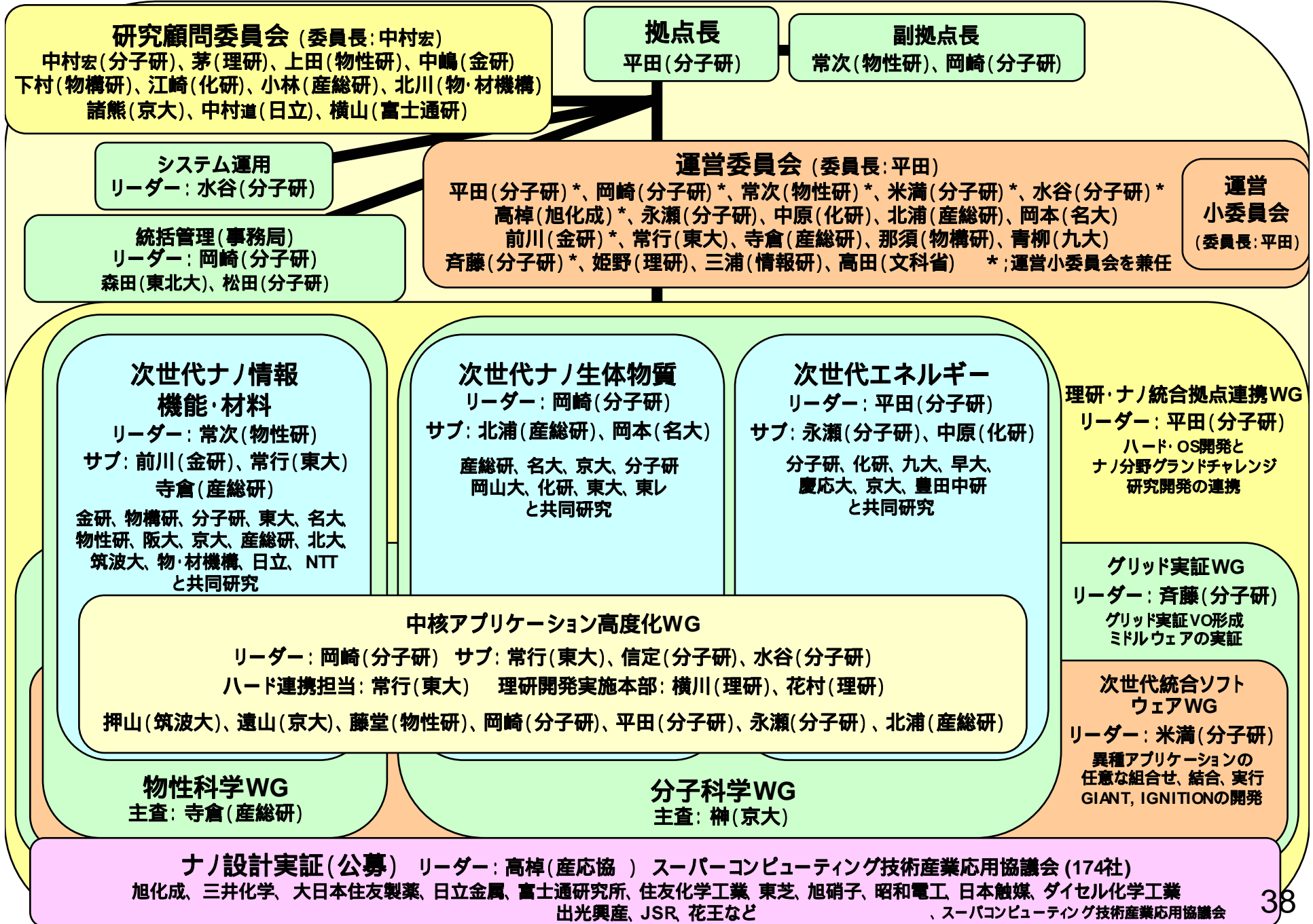
$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{P}}_\eta(t) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{R}}_\eta} \ln \omega(\hat{\mathbf{R}}) - \beta \int_0^t ds \sum_\alpha \langle [\mathbf{F}_\eta^Q(t-s)] [\mathbf{F}_\alpha^Q(0)]^T \rangle \frac{\hat{\mathbf{P}}_\alpha(s)}{M_\alpha} + \delta \mathbf{F}_\eta^Q(t)$$

蛋白質の波動関数がつくる静電ポテンシャルを高速に計算する手法を確立(酵素反応の自由エネルギー曲面の計算)

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \infty & r \in \text{core region} \\ \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' & r \in \text{inner region} \\ \sum_i^N \frac{\rho_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} & r \in \text{outer region} \end{cases}$$



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拠点体制図

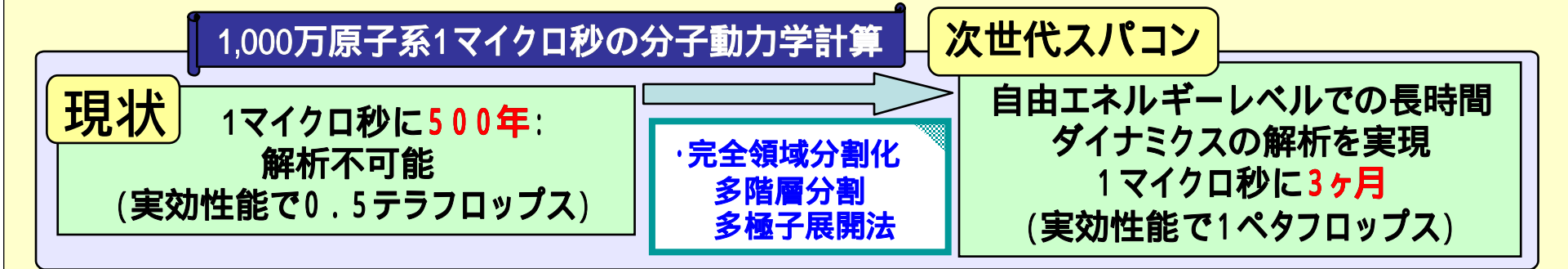


次世代スパコンで初めて可能となる計算の例(分子科学分野)

バイオマス⁽¹⁾ - 化学エネルギー転換技術に必要な酵素・触媒反応
(3次元RISM⁽²⁾/FMOシミュレーション)



巨大生体分子の動作機構解明のための全原子シミュレーション



次世代スパコンで初めて可能となる計算の例 (物性科学分野)

ポストシリコンデバイス実現のための複合的ナノ電子デバイスシミュレーション
(個々の素子の機能探索からデバイスとしての機能デザインへ)

現状

2千原子程度の複合系(量子細線と電極)の計算が可能
10万原子の系を扱うには**800年**:
実現不可能
(実効性能で1テラフロップス)

10万原子系の第一原理計算(複合的ナノ電子デバイスシミュレーション)

実空間差分等による第一原理計算
超並列計算
オーダーN法

次世代スパコン

量子細線や分子、電極、ゲート、基板などの全体(10万原子系)の計算が**2ヶ月程度**で可能
(実効性能で1ペタフロップス)

強相関電子の内部自由度を利用した巨大・超高速応答光スイッチ開発
(強相関多体電子系シミュレーション)

電子格子系における非線形光学応答

現状

格子振動の効果が不十分な
20原子系の線形応答が1日
精度が不十分な非線形応答が**30日**
(実効性能で100ギガフロップス)

動的密度行列
繰り込み群法

次世代スパコン

十分な格子振動を含んだ100原子系の
非線形光学応答を**半日**で高精度計算可能
(実効性能で1ペタフロップス)

次世代スパコンで初めて可能となる計算の例 (物性科学分野)

自己組織化を用いた構造制御と磁性ナノ粒子の特性
(自己組織化の機構と制御法、磁性ナノ粒子の静的・動的性質の解明)

現状

自己組織化と磁性ナノ粒子の磁場制御と量子ダイナミクス

次世代スパコン

短周期・薄膜モデル (~ (0.1ナノメートル)³), 少数スピン系のダイナミクス
(実効性能で1テラフロップス)

超大規模第一原理計算, 弾性論モデル, 拡張アンサンブル法, 数値的厳対角化法, 量子マスター方程式

有用なサイズ (~ (5ナノメートル)³) での自己組織化, スピン量子ダイナミクスの反復シミュレーション
(実効性能で1ペタフロップス)

次世代ナノ統合 シミュレーション ソフトウェア

