

**将来(2010年前後を想定)の研究目標と
スーパーコンピューティング環境について**

平成16年10月

物質・材料研究機構

計算材料科学研究センター

大野 隆央

内容

1. 現行のスーパーコンピュータシステム及び研究成果について
 - ・現行スーパーコンピュータシステム構築の背景
 - ・システム概要
 - ・現行スーパーコンピュータを使用した研究成果について

2. 将来想定される研究目標について

3. 将来(2010年前後)のスーパーコンピュータシステムについて

現行スーパーコンピュータシステム構築の背景

材料数値シミュレータ

第1代システム NEC-SX4

ベクトル型並列計算機: 16cpu x 2GFLOPS/cpu

運用期間: 1996年4月 ~ 2000年3月

第2代システム NEC-SX5

ベクトル型並列計算機: 32cpu x 8GFLOPS/cpu

運用期間: 2000年4月 ~ 2004年3月

稼働率: 常時90%以上(満杯状態)

ジョブ種類:

計算科学分野(研究者開発ソフトが主体。市販・フリーソフト利用は僅か)
第一原理手法、古典MD、量子スピンなど

ジョブ特徴

高いベクトル化率(殆どが99%以上)

ジョブ数が非常に多数

大多数が1cpuシリアル処理(cpu不足のため並列化が抑制)



新システム導入の考え方

従来システムの問題点

多数の小規模・長時間ジョブ => cpu数の絶対的な不足

大規模系への展開も始動

プログラム: 高いベクトル性能(殆どが99%以上)

並列性能(MPI, OpenMP)も高い

要求要件(考え方)

実効性能を4倍以上(従来システム比)

コスト性能比の良い計算機: ベクトル型 or スカラー型

単一システム: 小規模の複合体システムでは中途半端

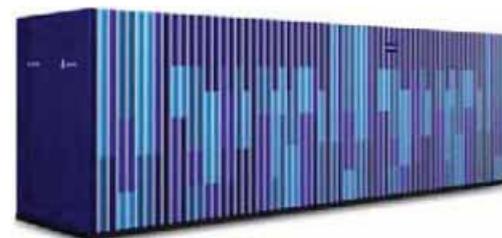
新システム(第3代システム) HITACHI-SR11000

スカラー型並列計算機: 64node x 16cpu/node x 6.8GFLOPS/cpu

運用期間: 2004年4月 ~ 現在

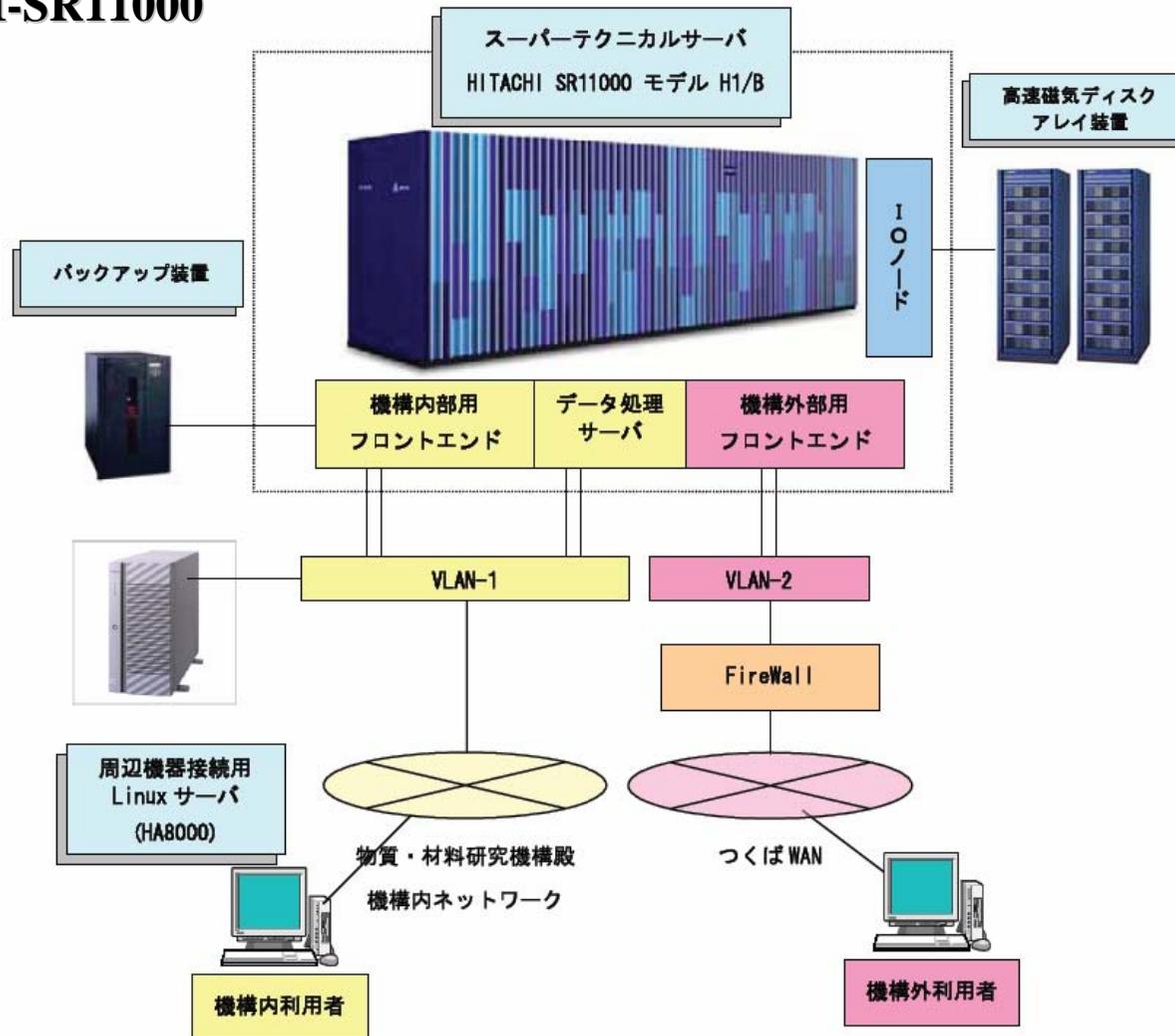
稼働率: 既に、90%以上

ジョブ種類: 計算科学分野



材料数値シミュレータ新システムの構成

HITACHI-SR11000



材料数値シミュレータ性能比

	従来システム NEC-SX5	現システム HITACHI- SR11000	比
システム構成	2 nodes 16 cpu/node	64 nodes 16 cpu/node	32
理論ピーク性能	256 GFLOPS	6.96 TFLOPS	27.2
LINPACK性能	243 GFLOPS	3.32 TFLOPS	13.7
記憶容量	128 GB 64 GB/node	2048 GB 32 GB/node	16
ディスク容量	1 TB	21.4 TB	21.4
テープ容量	10.5 TB	16 TB	1.5

実効性能(開発ソフト) = 8倍程度

シミュレーションソフト

特徴

- (1) 計算科学分野
- (2) 研究者開発ソフトが主体。市販・フリーソフト利用は僅か

- ・第一原理MD法： 計算量は原子数 N の3乗に比例 $O(N^3)$
- ・第一原理オーダー N 法： 計算量は原子数 N に比例 $O(N)$
- ・古典MD法： L-J及びEAMポテンシャル
- ・Phase-field法： 計算量はメッシュ刻みに依存。現状で、3D計算はかなり困難。
- ・量子スピン： 多数レプリカでの計算
- ・量子MC法： 計算量は原子数 N の5乗に比例 $O(N^6)$

現行スーパーコンピュータシステムを使用した研究成果

代表的な研究成果(主に、2004年3月まで稼働の従来システムを使用)

第一原理モデリング

表面ダイナミクスの量子論的解明

ナノ構造の伝導特性の解析

DNAのナノデバイス材料としての可能性の提言

分子系の光励起反応の解析

高誘電体材料の探索

高温超伝導体の電子状態

量子MC法の金属材料への適用

強相関モデリング

超伝導磁束量子系に見られる協力現象を解明

超伝導を用いた計算機マイクロプロセッサ設計の基礎構築

粒子・熱力学モデリング

金属ガラスのガラス形成能評価

Phase-field法による組織形成過程のモデリング

量子モデリング(第一原理 / 強相関)

大規模第一原理計算
 ハイブリッド計算
 ナノ構造機能シミュレーション
 (伝導、誘電、磁気・光学、電子相関、
 電子励起状態)
 機能探索最適化問題
 基礎理論
 (QMC, ハイブリッド、Order-N, DMRG)
 (共同研究)

粒子・熱力学モデリング

組織形成シミュレーション
 (MD、MC、PF、FEM)
 特性発現シミュレーション
 (第一原理、MD、MC、PF、FEM、
 経験式等)
 熱力学、拡散DB拡充(共同研究)

材料現象の 物理解明

電子・原子-
ナノ
スケール

PFMによる
統合化

原子-ナノ-
バルク
スケール

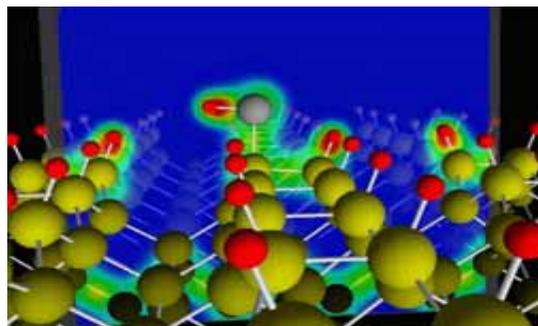
材料開発の指針と手法

デバイス構造・機能設計システム
 (半導体、分子デバイス、
 ナノ磁性体、触媒、燃料電池、
 生体材料、構造材料)

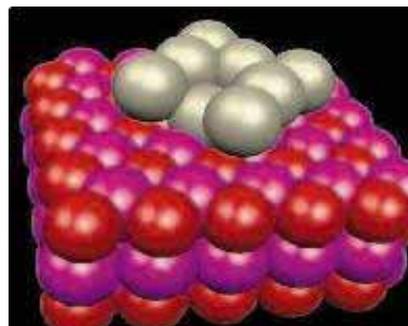
新奇的な量子現象の発見・予測
 (超伝導、磁性、ソフトマター)

材料組織・特性予測システム
 (磁性材料、形状記憶合金、
 ハンダ合金、耐熱合金、
 構造材料)

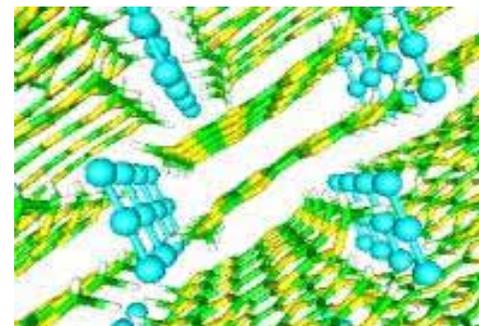
第一原理モデリング



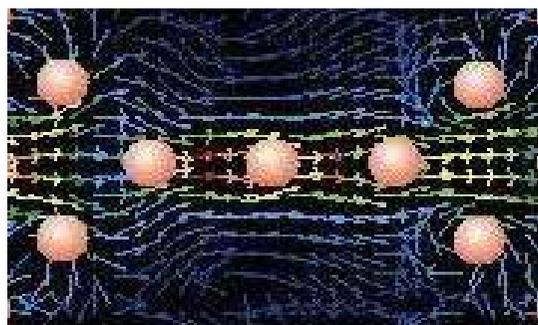
Surfaces and Interfaces



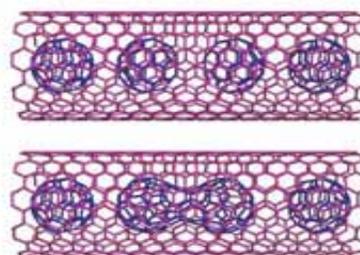
Catalytic Reaction
Nanoscale simulation system



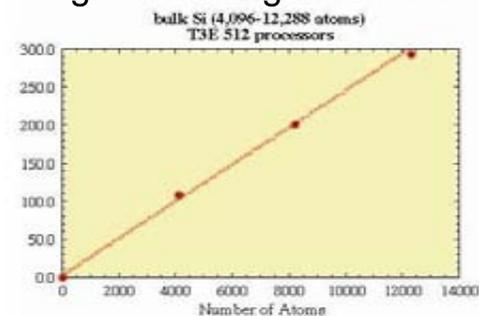
Organic Charge Transfer Salts



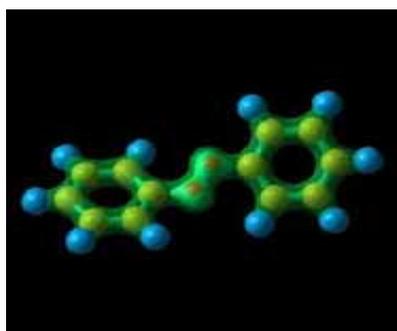
Transport Properties



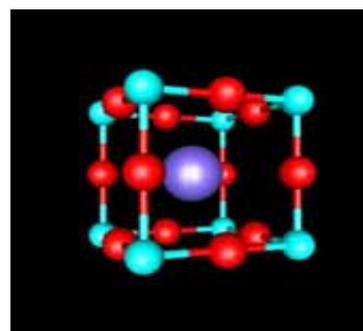
Nanoscale simulation system



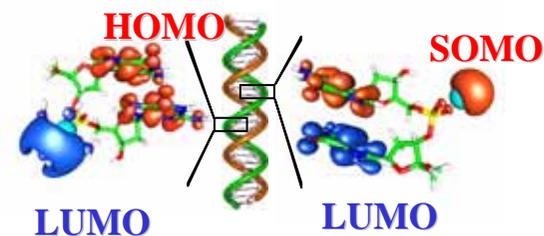
Development of Order(N) Programs



Photochemical Reaction (TD-DFT)



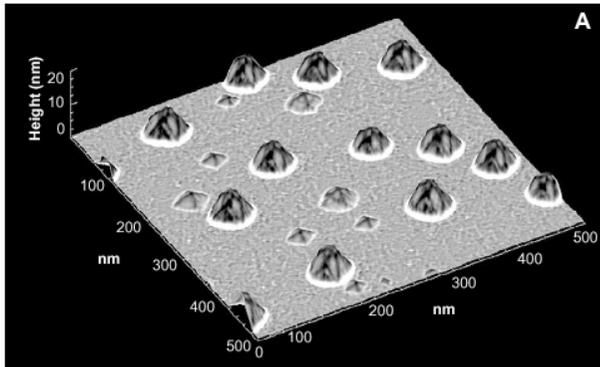
Electron Correlations (GW)



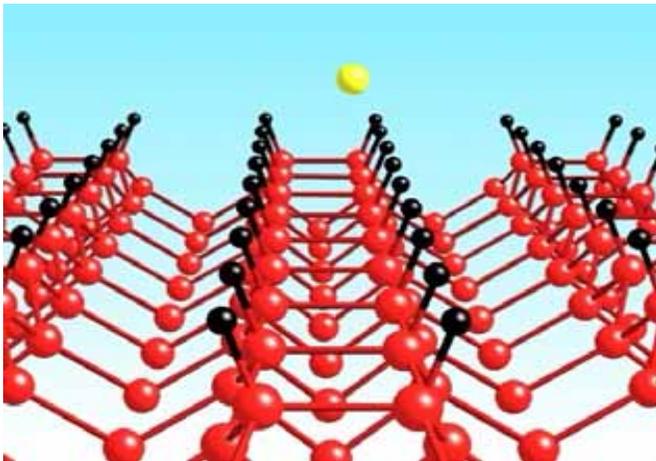
Hole doping into DNA

Surface Dynamics

Ge/Si systems: Quantum Dots
Self-organization induced by strain



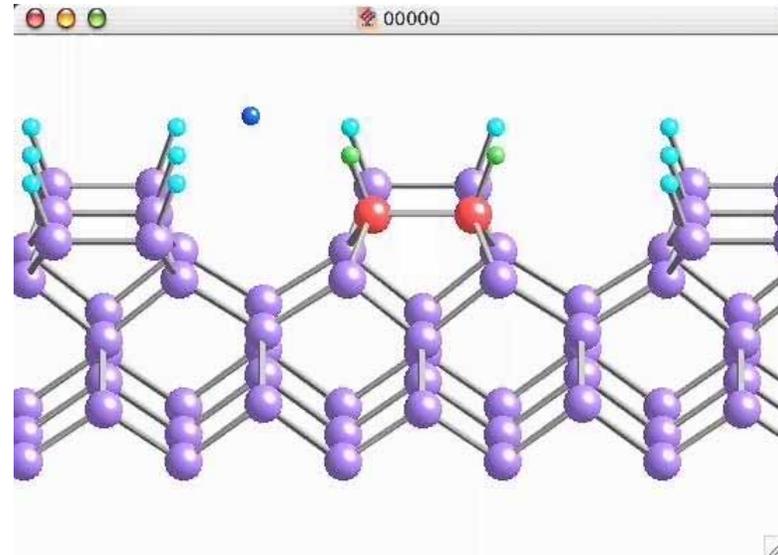
Adsorption of Ge on H/Si(001) surface



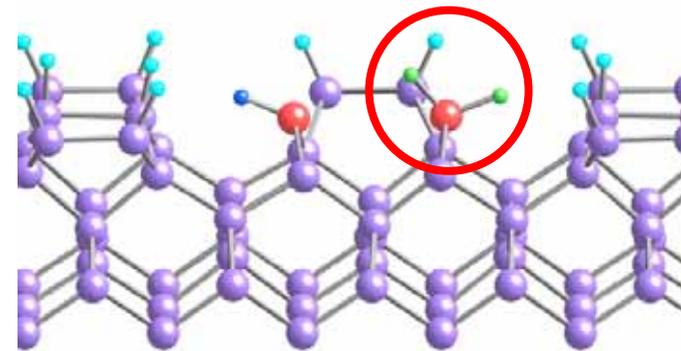
Sub-surface diffusion of a Ge atom

Adsorption of H on H/Si(001) surface

1.62 psec



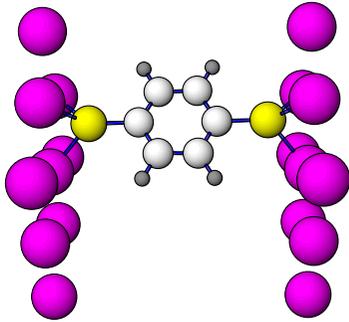
SiH₂ formation



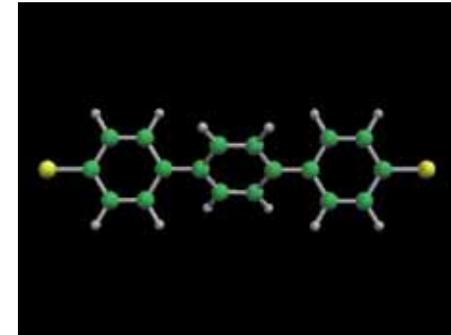
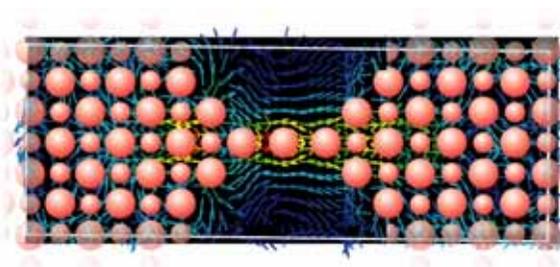
Transport through nano-structures

First-principles calculations for transport properties

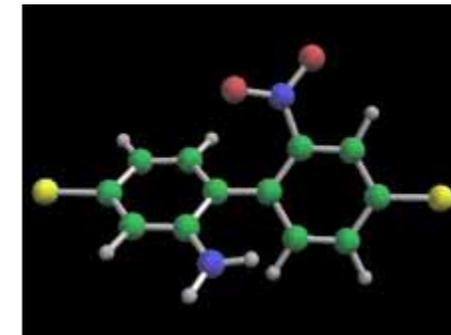
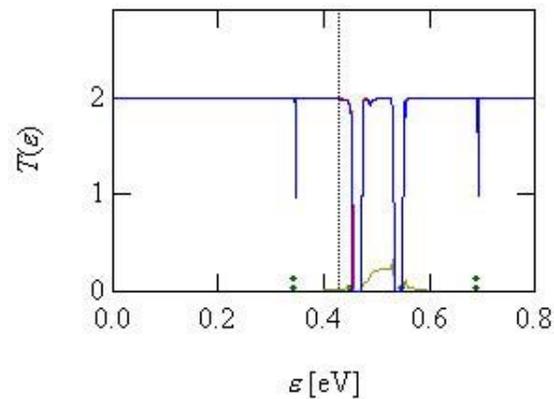
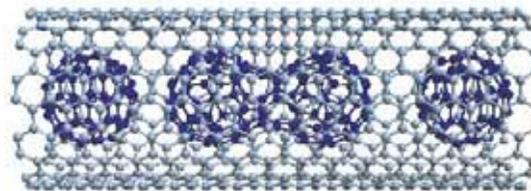
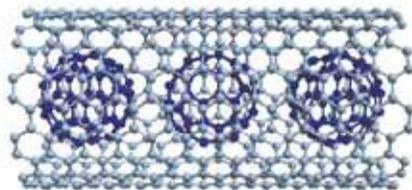
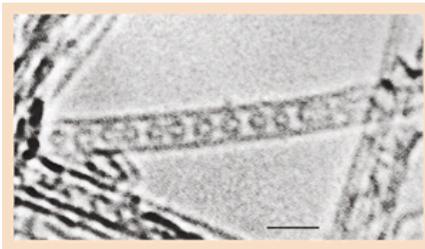
Molecular wires



Atomic wires

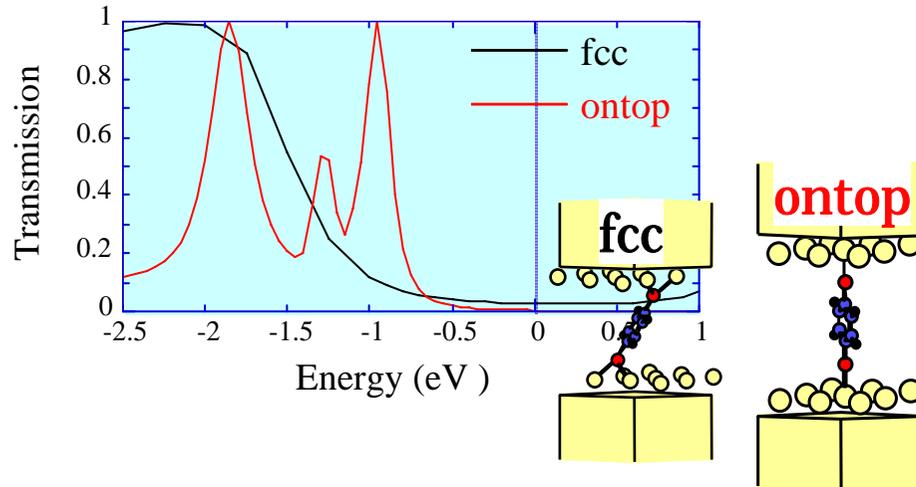


Peapod : C60@CNT

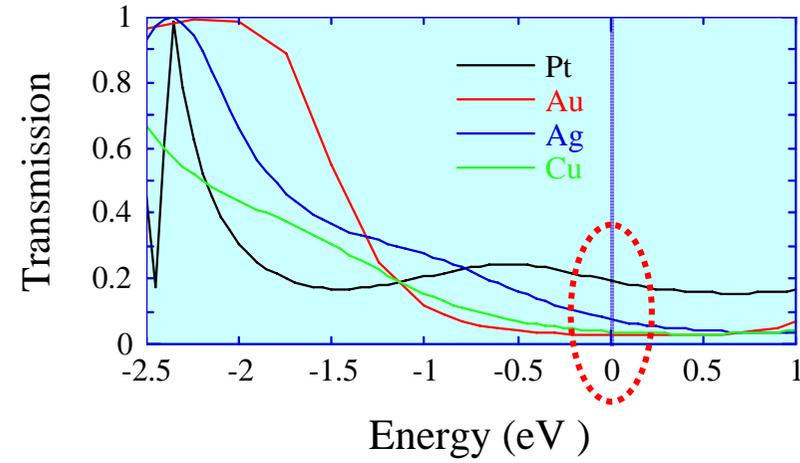


Transport: Effects of contact structures

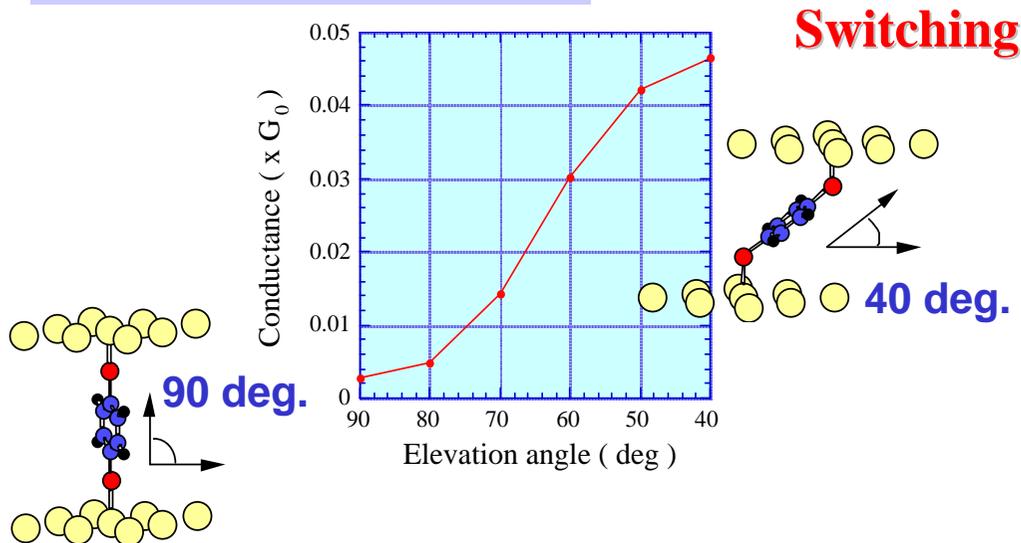
Effect of contact site



Effect of metal contact



Effect of Contact angle

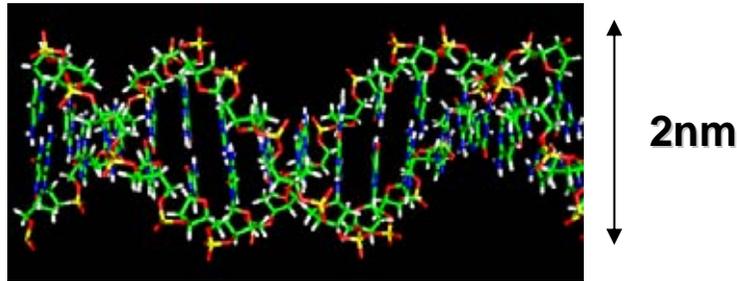


Pt makes better electrode than noble metals.

Conductance (in $G_0=2e^2/h$)

	Pt	Cu	Ag	Au
Bridge	0.194	0.043	0.079	0.037
Fcc	0.101	0.059	0.060	0.058

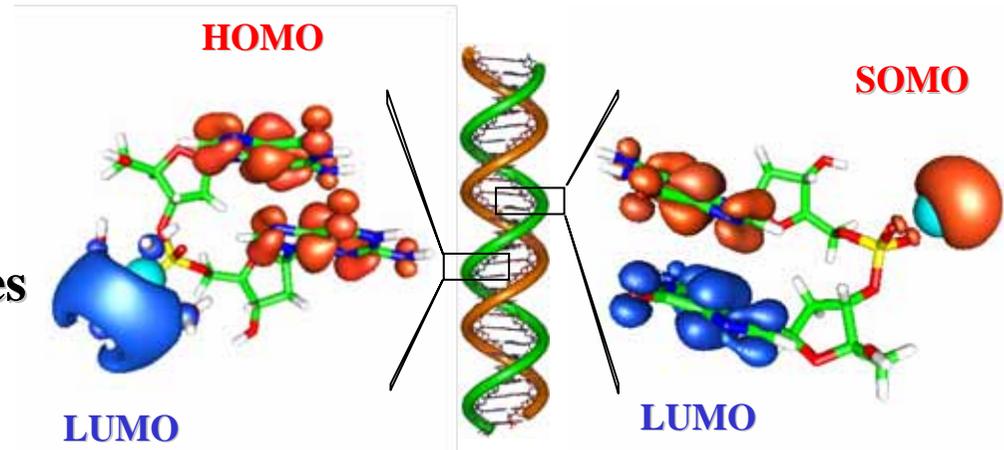
DNA: fusion of biotechnology and nanotechnology



Possible candidate for nano-structures

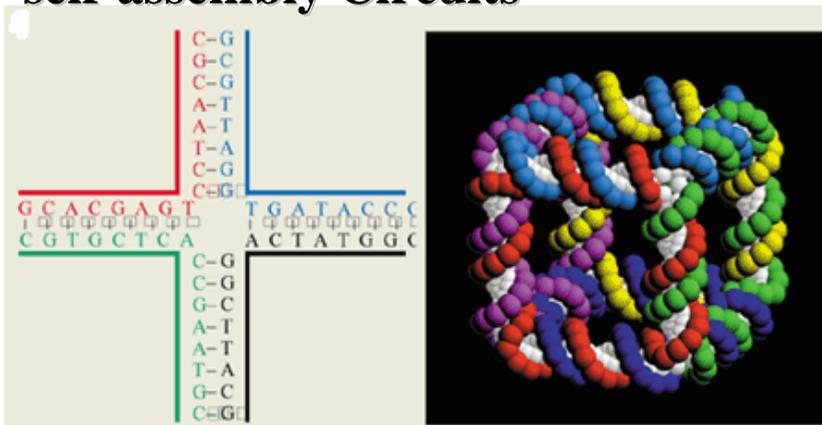
- (1) Length (~cm)
- (2) Narrow cross section (~nm wide)
- (3) Self-assembling
- (4) **Conducting ?**

hydrated Mg^{++} vs. anhydrous Mg^{++}

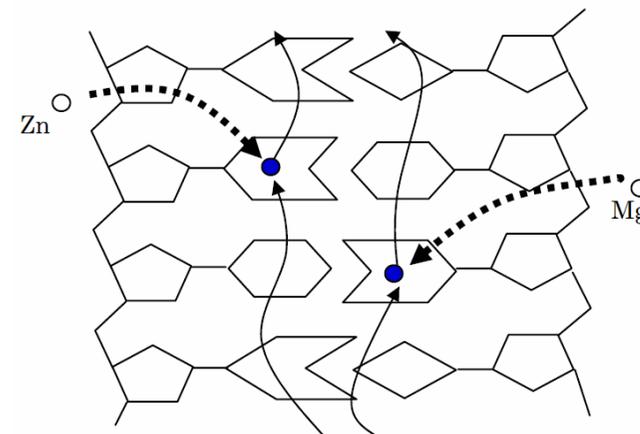


Hole doping into DNA is possible

self-assembly Circuits



G (guanine) – C (cytosine)
T (thymine) – A (adenine)

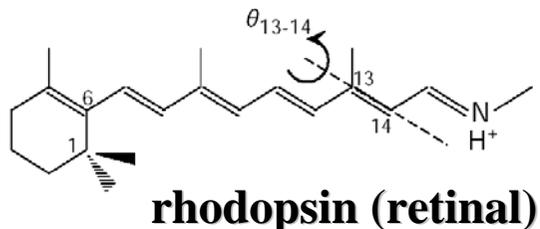


Nanodevice: diodes, tansistors

Photochemical reactions

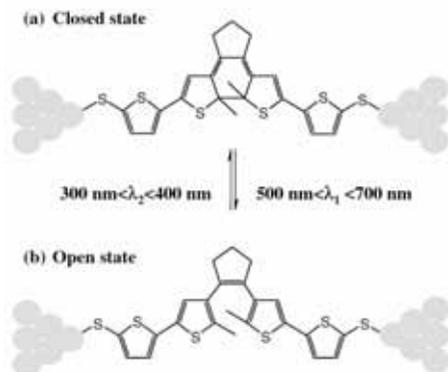
Structural transformation induced by photoexcitation

Photoisomerization



vision, photosynthesis

Photochromism



Photochromic molecules

optical switch

Time-dependent DFT calculation

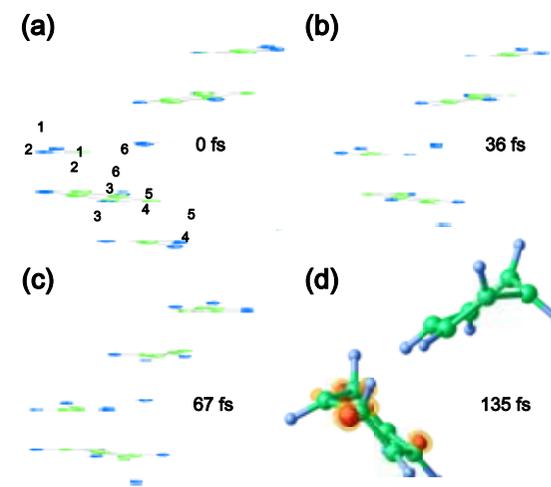
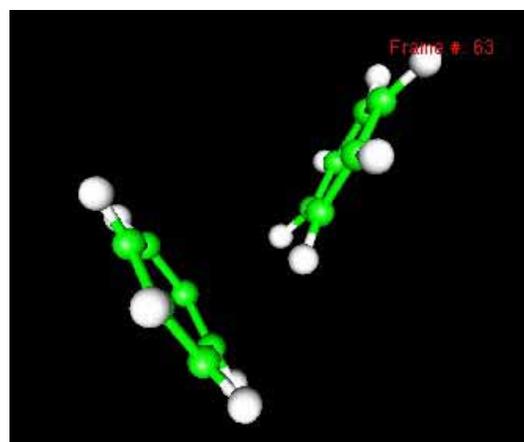
$$\phi_i(\mathbf{r}, t + \Delta t) = U(t + \Delta, t) \phi_i(\mathbf{r}, t)$$

$$U(t + \Delta, t) = \hat{P} \left[\exp \left(-i \int_t^{t+\Delta t} \hat{H}_{KS}(s) ds \right) \right]$$

photoinduced ring-opening of benzene

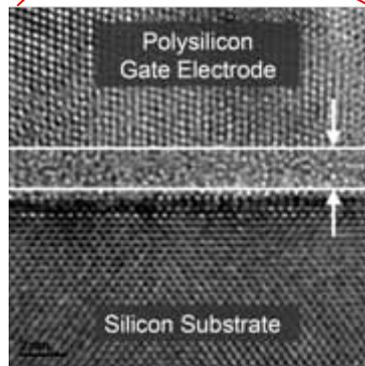
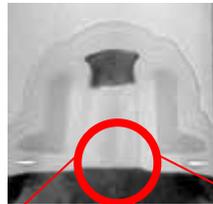
Photoexcitation enhances structural transformation from crystalline benzene to amorphous solid (a-C:H).

How does the π - π^* excitation affect the σ -bond breaking ?



Next generation CMOS transistors

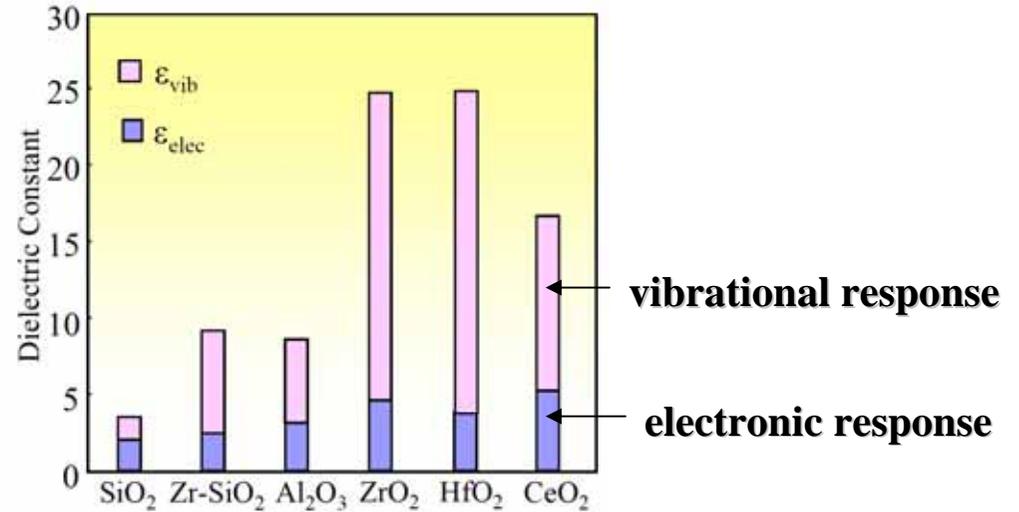
65nm CMOS



Gate dielectrics
SiO₂ layer

1.2nm

dielectric response of high-k materials

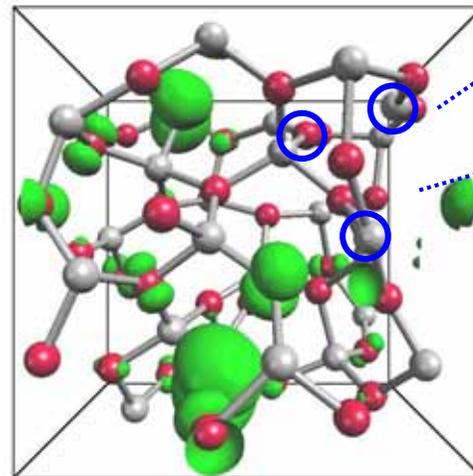


Extreme size reduction

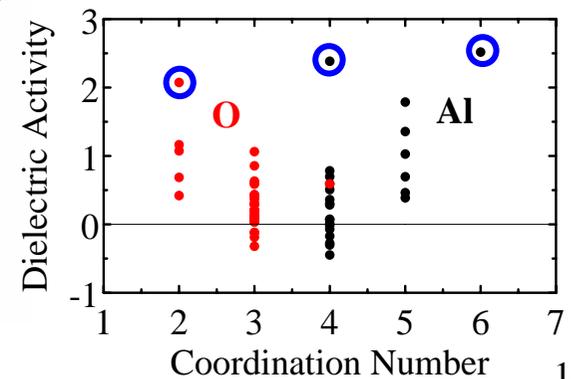
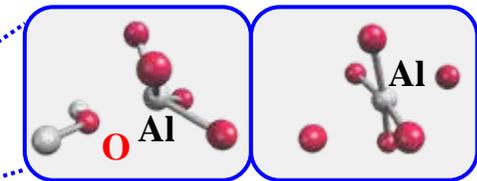
- ➔ Increase of gate leakage curr
- ➔ Use of high-k materials as a gate insulator

Al₂O₃, HfO₂, ZrO₂,,,

amorphous-Al₂O₃

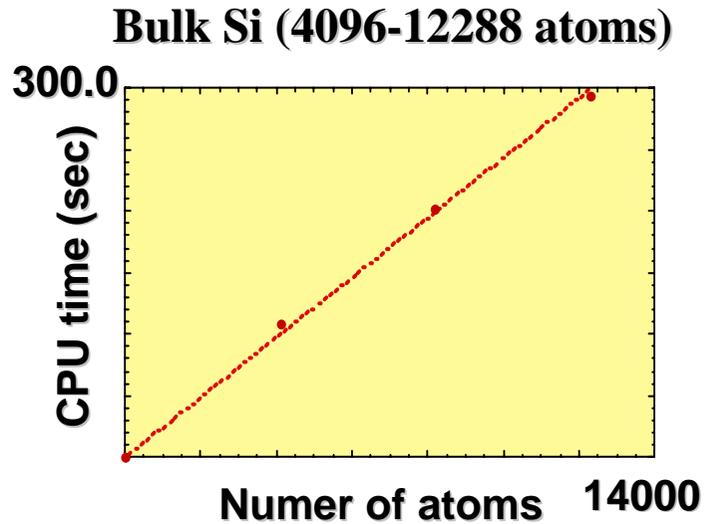


HOMO

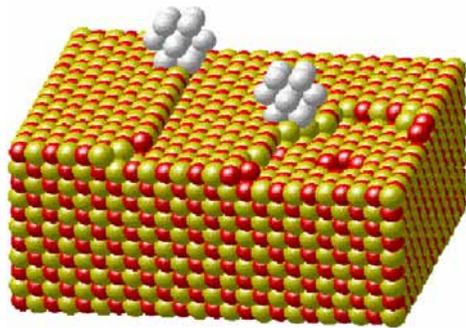


Large-scale DFT calculations

Efficient and reliable method: Order-N method



we have done SCF calculations on the systems containing up to 16,384 atoms



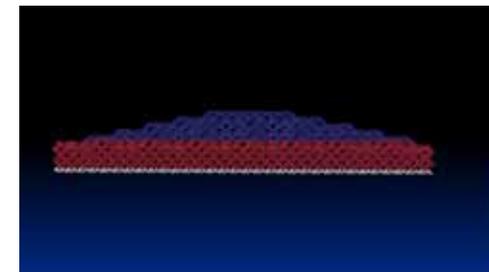
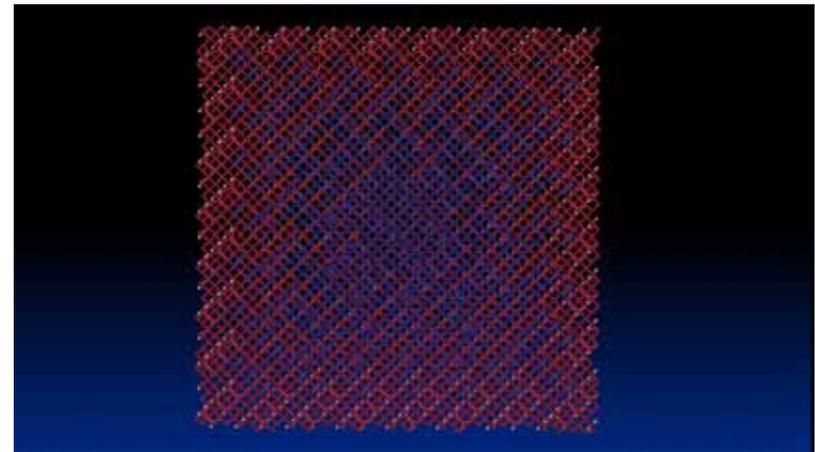
Nano-scaled catalysts: small metallic clusters on oxide surfaces

Ge/Si(001)

格子不整合による歪み

Hut cluster 12x12 (6.5nm x 6.5nm)
on Si基板 (8.7nm x 8.7nm)

全3399原子



「第一原理からの電子相関に関する理論的研究」

第一原理反応

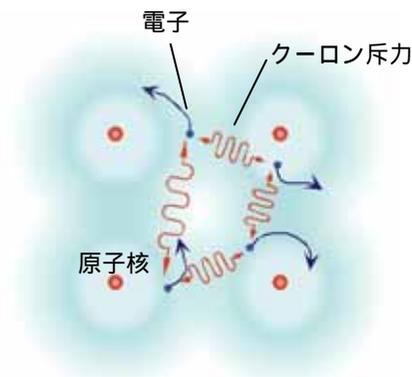
標準的な第一原理理論「LDA」

- 強すぎる原子間結合
- 励起状態(電氣的・光学的性質)に系統的ずれ

より現実的な電子間相互作用の理論:
拡散量子モンテカルロシミュレーション
 (DQMC)

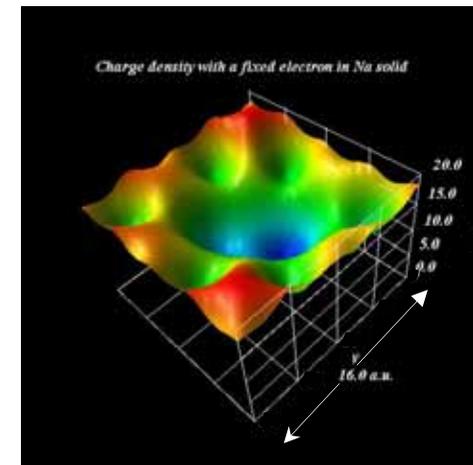
単純金属 (bcc Na) での結果

	凝集エネルギー	実験値との差	エネルギーバンド幅	解析値との差
実験値	1.129 eV	---	---	---
解析的理論	---	---	3.6 eV	---
LDA (DFT)	1.21 eV	0.08 eV~900 K	3.28 eV	-0.3 eV
DQMC	1.131 eV	0.002 eV~ 20K	3.7 eV	0.1 eV

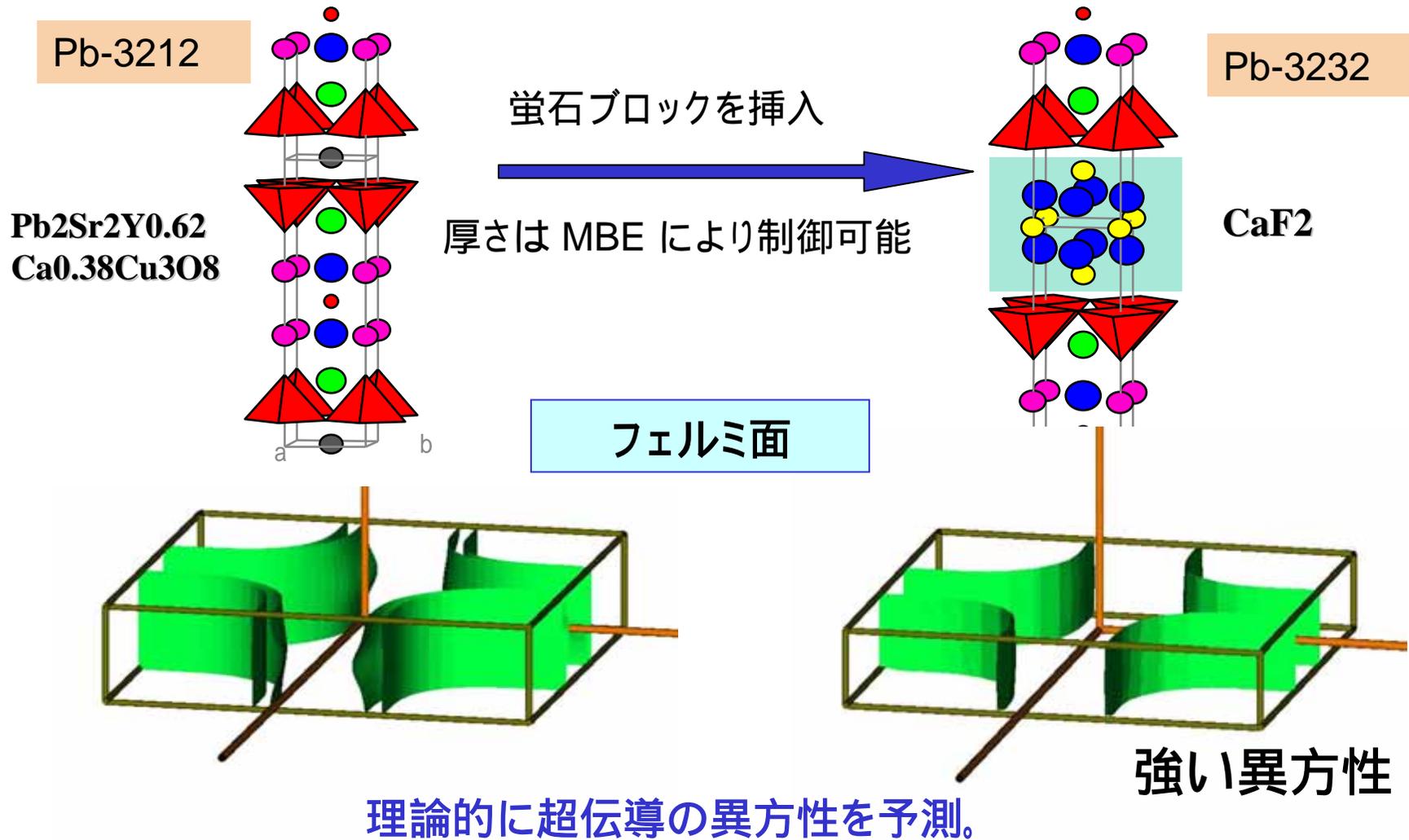


電子相関(電子同士の避け合い)を精密に記述。

一方の電子が(1/4,1/4,1/4)にある時の他の電子の分布 → 2原子程度の距離にわたって他電子が排除されている。



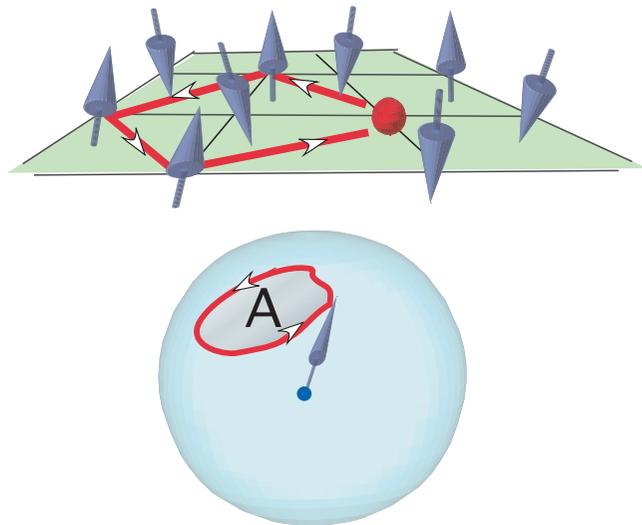
高温超伝導体Pb-32n2の電子構造： 蛍石ブロックの効果 (株東芝との共同研究)



強相関モデリング

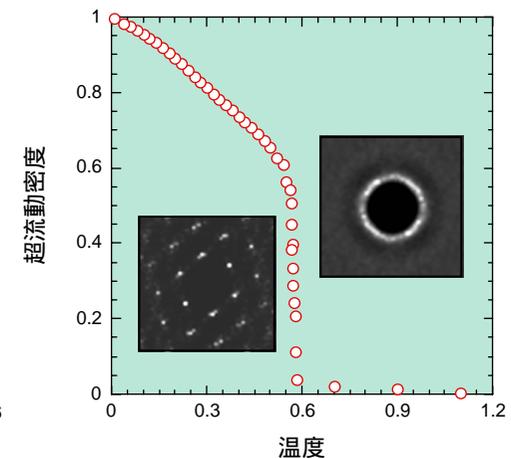
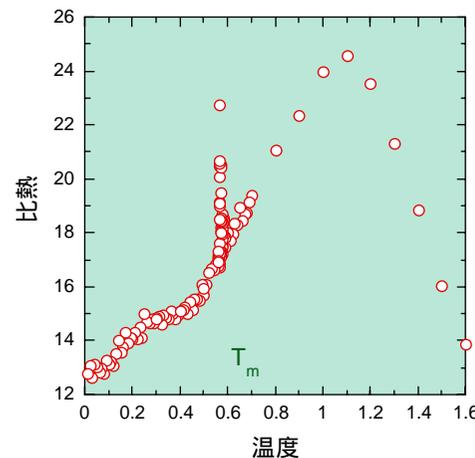
超伝導現象や磁気現象などの協力現象の理論解明、ナノ構造物の新奇現象探索。物理現象のモデリングと強結合的計算手法が特徴。

スピン・パイエルス系からの超伝導



電荷密度及びスピン自由度を記述する量子力学的位相間干渉の結果として高温超伝導現象を捉える定式化により、重要な示唆。

高温超伝導磁束量子系



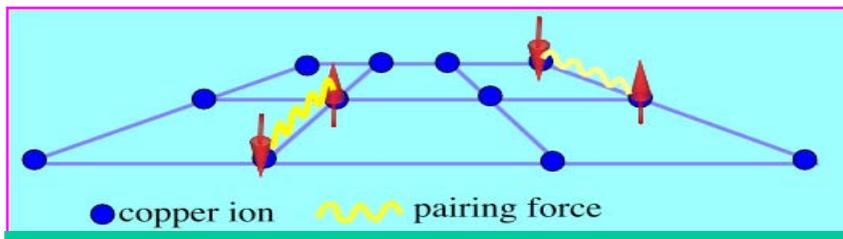
超伝導秩序変数の位相因子に着目し、磁場効果をゲージ場による位相のフラストレーションとしてモデル化。大規模MCシミュレーションにより、熱ゆらぎの効果を十分な形で扱い、**高温超伝導磁束格子融解相転移** (一次相転移) を世界に先駆けて数値的に実証。

新規材料における超伝導現象の理論解明

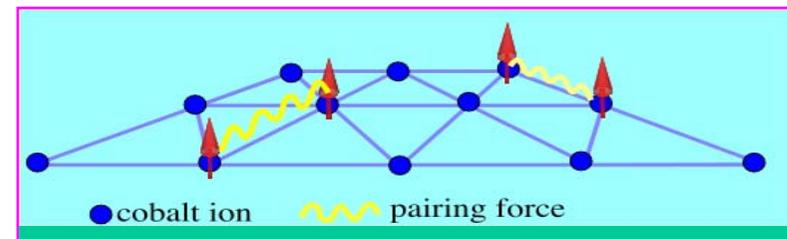
世界初の層状三角格子の超伝導物質 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$

NIMSで発見(2003年Nature)

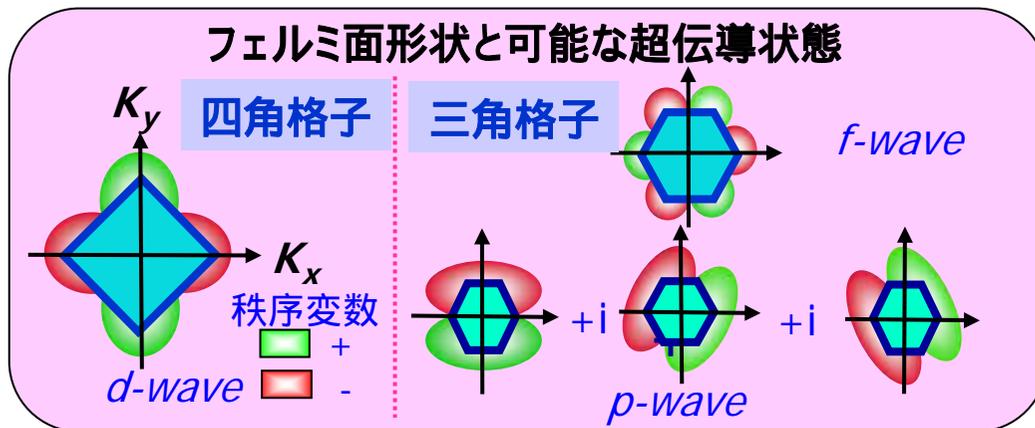
強相関効果とフェルミ面形状に基づき超伝導発現メカニズムを理論的に解明



銅酸化物(層状四角格子)の超伝導状態
スピン非分極型超伝導



新規材料の超伝導状態
スピン分極型超伝導



【特徴】
超伝導状態を構成する
電子対がスピン分極

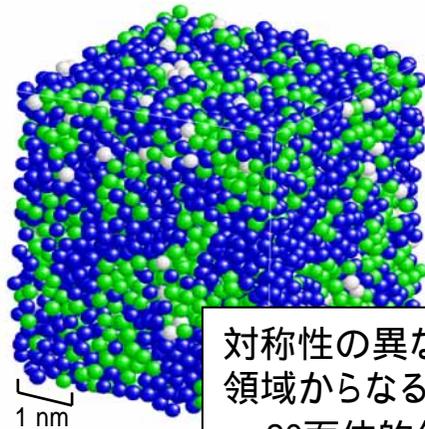
超伝導体の新規スピン輸送への応用の可能性も。

Physical Review Letters ,
in press

粒子・熱力学モデリング

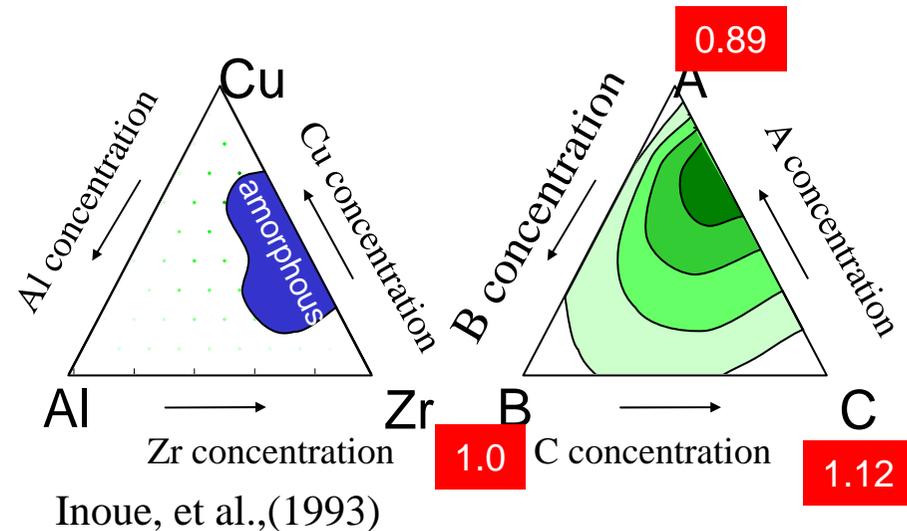
相変態、析出等の機構解明と、材料のナノ構造制御
へ向けた組織予測手法の確立。

分子動力学法によるアモルファス合金の構造と拡散機構の解析



1 nm

対称性の異なる三つの領域からなるナノ構造
・20面体的領域(青)
・結晶的領域(緑)
・乱れた領域(白)



Ti-50at.%Al 非晶質合金のナノ構造

ガラス形成能の予測

アモルファス合金のナノ構造と拡散機構を解明。アモルファス合金の熱処理過程を経て形成するナノ結晶組織の制御への応用に期待。

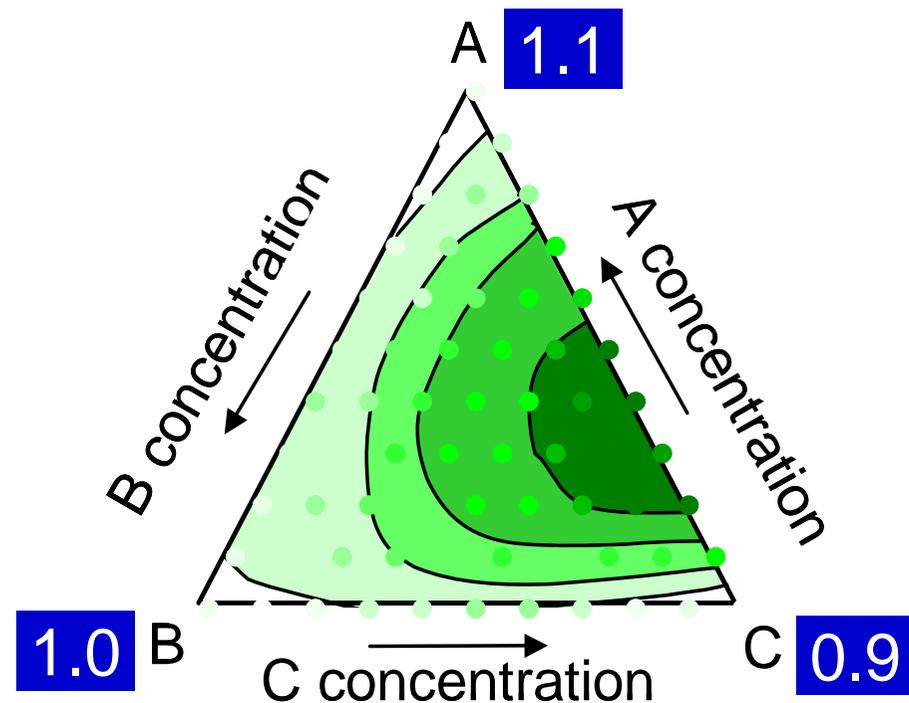
NIMS-PJ研究:「ナノ組織制御」,ナノ組織解析Gr (APFIM, TEM)、超鉄鋼C

ガラス形成能の予測

科研費特定領域「金属ガラスの材料科学」(03-07)

粒子・統計熱力学

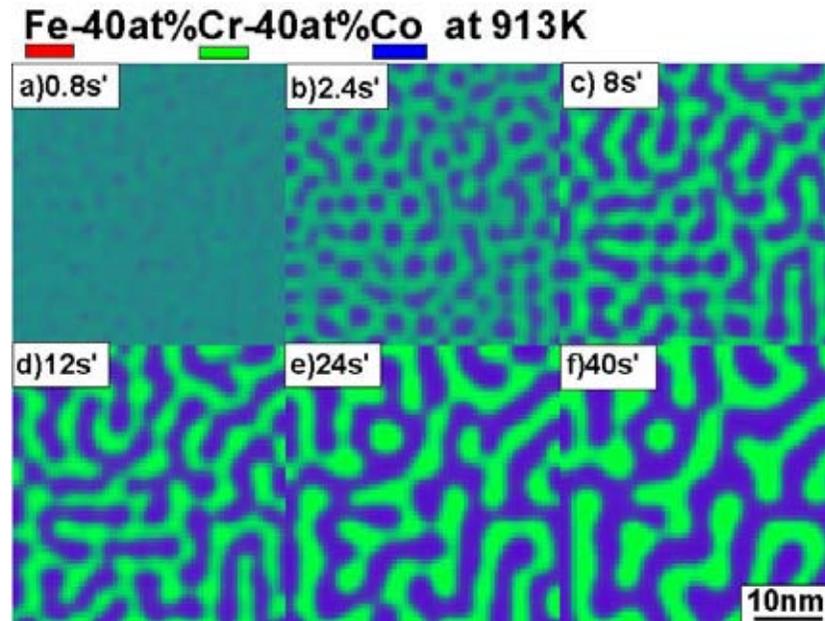
ガラス形成能の高い合金系系では、過冷却液相での**原子充填率**が高く、そのために拡散能の低下と緩和時間の増大がもたらされていることを明らかにし、**過冷却液相の充填率**を指標とすることにより、従来**MDシミュレーション**では困難であった合金のガラス形成能の予測を可能にした。



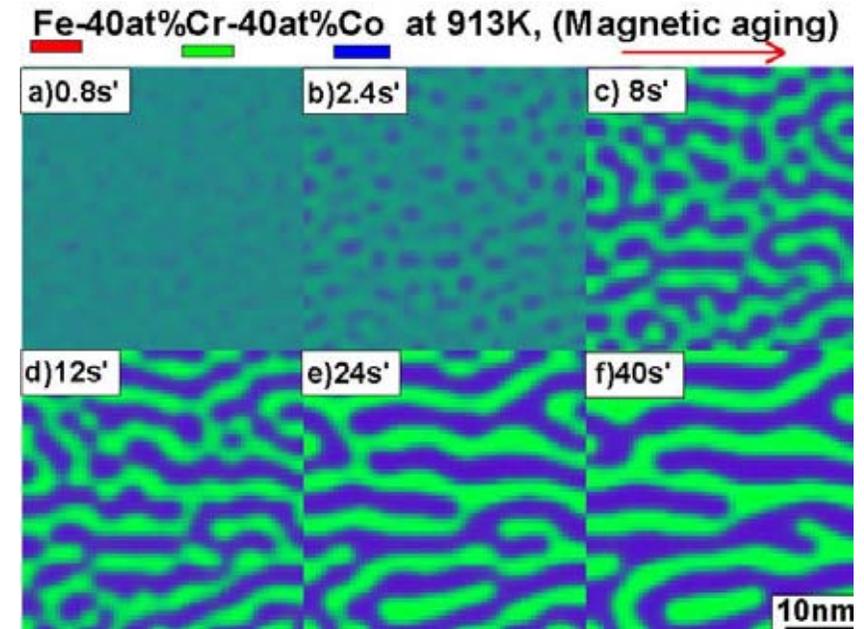
原子サイズ比1.1:1:0.9の三元合金系におけるガラス形成能のMDによる予測

Phase-field 法による組織形成過程のシミュレーション

—材料設計のツール開発—



Fe-Cr-Co磁性材料のスピンodal分解による組織形成過程のPhase-field法による予測。

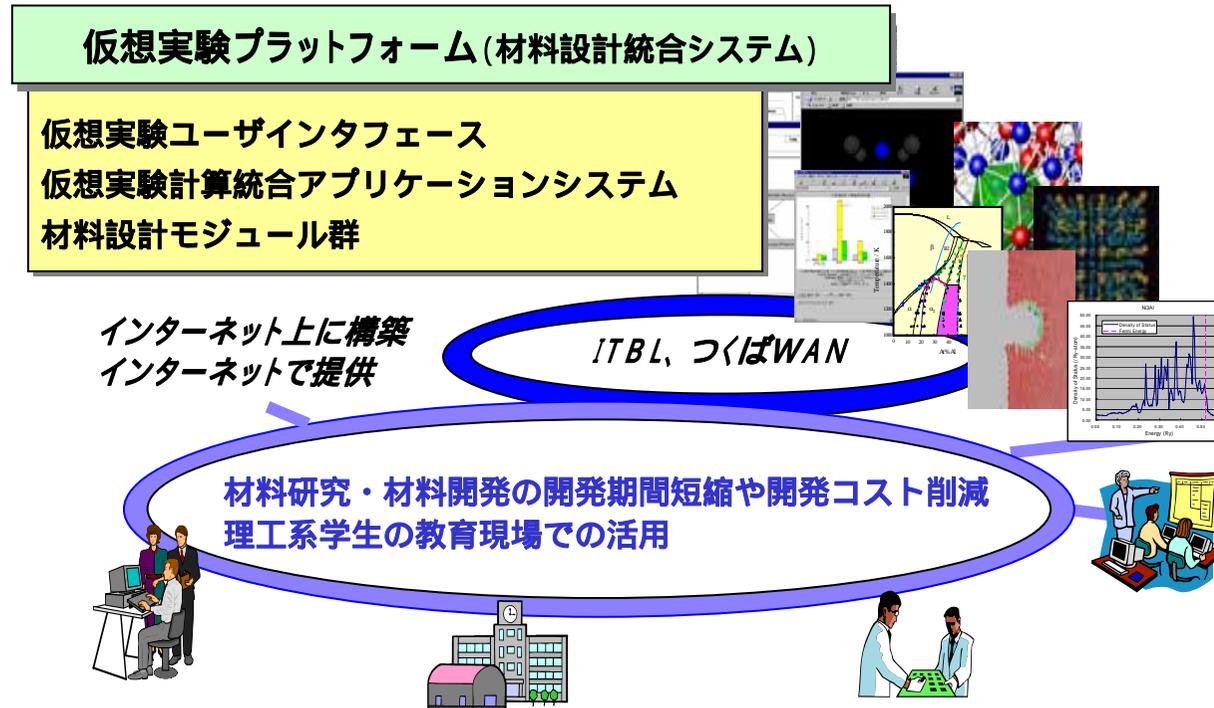


外部磁場の影響を予測。組織制御への有効性を示唆。

Phase-field法による磁性材料の組織予測を実現。開発中の特性予測手法と組み合わせ、**材料開発の標準ツール開発**を目指します。

仮想実験技術を活用した 材料設計統合システムの開発

ITBL
(IT-Based
Laboratory) PJ,
(JARI, NAL,
NIED, NIMS,
RIKEN, JST):
e-Japan 計画

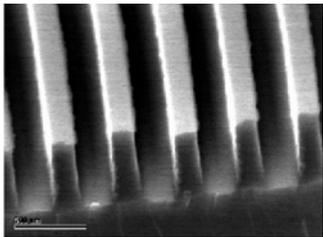


インターネット上に計算機資源、ソフトウェア資源の共有環境を創出するITBLを用いて、
広い範囲のユーザが利用可能な**仮想実験プラットフォーム**の構築を目指しています。

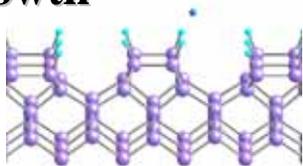
プロトタイプを公開: <http://matex.nims.go.jp/>

次世代基盤技術となる実用ソフトウェアの開発
 ナノ構造の形成・構造・物性・機能の高精度な解析・予測

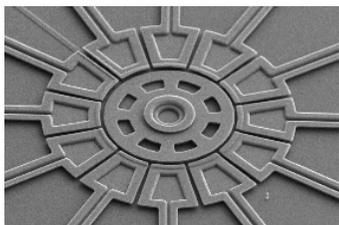
For nano-fabrication



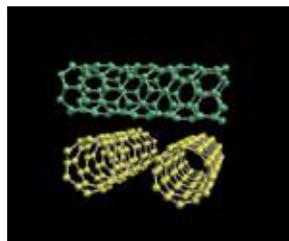
Nano-growth



For MEMS



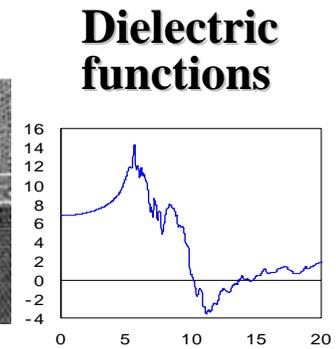
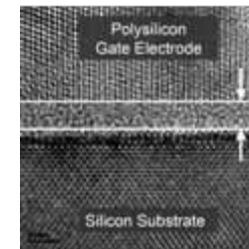
Nano-contact



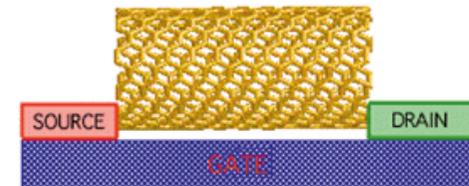
CHASE-3PT

Basic	Exp. analysis
PHASE	STM
ABCAP	XPS
CIAO	
Large-scale	Properties
Hybrid	Phonon
OrderN	Epsilon
	Trans

For Gate dielectrics



For quantum transport



ソフト公開:
<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/theme/nanoscal/>

将来(2010年前後)のシミュレーションの方向性

第一原理計算の大規模化・高精度化

- ・大規模化: 第一原理オーダーN法
大域的構造の最適化(数10万原子以上)
長時間(nano second以上)MD計算
自由エネルギー(有限温度)
反応経路の探索
- ・電子相関: beyond LDA、QMC (強相関デバイス)
- ・励起状態: TDDFT (電子励起反応、光触媒、光合成)

マルチスケール・マルチフィジクス

- ・階層間の統合 (材料の組織・特性予測、生体機能)
- ・機能解析の複合

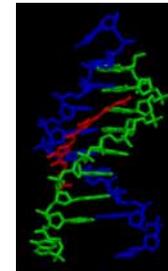
構造・物性の解析 => 物性・機能の設計

単一構造 => 複合構造・階層構造

結晶
ナノ構造
生体高分子

ナノ構造複合体
生体構造
デバイス素子

生体機能



触媒機能



2. 将来想定される研究目標について(1)

研究分野	アプリケーション	概要	目的	期待されるブレークスルー	波及効果	必要な実行性能
物質・材料	触媒設計シミュレーション	密度汎関数法に基づいたナノスケールの触媒(数万原子系)の構造とその触媒反応の活性化エネルギー等を計算で求める。	環境問題等を解決する触媒反応の探索、実現	計算科学的手法による 触媒設計	新産業創成、環境問題の解決	数10PFLOPS級
物質・材料 ライフサイエンス	生体反応シミュレーション(創薬設計)	密度汎関数法に基づく生体反応のシミュレーション、理論解析。	密度汎関数法に基づく生体反応のシミュレーション、理論解析。計算科学的手法による生体反応の解明、応用。	特定の生体反応を理解することによる 創薬設計	我が国医薬品業界の国際競争力がトップクラスになる。	数 ~ 数 10PFLOPS級
物質・材料	光励起反応シミュレーション	時間依存密度汎関数法に基づき、光励起状態における電子・原子のダイナミクスをシミュレートする。	光励起反応のフェムト秒スケールでのメカニズム解明	光スイッチなどの 光デバイス の高性能化に向けた理論の提供	ピコ秒～フェムト秒スケールで動作する超高速デバイスの開発	PFLOPS級
物質・材料	強相関電子系バーチャル物質設計シミュレーション	LDAを超える電子相関を取り入れた第一原理電子状態計算を用い、100程度の原子数の計算を行う。	実験不要の計算機内でのパラメタ無し完全自動物質設計シミュレーション	全く新しい 強相関電子デバイス設計	新デバイス創成	PFLOPS

将来想定される研究目標について(2)

研究分野	アプリケーション	概要	目的	期待されるブレークスルー	波及効果	必要な実行性能
物質・材料	酸化還元反応シミュレーション	グランドカノニカル第一原理分子動力学法を用いて、溶液中の電子移動反応プロセスをシミュレートする。	溶媒緩和を考慮した電子移動反応プロセスの微視的メカニズムの理解	計算機シミュレーションによる酸化還元反応コントロールの提案	生体化学、 燃料電池 、腐食、大気化学の様々な問題の解決への寄与	PFLOPS級
ライフサイエンス	タンパク質設計シミュレーション	タンパク質の高次構造を再現するモデルを設計する。	タンパク質の1次元構造から高次構造を予測し性質を予言	タンパク質が構造を読む対象から構造を作る対象に変わる。	創薬、難病治療への応用	PFLOPS級
物質・材料	MD, Phase-field, FEMの結合		計算科学手法による効率的材料開発の実現		トップクラスの材料産業競争力の維持と更なる向上	Pflops級(大規模MD計算が必要)

3. 将来(2010年前後)のスーパーコンピュータシステムについて

ハードウェア要件

実行性能が現在の地球シミュレータクラスの100～1000倍程度
(=少なくとも理論性能が、4～40 PFLOPS)

ソフトウェア要件

研究者開発ソフトが主体 => 計算機環境の利便性が重要
分散メモリ並列化を自動的に行い、並列化ソースを生成できるコンパイラ
任意のデータ列を扱える、柔軟な入力形式に対応した可視化ソフトウェア

ネットワーク要件等

超並列計算でもcpu間通信がボトルネックにならない高速ネットワーク
cpuと同程度 / それ以上の高速化

システム構築にむけての課題

超並列計算を効率的かつ容易に行えるアーキテクチャの設計
cpuとネットワークのバランスのとれた高速化
計算資源を効率的に配分するスケジューラ的设计