

5. 課題の達成状況等 (5)研究開発成果

1. ソフト研究開発・アプリ実証研究

↓課題グループ	次世代ナノ統合ソフトウェア		アプリ実証研究	
	中核アプリ	付加機能ソフト	通算	H23年度(内数)
(1)次世代ナノ情報機能・材料	3本	20本	10件	5件
(2)次世代ナノ生体物質	2本 ^(*1)	6本 ^(*2)	8件	7件
(3)次世代エネルギー	2本 ^(*1)	13本 ^(*2)	9件	4件
	連携ツール			
(4)課題共通・統括管理	2本			
合計	46本		27件	16件

*1: 1本は、次世代ナノ生体物質と次世代エネルギーの共同開発。

*2: 1本は、次世代ナノ生体物質と次世代エネルギーとの間で共通。

2. 中核アプリHP-RSDFTについて

実空間第一原理ナノ物質シミュレータ(HP-RSDFT)は、大規模並列化に適した実空間差分法と高速化アルゴリズムを用いることにより、オーダーN法等の近似を用いずに、世界にも類のない10,000原子を超える系の第一原理電子状態計算を実現した(H24年度ゴードンベル受賞)。

3. 連続研究会について

解決を迫られている課題を抽出するために、実験研究者、企業研究者との間で、延べ21回に及ぶ連続研究会を開催し、アプリ実証研究、共同研究に発展させた。

事業完了後の展開

利用場所		利用状況	備考
HPCI戦略分野2		46本中33本	必要な研究開発も継続
京 戦略 利用課題	優先課題	2 課題	
	重点課題	全 7 課題	
京 一般 利用課題	アカデミック	5 課題	
	産業利用	4 課題	
京を除くHPCI利用課題		7 課題	
分子研、東大物性研、東北大金研		必要に応じて利用予定	
計算科学振興財団		産業利用向けに、当初4本をインストール予定	

「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」 事後評価報告

2012年11月29日

平田 文男
(自然科学研究機構 分子科学研究所)

2. 課題の概要

背景: 科学技術基本計画における重点推進分野で、かつ、計算科学技術の成果の幅広い活用が期待できるナノテクノロジー分野を対象としてグランドチャレンジ・アプリケーションの開発を行う。また、具体的な研究開発課題は、分野別推進戦略において戦略重点科学技術として位置づけられている。なお、研究開発拠点に産学連携体制を構築し、研究成果の産業界への展開を図っていく。

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・方法論を確立することで、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、産業力の強化に繋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、また動的な振るまいをシミュレートできる方法論を確立する。

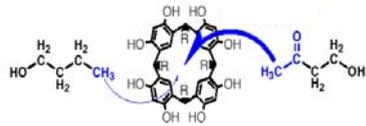
(3) 次世代エネルギー

高効率の触媒・酵素の設計ができる方法論を確立する。

何故、ナノサイエンスが挑戦的か？

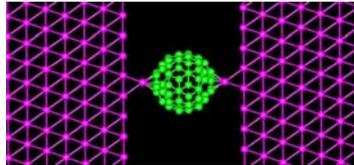
ミクロ
($10^{-11} \sim 10^{-8}$ M)

電子、原子、分子



ナノ
($10^{-9} \sim 10^{-6}$ M)

巨大分子
分子集合体



マクロ
($10^{-6} \sim$)

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。⇒ マルチスケール・マルチフィジックス

アニメーションやSFでごまかしてはいけない！！

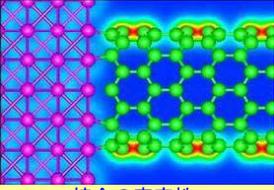
3

3. 研究開発目標

次世代ナノ情報機能・材料(例:ナノ電子デバイス)

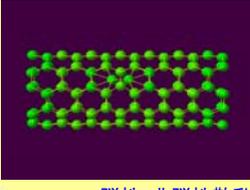
ポストシリコンデバイス実現のための複合的ナノ電子デバイスシミュレーション
(個々の素子の機能探索からデバイスとしての機能デザインへ)

電極と量子細線の接合



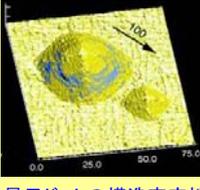
接合の安定性
接合抵抗

量子細線



弾性・非弾性散乱
電流誘起構造変化

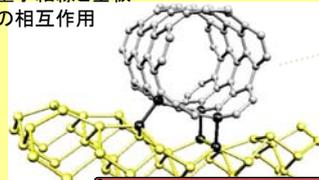
量子ドット

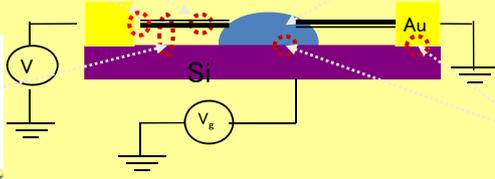


量子ドットの構造安定性
電子間相互作用

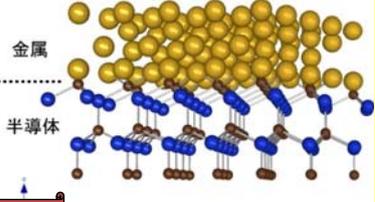
複合系としての
デバイス機能の
シミュレーション
には、部品間の
接合の解析が
重要な課題。
と基板の界面

量子細線と基板
の相互作用





金属
半導体



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**200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)

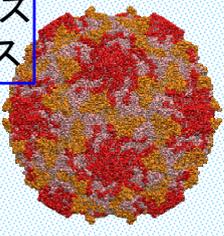
期待される具体的アウトカム

デバイスの超微細化の実現とそれによる**高速応答と高機能**、接合抵抗の低下と弾道的伝導の利用による**省エネルギー**、軽元素利用による**環境負荷の低減**により、イノベーションを起こす。

次世代ナノ生体物質(例:ウイルス)

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

小児麻痺ウイルス
リンゴ病ウイルス



小児麻痺ウイルスのカプシド

1,000万原子系1マイクロ秒の分子動力学計算

1000万原子系の分子動力学計算
セル多極子展開法による長距離相互作用の評価
安定構造、カプシドタンパク質間の接合構造と熱運動、
熱安定性、構造のpH依存性、化学物質との相互作用、
環境依存性、脂質膜、タンパク質との相互作用などをシミュレーション

現状

1マイクロ秒に**500年**:
解析不可能
(実効性能で0.5テラフロップス)

↓

次世代スパコン

自由エネルギーレベルでの長時間
ダイナミクスの解析を実現
1マイクロ秒に**3ヶ月**
(実効性能で1ペタフロップス)

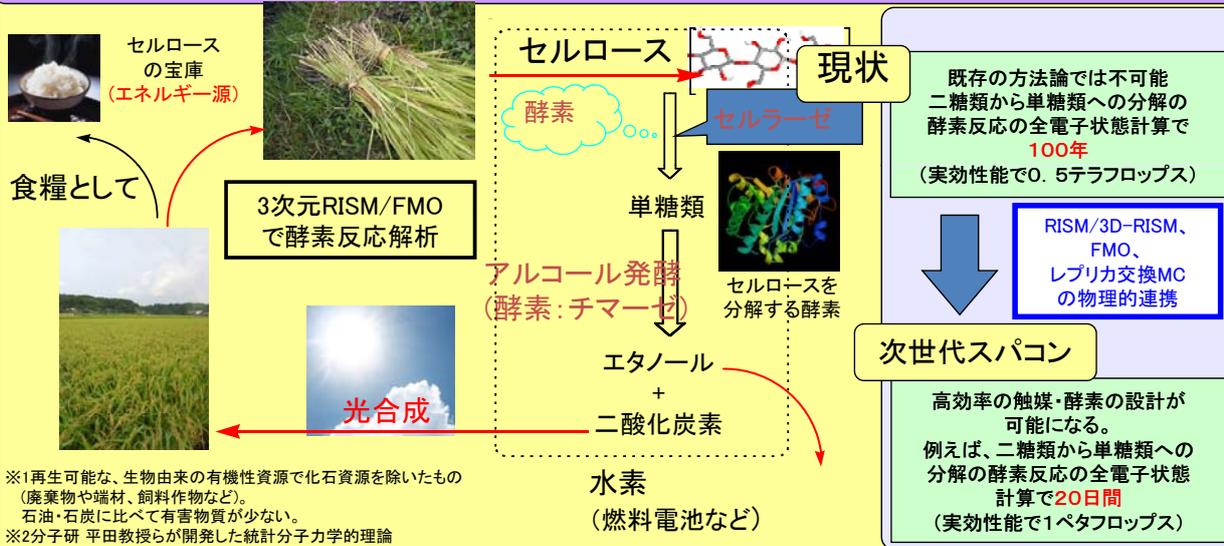
・自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化、また動的な振るまいをシミュレートできる方法論の開発と、10ペタフロップス級の高性能計算機を用いた大規模シミュレーションにより、水中のウイルス構造やその動作を解析、ウイルスの感染機構や免疫機構を解明

期待される具体的アウトカム

未克服のウイルスに対する**予防法と治療法の開発に寄与が可能となり**、国民の健康維持分野でイノベーションを起こす。

次世代エネルギー(例: バイオエタノール)

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

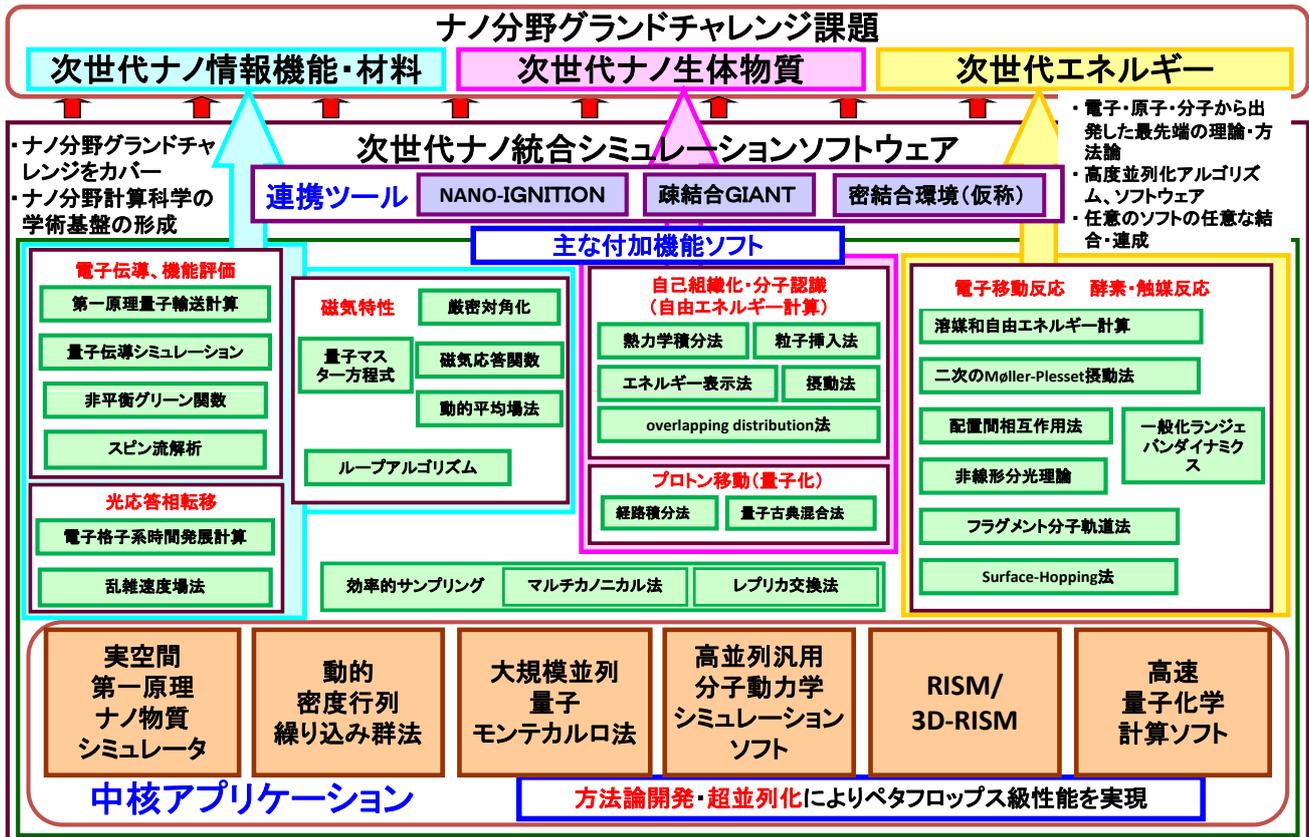


従来、全く不可能だった酵素反応解析が3次元RISM-SCFの開発で実現可能(10ペタFLOPS級の計算性能前提)

期待される具体的アウトカム

- 高性能触媒や酵素の開発により、バイオマス-化学エネルギーの転換技術が確立し、コスト性能比が優れかつ低公害を実現し、次世代エネルギーの開発でイノベーションを起こす。

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの構成



中核アプリケーションの概要

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 HP-RSDFT	押山 淳 (東大院工)	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。
大規模並列量子 モンテカルロ法 ALPS	遠山 貴巳 (京大基研)	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。
動的密度行列 繰り込み群法 DDMRG	藤堂 眞治 (東大物性研)	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。
高並列汎用 分子動力学 シミュレーションソフト MODYLAS	岡崎 進 (名大院工/ 分子研)	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。
高速量子化学 計算ソフト MP2/FMO	永瀬 茂 (分子研) 北浦 和夫 (産総研/神戸 大院シス情報)	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。
液体の 統計力学理論計算 RISM/3D-RISM	平田 文男 (分子研)	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。

4. 研究開発体制

「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

(1) 次世代ナノ情報機能・材料に関する研究開発

東大物性研 教授 高山 一 (H18)
東大物性研 教授 常次 宏一 (H19-H20)
東大院理/物性研 教授 常行 真司 (H21-H23)

①次世代ナノ複合材料に関する研究開発

産総研 研究顧問 寺倉 清之 (H18-H19)
産総研 グループ長 石橋 章司 (H20)
東大院理 教授 常行 真司 (H21-H23)

②次世代ナノ電子材料に関する研究開発

東北大金研 教授 前川 禎通 (H18-H21)
京大基研 教授 遠山 貴巳 (H22-H23)

③次世代ナノ磁性材料に関する研究開発

東大物性研 教授 高山 一 (H18)
東大物性研 教授 常次 宏一 (H19-H20)
東大物性研 教授 川島 直輝 (H21-H23)

(2) 次世代ナノ生体物質に関する研究開発

分子研 教授 岡崎 進 (H18-H19)
分子研/名大院工 教授 岡崎 進 (H20-H23)

(3) 次世代エネルギーに関する研究開発

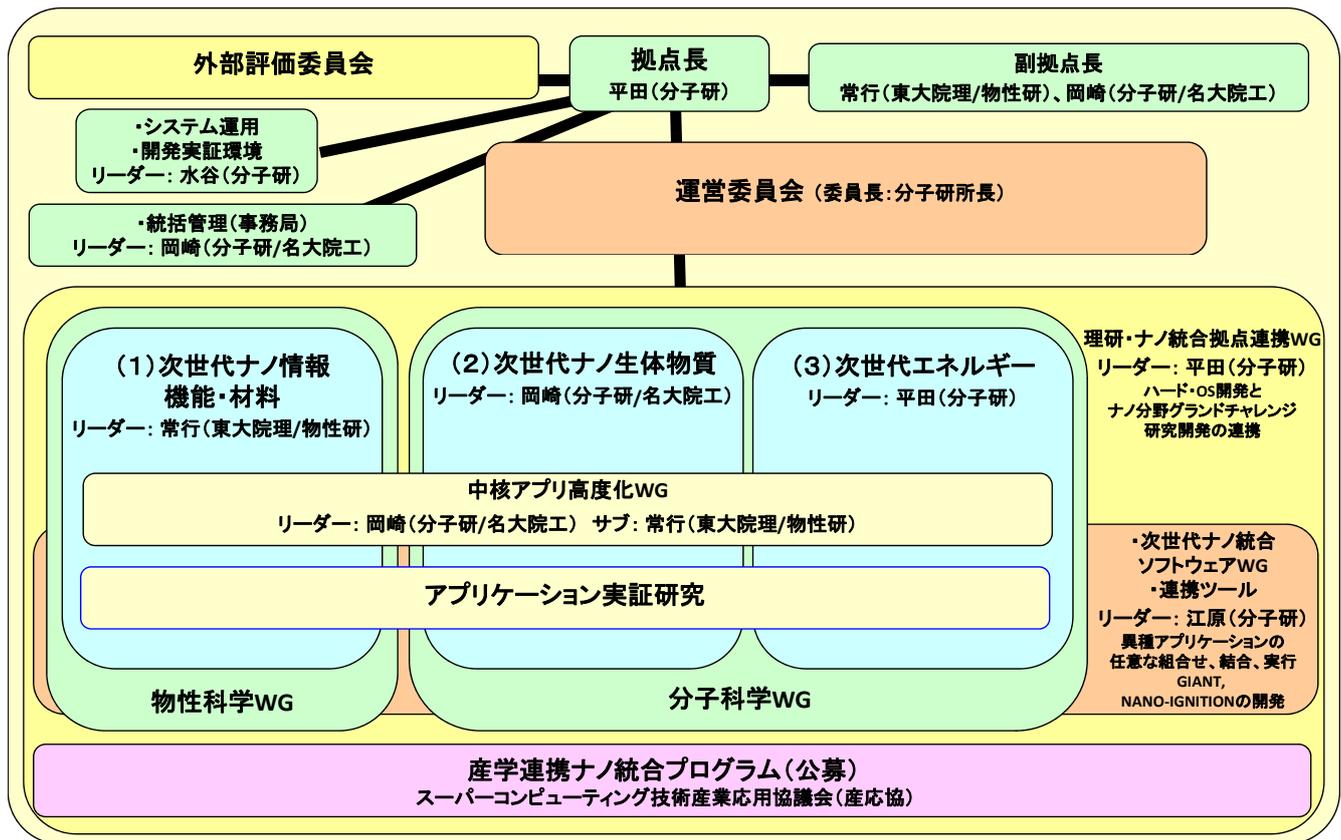
分子研 教授 平田 文男 (H18-H23)

(4) 課題共通・統括管理

分子研 教授 平田 文男 (H18-H23)
連携ツール開発；名大院工参加 (H20-H23)

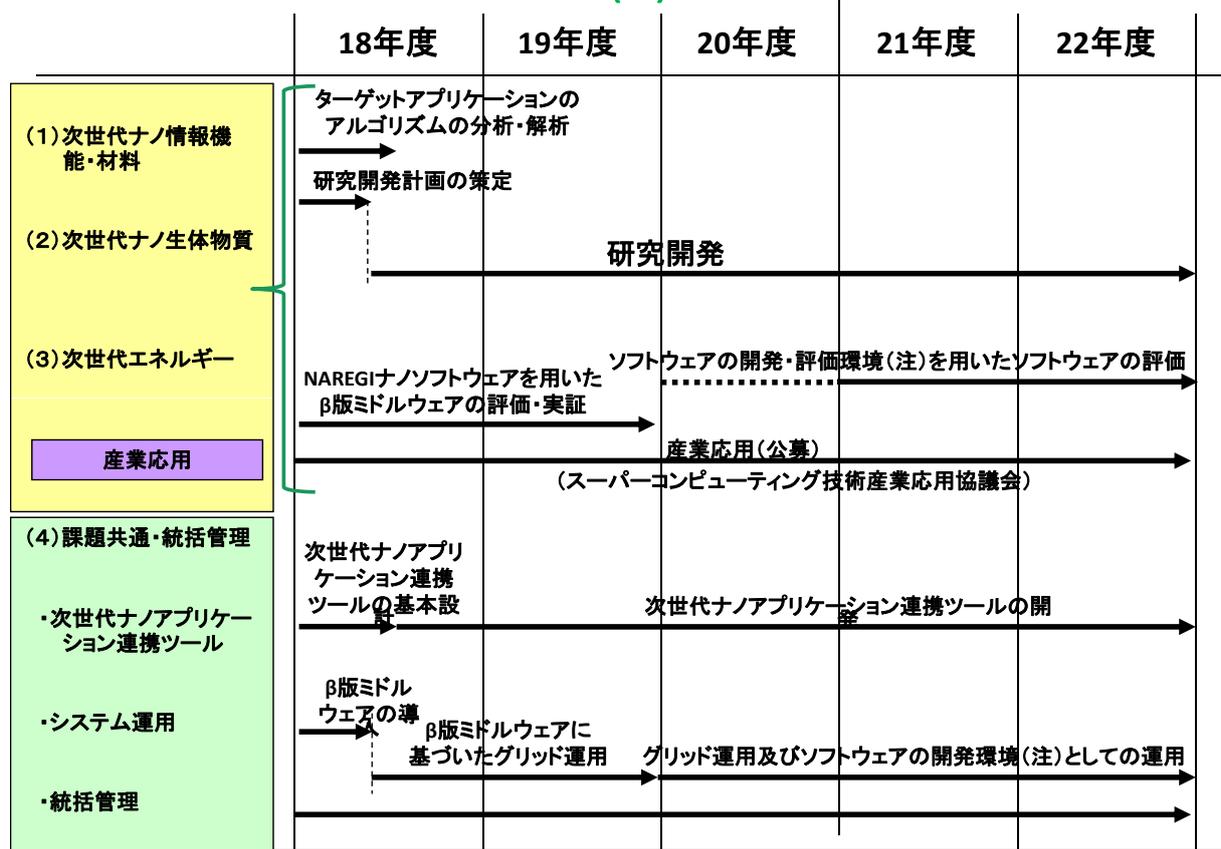
注. (H18-H23)等は担当年度を示す。所属・職名は当時のもの

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体制



11

5. 課題の達成状況等 (1)研究開発計画(当初)



5. 課題の達成状況等 (2)研究開発実績

	18年度	19年度	20年度	21年度	22年度	23年度①	24年度
スパコン開発日程	概念設計		詳細設計		試作・評価・製造		性能チューニング
(1)次世代ナノ情報機能・材料	ターゲットアプリケーションのアルゴリズムの分析・解析・チューニング		研究開発		一部稼働 4月		共用開始 9月
(2)次世代ナノ生体物質	研究開発計画の策定		研究開発		ソフト公開★		事後評価
(3)次世代エネルギー			中核アプリの高度化②		実機によるソフトウェアの実証		
産業応用			アプリ実証研究③				
(4)課題共通・統括管理	次世代ナノアプリケーション連携ツールの基本設計		開発				実機による連携ツールの実証
・次世代ナノアプリケーション連携ツール	β版モデルウェアの導入		ソフトウェア開発環境				
・システム運用④	β版モデルウェアに基づいたグリッド運用						
・ソフト管理運用					統合ソフト管理運用⑤		
・統括管理							
経費	4.96億円	6.51億円	6.13億円	4.14億円	3.70億円	2.88億円	

13

5. 課題の達成状況等 (3)目標達成状況

研究開発項目	達成状況
1. 次世代ナノ情報機能・材料	<p>当初の目標を達成した。</p> <p>中核アプリ:「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ(HP-RSDFT)」、「動的密度行列繰り込み群法(DDMRG)」、「大規模並列量子モンテカルロ法(ALPS/looper)」、付加機能ソフト:20本</p> <p>HP-RSDFTは2011年11月米国で開催されたハイ・パフォーマンス・コンピューティング(高性能計算技術)に関する国際会議SC2011において、最高の荣誉であるゴードン・ベル賞最高性能賞を受賞した。</p>
2. 次世代ナノ生体物質	<p>当初の目標を達成した。</p> <p>中核アプリ:「液体の統計力学理論計算RISM/3D-RISM」、「高速量子化学計算ソフト(FMO/MP2)」(次世代エネルギーとの共同開発)、付加機能ソフト:13本(1本、次世代エネルギーと共通)</p>
3. 次世代エネルギー	<p>当初の目標を達成した。</p> <p>中核アプリ:「液体の統計力学理論計算RISM/3D-RISM」、「高速量子化学計算ソフト(FMO/MP2)」(次世代ナノ生体物質との共同開発)、付加機能ソフト:13本(1本、次世代生体物質と共通)</p>
4. 課題共通・統括管理	<p>当初の目標を達成した。連携ツール(2本):GIANT及びNANO-IGNITIONを公開した。次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用(平成21年度から)については、公開のためのポータルサイトPALを開発し、管理規約、公開用ライセンスのひな型を用意し、ナノ統合ソフトの公開を実現した。</p>

14

5. 課題の達成状況等 (4)中間評価指摘事項への対応

中間評価指摘事項	対応
1. 開発された統合ソフトで可能になるグランドチャレンジ課題の明確化	<ul style="list-style-type: none"> ・今日的な課題への対応:分子素子、燃料電池、元素戦略など具体的な課題設定を行った。 ・具体的な例として、複合的ナノ電子デバイスシミュレーション、ウイルス全原子シミュレーション、酵素まるごと解析をプロジェクト紹介パンフレットにも記載した。
2. 統合ソフト開発の一層の推進	<ul style="list-style-type: none"> ・中核アプリについては高度化WGを設置し、理研、筑波大学及び富士通(業務委託)の計算機科学の専門家と共同で高度化を推進した。 ・京の試験利用開始前においても、10000コア並列の実行環境を利用して超並列化の準備を行った。
3. 統合ソフトの将来的な運用体制の整備	<ul style="list-style-type: none"> ・公開する仕組みとしてポータル(PAL)を開発整備し、標準的なライセンス契約ひな型も整備し、公開した。 ・現状、戦略機関における戦略課題研究に活用されている。 ・民間企業への利用も図るため、計算科学振興財団(FOCUS)とも契約を締結した(平成24年度)。
4. 実験研究者、企業研究者との連携	<ul style="list-style-type: none"> ・統合ソフト講習会・連続研究会を平成20年度後半より順次開催した。特に連続研究会は、通算21回開催し、実験研究者、企業研究者との連携が実現した。 ・統合ソフトの実証研究として、アプリケーション実証研究を、平成20年度から開始し、27件の実証研究を行った。 ・企業での普及・利用を図るためナノ統合産学連携プログラムを推進し、通算21社27件の研究が行われた。
5. 人材育成の推進	<ul style="list-style-type: none"> ・計算科学と計算機科学(計算機活用の基礎理論)の学際連携と人材育成を中核アプリ高度化WGを通じて推進した。 ・計算科学を自身の研究に活用できる実験研究者の育成を研究会、講習会、統合ソフトの実証を通じて推進した。 ・ポスドク62名は、アカデミックへ就職25名、民間企業へ就職4名、海外へ8名、残りが他予算のポスドク等に異動。
6. 広報活動の強化	<ul style="list-style-type: none"> ・平成20年度、広報要員として民間企業からの出向者2名を採用し、ホームページでの情報提供、パンフレットの作成(和文、英文)、産業界との情報交流を強化した。 ・統合ソフト説明会、ソフト講習会を実施し、国民向けのプロジェクト紹介ビデオを作成し配布した。
7. 開かれた視点に立った取り組み	<ul style="list-style-type: none"> ・平成20年度に、ノーベル賞受賞者2名を含む26名を海外から招聘し、国際シンポジウムを東京で開催し、最新情報と意見を交換した。 ・研究員として、留学生も受入れて研究開発を推進した。 ・英語ホームページも整備した。

15

5. 課題の達成状況等 (5)研究開発成果

1. ソフト研究開発・アプリ実証研究

↓課題グループ	次世代ナノ統合ソフトウェア		アプリ実証研究	
	中核アプリ	付加機能ソフト	通算	H23年度(内数)
(1)次世代ナノ情報機能・材料	3本	20本	10件	5件
(2)次世代ナノ生物物質	2本 ^(*1)	6本 ^(*2)	8件	7件
(3)次世代エネルギー	2本 ^(*1)	13本 ^(*2)	9件	4件
連携ツール				
(4)課題共通・統括管理	2本			
合計	46本		27件	16件

*1: 1本は、次世代ナノ生物物質と次世代エネルギーの共同開発。

*2: 1本は、次世代ナノ生物物質と次世代エネルギーとの間で共通。

2. 中核アプリHP-RSDFTについて

実空間第一原理ナノ物質シミュレータ(HP-RSDFT)は、大規模並列化に適した実空間差分法と高速化アルゴリズムを用いることにより、オーダーN法等の近似を用いずに、世界にも類のない10,000原子を超える系の第一原理電子状態計算を実現した(H24年度ゴードンベル賞受賞)。

3. 連続研究会について

解決を迫られている課題を抽出するために、実験研究者、企業研究者との間で、延べ21回に及ぶ連続研究会を開催し、アプリ実証研究、共同研究に発展させた。

16

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア一覧 (次世代ナノ情報機能・材料)

研究グループ名、種類	No.	プログラム名	開発責任者
(A)次世代ナノ情報機能・材料			
①次世代ナノ複合材料			
中核アプリ	1	実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山 淳
付加機能ソフト	2	QMAS (Quantum MAterials Simulator)	石橋 章司
	3	連続変位クラスター変分計算プログラム	毛利 哲夫
	4	オーダーN 量子伝導プログラム	小林 伸彦
	5	量子モンテカルロ計算(強相関電子系)	那須 奎一郎
	6	ナノ物質および固体表面での光励起キャリアーダイナミクスと高速化学反応	杉野 修
	7	実時間・実空間TDDFTコード	矢花 一浩
	8	OpenMX	尾崎 泰助
	9	TOMBO(全電子混合基底法)	川添 良幸
	10	FMO-LCMO	常行 真司
	11	M2TD	吉本 芳英
②次世代ナノ電子材料			
中核アプリ	12	動的密度行列繰り込み群法	遠山 貴巳
付加機能ソフト	13	電子格子系時間発展計算プログラム	米満 賢治
	14	実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェア	永長 直人
	15	変分モンテカルロ法	小形 正男
	16	磁性半導体中の磁気相関	前川 禎通
	17	不規則系コンダクタンス	井上 順一郎
	18	有限要素法によるスピン蓄積の解析	市村 雅彦
③次世代ナノ磁性材料			
中核アプリ	19	大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂 眞治
付加機能ソフト	20	電子スピン共鳴解析ソフト	宮下 精二
	21	オーダーN遮蔽グリーン関数法コード	赤井 久純
	22	McDMFT	常次 宏一
	23	DSQSS	川島 直輝
			17

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア一覧 (次世代ナノ生体材料、次世代エネルギー、共通)

研究グループ名、種類	No.	プログラム名	開発責任者	
(B)次世代ナノ生体物質				
中核アプリ	24	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	岡崎 進	
付加機能ソフト	25	高速量子化学計算ソフト	北浦 和夫	
	26	REM	岡本 祐幸	
	27	エントロピー力の統計力学理論解析ソフトウェア	木下 正弘	
	28	PIMD	三浦 伸一	
	29	Trajan	斉藤 真司	
	30	ermod	松林 伸幸	
	31	高精度自由エネルギー計算:CPOL	三上 益弘	
	(C)次世代エネルギー			
	中核アプリ	32	高速3D-RISM	平田 文男
付加機能ソフト	25	高速量子化学計算ソフト	永瀬 茂	
	33	DC: 分割統治量子化学計算プログラム	中井 浩巳	
	34	Etrans	藪下 聡	
	35	PIQUANDY	信定 克幸	
	36	多参照電子状態計算法	柳井 毅	
	37	多核金属含有分子用GSOプログラム	奥村 光隆	
	38	3D-RISM/MD	平田 文男	
	39	3D-RISM-SCF	平田 文男	
	30	ermod	松林 伸幸	
	40	Calnos	森田 明弘	
	41	半古典分子動力学プログラム(SCMD)	南部 伸孝	
	42	SO-SC-CI	江原 正博	
	43	MWDYN	関野 秀男	
	44	OpenFMO	青柳 睦	
(D)共通				
連携ツール	45	NANO-IGNITION	水谷 文保	
	46	GIANT	水谷 文保	
			18	

5. 課題の達成状況等 (5)研究開発成果

1) 次世代ナノ情報機能・材料

- ✓ 1~10万原子からなる半導体デバイスの第一原理電子状態計算をめざして、実空間差分法による密度汎関数法プログラムHP-RSDFTの開発、高度化を実施し、55,296ノードを用いて実行性能3.08PFLOPS(理論ピーク性能比44%)の世界最高性能を実現した。**2011年度のGordon Bell Prize(Peak Performance)を受賞した。**
- ✓ 同じく本研究で開発、高度化を行った強相関電子系モデルの光学応答計算を可能にする動的密度行列くりこみ群法プログラムDDMRGは、12288ノードで理論性能比27.09%、量子スピン系のシミュレーション手法であるループアルゴリズムのプログラムALPS/looperは24576ノードで対12288ノード比98.66%の並列性能と整数演算性能0.164PIPS(理論ピーク性能比10.4%)を実現した。
- ✓ スピン軌道相互作用を含む高精度第一原理電子状態計算を実現するQMAS、1000原子程度の高速度第一原理電子状態計算が可能なOpenMXなど、中核アプリを補う特徴的機能を持った付加機能ソフトと合わせ、開発されたソフトは高速デバイスや省エネデバイスなど、これまでにない新しいデバイスや材料の開発、その基礎研究に有用であると期待される。

19



HP-RSDFT

責任者名: 押山淳、岩田潤一(東京大学工学系研究科物理工学専攻)

I H23年度末までの研究開発成果

(1)プログラムの研究開発成果

RSDFTコードは量子力学の第一原理に基づく密度汎関数理論に基づいて、物質の電子状態と安定構造を求めるアプリケーション

コンピュータ・アプローチ: 超並列マルチコアのアーキテクチャに最適なRSDFT(実空間処理密度汎関数法計算)スキームを、コンピュータ・サイエンス分野との共同により、新たなアルゴリズム、新たな数学的手法をコードに実装することにより、高度化・高速化

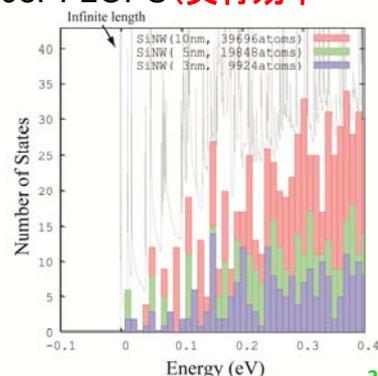
(2)プログラムの性能(京コンピュータ)

✓107,292原子から成るSiナノワイヤの電子状態計算に成功: 55,296 nodes (ピーク性能= 7.07 PFLOPS)を用いて、実効性能3.08PFLOPS(実行効率44%)、SCFループ1回を5456秒で計算

✓10,000原子計算: 768 nodes(全リソースの1%弱)を用いて、およそ24時間で、SCFループが収束し、電子密度・物理量を計算

(3)アプリ実証(サイエンス)成果

Siナノワイヤの電子状態がナノ形状に依存することを解明、有限長チャンネルでは1次元系に特有な特異性が消失することを発見



20

5. 課題の達成状況等 (5)研究開発成果

2) 次世代ナノ生体物質

- ✓ ウイルスの分子科学の展開を目指して、**modylas**ならびに**FMO/MP2**の開発を行い、前者では65,536ノードで目標である理論ピーク性能比10%、1 Pflopsを大幅に上回る41.1%、3.45 Pflopsを達成し、1,000万原子系で1ステップ5 msの全原子MDシミュレーションを実現、後者では24,576ノードを用い、約24,000原子系に対して11分の実用的な計算速度の全電子計算を実現した。
- ✓ また、付加機能ソフトにおいては**REM**(レプリカ交換法)、**ermod**(エネルギー表示分布関数理論)等のソフト開発を行い、ナノ生体物質に対して電子状態から全原子運動に至るまでの自由エネルギーレベルでの計算科学研究を可能とした。
- ✓ これらにより、ウイルスカプシドやタンパク質、細胞膜、界面活性剤、またDDS等の飛躍的な展開が期待される。

21

高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS

岡崎 進 (名大院工)

1. 23年度末までのアプリ開発の成果

完全領域分割化、
ハイブリッド並列、
隣接、近接通信化、
IF文の除去、SIMD命令、FFTの回避、
メモリアクセスの最小化、オンキャッシュ化、ループ長の最適化、負荷アンバランスの解消、通信回数の削減(マルチタイムステップ化)、buffering freeな通信。

周期境界条件下での
1000万原子系、長距離力

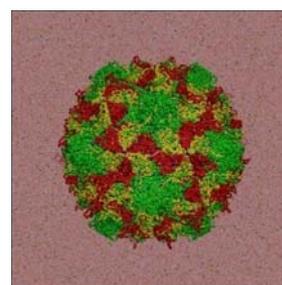
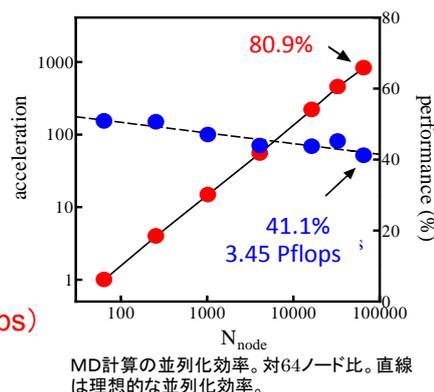
- ・65,536ノードで64ノード比、81%の並列化効率
- ・理論ピーク性能比41.1%、3.45Pflops (目標値: 10%、1Pflops)
- ・1,000万原子系で1ステップ5 msを達成

2. 24年度以降の研究進捗状況

- ・小児マヒウイルスカプシドに対し、全原子シミュレーションを開始。
- ・現在平衡化の途中(右中図参照)。レセプターについても安定構造を生成。ウイルスレセプター間の平均力の予備計算も終了。

3. 目指している研究成果

- ・ウイルスカプシドの構造安定性
カプシドタンパク質間の接合構造と熱ゆらぎ、水の役割、環境依存性、構造とそのゆらぎの持つ生物学的な意味
- ・感染初期過程の分子機構
レセプターとウイルスの特異な相互作用、相互作用の起源、結合時の構造結合を阻害する分子、新しい作用機構を持つ抗ウイルス剤



小児マヒウイルスのMD計算

22

5. 課題の達成状況等 (5)研究開発成果

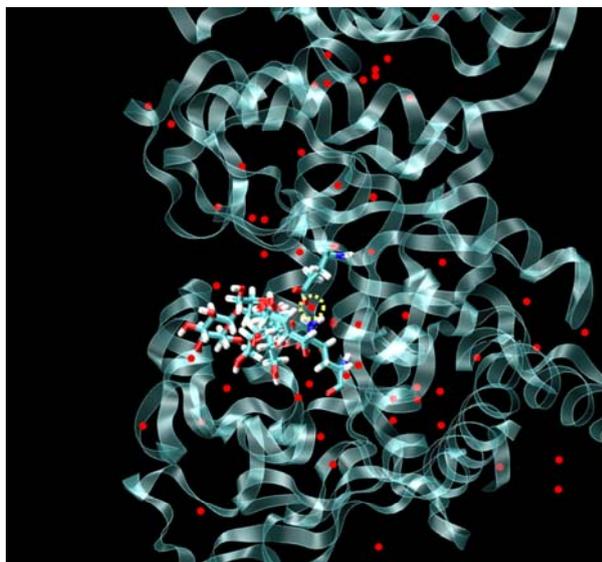
3) 次世代エネルギー

- ✓ 高効率セルロース分解酵素の設計を目指して、3D-RISM法の超高並列化(10000ノード)を実現し、セルロース-酵素複合体中の水分子(加水分解反応の中間体)を同定することに成功。また、3D-RISMとQM/MM法(量子化学)の連成計算、および3D-RISMと分子動力(MD)を結合する新たな付加機能ソフトを開発。
- ✓ 酸化チタンなどの固体表面の電子状態を解析する分割統治量子化学計算プログラムの並列化を行い94パーセント(36->72ノード)の並列化効率を達成。
- ✓ MDと量子化学を組み合わせることで界面和周波発生(SFG)分光を解析する新しい手法を開発。

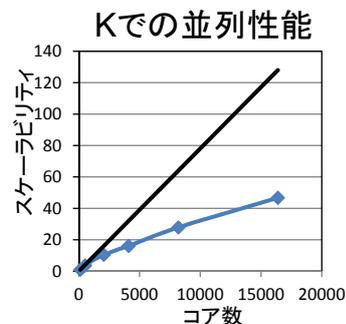
これらは、酵素反応や電極界面での化学反応を追跡する上で、強力な武器となることが期待される。

23

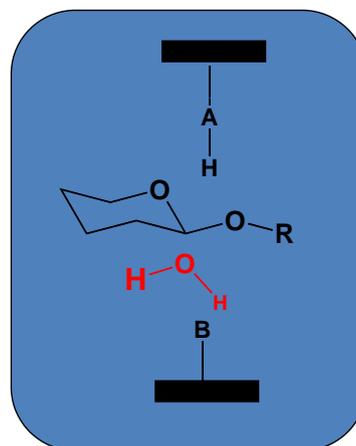
3D-RISM理論を使って酵素による加水分解反応の中間体(酵素-セルロース-水分子)を同定



酵素-セルロース複合体中に結合された水分子



拡大すると



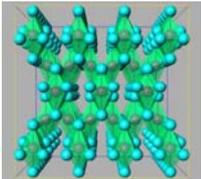
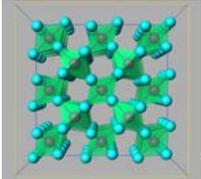
この水分子は反応してすぐ消失するので、X線ではつかまらない。
(ひとつの反応中間体に相当)

24

HSE03汎関数を用いた酸化チタン結晶の 周期境界条件計算 (中井浩巳)

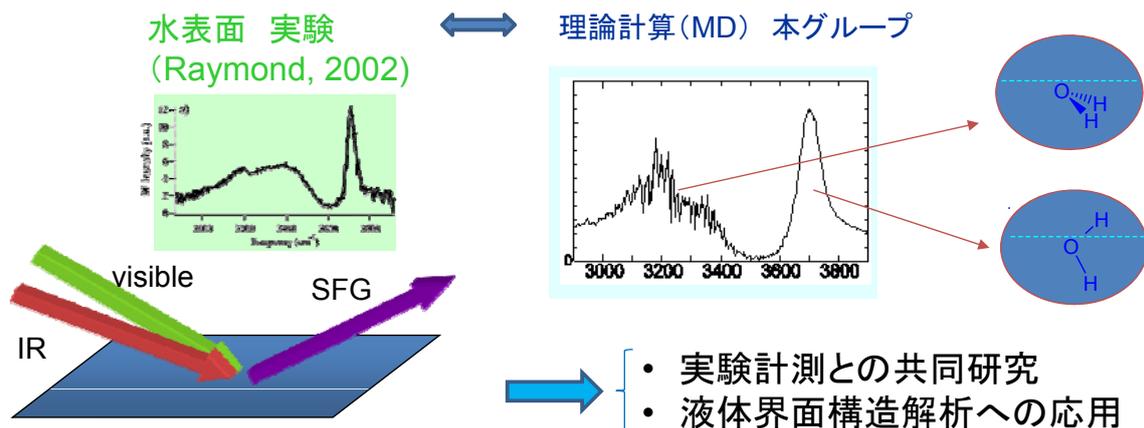
- HSE03: HF交換項に遮蔽クーロンポテンシャルを利用

➡ **高精度なハイブリッド汎関数を用いた
周期境界条件計算を大幅に加速**

System	Method	Cohesive Energy (eV)	Band Gap	
			Direct (eV)	Indirect (eV)
 Anatase	LDA	25.3154 (5.32)	2.3297	1.9955 (-1.20)
	PBE	21.3836 (1.38)	2.4221	2.0944 (-1.11)
	PBE0	19.5431 (-0.46)	4.5976	4.2533 (1.05)
	HSE03	19.6851 (-0.31)	3.8649	3.5132 (0.31)
	Exptl.	20		3.2
 Rutile	LDA	25.3451 (5.35)	1.7204	1.7204 (-1.28)
	PBE	21.3522 (1.35)	1.8082	1.8082 (-1.19)
	PBE0	19.5238 (-0.48)	4.0162	4.0046 (1.00)
	HSE03	19.6727 (-0.33)	3.2511	3.2431 (0.24)
	Exptl.	20		3.0

25

界面和周波発生(SFG)分光の理論計算手法の開発 (東北大院理 森田)



- 水表面の解明 —
- 電解質水溶液界面 —
電気二重層構造の多様な実体
- アルキル鎖界面 —
単分子膜、有機薄膜への応用



連続研究会実績(1/3)

No.	日程	場所	テーマ	担当者
1	2008年11月 21日(金) 13:30~	東京・秋葉原コンベンションセンタ	陽電子を用いた 半導体材料の評価	石橋 章司 (産総研) 上殿 明良 (筑波大)
2	2008年12月 10日(水) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	元素戦略・ナノクラスター (合同開催)	榊 茂好 (京大) 永瀬 茂 (分子研) 信定 克幸 (分子研) 中嶋 隆人 (東大)
3	2008年12月 12日(金) 10:30~	仙台・東北大学金属材料研究所	新しい概念に基づく熱電材料とその物理	小椎八重 航 (理研CMRG) 遠山 貴己 (京大基研) 前川 禎通 (東北大金研)
4	2008年12月 27日(土)・28日(日) 16:00~	熊本・グリーンピア南阿蘇	抗がん剤を使わない癌治療法:ハイブリッドリポソーム	平田 文男 (分子研) 岡崎 進 (名大) 上岡 龍一 (崇城大)
5	2009年1月 6日(火) 13:00~	東京・東京大学本郷キャンパス	ウイルスの分子科学	岡崎 進 (名大) 北尾 彰朗 (東大) 野本 明男 (東大) 有坂 文雄 (東工大)
6	2009年1月 29日(木) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	超分子、分子素子、分子発光・バイオマス (合同開催)	榊 茂好 (京大) 中原 勝 (京大) 永瀬 茂 (分子研) 江原 正博 (分子研)
7	2009年1月 29日(木) 9:00~	東京・東京女子医科大学河田町キャンパス	DDSナノキャリアー (脂質膜、タンパク質複合体、高分子ミセルを中心として)	岡崎 進 (名大) 松林 伸幸 (京大)
8	2009年1月 30日(金) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	分子エレクトロニクス、光エネルギー変換の化学	山下 晃一 (東大) 中井 浩巳 (早大) 中野 雅由 (阪大)

27

連続研究会実績(2/3)

No.	日程	場所	テーマ	担当者
9	2009年2月 10日(火) 13:30~	京都・ホテル法華クラブ京都	膜、ミセル (ソフト複雑系の分子科学)	松林 伸幸 (京大) 岡崎 進 (名大)
10	2009年2月 16(月) 13:00~ 17日(火)	岡崎・自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	タンパク質機能(イオンチャネル)	平田 文男 (分子研) 老木 成稔 (福井大)
11	2009年3月 9日(月) 13:30~	北海道大学・理学部6号館低層棟1階 6-103室	燃料電池 一物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 (豊田中研) 平田 文男 (分子研) 岡崎 進 (名大) 山下 晃一 (東大)
12	2009年3月 13(金) 13:20~ 14日(土)	三重・湯の山「希望荘」2F会議室・福寿草	エタノール製造、 バイオマス(酵素反応)	平田 文男 (分子研) 苅田 修一 (三重大)
13	2009年3月 18日(水) 10:30~	東京・キャンパスイノベーションセンター東京 3F 308教室	TDDFT:光応答計算の基礎、応用と展開	矢花 一浩 (筑波大) 善甫 康成 (住友化学)
14	2009年3月 30日(月)	東京・東京医科歯科大学 共同研究棟2階セミナー室	タンパク質機能(フォールディング)	岡本 祐幸 (名大) 平田 文男 (分子研)

28

連続研究会実績(3/3)

No.	日程	場所	テーマ	担当者
15	2009年 6月8日	山梨大学 甲府キャンパス	燃料電池 No. 2 —物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 (豊田中研) 平田 文男 (分子研) 岡崎 進 (名大) 山下 晃一 (東大)
16	2009年 6月30日	秋葉原コンベンションセンタ	ナノ構造体の電気伝導	小林 伸彦 (筑波大) 広瀬 賢二 (NEC)
17	2009年 11月16日、17日	東京大学 本郷キャンパス 山上会館	燃料電池 No. 3 —物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 (豊田中研) 平田 文男 (分子研) 岡崎 進 (名大) 山下 晃一 (東大)
18	2009年 12月10日、11日	京都大学湯川記念館 パナソニック国際交流ホール	相関電子系における光誘起現象	米満 賢治 (分子研) 岩井 伸一郎 (東北大) 岡本 博 (東大) 遠山 貴己 (京大基研) 石原 純夫 (東北大)
19	2010年 3月2日、3日	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	燃料電池 No. 4 —物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 (豊田中研) 平田 文男 (分子研) 岡崎 進 (名大) 山下 晃一 (東大)
20	2010年 12月2日、3日	福井市地域交流プラザ	イオンチャネル No. 2	平田 文男 (分子研) 吉田 紀生 (分子研) 老木 成稔 (福井大)
21	2011年 12月26日、27日	兵庫県立大学ポートアイランドキャン パス	燃料電池 No.5 —物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 (兵庫県立大) 平田 文男 (分子研) 岡崎 進 (名大) 魚崎 浩平 (物材機構) 山下 晃一 (東大)

29

5. 課題の達成状況等 (5)研究開発成果

4) 課題共通・統括管理

- ✓ 次世代ナノアプリケーション連携ツールとして、連携ツール(NANO-IGINATION、GIANT)を開発し、公開した。
- ✓ システム運用として、グリッドβ版ミドルウェアを導入し、グリッド環境を実現・運用した。
- ✓ **次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用として、ナノ統合ソフト公開のためのポータルPALを開発し、ナノ統合ソフト46本の公開を実現した。**また、京の試験利用開始前、筑波大の協力も得て、10000コア並列の実行環境を構築・運用した。
- ✓ 統括管理として、研究管理、分担調整、知的所有権、公募、情報交換、広報などを行い、プロジェクト紹介ビデオを作成した。

30

5. 課題の達成状況等 (6)独創性・優位性について

[独創性] 我が国から「発信」

- ✓「3D-RISM法」(開発者:平田):溶媒和、創薬、分子認識
- ✓「動的密度行列繰り込み群法(DDMRG)」(開発者:遠山):非線形光学応答
- ✓高速量子化学計算ソフト(FMO/MP2):巨大分子全系量子化学計算
- ✓「レプリカ交換法(REM)」(岡本):蛋白質構造空間探索
- ✓「エネルギー表示法(ermod)」(松林):溶媒和自由エネルギー

[優位性] ペタフロップス級超高並列化を達成

- ✓実空間密度汎関数法(HP-RSDFT)」(押山) (H24年度ゴードン・ベル賞最高性能賞受賞)
- ✓「分子動力学シミュレーション(MODYLAS)」(岡崎)
- ✓大規模並列量子モンテカルロ法(ALPS/looper)

31

6. 研究開発の発表状況(1/2)

＜主として本課題で得られた成果＞	
(1)研究発表件数	
査読付き論文	1,887件
査読なし論文	-
口頭発表	3,536件
(国内)	1,888件
(国際)	1,648件
(2)知的財産権等出願件数(出願中含む)*1	0件
(3)受賞等	82件

*1. 公開のための著作権確認と公開ポリシーの策定を行った(⇒次ページ)。

6. 研究開発の発表(公開)状況(2/2)

公開のための著作権確認と公開ポリシーの策定を行った。

(日本のひな形)

1) 著作権確認について

弁護士に相談して以下のように行う方針を定めた。

①各プログラムについて管理責任者を決め、著作権者全員から管理責任者に公開の方法・条件を委託する。

②各管理責任者から拠点長宛てに、著作権者から委任を受けた旨の報告を貰う。

2) 公開ポリシーについて

— 国家プロジェクトとあり、成果の公開が要請されていること。

— 最先端の研究であり、研究のクレジットを尊重すること。

これらの2点のバランスを取るため、公開の条件については統一せず、各管理責任者が自由に決定することにした。オープンソースなどで公開する場合を除いて、公開のためライセンスのひな型を作成した。

その中で標準的な選択条件として、以下を挙げて、管理責任者が自由に選択できる様式とした。

①事前相談、②引用・謝辞、③論文共著、④使用禁止(悪意利用)

これらについては、[公開用ポータルサイトPAL](#)上で各プログラムについて確認することを可能としている。

33

成果の利用について

利用場所		利用状況	備考
HPCI戦略分野2		46本中33本	必要な研究開発も継続
京 戦略 利用課題	優先課題	2課題	
	重点課題	全7課題	
京 一般 利用課題	アカデミック	5課題	
	産業利用	4課題	
京を除くHPCI利用課題		7課題	
分子研、東大物性研、東北大金研		必要に応じて利用予定	
計算科学振興財団		産業利用向けに、当初4本をインストール予定	

34

ナノ統合ソフト利用・問い合わせ状況 (最近1年間)

	利用中・利用予定 (共同研究も含む)	引き合い(単なる問 い合せを含む)
アカデミック	42	29
産業	17	10
合計	59	39

注. 産業の業界としては、電機、化学、製薬、鉄鋼、自動車、電力。
また、あるソフトでは、上記とは別に、公開サイトでのダウンロードが 2012年2月からで約100回あったが、同じユーザが繰り返しダウンロードしている可能性があるため、上記には含めていない。

35

ナノ統合アプリケーションポータル

<http://pal.ims.ac.jp/>

36

7. 今後の展望と課題

☆3つの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):医療や環境・エネルギーなど、現在、人類が直面している課題。

☆本プロジェクトで開発されたソフトウェア群→HPCI戦略プログラム分野2戦略機関「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)」利活用と継続的な機能強化。

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

- 10,000原子を超える系の第一原理計算を実現することによって、量子干渉効果の顕著なナノ構造デバイスの特性解析や設計支援を可能に(HP-RSDFT)。
 - 強相関電子系の光応答特性を利用した新しい光学デバイスや量子効果を駆使した磁気デバイスの基礎物理を確立(DDMRG, ALPS/loop)。
 - QMASやOpenMXなど中核アプリを補う数多くの付加機能ソフト。
- ⇒高速デバイスや省エネデバイスなど、これまでにない新しいデバイスの開発。
⇒広い分野で電子論に基づいた(無機)材料の設計開発に貢献。

37

7. 今後の展望と課題

(2) 次世代ナノ生体物質

- 1,000万原子を越える大規模系
高並列汎用分子動力学計算ソフトmodylas、
大規模量子化学計算FMO/MP2、
 - 自由エネルギー計算:付加機能ソフトermodやREMなど。
- ⇒ナノ生体物質、分子機能と物質変換、エネルギーなど広い応用分野。
⇒実験研究者との協働を可能に、産業応用にも大きく貢献。

(3) 次世代エネルギー

- 太陽エネルギー固定(太陽光発電、光触媒)、変換(燃料電池、セルロース分解)、貯蔵(二次電池):ミクロからマクロに至る様々な階層の物理。
- 6本の「中核ソフト」およびそれらを「付加機能ソフト」により有機的に結合することにより、これらのプロセスの設計が可能に。
- 例:セルロース分解酵素の知的設計:
 - (1) 酵素-基質(セルロース+水)複合体の形成(分子認識): 3D-RISMとMODYLAS
 - (2) 酵素内の化学反応(電子状態変化): 3D-RISM、量子化学(例えば、分割統治法)、およびMODYLASプログラムを連成。

38

8. 特記事項

(1) 機関を超えた計算科学者と計算機科学者間の連携による
計算アルゴリズムの開発およびプログラムの高度化

- 実空間密度汎関数法 (HP-RSDFT) : 2012年度のゴードン・ベル賞
- 3D-FFTの一万ノードの超高並列化を達成

(2) 実験研究者および企業研究者を含む「実証研究」および「
連続研究会」

- 連続研究会 (21回)、アプリ実証研究 (27件)

(3) プログラム公開とアプリケーション説明会・講習会

- 著作権確認
- 公開に関する原則、ライセンス契約ひな型の作成
- ソフトウェア説明会、講習会

39

END