

Sep 2011

NO. 3

# Torrent

## 10<sup>16</sup>が創り出す 新マテリアル

### CMSIの拠点研究員

計算物質科学の明日をつくる  
第1回若手技術交流会  
拠点研究員のプロフィール  
実験化学からのメッセージ

アプリケーション開発の最前線から

CMSIカレンダー

「京」から「エクサ」へ



CMSIの拠点研究員

# 計算物質科学の 明日をつくる 若手リーダーたち

CMSIでは「拠点研究員」という新しい制度を導入しています。拠点研究員の役割・ミッションはいろいろですが、活動の目的は、計算物質科学の振興と発展です。このポジションがどのようにして生まれ、その役割が決まったのかを紹介するとともに、拠点研究員として実際に活動を始めた新メンバーに心意気を語ってもらいました。



## 物質科学の源流から奔流へ

物性、分子、材料、3つの分野の計算科学研究者によってつくられるネットワーク型組織「計算物質科学イニシアティブ(CMSI: Computational Materials Science Initiative)」。CMSIは、文部科学省の補助金を受けて「HPCI(ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)戦略プログラム」分野2<新物質・エネルギー創成>を推進しています。計算物質科学は、理論と実験をつなぎ、科学と技術の次の扉を開くことを目指しています。研究対象は分子1個から実用材料まで多種多様、高度な計算が拓く若いサイエンスです。目標は、世界一の性能をもつ「京」を頂点とするスーパーコンピュータを活用し、物質科学の源流を物質機能とエネルギー変換を操る奔流に拡大・深化させることです。

CMSIの戦略プログラムの特徴は、現在注目されている特定のホットピックスに関する先端的な研究開発に加えて、計算物質科学の次の世代の展開につながる研究・開発の基盤形成をも大きな目的のひとつにしていることです。そのために、CMSIでは、シンポジウム、ワークショップ、実習、実験研究者との連携等を通じて、この分野に関心をもつ人たち、とくに若手研究者のネットワークを構築していきます。そして、これらの人材が計算機の利用、プログラム開発、プログラム利用、すべての面にわたって新しい研究・開発基盤を形成していく活動を支援します。また、研究成果だけでなく、人材、ソフトウェア、データも、広報誌やホームページ等を通じて紹介し、世界に発信する拠点づくりを進めます。

これらの分野振興や発展の活動を担う人

材として、CMSIでは「拠点研究員」という他に例をみないユニークな制度を取り入れています。

## ハードウェア開発トレンドに呼応した新しい研究・開発体制の必要性

すべての物質は原子や分子から成り立っています。計算物質科学の目的は、原子や分子の集まりとして物質のふるまいをとらえ、そのふるまいを記述する基礎方程式をコンピュータで解き、物質としてどのような性質をもつかを予測。また、実験結果を検証し、機能発現機構を理解し、さらにはそれを物質設計に役立てることにあります。

計算に用いるコンピュータは、主に計算を行う演算部(CPU)、データや結果を保持する記録部(メモリ)、CPUやメモリの間をつなぐ通信部(ネットワーク)で構成されています。より大規模な物理系のシミュレーションを行ったり、従来時間がかかっていた計算をより高速に行ったりするため、複数のCPUとメモリのネットワークからなるスーパーコンピュータを用います。近年の大型計算機の明らかなトレンドは、CPUの動作速度の加速が鈍っていることから、マルチコア化や大規模並列化であり、例えば、「京」は64万個もの計算コアをもっています。このような超並列計算機を有効に使うには、従来の延長上にはない、革新的なアルゴリズム・ソフトウェアの開発が必要です。計算性能の向上が主として単一コアの動作速度の加速によるものであった21世紀初頭までは、既存のプログラムを大きく改変せずともハードウェアの性能向上の恩恵を受けられることができ、その意味で、「待っていれば速くなる」時代でした。計算機ハードウェアの新

しいトレンドは、従来とは質的に異なる研究体制を要求しています。

これまで、先端的な物理化学現象を解明するソフトウェアの開発は、研究室の単位で開発・維持されるケースがほとんどでした。しかし、大規模な計算機の利用を想定したソフトウェアは、研究開発に多大な時間と労力を要し、かつ、プログラムの改良が複雑になります。そのため、計算物質科学の振興発展に寄与する、有用であり、かつ多くのメンバーが利用しうるソフトウェアは、継続的にプログラムを継承していくためにも組織的に維持管理し、発展させていくことが必要になってきました。この課題の解決に向けた取り組みが「拠点研究員」制度の誕生につながっています。

## 拠点研究員の役割とミッション

CMSIでは、「京」を利用して、計算物質科学の特定の重要課題に取り組む「重点研究員」と、計算物質科学分野の振興と発展を担う「拠点研究員」を、明確に区分して募集し、採用しています。重点研究員が現在もっとも緊急に成果をあげることを要求されている課題の解決に携わるのに対して、拠点研究員の役割は、次の世代の計算物質科学の発展の上で重要な課題解決や基盤整備を推進することです。すなわち、「計算物質科学分野で広く用いられる新しい方法論や基本技術の開発」、「計算物質科学分野で多くのユーザが見込まれる重要アプリケーションソフトウェアの開発・普及」、「高度な並列化技術、高速化技術を応用したコード開発と、それを利用した計算物質科学研究」、「実験家や企業研究者を含めた多くの人に成果を利用しても

らうための公開環境の整備」が主な役割です。これらのミッションはすべて、最先端の計算物質科学の学術的な成果を普及発展させ、社会に還元するところまでつなげ、計算物質科学が人びとの身近な課題を解決するためのツールとして利用されることを志向しています。

CMSIが取り組む研究課題は、超伝導などの物質機能発現機構の解明をはじめ、今後ますます重要となる次世代エネルギーの生成・貯蔵、高速化が頭打ちに近づく半導体デバイスのブレークスルーを目指す研究、ウィルスなど人類の脅威となる分子の制御機構の解明、また、希少元素を用いなくても同等な性能を発揮する磁性材料や構造材料など、人類が地球上で豊かに生きていくために必要なものばかりです。計算物質科学がこれらの領域の理論と実験を結びつけ、その成果が学術や社会の発展に寄与できるよう、拠



点研究員はそれぞれのカテゴリー(図を参照)で努力していきます。

#### 拠点研究員の活動の輪を世界へ

拠点研究員が所属する研究機関は、物性、分子、材料の戦略機関の各拠点(東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所)のほか、分子サブ拠点(東京大学大学院総合文化研究科)、材料サブ拠点(産業技術総合研究所関西センター)、および、産官学連携拠点(産業技術総合研究所、物質材料研究機構)

です。また、2011年4月に計算科学機構内に立ち上げられたCMSI神戸拠点は分野融合拠点として位置づけ、拠点研究員とともに、分野振興活動を先導し、全体のコーディネートを担当CMSI特任教員を配置します。

拠点研究員の活動の場は、所属機関に限られません。計算物質科学全体を活動のフィールドとし、物性、分子、材料分野の融合を促進していきます。そして、2か月に1回のペースで、CMSI若手技術交流会を開催し、大規模計算に必要な要素技術の講習会、各分野が抱える課題の議論、将来のスパコンのあるべき姿などについて、意見交換を行っていきます。交流会の企画・運営は、拠点研究員自らが行っていく予定です。

こうした拠点研究員の活動を通して、将来の計算物質科学を支える若手同士のコミュニケーションの輪を、世界に向けて広げていきます。

## 第1回CMSI若手技術交流会を開催

CMSI神戸拠点におけるイベントの第一弾として、7月7～8日、CMSIの若手研究員が計算科学研究機構に集い、技術交流会を開きました。

第1日目は、すでに「京」を試験利用している7名のCMSI若手研究者による講演が行われました。最先端の大規模計算手法と、課題解決に向けたアプローチが、コーディングする際の苦労話も交えて紹介され、参加者からはノウハウに関する質問が飛び交いました。また、石川裕・東京大学情報理工学研究所教授による招待講演「エクサスケールコンピューティングへの道程」では、すでに次のスパコンの開発が動き出していることを実感させられました。

夕方からは会場を移してポスターセッション。発表者と参加者が熱く議論する姿も見られ、その議論は懇談会へと引き継がれました。たがいに初対面の若手研究員も、計算物質科学を共通のキーワードとすることで、すぐに打ち解けて語り合い、大いに盛り上がりました。

第2日目は、川島直輝・東京大学物性研教授が「拠点研究員に期待すること」を講演しました。その後、分野振興を担う新人拠点研究員が自己紹介を兼ねて、これまでに行ってきた研究内容の発表と今後の抱負を述べるセッションが行われました。常行真司・CMSI統括責任者からも、拠点研究員の活動



内容に対しての要望が出されました。本交流会を通して、参加者全員がCMSIの活動内容や方針を再確認することができました。

本年度は、河野貴久、志田和人、米原丈博、小西優祐の4名の拠点研究員が若手技術交流会の幹事となり、第2回目以降の企画を担います。若手自らが運営する「技術交流会」。この会は、物性科学、分子科学、材料科学の分野が融合した計算物質科学の飛躍的な発展にとって重要な活動となります。

### 拠点研究員と重点研究員

#### CMSI拠点研究員・・・分野振興

先端的要素技術の開発、重要な分野共通アプリケーションの開発・普及、特別支援課題のサポートなど

#### CMSI重点研究員・・・重点課題推進

「京」における大規模並列化など

### 拠点研究員のミッション

#### カテゴリC

複数課題の推進を通じた分野振興

例：並列化を含むアプリケーション高度化など

#### カテゴリB

分野共通アプリケーションの開発・公開・普及

例：電気伝導率計算、行列対角化プログラム、量子MC法など

#### カテゴリD

ポータルサイト開発・管理/アプリケーション公開・普及

例：ポータルサイト開発・運営、ライセンス管理

#### カテゴリA

先端的な要素技術・アルゴリズムの開発

例：行列対角化、逆行列、FFTなどの並列化アルゴリズム開発など



# 拠点研究員のプロフィール

2011年8月31日までにCMSIに採用された拠点研究員を紹介します。



## 川頭 信之

かわがしらのぶゆき

**物性科学拠点研究員**  
東京大学物性研究所

筑波大学で計算機科学を専攻、大学院で一般言語学、バイオインフォマティクスを研究。

### 応募の動機

UNIX、データベース、ウェブ等の知識を生かしたいと思いました。

### ミッション・役割

情報処理技術を用いた計算物質科学の研究支援。

### 抱負

ウェブやSNSを利用して、計算物質科学の研究者のための情報コミュニティを立ち上げたいですね。

## 河野 貴久 こうの たかひさ

物性科学拠点研究員

名古屋工業大学大学院工学研究科

山口大学で電気電子工学を専攻、名古屋工業大学大学院でグリッドコンピューティングを研究。

### 応募の動機

大規模並列計算に興味をもち、アプリケーション開発を行いたいと思ひ応募しました。

### ミッション・役割

オーダーN実空間DFTのマルチスケールハイブリッド並列化と、実空間DFTコードの並列化チューニング。



### 抱負

MPIとOpenMPを併用したハイブリッド並列やその他大規模並列技術について研究し、次世代スーパーコンピュータ向けのアプリケーション開発に貢献したい。

## 榮 慶丈 さかえ よしたけ

分子科学拠点研究員

名古屋大学大学院理学研究科

総合研究大学院大学で機能分子科学を専攻、博士号取得。広島大学大学院で量子化学計算による酵素反応を研究。

### 応募の動機

アプリケーションの開発を続けていきたいと考えました。

### ミッション・役割

付加機能ソフトウェアREMの開発を行っています。このソフトウェアによって、既存のさまざまな分子シミュレーションプログラムを用い、効率的な分子構造探索を行うことが可能になります。

### 抱負

REMの機能の向上と、また新しい構造探索手法の開発、高精度なシミュレーションを実現するための分子力場の開発などにも取り組んでいきたいです。



## 桜庭 俊 さくらば しゅん

分子科学拠点研究員

京都大学化学研究所

東京大学大学院で情報生命科学を専攻、博士号取得。京都大学化学研究所で溶液理論に基づく溶媒和自由エネルギー計算ソフトウェアermodの開発に携わる。

### 応募の動機

ermodの改修を続けるため、開発を主業務とするCMSIの拠点研究員へ応募しました。

### ミッション・役割

ermodの並列化効率の向上と多成分不均一系への適用に努め、また利用者講習を含めたソフトウェアの周知活動も行います。



### 抱負

CMSIとしては逆説的ですが、「小さな計算でできること」を増やすため、理論・計算機特性の両面から研究を行っていきたいです。

## 志田 和人 した かずひと

材料科学拠点研究員

東北大学金属材料研究所

北陸先端科学技術大学院大学で情報科学を専攻、東北大学でモンテカルロ法による物性計算を研究。

### 応募の動機

学生時代も(当時の)先端的並列スーパーコンピュータを使っていたので、10年以上の間にどれだけ大きい進歩があったかに非常に大きな興味がありました。

### ミッション・役割

金属材料研究所で独自に作成された全電子混合基底法による第一原理電子状態計算プログラムTOMBOをはじめとしたプログラムを「京」に移植および最適化することで、いままでにない規模の材料物性計算を実現し、材料科学のあたらしい知見を得ることです。

### 抱負

目下のところは、これまでの研究(材料科学におけるモンテカルロ法)と最先端並列コンピューティングの「京」とのギャップを埋めるためにできる限り努力していきます。



### 抱負

「生命とは何か」その解明が究極の目標です。

## 城野 亮太 じょうの りょうた

分子科学拠点研究員

東京大学大学院工学系研究科

東京大学大学院で応用生命工学を専攻、博士号(農学)取得。分子動力学を用いた溶媒和構造や量子化学による電荷分離状態を研究。

### 応募の動機

「エネルギー創成」の観点から進めてきた光合成や太陽電池の電荷分離状態の研究を、「京」を使って発展させたいと思いました。

### ミッション・役割

電子が実際に利用できる形で伝達される過程をシミュレートすることで、光を素とする効率的なエネルギー変換機構提案のための指針を確立することです。

## 小西 優祐 こにし ゆうすけ

産官学連携拠点研究員

産業技術総合研究所ナノシステム研究部門

東京大学で物理学を専攻、理学博士号取得。高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所で光誘起相転移を研究。

### 応募の動機

物性物理、計算物理分野の研究ができるので応募しました。

### ミッション・役割

半導体などにおけるナノ構造の形成について第一原理、モンテカルロ、分子動力学などを用いて研究を進めていくとともに、CMSIの広報にも携わります。



### 抱負

人との協力関係を大事にしなが、さまざまな仕事を進めていきたいと思っています。

## 小林 正人 こばやし まさと

分子科学拠点研究員

早稲田大学理工学術院

早稲田大学で量子化学を専攻、博士号(理学)取得。2008年よりナノ統合拠点博士研究員として「京」でのアプリケーション開発に関わる。

### 応募の動機

「京」のソフトウェア開発を続けていくことで、計算科学の活性化や社会浸透を図りたいと応募しました。

### ミッション・役割

リニアスケール量子化学計算ソフトウェアDCのハイブリッド並列化と高速化を中心に、付加機能ソフトの高度化に従事します。



### 抱負

分野や計算・実験・理論といった既成の枠にとらわれず、CMSI内外の多くの人と交流を深めたい。

## Daniel J. Sindhikara

ダニエル シンディカラ

**分子科学拠点研究員**  
自然科学研究機構分子科学研究所

フロリダ大学で物理学を専攻。博士号取得後、分子研で分子認識を研究。

### 応募の動機

分子研で次世代スーパーコンピュータプロジェクトの研究に携わっていたので、その研究を継続したかった。

### ミッション・役割

3D-RISMプログラムの応用と、分析ツールの開発。特に3D-RISMでの創薬の手法開発。今は、タミフルのノイラミダーゼへの結合をモデル化しています。



### 抱負

3D-RISMで薬を自動的に作れるようにしたい。さらに、科学全体に適用できるツールも作りたいです。

## 野田 真史 のだまashi

**分子科学拠点研究員**  
自然科学研究機構分子科学研究所

東京大学大学院でマテリアル工学を専攻、博士号(工学)取得。分子研で大規模計算に基づくナノ構造体の光学応答を研究。

### 応募の動機

これまで行ってきた大規模計算に基づく電子ダイナミクスの数値計算的研究を、京コンピュータを利用した超並列大規模計算へと発展させたいと考えました。

### ミッション・役割

実時間実空間電子ダイナミクス法プログラムの京コンピュータへのチューニングを行うとともに、共通の数値計算アルゴリズムの開発を行い、他課題の研究にも寄与します。

### 抱負

エネルギー移動や太陽電池を対象とした大規模光学応答計算を行うことにより、自然現象を理解するとともに、デバイス開発への基礎的知見を獲得したい。



### 抱負

多くの研究者が利用できる、利便性、拡張性の高いパッケージの開発に努めたい。そして、新世代の高速計算機を活用した新しい物理の発見につなげたいです。

## 吉澤 香奈子 よしざわ かなこ

**物性科学拠点研究員**  
東京大学物性研究所

上智大学大学院で物理学を専攻、理学博士号取得。東京大学物性研究所で物性理論を研究。

### 応募の動機

今後の研究の発展には大規模並列計算機の活用が不可欠であり、次世代スパコンのプロジェクトに参加したいと考えました。

### ミッション・役割

「TAPP/QMAS 平面波基底第一原理計算コードの効率化」です。平面波基底DFTコードは第一原理計算の中でも基本的なもののひとつで、日本でも複数のソフトが開発されています。それらから一つを選ぶか、もしくは統合して機能を追加し、海外の主要なソフトに対抗できるものを整備する計画です。



### 抱負

自らが吸収した理論と計算技術をさまざまな形で発信するとともに、計算科学の分野から科学に貢献したいと思います。

## 米原 文博 よねはら たけひろ

**分子科学拠点研究員**  
東京大学大学院総合文化研究科

京都大学大学院で理論化学を専攻、博士号(理学)取得。東京大学大学院総合文化研究科では分子非線形科学を研究。

### 応募の動機

動力学の理論予測をこえた、自然界にない新分子相の創成・反応の制御に代表される新しい分子科学を切り拓いていく研究に参加したいと考えました。

### ミッション・役割

さまざまな発展してきた理論科学計算技術の橋渡しと、計算科学の諸分野の人たちと共有できる場を構築していくことです。



# 実験化学が望む 拠点研究員の条件

井上 晴夫 いのうえ はるお  
首都大学東京 戦略研究センター 教授



まず、私の目下の研究テーマである「人工光合成」の話しましょう。人工光合成とは、太陽光と水の電子を用いて物質を還元し、水素や炭水化物などの高エネルギー物質を生成するしくみです。太陽電池などとは異なり、必要なときに必要な量の燃料を取り出せる、還元反応が新たな汚染物質を生まないなど、エネルギーとして、また物質循環の視点からも理想的な次世代エネルギーシステムだと考えられています。

そうはいつても、自然界での巧妙なしくみを実現するのはなかなか難しいのです。自然の光合成では、光子をとらえ、また反応途中の物質の活性化状態を維持することにより、4つの光子で段階的に水から4つの電子を引き出し酸素を発生しています。一方、われわれは、1光子2電子酸化反応に注目して研究を進めてきました。近年、大きなブレイクスルーがあり、実際に水を原料とする人工光合成が視野に入ってきています。現在、密度汎関数法による電子状態計算も併用しつつ、反応機構の解明に取り組んでいます。

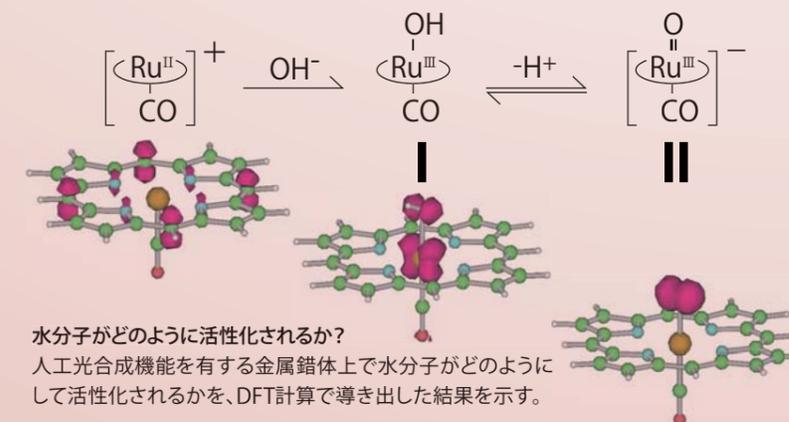
日本の理論化学は世界の中でも高いレベルにあります。しかしながら、計算手法の検証や応用の段階で、計算の側から理論家だけでアプローチすると、第一線の実験化学の課題としてのリアリティに欠けたものになりがちです。手法の開発だけでなく、それを検証し、さらに道具とし

材としても育っていくはずですよ。

CMSIの中だけでなく、将来的には、例えばプロポーザルに応じて実験家のもとに3カ月程度滞在するような枠組みに広がっていったらどうでしょう。実際、実験化学の現場でもかなり高度な電子状態計算を行うようになってきていますが、計算の初期の段階で理論家のサポートを受けることができれば、実験の解析は今よりも格段に進歩するでしょう。また逆に、実験家とのやりとりの中で実験化学のエッセンスを吸収することは、理論家にとっても大きな刺激となるはずですよ。さらに新しい視野が開けるのではないのでしょうか。

現実の物質における個々の階層のメカニズムの解析から、それを一般化し階層をつないで、新物質の予測・デザインへ。われわれ実験家もこれからの計算物質科学に大いに期待しています。

(2011年8月11日 計算科学研究機構にて)



Photochem. Photobiol. Sci., 9, 931-936 (2010). ChemSusChem., 4, 173-179(2011).

アプリケーション開発の最前線から

# RSDFTの開発者・ 岩田さんに聞く



話し手：  
**岩田 潤一** いわた じゅんいち  
東京大学 大学院工学系研究科 特任講師

聞き手：  
**久保田 好美** くぼた よしみ  
東京大学 大学院理学系研究科  
地球惑星科学専攻 博士課程2年



物質のさまざまな性質について経験的調整パラメータに依存しない「第一原理計算」を行うアプリケーション、実空間密度汎関数法 RSDFT。京コンピュータを使って10万原子規模の第一原理計算に挑戦しようとしている。第一原理計算とは何か、RSDFTにはどのような特徴があるのか、開発プロジェクトを引っ張ってきた東京大学の岩田潤一さんに話を聞いた。

## 「第一原理計算とは？」

私たちの身の回りにあるさまざまな物質。その色や固さといった性質もさまざまだが、これらの性質はどのように決まっているのだろうか？ 物性物理学は、物質の性質(物性)を知るために、電子や原子核というミクロなレベルでそれらのふるまいを調べる学問だ。しかし、ミクロのレベルでは、実験だけからすべて

のふるまいを理解するのは困難で、計算や数値実験が重要な役割を果たしている。

その重要な計算手法のひとつが第一原理計算だ。「第一原理」とは「他の原理や仮定などから推論することのできない最も基本的な原理」を意味する言葉で、物理学だけではなく哲学などでも使われる。研究分野が異なると「第一原理」の意味するところが微妙に違っ

てくることを、岩田さんは丁寧に説明してくれた。

「物性物理学での第一原理とは、量子力学の基本法則のことを指します。そこから出発して、電子の質量や電荷といった基本物理量以外には、実験結果と合わせるための調整パラメータの導入をいっさい行わないで計算することを「第一原理計算」と呼んでいます。

量子力学の第一原理に基づいて、この世に存在し得るすべての物質の性質を予測することが物性物理学の究極の目標です。しかし、第一原理から出発してすべての計算を近似なしで行うことは、実際上は不可能です。扱う系の大きさや研究対象によって、計算に用いる基本方程式を変えたり、近似を用いて計算方法を改良したりしなければいけないのです」

「第一原理計算」と一般的に呼ばれているものでも、基本となる方程式や近似の度合いによってさまざまな第一原理計算が存在する。その中で、岩田さんが開発を進め

てきた実空間密度汎関数法 (Real-Space Density-Functional-Theory、以下 RSDFT) は、1998年にノーベル化学賞を受賞した「密度汎関数理論」に基づいて、多電子-多原子核系の量子力学的第一原理計算を行うソフトウェアだ。第一原理計算は、「経験的パラメータを入れた手法」に比べると、信頼性の高い物性予測が可能となるが、扱える原子数が少なくなってしまうというデメリットがあり、せいぜい数百~1000原子が限界だろうと言われてきた。それに対して、「RSDFTを使うと、これまでの3桁も大きい10万原子の計算ができるようになります」という。

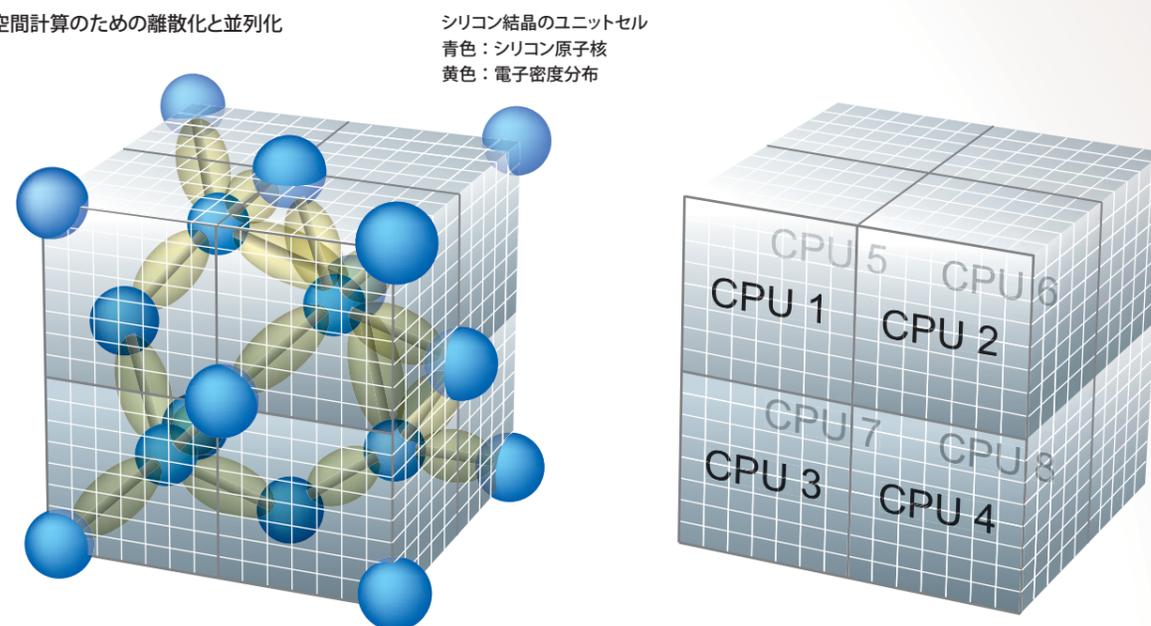
## 「RSDFTとはどんなソフト？」

物性を明らかにするには、電子状態を計算することが非常に重要だ。われわれの身の回りの物質を考える場合、通常、価電子(外殻電子)とイオン(内殻電子と原子核の集合

体)で構成される系を考えれば十分である。そうした上で、RSDFTでは、電子状態の計算を、密度汎関数理論を用いて行っている。密度汎関数理論は、電子の密度分布のみから電子のエネルギー基底状態(波動関数で表される)を計算できるという理論で、シュレーディンガー方程式を解くよりも計算が簡単になるので、多電子系を解くのに適している。「密度汎関数理論の基本方程式(コーン・シャム方程式)を、計算機上でいかに効率よく計算させるかを工夫したソフトウェアがRSDFTなのです」と岩田さん。RSDFTでは、偏微分方程式の形をしたコーン・シャム方程式を差分方程式の形で表し計算を行っているのが特徴だ。

これまで行われてきた数百原子までの第一原理計算では、波動関数を単純な平面波の重ね合わせで表現し、高速フーリエ変換(FFT)を用いる計算手法が大きな成功を収めてきた。しかし、計算機が大型化し、超

図1. 実空間計算のための離散化と並列化



空間中に配置されたシリコンの原子核(青色)の周りに、連続的に分布する電子(黄色)が存在する。実空間法では、この連続的な電子密度分布を離散的なメッシュ点上で表す。

現実の空間のメッシュは、大きなブロックに分けられる。それぞれのブロックは異なるCPUが担当し、隣り同士でたがいに通信しながら協調して計算を実行する。



## 岩田 潤一 いわた じゅんいち

学部時代には電気回路などの計算法を学んだが、計算法の裏付けを独学で勉強しているうちに物理、特に量子力学に興味をもつようになった。大学院では原子核理論の研究室に進み、時間依存密度汎関数法を用いた電子系の光応答の研究で博士号取得。並列計算を始めたのは2005年頃から。2011年8月から、CMSI特任講師として計算科学教育にも携わる。趣味はラーメン、マージャン、ジャンプなど。

並列化に向かっている中で、FFTは通信に膨大な時間がかかるため大規模並列計算のボトルネックになっていた。そこで、RSDFTでは、並列計算機の性能を十分に引き出せると理論的に知られていた実空間法を用いて波動関数を計算する手法を開発してきた。実空間法とは、空間を離散的な3次元のメッシュで表し、そのメッシュ点上での波動関数の値を数値計算で直接求めていく手法だ。そして、メッシュで区切られた空間をいくつかのブロックに分け、それぞれのブロックをそれぞれのCPUに対応させて計算している。つまり、分割された現実の空間が、計算機上でもCPUの単位として同じように分割されているのだ(図1)。そうすることによって効率よく仕事を割り振り、無駄の少ない並列計算ができるようになった。実空間法で波動関数を計算するという事は、FFTを用いる必要がなく、よって通信の問題を解消できたことになる。

### 「計算科学者との交流が飛躍に！」

RSDFTには、計算効率の向上に関してもう一つのウリがある。グラム・シュミットの直交化のアルゴリズムだ。波動関数の直交化は必要不可欠な計算だが、その計算量がメッシュ点の数の3乗に比例するため、シミュレーションする物理系が大きくなると、計算時間が爆発的に

増えるという問題があった。「ベクトルの内積計算を基本とするアルゴリズムから、コンピュータで処理しやすい行列積計算を基本とするアルゴリズムに置き換えることで、解決しました」。計算科学の知恵を借りることによって、計算効率を飛躍的に向上することが可能となった。

RSDFTの開発は、筑波大学で開発されてきたPACS-CS(計算科学向け超並列クラスター)プロジェクトから続いている。月1回の計算科学との合同ミーティングで、岩田さんはRSDFTで何をやりたいかを計算科学の研究者に説明した。「何度も説明していくうちに、いろいろとアドバイスをもらえるようになりました。最初は専門用語がよくわからなかったのですが、月に1回のペースで顔をあわせて直接コミュニケーションをとっていたら、いつのころからかすんなり話が通じるようになってきたんです。グラム・シュミット以外にも、分野外である計算科学の最新理論を知ることができたことも、アルゴリズムの構築にとっても役に立ちました」と、当時を振り返る。計算科学の研究

ケーションが成功の秘訣だったようだ。

一方で、岩田さんにとってRSDFTの開発に集中していた1~2年は、フラストレーションがたまる時期でもあった。岩田さんの本分は物理学の研究だ。ソフトウェア開発に多くの時間を取られていたため、データを出し、その成果を論文として公表するという研究者としてやるべき仕事ができなかった。このままで大丈夫なのかという不安と戦いながらRSDFTの開発に取り組んでいた。モチベーションをどうやって保っていたのか? 「できあがった暁には、何でも計算できるようになるんだ。インパクトが大きいはずだと信じてやっていましたね。気が長いほうなので…」岩田さんは持ち前のねばり強さで成果が出せない期間を乗り越えたが、日本では、ソフトウェアの開発だけでは業績としての評価につながりに

図3. 断面の直径5ナノメートルのシリコンナノワイヤの原子モデル

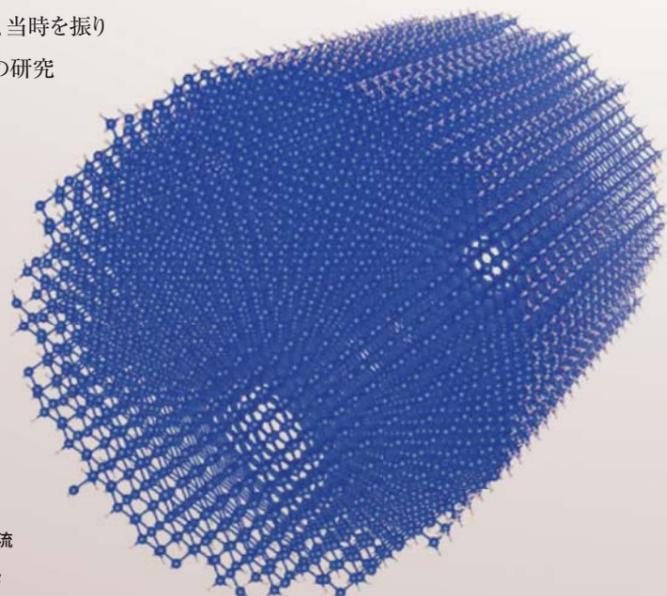
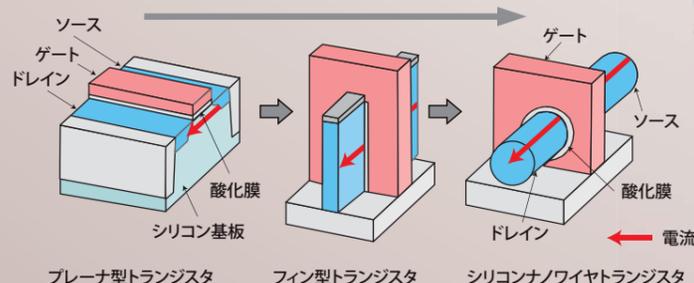


図2. 微細化に伴うトランジスタの構造変化

立体構造にすることでゲート電極によるソース・ドレイン間の電流の制御性が向上



くいのが現状だ。「今後は、こうした状況を改善していきたいです」と、CMSIの一員としての自覚を見せてくれた。

### 「次世代半導体デバイスへの応用」

「京」を使えば数万~10万原子規模の第一原理計算を実行できるようになる。では、どんなことに応用できるのだろうか? 10万原子のシミュレーションとして岩田さんたちがターゲットにしているのは、半導体デバイスだ。半導体デバイスは、私たちの身の回りにあるパソコンや携帯電話などの電子機器に不可欠であり、消費電力を抑えるため、また高速化を実現するため、デバイスの小型化が進んできた。数ナノメートルまで小さくなったデバイスでは、電子の量子力学的ふるまいが直接性能に影響を与えるようになる。実験のみでは詳細なデバイス設計方針を立てることが難しく、第一原理計算への期待が高まっている。

半導体デバイスに使われてきた電界効果トランジスタは平らなシリコン基板の上に酸化膜とゲートと呼ばれる金属が乗った構造になっている。ゲート電極の電圧をオン・オフさせてシリコンに電流を流すか流さないかをコントロールし、スイッチとして機能させている。ところが、あまりにもサイズが小さくなりすぎて(数ナノメートル)、電流オフの状態でもごくわずかな電流が漏れるようになり、小型化には限界が近づいている。そこで、これまでの二次元積層構造ではなく、円柱や角柱の形をしたナノワイヤ型トランジスタが次世代半導体デバイスとして提案されている。ナノワイヤ型トランジスタは、酸化膜とゲート金属がシリコンでできたワイヤ(シリコンナノワイヤ)を包み込むような構造をしている(図2)。実際のシリコンナノワイヤ型トランジスタでは、断面の直径が10~20ナノメートル、電流の流れる距離が5~10ナノメートル程度になると予想されて

いる(図3)。その中にはおよそ10万個のシリコン原子が入っており、ちょうど「京」を使って計算できるサイズと同じくらいになる。「京」を使った計算で、ナノワイヤ型トランジスタの物性を明らかにし、実用化につなげたいと思っています」と、岩田さんは意気込みを語る。

半導体以外では、生体分子への応用に注目している研究者もいる。単純なタンパク質なら、RSDFTを使うことで、分子丸ごとをシミュレーションすることが可能になるのだ。RSDFTは、固体だけではなく液体や気体にも適用できるため、いろいろな物質への応用が期待される。

取材協力:京極真也(東京大学大学院工学系研究科)  
図版提供:角嶋邦之(東京工業大学)



## 久保田 好美 くぼた よしみ

### ◆インタビュー後記

岩田さんは現在、RSDFTに分子動力学などの新しい計算機能を追加する共同研究を進めている。プロジェクトの共同開発者やソフトウェアユーザーからの信頼も厚いという評判を聞いた。今回の取材では、黒板やスライド資料を使って、丁寧に数式や専門用語を解説してくださったことが印象に残っている。CMSIの内外における計算科学の教育者として、今後の岩田さんの活躍が楽しみだ。

### 【ソフトウェア世界一を目指して】

今年6月、喜ばしいニュースが届いた。第26回国際スーパーコンピューティング会議(ISC'11, p.15参照)でのコンピュータの処理性能を競うTOP500ランキングにおいて、「京」は世界最高性能8.162ペタフロップスで世界第1位を獲得したのだ。この11月には、ソフトウェア開発における世界最高賞

「ゴードン・ベル賞」の発表がある。ゴードン・ベル賞はスーパーコンピュータ界のノーベル賞とまで称され、並列計算におけるその年のブレークスルーに与えられる賞だ。RSDFTはこの賞にノミネートし、ファイナリストにも残っている。ソフトウェアでも「世界一」への期待が高まる。

### Application SPEC Sheet [RSDFT]

コード名	HP-RSDFT
方法・アルゴリズム	実空間差分擬ポテンシャル法、共役勾配法
コードの概要・特徴	実空間差分擬ポテンシャル法により、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算を行う。高速フーリエ変換がいらぬため高並列化に適している。計算量はシステムサイズの3乗に比例するか、大部分が行列積演算のため非常に高効率で実行できる。
シミュレーションの対象となる物質	金属、半導体、表面・界面、欠陥、ナノ構造
開発責任者	押山 淳
開発者・開発機関一覧	岩田潤一ほか、筑波大学、東京大学、理研ほか
開発期間	2006年度より開発開始
開発言語・ソースコード行数	Fortran, 5万行
動作環境	PACS-CS, 筑波T2K, SGI Altix, 京 (Linux)
並列化方法	ハイブリッド並列 (MPIとOpenMP)
並列化の状況	最大1万2288コア(京)、ピーク性能比10~30%
ソフトウェアの公開	条件付きで公開予定(2012年度)
関連/競合するアプリケーション	RRSPACE(大阪大)、PARSEC(Minnesota大)、その他、第一原理計算
その他の機能	周期境界条件だけでなく、孤立系境界条件(分子など)も扱える。



## CMSIカレンダー

詳細は CMSI ホームページ <http://cms-initiative.jp> をご覧ください。

### ●2011年8月11～12日 計算分子科学拠点(TCCI)第2回研究会 場所：計算科学研究機構

TCCIは、CMSIの分子科学拠点として、2011年2月に設立された組織です。TCCIでは、本年2月に引き続き、第2回目の全体シンポジウムとして研究会を開催しました。猛暑のなか、約100名の研究者が集り、「京」用プログラム開発の状況や研究の進捗についての発表が行われました。

来賓の挨拶では、「京」でしかできないことをやって成果を早期に出してほしいと期待が述べられました。招待講演は、重点課題の代表者と、「京」用のプログラム開発で先行する次世代ナノ統合プロジェクトの中核アプリ、そして理研AICSの関連する研究者により行われました。この中で、物性科学からは前園 涼・北陸先端科学技術大学院大学准教授が、材料科学からは小山敏幸・名古屋工業大学教授が講演されました。

また特別講演として、人工光合成の研究者で、JST(科学技術振興機構)さがし「光エネルギーと物質変換」の研究総括でもある井上晴夫・首都大学東京教授が、「人工光合成を目指して」と題して、人工で実現できる光合成の基礎過程がかなりわかっていることを報告されました。

陰山 聡・神戸大学教授が行ったCAVE(多面立体視表示システム)見学ツアーには多くの人が参加し、CAVEへの関心の高さが窺われました。夕刻から開かれた懇親会にも半数以上が参加するという盛況ぶり、ここでは平尾公彦機構長が、TCCIは必ず成果をあげてほしいと激励されました。

2日目の午後に行われたポスターセッ



CAVE 見学ツアー

ションは、狭いラウンジでの開催となったものの、質疑応答・議論が活発に行われていました。



講演会風景



ポスターセッション

撮影：竹村 和浩(東京大学)、榮 慶文(名古屋大学)

- 分野2×分野5 異分野交流研究会  
日程：2011年7月26日  
場所：筑波大学計算科学研究センター
- 元素戦略ワーキンググループ「磁性の部」  
日程：2011年7月29日  
場所：東京大学理学部(本郷)
- 第15回 分子シミュレーション夏の学校  
日程：2011年9月9～11日  
場所：岡山大学理学部附属牛窓臨海実験所
- 計算物質科学研究センター  
第1回シンポジウム  
日程：2011年9月12～13日  
場所：東京大学物性研究所
- CMD®ワークショップ(CMSI・阪大主催)  
チュートリアルコース開催  
・第19回 2011年9月5～9日  
場所：大阪大学サイバーメディアセンター
- ・CMD®フィリピン(デラサル大共催)  
日程：2011年10月11～12日
- ・CMD®ベトナム(ホーチミン大共催)  
日程：2011年12月8～10日
- ・CMD®タイ(共催未定)  
日程：2012年2月中旬(予定)
- ・第20回 2012年3月6～10日  
場所：国際高等研究所(京都)
- 第2回 CMSI 若手技術交流会(同時開催「京」の次のスパコンを考える」パネル討論)  
日程：2011年9月14日  
場所：東京大学物性研究所

- ・第3回 CMSI 若手技術交流会  
日程：2011年11月25日  
場所：東京大学駒場キャンパス
- ・第4回 CMSI 若手技術交流会  
日程：2012年2月1日  
場所：東北大学金属材料研究所
- ・第5回 CMSI 若手技術交流会  
日程：2012年3月初旬(予定)  
場所：未定
- 第3回HPCI戦略プログラム合同研究交流会  
日程：2011年10月3日  
場所：計算科学研究機構
- TCCI 実験化学との交流シンポジウム  
日程：2011年11月10～11日  
場所：京大福井謙一記念研究センター
- 元素戦略ワーキンググループ「電池の部」  
日程：2011年11月9日  
場所：東大小柴ホール
- 元素戦略ワーキンググループ「触媒の部」  
日程：2011年11月12日  
場所：京大福井謙一記念研究センター
- TCCI 産学連携シンポジウム  
日程：2011年11月24日  
場所：野村コンファレンスプラザ日本橋
- 計算材料科学シンポジウム  
日程：2011年12月6～7日  
場所：東北大学金属材料研究所
- TCCI ウィンターカレッジ  
(分子シミュレーション)  
日程：2011年12月12～16日  
場所：自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター(量子化学)  
日程：2011年12月19～20日  
場所：自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター
- 材料科学・MPI講習会  
日程：2011年12月12日、1月(予定)、2月(予定)  
場所：阪大中之島センター(12月)
- CMSI合同研究会  
日程：2012年1月30～31日  
場所：東北大学金属材料研究所
- 産官学連続研究会  
日程：2012年2月上旬(予定)  
場所：未定
- 量子化学超並列コンピューティングワークショップ  
日程：2012年2月13～17日  
場所：自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター

## 「京」だより

ISC'11レポート

## 「京」から「エクサ」へ

International Supercomputing Conference (ISC) '11が6月19～23日にドイツのハンブルクで開催されました。この会議に出席した松尾春彦さんは、世界の計算機科学の最先端がすでに「京」から「エクサ」に移っていることを、肌で感じました。

ISCは、スパコン、ストレージ、ネットワークに関する世界規模の国際会議と展示会です。1986年から毎年1回開催されていて、年2回更新される TOP500 のうち1回はこの会議で発表されます。私は研究者として世界の動向を調べるため、今回の会議に出席しました。

初日は前夜祭的な感じで、チュートリアルや、ワークショップなどが行われ、2日目以降が本番でした。通常の学会と同様、国際会議 プラス 展示会といった内容でしたが、NVIDIAやSGIなど HPC(High-Performance Computing) 関連のベンダのトップなどが数多く講演者として参加しており、アカデミックな雰囲気よりも企業色が強く出ているのが特徴的でした。そのためアカデミックに偏っていない、現実的な近い将来のスパコン像を窺い知ることができたのではないかと思います。

初日、私は MPI/OpenMP の ハイブリッドプログラミングのチュートリアルに参加しました。ハイブリッドプログラミングの実践的な知識が得られるハイレベルな内



松尾春彦 まつお はるひこ  
東京大学大学院工学系研究科  
特任研究員

連続稼働時間の長さなどのほうがインパクトを与え、高く評価されたようです。

3日目はNVIDIAのデビッド・カーク(David Kirk)博士と、並列アーキテクチャの大御所であるトーマス・スターリング(Thomas Sterling)博士によるエクサスケールのスパコン環境についての討論を聞くことができました。他にも、紹介しきれないほどいろいろと面白い講演がありました。

ISC'11を通して強く感じたのは、「次世代スパコン」とはすでにエクサスケールのものだという事です。つい最近まで「京」を次世代スパコンと呼んでいたのに、スパコンの世代交代の速さにはあらためて驚かされました。また、スパコン関係のベンダのトップやそれに近い人たちの生の声が聞けたことで、近い将来のスパコンの動向調査について確かな手応えが得られました。



# コンピュータが打ち立てた金字塔

コンピュータシミュレーションがもたらすのは、予想された仮説の検証、現実の実験結果の解明だけにとどまりません。独創的な「数値実験」は、時に人間の予想をこえた結果をもたらし、まったく新しい研究分野をも生みだしてきました。

「マンデルブロ集合」は、部分が全体と相似になっている不思議な図形。単純なルールに従った計算により、この複雑で美しい「フラクタル」が描きだされることが、1980年代に見いだされた。

「地球シミュレーター」は、地球全体の大気と海洋を100kmと20kmの高解像度で計算。2100年までの地球温暖化を予測した(2004年)。

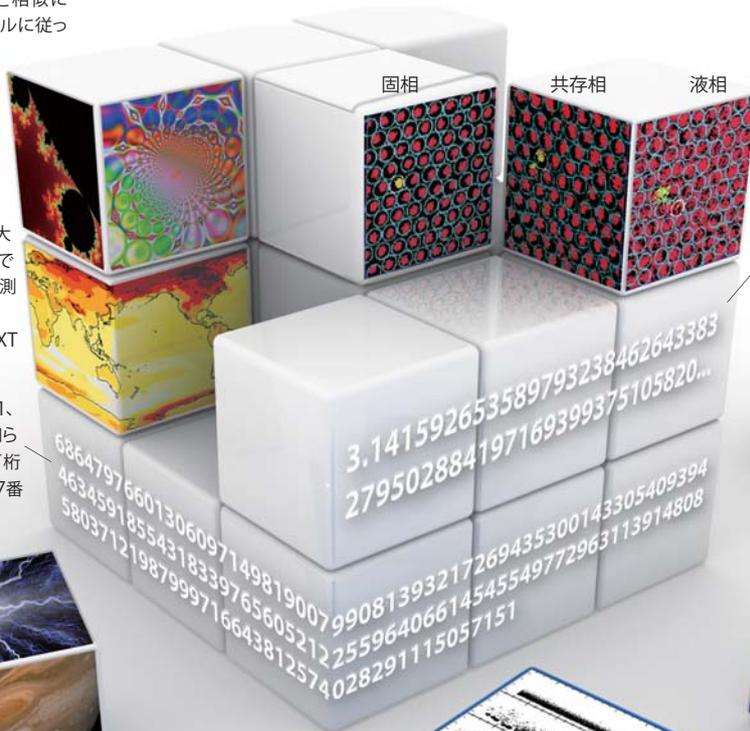
画像提供：AORI/NIES/JAMSTEC/MEXT

1952年、13番目のメルセンヌ素数( $2^{521}-1$ 、157桁)を見つける。古代ギリシアから知られる素数だが、コンピュータにより数百桁をこえる計算が可能に。2008年には47番目の素数(12,978,189桁)を発見。

プラズマ中の非線形波動

木星の大赤斑

フェルミ・バスタ・ウラムによる「非線形格子の実験」(1953年)。相互作用する多数の粒子に見られる準周期的な運動の発見が、その後、孤立波(ソリトン)やカオスの研究に発展していく(画像は自然界に見られる孤立波)。  
画像提供：NASA



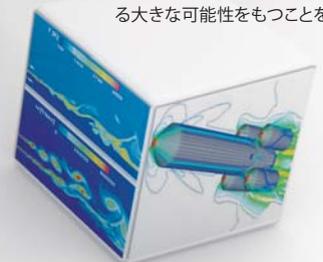
「アルダー転移」(1957~1960年)。純粋な剛体的斥力のみをもつ粒子系において、液相と固相の間の相転移が起こることが、シミュレーションによって発見された。

画像提供：豊木博泰

1943年、ENIACは円周率の値を2037桁まで計算。その桁数は、2010年には5兆桁に達した。



1997年、コンピュータ「ディープ・ブルー」が、ついにチェスの世界チャンピオンを破る。コンピュータが単なる道具をこえる大きな可能性をもつことを証明。



「NWT(数値風洞)」は、航空機や宇宙輸送機のまわりの流体解析シミュレーションの基盤をつくった。画像提供：JAXA

天文シミュレーション専用計算機「GRAPE」は多数の天体の重力相互作用を計算。太陽系の形成過程で、複数の原始惑星が支配的に成長していくことを発見(1997年)。  
画像提供：小久保英一郎

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.3, Sep 2011

© Computational Materials Science Initiative, 2011 All rights reserved  
CMSI(計算物質科学イニシアティブ)は、文部科学省「HPCI戦略プログラム」分野2<新物質・エネルギー創成>を推進する研究ネットワークです。

発行 計算物質科学イニシアティブ

編集 CMSI 広報小委員会

事務局 東京大学 物性研究所内 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

tel. 04-7136-3279 fax. 04-7136-3441 <http://cms-initiative.jp> ISSN 2185-7091

制作協力：サイテック・コミュニケーションズ デザイン：高田事務所

