

「H P C I 戦略プログラム」
分野 2 新物質・エネルギー創成

成果報告書（平成 24 年度）

平成 2 5 年 5 月 2 9 日作成

平成 2 6 年 5 月 2 9 日改訂（2 4 年度繰越分追加）

東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター



計算物質科学イニシアティブ 統括責任者

常行真司

【目次】
「HPCI 戦略プログラム」 分野 2 新物質・エネルギー創成 平成24年度
成果報告書

項目	頁
1. 業務の目的	1
2. 平成 24年度(報告年度)の実施内容	1
2. 1 当該年度(平成 24年度)の事業実施計画	1
2. 1. 1 戦略プログラムの総合的推進	1
2. 1. 2 戦略課題研究の本格実施	1
2. 1. 3 計算物質科学技術推進体制の構築	5
2. 2 実施内容(成果)	8
戦略目標	8
戦略目標についての説明	8
2. 2. 1 当該年度(平成 24年度)における研究成果	11
2. 2. 1. 1 研究開発課題(成果)	11
研究開発課題の成果概要	11
(1) 新量子相・新物質の基礎科学	13
(2) 次世代先端デバイス科学	23
(3) 分子機能と物質変換	32
(4) エネルギー変換	40
2. 2. 1. 2 計算科学技術推進体制構築(成果)	49
計算科学技術推進体制構築の成果概要	49
(1) 計算機資源の効率的マネジメント	53
(2) 人材育成	61
(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)	66
(4) 研究成果の普及	73
(5) 分野を超えた取り組みの推進	84
(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援	86
2. 2. 1. 3 研究開発課題・計算科学推進体制構築の評価	91
(1) CMSI 研究課題の見直し	91
(2) 分野 2 作業部会からのコメント	91
(3) 優先課題・重点配分課題の選定	93
(4) 平成 25 年度 CMSI 研究員・教員の配置	93
2. 2. 2 本格実施(平成 25 年度～27年度)における実施計画	96
2. 2. 2. 1 研究開発課題(計画)	96
(1) 新量子相・新物質の基礎科学	96
(2) 次世代先端デバイス科学	107
(3) 分子機能と物質変換	114
(4) エネルギー変換	123
(5) マルチスケール材料科学	133

2. 2. 2. 2	計算科学技術推進体制構築(計画).....	144
(1)	計算機資源の効率的マネジメント.....	145
(2)	人材育成.....	148
(3)	人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催).....	153
(4)	研究成果の普及.....	157
(5)	分野を超えた取り組みの推進.....	159
(6)	戦略分野の研究者を支える研究支援.....	160
2. 3	活動(運営委員会等の活動等).....	164
2. 4	実施体制.....	167
別表 1	平成24年度に於ける実施体制.....	174
別添 1	研究開発の年次計画.....	186
別添 2	計算科学技術推進体制構築の年次計画.....	192
別添 3	所要経費の見込額.....	196
2. 2	2. 2. 1. 2 計算科学技術推進体制構築(成果).....	(追加)
(7)	計算科学技術推進体制構築の強化(平成24年度繰越分、25年度に実施).....	199

添付資料1 平成24年度CMSI支援課題成果報告書

添付資料2 平成24年度CMSI研究課題成果のトピックス一覧

添付資料3 「京」試験利用成果報告書

添付資料4 平成24年度 外部への成果発表

添付資料5 イベント報告書

別冊1 第3回CMSI研究会論文集

別冊2 TCCI産官学連携シンポジウム講演資料集

別冊3 TORRENT NO.5 (日本語版)

別冊4 TORRENT NO.5 (英語版)

別冊5 TORRENT NO.6 (日本語版)

別冊6 TORRENT NO.6 (英語版)

別冊7 TORRENT NO.7 (日本語版)

別冊8 TORRENT NO.7 (英語版)

1. 業務の目的

【委託業務の題目】

「HPCI 戦略プログラム」 分野2 新物質・エネルギー創成

【戦略目標】

計算物質科学：基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ

特定高速電子計算機施設の性能を最大限発揮させ、戦略目標である「基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ」の実現に向け、世界最高水準の研究成果を創出するとともに、本分野における計算科学技術推進体制を構築することを目的とする。

2. 平成24年度(報告年度)の実施内容

2.1 当該年度(平成24年度)の事業実施計画

2.1.1 戦略プログラムの総合的推進

本事業は、戦略機関である東京大学物性研究所(代表機関)、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を中核とした、計算物質科学、計算分子科学、計算材料科学の各分野の代表者により運営するネットワーク型組織「計算物質科学イニシアティブ(英文名 Computational Materials Science Initiative, 略称 CMSI)」により推進する。

平成24年度の本事業は、平成21年度に実施したフィージビリティスタディ、平成22年度に実施した準備研究の成果、および、平成23年度より開始した研究に基づいて実施する。CMSIは以下の小委員会、および、委員会を設け、活動を推進する。「戦略課題小委員会(第1～4部会)」は、各研究開発課題の推進を実際に担当する研究者、および、課題の具体的内容に即したアドバイスを行うことのできる専門家から構成され、課題推進のための計画立案、実行、連絡、および、調整にあたる。「スパコン連携小委員会」では、特定高速電子計算機施設、および、各戦略機関の保有するスパコンなどを含む各種計算資源の、研究課題推進メンバーによる効率的・効果的な利用を支援するとともに、計算物質科学分野で広く用いられる共通ソフトの開発、共有、公開を推進する。「人材育成・教員小委員会」では、特定高速電子計算機施設を中核とするHPCIを戦略的に活用していくための人材育成や教育を目指した各種教育プログラムの立案・推進を担当する。「産官学連携小委員会」では、戦略目標である源流(基礎研究)から奔流(応用)へとつながる成果の有機的な連携を促進する。「広報小委員会」では、開発成果や分野共通ソフトを実験家、企業内研究開発担当者、非専門家、さらには一般の方々に対して広く公表・公開することを通じて、本分野に対する理解と成果の一層の有効活用を促進する。統括責任者の諮問機関である「企画室会議」では、各小委員会での課題を含めた議案を立案、整理し、運営委員会で議案を検討後、運営協議会にて議案の承認を受け、事業を推進していく。

なお CMSI の運営には、戦略機関に加え、教育拠点として東北大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、金沢大学、神戸大学、総合研究大学院大学、豊橋技術科学大学、産官学連携拠点として物質・材料研究機構、産業技術総合研究所の各協力機関が参加する。

2.1.2 戦略課題研究の本格実施

平成 23 年度に本格実施研究にて推進した研究課題に対する「アプリケーション並列化調査」の結果、平成 24 年 1 月 31 日に開催した「研究課題評価会議」の結果、および、HPCI 戦略プログラム分野 2 作業部会委員からのコメントを反映し、平成 24 年度は以下の重点研究を推進する。これらの研究課題には、特定高速電子計算機施設の計算資源を優先的に割り当てる。また、文科省が平成 23 年度まで推進した「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」プロジェクトにおいて開発された中核アプリケーションソフトウェアを活用した研究開発を推進し、世界最高水準の研究開発成果創出を目指す。

平成 24 年度に推進する「重点研究課題」、ポスト重点課題として支援を受ける「特別支援課題」、若手を中心とした先端的な研究として支援を受ける「支援課題」は、平成 24 年 10 月に開催する、重点課題見直しに関する意見交換会、平成 24 年度 12 月に開催する CMSI 研究会での成果報告書とその後に行われる評価会議、および、HPCI 戦略プログラム推進委員会が主導する作業部会会議からのコメント等を反映させ、平成 25 年度に推進すべき研究課題を選定する。

以下、4つの戦略課題小委員会の中で平成 24 年度重点課題として選定された課題の概要と、平成 24 年度の活動計画を示す。尚、重点課題 7 の課題は、平成 23 年度に作業部会からのコメントを踏まえて 2 回の厳密な審査会を開き、特定高速電子計算機施設を利用して成果が創出可能なテーマとして平成 24 年度新規に開始する。

1) 新量子相・新物質の基礎科学

重点課題 1 「相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明」

第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算に基づき、電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究、強相関電子系の励起ダイナミックスの研究、新しい量子相・量子臨界現象に関する研究を推進する。

平成 24 年度においては、本テーマを以下の 3つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を推進する。

①電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究

第一原理有効模型を導出し、この有効模型を高精度ソルバーで解くという一貫したハイブリッド複手法 (MACE) の超並列実装により、京で 10 万コア以上を要する制限 RPA 計算と多変数変分モンテカルロ計算を実行し、強相関電子系の現実物質の物性の解明と予測を進める。特に未解明の超伝導体と量子スピン液体を含む新奇量子液体について、現実物質で生じる現象の機構解明を進め、新しい現象を予測する。

②強相関電子系の励起ダイナミックスの研究

動的密度行列繰り込み群法、時間依存密度行列繰り込み群法、数値的厳密対角化法などを用いて、フォノンと結合したモット絶縁体の非平衡励起ダイナミックスと非線形光学応答、一次元量子スピン系の不純物誘起スピンダイナミックス、低次元強相関電子系の外場誘起相転移にともなう過渡ダイナミックスなどの計算を推進し、量子ビームや超高速分光の実験グループとの情報交換を行いながら、低次元強相関電子系の励起ダイナミックスの解明をめざす。

③量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究

種々の量子スピン模型、低次元量子模型に対して「京」の試験利用を継続して、9月以降の大規模並列計算実施に向けたプログラムの高度化をすすめるとともに、量子スピン系や光格子系におけるスピン液体相、脱閉じ込め臨界現象など、新奇な臨界特性の数値検証を行う。同時に、実験的な実現の可能性について検討する。

重点課題 2 「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」

電子状態・動力学・熱揺らぎの取り扱いをコアエレメントとして革新的な発展を図り、それらの融和的な理解と練成に基づいた新しい分子理論の展開によって、超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測、分子における電子の動的過程と多体量子動力学、凝縮分子科学系における揺らぎと遅いダイナミクスの解明を目指す。

平成 24 年度においては本テーマを以下の 3 つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を推進する。

① 高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測

平成 24 年度は、前年度に超並列実装を行った分子求積 MP2 法と MP2-F12 法を用い、ナノ炭素材料の大規模なプロダクションランを行うと共に、高次電子相関法への拡張を検討する。更に、相対論的電子状態理論と相関因子を用いたプロジェクターモンテカルロ法の開発を進め、重元素系の材料設計や、モデルメタルクラスターの計算による希土類の代替合金の探索を、京速計算機を用いて実現可能にすることを旨とする。

② 子における電子の動的過程と多体量子動力学

平成 24 年度は、新電子状態の創成とそれに伴う化学反応の制御を目指すため、高塚らが開発してきたレーザー場中の非断熱電子動力学理論のアルゴリズムの超並列実行をおこなう。加えて、従来量子化学の枠組みでは考えられたことのない、ポテンシャルエネルギー曲面が独立しては意味を持たないような超縮重電子状態での非断熱電子動力学理論のアルゴリズムの超並列実行をおこなう。また、反応分子系において、電子動力学が本質的に必要な部分と、それ以外の骨格部位を接続して大規模な分子に拡張するためのハイブリッド計算のための準備をおこなう。また、高塚らが新たに構築した分子の多体半古典力学をタンパクのレベルで応用するための超並列計算をおこなう。

③ 凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス

平成 24 年度は、非線形分光計算に基づく液体の揺らぎ、状態変化ダイナミクスの解析、タンパクの構造・安定性の解析のための MC-MOZ 法の高精度化と並列効率の向上に取り組むとともに、蛋白質の構造スイッチングダイナミクスの例としてミオシン分子モーターの運動を取り上げ、分子モーター解析の新規計算法を開発する。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、京都大学基礎物理学研究所、神戸大学大学院システム情報学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

2) 次世代先端デバイス科学

重点課題 3 「密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究」

10nm スケールのナノ構造体に対する、密度汎関数理論による第一原理計算を、特定高速電子計算機施設で実行可能にする高速計算技法を確立し、ナノ構造体の原子・電子構造とデバイス特性、構造体生成の機構を明らかにする。さらに輸送現象、過渡現象を扱うシミュレーション技法を確立し、ナノ接合系での電子、熱、原子の輸送特性を明らかにし、次々世代デバイスシミュレータ技術の基盤を構築する。

平成 24 年度は上記目標を達成するため、以下の 4 点の研究開発課題を遂行する。①「京」全体の約 3 分の 2 のシステムを用いて実効性能 3.08PFLOPS を達成した (2011 年 Gordon Bell Prize) RSDFT (Real-Space-Density-Functional-Theory) コードを高機能化する。とくに電場下でのワイヤーの電子状態計算を可能にし、デバイス動作化でのチャネル分布を明らかにする。またスピン自由度への高機能化により、新たな材料探索研究を開始する。②大規模量子論的ダイナミクス計算を目指して、Car-Parrinello 分子動力学法と

RSDFT を結合させたプログラムを開発し、マルチコア・超並列アーキテクチャでの高度チューニングを行う。③ オーダーN手法であるCONQUESTコードの高度チューニングにより、「京」の数十万コアでの並列計算を実行し、ヘテロエピタキシャル成長の初期過程の解明を目指す。④ コンダクタンス計算コードとRSDFTとの統合化を開始する。

なお、大阪大学大学院工学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

3) 分子機能と物質変換

重点課題4 「全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開」

ウイルスの全原子シミュレーションやウイルスタンパク質の全電子計算等を実行することにより、感染機構や免疫機構、また抗ウイルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにし、計算科学によるウイルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。

平成24年度は上記目標を達成するため、modylas や FMO を用いて「京」を用いたウイルスの丸ごとシミュレーションを開始する。同時に、ウイルスの感染初期過程を明らかにするために、レセプターとウイルスとの特異な相互作用を定量的に記述する自由エネルギー計算を開始する。

なお、名古屋大学大学院工学研究科、神戸大学大学院システム情報学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

4) エネルギー変換

重点課題5 「燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究」

電気化学環境下での現実的なシミュレーションを実現し、新規材料として候補に挙げられている遷移金属酸化物電極や炭化水素系電解質膜などの計算を行い、実験家との協力体制の下で機能性の理論予測等を行う。これらを通じて燃料電池機能に関する理論体系を確立し、実効的な応用を図る。

平成24年度は上記目標を達成するため、①第一原理分子動力学計算プログラム(STATE)の10万並列を目指した開発、②拡張アンサンブルおよび多配置平均場法を用いた電気化学シミュレーション技法の高度化、を行い白金上の水素・酸素発生反応等の定量的計算を可能にする。これらに基づき、実効的機能性予測の手法確立を目指す。

なお、大阪大学大学院工学研究科、東北大学原子分子材料科学高等研究機構とは、委託契約を結んで推進する。

重点課題6 「水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性」

ハイドレートの有効利用を実現するために、熱と物質の移動を取り入れたシミュレーションを行い、生成解離過程や熱力学的安定性を明らかにし、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。

平成24年度は上記目標を達成するため、メタンハイドレート温度、圧力、組成に対する相挙動を明らかにして、生成解離の熱力学量の予測を行う。さらに、メタンハイドレートの中・大規模分子動力学シミュレーションを行い、熱伝導率等を指標にしながら熱浴の適切な配置方法やその他の外部条件を検討する。これに基づいて、必要な温度圧力調整法を組み込み、本格的なシミュレーションの準備を整え、生成融解機構を解明して実用への指針を供することを目指す。また、水素ハイドレートに関しては、第一原理計算や水素移動の量子論的取り扱いも含めて、その安定性の予測法を確立する。

なお、岡山大学自然科学研究科とは、委託契約を結んで推進する。

重点課題7 「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」

飛躍的に優れた構造材料や耐熱材料等の開発は、エネルギー変換機器の効率の飛躍的向上、輸送機器の

超軽量化による省エネ化など、エネルギーの有効利用のために不可欠の課題である。こうした実用材料は多結晶体であり、種々の析出相や欠陥で構成される内部組織を持ち、それらが機能を支配している。こうした材料の高精度設計のために、ミクロの電子・原子の振り舞いからメゾの内部組織の構造や特性を理解し、マクロの機械的性質や機能を予測するマルチスケール組織設計・評価技術の開発が必要である。そのために、各結晶相のみならず、異相界面・粒界・転位等の大規模複雑構造の第一原理計算を行い、合金成分・不純物との相互作用を明らかにするとともに、それらを Phase Field 法に繋げる手法を確立する。

平成 24 年度は、鉄鋼材料中の Fe/析出相界面の構造モデルの構築、OpenMX を用いたテスト計算を進める。鉄鋼材料を中心に複雑な粒界構造や転位芯構造のモデルの構築を進め、OpenMX の適用を開始する。また、QMAS や TOMBO を用いた各種解析(局所エネルギー・局所応力、電子状態等)の準備、適用を進める。さらに、こうした第一原理計算を Phase Field 法に繋げることで内部組織を設計する技術を検討する。

なお、産業技術総合研究所関西センターとは、委託契約を結んで推進する。

2.1.3 計算科学技術推進体制の構築

1) 計算機資源の効率的マネジメント

研究の進展に合わせ柔軟な計算資源配分を行うため、重点課題、特別支援課題、支援課題の見直しを毎年行う。新規テーマを発掘する方策の一つとして、参加研究所の共同利用スパコンの運営委員会と連携し、共同利用スパコン利用者の課題より、特定高速電子計算機施設に適した課題を発掘して CMSI が開催する研究会へ投稿し、新たな支援課題として評価を受けることを促す。平成 23 年度の本格実施研究においては、物性研究所と分子研究所に関して共同利用スパコンの一部を活用して、大規模並列実行の試験的運用を行った。平成 24 年度についてもこれを継続するとともに、不足する計算資源の補填をするため、大学情報基盤センターの計算資源を借用し、重点課題の実施、および、次の重点課題として準備している特別支援課題、および支援課題に用いられるプログラム開発や性能評価を推進する。

また、平成 24 年中に共用が開始される特定高速電子計算機施設の戦略利用として、重点課題の研究を推進するとともに、一部をアプリケーション高度化支援のために利用し、特定高速電子計算機施設の一般利用課題として申請する研究課題の支援を行う。また、特定高速電子計算機施設で計算された結果を処理加工するために平成 23 年度に CMSI 神戸拠点に導入したポスト処理システムの活用を促進し、成果に結び付ける。さらに、物性研に導入したハイブリッド並列計算用 PC クラスタシステム(psi)を、並列化の初心者から高度化プログラムの動作確認、また、企業の方のトライアル利用等、幅広い用途で利用可能なように運用の検討を行い、並列化計算の分野振興を図る。さらに、計算物質科学で得られた結果を一般社会にアピールする際に重要となる、可視化技術を強化するため、物性研に可視化アプリケーションを設置して利用促進を図る。

なお、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とは、委託契約を結んで推進する。

2) 人材育成

計算物質科学の振興を図るとともに、特定高速電子計算機施設を中核とする HPCI を利用して国家的重要課題に取り組むことができる人材を育成する。

平成 24 年度は、CMSI 特任教員として採用したメンバーを中核とし、大学院講義、サマースクール、集中実習、ワークショップ、チュートリアルコースを国内外で実施するとともに、拠点大学方式にもとづいた、科目提供制度、単位互換制度、連携大学院制度を具体的にスタートさせる。また、講義や講習会をビデオサーバによる配信システムを活用し、特に若手研究者や学生への計算物質科学の振興を図る。さらに、実験研究者や企業研究者にも開かれた各種研究集会、産業利用スクール等の充実と拡充を図る。

なお、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、名古屋大学大学院工学研究科、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター、神戸大学大学院システム情報学研究科とは、委託契約を結

んで推進する。

3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)

i) 産官学連携

分野振興の一環として、計算物質科学シミュレーションの産業分野への普及活動を行う。平成 24 年度は以下の活動を実施する:①計算シミュレーションを中核としたオープンイノベーションに関する認識を共有する為の産官学連続研究会や合同ワークショップの継続的開催。②CMSI で開発しているアプリケーションソフトの産業界への情報発信・紹介。また、アプリケーションソフトポータルサイトの立ち上げとプログラム講習会開催を実施する。③産官学連携協力機関を通じた産学連携活動の支援。

ii) 計算物質科学の分野振興と国際連携

平成 24 年度は、CMSI 研究会を引き続き開催するとともに、各課題グループ(部会)や他の戦略分野で共有した計算コードについて集中討論する研究会を開催する。また、滞在型国際ワークショップ、国際会議との連携会議を開催する。

海外の計算物質科学研究拠点とは、共同研究プロジェクトや国際会議の共催企画、若手研究者の派遣等を通じて連携を図り、国際的な研究ネットワークを構築する。

また、各戦略機関では、それぞれの専門領域の分野と関連の深い実験、計測研究者や企業の研究者を交えたシンポジウム等を開催し、計算物質科学の活用を促進する。

なお、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、産業技術総合研究所とは、委託契約を結んで推進する。

4) 研究成果の普及

平成 24 年度は、企業、高校生、大学学部生を含む一般の読者を想定した広報誌を定期発行する。従来の CMSI 内若手メンバーとともに、計算物質科学に関連する外部の方にも焦点をあてた内容とする。また、ホームページをより充実し、ニュース、研究成果、公開ソフトウェア情報、人材紹介、人材公募などの情報を発信することにより、企業、他分野との人材交流を図り、ソフトウェアの開発・公開をサポートする。ユーザーの視点に立ってアプリケーションの紹介や利用を促進する「カフェテリア」を立ち上げ、閲覧を開始するとともに、アプリケーションの効率的な開発に関する指針をまとめる。

なお、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とは、委託契約を結んで推進する。

5) 分野を超えた取組の推進

企画室の下に機動的な連携ワーキンググループを設けた活動を推進する。平成 23 年度に発足したアプリケーション作業部会は、平成 24 年度より将来の HPCI を検討する調査研究の委託事業に発展した。CMSI の各行事において、その調査研究活動を支援し、将来必要となるスパコンのアーキテクチャーに対して、アプリ側からの要望をぶつけ、サイエンスオリエンテッドで将来必要となるスパコンの姿を探る。

平成 23 年度より開始した元素戦略 WG 活動は、平成 24 年度は新規に発足する新元素戦略プロジェクトとの共同で定常的な活動として推進し、磁石、電池・触媒、電子材料、構造材料の個々の課題を包括して計算物質科学に必要とされる共通手法を検討し、課題横断的な関わり方を構築する。実験や計測のグループとのコミュニケーションを密にし、真に必要とされているシミュレーション技術の先行開発を試みる。

戦略プログラムの他分野との交流研究会、5分野交流研究会等も適宜開催し、それらを通じて、特定高速電子計算機施設の運営主体である計算科学研究機構との連携機能も強化し、共通言語となる高並列化計算手法での連携開発成果のそれぞれの分野への活用、応用を図る。

なお、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とは、委託契約を結んで推進する。

6) 戦略分野の研究者を支える研究支援

大規模並列計算を戦略分野の研究者に普及発展させるためには、計算資源を有する機関がその計算機の特長や特定高速電子計算機施設の特長を考慮しながらアプリケーションの高度化を推進することが望ましい。そこで、共同利用の計算資源を有する、物性研、分子研、金研、および、神戸拠点に拠点研究員を配置する。拠点研究員は、ある特定の研究課題に取り組むのではなく、戦略課題研究や分野振興に広く役立つアプリの高度化と、そのアプリの利用環境を整備することが主たる役割である。

拠点研究員は、年に2回程度の頻度で若手交流会を合宿形式で自らの企画で推進する。CMSI 外の若手も含めて計算物質科学研究者の輪を広げること、講師を招いた勉強会、進捗状況報告会、情報交換ミーティングを開催して、広い知見を得て、分野振興に役立てる。全体の取りまとめは、神戸拠点に配置予定の教員が担当する。

平成 23 年度より、AICS 内に CMSI の神戸拠点として東大物性研究所の分室を設置し、特定高速電子計算機施設を試験利用する、物性、分子、材料計算科学研究者の支援活動をスタートしている。平成 23 年度中に 2 名の特任教員が神戸計算科学研究機構内に常駐しており、平成 24 年度も継続して常駐し、特定高速電子計算機施設の試験利用、および、共用開始後の利用の支援を行う。また、平成 24 年度中に 1 名の拠点研究員と 1 名の教員を追加配置し、特定高速電子計算機施設の運営主体である計算科学研究機構の共通基盤研究や分野融合研究等と積極的に連携していく。トータルとして、AICS 内の CMSI 神戸拠点には、東大物性研常勤スタッフが教員 1 名、研究員 1 名、事務補佐員 2、神戸大常勤スタッフが教員 1 名の、合計 5 名が常駐する。これに加え、特定高速電子計算機施設を試験利用可能な期間に関しては、CMSI 神戸拠点には常時 10 名程度のメンバーが滞在する。常勤スタッフは、滞在中の研究者との間で特定高速電子計算機施設の利用ノウハウに関する情報交換を行い、ノウハウを蓄積して新たな利用者に継承していく役割を持つ。

なお、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、産業技術総合研究所とは、委託契約を結んで推進する。

2.1.4 計算科学技術推進体制の構築の強化（事業の遅延により、平成 25 年度に繰越し実施する）

計算科学技術による画期的な科学的成果並びに社会的課題の解決に資する成果の早期創出への要請に応じて、特定高速電子計算機施設のパフォーマンスをより一層活用できるように、HPCI 戦略プログラム 分野2の基盤整備を図るため、以下の項目を追加して実施する。

- 1) 計算機資源の効率的なマネジメントに関して、平成 24 年度の「京」共用開始後の「京」ユーザー増加に伴いプリ処理、および、ポスト処理のニーズに合わせ、「京」向けプリ・ポストシステムの増強整備を追加して行う。
- 2) 人材育成に関して、CMSI 特任教員を配置しない教育拠点を含めた 9 大学の教育拠点全てに対し、不足している配信システムを整備配置するとともに、配信中核施設と配信システムの再整備を行い、教育連携体制を整える。
- 3) 人的ネットワークの形成における産官学連携に関して、①開発したアプリケーションソフトウェアを普及、発展させるために必要となる、マニュアルや GUI、機能拡張、バグ FIX 等の整備。②アプリケーションの開発・および普及のために、アプリケーションの開発、格納、および、テスト利用等を行うためのサーバの整備、を行う。

2.2 実施内容(成果)

戦略目標	計算物質科学:基礎科学の源流からデバイス機能とエネルギー変換を操る奔流へ			
研究開発課題の概要	基礎科学が生む新しい原理や、想像を超える概念から発する源流を実証・応用研究の海に繋る大河へと導いてはじめて、新時代のナノテクノロジーは真に次世代の産業構造を革新する力を持つ。そこで本課題では、物性科学分野、分子科学分野、材料科学分野にまたがる計算科学技術推進体制を構築する。この体制に基づき、デバイス機能制御、物質創成と物質変換、材料開発、エネルギー変換を通して、基礎科学の深化された概念が生む新量子相・新物質探索のアイデアや物質機能の深い理解を人類の課題解決へと導く道を、次世代スパコンシミュレーションによって切り拓く。			
計算科学技術推進体制構築の概要	参画各機関が保有する共同利用スーパーコンピュータと連携して計算機資源の効率的利用を図る。計算科学研究機構や大学情報基盤センター群等と連携しながら拠点大学方式により大学院教育を、講習会、ワークショップ等により社会人教育を実施する。研究会、国際会議、国際ワークショップ等により、国内外の人的ネットワークを形成する。神戸に数グループを派遣し、計算科学研究機構の計算科学者や異分野の計算科学者との連携を推進する。			
代表機関・組織名	国立大学法人東京大学物性研究所 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所、国立大学法人東北大学金属材料研究所			
提案者名	東京大学・物性研究所・所長 家 泰弘			
統括責任者	ふりがな 氏名	つねゆき しんじ 常行 真司	生年月日	西暦 1961年 5月 16日 (51歳) ※2013年 1月 1日現在
	所属部署	理学系研究科／物性研究所		役職 教授
	ふりがな 所在地	〒113-0033 とうきょうとぶんきょうくほんごう 東京都文京区本郷7-3-1		
	Tel	03-5841-4127		FAX 03-5841-4127
	E-mail	stsune@phys.s.u-tokyo.ac.jp		
	所属機関・ 組織の 産学官	「学」		
	エフォート	20%		
事務連絡 担当者 ※	ふりがな 氏名	かわしま なおき 川島 直輝	役職	教授
	所属部署	物性研究所		
	ふりがな 所在地	〒277-8581 ちばけんかしわしかの葉 千葉県柏市柏の葉5-1-5		
	Tel	04-7136-3260		FAX 04-7136-3264
	E-mail	kawashima@issp.u-tokyo.ac.jp		
経費見込・ 実績額 (概算)	本年度 493.5 百万円 (平成24年度実績) 総額 2,525 百万円 (平成22年度から27年度の計6ヵ年)			

【戦略目標】

戦略目標： 計算物質科学:基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ

戦略目標についての説明:

半導体材料や高分子材料など、20世紀の科学技術研究の中で生まれた物質群は、100種類ほどの元素の無限ともいえる組み合わせの中から見出され、特異な機能や新しい現象の発現を通して、現代社会の産業基盤を形成してきた。これらの物質や材料をミクロな視点に立って研究する物質科学は、物性科学、分子科学、材料科学という3つの学問分野にまたがり、基礎研究と応用研究を繋ぐ役割をも担う、広大な学問分野である。第2分野戦略機関は、これら3分野で独立にコミュニティを形成してきた計算物質科学研究者を結集し、新物質創成の一層の進展を図るとともに、新規エネルギー創成のための基盤的技術開発と持続可能社会の構築につながる研究開発を目指すものである。

物性科学は 10^{23} ほどの膨大な数の原子、分子多体系から成る自然を理解する営みを通じて、相転移に伴う自発的対称性の破れ、集団運動励起やトポロジー励起、マクロ量子現象といった基礎科学を一新する普遍概念をもたらし、素粒子物理学から経済学まで広がる様々な学問分野に大きな影響を与えてきた。一方分子科学は、化学反応の理解とそれに基づく新しい分子・分子集合体の創製を通じて、物質科学研究に大きな展開をもたらしてきた。また材料科学は、金属組織や粒界、複合材料など、材料としての利用に係る諸問題の解決を目指してきた。これらの成果は、20世紀以降の産業・先端技術革新を生み出す基盤となった。トランジスタ、トンネルダイオード、半導体レーザー、集積回路、巨大磁気抵抗素子、CCD(電荷結合素子)、有機ELなどの革新デバイス、合成樹脂や導電性高分子などの新材料は、ノーベル賞の受賞対象ともなった物質科学の基礎研究が生んだ例である。同じく物質科学の精華である超伝導は、最先端の医療用MRI の超伝導マグネットに使われ、さらに超伝導リアモーターやエネルギー損失の無い電力線として実用化されようとしている。高効率の太陽電池や高効率熱電素子など、地球規模のエネルギー問題解決に向けた新しい概念に基づくデバイスも、物質科学の基礎研究に基づいて提案され始めている。

20 世紀の要素解明から21 世紀には集団・階層解明と機能制御の時代に入ったと言われる現代科学の中核として、物質科学における基礎研究のフロンティアでは、量子ホール効果、トポロジー絶縁体、スピン液体、量子臨界や脱閉じ込めといった新概念が次々に発見され、自然の新機構解明への挑戦が続けられている。概念の革新は次世代、次々世代の最先端技術と応用へ展開する研究をますます活性化させているが、この基礎から応用への多段階リレーは、高度な蓄積を持つわが国を含む極めて限られた国でのみ追求し得る。大規模数値シミュレーションは、古くFermi-Pasta-Ulam の非線形励起・再起現象、剛体球のアルダー転移などの概念革新への寄与に始まり、現代量子多体系では、分数量子ホール効果の数値検証、相転移と臨界現象の解明、高温超伝導の機構提案など、物質科学の基礎研究に欠かせぬものとなった。一方応用へのリレーに、第一原理計算の定量的物性予測は今や無くてはならない。

そこで第2分野戦略機関では、物性科学、分子科学、材料科学の第一線で活躍する計算物質科学研究者を結集し、世界一、二を争うわが国の基礎研究を源流として次世代の産業革新へと至る物質科学の流れを、次世代スーパーコンピュータを駆使することで奔流に変えることを目標とする。これは国家の趨勢さえ決め得る未来の最先端技術のための価値ある投資である。この信念に基づき、異分野間の連携による相乗効果が最大限に発揮されるように配慮して、源流を3つのテーマからなる大河へと導くように4つの戦略課題を設定し、国家的・社会的見地から重要な基礎研究を推進する。

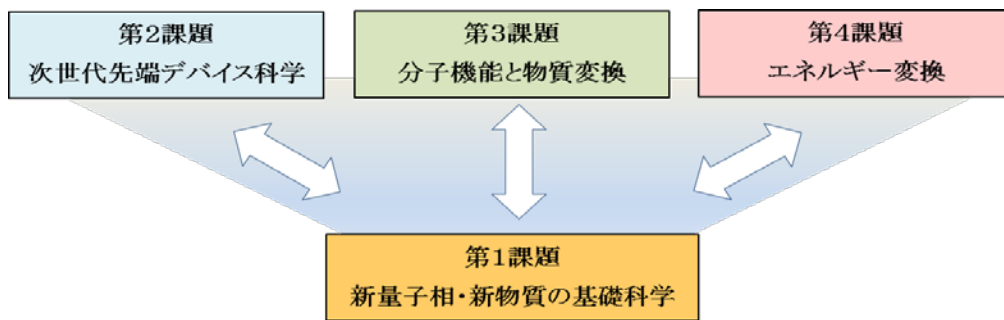


図2.2-1 4つの戦略課題の関連

第1課題「新量子相・新物質の基礎科学」では源流探索のために、研究分野の枠を超えて、粒子間の相互作用効果の強い分子系や凝縮物質(強相関量子多体系)を取り扱う強相関多体量子科学、計算科学の汎用手法を確立発展させるとともに、多体集団の励起状態や非平衡ダイナミクスの理解を飛躍させる。それにより、新奇な量子多体現象の発見、革新的な量子機能をもつ新物質の機構解明や新物質探索、化学反応や分子集団ダイナミクス制御、エネルギー変換や発光制御などの制御法の基礎の解明をめざす。次世代スーパーコンピュータによって初めて明らかにできる、未踏の強相関効果、階層性と量子性が生む新量子相・励起現象の理解・発見と、基礎物質科学の解明が目標である。

第2課題「次世代先端デバイス科学」では、第1課題の成果を取り入れながら大規模多機能量子シミュレーション手法を確立し、物質機能の予測、新機能を有する新材料、新ナノ構造の探索と提唱を行い、次世代先端デバイス科学研究を推進する。国際半導体技術ロードマップ(ITRS)が指摘するように、線幅22nmを切る次世代先端デバイス開発では、裏打ちする科学的成果が枯渇し、大きな困難に直面している。密度汎関数法に基づく第一原理計算手法を極限まで大規模高速化し、次世代先端デバイスの特性を定量的に予測・解明し、その開発に寄与する。これにより、経験と蓄積のテクノロジーを演繹と予測のそれに進化させる。さらに第1課題で得られた新量子相、量子機能についての知見を取り入れ、新概念に基づくデバイス開発への道を拓く。

第3課題「分子機能と物質変換」では、第1課題の電子状態計算に基づいた分子間相互作用の高精度評価、多体性に起因する動的過程と凝縮系におけるゆらぎの理解等を源流とし、これをナノスケール分子や分子集団系における構造形成と機能発現の奔流へと展開する。比較的小さな分子単体からナノスケールの分子・分子集団系機能への飛躍を最も重要な要素として位置付け、その中でも特に社会的な要請が高い、自己組織化により形成されたナノスケールの分子や分子集団の構造に基づいて創生される機能、すなわち分子認識、物質分離、分子輸送等の分子機能や、環境との変化に富んだ相互作用下において分子の電子状態が創る豊かな分子機能を明らかにし、新分子機能の開発・制御へと展開する。

第4課題「エネルギー変換」では、21世紀の最重要課題としてエネルギー・環境問題を取り上げる。現在地球規模で進んでいる技術革新の鍵を握るのは、化学・電気・熱などのあらゆる形態のエネルギーの相互変換や効率的な貯蓄・利用であり、その技術を支えるのは物質科学的な総合的知識基盤である。物性・分子・材料科学として個別に発展した分野の結集の下、超大規模シミュレーション技術を開発してそれを最大活用することにより、種々の電池(燃料、太陽、リチウム)やエネルギー資源(ハイドレート、バイオマス)の既存技術に内在する問題の根本原因を明確にし、さらに次世代革新技術の創生につながる原理を探る。

2.2.1 当該年度(平成 24年度)における研究成果

2.2.1.1 研究開発課題(成果)

【研究開発課題の成果概要】

平成 24 年度は、平成 23 年度に実施した研究課題の評価会議において選定された、重点課題 7 件と、特別支援課題 12 件の研究課題を推進した。表 2.2.1.1-1 に、各部会で推進された研究課題の一覧を示す。2.2.1 では、各研究課題成果の総括を報告する。また、**添付資料 1**には平成 24 年度に推進した支援課題 1 件の研究成果報告書を示す。

添付資料 2には、各部会で推進する研究課題で得られた成果のトピックス一覧を示す。この成果は平成 24 年 12 月 3～5 日(月～水)に実施された CMSI 研究会の論文集(**別冊 1**)の中で詳細に報告されている。第 1 部会から 10 件、第 2 部会から 9 件、第 3 部会から 9 件、第 4 部会から 12 件の論文が掲載されている。また、平成 25 年度からの特別支援課題候補の材料課題から 3 件、分野振興に関連した研究課題は 6 件で、内、CMSI 支援課題、および、支援課題候補課題として報告された論文は 2 件であった。また、27 件のポスター発表があった。

添付資料 3には、平成 24 年度「京」の試験利用で創出された研究成果報告書 18 件を示す。「京」の試験利用は平成 23 年 4 月より平成 24 年 9 月までの 1 年半にわたり実施された。平成 23 年度まで、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プロジェクト(ナノ統合)で開発がすすめられた中核アプリ 6 本である、DDMRG(遠山:京大)、ALPS(藤堂:東大)、RSDFT(押山:東大)、modylas(岡崎:名大)、FMOinGAMSS(北浦:神戸大)、RISM(平田:立命館)の京試験利用枠は、平成 24 年度上期より CMSI が引き継いだ。また、ナノ統合付加機能アプリケーションで高並列化が進んでいた DC(中井:早稲田)、QMAS(石橋:産総研)の 2 本が平成 24 年度よりナノ統合枠に加えた。また、平成 23 年度に CMSI 評価委員による審査により選定された、7 本(gellan(天能:神戸大)、CONQUEST(宮崎:NIMS)、MACE(今田:東大)、PIQUANDY(信定:分子研)、REM(岡本:名大)、OpenMX(大谷:AIST)、STATE(杉野:東大))のアプリケーションソフトウェアに加え、平成 24 年度は RSPACE(小野:小野)、CASINO(前園:北陸先端大)、CPMD(館山:NIMS)の 3 件を選定した。これら 18 本のアプリケーションは、平成 24 年 9 月末からの「京」共用開始後、全て CMSI 重点課題、および、特別支援課題の研究課題に利用されている。

添付資料 4には、平成 24 年度に推進した各研究課題に関して外部発表されたリストの一覧を示す。全体の合計で、論文数は 301 件、総説・解説が 53 件、招待講演が国内会議 101 件、国際会議 147 件、査読のある学会への発表件数が、国内会議 73 件、国際会議 39 件であった。また、学会等での受賞も 15 件あった。

表 2.2.1.1-1 平成 24 年度 CMSI 重点課題・特別支援課題

部会	種別	部会内 No	研究代表者	課題名
第一部会	重点 1	i	今田正俊	相関の強い量子系の新量子相探索とダイナミクスの解明
		①	今田正俊	電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究
		②	遠山貴巳	強相関電子系の励起ダイナミクスの研究
		③	川島直輝	量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究
	重点 2	ii	天能 精一郎	電子状態・動力学・熱揺らぎの緩和と物質理論の新展開
		①	天能 精一郎	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測
		②	高塚和夫	分子における電子の動的過程と多体量子動力学
	③	斉藤真司	凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス	
第二部会	重点 3	i	押山淳	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究
	特別支援	ii	尾形修司	ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション
		iii	信定克幸	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発
		iv	斎藤峯雄	スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索
		v	常行真司	新材料探索
第三部会	重点 4	i	岡崎 進	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開
	特別支援	ii	岡本祐幸	拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明
		iii	松林伸幸	ポリモルフから生起する分子集団機能
		iv	中井浩巳	ナノ・生態系の反応制御と化学反応ダイナミクス
		v	江原正博	機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性
第四部会	重点 5	i	杉野修	燃料電池関連物質における基礎課程の大規模計算による研究
	重点 6	ii	田中秀樹	水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性
	重点 7	iii	香山正憲	金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発
	特別支援	vii	山下晃一	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算
		iv	吉田紀生	バイオマス利用に向けた酵素反応解析
		v	大谷実	高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究
		vi	浅井美博	ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション

2. 2. 1. 1(1) 新量子相・新物質の基礎科学

第1部会 代表者：天能精一郎(神戸大)、今田正俊(東京大)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

第1部会は新量子相、新物質を基礎科学的に解明するために、京による大規模数値計算を活用して、基礎科学的な成果を挙げ、さらにこれによって実験研究、応用研究へと展開する道筋を考えることを目標としている。また、物理学と化学の分野が協力して、新量子相・新物質の基礎科学解明に資する計算手法を発展させることも目標としている。京の本格運用の開始によって、各研究課題から多彩な成果が出始めた。超伝導機構の解明、強相関電子系に特有な非平衡・励起ダイナミクスの探索と解明、脱閉じ込め現象の存在に関するより大規模な検証、擬縮重電子状態のためのモデル空間量子モンテカルロ法の開発、非断熱電子動力学論のアルゴリズムの開発、水和に関する溶媒和自由エネルギーの高精度算出法の開発などで広範な成果を挙げた。

【部会活動】

第一部会は物理と化学の分野の研究者が一堂に会する基礎研究プロジェクトであり、分野横断での交流に特段の努力が傾けられた。具体的な交流を行う会議として、2012年8月20日(月)～25日(土)の期間、第一部会の夏の学校を蔵王で開催した(プログラムは報告書7に記載)。また、戦略分野第5と連携して、原子核、物性、分子科学の3分野を横断して、共通する計算手法の課題を議論する国際ワークショップ“GCOE interdisciplinary workshop on numerical methods for many-body correlations”を開催した(プログラムは報告書36に記載)。

第一部会の活動として、他の部会との連携検討や、実験家との交流、エネルギー関連課題との関係検討等を行った結果、平成25年度より3つの項目を束ねて実施し、部会外との連携研究を加速、強化するにいった。

2) 研究開発課題

i) 重点課題1: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明

[代表者] 今田正俊(東京大)

本重点課題では、第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算に基づき、電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究、強相関電子系の励起ダイナミクスの研究、新しい量子相・量子臨界現象に関する研究を推進する。

平成24年度においては本テーマを以下の3つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を推進した。特にスピン軌道相互作用の強い系の第一原理的な高精度計算のために、3つの研究項目が協力して研究を開始した。

① 研究項目 1: 電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究

[担当者] 今田正俊(東京大)、求幸年(東京大)、有田亮太郎(東京大)、中村和磨(東京大)、三宅隆(産総研)、青木秀夫(東京大)、高田康民(東京大)、黒木和彦(電通大)、

[研究目的]

第一原理的な電子状態計算法は、物質の性質を理解し応用する上で基礎的な重要性を持っている。特に電子相関の強い系—強相関電子系—は近年多くの基礎物理学的に意義の高い現象の発見が続き、基礎原理の解明による、新機能や新原理を用いた応用展開へ向けた期待と合わせて、電子状態解明法確立への期待は大きい。このような現象や物性の例として高温超伝導、スピン液体などの新奇量子液体、分数量子ホール効果やトポロジカル絶縁体のようなトポロジー効果などがある。最近ようやく、強相関電子系の持つ特徴的エネルギー階層構造を利用し、電子相関の強い系を第一原理的に解明するための計算が MACE(階層的強相関電子状態計算スキーム)によって可能になった。本プロジェクトの目的はMACEを方法論的に整備し、汎用的手法として確立して、「京」を活用して強相関電子系の物性解明、予測に役立てることである。

[実施内容]

平成 24年度は京の本格運用開始により、本格計算を進めた。鉄系超伝導体の物性解明や超伝導機構の追究、より一般に理論模型であるハバード模型の超伝導機構の解明、量子スピン液体状態の物性を示す有機導体の有効模型を高精度で解いてスピン液体発現機構を明らかにする研究、より基本的な模型である三角格子ハバード模型、フラストレートした量子スピン系のスピン液体発現機構の研究を進めた。またスピン軌道相互作用の大きな系に生じるトポロジカル相の物性に関する研究が進行している。

[成果概要]

高温超伝導体(銅酸化物と鉄系超伝導体)の超伝導機構の解明と有機導体の量子スピン液体機構解明、スピン軌道相互作用の強い物質へのMACEの適用が進んで成果を挙げている。

鉄系超伝導体・銅酸化物超伝導体における超伝導機構 鉄系超伝導体の第一原理有効模型を用いて、電子濃度 n の関数として磁気秩序パラメタの大きさを計算し、鉄系超伝導体の位置する電子濃度 $n = 1.2$, 相対相互作用値 $\lambda = 1$ 付近の状態が $n = 1$ を中心とするモット絶縁体の巨大な影響下にあることを明らかにしたが、この成果論文は 2012 年度に Physical Review Letters に掲載された。また正方格子ハバード模型の超伝導機構解明を行ない、超伝導相が実際にはほぼ相分離する領域に限定され、現実的には存在しないこと、一方超交換相互作用とサイト間クーロン相互作用を加えることによって相分離を抑えたまま超伝導相を保持しうることを示した。また超伝導機構は、短距離スピン相関と相分離不安定性近傍の電荷ゆらぎの相乗作用が重要であること、d波クーパー対の持つ二重占有の排除が凝縮エネルギーを生むことを明らかにした。これらの知見は物質設計を行なうにあたって重要な情報を与える。

有機伝導体の物性とスピン液体の機構 dmit 塩の、単バンドおよび 2-3 バンドでの2次元有効模型を求め、多変数変分モンテカルロ法で解くことでスピン液体発現の条件を追究するとともに、より簡単化された模型である、

フラストレーションのあるスピン模型でスピングャップのあるスピン液体状態を見出し、このスピン液体状態の励起構造と運動量依存性を解明した。

スピン軌道相互作用系への拡張 トポロジカル絶縁体やスピンホール効果などスピン軌道相互作用に起因した物理現象がトポロジカル絶縁相の応用を意識して注目を集めている。またトポロジカル絶縁体に電子相関効果が相乗するとき、電子相関効果によってトポロジカル絶縁体が生じることをすでに示していたが、このトポロジカル絶縁体への転移が非従来型の量子臨界現象であることを明らかにしつつある。またパイロクロア型のイリジウム化合物に見られる奇妙な伝導・磁性現象がこの物質の磁気秩序に伴う磁壁の寄与であることを明らかにし、今まで単純な反強磁性秩序を持つ絶縁相ではトポロジカルな効果での表面金属状態は安定化しにくいと考えられていた従来の理解を覆した。磁性と伝導がトポロジカルな効果で保持される界面で絡み合うことで、両者を結びつける現象の開拓につながる。

② 研究項目 2: 強相関電子系の励起ダイナミクスの研究

[担当者] 遠山貴巳(京都大)、町田昌彦(原子力機構)、前川禎通(原子力機構)

[研究目的]

励起ダイナミクスの研究によって得られる外場への応答の理論や量子ビームを用いたスペクトロスコーピーなどの実験に対する情報は、強相関基礎科学の深化に貢献し、また強相関電子系特有の電子内部自由度による量子効果を最大限活用した次世代新機能デバイスの設計指針構築は応用へとつながる。本研究では、強相関電子系・量子スピン系の電荷・スピン励起などの計算を通じて強相関電子系に特有な非平衡・励起ダイナミクスの探索と解明を進めるとともに、強相関効果を利用した光スイッチなど次世代デバイス創成指針の構築を目指す。そのために、量子ビームや超高速分光の実験グループとの連携を進める。

[実施内容]

動的密度行列繰り込み群法を用いて、フォノンと結合したモット絶縁体の3次非線形光学応答スペクトルを「京」において計算し、非線形光学応答に対するフォノンの効果を明らかにした。また、一次元量子スピン系の不純物誘起スピンダイナミクスを、動的密度行列繰り込み群法を用いて計算し、今後J-PARCで行われる予定の非弾性中性子散乱実験に対する予測を行った。さらに、厳密対角化法により、一次元強相関電子系の光で誘起された状態の過渡ダイナミクスを計算し、光誘起電荷相関増大という現象を得た。

[成果概要]

- ① 電子相関とともに電子・格子相互作用の効果を取り入れた一次元モット絶縁体の模型(一次元ハバード・ホルシュタイン模型)の、3次の非線形光学応答スペクトルに着目した研究を行った。応答スペクトルの強度が増大すれば、光スイッチなどの光材料として有利である。そこで、電子・格子相互作用が、強度増大に寄与するのか明らかにするための計算を「京」にて実施した。残念ながら、電子・格子相互作用は強度の増大には寄与しないことがわかった。しかし、新たに低エネルギー領域において格子振動にアシストされたスピン励起が非線形光学応答に現れることを明らかにした。
- ② 無機スピン・パイエルス物質 CuGeO_3 の非弾性中性子散乱実験が最近 J-PARC で行われていることに刺激を受け、非磁性不純物によって乱されたスピン・パイエルス系のスピン励起を動的密度行列繰り込み群法を用いて調べた。幅広い周波数・運動量領域で動的スピン相関関数を計算した結果、不純物をドーピングするとスピン・パイエルス秩序状態のエネルギーギャップが変化し、そのギャップの中に反強磁性ギャップレスモードが現れる様子が見られた。さらに、この励起構造は運動量や不純物配置の仕方、不純物に関わる相互作用の強さに大きく依存することがわかった。この成果は、今後 J-PARC で行われる予定の非弾性中性子散乱実験に役立つと期待される。
- ③ 電場によって非平衡状態に駆動された強相関電子系では、しばしば顕著な状態変化が起きる。そのような状態変化の一般的特徴を解明するため、単純な模型として一次元拡張ハバード模型を採用し、スピン密度波状態が電荷密度波状態に、またはその逆の変化が生まれる条件を調べた。時間依存ランチョス法を用いた厳密対角化計算により、電場によって与えられたエネルギーに対応する励起状態がその状態変化に重要な役割を果たしているという結果を得た。この成果は Physical Review Letter誌に掲載された。

③ 研究項目 3: 量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究

[担当者] 川島直輝(東京大)、藤堂眞治(東京大)、宮下精二(東京大)、岡部豊(首都大)、鈴木隆史(兵庫県立大)、原田健自(京都大)、渡辺宙志(東京大)、坂下達哉(東京大)、大久保毅(東京大)、正木晶子(東京大)、富田裕介(芝浦工大)、設楽秀之(富士通)

[研究目的]

低次元量子系は自由度間の相関効果が非自明な形で現れる系の典型であり、銅酸化物超伝導体や近年盛んに研究されている鉄系超伝導体でも、その2次元性と超伝導発現機構の間の関連が議論されている。このような学術的な流れに触発されて、従来知られていなかったカテゴリの量子相転移、とくに、対称性の破れという範疇にはいらない臨界現象についてもその可能性が指摘されてきている。一方で、レーザートラップ中での極低温原子系の凝縮が成功して以来、理想的な実験場としての光格子系が脚光を浴び、量子コンピュータへの期待が高まっているが、これについても、実際にどのような系が実現されているかの同定を初めとして、計算物理との協調が不可欠なフェーズにある。本課題項目では、このような背景を念頭におき、多体問題のなかで自発的に生じる位相欠陥などの特異点・特異線や、外部的に付加されるランダムネスに関連する物性の基礎を明らかにすることによって、これら課題の解決に寄与する新しい知見を得ることを目的とする。

[実施内容]

種々の量子スピン系、ボーズ系に対する「京」を利用した大規模並列計算実施を通じて、低次元磁性体や光格子系におけるスピン液体相、脱閉じ込め臨界現象など、新奇な臨界特性の数値検証を行った。本課題ではグランドチャレンジ(ナノ統合)プロジェクトで開発を続けてきた ALPS を一部本プロジェクト用に改変して利用した。ALPS については、すでにKコンピュータ上で約 20,000 ノードを利用した性能試験を実施し、成績を上げている。月に1度メンバが集まり集中的に討論する会合を開催した。この結果、物理的な関心の焦点が整理され、その解明に必要な技術的な問題点も明確になった。特に、脱閉じ込め転移の解明に向けた計算を実施した。この転移については解析的な近似理論から、スピン自由度をとまなう渦欠陥の乖離であるという描像が立てられており、ここから通常の自発的対称性の破れとは異なるタイプの臨界現象が予想されている。一方、これを弱い1次相転移であるとする見解もあり、より確度の高い結論を得るには、予想される転移点での相関長よりも大きな系に関する計算を行う必要があった。このため、「京」コンピュータの大規模利用開始にあわせて、1辺の長さが256程度の系までについてその転移現象を調べた。

[成果概要]

種々の量子スピン模型、低次元量子模型に対して、9月までの段階では京の試験利用を継続して大規模並列計算実施に向けたプログラムの高度化をすすめ、10月以降は、京を利用して新奇な臨界特性の数値検証を行った。その結果、ベリー位相効果が本質的な役割を果たすと考えられる脱閉じ込め量子臨界現象を従来よりも高い信頼性で評価することに成功した。特に、臨界現象を特徴づける重要な指標である臨界指数について従来の評価からの系統的なずれを発見した。また、新しいタイプの量子相の実験的な実現の可能性についても検討し、整合粒子密度における光格子系において従来期待されていなかった量子相が見出される可能性のあることが分かった。

ii)重点課題2:電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

[代表者] 天能精一郎(神戸大)

本重点課題の目的は、電子状態・動力学・熱揺らぎの取り扱いをコアエレメントとして革新的な発展を図り、それらの融和的な理解と練成に基づいた新しい分子理論を推進する事である。超並列計算環境を高度に活用する事により、これまで取り扱いが困難であった複数の物理原理が絡み合う実在系の分子科学を発展し、物質設計・生命・エネルギー問題を基礎原理から解決する役割を担う。

平成24年度においては本テーマを以下の3つの項目に分け、それぞれの項目で示す成果を目指して研究を推進した。

① 研究項目 1:超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測

[担当者] 天能精一郎(神戸大)、柳井毅(分子研)、江原正博(分子研)、安田耕二(名古屋大)、波田雅彦(首都大)、大塚勇起(神戸大)

[研究目的]

露わに電子相関を考慮したF12法を始めとするポストハートリー・フォック電子状態理論の超並列計算を「京」コンピューターで実行し、ナノスケールの分子系で完全基底関数極限に近い高精度計算を達成する。炭素材料や含金属ナノ材料の構造やエナジेटィクス、電子物性に関する知見を飛躍的に発展させ、デバイス材料の物質設計につなげる。更に、エネルギーやレアアース等、我が国が直面している問題を計算科学の立場から物質の基本性質である電子状態を調べる事によりアプローチする。相対論的電子状態理論や強い電子相関含む励起状態の取り扱いを可能にする量子モンテカルロ法を発展させる事により、重元素を含む分子設計や、モデルメタルクラスターの計算による希土類の代替合金探索を、京速計算機を用いて実現することを目指す。

[実施内容]

「京」コンピューターを用いて超並列実装を行って来たハートリーフォック法と、分子求積MP2法、MP2-F12法を用いて、幾つかの炭素材料分子に対する計算を行った。又、重い元素を含む分子の定量的な計算を可能にするための相対論効果を考慮した四成分MP2-F12法の開発と、メタルクラスター等に見られる擬縮重電子状態の基底状態と励起状態を完全CI解程度に精度良く求める事を念頭に置いたモデル空間量子モンテカルロ法の開発を行った。

[成果概要]

平成24年度は課題目標を達成するために、以下の研究を行った。

1) 露わに相関した二次の摂動論(MP2-F12法)に関しては、GELLANプログラムへの超並列実装が完了し、100原子を超える分子の基底関数極限での計算が可能となっている。京コンピューターの供用開始に伴い、これを用いた応用研究の一環として、実装されたMP2-F12法を用いて、有機伝導体として有望な炭素材料の計算を行った。フラーレンの完全基底極限でのエネルギーと構造を算出し、フラーレンのような大きな分子でもMP2-F12法のような高精度な理論が適用可能であることを証明した。また、フラーレン二量体の相互作用エネルギーの算出では、分散相互作用を正確に見積もることができるSCS-MP2-F12法を適用し、最安定距離に関して実験値と比較して良好な結果を得ることに成功した。フラーレン二量体の分子間に働く分散相互作用は、従来広く用いられている密度汎関数理論ではまったく取り込むことができない効果であり、分子間相互作用の計算におけるSCS-MP2-F12法の有用性を証明することができた。この結果は、有機伝導体の局所的な構造を計算に基づいて予測することができることを意味しており、新規デバイス設計を行う上で、計算化学によって有用な知見を提供できるものと考えられる。また、実験分野ではルイス塩基などの外部修飾を行うことで電子的性質を変化させたフラーレン誘導体が注目されつつあるが、他にどのような外部修飾が可能であるかについての知見は

未だ乏しく、計算化学に基づいた提案が望まれる。本課題で実装した SCS-MP2-F12 法を用いて、フラーレンの外部修飾基の解析を行ったところ、N-ヘテロ環状カルベンのようなルイス塩基は、嵩高いアルキル置換基による分散相互作用でフラーレンを外部修飾することができていることが明らかになった。このことは、適切な置換基を導入することで、ルイス塩基だけではなく、更に多様な外部修飾が可能であることを示唆しており、新しい炭素材料開発への足がかりとなるものと期待される。

2) 重い原子を含む分子の高精度計算を実現するために、ノーペア近似に基づく新規のジェミナル展開法を発展させるとともに F12 法の四成分相対論への拡張を行った。Levy-Leblend 型の方程式で非相対論極限でのカस्प条件を満たすキネティックバランスを考慮したジェミナル基底を導出し、更に、大成分の完全基底への直交成分を利用する事により、実用的な計算に適した相対論的な強い直交射影演算子を発展させた。以上を二次のメラー・プレセット摂動理論に実装し、そのパフォーマンスを調べた。又、相対論と電子相関のクロスタームが Xe^{52+} を超えると顕著となる事を示し、AuH についても平衡核間距離や振動周波数について相対論的な F12 法が著しく実験との一致を改善する事を示した。

3) 強い電子相関の系に対する正確な電子状態計算に関しては、配位空間での量子モンテカルロ法の一つである PMC-SD 法のプログラムの開発を行ってきたが、強相関電子系や励起状態が計算出来ないという欠点があった。そこで、分子の電子状態理論では比較的良く知られて来た、エネルギー依存分割(EDP)に基づく有効ハミルトニアンを統計的に求める、モデル空間モンテカルロ(MSQMC)法を新たに提案した。MSQMC 法では、ヒルベルト空間をモデル空間(P-空間)とそれ以外の Q-空間とに分割し、Q-空間からの寄与をモデル空間内での有効ハミルトニアンに取り込む事により、多状態を同時に取り扱う事が可能なモンテカルロ法である。解かれるべき方程式はモデル空間のスレーター行列式に対して独立であり、超並列計算に適している。今後、MSQMC 法の超並列実装を行い、メタルクラスターの励起状態等、従来の電子状態理論では取り扱いが困難であった計算に適用する予定である。

② 研究項目 2: 分子における電子の動的過程と多体量子動力学

[担当者] 高塚和夫(東大)、河野裕彦(東北大)

[研究目的]

平成 24 年度は、新電子状態の創成とそれに伴う化学反応の制御を目指すため、高塚らが開発してきたレーザー場中の非断熱電子動力学理論のアルゴリズムの超並列実行をおこなうことを目的とする。加えて、従来量子化学の枠組みでは考えられたことのない、ポテンシャルエネルギー曲面が独立しては意味を持たないような超縮重電子状態での非断熱電子動力学を行う。また、反応分子系において、電子動力学が本質的に必要な部分と、それ以外の骨格部位を接続して大規模な分子に拡張するためのハイブリッド計算のための準備を行う。また、高塚らが新たに構築した分子の多体半古典力学を超並列計算によって、タンパクのレベルで応用することを目的とする。

[実施内容]

化学反応動力学における動的電子理論構築の一環として、大自由度多準位系への適用に向けた、分岐波束上の電子位相動力学を記述する輻射場下分子非断熱遷移動力学理論の開発を進めた。[文献1、2、3] Molpro、GAMESS 等の各種電子状態計算パッケージへの実装に関し検討した。併せて、現存する多くの量子化学計算パッケージへの一般性の高い実装法についての検討を行った。分子科学研究所の FX10、物性研究所の大型計算機等を使用し、非断熱電子動力学、半古典量子動力学の並列実装を行った。

既に、我々は開発した軌道に基づく方法論が Hybrid 並列計算と高い親和性を持つことを、非断熱電子動力学系を用い確認している。軌道間相関の近似レベルと呼応する形で情報通信の削減を系統的に行える事が、上記の並列計算の有用性に直結している。前年に続き、本年度は並列階層を増やす為に、バルクジョブのシェルスクリプトレベルでの実装に向けた準備を進めた。新規反応場探索に向けて、内部並列に留まらず、初期サンプル、レーザー場等の外部パラメータを変える並列計算にも着手していきたい。

一般に波動関数の軌道表現は、並列計算と極めて親和性が高い。一例を上げると、初期サンプリングに対して MPI を、数値微分評価に対しては openMP を用いることで、ほぼ完全な並列効率を Hybrid 形式で達成できる。部分系への分割による並列効率の利得が相関回復のコストを大幅に上回ることが期待できる、局所構造からなる巨大分子系、例えば光合成系に見られる分子集合系や、タンパク分子などにおいては、複数の部分系を並列化させる事により更に並列階層を上げ、計算の高速化を行う事ができると予想される。ノード通信、メモリ間通信コストとの競合の度合いにその有用性は依存するので、次世代エクサマシンのハード開発を行う上での指針とその応用事例と関連して、計算物質科学側からの要求を提供できるものとする。纏めると、我々の開発した並列技法は、物理要請に応じて用意される初期サンプリングと、重い計算コストを有するエネルギー及びその座標勾配評価を伴う動力学計算において一般に役立つ計算手法である為、今後、関連する多くのプロジェクトにおいて幅広い適用が期待できる。

最後に、超多体量子動力学の研究について報告する。軌道に基づいた精密な量子動力学の記述には安定性行列の情報に極めて重要な役割を果たすが、これは大規模系になると実践上計算が不可能である。安定性行列の評価を理論レベルで回避できる、軌道表現に基づいた量子多体動力学の定式化を行った。超並列計算機を活用した数値計算アプローチを通じ、その数理構造と適用可能対象に関する極めて重要な知見を得る事ができた。非断熱動力学と同じく、古典軌道計算は特に並列計算との親和性が高い為、非断熱電子動力学計算と合わせて、超並列計算機の本格使用に早い段階で着手したい。

[成果概要]

平成24年度は、新電子状態の創成とそれに伴う化学反応の制御を目指すため、高塚らが開発してきたレーザー場中の非断熱電子動力学理論のアルゴリズムの超並列実行化をおこなった。加えて、従来量子化学の枠組みでは考えられたことのない、ポテンシャルエネルギー曲面が独立しては意味を持たないような超縮重電子状態での非断熱電子動力学理論のアルゴリズムの超並列実行に向けた計算基盤の構築を進めた。また、反応分

子系において、電子動力学が本質的に必要な部分と、それ以外の骨格部位を接続して大規模な分子に拡張するためのハイブリッド計算のための準備をおこなった。

その結果、以下のように化学動力学の基礎理論と位置付け、次の二つを発展させることとした。

- (1) Born-Oppenheimer描像を超える分子の動力学理論の構築と計算
- (2) 超多体系に対する量子動力学理論 の構築と応用

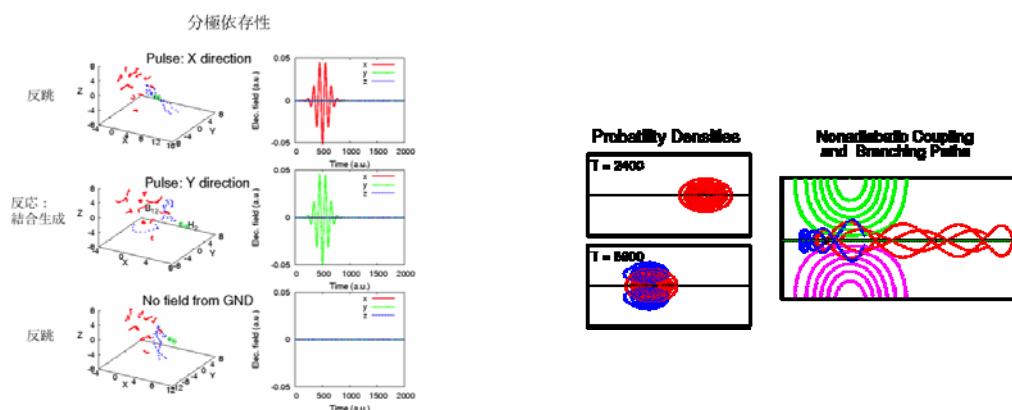
これら統合化することにより、原子核の運動と結合する電子動力学の展開を軸とした次世代の超高速化学反応学と反応制御の理論を開拓する。

本プロジェクトに必要な理論的手法、計算技法、物性についての量子化学知見の獲得はまだ過渡期にあるが、当グループで掲げている目標課題の達成は、新しい化学の基礎分野を創出し、それは物質設計や新しい物質創成を通じて一般社会の福利に寄与するはずである。また、量子動力学、電子動力学の理論、計算手法に関連しては、可視化等を通じ、現代科学技術を知る上で欠かせない量子力学についての理解を幅広い分野の方々に広めるのに役立つことができると考える。

[1] T. Yonehara, K. Hanasaki and K. Takatsuka, Chem. Rev. 112, 499 (2012)

[2] T. Yonehara and K. Takatsuka, J. Chem. Phys. 137, 22A520 (2012)

[3] T. Yonehara and K. Takatsuka, J. Phys. Chem. A. (2013) DOI: 10.1021/jp402655q



上左図：

B12 と水素分子との結合反応性、非反応性がレーザー場の分極により変化する例。

並列計算を用いた系統的調査、メカニズム解析は反応制御指針を提示する上で重要。

(文献1、2に続く研究から)

上右図：

円錐交差付近での異なる軌道間の電子位相干渉が原因で現れる節のイラスト図

(文献3より抜粋)

③ 研究項目 3: 凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス

[担当者] 斉藤真司(分子研)、佐藤啓文(京都大)、笹井理生(名古屋大)

[研究目的]

溶液やタンパク質などの凝縮分子系では、分子運動の複雑な絡み合いにより様々な時間・空間スケールの構造揺らぎ・化学反応が誘起され、多様な物性や機能を生み出す。とくに、タンパク質は水中で安定した構造をとるようにデザインされており、また、絶えず揺らいでいる水溶液の中で構造揺らぎ・化学反応が誘起され機能の発現へとつながっている。本項目の目的は、水和や溶液の動的揺らぎや緩和の分子論的機構やタンパク質の動作原

理の解析を通して、タンパク質のような多体分子化学系がどのように多様な物性や機能を発現しているかを解明することである。

[実施内容]

昨年度開発したエネルギー緩和を解析するための高効率の計算手法に基づき、水の中のエネルギー緩和過程の解析を行った。水和に関しては、高精度で溶媒和自由エネルギーを算出できる補正法を開発した。タンパク質の動作原理の解明に関して、1 万アミノ酸残基以上の巨大な蛋白質複合体を記述する粗視化モデルを開発し、粗視化モデルの物理的特徴を活かした並列計算を実施した。京を用いたテスト計算では、サンプリングに必要なデータを数 10 に分割する計算を実行し、10000 並列まで 99.907%の並列化効率を出せるプログラムを開発した。

[成果概要]

タンパク質は、人工の機械の及ばない高い効率のエネルギー変換・情報変換を行うシステムである。しかも、真空中で機能するものではなく、その構造も水中で安定化されるようにデザインされている。さらに、周囲にある水は単なる静的な環境ではなく、その揺らぎの中で効率的なエネルギーの集中と散逸のもと、シーケンシャルな構造変化・反応が引き起こされ機能を生み出す。このような人間の想像を超えたナノバイオマシンの設計原理を理解することは、凝縮化学系における反応とは何かという学術的な問題であり、未来の新技术を展望する技術的な問題にも繋がるものである。本研究項目では、水和および動的な揺らぎ・緩和の解析とともにタンパク質の動作機構の解明に向けた研究を進めている。

水溶液中で化学反応が起こると、それに伴い反応エネルギーの散逸が生じる。そのため水のエネルギー緩和機構の理解は、水溶液中における化学反応の理解に不可欠であり、動的な水和の理解に向け、水の揺らぎや緩和の解析を進めている。エネルギー緩和については、ポンプ-プローブ分光法によりその時定数を調べることができるが、分子論的な緩和機構を明らかにすることは難しい。分子論的な緩和機構の解明に向けて、我々は系に振動電場を照射する非平衡分子動力学計算のプログラムを作成し、水の分子内運動から分子間運動へのエネルギー緩和ダイナミクスを解析し、励起されるモードの性質の違いにより緩和の違いを明らかにするとともに、水中の高速でカスケード的なエネルギー緩和の分子機構を明らかにした。

また、水和に関しては、MC-MOZ 法について、個別の構成原子のみに関わる情報から参照項を算出する方法を幾つか考案し、その数値解の安定性や並列化効率について検討した。とりわけ擬似的 1D-RISM 方程式を参照項として用いた場合に数値解の安定性も高く、ほぼ完全な並列化効率を達成することを見い出している。一方、溶媒和自由エネルギーについては、多くの溶液系で HNC 近似が実験値に比べて系統的に過大評価することが広く知られていた。最近我々は、溶媒の分子構造情報に基づいて Kovalenko らによる補正法(RBC)を更に改善する新しい方法(CB-RBC)を提案し、とくにクロロホルムやベンゼンなどの有機溶液については著しく改善されることを見いだした。これは RBC においては、溶媒分子のサイズによって排除体積が過大評価される可能性があることに関係しており、CB-RBC においては分子の化学結合の情報を用いることで同効果の実効的な補正を達成していると考えられる。

タンパク質の構造スイッチングダイナミクスの例として、昨年度に引き続き、ミオシン分子モーターの運動を取り上げ、分子モーター解析の新規計算法を開発した。とくに、粗視化モデルの特徴を生かした並列化計算法を展開することによって、ATP 加水分解反応の各段階におけるミオシン運動の自由エネルギー曲面の計算を行った。ATP 加水分解反応の進行に伴って自由エネルギー面が切り替わる過程を記述する動的エネルギーランドスケープ理論の方法を整備して、ミオシン分子モーターの動作機構について詳細な分析を行った。

2. 2. 1. 1(2) 次世代先端デバイス科学

第2部会 代表者：押山淳(東京大)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

第2部会においては、次世代のテクノロジーを支えると目される材料、構造体に対して、量子論の第一原理に立脚した先端的計算を行い、その電子物性・機能を解明・予測することを目的としている。密度汎関数理論における既存の近似法計算を、マルチコア・超並列アーキテクチャのコンピュータ上で最適化、高速化することに加え、新たな近似法の開拓および密度汎関数理論を超えて電子相関を扱い得る手法の開拓、従来古典論でしか扱えなかった現象への量子論的手法の開拓が手法開発におけるターゲットである。それらは大規模電子構造計算(空間軸)、長時間ダイナミクス計算(時間軸)、高精度電子相関計算(精度軸)、さらには量子論のターゲットを拡大する(展開軸)という四つの軸に沿った研究開発である。平成24年度においては、以下の成果等が得られた。

- 1) 密度汎関数法計算を実空間で実行する手法(コード名: RSDFT、RS-CPMD、RSPACE、DC-RGDFT、FEMTECK 等)の、「京」コンピュータに代表されるマルチコア超並列アーキテクチャ上での高度化、高速化が達成された。
- 2) RSDFTとコンパクトモデルにより、次世代テクノロジーの基幹デバイスであるSiナノワイヤートランジスターの電流・電圧特性、ワイヤー内電流分布のゲート電圧依存性が解明された。
- 3) RSDFT 大規模計算により、シリセン(グラフェン状 Si 単層膜)においては、基板との相互作用によりディラック電子が消滅すること、摺じれた二層グラフェンでは、ディラック電子の速度が著しく減少し、フラットバンドが出現すること、などが明らかとなった。
- 4) RSPACE により、SiC の酸化膜界面の原子構造と電子状態が調べられ、SiC の界面での欠陥同定と炭素原子の関係について知見が得られた。
- 5) DC-RGDFT を用いた分子動力学法(MD)計算が、Li イオン二次電池の負極に対して実行され、溶媒添加物のひとつである LiPF₆ が Li イオンの界面透過率を増大させることを見出した。
- 6) サイズ N に線形にスケールするオーダー N 手法 CONQUEST のマルチコア超並列アーキテクチャ上での高度化、高速化が達成され、ヘテロエピタキシャル成長の典型である、Si 基板上の Ge ナノ構造生成機構のミクロな描像が得られ始めた。
- 7) ナノ構造体での光誘起電子ダイナミクスの解明のための、理論手法の構築と「京」上でのコードのチューニングが進展した。時間依存密度汎関数理論とマックスウェル方程式に基礎をおく新手法が開発され、「京」20,000 ノードでの良好な並列化効率を達成し、また「京」80,000 ノード全資源を用いた並列計算も実行された。応用計算の最初の例として C60 固体の光吸収スペクトルが計算され、実験と良い一致を示した。
- 8) 幅広いユーザーをもつ局在軌道基底密度汎関数法計算コードである OpenMX の多機能化、マルチコア超並列コンピュータ上での高速化を進めた。本年度は、新たな並列化手法が試みられ、「京」131,072 コアでのベンチマーク計算が実行され、16,384 コア計算との比較で、68%の並列化効率を達成した。これによる応用計算の一例として、強誘電体 PbTiO₃ に電界を付加することによる価電子帯のラッシュバ分裂が見いだされ、スピントロニクス応用への可能性を開いた。
- 9) 標準的な平面波基底密度汎関数法計算コードである QMAS、xTAPP の、マルチコア超並列コンピュータ上での高度化、高機能化を進めた。QMAS によって、有機導体、遷移金属酸化物等の電子状態計算が実行され、実験結果を合理的に説明した。xTAPP は様々な高機能化が施され、現在一般公開に向けて作業中である。

- 10) 密度汎関数理論の枠を超える波動関数理論である、トランスコリレーティッド法(TC++)、量子モンテカルロ法(CASINO)の高度化を進めた。CASINOにより分子性固体の構造同定がなされ、また xTAPP を用いた、熱力学的ダウンフォールディング法により、氷の融点の量子論的計算が実行された。
- 11) 第一原理分子動力学法と非調和格子ポテンシャルモデルを結合させた、格子熱伝導度計算の新たなスキームを開発した(コード名:ALAMODE)。ベンチマーク計算により精度を検証した。モデルへのマッピングは実際的に高精度で実行され、量子論的な熱伝導度計算への道を開いたと云える。
- 12) 超伝導密度汎関数理論により、フォノン機構による超伝導転移温度計算コードを開発した。

【部会活動】

第2部会の重点課題、特別支援課題の研究進捗状況、今後の研究計画については、平成25年10月3日(水)に東京大学工学部6号館、12月5日(水)に岡崎コンファランスセンターで第二部会委員会を開催し、議論と検討が行われた。研究進捗状況に関しては、「京」におけるコードの高度化の技術的問題を共有すること、ターゲットとしての物質科学的重要性の吟味、について議論された。また今後の研究計画に関しては、重点課題の再編成をも含む将来計画が議論された。具体的には、「ナノ界面科学」をキーワードとして、材料的には半導体から酸化物に至る、実際のデバイス界面系での、原子構造と電子状態・機能の解明に重点をおくこと、光励起電子ダイナミクス現象の解明・予測にも力点をおくことが合意された。

研究会については、第2部会独自のものは行わなかったが、文部科学省新学術領域研究「コンピューティクスによる物質デザイン:複合相関と非平衡ダイナミクス」(領域代表=押山淳)およびCMSI連携し、平成24年10月11日-10月13日に大阪大学において、International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Designを開催した。国内外150人を超える参加者を得て、第2部会関連の問題はもとより、計算物質科学およびコンピュータサイエンス(計算科学)全般にわたる活発な議論が展開された。

2) 研究開発課題

i) 重点課題3: 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究 (平成24年度優先課題)

(担当者) 押山淳、岩田潤一、渡邊聡(以上東京大学)、重田育照、小野倫也(以上大阪大学)、
宮崎剛(物質材料研究機構)、Boero Mauro(レイパスツール大学)、Bowler David(ロンドン大学)、
赤井久純(大阪大学)

[研究目的]

テクノロジーはポストスケーリング時代を迎え、既存の CMOS 技術のさらなる高度化・微細化に加えて、beyond-CMOS 技術の探求が必要となっている。そこでは、それらテクノロジーを支えるナノドット、ナノワイヤー、新材料などの電子機能の解明と予測が重要なターゲットとなっている。本研究課題においては、密度汎関数理論に基礎をおき、その理論的發展を目指すと同時に、「京」コンピュータに代表されるマルチコア・超並列アーキテクチャ上での、密度汎関数法計算のハイ・パフォーマンス・コンピューティング(HPC)技術を確立し、ナノ構造体の構造的安定性と電子機能についての高精度の解明・予測を行うことが目的である。

[実施内容]

数千から数万原子から構成されるナノ構造体の構造と電子物性を解明するための、実空間密度汎関数法コード RSDFT は、「京」上での高度化により、平成23年度にゴードンベル賞(最高性能部門)を獲得したが、24年度は更なる高度化と多機能化を行った。また、コンパクトモデルを用いた Si ナノワイヤーFET の電流・電圧特性の評価が行われた。より大規模計算に適したオーダーN密度行列最適化法である CONQUEST は、「京」上での高度化により、数十万原子系の構造最適化を実施した。ヘテロエピタキシャル成長の初期過程の解明が進んでいる。もうひとつの実空間密度汎関数法コードである RSPACE は殻電子に関する高精度の取り扱いと輸送係数計算の機能に特徴があるが、大規模計算のための「京」での高度化が実施された。ダイナミカル計算の側面では、Car-Parrinello 分子動力学法(CPMD)と RSDFT を結合した RS-CPMD コードが完成し、「京」上でのチューニングが実施された。また、CONQUEST に MD 機能を付加した。これらアプリケーションにより、以下に記述する物質への応用計算が実施された。

[成果概要]

手法開発:

(1) RSDFT の高度化により、DFT の標準的近似(局所密度近似、一般化勾配近似)の範囲での、10,000 原子群の構造最適化と電子状態解明は、「京」の 1000 ノード程度のリソースで数十時間で行うことが可能となった。(2) RS-CPMD では、「京」1,000 ノードを用いた 1,000 原子系 CPMD 計算の 1 タイムステップが数秒以下で終了するまでに高度化され、大規模第一原理 MD 計算が可能になった。(3) CONQUEST による数十万原子構造最適化計算が「京」上で可能となった。(4) RSPACE の高並列化効率が達成された。

応用計算:

(1) 図1は RSDFT で求めたバンド構造と波動関数を用い、Si ナノワイヤーでの弾道輸送における電流密度分布を表したものである。ゲート電圧の変化に応じて、ワイヤー断面の電流密度の位置が変化し、これにより実際の側面ラフネスがある FET での電流電圧特性が推測される。(2) RSDFT を用いた大規模計算により、シリセン(グラフェン状 Si 単層膜)においては、基板との相互作用によりディラック電子が消滅すること、摺じれた二層グラフェンでは、ディラック電子の速度が著しく減少し、フラットバンドが出現すること、SiC 表面でのナノファセット出現機構はステップバンチングによるものであること、などが明らかとなった。(3) ヘテロエピタキシャル成長のプロトタイプである、Si 基板上の Ge ナノ構造の安定性と生成機構探索が CONQUEST で行われ、数万原子規模の計算から、成長の際の原子吸着位置が明らかとなった。(4) パワーエレクトロニクス基幹材料である SiC の酸化膜界面および高誘電体材料/Si 界面での、原子構造と電子状態が RSPACE で調べられた。SiC の界面では炭素原子は存在しにくいという知見が得られ、実験的、工業的に問題となっている界面欠陥の同定に貢献した。(5) 非平

平衡グリーン関数法によるコンダクタンス計算が各種ナノ構造に対して実行され、サブ THz 帯での、原子構造に起因する特異な交流応答が見出された。

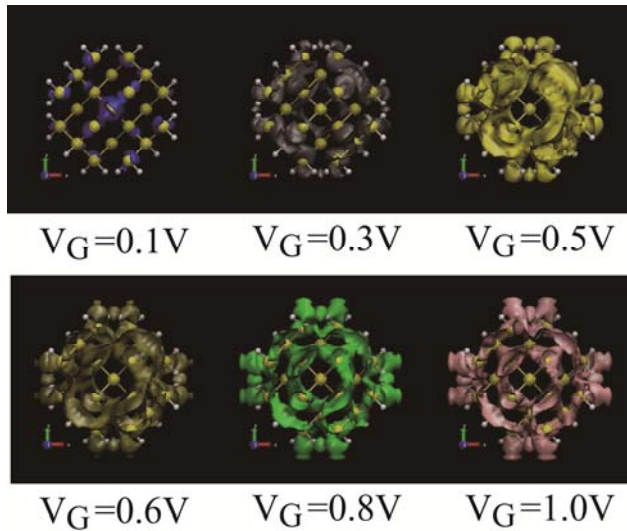


図1: Si ナノワイヤー型トランジスター(数ナノメートルの直径)でのゲート電圧を変えたときのワイヤー内電流分布。電流分布の等値面がワイヤー断面上で図示されている。ワイヤー軸は(110)結晶軸に平行。

特に、上記項目(1)および(3)は、平成24年度の優先課題として「京」のリソースの追加配分により研究が加速された。(1)においては、直径 10nm を超える Si ナノワイヤー(数千～数万原子系)が RSDFT で扱えるようになり、実際の次世代 FET 構造の特性を丸ごと第一原理計算によって予測することが可能となった。大規模計算において重要なのは計算の収束性の向上であるが、追加配分を得た事で収束の条件を早々に見出すことができ、その後の大規模計算が大いに加速された。また、数千～数万原子規模で電流輸送特性の情報を持つバンド構造の計算を行うことは現実的にはほぼ不可能であったが、追加配分によりこれが可能となった。これらの計算によって現在、直径 10nm 以上の Si ナノワイヤーにおいては、面方位の違いによるチャンネルの特性に大きな差は見られなくなること、電流はワイヤーの中心部分に集中することなどがわかっている。今後実験グループとの共同研究を進める。(3)においては、Ge ナノ構造の典型であるハット(小屋型)・クラスター(図2)について、成長時の新たな原子の吸着位置と、それによるナノ・モルフォロジーの変化が、追加配分によって行った数万原子規模の多数の構造最適化計算によって明らかにされた。具体的には、ハット・クラスターの小さなファセット面の上部に新たな Ge アドアトムが吸着しやすいことがわかった。今までの第一原理計算が対象としてきた、局所構造を取り出したモデル系ではなく、現実のサイズで計算することによって、初めて明らかにすることができた結果と言える。

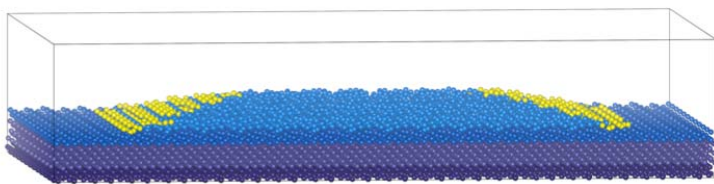


図2: Si(001)基板上の Ge ハット・クラスターの原子レベルでの構造。黄色いファセット面が新たな吸着および成長面となることがわかった。

ii) 特別支援課題 1: ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション

[担当者] 尾形修司(名古屋工業大学), 大庭伸子(豊田中央研究所)

[研究目的]

産業界で有用なデバイスや材料では、ナノ・メゾスケールのユニークな微細構造に応じた電子状態とダイナミックスが、その機械的性質や機能を大きく支配している。このような必然的に大規模な系のシミュレーションを直接行うことが期待されている。本課題では、化学反応が顕著な比較的小さな領域だけに高計算コストの電子状態計算を適用し、その他の領域には経験的な古典的原子間ポテンシャルあるいは粗視化手法を適用することで、大規模系の化学反応を含めたイオンダイナミックスをシミュレート可能とするハイブリッド量子古典コードを、超並列計算環境に合わせて高度化することを目指している。平成24年度の目的は以下である: (i) 電荷状態や境界条件が自由にとれるためハイブリッド量子古典法に適した実空間密度汎関数法を、分割統治の考え方でオーダーN化したDC-RGDFTコードの高速化と並列性能検証を行うこと。(ii) DC-RGDFTコードを用いた第一原理MDシミュレーションで、Liイオン二次電池の負極近傍に生成される固体電解質皮膜(SEI)と電解質液との界面モデル(約2,400原子)における、SEI側から電解質側へのLiイオンの溶媒和過程等を明らかにすること。(iii) DC-RGDFTコードを量子領域の計算法としたハイブリッド量子古典シミュレーションを、グラファイト中における数十個のLiイオン群の拡散ダイナミックスを調べるために行うこと。(iv) 分子系のマルチスケールな取り扱いに備え、時間反転対称性があり高速な、各分子を剛体として取り扱う動力学アルゴリズムを新たに提案すること。

[実施内容]

以下4項目を実施した: (i) 我々がアルゴリズムを提案しコード化したDC-RGDFTを、対象系全体の分割統治によるドメイン分割、分割ドメイン毎の空間分割、多数の電子レベルの分割計算、OpenMPによるDo-loop分割の計4レベルで並列化し、そのストロングおよびウィークスケーリングテストを大規模に行った。(ii) DC-RGDFTコードを用いた第一原理MDシミュレーションを、Liイオン二次電池のSEI-電解質液界面モデル(約2,300原子)に対してrun毎に5ps程度の長さで行い、塩として溶媒(エチレンカーボネート分子)にしばしば添加されているLiPF₆分子が、Liイオンの界面透過率を増大させる働きを持つこと等を見いだした。(iii) DC-RGDFTを用いたハイブリッド量子古典シミュレーションを、グラファイト中に挿入した数十個のLiイオン群の熱拡散に関して大規模に実行した。その結果、Liイオン群を取り囲むように上下層のグラファイトが変形してcageが形成されるため、Liイオン同士が互いに影響をおよぼしあいつつ拡散すること等を見いだした。(iv) 分子を粗視化して剛体として扱うことは大規模系のシミュレーションを行う際に有用である。我々は剛体分子の回転を含めた動力学アルゴリズムに関して、時間反転対称を持ち、既存のアルゴリズムに比べて計算負荷が最も軽いアルゴリズムを新たに提案した。

[成果概要]

DC-RGDFT コードは、予定していた並列化作業をほぼ終え、実用テストを行っている段階である。実際、DC-RGDFTコードを用いた大規模な第一原理MDシミュレーションを、Liイオン二次電池のSEI-電解質液界面を通してのLiイオン透過ダイナミックについて行い、Liイオンの溶媒和過程や溶媒に添加する塩がおよぼす効果等について、実験では得られていない新たな知見を得ることに成功した。また、Liイオン二次電池の負極にも使われているグラファイト中での多数のLiイオン群の拡散挙動をハイブリッド量子古典法により調べることに成功した。将来のマルチスケールな取り扱いで重要となる分子の粗視化に関連しては、その時間反転対称性があり高速な動力学アルゴリズムを新たに開発することに成功した。

iii) 特別支援課題 2: ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発

【担当者】 信定克幸(分子研)、矢花一浩(筑波大)、渡辺一之(東京理科大)

【研究目的】

理論や計算手法の開発と計算機能力の飛躍的な向上のおかげで、次世代量子デバイス候補となり得るナノ構造体個々の物性の基礎理学的理解は着実に進んでいる。しかしその一方で、機能発現のメカニズムは複雑であり、個々の物質の基礎的理解と機能性量子デバイス開発の間には未だ大きな隔たりがあることも事実である。本研究課題ではこの溝を埋めるために、過度に単純化した理論モデル系を対象とするのではなく、数～数十ナノメートル程度の大きさを持つ実在系ナノ構造体(金属クラスター、 C_{60} 分子、量子ドット等から構成されるナノ粒子アレイ)における実時間・実空間光誘起電子ダイナミクスの第一原理計算を行い、ナノ構造体における機能性発現のメカニズムを根源から理解するとともに、光エネルギー伝播、波長変換素子、量子データ転送、光触媒作用等の光・電子機能を持つ量子デバイスを計算により提案し設計することを目的とする。

【実施内容】

上記目的を達成するためには、第一に電子と電磁場の露なカップリングを取り扱う為のナノ光応答理論の開発、第二にその理論に基づく超並列大規模電子・電磁場ダイナミクス法プログラムの開発、第三にこのプログラムに基づく実在系ナノ構造体量子デバイスの計算科学的開発を進めなければならない。第一課題のナノ光応答理論の基本的枠組みは既に開発済みであり、平成 24 年度は特に、第二課題の超並列大規模計算プログラムの開発を主たる課題とした。また、開発したプログラムを使ったベンチマークテストと C_{60} 分子から構成されるナノ構造体の光学応答計算を行うことにした。

【成果概要】

プログラム開発は順調に進み、また 9 月下旬からの共用開始後の京一般利用枠にも採択され、更なる超並列化プログラミングとチューニングを行った。24,576 ノードの実機稼働に成功した。1 万ノード程度までであれば 80%程度以上の速度向上率、一部アルゴリズムに関しては 20%程度の実行性能を出すことができた。24,576 ノード(196,608 コア)では、実行性能は7～8%程度であるが、これはノード数増大に伴い、分割された計算空間の数が増大し、結果的に通信量が増えるためである。具体的には、ポアソン方程式を共役勾配法で解く際に差分法の分点数が多いことと、それに伴う隣接通信の増大、多数個の計算空間に分配されている電子密度を掻き集めるための全体通信の増大が顕著に現れ、超並列化計算に対するボトルネックとなることが分かった。特に、電子密度を掻き集めるために要する全体通信は、ノード数の増加と共に顕在化し、全体計算時間の 30%程度に達するため、最大のボトルネックとなっている。通信方法の最適化を行い、改善に努めている。3 月には京の全資源を使い切る約66万コアの計算にも成功した。

ベンチマークテスト及びプロダクトランに関しては、20万コアレベル以上の大規模計算が可能になったために、十数ナノメートルを超えるナノ構造体の光誘起電子ダイナミクスの計算が可能になった。 C_{60} 固体に対応する面心立方格子ユニットの光吸収スペクトルの計算を行い、実験値とも十分に比較し得る結果がほぼ出揃った。この研究結果は、電子ダイナミクスの超並列計算成果として報告するために、学術論文を執筆中である。現状では、最大で数千原子程度、10,000～20,000 電子数程度のナノ構造体の電子ダイナミクス計算は実行可能な状況であり、このサイズの実在系ナノ構造体の励起状態計算を実行できる研究グループは世界的に見ても非常に限られている。このアドバンテージを最大限に利用して、光・電子機能性デバイスの理論設計の計算を進めている最中である。また、光と物質の相互作用をより正確に記述するために、電子ダイナミクスと電磁場ダイナミクスの露なカップリングを取り込んだ数値計算手法の開発も進めた。具体的には現在進めている電子ダイナミクス法にマクスウェル方程式を解くためのルーチンの実装を進めている。

iv) 特別支援課題 3: スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索

[担当者] 斎藤峯雄(金沢大)、小田竜樹(金沢大)、小口多美夫(阪大)、尾崎泰助(北陸先端大)

[研究目的]

本研究では、ラッシュバ効果、磁気異方性、トポロジカル絶縁体の電子状態、スピンホール効果の起源を解析するコードを開発し、将来のスピントロニクス応用に貢献できる基礎研究を行う。この目的のため、カー・パリネロ分子動力学法プログラム[CPVO]、全電子FLAPWコード[HiLAPW]及び擬原子局在基底コード[OpenMX]を整備する。とくに、OpenMXとCPVOに関しては、「京」向けのチューニングを行い、大規模な計算を可能とする。

[実施内容]

CPVOでは、並列計算における実行効率を低下している問題点を明確にし、その改善策を実施するとともに、物性研システムBを用いた大規模キューや「京」の支援枠により、並列化効率の改善状況を評価した。さらに、スピン軌道相互作用に基づく材料の物性研究や、磁気トンネル接合系に現れる界面における大規模計算を実行した。OpenMXでは、数千から数万原子系の第一原理分子動力学計算を行うために、 $O(N)$ クリロフ部分空間法の超並列化に取り組み、修正再帰二分法と慣性モーメントテンソルに基づく新しい超並列化手法の開発を行った。スーパーコンピューター「京」の131,072コアを使用して131,072原子から構成されるダイヤモンド格子に対してベンチマーク計算を実施し、その並列効率は16,384コアを参照として68%であった。また本研究において、Row-Wise型領域分割に基づく、3次元FFTの新しい並列化手法の開発にも成功した。他の3次元FFT並列化手法と比較し、本手法は任意の並列分割数に対して、最小の通信量を持つ並列化手法であることが分かった。

[成果概要]

CPVOにおいては、実数行列積計算から複素数行列積計算への移行、行列対角化部へのscaLAPACK数値計算ライブラリーの適用、波動関数データにおける並列化入出力採用などの改善を行い、並列実行効率を向上させるとともに、本番実行時を想定した場合の高速化を達成した。具体的には、「京」にて4096ノードを用いたストロングスケーリングテスト(磁気接合系)では、k点のストロングスケーリングで実行効率23%(理論性能比)、バンド並列のストロングスケーリングでも並列化向上率53%(16

並列)を達成した。また、物性研システムBにおいて、8192コア(1024ノード)のテスト計算を実行する際に、H23年度までは計算の経過時間の3分2が入出力に裂かれていたが、入出力の並列化を実現することで、全体の計算経過時間が3分の1に近い時間にすることが可能となった。HiLAPWにおいては、全電子フルポテンシャル線形化補強平面波(FLAPW)法における応力テンソルの手法およびコード開発を進めた。Soler-Williams基底により局所密度近似(LDA)の範囲で擬ポテンシャル(PP)法と同程度の精度で応力テンソルが計算できることを示してきた。今回、この手法を一般化勾配近似(GGA)へ拡張した。OpenMXの計算結果より3次元のフェルミ面上でスピントクスチャを可視化するソフトを作成した。これにより、反転対称性が破れたバルク系でのスピ

ントクスチャの非自明な構造があきらかになった。強誘電体PbTiO₃に電界を印加することで、価電子帯トップの自由電子的なバンドがラッシュバ分裂を示し、電気分極反転によってスピントクスチャを反転させることが明らかになった。また、PbTiO₃の薄膜では、バルクで価電子帯トップにあった自由電子的なバンドが低エネルギー側にシフトするが、有効遮蔽体法による電界効果の計算をおこなった結果、ホールドーピングにより、ラッシュバ分裂した二次元電子状態を誘起することが可能であることが明らかになった。これらRashba効果等強いスピン軌道相互作用に由来する現象の基礎的理解は、今後のスピントロニクス応用において、新しいデバイス動作原理の発見につながるものである。

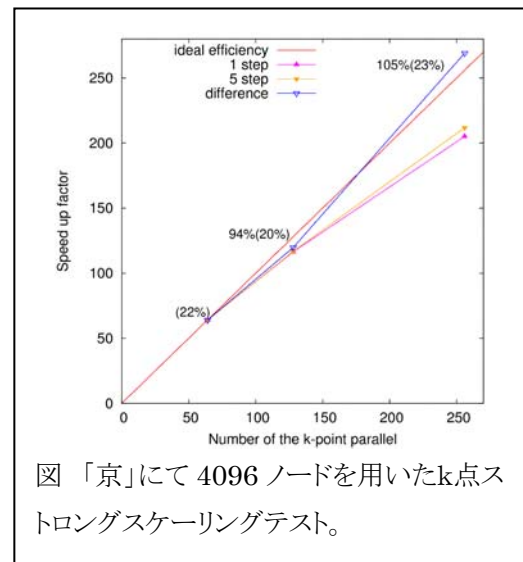


図 「京」にて 4096 ノードを用いたk点ストロングスケーリングテスト。

v) 特別支援課題 4: 新材料探索

[担当者] 常行真司(東京大)、吉本芳英(鳥取大)、田中 功(京都大)、石橋章司(産総研)、
土田英二(産総研)、前園 涼(北陸先端大)

[研究目的]

密度汎関数法およびそれを超える高精度物質機能シミュレーション技法を確立し、次世代電子デバイスのブレークスルーを引き起こす新奇物質群を探索する。またデバイスとしての実現可能性を念頭に置き、化合物の自由エネルギー計算を実現することで、ものづくりプロセスにも踏み込んだ研究を目指す。

[実施内容]

平面波基底関数を用いた密度汎関数法(DFT)コードQMAS、xTAPP、有限要素法によるDFTコードFEMTECK、第一原理量子モンテカルロ法コードCASINO、波動関数理論トランスコリレイティッド法コードTC++の高度化とそれを用いた応用計算を進めた。QMASは、従来のMPI並列に加えてスレッド並列を用いるハイブリッド並列化、および、k点並列とバンド/G点並列の二重化を進め、「京」、「oakleaf」、「kashiwa」上でテスト計算を行なった。CASINOは50万並列でのフラットMPI計算を行い、コードチューニングによって、高い強スケーリング性能を達成した。FEMTECK は「京」の上でジョブ当たり 64-256ノード程度を使用して応用計算を進めた。大規模系の場合にはピーク性能の 40% 程度の実行性能が得られることを確認した。xTAPPはH25年度中にGPLライセンスで公開するため、各種整備を行った。

[成果概要]

手法開発:

- (1) トランスコリレイティッド法コードであるTC++のジャストロウ関数最適化の手法開発を行い、バンドギャップの大きな絶縁体でギャップが大きく改善されることを示した。またTC++とCASINOを接続し、トランスコリレイティッド法の波動関数を試行波動関数として第一原理量子モンテカルロ計算を行えるようにした。
- (2) ハイブリッド汎関数を用いたDFT計算のための擬ポテンシャルを開発した。
- (3) 第一原理分子動力学法を利用して非調和格子ポテンシャルモデルを作り、得られたモデルを使ってボルツマン熱輸送方程式もしくは非平衡分子動力学法により格子熱伝導度を計算する手法(コード名 ALAMODE)を開発した。
- (4) 超伝導密度汎関数理論により、フォノンメカニズムの超伝導転移温度を計算するプログラムを開発した。
- (5) QMASにおいて、2成分相対論形式、および、最局在ワニエ軌道、などに関連する計算機能を充実させた。
- (6) xTAPPのハイブリッド汎関数のサポートを並列化方式を含めて実用的なものに仕上げた。
- (7) xTAPPを一般公開するべく、入出力の近代化、プリ・ポスト処理プログラムの整備、チュートリアル作成、マニュアルの作成などを行った。
- (8) CASINOにおいて、負荷バランス調整のタイミングや、非同期通信への換装による性能向上の有無について一連の検証計算とチューニングを行った。
- (9) インテルの最新アクセラレータ Xeon Phi を導入し、行列積等のベンチマークを取得した。FEMTECK についても Xeon Phi 上で(ソースコードを修正することなく)フラット MPI で正常に動作することを確認したが、実行性能については不十分であることが分かった。

応用計算:

- (1) GaP固溶体太陽電池材料の物質デザインを行い、MgとOを同時ドーピングすると光学遷移可能な中間バンドがギャップ中に出現して、太陽電池効率が上がる可能性のあることを示した。
- (2) チタン酸ストロンチウムの酸素欠陥(2価)に水素の陰イオンが容易に捕獲され、欠陥の見かけの価数が1価もしくは0価に減少することを示した。これは酸化物のキャリア制御を考える上で重要な知見である。
- (3) 有機導体(Cu(tmtd)₂)・遷移金属酸化物(Cd₂O_{s2}O₇)などの電子状態をQMASにより計算し、既存の実験結果

を合理的に説明できる結果を得た。

(4) ハイブリッド汎関数による氷I_hの融点を熱力学的ダウンフォールディング法を用いて評価した所、PBEでは410 Kと高すぎる融点がPBE0で373 K、B3LYPで343 Kと改善することがわかり、水系でのハイブリッド汎関数の重要性が示された。

(5) 分子性固体DIBのCASINOによる大規模並列計算の運用を開始し、異なる分子構造に対し、有意なエネルギー差を算定した。

(6) 第一原理MDコードFEMTECKを用いて熔融リチウムガラス系(約200原子)で5種類の組成に対してトータルで1ナノ秒程度の大規模シミュレーションを行った。過去の古典MDでは再現できなかった構造上の特徴を再現することができた。

(7) FEMTECKにより、Mg 合金結晶の高温相(700原子程度)に対して様々な代替イオンを導入し、Mg イオンの振る舞いの変化を解析することで多価イオン伝導体の確立を目指した。

2. 2. 1. 1(3) 分子機能と物質変換

第3部会 代表者：岡崎進(名古屋大)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

本部会においては、分子や分子集団系における構造形成と機能発現・機能制御の分子科学の確立を目指して、自己組織化により形成されたナノスケールの分子や分子集団の構造に基づいて創生される機能、また環境との相互作用下での分子の電子状態とそれに基づく機能発現を解明することを目的としている。

その中で、「全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開」においては、小児マヒウイルスに対する全原子シミュレーションを実施し、熱平衡状態においてウイルスが実現しているカプシドの安定な構造の実際の姿を分子レベルで明らかにした。ソフト開発としては、MODYLASの最適化をさらに進め、ソフトを第4部会におけるメタンハイドレートのシミュレーション研究に提供した。また、フラグメント分子軌道(FMO)法と有効フラグメントポテンシャル(EFP)の融合法(FMO/EFP法)を開発し、溶媒水分子をEFPであらわに扱い、タンパク質複合体にFMO法を適用して複合体の構造計算を行うことを可能とした。

「拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明」では、かねてよりの懸案であった、量子効果を取り入れたシミュレーション法と拡張アンサンブル法の合体に成功した。具体的には、新に開発した(古典系でも量子系でも使える)拡張アンサンブル法である、焼き戻し傘サンプリング法(simulated tempering umbrella sampling)を、マロンアルデヒドのプロトン移動に関する密度汎関数分子動力学シミュレーションに適用し、非常に精度の高い平均力ポテンシャル(potential of mean force)の計算に成功した。これによって、生体内の機能発現に関わる量子効果が重要な場合の計算も可能になった。

「ポリモルフから生起する分子集団機能」においては、全原子モデルによる自由エネルギー計算のために開発してきたエネルギー表示法ソフトウェアermodを用い、MDとの連携によって、脂質膜・ミセル・ポリマーのようなソフト分子集団系の自由エネルギー解析を行った。これにより、膜貫通タンパク質と脂質膜との相互作用、ミセルの可溶化、吸水ポリマー、海水淡水化のための高分子分離膜の設計等について大きな進展を見た。

「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」では、ナノスケールの分子などの巨大系の反応制御を電子状態理論により取り扱うために、昨年度に引き続き、大規模量子化学計算を行うためにDC手法の開発と高度並列化を行った。その中で、高精度な理論を用いた電子構造などの静的なプロパティ計算では、DC-MP2 プログラムの高度化を進め、並列化効率とピークパフォーマンス性能の改善を行った。また、これまで一点エネルギー計算に限定されていたDC-MP2法に対してエネルギー勾配法を開発し、構造最適化計算を可能とした。MD計算を用いた化学反応や生成プロセスなどの動的プロパティ計算では、DFTB手法で律速となる対角化の計算コストを削減するために、DC法とDFTB法を組み合わせたDC-DFTB法の開発を行った。また、計算が独立である部分系に対してMPI コミュニケータを用いたプロセス並列、部分系内部の計算をOpenMPによりスレッド並列とすることで、ハイブリッド並列化を行った。10,000原子以上のポリエチレン分子や溶液を対象としたテスト計算を行い、さらに予備的検討としてアミン溶液での二酸化炭素の吸収・放出反応を検証した。

「機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性」では、色素増感分子と基盤の大規模計算を行い、理論スクリーニングと分子設計に基づいて、実験研究者と協力して色素増感太陽電池のプロトタイプを作製した。また、紫外線遮蔽色素分子としてシンナメート誘導体を設計し、合成を行った。さらには、開設分子系の非線形光学(NLO)応答や一重項分裂(SF)に関しては、多環芳香族炭化水素(PAH)の幾何・電子構造依存性、ナノグラフェンに対する置換基導入効果、遷移金属二核系への配位子効果などを中心に、開設性に基づくNLO応答およびSF分子の設計原理の構築と新規系の提案を行った。

【研究会等の活動】

平成 24 年 9 月 28 日、分子研において第3部会の課題代表者会議を開き、各課題の進捗報告を行い、今後の研究の方向性等について検討した。また、CMSI における課題見直しに関し、第3部会の対応について議論した。さらに、平成 24 年 12 月 5 日、分子研において部会を開き、25 年度に向けて重点課題、特別支援課題等について議論した。特に重点課題「全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開」においては、実験研究者との検討会を阪大ならびに微生物化学研究所において 8 回開催し、計算、解析の方向等について綿密な議論を行いながら研究を進めた。

2) 研究開発課題

i) 重点課題4:全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開(平成24年度優先課題)

[担当者] 岡崎 進(名古屋大)、北浦和夫(神戸大)、北尾彰朗(東京大)、長尾秀実(金沢大)、
泰岡顕治(慶応大)

[研究目的]

本課題においては、小児マヒウイルスカプシド(約 1,000 万原子)の全原子分子動力学シミュレーションならびにインフルエンザウイルスタンパク質(約 24,000 原子)の全電子量子化学計算を行い、物質と生命の境界領域にあるウイルスを計算科学の俎上に乗せ、物質科学としてのウイルスの分子論を確立する。

前者では特に、カプシドとレセプターとの特異な相互作用、分子認識を自由エネルギーレベルで明らかにし、また結合後のカプシド構造の変化など感染初期過程の分子機構の解明を図る。また、カプシドの構造安定性について、構成タンパク質間の接合構造と熱ゆらぎや温度、pH、溶媒など環境に依存した構造の特徴などカプシドの物理的、化学的性質を明らかにする。一方、後者では大規模精密量子化学計算に基づいて、ウイルスの膜タンパク質の阻害剤など、治療薬の候補となる医薬品分子の設計研究を行う。

[実施内容]

平成24年度は上記目標を達成するため、京コンピュータ上でのMODYLASの最適化を引き続き実施すると共に、京コンピュータを用いてウイルスの丸ごと全原子分子動力学シミュレーションを開始し、同時に、ウイルスの感染初期過程を明らかにするために、レセプターとウイルスとの特異な相互作用を定量的に記述する自由エネルギー計算を開始した。これらはいずれも優先課題として実施した。また、インフルエンザウイルスの新規阻害剤の分子設計に向けて、タンパク質と糖鎖分子の結合に及ぼす溶媒効果を解析する方法として、フラグメント分子軌道(FMO)法と有効フラグメントポテンシャル(EFP)の融合法(FMO/EFP法)の開発を行った。

[成果概要]

MODYLAS の性能評価結果として、京のフルノードの約 80%を使用した 65,536 ノード並列において、8,000 万原子系に対し理論ピーク性能比 41.1%、3.45 Pflops を達成した。65,536 ノードにおいても 64 ノードと比較して 81%の並列化効率を維持しており、十分な性能を達成することができたと考えている。また、研究課題実施に必要な 1,000 万原子系規模の計算においては、全 MD 計算 1 ステップに対して約 5 ms の性能を達成し、実用面においても十分に高い性能を備えていることを実証した。これは、大規模系に対する MD 計算においては、世界最速クラスである。この MODYLAS を用いて小児マヒウイルスに対する全原子シミュレーションを優先課題として実施し、熱平衡状態においてウイルスが実現しているカプシドの安定な構造の実際の姿を分子レベルで明らかにした。同時に、レセプターとウイルスとの間に働く平均力を両者の距離の関数として評価する方法を確立し、実際にある相対距離下における平均力を実際に求めることに成功した。図は、電解液中のウイルスの実際の MD 計算からのスナップショットである。これらはいずれも優先課題としてはじめて実現可能となったものである。

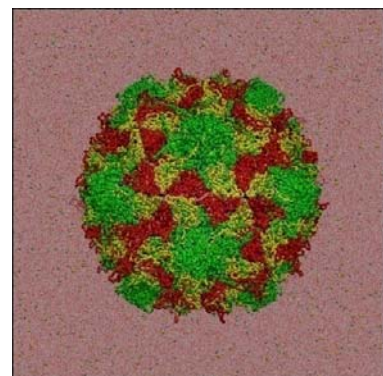


図 MD計算からの小児マヒウイルスのスナップショット。

また、インフルエンザウイルスの新規阻害剤の分子設計に向けて、タンパク質と糖鎖分子の結合に及ぼす溶媒効果を解析する方法として、フラグメント分子軌道(FMO)法と有効フラグメントポテンシャル(EFP)の融合法(FMO/EFP法)を開発した。本方法により、溶媒水分子をEFPであらわに扱い、タンパク質複合体にFMO法を適用して複合体の構造計算を行うことが可能となった。本方法の有効性を検証するために、HIVウイルスの阻害剤として知られているGriffithsinと糖鎖分子との溶媒中での複合体の構造最適化計算を行い結合に及ぼす溶媒効果を解析した。これにより、FMO/EFP法はタンパク質と糖鎖分子の結合に及ぼす溶媒効果の解析において実用的で有用な方法であることを示した。

ii) 特別支援課題1: 拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明

[担当者] 岡本祐幸(名古屋大)、奥村久士(分子研)、志賀基之(原研)、高橋英明(東北大)

[研究目的]

多自由度複雑系では、系にエネルギー極小状態が無数に存在するために、従来のモンテカルロ法や分子動力学法に基づくシミュレーションでは、それらエネルギー極小状態に留まってしまいう困難がある。この困難を克服するために、我々は、拡張アンサンブル法 (generalized-ensemble algorithm) と総称される手法を適用することを主張してきた。本研究は、拡張アンサンブル法を生体分子系に適用して、生体分子構造・機能の解明を目指すものである。更には、ab initio 経路積分法、real-space grid DFT による QM/MM 法や他の量子効果を取り入れる手法と拡張アンサンブル法を合体して、計算精度の向上を目指す。

[実施内容]

今年度も新しい拡張アンサンブル法の開発に努めた。特に、多次元焼き戻し法 (simulated tempering) の幾つかの具体例において、開発を目指した。焼き戻し法はレプリカ交換法のように適用が楽ではなく、まず、短い試行シミュレーションで、焼き戻し法の重み因子を決定する必要がある。この事前準備の労力を如何に簡略化するか様々な工夫を凝らした。また、これまでは、古典系の分子シミュレーションにおける拡張アンサンブル法の開発が主な課題であったが、今年度は、量子効果を取り入れた分子シミュレーション法においても有効な拡張アンサンブル法の開発に努めた。更には、古典系のタンパク質系の分子シミュレーションでは有効ポテンシャルエネルギーを使用する必要があるが、その精度を上げることも重要な課題であり、それにも取り組んだ。

[成果概要]

今年度はかねてよりの懸案であった、量子効果を取り入れたシミュレーション法と拡張アンサンブル法の合体に成功した。具体的には、新に開発した(古典系でも量子系でも使える)拡張アンサンブル法である、焼き戻し傘サンブル法 (simulated tempering umbrella sampling) を、マロンアルデヒドのプロトン移動に関する密度汎関数分子動力学シミュレーションに適用し、非常に精度の高い平均力ポテンシャル (potential of mean force) の計算に成功した。これによって、生体内の機能発現に関わる量子効果が重要な場合の計算も可能になった。また、古典的な生体系の分子シミュレーションに必須である、タンパク質系のポテンシャルエネルギーの精度をあげるために、アミノ酸の種類に依存する新しい主鎖のねじれエネルギー項の提案も行い、従来の項よりも実験結果との良い一致をみた。また、新しい温度と外磁場に関する2次元焼き戻し法である、simulated tempering and magnetizing の開発にも成功し、スピン系においてその有効性を示したが、この手法が生体分子系にも適用可能かどうかは今後の課題である。

「京」上でのレプリカ交換分子動力学法プログラムのチューニングは CMSI 拠点研究員の榮慶丈が中心に、以下のようになされた。第3部会代表の岡崎らが開発した超並列分子動力学法プログラム MODYLAS にレプリカ交換分子動力学法を組み込んで、最大限の並列化効率を実現した。「京」において最大 24576 ノードを利用した。シミュレーション条件として TIP3P の水分子を1万個配置し、レプリカ数を 2~3072 まで変えてレプリカ交換処理にかかる並列化率を測定した。「京」における並列化率は、ノード数が 3840 までは 99.9%、それ以上 6144 ノードまでは 99.8% となり、24576 ノードにおいても、99.3% の高い並列化効率を実現した。さらにこのプログラムを用いて今後予定している Protein A の折り畳みシミュレーションへ向けての準備もおこなった。具体的には 60101 原子系 (Protein A と水分子) についてそれぞれ異なる初期構造をもつ 256 レプリカの系を準備し、150,000 ステップのレプリカ交換分子動力学シミュレーションをおこない、動作することを確認した。またこれまでチューニングをおこなってきたプログラムとは別に、榮は、本特別支援課題の分担者の一人である奥村の分子動力学シミュレーションプログラム GEMB の並列化チューニングにも協力した。

iii) 特別支援課題 2: ポリモルフから生起する分子集団機能

[担当者] 松林伸幸(京都大)、篠田渉(産総研)、茂本勇(東レ)、吉井範行(名古屋大/CMSI 教員)、野口博司(東京大)、川勝年洋(東北大)、水口朋子(分子研/CMSI 研究員)

[研究目的]

本課題の目的は、熱ゆらぎ程度の強さの相互作用・MODYLAS のような大規模 MD ソフトと連携可能であり、MD との連携によって、脂質膜・ミセル・ポリマーのようなソフト分子集団系の自由エネルギー解析を行った。膜貫通タンパク質と脂質膜の相互作用解析のために、さまざまな結合様式における結合自由エネルギーを、全原子モデルを用いて計算した。ミセル系の計算では、可溶化される分子の疎水性／親水性と可溶化能の関連を、自由エネルギーのレベルで調べた。また、粗視化モデルの高精度化のために、脂質膜の弾性係数の解析を行った。粒子-連続場ハイブリッドモデルによって、ずり流動場中での紐状ミセルのシミュレーションを実施し、メッシュレス膜モデルを用いて、剪断流下の脂質膜構造の検討を行った。

[成果概要]

DMPC リン脂質二重膜と glycophorin A の膜貫通ドメイン(23 残基)の結合自由エネルギーの計算を行い、タンパク質の膜内 flip-flop 運動の経路を検討した。自由エネルギー計算には、ermodを用いて、溶質をタンパク質、(混合)溶媒を DMPC と水と見なして、溶媒和自由エネルギーを評価した。その結果、膜内回転が支配的な経路であることが明らかになった。flip-flop 運動は、時間スケールが日に及ぶものであり、自由エネルギー計算によってアプローチ可能である。この計算を chemical reality を反映する全原子モデルで行うことで、実験と比較可能な結果を得ている。脂質膜と並んで有用な水溶液内ソフト構造は、ミセルである。非イオン性ミセルへの可溶化について、イオン性ミセルの場合との比較を行い、水との親和性が高くない分子では、ミセルに応じて結合状態が大きく変化することが分かった。さらに、疎水性から親水性までの広い種類のポリマーの吸水自由エネルギーを、全原子モデルで評価した。吸水性は、ポリマーの原子レベル情報を敏感に反映するため、全原子モデルによる解析は必須である。緩和が遅いポリマーに対して、全原子 MD と溶液理論の融合手法によって、吸水性を評価した。海水淡水化に重要な役割を果たす高分子分離膜の原子・分子レベル設計に資する結果である。サブミクロン以上の長さスケールの現象の取扱いには、粗視化モデルの導入が必要となる。粗視化モデルによる膜の大域的形状の変化の記述のために、膜弾性係数の解析を行った。弾性係数に曲率依存性を導入することで、膜の連続体理論によっても、小さなリポソームの開口の自由エネルギー変化を定量的に記述できることを示した。また、紐状ミセル系にずり流動を印可したシミュレーションで、不均一流動(シアバンド)の発生が、枝分かれ構造の組み替えによることを示した。メッシュレス膜モデルを用いた解析では、剪断流において、ラメラ状の脂質膜が不安定化し、ロール状の構造が形成されることを明らかにした。この構造はオニオン形成途中に実験で見られる散乱パターンとよい一致を示す。

iv) 特別支援課題 3: ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス

[担当者] 中井浩巳(早稲田大)、IRLE Stephan(名古屋大)、吉澤一成(九州大)、武次徹也(北大)

[研究目的]

本研究の目的はナノスケールの分子や分子集合体などの大規模系に対して、量子化学計算を用いてさまざまな角度から反応制御を検討することである。これらの大規模系を取り扱うためには、高精度な大規模電子状態理論が鍵となる。そこで中井らが開発を進めてきた分割統治 (DC) 理論を用いた量子化学計算により、これを実現する。本研究は 1) 高精度な理論を用いた電子構造などの静的なプロパティ解析と 2) 分子動力学 (MD) 計算を用いた化学反応や生成プロセスなどの動的なプロパティ解析の 2 つの戦略により遂行する。

平成 24 年度は「京」を用いた大規模量子化学計算を行うために、高精度な電子状態理論である MP2 法を用いた、DC-MP2 法の高度並列化を行う。MD 計算においては、化学結合を取り扱うために平成 23 年度に開発を行った、量子化学計算手法である密度汎関数強束縛 (DFTB) 法に DC 法を適用した DC-DFTB 法の開発とその並列化を行う。さらに MD 計算に関連したコードの実装も行い、大規模計算分子動力学計算のための予備的計算も行う。

[実施内容]

大規模量子化学計算を行うために、DC 手法の開発と高度並列化を行った。

1) の静的プロパティ計算では、DC-MP2 プログラムの高度化を進め、並列化効率とピークパフォーマンス性能の改善を行った。また、これまで一点エネルギー計算に限定されていた DC-MP2 法に対してエネルギー勾配法を開発し、構造最適化計算を可能とした。

2) の動的プロパティ計算では、DFTB 手法で律速となる対角化の計算コストを削減するために、DC 法と DFTB 法を組み合わせた DC-DFTB 法を開発を行った。また、計算が独立である部分系に対して MPI コミュニケータを用いたプロセス並列、部分系内部の計算を OpenMP によりスレッド並列とすることで、ハイブリッド並列化を行った。10,000 原子以上のポリエチン分子や溶液を対象としたテスト計算を行い、さらに予備的検討としてアミン溶液中での二酸化炭素の吸収・放出反応を検証した。

[成果概要]

平成 24 年度は高精度な量子化学計算手法である DC-MP2 法の高度並列化に加え、DC-DFTB 法の開発とその並列化も行った。

DC-MP2 プログラムでは、平成 23 年度より行っているハイブリッド並列化をすすめ、600 原子と分割数が充分ではない大きさの計算であっても 1,152 ノードを用いてストロングスケーリングの並列化効率 76%を達成した。

また、平成 23 年度に開発を行った DFTB コードを元に DC-DFTB 法を開発を行った。ポリエチン ($C_{10000}H_{10002}$) 分子を対象として計算を行ったところ、計算精度を損なうことなく計算コストを線形にまで削減することに成功した。さらにハイブリッド並列化も行い、「京」の 500 ノードを用いて計算を行ったところ、各項の計算や MD 計算に必要なエネルギー勾配計算において 95%以上の並列化効率を達成し、全体として約 2 秒で計算することが可能となった。また、分子動力学計算コードや温度制御のためのアンサンブルなども作成し、今後の MD 計算に対する予備的検討として、アミン溶液中での二酸化炭素の反応過程を検証した。その結果、アミン分子と二酸化炭素の化学反応を経て、温度変化により二酸化炭素が吸収・放出される過程を確認することができた。

本年度の研究により、「京」を用いた大規模分子に対する反応制御解析を行うためのツールが完成しつつある。今後、これらのツールをより実践的に応用し、集積分子系、ナノ炭素分子材料、酵素反応、不均一系触媒などの電子構造と反応性について研究する。また、DC-MP2 と DC-DFTB を ONIOM 法により結合し、周囲の効果を取り込んだ大規模分子動力学計算を行うことで、より現実に近い反応解析が可能になると考えられる。

v) 特別支援課題 4: 機能性分子設計—光機能分子と非線形外場応答分子の光物性

[担当者] 江原正博(分子研)、中野雅由(阪大)、太田浩二(産総研)、藪下聡(慶應大)、小関史朗(大阪府大)

[研究目的]

色素増感太陽電池は持続的エネルギーの観点からその重要性が高まっている。また、非線形外場応答分子は、将来のフォトニクスにおける超高速光スイッチや大容量光メモリー、超微細加工技術、フォトダイナミックセラピー等の応用があり、これらの実現のためには高効率な特性をもつ分子の設計が不可欠である。本課題では、これら光機能分子や非線形外場応答分子の光物性と分子設計に関する研究を行った。

[実施内容]

並列計算によって色素増感分子と基盤の大規模計算を行い、理論スクリーニングと分子設計に基づいて、実験と協力して色素増感太陽電池のプロトタイプを作製した。紫外線遮蔽色素分子としてシナメート誘導体を設計し、合成を行った。また、開殻分子系の非線形光学(NLO)応答や一重項分裂(SF)に関しては、多環芳香族炭化水素(PAH)の幾何・電子構造依存性、ナノグラフェンに対する置換基導入効果、遷移金属二核系への配位子効果などを中心に、開殻性に基づく NLO 応答および SF 分子の設計原理の構築と新規系の提案を行った。1光子励起される場合に、解離生成物の角運動量成分に見られるコヒーレント成分の理論計算を行った。また Franck-Condon 因子の計算において Axis-switching 効果の影響を調べた。

[成果概要]

PAH 系に関しては、実験家と協力して新規に合成されたナノグラフェンの一種であるクォーターアンテンの電子構造と開殻性を予測し、この分子系が無限サイズグラフェン系のエッジ状態に対応する開殻性の電子構造を発現することを理論・計算・実験の観点から実証した。また、ナノグラフェンの三次 NLO 特性に対する置換基効果を最大にする分子設計として、開殻性の観点から奇電子(不対電子)密度の大きなサイトへの導入が、巨大な NLO 応答をもたらすことを明らかにした。フラレン系に関しては、系の対称性やトポロジーと開殻性、三次 NLO 物性の相関関係を明らかにした。一重項分裂(SF)に関しては、ジラジカル因子に基づく設計原理を提出し、それに基づいた SF 分子系の設計指針の構築を行い、それに基づき世界に先駆けて比較的小さなサイズのオリゴリレン系や $4n\pi$ 電子系を提案した(図 1)。オリゴリレン系については後に実験によりテリレンで SF が観測され我々の理論の妥当性が実証された。遷移金属二核系については、エクアトリアル配位子導入による開殻性と三次 NLO 応答への影響を明らかにした。上記の理論先導型研究による開殻因子に基づく非線形外場応答分子の設計原理にもとづき、実際に実験によりゼトレン系、ビスアクリジン二量体など複数の実在開殻 NLO 系が合成・測定され、開殻性に基づく設計原理の妥当性が実証されており、優れた NLO 特性をもつ実在開殻系の次世代フォトニクスにおける基本材料としての応用が今後期待できる。

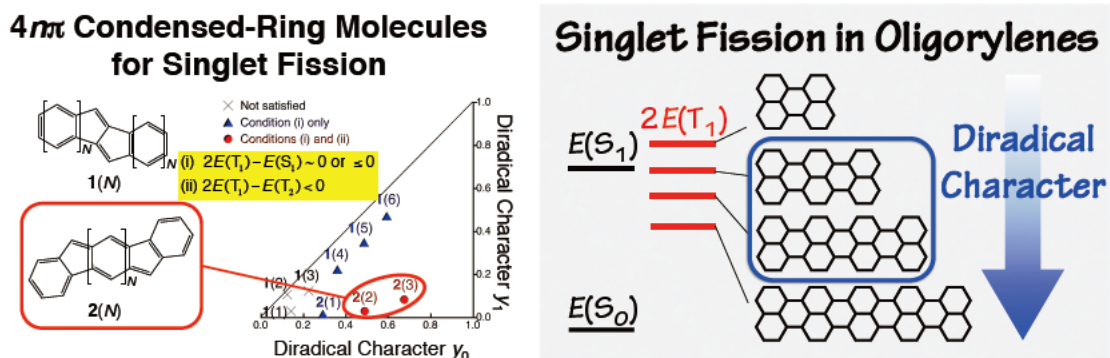


図 1. 新規 Singlet Fission 分子の設計:(a) $4n\pi$ 縮環系, (b) オリゴリレン系

色素増感太陽電池の色素増感分子としてD-D- π -A型分子を新規に提案し、N3色素の90%の光電変換効率を達成した(図2)。実験と協力して色素増感太陽電池のプロトタイプ(15 cm x 15 cm)を作製した(図2)。また、紫外線遮蔽色素分子としてヒドロキシ・シンナメートがUVB吸収および安定性に優れていることを理論的に提案し、これらの色素分子の合成を行った。

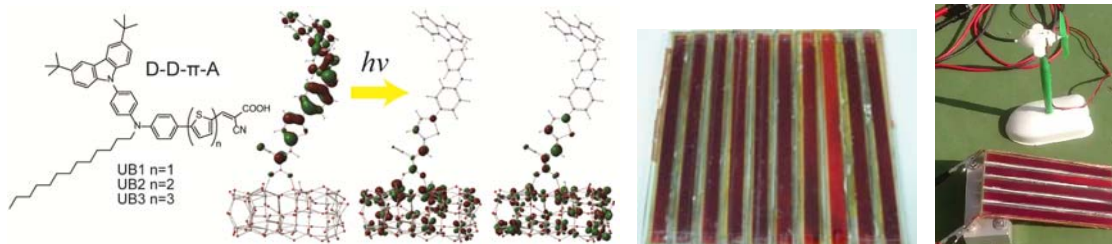


図2. D-D- π -A型色素増感分子と色素増感太陽電池のプロトタイプ

直線分子が平行遷移//と垂直遷移 \perp の混合した光励起によって別々の励起状態を経由して解離に至る場合、電子角運動量に異なる解離経路上のde Broglie波の位相差に関する情報が含まれる。ICI分子の高精度計算と動力学計算により、実験結果を分析し、非断熱遷移の詳細と生成物の角運動量分極の関係を明らかにした。小さい系のFranck-Condon因子の計算においては、従来のAxis-switching効果の0次だけでは不十分であり、その高次効果が重要になる場合があることが分かった。

2.2.1.1(4) エネルギー変換

第4部会 代表者： 山下晃一(東京大)、杉野修(東京大)

1) 部会全体の取り組み

【研究成果の概要】

本部会での研究は、化学結合エネルギー、電気エネルギー、光エネルギー(太陽光)、熱エネルギー間の相互変換に対する物質機能の役割を科学的に解明し、次世代におけるエネルギー変換の大幅な高効率化に資する計算データを提供すること、および、その計算を可能にする手法を確立することが目標である。プロジェクト2年目となる平成24年度の目標は、研究基盤(計算手法、並列化アプリ、研究コミュニティ)の強化と、年度後半から本格稼働した京コンピュータを用いた本格計算を軌道に乗せることである。課題i)および課題v)では、燃料電池(化学⇒電気)とリチウム二次電池(化学⇔電気)における電気化学過程を計算するための方法論・アプリ開発がかなり進展し、それを用いたシミュレーションから成果が出始めた。課題ii)では水素・メタンハイドレート(化学⇔化学)の熱力学的過程のシミュレーションが大規模に行われ、状態図等の平衡過程や気泡の発生などの非平衡過程の理解が進んだ。課題iii)では有機太陽電池および色素増感太陽電池(光⇒電気)における励起状態や構造の計算が進められ、分子設計指針獲得に向けた活動が進められた。課題iv)ではバイオマス利用(化学⇔化学)のための酵素反応の有効媒質法(3D-RISM法)を用いたシミュレーションの開発が継続して行われた。課題vi)では熱電変換(熱⇒電気)や太陽電池(光⇒電気)過程におけるナノ構造の役割について研究が進められた。特に、非平衡熱伝導のシミュレーション法の開発、研究コミュニティの強化が進んだ。課題vii)では、エネルギー変換物質を材料科学の観点からアプローチする研究が進展した。第一原理計算とフェーズ・フィールド法を用いたシミュレーションが行われ、これらの方法を組み合わせてシミュレーションを行うための手法の開発が進んだ。これらの活動をもとに、部会の研究をより円滑にするための課題再編(平成25年度より)が行われることとなった。課題v)を重点化して課題i)と統合することにより化学電池過程をより総合的に研究するための重点課題を設定し、課題vii)を物質科学コミュニティが結束して研究を促進するための仕組みとして、新たな部会として独立させることとなった。

以上の活動を通じて、研究手法やアプリの開発、研究コミュニティの形成に向けた着実な前進をすることができた。また、NIMS-GREEN、NEDO、JST-CREST、JST-さきがけなどのエネルギー関連、また触媒・電池元素戦略研究拠点など外部研究プロジェクトとの連携の強化も果たすことができた。

【研究会等の活動】

本年度は6月25日から7月11日の三週間にわたり、物性研共同利用との共催で滞在型国際シンポジウムMASP2012(MAterial Smulation in Petaflops era 2012)を開催した。これは、計算機がペタ・フロップス時代に突入した現在、どのような質的に新しい研究を行うことが可能なのかというテーマを深く掘り下げるために、電子状態計算の世界的な研究者を講師として招へいし、若手研究者と共に議論を尽くす研究会である。研究会の後半では、燃料電池やリチウムイオン二次電池に関わる固液界面のシミュレーション、太陽電池に関わる励起状態のシミュレーション、熱電変換に関わる熱流のシミュレーションについて、様々な議論が行われた。

燃料電池の重点課題では、前年度から継続して「燃料電池シミュレーション課題連絡会」が1-2か月に一度の頻度で開催され、産・官・学の研究者が頻繁に情報を交換する活動を行った。

2) 研究開発課題

i) 重点課題 5: 燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究

[担当者] 杉野修(東京大)、赤木和人(東北大)、森川良忠(大阪大)、牛山浩(東京大)、
兵頭志明(兵庫県立大)、尾形修司(名工大)

[研究目的]

電極・溶液界面および燃料電池の電極触媒反応を高精度にシミュレートするための計算手法の開発およびアプリの高度化を行う。それを用いて界面の構造と活性の関連を理論的に解明することにより、電極の性能や耐久性の向上に向けた指針を探る。また、産官学連携や理論・実験連携の下、研究コミュニティの形成を図る。

[実施内容]

第一原理分子動力学計算のためのアプリ「STATE」の高並列化を進めた。また、電極・溶液界面の計算を高度化するための新しい手法の開発を行った。燃料電池シミュレーション課題連絡会を定期的に開催し、また、連絡会に企業研究者を新たに迎え、産学官連携体制を強化した。

[成果概要]

第一原理分子動力学計算のためのアプリ「STATE」のアルゴリズム(FFTや規格直交化)の改良を進め、千原子シミュレーションを可能にする大規模並列化を行った。また、反応経路探索のための並列化の作業も行い、数千ノードを用いた大規模計算の実現に向けたアプリ開発が進んだ。計算効率は10%程度に向上し、一般の第一原理計算プログラムに比肩するレベルにまでになった。k点、Gベクトル、バンドの三つの軸に沿って並列化するための「三重並列化」のための書き換えを行い、ポスト京にも対応できるようなアプリの構造の改変を行った。

計算手法開発に関しても研究が進展した。電気二重層を計算するための手法の開発は電気化学計算の要であり、独自の手法で世界をリードしてきた。今回、有効遮蔽体(ESM)法をさらに高度化し、スムーズESMを完成させた。その結果、遠方の溶液の影響をより精度よく取り入れることが可能になった。さらに、これまで、余剰電子を導入することにより電位差を印加してきたが、constant- μ 法の開発を行い、一定の電位差を界面に与えながら電極界面を計算することを可能にした。これにより実験と対応するシミュレーションを行えるようになった。これらの成果は、論文(Physical Review Letters)に掲載され高い評価を得た。

計算手法をさらに高度化するためには、pH効果や電解質イオンの効果を正しく取り入れながら、化学反応過程を、恣意性を排した形で求める必要がある。そのためにも、電解質イオンをあらわに扱うシミュレーションために必要なモデルの規模とシミュレーション時間を多角的に検討した。また、あらかじめ想定した可能性の中から反応経路を探索するBluemoon法や、想定のを要らないWang-Landau法の有効性を検討した。

シミュレーションに関しては、正極(空気極)における界面構造(界面指数や欠陥等)や特異吸着構造(水分子や電解質イオン)の計算を行った。正極反応は過電圧(エネルギーロス)の主因とされているが、その過程は、結合エネルギーのみを用いた従来型の理論を超えて、界面域の構造を取り入れた理論で初めて説明する必要がある。本研究で示されたのは、界面の構造と水の水素結合網の形成が電極反応の鍵になっていることである。Pt(332)やPt(322)等の傾斜界面では、一見反応性が高そうに見えるステップで起こらず、細密構造を持つテラスでそれが起こることが知られているが、シミュレーションからその原因が水素結合網にあることが示唆された。今後シミュレーションを継続することにより、界面の構造や反応過程の関連が、以前とは比べ物にならない程に明らかになるものと考えている。

燃料電池シミュレーション課題連絡会等を通して、豊田中研や日産自動車などといった産業界や実験家からの情報を得るためのチャンネルが強化され、大規模シミュレーションに求められている課題がどのようなものか、それが燃料電池デバイスの開発現場に及ぼし得る影響について考えながら課題設定を行うための体制が形成された。

ii) 重点課題6：水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

[担当者] 田中秀樹(岡山大)、甲賀研一郎(岡山大)、水関博志(東北大)、三浦伸一(金沢大)

[研究目的]

エネルギー創生と貯蔵のために、メタンと水素ハイドレートのシミュレーションにより、熱力学的安定性と融解のダイナミクスを調べ、それらの実用に対する理論面からの支援を行うことを目的とした。ハイドレートの有効利用を実現するために、大規模なシミュレーションにより、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見の確立を目指す。特に、24年は大規模なメタンハイドレートの融解過程のシミュレーションから、効率的採取のための知見を得る。

[実施内容]

メタンハイドレートの融解過程のシミュレーションに際して、「京」の性能を最大限に引き出すための重要な検討事項について、数十コア計算機により試行的な計算を行った。そこで、最適な分子間相互作用の選択、境界条件の設定法の検討し、これらの大部分を決定した。大気圧にける相平衡の実測値との比較から、水-水の相互作用はTIP4P/2005、またメタンはOPLSとした。その後、「京」数千コアを用いておよそ10万分子時間10nsのシミュレーションを実施して、以下の研究成果にあるような結果を得た。また、これらの一部を2Dおよび3Dの動画として視覚化した。

これまでの分子動力学シミュレーションでは、分解に焦点を当てたものは少なく、さらに大規模な系ではなかった。ここでは、ハイドレートの分解機構に注目し、特に① どこからどのように壊れるか、② どういう時に壊れやすい（壊れにくい）のか、③ 分解に伴い何が起きるのか、についてのデータ収集を開始した。

[成果概要]

24年度は、小規模系で様々な計算条件によるシミュレーションを実施して、メタンハイドレート分解の温度、圧力、組成依存性についての十分な情報を得ることができた。これを進める上で、従来の分子動力学計算では示されていなかった新たな機構を見出すことに成功した。この機構では、ハイドレート分解の過程で生じるメタンの気泡が重要な役割を果たしている。またこの機構からは、ハイドレート分解がメゾスコピックなスケールでは不均一に進行するという新たな描像が予想される。これは小規模な計算では扱うことができない現象であり、京コンピュータの利用により始めて達成することができるものである。

より具体的には、適切な分子間ポテンシャルを選択したのち、メタンハイドレートと水などとの共存状態における一連の分子動力学計算機シミュレーションを行った。圧力100 MPaでは三相共存温度は280 K程度であることが判明した。一方、現実のメタン採取圧力である0.1 MPaでは、メタンの過飽和水溶液との平衡では300 K以上でも融解しないことが分かった。一部気相メタンの共存下では260 Kと低下し、過飽和からのメタン気泡生成が分解の律速となっていると考えられる。これらの知見をもとに、名古屋大で開発されたMODYLASを用いて、中規模の分子動力学シミュレーションを実施した。液体状態の水70000分子によって囲まれた、メタンハイドレート30000分子の10nsにわたるシミュレーションを行った。融解の開始後、過飽和の限界に至って、気泡が生成する過程について、視覚化などをして今後の解析に供することとした。メタンハイドレートの採掘を試みている実験研究者にとって、これらは融解の初期段階を加速するために重要な過程であり、今後ともマイクロな融解過程の情報を提供しつつ、メタン貯蔵も含めた実用への貢献をする。

iii) 重点課題7:「金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発」

[担当者] 香山正憲(産総研)、澤田英明、川上和人(新日鉄)、尾崎泰助(北陸先端大)、

尾方成信(阪大)、田中真悟、Vikas Sharma(産総研)

[研究目的]

飛躍的に優れた構造材料や耐熱材料等の開発は、エネルギー変換機器の効率の飛躍的向上、輸送機器の超軽量化による省エネ化など、エネルギーの有効利用のために不可欠の課題である。また、高信頼性の大型構造物など、社会基盤を支える技術である。こうした実用材料は多結晶体であり、種々の析出相や欠陥で構成される微細組織を持ち、それらが機能を支配している。こうした材料の高精度設計のために、ミクロの電子・原子の振る舞いからメゾの微細組織の構造や特性を理解し、マクロの機械的性質や機能を予測するマルチスケール組織設計・評価技術の開発が必要である。そのために、各結晶相のみならず、異相界面・粒界・転位等の大規模複雑構造の第一原理計算を行い、合金成分・不純物との相互作用を明らかにするとともに、それらを Phase Field 法に繋げる手法を確立する。

[実施内容]

平成 24 年度は、鉄鋼材料中の TiC 析出相と Fe 母相の間の異相界面の大規模第一原理計算を開始した。TiC(100)/Fe(100)の整合界面と部分整合界面のモデルを構築し、OpenMX コードを用いたオーダーN法第一原理計算を「京」で実行した。鉄鋼材料では、Nb、Ti、Vなどの微量の遷移金属合金成分を遷移金属炭化物(窒化物)として析出させることで、転位の動きを妨げて強度を上げ、また脆化の原因となる残留水素を界面にトラップさせる。初期には、整合界面(炭化物(100)/Fe(100)の方位関係等)を形成して析出するが、成長に伴い、格子 misfit による周囲の歪・応力の増大のため、非整合界面(大きな周期の部分整合界面)に遷移すると考えられる。現実的な大規模第一原理計算により、整合界面、部分整合界面の諸特性と遷移の臨界サイズを見積もることが求められる。一方、異相界面の応力の起源を電子挙動から解明するため、QMAS コードによる、整合界面の局所応力・局所エネルギーの詳細分析も行った。このコードでは、界面の各原子層の応力状態を高精度に求めることができる。

[成果概要]

TiC(100)/Fe(100)の整合界面では、界面エネルギーは安定だが、二物質間の格子 misfit により界面周囲に歪・応力が発生すること、部分整合界面は、周囲の歪は少ないが、格子 misfit により界面で原子が不整合となり、界面エネルギーが大きくなること、整合界面の歪エネルギーの見積もりから、析出物のサイズが臨界サイズを超えると整合界面が部分整合界面に遷移すること等が示された。また、QMAS コードによる局所応力解析から、界面の Fe 原子層で d 電子挙動に起因する大きな応力が発生する様子が示された。

遷移金属炭化物/Fe 界面の部分整合界面の第一原理計算は、TiC の場合、大規模スーパーセル(4319 原子セル)が必要となるため、「京」を用いることで初めて可能となった。こうした鉄鋼材料中の異相界面の大規模構造第一原理計算は、世界で初めてである。鉄鋼材料では、各種化合物相の析出や相転移、それらに伴う転位や粒界の集合体など、微細組織の形成により、優れた強度と靱性を実現している。こうした組織の設計や制御は、現象論や経験的知見に基づいて行われてきたが、第一原理計算からの解明は、飛躍的に高精度の設計・制御に繋がる大きな前進である。また、異相界面の応力の電子挙動に基づく解明も世界で初めてである。もちろん、今後、こうした結果を Phase Field 法に繋げることで、微細組織の解明と設計を進めることが望まれる。

iv) 特別支援課題 1: 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算

[担当者] 山下晃一(東京大)、杉野修(東京大)、宮本良之(産総研)、館山佳尚(物材機構)、長谷川淳也(京都大)、城野亮太(CMSI 研究員)、河津励(CMSI 研究員)

[研究目的]

有機系太陽電池は、無機系太陽電池と比べ製造が簡易で原料も安価であることから次世代のクリーンエネルギー源として期待されている。しかし電子供与分子/電子受容分子の異種界面を利用した有機薄膜太陽電池のエネルギー変換効率は10%程度と未だ低く、また色素増感型太陽電池は2011年に変換効率12%を達成しているが、これら有機系太陽電池の普及には変換効率や耐久性の更なる向上が必須である。そのためには異種界面での電荷分離過程、TiO₂電極と色素分子・電解質溶液界面における界面電子移動過程の微視的理解が不可欠である。これらの基礎過程は遷移金属酸化物/有機溶媒界面やTiO₂表面上の励起電子ダイナミクスや遷移金属錯体吸着といった、第一原理計算の観点からは電子励起状態や電子相関が絡む大規模系であり、その解析計算の実行は応用的観点のみならず計算科学的にも重要である。

[実施内容]

次世代太陽電池として実用化が期待されている有機薄膜太陽電池と色素増感太陽電池の更なる変換効率・耐久性の向上を目指して、その微視的メカニズムの理論的解明に取り組んだ。具体的には(1)電子供与分子/電子受容分子の異種界面での電子ダイナミクスと励起エネルギー移動、(2)酸化チタン-電解液界面での酸化還元反応について研究を行った。また(3)本課題で使用するアプリの最適化を行った。

[成果概要]

(1) 電子供与分子/電子受容分子の異種界面での電子ダイナミクスと励起エネルギー移動

有機薄膜太陽電池界面における電荷対生成の高効率化を目指し、電荷対生成過程の初期過程であるドナー分子からアクセプター分子への電荷移動反応が高効率におきる励起状態や界面配向を探索することを目的とした。ドナー分子として tetrabenzoporphyrin (BP)、アクセプター分子として bis(dimethylphenylsilylmethyl) [60] fullerene (SIMEF) からなる分子複合系をマーカス理論により解析したところ、ドナーの低励起状態ほど電荷移動速度が速いことがわかった。これは、有機薄膜太陽電池が利用可能な可視光エネルギー領域がマーカスの逆転領域に相当するためである。次に界面におけるドナーとアクセプターの分子間配向を変化させたところ、ドナーの励起状態毎に最適な分子間配向が異なることがわかった。つまり、光電変換に利用するエネルギー領域毎に最適な界面配向を用意することで電荷移動をより高効率に起こすことが可能であるとわかった。

(2) 酸化チタン-電解液界面での酸化還元反応

太陽電池変換効率を決定する最大要因の一つは、ヨウ素酸化還元反応に伴う Dye regeneration cycle の反応速度、特に、ヨウ素系原子(分子)との会合による色素分子の遷移状態のエネルギーである。遷移状態のエネルギーがヨウ素系との反応前、反応後の準安定状態のエネルギーと相対的に低い程、Dye regeneration は効率が良いと考えられる。そこで量子化学計算によってアセトニトリル溶液における trans-terpyridyl レネニウム錯体 (DX) と、ヨウ素系原子(分子)との反応経路を調べ、Dye regeneration 効率を高める一つの指針として、色素分子とは安定な結合を生成しないが、色素との効率の良い電子授受を保つような、レドックスと有機色素分子の組み合わせを用いることを示唆した。

(3) アプリの最適化

第一原理計算プログラム NWChem および第一原理分子動力学計算プログラム CP2K の「京」および FX10 向けの高速化を行った。CP2K については、Hartree-Fock 法を用いた計算実行時の高速化を行った。NWChem については、富士通 SSL2 ライブラリを有効に活用することで高速化の目処がたった。今後は汎用的な高速化コードを導入、最適な計算条件を探索し、実際の計算対象で実行する。

v) 特別支援課題 2: バイオマス利用のための酵素反応解析

[担当者] 吉田紀生(九大)、平田文男(立命館大)、森田明弘(東北大)

[研究目的]

バイオマス利用に向けた酵素反応解析のための方法論・プログラムの開発を目的とする。一つはセルロース分解酵素による酵素反応の解析で、もう一つはバイオマス表面での反応解析である。これらを理解するには、水溶液とバイオマス関連物質(セルロース、酵素、バイオマス表面等)を統合的に扱える方法・プログラムが必要である。申請者らは溶液界面を捉える分光実験を解析する計算手法を開発や、液体の統計力学理論による酵素の分子認識過程を解析する手法を開発しており、次世代スパコンでの利用をめざした高度化を行う。

平成24年度は 1)3D-RISM プログラムの「京」コンピュータ上での超高並列化、2)セルロースの分子認識/分解反応解析に向けた理論手法の開発とその応用を目的とした。

[実施内容]

1) 3D-RISM プログラムの「京」コンピュータ上での超高並列化

前年度に引き続き、3D-RISM プログラムの「京」コンピュータ上での超高並列化作業を行った。3D-RISM では計算の反復過程において正逆一對の3次元FFT(3D-FFT)の実行を含む。通常の並列版3D-FFTでは1軸でデータの分割を行うために上限ノード数が1軸上の格子点数に制限される。この問題を回避するために、筑波大学高橋大介准教授が作成した2軸分割3D-FFTを3D-RISMプログラムを組み込み、合わせて最適化を行った。

2) セルロースの分子認識/分解反応解析に向けた理論手法の開発

酵素反応に代表される、生体分子の化学反応において溶媒は中心的役割を果たしている。そこで、溶液内の化学反応を記述する手法として液体の積分方程式理論(RISM および 3D-RISM)と電子状態理論を組み合わせた3D-RISM-SCF法の開発・高度化および応用を行った。

[成果概要]

1) 3D-RISM プログラムの「京」コンピュータ上での超高並列化

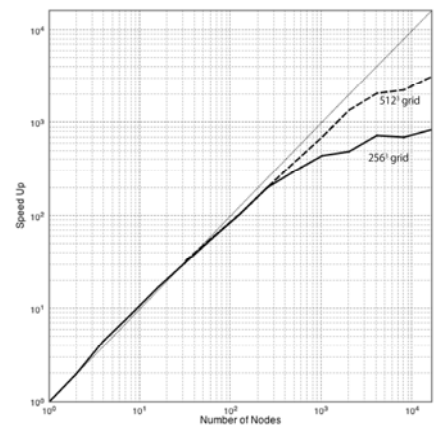
前年度につづき、3D-RISM プログラムへの2軸分割3D-FFTの組み込みと、「京」コンピュータへの最適化を行った。(図1) このチューニングに関しては、結果をまとめて現在投稿準備中である。

2) セルロースの分子認識/分解反応解析に向けた理論手法の開発

今年度はこの3D-RISM-SCF法を用いてアデノシン三リン酸(ATP)のモデル分子であるピロリン酸の加水分解反応の解析を行った。

われわれの体内では、アデノシン三リン酸(ATP)を媒体とするエネルギー循環が絶え間なく行われている。この一連のエネルギー循環に関してこれまで多くの研究が行われてきた。しかし、このエネルギー論の最も基本的な部分である、ATP加水分解エネルギー(ATPエネルギー)の起源に関してすら、統一見解が得られていないのが実情である。

本研究では、ATPのモデル分子であるピロリン酸の加水分解反応の自由エネルギー解析を行った。ここでは、3D-RISM-SCFを用いて、反応物、生成物、反応中間体の自由エネルギー解析を行った。ピロリン酸には4つの解離状態が、無機リン酸塩にも3つの解離状態が存在し、反応としての組み合わせは4つ存在する。その全てを解析し、溶媒が反応に与える影響を精査した。(JCTCに既報)



vi) 特別支援課題 3: 高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究

[担当者] 大谷実(産総研)、大脇創(日産自動車)、山下晃一(東京大)、長岡正隆(名古屋大)、麻田俊雄(大阪府大)

[研究目的]

リチウム電池の電極材料と電解質の界面では、電池動作に伴う負極表面における被膜構造の形成や正極材料からのイオン溶出など、電池の充放電特性や劣化に大きな影響を与える様々な化学反応が起こる。それら化学反応の機構を理解して電池の性能支配因子を捉え、電池用材料の設計指針を構築することは、電池開発の国際競争力における重要な要素となる。実際には実験では、特に有機電解質系での複雑な電気化学現象を捉えることは困難であるため、シミュレーションと実験の相補的アプローチに期待が持たれる。しかし、電極反応機構や性能を左右し得る界面構造をシミュレーションに基づいて検討することは、特にリチウム電池系では必然的に扱うべきモデルが大規模になるため、従来手法の枠内では非常に困難である。そこで本課題では、大規模モデルに基づく第一原理分子動力学(MD)シミュレーションを「京」で実行することで、リチウム電池系における界面構造や電気化学反応機構の解明を目指すこととした。

[実施内容]

我々は平成23年度に、第一原理計算プログラム「OpenMX」の Krylov 部分空間法に基づく O(N)-DFT 計算機能の高並列・高速化および大規模計算に特化したシミュレーション機能の構築を行った。平成24年度からは、それらシミュレーション技術を実際の計算モデルへの適用を開始した。

我々のアプローチは、(1) 電極-電解質界面系、(2) 電解質バルク系 の2つの系についての第一原理 MD シミュレーションで構成される。(1)では、リチウム電池の負極-電解質界面における分子レベル構造およびそれを反応場とする電気化学反応(電解質の酸化還元による被膜生成反応、溶媒とリチウムイオンの脱溶媒和過程)をシミュレートする。また、(2)は(1)との比較から、(1)でシミュレートされた界面でのリチウムイオンの挙動や分子レベル構造がどのような機構で特徴づけられているのかを検討することを目的とする。

平成24年度では、電解質の溶媒種をプロピレンカーボネート(PC)に統一し、各種負極表面による界面構造と電気化学現象の違いに関する基礎的知見を得ることを目指した。計算モデルは以下のとおりである。

計算モデル		原子数	対象とする電池	主な検討ポイント
界面系	H 終端 Si(111)負極表面+PC 溶媒+LiBF ₄ 塩	2688	リチウムイオン二次電池	Si 系負極界面における電解質側の分子レベル構造と電解質還元反応およびそれらの表面官能基による違い
	OH 終端 Si(111)負極表面+PC 溶媒+LiBF ₄ 塩	2752		金属系高容量負極である Al と電解質との界面構造と電解質還元反応
	Al(111)負極表面+PC 溶媒+LiBF ₄ 塩	2720		
	Li(111)負極表面+PC 溶媒+LiBF ₄ 塩	2624	リチウム空気電池	Li 金属負極と電解質との界面構造と電解質還元反応
バルク系	PC 溶媒+LiBF ₄ 塩	2176	リチウムイオン二次電池	電解質バルクにおける分子レベル構造と各イオンの挙動およびそれらのアニオン種による違い
	PC 溶媒+LiPF ₆ 塩	2208		電解質中の水がアニオンと反応して(正極材料の耐久性に悪影響を及ぼすとされる)酸が生成する過程
	PC 溶媒+LiPF ₆ 塩+H ₂ O	2224		

※ いずれのモデル系においても、PC 分子を160分子、塩分子を16分子として塩濃度 1 mol/l の電解質をモデル化

第一原理 MD 計算は、OpenMX に基づき flat MPI 並列で実行した。計算条件としては、擬ポテンシャルはノルム保存型、交換相関汎関数は GGA-PBE、基底関数は double numerical + single polarization 型とし、Krylov 部分空間法に基づく O(N)法で計算を実施した。また、電気化学的環境モデルとして、有効遮蔽体 (ESM;

effective screening medium)法を適用した。尚、このESM法はモデルに電場印加する前の構造シミュレーションに対しても適用し、分極性を有するモデルが隣接セル内のモデルと静電相互作用を起こして構造に影響を及ぼすことを回避した。MD計算の条件としては、設定温度は400K、アンサンブルはNVT、温度制御はvelocity scaling法(界面系の場合では、表面モデル領域と電解質領域それぞれに独立の熱浴を適用)、1 MD step = 1.2 fs (水素は重水素に置き換え)とした。

[成果概要]

平成24年度下期から開始された「京」での計算は、当該年度中は主に、初期構造の緩和と電場ゼロの状態における界面構造のシミュレーションとなり、電場影響下でのシミュレーションは今年度(平成25年度)から開始した。平成24年度の進捗として、特に幾つかの特徴的な結果が確認されたSi系負極界面モデルについての電場ゼロでのシミュレーションについて以下に述べる。

Si系負極界面モデルについてはいずれも初期構造から10~11 psの時間スケールでのMD計算が完了し、また、最初の2~3 psで構造緩和が為されていることを確認した。H-Si(111)負極界面モデルでは、界面近傍のPC分子群はその5員環面を電極表面に対して並行に配向し、それよりもバルク側の領域では配向性が減衰する傾向があり、それらによって界面構造が形成されていることが確認された。一方のOH-Si(111)負極界面モデルでは、OH基とPC分子との相互作用が強く、PC分子のカルボニル基が電極表面に接近する頻度が高かった。それと関連して、界面近傍のPC分子群は、H終端の場合のような平面的な配向を取る傾向は弱かった。

更にOH-Si(111)負極界面モデルでは、水分子が生成される反応が確認された。PC分子のカルボニル基がOH基同士の空隙に挿入する形でOH基と結合するSi原子に接近し、それと協奏的にOH基のSiからの乖離、更には隣接OH基のH引抜が起こって最終的に水分子が生成した。そもそもリチウム電池系では、水は電解質において塩のアニオンと反応して酸性物質を生成して電池の耐久性に悪影響を及ぼすと考えられており、電池製造をドライな環境で行うことの必要性は勿論、電池内部で起こる諸々の反応において副生成物として水が発生する可能性についても注意が払われる。従って今回確認された反応は、電池内部における水生成の可能性の一つを示すものである。

尚、実際にはSi負極の表面は主にSiO₂が支配的であると考えられているため、これまでに扱ってきたSi系負極モデルに加えて、更にSiO₂に被覆されたSi活物質についてもモデル構築を行い、同様の界面構造のMDシミュレーションを現在行なっている。

vii) 特別支援課題4: ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション

[担当者] 浅井美博(産総研)、中村恒夫(産総研)、吉田博(大阪大)、佐藤和則(大阪大)

[研究目的]

ナノ構造化する事によりエネルギー変換効率が向上する材料が幾つか知られている。比較的にはっきりした例が見つかっているのは熱電変換材料である。量子ドット、ナノワイヤ構造を用いる事により熱電変換効率因 ZT の値がバルク値と比べて向上する例が報告されており注目を集めている。 ZT の理論見積もりを得る為にはフォノン熱伝導度の計算も必要であるが今まで困難であった。今年度はこの研究を始めとして、ナノ構造創製過程の計算シミュレーション、ナノ構造体の熱電特性の計算シミュレーションなどを行い、高効率エネルギー変換材料の計算機上での探索スクリーニングの為のスキームを確立する。

[実施内容]

2端子(電極)系に対するフォノン熱伝導度の計算理論は本報告者等により既に確立済みなので、それを用いたモデルシミュレーションの実施と、第一原理計算コードの作成および、それを用いたテスト的な応用計算の実施を行った。並列化の作業も立ち上げ始めたところである。これを含めて本年度は以下の研究を実施した:

- ① 2端子系の熱電特性とその性能指数 ZT の理論研究と第一原理シミュレーション研究。
- ② ナノ接合系の電気伝導機構の研究。その温度依存性の理論研究と接触抵抗と界面構造の研究。
- ③ 自己組織的ナノ構造生成機構の計算シミュレーション研究。
- ④ 不揮発性メモリ材料とそのメモリ機構の計算シミュレーションを用いた研究。

[成果概要]

以下、①～④の課題に対する研究成果を簡潔にまとめる:

- ① ナノワイヤのフォノン及び電子熱伝導度、電気伝導度、ゼーベック係数や ZT の温度依存性、ワイヤー長依存性及び、電極のフェルミエネルギーとのエネルギーギャップ依存性を系統的に調べ、高い ZT が期待する事が出来る条件を明らかにした。また第一原理計算コードを開発し、Ru 錯体多層有機膜の熱電特性を調べた。高性能熱電材料の探索は、多くの企業や政府・府省で興味が持たれている熱マネジメント技術開発の重要な構成要素の一つであり、計算シミュレーションはそれに大きく寄与する事が求められる。(J.Phys.Cond.Matt.に発表、及び投稿中・投稿準備中)
- ② ナノ構造体の電気伝導機構にはまだまだ未知の部分が多い。それらの多くは現段階では学術研究が先行すべきであろうが、今後実用面で重要になってくる可能性がある。精密な計測実験と協力して有機分子ワイヤーの電気伝導の温度特性の詳細とその機構を明らかにした。(ACS Nano に発表、Phys. Rev. B Rapid Commun. に発表) 単分子接合の電気的な接触抵抗のアンカーグループ依存性について実験と計算シミュレーションにより電極とカーボン骨格の直付けの場合について検証した。(J. Am. Chem. Soc. Commun. 発表、J. Phys. Chem. C 発表) 水とTiO₂の界面構造に関して和集波スペクトルを計算し実験との比較を行い界面構造モデルにつき検討した。(J. Chem. Theor. Comp. に発表)
- ③ CuInSe₂ や Cu₂ZnSn[Se_{1-x}S_x]₄ について太陽電池性能を最大化すべく計算シミュレーションを用いた材料設計を行った。(Physica B に発表、Jpn. J. Appl. Phys.に発表) バルク中に埋め込まれた自己形成ナノ構造の創製プロセスについて、KKR 第一原理計算と kinetic ising シミュレーションを行い、その機構を解明した。(Jpn. J. Appl. Phys.に発表)
- ④ 不揮発性メモリ材料のメモリ オン・オフ状態を第一原理構造最適化計算と第一原理伝導計算の結果をもとに議論した。酸素欠陥が重要な電流パス形成に重要な役割を果たす事を見出した。(投稿中) この研究はナノエレクトロニクス分野において競争の激しい不揮発性メモリ研究に直結しており、企業開発研究と比較的近い領域の研究である。

2.2.1.2 計算科学技術推進体制構築（成果）

【計算科学技術推進体制構築の成果概要】

HPCI 戦略プログラム分野 2 を推進する計算物質科学イニシアティブ (CMSI) は、HPCI 戦略プログラム戦略拠点としての責務を担う組織として立ち上げた、東京大学物性研究所「計算物質科学研究センター (CCMS)」、自然科学研究機構分子科学研究所「計算分子科学研究拠点 (TCCI)」、東北大学金属材料研究所「計算材料科学研究拠点 (CMRI)」、教育拠点である、東北大学、東京大学、金沢大学、豊橋技術科学大学、名古屋大学、総合研究大学院大学、京都大学、大阪大学、神戸大学の 9 大学、および、産官学連携拠点である産業技術総合研究所、物質・材料研究機構の連携活動により運営されている。CMSI は、物性科学、分子科学、材料科学という異なる学問分野でそれぞれ独立に形成されてきたコミュニティを束ね、国家的課題である新物質・新エネルギー創成に資する計算科学技術推進体制を構築することを目標として活動を行っている。また、理化学研究所計算科学研究機構 (AICS) 内に CMSI 神戸 (CCMS 分室) を設置し、「京」の利用をサポートする体制を整えている。

平成 24 年度は、9 月末に「京」の試験利用が運用開始に移行する時期のため、「京」を効率的に活用するためのアプリ高度化に関するイベントや支援活動を重視して実施した。各分野の振興活動は戦略 4 拠点の他、「京」をはじめとする計算機資源の効率的なマネジメントに関しては、スパコン連携小委員会、学術と社会のニーズに合わせた人材育成、教育活動は人材育成・教育小委員会、産官学連携活動は産官学連携小委員会が担当した。また、広報やソフトウェア公開を通じて、計算物質科学の普及を図る活動に関しては広報小委員会が担当した。

平成 23 年度に実施したワーキンググループ活動「元素戦略 WG」は、平成 24 年度より文科省の「元素戦略プロジェクト」戦略拠点から CMSI が委託研究を受ける形として進展している。また、「CMSI アプリケーション作業部会」は、文科省の「将来の HPCI のありかたに関する調査研究」の委託研究に結びつき、AICS、および、東大情報基盤センター等と連携して推進している。平成 24 年度は、下記のワーキンググループを立ち上げて検討を実施した。

1) **エネルギーWG**: CMSI が実施する研究課題の中で、部会横断的にエネルギーに関連する課題を抽出してその関連性や取組を包括的にまとめるとともに、今後 CMSI で取り組むべきエネルギー研究課題を検討することを目的とし、CMSI の各部会代表者と作業部会のエネルギーに関連する魚崎先生、中村先生、栗野先生をメンバーとして WG を設置した、平成 24 年度は 2 回の関連した会合を行った。

2) **マテリアルズインフォマティクス検討会**: 今後の新材料探査のありかたとして、第一原理的なアプローチと、実験結果等の情報を統計的に処理するサイエンスビッグデータを活用するアプローチを融合させ、新たな材料開発手法を検討する検討を開始した。CMSI 企画室メンバーを中核として必要に応じて関係者を招集する形で推進している。平成 24 年度は、関連イベントを 2 回企画実施した。

平成 24 年に CMSI が開催したイベントの一覧を表 2.2.1.2-1、表 2.2.1.2-2 に示す。また、各イベントの報告書を添付資料 5 に示す。CMSI、および、各戦略機関が主体的に企画し、運営したイベントは 23 回、共催、協賛を合わせて 53 回の公開イベントを開催した。参加人数を把握しているイベントの、のべ参加者数は 2,370 名、産官(独)学の参加者区分を把握している主催イベントの、のべ参加者数は 2,146 名であった。その人数の産官(独)学の内訳と比率、主要な参加機関名とその参加内訳人数を図 2.2.1.2-1 に示す。CMSI に機関として参加している官(独)、学からの参加者数が多いことがわかる。

平成 24 年度は、広報誌「Torrent」No. 5,6,7 を発刊した。また、AICS の一般公開や SC12 への展示会等への出展にも協力し、SC12 に関しては東大情報基盤センターと CCMS の共同での出展も行い、計算物質科学コミュニティ内外に向けた情報発信を積極的に行った。

ここでは、平成 24 年度に実施した計算科学技術推進体制構築に関連する活動の結果報告を行う。

表 2.2.1.2-1 平成 24 年度 CMSI イベント一覧-1

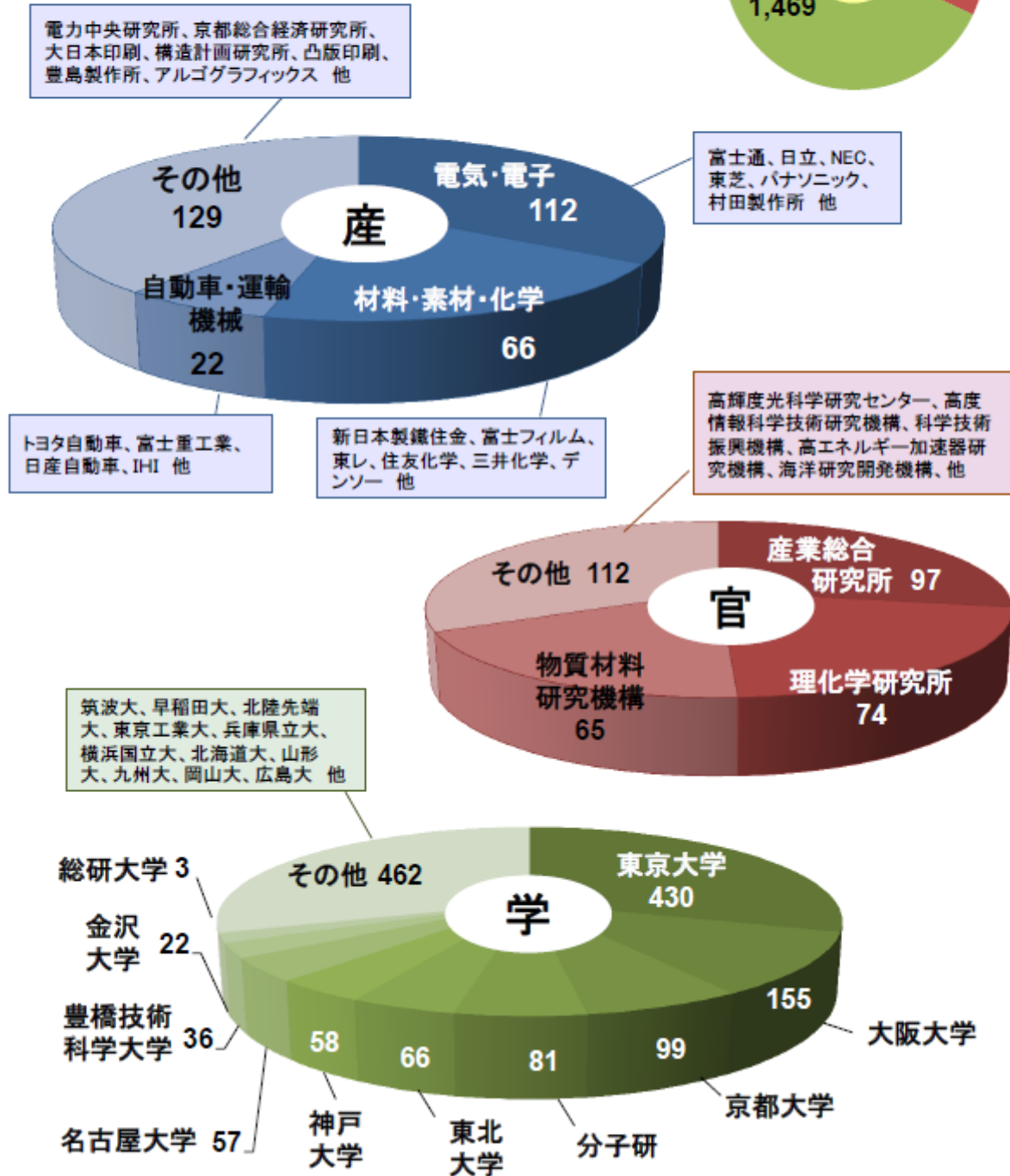
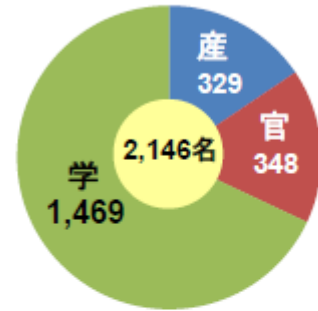
CMSI主催・共催・協賛行事			場所	実行	行事名	参加人数	参加人数内訳			報告書No.
月	日程	曜日					産	官	学	
人材育成										
8月	8月20日～8月24日	月～金	東京大学本郷キャンパス	TCCI 人材育成協賛	第52回分子科学若手の会夏の学校					x
9月	9月3日～7日	月～金	大阪大学大学院基礎工学研究科C棟	人材育成・教育	第21回 CMDワークショップ	88	14	4	70	x
	9月6日～8日	木～土	慶應義塾 立科山荘	TCCI 人材育成・教育	第16回 分子シミュレーション夏の学校	55	1	1	53	x
11月	11月30日	金	大阪大学大学院基礎工学研究科	人材育成・教育	第1回CMSI人材育成シンポジウム	28	0	4	24	x
12月	12月6～8日	木～土	ベトナム	人材育成・教育	アジアCMDワークショップ	31	0	0	31	x
	12月11日～14日	火～金	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	TCCI 人材育成・教育	TCCIウィンター・カレッジ・分子シミュレーション 第6回分子シミュレーションスクールー基礎から応用まで	91	9	1	81	報告書1
	12月17日～18日	月・火	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	TCCI 人材育成・教育	TCCIウィンター・カレッジ・量子化学 第2回量子化学ウィンタースクールー基礎理論と生体系の理論～	48	0	0	48	報告書2
1月	1月28日	月	早稲田大学	TCCI 人材育成・教育	第2回超並列化技術国際ワークショップ	47	9	6	32	報告書3
2月	2月14～16日	木～土	タイ	人材育成・教育	アジアCMDワークショップ	40				x
3月	3月4日～8日	月～金	計算科学研究機構、ニチイ学館(神戸)	人材育成・教育	第22回 CMDワークショップ	64	11	2	51	x
	3月7日	木	産業技術総合研究所 臨海副都心センター	人材育成・教育	OCTA講習会&トレーニング	39	21	0	18	報告書4
人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)										
CMSI・各拠点										
6月	6月18～19日	月・火	東北大学金属材料研究所 2号館講堂	CMRI	計算材料科学研究拠点(CMRI) 第1回シンポジウム	46	2	5	39	報告書5
6月	6月25日～7月1日	月～日	東京大学物性研究所	CCMS/ISSP	ISSP-CMS国際ワークショップMASP2012	205	8	54	143	報告書6
7月	7月3日～11日	火～水	東京大学物性研究所	CCMS/ISSP	ISSP-CMS国際ワークショップMASP2012					
	7月2日、12-13日	月、木、金	東京大学物性研究所	CCMS/ISSP	ISSP-CMS国際・シンポジウムMASP2012	82	6	20	56	
8月	8月20～25日	月～土	タカミヤビレッジホテル樹林(山形県蔵王)	CMSI第1部会	第1部会「新物質新量子相の基礎科学」夏の学校	40	0	3	37	報告書7
10月	10月9日～10日	火・水	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	TCCI	計算分子科学研究拠点(TCCI) 第3回研究会	83	4	8	71	報告書8
10月	10月20日	土	TKP東八重洲コンファレンスホール	CMSI	第1回CMSI元素戦略シンポジウム	57	11	16	30	報告書9
10月	10月22～23日	月～水	東京大学物性研究所	CCMS	計算物性科学シンポジウム(Spring-8, J-PARC連携)	55	8	11	36	報告書10
11月	11月16～17日	金・土	京大福井謙一記念研究センター	TCCI	TCCI第2回実験化学との交流シンポジウム	84	7	4	73	報告書11
12月	12月3～5日	月～水	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	CMSI	第8回CMSI研究会 - 超並列計算が拓く新しい計算物質科学	114	7	17	90	報告書12
1月	1月10日～11日	木～金	東京大学物性研究所	元素戦略 CCMS、ISSP	物性共同利用・CCMS・元素戦略合同研究会 - 計算物性物理学の 新展開	88	4	12	72	報告書13
1月	1月15日	火	九州大学 情報基盤研究開発センター	CMRI	MPIプログラミング講習会	25	0	0	25	報告書14
	1月21日～22日	月・火	東北大学金属材料研究所 2号館講堂	CMRI	計算材料科学研究拠点(CMRI) 第2回シンポジウム	37	5	7	25	報告書15
1月	1月24日	木	大阪大学中之島センター 10階 佐治敬三メモリアルホール	TCCI	TCCI第2回産学連携シンポジウム	66	31	6	29	報告書16
1月	3月25日	月	立命館大学びわこくさつキャンパス	TCCI	日本化学会第93春季年会特別企画「超巨大計算機時代の化学」					x
国際連携										
10月	10月15日～18日	月～木	ニチイ学館(神戸)	CMSI	Conference on Computational Physics (CCP2012)					x
	10月25日	木	韓国 昌原コンベンションセンター	CMRI	KIMJIM Symposium (Korean Institute of Metals and Materials Japan Institute of Metals Joint Symposium on Computational Materials Science)					x
11月	11月5日～7日	月～水	Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica (台北)	CMSI	15th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-15)					x
	11月10～16日	月～木	Salt Lake City, Utah, USA	CMSI/CCMS	Supercomputing Conference 2012 (SC12)	-				x
	11月23～25日	金～日	東北大学金属材料研究所、松島(宮城県)	CMRI	Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (ACCMS-VOT)					x
2月	2月18日～19日	月～木	金沢大自然科学講義室105	CMSI、金沢大 パント工科大	CMSIピカルミーティング(スピントロニクス) in ISCS2013 (International Symposium of Computational Science) 2/18-21	50				x
産官学連携										
5月	5月8日	水	秋葉原コンファレンスセンター	産官学	第4回産官学連携研究会 - 産業界におけるOCTA活用の現状	31	16	9	6	報告書17
12月	12月21日	金	秋葉原ダイビル コンファレンスセンター	産官学	第5回産官学連携研究会 - 原子スケールシミュレーションからTCAD へ	33	12	10	11	報告書18
3月	3月12日	火	秋葉原ダイビル コンファレンスセンター	産官学	第6回産官学連携研究会 - 熱マネジメント技術を支える材料シミュ レーション	97	56	24	17	報告書19

表 2.2.1.2-2 平成 24 年度 CMSI イベント一覧-2

CMSI主催・共催・協賛行事			場所	実行	行事名	参加人数	参加人数内訳			報告書No.	
月	日程	曜日					産	官	学		
研究成果の普及											
広報											
5月	5月15日	月	計算科学研究機構 R104-2	AICS/5分野	5分野&AICS 第2回情報交換会					x	
10月	10月26~27日	金・土	東京大学物性研究所	物性研/CCMS	東大柏キャンパス一般公開	-				x	
分野を超えた取り組み											
計算科学研究機構との連携											
7月	7月10日	火	計算科学研究機構 6階講堂	AICS/5分野	第4回 HPCI戦略プログラム5分野合同研究交流会					x	
10月	10月20日	土	計算科学研究機構	AICS/5分野	計算科学研究機構(AICS)一般公開	-				x	
1月	1月16日	水	計算科学研究機構 6階講堂	AICS/5分野	第5回 HPCI戦略プログラム5分野合同研究交流会					x	
他の戦略分野との連携											
5月	5月30日	水	東京大学物性研究所	CMSI/5分野5	HPCI戦略プログラム 5分野2x5分野5 異分野交流研究会 - 量子モンテカルロ計算	46	6	8	32	報告書20	
9月	9月15日	土	理化学研究所 福磨研究所 SACLA実験研究棟	CMSI	第1回RSC-CMSI合同セミナー マルチスケール構造科学を拓く	53	4	35	14	報告書21	
2月	2月5日~6日	火・水	東京大学本郷キャンパス 理学部4号館3階	分野連携	GCOE分野横断研究会 - 多体相関の数値解法	40				報告書36	
2月	2月14日	木	東京大学山上会館	分野連携	RIKEN Spring-8 Center-CMSI 放射光連携研究ワークショップ	59				x	
3月	3月5日	火	秋葉原UDXシアター	TUT, CMSI	第1回 計算物質科学“見える化”シンポジウム (TUT-CMSI)	165	61	30	74	報告書22	
戦略分野の研究者を支える研究支援(「京」利用に關しての研究会支援)											
4月	4月18日	水	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	第1回「京」物性セミナー 量子スピン系のトピックス	20	0	7	13	報告書23	
5月	5月10日	木	計算科学研究機構 6F 講堂	CMSI	第1回 CMSI「京」利用情報交換会	32	2	8	22	報告書24	
	5月23日	水	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	第2回「京」物性セミナー 物質中の双極子相互作用とその大規模高速計算	20	0	7	13	報告書25	
6月	6月13日	水	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	第3回「京」物性セミナー Real-Space DFT calculations on BlueGene/Q	25	0	7	18	報告書26	
7月	7月17日~19日	火~木	ヤマハリゾート(静岡県掛川市)	CMSI	第6回 若手技術交流会会合 - 京利用に向けた技術・情報の共有	34	5	2	27	報告書27	
	7月26日	水	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	第4回「京」物性セミナー 2次元フラストレーション系研究の現状と将来: 実験家の視点から見た数値計算への期待	30	0	7	23	報告書28	
9月	9月24日	水	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	第5回「京」物性セミナー 分数量子ホール状態を記述する厳密に解ける一次元格子模型	15	0	3	12	報告書29	
11月	11月6日	火	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	第6回「京」物性セミナー 量子モンテカルロ法によるハニカム格子ハバード模型の大規模数値	10				報告書30	
12月	12月11日	火	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	第7回「京」物性セミナー ALPSプロジェクト: 現状と将来	15				報告書31	
1月	1月28日	火	計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CCMS	第8回「京」物性セミナー せん断流、細管流中の赤血球、脂質ベシクルのダイナミクス	10				報告書32	
2月	2月7日	木	CMSI神戸拠点	CMSI	第1回CMSI神戸ハンズオン FMO講習会	13	3	2	8	報告書33	
	2月14~16日	木~土	キャッスルイン(石川県金沢市)	CMSI	第7回 若手技術交流会会合 - 京の効率利用のための技術習得と共有	43	5	6	32	報告書34	
3月	3月6日	水	CMSI神戸拠点	CMSI	第2回CMSI神戸ハンズオン ALPSチュートリアル	16	1	2	13	報告書35	
産官学参加内訳の合計							329	348	1469		
総合計							2370				

H24 開催イベント Review

イベント総数	53	
参加合計人数を把握しているイベント数	45	2,370 名
産官学の詳細分類を把握しているイベント数	36	2,146 名



産官(独)学のべ参加者人数と比率

図 2.2.1.2-1 平成 24 年度 CMSI 主催イベントへの産官(独)学からの参加者人数とその比率、内訳。データは、産官学人数比を把握しているイベントからのみ抽出してグラフにした。

2. 2. 1. 2(1) 計算機資源の効率的マネジメント

スパコン連携小委員会では、京コンピュータおよび3戦略機関の保有する計算資源や各大学情報基盤センターなど、CMSIとして利用可能な計算資源の概要・運用状況について引き続き検討した。京コンピュータについては、CMSI神戸分室をAICSビル内に設置し、藤堂、北浦の2教員がCMSI特任教授としてそれぞれ物性研究所、神戸大学において任用され、運営にあたる体制をとっている。これらの教員を中核として、CMSI雇用の研究員が現地において京コンピュータ計算リソースの効率的な利用方法を検討し、他のCMSI研究者に利用情報を展開している。戦略機関保有のスパコンなどの大規模計算資源については、平成24年度は平成23年度に引き続き、物性研、分子研において全計算資源の20%をCMSI枠として実際の運用が本格的に開始され、後述するように、高い利用率で効果的に利用された。平成24年度には、東北大学金属材料研究所においても、スパコンの機種更新にあわせて、全計算資源の20%に相当するCMSI利用枠が設定され、平成25年度からの本格的利用を予定している。これら戦略機関保有の計算資源と並んで、戦略機関保有でないスパコンについても計算資源確保に努め、東京大学情報基盤センター、九州大学情報基盤センターの2センターから、利用料負担の上、計算資源を確保し、CMSIで推進する研究課題に提供した。さらに、並列計算を利用した研究のすそ野を広げ、人材育成にも役立たせるために、小規模の並列計算機環境を物性研内、およびAICS内に設置されたPCクラスタの運用を行った。ともにCMSI研究者であれば、簡単な手続きで利用可能であり、前者は全国どこからでもネットワークを通しての利用が可能となっている。

1) 計算資源のマネジメント

研究の進展に合わせたより効率的な計算資源配分を行うため、重点課題、特別支援課題、支援課題の見直しを行った。(詳細については2.2.1.3項参照)また、新規テーマを発掘する方策の一つとして、参加研究所の共同利用スパコンの運営委員会と連携し、共同利用スパコン利用者の課題より、特定高速電子計算機施設「京」に適した課題を発掘してCMSIが開催する研究会へ投稿し、新たな支援課題として評価を受けることを促している。平成24年度の本格実施研究においては、物性研究所と分子研究所に関して共同利用スパコンの一部を活用して、大規模並列実行の試験的運用を行った。また、大学情報基盤センターの計算資源を借用し、重点課題の実施、および、次の重点課題として準備している特別支援課題、および支援課題に用いられるプログラム開発や性能評価を推進した。また、平成24年中に共用が開始された特定高速電子計算機施設の戦略利用として、重点課題の研究を推進するとともに、一部をアプリケーション高度化支援のために利用し、特定高速電子計算機施設利用の一般課題として利用申請する研究課題の支援を行った。また、特定高速電子計算機施設で計算された結果を処理加工するためのCMSI神戸拠点ポスト処理システムの活用を促進し、アプリケーション講習会などにも利用した。さらに、物性研に導入されているハイブリッド並列計算用PCクラスタシステム(psi)を、並列化の初心者から高度なプログラムの動作確認等、幅広い用途で利用可能なように運用を行い、並列化計算の分野振興を図った。また、企業の方のトライアル利用等に関する検討も行った。

1. 東京大学物性研究所の戦略利用

戦略メンバー向けの計算資源として、物性研究所のシステムB(SGI Altix ICE 8400)の計算ポイントを提供した。とくに、京コンピュータに向けた超並列計算のスキルアップもかねたプロダクションランのため、物性研において月に一度、通常は運用していない2048ノード等での運用を行い、大規模キューの実行を行っている。

2. 自然科学研究機構分子科学研究所の戦略利用

分子科学研究所計算センターの三機のスパコンの計算資源のうち20%をCMSIの課題研究推進のために提供している。

3. 東北大学金属材料研究所の戦略利用
東北大学金属材料研究所の保有する計算資源のうち、20%をCMSIの課題研究推進のために提供している。
4. 東京大学物性研究所 PC クラスタ Psi
京コンピュータ等を利用するためのテスト環境として設置した。
5. 東京大学情報基盤センター FX10
東京大学情報基盤センターFX10の計算資源を2012年4月から2013年3月までの期間、利用契約した。
6. 九州大学情報基盤センター FX10
九州大学情報基盤センターFX10の計算資源を2012年11月から2013年3月までの期間、利用契約した。
7. 神戸分室のデータポスト処理システム
「京」コンピュータでのプログラム開発、データ処理、技術支援のため、理化学研究所計算科学研究機構内のCMSI神戸分室にデータポスト処理システムを設置した。
8. 視覚化ソフトウェア利用提供
計算物質科学で得られた成果の可視化によるアウトリーチ活動を促進するために、CMSIではCMSI研究推進メンバーに対し、サイバネットシステム社のAVS/Express 8.0の利用提供を開始した。

2) 各戦略機関スパコン資源、CMSI 計算資源の活用

[物性研スパコンとPSI]

①東京大学物性研究所システムB

i) システム利用について

CMSIでは、東京大学物性研究所システムBの全計算資源の約20%を上限に戦略利用枠としてポイント化し、各課題代表者に配分し、利用した。

ii) 大規模キューについて

東京大学物性研究所システムBでは、月1回の定期保守後に最大1週間の大規模ジョブ実行期間を設けている。平成24年度は、通常時は最大128ノード(1024コア)のジョブが実行可能で、事前にスケジュールを調整の上、毎月の大規模ジョブ実行期間に、最大1024ノード(8192コア)の利用を行った。なお、大規模ジョブ実行に必要なポイントは、各課題代表者に配分したポイントから消費した。

iii) 計算機のスペック

名称: SGI 製 Altix ICE 8400EX

CPU: Intel Xeon X5570 2.93GHz (4コア/CPU, 11.72 GFLOPS/コア)

構成: 2 CPU/ノード, 64 ノード/ラック, 30 ラック

メモリ: 3 GByte/コア (24 GByte/ノード)

ノード内通信: 25.6GByte/s/リンク (QPI, 2リンク)

ノード間通信: 最大 8GByte/s/リンク (InfiniBand QDR, 2リンク)

総演算性能: 15360 コア, 1920 ノード, 180TFLOPS

iv) 利用ルール

戦略の各課題代表者が研究課題を申請し、その課題に対して東大物性研が審査した上で利用を認めるという利用形態を取っている。システムの利用申請できるのは課題代表のみであり、課題に含まれる他の利用者のアカウントも全て課題代表者の責任で行う。課題毎にポイントが割り振られ、ユーザーは所属する課題グループのポイント内で計算資源を利用することが出来る。利用申請の募集は年に一度となっている。平成24年度の戦略利用の課題は18あり、課題代表者は成果報告書を提出する義務がある。以下に研究課題一覧を示す。

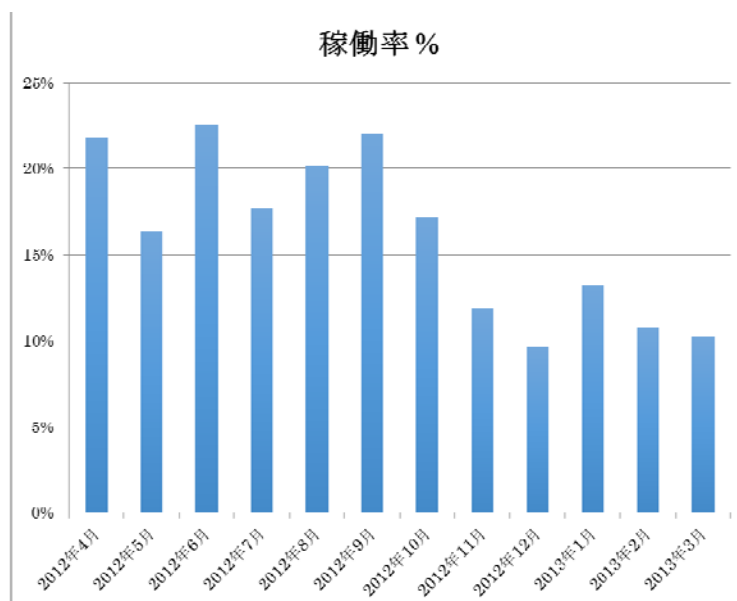
遠山 貴巳	強相関電子系の励起ダイナミクスの研究
天能 精一郎	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測
川島 直輝	量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究
今田 正俊	電子新機構解明と制御法開拓に関する相関の強い現実物質の研究
高塚 和夫	分子における電子の動的過程と多体量子動力学
斎藤 峯雄	スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索
押山 淳	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究
信定 克幸	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発
常行 真司	新材料探索のための第一原理計算手法開発
尾形 修司	オーダーN型の電子状態計算とハイブリッド量子古典コード
松林 伸幸	ポリモルフから生起する分子集団機能
岡崎 進	全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開
岡本 祐幸	拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明
吉田 紀生	バイオマス利用のための酵素反応解析
山下 晃一	太陽電池における光電変換の基礎課程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算
大谷 実	高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究
杉野 修	燃料電池関連物質における基礎課程の大規模計算による研究
浅井美博	非平衡伝導現象の理論シミュレーション研究

v) 利用状況

通常時は 256 ノード (1024 コア) までのキューを利用し、月 1 回の大規模キュー設定時に最大 1024 ノードのキューを設けた。通常キューの消費ポイントは 70245 ポイント、大規模キューのものは 10579 ポイントで、消費したポイント合計は 80823 ポイントとなった。

vi) 月別推移

東京大学物性研究所システム B の総 CPU 時間に占める戦略ユーザーの利用した CPU 時間の月次推移を示す。



②PC クラスタ Psi の整備と増強

CMSI では、OpenMP+MPI のハイブリッド並列のテスト環境として、PC クラスタ Psi の運用を行なった。

i) PC クラスタ Psi のスペック

CPU: Intel Xeon E5649 2.53GHz (6 コア/CPU, 10.1GFLOPS/コア)

構成: 2CPU/ノード, 40 ノード

メモリ: 2GB/コア (24GB/ノード)

ノード内通信: 23.4GByte/s/リンク (QPI, 2 リンク)

ノード間通信: 128MByte/s (ギガビットイーサネット)

総演算性能: 480 コア, 40 ノード, 4.8TFLOPS

ii) PC クラスタ Psi の増強

PC クラスタ Psi は、当初 10 ノードで運用を開始したが、利用者増大に伴い、平成 23 年度末に 40 ノードへの増強を行い、平成 24 年度から本格的な運用を行なった。

iii) 利用ルール

「京」の利用を目指すプログラムの開発を促進するために、OpenMP+MPI のハイブリッド並列をテストできるシステムとして、TORQUE バッチシステムで、最大 4 ノードのキューを用意して運用した。

iv) 利用状況

- ・利用ルール: CMSI メンバーであれば誰でも申請可能。
- ・利用状況: 現在 32 名がアカウント登録している。平成 24 年度は年間を通して全ノードの 50%~60%の使用率を維持していた。

③分子科学研究所スパコン

平成 24 年度の CMSI 研究課題に提供する計算資源として、全計算資源 (PRIMERGY RX300、SGI UV1000 および PRIMEHPC FX10 (合計 150TF)) の 20%を上限とし、平成 23 年度末の施設利用の募集と同時に CMSI 利用枠の募集を行った。重点課題および特別支援課題から合計 9 課題の申請があった。スパコン連携委員および各部会代表者からなる審査委員会を設け、審査を行い、その審査に基づき、計算科学研究センター運営委員会における審議を経て、これらの課題について利用が許可された。

課題名	課題責任者(部会)
量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究	川島直輝(第1部会)
分子における電子の動的過程と多体量子動力学	高塚和夫(第1部会)
凝縮分子科学系の揺らぎとダイナミクス	斉藤真司(第1部会)
密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	押山 淳 (第2部会)
全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	岡崎 進 (第3部会)
拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明	岡本祐幸(第3部会)
ポリモルフから生起する分子集団機能	松林伸幸(第3部会)
太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算	山下晃一(第4部会)
バイオマス利用のための酵素反応解析	吉田紀生(第4部会)

以上の CMSI 利用枠による利用に加え、CMSI が開催した以下の講習会にも FX10 の資源提供などを通して協力をした。

第7回 CMSI 若手技術交流会（2月14日（木）－2月16日（土））

参加人数 34名

内容 この講習会では、京で行ったチューニング内容、その経験から得た知見に関する講演「スーパーコンピュータ「京」におけるプログラムの最適化」と、富士通の講師によるプロファイラの利用法に関する講義を聴き、これを受けて3日間FX10で各自のプログラムのチューニングとコンパイルに取り組んだ。

第22回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン（CMD®）ワークショップ スーパーコンピューターコース（3月4日（月）－3月8日（金））

参加人数 6名

内容 この講習会では、実空間差分法に基づく第一原理計算コード（RSPACE）を利用した受講生の各研究テーマをFX10上で展開する実習を5日間かけて行った。

④金属材料研究所スパコン

平成24年度後半から、CMSI 研究課題に提供する計算資源として HITACHI スーパーテクニカルサーバ SR16000 モデルM1の20%を上限とし、CMSI利用枠の募集を行った。重点課題、特別支援課題、支援課題から合計10課題(17ユーザー)の申請があった。スパコン連携委員および各部会代表者からなる審査委員会を設け、審査を行い、その審査に基づき、これらの課題について利用が許可された。

3) 大学情報基盤センターとの連携とスパコン利用

① 東京大学情報基盤センター

CMSI では東京大学情報基盤センターが提供する FX10 の計算資源サービスを 252 ノード契約し、CMSI メンバーに対し提供した。

i) スペック

名称: 富士通 PRIMEHPC FX10

CPU: SPARC64 IXfx 1.85GHz (16 core/CPU, 14.78 GFLOPS/core)

構成: 1 CPU/node, 4800 node

メモリ: 2 GByte/core (32 GByte/node)

ノード間通信: 最大 5GByte/s/リンク (Tofu Interconnect, 20 リンク)

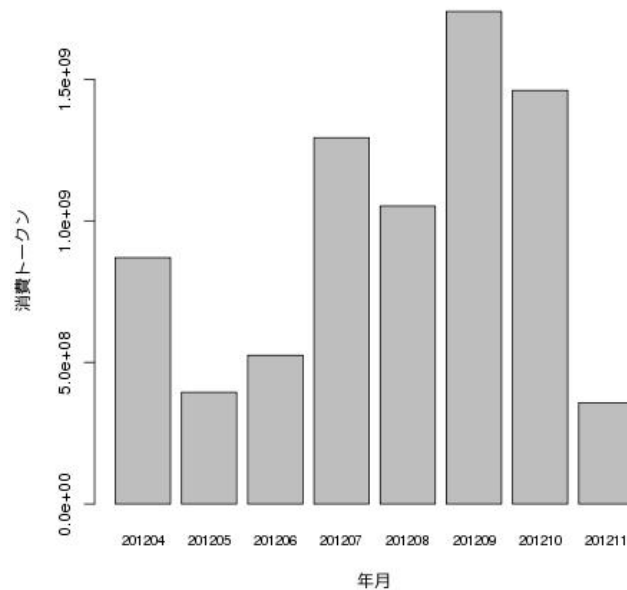
総演算性能: 76800 core, 4800 node, 1.135 PFLOPS

ii) 利用ルール

CMSI の重点課題、特別支援課題、支援課題を実施する担当者、および、協力者であれば、利用申請が可能とした。東大情報基盤センターはプリペイド方式であり、平成24年度は2,177,280ノード時間のトークンをCMSI全体で使用することが出来る。契約ノード252ノード内のキューであれば、トークン消費率は1.0である。しかし、252ノードより多いノード数のキューの場合、投入可能ではあるがトークン消費率が2.0となる。そのため、252ノード以上のキュー投入希望者は事前にCMSI事務局への通知を必要とするルールとした。

iii) 利用状況

平成24年度にCMSIで提供した計算資源の中で、最大利用コア数が最大の計算資源であり、また「京」をベースにしたシステムで同じコンパイラやプロファイラが利用できることもあり、非常にユーザーの利便性が高く、81名のユーザーが利用し、平成24年11月までに予定した資源量を使い果たした。月次トークン消費集計は、以下のとおりである。



② 九州大学情報基盤センター

東京大学情報基盤センターの計算資源を平成 24 年 11 月に使いきるようになったため、追加の FX10 の計算資源を利用するため、11 月から最大 96 ノードの利用を開始した。

i) スペック

名称: 富士通 PRIMEHPC FX10

CPU: SPARC64 IXfx 1.85GHz (16 core/CPU, 14.78 GFLOPS/core)

構成: 1 CPU/node, 768 node

メモリ: 2 GByte/core (32 GByte/node)

ノード間通信: 最大 5GByte/s/リンク (Tofu Interconnect, 20 リンク)

総演算性能: 12288 core, 768 node, 181.6 TFLOPS

ii) 利用ルール

東京大学 FX10 の利用者に向けて利用申請を募集した。CMSI 全体で最大 96 ノードまでの並列実行が可能であり、利用率は継続して 8 割を超えるものであった。

iii) 利用状況

計 23 ユーザーの登録のもと、平成 24 年 11 月から平成 25 年 3 月までのべ 4288 ジョブを投入し利用を行った。

4) アプリケーションのマネジメント

① 研究用ソフトウェア

i) スペック

大規模並列化計算の研究を推進し、研究ソフトウェアの普及させるために、研究者が開発した物性科学研究用のソフトウェア 4 本を東京大学物性研究所のシステム B および PC クラスタ Psi にインストールしている。

PC クラスタ Psi にインストールされているソフトウェア一覧

開発責任者氏名	ソフトウェア名称
川添 良幸	TOMBO
井上 順一郎	不規則系量子コンダクタンス
川島 直輝	DSQSS
藤堂 眞治	ALPS/looper

また、ALPS/looper に関しては、藤堂により、CMSI で提供している計算資源全てにインストールされている。ALPS がインストールされている計算資源のリストは、以下のリンクにある。

<http://todo.issp.u-tokyo.ac.jp/ja/members/wistaria/log/alps-preinstalled>

ii) 利用ルール

東京大学物性研究所システム B、PC クラスタ Psi とも、/opt/nano ディレクトリにインストールされており、当該システムのユーザー全員が自由に利用できるようになっている。そのため、CMSI メンバーだけでなく、東京大学物性研究所システム B の共同利用ユーザーも広く利用できる。

iii) 利用状況

CMSI メンバーだけでなく、物性研究所の共同利用のユーザー広く利用されている。ALPS/looper に関しては、「京」ポスト処理システム psi を実習環境として利用した CMSI 神戸拠点でのチュートリアルでも利用された。

② 視覚化ソフトウェア

研究成果をより分かりやすく伝えるために視覚化ソフトウェアが必要と考え、サイバネットシステム社の視覚化ソフトウェア AVS/Express 8 を購入し、CMSI メンバーに提供している。

i) スペック

- ・ 対応 OS: Windows, MacOSX, Linux
- ・ バージョン: 7.3, 8.0, 8.1
- ・ ライセンス: 同時利用が2人までのフローティングライセンス。

ii) 利用ルール

CMSI メンバーであれば、誰でも利用申請が可能で、ソフトウェアを東京大学物性研究所のサーバーからダウンロードできる。東京大学物性研究所内にライセンスサーバーを設置している。また、利用者はライセンスサーバーにブラウザでアクセスすることで、他の利用者による利用状況を確認することが出来る。

iii) 利用状況

現在 7 ユーザーにより利用されている。平成 25 年度には、研究成果の視覚化のさらなる推進を図るために、AVS/Express の講習会の開催も計画している。

5) 各戦略機関コミュニティとの連携

平成24年度の支援課題として、平成24年12月に分子研において開催された第3回CMSI研究会において、一般投稿された論文の内、あらかじめ発表者から希望のあった研究発表に関して、書面で提出されたアプリケーション性能情報とあわせて、企画室会議メンバーによる評価を行い、支援課題2件を選定した。

選定された研究者と課題名は、以下の通りである。

名前	所属	課題名
中野博生	兵庫県立大学	フラストレート磁性体の計算科学的研究 -- 空間異方性を持つ三角格子 S=1 ハイゼンベルク反強磁性体--
芝隼人	東京大学	剪断流下の脂質膜系の構造形成

また同じくCMSI研究会では、35才以下の若手研究者を対象に、優れた研究に贈られる「ポスター賞」を今年も実施し、若手研究者はそれぞれ工夫を凝らして発表を行った。今回から、受賞対象をポスターだけではなく講演まで広げ、新たに「若手奨励賞」と「ビジュアル賞」を設け審査された。ポスター賞受賞者は、以下の通りである。

第3回 CMSI ポスター賞受賞者と課題内容:

氏名	所属	課題名
・CMSI ポスター賞		
金子隆威	東京大学大学院工学系研究科	多変数変分モンテカルロ法を用いた J_1 - J_2 ハイゼンベルグ模型の解析
・CMSI 若手奨励賞		
森田悟史	東京大学大学院工学系研究科	多変数変分モンテカルロ法の最適化
・CMSI ビジュアル賞		
大庭伸子	豊田中央研究所	分割統治型 DFT コードを用いたハイブリッド量子古典シミュレーション

2. 2. 1. 2(2) 人材育成

計算物質科学の振興を図るとともに、特定高速電子計算機施設を中核とするHPCIを利用して国家的重要課題に取り組むことができる人材を育成することが目的である。平成 24 年度は、前年度に引き続き大学院講義、夏の学校、ウィンターカレッジ、**高並列化教育**、集中実習、ワークショップ、チュートリアルコースを国内外で実施するとともにオンライン講義配信を実施した。また、実験研究者や企業研究者にも開かれた各種研究集会を開催した。計算物質科学における手法・技法の修得させることを目的とした全国オンライン講義配信に向けたカリキュラムの一つとして計算科学技術特論 A の策定を行った。オンライン講義配信に関しては、当面、理研神戸 AICS に設置された、多地点配信システムを利用することとなった。このような動きのなかで、AICS との連携が進み、今後 AICS とも連携して計算物質科学を日本全体に発進していくベースを構築していく構想を検討した。

1) 計算物質科学の教育

i) CMD ワークショップ

① CMD ワークショップ

2012 年 9 月 3 日(月)～9 月 7 日(金)に、大阪大学基礎工学研究科 G 棟において、第 21 回 CMD ワークショップを開催した。受講生は、ビギナーコース 37 名、アドバンスコース 9 名、エキスパートコース 3 名、スーパーコンピューターコース 6 名、合計 55 名を受け入れて行った。これら受講生を、講師 21 名、チューター 12 名が講義、実習及びそのサポートを行い、第一原理計算を用いた物質設計を目指した教育を行った。

2013 年 3 月 4 日(月)～3 月 8 日(金)には、理化学研究所計算科学推進機構及びニチイ学館神戸ポートアイランドセンターにおいて、第 22 回 CMD ワークショップを開催した。受講生は、ビギナーコース 14 名、アドバンスコース 13 名、エキスパートコース 1 名、スーパーコンピューターコース 3 名、合計 31 名を受け入れて行った。これら受講生を講師 23 名、チューター 10 名が講義、実習及びそのサポートを行い、第一原理計算を用いた物質設計を目指した教育を行った。

第 21 回においてのスーパーコンピューターコースは、東京大学情報基盤センターのスーパーコンピューター FUJITSU FX10 の 12 ノードのトークンを事務局で購入して実施した。第 22 回においてのスーパーコンピューターコースは、自然科学研究機構岡崎共同研究施設計算科学研究センターのスーパーコンピューター FUJITSU FX10 を 72 ノード提供受けて実施した。今年度は、京コンピューターへの練習機ととも位置づけられるシステム実習を実施し、京コンピューターを使える人材の育成を行った。昨年から共用が開始され、京コンピューターを利用して成果を上げていく段階になった今、京コンピューターの威力を体験させ、ユーザーを増やしていくことが重要であるので、物質設計というワークショップの精神を維持しつつ、大規模な系での対応も今後継続していく。これまでスーパーコンピューターコースに参加した受講生のテーマは、かなり現在の産業界でも注目されているものが含まれており、それが丸事扱えるという体験は京コンピューターでしか体験できない。このことを体験してこそ京コンピューターの魅力がわかるので、できるだけ早くで京コンピューターでの実施を考えたい。

② ASIA CMD ワークショップ

平成 24 年度はフィリピン、ベトナム、タイの3カ所で開催した。

1. Phillipines, Manila, De La Salle University, 8-10 October, 2012

<http://www.cmdasia.tk/>

3. Vietnam, Hanoi, Hanoi University of Science, 6-8 December, 2012

<http://www.iop.vast.ac.vn/theor/vtpps/news.php?id=227>

3. Thai, Bangkok, Mahidol University, 14-16 February, 2013

<http://www.sc.mahidol.ac.th/scpy/cmd2013/>

3回のワークショップともに、日本国内で開催されているCMDワークショップのビギナーコースに準じた、講義と実習を含む形で構成され、それぞれの参加者人数は25～50名規模であった。講師は大阪大学からの派遣に加えて、現地大学の関連教員も講義を提供した。大阪大学からの講師派遣にあたってはCMSIが支援し、ワークショップ会場の準備については現地大学からのサポートを受けた。ワークショップの開催にあたってCMSIからの正式な共催のもと実施した。

ii) 計算分子科学の教育活動

① 第16回分子シミュレーション夏の学校

(9月6-8日 慶應義塾 蓼科山荘)

分子動力学シミュレーションやモンテカルロ法を中心とした計算科学分野の若手育成のために分子シミュレーション研究会が主催するイベントで、H24年で16回目を迎えた。幹事校は慶應義塾大学で、院生2名が企画・推進した。慶應義塾大学の蓼科山荘を会場として9月6日より8日まで行われ、全国から52名の参加者があった。分子シミュレーションの基礎、応用例としての自己組織化膜の分子動力学計算、第一原理計算の基礎等について、3名の講師から講義を受け、活発な質疑応答を行った。また、ポスターセッションにおいても15件の発表があり、相互の研究を理解する良い機会となった

② TCCI ウィンターカレッジ-分子シミュレーション

第6回分子シミュレーションスクール-基礎から応用まで (報告書1)

(12月11-14日分子研)

従来、分子研と分子シミュレーション研究会が開催してきたもので、今回が6回目。H23年度より「TCCI ウィンターカレッジ」の一環として自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターにて開催している。12月11日(火)の午後から14日(金)午前までの4日間のスケジュールであった。民間企業からの参加者も含めて91名が参加した。15名の講師により、分子シミュレーションの基礎から応用は勿論、並列化についての講義も行われた。最終日には、4日間完修した受講生に修了証書が手渡された。

③ TCCI ウィンターカレッジ 量子化学 (報告書2)

第2回量子化学ウインタースクール -基礎理論と生体系の理論-

(12月17-18日分子研)

第2回目の開催であり、分子研、計算科学研究機構、計算科学研究センターとの共催で、自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターにて開催した。12月17日(月)、18日(火)の2日間で、「生体内化学反応解析の基礎」から始まって、「新段階を迎える多参照電子状態理論」など最新の話題も含めた講義が行われた。48名が参加した。受講者からのポスター発表も行われ、研究課題についての情報交換も行われた。

④ 第52回分子科学若手の会夏の学校

(8月20-24日東大本郷)

H24年度は、特別講演「超並列計算による大規模分子集合体の分子動力学シミュレーション」を中心にサポートを行った。夏の学校は、回数からも分かるように非常に長い歴史があり、今回も103人が参加。毎晩、夕食・風呂の後に、ポスターセッション、懇親会があるという若手ならではのプログラムであった。また、分科会講師5人の内、2人は理論化学・計算化学分野という構成であった。

iii) 高並列化教育

① 第2回超並列化技術国際ワークショップ（報告書3）

（1月28日早稲田大学）

TCCI 及び CMSIによる国際ワークショップ「International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science」を開催した。超並列プログラミングの最前線に携わる米国アルゴンヌ国立研の Dr. Jeff Hammondを招聘し、Dr. Dmitri G. Fedorov(産総研)、小林正人博士(早大)、稲富雄一博士(九大)、安藤嘉倫博士(名大)の5講師を招き、早稲田大学西早稲田キャンパスで、講演とディスカッションを交えたワークショップを行った。総参加者は46名(産5含む)となり、超並列プログラミングの現状について日米での情報交換を行い、議論を行った。また、Dr. Jeff Hammond には、豊橋技術科学大学、分子研、理研 AICS にてセミナー講演と打合せをお願いした。

2) 社会人教育

① OCTA 講習会・トレーニング（報告書4）

2013年3月7日(木)10:00-17:00に(独)産業技術総合研究所 臨海副都心センター バイオ・IT 融合研究棟会議室にて、「OCTA 講習会&トレーニング」を開催した。今年度は、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)と(独)産業技術総合研究所の共催として開催した。出席者は、受講生として大学関係者17名、国立研究所1名、企業関係者20名の計38名と、講師3名および世話人2名(産総研 森田氏、東北大 川勝)の総計43名であった。午前はOCTAの概要(JSOL 小沢氏)、分子動力学エンジンCOGNACの概要(旭化成 青柳氏)および自己無撞着場エンジンSUSHIの概要(日本ゼオン 本田氏)に関する講義が行われ、午後は、各参加者が各自持ち込んだノートPCにOCTAをインストールし、それを用いてOCTAの使用法に関する実習を行った(指導員はJSOL 小沢氏、講師と世話人)。昨年度に比べ今年度は大学関係者の参加が大幅に増え、社会人教育としての効果に加えて、大学院生・教員への教育の面でも効果が大きかった。

3) 大学院教育

i) 各教育拠点の活動状況

①大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター

・第1回 CMSI 人材育成シンポジウム

平成24年11月30日(金)に「応用数理と計算科学の連携 I」として、シンポジウムを開催した。計算科学の方で数値計算の問題で困難があったり、その解決が物理の進展につながると期待されていたりする分野として2つのテーマを取り上げた。一つは、量子スピン系での高次特異値分解、テンソル分解という問題であり、もう一つは電磁場解析の手法に関する問題である。これに加えて、数値解析の専門家で計算科学分野との共同研究の経験がある研究者に講演をお願いし、両分野の交流について考えた。小規模で実施したため、非常に密な議論が両者で行えた。

本シンポジウムは、平成25年度から実施する人材育成カリキュラムの試験的な配信も兼ねて実施した。東京大学本郷キャンパス、名古屋大学、CMSI神戸拠点に配信し、それぞれ4名、6名、3名が参加した。大阪大学では講師8名に加えて7名が参加した。大阪大学ではテレビ会議システムを用いた講義は9年の歴史があるが、このシンポジウムを通して平成25年度から開始する講義の実施のための必要なことについて、ほかの拠点でも確認ができた。

・CMSI 教育コンテンツ配信

平成25年度からの人材育成カリキュラムの本格始動に向けて、まず機材の導入を東北大学、金沢大学、豊橋技術科学大学、京都大学、大阪大学(吹田キャンパス)に導入し、既に導入されている拠点、既存の機材のある拠点を含めて全会場に機材を整えた。テレビ会議システムは、まだまだ機種依存の相性問題があり、事前に接続確認のテストを実施しておかなければならない。平成25年度は理研のサーバーマシン(MCU)を利用して実

施するため、それを介しての接続テストを阪大からのコンテンツ送信を想定して各拠点個別にテストを実施した。

技術的な問題解決以外に、大阪大学では CMSI から提供する講義の単位化を進め、「計算科学技術特論 A」(平成 25 年度前期開講)と「計算科学技術特論 B」(平成 26 年前期開講)を基礎工学研究科から立ち上げる手続きを進めた。平成 25 年度以降これらの講義は隔年で開講される。大阪大学では、このようなテレビ会議システムを用いた講義の単位化についても経験があり、単位互換というような研究科同士の協定を結んで実施することなしに、単に講義を立てておいて、そのコンテンツは担当教員の責任において単位認定する方式で他大学に配信している。この講義もこれに倣い、大阪大学では平成 25 年度からの実施に向けて 5 月ごろから教務手続きを進めた。あくまで単位認定をするかどうかは各大学の判断であるが、大阪大学では、その場合のプロトタイプを作り上げた。

②東北大学金属材料研究所

金属材料研究所においては、テレビ会議システムを導入し大阪大学および他大学との多地点通信テストを行い、H25 年度前期に大阪大学から配信される講義:CMSI 教育計算科学技術特論 A の受講環境を整えた。同時に、教育拠点として先行している他大学の活動状況の調査を行った。

理学研究科においては、理学研究科－工学研究科間の計算機関係の講義に関する単位の相互認定や、他大学との間の単位互換制度に関する調査を行った。

③神戸大学大学院システム情報学研究科

世界で普及するプログラムを開発するための要件について、若手技術交流会における講義を行い、広報誌トレントに記事を書いた。また、FMO 法の基礎と応用についての講義と実習をあわせた講習会の開催、CMD ワークショップでの講演など、CMSI 人材育成・教育小委員会と連携した計算物質科学の人材育成活動を行った。

④名古屋大学大学院工学研究科

名古屋大学では、大学院工学研究科化学生物工学専攻における講義「分子物理化学特論」を計15コマ、平成24年前期に3日間の集中講義として実施した。単位互換協定を締結している総合研究大学院大学の学生も含め53名が履修した。この他に大学院生を対象としたオムニバスの講義「大規模並列数値計算特論」、グローバル 30 大学院講義「Advanced Physical Chemistry」、「計算科学フロンティア連続講義」を担当した。これらはいずれも計算科学に関する最近の成果を紹介する、あるいは並列計算の技術を講義するものであった。また、総合研究大学院大学にて平成 24 年度開講の分子科学関連の講義「構造分子基礎理論」について名古屋大学の学生が履修できるよう調整し、名古屋大学大学院工学研究科化学生物工学専攻の大学院生が履修した。

⑤東京大学 大学院 工学系研究科

東京大学大学院工学系研究科では、本年度から「物質科学のための計算数理Ⅰ」(夏学期)および「物質科学のための計算数理Ⅱ」(冬学期)という科目を新設し、夏学期は計算機・プログラミングの基礎から、物質科学分野に現れる計算アルゴリズムの数理、並列計算機を使いこなすための知識と技術の基礎的な内容を、冬学期は研究の最前線で用いられるアプリケーションプログラム(本年度は第一原理計算と量子モンテカルロ法)を実際に並列計算機上で作成・実行するとう内容の講義を行った。講義は、学生一人に一台の PC 端末が提供可能な東京大学情報基盤センター大演習室(定員 80 名)を利用して、講義と実習を交互に(ときには同時に)行うスタイルで進める。また講義内で並列計算の実習のために CMSI で購入した 10 ノード 120 コアからなる PC クラスタを利用する。なお本講義は理学系研究科物理学専攻との共通講義である。開講初年となる本年の受講者数は夏学期が60名程度、冬学期が20名程度であった。

⑥東京大学 物性研究所 神戸拠点

計算機科学と計算科学の連携促進を目的として、平成 24 年夏学期に集中講義「コンピュータ科学特別講義 III」(担当:常行真司、杉野修、藤堂真治、全 8 コマ、受講者約 10 名)を開講し、情報科学、計算機科学を専攻する学生を対象として計算物質科学の研究事例を紹介した。

2. 2. 1. 2(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)

1) 計算物質科学の分野振興

i) CMSI 全体行事

① 第3回 CMSI 研究会 (報告書12)

第3回 CMSI 研究会は、副題を「超並列計算が拓く新しい計算物質科学」とし、平成24年12月3～5日(月～水)自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターで実施した。第2回までの CMSI 研究会は、「京」を利用する重点課題選定のための評価会議としての位置づけであった。しかし、平成23年度中に重点課題は選定されている。そこで、第3回研究会は、若手研究者を中心とした研究課題のトピックスの発表を行う場とし、重点課題、特別支援課題、および、支援課題から必ず1件以上口頭発表することにした。口頭発表として、第1部会から10件、第2部会から9件、第3部会から9件、第4部会から12件あり、また、材料課題からは、特別支援課題候補である3件、分野振興に関連した研究課題は6件で内、支援課題、支援課題エントリーとして各1件の発表があった。また、27件のポスター発表があり、若手参加の多い活気のある会合となった。参加者は114名であった。全発表者を対象として「若手奨励賞(35才以下)」「ポスター賞」「ビジュアル賞」を設け、会議後広報誌 TORRENT 誌上にて受賞者の掲載を行った。招待講演として、AICS 黒田明義氏による FFT の高速化チューニング、京大田中功先生によるマテリアルズインフォマティックスの話題を取り上げていただき、参加者共通の課題として活発な議論がなされた。また、HPCI コンソーシアム共催で将来の HPCI の在り方を考える検討会も開催し、熱い議論がなされた。

②第1回 CMSI 元素戦略シンポジウム (報告書9)

平成24年6月にスタートした文科省元素戦略プロジェクト(研究拠点形成型)において、CMSIは各拠点に共通となる基盤的計算機シミュレーション手法を検討する役割を担っている。今回は、その役割の一環として、磁石材料、構造材料、電子材料、触媒・電池材料の4拠点の電子論グループリーダーより各拠点の計画と課題を述べていただき、理論研究の拠点共通課題の抽出と共有を図るシンポジウムを企画した。副題は「理論研究における共通課題の抽出と共有」とし、平成24年10月20日(土)に東京八重洲にて開催した。57名の参加があり、そのうち11名が企業からの参加者であった。理論から実験、産業化まで幅広い領域の方々の間で活発な議論がなされた。共通課題としては、これまでの第一原理計算に加えて、高度な実験から得られる大量なデータの統計的解析を行い、これらを融合させた材料探索が必要になるとの認識が得られた。今後、マテリアルズインフォマティックスとして新しい材料探索の方法の検討を継続していくことになった。

③ 第1部会「新物質新量子相の基礎科学」夏の学校 (報告書7)

平成24年8月20日(月)～25日(土)に タカミヤビレッジホテル樹林 (山形県蔵王)にて掲題の夏の学校を開催した。この企画は、CMSI第1部会の研究テーマ新量子相・新物質の基礎科学を中心として、新たな研究手法の開発や、そこから得られる物理や化学について分野を超えて交流を深め、今後の研究に資するために、若手(と自覚する)研究者を中心に寝食を共にして、突っ込んだ議論を行なうことを目的とした。テーマは非平衡および強相関に設定し、招待された講師による講演と若手研究者による話題提供を元にした議論の場を提供した。1日の講演の数を少数に限定した滞在型で、参加者同士での議論の時間を十分にとり、ネットアクセスのあるオフィススペースを設け、研究と議論を並行して行える環境を用意した。国内外からの招待した講師を始め、若手研究者や大学院生を含む39名が参加した。

ii) 計算物性科学研究センター(CCMS) (報告書6)

① ISSP-CMSI 国際シンポジウム・ワークショップ MASP2012

物性研(理論部門)との共催による滞在型国際ワークショップ MAterial Simulation in Petaflops era(MASP2012)

が 6 月 25 日から 7 月 13 日まで開催された。本ワークショップは、ペタフロップスの時代を迎えたスーパーコンピュータを活用することにより、どのような計算物質科学の新展開が図れるかを議論しようという趣旨のもとで、23 名の講師と 26 名の講演者による講義と講演を中心に、ポスター発表やインフォーマルセミナーも含めて 3 週間の間、精力的に議論や情報交換が行われた。本ワークショップは、一日に二コマゆったりとしたスケジュールで行われるワークショップの部と、研究会形式のシンポジウムの部から構成されたものであり、前者における講義では、大学院生や分野外の研究者にもわかるよう配慮されている。大学院生から物性研 OB まで、のべ 408 人(シンポジウムは 149 人)の参加者があった。

具体的な内容は、精密波動関数理論(量子モンテカルロや配置間相互作用)、多体摂動論、励起状態理論、励起状態の動力学、非平衡系(電子系、格子系)、超伝導密度汎関数理論、ファンデルワールス密度汎関数理論、超大規模系密度汎関数計算、固液界面、電気化学系であり、それぞれ最近著しく発展しているトピックが選ばれている。プログラムは以下の通りである。(なお、物性研ホームページ

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/public/masp2012/public/Program/workshop.html>

には講義に用いられたファイルが用意され、受講者等が復習できるように公開されている。)

② 計算物質科学シンポジウム(SPring-8、J-PARC 連携)(報告書10)

国家の大型計測施設である SPring-8、J-PARC、SACLA がもたらす最新の研究成果と、「京」等の HPCI を利用する計算物質科学のテーマを取り上げ、元素戦略プロジェクトに代表される国家的・社会的な課題の解決を加速するための実験・計測・計算が連携して取り組むべき新しい基礎理論等を議論するためのシンポジウムを企画した。平成 24 年 10 月 22-23 日に物性研にて実施し、55 名の参加があった。関連する実験、計測、計算の研究成果を続けて行うプログラム構成とし、18 件の講演を行った。コーヒブレークの時間を 30 分取り、また、初日終了後に懇談会を実施し、参加者間で交流する時間を多く設けた。本シンポジウムは継続的に開催する予定であり、実験、計測、計算連携の強化につなげていく。

③ 共同利用・CCMS・元素戦略合同研究会「計算物性物理学の新展開」(報告書13)

物性研共同利用スパコン (System A,B) の導入から平成 24 年度で 3 年目を迎え、次の共同利用スパコンの仕様検討を開始する時期が近づいている。平成 24 年度は京コンピュータの共用が開始され、超並列化を前提としたアプリケーションの開発が加速されている。また、将来のエクサコンピュータに関する議論もスタートしており、さらに、具体的な用途開発に向けた元素戦略プロジェクトと計算科学の結びつきも強まっている。このような環境において、今後、物性科学を進展させるために必要となるハードウェアのアーキテクチャーを検討し、計算物性物理学をどのように発展させていくのかの議論は非常に重要である。そこで、物性研共同利用、元素戦略、エクサコンピューティング等のプロジェクトで活躍中の研究者が一堂に会し、現状とこれからの展開について講演し、これからの展開を議論する合同研究会を企画した。平成 25 年 1 月 10、11 日に物性研で開催し、88 名の産官学からの参加者とともに議論した。22 名の口頭発表・招待講演と、38 件のポスターセッションが実施された。東工大松岡先生の招待講演では、GPU を活用した次世代スパコンアーキテクチャーの紹介があり、ハードウェアの進展が科学の進展をささげなければならないこと、次の世代のスパコンは消費電力と設置スペースの制約があるので、GPU やメモリアを利用せざるを得ずアプリケーションも進化していく必要があること、が示唆された。また、元素戦略各 4 拠点の各電子論グループ代表者より講演をいただき、成果の進捗を共有した。計算機科学、計算科学と、それを活用した応用科学に関係する幅広い人達の間で情報交換を行うことができた。

iii) 計算分子科学研究拠点(TCCI)

分野振興のため、図に示す研究会・シンポジウム等を開催した。



図 研究会・シンポジウム

行事名	開催日程	場所
TCCI第3回研究会	2012年10月9日(火)～10日(水)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター (岡崎市)
	参加者数:82名(内、民間企業4名)	
TCCI第2回 実験化学との交流シン ポジウム	2012年11月16日(金)～17日 (土)	京都大学 福井謙一記念研究セン ター(京都市)
	参加者数:85名(内、民間企業5名)	
TCCI第2回 産学連携シンポジウム	2013年1月24日(木)午後	大阪大学中之島セン ター(大阪市)
	参加者数:58名(内、民間企業28名)	
日本化学会第93春季 年会特別企画「超巨大 計算機時代の化学」	2013年3月25日(月)午後	立命館大学びわこくさつキャンパス (草津市)
	参加者数:約200名	

① 計算分子科学研究拠点(TCCI) 第3回研究会(報告書8)

10月9-10日分子研にて開催。TCCIの全体シンポジウムである第3回研究会を岡崎コンファレンスセンターで開催した。H24年度は、若手研究員全員が発表する企画で、若手の成長を再確認する場となった。今後も、毎年1回は公開の全体シンポジウムの開催を予定している。

② TCCI 第2回実験化学との交流シンポジウム(報告書11)

11月16-17日京都にて開催。TCCIの関わる有機化学、物理化学、生命科学の実験サイドから計算科学への期待・要望等に関する交流シンポジウムを開催した。今年度も優れた講演者の参加によって、非常に興味深く有意義なシンポジウムとなった。早速、ご講演いただいた研究者との共同研究の話も持ち上がっている。

③ TCCI 第2回産学連携シンポジウム(報告書16)(別冊2)

1月24日大阪にて開催。企業における計算科学の利用と学術研究への期待、TCCIにおける研究状況等の紹介・意見交換を通して産学連携を目的としているが、今回は、卒業生からも意見を聞くことも企画し、4人の卒業生に講演をお願いした。共通の課題の一つは、社内の関係者に計算化学に関する理解を深めて頂くことであった。今年度も半数近くが民間からの参加であり、この分野における産学連携への期待が継続していることが感じられる。

④ 日本化学会第93春季年会特別企画「超巨大計算機時代の化学」

汎用計算機として世界最高速のスーパーコンピュータ「京」は、2012年9月28日に共用が開始されたばかりであるが、文部科学省では、次々世代スパコン開発を目指した「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」という調査研究プロジェクトを開始した。これは、平成23年度、京に関係する有志で次々世代スパコン設計に向けてまとめた計算科学ロードマップ白書(サイエンスロードマップ)が評価され、文部科学省の正式調査研究として始まったものである。この調査研究にTCCIからも参加し、2020年頃までを見通した分子科学の将来像についてまとめを行っている。この内容などについて、日本化学会の特別企画として報告し、また、関係する実験化学者などの関係者からご意見、ご提案等をいただいた。

iv) 計算材料科学研究拠点(CMRI)

① 計算材料科学研究拠点(CMRI) 第1回シンポジウム (報告書5)

6月18日(月)及び19日(火)の両日にかけて、計算材料科学研究拠点の平成24年度第1回シンポジウム(通算3回目)を金研講堂において開催した。材料課題が重点化されてから初の研究会であり、重点課題の遂行の為の具体的な方策の検討と、今後予想される特別支援課題の設置に向けて、候補課題の選定をも考慮した研究会となった。材料科学関連者を主体とするこれまでよりも小規模なシンポジウムであったが、特別講演や招待講演を含めて総計22件の発表が行われ極めて内容の密な研究会を行うことができた。又、CREST、JST、新学術領域、さらには新元素戦略で計算材料科学のプロジェクトが始まっており、今後の連携に向けた情報交換の為の発表を行った。

② MPIプログラミング講習会 (報告書14)

1月15日(火)九州大学 情報基盤研究開発センターにおいて、平成24年度CMRI「MPIプログラミング講習会」を開催した。講師は前年度から引き高度情報科学技術研究機構(RIST)神戸センターの青山幸也氏に依頼した。今回は特に九州地区のCMRIメンバーや関連研究者を対象にしたが、九州大学、九州工業大学、佐賀大学、鹿児島大学、熊本大学をはじめ、横浜国立大学など本州の大学からも参加希望者があり、総計24名が受講した。

③ 計算材料科学研究拠点(CMRI) 第2回シンポジウム (報告書15)

平成25年1月21日(月)～22日(火)の2日間にわたって、平成24年度第2回(通算4回目)のシンポジウムを金研講堂において開催した。約50名の参加のもと、スパコン「京」の重点利用を目指す特別支援課題12件について重点的に発表を行い理解を深めた。これらに加えて5件の特別講演と、初の試みとして国際セッションを設け、3名の外国人講師による招待講演も行った。4月よりCMRIのメンバーが重点的に関与する「マルチスケール材料科学」なる新しい部会がCMSIに設立される予定であるが、本研究会ではこれを念頭に置いた発表・報告を行った。

④ 若手海外派遣

昨年度に引き続き2件の若手海外派遣を行った。共に、CMRIメンバーに公募を行い、運営委員会のメール審議を経て決定したものである。一名は、北海道大学・工・博士課程2年生伊勢谷健司氏で、派遣先はICAMS、Ruhr University、Bochum(独)、派遣期間は平成25年1月6日～平成25年2月9日、Prof. Ingo Steinbachの研究室でフェーズフィールド法によるマルチスケールモデリングの研究を行った。他の一名は、大阪大学・基礎工・准教授の君塚 肇氏で、London Centre for Nanotechnology at University College (英)に平成25年2月23日～平成25年3月22日まで派遣、Prof. Mike Gillanの研究室にて高性能並列計算機を活用した固体中ダイナミクスの量子・原子論的モデリング手法を構築する研究・議論を行った。

⑤ その他の活動

産総研関西においても3月14日(木)～15日(金)の2日間にわたって「第一原理計算コードOpenMX、QMAS、TOMBO セミナー」を開催し、CMRIが中心となって開発してきた3つのプログラムコードに関して、開発担当者が解説を行った。講師を入れて48名の参加者を得た。CMRIでは2つの国際連携事業を行ったが、これに関しては2)国際連携に報告する。

2) 国際連携

i) CMSI 全体と CCMS

②15th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-15)

今年で第 15 回目となる、計算物質科学と材料科学に関連する本会議は、台北の Institute of Atomic and Molecular Sciences、Academia Sinica にて 2012 年 11 月 5～7 日(月～水)の日程で実施された。目的は、アジア地域を中核とした第一原理電子状態計算の情報交換と深い議論の場を提供することである。日本からは CMSI に参画する小口(阪大)、大野(NIMS)、押山(東大)、寺倉(AICS)、渡邊(東大)、常行(東大)が組織委員を担っている。今回の参加者は 212 名(内 32 名が日本人)で、1 件 30 分の招待講演が 23 件シリアルセッションで実施され、各課題とも十分な議論がなされた。また、若手研究者を中心として 85 件のポスター発表が実施され、活発な議論がなされた。

④CMSI トピカルミーティング(スピントロニクス) in ISCS2013

金沢大学が計算科学分野で 2 重学位プログラムを実施しているインドネシア・バンドン工科大学等と共催した International Symposium on Computational Science 2013(2 月 18-21 日)の特別セッションとして、2 月 18-19 日に開催した。金沢大学内で行い 50 名程度の参加者があった。「スピントロニクス:第一原理シミュレーションと計測」というタイトルでトピカルミーティングを行い、スピントロニクスに関わる計測実験、理論、シミュレーションの 3 分野の研究者が講演を行った。スピントロニクス研究において、第一原理シミュレーションが今後果たすべき役割について理解を深めた。

ii) CMRI

①KIM/JIM Symposium (Korean Institute of Metals and Materials Japan Institute of Metals Joint Symposium on Computational Materials Science)

日本金属学会(Japan Institute of Metals)では、韓国金属学会(Korean Institute of Metals and Materials)と合同のシンポジウムを開催しているが、2012年度のテーマとして計算材料科学が選定(実行責任者;毛利)され、2012年10月25日(木) Changwon Exhibition Convention Center (Changwon, Korea)において、約60名の出席の下、両国から19件(日本9件、韓国10件)の発表が行われた。日本側の出席者は大部分をCMRIの関係者が占めた。強度物性や機能特性、凝固、相変態、格子振動、マルチスケール計算、タンパク質のホールディング、揺らぎ等を対象とし、非常に質の高い講演であった。

②ACCMS-VO7 (Asian Consortium on Computational Materials science-Virtual Organization)

平成 24 年 11 月 23 日(金)～ 25 日(日)、CMRI の共催のもと、東北大学金属材料研究所講堂および、ホテル松島大観荘において ACCMS-VO7 を開催した。キーノート講演や、招待講演を含む 47 件の口頭発表、44 件のポスター発表が行われた。出席者総数は、韓国、インド、中国、ロシアを中心に 103 人を数えた。ACCMS は旧・川添研究室が中心となって開催をしているものであるが、今回は VO を含めて計 17 回目であり、アジアの計算材料科学の振興に対して着実に大きな貢献をしている。

3) 産官学連携の促進

計算シミュレーション分野での産官学連携のあり方には2通りのやり方がある。第1は企業内の計算科学研究者を大学・研究機関が支援・育成していくやり方、第2は研究機関が企業からの受託研究を行うやり方である。従来、日本企業は自前主義が強く、前者の形での産官学連携が多かった様に思えるが、今後は後者の産官学連携も増して行く必要があろうと思われる。双方をバランスよく進めていく必要がある。後者の活動を経なければ産業界でのニーズが十分にアカデミアに伝わらず、その事が産官学連携の質の向上の障害になる事は明らかである。後者の活動を一定水準まで増やしていく必要があり、オープンイノベーション活動を現状より増やす必要があるのは明白である。各々の活動は各研究機関・企業に依存するが、研究会を通じてこういった産官学連携の現状の情報共有する事は頗る有益であろう。その事を意図して連続研究会を開催している。

i) 第4回産官学連続研究会 「産業界における OCTA 活用の現状」 (報告書17)

2002年、経済産業省出資の「高機能材料設計プラットフォームの研究開発(通称 土井プロジェクト)」終了時に公開された OCTA は、現在でも産業界において活用が続けられており、国家プロジェクトの成果物として公開されたソフトウェアの中では一つの成功例とされている。今後のソフトウェアの維持、発展に対する取り組みの参考とするために、産業界における OCTA 活用の現状を紹介していただく企画を5月8日に開催した。最初に(財)豊田理化学研究所(当時)土井正男氏より、プロジェクトの概要とオープンなツール、自立・分散・協調的連携を目指したという OCTA 開発の思想を紹介いただいた。(株)豊田中央研究所山本智氏より、新化学発展協会から新化学技術推進協会に至る、産業界を中心とした OCTA の活用研究の内容に関して紹介いただいた。この活動が継続している理由として、OCTA の対象とするソフトマテリアル材料シミュレーションのニーズが継続して存在すること、技術的な指導をお願いしている先生方および開発者の熱心なサポートがあることが挙げられた。また JSOL 小沢拓氏より OCTA の商用化による発展の戦略に関して紹介いただいた。OCTA の商用版である J-OCTA のユーザーも直実に増加しており、ここからもこの分野のシミュレーションのニーズが大きいことが示唆された。日本ゼオン本田隆氏からは OCTA のエンジンの一つである平均場シミュレータ SUSHI の並列化に関して紹介いただいた。プロジェクト後もこのようなエンジン開発者の継続的なアクティビティが存在することも、OCTA を支える原動力となる。最後に総合討論を行い、聴衆を含めて意見交換を行った。OCTA のような持続的な活動の原動力は、ソフトウェアやシミュレーションのニーズ、ソフトウェアやユーザーをサポートする組織、枠組み、人材の維持など多くの要素が絡むことが指摘されたが、決め手となる施策を明確にすることは出来ず、今後とも産官学が集う場において議論を続けていくことが望まれる。

ii) 第5回産官学連続研究会 「原子スケールシミュレーションから TCAD へ」 (報告書18)

半導体分野においては、デバイスの微細化、新材料の導入、新機能・新構造デバイスの研究開発などが進む中、原子スケールまで包括した CAD への期待は以前にも増して大きくなっている。しかし、産業応用にあたっては、計算時間、計算規模の問題、マルチスケール、マルチフィジクスへの取り込みなど、課題山積である。

そこで、(1) 富士通の佐藤成生氏からは、産業界からみた半導体シミュレーションのニーズについて、(2) 東芝の石原貴光氏からは、第一原理計算とナノデバイスにおける界面エンジニアリングの事例について、(3) ルネサスエレクトロニクス竹田裕氏からは、フルバンド・デバイスシミュレーションによるキャリア輸送特性解析事例について、それぞれ講演していただいた。これらの講演では、シミュレーションツールの連携のためのデータ入出力形式統一の重要性、ナノデバイスや新材料へのナノシミュレーションによる解析の必要性、3次元大規模計算や過渡解析への期待、などが述べられた。最後に、課題克服のための方策、今後の産業応用に向けたシミュレーションツールの連携、統合、体系化などについて参加者全体による議論を行なった。

iii) 第 6 回産官学連続研究会「熱マネジメント技術を支える材料シミュレーション」（報告書19）

省エネ技術により高温廃熱はかなり減っているが、取扱いが難しい低温の排熱は未だに社会に広く散在している。一方、最近の自動車、特にハイブリッド車や電気自動車ではエンジンルームからの熱が少なくなり冬季の暖房のエネルギー源に困るなどの問題があり、熱をやりくりする「熱マネジメント」技術に対するニーズが非常に大きくなっている。ヒートポンプや熱電システムに代表されるこれらの技術のシステム性能の多くの場合で、材料性能がボトルネックとなっており、蓄熱・断熱・熱電・ヒートポンプ技術の飛躍的な向上を果たす為には、これらで用いられる材料性能を飛躍的に向上させる必要がある。こういった革新的な材料開発の為には、計算シミュレーションを用いた探索スクリーニングを有効活用すべきである。この点では Materials ゲノムなどの材料開発支援プラットフォーム構築の構想と趣旨を共有する部分が大きく、「熱マネジメント」技術に対する計算シミュレーション・データベースを駆使した材料のスクリーニング探索の試みは、その最も重要な実例となるであろう。

これらの問題意識は広く産業界で共有されており、それに応える形で経産省のプロジェクトが概算要求などに提案されているが、アカデミアでもこの問題を良く認識し国全体でこの研究プロジェクトを支援していくべく問題意識を広く共有する事が重要である。今回の研究会ではこの問題に対して計算シミュレーションのコミュニティがどう応えて行くべきかを議論する為に開催した。多くの企業関係者と共に、大学・研究機関からの参加者も多く、問題意識の共有という面で十分に有用な会議となった。

iv) 産官学研究拠点としての活動

CMSI 広報委員会と協力し、広報活動およびアプリケーション普及に向けた活動を実施した。

広報活動としては CMSI 広報誌 Torrent の記事、「卒業生を訪ねて」(2012 年 7 月発行 No. 5、2012 年 11 月発行 No. 6) のインタビュー、記事作成および「計算物質科学分野の公開ソフトウェア」(2012 年 11 月発行 No. 6) の記事作成を担当した。

アプリケーション普及に向けた活動として、CMSI 広報小委員会と協力してアプリケーション公開サイトの企画、制作を行った。これは、計算物質科学分野におけるソフトウェアについての「見える化」を行う事により、アプリケーション利用の促進し、開発者と利用者の交流の場を提供する事を目的としている。平成 24 年度は、現在の CMSI 関係のアプリケーションの情報整理、開発者と利用者双方の要望の抽出、ウェブコンテンツの制作を行った。

また、来年度より産官学連続研究会の終了後に各々の研究会の概要・様子や、研究会企画者、主な講演者へのインタビューに基づく記事を執筆し、それを Torrent や web において紹介して行く事を予定しており、その企画準備を CMSI 研究員・小西が行った。これらの活動により産と学の間窓をより大きく広げて行く予定である。

2. 2. 1. 2(4) 研究成果の普及

平成 24 年度は、企業、高校生、大学学部生を含む一般の読者を想定した広報誌 TORRENT を 3 号発行した。従来の CMSI 内若手メンバーとともに、計算物質科学に関連する外部の方にも焦点をあてた内容とした。また、ホームページをより充実し、ニュース、研究成果、公開ソフトウェア情報、人材紹介、人材公募などの情報を発信することにより、企業、他分野との人材交流を図り、ソフトウェアの開発・公開をサポートした。ユーザーの視点に立ってアプリケーションの紹介や利用を促進するポータルサイトを立ち上げ、閲覧を開始するとともに、アプリケーションの効率的な開発に関する指針をまとめた。

1) 広報誌の発行

① Torrent No.5 (2012 年 7 月発行) (日本語版 別冊3、英語版 別冊4)

日本語版 3000 部、英語版 1000 部を発行。CMSI のアジアへの活動展開の紹介として、CMD ワークショップ 10 年の歩みとインドネシアでのワークショップを特集した。他には、「DC(分割統治法)」アプリケーション開発者へのインタビュー記事、大学院で計算物質科学を研究し、現在ゲームプログラマーとして活躍する OB を拠点研究員が訪ねるインタビュー記事、2012 年 4 月着任の拠点研究員 5 名の紹介など。

② Torrent No.6 (2012 年 11 月発行) (日本語版 別冊5、英語版 別冊6)

日本語版 3000 部、英語版 1000 部を発行。CMSI で開発されているソフトウェアの紹介と公開の必要性を特集記事として今後の方向性を示した。その他、物質の機能・構造を予測する「CONQUEST」アプリケーション開発者へのインタビュー記事、大学院で有機伝導体の研究を行い産総研などでの研究員を経て企業にて活躍する OB への拠点研究員によるインタビュー記事など。

③ Torrent No.7 (2013 年 3 月発行) (日本語版 別冊7、英語版 別冊8)

日本語版 1500 部、英語版 500 部を発行。CMSI の研究課題すべてを紹介する特集号。課題代表者を拠点研究員が取材する形で紹介している。コラムでは重点研究員の研究課題を本人が執筆する形で紹介した。

2) ソフトウェア開発・公開のサポート

分野 2 で開発しているアプリケーションの普及・ユーザ層の拡大を図るため、アプリケーションのポータルサイト「MateriApps (マテリアアップス)」の公開の準備を進めた。MateriApps では、アプリケーションの詳細を紹介するだけでなく、開発者の生の声も紹介することで、アプリだけでなく開発者自身の「見える化」も目指した。アプリは研究対象やアルゴリズムなどから柔軟に検索が行えるようになっている。また、アプリ毎に、インストール方法や使い方、機能拡張などをオープンに議論する場としての「フォーラム」機能を備えており、計算科学の専門家だけでなく、理論家や実験家などへの、計算物質科学シミュレーションの普及を図っている。

3) ホームページにおける情報発信

平成 23 年度に引き続き、ニュース、イベント情報をさらに充実させると同時に、計算物質科学コミュニティー誌“Torrent”の内容をホームページに展開し、アプリケーション開発者の紹介、若手教員の座談会、研究会報告などの情報の掲載を行った。イベント情報は、サイトへの訪問数を増やすため、主催だけでなく、共催・協賛イベントも掲載した。さらに、神戸拠点のページを充実させ、より詳しい情報提供を行った。

4) シミュレーション結果の公開

計算物質科学の普及を促進する活動として、結果の可視化がある。可視化とは、計算した原子や分子の位置情報を 3 次元的、もしくは、時間変化も含めて立体映像化、動画化することである。可視化の効果のひとつは、結果を感覚的にも理解しやすくすること、また、他人に結果を伝えるための手段としても有効に活用できる。もうひとつの目的は、新たなサイエンスの可能性の探索がある。とくに時間発展する物質の形状変化等は、動画化

によりはじめて得られる知見が多い。そこで、可視化技術を促進している岡山大学の松本正和先生に相談し、平成 24 年度は、「京」を利用した成果であるメタンハイドレートの融解過程の動画化に協力していただいた。今後、動画化による科学的な知見の取得も含めた研究を推進するため、計算結果を精度よく再現可能な高精細 3D ディスプレイを導入し、松本先生と共に検討を継続していく。

一般社会に対する、シミュレーション結果の公開に関し、エンターテインメント性を持たせた提示がその一つの候補であることが、CMSI 教育拠点である豊橋技術科学大学関野秀男先生より提案された。その一つが音楽と計算科学映像の融合であり、3 月 5 日に実施した「計算物質科学見える化シンポジウム」では、動画と音楽の融合のデモンストレーションを行い、参加者より驚きと革新性の評価を得た。そこで、大画面の映写が可能な 3D プロジェクタを導入し、計算結果を“魅せる”ためのエンターテインメントとの融合研究を継続していく。

5) 広報イベント・会議

①5 分野&AICS 第2回広報情報交換会

京による成果の普及、分野振興などの広報活動に関する情報共有と今後の広報活動方針に関する意見交換を進めるため、平成 23 年度より、「5 分野&AICS 広報情報交換会」を開催している。平成 24 年度は、理研 AICS において 5 月 15 日に第 2 回目の情報交換会を開催した。戦略 5 分野および理研 AICS の広報実務担当者が出席し、各分野の広報活動の現状、広報活動における今後の連携の方針について、議論を行った。

6) 展示会への出展

①Conference on Computational Physics (CCP2012)

平成 24 年 10 月 15 日(月)～18 日(木)、神戸ユニイ学館にて開催された。欧米、アジアの各地を回りながら毎年行われており、今年は神戸で大阪大学が事務局となつて行われた。5 分野で連携してブース展示を行い、分野 2 は CMSI の紹介および代表的なアプリケーション RSDFT と modylas の紹介を行った。拠点研究員 3 名(河津勲(金沢大)、チュオンビンチュオンズイ(北陸先端大)、大久保毅(東大))、重点研究員 1 名(正木晶子(東大))、TCCI 事務局員 1 名(石谷隆広)の 5 名にてブースの説明員を担当した。ポスターは図 2.2.1.2(4)-4 を用いた。

②計算科学研究機構(AICS)一般公開

平成 24 年 10 月 20 日(土)、計算科学研究機構にて一般公開が行われた。京コンピュータがガラス越しではあるが公開されるため一般市民約 3500 人が訪れた。「科学の広場」では戦略 5 分野がブースを出し、訪れた人々に各分野の理解を深めてもらおうと毎年趣向を凝らすのが、今回分野 2 は、「エネルギー変換」をテーマに、新物質を開発して効率良くエネルギーを創る・蓄える・使う流れをポスターで紹介した。また、ネオジム磁石を使って磁性流体の実験を行い、希土類(レアアース)を紹介するとともに、これに代わる物質の開発のための研究を京コンピュータ上で行うことを目指していることを紹介した。ブースを訪れた方への実験の手ほどきは拠点研究員 5 名で行った。ポスターは図 2.2.1.2(4)-1①～⑤ を用いた。

②東大柏キャンパス一般公開

平成 24 年 10 月 26 日(金)～27 日(土)、東大柏キャンパスの一般公開が行われ、電子計算機室(サーバルーム)の展示と連携して、CMSI を紹介するためのポスター展示(図 2.2.1.2(4)-1&2)を行った。これまでにない機能を持つ物質を設計し新しい機能性物質を創るために、CMSI の研究者が京などのスーパーコンピュータ上で素材となる原子の役割を計算していることなどを一般市民にわかりやすく紹介した。他にも、前週の AICS 一般公開で使用した「エネルギー変換」をテーマにしたポスターを展示し、新物質を開発して効率良くエネルギーを創る・蓄える・使う未来について紹介した。老若男女多くの人々がブースを訪れ CMSI の理解を深めてもらう機会となった。ポスターは、図 2.2.1.2(4)-1①～⑤および図 2.2.1.2(4)-2 を用いた。

③Supercomputing Conference 2012 (SC12)

11月10日(土)～16日(金)に米国ソルトレイクシティにて開催されたSC12にてブース展示を行った。展示会期は、12日(月)～15日(木)。東京大学情報基盤センターと物性研計算科学研究センターの共同出展ブースOakleaf/Kashiwa Alllianceと、AICSブースの両方にて、ポスター展示およびTORRENTの配布、ブースプレゼンを行った。Oakleaf/Kashiwa Alllianceブースで、CMSIはLead to new materials and energy creationという題名で計算科学研究センター(CCMS)を紹介し、そこでのCMSIの役割を説明した。また、中野博生(兵庫教育大)がHuge-Scale Numerical Diagonalizations of Quantum Spin Systemsの題名で、渡辺宙志(東大)がMolecular Dynamics Simulations on Petascale Computerの題名で研究成果のポスター発表およびブースプレゼンを行った。また、東大電子計算機室の矢田裕之がOverview of Supercomputer Centerと題して物性研のスパコンの紹介を行った。また藤堂眞治(東大)が、両方のブースでプレゼンを行った。説明員として、上記3名の他に広報担当者が2名参加して、展示活動を支援した。東大のブースでは図2.2.1.2(4)-3のポスター、AICSのブースでは図2.2.1.2(4)-4のポスターを展示した。



HPCI戦略プログラム 分野2

計算物質科学イニシアティブ (CMSI)

新物質・エネルギー創成

全ての物質は原子の集まりです。原子1個では何の機能も無くても、原子が集まることで、太陽光や熱を電気に変える機能が生まれます。CMSIは、素材となる原子の役割を計算し、新しい機能を持つ物質を設計して現実に機能性物質を創ることを目指しています。



目標1

手に入りやすい原子で高い機能を持った物質を創成する。

目標2

新物質を開発して効率良くエネルギーを創る・蓄える・使う。

CMSI は学術分野の融合でこれまでにない物質の発見を目指します。

計算

実験

《物性科学》

《分子科学》



自然科学研究機構
分子科学研究所



東京大学
物性研究所
(代表機関)

《材料科学》



東北大学
金属材料研究所

協力機関 (人材育成・教育)

- ・東北大学
- ・名古屋大学
- ・神戸大学
- ・総合研究大学院大学
- ・東京大学
- ・京都大学
- ・豊橋技術科学大学
- ・金沢大学
- ・大阪大学

協力機関 (産官学連携)

- ・物質・材料研究機構
- ・産業技術総合研究所

27大学、5独法、9企業より参加

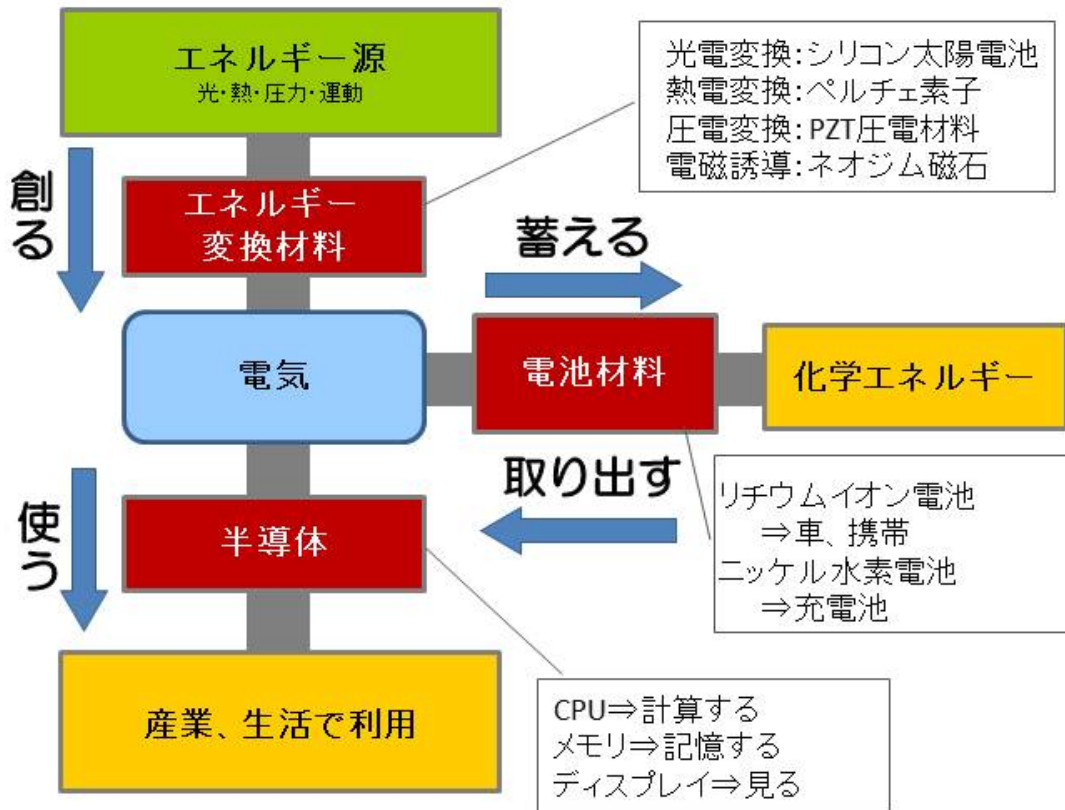
図 2.2.1.2(4)-1 ①新物質・エネルギー創成 (ページ1/5)

CTPSi

効率よく

電気を創る・蓄える・使う

私たちが日常生活を送る上で大切な電気エネルギー。
電気以外のエネルギーから物質を利用して電気を創り、電気を蓄え、電気を使う流れを考えてみましょう。



クイズ1 1時間に太陽光が地球を照らすエネルギーを全て電気に変えたら、地球上で必要とする電気何年分になるでしょうか？

クイズ2 一般家庭で1日に使う電気を、携帯に使われているリチウムイオン電池でまかなうとどの程度の大きさでしょうか？

クイズ3 日本で使われる電気の何パーセントが半導体で消費されているでしょうか？

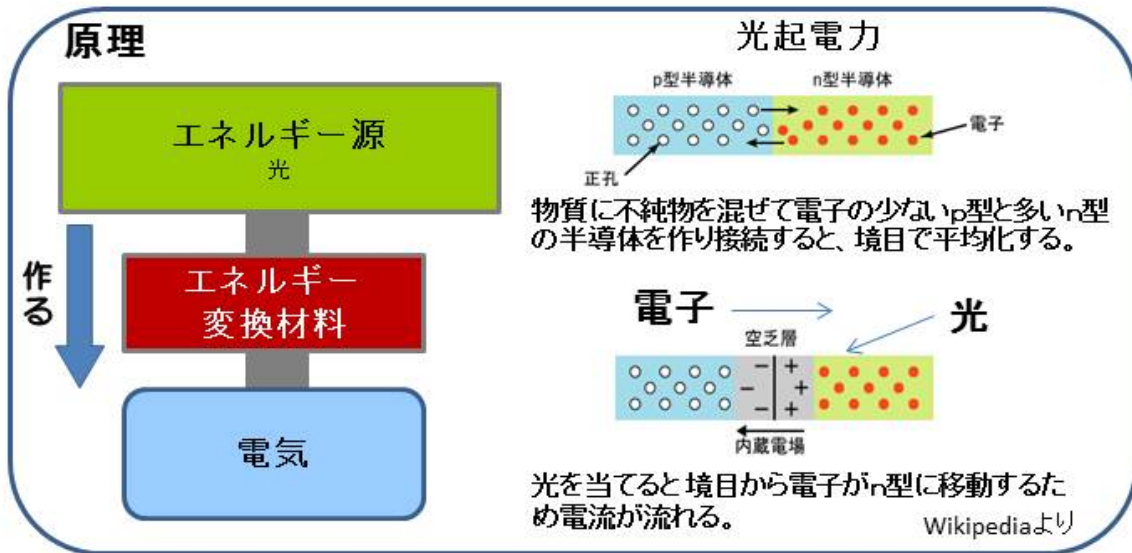
図 2.2.1.2(4)-1 ②電気を効率よく創る・蓄える・使う (ページ2/5)

CSI

効率よく

電気を創る

光から電気をつくる光電気変換機能を持つ物質を考えてみましょう。



<例>

代表的な光電気変換物質

○シリコン 変換効率最大20%

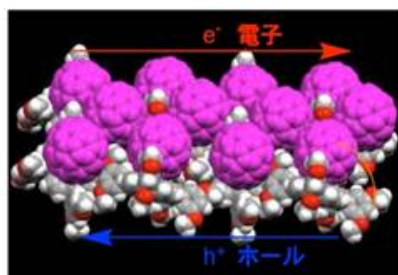
○有機 変換効率5%

⇒ただし室内光だと25%でシリコンをしのご

新有機光電池を計算で求める



Wikipediaより



AISIN精機webサイトより

クイズ1 解答

1時間に地球を照らす太陽光のエネルギーは174PWh。
地球上で必要とする電気約10年間分です。

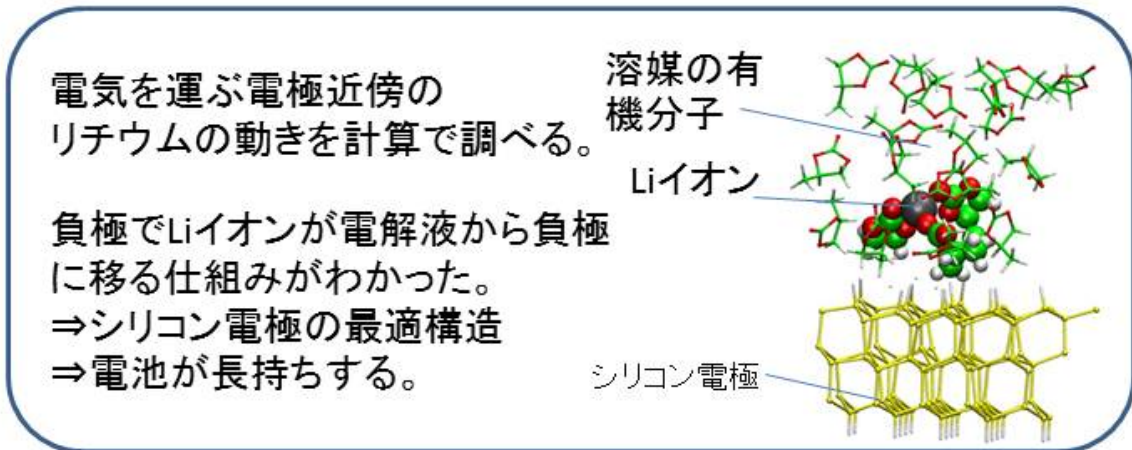
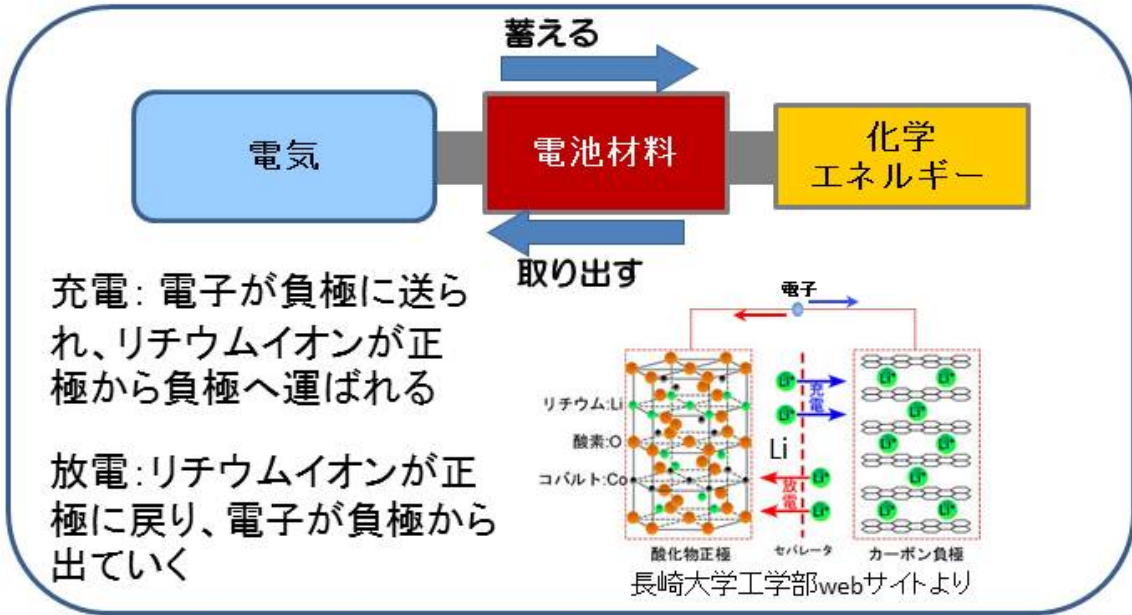
図 2.2.1.2(4)-1 ③電気を効率よく創る (ページ3/5)



効率よく

電気を蓄える

電気を蓄え、取り出す物質の現象を考えてみましょう。



クイズ2 解答

一般家庭で1日に使う電気は約10kWh、携帯に使われているリチウムイオン電池でまかなうと、右記の50×50×100cm程度の大きさになります。

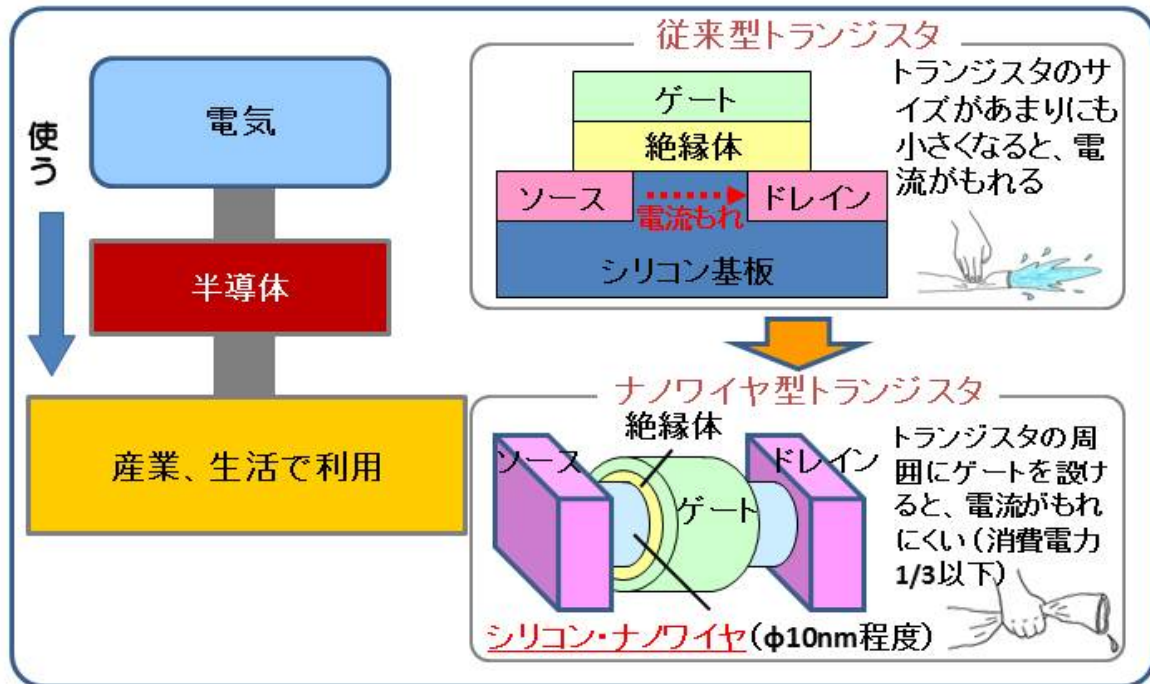


SONY webサイトより

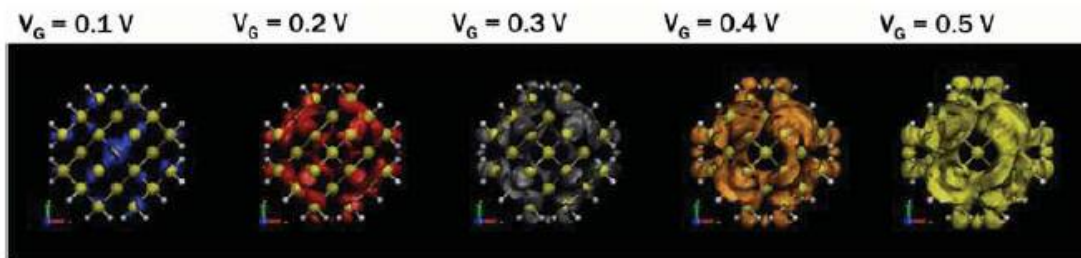
図 2.2.1.2(4)-1 ④電気を効率よく蓄える (ページ4/5)

effici **効率よく**
電気を使う

私たちの身近な電子機器は、半導体で電気の流れを制御しています。電子機器の省エネルギー化には、効率よく動作する半導体が必要です。



ナノワイヤーの断面に流れる電子の道をスパコンで計算
⇒最適な形状や使い方を調べる



ワイヤーの直径が小さいと電気は均等には流れない。

クイズ3 解答
日本の電気の消費量の5%は半導体によるものです。半導体の消費電力を下げると社会へのインパクトは非常に大きいですね。

図 2.2.1.2(4)-1 ⑤電気を効率よく使う (ページ5/5)

HPCI 戦略プログラム分野 2

新物質・エネルギー創成



計算物質科学研究センター(CCMS)、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

全ての物質は原子の集まりです。原子1個では何の機能が無くても、原子が集まることで、太陽光や熱を電気に変える等の機能が生じます。スーパーコンピュータは、素材となる原子の役割を計算し、新しい機能を持つ物質を設計して現実に機能性物質を創ることを目指しています。



【CMSI ネットワーク】

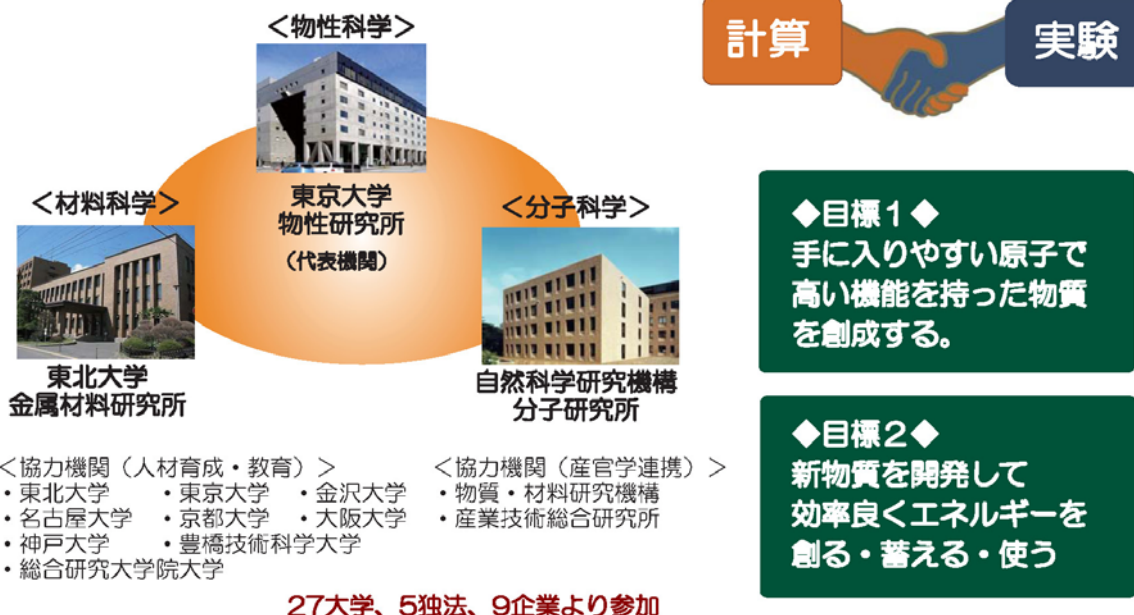



図 2.2.1.2(4)-2 CMSI の紹介

Center of Computational Materials Science (CCMS)

The University of Tokyo, Institution of solid state physics

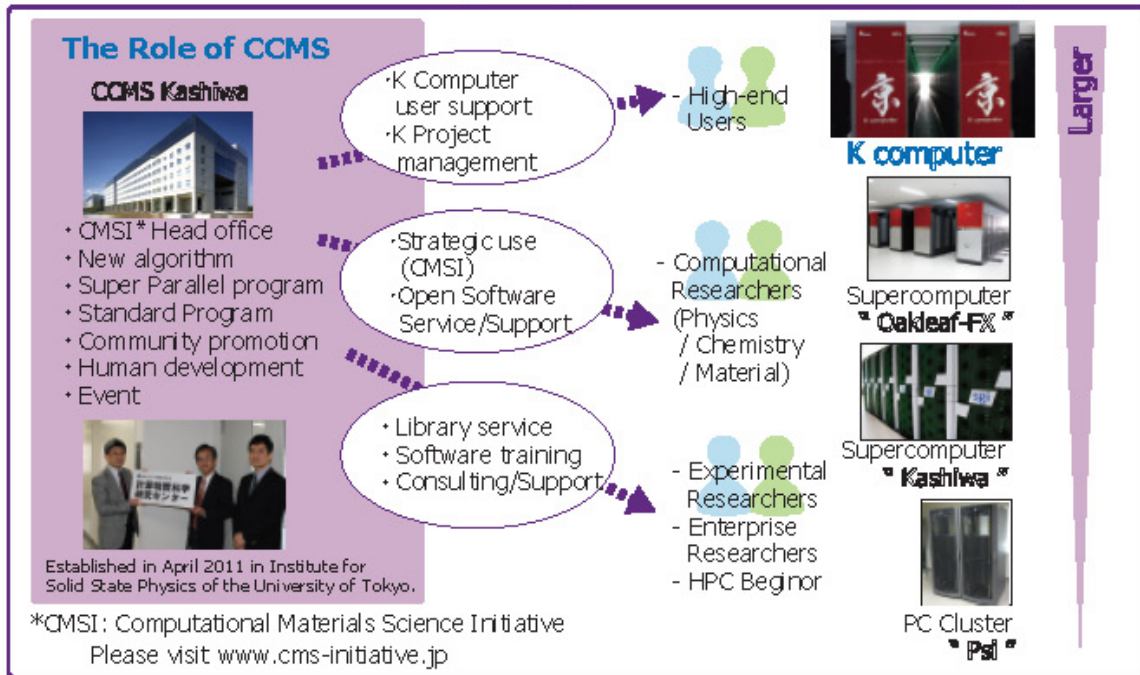
Lead to new materials and energy creation



Oakleaf/Kashiwa Alliance

Information Technology Center The Institute for Solid State Physics

CCMS boosts the cutting edge Material Sciences by HPC



Five Strategic Fields, #2

New Materials and Energy Creation



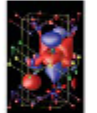

Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo,
 Institute for Molecular Science, National Institute of Natural Sciences,
 Institute for Materials Research, Tohoku University




Computational Materials Science Initiative

Our Strategic Objective Turning the Headwaters of Basic Science into a Torrent of Innovations in Functional Materials and Energy Conversion.

Our Study Groups

-  **Energy conversion**
-  **Next-generation advanced device science**
-  **Basic science of novel quantum states / new materials**
-  **Molecular function and chemical transition**

Create a new research field beyond the academic regions

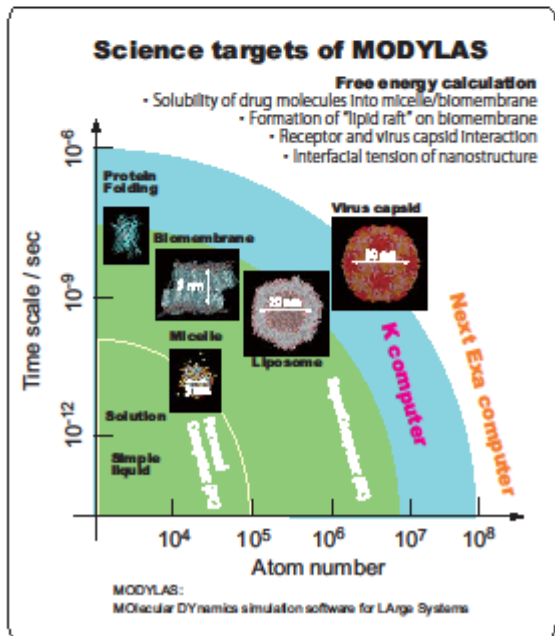
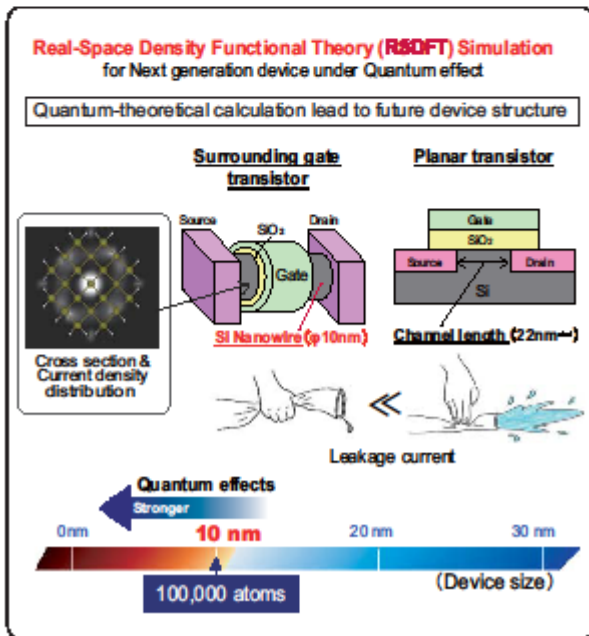
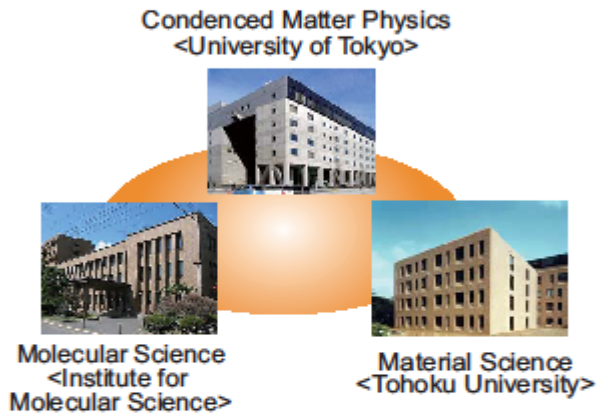


図 2.2.1.2(4)-4 CMSI の紹介 (英語版)

2. 2. 1. 2(5) 分野を超えた取り組みの推進

1) 計算科学研究機構との連携

①第4回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会

平成 23 年度から始まった、AICS と 5 分野の共催で行う交流会である。分野間での交流促進と「京」に関わる情報交換を行うことにより、HPCI 戦略プログラムの活動を活性化することが狙いである。平成 24 年度は 2 回開催された。第 4 回目は、分野 3 が幹事となり 7 月 10 日(火)に AICS で開催された。平成 23 年度に開催された第 3 回目と同様、「京」の試験利用を行なっているグランドチャレンジ(ナノ・ライフ)から各一名、戦略 5 分野から各 2 名の講演があり、一般共用開始にむけて京の効率的利用のための情報交換を行った。また、講演後、パネルディスカッション「ポスト京に向けての取組み」を各分野から 1 名のパネラーを選出して実施し、エクサスケールスパコンはどのような方向を目指すべきか、アプリケーションの立場から議論を行った。

②第5回 HPCI 戦略プログラム合同研究交流会

第 5 回目の合同研究交流会は、分野 4 が幹事となり 1 月 16 日(水)に AICS で開催された。「京」の共用開始から 4 ヶ月経った時点での開催であり、「京によるプロダクションラン」をキーワードとして、グランドチャレンジ(ナノ・ライフ)、戦略 5 分野から各 1 名の講演があり、「京」を用いた最新の研究成果の紹介が行われた。また AICS の研究チームからも、京におけるプログラミング環境研究や大規模並列数値計算ライブラリに関する講演があった。戦略プログラム 5 分野が互いの研究開発について理解を深めると共に、共通の問題について情報交換を行い、実質的な分野交流を進めることができた。

2) 他の戦略機関との連携

①HPCI 戦略プログラム 分野 2x 分野 5 異分野交流研究会 (報告書 20)

5 月 30 日に、物性研にて開催。量子系の構造やダイナミクスに対する大規模計算は、物質階層は異なるものの、分野 5「物質と宇宙の起源と構造」と類似した計算手法を用いた研究が行われている。本研究会は、物質科学分野と素・核・宇宙分野の研究者、そして数理科学の研究者を交え、異分野の研究者がインフォーマルな雰囲気の中で議論をし、最新の研究に関する情報交換を行った。

②GCOE 分野横断研究会「多体相関の数値解法」(報告書 36)

2 月 5 日、6 日に、東大本郷キャンパスにて開催。計算機性能の飛躍的向上に伴い、様々な量子多体系において、多体相関による効果を正面から数値的に取り扱うことが可能となった。このような背景には、計算機の進展だけでなく、計算手法に関する発展も大いに寄与している。原子核、量子化学、固体物理などの多岐にわたる学問分野で、対象とする物理系に応じたさまざまな手法が独立に開発されているため、これらの手法や共通する課題を検討し、今後の展望を議論することを目的として、戦略機関第 5 分野に属する大塚研究室との合組を核に、物性・原子核・量子化学横断の計算手法開発に関する国際ワークショップを開き、共通する課題について、理解を大いに深めた。新たな手法開発を含めた分野交流が進んだ。

3) 実験研究者との連携

①第 1 回 RSC-CMSI 合同セミナー マルチスケール構造科学を拓く (報告書 21)

X 線自由電子レーザー「SACLA」の登場は、構造物性の研究を大きく転換しようとしており、今後、階層構造を持つ物質のマルチスケールでの機能可視化などが可能になっていくと期待される。それには、従来からの構造可視化、XFEL の先端計測、データマネージメント、大規模シミュレーションの間での連携が不可欠である。それにむけた第一歩として、「マルチスケール構造科学を拓く高エネルギー光科学と計算科学の戦略的協奏」をテーマに、理研播磨研究所放射光科学総合研究センターとの共催で、9 月 15 日(土)に理研播磨研究所

において第 1 回 RSC-CMSI 合同セミナーを開催した。セミナーでは、周期系・非周期系それぞれの分野で放射光科学と計算科学の融合を図っている研究者が講演を行い、マルチスケール構造科学の展開を具体化するための、SPring-8/SACLA/京の大型研究施設の協奏的な利活用と協奏的共同研究の方向性について活発な議論がなされた。

②RIKEN Spring-8 Center-CMSI 放射光連携研究ワークショップ

平成 25 年 2 月 14 日(木)に東大山上会館にて、第 6 回の掲題会議を開催した(参加者 59 名)。副題を「量子秩序研究／創発物質科学／大規模計算科学の共創」とし、セッションとして、「スピン秩序から磁気構造科学、そしてデバイス応用へ」、「大規模計算機シミュレーションとナノ構造」「グリーン機能の構造デザインと計算化学」「励起秩序のダイナミクス」の 4 つを設けて 12 件の講演が行われた。そのうち 6 件は CMSI に参画する計算物質科学研究者によるものであり、放射光による高度な計測と計算科学の連携を強く打ち出した研究会となった。

4) 社会への情報発信

① 第 1 回 計算物質科学“見える化”シンポジウム (TUT-CMSI) (報告書22)

計算物質科学の内容や成果は、一般的に難しいものと考えられて敬遠されがちであるが、今後一般社会にむけてより広く、より分かりやすく伝えていくことが求められている。分野全体としてこの問題を考えるため、3 月 5 日(火)に秋葉原 UDX において「第 1 回 計算物質科学“見える化”シンポジウム」を開催した。分野内だけでなく、分野外、一般からも多くの参加があった。本シンポジウムは豊橋技術科学大学との共催である。また、理研 AICS と戦略 5 分野の協力のもとに計算科学の広報と教育活動の現状に関するフロア展示も行った。シンポジウムでは、まず CMSI および豊橋技術大学から、計算科学広報の課題提起があった。その後、科学広報の専門家や可視化技術の研究者、またマスコミの立場からの招待講演において計算物質科学広報に関する様々な提案がなされた。講演後のパネルディスカッションでは、今後の教育活動の重要性などに関して、活発な意見交換がなされた。

2. 2. 1. 2(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援

1) 研究支援拠点の整備

平成 23 年度より、AICS 内に CMSI の神戸拠点として東大物性研究所の分室を設置し、京の試験利用を開始し、物性、分子、材料計算科学研究者の支援活動をスタートしている。平成 23 年度中に 2 名の特任教員が神戸計算科学研究機構内に常駐しており、平成 24 年度も継続して常駐し、特定高速電子計算機施設の試験利用、および、共用開始後の利用の支援を行った。また、平成 24 年度からは 1 名の拠点研究員を追加配置し、計算科学研究機構の共通基盤研究や分野融合研究等と積極的に連携を推進した。トータルとして、AICS 内の CMSI 神戸拠点には、東大物性研常勤スタッフが教員 1 名、研究員 1 名、事務補佐員 2、神戸大常勤スタッフが教員 1 名の、合計 5 名が常駐する。これに加え、京の試験利用可能な期間に関しては、CMSI 神戸拠点には 16 名程度のメンバーが滞在可能なスペースを提供した。常勤スタッフは、滞在中の研究者との間で京の利用ノウハウに関する情報交換を行い、ノウハウを蓄積して新たな利用者に継承していく役割を担った。また、一般共用開始後は、ミーティングのためのスペースの充実を図り、以下に記す高度化サポートや CMSI 神戸ハンズオン、個別の情報交換などに役立てた。平成 23 年度末に神戸拠点に導入した高速なネットワークとストレージを備えた「データポスト処理システム」についても、京で大規模なシミュレーションを行う際に必要となる、データの前処理、後処理、あるいは計算結果の可視化をより効率的に行えるよう、アプリケーション導入などの環境整備を行った。図 2.2.1.2(6)-1 に CMSI 神戸拠点における支援活動を示したポスターを示す。

2) 「京」利用者の支援

平成 24 年 3 月に実施したアプリケーション高度化状況ヒアリングの結果にもとづき、平成 24 年度からの京の試験利用対象アプリを選定した。ヒアリングは CMSI 神戸教員が行い、1) ハイブリッド並列化の完了状況、2) 小規模環境におけるスケーリング性能、3) FLOPS 値などの CPU 性能指標、4) 大規模並列におけるボトルネックの特定と対策の検討状況、5) 大規模並列での性能推定とその妥当性、の 5 つの観点から、点数化・順序付けを行った。その結果、DC (代表者 中井(早大))、CASINO (前園(北陸先端大))、RSPACE (小野(阪大))、QMAS (石橋(産総研))の 4 つを平成 24 年 4 月からの大規模試験利用アプリケーションとして選定された。また、京の小規模試験利用(トライアル枠)についても、20 名のユーザを選定した。さらに平成 24 年 5 月には CPMD(館山(物材機構))を大規模試験利用アプリとして追加し、9 月末の供用開始まで試験利用を継続した。共用開始後の京の利用は、戦略プログラム利用枠の中の重点配分枠、一般配分枠、あるいは一般利用枠を通じた利用となる。この内、重点配分枠については、CMSI の重点課題の中から、「京」の能力を最大限利用しなければならない大規模計算であって、平成 24 年度中あるいは平成 25 年度の早期に画期的な科学的成果又は社会的課題の解決に資する成果が上げられると特に期待されるものを優先課題候補として選出した。また、戦略プログラム利用枠のうち一般配分枠は、優先課題外の重点課題による利用が主となるが、その一部を「計算各推進体制の構築」のための枠として確保し、特別支援課題・支援課題のアプリケーションの高度化、一般利用枠への申請のための準備、あるいは拠点研究員による新しいアルゴリズムの開発に利用した。

利用者支援としては、平成 24 年 6 月末までの期間は、週に 2 日、富士通 SE が CMSI 神戸拠点居室に常駐し、試験利用中に生じた疑問点などへの対応とアプリケーションの最適化・高度化のサポートを行った。8 月からは、京のネットワーク利用が可能になったが、年度末まで引き続き web やメールによる最適化・高度化のサポートを行った。また、平成 24 年 8 月からは、CMSI 神戸拠点を利用した「高度化コンサルティング」を開始した。これは、個別のアプリについて、CMSI 神戸拠点内で京あるいは東大情報基盤センターの FX10 を使いながら、富士通 SE から高度化についてのコンサルティングを受けるものである。平成 24 年度末までに、のべ 10 回計 19 名の利用があり、京の大規模利用に向けた実践的な高度化が効果的にすすめられた。

3) 拠点研究員による支援

i) 拠点研究員についての総括・配置状況

大規模並列計算は、計算機の特性を把握しながらアプリケーションを高度化する必要があるため、個人や個々の研究グループだけで対応するのは困難を伴う。大規模並列計算を戦略分野の研究者に普及発展させるためには、計算資源を有する機関がその計算機の特性を考慮しながらアプリケーションの高度化に対する支援活動を行うことが望ましい。そこで、各分野の拠点となる機関に拠点研究員を配置した。表2.2.1.2(6)-1に配置部門と、拠点研究員の各カテゴリA～D別の配置人数を示す。表の下にはA～Dのカテゴリの役割を示している。物性研に7名、分子研に6名、分子サブ拠点である東大総合文科に2名、金研に1名、また、産官学連携拠点である産総研に1名の合計17名を配置した。平成24年4月からは、カテゴリAの拠点研究員2名がそれぞれ神戸拠点、物性研に配置され、分野共通に利用できる先端的な要素技術の開発を行っている。また、カテゴリB、Cの拠点研究員は、重点課題の次点に位置する特別支援課題を中心に支援活動を行った。支援活動の結果は、添付資料1の中で示されている。また、表2.2.1.2(6)-1には、CMSI教員の配置機関も示している。神戸に配置された教員は拠点研究員の活動を指導、統括する役割も担っており、次に示す若手技術交流会の企画、実施に関して、アドバイスをを行った。

表 2.2.1.2(2)-1 CMSI 教員、CMSI 拠点研究員雇用実績(平成 24 年度)

雇用機関	CMSI 特任教員	CMSI 拠点研究員*				合計
		A	B	C	D	
物性研(神戸拠点)	1	1				2
神戸大(神戸拠点)	1					1
物性研		1	3	1	1	6
分子研			5			6
				1		
東大・総合文化 (分子地域拠点)			2			2
金研	1		1			2
産総研 (産官学連携拠点)				1		1
東大院・工(教育拠点)	1.5		0.5			2.0
名大院・工(教育拠点)	1					1
阪大院・工(教育拠点)	1					1
合計	6.5	2	7.5	6.5	1.5	24

*2つのカテゴリにまたがる場合は、各カテゴリを0.5人としてカウント

*カテゴリ (A) 分野共通に利用できる先端的な要素技術の開発

(B) 分野共通に利用できるアプリケーションの公開

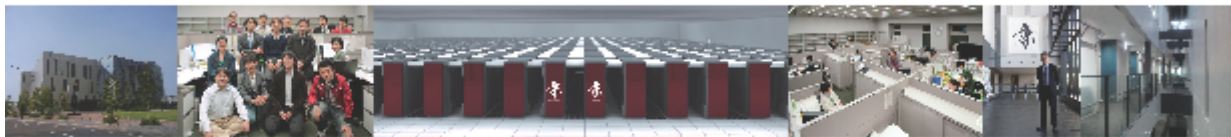
(C) 複数の重点課題・支援課題におけるアプリケーション開発・実行支援

(D) アプリケーション公開・普及支援



計算物質科学イニシアティブ神戸拠点

<http://cms-initiative.jp/division/kobe>



スーパーコンピュータ「京」が設置されている神戸ポートアイランドの理化学研究所計算科学研究機構 (AICS) 内に東京大学物性研究所計算物質科学研究センターの神戸分室が開設されています。この分室は「CMSI 神戸拠点」としての機能を持ち、「京」を利用する物性物理、分子科学、材料科学全ての分野の研究者の拠点となっています。CMSI 神戸拠点には 5 名のスタッフが常駐して、最新の大規模並列計算に関する情報の収集と展開に加え、神戸拠点を利用する CMSI 研究者の技術的・事務的なサポートを行っています。

<p>アプリ高度化コンサルティング</p> <p>CMSI 神戸拠点にて、コードの詳細情報を富士通 SE 他と共有し、実際にその場でコードやプロファイラの結果を見ながら、コンサルティングを行います。コンサルティングの例</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ソフトウェアの移植・実行 ・性能・ボトルネック解析・アルゴリズムの改良 ・ハイブリッド並列化 	<p>アプリケーション講習会</p> <p>分野共通アプリケーション、ツールなどに関する講習会を開催します。講習会では、データポスト処理システム phi などを用い、実際にプログラムを実行しながら、講習を進めます。</p> <p>平成 24 年度の予定</p> <ul style="list-style-type: none"> ・2013/2/7(木) 第 1 回 : FMO 講習会 ・2013/3/6(水) 第 2 回 : ALPS 講習会 	<p>セミナー・研究会</p> <p>計算科学研究機構では、異分野交流・融合の促進を目指し、さまざまなセミナー・研究会が定期的に開催されています。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・「京」物性セミナー (CMSI 主催) ・共通基盤ワークショップ (AICS 主催) ・AICS Café ・戦略 5 分野合同研究交流会 (次回 2013/1/16)
--	---	---

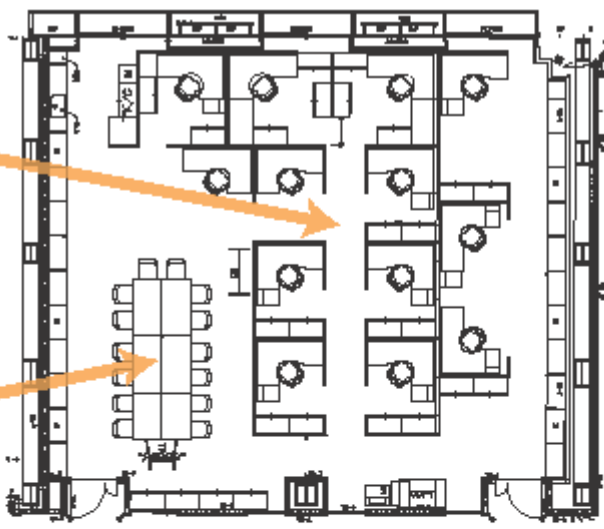
Work Space

神戸拠点には計 8 席のビジター用スペースが用意されています。(モニター・有線/無線 LAN 完備) CMSI 神戸拠点滞在中は自由に利用することができます。



Meeting Space

14 名で利用可能な会議スペースです。大型モニター、スクリーン、ホワイトボード、ネットワーク、電源が用意されています。研究打ち合せ、小規模なセミナー、講習会等に利用可能です。

データポスト処理システム phi

京コンピュータ利用者あるいは CMSI 神戸拠点利用者のためのクラスワークステーションです。京コンピュータとは 10GbE のネットワークで接続されています。シミュレーションデータのプレ/ポスト処理、可視化等に活用ください。

Sandy Bridge 64 コア・256GB メモリ・3TB HD

CMSI 神戸拠点スタッフ

藤堂真治	北浦和夫	坂下達哉	山下 恭・松下八重

お問い合わせ CMSI 神戸拠点事務局 adm-kobe@cms-initiative.jp

図 2.2.1.2(6)-1 に CMSI 神戸拠点における支援活動

ii) カテゴリ A 拠点研究員の活動

CMSIで固有値計算ライブラリに関するアンケートを実施し、それをもとに技術交流会で意見交換会を行った。また、このアンケートに関して、固有値計算ライブラリの並列化実装の専門家とミーティングを行った。実対称密行列の並列固有値計算ライブラリに対する統一的なインターフェイスの開発を行った。このインターフェイスには、固有値計算ライブラリのインストールおよびベンチマーク測定を行うためのスクリプトを含め、利用者の便宜を図っている。神戸拠点での講習会等のイベントにおいて、技術面でのサポートを行った。(坂下)

古典スピン模型のモンテカルロシミュレーションにおいて、局所的なスピン更新で生じる臨界点での緩和時間の増大を劇的に抑えることができる、大域的なスピン更新方法のクラスターアルゴリズムに関して、大規模並列計算機で有効的に実行できるアルゴリズム・プログラムの開発と高度化を行った。また、開発した大規模並列プログラムを核とする古典モンテカルロシミュレーションを用いて、非常に大きな系での計算が必要となる特殊な渦励起の秩序化の問題を解析することで、二次元古典スピン系におけるトポロジカル相転移の有無についての研究を進め、開発したプログラムが最先端の研究レベルで有効に働くことを確認した。(大久保)

4) 講習会、交流会等の開催

i) 若手技術交流会合宿

分野 2 内の研究者の相互交流を行い、アプリケーションの最適化・高度化や公開・普及に関する議論、技術や知識の共有を進めるため、CMSIの拠点研究員により運営される計算物質科学若手交流会を継続的に開催した。平成 24年度は、石村(分子研)、城野(東大)、吉澤(東大)、小西(産総研)の 4 名が、幹事として自主的に若手技術交流会を企画し、計2回開催した。各回の概要は以下の通りである。

①第6回 CMSI 若手技術交流会(2012年7月17日～10日 掛川) (報告書27)

「京利用に向けた技術・情報の共有」をテーマとして、初めに富士通の講師による「京及び FX10 でのコンパイル、チューニング」についての講義を聴き、これを受けて、3日間FX10で参加者各自のプログラムのコンパイル・チューニングに取り組んだ。多くのプログラムを京で実行できるようにするため、すでに京もしくはFX10を利用している参加者は、フリーソフトウェアのコンパイルに挑戦した。交流会用に wiki を立ち上げ、コンパイル時に生じる問題・チューニング箇所について情報、ノウハウの共有を行った。また、固有値計算ルーチンについての意見交換会、超並列時代のプログラム整備・継続開発と題した座談会を開き、これからの継続したプログラム開発における課題・体制について議論し、意見交換を行った。新拠点研究員 5 人の研究紹介も実施し、研究者間の交流にも取り組んだ。

コンパイル・チューニングに関して計 30 件の書き込みがあり、さらにフリーソフトウェア 6 本と複数のライブラリのコンパイルに成功した。これらのノウハウは交流会後に幹事が編集し、CMSI の共有財産としてウェブ上で共有している。

②第7回 CMSI 若手技術交流会(2013年2月14-16日 金沢) (報告書34)

「京の効率利用のための技術習得と共有」をテーマに、1日目の初めに理化学研究所の南一生先生による講演「スーパーコンピュータ「京」におけるプログラムの最適化」と、富士通の講師によるプロファイラの利用法に関する講義を聴いた。その後、交流会に先だって取得したプログラム解析データを基に 3 つのグループ(CPU、スレッド並列、MPI 通信・プロセス並列)に分かれ、グループ内で議論しながら 3日間FX10で各自のプログラムのチューニングに取り組んだ。1日日夜の座談会では、計算科学ロードマップ白書改訂、今後の計算機に適した計算手法とプログラム公開におけるライセンス形式について議論し、知識を深めた。2日目は、アプリケーション開発・公開に関する個別のヒアリングと意見交換会を開き、大規模計算の普及を目指したアプリ公開のためのサイトの構築について話し合い、問題意識の共有を図った。

チューニング参加者のうち 1/5 以上が計算時間を 3 割以上削減し、wiki にはチューニングに関して 18 件の書き込みがあった。これらの情報もウェブ上で共有している。また、次世代の人材育成のため、学生を中心とする新規参加者は FX10 で各自のプログラムのコンパイルに挑戦し、全員成功した。

ii) 第1回 CMSI 「京」利用情報交換会

平成 24 年 9 月末からの京一般利用開始へ向けた情報交換、共有を目的として、5 月 10 日に理研 AICS において、「第1回 CMSI 「京」利用情報交換会」を開催した。情報交換会では、試験利用の原状や共用開始前後の京利用形態について解説を行った。また 5 月末の HPCI システム利用課題公募に関する情報の説明を行った。その後、すでに試験利用をすすめているユーザから京利用に関するノウハウの紹介、トライアル枠利用を希望するユーザからの高度化準備状況の報告などが行われ、共用開始後の本格利用に向けた情報の共有が進んだ。

iii) 「京」物性セミナー

神戸理研 AICS 内外での分野間交流、連携を進めるために、平成 24 年度から CMSI 神戸拠点为主体となって「京」物性セミナーを企画・開催した。平成 24 年度は計 8 回のセミナーを開催した。毎回、計算物性物理の研究者だけでなく、理論物性研究者、材料科学分野の研究者や実験家、海外からの研究者などによる、幅広い分野から様々なテーマでの講演が行われた。聴衆も、CMSI 神戸拠点内だけでなく、理研 AICS、神戸大、兵庫県立大、大阪大、Spring-8 など、広く関西方面から多くの研究者が参加し、活発な質疑応答がなされた。

- 第1回 平成 24 年 4 月 18 日 講師 坂井(Spring-8)
- 第2回 平成 24 年 5 月 23 日 講師 西松(東北大)
- 第3回 平成 24 年 6 月 13 日 講師 Baumeister (Julich)
- 第4回 平成 24 年 7 月 26 日 講師 太田(神戸大)
- 第5回 平成 24 年 9 月 24 日 講師 中村(東工大)
- 第6回 平成 24 年 11 月 6 日 講師 大塚(理研)
- 第7回 平成 24 年 12 月 11 日 講師 藤堂(東大)
- 第8回 平成 25 年 1 月 28 日 講師 野口(東大)

iv) CMSI 神戸ハンズオン

分野 2 で開発されている分野共通アプリケーション、ツールの普及を図り、多層的なユーザを育てていくことを目指し、平成 24 年度より CMSI 神戸拠点において定期的なアプリケーション講習会「CMSI 神戸ハンズオン」を開始した。平成 24 年度は下記 2 回の講習会を開催した。

- 第1回 FMO 講習会 2 月 7 日 講師 北浦(神戸大)、Fedrov (産総研)
- 第2回 ALPS チュートリアル 3 月 6 日 講師 藤堂(東大)、松尾(RIST)、五十嵐(東大)

講習会は CMSI 神戸拠点内のミーティングスペースを用い、8 名程度の少人数形式で行われ、アプリケーションの概要についての講義の後、データポスト処理システム phi を用い、実際にプログラムを実行しながら、講習を進めた。また、計算結果の可視化の実習も行った。

2.2.1.3. 研究開発課題・計算科学推進体制構築の評価

平成 24 年度に推進した研究課題の見直しを実施し、平成 25 年度に推進する研究課題を決定した。また、HPCI 戦略プログラム分野 2 作業部会よりいただいた、指摘事項を示す。さらに、平成 24 年度の試験利用時に「京」を優先的に利用可能な「優先課題」の選定、平成 25 年度の戦略利用で「京」を重点的に利用可能な「重点課題」の分野推薦課題の選定結果を示す。最後に、検討の結果、決定した平成 25 年度に実施する各課題に対する CMSI 研究員、および、CMSI 教員・拠点研究員の配置機関と採用(継続を含む)予定人数を示す。

(1) CMSI 研究課題の見直し

平成 22、23 年度は、「京」を効率的に利用するアプリケーションの高度化に関する技術的な課題の克服が課題選定における重要なウエイトを占めていた。その後、各アプリケーションとも高度化が進展したため、平成 24 年度からは、より学術的、あるいは社会的にインパクトのある重要な研究成果をあげることが強く求められる。他の戦略分野である、医療・創薬、防災・減災、ものづくり、などと比べ、分野2の研究課題は一般社会に対して、社会的インパクトを理解してもらうことは容易ではない。また、基礎科学という側面から見ると、宇宙や素粒子が計算物質科学に勝り、より強く一般の興味を引いているということが、現実の状況である。それは、分野2の課題が多岐にわたるため、学術的にも社会的にも、焦点を絞って重要性を訴えることが難しいということがある。このことは、計算物質科学に限ることではなく、物質科学全般に言えることである。

H24 年 10 月 8 日に実施した意見交換会では、こうした状況を背景として認識したうえで、分野 2 の戦略課題をより良い方向に導いて成果を創出するため、参加者全員で、課題見直しに向けた活発な議論を行った。各部会での活動が、分野 2 全体としてどのようなストーリーで発展していくのか、更には、部会間の連携を通じてより大きい物質科学研究の絵を作り上げられるか、ということに意を注いでいただき、以下の議論を行った。

- 1) 部会で取り組むテーマ(戦略課題)と達成目標を社会や学術に対するインパクトとして俯瞰的に捉え、専門外の方にもわかりやすく説明する。
- 2) 部会目標実現に向けて推進する重点課題、特別支援課題を5年間かけてどのように推進するかのシナリオを部会全体の活動として示す。
- 3) 上記シナリオに照らし、現在の重点課題の進捗と課題、平成 25 年度、および、平成 26 年度以降に取り組むべき重点課題の内容を示す。
- 4) 今日の社会で特に強い意味を持っている「エネルギー」の課題がより強力に推進され、基礎科学的にも社会的にも意義の大きい成果につながるような活動を検討する。

その結果、平成 25 年度に向けた課題の見直しとして、第1部会の物性および分子の課題は3つの項目を廃止してひとつの課題として発展させ、他部会との連携を明確に打ち出すこと、第4部会の燃料電池とリチウムイオン電池の課題を電池課題として融合させること、第4部会の金属材料課題を中核とした第5部会として材料部会を設立したいとの提案がなされた。また、CMSI 部会横断型のエネルギーWG(リーダー:常行、メンバー:作業部会より寺倉、福山、魚崎、中村、栗野、その他は部会代表者)を立ち上げることの提案がなされた。これらの提案は、平成 24 年 12 月 5 日に実施された、CMSI 企画室会議の「評価会議」にて承認され、平成 25 年 1 月 15 日 運営員会、平成 25 年 2 月 4 日の運営協議会で審議、承認された。新設された第5部会名は「マルチスケール材料科学」となった。また、2つの支援課題候補であった、1)フラストレート磁性体の計算科学的研究(中野(兵庫県立大)、2)剪断流下の脂質膜系の構造形成(芝(物性研))の実施も正式に承認された。表 2.2.1.3-1 に平成 24 年度実施課題と、見直し後に平成 25 年度実施される CMSI 研究課題の推移を表す表を示す。

(2) 分野 2 作業部会からのコメント

HPCI 戦略プログラム分野 2 の活動において、平成 24 年度は、分野マネージャーである寺倉清之先生(産総研)、分野 2 作業部会委員である、福山秀敏先生(東京理科大)、栗野祐二先生(慶応大)、魚崎浩平先生

(NIMS)、中村信一郎先生(理研)、高梨弘毅先生(東北大)、加藤雅治先生(東工大)、幾原雄一先生(東大)の7名の先生方よりコメントをいただく機会を複数回設け、課題の見直しを実施した。具体的には、平成24年10月8日の「意見交換会」、および、平成25年1月15日の運営委員会に、作業部会委員へ出席を依頼し、作業部会からの意見を反映した計画を検討した。最終的に、平成25年2月12日に実施された平成25年度研究計画を定める作業部会で、平成25年2月4日にCMSI運営協議会で承認された案件は承認された。ただし、以下の点の指摘(要約)を受けたので、平成25年度の活動に反映させる。尚、下記のコメントの詳細と、それに対する対応は、2.2.2「本格実施における実施計画」の各部会の活動の中で回答する。

<第1部会>

物性物理学の課題については、「他の部会に広げて、源流から奔流へを実現する道筋を立てることが望まれる」という指摘があった。また、「強相関を構造の問題と繋げて考えると、実験の問題とつなげて考えることができる。鉄系超電導等はスピンや格子の核心の問題であるが、フォノンの役割の検討も加えて理解して欲しい。」との指摘があった。

分子科学の研究課題については、「他の部会で利用されるような状況を作り出せることが望ましい」とのコメントがあった。

<第2部会>

第2部会の課題全体に対し、「光誘起電子ダイナミクス関連の活動が、進展してきている。一般的に云って、実験との連携をより密にする必要がある。界面については、具体的な問題設定が必要」、さらに、「例えば、SiC/SiO₂界面の研究がどの程度のことをする積りかが気になりました。」、また「パワエレ、メモリに関してはまだ、日本に頑張っているメーカーがある。量子効果まで考慮したデバイス設計ツールを一番早く、一番良いところに適用したい。」との指摘があった。

<第3部会>

「ウイルス課題は実験家との連携が重要なので強化して欲しい。第3部会内の各課題の部会内外の関連性を明確にすること。」というコメントがあった。

<第4部会>

部会構成に関し、「独立した課題の寄せ集め」に見え、研究の内容に関しては、「達成目標と社会へのインパクトとして示されていることが一般的すぎる。このプロジェクトで実施する課題が解決されたら、電池の高効率化に対する指針を示し、その指針に実験研究者が実際にとびつく達成目標をしめさなければならない」という指摘があった。また、電池関連の研究課題に対しては、「燃料電池、リチウム電池の活動で、物質開発的な取り組みが手薄」であり、さらに「いつの時点でどこまで何がわかれば、何が得られるか」、あるいは、「現実のNEDOのプロジェクトとの関連はなにか」、との指摘があった。

<第5部会>

第5部会に共通なこと

- ① 実験研究者・技術者からもコメント等を求め、実社会と密接に関係する成果を期待。関連する国のプロジェクトも視野に入れ、共同して「マルチスケール材料科学」の発展を担うべき。
- ② 材料インフォマティクス手法などによる新規材料探索などの戦略も検討すべき。
- ③ 各課題間で分野の相違、ばらつきが大。共通の側面を整理し、統一的な解明を目指すべき。

重点課題

- ④ 重点課題(金属系構造材料)について、具体的内容を明確化するべき。粒界や界面には、Phase Field法のような取り扱いが必要。

特別支援課題

- ⑤ 誘電体の課題についての過剰なモデル化への懸念。

<推進体制の構築>

セミナーや研究会を実施するだけでなく、それが研究や産学連携等に実際に役に立っているのかを検証しなければならない。

(3) 優先課題・重点配分課題の選定

平成 23 年 4 月～平成 24 年 3 月までに「京」試験利用を行った研究課題の中より、早期に社会的インパクトのある成果が期待される課題を抽出し、「京」計算資源を優先的に割り当てる「優先課題」を選定することが文科省よりアナウンスされた。CMSI では、重点課題 7 課題全てを選定対象とし、優先課題の申請書を記載し、拠点代表者会議、および、企画室会議で検討した。その結果、第 1 部会の「関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明」、第 2 部会の「密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究」、第 3 部会の「全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開」の 3 課題を分野 2 として HPCI 戦略プログラム評価委員会に優先課題として推薦することになった。評価委員会は申請のあった全課題のヒアリング後、審査を行った。その結果、「密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究」と「全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開」の 2 課題が優先課題として選定された。

また、平成 25 年度に、1) 優先的な Job 実行、2) 「京」計算資源の追加配分、の 2 つが可能な優先課題 (CMSI では「京」利用課題を「重点課題」と呼んでおり、文科省が設定した「重点課題」との混同をさけるため、平成 25 年度も「優先課題」と記載する) の選定依頼があった。分野 2 からは、3 課題が選定可能となった。そこで、CMSI 内の企画室会議メンバーにて評価会議を実施し検討した結果、第 1 部会の「関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明」、第 3 部会の「全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開」、第 4 部会の「エネルギー変換の界面科学」の 3 課題が選定された。この 3 課題は、優先的な Job 実行が可能となる。次に、3 課題とも「京」計算資源の追加配分に関する HPCI 評価委員会のヒアリングを実施し、評価を受けた結果、第 3 部会の「全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開」、第 4 部会の「エネルギー変換の界面科学」の 2 課題が、「京」の追加配分枠を受ける課題として選定された。

(4) 平成 25 年度 CMSI 研究員・教員の配置

平成 25 年 1 月 15 日の運営委員会にて、研究課題の検討と同時に、平成 25 年度の CMSI 重点研究員、および、CMSI 拠点研究員の配置が検討された。平成 25 年度は研究課題に変更があるため、一部研究員の配置に変更がある。表 2.2.1.3-2 と表 2.2.1.3-3 に雇用する予定の人数を示す。重点研究員は 17 名、拠点研究員は 18.5 名、CMSI 教員は 6.5 名 (1 名が拠点研究員工数 0.5、教員工数 0.5 のため)、総勢 42 名の CMSI 教員、および、研究員を雇用する計画である。

表 2.2.1.3-1 平成 24 年度から平成 25 年度への研究課題の推移

平成25年度 GMSI研究課題の見直し								
部会	部会名	平成24年度研究課題			平成25年度研究課題			
		課題種別	課題(項目)代表者	タイトル	課題種別	新課題代表者	タイトル	
第1部会	新量子相・新物質の基礎科学	重点	今田正俊(東大)	相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明	項目を廃止し1課題に集約		相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明	
		項目	今田正俊(東大)	電子相関の強い実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究				
		項目	遠山貴巳(京大)	動的密度行列繰り込み群法による反転対称性の破れた1次元拡張ハバード模型の非線形光学応答の研究				
		項目	川島直輝(ISSP)	2次元量子系の新しい臨界現象・量子相				
		重点	天能精一郎(神戸大)	電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開	項目を廃止し1課題に集約		電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開	
		項目	天能精一郎(神戸大)	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測				
		項目	高塚和夫(東大)	分子における電子の動的過程と多体量子動力学				
項目	斉藤真司(分子研)	凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス						
第2部会	次世代先端デバイス科学	重点	押山淳(東大)	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究			密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	
		特別支援	尾形修司(名工大)	ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション			ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	
		特別支援	信定克幸(分子研)	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発			ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発	
		特別支援	斎藤峯雄(金沢大)	スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索			スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索	
		特別支援	常行真司(東大)	新材料探索			新材料探索	
第3部会	分子機能と物質変換	重点	岡崎 進(名大)	全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開			全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開	
		特別支援	岡本祐幸(名大)	拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明			拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明	
		特別支援	松林伸幸(京大)	ポリモルフから生起する分子集団機能			ポリモルフから生起する分子集団機能	
		特別支援	中井浩巳(早大)	ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス			ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス	
		特別支援	江原正博(分子研)	機能性分子設計—光機能分子と非線形外場応答分子の光物性			機能性分子設計—光機能分子と非線形外場応答分子の光物性	
第4部会	エネルギー変換	重点	杉野修(ISSP)	燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究	1課題に集約		エネルギー変換の界面科学	
		特別支援	大谷実(産総研)	高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究				
		重点	田中秀樹(岡山大)	水素・メタンハイドレート生成・融解機構と熱力学的安定性			水素・メタンハイドレート生成・融解機構と熱力学的安定性	
		特別支援	山下晃一(東大)	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化に向けた大規模数値計算			太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化に向けた大規模数値計算	
		特別支援	吉田紀生(分子研)	3D-RISM理論に基づく大きなリガンド分子の分子認識解析手法の開発と応用			3D-RISM理論に基づく大きなリガンド分子の分子認識解析手法の開発と応用	
		特別支援	浅井美博(産総研)	ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション			ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション	
		重点	香山正憲(産総研)	金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	第5部会にシフト			金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発
特別支援			大野宗一(北大)	合金系組織の高精度制御を目指した dendrite 組織の大規模数値計算				
特別支援			西松毅(東北大)	超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化				
第5部会	マルチスケール材料科学	特別支援				大野かおる(横国大)	ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス	
		支援課題	中野博生(兵庫県立大)	フラストレート磁性体の計算科学的研究				フラストレート磁性体の計算科学的研究
		支援				芝集人(ISSP)	せん断流化の脂質膜系の構造形成	
課題数		重点課題:7 特別支援課題:12 支援課題:1				重点課題:7 特別支援課題:14 支援課題:2		

表 2.2.1.3-2 CMSI 重点研究員の配置予定(平成 25 年度)

所属機関	第1部会		第2部会	第3部会	第4部会			合計
	重点1	重点2	重点3	重点4	重点5	重点6	重点7	
神戸大		2		1				3
分子研		1						1
東大院・工	2		2					4
京大基研								0
物性研	1				1			2
阪大院・工			1		1			2
名大院・工				2				2
岡山大院・自然						1		1
東北大・AIMR					1			1
産総研							1	1
合計	3	3	3	3	3	1	1	17

表 2.2.1.3-3 CMSI 教員、CMSI 拠点研究員雇用計画(平成 25 年度)

雇用機関	CMSI 特 任教員	CMSI 拠点研究員*				合計
		A	B	C	D	
物性研(神戸拠点)	1	1				2
神戸大(神戸拠点)	1					1
物性研		1	3	1	1	6
分子研		5				7
				2		
東大・総合文化 (分子地域拠点)			2			2
金研	1		1			2
関西産総研 (材料地域拠点)						0
産総研 (産官学連携拠点)				1		1
東大院・工(教育拠点)	2	/				2
名大院・工(教育拠点)	1					1
阪大院・工(教育拠点)	1					1
合計	7	2	7	7.5	1.5	25

- *カテゴリ
- (A) 分野共通に利用できる先端的な要素技術の開発
 - (B) 分野共通に利用できるアプリケーションの公開
 - (C) 複数の重点課題・支援課題におけるアプリケーション開発・実行支援
 - (D) アプリケーション公開・普及支援

2.2.2 本格実施(平成25年度～27年度)における実施計画

2.2.2.1 研究開発課題(計画)

2.2.2.1(1) 新量子相・新物質の基礎科学

第1部会 代表者: 天能精一郎(神戸大)、今田正俊(東京大)

1) 研究開発課題概要

[研究課題概要]

原子核や電子などの構成粒子の属性と量子力学や統計力学を通じた基本法則を出発点として、原子、分子の集合体、ナノ構造から、さらにはマクロな凝縮物質に至るまでの、現実物質の性質を理解し予測する学問として分子科学および物性物理学は発展してきた。計算機の飛躍的な発展はこの学問領域を革新し、両分野を統合する物質科学に強力な解析能力と予測可能性を付与しつつある。ニュートンやフーリエ以来、数学を基本的な道具とし、数学の構造と一体となって影響を与え合い発展してきた従来の基礎物理学と基礎化学は、前世紀末からのスーパーコンピュータの発展を契機として、スーパーコンピュータの大規模計算アルゴリズムと適合しあい、影響しあう学問体系へと発展し始めた。次世代スーパーコンピュータを含む超並列コンピュータとこれに適合する数値手法はこの流れを一気に加速する可能性を持つ。特に第一原理的な計算手法の発展は高精度の実験検証や設計に耐える予測と、実験に先立つ未知の物質相や概念の発見を可能にしつつある。

量子化学の分野ではここ半世紀の間に電子状態計算の精度が飛躍的に高まり、物質設計や反応機構の理解、創薬といった様々な分野で活発な応用が行われてきた。特に、高速計算機と多電子理論・基底関数の発展により、理論計算は実験研究に先駆けて化学反応や機能発現、エネルギー変換、生体内での酵素反応に踏み込む威力を示している。更に、相対論的電子状態理論は重元素を含む材料設計や物性の定量的予測を可能とし、分子シミュレーションの分野でも、溶液や蛋白質の自由エネルギー計算が行われ、多くの生命現象が計算機の上で解かれようとしている。

一方、多体量子系の示す多様性や階層性の理解は今世紀凝縮系物理学の中心課題であり、人類の自然探索と理解の最前線でもある。とりわけ強相関多体量子系は新しい現象と概念の宝庫であり、高温超伝導、巨大応答、トポロジーで分類される量子ホール相やトポロジカル絶縁体などの物理を生み出し、遷移金属酸化物、希土類化合物、有機導体などの強相関電子物質群やナノチューブなどのクラスター化合物、量子ドットなどの微細加工構造、冷却中性原子などの新しい系の探索と理解へと導いた。この流れは基礎科学の革新を生み出すだけでなく、将来の新しい応用や技術革新の芽にもつながり得る。摂動論や平均場近似の手の届かない強相関系でスーパーコンピュータを駆使した新しいアルゴリズムが新しい物質相を予言・実証するなど高速計算機は大きな威力を発揮し始めている。

以上の背景のもと、第1部会は物質科学の中核と基礎科学を担い、物理と化学の枠を超えて、粒子間の相互作用効果の強い分子系や凝縮物質(強相関量子多体系)を取り扱う強相関多体量子科学、計算科学の汎用手法を確立発展させるとともに、多体集団の励起状態や非平衡ダイナミクスの理解を飛躍させることが主要なミッションである。

まず分子軌道法や種々の量子モンテカルロ法、数値繰り込み群法などを出発点とする強相関量子多体系の汎用的大規模計算の基盤技術を超並列環境に適合するように発展させ、次世代スーパーコンピュータへ開発応用する。この応用によって、新奇な量子多体现象の発見、革新的な量子機能をもつ新物質の機構解明や新物質探索と、化学反応や分子集団ダイナミクス制御、エネルギー変換や発光制御などの制御法の基礎の解明をめざす。次世代スーパーコンピュータによって初めて明らかにできる、未踏の強相関効果、階層性と量子性

が生む新量子相・励起現象の理解・発見と、基礎物質科学の解明が目標である。さらに計算物性物理学と量子化学の分野を橋渡しし、第一原理計算とその応用に関して共通する課題を明らかにして、ふたつのコミュニティの間の相互交流の中から新たな計算基礎物質科学の進む道を探る。このためには物性物理学と量子化学の最先端基礎課題を推進するとともに、両者のバランスのとれた発展を図って、次世代スーパーコンピュータによる新たな地平を切り開く。

[社会的意義]

電子相関の強い系の第一原理電子状態解明の汎用手法の確立には次のような社会的なインパクトがある。

1. 長年の懸案である強相関量子系の一貫手法として広範な応用

現実物質の新量子相解明・検証の武器により新しい量子相(新超伝導、新絶縁体、新量子液体)＝未だ人類の知らない物質の新たな存在形態の発見を可能にする。

超並列化によりパラメタサーチによる物質探索などが可能になり、基礎物理学の革新につながる。

2. 新物質群の多くが、電子相関の大きな系に属し、次世代の応用や産業基盤開拓の基礎として期待される。

期待される現象、機能には高温超伝導、高効率熱電素子、マルチフェロイクスなどがあり、全く新しい原理による新機能応用の研究提案へと橋渡しし、基礎物理学の源流を応用に展開するための手法を提供する。高度な波及性・有用性は、如何にして、より基本的・普遍的な物理を解明するかにかかっており、意義は高い。

電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開の社会的意義は以下である。

電子状態理論は物質科学の基礎であり、エネルギー問題や希少金属の代替物探索等、我が国が直面している問題の解決の糸口を計算科学の分野から探索するのに不可欠な研究手段である。ポストハートリー・フォックの高精度理論を「京」コンピュータで実行する事により、シリアルで半世紀かかる計算が数時間で実現可能となり、実在系に近い材料設計がナノスケールの分子で実用化が可能となる。又、希少金属元素に対する代替合金の広範な予測が可能となり、社会的に意義の大きい成果につながると期待される。更に、溶媒やタンパク質環境からの熱揺らぎとダイナミクスを考慮する事により、生命現象の解明や人工光合成系の開発のボトムアップな発展が可能となる。

2) 研究開発課題内容

[平成 24 年度の評価による指摘事項]

物性物理学の課題については、作業部会からの指摘事項として「他の部会に広げて、源流から奔流へを実現する道筋を立てることが望まれる」という指摘があった。平成 25 年度は超伝導、非平衡電荷分離現象などで、太陽電池などエネルギー変換の他部会の課題の基礎付けを行なうとともに、スピン軌道相互作用の大きな系の現象について、新量子相を見出すなど、他部会および実験研究に刺激を与える。また、「強相関を結晶構造の問題やフォノン励起と繋げて考える必要がある場合がある。鉄系超伝導等は電子相関が重要であるが、結晶対称性の変化や格子ゆらぎの役割を指摘する考え方もある。格子ダイナミクスやフォノンの役割の検討も加えて理解して欲しい。」との指摘があったので、平成 25 年度は、その検討を継続する。

分子科学の研究課題については、作業部会からの指摘事項として「他の部会で利用されるような状況を作り出せることが望ましい」とのコメントがあった。平成 25 年度以降、発光性材料や有機太陽電池の課題に焦点をあてた研究会を組織すると共に部会間の共同研究を開始し、部会で発展させられた分子理論と他の課題との協働に配慮する。

他部会と連携して、エネルギー変換に関する夏の学校を開催し、協同して解決しうる課題を明らかにし、共同研究も進める。

[平成 25～27 年度の実施計画と成果目標]

「京」を用いた強相関第一原理シミュレーション法(MACE)の確立により、従来の数十年の CPU 時間を要していた計算が数十時間で行なえるなどの革新が可能になる。この手法を用いて新しい量子状態や量子相転移を 1 つ以上解明する。

(候補)

- ・量子スピン液体、非フェルミ金属、強相関トポロジカル絶縁体、トポロジカル転移
- ・いくつかの強相関超伝導体の物性解明
- ・非平衡・励起ダイナミクス手法と高励起実験解析手法の確立
- ・最先端の実験と歩調を合わせながら、強相関電子系特有の励起ダイナミクスの探索と理解をすすめる、強相関基礎科学および非平衡科学の深化に貢献する。
- ・強相関電子系特有の電子内部自由度による量子効果を最大限活用した次世代光学素子の設計指針を構築する。
- ・脱閉じ込め臨界現象、長距離相互作用系における超流動固体、ランダムネスによる新奇な臨界特性など物性物理と統計力学の教科書を書き換えるような新概念の数値検証、提案をめざす。
- ・光格子中の冷却原子系のような新奇構造などを用いて、新概念を実験検証する実験を提案し、高精度の予言を行うとともに、新概念を具現化する新機能系の設計指針を明らかにする。

以上の解明は以下の点で基礎科学の発展に貢献する。

1. 長年の懸案である強相関量子系の一貫手法として広範な応用

現実物質の新量子相解明・検証の武器により新しい量子相(新超伝導、新絶縁体、新量子液体)＝未だ人類の知らない物質の新たな存在形態の発見を可能にする。

超並列化によりパラメタサーチによる物質探索などが可能になり、基礎物理学そのものの革新につながる。

2. 新物質群の多くが、電子相関の大きな系に属し、次世代の応用や産業基盤開拓の基礎として期待される。

高温超伝導、高効率熱電素子、マルチフェロイクスなどがあり、全く新しい原理による新機能応用の研究提案へと橋渡しし、基礎物理学の源流を応用に展開するための手法を提供する。高度な波及性・有用性は、如何にして、より基本的・普遍的な物理を解明するかにかかっており、このための基盤的な手法が準備される。

分子理論では、GELLAN を用いた電子状態理論が「京」コンピュータ利用の中核として高精度ポストハートリー・フォック計算で2万ノード(16万 CPU)コア以上のノード拡大が進んでおり、ナノスケールの分子に対して実質的にペタスケールの計算が可能になっている。更に、動力学、熱揺らぎの研究項目との練成を図る。動力学の軸では、ナフタレン程度の大きさの分子の強電磁場中の非断熱電子動力学の計算の実行にとりかかる。分子の多体量子論は特に並列化しやすい理論構成になっており、タンパクのレベルの多体量子動力学の早期の開始を目標とする。熱揺らぎを中心とした研究項目では、これまでに開発してきた MC-MOZ 法により、生体分子など大型分子の溶媒と構造を高効率に求めることに成功したが、分子構造の揺らぎ、柔軟性も重要な役割を果たすことから、揺らぎを扱う理論手法の構築を推進する。分子そのものの揺らぎとともに分子の周囲の環境による揺らぎが、分子のダイナミクス、緩和を決定しており、実験的には高次非線形分光法で測定されるので、その理論解析も進める。研究概要は以下である。

1. ナノスケールでの完全基底関数極限でのポストハートリー・フォック計算。金属内包フラレン、フラレン多量体の構造と物性計算。
2. 相対論的電子状態理論のソフトウェア高度化と応用。四成分相対論 MP2-F12 法による金化合物の計算。
3. プロジェクタモンテカルロ F12 法やテンソルネットワーク型の手法の開拓。それに伴う二成分或いは四成分相対論を用いた希土類の計算。
4. ナフタレン程度の大きさの分子の強電磁場中の非断熱電子動力学の計算の実行とタンパクのレベルの多体量子動力学の開始。
5. 分子動力学法と MC-MOZ 法の組み合わせを検討するとともに、揺らぎを扱う理論手法の構築。
6. 非平衡分子シミュレーションを利用した高次非線形分光の解析を進め、分子内運動分子間運動がどのように揺らぎ、緩和しているかを解明する計算手法を開発する。
7. さらに、ミオシン分子モーターの運動を例に、タンパク質構造変化と複合体におけるタンパク質間相互作用変化の分子モーター動作における相関と協調を分析可能とする計算を行い、タンパク質大規模運動の新規計算法を開発する。

3)平成 25 年度の具体的な実施計画

[部会活動]

8 月末に滞在型研究会(サマースクール)を若手中心で他部会と連携しながら開催し、第一部会に共通する方法論的な課題を広く深く議論する場と、エネルギー変換に関する CMSI 共通の課題を抽出する。

[連携活動]

(部会連携)

第一部会の重点課題「相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明」の追究する研究課題は、

1. 新しい強相関量子相の発見・同定・解明・提案
量子液体(有機導体の量子スピン液体、遷移金属酸化物の非フェルミ液体など)
絶縁体(トポロジカル絶縁体の強相関効果)
電子相関が引き起こす超伝導
2. 新しい相転移機構
ランダウの自発的対称性の破れの枠を超えた転移
脱閉じ込め転移の解明やトポロジカル転移の解明
3. ダイナミクス・非平衡
非平衡量子現象、高励起実験手段の理論解析法の展開
JPARC での中性子非弾性散乱、SPring-8 での共鳴非弾性 X 線散乱、時間分解光電子分光
4. 第一原理による強相関現実物質解明法(MACE)の確立と展開

という 4 つの主要なテーマからなるが、これらは、複雑系汎用手法である多変数変分モンテカルロ、経路積分繰り込み群、クラスター拡張・動的平均場法を用いた任意構造のフェルミ多体問題、競合する秩序とゆらぎの解明、大規模系・高精度・高効率解法である量子モンテカルロ法を用いた統計力学(量子スピン問題)の基礎課題の解明、非平衡系・励起ダイナミクス手法である動的密度行列繰り込み群法を用いた高励起実験手法の理論的基礎の解明という異なる計算手法と研究対象を有機的に関連付けている。特にイリジウム酸化物のようなスピン軌道相互作用の大きな系での新量子相の探究において、異なる計算手法を用いて、総合的な観点から共同研究に取り組む。

一方、重点課題「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」では、電子状態理論、動力学、統計力学的な見地から、これらが錬成・融合された新しい分子理論の展開を行い、超並列計算環境を高度に活用した分子論の新機軸を展開している。

今後も継続して部会内(新量子相・新物質の基礎科学)の重点課題間での緊密な連絡を図る。

(CMSI 連携)

第 2 部会へ電子状態計算法、物質パラメタの提供は大きなテーマであり、

サブ課題 2:「ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発」(信定)

サブ課題 3:「スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ志向した材料探索」(齋藤)

サブ課題 4:「新材料探索」 xTAPP、QMC (常行)

は特に強く関連する。また

第 3 部会:

サブ課題 4:「機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性」(江原)

とも励起状態の計算手法の提供を通じて貢献できる。

その他の課題/部会に対しても成果を提供していくとともに、第3部会で開発していく MD 計算や量子化学計算のプログラムを第 1 部会でも活用する。

第 4 部会

サブ課題1:「太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算」(山下)では、ヘテロジャンクションにおける励起状態の構造緩和やエキシトンダイナミクス、チャージキャリアモビリティの見積もりが必要であり、基礎理論では第一部会の重点課題1および2と強く関係している。

サブ課題4: ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション(浅井)と量子輸送現象、非平衡ダイナミクスの課題について基礎理論から応用をつなぐ連携を図る。

(外部連携)

強相関電子系実験研究者との連携で研究を推進する。特に新物質探索、中性子、X 線散乱、光電子分光、透過型トンネル顕微鏡などの手段を用いる実験研究者と物性解明を進める。有機伝導体、遷移金属化合物、鉄系超伝導体、スピン軌道相互作用の大きな物質などが対象である。更に、戦略分野1とは従来から GELLAN を用いた QM/MM 計算に基づく反応経路最適化法の開発を進めており、電子状態と動力学が協働する生命現象の解明を目的に、連携を深める。また戦略分野 5 の原子核理論研究者とは方法論的に共通の課題を抱えており、平成 24 年度にも国際ワークショップを共催した。引き続き平成 25 年度も研究討論を続ける。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題1: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明

[代表者] 今田正俊(東京大)

第一原理に立脚する強相関量子多体系の高精度な予測・解明と、本質と原理を抽出するための理論模型による大規模計算に基づき、電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究、強相関電子系の励起ダイナミックスの研究、新しい量子相・量子臨界現象に関する研究を推進する。

[研究開発体制]

[担当者] ①今田正俊(東京大)、求幸年(東京大)、有田亮太郎(東京大)、中村和磨(東京大)、三宅隆(産総研)、青木秀夫(東京大)、高田康民(東京大)、黒木和彦(電通大)

②遠山貴巳(京都大)、町田昌彦(原子力機構)、前川禎通(原子力機構)、米満賢治(中央大)

③川島直輝(東京大)、藤堂眞治(東京大)、宮下精二(東京大)、岡部豊(首都大)、鈴木隆史(兵庫県立大)、原田健自(京都大)、渡辺宙志(東京大)

3つのグループが定期的にミーティングを行ないつつ、特にスピン軌道相互作用の大きな系の研究については第一原理模型の導出から解明まで共同して研究を進める。

[研究開発課題概要]

平成 25 年度においては、以下の 3 課題の研究を推進する。

①新しい量子相の解明

1. 今まで知られていない量子液体の一つとして 40 年来の基礎科学の難問となっている「量子スピン液体」の発生メカニズムを、実験的な候補となっている有機導体(dmit 塩)の第一原理模型を多変数変分モンテカルロ法で解くことにより解明する。
2. 従来の相転移の教科書を書き換えることが提唱されている「脱閉じ込め現象」という新概念の妥当性を判断するために、この新量子相転移が生じる候補となる理論模型である、正方格子系、およびハチの巢格子系の量子スピン模型である「SU(N)JQハイゼンベルクモデル」について、大規模計算を実施し、脱閉じ込め概念の有効性を明らかにする。さらに、その発展形として、ランダム系、長距離相互作用系、スピン・フォノン結合系などにおける課題の解決を目指し、特にスピン液体状態の実現の可能性のある実験系に即した計算を方法論の開発とともに行う。
3. 多数の原子をレーザーで閉じ込めた新しい系である「冷却原子系」では新量子相の出現が期待されている。新量子相探索のために、回転する冷却原子系に関するシミュレーションを行い、新量子相候補を抽出する。
4. 量子多体系に対する新しい数値計算法である projected entangled pair states (PEPS) 法と呼ばれる方法が最近提唱され、量子的絡み合いを正確に取り扱う、画期的な統計力学的状態和の計算法になり得ると注目されている。この手法に基づくシリアル版コードをチューンアップし、同時に並列化コードを完成させる。この手法が使えるようになる場合に、従来困難の多かった量子多体系の計算の可能性が大きく広がる。

以上、物性物理の最先端で提唱されている新概念を探索し、複数の系で新量子相候補を抽出する。

②強励起ダイナミックスの解明

光による高励起に伴う非平衡状態を利用した物性解明法(ポンププローブ法と呼ばれる)、光励起による相転移や緩和、励起子励起による電子・ホールの高効率分離輸送によって可能になる高効率太陽電池、温度差による非線形非平衡状態を利用した高効率熱電効果などの追究のために、強相関電子系での強い非平衡状態を利用した新たな物性解析法(時間分解光電子分解などのナノ秒、アト秒超高速現象の実験解析法)を開発する。

③ スピン軌道相互作用とトポジカル現象の物理

スピン軌道相互作用の大きな理論模型について、トポジカル新量子相を含む相図を探索する。まずスピン軌道相互作用系の有効模型として提唱されているキタエフ・ハイゼンベルク模型の相図を比較的小さな系で求める。またテンソルネットワーク法のコードを開発する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

① 新しい量子相の解明

MACE を用いた得た強相関第一原理模型をもとに、京を用いて高精度ソルバーで計算を行ない、新しい量子相の第一原理的な解明を行なう。これにより高温超伝導相やスピン液体相という高度な量子多体状態の再現が可能になる。特に鉄系高温超伝導体と銅酸化物高温超伝導体を中心に高温超伝導体の第一原理模型を用いて、大自由度で初めて得られる、超伝導機構について第一原理的に解明する。同じ手法を有機伝導体の第一原理模型に適用して MACE の低エネルギーソルバーで解き、実験結果と模型による相図を比較検証し、量子スピン液体の発生機構を明らかにする。上記の目標に対して、平成 25 年度には簡単化された理論模型の高精度計算により、超伝導および量子スピン液体の機構を明らかにする。現実物質での機構が実際に解明されることで、新しい物質相の全貌が明らかになり、物理的基礎が解明されるとともに、量子スピン液体相を実現するための指針も得られると期待される。

以上の総合的な展開により、第一原理手法に立脚し、新概念や新原理の提案・検証から応用可能性と機能設計指針までを必要に応じ高精度で取り扱える一貫手法が確立し、現実物質へ応用できる汎用手法の本格応用が始まることを意味する。個々の強相関現象の基礎科学的解明や設計提案はもとより、この一貫スキームの確立によって、強相関電子系計算手法に知られていた困難を克服し、応用研究への汎用的で役に立つ手法を基礎・応用に跨って物性科学研究者に提供し、今世紀の課題である強相関電子系、強相関量子系を「京」を用いて計算科学的に解明することができるようになる。

また、平均場近似など、一体問題に帰着する手法では本質をとらえることができない強相関量子多体系は大規模計算によってのみ、予測や設計が可能である。このような多体問題解決の1つの展望として、近年進展の著しい冷却原子系実験技術によって、「光格子系量子シミュレータによるシミュレーション」も現実味を帯びてきているが、これを実現する上でも、冷却原子系で起こっている現象の定量的な理解を通常型の計算機を利用して実行できる環境が不可欠である。一方、強相関系の未解決問題のなかでも、高性能永久磁石材料、高強度材料、超伝導材料などの設計は社会的な要請も高い重要な課題であるが、そこでは欠陥・界面などトポジカルな性質が物質としての特性に大きく関わっている。本課題項目では、このような背景を念頭におき、多体問題のなかで、自発的に生じる特異点(欠陥)や、更には、トポジカル数によってのみ特徴づけられる新しい量子相に関連する物性の基礎を明らかにする。

② 強励起ダイナミクス解明

動的密度行列繰り込み群法、厳密対角化法などを用いて、フォノンと結合したモット絶縁体の非平衡励起ダイナミクスと非線形光学応答、低次元強相関電子系の外場誘起相変化にともなう過渡ダイナミクス、低次元量子スピン系の不純物誘起スピンドイナミクス、フェルミ原子ガス光学格子系の一粒子励起スペクトルなどの計算を推進し、量子ビームや超高速分光の実験グループとの情報交換を行いながら、低次元強相関電子系の励起ダイナミクスの解明をめざす。その結果得られる、外場への応答理論や量子ビームなどを用いたスペクトロスコピー実験に対する情報は、強相関基礎科学の深化に貢献すると期待される。また、巨大非線形光学応答を得る条件を明らかにすることで、強相関効果を用いた光素子材料の探索に貢献する。

③スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

平均場近似など、一体問題に帰着する手法では本質をとらえることができない強相関量子多体系は大規模計算によってのみ、予測や設計が可能である。このような多体問題解決の1つの展望として、近年進展の著しい冷却原子系実験技術によって、「光格子系量子シミュレータによるシミュレーション」も現実味を帯びてきているが、これを実現する上でも、冷却原子系で起こっている現象の定量的な理解を通常型の計算機を利用して実行できる環境が不可欠である。一方、強相関系の未解決問題のなかでも、高性能永久磁石材料、高強度材料、超伝導材料などの設計は社会的な要請も高い重要な課題であるが、そこでは欠陥・界面の物性や長距離力の影響が実用材料としての成否に大きく関わっている。本課題項目では、このような背景を念頭におき、多体問題のなかで、自発的に生じる特異点(欠陥)や、外部的に付加されるランダムネスに関連する物性の基礎を明らかにすることによって、これら課題の解決に寄与する新しい知見を得る。

【「京」利用状況】

MACE による現実物質の電子状態解明のための制限 RPA 法および多変数変分モンテカルロ(mVMC)法が「京」のアプリケーション課題として活用されており、いずれも 24576 ノードまでの実証試験を行い、並列化高度化が行なわれている。制限 RPA 法で 24300 ノードでの測定値は flops/peak = 19%, mips/peak = 26%である。超伝導、および量子スピン液体の解明のために大規模計算が進行している。

次世代ナノ統合アプリケーションとして高度化を進めた動的密度行列繰り込み群法(開発責任者:遠山)は、「京」12288 ノードでの理論ピーク性能比 52%(FLOPS/PEAK)を記録している。ストロングスケーリングによる並列化効率化は 6144 ノードを基準として 12288 ノードで 90%である。一方、準 2 次元ハバードモデルに対する密度行列繰り込み群法(開発責任者:町田)は、原子力機構の BX900、東京大学の T2K、および名古屋大学の FX1 上で 1,000 を超えるコアを用いた並列計算でも並列化の効果が得られることを確認している。

本課題で利用するコードはグランドチャレンジ(ナノ統合)プロジェクトで開発を続けてきた ALPS に本課題に必要な改変を加えたものである。ALPS については、すでにKコンピュータ上で十分な性能試験を実施し、H24 年度の本格的利用においても、高い性能を発揮している。H25 年度以降も H24 年度に明らかになったいくつかの課題を解決するため ALPS コードの高度化を行う予定である。科学的側面も含めた準備活動としては、物理的な関心の焦点を整理し、その解明に必要な京利用上の技術的な問題点を明確にするため、月に1度メンバが集まり集中的に討議する会合を開催してきたが、これについては今後も継続する。

【研究実施内容】

① 新しい量子相の解明

並列化高度化を進めつつ、理論模型であるハバード模型及び拡張された模型で高温超伝導の生じるメカニズムを明らかにする。続いて銅酸化物、鉄系超伝導体の第一原理模型での超伝導機構を明らかにし、臨界温度を上昇させる方策を追究する。またフラストレーションのあるハバード模型および量子スピン模型で量子スピン液体相を実現し、スピン液体が生じる機構を解明する。3 バンドおよび1バンドの dmit 塩の第一原理有効模型の多変数変分モンテカルロ計算を実行し、この物質のスピン液体発生機構を明らかにする。

量子モンテカルロ法コードを利用して行ってきた脱閉じ込め転移の解明を更に継続し、最終段階に入る予定である。脱閉じ込め転移に関しては、解析的な近似理論から、スピン自由度をとまなう渦欠陥の乖離であるという描像が立てられており、この描像から通常の自発的対称性の破れとは異なるタイプの臨界現象が予想されている。一方、これを弱い1次相転移であるとする立場もあり、より確度の高い結論を得るには、予想される転移点での相関長よりも大きな系に関する計算を行う必要がある。これまでに一辺の長さが 256 格子間隔までの系の計算に成功しているが、H25 年度は 512 を目標とし、これによってこの問題に対する決定的な結論を得たいと考えている。特に、大きなスケーリング次元を持つ物理量の相関関数計算など、上記脱閉じ込め転移の特性をより明

確にする計算を実施するとともに、スピン液体状態を示すある種のスピン軌道相互作用物質において本質的であると考えられているキタエフ関連モデルの計算のための新しい方法論を開発することを目指す。

② 強励起ダイナミクスの解明

1. ポンププローブ分光でサブマイクロ秒での電子励起の緩和を見ることによって、非占有側の励起スペクトルを解明しようという時間分解光電子分光法の理論を提案することを目標に、強励起した強相関電子系のモデルの時間発展、緩和を計算する。
2. 太陽電池や熱電素子に生じるダイナミクスを解明するために、多励起子の生成緩和過程を明らかにするための計算手法を開発し、基礎的な知見を得る。
3. フォノンと結合したモット絶縁体の非平衡励起ダイナミクスと非線形光学応答
電子相関とともに電子・格子相互作用の効果を取り入れた一次元モット絶縁体のモデルに対して、三次の非線形光学応答スペクトルの計算により、大きな非線形光学応答を得る最適条件を明らかにする。
4. 低次元強相関電子系の外場誘起相変化にともなう過渡ダイナミクス
電場によって非平衡状態に駆動された強相関電子系では、しばしば顕著な状態変化が起きる。そのような状態変化の一般的特徴を解明するため、一次元拡張ハバードモデルのスピン密度波状態と電荷密度波状態の間をレーザー・パルス照射により行き来する条件を解明して、光で誘起された相変化に対する特徴を解明する。
5. フェルミ原子ガス光学格子系の一粒子励起スペクトル
強相関電子系と理論的に等価なフェルミ原子ガス光学格子系では、相互作用を空間的に変調可能とする実験技術が開発されたことで、反発力の空間変調を取り入れた強相関格子系を設定することが可能となってきた。その系を特徴づける電荷秩序に着目し、モット相から金属相までの量子相の変化を系統的に調べるとともに、その変化と一粒子励起スペクトルの関係を明らかにする。さらに、光学格子のフィリングと閉じ込めポテンシャルを調節することで、縮退したp軌道を利用した、多バンド光学格子系の研究にも着手し、その量子相の変化と一粒子励起スペクトルとの関係を明らかにする。

③ スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

スピン軌道相互作用の大きなイリジウム化合物の第一原理有効モデルを導出し、これを多変数変分モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法、テンソルネットワーク法で解き、トポロジカル相の実現される可能性、ディラック電子やワイル電子に伴う特異な表面金属状態とその制御、電子相関により生じるトポロジカル相の実現の可能性や特異な量子相転移の可能性を明らかにする。

ii) 重点課題2: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

[代表者] 天能精一郎(神戸大)

本重点課題の目的は、電子状態・動力学・熱揺らぎの取り扱いをコアエレメントとして革新的な発展を図り、それらの融和的な理解と練成に基づいた新しい分子理論の展開によって、超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測、分子における電子の動的過程と多体量子動力学、凝縮分子科学系における揺らぎと遅いダイナミクスの解明を目指す。

[研究開発体制]

[担当者] 天能精一郎(神戸大)、柳井毅(分子研)、江原正博(分子研)、安田耕二(名古屋大)、波田雅彦(首都大)、大塚勇起(神戸大)、高塚和夫(東大)、河野裕彦(東北大)、斉藤真司(分子研)、佐藤啓文(京都大)、笹井理生(名古屋大)、中野晴之(九大)、永瀬茂(京大福井センター)

[研究開発課題概要]

溶液やタンパク質環境の中で生じる化学反応や励起状態の失活過程を説明する分子科学では、様々な力学が絡み合う現象を取り扱う必要がある。しかしながら、広範な化学現象の源となる基礎原理を、エネルギーやレアアースといった問題に役立てるには幾つかのブレークスルーが必要である。本研究課題では、斬新な計算手法の発展と超並列計算環境の援用により、ポストハートリー・フォック計算によるナノスケールの材料設計やメタルクラスターによる代替物探索を高信頼度で行う。更に、電子状態・動力学・熱揺らぎが協働する、多体量子動力学や凝縮分子科学系における揺らぎ・ダイナミクスの計算を行い、有機太陽電池でのエキシトン移動やタンパク質の構造相転移の解明へと発展させる。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

タンパク質などを対象にする局所電子相関法の発達により大規模計算が可能になっている一方で、炭素材料分子を含む共役系分子系では、相関を取り扱いたい占有軌道が局所的でなく、ナノスケールの分子設計や相互作用の計算をポストハートリー・フォック法によって実行する事が困難である。超並列計算環境に特化した電子状態理論を発展させることにより、この問題を克服し、局所電子相関法やフラグメントによる多体展開が使えない多くの物質の理論研究を可能とする意義がある。モデル空間量子モンテカルロ法では電子相関の強い物質の凝縮重電子状態や多電子励起状態の計算が可能であり、京速計算機を効果的に用いる事により、多核金属錯体等で従来予測が困難であった分子理論が大幅に進歩すると考えられる。

更に、電子動力学、非断熱化学動力学、超多体量子動力学を発展させた独創的な分子理論に基づく、新しい化学反応理論で分子の未開拓の性質を明らかにし、「京」コンピュータの援用で、電子状態制御を通じた化学反応制御や、新物質の創成を行うための原理と実験指針を提供する。これによって、新しい化学の基礎分野を創出し、それは物質設計や新しい物質創成を通じて一般社会の福利に寄与する。

又、多くの分子系・化学系を特徴づける上で分子の内部自由度の柔軟性は重要な役割を果たしているが、その理解は殆ど進んでいないと言っても過言ではない。本課題では、分子内自由度を効率的に取り扱う手法を開発するとともに、内部自由度の揺らぎ・緩和を解析する手法の開発を進める。こうした多自由度系は分子系に普遍的に存在しており、本課題による成果は物質系の幅広い理解に寄与するものである。また、実験データとの比較を行いながら、タンパク質の構造スイッチングダイナミクスの計算法を開発し、並列化による大規模構造変化の追跡を可能にする。これらの解析は凝縮化学系における反応とは何かという学術的な問題の解決、さらに未来の新技术を展望する技術的な問題にも繋がるものである。

【「京」利用状況】

SCF 法、分子求積 MP2 法、MP2-F12 法、SCS-MP2-F12 法では「京」コンピュータでのハイブリッド並列実装が完了しており、24,576 ノード(196,608 コア)の計算では、実効性能は 28.2%、12,288 ノードから 24,576 ノードのストロングスケーリングの並列化効率は 79.6%を示している。モデル空間量子モンテカルロ法についてもハイブリッド並列実装が進行中である。

【研究実施内容】

平成 25 年度は、以下研究を実施する。

1) 炭素材料分子の高精度分子設計

「京」コンピュータで超並列実装が完了している分子求積 MP2 法と MP2-F12 法、SCS-MP2-F12 法を用いて、ナノ炭素材料の大規模なプロダクションランを継続して行う。特に IDipp や ICatcher などのかさ高い炭素性Lewis塩基とフラーレンの相互作用、高効率なチャージキャリアモビリティを実現するための分子設計を行う。高次電子相関と結合クラスター理論の超並列アルゴリズムの開発も継続して行う。

2) 合金クラスターの電子構造研究

レアアースの代替物探索や新しい性質を持つ合金の設計を目指して、擬縮重電子状態を正確に計算可能なモデル空間量子モンテカルロ法のハイブリッド並列化を「京」コンピュータ上で進める。励起状態を含むポテンシャルエネルギー面で試験計算を行い、計算手法の高効率化を図る。最終的には、モデルメタルクラスターの計算による代替合金の探索へと展開する。

3) 電子励起状態に対する材料設計

他部会との連携を活性化を念頭において、発光性材料と有機太陽電池におけるドナー・アクセプター分子によるヘテロジャンクションの研究を行う。多参照摂動理論を用いた励起状態の構造緩和と非断熱結合行列要素の計算手法を可能にする。更に、密度汎関数タイトバインディング法を用いて、バルクに近い物性予測のための大規模な励起状態計算と構造緩和を調べる。

4) 溶液・タンパク質の揺らぎとダイナミクス

分子構造の揺らぎを扱う統計力学理論(flexible RISM)の無限希釈系や三次元空間における相関関数への拡張を通じて、より実際の多原子分子系への展開をはかり、MC-MOZ 法との結合を目指す。また MC-MOZ 法を電極界面などの異方性を有する系へ拡張することを検討する。更に、非平衡分子シミュレーションを利用し分子内・分子間自由度の揺らぎ・緩和ダイナミクスを解明するとともに、凝縮系ダイナミクスのエッセンスが見られる過冷却液体における時間・空間的不均一ダイナミクスの解析を行う。また、ミオシン系のシミュレーションを行い、構造変形とミオシンの滑り運動の相関と協調を明らかにする。タンパク質構造転移の計算法を開発し、動的エネルギーランドスケープ理論の整備を進める。

5) 量子動力学研究

ポテンシャルエネルギー曲面の概念が意味を失うほどの超縮重電子状態を持つ非断熱電子動力学の例として、励起ボロンクラスター内の新しい量子相の同定を行う。次いで、同クラスター内部を反応場とする化学反応の大規模計算を行う。又、第一部会と遠山グループにおける強相関電子系の励起ダイナミクスにおける電子・フォノン結合の動力学、第二部会における光誘起電子動力学と近接場光による固体物性の研究、および第四部会における光励起電荷分離状態の再結合過程の研究と協力して、励起状態非断熱電子動力学の応用研究に参画する。更に、レーザーによる電子状態制御の制御原理の深化と、それに基づくアルゴリズムの開発を行うと共に、超多体量子動力学の応用を、クラスターの構造転移の動力学、タンパクの動力学、多原子分子内エネルギー移動の量子効果とカオスの相克、などに対して行う。

2.2.2.1(2) 次世代先端デバイス科学

第2部会 代表者：押山淳(東京大)

1) 部会全体の取り組み

[研究課題概要]

第2部会においては、「基礎科学の源流から物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ」という戦略目標達成のために、基礎科学の成果を積極的に取り入れた大規模多機能量子シミュレーション手法を確立し、物質機能の予測、新機能を有する新材料、新ナノ構造の探索と提唱を行う、次世代先端デバイス科学研究を推進する。国際半導体技術ロードマップ(ITRS)が指摘するように、線幅 22nm を切る次世代先端デバイス開発では、裏打ちする科学的成果が枯渇し、大きな困難に直面している。また従来からの CMOS テクノロジーを凌駕する新たな技術的展開も期待されている。密度汎関数法に基づく第一原理計算手法を極限まで大規模化、高精度化および高速化すること、および密度汎関数理論を超える電子相関効果の記述のための新手法を開拓すること、また超伝導などの量子相の定量的記述の手法を開拓することにより、次世代先端デバイスの特性を定量的に予測・解明し、その開発に寄与する。これにより、経験と蓄積のテクノロジーを演繹と予測のそれに進化させる。

[社会的意義]

年間30兆円の売上高を生み、人類の生活を支えてきた半導体テクノロジーは、微細化・高集積化を基盤に発展してきたが、それを支えるスケールリング則は破綻し、ポスト・スケールリング時代のテクノロジーに突入している。ここでは量子論に基づく深い科学的知見に基づいた、新たな材料探索、ナノ構造探索、デバイスシミュレーション、材料創成・ナノ加工技術開発が不可欠である。本研究課題においては、量子力学の最新理論手法を駆使し、それを未来のコンピュータ・アーキテクチャ上でのシミュレーションに発展させる高速コンピューティング技法を確立し、科学とテクノロジーの最重要課題にチャレンジするものであり、その社会的意義は大きい。

2) 研究開発課題内容

[平成 24 年度の評価による指摘事項]

平成24年度の第2部会の研究課題については、「光誘起電子ダイナミクス関連の活動が、進展してきている。一般的に云って、実験との連携をより密にする必要がある。界面については、具体的な問題設定が必要」、さらに、「例えば、SiC/SiO₂界面の研究がどの程度のことをする積りが気になりました。」、また「パワーエレ、メモリに関してはまだ、日本に頑張っているメーカーがある。量子効果まで考慮したデバイス設計ツールを一番早く、一番良いところに適用したい。」とのコメントを作業部会からいただいている。以下はこれらのコメントを踏まえた平成25年度以降の研究計画である。

[平成 25～27 年度の実施計画と成果目標]

25～27 年度においては、別添1の年次計画にあるように、参加メンバーによって開発されてきた独自手法を、超並列マルチコアおよび階層的超並列アーキテクチャ上で高度化、高機能化、高速化を行う。さらに、密度汎関数理論における近似の改良、密度汎関数理論を超えるような新手法の開拓も、ターゲット材料・構造の特質に合わせて行う。これにより、量子論の第一原理に立脚した様々な統合手法を整備し、ナノ構造体の電子デバイス機能の探索と予測、新材料の探索、光デバイスの提案を行い、21世紀のテクノロジーの発展に資する。また、それらテクノロジーの基盤を形作るナノ科学の基盤を形作り、さらにはそうした実際的計算により基礎科学の進展を促す。より具体的なテーマとして、「ナノ界面科学の構築とデバイスへの応用」を中心に据える。デバイス機能の発現は界面がその成否を握っている。従ってナノメートルスケールでの界面の構造的同定と電子物性の解明は、次世代先端デバイス科学の要諦である。Si、Ge 系にとどまらず、パワーエレクトロニクスの基幹材料である SiC、GaN、さらには emerging material と目されているグラフェン、ナノチューブなどの軽元素系ナノ構造、マルチフェロイクス・デバイスを担う酸化物等に対して、その界面での原子構造、電子物性、電子および熱の流れを量子論に基づく先端的計算により解明し、デバイス設計の指針を与えることを目指す。「光励起電子ダイナミクス」解明の計算手法が本部会で発展してきていることに鑑み、25年度での進展状況を見極めつつ、重点化の可能

性も含めて検討を継続する。計算手法の開発が順調に進展している状況下で、実験研究との共同の重要性が増している。デバイス設計ツールの基盤構築の為に、また具体的個別の問題における共同研究を促進するために、以下に記述するような CMSI 外部との連携を計画している。

3)平成 25 年度の具体的な実施計画

[部会活動]

平成25年度の研究進捗状況報告、平成26年度以降の研究計画を議論する部会内委員会を随時開催予定である。重点課題、特別支援課題の再構築を含む今年度および次年度以降の研究計画が議論される。

[連携活動]

(部会連携)

第2部会の研究課題はひとつの重点課題と4つの特別支援課題から構成されている。用いるアプリケーションは比較的多岐にわたっており、独自に高度化、高速化が行われている。これらの複数のアプリケーションの機能と特徴を整理し、物質科学計算のターゲットに最適なアプリケーションが選べるような体制を作る。また、電子状態計算、分子動力学法計算、輸送係数計算、キャパシタンス計算などの、異なる機能を有するアプリケーションを統合化し、より高度な物質科学計算に対応したい。具体的には、RSDFT と輸送計算に用いる NEGF (非平衡グリーン関数法)の統合をひとつの重要なプロトタイプとして実行する。HPC 技術開発については、先行する RSDFT のノウハウを他アプリケーションに活用することを考える。「ナノ界面科学の構築とデバイスへの応用」という共通テーマにできるだけ沿った研究テーマを進めるための議論を進める。

(CMSI 連携)

第2部会での主なる理論手法は、多岐にわたる物質群・現象の全てに対して万能ではない。第1部会で得られると期待される革新的理論手法を活用し、それを階層的超並列アーキテクチャ・スーパーコンピュータ上での、高性能コンピューティング技法にマップし、計算物質科学がターゲットとする自然現象の境界を押し広げる。また第3部会、第4部会における物質科学問題への強力な計算ツールを提供する。25年度における連携として、RS-CPMDを二次電池の電極反応のダイナミクスと自由エネルギー障壁解明に適用する検討が進んでいる。

(外部連携)

各々の研究課題では、ターゲットとする実際の物質群に対する、CMSI外の実験研究グループとの連携・共同研究をすでに行っている。またコンピュータ・サイエンス分野との、高速コンピューティング技術に関する連携も進んでいる。これら有機的連携・共同は、文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「コンピューティクスによる物質デザイン:複合相関と非平衡ダイナミクス(領域代表=押山淳)」を通じても行われる。実験的研究との共同も計画されており、Siナノワイヤーデバイスについては、東京工業大学岩井洋研究室、物質材料研究機構深田直樹グループとの共同研究が進行中である。さらにパワーエレクトロニクスを例として、実験研究との組織的な共同を行うために、産総研および企業16社から構成される「つくばパワーエレクトロニクスコンステレーション (Tsukuba Powe Electronics Constellations: TPEC)」に参加することを計画している。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題3：密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究

[研究開発体制]

(担当者) 押山淳、岩田潤一、渡邊聡(以上東京大学)、重田育照、小野倫也(以上大阪大学)、
宮崎剛(物質材料研究機構)、Boero Mauro(ルイパスツール大学)、Bowler David(ロンドン大学)、
赤井久純(大阪大学)

[研究開発課題概要]

ナノメートルスケールの構造体、新物質に対する、密度汎関数理論における標準近似(LDA、GGA)およびそれを越えた近似による大規模高速計算技法を確立し、ナノ構造体の原子構造と電子状態さらにはデバイス特性および構造体生成の機構を解明・予測する。さらに輸送現象、過渡現象を扱うシミュレーション技法を確立し、ナノ接合系での電子、熱、原子の輸送特性を明らかにすることにより、次世代デバイス・プロセス・シミュレーション技術の基盤を構築する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

計算手法の開発・高度化の側面では、実空間差分法に基づくRSDFT、密度行列の最適化に基づくCONQUEST、実空間電子状態・輸送特性計算法RSPACE、実空間Car-Parrinello分子動力学計算法RS-CPMDを主要コードと位置付け、マルチコア・超並列アーキテクチャ・コンピュータ上で、極限までそのパフォーマンスおよび精度を追求する。それに加えて、ハイブリッド汎関数などの高機能化をはかることにより、広範な物質群での高精度計算スキームを確立する。またRSDFTと非平衡グリーン関数法(NEGF)の統合を行い、大規模電子状態・輸送係数計算を可能にする。こうした手法開発の成果を、物質科学の諸問題、とくにデバイス構造の根幹であるナノ界面構造に適用し、物性科学、デバイス科学の進展に資する。これら物質科学の諸問題は、現在の産業を支える電子デバイスの開発における喫緊の課題であり、量子論に基づくその解明が待たれている。一方、高性能コンピュータを用いた量子論に基づく現象解明・予測は、理論物理学とコンピュータ科学の地平を広げることであり、学術的意義は高い。

[「京」利用状況]

RSDFTは「京」における100,000原子Siナノワイヤーの電子状態計算で2011年ゴードンベル賞を獲得したコードであり、その実行性能は世界一といって過言ではない。CONQUEST、RSPACEもハイブリッド並列による高性能化が「京」数万ノードを使用して検証されている。

[研究実施内容]

- RSDFTコードを高機能化する。とくに電場下でのナノ構造の電子状態計算を可能にし、デバイス動作化でのナノ構造の特性解明を目指す。
- 非平衡グリーン関数(NEGF)法とRSDFTを統合し、ソース、ドレイン、ゲート等のナノ界面を直接ターゲットとするデバイス丸ごと輸送シミュレーションの実現を目指す。
- RSPACEおよびRSDFTにより、パワーエレクトロニクス基幹材料であるSiCの基礎物性、とくに固有欠陥、ドーパント原子と固有欠陥の複合欠陥、酸化膜界面での欠陥の物性を明らかにし、デバイス特性向上に欠かせない、ギャップ中深い準位(deep level)のマイクロな同定を目指す。
- CONQUESTおよびRSDFTにより、エピタキシャル成長中に出現するナノ構造の成因を解明し、またその新たな電子機能の解明を目指す。
- RS-CPMDの「京」上での数千原子ダイナミカル計算を可能にする先端的チューニングを行う。それにより、エピタキシャル成長等のダイナミカル現象の反応機構の解明と自由エネルギー面の決定を目指す。
- 全てのコードの適用可能性を吟味しながら、炭素ナノ物質とその界面、半導体系ナノ構造とその界面、酸化物とその界面での物性解明と予測を目指す。また、第2部会内、他の部会さらにはCMSI外との連携により、本研究課題において高度にチューンされたコード群の、より広範な物質群への応用を行う。

ii) 特別支援課題 1: ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション

[研究開発体制]

(担当者) 尾形修司(名古屋工業大学)、大庭伸子(豊田中央研究所)、田中宏一(デンソー)

[研究開発課題概要]

実際のデバイスや材料では、結晶構造に加えて多様な界面・欠陥など、ナノ・メゾスケールの微細構造に応じてユニークに実現される電子状態とダイナミクスが、その機械的性質や機能を大きく支配している。例えば産業界で重要なリチウム二次電池等では、電場印可環境での様々な表面・界面でのナノやメゾスケールの反応や物質移動機構の解明が、性能向上の鍵となっている。このような周期的ではない大規模系を丸ごと扱うコンピュータシミュレーションを、電子に関する物理精度を高く保ちつつ実現することへの期待が、スパコンの発展に伴って近年益々高まっている。本課題は、化学反応が顕著な比較的小さな領域だけに高計算コストの電子状態計算を適用し、その他の領域には経験的な古典的原子間ポテンシャルを適用することでダイナミクスを高速にシミュレートするハイブリッド量子古典コードを、超並列計算環境に合わせて高度化することを目指している。平成25年度は特に、オーダーN化した実空間密度汎関数コード(DC-RGDFT)を量子領域計算に用いたハイブリッド量子古典コードを用いて、Liイオン二次電池の負極近傍の固液界面に適用したシミュレーションと、電子デバイスの放熱に関連したアルミナ結晶と高分子固体との界面を通じた熱伝導に関するシミュレーションを実施する。また、マルチスケールな分子系の取り扱いに関連して、昨年度新たに開発した分子動力学アルゴリズムを用いた大規模なシミュレーションを行う。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

対象系を構成する原子群のダイナミクスをシミュレートするには、全イオンに働く力を **minute**のオーダーで計算できることが必要である。このため、オーダー N^3 型の密度汎関数法を使った過去のハイブリッド量子古典シミュレーションにおいては、1つの量子領域を構成する原子数は百程度に過ぎなかった。このことは、ハイブリッド量子古典法を、産業界で重要な様々な対象に適用する際に、強い制限となっていた。本課題では、メニーコアを特徴とする新しいスパコンに合わせて実空間密度汎関数コードを最適化し、さらに計算手法をオーダーN化することで、ハイブリッド量子古典法において1つの量子領域を構成する原子数を千オーダーへと、桁違いに大きくすることを目標としている。その実現のあかつきには、これまで不可能であった様々な対象系について、その丸ごとシミュレーションが始めて可能となり、我が国の産業界の新しいシミュレーション基盤技術の一つとなると自負している。

[「京」利用状況]

現在、スパコン京に関しては、我々の課題独自のアカウントを保持していない。

[研究実施内容]

平成24年度までに、独自のアイデアで作成したオーダーN型の実空間密度汎関数コード(DC-RGDFT)の並列化作業をほぼ終えた。スパコン京以外のスパコン(Fujitsu FX10等)を利用して、DC-RGDFTを量子領域計算に用いるハイブリッド量子古典コードによる、Liイオン二次電池の負極近傍に関連したシミュレーションや、電子デバイスの冷却に関連した結晶固体と高分子固体との界面を通じた熱伝導シミュレーション等を、複数の企業研究者と共同して行う予定である。また大規模な分子系のマルチスケールな取り扱いに備えて、剛体分子系の大規模なシミュレーションについても実施する予定である。

iii) 特別支援課題 2: ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発

[研究開発体制]

(担当者) 信定克幸(分子研)、矢花一浩(筑波大)、渡辺一之(東京理科大)

(協力者) 安池智一(放送大学)、佐藤駿丞(筑波大 M1)、胡春平(東京理科大)

矢花グループとは光誘起電子ダイナミクスプログラムの開発に関して類似点が多く、密接に情報交換を行いながら効率的にプログラム開発を行う。渡辺グループとは、核波束ダイナミクスに関して情報交換を行い、各々のプログラム開発に活かす。

[研究開発課題概要]

半導体シリコンに代表される電子デバイスではなく、光と電子のダイナミクスに起因する光・電子機能性を持ったデバイスは、次世代量子デバイス候補の一つになると期待できる。我々のグループでは、ナノ分子構造体が持つ合成柔軟性と高機能多様性発現の可能性に注目し、理論的・計算科学的な観点から光・電子機能性量子デバイスの開発を行うことを目標としている。そのためには、双極子近似に基づく従前の光応答理論を超えたナノ光応答理論の構築と、実在系ナノ分子構造体を扱う為の大規模計算プログラムの開発が必須である。これらの理論と計算科学的手法を用いて、ナノ分子構造体機能性発現のメカニズムを根源から理解するとともに、広帯域・高効率太陽光エネルギー変換、光エネルギー伝播、超高速スイッチング、量子データ転送、光触媒作用等の光・電子機能を持つ量子デバイスを計算により提案し設計することを目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

デバイス開発を支援する理論計算の大半は定常状態計算であり、機能性発現の重要な要素である電子的励起状態を含むダイナミクスの理解が欠如している。一方、巨視的マクスウェル方程式を解いて電磁場ダイナミクスをシミュレートする方法もあるが、この方法では物質系の情報は誘電率等の巨視的物質パラメーターでしか取り込めず、機能性に強く関与する量子物性の効果は全く取り込めない。本研究課題で進める電子・電磁場ダイナミクス法はこれらの問題点を解決し得る方法であり、国際的にも殆ど類似例が無い研究であり、その学術的意義は非常に高い。基礎理学的な物質科学の知見を応用科学分野へ展開し、新しいデバイス科学へと昇華させることが本研究課題の根幹に有り、実在系とかけ離れたモデル系における基礎的理解と絨毯爆撃的な意味合いが否定できないデバイス開発路線の溝を埋める新しい研究領域の展開を可能とする。

[「京」利用状況]

9月下旬からの共用開始後の京一般利用枠にも採択され、京を使った超並列化プログラミングとチューニングは着実に進んでいる。3月には京の全資源を使い切る約66万コアの計算にも成功した。1万ノード程度までであれば80%程度以上の速度向上率、一部アルゴリズムに関しては20%程度の実行性能を出すことができた。24,576ノード(196,608コア)では、実行性能は7~8%程度であるが、これはノード数増大に伴う通信量が原因であり、下今後も引き続き通信方法の最適化を行い、改善に努める。

[研究実施内容]

次世代量子デバイスの理論設計を最終的な目標として、孤立系ナノ構造体に対しては主として信定グループが電子・電磁場ダイナミクス法を開発し、バルク系に対しては主として矢花グループがマルチスケール・シミュレーション法を開発を行う。将来的には上記2グループと主として表面ダイナミクスの解明を行う渡辺グループを融合して目標達成に向けて研究を進める。ナノ構造体アレイを使ったエネルギー伝播素子や波長コンバータ、光触媒作用を持つ不均一触媒の開発に資する基礎的知見を獲得する。

iv) 特別支援課題 3: スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索

[研究開発体制]

(担当者) 齋藤峯雄(金沢大)、小田竜樹(金沢大)、小口多美夫(阪大)、尾崎泰助(北陸先端大)

[研究開発課題概要]

シリコン半導体デバイスの微細化が、やがて限界を迎えるであろうと予想され、新しいデバイス動作原理に基づくテクノロジーが期待されている。スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用分野として、不揮発性磁気メモリ、スピンホール効果素子、スピン電界効果トランジスタ、マルチフェロイックセンサーなどが挙げられ、そのようなデバイスに最適な材料の探索が必要である。また、この分野はスピン軌道相互作用(SOI)、対称性の破れ、秩序交差相関、電気磁気効果、トポロジカル絶縁体、スピンホール効果といったキーワードで代表される基礎科学の上に成り立つものであり、基礎と応用を結びつける第1原理シミュレーションが重要であり、本課題でのテーマである。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

OpenMXコード、及びCPVOコードにおいて、「京」向け高度平並列化作業を進め、OpenMXにおいては、5千ノードで50万原子程度の電子状態計算を可能とし、千ノードを使用して1万原子程度の高速分子動力学計算の実現を目指す。開発したコードを用いて、スピン軌道相互作用を考慮した計算を行い、磁気異方性、表面系におけるラッシュバ効果、トポロジカル絶縁体等に関する機構解明を、具体的物質系(Si表面上Bi薄膜、磁気トンネル接合系など)に対して行う。新しい動作原理発見や電界駆動型磁気デバイス設計につながる基礎研究を行う。

[「京」利用状況]

CPVOコードに関しては、磁気トンネル接合系に対する繰り返し計算部分(準備計算とリスタートデータ入出力等を除いた計算部分)において、FLOPS値ピーク性能に照らして十分に高速化できていない部分を発見しさらなる向上を目指すとともに、具体的な系で計算を想定した試験実行を実施する。

OpenMXコードにおいては、数千から数万原子系の第一原理分子動力学計算を行うために、 $O(N)$ クリロフ部分空間法の超並列化に取り組み、修正再帰二分法と慣性モーメントテンソルに基づく新しい超並列化手法の開発を行った。スーパーコンピューター「京」の131,072コアを使用して131,072原子から構成されるダイヤモンド格子に対してベンチマーク計算を実施し、その並列効率は16,384コアを参照として68%であった。

[研究実施内容]

CPVOにおいては、接合薄膜(強磁性金属層/誘電体層)界面における構造緩和効果と磁性電界効果についての研究を行う。OpenMXコードにおいては、クリロフ部分空間法に基づくオーダーN計算手法の超並列計算を目指し、三次元領域分割法に基づき、プログラムの高度並列化を行う。5千ノードを使用して50万原子程度の計算を可能とし、また強スケーリングでは千ノードを使用して1万原子程度の高速分子動力学計算の実現を目指す。さらに、新しい3次元領域分割に基づく通信量の少ない計算・データ分割法を開発する。また新しい2次元領域分割に基づく高速フーリエ変換の超並列化法を開発する。非平衡グリーン関数法に基づく電気伝導計算手法と超並列プログラムコードを開発する。また、解析ツールを整備する。

人工的な超格子構造やナノスケール構造におけるスピン軌道相互作用由来の新奇な物性発見の電子論的機構を調べる。光電子分光実験研究で未解明な問題となっている、Si表面上Bi膜における特異なラッシュバ効果を電子論から調べその機構を明らかにする。

また、酸化物エレクトロニクスとしての応用が期待されている(Zn,Mg)O/ZnOの界面の構造と二次元電子面におけるラッシュバ効果について明らかにする。従来研究されてきたGaAs系やGaN系に比べて安全で安価なSpin-FETやSpin-LEDの実現可能性を明らかにする。

v) 特別支援課題 4: 新材料探索

[研究開発体制]

(担当者) 常行真司(東京大)、吉本芳英(鳥取大)、田中 功(京都大)、石橋章司(産総研)、
土田英二(産総研)、前園 涼(北陸先端大)、三宅隆(産総研)

(協力者) 合田義弘(東京大)、吉澤加奈子(東京大)

[研究開発課題概要]

2020年代前半にシリコンCMOS技術の限界が予測される中、新しい機能や優れた特性を持つポストシリコン材料が求められている。量子現象に関する基礎研究から生まれた数々の知見を生かし、新しい半導体特性、磁気特性、超伝導特性を持つ物質・材料を、計算科学的手法を用いて探索すること、またその方法論の開発は、革新的な次世代先端デバイスにむけた重要課題である。本課題では第1部会の研究グループや元素戦略拠点と連携して、密度汎関数法およびそれを超える高精度物質機能シミュレーション技法を確立し、次世代電子デバイスのブレークスルーを引き起こす新奇物質群を探索する。またデバイスとしての実現可能性を念頭に置き、化合物の自由エネルギー計算を実現することで、ものづくりプロセスにも踏み込んだ研究を目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

短期的には分子性半導体、磁性体・磁石材料の電子物性と構造計算、酸化物系の欠陥制御、化合物の界面構造と電子・格子系の物性計算、典型的な化合物相図の理論決定を目指し、シミュレーション手法開発と応用計算を進める。長期的には電子相関の強い遷移金属酸化物や生体物質由来のデバイス材料など、新しい物理現象、動作原理を生かした材料探索を視野に入れる。

[「京」利用状況]

平面波基底関数を用いた密度汎関数法(DFT)コード QMAS は、一般利用枠でテスト計算を行ない、また、第5部会の重点課題で構造材料の計算に利用されている。第一原理量子モンテカルロ法コード CASINO は、京の一般利用枠を使い、分子性固体の大規模な並列計算を行っている。波動関数理論トランスコリレイティッド(TC)法コード TC++は随時新機能を追加しており、引き続き京でテスト計算を行っている。FEMTECK は京の一般利用枠を使用し、電気化学に関連する液体系の第一原理MDを進めている。

[研究実施内容]

- ・QMAS、xTAPP、CASINO、FEMTECK、TC++の「京」向け最適化を進める。
- ・xTAPPのGUIを整備し、一般公開する。GUIはQMASや外国製コードなど、複数のDFTコードに対応するよう、順次拡張整備する。
- ・TC++の高度化と、「京」での最適化を進める。とくに原子に働く力の計算、CISによる励起状態計算の機能を追加する。
- ・材料の粒界物性解明に向け、電子状態計算と組み合わせた構造探査手法の開発を継続・推進する。
- ・超伝導DFTコードの開発を継続・推進する。
- ・磁性材料粒界の電子状態、誘電体材料の欠陥と不純物効果、特異な物性を示す遷移金属酸化物、有機導体、強誘電体、超イオン伝導体について応用計算を進める。
- ・OpenMPなどを組み合わせたノード内並列性能の向上に向けたCASINOのチューニングを行う。
- ・FEMTECKの「ベリー位相」を用いた分極率やボルン有効電荷の計算機能を活用し、電気化学における第一原理MDの適用範囲を拡張することを目指す。

2.2.2.1(3) 分子機能と物質変換

第3部会 代表者：岡崎進(名古屋大)

1) 部会全体の取り組み

[研究課題概要]

本部会においては、第1部会における電子状態の高精度計算に基づいた分子間相互作用の評価、多体性に起因する動的過程の理解、そして凝縮系におけるゆらぎの理解等を源流とし、これをナノスケール分子や分子集団系における構造形成と機能発現・機能制御の奔流へと展開する。

この流れに沿って、従来の比較的小さな分子単体からナノスケールの分子・分子集団系の機能の理論・計算化学研究への飛躍を最も重要な要素として位置付け、自己組織化により形成されたナノスケールの分子や分子集団の構造に基づいて創生される機能、つまり分子や分子集団による分子認識、物質分離、分子輸送等の分子機能を対象に課題 i)、ii)、iii)を、また環境との変化に富んだ相互作用下での分子の電子状態とそれに基づく機能発現を研究対象として課題 iv)、v)を設定している。そして、これらの中でも特に社会的な要請が高く、問題の解決が強く望まれている計算科学によるウイルスの分子科学の展開を重点課題とした。

- i) 重点課題 1: 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開
- ii) 特別支援課題 1: 拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明
- iii) 特別支援課題 2: ポリモルフから生起する分子集団機能
- iv) 特別支援課題 3: ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス
- v) 特別支援課題 4: 機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性

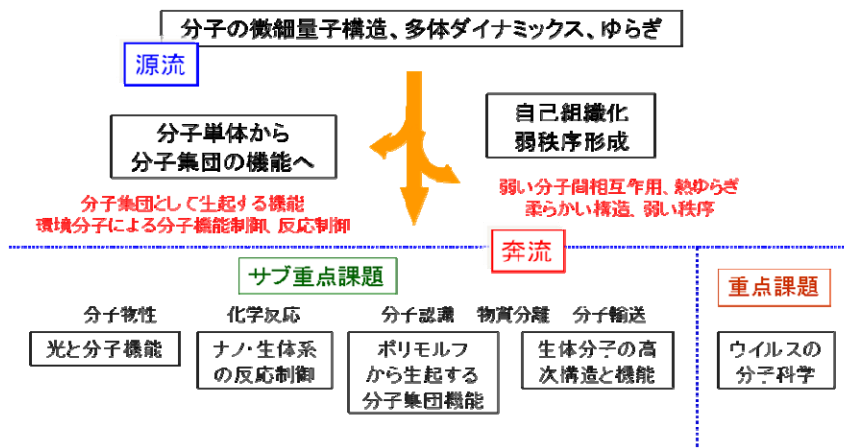


図 2.2.1.1(3)-1 分子および分子集団の創るナノ構造と分子機能・物質変換

[社会的意義]

ウイルスがもたらす感染症は、今や国家の責任で対策を講ずべき重要な課題となっている。感染症の克服において本質的に重要な役割を果たす抗ウイルス剤は、分子を用いてウイルスの営みを阻害することであり、ウイルスの成り立ちとその営みを複雑な分子の動きとして理解しようとする本研究は、その基礎的知見として不可欠なものである。

この意味で、従来の表面タンパク質の阻害剤に加えて、ウイルスカプシドそのものに注目した全く新しいタイプの阻害剤の可能性へと繋がる本課題の社会的意義は、極めて大きいものであると考えている。さらに、ウイルスの分子論を確立し、ウイルスの物理化学的安定性に対する温度の影響や溶媒である水の役割等を理解し、また酸やアルコールなどの化学物質によるカプシドの構造不安定化などウイルスカプシドの物理化学的性質を解明していくことは、予防法の確立においても重要な基礎をなすものである。

一方で、エンベロープを有するインフルエンザウイルスや HIV ウイルスなどについては、表面タンパク質に関

わる治療薬に対して耐性を獲得するため、新しい薬を継続的に開発しなければならない。従来から、創薬研究では力場によるタンパク質-リガンドの結合シミュレーションが行われてきたが、信頼性が不十分なために限定的な役割にとどまっている。しかしながら、本重点課題研究において、もし量子化学計算を用いることにより結合シミュレーションの精度向上が達成できることが実証できれば、医薬品開発の短期化・効率化において産業的意義は極めて大きい。

さらに、高精度大規模量子化学計算による高効率で環境に優しい物質変換を目指した新規な触媒設計や酵素設計、新しい反応経路の探索、太陽電池、また分子動力学シミュレーションも合わせたナトリウム電池やリチウムイオン電池などの電解液の性能予測、また高分子固体電解質、さらには電解液-電極界面の物理化学、さらには海水の淡水化などのエネルギーならびに環境に関わる基盤技術の確立は、我が国の将来を考えた時、不可欠なものである。これらに加えて、特に石油に代わるメタンの分離、貯蔵、輸送、そして化学原料としての利用技術の基盤確立は、国民的視点からも強く望まれるものである。

2) 研究開発課題内容

[平成 24 年度の評価による指摘事項]

作業部会から「ウイルス課題は実験家との連携が重要なので強化して欲しい。第3部会内の各課題の部会内外の関連性を明確にすること。」というコメントがあった。

前者に対しては、重点課題「全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開」において、実験研究者との検討会を阪大ならびに微生物化学研究所において8回開催し、計算、解析の方向等について綿密な議論を行いながら研究を進め、名大と阪大、微生物化研との共同研究として課題を推進した。

後者について、部会内、部会間において、開発した方法論、ソフトを相互に利用している。また研究面では、部会間において本部会の特別支援課題「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」、「機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性」における高機能触媒や高効率な太陽電池の研究成果を第4部会におけるエネルギー技術へと展開していくことを検討している。さらには、「元素戦略」における触媒・二次電池研究に対して、上記2課題における触媒開発に加えて、「ポリモルフから生起する分子集団機能」において開発した溶媒和自由エネルギーの計算手法を二次電池電解液の開発へと展開しつつあり、これを支援する。

[平成 25～27 年度の実施計画と成果目標]

ウイルス学、構造生物学等の実験研究者との密接な連携の下に、これらの分野で強く求められているウイルスの分子論を明らかにする。このため、主として小児マヒウイルスのウイルスカプシドとインフルエンザに関連したタンパク質に注目し、1. 特にウイルスカプシドの構造とその安定性、2. 感染初期過程として重要なカプシドとレセプターの特異的な結合、そして3. これらに基づいたウイルスカプシドに注目した新しいタイプの抗ウイルス剤の検討、さらには4. 大規模量子化学計算に基づいたウイルスタンパク質と阻害剤との高精度結合シミュレーションの4項目に絞って研究を推進し、ウイルス分子科学の端緒を開く。

3) 平成 25 年度の具体的な実施計画

[部会活動]

CMSI の方針に従い、課題の枠組みの再編などについて議論する部会を開催する予定である。また、実際の研究推進のために、適宜、関係者との打合せを行っていく。

[連携活動]

(部会連携)

特別支援課題において必要な大規模MD計算、量子化学計算の実行に際しては、本重点課題で開発するMODYLAS、FMO/MP2 を提供する。一方で、本重点課題においてMD計算により発生させた軌跡に対する解析の中で、カプシドタンパク質の水和の自由エネルギーを求める際には特別支援課題で開発しているエネルギー

一表示法による分布関数理論ソフト ermod を用いる。また、自由エネルギー計算においてしばしば問題となるサンプリングについては、レプリカ交換法のソフト rem と MODYLAS を連携させてサンプリング効率の向上を図る。

(CMSI 連携)

第1部会の重点課題2「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開」の成果を、本重点課題に応用する。一方で、上述の重点課題2、また第4部会の「水素・メタンハイドレート」などのエネルギー重点課題に対して、本部会で開発しているMD計算、量子化学計算に用いる MODYLAS ならびに FMO/MP2を提供する。

(外部連携)

本課題の推進において、ウイルス学や構造生物学などの実験研究者との連携は不可欠であり、これまですでに以下に示すウイルス学、薬学、生物物理学などの専門家と課題参加者で構成される研究推進WGを組織して課題設定の段階から密接に連携しながら研究を進めており、さらには共同研究も含めた協力体制の推進をはかりつつある。

(微生物化学研)野本明男	(阪大蛋白研)中村春木	(本課題参加者) 4名
(中部大生命)鈴木康夫	(阪大蛋白研)中川敦史	
(京大院薬)大石真也	(東工大院生命)有坂文雄	

一方で、本課題はウイルスカプシドや表面タンパク質の物質的理解を目指すものであり、生命現象や生命システムの理解と予測そして創薬を目指す分野1とは相補的な関係にあり、理研の「細胞内分子ダイナミクス」ならびに「創薬」グループと相互に協力し、密接に連携しながら研究を推進する。

さらには、「元素戦略」における触媒・二次電池研究に対して、本部会の特別支援課題「ポリモルフから生起する分子集団機能」、「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」、「機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性」の参加メンバーが、連携し、支援する。このため、このようなエネルギーや環境に関わる他プロジェクト、また実験研究者、産業などとの連携WGを組織する。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題4:全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

[研究開発体制]

(担当者) 岡崎 進(名古屋大)、北浦和夫(神戸大)、北尾彰朗(東京大)、長尾秀実(金沢大)、
泰岡顕治(慶応大)、入佐正幸(九州工大)

[研究開発課題概要]

ウイルスの全原子シミュレーションやウイルスタンパク質の全電子計算等を実行することにより、感染機構や免疫機構、また抗ウイルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにし、計算科学によるウイルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。

平成 25 年度は上記目標を達成するため、平成 24 年度に開始した京コンピュータを用いた小児マヒウイルスカプシドの丸ごとシミュレーションを継続実施し、ウイルスが実現している安定でかつ柔軟な構造の実際の姿について、pH や温度などの環境がもたらす不安定化についての研究を開始する。また、ウイルスの感染初期過程を明らかにするために、レセプターとウイルスとの特異な相互作用を定量的に記述する自由エネルギー計算を引き続き行い、同時にこれを阻害する分子の検討を開始する。また、本年度より、成果を分かりやすく説明するために、3Dディスプレイによるウイルスの動的可視化を行う。

高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS を用いて水中の小児マヒウイルスカプシド(約 1000 万原子)の全原子シミュレーションを実施し、物質と生命の境界領域にあるウイルスを計算科学の俎上に乗せ、物質科学としてのウイルスの分子論を確立する。特に、カプシドとレセプターとの特異な相互作用、分子認識を自由エネルギーレベルで明らかにし、また結合後のカプシド構造の変化など感染初期過程の分子機構の解明を図る。また、カプシドの構造安定性について、構成タンパク質間の接合構造と熱ゆらぎや温度、pH、溶媒など環境に依存した構造の特徴などカプシドの物理的、化学的性質を明らかにする。

このように、これまで全く不明であったカプシドの分子論を理解することは微生物学の新たな展開を可能にするものであり、学術的に極めて重要な意味を持つ。それ以上に、カプシドは感染や免疫に直接関係しているものであり、カプシドのふるまいを理解し、それを阻害する分子機構を考えて行くことにより、新しい作用機構を持つ抗ウイルス剤の提案が可能となる。これは、感染症克服の新たな第一歩となる。一方で、理想的なワクチンとなる RNA を持たない人工カプシドの開発も防疫上極めて重要であり、その開発には殻内に RNA を持たなくても十分な安定性を示すカプシドの構造設計指針が不可欠である。さらには、薬剤の選択的な体内輸送にカプシドを用いる研究も盛んに行われている。本研究は、これら感染症の克服を目指した重要な研究の学術的基盤となるものである。

一方で、高速量子化学計算ソフト MP2-FMO を活用して、インフルエンザウイルスの膜タンパク質の阻害剤など、治療薬の候補となる医薬品分子の設計研究を行う。特に、タンパク質ーリガンド複合体と水和水分子を含めて約10万原子系の FMO 計算を行い、結合に伴うタンパク質の分極応答など、縮小モデル系では捉えられない効果を見出し、創薬研究に活かす。

このため、ウイルス学、薬学、構造生物学等の実験研究者との密接な連携の下に、以下の4項目に絞って MD 計算や量子化学計算に基づいた研究を推進し、ウイルス分子科学の端緒を開く。

1. ウイルスカプシドの構造とその安定性について、カプシドタンパク質間の接合構造とその熱ゆらぎなど、カプシドの実際の生体環境における実像を明らかにする。さらには、温度、pH、化学物質、乾燥等のウイルスが置かれた環境が、カプシドの構造安定性に及ぼす影響について明らかにする。
2. 感染初期過程として重要なカプシドとレセプターの特異な結合に対し、両者の相互作用を自由エネルギーレベルで定量的に解明する。特に、ミュータントについても同様の計算を行い、分子認識の特異性について定量的に実証する。さらに、レセプター、カプシドの構造変化について、いわゆる induced fit 機構について分子レベルでの検討を行い、またレセプターの結合に伴うカプシド側の変化についても可能な限り追跡を行う。

3. ウイルスカプシドに注目した新しい作用機構を持つ抗ウイルス剤、つまりカプシドとレセプターの結合を阻害する分子の探索を行い、その可能性について検討する。
4. インフルエンザウイルスの新規阻害化合物を理論設計する。本研究の推進により FMO 法を活用した量子計算創薬手法を確立し医薬品開発の効率化に貢献する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

小児マヒウイルスや口蹄疫ウイルスは、RNAとそれを収納する球状の殻であるカプシドで構成されている。これまで全く不明であったこのカプシドの分子論を理解することは微生物学の新たな展開を可能にするものであり、学術的に極めて重要な意味を持つ。

それ以上に、カプシドは感染や免疫に直接関係しているものであり、カプシドのふるまいを理解し、それを阻害する分子機構を考えて行くことにより、カプシドに注目した新しい作用機構を持つ抗ウイルス剤の提案が可能となる。これは、感染症克服の新たな第一歩となる。一方で、理想的なワクチンとなるRNAを持たない人工カプシドの開発も防疫上極めて重要であり、その開発には殻内にRNAを持たなくても十分な安定性を示すカプシドの構造設計指針が不可欠である。さらには、薬剤の選択的な体内輸送にカプシドを用いる研究も盛んに行われている。本研究は、これら感染症の克服を目指した重要な研究の学術的基盤となるものである。

一方で、中部大・鈴木教授グループで発見されたインフルエンザ表面タンパク質ヘマグルチニンの阻害剤を基に、抗ウイルス剤となるより活性の高い化合物の創成を目指す。

[「京」利用状況]

MODYLASについては、FMMによるFFTフリーな長距離力の厳密計算、メタデータ法による並べ替えの除去、演算のブロック化によるL1の100%近いオンキャッシュ化等により、1000万原子系で5ms/stepを実現した。これは、MD計算の分野においては世界最高性能に相当する。

一方、MP2-FMOを高速化して、約2万4千原子からなるヘマグルチニンの電子相関を考慮したレベルの計算(FMO-RI-MP2/6-31G*レベル)が京コンピュータの24,576ノードを用いて582.3秒で終了する性能を達成した。このサイズの分子についての量子化学計算の報告例が皆無であるため、他の方法との計算速度の比較はできないが、本課題で遂行予定のヘマグルチニンとその阻害分子の複合体(構造は未知)の構造最適化計算により結合構造の予測を行うことが可能な計算速度であることから、医薬品分子設計において実用的に用いることができることを示した。

[研究実施内容]

タンパク質間の接合構造や熱ゆらぎなどの解析を行い、安定でかつ柔軟な構造の実際の姿を明らかにし、ウイルスが実現している安定性の分子機構を解明する。また、ウイルスとレセプターの距離Rの関数として自由エネルギー計算を行い、感染の初期過程であるレセプターによるウイルス認識機構を分子レベルで明らかにする。この計算は、熱力学的積分法に基づいて行う。つまり、Rを一定の値に拘束してMD計算を実施することによりウイルスとレセプター間に働く平均力を求める。そして、この平均力をRの関数として様々なRに対して求めることにより、その積分から自由エネルギーが計算される。さらには、結合に伴うレセプターや結合部であるキャニオンの構造変化にも注目し、induced fit機構を分子論的に解明する。

さらには、インフルエンザウイルス表面タンパク質ヘマグルチニン(HA)の阻害剤の分子設計に向けて、天然物から抽出された既知活性化化合物(構造は未知)について、FMO計算によりHAとの複合体構造を予測し、さらにFMO-MP2計算によりHAの分子認識様式の解明とFMO/PCM計算により結合に及ぼす溶媒効果を明らかにする。

ii) 特別支援課題 1: 拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明

[研究開発体制]

(担当者) 岡本祐幸(名古屋大)、奥村久士(分子研)、志賀基之(原研)、高橋英明(東北大)、

[研究開発課題概要]

生体分子の機能はその立体構造により決まっている。よって、形が決まって初めて、その生体分子系の機能が原子分子の詳細を含めて議論できることになる。しかし、計算機能力の絶望的な不足により、これまで、構造予測は不可能とされ、おもに、X線回折実験やNMR実験により構造決定がされてきた。本課題では、生体高分子の立体構造予測を計算機シミュレーションによって可能にすることを旨とする。また、様々な生体高分子系における精度の高い自由エネルギー計算法を確立することを旨とする。生体分子のような多自由度複雑系では、系に無数にエネルギー極小状態が存在し、従来の手法によると、シミュレーションがそれら極小状態に留まって、誤った答えを出してしまうという困難が存在した。本研究課題では、この困難を拡張アンサンブル法 (generalized-ensemble algorithm) と総称されるシミュレーション手法を導入することによって克服する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

これまで不可能とされていた生体分子の第一原理からの立体構造予測を可能にすることを旨とする。特に、大規模分子動力学シミュレーションにより、膜蛋白質や水溶性蛋白質の立体構造予測を対象とする。これにより、X線などの実験により構造決定を必要要件としないドラッグデザインや蛋白質の機能解析が可能となる。さらに、このようにして得られた立体構造に基づいて、電子状態や核の量子効果も含めた精度の高い計算手法を適用することにより、酵素反応の本質やプロトンチャンネルをはじめとした生体内量子過程等を分子論的に解明する。拡張アンサンブル法の生体分子系への適用は、基礎研究に大きな発展をもたらす「基盤技術」を提供するものである。また、計算機シミュレーションによる立体構造予測が可能になると、生体分子の構造形成の機構を解明できるばかりでなく、酵素反応の発現原理やイオンチャンネルの機能解明、医薬品の開発、間違っただり畳みに起因する病気の発現原理の解明など、その応用範囲は計り知れない。

[「京」利用状況]

「京」上でのレプリカ交換分子動力学法プログラムのチューニングはCMSI拠点研究員の榮慶丈が中心に、以下のようになされた。第3部会代表の岡崎らが開発した超並列分子動力学法プログラムMODYLASにレプリカ交換分子動力学法を組み込んで、最大限の並列化効率を実現した。「京」において最大24576ノードを利用した。シミュレーション条件としてTIP3Pの水分子を1万個配置し、レプリカ数を2~3072まで変えてレプリカ交換処理にかかる並列化率を測定した。「京」における並列化率は、ノード数が3840までは99.9%、それ以上6144ノードまでは99.8%となり、24576ノードにおいても、99.3%の高い並列化効率を実現した。さらにこのプログラムを用いて今後予定しているProtein Aの折り畳みシミュレーションへ向けての準備もおこなった。具体的には60101原子系(Protein Aと水分子)についてそれぞれ異なる初期構造をもつ256レプリカの系を準備し、150,000ステップのレプリカ交換分子動力学シミュレーションをおこない、動作することを確認した。昨年の第一回の一般利用申請では「京」利用は許可されなかったが、再度、申請をする予定である。

[研究実施内容]

アミノ酸数100程度の球状蛋白質数個(all α 、all β 、 α/β などの典型的な二次構造要素を持つもの)やアミノ酸数300余の膜蛋白質(例えば、バクテリオロドプシン)などの立体構造の予測法を確立する。拡張アンサンブル法としては、レプリカ交換法(REM)が一番適用が容易なので、まず、REMを使用する。しかし、それで十分でない場合、REM、マルチカノニカル法、焼き戻し法(simulated tempering)などを更に一般化した拡張アンサンブル法を導入する。また、最近開発した遺伝的アルゴリズムと合体させた拡張アンサンブル法もこの問題に適用する。更には、蛋白質系のポテンシャルエネルギー関数の精度を向上させることによって、その自由エネルギー最小状態としての立体構造予測に資することを旨とする。蛋白質の立体構造予測と並行して、これらの蛋白質の他の分子との相互作用に関わる自由エネルギー計算法を開発して、例えば、拡張アンサンブル法によるドッ

キングシミュレーションによる、新しい薬剤候補分子のスクリーニング法を確立する。これは、独自の手法であり、国産技術として世界に発信することを目指す。更に、ab initio 経路積分法や real-space grid DFT による QM/MM 法など、量子効果を取り入れた分子シミュレーション手法にも拡張アンサンブル法を導入して、小分子系において精度の高い自由エネルギー計算をできるようにして、実際の生体系の酵素反応に関する精度の高い計算を可能にすることを目指す。

iii) 特別支援課題 2: ポリモルフから生起する分子集団機能

[研究開発体制]

(担当者) 松林伸幸(京都大)、篠田渉(産総研)、茂本勇(東レ)、吉井範行(名古屋大)、野口博司(東京大)、川勝年洋(東北大)、水口朋子(CMSI 研究員)

[研究開発課題概要]

脂質や界面活性剤、高分子のような多官能性の分子は、温度や塩・共溶媒濃度のような外部パラメータによって多様な自己組織化状態を示し(ポリモルフ)、膜やミセル、そして液晶のようにナノあるいはメソスケールのソフトな構造体に自己組織化する。この構造に基づいて、系は分子の認識、分配、分離、輸送機能などの多様な機能を集団として発揮するが、これらは、生体模倣材料、ドラッグデリバリーシステム(DDS)、海水淡水化、食品・コスメティックといった広範な社会的ニーズに直結し、応用範囲が極めて広い分子集団機能である。本課題の目的は、熱ゆらぎ程度の強さの相互作用・相関によって生成されるソフトな自己組織化構造や分子集団としての機能を、単一分子の性質や分子間相互作用から計算科学的に予測することである。ソフト分子集団系における物質結合の定量的な評価手法を開発する。マルチスケールの物理・化学に立脚して全原子レベルからメソレベルまでをつなぎ、熱運動によってゆらぐ分子集団構造をあるがままに捉え、解析することを目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

溶液・脂質膜・ミセル・高分子のようなソフト分子集団系への物質結合は、上記概要で述べた機能の鍵となる過程である。この過程を支配する物理量が自由エネルギーであり、本課題では、自由エネルギーを軸として、ソフト分子集団系の機能解析を行う。本課題で取り扱う脂質膜系やミセル系は、多成分系であり、様々な種類の分子間相互作用が混在する。自由エネルギーの分割手法の開発によって、鍵となる成分・相互作用因子を同定し、ソフト分子集団系の機能制御に資する。熱エネルギーと同程度の大きさの相互作用を駆使する物質設計は、様々な相関を精度良く取り扱う必要があるという意味で理論・計算科学の最先端課題であると同時に、前項の概要に挙げた実用的課題に直結し、意義深い。

[「京」利用状況]

エネルギー表示法に基づく自由エネルギー計算ソフト ermod は、これまでに、数十万原子からなる系を対象として、千強の並列度を、95%以上の効率で達成している。また、数百残基に及ぶ大きなタンパク質の水と自由エネルギー計算や、共溶媒・脂質膜存在下での機能分子の結合自由エネルギー計算が、全原子レベルで可能になっている。

[研究実施内容]

共溶媒・脂質膜存在下における、タンパク質などの機能分子の結合解析の手法を確立する。共溶媒効果と脂質膜効果は、系の均一性/不均一性が違うだけで、同じ枠組みの中で解析できる。構造形成や膜内配置に支配的役割を果たす相互作用因子を、結合自由エネルギーの分割によって同定する。この解析は、実験研究との直接的対応が可能であり、実験グループとの連携をより深めていく。高分子材料の解析では、様々な官能基を持つ分子・イオンの溶解に対象を拡張し、分離の選択性を上げるための指針策定を目指す。さらに、ミセル系では界面張力、脂質膜系では弾性係数の解析を行う。弾性係数の見積精度を向上させることで、粗視化モデルを高精度化し、膜の大変形を伴う膜融合時の自由エネルギー障壁の解析に取り組む。また、粒子—連続

場ハイブリッドシミュレーションを大規模化して、界面におけるミセルの分布や組み替えの過程を明らかにする。メッシュレス膜模型による解析では、膜構造をさらに多層化し、オニオン構造の形成をシミュレーションで再現することを目指す。

iv) 特別支援課題 3: ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス

(担当者) 中井浩巳(早稲田大)、IRLE Stephan(名古屋大)、吉澤一成(九州大)、武次徹也(北大)

[研究開発課題概要]

これまでに理論化学によりさまざまな化学反応が解明され、それに基づいて設計が行われてきたが、ナノスケール(ナノ・生体系)の反応系を精密に解析し、その制御を行うことは現在においても容易ではない。反応制御はさまざまな分野で必要とされている。たとえば、ナノサイズ分子では反応条件の最適制御が求められており、産業界でも有用とされている触媒反応では金属表面における反応制御が求められる。さらに生体酵素反応は常温常圧で反応を高選択的に触媒する究極のグリーンケミストリーを実現するものであり、反応の解明によりエネルギー問題や環境問題を解決するための糸口となる。本課題では次世代スパコン「京」を使用し、電子状態理論計算により現実的な反応モデルを化学的精度で取り扱うことで、反応経路の探索と反応制御を行い、新しい化学反応を可能とする反応場設計の学術的基盤を確立する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

大規模分子計算手法である分割統治(DC)法の高度並列化を行い、ナノスケール分子の反応制御に対して、電子状態理論計算からの解析を行うことを目標とする。また、従来の分子動力学(MD)計算では長時間のシミュレーションを行っても、高い活性障壁を超えることが困難である。そこで、並列レプリカ法などの理論実装も併せて行う。上記概要で示した反応は産業・学術を問わず重要なものであるが、これまでの量子化学計算での評価は、その計算コストの大きさから、系の一部を抜き出したモデルに対して行われてきた。本研究により、これらの系を現実的なモデルで取り扱うことが可能となり、より詳細な解析を行うことで反応制御を行うための知見を得ることができる。

[「京」利用状況]

本課題は 1) 高精度な量子化学計算手法である DC-MP2 法と、2) MD 計算を行うための DC-DFTB 法の 2 つの理論構築により遂行される。

DC-MP2 法は平成 23 年度より MPI/OpenMP ハイブリッド並列化を進めてきた。小分子の計算でも「京」576 ノードに対して 1,152 ノードで 76% の並列化効率を達成している。また、ピークパフォーマンスに対する性能も 6% 程度と性能の出にくい量子化学計算プログラムとしては良い水準となってきた。

DC-DFTB 法は平成 24 年度に MPI と OpenMP を用いたハイブリッド並列を実装した。その結果、一部手続きを除いて、「京」500 ノードに対して 2,000 ノードで 95% の並列化効率を達成した。並列化効率の低い部分は逐次処理であるため 30% 程度の並列化効率であったが、現在は計算法を工夫することにより 85% 程度まで並列化効率を向上することに成功している。さらにチューニングを行うことで、高い並列化効率を目指している。

[研究実施内容]

平成 25 年度は、昨年度までに開発されてきた分割統治量子化学計算ソフトウェア「DC」を用いて、ナノ・生体系への用を行う。具体的には反応プロセスを DC-DFTB 法を用いた計算により観測し、それぞれのより精密な電子状態を DC-MP2 法を用いて解析することで、反応性や物性値の知見を得る。種々のフラーレンやカーボンナノチューブ分子の生成反応、アミン分子を用いた二酸化炭素の吸収・放出反応(CCS)や電池の極板上の反応などを適用系とする。これらの応用計算と並行して、ソフトウェアの開発も進める。「DC」の高度並列化を行い、数万ノード並列計算に実用的に耐えうるコードを開発する。さらに MD 計算で必要となるアンサンブルや、反応を加速するためのレプリカ法の実装、DC-MP2 と DC-DFTB 法とを ONIOM 法を用いて結合し、周囲の効果をあ

らわに取り込んだ、高精度な MD 計算手法の開発なども行う。

v) 特別支援課題 4: 機能性分子設計—光機能分子と非線形外場応答分子の光物性

[研究開発体制]

(担当者) 江原正博(分子研)、中野雅由(阪大)、太田浩二(京大)、藪下聡(慶應大)、小関史朗(大阪府大)

[研究開発課題概要]

光機能性分子では、分子の光学的性質とともに分子集合体における励起ダイナミクスが重要であり、優れた機能創出にはナノスケールの現象の理解とそれに基づく分子設計が必須である。光機能材料の開発は、これまで実験的なスクリーニングや工学的技術に基づいていたが、これまでにない機能分子の開拓には、より論理的な手法が不可欠である。本課題では光機能を示す有機 EL やバイオセンサー、非線形光学分子の光電子過程を明らかにし、分子設計の指針を示すことによって、技術革新を行うことを目的とする。これらの光機能では、分子の励起状態の性質が重要であり、励起緩和、電子移動、エネルギー移動なども検討する必要がある。第 1 部会の研究課題との連携を行い、電子状態理論と動力学理論に基づく技術革新を実現する。新たな技術革新を達成し、それらを応用することによって、産業や社会への貢献を目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

分子の励起状態に関する知見は、分子科学分野の基礎および応用の双方の面で重要である。最近では TDDFT 法が広く使用されているが、その励起状態に関する記述が不十分な場合も少なくない。我々はクラスター展開理論を開発して来た。この方法は化学的精度を持つが、一方で計算コストが高く、大規模分子への応用が限られていた。本研究では、大規模分子へ応用可能な理論・プログラム開発を行い、現在の化学が抱える光化学の諸問題に応用し、そこから得られた知見に基づいて、分子設計や開発を行う。これらは学術的にも工学的にも重要で意義深いものである。例えば、有機 EL は薄型ディスプレイや照明など広く利用されているが、製造コスト、発光色、発光効率、安定性など改善すべき課題が多く残されており、理論による光物性の評価は新規材料を設計・開発する上で重要である。

[「京」利用状況]

本課題では、励起する分子が大規模な共役系である系をターゲットとしており、並列化が困難な状況であるが、SAC-CI 法では OpenMP による並列化を進めた。さらなる高並列化、高並列に適した手法やアルゴリズムの導入を行う。

[研究実施内容]

光機能分子に関しては、昨年度、色素増感太陽電池の有機色素などの光物性の理論解析を行った。本年度は、引き続き色素増感太陽電池における電子移動過程について実験と協力した研究を行う。また、励起状態における溶媒効果について分極が重要となる系について研究を深める。第一部会との研究課題の連携を行い、光機能分子の光電子過程の精密な理論研究、励起ダイナミクスに関する研究を実施する。外場応答分子については、NLO 応答・一重項分裂(Singlet Fission, SF)・フォトリソリズムなどの現象に関して、引き続き多環芳香族炭化水素(PAH)や多核遷移金属錯体、典型元素含有化合物を始めとした開殻分子系の幾何・化学・電子構造依存性を検討し、新しい構造-特性相関を見だし、新規分子系の提案を行う。さらに、実際の測定やデバイスにおける環境下での応答物性の理解と制御を視野にいれ、これらをユニットとして持つ開殻超分子系もターゲットとする予定である。これらの系はジラジカルを越えたマルチラジカル性を有すると予測されるので応答特性とマルチラジカル性との相関を明らかにする。励起解離過程における量子干渉効果の定量的計算により、分子の電子状態と原子核の運動の結合様式を調べる。希土類錯体の光物性およびそのイオン結合性の電子状態を分析し、その分子機能との関連を調べる。

2.2.2.1(4) エネルギー変換

第4部会 代表者： 山下晃一(東京大)、杉野修(東京大)

〔研究課題概要〕

1) 部会全体の取り組み

本部会での研究は化学結合エネルギー、電気エネルギー、光エネルギー(太陽光)、熱エネルギー間の相互変換に対する物質機能の役割を科学的に解明し、次世代におけるエネルギー変換の大幅な高効率化に資する計算データを提供すること、および、その計算を可能にする手法を確立することが目標である。プロジェクト3年目となる平成25年度の目標は、研究基盤(計算手法、並列化アプリ、研究コミュニティ)をさらに強化させ、平成24年度後半から本格稼働した京コンピュータを用いた計算を本格的に行い、研究成果を出し始めることである。本年度より燃料電池(化学⇒電気)とリチウムイオン二次電池(化学⇄電気)の課題を統合して新たに化学電池課題(正式名称はエネルギー変換の界面科学)と設定して、電気化学過程を計算するための方法論・アプリ開発やシミュレーションを促進させる。特にリチウムイオン二次電池の社会的要請やシミュレーション準備状況などを考えて、この課題を重点的に推進させる。

本部会の研究は、エネルギー問題の多様性ゆえ、古典力学シミュレーションからボルン・オッペンハイマー動力学、さらに電子と原子核の動力学に至る様々なアプローチを用いて研究が行われている。方法論的には、個別に第二部会あるいは第三部会とのつながりが強い一方、部会内でのつながりが弱い側面がある。しかし、これまでCMSI研究会が頻繁に開催され、課題間の人的交流が行われており、徐々に分野が形成されつつある。この動きをさらに促進することにより、分野融合のメリットを生かしてブレークスルーを狙える体制を作るための取り組みを行う。

〔社会的意義〕

エネルギー問題はわが国の最重要課題の一つであるが、その重要性は東日本大震災以降急激に増加している。太陽光などの自然エネルギーを有効利用するためには、一次エネルギーを利用可能な形態に変換するか、あるいは蓄積可能な形態に変換する必要がある。エネルギー変換・蓄積は、物質を介して行われるため、物質機能を最適化する必要がある。しかし世紀を跨ぐ努力にも関わらず、最適化は達成されていないのが現状である。最新の物質科学やナノテク技術などにそれが託されている。

今注目すべき再生可能エネルギーは太陽光、それを植物が蓄積したバイオマス、あるいは熱として排出されているエネルギーなどである。さらに、新規の化石燃料であるメタンハイドレートもある。これらのエネルギーを消費し易い形で化学結合エネルギー(水素、二次電池への充電)として蓄積した後、消費地で電気エネルギーに変換するという利用が注目を浴びている。物質科学的にこれらの過程を突き止め、その効率を高める方針を見出すことは非常に重要である。本部会では、これらのエネルギー変換過程を定量的に突き止めるためのシミュレーションの手法を構築し、それを用いたブレークスルーを目指す。

2) 研究開発課題内容

[平成 24 年度の評価による指摘事項]

部会構成は「独立した課題の寄せ集め」に見え、研究の内容に関しては、「達成目標と社会へのインパクトとして示されていることが一般的すぎる。このプロジェクトで実施する課題が解決されたら、電池の高効率化に対する指針を示し、その指針に実験研究者が実際にとびつく達成目標をしめさなければならない」という指摘があった。また、研究課題に対しては、「燃料電池、リチウム電池の活動で、物質開発的な取り組みが手薄」であり、さらに「いつの時点でどこまで何がわかれば、何が得られるか」、あるいは、「現実のNEDO のプロジェクトとの関連はなにか」、との指摘がなされた。

[平成 25～27 年度の実施計画と成果目標]

燃料電池とリチウムイオン二次電池に関しては平成25年度より統合して化学電池課題(正式名称はエネルギー変換の界面科学)として活動を行う。リチウムイオン二次電池に関しては、電解液の分解過程や SEI 膜の形成過程に関するシミュレーションを行い、どのような有機溶媒や添加剤を導入すれば電池が安全に耐久性を持って動作するかに関する基礎データを得る。燃料電池に関しては電極反応活性に対する、電極の組成や構造、吸着分子、電解質イオンなどの存在と関連を明らかにするためのシミュレーションを行い、電極触媒反応の理解を深め、それに基づき高精度・高耐久性電極の設計指針を獲得する。

ハイドレート課題に関しては、メタンと水素ハイドレートによるエネルギー創生と貯蔵を目指し、熱力学的安定性と融解のダイナミクスを調べることにより、実用化に対する理論面からの支援を行う。太陽電池に関しては、光エネルギー変換の基礎過程「(i)電子正孔対形成(集光)、(ii)電子正孔対分離(電荷分離)、(iii)エネルギー移動・緩和と散逸」をシミュレートするためのアプローチを確立し、色素増感型太陽電池や有機太陽電池に関する動力的研究を行う。

バイオマス課題に関しては、アルコール生成過程に関する統合的な計算科学的解析を行う。酵素反応過程を詳細に解析することで、最適な反応条件を提案する。また、酵素のスクリーニングにより高効率酵素の設計につなげる。ナノ課題に関して、熱電変換(熱⇒電気)や太陽電池(光⇒電気)過程におけるナノ構造の役割について研究を行う。

これらの研究課題の多くは、外部プロジェクトとの連携の中から見出されたものであり、プロジェクトとの情報交換を密接に行いながら研究を推進する。

3) 平成 25 年度の具体的な実施計画

課題i)では、本年度より燃料電池(化学⇒電気)とリチウムイオン二次電池(化学⇔電気)の課題を統合して新たに化学電池課題(正式名称はエネルギー変換の界面科学)と設定して、電気化学過程を計算するための方法論・アプリ開発やシミュレーションを促進させる。特にリチウムイオン二次電池の社会的要請やシミュレーション準備状況などを考えて、この課題を重点的に推進させる。課題ii)では水素・メタンハイドレート(化学⇔化学)の生成解離過程や熱力学的安定性の古典分子動力学計算を継続して行い、ハイドレート制御のための基礎を確立する。課題iii)では有機太陽電池および色素増感太陽電池(光⇒電気)における励起状態や構造の計算を進め、分子設計指針獲得を目指す。課題iv)ではバイオマス利用(化学⇔化学)のための酵素反応の有効媒質法(3D-RISM法)を用いたシミュレーションの開発を継続して行う。課題vi)では熱電変換(熱⇒電気)や太陽電池(光⇒電気)過程におけるナノ構造の役割について研究を進める。

以上の活動を通じて、研究手法やアプリの開発、研究コミュニティの形成に向けた着実な前進をすることを目指す。

[部会活動]

部会の活動を包含する「CMSI エネルギーWG」活動に積極的に協力するとともに、CMSI の研究会やその他の会合を利用して、相互交流や理解を深める活動を行う。

[連携活動]

(部会連携)

リチウムイオン二次電池課題で用いる第一原理計算アプリ(CPMD)の効率を高めるために、第二部会と連携してRSDFTの高度化手法を分子動力学計算に適用したRS-CPMDの開発を行う。ハイドレート課題で用いる古典分子動力学アプリ(MODYLAS)に関して、第三部会からの支援を受けながら研究を行う。

(CMSI 連携)

CMSI エネルギーWGを通して、エネルギー創成・変換や省エネなどに関するCMSI全体の連携を促進する。

(外部連携)

燃料電池課題に関しては、燃料電池シミュレーション課題連絡会を通して、産官学や実験理論の連携を深める。リチウムイオン二次電池、燃料電池、太陽電池課題に関しては、研究者がそれぞれ JST や NEDO 等のプロジェクトに参加して連携した活動を行っている。たとえば、NIMS-GREEN での化学電池研究との連携、NIMS での太陽電池研究との連携、JST さきがけや CREST でのリチウムイオン二次電池研究との連携、NEDO や FC-Cubic での燃料電池電極開発研究、触媒・電池元素戦略研究拠点との連携がある。このほか、個別に企業との共同研究を推進している。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題5: エネルギー変換の界面科学

[研究開発体制]

(担当者) 杉野修(東京大)、赤木和人(東北大)、森川良忠(大阪大)、池庄司民夫(産総研)
牛山浩(東京大)、兵頭志明(兵庫県立大)、尾形修司(名工大)
館山佳尚(物材)、大谷実(産総研)、大脇創(日産自動車)、山下晃一(東京大)
長岡正隆(名古屋大)、麻田俊雄(大阪府大)

[研究開発課題概要]

リチウムイオン二次電池や燃料電池の基礎過程を大規模シミュレーションから解明し、化学電池の学理を構築する。リチウムイオン二次電池の安定性や耐久性の向上に資するシミュレーション結果を与え、実験・開発への指針提供を行う。燃料電池の電極反応における界面構造と活性の関係をシミュレーションから調べ、電極の高性能や高耐久性に向けた指針獲得を行う。これらの目的のため、シミュレーション技法の開発や改良を主要課題に据え、研究開発を行う。既存の第一原理計算プログラムへの機能追加、プログラムの並列化性能向上を行い、京コンピュータの性能を最大限に活用した高精度・高機能・高効率なアプリとして完成させる。

本課題は、従来の燃料電池重点課題とリチウムイオン二次電池特別支援課題を融合して新設されたものであり、第一原理計算アプリの開発に関しては、第二部会のメンバー数名を向かい入れて行うことにより、飛躍的な効率の向上を目指す。燃料電池シミュレーション課題連絡会に関しては、実験家も含めるなどして活動をさらに活性化する。リチウムイオン二次電池についても類似のコミュニティ形成を目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

リチウムイオン二次電池技術の課題として、高容量化を目指した電極物質探索、高速充電を目指した電解液や電極界面の設計、安全性や耐久性を目指した電解液や電極界面の改質などがある。本課題では、最後者に注目し、還元雰囲気中での電解液の分解に対する安定性や、電極界面における SEI (Solid Electrolyte Interphase) 膜の安定性の向上に資する計算結果の獲得を目指す。電解液を構成する分子(エチレンカーボネート等)の分解過程に関する先行計算はある。それらは系統的な計算ではあるが、孤立分子に対する計算となっている点で現実系とは異なるものに対する研究となっている。液中での計算の試みもあるが、計算モデルの規模が不十分であり実験との整合に疑問が残っている。そこで、十分な規模のモデルを用いて液中の分解過程を系統的に調べる。この計算を様々な有機溶媒分子や添加剤分子に対して行い、それぞれの安定性を詳細に解明することにより、新規溶媒の設計指針の獲得を試みる。さらに、分解された分子がどのように負極界面に堆積し、化学反応を起こすかを調べる。実験結果と詳細に比較検討することにより、SEI 膜形成の初期過程に関する知見を得る。計算には 2000 原子を用いたモデルと合計 1 ナノ秒にわたるシミュレーションを行い、Bluemoon 法を用いた反応の自由エネルギーを計算する。固体有機溶媒界面は複雑かつ緩和時間が長いので、この規模の計算を用いて初めて反応過程を明らかにすることが可能になる。

燃料電池(固体高分子形)の技術的課題には、電極の高機能性・高耐久性の問題や、高分子膜の選択透過性や電極との接合の問題などがある。本課題では電極の活性が表面の構造や吸着分子にどのように左右されるかをシミュレーションから明らかにする。計算結果を電気化学測定結果等と比較検討することにより、正極反応がどのような経路で起こっているのか、それが表面の元素組成や構造、溶液の pH や電解質イオンの種類により影響を受けるのかを明確にする。これらの知見を用いて、電極の機能性や酸化に対する耐久性などがどのように改善し得るのかに関する予測を行う。従来の反応中間体と電極原子の結合エネルギーのみに基づく理論がどのように修正を受けるのかを明らかにする。

手法開発として、電極に電位差をかける方法論として開発した smooth ESM や constant μ 法を STATE 上で効率的に用いるための調整を行う。また、自由エネルギー計算のため、Bluemoon 法における制限のかけ方の改良

や、Wang-Landau 法を用いた高精度自由エネルギー計算の実現を目指す。

アプリ開発として、リチウムイオン二次電池計算用として用いてきた CPMD に代わる RS-CPMD の開発を行う。基底を平面波から実空間に変更することにより並列効率を著しく向上させることを目指す。燃料電池計算用として開発してきた STATE に関しては、計算の収束性を向上させ、モデルの規模を大きくしたときにも計算の安定性を確保するための取り組みを行う。

【「京」利用状況】

CPMDを用いた計算は、2400原子を含むモデルの場合、512ノードを用いた計算が効率10%,strong scalingが90%を示している。3週間のシミュレーションで10ピコ秒の計算が可能になる。また、自由エネルギー計算では10-20点並列計算(1万ノード規模)を行い2-3百万ノード・時間を消費して、化学反応を一つ追う計算となる。これまで、予備計算として規模を縮小してシミュレーションを行ってきたが、本年度は京コンピュータの追加枠に選定されたため、フルスケールの計算が行える。CPMDによるプロダクションランを行う一方、RSDFTの高度化手法を分子動力学計算に適用したRS-CPMDの開発とその性能評価計算を行い、順次RS-CPMDを用いたシミュレーションに切り替えて並列効率を飛躍的に向上させる。

STATEを用いた計算は、計算の安定性の問題のため、規模を縮小した計算を行い、場合の数を尽くした計算を行っている。この計算から計算対象を絞り込み、安定化させたSTATEを用いて本格計算を行うことを予定している。

【研究実施内容】

リチウムイオン二次電池に関しては、2000 原子規模のモデルを用いて有機溶媒分子の分解過程を系統的に調べる。Bluemoon 法を適用して、反応経路を 10-20 分割して CPMD を用いた第一原理分子動力学計算を行うことにより、反応自由エネルギーを求める。この計算を数種類の有機溶媒分子と添加剤分子の組み合わせに対してを行い結果解析することにより、安定性に寄与している因子を解析する。さらに、分解された分子がどのように負極界面に堆積し、化学反応を起こすかを調べるために、その反応過程をシミュレーションから調べる。界面としてはグラファイトを想定し、分解された溶媒分子を界面に移動させて強制的に反応させるのに必要な仕事から、反応自由エネルギーや活性化自由エネルギーを見積もる。

燃料電池に関しては、表面の組成(白金や他の元素)や構造(ステップや欠陥)、さらに特異吸着分子(反応中間体や電解質イオン、水和水等)と反応の活性化エネルギーや反応熱の関連を系統的に調べる。従来の反応中間体と電極原子の結合エネルギーのみに基づく理論では説明がつかない電気化学測定結果の解明を行う。

smooth ESM、constant μ 法、Bluemoon 法や Wang-Landau 法の導入を行い、アプリ開発として、第二部会の協力のもと RS-CPMD の導入を検討する。STATE に関しては、さらなる並列効率の向上と計算の収束性の向上を行う。

研究成果は月に一度程度開催される連絡会で、一部の企業研究者や実験家に報告され、研究の妥当性のチェック等を受ける。この活動を積極的に行うことにより、「物質開発的な内容が希薄(作業部会指摘)」な側面を払拭することができるものと考えている。

ii) 重点課題6: 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性

[研究開発体制]

(担当者) 田中秀樹(岡山大)、甲賀研一郎(岡山大)、水関博志(東北大)、三浦伸一(金沢大)

担当者のうち、田中、甲賀がメタンハイドレートの融解過程を担当し、担当者全員が水素を含む多様なハイドレートの熱力学的安定性の理論・計算に従事する。また、協力者は融解過程について、一部協力してシミュレーションを行う。

[研究開発課題概要]

ハイドレートの有効利用を実現するために、熱と物質の移動を取り入れたシミュレーションを行い、生成解離過程や熱力学的安定性を明らかにし、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。

25年度には大規模な計算を実施して、通常の条件下における融解機構についての基礎理論の確立を目指す。メタンハイドレートの温度、圧力、組成に対する相挙動の解明、生成解離の熱力学量の予測とあわせて、メタンハイドレートの中・大規模分子動力学シミュレーション実施による融解速度の外部条件依存性の検討を行う。

エネルギー創生と貯蔵のために、メタンハイドレートのシミュレーションにより、熱力学的安定性と融解のダイナミクスを調べ、実用に対する理論面からの支援を行う。ハイドレートの有効利用を実現するために、MODYLAS、また、必要に応じて他の高効率分子動力学のためのソフトウェアを用いたシミュレーションから、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。

メタンと水素ハイドレートによるエネルギー創生と貯蔵を目指し、それらの実用化に対する理論面からの支援を行う。具体的には、分子動力学シミュレーションを行い、種々のハイドレートの熱力学的安定性と融解のダイナミクスを調べる。また、ハイドレートの有効利用を実現するために、熱と物質の移動を取り入れたシミュレーションを行い、生成解離過程や熱力学的安定性を明らかにし、ハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。さらに、上記目標を達成するため、自由エネルギー計算を行い、広い温度・圧力における熱力学的安定構造とその予測法の完成を目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

他の化石燃料の2倍以上の埋蔵が期待されるメタンハイドレートの生成解離過程や熱力学的安定性を正確に理解してその効率的な利用を図るための相転移・相分離の基礎を確立する。また来るべき脱炭素化社会におけるエネルギー源としての水素の安全で安価な貯蔵法としての水素ハイドレートの可能性を探り、その実用化に向けた基礎物性の予測を行うことを目的とする。

ハイドレートはゲスト分子を収容する12,14,15,16面体の水分子でできたケージがその面を共有することにより生成する結晶であるが、ゲスト分子種と温度・圧力に依存して多数の構造多形が存在する。これらの多形は、その構造により安定性が異なり、融解の潜熱も一定の分布がある。事実、メタンハイドレートの生成解離平衡は温度と圧力に依存し、またエタンなどの少量の不純物によっても構造相転移を起こすなど、平衡・構造に関してすらも未知である部分が多い。分子間相互作用に基づく温度、圧力、組成変化における構造と安定性および相転移に伴う熱物性の研究は、実験にも増して広範囲の探索がそれにより可能であり、またその分子論に基づく理解が容易であることから、実用的なメタンハイドレートの利用に欠くことができない。さらに、その資源としての利用には必ず解離過程が伴い、融解温度付近での異常な融解速度の低下など、その融解のミクロな描像からマクロな相分離に至る過程は殆ど理解されていない。そのため、現在最も有望視されている減圧法も含めた幾つかの方法に対して、その融解過程のシミュレーションを実施して、メタンの高効率な採取法についての理論側からの提案を行う。また、ハイドレート融解に関与する大振幅モードの励起や適切なハイドレート阻害物質の選択などについての検討も実施する。そのために、数10万の水分子に接するメタン-エタンの混合ガスについて、サブミリ秒のシミュレーションを行い、律速過程を含めた解離機構を明らかにする。メタンハイドレートについては、24年度に行った予備的計算をもとに、25年度以降、融解の本格的なシミュレーションを実施して、その熱伝導、

物質移動から分解や相分離過程の解析により、メタンハイドレート実用に対する指針を得る。

ハイドレートを利用した低圧での水素貯蔵を目指し、自由エネルギー計算からクラスレート安定化プロモーター分子の分子種と組成の包括的な探索を実施して、実験に対する的確な指針を供する。25年度は、さらに広い温度圧力下、またプロモーター分子種存在下での安定性を評価することにより、水素貯蔵の実用化の可能性を引き続き調べる。これらのシミュレーションは、これまでのプロジェクトで開発されてきた高度に並列化されたプログラムと自作のプログラムを組み合わせることにより実施する。

〔「京」利用状況〕

水素貯蔵としてのハイドレート安定性のための理論と自由エネルギー計算法に関しては、ほぼ完成して実行と結果の解析を行う段階にきている。また、メタンハイドレートの融解については、MODYLAS における熱浴について一部を改変する必要があるが、MODYLAS 自身は非常に高い並列化効率(ほぼ 100%)を有しているので、メタンハイドレートについても高効率でのシミュレーションが期待される。また、境界条件などの適切な設定に伴って、必要に応じて、他の高並列化ソフトウェアについても、使用を検討する。

〔研究実施内容〕

- ・ メタンハイドレート融解に伴う相分離状態において生じる界面の動的な構造の解明から、メタン採取の最適過程についての検討を行う。大規模系における分子動力学シミュレーションから、①メタン過飽和水溶液の安定性の評価、②分解が起きる熱力学的条件の探索、③気相の存在が分解を促進(添加物)の探索を行う。特に、京コンピュータを用いた大規模計算により、気泡生成とハイドレート分解の関係とSelf-preservation effectの機構解明を目指す。
- ・ 上記に関連して、メタン試掘や貯蔵の実用化を目指した実験研究者と、共同研究も視野に入れた情報交換を継続的に行う。
- ・ メタンおよび水素ハイドレートの生成過程についてのシミュレーションから、生成におけるボトルネックを明らかにする。これらから、メタンや水素貯蔵の効率等についての検討を行う。
- ・ 水素ハイドレートについて、第一原理計算などにより、その安定性の詳細と量子化されたプロトンのダイナミクスから水素移動機構を解明する。

iii) 特別支援課題 1 : 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算

[研究開発体制]

[担当者] 山下晃一(東京大)、杉野修(東京大)、宮本良之(産総研)、館山佳尚(物材機構)、長谷川淳也(京都大)、河津励 (CMSI 研究員)

[研究開発課題概要]

太陽光エネルギーを有効に活用する技術は、二酸化炭素排出量を削減し、現代文明のサステナビリティを実現するうえでの懸案課題である。既存の半導体太陽電池の高効率化、新規の有機太陽電池の超寿命化を達成する技術が模索されている。光エネルギー変換の基礎過程は (i)電子正孔対形成(集光)、(ii)電子正孔対分離(電荷分離)、(iii)エネルギー移動・緩和と散逸、の3点から構成されておりそれらの効率を向上させる必要がある。電子の基底状態理論と比べると未開拓な領域であり、物質科学の分野では最も高度な計算科学的課題として挑戦的な研究が必要とされ、大規模計算機を用いたブレークスルーが期待されている。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

有機系太陽電池は、無機系太陽電池と比べ製造が簡易で原料も安価であることから次世代のクリーンエネルギー源として期待されている。しかし電子供与分子/電子受容分子の異種界面を利用した有機薄膜太陽電池のエネルギー変換効率は 10%程度と未だ低く、また色素増感型太陽電池は 2011 年に変換効率 12%を達成しているが、これら有機系太陽電池の普及には変換効率や耐久性の更なる向上が必須である。そのためには異種界面での電荷分離過程、TiO₂ 電極と色素分子・電解質溶液界面における界面電子移動過程の微視的理解が不可欠である。これらの基礎過程は遷移金属酸化物/有機溶媒界面 TiO₂ 表面上の励起電子ダイナミクスや遷移金属錯体吸着といった、第一原理計算の観点からは電子励起状態や電子相関が絡む大規模系であり、その解析計算の実行は応用的観点のみならず計算科学的にも重要である。

[「京」利用状況]

平成 24 年度 HPCI システム利用研究課題として採択され、第一原理計算プログラム NWChem および第一原理分子動力学計算プログラム CP2K の「京」および FX10 向けの高速化を行った。今後は汎用的な高速化コードを導入、最適な計算条件を探索し、実際の計算対象で実行する。

[研究実施内容]

平成 24 年度に引き続き以下の研究課題に関して研究を実施する。

(1) 電子供与分子/電子受容分子の異種界面での電子ダイナミクスと励起エネルギー移動

Donor/Acceptor 異種接合界面について大規模系でのエキシトン・ダイナミクスの計算手法を開発し、界面 nm スケール・分子スケールでの界面設計による高効率化の理論的設計を目指す。また光エネルギー変換効率を Donor/Acceptor 異種接合界面での電荷移動状態から電荷分離状態の励起状態への遷移と関連付け、詳細な電子状態計算を行い、有機薄膜太陽電池の効率が上がらない大きな原因である、界面における電荷再結合過程の要因を明らかにする。種々の有機ヘテロ界面についての系統的な量子化学計算、量子マスター方程式法により Donor 励起状態から電荷移動状態への電子緩和ダイナミクスを解析し、最適な Donor 分子を理論的に設計する。

(2) 有機・無機ハイブリッド型太陽電池における電子ダイナミクス

これまで色素増感型太陽電池における界面錯体型遷移にともなう直接電子注入に関して、酸化チタンと吸着分子の複合系について変換効率向上へ向けた材料設計を行ってきたが、そこでの計算手法を有機素材と組合せた有機無機ハイブリッド構造体の計算へ展開する。有機・無機ハイブリッド系は有機高分子系に比較して閉回路電圧の低下が抑えられ、光エネルギー変換の高効率化が期待されている。励起子物性(励起子拡散や励起子解離)と光誘起電荷分離過程を中心に理論的検討を行う。

iv) 特別支援課題 2: バイオマス利用のための酵素反応解析

[研究開発体制]

(担当者) 吉田紀生(九大)、平田文男(立命館大)、森田明弘(東北大)

[研究開発課題概要]

食料と競合しないバイオマスエネルギー源としてセルロースが大きな注目を集めており、セルロースからアルコールを高効率に生成する技術が求められている。セルロースの加水分解には、熱水や強酸を用いた化学処理と酵素を用いた生物化学的な方法がある。前者は生成自体にエネルギーが必要なことや、廃液による環境負荷の問題が指摘されている。一方、酵素処理は酵素の再利用性が高く環境負荷も低いことや、マイルドな条件下での反応であることからエネルギー効率の向上も見込めるなど、今後のバイオマスエネルギー生成の中心になりえる技術である。本課題では、セルロース分解酵素によるアルコール生成過程に関する統合的な計算科学的解析を行う。酵素反応過程を詳細に解析することで、最適な反応条件を提案する。また、酵素のスクリーニングにより高効率酵素の設計につなげる。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

成果目標の一つは、3D-RISM 理論を軸とした酵素反応解析技術を確立することにある。分子認識過程において溶媒は極めて重要な役割を果たしているが、従来の分子認識解析手法では溶媒を統計的に扱ってこなかった。これは、溶媒というものはほぼ無限個存在し、その自由度が膨大であることに起因する。このため、統計力学理論に基づいて定式化されている 3D-RISM 理論を用いることで、この溶媒の自由度に関する配置積分を解析的に扱い、言わば、無限個の溶媒、無限時間のサンプリングを行ったのと同等の結果を得ることができる。理論・計算による分子認識解析技術を確立することは科学的・学術的意義の高いことは言うまでも無く、産業レベルでもエネルギー分野のみならず創薬分野などへの波及効果も大いに期待できる。

[「京」利用準備状況]

本研究課題遂行上、中心となる 3D-RISM は最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト・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において特に高度化を施す中核アプリケーションの一つとして開発が行われてきた。本研究課題代表者はこのプロジェクトにおいて 3D-RISM 開発グループの一員としてプログラムの高並列化・高度化に取り組んできており、本プロジェクトにおいても引き続き開発を行ってきた。現在、3D-RISM は 8192 ノード(6 万コア超)でのスケーラビリティを「京」コンピュータ上で達成している。この成果については現在論文の投稿準備中である。

[研究実施内容]

平成25年度は前年度に引き続き、3D-RISM プログラムの「京」コンピュータ上でのチューニングをさらに進める。具体的には、溶媒分布関数の入出力の最適化、自由エネルギー勾配の入出力最適化、分子動力学シミュレーションプログラムとの連成計算の高度化に取り組む。また、応用面ではバイオマス材料分子(リグニン、セルロース、糖)の溶媒和構造およびその温度依存性についての解析を行う。

v) 特別支援課題3: ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション

[研究開発体制]

(担当者) 浅井美博(産総研)、中村恒夫(産総研)、吉田博(大阪大)、佐藤和則(大阪大)

[研究開発課題概要]

ナノ構造を利用してエネルギー変換効率を高めようという実験研究が幾つか先行している。例えば熱電変換材料の場合、バルク・シリコンは熱電性能が高くないが、ナノワイヤ化すると変換効率 ZT が非常に著しく増大すると実験的に報告されている。本課題では変換効率の高いエネルギー材料(熱電変換材料、太陽電池材料等)の探索スクリーニングと、ナノ構造を創出する為のプロセス探索を計算機上で行う為に必要な理論面での整備を、特にスーパーコンピュータを用いた大規模計算技術面での整備を中心に行う。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

「変換効率の高いエネルギー材料(熱電変換材料、太陽電池材料等)の探索スクリーニングと、ナノ構造を創出する為のプロセス探索を計算機上で行う為に必要な理論面での整備を、特にスーパーコンピュータを用いた大規模計算技術面での整備を中心に行う」ことが本課題の成果目標である。このためにはエネルギー変換効率がナノ構造により増大する機構の理解やナノ構造が創製される非平衡準安定過程の理解が必要であり、いずれもそれらが達成された時の学術的な意義は大変大きい。教科書の1章が書けるほどの大きな意義がある。加えてこれらは、「未利用熱」の回収・再利用技術や「熱マネジメント材料」の開発を下支えする学理であるので、非常に大きな社会的な意義も併せ持つ。

[「京」利用状況]

阪大グループのプロセスシミュレーションに関しては、2体力場の計算は阪大・赤井教授の KKR コードに基づいており、並列化が施されている。産総研の非平衡伝導シミュレーション部分に関しては、電気伝導部分のコードに関しては、現状でも 10nm 膜厚程度の材料に対して計算を行う事が可能な為に必要性が差し迫っていないが、フォノン熱伝導度の計算では大変多くの計算機時間が必要となるため、この部分の並列化を急ぎ行う予定である。その完成をまって「京」の利用を行っていく。

[研究実施内容]

昨年度に引き続き、以下の課題の研究を継続する:

- ① 2端子系の熱電特性とその性能指数 ZT の理論研究と第一原理シミュレーション研究。
- ② ナノ接合系の電気伝導機構の研究。その温度依存性の理論研究と接触抵抗と界面構造の研究。
- ③ 自己組織的ナノ構造生成機構の計算シミュレーション研究。
- ④ 不揮発性メモリ材料とそのメモリ機構の計算シミュレーションを用いた研究

2.2.2.1(5) マルチスケール材料科学

第5部会 代表者：香山正憲(産総研)

1) 部会全体の取り組み

[研究課題概要]

様々な構造材料、機能材料を対象に、その構造や機能を高精度にシミュレートする計算技術を「京」の活用を通じて開発・整備する。実際の材料は、多結晶体であり、様々な析出相を含む微細組織など、複雑構造を有しており、そうした構造が材料機能の発現と関わっている。従って、材料の構造や機能を正しく扱うには、原子・電子の挙動から、粒界、異相界面、各種欠陥、さらにメソスケールの微細組織など、マルチスケールでの取り扱いが不可欠である。また、微細組織の形成過程や安定性を理解するには、内部エネルギーのみならず、有限温度や各種成分の化学ポテンシャルを含めた自由エネルギーの取り扱いが必要となる。H25 年度から本格始動する第5部会では、材料の有するマルチスケール性が顕在化される4つの課題(重点課題と3つの特別支援課題)を介して、様々な材料の電子構造、微細構造や機能、特性を対象に、マイクロからメソ、マクロまでをつなぐマルチスケール計算技術の開発、検討を行っていく。

[社会的意義]

構造材料、機能材料の構造や機能、特性は、本質的にマルチスケールに渡ることが特徴であり、そのため、高精度計算機シミュレーションを実現するには、独自の工夫が必要となる。材料のマルチスケール性の特徴や付随する計算上の問題点は、以下の諸点に集約し得る。第一に、多くの実用材料は、単結晶ではなく多結晶で、微細組織を有する構造である。それらを丸ごと第一原理計算で扱うことは困難である。第二に、微細組織は、内部エネルギーのみではなく、有限温度の効果や合金・添加成分の化学ポテンシャルを含めた自由エネルギーに支配される。また、必ずしも熱平衡状態でない場合も多い。従って、電子・原子スケールの自由エネルギーを基にして、微細組織の自由エネルギーを効果的に記述する必要がある。第三に、材料の性質や機能も、マルチスケールに渡る現象である場合が多い。例えば、機械的特性を支配する転位やクラックの挙動は、原子・電子レベルからメソスケールに渡る現象である。

こうした材料のマルチスケールの構造や現象、さらには帰結される機能や特性を効果的に扱う手法の開発は未踏の状態にある。本課題の遂行により、材料科学分野での高精度シミュレーション技術が確立されれば、優れた強度と靱性、耐熱性を併せ持つ金属材料の開発が飛躍的に進展すると考えられる。これは、高効率のエネルギー変換技術、輸送機器の省エネ化、大型建造物の耐震性向上等に繋がり、持続発展社会のために不可欠である。さらに、このような本部会の重点課題で対象とする構造材料に加えて、特別支援課題で取り上げる機能材料も、様々なエネルギー・環境技術や通信・電子技術、輸送技術、機械技術・製造技術、ロボット技術、大型建造物などの社会インフラから生活・医療・介護等に至るまで、我々の社会を支える基盤材料として重要な役割を果たしており、本課題の遂行は機能特性の効果的な開発や評価に対して大きな貢献をし得る。

2) 研究開発課題内容

[平成24年度の評価による指摘事項]

作業部会からの指摘は以下のように集約できる。

第5部会に共通なこと

- ① 実験研究者・技術者からもコメント等を求め、実社会と密接に関係する成果を期待。関連する国のプロジェクトも視野に入れ、共同して「マルチスケール材料科学」の発展を担うべき。
- ② 材料インフォマティクス手法などによる新規材料探索などの戦略も検討すべき。
- ③ 各課題間で分野の相違、ばらつきが大。共通の側面を整理し、統一的な解明を目指すべき。

重点課題

- ④ 重点課題(金属系構造材料)について、具体的内容を明確化するべき。粒界や界面には、Phase Field法のような取り扱いが必要。

特別支援課題

- ⑤ 誘電体の課題についての過剰なモデル化への懸念。

[平成 25～27 年度の実施計画と成果目標]

上述の指摘事項の内、④と⑤に関しては後に項目毎に検討するため、ここでは第 5 部会に共通の①～③への対応を中心に実施計画と成果目標を記述する。

本課題と関連するプロジェクトとして、JST 産学共創基礎基盤研究プログラム「ハミルトニアンからの材料強度設計」、科研費新学術領域「バルクナノメタル」、元素戦略プロジェクト「構造材料研究拠点」等が進行している。後二者は実験も含めたプロジェクトであり、メンバーも一部共通している。上の①の指摘事項に対しては、これら関連のプロジェクトとできる限り協調体制をとりながら(たとえば合同の研究会やシンポジウムの開催)、密な連携を図ることで対処する。既に、各プロジェクトの責任者の間で合同のシンポジウムを開催することに合意が得られており、本プロジェクトが本年度の第一回のシンポジウムの企画を行う。

②に関しては、既述のように本部会の課題の共通項は材料のマルチスケール性にあり、これを取り扱う各課題の手法について議論や検討を行う場を頻繁に設ける。特に、第一原理計算を Phase Field 法に繋げる方法については各課題の共通的な問題であり、これを対象にした議論の場を設ける。また、前年度までは、CMRI 全体としてのシンポジウムを年に 2 回開催してきたが、個々の課題を集中的に議論する研究会は開催していない。課題の具体的な遂行のためには、このような小規模でも集中的な討論の場が必要であり、課題担当者を中心にした独自の研究会を実施する。

③に関しては、調査・検討を進め、「京」や後継機の活用策についても検討する。

平成 25～27 年度の実施計画・成果目標を整理すると

第一に、重点課題や特別支援課題で、具体的な研究内容や「京」を用いた実行計画の立案を進める。CMRIの研究会などを活用する。実験家や各種プロジェクトとの議論を重視する。

第二に、重点課題と特別支援課題の協調的・相補的な発展を図るため課題担当者で独自に研究会を実施する。共通する検討課題として、第一原理計算をPhase Field法に繋げる方法について議論を深める。

第三に、各課題で、上記の指摘事項への対応を具体化する。重点課題(金属系構造材料の課題)については、課題内容をさらに明確化し、Phase Field モデルに繋ぐ方法を検討する。誘電体の課題では、モデル化の程度について検討する。

第四に、「京」での計算の実行を重点課題から各支援課題へ広げていき、大規模計算の経験を交流しながら、マルチスケール計算技術についての議論を深めていく。また、特別支援課題をさらに増やして、材料科学分野での大規模計算やマルチスケール計算科学の普及・振興を進めていく。

第五に、材料インフォマティクス手法等を用いた新規材料探索について、手法や可能性を調査、検討する。第一原理計算との連携、データベースの操作、大規模並列機の活用法等を調査し、検討する。

3) 平成 25 年度の具体的な実施計画

[部会活動]

本第 5 部会の発足は平成 25 年度であり、早急に体制を整備して他の部会と協調できるような成果を上げる必要がある。特に重点課題はすでに具体的な計算が開始されており、成果も挙がりつつあるが、特別支援課題に関しては開始したばかりであり、具体化が急がれる。このために、今年度は CMRI の全体のシンポジウム以外に各課題に特化した小規模の研究会をいくつか開催する予定である。また、現段階で特別支援課題の対象は 3 課題であるが、物性や分子グループとの連携を考えると、さらに 2 課題程度を増やして、材料科学のテーマに対する物性や分子の斬新なアプローチ法を導入したい。

昨年度まで、国際会議 ACCMS-VO を共催してきたが、今年度もこの会議を 11 月に開催予定であり、さらに、International Alloy Conference も予定している。また、例年と同じく並列計算の講習会も行い、CMRI 全体としての意識の向上や計算技術の底上げを図る。

材料インフォマティクス手法等を用いた新規材料探索について、手法や可能性の調査、検討を開始する。

[連携活動]

(部会連携)

部会内の連携としては、重点課題と3つの特別支援課題の間で、共通の課題であるマルチスケール計算手法の開発について集中的な議論を行い、これをそれぞれの課題遂行に反映させることが最重要である。このために、これまでに記載してきたように、小規模の研究会を頻繁に開催し、「京」を用いた実行計画の道筋を立案する。また、重点課題と特別推進課題の課題遂行者を進捗状況に応じて適宜入れ替える。

(CMSI 連携)

他の4つの部会との協調的・相補的な発展を図るため、前年度までと同じようにCMRIシンポジウムを開催し、他部会からの参加者に第5部会の課題の進捗状況についてコメントを求める。また、CMSI研究会やシンポジウムへの積極的な参加を行う。

又、上述のように、現在の第 5 部会は材料科学のメンバーに特化されているが、物性や分子との協同を考えるとこれらのコミュニティに関連したテーマを 2 題程度新規に追加することが望まれる。これはすでに昨年度から検討していたことであり、鉄鋼材料の有限温度磁性や材料の腐食防食が具体的なテーマとして考えられる。現段階では、これらのテーマは準備中であり具体化されていない。今年度は物性、分子と緊密な連絡を取りながら、これを特別支援課題に具体化していきたい。また、エネルギー関連の課題の遂行、あるいは課題の再構築化に関して、これまで WG でも指摘されているように、部会を超えた連携が必要であり、第 5 部会も柔軟に対応する。

(外部連携)

これまで CMRI ではシンポジウムに企業からの研究者を招いてきた。多くの材料科学の研究の出口が工学や製造にあることを考えると、用途や生産過程を考慮した研究が大切であることは言うまでもない。特に重点課題では材料の強度を取り扱うため、鉄鋼業や素材産業からのインプットを尊重する。加えて、すでに記したようにいくつかの関連大型プロジェクトが走っており、これらの関連プロジェクトと合同の研究会を開催するなどして連携を図る。

[研究開発課題の実施]

i) 重点課題7: 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発

[研究開発体制]

(担当者) 香山正憲(産総研)、澤田英明、川上和人(新日鉄)、尾崎泰助(北陸先端大)、
尾方成信、譯田真人(阪大)、田中真悟、Vikas Sharma(産総研)

関連するプロジェクトとして、JST 産学共創基礎基盤研究プログラム「ハミルトニアンからの材料強度設計」、科研費新学術領域「バルクナノメタル」、元素戦略プロジェクト「構造材料研究拠点」等がある。後二者は実験も含めたプロジェクトである。メンバーも一部共通しており、本重点課題と問題意識が共通し、連携しながら進める。

[研究開発課題概要]

飛躍的に優れた構造材料や耐熱材料等の開発は、エネルギー変換機器の効率の飛躍的向上、輸送機器の超軽量化による省エネ化など、エネルギーの有効利用のために不可欠の課題である。また、高信頼性の大型構造物など、社会基盤を支える技術である。こうした実用材料は多結晶体であり、種々の析出相や欠陥で構成される微細組織を持ち、それらが機能を支配している。こうした材料の高精度設計のために、ミクロの電子・原子の振る舞いからメゾの微細組織の構造や特性を理解し、マクロの機械的性質や機能を予測するマルチスケール組織設計・評価技術の開発が必要である。そのために、各結晶相のみならず、異相界面・粒界・転位等の大規模複雑構造の第一原理計算を行い、合金成分・不純物・添加元素(レアメタル)の挙動や役割を明らかにするとともに、それらを Phase Field 法に繋げる手法を確立する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

金属系の構造材料の開発では、転位の動きを抑えて強度を上げ、一方で、クラックの進展を防いで靱性(粘り強さ)を向上させるために、粒界や転位を高密度に入れたり、化合物相や変態相を析出させる等の方法を介して、強度と靱性を併せ持つ微細組織が形成される。このために、様々な合金成分、微量添加元素(レアメタルなど)を入れ、各種の高温処理による析出物・変態相の形成や、加工等による転位の導入等が行われる。飛躍的に高性能の材料を開発するためには、こうした微細組織の構造、形成機構を解明し、その機械的性質の発現機構をマルチスケールにわたって理解することを通じて、設計技術を構築することが必要である。

本重点課題で対象とする鉄鋼材料の開発では、例えば、Nb、Ti、Vなどの遷移金属成分を加えて、遷移金属炭化物、窒化物として析出させることで、転位の動きを妨げて強度を上げ、また脆化の原因となる残留水素を界面にトラップさせるという指針がとられる。析出初期には、整合界面(炭化物(100)/Fe(100)の方位関係等)を形成するが、成長に伴い、格子misfitによる周囲の歪・応力の増大のため、非整合界面(大きな周期の部分整合界面)に遷移すると考えられる。従って、整合界面、部分整合界面の諸特性と遷移の臨界サイズを見積もることが求められる。さらに各種の転位や粒界の構造、それらと合金成分、添加元素との相互作用の解明が必要である。

本重点課題では、まず、格子misfitを取り入れた異相界面(金属炭化物/Fe界面等)や、複雑な粒界、転位の大規模第一原理計算を、オーダーN手法であるOpenMXを用いて行うことで、未解明の複雑構造を明らかにし、構造の安定性に及ぼす合金成分・不純物・添加元素(レアメタル)の挙動や役割を解明する。また、QMASコードによる局所エネルギー、局所応力解析を行い、構造と機械的性質の相関の詳細を明らかにする。さらに、こうした解析結果を自由エネルギーに反映させ、Phase Field法に繋げることで、有限温度下における微細組織の形成機構の解明、機械的特性の評価を行う手法を確立する。

本課題には、以下の科学的・学術的意義がある:

材料強度は因果関係がミクロ(電子、原子レベル)からメゾ(微細組織)を介してマクロ(実材料)に及ぶ典型的な

マルチスケール現象である。従って非線形性が強い為に、個々のスケール域における強度の解析は行われてきたものの、全スケール領域を統合的に繋ぐような解析手法、予測手法の開発が遅れている。このことが材料強度の高精度の定量的予測・評価を拒む大きな理由である。本課題の遂行により、合金の材料強度学に高い精度の定量性をもたらすことが可能と思われる。これはひいては工学的にも材料設計手法の確立に貢献することを可能にする。

又、レアメタルを添加することで優れた強度や靱性、耐熱性を持つ材料が開発されている。しかし、レアメタルの析出物がどのように形成されるのか、あるいは、粒界や転位とどのように相互作用を行うのか等の微視的機構は未解明の状態である。このようにレアメタル元素を始めとする元素の役割が解明されれば、合金元素代替の方策が明らかとなり、代替材料開発が飛躍的に進むなど、元素戦略上の意義は極めて大きい。

「京」利用状況

オーダーN法第一原理計算プログラムOpenMXを用いて、TiC(100)/Fe(100)界面の整合界面、部分整合界面の大規模構造計算(4319原子)を実行している。プログラム開発者の尾崎泰助ら(当課題メンバー)を中心に「京」でのOpenMX最適化、調整、テストを行った。また、QMASの「京」でのテストも行っている(田中真悟ら)。

研究実施内容

異相界面・粒界・転位など、微細構造が機能を支配する金属系構造材料の高精度設計のために、ミクロの電子・原子の振る舞いからメゾスケールの微細組織の構造や特性を理解し、マクロの機械的性質や機能を予測するマルチスケール組織設計・評価技術の開発を行う。そのために、(1)結晶相のみならず、異相界面・粒界・転位等の大規模複雑構造の第一原理計算を行い、微視的な原子間結合の様子や原子・電子の機械的挙動、合金成分・不純物との相互作用等を明らかにする。(2)それらをPhase Field法に繋げ、微細組織を設計する手法を確立する。特に、マルチスケールを対象にしたPhase Field法では、離散格子の自由エネルギーを連続体のそれへ粗視化する手法の開発がキーと思われる。このことはこれまでも指摘しているものの開発が遅れているものであり、鋭意取り組む必要がある。

(1)に関しては、引き続き、鉄鋼材料中のTiC(100)/Fe(100)界面等の構造モデルの大規模第一原理計算をOpenMXコードを用いて進めるとともに、QMASコードを用いて、界面近傍の応力やエネルギー分布の精密解析を試みる。さらに、鉄鋼材料中の転位芯構造のモデルを構築し、OpenMXによる大規模第一原理計算を実行し、添加元素との相互作用を検討する。(2)に関しては、第一原理計算とPhase Field法をつなぐパラメータの特定、弾性エネルギーのような長距離力を離散格子上の自由エネルギーに導入する手法の開発を進める。

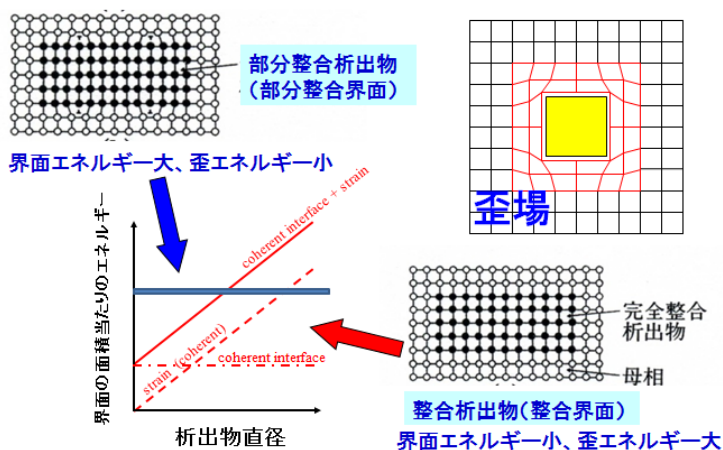


図 析出物の成長の伴い、整合界面から部分整合界面に遷移する様子。

ii) 特別支援課題1: 合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算

[研究開発体制]

(担当者) 大野宗一(北海道大学)、高木知宏(京都工芸繊維大学)、澁田靖(東京大学)

[研究開発課題概要]

合金材料の更なる高機能化・高品質化を達成するために、 casting・凝固プロセスにおいて材料組織を高精度に制御することが強く求められている。しかしながら、凝固組織をシミュレートする強力な手法として発展してきたフェーズフィールド・モデルが扱えるシステム・サイズは、計算負荷の点からデンドライト数本のレベルに限定されている。一方で凝固組織制御の主眼は、デンドライトを最小の構成要素としたときの要素間の相互作用とその要素の統計的挙動にある。本研究課題では、1)原子レベルの手法による凝固現象の高温物性値の算出、2)デンドライトの高精度計算を可能にする定量的フェーズフィールド・モデルの構築、そして 3)フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化によるデンドライト集団組織の解析、の三つの課題を遂行し、凝固工学における喫緊の課題であるデンドライト集団の競合過程(規則性、淘汰則、偏析挙動)の解明を試み、合金の凝固組織に対する高精度制御法の発展を目指す。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

本課題の成果目標は、大規模フェーズフィールド・シミュレーションによってデンドライト成長過程を高精度に記述可能にすること、そして、そのシミュレーションによって組織の配向性やサイズ、さらには凝固偏析の制御にかかわるデンドライト組織形成メカニズムを解明することにある。その知見は一方向凝固や連続 casting など異なる casting・凝固プロセスにおける組織制御において有益な情報となることが期待される。また、本課題で開発する定量的フェーズフィールド・モデルの枠組みは、デンドライト成長のみに限らず、一般の拡散相変態に適用可能であるため、固相変態における組織制御の分野にも展開可能である。加えて、原子レベルの手法に基づく高温物性値の算出とその物性値を用いた定量的フェーズフィールド・シミュレーションの取り組みは、原子レベルと組織レベルの手法の相補的アプローチに相当し、この取り組みはより高度なマルチスケール・モデリングへの足掛かりになることが期待される。これらの点に本課題の科学的・学術的意義がある。

[「京」利用準備状況]

当課題のメンバー(高木ら)は、東工大の TUBAME で数 mm サイズのシステムを対象とした大規模フェーズフィールド・シミュレーションの実績がある。また、担当者間でコードの並列化に関して情報交換を行っており、「京」の利用に向けた準備を進めている。

[研究実施内容]

本研究課題では、1)原子レベルの手法による凝固現象の高温物性値の算出、2)デンドライトの高精度計算を可能にする定量的フェーズフィールド・モデリング、そして 3)フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化によるデンドライト集団組織の解析を実施する。1)は澁田、2)は大野、3)は高木が主な担当者であり、鉄基合金を主な対象として進める。

まず、1)の課題では、固液二相共存状態及び凝固・融解現象を半経験的(EAM) MD シミュレーションにより原子レベルで解析し、フェーズフィールド・モデルの計算に必要な固液界面エネルギー及び動力学係数を算出する。固相の結晶面の方向によってこれらの物性値に異方性が生じ、その異方性を高精度に算出することが組織形成を適切に計算するための鍵となる。平成 25 年度は特に純鉄の固液界面エネルギーを対象とした高精度計算を実施する。2)の課題では、与えられた物性値のもとで固液界面移動を定量的に再現する定量的フェーズフィールド・モデルを構築する。モデルの妥当性は、界面幅(計算グリッド間隔)に対する、成長速度・曲率半

径・濃度プロファイル等の収束挙動によって評価する。平成 25 年度は多元系凝固を扱う定量モデルの開発に取り組む。3)では定量的フェーズフィールド・シミュレーションの大規模化を行い、本課題の目的であるデンドライト集団的成長挙動の解析を行う。デンドライト組織形成を記述する際は、数 100nm レベルの空間分解能を要するが、凝固組織制御で対象とする空間スケールは mm スケールである。したがって、本研究課題における計算は 10^9 - 10^{12} オーダーの空間メッシュ数を必要とし、これは「京」の活用が必須の計算規模である。平成 25 年度においては、二元系合金のデンドライト成長を対象にして並列化コードの構築を行う。

iii) 特別支援課題2: 超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化

[研究開発体制]

(担当者) 西松毅(東北大学)、森分博紀(ファインセラミックスセンター)、Scott Beckman(アイオワ州立大学)

[研究開発課題概要]

われわれが開発している強誘電体薄膜キャパシタのための超高速分子動力学シミュレーションプログラム feram を改良し、強誘電体薄膜キャパシタの

- ドメイン構造のダイナミクスとその温度および電極依存性
- 焦電効果と電気熱量効果

を直接的にシミュレートできるようにし、強誘電体薄膜キャパシタの高性能化の知見を得る。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

上記の課題概要のとおり、強誘電体薄膜キャパシタのダイナミクスや熱的性質を直接的にシミュレートできるようにすることを目標とする。組成や強誘電体薄膜キャパシタの構造がその性質に与える影響を解明して予測できるようにし、組成や構造の最適化の方針を編み出して、強誘電体メモリ (FeRAM)の高性能化や焦電エネルギーハーベスティングや電気熱量効果による固体冷却の高効率化に資する。

実験的手法では直接観察することの難しい電場下の強誘電体のバルクや薄膜のドメインのダイナミクス等を直接的にシミュレートできるようになれば、その理解が大きく前進し、本研究が他にはまだ例のない最初のものとなる。

また、同時に第一原理計算を用いて、強誘電体メモリや焦電効果と電気熱量効果とに最適な新しい材料を探索する。特に強誘電体の組成や強誘電体-金属電極界面の影響を分子動力学シミュレーションの結果と比較しながら行う。担当者には半導体および絶縁体の第一原理計算に豊富な経験がある。

近年、環境保護の観点から毒性のある鉛を使用しない工業製品(Pb-free)の実用化が求められている。しかしながら、数多くの試作実験がなされてきたにもかかわらず応用上必要な特性(室温前後での使用を想定した場合に必要な転移温度等)をもった Pb-free な強誘電体材料は現在のところ合成が困難である。強誘電体メモリや焦電デバイスもその例外ではなく、 $\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$ (PZT) ベースのものがよく用いられている。物性シミュレーションの究極の目標のひとつは、このような応用上必要とされる特性を持った物質をコンピュータにより物質設計 (Material Design) できるようにすることであるが、本研究は強誘電体のシミュレーションにおいてそのマイルストーンとなりうる。計算科学の分野から第一原理計算とそれに基づいた分子動力学計算を通して学術的にも工業的にも社会に貢献しうる。

[「京」利用準備状況]

feram は「京」および FX10 や SR16000 で並列化と最適化が済み、これらのスーパーコンピュータでいつでも実行可能である。

[研究実施内容]

研究担当者らは強誘電体薄膜キャパシタに特化した高速分子動力学計算のプログラム feram を独自に開発し、現有し、すでに多くの成果をあげている。本プログラム feram は、第一原理計算により得られた有効ハミルトニアンに基づく分子動力学計算を行う。薄膜キャパシタの高速なシミュレーションは電極(金属板)が電荷に対して静電的な鏡とみなせることを巧妙に利用している。ユニットセル1つにつき1つの電気双極子を定義するという粗視化、逆空間での長距離力の計算、高速フーリエ変換、OpenMP と MPI による並列化など様々な物理的数学的手法と計算機的手法とにより高速化が図られている。また、Linux クラスタやスーパーコンピュータ上で高速に

動作する。誘電率や外部電場に対する応答など様々な物性の評価が可能で、従前のモンテカルロ法と違い、分子動力学計算は真の時間発展計算が可能であるので、昇温/降温過程やヒステリシスループなどの履歴現象がシミュレート可能である。われわれはこのプログラムをフリーソフトウェアとして <http://loto.sourceforge.net/feram/> から公開している。また、CMSI のアプリポータルサイト <http://ma.cms-initiative.jp/> から情報発信をしている。すでにのべ 1500 を越えるダウンロードがあり、国内の数社のメーカーや国内外の研究機関に複数のユーザーを有している。

ドメイン構造のダイナミクスとその温度および電極構造依存性のシミュレーションのためにはすでに BaTiO₃ と PbTiO₃ の第一原理有効ハミルトニアンのパラメータを決定しており、計算をスタートさせている。

一方、今年度は、直接的に電気熱量効果を見積もる方法を開発する。具体的には、例えば、定温のカノニカルアンサンブル分子動力学計算により外部電場下の系の平衡状態を得る(これはすでに feram にインプリメントされている)。その後、外部電場を切ってマイクロカノニカルアンサンブル分子動力学計算(外部の熱浴と接触させない、全エネルギー一定の計算、新しいインプリメントが必要)をすることによって、系の温度がどの程度下がるかを見ることができる。注意すべきは、上述のゆきすぎた粗視化により、系の比熱 C_V を過小評価する可能性があり、結果として焦電効果・電気熱量効果を過大評価してしまうおそれがある点である。この問題は粗視化を多少緩くしてシミュレーションの系の自由度を大きくする(計算量は増えてしまう)等で回避する計画である。

また、結果をアニメーションにより可視化することで電場下の強誘電体のドメイン挙動を明らかにする。われわれには論文の Supplemental Material として強誘電体ドメイン構造の可視化アニメーションの作成経験がある(<http://prb.aps.org/supplemental/PRB/v78/i10/e104104>)。

これらの計算結果は様々な強誘電体の実験と照らし合わせて、検証も行ってゆく。現在も符徳勝(合成、電気特性; 静岡大学)、松浦直人(中性子回折; CROSS 東海)、大和田謙二(中性子回折; 日本原子力研究開発機構)、木口賢紀(高解像度電子顕微鏡像; 東北大学金属材料研究所)、津田健治(収束電子線回折; 東北大学多元物質科学研究所)らの実験家と共同研究を行っている。

さらに現在、強誘電体と磁性体を含めた双極子相互作用のある系の相転移を横断的にシミュレーションできるアプリケーションコード PARADIAS を開発中である(MRS 2013 Spring meeting で発表し高い評価を得た)。他の課題と連携し、材料の相転移の普遍的な理解を目指す。

本研究においては、温度-外部電場や温度-面内圧縮応力(気相成長薄膜強誘電体キャパシタの基板による)などの相図を描くことが重要である。温度や外部電場の変化に応じて物性がどう変わるか、スパコンの大きな容量を利用し(キャパシティコンピューティング)、1 ノードの計算を、条件を変えてたくさん行うことで、相図を描くための統計的なデータを集めることができる。feram を使って、スパコンの新しい利用法を開拓する。

iv) 特別支援課題3: ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス

[研究開発体制]

(担当者) 大野かおる(横国大)、小野頌太(横国大)、佐原亮二(物材機構)、野口良史(東大物性研)、水関博志(東北大金研)、桑原理一(アクセルリス(株))

本研究課題で使用する全電子混合基底第一原理計算プログラムは 1993 年頃から東北大学金属材料研究所で開発されてきたものであり、TOMBO (TOhoku Mixed Basis Orbitals *ab initio* program) の名前がつけられているが、大野、Sluiter、佐原がそれぞれ横国大、デルフト工科大、物材機構に異動し、横国大博士課程を修了した野口および修了予定の桑原は現在東大物性研とアクセルリス(株)にいる。これまで担当者毎にばらばらに開発が進められてきたため、これらのバージョンを一元化し、種々の機能を簡便に使いやすくして、様々な重要課題に応用していくとともに、広く社会に公開することを目的に、全ての担当者が協力しあって作業を進める研究開発体制が出来上がっている。

[研究開発課題概要]

ナノクラスターから結晶までの機能性材料の実験との対応において原子/電子レベルでの特性予測・性能評価に必要な全電子スペクトルとダイナミクスを調べることを目的にして、既存の第一原理計算手法の欠点を補う汎用性の高い全電子混合基底法プログラム TOMBO の開発を進め、それを実用機能性材料研究に応用する。この全電子混合基底法は、1 電子軌道を数値原子軌道関数(AO)と平面波(PW)の線形結合として表す方法であり、孤立系から結晶系までの芯電子から自由電子までの全軌道を 1 電子ハミルトニアンで完全に固有状態として記述できる、我が国が世界に誇ることでできる純国産の第一原理計算手法であり、GW 近似や Bethe-Salpeter 方程式などを用いた精密な電子励起スペクトル計算も可能である。コードは高度にハイブリッド並列化されており、どの計算機でも実行可能である。

平成 25 年度は、TOMBO を用いた材料および物質・エネルギー分野の応用研究として、全電子の枠組みで DFT や TDDFT に基づくダイナミクス計算を行い、化学反応や電子励起反応を調べるとともに、バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づく XPS, UPS スペクトル計算を行い、Bethe-Salpeter 方程式を解く精密な光吸収スペクトル計算を行う。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

密度汎関数理論(DFT)に基づく LDA 等はエネルギー・ギャップを過小評価し、例えば Ge を(相対論的効果を入れたら)金属と予測してしまう。これに対して、多体摂動論に基づく GW 近似は LDA と Hartree-Fock 近似を混合したハイブリッド法を越えて信頼性が高く、高いニーズがある。本研究課題では機能性材料として重要なクラスターや TiO₂ 結晶などの XPS, UPS スペクトル、不純物準位、光吸収スペクトルを多体摂動論に基づく全電子 GW 近似と Bethe-Salpeter 方程式の方法で詳細に調べる。また、金属ナノクラスターを触媒とする水素分子の解離、二酸化炭素から蟻酸の生成、鉄の酸化などの化学反応ダイナミクスを全電子の枠組みで DFT (LDA) や TDDFT (TDLDA) で扱い、これらの反応素過程を明らかにすることを目的とする。同時に TOMBO の開発を進め、年度内に LDA 部分のアカデミックへのソース公開を行うとともに、それを高性能並列コンピュータで実行することにより各種実用有用材料の特性予測とマテリアル・デザインを行い、計算材料科学の発展に貢献する。

[「京」利用準備状況]

既に京や富士通 FX10、日立 SR11000、NEC SX9、SGI などを含む様々な超並列スーパーコンピュータで GW+Bethe-Salpeter 計算が効率的に動くことを確認済みである。

[研究実施内容]

平成 25 年度は、まず、大野と野口が中心に開発してきた LDA/TDLDA ダイナミクス計算と結晶の GW 計算が可能な TOMBO 最新バージョンに、Sluiter が中心に開発してきたバージョンの Broyden 法などを移植して、LDA 自己無撞着計算やそれを用いた構造最適化を高速に行えるようにする。この目的のために CMSI の補正予算の補助を受けて企業委託による移植作業も行う。平成 25 年度中に、種々の機能を簡便に使いやすくして、アカデミックに向けて TOMBO の LDA 部分のソースを公開する予定である。

平成 25 年 3 月に産総研関西センターで実施された OpenMX, QMAS, TOMBO セミナーで、TOMBO の講習を行い、最新バージョンの公開を予告したばかりであるが、7 月に第 1 回 TOMBO セミナーを開催して、東京にて最新バージョン (8 版) の講習を行う予定である。また、同月にタイで開催される The 7th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS7) では最初の 2 日間に TOMBO Workshop を行う予定である : <http://accms7.sut.ac.th/> さらに、11 月に仙台で開催予定の国際会議 ACCMS-VO8 でも TOMBO の普及活動を行う予定である。

さらに、TOMBO の DFT (LDA) を越えた GW 自己無撞着計算においては、交換項にも分極にもパーテックス補正を取り入れた世界最高水準の GW Γ 法の計算ができるように改良を行い、電子相関を精密に取り入れた高精度電子状態計算を行う。これを Bethe-Salpeter 方程式を解く光吸収スペクトル計算に応用し、ナトリウムなどの簡単なクラスターを対象に、その計算性能を調べる。

平成 25 年度は、以上の TOMBO のプログラム改良と普及活動と並行して、材料やエネルギー分野における重要な計算課題に対して TOMBO を用いた応用計算を行っていく。特に、全電子の枠組みで LDA や TDLDA に基づくダイナミクス計算を行い、Ni などの金属ナノクラスターを触媒とする水素分子の解離反応(非断熱過程の取り扱いを含む)、二酸化炭素から蟻酸の生成(CO₂と 2H の反応を中心にして)、鉄の酸化腐食(水酸化鉄 II の生成プロセスの要素シミュレーション)などの化学反応素過程を調べるとともに、バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づいて、種々金属・半導体クラスターから酸素欠陥や Nb 不純物を含む TiO₂ 結晶の XPS, UPS スペクトル計算を行い、さらに Bethe-Salpeter 方程式を解く世界最高精度の光吸収スペクトル、XANES スペクトル計算を行い、実験から得ることが難しい材料の電子特性を精密に予測・解析する。

2.2.2.2 計算科学技術推進体制構築(計画)

我々の目的は、「京」を中核とする大規模並列計算資源「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(以下、HPCI)」を用いて、これまでの計算環境では成しえなかった画期的な研究成果を上げるのみならず、サイエンスのブレークスルーのために将来必要となる HPCI システムを検討し、同時に、希少金属代替材料やエネルギー創成の問題など社会的に重要喫緊である課題を、計算物質科学を通して解決していくための継続的な取り組みを図ることにある。そのために、「京」をはじめとする計算機資源の効率的なマネジメント、学術と社会のニーズに合わせた人材育成、計算物質科学の質的变化のシーズを育てる分野振興、産官学連携、海外連携を推進する。また広報やソフトウェア公開を通じて、研究成果の普及を図り、若手研究者のキャリアパス形成を進める。また、各拠点において、大規模計算をサポートする機能も構築する。計算科学研究機構、他の戦略機関、計算機科学コミュニティとは、研究と人材育成の両面で連携を図る。このような活動を通じ、世界有数にして東アジアでは群を抜く最大規模のネットワーク型拠点として、東アジアおよび国際社会における計算物質科学研究教育の中核となることを目指す。

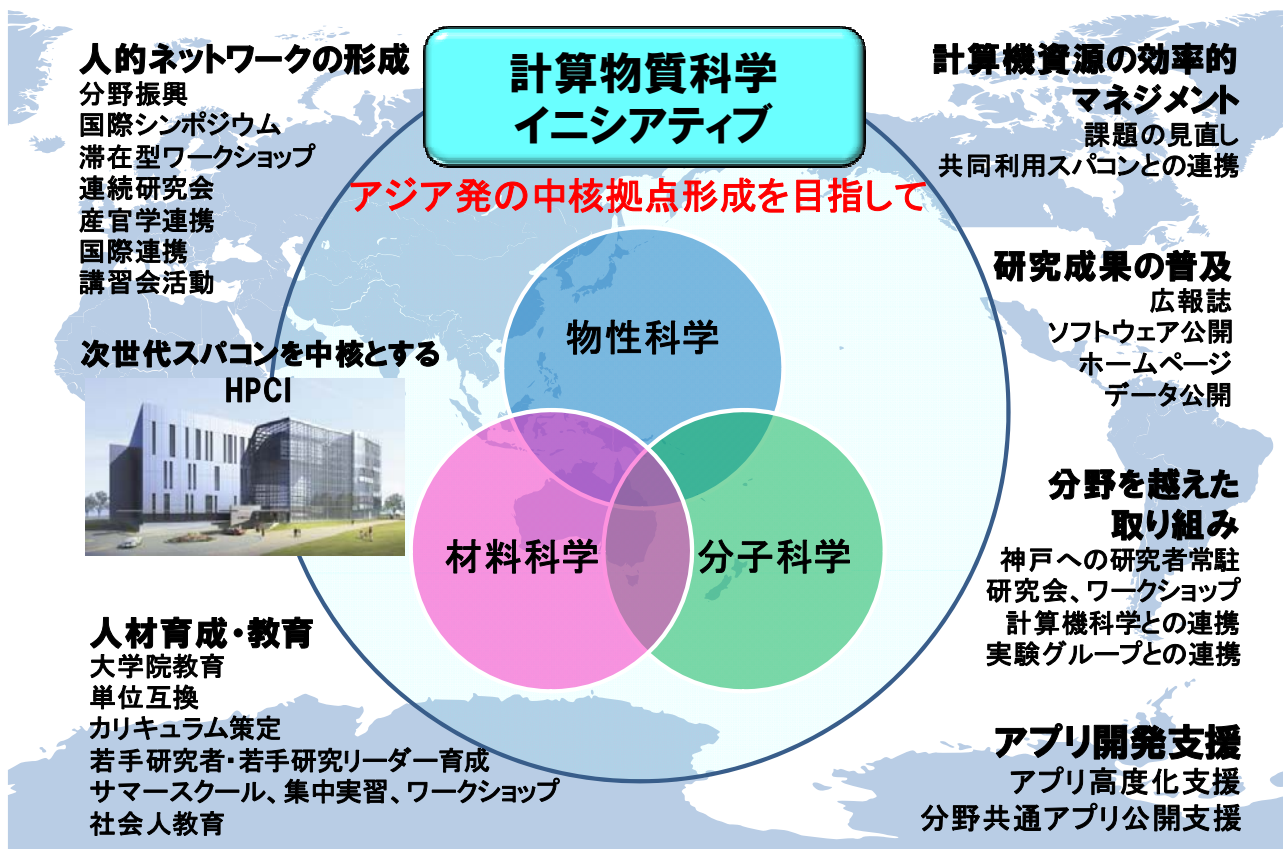


図 2.2.2.2-1 C MSI における計算科学技術推進活動

2. 2. 2. 2(1) 計算機資源の効率的マネジメント

1) 平成 24 年度の評価による指摘事項

計算物質科学振興発展のためには、ハードウェアだけでなく、アプリケーションソフトウェアも提供し、理論・実験研究者、企業研究者がハードとソフトを活用する環境を整えていく必要がある。また、アプリ利用にかかわる講習会等の後に、受講者がアプリの試験利用を継続して大規模計算の効果を実感してもらう環境整備が必要とされている。

2) 平成 25～27 年度の実施計画と目標

研究の進展に合わせ柔軟な計算資源配分を行うため、重点課題、特別支援課題のアプリケーション並列化・高度化のための体制を充実するとともに、参加研究所の共同利用スパコン運営委員会と連携して、新たな支援課題を設定して、計算科学のすそ野を広げることに努める。また、並列計算に関わる研究者の技術レベルや計算規模が非常に広範囲にわたることを考え、人材育成・教育小委員会との連携に基づく講習会などを通じて、広い範囲の研究者が計算科学的手法によって研究を進めることのできる環境を整備する。そのために、参画機関、および、大学情報基盤センターの計算資源を戦略機関の目的のために利用する仕組みを継続し次世代スパコンにおける超大規模計算へのスムーズな移行を図る。更に、並列計算の簡便な利用法の開拓を通じて、利用者層を拡大し、分野振興へと繋げるため、重点課題や特別支援課題で用いられるソフトウェアを中心に、並列計算用アプリケーションライブラリとして整備し、特にいくつかのアプリケーションについては、重点的に公開のための改良に努める。これらのアプリケーションソフトウェアに関しては、実際の利用に即した実習付きの講習会を実施する。

3) 平成 25 年度の具体的な実施計画

i) 計算資源のマネジメント

平成 25 年中に共用が開始される特定高速電子計算機施設の戦略利用枠に関しては、重点課題、特別支援課題間でその配分を調整する。その際、大きな配分のある重点課題については、学術的・社会的意義、その目的の明確性・具体性に応じて企画室会議・運営委員会などの議論に基づいて配分を決定すると同時に、各課題において利用される予定のアプリケーションの高度化準備状況に応じて計算実施時期を調整する。この調整の技術的な側面については、神戸分室で情報集約と整理を行う。とくに、平成 25 年度はプロジェクト全体の中心にあたるため、平成 26・27 年度に向けた本格的な課題の整理見直しを行う。

また、戦略利用枠の一部を特別推進課題などのアプリケーション高度化支援のために利用し、特定高速電子計算機施設利用の一般課題として利用申請する研究課題の支援を行う。

ii) 各戦略機関の共同利用スパコン資源、CMSI 計算資源の活用

特別支援課題、支援課題など、重点課題以外を含めた計算科学全体の分野振興の観点から、戦略機関で保有するスパコンや、CMSIの費用で確保するそのほかの計算資源をバランスよく配分する。平成 24 年度の京コンピュータ一般共用開始後の研究においては、物性研究所と分子研究所に関して共同利用スパコンの一部を活用して、大規模並列実行の試験的運用を行ったが、平成 25 年度以降については、これを東北大学金属材料研究所にも拡大するとともに、なお不足する計算資源の補填をするため、大学情報基盤センターの計算資源を借用し、重点課題の実施、および、次の重点課題として準備している特別支援課題、および支援課題に用いられるプログラム開発や性能評価を推進する。更に、特定高速電子計算機施設で計算された結果を処理加工するため、平成 23 年度 CMSI 神戸拠点に導入したポスト処理システムを増強し、その活用を促進する。一方、物性研に導入したハイブリッド並列計算用 PC クラスタシステム(ψ)を、並列化の初心者から高度化プログラムの動作確認、また、企業内研究者のトライアル利用等、幅広い用途で利用可能なように運用を行い、これらによ

て分野における並列化計算の振興を図る。さらに、計算物質科学で得られた結果を一般社会にアピールする際に重要となる可視化技術を強化するため、可視化アプリケーションを導入して利用促進を図る。

・物性研スパコンの戦略利用の予定

東京大学物性研究所では、富士通 PRIMEHPC FX10 を導入し、平成 25 年度からシステム C として運用を開始した(約 90TFLOPS)。CMSI ではこのうちの 60% (物性研全計算資源の 20%に相当)の利用ができるが、CMSI に申請のあった 18 研究課題に対して、東京大学物性研究所の審査のうえでポイントを配分している。「京」に近い環境での大規模計算が通常時から行える環境であり、平成 24 年度までのシステム B と比較して大規模計算がより高い頻度で実行できるような運用体制となっている。

・分子研スパコンの戦略利用の予定

平成 25 年度の利用申請に関しても、これまで同様、分子研の全計算資源の 20%を上限に CMSI 利用枠での募集を行った。CMSI として、合計で 10 課題(19 グループ)からの申請があり、その利用希望は全計算資源の 13%に相当している。申請書類をもとにスパコン連携委員および各部会代表者からなる審査委員会での審査、その審査に基づく計算科学研究センター運営委員会における審議を経て、これらの課題について利用が許可された。

高塚和夫(第 1 部会) 分子における電子の動的過程と多体量子動力学

笹井理生(第 1 部会) 凝縮分子科学系の揺らぎとダイナミクス

押山 淳(第 2 部会) 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究

尾形修司(第 2 部会) ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション

岡崎 進(第 3 部会) 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開

岡本祐幸(第 3 部会) 拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明

山下晃一(第 4 部会) 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化
にむけた大規模数値計算

吉田紀生(第 4 部会) バイオマス利用のための酵素反応解析

大野宗一(第4部会) 合金凝固組織の高精度制御を目指した dendrite 組織の大規模数値計算

西松 毅(第4部会) 超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化

・金研スパコンの戦略利用の予定

東北大学金属材料研究所では、HITACHI スーパーテクニカルサーバ SR16000 モデル M1 を導入し、平成 24 年度から運用を開始している。CMSI ではこの計算機資源の 20%を利用できる。CMSI より申請のあった10課題に対して 30 名のアカウントを作成した。「京」とは大きく異なるアーキテクチャーであるが、プログラムチューニングに必要なジョブ毎の CPU コアの利用率、理論性能比などの情報をユーザーに提供できる運用体制となっている。

・その他の戦略利用の予定

「京」で計算された結果を処理加工するために平成 24 年度に CMSI 神戸拠点に導入したポスト処理システム(phi)や、物性研に導入したハイブリッド並列計算用 PC クラスタシステム(psi)の一部を、CMSI 主催の理論家・実験家に向けたアプリケーション講習会や並列化実習時の実習環境としても利用する。また、CMSI では次世代のスパコンのひとつの候補となっている、コプロセッサ型のメニーコアアーキテクチャへの習熟をはかるために物性研に導入した Intel Xeon Phi(psimic)を活用し、CMSI メンバーのメニーコアの習熟をはかる。PC クラスタ psi に関してはさらに、並列化の初心者から高度化プログラムの動作確認、また、企業の方のトライアル利用等、幅広い

用途で利用可能なように運用を広げ、並列化計算の分野振興を図る。さらに、計算物質科学で得られた結果を一般社会にアピールする際に重要となる、可視化技術を強化するために導入した、可視化アプリケーションに関しては、計算結果の一般社会に対する“見える化”、および、可視化による結果理解の深化のため、より一層の利用促進を図る。

iii) 大学情報基盤センターとの連携とスパコン利用

並列化技術に関する共同研究の実施に向けた環境づくりとして、計算機科学の専門家との連携を進める。そのために、東京大学情報基盤センターなどと協力して共同企画を行う。さらに、産業界からの参加者に関しては、「京」および情報基盤センターの利用を支援する。具体的には、東京大学情報基盤センターの保有する FX10 の利用に関する相談や SC13 などの国際研究集会などでの共同出展などを検討・実施する。

iv) アプリケーションのマネジメント

ソフトウェアの公開・普及活動を、計算環境のもっとも基本的な要素と位置付け、開発者と利用者の交流を深めるべく、計算物質科学のポータルサイト「MateriApps」の運営を行う。MateriApps では、重要なアプリケーションを選定し、現開発者と協力しながら、可用性の向上も含めた高度化を進める。また、コミュニティソフトウェアとして整備するために、公開ソフトウェアの共同開発のためのプラットフォーム Github の利用支援なども行う。さらに、産官学連携小委員会および各戦略機関コミュニティと連携して、学術的・社会的ニーズに適合したソフトウェア利用環境を構築するため、各地でのソフトウェア利用講習会などの企画のほか、使い勝手のよい計算資源の確保・運用を進める。

v) 各戦略機関コミュニティとの連携

CMSI では、各分野の研究者のすそ野を広げると同時に、研究の進展に合わせ柔軟な計算資源配分を行うため、平成 25 年度も支援課題の選定を行う。各研究者の推進する研究課題を、共用利用が開始された「京」を含む HPCI 計算資源の一般利用研究課題に適した課題として応募を促進するため、HPCI 研究課題への申請と CMSI 支援課題への申請をシームレスに行えるようにする。また、広く各戦略機関のコミュニティに対し CMSI 主催の各種研究会や講習会への参加を呼びかけ、大規模並列計算手法や計算機利用法に関する情報展開を行い、同時に各研究者の課題についての討論・評価の機会を設定する。

2.2.2.2(2) 人材育成

1) 平成 24 年度の評価による指摘事項

教員採用時期の遅れによる計画遅延を挽回するため、配信講義への取り組みを加速する必要がある。全国配信可能な講義内容の検討実施とともに、各教育拠点間での単位互換を本格的に検討する必要がある。また、学生、研究者、社会人への教育とアプリ普及の活動を連携させて取り組むことにより、計算物質科学の裾野拡大と社会への浸透を図ることが可能となる。

2) 平成 25～27 年度の実施計画と目標

24 年度から実施を始めた全国配信大学院教育科目である計算科学技術特論 A、B をさらに充実する。例えばこれを開発者養成のためのコースと位置づけ、さらにユーザーを養成するためのコースを新たに設ける等の工夫によって HPC の本格利用に対応できる大学院教育システムを構築する。また、このような教育システムに不可欠な単位互換制度やそれと同等の効果が期待できる新制度の導入を拠点大学の協力のもとに推進する。

国際協力に関しては、欧米との研究および人材交流を促進するとともに、計算物質科学イニシアティブがアジア最大の計算物質科学コミュニティであることを生かした活動を行い、HPC および計算物質科学に関する教育をタイ、ベトナム、フィリピン、インドネシア等で展開するとともに優秀な人材をアジアから呼び込むことによって、計算科学技術の発展を目指す。

計算物質科学を推進していく上で、長期的な視野にもとづき若手研究者を育てていく必要がある。京あるいはエクサマンシを念頭に、物質科学に供する新しい大規模コードを開発していく能力をもった人材を育てるためのフレームワークやプログラムを構築するとともに、計算物質科学コミュニティからの若手研究者の参加を促す。

これらの計画には HPC を利用できる広いユーザー層の存在が前提である。その意味で最も幅広いユーザー層を抱える産業会への適切な情報と技術の伝達が重要であるが、これを有効的に行うための社会人教育が必須である。社会人をターゲットとした各種チュートリアルコース、ワークショップの開催、場合に応じてコンサルティングの機会を設けることを計画している。

尚、平成 24 年度中に整備した各教育拠点の講義配信設備をより活用していくため、これまで AICS に借用していた多地点接続装置(MCU)を物性研究所に導入する。また、どこの拠点からも講義を配信可能となるような設備も整える。

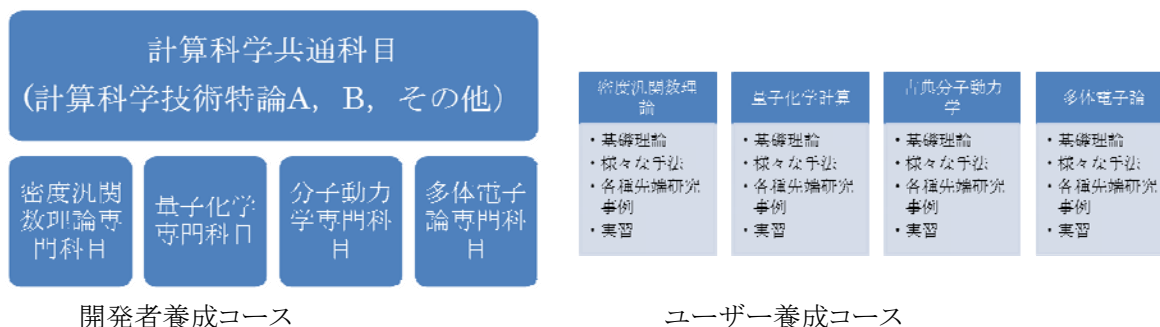
i) 大学院教育

CMSIでの大学院生あるいは若手研究者向けのカリキュラムの具体的な講義内容を決定し、決まり次第開始する。カリキュラムは開発者養成コースとユーザー養成コースで構成する。計算科学の研究では、ソフトウェアを開発するのに必要な知識や技術と、ソフトウェアを使うだけで研究を進めるのに必要な知識や技術では、現在において大きな開きがあり、両方の研究者を一様に育成することは両者にとって不満足とならざるを得ない。研究者のニーズにあったカリキュラムを作るには、この二つに分けるのが良いと考えられる。この大枠のもとに、それぞれの分野に特化した知識や技術を提供するように構成する。

開発者養成コースでは、並列化などの分野にかかわらず一般的なHigh Performance Computing(HPC)の知識や技術に関する内容を用意する。このHPCの“一般教養”的な内容の下にそれぞれの分野に特化した内容を提供する。講義数は、分野によって必要な知識や技術が異なるため、それぞれで決めれば良い。

ユーザー養成コースでは、ソフトウェアが使えて研究に利用出来るのに必要最低限の知識と技術を提供する。これも分野によって内容が異なるため、講義数などはそれぞれで決めれば良いが、一番大事なものは実習での具体的なトレーニングであるので、これは必ず実施する。

これらはテレビ会議システムを用いてオンライン配信で実施する。実習は、それぞれの分野で予定を決めて一箇所に集まり、集中的に実施する。単位認定をするかどうかはあくまで各大学の判断であるので、それ自体は強制しない。しかし、大学院生のみならず日本全体の若手研究者の育成に貢献できる内容とし、講義は可能な限り一般公開として自由に聴講できるようにする。



ii) 国際協力

計算物質科学イニシアティブの主催・共催するシンポジウム、ワークショップ・チュートリアルコース等に国外からの参加を促すとともに、コミュニティの若手研究者、大学院学生に国際交流の機会を積極的に設けていく。また、アジアをターゲットとした計算機マテリアルデザイン(CMD)ワークショップをアジア各地で年会3ないし4回開催し、計算物質科学イニシアティブで提供できるプログラムコードに関するチュートリアルコースを含めた人材育成・教育プログラムを実施していく。東京都大学が中心となって行っている21世紀東アジア青少年大交流計画などと連携して、若手研究者にとどまらず、博士課程学生も短期間受け入れ、短期実習を行い、理論・計算化学研究の教育にも貢献する。東北大学金属材料研究所ではACCMS (Asian Consortium on Computational Materials Science) の短期講習を通じて計算材料科学の教育に取り組んできたが、このプログラムを継続発展させる。東京大学物性研究所や京都大学基礎物理学研究所の滞在型プログラムを含む国際集会のシステムを利用することも想定している。これらと連携してアジアなどの若手研究者(我が国の研究者も参加)を対象とするチュートリアルコースやサマースクールを拠点大学が中心になり開催する計画を推進する。

iii) 若手研究者・若手リーダーの育成

以下に示すような戦略的なプログラムのもとに若手研究者育成を実施する。これまで京コンピュータにおいてチューニングを行い、十分な高速化に成功しているソフトウェアの中からいくつかを選び、そのソフトウェアと開発者を中心としたチームを2年程度かけて形成していく。このチームは、開発者と共に開発を推進するメンバー、開発はそれほどやらないが、ユーザーとしてそのソフトウェアを様々な系に適用するメンバーから構成し、ユーザーの中には実験家からも選ぶ。実験家は実験側からの視点や意見を入れる役割としても重要である。これらのメンバー構成は、ソフトウェアが理論計算の研究者の中で使われる段階、更に実験かも含めた広いユーザーに使われて具体的な問題の解決につながるまでの、それぞれの段階をクリアするための役割を担える人材を育成しつつ、ソフトウェアを育てていくことを目指す。メンバーは大学院生を含めた若手で構成する。

具体的な内容としては、開発をするメンバーは毎週あるいは1ヵ月に数回開発者とミーティングをしながら開発を進める。ユーザーメンバーは使い始めだけは集中的に打ち合わせやトレーニングを行い、それ以降は具体的なテーマの計算の進捗を実験家も交えて定期的に確認する。開発者はこのチームをまとめて研究を推進することでマネジメントの訓練をし、リーダーとしてチームを率いていける能力を養成する。

今年度は中心となるソフトウェアを選び出し、その開発者を中心にチームを形成する。そして、具体的な科学的テーマを決定し、その戦略を立てる。平成26年度以降はそれぞれのチームでスケジュールを決めて、研究を

実施する。これらは京コンピュータの若手人材育成課題などに申請して、人材の育成と重要テーマの研究推進を同時に実施する。

iv) 社会人教育

拠点大学を中心に、計算物質科学に関する社会人教育を企画、実施する。また、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(以下、産応協)、計算科学振興財団と協力して産業界向け人材育成教育プログラムの充実をはかる。これらの実施のために各教育拠点大学における教員のみならず、他大学、産業界に対しても講師の派遣等の協力を要請する。

大学で社会人教育を(大学院社会人枠ではなく)正規の授業として行う場合に生じる制度上の問題を解決していく。例えば、HPCに関する教育を実施するための産学コンソーシアムを立ち上げる等の方策を考えていく。産応協の提供するHPC産業利用スクール等のように産業界が組織した人材育成のためのコースにおいては、大学側は講師を派遣するだけであり、制度上の問題は生じないが、このような場合も計算物質科学イニシアティブで企画していく社会人教育プログラムと整合性を保ち全体として効率の良いプログラムが構成できるよう調整を行っていく。

大阪大学では「大阪大学ナノ理工学人材育成産学コンソーシアム」を通じて社会人教育プログラムを実施しているが、これらと産応協HPC産業利用スクール、計算科学振興財団提供プログラム等を連携させ、充実と拡充を行う。これらには各拠点大学の教員が非常勤講師として参加する。また東京大学、総合研究大学院大学、豊橋技術科学大学、名古屋大学、京都大学、神戸大学の6大学からなる「分子科学社会人教育コンソーシアム」を立ち上げ「分子ナノサイエンス計算科学社会人教育プログラム」を実施することを検討する。実施する内容については、特に、産業界が要求する「人材」の意味を明確にし、それらに対応した社会人教育プログラムを策定する。

3) 平成 25 年度の具体的な実施計画

i) 計算物質科学の教育

(1) CMD ワークショップ

① CMD ワークショップ

今年度は、第23回を平成 25 年9月2日(月)－9月6日(金)の日程で、大阪大学基礎工学研究科 G 棟で開催する。第24回は平成 26 年3月3日(月)－3月7日(金)の日程で開催する。これまで同様に、基礎となる第一原理計算手法の訓練と共に、どのようなアイデアで新物質を設計するのかといったデザインのための考え方を、ワークショップ全体を通して訓練できるようにする。特に、先端研究事例では元素戦略に関連する講師を招き、物質設計という考えがどのように期待されているかを紹介する。

② ASIA CMD ワークショップ

今年度は5月にインドネシア、10月にフィリピン、12月にベトナム、2月にタイの4カ国において開催する。第一原理計算手法の技術的な訓練と、理論計算主導で物質開発をする事例を紹介し、アジア諸国の人材の育成に貢献する。

(2) 計算分子科学の教育活動

① 第 17回分子シミュレーション夏の学校

H25 年度もサポートする予定。新潟大学の院生が幹事となって、9月2日(月)から4日(水)まで、湯沢ニューオータニホテルにて開催する予定。

② 第7回 TCCI シミュレーション分子 - TCCI ウインターカレッジ

分子研にて、昨年度と同様、開催する予定。日程等については調整中。

③ 第2回量子化学ウインタースクール - TCCI ウインターカレッジ

分子研にて、昨年度と同様、開催する予定。日程等については調整中。

(3) 高並列化教育

① 第3回超並列化技術国際ワークショップ

昨年度と同様、開催する予定。場所・日程等については調整中。

ii) 社会人教育

① OCTA 講習会・トレーニング

OCTA 講習会&トレーニングを H25 年度以降も継続して実施し、内容のさらなる充実とユーザーの裾野を広げる活動を推進する。

iii) 大学院教育

i) 各教育拠点の活動状況

(1) 大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター

・CMSI 教育コンテンツ配信講義 CMSI 計算科学技術特論

4 月より計算科学技術特論 A を木曜 3 限(13:00-14:30)の時間で開講する。大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターを配信元として、CMSI 教育拠点をはじめとする10カ所に配信する。4月11日を第1回として7月25日まで15回行う。講師は片桐(東大情報基盤センター)、中田(理研)、渡辺(東大物性研)、山本(神戸大情報)、吉井(名大計算科学センター)、石村(分子研)で実施する。計算科学技術特論 B の講師は今年度決定して来年度開講する。

CMSI 人材育成シンポジウム「応用数理と計算科学の連携Ⅱ」を11月に企画して実施する。計算科学側の数値計算的な問題について、数値解析の専門家との意見交換ができるような内容を企画する。

(2) 東北大学金属材料研究所

H25 年度より大阪大学から配信される CMSI 教育コンテンツ配信講義「CMSI 計算科学技術特論」の開講に伴い、金属材料研究所での受講体制を整備する。金属材料研究所(片平キャンパス)の立地条件を鑑み、大学院生(多くは青葉山キャンパスに在籍)の出席を促すような方策を検討する。

また、H24 年度に引き続き、教育拠点として先行している他大学の活動状況の調査を行い、東北大学での教育の方向性として、材料科学と物性科学におけるマルチスケールシミュレーションをキーワードに教育拠点活動を進めることとして検討を開始した。

H25 年度後期に工学研究科マテリアル開発系にて開講される「計算材料科学」について、理学研究科物理学専攻での単位認定の検討を手始めに、拠点大学方式にもとづいた科目提供制度、単位互換制度などについても検討を開始する。さらに、マルチスケールシミュレーションの基礎や応用に関するセミナーを H25 年度後期より開始し、他大学への配信の準備を始めるとともに、次年度以降、その充実と拡充を図る。

(3) 神戸大学大学院システム情報学研究科

平成 24 年度に引き続き FMO アプリケーションの講習会を CMSI 神戸拠点で開催する。FMO の利用者を核として産官学連携を促進する。また、FMO の使い勝手向上のため、入出力インターフェースの整備を行う。

(4) 名古屋大学大学院工学研究科

名古屋大学では、前年度に引き続き大学院生を対象としたオムニバスの講義「大規模並列数値計算特論」、グローバル 30 大学院講義「Advanced Physical Chemistry」、「計算科学フロンティア連続講義」を担当予定である。また、阪大で開講される「CMSI 計算科学技術特論 A」に講師として参加する。その他、総合研究大学院大学にて平成25年度開講予定の分子科学関連の講義「生体分子シミュレーション入門」について名古屋大学の学生が履修できるよう調整する。なお、前年開講の講義「分子物理化学特論」は隔年のものであり本年は開講されない。

(5) 東京大学 大学院 工学系研究科

東京大学大学院工学系研究科では、平成 24 年度から開講した「物質科学のための計算数理 I」および「物質科学のための計算数理 II」において、引き続き、計算機・プログラミングの基礎から、物質科学分野に現れる計算アルゴリズムの数理、並列計算機を使いこなすための知識と技術、そして研究の最前線で用いられるアプリケーションプログラムの実際を知るという内容の講義を行い、計算物質科学分野において HPC に慣れ親しんだ人材の育成に力を注ぐ。また CMSI の教育コンテンツ配信講義等を活用したセミナー等開催し、分野のスキルアップおよび分野の裾野拡大に協力する。さらに「物質科学のための計算数理 I・II」を教育コンテンツ充実のために整備する事も目指す。

(6) 東京大学 物性研究所 神戸拠点

情報科学、計算機科学を先行する学生を対象とする「コンピュータ科学特別講義」を平成 25 年度も引き続き開催する。

2. 2. 2. 2(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)

1) 計算物質科学の分野振興

i) 平成 24 年度の評価による指摘事項

数多くのセミナーや研究会を行っているが、その後役に立っているのか検証する必要があるとの指摘が分野 2 作業部会よりあった。分野融合や実験研究者とのコラボ等の題目をこなすだけになっていないかを検証し、イベントの目的を、その開催後にどのように展開していくのかに着目して計画し、それを実施していくことが重要となる。

ii) 平成 25～27 年度の実施計画と目標

CMSI では、「京」を中核とする HPCI システムを活用した研究成果を幅広い分野の方々に周知するとともに、CMSI 内外の方々との交流し議論を深めるためのイベントを精力的に実施している。研究成果を社会貢献に導くためのターゲットを定める活動として平成 24 年度に複数回開催した元素戦略関連ワークショップは、平成 25 年度より文科省からの委託研究「元素戦略プロジェクト」拠点からの再委託に結びつけることができた。平成 25 年度は、元素戦略の触媒電池、電子、磁石、構造の各材料に共通して貢献しうる課題となる、SPring-8 や J-PARC と「京」の大規模研究施設間の連携を軸とした新しい材料探査の方法を探るための研究会やセミナーを開催する。これらのイベントが、具体的な共同研究や共通アプリケーション開発につながるよう、企画を進める。

iii) 平成 25 年度の具体的な実施計画

①CMSI 全体行事

「京」の共用開始から 1 年が経過する平成 25 年 10 月に、CMSI 国際シンポジウムを開催する。超並列計算がもたらす、新しい計算物質科学の発信を目的とする。物性、分子、材料の分野や、各部会で取り組む戦略課題を基盤とし、それを超えた大規模超並列計算が拓くサイエンスの課題(例えば「電子物性」、「構造」、「ダイナミクス」「非平衡」等)を話題として取り上げ、「京」を中心とする HPCI を用いた成果を発信する。また、若手国際交流の促進も大きな目的の一つである。そのため、スケジュールとして、前半3日間は小人数で課題特化型若手中心の「サテライトミーティング」、後半2日間は「京」のタイムリーな成果や計算物質科学のトピックスの講演等による「シンポジウム」で構成を検討する。前半は国際的な若手間の人脈形成を図り、そこでの交流をシンポジウムに持ち込み、活発な議論ができる環境を提供する。

第 4 回となる CMSI 研究会は、12 月初旬に物性研で開催する。昨年度同様、CMSI で実施している研究課題のトピックスを若手研究者を中心として発表し、活発な意見交換を行う。研究成果だけでなく、「京」を中核とする HPCI を使いこなして研究成果を上げるためのノウハウを共有する企画実施も検討する。

また、第 2 回となる CMSI 元素戦略シンポジウムを実施する。今年度は、各戦略拠点における具体的な課題の発表と、全拠点へ共通して貢献しうる、具体的な計算物質科学通課題を明確化するための企画を検討する。

②計算物性科学研究センター(CCMS)

物性研国際ワークショップ・シンポジウム EQPCM2013 に CCMS 内に設置した CMSI 元素戦略拠点が共催して実施する。この国際会議では、トポロジカル相に代表される新奇な量子相に関して、抽象化されたモデルに基づく理論と、第一原理計算による定量的な物質の理論の双方の立場から発展をはかる。本イベントは、最新の成果の討議を集中的に行うシンポジウム期間と、入門的な講義およびインフォーマルな議論を中心とするワークショップ期間からなる。元素戦略各拠点に共通する新材料開発を、計算科学の進展で活発化している新奇な量子相の観点から検討することで、従来とは全く異なる原理に基づいた機能発現の可能性を見出すことを目的とする。

CCMS では、2 年連続で大規模実験施設 (SPring-8, J-PARC, K-computer) の連携ということで秋にシンポジ

ウムを開催している。平成 25 年度は、その連携に加えてサイエンステーマを「スピン軌道相互作用」にフォーカスし、ISSP 内の実験研究者も企画に加えて実施する。

また、物性コミュニティ全体に超高並列計算への興味を促すことを目的とし、物性研スパコン共同利用研究会を CMSI 研究会に合わせて実施する。この研究会には、元素戦略拠点の電子論グループメンバを招聘し、社会的な課題への計算科学の活用に関しての意見交換も行う予定である。

③計算分子科学研究拠点(TCCI)

平成 24 年度に改定した体制により分野振興を推進する。全体研究会、実験化学との交流シンポジウム、及び産学連携シンポジウムを、平成 25 年度も開催する。全体研究会については、得られた成果の発信と、コミュニティの裾野拡大も意識した内容としたい。実験化学との交流については、CMSI の強化テーマである「エネルギー」に役立つ内容にしていく。また、産学連携については、学生のキャリアパス拡大に向けて、シンポジウムでの新規課題の発掘・相談、社会人の再教育の場の提供など、産に対する一貫性のある対応システムの確立を目指して継続する所存である。

④計算材料科学研究拠点(CMRI)

25 年度の分野振興策として、23 年度、24 年度と同じく、①CMRI シンポジウムの実施、②MPI 講習会の開催、③若手の海外派遣、の 3 つを柱とする活動を行う。特に、本年度より CMRI のメンバーを中心として第 5 部会「マルチスケール材料科学」が設置され、この部会の充実と連動した分野振興策を実施する。具体的には、大きな全体のシンポジウム以外に、重点課題や特別支援課題の個々のテーマに焦点を絞った小規模の研究会を実施し、さらに、材料科学分野で進行中の大型プロジェクト(CREST、JST、科研費学術新領域、新元素戦略など)とも連携を取りながら共通テーマに対して多面的な議論を深める。②に関してはこれまでに開催した東北、関西、九州地区以外で 1 回講習会を行う。本拠点には、今年 1 月より教育・人材育成担当の准教授が常駐しており、教育・人材育成プログラムと有機的に連動し得る講習会を目指す。③に関しては前2年度と同じく 2 名の派遣を行う。派遣者は 23 年度が院生 2 名、24 年度が院生 1 名、教員 1 名であったが、今年度も院生と若手教員を対象とする。また、国際連携を図るために、今年度も 11 月 7 日～9 日に ACCMS-VO (Asian Consortium on Computational Materials science-Virtual Organization) の開催に協力(共催)し、アジアを始めとする近隣諸国との連携を図る。また、新たに International Alloy Conference(IAC) の企画、開催する。これは合金理論を対象にした国際会議であるが、過去には鉱物などもテーマに加えており、材料科学の周辺領域も含む形で企画を行う。

⑤CMSI 国際会議協力

平成25年6月に開催される、国際的な若手交流の機会である「International HPC Summer School 2013」に協力し、CMSIより若手3名が参加する。日本の計算物質科学のアクティビティを紹介するとともに、世界最先端技術を吸収する。そこで得た情報、ノウハウはCMSI全体に展開する。

また、国際会議連携として、16th Asian Workshop、ICMS2013への協賛を行う。また、国際的なスパコンの研究会と展示会である。ISC13、および、SC13にも参加し、ブース出展も行う予定である。

2) 産官学連携の促進

i) 平成 24 年度の評価による指摘事項

分野振興課題と同様に、数多くのイベントが、その後役に立っているのか検証する必要があるとの指摘が分野2作業部会よりあった。

産官学連続研究会では開発事業に直接関係するような話題・テーマを選び、かつ、企業からの講演者を中心に研究会を運営開催し、大学・研究機関の方には聴講していただく企画としてきた。平成 25 年度からは、企業と大学との対話の促進という観点から大学・研究機関からの講演者を増やす事を考えている。産官学連続研究会での話題設定・テーマ選定・運営は上記の様な観点から行う予定である。作業部会からのコメントに対しては、実績として昨年度開催した研究会テーマに関連した経産省の未来開拓プロジェクト「未利用熱の革新的利用技術開発」が実施に立ちあがる予定であり、研究会での議論は次のステップ推進として着実に役立っている。

ii) 平成 25～27 年度の実施計画と目標

戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」は分野4「次世代ものづくり」とならび、戦略プログラムの中では最も産業に近い所に位置づけられる研究領域であり、また分野2を推進するCMSIの掲げている「源流から奔流へ」というテーマにも、産学官連携が重要欠くべからぬ活動である事が明瞭に謳われている。産学官連携をどの様に行っていくかという問題は、CMSIの成否にとって非常に重要な問題である。CMSIに設置される産学官連携小委員会と産学官連携協力機関はこの様な問題を解決する為に設置された重要な分野内サブ組織である。

計算シミュレーション分野での産官学連携のあり方には2通りのやり方がある。第1は企業内の計算科学研究者を大学・研究機関が支援・育成していくやり方、第2は研究機関が企業からの受託研究を行うやり方である。CMSI では計算プログラムの産業分野への普及活動をおこなっており、前者の形での産官学連携が今までは多かった。しかし、昨今は企業内で研究シーズの立ち上げを行う事は難しくなっており、今後は企業側からも後者の産官学連携も増して行く事に対するニーズが増えるであろう。大学・研究機関側の立場から、後者の活動を経験しなければ、産業界でのニーズが十分に把握できないという面があり、その事が産官学連携の質の向上の障害になるという事情もある。CMSI では第1と第2のやり方の二つを両輪とした産官学連携活動を推進して行く。

前者(第1)の活動例としてCMSIアプリケーション公開サイト「MateriApps」の企画活動などを挙げる。これは広報小委員会との共同作業であるが、計算物質科学の専門家だけでなく、実験家や企業ユーザにアプリケーション利用を広げる事も目的としており、それを実現するために、公開後のサイト利用者からのフィードバック、アプリ利用者の要望抽出を基にさらにサイトを改良して行き、アプリケーションの利用方法や性能評価に関する記事をさらに充実させていく予定である。この活動は重点各課題や各分野代表機関の協力も必要でありCMSI全体で支援して行く必要がある。

後者(第2)の活動の例は、コンソーシアム活動や企業が主体となった国プロへ、計算シミュレーションが加わる事への支援活動である。例えば、経産省プロジェクトで計算シミュレーションが活躍できる場を見つけ、育てていく努力を行っていきたい。また、企業コンソーシアムにも同様に、計算シミュレーションが加わる機会を増やして行きたい。これらを支援する活動を産官学連携委員会・協力機関でおこなっていく予定である。

前者と後者の活動を円滑に行っていく為に産官学連続研究会を開催する。企業と大学の間の相互理解を醸成して行くという期待も込めている。

iii) 平成 25 年度の具体的な実施計画

①産官学連続研究会

平成25年度の産官学連続研究会は3回程度の開催を予定している。周知のとおり、日本の電子産業は苦境が続いている。電子技術は自動車産業や機械産業などにおいても重要な要素技術であるので、その技術の芽

が国内から完全に消えて良いわけではなく、長い目で見た時に再興も十分に考えられる。現状の苦境を鑑みると、当面は大学・研究機関で技術の芽を育てていく必要があり、計算シミュレーション分野もそれに協力すべきであろう。この観点から3回の内の1回はナノエレクトロニクス分野の話題を中心とした研究会とする。もう一つは分野2の柱の一つであるエネルギー分野の話題を充てる。残りの1回は産官学連携小委員会の企業委員の希望を募り決めたい。ナノエレクトロニクス分野の研究会は既に2年度継続して来ており、平成25年度で3年度目の連続開催となる。

②産官学連携環境整備・コンソーシアム検討

企業と大学・研究機関の協働の機会を増やして行く。具体的には企業などが主体となるプロジェクトにおいて計算シミュレーション活用の実績を積み上げていく事が重要である。経産省プロジェクトへの積極的な取り組みと同時に、関連するポテンシャルを有する大学などの参加を呼び込み、産官学連携の経験を広めて行く。同時に、企業コンソーシアムなどへも取り組む。計算シミュレーションが関わるコンソーシアムの立ち上げと活動を支援する。これらの活動を通じて大学・研究機関が企業の抱える課題を理解し始める事が出来る様になると期待する。

③産官学研究拠点としての活動

CMSI のアプリケーション普及に向けた活動として、CMSI 広報小委員会との協力により前年度から CMSI のアプリケーション公開サイト「MateriApps」の公開に向けて情報の収集、サイトの整備を行なってきた。「MateriApps」は計算物質科学の専門家だけでなく、実験家や企業ユーザーにアプリケーション利用を広げる事も目的としており、それを実現するために、公開後のサイト利用者からのフィードバック、アプリ利用者の要望抽出を基にさらにサイトを改良していく事が必要である。特にアプリケーションの利用方法や性能評価に関する記事をさらに充実させていく。それに加えて、アプリケーション利用の希望者に対する講習会の企画、実施などの活動を行なっていく予定である。（産官学拠点研究員 小西）

2. 2. 2. 2(4) 研究成果の普及

1) 平成 24 年度の評価による指摘事項

他分野と比較して、分野2は成果の一般社会へのアピールが不足している。成果の説明手法の工夫として、可視化や動画化、成果のデフォルメ、伝えるシナリオ等を研究する必要がある。また、CMSI-Web の充実、広報誌 TORRENT コンテンツのさらなる工夫、アプリポータルサイト“MateriApps”を活用したアプリ普及活動等を、他の小委員会での分野振興活動と連動させ、効果的に成果を普及させていく必要がある。

2) 平成 25～27 年度の実施計画と目標

科学技術の振興、および国際競争力の向上のためには、従来から行なわれてきた学術的な研究成果の普及だけでなく、開発されたソフトウェアや蓄積されたノウハウを公開し、企業・実験研究者へ普及することが不可欠である。計算物質科学は、その基礎理論自体が多層構造をなしており、それぞれのレベルにおける方法論が非常に多岐にわたり、かつそれぞれが相補的に発展してきたことが大きな特徴の一つである。このような計算物質科学の特性、歴史的経緯をふまえると、単なる共通シミュレーションソフトウェアの整備・公開だけではなく、ソフトウェア公開を促す環境づくりなど、より総合的な普及活動が必要であると考えられる。平成25年度以降は平成24年度までの議論を踏まえ、以下の広報活動をすすめていく。

3) 平成 25 年度の具体的な実施計画

i) 広報誌の発行

広報誌 TORRENT は、これまで1～7号まで発刊した。平成 25 年度は8、9号を刊行する予定である。8号は、平成 24 年 3 月に開催した「計算物質科学見える化シンポジウム」の内容に沿い、ポータルサイト“MateriApps”の紹介や教育活動等、CMSI が推進する分野振興活動を一般社会を含めて“魅せる”にはどうすればよいかを特集する。9号は CMSI 国際シンポジウム、元素戦略との連携等のトピックスを交え、計算物質科学の社会への浸透や貢献等にフォーカスすることを検討予定である。より幅広い方々に手に取って読んでいただける内容としていく。

ii) ソフトウェア開発・公開のサポート

物質科学シミュレーションのポータルサイトMateriAppsを中心に、計算物質科学コミュニティ向けに、ソフトウェアの開発・公開をサポートする環境として、スーパーコンピュータシステム、コンパイラ、ライブラリ、並列化、チューニング、講習会、ソフトウェアのソースコード管理システム、ドキュメント作成ツールなどに関する情報提供と、整備の支援を行う。

平成25年度は、物質科学シミュレーションのポータルサイトMateriAppsを正式公開する。また、ソフトウェアの紹介、外部へのリンク、論文リスト、計算結果の図などからなる「ひな型」を用意し、開発者によるホームページでのソフトウェア公開および情報の更新を促す。さらに、戦略機関内、機関外を問わず、物質科学分野で開発・公開されているソフトウェアの一覧を作成・公開する。ソフトウェア一覧は単なる羅列ではなく、企業研究者・実験研究者などがそれぞれの目的・条件に応じて、適切なソフトウェアを選ぶことのできる「アプリケーションのカフェテリア」として機能するようなものを目指す。さらに、研究者向けのシミュレーションソフトウェアや一般向けのデモンストレーションソフトウェアを、ホームページ上で自由に実行、あるいは簡単に実行できるUSB版(MateriApps Live!)を作成、配布し、ソフトウェアおよびその開発者について一般に広く親んでもらえる環境を整備する。さらに、ソフトウェアの開発・公開をサポートする環境として、ソフトウェアのソースコード管理システム、ドキュメント作成ツール、ライセンスなどに関する情報提供の提供を行う。英語版も作成し、海外へ向けた情報発信も強化する。ポータルサイトMateriAppsやUSBソフトMateriApps Live!は、アプリ講習会や計算科学の講義の中でも積極的に活用する。

iii) ホームページにおける情報発信

平成 25 年度は CMSI-Web をリニューアルする。過去に開催したイベントやコミュニティー誌 TORRENT 等の内容も含めて整理し、検索できるようにする。CMSI-Web と TORRENT のページは分けて整理する。研究のトピックスを動画等と共に紹介するサイトを設け、イベント情報等は MateriApps ともリンクさせて、訪ねて来た方を迷いなく目的のコンテンツにナビゲートするシステム構築を目指す。

iv) シミュレーション結果の公開

学術論文や国際学会における最終的な学術的成果の発表だけでなく、シミュレーションの結果(一次データ)の保存・共有・公開する仕組みについて検討を行い、個々の研究者によるデータ公開をサポート・促進する。また、公開ソフトウェアを利用して行った研究の実例(スーパーコンピュータにおけるソフトウェア実行例から、データ解析、論文発表まで)をホームページ上で積極的に紹介する。これにより上記「MateriApps」の機能が補完され、CMSI 発のソフトウェアの企業・実験研究者へのより一層の普及が期待される。また、シミュレーション結果の可視化技術の強化を進めるため、講習会、研究会を開催する。

シミュレーション結果の可視化技術の強化を進めるため、可視化ソフトウェア AVS の利用方法および活用実績に関する講習会、研究会を開催する。また、平成 24 年度に導入した可視化用システムを活用しシミュレーション結果の動画化技術についてのサポートを行う。

v) 広報イベント・会議

3 ヶ月に 1 回程度「5 分野 & AICS 広報情報交換会」を開催し、京による成果の普及、分野振興などの広報活動に関する情報共有と今後の広報活動方針に関する意見交換を進め、戦略 5 分野分野と AICS が共同でのプレスリリース、成果公開など、連携の仕組み作りを目指す。

vi) 展示会への出展

CMSI 活動を国内外にアピールするため、そして、平成 25 年度は計算物質科学アプリケーションのポータルサイト「MateriApps」の普及を目的として展示会に出展する。スーパーコンピュータの国際会議である、ISC13、SC13、AICS や物性研での一般公開等に加え、物理学会、応用物理学会、化学会、金属学会等、アプリケーションの利用者が多く参加する学会併設の展示会への出展も積極的に検討する。また、学会のポスターセッション等にも投稿し、広く MateriApps をアピールする。

2. 2. 2. 2(5) 分野を超えた取り組みの推進

1) 平成 24 年度の評価による指摘事項

文科省元素戦略プロジェクト(拠点形成型)がスタートして実験家との連携を深める環境は整ったので、アイデアをリアルにつなげる活動を促進する必要がある。平成 24 年度に新たに検討を開始した、“マテリアルズインフォマティクス”、“数学との連携”、“エネルギーWG”の分野を超えた取り組みが、新プロジェクトの立案等の次の具体的な活動につながるよう、検討を深めていく必要がある。

2) 平成 25～27 年度の実施計画と目標

計算物質科学は、シミュレーションにより実際に生じる現象を発見したり予測したりするものである。結果がシミュレーションだけでなく、実験家との連携によるリアルに発展してこそ、計算科学の社会に対する価値は高まる。本プロジェクトも平成 25 年度で 3 年目を迎える。「京」を活用した成果を創出するためには、実験研究者や企業との連携によるリアルな結果に結び付けていくための、分野を超えた取り組みを推進する。一方、基礎科学を研究目的としている課題に関しては、その成果を一般社会にわかりやすく伝えて夢や興味を抱いてもらうための、アウトリーチ活動を強化していく。

3) 平成 25 年度の具体的な実施計画

i) 計算科学研究機構との連携

理研計算科学研究機構で開催されている共通基盤研究ワークショップ、AICS Café などへの参加、あるいは CMSI が神戸拠点で開催している「京」物性セミナーへの計算科学研究機構研究チームからの参加などを通じて、研究チームとの研究交流・連携を図る。また、理研計算科学研究機構において 5 分野持ち回りで企画されている 5 分野合同研究交流会についても、分野 2 の研究者の参加・講師の派遣などを通じて協力していく。

ii) 他の戦略機関との連携

これまで、分野 5 との連携による研究会を継続して開催している。計算手法が類似しており、「京」活用の基礎科学としての共通性は大きい。宇宙や素粒子研究と、新量子相等の研究が何等かの形でリンクされ、新量子相も物質の新たな宇宙を創造するという観点で基礎分野を掘り下げるとともに、応用も考えたい。

iv) 実験研究者との連携

大規模実験施設との連携は継続して行う。各部会単位では実験家も交えた検討会を行っている。本年はその活動を加速させ、計算結果をアピールする。

v) 社会への情報発信

① 第 2 回 計算物質科学“見える化”シンポジウム

平成 24 年度に行われた「第 1 回物質科学“見える化”シンポジウム」は分野内外から大きな反響があった。今年度も第 2 回計算物質科学“見える化”シンポジウムを開催し、社会への成果発信の方法、特に基礎科学分野に関して、議論を進めていく予定である。また、成果発信だけではなく、可視化技術の共有、アプリケーションの普及などのテーマも取り上げていく。

2. 2. 2. 2(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援

1) 平成 24 年度の評価による指摘事項

CMSI 支援課題申請を「京」一般利用枠申請とリンクさせ、大規模計算に対するモチベーションの高い人材へのサポートを強化していき、次世代のリーダーを醸成する必要がある。アプリ高度化ノウハウやライブラリの活用情報等を集約して提供し、開発を効率的に推進していくことが課題である。類似する計算手法毎に、集中的にアプリ高度化支援を開催する等、大規模計算によるサイエンスの発展に貢献する活動を加速したい。

2) 平成 25～27 年度の実施計画と目標

大規模並列計算は、計算機の特性を把握しながらアプリケーションを高度化する必要があるため、個人や個々の研究グループだけで対応するのは困難を伴う。大規模並列計算を戦略分野の研究者に普及発展させるためには、計算資源を有する機関がその計算機の特性を考慮しながらアプリケーションの高度化に対する支援活動を行うことが望ましい。平成23年度より、神戸計算科学研究機構内にCMSIの神戸拠点として東大物性研究所の分室を設置し、特定高速電子計算機施設の試験利用に関する、物性、分子、材料計算科学研究者の支援活動をスタートしている。CMSI神戸拠点には、合計5名のスタッフが常駐し、滞在中の研究者との間で特定高速電子計算機施設の利用技術に関する情報交換を行い、それを蓄積し継承していく。また、CMSI共同利用の計算資源を有する、物性研、分子研、金研、および、神戸拠点に支援のための要員である拠点研究員を配置し戦略課題に広く役立つ並列計算アプリの高度化と、そのアプリの利用環境を整備する。

3) 平成 25 年度の具体的な実施計画

i) 研究支援拠点の整備

平成 23 年度より、神戸計算科学研究機構内に CMSI の神戸拠点として東大物性研究所の分室を設置し、京の利用に関する、物性、分子、材料計算科学研究者の支援活動をスタートしている。平成 23 年度中に 2 名の特任教員、平成 24 年度中に 1 名の特任研究員が神戸計算科学研究機構内を勤務地として雇用され、平成 24 年度も継続して常駐し、京の利用の支援、あるいは計算科学研究機構の共通基盤研究や分野融合研究等の連携を進めている。平成 25 年度の研究支援は、神戸計算科学研究機構内の CMSI 神戸拠点に、東大物性研常勤スタッフとして教員 1 名、研究員 1 名、事務補佐員 2、神戸大常勤スタッフとして教員 1 名の、合計 5 名が常駐する体制となる。また、高度化のスキルを持つメーカーの SE・神戸教員による「高度化コンサルティング」、神戸教員あるいは計算科学研究機構の研究チームとの共同研究、情報交換会、アプリケーション利用者講習会などを通じて、研究者のための研究・開発環境、情報交換・交流環境の整備を進める。

ii) 「京」利用者の支援

京の利用は、戦略プログラム利用枠の中の重点配分枠、一般配分枠、あるいは一般利用枠を通じた利用となる。この内、重点配分枠については、CMSI の重点課題の中から、「京」の能力を最大限利用しなければできない大規模計算であって、早期に画期的な科学的成果又は社会的課題の解決に資する成果が上げられると特に期待されるもの選出し、優先課題候補とする。また、戦略プログラム利用枠のうち一般配分枠は、優先課題外の重点課題による利用が主となるが、その一部を「計算各推進体制の構築」のための枠として確保し、特別支援課題・支援課題のアプリケーションの高度化、一般利用枠への申請のための準備、あるいは拠点研究員による新しいアルゴリズムの開発に役立てる。

アプリケーションの高度化の支援については、高度化のスキルを持つメーカーの SE、神戸教員によるオンサイトの支援体制を継続すると同時に、メールベースでの Q&A 対応、「京」以外の HPC システムにおけるアプリケーション導入、利用、高度化支援も行う。また、平成 24 年度に導入した高度化コンサルティング(1～2 カ月の間に 4 回程神戸拠点においてミーティングを行う)の仕組みを継続し、効率的に個別アプリの高度化を進める。

iii) 拠点研究員による支援

[拠点研究員についての総括・予定]

拠点研究員の必要人数は、その分野のコミュニティで大規模化を目指す研究者やグループが扱うアプリケーションの数にほぼ比例する。平成25年度については、物性分野7名、分子化学分野9名、材料科学分野1名の配置を予定している。物性分野は主として物性研と神戸拠点、分子化学分野は主として分子研、材料科学分野は主として金研に配置予定である。

拠点研究員は、ある特定の研究課題に取り組む研究員とは異なり、戦略課題に広く役立つ並列計算アプリの高度化と、そのアプリの利用環境を整備することが主たる役割であるが、特に重点を置くミッションによって、以下の4つのカテゴリに分類する。

- (A) 分野共通に利用できる先端的な要素技術の開発
- (B) 分野共通に利用できるアプリケーションの公開(アプリ開発、マニュアル・GUI整備)
- (C) 複数の重点支援課題(サブ課題)におけるアプリケーション開発・実行支援
- (D) アプリケーション公開・普及支援(ポータルサイト開発・運営、ライセンス管理)

(A)は次々世代スパコンのためのアプリ開発技術にもつながるような先端的並列化アルゴリズム、技法の開発に関するもので、分野の並列計算技術開発の牽引力となることが期待される。(B)はプロジェクトにおけるアプリ開発を支援するとともに、開発されたアプリを多くの研究者・開発者が利用できるような形式に整備するもので、計算物質科学分野の並列計算テクニックをより広い範囲の研究者や開発者に向けて展開することを目指す。(C)はアプリ開発(高度化)に関するもので、研究を推進する研究者、および、研究グループの利用する具体的なアプリケーションに対する支援が主となる。異なるアプリを支援する要員間のコミュニケーションや、複数のアプリ高度化の経験によりノウハウを蓄積していくことで、支援のレベルをアップすることが可能となる。(D)はアプリの利用環境の整備に関するもので、複数のユーザが利用している、もしくは利用しうるアプリケーションの開発強化、および、公開が、その業務となる。戦略分野への普及を促進するために、アプリ開発者と連携してマニュアルの整備や使い勝手の向上、利用環境の整備、付加機能ソフトの追加、ポータルサイトMateriAppsの開発・整備等を担う。実験研究者からのシミュレーション依頼への対応等も視野にいれ、計算物質科学アプリケーションのユーザ数増加を目指す。

[カテゴリ A の拠点研究員活動]

昨年度から開発を行っている、実対称密行列の並列固有値計算ライブラリに関する統一インターフェイスとそれを用いたベンチマーク結果について、HPC 研究会で発表を行う。また、このテーマで SC13 のポスターセッションにも投稿する予定である。平成 25 年度からは、統計物理に関する厳密対角化のパッケージの作成に着手する。また、引き続き、学会等を通して、数値計算ライブラリに関して CMSI 内、理研計算科学研究機構、各大学の情報基盤センター、戦略分野間、並列実装・数値アルゴリズムの専門家との交流を行い、分野共通で活用可能な技術開発に活かす。(坂下拠点研究員)

24年度に開発した古典スピン系におけるクラスターアルゴリズムの大規模並列プログラムの改善と効率の向上を行うと共に、それを用いた物理の研究を進めて有用性を確認することで、開発した並列プログラムの公開に向けた準備を進める。また新たに、二次元以上の様々な量子系に適用可能な、近年発展中の新しい解析手法である、テンソルネットワーク変分法の効率的なアルゴリズムの開発と、その並列化に挑戦し、これまでに数値計算がアプローチ出来なかった問題に適用可能なアプリケーションの開発を進める。(大久保拠点研究員)

iv) 講習会、交流会等の開催

①若手技術交流会合宿

拠点研究員は、CMSI 若手技術交流会を自ら企画・実施する。平成 25 年度は 2 回の実施を計画している。技術交流会では、講師を招いた勉強会・実習、進捗状況報告、並列化・高度化に関する情報交換を通じ、CMSI 外の若手も含め計算物質科学研究者の技術の向上・共有、分野共通アプリケーションの育成と普及を図り、分野振興を進める。全体の取りまとめは、神戸拠点の教員が担当する。今年度の予定を以下に示す。

第8回 CMSI 若手技術交流会（2012 年 7 月 1 日～3 日 三島）

企業の研究者による企業における科学計算の役割に関する講演の他、知的財産一般、及び、ソフトウェアでの特許取得に関する講演、研究内容を知的財産の観点から見直すための実習を行い、参加者が自身の研究を様々な価値観で評価する機会を提供することを予定している。また、既に公開済みのアプリケーションを実際に使用し、公開方法へのアドバイス、使用感のレポートを行う等の実習を通じて、アプリケーション公開に対する、参加者の意識向上と、複数アプリを活用可能なスキルを身に着けることを考えている。

第9回 CMSI 若手技術交流会（2014 年 2 月頃 未定）

参加者らが京の一般利用開始からおよそ一年の間で得た最新の研究成果、共有可能な技術の発展を紹介することで、京によるサイエンス、技術の広がり共有する機会をもうける。講演者には、広い分野にまたがる聴衆を意識した講演の準備を通じて、自身の研究を分かりやすく伝える技術の向上を期待する一方、聴衆には、他分野での計算技術の活用される方、アプリケーション高度化の恩恵等の情報から、自身への研究へのヒントを掴みとってもらうことを期待する。

②CMSI アプリ高度化合宿

平成 26 年度以降の京や HPCI システム利用一般採択に向けた、アプリ高度化支援合宿を CMSI 神戸拠点において 3 回程度開催する。若手技術交流会とは異なり、実行性能向上、並列化性能など、毎回テーマを絞り、具体的な数値目標を掲げた少人数での集中した合宿形式の講習会とする。期間中は富士通 SE および拠点研究員が最適化のサポートに当たる。合宿全体のとりまとめは神戸拠点の教員が行う。

③「京」一般利用情報交換会

京一般利用へ向けた情報交換、共有を目的として、CMSI 神戸拠点において「京」利用情報交換会を年 2 回開催する。情報交換会では、京利用の原状や HPCI システム利用課題公募に関する情報、あるいはすでに大規模利用を進めているユーザ・グループからのノウハウ紹介、サポート体制の紹介などを行う。

④「京」物性セミナー

神戸理研 AICS 内外での分野間交流、連携を進めるために、平成 24 年度から CMSI 神戸拠点が主体となって「京」物性セミナーを開催している。平成 25 年度も 8～10 回程度開催の予定である。計算物性物理の研究者だけでなく、理論物性研究者、材料科学分野の研究者や実験家、海外からの研究者などによる、幅広い分野から様々なテーマでの講演を計画している。

⑤CMSI 神戸ハンズオン(アプリケーション講習会)

分野 2 で開発されている分野共通アプリケーション、ツールの普及を図り、多層的なユーザを育てていくことを

目指し、平成 24 年度より CMSI 神戸拠点において定期的なアプリケーション講習会「CMSI 神戸ハンズオン」を開始している。平成 25 年度も月一回合計 12 回程度の講習会の開催を予定している。取り上げるアプリケーションについても、すでに講習会を開始している FMO、ALPS に加え、第一原理計算、分子動力学、可視化ツールなど、分野共通アプリケーション、ツールを幅広く取り入れていく。

2.3 活動(運営委員会等の活動等)

(1) 委員会活動

平成 24 年度に開催した、CMSI の各種委員会等の一覧を表 2.4-1 に示す。CMSI 活動において、検討を要する事項はまず拠点代表者会議で検討して議案を作成し、企画室会議にて審議、検討を行っている。重要事項に関しては、運営委員会、運営協議会で審議し、決定される。また、迅速な判断を要する案件に関しては、必要に応じてローカルな検討会議を行って議案を作成し、運営委員会、および、運営協議会メンバーに対するメール審議を行い、決定している。人事採用関連の審議は、関連した書面を運営委員会、および、運営協議会メンバーに郵送し、郵送投票にて採用の承認を取っている。

戦略課題小委員会各部会活動、および、スパコン連携、人材育成・教育、産官学連携、広報の各小委員会に関しては、必要に応じて小委員会の代表者が会議を開催し、イベント等に関する企画立案、および、実施の打合せを行っている。

平成 24 年度は研究課題をよりよく発展させるための見直し活動を、作業部会のメンバーも交えて 2 回行った。また、エネルギーWG、マテリアルインフォマティクス検討会を立ち上げ、将来の重要課題に対する取り組みの検討を開始した。また、「第1回計算物質科学“見える化”シンポジウム」を開催し、社会に対する情報発信のあり方に関する本格的な議論を開始するための、課題を抽出した。また、計算物質科学関連アプリケーションソフトウェアの本格的な普及を促すためのポータルサイトの企画検討を行う会議を継続して実施し、「MateriApps」の基本骨格を完成させ、平成 25 年度に試験運用を試みて修正を行った後、本格運用していくための準備を整えた。

各戦略拠点である、CCMS、TCCI、CMRI では、運営委員会をはじめ必要に応じた委員会を開催し、分野振興に努めた。表 2.4-2 に、各拠点で開催した委員会等の一覧を示す。

表 2.3-1 CMSI 平成24年度委員会活動一覧

CMSI平成24年度委員会活動一覧				
月日	場所	担当機関	行事名	参加人数
会議・小委員会・WG				
4月3日	東大本郷キャンパス	広報	Torrent広報打合せ（インタビューア面談）	5
4月3日	東大本郷キャンパス	広報	Torrent広報打合せ（CMD特集について）	5
4月19日	産総研・筑波センター	産官学連携	産官学連携小委員会	4
4月27日	東京（丸の内ビル）	広報	Torrent広報打合せ	4
5月1日	東大本郷キャンパス	拠点代表・分野マネージャー	拠点代表者・分野マネージャー会議	6
5月15日	理化学研究所計算科学研究機構（RIKEN AICS）	広報	5分野AICS広報情報交換会	16
5月18日	東大柏キャンパス物性研究所	広報	Torrent広報打合せ	4
5月22日	東大本郷キャンパス	広報	Torrent広報打合せ	4
5月22日	東大本郷キャンパス	企画室	企画室会議	20
5月25日	東京（丸の内ビル）	広報	Torrent広報打合せ	4
5月31日	東大本郷キャンパス	広報	Torrent広報打合せ	4
7月5日	ネット会議（Saasboard）	CMSI WG	CMSI International Symposium2013実行委員会	9
7月24日	ネット会議（Saasboard）	広報	Torrent広報打合せ	4
8月2日	東大柏キャンパス物性研究所	広報	Torrent広報打合せ	4
9月3日	東大柏キャンパス物性研究所	広報	Torrent広報打合せ	4
10月2日	東大本郷キャンパス	拠点代表・分野マネージャー	拠点代表者・分野マネージャー会議	6
10月8日	東大本郷キャンパス	企画室・分野2作業部会	H24年度CMSI研究課題見直しに関する意見交換会	25
11月7日	東大柏キャンパス物性研究所	広報	Torrent広報打合せ	4
12月3日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	運営委員会	H24年度第1回CMSI運営委員会	30
12月4日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	スパコン連携	スパコン連携小委員会	2
12月4日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	人材育成・教育	人材育成・教育小委員会	9
12月4日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	産官学連携	産官学連携小委員会	3
12月4日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	広報	広報小委員会	4
12月5日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	第1部会	第1部会小委員会	4
12月5日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	第2部会	第2部会小委員会	8
12月5日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	第3部会	第3部会小委員会	8
12月5日	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	第4部会	第4部会小委員会	9
12月5日	分子研研究棟201会議室	企画室	企画室会議	19
12月12日	北陸先端科学技術大学院大学東京サテライト	CMSI WG	materials informatics 会合	17
12月18日	東大本郷キャンパス	エネルギーWG	CMSIエネルギーワーキンググループ会議	6
1月15日	東大本郷キャンパス	運営委員会・分野2作業部会	H24年度第2回CMSI運営委員会・分野2作業部会	28
1月15日	東大本郷キャンパス	広報	Torrent広報打合せ	4
1月22日	東大柏キャンパス物性研究所	小委員会連携WG	第1回計算物質科学アプリケーション利用促進のためのポータルサイト制作会議	11
1月28日	東大本郷キャンパス	拠点代表・分野マネージャー	拠点・分野マネージャー会議	7
1月29日	東大柏キャンパス物性研究所	小委員会連携WG	第2回計算物質科学アプリケーション利用促進のためのポータルサイト制作会議	11
2月4日	東大本郷キャンパス山上会館	運営協議会	H24年度CMSI運営協議会	12
2月8日	東大柏キャンパス物性研究所	小委員会連携WG	第3回計算物質科学アプリケーション利用促進のためのポータルサイト制作会議	8
2月12日	文科省	分野2作業部会	第4回HPCI戦略プログラム作業部会（分野2）	13
2月22日	東大柏キャンパス物性研究所	小委員会連携WG	第4回計算物質科学アプリケーション利用促進のためのポータルサイト制作会議	10
3月1日	東大柏キャンパス物性研究所	広報	Torrent広報打合せ	4
3月8日	東大柏キャンパス（ネット）	広報	広報小委員会	7
3月8日	東大柏キャンパス物性研究所	小委員会連携WG	第6回計算物質科学アプリケーション利用促進のためのポータルサイト制作会議	10
3月15日	東大柏キャンパス物性研究所	小委員会連携WG	第7回計算物質科学アプリケーション利用促進のためのポータルサイト制作会議	8
3月16日	東京（サピアタワー）	人材育成・教育	人材育成・教育小委員会	15
3月22日	東大柏キャンパス物性研究所	小委員会連携WG	第8回計算物質科学アプリケーション利用促進のためのポータルサイト制作会議	9
3月28日	東大柏キャンパス物性研究所	小委員会連携WG	第9回計算物質科学アプリケーション利用促進のためのポータルサイト制作会議	5

表 2.3-2 各分野拠点における平成24年度委員会等の活動一覧

各分野拠点における平成24年度委員会活動等の一覧				
月日	場所	担当機関	行事名	参加人数
東京大学物性研究所計算物質科学研究センター (CCMS)				
8月6日	東大柏キャンパス物性研究所	CCMS	H24年度第1回CCMS運営委員会	15
10月23日	東大柏キャンパス物性研究所	CCMS	CCMS構造探査に係る打合せ	15
1月11日	東大柏キャンパス物性研究所	CCMS	H24年度第2回CCMS運営委員会	13
自然科学研究機構 分子科学研究所 計算分子科学研究拠点 (TCCI)				
5月12日	自然科学研究機構 計算科学研究センター200会議室	TCCI	TCCI第5回運営委員会	11
9月12日	分子研 実験棟512号室 (TCCI会議室)	TCCI	サイエンスロードマップ検討会	7
10月9日	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(OCC)	TCCI	サイエンスロードマップ改訂会議	21
10月10日	分子研 研究棟201会議室	TCCI	TCCI第6回運営委員会	16
11月17日	京大福井謙一記念研究センター	TCCI	サイエンスロードマップ懇談会	8
11月30日	分子研 実験棟512号室、京大化研(IV)	TCCI	サイエンスロードマップ改訂委員会	8
1月24日	大阪大学中之島センター9階会議室2	TCCI	TCCI第7回運営委員会	10
1月28日	早稲田大学西早稲田キャンパス 55号館N棟 2階、第四会議室	TCCI	サイエンスロードマップ懇談会	12
2月2日	自然科学研究機構 計算科学研究センター200会議室	TCCI	TCCI H24臨時人事検討委員会	4
東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点 (CMRI)				
4月26日	東北大金研	CMRI	CMRI運営委員会	12
7月20日	東北大金研	CMRI	CMRI拠点	3
7月20日	東北大金研	CMRI	CMRI人事選考委員会	4
8月23日	東北大金研	CMRI	CMRI拠点	3
8月23日	東北大金研	CMRI	CMRI人事選考委員会	4
8月29日	東北大金研	CMRI	CMRI人事選考委員会	4
9月6日	東北大金研	CMRI	CMRI人事選考委員会	5
10月21日	東北大金研	CMRI	CMRI人事選考委員会	5
11月13日	東北大金研	CMRI	CMRI運営委員会	12
12月18日	横浜国立大	CMRI	CMRI運営委員会	2
12月19日	産総研関西センター	CMRI	CMRI運営委員会	2
12月19日	大阪大学	CMRI	CMRI運営委員会	2
2月20日	東北大金研	CMRI	CMRI拠点	3
2月26日	東北大金研	CMRI	CMRI拠点	3
3月15日	東北大金研	CMRI	CMRI拠点	2

2.4 実施体制

(1)CMSI 組織

HPCI 戦略プログラム分野 2 は、物性科学、分子科学、材料科学の 3 つの計算物質科学分野が融合した組織体制「計算物質科学イニシアティブ (CMSI)」で推進している。CMSI の運営には、3 つの研究機関(東京大学物性研究所／自然科学研究機構分子研究所／東北大学金属材料研究所)、9 つの教育機関(東北大学／東京大学／大阪大学／金沢大学／京都大学／神戸大学／名古屋大学／総合研究大学院大学／豊橋技術科学大学)、2つの産官学連携機関(物質・材料研究機構／産業技術総合研究所)が参画している(図 2.4-1)。代表機関は、東京大学物性研究所である。また、これらの機関に所属しているメンバーだけでなく、これらの機関と関連している機関に所属しているメンバーから CMSI の委員を選出し、図 2.4-2 の複数の小委員会と委員会より成る運営体制を整えている。平成 24 年度において、選出された委員の人数は、のべ 136 名、実質 65 名である。これらの委員は、組織として参加する9機関以外に 17 機関の合計 26 機関(18 大学、3 独立行政法人、5 企業)から選出されている。この CMSI 委員は「物性」「分子」「材料」の 3 分野から、コミュニティの人数比を考慮して選出している。平成 25 年度も同様の委員で構成する。

研究担当者も含めた CMSI の活動全体とすると、参画機関は全 39 機関(28 大学、4 独立行政法人、7 企業)が関連しており、合計人数はのべ 201 人、実質 130 人となる。

平成 24 年度における実施体制を別表 1 に示す。実施体制-1～6 は、CMSI の運営や企画に関する CMSI の各種委員、実施体制-7～10 は、CMSI の研究課題を推進した研究担当者を記載している。CMSI で基底した運営規則に準じて、運営協議会、運営委員会、企画室、および、小委員会の活動が行われている。

i) CMSI 事務局

CMSI の運営をサポートするため、CCMS 内に CMSI 事務局を設置し、文科省、AICS 等との間で必要となる契約関連業務、本補助事業補助金の経理業務、CMSI 活動の企画、および、実行支援を行っている。また、AICS 内には CMSI 神戸事務局を設置し、CMSI 神戸拠点に関わる運営および事務業務をサポートしている。平成 23 年度の本格実施からは、東京大学が代表機関として文科省より補助金を請け、東京大学以外の機関との間で委託契約を結んで補助事業を実施することになった。そのため、本補助事業で人材を雇用する機関と研究委託契約を締結して事業を推進した。図 2.4-3 には、3 戦略機関、研究に携わる東京大学内の関連部局、委託研究契約を締結する機関、および、その他の補助事業参加機関、および、拠点の関係を示す。各小委員会の予算に関しては、CMSI 事務局に留め置き、必要に応じて請求を受けて利用していく形を取っている。

AICS とは、計算科学研究機構施設で居室を利用するにあたり、物性研、分子研、金研の 3 研究機関と計算科学研究機構の 4 者で覚書を締結している。

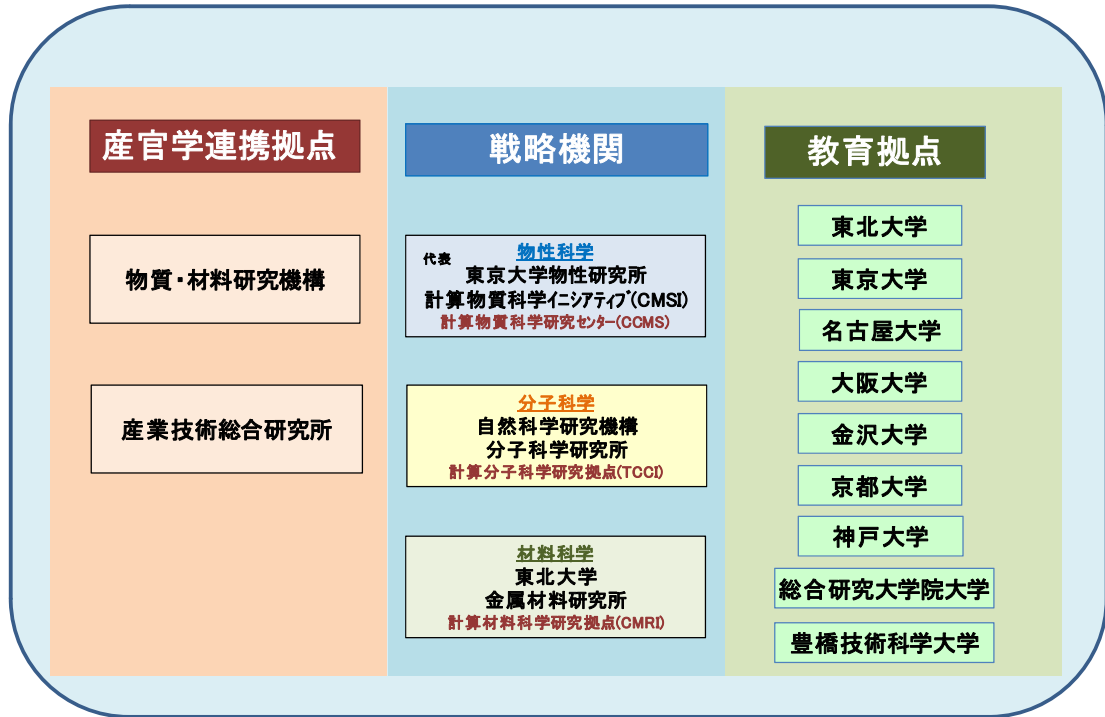


図 2.4-1 CMSI の運営に参加する機関

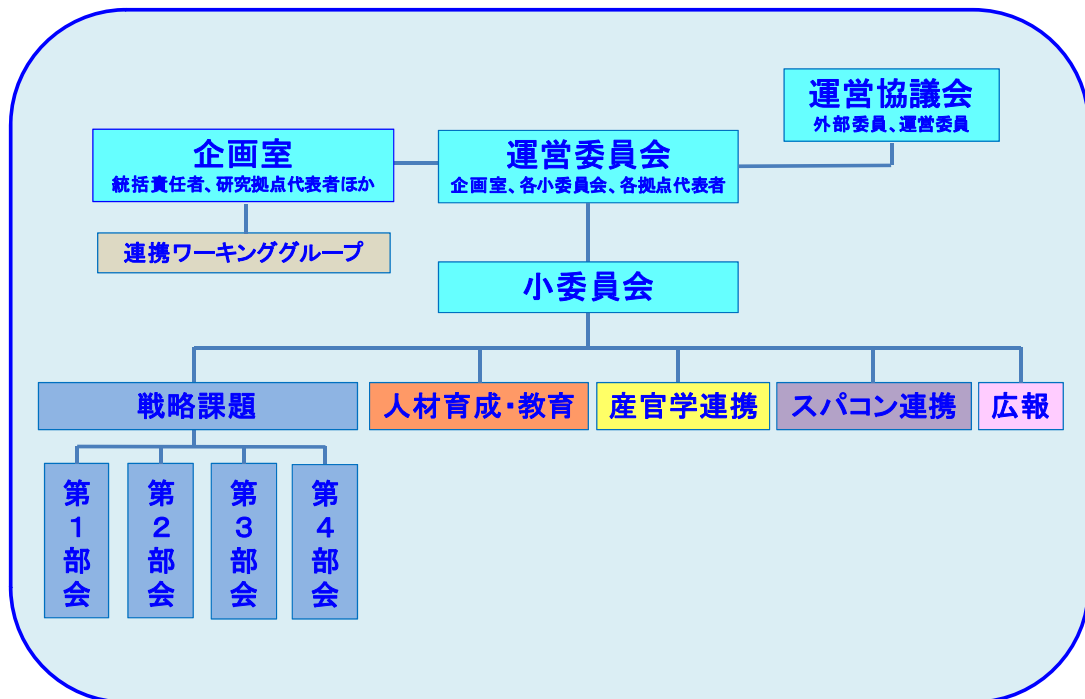


図 2.4-2 CMSI 運営体制

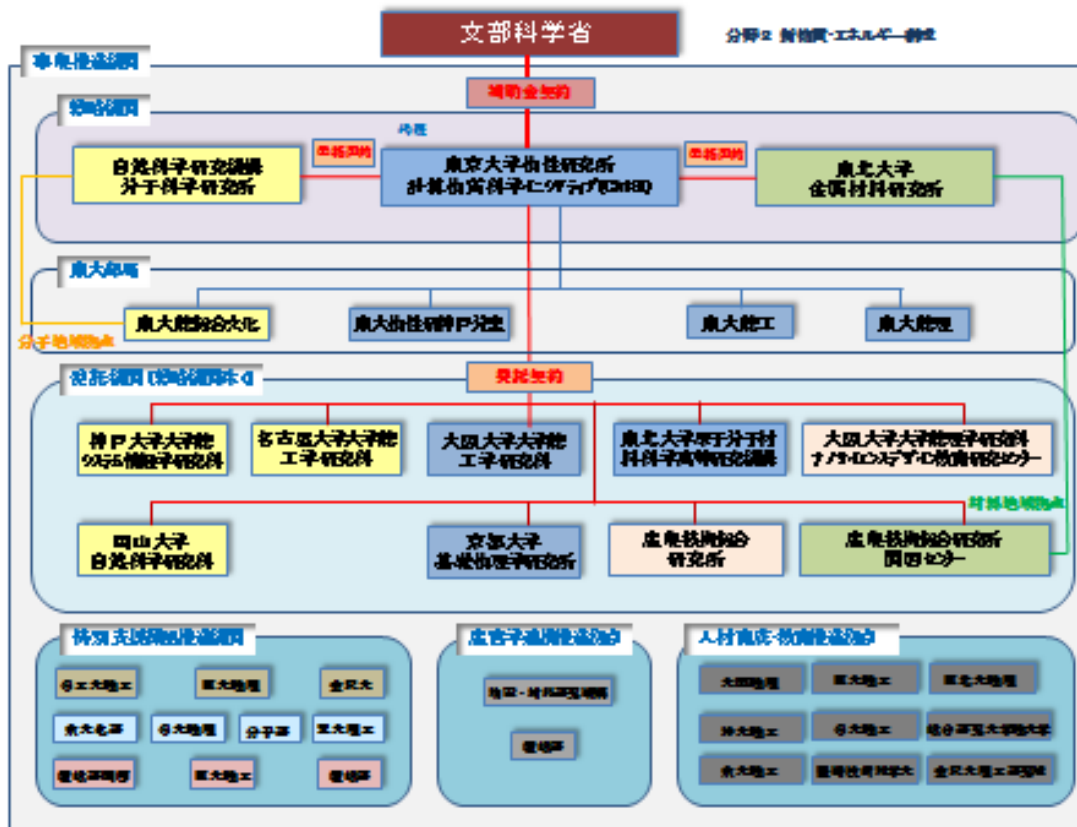


図 2.4-3 東京大学と委託契約を締結する機関、および、補助事業推進機関

ii) 計算物性科学研究センター(CCMS)

本センターは、国家プロジェクトとして開発されている大型汎用スーパーコンピュータ「京」の利活用をも念頭に、先端的計算物質科学の研究を推進するために 2011 年 4 月に設立された。従来からの物性研究所スパコン共同利用と連携し、更に並列度の高い計算を用いた先端的研究の推進、大規模並列ソフトウェア・アルゴリズムの開発とその普及などを通じて、直接的に計算物質科学の進展に寄与するとともに、次世代の計算科学の担い手となる人材の育成を目指す。本センターでは、スーパーコンピュータ「京」の計算物質科学利用枠や、物性研究所共同利用スパコンの大規模実行枠などを始めとする様々な計算資源を活用して、計算物質科学コミュニティの組織である計算物質科学イニシアティブ(CMSI)の活動を支援している。

また、本センターでは、スーパーコンピュータ「京」が設置されている神戸ポートアイランドの理化学研究所計算科学研究機構ビル内に分室を設けて、「京」を利用する物質科学研究者をサポートしている。分室では、利用者に対して、研究スペース、研究会・研修会への参加を通じた分野間交流の場、大規模並列化プログラミングに関する情報などを提供する

CCMS は CMSI の組織構成にない、運営委員会の下にスパコン連携小委員会、人材育成・教育小委員会、産官学連携小委員会、広報小委員会を設置している。CMSI の運営委員メンバーとそれぞれの委員会の代表者は下記の通りである。

CCMS 運営委員会メンバー(平成 24 年度)

役 割	氏 名	所 属
委員長	常行 真司	東京大学物性研究所
スパコン連携	川島 直輝	東京大学物性研究所
委員	高田 康民	東京大学物性研究所
委員	廣井 善二	東京大学物性研究所
委員	杉野 修	東京大学物性研究所
委員	野口 博司	東京大学物性研究所
広報	藤堂 眞治	東京大学物性研究所
委員	今田 正俊	東京大学大学院工学系研究科
委員	押山 淳	東京大学大学院工学系研究科
委員	高塚 和夫	東京大学大学院総合文化研究科
委員	川勝 年洋	東北大学大学院理学研究科
産官学連携	浅井 美博	産業技術総合研究所
委員	斉藤 峯雄	金沢大学理工研究域数物科学系
人材育成・教育	赤井 久純	大阪大学海外拠点本部

iii) 計算分子科学研究拠点(TCCI)

平成 24 年度の推進体制を図 1 に示す。左側は、研究部門であり、特別支援課題、重点課題を支援するための組織である。支援を行う研究員・教員の配置を図 2 に示す。図 1 の右側が、TCCI としての執行部門であり、各先生にお願いして拠点として必要な活動を分担して頂いている(図 3)。その多くは、上部組織である CMSI の小委員会の機能に対応するもので、TCCI の責任者は、CMSI の委員も兼務して、CMSI と TCCI で風通しのよい活動をねらっている。特に執行の要となる運営委員会では、これらの執行部門と前記の部会の分子科学の責任者などから構成し、TCCI の運営に必要な審議・決定を行うようにしている。

平成 24 年度、正式なプロジェクトとして発足した「新・元素戦略」への支援を行うための「元素戦略対応部門」と、平成 23 年度で終了した「次世代ナノ統合シミュレーションソフトの研究開発」(ナノ統合)の成果であるナノ統合ソフトも含め、分子科学アプリの普及対応のための「ソフトライブラリ部門」を創設し、対応を開始した。



H24年10月10日改定

図1 計算分子科学研究拠点(TCCI)体制

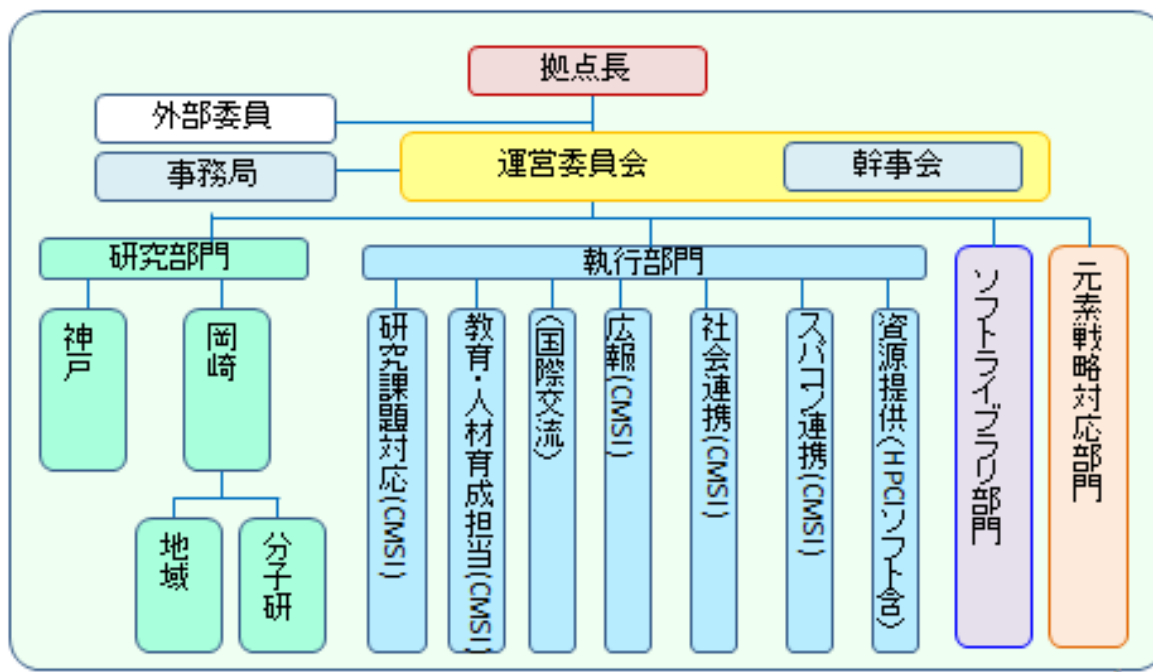




図2 CMSI研究員・教員配置

		第1部会	第2部会	第3部会	第4部会
分子科学	重点課題	天能(2) 笹井(1)		岡崎(2) 北浦(1)	田中(1)
拠点関係 分子研(1) 東大院総合文化(1) 神戸大院 の 情報(1)* 名大院工(1)*	特別支援課題		信定(1)	岡本(1) 松林(1) 中井(1) 岡崎・ 北浦(1)	山下(1) 長谷川・ 三浦(1)

*:教員

2



H24年5月12日改定

図3 TCCIの委員会など

会議体	委員(○委員長または責任者)
運営委員会 (3ヶ月に1回)	○高塚、天能、信定、岡崎、山下、長岡、関野、奥村、柳井、兵頭、斉藤、江原、榊、佐藤、田中
幹事会(2ヶ月に1回) (運営委員会の一部)	○高塚、斉藤(主幹会議担当)、江原、榊、岡崎
外部委員	(未定)
事務局	榊、岡崎、石谷
人事検討委員会	(改めて設置)
教育・人材育成委員会	○信定、天能、長岡、関野、岡崎
国際交流	(未定)
広報	○奥村、柳井
社会連携	○兵頭、高塚、榊、太田、岡崎、江原、佐藤
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原

3

iv) 計算材料科学研究拠点 (CMRI)

計算材料科学研究拠点 CMRI(Computational Materials Research Initiative)は平成 23 年 4 月に東北大学金属材料研究所に設立され、計算材料科学の研究とこの分野の振興を図っている。平成 24 年度は、他のコミュニティとより緊密な連携を図るべく、物性科学分野の常行真司教授(東大理)、分子科学分野の高塚和夫教授(東大総合文化)に新たに運営委員を委嘱し、計 14 名の運営委員体制で諸活動の計画立案・運営に臨んだ。組織図と運営委員会構成メンバー名を下に示す。また、産業技術総合研究所関西センターに CMRI の関西拠点を設けている。

計算材料科学の研究の支援のために、拠点研究員 2 名を雇用しており、一名は金研の拠点に、他の一名は関西拠点に配置している。また、東北大学は CMSI の教育拠点としての役割も担っており、教育・人材育成担当の准教授を平成 25 年 1 月より雇用(寺田弥生氏)、CMRI に常駐して拠点運営にも携わっている。

拠点の運営は、年度初めの運営委員会で基本方針を決定し、院生や若手研究員の海外派遣に関してはメンバーの間で公募を行い、また、年 2 回のシンポジウムは企画担当者を決めて計画の立案を行っている。その他の事業に関しても、運営委員の間でメール審議を行い、特に、年度途中の運営委員会では予算の執行状況や事業の実施状況などに関してチェックし、適正な執行と運営を図っている。

平成 25 年度からは、CMRI が中心となる新しい部会の設置が決定されており、本年度はこれに対する重点課題の実施体制、特別支援課題の選定や実施体制の整備を行った。



CMRI 運営委員会メンバー(平成24年度)

氏名	所属	特記事項
毛利 哲夫	北海道大学 大学院工学研究院	拠点長
新家 光雄	東北大学 金属材料研究所	金研所長
古原 忠	東北大学 金属材料研究所	金研副所長
高梨 弘毅	東北大学 金属材料研究所	金研副所長
佐藤 義幸	東北大学 金属材料研究所	金研事務部長
水関 博志	東北大学 金属材料研究所	
大野 かおる	横浜国立大学 大学院工学研究院	
尾方 成信	大阪大学 大学院基礎工学研究科	
川添 良幸	東北大学 未来科学技術共同研究センター	
香山 正憲	(独)産業技術総合研究所	
高塚 和夫	東京大学 総合文化研究科	計算分子科学拠点 拠点長
田中 功	京都大学 大学院工学研究科	
常行 真司	東京大学 大学院理学研究科	戦略分野2 統括責任者
松宮 徹	新日鐵住金株式会社	

別表 1 平成 24 年度に於ける実施体制－1

委員会	担当機関等	委員
【統括責任者】 【拠点代表者】 ・物性科学分野 ・分子科学分野 ・材料科学分野	東大院・理／物性研 東大・物性研 東大院・総合文化／分子研 北大・工／東北大・金研	常行真司(51) 川島直輝(48) 高塚和夫(62) 毛利哲夫(61)
【運営協議会】 ・本事業に関する実施事項の審議、および、決議	東大・物性研 自然科学研究機構・分子研 東北大・金研 産総研 理研・計算科学研究機構 新日鐵住金 物材機構 東レ 東大院・理／物性研 東大・物性研 東大院・総合文化／分子研 北大・工／東北大・金研	家泰弘(61) 大峯巖(67) 新家光雄(62) 寺倉清之(71) 平尾公彦(69) 松宮徹(63) 曾根純一(62) 恒川哲也(53) 常行真司(51) 川島直輝(48) 高塚和夫(62) 毛利哲夫(61)

別表 1 平成 24 年度に於ける実施体制－2

委員会	担当機関等	委員
<p>【運営委員会】 ・本事業に関する実施事項の審議、決議、および、運営協議会への上申</p>	<p>◎東大院・理／物性研 東大院・工 東大・物性研 神戸大院・システム情報 東大院・工 阪大・海外拠点本部 名大院・工／分子研 自然科学研究機構・分子研 北大・工／東北大・金研 東大・物性研 産総研・ナノシステム 東大院・工 岡山大・自然科学 京大・福井謙一記念研究セ 理化学研究所・計算科学 旭硝子 物材機構・理論計算科学ユ 東大・物性研 東北大院・理 金沢大院・理工 名大院・情報科学 京大院・工 自然科学研究機構／分子研 豊橋技科大院・知識情報 東大院・総合文化／分子研 横浜国大院・工 産総研・ユビキタスエネ 阪大院・基礎工</p>	<p>◎常行真司(51) 今田正俊(58) 川島直輝(48) 天能精一郎(48) 押山淳(60) 赤井久純(65) 岡崎進(58) 江原正博(47) 毛利哲夫(61) 杉野修(51) 浅井美博(53) 山下晃一(60) 田中秀樹(56) 榊茂好(66) 伊藤聡(56) 高田章(58) 大野隆央(58) 藤堂眞治(44) 川勝年洋(52) 斎藤峯雄(56) 長岡正隆(53) 田中功(53) 信定克幸(44) 関野秀男(60) 高塚和夫(62) 大野かおる(56) 香山正憲(55) 吉田博(62)</p>

注 1. ◎:議長

別表 1 平成 24 年度に於ける実施体制－3

委員会、研究項目	担当機関等	委員
<p>【企画室】</p> <p>・本事業に関する実施事項の検討、および、運営委員会にかかる議事の検討</p> <p>2.2.2.当該年度における研究成果</p> <p>2.2.2.1 研究開発課題</p> <p>(2)研究課題の評価</p> <p>2.2.2.2 計算科学推進体制構築</p> <p>全般</p>	<p>◎東大院・理／物性研</p> <p>東大院・工</p> <p>東大・物性研</p> <p>神戸大院・システム情報</p> <p>東大院・工</p> <p>阪大・海外拠点本部</p> <p>名大院・工／分子研</p> <p>自然科学研究機構・分子研</p> <p>北大・工／東北大・金研</p> <p>東大・物性研</p> <p>産総研・ナノシステム</p> <p>東大院・工</p> <p>岡山大・自然科学</p> <p>京大・福井謙一記念研究セ</p> <p>東大院・総合文化／分子研</p> <p>東大・物性研</p> <p>横浜国大院・工</p> <p>産総研・ユビキタスエネ</p>	<p>◎常行真司(51)</p> <p>今田正俊(58)</p> <p>川島直輝(48)</p> <p>天能精一郎(48)</p> <p>押山淳(60)</p> <p>赤井久純(65)</p> <p>岡崎進(58)</p> <p>江原正博(47)</p> <p>毛利哲夫(61)</p> <p>杉野修(51)</p> <p>浅井美博(53)</p> <p>山下晃一(60)</p> <p>田中秀樹(56)</p> <p>榊茂好(66)</p> <p>高塚和夫(62)</p> <p>藤堂眞治(44)</p> <p>大野かおる(56)</p> <p>香山正憲</p>

注 1. ◎:議長

別表 1 平成 24 年度に於ける実施体制－4

委員会、研究項目	担当機関等	委員
<p>【戦略課題小委員会】 2.2.1 本格実施における実施計画 2.2.1.1 研究開発課題 [第 1 部会] (1) 新量子相・新物質の基礎科学</p> <p>[第 2 部会] (2) 次世代先端デバイス科学</p> <p>[第 3 部会] (3) 分子機能と物質変換</p>	<p>神戸大院・システム情報 東大院・工 東大・物性研 京大・基研 首都大院・理工 東大院・理 東大院・総合文化／分子研 自然科学研究機構・分子研 自然科学研究機構・分子研 京大院・工 横浜国大院・工</p> <p>東大院・工 金沢大・理工 東大院・工 物材機構・理論計算科学ユ 阪大・海外拠点本部 東大院・理／物性研 阪大院・基礎工 自然科学研究機構・分子研 名工大院・工 京大院・工</p> <p>名大院・工／分子研 京大・化研 名大院・理 産総研・健康工学研究部門 (産総研・ナノシステム) 早大・理工 自然科学研究機構・分子研 九大・先導物質化学 神大院・システム情報 阪大院・工 東大・物性研 北大・工/東北大・金研 阪大院・基礎工</p>	<p>◎天能精一郎(48) ◎今田正俊(58) 川島直輝(48) 遠山貴巳(48) 岡部豊(63) 宮下精二(59) 高塚和夫(62) 柳井毅(39) 斉藤真司(47) 佐藤啓文(44) 大野かおる(56)</p> <p>◎押山淳(60) 斎藤峯雄(56) 渡邊聡(51) 宮崎剛(46) 赤井久純(65) 常行真司(51) 中野雅由(49) 信定克幸(44) 尾形修司(49) 田中功(53)</p> <p>◎岡崎進(58) 松林伸幸(44) 岡本祐幸(55) 篠田渉(41)</p> <p>中井浩巳(48) 江原正博(47) 吉澤一成(54) 北浦和夫(65) 森川良忠(45) 野口博司(39) 毛利哲夫(61) 尾方成信(42)</p>

注 1. ◎:小委員会／部会 代表者 注 2. ()内は H24 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 24 年度に於ける実施体制－5

委員会、研究項目	担当機関等	委員
[第 4 部会] (4) エネルギー変換	東大・物性研 東大院・工 産総研・ナノシステム 物材機構・理論計算科学ユ 阪大院・基礎工 岡山大院・自然 名大院・情報 東北大院・理 北大・触媒化学研究セ(京 大・福井謙一記念研究セ) 兵庫県立大院・シミュレーション学 東北大・金研 産総研・ユビキタスエネ	◎杉野修(51) ◎山下晃一(60) 浅井美博(53) 大野隆央(58) 吉田博(62) 田中秀樹(56) 長岡正隆(53) 森田明弘(47) 長谷川淳也(42) 兵頭志明(57) 水関博志(44) 香山正憲(55)
【スパコン連携小委員会】 2.2.2.2 計算科学技術推進体制構築 (1) 計算機資源の効率的マネジメント	東大・物性研究所 自然科学研究機構・分子研 東北大・金研 東大・情報基盤センター	◎川島直輝(48) 斉藤真司(47) 水関博志(44) 中島研吾(50)
【人材育成・教育小委員会】 2.2.2.2 計算科学技術推進体制構築 (2) 人材育成	阪大・海外拠点本部 東大院・工 名大院・情報科学 豊橋技科大院・知識情報工 北大・工／東北大・金研 理化学研究所・計算科学 旭硝子・中研 東北大院・理 金沢大・理工 自然科学研究機構・分子研 京大院・工 神戸大院・システム情報 阪大院・基礎工	◎赤井久純(65) 今田正俊(58) 長岡正隆(53) 関野秀男(60) 毛利哲夫(61) 伊藤聡(56) 高田章(58) 川勝年洋(52) 斎藤峯雄(56) 信定克幸(44) 田中功(53) 天能精一郎(48) 吉田博(62)
【産官学連携小委員会】 2.2.2.2 計算科学技術推進体制構築 (3) 人的ネットワークの形成 3) 産官学連携の促進	産総研・ナノシステム 物材機構・理論計算科学ユ 富士通研・次世代ものづくり 技術研究セ 新日鐵住金 東大・物性研 兵庫県立大院・シミュレーション学 旭化成	◎浅井美博(53) 大野隆央(58) 金田千穂子(56) 松宮徹(63) 杉野修(51) 兵頭志明(57) 青柳岳司(49)

注 1. ◎:小委員会／部会 代表者 注 2. ()内は H24 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 24 年度に於ける実施体制－6

委員会、研究項目	担当機関等	委員
【広報小委員会】 2.2.2.2 計算科学技術推進体制構築 (4) 研究成果の普及	東大・物性研 東大・物性研 自然科学研究機構・分子研 北大院・工 阪大・産業科学研究所 自然科学研究機構・分子研	◎藤堂眞治(44) 野口博司(39) 奥村久士(36) 大野宗一(36) 小口多美夫(57) 柳井毅(39)

注 1. ◎:小委員会／部会 代表者

別表1 平成 24 年度に於ける実施体制－7

研究項目	担当機関等	研究担当者
2.2.2.1 研究開発課題 (1)アプリケーション並列化調査 (2)準備状況の報告 (第1部会)新量子相・新物質の基礎科学 ＜重点課題＞	東大院・工	○今田正俊(58)
i) 関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明	東大院・工	○今田正俊(58)
① 電子関連の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究	東大院・工 東大院・工 東大院・工 九州工業大院・基礎科学 (東大院・工)	求幸年(41) 有田亮太郎(39) 中村和磨(38)
② 強相関電子系の励起ダイナミクスの研究	東大院・理 東大・物性研 産総研・ナノシステム 電通大・電気通信学部 東大院・工	青木秀夫(61) 高田康民(61) 三宅隆(41) 黒木和彦(46) 森田悟史(30)
③ 量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究	京大・基研 原研・先端基礎研セ 原研・システム計算科学 自然科学研究機構・分子研 京大・基研	○遠山貴巳(48) 前川禎通(65) 町田昌彦(46) 米満賢治(50) Lu Hantao(34)
ii) 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と物質理論の新展開	東大・物性研究所 東大・物性研 東大院・理 首都大院・理工 京大院・情報 兵庫県立大院・工 東大・物性研 東大・物性研	○川島直輝(48) 藤堂眞治(44) 宮下精二(59) 岡部豊(63) 原田健自(42) 鈴木隆史(33) 渡辺宙志(35) 正木晶子(29)
① 超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測	神戸大院・システム情報 神戸大院・システム情報 自然科学研究機構・分子研 神戸大院・システム情報 自然科学研究機構・分子研 名大・エコトピア科学研究所 首都大院・理工学 神戸大院・システム情報	○天能精一郎(48) ○天能精一郎(48) 柳井毅(39) 大塚勇起(34) 江原正博(47) 安田耕二(43) 波田雅彦(55) 大西裕也(32)
② 分子における電子の動的過程と多体量子動力学	東大院・総合文化／分子研 東北大院・理	○高塚和夫(62) 河野裕彦(59)
③ 凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス	自然科学研究機構・分子研 京大院・工 名大院・工 自然科学研究機構・分子研	○斉藤真司(47) 佐藤啓文(44) 笹井理生(56) Nie QingMiao(33)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H24 年度中の異動前の所属

別表1 平成 24 年度に於ける実施体制－8

研究項目	担当機関等	研究担当者
(第2部会)次世代先端デバイス科学 ＜重点課題＞		
i)密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	東大院・工 東大院・工 阪大院・基礎工学 ルイパスツール大 物材機構・理論計算科学ユ ロンドン大 東大院・工 阪大院・工 阪大・海外拠点本部 東大院・工 阪大院・工 東大院・工	○押山淳(60) 岩田潤一(39) 重田育照(40) Boero Mauro(45) 宮崎剛(46) Bowler David(40) 渡邊聡(51) 小野倫也(38) 赤井久純(65) 小泉健一(35) Marcus Heide (38) 古家真之介 (36)
＜特別支援課題＞		
ii)ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション	名工大院・工 阪大院・基礎工 名工大・若手研究イノベータ	○尾形修司(49) 尾方成信(42) 田村友幸(38)
iii)ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発	自然科学研究機構・分子研 筑波大院・計算科学研究セ 東京理大院・理	○信定克幸(44) 矢花一浩(52) 渡辺一之(58)
iv)スピントロニクス／マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索	金沢大・理工 金沢大・理工 阪大・産業科学研究所 北陸先端大院・シミュレーション科学	○斎藤峯雄(56) 小田竜樹(46) 小口多美夫(57) 尾崎泰助(43)
v)新材料探索	東大院・理／物性研 鳥取大院・工 京大院・工 産総研・ナノシステム 北陸先端大院・情報科学 産総研・ナノシステム	○常行真司(51) 吉本芳英(40) 田中功(53) 石橋章司(49) 前園涼(41) 土田英二(42)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H24 年度中の異動前の所属

別表1 平成 24 年度に於ける実施体制－9

研究項目	担当機関等	研究担当者
(第3部会)分子機能と物質変換 <重点課題> i)全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開	名大院・工／分子研 神戸大院・システム情報 東大・分生研 金沢大院・自然科学 慶大・理工 名大院・工 名大院・工 神戸大院・システム情報	○岡崎進(58) 北浦和夫(65) 北尾彰朗(47) 長尾秀美(49) 泰岡顕治(45) 安藤嘉倫(35) 藤本和士(28) 永田武史(36)
<特別支援課題> ii)拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明	名大院・理 自然科学研究機構・分子研 原研・システム計算科学セ 東北大院・理	○岡本祐幸(55) 奥村久士(36) 志賀基之(40) 高橋英明(43)
iii)ポリモルフから生起する分子集団機能	京大・化研 産総研・健康工学研究部門 (産総研・ナノシステム) 東レ・先端材料研究所 名大院・工 東大・物性研 東北大院・理	○松林伸幸(44) 篠田渉(41) 茂本勇(39) 吉井範行(41) 野口博司(39) 川勝年洋(52)
iv)ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス	早大・理工 九大・先導物質化学研 北大院・理 名大院・理	○中井浩巳(49) 吉澤一成(54) 武次徹也(48) IRLE Stephan(46)
v)機能性分子設計－光機能分子と非線形外場応答分子の光物性	自然科学研究機構・分子研 阪大院・基礎工 京大・学際融合教育研究推進セ(産総研・ユビキタスエネ) 慶大・理工 大阪府大院・理	○江原正博(47) 中野雅由(49) 太田浩二(62) 藪下聡(58) 小関史朗(56)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H24 年度中の異動前の所属

別表1 平成 24 年度に於ける実施体制－10

研究項目	担当機関等	研究担当者
(第4部会)エネルギー変換 ＜重点課題＞		
i) 燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究	東大・物性研 兵庫県立大院・シミュレーション学 名工大院・工 東北大・AIMR 東大院・工 阪大院・工 産総研・ナノ 技術研究組合・FC-Cubic 東大・物性研 阪大院・工 東北大・AIMR	○杉野修(51) 兵頭志明(57) 尾形修司(49) 赤木和人(42) 牛山浩(43) 森川良忠(45) 池庄司民夫(63) 錢玉敏(30) Bonnet Nicephore Arthur Francois (30) 木崎栄年(33) 洗平昌晃(33)
ii) 水素・メタンハイドレート生成、融解機構と熱力学的安定性	岡山大院・自然 岡山大院・自然 東北大・金研 金沢大・理工 岡山大院・自然	○田中秀樹(56) 甲賀研一郎(43) 水関博志(44) 三浦伸一(46) 矢ヶ崎琢磨(34)
iii) 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	産総研・ユビキタスエネ 産総研・ユビキタスエネ 阪大院・基礎工 新日鐵住金 新日鐵住金 新日鐵住金 横浜国大院・工 東北大・金研 物財機構(東北大・金研) 北大・工/東北大・金研 北大院・工 阪大・基礎工 産総研・ユビキタスエネ	○香山正憲(55) 田中慎悟(42) 尾方成信(42) 澤田英明(49) 松宮徹(63) 川上和人(56) 大野かおる(56) 水関博志(44) 佐原亮二(40) 毛利哲夫(61) 大野宗一(36) 譚田真人(32) Sharma Vikas(32)
＜特別支援課題＞		
iv) 太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算	東大院・工 東大・物性研 産総研・ナノシステム 物材機構・MANA 北大・触媒化学研究セ(京大・福井謙一記念研究セ)	○山下晃一(60) 杉野修(51) 宮本良之(50) 館山佳尚(42) 長谷川淳也(42)
v) バイオマス利用のための酵素反応解析	九大院・理 立命館大・生命科学 東北大院・理	○吉田紀生(38) 平田文男(65) 森田明弘(47)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H24 年度中の異動前の所属

別表1 平成 24 年度に於ける実施体制－11

研究項目	担当機関等	研究担当者
vi) 高性能リチウムイオン電池の開発に向けた基礎的研究	産総研・ナノシステム 東大院・工 日産自動車 名大院・情報 大阪府大・理	○大谷実(40) 山下晃一(60) 大脇創(41) 長岡正隆(53) 麻田俊雄(46)
vii) ナノ構造体材料における高効率非平衡エネルギー変換過程とナノ構造創製の理論シミュレーション	産総研・ナノシステム 産総研・ナノシステム 阪大院・基礎工 阪大院・基礎工	○浅井美博(53) 中村恒夫(41) 吉田博(62) 佐藤和則(41)
＜支援課題＞		
i) カゴメ格子反強磁性体の厳密体格法による研究	兵庫県立大・物理	中野博生(43)
＜アプリ高度化支援に関する研究課題＞		
	東大・物性研 東大院・工 神戸大院・システム情報学 阪大・ナノ教育研究セ 東北大・金研 東大院・工 名大院・工 自然科学研究機構・分子研 東大・物性研 東大・物性研 自然科学研究機構・分子研 東大・物性研 東大・物性研 産総研・ナノシステム 自然科学研究機構・分子研 東大・物性研 東大・物性研 自然科学研究機構・分子研 自然科学研究機構・分子研 自然科学研究機構・分子研 東大・物性研 東大院・総合文化	○藤堂眞司(44) 岩田潤一(39) 北浦和夫(65) 下司雅章(40) 寺田弥生(42) 山地洋平(31) 吉井範行(41) 石村和也(34) 五十嵐亮(31) 大久保毅(33) 河津励(38) Guo Zhixin(29) 河野貴久(33) 小西優祐(31) 榮慶丈(35) 坂下達哉(29) Truong Vinh Truong Duy(32) 西澤宏晃(29) 野田真史(32) 水口朋子(30) 吉澤香奈子(35) 米原丈博(36)

注 1. ○: 課題代表者

研究開発課題の年次計画

研究開発課題及び責任者名		H25 年度	H26 年度
第1部会 「新量子相・新物質の基礎科学」 (今田・天能)	重点課題1: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明	<p>1. MACE のcRPA およびmVMC の改良、拡張と新たな低エネルギーソルバーの京への実装に取り組む。多種の物質探索による物性予測と高機能量子物質の機構を提案。高温超伝導体の機構、非平衡現象の解析法の提案を行なう。強相関電子系における電子格子相互作用を扱う手法開発開始。</p> <p>2. DMRG による光誘起非平衡状態計算・非線形光学応答計算コードの高度化と強相関電子系の光誘起非平衡状態・非線形光学応答の特徴の解明。2次元 DMRG 法の開発と強相関電子系・スピン系への適用。</p> <p>3. 次世代スパコンによる脱閉じ込め現象解明計算と機構解明。新しいタイプの量子臨界現象の提案。スピン軌道相互作用系に対するテンソルネットワーク法の開発とそれを用いたスピン液体相のシミュレーション実施。</p> <p>4. 強いスピン軌道相互作用を持つ物質の新機構・新量子相提案および第一原理模型の導出と解析</p>	<p>1. 高機能量子物質、新超伝導体の可能性を網羅探索</p> <p>2. DMRG による時間依存角度分解光電子分光計算コードの開発・高度化と強相関電子系の時間依存一粒子励起スペクトルの特徴の解明。2次元 DMRG 法による強相関電子系・スピン系の新規量子相の提案。</p> <p>3. スピン軌道相互作用モデルにおけるスピン液体相の解明。人工格子(光格子など)上の冷却原子系に関して、高精度の予言を行う。</p> <p>4. 新規トポロジカル相の提案、新量子相のための新規プロジェクト開始</p>
	重点課題2: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開	<p>1. MP2-F12 法、SCS-MP2-F12 法を用いて京コンピュータ上でナノ炭素分子の大規模な応用計算を行うと共に、高次電子相関法の超並列実装を行う。又、モデル空間量子モンテカルロ法の超並列実装を進め、金属クラスターや電子相関の強い系の基底状態と励起状態への応用を行う。更に、有機 EL や有機太陽電池への応用を開始する。</p> <p>2. 「強い超短電磁場中に置かれた分子の非断熱電子波束動力学」の超並列プログラムを「京」にて超並列の実装と具体的なシミュレーションを行う。このころまでには、分子の電子状態設計とそれに基づく反応制御の理論とアルゴリズムを完成させ、10 原子程度からなる分子系のリアリティックな反応を設計指針を具体化する。また、超多体半古典ダイナミクスでは、タンパクの動力学に関する量子効果の検討を行う。</p> <p>3. 前年度に引き続き、高次非線形分光法・多時間相関関数による揺らぎ・エネルギー緩和機構の解析。MC-MOZ 法について周辺理論との統合を進めて、計算対象を拡大する。カメレオンモデルを拡張した動的エネルギーランドスケープ理論を整備し、分子モーター、チャネル、シグナル伝達における化学反応へ適用する。</p>	<p>1. 前年度までの成果を基に、相対論的な F12 理論の超並列実装を開始し、重元素を含む材料の超高精度計算を可能とする。モデル空間量子モンテカルロ法についても、京コンピュータを用いた、レアアースの代替物となる合金のシミュレーションを行う。有機光材料分子の計算も引き続き行う。</p> <p>2. 前年に引き続き、分子の電子状態設計とタンパク動力学の量子効果の研究をシミュレーションレベルに引き上げるよう、並列度を上げて大規模化する。特に、分子の電子状態設計については、電子高励起状態や密集電子状態への研究へと展開する。また、超多体半古典ダイナミクスでは、筆者らによる多次元トンネル理論の実装を行い、生体分子のトンネル現象の研究へと展開を図る。</p> <p>3. 前年度までに開発した理論を基に、固液界面などの不均一系を対象とした計算の実行。動的エネルギーランドスケープ理論の応用による分子モーターの化学反応理論への展開。</p>

次ページに続く

H27 年度	最終成果目標
<p>1. 多自由度クラスター動的平均場法などの手法でのダイナミクス計算。強相関係の高速緩和、光誘起転移などの非平衡現象解明と高機能素子探索。</p> <p>2. DMRG 共鳴非弾性X線散乱スペクトル計算コードの高度化と 10000 ノード以上で並列化効率 80%以上、理論ピーク性能比 30%以上。内核 K-端や L-端に対する共鳴非弾性X線散乱スペクトル計算によるスピン励起と軌道励起の解明と実験に対する提案。</p> <p>3. スピン軌道相互作用系や人工格子(光格子など)上の冷却原子系におけるスピン液体相など新量子相の提案を行う。</p> <p>4. 新量子相、新物質探索のための新規プロジェクト遂行</p>	<p>電子を含む多体量子系の物性を解明する計算手法を開発整備することによって、京を用いなければできない物性基礎科学の進展を図る。特に京を用いた強相関第一原理シミュレーション法(MACE)を整備し、汎用的な電子状態計算法として確立する。</p> <p>この手法を用いて、新しい量子状態や量子相転移を1つ以上解明する。例えば、量子スピン液体、非フェルミ金属、強相関トポロジカル絶縁体、トポロジカル転移などはその候補である。さらに、いくつかの強相関超伝導体の物性を解明する。</p> <p>また、最先端の実験と歩調を合わせながら、強相関電子系特有の励起ダイナミクスの探索と解明を行なう。</p> <p>強相関電子系特有の電子内部自由度による量子効果を最大限活用した次世代光学素子の設計指針を構築する。</p> <p>教科書の書き換えにつながるような基礎概念の革新をめざして、基礎的な理論模型の持つ新しい量子現象、量子概念の検証を行なう。</p> <p>例えば、脱閉じ込め機構の検証・解明はその重要なターゲットである。</p> <p>低エネルギーソルバーの整備 (京への実装応用)</p> <p>500-1000 自由度以上のサイズの強相関フェルミ格子</p> <p>10 万サイト以上の量子スピン格子</p> <p>100 サイトのダイナミクス</p> <p>一部 ALPS プロジェクトに基づくソルバーの公開 化学反応への適用。</p>
<p>1. 前年度までの項目に加え、相対論的な F12 理論の超並列実装の擬縮重系に対応した実装を行い、磁性やナノ金属クラスターの高精度構造予測を可能とする。</p> <p>2. レーザーによる分子の電子状態設計を、真空中のそれから溶媒ないしクラスター中のダイナミクスへと発展させる。第 3 グループとの強い連携研究を行う。更なる計算の巨大化に向けて、次世代を見据えたアルゴリズムの検討を行いつつ、リアリスティック電子状態設計のシミュレーションを行う。</p> <p>3. より一般的な化学反応や酵素反応をターゲットに、これまで開発してきた理論の展開。動的エネルギーランドスケープ理論の応用による分子モーターの物質輸送と制御理論の展開と有効性の検証。</p>	<p>電子相関と相対論を高精度に扱う電子状態理論を 20 万コア以上、70%以上の並列化性能で実現する事を目標とする。ナノ炭素材料の設計や、レアアースメタル等の稀少金属を用いない磁性材料や水素吸蓄合金の高精度予測を可能とし、工業的に価値の高い材料の高度設計を実現可能とする。</p> <p>動的な電子状態設計は、新しい時代の「化学」を切り拓く重要な次元の一つである。安定に存在する分子の状態を研究する理論化学から、自然界には存在しない電子状態を創り出し制御する科学へと、「京」の上での実行を通して、パラダイムの転換を図る。</p> <p>高次非線形分光法に関する計算手法の確立し、最も身近な溶媒でかつ複雑な運動を示す水の分子内・分子間ダイナミクスおよび物性を解明する。また、積分方程式理論に構造揺らぎを取り入れる理論を組み合わせ大規模分子の内部自由度を時間・空間的に分離する手法を開発し、固液界面などの不均一系、化学反応や酵素反応の分子論的解明に取り組む。さらに、蛋白質無撞着ダイナミクス計算法の確立と応用により、広範な生化学反応を理解するための新描像を得る。溶液の性質、アミノ酸置換、巡回置換などのシステム制御により蛋白質反応を制御する方法を提案する。ヘモグロビン、シャペロン、分子モーターなど蛋白質複合体への応用を展開し、分子科学の立場から生物学的な新しい原理を導く。これらの研究により得られる新しい分子論的知見は、他の部会だけでなく、実験研究に与える影響も大きい</p>

研究開発課題及び 責任者名		H25 年度	H26 年度
第2部会 「次世代先端デバイス科学」 (押山)	重点課題3: 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	<p>*RSDFTと輸送シミュレータとの統合</p> <p>*CONQUESTによるナノワイヤーへのイオン注入シミュレーション</p> <p>*CONQUESTによるナノ界面構造決定とRSDFTによる電子状態解明予測</p> <p>*ワイドギャップ系(SiC, GaN)への応用</p> <p>*十数万コア程度の並列化計算を用いて、サーフェスプラズモンポラリトン、励起子ポラリトン伝播の解明。1次元量子井戸とパルス光の非線形相互作用を解明</p> <p>*ハイブリッド QM-CL コードのスパコン上での大規模実行</p> <p>*QM 法として、他のコード(RSDFT 等)の実装化</p> <p>*平面波 DFT コード(統合版)の開発(高度化・高並列化)</p> <p>*平面波 DFT コード(統合版)とポストプロセスのパッケージ化作業(マルチカノンカル法 M2TD, フォノン, 熱伝導, 超伝導 DFT, トランスコレイティッド法, DMC)</p> <p>*上記ソフトウェアの部分公開</p> <p>*分子性半導体, 酸化物系の欠陥, 化合物界面, 固液界面, マルチフェロイクス材料への応用</p> <p>*関連の強い電子系(遷移金属酸化物, 格子欠陥)への応用</p>	<p>*RSDFT+輸送シミュレータによるナノワイヤー・FET 特性解明</p> <p>*ワイドギャップ系(SiC, GaN)での界面への応用</p> <p>*十数万コア以上の並列化計算を駆使して、ポラリトン伝播に基づく光合成プロトタイプ開発。高強度パルス光の振幅・位相情報が電子状態に転写されるメカニズムを解明。パルス光の2次元的な伝播を計算するコードを作成する。</p> <p>*Li イオン 2 次電池の電極界面や半導体表面のナノ構造形成ダイナミクス解明に向けて、ハイブリッド QM-CL コードのスパコン上での大規模実行</p> <p>*粗視化法コードによる、デバイスの実際的な形状やサイズでの変形・応力場の取り入れ</p> <p>*平面波 DFT コード(統合版)とポストプロセスパッケージの高度化</p> <p>*磁性材料, マルチフェロイクス材料, 関連の強い電子系(遷移金属酸化物, 格子欠陥)への応用</p> <p>*新奇材料探索</p> <p>*ノンコリニアスピン輸送シミュレーション</p>
第3部会 「分子機能と物質変換」 (岡崎)	重点課題4: 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	<p>(MODYLAS)</p> <p>1. 温度、pH、アルコールなどの化学物質等のウイルスが置かれた環境が、カプシドの構造安定性に及ぼす影響について明らかにする。</p> <p>2. ウイルスに機械的な外力が加わった場合の変形について明らかにする。</p> <p>3. カプシド-レセプター間の特異な相互作用について、継続的に自由エネルギーレベルでの解析を行う。また、異なるタイプのレセプターや抗体との相互作用についても検討を開始する。</p> <p>4. induced fit 機構について分子レベルでの検討を継続して行う。</p> <p>(FMO)</p> <p>1. ヘマグルチニンの新規阻害剤の探索を行い、数十個の活性化化合物を見出す。これらの結合構造と結合エネルギーの計算予測を行い、次の分子設計のステップに向けて3~5個のシード化合物を選択する。</p>	<p>(MODYLAS)</p> <p>1. 温度、pH、アルコールなどの化学物質等のウイルスが置かれた環境が、カプシドの構造安定性に及ぼす影響について継続的に検討を行う。</p> <p>2. これまでのレセプターに加えて、さらに結合部位のアミノ酸を他のものに置換したミュータントならびに異なるタイプのレセプターや抗体についても結合の自由エネルギー計算を行い、これまでの結果との比較からレセプターによるウイルスの分子認識の特異性について定量的に検討する。また、レセプターの結合に伴うカプシド側の変化についても可能な限り追跡を行う。</p> <p>(FMO)</p> <p>1. 前年度に見出した新規活性化化合物を基に、数十個の化合物を分子設計する。これらの結合エネルギーを高精度計算で予測し、大きな結合エネルギーを持つ化合物を5~10個見出す。</p>

次ページに続く

H27 年度	最終成果目標
<p>* 数十万コア並列を目指して TDDFT+マクスウェル多階層緊密結合シミュレーションコードで、実在系ナノ構造体光誘起ダイナミクスの計算を行う。また、2次元的な光伝播の計算を行い、2次元ナノ構造とパルス光の非線形相互作用を解明する。</p> <p>* 実際の形状やサイズでの、デバイス丸ごとハイブリッドシミュレーションの大規模実行</p> <p>* 平面波 DFT コード(統合版)とポストプロセスパッケージの高度化と公開</p> <p>* 新奇材料探索</p> <p>* 化合物相図探索</p>	<p>* 実空間法に基づく FET 性能シミュレータの原型開発</p> <p>* ナノ構造体の電子機能発現予測に関するナノ科学の確立</p> <p>* 計算機を用いた材料探索手法の確立と基盤ソフトウェアの公開</p> <p>* 基礎科学の知見に立脚した新奇デバイス材料の提案</p>
<p>(MODYLAS)</p> <p>1. レセプターのミュータントに対する結合の自由エネルギー計算を継続して行い、レセプターによるウイルスの分子認識の特異性について定量的に実証する。</p> <p>2. レセプターの結合に伴うカプシド側の変化についても継続的に追跡を行う。</p> <p>3. ウイルスカプシドに注目した新しいタイプの抗ウイルス剤の可能性について検討し、カプシドとレセプターの結合を阻害する分子の探索を行い、カプシドに関わる抗ウイルス剤の可能性についての指針を得る。</p> <p>(FMO)</p> <p>1. 前年度に設計した 3~5 個の化合物を選択し、これらの化合物とタンパク質との複合体構造と結合エネルギーを高精度計算で求めて活性を予測し、これらの内で十分な活性を有する化合物を医薬品の候補化合物として提案する。</p>	<p>ウイルス学、薬学、構造生物学等の実験研究者との密接な連携の下に、これらの分野で強く求められているウイルスの分子論を明らかにする。このため、主として小児マヒウイルスのウイルスカプシドとインフルエンザウイルスのウイルスタンパク質に注目し、特に以下の4項目に絞ってMD計算や量子化学計算に基づいた研究を推進し、ウイルス分子科学の端緒を開く。</p> <p>1. ウイルスカプシドの構造とその安定性について、カプシドタンパク質間相互作用と正二十面体構造形成の原理を明らかにし、カプシドの実際の生体環境における実像を明らかにする。さらには、温度、pH、化学物質、乾燥等のウイルスが置かれた環境が、カプシドの構造安定性に及ぼす影響について明らかにする。</p> <p>2. 感染初期過程として重要なカプシドとレセプターの特異な結合に対し、ウイルスへの結合比率も含めて定量的に解明する。特に、ミュータントについても同様の計算を行い、分子認識の特異性について定量的に実証する。さらに、レセプター、カプシドの構造変化について、いわゆる induced fit 機構について分子レベルでの検討を行い、またレセプター-カプシドの結合に伴うカプシド側の変化についても可能な限り追跡を行う。</p> <p>3. ウイルスカプシドに注目した新しいタイプの抗ウイルス剤、つまりカプシドとレセプター-カプシドの結合を阻害する分子の探索を行い、これらの可能性について指針を得る。</p> <p>4. インフルエンザウイルスの新規阻害化合物を理論設計する。本研究の推進により FMO 法を活用した量子計算創薬手法を確立し医薬品開発の効率化に貢献する。</p>

研究開発課題及び 責任者名	H25 年度	H26 年度
<p data-bbox="161 723 290 913">第4部会 「エネルギー変換」 (杉野・山下)</p>	<p data-bbox="316 210 555 320">重点課題5: エネルギー変換の 科学</p>	<p data-bbox="582 210 1010 797">1. 最大ノードでの実効並列度を改善して STATE に関しては効率 10%と SCF の安定性を達成させる。CPMD に関しては、RS-CPMD の導入により計算効率を著しく向上させる 2. SmoothESM や constant μ を用いたシミュレーション法の高度化を果たす 3. 界面の構造や溶液の組成などと燃料電池活性の関連を明確にする計算を行う。リチウムイオン二次電池の溶媒の分解過程と SEI 膜の形成過程に関する計算を行う。安定性などの対する溶媒分子や添加物分子の種類の影響を調べ、溶媒設計のための知見を得る。 4. 理論-実験研究者による燃料電池シミュレーション課題連絡会を継続開催。</p>
<p data-bbox="161 1442 290 1655">第5部会 「マルチスケール材料科学」 (香山)</p>	<p data-bbox="316 1442 555 1632">重点課題7: 金属系構造材料の 高性能化のためのマ ルチスケール組織設 計・評価手法の開発</p>	<p data-bbox="582 1442 1010 1991">1. Fe/炭化物界面について、引き続き整合界面と部分整合界面の大規模スーパーセル計算を OpenMX で行うとともに、炭化物の種類による違いを分析する。併せて QMAS による界面の局所応力・局所エネルギー解析を進める。また、Fe の転位芯について、大規模スーパーセルを構築して計算を開始する。不純物や合金成分との相互作用を検討する。 2. Phase Field 法について、引き続き、第一原理計算からの各種パラメータ導入法など、第一原理計算の結果を Phase Field 法に繋げる手法について検討する。</p>
	<p data-bbox="316 848 555 994">重点課題6: 水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性</p>	<p data-bbox="582 848 1010 1397">1. 使用する主なアプリケーションは MODYLAS である。その開発の主な部分は第三部会と同じである。必要であれば、境界条件の設定などにおいて、実在の界面に類似の設定と成るようなチューニングを行なう。 2. 前年に引き続き、メタンハイドレートの大規模解離過程のシミュレーションを実施して、その結果に基づいて付与する熱量と温度勾配また圧力勾配などについて詳細に検討し、融解の速度などに対する適切な条件を探る。さらに、融解に関与する大振幅モードの励起や適切なハイドレート阻害物質の選択などについての検討も実施する。</p>
		<p data-bbox="582 1442 1010 1991">1. Fe/炭化物(窒化物)界面、Fe の転位芯、Fe の結晶粒界について、大規模スーパーセルで OpenMX を用いた大規模計算を行う。QMAS による局所応力・局所エネルギー解析も行う。転位芯・粒界と不純物・合金成分との相互作用を詳細に解明する。また、大規模スーパーセルを変形させて、各種応力下での界面や欠陥の原子間結合の変化等、力学挙動を探る計算を開始する。 2. Phase Field 法について、異相界面、粒界、転位の第一原理計算から各種パラメータを導入し、鉄系での微細組織の形成過程のシミュレーションを試みる。</p>

H27 年度	最終成果目標
<p>1. さらに実効効率を上げる。そのために平面波基底による計算から実空間基底あるいは局在基底を用いた計算との効率や精度のチェックを行い、計算効率の飛躍的向上ができないか検討する。</p> <p>2. 前年まで行ってきた計算を貴金属表面以外の表面に拡張する。貴金属表面の物性の制約を離れた場合にどの程度電池性能が向上できるものかを調べる。その際、遷移金属酸化物などの電子状態のかなり異なる材料を調べる。</p> <p>3. 各共同研究の具体的課題で理論を実験で検証。燃料電池全体に関わるシミュレーション技術を統括的に検討</p>	<p>白金から他の貴金属さらに遷移金属酸化物までの表面に対して、面方位や欠陥や印加電位依存性を調べ、さらに吸着構造についても考慮した計算をこのように系統的に行うことにより、結局水素酸化と酸素還元から構成される燃料電池反応機構というものがどのような条件下で加速減速されるのかに対する現時点での最終回答を得る。その結果はなぜ白金が優れているのか、また白金を代替するにはどのような条件を満たさなければならないかについての一応の回答になっているはずである。</p> <p>計算科学の普及として、燃料電池の表面科学全般に関するシミュレーション技術を確立し、実験研究者を含めて利用しやすい環境を整える。</p>
<p>1. 使用する主なアプリケーションはMODYLASである。その開発の主な部分は第三部会と同じである。</p> <p>2. 大規模計算、解析を引き続き実行する一方、研究成果としての取りまとめを行う。</p>	<p>1. メタンハイドレートの融解や水素ハイドレートの安定性について、コストのかかり高圧で危険である幾つかの実験を理論的予測によりおきかえることを目指す。また、新規な構造をもつハイドレートの存在の予測をおこなう。</p> <p>2. 実在の境界条件下において熱と物質の移動を取り入れたシミュレーションを行い、相転移過程の熱力学的な側面だけでなく動力学的な側面を含めて明らかにし、メタンハイドレートの制御可能性に関する科学的知見を確立する。それを基礎として、実験では不明な氷点近傍における融解速度の極端な低下(自己保存性)の解明並びに現在提案されている減圧法、加熱法、インヒビター圧入法、異種ガス圧入法などの優劣の検討を行う。同様の手法で水素ハイドレートに関しても効率的な生成解離過程や安定性を明らかにすることにより、水素の安全で安価な貯蔵法としてのハイドレート利用の可能性を探る。</p>
<p>1. 引き続き、Fe/炭化物界面、Fe/窒化物界面も含めて、Fe の転位・粒界・界面の各々の大規模スーパーセルを変形させて、各種応力下での界面や欠陥の原子間結合の変化等、力学挙動を探る計算を行う(OpenMX)。不純物・合金成分を含むセルの変形計算も行い、界面・粒界・転位の力学挙動への不純物・合金成分の効果を解明する。</p> <p>2. Phase Field 法について、引き続き、異相界面、粒界、転位の第一原理計算から各種パラメータを導出し、鉄系での微細組織の形成過程のシミュレーション法を提案する。</p>	<p>優れた構造材料・耐熱材料の開発は、エネルギー変換機器の効率向上、輸送機器の軽量化による省エネ化など、エネルギーの有効利用のために不可欠である。こうした実用材料は多結晶体で、合金成分や添加元素(レアメタル)を含み、析出相や界面・粒界・欠陥で構成される「微細組織」が優れた耐熱性や機械的性質を持つ。こうした「微細組織」の構造や性質、合金成分・添加元素の役割を解明し、設計技術を確立するため、以下の二点が必要である: 第一に、異相界面・粒界・転位など、微細組織を構成する複雑構造の大規模第一原理計算を行い、異相界面や粒界・欠陥での原子配列や原子間結合の様子やエネルギー、不純物・合金成分の挙動など、原子・電子の振る舞いを高精度に明らかにすること、第二に、相変態や析出、拡散など有限温度の自由エネルギーに支配されたメソスケール現象を理解し設計するため、Phase-Field 法を第一原理計算と組み合わせることで適用すること、である。</p> <p>鉄鋼材料中では、レアメタル(希少元素)を含む添加元素や合金成分が、析出相を生んだり、粒界・欠陥と相互作用する等、構造や性質を大きく支配する。特に炭化物や窒化物などの析出相と周りの金属との界面は、格子 misfit のため界面近傍に転位や歪を生み、機械的性質を大きく支配する。こうした異相界面形成や粒界・転位での添加元素・合金成分の挙動の解明は、微細組織を理解し設計するための最重要課題である。レアメタル代替技術開発に直結し、元素戦略上も大きな意義がある。</p>

「HPCI 戦略プログラム(本格実施)」
計算科学技術推進体制構築の年次計画

分野振興内容	H25 年度	H26 年度
計算機資源の効率的マネジメント	<ul style="list-style-type: none"> 重点課題・特別推進課題の評価会(成果報告会)の開催(年1回) 共同利用課題から戦略候補課題へのノミネート ハイブリッド並列アプリ開発テスト環境の運用 戦略機関保有スパコンの戦略プロジェクト枠の運用 戦略アプリ開発・実行環境の運用 ソフトウェア資源公開作業(個別アプリのGUIなど) ソフトウェア資源公開サイトの運用 Phi システムの増強 	<ul style="list-style-type: none"> 重点課題・特別推進課題の評価会(成果報告会)の開催(年1回) ハイブリッド並列アプリ開発テスト環境の運用 戦略機関保有スパコンの戦略プロジェクト枠の運用 戦略アプリ開発・実行環境の運用 ソフトウェア資源公開作業(統合化、ライブラリ化など) ソフトウェア資源公開サイトの運用
人材育成	<p>24 年度で実施した大学院教育、若手研究者育成、社会人教育、ワークショップ(チュートリアルコース)を継続、充実するとともに以下を実施する。</p> <ul style="list-style-type: none"> 策定した計算物質科学大学院教育基本カリキュラムに従った大学院教育を開始 単位互換あるいはコンテンツ配信による単位認定制度を利用した全国大学への講義提供のための制度整備を行う。 	<p>25 年度で実施した大学院教育、若手研究者育成、社会人教育、ワークショップ(チュートリアルコース)を継続、充実するとともに以下を実施する。</p> <ul style="list-style-type: none"> 単位互換あるいはコンテンツ配信による単位認定制度を利用した全国大学への講義提供を開始する 連携大学院方式による計算物質科学副専攻プログラム(あるいは副プログラム)実施の検討
人的ネットワークの形成	<ul style="list-style-type: none"> CMSI 国際シンポジウムの開催 CMSI 研究会の開催。 分野シンポジウム(物性研、分子研、金研)の開催。 元素戦略、大型実験施設との連携会議開催 神戸拠点インフォーマルセミナーの開催。 そのほか小規模研究会。(適宜) 	<ul style="list-style-type: none"> CMSI シンポジウムの開催。 CMSI 研究会の開催。 分野シンポジウム(物性研、分子研、金研)の開催。 元素戦略、大型実験施設との連携会議開催 神戸拠点インフォーマルセミナーの開催。 そのほか小規模研究会。(適宜)
産官学連携	<ul style="list-style-type: none"> 企業と大学・研究機関の計算シミュレーション・コミュニティの協働の場を多く作っていく。国プロやコンソーシアムなどを協働の場として支援していく。 産業界と大学・研究機関の計算シミュレーション・コミュニティの間の相互理解を醸成する為に、連続研究会を実施する。年3回程度の開催をめざし、その内の2つナノエレ分野とエネルギー分野とする。 CMSI アプリケーション公開サイト「MateriApps」の企画・立ちあげ・運用作業を広報委員会と協力して行う。 	<ul style="list-style-type: none"> 企業と大学・研究機関の計算シミュレーション・コミュニティの協働の場を多く作っていく。国プロやコンソーシアムなどを協働の場として支援していく。 産業界と大学・研究機関の計算シミュレーション・コミュニティの間の相互理解を醸成する為に、連続研究会を実施する。年3回程度の開催をめざし、その内の2つナノエレ分野とエネルギー分野とする。 CMSI アプリケーション公開サイト「MateriApps」の企画・立ちあげ・運用作業を広報委員会と協力して行う。

次ページに続く

H27 年度	最終成果目標
<ul style="list-style-type: none"> ・重点課題・特別推進課題の評価会(成果報告会)の開催(年1回) ・ハイブリッド並列アプリ開発テスト環境の運用 ・戦略機関保有スパコンの戦略プロジェクト枠の運用 ・戦略アプリ開発・実行環境の運用 ・ソフトウェア資源公開作業(統合化、ライブラリ化など) ・ソフトウェア資源公開サイトの運用 	<ul style="list-style-type: none"> ・重点課題の達成のための開発実行環境の完成。 ・新規重点課題の選定と達成のための開発実行環境の完成。 ・高効率ハイブリッド並列プログラミング環境の完成。 ・ソフトウェアライブラリの公開と標準化。
<p>26 年度で実施した大学院教育、若手研究者育成、社会人教育、ワークショップ(チュートリアルコース)を継続、充実するとともに以下を実施する。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・単位互換あるいはコンテンツ配信による単位認定制度を利用した全国大学への講義提供 ・連携大学院方式による計算物質科学副専攻プログラム(あるいは副プログラム)を試験的に実施 	<p>以下の活動を含むリサーチ・トレーニング・ネットワーク(RTN)の構築をめざす。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・大学院教育、若手研究者育成、社会人教育、ワークショップ(チュートリアルコース)の充実と定常的な実施 ・東アジア地域における計算物質科学における教育 ・計算物質科学大学院教育基本カリキュラムの策定 ・策定した計算物質科学大学院教育基本カリキュラムに従った大学院教育の実施 ・単位互換あるいはコンテンツ配信による単位認定制度を利用した拠点大学から全国大学への講義提供 ・連携大学院方式による計算物質科学副専攻プログラム(あるいは副プログラム)を開始
<ul style="list-style-type: none"> ・CMSI 国際シンポジウムの開催。 ・CMSI 研究会の開催。 ・分野シンポジウム(物性研、分子研、金研)の開催。 ・元素戦略、大型実験施設との連携会議開催 ・神戸拠点インフォーマルセミナーの開催。 ・そのほか小規模研究会。(適宜) 	<ul style="list-style-type: none"> ・分野内ネットワークの形成。とくに交流を通じた新しい研究テーマの開拓。 ・分野間ネットワークの形成。とくに並列計算技法を共通言語とする有機的な他分野コミュニティを形成。 ・国際ネットワークの形成。とくにアジア諸国間の連携を強化。 ・元素戦略プロジェクト、大型実験施設の実験家との連携を強化し、計算科学と実験科学の融合による成果を導く。
<p>①前年度までに行って来た事業の総括を行うと同時に、その実施主体を CMSI から主たる参画機関に委譲し、プロジェクト終了後も従来の事業がスムーズに継続される様に努力する。</p>	<p>「新物質・エネルギー創製」分野の計算シミュレーションを産業界に深く普及させ、この分野のイノベーションに計算シミュレーションを通して CMSI が強く関与する。</p>

分野振興内容	H25 年度	H26 年度
研究成果の普及計画	<ul style="list-style-type: none"> ・広報誌を定期的に発行 ・「ソフトウェアのポータルサイト“MateriApps”」正式版公開 ・ホームページのリニューアル ・公開アプリトライアル環境の整備 ・アプリ開発環境の提供 ・ソフトウェア利用事例の公開 ・成果の公開用サーバ整備 ・見える化シンポの企画実行 	<ul style="list-style-type: none"> ・広報誌を定期的に発行 ・「MateriApps」の更新・充実 ・パンフレット内容の見直し、改訂版発行 ・ソフトウェア利用事例の更新・充実 ・見える化シンポの企画実行
分野を超えた取組みの推進	<ul style="list-style-type: none"> ・技術交流会(神戸拠点)の開催 ・他分野との交流セミナー(神戸拠点)の開催 ・情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会との研究会共催 ・実験研究者との討論会 ・高強度材料に関するJSTプロジェクトなどとの連携推進 	<ul style="list-style-type: none"> ・技術交流会(神戸拠点)の開催 ・他分野との交流セミナー(神戸拠点)の開催 ・情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会との研究会共催 ・実験研究者との討論会 ・高強度材料に関するJSTプロジェクトなどとの連携推進
戦略分野の研究者を支える研究支援	<ul style="list-style-type: none"> ・先端的並列計算要素技術の開発。 ・並列化アプリ開発・高度化支援。 ・並列化アプリ公開支援。 ・アプリ公開環境整備。(ポータルサイト構築など) ・拠点研究員による並列化技術交流会。 	<ul style="list-style-type: none"> ・先端的並列計算要素技術の開発。 ・並列化アプリ開発・高度化支援 ・並列化アプリ公開支援 ・アプリ公開環境整備。(ポータルサイト構築など) ・拠点研究員による並列化技術交流会。
実施体制・	<ul style="list-style-type: none"> ・緊急案件の審議にはテレビ会議・メール会議を活用し、迅速に対応する。 ・継続的審議の必要な重要案件が生じた場合は、企画室会議の下にWGを立ち上げ対応する。 ・戦略機関内の交流を図り、CMSI 拠点研究員、重点研究員がアプリケーション高度化に関する共通の課題意識を持ってその解決に取り組める実施体制を整える。 	
	<ul style="list-style-type: none"> ・エクサスケールコンピューティングにおいて想定される計算モデルを検討し、物質科学分野における将来構想を策定する。これに基づいて、プロジェクト後半に向けた CMSI の諸活動(計算資源提供、ソフト開発・公開・普及、人材育成・教育、研究会・講習会、産官学連携、広報等)の再検討を行う。更にポスト「京」プロジェクト立案に向けた提言、提案活動を行う。 	<ul style="list-style-type: none"> ・各戦略機関で、ハード、ソフト両資源の提供と、計算物質科学分野における問題解決についてのコンサルティングが可能な人材の教育、育成を強化。

次ページに続く

H27 年度	最終成果目標
<ul style="list-style-type: none"> ・広報誌を定期的に発行 ・「MateriApps」の更新・充実 ・パンフレット内容の見直し、改訂版発行 ・ソフトウェア利用事例の更新・充実 ・見える化シンポの企画実行 	<p>科学技術の振興、および国際競争力の向上のために、「MateriApps」、ホームページ上のデモ、ソフトウェア利用事例を通じて、ソフトウェアの開発を促し、さらに開発されたソフトウェアや蓄積されたノウハウを公開し、企業・実験研究者へ普及させる。最終的な学術的な研究成果の普及だけでなく、シミュレーションの結果の保存・共有・公開する仕組みを整備し、個々の研究者によるデータ公開をサポートする。人材紹介にも重点を置いた広報活動全般を通して、学生・若手研究者のコミュニティへの参加を促すと同時に、企業、他分野との人材交流を加速する。</p>
<ul style="list-style-type: none"> ・技術交流会(神戸拠点)の開催 ・他分野との交流セミナー(神戸拠点)の開催 ・情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会との研究会共催 ・実験研究者との討論会 ・高強度材料に関するJSTプロジェクトなどとの連携推進 	<ul style="list-style-type: none"> ・計算機科学との連携による新しいアルゴリズム・コードの提案。 (エクサスケールコンピューティングへのスムーズなソフトウェア技術の向上。) ・実験研究者との連携による新しい課題提案とその解決。 (エクサスケールコンピューティングにむけた挑戦的課題の明確化。)
<ul style="list-style-type: none"> ・先端的並列計算要素技術の開発。 ・並列化アプリ開発・高度化支援 ・並列化アプリ公開支援 ・アプリ公開環境整備。(ポータルサイト構築など) ・拠点研究員による並列化技術交流会。 	<ul style="list-style-type: none"> ・重点課題の遂行。 ・エクサスケールコンピューティングにむけた並列化ソフトウェア技術の構築 ・並列化アプリの公開と普及、標準化。 ・アプリ公開環境の完成。 ・エクサスケールコンピューティングに対応可能な若手人材の養成。
<p>同左</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・物性科学、分子科学、材料科学など物質科学諸分野の有機的な連携に基づく計算物質科学コミュニティの強化。 ・計算機科学(コンピュータ・サイエンス)分野、他の計算科学分野、ならびに産業界との連携体制構築。 ・計算物質科学分野の人材育成に関するシステム整備(人材の流動化、キャリアパス形成を含む) ・CMSI 活動で培う計算物質科学推進実施体制を物性研、分子研、金研の組織内に定期的に取り込み、戦略プログラム終了後も継続させる。
<ul style="list-style-type: none"> ・戦略プログラム終了後に向けて、CMSI の主要な分野振興活動の恒常化を検討する。 	<ul style="list-style-type: none"> ・京コンピュータを頂点とする HPCI を活用し、計算物質科学の基礎から応用、産業活用の各フェーズで社会に貢献しうる成果を創出する。 ・計算資源としてハード、ソフトの提供と、それらの活用のためのコンサルティング機能をそれぞれの戦略機関が持ち、継続した分野の支援振興ができる体制を構築する。 ・日本の HPC

別添 3

「HPCI 戦略プログラム(本格実施)」

所要経費の見込額

(単位:百万円)

	25年度	26年度	27年度	合計
1 研究開発課題				
(1)新量子相・新物質の基礎科学				
人件費				
業務担当	38.5	38.5	38.5	115.5
業務実施費				
消耗品費	5	5	5	15
旅費	8	8	8	24
電子計算機諸費	1	1	1	3
その他	4.5	4.5	4.5	13.5
小計	57	57	57	171
(2)次世代デバイス科学				
人件費				
業務担当	48	48	48	144
業務実施費				
消耗品費	4	4	4	12
旅費	4	4	4	12
電子計算機諸費	0.5	0.5	0.5	1.5
その他	0.5	0.5	0.5	1.5
小計	57	57	57	171
(3)分子機能と物質変換				
人件費				
業務担当	42	42	42	126
補助者	2	2	2	6
業務実施費				
消耗品費	3.5	3.5	3.5	10.5
旅費	6	6	6	18
電子計算機諸費	0.5	0.5	0.5	1.5
その他	3	3	3	9
小計	57	57	57	171
(4)エネルギー変換				
人件費				
業務担当	42	42	42	126
業務実施費				
消耗品費	4	4	4	12
旅費	4	4	4	12
電子計算機諸費	0.5	0.5	0.5	1.5
その他	0.5	0.5	0.5	1.5
小計	51	51	51	153
(5)マルチスケール材料科学				
人件費				
業務担当	6	6	6	18
業務実施費				
消耗品費	1	1	1	3
旅費	3	3	3	9
電子計算機諸費	0.5	0.5	0.5	1.5
その他	0.5	0.5	0.5	1.5
小計	11	11	11	33

	25年度	26年度	27年度	合計
2 計算科学技術推進体制構築				
(1) 計算資源の効率的マネジメント 業務実施費				
電子計算機諸費	10	10	10	30
小計	10	10	10	30
(2) 人材育成 人件費				
業務担当	43	43	43	129
補助者	1	1	1	3
業務実施費				
消耗品	1.5	1.5	1.5	4.5
旅費	5	5	5	15
会議費	2	2	2	6
小計	52.5	52.5	52.5	157.5
(3) 人的ネットワーク(産官学連携) 人件費				
業務担当	6	6	6	18
業務実施費				
消耗品費	1	1	1	3
旅費	2	2	2	6
会議開催費	2	2	2	6
小計	11	11	11	33
(4) 研究成果の普及 業務実施費				
印刷製本費	2.5	2.5	2.5	7.5
雑役務費	8	8	8	24
小計	10.5	10.5	10.5	31.5
(5) 分野を超えた取組 業務実施費				
旅費	2	2	2	6
その他	1	1	1	3
小計	3	3	3	9
(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援 人件費				
業務担当	28.5	28.5	28.5	85.5
補助者	3	3	3	9
業務実施費				
消耗品費	1.5	1.5	1.5	4.5
旅費	4.5	4.5	4.5	13.5
電子計算機諸費	7	7	7	21
その他	1	1	1	3
小計	45.5	45.5	45.5	136.5

	25年度	26年度	27年度	合計
(7)物性研				
人件費				
業務担当	14	14	14	42
業務実施費				
消耗品費	1	1	1	3
旅費	5	5	5	15
会議開催費	2	2	2	6
小計	22	22	22	66
(8)分子研				
人件費				
業務担当	22.5	22.5	22.5	67.5
補助者	4.5	4.5	4.5	13.5
業務実施費				
消耗品費	2	2	2	6
旅費	4	4	4	12
会議開催費	1	1	1	3
その他	1	1	1	3
小計	35	35	35	105
(9)金研				
人件費				
業務担当	6	6	6	18
補助者	2.5	2.5	2.5	7.5
業務実施費				
消耗品費	2.5	2.5	2.5	7.5
旅費	6	6	6	18
会議開催費	1	1	1	3
その他	1	1	1	3
小計	19	19	19	57
4 実施体制				
設備備品費	6	6	6	18
人件費				
業務担当	18.5	18.5	18.5	55.5
補助者	10	10	10	30
業務実施費				
消耗品費	3	3	3	9
旅費	9	9	9	27
会議開催費	3	3	3	9
その他	9	9	9	27
小計	58.5	58.5	58.5	175.5
1～4合計(直接経費)	500	500	500	1500

2. 2. 1. 2(7) 計算科学技術推進体制構築の強化（平成 24 年度繰越分）

HPCI 戦略プログラム 分野2の計算科学推進体制構築の強化を図るため、平成 24 年度の補正予算を、平成 25 年度に繰り越して実施した。下記に実施内容を報告する。

1) 計算機資源の効率的マネジメント

計算科学技術による画期的な科学的成果並びに社会的課題の解決に資する成果の早期創出への要請に応じて、特定高速電子計算機施設の性能をより一層活用できるように、HPCI 戦略プログラム分野2の基盤整備を図るため、以下の項目を平成 25 年度に追加して実施した。

- i) 計算機資源の効率的マネジメントに関し、平成 24 年度の「京」共用開始後の「京」ユーザー増加に伴いプリ処理、および、ポスト処理のニーズに合わせ、「京」向けプリ・ポストシステムの増強整備を追加して行った。「京」で計算した結果の処理、および、「京」計算前の処理、さらに、「京」を利用するアプリケーションソフトウェアの利用促進のためのテスト計算にも使い、効率的に「京」を活用するための計算資源体制を整えた。
- ii) 「京」で開発しているアプリケーションソフトウェアを、「京」の次の世代のアーキテクチャーでも継続的に有効活用するため、次の世代のアーキテクチャーを想定した試験システムを購入し、「京」で活用しているアプリケーションの動作検証を実施できる環境を整備した。
- iii) 「京」やHPCI、CMSIが提供するスパコン資源を利用する前のテスト計算用として導入しているPsiシステムに関し、ユーザー数や登録データ数が増えてメモリの容量を超えてしまったため、ストレージを増強した。
- iv) 計算材料科学研究拠点である東北大学金研のスパコンとの連携利用することを目的とし、アプリケーションの開発、普及、格納、および、テスト計算を効率的に実施するための「材料アプリライアル用サーバ」の整備を行った。

2) 人材育成

人材育成に関して、CMSI 特任教員を配置しない教育拠点を含めた 9 大学の教育拠点全てに対し、不足している講義配信システムを整備配置した。具体的には、配信中核施設として 20 拠点間の接続を可能とする、多地点接続装置サーバ装置を東大物性研に配置した。また、配信システムの再整備も行い、教育連携体制を整えた。その結果、導入したシステムを利用して配信講義、および、配信シンポジウム等を複数開催でき、遠隔地間で研究議論を行うことの効果、および、録画による講義の事後学習の有効性を確かめることができた。

3) 人的ネットワークの形成-産官学連携の促進

人的ネットワークの形成における産官学連携に関して、MateriApps の整備、および、開発しているアプリケーションソフトの整備を実施した。その結果、「京」の一般・産業利用者による CMSI 関連アプリの利用が促進され、また、利用者講習会による参加者も増え、HPCI の利用者とアプリケーションソフトの開発者の距離を縮め、幅広い分野振興活動に貢献することができた。具体的に以下に示す。

- i) 計算物質科学のポータルサイト“MateriApps”を立ち上げて、上記の整備したアプリケーションを含む計算物質科学関連ソフトの利用と開発を促した。また、計算分子科学材料拠点(TCCI)の基盤ソフト紹介サイトの改訂を実施した。さらに、外部の民間企業からのアクセスも対象とした、基盤ソフトの試用のための TCCI マシンの試用環境を整備した。

ii) 開発しているアプリケーションソフトウェアを普及、発展させるために必要となる、マニュアルや GUI、機能拡張、バグ FIX 等の整備を実施した。具体的に取り組んだアプリは下記の通り。

<物性拠点関連アプリ>

- ① xTAP
関連ソフトウェアとの統合、および、入出力ファイルソフト、可視化ツールとの連携、バイナリ化
- ② OpenMX
日本語、および、英語のマニュアル整備とその印刷
- ③ DSQSS
量子モンテカルロプログラムの整備と高度化
- ④ CONQUEST
公開に向けたマニュアル・チュートリアル整備および FFT ライブラリの実行性能調査

<分子拠点関連アプリ>

- ① Calnos
利便性向上のため、プログラムの高速化
- ② ERmod
利便性向上のため、CHARMM 及び LAMMPS 対応の機能追加
- ③ MODYLAS
利便性向上のため、入力データ作成を支援するツールの開発、和文マニュアルの英訳
- ④ FMO in GAMESS
MODYLAS との連携を実現するツールの開発
- ⑤ REM
MODYLAS との連携を容易にするツールの開発

<材料拠点関連アプリ>

- ① TOMBO (TOhoku Mixed Orbitals *ab initio* program)
全電子混合基底法に基づく第一原理計算プログラムの移植作業
- ② feram
強誘電体に特化した高速分子動力学計算のフリーソフトウェアの利用環境の整備

なお、平成 24 年度の補正予算を平成 25 年度に繰り越して実施する当初の計画を見直し、上記の計算科学推進体制構築の強化の一部に関しては、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と委託契約を結んで推進した。

本報告書は、平成 24 年度に、文部科学省の高性能汎用計算機高度利用事業による補助金で推進した「HPCI 戦略プログラム」（代表機関；東京大学物性研究所）の実施に関する成果報告書である。