

「H P C I 戦略プログラム」
成果報告書（平成 26 年度）
分野 2 新物質・エネルギー創成

平成 2 7 年 5 月 2 9 日

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

本報告書は、平成 26 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。

【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26年度)
成果報告書

	項目	頁
1.	業務の目的	1
2.	平成 26 年度(報告年度)の実施内容	1
	2. 1 当該年度(平成 26 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	2
	2. 1. 3 計算物質科学技術推進体制の構築	6
	2. 2 実施内容(成果)	10
	戦略目標	11
	戦略目標についての説明	11
	2. 2. 1 当該年度(平成 26 年度)における研究成果	14
	2. 2. 1. 1 研究開発課題(成果)	14
	研究開発課題の成果概要	14
	(1) 新量子相・新物質の基礎科学	16
	(2) 次世代先端デバイス科学	23
	(3) 分子機能と物質変換	33
	(4) エネルギー変換	44
	(5) マルチスケール材料科学	53
	2. 2. 1. 2 計算科学技術推進体制構築(成果)	59
	計算科学技術推進体制構築の成果概要	59
	(1) 計算機資源の効率的マネジメント	63
	(2) 人材育成	70
	(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)	77
	(4) 研究成果の普及	90
	(5) 分野を超えた取り組みの推進	105
	(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援	107
	2. 2. 1. 3 研究開発課題・計算科学推進体制構築の評価	113
	(1) 分野 2 作業部会からの指摘事項	113
	(2) 平成 26 年度 CMSI 研究員・教員の配置	114
	2. 2. 2 本格実施(平成 27 年度)における実施計画	116
	2. 2. 2. 1 研究開発課題(計画)	116
	(1) 新量子相・新物質の基礎科学	116
	(2) 次世代先端デバイス科学	126
	(3) 分子機能と物質変換	134
	(4) エネルギー変換	144
	(5) マルチスケール材料科学	154
	2. 2. 2. 2 計算科学技術推進体制構築(計画)	162

	(1) 計算機資源の効率的マネジメント	163
	(2) 人材育成	166
	(3) 人的ネットワークの形成(研究会、セミナーの開催)	171
	(4) 研究成果の普及	175
	(5) 分野を超えた取り組みの推進	177
	(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援	178
2.3	活動(運営委員会等の活動等)	182
2.4	実施体制	185
別表 1	平成26年度に於ける実施体制	192
別添 1	研究開発の年次計画	206
別添 2	計算科学技術推進体制構築の年次計画	212
別添 3	所要経費の見込額	214
添付資料1	平成26年度イベント報告書(報告書1～60) (巻末のリンク先参照)	

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26年度（報告年度）の実施内容

2. 1 当該年度（平成26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26年度の本事業は、平成22年度までに実施したフィージビリティスタディ、平成23年度準備研究の成果、および、平成24年度から25年度までに本格実施した研究成果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1～5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主として参加する。

2.1.2 戦略課題研究の本格実施

平成25年度に本格実施研究にて、平成25年8月21日に実施した「CMSI 課題見直し意見交換会」、平成25年10月8日に開催した「分野2作業部会中間評価会議」、平成25年12月4日に開催した「HPCI 戦略プログラム中間評価委員会」で検討した結果やコメント、指摘事項を反映し、平成26年度は以下

の重点課題を推進する。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 年度まで推進していた「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は、平成 26 年度も引き続き活用して研究開発を推進し、世界最高水準の研究開発成果創出を目指す。

平成 26 年度に推進する「重点課題」、ポスト重点課題として支援を受ける「特別支援課題」、次の特別支援課題候補として支援を受ける「支援課題」は、平成 26 年 8 月の開催を予定している、平成 27 年度からの重点課題検討会議、平成 26 年 12 月を予定している CMSI 研究会での成果報告と、その後に行う評価会議の結果、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を反映させ、平成 27 年度に推進すべき研究課題を選定する。

以下、HPCI 戦略プログラム分野 2 作業部会の承認を経て平成 26 年度重点課題として選定された課題の概要と、平成 26 年度の活動計画を示す。

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 26 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. 銅酸化物高温超伝導体の第一原理模型を用いて超伝導メカニズムを解明する。単バンドの第一原理格子模型での一辺十サイト以上の計算を推進継続することによって、熱力学的極限への外挿が行なえる。多バンド模型の計算と比較することによって、超伝導機構をピンポイントで理解できるようになる。また網羅探索により今後の高温超伝導への指針追究を推進できる。

2. 強相関電子系群の基底状態や電流・熱相関関数を対角化法、マスター方程式の方法、密度行列繰り込み群法により計算し、特異なエネルギー輸送および効率的なエネルギー変換を解明する。これを用いて効率的な太陽電池での電荷分離機構の解明を進める。

3. 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、正方格子上、およびハチの巢格子上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、さらに大規模計算を継続し、脱閉じ込めの概念の有効性と特異な 1 次転移的なふるまいの原因を明らかにする。

4. 新しい計算手法であるテンソルネットワーク法の開発実装を行なう。

以上、新量子相や量子相転移の候補を抽出し、テンソルネットワーク法などの新しい手法の開発と実装を行なう。

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を開始し、まず光励起された励起子からの電荷分離機構を解明する。

③スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

1. スピン軌道相互作用の大きな理論模型について、トポロ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を応用して計算を進める。

2. スピン軌道相互作用の強いイリジウム化合物の第一原理模型に対して実験で明らかとなっている物性をパラメタなしに説明する。スピン液体を実現する方策を検討する。

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26年度においては、以下に示す成果を目指して研究を推進する。

超並列実装を行った分子求積 MP2 法と MP2-F12 法による、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。ナノスケールの物質に対してエネルギー分母を補正した摂動理論を用い、かさ高い炭素性ルイス塩基とフラレーンの相互作用を網羅的に調べ、新奇な結合様式を持つデバイス材料の物質設計を行う。

モデル空間量子モンテカルロ法については、小規模分子を対象にする範囲では超並列実装が完了しており、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計算や数原子分子の高励起状態を計算し、未知の量子状態の探索を行う。

更に、今年度は、相互作用を分散させた超並列実装を進め、生体無機化学への展開を図る。特に、光システム II のマンガンクラスターの励起状態を一般化混成軌道 QM/MM 法とモデル空間量子モンテカルロ法を組み合わせる事によってアプローチする。

剛性の高い分子フレーム中に自由に回転する部位（回転子）を導入した分子やその結晶の性質は回転子の運動によって顕著な変化を示し、ナノデバイスの重要なパーツとして大きな役割を担うことが期待されている。本計画では、結晶性分子ジャイロスコープ(分子コマ)とナノマシンの基本単位となり得るフラレーン内包分子ベアリングを対象として、その機能を支配すると考えられる分子運動（回転運動）の原理を電子状態計算やナノ秒からマイクロ秒の動力学計算によって明らかにすることを目的とする。

結晶性分子ジャイロにおいては、動的挙動の理論的解明と光応答・誘電応答の電場制御を目指し、分子ベアリングにおいては、ベアリング（軸受け）内に捕捉されたフラレーンの回転速度と回転方向の支配因子を明らかにする。

分子における電子の動的過程と多体量子動力学においては、前年度に引き続き、「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行と具体的な系の化学動力学研究を進める。26年度は、後継者養成の観点から、優秀で超並列計算に関心と力量を持つ大学院生の研究参加を促し、具体的な化学反応の研究を通して、分子と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、反応の設計指針を具体化する。また、超多体量子ダイナミクスでは、本年度出版された基礎理論を応用方面にさらに洗練し、非線形振動子系におけるエネルギー移動とソリトン様モードの量子効果に関する検討を行う。

なお、神戸大学大学院システム情報学研究科、東北大学大学院理学研究科とは、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時空場での電子機能予測とその実現」

次世代先端デバイスの典型的サイズである 10nm 構造体に対する、密度汎関数理論に立脚した第一原理計算を、マルチコアおよびメニーコア超並列アーキテクチャのコンピュータ上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、次世代デバイスシミュレータ技術の基盤を構築する。

平成 26 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。①2011 年 Gordon Bell Prize を獲得した RSDFT 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。また非平衡グリーン関数 (NEGF) 法と統合し、デバイス丸ごと輸送シミュレーションの実現を目指す。またスピン自由度への高機能化、交換相関エネルギーに対する進んだ近似の導入により、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 (RS-CPMD) 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、界面系での原子・電子構造、界面形成過程を探索する。④京コンピュータ上で高度にチューニングされた RSDFT、CONQUEST、RSPACE、RS-CPMD コードを活用し、パワーエレクトロニクスを支える広ギャップ半導体、省エネ次世代デバイス材料としての半導体ナノ構造と炭素ナノ構造の物性解明と、異種物質との界面での原子構造と物性機能の相関を解明する。⑤新たな展開として、光励起による電子ダイナミクスの解明と新機能探索を目標に、時間依存密度汎関数理論とマックスウェル方程式を結合させた新計算手法を京コンピュータ上でチューニングし、デバイス界面形成機構の解明、界面活用新機能探索を行う。

なお、自然科学研究機構分子科学研究所、大阪大学大学院工学研究科、筑波大学計算科学研究センターとは、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ィルスの分子科学の展開」

ウィルスの全原子シミュレーションやウィ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、計算科学によるウィルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。

平成 26 年度は上記目標を達成するため、すでに開始している京コンピュータを用いた小児マヒウィルスカプシドの丸ごとシミュレーションを継続実施し、ウィ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、その分子論的な仕組みの解明に関する研究を引き続き行う。また、ウィルスの感染初期過程を明らかにするために、レセプターとウィ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その起源を明らかにするとともに、同時にこれを阻害する分子の検討を行う。また、B 型肝炎ウィルスに対し、カプシドを透過する抗ウイルス剤の薬剤送達に関する研究について、名古屋市立大学大学院医学研究科を支援し開始する。

また、ウィルスタンパク質と宿主細胞表面の受容体との分子間相互作用を量子化学計算で解析し、タンパク質の分子認識機構についての知見を得る。あわせて、医薬品分子設計における FMO 法の有用性を高めるための機能拡張を行う。特に、FMO 法と古典力場 (MM) との融合法 (FMO/MM 法) の開発に優先的に取り組む。これにより溶媒分子をあからさまに含めたシミュレーションが可能になることから、より現実系に近いモデルで、タンパク質とリガンドの相互作用解析が可能になり、インシリコドラッグデザインの信頼度が向上することが期待される。

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 「エネルギー変換の界面科学」

燃料電池やリチウム二次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。理想的な化学結合・電気エネルギー変換をもたらす物質構造や界面構造の探求、さらに、エネルギー変換の界面科学の構築を目指し、同時に、本課題で構築したシミュレーション技法を外部プロジェクトで活用する事を積極的な促し、電池材料開発等に貢献することを目指す。

平成 26 年度は、燃料電池とリチウムイオン二次電池などにおけるエネルギー変換過程に関する第一原理シミュレーションを行い、その微視的機構を解明する。またシミュレーション基盤を整備し、それを新型電池などの開発への利用を促進するための活動を行う。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, statCPMD, RS-CPMD, OPEN-MX) の開発、(2)電気化学シミュレーション技法の高度化を行い、電極反応や界面保護膜形成過程、充放電過程の定量的計算を行う。

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、産業技術総合研究所とは、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 26 年度は、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理論的予測を行う。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り、融解速度の外部条件依存性の検討を実施する。

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解析を行う。そのために、MD シミュレーションを実施して、メタンや水素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。より具体的には、modylas 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。特に 26 年度には、異状な分解速度の低下の対応を目指し、大規模な計算を実施して、一度分離したメタンが再度ハイドレートを形成することを防止するための基本的な方法を確立する。そのためにメタンや水素ハイドレートの生成過程の大規模 MD シミュレーションを実施し、ハイドレートの生成融解過程の解析等を行う。

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。

5) マルチスケール材料科学

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・原子の振る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 26 年度は、第一に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中の Fe/析出相界面の部分整合構造の大規模第一原理計算を OpenMX コードを用いて進め、界面の水素捕獲についても検討する。併せて、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行う。第二に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中の転位芯構造の OpenMX による大規模第一原理計算を推進する。Si はじめ合金元素との相互作用を明らかにする。また、結晶粒界の計算にも着手する。第三に、第一原理計算と Phase Field 法の連携について、理論的・計算技術的な検討をさらに進める。CMSI 第 5 部会マルチスケール材料科学全体の活動とも連携しながら進める。

また、第 5 部会マルチスケール材料科学の研究活動推進として、以下の業務を行う。

- ① 「京」を用いた重点課題の実行計画の立案を行う。
- ② 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に特化した研究会を実施する。
- ③ 他の 4 つの部会との協調的・相補的な発展を図るため、シンポジウムや研究会を実施する。

なお、産業技術総合研究所関西センター、東北大学金属材料研究所、および、横浜国立大学大学院工学研究院とは、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 24 年度より開始した本格実施研究においては、物性研究所、分子研究所、および、金属材料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ている。平成 26 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 9 月末より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 24 年度、および、平成 25 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、引き続き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 26 年度は、CMSI 特任教員として採用したメンバーを中核とし、平成 24 年度より継続している、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。また、平成 25 年度までに整備したビデオ配信システムによる配信講義、配信シンポジウムにより、若手研究者や学生、社会人への計算物質科学の振興を図る。さらに、配信講義を介した、大学間の科目提供制度、単位互換制度、連携大学院制度等の本格検討を実施する。配信講義やシンポジウムをビデオサーバに録画し、WEB 学習できるシステムをより強化し、いつでも、誰でも学べる環境を整える。平成 25 年度に本格運用を開始した、計算物質科学のアプリケーションポータルサイト “MateriApps” と関連させて、実験研究者や企業研究者にも開かれたアプリケーション利用講習会を実施し、計算科学の普及活動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 26 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。
- ② CMSI 活動内容の産業界への情報発信・紹介を CMSI 広報小委員会と協力しながら行う。MateriApps の構築活動、産官学連続研究会の概要の広報誌への掲載、企業研究者インタビュー等。
- ③ 産官学連携協力機関を通じた産学連携活動の推進。協力機関での技術研究組合、コンソーシアムとの連携を通じた CMSI 活動の企業への周知活動等。

ii) 計算物質科学の分野振興と国際連携

平成 26 年度は、CMSI 研究会、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等に関して集中討論する研究会を引き続き開催する。また、滞在型国際ワークショップや、国際学会との連携会議等を開催する。さらに、「京」で得られた計算技術の成果を海外から招聘した若手研究者と共有するためのワークショップを開催し、国際的な人脈を築く機会を提供する。海外の計算物質科学コミュニティーとは、共同研究プロジェクトや国際会議の共催企画、国際スクールや若手研究者の海外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。平成 24 年度から開始した文部科学省元素戦略プロジェクトに関し、4 つの元素戦略材料拠点をもたがる共通課題の提起と課題解決に向けた取り組みを検討する会議を開催し、元素戦略 4 つの材料拠点と CMSI の 3 つの戦略拠点間の連携を図る。

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、横浜国立大学大学院工学研究院、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 26 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 を引き続き発行する。プロジェクトの成果の紹介とともに、分野振興活動として計算物質科学に関連する外部のプロジェクトにも焦点をあてる。また、平成 25 年度にリニューアルした WEB ページををより充実し、継続的に、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。ソフトウェア開発者の公開をサポートし、実験研究者や企業、他分野の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ために平成 25 年度に本格運用を開始した「MateriApps」の運用、改善を継続し、アプリケーションの効率的な開発および活用を促す。学会等に併設する展示会に積極的に出展し、アプリケーションの普及を図る。

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、横浜国立大学工学研究院とは、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 年度は文科省からの委託研究として「将来の HPCI のあり方の調査」がスタートした。平成 25 年度はその調査研究を継続し、将来必要となるスパコンのアーキテクチャに対して、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った。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からの委託研究に発展した。平成 25 年度は、エネルギーWG を設けて研究の進め方を検討し、重点課題である「エネルギー変換の界面科学」と「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」の課題取り組み体制の変更、強化につながった。

平成 26 年度は、「京」で開発を進めてきたアプリケーションの活用を分野 2 内の部会間や他分野、および、元素戦略プロジェクト等の他プロジェクト等に広げ、計算物質科学に必要とされる共通手法の開発をスタートさせる。また、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、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、横浜国立大学工学研究院とは、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、神戸拠点と、分子サブ拠点である東大駒場、平成 26 年度から新たに材料サブ拠点として横浜国立大学に、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。年に 2 回、技術交流会の

合宿等を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 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利用を開始している。共用開始後は、アプリケーション開発サポート機能を有しており、ポスト処理システムも導入して、物性、分子、材料計算科学研究者の支援を実施している。平成 25 年度に引き続き、平成 26 年度は 2 名の特任教員 1 名の拠点研究員、2 名のアシスタントを配置し、特定高速電子計算機施設利用者の研究支援活動を担う。常駐スタッフは、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する。平成 25 年度に CMSI 神戸居室内に 12 名程度までの講習会やワークショップが実施可能なスペースを立ち上げた。平成 26 年度もこのスペースを活用し、アプリのハンズオンや京利用申請者に対する講習会等を実施し、「京」利用ノウハウを広める。

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、横浜国立大学工学研究院とは、委託契約を結んで推進する。

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機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・教授(元所長) 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 (53歳) ※2015年 1月 1日現在	
	所属部署	大学院理学系研究科／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 東京都文京区本郷七丁目 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わ は 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 441.910 百万円 (平成26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、源流から奔流を経て大河へと導くように、5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。

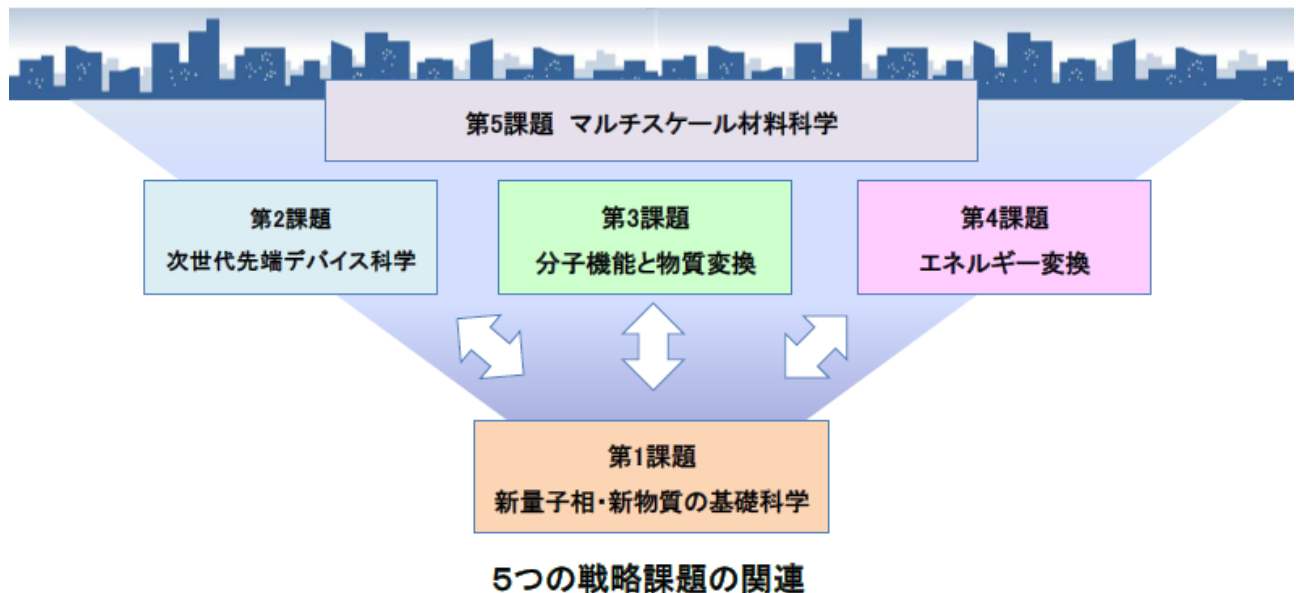


図2.2-1 5つの戦略課題の関連

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(水素、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。

第5課題「マルチスケール材料科学」では、鉄鋼材料をはじめとする構造材料や、誘電体材料などの機能性材料の特性の発現が、ミクロスケールの電子や原子の挙動に端を発し、メソスケールにおける内部組織によって変調を受けながらマクロ特性に反映されていくことに鑑み、マルチスケールにわたるシームレスなシミュレーションを行うことを目的としている。又、凝固過程のような材料の製造プロセスが製品の特性に大きな影響を及ぼすことから、プロセスと特性の相関の解明も課題としている。信頼し得る構造材料の製造は、これまで我が国の基幹技術として世界に優位を誇ってきた。今後もこのような地位をゆるぎないものにする為に、材料の設計に資するシミュレーション技術の確立につなげていく。

2.2.1 当該年度(平成 26 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 26 年度は、平成 25 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 13 の研究課題を推進した。また、平成 26 年度に新規に選定した 2 件を加えた分野振興としての支援課題 8 件を実施した。表 2.2.1.1 に、平成 23 年度から平成 26 年度にかけて推進した研究課題の一覧と、査読付き論文の発表数、および、プレスリリース等により、新聞、雑誌等に取り上げられた件数の経緯を示す。平成 26 年度の査読付き論文発表数は 141 件であり、その中で「京」を利用した論文は 35 件である。また、これまでの合計として、査読付き論文数は 399 件、内「京」を利用した論文は 86 件、マスコミに取り上げられた件数は 61 件である。また、特別支援課題である「ポリモルフから生起する分子集団機能」(阪大松林代表)より、特許「自由エネルギー計算装置、方法、プログラム、並びに該プログラムを記録した記録媒体」を出願した。

平成 25 年度に、「京」、HPCI、および、各戦略プログラムで提供している計算資源を利用した、HPCI 戦略プログラム全体の成果を登録するデータベースシステムが、RIST により構築され、HPCI 戦略プログラム、および、「京」の一般利用の全体で運用されている。このシステムを利用すれば、論文(査読有無)、講演、広報やプログラム公開、特許等の件数や内容の迅速な検索が可能である。成果の詳細はこのサイト(下記参照)をご参照いただきたい。

成果登録データベース <https://www.hpci-office.jp/hpcidatabase/publications/search.html>

CMSI で実施している研究課題の成果は、平成 26 年 12 月 8～10 日(月～水)に東北大学金属材料研究所で実施された「第 5 回 CMSI 研究会」で詳細に報告された。この報告会では、第 1 部会から 6 件、第 2 部会から 6 件、第 3 部会から 6 件、第 4 部会から 6 件、第 5 部会から 5 件の優れた成果が口頭発表されている。また、それらの成果を支える研究課題、計算物質科学分野の振興に関する課題等 50 件がポスターで発表され、参加者間で活発な議論が行われた。発表された各課題の概要集は、下記 HP からダウンロード可能である。

CMSI 研究会概要集 <http://www.cms-initiative.jp/ja/events/cmsi-society/20141208-cmsi>

表 2.2.1.1 平成 26年度 CMSI 研究課題の成果一覧

部会	種別	課題番号	研究代表者	課題名	査読付き論文					広報
					H23年度 (2011)	H24年度 (2012)	H25年度 (2013)	H26年度 (2014)	合計	合計
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	電子相関の強い実物質の新機構解明と制御法開拓に関する研究	1	2	20	18	41	16
		②	遠山貴巳	強相関電子系の励起ダイナミクスの研究	2	1	4	4	11	
		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	11	11	12	6	40	
	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	1	2	2	7	1
		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	4	4	5	4	17	2
		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			1	2	3	
第二部会	重点3	i	押山淳	密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現						
		①	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(旧)	1	8	16	12	37	8
		②	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(旧)		3	3	3	9	
	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			3	1	4	1
		iii	斎藤肇雄	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		1	7	12	20	
		iv	常行真司	新材料探索		2	10	4	16	4
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		2	1	5	8	7
		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		18	10	8	36	
		iii	松林伸幸	ポリモルフから生起する分子集団機能				10	10	
		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			11		11	
		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			21	23	44	
第四部会	重点5	i	杉野修	エネルギー変換の界面科学		1	8	4	13	11
		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		6	3	4	13
	特別支援	iii	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				1	1	1
		iv	吉田紀生	バイオマス利用に向けた酵素反応解析		1	3	2	6	
		v	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	5	4	4		13	
第五部会	重点7	i	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		1	1	2	4	
		ii	大野宗一	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			1	4	5	
		iii	西松毅	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			2		2	
		iv	大野かおる	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			4	5	9	
推進体制構築			藤堂真治	計算科学推進体制構築				1	1	2
支援課題	i	中野 博生	フラストレート磁性体の計算科学研究			5	1	6		
	ii	芝 隼人	界面活性剤系のマルチラメラ高次構造形成の大規模粗視化分子動力学計算			1		1		
	iii	大久保 毅	フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化		1	2	2	5		
	iv	土居 抄太郎	Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算					0		
	v	石村 和也	ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索					0		
	vi	今井 英人	HPOを用いた次世代電池の反応機構の解明					0		
	vii	立川 仁典	物質デザインのための確率的手法に基づく多成分系量子化学の高度化					0		
	viii	渡辺宙志	多重気泡生成過程における気泡間相互作用の数値的解析	3	1	1	1	6	4	
合計					29	68	161	141	399	61

2. 2. 1 当該年度(平成26年度)における研究成果

2. 2. 1. 1 研究開発課題概要

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。京の本格運用によって、各研究課題から多彩な成果が出ている。スピン軌道相互作用の大きな物質に生じるトポロジカルな相の物性と機能探索、特にイリジウム酸化物であるパイロクロア型結晶構造を持つ $A_2Ir_2O_7$ (Aは希土類元素)や蜂の巣格子状の Na_2IrO_3 においてトポロジカル相の出現を吟味・予言した。 $A_2Ir_2O_7$ では(反強磁気秩序相に生じる)磁壁がトポロジカルに保護された伝導を示すという前例のない予言を行い Na_2IrO_3 ではキタエフ液体と呼ばれる未発見の量子スピン液体の可能性を吟味した。また鉄系超伝導機構の解明を行い、銅酸化物と合わせて強相関電子系に生じる普遍的な超伝導機構を抽出した。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、F12 理論を用いたN-ヘテロ環状カルベンによるフラレンの外部修飾計算、モデル空間量子モンテカルロ法のハイブリッド並列実装と高電子励起状態の計算、水やタンパク質の動力学研究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、分野横断での交流が続けられた。滋賀県高島市 白浜荘, 2014年8月18日から8月22日の期間、第一部会の夏の学校を琵琶湖畔白浜荘で開催し、高精度計算手法、光による励起ダイナミクス、電子の持つトポロジカルな性格などに焦点を当てて若手を中心に議論を深め、物理と化学の交流も深めた。また個々に実験家との交流が進んだ。また2015年2月18日から21日まで東大本郷キャンパスにおいて International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems を開催した。この国際ワークショップは分野5との共催で、素粒子物理学、原子核物理学分野も含めた学際的な数値計算方法論の第一線の研究者をそろえたワークショップとなり、21名の招待講演者(国外から12名)を交えて、活発な意見交換と交流が進んだ。

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)

[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)、遠山貴巳(東京理科大)、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)、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)

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した。

H26年度は、以下の研究を推進した。

[研究の背景と目的]

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の一つは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。

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、実験に対する情報を提供するとともに、スピン軌道相互作用系の有効スピン模型の基底状態の解明と励起ダイナミクス探索の基盤構築を目的としている。

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している。

[実施内容(計算モデル)]

「京」も含むスーパーコンピュータの駆使により、本格計算を進めた。鉄系超伝導体および銅酸化物の超伝導機構の解明、理論模型であるハバード模型の超伝導機構の解明、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相の存在とその性質が明らかとなった。第一原理強相関有効模型の導出においては昨年に引き続き MACE の手続きを採用し、低エネルギーソルバーとして、変分モンテカルロ法、クラスター動的平均場近似と合わせて厳密対角化なども利用している。また MACE の適用範囲を拡大するために、電子格子相互作用も取り入れるための手法開発をさらに進め、電子格子相互作用があるときの変分モンテカルロ法のアルゴリズムが実装されたので、これの実応用を進めた。また動的密度行列繰り込み群法(動的DMRG)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、フラストレーションを持つ一次元鎖からなる梯子型量子スピン系のスピン励起ダイナミクスを計算も進めた。また、厳密対角化法(ランチョス法)を用いて、二次元 t - J 模型のスピン励起・電荷励起ダイナミクスを計算し、銅酸化物高温超伝導体の共鳴非弾性 X 線散乱実験に対する情報提供も進めた。さらに2次元密度行列繰り込み群法(2D-DMRG)、厳密対角化、テンソルネットワーク法を併用しながら、ハニカム格子を有するイリジウム酸化物の有効スピン模型(拡張キターエフ・ハイゼンベルグ模型)の基底状態を「京」を用いて計算した。さらに種々の量子スピン系、ボーズ系に対する「京」および全国共同利用研究所のスーパーコンピュータ等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さらに進めた。月に1度の頻度で、メンバが集まり集中的に討論する会合を継続している。この結果、研究の進展に伴って、物理的な課題内容が深化するとともに整理され、その解明に必要な技術的な問題点の明確化に役立った。この成果の論文を準備している。特筆すべきはこの共同研究を通じて、蜂の巣格子型イリジウム酸化物の第一原理的な計算が進み、実験で観測されているジグザグ型と呼ばれる反強磁性秩序が計算でも再現され、望まれているキターエフ型の量子スピン液体を実現する道筋や、謎であった実験結果の解釈ができたことである。第一原理計算による有効模型導出において MACE の枠組みを適用し、この模型を DMRG、テンソルネットワーク、厳密対角化、変分モンテカルロ法など、最先端の高精度解法を動員して総力を挙げて性質の解明を行なった。

[並列計算の方法と効果(性能)]

OPENMP, MPI を併用した高い並列効率の多変数変分モンテカルロ法のコードでは、ピーク性能比で 10%から最大で 40%が達成されている。また DMRG コードでは、計算の中核となる行列・ベクトル積が効率よく並列化されている。さらに、動的 DMRG ではエネルギー領域に関する並列化も実装されており、高い並列化効率を示している。ALPS/LOOPER を含め、すでに平成 25年度に高い並列性能、実効効率を達成しており、平成 26 年度はこれを活用した応用に注力した。

[研究成果]

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している。

平成 26 年度においては、以下の 3 課題の研究を推進した。

①新しい量子相の解明

1. 銅酸化物高温超伝導体の第一原理模型を用いて超伝導メカニズムを解明することを目的に、単バンドの第一原理格子模型での一辺十サイト以上の計算を推進継続することによって、熱力学的極限への外挿を行なった。多バンド模型の計算と比較することによって、超伝導機構をピンポイントで理解できるようになり、また網羅探索により今後の高温超伝導への指針追究を推進した。鉄系超伝導体の超伝導機構の第一原理手法での解明が進み、密度のゆらぎの増大が超伝導と密接に結びつくという、銅酸化物との共通点があきらかとなった。予定外の成果として、高温超伝導の転移温度を上昇させる主たる要因が隠れたフェルミオンであることを発見した。

2. 強相関電子系群の基底状態や電流・熱相関関数を対角化法、マスター方程式の方法、密度行列繰り込み群法により計算し、特異なエネルギー輸送および効率的なエネルギー変換を解明することを目的に、その手法を用いて効率的な太陽電池での電荷分離機構の解明を進めた。その結果、カーボンナノチューブを例にとり、太陽光による励起子生成後に明るい励起子と暗い励起子の間に導入される散逸によって励起子の寿命を伸ばし、エネルギー変換の高効率化を図る機構を明らかにした。
3. 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、正方格子上、およびハチの巣格子上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、さらに大規模計算を継続し、脱閉じ込め概念の有効性と特異な1次転移的なふるまいの原因を明らかにすることを目的に、世界最大級のサイズでの計算を進め、1次転移と連続転移の差を突き詰める考察を進めた。
4. 新しい計算手法であるテンソルネットワーク法の開発実装を行なった。イリジウム酸化物の第一原理模型に適用して、実験結果を再現する結果を得た。

②強励起ダイナミクスの解明

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を開始している。ポンププローブ分光の解析法を提案し、熱平衡状態における非占有側の電子状態を知る方法を提唱した。

③スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

1. スピン軌道相互作用の大きな理論模型について、トポロジカル新量子相を含む相図を探索するため、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た。また、テンソルネットワーク法を応用して計算を進めた。
2. スピン軌道相互作用の強いイリジウム化合物の第一原理模型に対して実験で明らかとなっている物性をパラメタなしに説明することを試み、スピン液体を実現する方策を検討した。その結果、実験で明らかになっているジグザグ型の磁性を計算で再現し、スピン液体を実現する方策を提案した。

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)

[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)、齊藤真司(分子研)、佐藤啓文(京都大)、笹井理生(名古屋大)、中島晴之(九大)、永瀬茂(京大)

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。

H26年度は、以下の研究を推進した。

[研究の背景と目的]

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ェティクス、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(計算モデル)]

電子状態計算に関しては、超並列版の MP2-F12 法を用いて「京」コンピュータ上で、N-ヘテロ環状カルベンによるフラレーンの外部修飾に関して、複数サイトに結合する複合体の計算を進めた。F12 理論による二次ダイソン方程式によるイオン化ポテンシャルの計算手法を整備し、有機系太陽電池のドナー分子の計算を行った。モデル空間量子モンテカルロ(MSQMC)法については超並列実装を継続して行い、遷移金属化合物や光システム II のスピン状態に適用した。後者の酸素発生中心については、フラグメント分子軌道法を用いてリガンド効果を調べた。更に、「京」で実装された制限分母 MP2-F12 法を用いて、内部自由度を持つ分子ベアリングや分子ジャイロスコープの計算も進めた。

[並列計算の方法と効果(性能)]

MP2-F12 法は実空間の求積法を用いることにより並列性能を高めており、「京」上で分子間相互作用の記述を改善した制限分母法や二次ダイソン準粒子エネルギーの計算手法への拡張を完了している。MSQMC 法は、サンプリングがモデル空間の状態に対して独立なので超並列計算に適しているが、モデル空間と Walker の分散に対する2次元 MPI にノード内の OpenMP を組み合わせたハイブリッド実装を行い、計算速度の向上を図っている。

[研究成果]

1. 高精度電子状態計算によるフラレーン誘導体の計算

露わに相関した二次の摂動論(MP2-F12 法)と分子求積 MP2 法に関しては、前年度までに GELLAN プログラムに超並列実装が完了している。H25 年度に開発および実装した分子間相互作用エネルギーを正確に計算するための分母を制限した二次の摂動論(RD-MP2 法)と密度汎関数理論を併用して、H26 年度にはフラレーンの外部修飾に関する計算を更に進め、一つのフラレーン分子には、最大で三箇所 N-ヘテロ環状カルベンが結合しうることが計算によって示唆された。複数のカルベンを結合させると結合エネルギーが順次わずかに減少していくため、複数個の N-ヘテロ環状カルベンを結合させるためには、実際の実験条件下では過量の N-ヘテロ環状カルベンを必要とすることになり、結合する個数の制御が難しく、結果として目的である電子的性質の制御が難しくなることが想像される。そこで、二つや三つの N-ヘテロ環状カルベンを一つの分子内に保有する分子の設計を試みた。予備的な計算により、架橋部の結合距離をうまく設計すれば、二箇所や三箇所フラレーンに結合できる N-ヘテロ環状カルベン分子を設計できる見通しとなった。このようなフラレーン誘導体は一つのカルベンが結合した分子とは電子的な性質が異なるため、本結果は、多様な電子的な性質をもつフラレーン誘導体を精密に合成できる可能性を示したと言える。また、H26 年度は上記の研究課題に加えて、分子のイオン化ポテンシャルを二次の摂動論に基づいて正確に計算する露わに相関した二次のダイソン方程式法の開発も行った。多環芳香族炭化水素やチオフェン分子、ポルフィリン分子など、有機電子材料として使われるいくつかの分子に適用したところ、密度汎関数理論や Hartree-Fock 法よりも実験値に近い良好な結果が得られた。このような有機電子材料のイオン化ポテンシャルを高精度に計算する手法は、新しい分子の設計に貢献するものと期待される。

2. モデル空間量子モンテカルロ法の並列プログラム開発と光システム II のスピン状態の計算

強い電子相関を持つ系の電子状態計算を目的としたモデル空間量子モンテカルロ(MSQMC)法に関しては、昨年度に完成した MPI/OpenMP 並列プログラムの高速化を行った。アルゴリズムやデータ構造を修正した中で最も効果の大きかったのは、各ノードが受け持つウォーカー数を、計算中にダイナミックに平均化することによって、より均等な負荷分散を達成したことである。現在のアルゴリズムでは、1000 モンテカルロステップ毎に、各ノードに存在するウォーカー数を調べ、平均よりも多い数が存在するノードから、少ないノードに移動させることによってウォーカー数の平均化を行っている。ウォーカーの通信による遅延が生じるが、並列化効率が向上したことによって計算は高速化され、約2億のウォーカーを使用したクロム 2 量体の MSQMC 計算では、FCIQMC や DMRG 法による最善値と統計誤差内で一致する結果が得られた。遷移金属水素化物の基底状態と励起状態のポテンシャル曲線への応用では、MSQMC 法による様々なスピン状態の結合解離エネルギーは、実験値と良い一致を示した。また、数千の電子配置(スレーター行列式)からなる P-空間を使用して、光システム II の活性中心(OEC)のモデル系について、様々なスピン状態のテスト計算を行った。この系では、最低でもマンガンd軌道と酸素2p軌道(合計35軌道)を考慮してP-空間に主配置を生成しなければならないが、これらの全ての軌道を含めて初期 P-空間を決定することは不可能である。このような場合には、MSQMC 計算中に Q-空間に存在するスレーター行列式の中で多数のウォーカーを持つようになったものを、P-空間に移動させる“プロモーション”が本質的になる。今回の計算では、限られたd軌道内の励起のみを含むスレーター行列式からなる初期 P-空間を使用して MSQMC 計算を開始し、プロモーションによって全てのd軌道と酸素2p 軌道間の励起を含むスレーター行列式を追加することにより、P-空間の改善を行った。様々な d 軌道間の励起を含む多数のスレーター行列式が生成され、MSQMC 計算の結果からは、Broken-Symmetry(BS)DFT 法では計算できない4重項スピン状態が、低エネルギー領域に存在することが示唆された。

3. 光システム II の構造と電子状態の研究

光システムII(PS II) の活性生中心(OEC)であるマンガンクラスター(CaMn_4O_5) には第二配位圏からのアミノ酸残基や水分子が存在し複雑なクラスター構造を形成している。高分解能X線回折(XRD)構造ならびにF. Neeseの最適化構造を基にしたOECと第二配位圏の周辺アミノ残基から成るモデル系に対して酸化状態 S_2 の全電子計算を行った。OECは強相関電子系であり、非常に複雑なスピン状態を有する。このような系に静的電子相関効果を取り込むためにBroken-Symmetry(BS)法を適用した。計算レベルはUB3LYP/6-31G(d)である。得られたOECのBS解のうち低スピン解($S_z=1/2$)の全電子エネルギーが最小で、次いで中間スピン解($S_z=5/2$)の全電子エネルギーが小さかった。 S_2 状態は電子スピン共鳴(ESR)測定からは二重項が基底状態、六重項が第一励起状態と帰属されており、 $S_z=1/2, S_z=5/2$ のBS解がそれぞれ対応すると考えられる。BS解はいずれもスピン混入が大きく、静的電子相関効果を取り込まれていることも分かった。低スピン解に対してスピン密度を求め、超微細構造定数の計算を行った。スピン密度はいずれもマンガンに局在しており、His332 が配位したマンガンの超微細構造定数が最大であった。各マンガンの超微細構造定数は電子-核二重共鳴(ENDOR)測定結果と定性的に一致することが分かった。さらに得られたBS解を用いてOECに周辺のタンパク質を取り込んだモデル系に対して相互作用を分散させた並列フラグメント分子軌道(FMO)計算を行った。計算レベルはFMO-UB3LYP/6-31G(d)である。ペア相互作用解析を行うことによって周辺タンパク環境がOECに与える影響を定量的に評価することができた。周囲 3 Å 程度離れたアミノ残基(Glu329, Val330, Ala351, Leu352 など)までがOECに電子的影響を与えており、5 Å 程度以上離れたアミノ残基(Arg357, Cl679, Thr316, Lys317 など)も静電相互作用による影響があることが示された。このことから酸素発生過程において第二配位圏のアミノ残基の寄与は重要であると考えられる。周辺アミノ残基を含めたモデル系に対してFMO-UB3LYP/6-31G(d)レベルの構造最適化を行うことによってより精密な解析が可能であると考えられる。

4. 自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学

ナノマシンのベアリングとして期待されるフラーレン内包の有限ナノチューブの構造とダイナミクスに関する研究を進めた。フラーレンのピロリジニウム軸がナノチューブ内部を旋回する“歳差運動”と軸を中心として回る自

転運動の2種類の回転機構が室温で存在することを密度汎関数強束縛法(DFTB)による動力学計算を使って詳細に調べた。その成果は Chem. Science 6, 2746 (2015)に EDGE ARTICLE として掲載され、日刊工業新聞 H27 年 4 月 21 日に「ナノサイズの分子がコマのように回転する仕組みを解明」した研究として紹介された。また、GELLAN に実装されている RD-MP2-F12 法による高精度計算を行った。分子ベアリングの会合エンタルピーの実験値は 13 kcal/mol であるが、予備的計算においては、100 kcal/mol 以上と算出されており、現在構造最適化や溶媒効果を含めて改善を進めている。

フッ素置換のフェニレン環回転子が頑強な 3 つのシラアルカン鎖(固定子)で囲まれた結晶性分子ジャイロスコープを対象にした研究も進めており、室温では安定構造間の回転障壁を約 3 ns に 1 回の頻度で越えるという回転の時間スケールの算出にすでに成功している。H26 年度は、双極子モーメントを有する回転子が振動電場存在下でどのように振る舞うかを回転制御も視野に入れて調べた。まず、4 分子で構成される X 線結晶構造の単位格子から 1 分子を取り出したモデルを採用し、DFTB 法を用いてテラヘルツ波駆動の回転動力学に関する理論計算を行った。分子内のエネルギー移動を解析するために、分子の全エネルギーを各原子の成分和として表す原子分割エネルギー解析法を開発した。解析結果から、フッ素置換による双極子モーメントの効果で回転子が電場から注入されるエネルギーの半分以上の獲得に寄与していることがわかった。その大部分は固定子に移動するが、実験的に可能な強度(< 2 GV/m)では数 ns 経過すれば連続回転に至ると考えられる。テラヘルツ波による回転により、その結晶の光学的・誘電的特性を高速制御できる可能性を示している。

2.2.1 当該年度(平成26年度)における研究成果

2.2.1.1 研究開発課題概要

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、さらにはポスト京のアーキテクチャまで視野に入れて、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、および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26年度においては、以下の成果が得られた。

- 1) 重点課題においては、密度汎関数法計算を実空間で実行する複数の手法が開発され、マルチコア超並列アーキテクチャのコンピュータ上で、高速化、高度化が行われている。それらは、実空間密度汎関数法計算コード(RSDFT)、実空間電子状態輸送計算コード(RSPACE)、オーダーN密度汎関数法計算コード(CONQUEST)、実空間Car-Parrinello分子動力学計算コード(RS-CPMD)、実空間・時間依存密度汎関数法+電磁場結合コード(GCEEDおよびARTED)であり、京コンピュータ上で高い実行効率と実行時間の良好なスケーリングを示している。これらの手法により、パワーエレクトロニクス材料であるSiC表面・界面の物性、とくにエピタキシャル成長中の自己組織化によるナノ構造での磁性発現の予測が行われた。また基板上およびfreestanding なシリセンの原子構造の特徴、ディラック電子の存在の有無などが明らかになった。さらには、Si/Geヘテロ接合での特徴的なナノ構造(ハットクラスター)の原子スケールでの成因も明らかになってきた。また、金クラスターのプラズモン励起、またパルスレーザー光による表面加工に対して、時間依存密度汎関数法計算が実行され、光励起ダイナミクス研究がスタートした。
- 2) 電子状態とそのダイナミクスが機械的性質や機能に重要な役割を果たすナノ・メゾスケールデバイスでは、量子論と古典論を統合したマルチスケールシミュレーションが不可欠である。特別支援課題1においては、分割統治型密度汎関数法であるDC-RGDFTコードを量子論的計算に用いたハイブリッド量子古典コードを超並列アーキテクチャ上で高度化している。また今年度、新たに高速動力学アルゴリズムを開発した。これらの手法により、今年度、Liイオン電池のグラファイト負極中での複数Liイオン群の拡散機構解明、サブミクロンの氷結晶での融解と再結晶化のダイナミクス解明、パワーデバイスの放熱材料であるアルミナ/エポキシ樹脂複合体での界面熱抵抗の樹脂厚等による変調解明、を行った。
- 3) ポストシリコン・テクノロジーにおいてスピントロニクス技術に期待が高まっている。特別支援課題2においては、スピントロニクス材料探索に適した、擬原子局在基底プログラム(コード名:OpenMX)、Car-Parrinello分子動力学法プログラム(コード名:CPVO)、全電子FLAPW法プログラム(コード名:HiLAPW)の開発を行っており、OpenMXは京コンピュータ上でのチューニングも進んでいる。これらコードの活用により、今年度、ZnO膜の表面に永続スピンヘリックス状態が存在することの発見、MgO/Fe/MgO接合系における磁気異方性エネルギー電界効果の解明、Si(557)微斜面上Auワイヤーの対称性とスピン分極、バンド分散の解明、が行われた。
- 4) 新しい機能や特性を示す新材料の開発・探索には、密度汎関数法プログラムの機能強化や密度汎関数法

を超える手法の開発が必要である。特別支援課題3においては、平面波基底関数 (QMAS、xTAPP)と有限要素法(FEMTECK) を用いた密度汎関数法プログラム、より高精度な全エネルギー計算を実現する第一原理量子モンテカルロ法プログラム(CASINO)、波動関数理論に基づくトランスコリレイティッド法プログラム (TC++)の高度化、磁性や光学特性、熱特性、超伝導特性、固液相変化等の計算に関する機能強化、その他GUIなど周辺アプリの開発を行っている。これらの手法を用いて、クラスレート化合物の低い熱電率の原因解明、高圧実験で報告された H_2S の高温超伝導転移の定量計算、新材料 $NdFe_{12}N$ の磁気特性予測、強誘電体材料における共有結合に起因する電子分極機構の解明等が行われた。

【部会活動】

昨年度までの特別支援課題のひとつであった「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」を、今年度から重点課題に組み入れた。これは実空間手法という超並列アーキテクチャに最適な手法を、High Performance Computingの基盤技術とし、従来からの重点課題である密度汎関数法による電子機能予測に、光という新たな制御パラメータを導入することによる新展開を目指すものである。

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時空場での電子機能予測とその実現

[代表者] 押山淳(東京大)

[担当者] 押山淳、岩田潤一、渡邊聡(以上東京大)、重田育照、小野倫也(以上筑波大)、
宮崎剛(物質材料研究機構)、Boero Mauro(ルイパスツール大)、Bowler David(ロンドン大)、
赤井久純(東京大)
信定克幸(分子研)、矢花一浩、朴泰祐(筑波大)、渡辺一之(東京理科大)

[研究の背景と目的]

CMOSデバイスに代表される半導体テクノロジーは、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。また、持続する社会のインフラであるパワーデバイスあるいはセンサー等の重要性も増大している。ここでは、それらテクノロジーを支えるナノドット、ナノワイヤーなどのナノ構造、新しい物性・機能を有する新材料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(DFT: Density Functional Theory)に基礎をおき、その理論的発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(計算モデル)]

数千から数万原子さらには数十万原子から構成されるナノデバイス構造体の構造と電子機能、さらにはそのダイナミクスの解明予測のためには、量子論に基づく大規模高精度長時間シミュレーションが必要となる。本重点課題においては、実空間手法を軸とするDFT 計算手法の開発と高度化を行ってきた。これは、マルチコアあるいは次世代メニーコアの超並列アーキテクチャコンピュータにおいては、実空間手法が通信付加の低減という観点から、原理的に有利であることに基づいている。具体的には、RSDFTコード(Real-Space DFT:2011年度ゴールドンベル賞最高性能賞受賞)、RSPACEコード(Real Space 電子状態コンダクタンス計算コード)、CONQUESTコード(Concurrent O(N) QUantum Electronic Simulation Technique)、RS-CPMDコード(Real Space Car-Parrinello Molecular Dynamics)の開発と京コンピュータ上での先端的チューニングを行ってきた。また今年度から、時間依存密度汎関数法と電磁場のマクスウェル方程式に依拠した、光励起機能の研究を本重点課題内で開始した。計算手法は実空間・実時間法であり、具体的には、GCEEDコード(Grid-based Coupled Electron and Electromagnetic field Dynamics)、ARTEDコード(Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulator)である。いずれのコードも「次世代先端デバイス科学」の特別支援課題として昨年度まで、チューニングを重ねてきたものである。今年度はこれらの実空間手法の、さらなる高速化、高機能化を行うと同時に、それを用いて、Si/Ge系ナノ構造、パワーデバイス材料として有力なSiC、次世代材料グラフェン、シリセン等における、ナノ表面・界面での電子機能解明、ナノ金属の光励起ダイナミクスの解明、高強度レーザーパルス光加工シミュレーションを実施した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

いずれの計算コードもMPIとOpenMPによるハイブリッド並列化が終了している。RSDFTコードの京コンピュータ上での高速化はすでに世界トップレベルであり、現在は高機能化を行っている。今年度は、励起エネルギーの定量的計算のための交換相関エネルギー汎関数に対するHybrid近似の導入が終了した。ここではGP-GPUハードウェアを用いたコーディングによる高効率化を実証している。また、ultrasoft擬ポテンシャルを実装し、ターゲットとする材料系の幅を広げた。RSPACEコードは高速高精度電子状態計算とコンダクタンス計

算に特徴があるが、一万原子規模の計算において実行効率30%超を達成している。また、数理分野との共同研究により、非平衡グリーン関数の新たなアルゴリズムによる解法を実装し、22倍の高速化を成し遂げた。CONQUESTコードでは、密度行列の導入とその実空間での局所化により、サイズNに対するオーダーNの計算コストが実現されている。現在では1,000,000原子規模の計算が可能となっている。また、今年度は分子動力学計算の機能を導入し、第一原理オーダーN分子動力学法計算を実行した。また、後処理としての櫻井・杉浦法による電子準位計算手法が実装された。電子とイオンのダイナミクスを解明するためのRS-CPMDコードは、今年度高速化に取り組んだ。京コンピュータ上での1,000ノード程度を用いた2,000-3,000原子系のシミュレーションがターゲットであり、現在1000原子系を1000 MPI / 8 OpenMP並列で、1ステップ2.55秒の速さで実行可能となっており、これはCPMD計算としては世界トップレベルの効率である。このRS-CPMDは第4部会との共同により、電池シミュレーションにも活用される。GCEED、ARTEDでは、3次元計算空間を多数個のグリッド点で区切り、そのグリッド点において偏微分方程式を差分法に基づいて直接的に解く実空間法を採用している。対角化やFFTが一切存在せず、超並列に非常に適したプログラム開発が可能である。並列化はMPI及びOpenMPを用いたハイブリッド並列を行っている。一般的な差分法アルゴリズムに話を限定すれば、京のアーキテクチャを考慮に入れると、その実行性能理論限界値はおよそ15%前後と見積もることができる。GCEEDは、現状で1~2万ノードで10%程度の実行性能が出ている。ARTEDは、 k 点並列が有効に効く為に、更に高い実行性能が出ている。

[研究成果]

上述の実空間シミュレーション手法により、(i) SiC 表面での自己組織化によるナノファセットの出現機構解明とそこでの磁性発現の予測、(ii) 基板上および freestanding の層状 Si(シリセン)の原子構造と電子状態の解明と実験結果との比較、(iii) 金クラスターのプラズモン励起の解明とレーザー加工の基礎的パラメータの取得、(iv) SiC と酸化膜界面における重要構造欠陥の同定とそのリーク電流への影響解明、(v) ヘテロ界面の代表である Si 上 Ge ナノ構造(ハット・クラスター)の構造的特徴の解明、が行われた。以下、(i)、(iii)について少し詳しく述べる。

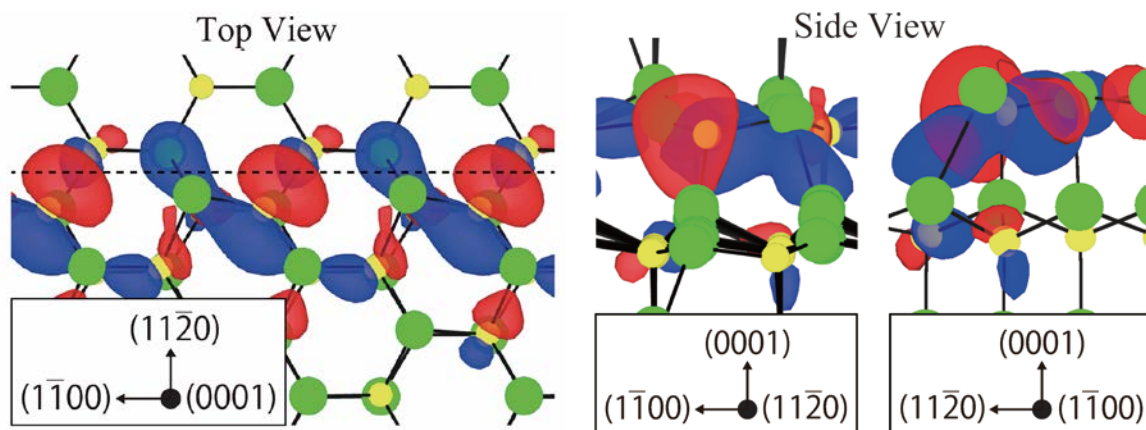


図1: SiC(0001)面上に形成されたナノファセットの1双原子層ステップエッジに沿って広がった電子状態(左:上面図、右(側面図)。黄色、緑色の丸が炭素原子、Si 原子の位置を示し、左の上面図の点線がステップエッジの位置を示す。電子状態の波動関数の正と負の等値面が赤と青で示されている。波動関数は黄色の炭素原子のダングリング・ボンド(赤色)と Si との背後のボンド(青色)との線形結合となっていることがわかる。

(i)の SiC(0001)表面では、エピタキシャル成長中あるいは熱処理中に、ナノファセットが自己組織化することが実験的に知られていた。昨年度からの RSDFT 計算により、このナノファセットは原子レベルでは1双原子層の高さのステップがバンチングしたものであること、ステップ間の斥力相互作用と表面エネルギーの兼ね合いにより、ファセット面 $[(112-n)$ 面]が実験条件によらずほぼ一定であること(魔法角)、が明らかとなった。さらに興味深いこ

とに、このバンチングした双原子層ステップに平行な方向に分布した特異な電子状態が出現することが見出された。これは主にステップ端での炭素原子のダングリングボンドの重ね合わせであり(図1)、ステップ端に沿った方向に平坦バンドを生み出すことが明らかとなった。さらに表面に水素原子を曝露すると、水素は表面テラスの Si 原子さらにはステップ端の Si 原子を選択的に被覆し、図1のステップ端 C 原子から成る特異的な状態がフェルミ準位に位置することが、RSDFT 構造最適化全エネルギー計算からわかった。被覆の程度により、平坦バンドの電子占有率を制御することが可能で、その結果、ナノファセットのステップ端に、強磁性状態あるいは反強磁性状態が出現することが見出された。磁性状態と非磁性状態のエネルギー差が小さいため、磁性発現は低温に限られるが、非磁性元素だけから成る典型的な半導体表面での、自己組織化ナノ構造における磁性発現という意味で興味深い。

(iii)の金クラスターのプラズモン励起に関しては、実在系ナノ構造体の光励起電子ダイナミクスとしては世界最大規模の計算を実行することに成功し、GCEED コードの有用性を示す事ができた。プラズモン励起の第一原理計算に基づく可視化とその解析を詳細に行うことができ、学術的にも有用な知見を与えた。また、3次元周期系及び2次元周期系(界面系)のナノ構造体・ナノ界面光励起ダイナミクスを扱うことができるように拡張を試みた。3次元周期系に関しては年度内にその開発が終了し、2次元周期系に関しては現在開発を継続している。ARTEDコードを用いたレーザー加工の初期過程シミュレーションに関しては、透明材料のフェムト秒レーザー加工において、加工に必要となるレーザーの閾値強度、表面からの加工の深さに関して、測定データとよく一致する結果が得られた。また、高強度パルス光をガラスに照射した場合のガラス表面に発生する超高速電流、高強度パルス光をシリコン結晶に照射した際のバンドギャップの超高速変化等の実験結果に関し、ARTED を用いた解析を行った。

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)、大庭伸子(豊田中央研究所)、田中宏一(デンソー)

[研究の背景と目的]

産業界で有用なデバイスや材料では、ナノ・メソ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(量子計算)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し、実際に運用することを目指している。

平成26年度は以下を目的とした: (i) 独自開発した分割統治型の実空間グリッド型 DFT である DC-RGDFT を量子領域の計算エンジンとしたハイブリッド量子古典シミュレーション法を、Li イオン電池の負極グラファイト中における複数個の Li イオン群の拡散ダイナミクスを調べるために適用すること。(ii) 分子内の原子を粗視化した水分子集合系を、時間反転対称性があり最高速な独自開発の動力学アルゴリズムで扱い、氷表面でのナノメートル厚の特異な液体層の動的挙動を解明すること。(iii) パワーIC 等の高効率な放熱が必須となっていることを踏まえ、アルミナに挟まれたエポキシ樹脂を通じた界面熱抵抗に関して、その樹脂厚依存性を明らかにするシミュレーションを行うこと。

[実施内容(計算モデル)]

上記 3 項目に対応して以下を実施した: (i) 我々が前年度にアルゴリズムを提案しコード化した DC-RGDFT コードを量子領域の計算エンジンとして用いたハイブリッド量子古典シミュレーションを、グラフィック中に挿入した 7 個の Li 原子群の熱拡散に関して大規模に実行した。その際、複数の量子領域は Li の配置に応じて動的に選択した。個々の Li 原子からは上下にある近傍の炭素原子に電子が移動するため、Li イオン状態となる。このため、古典的な Li-C 原子間ポテンシャルを高精度に構築することは容易でなく、本シミュレーションにおけるハイブリッド法が有用である。Li イオン群は離散集合するため、その配置に応じて、動的かつアダプティブに複数の量子領域を設定し、全計算量をできるだけ少なくした。個々の量子領域の計算は独立に行うことができるため、スパコンのメニーコア環境では理想的な並列性能となった。(ii) 分子を剛体として扱うことは大規模系のシミュレーションを長時間行う際に、時間ステップを数倍長く設定できることから有用である。我々は剛体分子の回転を含めた動力学アルゴリズムとして、時間反転対称を持ち、既存のシンプレクティック法にくらべて高々 2-3 割の計算時間に留まる(最高速のアルゴリズムといえる)ものを一昨年提案した。また長距離に及ぶクーロン力の計算のためにオーダー N 型である高速多重極展開法を取り入れた。その結果、百万を越えた個数の水分子からなるサブ μm 規模の氷について、融点以下で表面に生じる擬似液体層に関する大規模シミュレーションを行うことに世界で初めて成功した。(iii) 高熱を発するパワー素子から放熱するために、密着性の良いエポキシ樹脂を塗布し、樹脂内にはアルミナ等のフィラー(微小粒子)を充填することで熱伝導を良くすることが模索されている。本年度は、高い充填率状態でアルミナに挟まれたナノメートル厚のエポキシ樹脂が示す熱伝導特性を調べた。既存の汎用型の高分子系ポテンシャルとアルミナ系のポテンシャルに加え、密度汎関数計算により新たに定めた高分子-アルミナ間のポテンシャルを構築し適用した。非平衡古典 MD シミュレーションを行い、界面を通じた熱輸送効率のエポキシ樹脂厚依存性を明らかにし、その依存性に物理的な理由を解明した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

上記3項目の並列計算の方法と効率は以下である: (i)においては、電子状態を計算する DC-RGDFT コード部分に要する時間が、全計算時間の中で支配的である。DC-RGDFT コードの並列化は、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並列計算、OpenMP による Do-loop 分割の計4レベルで並列化している。そのストロングスケーリングによるベンチマーク結果は、1728 個の Si からなるクラスターの場合、スパコン京を 1024 ノード、2048 ノード用いると、電子状態をえるための時間がそれぞれ 411.3 秒、232.1 秒であり、実行並列化率は 99.998% である。この際の実行効率は 5.9% であった。実行効率は、ノード毎の計算量を多くすると 10% を超える。たとえば、Si 原子 1000 個の系を、スパコン京の 192 ノードを用いて計算する場合、実行効率は 10.0% である。(ii)においては、対象系を 512,あるいは 1024 個に空間分割することで並列化を行っている。ウィークスケーリングのテストでは、99.998% の実行並列化率である。(iii)においては、対象系は規模が小さいため、粒子並列により並列化した。コード運用時の並列数は 32 ノード程度と小さいため、並列化効率の計測はしていない。

[研究成果]

上記3項目に対応して以下に成果を得た: (i) DC-RGDFT 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を、グラフィック中に挿入した 7 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ィックが変形して大きさ 14\AA 程度の cage が形成されること。その cage の中で、Li イオン同士は互いに影響をおよぼしあいつつ良く拡散すること(5ps 程度の短時間での拡散係数は、1 個の Li イオンの場合での 6 倍程度の大きさ)。cage 自身の長時間での拡散係数は、1 個の Li イオンの場合より若干小さい程度で良く似ていた。その理由は、cage の移動はその cage 周の各所で頻繁に起こる、上下 C 間の vdW ボン

ドの切断によるため、cage サイズによらずに cage 移動が少しずつ起こるためである。(iii) 高速多重展開法を取り入れた剛体分子動力学コードを用いたサブ μm 規模の氷のシミュレーションでは、融点以下で表面に生じる擬似液体層が、温度上昇と共に水分子 bilayer 単位で増大すること。また熱揺らぎにより表面では局所的に融解と再結晶化を時間経過と共に繰り返し、氷と表面水層の間で水分子が頻繁に入れ替わること等を発見した。これは外部環境から水溶性の物質を氷内部に高速に取り込む過程が存在する可能性を示唆している。自然界で酸性の氷が観測されている事実に関連し、環境問題との関連で特に興味深い。(iii) アルミナに挟まれたエポキシ樹脂の界面熱抵抗を非平衡古典 MD シミュレーションで求めた結果、樹脂厚がエポキシ樹脂分子の大きさ程度に薄くなると、エポキシ樹脂の配向性が制限されるため、界面熱抵抗が 2 倍程度に増大することを発見した。また、その増大は、アルミナとエポキシ樹脂とを結合する働きをする界面結合分子を少量加える事で半分程度に抑えられることを示した(図1参照)。

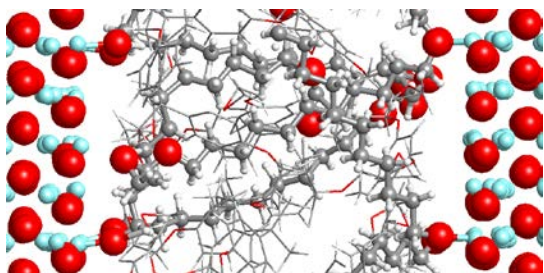


図 1: アルミナに挟まれたエポキシ樹脂(厚さ 14\AA)に界面結合分子を導入したケースでの、界面近傍の様子。左右のアルミナを連結するように配置された界面結合分子が存在するため、界面熱抵抗の増大は抑えられる。

iii) 特別支援課題2: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(東京大)

[研究の背景と目的]

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、新しい動作原理に基づくデバイスの開発が求められている。本研究では、スピントロニクス・マルチフェロイクスに基づく新デバイス実現に向けて、これらに適した材料探索を行う。ラシュバ効果、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、将来のデバイ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(計算モデル)]

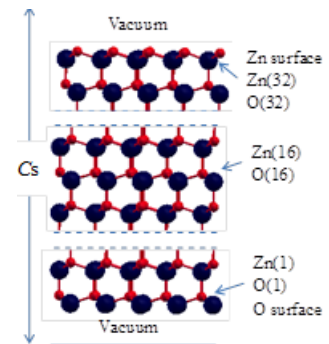
スピントロニクスデバイスの高度シミュレーションを実現するために、数値局在基底法に基づく第一原理電子状態計算コード OpenMX の機能拡張を行った。具体的にはスピン軌道相互作用を含めたノンコリニア密度汎関数理論と非平衡グリーン関数を融合し、トポロジカル絶縁体やトンネル磁気抵抗素子などの広範囲な第一原理デバイスシミュレーションを可能とした。またゲート電圧を印加する機能も実装し、実験との対応が可能なより現実に即したシミュレーターを開発した。CPVO では、平成 24、25 年度に実施した並列計算の実行効率の改善を受けて、物性研システム C を用いた計算枠を用いて、磁気トンネル接合系に現れる界面における大規模計算を実行した。計算は、実験結果を解析することを重視し、2つの接合界面をもつ2重界面系 $\text{MgO}(4\text{ML})/\text{Fe}(3\text{ML})/\text{MgO}(7\text{ML})$ で実施して、磁気異方性エネルギー電界効果を調べた。また電界点に対する異方性エネルギー計算を並列させて実施するための並列化の開発を推進した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

CPVO を用いた、2重界面系の電子状態解析を行うための計算は、これまでに効率化させた並列計算コードを用いて実施した。目的とする計算において MPI-OpenMP の並列処理を用いたk点並列計算が実行可能であり、もっとも効率的であったので、その並列計算において本番計算(プロダクションラン)を行った。k点並列なので十分な並列化効率が得られているはずである。このような計算は電界点に対して冗長に実行したが、電界値が異なっても比較的計算量が均衡しているため並列に実行することで大規模計算機を有効に活用することが可能である。そこで電界点等が異なる一連の計算を同時に実行するための並列機能(システム並列機能)を開発した。

[研究成果]

(Zn,Mg)O/ZnO の界面の構造(図)の研究を目指した研究については、電気分極状態の ZnO 薄膜の計算を実施した。類似の系を同時に計算する並列機能(システム並列機能)については、もっとも単純なプロトタイプの計算コードが作成され試験的な計算を行うことに成功した。



また、ZnO(10-10)膜の表面状態のスピンテクスチャを解析したところ、永続スピンヘリックス(PSH)の性質を持つことが判明した。スピン長寿命を持ちそのスピントロニクス応用が注目される PSH は、閃亜鉛鉱型半導体のみに対して研究されてきた。それとは異なる対称性を有するウルツ鉱型での可能性を示した点で、今後の PSH 研究に有益である。

2重界面系 MgO/Fe)/MgO において、相対論的擬ポテンシャル平面波法を用いて磁気異方性エネルギー電界効果の計算を実施し、実験結果とよく対応する結果を得た。磁気異方性エネルギー電界効果については、実験結果の特徴である電界に対する非線形性および変調量を良く再現している結果を得ることができた。非線形性は、電界を直接受ける界面 Fe の電子数とよく相関していることを発見した。得られた計算結果はこうした界面接合薄膜における機能を理論計算により解析する出発点を与えている。そして採用している計算手法は最先端スピントロニクス研究に大きく貢献し得ることを示している。また Fe 原子のスピン磁気モーメントにおいては、電界によりスピントリップが生起することが明らかとなった。これは Fe サイトにおける電子相関と電界が関係していることを示唆しており、電界が界面の特徴を解析する手段となる可能性を暗示している。

HiLAPW においては、Si(557)微斜面上の Au ワイヤに対して観測された一次元バンドに対する Rashba 効果は既に第一原理計算によりよく再現されることが示されているが、今回、時間反転不変運動量における対称性とスピン分極の確認、及び Au ワイヤ方向以外の方向に対するバンド分散の振る舞いを明らかにした。また、トポロジカル絶縁体 TlBiSe₂ の表面に積層された Bi バイレイヤーにおいて、元々 TlBiSe₂ の表面に局在していたディラック的バンド分散を表面状態が Bi バイレイヤー表面に現れる現象が観測され、第一原理電子状態計算により、スピンに依存した軌道混成の効果によって説明されることを示した。

iv) 特別支援課題3: 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)、三宅隆(産総研)、合田義弘(東工大)、吉澤加奈子(東京大)

[研究の背景と目的]

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(計算モデル)]

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、周辺アプリ開発、ならびにそれらを用いた応用計算を進めた。

[並列計算の方法と効果(性能)]

[研究成果]

手法開発:

- QMAS、xTAPP、CASINO、FEMTECK、TC++の最適化、高度化を進めた。
- xTAPPに九工大中村氏による最局在ワニエ関数の計算コードを統合した。自発電気分極についてはワニエ中心に加えてBerry Phaseによる計算も行なえる。ワニエ関数を用いた補間バンドの計算や、ワニエ関数へのprojected DOSの計算が可能になった。
- xTAPPにDFT-D分散力の計算機能を追加した。
- xTAPPにphonopyと連携してフォノン計算をする機能を追加した。
- xTAPPの入出力ファイルまわりの利便性を向上した。またサンプル入力にさらに応用例を追加した。
- xTAPPの入力支援および出力解析支援のためのGUIアプリ(コード名TAPIOCA)の機能改良を行った。また他のDFTコードへの対応準備を進めた。
- xTAPPを利用した分割統治法(LS3DF法)と、その結果を利用した大規模系の一電子エネルギースペクトル計算手法(LCFO法)のプログラムを開発し、いくつかの半導体、絶縁体でテスト計算を行って動作を確認した。
- xTAPP等の第一原理計算パッケージを用いて非調和格子モデルの作成と熱伝導度計算を行うパッケージALAMODEの高度化を行い、GPLライセンスによる公開を行った。またボルン有効電荷テンソルを用いて長距離クーロン相互作用を取り入れ、イオン結晶のフォノンに見られるLO-TO分裂を第一原理から再現できる機能を追加した。
- ブリリュアンゾーン積分の収束を早める改良テトラヘドロン法をライブラリとして公開した。
- 材料の粒界物性解明に向け、超球面探索法のアイデアに基づいてポテンシャルを改変することで構造探索する手法を開発し、xTAPPに実装してテスト計算を開始した。
- 超伝導DFTコードの開発を推進し、当グループで開発した最適化テトラヘドロン法等の実装により、高精度計算を実現した。
- QMASの2成分スピノル形式電子状態計算実行において、既存のスピ磁気モーメント制御機能に加えて、軌道磁気モーメント制御機能を付与した。前年度に引き続き、結晶場係数や最局在ワニエ軌道計算機能の整備を進めた。
- 第一原理分子動力学計算を行う際に、非常に大きなステップを用いた時間発展を可能にするようなアルゴリ

ズムを開発した。

- 有限要素法を用いた第一原理計算の最近の発展及び燃料電池の電解質系に対する応用計算について論文にまとめた。
- CASINOに新たに適用・実装した試行関数形を用いて、1次元電子ガスワイヤ間に作用する微弱な相互作用を評価し、新たな減衰ベキ則を解明した。また、大規模計算資源を必要とする分子性固体の多形予見に関して有限サイズ誤差を明らかにした。
- TC++に、従来のLDA基底関数による対角化に代えて、平面波基底から逐次対角化を行う機能を追加し、大幅な高速化を実現した。これにより遷移金属を含む系の計算が現実的な計算時間で行えるようになった。またTC++の計算結果を用いてメラー・プレセット2次摂動により全エネルギーとバンドギャップを計算する機能を実装した。
- TC++の出力波動関数を用いた量子モンテカルロ計算を、CASINOで実現し、性能評価を開始した。

応用計算:

- ALAMODEを用いて熱電材料として期待されるクラスレート化合物 $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Ge}_{30}$ の第一原理非調和格子モデルを作成して熱伝導率の定量解析を行い、かご内イオンのラットリング運動によるフォノン散乱が、この物質の低い熱伝導の主な要因であることを明らかにした。
- 高圧下ながら190K以上という高温超伝導転移が報告された H_2S について、SCDFT(超伝導密度汎関数理論)による第一原理的な転移温度計算を行い、フォノン機構(+プラズモン機構)により実験結果を説明できる高い転移温度が実現されること、また理論予測されている超高压相ではさらに高い転移温度となる可能性があることを示した。
- 最局在ワニエ軌道を活用することで、有機強誘電体TTF-CAおよびペロフスカイト型遷移金属酸化物強誘電体 $\text{BaTiO}_3 \cdot \text{PbTiO}_3$ において、共有結合性に起因する電子分極発現の機構を明らかとした。
- 希土類磁石化合物 $R\text{Fe}_{12}\text{N}$ 、 $R\text{Fe}_{11}\text{TiN}$ において希土類(R)イオンをY, Nd, Smと変化させたときの磁化、結晶場係数の変化と構造緩和の影響を調べ、 NdFe_{12}N が最もよい磁気特性をもつことを示した。
- 千葉大学の実験グループとの共同研究として、高温のリチウムガラス融体に対する研究を進め、FEMTECKによるボルン有効電荷の時間変化の解析や NMR パラメータの推定等を行った。
- xTAPPとM2TDを組み合わせ、B3LYPハイブリッド汎関数とDFT-D3モデル分散力を考慮した水分子モデル原子間ポテンシャルを作成したところ、PBE汎関数で問題になっていた、低すぎる自己拡散係数、高すぎる氷の融解温度、大きすぎる氷の融解熱の問題が大幅に改善することが分かった。

2. 2. 1 当該年度(平成26年度)における研究成果

2. 2. 1. 1 研究開発課題概要

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。

「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昨年度に引き続いて継続実施し、ウイルスの圧力耐性や乾燥による不活化についてその分子論的な起源を明らかにした。一方で、感染の第一過程であるCD155レセプターと小児マヒウイルスの結合に関して、統計量を昨年度の12倍取り、極めて微弱ながらも引力相互作用が確かに存在することを定量的に実証した。さらには、CD155との結合に際して、カプシドの結合部位選択性を示すことも示した。

ソフト開発としては、MODYLASの高度化をさらに進め、自由エネルギー計算が可能な新規バージョンMODYLAS_1.0.3を公開した。FMOについては、FMO法と古典力学の融合法(FMO/MM法)と部分構造最適化法(FMO/FD法)を開発し、さらにはFMO計算の入力データの作成と結果をグラフ化するためのGUIプログラムFUを開発した。

「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、独自に開発した拡張アンサンブルドッキングシミュレーション手法(すなわち、レプリカ交換傘サンブル法(Replica-Exchange Umbrella Sampling: REUS)とレプリカ溶質焼き戻し法(Replica-Exchange Solute Tempering: REST)を合体させた2次元レプリカ交換法: REUS/REST)を用いて、oncoprotein MDM2 とリガンド Compound 29 の系における自由エネルギー最小構造を予測し、X線回折実験とよく一致することを示した。さらに、このドッキング構造を元にして、ダブル・ディカプリング法によって、結合自由エネルギーを計算し、ここでも実験結果との良い一致をみた。また方法論的面では、水溶液の統計力学的・熱力学的性質が厳密に保持されるQM/MM分子動力学シミュレーションを可能にした。

「ポリモルフから生起する分子集団機能」では、リン脂質二重膜へのタンパク質の結合様式を、全原子MDとエネルギー表示溶液理論によって検討し、また高分子系の全原子モデルによる解析では、高分子に対するアルコール分子の溶解自由エネルギーの計算から、アルコール/水の分離係数の実験結果を定性的に再現した。ミセル系の全原子シミュレーションでは、球状の非イオン性ミセルを対象として、圧力プロフィール計算によって、ミセル表面の水の配向相関が界面張力を支配していることを明らかにした。また、ストーク中間体を經由する膜融合過程の自由エネルギー解析を粗視化モデルを用いて行い、さらには、BARタンパク質のように自発曲率に異方性のある分子の生体膜上での凝集過程を計算可能とした。また、方法論開発の立場からは、LogMFD法により on-the-fly の自由エネルギー計算を可能とし、さらにカスケード型シミュレーション法を用いて得られたトラジェクトリから自由エネルギーを計算する方法を構成した。

「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」においては、アミン吸収液による二酸化炭素の吸収過程の研究では、双性イオンを形成する反応と重炭酸イオンが生成する反応を確認し、双性イオン形成反応、重炭酸イオン生成反応の特徴、分子機構を明らかにした。一方、吸収された二酸化炭素が加熱により放散される過程に対しては、二酸化炭素の脱離とアミンの再生などその反応機構を解明した。ソフト開発においては、総原子数約10,000の大規模シミュレーションを「京」840ノード利用時に約18時間で1psのトラジェクトリを計算することを可能とした。また、超巨大系の反応ダイナミクスを「京」で取り扱うことを可能とするため、昨年度までに手法開発を行った分割統治密度汎関数強束縛(DC-DFTB)法の計算プログラム「DC-DFTB-K」の高効率化と超高

並列化を引き続き進め、二酸化炭素吸収・放出反応(CCS)やリチウムイオンデバイスにおける極板表面の反応に適用した。

「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、高周期典型元素を含んだ平面四員環化合物についてモデル系を構築し、化学修飾が開殻性に与える影響を体系的に検討した。また、化学修飾が開殻性に与える影響については、電荷分布、軌道相互作用や共鳴構造式から定性的な説明が可能であることを明らかにした。一方で、様々な機能性物質として期待される1次元遷移金属鎖の鎖長方向の γ の鎖長(核数)依存性、また2核金属錯体における非線形光学効果についても検討した。

【部会活動】

平成 26 年 12 月 9 日、東北大金研において部会小委員会を開き、27 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。また、第 1 部会、第 4 部会と連携して、TCCI 将来アプリ検討 WG を組織し、平成 26 年 9 月 13 日の第 1 回 WG を皮切りに、平成 27 年 1 月 28 日の第 13 回 WG まで連続的にのべ 13 回の WG を開催し、今後開発すべきアプリについての検討を行った。

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

[代表者] 岡崎進(名古屋大)

[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)

[研究の背景と目的]

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、小児マヒウイルス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、感染初期過程の分子機構の解明を図る。また、小児マヒウイルスカプシドの研究を通して確立した手法をさらに発展させ、B 型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤がカプシドを透過して内部に送達される分子機構を解明し、新薬開発に貢献する。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(計算モデル)]

平成26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、機能強化を引き続き実施すると共に、前年度に引き続き京コンピュータを用いて小児マヒウイルスカプシドに対する丸ごと分子動力学計算を実施し、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、小児マヒウイルスが有している圧力耐性や、逆に乾燥による不活化の分子論的描像の検討を行った。また、小児マヒ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実施した。一方で、B型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤がカプシドを透過する自由エネルギープロフィール計算に必要なB型肝炎ウイルスカプシドの熱平衡状態構造を得るための計算を開始した。

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、FMO法を創薬研究に応用する上で有用な、FMO法と古典力学の融合法(FMO/MM法)と、高速に構造最適化計算が行える部分構造最適化法(FMO/FD法)の開発を行った。

[並列計算の方法と効果(性能)]

高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS は、京コンピュータにおける超並列計算に対応するために、並列化効率を大幅に低下させる FFT を回避し、周期境界条件下にある分子集合体における長距離力に対して FMM を用いて高精度に計算できるペタフロップス級の MD 計算を目指した汎用プログラムである。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。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。

FMO 法計算プログラムは、CPU コアをグループ分けし、フラグメントやフラグメントペアをグループに割り当て、グループ内では通常の ab initio MO 計算とはほぼ同じ並列計算を行っているが(2段階並列化)、石村氏開発の 2 電子積分ルーチンを組み込み、7.3%の実行性能を実現している。

【研究成果】

ウイルスカプシドは環境に対してどの程度 robust であるかを明らかにするために、まずは圧力変化に対する耐性について検討した。その結果、小児マヒウイルスは6000気圧の外部印加圧力に耐え、相当に圧縮されながらも構造を安定に保つことを見出した。この観察は、小児マヒウイルスが圧力印加によっては不活性化されないという実験事実をよく証明している。また、乾燥状態においてはカプシド内部の水が外部に容易に放出されることが計算により明らかとなり、ウイルスが乾燥により不活性化される分子機構を得た。

また、生理的条件であるpH7.4において、小児マヒウイルスカプシドは $-240e$ に、またCD155レセプターは $-2e$ に電離し、共に負の電荷を帯びている。このため、両者の間に働くクーロン相互作用は本来強い斥力である。たとえ電解液が存在し、Debye-Hückel 則に示されているようなクーロン相互作用の遮蔽があったとしても、近距離では依然として大きな斥力が働くこととなる。そうであればカプシドとレセプターは結合しない。しかしながら実際には両者は結合し、感染する。この機構を明らかにするために、熱力学的積分法に基づいた分子動力学計算よりカプシド-レセプター間の平均力を求めてきた。平成26年度は、統計量を昨年度までの12倍に増やし、高精度な平均力の計算を行い、弱い力をも検知しながら詳細に解析した。その結果、これまでのところ、電解液の存在によりカプシドの生成する電場が極めて弱いながらも引力的なものに逆転すること、そして、ウイルスはレセプターとキャニオン部で結合するために、結合位置選択性を有していることを明らかにした。その一方で溶媒との相互作用による熱的な力、つまりランダム力は平均力の1000倍にも及ぶことを見出し、ウイルスは確率論的にレセプターに近づいてくることを明らかにした。

さらに、名古屋市大と共同でB型肝炎ウイルスカプシドの薬剤透過に関する研究を開始した。現実系での薬剤透過機構を解明するためには、ssRNAを含むウイルスに対するシミュレーションを実施する必要があるため、このためクライオ電顕からの電子分布に基づいてRNA構造を再構築した。現在、ゲノムを含むウイルスのシミュレーションを開始したところである。

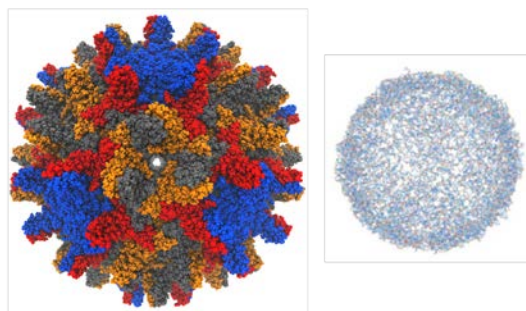


図 B型肝炎ウイルスカプシドと、再構成したss-RNA。

【ソフトの開発、公開等】

ソフト開発としては、MODYLASの高度化をさらに進め、系の中に選択した任意の部分分子集団系間の距離を拘束し、集団間の平均力や自由エネルギー計算が可能なMODYLASの新規バージョンMODYLAS_1.0.3をweb上にソース公開した。また、直方体セルへの対応を可能とし、 2^n のセル分割に加えて $2^n \times 3^m$ のセル分割も可能としたバージョンについても公開準備が整ったところであり、近々公開予定である。また、東大情報基盤センター、名大情報基盤センター、理研計算科学研究機構と連携して、JHPCNにおいて高度化を開始した。

一方、インフルエンザウイルスの新規阻害剤の分子設計の研究では、FMO法を創薬研究に応用する上で有用な、FMO法と古典力学の融合法(FMO/MM法)と、高速に構造最適化計算が行える部分構造最適化法(FMO/FD法)を開発した。これにより、構造最適化した複合体で、溶媒分子をあからさまに考慮して結合自由エネルギー計算を行うことが可能となった。これらにより、分子設計の信頼性が向上すると期待される。また、FMO法の創薬研究への応用を容易にするために、FMO計算の入力データの作成と結果をグラフ化するためのGUIプログラムFUを開発した。

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)

[研究の背景と目的]

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、強力な拡張アンサンブル法を開発して、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することも目指す。

[実施内容(計算モデル)]

今年度は、国民の健康保全のために重要な問題である、病気の原因解明に適した拡張アンサンブル法の開発に特に力を入れた。具体的には、タンパク質が間違っただけで折れ畳み凝集することにより生じるアミロイド線維の形成過程を調べるのに適した手法の開発を行った。

[並列計算の方法と効果(性能)]

本研究グループでは、拡張アンサンブル法として、レプリカ交換法やマルチカノニカル法を改良・一般化した手法を使っているが、特に、レプリカ交換法は、100%に近い、非常に高い並列化ができる手法であり、多くの計算機でもそれは確認されているが、MODYLAS と合体することによって、「京」上でも最大 24576 ノードにおいて、99.3%の高い並列化効率を実現している。

[研究成果]

昨年度、独自の開発に成功した拡張アンサンブルドッキングシミュレーション手法(すなわち、レプリカ交換傘サンプリング法 (Replica-Exchange Umbrella Sampling: REUS) とレプリカ溶質焼き戻し法 (Replica-Exchange Solute Tempering: REST) を合体させた2次元レプリカ交換法: REUS/REST) を計算例として、oncoprotein MDM2 とリガンド Compound 29 の系に適用した。そして、自由エネルギー最小状態として得られたリガンドとタンパク質とのドッキング構造が、X線回折実験の結果とよく一致することを示した。我々は更に、このドッキング構造を元にして、ダブル・ディカプリング法によって、結合自由エネルギーを計算し、これまた、実験結果との良い一致をみた。

タンパク質の構造を探索するための手法として近年レプリカ交換法が多く用いられている。最近、より効率の良い手法としてレプリカ置換法を開発した。レプリカ交換法では2つのレプリカ間で温度の交換を行うのに対し、レプリカ置換法では3つ以上のレプリカ間で温度を置換する。また温度を置換するか否かの判定には通常のメトロポリス法ではなく、諏訪・藤堂法を用いる。諏訪・藤堂法はメトロポリス法とは異なり詳細釣り合い条件ではなくただの釣り合い条件のみ満たすモンテカルロ法であり、状態遷移のリジェクト率を最小化できる。この方法をレプリカ置換法に用いることでより効率的なサンプリングを実現できるようになった。最近、諏訪と藤堂により詳細釣り合い条件を満たしながら状態遷移のリジェクト率を最小化する理論が提案された。今年度は、詳細釣り合い条件を満たす場合と満たさない場合の諏訪・藤堂法をレプリカ置換法へ適用し、生体分子に应用することで温度、構造空間のサンプリング効率を検証した。その結果わずかではあるが、詳細釣り合い条件を満たさない諏訪・藤堂法を用いた場合の方がより効率が良いことが分かった。今後アミロイド線維を形成するタンパク質の研究にこの手法を応用していく。

生体分子の機能発現は、活性部位における化学反応で制御されるが、その反応過程において溶媒である水との相互作用が重要な役割を果たす。分子シミュレーションによって、生体分子の反応過程を理論的に解明す

るためには、反応中心と反応場としての水溶液を同時に扱うマルチスケール・モデリングの確立が鍵となる。なかでも便利なのが、量子系(QM)と古典系(MM)に領域を分割したQM/MM法だが、水の揺らぎ効果を正しく表せないため、計算の精度や信頼性への問題が古くから指摘されていた。今年度は、水の揺らぎに対応した開放系のQM/MM法を独自に提案し、これに決着をつけることに成功した。系に内在している座標交換対称性から、開放系のQM/MM法の満たすべき境界条件を数学的に導くことによって、水溶液の統計力学的・熱力学的性質が厳密に保持されるQM/MM分子動力学シミュレーションを初めて可能にした。

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(阪大)、篠田渉(名古屋大)、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)、森下徹也(産総研)、北尾彰朗(東京大)、西原泰孝(東京大/CMSI研究員)

[研究の背景と目的]

脂質や界面活性剤、高分子のような分子は、外部変数の設定によって多様な自己組織化状態を示し(ポリモルフ)、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する分子集団機能を発現する。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。特に、溶液・タンパク質・脂質膜・ミセル・高分子のようなソフトな分子およびその集団系に焦点を当て、全原子モデルと粗視化モデルを用いたマルチスケール解析によって、a) タンパク質-脂質膜相互作用、b) 膜のモルフォロジー及びトポロジー変化、c) 高分子非晶に対する有機分子の溶解性能、d) 非イオン性ミセルの界面張力、e) 脂質膜のメゾ構造、f) 紐状ミセルの絡み合い挙動、g) 水中タンパク質のコンプォメーション変化、および、h) タンパク質・膜系の構造変化パスウェイの解析を行う。

[実施内容(計算モデル)]

全原子モデルによる自由エネルギー計算のために、エネルギー表示法ソフトウェア ERmod を高度化している。MODYLASのような大規模 MD ソフトとの連携によって、タンパク質の関与する会合過程に対する水の効果を計算した。さらに、ベシクルや平面膜の融合を記述可能な粗視化モデルを開発し、メッシュレス膜模型や粒子-連続場ハイブリッドモデルに基づいて混合脂質膜と紐状ミセルの大域構造を調べた。また、LogMFD法によって自由エネルギーの on-the-fly 計算を行い、タンパク質構造空間の効率的なサンプリングのためにカスケード型並列シミュレーション法 PaCS-MD の開発を進めた。

[並列計算の方法と効果(性能)]

全原子モデルによる並列自由エネルギー計算を、ERmod を用いて行う。1000 程度の並列度を 95%以上の効率で達成している。また、大規模系の全原子 MD 計算のために MODYLAS を開発し、例えば、約 50 万コアを用いると 1000 万原子系の計算が約 5 ms/ステップで実行可能となっている。PaCS-MD によって、MD を 10~100 同時に完全並列で実行し、サンプリング効率を更に向上させることができる。

[研究成果]

POPC および DMPC リン脂質二重膜への alamethicin の結合様式を、全原子 MD とエネルギー表示溶液理論によって検討し、脂質膜界面における自由エネルギー安定化が水との相互作用に起因することを見出した。高分子系の全原子モデルによる解析では、ポリシロキサン膜に対するアルコール分子の溶解自由エネルギー

の計算から、アルコール／水の分離係数の実験結果を定性的に再現し、ミセル系の全原子シミュレーションでは、球状の非イオン性 C12E8 を対象として、圧力プロフィール計算によって、ミセル表面の水の配向相関が界面張力を支配していることを明らかにした。また、ストーク中間体を経由する膜融合過程の自由エネルギー解析を粗視化モデルを用いて行い、脂質組成によるエネルギー障壁の変化の記述には、脂質コンフォメーションの考慮が定量的な説明に重要であることを示すとともに、BAR タンパク質のように自発曲率に異方性のある分子の生体膜上での凝集過程を計算可能とした。さらに、流路中の紐状ミセル溶液の解析を行い、粒子一連続場ハイブリッドモデルを用いることで、紐状ミセルの流動方向に対する空隙率が異なるなどネットワーク構造の形状が異なることを見出した。方法論開発の立場からは、LogMFD 法の水中タンパク質への適用性を検証し、従来法の欠点を明らかにする一方で、LogMFD 法により on-the-fly の自由エネルギー計算が生体分子系でも可能であることを示し、カスケード型シミュレーション法 PaCS-MD を用いて得られたトラジェクトリを、Markov State Model を用いて解析し自由エネルギーを計算する方法を構成した。

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)、

[研究の背景と目的]

ナノスケール系で起こる化学反応を精密に制御するための指針を確立することは、化学プロセスの合理化や材料の性能評価、新規材料の設計・提案を可能とし、エネルギーの効率的な利用などにつながる有用な足がかりである。本課題では、大規模電子状態理論を用いることにより、現実的な反応モデルに対する反応経路の探索、反応条件の最適化を化学的精度で解析することを目指した研究を推進している。特に、中井らが開発を進めてきた分割統治(DC)法を電子構造に代表される静的なプロパティの評価と、反応ダイナミクス解明のための動的なプロパティの記述の両方に適用し、実用的な基盤技術を構築することを特長としている。

平成 26 年度は、昨年度より取り組んできた超巨大系の反応ダイナミクスを効果的に取り扱う分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法と、その計算プログラム「DC-DFTB-K」の機能拡充と超並列化を継続した。また、これまでに予備的検討を行ってきたアミン吸収液による二酸化炭素化学吸収反応について、代表的な吸収液の性能を評価するとともに、「京」を用いて大規模系の化学反応シミュレーションを実践した。

[実施内容(計算モデル)]

DC-DFTB-K の高度化では、弱い相互作用を適切に記述するための経験的分散力補正項の導入、荷電系や水素結合系に対する精度の改良に成功した DFTB3 法の実装など理論面の機能拡張を行った。また、DFTB 計算の収束アルゴリズムや MD 計算の熱浴を追加し、様々な計算条件に柔軟に対応できるようにした。さらに、拘束の動力学や補間を用いた初期推測電荷の改良によるシミュレーションの高速化など MD 計算の効率化に向けた取り組みも遂行した。

二酸化炭素吸収液の性能評価のために、総原子数約 200 の小規模モデルによる DFTB-MD を 100 ps 実行し、実験で広く用いられているアミン 5 種類(AMP, MEA, PZ, IPAE, MDEA)に対してそれぞれ 100 本のトラジェクトリを解析した。大規模系の二酸化炭素化学吸収シミュレーションでは、総原子数約 2,000 の中規模単一アミン溶液モデル 5 種類と、総原子数約 10,000 の大規模混合アミン(AMP+PZ)溶液モデルを重点的に扱った。

[並列計算の方法と効果(性能)]

DC 法は、全系をいくつかの部分系に分割して計算を行う方法である。各部分系の計算は独立しているため部分系間を MPI、部分系内部を OpenMP でハイブリッド並列化することにより高い並列化効率を達成できる。MD

計算における部分系の決定では立方体グリッドを用いた自動分割が簡便である一方、原子位置が時々刻々と変化するため各部分系に含まれる原子数にばらつきが生じたことに由来するロードバランスの変化が並列性能低下の問題点として残っていた。そこで、部分系と周囲の環境の効果として加えられるバッファ領域からなる局在化領域の基底関数の数を用いて、各 MPI プロセスへ割り当てられる部分系の計算負荷を均等化するアルゴリズムを開発し、MD 計算全体のパフォーマンス改善に成功した。

また、DFTB計算でコストのかかる電荷間のクーロン相互作用に関連する項の部分系当たりの計算量を削減可能となるようプログラムを改良した結果、クラスターモデルで従来の3倍弱、周期境界条件(PBC)モデルで約60倍の高速化を達成した。立方体セル中に密度 1.0 g/cm^3 となるよう水分子を配置したクラスターモデル系によるベンチマーク計算の結果、「京」16,000 ノード (128,000 コア) 利用時の原子数に対するDFTB計算時間のスケーリングは、線形に近い $O(N^4)$ となることがわかった。この時水50万分子系のエネルギー1点計算は42.4秒で完了し、DC-DFTB-Kプログラムはナノスケール系の化学反応シミュレーションの実現に高い性能を備えていることを実証した。

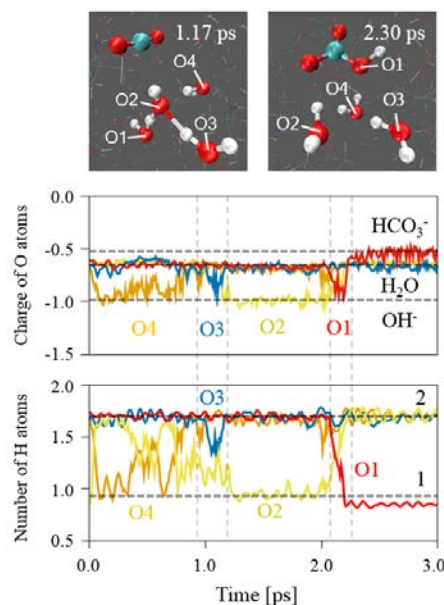


図 重炭酸イオン生成による二酸化炭素吸収反応機構の解析

[研究成果]

アミン吸収液による二酸化炭素の吸収過程では、双性イオンを形成する反応と重炭酸イオンが生成する反応を確認した。双性イオン形成反応では、PZ が他のアミン種と比較して二酸化炭素と選択的に反応する特徴を示した。重炭酸イオン生成反応は、塩基性条件下水のネットワークを介したプロトンリレーを経る機構であることが構造的、電子的な解析から明らかとなった(図)。一方、吸収された二酸化炭素が加熱により分散される過程では、反応する2分子が静電相互作用により接近し、反応に最適な配向となるまで衝突を繰り返した後に二酸化炭素の脱離とアミンの再生が起こることが観測された。この過程は重炭酸イオンからの二酸化炭素脱離がカルバメートからの脱離よりも優位に進行することが拡散係数との相関から示唆された。

総原子数約10,000の大規模シミュレーションは、プログラムの高効率化により「京」840 ノード利用時に約18時間で1 psのトラジェクトリを計算することができた。十分なシミュレーション時間およびトラジェクトリ数が求めた後、大規模モデルにより初めて議論が可能となる反応の同時多発性やアミンの pK_a 依存性などに関する検討を行っていく予定である。

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(京大)、藪下聡(慶應大)、小関史朗(大阪府大)

[研究の背景と目的]

非線形外場応答分子は、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期待されており、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。また、光機能分子の開発では、理論の精密な情報が不可欠であり、環境場を考慮した大規模系の励起状態を記述する高精度電子相関理論が必要である。本課題では、これら非線形外場応答分子や光機能分子の光物性と分子

設計に関する研究を行ってきた。本年度は主に非線形外場応答分子に関する研究について報告する。

[実施内容(計算モデル)]

非線形光学(NLO)分子の設計では、系の開殻性と第二超分極率 γ の構造-特性相関に関して研究を進め、対象としては、(i)高周期典型元素を含んだ4員環化合物、(ii)金属-金属結合を含むマルチラジカル系、(iii)X-p-X 型分子内電荷移動(ICT)系、(iv)1,3-ジラジカル系、(v)チアジラジカル分子集合系、について研究した。一重項分裂(SF)に関する研究では、効率のよい SF 候補分子の探索を行い、また、SF における振電相互作用の効果を検討するため、テトラセン二分子からなるSFの最小モデルを構築し、二量体での振電相互作用を算出した。さらに、その化学的起源を明らかにするため、振電相互作用密度(VCD)解析を行った。

[並列計算の方法と効果(性能)]

OpenMP による高並列化を進めており、従来計算が不可能であった大規模共役分子系の理論計算が実現されている。また、励起状態の溶媒効果や電子共鳴状態の理論計算についても、並列化を行った。さらなる高並列計算アルゴリズムの開発を行っている。

[研究成果]

高周期典型元素を含んだ平面四員環化合物は、一重項開殻性をもつことや構成元素・置換基の変更といった化学修飾によって開殻性を制御できる可能性がこれまでに指摘されてきた。そこで cyclobutane-1,3-diyl, Niecke-type, Bertrand-type の典型的な3つのタイプの四員環ジラジカル化合物(図1)についてモデル系を構築し、 y と γ の相関ならびに化学修飾が開殻性に与える影響を体系的に検討した。その結果、 y と γ の相関については同等のサイズを有する系において、中間的な一重項開殻性を示す系が閉殻系や完全開殻系に比べて著しく大きな γ をもつこと、同等の開殻性においてはNiecke-typeがBertrand-typeよりも大きな γ を示すことが明らかになった。また、化学修飾が開殻性に与える影響については、電荷分布、軌道相互作用や共鳴構造式から定性的な説明が可能であることを明らかにした[1]。

様々な機能性物質として期待される1次元遷移金属鎖について、鎖長方向の γ の鎖長(核数)依存性について調べた。図2に $2n$ 核系($n=1-4$)における γ/n の R 依存性を示す。 n の増加とともに γ/n の最大値(γ_{\max}/n)は著しく増大することがわかる[1080 a.u.(二核)→17000 a.u.(四核)→69700 a.u.(六核)→466000 a.u.(八核)]。これは γ_{\max} の著しい鎖長依存性に由来している。一方、 R_{\max} は鎖長の増加に対して短くなる[2.8 Å(二核)→2.6 Å(四核)→2.6 Å(六核)→2.5 Å(八核)]。この顕著なNLO物性の鎖長依存性は、 $d\sigma$ 中間開殻性の遷移金属鎖を有する多核錯体が三次NLO化合物として大きな可能性を秘めていることを示唆している[2]。また、2核金属錯体においてアキシアル型リガンドのジラジカル因子 y と非線形光学効果に与える影響についても検討し、小さい y 領域で γ が負の極大をとることを新たに発見した。さらに、中間 y 領域では正の γ の極大を取り、リガンド無しの場合に比べて、30倍もの増大が見られた[3]。

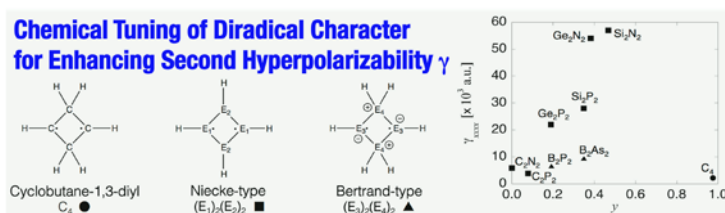


図1. 四員環ジラジカル化合物のジラジカル性の制御とNLO物性

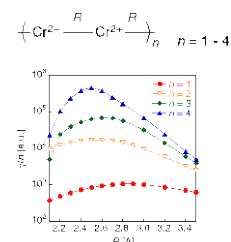


図2. 1次元開殻一重項 Cr^{2+} 鎖の γ/n

Si、Ge二置換パラキノジメタンは無置換パラキノジメタンに比べ、非常に強い対称D- π -D性と中間的な開殻性を有し、結果として約7-8倍の第二超分極率 γ (分子レベルでの三次非線形光学効果)を示すことが分かった。この結果は、開殻性を示しうる共鳴構造を持ちながら、ほぼ閉殻の π 共役炭化水素骨格のラジカルサイトに高

周期典型元素を導入するという全く新しい設計指針の構築を可能とした[4]。

近年、シクロペンタン-1,3-ジラジカル構造を有する中間体の C2 位への電子吸引性置換基 X (= OR, F) の導入により、Through-bond 軌道相互作用に起因する一重項状態の速度論的安定性の増大が広島大学の安倍らにより実験的に明らかにされた(図 4)。シクロペンタン-1,3-ジラジカル化合物の開殻性と非線形光学(NLO)特性との相関を密度汎関数法により検討し、電子吸引性置換基の導入により軌道相互作用を通じて開殻性が中程度となること、その結果として三次 NLO 特性の著しい増大が得られることが明らかになった。ホモリティック結合生成-開裂反応の基本的な中間体である 1,3-ジラジカル化合物の構造-NLO 特性相関が見出された[5]。

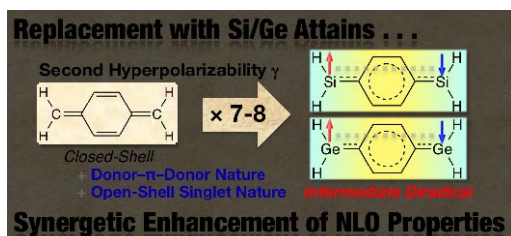


図3. 二置換パラキノジメタン系における第二超分極率の相乗的増大

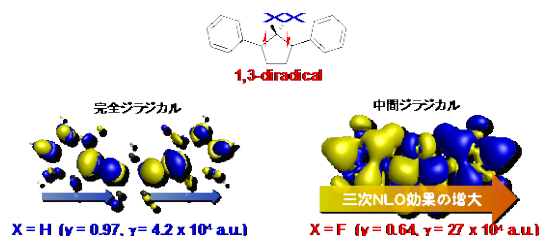


図4. 1,3ジラジカル化合物の開殻性と3次NLO特性

図 5 に示すチアジル分子 DTDA の多量体は分子間距離の伸長にもなって開殻性が増大し、結晶構造での分子間距離では中間的な開殻性を持つことが明らかとなった。 γ は分子間距離に対して顕著な依存性を見せ、中間的な開殻性を持つ領域で γ のピークを持った。一方で最高スピン状態や閉殻系のベンゼンを対照系として検討したが、分子間距離に対する依存性は殆ど見られず、 γ の値も開殻一重項性をもつ系よりも小さくなった。また、UCCSD(T)の計算結果との比較により LC-UBLYP($\mu=0.33$)が分子間距離-開殻性-第二超分極率の相関について信頼性の高い汎関数であることが明らかとなった。

テトラセン二量体の振電相互作用を算出したところ、1000-1700 cm^{-1} の高振動数領域に大きなHolstein couplingを持つ炭素-炭素伸縮振動モードが、また60-800 cm^{-1} の低-中程度の振動数領域に大きなPeierls couplingを持つring breathing振動モードなどが見られた。特に、SFの終状態であるTT状態のHolstein couplingについて、同じく始状態である S_1S_0 状態のPeierls couplingの二倍という大きな値を持つことがわかった。VCDによる解析から、これの大きさはTT状態の二電子励起的な性質に起因していることを明らかにした(図6)。こうした高振動数の振動が S_1S_0 -TT状態間のエネルギー差を有効的に小さくすること、また、低振動数の振動モード由来の状態間の相互作用のゆらぎ(Peierls coupling)が高速なSFのための駆動力となっている可能性を示唆した。

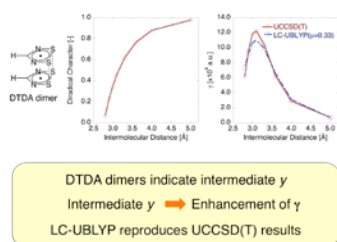


図 5. チアジル分子(DTDA)二量体における分子間距離、開殻性、および第二超分極率の関係

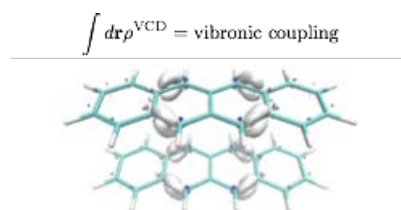


図 6. テトラセン二量体の 1455 cm^{-1} 伸縮振動に対応する振電相互作用密度(VCD)

エネルギーマッチング条件を満たす SF 候補分子の探索においては、前年度から引き続き、窒素原子置換の効果を検討し、縮環共役分子のアセン類についてサイズと窒素置換による開殻性と励起エネルギーの関係を共鳴構造や芳香族性と関連付けて明らかにした[6]。

関連論文リスト

1. H. Matsui, K. Fukuda, S. Takamuku, A. Sekiguchi, M. Nakano, *Chem. -Eur. J.* **21**, 2157 (2015).
2. H. Fukui, S. Takamuku, T. Yamada, K. Fukuda, T. Takebayashi, Y. Shigeta, R. Kishi, B. Champagne, M. Nakano, *Inorg. Chem.* **53**, 8700 (2014).
3. T. Yamada, S. Takamuku, H. Matsui, B. Champagne, M. Nakano, *Chem. Phys. Lett.*, **608**, 68 (2014).

4. K. Fukuda, T. Nozawa, H. Yotsuyanagi, M. Ichinohe, A. Sekiguchi, M. Nakano, *J. Phys. Chem. C*, **119**, 1188 (2015).
5. R. Kishi, Y. Murata, M. Saito, K. Morita, M. Abe, M. Nakano, *J. Phys. Chem. A*, 118, 10837 (2014).
6. S. Ito, M. Nakano, *J. Phys. Chem. C*, **119**, 148 (2015).

2. 2. 1 当該年度(平成26年度)における研究成果

2. 2. 1. 1 研究開発課題概要

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】

太陽光、熱、水素やハイドレート、バイオマスなどの一次エネルギーを電気エネルギーあるいは二次エネルギーに変換する過程をシミュレートすることにより、その物質科学的な機構解明を行うと同時に、実験研究者や企業研究者と共同でエネルギー変換デバイスの新規材料探索・設計指針に寄与する知見を獲得する。また、研究に用いたアプリの実験・開発研究者への普及を促進して、間接的に「京」の成果の産業への貢献を行う。これらの活動を通じて、産業につながるシミュレーションを行うコミュニティの醸成、若手研究者の育成を行い、継続的・持続的に活動を行う基盤を構築し、将来の発展につなげる。これらの目的のために本年度は以下のような活動を行い、成果を得た。

リチウムイオン二次電池および固体高分子形燃料電池の元素戦略的研究を国のプロジェクトと共同で行い、リチウムイオンのナトリウムイオンによる代替、白金電極触媒のジルコニアによる代替の実現を目指したシミュレーションを行い、知見を得た。前者においては新規の濃い電解液の優れた還元耐性の理由、後者においてはジルコニアの酸素空孔と窒素不純物による活性化向上の理由に関する知見を得た。また次世代二次電池候補である全固体電池とリチウム空気電池に関するシミュレーションを行い、前者に関しては、緩衝層の導入による界面抵抗低減機構の解明を行い、後者に関しては、電解液の違いによるリチウムの析出とリチウムイオンの拡散の影響に関する知見を得た。また、これらのシミュレーションを可能にするための手法開発にも注力した。

メタンハイドレートに関するシミュレーションからはハイドレートの融解と生成機構の解明が行われ、メタンを安定かつ高速に取り出すための知見を得た。メタンの分離に関する新たなメカニズムが発見され、ハイドレートが純粋と接しているときと食塩水に接しているときでは気泡発生の起こり方やメタンの分離速度の違いが現れることなどが示された。

有機太陽電池の変換効率の向上のためには誘電率の向上が必要であるため、誘電率を高めるための仮想物質設計を行い、理論上、比誘電率を 14 程度にできることを示した。有機無機ペロブスカイトのキャリアの有効質量やキャリアの緩和過程に関する電子論的な計算を行い、知見を得た。色素増感太陽電池に関しては、励起状態の寿命を密度汎関数理論の枠内で計算する手法を開発し、チタニア表面での吸着分子の寿命の定量計算が可能であることを示した。

バイオマス利用に向けた酵素反応を解析するためのプログラム開発を継続的に行い、セルロースの分子認識のための溶媒和理論である 3D-RISM の高度化、CBM とよばれるセルロース分解酵素への適用を行った。

【部会活動】

シミュレーション課題連絡会を 1-2 ヶ月に一度の割合で開催し、重点課題5内での成果に関する情報交換を行った。この会合では重点課題5のメンバーに加えて、東芝の理論研究者、千葉大学の星先生(実験)が参加している。重点課題6と産総研メタンハイドレートセンターと共同でシンポジウムの開催、情報交換を行った。

2) 研究開発課題

i) 重点課題 5: エネルギー変換の界面科学

[代表者] 杉野修(東京大)

[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)、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)

[研究の背景と目的]

リチウムイオン二次電池(LIB)や固体高分子形燃料電池(PEFC)に代表される化学結合エネルギーと電気エネルギーの変換に関わる計算物質科学、特に計算界面科学を発展させ、電池開発につながるような成果創出につなげるのが本研究の目的である。最近、電池開発が SPring-8 に代表される大型実験施設等での微視的測定により加速されつつあるが、さらなる加速が計算機シミュレーションからもたらされることが強く望まれている。その可能性を実証すべく、開発企業と大学等の実験研究室が関わる国のプロジェクトと協働で、実践的な問題に対する計算界面科学的課題を解決するのが本課題の特徴である。

二次電池、燃料電池共にすでに自動車用、家庭用に製品化され、本格的な普及のための耐久性向上やコストの低下、希少元素を使わない元素戦略が目下の最重要課題となっている。さらに今後は、電池容量の拡大や充放電・発電の高速化・高出力化を果たし、蓄電社会や水素社会での多様な用途に適合する電池を市場投入させることが重要な課題となっていく。現在、国のプロジェクトにおいては、リチウムを使わない二次電池(元素戦略)や白金を使わない PEFC (NEDO) の開発が進められ、還元雰囲気耐える電解液や白金並みの活性を持つ電極触媒の探索が行われている。また、全固体電池やリチウム空気電池の開発も進められている。本課題ではこれらの開発に伴う問題点に対して、その解決につながりうる知見を計算から獲得することを目標に研究を行う。

電池に関わる膨大な物理的・化学的事象を記述するためのシミュレーション手法には、数十ナノメートルを一つの格子点として粗視化して水や燃料の輸送を調べる巨視的なものから、それより何桁も細かい格子点を用いて電子移動のレベルから調べる微視的なものまで多種多様なものがある。今回、国のプロジェクト等で特に強く求められていると判断されたのは、電極・電解質界面での活性や劣化に関わる電子論的な微視的シミュレーション(化学反応を伴う非平衡ダイナミクス)であり、ここに開発企業がノウハウを有しない未開拓領域がある。「京」の時代においては、密度汎関数理論に基づく従来型の結合エネルギー計算に加えて、電極界面に電気二重層が形成された状況下で起こる反応を追えるリアルなシミュレーションが行われるべきであり、その両面からアプローチして初めて実験家から信頼される理論に近づくことができる。その考えの下、シミュレーション手法の開発にも注力して研究を行っている。昨年度までに、電極に電位差を印加し、さらに電位を制御するためのアルゴリズムを提唱して STATE 等に導入した。また、溶媒揺らぎを考慮に入れて反応自由エネルギー障壁を効率的に計算するためのアルゴリズムを開発して stat-CPMD 等に導入した。今年度はさらに、これら第一原理計算結果から原子間力を抽出して、空間的・時間的スケールのより大きな計算につなげるための方法(マルチスケール法)を改良し、電極反応による核発生などに関するシミュレーションを可能にした。

これら新旧の計算手法を行い、実験プロジェクトと連携しながら問題解決型のシミュレーションを遂行して、電池開発に資するシミュレーションの可能性を探るのが本課題である。

[実施内容(計算モデル)]

実施した計算は次のとおりである。(1) 3次元周期境界条件の下でモデル化した電解液に対するリチウムイオン二次電池の高濃度電解液の還元反応の計算、(2) 電位差印加条件の下でモデル化した白金電極表面(Pt(111),Pt(322))と酸性水溶液(過塩素酸等)界面での水の解離のシミュレーション、(3) 白金代替触媒 ZrO_2 での酸素還元反応のスラブモデル(真空表面モデル)を用いた第一原理分子動力学計算およびバルク固体モデルを用いた不純物効果に関する全エネルギー計算、(4) 全固体電池の固固界面の計算に関する全エネルギー計算、(5) リチウム空気電池の核発生反応およびリチウムイオン輸送係数に関する第一原理計算と力場計算。

[並列計算の方法と効果(性能)]

平面波基底を用いた第一原理分子動力学計算を基本としているので、その並列化が重要である。並列性能に関しては既に報告しているとおり、2400 原子系を用いた一点計算の場合、3840 ノードを用いた実効効率が29%出ている。これは、エネルギーバンドと逆格子ベクトル、ブロッホ波数の3軸を並列軸にとって達成したものであるが、これに加えてメタダイナミクスやブルームーン法などを用いて自由エネルギー計算を行う場合には、レプリカや反応経路点を第四番目の並列軸にとって計算することが可能になり、実効効率を落とさずに使用ノードを100 倍程度増やすことが可能である。

[研究成果]

(1) リチウムイオン二次電池の高濃度電解液: 高濃度 $LiN(SO_6CF_3)_2$ (LiTFSA)塩/アセトニトリル(AN)溶液を用いるとAN溶媒の還元耐性が向上することは既に報告したが、その機構に関しては未解明であった。そこで、還元環境下での反応自由エネルギー計算を行ってその理由を明らかにした。鍵はTFSAとANの還元反応の起こりやすさの違いにある。高濃度下ではTFSAアニオンの反結合性軌道に電子が移動して、TFSAは自発的に分解する。その分解生成物が負極界面に堆積すること(その結果安定なSEI膜の生成につながっていると推定されること)は実験からも確かめられた。しかし低濃度下ではAN自体が二電子還元を受けて分解して電解液劣化が起ってしまう。すなわち、高濃度化ではTFSAが犠牲的に還元された結果ANの分解が防げていたが、低濃度化ではそれが起こらないのが高濃度下のメリットであることが突き止められた。【元素戦略での山田グループ(実験)との共同研究】

(2) 燃料電池白金電極表面での酸素還元機構: 白金表面での酸素還元反応が Pt(322)上で高活性になることが実験的に示されているが、その機構に関してはよくわかっていない。そこで、水素イオンと過塩素酸イオンを導入した電極界面模型を用いて、酸素還元を逆方向から(すなわち逆反応である水の解離反応から)調べてその活性点を探った。シミュレーションを行うと、Pt(322)のステップ上で水が解離し、生成された OH はブリッジサイトに吸着する事象を見いだすことができた。なお、この OH 吸着構造は超高真空表面上での再安定な吸着構造と一致する。さらにシミュレーションを続けると OH は解離して O として吸着して安定化する。このステップエッジでの吸着 O 原子を経由する反応が重要であると考えられる。また、Pt(111)での酸素還元反応の反応経路に関して、これまでの第一原理計算および種々の実験結果に基づいて運動論的模型を作り、反応機構に関する考察を行った。酸素濃度に対する反応次数が電位に依らずにほぼ1であるという実験結果があり、この事実と整合性を保持するためには、反応機構が解離型と会合型が競合しており、平衡電位付近では会合型が優勢になるという結論が得られた。【一部、星グループ(実験)との連携研究】

(3) 白金代替触媒 ZrO_2 での酸素還元: ZrO_2 を用いた燃料電池電極開発が進んでいる。酸素空孔と窒素不純物の導入により活性の向上が図られているが、活性向上の機構についてはよくわかっていない。そこで反応の中間体や反応経路に関する情報を得るために第一原理分子動力学計算を行った。計算の結果、最安定表面

は表面のO原子が水素化されている構造であり、それが酸素分子と反応して表面に酸素空孔ができる反応が最も起こりにくいことがわかった。このことは酸素空孔を安定化することが活性を上げるためには必要であり、それを実現するような材料設計の重要性を示している。ここに窒素不純物を導入すると、酸素空孔から窒素原子に電子が移動して正の荷電状態として酸素空孔が安定化することがわかった。すなわち、窒素原子の導入により活性化向上がもたらされることが示された。【NEDOプロジェクトでの太田グループ(実験)との連携研究】

(4)全固体電池の固固界面の計算に関する全エネルギー計算:第一原理計算を用いて全個体酸化物正極-硫化物電解質界面における界面原子構造を調べ、硫化物側の空間電荷層の成長が正極界面抵抗の主因であり、緩衝層を導入することによりこの空間電荷層効果を軽減することを示した。この研究は、緩衝層の導入による全固体電池の高性能化を促進する結果となっている。【物材の高田グループ(実験)との共同研究】

(5)リチウム空気電池の核発生反応:非水系リチウム空気電池の放電反応を抑制する反応としてリチウム酸化物析出が大きな問題となっており、その初期過程である Li_2O_2 クラスタ生成過程およびクラスタの電極への吸着反応を調べた。計算に用いた電解液は有機溶媒DMSOとそれと比較のためのTFSIである。ファンデルワールス力を扱える密度汎関数を用いて予備のシミュレーションを行い、その結果を、遺伝的アルゴリズムを用いて力場関数にあてはめ、拡張アンサンブル法に基づく古典分子動力学計算を行った。 LiO_2 が対を生成する反応およびその金電極への吸着反応に対する活性化自由エネルギー障壁を計算したところ、それがDMSOに対して低いことがわかった。DMSOでは問題となる反応がTFSIより起こりやすいことが分かった。一方、リチウムイオンの拡散係数もTFSIより大きく、その意味で望ましい性質を持っていることが分かった。すなわちクラスタ生成の活性とリチウムイオンの拡散にはトレードオフの関係があり、それを克服するための材料開発が必要であることが示された。

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

【代表者】 田中秀樹(岡山大)

【担当者】 田中秀樹(岡山大)、甲賀研一郎(岡山大)、三浦伸一(金沢大)

【研究の背景と目的】

エネルギー資源として、またメタンや水素の貯蔵手段として、水素・メタンハイドレートが注目されている。本課題は、分子シミュレーションによりこれらのハイドレートの融解と生成の過程を解明して、実用に対する指針を得ることを目的とする。水溶液中のメタンハイドレートの分解過程を京コンピュータによる大規模な分子動力学計算により解析する。様々な温度条件における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。

【実施内容(計算モデル)】

分子動力学計算にはMODYLASパッケージを用いた。水で満たされた立方体セルの中に、 $9 \times 9 \times 9$ のユニットセルからなるメタンハイドレートを置いた状態を初期構造とした。系はメタン 5832 分子、水 33534 分子で構成される。これは従来の典型的なハイドレート分解の計算と比べ約 10 倍の大きさである。このハイドレートの周囲に 2 倍以上の分子数の水溶液を配置した。水分子には TIP4P/2005 モデル、メタン分子には OPLS モデルを採用した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

本研究課題は、高並列計算プログラムの独自開発を目的としていない。京におけるすべての計算は、名古屋大学、岡崎グループにより開発された MODYLAS パッケージを用いて行った。多くの分子動力学パッケージでは、長距離クーロン力を Particle Mesh Ewald 法で扱う。これに対し、MODYLAS は Fast Multipole Method を用いることで通信に時間のかかるフーリエ変換を避け、高並列における高効率を実現している。また、一部の計算では GROMACS を利用した。計算のほとんどは 512 ノード並列で行った。実行効率は約 24 %である。

[研究成果]

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理論的予測を行った。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り、融解速度の外部条件依存性の検討を実施した。具体的には、MODYLASを用いて数十万原子以上の大規模またサブ μ 秒の長時間シミュレーションを実施し、メタン分離の速度について新たなメカニズムを見出した。その中で、ハイドレートと接する界面が水である場合には、メタンの過飽和水溶液とそれから生じる気泡が、重要な役割を果たしていることを指摘してきた。これに対して、より現実的な条件であるハイドレートがNaCl水溶液と接する場合の、同条件下のシミュレーションを実施した。その結果、融解機構はNaClの存在により大きく変化するが、その変化の仕方は一様ではなく、分解速度の抑止と促進の両方に寄与していることが判明した。この中で、高濃度のNaCl水溶液中では、解離速度が促進され、また気泡の生成が界面で起きていることを見出した。これは、電解質水溶液中でのメタンの高い化学ポテンシャル(低い溶解度)により起きているが、そのダイナミクスについての知見は「京」を用いてははじめて得ることができた。さらに、THF(tetrahydrofuran)の融解に関して、一方向に融解が起こるような適切な境界条件を設定することにより、幾つかの境界となる面の安定性についてのシミュレーションを実施し、面依存性が大きいことが確認された。

産総研メタンハイドレート研究センターとは、共同でシンポジウムを開催したほか、種々の情報交換を行った。これにより、実用面での課題に関する情報を得て、京によるシミュレーションとその解析法に活かした。

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

[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(北大)、立川仁典(横浜市大)、三浦伸一(金沢大)、河津励(CMSI 研究員)、David Sulzer(CMSI 研究員)

[研究の背景と目的]

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 表面と色素分子・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(計算モデル)]

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エキシトン・ダイナミクス、また最近 20%の変換効率を達成した(2)有機無機ペロブスカイトの電子物性と光電荷移動の機構、さらに(3)色素増感太陽電池の改良に向けた励起状態寿命に関しての理論的解析を行った。

[並列計算の方法と効果(性能)]

半経験的分子軌道法にもとづき、大規模励起状態計算を可能とするプログラム MolDS を東大情報基盤センター FX10 に移植し、1 万コアを超える計算が可能になり、12544 コア(784 ノード×16 コア)における計算で 5.6TFLOPS, 実行効率 3.0%を達成している。この MolDS プログラムを用いて有機薄膜太陽電池における 1776 原子系界面の励起状態計算を行った。

[研究成果]

(1) 電子供与分子/電子受容分子の異種界面でのエキシトン・ダイナミクス

有機系太陽電池の変換効率が低い主要因として、有機物材料の誘電率が小さく、光吸収により生成した電子-正孔対がドナー・アクセプター界面へ拡散する過程、あるいは界面電荷移動状態において容易に再結合することが考えられる。そこで高誘電率有機物の理論的デザインを行った。デザインコンセプトとして、二次元的にパイ共役を展開することにより、分子の分極率を増加させた。具体的に、主鎖としてポリベンゼン環を炭素二重結合あるいは炭素三重結合により結合させ、側鎖にポリチオフェン系を導入した。クラウド・モソッティの関係式を用いて、密度汎関数法計算に基づく分子分極率から(電子的)誘電率を評価し、比誘電率が14程度に及ぶ有機材料の設計に成功した。これら有機物をドナー、PCBMをアクセプターとして光吸収スペクトルの計算を行い、界面電荷移動型電子遷移を確認した。

(2) 有機無機ペロブスカイトの電子物性と光電荷移動機構

最近 20%に迫る変換効率を達成した有機無機ペロブスカイトの電子物性と光電荷移動の機構に関しての理論的解析を行った。まずメチルアンモニウム・ヨウ化鉛ペロブスカイトについて電子、正孔の有効質量がシリコンのそれらと同程度に小さいことを明らかにし、ambipolar な電子特性を議論した。さらに ambipolar な特性の発現に、メチルアンモニウム・カチオンが重要な役割を果たしていることを明らかにした。一方、キャリア、特にホールバンド内緩和過程に関連した過渡吸収実験の結果について、キャリア-フォノン相互作用を考慮した多体摂動論に基づいた自己相互作用エネルギーの解析から議論した。

(3) 色素増感太陽電池の改良に向けた励起状態寿命の計算

太陽光光子はTiO₂ナノ粒子に吸着した色素分子を励起し、励起された電子は酸化チタンの伝導帯へ注入され、光電流を生成する。したがって光電流は光子吸収と電子注入効率で決まる。そこでTiO₂粒子に吸着した分子の励起状態の寿命を、時間依存密度汎関数法に対する複素自己エネルギー補正を計算する手法を開発した。得られる励起状態は複素エネルギーを持ち、その虚部が寿命と電子注入速度を与える。半無限結晶でモデル化したTiO₂表面に吸着したブラックダイに適用したところ、色素から半導体への電荷移動励起は、大きな振動子強度を持ち、9フェムト秒の寿命が得られ、これまでの非経験的計算結果を良く再現した。

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

[担当者] 吉田紀生(九大)、平田文男(立命館大)、森田明弘(東北大)

[研究の背景と目的]

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。

[実施内容(計算モデル)]

1) 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

セルロース分解酵素は carbohydrate binding domain (CBM) とよばれる部位でセルロースを選択的に認識し、その後分解反応を行う事が知られている。したがって、CBMの動作原理・選択性の分子論を理解することは高効率酵素のデザインに寄与すると期待できる。CBM-セルロースの結合には、タンパク-リガンド間相互作用の精密な記述と、分子認識に伴う脱水和の自由エネルギー変化の両方を扱える理論が必要である。そこで、本年度は、タンパク質-リガンド相互作用の全電子状態計算を可能にするフラグメント分子軌道法と、生体分子の溶媒和理論である 3D-RISM 法を組み合わせた手法(FMO/3D-RISM)の定式化、変分的導出と高効率プログラムの開発を行った。

2) CBM の糖鎖認識におけるイオンの役割の解析

CBMはその糖鎖認識機構の違いによって、いくつかのファミリーに分類される。我々はCBMの一つであるCBM36に着目し、その糖鎖認識機構の解析を行ってきた。CBM36は糖鎖認識部位にカルシウムイオンをもち、このイオンが補因子として働くと考えられているが、その分子論的機構についてはまだ知られていない。そこで、本研究では、分子シミュレーションにより、CBM36、糖鎖(キシラン)およびカルシウムイオンの構造サンプリングを行い、得られた構造に対して溶媒和自由エネルギーを3D-RISM理論を用いて評価し、糖鎖認識におけるイオン種による分子認識能依存性、認識に伴う脱水和および溶媒再配向の効果、そして、糖鎖の選択性について解析を行う。

[並列計算の方法と効果(性能)]

昨年度までに並列化を行った3D-RISMプログラムおよびGPGPU用に開発された3D-RISMプログラムを用いた。並列手法・計算性能は既報の通りである。

[研究成果]

1) FMO法と3D-RISM法の連成手法の変分的定式化と、効率的に相互作用を計算するプログラム開発を行った。成果はJ. Chem. Phys.誌に掲載された。

2) CBM36のアポ状態およびホロ状態の、分子シミュレーションによる構造サンプリング、および得られた構造に対する3D-RISM計算を行った。現在は、得られたデータを元に解析に取り組んでいる。

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

[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)

[研究の背景と目的]

高い熱電変換効率 ZT を示す有機材料が最近見出されている。PEDOT:PSS などの導電性高分子やカーボンナノチューブと高分子のコンポジット材料は既に 0.3 程度の ZT を室温で示している。ビスマス・テルルが室温で高々 0.9 程度の ZT しか示さない事を考慮に入れると、まずまずの数値である。有機熱電材料の本格的な研究の歴史は非常に短いので、系統的な探索により更に高い性能を持つ有機熱電材料の開発も可能であろう。有機材料には元素性の毒性は無い事、軽量である事、安価である事、プリンタブル技術を用いたフレキシブル化が容易である事等の独自の利点も多く、用途拡大も期待出来る。この様な最近の進展を踏まえ、経産省・未来開拓プロジェクト「未利用熱エネルギー革新的利用技術開発」で有機熱電材料開発の一つのフォーカスを当てた研究が進行中である。本課題担当者の内、産総研の2名は経産省プロジェクトに加わり計算シミュレーションを用いた有機熱電材料の探索スクリーニング研究を実施している。研究費の配分がない本スパコン戦略プロジェクト(HPCI)課題では、HPCI 計算機上での第一原理計算手法の精密実装と、プログラムの並列化による大規模数値計算能力の向上等、限定的な目標に留める。

[実施内容(計算モデル)]

有機薄膜材料の熱電変換効率 ZT ($ZT = G^2 S T / (\kappa_e \kappa_p)$, Gは電気伝導度, Sはゼーベック係数, κ_e は電子熱伝導度, κ_p はフォノン熱伝導度, Tは温度)を、量子伝導理論に基づき、電気的および熱的な界面抵抗を含めて第一原理的に計算する。これらの計算の内、フォノン熱伝導度 κ_p は我々独自のシミュレーション基礎理論に基づいた計算を行う。異種界面も取り扱えるこの理論に基づき ZT の完全な第一原理計算を行えるのは我々のグループ以外にない。既往の計算手法では、カーボンナノチューブ電極に挟んだカーボンナノチューブの計算のような限定的・非現実的な計算しか出来ない。

[並列計算の方法と効果(性能)]

現在、上記の伝導計算プログラムを実空間大規模第一原理電子状態計算プログラムと融合するコード作業を実施中である。

[研究成果]

昨年までに発表した研究成果【H. Nakamura, T. Ohto, T. Ishida, and Y. Asai, J. Am. Chem. Soc. 135, 16545 (2013)】においては、分子内部力場に対して剛体近似を用いた上でのフォノン熱伝導度の計算が行われていたが、分子内部力場も第一原理計算で求め、それに基づくフォノン熱伝導度の計算を行い、その成果を取りまとめて論文発表を行った。【M. Bürkle, T. Hellmuth, F. Pauly, Y. Asai, Phys. Rev. B 91, 165419 (2015)】実験との精密な比較検証に関しては、C82 分子やその金属内包化合物のゼーベック係数と電気伝導度に関して、単分子ブレイクジャンクション実験を行えるグループとの共同研究を行った。通常の LDA の範囲では実験と理論計算の一致はそれほど良くなかったが、計算にイメージポテンシャル補正の影響を加える事により、両者の一致はすこぶる良くなった。これらの研究結果は近々科学論文誌に投稿予定である。その他の有機分子や生体分子の熱電を含めた輸送係数に関して幾つかの実験グループと共同研究を行い、それらの成果を論文の形でとりまとめ投稿済みである。このように我々の開発した熱輸送理論やそれに基づく第一原理熱輸送計算プログラムは大変有用であり、世界的に見てもそれ等に対する評価は高いが、そのメリットをより広範な物質・材料に活か

す為、伝導計算プログラムを実空間大規模第一原理電子状態計算プログラムと融合する為のコード作業を実施中である。

2.2.1 当該年度(平成26年度)における研究成果

2.2.1.1 研究開発課題概要

2.2.1.1(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

【研究成果の概要】

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大規模計算技術を「京」の活用を通じて開発・整備してきた。特に実用材料のマルチスケール性が顕在化される諸課題(重点課題と3つの特別支援課題)を介して、その構造や機能を、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で解明し設計するための計算技術の開発、検討を行ってきた。26年度は、重点課題、特別支援課題ごとに計算技術や実行計画を掘り下げて検討するとともに、マルチスケール計算科学の見地から、共同で研究会を行い、またCMRIのシンポジウムに結集して議論を行った。研究会では、前年度に引き続き、大規模第一原理計算をPhase Field法にマッピングする理論、手法についての議論を行い、検討を進めた。

【部会活動】

各課題を掘り下げて検討することを目標とし、各課題で研究会を開催するとともに、CMRIの研究会(兼国際workshop)も開催し、全体の議論を進めた。

以下に、重点課題と全体の研究会の概要を記載する。

26年5月28日 重点課題の第1回研究会(部会全体に公開)、産総研関西センター。

特別講演:尾崎泰助(東大物性研):OpenMXの概要、京での最適化、Fe用の擬ポテンシャルと局在基底の最適化、板倉充洋(原研):転位芯の第一原理計算の方法、Fe中の転位芯理解の現状と課題

26年10月6日 重点課題の第2回研究会(部会全体に公開)、産総研関西センター。

特別講演:山田泰徳(東北大院):クラスター変分法+NEB法による合金の転位挙動、転位ダイナミクス+PFM他、佐原亮二(物材機構):SQS法によるTi-Metal合金の安定構造解析とPhase Field Crystal法への展開

26年11月10-11日 CMRI International Workshop on Multi-scale Computational Materials Science およびCMRI研究会

海外招待講演:Prof. Olson, Materials Genomics, Dr. Spatschek, Dr. Reiter, Dr. Cooper

内容は、Multi-scale, Phase-Field Model等

国内(日本語セッション):福田雅文(高効率発電システム研)、西井俊明(電源開発)

内容は、新規火力発電炉材料開発課題

また、ポスト京プロジェクトの準備会合として、以下の会合に第五部会から多数のメンバーが参加した。

26年6月26日、東北大学東京分室

ポスト京にむけた構造材料の解明や設計の現状や課題について、第五部会のメンバーを中心に発表と議論が行われ、現「京」プロジェクトの完遂が重要であることを確認し、今後の展開について議論を深めた。

2) 研究開発課題

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」

[代表者] 香山正憲(産総研)

[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、石橋章司、原口誠(産総研)、板倉充洋、山口正剛(原研)

[研究の背景と目的]

飛躍的に優れた構造材料の開発は、エネルギー変換機器効率の飛躍的向上、輸送機器の超軽量化による省エネ化、長寿命・高信頼性の大型構造物など、社会基盤を支え、持続可能社会実現のための不可欠の課題である。こうした構造材料は多結晶体であり、種々の析出相や粒界・欠陥・添加元素等で構成される微細組織が機能を支配している。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(計算モデル)]

鉄鋼材料中の典型的な析出相である TiC 析出粒子による強化機構解明のため、Fe/TiC の整合界面と部分整合界面の大規模第一原理計算を行ってきた。析出粒子が小さい時は整合界面で成長するが、粒子サイズが大きくなると歪エネルギー増加のため、界面が不整合な部分整合界面に変化する。その変化の臨界サイズの解明が設計・制御上重要である。実験で観察される TiC(100)/Fe(100)の整合界面と部分整合界面を OpenMX コードによるオーダーN 法第一原理計算で扱い、さらに粒子サイズに比例する整合界面の歪エネルギーを適当なモデルで扱い、界面エネルギーと歪エネルギーの和を粒子サイズの関数として求める。これまで、4319 原子/セルの大規模第一原理計算を実行することで、整合-部分整合の遷移の臨界サイズが 2.3nm 程度であることが判明した。これは最近の実験観察結果を裏付けるものである。26年度は、こうした界面の水素捕獲能を検討するため、水素の存在する部分整合界面の大規模第一原理計算を試みた。

一方、TiC(100)/Fe(100)の整合界面での格子 misfit による界面や近傍の歪エネルギーや応力の分布を高精度に探るため、局所エネルギー・局所応力分布の第一原理解析を引き続き QMAS コードで試みた。

鉄鋼材料の微細組織を構成し、且つ機械的性質を支配する要素として、転位に着目し、Fe 中のらせん転位芯の大規模第一原理計算を OpenMX コードで開始している。bcc 金属中では、特にらせん転位が機械的特性を支配する。25 年度までに quadrupolar な並びになるスーパーセルで転位の長範囲の応力を打ち消すことができ、らせん転位芯の基本的な原子・電子構造が再現できることを確認した。26 年度は、Si や遷移金属など添加元素と転位芯との相互作用を詳細に検討した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

「京」において、オーダーN 法第一原理計算を OpenMX コードで行う。本コードは、OpenMP と MPI のハイブリッド並列(8 コアのノード内で OpenMP 並列、ノード間で MPI 並列)である。金属系で OpenMX プログラムを利用する場合、1 コア当たりの原子数が 1 個以上の時に高い並列化効率が可能であった。例えば、TiC/Fe 部分整合界面の 4319 原子セルについては、540 ノードで計算を実施する。また、Fe の転位芯では、転位芯に沿った周期サイズに比例してセル原子数が増える。26 年度は、数原子層の周期で、数百原子セルの計算を行った。

【研究成果】

26年度は、第一に、前年度までに求めた鉄鋼材料中のFe/TiCの部分整合界面構造について、界面の水素捕獲能の大規模第一原理計算をOpenMXコードで行った。析出相との界面が水素を捕獲することで粒界の水素脆化を防ぐ効果を検証する目的である。部分整合界面の各種サイトで安定性が異なることが判明し、界面の局所的な電荷との相関が見いだされた。今後、界面や近傍の欠陥の水素捕獲を計算し、比較することが求められる。一方、整合界面での応力とエネルギー分布の第一原理解析をQMASコードで行い、局所応力や局所エネルギーが界面のFe-CとFe-Tiのコンタクトの様子に大きく依存することを明らかにした。第二に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中の転位芯構造のOpenMXコードによる大規模第一原理計算を進めた。合金成分や添加元素として鉄鋼に用いられるSiなどのsp元素や一連の遷移金属について、それらの原子とらせん転位芯との相互作用を高精度に求めた。その結果、転位芯と強い相互作用がある元素は、実験的にも転位をトラップして強度増加の効果が大きいこと、sp元素は遷移金属と異なり、転位芯の移動過程に大きな効果を持つ(移動過程の準安定構造間のエネルギー差を減少させる)ことが判明した。Siについて、転位論に繋げることにより実験で観察されるSi添加によるFeの機械的性質の変化(低温軟化と高温硬化)が初めて説明できた。第三に、第一原理計算とPhase Field法の連携について、重点課題や第五部会の研究会において、理論的・計算技術的な検討をさらに進めた。特に第一原理に基づくPhase Field法の定式化について、大きな進歩があった。

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 dendrite 組織の大規模数値計算

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

【研究の背景と目的】

多くの実用合金は casting・凝固プロセスを用いて製造されている。製造プロセスの歩留り向上や低コスト化、さらには材料の高機能化・高品質化を達成するために、casting・凝固プロセスにおいて形成する材料組織、すなわち凝固組織を高精度に制御することが求められている。凝固組織の中でも dendrite 組織は多くの合金系で形成する典型的な凝固組織であり、その形成機構やサイズ・形態の制御因子を解明する必要がある。フェーズフィールド・モデルは dendrite 組織の形成過程を記述する強力な計算モデルとして発展してきた。しかし、このモデルの計算コストは高く、対象とできるシステムサイズが dendrite 数本程度に限られてきた。また、インプットパラメーターである高温物性値(固液界面エネルギーや動力学係数等)の実測値や計算値が欠如していることから、実用材料の凝固現象を定量的にシミュレートすることに困難が伴ってきた。

そこで、本特別支援課題では、1)分子動力学法(MD)による凝固現象の高温物性値の算出、2) dendrite 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、3)大規模フェーズフィールド・シミュレーションによる dendrite 集団組織の解析を実施する。平成26年度においては、大規模 MD による核生成現象のシミュレーションと定量的フェーズフィールド・シミュレーションによる dendrite 競合成長過程の解析を目的とした。

【実施内容(計算モデル)】

大規模 MD においては、Finnis-Sinclair ポテンシャルを用いた古典 MD によって Fe 数百万原子のシステムにおいて凝固現象をシミュレートした。また、定量的フェーズフィールド・モデルによる一方向凝固過程のシミュレーションを実施した。

[並列計算の方法と効果(性能)]

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は、ステンシル計算コードの MPI 並列化を実施しており、自然科学研究機構の京用開発サーバ (PRIMEHPC FX10)で、その性能を前年度に既に検証している。

[研究成果]

大規模 MD においては、100 万原子程度の解析によって、純鉄凝固核異方性の発現をシミュレートするとともに固液界面エネルギーや動力学係数といった組織形成を決定する高温物性値の算出法を検討した。また、核生成現象の解析も実施し、過冷度と潜伏期の関係を古典核生成理論と矛盾しない形で算出できることを明らかにした。したがって、本取り組みによって、MD から高温物性値のみならず、核生成頻度に関する情報もフェーズフィールド・シミュレーションに提供しえることが示された。また、2014 年 10 月 1 日から CMSI 拠点研究員として雇用されている Sankar Kumar Deb Nath 氏の協力で、合金系における高温物性値の算出を検討すべく、まずは Al-Cu 合金の液相線温度を系統的に算出することにも成功している。

大規模定量的フェーズフィールド・シミュレーションによって二元系合金の一方凝固過程におけるデンドライト競合成長の解析を行った。従来、熱流方向に優先成長方位 $\langle 100 \rangle$ を有するデンドライトが他のデンドライトを淘汰して成長することが想定されてきたが、本計算によってこの従来の想定とは異なる機構が生じることが示された。具体的には、熱流方向に対して優先成長方位がある程度傾きを持って成長していても、1次デンドライトアーム間隔の調整機構との兼ね合いで、他のデンドライトを淘汰しえることを示し、これは昨今海外のグループによって示された実験事実をよく説明するものであった。

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

[担当者] 西松毅(東北大)、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)

[研究の背景と目的]

近年、省エネルギーの観点から新しい個体冷却素子の開発が求められている。われわれも、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 を使用し、電気熱量効果を直接的にシミュレートし、強誘電体薄膜キャパシタの電気熱量効果による冷却の可能性について研究してきた。さらに、今年度は feram をさらに改良し、強誘電体やその薄膜キャパシタの弾性熱量効果 (elastocaloric effect) を直接的にシミュレートできるようにし、その冷却素子への応用の知見を得ることを目標としていた。

[実施内容(計算モデル)]

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。Linuxマシン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1700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、PbTiO₃、KNbO₃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いる。

[並列計算の方法と効果(性能)]

OpenMPで並列化され基本的にノード内で動作する。高速フーリエ変換には高度に高速化されたFFTWライブラリを用いている。MPI (feram_mpi)によりアレイジョブをMPIプロセスとして実行することも可能である。

[研究成果]

26年度は、直接的に弾性熱量効果を見積もる方法を開発した。具体的には、定温のカノニカルアンサンブル分子動力学計算により、引っ張り応力下の系の平衡状態を得る。その後、外部引っ張り応力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)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ようになった。本feramプログラムを使ってPbTiO₃の弾性熱量効果を予言した論文を発表した。本件などに関して海外の招待講演1、国内の基調講演1招待講演3を含む多数の対外発表も行った。

26年度、feramは上記改造やユーザーの要望などから計5回のバージョンアップを行った。利用講習会も1回開催した。

[出版論文]

1. Jordan A. Barr, S. P. Beckman and Takeshi Nishimatsu: "Elastocaloric Response of PbTiO₃ Predicted from a First-Principles Effective Hamiltonian", J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 024716 (2015), doi:10.7566/JPSJ.84.024716.
2. Jordan A. Barr and Scott P. Beckman: "Electrocaloric response of KNbO₃ from a first-principles effective Hamiltonian", Materials Science and Engineering B **196**, 40-43 (2015), doi:10.1016/j.mseb.2015.02.004.

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

[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)、桑原理一(ダッソーシステムズ・バイオピア(株))

[研究の背景と目的]

平成26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。

また、重点課題との関係で、第一原理計算からのPhase Field法へのマッピングの方法を考案し、そのテスト計算を行う。計算材料科学研究サブ拠点として、10月1日付けで横浜国立大学に拠点研究員1名を配置し、これらの研究課題に取り組む。

[実施内容(計算モデル)]

横浜国大にTOMBO公開サポートWEBシステムを導入し、TOMBOのLDA部分のソース公開を行う準備を行った。また、計算材料科学研究サブ拠点(横浜国立大学)で採用した拠点研究員と協力して、第5部会の重点課題「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」の一環として、第一原理計算をPhase Field法にマッピングする方法に関する研究に着手し、Fourier空間でのPhase Field Crystalへのマッピングを試みている。さらに、TOMBOの開発、応用研究として、バンドギャップやバンド構造を正しく再現できるGW近似に基づく純粋なTiO₂やZnOの結晶や不純物を含む系、およびナノクラスターの全電子スペクトル計算を行い、Bethe-Salpeter方程式を解く精密なXANESスペクトルの試験計算を原子に対して行った。また、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、一酸化炭素と水素からメタノールの生成(COと4Hの反応を中心にして)、鉄の酸化腐食(水酸化鉄IIの生成プロセスに関するさらに詳細なシミュレーションを行う)などの化学反応素過程を調べた。

[並列計算の方法と効果(性能)]

昨年度、TOMBOのベンチマークテストとしてNa90量体のGW計算を物性研のFX10で実行した段階から性能は向上していない。昨年度は、ノード数48と96の2通りで計算したところ、前者では120204秒、後者では64552秒で計算が終了した。このことから、実行並列化率 $\alpha = 99.9896\%$ 、並列化効率 $E_n = 86.2216\%$ であることが測定されている。しかし、GW計算のホットスポットにおいて、画期的な計算工程の短縮が図れることが分かったため、来年度は「京」上でのチューニングを含め、性能向上に向けてプログラムの大幅な改修を行う予定である。

第一原理計算をPhase Field Crystal法にマッピングする方法に関しては、Fortran90を用いて、高速Fourier変換の部分はMPI対応でプログラムを作成中であるが、まだ並列実行には至っていない。

[研究成果]

密度汎関数理論を超えて、多体摂動論のGreen関数法に基づくone-shot GW近似に基づいて、TiO₂やZnOのTOMBOによるバンド計算を行い、ルチル型のTiO₂についてはNb原子を不純物として導入した系の電子状態を計算した。Nb不純物を含むNb_{0.25}Ti_{0.75}O₂の準粒子スペクトルにおいては、TiO₂ホストのバンドギャップ中に深い電子占有Nb不純物準位が現れることを明らかにした(論文投稿中)。

また、自己無撞着GW近似のTOMBOへのインプリメントを完成させるとともに、von der Linden-Horschのプラズモン・ポール近似の範囲内で、Luttinger-Ward汎関数 $\Phi[G]$ を勘弁に評価する方法を発見し、それをインプリメントし、全エネルギー計算を可能とした。そして、そのプログラムを用いてvirial定理(ポテンシャルエネルギーと運動エネルギーの比が-2になるという定理)の検証を行った(J. Chem. Phys.)。様々な結合長のNa₂などに対する自己無撞着GW全エネルギー計算を行い、最適結合長の場合にvirial定理を0.04%の誤差で満たすことを確認することが出来た。また、He₂の結合長が離れた場合の漸近的振る舞いは良好で、GW近似が分散力の記述に向いていることを確かめることが出来た(日本物理学会秋期大会)。さらに、この計算手法を用いて、B₂、Al₂、Si₂の最安定スピン配置を求めることに成功した(Mod. Phys. Journal B)。

自己無撞着GW近似においては、一般に自己エネルギーはエネルギー依存性を持つことから、非エルミートであり、取り扱いが難しい。そこで、この問題を取り扱うべく、我々は自己エネルギーをエネルギーについて線形化する全く新しい計算手法(linearized GW method)を提案し、インプリメントするとともに、そして、このプログラムを用いて幾つかの具体的な計算を行った(Phys. Rev. A.)。さらに、2nd exchangeなどのバーテックス補正を取り入れた自己無撞着GW法 Γ 法のインプリメントをほぼ完了しつつある。

この他、1次元フラレン・ポリマーの多数の異なる構造と全エネルギーなどの関係を議論するとともに、キャップ付きカーボン・ナノチューブとZnフタロシアニン接合太陽電池のエネルギー変換効率を計算した。

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 26 年度は、「京」が運用開始されてから 1.5 年が経過し、それにともなって計算はプロダクトランに移行しており、研究成果をまとめた論文が複数出た時期であった。そのため、「京」や HPCI を利用して創出された成果の発表と情報交換、成果を創出するために利用されたアプリケーションの講習会等の普及活動、体系化され始めた超並列計算の教育活動を重視して実施した。物性、分子、材料の各分野の振興活動は、それぞれの戦略拠点、分野共通課題は CMSI 神戸を主として実施した。「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それぞれ担当した。また、広報やソフトウェア公開、コミュニティー誌を通じて、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 24 年度から開始したマテリアルズインフォマティクス検討会は、平成 25 年度は JST 主催の全国的な会合に発展し、平成 26 年度は本格的な国家 Pj 化の検討が継続され、文科省に対して施策提案に協力した。その結果、平成 27 年度よりプロジェクト化することが決定された。

平成 26 年度は、平成 25 年度の HPCI 戦略プログラム中間評価で指摘を受けた事項を含めて課題に取り組み、年度末に作業部会を開催し、最終年度に向けた取り組みに対する課題と対策の検討を行い、実施する重点課題に対する指摘事項を提示した。

平成 26 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 3 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 50 回、共催、協賛を合わせて 64 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 2,480 名、産独(官)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 2,381 名であった。その人数の産独学の内訳と比率、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。産業界からは、電気・電子関連、材料・素材・化学関連、自動車・運輸・機械関連として、日本の主要なメーカーの方が参加されている。

平成 26 年度は、広報誌「Torrent」No. 10,11 を発刊した。また、AICS の一般公開や SC14 への展示会等への出展にも協力し、SC14 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ー内外に向けた情報発信を積極的に行った。

ここでは、平成 26 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 26 年度 CMSI イベント一覧-1

CMSI主催・共催行事													
月	開催日	曜日	場所	主催者	行事名	技術 展示	一般 展示	分類	参加人数	産	学	報告書	
人材育成													
4月	4月10日～7月24日	木	最大20拠点	人材育成	【配信講座】CMSI計算科学技術特論B 全15回			主催	180	11	11	158	1
9月	9月1日～5日	月～水	大原温泉満元のお宿 民宿大原山荘(京都市)	TOCCI人材育成	第18回 分子シミュレーション夏の学校			協力・協賛	27	2	1	24	2
	9月1日～5日	月～金	国際高等研究所	CMDI人材育成	第25回 Computational Materials Design (CMD) ワークショップ			共催	37	0	1	36	3
10月	10月7日～10月21日 11月7日(配信セミナー)	火・木	東北大学理学研究科物理学教室	CMRV人材育成	金曜の計算材料物性 マルチスケールのアプローチ・セミナーシリーズ 全8回(第7.8回は配信)			主催	61	5	3	53	4
	10月14日～17日	火～金	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	TOCCI人材育成	第8回分子シミュレーションスクール-基礎から応用まで- TOCCIインターカレッジ-分子シミュレーション-			主催	68	6	0	62	5
11月	11月13日～14日	木・金	バンドン工科大学(インドネシア)	CMDI人材育成	アジアCMDワークショップ(主催:CMD)			共催	50	0	0	50	-
12月	12月15日～16日	月・火	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	TOCCI人材育成	第4回量子化学ウィンドウズスクール-大規模系を目標とした基礎理論-			共催	49	4	3	42	6
1月	1月15日	木	大阪大学豊中キャンパス文理融合棟305セミナー室(配信元)	人材育成	第3回CMSI人材育成シンポジウム「応用数理と計算科学の連携Ⅱ」			主催	31	0	2	29	7
2月	2月5日	木	東北大学東京分室	CMRV人材育成	MPIプログラミング講習会(主催:RIST)			共催	9	0	1	8	8
	2月23日～27日	月～金	大阪大学基礎工学研究棟	CMDI人材育成	第26回 Computational Materials Design (CMD) ワークショップ			主催	37	7	0	30	9
3月	3月4日	水	産業技術総合研究所臨海郡中心センター	人材育成	OCTA 講習会&トレーニング(共催:産総研)			共催	56	45	3	9	10
人的ネットワークの形成													
CMSI・各拠点活動													
全体													
8月	8月18日～21日	月～木	滋賀県高島市 白浜荘	第1部会	CMSI第一部会「新物質・新量子情報の基礎科学」夏の学校 2014			主催	33	0	0	33	11
9月	9月28日	日	ステーションコンファレンス東京	CMSI	ポスト「京」物質科学関連課題検討会			主催	64	7	13	44	12
12月	12月8日～10日	月～水	東北大学金属材料研究所	CMSI	第5回CMSI研究会			主催	130	9	19	102	13
1月	1月16日	金	ステーションコンファレンス東京	CMSI	「京」からポスト「京」に向けた、分野融合型基礎研究検討会 基礎科学のフロンティア- 極限への挑戦			主催	44	4	4	36	14
全体 (国際会議)													
10月	10月20日～22日	月～水	理学研究所計算科学研究機構	CMSI	CMSI International Workshop 2014: Tensor Network Algorithms in Materials Science			主催	41	0	10	31	15
11月	11月10日～11日	月～火	東北大学金属材料研究所	CMSI	CMSI International Workshop on Multiscale Computational Materials Science (CMR研究会と同時開催)			主催					-
	11月23日～24日	日～月	東京大学本郷キャンパス 工学部	CMSI	第4回並列化技術国際ワークショップInternational Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics 量子化学-第一原理物理計算プログラミンクネットワーク- Toward post-K computers			主催	38	1	9	28	16
2月	2月18日～21日	水～土	2/18工学部講義室、2/19・2/21小栗ホール	CMSI	CMSI International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations --- Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems			主催	120				17
OOMS (計算物質科学研究センター)													
6月	6月16日～7月4日	月～金	東京大学物性研究所	物性研/CCMS	物性研国際ワークショップ「強相関系物理の新展開」 ISSP International Workshop "New Horizon of Strongly Correlated Physics" (NHSCP2014)			共催	-	-	-	-	-
	6月25日～27日	水～金	東京大学物性研究所	物性研/CCMS	物性研国際ワークショップ「強相関系物理の新展開」シンポジウム			共催	-	-	-	-	-
8月	8月27日	水	東京大学本郷キャンパス 理学部4号館	理学研/CCMS	xtAPP Developers Meeting 2014			主催	34	24	7	3	18
	8月30日	土	東京ステーションコンファレンス	主催:CCMS, CMRI 協賛:CMSI	ポスト「京」で取り組む計算物質科学関連課題に関する説明会(第1回)			主催	50	10	7	33	19
11月	11月12日～14日	水～金	東京大学 物性研究所	物性研/CCMS	物性研究所計算物質科学センター 第4回シンポジウム-物性研スーパーコンピュータ共同利用報告会			主催	70	6	8	56	20
CCMS (ハズオン)													
7月	7月30日	水	東京大学 物性研究所 A616	CCMS	第5回CCMS抽ハズオン: AkaIKR チュートリアル			主催	6	0	1	5	21
8月	8月28日	木	東京大学本郷キャンパス 理学部1号館	CCMS	CMSiハズオン(本題): OpenACC 2.0によるGPGPUコンピューティング			主催	21	1	3	17	22
10月	10月16日	木	東京大学 物性研究所 A614	CCMS	第6回CCMS抽ハズオン: ALPSチュートリアル			主催	10	0	1	9	23
12月	12月17日	水	東京大学 物性研究所 A616	CCMS	第7回CCMS抽ハズオン: Feramチュートリアル			主催	2	1	0	1	24
3月	3月11日	水	東京大学 物性研究所 A612	CCMS	第8回CCMS抽ハズオン: OpenMPチュートリアル			主催	15	4	0	11	25
TOCCI (計算分子科学研究拠点)													
4月	4月17日	木	分子科学研究所	TOCCI	ポスト京向けアクセラレータについての勉強会			主催	20	0	3	17	26
5月	5月21日	土	名古屋大学ES総合館ESホール	TOCCI	第1回TOCCIインフォーマルミーティング			主催	81	7	12	62	27
8月	8月31日	日	分子科学研究所	主催:TOCCI 協賛:CMSI	ポスト「京」で取り組む計算物質科学関連課題に関する説明会(第2回) (8月30日に東京で開催された第1回と同内容)			主催	24	2	2	20	28
9月	9月27日	土	名古屋大学ES総合館1F大会議室	TOCCI	第2回TOCCIインフォーマルミーティング	2		主催	37	2	7	28	29
10月	10月12日	日	イオンコンパス名古屋駅前会議室9F ROOM A	TOCCI	第3回TOCCIインフォーマルミーティング			主催	24	1	3	20	30
	10月17日～18日	金・土	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	TOCCI	計算分子科学研究拠点(TOCCI)第5回研究会			主催	73	15	10	58	31
1月	1月23日	金	東京大学 弥生講堂一乗ホール	TOCCI産総協	TOCCI第4回産学連携シンポジウム/産総協第31回スーパーコンピューティングセミナー 「産総協研究拠点における理論-計算化学の真摯について」			主催	85	48	12	25	32
CMRI													
5月	5月28日	月	産総研西センター	CMRV第5部会	CMSI第5部会「マルチスケール材料科学」重点課題第1回研究会			主催	10	2	5	3	33
6月	6月26日	木	東北大学東京分室	CMRI	CMRVポスト案に関する研究会			主催	15	1	2	12	34
10月	10月6日	月	産総研西センター	CMRV第5部会	CMSI第5部会「マルチスケール材料科学」重点課題第2回研究会			主催	8	1	4	3	35
11月	11月11日	火	東北大学金属材料研究所	CMRI	CMRI研究会(国際)WS: International Workshop on Multiscale Computational Materials Scienceと同時開催			主催	53	4	10	39	36
国際連携													
11月	11月3日～5日	月～水	Yonsei University, ソウル	Asian Workshop committee	The 17th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations			協力・協賛	-	-	-	-	-
	11月10日～11日	月～火	慶應義塾大学三田キャンパス	Nose30 Organizing Committee (CMSI/TOCCI)	International Symposium on Extended Molecular Dynamics and Enhanced Sampling: Nose Dynamics 30 Years (NOSE30) MD計算国際シンポジウム(能勢メモリアル)			協力・協賛	-	-	-	-	-
12月	12月1日～3日	月～水	東京大学本郷キャンパス 小栗ホール	ISC-QSD Organizing Committee	International Symposium on Compuics - Quantum Simulation & Design (ISC - QSD) 2014(押山新学術)			共催	136	2	25	109	37
	12月20日～22日	土～月	沖縄	ACCMS (CMSI/CMRI)	Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (ACCMS-VO) 国際会議			協力・協賛	106	5	21	80	38
産官学連携													
11月	11月20日	木	秋葉原ダイビル5階 カンファレンスフロア5B	産官学連携	第9回 産官学連携研究会「炭素繊維複合材料と分子シミュレーション」			主催	40	22	10	8	39
12月	12月19日	金	秋葉原ダイビル5階 カンファレンスフロア5B	CMRV産官学連携	第10回 産官学連携研究会「構造用金属(鉄鋼)材料における計算材料科学」			主催	37	18	11	8	40
2月	2月13日	金	秋葉原ダイビル5階 カンファレンスフロア	TOCCI産官学連携	第11回 産官学連携研究会「ソフトマテリアル開発における大規模計算」			主催	30	19	8	3	41

表 2.2.1.2-2 平成 26 年度 CMSI イベント一覧-2

研究成果の普及													
広報 (AIOSとの連携の広報活動は、別枠)													
9月	9月21～24日	日～水	広島大学東広島キャンパス	CMSI/TOCI	第8回分子科学討論会2014 (出席)	○	出席	45				-	
10月	10月24～25日	金・土	東京大学物性研究所	物性研/CCMS	東京大学柏キャンパス一般公開2014		○	出席	-	-	-	-	
	10月15日	水	計算科学研究機構(神戸)1Fセミナールーム	CMSI	「京」で革新するエネルギー創成 記者勉強会 ～リチウムイオン電池・太陽電池・燃料電池・光合成～			共催	44	8	16	1	42
11月	11月16日～20日	日～木	New Orleans, USA	IEEE/ACM	International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC14)	○	出席	-	-	-	-	-	
12月	12月6日～6日	金～土	九州工業大学情報工学部(飯塚キャンパス)	九工大共催・CMSI/TOCI	立体視プロジェクションシステムを使った分子科学研究講演会(DDCMS2014)			共催	130				-
2月	2月28日	土	秋葉原UDXシアター	CMSI	第3回TUT-CMSI 計算物質科学見える化シンポジウム		○	共催	101	32	17	52	43
3月	3月18日～20日	水～金	東京大学駒場キャンパス	CMSI/CMRI	日本金属学会春期(第156回)講演大会	○	出席						-
分野を越えた取り組み													
計算科学研究機構(AIOS)との連携 (広報活動・出席含む)													
6月	6月22日～26日	日～木	Leipzig, Germany	ISC	International Supercomputing Conference 2014 (ISC14)	○	出席	-	-	-	-	-	
8月	8月23日～24日	土日	科学技術館(東京)	AICS/CMSI	未来をひらくスーパーコンピュータ～「京」からその先へ 限りなき挑戦～	○	出席	-	-	-	-	-	
9月	9月5日～6日	金・土	Gatlinburg, TN, USA	ORNL/AICS	US-Japan Workshop on Exascale Applications			協力・協賛	-	-	-	-	
10月	10月25日	土	理化学研究所計算科学研究機構	AICS/5分野	計算科学研究機構(AICS)一般公開		○	出席	-	-	-	-	
他の機関分野との連携													
7月	7月9日	水	理化学研究所計算科学研究機構 講堂	本新学術領域研究 研究センター	科研費新学術領域研究「コンピュータによる物質デザイン」コンピュータ・サイエンス勉強会 (応用元・東京大学情報基盤センター)			共催	6	0	0	6	44
9月	9月2日	火	東京・秋葉原UDX会議室(NEXT-1)	RIST/CMSI	第1回「京」と大型実験施設との連携利用シンポジウム	○	共催	60	26	24	10	45	
10月	10月31日	金	ココホホール(品川)	RIST	「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会(第1回)	○	協力・協賛	-	-	-	-	-	
11月	11月4日～5日	火・水	兵庫県立大学 神戸情報科学キャンパス大講義室	兵庫県立大学	第1回計算科学研究センター学術会議 ー兵研教授退職記念ー「高分子素材分野における大規模MDシミュレーション技術の展望」			共催	-	-	-	-	-
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支援)													
4月	4月23日	水	理化学研究所計算科学研究機構 1F R104-2会議室	CMSI神戸	平成26年度 第1回「京」物性セミナー 『相関量子多体系におけるレーザー誘起非平衡現象についての理論-レーザーによる励起とカイラリティの制御とキタエフ・ハニカム格子模型におけるレーザー誘起トポロジカルマヨラナ導体』			主催	10	-	-	-	46
	4月28日	水	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第14回CMSI神戸ハンズオン: FUチュートリアル			主催	9	0	4	5	47
5月	5月30日	金	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第15回CMSI神戸ハンズオン: バージョン管理システムチュートリアル			主催	9	0	7	2	48
6月	6月16日	月	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第16回CMSI神戸ハンズオン: ALPSチュートリアル			主催	11	1	3	7	49
	6月30日～7月1日	月～火	理化学研究所計算科学研究機構 講堂	CMSI神戸	第3回CMSI「京」HPCIパソコン利用情報交換会			主催	43	8	17	18	50
7月	7月1日～7月2日	火～水	理化学研究所計算科学研究機構 講堂	CMSI神戸	CMSI「7」高度化合宿「TOKKUN4(アブリ高度化・利用方法習得)」			主催	19	1	5	13	51
7月	7月7日～9日(3日間)	月～水	理化学研究所計算科学研究機構 講堂	CMSI	第10回CMSI若手技術交流会合宿			主催	34	2	8	24	52
8月	8月4日～6日	月～水	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	CMSI「7」高度化合宿「TOKKUN5(実行・並列性向上)」			主催	15	0	4	11	53
	8月18日	月	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第17回CMSI神戸ハンズオン: FUチュートリアル			主催	7	0	3	4	54
9月	9月18日	木	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第18回CMSI神戸ハンズオン: Rokkoチュートリアル			主催	8	0	1	7	55
10月	10月10日	金	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第19回CMSI神戸ハンズオン: OpenMX チュートリアル			主催	14	4	1	9	56
12月	12月12日	金	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第20回CMSI神戸ハンズオン: xTAPP チュートリアル			主催	7	0	0	7	57
1月	1月30日	金	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第21回 CMSI神戸ハンズオン: MODYLASチュートリアル			主催	14	5	1	7	58
2月	2月4日～6日	水～金	掛川市(静岡県)	CMSI	第11回CMSI若手技術交流会合宿 計算物質科学アプリ勉強会 ー講演会講師を体験し、計算手法、アプリの構造、プレゼン技法等を学ぼうー			主催	28	0	3	25	59
	2月16日	月	CMSI 神戸拠点(理研AICS5階501号室)	CMSI神戸	第22回CMSI神戸ハンズオン: SMASHチュートリアル			主催	8	0	3	5	60

表 2.2.1.2-3 平成 26 年度 CMSI 講義一覧

各教員(研究員が実施した講義) CMSI共通イベント除く												
月	詳細日程	曜日	場所	主催者	講義名	参加人数	座	独	学			
人材育成 - CMSI教員(研究員含む)による講義												
4月	4月4日～7月25日	金	東大情報基盤センター大演習室2	東京大学大学院工学系研究科 担当: 岩田・山地	物質科学のための計算数理 I	50名程度						
10月	10月3日～1月30日	金	東大情報基盤センター大演習室2	東京大学大学院工学系研究科 担当: 岩田・大越	物質科学のための計算数理 II	10名程度						
夏学期	4月～7月	月・水・木	東京大学理学部1号館317	東京大学理学部物理学科 担当: 藤野秀彦	物理学実験1-計算機実験(東京大学理学部物理学科3年生必修科目)	71						71
4-7	4月10日～7月24日	木	名古屋大学工学部号館	名古屋大学大学院工学研究科 担当: 吉井範行	分子物理化学特論	58	0	0				58
7	7月9, 16日	水	名古屋大学工学部7号館B棟	名古屋大学大学院工学研究科 担当: 吉井範行	大規模並列数値計算特論	51	0	0				51
11	11月7日	金	名古屋大学工学部1号館	名古屋大学大学院工学研究科 担当: 吉井範行	計算科学フロンティア連続講義	36	0	0				36
4-7	4月8日～7月29日	火	名古屋大学工学部1号館	名古屋大学工学部 担当: 吉井範行	熱力学	132	0	0				132
11	11月29日	木	名古屋大学大学院工学研究科	名古屋大学大学院工学研究科 担当: 吉井範行	Advanced Physical Chemistry	1	0	0				1
9月1日	9月1日	月	国際高等研究所	CMD 担当: 大阪大学 下司雅章	大規模計算序論	3						3
2月	2月23日	月	大阪大学産業科学研究所	CMD 担当: 大阪大学 下司雅章	大規模計算序論	3						3
2月	2月23日	月	大阪大学産業科学研究所	CMD 担当: 東京大学 特任研究員 五十嵐亮	スバホンの特徴と使い方	-						-
10月	10月30日	木	神戸大学大学院システム情報学研究科	神戸大学 担当: 東大物性研 尾崎	大学院講義 大規模シミュレーション総論II	-						-

H26 開催イベント Review



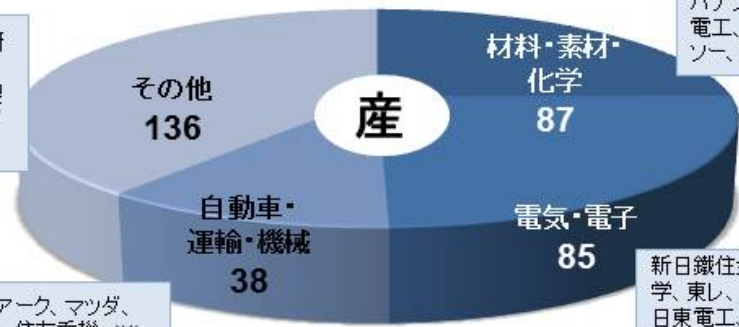
H26年度イベント 総数(主催・共催)	64	
参加合計人数を把握しているイベント数	61	2,480名
産独学の詳細分類を把握しているイベント数	57	2,381名

サイバネット、構造計画研究所、清水建設、TDK、大日本印刷、第一工業製薬、東京電力、クロスアビリティ 他

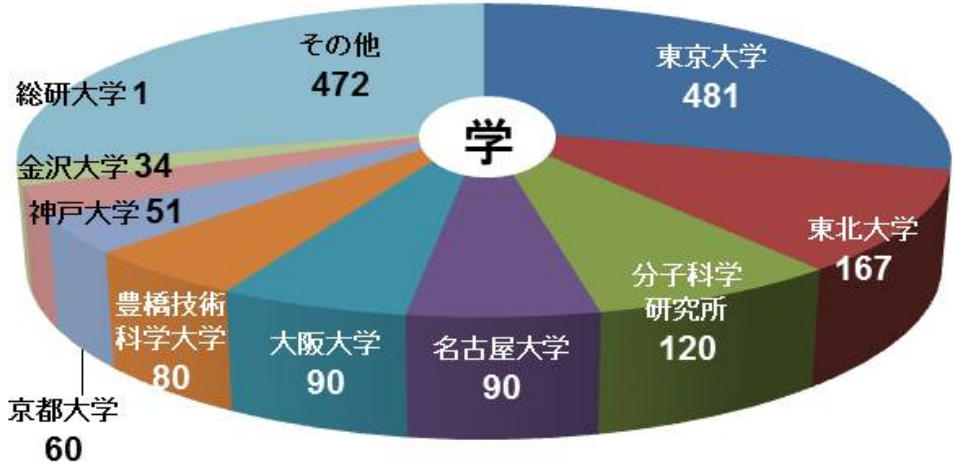
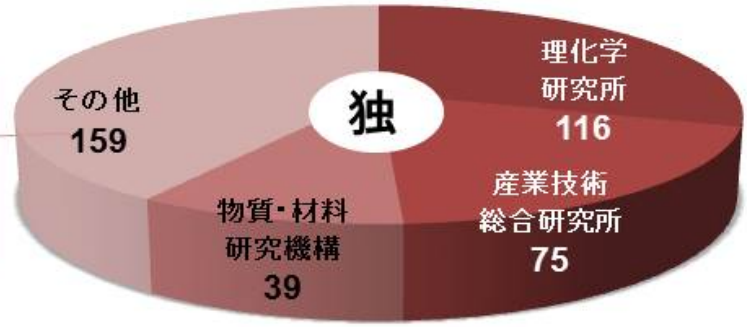
トヨタ、日産アーク、マツダ、村田製作所、住友重機、IHI 他

富士通、日立、パナソニック、古川電工、東芝、デンソー、ソニー 他

新日鐵住金、住友化学、東レ、日本ゼオン、日東電工、旭化成、三菱レイヨン 他



高度情報科学技術研究機構、文科省、高エネルギー加速器研究機構、日本原子力研究開発機構、総合科学研究機構、高輝度光科学研究センター、科学技術振興機構、米陸軍 他



産独学のべ参加者人数と比率

図 2.2.1.2-1 平成 26 年度 CMSI 主催イベントへの産独学からの参加者人数とその比率、内訳。
データは、産独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 当該年度(平成26年度)における研究成果

2.2.1.2(1) 計算機資源の効率的マネジメント

平成 26 年度、CMSI 研究課題は成果創出期に入り、「京」ではプロダクトランを実施するウエイトが高まった。貴重な「京」資源を効率よく利用するため、アプリケーションソフトの開発やチューニング等は、各戦略機関のスパコンで実施した。また、「京」で計算する際のテストやプリ・ポスト処理を実施するために神戸に「phi」システムを導入しており、今年度も継続運用した。

1) 計算資源のマネジメント

平成 26 年度 CMSI 重点課題で開発しているアプリケーションの高度化開発の課題間利用が増加した。具体的には、“RSDFT が他のアプリに組み込まれたり、MODYLAS の課題間利用が加速されたり、FMO に SMASH との結合機能が不可されたり、OpenMX が複数の研究課題で利用されたりしている。それにともない、汎用的なアプリは、「京」、および、各研究機関のスパコンにプレインストールする活動の準備を開始した。一部のアプリは平成 26 年度中にインストールを実施している。

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 C の全計算資源の約 60% (東京大学物性研究所の計算資源全体の約 20%)を 戦略利用枠として、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

平成26 年度は、並列化テストなどのために大規模な計算が必要な場合は、他の計算資源の利用を推進したため、大規模キューの運用は行わなかった。

iii) 計算機のスペック

名称: FUJITSU 製 PRIMEHPC FX10

CPU: SPARC64™ IXfx 1.848GHz

構成: 16 コア/CPU, 1 CPU/ノード, 96 ノード/ラック, 4 ラック

メモリ: 2GByte/コア (32GByte/ノード)

iv) 利用ルール

CMSI の各課題代表者が研究課題を申請し、CMSI 内部での審査の後、東京大学物性研究所の共同利用委員会で審査を受けたうえで利用を認めるという利用形態をとっている。利用申請できるのは課題代表者のみであり、各課題に含まれる他の利用者のアカウントの発行に関してはすべて課題代表者の責任で行っている。課題ごと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できる。研究課題の募集は年に 1 度であり、課題代表者は成果報告書を提出する義務がある。

以下に平成 26 年度の研究課題一覧を示す。

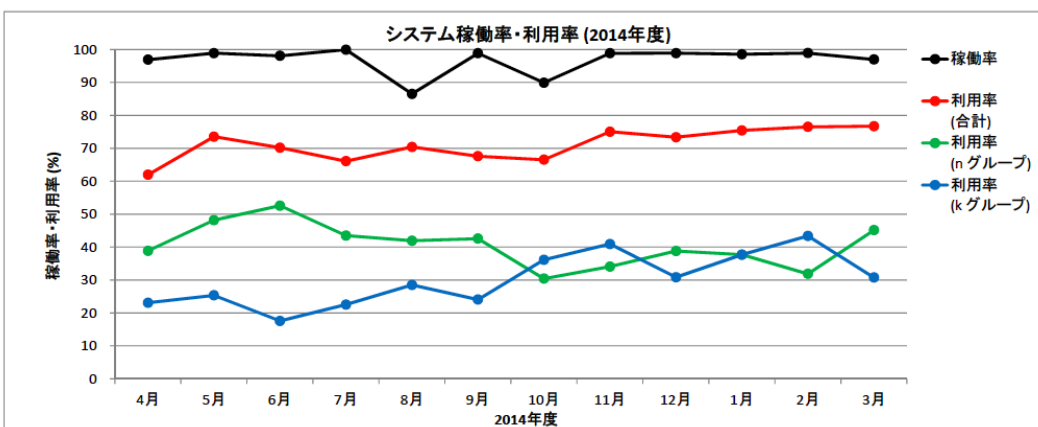
研究代表者	課題名
高塚 和夫	分子における電子の動的過程と多体量子力学
今田 正俊	スピン軌道相互作用と電子相関の協奏が生む新量子相
遠山 貴己	強相関電子系の励起ダイナミクスの研究
川島 直輝	量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究
尾形 修司	ナノ構造の電子状態から機械的性質までの マルチスケールシミュレーション
押山 淳	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究
常行 真司	新材料探索のための第一原理計算手法開発
斎藤 峯雄	スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索
信定 克幸	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと 光・電子機能性量子デバイスの開発
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
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
杉野 修	エネルギー変換の界面科学
吉田 紀生	バイオマス利用のための酵素反応解析
芝 隼人	剪断流下の脂質膜系の欠陥ダイナミクスの研究
中野 博生	フラストレート磁性体の計算科学的研究
土居 抄太郎	Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算
大久保 毅	フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化

v) 利用状況

最大で 96 ノード(1536 コア)までのキューを利用した。消費したポイント合計は、約 62,000 ポイントである。

vi) 月別推移

東京大学物性研究所システム C の稼働率および戦略ユーザー(n グループ)の利用率の月次推移を示す。



②PC クラスタ Psi

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) 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ている。また、ソフトウェア講習会の際のユーザーの計算環境としても利用している。

iii) 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 58 名がアカウント登録している。平成 26 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。

[物性研神戸拠点 Phi]

①PC クラスタ Phi

i) PC クラスタ Phi のスペック

計算サーバは 16 ノードある。1 ノードあたりの構成は以下の通りである。

- ・CPU : 合計 16core / Intel SandyBrige E5-2670 (8core/2.6GHz) x 2
- ・Memory : 合計 64GB / 8GB DIMM x 8
- ・内蔵 Disk : 合計 300GB (300GB SAS x 1)

ii) 利用ルール

利用者は以下の通りである。

- ・CMSI 関係者で、「京」のアカウント保持者。(「京」のアカウントを持っていないと、AICS 外から Phi にアクセスできないため。)
- ・神戸ハンズオン受講者

iii) 利用状況

用途は以下の通りである。

- ・「京」プリ・ポストデータ処理。「京」からの出力ファイルをバックアップするためのストレージの接続先としての用途も含む。
- ・神戸ハンズオンの実習
- ・ソフトウェアのインストール、実行テスト
- ・作成したアプリのベンチマーク採取等

iv) 月別推移

利用率は高い。現在、ジョブ管理システム未導入のため、詳細は不明。

[分子科学研究所スパコン]

平成 26 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、CX400、SGI UV2000 および PRIMEHPC FX10(合計 326TF)) の 20% を上限とし、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 7 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、審査を行った。その後、計算科学研究センター運営委員会での審議を経て、これらの課題について利用が許可された。なお、許可された計算時間は、計算科学研究センターの約 11% であった。

課題名	課題責任者(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)
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)
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	尾形修司(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)
太陽電池および人工光合成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)

[金属材料研究所スパコン]

平成 24 年度後半から、HITACHI スーパーテクニカルサーバ SR16000 モデル M1 の 20% を上限として、CMSI 研究課題に計算機資源を提供している。平成 26 年度も平成 24 年度、25 年度に引き続き CMSI 利用枠の募集を行った。重点課題、特別支援課題、支援課題からの申請に対して、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、その審査結果に基づき、以下の課題 9 件について利用を許可した。

平成 26 年度に採択した金研の共同利用枠の採択件数は 38 件であり、全課題数に占める CMSI 枠の課題件数 9 件は約 19% に相当する。一方、全ユーザーに占める CMSI 枠のユーザーの利用時間ノード積は、約 11% であった。

平成 26 年度 CMSI 枠課題一覧

課題代表者	課題名
前園 涼	新材料探索
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
中野 博生	フラストレート磁性体の計算科学的研究
宮本 良之	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
森川 良忠	エネルギー変換の界面化学
佐原 亮二	スピルオーバーを利用した水素貯蔵材料の高密度化
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・評価方法の開発
大野 かおる	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
今井 英人	HPC を用いた次世代電池の反応機構の解明

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 132 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 132 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、132 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、132 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 26 年度に CMSI で提供した計算資源の中で、最大利用コア数が「京」の次に大きい計算資源であり、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、94 名のユーザーが利用し、平成 27 年 3 月までに予定した資源量を使いきった。

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 (MateriApps Installer)

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 にインストールした。

PC クラスタ Psi およびシステム B にインストールしたソフトウェア一覧

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、計算物質科学分野に共通するアプリを国内(外)の主要なスパコン全てにインストールすることを目標とする MateriApps Installer というプロジェクトを推進しており、これまでに次のようなアプリケーションを次のようなシ

システムにインストールしている。

インストール済みスパコン	ソフトウェア名称
Psi / Phi 等 Intel クラスタ	ALPS
京	xTAPP / TAPIOCA
物性研システム C	OpenMX
九州大学 FX10	MODYLAS / Ignition

ii) 利用ルール

ソフトウェアは、インストール済みシステムのユーザーであれば、CMSI メンバーでなくても利用できる。

iii) 利用状況

CMSI メンバーだけでなく、共同利用スパコンなどのユーザーにも広く使われている。また、これらのソフトウェアは、Phi / Psi などの PC クラスタを実習環境として利用したチュートリアルでも利用された。

② 視覚化ソフトウェア

i) スペック

- ・ 対応 OS: Windows, MacOSX, Linux
- ・ バージョン: 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ユーザにより利用されている。

5) 各戦略機関コミュニティとの連携による支援課題

CMSI では、超並列計算技術を普及させていく取り組みとして、支援課題制度を設けており、年に2回募集し、厳密な審査で課題を選定している。平成 26 年度は、平成 25 年度より継続された6課題と、新たに選定された2課題を推進した。支援課題は、CMSI が提供する計算資源、および、「京」の計算科学推進体制構築枠を利用することが可能である。

《平成 26 年度 CMSI 支援課題》

名前	所属	課題名
＜平成 25 年度より継続＞		
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— スピン空間に異方性のない系でのスピントロピック現象—」
芝 隼人	東京大学	「せん断流下の脂質膜系の構造形成」
大久保 毅	東京大学	「フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化」

石村 和也	分子科学研究所	「ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索 —大規模並列計算プログラムの効率的な開発—」
土居 抄太郎	東京大学	「Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算」
茂木 昌都	日産アーク	「HPC を用いた次世代電池の反応機構の解明」

<平成 26 年度審査で選定された新支援課題>

立川仁典	横浜市立大学	「物質デザインのための確率論的手法に基づく多成分系量子化学の高度化」
渡邊宙志	東京大学	「多重気泡生成過程における気泡間相互作用の数値的解析」

2.2.1 当該年度(平成26年度)における研究成果

2.2.1.2(2) 人材育成

特定高速電子計算機施設を中核とする HPCI の高度利用を軸に計算物質科学の振興を図るとともに、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り、さらにアジア地区における研究と人材育成のための研究人材ネットワークの充実をめざす。平成 26 年度は、前年度に引き続き、計算機マテリアルデザイン人材育成教育活動においては CMD ワークショップ(大阪大学大学院講義単位化)、アジア CMD ワークショップ、計算分子科学人材育成教育活動においては分子シミュレーション夏の学校、TCCI ウィンターカレッジ、超並列化教育・集中実習、計算材料科学教育活動においては CMRI・MPI プログラミング講習会、海外若手派遣を実施した。それらとともに全国にむけたオンライン大学院教育においては、平成 24 年度にカリキュラムを策定、平成 25 年度に全国オンライン配信を開始し計算科学技術特論 A を提供したが、これに引き続き、平成 26 年度には計算科学技術特論 B の全国オンライン講義配信を実施した。平成 25 年度の実績をふまえて充実した講義の配信をはかるとともに配信システムの高度化を目指した。講義配信のための体制として、理研神戸 AICS に設置された、多地点配信システムを利用し、阪大学豊中キャンパスを配信元に全国 9 大学11カ所に双方向オンライン配信できる体制を作っているが、実施の問題点等を洗い出しトラブルの少ないスムーズな配信をするためのノウハウの蓄積を行った。今後、計算科学技術特論 C を提供することを考えて、そのカリキュラムを検討するワーキングを立ち上げ、基本的な案を策定した。また、東北大学、東京大学、名古屋大学、大阪大学、神戸大学においてそれぞれ独自の計算物質科学に関する大学院教育プログラムを実施した。

1) 計算物質科学の教育

i) CMD ワークショップ

①CMD ワークショップ (報告書3,9)

9月1-5日 第25回 CMD ワークショップ 国際高等研究所

2月23-27日 第26回 CMD ワークショップ 大阪大学大学院基礎工学研究科研究棟にて開催

2014年9月1日(月)~9月5日(金)に、国際高等研究所において、第25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28名、アドバンスコース14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3名、合計48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14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。先端研究事例や特別講演では、バイオ系なども含めた事例や今後期待される構造探索手法などの紹介や、今後の計算機の発展の展望を考えた計算機科学者からの講演を企画した。これらによって、これからの計算機の発展とどう向き合いながら進めるべきかを考える情報を提供した。

2015年2月23日(月)~2月27日(金)の日程で、同じく大阪大学基礎工学研究科 G 棟において、第26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24名、アドバンスコース8名、エキスパートコース2名、スーパーコンピューターコース3名、合計37名を受け入れて行った。これら受講生を講師25名、チューター13名が講義、実習及びそのサポートを行った。先端研究事例や特別講演では、今後の省エネルギーなどを支える分野の一つとして期待されるスピントロニクス関連の講演を企画し、これらの方面への物質設計及びそれらの技術の実験からの期待や重要性を印象付けた。

第25回と第26回のスーパーコンピューターコースは、共に東京大学物性研究所のシステム C の FUJITSU FX10 の 96 ノード(1ラック)を専有して実施した。

②ASIA CMD ワークショップ

11月13-14日 CMD Asia at Bandung Institute of Technology, Indonesiaにて開催

3月19-21日 CMD Asia at De La Salle University, Biñan, Laguna Philippines

平成26年度は、インドネシアのバンドン工科大学とフィリピンのデラサール大学の2カ所で開催した。インドネシアではSymposium Nanotechnology and Biotechnology 2014の中の一つのプログラムとして開催され、約50名の参加があった。[\(http://nrcn.itb.ac.id/\)](http://nrcn.itb.ac.id/) 日本国内の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実施された。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。フィリピンでは、デラサール大学の新キャンパスで、現地スタッフによる企画運営によって開催され、約45名の参加があった。こちらも、ビギナーコースに準じた講義と実習を含む形で実施された。両方とも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及び実習も提供した。両国とも長年の開催による経験が現地に根付いており、ほぼ現地スタッフで実習まで実施して開催出来るようになっていた。

ii) 計算分子科学の教育活動

図2. 2. 1. 2(2). 1に示すように、CMSI 人材育成・教育活動の一環として企画・開催・共催等を行った。

行事名	開催日程	場所
第18回分子シミュレーション夏の学校	2014年9月1日(月)~3日(水)	大原温泉 湯元のお宿 民宿大原山荘(京都府)
	講師3名、参加者24名	
TCCIウインターカレッジ(分子シミュレーション)	2014年10月14日(火)~17日(金)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	講師15名、参加者89名(内、民間企業12名)	
第4回超並列化技術国際ワークショップ	2014年11月23日(日)、24日(月)	東京大学工学部6号館64講義室(東京都文京区)
	参加者37名(内、民間企業1名)	
TCCIウインターカレッジ(量子化学)	2014年12月15日(月)、16日(火)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	講師5名、参加者数42名(内、民間企業3名)	

図2. 2. 1. 2(2). 1 TCCI 企画・開催・共催した教育活動

①第18回分子シミュレーション夏の学校(報告書2)

9月1日(月)から3日(水)まで、京都の大原温泉にて開催。分子動力学シミュレーション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、H26年で18回目を迎えた。今年度の幹事校は京都大学で院生が企画・推進し、全国から24名が参加した。全体基礎講義として「計算化学による反応解析の基本と実践へのヒント」を行い、QM分科会「酵素反応系の理論計算分子科学」、MM分科会「酵素反応系の理論計算分子科学」のどちらかを選択受講できるように講義が行われ、活発な質疑応答が行われた。また、ポスターセッションもあり、相互の研究を理解する良い機会となった。

②第8回分子シミュレーションスクール—基礎から応用まで

TCCI ウィンターカレッジ—分子シミュレーション (報告書5)

10月14日(火)から17日(金)まで 自然科学研究機構 分子科学研究所 岡崎コンファレンスセンターにて開催。H22年度まで、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8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。今年も会場の都合で10月開催となった。民間企業からの参加者も含めて89名が参加。15名の講師により、「計算科学の新規性(先進性)と脆弱性「これまで」から「これから」を予測する」から「QM/MM-ER 法」についての講義が

行われた。4 日間完修した受講生に、例年通り、修了証書が手渡された。

③第 4 回量子化学ウインタースクール～大規模系を目指した基礎理論～(報告書6)

12 月 15 日(月)、16 日(火)に 自然科学研究機構 分子科学研究所 岡崎コンファレンスセンターにて開催。第 4 回目の開催であり、今年度も分子研、計算科学研究機構、計算科学研究センターとの共催で開催した。2 日間で、「分子軌道法の基礎と相対論的有効ポテンシャル法」から始まって、「分子の磁氣的性質」など最新の話題も含めた講義が行われた。42 名が参加した。受講者からのポスター発表 9 件も行われ、研究課題についての情報交換も行われた。

iii) 計算材料科学の教育活動

①CMRI・MPI プログラミング講習会 (報告書 8)

2 月 5 日 東北大学東京分室にて開催 (講師 青山幸也氏 高度情報科学技術研究機構(RIST)神戸センター)

毎年異なる開催地区(過去実績:仙台、名古屋、京都、大阪、九州)での並列計算技術の普及を目的とするため、本年度は東京での開催とした。参加者は 8 名で、学生・院生(横浜国大、東北大等)、および、教員(愛媛大学・青山学院大学等)であった。質疑応答も大変活発で、若年層や実際にプログラミングを行っている研究者に対して並列計算の普及を行うことが出来た。

②若手海外派遣

大学院生及び若手研究者の海外研修支援を行い、国際交流を活性化して、グローバルな人材育成を実施。以下に、派遣者の報告を掲載する。

・ 派遣者: 設楽一希、炭谷晃史 (京都大学大学院工学研究科)

期間: 平成 26 年 7 月 4 日～8 月 3 日

派遣先: Department of Materials Science and Engineering Iowa State University (米) Professor Krishna Rajan 研究室

Krishna Rajan 教授の下、情報学に基づいた材料物性の予測手法を学んだ。分析手法としては主に主成分分析、クラスター化を、回帰手法としては主として、部分線形二乗法、LASSO 回帰、ランダムフォレストを習得した。並行して我々の所持している融点データベースに対して学んだ手法を適用し、それによりそれぞれの手法のメリット・デメリットを実感できた。また、データベースの一部を変更する、滞在研究室のデータベースと組み合わせる等を行ったのち、同様の分析を行うことでデータベース本体による影響についても学んだ。このように様々な分析・予測手法などを習熟でき、今後の研究に対し非常に有意義なものであった。

・ 派遣者: 小野頌太(横浜国立大学研究教員)

期間: 平成 26 年 1 月 4 日～3 月 30 日

派遣先: Department of Physics, University of California, Berkeley (米) Steven G. Louie 研究室

Steven G. Louie 研究室にて共同研究を行った。近年、金属において過渡励起子と呼ばれる新奇素励起子が観測された。従来の励起子理論では、その動力学を扱うことが困難であり、新規理論の構築が急務である。我々は、電子ホール対密度の外場に対する線形応答理論を展開し、電子ホール対に働く引力相互作用および遮蔽効果を理論に取入れ、励起子密度を第一原理的に定義した。この定義に基づくと、過渡励起子の概念が自然に導出され、その動力学研究が可能となる。理論を均一電子ガスの励起子に適用した結果、Wigner-Seitz 半径が増大すると過渡励起子の寿命が長くなるという妥当な結論を得た。本成果は、励起子動力学に対して新しい視座を与えるため、今後の物性論の発展に大きく貢献することが期待される。

iv) International HPC Summer School 2014

6月1-6日 Budapest, Hungaryにて開催

各分野から推薦を受けた物性分野 五十嵐/東大物性研、分子分野 野村/慶応大、材料分野 高橋/京大の三名が、選出され、本サマースクールで学んだ。また講師としても、東大常行教授も参加した。

基本的に午前中に講義、午後の実習というプログラムであり、内容は、スーパーコンピューターを用いた計算科学分野の研究紹介、並列プログラミング、アクセラレータ利用、プログラムの性能測定と最適化手法、可視化、数値ライブラリと多岐にわたり、計算科学及び計算機科学の最新情報を幅広く得ることができた。実習ではアクセラレータ利用コースとそれ以外のコースの2つを選ぶことができた。ポスターセッションや、テーマごとに分かれて食事をしながらディスカッションをする時間もあり、参加者間のコミュニケーションを図ることもできた。特にアクセラレータ(GPGPU、Xeon Phi)利用の実習では、実際に米国で正式運用中でアクセラレータが利用できる10ペタフロップス級のスーパーコンピューター BlueWaters を用いて、CPUとは異なる点を実際にプログラミングを行いながら学ぶことができ、今後のエクサスケール計算機利用を考えるうえで、非常に重要な知見を得た。

なお、CMSI 統括責任者である東大常行教授も講師として招へいされ、参加した。

2) 社会人教育

OCTA 講習会・トレーニング (報告書10)

2014年3月4日(水)10:00-17:00に、(独)産業技術総合研究所 臨海副都心センター 本館第1会議室にて、「OCTA 講習会&トレーニング」を、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、会場のキャパシティの関係で定員50名のところ、大学関係者8名および企業関係者42名の計50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55名で、過去に開催したOCTA講習会の中では最大の人数となった。

講習会の内容は、午前にOCTAの概要(産総研 森田氏)、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)に関する講義を行い、午後には、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 大島氏、講師と世話人)。講習会の内容は、昨年に引き続きOCTAの利用法を解説した成書である「高分子材料シミュレーション ―OCTA活用事例集―」(化学工業日報社)の内容を利用しつつ、本講習会尾の独自の教材も多数用いた内容で実施した。

参加者数は昨年度の29名から会場の定員一杯の55名へと大幅に増加しているが、昨年に引き続き大学関係者の参加がまだ少ない点が、今後改善を要すると思われる。一方で、企業研究者の参加は依然活発で、OCTAが企業の現場で関心を持たれていることが解る。

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

①CMSI 教育コンテンツ配信講義 - CMSI 計算科学技術特論B (報告書1)

4月10日～7月24日 全15回

配信元: 大阪大学大学院基礎工学研究科 G棟

配信先: 11 機関 14 拠点(東北大青葉山・片平、産総研、筑波大、金沢大、豊橋技術科学大、総合研究大学院大学(分子研)、名古屋大、京都大、大阪大吹田・豊中、神戸大(CMSI 神戸拠点)、東大本郷・柏・駒場)

4月10日～7月24日 全15回 (詳細は、報告書参照)

人材育成カリキュラムの具体的な講義の2つ目として、計算科学技術特論 B を実施した。本講義は、大阪大学豊中キャンパスを配信元として、CMSI で設置した MCU を利用して全国11機関14拠点(東北大青葉山・片平、産総研、筑波大、金沢大、豊橋技術科学大、総合研究大学院大学(分子研)、名古屋大、京都大、大阪大吹田・豊中、神戸大(CMSI 神戸拠点)、東大本郷・柏・駒場)に配信し、双方向のオンラインシステムで実施した。全講義の動画とテキストは CMSI の HP で一般公開されている。動画の再生は多いものでも 200 回程度であるが、slideshare で公開しているテキストについては 2000 回近く見られており、多くの講義で 1000 回以上見られている。動画を長時間見るよりも、手軽にテキストを参考にする人が多いと思われるが、そういう人が当日の参加者の約 10 倍以上いることを示していると考えられる。

大阪大学では、本講義を基礎工学研究科から正式な講義として立ち上げ、ナノサイエンスデザイン教育研究センターで実施している大学院生向けの副専攻・副プログラムの認定科目としても登録している。出席とレポートによって判定し、昨年の計算科学技術特論 A に続いて、今年度も 3 名が単位取得した。

本講義の内容としては、開発者養成のための基礎知識という位置づけにし、初心者ではなく京コンピュータなどのスパコンでの開発に向けて、ある程度の開発経験者を対象としている。計算科学技術特論 A との違いは、一般的な MPI や OpenMP の話ではなく、アプリケーションの性能向上させることに焦点を集中した内容を最初に行い、A では取り扱わなかった高速フーリエ変換、オーダー N 法を入れた。古典分子動力学法と量子化学計算についても、A とは異なった通信負荷の軽減に焦点を当てた開発やオーダー N 法を採用した量子化学計算という内容になっている。そして、最後の2回は現在の HPC の重要な内容である GPU とメニーコア CPU について企業の方に講義を依頼した。

講義後のアンケートでは、概ね好評であった。HP で動画とテキストを公開していることで、当日参加できない人にも知識を提供出来ていることはアクセス数から確認出来ている。その数もかなり多く、特に Slideshare で公開しているテキストのアクセス数は多いものは 2000 回近くある。内容的にある分野に偏ったものでも 500 回を超えている。これらデータから、潜在的にこのような講義に対してニーズがあることを示している。一方、個別に学生にとっては難しすぎたという話は A に続いていくつか聞いている。計算科学技術特論 A と B の二つの講義は隔年で継続する方向で考えているが、このレベルまで学生らを引き上げる講義や実習などを考えて、ポスト「京」において活躍できる人材を育成していく必要がある。

②人材育成シンポジウム (報告書7)

1月15日 第3回 CMSI 人材育成シンポジウム「応用数理と計算科学の連携Ⅱ」

配信元: 大阪大学大学院基礎工学研究科 G 棟

配信先: 10 機関 12 拠点(東北大 片平、産総研、金沢大、豊橋技術科学大、分子研、名古屋大、京都大、大阪大吹田・豊中、神戸大(CMSI 神戸拠点)、東大本郷・柏)

昨年に引き続き、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターで第 3 回人材育成シンポジウムを1月15日に開催した。今回は「応用数理と計算化学の連携Ⅱ」と題し、10 機関 12 拠点(東北大 片平、産総研、金沢大、豊橋技術科学大、分子研、名古屋大、京都大、大阪大吹田・豊中、神戸大(CMSI 神戸拠点)、東大本郷・柏)に配信して行った。参加者は、全国で31名であった。

今回は、数値解析分野と計算科学分野の連携の成功例として、鳥取大の星健夫准教授に「京」での1億原子電子状態計算を実施できるアプリケーションの開発を、物理側から如何にして大行列計算のソルバーなどを開発したか、そこでの数値解析の専門家との連携について講演をお願いした。それに数値解析側から連携された名古屋大学の宮田考史助教、張紹良教授に、物理側からのニーズに対してどのようにアルゴリズムを開発したかについて講演をお願いした。そして、筑波大学の櫻井鉄也教授には、新しいタイプの状態密度計算手法につ

いて紹介いただき、超並列固有値解析の進展の様子を講演いただいた。

内容的にかなり高度な数値解析アルゴリズムや数学的内容も含まれていたが、ポスト「京」も世界の動向も超並列計算機に加速がかかることは間違いない中で、技術的なものというよりも学術的な進展によって HPC を進めるということは極めて重要であり、その先端的な内容を紹介できた。

(2) 東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点

①”金属の計算材料物性” – マルチスケールのアプローチ セミナーシリーズ (報告書 4)

10月7日～11月7日 全8回(7,8回は配信セミナー)(詳細は、報告書参照)

実施場所、配信元: 東北大学青葉山キャンパス理学合同 B棟7階743室

配信先: 10機関13拠点(東北大青葉山・片平、産総研、金沢大、豊橋技術科学大、分子研、名古屋大、京都大、大阪大吹田・豊中、神戸大(CMSI 神戸拠点)、東大本郷・柏)

マルチスケール計算材料科学をキーワードに、第一原理計算から、平均場計算・フェーズフィールド法・CALPAD 法など、マイクロからマクロなスケールまでを俯瞰できるプログラムでのセミナーを東北大学教育拠点と合同で実施した。特に、最終日の第7-8回は、講師として大学と企業からそれぞれ1名を招聘し、大学での基礎研究及び企業での最先端の応用や要請も含めた講演の配信セミナーとした。第1回-6回は毎回20名程度、配信セミナーの第7-8回は42名(うち産5官3)の参加があった。配信セミナーでは、特に産官学の幅広い参加があり、全てのセクターへの計算材料科学の配信を進めることが出来た。また、全セミナー終了後、受講者より計算材料科学についての教育・人材育成に関するアンケートを実施し、セミナー実施の効果やセミナー実施形態への要望、今後のニーズを調査した。

②その他

平成25年度青葉山キャンパス理学部に設置したTV会議システムにより、平成26年度から配信講義受講場所として、研究所主体の片平キャンパス(金属材料研究所)のみならず工学研究科と理学研究科の大学院生の多くが在籍する青葉山キャンパス(理学部)を選択することが可能となり、平成25年度に比べ、平成26年度の配信講義受講者数が増加した。

(3) 神戸大学大学院システム情報学研究科

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。CMSI 神戸分室において、GAMESS-FMO プログラムによるFMO計算と、FMO計算支援ソフトウェアFUの講習会を実施した。

(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」を前期に開講し、分子動力学(MD)シミュレーションの基礎理論から最新の計算例に至るまでについて15コマの講義を通して解説した。工学研究科の同専攻をはじめ、理学研究科、情報科学研究科からの出席もあり受講者数は58名であった。また、名大の大学院生を対象とした並列計算プログラミングの習得を目的としたオムニバス形式の講義・実習科目「大規模並列数値計算特論」を開講し、MD計算の高速化・並列化を解説した。受講した51名のために名大情報基盤センターのスパコンにアカウントを取得し、これを用いた実習によってMPI、スレッド並列を駆使した並列プログラミング技術を修得した。また、最新の計算科学の発展についての解説を行う大学院のオムニバス講義「計算科学フロンティア連続講義」や学部留学生向けの「Advanced Physical Chemistry」においては、分子シミュレーションの歴史から京スパコンを用いた最新の研究成果に至るまでを紹介した。この他、CMSIの配信講義「CMSI計算科学技術特論B」やTCCI主催の分子シミュレーションスクールにおいて、MD計算の原理や並列化技術についての講義を担当した。

テレビ会議システムを用いた CMSI の配信については、「CMSI 計算科学技術特論 B」や、「”金属の計算材料物性” - マルチスケールのアプローチ」(東北大)、「第3回 CMSI 人材育成シンポジウム 応用数理と計算科学の連携 II」(阪大)を名大において受信・中継した。

この他、慶應義塾大学三田キャンパスにて 11 月に開催された CMSI 協賛の MD 計算関連の国際シンポジウム「International Symposium on Extended Molecular Dynamics and Enhanced Sampling: Nosé Dynamics 30 Years (NOSE30)」(参加者 130 名)に実行委員として参加した。

(5) 東京大学大学院工学系研究科

2012 年より工学系研究科・理学系研究科共通科目として開講している「物質科学のための計算数理 I、II」を今年度も開講した。前期の計算数理 I で(2014 年 4 月 4 日～7 月 25 日)は東大情報基盤センター大演習室 2(端末 40 台)で講義を行った。開講当初に比べ、他学科においても計算機端末を用いた講義が増えたためか、演習室の予約の競争が激しくなっており、今年度は端末数の少ない部屋を使わざるを得なかった。可能な学生には自前のノート PC を持参してもらうことで実習形式の講義を行うことができたが、今後、端末を確実に確保するための環境改善が望まれる。計算機や Fortran プログラムの基礎的な事項から、OpenMP を用いた並列計算、MPI を用いた並列計算の簡単なプログラムが作れるようになるまでを、演習も交えながら講義した。後期の計算数理 II(2014 年 10 月 3 日～2015 年 1 月 30 日)では、より実用的な物質科学のアプリケーションの中身を知るといった目的で、量子モンテカルロ法および平面波基底による第一原理電子状態計算のプログラムの開発を行った。講義の途中でゲスト講師として筑波大学計算科学研究センターの高橋大介教授をお招きし、高速フーリエ変換についての講義を行っていただいた。最終的に前期 50 名程度、後期 10 名程度の学生が単位を取得した。

正規の授業とは別に、阪大で配信されている計算科学技術特論 B をセミナーという形式で本郷でも開講した。毎回 10 名弱の参加者があり、東大の学生のみならず、企業からの参加者もあった。場所は東京大学工学部 6 号館を利用した。時折音声等が途切れるトラブルがあったが、概ね問題なく開講できた。

(6) 東京大学大学院理学系研究科

平成 26 年度、東京大学大学院理学系研究科(理学部物理学科)では、学部 3 年生(71 名)に対して、「物理学実験 I」の中の計算機実験のカリキュラムを通じ、ネットワーク上での作業やプログラミング基礎の教育を行った。台形公式等の基礎的な事項の後、プログラミングの物理的な応用例として、微分方程式の解法を学習した。また 3 人 1 組にグループ分けをして、プログラムのコードレビューと速度比較も行った。

また本専攻の諏訪と藤堂眞治氏は、松尾春彦氏(RIST)、五十嵐亮氏(物性研)と共同で、強相関量子格子模型シミュレーションのためのオープンソースソフトウェア ALPS (<http://alps.comp-phys.org/>)に関するハンズオンを 10/16(木)に物性研究所で行った(http://www.cms-initiative.jp/ja/events/20141016_alps)。古典モンテカルロ法や量子モンテカルロ法等を例にした ALPS アプリケーションの利用法と、自前のプログラムを様々な格子やモデルに応用するための ALPS ライブラリの利用法を学習した。また講習会で用いた資料の公開も行っている(<http://sourceforge.net/projects/alps-tutorial/files/>)。

(7) 東京大学 物性研究所 神戸拠点

神戸大学大学院システム情報学研究科の大学院講義「大規模シミュレーション総論 II」の一部を担当(担当:尾崎泰助、1 コマ分(2014 年 10 月 30 日))し、情報科学、計算機科学を専攻する学生を対象として物質科学における第一原理電子状態計算手法とその応用例を紹介した。CMSI 計算科学技術特論 B の第 9 回(2014 年 6 月 5 日)と第 10 回(2014 年 6 月 12 日)を担当(担当:尾崎泰助)し、第一原理電子状態計算におけるオーダー N 法とその応用事例に関して講義を行った。

2.2.1 当該年度(平成26年度)における研究成果

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、等)

1) 計算物質科学の分野振興

i) CMSI 全体行事

(1) 全体

①第5回 CMSI 研究会 (報告書13)

12月8-10日 東北大学金属材料研究所にて開催した。本研究会は、CMSI 研究課題全ての発表が義務付けている成果報告会でもある。平成26年度は10月で「京」が稼働して1年が経過し、昨年度に比べて格段に「京」を利用した成果が出ていることが伺えた。参加者の専門領域は多岐にわたるが、共通課題である「京」利用のための高度化技術や、計算手法等の情報共有がなされた。本研究会は、参加者間で新たな共同研究を検討する場も提供している。

CMSI研究会では、40才以下の若手研究者を対象に優れた研究発表に贈る「ポスター賞」「若手奨励賞」「ビジュアル賞」を設定し、若手研究者はそれぞれ工夫を凝らして発表を行った。審査の結果、ポスター賞他受賞者は、以下の通りである。

第5回 CMSI ポスター賞、若手奨励賞、ビジュアル賞受賞者と課題内容:

氏名	所属	課題名
・CMSI ポスター賞		
西原 泰孝	東京大学	「Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics と Markov State Model を用いたタンパク質構造変化の自由エネルギー計算」
・CMSI 若手奨励賞		
袖山 慶太郎	京都大学	「第一原理分子動力学法を用いた高濃度リチウムイオン電池電解液の還元反応解析」
・CMSI ビジュアル賞		
矢ヶ崎琢磨	岡山大学	「塩水中のメタンハイドレートの分解機構」

②ポスト「京」物質科学関連課題検討会 (報告書12)

9月28日ステーションコンファレンス東京にて開催した。理化学研究所 AICS にて、平成26年度よりポスト「京」の開発がスタートしており、「京」で開発している研究課題や、アプリケーションの開発を、今後、開発がすすめられる次の世代の計算機にどのように結び付けていくのかが、今後の課題となっている。そのため、CMSI で実施している計算物質科学の研究課題において、次世代の計算機利用に対して具体的にどのような課題があるかを検討するため、本会議を開催した。「京」の成果をより発展させるためには、さらなる計算機の並列化向上とアプリケーションの改良が必要であることが議論された。

③「京」からポスト「京」に向けた 分野融合型基礎研究検討会 基礎科学のフロンティア 極限への挑戦

(報告書14)

1月16日ステーションコンファレンス東京にて開催した。CMSI では基礎課題として「新量子相・新物質の基礎科学」を推進しているが、「京」のシステムサイズではまだ解けない課題が山積している。また、他の分野においても、同

様であり、基礎部分に関しては、分野間の融合にて取り組んだ方がより、俯瞰的な学問としての取り扱いが可能となる。そこで、分野融合型の基礎研究を今後どのように推進していくのかを検討するため、本会議を企画した。各分野で実施されているマルチスケールの科学を融合させることで、地球のプレートやマントル、岩石や人工物の破壊、それが分子原子の欠陥等に影響を与えるところまでつなげて考えられることが議論された。また、破壊現象以外に、流体と相転移や量子、極限環境における基礎科学は分野を超えて議論していくべき課題であることの意志を共有した。

④CMSI 第一部会「新物質・新量子相の基礎科学」夏の学校 2014（報告書11）

8月18-21日 滋賀県高島市白浜荘にて開催

CMSI 第1部会では、部会の枠を越えて共通する科学的興味と課題を共有し、課題解決へ向けた議論を継続的に行うため、毎年中心課題を選定してサマースクールを行っている。専門家を講師として、また若手研究者を話題提供者として招き、参加者全員が参加し課題解決に向けた活発で濃密な議論を行うことを目指している。平成26年度は、光合成系を始めとする励起状態を介したエネルギー変換やそれと関連する光励起ダイナミクスを中心課題とし、光と熱制御をめぐって抽出される基礎科学的課題をテーマに設定した。本サマースクールは下記のプログラムの通りに開催され、招待講演者、若手研究者および大学院生を含む33名が参加した。

招待講師のよる講義(Lecture、実験家による講演を含む計7件)と第1部会の研究者を始めとする若手による講演(6件)を中心に、活発な意見交換が行われた。テーマは多岐にわたり、高効率太陽電池の設計、励起状態での分子間相互作用、動的平均場理論の基礎、光電子分光やESR分光法、トポロジカル絶縁体や強相関電子系のための電子状態理論など、将来のデバイスへの応用が期待される物理・化学現象の理論から、理論との協調による現象解明が期待される実験手法が講義され、活発な議論が行われた。とくに、強相関系の電子状態理論による計算結果と複雑な電子状態をもつ光合成系のESR法による実験結果の比較や、分子科学の強相関電子状態理論と物性物理の強相関電子状態理論の相互の適用可能性に関する議題が注目を集めた。

CMSI 第一部会 夏の学校 2014 スケジュール

	8/18	8/19	8/20	8/21	8/22
- 9:30		Breakfast	Breakfast	Breakfast	Breakfast
9:30 - 10:30		Lecture 2-2	Lecture 4-2	Lecture 6-2	Lecture 7-2
10:30 - 11:00		Break	Break	Break	Break
11:00 - 12:00		Lecture 3-1	Lecture 5-1	Lecture 7-1	Farewell
12:00 - 13:30	Welcome	Lunch	Lunch	Lunch	Lunch
13:30 - 14:30	Lecture 1-1	Lecture 3-2	Lecture 5-2	Free discussion	
14:30 - 15:00	Break	Break	Break		
15:00 - 16:00	Lecture 1-2	Lecture 4-1	Lecture 6-1		
16:00 - 16:30	Break	Free discussion	Free discussion		
16:30 - 17:30	Lecture 2-1				
17:30 - 18:00	Break				
18:00 - 20:00	Dinner	Dinner	Dinner	Dinner	
20:00 - 21:00	Short Talk 1, 2	Short Talk 3, 4		Short Talk 5, 6	
21:00 - 24:00	Free discussion	Free discussion	Free discussion	Free discussion	

Lecture 1	金光 義彦 教授	ナノ材料の光機能と高効率太陽電池の設計
Lecture 2	長谷川 淳也 教授	励起状態と分子間相互作用
Lecture 3	大槻 純也 助教	動的平均場理論の基礎と最近の発展
Lecture 4	石坂 香子 准教授	光電子分光
Lecture 5	村上 修一 教授	固体のバンド構造とトポロジカル相
Lecture 6	三野 広幸 准教授	電子スピン共鳴法で見る酸素発生系マンガングラスターの構造
Lecture 7	倉重 佑輝 助教	分子多参照電子状態

Short Talk 1	大塚 勇起 特命講師	モデル空間量子モンテカルロ(MQMC)法の開発と応用
Short Talk 2	上島 基之 特命助教	発光材料における無輻射失活と再配列エネルギー
Short Talk 3	三澤 貴宏 助教	ハバード模型における高温超伝導
Short Talk 4	山地 洋平 特任講師	イリジウム酸化物のトポロジカルな性質
Short Talk 5	中谷 直輝 特任助教	テンソルネットワークの分子系への適用
Short Talk 6	大久保 毅 特任研究員	テンソルネットワーク法による量子スピン模型の基底状態計算

(2) 国際会議:

①CMSI International Workshop 2014: Tensor Network Algorithms in Materials Science (報告書15)

10月20-22日 理化学研究所計算科学研究機構(AICS)にて開催

本ワークショップは、物性物理や量子化学等の分野で近年注目を集めている「テンソルネットワーク」をテーマとして、海外から7名、国内から40名近くの研究者が集まり、神戸の計算科学研究機構で開催された。ワークショップでは、多体量子系の基底状態におけるエンタングルメント、行列積状態、密度行列繰り込み群、PEPS (Projected Entangled Pair State)など、テンソルネットワークの基礎理論から、量子化学計算、強相関量子系、相転移と臨界現象、不純物問題、格子ゲージ理論にいたるまで幅広い分野への応用が紹介された。さらには、シミュレーションにおける演算量の最適化、計算精度のテンソルネットワーク依存性、汎用的テンソル計算や並列SVDソルバーのライブラリ開発といった、計算科学的な観点からの興味深い講演も数多くなされ、若手を中心に活発な議論が展開された。

②CMSI International Workshop on Multiscale Computational Materials Science (報告書16)

11月10日(月)-11日(火) 東北大学金属材料研究所にて開催

CMRI 研究会との同時開催とした。53名の参加があり、招待講演4件、一般講演6件、特別講演1件を行っ

た。マイクロからマクロなスケールにわたる全電子第一原理計算、分子動力学法、定量的なフェーズフィールド法など様々な時空間スケールを取り扱う理論的手法の開発や改良、融合、さらに、これらの手法を用いた大規模数値計算によって、マルチスケールにわたる材料の様々な特性やプロセスの問題などを解明するために、この分野の最先端で活躍している4名の専門家(うちドイツ2名、米国2名)を海外から招聘し、国内の計算材料科学研究者とともに最近のマルチスケール計算材料科学の進展と今後の方向性について議論を行った。

③CMSI International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations — Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems (報告書17)

2月18-21日 東京大学大本郷(2月18日 工学部講義室、2月19-21日小柴ホール)にて開催

強く相互作用する多体フェルミ粒子系は物性物理学、量子化学、原子核物理に共通する中心的課題であり、その未解明の性質に迫ることは数値計算科学のグランドチャレンジの一つとなっている。本ワークショップでは、このグランドチャレンジに挑む研究者が国と分野を横断して集い、物性物理学、量子化学、原子核物理の3分野に共通する多体問題の数値解法について活発な議論を行い今後への展望を話し合った。

ワークショップは4日間にわたり、21の招待講演に加え、18の一般講演、40のポスター発表が行われた。以下に招待講演者リスト及びプログラムを示す。

招待講演者 (21名):

Paul Ayers (Department of Chemistry, McMaster University, Canada)

Silke Biermann (Ecole Polytechnique, France)

George Booth (King's College London / University of Cambridge, UK)

Garnet Kin-Lic Chan (Department of Chemistry, Princeton University, USA)

George Fann (Oak Ridge National Laboratory, USA)

Stefano Gandolfi (Theoretical Division, T-2, Los Alamos National Laboratory, USA)

Emanuel Gull (Department of Physics, University of Michigan, USA)

Hiroshi Nakatsuji (Quantum Chemistry Research Institute, Japan)

Takashi Nakatsukasa (Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Japan)

Hidekatsu Nemura (Faculty of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba, Japan)

Tomotoshi Nishino (Department of Physics, Kobe University, Japan)

Takashi Oka (Department of Applied Physics, University of Tokyo, Japan)

Roman Orus (Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität, Germany)

Junya Otsuki (Department of Physics, Tohoku University, Japan)

Noritaka Shimizu (CNS, University of Tokyo, Japan)

Toru Shiozaki (Department of Chemistry, Northwestern University, USA)

Gustavo E. Scuseria (Department of Chemistry & Department of Physics and Astronomy, Rice University, USA)

Sandro Sorella (SISSA, Trieste, Italy)

Naofumi Tsunoda (Department of Physics, University of Tokyo, Japan)

James P. Vary (Department of Physics and Astronomy, Iowa State University, USA)

Takeshi Yanai (Institute for Molecular Science, Japan)

プログラム:

Eng. Bldg.2		Sc. Bldg.1			
Room #212	Feb. 18	Koshiba Hall	Feb. 19	Feb. 20	Feb. 21
	9:00 Registration				
	9:45 Opening		9:30 Invited	Invited	9:30 Invited
	10:00 Invited		Nemura	Nishino	Vary
	Nakatsuji		10:10 Invited	Invited	10:10 Invited
	10:40 Invited		Fann	Yanai	N. Tsunoda
	Ten-no		10:50 Break	Break	10:50 Break
	11:20 Ochi		11:20 Anderson	Invited	11:20 Y.Tsunoda
	Nomura		11:40 Invited	Shiozaki	Kim
	12:00 Lunch		12:00 Otsuki	Okubo	12:00 Yamaji
			12:20 Lunch	Lunch	12:20 Lunch
	13:30 Invited				
	Scuseria		13:50 Invited	Invited	13:50 Invited
	14:10 Invited		Sorella	Gull	Nakatsukasa
	Ayers		14:30 Morita	Invited	14:30 Yonehara
	14:50 Mizusaki		14:50 Nasu	Orus	14:50 Yamada
	15:10 Break		15:10 Break	Break	15:10 Invited
	15:40 Invited		15:40 Invited	Invited	Oka
	Gandolfi		16:00 Chan	Biermann	15:50 Maezono
	16:20 Invited		16:20 Invited	Nakamura	16:10 Closing
	Shimizu		16:40 Booth	Shinaoka	
	17:00 Togashi		17:00 Sakai		
	17:20 Harada		17:20	Poster session	
			18:00 Banquet		
			20:00		

また、本ワークショップの組織委員は以下のメンバーである:

今田正俊 (東京大学)、大塚孝治 (東京大学)、天能精一郎 (神戸大学)、川島直輝 (東京大学物性研究所)、山地洋平 (東京大学)、藤堂眞治 (東京大学)、大西裕也 (神戸大学)、大越孝洋 (東京大学)



④第4回超並列化技術国際ワークショップ International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics (量子化学・第一原理物性計算プログラミングナウ) - Toward post-K computers (報告書16)

11月23日(日)、24日(月) 東京大学大本郷 工学部にて開催。今年度は、化学・物理で共同し追加予算を得たため、2日間に拡大し、海外の研究者3名、国内の研究者9名の招待講演に加えて、参加者も含めたポスター発表も行った。このため、講演者・参加者の間で高速化手法などについて時間を掛けた情報交換・議論が行われた。

ii) 計算物性科学研究センター(CCMS)

①物性研国際滞在型ワークショップ「強相関係物理の新展開」 ISSP International Workshop “New Horizon of Strongly Correlated Physics” (NHSCP2014)

6月16日-7月4日 東京大学物性研究所にて開催、シンポジウム 6月25-27日

物性研究所主催による滞在型国際ワークショップは2006年に始まり、東日本大震災のあった2011年を除いて毎年開催しており、第8回目となる今年は、強相関係理論の最近の進展をテーマに New Horizon of Strongly Correlated Physics(NHSCP2014)と題して、6月16日から7月4日までの3週間にわたり開催した。今回のワークショップおよびシンポジウムにおいて、最近の強相関係の理論および数値計算の進展が議論された。3日間のシンポジウムは、物性研短期研究会「強相関係物理の新展開:シンポジウム」の形式で行われ、33件の口頭講演および17件のポスター発表があった。それ以外のワークショップ期間においては、1日に2コマ程度の余裕を持ったスケジュールで計21件の講演が行われ、当該分野の最新成果に関して国内外の参加者による精力的な討議が行われると同時に、自由時間を活用した様々な情報交換や共同研究が行われた。シンポジウムの延べ参加者は272名、12日間のワークショップ期間中は328名、合計延べ600名の参加があり非常に盛況であった。

②物性研究所計算物質科学研究センター 第4回シンポジウム・物性研スーパーコンピュータ共同利用報告会 (報告書20)

11月12-14日 東京大学物性研究所にて開催した。平成26年度は、物性研スパコン共同利用スパコンの現システム A, B の最終利用年度にあたり、平成27年度は「京」と同等クラスの2ペタ級のスパコンが導入される。そのため、「京」の規模で研究開発されている研究やアプリケーション開発が、平成27年度からは物性研スパコンで実施できることになる。そこで、平成26年度はスパコン共同利用の成果報告会と「京」の研究をリードする計算物質科学センター(CCMS)シンポジウムを合同で開催した。本研究会は、物性研スパコンの共同利用ユーザに加えて、他の計算機物質科学や物性実験の研究者を交え、最新の研究成果の情報交換をするとともに、大規模計算の研究の産業応用、今後のさらなる物質科学の研究の発展の方向について議論した。その結果、「京」で可能となること、さらに次世代の計算機が必要であることが議論され、実験の再現や予測が一部可能となっており、さらなる発展が期待されることが議論された。

③ポスト「京」で取り組む計算物質科学関連課題に関する説明会(第1回)(報告書19)

8月30日 東京ステーションコンファレンスにて第1回、8月31日に分子研にて、同内容で2回目を開催した。「京」で取り組んでいる研究課題の成果を実現するとともに、次の世代の計算機、ポスト「京」にも課題を引きついでいかなければならない。文科省が主体で実施していた「ポスト「京」で実施すべき課題」の最終答申が報告され、その中の計算物質科学関連課題は、現在実施しているCMSIの重点課題との関連性が高い。そこで、ポスト「京」でのこれらの課題がどのようにして検討されてきたのかを、文科省の委員会での内容をコミュニティに対して説明するとともに、提示された研究課題に、どのように対応していくべきかを、実験家や企業の方を交えて検討した。アプリケーション開発コストが増大している現在、これまで蓄積されてきた機能やノウハウは継続して活用すべきとの意見が出された。

④xTAPP Developers Meeting 2014 (報告書18)

8月27日 東京大学本業キャンパス理学部にて開催

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理電子状態計算ライブラリ xTAPP は、2013年4月に GPL ライセンス(ver.3)によって公開され、物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps にも掲載されてユーザ数を増やしつつある。今後は xTAPP の出力を利用したポストプロセス等、周辺プログラムの開発・公開も加速されることが期待される。そこで xTAPP 本体や周辺プログラムの開発をより効果的・効率的に進めるため、情報交

換の場として本ミーティング開催した。

⑤CCMS ハンズオン講習会

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター(CCMS)では、平成 26 年度、以下の 5 回のハンズオン講習会を行った。毎回 4 名から 16 名までの参加があり、ソフトウェアの開発者による講義と、東京大学物性研究所で CMSI が利用している PC クラスタ Psi および GPGPU クラスタ psitesla を利用した実習を行った。参加者は、計算物質科学分野の大学院生や各研究機関研究員だけでなく、企業研究者や気象の関係者等、幅広い参加があった。

第 5 回 7 月 30 日 CCMSI 柏ハンズオン: AkaiKKR チュートリアル (報告書21)

講師: 赤井久純(東大物性研)、土居抄太郎(東大物性研)

第一原理計算ソフトウェアである AkaiKKR について、理論の基礎から合金系の磁性の計算実習まで、初級者に向けた講習会を行った。

8 月 28 日 CMSI ハンズオン(本郷): OpenACC 2.0 による GPGPU コンピューティング (報告書22)

講師: Michael Wolfe (The Portland Group)

OpenACC を実装したコンパイラの開発者から、GPGPU の基礎と今後の発展の方向性についての講義と、サンプルプログラムの OpenACC 化の実習をおこなった。

第 6 回 10 月 16 日 CCMS 柏ハンズオン: ALPS チュートリアル) (報告書23)

講師: 藤堂眞治 (東大院理/物性研)、松尾春彦 (RIST)、諏訪秀磨 (東大院理)

量子格子模型のシミュレーションソフトウェアである ALPS について、初級者に向けての講義と、厳密対角化、モンテカルロシミュレーションのチュートリアルの実習を行った。

第 7 回 12 月 17 日 CCMS 柏ハンズオン: feram チュートリアル (報告書24)

講師: 西松毅(東北大金研)

強誘電体のシミュレーションプログラムである feram について、基礎理論の講義および、ヒステリシスループなどの計算実習を行った。

第 8 回 3 月 11 日 CCMS 柏ハンズオン: OpenMX チュートリアル) (報告書25)

講師: 尾崎泰助(東大物性研)

第一原理計算ソフトウェア OpenMX について、理論の基礎から、シリコンのバンド図の作成などの実習まで、初級者に向けた講習会を行った。

iii) 計算分子科学研究拠点(TCCI)

分野振興のため、図2. 2. 1. 2(3). 1に示す研究会・シンポジウム等を開催した。

行事名	開催日程	場所
TCCIインフォーマル研究会	2014年5月21日(水)	名古屋大学(東山キャンパス)ES総合館 ESホール(名古屋市)
	参加者数: 81名(内、民間企業7名)	
第2回TCCIインフォーマルミーティング	2014年9月27日(土)	名古屋大学(東山キャンパス)ES総合館 ES会議室(名古屋市)
	参加者数: 43名(内、民間企業3名)	
TCCI第5回研究会 (実験化学との交流シンポジウム 兼)	2014年10月17日(金)、18日(土)	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: 69名(内、民間企業3名)	
第3回TCCIインフォーマルミーティング	2014年10月12日(日)	イオンコンパス名古屋駅前会議室 5F ROOM A (名古屋市)
	参加者数: 24名(内、民間企業1名)	
TCCI第4回産学連携シンポジウム/ 産応協第31回産応協スパコンセミナー(共催)	2015年1月23日(金)午後	東大弥生講堂一条ホール(東京都文京区)
	参加者数: 85名(内、民間企業48名)	

図2. 2. 1. 2(3). 1 TCCI 開催・共催した研究会・シンポジウム

①計算分子科学研究拠点 第5回研究会(報告書31) 招待講演の予稿集あり。

10月17日(金)、18日(土)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。今年度は、予算削減などの影響のため、「実験化学との交流シンポジウム」も兼ねて開催した。このため、実験研究者5名、ポスト「京」開発リーダー1名の招待講演を行い、TCCI からの報告9件を行った。実験サイドから計算科学への期待・要望等も含めて、情報交換、議論が行われ、興味深く有意義なシンポジウムとなった。

②TCCI 第4回産学連携シンポジウム「HPCの利用と成果と人材」(報告書32)

産応協「第31回スーパーコンピューティング・セミナー」 「触媒研究開発における理論・計算化学の貢献について」

1月23日(金) 東京大学弥生講堂一条ホールにて開催。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の推進を目的としている。今回は、「触媒研究開発における理論・計算化学の貢献について」をテーマとし、民間企業の団体であるスーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)と、共同開催することになった。また、京大触媒・電池元素戦略拠点(ESICB)も協賛を頂き、ESICB からの講演を中心に、三井化学からは民間企業からの事例紹介のご講演が行われた。産応協との共同開催としたこと、民間企業の関心の高いテーマであったため、従来以上の多くの民間企業の方々にご参加頂いたことは大きな収穫であった。

③第1回 TCCI インフォーマルミーティング (報告書27)

5月21日(水)、名古屋大学ES総合館 ESホールにて開催。

④第2回 TCCI インフォーマルミーティング (報告書29)

9月27日(土)、名古屋大学ES総合館1F大会議室にて開催。

⑤第3回TCCIインフォーマルミーティング (報告書30)

10月12日(日)、イオンコンパス名古屋駅前会議室5F ROOM Aにて開催。

平成25年度まで、文部科学省が行ってきた調査研究を基に、次のスーパーコンピュータとしてのポスト「京」プロ

プロジェクトが開始された。これに対応してポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の検討に向けて、今後、HPCI 戦略分野で何を行っていくべきか、また成果を如何に出すべきかの観点からインフォーマルミーティングを開催し、関係者の意見の集約を図った。

⑥ポスト京向けアクセラレータについての勉強会 (報告書26)

4月17日(木)、分子科学研究所にて開催。次世代のスーパーコンピュータについて可能な限りで情報を収集し、HPCI 戦略分野でのアプリ開発にフィードバックを行うため、関係者の勉強会を開催した。

⑦ポスト「京」で取り組む計算物質科学関連課題に関する説明会(第2回)(報告書28)

8月31日 分子科学研究所にて開催

8月30日に東京で行われた第1回と同じ内容で実施。

iv) 計算材料科学研究拠点(CMRI)

①CMRI(東北大学計算材料科学研究拠点)研究会(報告書36)

(国際WS:International Workshop on Multiscale Computational Materials Science と同時開催)

11月10日(月)~11日(火)の2日間、東北大学金属材料研究所にてCMRIの年会を開催した。この内、初日から2日目のお昼までをInternational Workshop on Multiscale Computational Materials Science(上の(2)国際会議②に記載)とし、第2日目の午後からをCMRI研究会とした。参加者は53名を数え、特別講演1件、一般講演3件を行った。以下に11月11日(火)のプログラムを掲載する。

CMRI 研究会セッション

セッション1 座長: 毛利 哲夫

13:30 - 14:30 [特別講演]「研究」と「社会の課題」との間 牧野内昭武/理化学研究所

セッション2 座長: 香山 正憲

14:40 - 15:30 A-USC プロジェクトの概要 福田雅文/高効率発電システム研究所

15:30 - 16:20 A-USC 材料の非破壊評価における材料計算科学への期待

西井俊明, 森安勝浩/電源開発(株)

16:20 - 17:10 金属材料における拡散と変形の原子論的解析 尾方成信/大阪大学

”「研究」と「社会の課題」との間”なる特別講演は、講演者のVCAD開発の経緯・経験を中心に講演がなされたが、本CMRIのプロジェクト遂行の困難さと軌を一にするとともに多く、大変有用であった。又、シミュレーターの開発に対する産業界からの要請やコンソーシアムの結成などは、計算材料科学の背後での産との連携の重要性に通じるものであり、今後の連携に対して多くの示唆を得ることができた。

②CMSI 第五部会「マルチスケール材料科学」重点課題第1回研究会(報告書33)

平成26年5月28日(水)産業技術総合研究所 関西センターにて上記タイトルの研究会を開催した。

参加者数は10名(産2、官5、学3)で5件の研究報告があった。以下が主たる内容である。

始めに:香山:プロジェクトの概要、経緯、本年度の計画について概説

①澤田(新日鉄住金):TiC/Fe界面の整合界面、部分整合界面のオーダーN第一原理計算と歪エネルギーの見積もりによる遷移サイズの見積もり、実験との比較、今後の計画等について紹介

②譚田(阪大):Fe中のらせん転位芯、およびSiとの相互作用の第一原理計算について、VASPの結果との比較やポテンシャル基底・初期構造設定や緩和方法、セルなど、状況と問題点の紹介・議論

③尾崎(北陸先端大):OpenMXの概要、京での最適化、Fe用の擬ポテンシャルと局在基底の最適化についての紹介と報告

- ④板倉(原研): 転位芯の第一原理計算の方法論、Fe 中の転位芯理解の現状、課題についての詳細な報告
- ⑤香山、Sharma(産総研グループ): 局所エネルギー、局所応力法開発の現状、TiC/Fe の整合界面への適用結果の報告
- 最後に平成 26 年度の各種研究会の予定、計画、「京」の具体的な使用の打ち合わせ等を行った。

③CMSI 第五部会「マルチスケール材料科学」重点課題第 2 回研究会(報告書35)

平成 26 年 10 月 6 日(月)産業技術総合研究所 関西センターにて上記タイトルの研究会を開催した。参加者数は 8 名(産 1、官 4、学 3)で研究報告が 5 件、勉強会の発表が 2 件あった。以下が主たる内容である。

- ①研究の進行状況や今後の計画、下期の「京」での研究計画等
澤田(新日鉄住金)、譯田(阪大)、板倉(原研)、Sharma(関西産総研)
- ②ポスト「京」での構造材料等のプロジェクト提案等についての議論、香山より状況報告。
- ③勉強会、山田泰徳(東北大)及び 佐原亮二(物材機構)

④CMRI ポスト京に関する研究会(報告書34)

平成 26 年 6 月 26 日(木) 東北大学東京分室にて上記タイトルの研究会を開催した。CMSI 事務局の古宇田氏と拠点長の毛利より、ポスト京に関するこれまでの経緯と進展状況に関して説明と報告があった。現「京」プロジェクトの研究成果をポスト京へスムーズに展開する為には、「京」プロジェクトの完遂が重要であることを確認し、現時点での「京」プロジェクトの遂行状況と今後の展開に対する発表・報告を行った。参加者は 15 名で、特に若手研究者中心の発表・自由討論を 10 件行い極めて盛会であった。以下が主たる内容である。

- 14:00 ポスト京に関する経緯と進展状況の説明と報告(毛利、古宇田、寺田)
「京」プロジェクトの進捗状況と今後への展開
発表・報告者は以下の通り
澤田(新日鉄住金)、譯田(阪大)、西松(東北大)、大野(宗)(北大)、澁田(東大)、
高木(京工繊大)、小野(横浜国大)、君塚(阪大)、田中(関西産総研)、吉矢(阪大)
- 17:00 終了

2) 国際連携

CMSI 全体と CCMS:

i) The 17th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-17)

11 月 3-5 日 韓国 Yonsei University にて開催

本国際会議はアジアにおける第一原理電子状態計算分野のコミュニティ形成を促進する上で、ハイライト的なイベントである。1998 年に第 1 回会議がつくばで開催(実行委員長:寺倉清之氏)され、その後は日本、韓国、中国、台湾の持ち回りで年次国際会議として運営されている。本年度は韓国の延世大学校で第 17 回会議が開催され、200 名を超える参加者があり、大変に盛況であった。

ii) International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD2014) (報告書37)

12 月 1-3 日 東京大学本郷キャンパス小柴ホールにて開催

本国際会議は、文部科学省科学研究費補助金新学術領域「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)」の主催によって、隔年に 1 回開催されている計算物性科学と計算機科学両分野にまたがるコンピューティクス分野の会議である。CMSI の研究開発活動とベクトルを共有するもの

であり、前回、今回ともにCMSIの共催で開催されている (<http://computics-material.jp/ISC-QSD2014/> および <http://computics-material.jp/>)。今年度は標記の日時場所で3日間に亘り開催された。正式登録人数だけでも137名を数え、外国機関からの招待者7名による講演を含む全31件の口頭発表と88件のポスター発表が行われた。非日本人の参加者は20名であり、日本で開催される国際会議としては比較的国際色豊かなものであった。Princeton大学Roberto Car教授のsummary talkにあるように、コンピューティクスの研究活動に関する熱心な議論が繰り広げられた。

TCCI:

i) International Symposium on Extended Molecular Dynamics and Enhanced Sampling: Nosé Dynamics 30 Years (NOSE30) MD 計算国際シンポジウム(能勢メモリアル)

11月10日(月)、11日(火)、慶應義塾大学三田キャンパスにて開催。分子動力学シミュレーションにおける温度制御手法が、故・能勢修一教授(慶応大)によって発表されて30年となるが、“能勢の方法”は、分子シミュレーションを統計力学に結びつけたばかりでなく、拡張系の方法という新たなジャンルを確立し、当該分野で重大な影響をもたらしている。この節目の年を記念し、最新の分子シミュレーション手法に関する会議をTCCIとCCMSが共同し、関係する部会の協力も得て、また分子シミュレーション研究会ほかと連携して開催した。会議は招待講演とポスター発表から成り、招待講演ではMD手法やサンプリング手法開発の分野で活躍する研究者、海外から9名、国内から5名をお願いした。参加者は招待講演者を除いて130名、ポスター講演は70件であった。終始活発な議論がなされ、会議は盛況のうちに閉会となった。

CMRI:

i) ACCMS-VO9 (The 9th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science – Virtual Organization) (報告書38)

平成26年12月20日(土)-22日(月)沖縄科学技術大学院大学にて開催 (CMRIは共催)

ACCMSはCMRIの運営委員の一人である川添名誉教授の研究室が中心となって開催をしているものであり、この分野に活躍する外国人研究者、特にアジア地域の研究者との交流に実をあげてきた。CMRIでは、メンバーの主催する関連会議を通じて国際連携の推進を図るべく、今年度もこれまでに引き続いてACCMSの年会を支援した。参加人数は106名を数え、基調講演2件、招待講演11件、一般講演34件、ポスター発表34件と、極めて盛会であった。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

企業開発現場での計算シミュレーションの利活用の状況を窺い知る為に、経産省プロジェクト等、多くの企業が参画しているプロジェクトで中心課題となっている開発テーマや、企業委員から発案のあったテーマを個別に取り上げ、そのテーマを主題とした研究会を継続して行っている。産官学連携の対象になり得るテーマのみを取り上げるという意味で、産官学連続研究会と呼んでいる。今年度は、産官学連続研究会の開催運営に加え協力機関で準備しているコンソーシアム立ち上げに関して協力支援をおこなった。

i) 第9回産官学連続研究会（報告書39）

「炭素繊維複合材料と分子シミュレーション」

11月20日 秋葉原ダイビルにて開催

CFRP(Carbon-fibre-reinforced plastic: 炭素繊維補強プラスチック)等の炭素繊維複合材料は、航空機機体に用いられているだけではなく、自動車車体への用途活用も視野に入っている。軽量化による大きな燃費の向上が見込まれる。車体に用いられる場合、衝突安全性など厳しい強度基準を満たす必要があり、材料に対する要求性能も厳しい。現状では材料の破綻／破壊過程に関して未知な部分も多く、材料開発研究の余地も多く残っている。本研究会では、炭素繊維複合材料(CFRP)に焦点を当て、最先端の計算科学とエクス時代に向けた期待について発表と議論を行った。CFRP の設計には、ミクロな炭素繊維またはマトリックス樹脂そのものの構造や基礎物性から、界面強度、積層構成、そしてマクロな特性に至るマルチスケールでの検討が要求される。しかし、マクロな領域のシミュレーションが基礎的にも実用的にも長足の進歩を遂げているのに対して、ミクロな原子・分子スケールのシミュレーションは、モデリングの困難や計算負荷の問題から、緒に就いたばかりというのが実情である。そこで本研究会では、CFRP のミクロなシミュレーションを指向して研究されている産学の講演者を招聘し、話題提供していただいた上で、来るエクサスケールコンピューティング時代に期待される CFRP の計算科学についても議論した。

ii) 第10回産官学連続研究会（報告書40）

「構造用金属(鉄鋼)材料における計算材料科学」

12月19日 秋葉原ダイビルにて開催

構造用金属材料に焦点を当て、最先端の計算材料科学とその期待について発表と議論を行った。計算材料科学においては、原子オーダーの現象から、メゾ領域の金属組織の形成、そしてマクロな特性に至るマルチスケールでの研究が進んでいる。一方では、解析技術の進歩も著しく、従来見えないものが可視化できるようになり、実験と計算との対応も可能となってきた。本分野の重要な学術基盤として位置づけられるこのマルチスケールアプローチは CMRI の人材育成・教育セミナーにおいても取り上げられている。今回の連続研究会を CMSI の産官学連携と CMRI の人材育成・教育の共同開催とし、両者の有機的な連携とシナジー効果の発揮も目指しまた。最先端のマルチスケールアプローチや解析技術の現状と課題・期待について産と学から話題を提供していただき、今後の進め方についても議論した。

iii) 第11回産官学連続研究会（報告書41）

「ソフトマテリアル開発における大規模計算」

2月13日 秋葉原ダイビルにて開催

ソフトマテリアル分野における大規模計算の取り組みに関して取り上げた。ソフトマテリアルは分子構造のみでなく、分子集合体が発現する多階層な構造が、材料の機能に大きく関与する。さらに化学反応をはじめとした構造変化のダイナミクスも重要で、時間スケールの多階層性をも考慮する必要がある。そのため、従来の分子シ

ミュレーション手法では、現在の「京」をはじめとしたスーパーコンピューターを持ってしても直接的な課題解決は困難で、新たな計算手法との組み合わせが必要になる。これらの課題に対して最新のハードウェアと計算手法を駆使し大規模系の計算に取り組んでおられる方々に講演をいただき、ソフトマテリアル分野における大規模計算の現状と今後の期待に関して紹介して頂いた。

iv) 産官学研究拠点としての活動

産官学連携拠点として、4月から7月にかけて大阪大学から配信された配信講義「CMSI 科学技術特論 B」の配信を行った。またそれに加えて11月7日に東北大学から配信された「金属の計算材料物性 - マルチスケールのアプローチ」についても配信を行った。CMSI で制作、運営しているポータルサイト「MateriApps」に関しては、東大物性研、東北大金研、分子研と分担してアプリ紹介や講習会情報などのコンテンツ制作を担当した。外部向けの発表としては平成27年8月につくばで開催された国際会議 Computational Science Workshop 2015 において、MateriApps 活動についての発表を行った。また、アプリ普及活動の一環として、平成27年1月30日に開催された分子動力学アプリケーション MODYLAS の講習会において、初心者向けの部分を担当し、アカデミック、学術双方の参加者に対して使用方法の解説を行った。

2.2.1 当該年度(平成26年度)における研究成果

2.2.1.2(4) 研究成果の普及

平成 26 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2号発行した。プロジェクトの成果の紹介とともに、分野振興活動として計算物質科学に関連する外部のプロジェクトにも焦点をあてた。また、平成 25 年度にリニューアルした WEB ページをより充実し、継続的に、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で、企業、他分野との人材交流を図った。また、平成 27 年度中にこれまでの活動をまとめて、計算物質科学を特に高校生や大学1～2年生に広く周知し興味を持ってもらうことを目的とした「TORRENT 特集号」を作成することが CMSI 運営委員会で決まり、平成 26 年度中に企画検討を開始した。

また、ソフトウェア開発者の公開をサポートし、実験研究者や企業、他分野の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ために平成 25 年度に本格運用を開始した「MateriApps」の運用、改善を継続し、アプリケーションの効率的な開発および活用を促進した。また、分子科学討論会、金属学会の展示会に MateriApps を出展し、アプリケーションの利活用を促進した。

広報戦略として、推進しているエネルギー関連の4課題に関する記者勉強会を開催し、一般の方にも理解できるプレゼンを実施した結果、2件が新聞記事に取り上げられた。また、「京」の成果をどのようにアピールし、ポスト「京」のプロジェクトにつなげていくのかを検討するため、第3回見える化シンポジウムを実施して広報のあり方を検討した。さらに、HPCI 事業を一般社会に照らしてどのようなコンセプトで実施していけばよいかの調査を実施し、有識者間で議論する機会を設けた。

1) 広報誌の発行

①Torrent No.10 (2014 年 10 月発行) (日本語版 別冊、英語版 別冊)

<http://torrent.cms-initiative.jp/backnumber/torrent10>

日本語版 1500 部、英語版 500 部を発行。巻頭で、『CMSI が拓いた計算物質科学 分野振興の成果と次なるステップ』をテーマとした座談会を特集し、さまざまな立場から分野振興を担ってきた方々に、これまでの活動を振り返り、ポスト「京」プロジェクトを見据えた次なるステップについて語ってもらった。その他、「フェーズフィールド法」のアプリケーション開発者へのインタビュー記事、大阪大学大学院で計算物理を専攻し、卒業後日東電工にて製品開発に取り組む卒業生への拠点研究員によるインタビュー記事など。さらに、CMSI の拠点紹介として東京大学物性研究所にスポットを当てた。

②Torrent No.11 (2015 年 3 月発行) (電子版のみ)

冊子の印刷を行わず CMSI Torrent Web 上のみの公開とした。特集はなく、シリーズ記事のみ。アプリケーション開発者へのインタビューは、「SMASH」開発者。また、東京大学物性研究所にて物性理論研究を行っていた卒業生を訪ね、東京大学大学院で科学システム工学を専攻する学生がインタビューを行った。CMSI 拠点紹介の最終回は、CMSI 神戸拠点。

③Torrent 特集号コンテンツ調査

プロジェクト開始年度より、一般を含めた多くの人に CMSI の活動を知ってもらうため、広報誌 Torrent を発行してきた。プロジェクト最終年度(平成 27 年度)を前に、既刊 Torrent 全 11 号の記事をリストアップし、CMSI の研究活動や分野振興活動などをどのように取り上げてきたかを分析。

さらに、これまでの活動成果をまとめた特集号の発刊が、平成 26 年 12 月の CMSI 運営委員会で合意されたことを受けて、特集号の企画にあたって必要となる多面的な検討—サイエンス・コミュニケーション(SC)の動向、出版物における SC 事例の調査などをおこない、そのうえで、Torrent 特集号では SC をどのように応用していくべき

かを検討し、特集号としてふさわしいと考えられるコンテンツ素案を作成した。作成形態としては、3つの方法が考えられる。(1)計算物質科学のガイドブック(新規制作) (2)既刊 Torrent の特集号としてムック形式で制作 (3)CMSI のガイドブックと(新規制作) 2016年2月末刊行予定として、企画検討・取材・執筆を進めていく。

2) ソフトウェア開発・公開のサポート

平成25年度に本格的に立ち上げた物質科学シミュレーションのポータルサイト「MateriApps」の運用・改善を継続しておこなった。MateriAppsでは、物質科学における主要なアプリケーションやツール130本以上の情報を収集し、掲載している。加えて、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」も進めた。平成26年度は、掲載アプリ数の充実を図ると同時に、情報の整理、検索方法をみなおし、より直感的に柔軟にアプリ検索が行えるように改善をおこなった。また、MateriAppsで紹介されているアプリのうち、オープンソースかつPCに導入可能なアプリを収めた「MateriApps LIVE!」の開発も継続しておこなった。MateriApps LIVE! USBには、OS(Debian GNU/Linux)、エディタ、解析ツールなど使い始めるのに必要な環境は全て収められており、ノートPCなどで手軽にシミュレーションを開始することができる。MateriApps LIVE! 収録アプリの充実、収録アプリのバージョンアップを進めると同時に、仮想マシン用のハードディスクイメージでの配布を開始するなど、より使いやすい環境の開発を進めた。分子科学討論会、金属学会の展示会にMateriAppsを出展し、MateriApps LIVE! USBのサンプルを配布するなど、アプリニーズの調査を継続しておこなった。平成26年度末時点でのUSB配布数は累計で325本、ネットからのダウンロード数も累計で632本となり、着実に普及が進んでいる。また、東京大学理学系研究科や東京工業大学大学院理工学系研究科での大学院講義などにおいても利用が始まっている。

3) ホームページにおける情報発信

昨年度に大幅改訂を行いCMSI Web、MateriApps、Torrent Webの三本柱サイトを独立させたが、各サイトをさらに充実させた。

ここでは主にCMSI Webについて報告する。平成25年度に引き続き、ニュース・公募情報、イベント情報(主催・共催・協賛)をタイムリーに掲載し、毎週金曜日に発行するメールマガジンと連動させることで、Webへのさらなる誘導を図った。また、トップページ画像から直接関連イベントページにリンクを張り、画像を頻繁にアップデートすることで情報の新鮮さを印象付けた。ニュースについては受賞記事をできる限り掲載し、研究員の活躍を広く知らせる努力を行った。各イベントにはタグ付けをして、イベントの種類から検索できるようにし、HP訪問者がどのイベントに参加すればよいか理解しやすくした。

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。2月28日(土)、秋葉原UDXシアターにて開催した**第3回 TUT-CMSI 見える化シンポジウム**では、「物質と社会をつなぐ」をテーマとして、単に可視化にとどまらず計算物質科学の成果をどのように伝えていくかについて議論を行った。また、平成25年度に導入した3Dプリンターについても活用方法の検討を進め、CMSI研究者に対する「モデリング支援」も開始した。

5) プレスリリース

次の2件のプレスリリースを行った。

- (1) エネルギー関連の研究を取り上げた“「京」で革新するエネルギー創成”記者勉強会のお知らせ～リチウムイオン電池・太陽電池・燃料電池・光合成～(理研・東大合同)のリリースを2014年10月に行った。10月15日に記者勉強会を行い、結果として、重点課題「電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子論の新展開」関連の記事が、神戸新聞およびYahoo ニュース(2015.1.15)にて「現実味帯びる「人工光合成」 兵庫の研究機関に世界注目」として掲載された。同時に、特別支援課題「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」関連の記事が、朝日新聞大阪本社版朝刊(2014.11.27)にて「基板に塗るだけ 新型太陽電池 曲げる・半透明化 自在に」として掲載された。
- (2) 重点課題「関連の強い量子系の新量子相探索とダイナミクスの解明」に関する「鉄系高温超伝導が生じるしくみをスーパーコンピュータ「京」を用いて解明 -電子密度のゆらぎと超伝導の出現が連動- (東京大学)」のプレスリリースを行った(2014年12月)。12月25日に、マイナビニュース(オンライン)および財經新聞(オンライン)にて取り上げられた。
- (3) 支援課題「多重気泡生成過程における気泡間相互作用の数値的解析(東大・渡辺宙志)」の成果は AIP publishing の Journal Highlights として取り上げられ、”How the Physics of Champagne and Soda Bubbles May Help Address the World’s Future Energy Needs (2014年12月)”と題して、AIP(米国物理学協会)よりプレスリリースされた。結果として、スミソニアン博物館、MOTHERBOARD、Sinc(スペイン)よりメール取材を受け、各ニュースサイトに掲載された。また、ディスカバリーチャンネルのニュースサイト、HPC wire、シャンパン/スパークリングワインの通販サイト、Yahoo News India を始めとして海外で40超のサイトに掲載された。

6) 広報イベント・会議

①第3回 TUT-CMSI 見える化シンポジウム (報告書43)

2月28日(土)、秋葉原UDXシアターにて、「物質と社会をつなぐ」をテーマとして開催。参加者は101名。昨年に続き、オープニングは「水分子のダンスレボリューション」と題して、水分子の映像に合わせてオリジナル楽器の生演奏とタップダンスのコラボレーションパフォーマンスで、芸術と学術の融合を体感してもらった。

今回は、講師として、吉本興業の“大学の先生芸人”黒ラブ教授を招き、科学が苦手な人向けに科学を楽しく伝える黒ラブ・サイエンスコミュニケーション論を披露した。また、デザイン先導型のイノベーションで地域ブランド創出事業などを手掛ける方、サイエンスライティングを専門とする方などが講演を行った。

パネルディスカッションは、「スパコンが社会に溶け込むインパクト」を題目として、「京」が社会に与えたインパクトや計算科学が社会に溶け込むための鍵などを、具体的に議論。例年通り、パネリストと会場の境なく議論が行われ盛り上がりを見せた。シアターの外では併設展示会を行った。(詳細は報告書43に記入)

②「京」で革新するエネルギー創成”記者勉強会 ～リチウムイオン電池・太陽電池・燃料電池・光合成～

(報告書42)

平成26年10月15日(水)14:00～16:30に計算科学研究機構(AICS)セミナー室にてAICS広報との共催で開催した。「京」をはじめとする超並列スーパーコンピュータではじめて実現した、原子の位置や電子の動きを精密に推測する計算手法、それらの計算手法が、燃料電池、リチウムイオン電池、太陽電池、人工光合成などによるエネルギーの創成、蓄積、変換技術をどのように革新しているかを最新の成果を交えてやさしく紹介し、AICS平尾機構長からポスト「京」で期待される成果も説明した。7名の記者と16名の戦略プログラム関係者の参加があった。記者は公の場では質問はしないが、休み時間や講演終了後の交流タイムの時間に各先生方のごとくに個別に取材があった。本勉強会終了後、神戸大天能先生による人工光合成の課題、および、東大山下先生の有機太陽電池の課題が新聞記事として掲載され、本勉強会の効果が示された。普段の研究会等よりや

さしく丁寧な説明資料を先生方に作成していただいたが、一般社会への研究成果のアピールのむずかしさを改めて感じるとともに、このような機会を設けていくことの重要性を感じた。

③立体視プロジェクションシステムを使った分子科学研究講演会(3DCMS2014)

12月5-6日九州工業大学にて開催。

CMSIからは、次の3つの講演を行った。

- ・「水、氷、メタンハイドレートの相転移と水分子の動き—京を用いたシミュレーションから—」(田中秀樹・岡山大)
- ・「京コンピュータを用いた小児マヒウイルスの全原子分子動力学シミュレーション」(岡崎進・名古屋大)
- ・「3Dプリンターで作る分子模型」(松本正和・岡山大)

全体として、今後のサイエンスにおいて、3D可視化が重要であることが示された。3Dプリンターの利用活用方法も重要となってくる。スーパーコンピュータの計算結果を可視化することも、大きな課題になりつつあることがわかった。

7)展示会への出展

・一般出展

① 東京大学柏キャンパス一般公開

10月24-25日東京大学柏キャンパスにて開催、物性研究所電子計算機室において出展。

CMSI紹介には、「京」で飛躍する新物質開発とエネルギーの創成」というスライドを使用した。3Dプリンターを展示・実演し、出来上がった3D“物性犬”に色をつけることができるコーナーを作り、来場者が3Dプリンターで作ったものに触れる機会を設けた。

・技術出展

② 8回分子科学討論会 2014 図 2.2.1.2(4)-1

平成26年9月21日から9月24日に、広島県東広島市の広島大学東広島キャンパスで開催された第8回分子科学討論会の展示会場にて、MateriApps、MateriAppsLIVE!、ERmod、GROMACS、SMASHに関する説明やデモを行い、50名を超える方にブースにお越し頂いた。また、アンケートに回答頂いた方44名に、MateriAppsLIVE! USBの配布を行った。なお、アンケート回答者には電子メールアドレスの記載も求め、MateriApps LIVE!利用状況等の追跡調査やMateriApps LIVE!改定時の情報提供が可能となるようにした。MateriAppsを知らない方が多かったが、iPadによる実演を交えながらMateriAppsの内容をつかんでもらい、MateriAppsを普及させることができた。また、MateriApps LIVE!についても、インストールの苦労が軽減できるなど、いろいろ好意的な意見をもらえた。

③ International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC14)

11月16-20日 New Orleans, USAにて開催。 図 2.2.1.2(4)-2

- (1) 東大情報基盤センターと合同で出展。CCMS紹介ポスターの展示を行った。
- (2) AICS ブースでの出展。ポスター展示を行い、ウイルスシミュレーション、リチウムイオン電池電解液の還元反応機構、およびMateriAppsの紹介を行った。また、ブースでのショートレクチャを行った。タイトルは、「OpenFFT: An Open-Source Package for 3-D FFTs with Minimal Volume of Communication」(Truong Vinh Truong Duy・東大)

④ 日本金属学会春期(第156回)講演大会 図 2.2.1.2(4)-3

平成27年3月18日から3月20日に、東京都目黒区駒場にある東京大学駒場キャンパスで開催された日本

金属学会春期(第 156 回)講演大会の付設展示場にて、計算物質科学のポータルサイトである MateriApps の紹介、MateriAppsLIVE!のデモンストレーション、MateriAppsLIVE!に含まれる CMSI メンバー開発アプリの紹介等を行った。来場者数は 3 日間合計 44 名で、来場者のうち MateriApps に関するアンケート回答者 26 名に MateriAppsLIVE! USB を配布した。アンケート回答では、本展示にて MateriApps を知ったとの回答も多く、材料分野における MateriApps の普及を促進させることができた。合わせて、材料分野における計算物質科学関連の研究等のニーズ、MateriApps への要望等、今後の MateriApps の活動に必要な情報の収集を行った。

・計算科学研究機構(AICS)との連携・出展

④計算科学研究機構(AICS)一般公開 図 2.2.1.2(4)-4

10 月 25 日 計算科学研究機構(AICS)にて開催、出展。

主な展示物は、ウイルスのシミュレーション結果を映した3次元映像と、メタンハイドレードの溶解の様子を映した映像。また、メタンハイドレートとウイルス各 1 枚のポスター展示を行い、映像の解説資料や広報誌 Torrent を配布した。多くの方が立ち止まって見学し終始盛況であった。全体の来場者は約 2,500 名。

⑤未来をひらくスーパーコンピュータ ～「京」からその先へ 限りなき挑戦～

8 月 23-24 日 科学技術館にて開催、ブース出展と講演(1 枠)を行った。 図 2.2.1.2(4)-4

ブーステーマを『超高速計算ソフト「モジラス」でマイクロの謎にせまる ～メタンハイドレートとウイルス～』として、メタンハイドレートとウイルス各 1 枚のポスター展示を行い、各映像(ウイルスは3D 映像)を使って 1 日 5 回のブースプレゼンを行った。ポスター展示では、CMSI の紹介も行った。また3D プリンターをメーカーより展示してもらい、実演を行った。夏休みのため、家族連れも多く、3D 映像および3D プリンタにひじょうに興味を持たれた。講演は、「スーパーコンピュータによる水・氷・ハイドレートの科学」(松本正和・岡山大)。アンケートでは、84%の方が「わかりやすい」、82%の方が「面白い」と回答しており、おおむね好評であった。

⑥International Supercomputing Conference 2014 (ISC14) 図 2.2.1.2(4)-5

6 月 22-26 日 Leipzig, Germany にて開催、AICS ブースにて出展。

ポスター展示を行った。タイトルは「Next-generation computational materials science by using the K computer」で、ウイルスのシミュレーション、リチウムイオン電池電解液の還元反応機構、および MateriApps の紹介を行った。

7-1) 展示会への出展



物質科学シミュレーションの
ポータルサイト

MateriApps とは？

物質科学ソフトウェア（アプリ）のポータルサイトです。

利用者と開発者をつなぎ、双方に利益のある
コミュニティの形成を目指しています。

アクセス数約 7000/月、ユニークユーザー数約 1000/月を達成しています。
(2014年7月までの統計)



MateriApps データベース

100 以上のアプリを収録しています。

「キーワード検索」や「アプリ検索」により、
分野と目的に応じて容易に検索できます。

<p>有機計算機法</p> <p>AlcalIKR* CASINO* OpenMIX* XTAPP* ABINIT ..</p>	<p>量子化学</p> <p>DC* FMO* SMASH* ADF GAMESS ..</p>	<p>分子動力学</p> <p>Efmod* Teram* MDADP* MODYLAS* GROMACS ..</p>	<p>格子模型</p> <p>ALPS* DSQSS* BLOCK CCCM DMRG++ ..</p>	<p>連続体 シミュレーション</p> <p>ANSYS MultiPhysics HOOMO-blue MICRESS MMSP ..</p>	<p>データ解析</p> <p>CLUPAN* phocopy* ..</p> <p>可視化</p> <p>Tu* TAPOCA* ..</p>
--	--	--	--	--	--

* CMSI メンバーによる開発アプリ

収録アプリの例

ERmod
ソフト分子集団系の自由エネルギー計算ソフトウェア
分子動力学法とエネルギー表示溶液理論により
自由エネルギーを効率的に精度よく計算する。
通常の液体はもちろん、超臨界流体やイオン液体など
広範な溶媒種への溶解度も決定できる。
ミセル・脂質膜・タンパク質への物質結合の
強度とサイトも評価可能。

MODYLAS
汎用の大規模分子動力学計算ソフトウェア
長距離力の取り扱いを含め、ナノ分野・バイオ分野に
おける分子動力学計算に必要な各種手法を備える。
超並列スーパーコンピュータを用いて溶媒中のウイルス (1000 万原子)
の全原子計算、リボソーム (数 10 万原子) の
長時間計算に実績がある。

SMASH
大規模並列量子化学計算ソフトウェア
分子を空間的に分割するタイプの近似を適用せずに、ナノ
サイズ分子のエネルギー及び最適化構造を計算できる。
「京」から PC まで、幅広いプラットフォームで利用可能。
頻繁に用いられるサブルーチンは容易に抜き出せる。
2014 年 9 月時点で可能な実行方法は、
Hartree-Fock, DFT, MP2。

GROMACS
生体分子向け分子動力学計算ソフトウェア
タンパク質、脂質、核酸などの生体高分子や溶液・
界面系の動力学シミュレーションが可能。
温度圧力制御、長距離相互作用計算、自由エネルギー
計算等が効率的に実行できる。
計算科学者自身が中心になることで、生体分子動力学を
対象にした並列計算に特化した最適
アルゴリズムの構築に成功している。



図 2.2.1.2(4)-1 (ページ 1/2)
(技術出展: 8 回分子科学討論会 2014)



<http://ma.cms-initiative.jp/>

物質科学シミュレーションの ポータルサイト

MateriApps LIVE!

多くのアプリが1本のUSBに収められており、
手持ちのノートPCなどを用いて簡単にアプリを試すことができます。

収録アプリ

ABINIT, AkaiKKR, ALPS, CP2K, feram, ERmod, Gromacs,
OpenMX, Quantum Espresso, SMASH, xTAPP,
GAMESS セットアップツール

可視化ツール

gnuplot, OpenDX, Paraview, Pymol, TAPIOCA



講習会

神戸 AICS および物性研でアプリの講習会が毎月開かれています。

今年度の講習会

月	日程	講習会トピック
4月	28日	FU「量子化学モデリング」
5月	30日	バージョン管理システム
6月	16日	ALPS「格子模型」
7月	30日	AkaiKKR「第一原理」
8月	18日	FU「量子化学モデリング」
	28日	OpenACC2.0 (GPGPU)
9月	18日	Rokko「数値計算ライブラリ」
10月	10日	OpenMX「第一原理」
	16日	ALPS「格子模型」
11月	中旬	xTAPP「第一原理」
12月	17日	feram「格子模型」
1月	初旬	MODYLAS「分子動力学」
2月	初旬	SMASH「量子化学」

講習会資料は MateriApps の web サイト上で閲覧できます。

FU「量子化学モデリング」チュートリアル (2014/4/28 第14回 CMSI 神戸ハンズオンより)

FUの機能と操作法

FUは、FMO計算支援ソフトウェアとして開発されたGUIベースのプログラムであるが、タンパク質の構造モデル作成機能を持っている。本講習会では、FUのモデリング機能を用いて、PDBのX線実験構造から始めて、分子計算を行うための構造データを作成する。

FUは、feramol, faplot, fxtodeの3つのプログラムからなる (公開版にはfxtodeは含まれない)

- feramol**: タンパク質の構造モデルとFMO計算のための入力データの作成を支援するソフトウェア。TINKERとGAMESSの実行環境もある。
- faplot**: FMO計算の結果をグラフィックにするソフトウェア。(本日の講習会では無い)
- fxtode**: コンソールアプリケーション。PDBファイルの分割・結合などを行うツール類。

開発支援 / ユーザサポート

- ・プライベートリポジトリの発行
GitHub 上でアプリのバージョン管理や、公開のための準備を行うことができます。
- ・フォーラム
利用者と開発者が交流できる場です。
インストール、バグ、使用上の注意点など、アプリの最新情報を共有することができます。

フォーラム



掲載ソフトウェア募集中! <http://ma.cms-initiative.jp/>




図 2.2.1.2(4)-1 (ページ 2/2)
(技術出展: 8 回分子科学討論会 2014)

7-2) 展示会への出展

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 encourage the cutting edge Material Sciences by HPC

The Role of CCMS

CCMS Kashiwa



- CMSI* Head office
- New algorithm
- Super Parallel program
- Standard Program
- Community promotion
- Human development
- Event



CCMS Young Researchers

*CMSI: Computational Materials Science Initiative

- K Computer user support
- K Project management

- Strategic use (CMSI)
- Open Software Service/Support

- Library service
- Software training
- Consulting/Support


- High-end Users

- Computational Researchers (Physics/Chemistry/Material)


- Experimental Researchers

- Enterprise Researchers


- HPC Beginner




K computer



Supercomputer Center "Oakleaf"



Supercomputer "Kashiwa"



PC Cluster "PSI"

Larger

CCMS Kobe Branch

- Located in the same building with K Computer
- Forum among researchers with K computer.
- Technical Consulting on Massively Pararelized Computaion
- Live-in Meeting
- Software Usage Workshop
- Meeting to share "Know how"




Collaboration with Experimenters

- Bridge between Physics Experimenter Researcher and Computational Materials Scientist Researcher.
- With large experiment facility like SPring-8, SACLA, J-PARC
- With Important National Strategic Project like Substitution of Critical Metal.







THE UNIVERSITY OF TOKYO






図 2.2.1.2(4)-2 (ページ 1/2)
(技術出展: SC14(東大情報基盤センターブース))



Strategic Programs for Innovative Research Field

SPIRE Field 2 “New Materials and Energy Creation”
Next-generation computational materials science by using the K Computer.



Please visit: <http://www.cms-initiative.jp/>

CMSI Research Highlights:

Towards discovery of antiviral through all-atom simulations:

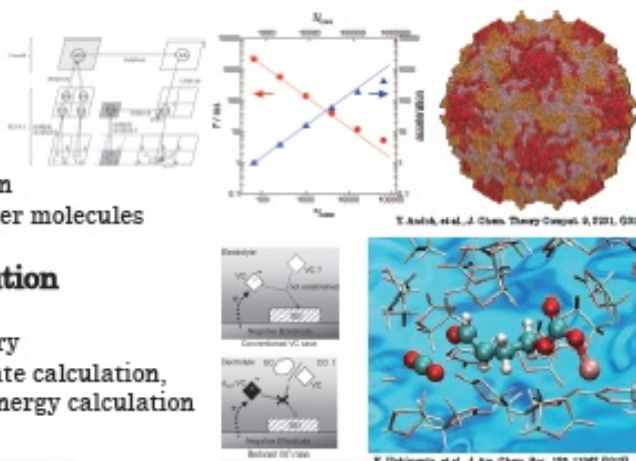
- Elucidation of infection process of virus
- Large-scale molecular dynamics simulation
- All-atom simulation of poliovirus with water molecules

Chemical reaction in electrolyte solution of Lithium-ion battery:

- Performance problem of Lithium-ion battery
- Integration of first-principles electronic state calculation, molecular dynamics simulation, and free energy calculation
- New mechanism of SEI creation process

CMSI Research Topics:

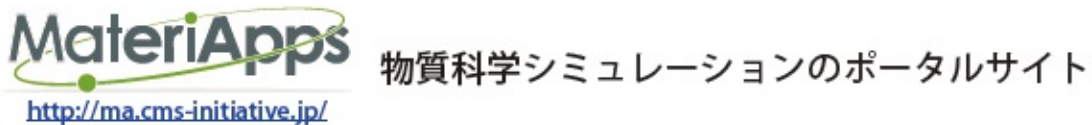
- Next-generation advanced device science
- Molecular function and chemical conversion
- Energy conversion
- Basic Science of novel quantum state / new materials
- Multiscale materials science



T. Ando, et al., J. Chem. Theory Comput. 9, 2021, 6320
 K. Uchirogata, et al., J. Am. Chem. Soc., 135, 11947 (2013)

図 2.2.1.2(4)-2 (ページ 2/2)
 (出展: 技術出展: SC14 AICS ブース)

7-3) 展示会への出展



MateriApps (マテリアップス) とは？

Q. MateriApps って何？

物質科学ソフトウェア (アプリ) のポータルサイトです。アプリの紹介、利用者開発者間の交流を通じた計算物質科学コミュニティの形成を目指しています。

Q. 興味のあるソフトウェアを探すには？

「アプリ検索」を利用して特徴、対象、手法・アルゴリズムなどから逆引きできます。

Q. 開発者と交流するには？

フォーラムで開発者に直接質問できます。(現在9アプリ)

物質科学研究者のための MateriApps

Q. アプリは何の役にたつの？

MateriApps で紹介されているアプリを利用することで、候補物質のスクリーニングや、実験結果の解釈が素早くできるようになります。

Q. アプリを簡単に試したい！

MateriApps LIVE! を利用して、インストール作業なしでアプリを試用できます。

Q. アプリの使い方がわからないのですが…

CMSI では毎月アプリの講習会を開催しています。開催情報は MateriApps に掲載しています。これまで AICS で 22 回、ISSP で 7 回の開催実績があります。

MateriApps で紹介しているソフトウェア

Q. MateriApps にはどのくらいアプリがあるの？

134 のアプリ (2015 年 2 月現在) が登録されています。

Q. どんなアプリがあるの？

第一原理計算、分子動力学法などのアプリがあります。例えば、第一原理計算では、バンド計算、構造予測、物性評価ができます。また、分子動力学法を使うと、溶液中の高分子の安定構造、動的性質などを調べることができます。



掲載ソフトウェア募集中! <http://ma.cms-initiative.jp/>



図 2.2.1.2(4)-3 (ページ 1/2)

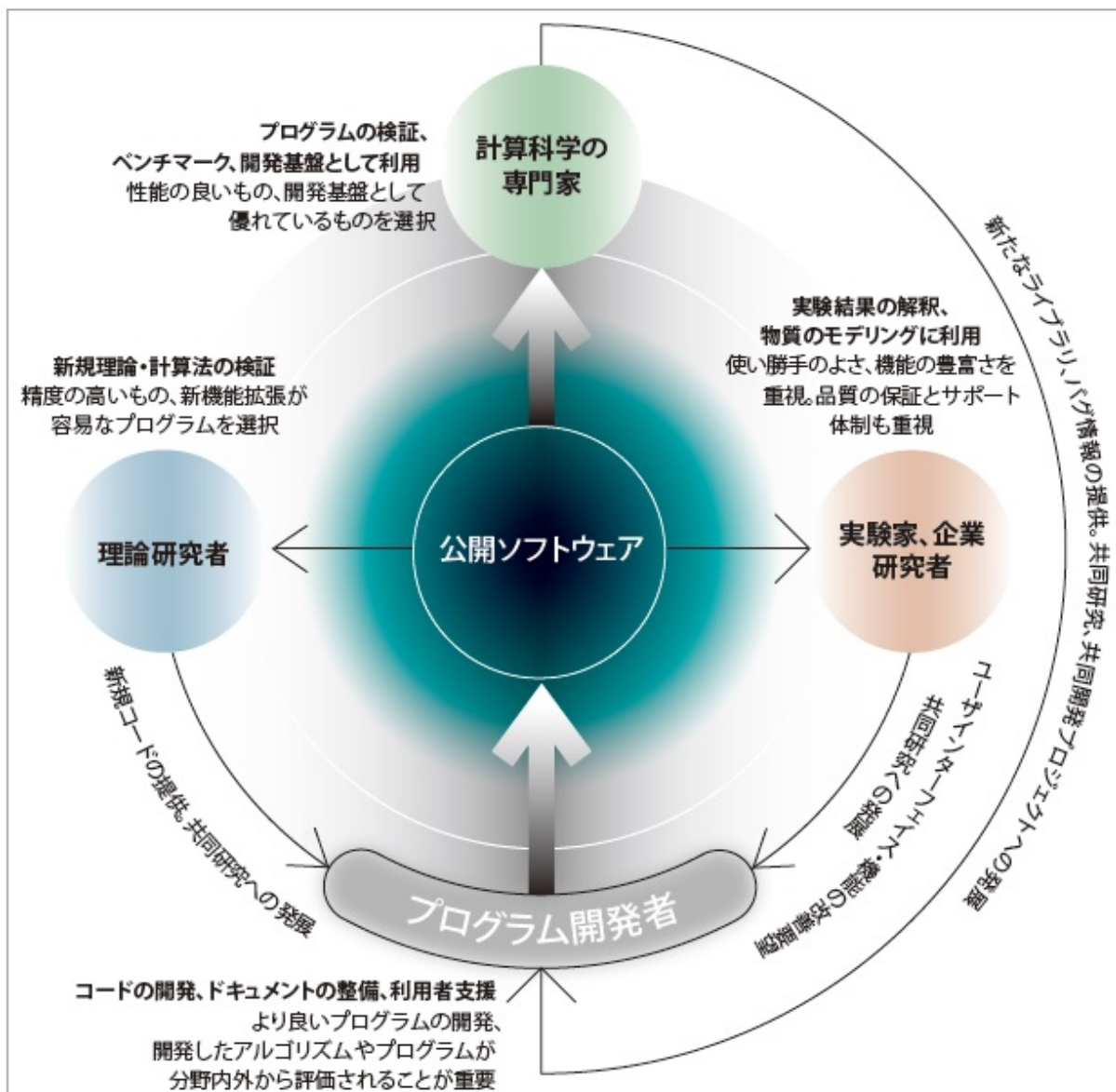
(技術出展: 金属学会)



物質科学シミュレーションのポータルサイト

物質科学における実験・計算・理論の協働を目指して

計算物質科学イニシアティブ (CMSI) では、物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps を運営し、ユーザの視点に立ったコミュニティーコードの育成などを通じて、アプリケーション利用者と開発者の両者にとって役立つコミュニティーを創出します。



掲載ソフトウェア募集中! <http://ma.cms-initiative.jp/>



図 2.2.1.2(4)-3 (ページ 2/2)
(技術出展: 金属学会)

7-4) 計算科学研究機構(AICS)との連携・出展:

④計算科学研究機構(AICS)一般公開

⑤未来をひらくスーパーコンピュータ ~「京」からその先へ 限りなき挑戦~


文部科学省「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(HPCI)の構築」
HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」 計算物質科学イニシアティブ(GMSI)

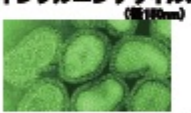
超高速計算ソフト「モジラス」でミクロの謎にせまる

～ ウィルス ～

関連課題番号: hp120292, hp120293, hp130011, hp140217

■ ウィルスとは？

小児マヒウイルス (直径30nm)


インフルエンザウイルス (直径100nm)


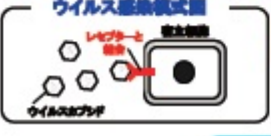
ウィルス
カプシド (殻)
DNA/RNA

- タンパク質で出来たカプシド(殻)のなかにDNA/RNA(遺伝子)がおさまられている物質
動物立細胞の細胞膜(エンベロープ)で包まれたものもある。
- 非常に小さく目に見えない物質
ウィルスの大きさは20~970nm (ナノメートル: 1mmの100万分の1) であり、細菌の大きさの1~5μm (マイクロメートル: mmの1000分の1) より小さい

■nm(ナノメートル)ってどれくらいの大きさ?
1nm=10億分の1m
例) 月(直径約3,475km)を10億分の1にすると、小さいとんとう位の大きさになる。 月(直径約3,475km) 小さいとんとう星(直径約1km)

- 他の細胞を利用して増えていく
自力で増えることができないので、感染した細胞をだましてその力を利用し、増殖

■ どうやってウィルスは感染するの？

ウィルス感染模式図


ウィルスが他の生物の細胞表面にある **レセプターと結合(感染)**
↓
侵入 → 増殖 → 発芽

■ ウィルス感染の予防薬・治療薬を開発するには？

- ウィルスの化学メカニズムを知る
- 感染のメカニズムを知る
- ワクチンの設計
- 抗ウィルス剤との結合を知る

感染や免疫の初期過程の分子構造を解明する！

■ 課題1: ウィルスの基本構造体であるカプシドの仕組みを分子レベルで探る

◆ ウィルスカプシドの構造とその動的な振る舞いを理解する

- タンパク質240個で構成
- 20面体
- 水を食めて1000万原子系
- ゲノムを収納
- レセプターと結合して感染
- 抗体により認識

■ 安定な構造の仕組み？
■ 環境への適応は？
温度、圧力、pH、乾燥、化学薬品、電解質濃度等によって変化するのか？

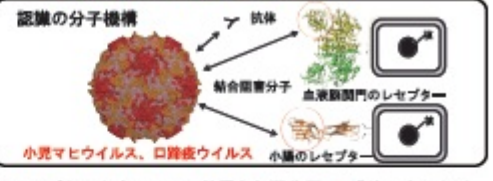
◆ ゲノムを持たない空のカプシドとは？

- 完全なウィルス
- 空のカプシド
- 凍の導入
- 自然界にも存在
- 人工的にも合成可
- 完全なウィルスと比べて不安定

■ 安定な人工カプシドの分子設計ができれば・・・

- 理知的なワクチンや
- 高選択性DDSキャリアーの作成が可能になる！

■ 課題2: カプシドとレセプターの結合 ~感染初期過程の分子機構を探る~


認識の分子機構


■ レセプターとウィルスの特異な相互作用 → 感染のきっかけ
■ 結合後のウィルスの構造変化 → 侵入、脱殻
■ 抗体との結合 → 免疫

↓
結合を阻害する分子、構造変化を阻害する分子
新しい作用原理を持つ抗ウィルス剤の可能性


世界最速！ 分子動力学計算ソフトウェア

MODYLAS(モジラス) 1000万原子のマイクロ秒の分子動力学シミュレーション



安藤 直徳
名古屋大学
MODYLAS 開発総長

ウィルスの全体構造を世界ではじめにシミュレーションすることに成功！！
ウィルスの周囲の溶媒温度や水素イオンノードの変化で、安定構造がどのように変化するかを計算することに成功！！



カプシド表面の計算結果

↓

実験研究に、計算によるウィルス構造の結果を取り入れることでウィルスの実態に迫り、製薬開発競争をリードすることが可能、感染を抑制する製薬に新たな道を拓くことに！

- ウィルス全1000万原子系を5ms/stepで超高速計算
- 従来10年かかる計算を「京」では3ヶ月で計算

資料提供: 名古屋大学大学院工学研究科 岡崎研究室

計算分子科学研究拠点
Theoretical and Computational Chemistry Initiative

図 2.2.1.2(4)-4 (ページ 1/3)

(計算科学研究機構(AICS)との連携・出展)

文部科学省「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(HPCI)の構築」
HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」 計算物質科学イニシアティブ(GMSI)

超高速計算ソフト「モジラス」でミクロの謎にせまる ～メタンハイドレート～

調達課題番号: hp120277, hp130020, hp140216

■メタンハイドレートとは??

溶かすと ほとんど溶けない
膨大に溶ける!
凍ると
加熱にする
減圧する

燃える水

水とメタンからできたシャーベット状の水

分解してメタンガスを発生!!
(元の体積の約170倍のメタンガス)

■メタンハイドレートの構造

水の酸素原子
メタン分子
メタンハイドレート

水分子のつくるカゴ状の分子構造内にメタン分子が取り込まれてできた氷状の固体

★講演日時
2014.5.23 14:05-14:30
『スーパーコンピュータによる水・氷・メタンハイドレートの科学』
橋本正和 准教授(岡山大学)

■次世代の有望な資源と注目!

世界のメタンハイドレート分布域
日本周辺海域のメタンハイドレート分布

- 世界では、永久凍土地帯、大陸縁辺部の海域、深い湖底に存在
- 日本周辺海域でも多くの濃集帯が認められている(約12万km²)
- 静岡県沖から和歌山県沖に至る東部南海トラフには、1兆1400億m³の原始資源量があると評価されている(わが国の天然ガス年間消費量の約10年分)
- CO₂の放出量は石油の70%以下

クリーンなエネルギー源

■メタンハイドレートの生産

- 深海の地層中にあるメタンハイドレートをそのまま掘り出すのは効率的ではない
- 地層内に固体として存在するメタンハイドレートをエネルギーとして利用するには、メタンハイドレートを分解させメタンガスと水に分けて、メタンガスだけ回収する必要がある
- メタンハイドレートを加熱または減圧して地層中で分解させ、分解して出てきたメタンガスを井戸や生産システムを通じて回収

★海域のメタンハイドレートの形態

減圧法は、生産のために投入したエネルギーに対する生産されたエネルギーの比が高く、商業性の見込める方法であることが判明

海底での減圧法を主とする採取方法が計画されている

■課題

- どのようにメタンと水に溶解するのか不明
- 安定的にメタンガスを取り出す技術が確立されていない

シミュレーションに期待!

世界最速! 分子動力学計算ソフトウェア

MODYLAS(モジラス)

1000万原子のマイクロ秒の分子動力学シミュレーション

岡山大学 研究グループ
矢ヶ崎 敬典 特任助教

スーパーコンピュータ「京」を用いたシミュレーションによりメタンハイドレートが分解しメタンが分離するメカニズムを世界で初めて解明!

- メタンハイドレートを高圧の海底から常圧の場所に取り出した際の変化をシミュレーション
- メタンと水の分子計10万個を対象に、分子間の引力や反発力を求め1千万分の1秒の間に分子がどう動くか計算

↓

はじめはゆっくりだった分解速度が、メタン分子が約40個集まり極めて微小な気泡ができた瞬間から、急速に速まることが判明

⇒メタンガスの効率的な採取方法の研究に応用することができると期待!

メタンハイドレート(中央部)からメタンガスが放出する様子を示す画像

計算分子科学研究拠点

Theoretical and Computational Chemistry Initiative

資料提供
(株)産業技術総合研究所
岡山大学大学院自然科学研究科
名古屋大学大学院工学研究科

図 2.2.1.2(4)-4 (ページ 2/3)
(計算科学研究機構(AICS)との連携・出展)



文部科学省「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(HPCI)の構築」
HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」

計算物質科学イニシアティブ(CMSI)



世界最先端のぶっしつ(物質)とエネルギーを創る研究課題



若き研究者たち

「京」を使って
社会にこうけん
(貢献)したい!

MateriApps

TORETA

コミュニティ
メンバー登録

<http://www.cms-initiative.jp/ja/index/ja/community>

図 2.2.1.2(4)-4 (ページ 3/3)

(計算科学研究機構(AICS)との連携・出展)

7-5) 計算科学研究機構 (AICS) との連携・出展:

⑥ International Supercomputing Conference 2014 (ISC14)

Next-generation computational materials science by using the K computer

CMSI is an open research community promoting Field 2 “New Materials and Energy Creation” within HPCI Strategy Program (SPIRE) of the MEXT, Japan
 CMSI research topics:

- Next-generation advanced device science
- Molecular function and chemical conversion
- Energy conversion
- Basic Science of novel quantum state / new materials
- Multiscale materials science

Towards discovery of antivirals through all-atom simulations

- Elucidation of infection process of virus
 - Real experiment can be performed only at very low temperatures
 - Need of computer simulation at normal temperatures
- Large-scale molecular dynamics simulation
 - Development of MD simulation software: MODYLAS
 - Achieved 5ms for 1MD step of 10 million atom dynamics
- All-atom simulation of poliovirus with water molecules
 - Calculation of free energy profile of virus capsid and receptor
 - Identification of place of attachment with receptor

Y. Ando, et al., J. Chem. Theory Comput. 9, 3201, (2013)

Chemical reaction in electrolyte solution of Lithium-ion battery

- Performance problem of Lithium-ion battery
 - Degradation of capacity upon successive charge-discharge cycles
 - Need of understanding of creation process of SEI (solid-electrolyte interface)
- Integration of first-principles electronic state calculation, molecular dynamics simulation, and free energy calculation
 - Identification of reaction process by exhaustive search
- New mechanism of SEI creation process
 - Additives inactivate decomposed organic solvent and prevent excess SEI deposition

K. Ushirogata, et al., J. Am. Chem. Soc., 135, 11967 (2013)

MateriApps Portal for materials science simulation

- Goal of MateriApps
 - Promoting materials science software
 - Giving fair credit for developers
 - Linking users and developers
- 100+ major materials science application software
 - Density functional theory, quantum chemistry, molecular dynamics, Monte Carlo...
- MateriApps LIVE! <http://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>
 - Boot and run materials science simulation immediately from a USB stick!

<http://www.cms-initiative.jp>

Computational Materials Science Initiative <http://cms-initiative.jp/>

図 2.2.1.2(4)-5 (ページ 1/1)
 (AICS との連携・出展 ISC14)

2.2.1 当該年度(平成26年度)における研究成果

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(AICS)との連携 (AICS ブースでの展示協力も含む)

①International Supercomputing Conference 2014 (ISC14)

6月22-26日 Leipzig, Germany にて開催されたISC14のAICSブースにて展示を行った。CMSIの概要と活動、大規模並列分子動力学ソフトMODYLAS、リチウムイオン電池における化学反応の第一原理計算シミュレーション、物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps に関するポスターを展示し、ブースで説明を行った。また、最新の世界のスパコン・HPCの動向について情報収集を行った。

(展示については、(4)研究成果の普及の項目を参照。)

②未来をひらくスーパーコンピュータ ～「京」からその先へ 限りなき挑戦～

8月23-24日 科学技術館にて開催、ブース出展と講演(1枠)を行った。

ブーステーマを『超高速計算ソフト「モジラス」でマイクロの謎にせまる ～メタンハイドレートとウィルス～』として、メタンハイドレートとウィルス各1枚のポスター展示を行い、各映像(ウィルスは3D映像)を使って1日5回のブースプレゼンを行った。ポスター展示では、CMSIの紹介も行った。また3Dプリンターをメーカーより展示してもらい、実演を行った。夏休みのため、家族連れも多く、3D映像および3Dプリンタにひじょうに興味を持たれた。講演は、「スーパーコンピュータによる水・氷・ハイドレートの科学」(松本正和・岡山大学)。アンケートでは、84%の方が「わかりやすい」、82%の方が「面白い」と回答しており、おおむね好評であった。

(展示については、(4)研究成果の普及の項目を参照。)

③US-Japan Workshop on Exascale Applications

9月5、6日にアメリカ・テネシー州のGatlinburgで開催されたUS-Japan Workshop on Exascale Applicationsに尾崎(東大)、常田(山梨大)、高木(京都工芸繊維大)、安藤(名古屋大)の4名が参加し、オークリッジ国立研究所の計算物質科学研究者とエクサスケール時代における次世代のシミュレーション技術の課題と展望に関して意見交換を行った。議論においてエクサスケール時代においても計算手法の開発が重要であり、特に低次スケールリング手法の開発に重点を置くべきであるという共通認識に至った。また計算規模だけでなく密度汎関数法における本質的な計算精度の向上(汎関数の改良)や磁性体のポテンシャル関数の開発も重点的に進めるべき課題であり、また組織構造まで踏み込んだ材料設計には原子スケールのシミュレーションからメゾ、マクロへのシミュレーションに繋ぐフェーズフィールド法などの開発も今後取り組むべき課題であることが議論された。オークリッジ国立研究所において取り組まれている課題は戦略分野2の課題と重複しており、今後、連携を促進していくことが望ましい。

④計算科学研究機構(AICS)一般公開

10月25日に計算科学研究機構(AICS)にて開催されたAICS一般公開にCMSI神戸拠点のメンバーが参加し、一般を対象として戦略分野2の研究成果を分かりやすい形式で紹介した。MODYLASの研究成果であるインフルエンザウィルスの超大規模分子動力学計算の三次元立体視動画とメタンハイドレートの融解機構に関する動画をディスプレイ表示し、同時にディスプレイ前で解説を行うことで聴衆に関心を持ってもらうように工夫を行った。その結果、200名程度の訪問者があり、小学生から年配を含めて展示時間を通して質問が絶えず、物質科学シミュレーションへの関心の高さが伺えた。戦略分野2の研究活動を一般に広報する機会として大変に有意義な機会であった。

(展示については、(4)研究成果の普及の項目を参照。)

2) 他の戦略機関との連携

①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」コンピューティクス勉強会（報告書44）

7月9日 若手技術交流会終了後、上記コンピューティクスに関するテーマの配信を計算科学研究機構(AICS)にて受信し、勉強会を開催した。

配信内容（配信元：東京大学情報基盤センター）

物理：小野氏（阪大）：量子電気伝導計算（非平衡グリーン関数理論）に現れる行列問題

数理：宮田氏（名古屋大）：中間固有値問題

②「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会（第1回）

10月31日 コクヨホール（品川）にて RIST の主催で開催された。「京」が稼働して約1年が経過したので、「京」を利用している戦略課題、および、一般課題、産業課題に関する発表がなされた。また、優秀な実施課題に対しては、表彰がなされ、CMSI からは、特別支援課題の合田氏、松林氏がダブル受賞した。

③第1回計算科学連携センター学術会議 -兵頭教授追悼記念- 「高分子素材分野における大規模 MD シミュレーション技術の展望」

11月4日～5日 兵庫県立大学 神戸情報科学キャンパスにて開催した。産官学連携小委員会の委員であった兵頭先生の追悼も兼ねて実施された。企業の方の参加が主であり、実際の製造現場で課題になっている高分子素材のシミュレーションに関する内容が多く、実用的に利用されている OCTA 等のアプリケーションソフトも照会された。「京」で培われている大規模計算技術も OCTA 等と連携させて、より、精度の高い計算を実施していかねばならないことが示唆された。

3) 実験研究者との連携

①第1回「京」と大型実験施設との連携利用シンポジウム（報告書45）

9月2日 秋葉原 UDX 会議室（NEXT-1）で実施。RIST と CMSI の共催、JASURI と CROSS の協力で実施した。大型研究施設間連携課題の紹介と、CMSI から公開汎用ソフトの紹介を行った後、元素戦略プロジェクト、および、各大型実験施設から計算科学に対する要望を述べていただいた。測定器の精度が上がってデータ数が増える一方、その解釈が追いついてない部分が課題としてある。結晶だけでなく、ドメイン構造やガラス構造などの解析が今後必要となり、実験と計算の連携は必須であると考えられる。

2.2.1 当該年度(平成26年度)における研究成果

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、物性、分子、材料計算科学研究者の京利用のための支援活動を行っている。平成 23 年度中から 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 年度からは 1 名の拠点研究員、平成 25 年度からさらに 1 名を追加配置し(平成 26 年 1 月に退職)、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。平成 27 年 3 月の時点で、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 名が常駐している。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、ミーティングのためのスペースを活用し、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、データの预处理、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い、また平成 26 年度に開催されたアプリケーション講習会(CMSI 神戸ハンズオン)にも積極的に活用した。特に平成 26 年度は神戸拠点においてアプリケーション講習会(CMSI 神戸ハンズオン)を積極的に開催し、戦略分野 2 で開発されたアプリケーションの普及活動を行い、成果の普及に努めた。

2) 「京」・HPCI 利用者の支援

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。また、CMSI 神戸拠点 Wiki の内容の充実させ、利用の便宜を図った。また前年度以前に設置された TV 会議システムを活用し、神戸拠点常駐者による外部の「京」・HPCI 利用者への支援を行った。

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(2)-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(神戸拠点含む)に 7 名、分子研に 6 名、分子サブ拠点である東大総合文化に 2 名、金研に 1 名、東大院工に 0.5 名、また、産官学連携拠点である産総研に 1 名の合計 17.5 名を配置した。カテゴリ A の拠点研究員は神戸拠点、物性研にそれぞれ 1 名ずつ配置され、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(2)-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 26 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

ii) カテゴリ A 拠点研究員の活動

・ 昨年度に引き続き、固有値ソルバの統一インターフェース Rokko の開発、チュートリアル改訂増補を行った。また、Rokko を用いた Heisenberg-Kitaev 模型の固有値計算を行うプログラムの開発に着手した。さらに、Rokko に関する紹介を MateriApps のホームページに掲載した。固有値計算に関する情報交換のため、AICS の今村チームと対角化ミーティングを行った。

今年度の若手技術交流会では、幹事の一人として第10回、11回の企画、運営を行った。第11回の交流会では、Rokko のミニ講習会および Rokko チームの講師を務めた。

神戸ハンズオンでは、Rokko、バージョン管理システムの回の講師を務めた。他の回でも、アプリのインストール、実習用クラスタへのログイン方法の改良を行った。これらの知見を他の拠点と共有するため、GitHub リポジトリを作成した。また、講習会の実習用も兼ねて神戸拠点に設置されている、「京」ポストデータ処理用クラスタ phi のメンテナンスを行った。

戦略分野と AICS の情報共有のために行われている「京」ユーザブリーフィング、AICS café に参加し、得られた情報を CMSI に展開した。さらに、AICS で行われた CMSI 主催のイベント(配信講義・セミナーの受信、「京」・HPCI スパコン利用情報交換会、テンソルネットワークをテーマとした CMSI International Workshop、TOKKUN!)と AICS 一般公開について、会場準備、宣伝等の支援を行った。また、広報誌 Torrent に神戸拠点の紹介の記事を執筆した。(坂下拠点研究員)

- ・ 昨年度までに開発・チューニングを行った、大規模並列モンテカルロシミュレーションプログラムを用いて、フ

ラストレートした相互作用が存在する古典スピンモデルにおける、トポロジカル励起が引き起す相転移に関する研究を進めた。また、二次元以上の種々の量子系に適用可能なテンソルネットワーク変分法のプログラム開発とチューニングを進め、開発したプログラムをスピン軌道相互作用が引き起す異方的な相互作用が存在する系に適用して、基底状態で実現する磁気秩序、スピン液体に関する研究を行った。(大久保拠点研究員)

4) 講習会、交流会等の開催

i) 若手技術交流会合宿

活動の総括:

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 26 年度は、坂下(東大)、河津(横浜市立大)、野田(分子研)の 3 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 10 回 CMSI 若手技術交流会 (報告書 52)

テーマ: 可視化

7 月 7-9 日 計算科学研究機構(AICS)/神戸にて開催

「京」をはじめとするスパコンによるシミュレーション結果を研究者および一般向けにわかりやすく紹介する上で重要となる可視化技術をテーマとした。

最初に幹事によるフリーの可視化ソフトウェア ParaView の解説を行い、東大情報基盤センターの中島氏、ヴェイサエンターテイメント株式会社の武田氏に可視化の注意点を含む講演をいただいた。これらのアドバイスを元に、参加者は、ParaView または講演で紹介された可視化ソフトを用いて、各自が持ち込んだ素材(計算物質科学のアプリの出力データ)の可視化を行った。最終日は、そのノウハウを共有するため、成果を wiki にまとめ発表を行った。

そのほか、未来モノづくり研究所の宮野氏、株式会社フューチャーラボラトリーの橋本氏に「次世代の計算物質科学推進体制構築に向けた人財開発」と題して講演していただき、産学における人材育成のあり方について議論した。また、MateriApps に関する座談会、MateriAppsLive! の使用体験の時間も設けた。開催地が AICS という点を活かし会場を出入り自由とすることで、可視化チームをはじめとする AICS の研究者、広報の方々にも参加していただくことができた。

②第 11 回 CMSI 若手技術交流会 (報告書 59)

計算物質科学アプリ勉強会 ～講習会講師を体験し、計算手法、アプリの構造、プレゼン技法等を学ぼう～

2 月 4-6 日 静岡県掛川ヤマハリゾートにて開催

今回の交流会は、CMSI のアプリを使用してみるだけでなく、講習技法を学び実際に「講習会を作る」経験をすることで、「各自が開発したアプリの普及活動を自ら行う事ができる研究者」を育成する事を目的とした。また、開発に携わっていないアプリについても、講師として説明できる程度まで、適用対象となる物質系や計算手法、ソフトの使い方を理解し、その理解の過程で他分野の研究者との対話に関する知見を得ることで、今後需要が高まると予想される「実験家と計算物質科学との架け橋になる人材」を養成することも目指した。

初日には、CMSI で開発されたアプリ(OpenMX, ALPS, xTAPP, Rokko, MODYLAS)のミニ講習会を実施し、参加者は各アプリで用いられる計算手法、ソフトの使い方を学び、アプリの実行を体験した。2 日目午後以降は、各アプリにつき 3 人程度のチームに分かれて、説明練習、スライドの改訂(題材の配置の工夫、新たな素材の追加など)を行った。中間および最終発表はチームメンバーで分担し、ミニ講習会と同様の英語によるプレゼン形式で行った。また、計算科学振興財団の西川武志氏に「アプリケーションを普及させるには何を為すべきか」と

題して講演をいただき、討論を行った。

ii) 第3回 CMSI「京」・スパコン利用情報交換会

6月30日-7月1日 計算科学研究機構(AICS)/神戸にて開催

「京」を含むHPCI共用計算資源の一般利用、若手利用、産業利用を促進するため、計算科学研究機構において、6月30日-7月1日の期間、アプリ高度化内容、利用可能なアプリに関する情報交換会を開催した。情報交換会では、これまでの「京」一般利用枠審査基準と採択率等に関して、RIST から説明がなされた。また、すでに「京」の一般利用を進めているユーザ3名から、京利用に関するノウハウの紹介、理研 AICS から将来の計算機アーキテクチャ、専用計算機の可能性に関して講演があった。また CMSI で開発が進められている4件のアプリケーションやCMSIのHPCI利用促進支援活動及びその成果に関する紹介が行われ、利用者間での活発な情報交換がなされた。

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、CMSI 神戸拠点が主体となって「京」物性セミナー(計1回)を開催した。聴衆も、CMSI 神戸拠点だけでなく、理研 AICS、神戸大、兵庫県立大、大阪大、Spring-8 など、広く関西方面から研究者が参加し、活発な質疑応答がなされた。

第1回4月23日 講師:佐藤正寛(青学大) 計算科学研究機構(AICS)/神戸にて開催「相関量子多体系におけるレーザー誘起非平衡現象についての理論 -レーザーによる磁化とカイラリティの制御とキタエフ・ハニカム格子模型におけるレーザー誘起トポロジカルマヨラナ液体相」

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」を開始している。講習会では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、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 を用いてプログラムの実行、計算結果の可視化などの実習を行っている。平成26年度は合計で9回の講習会を開催し、産官学からのべ67名の参加があった。

第14回4月28日 FUチュートリアル

講師: Dmitri G. Fedorov (産総研)、北浦和夫(神戸大学)

第15回5月30日 バージョン管理システムチュートリアル

講師: 松尾春彦(RIST)、坂下達哉(東大物性研)

第16回6月16日 ALPSチュートリアル

講師: 藤堂眞治(東大院理/物性研)、松尾春彦(RIST)

第17回8月18日 FUチュートリアル

講師: 北浦和夫(神戸大学)

第18回9月18日 Rokkoチュートリアル

講師: 坂下達哉(東大物性研)、藤堂眞治(東大院理/物性研)

第19回10月10日 OpenMXチュートリアル

講師: 尾崎泰助(東大物性研)、Truong Vinh Truong Duy(東大物性研)、坂下達哉(東大物性研)

第20回12月12日 xTAPPチュートリアル

講師: 吉本芳英(東大)

第 21 回 1 月 30 日 MODYLAS チュートリアル

講師：安藤嘉倫（名古屋大学）、遠藤裕太（名古屋大学）、小西優祐（産総研）、吉見一慶（構造計画研究所）、坂下達哉（東大物性研）

第 22 回 2 月 16 日 SMASH チュートリアル

講師：石村和也（分子科学研究所）

v) CMSI アプリ高度化合宿（“TOKKUN!”）

参加対象者：CMSI 研究課題推進者（重点／特別支援／支援）もしくは上記課題推進者から紹介を受けた計算物質科学分野で「京」一般利用枠の申請を行う方で、「京」もしくは FX10 のアカウント保持者
開催場所：計算科学研究機構（AICS）

・7 月 1-2 日 “TOKKUN! 4（アプリ高度化・利用方法習得）”

「京」一般利用枠採択を目指して、RIST サポートチーム及び「京」を利用している CMSI 研究員による FX10 を用いたアプリの解析と問題解決方法の提案、主要な CMSI アプリ(FMO、MODYLAS、OpenMX)の開発者による利用方法の説明によって、参加者は各自のアプリの高度化もしくは CMSI アプリの効率的な利用方法の習得を行った。アプリ高度化では、アルゴリズムから見直した計算負荷のばらつき解消と通信量削減、指示行の挿入による例外処理(if)がある場合の SIMD 化などを行った。利用方法の支援では、巨大系の複雑な電子状態の収束における効果的なオプション指定、並列性能を向上させるための効率的な空間分割方法についてアプリ開発者から詳細な説明を受け、「京」もしくは FX10 で計算を実行して説明内容を確認した。

・8 月 4-6 日 “TOKKUN!5（実行・並列性能向上）”

RIST サポートチーム及び「京」を利用している CMSI 研究員による支援によって、学生を含めた参加者は FX10 を用いてアプリの高速化と並列化に取り組んだ。FX10 のアプリ解析ツールの使い方とデータの読み方の説明を受けた後、参加者は各自のアプリの解析、ホットスポットの特定を行った。サポートチームのアドバイスで、問題点の原因とその解決方法を理解し、アプリの改良を行った。実行性能向上に取り組んだ学生は 3 日間で計算時間を 38%削減することに成功した。並列性能向上では、マスタープロセスのみのディスクへの書き込みが計算時間のばらつきの原因であることを解析ツールのデータから特定し、それぞれのプロセスが書き込む方法に変更することで均等な負荷分散を実現した参加者もいた。取り組んだ高度化内容を議論する時間を毎日設けて、参加者全体で情報共有も図った。

vi) 3Dプリンターを用いた物質構造モデル作成支援

CMSI では 3 つの 3D プリンターを導入した。3 色の 3D プリンター（CUBEFY）は京都工芸繊維大学高木研究室に、2 色の 3D プリンター（Replicator 2X）は、物性研究所と岡山大学松本研究室に設置した。それぞれ、スーパーコンピューターで計算した結果をモデリングするために使われる。そのほか教材等の開発にも使う予定である。

物性研究所では、本年度 10 月 1 日より 3D プリンターを使った物質構造モデル作成支援活動を開始した。3D-CAD の導入、3D プリンターの試運転等を経て、物性研究所一般公開向けに試作・実演を行った。

分子構造、結晶構造のモデリング方法を開発した。具体的には、結晶描画ソフトを使い結晶データから 3D 結晶画像を作成、CG ソフト（コンピューター・グラフィックス）にてファイルを変換し、3D プリンター用ソフトに読み込ませた。さらにこのソフトを使い 3D プリンターを動かすプログラムを生成し、実際に 3D プリンターにてプリントを行った。なお、製作したモデルは、ダイヤモンド構造、鉄系超伝導体、分子性導

体、酸化バナジウム系、ネオディウム系磁石等である。

京都工芸繊維大学高木研究室と共同で3色の結晶構造のモデリング方法の開発・検討した。3色の分子性導体のプリントを行った。より高精度のプリントを行うための改良点など相談した。

見える化シンポジウムでは、岡山大学松本研究室と共同で水分子の集合体を製作、水分子の集団振動の振る舞いを実演した。具体的には、水分子1個相当の球を作り、内部に二本の磁石を入れた。これは、水分子の極性と水素結合を表現するためである。これを数十個作り水槽の中に入れた。リアルな水分子の配位を表現しながら水分子同士の振動も表現することができた。

物性研究所では、Maker Bot 社の Replicator 2X を導入している。試運転の段階から、初期設定、3D プリントするための樹脂の供給、専用ソフトなどの改良点を検討した。さらに、代理店の日本バイナリー社経由で改良点を指摘、改善提案などを行った。

物性研究所所内向けに物質構造モデル作成支援の広報活動を行った結果、元素戦略系の研究室から、 $N_2Fe_{14}B$ の結晶構造のモデリング製作の依頼を受けた。製作物は、磁石設計時のアイデアねん出等に使われている。

岡山大学松本研究室、豊橋技術科学大学後藤研究室と3Dプリンターの活用方法を話し合った。磁石と3Dプリンターを使い水の結晶成長モデルが作れないか議論した。あわせて特許取得の可能性についても話した。今後、教材開発等についても話を進めていく予定でいる。

本年度は、3Dプリンターを使った支援事業は準備段階であった。来年度以降本格的な支援事業を展開していく予定でいる。

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 26 年度は、平成 25 年度に実施された HPCI 戦略プログラムの中間評価で受けた指摘事項を考慮して立案された計画に沿って活動を行った。平成 27 年 2 月には、分野 2 作業部会メンバーによる作業部会にて評価を受け、下記の通りいただいた指摘事項を参照して、平成 27 年度に推進する研究開発課題とそれに利用する「京」計算資源、および、計算科学推進体制構築の実実施計画を策定した。それらの計画を実施するために必要となる、平成 27 年度に雇用する 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) 作業部会からの指摘事項

1) 全体(常行)

- ・ポストドクのキャリアパスとして、企業への就職を視野に入れた活動を促進して欲しい。
- ・産官学連携イベントで、CMSI 成果の発信を実施して欲しい。普及が広まる可能性がある。

2) 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(今田)

- ・今後は、電子格子相互作用を計算で考慮して検証していく必要がある。
- ・超伝導への要望のひとつに、臨界電流密度を増やしたいということもある。

3) 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(天能)

- ・今年1月にフォトシステムIIでダメージの少ない実験結果が示されているのでそれと比較して欲しい。
- ・各種の手法の開発により複雑系の計算ができるようになった。今後、現実への適用例としてマンガクラスターのどのような反応をどこまで解明できるのかの見通しをはっきりさせる必要がある。

4) 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(押山)

- ・ベースサイエンスとして、このような方法、アプローチは大変なブレークスルーの可能性を持っている。
- ・バルクの中の粒子表面の局所的な電子状態が面白いが、金属系への適用は難しいことが課題。

5) 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(岡崎)

- ・チャージに関する計算は電池に関する電気化学的な観点からも大変面白い結果である。
- ・定量性は多少犠牲にしながらも、コンセプトとして電荷の問題を検討していくことは大事である。

6) 重点課題5: エネルギー変換の界面科学(杉野)

- ・現状は理想的な燃料電池電極のシミュレーションなので、実際に実験で実施されているものへの適用にどのようなアプローチで持っていくのかを示さないといけない。基礎課題ではなく、エネルギー課題と名乗るからには、実際の燃料電池とどのようにつないでいくのかの計画が必要。

・リチウム空気電池の Li_2O の成長位置は溶媒中だけでなく、電極表面等いろいろなケースがありうる。実験の人が「ああそうか」と感じる結果を示して欲しい。

・SEI膜は「のぞまれていない分解で生成する」のではなく、「制御した電解液の分解で生成する」という表現が正しい。

・難しい現象を説明するよりも、まずは、実験で検証可能なシミュレーションを実施して、実際と合っていることを示すことが重要では。

・白金111面の検証は、実験と計算の検証モデルになると思うが、まだ実験側が納得する状況にはなっていない。手法はかなり進展しているので、別途時間を設けて詳細を聞く機会を設けたい。

7) 重点課題6: 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(田中)

・研究のターゲットが曖昧。何を狙って何をするのか、特に実験的背景と何が要望されているのかを最初にきちんと記述されている必要がある。実験と整合させ、どのような新しいメカニズムが解明されたのか残り1年で実施してください。

・次回報告までには、実験家が困っていることのリストを明確にしてください。

8) 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(香山)

- ・第一原理と MD を活用して転位の問題の手法がかなり進歩し、理解が進んできている。
- ・置換元素と s, p 軌道、d 軌道の関連等を電子密度計算まで突っ込んだ理解をすることが大事。今後期待する。

9) 計算科学技術推進体制の構築(常行)

- ・重点課題で実施している課題の実験家の声を拾えていないケースがあるので、そのようなイベントを企画する。とくに、エネルギー課題の2つ。
- ・出口までのアプローチとして、サイエンスにどうブレイクダウンして答えを出していくのか。元素戦略のように、現場のニーズを知る努力を活動の中で実施した方が良い。

10) 総合討論

- ・ベーシックサイエンスで分野を超えた新しいサイエンスを作る活動として、物性、分子、材料、バイオ等が新しいサイエンスの見え方につながって出てきたら、それは胸を張って強調すべき。押山課題と信定課題のコラボ、岡崎先生の新しい観点は新しい方向を感じた。天能先生のフォトシステムも量子化学と物性的な電子励起や電子伝達のやりとりが生じてきた。やっと分野融合の目がでてきた。
- ・現状のサイエンスの分野は人間が勝手に決めたもの。先生方には現場の声を聴いて、自分の技術ではないからといって関与するのを止めず、他の分野の誰につなぐといった仲人をおこなって欲しい。
- ・CMSI の仕組みを戦略プログラム後も何とかして残す方向で検討して欲しい。
- ・中間評価の際の指摘事項をもう一度よく見て、最終年度に向けてそれを実現して欲しい。
- ・ポスト「京」にも戦略プログラムの重点課題が引き継がれていくという点を考慮して、中間評価の指摘事項に真摯に対応して欲しい。
- ・機関が責任をもって実施する成果発表のプレスリリース文の表現方法には、理研の問題を教訓にして、気を付

(2) 平成26年度 CMSI 研究員・教員の配置

平成 26 年 12 月 8 日の運営委員会にて、研究課題の検討と同時に、平成 27 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。表 2.2.1.3-10 と表 2.2.1.3-11 に雇用する予定の人数を示す。重点研究員は 16 名、拠点研究員は 20.5 名、CMSI 教員は 7 名(1 名が教員 0.5 と拠点研究員 0.5、もう 1 名が教員 0.5)、総勢 43.5 名の CMSI 教員、および、研究員を雇用する計画である。

表 2.2.1.3-10 CMSI 重点研究員の配置予定(平成 27年度)

所属機関	第1部会		第2部会	第3部会	第4部会		第5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		0				2
東北大院理		1						1
東大院・工	2		1.5					3.5
物性研					1.5			1.5
阪大院・工					0			0
筑波大			1					1
名大院・工				2				2
岡山大院・自然						1		1
東北大・AIMR					0			0
産総研関西							1	1
合計	2	3	2.5	2	1.5	1	1	13.0

表 2.2.1.3-11 CMSI 教員、CMSI 拠点研究員雇用計画(平成 27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	0.5	1	3	1	1	7.5
				1(産官学連携)		
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
横浜国大 (材料地域拠点)			1			1
東大院・工(教育拠点)	1.5		0.5			2
名大院・工(教育拠点)	1					1
阪大院・工(教育拠点)	1					1
合計	7.0	2	16.0		1.5	26.5
		(拠点研究員合計 19.5)				

*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) 部会全体の取り組み

[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。

量子化学の分野においても、最近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行われている溶液や蛋白質の自由エネルギー計算を用いることにより、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27年度の実施計画と成果目標]

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「本分野のキャッチフレーズには、「源流から奔流へ」という文言が入っていて、本課題は源流の一つである。他の課題への波及効果にも意を尽くしてもらいたい。」という指摘および類似する指摘があった。平成 25 年度に引き続き、基礎学理の観点から、太陽電池などエネルギー変換課題の基礎付けを展開していく。また 25 年度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の発展があったが、さらに他部会および実験研究に刺激を与える展開をめざす。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。」との指摘が以前あったが、平成 25 年度は、その検討を開始した。今年度はさらに推進し、特に電子格子相互作用のある系を取り扱う手法の適用範囲を広げ、第一原理模型から低エネルギーソルバーで解くまでを一貫して行える枠組みを作る。

分子科学の研究課題については、作業部会の中間評価指摘事項として、「開発された計算手法とプログラムを分野横断的な形で現実の問題へ展開することが望まれる」という趣旨のコメントがあった。分子設計という観点では、平成 26 年度以降、フラーレンルイス塩基アダクトに関して、ルイス塩基と原子種を換えた網羅的な研究を行い、生成効率に優れたデバイス材料の予測を行う。更に、植物の光合成反応中心の電子状態と酸素発生の機構の研究を FMO 法とモデル空間量子モンテカルロ法を用いて、部会内連携および第3部会との部会間連携の形で進める。計算手法そのもの発展についても、物性物理分野とは相関の強い電子状態の取り扱いが共通の関心であり、第一部会での研究会等の活動を一層活性化する事により、F12 電子状態理論やモデル空間量子モンテカルロ法を物性物理の問題に応用したり、その逆の効果が期待出来る。

他部会と連携して、励起状態、非平衡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。

26～27 年度においては、「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
- ・強相関超伝導体の機構解明
- ・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、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)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であり、旧動力学および凝縮系の研究項目との練成を図る。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和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。有機デバイス材料としての金属内包フラレン、外部収束フラレンの構造と物性計算
2. モデル空間量子モンテカルロ法による遷移金属化合物の計算
3. フラグメント分子軌道法とモデル空間量子モンテカルロ法を用いた光システム II の構造と電子状態の研究
4. 内部回転自由度を持つナノ分子の電子状態と動力学研究

3) 平成27年度の実施計画

[部会活動]

部会共通活動用の活動資金の配分がないので、今年度は大きな活動は行なわず、重点課題の成果のとりまとめと、ポスト京への発展継承に尽力する。

[連携活動]

(部会連携)

第一部会の重点課題「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」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と強相関効果)

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

高効率太陽電池開発の原理解明

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、テンソルネットワーク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を26年度に引き続き展開する。

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。第三部会の北浦と協力して、フラグメント分子軌道法を用いた光システム II の全原子計算を行い、タンパク質反応場が酸素発生中心の電子状態に与える影響を調べる。

(CMSI 連携)

平成 26 年度に引き続き下記の課題で連携を推進するとともに、ポスト「京」課題と連携を進め、発展的推進につなげる。

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)

ポスト「京」プロジェクトで立ち上げる実験家との超伝導およびトポロジカル物質に関するフォーラムを協力して推進し、強相関電子系分野の実験研究者と連携して研究を推進する。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を対象とする。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。

[研究開発課題(計画)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(東京理科大)、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]

26年度に引き続き、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27年度においても、以下の3課題の研究を推進する。

- ①新しい量子相の解明
- ②強励起ダイナミクスの解明
- ③スピン軌道相互作用とトポロジカル現象の物理

[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。26年度に解明した鉄系高温超伝導体の超伝導機構に引き続き、銅酸化物高温超伝導体の第一原理模型を導き、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。平成27年度は特に第一原理有効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、高温超伝導や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、強相関係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・界面などトポロ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、トポロ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)の開発を引き続き進める。

動的密度行列繰り込み群法、厳密対角化法などを用いて、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や磁場誘起スピンダイナミ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、低次元強相関電子系の光励起非平衡ダイナミクスから得られる緩和に関する知見を得ることで、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

イリジウム化合物の第一原理有効モデルをもとに、実験のより完全な理解と、キタエフスピン液体を実現する道筋を追求する。スピン軌道相互作用の大きな理論モデルについて、トポロジカル新量子相を含む相図を探索する。テンソルネットワーク法のコードを開発実装する。またテンソルネットワーク法の制度の改良に取り組むとともにフェルミオン系での計算手法の開拓を進める。基礎科学的に量子スピン液体の発生機構と性質がより深く理解されるだけでなく、この系が生み出すマヨラナフェルミオンとそれを用いた量子計算などの応用の可能性に対して、基礎学理が解明される。

【「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で、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%を達成済みである。また低エネルギーソルバーである多変数変分モンテカルロ法は最大実行効率がピーク性能比 10%から最大 40%以上に達している。これを用いて超伝導、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は 6144 ノードを基準として 12288 ノードで 90%である。また、二次元電子系・スピン系に有効な並列化技法を開発して実装しており、「京」での高並列化に対応する二次元密度行列繰り込み群法も開発済みである。

本課題で利用するコードに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もある。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、高い性能を発揮している。今後も 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度メンバー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(計画)内容】

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に関する研究、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 27 年度においては、以下の課題の研究を推進する。

1. 銅酸化物高温超伝導体の第一原理模型を用いて超伝導メカニズムを解明する。単バンドの第一原理格子模型での一辺十サイト以上の計算を推進継続することによって、熱力学的極限への外挿が行なえる。多バンド模型の計算と比較することによって、超伝導機構をピンポイントで理解できるようになる。また網羅探索により今後の高温超伝導への指針追究を推進できる。
 2. 強相関電子系群の基底状態や電流・熱相関関数を対角化法、マスター方程式の方法、密度行列繰り込み群法により計算し、特異なエネルギー輸送および効率的なエネルギー変換を解明する。これを用いて効率的な太陽電池での電荷分離機構の解明を進める。
 3. 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、正方格子上、およびハチの巢格子上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、さらに大規模計算を継続し、脱閉じ込めの概念の有効性と特異な 1 次転移的なふるまいの原因を明らかにする。
 4. 新しい計算手法であるテンソルネットワーク法の開発実装を行なう。
- 以上、新量子相や量子相転移の候補を抽出し、テンソルネットワーク法などの新しい手法の開発と実装を行なう。
5. 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を開始し、まず光励起された励起子からの電荷分離機構を解明する。
 6. スピン軌道相互作用の大きな理論模型について、トポロ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を応用して計算を進める。
 7. スピン軌道相互作用の強いイリジウム化合物の第一原理模型に対して実験で明らかとなっている物性をパラメタなしに説明する。スピン液体を実現する方策を検討する。

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 (記入担当者: 天能)

【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現実の問題に利用す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。

凝縮系に関しては、界面や電場などの異方性の影響を考慮できるように、三次元空間分布関数に基づくMC-MOZ 法、3D-RISM 法の整備を進める。又、多くの熱力学的異常性を示す水とくに過冷却状態における動力学、揺らぎを解析し、液-液転移およびガラス化に至る変化を解析し、水の多様性・熱力学の裏に潜む分子機構を解明する。この研究により四面体構造を形成する水を始めとする物質の物性、動力学の理解を深化させることができ、大きな科学的意義が期待される。更に、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、分子モーターを例にとり、実験では想像できないタンパク質の動作機構原理を解明する。

〔「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完了し、モデル空間の次元数に対してほぼ完全に線形なスケーリングが得られている。

[研究実施内容]

平成 27 年度は、以下研究を実施する。

1) 有機伝導分子の高精度分子設計

前年度に引き続き、MP2-F12 法と RD-MP2-F12 法を用いて有機伝導体分子の計算を行う。特に、フラーレンの外部修飾の計算では、H26 年度に検討した様々な形状のカルベン分子の計算を行い、最適な架橋距離をもつ分子を特定し、新しい電子的性質をもつフラーレン誘導体の創出を目指す。これに加え、ポリチオフェンの分子間相互作用エネルギーの計算から最適な分子間距離を求める。また、H26 年度に導出と実装を行った露わに相関した二次のダイソン方程式について、精度を上げるための新たな項を導入し、より低コストで高精度な計算ができるようにする。本手法を用いて、上記のフラーレン誘導体や種々の有機電子材料のイオン化ポテンシャルの高精度計算、およびポリチオフェン分子同士が相互作用することによってどの程度イオン化ポテンシャルが変化するかについて調査する。

2) MSQMC プログラムの高度化と光システム II の電子状態への応用

MSQMC 法の並列プログラムの整備については、ノード間の MPI 並列化に関しては、現在のアルゴリズムで完成したと考えており、ノード内並列の高度化を引き続き行う。現在、ノード内の並列化は、OpenMP を用いて個々のウォーカーについての計算を独立に行うことによって実行しているが、ウォーカーの代わりに個々のステップを並列化し、計算密度を高めることによって、さらなる高速化が可能である。新しいスレーター行列式を乱数に従って発生させるステップでは、確率の計算に分子積分が必要であるが、このステップを続けて行うことによって、メモリ上の分子積分へのアクセスを連続化できるアルゴリズムの開発を行う。計算に関しては、光システム II の活性中心のテスト計算では、6-31G 基底関数を使用し、マンガン d 軌道と酸素 2p 軌道よりなる最低限の活性空間しか用いなかったが、分極関数も含んだより大きな基底関数し、他の理論では用いることのできない大きな活性空間を使用した計算を行うことによって、低エネルギー領域に存在するスピン状態に対する他の軌道の効果を調べる。また、テスト計算で用いた最小モデルよりも大きな系を用いることによって、周りのアミノ残基の効果や、構造依存性についても解析を行う。

3) 光システム II の構造と電子状態の研究

得られた OEC の BS 解はスピン混入が大きかったため、精密な電子状態を得るためにはスピン射影を行わなければならない。したがってスピン射影法を開発し、GELLAN に実装する予定である。スピン射影演算子は Percus-Rotenberg 角運動量射影演算子を用いる。ここでスピン射影法は UHF 法でエネルギー変分後にスピン射影する手法(PAV)ならびに、スピン射影後にエネルギー変分する手法(VAP)に大別される。VAP である SUHF 法は BS-UHF 解以上の静的電子相関が取り込めると考えられるので SUHF 法の開発ならびに実装を行う。さらに OEC に SUHF 法を適用して各スピン状態を求め、ESR や ENDOR などの実験と比較しながら、それぞれの精密な帰属を行う予定である。さらに動的電子相関を取り込むためにスピン射影 DFT 法 (SUKS) 法の開発も行う。その一方で OEC のスピン射影状態から構造最適化を行う予定である。そのために VAP である SUHF 法の勾配法と PAV の勾配法の両方を開発し、GELLAN に実装する予定である。スピン射影された OEC と周辺アミノ残基を含めて、FMO-UB3LYP/6-31G(d) レベルで構造最適化を行うことによってさらに精密な電子状態を求め実験との比較を行う。

4) 自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学

フラーレン内包有限ナノチューブの会合エンタルピーの計算を GELLAN を使って進め、内包フラーレンの内部回転に対する遷移状態に関する高精度ポテンシャルも構築する。このような精度を高めた取り扱いによって、フラーレンの回転によってブロードニングと先鋭化を起こしている実測の NMR スペクトルの再現や分子ベアリングの機能評価法の確立を目指す。DFTB 法や QM/MM 法などを使って、溶媒の効果も評価する。結晶性分子ジャイロスコープの構造と動力学の定量化も進め、テラヘルツ波を使った回転運動の制御法を提案していく。H26 年度は単一分子と光との相互作用を扱ったが、H27 年度は偏光方向に単位格子 2、3 個のレイヤーを組み、垂直方向に周期境界条件を課した結晶モデルを採用する。この現実的なモデルにおいて、双極子モーメントを有する回転子がテラヘルツ波から得たエネルギーによってどの程度の時間で高速回転を始めるか評価する。GELLAN を使って分子ジャイロスコープ単分子の回転子と固定子間の分子間力も評価し、その結果を使って DFTB の分子間力パラメーターを再構築して、X 線結晶構造の全原子位置の再現を目指すなど、機能評価や分子設計に必要な信頼性を高める。

2.2.2 本格実施(平成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(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い、次世代先端デバイス科学研究を推進する。Si/Ge系を中心とする線幅20nmを切る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。一方Siを凌駕する広ギャップ半導体 GaN、SiC を用いたパワーデバイスは、精緻な微細化のレベルには達しておらず、シミュレーションによる条件出しとデバイス設計が必要である。さらに、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や光と電子の新たな結合を活用した新機能の発現も期待されている。密度汎関数理論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リング則は破綻し、ポスト・スケーリング時代のテクノロジーに突入している。そ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27年度の実実施計画と成果目標]

第2部会においては、電子相互作用の記述に関しては密度汎関数理論を軸として、それを越える理論をも取り入れ、さまざまな物質群に対する高精度シミュレーションが実行されてきた。重点課題では実空間手法を軸とする京コンピュータ上での先端的大規模計算が実行され、半導体、炭素ナノ物質等の電子機能が解明されてきた。26年度からは、光関連省エネデバイスを念頭に、時間依存密度汎関数理論による時間依存 Kohn-Sham 方程式と Maxwell 方程式を結合させた理論スキームの実空間・実時間解法による計算も重点課題として加わった。残る3つの特別支援課題においては、機械的性質と電子状態を結びつけるマルチシミュレーション、スピントロニクス材料の探索シミュレーション、各種アプリケーションを活用した新物質探索などが実行されてきた。平成 27 年度においては、これまでマルチコア超並列アーキテクチャのコンピュータ上で培ってきた HPC(High Performance Computing)技術を活用し、先端デバイス材料、ナノ構造に関する高精度・大規模計算を行っていく。「社会的にインパクトの強い課題の遂行が望まれる」、「パワーレ、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。」等の作業部会からのコメントに呼応し、またわが国におけるテクノロジーが Si を中心とするロジックデバイスから、省エネルギー社会を支える新たなパワーデバイスへとシフトしていることに鑑み、新たな材料系をターゲットとして取り込

んでいく。

27 年度における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、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。

3) 平成27年度の具体的な実施計画

[部会活動]

平成 27 年度の研究進捗状況報告、これまでの研究成果の総括、今後のポスト京時代に備えて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。

[連携活動]

(部会連携)

平成 27 年度の第2部会の研究課題はひとつの重点課題と 3 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、電子ダイナミクス計算などの、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 RS-CPMD は RSDFT と統合する。RSPACE と RSDFT は比較的類似のアルゴリズムを用いているので、互いの優位点を共有する方向で改善する。RSDFT と GCEED および ARTED は共通の数学的構造の部分が多々あるので、HPC 技術を共有する。HPC 技術開発については、先行する RSDFT だけでなく、RSPACE、CONQUEST、RS-CPMD、GCEED などのソフトウェアが京コンピュータ上でチューンされてきた。このノウハウを他のアプリケーション群にも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年度から始まった連携として、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ことが始まった。より一層の推進を目指す。また RSDFT 等、いくつかのコードは 27 年度中の公開を目指して整備する。

(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。また、製造現場でのデバイス・シミュレータ、プロセスシミュレータへの展開を目指し、半導体産業研究所(福間雅夫所長)からのアドバイスを受ける。

[研究開発課題(計画)の実施]

i) 重点課題3:密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現

[代表者] 押山淳(東京大)

[研究開発体制]

[担当者] 押山淳、岩田潤一、渡邊聡(以上東京大)、重田育照、小野倫也(以上大阪大)、
宮崎剛(物質材料研究機構)、Boero Mauro(レイパスツール大)、Bowler David(ロンドン大)、
赤井久純(東京大)
信定克幸(分子研)、矢花一浩(筑波大)、渡辺一之(東京理科大)

[研究開発課題概要]

密度汎関数理論および時間依存密度汎関数理論における近似手法(LDA、GGA、ハイブリッド近似、ブートストラップ近似)の活用と改良を行い、さらには摂動論的アプローチも併用した大規模高速計算技法を、マルチコア・超並列アーキテクチャのコンピュータ上で確立する。それにより、ナノ構造体・材料、新奇物質群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、光応答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、熱の輸送特性と光励起物性を明らかにする。これにより、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、時間依存 Kohn-Sham 方程式とマックスウェル方程式との結合方程式を実空間実時間で解く GCEED および ARTED 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、理論手法の改善により、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、大規模デバイスシミュレータ開発への展開をはかる。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。また、光と電子の動的相関を露に取り込む計算手法の開発は、新機能を持つ光・電子デバイスの計算科学的設計につながり、学術的にも実社会への還元の意味からも高い意義を持つ。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(最高性能賞)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、RS-CPMD、GCEED の各コードもハイブリッド並列による高性能化が京コンピュータを使用して検証されている。

[研究実施(計画)内容]

超並列アーキテクチャのコンピュータにおいては、通信負荷の軽減の観点から実空間手法が原理的に有利である。本重点課題で研究開発の軸にすえている6個のプログラムコードはいずれも実空間手法であり、前年度から引き続いて、その高速化、高度化を遂行する。物質計算では、ロジックデバイス系から、パワーデバイス系さらには新奇光デバイス系までの広範な材料をターゲットにする。具体的には、Si、Geのナノ構造に加え、SiC、

GaNなどの広ギャップ半導体、酸化膜界面、金属酸化物のナノ構造体等も重要な課題とする。具体的には、

- エピタキシャル成長、酸化、エッチング等の物質創成技術の量子論的シミュレーションによる反応機構の解明と自由エネルギー面の決定
- Si/Geコアシェル・ナノワイヤーの原子構造と電子物性の相関解明、ワイヤー状酸化膜との界面の構造同定と界面欠陥の同定、さらには熱輸送の微視的機構解明
- パワーエレクトロニクスの基本材料であるSiCおよびGaN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解明、および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)のマイクロな同定と電流と熱の輸送特性解明
- 次世代材料である炭素ナノ物質および軽元素ナノ物質、とくにグラフェン、チューブさらには異種元素ハイブリッドナノ構造の電子物性、輸送特性、光応答、熱輸送の解明
- 近接場光の2次高調波電場成分に起因する2光子励起を利用した広帯域・高効率光エネルギー変換デバイスや近接場光の大きな波数を用いた電子励起による半導体発光デバイスの計算科学的設計
- 高強度パルス光励起によりバルク表面・ナノ界面に生じる超高速キャリアダイナミクスと、その光波へのフィードバックを記述する第一原理計算手法の開発

を中心的課題とする。

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)、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、電場印可環境で促進される様々な表面・界面でのナノやメゾスケールの反応や、長距離に及び変形やストレスに関係した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ー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。本課題はこのようなマルチスケールな対象系のために、主として、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原子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法を、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27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発展させて、グラファイト中のLiイオン群の拡散挙動、酸化膜を有するアルミニウムの接着に関連して樹脂-金属接着・接合部の応力解析と密着性・耐久性評価、電子デバイスの放熱等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輸送、応力下にあるシリカガラスと水分子とのクラック生成反応に関するシミュレーション等を実施する。

[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、全原子に働く力を、短時間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。我々は、産業界からの期待が高い対象系をいくつか選定し、実際にスパコンを大規模に活用することで、これまでは不可能であった様々な対象系の丸ごとシミュレーションに、より一層近づけることを実証する。産業界の、原子分子スケールからの新しいシミュレーション基盤技術の一つとなると期待している。

〔「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(計画)内容〕

既に、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)の並列化作業は終わっている。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、電子デバイスの放熱、金属-樹脂界面の接合に関連した結晶固体と高分子固体との界面に関する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。また新しいアイデアによる融雪剤を目指して、大規模系の剛体水分子系に関する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: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(東京大)

〔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に基づくデバイス実現に向けて、最適な材料の探索を行うことのできるプログラム開発を行う。近年スピン軌道相互作用由来の現象が基礎科学において注目されている。このような基礎科学の研究と応用を結びつける第1原理シミュレーションを行うのが、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、高度平並列化作業を進め、OpenMXにおいては、1万6千ノードで13万原子程度の電子状態計算を可能とし、1000ノードを使用して5000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・界面系におけるラッシュバ効果、トポ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、酸化物など)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。開発を進めているシステム並列機能についての試験的計算を推進し、実際に使用できる並列

度数の飛躍的向上が可能であることを確認する。

[研究実施(計画)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。この際に、開発を進めているシステム並列機能についての試験的計算を推進するとともに、これまで達成してきた計算コードの高度化を統合してコード開発を推進する。また最適化問題を解く進化論的(遺伝的)アルゴリズムといった手法を大規模計算機において実施するための実装を推進する。

OpenMX については、第一原理経路積分法の高度並列化計算を実現する。スピントロニクス研究等において用いられるミュオン実験では、ミュオンの量子効果の解明が必要とされており、それに対応した計算が行える様にすることを目標とする。

HiLAPW・OpenMX を用いた研究において、引き続きスピン軌道相互作用に起因して発現する Rashba 効果やトポロジカルな物性に関する研究を進める。OpenMX に関しては、異常ホール効果、スピンホール効果の計算プログラムの開発をおこなう。また、HiLAPW コードに関して使いやすさの観点から、結晶主軸の取り方に依らず任意の空間群に対して計算のセットアップを可能とする汎用化を図る。HiLAPW・OpenMX において、方法論の開発としては、空間反転対称性のない系に対して Z2 不変量を計算可能とするコードの開発を行う。

iv) 特別支援課題3: 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。

[研究実施(計画)内容]

- QMAS、xTAPP、CASINO、FEMTECK、TC++の最適化、高度化を進める。
- xTAPPの高度化を行なう。特にスピン軌道相互作用の計算機能を実装する計画を進める。まずはノンコリニア磁性の計算機能から実現する。ワニエ関数など既存機能の高度化も行なう。またxTAPPとcRPAなど電子相関が強い系を意識した手法との連携を強化する。
- xTAPP, RSDFT, OpenMX, VASPの入力データ変換ツールを整備し、xTAPPのGUIであるTAPIOCAを用いた入力を実現する。
- xTAPPを利用した分割統治法と、その結果を利用した大規模系の一電子エネルギースペクトル計算手法のプログラムを整備する。
- QMASにおいて、引き続き、2成分スピノル形式電子状態計算や結晶場係数計算に関わる機能を充実させ、永久磁石を中心とする磁性材料についての応用研究を進める。また、最局在ワニエ軌道関連計算機能についても継続して整備を行ない、強誘電体などを対象に物質開発を目指した応用研究を展開する。
- 昨年度に引き続き、第一原理分子動力学計算を効率良く行うための時間発展アルゴリズムを開発する。
- 第一原理分子動力学法による輸送現象の研究を行う。
- CASINOに更に新たな多体試行関数形、および、その最適化スキームを実装し、電子正孔系におけるポリ励起子の実現可能性解明を進める。また、大規模分子系に対するプロダクトランを実施し、ゾルゲル法を念頭に置いた濡れ性記述の第一原理的計算を進める。
- TC++の高度化を進める。
- 第一原理非調和格子モデルの作成と熱伝導度計算を行うパッケージALAMODEの機能を拡張し、高温でのみ動的平均構造として実現される結晶のフォノン計算に対応させる。
- 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、水素を含む新規化合物について応用計算を進める。

2.2.2 本格実施(平成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(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

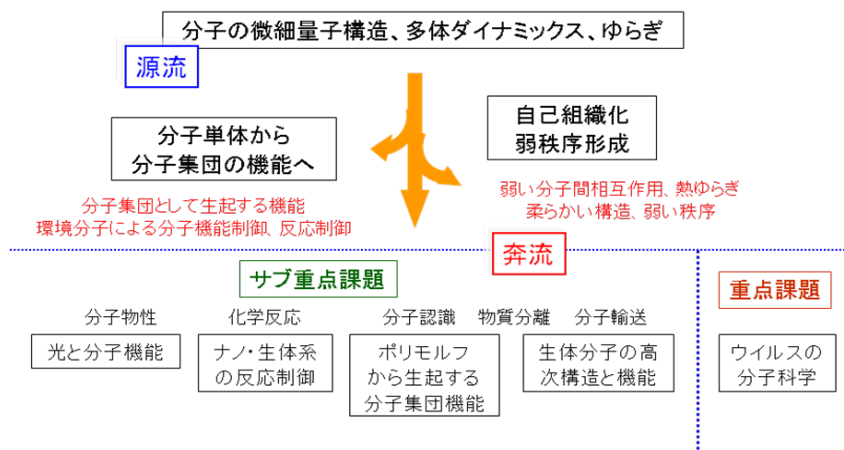


図 2.2.1.1(3)-1 分子および分子集団の創るナノ構造と分子機能・物質変換

[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、ウイルスカプシドに注目した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、ウイルスの分子論の研究を通して確立した手法をさらに発展させ、B 型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤など実社会で必要とされる抗ウ

ウイルス剤の開発に貢献していくことは極めて重要である。

一方で、エンベロッ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、化学物質のゼロエネルギー分離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、また広範な産業利用が見込まれる高機能高分子開発のための基礎の確立は、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27年度の実施計画と成果目標]

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、前年度に引き続き、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、特に、1. 小児マヒ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な結合、3. B 型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤がカプシドを透過する分子機構、そして、4. インフルエンザウイルスの新規阻害化合物の理論設計について研究を進める。

「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、これまでに開発してきたレプリカ置換法を使ってアミロイドβ ペプチドが単量体から多量体を形成する過程を明らかにする。また、量子効果を取り入れた拡張アンサンブル法や開放系の QM/MM 分子動力学シミュレーションの検証を行い、サンプリング効率を高めるレプリカ交換法、水素原子核の量子効果を含める経路積分法も取り入れて、さらなる高度化を進める。さらには、2次元レプリカ交換法に基づくドッキング手法を G 蛋白質共役受容体の系に適用して、その有効性を調べる。

「ポリモルフから生起する分子集団機能」では、タンパク質構造に対する環境効果を全原子 MD とエネルギー表示溶液理論で検討する。高分子系では、全原子モデルを用いて架橋構造を含む高分子膜での水分子の溶解性や運動性を検討する。ミセル系の全原子計算では、その可溶性や構造安定性とイオン強度や pH といった溶液条件との相関を探る。さらに、タンパク質やコレステロールに対する粗視化モデル、粒子-連続場ハイブリッドモデルを流体シミュレーションに埋め込んだマルチスケールシミュレーション、LogMFD 法の粗視化タンパク質のコンフォメーション変化の取扱いへの拡張、カスケード型超並列シミュレーションの最適化を行い、タンパク質・膜系への応用を進める。

「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」では、昨年度に引き続き、(a)二酸化炭素分離回収のためのアミン吸収液の探索と、(b)リチウムイオンデバイスにおける固体電解質界面 (SEI) 膜の構造・機能の解析、に DC-DFTB 計算を応用する。前者では特に、吸収液の濃度および反応温度依存性から、反応制御の指標として有効となり得る物性値からの物質探索へと結びつけ、また後者では、リチウムイオンの効果を取り込んだ分子シミュレーションへ発展させ、SEI 膜生成メカニズムの詳細を探る。

「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、非線形外場応答分子については開設分子集合系の幾何・電子構造の開設性に基づく非線形光学物性との相関の解明、新たな NLO 開設分子

集合系の設計指針の構築を目指す。また、実験的に観測可能な非線形感受率の理論計算、第二超分極率の増大についてのより詳細なメカニズムの検討、非対称開殻系に属する実在分子系のモデルの提案等を行う。高効率な一重項分裂(SF)の分子設計では、置換基や骨格、分子配向の違いが及ぼす影響を検討する。光機能分子に関しては、大規模系における準安定な共鳴状態を記述できる理論の開発を行う。

3)平成27年度の具体的な実施計画

[部会活動]

昨年に引き続き、光合成、太陽電池、電池、触媒等についてもさらに検討を進める。また、創薬とウイルス、DDS等についても、物質科学サイドからの貢献について可能性の検討を進める。これらの検討に際しては CMSI 内では第4部会、また分野間では分野1等とも連携しながら活動していく。

[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。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。また、光合成、触媒、酵素、電池、高分子、メタン、水資源等について、第4部会、第1部会と共同で検討を進める。

(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とが、課題設定の段階から密接に連携しながら研究を進めている。

(阪大蛋白研) 中村春木	(阪大蛋白研) 中川敦史
(中部大生命) 鈴木康夫	(東工大院生命) 有坂文雄
(京大院薬) 大石真也	(名古屋市大院医) 田中靖人
(名古屋大院医) 石川哲也	

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」などの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。

また、ImPACT「しなやかポリマー」における高分子破壊の分子機構の解明に参加、協力する。

[研究開発課題(計画)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

[代表者] 岡崎進(名古屋大学)

[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)、
泰岡頭治(慶応大)、入佐正幸(九州工大)

[研究開発課題概要]

本研究においては、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。特に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。

感染の最初のプロセスはウイルスとレセプターの結合である。本課題では、このウイルスとレセプターの特異な相互作用を電子レベルで、また自由エネルギーレベルで明らかにし、感染初期過程の分子機構を解明する。この中で、FMO 計算を創薬に応用し、論理的な医薬品分子設計を進展させ創薬研究の効率化に貢献する。また、ウイルスの構造体であるカプシドの構造安定性実現の仕組みを、分子動力学計算によって明らかにし、RNA を持たない理想的な人工ワクチンの可能性について検討する。

このため、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、感染初期過程の分子機構の解明を図る。また、ここで確立された手法をさらに発展させ、B 型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤など、実社会に必要な抗ウイルス剤の開発に貢献する。

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。

より具体的には、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. 小児マヒ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、圧力、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、分子認識の特異性について定量的に実証する。
3. B 型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤がカプシドを透過する分子機構を解明し、薬剤送達の基礎を確立することにより新規抗ウイルス剤の開発に貢献する。
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。

京コンピュータによるMP2-FMO計算は、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24,576ノードを用いて582約10分で終了する性能を達成していたが、石村氏開発の2電子積分ルーチンを組み込むことで実効性能が1.66倍向上した。より高速にFMO計算ができるようになったことから、医薬品分子設計においての実用性が向上した。

[研究実施内容]

平成26年度までに、小児マヒウイルスカプシドに対する丸ごと分子動力学計算を実施し、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を解明し、生理学的環境下でのレセプターとの相互作用を定量的に評価し、感染初期過程の分子機構を明らかにしてきた。平成27年度は、感染初期過程に関してはモデル系を用いてウイルスとレセプターの間に関与する力の起源について明らかにする。一方で、B型肝炎ウイルスカプシドの薬剤透過に関し、名古屋市大と共同で自由エネルギープロファイルの計算を開始する。なお、自由エネルギー計算にあたっては、タンパク質-リガンドの単純なモデル系を用いて、高精度計算手法の検討を行う。また、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等を引き続き行う。

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-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。

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。そして、これまで古典力学を元に拡張アンサンブル法を開発してきたが、量子効果を取り入れた拡張アンサンブル法の開発にも力を入れる。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

大規模拡張アンサンブル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目標とする。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。そして、これらの基盤技術により、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、間違った折り畳みに起因する病気の発現原理の解明などへと幅広い発展性がある。

[「京」利用状況]

時間配分を得られず、利用予定なし。

[研究実施(計画)内容]

タンパク質は溶液中の濃度が高くなるとアミロイド線維を形成することがある。アミロイド線維は20種類以上の病気の原因と考えられている。例えばアルツハイマー病はアミロイドβペプチドが凝集してできたアミロイド線維が原因であると言われている。これまでに開発してきたレプリカ置換法を使ってアミロイドβペプチドが単量体から2量体を形成する過程、さらには3量体、4量体などのオリゴマーを形成する過程を明らかにする。分子間βシート構造を作る際の分子内構造などに焦点を当て、原子レベルでアミロイド形成過程を解明する。

生体分子系では、ヘムやクロロフィルなどのポルフィリンが重要な機能を担うことが多い。本年度は、量子効果を取り入れた拡張アンサンブル法(具体的には、Replica-Exchange Umbrella Sampling)による分子動力学シミュレーションによって、成分分子から一つのポルフィリンが形成されるメカニズムを調べる。拡張アンサンブル法では、反応の過程を直接追うことはできないが、自由エネルギー地形を描くことによって、ポルフィリン形成に関わる遷移状態を網羅することによって、ポルフィリンの形成過程に関する情報が得られると期待する。

前年度に確立した開放系のQM/MM分子動力学シミュレーションを利用して、水溶液中における生体分子の反応過程を解明する。具体的には、ストリング法と組み合わせることで反応の最小自由エネルギー曲線、メタダイナミクスと組み合わせることで自由エネルギー地形を第一原理的に計算する。遷移状態を解析することにより、水の水素結合の組み替えやプロトン移動の役割など、実験では捉えにくい反応の動的過程の詳らかになると期待される。また、サンプリング効率を高めるレプリカ交換法、水素原子核の量子効果を含める経路積分法も取り入れて、さらなる高度化を進める。この研究を通じて開発したコード PIMD は今年度中に無料でソースを公開する。TCCIの石村和也氏の開発した量子化学計算コード SMASH と階層的でシームレスに結合することで、超並列計算を実施する。

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(阪大)、篠田渉(名古屋大)、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)、森下徹也(産総研)、北尾彰朗(東京大)、西原泰孝(東京大/CMSI研究員)

[研究開発課題概要]

界面活性剤や脂質、高分子のような多官能性の分子は、温度や塩・共溶媒濃度を含む外部パラメータによって、ミセルや膜、液晶のようなナノ～メソスケールの多様な構造体に自己組織化する(ポリモルフ)。これらの構造に基づいて、分子集団系は、異種分子の認識、分配、分離、輸送といった、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・コスメティックのような広範な社会的ニーズに直結する機能を発揮する。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対する異種分子の結合の定量的な評価手法を開発し、機能性分子集合体の構造予測を可能にする。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、熱運動によりナノスケールの集団構造がダイナミックに変化するあるがままの姿をシミュレートし、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・タンパク質・脂質膜・ミセル・高分子のようなソフト分子およびその集団系への異種分子の結合は、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、ソフト分子とその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・生体分子系には、様々な種類の分子間相互作用が混在する。構造探索を加速する高度サンプリング手法と自由エネルギーの分割手法の開発によって、多数の自由度で張られる広い配置空間の探索を可能としつつ、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]

自由エネルギー計算ソフト ERmod は、数十万原子からなる系を対象として、1000 強の並列度を、95%以上の効率で達成している。大規模 MD は MODYLAS によって高効率で遂行可能であり、1000 万原子系における 65536 ノード利用時の実行効率は 40%超(対 64 ノード比の並列化効率は 90%超)である。分子複合系の立体構造探索にはカスケード型並列シミュレーションを用いる。これにより、320 万原子からなる複合系の大きな構造変化をナノ秒オーダーでサンプリングできるようになっている。

[研究実施(計画)内容]

タンパク質構造に対する環境効果を全原子 MD とエネルギー表示溶液理論で検討する。共溶媒を加え、タンパク質-水-共溶媒間の各相互作用成分の強化/弱体化とタンパク質構造ゆらぎの相関を調べる。高分子系では、全原子モデルを用いて、有機小分子に対する溶解自由エネルギーの計算精度検証のために水/オクタノール分配係数を算出し、架橋構造を含む高分子膜での水分子の溶解性や運動性を検討する。ミセル系の全原子計算では、その可溶化能や構造安定性とイオン強度や pH といった溶液条件との相関を探る。さらに、タンパク質やコレステロールの粗視化モデリングを行い、これらの分子の添加が膜物性、特に膜構造やトポロジーに及ぼす影響を明らかにするとともに、BAR タンパク質による生体膜の変形過程を解析する。紐状ミセル溶液のシ

アバンド流動挙動の解析には、粒子-連続場ハイブリッドモデルを流体シミュレーションに埋め込んだマルチスケールシミュレーションを用いることで、ネットワーク構造の形状の違いを定量的に示す。また、LogMFD 法を粗視化タンパク質のコンフォメーション変化の取扱いに拡張し、カスケード型超並列シミュレーションでは、カスケードの展開方法や個別の MD 計算の長さの最適化を行い、タンパク質・膜系への応用を進める。

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)、小林正人(北大)、西村好史(CMSI 研究員)

[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。他方、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、ナノサイズ機能性分子の設計や産業界で有用とされる高効率触媒の開発、常温常圧で反応を高選択的に活性化する生体酵素反応を用いたグリーンケミストリーの実現など様々な分野で必要とされている。これらの反応では、金属表面や溶液環境、外部刺激のような複雑な反応場を踏まえた上で、機能発現を支配する構造・官能基の特定や温度など反応条件の最適化を行うことが求められている。反応の解明と制御のための指針を提供できれば、エネルギー問題や環境問題を解決するための糸口につながることを期待される。本課題では次世代スパコン「京」を使用し、大規模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ことを目的とする。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

密度汎関数強束縛(DFTB)法に線形スケーリング理論の 1 つである分割統治(DC)法を適用することで計算速度と精度を両立した分子動力学計算(DC-DFTB-MD)法により、ナノスケールの分子や分子集合体の化学反応シミュレーションを実施する。分子構造および電子構造の観点から多様な検討を行うことで反応性や物性に対する知見を蓄積し、産業的・学術的に意義のある巨大系の反応制御に資する。また、DFTB 計算で必要となるパラメータの拡充を図り、これまでに適用が困難であった系の記述を目指す。パラメータ開発により汎用化が達成されれば、元素戦略などを考慮した柔軟な反応設計・材料探索の実現が可能となり、より実験のニーズに即したナノスケール反応系の理論研究を展開することができる。

[「京」利用状況]

DC-DFTB計算が「京」上で高効率に動作するプログラム「DC-DFTB-K」の開発を平成 24 年度より進めてきた。平成 26 年度は、DC法の手続きである各部分系の計算をロードバランスが均等になるようにMPIプロセスに割り当てるアルゴリズムの導入や、部分系当たりの計算コストを削減するチューニングを行った。その結果、「京」16,000 ノード(128,000 コア)利用時の原子数に対するDFTB計算時間のスケーリングが $O(N^{1.4})$ 、水 50 万分子(150 万原子)系のエネルギー一点計算が 42.4 秒で完了するプログラムへの改良に成功した。本年度は、特に周期境界条件における長距離クーロン相互作用を効率的に取り扱う手法(例えば高速多重極展開法(FMM))の導入を試みて、さらなる高度並列化を狙う。

[研究実施(計画)内容]

昨年度に引き続き(a)二酸化炭素分離回収のためのアミン吸収液の探索と、(b)リチウムイオンデバイスにおける固体電解質界面(SEI)膜の構造・機能の解析、にDC-DFTB計算を応用する。

(a)について、従来の化学反応シミュレーションからアミン種による吸収特性の違いや拡散速度と二酸化炭素放散反応性の相関など吸収液の性能評価に向けた分子論的知見が広がりつつある。平成 27 年度は、吸収液の濃度および反応温度依存性に対する解釈を進め、反応制御の指標として有効となり得る物性値からの物質探索へと結びつける。併せて吸収・放散過程のダイナミクスを再度追跡し、副次的に生成する中間体の役割について検討を行う。

(b)ではこれまでに負極界面における単一溶媒の電気分解シミュレーションや、グラファイト極板の化学修飾が電極電位に与える影響の検討を行うとともに、予備的な Li 原子のパラメータを作成しその精度を検証してきた。本年度は同パラメータの改良を実施し、リチウムイオンの効果を取り込んだ分子シミュレーションへ発展させ、SEI膜生成メカニズムの詳細を探る。また、P や F などの原子に対する DFTB パラメータの拡張を開始し、異なるアニオン種や添加剤により生じる反応性の違いを半定量的に解析するための体制を整える。

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

[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、新たな技術革新を達成し、それらを応用し、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]

生体プローブなどの大規模系光機能分子の光・電子過程を解析し、その解析法や理論設計に関する方法の指針を示す。また、それらの電子過程で重要となると考えられる電子共鳴状態を研究するための方法論の開発を行い、これまで不可能であった大規模系の共鳴状態を研究する方法論の確立を目指す。非線形外場応答分子については、結晶中などの集合系において中間的な一重項開殻性が期待される系や励起プロパティの開殻性、 $X-\pi-X$ 性依存性を解明する。さらに高効率な一重項分裂(SF)のための分子設計を目指す。これらの研究は、光エネルギー利用の基礎研究として学術的・社会的に重要な意味を持つ。

[「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。さらなる高並列化の手法やアルゴリズムの導入を行う。また、電子共鳴状態の研究においては、複素吸収ポテンシャルの積分計算の並列化アルゴリズムに取り組む。

[研究実施(計画)内容]

非線形外場応答分子については、結晶中で共有結合的分子間相互作用をもつ集合系において中間的な一重項開殻性が期待されるチアジラジカル分子集合系を対象に、開殻分子集合系の幾何・電子構造の開殻性に基づく非線形光学物性との相関の解明、および新たな NLO 開殻分子集合系の設計指針の構築を目指す。また、実在する結晶構造をもとに実験的に観測可能な非線形感受率の理論計算による算出を検討する。さらに、これまで行ってきた開殻 X- π -X における第二超分極率の増大について、より詳細なメカニズムを検討するために点電荷4サイトモデルを採用し、励起プロパティの開殻性、X- π -X 性依存性を解明する。また、非対称開殻系に属する実在分子系のモデルを提案し、そのスピン状態、荷電状態、開殻性、非線形光学効果の相関について高精度量子化学計算を用いて解明する。高効率な一重項分裂(SF)のための分子設計を目指し、前年度に得られた振電相互作用に関する知見を発展させるため、置換基や骨格、分子配向の違いが及ぼす電子/振動構造の変化に起因する振電相互作用への影響を検討する。

光機能分子に関しては、H26 年度には励起状態の溶媒効果を効率的かつ定量的に記述する理論の開発や電子移動が重要となる系への適用や電子移動の化学指標に関する研究を行った。本年度は、大規模系における準安定な共鳴状態を記述できる理論の開発を行い、これまでの研究成果に基づいて、様々な光機能分子の光物性について研究を行う。さらに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。

2.2.2 本格実施(平成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(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

[研究課題概要]

化学結合エネルギーと電気エネルギーの変換デバイスである二次電池と燃料電池、太陽光エネルギーを電気エネルギーに変換する太陽電池技術、メタン・水素ハイドレートやバイオマスから利用可能な形でエネルギーを取り出す技術に関する研究を行う。

[社会的意義]

近年、自動車用・家庭用に製品化され普及が進むリチウムイオン二次電池(LIB)や固体高分子形燃料電池(PEFC)では、電池の安全性や耐久性に資する材料開発が重要な課題である。また、リチウムや白金といった高価で希少な金属の代替につながる元素戦略的な研究が必要となる。さらにスマートグリッドや産業用など多様な需要に答えるための大容量化や大出力化・急速充放電も課題となっている。クリーンな一次エネルギー源として様々なものが利用可能であるが、なかでも太陽光は極めて重要である。太陽電池に関しては普及が進むなか、より安価で長寿命な製品を用いたさらなる普及拡大が望まれている。現行の無機系太陽電池を用いた技術に比べて有機系太陽電池技術は安価な材料を用いて容易に製造ができるため注目を集めている。しかし、未だに変換効率が10%程度と低く耐久性も高くないため、これらを克服するための技術革新が課題となっている。一次エネルギー源としてわが国が保有している資源は必ずしも大きくないが、海底に眠るハイドレートは海外に比べても遜色ない量が確認されている。しかし、これを安定に回収して利用するための技術は確立していない。海水中で減圧したときにどのような現象が起こるのかの理解すら不十分である。バイオマス利用に関しても国内の資源量は小さくない。利用技術は存在するが効率が必ずしも高くなく、物質科学的な観点から飛躍的に向上させるための技術が開発されることが望まれている。二次電池や燃料電池(化学電池)、太陽電池など世界的な競争にさらされているエネルギー変換技術、ハイドレートなどのわが国固有の理由から開発すべきエネルギー利用技術、バイオマスなどの地道な研究から将来の飛躍的な成果につなげるべき技術を本部会では取り上げて研究を行う。

2) 研究開発課題内容

[平成27年度の実実施計画と成果目標]

化学電池に関しては SPring-8 に代表される大型実験施設等での微視的測定技術が発展し、大きな成果をもたらしているが、計算機シミュレーションがさらなる貢献をするものと大きな期待が寄せられている。特に、界面の微視的構造を反映した緻密なモデリングにより定量的な結果を得て、実験にフィードバックをかける効果は大きいものと考えられる。そこで開発企業と大学等の実験研究室が関わる国のプロジェクトと協働で、実践的な問題に対する計算界面科学的課題を解決する。現在、国のプロジェクトにおいては、リチウムを使わない二次電池(元素戦略)や白金を使わない PEFC (NEDO) の開発が進められ、還元雰囲気にも耐える電解液や白金並みの活性を持つ電極触媒の探索が行われている。また、全固体電池やリチウム空気電池などの次世代電池の開発も進められている。本課題ではこれらの開発に伴う問題点に対して、その解決につながりうる知見を計算から獲得することを目標に研究を行う。

太陽電池に関しては電子正孔対の生成、分離、緩和と散逸現象といった未解明の過程が直接効率に絡むため、課題はより挑戦的になる。そこで定量的な量子化学計算と現象論的なマスター方程式などを組み合わせる

ことにより、基礎課程を押さえつつ材料開発指針の獲得につなげるアプローチを取る。研究の対象とするのは、電子供与分子と電子受容分子の界面での電子の動力学と励起エネルギーの移動のシミュレーション、有機無機ペロブスカイトの鉛代替を目指した電流電圧曲線のヒステリシス効果の計算、三重項状態を利用した電圧向上を目指した色素増感太陽電池の電荷移動速度の計算を行う。

水素・メタンハイドレートに関しては、これまで純水中と食塩水中で分解の機構や速度が異なることが示されたが、本年度は電解質の違いを調べ、電解質組成により分離を制御するための知見を得る。また、一度分離したメタンが再度ハイドレートを形成することを阻害する方法を見出す。シミュレーションをメタンだけでなく水素ハイドレートに対しても実施し、特に水素と水、それに THF やシクロヘキサン、あるいは TBAB を含むセミクラスとレートなど適用して分離のための知見を得る。

バイオマスに関しては、セルロース分解酵素によるセルロースの認識過程、その後の分解過程を研究できるような、たんぱく質とリガンドの相互作用を扱えるフラグメント分子軌道法と、生体分子の溶媒和理論である 3D-RISM を組み合わせたプログラムの開発を継続的に行う。それを用いて、CBM36 とよばれるセルロース分解酵素の部位による選択的糖認識を解明につながるシミュレーションやその解析を行う。

3) 平成27年度の具体的な実施計画

[部会活動]

界面科学シミュレーション課題連絡会を月 1-2 回の頻度で行い、重点課題5内での情報共有と研究打ち合わせを行う。産総研メタンハイドレード研究センターと共催のシンポジウム開催、先方との情報共有を行う。

[連携活動]

元素戦略、CREST、さきがけ、ALCA 等の国のプロジェクトと連携し、開発・実験研究者と密に情報交換を行いシミュレーションの遂行を行う。「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム(<http://eisconsortium.org/>)」を通じてシミュレーション手法の普及を行う。

[研究開発課題(計画)の実施]

i) 重点課題5: エネルギー変換の界面科学

[代表者] 杉野修(東京大)

[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)、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(LIB)や固体高分子形燃料電池(PEFC)に代表される化学結合エネルギーと電気エネルギーの変換に関わる計算物質科学、特に計算界面科学を発展させ、電池開発につながるような成果創出につなげるのが本研究の目的である。最近、電池開発が SPring-8 に代表される大型実験施設等での微視的測定により加速されつつあるが、さらなる加速が計算機シミュレーションからもたらされることが強く望まれている。その可能性を実証すべく、開発企業と大学等の実験研究室が関わる国のプロジェクトと協働で、実践的な問題に対する計算界面科学的課題を解決するのが本課題の特徴である。

二次電池、燃料電池共にすでに自動車用、家庭用に製品化され、本格的な普及のための耐久性向上やコストの低下、希少元素を使わない元素戦略が目下の最重要課題となっている。さらに今後は、電池容量の拡大や充放電・発電の高速化・高出力化を果たし、蓄電社会や水素社会での多様な用途に適合する電池を市場投入させることが重要な課題となっていく。現在、国のプロジェクトにおいては、リチウムを使わない二次電池(元素戦略)や白金を使わない PEFC (NEDO) の開発が進められ、還元雰囲気能耐える電解液や白金並みの活性を持つ電極触媒の探索が行われている。また、全固体電池やリチウム空気電池の開発も進められている。本課題ではこれらの開発に伴う問題点に対して、その解決につながりうる知見を計算から獲得することを目標に研究を行う。

電池に関わる膨大な物理的・化学的事象を記述するためのシミュレーション手法には、数十ナノメートルを一つの格子点として粗視化して水や燃料の輸送を調べる巨視的なものから、それより何桁も細かい格子点を用いて電子移動のレベルから調べる微視的なものまで多種多様なものがある。今回、国のプロジェクト等で特に強く求められていると判断されたのは、電極・電解質界面での活性や劣化に関わる電子論的な微視的シミュレーション(化学反応を伴う非平衡ダイナミクス)であり、ここに開発企業がノウハウを有しない未開拓領域がある。「京」の時代においては、密度汎関数理論に基づく従来型の結合エネルギー計算に加えて、電極界面に電気二重層が形成された状況下で起こる反応を追えるリアルなシミュレーションが行われるべきであり、その両面からアプローチして初めて実験家から信頼される理論に近づくことができる。その考えの下、シミュレーション手法の開発にも注力して研究を行っている。これまで、電極に電位差を印加し電位を制御するためのアルゴリズム、溶媒揺らぎを考慮に入れて反応自由エネルギー障壁を効率的に計算するためのアルゴリズム、さらにこれら第一原理計算結果から原子間力を抽出して、空間的・時間的スケールのより大きな計算につなげるための方法(マルチスケール法)を開発した。これらの計算手法を行い、実験プロジェクトと連携しながら問題解決型のシミュレーションを遂行して、電池開発に資するシミュレーションの可能性を探るのが本課題である。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

これまでの成果に基づき研究を加速度的に進展させ、よりレベルの高い成果創出につなげる。リチウムイオン二次電池に関してはこれまで主に電解液のシミュレーションの成果が得られたが、電極と電解液の界面のシミュ

レーションに関しても研究を収束させ、脱溶媒和などの界面を経由したエネルギー変換過程に関する成果を得る。界面保護膜の微視的解明につながるシミュレーションも成果創出につなげる。リチウム空気電池に関しては、昨年度開発した新手法をさらに高度化するとともに他の材料に適用して、電解液や電極物質と電池機能の関連の究明を行う。燃料電池白金電極およびジルコニア電極については、シミュレーションを積み上げることにより、高活性の原因究明と高活性化のための指針獲得につなげる。

【「京」利用状況】

平面波基底を用いた第一原理分子動力学計算の並列化に関しては、2400 原子系を用いた一点計算の場合、3840 ノードを用いた実効効率が 29%、自由エネルギー計算の場合には、レプリカ数分だけ自明に使用ノードを増やせることが示されている。効率はどの計算も高いが、リチウムイオン二次電池のシミュレーションは数値的に特に安定であるなど最も「京」での計算に適しているため、ここに「京」のリソースを重点配分している。「京」の利用は昨年度 1600 万ノード時間を 100%消費し、平均の実行効率が 11%と好成績を達成している。今年度認められているのは 600 万ノード時間であり、早期の消費が達成される見込みである。

【研究実施(計画)内容】

(1)リチウムイオン二次電池:シリコン負極と有機溶媒の界面でのエネルギー変換過程(脱溶媒和)に関する活性化エネルギーの高さ(自由エネルギー)と電位差あるいは溶媒分子との関連を解明する。この計算はすでに予備的に行われ、第一原理分子動力学計算から電位差印可の下でのトラジェクトリーが得られ、ブルームーン法に基づく計算から反応自由エネルギーが得られることが示されている。この計算手法を用いて物質(材料)と反応性の関連を調べ、電池の充放電速度の向上を目指した材料設計指針を獲得する。また、これまで行ってきた炭素負極と有機溶媒の界面構造の予備計算を本格実施モードに移し、実験データと付き合わせながら SEI 膜の解明に迫る解析を行う。

(2)白金電極表面(Pt(111),Pt(322))と酸性水溶液(過塩素酸等)界面での酸素還元:電位差制御の下で酸素原子から水分子が生成される(あるいはその逆の)反応において、表面ステップがどのような役割を果たしているのかを解明するためのシミュレーションを継続的に行い、研究を収束させる。より簡便な計算による結果や電気化学測定結果と付き合わせて、ステップでの酸素あるいは水酸基の結合の強さ、溶液側での水素結合網の安定性といった微視的な要因と反応活性の関連を明確化し、その結果から白金電極の活性化向上の指針を獲得する。

(3)白金代替触媒 ZrO_2 での酸素還元反応:白金代替材料として開発が進められているジルコニアでの反応機構を解明する。酸素空孔と窒素不純物の導入による活性向上(実験結果)の理由を解明するために、高輝度線源を用いた微視的測定と連携しながらシミュレーションを行う。前年度までに得られている予備的結果を本格実施モードに移し、解明を目指す。

(4)全固体電池の固固界面の計算に関する全エネルギー計算:固固界面の生成法やエネルギー汎関数(GGA+U)の高度化を行い、緩衝層の役割についてより詳細な結果を得て、全固体電池の最適化への材料設計指針に関する知見を得る。

(5)リチウム空気電池の核発生反応およびリチウムイオン輸送係数:前年までに開発された新手法を発展させるとともに幾つかの有機溶媒あるいはイオン液体に対する核発生反応(電池の阻害反応)やイオン伝導度(電池

の充放電速度に関連)等に関するシミュレーションを継続的に行い、リチウム空気電池の実験を支援して開発に寄与できるような計算科学的知見を得る。

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

[代表者] 田中秀樹(岡山大)

[研究開発体制]

[担当者] 田中秀樹(岡山大)、甲賀研一郎(岡山大)、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]

日本近海の海底に多量に存在するメタンハイドレートは、新しいエネルギー資源として注目を集めている。また、海底のハイドレートの安定性や分解過程は、地球温暖化と密接な関係がある可能性が指摘されている。さらには、メタンや水素のハイドレートは、これらの可燃性ガスを、安全に輸送・貯蔵する手段としても期待されている。本研究課題では、分子シミュレーションを駆使して、これらの物質の産業利用の基礎となる化学的・物理的機構の解明を目指している。

これまでに、純水中のメタンハイドレートの分解機構を解析した。ハイドレートの分解に伴いメタンの泡が生成する。我々は、この泡生成過程が分解の速度論に大きな影響を与えていることを明らかにした。また、より現実的な NaCl 水溶液中におけるメタンハイドレートの分解過程についても、京コンピュータの計算資源を活用し、NaCl 濃度や温度などを変えた様々な条件下でのシミュレーションを行い、分解の速度論的な機構を明らかにした。輸送・貯蔵を目的とした場合であれば、コストと安全性が許す限り、必要に応じてどのような物質でも添加することができる。このために、本年度は、非電解質水溶液および生成阻害剤共存下での融解機構と速度を調べる。溶質効果の解明は多くの産業利用につながることを期待される。このメタンハイドレート採取の実用化への貢献に関しては、産総研メタンハイドレート研究センターとの情報交換と共同でのシンポジウム開催の他に、実際に試掘を行っているグループとの連携を深めることにより達成する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

ハイドレートの巨視的な物性に関する知見は、実験研究により日々蓄積されている。これらの背景になる微視的な機構を理解するために、分子動力学法は強力な道具となる。これまで、分子動力学法は、構造、熱力学的安定性、結晶成長、分解などハイドレートの多くの物性の解析に役立ってきた。しかしながら、従来の研究のほとんどすべてが水とゲストの二成分系を対象としている。実験的には、水相への溶質の添加がハイドレートの物性に大きな影響を与えることはよく知られている。たとえば、天然ガスのパイプライン中でメタンハイドレートが生成し詰まってしまうという問題があるが、これを阻害する代表的な方法がメタノールの添加である。また、NaCl やアルコール類を添加することでハイドレートの生成温度が下がることも知られている。これら溶質効果に対する微視的な知見は未だほとんど得られていない。

産業利用の面で溶質効果の解明は重要である。たとえば、何らかの物質を添加することでハイドレートの熱力学的安定性や分解・生成速度をコントロールする新たな機構を見つけることができれば、それは広範な応用につながる。本課題で目指すメタンハイドレートの分解速度に対する非電解質の代表であるアルコール類添加の機構解明はその端緒となりうる研究である。また、生成阻害剤としてしばしば用いられているポリマーの役割が明

らかになれば、よりハイドレート生成解離の制御に対して、応用の可能性が広がる。

本課題ではメタンに加え、水素ハイドレートの解析も行う。水素とメタンの大きな違いはそのサイズである。小さな水素の場合はケージ間のゲスト移動が起こる。これはメタンハイドレートでは起こらない現象である。また、THFなどとbinary hydrateを作ることでその安定性が大きく変わることが知られている。他にも、水素と水の二成分系は通常の籠状のハイドレート以外に多様な結晶構造を取ることが知られている。たとえば氷IIの空隙に水素を含む C_1 filled iceや氷VIIの副格子の一つが水素と置き換わった C_2 filled iceがその例である。我々のこれまで研究により、これらの物質の熱的な物性の多くは明らかになっている。しかしながら、動的な機構については未だ不明な点が多い。昨年度に引き続き、分子動力学計算を行い、当該ハイドレートの熱力学的安定性と結晶成長や分解の機構解明を目指す。

【「京」利用状況】

平成 26年度と同様に、MODYLAS パッケージを用いて大規模並列計算を実施する。また、状況に応じて他のソフトウェア(例えば GROMACS)も使用し、京の巨大な計算資源を十分に活用する。

【研究実施内容】

メタノール水溶液中のメタンハイドレートのシミュレーションは、前年度に実施した NaCl 水溶液についての計算と同様の規模(120000~130000 分子)で行う。これまでの結果から、純水中の分解の場合、融点に近い温度で分解する場合と高い温度で急激に分解する場合では、分解速度だけでなく機構も異なることが明らかになっている。また、融解機構は NaCl の存在により大きく変化するが、その変化の仕方は一様ではなく、分解速度の抑止と促進の両方に寄与していることが判明した。この中で、高濃度の NaCl 水溶液中では、解離速度が促進され、また気泡の生成が界面で起きていることを見出した 27 年度には、電解質に引き続き非電解質の阻害剤となるアルコール共存下の解離ダイナミクスを解明するための MD シミュレーションを実施する。また、メタン保存のためのハイドレート利用に関して、バルク相の共存と生成解離について、大規模 MD シミュレーションを実施して、一度分離したメタンが再度ハイドレートを形成することを防止するための基本的な方法を確認する。さらに、ハイドレート融解促進の方法を探るため、窒素を含む 6-7 員環を基本構造に持つポリマーをハイドレート生成の阻害剤として選び、阻害剤存在下でのメタンハイドレート融解の MD シミュレーションを行なう。ポリマーの特性に応じた、ハイドレート生成の阻害機構を解明して、ハイドレートの融解に関する知見を得る。これまでの大規模計算の結果について包括的に解析を実行する一方、これらを基礎にした研究成果としての取りまとめを行う。この際、メタン採取の実用化における問題解決に関しては、産総研メタンハイドレート研究センターと情報交換を密にするとともに、実際に試掘を行っているグループとの連携を深めることにより達成する。

水素と水からなる 2 成分系の結晶構造は、II型ハイドレート、 C_2 filled iceなど多岐にわたる。また、THFやシクロヘキサノンなどを加えた 3 成分系もハイドレートとなる。さらには、TBAB(tetrabutylammonium bromide)と水からなるセミクラスレートにも水素分子が包接されることが知られている。いずれについても、結晶成長や分解などの微視的機構については未だ明らかでない。26 年度に引き続いて、代表的な構造であるII型の水素ハイドレートの分解過程を明らかにする。さらにII型ハイドレートの大ケージにTHFを包接した構造の解析を行う。実験、シミュレーションの両面から、THFによりハイドレートの熱力学的安定性が大きく増加することが知られている。本研究はこれに対し、THFの速度論的な効果を明らかにすることを目指す。

分子動力学シミュレーションでは、すべての粒子の時間発展が結果として得られる。これを用いて、現象の直感的な理解に役立つ動画を作ることが可能である。専門家だけでなく、一般の方にもアピールできる動画の作成を積極的に行う。

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(北大)、立川仁典(横浜市大)、三浦伸一(金沢大)、河津励(CMSI 研究員)、David Sulzer(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イ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 表面と色素分子・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 27 年度 HPCI システム利用研究課題として、引き続き第一原理分子動力学計算プログラム CP2K および大規模励起状態計算を可能とするプログラム MolDS の「京」向けの高高速化を行う。また「京」上で高い実行効率を実現している量子化学計算プログラム NTChem を用いた大規模系での時間依存密度汎関数計算を実行する。

[研究実施(計画)内容]

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

平成26年度に引き続き、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の開発を継続し、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) 有機無機ペロブスカイトの電子物性と光電荷移動機構

高効率な太陽電池として大きく注目を集めているペロブスカイト型太陽電池(MAPbI₃)であるが、実用化にはPbを使用しないことが望ましい。そこでMAPbI₃のPbを周期表の両隣に位置する原子で異原子置換する、あるいは合金化により、環境に優しい太陽光発電に向けたデバイスの有望な候補を探索する。またMAPbX₃有機無機ペロブスカイトにおける最も有害な効果のひとつ、すなわち、実験的に観測された電流-電圧曲線における大きなヒステリシス効果の原因についての微視的メカニズムの解明を目指す。

(3) 色素増感太陽電池の改良に向けた励起状態寿命の計算

時間依存密度汎関数法に対する複素自己エネルギー補正による半導体に吸着した分子の励起状態寿命の計算手法を様々な電荷移動現象に適用する。特に色素の三重項状態からの注入を最適化することにより色素増感太陽電池の光電流を減らさずに電圧を改良できると提案されていることから、色素の三重項状態の寿命、また欠陥トラップ準位にある電子の電解質への電荷移動の速度等に適用する。

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]

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。

[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、溶媒というものに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行い、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なく、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。結果は論文としてまとめられ、Journal of Computational Chemistry 誌に受理されている。

現在は、京用に開発されたコードを用い、分子研・物性研・金研のスパコン上での運用を行っている。

[研究実施(計画)内容]

セルロース分解酵素は carbohydrate binding domain (CBM) とよばれる部位でセルロースを選択的に認識し、その後分解反応を行う事が知られている。したがって、CBM の動作原理・選択性の分子論を理解することは高効率酵素のデザインに寄与すると期待できる。CBM-セルロースの結合には、タンパク-リガンド間相互作用の精密な記述と、分子認識に伴う脱水和の自由エネルギー変化の両方を扱える理論が必要である。そこで、これまで、タンパク質-リガンド相互作用の全電子状態計算を可能にするフラグメント分子軌道法と、生体分子の溶媒和理論である 3D-RISM 法を組み合わせた手法(FMO/3D-RISM)の定式化、変分的導出と高効率プログラムの開発を行ってきた。

これら、これまでに開発を行った高速3D-RISMプログラム、およびFMO/3D-RISMプログラムを用いて、CBM36の選択的糖鎖認識におけるイオン・溶媒の役割の解析を行う。分子シミュレーションにより、アポ状態およびホロ状態の構造サンプリングを行い、得られた構造に対して3D-RISM理論適用し溶媒和自由エネルギー変化を求めた。このデータを元に本年度は、糖鎖認識におけるイオン・溶媒の役割、イオン種による認識機構依存性、糖鎖の選択性について解析を行っていく。

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]

昨年度まで、熱電材料との関係で電気伝導度、ゼーベック係数、熱伝導度(電子成分、フォノン成分)を界面効果も含めて計算する為の量子伝導理論とそれに基づく第一原理計算プログラムの整備を行ってきた。特に、本スパコン戦略プロジェクト(HPCI)課題では、それらの第一原理計算手法の HPCI 計算機上での精密実装と、プログラムの並列化による大規模数値計算能力の向上等に関する部分の研究を遂行してきた。これらの計算手法やそのプログラムのメリットをより広範な物質・材料に活かす為、伝導計算プログラムを実空間大規模第一原理電子状態計算プログラムと融合する事が重要である。本年度は、伝導計算プログラムを実空間大規模第一原理電子状態計算プログラムと融合する為のプログラムの開発を HPCI 計算機上で行う。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

伝導計算プログラムを実空間大規模第一原理電子状態計算プログラムと融合する為のプログラム大規模な計算が可能な HPCI 計算機上で行う事により、数百 nm 程度の厚みを持つチャンネル材料の輸送係数の第一原理計算を可能とする事を目指す。当面の計算ターゲットは電気伝導度、IV 曲線、ゼーベック係数などの物理量である。これらはナノエレクトロニクスへの応用において重要である。近年、ナノエレクトロニクス分野では従来 TCAD などのデバイスシミュレータが用いられた問題に第一原理非平衡伝導シミュレーション(NEGF)が替わって適用されるケースが増えている。とはいっても、計算規模の制約があり、あまり大きなデバイスへの適用はされて来なかったが、実空間大規模第一原理電子状態計算プログラムと融合する事により数百 nm 程度から μm の厚みを持つチャンネル材に適用出来るようになり、取り扱えるデバイスの種類と形状が増える。第一原理非平衡伝導シミュレーション(NEGF)の信頼性は TCAD と比べて随分高いので、本課題が上手く遂行出来れば、それが生み出す科学的・学術的意義は非常に大きい。将来的に、既に小さな系での理論の検証・評価が良好であっ

た熱伝導(電子成分、フォノン成分)の計算、電子・フォノン散乱効果の計算などを、このサイズレベルで行う事が出来るようにする予定であり、それにより輸送特性の温度依存性の記述や発熱を含めて熱特性の理論的な取り扱いが格段に改善する。その意義も大変大きい。

【「京」利用状況】

今後、活用する予定である。資源配分などをご支援頂きたい。

【研究実施(計画)内容】

非平衡グリーン関数法(NEGF)に基づく伝導計算プログラムを、実空間大規模第一原理電子状態計算プログラムと融合する為のプログラムの開発をHPCI計算機上で行う。特に、それを「京」で動かし、数百 nm \sim μ m 程度の厚みを持つチャネル材料の輸送係数の第一原理計算を実施する。

2.2.2 本格実施(平成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(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。特に、材料の有するマルチスケール性が顕在化される諸課題を介して、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。実際の材料は、多結晶体であり、析出相や合金・添加元素を含む微細組織など、複雑構造が材料機能の発現を支配している。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・添加元素、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。

これまで重点課題と3つの特別支援課題を通じて、構造材料、機能材料、製造プロセスに関わる材料科学の典型的な課題を対象にマルチスケール計算を進めてきた。この方向で計算の進展・深化を図る。また、電子状態の計算の大規模化に加えて、Phase Field 法を中心にしたメソスケールの取り扱いへ重心をシフトしていく。重点課題では転位の電子状態計算を進めるとともに Phase Field モデリング手法の開発に重点を置く。凝固シミュレーションの特別支援課題では、Phase Field モデリングは相応のレベルに達しており、固液界面に加えて固相内拡散の取り扱いや固相変態に適用できる汎用性の高いモデルの構築を進める。他の特別支援課題では、プログラムの改良開発により、マルチスケールな機能特性の計算対象の拡大を図る。TOMBO を用いた計算では、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。また強誘電体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 をさらに改良し、強誘電体の熱伝導率を直接的にシミュレートできるようにする。

[社会的意義]

材料のマルチスケール性の特徴、問題点は、以下の諸点に集約しうる。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。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、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、さらには凝固工学のような製造プロセスの最適化に対しても大きな貢献をし得る。

2) 研究開発課題内容

[平成27年度の実施計画と成果目標]

第5部会の平成27年度の実施計画・成果目標は、以下のとおりである。第一に、重点課題や特別支援課題で、具体的な研究計画を深め、「京」や関連資源を用いた計算の実行を進める。各課題毎に独自に研究会等を行うとともに、部会全体の研究会や CMRI 研究会などを活用して、部会内の議論や情報交換、関連する実験家や各種プロジェクトとの議論や連携を進める。第二に、重点課題と特別支援課題の全体に共通する計算手法・技術として、マルチスケール計算科学の取り組みを連携して進める。特に大規模第一原理計算を Phase Field 法等に有効につなげる手法、技術の開発を推進する。引き続き、集中した勉強会、研究会を組織して進める。第三に、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・振興を進めるとともに、材料インフォマティクス手法等を用いた新規材料探索や鉄の有限温度磁性の問題、腐食防止の計算科学の問題等、新規課題の展開について、引き続き、調査、検討を行う。他の部会との共同、連携も重視する。

作業部会の指摘事項は、昨年度と同様、以下の3点に要約できる：第一はマルチスケール解析の実行の遅れ、第二に転位芯計算の重要性、第三に鉄の有限温度の磁性への取り組みの重要性の指摘、である。第一の点は、Phase Field 法の専門家も加わっている第5部会において、メゾ・マクロの構造や特性の予測、設計に繋げるマルチスケール計算の方策の具体的な検討を行っており、27年度も部会の最重要課題として取り組む。第二の点については、重点課題で27年度に集中して進める。第三の点は、材料科学のコミュニティーだけでは完全には扱えない現象であるため、物性のコミュニティーとも連携して検討する。ポスト京の重点課題7のサブ課題とも関連して、連携を進める。

3) 平成27年度の具体的な実施計画

[部会活動]

第一に、重点課題と特別支援課題の各々で、引き続き、計算技術の開発、「京」や各種計算資源の活用を進め、研究の深化を図る。第二に、マルチスケール計算手法の開発について、引き続き、第一原理計算と Phase Field 法との具体的な連携法など、集中した研究会、会合等を通じて議論、検討、試行を進める。第三に、各種実験や開発を中心とした材料関係プロジェクトとの連携、共同を進めるとともに、磁性や腐食、LPSO 相の課題や informatics を用いた材料設計など、新たな課題や方向について議論を進める。

[連携活動]

(部会連携)

前年度に引き続き、重点課題と特別支援課題の間で、研究内容や遂行状況を交流し、情報交換、議論を進める。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、それぞれの課題遂行に反映させる。そのための研究会を頻繁に開催し、手法の具体化、各種の試行を行う。

(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との討議、意見交換、情報交換を進める。また、CMSI 研究会やシンポジウムへの積極的な参加を行う。鉄鋼材料の有限温度磁性や材料の腐食防食、或いは informatics など、新規のテーマに関して、物性や分子との協同も検討する。

(外部連携)

前年度に引き続き、CMRI のシンポジウムなどの場を利用して、各種実験や開発を中心とした材料関係プロジェクトとの情報交換、連携、共同を進める。鉄鋼業や各種素材産業、エネルギー産業の研究者・技術者との情報交換、連携を重視する。

[研究開発課題(計画)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

[代表者] 香山正憲(産総研)

[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・東京大)、尾方成信、譯田真人(阪大)、田中真悟、Vikas Sharma、石橋章司、原口誠(産総研)、板倉充洋、山口正剛(原研)

[研究開発課題概要]

飛躍的に優れた構造材料の開発は、エネルギー変換機器効率の飛躍的向上、輸送機器の超軽量化による省エネ化、長寿命・高信頼性の大型構造物など、社会基盤を支え、持続可能社会実現のための不可欠の課題である。こうした構造材料は多結晶体であり、種々の析出相や粒界・欠陥・添加元素等で構成される微細組織が機能を支配している。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。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

金属系構造材料では、転位の動きを抑えて強度を上げ、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、粒界や転位を導入し、化合物相、変態相を析出させ、強度と靱性を併せ持つ微細組織を形成させる。微細組織は、合金成分・添加元素(レアメタルなど)を入れ、各種高温・加工プロセス処理により形成される。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と機能、形成プロセスを解明し、設計することが求められる。このためには、欠陥・粒界・界面、各相内の原子間結合から、微細組織のメゾ、マクロスケールまで、マルチスケールの構造や機能の理解が必要となる。また、強度・変形の担い手である転位・クラックの挙動自体が、転位芯・クラックのミクロの原子間結合からメゾ・マクロの応力分布が関わるマルチスケール現象である。

本研究課題では、飛躍的に高性能の金属系構造材料の開発のために、微細組織の構造や機能を高精度に解明し、さらに設計するための手法を開発する。鉄鋼材料を対象に、まず、析出相/母相界面、転位、粒界など、微細組織の構成要素の大規模第一原理計算を行い、そこでの原子間結合の様子や合金成分・添加元素との相互作用を電子挙動に基づいて高精度に明らかにする。さらに、こうした第一原理計算の結果をPhase Field法に繋げる手法を確立し、構造材料のためのマルチスケール計算技術を開発する。

具体的には、まず、鉄鋼材料中の典型的な析出物として、TiC相と母相Feとの異相界面の高精度第一原理計算をオーダーN法プログラム(Open MXコード)で行う。格子misfitのため、界面エネルギーと歪エネルギーが重要で、析出粒子サイズが小さい場合は界面エネルギーの低い整合界面が、サイズが大きくなると歪エネルギーを減らすため部分整合界面に遷移する。実験で観察される方位関係のTiC(001)/Fe(001)界面について、整合界面と部分整合界面の大規模第一原理計算を「京」で実行し、歪エネルギーの見積もりを加えて、遷移の臨界粒子サイズを見積もる。また、整合界面、部分整合界面での水素などの挙動を解明し、バルクの水素脆化を防ぐための水素捕獲能について検討する。また、Fe中の転位芯の安定構造と移動障壁、添加元素との相互作用の大規模第一原理計算も行き、転位挙動を明らかにする。なお、異相界面、転位、粒界について、QMASコード(平面波基底第一原理計算)による局所エネルギー、局所応力の精密解析も行き、異相界面、転位、粒界での原子・電子挙動の支配因子を検討する。そして、こうした第一原理計算の結果をPhase Field法に繋げる手法を確立し、構造材料のためのマルチスケール計算技術を開発する。

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、全スケール領域を整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、金属材料の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。これは工学的にも材料設計手法の確立に貢献する。また、希少元素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、希少元素の効果の微視的機構は未解明の状態である。希少元素を始めとする添加元素や合金成分の役割が解明されれば、希少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。

なお、関連するプロジェクトとして、元素戦略プロジェクト「構造材料研究拠点」、新学術領域「シンクロ型LPSO構造の材料科学」、新学術領域「ナノ構造情報のフロンティア開拓ー材料科学の新展開」等がある。これらは、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。

【「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)を実行してきた。H25年度より、Fe中のらせん転位芯構造の大規模構造計算(OpenMX)を開始し、H26年度に本格的に実行している。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の調整、テスト、最適化を行っている。また、平面波基底第一原理計算プログラムQMASの最適化、試行も開発者の石橋章司ら(当課題メンバー)が行っている。

【研究実施(計画)内容】

平成27年度は、第一に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中のFe/析出相界面の水素捕獲に関する大規模第一原理計算をOpenMXコードを用いて進める。同時に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行う。第二に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中の転位芯構造のOpenMXによる大規模第一原理計算を推進する。合金元素・添加元素との相互作用を明らかにするとともに、キンク構造の大規模計算を行い、転位挙動についての未曾有の解明を図る。第三に、第一原理計算とPhase Field法の連携について、理論的・計算技術的な検討をさらに進める。

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 dendrite 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)、高木知宏(京都工芸繊維大)、澁田靖(東京大)

【研究開発課題概要】

本研究課題では、1)分子動力学法(MD)による凝固現象の高温物性値の算出、2)dendrite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 dendrite 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 dendrite 集団の競合過程の解明を試み、合金の凝固組織に対する高精度制御法の発展を目指す。平成27年度においては、二元系合金系における動力学係数を MD から算出する方法を検証する。そして、フェーズフィールド・シミュレーションによって一方向凝固における dendrite 組織形成過程の解明とマイクロ偏析の解析を実施する。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

連続鋳造やインゴットキャスティングなどの鋳造・凝固プロセスにおいて、歩留まり向上や鋳片の高品質化の観点から、デンドライト組織のサイズと形態を高精度に制御することが求められている。本課題で開発する定量的フェーズフィールド・モデルは、デンドライト組織形成の高精度計算を可能にするものであり、実機条件下における組織形成過程の予測やデンドライト組織形成メカニズムの解明において極めて有用であると考えられる。本研究課題の特色は、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であり、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する。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。また、本課題で試みている大規模フェーズフィールド・シミュレーションは、本分野において世界的にも最大規模のものであり、現在、デンドライト集団挙動の解明において、国内外の研究をリードするような成果が得られつつある。これらの点に本課題の科学的・学術的意義がある。

〔「京」利用状況〕

自然科学研究機構の京用開発サーバ（PRIMEHPC FX10）を活用し、定量的フェーズフィールド・シミュレーションの並列化コードを開発済みである。「京」による大規模計算についても検討する。

[研究実施(計画)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、鉄基合金やAl合金を主な対象として進めている。

1)の課題では、現在まで純物質を対象とした計算を実施してきたが、本年度はこれを合金系に拡張し、二元系合金における高温物性値、特に動力学係数の算出を試みる。また、前年度に実施した核生成の解析を進め、凝固中の核生成現象に関する原子レベルの知見を得るとともに、これをフェーズフィールド・シミュレーションに展開する方法について検討する。2)の課題では、既存の定量的フェーズフィールド・モデルの適用範囲を拡張すべく、より高度なモデリングに取り組む。具体的には、固相内拡散の取り扱いに関して精度を高めたモデリングを実施し、固相変態へそのまま適用できるような汎用性の高いモデルの構築に取り組む。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計算によって、一方向凝固におけるデンドライト淘汰則を解明する。特に、3次元配列を考慮した際の淘汰現象の計算は、世界的に見ても初めての試みであり、本年度にそのシミュレーションを実施する。

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)、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)

[研究開発課題概要]

われわれが開発している強誘電体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 をさらに改良し、強誘電体の熱伝導率を直接的にシミュレートできるようにする。

[成果目標とその科学的・学術的意義]

強誘電体の熱伝導率の理解と見積りは、その熱素子への応用にも関連して重要である。また、熱伝導の方向と分極の方向の関係など物理的な興味の対象となりうる**意義深い研究**である。

〔「京」利用状況〕

feram は「京」および FX10 や SR16000 で並列化と最適化が済んでおり、これらのスーパーコンピュータでいつでもアレイジョブとして実行可能である。一般利用に応募したが不採用であったため、平成 27 年度内に京は利用する予定はない。

〔研究実施(計画)内容〕

上記の feram の改造の他に、プログラムの内部データ構造の大改造を計画している。日立 SR16000 での高速化が見込める。熱伝導率の効率的なシミュレーションを目指す。データ構造改造版を夏にリリースする予定である。

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)、桑原理一 (ダッソーシステムズ・バイオピア(株))、BHATTACHARYYA, Swastibrata (横国大)、張明 (横国大)、桑畑和明 (横国大)、正地徹 (横国大)、青木翼 (横国大)、谷川幸晴 (横国大)

〔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¹の完全固有状態として記述できる、我が国が世界に誇ることの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。

バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる GW 近似に基づく純粋な遷移金属酸化物結晶や不純物を含む系の準粒子スペクトル計算を行い、より精密な GW Γ 法に基づくナノクラスターの全電子スペクトル計算を行う。これに加えて、全電子 GW + Bethe-Salpeter 計算により、一切のパラメタを用いない精密な XANES スペクトル計算も行う。また、電子励起状態からスタートするダイナミクス・シミュレーションの現実系への応用を考える。さらに、TOMBO の「京」でのチューニングを行い、実行性能の向上を図る。一方、第一原理計算から Fourier 空間における Phase Field Crystal 法へのマッピングを行う。

〔成果目標とその科学的・学術的意義〕

まずは、バンドギャップやバンド構造を正しく再現できる全電子GW近似に基づく純粋なTiO₂やZnOの結晶や不純物を含む系の正確な準粒子スペクトル計算を行うことを目標とする。これまで全電子GW計算で半導体中の深い不純物準位に対する精密な計算が行われた例は少なく、本研究が成功すれば、その意義は大きい。次に、これまで完全に自己無撞着なGW Γ 計算が行われた例はないことから、世界に先駆けてその計算を行うことを目

標とする。我々は、スピン偏極したNa, Na₃に対して、準粒子スペクトルと光吸収スペクトルを計算する。さらに、全電子GW + Bethe-Salpeter計算により、一切のパラメタを用いない精密なXANESスペクトル計算を分子に対して行い、結晶への拡張を考える。また、任意の電子励起状態からスタートできるダイナミクス・シミュレーションの計算手法を確立することは重要であり、我々は多体摂動論を任意の電子励起に拡張することにより、新しい理論の定式化と、簡単なシミュレーションによる正当化検証を行う。それと同時に、TOMBOを用いて、COやHを含む化学反応に対するTDDFTダイナミクス・シミュレーションを行う。一方、第一原理計算からのPhase Field Crystal法へのマッピングを可能とし、マルチスケール・シミュレーションの分野のブレークスルーに繋げる。

〔「京」利用状況〕

平成 27 年度は、「京」上での TOMBO のチューニングを行うために、「京」初中級講習会に参加し、RIST の高度化支援を受ける予定である。TOMBO の GW 計算におけるホットスポットの抜本的な計算アルゴリズムの効率化により、必要な計算工程を抜本的に減らした上で、SIMD 化を行う。

〔研究実施(計画)内容〕

平成 27 年度は、このプログラムTOMBOのLDA部分を限定的にソース公開する。このためのホームページの準備は整っており、プログラムやマニュアルの整備が整い次第、公開に踏み切る予定である。プラズモンポール近似を用いずに、正確に ω 積分により、全電子GW計算を行えるようにプログラムを改良し、TiO₂やZnOの結晶や不純物を含む系や、分子や少数原子系に対して、正確なGW準粒子スペクトル計算を実行するとともに、GW + Bethe-Salpeter XANESスペクトル計算を行う。また、早期に自己無撞着なGW Γ 計算プログラムを完成させ、スピン偏極したNa, Na₃に対して、準粒子スペクトルと光吸収スペクトルを計算する。これと並行して、任意の電子励起状態からスタートするダイナミクス・シミュレーションの定式化・正当化検証を行うとともに、TDDFTを用いたダイナミクス計算も行う。一方、第一原理計算をPhase Field Crystal法にマッピングする方法に関しては、Fortran90 を用いた高速Fourier変換を含むMPI + openMPハイブリッド並列プログラムを完成させ、簡単な系でのシミュレーションのテストを行っていく。

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ことである。また、計算物質科学分野の HPCI システムを構築し、希少金属代替材料やエネルギー創成の問題など、科学的・社会的に重要喫緊である課題を解決していくための取り組みを継続することにある。そのため、「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変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。

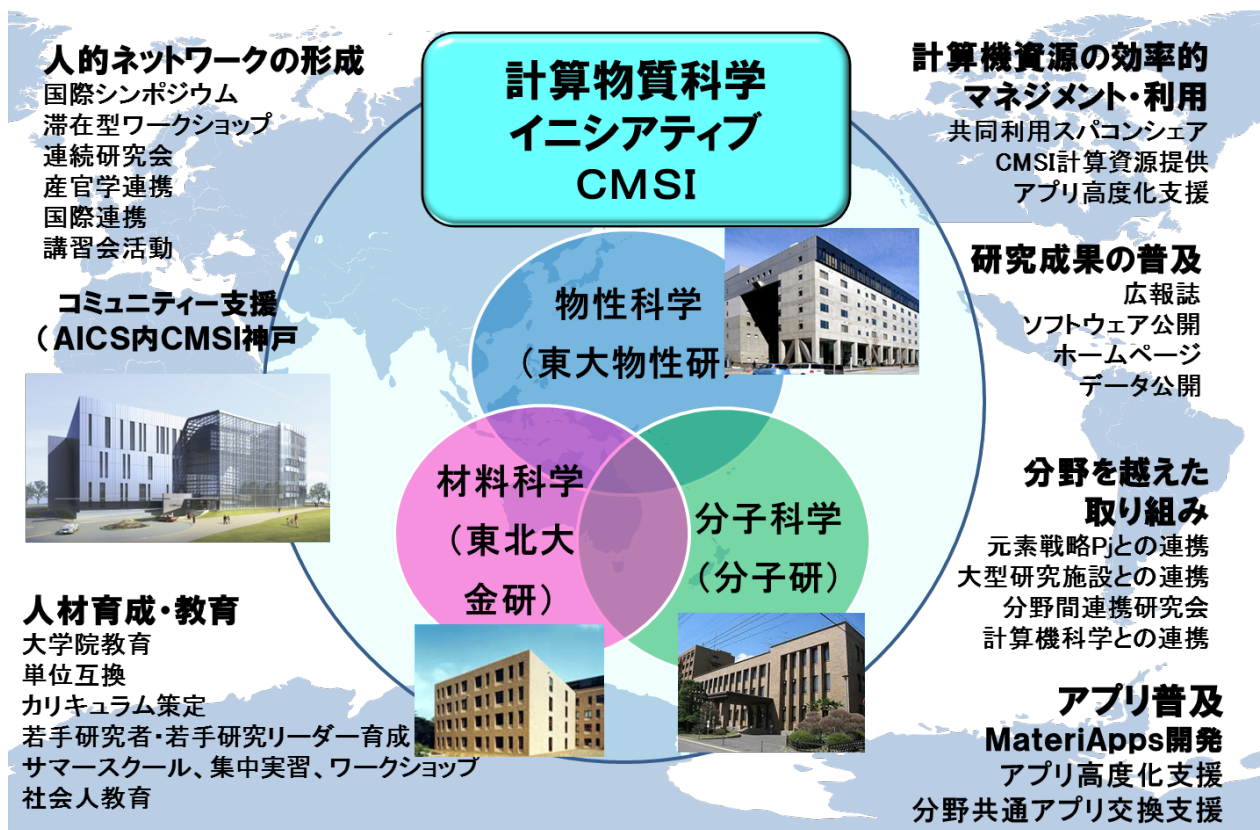


図 2. 2. 2. 2-1 CMSI における計算科学技術推進活動

2. 2. 2 本格実施（平成27年度）における実施計画

2. 2. 2. 2(1) 計算機資源の効率的マネジメント

1) 平成27年度の実実施計画と目標

引き続き、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維持・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を中心として、その内容や特性を紹介し、利用方法が簡単に分かるウェブサイトを構築する。このうち、特に、重要なものについては、必要に応じて、その開発者と連携して、ユーザが利用しやすいライブラリとして整備し、京コンピュータや全国共同利用スーパーコンピュータセンターなどでも利用できるような環境を整備するなど、重点的に公開・普及を促進する。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。

2) 平成27年度の具体的な実施計画

i) 計算資源のマネジメント

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、特別支援課題に対して引き続き柔軟かつ機動的に資源配分を調整する。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。

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引き続きバランスよく配分する。平成25年度、26年度においては、物性研究所、分子研究所、東北大学金属材料研究所の3研究所で、歩調をそろえて、戦略分野2のコミュニティに対して計算資源を提供する仕組みが整ったが、27年度もこの体制を維持し、更なる大規模計算への開発環境として利用するとともに、中規模並列計算による研究推進を図る。また、大学情報基盤センターの計算資源の借用も引き続き行う予定である。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に、平成27年度も、CMSI 神戸拠点に導入されたポスト処理システムの活用を促進する。一方、物性研に導入され、GPGPUの追加導入もはかられた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、企業内研究者のトライアル利用など従来からの利用に加えて、新しい計算機アーキテクチャへ対応するためのソフトウェア技術開発にも役立つよう、幅広い用途で利用可能なように運用を行い、これらによっ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に導入された可視化アプリケーションを利用した研究およびアウトリーチ活動にも注力する。

・物性研スパコン&Psi の戦略枠利用の予定

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 20 程度の研究課題に対して、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。また、平成 27 年 7 月から新システム B(約 2PFLOPS)を運用する予定であるが、そちらへのポイント配布も行う予定である。

東京大学物性研究所に CMSI が設置しているハイブリッド並列計算用 PC クラスタシステム(psi, 40 ノード)は、今年度も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、講習会時の実習環境等、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。

・物性研神戸拠点 Phi の戦略枠利用の予定

昨年度に引き続き、神戸ハンズオンの実習用クラスタ、「京」ポストデータ処理、「京」の出力データのバックアップ用の NAS の接続先、可視化のための使用を推進する。また、アプリ開発・実行環境を整備するためのインストール・実行のテスト、アプリのベンチマークとしての用途も継続する。(作成したインストールスクリプトは、Github レポジトリ <https://github.com/wistaria/MateriAppsInstaller> で公開されている。)さらに、今年度は、アプリのチューニング合宿 TOKKUN!において、Phi にインストールされている Intel のプロファイラの活用を検討する。

・分子研スパコンの戦略枠利用の予定

平成 27 年度の利用申請に関して、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い、合計で 9 課題(18 グループ)からの申請があった(利用希望は全計算資源の 16%に相当)。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
安田耕二(第 1 部会)	色素増刊太陽電池の電子移動過程の理論的研究
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
大野かおる(第 5 部会)	ナノクラスターから決勝までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス

・金研スパコンの戦略利用の予定

平成 27 年度の CMSI 枠は 3 月に採択者を決定したが(後に 5 月に一件増加)、採択課題数は 6 課題で去年より 3 課題減となっている。割り当てたノード時間積の総量は 305,500 時間、これは本年度の金研スパコンの総ノード時間積の 20%に相当する。また、平成 27 年度に本センターのスパコン利用の課題として採択したのは、研究部共同研究が 4 件、本センター共同利用が 28 件であり、従って、CMSI 枠の課題数 6 件は全課題数 38 件の約 16%に相当する。昨年度は電気代高騰の為に SR16000 の全停止、部分稼働を余儀なくされたが、今年度は部分稼働ながら年間を通じての運用を行う方針である。又、今年度はユーザーの計算機使用量を把握できる機能を導入する予定であり、これにより、よりきめの細かい運営と支援業務を行っていく。

・その他の戦略利用の予定

CMSI では次世代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、これまで Intel Xeon Phi と NVIDIA Tesla をそれぞれ 2 ノードずつ導入し(psimic と psitesla)、また講習会を開催するなど CMSI メンバーのメニーコアへの習熟をはかってきたが、今年度もこれを継続する。

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、研究会・ワークショップなどの共同企画を行う。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 SC15 などの国際研究集会などでの共同出展などの合同企画などを検討・実施する。

iv) アプリケーションのマネジメント (MateriApps)

CMSI では、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の一つと位置付けており、平成 25 年度から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」の本格的な運営を行っている。今年度はこれまでの MateriApps の開発や運営を継続するとともに、ソフトウェアを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。また、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、アプリ試用のための環境である「MateriApps LIVE!」の開発・普及や各地でのソフトウェア利用講習会などの企画のほか、計算物質科学コミュニティの計算資源にコンパイル済みソフトウェアをインストールする「MateriApps Installer」の整備など、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 27 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たり、共同で研究会を開催するなどして、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 本格実施(平成27年度)における実施計画

2.2.2.2(2) 人材育成

25年度から開始している双方向オンライン配信システムを用いて、全国オンライン配信を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。現在のところこのカリキュラムは研究者あるいは開発者養成のためのコースと位置づけられる。平成 26 年に発足したワーキング委員会の素案をもとに新コースである計算科学技術特論 C の内容を具体化する。さらに、新コースに含まれるいくつかのテーマについて、試験的な配信を行い、その妥当性を検討する。これらの3コースがプロジェクト終了後も継続することが可能な体制を構築する。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に関しては、拠点大学での個別の取り組みに期待するところが大きい。各拠点から提案に対しては積極的に議論を進めて、全拠点大学の協力のもとに、単位認定に関してより柔軟性と可能性の高い方式を確立していく。

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、26年度まで実施してきた活動により築かれてきた人的基盤と、確立されてきた方法論をもとに、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、インドネシア等で引き続き展開する。また、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、若手研究者を育てていく重要性が認識されているが、長期的な視野にもとづいてこれを行う必要がある。その観点から、今後はポスト「京」も念頭に置くべきである。現在、そのような枠組みを担保する具体的なプロジェクトは見当たらないが、ダイナミックに発展する計算機アーキテクチャを先取りする先進性をもって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ことは計算物質科学の発展のために必須であり、そのための努力を続けていく。このような計画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ための企画を行っていく。

計算科学の発展のためにはHPCを有効に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界への適切な情報と技術の伝達が重要であるが、その実現のためには長期的な展望のもとでの社会人教育が必須である。これまで、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てきたが、最終年度にあたって、これらをさらに充実することを計画している。

平成 26 年度に物性研究所に導入した多地点接続装置(MCU)を効率的に運用し、どこの拠点からも講義の配信においてもトラブル発生が押さえられ、またトラブル発生時にも迅速に対応し大きな影響なく復旧できるようなシステムの充実とそれを運用できるノウハウの蓄積を行う。

1)平成27年度の実実施計画と目標

i)大学院教育

計算科学技術特論A、Bの充実をはかるとともに、26年度において策定を開始した計算科学技術特論Cの具体的なカリキュラム策定を行う。カリキュラムはすでに実施中の大学院科目である計算科学技術特論A、Bの実施と整合性が保たれるようにこれらと総合して考える。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、両方の研究者を一樣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な構成が望ましい。計算科学技術特論Cにおいてはアプリ開発者および本格的なアプリ開発を志向する人を対象に、本格的なアプリ開発に必要な総合的技術、公開運営に必要な知識やノウハウを学ぶことを目標とするコースの策定を目指している。内容としては

- ・「京」およびポスト「京」における計算技術とアプリケーション開発、

- ・アプリケーション公開に関するライセンス、宣伝広報について、
- ・マニュアル、チュートリアル、GUI、可視化技術、
- ・各アプリケーションについて目標、実装、開発体制、公開・運用、開発者育成、
- ・デバッグ・チューニング事例

等を考えているが、これらを具体化するカリキュラムを策定するとともに、それらの幾つかについて実際に配信講義を行い、その科学技術特論としての有効性を検証する。

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きたが、これらを継続するとともにいっそうの充実をはかる。また、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してレポーターを広げて実施していく。東京都の大学が中心となっており行っている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。以上の計画と連携して、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。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。

iii) 若手研究者・若手リーダーの育成

戦略的なプログラムのもとに若手研究者育成を実施してきたが、今後、これをさらに発展させる。京コンピュータ上で実行実績をのこしているソフトウェアの開発者を中心とした連携チームを形成する。チームは、そのソフトウェアの開発を推進するメンバーとユーザーと実験家を含めたソフトウェアを活用するメンバーから構成する。これによって、ソフトウェアが理論計算の研究者から実験家も含めた広いユーザーに使われ、最終的に具体的な問題の解決につながるまでの各段階で、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。

iv) 社会人教育

プロジェクト終了後も社会人教育に対して、一定の責任がはたせるよう、拠点大学を中心に、計算物質科学に関する社会人教育を引き続き企画、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するため引き続き努力する。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プロジェクト終了後を視野においた調整を行っていく。

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ることも視野にいて、今後のための充実を行う。これらのプログラムに各拠点大学の教員の非常勤講師としての参加を拡充することにより、より広い俯瞰に基づく社会人教育カリキュラムを可能にしていく。

2) 平成27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

①CMD ワークショップ

今年度は、第27回を平成 27 年 8 月 31 日(月)－9月 4 日(金)の日程で、大阪大学大学院基礎工学研究科 G棟で開催する。第 28 回は平成 28 年 2 月 29 日(月)－3 月 4 日(金)の日程で、大阪大学産業科学研究所で開催する。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、CMSI の研究部会を横断して広い視点で物質設計を考えられるようにマクロスケールなシミュレーションなどの事例も紹介する。

②ASIA CMD ワークショップ

今年度はインドネシア、ベトナム、フィリピン、の3カ国において開催する予定である。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 19 回分子シミュレーション夏の学校

今年度も開催予定。

②第 9 回 TCCI シミュレーション分子 - TCCI ウインターカレッジ-分子シミュレーション

自然科学研究機構 分子科学研究所 岡崎コンファレンスセンター にて開催予定。

③第 5 回量子化学ウインタースクール - TCCI ウインターカレッジ-量子化学

自然科学研究機構 分子科学研究所 岡崎コンファレンスセンター にて開催予定。

(3) 計算材料科学の教育活動

計算材料科学の教育活動として、①配信講義の受講の促進、②配信講義の企画と実施、③チュートリアルなセミナーやシンポジウムの実施、④海外研修、という 4 点を中心に進めていく。①に関しては、東北大学片平キャンパス及び青葉山キャンパスでの受講が可能であるため、今年度も、ポスドク、企業の研究者に加えて、マテリアルや物理を専攻する院生に対して積極的に受講を勧めていく。②については、昨年度の配信講義で 40 数名の受講者があり、今年度もこれを継続する。但し、③とも関与するが、今年度もセミナーシリーズの一部(2 回程度)を配信講義として企画する。昨年度実施した「マルチスケール材料科学」に関するセミナーシリーズは好評であった。今年度も、これを計算物質科学へと発展させていき、上述のように、一部を配信講義とする。また、これまでに東北、関西(2回)、九州、中部、東京で計 6 回実施してきた MPI プログラミングの講習会については今年度も実施を検討する。④については、CMRI では毎年、若手研究者と院生を対象に、2 名程度1か月程度、海外の大学、研究機関に派遣して研修を行っている。今年度もこのプログラムの予算措置をしており、次世代を担う若手に対して啓蒙活動の一助とする。

(4) 高並列化教育

① 第 5 回超並列化技術国際ワークショップ

以下のイベント名で11月に開催する。内容は例年どおり、実際の実装に重きをおいたワークショップと海外のスパコン事情の紹介をおりませたものとする予定。

“Fifth International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics (量子化学・第一原理物性計算プログラミングナウ) – Toward post-K computers”

(5) International HPC Summer School 2015

6月21-26日、International HPC Summer School 2015 (Toronto, Canada)にて開催
分野2からは2名(物性1名、分子1名)が参加予定である。

ii) 社会人教育

① OCTA 講習会・トレーニング

27年度の開催はまだ未定である。

iii) 大学院教育

1) 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A

4月9日～7月23日 全15回

今年度再び計算科学技術特論Aを、4月9日から7月23日まで木曜3限(13:00-14:30)の時間で15回開講する。大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター(豊中キャンパス)を配信元として、14カ所(東北大物理、東北大金研、産総研、筑波大(分野5)、東大柏、東大本郷、東大駒場、金沢大、豊橋技科大、分子研、名大、京大、阪大吹田、CMSI 神戸)に配信する。講師は前回同様片桐(東大)、中田(理研)、渡辺(東大)、山本(電通大)、吉井(名大)、石村(分子研)に加えて分野1に属する理研のJung氏に講義を依頼し、分野を超えた技術交流も行う。

・人材育成シンポジウム

CMSI人材育成シンポジウムを11月頃に企画して実施する。CMSIのいろいろなイベントで取り上げられることが少ないもので且つ重要なトピックスを選び、数値解析、計算科学の連携、物質開発、デザインといったキーワードを中心にした講演を企画する。

(2) 東北大学金属材料研究所 計算材料科学研究拠点

昨年度はマルチスケール計算材料科学をキーワードに、「”金属の計算材料物性” – マルチスケールのアプローチ」セミナーシリーズ(全8回、うち第7-8回は配信基を含む10地点への配信セミナー)を行った。その実施状況と受講後の参加者アンケート結果などを踏まえ、平成27年度は、計算材料科学分野のみならず、材料科学・物性科学・分子科学の2つの分野以上にまたがる複数のテーマについてのセミナー(全6-8回程度)の実施

を企画する。また、本セミナーの一部(2回程度)は、複数のCMSI拠点への配信セミナーとしての実施を予定している。

(3) 神戸大学大学院システム情報学研究科

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う。CMSI 神戸分室において、FMO および FMO 計算支援ソフトウェア FU のチュートリアルを実施する。

(4) 名古屋大学大学院工学研究科

名古屋大学において毎年度開講している計算科学関連の大学院講義として、並列計算に関する講義・実習科目「大規模並列計算科学特論」、および計算科学の最新研究動向解説する「計算科学フロンティア連続講義」を本年度も分担する。また、化学系学部生を対象とした「熱力学」や留学生を対象とした「Advanced Physical Chemistry」といった講義についても担当する。この他、CMSI 計算科学技術特論 A や TCCI ウインターカレッジ・分子シミュレーションスクールにおいては、分子動力学計算に関する講義を行う。一方、これまで毎年進めてきた総合研究大学院大学との単位互換については、本年度も名古屋大学の大学院生が分子科学研究所にて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」について履修できるよう連絡・調整を行う。

(5) 東京大学大学院工学系研究科

27 年度も工学系研究科・理学系研究科共通講義として「物質科学のための計算数理 I, II」を開講する。また阪大で開講される配信講義「計算科学技術特論 A」も昨年度に引き続き、セミナー形式で誰でも自由に参加できるように受信開講する。さらに 27 年度後期には、東大が主催校となり「計算科学技術特論 C」を配信する予定である。これまで阪大主催で行われてきた「計算科学技術特論 A」および「計算科学技術特論 B」と異なり、開発したアプリを公開・運用するための知識や技術を習得することを目的とした内容とする予定である。

(6) 東京大学大学院理学系研究科

東京大学大学院理学系研究科(理学部物理学科)では、平成 27 年度、学部 3 年生(71 名)に対して新しい必修科目「計算機実験」を開始した。この科目では、1 回 105 分の授業が 14 回行われる予定である。35 名と 36 名の 2 つのグループに分かれ、座学(講義)と実習を交互に行う。諏訪は主に実習を、同専攻の藤堂眞治氏が主に講義を担当する。授業内容は、数値微分、バージョン管理、微分方程式、連立一次方程式、対角化、回帰分析、モンテカルロ法等を予定している。また最後の授業では、4 人 1 組のグループに分かれ、作成したプログラムによる計算結果の発表会も行う予定である。

(7) 東京大学物性研究所 神戸拠点

CMSI 教育機関、および、他大学とも連携し、計算物質科学の人材育成活動を行う。また、CMSI 神戸分室において、「京」で活用するオープンソフトウェアの開発者会議及びチュートリアルを実施する。

2.2.2 本格実施(平成27年度)における実施計画

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)

i) 計算物質科学の分野振興

1) 平成27年度の実実施計画と目標

平成 27 年度は、これまで推進してきた計算科学推進体制を物性研、分子研、金研のそれぞれの戦略機関の活動としてどのように継続していくのかを検討し、有効な活動を平成 28 年度以降も継続していく体制を整えることが目標である。

3) 平成27年度の具体的な実施計画

①CMSI 全体行事

(1) 全体

平成 27 年度は、12 月 7-9 日に東大本郷キャンパス小柴ホールで分野2「新物質・エネルギー創成の最終報告会となる、第 6 回 CMSI 研究会を開催する。「京」で何ができるようになったのかを、研究成果とアプリケーションの開発の観点で全ての CMSI 研究課題に報告していただく。

(2) 国際会議

平成 25 年度より実施してきた若手 CMSI International Workshop を平成 27 年度も実施する予定で予算を確保している。本 Workshop は世界の若手研究者のネットワーク形成を目的としている。若手が中心になって企画し、自身の研究成果を世界に発信するとともに情報を交換して研究レベルを高めていくことも期待している。

②計算物性科学研究センター(CCMS)

CCMS では、27年度も CCMS シンポジウム、CCMS ハンズオン講習会の開催を予定している。また、物性研国際滞在型ワークショップ New Perspectives in Spintronic and Mesoscopic Physics (NPSMP2015) が、6 月 1 日から 6 月 19 日 の間、東京大学物性研究所での開催が予定され、連携して実施する予定である。

ハンズオン:

CCMS ハンズオンに関しては、今年度は計 6 回程度の開催を予定している。特に後期には、CMSI 重点課題で開発されてきたソフトウェアでこれまでに講習会を開催していないソフトウェアを中心にハンズオンを開催する予定である。

③計算分子科学研究拠点(TCCI)

全体シンポジウムとしての研究会は、「計算化学(計算分子科学)の発展を展望」をテーマとして、3 月 14 日から 16 日の間の 2 日間、分子研で行う予定。TCCI 第 5 回産学連携シンポジウムについては、1 月後半、産応協のスパコンセミナー(1回分)と共同で開催すべく調整している。

④計算材料科学研究拠点(CMRI)

27 年度の分野振興策として、①研究活動の推進の為に企画・支援、②教育活動・人材育成活動・啓蒙活動の立案・遂行、という 2 本の柱を中心に活動を行う。23 年度～25 年度は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 つの柱を標榜していたが、平成 26 年度よりこれらを上記の 2 つの大きな括りにした。平成 25 年度より第 5 部会が発足したが、核となる課題遂行者は CMRI のメンバーにより構成されている。重点課題と特別支援課題をさらに推進し、加えて新たな特別支援課題のテーマを計画・実施することが第 5 部会の重要なミッションであるが、CMRI はこれを全面的に援助するような具体案を立案し、実行する。分野振

興の諸々の計画は、このような第5部会の課題遂行のための支援と不可分、あるいは、その延長線上にある。又、今年度に特徴的なこととして、本プロジェクトと並走している「ポスト京」と同期しながら計画の企画立案を行うのが望ましいと思われる。第一回の「京」およびポスト「京」の打合せ会議・研究会を6月23日(火)に実施する。

上述の①に関しては、各種のシンポジウムや研究会の開催を通じて、課題の進捗状況を確認しながら、計算の具体化・深化を図る。今年度は平成27年10月13日(火)～14日(水)にCMRIの年会を計画しており、この一部を国際シンポジウムとして企画する。②に関しては、各種のセミナー、講義の実施や配信、若手の海外派遣など、前年度までに行ってきたことをさらに効果的に実施する。特に第5部会の課題は「マルチスケール材料科学」であり、講義の実施や配信にあたっては鋭意、このテーマを中心にしたものとする。又、今年度は長年の課題であった「腐食」に関して取り組む予定である。まず、平成27年6月22日(月)に、マックスプランク研究所(MPIE)の専門家による基調講演などを含む「CMRI 腐食 WS」なる国際WSを開催し、問題点の共有を図る。

また、若手教員と院生を対象にした海外研修を実施する。過去4年間に院生が7名(23年度2名、24年度1名、25年度1名、26年度3名)、若手教員が3名(24年度、25年度、26年度各1名)、この制度のもとで欧米の大学や研究所に短期留学しており、いずれもその後の研究の遂行に大きなモチベーションを得て帰国した。平成27年度も引き続きこの制度を実施し、若手研究者の啓蒙に努める。

これらに加えて、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)や大型実験施設とも密に連絡を図り、共通項の大きなテーマに対して連携していく。特に科研費学術新領域の「LPSO 相」に関しては実験サイドから計算のコミュニティとの研究会の開催を望む声が多く、平成27年8～10月にTopical WSを開催する。

⑤CMSI 国際会議連携

国際会議連携として、3rd OpenMX、18th Asian Workshop、ICQC神戸への協賛を行う。また、国際的なスパコンの研究会と展示会である。ISC15およびSC15にも参加し、ブース出展も行う予定である。

•The 3rd OpenMX/QMAS Workshop 2015 hands-on workshop on electronic structure methods

5月11-13日 東京大学物性研究所にて開催

アジアのコミュニティが中心となり開発を進めている第一原理電子状態計算ソフトウェアOpenMXとQMASに関してワークショップを開催。日本、韓国、中国、台湾より計17名の招待講演者を招聘し、計算手法の基礎や最新の応用計算を議論し、第一原理電子状態計算ソフトウェアOpenMXとQMASのさらなる発展を目指す。

•The 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculation

11月2-3日 東京大学物性研究所にて開催

27年度の18回会議は、東京大学物性研究所で開催予定である。第一原理電子状態計算を主体とする計算物理及び計算化学の最先端の計算手法やその応用計算が会議の主題である。欧米からも5名程度の著名な研究者を招き、俯瞰的な立場からの招待講演は欧米の研究動向を知る上で貴重な機会となっている。参加者は計180名程度を予定しており、その内訳は日本100名、韓国30名、中国10名、その他10名である。本会議を開催することで、計算物質科学のさらなる進展が期待され、またアジア・欧米での第一原理電子状態計算コミュニティにおける物性研の役割を高める上でも極めて効果的となる会議である。

•ICQC2015 神戸サテライトシンポジウム Novel Computational Methods for Quantitative Electronic Structure Calculations (ICQC 神戸)

国際量子分子科学アカデミー(IAQMS)が3年に一度開催する「量子化学国際会議(ICQC)」が2015年に北京で予定されている。これに合わせて、我が国でサテライトシンポジウムを開催し、最先端の電子状態計算に関する

る議論と国際的な相互理解を深める。これまで取り扱いが困難であった分子系や固体の新しい電子状態計算手法(露わに 관련된 手法、強相關理論、統計的手法、物理と化学のインターフェース)に加え、スーパーコンピュータによるハイパフォーマンス計算のための理論とアルゴリズムにフォーカスした議論を行う。

【会期】 平成 27 年 6 月 16 日(火)～20 日(土)

【会場】 神戸大学コンベンションホール(本会場)、理化学研究所計算科学研究機構(ポスター会場)

【招待講演者】海外国内から全 26 名

【参加人数】 13ヶ国 100 名以上(海外 60 名、国内 40 名) 予定

2.産官学連携の促進

1)平成27年度の実施計画と目標

企業開発現場での計算シミュレーションの利活用の状況を窺い知る為に、経産省プロジェクト等、多くの企業が参画しているプロジェクトで中心課題となっている開発テーマや、企業委員から発案のあったテーマを個別に取り上げ、そのテーマを主題とした研究会を継続して行っている。産官学連携の対象になり得るテーマのみを取り上げるという意味で、産官学連続研究会と呼んでいる。今年度は、産官学連続研究会の開催運営に加え協力機関で準備しているコンソーシアム立ち上げに関して協力支援を行う。

2) 平成27年度の具体的な実施計画

i)産官学連続研究会

分子科学拠点、材料拠点などとも協力しながら、産官学連続研究会を3回程度実施開催する。

ii)産官学連携環境整備・コンソーシアム検討

協力機関で準備している電池に関わる計算シミュレーションの研究コンソーシアムの立ち上げシンポジウムの開催支援等、CMSI 成果に関わるコンソーシアム立ち上げに対して引き続き支援を継続する。

iii)産官学研究拠点としての活動

東大物性研と協力して、平成 27 年度 CMSI 配信講義「計算科学技術特論 A」の開催にあたる。また、ポータルサイト MateriApps に関して物性研、東北大金研、分子研と協力してアプリや物質データベースの紹介、講習会情報などのコンテンツ制作にあたる。MateriApps 活動に関しては9月に名古屋で開催される応用物理学会及び東工大大岡山キャンパスで開催される分子科学討論会でのブース展示を予定しており、アプリ普及活動とともにアンケート調査による要望抽出などを行う予定である。

2.2.2 本格実施(平成27年度)における実施計画

2.2.2.2(4) 研究成果の普及

1) 平成27年度の実実施計画と目標

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、人材に焦点をあてた広報活動、開発されたソフトウェアや蓄積されたノウハウを公開、企業・実験研究者への普及が不可欠である。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27年度は平成26年度までの成果を踏まえ、プロジェクトの集大成として以下の活動をすすめていく。

2) 平成27年度の具体的な実施計画

i) 広報誌の発行

広報誌 TORRENT は、本年度は冊子の発行は、平成 28 年 2 月刊行予定の 5 年間のプロジェクト集大成ムック本のみとする。ムック本は高校生程度読者対象とし、専門的な説明をより求める方向けとして Web 上に全課題の成果報告、画像、動画などを掲載し、読者がムック本からリンクできるようにする予定。

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。また、MateriApps、MateriApps LIVE!を利用して、元素戦略プロジェクトや大規模実験施設などの実験家への計算物質科学アプリケーションの普及にも努めていく。

平成27年度も引き続き、物質科学シミュレーションのポータルサイトMateriAppsの整備を行う。収録するアプリの件数を増す同時に、個々のアプリの情報の情報を充実する。MateriApps LIVE! USBへの収録アプリを増やし、主要学会における展示会やアプリ講習会などにおけるUSBの配布、国内の主要スパコンへのMateriAppsアプリのインストール、クラウドや仮想環境の提供、学部や大学院の講義などでの利用などを通じ、MateriAppsアプリのさらなる普及を図る。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、MateriAppsあるいはCMSI web上で、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。

iii) ホームページにおける情報発信

平成 25 年度にリニューアルした CMSI Web および Torrent Web 内のリンク切れ、タグ付けなどを細部にわたり確認し完成度を高める。情報発信をタイムリーに行い、来訪者が迅速かつ迷いなく目的のコンテンツに辿り着けるようにする。メールマガジン“CMSI 週刊ニュース”や Facebook とも連動させ、訪問者数を増やすよう努める。終了したイベントの開催報告を掲載し、イベントに参加しなかった方たちの参加意欲を高めるよう工夫をする。研究成果ページでは常に最新の成果を掲載し、プレスリリース情報などをリアルタイムで掲載し、研究の推進をアピールする。受賞に関するニュースを漏れなく取り上げ、研究者個人にもスポットライトを当てる。

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・公開する仕組みやデータベースなどについて、MateriApps上で情報収集・公開し、研究者によるデータ公開・利用をサポート・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)のMateriApps上での紹介も継続しておこなう。これにより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。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、研究会を継続する。また、平成25年度に導入した3Dプリンタの活用も継続し、シミュレーションにより得られた分子構造や、電子状態などの可視化の可能性を検討する。

v) 広報イベント・会議

12月7日(月)～8日(火)にCMSI研究会を開催する。各課題成果についての発表、招待講演、ポスターセッションを行う予定。3月上旬には、第4回見える化シンポジウム開催を予定しており、例年通り、画像・音プラスアルファのコラボレーションを行う予定。

vi) 展示会への出展

CMSI活動を海外にもアピールするため、7月12日～16日に開催されるISC14(開催地:ドイツ・フランクフルト)のAICSブースにてポスター展示を行う。同様に、11月15日～20日のSC14(開催地:米国テキサス州オースティン)にて、東京大学情報基盤センターと共同出展する予定。

2016年1月29日にAICS主催の「未来をひらくスーパーコンピュータ」に出展予定。ブース展示、講演会、ポスター発表を行う。また、10月にAICS一般公開および東大柏キャンパス一般公開において展示を予定。

その他の学会関連の展示会なども、MateriAppsの普及など必要に応じて積極的に出展を検討する。

2. 2. 2 本格実施（平成27年度）における実施計画

2. 2. 2(5) 分野を超えた取り組みの推進

1) 平成27年度の実実施計画と目標

これまで分野2では、実験科学、計算機科学、戦略プログラムの他分野、SPring-8 や J-PARC 等の大型研究施設、他 Pj 等との分野を超えた取り組みを実施してきており、平成27年度もそれらは継続する。とくに、元素戦略 Pj やマテリアルズインフォマティクス、大型研究施設間の連携に関しては、継続した連携活動を推進し、大きな成果創出に貢献しうる行事などを実施していく。

2) 平成27年度の具体的な実施計画

i) 計算科学研究機構との連携（AICS ブースでの展示協力など）

ISC15、SC15、また、AICS で実施する一般公開等における各種展示会の出展に関する連携を実施する。また、「京」を知る集いやミラスパ等の広報関連イベント等においても、講演者の選定および招聘、展示会出展で連携していく。また、平成26年度よりスタートした AICS の5分野教育コンテンツ集約サイトとの連携を平成27年度も継続する。

ii) 他の戦略機関との連携

平成23年度より分野5との連携会議を毎年実施しており、平成27年度も実施予定である。また、5分野と AICS、RIST の間で連携した広報の情報共有活動を実施している。平成27年度は広聴機能をどのように推進していくかが課題となっており、検討を継続して実践に移す。

iii) 実験研究者との連携

元素戦略 Pj とは引き続き連携を継続し、CMSI の役割である基盤的計算技術開発の推進を実施する。また、SPring-8 や J-PARC 等とは、これまで実施してきた連携利用シンポジウムや計算物質科学アプリケーションの紹介に加えて、物質科学課題に対する実験計算連携の共同コンサルティングのパイロット事業を実施する予定である。

2. 2. 2 本格実施（平成 27 年度）における実施計画

2. 2. 2. 2(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援

1) 平成27年度の実実施計画と目標

大規模並列計算は、計算機の特徴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徴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た。平成27年度、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京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し、超並列大規模計算による計算物質科学の成果創出に資する。

2) 平成27年度の具体的な実施計画

i) 研究支援拠点の支援体制

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、更に平成 25 年度中に 1 名の特任研究員(平成 26 年度に退職)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 27 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る。平成 27 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、合計 5 名が常駐する体制となる。また、京や HPCI における高度化のスキルを持つ RIST と協力し、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」・HPCI 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 RIST と協力し、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。

iii) 拠点研究員(カテゴリ A)による支援

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 27 年度については、物性分野 6 名、分子化学分野 10 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。

坂下拠点研究員の活動予定:

昨年度に引き続き、固有値ソルバの統一的インターフェース Rokko の改良、それを用いた Heisenberg-Kitaev 模型の固有値計算プログラムの実装を行う。また、Rokko に関する論文、Heisenberg-Kitaev 模型の固有値計算に関する論文を執筆し、7月に講習会を行う。さらに、進捗に応じて以下の交流を行う。

- ・CMSI で開発されているテンソルネットワーク並列化パッケージに対して、Rokko との連携、固有値ソルバ、線型計算アルゴリズムに関するノウハウの共有
- ・AICS の今村チームとの対角化ミーティング、Rokko の Python binding の提供をいただいた前田チーム、中嶋チームとの交流
- ・CMSI のソフトウェア(SMASH、OpenMX 等)との連携の模索

また、神戸拠点の常駐者として、昨年度に引き続き、神戸拠点の運営の支援を行う。

大久保拠点研究員の活動予定:

これまでに大規模並列化とチューニングを終えた、古典スピン模型のモンテカルロ法プログラムを用いて、京コンピュータで大規模計算を行い、二次元フラストレートスピン系における、トポロジカル欠陥が引き起す相転移の可能性について、結論を得る。また、昨年度までに開発してきた、量子系の基底状態計算を行うテンソルネットワーク法の並列化を進めると共に、開発したプログラムを二次元量子スピン模型に適用して、最先端の物性研究を進める。

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 27 年度は 1 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12回 CMSI 若手技術交流会

2015 年 9 月頃予定、開催場所未定

計算科学分野における研究成果を社会に還元するという社会的要求に対応した人材を育成するため、開発したアプリの利用を重点に置いた講習、および実習を行う。これまでの若手技術交流会では、「京」を利用するための技術、開発したアプリの公開、講習の方法など、開発者視点に立った実習を行ってきた。これらのアプリの利用は、開発者あるいは計算に慣れたユーザであれば問題ないが、多くのユーザにとっては入力情報の作成、出力情報の解析が煩雑、複雑になりがちである。そこで、スタンドアロン、あるいはウェブ上での GUI による入力・選択で、これらの処理を補助するユーティリティを作成するための講習と実習を行う。出力情報の解析には情報の描画が必要となることがあるが、昨年度に実習を行った ParaView で処理可能な中間ファイルを作成することでこれを可能とする。

② CMSI 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 27 年度も合計で 6 回程度の講習会を開催する。

③ CMSI アプリ高度化合宿 “TOKKUN!”

これまで「京」、FX10 を使ってきた CMSI 研究員が、学生を中心とする若手のアプリ開発を支援し、次世代の人材育成を行う。アプリ解析ツールの紹介と利用方法の説明を行い、参加者に各自のアプリの解析データを取得させる。そのデータを基に、何が問題点であるか、どのように解決するかを個別にアドバイスする。アプリ改良後、データを再取得させ、どの程度向上したかを実感させることにより、合宿後も常に実行性能と並列性能の向上を意識したアプリ開発ができるようにする。さらに、参加者全員で話し合う場を設けて情報共有も行う。

④ その他

CMSI 神戸拠点においても研究活動を活発に推進し、研究者間の情報交換を促進するために外部の計算物質科学の専門家を招へいし、3 回程度(平成 27 年度)の計算物質科学セミナーを開催する。

⑤ 3Dプリンターを用いた物質構造モデル作成支援

27 年度から 3Dプリンターを用いた物質構造モデル作成支援を本格的にスタートさせる。活動項目を列記する。

1. 本格的な 3D-CAD を導入する。
2. ホームページを作成、支援事業を公開する。
3. CMSI 参加の研究室から物質構造モデリング製作依頼を受け付け開始する。
4. 3Dプリンター自体の開発テーマについて民間企業と話し合う。
5. スーパーコンピュータの計算結果をモデリングする。

6. 研究会等で物質構造モデル作成支援事業を広報する。

7. 見える化シンポジウムに出展する。

東京工業大学合田研究室からスーパーコンピューター京の計算結果のモデリング依頼を受けた。27年度中に製作予定である。その他の研究室からも製作依頼を受けている。

現在のアルゴリズムではプリント過程に問題があるので、より最適化されたアルゴリズムの可能性を調べるため、3Dプリンターのプリントアルゴリズムをメーカーと話し合う予定でいる。

CMSI 参加の研究室と3Dプリンターの利用などについて議論を進める。

2.3 活動(運営委員会等の活動等)

(1) 委員会活動

CMSI の委員会活動の仕組みを説明する。CMSI 全体にかかわる検討を要する事項は、必要に応じて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。

平成 26 年度に開催した、CMSI 全体の各種委員会等の一覧を表 2.3-1 に示す。

また、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。

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 2.3-2 に、各拠点で開催した委員会等の一覧を示す。

また、計算物質科学アプリケーションのポータルサイト“MateriApps”は開発チームを形成し、表 2.3-3 に示す通り、精力的に会合を重ね、本サイトを作成した。

表 2.3-1 CMSI 平成26年度委員会活動

CMSI (計算物質科学イニシアティブ) 平成26年度委員会活動一覧				
月日	場所	担当	行事名	参加人数
会議・小委員会・WG				
4月15日	東京大学本郷キャンパス理学部	CMSI 拠点代表	CMSI 拠点代表者会議 (第1回)	5
7月11日	東京大学物性研究所 TV会議 (6地点)	広報小委員会	CMSI 広報小委員会 (第1回)	10
7月31日	東京大学物性研究所 TV会議 (11地点)	人材育成・教育 小委員会	CMSI 人材育成・教育小委員会 (第1回)	22
8月7日	東京大学本郷キャンパス理学部	CMSI 拠点代表	CMSI 拠点代表者会議 (第2回)	6
8月30日	ステーションコンファレンス東京	企画室	CMSI 企画室会議 (第1回)	18
12月1日	東京大学物性研究所 TV会議 (3地点)	広報小委員会	CMSI 広報小委員会 (第2回)	7
12月8日	東北大学素材工学研究棟	運営委員会	CMSI 運営委員会	22
12月9日	東北大学材料・物性総合研究棟	第1部会	CMSI 第1部会小委員会	5
12月9日	東北大学材料・物性総合研究棟	第2部会	CMSI 第2部会小委員会	6
12月9日	東北大学素材工学研究棟	第3部会	CMSI 第3部会小委員会	8
12月9日	東北大学素材工学研究棟	第4部会	CMSI 第4部会小委員会	5
12月9日	東北大学素材工学研究棟	第5部会	CMSI 第5部会小委員会	5
12月10日	東北大学材料・物性総合研究棟	CMSI 小委員会	CMSI 合同小委員会 (スパコン連携、産官学連携小委員会、 人材育成・教育小委員会 (第2回))	24
1月30日	東京大学本郷キャンパス工学部 TV会議 (5地点)	企画室	CMSI 企画室会議 (第2回)	19
1月31日	ステーションコンファレンス東京	運営協議会	CMSI 運営協議会	13

表 2.3-2 各分野拠点における平成26年度委員会等の活動

各分野拠点における平成26年度委員会活動等一覧				
月日	場所	担当	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)				
6月11日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	第1回CCMS打ち合わせ	9
7月17日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	第2回CCMS打ち合わせ	9
9月25日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	第3回CCMS打ち合わせ	9
10月16日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	第4回CCMS打ち合わせ	8
11月14日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	平成26年度CCMS運営委員会	16
12月18日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	第5回CCMS打ち合わせ	7
1月22日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	第6回CCMS打ち合わせ	9
3月19日	東京大学柏キャンパス物性研究所	CCMS	第7回CCMS打ち合わせ	6
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21日	名古屋大学 (東山キャンパス) ES総合館	TCCI	TCCI第10回運営委員会	9
9月13日	自然科学研究機構 分子科学研究所	TCCI	TCCI拡大運営委員会	20
10月18日	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	TCCI	TCCI第11回運営委員会	9
3月23日	自然科学研究機構 分子科学研究所	TCCI	TCCI第12回運営委員会	9
9月13日	自然科学研究機構 分子科学研究所	TCCI	TCCI第1回将来アプリ検討WG	10
9月27日	名古屋大学 (東山キャンパス) ES総合館	TCCI	TCCI第2回将来アプリ検討WG	9
9月27日	名古屋大学 (東山キャンパス) ES総合館	TCCI	TCCI第3回将来アプリ検討WG	9
10月6日	自然科学研究機構 分子科学研究所+TV会議	TCCI	TCCI第4回将来アプリ検討WG	10
10月12日	イオンコンパス名古屋駅前	TCCI	TCCI第5回将来アプリ検討WG	12
10月18日	自然科学研究機構 分子科学研究所	TCCI	TCCI第6回将来アプリ検討WG	9
10月19日	自然科学研究機構 分子科学研究所	TCCI	TCCI第7回将来アプリ検討WG	10
10月23日	AP名古屋 名駅	TCCI	TCCI第8回将来アプリ検討WG	5
10月30日	自然科学研究機構 分子科学研究所+TV会議	TCCI	将来アプリ検討WG責任者会議	4
11月8日	AP品川アネックス	TCCI	TCCI第9回将来アプリ検討WG	10
11月18日	神戸大学 自然科学総合研究棟 4号館	TCCI	TCCI第10回将来アプリ検討WG	9
11月21日	神戸大学 自然科学総合研究棟 4号館	TCCI	TCCI第11回将来アプリ検討WG	8
11月26日	自然科学研究機構 分子科学研究所+TV会議	TCCI	TCCI第12回将来アプリ検討WG	9
1月28日	自然科学研究機構 分子科学研究所	TCCI	TCCI第13回将来アプリ検討WG	11
東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点 (CMRI)				
4月16日	東北大学金属材料研究所	CMRI	平成26年度CMRI第1回運営委員会	7
11月11日	東北大学金属材料研究所	CMRI	平成26年度CMRI第2回運営委員会	12

表 2.3-3 MateriApps(物質科学シミュレーションのポータルサイト)平成 26 年度関連会議

MateriApps (物質科学シミュレーションのポータルサイト) 運用活動一覧				
月日	場所	担当	行事名	参加人数
5月7日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第1回編集会議	8
5月19日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第1回全体会議	12
5月19日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第2回編集会議	11
5月28日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第3回編集会議	9
6月11日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第2回全体会議	13
6月11日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第4回編集会議	13
6月20日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第5回編集会議	9
7月18日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第3回全体会議	12
7月18日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第6回編集会議	11
7月28日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第7回編集会議	9
8月8日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第4回全体会議	12
8月8日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第8回編集会議	9
8月29日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第9回編集会議	10
9月12日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第5回全体会議	11
9月12日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第10回編集会議	10
9月29日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第11回編集会議	10
10月7日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第6回全体会議	13
10月15日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第11回編集会議	10
11月6日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第7回全体会議	14
11月6日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第13回編集会議	8
11月26日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第14回編集会議	8
12月24日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第8回全体会議	11
12月24日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第15回編集会議	8
1月20日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第16回編集会議	10
1月29日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第9回全体会議	10
2月12日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第17回編集会議	8
2月25日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第10回全体会議	12
2月25日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第18回編集会議	11
3月10日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (3拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第19回編集会議	9
3月26日	東京大学柏キャンパス物性研究所 TV会議 (4拠点)	CMSI	【MateriApps】運用支援第11回全体会議	13

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 26 年度において、選出された委員の人数は、のべ 141 名、実質 67 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 27 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 44 機関(31 大学、4 独立行政法人、9 企業)が関連しており、合計人数はのべ 298 人、実質 202 人となる。

平成 26 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。

計算科学研究機構 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。

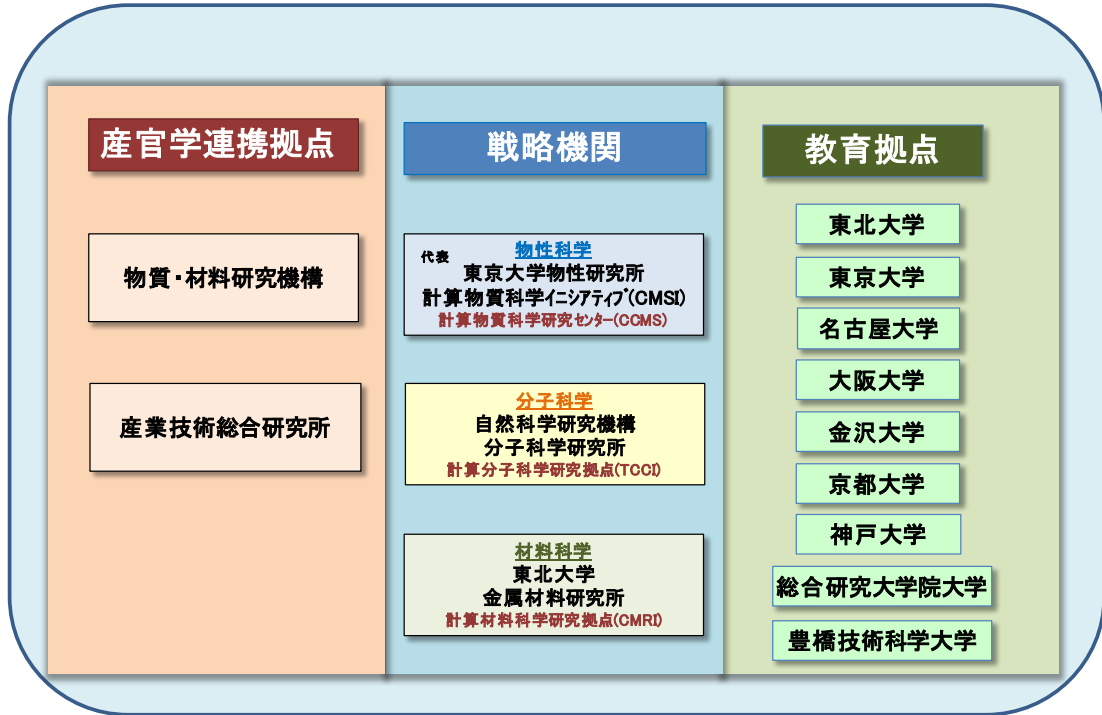


図 2.4-1 CMSI の運営に参加する機関

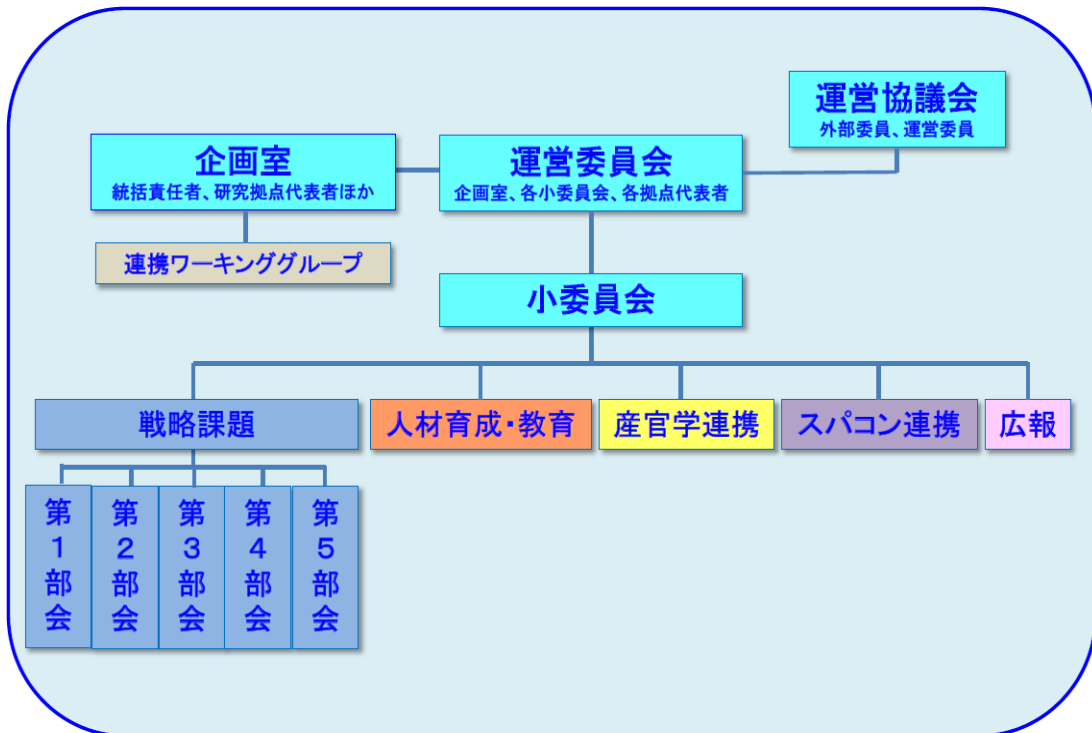


図 2.4-2 CMSI 運営体制

表 2.4-1 CCMS 運営委員会メンバー(平成 26 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
委員	尾崎 泰助	東京大学物性研究所
広報	藤堂 眞治	東京大学物性研究所・大学院理学系研究科
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	東京大学物性研究所
委員	吉田 博	大阪大学大学院基礎工学研究科

iii) 計算分子科学研究拠点(TCCI)

平成 26 年度の推進体制を図 2.4-4 に示す。平成 24 年 10 月に、「元素戦略対応部門」と「ソフトライブラリ部門」を創設してから、基本的に変更はない。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 2.4-5 に示す。プロジェクト開始から3年間が経過したため、CMSI 研究員の配置については、平成 26 年度より再配置を行った。

図 2.4-4 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。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(表 2.4-2)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。尚、平成 26 年度より、社会連携委員会の責任者を太田先生に、また、新たに松本先生に運営委員をお願いした。

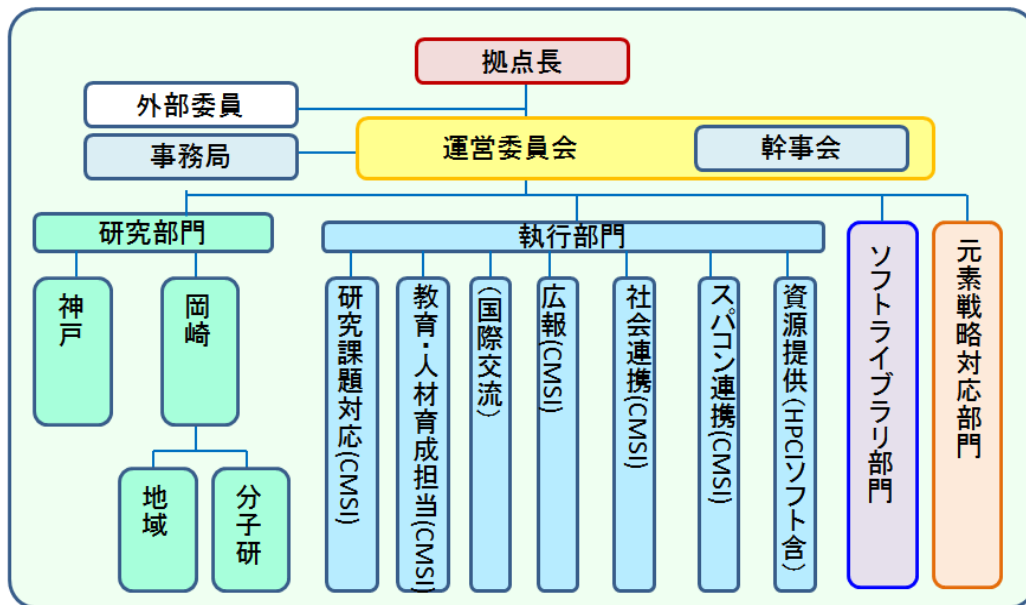


図 2.4-4 計算分子科学研究拠点(TCCI)推進体制

		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) 河野(1)	信定(1)	岡崎(2) 北浦(1)	田中(1) 長岡(1)
拠点関係 分子研(1) 東大院総合文化(1) 神戸大院シ情報(1)* 名大院工(1)*	特別支援課題			志賀(1) 北尾(1) 中井(1) 奥村(1)	立川(1)

* :教員

()内は員数を示す。

図 2.4-5 TCCI における CMSI 研究員・教員の配置

表 2.4-2 TCCI 運営委員会メンバー(平成 26 年度)

氏名	所属	特記事項
高塚 和夫	東京大学 大学院総合文化研究科/ 自然科学研究機構 分子科学研究所	委員長
江原 正博	自然科学研究機構 分子科学研究所	
岡崎 進	名古屋大学 大学院工学研究科/ 自然科学研究機構 分子科学研究所	
奥村 久士	自然科学研究機構 分子科学研究所	
斉藤 真司	自然科学研究機構 分子科学研究所	
榊 茂好	京都大学 福井謙一記念研究センター	
佐藤 啓文	京都大学 大学院工学研究科	
関野 秀男	豊橋技術科学大学 知識・情報工学系	
田中 秀樹	岡山大学 理学部化学科	
天能 精一郎	神戸大学 大学院システム情報学研究科	
長岡 正隆	名古屋大学 大学院情報科学研究科	
信定 克幸	自然科学研究機構 分子科学研究所	
松本 正和	岡山大学 理学部化学科	H26 年度就任
柳井 毅	自然科学研究機構 分子科学研究所	
山下 晃一	東京大学 大学院工学系研究科	

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 年度以降、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、他のコミュニティとより緊密な連携を図っている。平成 26 年度は計 14 名の運営委員体制で諸活動の計画立案・運営に臨んだ。下の図 2.4-6 に組織図と表 2.4-3 に運営委員会構成メンバー名を示す。平成 25 年度までとは異なり、副拠点長職を廃した。これは、当初、拠点長の毛利が北大所属であったため、東北大・金研所属の運営委員を副拠点長に任じていたものであるが、毛利が平成 25 年 4 月に東北大・金研へ異動したことにより、平成 26 年度から副拠点長職を廃することにした。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が、平成 26 年度より横浜国大を新たなサブ拠点とした。

計算材料科学の研究の支援のために、平成 25 年度までは拠点研究員 2 名の枠があったが、横浜国大がサブ拠点となったため、この枠が 3 名に増えた。重点課題の拠点研究員は関西拠点に配置しているが、金研の拠点研究員と横浜国大の拠点研究員を新たに 10 月 1 日より採用した。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・人材育成担当の特任准教授を平成 25 年 1 月より雇用(寺田弥生氏)、CMRI に常駐して拠点運営や諸々のイベントの企画・立案と実行に携わっている。

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、国際会議参加の支援、計算センターの利用料金の支援、院生や若手研究員の海外派遣等に関してはメンバーの間で公募を行い、運営委員の間でメール審議を行って採択決定を行っている。その他の事業に関しても、運営委員の間でメールを中心に審議を行い、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。又、拠点研究員の採用にあたっては、国際公募を行い、CMRI、CMSIの双方の人事委員会の承認を得ることを旨としている。

又、平成 25 年度からは、CMRI が中心となる第 5 部会が発足し、重点課題遂行者の補填、小規模研究会の多数の開催等を通じて、重点課題、特別支援課題の実施体制を強化した。

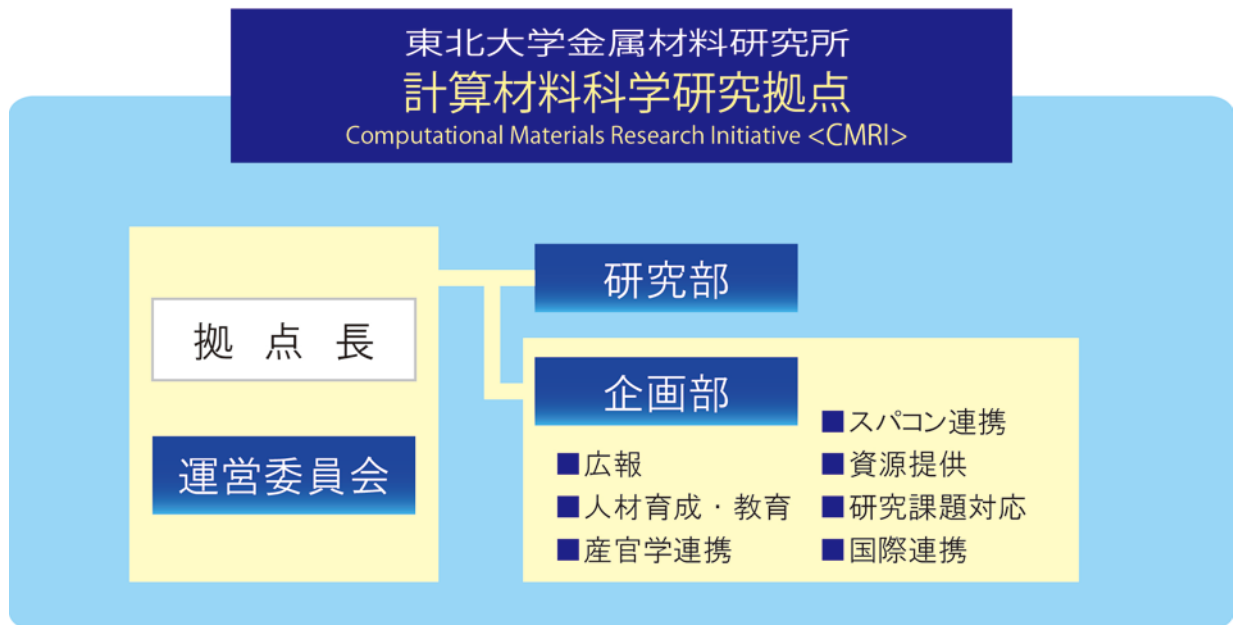


図 2.4-6 CMRI 運営体制

表 2.4-3 CMRI 運営委員会メンバー(平成 26 年度)

氏名	所属	特記事項
毛利 哲夫	東北大学 金属材料研究所	拠点長
高梨 弘毅	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	
新家 光雄	東北大学 金属材料研究所	
丸山 正彦	東北大学 金属材料研究所	金研事務部長
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 大学院総合文化研究科	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
潮田 浩作	新日鐵住金株式会社	
久保 百司	東北大学 大学院工学研究科	

別表 1 平成 26 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 東北大・金研	常行真司(53) 川島直輝(50) 高塚和夫(64) 毛利哲夫(62)
【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 東北大・金研	瀧川仁(59) 大峯巖(68) 高梨弘毅(56) 寺倉清之(72) 平尾公彦(69) 潮田浩作(61) 曾根純一(63) 真壁芳樹(52) 常行真司(53) 川島直輝(50) 高塚和夫(64) 毛利哲夫(62)

別表 1 平成 26 年度に於ける実施体制ー2

委員会	担当機関等	委員
<p>【運営委員会】</p> <p>・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 東大・物性研 名大院・工／分子研 自然科学研究機構・分子研 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 東芝研究開発センター 物材機構・理論計算科学ユ 東大院・理／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 東大・物性研</p>	<p>◎常行真司(53) 今田正俊(59) 川島直輝(50) 天能精一郎(51) 押山淳(61) 赤井久純(66) 岡崎進(59) 江原正博(48) 毛利哲夫(62) 杉野修(52) 浅井美博(54) 山下晃一(62) 田中秀樹(59) 榊茂好(67) 伊藤聡(58) 石田邦夫(50) 大野隆央(61) 藤堂眞治(46) 川勝年洋(53) 斎藤峯雄(57) 長岡正隆(56) 田中功(54) 信定克幸(46) 関野秀男(63) 高塚和夫(64) 大野かおる(59) 香山正憲(56) 吉田博(63) 尾崎泰助(44)</p>

注 1. ◎:議長

別表 1 平成 26 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】 ・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>2.2.1.当該年度における研究成果</p> <p>2.2.1.1 研究開発課題 (2) 研究課題の評価</p> <p>2.2.1.2 計算科学推進体制構築 全般</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 東大・物性研 名大院・工／分子研 自然科学研究機構・分子研 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 東大院・総合文化／分子研 東大院・理／物性研 横浜国大院・工 産総研・ユビキタスエネ 東大・物性研	◎常行真司(53) 今田正俊(59) 川島直輝(50) 天能精一郎(51) 押山淳(61) 赤井久純(66) 岡崎進(59) 江原正博(48) 毛利哲夫(62) 杉野修(52) 浅井美博(54) 山下晃一(62) 田中秀樹(59) 榊茂好(67) 高塚和夫(64) 藤堂眞治(46) 大野かおる(59) 香山正憲(56) 尾崎泰助(44)

注 1. ◎:議長

別表 1 平成 26 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】</p> <p>2.2.2 本格実施における実施計画</p> <p>2.2.2.1 研究開発課題</p> <p>[第 1 部会]</p> <p>(1) 新量子相・新物質の基礎科学</p> <p>[第 2 部会]</p> <p>(2) 次世代先端デバイス科学</p> <p>[第 3 部会]</p> <p>(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 東大・物性研 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 阪大院・基礎工 名大院・理 名大院・工 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 東北大・金研 阪大院・基礎工</p>	<p>◎天能精一郎(51) ◎今田正俊(59) 川島直輝(50) 遠山貴巳(51) 岡部豊(64) 宮下精二(60) 高塚和夫(64) 柳井毅(40) 斉藤真司(48) 佐藤啓文(45) 大野かおる(59)</p> <p>◎押山淳(61) 斎藤峯雄(57) 渡邊聡(53) 宮崎剛(48) 赤井久純(66) 常行真司(53) 中野雅由(50) 信定克幸(46) 尾形修司(50) 田中功(54)</p> <p>◎岡崎進(59) 松林伸幸(47) 岡本祐幸(56) 篠田渉(42) 中井浩巳(49) 江原正博(48) 吉澤一成(56) 北浦和夫(66) 森川良忠(48) 野口博司(42) 毛利哲夫(62) 尾方成信(46)</p>

注 1. ◎:小委員会／部会 代表者 注 2. ()内は H26 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 26 年度に於ける実施体制ー5

委員会、研究項目	担当機関等	委員
<p>[第 4 部会] (4) エネルギー変換</p> <p>[第 5 部会] (4) マルチスケール材料科学</p>	<p>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 産総研・ユビキタスエネ</p> <p>産総研・ユビキタスエネ 横浜国大・工 東北大・金研 阪大院・基礎工 新日鐵住金 北大院・工 東北大・金研 東大院・理／東大・物性研 東大・総合文化／分子研</p>	<p>◎杉野修(52) ◎山下晃一(62) 浅井美博(54) 大野隆央(61) 吉田博(63) 田中秀樹(59) 長岡正隆(56) 森田明弘(50) 長谷川淳也(44) 香山正憲(56)</p> <p>香山正憲(56) 大野かおる(59) 毛利哲夫(62) 尾方成信(46) 澤田英明(51) 大野宗一(37) 西松毅(41) 常行真司(53) 高塚和夫(64)</p>
<p>【スパコン連携小委員会】 2.2.1.2 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</p>	<p>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</p>	<p>◎川島直輝(50) 齊藤真司(48) 毛利哲夫(62) 中島研吾(52)</p>
<p>【人材育成・教育小委員会】 2.2.1.2 計算科学技術推進体制構築 (2) 人材育成</p>	<p>東大・物性研 東大院・工 名大院・情報科学 豊橋技科大院・知識情報工 東北大・金研 理化学研究所・計算科学 東芝研究開発センター 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</p>	<p>◎赤井久純(66) 今田正俊(59) 長岡正隆(56) 関野秀男(63) 毛利哲夫(62) 伊藤聡(58) 石田邦夫(50) 川勝年洋(53) 斎藤峯雄(57) 信定克幸(46) 田中功(54) 天能精一郎(51) 吉田博(63)</p>

別表 1 平成 26 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
【産官学連携小委員会】 2.2.1.2 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 旭化成	◎浅井美博(54) 大野隆央(61) 金田千穂子(57) 潮田浩作(61) 杉野修(52) 青柳岳司(52)
【広報小委員会】 2.2.1.2 計算科学技術推進体制構築 (4) 研究成果の普及	東大院・理/物性研 東大・物性研 岡山大院・自然科学 阪大・産業科学研究所 自然科学研究機構・分子研 京都工芸繊維大学	◎藤堂眞治(46) 野口博司(42) 松本正和(45) 小口多美夫(59) 柳井毅(40) 高木知弘(41)

注 1. ◎:小委員会/部会 代表者

別表 1 平成 26 年度に於ける実施体制ー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時空場での 電子機能予測とその実現	東大院・工 東大院・工 筑波大・計算科学研究セ 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 東大院・工 東大院・工 筑波大院・計算科学研究セ (阪大院・工) 東大・物性研 東大院・工 東大院・工 筑波大院・計算科学研究セ (阪大院・工) 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 自然科学研究機構・分子研 筑波大院・システム情報工	○押山淳(61) 岩田潤一(41) 重田育照(42) Boero Mauro(47) 宮崎剛(48) Bowler David(42) 渡邊聡(53) Md.Moshiour Rahaman(37) 桂ゆかり(34) 小野倫也(39) 赤井久純(66) 内田和之(37) 酒井佑規(28) Kirkham Christopher (26) 信定克幸(46) 矢花一浩(54) 渡辺一之(60) 野田真史(34) 朴泰祐(53)
<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 豊田中央研究所 東大・物性研 デンソー	○尾形修司(50) 大庭伸子(45) 河野貴久(36) 田中宏一(34)
iii) スピントロニクス/マルチフェロイックスの応用へ 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 東大・物性研(北陸先端大 院・シミュレーション科学)	○斎藤峯雄(57) 小田竜樹(47) 小口多美夫(58) 尾崎泰助(44)
iv) 新材料探索	東大院・理/物性研 東大院・情報理工(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 東大院・理 産総研・ナノシステム	○常行真司(53) 吉本芳英(41) 田中功(54) 石橋章司(50) 前園涼(42) 土田英二(43) 合田義弘(39) 三宅隆(43)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H26 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 26 年度に於ける実施体制ー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イ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(立命館大) 名大院・工 名大院・工 九州工大院・工 神戸大院・システム情報 名大院・工 名大院・工	○岡崎進(59) 北浦和夫(66) 北尾彰朗(48) 長尾秀美(50) 泰岡顕治(46) 安藤嘉倫(36) 藤本和士(29) 吉井範行(43) 山田篤志(39) 入佐正幸(51) Pavel V.Avrarov(54) 篠田渉(42) 水口朋子(37)
<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(56) 奥村久士(38) 志賀基之(42) 高橋英明(45)
iii) ポリモルフから生起する分子集団機能	阪大院・基礎工 名大院・工 東レ・先端材料研究所 名大院・工 東大・物性研 東北大院・理 産総研・ナノシステム 東大・分生研 東大院・総合文化	○松林伸幸(46) 篠田渉(42) 茂本勇(41) 吉井範行(43) 野口博司(42) 川勝年洋(53) 森下徹也(41) 北尾彰朗(48) 西原泰孝(37)
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・トランスフォーメティブ生命 北大院・理 自然科学研究機構・分子研	○中井浩巳(49) 吉澤一成(56) 武次徹也(50) IRLE Stephan(48) 小林正人(34) 西村好史(28)
v) 機能性分子設計ー光機能分子と 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 慶大・理工 大阪府大院・理	○江原正博(48) 中野雅由(51) 太田浩二(64) 藪下聡(60) 小関史朗(58)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H26 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 26 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) エネルギー変換の界面科学	東大・物性研 名工大院・工 東北大・AIMR 東大院・工 阪大院・工 阪大院・工 東大・物性研 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 東大院・工 物材機構 東大・物性研	○杉野修(52) 尾形修司(50) 赤木和人(44) 牛山浩(45) 森川良忠(48) 木崎栄年(35) 植村渉(28) 大谷実(42) 山下晃一(62) 大脇創(43) 長岡正隆(56) 麻田俊雄(48) 安藤康伸(30) 館山佳尚(44) 野口良史(35)
ii) 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	岡山大院・自然 岡山大院・自然 金沢大・理工 岡山大院・自然 岡山大院・自然	○田中秀樹(59) 甲賀研一郎(45) 三浦伸一(48) 矢ヶ崎琢磨(36) 松本正和(45)
<特別支援課題> iii) 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 東大・総合文化 東大院・工 横浜市立大院・生命ナノ 名大・エコトピア科学研究所	○山下晃一(62) 杉野修(52) 宮本良之(52) 館山佳尚(44) 長谷川淳也(45) 河津励(40) 藤井幹也(34) 立川仁典(47) 安田耕二(45)
iv) 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(40) 平田文男(67) 森田明弘(50)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H26 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 26 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
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(54) 中村恒夫(43) 吉田博(63) 佐藤和則(43)
(第5部会) マルチスケール材料科学 <重点課題> i) 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 <特別支援課題> ii) 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 iii) 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 iv) 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	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 産総研・ユビキタスエネ 東大・物性研(北陸先端大院・シミュレーション科学) 阪大院・基礎工 原研・システム計算科学センター 原研・システム計算科学センター 北大院・工 京都工芸繊維大・工芸科学 東大院・工 東北大・金研 ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所 アイオワ州立大 横浜国大院・工 横浜国大院・工 物材機構・元素戦略材料セ 東大・物性研 横浜国立大院・工	○香山正憲(56) 田中慎悟(43) 尾方成信(46) 澤田英明(50) 川上和人(57) Sharma Vikas(33) 尾崎泰助(44) 譯田真人(33) 山口正剛(48) 板倉充洋(45) ○大野宗一(37) 高木知宏(41) 澁田靖(39) ○西松毅(42) 森分博紀(41) Scott Beckmen(39) 大野かおる(59) 小野頌太(29) 佐原亮二(41) 野口良史(35) 桑原理一(28)

別表 1 平成 26 年度に於ける実施体制－12

研究項目	担当機関等	研究担当者
＜支援課題＞		
i) フラストレート磁性体の計算科学的研究— スピン空間に異方性のない系で のスピンフロップ現象—	兵庫県立大・物理	○中野博生(45)
ii) せん断流下の脂質膜系の構造形成	東大・物性研	○芝隼人(33)
iii) Screened KKR 法による永久磁石材料 の第一原理電子状態計算	東大・物性研	○土居抄太郎(33)
iv) フラストレート磁性体における トポロジカル励起の秩序化	東大・物性研	○大久保毅(35)
v) ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索— 大規模並列計算プログラムの効率的な開発—	自然科学研究機構・分子研	○石村和也(36)
vi) HPC を用いた次世代電池の反応機構の解明	(株)日産アーク (株)日産アーク (株)日産アーク	○今井英人(46) 茂木昌都(49) 久保渕啓(40)
vii) 多重気泡生成過程における 気泡間相互作用の数値的解析	東大・物性研	○渡辺宙志(36)
viii) 物質デザインのための確率論的手法に 基づく多成分系量子化学の高度化	横浜市立大院・生命ナノ	○立川仁典(47)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H26 年度中の異動前の所属

別表 1 平成 26 年度に於ける実施体制－13

研究項目	担当機関等	研究担当者
<アプリ高度化支援に関する研究課題>	東大院・理／物性研 東大・物性研 東大院・工 東大院・工 東大院・工 東大院・理 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 名大院・工 名大院・工 東大・物性研 東大・物性研 東大・物性研 東大・物性研 東大・物性研 東大・物性研 東大・物性研 東大院・総合文化 東大院・総合文化 東大院・総合文化 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 自然科学研究機構・分子研 自然科学研究機構・分子研 産総研・ナノシステム 横浜国立大院・工 東北大・金研	○藤堂眞治(46) 尾崎泰助(44) 岩田潤一(41) 山地洋平(33) 大越孝洋(29) 諏訪秀磨(30) 北浦和夫(66) 下司雅章(42) 寺田弥生(44) 吉井範行(43) 安藤嘉倫(36) 五十嵐亮(33) 大久保毅(35) 河野貴久(36) 坂下達哉(31) 吉澤香奈子(38) Thung Vinh Trung Duy(34) Md.Moshiour Rahaman(37) 河津励(40) 米原丈博(38) 西原泰孝(36) 石村和也(36) 西澤宏晃(31) 野田真史(34) 西村好史(28) 岡安竜馬ダヴィット(29) Sergio Ruiz Barragan(38) 小西優祐(33) SWASTIBRATA BHATTACHARYA(33) Sankar Kumar Deb Nath(43)

注 1. ○課題代表者 注 2. ()内は H26 年度中の異動前の所属

研究開発課題の年次計画

研究開発課題及び 責任者名	H27 年度
第1部会 「新量子 相・新物 質の基礎 科学」 (今田・天能)	<p>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</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 多自由度クラスター動的平均場法や多変数変分モンテカルロ法などの手法を基礎にしたダイナミックス計算法を開発する。これをもとにポンププローブ分光の理論構築を行ない、太陽電池の基礎模型に対する電子相関効果の解明などに応用する。強相関系の高速緩和、光誘起転移などの非平衡現象解明と高機能素子探索。 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。 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。 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>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> <ol style="list-style-type: none"> 1. 前年度までの研究項目である、炭素材料分子、代替合金、メタル結合の励起状態、光システム II の研究を完了する。 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。 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。

次ページに続く

最終成果目標

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。

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。

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。

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。

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。

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。

低エネルギーソルバーの整備（京への実装応用）

500-1000 自由度以上のサイズの強相関フェルミ格子

10 万サイト以上の量子スピン格子

100 サイトのダイナミクス

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。

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。

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。

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、シャペロニン、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

研究開発課題及び 責任者名		H27 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 るナノ構造時空場 での電子機能予測 とその実現	<p>*RS-CPMD と RSDFT コードを一体化し、また交換相関エネルギー汎関数の改良を行い、数千～一万原子規模のナノ構造・新材料に対する、第一原理・静的・動的シミュレーションを行う。</p> <p>*オーダーN手法の CONQUESTコードにより、一万～十万原子規模のナノ界面の原子構造と電子状態の相関を明らかにする。</p> <p>*RSPACE 等を活用し、パワーデバイスでの界面欠陥と電子物性の関係を解明する。</p> <p>*GCEED、ARTED コードを高度化し、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手法による、実在系ナノ構造体光誘起ダイナミクス計算を行う。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>
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>感染初期過程に関してはモデル系を用いてウイルスとレセプターの間に働く引力の起源について明らかにする。一方で、B型肝炎ウイルスカプシドの薬剤透過に関し、名古屋市大と共同で自由エネルギープロフィールの計算を開始する。また、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等を引き続き行う。</p> <p>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-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。</p>

次ページに続く

最終成果目標

* マルチコア超並列アーキテクチャに最適な実空間手法により、密度汎関数理論および時間依存密度汎関数理論さらには電磁場との結合を含んだ、原子構造、原子反応、電子物性に関する静的および動的な第一原理シミュレーションを、ナノ構造体・新材料に対して高効率で行うアプリケーション群を開発する。

* そのアプリケーションの「京」上での実行により、Si/Ge 系ナノ構造、パワーデバイス系 SiC、GaN、新伝導体2次元材料(グラフェン、シリセン他)、光デバイス材料、におけるナノ物性科学を推進し、新たな物性機能の探索を行う。

* ナノ構造体の電子機能発現予測に関するナノ界面科学の確立

* 基礎科学の知見に立脚した新奇デバイス材料の提案

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、計算科学に基づいたウイルス分子科学の端緒を開く。このため、小児マヒウイルス、B 型肝炎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する。

1. 小児マヒ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、圧力、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、分子認識の特異性について定量的に実証する。

3. B 型肝炎ウイルスの抗ウイルス剤がカプシドを透過する分子機構を解明し、薬剤送達の基礎を確立することにより新規抗ウイルス剤の開発に貢献する。

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。

研究開発課題及び 責任者名		H27 年度
第4部会 「エネルギー変換」 (杉野・山下)	重点課題5: エネルギー変換の 科学	<p>1. stat-CPMD, STATE, OPEN-MX に電位差印加や自由エネルギー計算の新しい手法を適用して、二次電池や燃料電池の電極反応過程のシミュレーションを高精度かつ高効率にする。</p> <p>2. 既存の電池に対する計算に加え、リチウム空気電池などの次世代型二次電池、白金代替型のジルコニア燃料電池電極に対する計算についても本格的な計算を行う。</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>
	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>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. 種々の水溶液環境下において、融解の MD シミュレーションを行ない、共存する水溶液中の水の性質から、融解の速度と機構を解明する。</p> <p>3. ポリマーをハイドレート生成の阻害剤として選び、阻害剤存在下でのメタンハイドレート融解の MD シミュレーションを行なう。ポリマーの特性に応じた、ハイドレート生成の阻害機構を解明して、ハイドレートの融解に関する知見を得る。</p> <p>4.これまでの大規模計算の結果について包括的に解析を実行する一方、これらを基礎にした研究成果としての取りまとめを行う。</p>
第5部会 「マルチスケール材料科学」 (香山)	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>第一に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中のFe/析出相界面の水素原子捕獲に関する大規模第一原理計算をOpenMXコードを用いて進める。同時にQMASコードを用いてFe/TiC界面近傍の応力やエネルギー分布の精密解析を行う。第二に、前年度に引き続き、鉄鋼材料中の転位芯構造のOpenMXによる大規模第一原理計算を推進する。合金元素・添加元素との相互作用を明らかにするとともに、キンク構造の大規模計算を行い、転位挙動についての解明を図る。第三に、第一原理計算とPhase Field法の連携について、理論的・計算技術的な検討を進める。</p>

次ページに続く

最終成果目標

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の下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。

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。

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。
2. ゲスト分子以外の物質を含んだ巨大系の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。

高性能の金属系構造材料の開発のために、微細組織の構造や機能を高精度に解明し、さらに設計するための手法を開発する。鉄鋼材料を対象に、まず、析出相/母相界面、転位、粒界など、微細組織の構成要素の大規模第一原理計算を行い、そこでの原子間結合の様子や合金成分・添加元素との相互作用を電子挙動に基づいて高精度に明らかにする。さらに、こうした第一原理計算の結果をPhase Field法に繋げる手法を確立し、構造材料のためのマルチスケール計算技術を開発する。

具体的には、まず、鉄鋼材料中の典型的な析出物として、TiC 相と母相 Fe との異相界面の高精度第一原理計算をオーダーN法プログラム(Open MXコード)で行う。格子 misfit のため、界面エネルギーと歪エネルギーが重要で、析出粒子サイズが小さい場合は界面エネルギーの低い整合界面が、サイズが大きくなると歪エネルギーを減らすため部分整合界面に遷移する。実験で観察される方位関係の TiC(001)/Fe(001)界面について、整合界面と部分整合界面の大規模第一原理計算を「京」で実行し、歪エネルギーの見積もりを加えて、遷移の臨界粒子サイズを見積もる。また、整合界面、部分整合界面での水素などの挙動を解明し、バルクの水素脆化を防ぐための水素捕獲能について検討する。また、Fe 中の転位芯の安定構造と移動障壁、添加元素との相互作用の大規模第一原理計算もを行い、転位挙動を明らかにする。なお、異相界面、転位、粒界について、QMASコード(平面波基底第一原理計算)による局所エネルギー、局所応力の精密解析もを行い、異相界面、転位、粒界での原子・電子挙動の支配因子を検討する。そして、こうした第一原理計算の結果を Phase Field 法に繋げる手法を確立し、構造材料のためのマルチスケール計算技術を検討する。

「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	H27 年度	最終成果目標
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) 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。
人材育成	<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を継続するとともに、新たなコンテンツ配信を開始する。 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)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
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"> 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。
産官学連携	<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	H27 年度	最終成果目標
研究成果の普及計画	<ul style="list-style-type: none"> ・ 広報誌(ムック本)の発行 ・ 「MateriApps」の更新・充実を通じたソフトウェア開発・公開・普及 ・ ホームページにおける情報発信強化 ・ 見える化シンポの企画実行 ・ 国内外の学会・展示会における CMSI の成果の広報活動・MateriApps 普及活動 	<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>
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"> ・ 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。)
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"> ・ 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。
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。 ・ 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"> ・ 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 活動で培った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。 ・ 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とそれぞれの戦略課題を持ち、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

「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)

	27 年度
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	36
業務実施費	
消耗品費	1
旅費	10
その他	1.65
小計	48.65
(2)次世代デバイス科学	
人件費	
業務担当	40
業務実施費	
消耗品費	1
旅費	4
その他	0.49
小計	45.49
(3)分子機能と物質変換	
人件費	
業務担当	36
業務実施費	
消耗品費	1
旅費	4
その他	1.58
小計	42.58
(4)エネルギー変換	
人件費	
業務担当	27
業務実施費	
消耗品費	1
旅費	3
その他	7.39
小計	38.39
(5)マルチスケール材料科学	
人件費	
業務担当	12
業務実施費	
消耗品費	1
旅費	1
その他	0.90
小計	14.90

	27年度
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	6.3
小計	6.3
(2) 人材育成 人件費	
業務担当	38
補助者	0.9
業務実施費	
消耗品	1
旅費	4
会議費	1.07
小計	44.97
(3) 人的ネットワーク(産官学連携)	
人件費	
業務担当	6
業務実施費	
消耗品費	1
旅費	1
会議開催費	1.07
小計	9.07
(4) 研究成果の普及 業務実施費	
印刷製本費	2
雑役務費	6.51
小計	8.51
(5) 分野を超えた取組 業務実施費	
旅費	1
その他	1
小計	2
(6) 戦略分野の研究者を支える研究支援協力 人件費	
業務担当	24
補助者	3
業務実施費	
消耗品費	0.5
旅費	2.5
雑役務費	2
その他	0.47
小計	32.47

	27年度
(7)物性研	
人件費	
業務担当	12.2
業務実施費	
消耗品費	1
旅費	2
その他	6.6
小計	21.8
(8)分子研	
人件費	
業務担当	23
補助者	4
業務実施費	
消耗品費	1
旅費	3
会議開催費	1
その他	1.38
小計	33.38
(9)金研	
人件費	
業務担当	6
補助者	2
業務実施費	
消耗品費	2
旅費	3
会議開催費	2
その他	0.62
小計	15.62
4 実施体制	
設備備品費	0.5
人件費	
業務担当	12
補助者	3
業務実施費	
消耗品費	3
旅費	7
会議開催費	3
その他	5.28
小計	33.78
1～4合計(直接経費)	397.91

【補足】

- 成果報告書の添付資料については、下記リンク先を参照下さい。

添付資料 1 平成 26 年度イベント報告書(報告書 1～60)

<http://www.cms-initiative.jp/ja/contact/cmsi-misc/seika2015>

- 成果報告書中に掲載したリンク先の一覧です。

2.2.1.1 研究開発課題(成果) :

成果登録データベース

<https://www.hpci-office.jp/hpcidatabase/publications/search.html>

第 5 回 CMSI 研究会論文集

<http://www.cms-initiative.jp/ja/events/cmsi-society/20141208-cmsi>

2.2.1.2(4) 研究成果の普及 :

TORRENT NO.10 (日本語版、英語版)

<http://torrent.cms-initiative.jp/backnumber/torrent10>

TORRENT NO.11 (日本語版、英語版)

<http://torrent.cms-initiative.jp/>

本報告書は、平成 26 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。