

5-6 最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用

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

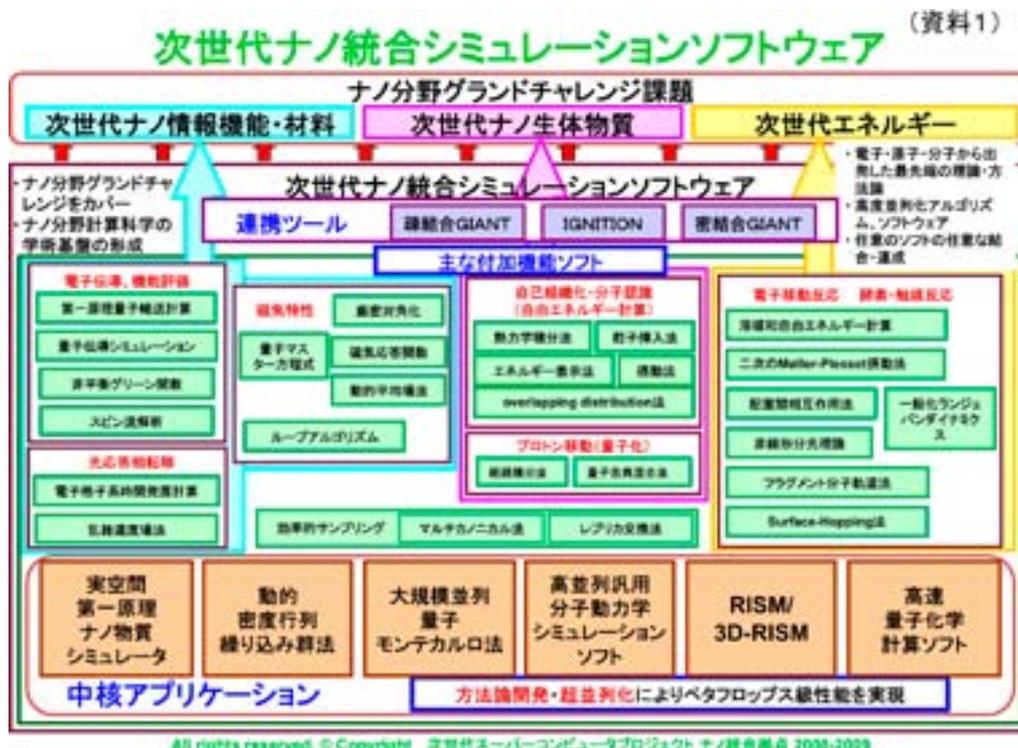
(文部科学省)

分子科学研究所は2006年4月より表記の「最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおける「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」拠点としてナノ分野の「グランドチャレンジアプリケーション研究」を推進している。我々は「次世代スパコン」プロジェクトの一環として、わが国の近未来の学術、産業、医療の発展に決定的なブレークスルーをもたらす可能性をもつ三つのグランドチャレンジ課題を設定し、その解決を目指して、理論・方法論およびプログラムの開発を進めてきた。

- (1) 次世代ナノ情報機能・材料
- (2) 次世代ナノ生体物質
- (3) 次世代エネルギー

これらのグランドチャレンジ課題はいずれも従来の物理・化学の理論・方法論の「枠組み」あるいは「守備範囲」をはるかに超えた問題を含んでおり、ただ、単に計算機の性能が飛躍的に向上すれば解決するという種類の問題ではなく、物理・化学における新しい理論・方法論の創出を要求している。さらに、構築が予定されている「次世代マシン」は従来の常識をはるかに超えるノード数からなる超パラレルプロセッサであり、プログラムの高並列化を始めとする「計算機科学」上のイノベーションをも要求している。

上記の三つのグランドチャレンジ課題を解決するために「ナノ統合拠点」は必要な理論・方法論およびプログラムの開発を進めてきた。(資料1)



その中で、「ハードナノ」および「ソフトナノ」分野における基本的な理論・方法論に関わる6本のアプリケーションを「中核アプリ」として設定し、その「高度化」を行うとともに、それらを統合して実行するためのツール群を含

む「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」の開発を進めてきた。

2008年度はプロジェクトの中間年度にあたり、文部科学省に設置された「外部評価委員会(委員長:魚崎浩平先生)」による中間評価を受けるとともに、評価委員会で指摘されたいくつかの課題を解決する取り組みを行ってきた。

中間評価の結果とその後の取り組み

外部評価委員会によるヒアリングは2008年2月と5月の2回に渡って行なわれ、グランドチャレンジ課題の設定と、中核アプリの高度化に関する取り組みなどプロジェクトの骨格部分に関しては、下記のような高い評価をいただいた。

「本プロジェクトにおいては、次世代スパコンにおける計算機能力の飛躍的向上を最大限活用し、計算科学を質的に発展させ、ナノサイエンスのルネッサンスを先導する意義深いプロジェクトである。ナノサイエンスのブレークスルーを通して我が国の国際競争力を強化する正しく時代に適切なものであり、オールジャパン体制で取り組むべき重要な課題である。このプロジェクトを契機として、実験と理論に次ぐ第三の研究の方法論としてのシミュレーションをはじめとする計算科学をしっかりと確立して行くことが強く期待される。研究開発計画は概ね適切なものであり、また順調に進捗している。今後とも、分子科学研究所を拠点とした推進体制の下、実験研究者や産業との連携を強化するという観点から委員会体制等の一部改善を図りつつ、また若手育成に注力しながらより一層強力に推進していくことが妥当である。」

一方、プロジェクトの広報活動(「シンボリック」な課題設定など)、全日本的(All Japan)な取り組みの強化について課題を指摘された。

「外部評価」報告およびその後の「ナノ統合拠点」運営委員会での議論を踏まえて、これまでの研究開発を実際の成果に結実させるために拠点に課せられた要請は次の3点にまとめられる。ひとつは「中核アプリ」を中心に主要な「付加機能ソフト」およびそれらの「連携技術」を含めて我々がこれまで開発してきたプログラムを実際に「次世代スパコン」で性能を引き出すところまで「高度化」を進めること。第二の要請はこれまで開発してきた方法論およびプログラムが実験研究や企業研究の現場で有効であることを実証すること。また、この取り組みを通じて、実験家、企業研究者を含むさらに、全日本的な開発体制を構築する。第三の要請はこれまで開発したプログラムを「ナノ統合シミュレーションソフトウェア」に結実させ、できるだけ広汎に利用していただくための「枠組み」を整備していくことである。

まず、プログラムの超高並列化については、現在、「中核アプリ高度化ワーキンググループ(主査:岡崎教授)」を中心に作業を進めており、いくつかの中核アプリに関して、「ペタフロップス」級の性能が、実際に、期待できる状況になっている。この作業過程で重要な教訓が生まれている。(資料2)それはこのような可能性が物理・化学分野における計算科学者と情報科学分野の研究者(計算機科学者)との共同研究によって作り出されたことである。その具体例のひとつは、実空間密度汎関数(HP-RSDFT)であり、他のひとつは3D-RISMのプログラムである。いずれも筑波大学の計算センター(センター長:佐藤教授)との共同で進めているが、特に、3D-RISMについてはこのプログラムで多用する3D-FFTの並列化が難しいことから、プロジェクト当初、理研開発チームから「高並列化は不可能」とレッテルを貼られたプログラムであり、このプログラムの高並列化の目処が出たことは「計算科学者」と「計算機科学者」との連携が極めて有効であることを示している。この教訓を活かして、並列化が困難といわれてきたもうひとつの中核アプリである「分子軌道法」関連プログラムの高並列化(巨大行列の対角化を含む)が期待されている。

中核アプリ高度化

(資料2)

中核アプリ名	責任者	開発内容
真空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山	(1) MPIによる、実空間セル並列とノード並列の多層並列の有効性の検討と、対応プログラム開発。 (2) Open MPによるノード内スレッド間並列の有効性検討。
動的密度緩和込み群法	遠山	(1)線形応答感受率プログラムチューニング (2)その他・最適化
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂	アプリケーションの逐次処理部、ループ認識処理部の並列化効率の改善
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトmodylas	岡崎	(1)単体性演算部のチューニング ・条件分岐の除去、・配列データの並び替え、・演算量の削減 (2)高並列化のチューニング ・通信量の削減、・3次元隣接通信の採用
RISM/3D-RISM	平田	(1)3次元FFTの2次元分割対応3D-RISMコード開発 (実装位置グループとの共同開発) (2)細部のチューニング(メモリ分散、IOの見直しなど) (3)IT2Kによる大規模スパコンでの運用テスト
高速量子化学計算ソフト	永瀬 北清	(1)データ転送量の削減 ・電子密度行列の転送量を削減するための改良 ・T2Kによる性能測定 (2)細部のチューニング
中核アプリの大規模並列化支援	佐藤	中核アプリ6本に対し、並列性および性能の詳細な解析を行い、必要に応じてモデルや数値計算アルゴリズムの改善などの支援。具体的には既存の大規模システムでプログラムを実行し、定量的な評価とアルゴリズムの検討・改善の支援を進める。なお、具体的なプログラムへの変更については担当のメーカと打ち合わせをしつつ進める。また、同時にマルチコアプロセッサの利用等の次世代スパコン利用に必要な並列化の方法についても検討する。

All rights reserved. © Copyright 次世代開発環境(IT2K)コアプロジェクト ナノ統合拠点 2008-2009

上に述べた第二の要請は、「ナノサイエンス」分野の実験研究者および企業研究者との共同研究の推進であるが、これは本プロジェクトで開発したプログラムの有効性を実証する「実証研究」として位置づけられる。我々のプロジェクトの第一義的なミッションはナノ分野のグランドチャレンジ課題の解決に向けて理論・方法論を開発し、「次世代スパコン」上で最大限の性能を発揮するようなプログラムを開発することにあるが、それは現在「ナノ分野」の実験研究者や生産の現場にいる企業研究者が抱えている課題と無関係ではない。むしろそれらの問題を解決する努力の過程で方法論が鍛えられ、新しい「計算科学」が生み出されてくる可能性が高まると考えられる。この面でもすでにいくつかの先駆的な取り組みが行われているが、「ナノ統合拠点」では文部科学省「ナノテクノロジー・材料開発推進室」との連携の下に、より系統的な取り組みを進めつつある。すなわち、文科省「ナノテクノロジー・材料委員会」を中心として実験研究者、企業研究者、およびナノ統合拠点で活動している計算科学者が研究テーマ毎に小規模の「連続研究会」を開催し、計算科学者と実験研究者の共同研究を育てていくという取り組みである。これは「ナノ統合拠点」で開発された計算科学の方法論が実際の実験研究や企業で有効であることを示すだけでなく、「次世代スパコン」に対する必要性和モチベーションを社会に喚起する上でも極めて重要な取り組みであると考えている。(資料3)

本プロジェクトの目的を成功裏に達成するための三つ目の要請は「ナノ統合拠点」で開発したソフトウェアを社会に還元し、アカデミズムの研究はもとより、「もの造り」や医療の現場に如何に有効に活用していくかという問題である。自明のことであるが本プロジェクトは「科研費」とは異なり、国家から委託を受けたプロジェクトである。「科研費」の場合、助成を受けた研究者は自らが提案した研究を遂行し、その成果を論文として公表することにより、その責任を果すことになる。一方、我々のプロジェクトはナノ分野の「アプリケーション」を開発することが重要なミッションのひとつであり、それを「公開」して初めてプロジェクトの目的を達成したことになる。もちろん、「プログラムの公開」といっても、それは必ずしも不特定多数のユーザーを対象にしたもの(例えば、GAUSSIANのような商業ソフト)であることを意味しない。化学や物理のバックグラウンドをもつ実験研究者や企業内の計算科学者などが

一定のトレーニングを受けて使えるレベルのプログラム「公開」を意味している。しかしながら、公開のレベルをこのように限定しても、非常に困難な問題が残されている。それは「知的財産権」や「著作権」が関わる問題である。「ナノ統合拠点」で開発しているプログラムは本プロジェクト内で開発されたものだけでなく、その多くは過去に多数の研究者（学生を含む）や大学・機関が関与したものであり、その「著作権」や「知財権」が極めて複雑な状況にある。「ナノ統合拠点」では、現在、この分野を専門に活躍されている辻巻弁護士の指導の下に、合理的な「公開」の方策を検討しているところである。

連続研究会(1/2)

(資料3-1)

No.	日程	場所	テーマ	担当教
1	2008年11月 21日(金) 13:30~	東京・秋葉原コンベンションセンター	薄電子を用いた 半導体材料の評価	石橋 幸司教授(グループ長(産総研)) 上野 明彦准教授(筑波大)
2	2008年12月 10日(水) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	光電結合・ナノクラスター (合同開催)	柳 茂樹教授(京大) 永瀬 茂教授(分子研) 飯定 高幸准教授(分子研) 中嶋 清人准教授(京大)
3	2008年12月 12日(金) 10:30~	仙台・東北大学金属材料研究所	新しい概念に基づく(新)電材料とその物性	小椋八重 純氏(理研CNRG) 遠山 貴也教授(京大基礎) 野川 誠通教授(東北大学研)
4	2008年12月 27日(土)~28日(日) 16:00~	熊本・グリーンピア南阿蘇	炭がん素を用いた電気療法・ハイブリッドリポソーム	平田 文男教授(分子研) 岡崎 道教授(名大) 上野 明彦教授(筑波大)
5	2008年1月 8日(火) 13:00~	東京・東京大学本郷キャンパス	ウイルスの分子科学	岡崎 道教授(名大) 北尾 彰准教授(京大) 野本 明彦教授(京大) 青坂 文雄准教授(京工大)
6	2008年1月 29日(水) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	超分子、分子素子、分子発光・バイオマス (合同開催)	柳 茂樹教授(京大) 中野 謙教授(京大) 永瀬 茂教授(分子研) 江原 正博教授(分子研)
7	2008年1月 29日(水) 9:00~	東京・東京女子医科大学阿田町キャンパス	DOXナノキャリアー (脂質膜、タンパク質複合体、高分子ミセルを中心として)	岡崎 道教授(名大) 松林 伸幸准教授(京大)
8	2008年1月 30日(金) 9:00~	岡崎・分子科学研究所	分子エレクトロニクス、光エネルギー変換の化学	山下 晃一教授(京大) 中野 謙教授(早大) 中野 豊由教授(京大)

All rights reserved. © Copyright 次世代スーパーコンピュータプロジェクト ナノ統合拠点 2008-2009

連続研究会(2/2)

(資料3-2)

No.	日程	場所	テーマ	担当教
9	2008年2月 10日(火) 13:30~	京都・ホテル法華クラブ京都	膜、ミセル (ソフト凝縮系の分子科学)	松林 伸幸准教授(京大) 岡崎 道教授(名大)
10	2008年2月 16日(月) 13:00~ 17日(火)	岡崎・自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	タンパク質機能(イオンチャネル)	平田 文男教授(分子研) 老本 成昭教授(福井大)
11	2008年3月 9日(月) 13:30~	北海道大学・理学部6号館低層棟1階 6-103室	燃料電池 -物性科学WGとの合同開催	高橋 志明氏(豊田中研) 平田 文男教授(分子研) 岡崎 道教授(名大) 山下 晃一教授(京大)
12	2008年3月 13日(金) 13:20~ 14日(土)	三重・湯の山「希望荘」2F会議室・稲 倉車	エタノール製造、 バイオマス(酵素反応)	平田 文男教授(分子研) 高田 修一准教授(京工大)
13	2008年3月 18日(水) 10:30~	東京・キャンパスイノベーションセン ター東京 3F 309教室	TDOFT: 光応答計算の基礎、応用と展開	矢野 一浩教授(筑波大) 青野 康成氏(住友化学)
14	2008年3月 30日(月)	東京・東京医科歯科大学 共同研究 棟2階セミナールーム	タンパク質機能(フォールディング)	岡本 祐幸教授(名大) 平田 文男教授(分子研)
	(調整中)		表面ナノ構造の自己形成	実行 真司教授(京大) 小森 文夫教授(物性研)
	(調整中)		ナノ構造体の電気伝導	小林 伸幸准教授(筑波大) 広瀬 賢二氏(MEC)

問合せ先 米沢東夫 0564-55-7464

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

All rights reserved. © Copyright 次世代スーパーコンピュータプロジェクト ナノ統合拠点 2008-2009