

## 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

ナノ物質内の電子制御をシミュレートできる方法論を確立する。

(2) 次世代ナノ生体物質

ナノスケールの生体物質に対して、自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化、また動的な振る舞いをシミュレートできる方法論を確立する。

(3) 次世代エネルギー

高効率の触媒・酵素の設計ができる方法論を確立する。

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。

「ナノ統合拠点」は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必要な理論・方法論およびプログラムの開発を進めると同時に、その実証研究を進めてきた。2009年度に遂行した主な課題は下記のとおりである。

#### 5-6-1 中核アプリを中心とする「次世代ナノ統合ソフトウェア」開発

我々が開発しているアプリケーションは3つの階層構造から成り立っている。

中核アプリ: ナノ分野の研究にとって基本的な量子力学、統計力学、分子シミュレーションに関する6本のアプリケーション。

付加機能ソフト: 上記6本のアプリケーションを様々に組み合わせ、マルチスケール・マルチフィジックス問題を解決したり、構造探索を効果的に行なうなどの目的に対応するプログラム群。

連携ツール: 「中核アプリ」と「付加機能ソフト」をシームレスに連結するためのツール群および蛋白質一次配列情報やポテンシャルパラメタなどの初期インプット情報を生成するためのプログラム。(資料1)



「中核アプリ」に関する 2009 年度の進捗状況は下記の表にまとめてある。

表 1

## 中核アプリ高度化

中核アプリケーション	責任者氏名	H21年度進捗状況
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	神山 博	① フラット MPI 並列により、キノード規模の計算機上(筑波大学 PACS-CS)での 1000 原子計算の実現。 ② マルチコアアーキテクチャ上(TKG)での、ハイブリッド並列(MPI+OpenMP)プログラム作成終了。
動的密度行列繰り込み群法	遠山 貴巳	① 行列ベクトル積向けベクトル転送量削減方法のもう一つの可能性である二次分断法について検討を進め、実算・転送オーバーラップ手法との比較を行った。 ② 有限温度での動的行列繰り込み群法を汎用的な高次元計算プログラムへ組み込むための検討を行った。
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂 真治	① 名大 FX1 における富士通 C++ コンパイラへの移植作業。 ② ALPS/parpack スケジューラの MPI+OpenMP による多重並列化。 ③ 実空間方向および虚時間方向のスレッド並列化アルゴリズムの開発。 ④ MPI+OpenMP によるハイブリッド並列化の実装。
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	岡崎 道	① FMM/mesylas における多核子展開・局所展開部の通信の最適化 ② FMM/mesylas における多核子展開・局所展開部の演算の最適化とメモリの削減 ③ FME/mesylas における逆格子演算部の FFT 最適化の検討(筑波大との連携)
RISM/3D-RISM	甲田 文男	筑波大学(佐藤グループ)との共同研究によって、1D-FFT の 2 次元分割化に成功し、数千コアまでのスケールアップを達成した。
高速量子化学計算ソフト	永瀬 茂 北浦 和夫	① IOOII に関して、ARMCI での対応を検討。 ② TKG で大規模並列 FMO 計算を実施し、改善すべき点を調査する(予定)。
中核アプリ大規模並列化支援	佐藤 三久	① RISM-OFT については、ハイブリッド並列を行い、詳細な性能解析を行い、スケールアップ性を改善した。 ② 3D-RISM に対しては、2 次元分割の 3D-FFT の開発を行い、これを用いて 1000 倍の高速化に成功した。 ③ 3D-FFT については現在、MO の並列 Twinn 法に対する適用を検討している。 ④ FMO については、マルチコアを利用するためのハイブリッド化の作業を行っている。

## 5-6-2 「アプリケーション実証研究」および「連続研究会」

昨年度に引き続き、ナノ分野における「アプリケーション実証研究」および「連続研究会」を実施した。これらの研究活動は、昨年度、外部評価委員会（魚崎浩平委員長）のアドバイスに基づき開始したものである。そもそも本拠点は前に述べた3つのグランドチャレンジ課題を解決する目的で「次世代スパコン」上で最大限の性能を発揮するアプリケーション群の開発を目指しているが、個々のアプリケーションは、問題を限定すれば、現在、稼働中のマシンを使用することにより、実験研究者が直面しているいくつかの問題の解決に有効である可能性をもっている。そこで、まず、解決を迫られている「ナノ分野」の課題を抽出するため、大学における実験研究者、企業研究者、および計算科学者を含む「連続研究会」を電子デバイス、ライフサイエンス、環境・エネルギーの広汎な分野で企画した。この連続研究会は19回におよぶ。以下の表に、過去2年間の連続研究会の開催状況を示す。その規模と広がりから、研究者の中に全国的な反響を巻き起こすと同時に、その中からすでに実験研究者と計算科学者の間で、いくつかの共同研究が生まれ、具体的な成果に結びついている。例えば、「抗がん剤を使わない癌治療法（上岡教授）に関する計算科学的サポート（岡崎グループ： 上岡教授（崇城大学）との共同研究）」、あるいは、「カリウムチャネルのイオン選択性に関する3D-RISM計算（平田グループ： 老木教授（福井医科大）との共同研究）」は、その例である。

### 平成21年度連続研究会

開催日	開催場所	テーマ	開催責任者
2009年 6月8日  (第15回)	山梨大学 甲府キャンパス	燃料電池 No.2 -物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 氏(豊田中研) 平田 文男 教授(分子研) 岡崎 達 教授(名大) 山下 晃一 教授(東大)
2009年 6月30日  (第16回)	牧野原コンベンションセンター	ナノ構造体の電気伝導	小林 伸彦准教授(筑波大) 立崎 賢二氏(NEC)
2009年 11月16日、17日  (第17回)	東京大学 本郷キャンパス 山上会館	燃料電池 No.3 -物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 氏(豊田中研) 平田 文男 教授(分子研) 岡崎 達 教授(名大) 山下 晃一 教授(東大)
2009年 12月10日、11日  (第18回)	京都大学 湯川記念館 パナソニック国際交流ホール	相関電子系における光誘起現象	米満 賢治 准教授(分子研) 岩井 伸一郎 教授(東北大) 西本 博 教授(東大) 遠山 貴己 教授(京大基研) 石原 純夫 准教授(東北大)
2010年 3月2日、3日  (第19回)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター	燃料電池 No.4 -物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 氏(豊田中研) 平田 文男 教授(分子研) 岡崎 達 教授(名大) 山下 晃一 教授(東大)

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 2008-2010

以下に、プロジェクト開始時からの研究成果を表にまとめてある。

## 論文など

### 成果の公表や情報発信など研究開発成果の普及に向けた取り組み

#### ① 学術活動の成果 1 (学術論文、総説解説、受賞)

	平成 18年度	平成 19年度	平成 20年度	平成21 年度
学術論文	278件	344件	326件	326件
総説解説	59件	67件	55件	80件
受賞など	13件	18件	20件	18件



学術論文の 代表的発表先	平成 18 年度	平成 19 年度	平成 20 年度	平成 21 年度
J. Chem. Phys.	31件	33件	33件	29件
J. Am. Chem. Soc.	8件	9件	9件	12件
J. Phys. Chem.	20件	18件	23件	13件
Chem. Phys. Lett.	17件	13件	17件	13件
Phys. Rev.	27件	63件	51件	52件
Phys. Rev. Lett.	14件	14件	12件	13件
J. Phys. Soc. Jpn.	31件	22件	22件	26件
計	130件	172件	159件	168件
合計	278件	344件	326件	326件

#### ② 学術活動の成果 2 (招待講演、口頭発表)

	平成 18年度	平成 19年度	平成 20年度	平成21 年度
招待講演 (国内会議)	103件	97件	98件	127件
招待講演 (国際会議)	137件	131件	164件	182件
口頭発表 (国内会議)	174件	194件	261件	279件
口頭発表 (国際会議)	124件	103件	143件	108件

All rights reserved. © Copyright 次世代スーパーコンピュータプロジェクト 学会報告 2006-2010

### 5-6-3 プログラム公開に向けた取り組み

本プロジェクトは国家プロジェクトであり、そこで開発されたプログラムは「公開」を原則とする。一方、本プロジェクトで開発されたプログラムの多くは過去の履歴をもっており、公開に関しては様々な制約を帯びている。同時に、本プロジェクトで解決を目指している課題の多くは新規の理論や方法論の開発など基礎研究の要素をもっており、研究者（開発者）のクレジットやプライオリティが保証されなければならない。現在、「産」「学」「官」の間で、これらの二つの要素を考慮した「プログラム公開」の原則を確立するための意見調整を行なっている。

### 5-6-4 今後の課題と取り組み

本プロジェクトは2年後に終了するため、これまでの開発計画を継続しながらプロジェクト完了に向けた取り組みを強めていく。その第1は、本プロジェクトの一義的ミッションである「中核アプリ」および重要な「付加機能ソフト」の次世代機に向けた高度化および実機での検証である。この取り組みは、「次世代機」稼働前においてはT2KやFX上で最大限の高度化および実証研究を行ない、「次世代機」稼働後は可能な限りのノードを使ってチューニングを行なう。

第2は「アプリ実証研究」および「連続研究会」であるが、これらの活動については、昨年度行なわれた外部評価委員会からのアドバイスおよび昨年暮れの「仕分け作業」の状況を踏まえて、新たな取り組みが必要である。外部評価委員会から我々のプロジェクトに対して「キャッチコピーが欠如している」との指摘があった。すなわち、「何のために『次世代スパコン』が必要か?」、「『次世代スパコン』でどんな素晴らしいことができるか?」という国民の間に端的に答え得る「課題提示」が必要との指摘である。この指摘は、実は、「仕分け作業」において「仕分け委員」から「次世代スパコン」プロジェクト全体に対して投げかけられた疑問と軌を一にしている。プロジェクト終了に向けた、今後、2年間の「アプリ実証研究」において、この問題を解決する取り組みが必要である。