

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、平成 18 年度より平成 23 年度まで「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。平成 22 年度に遂行した主な課題は下記のとおりである。

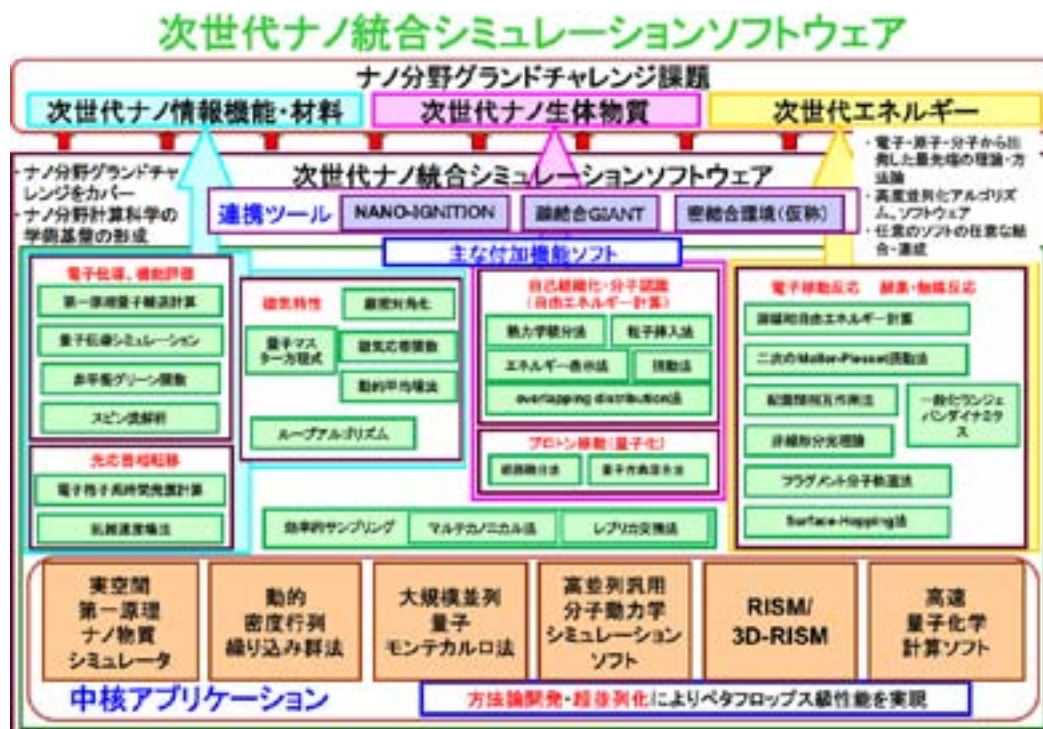
5-6-1 中核アプリを中心とする「次世代ナノ統合ソフトウェア」開発

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な組み合わせで、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」に関する平成 22 年度の進捗状況は下記の表にまとめてある。

中核アプリ高度化

中核アプリケーション	責任者氏名	H22年度進捗状況(大規模実行テストを除く)
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	神山 洋	① ハイブリッド並列プログラムは開発済み。現在 T2K 上でチューニング中。 ② 実空間セル並列と電子状態グループ並列コードは開発済み。現在 T2K 上でチューニング中。 ③ 多核化の例題では、スピン自由度への拡張は終了。現在、グラフィックの留性についての応用計算実行中 ④ RSDFT-CFMD コードは現在開発中
動的密度行列繰り込み群法	遠山 貴也	① 行列ベクトル積に2次元分割法を採用し、光子応答関数計算プログラム、熱伝導率プログラムへの組み込みと、有限温度動的行列繰り込み群法の先学応答関数計算への組み込みを完了。現在、高次元・チューニング中。 ② エネルギー領域分割並列と行列ベクトル積並列が共存する場合のプログラムの動作試験を T2K 上で実施中。 ③ 実機を想定したエネルギー領域分割並列の動的な制御プログラムのアルゴリズムを開発済み。
大規模並列量子モンテカルロ法	藤室 真治	① 液体性質(特にループ結合振動数)について、プロファイラおよび基盤調整によるボトルネックの特定作業を行い、必要に応じてソースコード修正を繰り返しチューニングを行った。 ② アプリケーション版に "improved estimator" と呼ばれるもう一種の物理量測定方法を実装しその性能評価を行った。
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(mod/asi)における長距離相互作用計算部分の全通信参加ノード数を、距離化アルゴリズムにより、 2^{20} 分の1(同時点では $n=1$)に削減した。 ② PME(mod/asi)における逆格点演算部のFFTに対し、T2K上でチューニング中。
RISM/3D-RISM	平田 文男	① 遠隔相互作用部分の改良を組み込み済み。 ② 上記コードの T2K 上での小規模テスト済み。 ③ 遠隔計算インターフェースの設計中
高速量子化学計算ソフト	永瀬 豊 北澤 和夫	① AROMCを用いたGAMESS-PMO計算の動作確認を行った(佐藤Gの支援)。 ② スレッド並列化を実施中(佐藤Gの支援)。 ③ 本年1月に実施したT2K大規模テスト計算で得られたデータ交換の問題点を改良した。 ④ MP2の最適化であるRI-MP2コードを開発し、FMOで利用可能とした。
中核アプリ大規模並列化支援	佐藤 三久	① RSDFTについては、大規模実行支援を行った。 ② 3D-RISMでは、通信最適化を終了。最適化は完了。大規模実行を支援。 ③ 動的密度行列繰り込み群法の行列・ベクトル積については富士通までいくことになり、一応終了。 ④ 行列Ewald法の3次元FFTの適用について、作業。 ⑤ FMOについては基本的なOpenMP化を終了。現在、組み込んで評価。大規模実行を支援。 ⑥ 量子モンテカルロについては、さらなる並列化のための手法を検討。T2K実行時のキャッシュ解析を検討中。

2010 年度は、筑波大学 T2K, 名古屋大学 FX1 を利用した高並列化に向けた高度化を継続実施した。特に、筑波大のご協力を得て、大規模高並列(1 万コア並列)テストを 3 回実施(通算 4 回)した。中核アプリ 6 本について、目

標を達成しつつある。また、理研と共同でカーネル評価を実施し、次世代スパコン京の 400 ノードを利用する代行実行も開始した。

5-6-2 「アプリケーション実証研究」および「連続研究会」

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、2008 年、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 20 回におよぶ。以下の表に、2010 年度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 22 年度、総合科学技術会議（CSTP）からも、次世代スパコンのグランドチャレンジ研究の成果を期待する旨のコメントがあり、国民にアピールできる成果を目指してアプリ実証研究を推進している。

平成22年度連続研究会

開催日	開催場所	テーマ	開催責任者
2010年 12月2日、3日 (第20回)	福井市地域交流プラザ	イオンチャネル No.2	平田 文男 教授(分子研) 吉田 紀生 助教(分子研) 老木 成徳 教授(福井大)
2011年 3月17日、18日 (第21回)	物質・材料研究機構 千歳地区 本研究会は、東北地方太平洋沖地震の影響により中止	燃料電池 No.5 ー物性科学WGとの合同開催	兵頭 志明 主席研究員 (豊田中研) 平田 文男 教授(分子研) 岡崎 進 教授(名大) 山下 晃一 教授(東大)

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た。

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	平成 22年度
学術論文	278報	344報	326報	326報	306報
総説解説	59報	67報	55報	80報	66報
受賞など	13件	18件	20件	18件	12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	平成 22年度
招待講演 (国内会議)	103件	97件	98件	127件	103件
招待講演 (国際会議)	137件	131件	164件	182件	139件
口頭発表 (国内会議)	174件	194件	261件	279件	275件
口頭発表 (国際会議)	124件	103件	143件	108件	144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	平成 22 年度
J. Chem. Phys.	31報	33報	33報	29報	30報
J. Am. Chem. Soc.	8報	9報	9報	12報	5報
J. Phys. Chem.	20報	18報	23報	13報	27報
Chem. Phys. Lett.	17報	13報	17報	13報	17報
Phys. Rev.	27報	63報	51報	52報	42報
Phys. Rev. Lett.	14報	14報	12報	13報	16報
J. Phys. Soc. Jpn.	31報	22報	22報	26報	28報
他	130報	172報	159報	168報	141報
合計	278報	344報	326報	326報	306報

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あり、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あり、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。

このため、本プロジェクトでは、成果の公開と研究に対するクレジットの尊重のバランスを取り、プログラム開発者が公開条件を設定することとし、関係機関の了解も得た。なお、公開するナノ統合ソフトの一覧を文末の表に示す。また、プログラム情報は <http://pal.ims.ac.jp/> で公開している。

5-6-4 今後の課題と取り組み

本プロジェクトは、平成 23 年度で終了するため、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。

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次世代スパコン京実機での検証と動作確認である。また、公開に向けたマニュアル整備等を進める。

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、平成 20 年度に行なわれた外部評価委員会からのアドバイスおよび平成 21 年暮れの「仕分け作業」、更に平成 22 年度の CSTP のコメントを踏まえて、「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?」という国民の問に端的に答え得る「課題提示」が必要である。

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア一覧 (次世代ナノ情報機能・材料)

研究グループ名、種類	No.	プログラム名	開発責任者
(A) 次世代ナノ情報機能・材料			
①次世代ナノ複合材料			
中核アプリ	1	実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	澤山 淳
	2	QMAS (Quantum Materials Simulator)	石橋 章司
	3	連続変位クラスター変分計算プログラム	毛利 哲夫
	4	オーダーN 量子伝導プログラム	小林 伸彦
	5	量子モンテカルロ計算(強相関電子系)	加道 重一郎
	6	ナノ物質および器体表面での光励起キャリアーダイナミクスと基体化学反応	杉野 修
	7	OpenMX	塚崎 泰弘
	8	TOMBIX(全電子混合基法)	川道 良幸
	9	FMO-LCMO	常行 真司
	10	M2TD	吉本 芳英
②次世代ナノ電子材料			
中核アプリ	11	動的密度行列繰り込み群法	満山 貴巳
	12	電子格子系時間発展計算プログラム	米満 賢治
	13	実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェア	永長 直人
	14	変分モンテカルロ法	小杉 正男
	15	磁性半導体中の磁気相関	前川 祐通
	16	不規則系コンダクタンス	井上 順一郎
	17	有限要素法によるスピン重積の解析	市村 貴彦
③次世代ナノ磁性材料			
中核アプリ	18	大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂 賢治
	19	電子スピン共鳴解析ソフト	宮下 隼二
	20	オーダーN道幅グリーン関数法コード	赤井 久純
	21	McDMFT	常次 宏一
	22	DSQSS	川島 直輝
付加機能ソフト			

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア一覧 (次世代ナノ生体材料、次世代エネルギー、共通)

研究グループ名、種類	No.	プログラム名	開発責任者
(B) 次世代ナノ生体物質			
中核アプリ	23	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	岡崎 進
	24	高速量子化学計算ソフト	北瀬 和夫
	25	REM	西本 祐幸
	26	エントロピー力の統計力学理論解析ソフトウェア	木下 正弘
	27	FIMO	三浦 伸一
	28	Trajen	斉藤 真司
	29	qmod	松林 伸幸
	30	高精度自由エネルギー計算:CPOL	三上 益弘
	31	高速3D-FISM	平田 文男
	32	高速量子化学計算ソフト	永瀬 茂
付加機能ソフト	33	DC: 分割統治量子化学計算プログラム	中井 浩巳
	34	Etrans	藤下 聡
	35	PIQUANDY	信定 亮幸
	36	多参照電子状態計算法	堀井 毅
	37	多核金属含有分子用CISOプログラム	奥村 光隆
	38	3D-FISM/MD	平田 文男
	39	3D-FISM-SCF	平田 文男
	40	qmod	松林 伸幸
	41	Calnos	森田 明弘
	42	Tullyの古典軌道ホップ法プログラム(TSH)	南都 伸幸
	43	SO-SO-CI	江原 正博
	44	MWDYN	関野 秀男
	45	Open-FMO	柳富 雄一、他
(C) 次世代エネルギー			
(D) 共通			
連携ツール	46	NANO-IGNITION	水谷 文彦
	47	GIANT	水谷 文彦