

# 『京』は計算物質科学を どう変えるか？

東京大学・物性研究所／大学院理学系研究科

常行真司

(分野2 「新物質・エネルギー創成」 戦略機関 CMSI 統括責任者)



計算物質科学イニシアティブ

Computational Materials Science Initiative

戦略プログラムに合わせてつくられたネットワーク型組織

<http://cms-initiative.jp>

# 物質科学の広がり



# 基礎科学としての物質科学

---

- 約100種類の元素から、無限とも言うべき種類の物質（分子、固体、材料）
- 「多数」の粒子が集まったときに初めて現れる特徴・性質、何かしらの「秩序」
- P.W. アンダーソン（1977年 ノーベル物理学賞）の言葉によれば,  
    'More is different.'  
    (数が多いと何かが変わる)

# 『京』が変える計算物質科学

- 物質と現象の深い理解に基づく、革新的なアイデアの創出
- アイデアを実現する具体的な指針を得て、応用研究に橋渡し
- 分野の壁を越えた人的ネットワークによる研究の効果的・効率的推進（基礎から応用までをカバーする計算物質科学研究者の組織化）



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  
Computational Material Science Initiative 

戦略機関（代表 物性研究所）

自然科学研究機構  
分子科学研究所

東京大学  
物性研究所

東北大学  
金属材料研究所

協力機関

産官学連携

教育

・産総研  
・物材機構

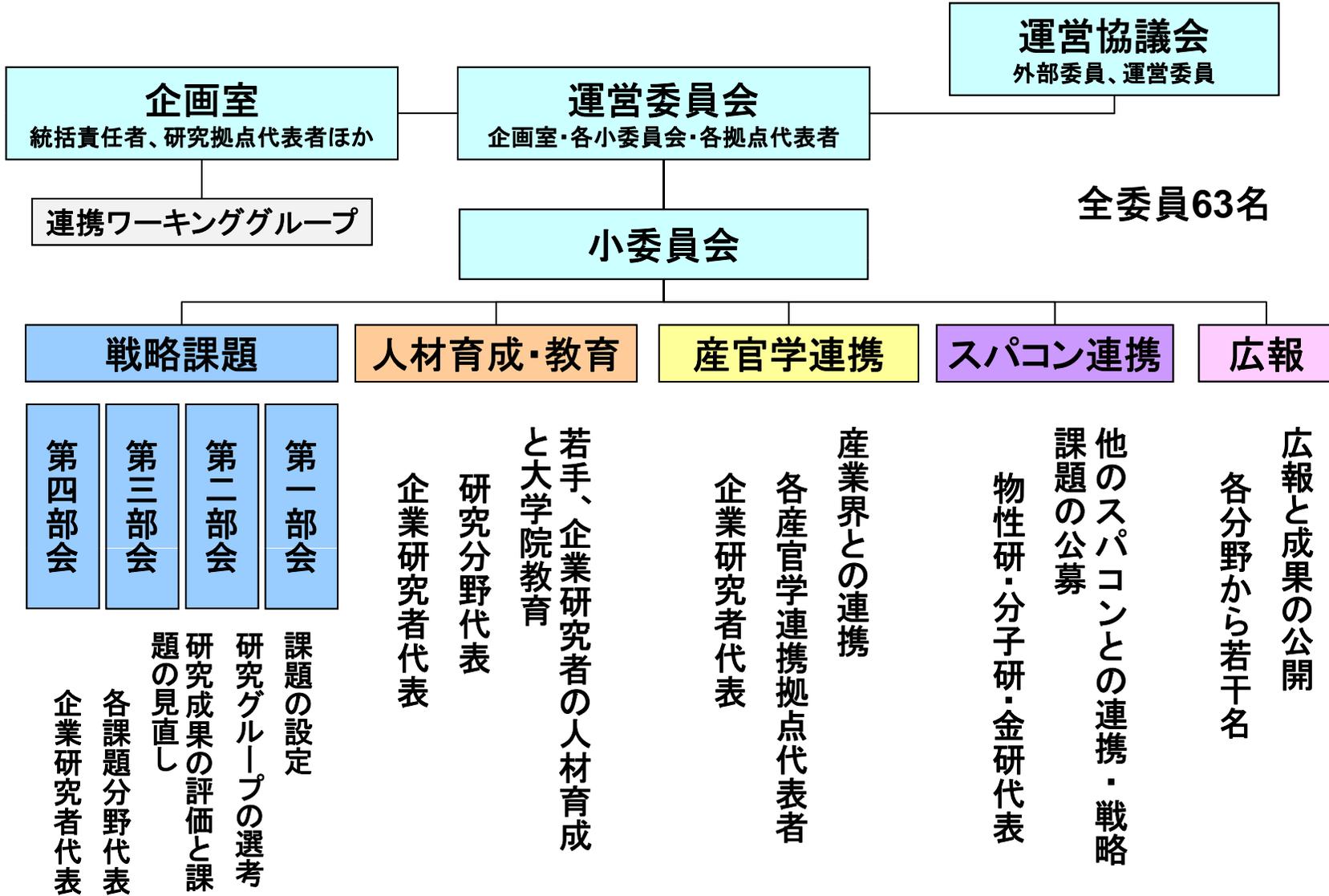
・豊橋技科大  
・総研大  
・名古屋大学  
・神戸大学  
・京都大学  
・金沢大学  
・大阪大学  
・東京大学  
・東北大学

分子科学

物性科学

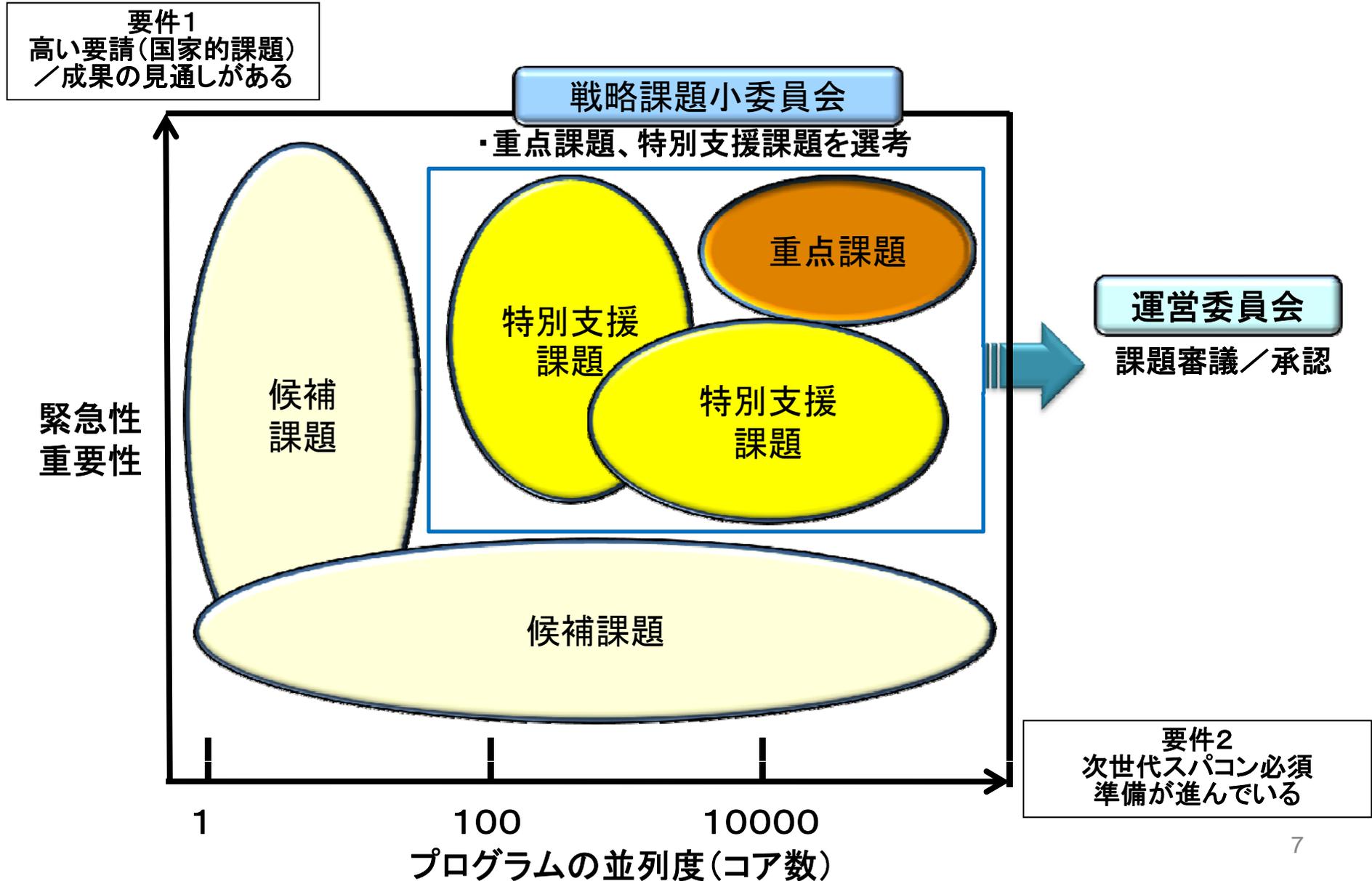
材料科学

# 「計算物質科学イニシアティブ」運営体制



# 重点課題の選定

課題の評価と見直しを毎年行い、研究活性化と新陳代謝を図る



# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

## ナノ分野グランドチャレンジ課題

次世代ナノ情報機能・材料

次世代ナノ生体物質

次世代エネルギー

- ・ナノ分野グランドチャレンジをカバー
- ・ナノ分野計算科学の学術基盤の形成

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

連携ツール

疎結合GIANT

IGNITION

密結合GIANT

- ・電子・原子・分子から出発した最先端の理論・方法論
- ・高度並列化アルゴリズム、ソフトウェア
- ・任意のソフトの任意な結合・連成

主な付加機能ソフト

電子伝導、機能評価

第一原理量子輸送計算

量子伝導シミュレーション

非平衡グリーン関数

スピン流解析

光応答相転移

電子格子系時間発展計算

乱雑速度場法

磁気特性

厳密対角化

量子マスター方程式

磁気応答関数

動的平均場法

ループアルゴリズム

自己組織化・分子認識  
(自由エネルギー計算)

熱力学積分法

粒子挿入法

エネルギー表示法

摂動法

overlapping distribution法

プロトン移動(量子化)

経路積分法

量子古典混合法

効率的サンプリング

マルチカノニカル法

レプリカ交換法

電子移動反応 酵素・触媒反応

溶媒和自由エネルギー計算

二次のMøller-Plesset摂動法

配置間相互作用法

一般化ランジェバンダイナミクス

非線形分光理論

フラグメント分子軌道法

Surface-Hopping法

実空間  
第一原理  
ナノ物質  
シミュレータ

動的  
密度行列  
繰り込み群法

大規模並列  
量子  
モンテカルロ法

高並列汎用  
分子動力学  
シミュレーション  
ソフト

RISM/  
3D-RISM

高速  
量子化学  
計算ソフト

中核アプリケーション

方法論開発・超並列化によりペタフロップス級性能を実現

## 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

## 戦略課題

### 次世代先端 デバイス科学

量子論で切り開く  
次世代デバイスの  
ブレークスルー

### エネルギー 変換

次世代エネルギー技術の基盤  
となる物質機能性の探索

### 分子機能と 物質変換

ウイルスの分子科学を  
確立し、感染機構や免  
疫機構の解明に貢献

### 新量子相・新物質の 基礎科学

計算基礎科学と革新技术から湧き出す潮流：  
量子概念・量子機能の解明・予測・設計

# 新量子相・新物質の基礎科学

物性 分子

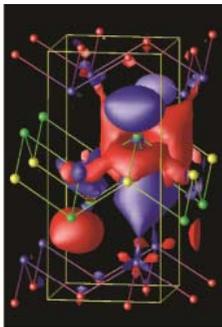
第1部会 代表者: 天能精一郎(神戸大)、今田正俊(東京大)

- ◎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
- ◎超高精度計算による本質と原理の抽出、物質科学の新展開(他部会連携)

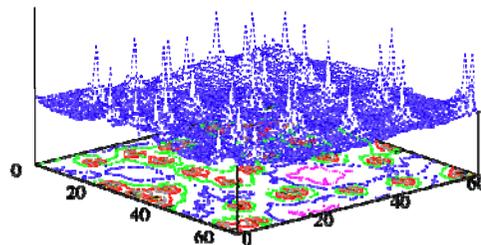
## 重点課題1

### 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

- ・超伝導等の機構解明、新物質探索
- ・スピン利用新機能デバイス設計指針
- ・ランダムネス効果による新機能発現



第一原理からの強相関物質機能予測

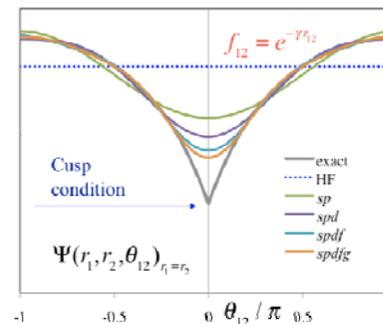


ランダムな磁性体に生じる量子相転移の解明

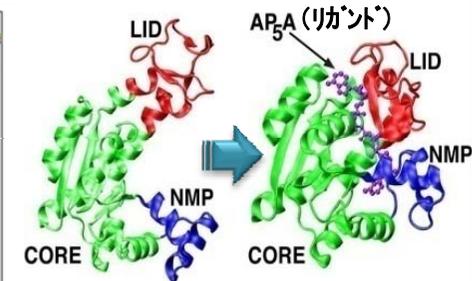
## 重点課題2

### 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開

- ・電子状態計算の超高精度化とナノ分子の構造・機能の解明・予測
- ・化学反応電子動力学の理論開拓
- ・反応場を含む構造と機能発現の解明



クーロン孔を露に考慮した高精度電子状態計算

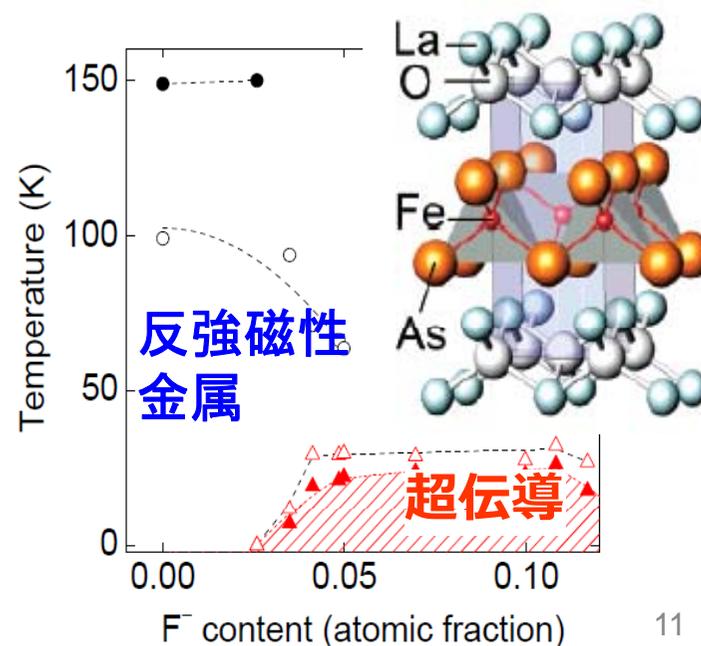
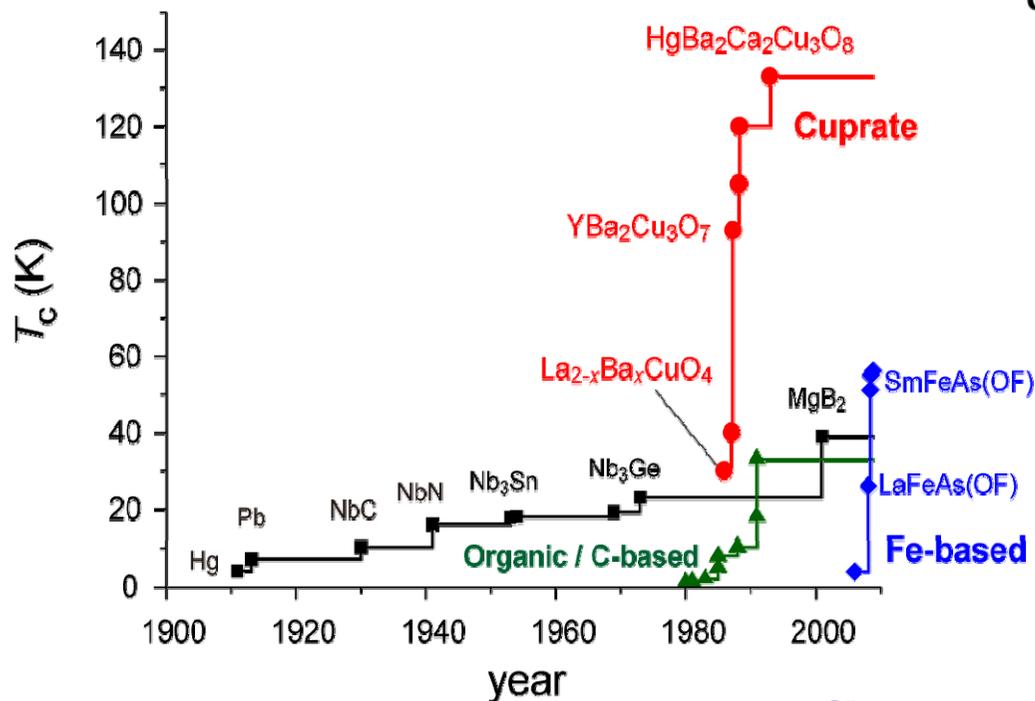
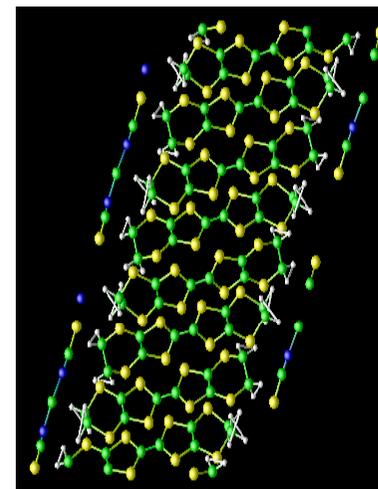
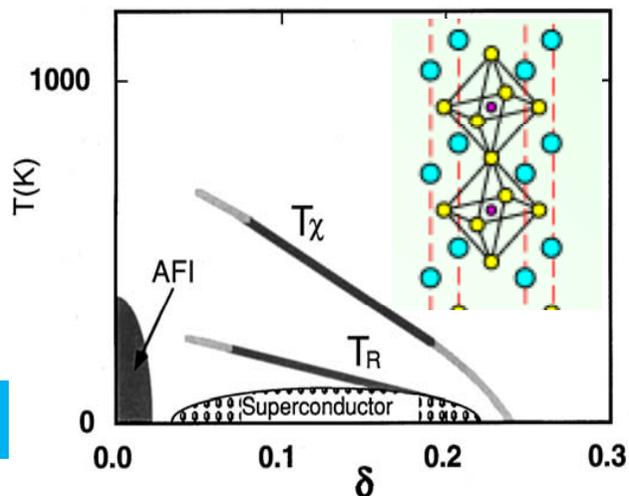


リガンドの結合による蛋白質の大きな構造変化

# 高温超伝導体などの新物質

- 銅酸化物超伝導体
- 希土類化合物超伝導体  
(重い電子の超伝導)
- 有機超伝導体
- コバルト系超伝導体
- 鉄系超伝導体

多様な物質群の多様な物性



# 強相関系の第一原理計算：汎用階層手法

今田G

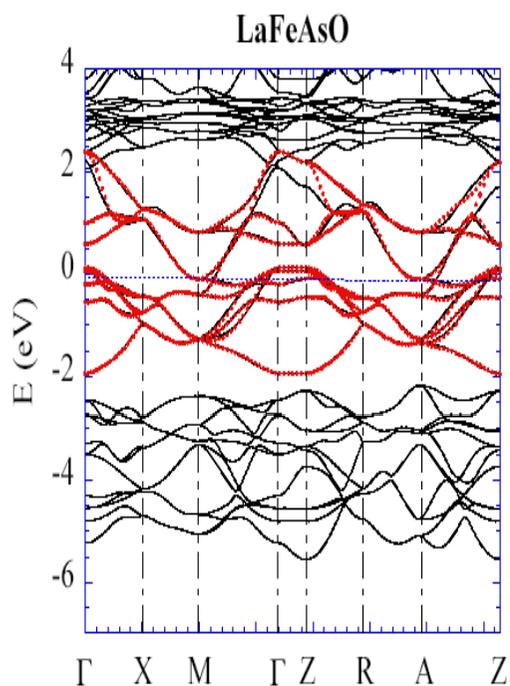
第1段階  
「バンド構造」  
の導出



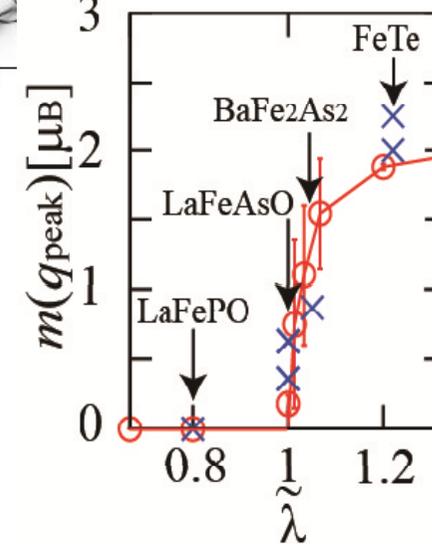
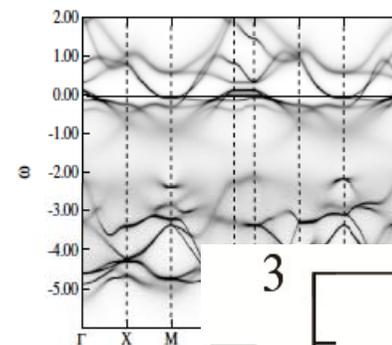
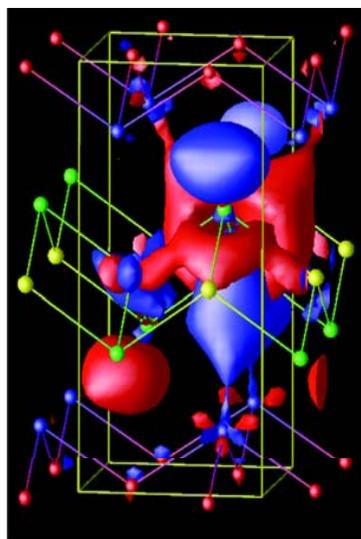
第2段階  
低エネルギー模型  
の導出



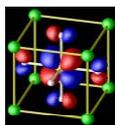
第3段階  
低エネルギー模型  
の解



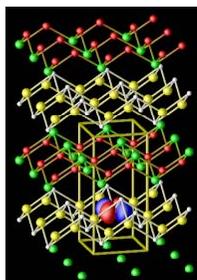
$$H = \sum_i t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



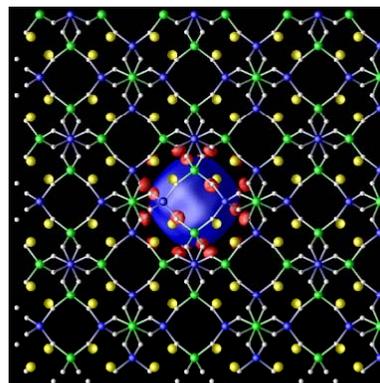
# 複雑な系への挑戦



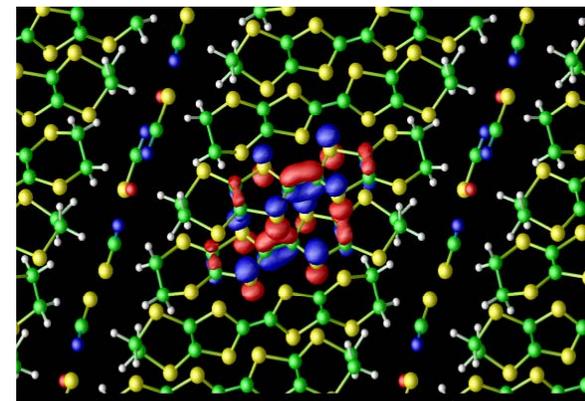
**Finished:**  
**SrVO<sub>3</sub>**  
- 5 atoms  
- 383 au<sup>3</sup>



**Finished:**  
**LaFeAsO**  
- 8 atoms  
- 961 au<sup>3</sup>



**Finished:**  
**Na<sub>4</sub>Al<sub>3</sub>Si<sub>3</sub>O<sub>12</sub>**  
- 44 atoms  
- 4726 au<sup>3</sup>



**Finished:**  
**κ-(BEDT-TTF)Cu<sub>2</sub>CN<sub>3</sub>**  
- 118 atoms  
- 11003 au<sup>3</sup>

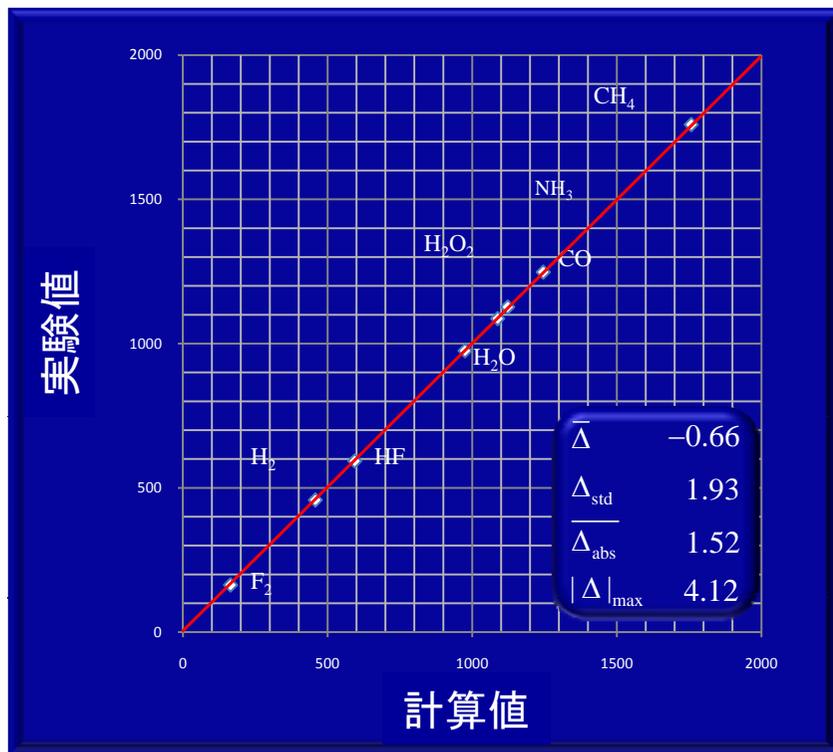
**ONGOING:**  
**EtMe<sub>3</sub>Sb[Pd(dmit)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>**  
- 228 atoms  
- 22411 au<sup>3</sup>  
- 125 *k*-points  
- 1500-2000 bands  
- 150,000 plane waves

模型を導き、模型を操り、  
自然を解き明かす

超並列計算への挑戦

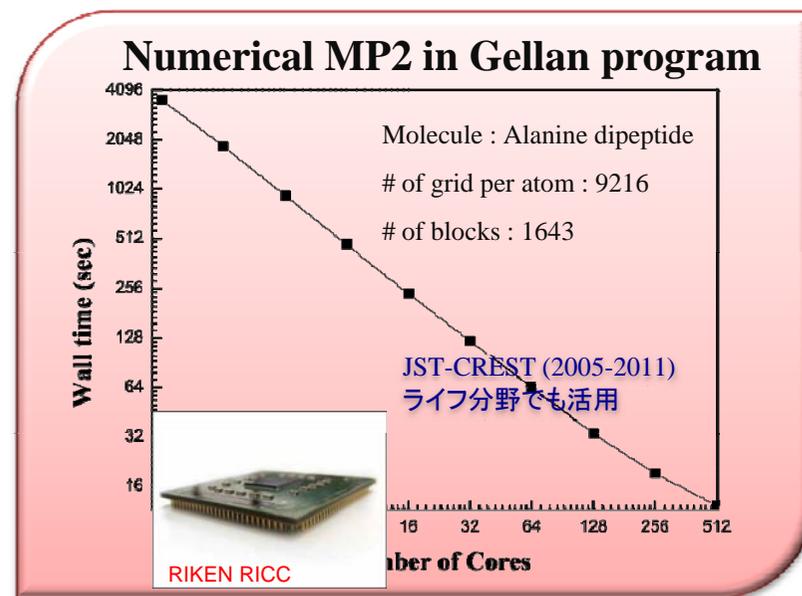
# 分子の超高精度電子状態計算

高精度F12理論で得られた  
原子化エネルギーの実験との比較 / kJ/mol



## 求積法ベースの量子化学 Quadrature-based Quantum Chemistry

原理的には求積点の数にスケール  
10,000点×100原子系で次世代スパコンの全コア



次世代スパコンでは、分子振動や相対論的な効果も入れて  
実験に匹敵する分光学的精度 ( $1\text{cm}^{-1} = \text{数}\mu\text{eV}$ ) の計算が可能？  
実験の完全予測や、革新的な材料設計に繋がる  
新しい量子効果や超微細構造の研究を可能に

# 次世代先端デバイス科学

物性 分子 材料

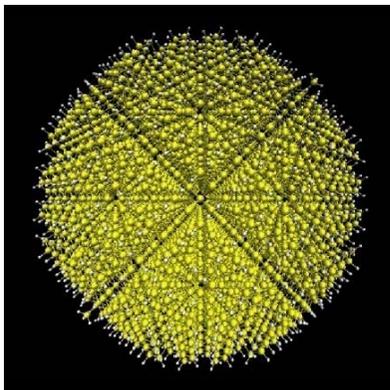
第2部会 代表者: 押山 淳(東京大)

- ◎デバイス物質機能の予測、新機能材料、新ナノ構造の探索と提唱
- ◎第一原理計算手法を極限まで大規模高速化し、定量的にデバイス特性を予測解明

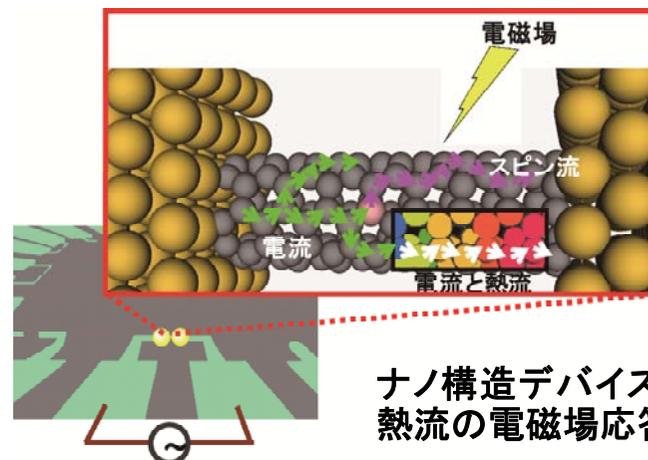
## 重点課題

### 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

- ・次世代デバイスの起爆剤となる、ナノドット・ワイヤーの構造的安定性と電子機能予測
- ・次世代デバイス・ナノ接合部の電子、熱、原子輸送の量子論構築とデバイス特性の解明
- ・ポストスケール時代のデバイス・シミュレーター基盤技術の構築



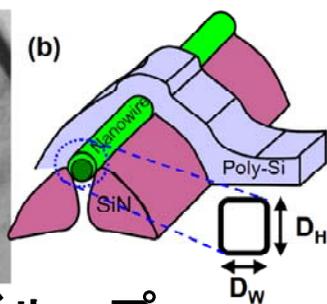
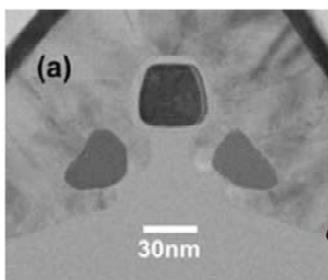
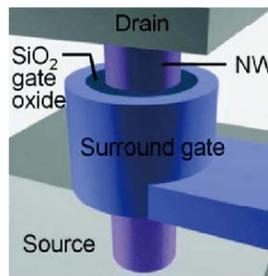
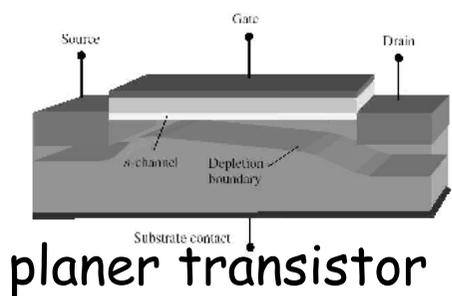
直径7.6 nmのSiナノドット構造の電子密度。12667原子系での電荷注入エネルギーの直接計算



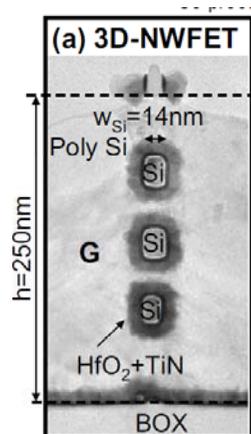
ナノ構造デバイスでの電流・スピン流・熱流の電磁場応答解明と制御

# シリコン・ナノワイヤー・トランジスター

## 次世代テクノロジーを支える新しいトランジスター

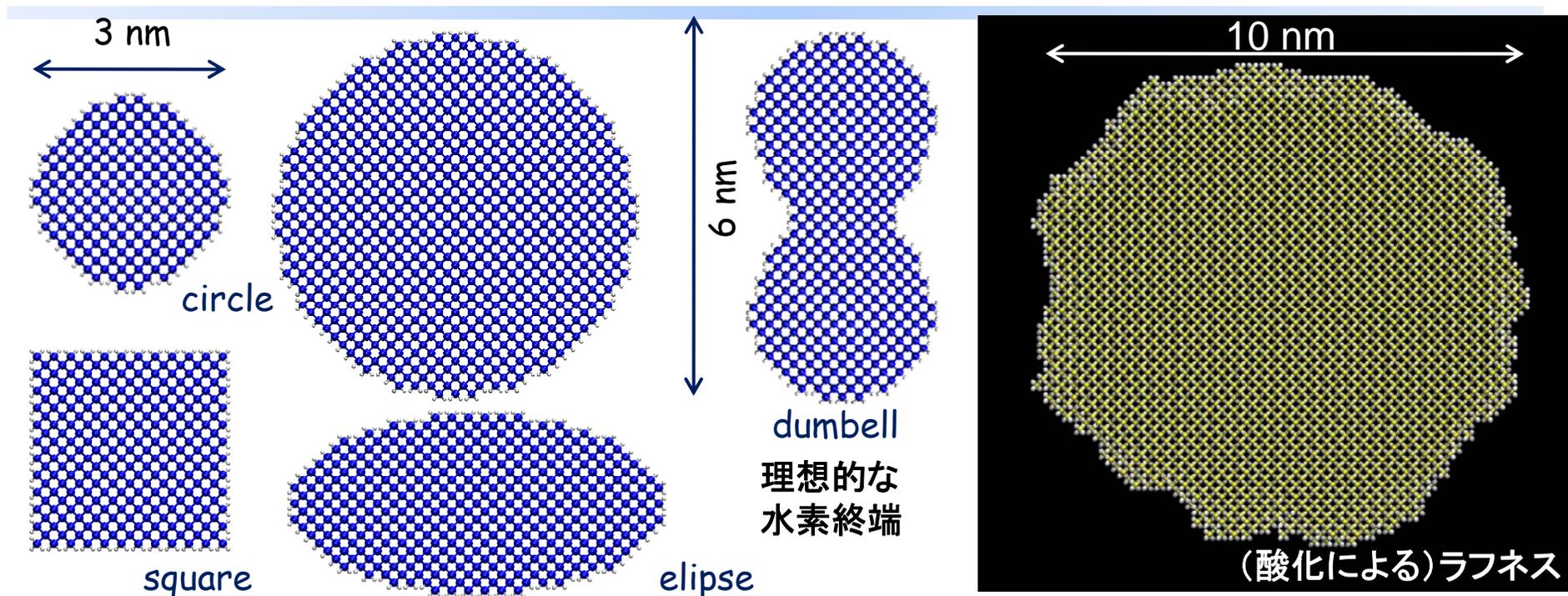


東工大岩井グループ  
(NEDOでの共同研究)  
つくばイノベーションアリーナ  
との共同



形状、方位、直径、、、  
最適なナノ構造は？  
量子論計算科学の出番

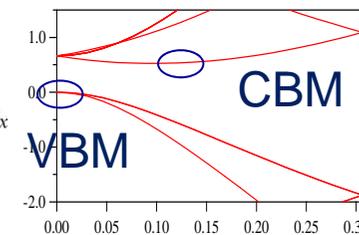
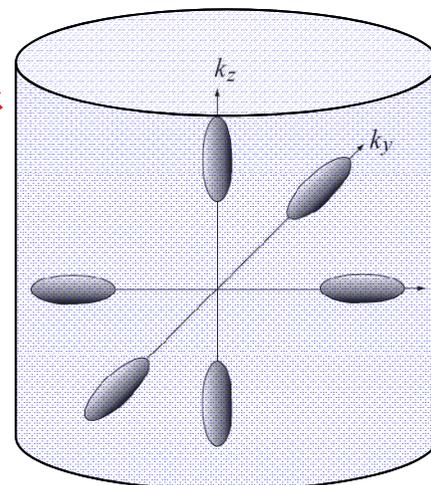
# <100> ワイヤー: 様々な断面



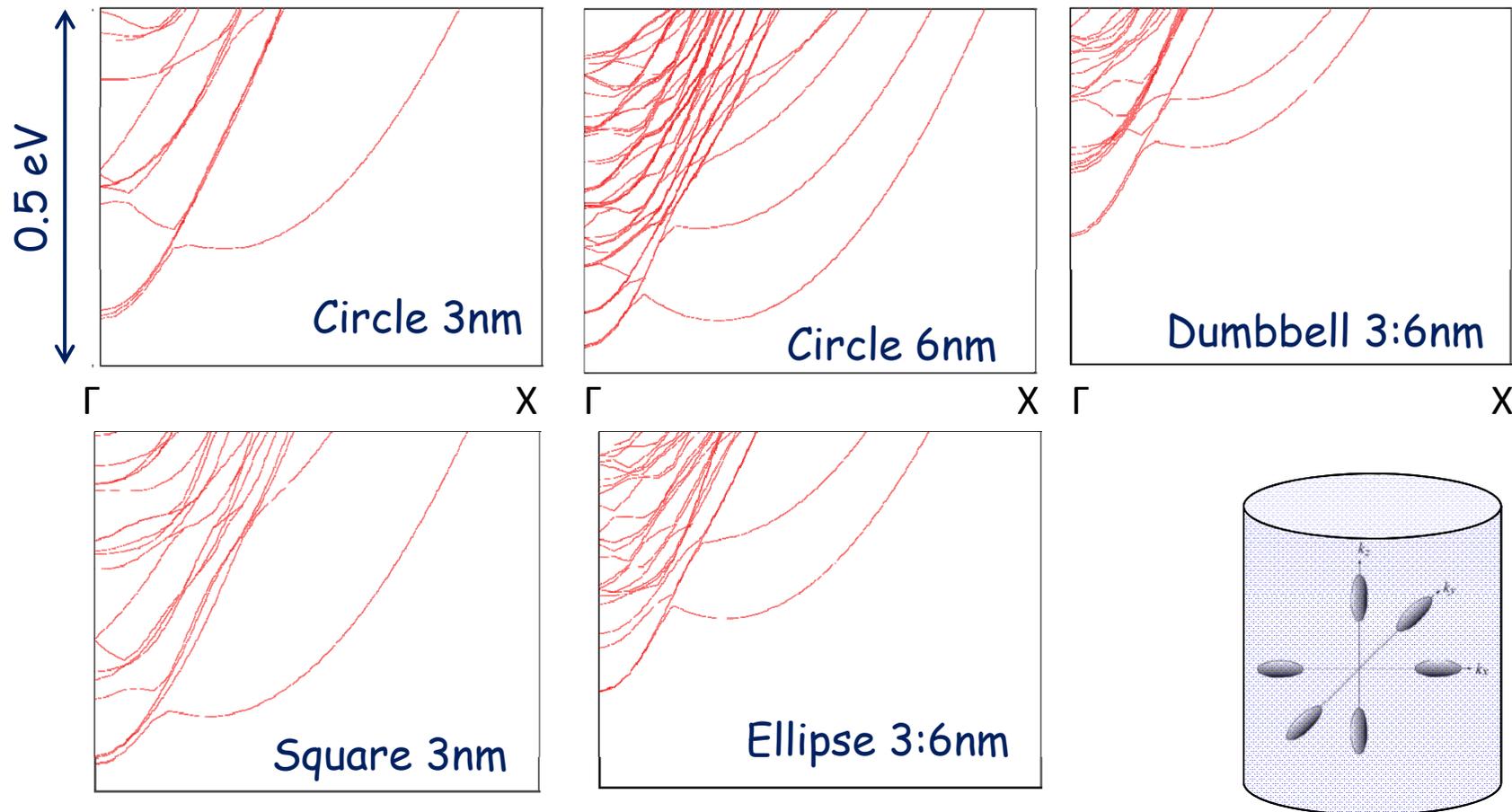
## 二つの要素

- ✓ バルクバンド構造のワイヤー方向への射影
- ✓ 量子効果によるキャリアの選択

	light ele	heavy ele	light hole	heavy hole
expt	0.19	0.92	0.15	0.5
calc	0.19	0.95	0.17	0.3



# RSDFTで明らかにした ワイヤー断面形状と伝導帯の関連



$\Delta E_{\text{shift}}$ 、 $m^*$ 、縮重度が  
ワイヤー断面形状とサイズによって変化

# RSDFTによるアプローチ

$$\text{DFT: Kohn-Sham eq} \left\{ \begin{aligned} & \left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{\text{nucl}}(\vec{r}) + \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\vec{r})}(\vec{r}) \right] \varphi_j(\vec{r}) = \varepsilon_j \varphi_j(\vec{r}) \\ & n(\vec{r}) = \sum_j |\varphi_j(\vec{r})|^2 \end{aligned} \right.$$

現在広く行われている、平面波基底スキームにはフーリエ変換が不可欠。  
しかし、FFTの通信負荷は超並列大規模計算では致命的

⇒

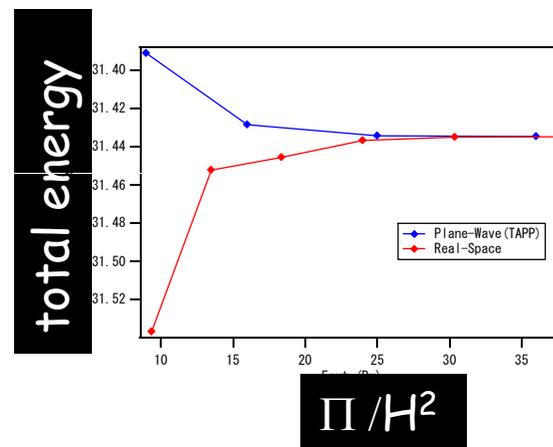
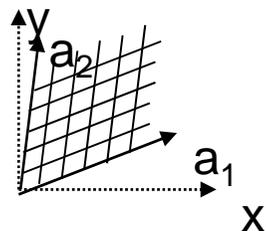
我々の選択: 実空間差分スキーム

実空間にメッシュを導入し、すべての量を

そのメッシュ上で計算

メッシュ間隔を狭めて、系統的に精度を保証

—RSDFT—



# RSDFTの並列化・高速化

押山G

## パラレルマシンでは:

- 莫大な数の3Dメッシュ点は適切なサイズのセルに分割
- それぞれのセルはそれぞれのCPU

## さらにマルチコアマシン用のハイブリッド並列:

- CPUに対してMPI、Coreに対してOpenMP
- メッシュ点並列と電子状態並列

新アルゴリズムによるGram-Schmidt 演算での性能 (筑波PACS-CS, 1000CPU)

Theoretical Peak Performance	Our RSDFT (Operation)	Our RSDFT (Operation & Communication)
5.6 GFLOPS/cpu	4.3 GFLOPS/cpu	3.5 GFLOPS/cpu

$O(N^3)$  部分で理論ピーク性能の80%を達成!  
全体で10-20%の実効性能

T2K(筑波大)での10,000コアハイブリッド並列計算に挑戦中

京は640,000コア!! 前人未到の世界!!

# 分子機能と物質変換

物性 分子

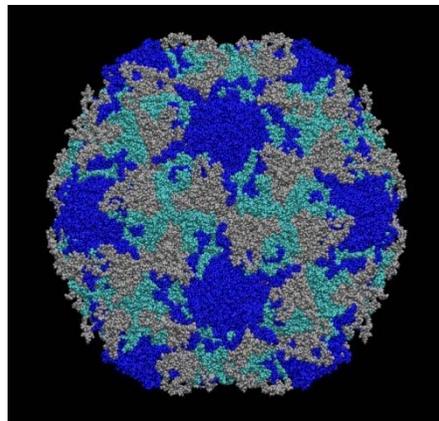
第3部会 代表者：岡崎 進(名古屋大)

- ◎自己組織化された分子集団系における構造形成と機能発現機構の解明
- ◎MO計算、MD計算を極限まで大規模高速化し、定量的に分子機能を予測解明

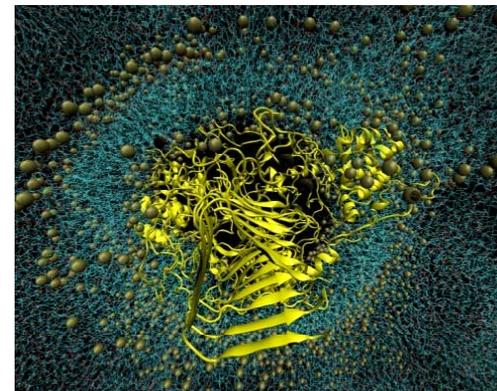
## 重点課題

### 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

- ・小児マヒウイルスとレセプター、抗体との相互作用評価による感染や免疫の分子機構の解明
- ・抗ウイルス剤シード化合物から出発した、高活性化化合物の理論設計
- ・生体物質が利用している未知の分子機構やダイナミクスなどの普遍原理の発見



小児マヒウイルスの分子動力学計算  
(正二十面体回転対称性を仮定)

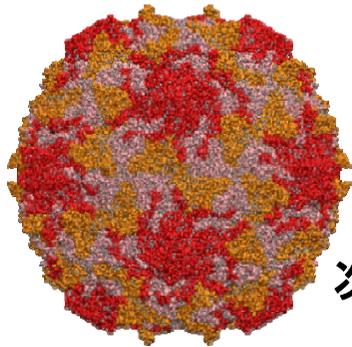


バクテリオファージ先端の膜貫通のシミュレーション 21

# ウイルスの全原子シミュレーション

岡崎G

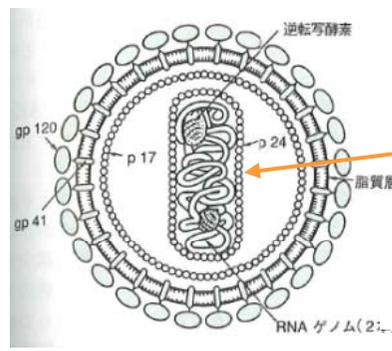
## ウイルスによる感染症の猛威



カプシド  
(タンパク質でできた)  
ウイルスの殻

1000万原子系

次世代スパコンであれば  
丸ごと計算可



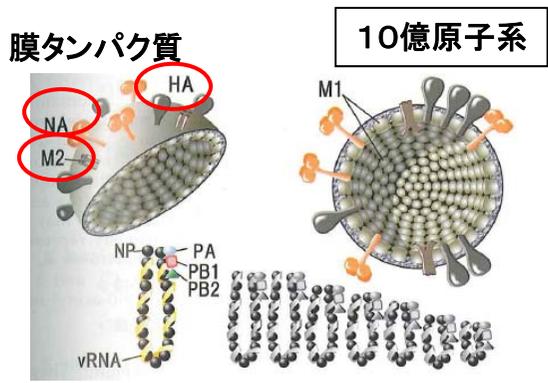
成長戦略課題  
HIVウイルス

エンベロップ、カプシド

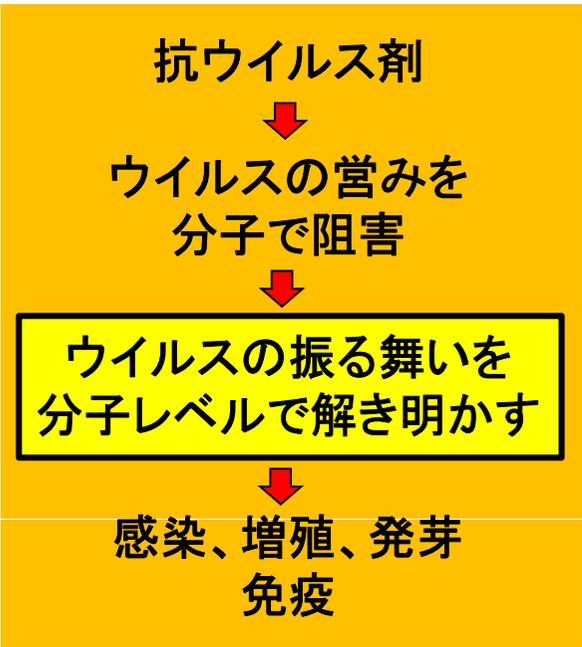
10億原子系

丸ごと計算は次々世代スパコン

口蹄疫ウイルス  
小児マヒウイルス



インフルエンザウイルス  
エンベロップ  
(宿主から取ってきた細胞膜)



米国も重要課題として選定  
Blue Waterと全面的に競合

我々は5年前から提案  
ソフト・アルゴリズムで先行

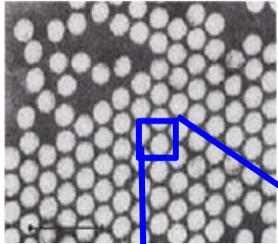
カプシドの性質  
感染、免疫

タンパク質の阻害

# 感染機構を解き明かす ウイルスとレセプターの特異な相互作用

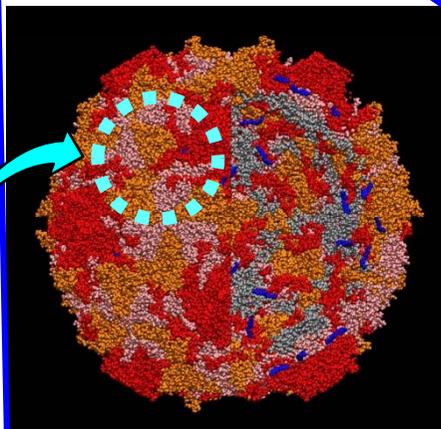
次世代スパコンが不可欠

ウイルス全体1000万原子系の  
分子動力学計算が必要



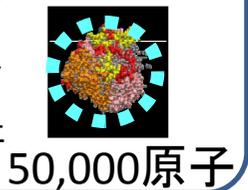
小児麻痺  
ウイルス  
"Medical Virology",  
edited by D. O. White and  
F. Fenner, Academic Press

10,000,000原子

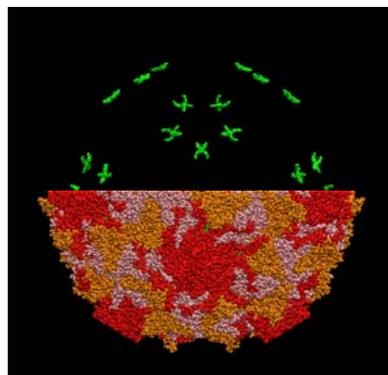
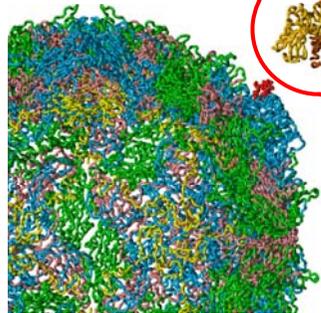


現在計算可能

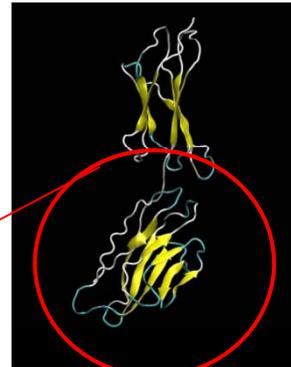
断片のタンパク質ユニット  
が60個集まって1個のウ  
イルスを構成。水もフルに  
含めると約 50,000 原子



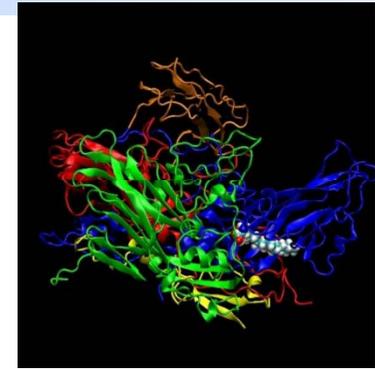
50,000原子



ウイルスカプシドに  
吸収された抗ウイルス剤  
(カプシド上部は透明にして表示)  
PDF database



レセプターの先端



カプシドとレセプターの結合  
・レセプターの構造変化？

## ウイルスを計算科学の俎上に カプシドの構造安定性

1. 接合構造、熱ゆらぎ
2. 温度、PH, 化学物質、溶媒
3. 応力

## 感染(ピコルナウイルス)

1. カプシドとレセプターの特異な結合
2. カプシド構造の変化
3. 細胞内へのRNAの侵入

・カプシドの変異  
感染対象の拡大

・阻害  
抗ウイルス剤の機能

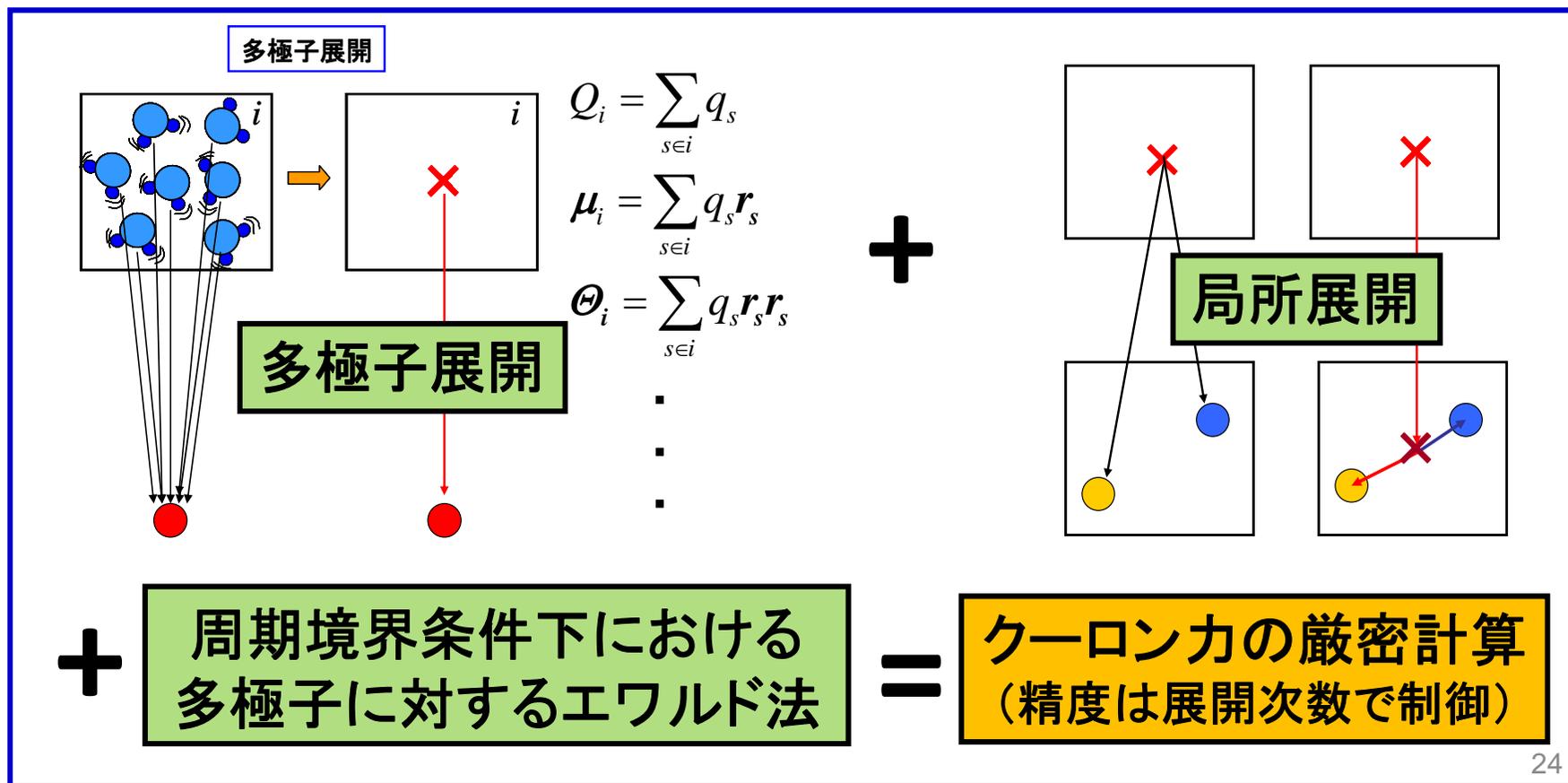
# 分子動力学法コード：modylas

## 並列化

- 完全領域分割
- 多階層隣接通信化

実質的に FFT free !

大きな通信はすべて隣接通信化



# エネルギー変換

物性 分子 材料

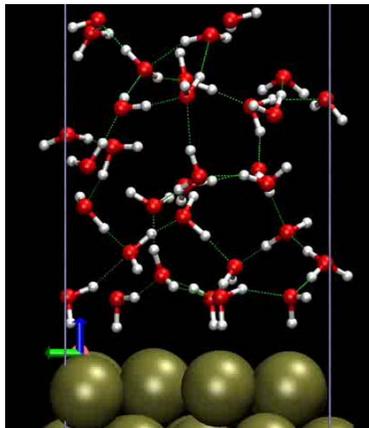
第4部会 代表者: 杉野 修(東京大)、山下晃一(東京大)

- ◎化学、電気、熱、光の各エネルギーの相互変換と貯蔵、輸送、利用の本質理解
- ◎電池、エネルギー資源に関する次世代革新技術の創成

## 重点課題1

### 燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究

- ・電解質膜形成からイオン電導、電極反応のシミュレーションを組合せた連携計算確立
- ・電池作成評価実験との密接な協力体制構築による実践的機能予測

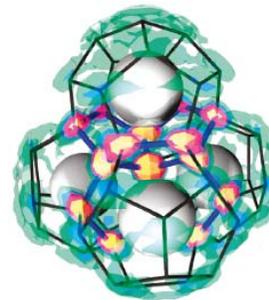


有限バイアス電圧を印加した白金電極表面での化学反応の第一原理分子動力学計算。

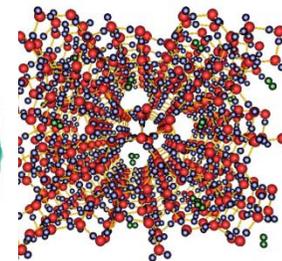
## 重点課題2

### 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

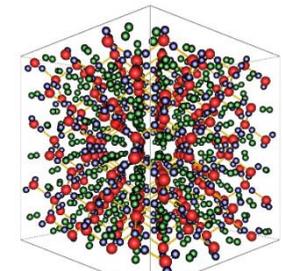
- ・生成過程、熱力学的安定性の解明
- ・水素の安全安価な貯蔵法としての利用探索
- ・サブミリ秒MD計算による融解過程の微視的描像解明とメタンの効率的採取法開発



メタンハイドレート生成の時間発展と結晶成長過程(逆過程も)。



氷II内の水素(左)と氷Ic内の水素(右)の安定性と生成条件の理論予測。



# 燃料電池

材料科学 + 表面科学 + 反応化学全てが関わる総合科学的分野

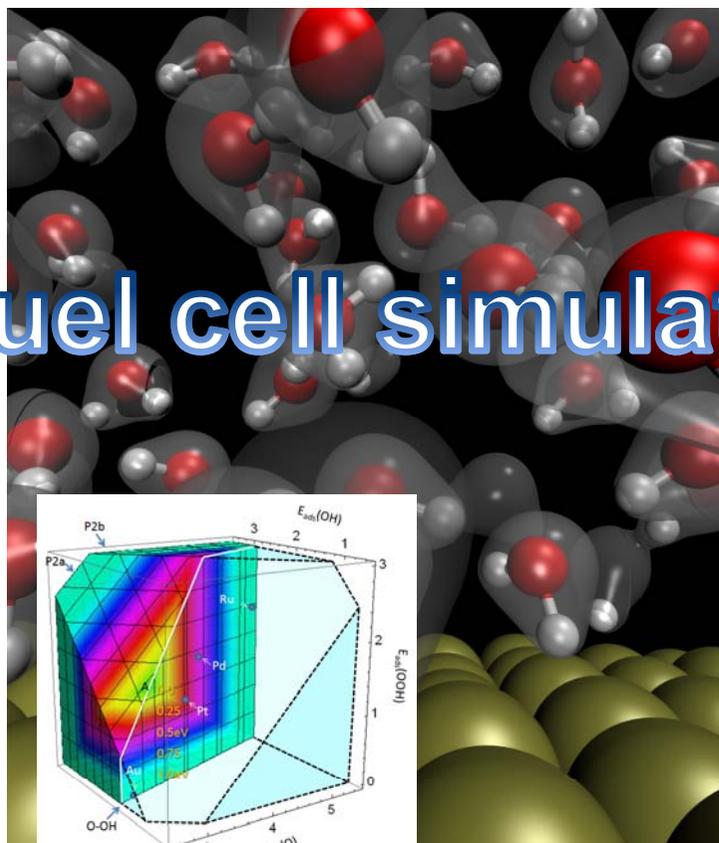
自由エネルギー計算  
多自由度系探索

非平衡状態  
動力学

電子状態計算理論

- ファンデルワールス力
- 強相関電子系
- 電子励起状態

## Fuel cell simulation



液体

金属

高分子

表面・界面  
 $N_{\text{atom}} > 1000$

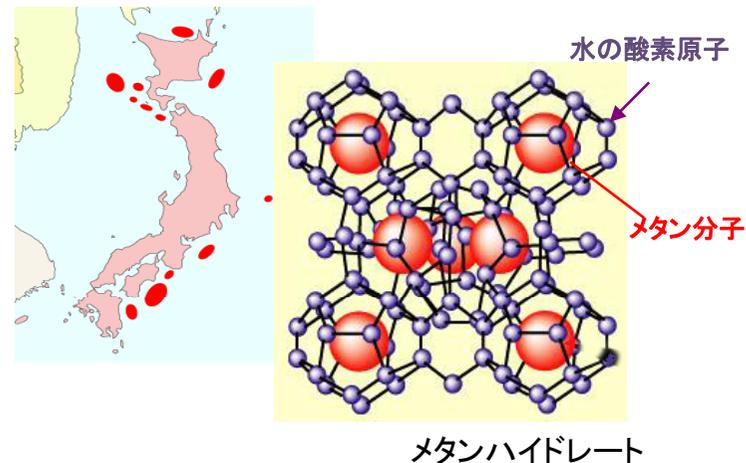
岡本杉野 JPCC (2010)

# 水素・メタンハイドレート

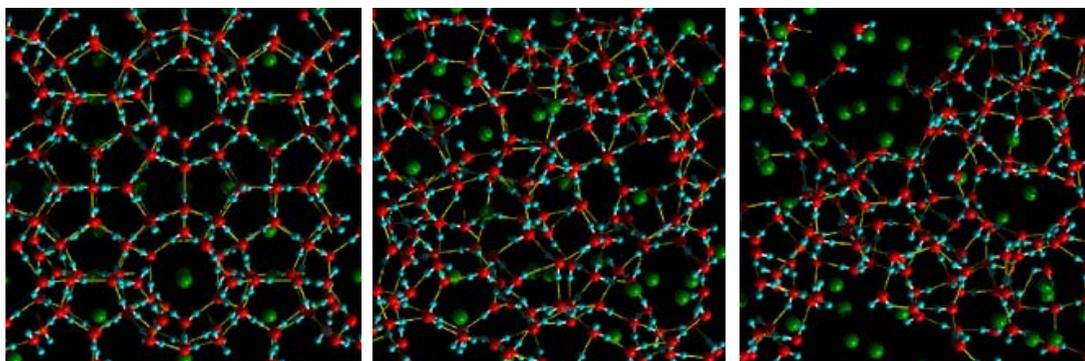
メタンハイドレートは日本近海に豊富に存在  
CO<sub>2</sub>の放出量は石油の70%以下

地殻変動等でのメタンの放出→温室効果はCO<sub>2</sub>の20倍

海底での減圧法を主とする採取方法  
が計画されている



どのようにメタンと水に融解するのかが未だに不明  
熱の供給が多く、融解が短時間に



400分子でのメタン融解の分子動力学シミュレーション

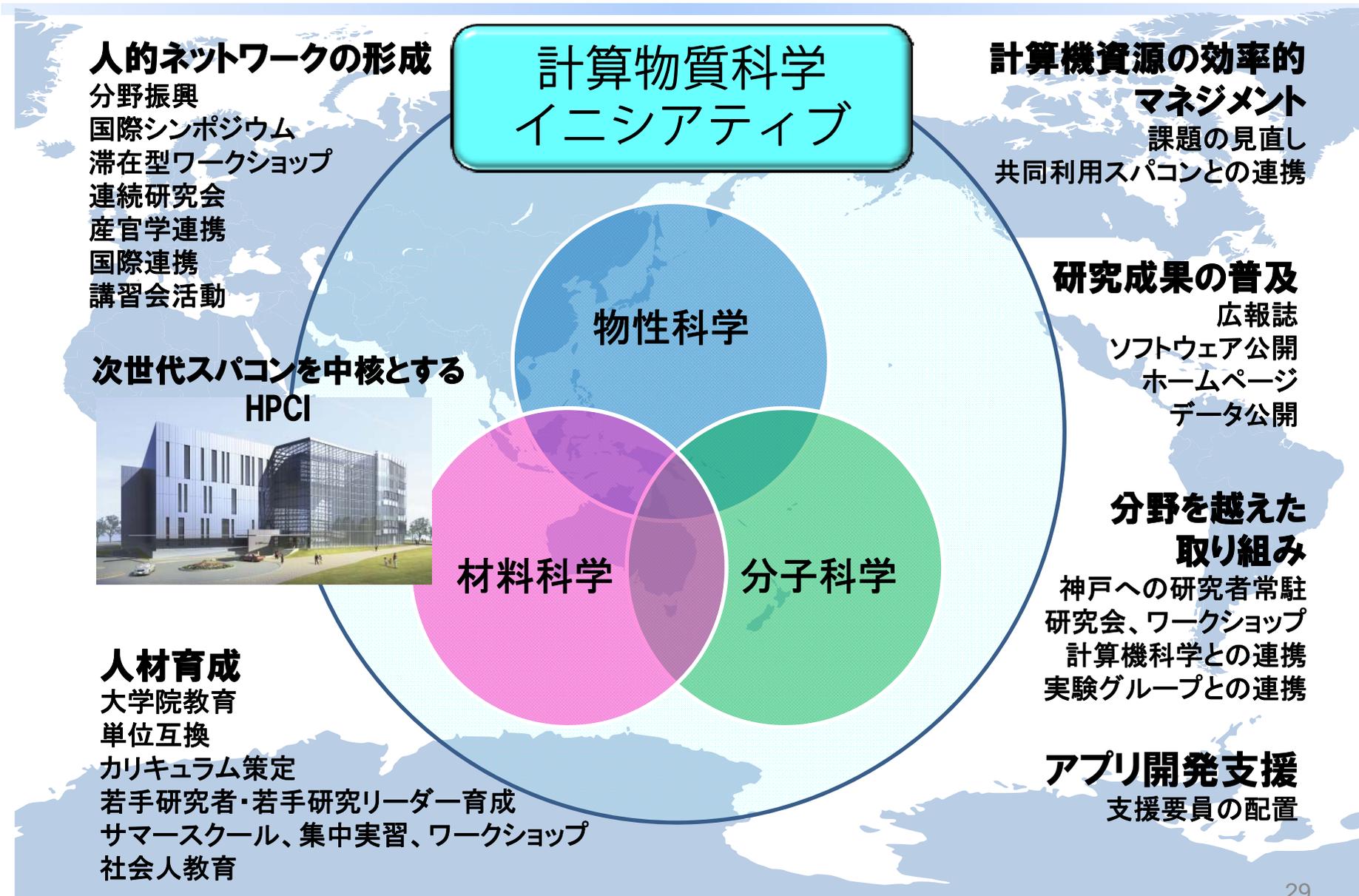
熱伝導、準安定領域、平衡 (温度と圧力)等の正確な情報

100万分子のマイクロ秒の  
分子動力学シミュレーション  
(modylas)  
↓  
融解機構を解明して  
最適なメタン回収法の指針を与える

# 課題一覧 (重点課題+特別支援課題)



# 計算科学技術推進体制構築のために



# 若手研究者のために

- 計算科学、計算機科学に関する大学院講義の充実
- プログラム高度化教育（講習会、実習など）
- プログラム高度化支援（支援要員サポート）
- プログラム高度化ノウハウの蓄積と情報提供
- アプリケーション講習会
- 分野横断型の研究会、ワークショップ
- プログラム公開のサポート（広報）
- 人材紹介（広報）
- その他

<http://cms-initiative.jp>



# 今年度の予定

## 計算分子科学拠点第1回研究会

【日時】2011年2月4日(金) 13:00~17:15 及び 懇親会  
2011年2月5日(土) 9:00~16:30

【場所】自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 大会議室

【参加登録】[http://cms-initiative.jp/events/KeisanBunshi\\_No1](http://cms-initiative.jp/events/KeisanBunshi_No1) よりご登録下さい

第1日目：2月4日(金)      第2日目：2月5日(土)

<p>13:00-13:05 開会挨拶(15分) 高橋 和夫 開会挨拶</p> <p>13:05-13:10 (15分) 大塚 直 講演</p> <p>13:10-13:15 (5分) 文野 浩 講演</p> <p>13:15-13:20 (5分) 伊藤 隆 講演</p> <p>13:20-13:25 (5分) 藤原 隆 講演</p> <p>13:25-13:40 休憩</p> <p>13:40-14:40 基調講演1 13:40-14:40 (1時間) 高橋 和夫 基調</p> <p>14:40-14:50 (10分) 文野 浩 講演</p> <p>14:50-14:55 (5分) 伊藤 隆 講演</p> <p>14:55-15:00 (5分) 藤原 隆 講演</p> <p>15:00-15:05 (5分) 山本 英一 講演</p> <p>15:05-15:40 休憩</p> <p>特別講演 15:40-16:30 (50分) Michael, Klein 16:30-16:45 (15分) 橋本 和仁</p> <p>17:00-17:30 懇親会・夕食</p> <p>17:30-18:30 懇親会 (懇話会100分) 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター 中会議室</p>	<p>9:00-9:20 基調講演1 9:00-9:20 (20分) 常行 真司 基調講演 計算物科学イニシアティブ(CMSI)について 高橋 和夫 講演 計算物科学イニシアティブの発展(坂本)</p> <p>9:20-10:20 (1時間) 常行 真司 講演 イニシアティブの発展(坂本)</p> <p>10:20-10:35 休憩</p> <p>基調講演2 10:35-11:05 (30分) 高橋 和夫 基調講演 水素と有機材料の分子動力学 伊藤 隆 講演 水素と有機材料の分子動力学(坂本)</p> <p>11:05-11:35 (30分) 高橋 和夫 講演 水素と有機材料の分子動力学(坂本)</p> <p>11:35-12:05 (30分) 山本 英一 講演 ソフトウェア・ハードウェアの連携</p> <p>12:05-12:30 昼食・休憩</p> <p>基調講演3 12:30-14:00 (1時間30分) 常行 真司 基調講演 FMO-LCMOの分子動力学(坂本)の発展 高橋 和夫 講演 FMO-LCMOの分子動力学(坂本)</p> <p>14:00-14:40 (40分) 高橋 和夫 講演 ソフトウェア・ハードウェアの連携</p> <p>14:40-14:55 (15分) 山本 英一 講演 ソフトウェア・ハードウェアの連携</p> <p>14:55-15:05 (10分) 伊藤 隆 講演 ソフトウェア・ハードウェアの連携</p> <p>15:05-15:20 (15分) 藤原 隆 講演 ソフトウェア・ハードウェアの連携</p> <p>15:20-15:35 (15分) 高橋 和夫 講演 ソフトウェア・ハードウェアの連携</p>
--	---

【主催】分子科学研究所 計算分子科学拠点  
【協】次世代ナノ統合シミュレーションプログラムの研究員

【協賛】自然科学研究機構 分子科学研究所  
〒477-8581 千葉県旭市旭5-1-5 東京大学 物性研究所内  
TEL 04713813279 / FAX 04713813441  
E-mail: nanocg1@imnag.cmis.ac.jp

## 「新物質・エネルギー創成」 次世代スーパーコンピュータ社会への期待：エネルギー創成

## 計算シミュレーションの 新たな産業応用への展望

【開催日】  
2011年2月7日(月)

【場所】  
秋葉原コンベンションホール  
<http://www.akibahall.jp/data/access.html>

【プログラム】

<p><b>基調講演</b></p> <p>井上 諭一 (文部科学省計算科学技術推進室長)</p> <p>北岡 康夫 (経済産業省ナノテク・材料産業戦略官)</p> <p>高尾 正敏 (大阪大学基礎工学研究科 教授)</p> <p>井上 愛一郎 (富士通(株) 次世代テクニカルコンピューティング 開発本部長/常務理事)</p> <p>常行 真司 (計算物科学イニシアティブ統括責任者)</p> <p><b>招待講演</b></p> <p>Michael L. Klein (Temple Univ. Prof. / Temple Institute for Computational Molecular Science) 「HPC Challenges for the next decade and beyond: From discovery to applications at the nano-bio-med frontier」</p> <p>橋本 和仁 (東京大学大学院工学系研究科 教授/先端科学技術研究センター) 「新物質・エネルギー創成研究者が期待する計算科学」</p>	<p>10:00-18:30 <b>基調講演</b> <b>招待講演</b> 産官学連携講演 <b>パネル討論</b></p> <p>18:30-19:30 <b>意見交換会</b> (ホワイエにて) <b>ポスターセッション</b></p>
--	---

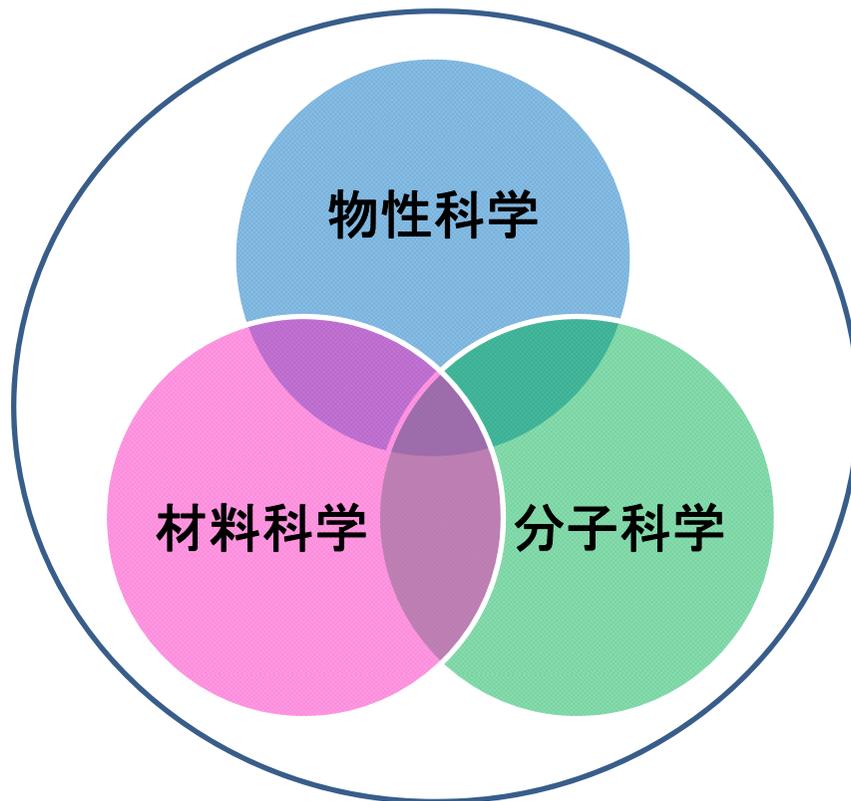
【参加登録】 参加費用は無料。こちらから登録ください。(「計算物科学イニシアティブ」で検索)  
[http://www.cms-initiative.jp/events/sankangaku\\_sympo1](http://www.cms-initiative.jp/events/sankangaku_sympo1)

<主催> 計算物科学イニシアティブ  
 <協賛> 次世代ナノ統合シミュレーションプログラムの研究開発拠点  
 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会  
 <企画> CMSI 産官学連携委員会  
 <お問い合わせ>  
 計算物科学イニシアティブ事務局  
 〒277-8581 千葉県旭市旭5-1-5 東京大学 物性研究所内  
 TEL 04713813279 / FAX 04713813441  
 電子メール contact@cms-initiative.jp

  
 次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム 分野2

# 物質科学の研究者コミュニティ

- 「多数」の粒子が集まったときに初めて現れる特徴・性質、何かしらの「秩序」
- 'More is different.' (数が多いと何かが変わる)



CMPSi

計算物質科学イニシアティブ

**計算物質科学は  
ここから変わる！**