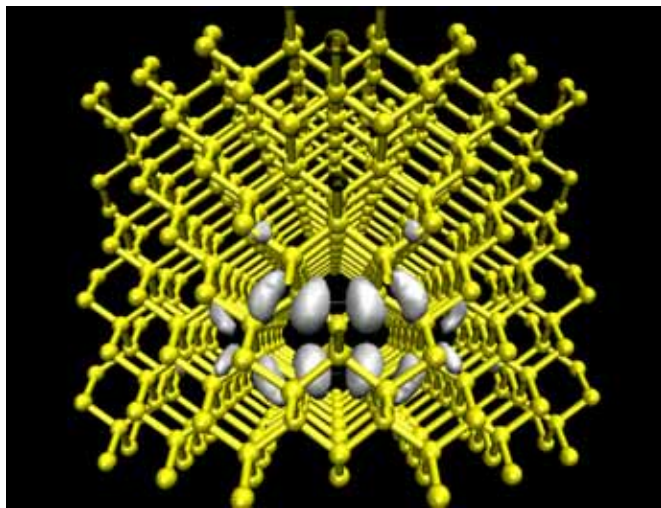

平成18年度の進捗

次世代ナノ情報機能・材料

【平成18年度の進捗状況】

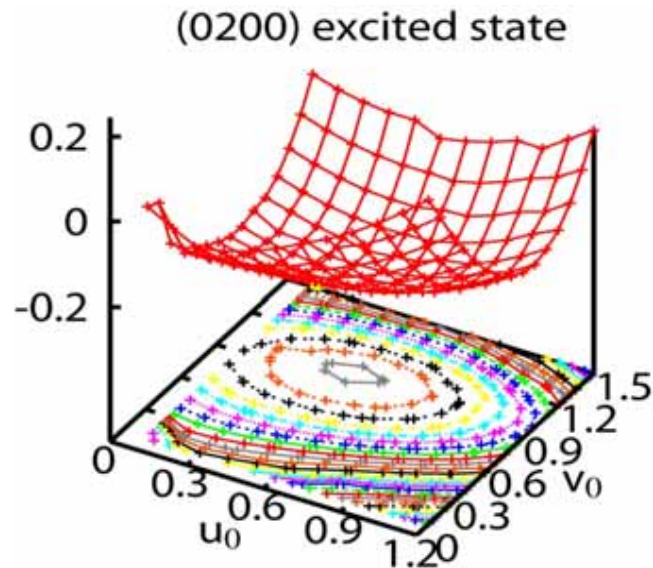
- ・量子モンテカルロ法による磁性半導体設計開発プログラムの作成を行うと共に、格子との相互作用を取り入れたプログラムの作成を行い、大規模電子状態計算のためのソフトウェア開発を進めた。
- ・ナノ磁性体の磁性の発生メカニズムを研究するためのグリーン関数法の並列化を実施すると共に、新しい手法の定式化を行った。また静的・動的な磁気的性質の解明に向けたプログラムを開発し、大規模シミュレーションのための準備を行った。

大規模第一原理計算： 実空間差分法を用いた計算例



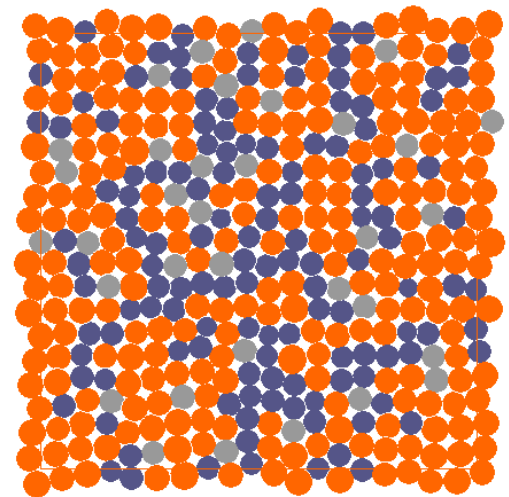
実空間差分法による電子状態並列計算の結果。Siの複原子空孔での深い電子準位の波動関数。

動的密度行列繰り込み群 プログラムによる計算例



密度行列繰り込み群法により計算したバンド充填率1/4の有機塩の励起状態エネルギー。

モンテカルロ法による計算例



大きさが変化する分子磁性体のモンテカルロ計算。オレンジ色の大きな分子は非磁性、小さな分子は上向き(紺色)または下向き(灰色)の磁気モーメントを持って、1次元的に配列。

次世代ナノ生体物質

【平成18年度の進捗状況】

- ・これまで現実的には不可能であった1,000万原子オーダーの大規模系に対する計算に対し、新たにアルゴリズムの開発を行い、次世代スーパーコンピュータで取扱い可能な効率的計算法を確立した。
- ・上記の開発アルゴリズムをターゲットアプリケーションである分子動力学シミュレーションソフトModylasに組み込み、十分な精度で正しい計算が行われていることを確認した。

ソフトウェアの開発

(分子研・岡崎)

1000万原子系のMD計算
1PFlopsの実効性能が目標

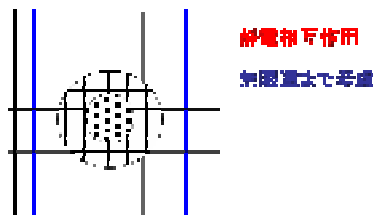
高並列汎用MD計算ソフト modylan

- 超並列化
 - ・完全領域分割化
 - ・多階層分割
- 多種子展開法
 - ・FMM法
 - ・同期境界条件

計算例

- 同域厳密なEwald法 -5.137264608
- FMM法 -5.137275771

分子集団・同期境界条件



解電相互作用
同期境界条件

多種子-多種子相互作用に対するFMM法

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k} \frac{q_i q_j q_k}{r_{ij} r_{jk} r_{ki}}$$

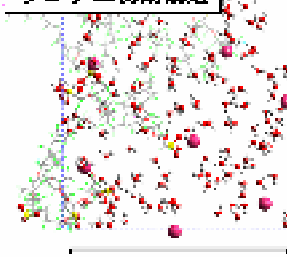
計算例 2

(東レ・茂本)

Nafion膜の
ナノ構造形成

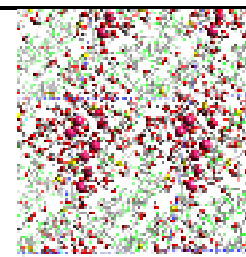
膜のシミュレーションの応用

ランダム初期構造



電荷可変
MD
最適化QE
パラメータ

ナノ相分離構造を再現



計算例 1

(産総研・北浦)

水和効果を取り込んだ
コリスメートミューターゼの全電子計算

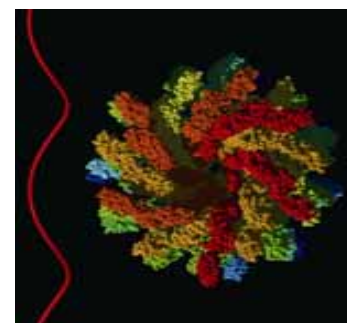


FMO計算
約5,600原子系の
全電子計算

計算例 3

(東大・北尾)

細菌べん毛繊維の分子動力学計算



240万原子系
20 ns

べん毛の運動を解明
・超らせん構造転移
・エネルギー変化が小

次世代エネルギー

【平成18年度の進捗状況】

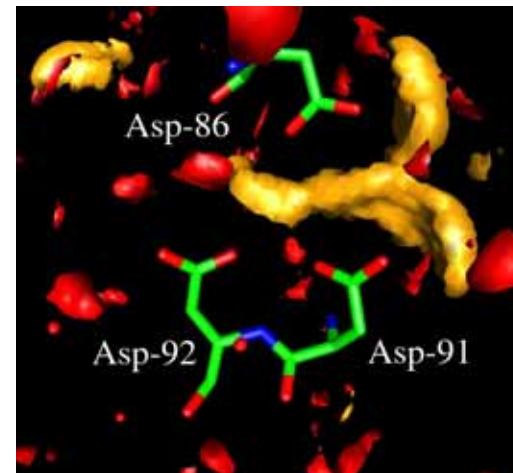
- ・巨大分子がつくる静電ポテンシャルの高速計算アルゴリズムの開発を行い、ターゲットアプリケーションである3D-RISMの加速化を実現。
- ・3D-RISMを用いてタンパク質による分子の認識機構の解明を行った。
- ・グランドチャレンジアプリケーションの中核ソフトの設定を行い、開発に着手した。
- ・グランドチャレンジ課題に沿った研究においていくつかの科学的成果を挙げた。
(その例を図示)

射影演算子法に基づき溶媒を粗視化したMDシミュレーションの方法論を提案
(酵素反応における蛋白質骨格のダイナミクスを実現)

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{P}}_{\eta}(t) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \hat{\mathbf{R}}_{\eta}} \ln \omega(\hat{\mathbf{R}}) - \beta \int_0^t ds \sum_{\alpha} \langle [\delta \mathbf{F}_{\eta}^o(t-s)] [\delta \mathbf{F}_{\alpha}^o(0)]^T \rangle \frac{\hat{\mathbf{P}}_{\alpha}(s)}{M_{\alpha}} + \delta \mathbf{F}_{\eta}^o(t)$$

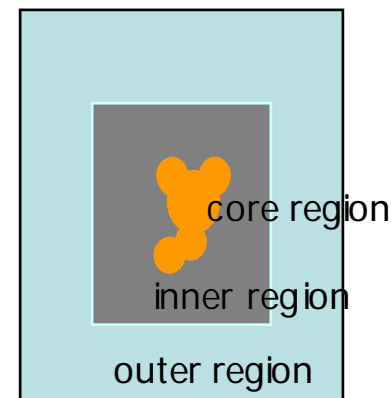
3D-RISM理論により、
蛋白質の選択的
イオン認識を計算

(酵素反応における
もっとも本質的な
プロセスである「分子
認識」問題を解決する
見通しを与えた。)



蛋白質の波動関数がつくる静電ポテンシャルを高速に計算する手法を確立
(酵素反応の自由エネルギー曲面の計算)

$$\phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \infty & r \in \text{core region} \\ \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' & r \in \text{inner region} \\ \sum_i^N \frac{\rho_i}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} & r \in \text{outer region} \end{cases}$$



国際的に見た研究の水準 (学術的活動の成果)

学術活動の成果1 (研究論文 - 発表先、受賞等)

	平成 15年度	平成 16年度	平成 17年度	平成 18年度
学術論文	112報	234報	284報	278報
総説解説	33報	47報	57報	59報
受賞など	3件	4件	7件	13件

学術活動の成果2 (研究発表・講演 - 発表先等)

	平成 15年度	平成 16年度	平成 17年度	平成 18年度
招待講演 (国内会議)	55件	54件	81件	103件
招待講演 (国際会議)	70件	87件	159件	137件
口頭発表 (国内会議)	110件	207件	221件	174件
口頭発表 (国際会議)	68件	130件	121件	124件

代表的発表先	平成 15年度	平成 16年度	平成 17年度	平成 18年度
J. Chem. Phys.	15報	28報	33報	31報
J. Am. Chem. Soc.	4報	8報	16報	8報
J. Phys. Chem.	6報	13報	11報	20報
Chem. Phys. Lett.	14報	25報	14報	17報
Phys. Rev.	15報	30報	37報	27報
Phys. Rev. Lett.	2報	4報	17報	14報
J. Phys. Soc. Jpn.	7報	15報	21報	31報
他	49報	111報	135報	130報
合計	112報	234報	284報	278報

補足資料

中核アプリケーション研究開発計画

中核アプリケーション一覧

グランドチャレンジ課題を達成するために中核となる6本の中核アプリケーションを設定し研究開発を行う。

中核アプリケーション名	責任者		研究グループ
	氏名	所属・部局・職	
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ	押山 淳	筑波大学・計算科学研究センター・教授	次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ複合材料
動的密度行列繰り込み群法	遠山 貴巳	京都大学・基礎物理学研究所・教授	次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ電子材料
大規模並列量子モンテカルロ法	藤堂 眞治	東京大学・大学院工学研究科・講師	次世代ナノ情報機能・材料 次世代ナノ磁性材料
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト (modylas)	岡崎 進	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授	次世代ナノ生体物質
RISM/3D-RISM	平田 文男	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授	次世代エネルギー
高速量子化学計算ソフト	永瀬 茂	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授	次世代ナノ生体物質 次世代エネルギー

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

中核アプリケーションの概要

中核アプリケーション名	責任者氏名	概要
実空間第一原理 ナノ物質シミュレータ	押山 淳	特徴的な長さスケールが10nm以下の素子を利用した次世代エレクトロニクス のデバイス開発をめざす。そのため、10万原子を量子力学的に扱える電子状態計 算プログラムと効率的位相空間探索プログラムからなる、第一原理ナノ物質シ ミュレータを構築する。
動的密度行列 繰り込み群法	遠山 貴巳	電子の強い相関効果に起因する光照射量子現象を解明するため、動的に拡張 された密度行列繰り込み群法を用いて低次元強相関電子系の線形および非線 形光学応答感受率の並列計算を実行する。また光照射により作られた励起状態 の時間発展を同手法で計算し、その緩和過程のシミュレーションを行う。
大規模並列量子 モンテカルロ法	藤堂 眞治	ナノ磁性体や電子系などの量子格子モデルのシミュレーションのためのライブラリ とアプリケーションのパッケージ。並列化された量子モンテカルロ法を中心に、他 にも厳密対角化法などのアルゴリズムの中から最適なものを選びシミュレーシ ョンを実行する。格子構造、相互作用などはXMLを用いて柔軟に指定できる。
高並列汎用 分子動力学 シミュレーションソフト	岡崎 進	任意の分子集合体に対する高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト。長距 離力を含めてナノ分野、バイオ分野における分子動力学計算に必要な計算手法 のほとんどを備えている。IGNITIONと連携。1000万原子系の巨大システムや 自由エネルギー計算にも対応している。
RISM/3D-RISM	平田 文男	液体の統計力学理論に基づき蛋白質などナノ分子の水和構造や水和自由エネ ルギーを計算するプログラム。分布関数(相関関数)に関する積分方程式を解く ために、フーリエ変換を多用する。そのため、高速フーリエ変換(FFT)の速度が 重要である。
高速量子化学 計算ソフト	永瀬 茂	電子状態を正しく記述するための電子相関を取り組んだ大規模量子化学並列計 算を精度高く高速に実行できるようにする。超巨大分子の量子化学計算を実現 するために、FMO法の高速並列化と分子力学との融合法を開発する。

中核アプリケーションの計画と課題 (解決すべき問題点)

中核アプリケーションの計画と課題(1)

中核アプリケーション名		責任者	
実空間第一原理ナノ物質シミュレータ		氏名	所属・部局・職
		押山 淳	筑波大学・計算科学研究センター・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	<ul style="list-style-type: none"> ●実空間格子上での密度汎関数理論計算(RSDFT)の定式化とコード開発。 ●その並列計算機上でインプリメンテーション。 		
平成19年度	<ul style="list-style-type: none"> ●RSDFTの並列計算機(当面は筑波大学設置PACS-CS)上での演算・通信の最適化。 ●位相空間探索手法であるMeta-Dynamics(MeD)法とCar-Parrinell型分子動力学(CPMD)法の結合 		
平成20年度	<ul style="list-style-type: none"> ●PACS-CS上 512-1024 node(ピーク性能 3-7 TFOPS)でのRSDFTによる10,000原子全エネルギー電子構造計算の実行 ●Med+CPMD法の実空間化(実空間格子上計算)の定式化とコード開発、および並列計算機上でのインプリメンテーションと最適化 		
平成21年度	<ul style="list-style-type: none"> ●RSDFTに基づく機能シミュレーションツールの開発整備:電子応答、コンダクタンス、キャパシタンス、分散力記述等。 ●実空間MeD+CPMDによる$10^{**2} - 10^{**3}$個原子群に対する10-100 psec MD計算の実行(想定マシン=並列10TFLOPS超マシン) 		
平成22年度	<ul style="list-style-type: none"> ●RSDFT、実空間CPMD+MeD(RSCPMD-MeD)、およびQM/MMハイブリッドの並列機上での高速化、整備による、ナノ機能シミュレーションの統合化 		
平成23年度 ~ 24年度	<ul style="list-style-type: none"> ●22年度統合化システムの強化 		

中核アプリケーションの計画と課題(2)

中核アプリケーション名		責任者	
動的密度行列繰り込み群法		氏名	所属・部局・職
		遠山 貴巳	京都大学・基礎物理学研究所・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	強相関電子系の光励起状態を理解するには電子間相互作用とともに電子格子相互作用を取り入れる必要がある。動的密度行列繰り込み群法に電子格子相互作用を取り入れるアルゴリズムの開発と線形光学応答感受率計算のためのプログラム改良を行った。		
平成19年度	低次元強相関電子系に存在する様々なタイプの電子格子相互作用を取り入れた動的密度行列繰り込み群法の並列アルゴリズム開発と、それをを用いた線形光学応答感受率計算プログラムの開発のほか、光励起状態の緩和過程を追う時間発展プログラムの並列アルゴリズムを開発する。		
平成20年度	電子間相互作用と電子格子相互作用を取り込んだ非線形光学応答感受率計算の超並列アルゴリズムの開発を行う。その際、計算結果の収束性を向上させるよう工夫する。時間発展プログラムの開発を継続する。開発・評価環境を用いて線形応答感受率プログラムの動作試験を行う。		
平成21年度	非線形光学応答感受率計算アルゴリズムの最適化を図るとともに、時間発展プログラムのアルゴリズムの改良を行い、緩和現象を効率よく記述できるような超並列プログラムを作成する。開発・評価環境を用いて両者のプログラムの動作試験を実施する。		
平成22年度	開発・評価環境を用いた動作試験から得られた問題点を克服するため、非線形光学応答感受率計算や緩和過程計算の並列アルゴリズムやプログラムの改良を進める。		
平成23年度 ~ 24年度	実機による線形・非線形光学応答感受率計算や緩和過程計算を実施する。		

中核アプリケーションの計画と課題(3)

中核アプリケーション名		責任者	
大規模並列量子モンテカルロ法		氏名	所属・部局・職
		藤堂 眞治	東京大学・大学院工学研究科・講師
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	多重並列スケジューラの開発、長距離相互作用系に対するオーダーNモンテカルロ法の開発、擬一次元量子系に対するシミュレーション手法の開発		
平成19年度	オーダーN法の量子系への拡張、格子自由度との結合のある系に対する量子モンテカルロ法の開発、XML入出力フォーマットライブラリの整備、マルチプラットフォームGUIの整備		
平成20年度	量子モンテカルロ法のシミュレーションエンジンの製作、多重並列スケジューラのGridミドルウェア(GridRPC、GridMPI)対応、波数空間モンテカルロ法の開発、拡張アンサンブル法との連携		
平成21年度	量子モンテカルロ法のシミュレーションエンジンの並列化と性能評価、最大エントロピー法エンジンの開発と製作、長距離相互作用系・格子自由度のある系に対する並列モンテカルロ法の実装		
平成22年度	開発・評価環境を用いたアプリケーション全体の動作試験、予備実証計算、実機動作にむけたチューニング、アプリケーション連携ツールによる連携の実証		
平成23年度 ~ 24年度	実機によるソフトウェアの検証、実証計算の実施		

中核アプリケーションの計画と課題(4)

中核アプリケーション名		責任者	
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト (modylas)		氏名	所属・部局・職
		岡崎 進	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	FFTの利用が不可避であり、これまで現実的には不可能であった周期境界条件下での1000万原子オーダーの大規模系に対する長距離力の計算に対し、多極子展開法を利用したアルゴリズム開発を行い、次世代スパコンで取り扱い可能な水準での効率的計算法を確立した。具体的には、開発したアルゴリズムに基づいた実ソフトウェアを作成し、十分な精度で正しい計算がおこなわれていることを確認した。		
平成19年度	上記の方法に基づくと、クーロン相互作用系に対しても実質的に完全領域分割化が可能となる。そこで、これまでに開発してきている現有ソフトに対して上述のアルゴリズムを適用し、相互作用計算の完全領域分割化を行い、超並列計算を可能とする。		
平成20年度	拘束の動力学、微分法的式の数値解等、相互作用計算以外の部分に対しても超並列化を実現し、基本構造として次世代スパコンにおいて所定の性能が実現可能なソフトウェアの開発を行う。		
平成21年度	次世代スパコンの仕様に最適化されたチューニングを行い、実性能としての所定の計算性能の実現を目指す。同時に、熱力学積分法等に基づいた自由エネルギー計算など、付加機能の充実をはかる。		
平成22年度	チューニングを継続実施するとともに、試作機を用いて実性能の評価を行う。また、入出力部分の整備、ソフトのサブルーチン化による整理等、実用ソフトウェアとしての周辺整備を行う。さらには、試作機を用いてウイルスカプシドの全原子計算の予備計算を開始する。		
平成23年度 ~ 24年度	次世代スパコンを用いて、ウイルスカプシドや細胞膜、DDSミセル等のナノ生体物質に対して大規模分子動力学計算を実行し、所定の実性能の達成に対する評価を行うとともに、グランドチャレンジとしてのナノサイエンス研究を進める。		

中核アプリケーションの計画と課題(5)

中核アプリケーション名		責任者	
RISM/3D-RISM		氏名	所属・部局・職
		平田 文男	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	分子認識問題に3次元RISM理論を適用可能とし、構造が決まった蛋白質による水およびイオンの認識を解いた。		
平成19年度	構造が揺らいでいる蛋白質による分子認識(induced fit)を記述するための方法論を構築する。このために、溶液中の蛋白質の構造空間を動的に探索するブラウニアンダイナミクスの手法を開発する。		
平成20年度	前年度に開発した方法をいくつかの蛋白質による分子認識(induced fit)問題に適用し、方法論の有効性を確認する。		
平成21年度	3次元RISMとFMOを組み合わせた手法により酵素(蛋白質)の活性部位に認識された基質分子の電子状態を記述するための方法論を構築する。		
平成22年度	前年度までに開発した方法論を簡単な酵素反応に適用し、方法論の有効性を実証する。		
平成23年度 ~ 24年度	前年度までの研究総括を行い、開発した方法論をセルロース分解酵素反応に展開するための問題点を検討する。		

中核アプリケーションの計画と課題(6)

中核アプリケーション名		責任者	
高速量子化学計算ソフト		氏名	所属・部局・職
		永瀬 茂	自然科学研究機構・分子科学研究所・教授
年度	計画と課題(解決すべき問題点)		備考
平成18年度 (成果報告)	MP2法のエネルギー微分計算の高速並列化を行った。FMO-TDDFT法と並列計算法を開発して巨大分子の励起状態計算を可能にした。		
平成19年度	ラプラス変換MP2法とSCS-MP2法の並列化を行う。高精度計算のために、CSFに基づいた量子モンテカルロ法(CSF-QMC)を開発を始める。また、FMOスキームによるCI法とEOM-CC法を開発する。		
平成20年度	CSF-QMC計算の並列化アルゴリズムを開発する。ラプラス変換MP2法による周期境界条件を用いたエネルギー計算を可能にする。FMO法を拡張して、周期境界条件による電子状態計算を可能にする。		
平成21年度	CSF-QMC計算の高速並列化を行う。マルチレイヤFMO(MFMO)法を基盤とした分子力学との融合法(MFMO/MM)の開発を始める。		
平成22年度	MFMO/MMの高速化をはかり、水和タンパク質などの巨大分子系の分子動力学シミュレーションを可能にする。		
平成23年度 ~ 24年度	開発された量子化学計算ソフトの応用研究より、アルゴリズムとプログラムと総合的チューニングを行い、超並列計算の効率向上を図る		