

March 2012

NO. 4

Torrent

10¹⁶が創り出す 新マテリアル

座談会

計算科学の人材育成：
CMSIで教えたいこと、学びたいこと

インタビュー

アプリケーションferam
開発者・西松 毅

- 3 座談会
CMSIで教えたいこと、
学びたいこと
岩田潤一／下司雅章／山地洋平／吉井範行／
石井明男／小嶋秀和／西村達仁
- 8 アプリケーション開発の最前線から
feramの開発者・
西松さんに聞く
西松 毅 × 久保田好美
- 12 京だより
SC11レポート
チュオン ヴィン チュオンズイ

- 13 拠点研究員のプロフィール
- 14 産官学連携シンポジウム
「界面と組織制御」から
- 15 CMSIカレンダー
- 16 双極子と強誘電体

表紙：「京」を用いた研究が、次々とたくさんの
花を咲かせることをイメージしました。

What's CMSI?



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 (Torrent)へ

計算物質科学イニシアティブ (CMSI; Computational Materials Science Initiative) は、物性科学、分子科学、材料科学を母体とする計算科学研究者で構成されるネットワーク型組織です。文部科学省「HPCI戦略プログラム (SPIRE)」分野2<新物質・エネルギー創成>の助成を受け、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所の3機関を中核拠点とし、11の協力機関、および計算物質科学に関連する大学・研究機関、企業の人たちとともに運営しています。計算物質科学に関連する新規研究テーマや、既存のイベント活動に対しても連携や支援を行

い、開かれたコミュニティをつくっています。CMSIの目標は、世界一の性能をもつ「京」を頂点とするスーパーコンピュータを活用し、物質科学の新たな世代を築いていくことです。主な研究課題としては、超伝導物質や分子の機能発現機構の解明、エネルギーの生成と貯蔵のための次世代技術の開発、半導体デバイスを高速化するブレークスルー、ウイルス等の分子制御機構の解明、希少元素を使わなくても同等な性能が得られる磁性材料や構造材料等の開発があります。また、新たに提案された重要なテーマに対しては、計算資源を提供し、次なる発展を支援していきます。

CMSI活動の特徴は、先端的な研究開発に加えて、計算物質科学の次の世代の展開につながる研究・開発の基盤形成を大きな目的の一つにしていることです。そのために、研究会、シンポジウム、ワークショップ、実習、実験研究者や企業研究者との連携等を通じて、計算物質科学に関心のある人たち、特に若手研究者のネットワークを構築していきます。また、計算機やプログラムの開発・普及を促進するための組織づくりや活動を支援します。さらに、人材育成や教育、広報活動を進めて、計算物質科学の役割を社会に普及させ、理解と興味を促します。

『Torrent』は、若手研究者を取材対象の中心に据え、学生、教員、研究者、企業や一般の人との交流を図ることを目的として創刊しました。「計算物質科学」が特別なものではなく、誰にでも関係する科学であることを理解してほしいと考えています。本誌を通して多種多様な人との出会いが生まれ、それが学問やコミュニティの深化発展にもつながることを期待しています。

写真は左から、毛利哲夫計算材料科学拠点代表、川島直輝計算物性科学拠点代表、常行真司CMSI統括責任者、高塚和夫計算分子科学拠点代表

撮影：由利修一



参考機関数：26大学、4独立行政法人、6企業 (2012年2月時点)

座談会

CMSIで教えたいこと、 学びたいこと

計算科学を担う人材の育成は、CMSIの大きな役割のひとつです。各拠点や機関では、新しい講義が立ち上がり、教育の枠組みやシステムが検討されています。教育担当の教員と大学院生に、それぞれの立場からどんな教育を望んでいるのかを語っていただきました。



石井 明男

大阪大学大学院
基礎工学研究科
機能創成専攻 D1

下司 雅章

大阪大学
ナノサイエンスデザイン
教育研究センター
特任准教授

山地 洋平

東京大学大学院
工学系研究科
物理工学専攻
特任助教

西村 達仁

神戸大学大学院
システム情報学研究所
計算科学専攻 M1

吉井 範行

名古屋大学大学院
工学研究科
附属計算科学連携
教育研究センター
特任准教授

司会：
岩田 潤一

東京大学大学院
工学系研究科物理工学専攻
特任講師

小嶋 秀和

名古屋大学大学院
工学研究科化学・
生物工学専攻 M2

大学院の講義からスタート

岩田(司会) CMSI全体の教育を語れるほど経験豊かではないのですが、前提として計算機の仕組みが複雑になり、研究の片手間にプログラムを書くことが難しくなっています。進歩した計算機を使いこなしつつ、どう研究を進めるか、どうすれば学生さんが入門しや

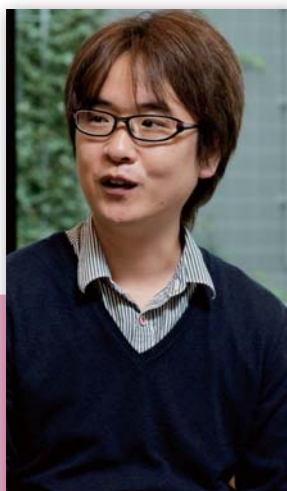
すくなるのかを考えないといけない。

教員のみなさんは、来年度CMSIで何をやる予定ですか。

吉井 教育プランを検討中です。既存の枠組みを少し変えるとCMSIのプロジェクトに合うものがあるので、それを活用します。例えば、分子シミュレーション研究会が主催していた「分子シミュレーションスクール」への協力

を、今年度から開始しました。12月には、CMSIと分子科学研究所の主催で「分子シミュレーションスクール」を開きます。

来年度は、名古屋大学と総合研究大学院大学の既存の単位交換制度を活用し、名大では分子物理化学特論の分子シミュレーションの講義を、総研大では計算科学の講義を取れるように、単位互換にします。


岩田潤一 (いわた じゅんいち)

物性の第一原理計算、密度汎関数計算が専門で、超並列計算機を駆使し、大規模な第一原理計算のコードを開発中です。

を使い倒し、こんなに使えるのだと経験させます。これまでは、阪大サイバーメディアセンターのSX-9を最大8ノードまで使って実施しました。

このワークショップは第一原理計算を学びたい人に人気です。実験の人が理論の研究の門を叩くのは敷居が高いというときにも、大手を振って質問できますよね。

岩田 合宿に参加すれば単位を取れるのですか。

下司 はい、修了証をもらって認定されます。

それから、社会人向けにはテレビ会議システムで夜6~9時に全国配信しており、基礎から応用をひと通り勉強できます。

山地 CMSI全体の教育として、他のすべての教育拠点と連携を行うことが目標ですが、

岩田 分子シミュレーションスクールでは講師をされているのですか。

吉井 はい、並列化の講義をしています。並列コンピュータがどんな構造かという初歩から、OpenMPまでを1時間半に詰め込んでいます。毎回100人くらいの参加者があり、分子シミュレーションが浸透しているという嬉しさがあります。

小嶋 僕も2回行って、周りにも参加している人が結構いますね。

下司 大阪大学では、密度汎関数理論をベースにしたCMD[®](コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン)ワークショップが年2回あり、20回目を迎えます。5日間の合宿形式で、大阪大学では大学院の単位になる一方、社会人教育のプログラムの必修単位でもあります。これらと無関係の一般の方も参加しています。4コースあり、初心者を対象とするビギナーコース、その発展版のアドバンスコース、さらに上のエキスパートコース、そして、2010年からスパコンコースを開講しました。これは、少人数でスパコン


下司雅章 (げしまさあき)

第一原理計算、DFTの計算が専門で、高温・高圧下で合成する新物質の設計をしています。大規模計算では、オーダーNタイトバインディング法をMPIで並列化し、原子200万個程度を扱った経験があります。


吉井範行 (よし のりゆき)

分子動力学計算を用いて、生体膜と薬物との相互作用や、薬物の膜透過現象について調べています。

ど時間発展の数理です。それと、実際に簡単なところからフルスクラッチで実装して、MPIとOpenMPで並列化まで実習してもらう計画で、120並列まで自由に使えるPCクラスター環境を用意しています。

吉井 その講義は何人ぐらいを想定されているのですか。

岩田 80人が入れる演習室を予約していますが、その半分ぐらいを見込んでいます。

山地 最終的には、各拠点の講義を配信してもらったり、われわれの講義を他にも配信することを考えています。他のCMSIの教育拠点との単位互換制度が今のところ存在しませんので、東京工業大学やお茶の水大学など近場から始めて実績を積んで、下司先生、吉井先生と連携して講義の配信をしていくことを考えています。

計算機科学との交流も教育

岩田 学生さんとしては、講義にどんなことを期待していますか。

石井 研究の実用に耐えられるほど並列計算ができるようになるには、けっこう勉強しなければいけない。僕らは応用がしたいのですが、そこはどう考えたらいいのでしょうか。

吉井 CMSIには両面があって、世界一の計算ができる「京」でコードを開発する人と、それを使って実際の研究をしたい人がいます。ユーザーとコードを作る人を別々に教育しないと。

山地 「実用」というところが問題で、並列化といっても、モンテカルロ法だと100並列ぐらいまでは専門的な勉強をしなくてもできる。

吉井 既存のコードがあればそれを使えばいいのですが、特に分子動力学(MD)では「この計算にはこのルーチン」ときれいに切り分けることができない。コードがない場合はそれを作る場所から研究になってしまう。

岩田 よく使われる計算を集めたライブラリとこのありますから、それに自分のプログラムをリンクさせるのも一つの手ですね。

吉井 確かに、自分で書いたものは下手くそ


山地洋平 (やまぢようへい)

銅酸化物超伝導体等の強相関電子系の解析的理論研究で学位を取り、多体電子系の数値計算を現在行っています。今後、1万~10万並列のコード開発に携わる予定です。



分子シミュレーションスクール(CMSI/TCI、分子科学研究所、分子シミュレーション研究会)。
©CMSI/TCI、分子科学研究所、分子シミュレーション研究会

で遅い部分があり、それを行列計算の速いライブラリに置き換えると、突然性能が上がることがあります。

下司 数値計算に本腰を入れるのは難しいですが、知っておくべきこともあります。数値計算の専門家から情報ももらっては? CMSIが交流をリードする必要がありそうです。

岩田 交流が教育になるということですね。

下司 われわれは使ってメリットがあるが、作る側は使われてこそ価値があるので、われわれと共同研究するメリットがある。それが新しいアルゴリズムの開発などに発展するといったニーズとシーズがマッチングする場がほしいですね。

小嶋 僕は、プログラムを書いて原理を理解することに興味があります。できたら自分で書きたい。今やっているのは1次元の反応ですが、3次元にするなど拡張の余地があり、そうなる自分で書くしかないでしょうね。

山地 学生さんがそういう興味をもってくださると有り難いですね。

下司 東大生産技術研究所では日立製作

所から専門家を呼び、半期でプログラムを書かせる猛烈トレーニングをしています。

西村 並列化について開かれる講義は院生向けですか。

吉井 単位互換は大学院ですが、学部教育でも物理化学実習に分子シミュレーションを取り入れています。

下司 今のワークショップは大学院以上が対象で、社会人も修士以上です。これはユーザーの養成なので、学部や社会一般に向けて、シミュレーションはこんなに役に立つという普及活動をして、計算科学を本格的にやりたい人をもっと集めたいですね。

山地 学部から教育するのは賛成ですが、4年生は実験があり、統計力学や量子力学も勉強しなければいけない。そこに、数値計算をどう入れ込むか、モチベーションをどうやってつくるか。

下司 社会人はモチベーションが明確です。自分の研究の方向づけを第一原理計算に求める人もいるし、マネジメントの立場の人は第一原理計算の知識が外せなくなってきました。

大規模計算への道はそれぞれ

岩田 学生さんたち、これからどんな研究を。

小嶋 進学して、溶液中のプロトン移動反応の研究を続けます。今扱っているのは分子内の反応ですが、分子間や3次元な反応にまで拡張したいです。分子間反応になると、多数の分子が関わるので、より難しくなります。

岩田 計算量の問題だけでなく、方法論が確立されていないので、理論の開発、プログラム作りも全部やらなければいけないのですね。

吉井 石井さんがやっている固体中の炭素拡散の解析も同じような状況では。

石井 手法そのものはできているのですが、大規模計算がすぐに必要ということではありません。今は小さな系を使って、できるだけ計算量をおさえ、現象をスマートに解析するのがうちの研究室の流儀らしいです。計算



石井明男 (いしい あきお)

固体物理の研究室に在籍しており、統計力学的なアプローチを用いてMDを加速する研究、またそれを固体内部の解析に応用する研究をしています。

機は、並列計算ができるような20並列、コア8個程度のものが並んでいます。

岩田 西村さんは並列計算を念頭においたプログラム開発をされている。

西村 研究室のPCクラスタでは1コア、これから並列計算にもっていく段階なので、1ノードしか使っていませんが、将来は「京」で流せるような大規模並列向けのプログラムにしたいです。

岩田 既存の計算法の並列化だけでなく、アルゴリズムから考えているのですね。

西村 そうです。並列化を教わったのは研究室に入ってからです。

岩田 西村さんは情報系なので、もっと使っているかと思いました。

西村 3回生用にMac4台を並列化して使う実習があるので、基礎知識を備えた学部生もいます。1年前に計算科学の専攻ができて、並列計算の勉強も始めたところです。

山地 アルゴリズムやコード開発の分野が評価されているのですか。

西村 研究室は化学が中心ですが、情報系

の人間が研究室に入って、さあ化学をやれと言われても難しい。評価されるかどうかはさておき、やはりコンピューティングになります。コンピューティングは何か結びついて初めて意味があるので、適用する分野をしっかりと勉強する必要はあると思います。

岩田 では、化学の勉強もしている。

西村 量子力学の理論の授業を受けていますが、そこは苦勞しています。でも、スパコンを使いたくて計算科学の道に入ったので、こちらは楽しいです。大規模なスパコンを使う実習形式の授業がほしいですね。

下司 「京」を使ってみたいですか。

西村 はい、計算速度がどんどん上がるのが魅力です。

岩田 小嶋さんは大規模計算をやっていくことになるでしょうが、プログラムを書いたことは？

小嶋 簡単なMDのプログラムをFortranで書いたことはあります。

吉井 並列化の指導は何か受けましたか。

小嶋 まったく。研究室にある本で勉強しました。



小嶋秀和 (こじま ひでかず)

溶液中の分子内プロトン移動反応のMDシミュレーションをしています。プロトンは軽いので量子的に扱う必要があり、手法は発展途上です。

岩田 石井さんは今の計算規模で十分やっつけていけるということでしたが、自分でプログラムを書きますか。

石井 研究室にメインのMDのプログラムがあって、それを自分の研究に合わせて改良しています。

吉井 統計力学を用いてシミュレーションを加速するというお話ですが、マルチカノニカル法のようなイメージですか。

石井 それに近いですね。もともとのモチベーションとしては現実の事象を解析したいというのがあって、そのためには時間スケールを上げないと、つり合いがとれない。なんとかして時間スケールを上げたいのです。

岩田 計算機を使いこなすというよりは、手法を改良していきたいということですね。サンプリングはどこがネックになるのですか。

石井 サンプリングはMDと同じです。

下司 そうすると、研究室の外のもっと速い計算機にもっていくと、びっくりするほど速くなる可能性もある。壁もあるでしょうが、外の世界を見ることも大切です。

山地 目の前のことをやるだけで忙しいのはわかりますが、壁の外に行ってみるのもいいなという気持ちだけはもってほしい。そう目を向けさせるのもわれわれの仕事なのかもしれないですね。

いつでもどこでも聞ける授業を

吉井 石井さんは、どんな教育システムで研究室のテーマまで到達しましたか。昔は自力ではい上がった者だけ残れば結構というスタンスでしたが、効率が悪すぎます。

石井 必要なときに議論する程度で、あとは自分で研究を進めていくといった感じです。プログラムの使い方は学生どうして教え合う



コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD[®]) ワークショップ
© <http://ann.phys.sci.osaka-u.ac.jp/CMD/index.html>

べしと。

小嶋 僕は、助教の研究論文を渡され、プログラムの使い方を多少教わります。

下司 CMSIではカリキュラムを考案中です。プログラムを作ることを想定したら、もっと実践的な話、詳しい数値アルゴリズムの話、計算機アーキテクチャの話などを聞きたいですか。

石井・西村・小嶋 聞いてみたいです。

下司 どこでも聞けるオンデマンドの授業をもっと広げて、化学だけでなく、ほかの分野まで聞けるようにしては。

石井 それに、いつでも聞けるビデオ形式にできたらうれしいです。

下司 阪大のプログラムは録画があり、その場でも、あとからでも聞けます。

山地 そのときに、登録していないと見られないのでは不便です。課金なしで見られればベストですが、著作権の問題が気になります。

下司 阪大では講義の受講生はIDとパスワードで見られます。著作権のこともあり、ストリーミングのみです。

講義した内容というのは、これまでは使い

捨てにされてきました。しかも、蓄積したノウハウは自分の学生にしか伝わらない。せめて日本のコミュニティに残すべきですね。

岩田 クリックしたらすぐに見られる講義は便利ですが、それで単位は取れない。

石井 それでいいです。さらに、気軽に質問できて、答えてくれれば。

岩田 CMSI版「教えてgoo」をつくるというかな。

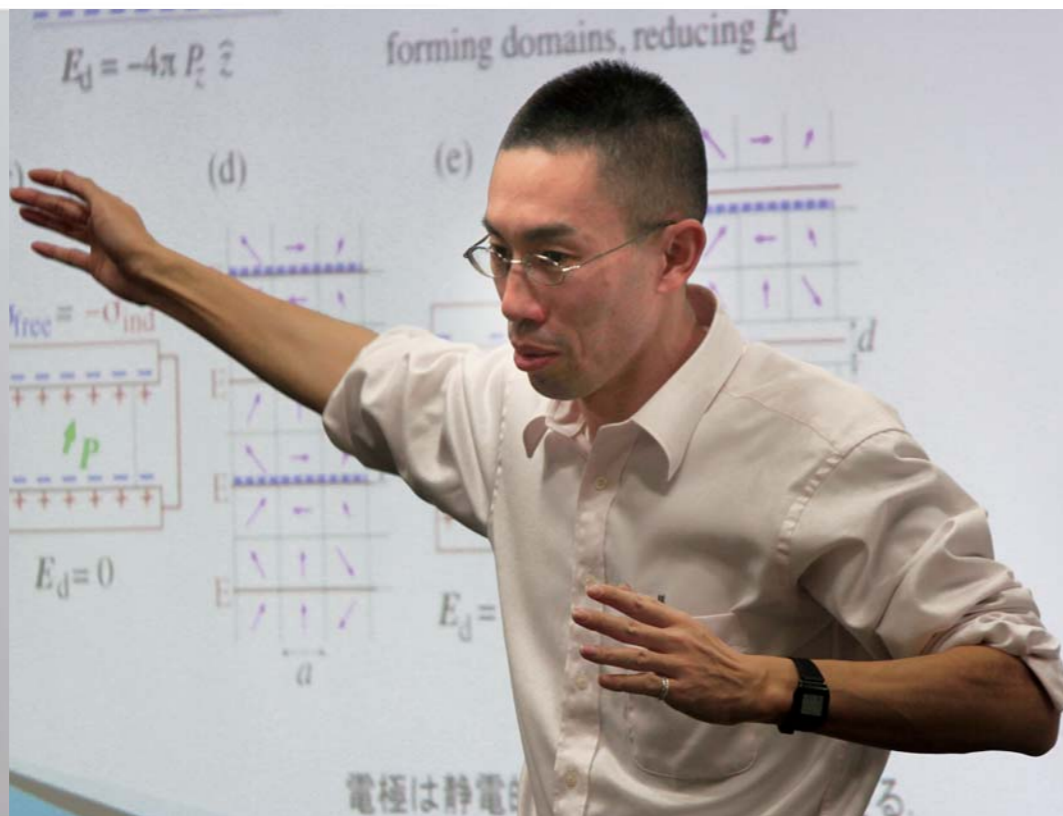
下司 それは拠点研究員などのグループでサポートするかが考えられますが、質問に答えてもらうには少なくとも授業には出ていないと。

岩田 いろいろなご意見が出ましたが、研究に計算機を使うニーズはますます多くなっています。本業の時間を削らずにすむような教育をわれわれは提供しなければいけない。さらに、並列化やチューニング、プログラミングツールについての講義をどうやって広めるか、CMSIだけでなく日本国内への普及システムも提案していきたいと思っています。

(2011年12月8日 CMSI神戸拠点で収録)

撮影：由利修一

アプリケーション開発の最前線から feramの開発者・ 西松さんに聞く



話し手：
西松 毅 (にしまつ たけし)
東北大学金属材料研究所 助教

聞き手：
久保田 好美 (くぼた よしみ)
東京大学 大学院理学系研究科
地球惑星科学専攻 博士課程2年

電子部品の材料として面白い特性をもつ強誘電体。強誘電体を応用したメモリFeRAMはパソコンをはじめとした最先端のデジタル機器への搭載が期待されている。西松さんが開発したferamはFeRAMなどに使われる薄膜コンデンサをシミュレーションするソフトウェアだ。難しいとされてきた高速シミュレーションが可能となった背景には西松さん独自のアイデアがあった。

不揮発性メモリFeRAMへの期待

「強誘電体」という言葉を聞いたことがあるだろうか。電気を通しにくいセラミックスなどでは、外部から電場をかけると、物質自身に電荷の偏り(分極)がおこる。こうした性質をもつものを誘電体と言い、この中には桁違いに大きな分極がおこるものが存在する。それ

が強誘電体だ。強誘電体は、分極が大きいだけでなく、外部から電場をかけなくても自発的な分極が残り、さらに反対の電場をかけると強誘電体内の電荷の偏りが反転する性質ももつ。強誘電体として知られているのが、チタン酸バリウム(略してチタバリとも言われる)やチタン酸ジルコン鉛(PZT)などのセラミックスだ。チタン酸バリウムは1942年にアメ

リカ、1944年に旧ソ連と日本でほぼ同時に発見されて以来、その高い誘電率が材料分野で注目され、実用化にむけた研究が盛んに行われてきた。

近年、強誘電体の応用例として特に注目されるのが、コンピュータに搭載されるメモリだ。パソコンの小型化、高速化が加速する中で、新しいタイプのメモリが求められている。PZTなどの強誘電体の薄膜を集積して作られるFeRAM(強誘電体ランダムアクセスメモリ)の開発はその一つだ。FeRAMは強誘電体を使っているため、電源を切っても記憶が消えないメモリ(不揮発性メモリ)を作ることができる。FeRAMが搭載されれば、電源を入ると同時に電源を切る直前まで使っていたアプリケーションをすぐ使うことができるなど、パソコンの消費電力を大幅に削減できる。

しかし、FeRAMをパソコンのメモリとして搭載するには課題が残されている。現在、FeRAMは、ICカードに用いられるなど実用化の例もあるが、大量のコンデンサとして集積するパソコンのメモリ用にするには微細化がまだ十分ではないため、実用化には耐えられないのだ。その原因の一つが、電極と強誘電体薄膜の間に分極がおきにくい不活性層が発生することだと言われる。ところが、具体的にどのような現象がおこっているのか、数十nmの微細な薄膜の分極をその場で直接観察することは難しい。そこで、コンピュータシミュレーションでの研究が大きな役割を果たすことになるのだ。

双極子のふるまいを計算する

西松さんが開発したソフトウェアferam(エフイーラム)は厚さ数十nmという現実と同等な薄膜サイズでのシミュレーションが可能な分子動力学のソフトウェアだ。feramはフリーソフトウェアとして世界中に公開されており、誰でも自由にプログラムを使用、改良し、再配布することがで

きる。現在、検索エンジンGoogle(グーグル)で「feram」を検索すると、日本語サイトで6番目に、Bing(ピング)では10番目にランクされ、ダウンロード数は延べ900件以上になる。

「私もフリーソフトウェアの恩恵を受けているので、私の研究を誰もが追実験できるようにferamも公開しました。ソフトウェアの名前はFeRAMに合わせてferamとし、インターネット上で検索しやすいようにしたんです。メモリの開発者や研究者にもferamを使ってほしいですね」と西松さん。

では、ソフトウェアferamは強誘電体薄膜をどのようにシミュレーションするのだろうか。

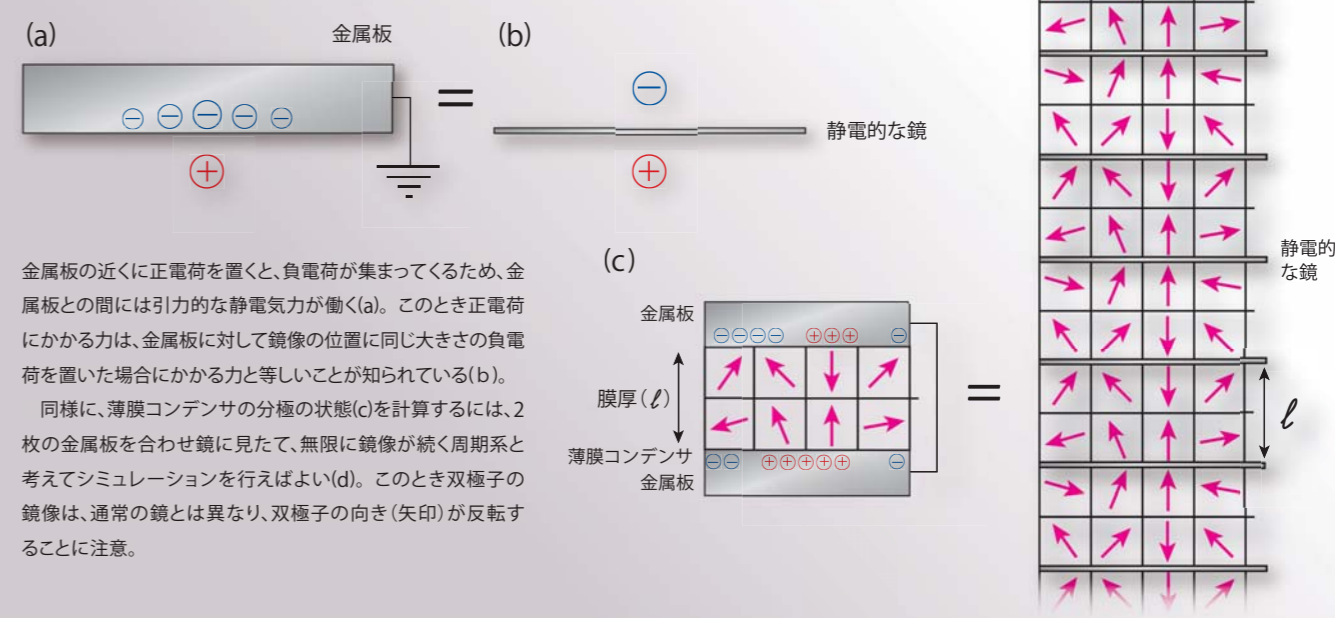
このシミュレーションを理解するには、「双極子」という概念を使うとわかりやすい。負の電荷をもった電子は誘電体の中を自由に動くことはできない。では、なぜ電気的な偏りができるのか。誘電体を電場の中におくと、結晶中の原子の位置がわずかにずれることによって微小な領域に電気的な偏りが生じる。これは、正と負の点電荷が微小な距離で離れて存在すると考えることができる。この状態を電気双極子あるいは双極子と呼んでいる。これら

の双極子の動きによって、物質全体の電気的な偏りが決まるというわけだ。

強誘電体薄膜シミュレーションの第1段階として、まず対象とする強誘電体の物性を第一原理計算で決める。チタン酸バリウムの場合は、チタン原子とバリウム原子が1原子ずつ、酸素原子が3原子入っている一辺が0.4nmの立方体の単位格子が計算の対象だ。格子定数や弾性定数、格子振動の様子(フォノン物性という)は第一原理計算で比較的簡単にかつ高精度に求めることができる。

次は、原子の変位の大きさとエネルギーの関係について調べる。強誘電体の特徴は、自発分極がおこることだ。分極するとはつまり、原子が変位することを意味する。単位格子内の原子を変位させると格子全体のエネルギーも変わるが、西松さんは第一原理計算ソフトウェアABINITを改良し、原子の変位に対してエネルギーが最小となるいろいろなパラメータを決めることができる手法を開発。feramとともに活用している。これらのパラメータは有効ハミルトニアンとして構築され、

図1. 薄膜コンデンサの中の分極状態のシミュレーション





西松 毅 にしまつ たけし

西松さんはアメリカ、インドと海外での研究経験が豊富だ。インド留学中に、feramの合わせ鏡のアイデアを思いついた。「バンガロールの近くのシヴガンガという聖地へのハイキングの前日、受け入れ教官のWaghmare教授と議論しているときに合わせ鏡のアイデアを思いついたんです。徹夜で考えたので、次の日の登山はくたくたでしたが、インドで悟りを得たのでしょうか」と笑う西松さん。なんとも面白い偶然だ。

feramでの分子動力学計算で必要になる。

「第一原理計算によって有効ハミルトンのパラメータを25個も決めます。これだけ決めるのは難しいですが、自動的に簡単に計算できるように工夫しました」。

西松さんが魂をこめた研究の一つだという。

第一原理計算で求めた25個のパラメータの情報を用いて、feramで分子動力学計算を行う。feramでは、双極子同士の相互作用をどう表すかがポイントだ。双極子同士は、お互いの距離の3乗に反比例して力を及ぼしあう。スーパーセルと呼ばれる数十×数十×数十個の格子状に並んだ単位格子一つ一つに双極子をおき、双極子同士に働く力を計算し、双極子の運動を、時間を追ってシミュレーションする。第一原理計算では取り入れるのが難しい温度や外部の電場など条件を変化させつつ、シミュレーションできるのがferamの特徴だ。

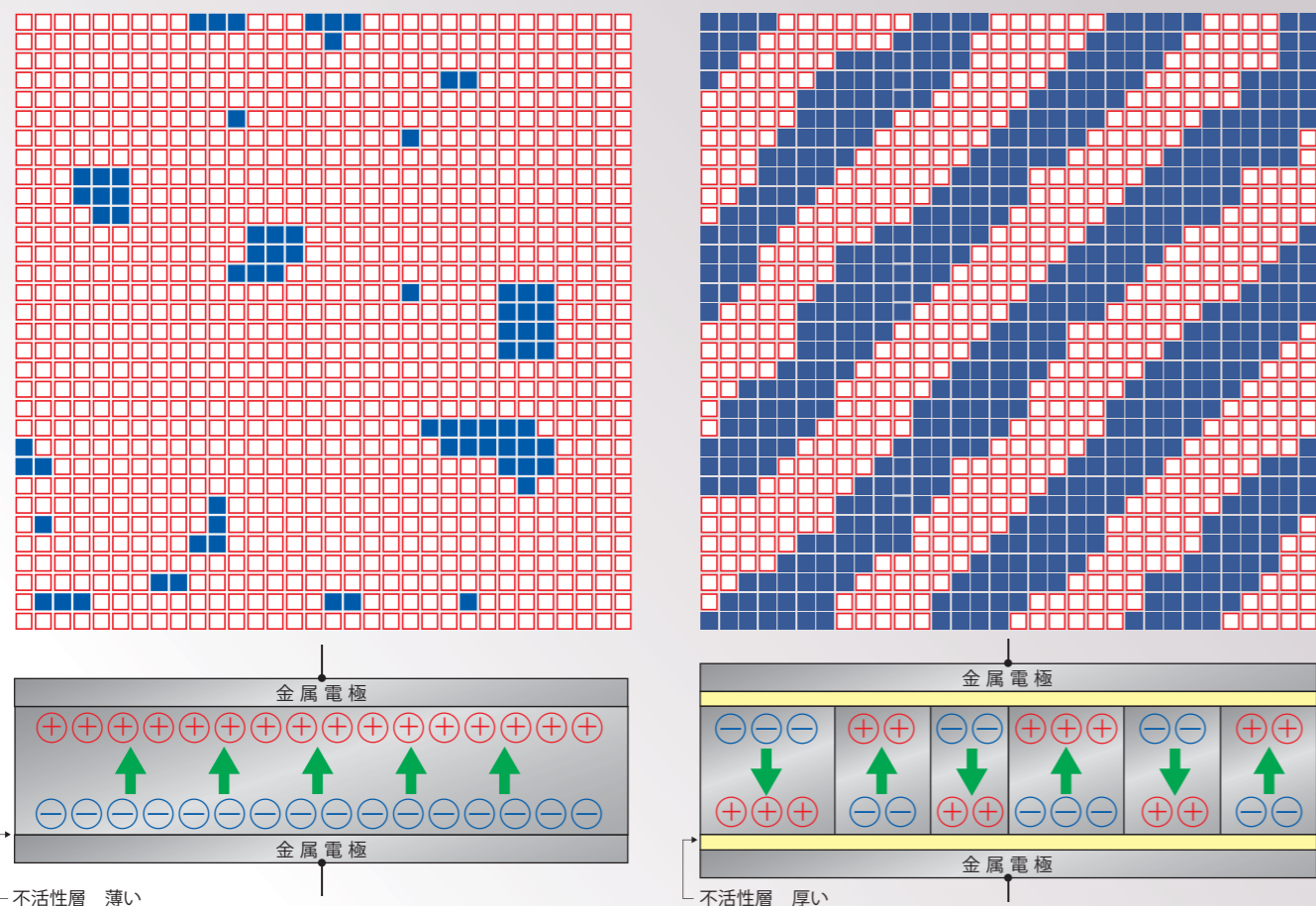
れた双極子の影響が大きくなるために、シミュレーションする物体のわずかな形の変化で全体の双極子の動きも変わってしまう。特に問題となるのが物体の端をどう扱うかだ。巨視的には物体とそれ以外の空間の境目ははっきりしているようでも、微視的には、境目付近で電子が複雑にふるまう。そこでは、物体と空間の境目をはっきりと決めることができないため、シミュレーションが難しい。この境目の問

feramで高速フーリエ変換を実現

双極子同士の力の特徴は、異方的な長距離力であることだと西松さんは言う。遠く離

れた双極子の影響が大きくなるために、シミュレーションする物体のわずかな形の変化で全体の双極子の動きも変わってしまう。特に問題となるのが物体の端をどう扱うかだ。巨視的には物体とそれ以外の空間の境目ははっきりしているようでも、微視的には、境目付近で電子が複雑にふるまう。そこでは、物体と空間の境目をはっきりと決めることができないため、シミュレーションが難しい。この境目の問

図2. 薄膜コンデンサにおける分極の分布



上図の赤いセルは上向き分極を、青いセルは下向き分極を表す。下図はその側面図。不活性層が十分に薄い場合は、電極からの電場により一様で大きな自発分極が現れる(左図)。一方、不活性層が厚くなると、ドメイン構造が生じ分極が打ち消しあうため、全体としての自発分極は小さくなる(右図)。

題自体も面白い研究テーマなのだが、今回の目的のようなある程度大きな系の挙動を知りたい場合には、やっかいな問題となる。また、双極子同士の相互作用が長距離力であることによって、端がある(有限)系と無限系では、計算結果が異なるという問題もおこる。

加えて、有限系では計算方法においてもデメリットがあった。双極子同士の長距離力を現実的な規模で計算しようとすると、非常に時間がかかってしまう。厚さ数十nmとは言っても、双極子の層に換算すると100層以上の大規模な計算なのだ。

「端の問題と計算速度の問題は悩みの種でした。ところが、あるとき、研究者との議論の中で両方の問題を解決できる、すばらしいアイデアを思いついたんです」と生き生きと語る西松さん。それは、どんなアイデアだったのだろうか。

薄膜コンデンサとは、強誘電体の薄膜を金属の2枚の板で挟んだ構造をしている。ここで、強誘電体薄膜が自発的に分極していれば薄膜の表面に電荷が現れる。もし、2枚の金属の板が電線でつながっていれば金属中の電子は自由に動くことができるので、金属板の表面には薄膜とは反対の電荷が現れる。あたかも薄膜と金属の間に鏡があるかのように、同じ大きさで符号の違う電荷が金属板に現れるのだ。2枚の金属板の間に強誘電体を挟むコンデンサの構造だと、2枚の金属板があることによって合わせ鏡のような

Application SPEC Sheet [feram]	
コード名	feram
方法・アルゴリズム	第一原理有効ハミルトニアンに基づいた分子動力学法
コードの概要・特徴	双極子-双極子相互作用を高速フーリエ変換(FFT)で計算するので高速。パルクだけでなく強誘電体薄膜コンデンサのシミュレーションも可能。GNU Autotoolsを用いているので、各マシンでのコンパイルと開発が容易。
シミュレーションの対象となる物質	ペロブスカイト型強誘電体
開発責任者	西松 毅
開発者・開発機関一覧	東北大学金属材料研究所川添研究室
開発期間	2005年インド・バンガロール滞在中、Umesh V. Waghmare教授の下で開発開始
開発言語・ソースコード行数	Fortran, 3500行, オブジェクト指向プログラミング(OOP)を採用
動作環境	SR11000, FX1, GNU/Linux, GNU Fortran, Intel Fortran 等
並列化方法	OpenMP, コンパイラの自動並列化
並列化の状況	SR11000の1ノードで高速に動作
ソフトウェアの公開	フリーソフトウェアとして http://loto.sourceforge.net/feram/ から公開
関連/競合するアプリケーション	海外の2~3のグループが同様のものを独自に開発。フェーズフィールド法もライバル

役割を果たし、強誘電体の像が合わせ鏡の向こうに無限にあるような状態が生まれる(図1)。つまり、計算したい領域は薄膜だけなのだが、その鏡像が薄膜の上下に無限に続いていくと考えることができる。

「合わせ鏡のアイデアを思いついたときは、「これだ!」と思いましたね。feramでは、仮想的に薄膜を無限で、かつ周期的な構造として計算することによって、高速フーリエ変換を用いることができるようになり、これまでよりもずっと速い計算が実現できました。強誘電体薄膜コンデンサのシミュレーションを高速フーリエ変換で行っているのは世界中で私のferamだけです」。

すでに西松さんの研究では、外部から与える電場の変化によって薄膜の電荷の偏りがどう変わるかを示すヒステリシス・ループを不活性層がある場合で計算し、不活性層が強誘電体コンデンサの性能にどのよう

にどんな悪影響を及ぼしているのかを明確にした(図2)。

今後の研究の方向としてスパコンを用いた新しい展開も考えているそうだ。このシリーズで紹介してきたModylasやRSDFFTは、ノード間の通信を工夫することで、なるべくたくさんノードを使った大規模な計算を行おうというものだった。feramの場合は、使うノードは一つだけである。

「材料開発においては、相図を描くことが重要です。温度や外部電場の変化に応じて物性がどう変わるか、スパコンの大きな容量を利用し(キャパシティコンピューティング)、1ノードの計算を、条件を変えてたくさん行うことで、相図を描くための統計的なデータを集めることができます。feramを使って、スパコンの新しい利用法を開拓していきたいです」。

feramはスパコンの新しい可能性を広げてくれそうだ。



久保田 好美 くぼた よしみ

◆ インタビュー後記

電気双極子は目に見えないので、なかなか理解しにくい。西松さんは、電気双極子に見立てた磁石で双極子の動きを説明してくれた。ほかにも、強誘電体デバイスの一つである圧電素子が、電圧をかけると音が出るスピーカになり、叩くとLEDが点滅する振動センサになる実験を見せてくれた。こうして誘電体の性質をイメージするインタビューはとても楽しいものだった。



2011年11月12日から18日まで、私は米国シアトルで開かれたSC11に出席しました。

SC(かつてのSupercomputing)は、ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)、ネットワーク、ストレージ、分析に関する国際会議です。1988年以来、計算機に関わるほぼすべての分野に、情報交換と課題検討の場を提供してきました。今回のSC11には約1万1000人が参加。投稿された論文数は350以上で、その20%が採択されました。また、23のワークショップと33の大学を含む349グループの展示がありました。

私たち JAISTは、OpenMXやGreen Cloudなどの研究活動を紹介するため、ブースにおいて3次元液晶ディスプレイによるシミュレーション結果の上映やO(N)大規模第一原理計算に関するポスター展示などを行いました。また、CMSI拠点研究者として、HPC分野の最近の進歩について学ぶため、ゴードンベル賞のファイナリストによる講演やHPCチャレンジ賞、TOP500、GPUによる計算、密度汎関数法(DFT)、性能分析と最適化などのセッションに参加しました。

のセッションに参加しました。

今回の国際会議では「京」コンピュータの存在は際立っていました。ゴードンベル・ピーク性能賞受賞、HPCチャレンジにおけるすべてのベンチマーク第1位、TOP500第1位という3つを独占したのです。

一方、多くのセッションが並行して行われました。その数があまりにも多く、また商業色が強く、学術的な国際会議とは言いがたいなど、SC11も完璧とは言えません。しかしながら、GPUがDFTや量子色力学(QCD)計算に応用され成功を収めつつあり、今後ますます広まっていく動向がつかめました。すでにベータスケールのアプリケーションも登場し、今後10年以内にはエクサスケールのスーパーコンピュータも実現すると期待されています。エクサスケールはおそらくマルチコアのCPUとGPUからなるハイブリッド型、あるいはARMアーキテクチャによる統合チップとなるようです。また、ハイブリッドプログラミングや非ブロッッキング集団通信のサポートが加わる次期MPIについて、最新の情報を得ることができ



北陸先端科学技術大学院大学 (JAIST) のブース



スーパーコンピューティングの未来はスーパーフォンになるか?

ました。将来のスーパーコンピュータにおけるスケーラブルかつ互換性のあるアルゴリズム開発の指針についても、学ぶことができ、SC11への参加は私にとって非常に意義深いものでした。

撮影：チュオン ヴイン チュオン ズイ

2011年 ゴードンベル・ピーク性能賞を受賞

「京」を用いた研究成果「シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算」が2011年のゴードンベル・ピーク性能賞をみごと獲得した。

実空間密度汎関数法RSDFT (『Torrent』No.3で紹介)を用いた第一原理計算で、10万シリコン原子からなるナノワイヤのシミュレーションを行い、実効性能3.08ペタフロップス(実効効率43.6%)を達成。2004年の地球シミュレータ(初代)以来、7年ぶりのピーク性能賞受賞をなしとげた。

写真の前列左から2番目がRSDFT 開発者の岩田潤一さん。
画像提供：理化学研究所



拠点研究者のプロフィール

2011年9月1日から2012年2月29日までにCMSIに採用された拠点研究者を紹介しています。

河津 励 かわつ つとむ

分子科学拠点研究者
京都大学福井謙一記念研究センター

名古屋大学大学院で生物物理化学理論を専攻、理学博士号取得。京都大学福井謙一記念研究センターでブリッジを媒介とする励起エネルギー移動を研究。

応募の動機

自然科学の数値計算には、大規模で精度の良いサンプリングが必要です。そのための大規模並列計算機の活用技術を獲得したいと考えました。

ミッション/役割

経路積分法のための第一原理分子動力学法に用いる計算手法の高速化と、第一原理分子動力学法による高効率なサンプリングを行うための計算手法に関する開発を行うことです。

抱負

精度と速度を両立させながら量子化学的なプロパティを統計的に扱えるようなサンプリングシミュレーション手法を確立することが目標です。



Guo Zhi-Xin グオ・ジシン

物性科学拠点研究者
東京大学大学院工学系研究科

復旦大学(中国・上海)で計算物理学専攻、博士号取得。実空間DFTコード開発を研究。

応募の動機

研究の範囲を熱伝導から電子伝導へと広げ、さらに古典的な分子動力学から第一原理へ研究手法を展開していきたいと考えました。

ミッション/役割

C/Si 材料の電子構造を、実空間DFTコードを用いて計算し、実空間DFTの開発に貢献すること。



抱負

伝導性計算に有効なコードを開発し、ナノスケールデバイスの輸送特性について新しい発見をしたいと考えています。それから、日本でたくさんの友人をつくりたいですね。

Truong Vinh Truong Duy チュオン ヴイン チュオン ズイ

物性科学拠点研究者
北陸先端科学技術大学院大学先端融合領域研究院

北陸先端科学技術大学院大学で情報科学を専攻、博士号取得。同大学でグリーンクラウド技術を研究。ベトナム・ホーチミン市出身。

抱負

情報科学と計算物質科学の境界をこえた融合領域研究のロールモデルになりたい。

応募の動機

融合領域研究で計算物質科学に情報処理技術を生かしたいと思い、応募しました。

ミッション/役割

次世代スーパーコンピュータ向けの大規模アプリケーションのハイブリッド並列化を実現し、チューニングすること。



拠点研究者の ミッション

カテゴリA

先端的な要素技術・アルゴリズムの開発

例：行列対角化、逆行列、FFTなどの並列化アルゴリズム開発など

カテゴリB

分野共通アプリケーションの開発・公開・普及

例：電気伝導率計算、行列対角化プログラム、量子MC法など

カテゴリC

複数課題の推進を通じた分野振興

例：並列化を含むアプリケーション高度化など

カテゴリD

ポータルサイト開発・管理/アプリケーション公開・普及

例：ポータルサイト開発・運営、ライセンス管理



産官学連携シンポジウム「界面と組織制御」から

2011年12月7日 場所：東北大学金属材料研究所

今回の産官学連携シンポジウムは、12月6日、7日に開かれた計算材料科学研究拠点第2回シンポジウムとの共催で、2日目午後に行われました。まず、「界面と組織制御」のテーマに沿った企業での計算材料科学の活用例が紹介されました。

新日本製鐵の澤田英明さんは、「鋼中析出物界面の構造とエネルギー」と題して、鋼の強度を決める重要な因子である析出物のシミュレーション研究とその成果を発表しました。ニオブカーバイト(NbC)などの析出物が母相の鉄の中でどのような条件でどのくらい大きくなるかは、母相と析出物の界面エネルギーから求められます。ナノサイズ以下の微小なNbCは鉄の母相と格子位置が整合しますが(下の図)、この析出物が成長するにつれて部分的にしか整合しなくなり(部分整合界面)、母相と析出物の界面エネルギーは変化します。この部分整合界面のエネルギーを計算するには、数千から数万のオーダーの原子数を考慮する必要があり、従来の第一原理計算では困難でした。そこで、北陸先端科学技術大学院大学の尾崎泰助さんが開発したOpenMXを使い並列計算を行いま

した。このプログラムはクリロフ部分空間を用いたオーダーN法により、多原子系を効率良く計算することができます。コンピュータは東京工業大学のTSUBAME2です。その結果、部分整合界面でのエネルギーと析出物界面の構造が明らかになりました。今後は、界面で生じるひずみも考慮した計算を行い、析出物が整合から部分整合に遷移する大きさを予測し、より強度の高い鋼材の開発をしていこうとしています。

続いて、電力中央研究所の中村馨さんが「耐熱鋼中の界面におけるクリープ損傷シミュレーション」の研究を、住友金属工業の海藤宏志さんが「Phase-Fieldモデルに基づく転位動力学計算と力学特性評価」の研究を発表しました。その内容は、計算科学が材料開発に組み込まれていることを実感させるものでした。

産官学連携の2つの流れ

講演後に、パネル討論「産官学連携に期待すること」が開かれました。パネラーは講演した3人と、香山正憲さん(産業技術総合研究所)、大谷博司さん(九州工業大学)、陳迎さん(東北大学)、司会は新日本製鐵の松宮徹さんが務めました。まず、それぞれが経験した産官学連携がどんなものであったかを語ってもらい、ついで計算材料科学、工業の推進を考えたとき、どのような産官学連携を期待し



シミュレーション研究を発表する澤田英明さん。原理原則に基づく鋼の特性向上をめざし、第一原理計算の大規模化に取り組んでいる。

ているかという議題が投げかけられました。澤田さんは、「学の人には、“企業側の産官学連携の目的は最終的なアウトプットを求めること”と思っている印象がありますが、大学には基礎的なところをしっかりとやっていただきたい。それを、企業が具体的なニーズに発想転換して、材料開発につなげていきたい」。中村さんは、「学がソフトウェアの適用範囲などを明確にしてくれると、それを使う立場の産業界の人に役に立ちます」と述べ、学は基礎づくり、活用は企業の能力でやるという産官学連携の一つの流れを示しました。

これに対して陳さんは、「産の視点から解決してほしい問題や実験データをいただければ、学が研究の焦点をどこに置くかを考えると、とても役立ちます」と、産官学連携のもう一つの流れを考えています。

香山さんは、「モノづくりの現場でどのような問題がおきていて、計算科学で解決できる課題はどこにあるのか。これを研究会などでオープンにいただき、フランクに情報交換できる場があれば、生きのよいネタを使った計算ができます」と、情報交換への期待を語りました。

産官学をつなぐ方策を求める

では、具体的にどのようなことを進めていくべきでしょうか。人的な交流、インターンシップの導入についてはこれまでも言われてきました。その内容について、海藤さんは、「インターンシップの学生に、第一原理計算で周期律表の金属の電子状態を計算し、その強度と耐蝕性がなぜトレードオフになるのかを勉強してもらいました。実用的な特性につながる計算は大学では困難なので、非常に満足してもらった」と紹介しました。

「私は逆のことも考えています。企業の若手研究者を大学に派遣してもらい、いっしょに研究できれば、連携にも人材育成にもなる。そんなシステムができればいいと思います」と、陳さんが発言。

「企業がこれから何を必要としているかは、たとえば材料戦略委員会ではロードマップをつくって示そうとしている」と松宮さんが答えると、それは業界によっても異なり、小さな企業ではノウハウの守秘が厳しい場合もあるという意見もあがりました。

企業と大学では立ち位置が異なり、大学で



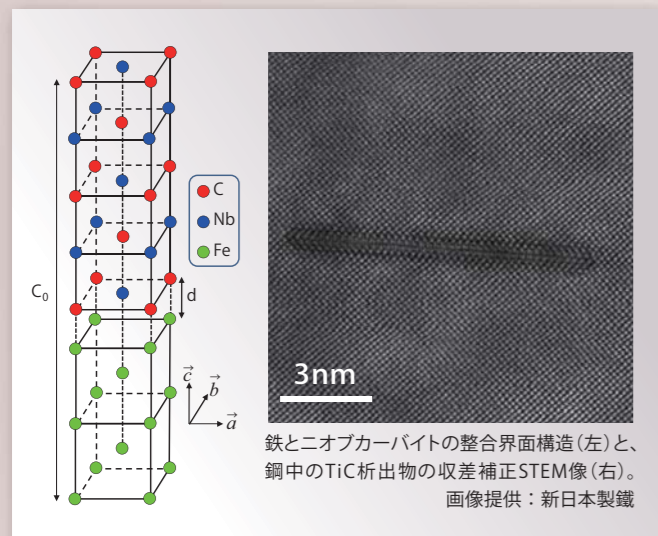
パネラーの陳迎さん。専門は金属材料、磁性材料、核燃料物性に関する第一原理計算。

研究したものはオープンにしなければいけない。そのため、企業と大学の間の人的な交流システムはなかなかつけれないのが現状です。とくに地方の大学が企業との情報交換で知財に縛られていることを指摘していた大谷さんは、「知財の問題は1企業を相手とするからで、複数の企業が入って共通の基盤としての知識として理解されれば、発表しやすい」と、複数企業が参加するプロジェクトに期待を寄せました。

会場からも、「自分たちのやっていることが工業的にどう応用できるのかということは、いつも気になっているのです。そこで、産学共創基礎基盤研究センターというプロジェクトをつくり、産業界の人にも大勢入っていただいています。先ほどプレゼンテーションされたような鋼の複雑な組織に関する計算は、企業の人たちと意見交換していきながらブレークダウンしていったから実現できたことです。限られた守秘義務は課せられますが、これは実現しやすい産学協働のかたちではないかと思っています」といった計算材料科学での実例や、「かつて先輩から、“俺の代では無理だからお前らがやれ”と引き継いだ研究がありましたが、そのつなぎができるのは産官学が集う研究会や学会です。計算科学もそういう段階に入っていくのだと思うのです。鉄鋼協会では、非常に熱心に継続的な教育をやられている」「たとえば、機械系と材料系をつなぐ分野横断型の研究会を開催すればよいのでは」といった提案など、活発な議論が交わされました。

産官学連携は、それぞれの立場で取り組むフェーズは異なりますが、取り組む課題をいかに社会貢献に繋げるかの意識を共通にもつことが重要であると感じさせられました。

取材協力：志田和人(東北大学)



鉄とニオブカーバイトの整合界面構造(左)と、鋼中のTiC析出物の収差補正STEM像(右)。画像提供：新日本製鐵

CMSIカレンダー

詳細は CMSI ホームページ
<http://cms-initiative.jp> を
ご覧ください。

●第3回 CMSI産官学連続研究会 「電子材料分野における計算シミュレーションの産業応用の現状と今後」

日程：2012年2月10日
場所：秋葉原コンファレンスセンター

●CMD® ワークショップ

日程：2012年2月16日～19日
場所：マヒドン大学(タイ・バンコク)

●International Workshop on Quantum Chemistry Massively Parallel Programming Now in Supercomputers

日程：2012年2月28日
場所：東京大学駒場ファカルティハウス

●第2回AICS国際シンポジウム

日程：2012年3月1、2日
場所：理化学研究所計算科学研究機構

●次世代ナノ・ライフ公開シンポジウム

日程：2012年3月5、6日
場所：ニチイ学館神戸ポートアイランドセンター

●CMD® ワークショップ

日程：2012年3月6日～10日
場所：国際高等研究所(京都)

●第5回CMSI若手技術交流会

日程：2012年3月12日～14日
場所：ホテル水葉亭(熱海)

●京コンピュータ・シンポジウム2012 および戦略プログラム5分野合同WS

日程：2012年6月14日～15日
メイン会場：神戸大学 新国際会議場
ポスターセッション会場：計算科学研究機構セミナー室

●MASP(滞在型国際ワークショップ)

日程：2012年6月25日～7月13日
場所：東京大学物性研究所

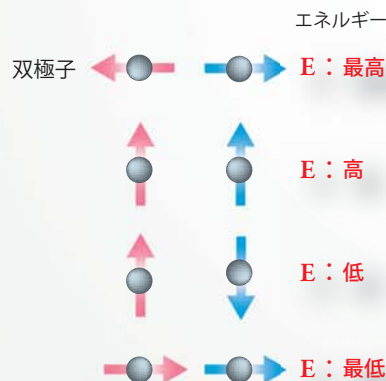
●CCP2012

日程：2012年10月14日～18日
場所：神戸

双極子と強誘電体

「アプリケーション開発の最前線から」で紹介したferamのキーワードは「双極子」と「強誘電体」。その意味を説明しましょう。

絶縁体は全体としてみれば電氣的にほぼ中性ですが、外部からの電場や結晶格子のひずみにより、局所的に電荷分布に偏りが生じることがあります。これを「電気分極」と言います。理論的には電気分極は小さな“矢印”で表すことができます。負電荷から正電荷へ矢印の向きをとり、電荷量と電荷間の距離との積を長さとした“矢印”のことを「電気双極子」あるいは「双極子」と呼んでいます。



双極子相互作用の不思議

双極子相互作用の強さは、上の図のように、2つの双極子が並列のときには、お互いに反対方向を向いた方がエネルギーが低く(すなわち安定に)なります。2つの双極子が直列のときには、逆にお互いに同じ方向の方がエネルギーが低くなります。

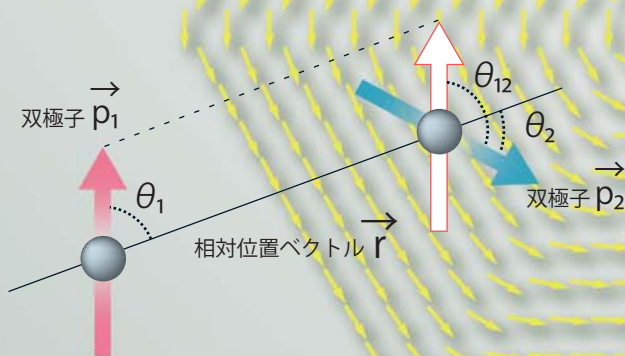
この「異方性」と呼ばれる性質のため、双極子が3つ以上集まったときには、複雑な安定構造をとります。三角格子上に双極子を配置したときには、左の図のように、渦状の構造が現れます。

強誘電体の応用

外部からの電場がなくても電気分極が一方にそろい、かつその方向を電場により切り替えることができる物質を「強誘電体」と呼びます。強誘電体は、圧電スピーカーとして携帯電話やICレコーダーに、またセラミック発振子として電圧の影響を受けにくい発振回路に使われています。また、FeRAMメモリとしてICカードやICタグへの応用が広がっています。

$$E = \frac{\vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2}{|\vec{r}|^3} - \frac{3(\vec{p}_1 \cdot \vec{r})(\vec{p}_2 \cdot \vec{r})}{|\vec{r}|^5}$$

$$\sim \frac{\cos \theta_{12} - 3 \cos \theta_1 \cos \theta_2}{r^3}$$



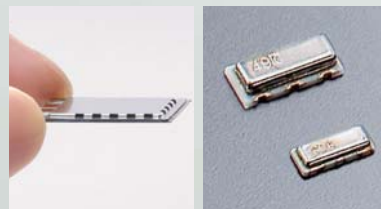
双極子相互作用とは?

双極子と双極子との間には相互作用(E)が働きます。その力は、双極子の電荷に働く引力や斥力がもとになっていますが、それを数学的に表すと、上のような複雑な式になります。

双極子相互作用の特徴は、比較的長距離にまで効果が及ぶことと、その強さが双極子同士の向き(θ_{12})だけでなく相対的な位置(θ_1, θ_2)にも依存することです。



4メガFeRAMチップ(左)とICカードインレット(右)。 画像提供: 富士通セミコンダクター



圧電スピーカ(左)とセラミック発振子(右)。 画像提供: 村田製作所

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.4, March 2012

© Computational Materials Science Initiative, 2012 All rights reserved
CMSI(計算物質科学イニシアティブ)は、文部科学省「HPCI戦略プログラム(SPIRE)」分野2<新物質・エネルギー創成>を推進する研究ネットワークです。

発行 計算物質科学イニシアティブ

編集 CMSI 広報小委員会

事務局 東京大学 物性研究所内 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉5-1-5
tel. 04-7136-3279 fax. 04-7136-3441 http://cms-initiative.jp ISSN 2185-7091

制作協力: サイテック・コミュニケーションズ デザイン: 高田事務所