

March 2015

NO. 11

Torrent

10¹⁶が創り出す 新マテリアル

インタビュー
SMASHの開発者
石村和也

CMSI神戸拠点
「京」だより

アプリケーション開発の最前線から 第8回

SMASHの開発者・石村さんに聞く



話し手：

石村和也 いしむら かずや
 自然科学研究機構 分子科学研究所
 計算分子科学研究拠点 特任研究員

聞き手：

澁田 靖 しづた やすし
 東京大学大学院工学系研究科
 マテリアル工学専攻 准教授

2014年9月1日、量子化学計算プログラムのニューフェイスがオープンソースライセンスでweb公開された。その名はSMASH。量子化学計算分野には、すでにGaussianやGAMESSといった大きなシェアをもつプログラムがあり、世界中の研究者・技術者の知識と経験を取り込み進化を続けている。そのような状況のなか、驚くべきことにSMASHはたった一人の研究者の不断の努力と熱意によって開発され、公開にまでたどり着いた。そのSMASHの開発者である石村和也さんにスポットを当ててみた。

メニーコア時代の量子化学計算

SMASHの正式名称はScalable Molecular Analysis Solver for High performance computing systems。その名の通り、スカラ型CPU搭載マシンであればPCクラスから「京」まで、ルーチンワークで電子状態および構造最適化計算が可能なのが特色である。

量子化学計算では、水素原子など一部の例外を除いて解析的に解けないSchrödinger方程式に、化学・物理的知見に基づいた近似を導入して、分子の電子分布などを求める。具体的には、原子軌道(原子の電子分布)と座標を入力として、最も基礎となるHartree-Fock計算をおこなうと、分子軌道(分子の電子分布)を得ることができる(図1)。計算量はおおよそ原子数の3乗、高精度計算では5乗以上に比例して増加するため、計算の高速化と並列化が不可欠である。

SMASHでは、座標軸を回転させて演算量を削減するPople-Hehre法と漸化式を用いて高い軌道角運動量項を効率的に求めるMcMurchie-Davidson法を組み合わせ、ほとんどの量子化学計算で行われる原子軌道2電子積分計算の高速化を実現した。また、結合長、角度、ねじれ角の情報を利用するredundant座標などの導入により、構造最適化サイクルを削減して、より実用的なプログラムになっている。

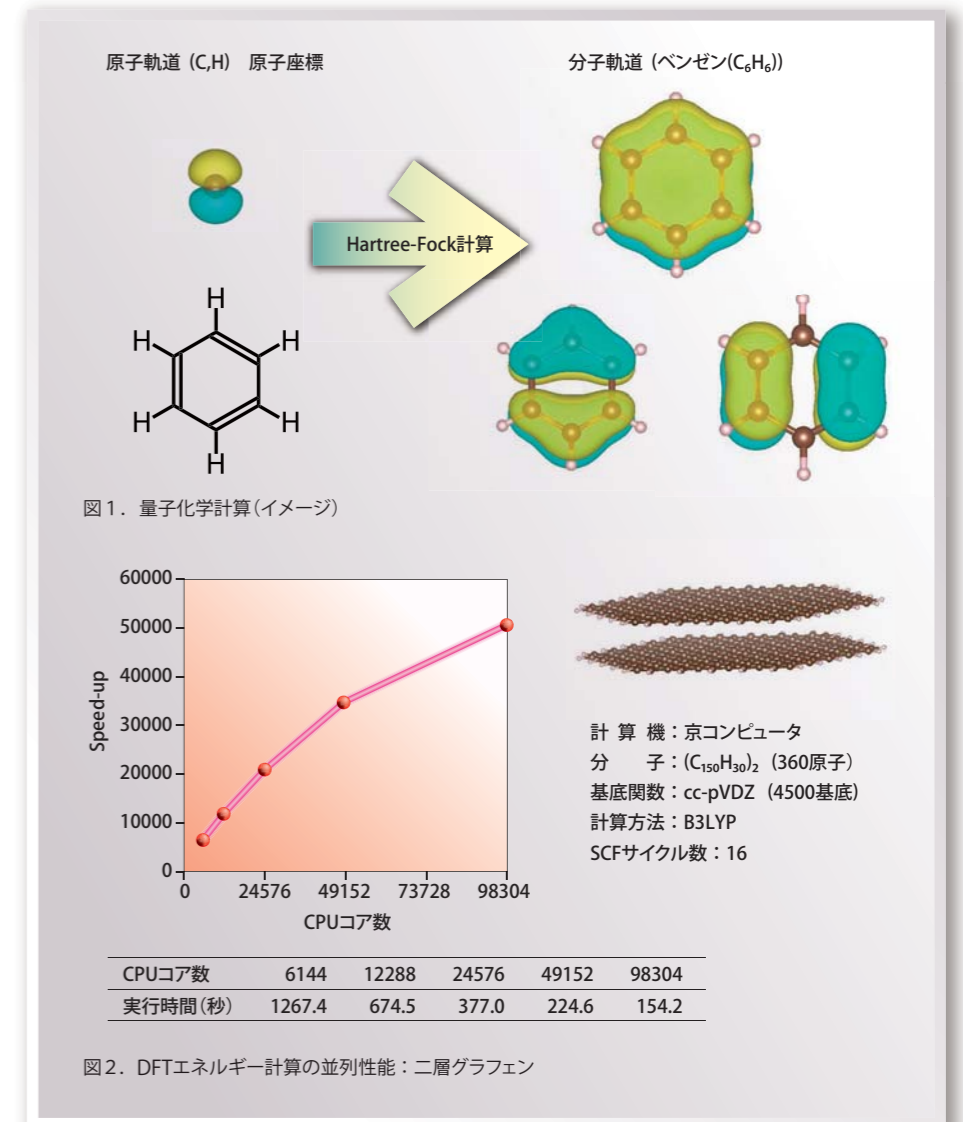
実際、SMASHによる大規模並列計算では、360原子からなる2層グラフェン($C_{150}H_{30}$)₂のB3LYPエネルギー計算を、「京」10万CPUコアを用いておこなった結果、5万倍のスピードアップと実行効率13%を達成した(図2)。また1ノード計算性能としては、タキソール($C_{47}H_{51}NO_{14}$)分子のHartree-Fock

エネルギー計算時間をGAMESSと比較して最大40%削減することに成功している。

これは、これまで困難とされていた巨大分子の電子状態関連の大規模並列計算に一筋の光を与えるもので、メニーコア時代を迎えて効率的な開発を進めるための基盤ツールとして多くの期待を集めている。このような大きな可能性を秘めた大規模並列量子化学計算プログラムの開発に、石村さんはなぜひとりで立ち向かったのだろうか。

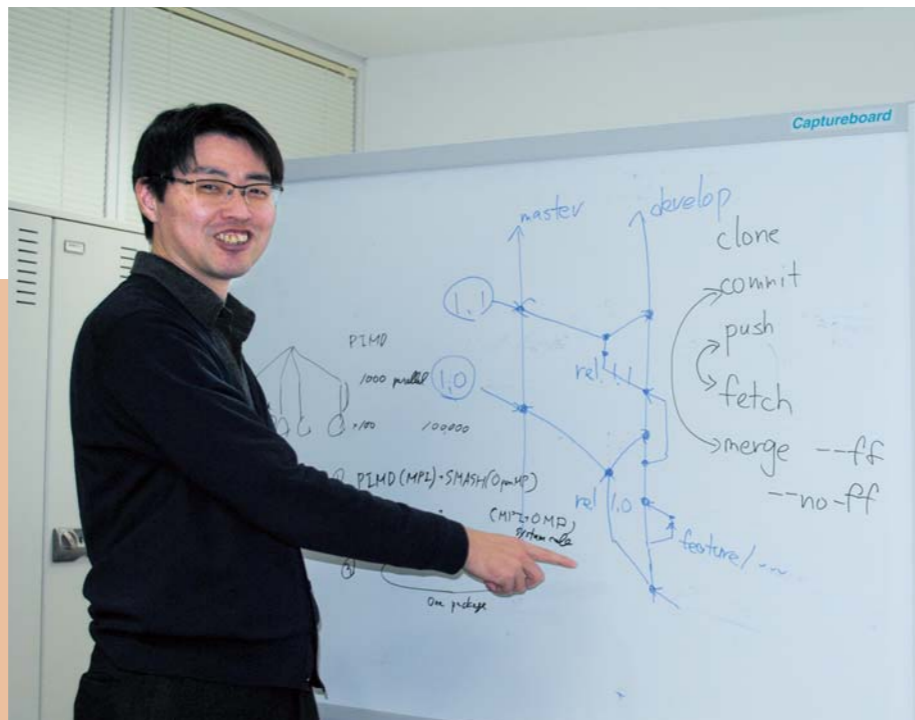
SMASH開発のきっかけと苦労

石村さんは卒論研究以来、量子化学計算の研究に携わってきた。プログラムはGAMESSをベースにして開発してきた。その間、2電子積分計算および電子相関計算の一つである2次の摂動(MP2)法に関するコードが公式にGAMESSに採用されるなど、アルゴリズムとプログラム開発の経験を着実に積み重ねてきた。ところがあるとき、より高



石村和也 いしむら かずや

総合研究大学院大学で博士(理学)を取得後、株式会社豊田中央研究所、神戸大学で量子化学計算の大規模並列および高速アルゴリズム・プログラム開発に従事。かつて開発した2電子積分計算コードは量子化学計算プログラムGAMESSに組み込まれ、デフォルトルーチンとして現在使われている。趣味はバドミントン。



い並列性能を実現するためGAMESSにOpenMPを導入しようとしたところ、変数の取り方から骨格部分にいたるまで大幅に変更する必要が生じ、結果的に特定の計算しかできない特殊なコードになってしまった。当然、それをGAMESS本体に採用してもらうことはできない。石村さんはこのとき、メニーコア時代の計算機を効率よく使うプログラムの必要性を痛感した。そして、既存のプログラムベースでの開発に限界を感じ、「それなら一から自分でつくってしまったほうが結果的に早いだろう」と、大規模並列量子化学計算プログラムの本格的な開発を始めたのである。

プログラム開発と聞くと一日中キーボードをたたいている姿を想像してしまうが、石村さん

の場合、紙と鉛筆を用いた作業に多くの時間を費やすという。プログラムを速くするための式の形や、多次元配列の並び、ループの回り方、適切な近似の導入などを総合的に考えてアルゴリズムをつくっていく過程が重要であり、プログラムを書くこと自体にはそれほど大きな苦労はなかった。半面、SMASHを開発していく中で、こういうプログラムを一からつくってもどう評価されるか分からないという不安と苦悩があった。メインのアルゴリズムはすでに論文にされており、それを具体化して誰もが自由に使えるようにするのがSMASHの開発だ。その意味では、プログラム開発はあくまで目的ではなく手段であり、手段のところで時間をかけても成果としてのアウトプットが見えにくいのが正直なところである。

あらたな出会いと発展

たった一人で地道に開発を続けてきた石村さんであったが、今、その努力が着実に花開きつつある。昨年のプログラム公開以降、SMASHを使って量子化学計算を始めたいという申し出や、SMASHプログラムの一部の機能を取り込んで自前のプログラムを開発したいという要望など、さまざまな分野の研究者・開発者からコンタクトがあった。予想外だったのは計算機科学分野からの反応で、計算機の専門家ならではのプログラムの詳細についての問い合わせもあった。オープンソースライセンスかつシンプルな実行方法にしたことで、わずか半年という短期間に多様な分野の人を惹きつけ、新しいシーズを生み出すことに成功したのだ。「SMASHは一部だけ使ってもらってもいいし、どっぷりとSMASHに関わってもらってもいい。ポスト「京」にむけてやるべきことはたくさんあるので、興味のある人にどんどん開発に加わってもらい、多様なレベルで連携をしていきたい」。石村さんはユーザーの力に期待している。

一方、SMASHは量子化学計算に対するニーズに対しても確実に期待に応えている。例えば石村さんは、文部科学省「元素戦略プロジェクト」と連携し、自動車の排ガス浄化触媒における代替金属を探そうと量子化学の

立場から検討している。金属酸化物担体上の金属触媒の量子化学計算では、担体や触媒の特性にクラスターサイズの影響が出ないようにするため、最低でも数nm以上のサイズが必要であると考えられる。石村さんはすでに560原子からなるAlPO₄担体上のRh触媒の電子状態計算を実現している(図3)。こうした研究が積み重ねられ計算機の支援によって代替金属触媒が設計できるようになれば、触媒開発にかかる実験コストが大きく下がり、とくに自動車産業への貢献が非常に大きくなることだろう。大規模並列量子化学計算を実現するSMASHに大きな期待が寄せられているのは当然の流れといえる。

ポスト「京」世代の人材育成

これまで独力でSMASHを開発してきた石村さんであるが、ポスト「京」時代のプログラム開発は、チームワークでやっていく必要があると考えている。そのための若い人材を育てる機会を積極的に提供している。石村さんが2年前に企画した若手技術交流会では、参加者が持ち寄ったプログラムのプロファイルデータを基に、グループごとに異なるチューニングをおこなう合宿をした。チューニングやアルゴリズムを見直した結果、計算時間を30%以上早くできた参加者も2割程度いたそうで、目に見える形での成果が現れた。一方で、参加者がつまらず点や抱えている問題には共通点が多い。そこで石村さんは、参加者個々のレベルアップのみに終始するのではなく、コンパイルやチューニングに関するノウハウを共有できる環境を整え、分野の若手全体のレベルアップを重視するようにしている。

Application SPEC Sheet [SMASH]	
コード名	SMASH
方法・アルゴリズム	量子化学計算 (Hartree-Fock, DFT, MP2法)
コードの概要・特徴	高い並列効率でナノサイズ分子のエネルギー及び構造を計算することが可能。インプット形式、プログラム構造がシンプル。よく用いられるルーチンを容易に抜き出すこともできる。
シミュレーションの対象となる物質	約1,000原子までの分子・クラスター
開発責任者	石村和也
開発者・開発機関	分子科学研究所 計算分子科学研究拠点
開発期間	3年
開発言語・ソースコード行数	Fortran90/95, 75,000行
動作環境	「京」, FX10, Intel CPU搭載計算機 (Intel, GNU, PGI compiler)
並列化方法	MPI, OpenMP
並列化の状況	「京」10万CPUコアで5万倍のスピードアップ
ソフトウェアの公開	オープンソースライセンス(Apache 2.0)で http://smash-qc.sourceforge.net/ において公開
関連/競合するアプリケーション	Gaussian, GAMESS, NWChem, NTChem, GELLANなど

プログラムを開発することと次世代の人材を育てることに共通点が多い。縁の下の力持ち的な要素が多く、目に見える成果が得られるまでに多くの時間と労力を要するからである。地道なプログラム開発を経験してきた石村さんだからこそ、ある意味自然な流れの中で次世代の人材育成に取り組めるのかもしれない。「私自身がかつてGAMESSで量

子化学計算の基礎を勉強したように、若い人がSMASHで勉強してくれればうれしい」。石村さんの言葉には重みを感じられる。ちなみにSMASHというネーミングは、今でも石村さんが週1回は練習しているという趣味のバドミントンに由来する。SMASHのロゴにあるシャトルのように、SMASHがポスト「京」時代の最前線を疾走することを期待したい。

◆インタビュー後記

澁田 靖 しづた やすし

今回のインタビューを通じて、目に見える成果が得られるまでに多くの時間と労力を要するプログラム開発と、次世代の人材育成との間に、多くの共通点があると感じました。石村さんのプログラム開発にける不断の努力と熱意に触れることにより、学部学生や大学院生への教育のあり方に日々苦心する一人の大学若手教員として、大いに触発される良い機会となりました。

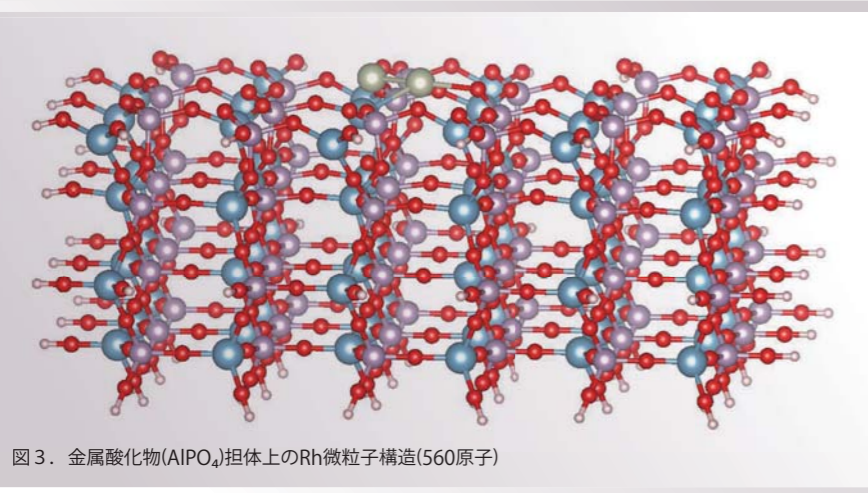


図3. 金属酸化物(AlPO₄)担体上のRh微粒子構造(560原子)

6 卒業生を訪ねて

桐野俊輔 きのりの しゅんすけ

株式会社ACCESS
研究開発本部 研究開発室

東京大学物性研究所にて、時間依存密度行列繰り込み群法を用いた量子ドット系の非平衡輸送現象やモット絶縁体の絶縁破壊などに関する物性理論研究をおこない博士号取得。2011年にACCESS入社。



研究で培ったプログラミング技術を生かして

「卒業生を訪ねて」第6回は、株式会社ACCESSでソフトウェア・エンジニアとして活躍する桐野俊輔さんを、東京大学大学院博士課程の黒木彩香さんが訪問しました。桐野さんは入社4年、現在は若手を率いて新しいプロジェクトに挑戦する技術リーダーです。



黒木彩香 くろき あやか

東京大学大学院工学系研究科
化学システム工学専攻 博士課程3年

専門は理論化学・計算化学。研究者の営みに魅力を感じ、大学博物館で運営や展示制作を経験したほか、ビジュアルデザイナーとして科学系のコンテンツ制作に携わるなど、研究者のことは広くさまざまな人へつなぐ活動をおこなっている。

大学院でプログラミングの面白さを知る

黒木 理論物性物理の研究からソフトウェア・エンジニアの仕事につかれたそうですが、もともとプログラミングが得意だったのですか。

桐野 実は、修士1年までは、プログラミングをほとんどやっていなかったんです。研究室に密度行列繰り込み群という数値計算手法のエキスパートがいて、その方に師匠になってもらって教わりました。

黒木 プログラミングを面白いと思いはじめたのはその頃？

桐野 そうですね。今までできなかったことがコンピュータを使ってできるようになるところが面白いと思いました。物理の文脈で言ったら、

新しい計算が工夫してできるようになるとか、新しい現象が見えるとか。

黒木 自分の進む道として、エンジニアが選択肢に入ってきたきっかけはあったのですか。

桐野 明確に切り替わったわけではないですけど、プログラミングが面白くなったということです。2年ぐらいプログラミングをやった、D2の初めぐらいでした。

黒木 研究で使われていたプログラミングの言語やライブラリは、今の仕事とは違うのですか。

桐野 全然違います。ですが、どうすれば速くなるか、簡潔に書けるかといった基本的なところは結局同じなので、前にやっていたことがすごく役に立っています。

もちろん規模も大きいですし、ほかの人がいっしょに作業するとなるとリーダーシップがいちばん大事になります。それに、ソフトウェアを初めてつくるときのコストよりも、継続的に使っていく間に修正したり機能を追加したりする保守のコストのほうが大きいと言われていました。保守のコストを減らすことが大事で、そのためには設計が良い、読みやすいといった、修正しやすいコードになっていないといけません。

システムの“裏方”をつくる

黒木 では、現在のお仕事を教えてください。

桐野 ACCESSは、ブラウザ、情報家電、ス

マートフォン、電子出版などの情報ネットワークのソリューションを製品としています。例えば、企業が使うチャットやテレビ電話ができる機能、課金をするための機能、スマートフォンに通知する機能をサーバーのシステムとして作り、それを複数のアプリケーションから共通機能として使ってもらいます。最近ではセンサーデバイスのイノベーションによって、さまざまなセンサーがクラウドにつながる状況になってきていて、センサーからの情報を受け取って処理をするサービスを共通機能として提供することも準備しています。

一つのシステムは通常、複数のコンポーネントから構成されています。例えばスマートフォンのアプリでは、まずスマートフォンから通信を受け付ける部分があって、受け付けたデータを別のコンポーネントに受け渡します。そこで何らかの処理をしてレスポンスを返すというように協調動作するようにつくってあります。その裏方(バックエンドシステム)の部分をつくっているのです。

黒木 裏方とは？

桐野 企業向けのチャットツールだったら、このUIではこういう情報を画面に出すとか、このタイミングで通知を送るといったデータをやりとりする仕様を決めて、そのプログラムをつくるんです。

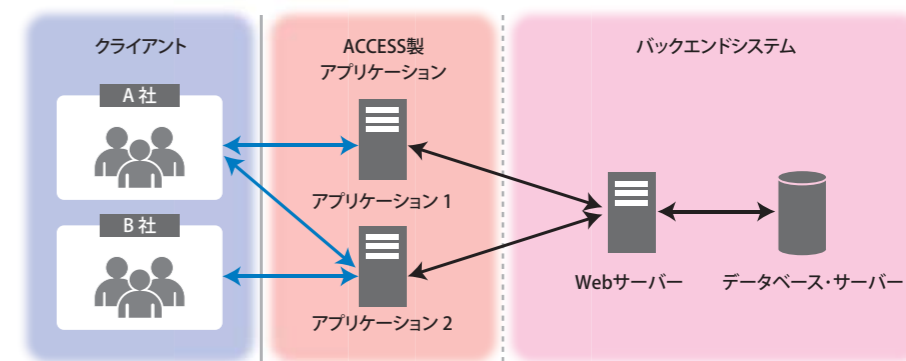
黒木 システムティックな感じですね。UIといっても、人の行動を予測して考えるのではなくて。

桐野 機械のほうがやりとりする部分をつくっているんですね。人が直接触る部分ではないので、そういう意味でちょっと裏方なんです。

僕は今、研究開発部門に所属していて、さまざまな社内アプリケーションから共通で使われるシステムを構築・運用しています。社内でも共通で使われる機能、例えばユーザー管理とかメール送信などですが、こういった共通部分をそれぞれのアプリケーションが個別につくらずに良いようにするためのものです。実は今、私たちのつくったシステムを使っていての人がじわじわと増えている傾向にあって、裏で動くプログラムならではのやりがいを感じています。

黒木 表のほうに憧れたことはないのですか。

桐野 裏方のほうがいいと決めてかかっている面がありますね。個人的な好みではありますが、裏方のほうが技術的に面白いことが多



サーバーのシステムづくりの概略

いと思っています。例えば、大規模なリクエストをさばくとか、大規模なデータを入れて検索できるようにするとか、1台のサーバーが壊れたとしても動き続けるようにするといったところです。

入社3年目で技術リーダーに

黒木 会社に入ってから学ばれたことが多いのですか？

桐野 そうですね。要はサーバーサイドのプログラミングをしているわけですが、大学院ではサーバーとかいじったことなかったですから。入社して研修を受けたあと、電子書籍のプロジェクトに入って、そこで勉強しました。2年半で今のプロジェクトに移ったのですが、またいろいろ勉強しました。

黒木 新しい技術や研究についても学ぶのですか。

桐野 それは必要ですね。コンピュータサイエンスの最先端についていくのは難しいですが、博士課程まで行く論文に大事なことが書いてあるという認識がしみついているので、キャッチアップするために論文を読むことはあります。

黒木 会社の年齢層はどのくらいですか？

桐野 今のチームは4人でですけど僕が最年長で、31から26歳です。前のチームもそのくらいでした。

黒木 チームのリーダーを務めていらっしゃるということですが。

桐野 今のプロジェクトを新規に立ち上げたときに、リーダーに起用されました。うちの会社は若い人にも自由にやらせてくれる雰囲気があって、3年目でリーダーという形で入れたことは、僕と

では非常に良かったと思っています。今は他の3人のメンバーがやりたがっている仕事を引き出したり、技術レベルのちょっと上のタスクをアサインしてレベルアップしてもらえようとしたりと、どの仕事をやらせようか考えるんですけど、なかなか難しいですね。前のチームのリーダーはスタッフとの距離感をとるのが非常にうまくて、僕が不満に思っていることを察知してくれていました。仕事へのモチベーションがほとんどに大事なんです。

多くの人が便利に感じる何かをつくりたい

黒木 プログラミングができるようになって、いろいろな仕事ができるようになったところで、これから先について何か考えていらっしゃいますか。

桐野 裏方裏方と言っていますが、やはりいろんな人が使ってくれる製品をつくりたいですね。この会社に入った動機もそこにあります。例えば、携帯のブラウザができたことで、PCを持ち歩かなくても、どこからでもインターネットができるようになった。最近では、スマートフォンと多種多様なアプリが出てきてコミュニケーションのとり方を変えたと思うんです。そのように、仕事や生活のしかたを変えるような何かをつくりたいですね。できるだけ多くの人が便利に感じる何かをつくりたいです。

黒木 今の仕事のプロダクトは海外でも使うことができるものなのですか。

桐野 ネットの世界では国境はあまり意識しません。ですが、プロダクトの中にはユーザーの文化に根差しているものもありますから、文化を知らないといけません。



CMSI神戸拠点

坂下達哉 さかした たつや

東京大学物性研究所計算物質科学研究センター / CMSI物性物理拠点研究員

CMSI神戸拠点は、スーパーコンピュータ「京」が設置されている理化学研究所計算科学研究機構(AICS)にあり、「京」を利用する物性物理、分子科学、材料科学すべての分野の研究者の拠点としての役割を担っています。その活動を坂下達哉さんが紹介します。

「京」にもっとも近い活動拠点

CMSI神戸拠点は、東京大学物性研究所計算物質科学研究センターの神戸分室として、2011年4月に神戸ポートアイランドにあるAICSの5階の一室に開設されました。そこは「京」にもっとも近く位置した居室です。

現在、「京」はどこからでもログインして利用できるようになっていますが、2012年9月までは試験利用期間でありAICS内からのみ利用可能となっていました。私が着任したのは、ちょうどその期間で、全国からCMSIの研究者が神戸拠点に集まり、日夜、作業に没頭していました。

神戸拠点には、7席の訪問者用の作業スペースのほか、14名で利用可能な会議スペース(大型モニタ、テレビ会議システム)も用意されており、滞在者は自由に利用することができます。このスペースは、計算物質科学セミナーや、CMSI配信講義(Torrent No.8参照)および配信セミナーの受信会場として活用しています。また、以下で紹介する神戸ハンズオン、TOKKUN!(アプリ高度化・利用相談)も実施しています。

アプリの普及と高度化のための講習会とTOKKUN!(特訓)

CMSIでは、「京」を用いた大規模シミュレーションによる最先端の計算物質科学研究だけでなく、そこで開発されたアプリケーションも成果として積極的に公開し、国内外での普及をめざしています(Torrent No.8 MateriAppsの記事参照)。その一環として、神戸拠点では毎月講習会(神戸ハンズオン)を実施しています。講習会では、「京」の

計算データの後処理および可視化用も兼ねて設置されたクラスタワークステーションを用いて、実際にプログラムを動かしながら操作方法を学んでいきます。

これまで講習会で扱ったのは、CMSIで開発したアプリALPS、OpenMX、xTAPP、Rokko、feram、FMO in GAMESS、FU、MODYLAS、SMASHのほか、いまやソフトウェア開発に必須のツールであるバージョン管理システムです。講習会は回を重ねるにつれて、初心者、中級者、上級者向け(アプリ

開発者向け)と難易度や目的に応じて内容が充実してきました。講習会をおこなうことは、アプリの開発者側にとっても、新規ユーザー開拓、機能追加の要望、使いやすくなるための改善案などのフィードバックをもらえるという利点があります。また、これまで別々に開発されてきたアプリ間の連携を生み出すきっかけともなっています。

TOKKUN!は、「京」の一般利用枠への採用を目標として、参加者が持ち込んだプログラムを逐次および並列レベルでチューニングすることを目的とした合宿です。TOKKUN!では、CMSI拠点研究員、富士通のシステムエンジニア、高度情報科学技術研究機構の研究員のアドバイスを受けることができます。また、プログラム作成を皆と気軽に相談しながらおこなう良い機会にもなっています。前回からは、CMSIで開発したアプリ(OpenMX、FMO、MODYLAS)の利用相談も始めました。

大規模並列計算を通じた分野融合をめざして

それ以外にも、チューニング事例、アプリ利用例を共有するための、「京」・HPCIスパコン

利用情報交換会や、CMD®ワークショップ、CMSI若手技術交流会、さらに、素核宇宙分野とも関連が深いイベントとして、テンソルネットワークをテーマとした国際ワークショップ2013、2014(Torrent No.9参照)などをおこなっています。また、「京」を用いたシミュレーション成果を一般向けに説明する記者勉強会、TCCI Seminar(計算分子科学セミナー)をAICSとともに企画・実施しています。

スパコンは超並列の時代を迎え、高速で高精度の計算手法や使いやすいソフトウェアを

創出するには、ハードウェア、ソフトウェア、物理、化学、数学などの研究者間の連携が不可欠となりました。AICSは、このような多分野の研究者が一か所に集う日本で初めての研究機関です。われわれは、AICSの研究チームをはじめとする近隣の計算科学の研究者との交流に加えて、CMSIがもつ計算物質科学の全国規模の人材ネットワークを活用することで、CMSI神戸拠点を「大規模並列計算を通じた分野融合」という新たな試みの場として引き続き発展させていきます。



CMSI神戸拠点長からのメッセージ

尾崎泰助 おざき たいすけ

資本主義社会では富める者はますます富むことを論じたピケティ教授の『21世紀の資本』がベストセラーになっています。その話を聞きかじり、シミュレーションのソフトウェア開発でも同じ状況ではないかと感じています。日本のコミュニティではソフトウェア開発は副業的な側面が強く、標準コード開発の成功事例を多く聞きません。標準コードは通常20年以上の開発期間を経ており、いったん優劣が生じると情報や人材が集約され、開発が加速的に進んでいきます。差異が明らかになった際には時すでに遅し、10年スパンでの差が生じていることとなります。CMSIでは現状を正しく認識し、ソフトウェアを育てるために何をすべきなのか議論し、開発者支援のための活動をおこなってきました。今後、この活動が実を結び、世界を先導するソフトウェアが育っていくことを期待しています。



神戸拠点のメンバー。左から、松下八重、北浦和夫、尾崎泰助、坂下達哉、山下恭。

「京」だより

「京」の後継となるスーパーコンピュータ(ポスト「京」)の開発をめざすプロジェクト「フラッグシップ-2020」が始動しました。ポスト「京」は、汎用CPUを用いたメニーコア型のアーキテクチャとなる予定で、2020年ごろまでにエクサスケールコンピューティング*の実現をめざしています。ハードウェアの開発と並行して、ポスト「京」で実行するアプリケーションの開発も始まっています。

基礎科学から防災・環境問題にわたる幅広い分野から9つの重点課題が設定され、そのうち、重点課題(5)「エネルギーの効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」では分子研を代表とする9機関が、重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」には物性研を代表とする9機関が実施機関として採択されました。今後、準備期間を経て、計算機科学者と連携して次世代の計算物質科学アプリケーションの開発を進める予定です。

*「エクサ」は京の100倍、10の18乗を表します。

拠点研究員のプロフィール

2014年10月にCMSIに着任した拠点研究員を紹介します。

Swastibarata Bhattacharyya

Materials Science Division Researcher

Department of Physics, Yokohama National University



I did my masters in physics from Indian Institute of Technology Guwahati. I received my PhD in the field of material science from Indian Institute of Science, Bangalore. At present, I am working on first principles mapping onto phase field model at Department of Physics, Yokohama National University, Japan.

Ambition

To learn and contribute to the first-principles all-electron mixed basis program TOMBO.

Motivation for applying for the position

To learn development of first principles based theory and code that will be used to study materials properties.

Mission/Role

Phase field methods are very effective in studying the evolution of microstructures in various materials. We want to bridge this empirical method to the first principles based atomistic methods.

Sankar Kumar Deb Nath

Materials Science Division Researcher

Institute for Materials Research, Tohoku University



I obtained Ph.D. from the department of Mechanical Engineering, Bangladesh University of Engineering and Technology, Dhaka, Bangladesh on the mechanics of composite materials. Majored in multi-scale modelling in mechanics of solids and liquids, atomistic simulations of physics and chemistry related problems.

Currently I am working on the phase field modelling of Cu, Al and Cu-Al alloys using molecular dynamics simulation.

Motivation for applying for the position

Dendrite structures are formed during the solidification of pure and alloy materials due to the anisotropy of the phase change of the solid-liquid interface. Detailed investigation of the physical and thermodynamic properties of the solid liquid interface are needed by the atomistic approach like molecular dynamic simulations to study the anisotropy of the solid-liquid interface during solidification using the large scale phase field modelling.

Mission/Role

The anisotropy of the solid-liquid interfacial properties of Cu, Al and Cu-Al alloys such as kinetic coefficient, melting point, interfacial free energy etc. will be determined from the project.

Ambition

My aim is to investigate the thermodynamic properties of the solid-liquid interface of Cu, Al and Cu-Al alloys.

Sergi Ruiz-Barragan

Molecular Science Division Researcher

Japan Atomic Energy Agency



Graduated in Chemistry at University of Girona and received the Doctorate in the same university with a exited states and non-stationary processes thesis. Current research with path integrals and QM/MM Molecular dynamics in Shiga's group at JAEA.

Ambition

Provide a new program for doing molecular dynamics and path integrals at the same time that I improve my conception of the molecular movement.

Motivation for applying for the position

Develop new methods for studying dynamics. Chemist is not a static science and I think that we need to understand correctly the movement of atoms and molecules to improve the reaction and obtain greener ways to produce some products.

Mission/Role

To improve the path integral code for QM/MM and use it for study some reactions with the solvent for understand the temperature and the isotope effects in reactions.

Torrent No.11 March 2015

2 | アプリ開発の最前線から 第8回
SMASHの開発者・石村さんに聞く
石村和也×澁田 靖

6 | 卒業生を訪ねて 第6回
研究で培ったプログラミング技術を生かして
桐野俊輔×黒木彩香

8 | CMSIの拠点 第4回
CMSI神戸拠点
坂下達哉

9 | 「京」だより
10 | 拠点研究員のプロフィール

表紙：百間は一見に如かずといいますが、シミュレーションの結果を説明する場合も、画像を添えると、納得してもらいやすくなります(拙い英語で話す場合はなおさら)。ただし、単に精細な絵を作ると、こちらの意図とは違うところに注目され、余計な誤解を生むこともあり、表現方法を慎重に考える必要があります。この図はメタンの泡がメタンハイドレート結晶(重心からの距離で色分け)の分解を促進する一方で、結晶表面がでこぼこになってしまう様子です。水分子は省きました。(CG制作：松本正和・岡山大学)



Computational Materials Science Initiative

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.11, March 2015

© Computational Materials Science Initiative, 2015 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