

May 2011

NO. 2

Torrent

10¹⁶が創り出す 新マテリアル

CMSIの若手研究者たち

アプリケーション開発の最前線から

産官学をつなぐ

人を育てる

CMSIカレンダー

「京」だより

CMSIの若手研究者たち

第1回 CMSI ポスター賞の受賞者

『Torrent』はCMSIの交流の場です。

今回は、1月5～7日に物性研・CMSI・次世代ナノ情報*合同で開催した研究会「計算物質科学の課題と展望」でポスター賞を受賞した3人が集まり、それぞれの研究のこと、スパコンとの関わり、CMSIでの交流、若手のつながりなどを語ります。

*物性研：東京大学物性研究所
次世代ナノ情報：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 次世代ナノ情報機能・材料グループ



■ ポスター賞受賞者

三澤 貴宏

東京大学大学院工学系研究科
物理工学専攻 助教

諏訪 秀磨

東京大学大学院工学系研究科
物理工学専攻 博士課程3年

芝 隼人

東京大学物性研究所
物質設計評価施設 助教

■ 司会

大野 宗一

北海道大学工学研究院 准教授



**みんな理論好きだが
アウトプットもほしいタイプ**

大野 三澤さんは「多変数変分モンテカルロ法を用いた鉄系超伝導体の有効モデルの解析」で最優秀ポスター賞を受賞、諏訪さんは「詳細つりあいを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法」で優秀ポスター賞を、芝さんは「陽に溶媒を取り込んだ生体膜分子シミュレーションの超並列計算に向けて」で審査員特別賞を受賞しました。偶然、3人とも物性が専門ですが、志した動機などは違うと思います。まずは自己紹介から。

三澤 学部の頃から自分で考えたり計算したりすることが好きで、理論に進もうと思っていました。物性物理を始めたのは大学院から。物性は、素粒子や原子核に比べると、計算と実験を比較しやすいのが魅力です。今までの研究も物性のなかでは実験に近いところをやっています。

諏訪 物性は「わかること」を楽しめる分野だと思います。素粒子はあまり身近でなく、化学や生物は仮定をたくさん置く必要があってなかなかわかった気になれない。物性は公理や原理から少ない仮定で身近な問題を考えられます。学部の卒論研究では実験が必須だったので、大学院に進む時に理論をやってみようと思った。研究室はモンテカルロ法を中心にやっており、所属して以来、モンテカルロ法のおもしろさにはまっています。受賞テーマはモンテカルロ法の一般的な改良で、ずっと考えていてあるとき突然アイデアが湧きました。

芝 2人は量子系ですが、私は古典一本槍です。漠然と理論をやりたいと思っていましたが、学部の卒業課題で実験の研究室に

最優秀ポスター賞

**第一原理
ダウンフォールディング法を用いた鉄系新超伝導体の
磁氣的性質の解明**

三澤 貴宏

みさわ たかひろ

東京大学大学院工学系研究科
物理工学専攻 助教



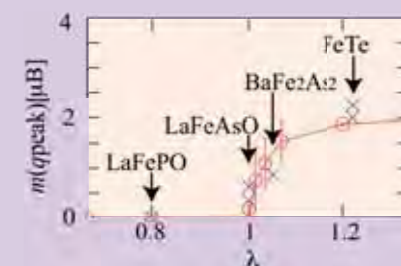
固体中の電子がバンド幅に匹敵するほどの大きなクーロン斥力で相互作用しあう系は「強相関電子系」と呼ばれ、近年の固体物理学の中心的な研究対象です。この強相関電子系においては、電子間に働く強い相互作用の結果、高温超伝導などの興味深い状態が実現することが知られています。

このような物性を固体中の「第一原理ハミルトニアン」、すなわち原子がつくる周期ポテンシャルおよび電子間のクーロン相互作用を考慮したハミルトニアンから理解するのが、固体物理学の究極の目標の一つです。しかし、第一原理ハミルトニアンがもつ膨大な自由度のため、現時点での最大規模・最速のスーパーコンピュータを用いても、第一原理ハミルトニアンを厳密に解析することはできません。そこで、これまでは考えている系の興味のある低エネルギーの部分のみに注目して、自由度を減らした有効モデルを考案し、それを解析する方法がとられてきました。この方法は多くの成功を収めてきたものの、有効モデルのパラメータは多くの場合、「手」で決められており、そのパラメータの妥当性が常に問題となっていました。

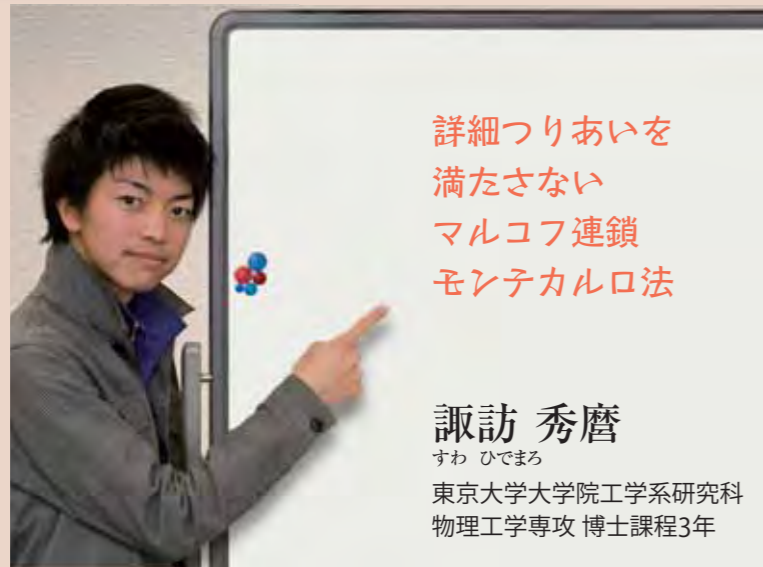
そこで、われわれは、第一原理ハミルトニアンと有効モデルをつなぐ橋渡しとして、「第一原理ダウンフォールディング」という方法を開発してきました。この方法では、まず、第一原理ハミルトニアンにもとづいて固体の大規模構造で

ある、バンド構造を計算します。そして、フェルミエネルギーから離れた高エネルギー部分の自由度を、制限乱雑位相近似と呼ばれる方法で消去して、少数の自由度のみを残した有効モデルを導出します。この方法を用いることで、固体の構造のみから、人為的なパラメータを導入することなしに、有効モデルのパラメータを決めることができます。この有効モデルを高精度な数値計算手法（たとえば、多変数変分モンテカルロ法など）で解析することで、固体の物性を解明、予測することができるのです。

この手法を、近年発見された鉄系超伝導体に適用して、鉄系超伝導体の多彩な磁氣的性質がおのおのの物質の相互作用の大きさの違いに起因していることを明らかにしました（図を参照）。この多彩な磁氣的性質の微視的な起源は、第一原理的に有効モデルのパラメータを導出して初めて明らかになったことです。



理論的に計算した磁気秩序モーメント $m(q_{peak})$ (赤丸) と実験値 (青×) の比較。横軸は相互作用を一様にスケールするパラメータ λ である。理論計算の結果と実験値が非常によく合っていることがわかる。

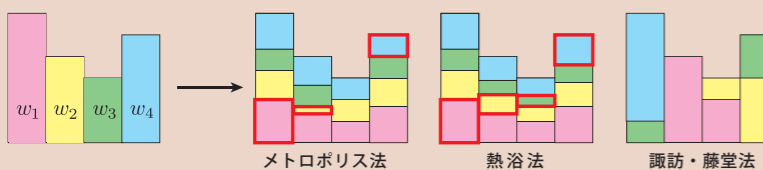


われわれが興味をもっている相転移現象や量子的相関の強い状態の発現は、いまだに理解されていない新奇な物理を豊富に含んでおり、新しい物質設計などへの応用も期待されています。これらの多くの物理現象では多粒子(多自由度)であることが本質で、粒子間の平均量だけに注目する大ざっぱな近似は有効ではありません。人間の手計算で解くことが難しいこれらの問題も、コンピュータをうまく利用することで初めて解析可能となるのです。

しかし、むやみやたらに計算機を大規模に使えば済むという問題ではなく、いかにそれらを賢く効率良く使うかが重要です。われわれの取り組んでいるマルコフ連鎖モンテカルロ法にも、それは当てはまります。この手法は多重積分をコンピュータで求める汎用性の高い手法で、物理に限らず、化学、生物、医学、統計、経済など、さまざまな分野で必要不可欠となっています。これまでのマルコフ連鎖モンテカルロ法は、ほとんどの場合、「詳細つりあい」という

条件を用いており、半世紀以上の間この条件の枠の中で発展を続けてきました。ところが、この条件は計算の都合上便宜的に用いてきたもので、本来必要な条件ではありません。そこで、われわれはこれまでの常識を破り、「詳細つりあいを満たさずとも正しい計算を可能とする」新しいアルゴリズムを考案しました。

このアルゴリズムは、「重みの埋め立て」という幾何学的な手続きにより、効率低下の要因である平均棄却率をいつでも最小化し、多くの場合でゼロにします(図)。計算効率は大幅に改善され、これまでの計算機の数倍から百倍以上の効率を示すことができました。また量子力学的な問題であるスピン系に応用し、スピンの液体状態から固体状態への新しい相転移を見いだしました。この手法はさまざまな分野で用いられているほぼすべてのマルコフ連鎖モンテカルロ法に適用可能であり、今後それらの分野で広く貢献していくと期待されています。



配属されました。そこでソフトマターや線形非平衡実験などに触れ、「まずはやってみる」ことが面白く、理屈とかけ離れた側面があると感じました。修士課程のときの研究室ではかなり本格的な数値計算をやっていたので、「まずはやってみて、意外なことは何かを考える」シミュレーションに入りました。

大野 みんな理論好きで、公理から物事を突き詰めていくのが楽しい。それだけでなく、アウトプットとして目に見えるものもほしい。それが共通点。

計算からのアウトプットを実験に使ってもらうなど、実験の人とのコラボはしていますか。

三澤 ある物質の有効モデルを解いたりしているのですが、実験事実の解釈や理論との整合性などについて、実験屋と密接に議論します。

大野 私自身は材料科学分野で計算をしています。実験屋とコラボしようとする、彼らが計算に求めるところと、計算に出来ることとの間に大きな隔たりがあって、埋まらないことがしばしばです。物性ではどう?

諏訪 同じです。理論屋が示したモデルで説明できないところがあると、実験屋はむしろ喜びます。理論屋はまとめようとしますが、実験屋はそこから飛び出そうとする。

大野 確かに。単純な系なら両者が合うのですが、現実的な系では実験結果を出すようなシミュレーションはなかなか難しいですね。

古典分子動力学をやっている芝さんは、新しいスパコンを使えば実験屋がほしがっているところに近づけるという印象をもっていますか。

芝 古典モデルのシミュレーションは計算スケールが計算機の能力に応じて拡大しやすい側面があり、実験屋の求めるところにある程度行けるのかもしれない。しかし、計算を

無限にたくさんできるわけではないから、何を選ぶかは依然問題です。技術的にできないわけではないが、何をやるかをもっと考えていかなければいけない印象ですね。

大野 計算サイドから実験サイドに求めることはありますか。

芝 今までは計算できたところに実験が降りてきたが、今は計算が実験に追いつこうとする、あるいは実験がやっていることを発展させるために計算するという意味合いが強いのと思います。計算の大規模化によって両方は少しずつ近づいていくのでは? コラボは重要ですね。

三澤 量子系だと、光格子というのが最近流行っていて、ハバードモデルを解く理論屋と光格子の実験屋のコラボが進んでいます。理論で計算パラメータを振るようなことが、実験でもできるようになりつつある。

スパコン「京」に何を求めるか、何ができそうか

大野 スパコンとの関わり方について聞きましょう。「京」があればこんなことができそうだと思います。思い描いていることはありますか。

諏訪 古典系だと、メソスコピック系のシミュレーションに届くようになれば、輸送現象などを詳しく調べられるかもしれない。

芝 ソフトマターについては、流体力学的なマクロな記述とミクロレベルとにギャップがあって、それがなかなかつながらない。つなぐ努力が必要だと思いますが、一方で一つの手法でそこを突き抜ける何かを見いだしたいとも思います。

諏訪 量子系でうまく並列化できている計算は少なく、私がやりたいと思っている広

「若手つながりを広げる場をいろいろ考えていきたい。「Torrent」もそのひとつです」

■ 司会
大野 宗一 おおの むねかず
北海道大学工学研究院 准教授



いモデルに使えるような計算だと、並列化が根本的に難しい状態。「京」を使いこなすためには、手法自体の開発が求められています。

三澤 「京」を数万コア占有的に使えば、たくさんの物質を系統的に探索しやすくなる。

大野 普段は今あるマシンパワーで出来ることを探してやっている状態で、いきなり新しい大きなマシンが与えられて、「さあ、テーマは?」と問われると、確かにちょっと難しいところがありますね。今後「京」を使うとなると、直接の研究テーマとは違う計算機科学の知識を増やす必要が出てきます。

計算機のことを知らないで物性だけ知っていても結果がでない状況になりつつあるが、計算機をよく知っているからといって物性について何か結果が出るわけではない。そのバランスをどう考える?

諏訪 私は並列化の細かいテクニックを極めるより、計算の方法の根本的な部分をやりたい。

芝 この数カ月、並列化ばかりやるなかで、あちこちのスパコンを使ったが、理屈よりも実際にさわって努力することも大事な、と思います。

大野 コードやアルゴリズムの開発とか並列化処理にどのくらい時間を割いていますか。今回の受賞対象研究の場合はどう?

三澤 他人が作った資源を部分的に利用しているので、ゼロから自分で作ったのは2割くらい。むしろ計算時間のほうが長くかかりました。システムサイズの3乗で計算時間が増えるので、2倍大きくなれば計算時間は8倍です。

芝 昨年9月から本格的に並列計算を始めて、3カ月間ずっと引きこもり状態でやりました。だから今回は100%(笑)。

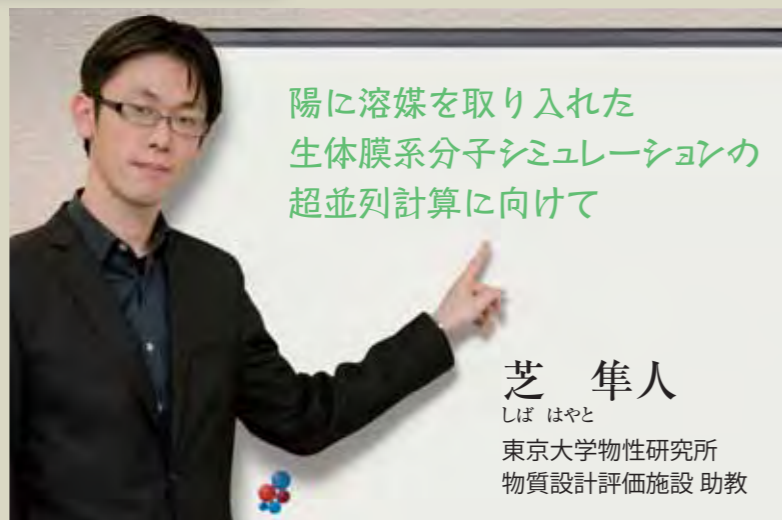
諏訪 普段の姿勢として、今までぜんぜんできなかったことを手法の解析から挑戦して一気に理解しようとしているので、プログラムやアルゴリズムの開発がメインになっていますね。

物理屋は融通無碍、ミクロで大雑把マクロで精密

大野 CMSIのメリットは異分野の人と関わることですが、他の分野にどんな印象をもっていますか。計算するときの哲学も分野



審査員特別賞


 陽に溶媒を取り入れた
生体膜系分子シミュレーションの
超並列計算に向けて

芝 隼人

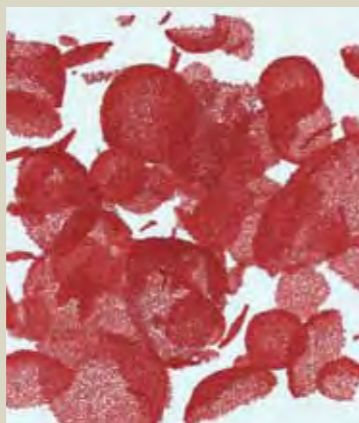
しば はやと

 東京大学物性研究所
物質設計評価施設 助教

細胞膜や赤血球をはじめ、分子集合体によって形作られる膜構造は、生体内に数限りなく見られます。これらは親水基、疎水基を伴った脂質分子や界面活性剤を主な構成要素とする分子集合体としての性格をもっています。個々の分子の性質からマクロな構造形成、膜面内のさまざまな構成要素の不均一分布などに至るまで多くの興味深い側面があり、生物学のみならず、化学、物理からのアプローチがなされている境界領域でもあります。これらの物質は、現象を支配する空間・時間スケールが大きい非平衡現象を伴うソフトウェアの一例であり、よくコントロールされたサイエンスとしての実験から実際の工業的応用まで、広く関わっています。

物理的な視点からは、2次元状の膜面の膜弾性や面内流動・結晶化などに由来する性質が、膜の構造や形態の転移、また時間依存のダイナミクスに及ぼす影響が1980年代から議論されてきました。時空間スケールの大きいダイナミクスの研究に便利な手法として、90年代から用いられてきた方法に、「粗視化分子動力学法」があります。全原子の分子をすべてシミュレーションに取り入れるのは困難であるため、巨視的な構造とダイナミクスを再現できる程度に複数の原子の自由度を一つの粒子で代表させる手法です。

膜を取り囲む環境溶媒の効果(浸透圧)の研究のため、特に化学分野の計算では溶媒分子と同一系として膜分子の運動を解く手法がかなり普及していますが、物理的な観点からも解明されるべきことが数多くあります。われわれは、粗視化度を大きく取ったメッシュレス膜模型に溶媒を同一系として取り入れることを考えました。メッシュレス膜模型は単分子状の膜の形状を自発的に構成する、膜弾性理論に即して高度に理想化された粗視化分子模型で、膜の開裂、ベシクルの自己集合、融合などが再現できます。これを用いて、膜に対して溶媒の関与する構造転移など、非平衡現象の全容の解明をめざしています。



100万粒子近い多数の溶媒粒子(非表示)中に、メッシュレス膜模型に基づく粗視化粒子(赤色)が擬2次元の膜構造を形作っている。溶媒の自由度の合理的な可視化方法の構築も重要な課題である。

によって違うのでは？

芝 物理系のソフトウェアの研究者が分子動力学をやるときは大胆にモデル化しますが、分子科学系の人にはまじめなモデルをスパコンまで持っていく印象です。

大野 なるほど。「第一原理」という言葉も、分子科学と材料科学では使い方が違う。化学系の人には電子相関を考慮した厳密な計算をするようで、それを第一原理と呼ぶようです。

諏訪 物理屋はある意味で適当なところがある(笑)。

大野 物理では必要以上に厳密さを追わないということも多い。その結果、マイクロでは大雑把だがマクロではきちんと精密、ということもありうる。

異分野との交流を広げたい気持ちはありますか。材料と物性では似た物質を対象にすることがあるが、学会も違うので交流があるとは言えません。一緒にやってみると、多様な視点が入っておもしろいのでは？

諏訪 私のやっているモンテカルロ法は広い分野で使われ、ニーズも多い。いろいろな人の意見を聞くと、手法についてアイデアが出そうな気がします。モンテカルロ法は1950年代に物理から発祥して広がり、1990年代以降は統計学などでも使われていますが、それまでに40年もかかっている。もっと速く広がるようにするには、分野間の交流を盛んにして問題意識を共有するとプラスになるはず。個人的にはいろんな分野の手法をチェックするようにしています。

大野 諏訪さんの仕事は波及効果が大きいから、他分野の人が目をつけてくれるとおもしろい。

諏訪 分野間交流にあたって難しいと思う

のは、用語が違うこと。それで交流があまり進まなかったと思います。

芝 物理はモデルをすっかり変えたりしますが、化学はそれぞれの原子のモデルをライブラリ化して使い回す。物理の分子動力学は融通無碍にやっぺいこうというスタンスがある。超並列化に耐える分子動力学の枠組みを作ることは双方に有用だろうとは思いますが。

諏訪 物理屋はメカニズムに興味があり、化学屋は物質自体に興味がある。モデル化する時も、細部を省略して抽出しようとするのが物理で、化学は原子や分子の性質をそのまま使っぺいこうとする。

三澤 量子化学の人は定量性にこだわる人が多いのでは？物理では本質がわかるミニマムな模型を考えようという立場をとる人が多く、定性的です。受賞対象となった今の研究は量子化学に近くて、第一原理的に現実の模型を出して丸ごと解いてしまおうというもの。そのなかでも、強く意識しているのは、できるだけその模型の中にどんな本質が隠れているかを明らかにしたいということ。その点は物理的かな。欲張りなんです(笑)。

CMSIで異分野交流、情報交換、若手のつながり

大野 スパコンを使うかどうかによらず、CMSIがもたらす交流から期待するのはどんなことですか。

三澤 大規模計算のノウハウを他分野からもらえるとうれしい。論文にはなりにくいですが、情報交換できるといい。第1回のCMSI研究会では普段は会えない人たちに聞いて

いただき、刺激になりました。

大野 CMSIが発足して半年たったが、計算機の使い方のテクニックを知りたいという要望が出ている。そのためには何があると役に立つと思う？

諏訪 プログラムを公開するとか。

大野 研究テーマごとではなく、例えばモンテカルロ法を軸にしてこんなテーマがCMSIにはありますよ、というマップを作ると手法ベースで人が集まるのでは？違う手法をもつ人との情報交換はおもしろいので、そのきっかけになるマップがあるといいと思う。

諏訪 細かいことまで話ができる小規模な会がほしいです。

芝 賛成。そこにバンダーにも入ってもらうわけにはいかないだろうか。

大野 それはおもしろい。

芝 バンダーに相談するときのノウハウや相談した内容を共有できるといいですね。相談内容や結果は誰からも見えずにしまわれてしまうから。

大野 実験の場合は、コツなどが論文に書いてある場合があり、それが現象を見るためのエッセンスである場合もある。でも、この計算機にはこんな癖があるというような情報は公開されず、むしろ隠されてしまう。

諏訪 そういうことをみんなが自由にアップする場があって、困ったときに見られるといい。CMSIのウェブページにQ&Aがあれば役立つと思います。

大野 若手のつながりも広がるといいですね。

諏訪 手法開発も評価してほしい。海外に比べて評価されない。

大野 手法開発は資金を取りづらい印象がある。しかし、手法がなくては発展もありませ

ん。最後に、CMSIへ期待や苦言をどうぞ。

三澤 組織がどうなっているのか、どうもわかりにくい。

芝 何がどう決まっぺいこうのか、全体像がよくわからない。

大野 次世代スパコンを誰にどんなことに使わせるかを議論して決めるのが元来はCMSIの最大のミッションでした。その後、いろいろの目的が加わったが、萌芽的な研究をいかに汲み上げるかを重視して、みんながハッピーになるように考えたい。

諏訪 では是非、次世代スパコンを使わっぺいこうして下さい。

大野 2011年4月にいよいよ神戸で「京」を使い始めますが、その次にどんなものが必要かもそろそろ議論をつめる必要がある。スパコンの1世代は5年単位ですから、次世代について遠慮せずに早い段階から声をあげてほしい。

全員 なるほど。わかりました。

大野 皆さんのCMSIでの活動に期待しています。

(2011年2月24日 東京大学理学部で収録)

構成：古郡悦子
撮影：由利修一





アプリケーション開発の最前線から

Modylasの開発者・安藤さんに聞く

1000万個もの原子の動きを一度に計算できるソフトウェア

「Modylas」が誕生しつつある。Modylasを使って何を明らかにできるのか、またどんなことに応用可能なのか、開発プロジェクトで中心的な役割を担う名古屋大学岡崎進研究室所属の安藤嘉倫さんに話を聞いた。

話し手：
安藤嘉倫 あんどう よしみち
名古屋大学 工学研究科 研究員

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



「Modylasとはどんなソフト?」

Modylas (モジラス)。親しみを感じるネーミングだ。その由来をまず聞いてみた。「MOlecular DYnamics simulation software for LARge Systemから名づけられました。文字通り、大規模な分子動力学シミュレーションを行うことができるソフトウェアです」

分子動力学(MD)計算では、分子集団(系)を構成する全原子の座標および原子間相互作用を記述するさまざまな力場パラ

メータを入力としてニュートン方程式を数値的に解き、系の構造や変化(ダイナミクス)を解析する。原子間相互作用の計算には膨大な計算量が必要になるので、コンピュータの進歩と並行して扱える系の規模を広げてきた。しかし、既存のスーパーコンピュータが扱うことができる系の規模は数十~数百万原子である(図1)。

安藤さんは分子動力学の専門家だ。コンピュータ科学にも明るく、プログラミングを書くスキルも持ち合わせていたとはいえ、高度化したスーパーコンピュータ向けのソフト

ウェア開発は容易ではなかった。「京」は8万台以上の計算ノードから構成される複雑なコンピュータです。「京」の能力を最大限に引き出すには、通信の回数を減らして効率よく演算するアルゴリズムを構築することが鍵となります。Modylasの開発ではコンピュータ科学の専門家しかわからないような高度な技術もたびたび求められました。これまで、重要な部分についてはソフトウェア開発の技術者(富士通)との共同研究で進めてきましたが、共同研究を円滑に進めるにはわれわれもコンピュータの

ことを良く知っていないといけないし、コンピュータ科学は新しい専門用語が次々と生まれている分野なので、言葉が通じない苦労もありました」

最大の難問は、原子間に働く力の一つであるクーロン力(静電気力)をどのように効率よくMD計算に組み込むか、だった。クーロン力は人間が感じるほど遠くまで作用する力だ。このクーロン力は原子レベルのミクロの世界でも現象を支配していると考えられているので、当然シミュレーションでも正確に記述しなければならない。

「これまでのスパコンでは、クーロン力の計算にParticle-Mesh Ewald method (PME法)が使われてきました。これは高速フーリエ変換(FFT)を利用した近似計算法で、精度は十分良いのですが、計算ノード数が増えるにつれFFTに起因するノード間の通信量が膨大になり、計算効率が低下するという難点がありました。計算ノード数が8万を越える“京”では、PME法に代わるより効率的なクーロン力の計算方法が必要になります。そこで、われわれは、高速多極子法(Fast Multipole Method: FMM)にもとづくクーロン力計算プログラムを新たに開発することにしました。FMMは、近くの粒子からの力は厳密に、より遠くの粒子からの寄与はひとまとめに扱うことにより、高い精度を保ちながら、高速なシミュレーションを実現するアルゴリズムです(図2)。しかしながら、PME法と比べプログラムの構造がはるかに複雑となるため、これまで実際のソフトウェアではほとんど使われてきませんでした。数万ノードから構成されるスパコン上での稼働を前提にソフトウェアに実装した例はわれわれが初めてです」と安藤さん。FMMの実装は、今ではModylasの一番の売りとなっている。

「Modylasで何がわかるのか?」

Modylasを使うと、どのようなシミュレーションができるのだろうか。現在のスパコンでは500年もかかり、実現できないといわれてきた1000万個の原子からなる系の分子動力学計算が可能になる。ウイルスに代表される生体高分子集合体の構造安定性の起源は科学として大いに興味をもたれるテーマの一つだ。高効率なMD計算ソフトウェアは、タンパク質の構造予測、細胞膜の構造変化といったナノスケールでの研究に幅広く役立つ。

きれいな映像がシミュレーションで見られることも、この研究の魅力だという安藤さん。実際、私が当日見せていただいた映像からも、1000万個の原子からなるウイルスの分子は面白い構造であることがすぐに見て取れた。カプシドと呼ばれるタンパク質でできたウイルスの殻は、タンパク質の同じパーツ同士

が塊になってある模様を形作っている。

「“京”スパコン上で計算することで、周りの水分子を構成する原子からウイルスを構成する原子まで、約1000万個のすべての原子の挙動を追うことができます。これまでは、ウイルスがなぜこういう構造をとることで安定化するのか、科学的によくわかっていませんでした。スパコンでのシミュレーションから、原子レベルでその謎を解明したいと思っています」

「何に応用できる?」

Modylasの創薬分野への応用が注目されている。ウイルスの細胞への感染やウイルスと免疫機構との応答の分子メカニズムを実験によって明らかにするのは難しい。それに代わる新しい手法として期待されるのが全原子MDシミュレーションだ。

「ウイルスと受容体(レセプター)との相互



図1. 分子動力学計算(MD)法が対象とする系の大きさとその時間スケール
コンピュータとアルゴリズムの進歩に伴って、計算規模が広がってきた。最初のMDが試みられたのは1957年、わずか100原子規模。



安藤 嘉倫 あんどう よしみち

航空宇宙工学に興味を持ち大学に入学したが、学部4年の時、無数の分子の作り出す多彩な現象に魅せられ、分子科学の道を志す。開放環境科学を専攻し、分子動力学によるアルコール水溶液における気液界面の研究で工学博士号取得。その後、自然科学研究機構・分子科学研究所、さらに2008年からは名古屋大学で、岡崎進教授の指導の下、Modylasの開発に専念する。「京」のある神戸では、六甲全山縦走大会での完走も目標のひとつ。

作用を自由エネルギーとして定量化することで、ウイルスが人間の体内でなぜ特定の受容体にのみくっつくのか？ その理由が分子レベルから明らかになります。そこで、ウイルスがくっつく前に、ウイルス側の接合部に似た構造の違う分子が受容体にくっつくようになれば、ウイルスが細胞内に侵入するのを阻害できます。ウイルス構造の理解は、こうしたウイルスをブロックする薬の開発にもつながるのです」

「また、ベシクルという細胞内の物質輸送担体を利用したドラッグデリバリーシステム(DDS)の開発にも貢献できるのではないかと期待されています。ベシクルは水相を脂質二重膜が包み込んだ袋状の構造体で、その内部もしくは脂質二重膜に薬を注入し、薬を体内の目的の患部まで効率よく届けようとするものです。このDDS開発研究では、ベシクルを構成する脂質膜と内包する薬剤との相互作用、およびベシクルと膜融合対象である細胞膜との相互作用といった基礎的な事項が依然よくわかっておらず、MDシミュレーションによる新しい知見が求められています」

現状では、泡や宇宙空間での星の形成といったスカスカな系は計算の効率が悪くModylasにはあまり向かないようだ。水と目的のタンパク質を入れて計算するウイルスのシミュレーションのように、物質で充満したほぼ均質な密度をもつ系の計算を得意とするModylas。アイデアがあれば生体分子に関わらずさまざまな対象に使ってほしいと安藤さんは語っている。

「日本独自のソフトウェアで世界をリードしたい」

安藤さんのように、物理や化学の基礎知識に合わせてプログラミングの技術を持ち合わ

せた研究者は少ない。

「今は、MDコードのプログラミングと研究とを両立させている分子動力学分野の研究者はマイノリティですが、理想的にはマジョリティになってほしいと思っています」

また、日本でのソフトウェア開発には、本質となる知識を次世代に伝えていく意味もある。

「現在、日本の分子動力学のコミュニティには、誰もが使え、かつ世界と比肩できるほど高効率に計算できるソフトウェアが存在しません。一方で、アメリカやヨーロッパ諸国では20年ほど前からソフトウェアの開発はコンピュータ科学や物理学などいろんな分野の専門家が集まって開発する共同研究として進んでおり、組織力の面で日本はかなり遅れをとっています。もちろん、アメリカのソフトウェアを輸入して使うこともできますが、それではソフトを使うだけになってしまい、その根本の原理がどうなっているのかという科学の本質の部分が世代を経るうちに次第にわからなくなってしまうという恐れがあります。どの分野にも言えることだと思いますが、こうした知識の空洞化が起らないように、日本独自で一から最新のソフトウェアを作り上げることは重要なのです」

これから、分子動力学を含むいろいろな分野の専門知識をもった研究者を集め、「京」でのModylas最終チューニングが始まる。分野を異にする専門家が集まることで、ソフトウェアのパーツごとの計算速度は確実に速くなるだろう。その中で、安藤さんはModylasプロジェクトのキャプテンを務め、全体性能の最適化を図る。

「これまで、分野による言葉の違いも密にコミュニケーションを図ることで解決してきました。今後お互いが協力しあい、プロジェクトを成功させたいと思います」

目標は世界のトップレベルに立つことだ。

久保田 好美 くぼた よしみ

専門は、過去の地球の気候を復元していく古気候・古海洋という分野。博士課程での研究テーマは過去4万年間の東アジア地域の気候変動。文明の盛衰と気候変動の関係にも興味をもつ。

東京大学大学院理学系研究科の有志でつくる「0 to 1」(0から1へ)のメンバー(2011年度代表)として、科学の楽しさを伝えるためのイベントや科学の問題点を議論する活動に加わるほか、サイエンスライターとしての執筆活動にも取り組んでいる。



【インタビューから見た安藤さん像】

東日本大震災が起った3月11日の午後5時。「このような非常事態で特に久保田様の名古屋への移動はむずかしいと思われます。よって明日の取材の日程を延期すべきかと思います」安藤さんは関係者へメールで呼びかけた。これを受けて、12日に予定されていた取材は延期された。この心配りには安藤さんの人柄が反映されているようだ。研究面での

活躍は言うまでもないが、共同研究者への気配りや後輩の面倒見の良さも折り紙つきだと言う。「京」でのシミュレーションでは、自ら先頭に立ってソフトウェア開発を進めるだけでなく、専門家間のコミュニケーションを取り持つ重要な役割が期待されている。安藤さん自身も「Modylasプロジェクトチームにおけるキャプテン」だと自覚している。

撮影：奥村久士(分子科学研究所)

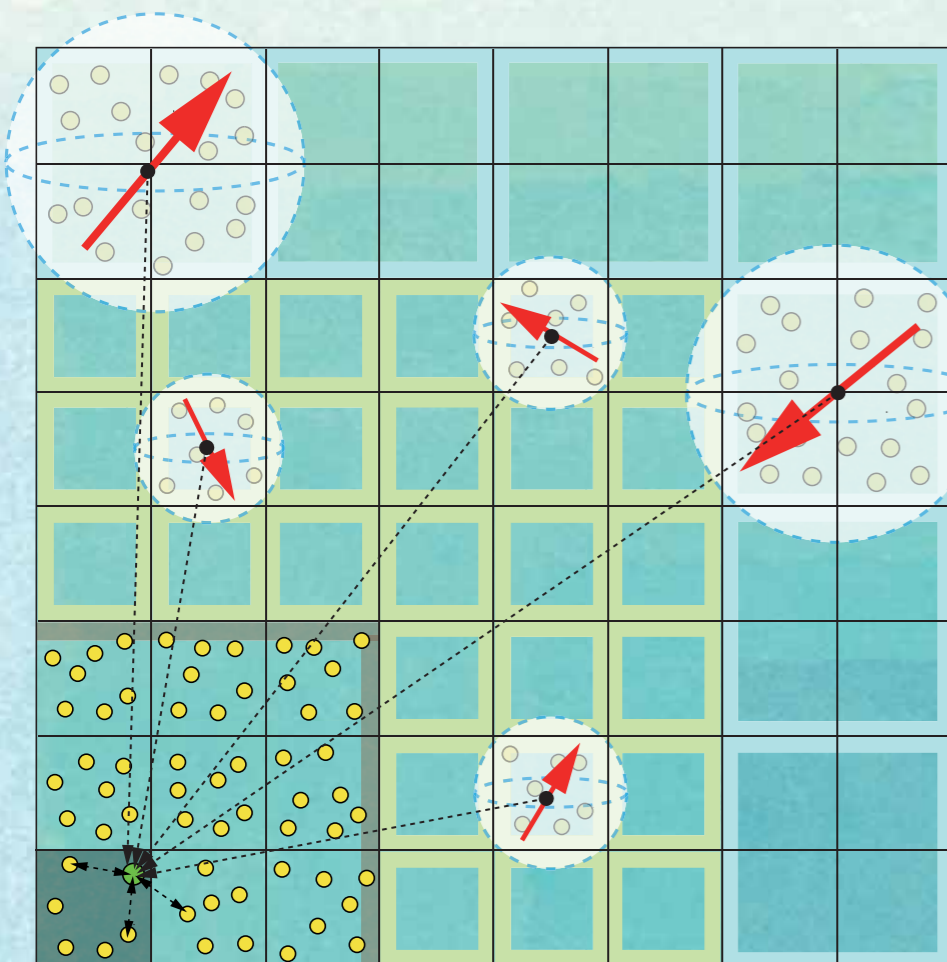


図2. FMMによるクーロン相互作用の計算

近くの粒子との相互作用は厳密に計算する。より遠くの粒子からの寄与はひとまとまりにして多極子として表現する。さらに遠くはより広い範囲をひとまとまりにする階層性を導入することにより、計算精度を落とすことなく、計算を高速化することが可能となる。

Application SPEC Sheet [Modylas]

コード名	Modylas
方法・アルゴリズム	分子動力学法
コードの概要・特徴	近距離粒子対演算部と遠距離FMM演算部から構成。基本セルを完全領域分割し、全体通信を極力排除した超10,000プロセス並列対応の分子動力学計算プログラム。
シミュレーションの対象となる物質	水相中の生体分子集合体(ウイルス、脂質二重膜およびミセル)
開発責任者	岡崎進(名古屋大)
開発者・開発機関一覧	安藤嘉倫、藤本和士、山田篤志(名古屋大)、吉井範行(姫路獨協大)、川口一朋(金沢大)、岩橋建輔、水谷文保(分子研)、富士通 *2010年度まで
開発期間	2006年度より概念設計開始、2011年度末完成
開発言語・ソースコード行数	Fortran・約20,000行
動作環境	筑波T2K(Linux)、富士通FX1(Solaris)、京(Linux)、ほか一般的なサーバコンで動作可
並列化方法	ハイブリッド並列(MPIとOpenMP)
並列化の状況	最大並列度8192コア。プロセス並列化率(ほぼ100%(粒子対計算部)、60%(FMM部))
ソフトウェアの公開	共同研究者へのバイナリ提供が基本姿勢
関連/競合するアプリケーション	関連：REM、ermod 競合：NAMD(米国)
その他の機能	NANO-IGNITION、GIANT(ともに分子研)との連携

産官学をつなぐ—CMSI産官学連携シンポジウム招待講演

新物質・エネルギー 創成研究者が 期待する計算科学

橋本 和仁 はしもと かずひと

東京大学大学院 工学系研究科/先端科学技術研究センター教授

わが国の基礎研究、特に理論や計算では、多くの優秀人材が、自分の役割は基礎研究だ、自分は応用研究には向いていない、応用研究は基礎研究に比べておもしろくない、などと考えているようです。しかし、それは違います。応用研究にも極めて独創性が必要です。

私自身、基礎化学の出身ですが、1990年頃に酸化チタンを菌や汚れの分解に使えるのではないかと思いつきました。これは単なる応用です。しかし、幸運なことに、研究の過程で光を当てると表面が非常に親水化するというサイエンスとして新しい現象も見付き、しかもそれは実用技術としても展開して、建築、農業から土木にいたるまで、現在も応用が広がり続けています。

異なる分野への研究展開は、実はそれほど難しくありません。基礎研究でオリジナリティの高いアイデアをもっている人は、応用研究でもオリジナリティの高いものを出せるようです。出口を見据えた応用研究には、異分野研究者やマーケットとの双方向の情報交換の場をつくることも大切です。その意味で、CMSIの3つの拠点あるいは神戸のスパコン拠点を、継続的に企業の方が入ってこられるような場にすることが重要だと思います。



われわれ実験家も、高効率の有機太陽電池や可視光光触媒物質の探索において、バンド計算を使った物質設計を試みています。しかし、われわれの計算レベルでは、実際に合成してできたものとは全然合わないことが多い。そこで、何をやるかという、運よく当たるまでどんどんつくるわけです。計算科学の専門家へ期待するのは、そんなわれわれの直感を下支えしてくれることです。メカニズム解析も重要だけれども、本当に欲しいの

は、どの方向に行ったら確率が上がるのかという作業仮説なのです。

機能部材、ナノ材料の応用研究の分野で、アカデミアへの期待はますます大きくなってきています。研究をもって社会に貢献するということをミッションの一つと捉えるのであれば、実験科学者や企業と組んで応用研究を進めていくことによって初めて、いわゆる学術も守っていける、そういう時代になってきているのだと思います。

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。

●2011年2月7日

CMSI産官学連携シンポジウム「計算シミュレーションの新たな産業応用への展望」
場所：秋葉原コンベンションホール

産官学連携小委員会が企画し、CMSIが主催する産官学連携シンポジウムには、産官学の関係者150名が集まりました。今回の目的は、計算シミュレーションの産業利用の現状を、産、官、学それぞれの立場から検証し、今後のあるべき方向を議論することでした。

文科省の計算科学技術推進室長は、「“京”を中核とした大規模スパコンプロジェクトでは、産官学が連携し、国家の産業競争力を高めることが必要」と、行政の指針を示されました。これを受けて基調講演では、「スパコンの産業活用で日本が世界をリードするためには、大規模に

並列化されたスパコンを最大限に活用できるソフトを効率的に開発しなければならない」と、大規模ソフト開発の課題が掲げられました。

その後立った講演者からは、「大規模計算ソフトを開発・維持・管理し、産業に活用していく戦略的な仕組みの構築」、「実験家との密な連携によるターゲットの設定」といった具体的な取り組みが提案されました。夕方から始まったパネル討論では、「利用者視点に立ったプログラムの整理と提供」、「産官学間の人の移動や交流促進の場の創出」といった問題が議論され、最後の意見交換会では、講演者と参加者間でも活発な意見が交わされました。

*招待講演の内容は13、14ページで紹介しています。

●CMSI研究員ワークショップ

日程：2011年7月、11月、2012年3月予定
場所：CMSI神戸拠点
内容：アプリケーション高度化を議論

●計算分子科学シンポジウム

日程：2011年8月予定
場所：CMSI神戸拠点

●計算物質科学研究センター研究会

日程：2011年9月予定
場所：東京大学物性研究所

●計算分子科学・実験家交流会

日程：2011年11月予定
場所：京都

●CMSI・金研合同研究会

日程：2011年12月予定
場所：東北大学金属材料研究所

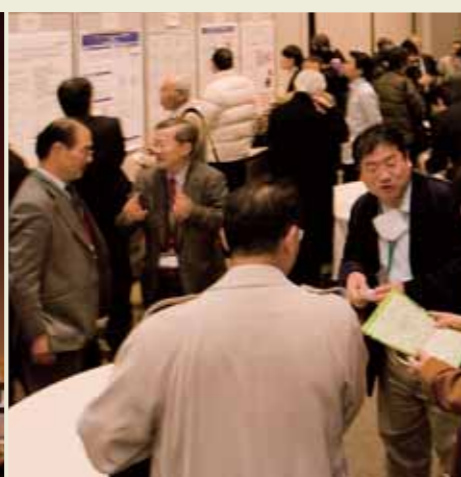
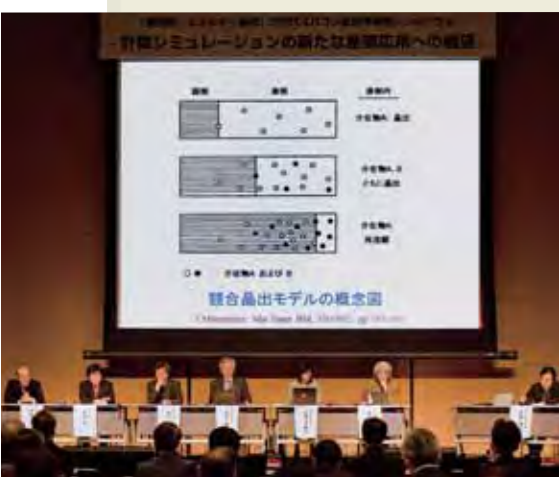
●CMSI産官学連携シンポジウム

日程：2012年2月予定
場所：未定

●CMD®ワークショップ(CMSI・阪大主催)

チュートリアルコース開催

- ・第19回 2011年9月5～9日
場所：大阪大学サイバーメディアセンター
- ・第20回 2012年3月6～10日
場所：国際高等研究所(京都)
- ・CMD®インドネシア(バンドン工科大共催)
日程：2011年7月19～22日
場所：バカンバル予定
- ・CMD®フィリピン(デラサル大共催)
日程：2011年10月初旬(調整中)
- ・CMD®ベトナム(ホーチミン大共催)
日程：2011年12月中旬(予定)
- ・CMD®タイ(共催未定)
日程：2012年2月中旬(予定)



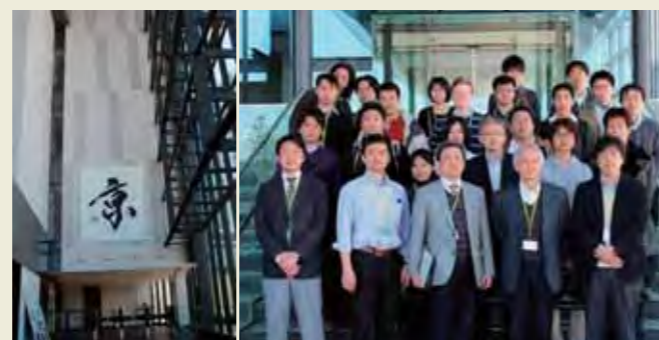
「京」だより

CMSI神戸拠点がスタート

4月4日、次世代スパコン「京」が設置されている計算科学研究機構内に、CMSI神戸拠点がスタートしました。早速、「京」で世界リードをめざす計算物質科学の研究者たちが結集! 真新しい施設と環境の中で、専門分野を越えた熱い議論が交わされています。4月6日には、機構に隣接した「神戸花鳥園」で懇親会も開催。異分野交流をさらに深め、イノベーション創出につなげたいですね。

今後、アプリ高度化検討会等を企画する予定ですので、詳しくはCMSIのHPをご覧ください。

「来たれ、CMSI神戸!」URL <http://cms-initiative.jp>



産官学をつなぐ—CMSI産官学連携シンポジウム招待講演

HPC Challenges for the Next Decade and Beyond –From Discovery to Applications at the Nano-Bio-Med Frontier

Michael L. Klein

 Professor, Institute for Computational Molecular Science,
Temple University, Philadelphia PA 19122 USA


As George Whitesides said recently in *Nature Magazine* – scientists should try to solve problems that are important and recognizable to society. Practical problems can be more challenging than those typical academics tackle; e.g., catalysis and polymers started in industry before becoming exotic fields within theoretical physics and synthetic chemistry.

Things in biology are not so simple. For example, consider a hybrid system of a DNA and a carbon nanotube. This is interesting because a device like this can pick up characteristics of functionalized DNAs, which are more and more important in biological environments. This is the intersection between biology, physics, and

nanotechnology. Each time a DNA strand binds to a carbon nanotube it will take on a different structure. In order to discover the ideal packing we need to repeat the simulation hundreds of times and it required an IBM 'Blue Gene' using 2048 processors for one month. It's not just heroic calculations we need that use hundreds of thousands of processors. We also need capacity computing to gain time to solution.

The K computer will be a significant step on the pathway to empowering computation as a tool to complement experiment. But the real breakthrough during the last 30 years was about algorithms; the Feynman path-integral representation of quantum mechanics, the Nosé thermostat to simulate the canonical ensemble, and the Car-Parrinello method, which gave us the ability to simulate silicon both as a semiconductor and as a liquid metallic system. The latter, was a really significant breakthrough. It took a decade before the method was used widely, but since then it has become routine. So, algorithms have played a key role, and in the latter case we had to wait for big machines to catch up.

In biology, interesting things are micron size. They are assemblies of

nanoscale machines. And these machines in the cell wall are membrane proteins that either transport ions or particles in and out of the cell. By understanding how these machines work, we can use the design principles from nature to do things that nature didn't do. This is a frontier area of material science. But the length scales are not appropriate to density functional theory. Heroic calculations on current supercomputers would allow us to handle about ten thousand lipids. But we are still a long way short of an interesting size. That has led to the idea of using different methods for different scales; the bridging of length scales. Unfortunately, the trouble is where we want to join a quantum method to a classical atomistic method. There are as many methodologies for doing this as there are groups doing calculations, and it's an intrinsically tough problem to deal with. In summary, we need more than just the big hardware. We need algorithms. We do need heroic calculations that could only possibly be done on a K computer type machine. But we also need capacity computing. The latter is especially important to solve real world problems.

撮影：由利修一



人を育てる

CMD®18ワークショップ 体験レポート

島 宏美 しま ひろみ

東京理科大学 理学研究科物理学専攻(当時)

CMSIが共催する第18回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®)ワークショップが3月8日~12日、国際高等研究所で開かれました。実際にスパコンで計算して物質を設計することに重点を置いたワークショップで、これまでに大学、企業から700名余りが受講しています。今回のワークショップに参加した島 宏美さんが、その様子をレポートします。

私は強誘電体薄膜や圧電体に関する材料の研究を行っています。俗に言う「実験屋」です。今回のワークショップに参加しようと思ったのは、計算を始める「とっかかり」が欲しかったのです。材料の探索では、2種類以上の材料を組み合わせ、目的の物性値を達成することがよくあります。この際、どの組み合わせが良いか計算によりある程度予測できれば、格段に研究の効率をあげることができるはずですが、そのための勉強をしなければと、何度か机に向かったことはあるのですが、なかなか持続することができませんでした。

ワークショップに申し込んだものの、あまりに初心者過ぎて、講義や実習についていけるかどうか不安でした。実習では、UNIXでの操作自体が初めてでしたので、言われた通りにひたすらキーボードをたたいているというありさまでした。しかし、それぞれのコードで一連の計算を終える頃には、だんだんと自分が何をしているのかがわかってきました。これは、講師の先生方が基礎からとても丁寧に説明され、かつ、それをフォローするチュー



ターの方がいて、といった実習スタイルによるのだろうと思います。5日間のワークショップで3つの計算コードを習ったのですが、その順番も非常に考えられているなど、自習を終えた今になって感じています。

これでCMD®手法を完璧に理解し、実際に自分の材料系で計算を行えるレベルになったとは言えませんが、計算に関して門外漢だった私が、初級者程度のレベルになったと思います。今後も興味をもって取り組める確かな手応えを得られたのが何よりの成果でした。

撮影：下司雅章(大阪大学)

チュートリアル・コース

受講生の希望により選択できる。

計算機ナノマテリアルズデザイン 基礎チュートリアル・コース

- ・CMD®先端事例の講義と特別講演
- ・第一原理計算の基礎理論講義
- ・第一原理計算入門実習 (3種類のコード)

計算機ナノマテリアルズデザイン 専門チュートリアル・コース

- ・CMD®先端事例の講義と特別講演
- ・CMD®実習 (5種類のコードの中から2種類を選択)

計算機ナノマテリアルズデザイン 先端チュートリアル・コース

- ・CMD®先端事例の講義と特別講演
- ・CMD®実践研究

計算機ナノマテリアルズデザイン スーパーコンピュータ・コース

- ・CMD®先端事例の講義と特別講演
- ・CMD®実習 (RSPACE)

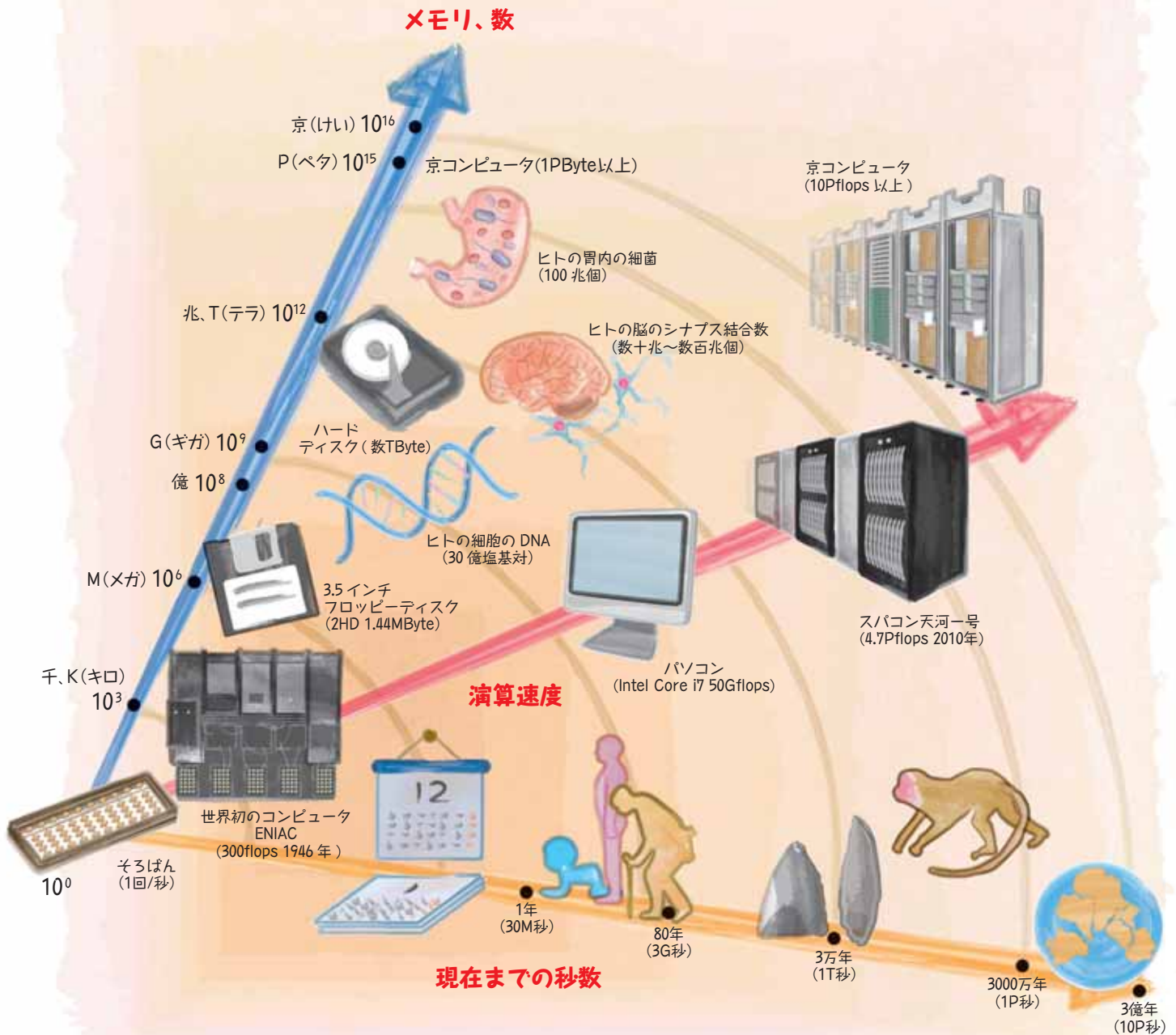
定員：25名

参加費：受講費は無料

(旅費・食事は受講生負担)

「京」は時を駆ける

京コンピュータは1秒間に1京($10^{16} = 10,000,000,000,000,000$)回の演算を実行します(10ペタフロップス)。これは、人間が1秒間に1回計算するとしたら、3億年にかかる莫大な計算量です。3億年前には、人類はまだ誕生していませんし、日本列島もできていませんね。



イラスト：秋本祐希(マブチデザインオフィス)

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.2, May 2011

© Computational Materials Science Initiative, 2011 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」
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

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