

July 2012

NO. 5

# Torrent

## 10<sup>16</sup>が創り出す 新マテリアル

CMD<sup>®</sup>ワークショップ10年の活動  
—関西から日本、そしてアジアへ

インタビュー  
アプリケーションDCの  
開発者・小林正人





# CMD®ワークショップ 10年の活動

関西から日本、そしてアジアへ



小口多美夫

おぐち たみお

大阪大学産業科学研究所  
産業科学ナノテクノロジーセンター 教授



第20回CMD®ワークショップの参加者と講師陣。最前列左端が下司特任准教授、最前列左から3人目が小野助教、5人目が赤井教授、最前列右から2人目が小口教授。

2012年3月6日(火)から10日(土)の5日間、  
第20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  
京都府木津川市にある国際高等研究所(高等研)で開催されました。  
CMD®ワークショップは毎年2回開催されており、  
今回で開始からちょうど10年目の節目を迎えました。  
その活動を振り返り、計算物質科学イニシアティブ(CMSI)との  
連携までの歩み、見えてきたいくつかの課題とその取り組みを紹介し、  
今後は展望します。

\*CMD®はCMDコンソーシアムの登録商標です。  
CMD®ワークショップの企画立案はCMDコンソーシアムが行っています。

## CMD®ワークショップの誕生

CMD®ワークショップの母体となったのは  
高等研のスペシャリスト養成事業です。  
2001~2002年、この事業の第1弾として「情報生物学適塾」が成果を上げていました。  
「情報生物学適塾」というのは、既成の大学院ではカバーできない新しい研究課題を取り  
上げて専門家を講師に招き、若手の受講生  
を対象にして合宿スタイルでセミナーもしくは  
ワークショップを行うものでした。受講者が単  
に目的の知識を得るだけでなく、講師と双方  
向で交流する機会を積極的につくり、相乗効  
果として将来を担うスペシャリスト集団が形  
成されることを目的としていました。

一方、大阪大学には当時、第一原理計算  
を専門とする研究者がそろっていました。赤  
井久純氏、吉田博氏、笠井秀明氏、鈴木直  
氏、張紀久夫氏らです。こうしたバックグラ  
ンドがうまく働いて、2001年、科学技術振興事  
業団(JST、現在の科学技術振興機構)の計  
算機活用型プロジェクト「計算機ナノマテリア  
ルデザイン手法の開発」が採択されました。  
その支援を受けて、高等研のスペシャリスト  
養成事業の第2弾として2002年9月、CMD®  
ワークショップが産声をあげたのです。

CMD®, コンピューショナル・マテリアル  
ズ・デザインとは、ある機能や物性を求めて、  
それを備えた未知の物質や構造を理論的  
に設計する、いわば「量子デザイン」です。

具体的には、物性物理の基礎理論に基づ  
き、計算機の力を使って計算します。量子  
デザインをするツールは計算機なのです。  
CMD®ワークショップは、この量子デザインが  
できるように、基礎知識や技術を提供するこ  
とを目的としています。

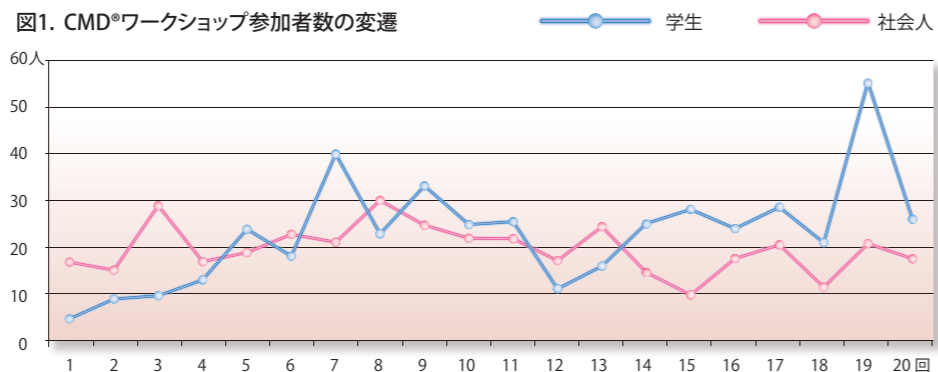
第1回CMD®ワークショップの講義の場所  
は高等研が中心になり、計算機実習は日本  
原子力研究所(JAERI)関西研究所(当  
時)のITBLの施設を利用しました。参加者  
は大学院生5名、大学・高専関係者4名、  
民間企業12名、公的研究機関1名の計22  
名でした。4泊5日、講義は連日夜9時頃まで  
続き、合宿形式ならではの充実した内容とな  
りました。

## CMSIとの連携へ

CMD®ワークショップはその後、高等研を  
はじめ、新エネルギー・産業技術総合開発  
機構(NEDO)材料ナノテクノロジープログラ  
ム、科学技術振興調整費、科学研究費特定  
領域研究、振興分野人材養成プログラム等  
の支援を受けて、継続的に開催することがで  
きました。図1に第1回より20回までの学生お  
よび社会人の参加者数の変遷を示します。  
20回にわたる総参加者数は858名(うち学生  
461名、社会人397名)でした。

民間企業からの参加者の多さは第1回か  
ら注目され、このようなワークショップがいか  
に必要とされているかが認識されました。そし





て、2004年10月には大阪大学で社会人教育プログラムが開設されたのです。

第6回CMD®ワークショップからは、社会人教育プログラム内でのCMD®ワークショップの受講が必修となりました。また、このプログラムは大学院科目としても単位認定されています。その後、2009年よりナノサイエンス・ナノテクノロジー高度学際教育研究プログラム (<http://www.sigma.es.osaka-u.ac.jp/pub/nano/>)として発展しています。

## CMD®ワークショップの今後の課題



赤井久純 あかい ひさずみ

大阪大学名誉教授/  
大阪大学海外拠点本部グローニンゲン  
教育研究センター センター長

これまでの20回のワークショップをふりかえってみると、その講義や実習のほとんどは量子シミュレーションの段階にとどまっていたと思います。量子シミュレーションは、既存の物質を対象にして機能や物性を明らかにするものです。これに対して、われわれが標榜してきたのは、CMD®(コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン)、新たに求める機能や物性をもつ物質や構造を理論的に設計する「量子デザイン」でした。

今後は、この「デザイン」ということを実習においてもより意識して、より高いレベルで実施していければと考えています。もちろん、5日間の実習で「デザイン」ができるようになるものではありません、長年研究していてもうまくいくことは稀有です。CMD®

第1回より同プログラムに引き継がれるまで、ワークショップの事務局は工学研究科の笠井研究室が受け持っていました。

さらに、2011年10月開催の第18回CMD®ワークショップからは、CMSIの主催する活動のひとつとしても位置づけられるように

ワークショップでは、そのための技術や考え方、ヒントをつかんでもらい、それぞれの職場や研究室に戻ってから研究を進めてほしいと期待しています。

今後の課題としてもう1つあげておきたいのは、われわれの研究成果を社会に広く公開して利用してもらうための仕組みをつくることです。CMD®ワークショップの実習で使っているソフトウェアはすべてフリーウェアで、誰でも自由に利用することができます。科学技術計算ソフトウェアの公開と普及についてはいろいろな考え方がありますが、われわれのコミュニティでは「CMD®コピーマート®」というデジタルコンテンツの流通に関する契約モデルを利用しています。

コピーマート®は、北川善太郎京都大学名誉教授によって提唱されたもので、「コピーしてはいけない」という従来の権利処理に対して、契約を介することによって、あらかじめ権利者の許諾があれば「コピーができる」仕組みを構築しようとするものです。その研究はCMD®ワークショップ以前から始まり、高等研において議論が重ねられてきました。CMD®ワークショップでは第12回からこれを講義に取り入れ、普及に努めています。われわれの成果をできる限り広く社会に還元するには、そのための仕組みづくりも重要ですので、CMD®コピーマート®を1つのモデルとして検討されると良いのではないのでしょうか。

(聞き手：下司雅章 けし まさあき 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)

なったのです。そもそも、量子デザインする物質が単位胞に多くの原子を含んでいたりと、ナノ粒子系のような規模の大きいものになると、相応する規模の計算が必要になり、そのような計算を実行できるコードの開発技術も必要になってきます。2010年9月に発足したCMSIは「京」コンピュータを使った大規模計算を目指していましたが、この点で重なりをもっていました。また、量子デザインができる人材を育成するという点も、両者の目標に含まれていました。

## 多様な受講生への対応に向けて

CMD®ワークショップの第1、2回の講義と実習はその後のビギナーコースの内容に相当する単一クラス形式でした。しかしながら、受講生の経歴や実習技能に幅があり、現場での運用にいくつかの問題が生じていました。その経験を踏まえて、第3回からはコース制を取り入れました。ビギナーコースとアドバンスコースの2コース制を数回続けたのち、エキスパートコースを併設。多様な受講生の要望に対応するとともに、第17回からはスーパーコンピュータコース(詳細は次ページ「CMD®20「スパコンコース」」参照)が新設されました。

受講生がCMD®ワークショップに何を求めるかは実際まちまちで、第一原理計算をまずは体験したいという初級者から、具体的な研究課題に第一原理計算を活かしたいという目的がはっきりしている人まで、たいへん幅広い対応を求められました。たとえば第一原理計算では多くの場合、計算機端末上に各種指示としてコマンドを打ち、またUNIX®レベルのファイル操作が最低限基本となります。当初は、各

## CMD®20「スパコンコース」

小野倫也 おの ともや

大阪大学工学研究科  
附属超精密科学研究センター 助教

CMD®ワークショップの「スパコンコース」は2012年3月のCMD®20で4回目になる新しいコースです。

スパコンコースでは、計算機リソースを考えて、受講生数は3~4名に制限し、私たちがふつうに研究を行っているリソースに近い環境でマンツーマンの実習を行うようにしています。参加申し込みをしたのは、大学院生、ポスドク、民間企業まで、これからの計算科学を担う人材です。その中から、ビギナーコースやアドバンスコースへの参加状況、これまでの履修内容などを見て受講生を選びました。

講師には小野(大阪大学)と江上喜幸さん(長崎大学)が、ティーチングアシスタントに齊藤正一朗さん(大阪大学)の計3名が当たりました。スパコンコースではRSPACEコードと

STATEコードを交互に使用していますが、今回はRSPACEを使いました。実習で行う計算内容は、あらかじめ受講生に希望を出してもらい、私たち講師と相談して決めています。受講生はこのRSPACEを使った学術論文を読みこんでいて、的を外さない計算テーマを出していました。実習用のスパコンはこれまで大阪大学サイバーメディアセンターのSX-9を利用していましたが、今回は東京大学物性研究所のAltix ICEを使いました。

実習初日は、まず計算機の紹介から始まり、その後、コードを使った実習に入ります。コードを使うのが初めてという人が多いので、最初はマニュアル兼テキストを読みながら進めていきます。RSPACEは、MPIによるプロセス並列とOpenMPIによるスレッド並列の両方で並列化されています。Altix ICEはマルチノードでの利用を前提としているので、あえてMPIによるプロセス並列を意識させるように実習を行いました。RSPACEは、使うコアを増やせば計算時間を短縮できるので、受講生には次世代スパコンのような超並列

アルゴリズムの重要性を実感してもらえたのではないかと思います。

ワークショップ後のアンケートによると、ノード、CPU、コアといった計算機の構造と、それに対するプロセス並列、スレッド並列の役割が理解しづらかったようです。今後、ワークショップで超並列計算機を利用した実習を進めていくにあたり、物理・化学の授業に加えて計算機の構造を解説するようなコンテンツも必要だと痛感しました。

2日目以降の会場の雰囲気は、まるで研究室のようでした。他のコースと同様に休憩時間をとっているのですが、計算に没頭してしまい、ジョブの合い間に休憩をとる人や、休憩なしで計算を続ける人もいました。そして、少し使い慣れたところに、ワークショップが終了となりました。

ワークショップでやりたかったことができなかつた受講生がいたのは残念ですが、終了後のアンケートを見ると、今後の共同研究の希望が生き生きと書かれていたりして、講師としてやりがいを感じる場面もありました。

講義の中で必要に応じて説明をしていましたが、最近のワークショップではビギナーコースの初日にUNIX®講座を開設しています。さらに、第一原理計算の基礎にかかわる講義・実習に加えて、毎回、主に外部から講師を迎え、先端研究事例として大学、研究機関、民間企業における第一原理計算を使った物質・デバイス領域への応用例が紹介されています。

CMD®ワークショップでは毎回、終了後に受講生と講師に対してアンケート調査を実施しています。ここで、ワークショップの内容や実施形態に関する要望、問題点を指摘してもらい、以後の企画や運営に反映させるようにしています。

## アジアへの展開

第10回ごろから、東アジア地域からの外国人の参加が増えてきました。大阪大学に留学している大学院生が中心で、第10回の外国人参加者数は9名、第19回には18名に増

えています。これには、笠井教授の尽力によるところが大でした。一方、外国からの参加者が増えたため、講義・実習を日本語だけで行うことが難しくなり、説明スライドだけでなく口頭説明についても日本語と英語を併用するようになりました。このスタイルは今日まで継続されていますが、困った問題がおこることもあります。受講生の質問がきっかけで講義に熱が入ると、しばしば日本語もしくは英語での説明に偏り、その結果、受講生が講義に不満をつのらせてしまうのです。

このような問題があるものの、留学生の受け入れは大きな効果をもたらしてくれました。CMD®ワークショップを介した東アジア地域の人たちとの交流がもとになって、2008年から東アジア地域でのアジアCMD®ワークショップが始まったのです。2008年8月、インドネシア・バンドン工科大学での開催を皮切

りにして、同9月にはフィリピン・デラサール大学で、2009年度はインドネシア、フィリピンに加えてベトナムでも開催。2010年度、2011年度にはさらにタイを含む東アジア4カ国でアジアCMD®ワークショップが開かれました。

東アジア地域等の開発途上国では計算科学に対する関心と期待がそもそもたいへん高く、パソコンレベルの計算機資源を使った若手人材育成が実施可能なCMD®ワークショップの開催を熱望する積極的なリクエストが数多くあります。



フィリピンでのCMD®ワークショップ 写真撮影:Wilson Diño准教授



表1. インドネシア・リアウ大学で開催されたCMD®ワークショップのプログラム

	19-Jul	20-Jul	21-Jul	22-Jul
8:00				
9:00	Opening	lecture Morikawa	lecture Ono	lecture Nakanishi
10:00	Introduction & Lecture Kasai break lecture Hermawan	break hands-on practice STATE-Senri Morikawa	break hands-on practice RSPACE Ono	hands-on practice NANIWA Nakanishi break lecture Ogawa
11:00	lunch	lunch	lunch	Closing
12:00				
13:00	UNIX operation guide break lecture Oguchi	hands-on practice STATE-Senri Morikawa	hands-on practice RSPACE Ono	
14:00	hands-on practice HiLAPW Oguchi	break lecture Shirai	break lecture Akai	
15:00		hands-on practice Osaka2k Shirai	hands-on practice MACHIKANEYAMA Akai	
16:00	break hands-on practice HiLAPW Oguchi			
17:00		break hands-on practice Osaka2k Shirai	break hands-on practice MACHIKANEYAMA Akai	
18:00				

## インドネシア・リアウ大学でのCMD®ワークショップ

過去3回のインドネシアにおけるアジアCMD®ワークショップはバンドン工科大学(ITB)で開催されてきましたが、2011年7月はインドネシア化学会(Himpunan Kimia Indonesia, HKI)との共催によりプカンバル市にあるリアウ(Riau)大学において開かれました。期間は7月19日から22日の4日間。その概要を簡単に紹介するとともに、参加者の中から大阪大学へ短期留学した経験のあるIrmaさんとHaniさんにレポートを寄せてもらいました。

CMD®ワークショップの特徴は、第一原理計算の基礎理論、手法の詳細、またその応用に関する講義に加えて、講師により開発された第一原理計算コードを用いた計算機実習が行われることです。今回のアジアCMD®

ワークショップでは、ITBとリアウ大学の協力を得て、計算サーバおよび50台のLinux®端末が用意されました。

参加者は50名、HKIからの化学分野の参加者がほとんどでした。Linux®の使用経験のない参加者が多数おり、UNIX®操作に関する実習に多くの時間を当てました。CMD®ワークショップのプログラムを表1に示しますが、計算機実習は、HiLAPW、STATE-Senri、Osaka2k、RSPACE、MACHIKANEYAMA、NANIWAの6種類の第一原理計算コードに

より行われました。各講義は約1時間、実習には約3時間が配分され、理屈よりもいろいろな計算を実際に体験することを中心にしました。ホスト側からも、ITBのHermawan教授による第一原理計算の入門的な講義が提供されました。講義、そして昼食時や懇親会等、参加者と講師が話を交わす機会も多く、これまでに積み上げられたCMD®ワークショップの良い面がアジアCMD®ワークショップでも見られました。特に、異なる文化背景をもつ講師陣と受講生が4日間にわたりワークショップを共有できたことは、今後の日本とインドネシア間

の相互理解や研究交流に活かさせるものと期待されます。



リアウ大学でのアジアCMDワークショップでの講師、バンドン工科大学Hermawan教授



CMD®ワークショップの会場となったリアウ大学本部棟



講義を行う赤井教授



会場の風景

### CMD®インドネシア体験レポート

#### Hanifadinna

Bandung Institute of Technology (ITB), Indonesia

**Brief personal history on major study and research** — I hold a bachelor degree in Engineering Physics from ITB, Indonesia. My undergraduate thesis was ab initio study for polypyrrole catalyst using Gaussian Software. After my undergraduate study I had an opportunity to stay for eleven months at Kasai's Laboratory, Osaka University. Now I am a master-course student in ITB and continuing research in computational materials science and engineering.

**Experience in the previous workshop** — When I was a research student in Osaka University I also have an opportunity to attend the CMD® workshop on March 2010 in Kyoto.

**Purpose of attendance to present workshop** — I hope within the CMD® workshop I can broaden my knowledge in the area of computational material design, especially for my present research and I also hope I can share to those who interest with this area.

**How to use the skills and knowledge you got in the workshop** — I will try to use it in my research, to get the calculation result if it is applicable.

**What kind of calculations to perform with the "K" computer** — I want to perform an ab-initio molecular dynamic calculation for my further research.

**Aspirations for future relation and cooperation to Japan** — I hope there will be any program like CMD® which gives an impact for the education atmosphere in Indonesia and I hope some students could have an opportunity to learn in Japan because Japan is well known for advances in science, technology and industry while maintaining high belief in traditional cultures. With this condition, I believe the activity like CMD® becomes high motivation for many students and researchers in Indonesia in pursuing the advanced education.

**Dream in research** — I hope I can design a new advanced material in fuel cell technology



Haniさん(向かって右)とCMD®ワークショップを全般的にサポートしていただいたITBからの阪大留学生Triatiさん(向かって左)

and other applications with my knowledge in computational material design. I also hope that I can share my knowledge and experience with the students who are interested in fuel cell and quantum engineering. To train and find the potential individual who can help out my research project and maybe can develop it any further. After all, to make the continuity of research and to keep it going, it cannot be done by one person alone but nevertheless have to work as a team.

### CMD®インドネシア体験レポート

#### Irma Syafitri

Bandung Institute of Technology (ITB), Indonesia

**Brief personal history on major study and research** — In 4th year at ITB, my project was "Immobilization of leucine on polypyrrole for biosensor applications: A density functional theory study." After that, I joined Akai's group in Department of Physics, Osaka University. I had two research topics "Metal-to-insulator transition in yttrium trihydride" and "Knight shift of hydrogen in NiTi," by using KKR method. My current project at ITB is "Immobilization of leucine on polypyrrole for biosensor applications by water solvent: A density functional theory study."

**Experience in the previous workshop** — In 2009, I became one of the committee in Asia CMD® workshop at ITB. In that time, I helped the things which needed in the CMD® workshop, such as place of activities, consumption, or certificate. In 2009, I became one of the participants in CMD® Workshop at International Institute for Advanced Study, Kyoto. In

the workshop, I was learned some kind of the CMD® tools, such as ABCAP, ES-opt, HiLAPW, MACHIKANEYAMA, NANIWA, Osaka2k, STATE-Senri, and TSPACE. In this workshop, we can learn the CMD® tools from the developers directly. By these tools we can calculate the properties of the material such as the electronic structures of metals, semiconductors and compounds, etc.

**Purpose of attendance to the present workshop** — My purpose in the current CMD® workshop is to learn more how to use CMD® tools that I did not learn in the previous workshop and make good relation with Japan university lecturers.

**How to use the skills and knowledges you got in the workshop** — After attended this workshop I will use this knowledge and skills in research, workplace and living environment.



Irmaさん

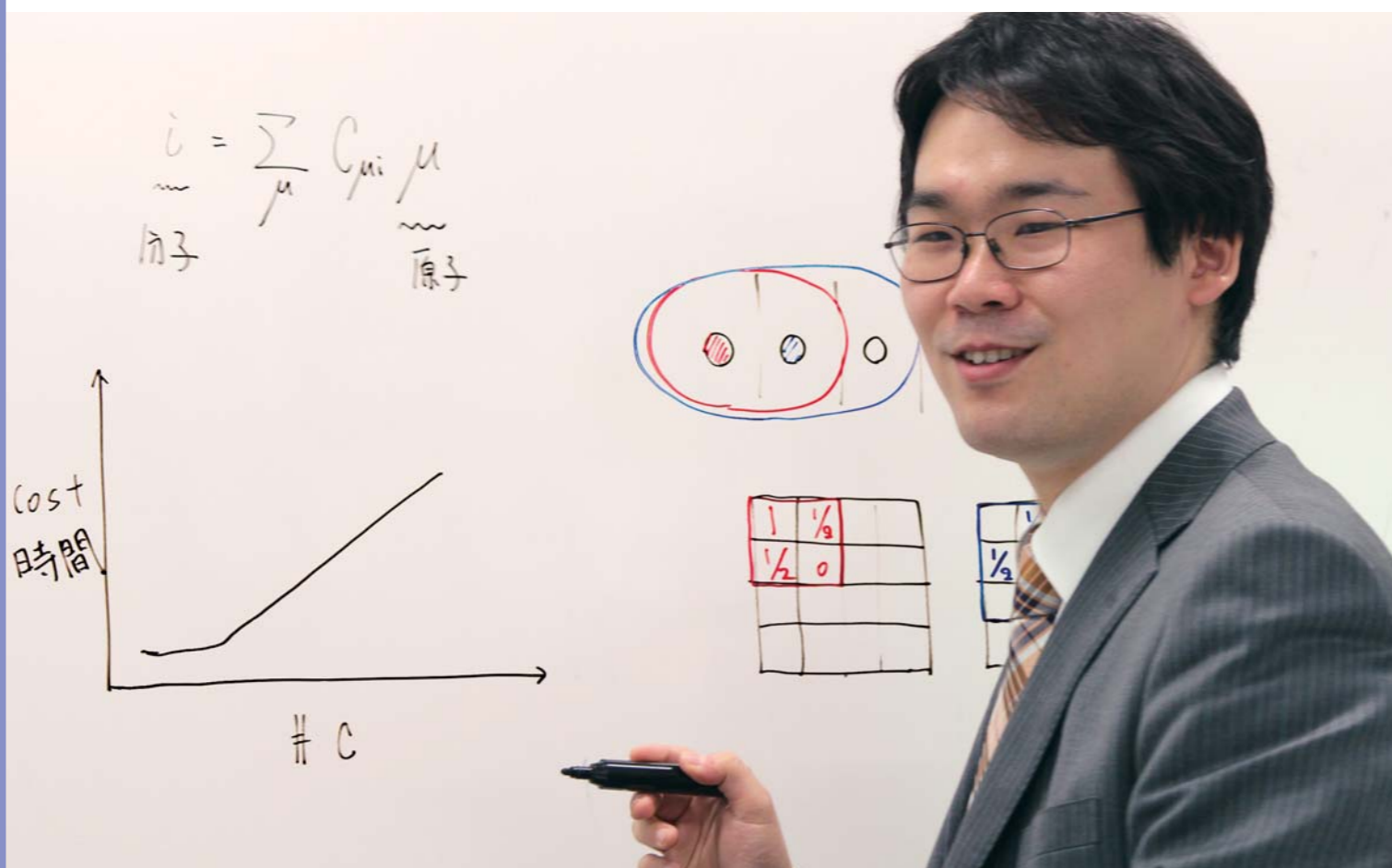
**What kind of calculations to perform with the "K" computer** — By this "K" computer we can calculate the properties of the material in the big size input file, such as electronic structures of metals, semiconductors and compounds, etc. I hope it can help our project and research for Japan and Asian nations.

**Aspirations for future relation and cooperation to Japan** — By this CMD® workshop, I can make good relation with Japan University lecturers, so that in the future I can make cooperation in research field.

**Dreams in research** — I hope I can find new theory in computational material design. At least, I can show the phase diagram of metal-to-insulator transitions of YHx. This is a challenge for me in order to solve this problem, so in the future it can be useful to find new technologies and new theories.



# DCの開発者・小林さんに聞く



話し手：  
**小林正人** こばやし まさと  
早稲田大学 高等研究所 助教

聞き手：  
**谷内 悠** やち ゆう  
東京大学 大学院人文社会系研究科  
基礎文化研究専攻 博士課程

「困難は分割せよ」とデカルトは述べている。「分割統治」の考え方は古くから政治などさまざまな分野で使われてきたが、近年では大規模系の計算手法、特に電子状態計算の高速化のために応用されている。分割統治法を研究してきた小林さんは、さらに精度を上げるため、電子相関を取り込むことに挑戦。独自のアイデアで新しいソフトウェアDCの開発に成功した。

## 量子化学計算とコンピュータ

「実験をして、銅イオンの青い色が現れる、というのは確かに魅力的です。でも、なぜ青いか、ということはなかなか知ることができない。そういうファンダメンタルなことを量子化学によって理解できる。そこに惹かれました」。小林さんが量子化学の道を選んだ理由はここにある。

すべての物質の構造や性質を決めているのは、電子や原子核のふるまい。それを理論的に説明づけるのが量子化学だ。電子状態、つまり電子の密度、エネルギー状態、スピンなどはシュレーディンガー方程式を解くことにより計算できる。実際には、多数の電子と原子核からなる多体系の方程式を厳密に解くことは不可能なので、近似を使って計算することになる。

とはいえ、物質の性質を十分に再現できるような精度の高い近似計算をするには、「京」のような計算能力の高いコンピュータを使っても、莫大な時間がかかる。原子数を $N$ とすると、 $N^3$ から $N^7$ に比例して計算時間が長くなる。例えば、原子1個について計算するのに1秒かかるコンピュータがあるとしよう。その場合、原子2個からなる物質の計算にかかる

時間は30秒から2分ほどだが、原子100個だと30年から30万年もかかってしまう。

このように膨大な計算時間を短縮するためには、ハードウェアの進歩だけでは十分ではない。まったく新しい近似計算の理論と、最新のハードウェアを十分に使いこなせるソフトウェアの開発が大きな鍵となる。それが分割統治法とそれに基づくプログラムDCだ。

## 「困難は分割せよ」

「分割統治 (Divide and Conquer) 法」というのは、そのままでは計算できない問題を小さな部分に分割して解くという考え方を指す。量子化学における分割統治法では、大きな分子を分割して、それぞれについて計算を行い、最後に足し合わせる。

発想はシンプルだが、実際にはさまざまな工夫が必要である。まず、対象となる分子を重ねのりないいくつかの領域に分割する。そのままでは周りの領域の影響が計算に含まれず、精度が低くなってしまったため、周辺の原子をバッファ領域として付け加えた部分を、別々に計算する(図1)。そしてバッファ領域分が重複しないように足し合わせる。このようにして得られた電子密度が空間の各点で一定の値に収束するまでくりかえす。

分割統治法では、このように全系を大きさ一定の部分系に分割して計算を行うので、計算時間は $N$ に比例する。先ほどの例で言うと、原子100個の計算が100秒でできるようになる。さらに、それぞれの部分系の計算は独立しているので、「京」のような多数の計算ノードからなる現代のスーパーコンピュータを用いて効率的に並列計算を行うことができる。分割統治法には、部分系を小さくして、たとえ1原子ごとに分けたとしても、精度があまり落ちないという特徴もある。小林さんはそこに注目して、誰もが簡単に使えるソフトウェアをつくらうと考えた。

## 「エネルギー密度解析」との出会い

より高い精度の計算を行うためには、「電子相関」の効果をとり入れる必要がある。従来の分割統治法では、電子と電子の間にはたらく相互作用を平均化している。その平均化した相互作用と厳密なものとの差を「相関エネルギー」と呼ぶ。

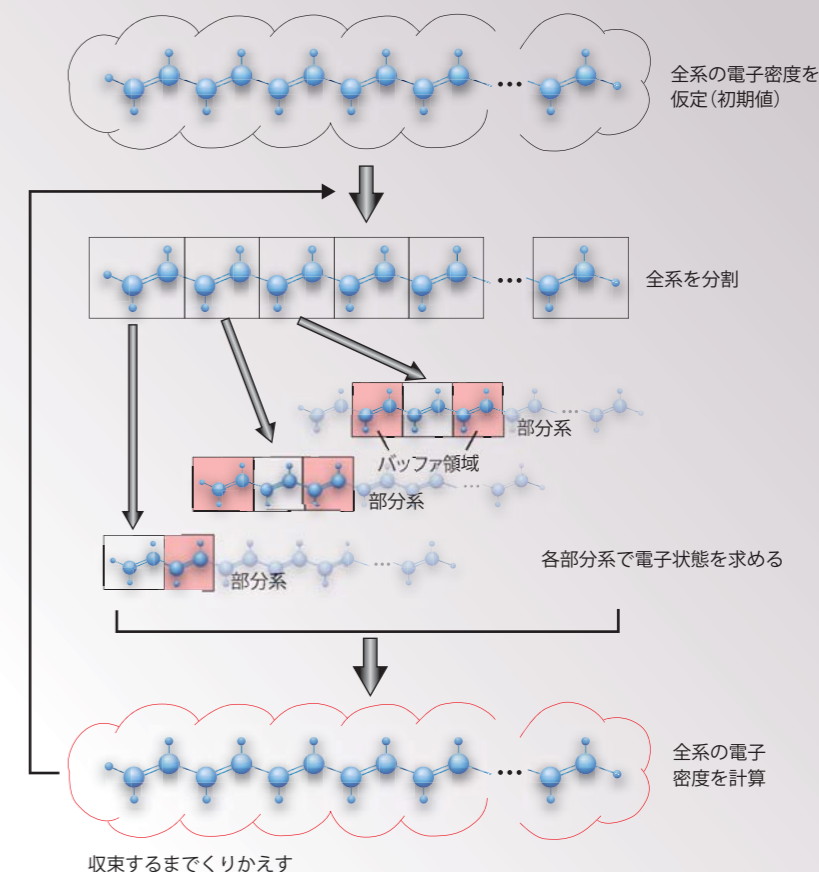
しかし、電子相関を取り込んだ計算に分割統治法を用いるには大きな問題が1つあった。従来の分割統治法から得られるのは、バッファ領域を含んだ部分系ごとの相関エネルギーなので、単純に足し合わせると二重に計算されてしまう。その問題の解決が不可

欠だった。

小林さんは、ある日研究室のゼミで「エネルギー密度解析 (Energy Density Analysis; EDA)」についての発表を聞いた。そのとき、分割統治法にエネルギー密度解析を採用するというアイデアがひらめいた。

エネルギー密度解析というのは、分子全体のエネルギーを、個々の原子に割り当てる解析手法である。小林さんは、このエネルギー密度解析の手法を使うことによって、バッファ領域を含まない個々の領域の相関エネルギーを導き出せるのではないかと考えた。それらを足し合わせることにより、相関エネルギーも、 $N$ に比例した計算時間で求められる

図1. 分割統治計算の基本過程



分割統治法では、重なりなく分割された個々の領域に、周囲の原子(バッファ領域)を付け加えた部分系で計算を実行する。この手法によって高い精度を保つことが可能となっている。





## 小林 正人 こばやし まさと

量子化学の計算理論を組み立てるだけでなく、プログラミングもこなす小林さん。特に後者は、小学生の頃にBASICに触れて以来という筋金入りだ。さらに、特許など取らず

にフリーでソフトウェアを公開していることについては、「たくさんの人に使われるようになっただけで嬉しい」と語る。趣味はチューバ。多彩な才能をもち、知の探求を純粋に楽しむ心をもった小林さんのこれからは楽しみだ。

ことになる。これが、小林さんの開発したEDA分割統治法である。

「EDAのような解析の考え方を計算理論に使うというのは、物理学的には禁じ手かもしれませんが、それだけに実際うまく行くか不安も大きかったです。でも、いくつかの方法を試してみましたが、エネルギー密度解析を用いる方法がいちばん精度が高く、計算時間も短かったんです」と小林さん。

### より大きな系を、より高精度に

エネルギー密度解析と分割統治法を組み合わせることによって、電子相関を含んだ精度の高い計算が、短い時間でできるように

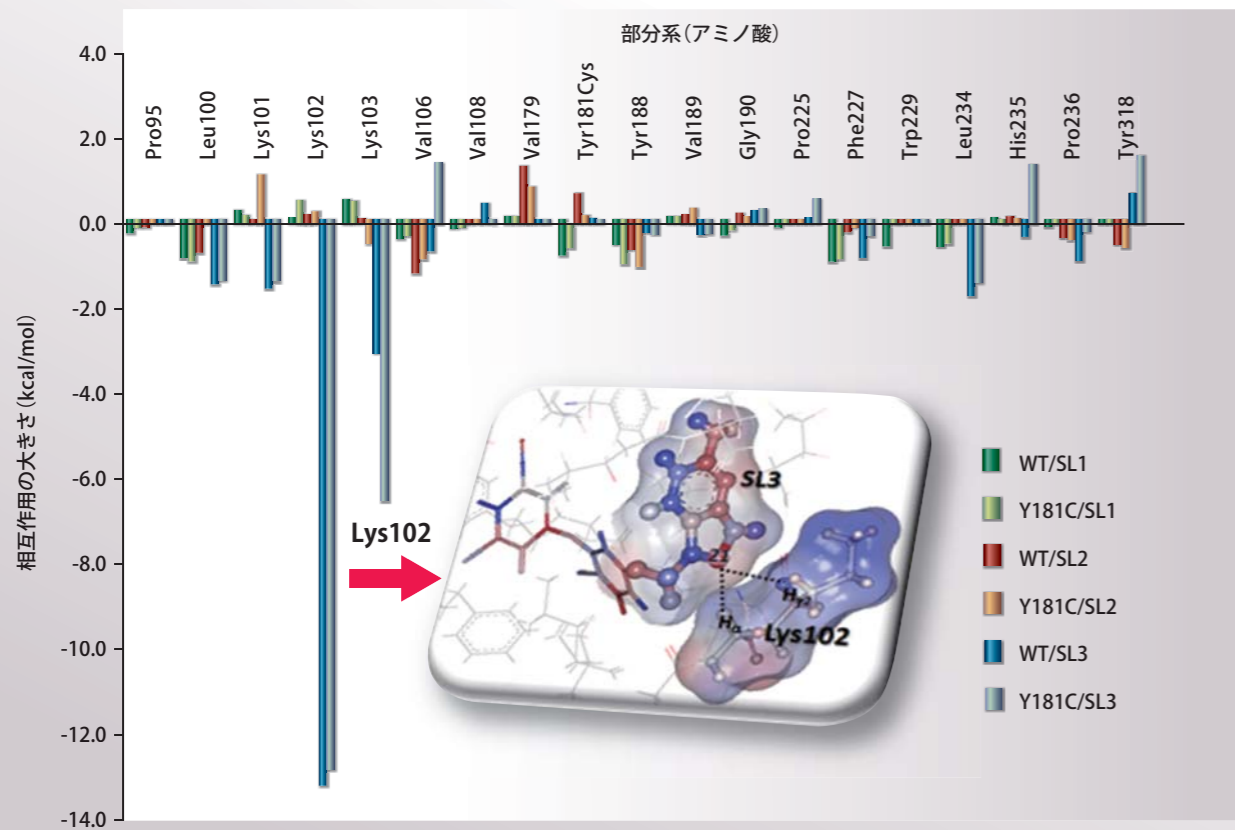
なった。この手法は、電子が局在しておらず、あちこち動きまわっているような物質を調べるのに向いている。「京」コンピュータを使えば、ナノサイズの物質の超高精度計算にも手が届く。例えば、有機太陽電池の発電効率には、その中で電荷を運ぶペントセンなどの電気的な性質が大きく影響する。分割統治法を用いて電荷の動きやすさを計算することで、より高い効率をもつ太陽電池材料のデザインも可能となりつつある。

それだけではない。エネルギー密度解析によって領域ごとの相関エネルギーが計算できるので、ここの相互作用が大きいか、ここは結合が切れそうで不安定だとかいったことを直接解析できるのだ。例えば、HIV(エイズウイルス)とその活動を抑える逆転写酵素阻害剤がどのように結合しているのかを詳しく調べることができる(図2)。将来的には、このような情報を用いて、より強力にはたらく薬の開発を安全に進め、コストを大幅に削減できるようになるだけでなく、副作用の予見も可能となるかもしれない。

現在、EDA分割統治法ソフトウェアDCは、フリーウェアとして一般に公開されている。世界一使われている量子化学計算のためのフリーソフトウェアGAMESSに、オプションとして組み込まれているのだ。小林さんは、GAMESSをカスタマイズすることにより自身の手法を実装して仲間内で使っていた。それをより多くの人に使ってもらおうと、GAMESSを管理しているアイオワ州立大学にコンタクトを取り、正式採用されたのである。

さらに最近、「京」への挑戦がはじまったばかりだ。「京」コンピュータは64万ものコアからなっている。「これまでのスーパーコンピュータとはまったく違うので、ソフトウェアに特別なチューニングが必要です。まだいくつかのハードルがあります。これからの課題ですね」と小林さん。むしろ楽しげな口調が印象的だった。

図2. EDA分割統治法で求めたエイズウイルスと薬剤の相互作用



EDA分割統治法を用いることにより、生体分子と薬が複合したような大きな系も取り扱うことができるようになる。図はエイズのHIV-1逆転写酵素とその阻害剤MK-4965の間にはたらく相互作用の大きさを示しており、MK-4965のサブリガンド3 (SL3)が、リシン102 (Lys102)、リシン103 (Lys103)と特に強く結合していることがわかる。このような詳しい相互作用の情報は、新薬開発の糸口としても注目される。

Application SPEC Sheet [DC]	
コード名	DC
方法・アルゴリズム	分割統治(DC)法を用いたHF、MP2、CC、密度汎関数理論計算
コードの概要・特徴	現在、高速量子化学計算手法は世界中から注目されており、さまざまなアプローチが考案されているが、DCは非局在化した電子状態にも適用可能であると同時に、高精度なMP2、CC計算も実行可能である点が特徴である。
シミュレーションの対象となる物質	ナノ・生体系
開発責任者	中井浩巳
開発者・開発機関	早稲田大学先進理工学部中井研究室、早稲田大学高等研究所
開発期間	2005年より開発開始
開発言語・ソースコード行数	Fortran、約80万行(GAMESS本体含む)
動作環境	K Computer
並列化方法	DDI (MPI+ARMCIで実装)/OpenMP ハイブリッド
並列化の状況	現在は36ノードに対し72ノードで並列化効率94.80%
ソフトウェアの公開	ソースコードを公開
関連/競合するアプリケーション	FMO-MP2、OpenMX、Conquestなど
その他、特徴的な機能	入力データはFMO-MP2とほぼ互換が取れるようにしており、FMO-MP2に対応したGUIを用いて作成することも可能である。

## 谷内 悠 やち ゆう

自然科学が好きで東京大学理科I類に入学するも、かねてからの哲学や文学への憧れが振り切れず、文学部に進学。研究テーマは「現実／虚構とはなにか?」。分析哲学、神話学、認知神経科学など、幅広い角度からアプローチしている。自然科学と人文科学、アカデミアと社会をつなぐ道を模索するため、科学技術インタープリター養成プログラムを受講。ライターとしても活動中。



## 第2回CMSIポスター賞

CMSI第2回研究会は2012年1月30、31日に東北大学金属材料研究所で開催された。この研究会では、CMSIの1年間の活動が報告され、評価される。「新量子相・新物質の基礎科学」、「次世代先端デバイス科学」、「分子機能と物質変換」、「エネルギー変換」の4つの部会ごとに、合計23件の研究課題について口頭発表があった。

ポスターセッションでの発表は53件。1日目の夕方、1件あたり1分のプレゼンテーションのあと、2時間にわたって議論が交わされた。これらの発表の中から、35歳以下の若

手研究者・大学院生を対象として優秀な発表にポスター賞が贈られる。今回の第2回CMSIポスター賞には、「アプリケーション開発の最前線から」でも紹介した小林正人さん(早稲田大学先進理工学部:当時)による「分割統治(DC)量子化学計算プログラムの展開」、安藤康伸さん(東京大学大学院理学系研究科:当時)による「第一原理分子動力学法による固液界面の電気二重層キャパシタンスに関する研究」、渡辺宙志さん(東京大学物性研究所)による「超並列古典分子動力学法におけるシステムノイズの影響」が選ばれた。初日夜の懇親会で表彰が行われ、受賞した3人にあたたかい拍手がおくられた。



# 1 卒業生を訪ねて

## 小野哲平

おの てっぺい

スクウェア・エニックス テクノロジー推進部  
東京大学大学院理学系研究科で物理学を専攻し、GPUプログラミングの第一原理計算への応用を研究。修士号を取ったあと、スクウェア・エニックスに入社。



## 第一原理計算から ゲームプログラマーの世界へ

このページでは、計算物質科学を学び、産業界で活躍している若手を紹介していきます。第1回目は、ゲームプログラマーになった小野哲平さんを、CMSI拠点研究員の小西優祐さんが訪問。大学院での研究、この仕事を選んだ動機、どんな仕事なのか、をお聞きしました。



### 小西優祐 こにし ゆうすけ

産業技術総合研究所ナノシステム研究部門  
CMSI産官学連携拠点研究員

### ゲームプログラミングの仕事って、その魅力は？

**小西** まず、今の仕事を説明していただけませんか。

**小野** 私の所属するテクノロジー推進部は社内の技術支援部隊という立ち位置です。その中でも、私はゲームエンジンの開発に携わっています。ゲーム作りは、グラフィック、アニメーション、AI、物理演算など、さまざま仕事から成り立っています。新しいゲームを開発するとき、それらを一から作るのには難しくなっており、既存のシステムとかライブラリを利用します。そのような共通基盤やシステムを作り、開発環境を整えるのがゲームエンジンで、私はツールプログラミングを担当しています。

**小西** ゲーム制作の企画から完成に至るフローの中の、どこに位置しているのですか？

**小野** ゲームエンジンの開発自体はゲーム制作のフローには入りません。ゲームエンジンはあくまでゲームを作る手段、それを使うことによってゲーム制作フローの各ステップが効率的、高品質になるのです(次ページの図)。

**小西** その共通基盤というのは、ゲーム機用、PC用、スマートフォン用など、どれを作るときにも共通して使うことができるのですか。

**小野** ゲームエンジンを使うことで、PC上で作ったものが、どのマシンでも動くというのが理想です。環境の違いでうまく動かない部分を別のコードに差し替えたりできるように、ゲームエンジンを設計しておくことも大切です。

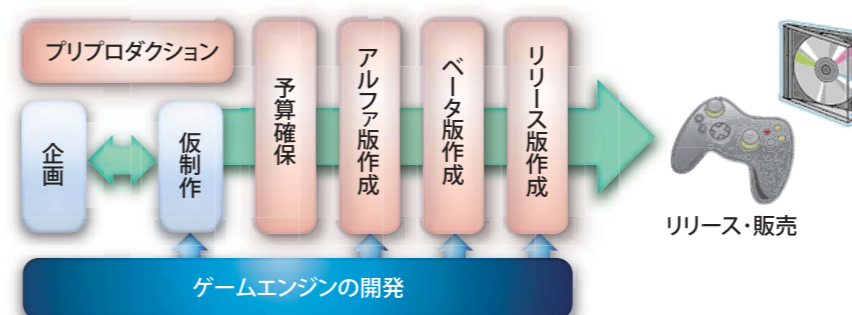
**小西** プログラミングのどういうところが好きなのですか。

**小野** スキルを身に着けることにより、もっとうまくプログラムが書けるようになる。それが、すごく楽しくて。

**小西** 新しい製品が世の中で人気が出て、数百万本売れたりするといった醍醐味もあるのでは？

**小野** まだ入社2年目なので、そういう経験はないのですが、もちろん、今までの常識をくつがえすようなゲームを出したいと

ゲーム制作フローの例とゲームエンジン



いう思いはありますね。

### 物理からゲームプログラミングに 方向転換した動機は？

**小西** そもそも、この仕事を選んだ動機は何だったのでしょうか。物理を研究した人の就職先としては珍しいですが。

**小野** 大学1年の終わり頃、ゲーム制作に興味でやろうとプログラミングの勉強を始めました。最初は2次元のゲームを、スキルがついてから3次元のゲーム制作にも挑戦しました。そこで、ものができていく楽しさを実感すると同時に、ゲームプログラミングの難しさ、奥深さにも惹かれました。

ところが、どうしても解決できない問題にぶつかり、またプログラムが巨大になって管理できなくなり、挫折してしまいました。

**小西** いつ頃ですか？

**小野** 大学3年の末くらいですね。でも、諦めたはずなのに、なぜかソースを眺めることをやめられなかったのもう一度やってみようと思直し、プログラムの勉強を一から始めました。そうしたら、以前よりはるかに高度なプログラムが書けるようになったのです。これが大きな節目になり、ゲームプログラミングを仕事としてやっていこうと考えるようになりました。

**小西** ゲーム会社の中でスクウェア・エニックスを選んだ理由は？

**小野** 単純に、販売されていたゲームが好きだったということがあります。それと、技術を

売りにしている。つまり、ゲームプログラミングに高度な技術を使っているところに、魅力を感じました。

### 大学院での研究は活かされている？

**小西** では、大学院時代には、どんな研究がされていたのですか。

**小野** CUDA (GPUのためのプログラム環境)が出始めた頃で、第一原理計算における拡散モンテカルロ法のGPUによる高速化に取り組んでいました。モンテカルロ法は並列計算との相性がよくて、十数倍のスピードを実現できたので、その点では成果を出せました。ただ、ある程度の大きさの分子までは計算できても、プログラムの安定性の問題などがあって、大きな系には適用できませんでした。

もう1つの研究テーマはGPUの単精度演算でした。今のGPUは倍精度演算も可能となっていますが、当時はまだまだで、単精度だけでどの程度計算できるのかを模索していました。

**小西** 単精度だと「丸め誤差」の問題が大きそうですが、そこは？

**小野** やはり、高い精度が求められる状況では、単精度だけでは難しいという結論に至りました。GPUに限らず、安価で高速な演算装置が出てきたとしても、単精度演算だけでは有用ではないということが見極められてよかったです。

**小西** 大学院での研究は今の仕事に活かされているのでしょうか？

**小野** GPUの知識を得たことは今の仕事に役立っています。実際には、ゲームの中で数値シミュレーション自体を使うことはないかもしれませんが、今後、よりリアルなゲームを制作していく過程で、事前にデータを準備するのに数値シミュレーションを使う可能性があると思います。

### 先輩から後輩へひとこと

**小西** 最後に、計算物質科学を学んだ先輩として、後輩へのアドバイスをひとこと。

**小野** 学生時代に始めたプログラミングは自己流のところがあり、設計の勉強をきちんとやっておけばよかったと思っています。入社してからデザインパターンを本格的に勉強したわけですが、学生のうちにマスターしていれば、研究ももっといい結果になったかもしれません。

今、仕事では他の人がそのコードを使うなり拡張するなりするかもしれないという観点から、柔軟で汎用性の高いプログラムを意識して組んでいます。これは科学数値計算でも必要なことですね。特にプログラムが大規模になってくると。

**小西** 「京」コンピュータを使うとなると、そうなりますね。

**小野** はい。あとは環境に関して、今後、複数人開発も増えてくると思うので、バージョン管理ソフトはどうしても使わないといけない。

**小西** 大規模なソフトウェア開発に必要なノウハウを身につけられる体制作りも、CMSIとして頑張らないといけないですね。

(2012年4月25日 スクウェア・エニックス本社にて)





# 拠点研究員のプロフィール

2012年4月にCMSIに着任した拠点研究員を紹介します。

## 石村 和也

いしむら かずや

### 分子科学拠点研究員

自然科学研究機構 分子科学研究所

京都大学大学院で量子化学を専攻、総合研究大学院大学で博士(理学)を取得。分子研で大規模量子化学計算手法を研究。

### 応募の動機

これまでの大規模並列計算に関する研究を生かして、「京」コンピュータ利用のための基盤プログラムを開発したいと考えました。

### ミッション/役割

量子化学計算の高速・高並列プログラムを開発し、他課題の研究にも貢献できるように公開します。開発に関するノウハウの提供なども行い、多くの研究者が参加しやすい環境作りに努めます。



### 抱負

「京」を使って、触媒、2次電池などの材料設計の指針を示していきたい。

## 大久保 毅

おおくぼ つよし

### 物性科学拠点研究員

東京大学物性研究所

九州大学大学院で物理学を専攻。博士(理学)を取得後、大阪大学大学院でフラストレート磁性体の秩序化とダイナミクスを研究。

### 応募の動機

「京」を用いた大規模並列計算が進むことにより、これまでとは質的に大きく異なる物性研究の世界が広がると期待し、そのプロジェクトに貢献したいと思いました。

### ミッション/役割

大規模並列計算による計算物性物理学のための革新的アルゴリズムや手法の開発と、それを用いた物性物理学研究を行います。

### 抱負

新しいことにどんどんチャレンジし、楽しくアルゴリズムを開発。それらを活用して、面白い物理の研究を進めていきたいです。



## 西澤 宏晃

にしざわ ひろあき

### 分子科学拠点研究員

自然科学研究機構 分子科学研究所/早稲田大学理工学術院

早稲田大学で量子化学を専攻、博士(理学)を取得。非断熱理論に関する理論開発を行ってきた。

### 応募の動機

研究だけでなく、趣味としてもプログラム開発を行っているため、そのスキルを役立てることができると考えました。

### ミッション/役割

リニアスケール量子化学計算手法であるDC法や量子分子動力学法の高度並列計算プログラムを作成し、化学反応に対する実証研究を行います。



### 抱負

実験の人にも利用しやすい、機能だけでなくユーザビリティも高いソフト開発を行いたいと考えています。

## 水口 朋子

みずぐち ともこ

### 分子科学拠点研究員

京都大学化学研究所

九州大学大学院で物理学を専攻、博士号取得。フランスのリール第一大学で、分子動力学法を用いてガラス転移を研究。

### 応募の動機

ガラス系における時間スケールおよび相互作用の系統的分離手法を拡張し、より複雑な分子間相互作用をもつ多成分不均一系にアプローチしたいと思いました。

### ミッション/役割

大規模並列計算による計算物性物理学のための革新的アルゴリズムや手法の開発と、それを用いた物性物理学研究を行います。

### 抱負

分子科学研究とソフト運用高度化を一体化させることによって、分子集団機能の原子・分子レベルの解析法・制御法の確立に寄与したいと思います。



## 拠点研究員のミッション

### カテゴリA

先進的な要素技術・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



## 坂下 達哉

さかした たつや

### 物性科学拠点研究員

東京大学物性研究所/CMSI神戸拠点

広島大学、大阪大学大学院で純粋数学を専攻。電気通信大学大学院にて量子情報理論の研究で博士(工学)を取得。

### 応募の動機

博士課程で行っていた量子情報理論における大規模計算の実装には、固有値解法についての深い理解が不可欠でした。この経験を次世代スパコンの並列化実装に生かしたいと考えました。

### ミッション/役割

ALPSやQDS等の統計力学のシミュレーションプログラムについて、固有値解法を含めた線型計算まわりの効率的な実装に取り組めます。



### 抱負

線型計算、計算機アーキテクチャ、物性理論等、すべての観点から最適な実装をめざします。

## 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。

### ●第1回「京」物性セミナー

日程：2012年4月18日  
場所：計算科学研究機構

### ●CMSI産官学連携シンポジウム

「産業界におけるOCTA活用の現状」  
日程：2012年5月8日  
場所：秋葉原コンファレンスセンター

### ●第1回 CMSI「京」利用情報交流会

日程：2012年5月10日  
場所：計算科学研究機構

### ●第2回「京」物性セミナー

日程：2012年5月23日  
場所：計算科学研究機構

### ●HPCI戦略プログラム 分野2×分野5

異分野交流研究会  
日程：2012年5月30日  
場所：東京大学物性研究所

### ●第3回「京」物性セミナー

日程：2012年6月13日  
場所：計算科学研究機構

### ●京コンピュータ・シンポジウム

2012および第2回戦略プログラム5分野合同WS  
日程：2012年6月14日～15日  
場所：神戸大学 統合研究拠点 コンベンションホール

### ●第3回 計算材料科学研究拠点研究会

日程：2012年6月18日～19日  
場所：東北大学金属材料研究所 2号館講堂

### ●MASP2012 ワークショップおよびシンポジウム

(ワークショップ)  
日程：2012年6月25日～7月1日  
2012年7月3日～7月11日 (シンポジウム)

### ●第4回 HPCI戦略プログラム5

分野合同研究交流会  
日程：2012年7月10日  
場所：計算科学研究機構

### ●第4回「京」物性セミナー

日程：2012年7月26日  
場所：計算科学研究機構

### ●第6回 CMSI若手技術交流会

日程：2012年7月17日～19日  
場所：ヤマハリゾート(静岡県)

### ●第1部会「新量子・新物質相の基礎科学」夏の学校

日程：2012年8月20日～25日  
場所：蔵王タカミヤビレッジホテル 樹林(山形県)

### ●CMD\*21

日程：2012年9月3日～7日  
場所：大阪大学大学院基礎工学研究科G棟

### ●超並列技術ワークショップ

日程：未定  
場所：未定

### ●AICS一般公開

日程：2012年10月20日  
場所：計算科学研究機構

### ●計算物性科学シンポジウム

(SPRING-8、J-PARC連携)  
日程：2012年10月22日～23日  
場所：東京大学物性研究所

### ●TCCI 第3回研究会

日程：2012年10月(日にち未定)  
場所：未定

### ●SC12(ブース出展予定)

日程：2012年11月10日～16日  
場所：ソルトレイク(米国)

### ●第3回 CMSI研究会

日程：2012年12月3日～5日  
場所：分子科学研究所

### ●TCCIウィンターカレッジ(分子シミュレーション)

日程：2012年12月11日～14日  
場所：分子科学研究所

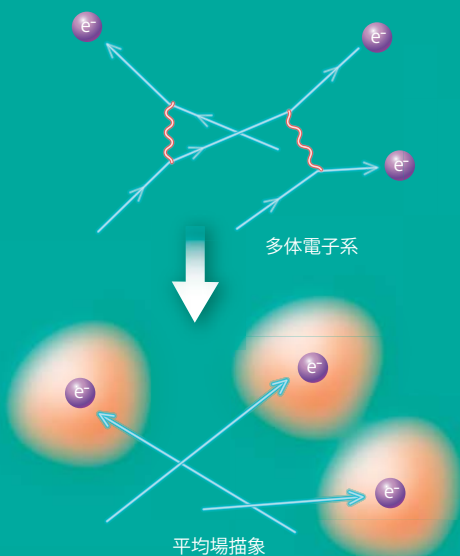


# 電子相関がもたらす効果

本号で紹介したアプリケーションDCのキーワードは「電子相関」です。  
電子相関は物質のどのような性質にかかわっているのでしょうか。

## 物質科学の出発点：平均場近似

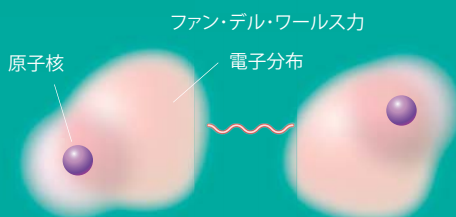
物質の内部では、多数の電子が互いに反発し合いながら運動しています。多数の電子の運動を予言することは現在の発達した計算機を用いても不可能です。しかし、量子力学の誕生以来、科学者は平均場近似と呼ばれる理論を出発点に物質の性質を解明してきました。



平均場理論では、「相互作用する多数の電子」を「他の電子からの平均化された電場を感じる1個の電子」に置き換える。

## 平均場からのゆらぎ「電子相関」

とはいえ、平均場理論では記述できない現象が自然には多く存在します。その1つが、中性な原子分子の間にはたつきドライアイスなどの分子性結晶や液体を形成する力、ファン・デル・ワールス力です。この力は電子分布の平均値からのずれ、ゆらぎによって生じます。このような平均場からのずれ・ゆらぎを「電子相関」と呼びます。

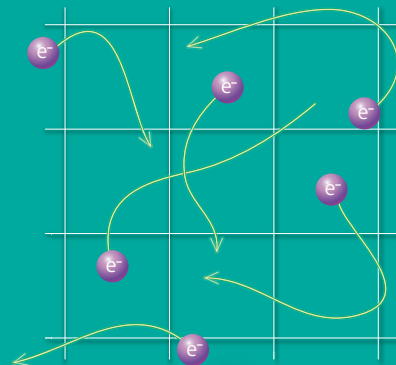


電氣的に中性な原子分子もごく短い時間の間には電子の分布がゆらいている。そのゆらぎは、さらに他の原子分子の電子の分布を歪ませる。

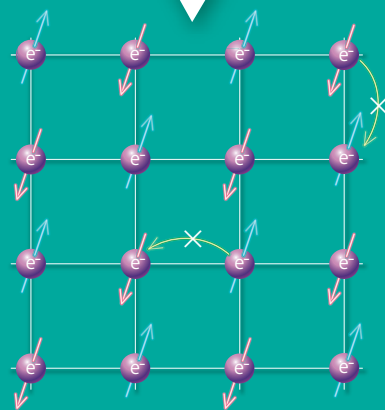


## 電子相関がもたらす 電子の磁石としての性質

個々の電子は小さな磁石としての性質をもっています。鉄やニッケルが全体としても磁石の性質を示すのは、これもまた電子相関のあらわれです。一方、遷移金属の酸化物などには、強い電子相関効果により電気を流さない絶縁体となるものもあります。これは「モット絶縁体」と呼ばれます。



電子間の強いクーロン反発力



モット絶縁体では、電子の波として広がる性質が電子相関で押さえ込まれ、結果として電流が流れなくなる。ファインセラミックスや鉱物、分子性結晶の一部がモット絶縁体として知られている。

協力：山地洋平(東京大学)

## 次世代テクノロジーにおける電子相関

テクノロジーの進歩は、「量子ドット」と呼ばれる原子数百個程度の長さの空間に電子を閉じ込め、さらに電子1個1個を出し入れすることさえ可能にしました。高温では流れにくかった電流が、ドット内の電子と回路の電子との「相関」により温度を下げると流れはじめるといった現象も見つかっています。次世代の電子回路の理解には電子相関が重要であることを端的に示しています。

## Torrent No.5 July 2012

表紙：ユニークな外見と味を楽しめる  
トロピカルフルーツは未知の可能性を彷彿とさせます。  
CMSIが推進する多様な研究に似て。

- 2 | CMD®ワークショップ10年の活動  
関西から日本、そしてアジアへ  
小口多美夫
- 8 | アプリケーション開発の最前線から 第4回  
DCの開発者・小林さんに聞く  
小林正人 × 谷内 悠

- 12 | 卒業生を訪ねて 第1回  
小野哲平 × 小西優祐
- 14 | 拠点研究員のプロフィール
- 15 | CMSIカレンダー
- 16 | 電子相関がもたらす効果



Computational Materials Science Initiative

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.5, July 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