

November 2012

NO. 6

Torrent

10¹⁶が創り出す
新マテリアル

特集：CMSIにおける
ソフトウェア開発

グローバルに展開するアプリケーション
CONQUESTの開発者・Bowlerさんと
宮崎さんに聞く

CMSIにおけるソフトウェア開発



スーパーコンピュータ京の一般利用がこの9月から開始されました。

このような最先端のコンピュータを使いこなすにはアルゴリズムの発展のみならず

コミュニティーコードの整備が不可欠です。本号では、計算物質科学分野でのソフトウェア開発の現状

を俯瞰するとともに、CMSI内ですでに始動しているオープンソースプログラム開発の試みと、

国際共同体制で開発が進められているオーダーN第一原理ソフトウェアCONQUESTを紹介。

今後のソフトウェア開発の進むべき方向を考えます。

計算機の性能向上とアルゴリズムの進歩

世界で最初の汎用コンピュータENIACの誕生(1946年)から66年、最先端のスーパーコンピュータの演算性能はこの間に50兆倍以上もの進化をとげました。最初のTOP500リスト(<http://top500.org/>)が公開された1993年以降の19年間だけを見ても約27万倍の性能向上です。この計算機の圧倒的な進化のおかげで、100万原子系の第一原理計算、あるいは1000万原子系の分子動力学計算など、従来と比べ飛躍的に大規模な系をより高い精度でシミュレーションすることが可能になってきています。

私たちCMSIの研究分野である、物性物理・分子科学・材料科学においては、ほかにも量子化学計算やモンテカルロ法、行列の厳密対角化、あるいは複数の手法をつなぎ合わせたマルチスケール/ハイブリッド法など、さまざまな手法が用いられてきました。これらの分野を網羅する「計算物質科学」におけるシミュレーションの最も大きな特徴の一つは、ある特定の初期状態から得られる系の時間発展よりむしろ、相関の強い系の平衡状態や定常状態に興味がある点です。あるいは、非平衡状態を議論する場合にも、フェムト秒からピコ秒、ナノ秒といった非常に長時間のシミュレーションが要求されます。さらには、シミュレーションの対象となる系の次元も必ずしも三次元とは限りません。相関の強い量子多体系のシミュレーションにおいては、量子相関の効果を正確かつ効率的に取り込む、あるいは、できる限り少ない反復回数で平衡状態にたどりつくための工夫として、非局所的な演算が用いられることも多く、一般的に膨大な演算量とネットワーク通信量が必要となります。

スーパーコンピュータ京のような最先端の計算機をフル活用し、次世代の物質科学研究を進めていくには、計算機自体の演算性能

の進化だけでは十分ではありません。物質科学の基礎方程式を効率的に解くための計算科学的な理論、すなわち「アルゴリズム」の発展もまた非常に重要な役割を果たしてきました。高速フーリエ変換やモンテカルロ法など、与えられた方程式をより速く解くための工夫だけでなく、これまでTorrentで紹介してきた、高速多極子法(Torrent No.2)や分割統治法(Torrent No.5)、本号で取り上げるオーダーN法など、精度を落とすことなく計算量を大幅に減らすことのできる近似手法の開発、あるいは、実空間法(Torrent No.3)のような現代の計算機アーキテクチャに向けた方法の開発などがその代表例です。

計算物質科学分野の現状

計算物質科学分野においては、日々新しい手法が提案され、その応用も活発に試みられています。現実の物質に見られる現象を説明するための「有効モデル」の抽出～さまざまなアイデアにもとづくアルゴリズム開発～プログラミング～シミュレーション～結果の解析～「有効モデル」へのフィードバック、といった一連のサイクルを、たった一人の研究者、あるいはごく少数のグループで行っていることも珍しくありません。実験や応用に近い領域では、量子化学計算におけるGAUSSIAN (p.5 コラム参照)のような超巨大なアプリケーションソフトも広く使われていますが、これはむしろ例外的で、多くの研究グループにおいては、グループごとに固有のプログラムが使われています。大学院生の卒業などでグループ内の利用者がいなくなってしまうと、そのプログラムの存在は忘れ去られてしまうことになります。

独自コードが多いということは、計算に用いるパラメータの入力やシミュレーション結果の出力についても、独自形式のものが多いことを意味します。その結果、統一的な形での

データの保存・検索が困難となります。また、他の研究者が開発したツールを用いた解析や連成計算(二つ以上の異なるアプリケーションを組み合わせたハイブリッド計算)などを進める上でも大きな障害となりつつあります。

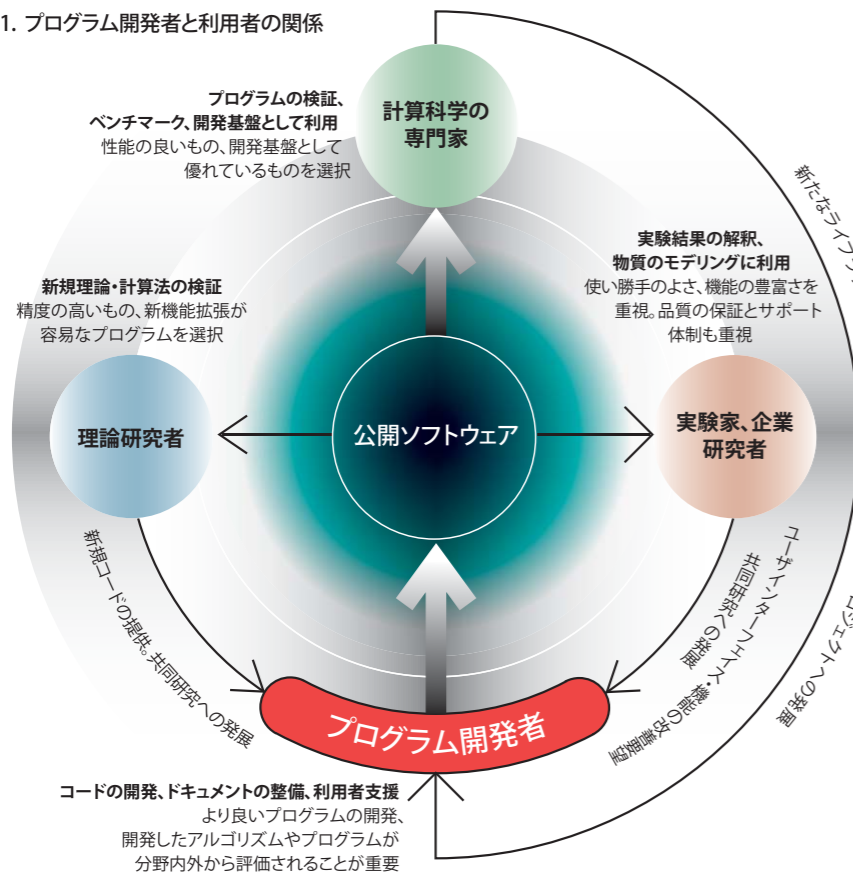
その一方で、現在主流の超並列計算機・マルチコアアーキテクチャに対応するためのハイブリッド並列化やキャッシュチューニング、ネットワークのトポロジに合わせた通信の最適化など、アプリケーションの開発・高度化のコストが増大してきています。スーパーコンピュータ京のような大規模な計算機を使いこなすためには、ソフトウェア開発においても個人を越えて組織的に進めることが不可欠となってきました。また、計算科学分野内だけでなく、計算科学・数値計算の専門家との協働作業もますます重要となってきています。

「ソフトウェアの公開」とは?

CMSIが進めている拠点研究員制度(Torrent No.3参照)は、これまでの博士研究員とは異なり、特定の研究グループ内で閉じるのではなく、計算物質科学分野全体の振興、すなわち次の世代の計算物質科学にとって重要な先端の要素技術開発や基盤技術整備をミッションとする、他に例を見ない極めてユニークな制度です。これに対応して、今後はプログラム自体も分野全体で育てていく、すなわちソフトウェアの公開を推進していく必要があります。

ここでいう「公開ソフトウェア」とは、比較的緩やかな利用条件(ライセンス)のもとで、利用者がwebなどからソースコードをダウンロードし、自身でコンパイル・実行し、シミュレーション結果を公表することができるようなものを指します。共同研究契約が必要なものと、パブリックのみの配布のものは、ここでの(狭義の)公開ソフトウェアには含めないことにします。利用条件はソフトウェアによって少しずつ異なり

図1. プログラム開発者と利用者の関係



ますが、利用者は計算対象に応じて、ソースコードを改変したり、自身のプログラムに取り込んだり、あるいは修正を加えたコードを再配布することが可能な場合もあります。このような形で公開されているプログラムは、しばしば「オープンソースソフトウェア」と呼ばれます。基本OSのLinux、エディタEmacs、コンパイラGCCなどが有名です。

計算物質科学分野において、利用者のタイプはさまざまです。理論研究者は自身の新しい理論・近似法の検証や、新しいアイデアを試すための基盤として、あるいは実験研究者や企業の研究者は実験結果の解釈や実験物質のモデリングに利用するでしょう。計算科学の専門家にとっても、自身のプログラムの出力結果の検証や計算速度のベンチマーク、連成計算のモジュールの一つとして公開ソフトウェアは役に立つでしょう。その一方で、公開ソフトウェアに対する要求も利用形態によって、使いやすさや機能の豊富さ、実行速度や計算精度などさまざまです(図1)。

コミュニティコードの必要性

ソースコードをweb上で公開するだけでは

「公開ソフトウェア」とは呼べません。広く利用者に使ってもらうためには、まず、正しく動くコードと利用しやすいGUIなどのユーザーインターフェイス、インストール方法や使用方法に関するマニュアルや典型的な利用法に関するチュートリアルなどの日本語や英語によるドキュメントの整備が必須です。また、電子メールや掲示板などを用いた利用者支援や、定期的な利用者講習会も不可欠でしょう。バグフィックスや新機能の要望にも継続的に対応していく必要があります。

計算物質科学分野、特に日本発の公開ソフトウェアはまだそれほど多くありません。その理由としては、まず第一にこのような公開にともなう手間・コストがあげられます。プログラムの公開やメンテナンスにともなう障壁を少しでも低くするため、CMSIでは、ソースコード管理やドキュメント、プログラムの公開サイトの作成のためのツールの整備や利用講習会、アプリケーションの紹介サイト(通称「アプリケーション」)の充実など、拠点研究員のスキルアップと並行して継続的に取り組んでいきます。

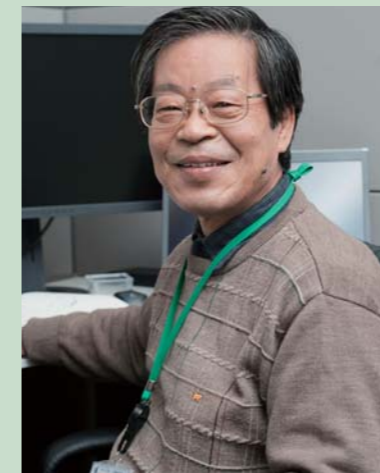
それでは逆に、ソフトウェアを公開することにはどのような意義があり、また開発者にはどのような利益があるのでしょうか? プログラム

を公開し、多くの人からフィードバックをもらうことにより、プログラムはより信頼性の高いものとなります。協力者からのコードを受け入れることにより、新たな機能を付け加えソフトウェアをより充実させていくことも可能となります。また、利用者とのやり取りが新たなアルゴリズムの開発、新たな共同研究やコミュニティの創出につながっていくことも多いでしょう。たとえ、いかに優れたアルゴリズムを開発したとしても、それがソフトウェアという形で具現されていなければ、その手法が評価されるチャンスはほとんどありません。

この傾向は量子化学計算の分野で最近特に顕著ですが、今後、計算科学分野全体に広がっていくでしょう。理想的には、新規計算手法のコードを公開し広く使ってもらおうと同時に、そのプログラムが新たな手法を実装するための基盤ソフトとしてコミュニティの中で成長していく。そのような「コミュニティコード」を育てることができれば、開発者のみならず分野全体にとって大きな利益となります。プログラムの公開は決して他人のためのサービスではなく、自身の業績(サイエンス)をソフトウェアという形で残すことにほかなりません。

国内では、2012年9月末にスーパーコンピュータ京の一般利用が開始されたばかりですが、次世代のエクサフロップス級のスーパーコンピュータの建設に向けた調査研究もすでに動き始めています。計算物質科学分野にとって重要なアプリケーションプログラムを超並列アーキテクチャ向きにチューニングされた形で整備し、さらにそれらにもとづき計算機科学分野の研究者といっしょに次の世代のスーパーコンピュータのデザインにも主体的に関わっていく。そのようなサイクルを確立するためにも、計算物質科学のコミュニティコードの充実を戦略的に進めていくことが今後より重要になっていくに違いありません。(CMSI広報小委員会代表/東京大学物性研究所 藤堂真治)

GAUSSIANはなぜ世界中で使われているのか?



北浦和夫

きたうら かずお

神戸大学システム情報学研究所
特命教授

世界標準の地位を確立

今日、多数の量子化学計算プログラムが存在する中で、GAUSSIANが世界中で圧倒的なシェアを誇っている。このプログラムは、1998年に「量子化学における計算化学的方法の展開」の業績によりノーベル化学賞を受賞したJohn A. Popleのグループによって開発され、現在はGAUSSIAN社から提供されている。「GAUSSIANが動かないスーパーコンピュータは売れない」と言われるほど、学術界のみならず産業界にも広く普及し教育・学術研究・開発研究に活用されている。

この圧倒的なシェアを背景として、量子化学計算の「標準」の地位を獲得している。「標準」とは、他のプログラムの計算結果が正しいかどうかの検証に使われるという意味だけではない。多数の人が用いるので、

GAUSSIANに実装されている理論・計算方法が標準的計算法とみなされるという意味でもある。これは、第一級の研究者たちが、継続的に先端的な理論・計算法を開発してコードを提供している結果である。

抜群の使いやすさ

GAUSSIANは1970年版(GAUSSIAN70)から始まるが、私がこのプログラムに接したのは1975年からである。そのときに受けた衝撃は今でも鮮明に覚えている。

当時はFORTRANで3万行ぐらいの規模(当時の超巨大プログラム)であったと思うが、まず、プログラムの構造の斬新さに驚いた。そのころはオーバーレイ・セグメント方式と呼ばれていたが、2電子積分計算部分、SCF計算部分など計算の各ステップごとにほぼ独立に作られていた。このために、新しい機能を付加する際には関連する最小限部分の改変ですませることができ、新規理論・計算法を検証する際の優れたプラットフォームであった。

もう1つの衝撃は、コメントのどこかに「有機化学者のための量子化学計算プログラム」と書かれていたことである。当時は、アメリカ以外では、量子化学者がやっとなab initio MO計算を始めたときである。今振り返ると、GAUSSIANは開発当初から「量子化学」ではなく「化学」の研究ツールとしての今日の状況を想定していたように思える。

そして、1980年代半ば以降、計算化学者の増加と実験研究者が自ら量子化学計算を行う時代に入ってGAUSSIAN利用者が急増した。当時、HONDOなどいくつかのab initio MO計算プログラムが普及していたが、それらの中にあって、使いやすさ(主に入力デー

タの作成の容易さ)の面でGAUSSIANが群を抜いていた。これは広く使われるために当然とも言える要件である。

ユーザーの数が多くなると必然的に改善・改良に関するフィードバックも増えることから、これらに対応することにより他の類似プログラムに対する優位性をますます上げていくことになった。

日本発のソフトウェアを世界へ発信するチャンス

わが国発で世界で普及している学術プログラムが皆無であることが憂慮されて久しい。誤解のないように述べておくと、世界で普及している量子化学計算プログラムであるGAUSSIANやGAMESSなどには多数の日本人研究者がコードを提供している。これらはアメリカ産ではあるが、いわゆる国際的コミュニティコードと見なすことができる。いずれもFORTRANで百万行にも及ぶ超巨大プログラムとなっている。

これらに対抗するプログラムを一朝一夕に開発できるとは思えない。仕切り直して挑戦するチャンスが来るとしたら、既成の解き方は異なるまったく新しいアルゴリズムを提案するか(これが最も望ましい)、コンピュータのアーキテクチャやプログラミング言語が一変されるか、など既成のプログラムが恐竜化する時しかないであろう。

このように考えると、これまでと桁違いのCPU・コア数をもつ超並列計算機が普及の途についた今、次世代のエクサフロップスコンピュータを視野に入れた画期的な並列計算プログラムを開発して、世界に向けて発信する数少ないチャンスであろう。

第一原理計算の現状と課題を考える

日本と海外の第一原理ソフトウェアの概要

第一原理電子状態計算とは、文字通り物質の性質のほとんどを決めている電子の状態を計算する手法である。密度汎関数法など写実的な近似のもとに計算するので、物性の個性へのアプローチに適している。この手法は計算機リソースを多く必要とするが、スーパーコンピュータ京によってその可能な応用範囲が大きく拡大されることは間違いない。例えば、今までとすれば不十分であった統計的な物質構造の揺らぎや多様性の扱いが完全な物となるなど、新しい展開が今後期待される。

第一原理計算を行うプログラムは国内、国外に数多くあるが、超並列化が必須になってきていること、対象となる物理量が多様化してきていることなどで、プログラムは複雑化している。そのため、日本の第一原理計算プログラム開発を今後どのような方向に導いていくのかは、関連するコミュニティにとって重要な課題となっている。そこで、国内外のプログラム群の現状について把握するため、まずは電子相関の近似手法による分類と、電子状態を表現する基底関数による分類を試みた(表1)。第一原理計算は物性物理系と分子科学系の2系統に大きく分けられるが、ここでは物性物理系のみを取り上げている。

一方、海外のプログラムは <http://www.psi-k.org/codes.shtml> でよくまとめられている。そのうち、筆者がしばしばその名前を見聞きするものを表2にまとめた。これらに対応する機能についても調べているが、今回は誌面を割くことができなかった。



吉本芳英

よしもと よしひで

鳥取大学大学院工学研究科 准教授

れており、開発者にとって必要性が薄い機能の整備は後回しになっているためではないかと思われる。

平面波基底によるプログラムは他のプログラムに比べて、実験関係者などプログラム開発を行っている研究者とその周辺だけでなく、一般の利用者への普及がもっとも進んでいるが、国際的に見るとVASPが台頭しており、日本にも浸透してきている。VASPは有償ではあるが、マニュアル、チュートリアルなどの整備状況がよく、また質問などできるコミュニティが確立していること、VASPで計算したとする論文が増えており、それが安心感につながっている。

一方、その他のタイプのプログラムを含めて国内を見ると、阪大のCMD[®]関連のプログラム群(STATE、MACHIKANEYAMA、Osaka2K、ES-opt、HiLAPW)やOpenMX、Phase、DV-X α が普及に熱心である。DV-X α 法は、独特な方法で固体のエネルギースペクトル(特に内殻準位を含む)を低コストで調べることが得意とする。調査してみると、マニュアル/チュートリアルやユーザーコミュニティの整備は進んでおり、また利用者の数も平均的な国内の平面波基底プログラム以上である。

第一原理計算の今後の方向を探る

では、第一原理計算プログラムは今後、ど

う導いていくべきであろうか。

言うまでもなく、用いている近似には精度が十分でないものは数多くあり、新しい手法開発は継続しなければならない。また、マルチフィジックス、マルチスケールの手法など、この計算を部品として必要とする手法を開発していくには、計算の中身を把握している必要がある。これら二点は手法開発ができる基盤を維持する必要性を示している。しかし、一方で基盤に求められる機能は多様化しており、また高並列化への対応、計算の入力データの作成(前処理)から、計算の可視化(後処理)など利便性向上のための開発までが求められている。そうすると、1人の開発者がプログラム開発からアプリケーションまでを一貫して行うことは難しく、多人数での協力がようになってくる。

この観点に立つと、国内で特に数の多い平面波基底のプログラム群は、できれば一本化することが望ましい。その必要性は前々から議論されているが、なかなか進んでいない。その理由を、まず開発者側から見ると、もともとこれらのプログラムは開発者やその周辺の人たちの必要性から作られており、自分たちがそれを理解できることが前提になっている。そのため、数万行から十数万行の規模になると、理解するのに時間がかかり、プログラムの引越しに大変な抵抗感が出てしまう。

一方、ユーザー側から見ると、第一の理由は入力出力操作の慣れが大きい。もう一つは、同等の手法のプログラムでもその詳細は異なるため、どうしても計算結果には手法の細かい差に起因する違いが含まれている可能性がある。そのため、他のプログラムに移行するには再計算して確認する必要がある。

このようなことから、一本化を推進するには段階を踏んでそれぞれのプログラムを利用/開発しているコミュニティを誘導していく必要がある。まずは、プログラム間で入力出力を

共有/比較できるようにすることではないかと思う。同等の入力について、複数のプログラムの中で同じ結果がきちんと出るとは、プログラムや手法の検証の意味で重要であるし、またプログラム間の性能比較の上でも欠かせない。

さらに、一本化によって引越しを行う利用者/開発者が引越し先のコミュニティにうまく受け入れられるような環境づくりも必要になる。例えば、プログラムには思想が現れるか

ら、複数の思想のプログラムが混じると多少の不統一感が出るが、これはある程度許容しないと、異なる開発者がまとまることはできない。また、あるプログラムからの乗り換えを奨励する場合、国内で候補となるプログラムが海外のプログラム群と比較して、ライセンスのあり方、コードの詳細についての情報提供の体制などで遜色ない体制になっていないと、かえって空洞化が促進されることになるだろう。

表1. 国内の第一原理計算ソフトウェア

名前	主な開発者(グループ)	相関	基底
PHASE	山崎(富士通)	1	i
QMAS	石橋(産総研)	1	i
STATE-Senri	森川(阪大)	1	i
CPVO	小田(金沢大)	1	i
(x)TAPP	TAPPコンソーシアム	1	i
FPSEID	杉野(物性研)、 宮本(産総研)	2	i
無名	押山(東大)、 岡田(筑波大)	1	i
ES-Opt	草部(阪大)、 荻野(リパモア)、 常行(東大)	1	i
OSAKA2K	白井(阪大)	1	i
TC++	佐久間(千葉大)、 常行(東大)	4	i
HiLAPW	小口(阪大)	1	iii
ABCAP	浜田(東理大)	1	iii
Ecalj	木野(物材機構)、 小谷(鳥取大)	1,3	iii
MACHIKANEYAMA	赤井、小倉(阪大)	1,4	iii
TOMBO	大野(横浜国大)、 川添(金研)	1,3	iii
RS-DFT	岩田、押山(東大)	1	iv
FEMTECK	土田(産総研)	1	iv
RSPACE	小野、広瀬(阪大)	1	iv
ARTED	矢花(筑波大)	2	iv
OpenMX	尾崎(JAIST)	1	ii
ELSESES	星(鳥取大)	1	ii
DV-X α	足立(京大)	1	ii
Electron Transport Simulator	小林(筑波大)、 広瀬(NEC)	1	vi
無名	渡邊(東大)	1	vi
無名	胡、渡辺(東理大)	2	iv
ASCOT	近藤(物材機構)	1	ii
CONQUEST	宮崎(物材機構)、 D.Bowler(UCL)	1	ii,v

表2. 海外の第一原理計算ソフトウェア

名前	主な開発者(グループ)	相関	基底
VASP	J. Hafner (Austria)	1,2,3	i
abinit	X. Gonze (Belgium)	1,2,3	i
qbox	F.Gygi (US)	1	i
bigDFT	T. Deutsch, S.Goedecker (Germany)	1	vii
CASTEP	M.Payne (UK)	1	i
quantum espresso	DEMOCRITOS, SISSA (Italy)	1,2,3	i
Siesta	E. Artacho (Spain)	1	ii
octopus	A.Rubio (Spain)	1,2	iv
WIEN 2k	K. Schwarz (Austria)	1	iii
CP2K	J. Hutter	1,2	i,ii
CPMD	J.Hutter (US,Germany)	1,2	i
Ontep	P. Haynes (UK)	1	ii
LMTO	O.K.Andersen	1	iii

電子相関の近似手法

- 1: 密度汎関数法によるもの
- 2: 時間依存密度汎関数法によるもの
- 3: GW近似によるもの
- 4: その他

電子状態を表現する基底関数による分類

- i: 平面波(フーリエ変換)
- ii: 原子局在基底
- iii: 補強した基底(平面波等)
- iv: 実空間メッシュ(構造格子)
- v: 有限要素法(非構造格子)
- vi: ラウエ表示(2D平面波+1D格子)
- vii: ウェーブレット

計算物質科学分野の公開ソフトウェア

ここでは、CMSIに関連する研究者が中心になって開発を進めている公開ソフトウェアを紹介します。これらのソフトウェアは、webからソースコードをダウンロードし、研究に活用することができます。日本発の公開ソフトウェアはまだ少数ですが、物性物理、分子科学、材料科学の各分野で、コミュニティコードを目指し、特徴あるソフトウェアの整備が進んでいます。

ALPS

コード名	ALPS
方法・アルゴリズム	量子モンテカルロ法、古典モンテカルロ法、厳密対角化、DMRG、DMFT
概要	量子スピン系、電子系などの強相関量子格子モデルのシミュレーションのためのオープンソースソフトウェア。格子構造、相互作用などはXMLを用いて柔軟に指定できる。対象となる系、興味のある物理量に応じて、量子モンテカルロ法、厳密対角化、DMRGなど最適なアルゴリズムを選択可能であり、計算物理の専門家でもなくとも様々な模型について手軽にシミュレーションを始めることができる。
対象となる物質	量子スピン模型、ボーズハバード模型、フェルミハバード模型などの量子格子模型一般
主な開発者	Matthias Troyer (ETH Zürich)、藤堂眞治 (東大)、他
URL	http://alps.comp-phys.org/

clupan

コード名	clupan
方法・アルゴリズム	クラスター展開法を用いた熱力学計算
概要	クラスター展開法などを用いて合金のモデリングを行い、原子間の相互作用を第一原理計算から評価する。第一原理計算の精度を損なうことなく原子配置効果を見積もることができれば、高い精度の基底状態の構造、熱力学量や平衡状態図を得ることが可能となる。
対象となる物質	二種類以上の原子種を含む固体
主な開発者	世古敦人 (京大)
URL	http://clupan.sourceforge.net/

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
概要	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、様々なアプローチが考案されているが、DC法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。
対象となる物質	ナノ・生体系
主な開発者	中井浩巳、小林正人 (早大)
URL	http://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/

ermod

コード名	ermod
方法・アルゴリズム	エネルギー表示法による溶液系・ナノ不均一弱秩序系の自由エネルギー計算・解析
概要	下記の対象物質系における物質結合の自由エネルギーの計算を行う。問題とする溶液系と参照溶液系の分子シミュレーションから、溶質-溶媒相互作用エネルギーの分布関数を構成し、エネルギー表示溶液分布関数理論によって、高速で正確な自由エネルギー解析を行う。
対象となる物質	溶液(非水系やイオン液体も含む)、脂質膜、ミセル、タンパク質、高分子非晶、QM/MM系
主な開発者	松林伸幸 (京大)、櫻庭俊 (原研)
URL	http://ermod.sourceforge.net/

feram

コード名	feram
方法・アルゴリズム	分子動力学法
概要	強誘電体薄膜の高速分子動力学シミュレータ。系を粗視化し、長距離力である双極子-双極子相互作用を持つ古典擬スピン系としてモデル化する。FFTにより逆空間で高速に力を計算する。
対象となる物質	ペロブスカイト型強誘電体
主な開発者	西松毅 (東北大)
URL	http://loto.sourceforge.net/feram/

GAMESS-FMO

コード名	GAMESS-FMO
方法・アルゴリズム	フラグメント分子軌道法(FMO法)
概要	全系を小さなフラグメントに分割し、フラグメントとフラグメントペアについてab initio MOの計算を行い、それらの結果を用いて全系のプロパティを計算する。計算時間はシステムサイズにほぼ比例する。
対象となる物質	タンパク質やDNA/RNAなどの生体高分子およびそれらと有機低分子化合物との複合体
主な開発者	北浦和夫 (神戸大)、Dmitri G. Fedorov (産総研)
URL	http://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/

MACHIKANEYAMA2002

コード名	MACHIKANEYAMA2002
方法・アルゴリズム	KKR-CPA法
概要	密度汎関数法の局所密度近似(LDA)あるいは一般化勾配近似(GGA)に基づく第一原理電子状態計算のためのプログラムパッケージ。コヒーレントポテンシャル近似(CPA)を組み込んでいるため、通常の規則結晶だけでなく、不純物系や不規則置換合金、混晶といった不規則系を取り扱うことができる。
対象となる物質	金属、半導体、酸化物など
主な開発者	赤井久純、赤井昌子
URL	http://kk.phys.sci.osaka-u.ac.jp/

MDACP

コード名	MDACP
方法・アルゴリズム	分子動力学法
概要	MDACP (Molecular Dynamics code for Avogadro Challenge Project)は、KAUST GRP Investors 賞受賞研究「アボガドロ数への挑戦-非平衡現象の計算統計物理学-」のプロジェクトで開発された Lennard-Jones 粒子用並列MDコード。記述言語はC++で、MPI+OpenMPを用いた空間分割により並列化されている。
対象となる物質	一般の気相、液相、固相間の相転移
主な開発者	渡辺宙志(東大)、鈴木将(九大)、伊藤伸泰(東大)
URL	http://mdacp.sourceforge.net/

OpenMX

コード名	OpenMX
方法・アルゴリズム	密度汎関数理論、数値局在基底、擬ポテンシャル法、オーダーN法、非平衡グリーン関数法、有効遮蔽媒質法
概要	密度汎関数理論に基づき数値局在基底・擬ポテンシャル法を用いて基底状態の電子状態を計算。クリロフ部分空間法に基づくオーダーN法が実装されており、並列計算機上で大規模分子動力学計算が可能である。またスピン軌道相互作用を含めたノンコリニア磁性の取り扱いや非平衡グリーン関数法に基づく電気伝導計算も実装されている。
対象となる物質	カーボン系物質、金属、界面構造、遷移金属酸化物、液体等
主な開発者	尾崎泰助(北陸先端大)
URL	http://www.openmx-square.org/

phonopy

コード名	phonopy
方法・アルゴリズム	フォノン分散計算
概要	VASPやWien 2kといった第一原理計算ソフトウェアで計算された力をもとにフォノン分散、状態密度や種々の熱力学量を計算する。主にPythonを用いて記述されている。
対象となる物質	一般の固体
主な開発者	東後篤史(京大)
URL	http://phonopy.sourceforge.net/

RSPACE

コード名	RSPACE
方法・アルゴリズム	実空間差分法を用いた電子状態計算およびOverbridging boundary-matching法を用いた輸送特性計算
概要	実空間差分法を用い、ナノ構造の電子状態および輸送特性計算を行う。PAW擬ポテンシャルを用いているため、遷移金属を含んだモデルの電子状態やスピン・軌道相互作用が重要な役割を果たすモデルの高精度計算が可能である。また、電子状態計算のみならず、半無限境界条件を用いたナノ構造の輸送特性計算も可能である。
対象となる物質	分子、クラスター、半導体表面・界面
主な開発者	小野倫也、Marcus Heide (阪大)、塚本茂 (FZJ)、江上喜幸 (北大)
URL	http://cmdcm.phys.sci.osaka-u.ac.jp/

STATE

コード名	STATE
方法・アルゴリズム	平面波基底第一原理分子動力学法
概要	密度汎関数法に基づく第一原理分子動力学シミュレーションプログラムで、GGA、ウルトラソフト擬ポテンシャル、Van der Waals力を計算する。物質のエネルギーを解析するだけでなく、ESM法、NEB法、BM法により、界面や液中での反応経路や活性化障壁を求めることができる。
対象となる物質	固体のバルク・表面の電子状態解析、固気・固液界面及び液中での反応シミュレーション
主な開発者	森川良忠、稲垣耕司、木崎栄年(阪大)、杉野修(物性研)、濱田幾太郎(東北大)、大谷実(産総研)
URL	http://cmdcm.phys.sci.osaka-u.ac.jp/



グローバルに展開するアプリケーション CONQUESTの開発者・Bowlerさんと 宮崎さんに聞く



次世代の半導体デバイスやDNAなど、100万個レベルの原子が集まった物質の機能・構造を予測する“CONQUEST”。ユニバーシティ・カレッジ・ロンドン(UCL)のBowlerさんと物質・材料研究機構の宮崎さんが、アプリ開発の最前線に立つ。

「京」での動作を機に、日本での普及活動を本格的にスタートさせる予定だ。



UCLの桜の花の前で
David Bowler (University College London)

「実験結果を再現したい」 —Bowlerさんの動機

「オックスフォード大のドクターコースでシリコンの薄膜成長に関する研究に関し、自分の計算した結果を実験で確かめながら進進していました」。Bowlerさんは実験研究者としての経歴をもつ。その後、原子の振る舞いを忠実に計算する第一原理計算手法は扱える原子の数に限界があると感じ、「同僚の実験家と密接に連携しながら実験での再現を求めて計算科学の研究に集中しました」とBowlerさん。そのときに着目したのが“オーダーN法”だ。1997年、この新手法を取り入れた“CONQUEST”の開発者、キール大学のMichael J. Gillan研究室の門を叩いた。1998年にはGillan先生とともにUCLに移籍し、CONQUESTの開発拠点を築いている。

「大規模計算を行いたい」 —宮崎さんの動機

「JRCAT(アトムテクノロジー研究体)の参加メンバーの多くが、今の日本の計算物性科学を牽引しています」。宮崎さんが1993年より参加した産官学連携国家プロジェクトJRCATでは、多くのライバルたちが第一原理計算を適用したプログラムを開発し、それを使って半導体等に関する先端的な結果を世に送り始めていた。その後、金属材料技術研究所に移った宮崎さんは、「材料科学で一步抜き進めるには計算する原子の数を増やすことが必須」と考え、“オーダーN法”開発に関する文献を調べた。そこで、Gillan先生のCONQUESTの論文に出会った。目を通したとたん、「これだ!」と一目ぼれ。すぐさま海外在籍研究員の資格を得て、99年に設立直後のUCL CONQUEST拠点へ合流した。「1年間はプログラム開発に没頭しました」。この日々が、日



物理学会中にインタビューに応じていただいた。
宮崎 剛(物質材料研究機構)

本に戻ってからの宮崎さんのアプリ普及にかけ幹を形成する。

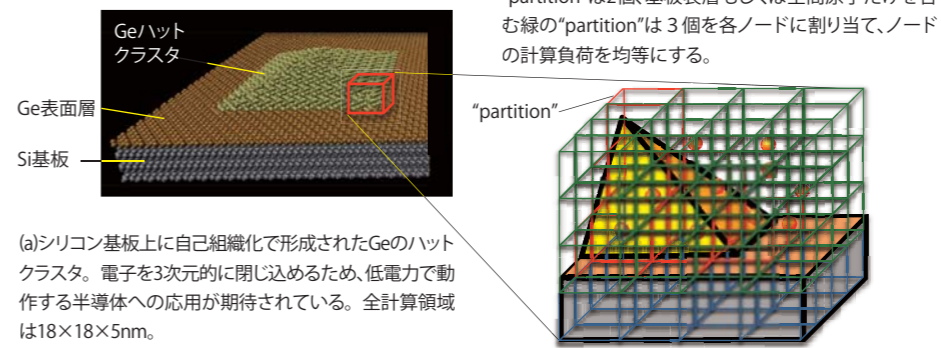
ユーザー視点のプログラム開発

2人のプログラム開発にかける思いは共通だ。「開発したアプリケーションは人に使われてこそ価値がある」。CONQUESTの創始者Gillan先生の「ユーザー視点」のポリシーを引き継ぐ。2007年、CONQUESTは最新のオーダーN法を用いたアプリに育っていたが、応用計算への適用を可能とするため、さらなる手法開発が必要であった。そこで2人は共同研究の公募を実施し、5件の課題を選定して限定β版ソースコードを公開。「共同研究により、アメリカ、ドイツ、フランス等、アーキテクチャの異なる各国のスパコンでナノテクやバイオ等の幅広い分野で利用されたので、高精度化や高並列化の共通課題が把握でき、使い勝手のよいプログラム開発に生かされました」とBowlerさん。それ以降、継続して共同研究者を募っており、2012年9月現在、10グループがCONQUESTのユーザーとなり、触媒分野などへの応用にも広がっている。

超並列と計算精度で 一步抜き進める

物質の特性を一般的な第一原理で厳密に計算する場合、計算する物質の原子数をNとすると、Nの3乗、もしくはそれ以上に比例して計算量が増大してしまう。そのため、「京」を用いても10

図1. シリコン基板上的ゲルマニウム(Ge)ハットクラスタのシミュレーション結果と“partition”の説明



(a)シリコン基板上に自己組織化で形成されたGeのハットクラスタ。電子を3次元的に閉じ込めるため、低電力で動作する半導体への応用が期待されている。全計算領域は18×18×5nm。

(b)“partition”の計算ノードへの割り当ての模式図。全て原子で満たされる計算量が多い青の“partition”は1個、ハットクラスタ表面の原子と空間原子を含む赤の“partition”は2個、基板表面もしくは空間原子だけを含む緑の“partition”は3個を各ノードに割り当て、ノードの計算負荷を均等にする。

万原子程度の計算が限界だ。しかし、電子デバイスや生体分子等では100万個の原子が集まってはじめて機能を発現するケースが多い。そこで、計算できる原子の数をもっと増やしたい。この目的で開発されているのが原子数Nに計算量が比例する“オーダーN法”である。オーダーN法にはいくつかの方法があるが、CONQUESTは電子状態をN×Nの密度行列で表す方法を用いている。ある場所の電子は遠くの電子から受ける影響は小さいと仮定し、行列の対角項近くの要素だけを残して他を0とし、計算量を最小化する。この工夫により、“オーダーN法”を実現し、電子状態と全エネルギーを求めている。

CONQUESTの最大の特徴は、「超並列計算機を効率的に利用可能なこと」、「計算した結果の精度が高いこと」と宮崎さん。語源である“Concurrent Order N Quantum Electronic Simulation Technique”の“Concurrent”は、“並列計算を前提にした”の意味だ。計算したい全領域を局所的な“partition”と呼ぶ小さな単位に分けて電子状態を計算できるように、プログラムを書く。この“partition”を構成する原子の状態により、その計算量は異なる。そのため、スーパーコンピュータの計算単位となるノードに同じ比率で“partition”の計算を割り当てると、“暇なノード”と“忙しいノード”が生じてしまい、効率的な計算ができない。そこで、ノードに割り当てる“partition”の数をその計算量に応じて最適化し、ノードの負荷を均等にする方法を

開発した(図1)。「計算機が大規模化しても、“partition”のノードへの割り当てを最適化することで迅速に対応し、より多くの原子数を扱う計算が可能になります」と宮崎さん。CONQUESTはこの超並列計算の強みにより、HPCI戦略プログラムで重点アプリに選定され、2011年4月から「京」の試験利用を開始した。次世代半導体素子として期待されるシリコン(Si)基板上のゲルマニウム(Ge)原子ハットクラスタのシミュレーションで、すでに実際の実験結果を再現し、高い計算精度を「京」で実証済だ。「オーダーNを活用した超並列動作と計算精度で一步先に出ました」と宮崎さんは胸を張る。

広視野の人材育成をめざす

Bowlerさんは教育にも力を入れている。「実験と計算の両方の研究の醍醐味を知っているのが私の強み。その経験を学生に伝え、バランスの良い研究者を育てたい」と語ってくれた。実験研究の道に進んだ卒業生との共同研究も実現している。

宮崎さんも理科大の客員教授として学生を受け入れ、自分の専門分野ではない生体分子のシミュレーションに取り組み、CONQUESTの活用領域を広げている。アプリ開発や利用者のコミュニティを継続的に発展させるためには、視野を広くもって若手の人材育成に取り組むことが重要だ。

「日本での普及」—2人の活動戦略

2人は「京」での動作をばねに、日本での普及活動の戦略を練る。

「ナノサイエンスの領域で、国際的に学生やポスドクの人的交流を促進する仕組みを設けたらどうか」とBowlerさん。「京」で動作するアプリを活用した研究交流が進めば利用者が増え、国際的なアプリ普及が可能となる。

CONQUESTはグローバルに発展してきたが、日本語のマニュアルがなく、日本での普及が遅れているのが課題だ。日本で利用講習会等を積極的に開催し、ソースコードの正式版の公開も行う予定です」と宮崎さん。CONQUESTの普及活動の機は熟している。

UCLのスパコンを保有する情報サービス部門学術計算サービスグループ長のClare Gryceさんは、「Bowlerさんと宮崎さんの日英共同研究がさらに多くの共同研究につながってほしい」と、UCLの研究者にとって新たな機会がもたらされることを期待する。CONQUESTは分野や国を超えた連携活動を促進してくれそう。これからのBowlerさん、宮崎さんの活躍から目が離せない。

取材：古宇田光(CMSIプロジェクトマネージャ)

Application SPEC Sheet [CONQUEST]	
コード名	CONQUEST
方法・アルゴリズム	密度行列最適化によるオーダーN法第一原理計算
コードの概要・特徴	オーダーN法第一原理計算手法を用い、構造最適化や分子動力学を実現する。計算コスト(メモリ量、演算量)が計算する系の含む原子数Nに比例するオーダーN法を用いていることにより、数十万原子以上を含む超大規模系に対する第一原理計算を可能とする。通常の計算も実現可能である。並列化効率が高。
シミュレーションの対象となる物質	ナノ構造物質(半導体表面、酸化物表面)、生体物質
開発者	David Bowler (University College London)、宮崎剛(物質材料研究機構)、他

2 卒業生を訪ねて

吉見一慶 よしみ かずよし

株式会社構造計画研究所
社会インフラシステム部

東京大学物性研究所にて有機伝導体の研究で修士号、電荷秩序現象における揺らぎの理論研究で博士号を取得、東京医科歯科大学、産業技術総合研究所で研究員としてすごしたのち、構造計画研究所に入社。



研究畑から社会インフラのシステムエンジニアへ

産業界で活躍する計算物質科学の「卒業生を訪ねて」第2回は、構造計画研究所の吉見一慶さんにお話を伺いました。入社して半年、携帯電話などの電波伝搬の解析に携わっています。大学院での研究、この仕事を選んだきっかけ、そして、これから取り組んでいきたい仕事は？



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

既存+αという意識が浸透した職場

小西 社会インフラシステム部というのは文字通りだと思うのですが、具体的にはどんな仕事なのですか。

吉見 電波伝搬や信号通信に関する解析を主にしています。例えば、弊社では「RapLab (Radio Propagation Laboratory)」という電波伝搬解析のパッケージを出しています。携帯電話やラジオ、テレビ等の信号を解析するソフトですが、その特色は新しい研究成果を取り入れて市場の需要にマッチするような形にして売り出しているという点にあります。そのパッケージの中で利用されているアルゴリズム、その改良には携わっています。

小西 アルゴリズムの改良にあっても研究機

関や大学などと協力したりするのでしょうか。

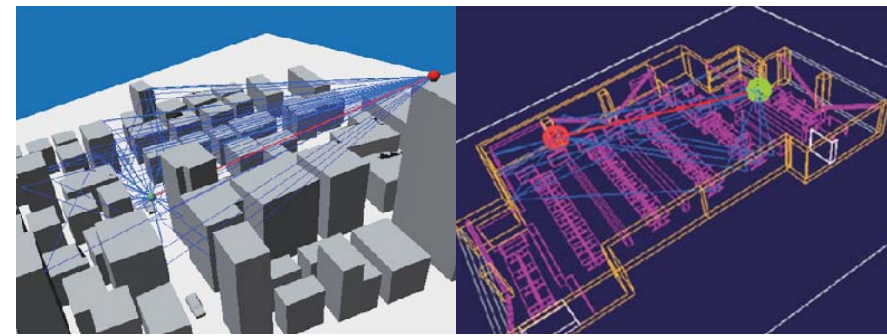
吉見 そうですね。学会発表・論文などで知ったアルゴリズムが使えると思ったら、積極的に取り入れる。その導入にあたり不明な点が発生した場合は、研究者に直接コンタクトを取り、最終的に実装までもっていくことが多いです。その意味では、学界との連携は重要です。

小西 今の仕事の魅力と？ アカデミックと比べてときの違い、共通点なども含めて。

吉見 社会に密接したさまざまなことをやっているところが大きく違いますね。アカデミックに比べると、自分自身と自然現象と対話しているようなところがあるじゃないですか。今の仕事では、顧客が求めているベスト・ソリューションが、私の考えているものと違っていたりします。その違いを上手く調整するところが、社会との関わりという意味で非常に面白いと思いますね。

また、職場自体も魅力的です。新しいことを始めようという意識がすごく高い。視野を全方位に広げていて、関係なさそうな分野に対しても自分たちのもつ技術を手早く活用できるアイデアがないか、部全体で考え議論する。そのような機会が多く、刺激的な環境になっています。

アカデミックとの共通点に関しては、基本的に電波を扱うという点で技術的な部分が似ていると思います。そうはいつても、携帯電話の



電波伝搬解析ツールを使ったイメージの一例。市街地(左)と屋内(右)。送信点から受信点へ到達する電波を追跡することにより、伝搬距離、反射の様子、受信レベルなどをシミュレーションして計算する。建物が多くなると、反射される回数が増え、パスが複雑になる。実際の街に適用すると、非常に大規模な計算になる。

信号解析等に関する技術や知識はもっていないので、いろいろと吸収している段階ですが。

小西 物理というより電気工学のほうに近い印象ですね。その仕事はプロジェクトを組んでやっているのですか。

吉見 そうですね。社会インフラシステム部は30名ほどの部署で、その中の5~10名くらいで1つのプロジェクトを担当しています。プロジェクトを立ち上げたら、どのくらいの作業量になるか、人数や日数を見積もり、工程を入れた線表を作ります。そして、作業を進めながら、線表とのずれを確認していくことになります。そのあたりはアカデミックと違うところですね。また、プロジェクト内では、同じコードをいろいろな人が使うので、ほかの人が読みやすいようにコーディングするように心がけています。

自己管理の大切さを学んだ研究生生活

小西 吉見さんは大学院でどんな研究をされてきたのですか。

吉見 東京大学物性研究所の森 初果先生の研究室で有機伝導体について研究していました。当時、有機トランジスタなどが話題になっていて、興味をもったことがきっかけです。ただ、もともと理論気質だったこともあって、修士から博士課程に移るときに、同じ物性研の加藤岳生先生の研究室に移りました。そこでは、超伝導や磁化率について研究しました。

小西 加藤先生の研究室で博士号を取られて、その後は研究員となられた。

吉見 はい。博士号取得後、最初の1年間は、東京医科歯科大学の越野和樹先生の研究室で特任助教として量子光学の研究をしていました。その後、産総研の石橋章司先生の下で博士研究員として2年間、ふたたび有機伝導体を研究しました。

小西 それぞれの先生から学んだことは？

吉見 森先生からは、発想したらチャレンジという自由さ。加藤先生からは、自由さプラス自己管理の大切さ。そして、越野先生と石橋先生からは、アウトプットを出すことの重要性を学びました。

小西 数値計算との関わりは？

吉見 修士課程のときは、数値計算のパッケージを使う側でした。博士課程では、研究用に自分でコードを組むようになりました。その次の医科歯科大では解析計算が主になったため、ふたたびプログラムを使う側になり、Mathematicaを用いて計算結果を確認したりしていました。産総研では、第一原理のプログラム(QMAS)を利用しモデル化したものを、厳密対角化のプログラムで解析するという形で数値計算に関りました。

目標は自発・協奏的に発達していく産学連携のシステム作り

小西 その後、現在の会社に入社されるのですが、キッカケは何だったのですか。

吉見 博士課程のときから就職希望はあったのですが、研究機関に近いことをやりたいという思いもありました。そのような中、弊社に勤める知り合いから話を聞く機会がありました。それが小さなキッカケです。そのときは記憶にとどめた程度でしたが、その後、実際にホームページを見たのが大きかったです。企業理念としては、なかなか前面に打ち出さないので「大学・研究機関と実業界をブリッジする総合エンジニアリング企業」。それを堂々と謳っていることに深く感銘を受け、気づいたら志望していました。

小西 入社して半年ですね。これから取り組んでいきたい仕事は？

吉見 まずは、今の社会インフラの仕事の中で、市場をきっちり理解し、顧客と自分が求めているものを上手くすり合わせるようにしたいと考えています。

また、ビッグデータの応用に関しても興味があります。

小西 データをどう集めて、どう使うかということですか。

吉見 データを集めることはできるようになっています。それを、どう解釈してどう使うのが課題だと考えています。終点をざっくり見定めた上での、たくさんある「シ点」からの情報抽出。個人的には、スマート技術の上に立った教育、例えばeラーニングまで含めて行うことができれば、面白いのではないかと考えています。

また、現在の仕事にプラスアルファで新しいことにチャレンジしていきたいですね。そのときに、通常の企業よりも立ち位置を研究機関に比較的近くとる。そして、弊社の理念をパワーアップさせ、アカデミックの発達と企業への知識の還元を同時に行う。そういった産学がWin-Winの関係にある自発的・協奏的なシステム作りに関わっていきたいですね。

(2012年9月11日 構造計画研究所本所にて)

第1部会「新量子相・新物質の基礎科学」 夏の学校レポート

CMSI第1部会「新量子相・新物質の基礎科学」夏の学校が、8月20～25日の6日間開催されました。大学院生やポスドクなどの若手を中心としてベテラン研究者まで、約40名が参加。講義だけでなく、ディスカッションにも十分時間をとり、滞在型ならではの深い交流がはかられました。



正木晶子 まさき あきこ

東京大学物性研究所
CMSI重点研究員

表「ショートトーク」があり、そのあとは自由に議論し合うという構成でした。普段不規則な生活を送る若手研究者たちにとっては健康的な流れだったと思います。

合宿前半の講義は量子化学のトピックに焦点が当てられました。私個人としては、計算科学研究機構(AICS)の中嶋隆人先生の「量子化学計算における相対論効果」の講義が印象的でした。「金がなぜ金色か」は相対論的效果に起因し、重原子分子の内殻電子に関する相対論効果やスピン軌道相互作用が大きな役割をもつという結果は、量子化学の素人にとって純粋な面白さがありました。

テンソルネットワークへの関心が高まる

後半の講義は物性物理で、北京大学よりはるばるお越しのTao Xiang先生による「Renormalization of Tensor Network States」は私たちのグループに関連が深く、私自身も以前Time-Evolving Block Decimation

(TEBD)を学んだことがあったため、この講義を楽しみにしていました。

私は川島・藤堂グループの重点研究員として、並列化可能な世界線量子モンテカルロ法(QMC)の新しいアルゴリズム開発の任務に携わっています。QMCには統計誤差を除いて厳密で大規模な高次元系の有限温度での計算が容易であるという利点はありますが、フラストレーションのあるスピン系やフェルミ系には悪名高い負符号問題が解決できていないという弱点もあります。数値繰り込み群法から派生し発展をとげたテンソルネットワークは、負符号問題がない準厳密な大規模計算手法として近年注目を集めています。QMCにはいまだ難しいダイナミクスを、時間発展演算子のプロジェクトを行うことで追う方法もあります。テンソルネットワークにはさまざまな手法がありますがXiang先生が用いているのはPEPSでした。PEPSはテンソル積の作り方の違いを除いてDMRGやTEBDと基本的には同じ手法

ですが、それらと違い2次元以上への適用が簡単であることがわかりました。この講義を聴き、ますますテンソルネットワークへの関心が高まり、ぜひ自分で手を動かしてコードを書き、みたいと思うようになりました。京都大学の原田健自先生のショートトークでもフェルミ系のテンソルネットワークが取り上げられ、こちらも非常に勉強になりました。

滞在型の研究会で若手の育成と交流を

私自身は物性物理の分野に身を置き、ボーズ粒子系および量子スピン系の格子模型を対象にQMCを用いて平衡状態での統計物理的性質や量子相を調べる研究をしています。量子化学の分野からは比較的遠い研究していますが、講義全体を通し、これまで理解できなかった他の方々の研究を基礎から学べただけでなく、テクニカルな面に関しても理解が深まったと感じています。

余談となりますが、この夏の学校では講義

の間にまとまった休憩時間があったため、開湯1900年という長い歴史をもつ蔵王の温泉街や高原を闊歩しながら、講義で聞いた話を思い出しての砕けたディスカッションもでき、都会(といっても相ですが)の慌ただしさを忘れてのリフレッシュを兼ねた合宿となりました。このような滞在型の研究会があればまたぜひ参加させていただきたいですし、今後も継続することで、若手の育成と分野をまたいだ技術協力がさらに進むことを期待しています。



CMSI第1部会 夏の学校プログラム

■ 8月20日(月)	13:00~13:10	● はじめに(天能精一郎 神戸大学)
	13:10~14:10	● 講義：分子系の電子相関理論の基礎と多参照摂動理論(1) (中野晴之 九州大学)
	15:30~16:30	● 講義：分子系の電子相関理論の基礎と多参照摂動理論(2) (中野晴之 九州大学)
	17:00~18:00	● 講義：電子とプロトンのダイナミクス(1) (安藤耕司 京都大学)

■ 8月21日(火)	09:30~10:30	● 講義：電子とプロトンのダイナミクス(2) (安藤耕司 京都大学)
	11:00~12:00	● 講義：量子化学計算における相対論効果(1) (中嶋隆人 理化学研究所)
	15:00~16:00	● ディスカッション 量子化学計算諸手法の比較と展望
	20:00~21:00	● ショートトーク(量子化学計算・励起状態) 高精度量子化学手法の開発 (大西裕也 神戸大学) 電荷移動状態の量子化学計算 (城野亮太 東京大学)

■ 8月22日(水)	09:30~10:30	● 講義：量子化学計算における相対論効果(2) (中嶋隆人 理化学研究所)
	11:00~12:00	● 講義：強相関電子系の非平衡相転移と非平衡動的平均場理論(1) (岡 隆史 東京大学)
	14:00~17:00	● 自由討論
	20:00~21:00	● ショートトーク(非平衡・強相関電子系) 非平衡輸送・量子測定論・緩和過程 (山田康博 東京大学) 銅酸化物高温超伝導体 (西口和孝 東京大学)

■ 8月23日(木)	09:30~10:30	● 講義：強相関電子系の非平衡相転移と非平衡動的平均場理論(2) (岡 隆史 東京大学)
	11:00~12:00	● 講義：Renormalization of Tensor Network States (1) (Tao Xiang 北京大学)
	15:00~16:00	● 講義：Renormalization of Tensor Network States (2) (Tao Xiang 北京大学)
	20:00~21:00	● ショートトーク(量子多体問題の数値計算手法) テンソルネットワーク変分法 (原田健自 京都大学) 変分モンテカルロ法 (森田悟史 東京大学)

■ 8月24日(金)	09:30~10:30	● 講義：第一原理MDの基礎と応用(1) (森川良忠 大阪大学)
	11:00~12:00	● 講義：第一原理MDの基礎と応用(2) (森川良忠 大阪大学)
	14:00~15:00	● ディスカッション 非平衡の計算科学 一手法と応用最前線・これから探る
	20:00~21:00	● ショートトーク(非平衡・強相関電子系) 低次元強相関電子系の光学応答 (曾田繁利 理化学研究所) 強相関多体電子系 (山地洋平 東京大学)

■ 8月25日(土)	09:30~10:30	● 講義：共鳴Hartree-Fock法を用いた電子と格子の量子揺らぎ(1) (富田憲一 山形大学)
	11:00~12:00	● 講義：共鳴Hartree-Fock法を用いた電子と格子の量子揺らぎ(2) (富田憲一 山形大学)
	13:00~14:00	● ディスカッション 強相関電子系の新しい方法論 (おわりに(今田正俊 東京大学))

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。

- SC12
日程：2012年11月10～16日
場所：Salt Lake City, Utah, USA
- TCCI 第2回 実験化学との連携シンポジウム
日程：2012年11月16～17日
場所：京都大学福井謙一記念研究センター
- 第7回 ACCMS-VO 国際会議
日程：2012年11月23日～25日
場所：仙台、松島(宮城県)
- 第3回 CMSI 研究会
日程：2012年12月3～5日
場所：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
- 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11～14日
場所：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
- TCCI ウィンター・カレッジ-量子化学-
日程：2012年12月17～18日
場所：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター

- 材料科学・MPI 講習会
日程：2012年12月
場所：未定
- 元素戦略構造材料拠点シンポジウム
日程：2013年1月7～9日
場所：京都大学
- 元素戦略理論シンポジウム
日程：2013年1月9～11日
場所：東京大学物性研究所
- 第2回 CMRI 研究会
日程：2013年1月21～22日
場所：東北大学金属材料研究所
- TCCI 第2回産学連携シンポジウム
日程：2013年1月24日
場所：大阪大学中之島センター 佐治敬三メモリアルホール
- 第2回 超並列化技術国際ワークショップ
日程：2013年1月28日
場所：早稲田大学西早稲田キャンパス 55号館N棟1階 大会議室
- 第7回 若手技術交流会
日程：2013年2月中旬
場所：金沢
- CMD*ワークショップ
日程：2013年3月7～8日
場所：ニチイ学館(神戸)

「京」だより

スーパーコンピュータ「京」
2012年9月28日から共用開始

理化学研究所が2006年度から整備を進めてきたスーパーコンピュータ「京(けい)」は、9月28日に共用を開始しました。HPCI戦略プログラム5分野の課題(重点配分枠の優先課題7件、一般配分枠24件)に加え、一般利用枠の課題(2013年度末まで)として62件(一般利用課題29件、若手人材育成課題8件、産業利用課題25件)が選定されています。これらの一般利用枠の課題は、登録施設利用促進機関である高度情報科学技術研究機構(RIST)により中立公正な立場で審査されました。なお、一般利用枠の産業界向けのトライアル・ユースについては、今後も随時、応募を受け付けています。

アプリケーションってなんだろう

CMSIのメンバーは、日々アプリケーションの開発にとりこんでいます。
このアプリケーションとはいったいなんなのでしょう？

ソフトウェアとハードウェア

パソコン本体のような「形あるもの」をハードウェア、そこに搭載されている「形のないもの」をソフトウェアと言います。ソフトウェアは、基本ソフトと応用ソフトに分けることができます。

WindowsやMacといったOSが基本ソ



フトです。

その上で動作するメールソフトやブラウザなど、直接私たちが操作するのが応用ソフト、つまりアプリケーションです。

計算科学分野では、物質の性質を予測したり、複雑な化学反応を解析したりするアプリケーションが開発、利用されています。

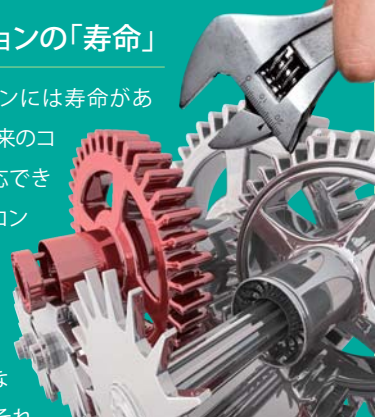
プログラム

ソフトウェアの設計図にあたるのがプログラムです。CMSIのメンバーは毎日プログラムを書いてアプリケーションを作成、改良しています。最先端のコンピュータの性能を引き出すには、たくさんのマシンを協調して動作させる「並列化」の技術や、コンピュータの内部の仕組みがよくわかっていないとできない高度な最適化技術が必要です。「京」のように、大きなコンピュータになるほど「職人芸」が要求されます。



アプリケーションの「寿命」

アプリケーションには寿命があります。例えば、従来のコンピュータには対応できても、新しいコンピュータでは動かなかったり、せつかくの計算能力を活かしきれなかつたりします。それを放置すれば誰にも使われなくなり、やがて存在を忘れられてしまいます。アプリケーションが生き続けるためには、誰かがプログラムを修正しつづけなければなりません。それを一人で続けるのは大変です。プログラムを公開すれば誰かが開発を引き継いでくれるかもしれませんが、プログラムには開発者のノウハウすべてが詰まっています。プログラムを公開するか、公開するならどのような形式(ライセンス)にするかは難しい問題です。
協力：渡辺宙志(東京大学物性研究所)



Torrent No.6 Nov. 2012

2 | CMSIにおけるソフトウェア開発

5 | GAUSSIANはなぜ世界中で使われているのか？
北浦和夫

6 | 第一原理計算の現状と課題を考える
吉本芳英

8 | 計算物質科学分野の公開ソフトウェア

10 | アプリケーション開発の最前線から 第5回
グローバルに展開するアプリケーション
CONQUESTの開発者・Bowlerさんと
宮崎さんに聞く

12 | 卒業生を訪ねて 第2回
研究畑から社会インフラの
システムエンジニアへ
吉見一慶 × 小西優祐

14 | 第1部会
「新量子相・新物質の基礎科学」
夏の学校レポート
正木晶子

15 | CMSIカレンダー／「京」だより
16 | アプリケーションってなんだろう

表紙：紅葉は昼夜の温度差が激しいほど色が鮮やかになるという。研究においても数多くの失敗と成功、切磋琢磨が繰り返され、やがて時が熟し多様な彩りへと変化していく。

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.6, Nov. 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



Computational Materials Science Initiative