

平成 22 年 8 月 30 日

共同発表： 自然科学研究機構 分子科学研究所
国立大学法人 筑波大学

文部科学省の国家プロジェクト

「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築」

自然科学研究機構がナノサイエンス分野での実証に向けて
筑波大学計算科学研究センターの T 2 K 筑波システムを用いて
国内最大級の大規模高並列計算を開始

自然科学研究機構分子科学研究所では、平成 18 年度から開始された次世代スーパーコンピュータの研究開発プロジェクト「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト（現、「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築」プロジェクト）の一環として、ナノサイエンス分野のグランドチャレンジ研究開発課題に取り組んでおり、開発するシミュレーションソフトウェア群による次世代スーパーコンピュータ「京」上での大規模高並列計算の実証を目指しています。その実証の準備として、筑波大学計算科学研究センターの T 2 K 筑波システムを用いて、国内最大級の大規模高並列計算を開始しました。

分子科学研究所では、文部科学省の国家プロジェクトの一つとして平成 18 年度から開始された「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト（現、「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築」プロジェクト）の一環として、ナノサイエンス分野の 3 つのグランドチャレンジ研究開発課題、(1)次世代ナノ情報機能・材料、(2)次世代ナノ生体物質、(3)次世代エネルギーに取り組んでいます（拠点長：平田文男分子科学研究所教授）。開発中の次世代スーパーコンピュータ「京」を分子・物質の計算科学のシミュレーションで最大限に活用できるよう、計算科学理論・方法論の確立と、それらに基づくソフトウェア群「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」の開発を行ってきました。本研究開発は、電子・原子・分子レベルからの精緻な大規模計算にもとづいて、ナノスケールの物質で発現する特有の現象・特性を解明し、予測することを目的としています。すなわち、上記のナノスケールの原子・分子系や電子系などが自己組織化により自発的に形成する構造や、それに基づいて発現される物質のさまざまな機能に対し、分子軌道法、分子動力学法、固体電子論などの計算科学的手法を用いて明らかにしようというものです。これにより、たとえば分子エレクトロニクス素子や新規触媒、創薬、そして新しい原理に基づいた高密度記録材料や光スイッチなど、これまで経験に依存していた次世代ナノ材料設計に対する計算科学的手法の学術基盤を形成します。

今般、上記実証研究の準備として、筑波大学計算科学研究センター（佐藤三久センター長、筑波大学教授）の全面的な協力を得て、T 2 K 筑波システム的全システム (640 ノード (10,240

コア))を用いて、国内最大級の大規模高並列計算を開始しました。第1回目の大規模高並列計算は、平成22年3月上旬に実施されました^(注1)。第2回目の大規模高並列計算は、平成22年8月下旬に実施予定で、以降11月下旬、平成23年2月下旬と計画的な実施を予定しています。

(注1) 平成22年3月9日～12日に、「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」のソフトウェア群の中の、「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ」(開発責任者、押山淳東京大学大学院工学系研究科教授)、「大規模並列量子モンテカルロ法」(開発責任者、藤堂眞治東京大学大学院工学系研究科講師)、「高速量子化学計算ソフト」(開発責任者、永瀬茂分子科学研究所教授、北浦和夫産業技術総合研究所ナノシステム研究部門顧問/京都大学大学院薬学研究科教授)の3つのソフトウェアで実施。

別紙1：ナノサイエンス分野の3つのグランドチャレンジ研究開発課題について

別紙2：次世代スーパーコンピュータ「京」が完成された際に、シミュレートが可能となるグランドチャレンジ課題の一例

別紙3：T2K筑波システムについて

別紙4：「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」の概要について

別紙5：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実施体制について

別紙6：未来に向けたナノ分野グランドチャレンジ課題について

グランドチャレンジ課題の研究内容

本プロジェクトが目指すグランドチャレンジ課題(平成18年度～23年度)

次世代ナノ情報機能・材料

①次世代ナノ複合材料

ナノチューブ等に代表される新規ナノ構造体の設計とそれらナノ構造体の複合による超高集積デバイス開発、材料におけるナノスケール内部組織構造の制御による、高強度の実現と高性能誘電・磁性特性の探索・設計を目指し、その開発基盤となるシミュレーションソフトウェアの研究開発を行う。



東大院理/物性研教授
常行 真司

②次世代ナノ電子材料

量子現象をマクロな世界に引き出すことを目的に、物質やナノ構造での電子物性の研究を行っている。右図に示すように、銅酸化物絶縁体における素励起、スピノン及びホロンの検証とそれらを用いたデバイスの提案、超伝導/強磁性ナノハイブリッド構造による量子現象の解明とそのデバイス機能の構築等が研究課題である。



京大基研教授
遠山 貴己

③次世代ナノ磁性材料

自己組織化を用いた磁性ナノ粒子の作成およびその磁気デバイスとしての応用を目指し、自己組織化の機構と制御法、磁性ナノ微粒子の静的・動的性質の研究を行う。そのために超大規模第一原理計算、弾性論モデル、量子モンテカルロ法、拡張アンサンブル法、厳密対角化法、量子マスター方程式などのソフトウェア開発を行っている。



物性研教授
川島 直輝

次世代ナノ生体物質

ナノスケールの生体物質に対して、自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化や動的なふるまいをシミュレートできる方法論を確立する。これに基づいて、たとえば水中のウイルスカプシド(ウイルスの殻)など、1,000万原子オーダーの全原子大規模分子動力学シミュレーションを実現する。また一方で、たんぱく質の分子認識やドラッグデリバリーのナノプロセスといった精緻なシミュレーション方法の確立も目指していく。



分子研/名大院工教授
岡崎 進

次世代エネルギー

光エネルギーの化学エネルギーへの固定、貯蔵、電気エネルギーへの変換など太陽エネルギーの有効利用に関わる計算科学的理論・方法論およびソフトウェアを開発する。特に、地球上に普遍的に存在する「セルロース」から「エタノール」を生成するための最も有力な方法である「酵素反応」に関わる計算科学的理論・方法論を確立する。



分子研教授
平田 文男

次世代スーパーコンピュータ本体が完成された際に、シミュレートが可能となるグランドチャレンジ課題の一例

次世代ナノ複合材料

ナノスケール電子デバイス

ボトムアップ技術による次世代ナノ電子デバイスの模式図。個々の部品に関する理論研究を統合して、部品を組み上げたシステムとしての性能の研究を可能にする。

次世代ナノ電子材料

(上) 強相関電子を利用した次世代光スイッチ。銅酸化物絶縁体における素励起、スピノン及びホロンの模型図。
 (下) 超伝導 / 強磁性ナノハイブリッド構造を持つ量子コンピュータ素子。

次世代ナノ磁性材料

自己組織化によって形成されるナノ粒子を用いた次世代のナノ磁気デバイスの模式図。ナノ粒子形成とその磁気特性を調べるシミュレーションを目指している。

次世代ナノ生物物質

次世代エネルギー

バイオマス-化学エネルギー転換技術によるバイオエタノール（「セルロース」から「エタノール」）：3D-RISM 理論による蛋白質の選択的イオン認識の計算。酵素反応におけるもっとも本質的なプロセスである「分子認識」問題を解決する見通しを与えた。

(左) T4 ファージ先端の脂質膜貫通の分子動力学シミュレーション。ファージが細菌に感染する最初期に、タンパク質3量体 gp5 が細胞膜を貫通する。
 (右) ドラッグデリバリーのナノプロセスを担うリポソーム。脂質二重層膜で球状の一枚膜を形成し、もっとも単純な細胞モデルでもある。いずれも、自由エネルギーレベルでの全原子分子動力学シミュレーションを目指している。



筑波大学 計算科学研究センター

T2K 筑波システム

「ピーク性能95TFLOPS
ハイエンドスーパーコンピュータシステム」

Appro Xtreme-X3 Supercomputer



筑波大学計算科学研究センター
に新規導入されたスーパーコン
ピュータシステムは理論ピーク
性能 95TFLOPS を有し、648 台の
新規開発 4-way 計算ノードを 4 本
の 4XDDR Infiniband で結合しノード間
通信性能 8GB/ 秒 (単方向) を実現します。

システムの主な仕様

理論ピーク演算性能総和 (計算ノード + ログインノード)95TFLOPS

総主記憶容量 (計算ノード + ログインノード)20TB

大容量磁気ディスク装置のユーザ利用可能領域総和800TB

大容量磁気ディスク装置全体の理論ピークバンド幅16GB/ 秒

大容量磁気ディスク装置がサポートする RAID レベルRAID6

並列処理ネットワークQuad-rail Infiniband Fat-Tree
(フルバイセクションバンド幅)

クラスタ管理ソフトウェアACE (Appro Cluster Engine)

ソフトウェア

RHEL 5 AS/WS、OFED 1.2.5 (Appro カスタム仕様、MVAPICH、OpenSM 等)

Lustre ファイルシステム、PGI CDK、Intel コンパイラ、IMSL ライブラリ

GridEngine、BLCR (Berkeley Lab Checkpoint/Restart)、Gfarm グリッドファイルシステム

利用者管理システム、課金管理システム、遠隔監視システム

	SU1	SU2	SU3	SU4	SU5	SU6	SU7	SU8	SU9	SU10	#Total
#Compute Node	70	70	70	70	8	70	70	70	70	70	638
#Login Node	0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	8
#NFS Node	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	2
#I/O Node	0	0	0	0	22	0	0	0	0	0	22
#Sub-Mgmt Node	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	20
#Management Node	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	2
#Spare Node	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	4
Total Nodes	72	72	72	72	48	72	72	72	72	72	696
Total TFLOPS	10.4TF	10.4TF	10.4TF	10.4TF	1.8TF	10.4TF	10.4TF	10.4TF	10.4TF	10.4TF	95TF

SU とは Sub-Mgmt Node2 台を含む最小単位の構成です



計算ノード 主な仕様

プロセッサ : Quad-Core AMD Opteron プロセッサ
8000 シリーズ 2.3GHz x4

主記憶装置 : 32GB (2GB 667MHz DDR2 DIMM x16)

チップセット : NVIDIA nForce Professional 3600/3050

磁気ディスク : RAID01 500GB

(250GB 7200RPM STAT II ディスクドライブ x4)

InfiniBand I/F : Mellanox MHGH28-XTC ConnectX HCA x4

その他 : GbE x2、BMC/IPMI2.0

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの概要

完成された次世代スーパーコンピュータでシミュレート

次世代ナノ情報機能・材料

次世代ナノ生体物質

次世代エネルギー

グランドチャレンジの3課題

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

- ナノ分野グランドチャレンジをカバー
- ナノ分野計算科学の学術基盤の形成
- 電子・原子・分子から出発した最先端の理論・方法論
- 高度並列化アルゴリズム、ソフトウェア
- 任意のソフトの任意な結合・連成

連携ツール

NANO-IGNITION

GIANT

密結合環境 (仮称)

主な付加機能ソフト

量子マスター方程式	第一原理量子輸送計算	熱力学積分法	溶媒和自由エネルギー計算
厳密対角化	量子伝導シミュレーション	粒子挿入法	二次のMøller-Plesset摂動法
磁気応答関数	非平衡グリーン関数	エネルギー表示法	配置間相互作用法
動的平均場法	スピン流解析	摂動法	非線形分光理論
ループアルゴリズム	マルチカノニカル法	overlapping distribution法	一般化ランジェバンダイナミクス
電子格子系時間発展計算	レプリカ交換法	経路積分法	フラグメント分子軌道法
乱雑速度場法		量子古典混合法	Surface-Hopping法

中核アプリケーション ● 方法論開発・超並列化によりベタフロップス級性能を実現

実空間第一原理 ナノ物質 シミュレータ	動的密度行列 繰り込み群法	大規模並列量子 モンテカルロ法	高並列汎用 分子動力学 シミュレーションソフト	RISM/3D-RISM	高速量子化学計算 ソフト
---------------------------	------------------	--------------------	-------------------------------	--------------	-----------------

責任者：押山 淳
(東大院工)

特徴的な長さスケールが 10nm 以下の素子を利用した次世代エレクトロニクスデバイス開発をめざす。そのため、10 万原子を量子力学的に扱える電子状態計算プログラムと効率的位相空間探索プログラムからなる、第一原理ナノ物質シミュレータを構築する。

責任者：遠山 貴己
(京大基礎物理解研)

電子の強い相関効果に起因する光照射量子現象を解明するため、動的に拡張された密度行列繰り込み群法を用いて低次元強相関電子系の線形および非線形光学応答感受率の並列計算を実行する。また光照射により作られた励起状態の時間発展を同手法で計算し、その緩和過程のシミュレーションを行う。

責任者：藤堂 眞治
(東大院工)

ナノ磁性体や電子系などの量子格子モデルのシミュレーションのためのライブラリとアプリケーションのパッケージ。並列化された量子モンテカルロ法を中心に、他にも厳密対角化法などのアルゴリズムの中から最適なものを選びシミュレーションを実行する。格子構造、相互作用などは XML を用いて柔軟に指定できる。

責任者：岡崎 進
(分子研/名大院工)

任意の分子集合体に対する高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト。長距離力を含めてナノ分野、バイオ分野における分子動力学計算に必要な計算手法のほとんどを備える。NANO-IGNITION と連携。1000万原子系の巨大システムや自由エネルギー計算にも対応する。

責任者：平田 文男
(分子研)

液体の統計力学理論に基づき蛋白質などナノ分子の水和構造や水合自由エネルギーを計算するプログラム。分布関数(相関関数)に関する積分方程式を解くために、フーリエ変換を多用する。そのため、数学ライブラリの高速度フーリエ変換(FFT)を活用する。

責任者：永瀬 茂
(分子研)
北浦 和夫
(産総研/京大院薬)

電子状態を正しく記述するための電子相関を取り込んだ大規模量子化学並列計算を精度高く高速に実行できるようにする。超巨大分子の量子化学計算を実現するために、FMO 法の高速度並列化と分子力学との融合法を開発する。

本プロジェクトで目指すシミュレーションソフトウェア(平成18年度〜23年度)

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア・次世代ナノアプリケーション連携ツール

ナノサイエンス分野の広い領域にまたがった、6本の中核アプリケーションと多数の性格の異なるソフトウェアの集合体。共通基盤的で専門知識を必要としないものと、高度に専門的で開発者と連絡を取り合う必要があるものがある。さらにソフトウェアの連携を補助するためのツールとして NANO-IGNITION※1 や GIANT※2 を含む。連携ツール等を用いたアプリケーションの組み合わせにより、様々なニーズに対応できる。

※1 NANO-IGNITION

多様なソフトウェアを実行する際に入力する初期データを自動的に生成し、指定した形式で出力する。

※2 GIANT、密結合環境 (仮称)

複数アプリケーションによる連成・連携シミュレーションを実現するため、データ形式の変換を行う。

6つの中核アプリケーションと付加機能ソフトを、連携ツール“GIANT”を用いて任意に組み合わせることにより、次世代スーパーコンピュータで機能・性能を発揮できるソフトウェア群

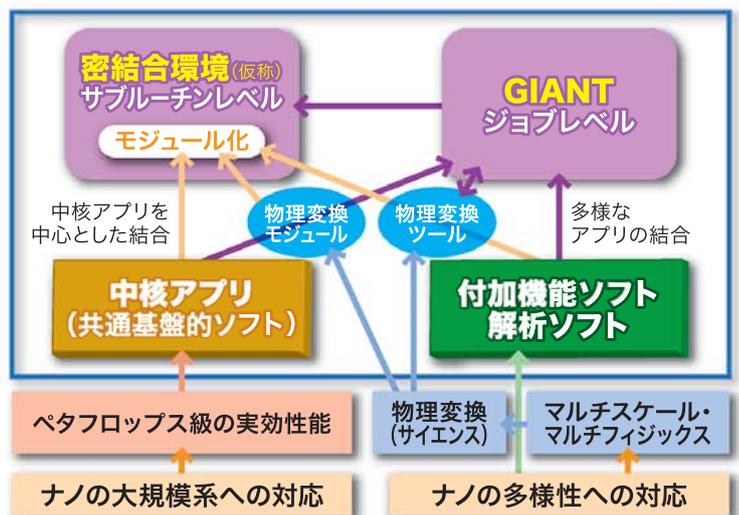
これらを活用

グラントチャレンジ課題を解決する

ナノ統合ソフトウェアの階層性

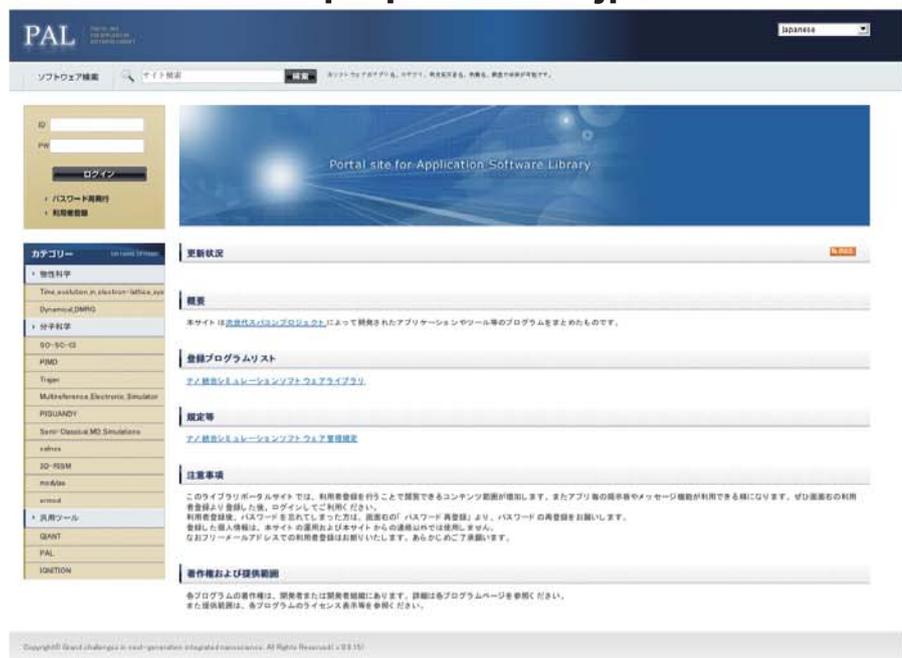


アプリケーション間の連携



ナノ統合アプリケーションポータル『PAL』ソフトウェア情報の公開

<http://pal.ims.ac.jp/>



ナノ統合拠点の体制

名称	略称
分子科学研究所	分子研
理化学研究所	理研
東京大学物性研究所	物性研
東北大学金属材料研究所	金研
物質構造科学研究所	物構研
京都大学化学研究所	化研
産業技術総合研究所	産総研
物質・材料研究機構	物・材機構
日本原子力研究開発機構	原子力機構
豊田中央研究所	豊田中研

拠点長



平田文男(分子研)

副拠点長



常行真司(東大院理/物性研) 岡崎 進(分子研/名大院工)

外部評価委員会

委員長: 魚崎浩平(物・材機構)

開発・実証環境

リーダー: 水谷文保(分子研)

運営委員会

委員長: 大峯 巖(分子研)

統括管理(事務局)

リーダー: 岡崎 進(分子研/名大院工)

次世代ナノ情報機能・材料

リーダー: 常行真司(東大院理/物性研)
 サブリーダー: 遠山貴己(京大基研)、
 常次宏一(物性研)、
 川島直輝(物性研)
 金研、物構研、分子研、東大、名大、日立、
 物性研、阪大、京大、産総研、北大、筑波大、
 物・材機構、原子力機構、北陸先端大

次世代ナノ生体物質

リーダー: 岡崎 進(分子研/名大院工)
 サブリーダー: 北浦和夫(産総研/京大院薬)、
 岡本祐幸(名大院理)
 産総研、名大、京大、分子研、岡山大、
 化研、東レ、東大、金沢大

次世代エネルギー

リーダー: 平田文男(分子研)
 サブリーダー: 永瀬 茂(分子研)、
 松林伸幸(化研)
 分子研、化研、九大、豊田中研、早大、
 慶應大、京大、阪大、東北大、上智大、
 豊橋技科大

次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・アプリケーション実証研究

物性科学WG

主査: 寺倉清之(産総研)

分子科学WG

主査: 榊 茂好(京大/分子研)

産学連携ナノ統合プログラム(公募) リーダー: 高棹 滋(産応協*)

*スーパーコンピューティング技術産業応用協議会: 191 機関(平成22年5月現在)

次世代ナノ統合ソフトウェアWG リーダー: 江原正博(分子研)

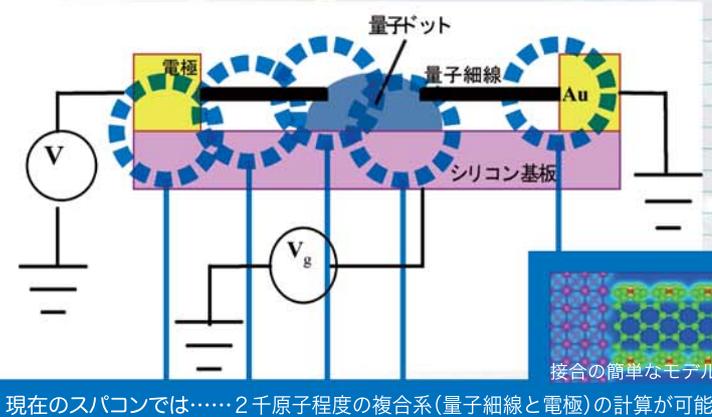
中核アプリケーション高度化WG リーダー: 岡崎 進(分子研/名大院工)

理研・ナノ統合拠点連携WG リーダー: 平田文男(分子研)

未来社会へ向けたナノ分野グランドチャレンジ課題

①高速、高機能、省エネルギー電子デバイスの開発へ…複合的ナノ電子デバイスシミュレーション

部品間の接合の解析が重要な課題。
ナノ電子デバイス全体、10万原子系の電子状態計算が必要。



次世代スパコンでは……

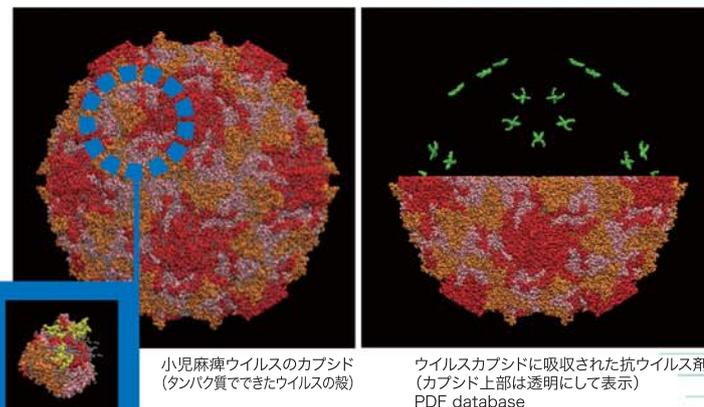
ナノ電子デバイス全体10万原子系の計算が2ヶ月程度で可能(実効性能1ペタフロップス)



電子デバイスの高速応答・高機能、省エネルギー、環境負荷の低減を可能に。新たなデバイス創製に寄与する。

②感染症の克服に向けて …… ウィルス全原子シミュレーション

ウィルス全体1000万原子系の分子動力学計算が必要



次世代スパコンでは……

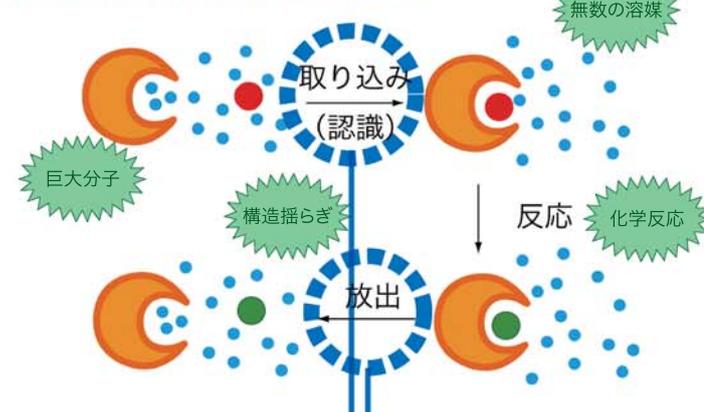
ウィルスと抗ウイルス剤の結合による不活性化、抗体との特異な相互作用の解析を実現。1マイクロ秒の原子の動きをシミュレーションする：3ヶ月(実効性能1ペタフロップス)



未克服のウィルスに対する予防法と治療法の開発、ひいては創薬の効率化に寄与

③セルロースからバイオマスエタノール生成へ …… 酵素反応のまるごと解析

酵素(蛋白質)、水などが絡む複雑な反応



次世代スパコンでは……

より大きなタンパク質の構造揺らぎや化学反応を、より高精度に解析。1度の3D-RISM計算が数秒で可能となり、全体でも1日~十数日で計算出来る。



高効率の触媒・酵素の設計が可能に。