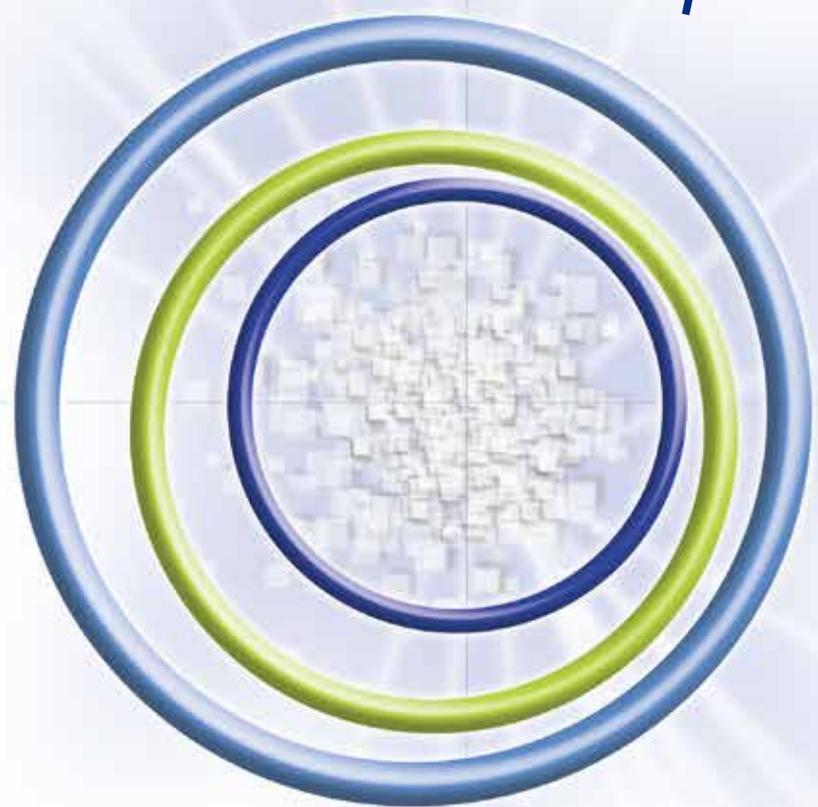


東京大学 物性研究所
スーパーコンピュータ全国共同利用

スパコンが切り拓く

物性物理の最先端



スパコンが切り拓く 物性物理の最先端

物性研究所では1995年よりスーパーコンピュータの全国共同利用を行ってきております。この共同利用は、

- 公正な運用
- 高いアベイラビリティ
- 安定的な計算環境の提供

を特色としています。

物性研スパコン共同利用の最大の特色である公正な運用は、専門家による無報酬のピアレビューによって支えられています。申請は申請書に書かれた研究目的と研究計画に照らして公平に審査されます。審査員の大部分は物性研外の専門家で占められています。審査結果に基づいて申請の採否を決定する我々スーパーコンピュータ共同利用委員会も約半数は物性研外の委員により構成されています。

物性研スパコン共同利用は国内の研究機関の研究員による物性研究を目的とする計画であれば、どなたでも利用申請を行うことができます。申請の機会は年2回(6月と12月)の定期的なB・C・E・Sクラス申請のほか、特に緊急度の高い大規模計算についてはDクラスとして、小規模な試用計算についてはAクラスとして、随時申請を受け付けています。実際の採択率も非常に高い率を維持していますが、特にスパコンでなければ実行できない大規模計算を推進するために、審査員による評価に基づいて充足率には差をつけています。

安定的な計算環境の提供は近年特に重要性が増してきているようです。昨今研究室によってはPCクラスタなどで昔では考えられないほどの計算を実行

できる場合もありますが、大学や諸研究機関の研究費がプロジェクト資金的なものにシフトしている状況では、長期にわたって頼りにできる計算資源を物性物理コミュニティとして確保していることは、大きな意義があるのではないのでしょうか。

物性研では共同利用開始以来、5年サイクルのハードウェア更新をこれまで4度行い、現在は2015年度に運用を開始した5世代目にあたります。また、2010年度から物性研を代表機関として計算物質科学イニシアティブCMSIがスパコン京の戦略プログラム分野2の実施機関として発足し、その活動を支える物性研内の組織として、計算科学センターが2011年度から設置されました。CMSIは2015年度で終了しますが、今後、計算科学センターはポスト京の研究課題を支援していきます。また、スパコン共同利用においてもユーザの利用を支援するため、ソフトウェアの開発、高度化プロジェクトを2015年度に開始しました。これらの活動を通して計算物質科学の研究の発展に貢献していく所存です。

この度、物性研スパコンとその運用状況、計算科学センターをご紹介しますと共に、物性研スパコンを利用してそれぞれの分野に大きなインパクトをもたらす研究成果をあげられた方々にお願ひして、物性研スパコン共同利用に関するこの小冊子を作りました。従来のユーザや将来ユーザになる可能性のある皆様に物性研スパコン全国共同利用の来歴・概要・展望をより知っていただく一助となれば幸いです。

CONTENTS

part 1 新スーパーコンピュータの導入

- 1 新システム導入のねらい
演算加速装置GPGPU搭載・SGI ICE XA/UV
- 2 システムB,Cの性能諸元
GPGPU 移植支援サービス
- 3 物性研究所スーパーコンピュータの歴史
計算機性能と計算物性分野の変遷
- 5 スパコン運用実績データ
分野別課題採択数の推移/スパコン運用実績

part 2 研究ハイライト

- 7 i. 強力永久磁石の量子シミュレーション
産業技術総合研究所 三宅 隆
- 9 ii. シミュレーションで迫る強相関電子系の中の新たな粒子
東京大学 大学院工学系研究科 山地 洋平
- 11 iii. 多重気泡生成現象の全粒子シミュレーション
東京大学 物性研究所 渡辺 宙志

part 3 計算物質科学研究センター

- 13 これまでの活動と今後の展望
計算物質科学研究センター センター長 常行 真司
- 14 MateriAppsの紹介
物質科学シミュレーションのポータルをめざして

part 4 物性研スパコンの活動

- 15 ソフトウェア開発・高度化プロジェクト
- 16 物性研スパコンと主な計算物理



新システム導入のねらい

演算加速装置GPGPU搭載・SGI ICE XA/UV

物性研究所スーパーコンピュータセンター第五期の計算機システムとして、SGI ICE XA/UVが2015年の7月に新たに導入された。総理論演算性能は一桁増強されて2.6PFLOPSとなり、これにより本センターにおいてもペタ・フロップス計算の時代が到来した。本システムはスカラー型の演算器で構成されており、1995年に本研究所に初めてスーパーコンピュータが導入されて以来初めて、ベクトル型あるいは疑似ベクトル型の演算器が姿を消した。これに替わって導入されたのは演算加速装置GPGPUであり、システムの一部に搭載されて稼働している。ベクトルから加速装置への潮流は、計算機科学的には決して目新しいものではないが、計算機のエンドユーザとしての物性研究者にもこの流れが及びつつあるとの判断の下に初めて導入された。これはまた、2000年に第二期のシステムが導入され、物性研ユーザが並列プログラミングに取り組み始めて以来の大きな変化と考えることもできる。その後15年経過して並列プログラミング技術が普及した現在、次なる高速化技術の醸成に踏み出すこととなる。

そもそも、本センターでは500人規模の全国のアカデミック利用者を抱えており、利用者の過半数が自作プログラムを用いて計算を行っているのが特色である。一方で先鋭的な自作プログラムを長期間かけて開発して計算の限界に挑戦

するような研究が行われ、他方で独自の理論をサポートするのに必要な数値計算が行われている。また、既存のパッケージを用いて実験結果の解析やデータベースを作成するような研究も行われている。この状況下では、利用者から寄せられる様々な要求を全て満足できるようなシステムを導入することは不可能である。しかしながら、利用者アンケートの結果からは重要なキーワードが浮かび上がってきている。重要な鍵は、①超大型計算を可能にする先端的な機能、②既存のプログラムが高速かつ安定に動作する計算環境、③できる限り多くの計算時間の提供にある。①に関しては、加速装置のために自作プログラムを改変する労力を厭わない傾向が先端的利用者に広がっており、また、いくつかのパッケージでは加速装置を用いた高速化が進んでいるため、加速装置の導入が時宜を得ていると考えられる。②に関しては、各研究室のPCクラスタで作上げたプログラムを最小の労力で動かせるシステムの導入が必要であり、PCクラスタ環境との親和性の高いシステムの導入が望まれていると考えられる。③に関しては、できるだけ総理論演算性能を高めることが必要であり、多くのCPUを用いたシステム構成が望まれていると考えられる。本システムはこれらの要求を最大限に満たせるように設計されており、物性研究のレベルアップに大きく貢献するものと期待することができる。



*Introduction of
New Supercomputing System*

システム B, C の性能諸元

物性研究所スーパーコンピュータは 2016 年現在、システム B、システム C の 2 つのシステムで構成されている。それぞれのシステムの性能と特性を互いに比較しながら概観してみる。

物性研究所では、汎用的でありながら国内有数の総理論演算性能を有するシステム B (SGI ICE XA/UV)、国内フラッグシップスパコンである京コンピュータと高い互換性を有するシステム C (FUJITSU PRIMEHPC FX10) の 2 つのスーパーコンピュータシステムを共同利用に供している。

2015 年 7 月に稼働を開始したシステム B は、多数の汎用的な計算ノード間を高速なネットワークで接続した高並列スーパーコンピュータである。多様なニーズに応えるため、標準的な構成の CPU ノード、演算加速装置として GPGPU を搭載した ACC ノード、そして大容量メモリを搭載した FAT ノードから構成されており、合計で 2.6 PFLOPS の総理論演算性能を有する。これは、利用分野が特定されたスパコンとしては世界でも最大級の規模であり、2015 年 6 月の世界スーパーコンピュータランキング TOP500 において CPU ノード部は 54 位 (国内 6 位)、ACC ノード部は 88 位 (国内 12 位) にランクインしている。同時に、電力あたりの性能ランキングである Green500 では ACC ノード部が 15 位、CPU ノードが 72 位に認

定されており、本システムがトータルの演算性能、エネルギー消費効率の双方において優れたシステムであることが分かる。CPU ノードと ACC ノードはセルと呼ばれる密閉構造の中に配置されており、セルの中で発生した熱のほぼ全てが、エネルギー効率の高い水冷システムによって冷却されている。通常運用時では、ユーザは 1 つの計算ジョブで CPU ノードを最大 144 ノード (約 140 TFLOPS)、あるいは ACC ノードを最大 72 ノード (約 270 TFLOPS) まで占有して計算を実行できる (2015 年 7 月現在)。これは、2015 年 3 月まで稼働していた旧システム B 全体の理論演算性能 (約 180 TFLOPS) と同程度であり、演算性能や利用技術の進歩の速さが窺える。

一方、2013 年 4 月に稼働を開始したシステム C は、京コンピュータで実行する大規模並列プログラムのチューニングなどを行う場としての役割を果たしている。特徴としては、高いメモリバンド幅/演算性能比、省電力性能、高いスケラビリティなどがあげられる。システム B と同様、水冷システムによって高効率な冷却を行っている。

		システム B			システム C
		CPU ノード	ACC ノード	FAT ノード	
ノード構成	CPU	Xeon E5-2680v3 (12 cores 2.5 GHz) × 2	Xeon E5-2680v3 (12 cores 2.5 GHz) × 2	Xeon E5-4627v3 (10 cores 2.5 GHz) × 4	SPARC64 IXfx (16 cores 1.848 GHz) × 1
	メモリ	128 GB DDR4-2133 SDRAM	128 GB DDR4-2133 SDRAM	1 TB DDR4-2133 SDRAM	32 GB DDR3-1333 SDRAM
	GPU		Tesla K40 (2880 CUDA cores) × 2		
ノード数		1584	288	19	384
理論演算性能/ノード		960 GFLOPS	3820 GFLOPS	1600 GFLOPS	236 GFLOPS
理論メモリバンド幅/ノード		136 GB/s	CPU 部 : 136 GB/s GPU 部 : 576 GB/s	272 GB/s	85 GB/s
ノード間ネットワーク		Infiniband FDR (4X) × 2 (片方向 13.6 GB/s) Enhanced hypercube トポロジー		Infiniband FDR (4X) × 2 (片方向 13.6 GB/s) Fat tree トポロジー	Tofu Interconnect (片方向 5 GB/s) 6 次元メッシュトラス
ファイルシステム		Lustre ファイルシステム /home 157 TB, /work 1137 TB			富士通 FEFS 129.6 TB
総理論演算性能		1.52 PFLOPS	1.10 PFLOPS	30.4 TFLOPS	90.8 TFLOPS
HPL ベンチマーク		1.1783 PFLOPS	0.7774 PFLOPS	N/A	N/A

GPGPU 移植支援サービス

2015 年 7 月に導入された新しいシステム B では、一部のノードに演算加速装置として GPGPU が搭載されています。物性研スパコンが演算加速装置を導入するのは今回が初めてであり、物性コミュニティのユーザが開発、利用中のプログラムの多くが GPGPU に未対応であると思われる。そこで、物性研スパコンを効果的に活用するために、物性研スパコン共同利用の一環として「GPGPU 移植支援サービス」を実施しています。

移植支援サービスの対象は、GPGPU 利用が未対応、もしくは対応が不完全な数値計算プログラムで、GPGPU による十分な加速が見込め、かつ科学的に重要であるものとしています。年に一度の公募により採択された課題について、物性研スパコン導入ベンダーのシステムエンジニア及び物性研スタッフが、申請者の協力の下で、プログラムの解析や GPGPU への移植対応を行います。この移植支援サービスは、1 年につき 5 件の採択課題を上限として、2019 年度まで公募を継続する予定です。詳細な公募情報については、物性研スパコンのウェブページにて公開いたします。ユーザの皆様からの積極的な応募をお待ちしております。

物性研究所スーパーコンピュータの歴史

計算機性能と計算物性分野の変遷

第一期(1995-2000): 物理学における計算機利用が急速に拡大したのは、大型計算機の演算性能が飛躍的に向上した1980年代であろう。ベクトル演算器が導入されると「スーパー」なコンピュータ性能に皆、驚愕を覚えた。その頃から計算機は研究に不可欠な手段として重視されるに至った。それだけに留まらず、計算物理という分野が実験物理と理論物理から独立した新しいカテゴリーを形成して自律的な発展を遂げていく。それに伴って、様々な研究拠点におけるスーパーコンピュータセンターの整備が進み、研究者に計算機資源が手厚く提供されていくこととなった。我が国の計算物性科学においては、海外や他分野の動きに比べて計算機センターの整備に遅れを取り、1980年代後半になると、計算科学としての分野形成の立ち遅れが顕著化してきた。この事態に危機感を感じた当時の研究者は、「物性研究のための大型計算機センター設置ワークショップ」(1987年)を開き、日本学術会議の物理学研究連絡委員会としてスーパーコンピュータ導入に向けた活動を行う(1991年)などの様々な努力を重ね、遂に1995年4月から物性研究所にセンターが発足することとなった。

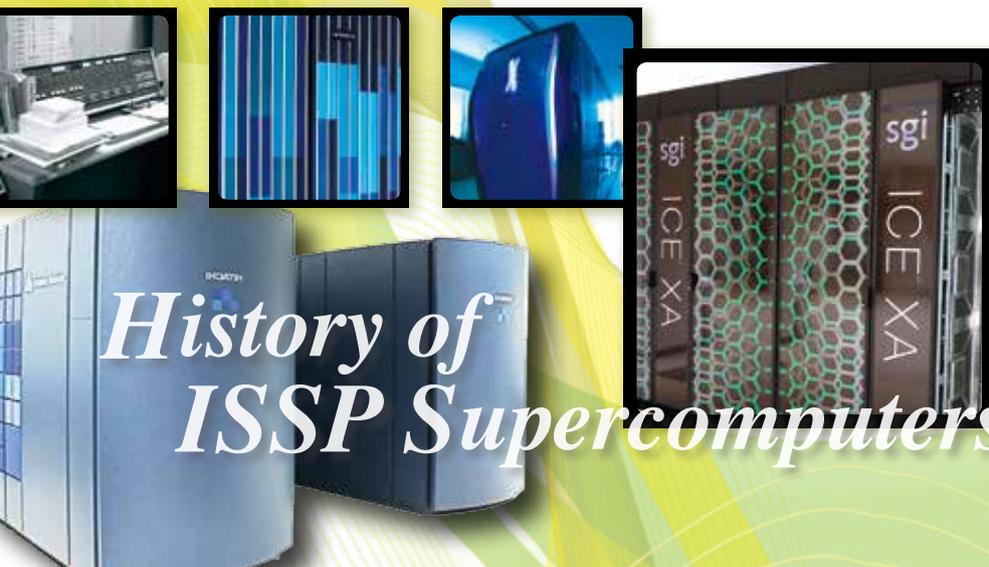
1995年に導入されたのはFUJITSU VPP500/40である。これは航空技術研究所と富士通が共同開発したベクトルパラレル型と呼ばれる新方式のスーパーコンピュータであり、砒素化ガリウムLSIなどを採用することなどにより世界最高速を誇った計算機である。この計算機資源をできるだけ多くの物性研究者に配分し、しかも緊急性や重要度の高い研究課題は重点化するという基本方針を定めて全国共同利用が始まり、それが今日も継承されている。

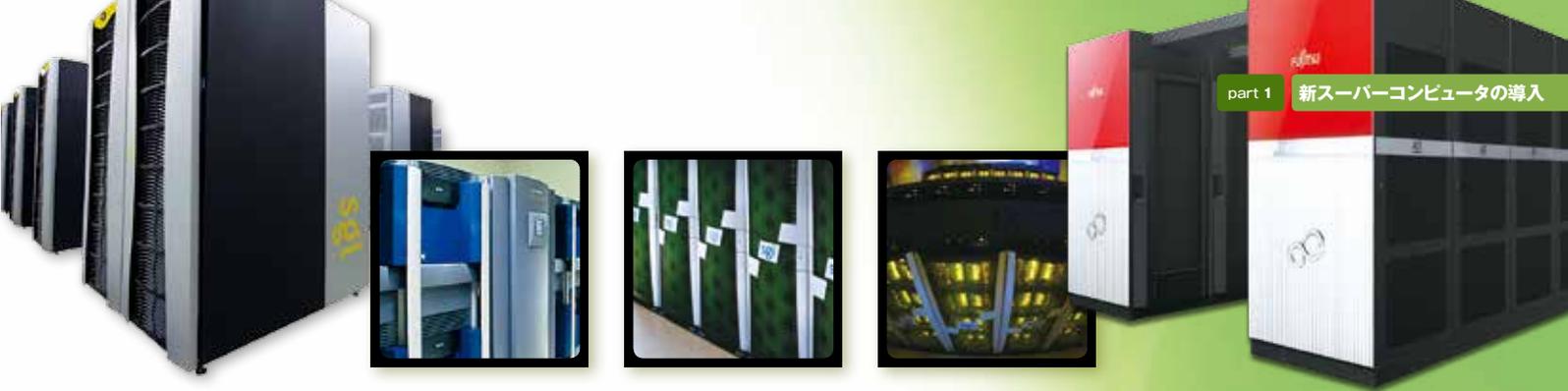
第一期から超大規模計算が積極的に行われ、例えば常行真司氏らは第一原理経路積分法とよばれる方法で結晶珪素中の水素不純物状態を調べる等、専用のスーパーコンピュータでなければなかなか着手できない規模の大型計算を実施した。また独自の計算手法の開発が積極的に進められ、福島孝治氏らの交換モンテカルロ法などが成果として生まれた。

第二期(2000-2005): 第一期システムの導入以降、5年毎にシステムが最新のものに更新されている。さて、初期スーパーコンピュータ導入後に顕著に起こったのは計算機のダウンサイジングである。比較的安価なPC等をネットワークで

接続したクラスタ計算機が飛躍的に高速化を遂げる時期が訪れた。デスクトップスーパーコンピュータという言葉が生まれ、先進的な研究者がそれぞれのグループ単位でその利用を始めた。そのため第二期のシステム(2000~)を導入する際、ベクトルパラレル型の計算機(システムA)だけでは利用者の要求を満たすことができないと判断され、スカラーパラレル型の計算機(システムB)も加えた複合システムを導入することとなった。システムAとして導入されたのは日立製のSR8000/60 model F1で、これはベクトル機として位置づけられるものの、ソフトウェア等で疑似的にベクトル演算を達成させたものであり、CPU技術的にはスカラー計算機と考えることができる。すなわち計算機のスカラー化は、既にこの時に行われたと言える。システムAは第一期に比べて計算ノード数が40から60に増加した結果、より多数の計算を同時に実行することが可能になりユーザ層の拡大に寄与した。システムBとしてはSGI製のOrigin 2800/384が導入された。このスカラーパラレル機は384CPUから成るものであり、これを用いた大規模計算が導入当初から積極的に行われた。例えば2000年度には、藤堂眞治氏のモンテカルロ計算や大槻東巳氏らのスケーリング計算などの大規模計算が行われた。

第三期(2005-2010): 2000年頃はCPU動作周波数の著しい向上が見られた時期であり、その結果特に苦勞して並列プログラミングをしなくても容易に高速化が達成される状況であった。しかもCPUの単価が急激に下がったため、手持ちのPCクラスタだけでもある程度大型計算を行うことが可能になった。その結果、





センターの計算機の演算性能が相対的に低下し(すなわち陳腐化し)、利用者離れの兆候が見られるに至った。そこで第三期(2005～)のシステムBとしては、研究室のPCクラスターで開発した計算プログラムをそのまま物性研の計算機センターで利用できるような計算機環境を提供することが望ましいとの意見が多数寄せられた。しかも計算機の陳腐化を防ぐためにできるだけ多数のCPUから構成される計算機を調達することが必要となった。そうすると問題になるのは設置場所と冷却能力であり、その確保および付帯設備工事が困難になる。そこで共同利用計算機としては初めての試みとして、データセンターに設置してリモートアクセスする方法を取るようになった。

一方、この手のスカラーパラレル機は一般に、CPUの演算性能に対してデータ転送性能が低く、第一原理計算のような通信が多く発生する問題には不向きであった。したがってまだベクトルパラレル機への需要は高かった。そのため第三期においてもシステムA,Bの二種類のハードウェアを導入することとなった。

この状況の下、2005年には疑似ベクトル機であるHitachi SR11000がシステムAとして、Intel Itanium 2で構成されるSGI Altix 3700がシステムBとして導入された。後者の計算機は、スカラーパラレル機の中でもメモリ転送にコストがかけられた高性能機であり、バランスが取れたシステムである。システムBの性能が引き上げられたことは大きな意味があった。これまでシステムAのみ利用してきた研究者(特に第一原理計算)がシステムBもうまく使いこなせるようになり、両システムを併用して計算する人が増加したのである。これは、計算機がシステムB一本

に集約していく布石となった。

第三期は地球シミュレータ活用や京コンピュータ利用準備などが盛んに行われた時期でもある。これらの国策スパコンの導入により並列プログラミング技法の普及が進み、大規模計算を指向する研究者が急増した。それを象徴するのは例えば、押山淳氏らの次世代スーパーコンピュータ用の大規模第一原理計算プログラムRSDFTの開発や、大谷実氏らの物性研スーパーコンピュータや地球シミュレータを用いた反応動力学の大規模応用計算などであろう。

第四期(2010-2015):第三期頃から、徐々にCPUの発熱や電気使用量が増加し、PCクラスターの設置や維持のためのコストが表面化した。そのため、手持ちのPCクラスターで計算するよりもセンター利用を指向する研究者が増加した。実際、徐々にセンター利用者が増加し計算機利用率も高水準を記録し、利用者離れの傾向はもはや過去のこととなった。今回は総使用電力量が増え過ぎて受け入れられるデータセンターの候補がなかなか見つからず、物性研に配置しなければならなくなり、物性研計算機センターの大規模な電源拡張工事を行って計算機調達に望むこととなった。同時に、冷却が空冷では間に合わなくなり水冷装置の導入にも踏み切った。

第四期(2010～)の計算機調達としては、システムBを主柱とする一方、必要最小限の規模のシステムAを導入して高速メモリ転送を必要とする特殊用途に供することとした。導入されたのはNEC SX-9(システムA)およびSGI Altix ICE 8400EX(システムB)である。導入当初は170TFLOPSというトータルのスペック

はかなりのものであり、システムBは使ってもなかなかポイントが減らないと評された。この第四期のシステムの導入当初から大規模計算が盛んに行われた。例えば、中野博生氏はシステムBの過半数のCPUを用いた厳密対角化の計算を行った。また、京コンピュータの練習機としてシステムBが利用され、1000CPUを超えるような大規模計算が頻繁に行われた。

2011年3月11日の東日本大震災に伴う原発事故をきっかけとして電力事情がひっ迫すると、しばらくの間計算機を停止せざるを得なくなり、対抗策として西日本への計算機システムの移設が真剣に議論された。結局移設は行われなかったが、学内の節電の要請に応じて最大半数のノードを停止させて縮退運転が行われるようになった。その後節電の要請は無くなったが電気料が大幅に値上げされ、次期以降の計算機調達のために取り置いてきた予算を崩して電気使用料を支払いながらの運用となった。

2013年4月からは京コンピュータの練習機としてFUJITSU PRIMEHPC FX10がシステムCとして導入された。その一部は戦略枠としてCMSIに提供され計算機資源配分が任せられ、残りが共同利用枠として利用されることとなった。

第五期(2015-):2015年7月よりスカラー並列機SGI ICE XA/UVが導入され、ベクトル並列機が姿を消した。歴史的な経緯から本システムはシステムBとよばれ、その結果システムB,Cによるサービス体制が誕生した。システムBの一部には演算加速装置GPGPUが搭載され、プログラムのさらなる高速化が可能になった。このシステムが更なる計算物性の発展につながるものと期待される。

スパコン運用実績データ

東京大学物性研究所では1995年に初めてスーパーコンピュータが導入されてから現在にいたるまで物性研究コミュニティのための計算資源を安定的かつ継続的に提供している。システムは高い稼働率と利用率を維持しており、関連論文も継続的に出版され続けている。

東京大学物性研究所では、物性研究のための大規模計算資源への要望の高まりに応える形で、1995年に物性研初代スーパーコンピュータ、FUJITSU VPP500/40を導入、運用を開始した。当初から物性研究コミュニティに公正かつ効率的に計算資源を配分するため、計算時間の上限を3種類設定し小さい方から順にクラスA, B, Cを設けた。また、計算物理による物性研究分野において特に重要な課題で、かつ大規模計算を伴うものを重点的に支援するための特別クラスとして、Sクラスが設けてある。これらの課題は年に二回（前期、後期）に申請を受け付けているが、緊急に大きな計算資源を必要とする課題はDクラスとして随時申請を受け付けている。2012年度からは、より大規模な計算をしたいという需要に答えるために、Cクラスを超える定期採択の大型クラスとしてEクラスを設けている。スパコン運用開始当初はクラスA, Bの比較的小規模な課題申請が多かったが、システムが更新される度にクラスC, Eの割合が増え続けている。ここから物性研究コミュニティのユーザが、より大規模な計算を志向していることが窺える。

プロジェクト採択数は年々増加しており、2014年度には200件を超えるプロジェクトが採用された。分野別課題採択数を見ると、各分野から満遍なく課題が採択されていることが分かる。より幅広いユーザに利用していただくため、申請時の分野として実験・データ解析を2005年度に新設した。近年は、専門家以外でも利用できる第一原理計算アプリケーションが整備されたことを反映して、第一原理計算の応用に関連した課題が増加している。

計算機の稼働率は、2000年度以降概ね95%を超えており、これは物性研のシステムが高い安定性を持った、信頼性の高い計算資源であることを示している。2010年度と2011年度に稼働率が低下しているのは、2011年3月に発生した東日本大震災の影響を受けたものである。特に2011年度は、原子力発電所の停止などによる電力不足のため、2011年9月までシステムAは50%、システムBは75%に稼働率を制限して運用を行っていた。

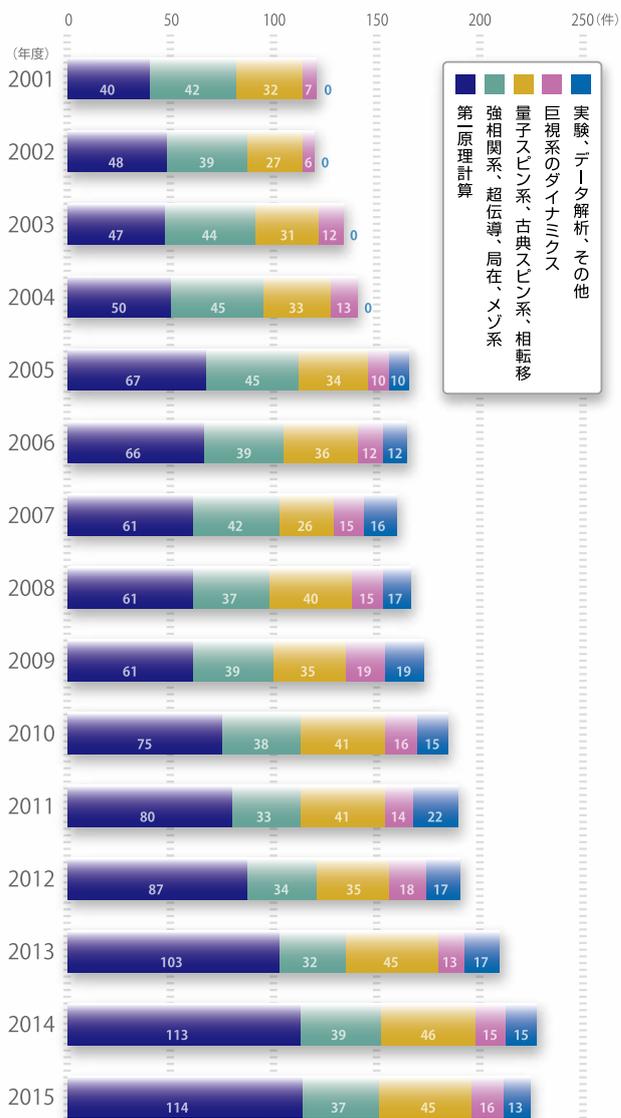
利用率（稼働時間中に計算資源が使われた割合）は、第三期のシステムが導入された2005年から約80%と高い水準を維持しており、計算資源がユーザによって有効に使われていることがわかる。2013年に導入されたシステムCの利用率も順調に伸びてきている。

物性研スパコンは利用者に無料で提供されているため、毎年利用報告書の提出、及びスパコンを利用して得られた成果が論文として出版される際には謝辞に物性研スパコンを利用したこ

との明記を義務づけている。利用報告書は、数編の招待論文と共に Activity Reportとしてまとめられ、毎年発行されている。2013年度からは電子版となり、ウェブ上で誰でも閲覧可能である。関連論文は毎年500編前後出版されており、物性研スパコンが物性研究の発展に大きな貢献をしていることがわかる。

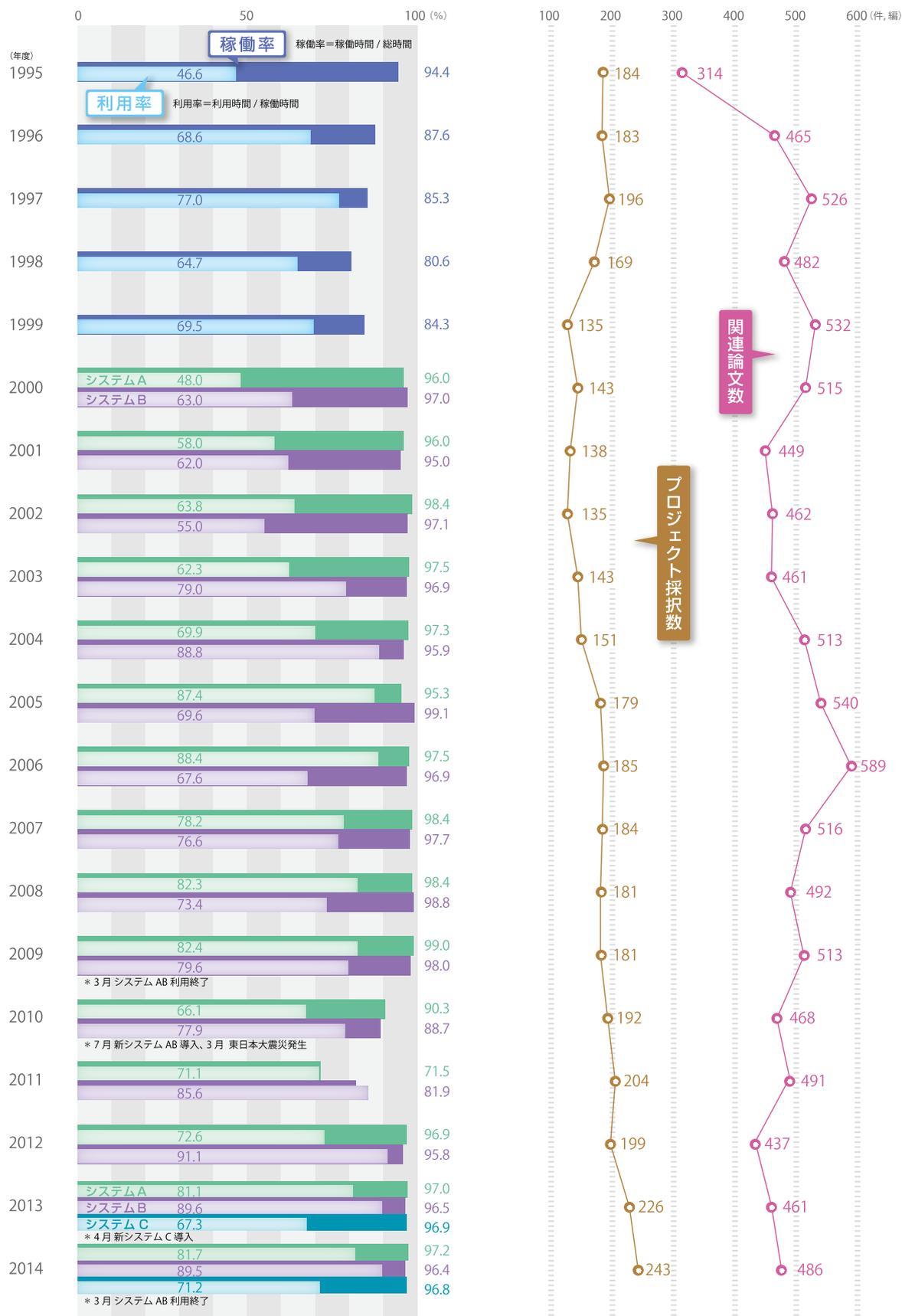
今後も物性研は計算資源を安定的に、かつ使いやすい形で物性研究コミュニティに提供するために努力を続けていく。ユーザの皆様は是非有効に活用し、すばらしい成果を挙げてほしい。

分野別課題採択数の推移



※ 定期採択課題（クラスB, C, E, S）を集計

スパコン運用実績



Quantum simulation of strong permanent magnets

強力永久磁石は、パソコン、エアコン、自動車など私たちの身の回りの様々な製品で使われている。現在の最強磁石は1982年に佐川真人が発明したネオジム磁石で、その性能（最大エネルギー積）は、1917年に本多光太郎が開発したKS鋼の約60倍にも達する。ネオジム磁石の主相は強磁性体のNd₂Fe₁₄Bで、希土類元素であるネオジム（Nd）を含むために希土類磁石に分類される。近年、ハイブリッド車や電気自動車の駆動用モータや風力発電機での使用量が急増しており、強力磁石の世界的な開発競争が繰り広げられている。これに拍車をかけたのが、いわゆるレアアース（希土類）問題である。一般に温度上昇とともに磁石機能は低下するが、ネオジム磁石は温度特性が悪く、自動車の高温動作領域（200°C程度）で必要な保磁力が得られない。そこで耐熱性を上げるためにジスプロシウム（Dy）が添加されている。ところが、重希土類であるDyは希少元素で、資源リスクを抱える。またDy添加で保磁力は改善する一方で、磁石性能は低下する。そのため、Dyを用いない強力磁石の開発が注目されている。

磁石の性能指数である最大エネルギー積 $(BH)_{\max}$ が大きくなる条件として、大きな飽和磁化と大きな保磁力が挙げられる（図1）。保磁力は材料組織にも依存するが、物質固有の結晶磁気異方性と強い正の相関を持つ。飽和磁化、結晶磁気異方性ともに温度の関数で、キュリー温度（強磁性の性質が失われる温度）が温度特性の指標になる。

したがって、高飽和磁化、高結晶磁気異方性、高キュリー温度が永久磁石化合物に求められる条件となる。このうち、磁化を大きくするには、単純には3d遷移金属元素の割合を大きくすればよい。しかし、これだけでは結晶磁気異方性が小さすぎて強力磁石にならない。そこで少量の希土類元素を加えて結晶磁気異方性を増強する。これが希土類磁石の基本的なアイデアである。すなわち、希土類磁石化合物は、遍歴的な3d電子と局在性の強い4f電子が結合した量子多体系で、電子間相互作用や相対論効果の一種であるスピン軌道相互作用により磁石機能が発現する。さらに元素の置換や添加、わずかな格子変形が磁石性能を左右する。ここにスーパーコンピュータを用いた物質の量子シミュレーションが威力を発揮する。現在の第一原理電子状態計算を用いると、広い物質群の構造特性、電子状態、磁気的性質などを、実験値を用いることなく記述することができる。計算手法とソフトウェアは日々発展しており、物性の理解と予言、機能解明、新物質の探索・設計などに利用されている。

私たちは、Nd₂Fe₁₄Bを超える磁石化合物の開発を目指して、NdFe₁₁TiNの第一原理計算を実行した [1]。NdFe₁₁TiNは1991年に報告された磁石化合物である。高い磁石性能を示すものの、Nd₂Fe₁₄Bよりも劣るため、歴史的には半ば忘れられていた。しかし、知られている鉄基希土類合金の中で最も希土類の割合が小さく、周辺

強力永久磁石の 量子シミュレーション

産業技術総合研究所
三宅 隆

物質に高磁化の化合物が見つかる可能性が考えられた。そこでまず、チタン (Ti) と窒素 (N) が磁性に与える影響を詳細に調べた。その結果、Tiを鉄 (Fe) で置換すると、大幅に磁化が増加することがわかった。非磁性のTiを磁性元素のFeに置き換えると磁化が増加するのは自然に思うかもしれない。しかし、その増加量は置換した鉄原子の磁気モーメントよりもはるかに大きく、単純な描像は成立しない。また結晶場理論に基づいた解析の結果、Tiが磁気異方性に与える影響は小さいことがわかった。さらにNにより、磁化が顕著に増加するとともに強い軸異方性が誘起されることも示された (図2)。これらの結果は、NdFe₁₂Nが良い磁石化合物であることを示唆する。この計算と連携して、実験グループによりNdFe₁₂N_x膜が合成された [2]。彼らは、MgO基板の上にタングステン (W) の下地層を積み、その上にNdFe₁₂膜を成長させることに成功した。これを窒化して磁気特

性を測定したところ、室温からキュリー温度に至る広い温度領域で、磁化と異方性磁場のいずれもNd₂Fe₁₄Bを超えることがわかった。実に32年ぶりの記録更新である。

記録更新とはいうものの、永久磁石材料としての実用化に向けては、まだ先は長い。まず薄膜ではなくバルクの安定相を作る必要がある。さらに、実用磁石材料は主相と副相が入り混じった複雑な材料組織をもっている。この材料組織の詳細により保磁力が左右される。特に主相と粒界相の界面の状態が保磁力に影響を及ぼすと考えられているが、その機構は未解明である。保磁力の改善は、これまで手探りで職人技的に行われてきたが、最近ではスーパーコンピュータやSPRING-8、J-PARCなどの最先端の大型研究設備を用いた微視的な解析が始まっている。今後、解明が進むと思われる。一方、Nd₂Fe₁₄BやNdFe₁₂Nをも超える新化合物の提案には、組成を変えた系統的

な計算やそのための結晶構造の決定が重要である。マテリアルズ・インフォマティクス手法を取り込むことが有効と考えられる。また、希土類磁石化合物は、強い電子相関のために電子状態を完全に第一原理的に記述することが困難で、未だに計算手法の開発が発展途上であることも忘れてはならない。ここは物性物理学の領域であり、磁性の定量的理解と概念の創出にむけて物性理論と計算物質科学に対する期待は高い。このように伝統的な物理の手法と材料学の知見、さらに情報科学も活用して磁石研究が進展し、近い将来に新たな強力磁石が発明されることを期待してやまない。

参考文献

- [1] T. Miyake, K. Terakura, Y. Harashima, H. Kino and S. Ishibashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 043702 (2014).
- [2] Y. Hirayama, Y.K. Takahashi, S. Hirose and K. Hono, *Scripta Mater.* **95**, 70 (2015).

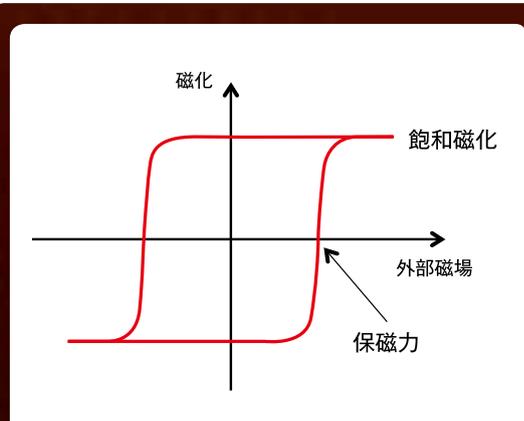


図1 磁化曲線。外部磁場を変化させると、磁化はヒステリシス曲線を描く。磁化と反対方向に外部磁場を加えた時に、ある値で磁化反転が起こる。この磁場の大きさを保磁力とよぶ。

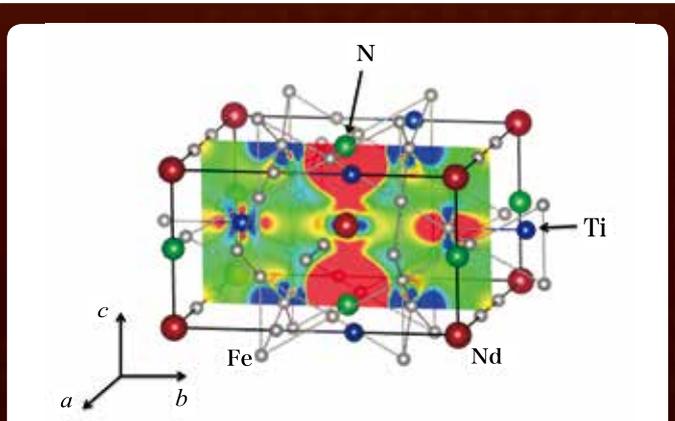


図2 NdFe₁₁TiNの結晶構造と窒化による電子密度の変化 [1]。窒化によりNdとNの間の電子密度が増加する。これを避けるようにNdの4f電子が分布することが強い一軸磁気異方性を誘起する。

Simulating emergent particles in strongly correlated electrons

量子力学に基づいて固体中の電子の振る舞いを理解しようとする営みが、エレクトロニクスの基礎を支えてきた。固体の中では、 1cm^3 あたり 10^{23} 個程度の電子がお互いに影響を及ぼし合いながら運動している。集団中の二つの電子に注目すると、周囲の電子と固体の骨格となる陽イオンの影響を受けながら、お互いのクーロン斥力を感じている。同じく距離の逆二乗に従う引力、重力が支配する太陽系の惑星の運行の複雑さを思うと、電子集団の運動を予測することは、ほとんど不可能に見える。

ところが、低温の金属や半導体では、パウリの排他律と運動量・エネルギー保存則によって電子同士の衝突が強い制限を受けるため、クーロン斥力を無視した場合とよく似た振る舞いを示す。このような振る舞いは、フェルミ液体論と呼ばれる理論として整理され、電子集団の振る舞いを記述する基礎を与えてきた。さらに、一つの電子がその他の電子から受ける影響は、周りの電子が及ぼす相互作用を平均化した、平均場と呼ばれるポテンシャルとして置き換えられ、電子集団の運動は、個々の電子が平均場を感じながら独立に運動しているとして良く近似できる。多くの電子が強く相互作用しているにもかかわらず、シンプルな理論によって金属や半導体の性質を予測できるのだ。

このような従来の理解を広げていくこと、あるいは従来の紙と鉛筆の理論では手が届かないところに、現在の物性物理学のフロンティアが広がっている。フロンティアの開拓には、二つのアプローチがある。

一つは、電子の運動方程式を操ることで

ある。従来の半導体科学においても、固体結晶の中で、電子の運動方程式が変更を受けることを利用してきた。例えば高速に動作する半導体素子では、運動方程式中の質量が真空中よりも見かけ上軽くなり、電場で動かし易くなることを利用している。近年注目を集めているのは、電子が示す磁石のような性質、スピンと、電子の運動方向を結びつける、スピン軌道相互作用に注目するアプローチである。

もう一つのアプローチは、電子の運動エネルギーに比べて斥力が優勢となる、強相関電子系と呼ばれる物質群に着目することである。強相関電子系では、フェルミ液体論や平均場理論による記述に限界がおとずれ絶縁化する場合がある。電子集団の振る舞いを予測することが難しくなると同時に、フェルミ液体論で記述できる金属では起こらなかった興味深い現象が起り始める。遷移金属の酸化物ではとくに絶縁体状態が実現しやすく、電子や正孔を導入することで、銅酸化物における液体窒素温度よりも高温での超伝導が発現している。

強相関電子系ではさらに思いもよらぬ現象が起こることがある。例の一つが、電子の集団運動を『真空』とする新しい粒子の出現である。

これらの新しい現象を予測し、現象の背後にあるメカニズムを解明することが、理論と計算科学の役割となってくる。平均場理論が適用できる場合、 N 電子系の振る舞いを N 個程度の連立方程式に還元できる。工夫によって連立方程式を10個程度までに削減できれば紙と鉛筆で解くことができるが、例えば、 $1\mu\text{m}$ のスケールの不均一な構造を扱うには N を 10^9 程度まで大きくせざるを得ない。また、平均場理論が破綻する場合、相互作用する

N 個の電子の性質は、電子の動きが止まった強相関絶縁体の場合でも、スピンの自由度のすべての組み合わせに対応する 2^N 個に及び非常に多数の連立方程式で記述される。

平均場理論が有効な場合でも $N \sim 10^6$ 程度、平均場理論が破綻する場合には $N \sim 36$ 個程度の電子を考えるだけで、コンピュータのCPUに接続されたメモリに少なくとも1TB ($\sim 10^{12}$ バイト)の情報を記憶しなければ計算を行うことはできない。ハードディスクであれば、家庭用PCでもこの程度のデータを記憶することはできるが、メモリに記憶させ高速に計算を実行しようすると、スーパーコンピュータと呼ばれる大型の計算機がどうしても必要となるのだ。 10^{23} と比べ、ずいぶん小さな N の話をしていると思われるかもしれないが、電子が近視眼的に振舞うことから、この程度の小集団の計算でも固体結晶の性質を予測できる場合がある。

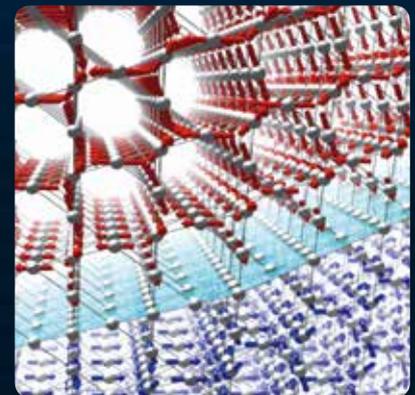


図1 数値シミュレーションによる $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ (R: 希土類元素)の磁壁。赤と青の矢印は、イリジウム原子上の電子のスピンを表している。水色の平面で示されている二色の磁性相の境界、磁壁の上では、磁性相自体は絶縁体であるにも関わらず、2次元の金属状態が現れる。

シミュレーションで迫る 強相関電子系の中の新たな粒子

東京大学 大学院工学系研究科
山地 洋平

筆者らの研究から具体例を紹介したい。2010年代初頭から、スピン軌道相互作用が重要となる貴金属、イリジウムの酸化物において、2つの新しい粒子が発現する可能性が注目を集めている。新しい粒子とは、ニュートリノの性質を説明するために1930年代ごろに考案された相対論的量子力学の運動方程式の解として現れる2種類の粒子、質量を持つことができないうイル粒子と、粒子が同時に反粒子でもあるマヨラナ粒子である。いずれもニュートリノはもちろん、発見されたどの素粒子にも当てはまらないのだが、イリジウムの酸化物の中の素励起が、これら2種類の粒子で記述される可能性が指摘されたのだ。

ワイル粒子は、電子の固体結晶中での運動方程式の変更を通して現れるため、ワイル電子と呼ばれている。イリジウム原子が四面体を頂点でつなぎ合わせたパイロクロアと呼ばれる格子に配置する酸化物 $R_2Ir_2O_7$ (R : 希土類元素)において、電子のスピンが四面体の各頂点から中心へ向かって秩序化した磁性相でワイル電子が現れることが数値シミュレーションによって指摘されている。

しかし、ワイル電子には右巻きと左巻きの2種類が存在し、右巻きと左巻きのワイル電子の組は、あたかも粒子と反粒子のように対消滅してしまうため、固体中で安定に存在するには厳しい条件を満たす必要があることが観測から明らかとなってきた。

ところが $R_2Ir_2O_7$ の磁性相において、磁壁と呼ばれる2種類の磁気秩序の境目を作ると、対消滅の名残が見えることが、計算機の中で磁壁をシミュレーションすることで分かってきた(図1を参照)。均一な磁性相では絶

縁体であるにもかかわらず、磁壁は2次元の金属になることが分かってきたのである。従来の半導体素子では、製造技術を駆使して2つの半導体を張り合わせた界面に、電圧を印加して電子を溜めることで2次元電子系を実現している。ところが、磁壁は磁場によって生成・消滅させることができるため、エレクトロニクス基盤の一つである2次元電子系を実現し制御する全く新しい可能性を与えている。

一方、ノイズに強い量子コンピュータの量子ビットとして、電子スピンの集団からマヨラナ粒子を生み出すために考案された理論モデルが、イリジウム原子が蜂の巣格子を組む物質 Na_2IrO_3 で実現できる可能性が注目を集めている。

残念ながら、 Na_2IrO_3 そのものではマヨラナ粒子を観測することは出来ていないが、現在、研究の最前線では、 Na_2IrO_3 から出発して実際にマヨラナ粒子を作り出すことを目指

している。計算機の中で Na_2IrO_3 を再現し、一体何がマヨラナ粒子の発現を妨げているのか、 Na_2IrO_3 が理論モデルからどの程度ずれているのかを理解しようとしている。結晶固体の結晶構造と構成元素の原子番号から電子の性質を予測する第一原理電子状態計算手法と、 2^N 次元 ($N \sim 32$)のスピン系のシミュレーションを組み合わせることで、実験データを再現し、さらにどのような結晶構造を持つ物質を合成すべきかの方針を予想できるようになってきた(図2を参照)。

近い将来、化学式だけから出発して、化合物の安定性と結晶構造、そして固体中の多体電子の振る舞いまで、計算機の中で検証できるようになるかもしれない。筆者を含む研究者たちは、そのようなゴールへ向かって、スーパーコンピュータを使いこなすための技術向上と数値計算手法の発展に、日々努力している。

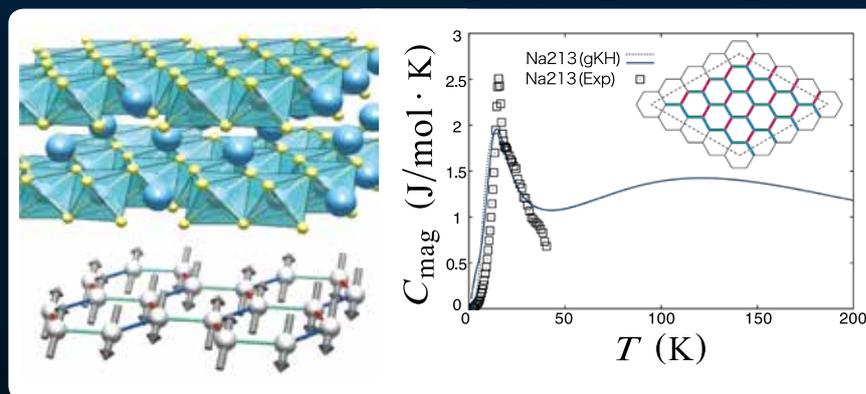


図2 現実の Na_2IrO_3 結晶構造(左上)から、スピン自由度のみ(左下)を抽出し、電子系の温度を 1°C 上げるのに要する熱量、熱容量 C_{mag} を計算した結果(右)。実験結果(□)を32個のスピン($N=32$)に対する数値シミュレーションが40K以下で再現している。

水を加熱すると沸騰して水蒸気となる。この蒸気の圧力を運動エネルギーに変換するのが蒸気機関であり、18世紀頃の産業革命の原動力となると共に、熱機関の原理を理解し、その効率を上げるという必要性から熱力学という学問を発展させることとなった。現在でも我々が利用する電気のほぼ9割は、何らかの熱源により水を沸騰させ、その蒸気でタービンを回すことで作られている。にもかかわらず、加熱された水からどのように気泡が発生し、気泡がどのように相互作用し、さらに流れにどんな影響を与えているのか、その詳細はほとんどわかっておらず、熱機関の設計は経験的事実に頼る部分が多い。これは、ボイラーやタービンの中で起きている現象が強い非平衡状態にあり、かつマイクロな分子間相互作用の結果起きる相転移とマクロな流動が、スケールが何桁も異なりつつもお互いに強く影響を与え合う、典型的なマルチスケール・マルチフィジックスな問題であることによる。このように気相と液相が共存し、お互いに相転移しつつ流れていく系を気液混相流と言う。気液混相流を数値計算課題として見ると、相転移に伴い界面が生成、消滅することが計算を難しくする。さらに界面を通じたエネルギーや運動量といった物理量の輸送係数については経験的に与えるしかなく、シミュレーションの予言能力を強く制限してしまう。

そこで我々は気液混相流を非経験的に扱うべく、全粒子計算の研究を行っている。全粒子計算とは、系を構成する分子を全て陽に扱い、分子間相互作用のみを仮定し、後は分子動力学法 (Molecular Dynamics Method, MD) で力任せに解いてしまうという方法論である。全粒子計算を行えば、相界面は自発的に生成、消滅し、さらにこれまで経験的に与えるほかなかった界面での輸送も考慮しなくて良い。その代償として、マルチスケールな問題を扱うためには、スケールをまたぐのに十分な粒子数を用意する必要があり、必然的に大規模計算が要求される。もともと短距離力相互作用する粒子系のMDは並列計算に向けた手法であり、多くの並列実装がある。それでも1万プロセスを超えた規模で実用的な計算ができるコードの開発は容易ではなかった。さらに大規模計算を行うためには、

MPIを用いたプロセス並列と、OpenMPを用いたスレッド並列の両方を用いるハイブリッド並列化が必須であり、さらにCPUコアの性能を最大限活かすためにはSIMD (Single Instruction Multiple Data) と呼ばれるベクトル命令を十分に活用する必要があった。我々は、スレッドをプロセスのように扱う擬似Flat-MPI法というアルゴリズムを採用することで、スレッド並列とSIMDの階層を分離し、十分な並列化効率と高い実行効率を両立させることができた。並列コードの開発は、当時の物性研システムB (SGI Altix ICE 8400EX) 上でを行い、最大8192プロセスでの動作まで確認した。さらに、京コンピュータ互換のアーキテクチャを持つシステムC (FUJITSU PRIMEHPC FX10) 上でチューニングをすることで、最終的に京コンピュータフルノードでの計算の準備を行った。

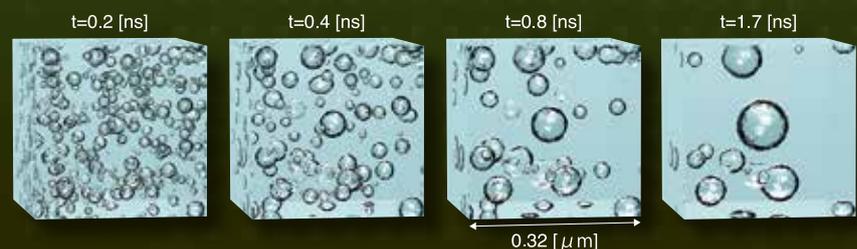


図1 多重気泡生成のMDシミュレーション。減圧直後に気泡が多数生成した後、お互いの相互作用により大きい気泡がより大きく、小さい気泡がより小さくなるオストワルド成長が起きる。可視化は理研の福岡創氏に依る。

多重気泡生成現象の 全粒子シミュレーション

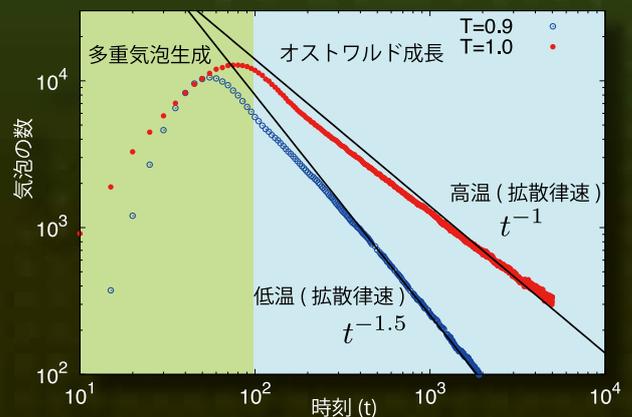
東京大学 物性研究所
渡辺 宙志

我々は気液混相流の全粒子計算に向けた第一歩として、多重気泡生成過程のシミュレーションを行った。炭酸飲料の栓を抜くと、まず多数の気泡があらわれた後、気泡間相互作用により、大きな気泡がより大きく、小さな気泡がより小さくなるオストワルド成長と呼ばれる現象が起きる(図1)。オストワルド成長は一次転移を伴う系において普遍的に見られる現象であり、その理論は1960年代にLifshitz、Slyozov、Wagnerらによって構築されたLSW理論としてまとめられている。しかし、これまで液滴生成や、合金系への適用はあったが、気泡生成で本当に成り立つかは確認されてこなかった。また、準安定領域からの核生成率を予言する古典核生成論が、液滴生成率をよく予言するのに対し、気泡生成率は桁でずれてしまうという問題があり、古典核生成論がLSW理論と多くの仮定を共有していることから、気泡生成におけるオストワルド成長はLSW理論で記述できない可能性もあった。そこで我々は最大で7億3千万粒子の計算を行うことで、気泡数密度分布関数を精度よく測定することに成功した。計算には京コンピュータの4096ノードを24時間用いたジョブを、条件を変えて10本、合計で100万ノード時間が費やされた。このような大規模計算により初めて分布関数を

理論予測と直接比較、検討することが可能となり、気泡生成過程もLSW理論で良く記述できることがわかった。さらに、温度をわずかに変えると系の性質が大きく変わり、気泡の数のべき的振る舞いの指数が変化することがわかった(図2)。これは、低温では界面での蒸発が、高温では拡散がそれぞれ全体のダイナミクスのボトルネックとなっているためと判明した。一般に非平衡過程におけるミクロなダイナミクスは、非平衡カレントが熱運動に紛れてしまうために調べるのが難しい。今回得た結果は、大規模な計算を行うことで、マクロな振る舞いからミクロなダイナミクスの解明に成功したことを意味する。さらに京コンピュータのフルノードを用いて100億粒子規模の大規模計算を行い、多重気泡生成直後に何が起きているか、詳細に調べている。

このように、昨今のスーパーコンピュータの計算能力の向上により、以前は夢物語であった「マルチスケールな問題のミクロレベルからの全粒子計算」が現実的に実現可能となった。少し前のこととなるが、筆者がMDで再現した多重気泡生成のムービーをある研究者に見せたところ「MDで多重気泡生成は無理だと思っていた」と言われたことがある。通常のPCやクラスタではできない規模の計算を行うのもスーパーコンピュータの重要な役割であるが、実はその計算能力が計算物理学者の想像力の限界を決めるという側面も持っている。逆に、アクセス可能な計算資源が大きければ大きいほど、試してみようと思うテーマも幅広くなる。スーパーコンピュータは、単により大きな計算ができる、より早く結果を出せる、というだけでなく、研究者の想像力を広げ、質的に異なる研究を生み出すツールでもある。

図2 総気泡数の時間発展。オストワルド成長をする時間領域において総気泡数はべき的に減衰するが、ミクロなダイナミクスを反映し、その指数は温度によって異なる。



計算物質科学研究センターの これまでの活動と今後の展望



計算物質科学研究センター センター長
(東京大学・大学院理学系研究科/物性研究所 教授)

常行 真司

物性研究所計算物質科学研究センター (CCMS; Center of Computational Materials Science) は、文部科学省の推進する HPCI戦略プログラム(2011-15年度)のため、2011年4月に設置され、5年間の活動を実施してきました。2016年度から新たな活動を開始するにあたり、これまでの総括と今後の展望をお伝えします。

HPCI戦略プログラムの最大の特徴は、超並列計算を駆使した科学・技術の振興のために、物性、分子、材料分野を融合したネットワーク型のコミュニティー「計算物質科学イニシアティブ」(Computational Materials Science Initiative、以下 CMSI) を形成したことです。CMSIは物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所を中核拠点、産業技術総合研究所、物質材料研究機構を産官学連携拠点、東北大学、東京大学、金沢大学、豊橋技術科学大学、総合研究大学院大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、神戸大学を教育拠点とし、さらに個人参加の研究者を加え、中核メンバーは 117名、コミュニティーメンバーは 1,000名を超えました。主催した研究会やシンポジウム等への行事参加者のべ人数は2015年12月時点で11,123名となり、物質科学分野に大きなインパクトを与えています。

研究開発では、世界最先端のスパコン「京」でブレークスルーが期待される「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」「マルチスケール材料科学」の5つの研究領域で、「京」を利用する戦略課題と、関連する3~4の特別支援課題を設けました。各メンバーは物性研、分子研、金研のスパコン20%の計算資源提供や CCMS神戸拠点でのプログラム高度化支援等を受け、超並列計算技術を習得しました。その結果、多くの特別支援課題が「京」の一般利用公募に採択されています。

CMSIが実施した実験家や企業との連携研究会やシンポジウムは、文部科学省の元素戦略プロジェクト<研究拠点形成

型>(2012-21年度)への CMSIメンバーの参画や、実験研究者との共同プロジェクトの受託、企業との共同研究開始や産学のコンソーシアム設置等につながっています。SPRING-8や J-PARC、KEK-PFなどの大型研究施設と実施した連携シンポジウムは、情報共有が進んだことで、具体的な課題の解決策を探る勉強会に発展しています。

人材育成活動としては、全国の若手研究者育成のための計算科学特論の配信講義、最先端の超並列計算技術を学ぶための合宿、ソフトウェア利用促進のための講習会など、様々な企画を実施しました。配信講義の人気サイトへのアクセスは1万件を超えています。また、CMSIで構築し運営している物質科学計算ソフトウェアのポータル MateriApps(右ページ参照)は、ユーザー数が1万人を超えるサイトに育っています。

2016年度からは文部科学省フラグシップ 2020ポスト「京」重点課題プロジェクトが本格実施されます。CCMSは金研とともに、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」を、分子研は重点課題(5)「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」を実施しますが、それぞれの重点課題は分野融合型の研究チームで構成されています。また、CCMSでは物質設計評価室と連携して、2015年度から新たに採択された文部科学省「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業」において「計算物質科学人材育成コンソーシアム」(東北大学(代表機関)、分子研、大阪大学と共同)を立ち上げ、計算物質科学人材のキャリアアップを支援する活動を開始しました。さらに、物質・材料研究機構に2015年度に形成された「情報統合型物質・材料研究拠点(MI²I)」との連携を強化し、情報科学的手法を計算物質科学に導入する試みも始めています。

このように、CCMSでは5年間のHPCI戦略プログラムでの活動を発展させて、物性、分子、材料分野が融合した計算物質科学の振興活動を引き続き推進する体制を整えています。この体制を基礎として、最先端の超並列計算手法の開発・普及をさらに進めるとともに、解析的理論研究者、実験・計測研究者へも活動の幅を広げながら、イノベーションの創出と科学的・社会的価値の創造を目指します。

MateriApps の紹介 ■ 物質科学シミュレーションのポータルをめざして

物性研スーパーコンピュータ共同利用、ナノ統合プロジェクト、HPCI戦略プログラム等を通じて、様々な物質科学アプリケーションが開発されてきました。効率的なアルゴリズム、優れた並列性能、最先端の機能など、これまでにない優れたアプリケーションも数多く生まれています。しかしながら、実験家・企業研究者にその存在が伝わっておらず、主として海外製の公開ソフトウェア・商用ソフトウェアが使われているのが現状です。また、ソフトウェア開発そのもの、あるいはその開発者が十分に評価されているとはいえません。

我々は、物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps[®] (マテリアップス) の整備を通じて、これまであまり知られていなかった国内外で開発された物質科学アプリケーション、あるいは今開発されているアプリケーションを紹介しています。利用者の「やりたいこと」から効率的に検索が行えるよう、アプリケーションは、その計算手法、対象となる物質、興味のある現象・物理量などの視点から多角的に整理されています。また、充実したマニュアル・チュートリアルなど、利用者が気軽に試すことのできる環境を整備し、アプリケーションの魅力、将来性、応用性につ

いて開発者自身の生の声を伝えます。さらには、アプリケーションごとに用意されたフォーラムにより、利用者とアプリケーション開発者が直接情報共有、意見交換を行うことのできる場を育てます。

その一方で、物質科学の公開アプリケーションを使い始めようとする際に、ソフトウェアのインストールそのものが大きな障害となっているのも事実です。物性研のスーパーコンピュータシステムだけでなく、京コンピュータを始めとする国内の主要なスーパーコンピュータへの計算物質科学アプリケーションツールのプレインストールを進めるために、インストールツール MateriApps Installerを整備しています。さらに、物質科学アプリケーション、OS (Debian GNU/Linux)、エディタ、可視化ツールなど、物質科学シミュレーションを始めるのに必要な環境が全て一つのイメージファイルに収められ、USBメモリや仮想マシンからブートするだけで簡単に使用することのできるパッケージソフトウェア MateriApps LIVE!を開発・公開し、講習会などの機会に広く配布しています。MateriApps LIVE!を教材とした物質科学シミュレーションのチュートリアル整備も進んでいます。



物質科学シミュレーションのポータルサイト
MateriApps <http://ma.cms-initiative.jp/>

密度汎関数法 AkaiKKR ☆ OpenMX ☆ xTAPP ☆ ABINIT ☆ ...	量子化学 FMO ☆ SMASH ☆ GAMESS ☆ DC ☆ ...	分子動力学 MODYLAS ☆ Gromacs ☆ ERmod ☆ MDACP ...	格子模型 ALPS ☆ DSQSS ☆ HΦ ☆ DMRG++ ...
連続体シミュレーション ANSYS Multiphysics Octa ...	データ解析 CLUPAN phonopy ...	可視化 fu ☆ TAPIOCA ☆ ...	

MateriApps で取り上げられている主要アプリケーション。2016年1月現在 168 の物質科学アプリケーション・ツールが掲載されている。

※ ☆印は MateriApps Installer/LIVE! 収録 (一部予定) ソフトウェア



物質科学アプリケーションが
収められた USB パッケージ
MateriApps LIVE!



ソフトウェア開発・高度化プロジェクト 開始!!

東京大学物性研究所では、物性研究所共同利用スーパーコンピュータ(以下、物性研スパコン)の一層の普及を目指し、2015年4月からソフトウェア開発・高度化のプロジェクトを開始しました。

ソフトウェア開発・高度化プロジェクトでは、並列計算の高度化・複雑化に対応するため、物性研究分野で特に重要であり、物性研スパコン上での利用が見込まれるプログラムを対象に、その開発または高度化を行います。利用者がより簡便に高度な並列計算を実施できる環境を整備することで、新規現象の予測や実験結果との検証などを迅速に可能とする、ユーザビリティの高い計算機資源の提供を行なっていきたいと考えています。

対象とするプログラムは、毎年物性研究所の公募により募集を行い、共同利用委員会による審査の上、選定します。選定されたプロジェクトは、

- 提案者・提案者の指定する研究協力者
- コーディネータ (物性研教員, 1名)
- プログラム作成者 (物性研専任職員, 2名程度)
- その他物性研スタッフ若干名

の体制のもと、約1年の期間を通しソフトウェアの開発・高度化を行います。

高度化支援では開発だけではなく、付随するドキュメントの整備や普及支援(物性研スパコンへのインストールやウェブページへの掲載など)、物性研スパコンでのテスト計算実施なども行います。実際に高度化した内容はソフトウェア高度化推進チームのウェブページ*等で順次成果報告していく予定です。

また、プロジェクトで高度化されたソフトウェアはオープンソースソフトウェアとして公開することを基本としています。そのため成果物は物性研スパコンに留まらず様々な計算機資源で利用可能であり、本プロジェクトを通した物性物理コミュニティ全体への発展の寄与が期待されます。

* <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/rsayh2/softwea-dev>

プロジェクト体制 (2015年4月開始)

実行メンバー

- コーディネータ (1名 / 物性研スタッフ) + 課題代表・協力者
- プロジェクトマネージャ (デベロッパー兼) (1名) + デベロッパー (1名)

対象ソフトウェア

- 公募で募集。物性研スパコン委員会による審査に基づき、年2件程度採用。
- 最終的にはオープンソースソフトウェア (OSS) として公開→科学・社会への貢献。

課題代表・協力者

〈応募時〉

- ニーズ・目標・作業内容の説明
- OSSとしての公開に対する同意

〈プロジェクト時〉

- 既存コード・実装内容の説明
- テスト協力、マニュアルチェック

ミーティング

ソフトウェア開発・高度化

〈審査時 (物性研スパコン委員会)〉

- ニーズ・将来性・実現性の検討

〈プロジェクト時〉

- スケジュール立案・管理
- 機能設計、コーディング、チューニング
- バージョン管理ソフト導入、マニュアル作成



東京大学 物性研究所
スーパーコンピュータ全国共同利用
スパコンが切り拓く
物性物理の最先端

2016年2月 発行

東京大学 物性研究所
物質設計評価施設/ 計算物質科学研究センター / スーパーコンピュータ共同利用委員会
〒277-8581 千葉県 柏市 柏の葉 5-1-5
TEL 04-7136-3207 URL <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/>

物性研スパコンと主な計算物理

1960-

- 富士通 FACOM 202(PC2)
- 富士通 FACOM 270-30
- 富士通 FACOM 230-48
- 富士通 FACOM M-160F
- 富士通 FACOM M-360
- 富士通 FACOM M-380R
- 富士通 FACOM M-380

-1995.01

1995.01-

- 富士通 VPP500/40
- SGI Origin 2000(24CPU)
- Intel Paragon(66CPU)

-2000.03

2000.03-

- A 日立 SR8000/60 model F1
- B SGI Origin 2800/384

-2005.03

2005.03-

- A 日立 SR11000 model J1/48
- B SGI Altix 3700 Bx2/1280

-2010.03

2010.07-

- A NEC SX-9
- B SGI Altix ICE 8400EX

-2015.03

2013.04-

- C 富士通 PRIMEHPC FX10

2015.07-

- B SGI ICE XA/UV



富士通 FACOM 202 (PC2)

- 金属・イオン結晶のバンド計算
- 量子モンテカルロ法
- 遷移金属中不純物の電子状態計算
- ハバードモデルの数値対角化計算
- ハバードモデルの量子モンテカルロ計算



日立 SR8000/60 model F1

- レプリカ交換法
- スピングラス問題の数値計算による検証
- カーボンナノチューブのエキシトン
- ヘテロダイヤモンド構造 BC₂Nの第一原理計算
- 非平衡緩和法
- 量子モンテカルロ法の並列化
- 経路積分繰り込み法
- 3次元ハイゼンベルクスピングラスモデルの大規模計算
- 数値行列対角化法によるアンダーソン局在のスケール理論の検証
- カーボンナノチューブの電子状態計算
- 確率変動法と2次元クロックモデルへの適用
- 表面への水素原子吸着の第一原理計算



SGI Origin 2800/384

- 2バンドハバードモデルの動的平均場近似計算
- 帯電した表面付近の第一原理分子動力学計算
- 遷移金属化合物での巨大スピンホール効果
- 蛋白質結晶における水和効果の分子動力学計算
- ナノ構造体の密度汎関数計算
- 価数転移の量子臨界点近傍に出現する超伝導
- ジョセフソン接合配列での非線形電気伝導、非線形レオロジー



NEC SX-9

- カゴメ格子ハイゼンベルグ反強磁性体の厳密対角化法による研究
- 高強度パルスレーザー伝播の第一原理計算
- 遷移金属酸化物の第一原理計算
- 電極反応の第一原理シミュレーション
- 鉄系超伝導体の変分モンテカルロ計算
- 並列化マルチワームアルゴリズム
- フラストレート磁性体におけるトポロジカル相転移



SGI ICE XA/UV



富士通 PRIMEHPC FX10



SGI Altix ICE 8400EX

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/>



The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo

東京大学 物性研究所

物質設計評価施設/計算物質科学研究センター / スーパーコンピュータ共同利用委員会

〒277-8581 千葉県 柏市 柏の葉 5-1-5 TEL: 04-7136-3207