

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

スーパーコンピュータによる 計算物性研究の革新と未来



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

The Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo



東京大学 物性研究所 所長
森 初果

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います。この共同利用は、全国の専門家の協力による資源配分と安定的な計算環境の提供を特色としています。

多くの専門家による無報酬のピアレビューは、課題申請者が申請書に書いた研究目的、準備状況、および研究計画に照らして公平に審査されます。審査員のほとんどは物性研外の専門家です。レビューワーからの審査結果に基づいて申請の採否を決定するのは、スーパーコンピュータ共同利用委員会ですが、この委員も約半数は物性研外の委員により構成されています。

物性研スーパーコンピュータ全国共同利用は全国の大学・公的研究機関の教員、研究者であり、物性研究を目的とする計画であれば、課題申請を行うことができます。申請には年2回(通常6月と12月)受け付けている定期的なB・C・E・Sクラス申請があり、このほか、随時受け付けているものとして、特に緊急度の高いと認められるDクラス課題、また小規模な試用計算のためのAクラスがあります。実際の採択率も非常に高い率を維持していますが、特にスーパーコンピュータでなければ実行できない大規模計算を推進する観点から、審査員による評価に基づいて充足率には差をつける運用を行なっています。

安定的な計算環境の提供は重要性が増してきています。昨今、研究室によってはPCクラスタなどでかなり大規模な計算を実行できる場合がありますが、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きている状況では、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には、大きな意義があると考えています。

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5度行っており、このパンフレットが配布されるころには、主力システムであるシステムBの第6世代が稼働している予定です。また、2010年度から物性研は、「京」や「富岳」に代表される国のフラッグシップスーパーコンピュータに関連した事業にも参画してきており、2011年に物性研内に設置された計算科学センターが中心となってその活動を支えています。また、スーパーコンピュータ共同利用においてもユーザの利用をソフトウェアの面から支援するため、ソフトウェア開発・高度化プロジェクトを2015年度に開始し、これまでに9件のソフトウェアをソース公開しています。

この度、物性研全国共同利用スーパーコンピュータとその運用状況、計算物質科学研究センターをご紹介しますと共に、物性研スーパーコンピュータ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いして、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ーパーコンピュータ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。

2021年 3月





part 1 スーパーコンピュータ全国共同利用

- 1 物性研究所の計算科学と物質設計評価施設
- 3 新システム導入のねらい
超大規模並列計算を可能にするDell EMC PowerEdge
- 4 システムB,Cの性能諸元
- 5 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
- 7 スーパーコンピュータ運用実績
分野別課題採択数の推移／スーパーコンピュータ運用実績
- 9 ソフトウェア開発・高度化プロジェクト
- 10 データリポジトリの運用

part 2 研究ハイライト

- 11 i. 環境調和型エネルギー変換材料の量子シミュレーション
金沢大学 ナノマテリアル研究所 石井 史之
- 13 ii. 磁石に潜むマヨラナ粒子
東京大学 大学院工学系研究科 求 幸年
- 15 iii. 分子シミュレーションで迫る高分子材料の破壊プロセス
東京大学 物性研究所 樋口 祐次

part 3 計算物質科学研究センター

- 17 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 尾崎 泰助
- 19 MateriApps — 物質科学シミュレーションのポータルサイト —

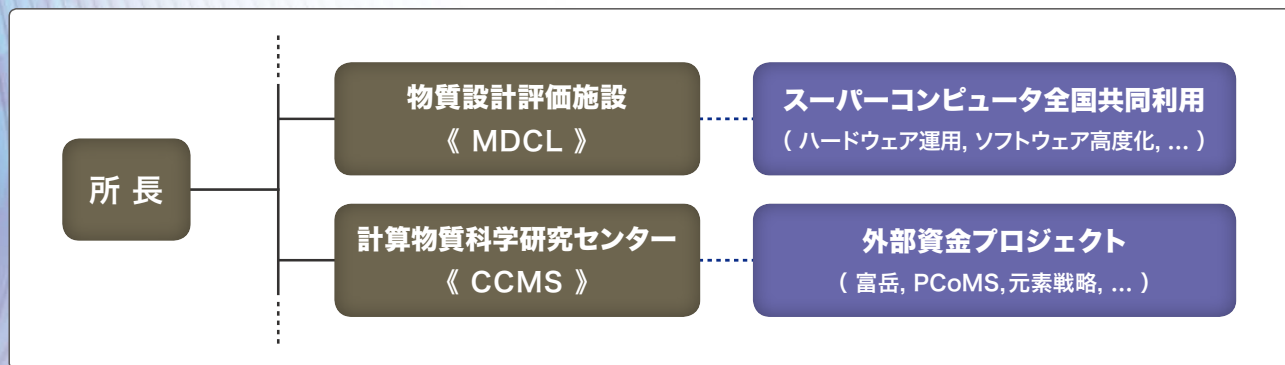


物性研究所の計算科学と 物質設計評価施設

物性研究所では、スーパーコンピュータハードウェアの全国共同利用を始めとして、計算物性科学に関連した様々な事業を行っています。その事業を主に担っているのは、物質設計評価施設(MDCL)と、計算物質科学研究センター(CCMS)の二つの組織です。MDCLでは、様々な実験設備の共同利用の一環として、スーパーコンピュータハードウェアの共同利用を運営していますが、スーパーコンピュー

タはそのなかでも最大規模の設備です。ハードウェアの並列化に伴って大規模計算のなかのソフトウェアの役割の重要性が高まってきており、MDCLでは、ソフトウェアの高度化・開発事業にも力を入れています。

また、人材育成や目的特化型の外部資金によるプロジェクトの受け皿としてCCMSが設立されましたが、そちらについては、p.17～20で別途紹介しています。



システムの変遷

1960.06ー 【所内利用時代】

- 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ー 【全国共同利用の開始】

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

主な計算物理〈主要プロジェクト〉

- 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
- 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

2000.03-

■ 日立 SR8000/60
model F1

2000.03-

■ SGI Origin 2800/384



- 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ガ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

2005.03-

■ 日立 SR11000 model
J1/48

2005.03-

■ SGI Altix 3700 Bx2
/1280

- 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

2010.07-

■ NEC SX-9



2010.07-

■ SGI Altix
ICE 8400EX

2013.04-

■ 富士通 PRIMEHPC
FX10

- 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

2015.07-

■ SGI ICE XA/UV



2018.01-

■ HPE SGI 8600



- 第一原理計算による熱電材料探索
- 大規模並列電子状態計算手法の開発
- 大規模計算とデータ駆動手法による高性能磁性材料の研究
- 高分子材料の破壊プロセスの大規模粗視化分子動力学シミュレーション
- キタエフ模型による量子スピン液体研究
- テンソルネットワーク/ニューラルネットワークを用いた量子多体系の解析

2020.10-

■ Dell EMC
PowerEdge
C6525/R940

新システム導入のねらい

超大規模並列計算を可能にする Dell EMC PowerEdge

物性研究所スーパーコンピュータセンター第六期の計算機システムとして、Dell EMC PowerEdgeを中核とするシステムB (ohtaka)を2020年の8月に導入を開始し、10月より全面稼働した。これにより総理論演算性能は約2.6倍に増強されて6.9PFLOPSとなった。本システムはスカラー型の演算器で構成されており、1995年に本研究所にスーパーコンピュータが導入されて以来初めて、アドバンスト・マイクロ・デバイセズ(AMD)のCPUが採用された。1ノードに2CPU、128コアが搭載されている。これは、前機種の24コアの5.3倍のコア数であり、より高並列の計算が可能となっている。また、大規模メモリを必要とする計算のために3TBのメモリを搭載するFATノードも導入した。これは前機種の3倍のメモリサイズであり、より大規模なシステムの計算が可能となっている。

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、他方で独創的な理論研究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

するような研究や、最近発展している機械学習を用いた物性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、超大型計算を可能とするため、新システムでは、ノード間は高速なネットワークで繋がっている。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。そのため、前機種に搭載されたIntel Xeon CPU同様、親和性の高いAMD CPUを搭載している。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2020年現在、システムB (ohtaka)とシステムC (enaga)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概観してみる。

物性研究所では、国内有数の総理論演算性能を有するシステムB (ohtaka, Dell EMC PowerEdge C6525/R940)とシステムC (enaga, HPE SGI 8600)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。

2018年1月に稼働を開始したシステムC (enaga)は、CPUにIntel Xeonを採用した汎用的な高密度型水冷計算機であり、774TFLOPSの総理論演算性能を有する。1ノードに40コアを含む計算ノードを252ノード有することにより、高並列な計算を可能にしている。計算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冷却は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まかなわれている。

2020年10月に新たに稼働を開始したシステムB(ohtaka)は、約6.9PFLOPSの総理論演算性能をもち、2020年のスパコンTop500では87位となった国内屈指のスーパーコンピュータシステムである。多様なニーズに応えるため、

標準的な構成のCPUノードを1680ノード、大容量メモリを搭載したFatノードを8ノード有した構成となっている。CPUノードには、1ノードに128コアをもつAMD EPYC 7702 (Rome)を採用し、少数ノードでも大規模並列計算が可能となっている。2020年6月まで稼働していた旧システムBが1ノードあたり24コアであったことと比較して、ohtakaではコア数が5倍以上に増大しており、大規模並列計算に適したソフトウェア開発と相まって、これまでにない高いアプリケーション性能を引き出すことが期待される。ユーザは1つの計算ジョブで最大144のCPUノード(～590TFLOPS)を占有して計算を実行することができ、合計18432コアによる超大規模並列計算が実行可能である(2020年10月現在)。これはシステムC(enaga)の総コア数の1.8倍に相当する。また、水冷冷却方式として「Passive Rear Door Cooling Unit」が採用され、CPUで生じた熱をラックの背面にあるコールドプレートにより冷却することにより、電力と冷却のバランスの取れた効率的なシステム運用を可能にしている。

		システム B		システム C
		CPU ノード	FAT ノード	
ノード構成	CPU	AMD EPYC 7702 (64 cores, 2.0GHz) × 2	Intel Xeon Platinum 8280 (28 cores, 2.7GHz) × 4	Intel Xeon 6148 (20 cores, 2.4 GHz) × 2
	メモリ	256 GB DDR4-3200	3 TB DDR4-2933	192 GB DDR4-2666
ノード数		1680	8	252
理論演算性能/ノード		4.096 TFLOPS	9.677 TFLOPS	3.072 TFLOPS
理論メモリバンド幅/ノード		409.6 GB/s	563.136 GB/s	255.936 GB/s
ノード間ネットワーク		Infiniband HDR100 (2X) (片方向 12.5 GB/s) Fat tree トポロジー	Infiniband HDR100 (2X) (片方向 12.5 GB/s) Fat tree トポロジー	Infiniband EDR (4X) × 2 (片方向 12.5 GB/s) Enhanced hypercube トポロジー
ファイルシステム		Lustre ファイルシステム /home 300 TB, /work 2 PB		Lustre ファイルシステム /home 70 TB, /work 430 TB
総理論演算性能		6.88 PFLOPS	77.4 TFLOPS	774 TFLOPS

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。ベクトル演算器を搭載したスーパーコンピュータの高い性能は驚きを持って迎えられた。その頃から計算機が多くの研究者にとって研究に不可欠な手段とみなされるようになり、さらに計算物理という分野が実験物理と理論物理と並ぶ新しいカテゴリーとして発展しはじめた。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、1980年代後半に計算科学としての分野形成の立ち遅れが顕著になってきた。このため物性科学研究者による「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）が開かれ、日本学会の物理学研究連絡委員会によるスーパーコンピュータ導入に向けた活動などを経て、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。最初に導入されたのは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。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。第一期から大規模計算が積極的に行われ、例えば常行真司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規模計算を実

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。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た。デスクトップスパコン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技術的にはスカラ計算機と考えることができる。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、藤堂真治のモンテカルロ計算や大槻東巳らのスケール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。また、CPUの単価が急激に下がったため、研究室のPCクラスタと比較した際のスーパーコンピュータの相対的な優位性が低下した。そこで第三期（2005～）のシステムBとしては、多数のCPUから構成されるスカラパラレル機であってPCクラスタで行われる計算もスムーズに移植可能なものが望まれた。多数のCPUを運用するために設置場所と冷却能力の問題が大きくなったため、物性研としては初めての試みとして、データセンターにスーパーコンピュータを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、高いデータ転送性能が要求される第一原理計算のような計算は、スカラパラレル機ではカバーされなかったためベクトルパラレル機の需要も多く存在した。そのため第三期においてもシステムAのハードウェアを引き続き並行して導入することとなった。こうした背景から、2005年に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のメモリ転送性能が引き上げられたため、両システムを併用して計算するユーザが増加し、主な計算機をシステムBに集約していくことが可能になった。この時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。これらの大型スーパーコンピュータ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。例として、押山淳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、大谷実らによる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がある。



＜・・・ 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クラスタの設置や維持のためのコストが表面化した。そのため、個別研究室レベルのPCクラスタ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た。一方、第四期の調達にあたっては、総使用電力量の面からデータセンターの利用が困難となり、物性研建屋内に配置する必要が生じた。このため、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臨むこととなった。同時に、冷却も空冷から水冷への転換することとした。この結果、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なった。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大きく、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。また、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京コンピュータ戦略課題や元素戦略＜拠点形成型＞など物性研が参画する大型プロジェクトの支援のために提供されることとなった。第四期においては、新システムB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。しかし、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逼迫すると、しばらくの間計算機を停止せざるを得なくなり、

対策として計算機システムの移設が真剣に議論された。結果として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がりし予算的には厳しい運用となった。第四期に行われた特筆すべき計算事例としては、元素戦略に関連して永久磁石のための新素材に関する三宅隆らによる第一原理計算、イリジウム化合物とキタエフスピン液体との関係を明らかにした山地洋平らによるダウンフォールディング計算、渡辺宙志らによる大規模MDシミュレーションによる液体を急減圧した時の気泡発生メカニズムの解明、などがあげられる。

＜・・・ 第五期 2015-2020 ・・・＞

第四期から第五期にかけて、発熱の問題等で性能向上に鈍りが見え始めたCPUに対して、元来グラフィックス用に用いられてきたGPUをグラフィックス以外にも用いる技術であるGPGPUや、シンプルなコアを大量に集積したメニーコアマシンなど、低消費電力で高い性能を持つアクセラレータ付きのスーパーコンピュータが新たなトレンドとなった。しかし、これらの採用は物性研スーパーコンピュータ共同利用にとってはチャレンジングな状況であった。物性研スーパーコンピュータの多くのユーザーが自作アプリケーションで計算を行っている一方で、彼らはプログラミングだけを専門に仕事にしているプログラマーではないため、通常のスカラー並列期からアクセラレータ向けのソフトウェアへの改変や高度化は非常に高い技術的なハードルになるからである。計算物性科学コミュニティに対して使いやすい計算環境を提供することと、計算物性科学における先端的な計算を先導する役割との両立が課題であった。このため、システムBの一部にGPUを搭載しGPGPUの利用も可

能にする一方でCPUのみの使用においても満足すべき性能をだせるようなバランスを持った計算機を導入することとなった。こうして導入されたのが、Intel Xeonと、NVIDIA Tesla K40からなるハイブリッドシステムSGI ICE XA/UVであった。さらに、2018年1月よりシステムBの計算性能を補強するため、システムCとして、スカラー並列機HPE SGI 8600を導入した。このように、第五期の一般的ハードウェアの性能向上は高い並列度やGPGPUなどのアクセラレータなどの導入に依存する部分が大きく、これらを最大限に活用するためのソフトウェアの高度化にかかる人的コストがこれまでになく高いものとなった。これを個々のユーザーが負担するのは従来のアプリケーション開発と比較して格段に大きな困難を伴うため、物性研では、第五世代システムBハードウェアの導入に合わせて、ソフトウェア開発・高度化プロジェクト、およびGPGPUソフトウェア移植サービスの2つの事業を開始した。とくにソフトウェア開発・高度化プロジェクトでは13件の提案に基づいて9件のソフトウェアを開発し、物性研スーパーコンピュータ上での利用に供するとともに、オープンソースコードとして公開した。第五期における代表的な研究例としては、求幸年らによるスピン軌道相互作用系に関する一連の計算、尾崎泰助らが開発した第一原理計算アプリケーション OpenMXを利用した石井史之らによるエネルギー変換材料についての実験家との協力研究、樋口祐次らによる半結晶性ポリマーの粗視化分子動力学シミュレーション、などがあげられる。

スーパーコンピュータ運用実績

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答える形で、1995年に物性研初代スーパーコンピュータを導入、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、計算時間の上限を設定したクラス分けを行っている。現在では小さい方から順にクラスB, C, Eを設けている。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に、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）の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（Dクラス）と、初めての利用者向け課題（Aクラス）は随時申請を受け付けている。

プロジェクト採択数は年々増加しており、システムBが更新される2020年度では300件を超えるプロジェクトが採択された。分野別課題採択数の推移を見ると、第一原理計算分野の採択数が増えている。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いる。2005年度に新設した実験・データ解析や他の分野からの採択数は安定しており、各分野から満遍なく課題が採択されていることがわかる。

計算機の稼働率は、2000年度以降概ね95%を超えており、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。

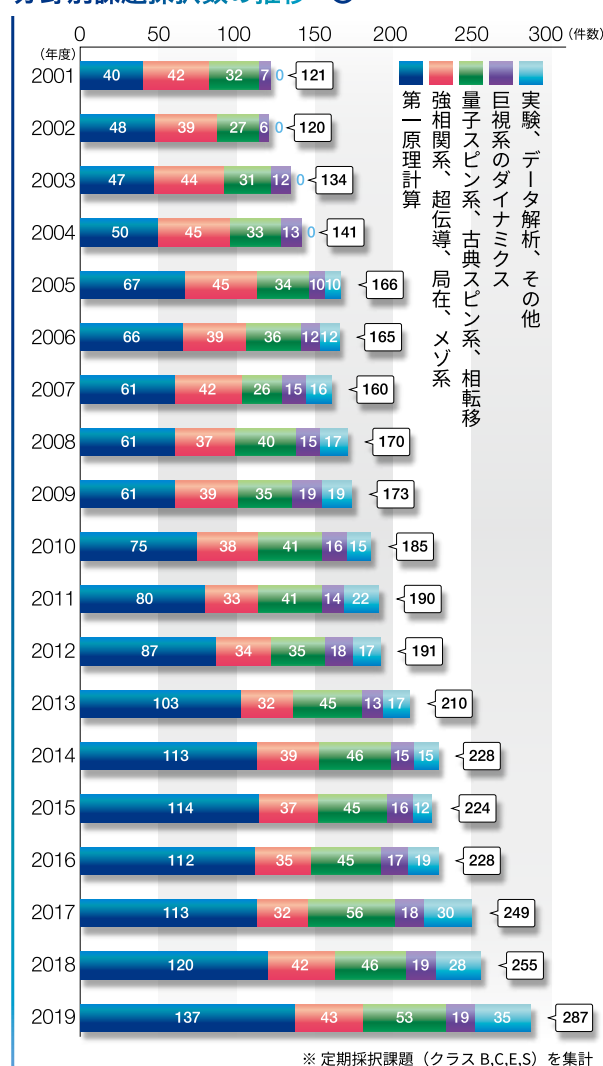
利用率（稼働時間中に計算資源が使われた割合）は、第五期のシステムBが導入された2015年から約90%と高い水準を維持しており、計算資源がユーザによって有効に使われていることがわかる。2018年に導入されたシステムCの利用率も順調に伸びてきている。

物性研スーパーコンピュータ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、及びスーパーコンピュータ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ーパーコンピュータ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。

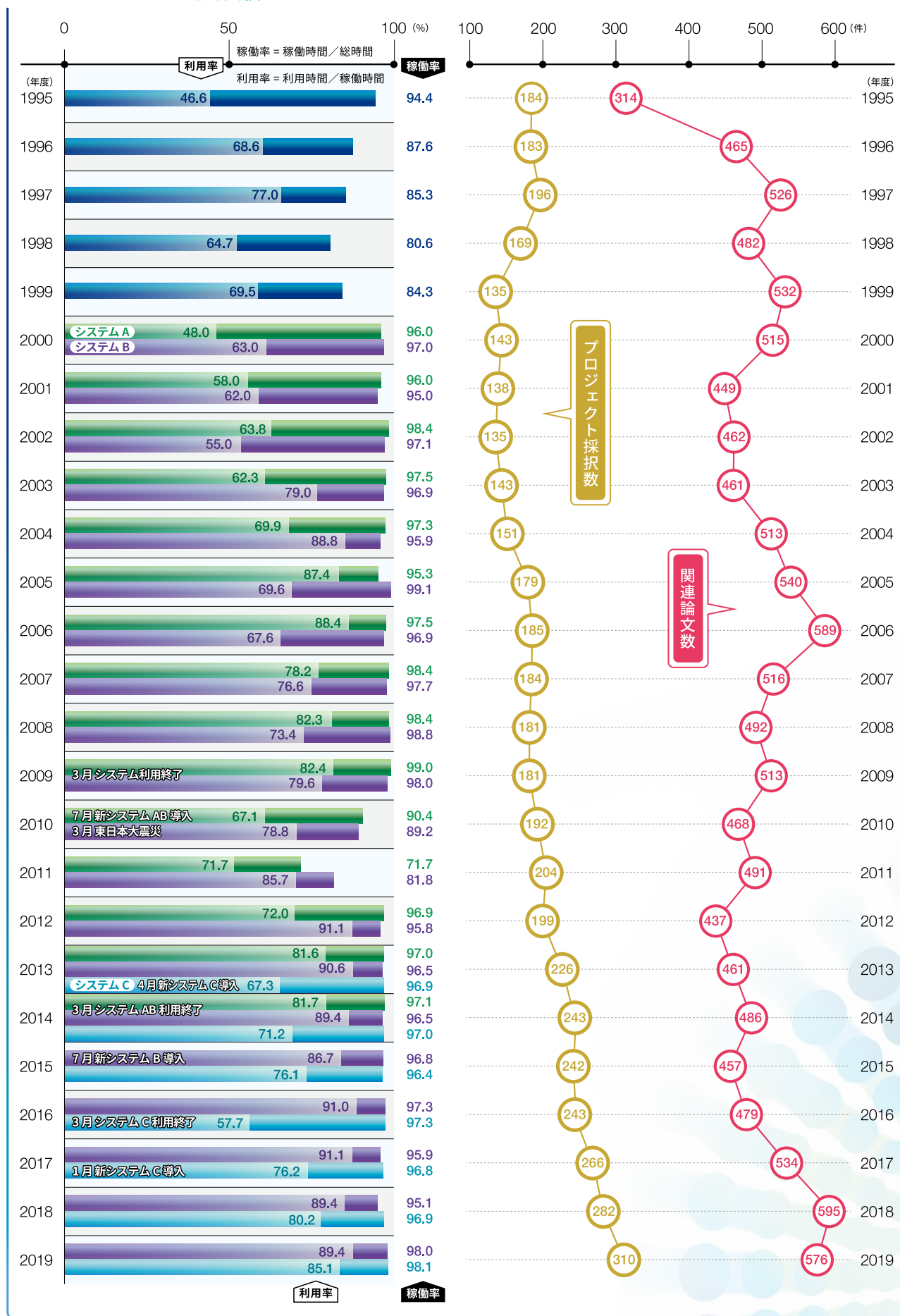
2013年度からは電子版となり、ウェブ上で誰でも閲覧可能である。関連論文は毎年500編前後出版されており、物性研スーパーコンピュータが物性研究の発展に大きな貢献をしていることがわかる。

2015年からソフトウェア開発・高度化プロジェクトを行っており、ユーザがソフトウェアやアプリケーションソフトをスーパーコンピュータで使いやすいように、ソフトウェアの整備を継続的に行っている。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いただきたい。

分野別課題採択数の推移



スーパーコンピュータ運用実績



ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

東京大学物性研究所では、スーパーコンピュータの共同利用（以下、物性研スーパーコンピュータ）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（Project for advancement of software usability in materials science, PASUMS）^[1]を開始している。PASUMSでは、並列計算アルゴリズム、アーキテクチャの高度化・複雑化に対応するため、物性研究分野で特に重要であり、物性研スーパーコンピュータ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う。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、新奇現象の予測や実験結果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目指している。

対象とするプログラムは、毎年物性研究所スーパーコンピュータセンターから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で選定する。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・高度化を行う。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（物性研スーパーコンピュータへのインストールやウェブページへの掲載など）、物性研スーパーコンピュータでのテスト計算なども実施する。プロジェクト終了後は、ハンズオン講習会の開催やソフトウェア論文の執筆などの支援を行い、ソフトウェアの普及にも取り組む。

なお、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る。そのため、成果物は物性研スーパーコンピュータ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じ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る。

2015年度から2019年度まで、10件の課題が採択されている（下表）^[2]。これまで結晶構造から電子状態を計算することが可能な第一原理計算に関連したソフトウェア、第一原理計算により得られた電子状態をもとに複雑な電子の絡み合いを表現できる有効模型を構築するためのソフトウェア、そして得られた有効模型を解析するソフトウェアの開発・高度化が行われてきた。これらは、関連するソフトウェアとともに、物性研スーパーコンピュータへのプリインストールがされている。これにより結晶構造を出発点にした現実的な模型の高精度解析を、物性研スーパーコンピュータ上でシームレスに実施することが可能となった。また、近年では物質科学の課題解決へのアプローチとして、理論科学、実験科学、計算科学に加え、データ科学が盛んに活用されている。こうした背景もあり、2020年度では機械学習の一つであるベイズ最適化パッケージCOMBOの高度化や、実験データの高精度かつ高速な解析を行うためのツールの開発といった、新しい種類の提案が採択・実施されている。このように、最新の物性科学分野のニーズを汲み取ったユーザビリティの高い計算機資源・環境の提供、その実現に向け日々取り組んでいる。

[1] <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp>

[2] <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/list>

ソフトウェア開発・高度化採択課題一覧

年度	提案者	課題申請時の所属	プログラム名
H.27	尾崎泰助	東京大学 物性研究所	第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の高度化
H.27	山地洋平	東京大学大学院 工学系研究科	高並列汎用量子格子模型ソルバー・パッケージの整備・公開
H.28	星健夫	鳥取大学大学院 工学研究科	シフト型クリロフ理論を中核とした物性計算むけ大行列数値ソルバー
H.28	三澤貴宏	東京大学 物性研究所	汎用多変数変分モンテカルロ法の整備・公開
H.29	品岡寛	埼玉大学 理学部	動的平均場近似に基づく第一原理計算パッケージの高度化
H.29	山地洋平	東京大学大学院 工学系研究科	理論・実験・データ科学の融合を目指した量子格子模型シミュレータの開発
H.30	中村和磨	九州工業大学大学院 工学研究院	第一原理有効模型導出プログラムRESPACK と模型解析プログラムHΦ/mVMCの融合による非経験的強相関電子構造解析ソフトウェアの整備
H.30	正木晶子	理化学研究所	非自明並列を実装した量子モンテカルロソルバーDSQSSの高度化
H.31	笠松秀輔	山形大学理学部	拡張アンサンブル法・第一原理計算結合フレームワークの高度化
H.31	川島直輝	東京大学物性研究所	テンソルネットワークによる量子格子系ソルバ
R.2	田村亮	物質・材料研究機構	ベイズ最適化パッケージCOMBO
R.2	藤堂眞治	東京大学大学院 理学系研究科	MateriApps Installer - オープンソースソフトウェアインストールツール
R.2	星健夫	鳥取大学大学院 工学研究科	二次元物質構造解析向け実験データ解析の高度化

* 開発したソフトウェアは物性研スーパーコンピュータにプリインストールが行われます。

持続可能な社会を実現するため、環境と調和したエネルギー利用の重要性が急速に高まっている。身近家電や自動車などから排出される、棄てる「熱」：廃熱を回収して電気として再利用する熱発電や、太陽エネルギーによる太陽光発電の幅広い活用に期待が集まっている。物性物理学分野では、高効率なエネルギー変換材料の探索・デザインと創製や、新しいエネルギー変換機構の提案と実現が重要な研究テーマになっている。以下では最近の我々の研究から関連する二つの取り組みについて紹介する。

最初に、排熱から電気を創ることへ応用が期待される、高い熱電変換現象を示す磁気物質の研究についてである。熱電変換効率を高める試みの中で、物体に熱を与えて

生じた温度差により起こる熱の流れ・電子の流れの方向に電圧が生じる「ゼーベック効果」が多く研究されてきた。これとは異なる熱電効果に、温度差によって起こる熱の流れ・電子の流れの方向と垂直に電圧が生じる「ネルンスト効果」がある。通常の「ネルンスト効果」は磁場下で生ずるが、外から磁場をかける代わりに磁性体の電子スピンの生み出す「仮想磁場」が引き起こす「異常ネルンスト効果」が近年注目されている。この「仮想磁場」は物質の波動関数の曲率（ベリー曲率と呼ばれる）に起因しており、近年のトポロジカル絶縁体などの研究でも電子の状態（波動関数）を特徴付ける新たな量として重要となっている。

我々は実験グループと共同で鉄にアルミやガリウムを添加した材料で鉄単体より20

倍の異常ネルンスト効果の増大を発見するとともに、薄膜でも性能を維持し、室温・ゼロ磁場で世界最高の異常ネルンスト効果を実現した。そしてその起源として、ベリー曲率を大きくすることが知られている電子の特徴である「ノーダルライン」が複雑に蜘蛛の巣の様に絡み合った「ノーダルウェブ」と名付けたトポロジカルな電子構造を明らかにした。図1に実験による異常ネルンスト電圧の測定結果、理論計算による鉄系材料 Fe_3Ga の電子構造におけるノーダルウェブ、その周辺の高い仮想磁場（ベリー曲率）を示した。異常ネルンスト電圧はこれまで発見されている最大値にせまるものであるが、熱発電に応用するにはまだ小さく、このノーダルウェブを活用した高い熱電変換効率を示す新しい物質の発見が待たれる。

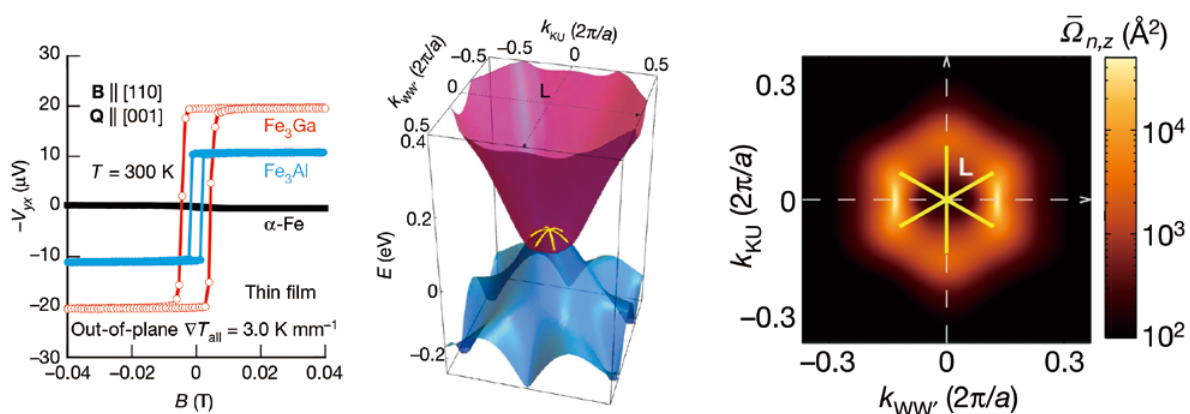


図1 鉄系材料における磁気熱電効果とその起源[1]。異常ネルンスト電圧の磁場依存性（左）とそのゼロ磁場での起源と考えられているノーダルウェブを形成するバンド構造（中）、ノーダルウェブ周辺の仮想磁場（ベリー曲率）の分布。

環境調和型エネルギー変換材料の 量子シミュレーション

金沢大学 ナノマテリアル研究所
石井 史之



次に、太陽エネルギーによる太陽光発電と関連する「光誘起スピン流—電流変換現象」に関する研究について紹介する。電子の持つ磁石としての性質であるスピンの流れをスピン流と呼び、電子の電荷の流れである電流と同様に、エレクトロニクスへの応用が期待されている。特に、既存の電子デバイスへ応用するためには、スピン流を電流に変換する必要がある。これはスピン流を活用したエネルギー変換材料においても同様である。例えば、温度差によってスピン流が生ずるスピンゼーベック効果から電力を取り出すためには、スピン流を電流に変換する必要がある。

スピン流と電流の相互変換には物質中の電子が原子核近傍で光速に近づく速いスピードで運動する際に生ずる相対論的効

果であるスピン軌道相互作用の電子構造への影響が重要となる。スピン軌道相互作用による電子構造への影響は二つの異なる物質を接合した界面で大きくなることが明らかにになっている。我々は実験グループと共同で貴金属とスピン軌道相互作用が大きなピスマス元素を含むBi酸化物 Bi_2O_3 の界面で、円偏光を照射することでスピン流を生み出すことが可能であること、そしてその生じたスピン流を電流に変換することが可能であることを明らかにした。図2に界面における光で誘起されるスピン流の模式図、銅/Bi酸化物の界面における電荷分布、スピン軌道相互作用によって生じたRashba効果と呼ばれる現象による電子構造のエネルギー分裂を示した。自然光を円偏光へ変換する等、さらに研究をすすめる

必要があるが、この現象の太陽電池高効率化への応用が期待される。

以上の2つの研究で明らかにされた環境調和型エネルギー変換材料に関する研究は、身の回りの微小エネルギーから“その場で”自給自足で電気を創る「エネルギーハーベスティング」技術として、IoT (Internet of Things: モノのインターネット) への応用へ向けても有望であり、今後のさらなる研究の進展が望まれる。

参考文献

- [1] A. Sakai, S. Minami, T. Koretsune, T. Chen, T. Higo, Y. Wang, T. Nomoto, M. Hirayama, S. Miwa, D. Nishio-Hamane, F. Ishii, R. Arita and S. Nakatsuji, *Nature* **581**, 53 (2020).
- [2] J. Puebla, F. Auvray, N. Yamaguchi, M. Xu, S.Z. Bisri, Y. Iwasa, F. Ishii, and Y. Otani, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 256401(2019).

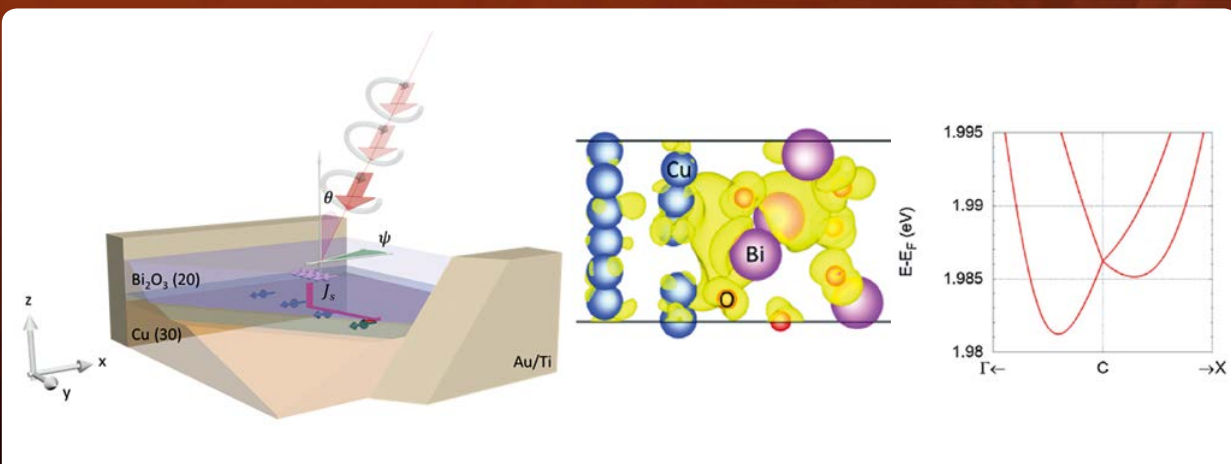


図2 酸化物/貴金属界面 ($\text{Bi}_2\text{O}_3/\text{Cu}$) における光誘起スピン電流 [2]。光で誘起されるスピン流の模式図 (左) と計算された電子状態密度分布 (中) と Rashba 効果によるエネルギー分裂 (右)。

Majorana particles in magnets

人類が磁石と出会ったのは古代ギリシアとされる。以来数千年にわたって磁石は人類社会の発展に貢献し、現代では電子機器や情報・通信はいうまでもなく、医療や都市基盤、交通・物流に至るまで我々の生活を根底から支えている。にもかかわらず、人類が磁石の示す性質（磁性）を本質的に理解するには、20世紀初頭に発見された量子力学を待つ必要があった。これは、磁性の理解には古典的な電磁気学では不十分で、物質中を運動する電子が示す量子力学的な性質が不可欠であったためである。すなわち、磁性とは室温で現れる量子現象なのだ。

磁性のもととなるのは、電子のスピンに由来したミクロな磁気モーメントである。物質中にアボガド数程度存在するこの磁気モーメントが、量子力学的に生じる相互作用を通じて互いの向きを揃えることで磁性が発現する。この描像に基づいて、強磁性や反強磁性、らせん磁性といった多彩な現象が理解されてきた。ところが、1973年にP. W. Andersonは、これらとは全く異なる量子状態の可能性を示した。そこでは、磁気モーメントが互いに強く相互作用しながらも、向きを揃えることなく乱雑なままにとどまるとされる。これは、磁気モーメント同士がドロドロと量子力学的に絡み合った「液体」的な状態と見ることができる。このことから、この新しい量子状態は量子スピン液体と呼ばれる。このような状態が実現しうかどうかは、物性物理学における大問題として半世紀にわたって研究されてきた。

21世紀に入って、この量子スピン液体研究に大きな転機が訪れている。これは、2006年のA. KitaevによるKitaev模型の提案に端を発する。Kitaev模型とは、2次元蜂の巣格子上に配列した磁気モーメントの間に、3種類のボンドに沿って異なる相互作用が働くモデルである（図1）。この模型が大きなブレイクスルーをもたらした要因は2つある。一つは、この模型が、絶対零度において量子スピン液体を実現することが厳密に示されたことである。この量子スピン液体では、特筆すべき性質として、電子のスピンが「分裂」し、マヨラナ粒子が現れる。マヨラナ粒子とは、自身とその反粒子が等価という奇妙な性質を持つ粒子で、1937年にE. Majoranaによって理論的に予言されて以来、素粒子物理学の分野において長年追いつめられてきた幻の素粒子である。Kitaev模型は、この幻の素粒子が磁石の中に潜んでいる可能性を示したことになる。もう一つの要因は、この

模型が、ある種の物質群の良いモデルとなることが指摘されたことである。これにより、現実の物質中に量子スピン液体とマヨラナ粒子を実現できる可能性が急速に浮上してきた。これらを通じて理論と実験の協働という世界的な潮流が巻き起こり、長年の謎に包まれていた量子スピン液体の素顔が解き明かされようとしている。

量子スピン液体の性質を明らかにする上で重要となるのは、実験的に検出可能な量子スピン液体固有の特徴を捉えることにある。Kitaev模型以前にも数多くの研究がなされてきたが、量子スピン液体がドドロとした液体的な状態であって、例えば強磁性体の巨視的な磁気モーメントのようなわかりやすい指標を持たないために、万人が認める明白な証拠を得ることが難しかった。Kitaev模型においても同様の困難はあるが、スピンが分裂してマヨラナ粒子が現れることが大きな手がかりを与えている。すなわち、このマヨラナ粒子を実験的に捉

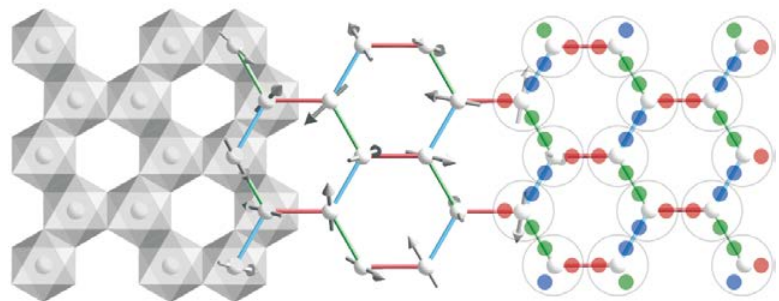


図1 磁性体とKitaev模型、およびそこに現れるマヨラナ粒子の模式図。左は物質中のミクロな格子構造、真ん中の矢印は蜂の巣格子上に配置された電子の磁気モーメント、右はそれらがマヨラナ粒子に分裂する様子を示す。

磁石に潜むマヨラナ粒子

東京大学 大学院工学系研究科
求 幸年



えられれば、Kitaef模型における量子スピン液体の証拠となり得るわけである。しかしながら、厳密解は絶対零度に限られていたため、実験観測に向けたさらなるブレークスルーが必要とされていた。

そこで我々は、マヨラナ粒子の実験的な検出に資する理論を構築する目的で、新しい数値計算アルゴリズムを開発し、スーパーコンピュータによる数値シミュレーションを駆使することで、Kitaef模型の有限温度の性質を明らかにしてきた。これまでに、比熱や磁化率といった基本的な熱力学量や、磁性研究に欠かせない非弾性中性子散乱や核磁気共鳴、さらにはラマン散乱や熱伝導度・熱ホール伝導度といった物理量の温度・磁場依存性を解明した。これらの結果と候補物質における実験結果との間に良い一致が見られることから、マヨラナ粒子の存在証明に迫る成果を得ている(図2)。とりわけ、ごく最近行われた熱ホール伝導度の実験では、半整数量子化という理論予測に一致する振る舞いが観測され、マヨラナ粒子の直接的な証拠として大きな注目を集めている。

さらに我々は、Kitaef模型の3次元拡張版に対しても大規模な数値シミュレーションを行い、これまでの常識を破る新しい相変化を見出すことにも成功した。ここでは、絶対零度で実現する量子スピン液体から、ある温度を境に「気体」に対応する常磁性状態へと転じることを数値的に明らかにした。さらに、この相変化が、マヨラナ粒子の大局的な性質の急激な変化によって引き起こされることを突き止めた。これは、

素粒子物理学において格子ゲージ理論と呼ばれる枠組みで議論されてきたものの物性版ともいえる。現実に3次元Kitaef模型の候補物質も見出されており、このようなマヨラナ粒子が引き起こす新しい相変化の実験的な検出が待たれる。

スピンが分裂して現れるマヨラナ粒子には、その強い量子的な絡み合い(エンタングルメント)を量子計算に利用できるという指摘がある。つまり、磁石は量子コンピュータの実現にも活躍する可能性があるというのだ。このこともあって、最近では、量子スピン液体研究の枠を超えて、マヨラナ粒子の創出や制御といったことが研究の焦点となりつつある。ここでもスーパーコンピュータを用いた大規模な数値シミュレーションが研究を切り拓く原動力として期待

されている。磁石によって発展してきたテクノロジーが、磁石の新しい側面を見出すのに活かされ、さらにその発見が新しいテクノロジーへとつながっていく。古くて新しい磁石は我々を魅了してやまない研究対象である。

参考文献

* 最近の進展をまとめたものとして、以下の招待レビュー論文がある。

Y. Motome and J. Nasu, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 012002 (2020)

* 日本語の解説としては以下のものをご参照いただきたい。

求 幸年, 那須 誠治, *固体物理* **52**, 199 (2017); **53**, 305 (2018); **54**, 217 (2019); **57**, 297 (2020)

求 幸年, *バリティ* **30**, 10月号 p36 (2015); **31**, 1月号 p22 (2016)

求 幸年, *日本物理学会誌* **72**, 852 (2017)

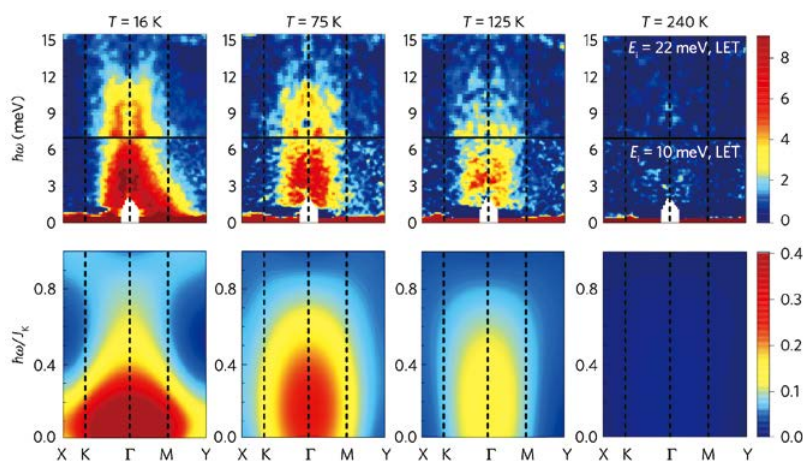


図2 Kitaef模型で実現する量子スピン液体の候補物質 α -RuCl₃に対する非弾性中性子散乱実験の結果(上)と、Kitaef模型に対する量子モンテカルロ法による理論計算の結果(下)の比較。広い温度・エネルギー範囲にわたって実験と理論が良い一致を示しており、マヨラナ粒子が現れていることの証拠の一つと考えられている。S.-H. Do *et al.*, *Nat. Phys.* **13**, 1079 (2017)より転載。

身の周りの物が壊れてしまい困ったことが誰しもあるのではないだろうか。例えば、プラスチック製の買い物袋が破れてしまい、悲しい思いをしたことがある人は多いのではないだろうか。工業製品の部品が壊れてしまうと、重大な事故につながってしまうこともあるだろう。このため、製品が壊れないように性質を改善することは、安全性や省資源の観点から重要な課題である。改良のために様々な研究が行われているが、「何故、どのように壊れるのか」が分かれば、材料開発のヒントになるのではないだろうか。とくに、破壊の起点となる、分子レベルの小さなスケールの現象を解明したいが、実験だけではなかなか難しい。そこで活用するのがシミュレーションである。今回は上述のプラスチック製の買い物袋などの、高分子材料の破壊に焦点を当てて紹介する。

分子が長くつながってできているのが高分子である。長い紐、毛糸、鎖などがイメージに近く、実際に一本の高分子は高分子鎖と呼ばれている。高分子が多数集まり集合体を形成して、ゴムやプラスチックになる。CH₂がつながってできている結晶

性高分子のポリエチレンの構造に関して紹介する(図1)。結晶性と言っても完全な結晶になることは難しく、高分子鎖は途中で折りたたまれる。結晶性の高い層と、低いアモルファス層に分離してラメラ構造をつくる。ラメラが束になって、球晶構造になり、球晶が集まってマクロなスケールへとつながっていく。このように階層構造となることが知られている。注目するスケールによって特徴的な構造や物性が異なり、スケール間相互作用も考慮する必要があることから、現象解明は非常に難しい。まずは、基礎となるラメラ構造に着目していく。

四層で構成されるラメラ構造を立方体で用意することを考えよう。一層がおおよそ10~15nmくらいであるから、一辺が40~60nmとなりシミュレーションで扱うには少しサイズが大きい。原子を全て扱うと計算時間が膨大になることから、粗視化モデルを使用する。粗視化とは特徴的な構成単位を一つの球で表し、文字通り計算モデルを粗くしていく方法である。今回はポリエチレンのモノマー CH₂を一つの球で表し、球をバネでつないで一本の長い紐になるようにした。

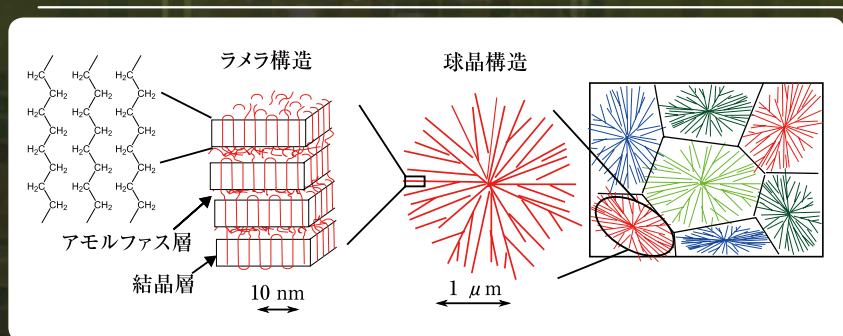


図1 結晶性高分子の階層構造。

分子シミュレーションで迫る 高分子材料の破壊プロセス

東京大学 物性研究所
樋口 祐次



粗視化すると原子の情報は失われていくが、高分子に重要な鎖長を稼げるため、高分子らしさを捉えることができるモデルである。

分子スケールにおいてラメラ構造はどのように壊れていくだろうか。ラメラ構造を伸長していくと、アモルファス層から空孔が生成し、成長していく様子が観察された(図2)。空孔の周りの高分子鎖は配向して繊維化していく様子も見られた。結晶層は堅く、形状を保つものの、最終的には壊れ、断片化していった。空孔の形を詳しく調べると、伸長と垂直方向に成長した後に伸長方向へ大きく成長していくことが分かった。この時の応力や、配向性の変化は実験結果と定性的に一致しており、シミュレーション結果の妥当性を確かめることができた。電子顕微鏡像など、実験で観測されている実験結果も良く表すことができた。

次に、空孔の生成原因を調べた。伸長前

にはアモルファス層に局在化していた高分子鎖の末端が、空孔生成の直前に結晶層へと抜けていくことが分かった。高分子鎖末端が抜けることで、アモルファス層に空間ができ、空孔の生成へとつながることが分かった。この結果を確かめるために、高分子鎖末端が局在化した構造を作成した(図3)。破壊プロセスを見ると、高分子鎖末端が局在化した個所から選択的に空孔が生成し、高分子鎖末端がほとんど存在しないアモルファス層では空孔が生成しなかった。高分子鎖末端が均等にアモルファス層に存在した破壊プロセス(図2)と比較すると、その違いは明らかである。さらに、ひずみに対する応力が低下したことから、高分子鎖末端が局在化することは、欠陥となることが分かった。これら分子スケールの空孔の生成原因や、その成長過程は、実験からだけでは解明することが難しく、シミュレーション

の有効性を示すことができた。

空孔が生成して成長するプロセスを観察するには、空孔のサイズよりも十分に大きい計算サイズが必要である。このため、今回紹介したプロセスを解明するには、スーパーコンピュータを使用した大規模計算が必須である。今回測定した空孔の最大サイズは約58,500nm³となり、実験で観測できる空孔のサイズはおおよそ64,000nm³である。実験結果と直接比較することが可能な領域が近づいてきている。実験では破壊現象を直接見ることはできない。シミュレーションでは目で見ることができ、これは大きな利点である。現象の直感的な理解を助け、新しいアイデアを促す効果は大きい。実験研究者との共同研究を実施する際にも、大規模計算による結果は説得力が大きい。スーパーコンピュータを用いた研究が材料開発の一助になれば幸いである。

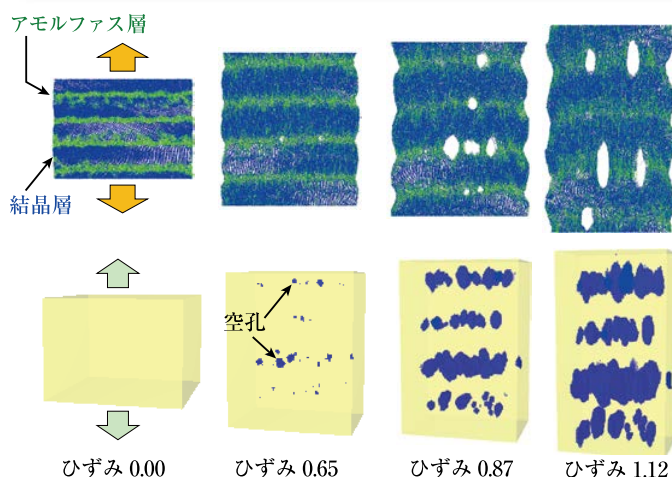


図2 1500万粒子で構成されたラメラ構造の破壊プロセス。(上段)断面図。青色は結晶層、緑色はアモルファス層を示す。(下段)空孔生成・成長プロセス。対象全体を黄色の直方体で、生成した空孔を青色で表した。

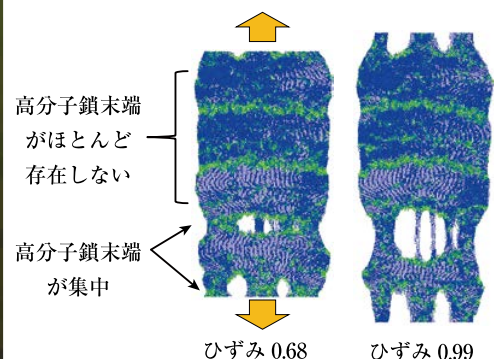


図3 末端が局在化したラメラ構造の破壊プロセス。400万粒子で構成されたモデル。高分子鎖末端が局在化した個所から選択的に空孔が生成・成長した。高分子鎖末端がほとんど存在しない個所は、ほとんど変形せず、空孔の生成も観察されなかった。



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（東京大学物性研究所 教授）

尾崎 泰助

2012年に開始した文部科学省の「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）戦略プログラム」では、当時世界最速のスーパーコンピュータ「京（けい）」の戦略的利用と計算科学の振興を図るため、5つの分野で戦略機関（H23-27）が選定されました。そのうち分野2「新物質・エネルギー創成」では、物性研究所（物性科学分野）を代表機関として、自然科学研究機構分子科学研究所（分子科学分野）、東北大学金属材料研究所（材料科学分野）の3研究所が戦略機関となり、産官学連携担当の2独法、教育担当の9大学を協力機関に加えた全国的なネットワーク型組織「計算物質科学イニシアティブ」（Computational Materials Science Initiative、以下CMSI）として活動してきました。

物性研究所計算物質科学研究センター（CCMS: Center of Computational Materials Science）は、分子科学研究所計算分子科学研究拠点（TCCI: Theoretical and Computational Chemistry Initiative）および金属材料研究所計算材料科学研究拠点（CMRI: Computational Materials Research Initiative）と連携し、CMSIの活動、すなわち「京」の戦略的利用と計算科学の振興を推進するため、2011年4月に設立されました。

2016年度からは2021年度からの本格稼働が予定されているポスト「京」コンピュータ（後にスーパーコンピュータ「富岳」と命名）を用いた早期の成果創出を念頭に、ポスト「京」プロジェクト重点課題（7）が選定され、本センターCCMSが代表機関としてプロジェクトの牽引に務めました。本課題では「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」をプロジェクトの表題として、実デバイス材料のシミュレーションを可能とするシミュレーション手法・ソフトウェアの開発を先導しました。2020年度からはスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム（R2-4）が始まり、領域③「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」と領域③「大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発」の課題にCCMSのメンバーが参画し、スーパーコンピュータ

「富岳」を用いた革新的な成果創出を目指し、研究活動を行っています。

以上のこれまでの活動を踏まえ、今後もスーパーコンピュータの利活用と分野間の連携を積極的に進め、計算物質科学のさらなる発展を目指し、本センターでは研究開発、人材育成、分野振興、産学連携を柱として活動を進めていく所存です。以下、各項目別に今後の活動をご紹介します。

1 最先端のスーパーコンピュータを利用した研究開発

1.1 「富岳」成果創出加速プログラム

理化学研究所が開発を進めるスーパーコンピュータ「富岳」は2021年度に一般稼働が予定されている。本センターにおいてはスーパーコンピュータ「京」で培われた量子論に基づくシミュレーション手法や新しいマルチスケールシミュレーション手法をさらに発展させ、現代社会に不可欠な先端電子デバイスや高機能物質・材料の究極的洗練化、新しい物理原理に基づく機能創出、将来のイノベーションの源泉となる学理の追及を通じて、我が国の次世代産業・社会基盤の構築に寄与することを目的とした研究課題を提案し、産官学が一体となった研究チームを構成し、プロジェクトを推進する。

1.2 元素戦略プロジェクト

文部科学省「元素戦略プロジェクト＜研究拠点形成型＞」は10ヵ年事業として2012年4月にスタートした国家プロジェクトである。持続可能な社会の構築のために解決すべき資源・エネルギー・環境問題に、元素戦略を共通概念とする物質科学・物性科学の観点から取り組み、既存の延長線上にない物質・材料の革新的機能の創出を目指している。本センターは本プロジェクト開始時より「磁性材料研究拠点」と「構造材料研究拠点」の研究に参画し、理論・シミュレーションの立場から分担研究を担い、元素戦略プロジェクトの推進に重要な貢献を果たしてきた。今後もスーパーコンピュータ「富岳」や共同利用スーパーコンピュータを十二分に活用し、実験グループとの連携をさらに強めながら、新物質の探索や材料の革新的機能の創出を目指して、研究を推進していく。

2 人材育成活動

2.1 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) —

計算物質科学の高い専門性を持った若手人材を育成するために、4つの機関（東北大学、東京大学、自然科学研究機構分子科学研究所、大阪大学）が連携し、計算物質科学人材育成コンソーシアム（Professional development Consortium for Computational Materials Scientists: PCoMS）が2015年8月に設立された。本事業では「計算物質科学」に関心を持つ大学院生、博士研究員が、既存の専攻や実験・理論の枠組みを超え、自身の専門分野を活かしながら企業における研究開発の現場を体験する研究インターンシップを促進してきた。これまでに理学系研究科、工学系研究科、新領域創成科学研究科に在籍する博士後期課程学生36名がイノベーション創出（IPD）人材として登録され、うち、インターンシップ参加義務のあるフェロー28名が、2015年度～2019年度の5年間で累計29件の研究インターンシップを実施した。今後も計算物質科学の高い専門性を持った若手人材を育成し、そのキャリアパスを支援するために、企業とも協力体制を構築しながら本コンソーシアム事業を継続・発展させていく。

3 分野振興活動

3.1 計算物質科学協議会 —

我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し、高いレベルでの成果創出と、シミュレーション技術と材料情報科学技術の社会実装を速やかに実現するため、計算物質科学に関わる全ての方々に開かれた、計算物質科学協議会を2020年

5月に設立した。本協議会は、物質科学分野向けのスーパーコンピュータ共同利用・共同研究拠点である、東北大学、東京大学、自然科学研究機構と、教育拠点である大阪大学を運営機関とし、個人の研究者、シミュレーション技術を開発する国家プロジェクト、国家プロジェクトで開発されたソフトウェアの利用を支援する機関、シミュレーション技術を活用し学界や社会への貢献に導く企業や研究機関に所属する方々などで構成する予定である。将来の研究開発の方向性についての意見集約と国や関係諸機関への提言を行い、日本における計算物質科学関係者の連携を促進する。

3.2 MateriApps —

MateriAppsは物質科学シミュレーションにおけるソフトウェアの情報を集約するポータルサイトであり、2013年より本センターが中心となって開発・運営を行っている。現在では270以上の物質科学シミュレーションのソフトウェア、データベース及びユーティリティなどが分かりやすく紹介されている。2019年度では、月間でおよそ1万7千のページビュー（4500ユニーク ユーザー）があり、その内、海外からの利用は2割程度である。ポータルサイトを運用するだけでなく、コミュニティに有用なソフトウェアに関しては定期的に講習会を開催しており、MateriAppsポータルサイトでその講習会の情報も広く周知している。またMateriAppsLIVE!という環境を提供し、シミュレーションの普及活動を行っている。今後もMateriAppsの活動を継続し、物質科学シミュレーションの普及・振興を図り、さらに方法論・ソフトウェア開発者と利用者を橋渡ししていく活動を進める。





MateriApps — 物質科学シミュレーションのポータルサイト —

今日ではコンピュータを用いた数値計算は、物質科学の理論研究において必要不可欠なものとなっています。計算物質科学を推し進めていくためには、計算機の演算性能の進化だけでは十分ではありません。物質科学の方程式を効率的に解くための手法、すなわち「アルゴリズム」の発展もまた重要な役割を果たしています。計算物質科学の研究現場では日々新しい手法が提案され、さまざまなソフトウェアが開発されています。物性研究所スーパーコンピュータ（物性研スパコン）の全国共同利用やスーパーコンピュータ「富岳」プロジェクト等を通じたソフトウェア開発も活発に行われています。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・企業研究者を含めた幅広いユーザにその存在を伝える場がほとんどありませんでした。

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）を通じて、国内外で開発された277の物質科学アプリの情報を発信しています（2020年9月時点）。物質科学アプリにはさまざまなものがありますが、MateriAppsではそれらを「電子状態計算（固体物理/量子化学分野）」「分子動力学」「可視化・モデリング」「強相関系・有効模型計算」「データ解析・補助ツール」「機械学習」などに大きく分類し、整理しています。さらに利用者の「やりたいこと」から効率的に検索が行えるよう、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次元的に整理されています。各アプリのページでは、ドキュメント充実度や公開度、開発者・ライセンスなどが掲載されており、アプリを選択する際に有益な情報がまとめられています。アプリの魅力、将来性、応用性について開発者自身の生の声を聞くこともできます。

MateriAppsでは、利用者が気軽に物質科学アプリを試すことができるよう、「レビュー」「アプリコンシェルジュ」

物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp>



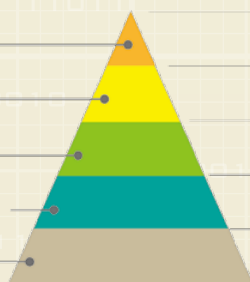
フラッグシップマシン
（「富岳」など）

国内の HPC スパコン

共同利用スパコン

研究室所有のクラスター計算機
クラウドコンピューティング

個人のパソコン



MateriApps

MateriApps
Installer

MateriApps
LIVE!

コンピュータの
階層構造と
MateriApps

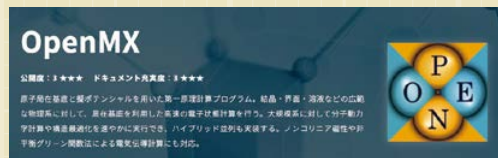
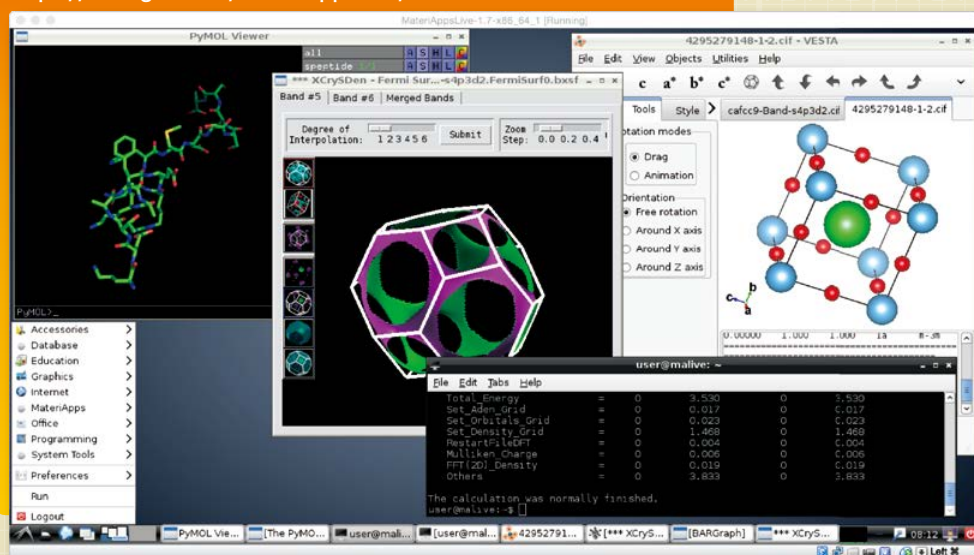
「キーワード解説」などの記事も掲載されています。各アプリの「レビュー」では、具体的な例に対してアプリを実行する方法が掲載されており、どのような手順で計算を行うか、どのような入力ファイルを用意すればいいか、などの概略を知ることができます。「アプリコンシェルジュ」では、アプリに関するよくある質問への回答や計算目的に応じたアプリの選び方などの情報がまとめられています。「キーワード解説」では、計算科学アプリで用いられている計算手法・アルゴリズムについての用語が解説されており、関連するアプリも紹介されています。サイト全体で毎月のページビュー数がおよそ25,000あり、多くの利用者に閲覧されていることがわかります(2020年7月時点)。

利用者が物質科学の公開アプリを使い始めようとする際の大きな障害は、ソフトウェアのインストール作業です。我々はこのインストール作業の困難を軽減するために、手持ちのノートPCで気軽に物質科学アプリの実行環境が構築できる MateriApps LIVE! (<https://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>) の開発・公開も行っています。

MateriApps LIVE!には、OS (Debian GNU/Linux)、各種計算アプリ、エディタ、可視化ツールなどが仮想化ソフト VirtualBox の仮想ハードディスクイメージ (OVA) としてまとめられており、Windows・macOSなどの主要なOS上で簡単に物質科学計算を行うことができます。MateriApps LIVE!を用いることで、ソフトウェア講習会や授業などで参加者がアプリの演習を短時間で行うことができるようになります。

さらに実用向けの計算やその解析・可視化を行うには、物性研スパコンなどの国内の主要なスーパーコンピュータから各研究室のクラスタ計算機、個人のPCまで、幅広い計算機環境において計算物質科学アプリをインストールする必要があります。我々はこれらの多種多様な計算機へのアプリのインストール作業を補助するために、シェルスクリプト集である MateriApps Installer の開発・公開も行っています。MateriApps Installerを用いることで、手持ちの計算機環境に物質科学アプリを手軽にインストールできます。また、物性研スパコンにおいて、主要アプリのブレイクインストールにも利用されています。

MateriApps LIVE! による計算物質科学シミュレーションと結果の可視化の例
<https://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>



MateriApps に
掲載されている
アプリ情報の例



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
スーパーコンピュータによる
計算物質研究の革新と未来
2021年3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 : <https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/>

<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/>



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