

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

Supercomputer Facility for Condensed Matter Physics

計算物質科学研究センター

Center of Computational Materials Science

<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

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



大規模計算が切り拓く 物性物理の最先端

東京大学物性研究所では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おります。この共同利用は、

- 開かれた公正な運用
- 安定的な計算環境の提供
- 高いユーザビリティ

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徴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。

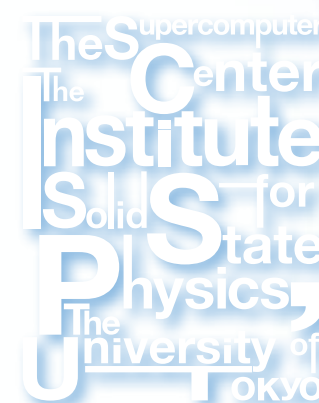
物性研スパコン共同利用は、国内の研究機関の研究員による物性研究を目的とする計画であれば、どなたでも利用申請を行うことができます。申請の機会は年2回(6月と12月)の定期的なB・C・E・Sクラス申請のほか、特に緊急度の高い大規模計算についてはDクラスとして、小規模な試用計算についてはAクラスとして、随時申請を受け付けています。実際の採択率も非常に高い率を維持していますが、特にスパコンでなければ実行できない大規模計算を推進するために、審査員による評価に基づいて充足率には差をつけています。

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、長期にわたってあて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3度行い、現在は2010年度に運用を開始した4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)が次世代スパコン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、計算物質科学研究センターが2011年度から設置されました。これまで行ってきた物性研スパコンの共同利用とCMSIの活動を連携させ、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、計算物質科学研究センターをご紹介しますとともに、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いて、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・展望をより深く知っていただく一助となれば幸いです。

2012年 1月



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
ノード単体性能のNEC SX-9・総処理能力のSGI Altix ICE 8400EX
- 2 システムA,Bの性能諸元
2つのシステムの性能と特性
- 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
クラス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. 触媒反応シミュレーション
大阪大学 大学院工学研究科 森川 良忠
- 9 ii. 強相関量子多体系のシミュレーション
東京大学 大学院工学系研究科 今田 正俊
- 11 iii. 交換モンテカルロ法 - 物性研究所共同利用からうまれたアルゴリズム -
東京大学 大学院総合文化研究科 福島 孝治

part 3 | 計算物質科学研究センター設立

- 13 計算物質科学研究センター設立にあたって
計算物質科学研究センター センター長 常行 真司
- 14 計算物質科学研究センターの役割／CMSI運営体制
- 15 CENTER NEWS - 神戸分室を開設しました -

part 4 | スーパーコンピュータ年表

- 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

ノード単体性能のNEC SX-9・総処理能力のSGI Altix ICE 8400EX

物性研究所スーパーコンピュータセンターに導入されている計算機は、NEC SX-9 (system A) およびSGI Altix ICE 8400EX (system B)の2システムであり、本研究所に初めてスーパーコンピュータが導入された1995年から数えて第四期の計算機システムである。これを全国の500人規模の研究者が登録し、入れ替わり立ち替わり常時20人程度のヘビーユーザが利用している。利用者の幅はかなり広く、手掛けている問題はメモリ転送速度が重要なものから総クロック数が重要なものまで多岐にわたる。そこから生じる様々な要求に応えるために、アンケート調査結果に基づき上記システムが導入された。

System Aはメモリ転送速度重視のベクトル機である。ベクトル機は利用が最も多い第一原理計算には、かつて不可欠のものであった。しかしスカラー機の性能が最近著しく向上したためsystem Bでも十分に事足りるようになった。そこで、system Aはメモリ転送速度を特に重視する計算の専用機として位置づけ、規模を縮小して(4ノード64CPU構成で)導入された。

System Bはメインシステムであり、3840CPUで構成される。利用者数が多いため常時多数ノードを利用した計算にリソースを分け与えることができない。そこでシステム

全体を約4TFlopsのブロック(256CPU)に分けて、第一原理計算も比較的高速に行えるように、ブロック内は比較的数据転送が速い密結合機能的な構成とした。多くの利用者にはブロック内で閉じた計算をしてもらおうという狙いである。ブロック間は疎結合的な構成とするように設計したが、それでも一般的な疎結合システムよりはデータ転送機能重視型のシステムになっている。そのため、経験が比較的浅い研究者が高並列計算プログラムを作成して速度を出すための練習機として向いていると考えられる。その他、A,Bの2システムを相互にうまく利用して一つの問題を解くような高度利用も行われており、それが2システム構成の特長である。

本システムの利用者には大学院生や初学者が多く、しかも自前のプログラムを用いて研究している利用者が多い。そのため、堅牢かつレスポンスの良いファイルシステムを構築する必要がある。大型のファイルシステムの構築はかなりの技術が必要であり、全ての業者がそれを持っているわけではない。そこで、十分に経験を積んだ業者を選定し、細心の注意を払って構築した。大型計算機の割にはプログラム作成やデバッグをストレスなく行っていただけるものと考えている。



Introduction of New Supercomputing System

システム A, B の性能諸元

物性研究所スーパーコンピュータは、システム A(shii)、システム B(kashiwa) 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。

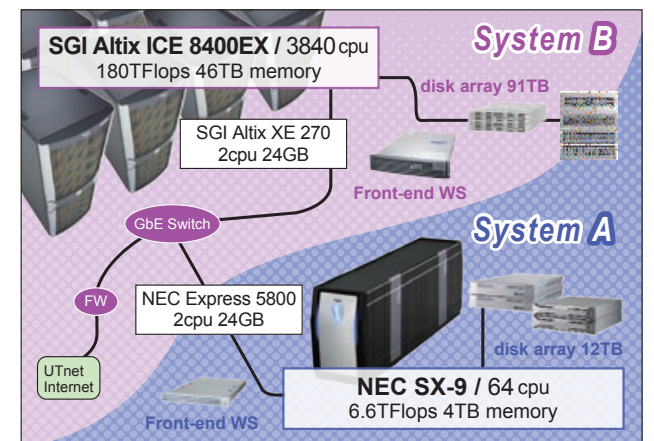
システム概要：まず、システムAとBの特性の違いについて簡単に触れる。システムAはCPU単体の性能とメモリ転送能力、CPU間の通信速度を重視することで、通常のクラスタ計算機では不可能なサイズの計算を高速で行えることを特徴とする。一方システムBは、量産されている比較的安価なCPUを高速ネットワークで接続することで、CPU間の通信を要する大規模並列計算を可能としている。

CPU・メモリ性能：システムAのCPUは加算器と乗算器を2つずつ持つベクトルパイプラインを8本持ち、これらが3.2GHzのクロック数で動作することで102.4GFlopsという高いCPU単体性能を持つ。システムBのCPUの動作クロック数は2.93GHzで、1CPUにつき4つのコアが搭載されている。それぞれのコアは加算器と乗算器を1つずつ持ち、128ビットのデータを1回の命令で処理するSIMDを利用することでCPU単体性能は46.88GFlopsとなる。システムAの最大の特徴は大きなメモリバンド幅である。システムBのメモリバンド幅が32GB/sなのに対し、システムAは256GB/sで、メモリバンド幅とCPUの演算能力の比(Byte/Flop)で比べても、システムAが2.5、システムBが0.7で、システムAのCPUへのデータ転送能力はとても高いものとなっている。システムBはメモリからのデータ転送の遅延を隠蔽化するために、高速少容量のキャッシュメモリを持つ。システムBのキャッシュメモリはレイテンシと容量の異なる3つの階層構造(L1キャッシュ、L2キャッシュ、L3キャッシュ)を持ち、それぞれの容量とレイテンシは、64KB(4サイクル)、512KB(15サイクル)、8MB(40サイクル)である。理論演算性能に近い性能を出すためには、システムBではキャッシュメモリを意識したプログラミングが必要となる。メモリ容量は、システムAで1ノード(16CPU)あたり1TB、システムBでは1ノード(2CPU)あたり24GBであるが、OSや管理ツールなどもこれらのメモリを利用するため、実際に利用できる容量はこれより小さくなる。CPU単体性能から見るとシステムAはシステムBを上回るが、全体の総演算性能で見ると、この優劣は逆転する。つまり、総演算性能はシステムA(4ノード)が6.6TFlopsであるのに対し、システムB(1920ノード)は180TFlopsであり、システムAの約27倍もの総演算能力を有する。

ネットワーク性能：ノード内16CPUで1TBのメモリを共有するシステムAと異なり、システムBはノード内24GBまでしかメモリを共有していない。そのため、1つの計算を複数のノードに分担させる並列計算を行うには、ノード間のデータ転送を高速に行う必要がある。そのためシステムBでは、ノード間のスイッチを4本のInfiniBand(QDR)を用いて接続し、8GB/sのデータ転送を行う(256CPUから先は4GB/s)。ネットワークのトポロジーはdual planeのenhanced hyper cube構造で、高速かつ低レイテンシなノード間通信が可能になっている。

磁気ディスク：大量の計算結果の保存や、入力データの読み込みをスムーズに行うには、書き込みおよび読み込み性能にすぐれた磁気ディスク装置が必要である。システムAではそれぞれのノードから4GbpsのFibre Channelを4本用いて磁気ディスクをつないでいる。システムBでは計算機とファイルサーバをつなぐ4本のInfiniBand(QDR)と、ファイルサーバから磁気ディスクをつなぐ8GbpsのFibre Channelを4本用いることにより、高速な書き込みと読み込みを実現している。磁気ディスク容量はシステムAで12TB、システムBで91TBを用意している。

冷却システム：現スーパーコンピュータの導入にあたり、物性研では水冷による計算機の冷却を決定し、設置を行った。水冷の利点は、増大する空調機を減らして計算機の設置面積を増やせること、空調機に比べ高効率の冷却ができることにある。現在、毎分14℃ 970リットルの冷水をシステムBに供給することで、システム全体の約半分の熱量を水冷で冷却することに成功している。



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増加したのは、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不可欠な研究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。海外や他分野の動きに比べて我が国の計算物性科学におけるセンターの整備は遅れを取り、計算物理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(当時)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、ガリウムひ素LSIなどを採用した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ることとなり、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、現在は第四期のシステム(2010年～)が導入されている。さて、初期スーパーコンピュータ導入後に起こったこと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する時期が訪れた。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の利用を始めた。そのため第二期のシステム(2000年～)を導入する際、ベクトルパラレル型の計算機(system 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(system B)も加えた複合システムを導入することとなった。

System 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もできる。すなわち計算機のスカラー化がこの時に行われた。System 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。System BとしてはSGI製のOrigin 2800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年～)のsystem Bとしては、研究室のPCクラスタ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に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ることとなった。

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system A,Bの2種類のハードウェアを導入することとなった。

2005年には疑似ベクトル機であるHitachi SR11000がsystem Aとして、Intel Itanium 2で構成されるSGI Altix 3700がsystem 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としてはメモリ転送能力がかなり優れた高性能機が導入された。System 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system Aのみ利用してきた研究者(特に第一原理計算)がsystem 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。計算機がsystem B一本に集約していく布石となった。

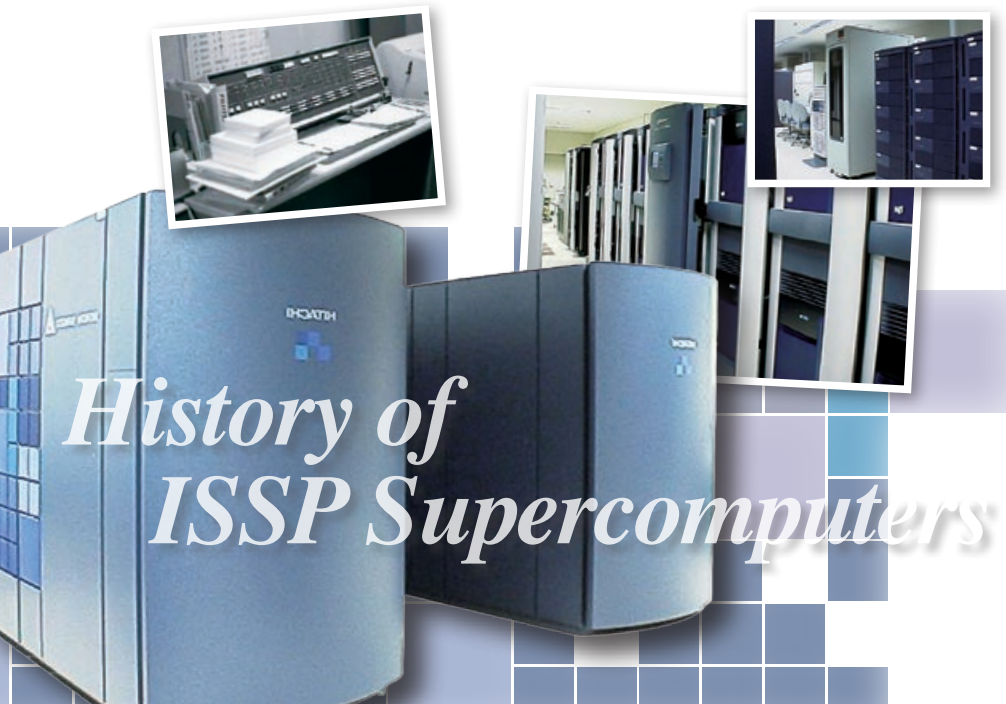
第三期は地球シミュレータ活用や京コンピュータ利用準備などが盛んに行われた時期である。並列プログラミング技法の普及が進み、大規模計算を志向する研究者が急増した。それを象徴するのは例えば、押山淳氏らの次世代スーパーコンピュータ用の大規模第一原理計算手法の開発や、大谷実氏らの物性研スーパーコンピュータや地球シミュレータを用いた反応動力学の大規模応用計算などであろう。

第四期(2010-): 第三期頃から、徐々に電気使用料の問題が表面化し、手持ちのPCクラスタで計算するよりもセンター利用を志向する研究者が増加した。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。そこで第四期(2010年～)の計算機調達としては、system Bを主柱とする一方、必要最小限の規模のsystem 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。NEC SX-9(system A)およびSGI Altix ICE 8400EX(system B)が導入された。導入当初は180TFlopsというスペックはかなりのものであり、system 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は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system 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system 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、節電のため最大半数のノードを停止させた縮退運転が行われるようになった。今まで当たり前だと思っていた電力の安定供給に対する神話が崩れた。さらに電気料の大幅な値上げが行われるとの予想もある。その際、計算のグリーン化がますます求められることとなるであろう。すなわち電力使用量の小さな計算機をいかに巧みに利用して成果をあげるかがこれからの鍵となり、第一期からの鍵であった並列化に代わる課題として今後対峙することになると考えられる。その時代にどのような種類の計算が発展を遂げるのであろうか。



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(以下物性研)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。当初から無料で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課題クラスA,B,C(それぞれ計算時間小、中、大)を設けた。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。これらのクラス別課題採択数の推移を見ると、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、その後Cクラスの割合が増え続けている。ここから物性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。

物性研究の中でも、計算手法によりベクトル型の計算機に向く手法とスカラ型型の計算機に向く手法がある。物性研はそのどちらのニーズにも対応するため、2000年度からシステムA(ベクトル型)とシステムB(スカラ型)に分けて二種類の計算資源を提供している。その後、計算機の稼働率は常に90%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。

利用率(稼働時間中に計算資源が使われた割合)は、2005年のシステムが導入されてからはおおむね80%を超え、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。なお、2010年度に稼働率がやや低下しているのは、2010年の7月から運用を開始した新システムが、2011年3月に発生した東日本大震災の影響を受けた

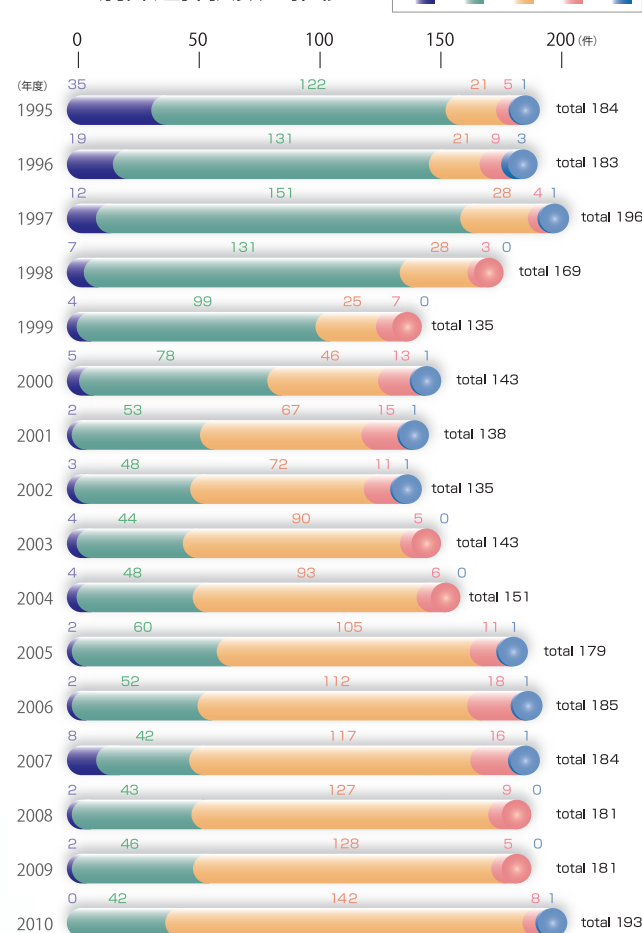
ものである。震災当日、システムは加速度計による緊急システムが作動して緊急停止し、火災も発生せず、水冷システムの水が漏れだすこともなかった。はからずも通常時の安定運用性だけでなく非常システムも信頼できることが判明したわけだが、二度と緊急システムが動作することのないよう祈るばかりである。

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

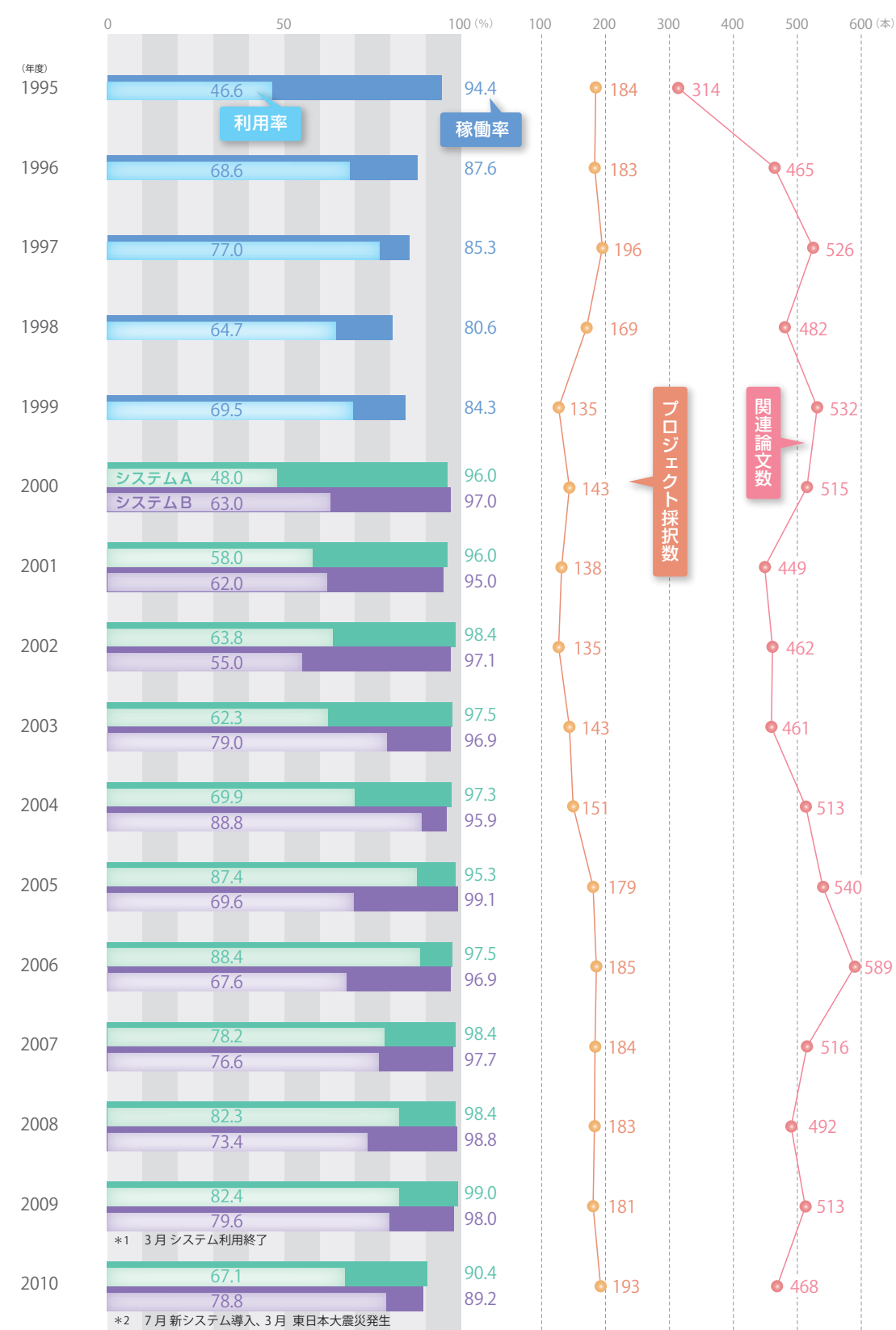
物性研のスパコンを利用したことの明記を義務づけている。利用報告書は、数編の招待論文と共にActivity Reportとしてまとめられ、毎年発行されている。関連論文は500編前後出版されており、物性研スパコンが物性研究の発展に大きな貢献をしていることがわかる。

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。

クラス別課題採択数の推移



スパコン運用実績



Simulation of Catalyzed Reaction

最新のスーパーコンピュータにより、物質中のナノスケール（原子・分子のサイズ）で起こる現象をつぶさに見ることが可能になってきている。特に、「第一原理電子状態計算」と呼ばれる手法は、物理学の基本原理解である量子力学に基づいて、物質中の原子や電子の運動状態をスパコン上で忠実に再現しようとする計算手法であり、究極の時間・空間分解能を持つ顕微鏡とすることができる。この手法を用いた研究は近年大きく発展し、無機物質、有機物質や生体分子中の原子構造や運動状態、電子の分布などを調べるために盛んに用いられるようになってきている。特に、実験的に解明することが困難な、電極界面や生体分子中など複雑な物質中で起こる化学反応や、超高压下での物質の構造の解明などにも威力を発揮しており、実験、理論に並ぶ第三の研究手法である「計算科学」の中心的手法となっている。第一原理電子状態計算では原子の構造のみならず、電子状態も計算機中で再現するので、現象を支配する物理的機構を明らかにすることにも大きな力を発揮する。電子状態や原子構造を少しずつ変化させると物質の性質がどのように変化するかという仮想的な実験を計算機中で系統的に行うことが可能であり、それによって、物質が持つ性質の起源を理解することが可能となる。さらに、物質の持つ性質の起源を理解することにより、より望ましい物質を設計する指針を与えることも可能となり、知的好奇心を満たす基礎科学的な意義に加え、人類の将来

に有用となる新たな物質を設計する工学的応用も期待されている。

本稿では、最近行った、白金電極表面上での反応シミュレーション、および、自動車排ガス触媒の自己再生機構について紹介する。白金は代表的な宝飾品用の金属であるが、「触媒」としての有用性も高く、特に自動車の排気ガスを浄化する触媒として多く用いられている。触媒とは、それ自身は変化せずに、化学反応を促進する物質のことである。たとえば、水素と酸素を常温・常圧で混合しただけでは何の反応も起こさないが、少量の白金があると爆発的に反応が起こり、水ができる。また、将来のクリーンで高効率なエネルギー変換デバイスとして有望視されている燃料電池においても白金が電極触媒として使われており、そこでは水素と酸素を穏やかな状況下で反応させて電力としてエネルギーを取り出すことを可能にしている。このように、白金はエネルギーや環境問題を解決するための重要な金属である。しかしながら、白金は資源的に希少であることと、産出が南アとロシアで90%を占めるという偏在性の問題がある。近年、自動車の排ガス規制が強化されてきていること、新興国における自動車の需要が増えてきていること、さらには、燃料電池の普及を考えると、白金に代わる触媒を開発することの重要性は益々高まっている。触媒開発をより効率的に行うためには、触媒反応過程を明らかにすることが重要である。その基礎として、表面科学の分野では、原子レベルで構造が規

定された固体表面上での分子の吸着や反応について研究が行われてきた。そのような研究を開拓してきたことで、2007年のノーベル化学賞はドイツのErtlが受賞した。また、2010年のノーベル化学賞は、白金族元素の一つであるパラジウムを用いて有機物の炭素-炭素結合を作る触媒を開発した鈴木章、根岸英一、R. Heck 各氏が受賞し、触媒が身近なところで重要な役割を果たしていることを改めて認識させられた。

表面科学の研究では、超高真空中において原子レベルで平らで清浄な固体表面を作り、そこへ原子や分子を吸着させ、吸着状態や反応過程を様々な分光学的手法を用いて調べる。また、第一原理電子状態計算によっても、固体表面上での原子や分子の吸着状態は精密に計算することが可能であり、原子や分子の一つ一つの動きまで明らかにされてきている。このように、固体表面と気体分子との相互作用は原子レベルでの研究が進んでいる。一方、電極表面のように固体表面が水と接している界面での反応については、それほど解明が進んでいない。電極表面上の反応では溶媒である水が大きな役割を持つが、水で覆われた固体表面第一層の情報を実験的に得るのは難しい。本研究では、究極の時間・空間分解能を持つ顕微鏡である第一原理計算機シミュレーションにより、電極界面での反応過程を見ることを試みた。電極界面のシミュレーションも、それほど容易ではない。第一に、複雑な水の構造を計算モデルに取り入れる必要があるため、多数



触媒反応シミュレーション

大阪大学 大学院工学研究科
森川 良忠

の水分子を含む系を計算する必要がある。また、水は弱い水素結合でネットワークを作っており、常温で頻繁にネットワークの組み換えを行っている。電極界面での反応をシミュレーションするには、これら無数の準安定状態を効率的にサンプリングする必要がある。さらに、電極反応は電極電位によって制御されており、界面での電場の効果を計算に取り入れてやる必要がある。これらの効果を上手に取り入れることにより、電極表面での水素発生反応の第一段階のシミュレーションに成功した。¹ 図1に水中のヒドロニウムイオンが白金電極表面上で電子を受け取り吸着水素となる過程を示す。水素発生反応は電気化学反応の最も基本的な反応であることに加え、上で述べた燃料電池の水素極での反応の逆反応に対応しており、白金電極触媒上での反応を解明する上で重要な研究である。

実際の触媒は様々な反応ガスにさらされ、また、高温の環境下で使用されるので、それらの影響を受けて反応中は触媒表面構造が変化している可能性がある。上述した自動車排ガス触媒では、白金をはじめ、パラジウム、ロジウムといった白金族を用いているが、重量あたりの表面積をできるだけ大きくするために金属をナノスケールの微粒子にして触媒として用いられる。しかし、高温の排気ガスにさらされるために、長い間使用していると微粒子同士が集まって大きな粒子になり、表面積が減少してしまう。これを熱劣化と呼んでいる。最近、ペロブスカイトと呼ばれる特殊な酸化物に金属を

担持すると熱劣化が大幅に抑制されることが知られ、インテリジェント触媒と呼ばれている。第一原理熱力学法を用いた計算機シミュレーションにより、パラジウムを担持したペロブスカイト酸化物表面では、図2に示すようにペロブスカイト酸化物表面の第一層にパラジウム酸化物が安定的に形成していることがわかった。² このように、担体の酸化物表面の第一層に主にパラジウムが存在することが、効率的な触媒性能を維持する要因となっていることを示した。

このように、溶媒効果や雰囲気ガスの効果を取り入れた複雑な触媒反応の第一原

理シミュレーションが可能になりつつあり、望みの性質を持つ触媒を自在に設計することが可能な時代が来ると期待できる。

- 参考文献
1. M.Otani, I.Hamada, O.Sugino, Y.Morikawa, Y.Okamoto, and T.Ikeshoji, "Electrode Dynamics from First Principles", J. Phys. Soc. Jpn., 77 024802-1-6 (2008).
 2. I.Hamada, A.Uozumi, Y.Morikawa, A.Yanase, and H.Katayama-Yoshida, "A Density- Functional Theory Study of Self-regenerating Catalyst LaFe_{1-x}MxO_{3-y} (M=Pd, Rh, and Pt)", J. Am. Chem. Soc. vol. 133, 18506 - 18509 (2011).

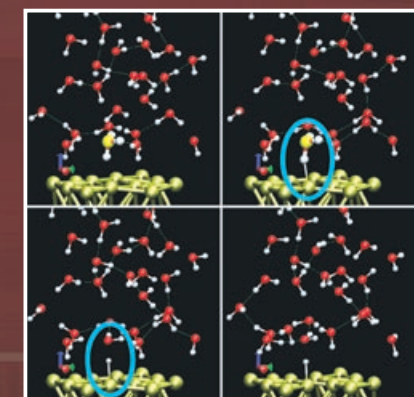


図1
水/白金界面での水素発生反応過程。水中に溶けているプロトン(水と結合してH₃O⁺となっている)が白金電極で電子を受け取り吸着水素になる過程を示す。

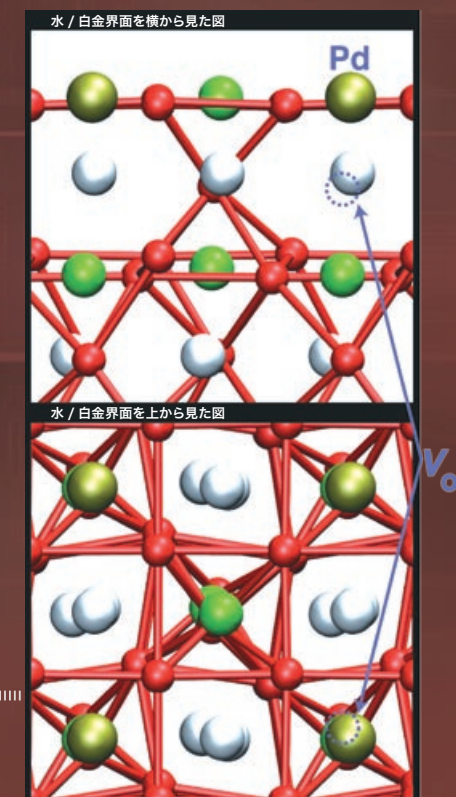


図2
ペロブスカイト酸化物 (LaFeO₃) 表面の第一層にパラジウム (Pd) 酸化物が形成されている構造。

強相関量子多体系のシミュレーション

東京大学 大学院工学系研究科
今田 正俊

私たちの目にする物質の性質の多くは物質中の電子の示す性質によって決まる。この性質は、電子が多数の集団となったときにはじめて現れ、単一の電子の性質だけからでは容易には想像できない。量子力学に従う電子集団が示す電気伝導性を制御する技術は、20世紀に半導体エレクトロニクスとして花開き、半導体物理学はコンピュータ、オーディオ機器から携帯電話までの現代産業技術を支える学問となった。半導体物理学は、ある電子と相互作用する周囲の電子の動きをならして平均化する近似で成功を収めたが、クーロン反発力によって電子が互いに避けあう効果が重要になってくると、単純な平均化では記述できなくなる。高温超伝導など、平均化では理解できないフロンティアが、実際、自然界に多く見出されるようになった。遷移金属酸化物、有機化合物などの強相関電子系と呼ばれる物質群は、このような未知の現象探求への現代物理学のフロンティアである。

近年勃興した量子シミュレーション法は、強相関電子系を計算機でまるごと平均化の近似なしに扱う手法として発展した。金属中で量子力学的にふるまう電子集団は電子の運動量の空間でフェルミ球を作り、その表面がフェルミ面となる。フェルミ球を地球になぞらえると、電子間相互作用の効果が大きいのは地表付近（すなわちフェルミ面付近）の電子である。地球の大気現象と同じくフェルミ面表面付近の電子は強

い相互作用とゆらぎを伴う。この強相関効果と階層性を記述する計算機シミュレーション法の開発は現代物理学の基礎と応用の中心課題である。

私たちは従来の困難を克服しながら、量子モンテカルロ法、経路積分モンテカルロ法、ガウス基底モンテカルロ法、多変数最適化変分モンテカルロ法などの強相関電子系のシミュレーション法を開発し、第一原理計算手法と融合することによって、現実の強相関物質の定量性まで含めた物性解明を進めてきた。スーパーコンピュータを駆使する量子シミュレーションによって、強相関電子の示す多様性とその本性のベールが剥がれてきている。ここで2つの例を示そう。

クーロン力で反発する電子はひしめき合

いながらも巧妙に避けあって動きがとれなくなり、金属から絶縁体へ転移することがある。この絶縁体をモット絶縁体と呼ぶ。モット絶縁体への転移（モット転移）は強相関効果の最も顕著な現れであり、転移周辺に高温超伝導をはじめ、未解明の現象を多彩に示す。

金属ではあるエネルギー以下の量子力学的準位が電子によって占有され、それより高いエネルギーの非占有側との間に、フェルミ面を作ることが知られている。このフェルミ面は理論的には電子の一粒粒子グリーン関数が発散する「極」によって表わされることが知られている。一方絶縁体ではフェルミ面は消滅し、占有されているバンドと空のバンドの間にギャップが生じる。このとき発散する「極」は存在せず、代わ

りにモット絶縁体ではグリーン関数がゼロとなる「ゼロ面」が現れる。モット絶縁体近傍の金属では、この「極」が「ゼロ面」と共存し絡み合うために、普通の金属と異なる奇妙な性質を示すことが、クラスター拡張した動的平均場法と呼ばれる大規模計算によって明らかとなった。銅酸化物高温超伝導体に見られる超伝導や「擬ギャップ」などの未解明の現象の謎を解く鍵も、普通の金属には見られない、また実験観測の難しい「ゼロ面」との絡み合いが握っている。

銅酸化物に次ぐ高い超伝導転移温度（絶対温度で最高56K）を示す物質群は、鉄系超伝導体と呼ばれる鉄と砒素やセレンなどの陰イオンとの化合物である。この物質群では超伝導近傍に反強磁性秩序が見られることがわかっているが、物性や超

伝導性を決める上での電子間相互作用の役割が何であるのかははっきりしたことはわかっていなかった。スーパーコンピュータの駆使によって、鉄系超伝導体の種々の化合物の大局電子構造と、これをもとにして鉄に由来するフェルミレベル付近の電子の有効模型が導かれた。この有効模型を多変数最適化変分モンテカルロ法という高精度のシミュレーション法で解くことによって、鉄系超伝導体群の物性の多様性を決める主因が電子間相互作用効果であることが示された。鉄系超伝導体は銅酸化物とはずいぶん異なるにもかかわらず、同様にモット絶縁体の深い影響下にあることがわかり、超伝導機構解明への手掛かりを与えている。

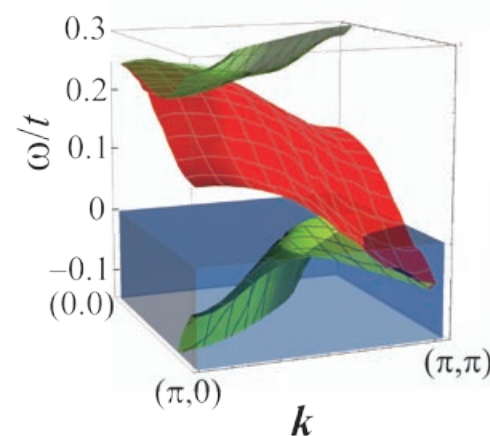


図1

電子の一粒粒子グリーン関数を波数 k とハバード模型のパラメタであるトランスファー t でスケールしたエネルギー ω/t の空間で解析すると、モット絶縁体近傍の金属には、フェルミ面を与える「極面」（緑面）とグリーン関数がゼロとなる「ゼロ面」（赤面）の共存と絡み合いが生まれ、ゼロ面が生む「擬ギャップ」（ゼロ面が極面を隔てることによって生じるギャップ）や「フェルミアーク」（ $\omega=0$ の水色面より上に下部極面が作る島構造）などの、観測されている奇妙な金属相の謎が解けてくる。

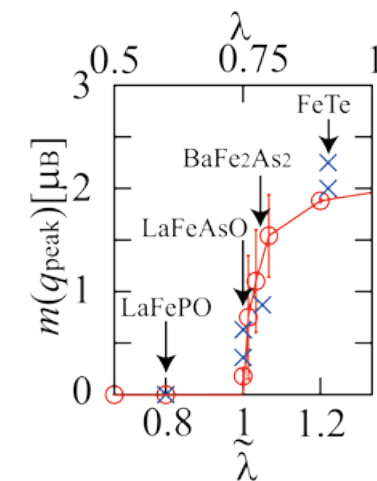


図2

鉄系超伝導体の磁気秩序モーメントの値 m は第一原理的なシミュレーション予測と実験結果とが大変良い一致を示し、電子間相互作用（ λ でスケールする）の違い、異なる化合物同士の物性の多様性を理解する鍵であることがわかる。

交換モンテカルロ法

— 物性研究所共同利用からうまれたアルゴリズム —

東京大学 大学院総合文化研究科
福島 孝治

やや唐突だが、次のようなパズルを考えてみる。図1のように蜂の巣状の格子の上に粒子を置く問題である。粒子は少し大きいので、ある格子点に粒子を置くとその隣には1つ以上は置くことができないとする。このルールを満たしながら、どのくらい沢山の粒子を置くことができるだろうか？

少し遠慮しながら、蜂の巣の六角形に2個の割合で粒子を置いてみると、隣の六角形の粒子に注意しながら容易に置くことができる(図2上)。まだ余裕があるし、置いてある粒子を少々動かしてもルール違反に

はならない。次に、少し頑張って、各六角形に3個の割合で置いてみよう。すぐに思いつく「解」として、1つおきに置いてみる。綺麗な結晶ができた(図2下)。今度は、もう粒子を隣に移動することはできないし、これ以上粒子を足すこともできない。しかし、これは最も密に粒子を詰めた解ではない。

このパズルのような問題は、格子ガラス模型と呼ばれるガラスの簡単な物理模型である。ガラスは我々の身近にあり、古来より日常生活で欠かせない物質であるが、その物理的な特性は意外なほどに理解されて

いない。例えば、ガラスは通常の固体と異なり結晶構造を持たないことが知られている。まるで液体のようである、しかし、固体のように固い特性も持ち合わせている。ガラスは結晶構造を持たないという意味で「汚い固体」と認識すべきなのか、それとも「非常に粘っこい液体」なのかはガラス物理の基本的な問題である。

先のパズル模型において、粒子数が少ないときには液体のように粒子は自由に動き回れるが、粒子数が多くなったときに粒子は動けなくて固体のように固くなることが想像できる。その際にきれいな結晶ができれば通常の固体となるが、ランダムな固化状態が実現すればガラスと考えたくなる。液体が固体に変化するときには、水が氷になるときのような相転移が起こるが、もしガラス状態が実現すると、液体とガラスの間にはそのような“相転移”は存在するのだろうか？この問題を解明するために、このパズル模型は研究されている。

有力な研究手法に、計算機シミュレーションの方法の一つであるモンテカルロ法がある。しかし、このパズルのような問題を解くことは非常に難しい。困難点の一つは、図2下のようにそのままでは粒子を増やすことが不可能な状況にたびたび陥ることである。これはランダム磁性体の研究では古くから

指摘されてきたモンテカルロ法に共通する困難点である。この困難を解消するために、のちに拡張アンサンブル法と呼ばれる一連の方法群が1990年代に提案された。その中の交換モンテカルロ法は筆者らによって提案され、最初の大規模なランダム磁性体への応用は当時の物性研究所のスーパーコンピュータで行われた。

交換モンテカルロ法は当初ランダム磁性体の計算物理的技法として考案されたが、複数の状態が拮抗する物性物理の問題やタンパク質の立体構造予測の問題(図3参照)、さらには物理の分野だけでなく応用数学や統計推論等の様々な分野にも精力的に応用されている。近年、タンパク質の分子動力学法の汎用パッケージにも、この交換法が標準で組み込まれるほどである。また、この方法は現在の主流である並列計算機に効率よく実装できるため、今後もシミュレーション科学の1つの手法として応用されていくだろう。

さて、パズルの答えだが、この方法で見つけた解の例を図4に示す。図2下の結晶状態よりも密に粒子は詰まっていて、結晶状態と言うにはほど遠い乱れた状態の解が見つかった。我々の見つけた重要な事実は液体とこの乱れた状態の間に特異な相転移が存在することである。

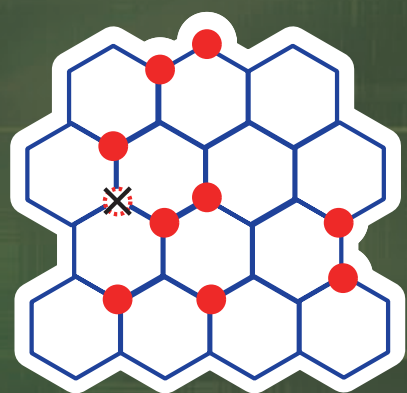


図1 格子点上に粒子を置くパズル問題。ただし、印の格子点のように近傍に2個以上の粒子があるところには粒子は置けない。

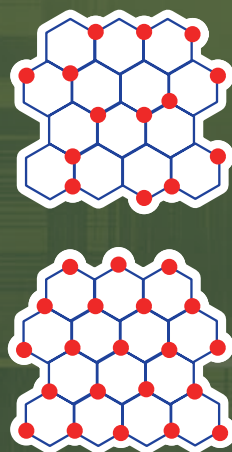


図2 粒子密度1/3(上)と粒子密度1/2(下)のときの解の例

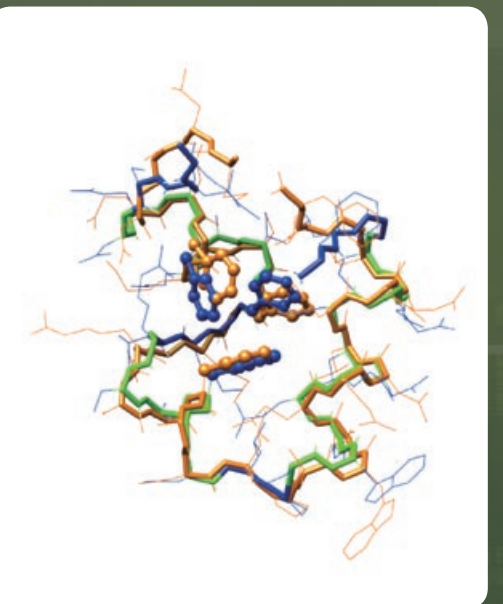


図3 水溶性タンパク質villin headpieceの構造。水分子をあらわに取り入れ、マルチカノニカルレプリカ交換MD法を用いて得られた構造(黄色)が、実験で決定された構造(緑と青)とよく重なっていることがわかる。
— 名古屋大学 岡本祐幸氏の提供による

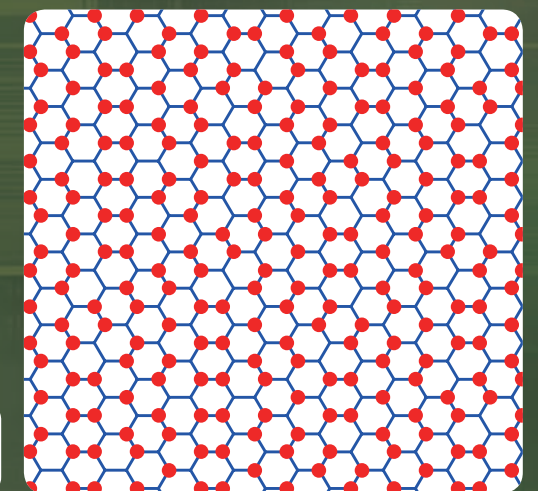


図4 交換モンテカルロ法で見つけた解の例

Exchange Monte Carlo Method

計算物質科学研究センター設立にあたって

スーパーコンピュータ「京」の戦略的利用と 計算科学の振興のために



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)
(計算物質科学イニシアティブ(CMSI) 総括責任者)

常行 真司

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、世界最速(2012年現在)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)として活動を開始しました。

CMSIは、しばしば「文化が違う」とも言われる3分野を一つにまとめた初めての組織です。計画立案には3研究所の共同利用スパコンユーザを中心に、コミュニティの意見が広く取り入れられています。また構成機関に所属していない研究者であっても個人として企画に参加することのできる、オープンな組織です。

物性研究所計算物質科学研究センターは、このCMSIの活動を支え、先端的計算物質科学の研究を推進するため、2011年4月に設立されました。本センターは物性研究所物質設計評価施設のスーパーコンピュータ共同利用と連携し、並列度の高い計算を用いた先端的研究の推進、大規模並列ソフトウェア・アルゴリズムの開発とその普及などを通じて、計算物質科学を振興し、次世代の計算科学の担い手となる人材を育成することを目指しています。また「京」コンピュータが設置されている

神戸ポートアイランドの理化学研究所計算科学研究機構ビル内に分室を設けて、研究スペース、研究会・研修会など分野間交流の場、大規模並列化プログラミングに関する情報を提供し、「京」を利用する物質科学研究者をサポートしています。

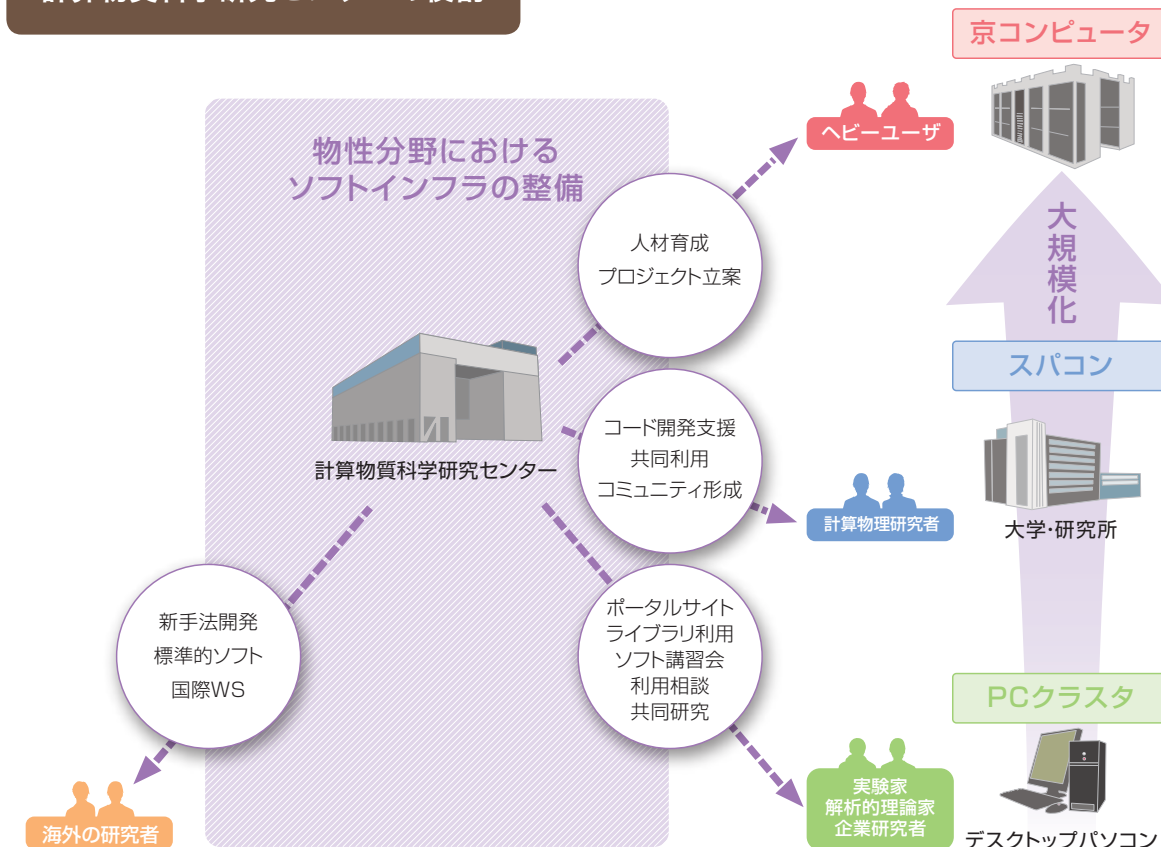
私たちは、全国共同利用研究所である物性研究所の利点を生かし、物性実験研究者と計算物質科学研究者をつなぐ窓口として、あるいはSPRing-8、J-PARC、京コンピュータという我が国が世界に誇る3つの大型実験施設の連携窓口として、様々な企画を用意しています。実験研究者も含め、広く研究者の皆様のご参加をお待ちしています。



計算物質科学イニシアティブ (CMSI)
URL : <http://cms-initiative.jp/>

事務局 (柏) 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5
東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター
Tel : 04-7136-3279 Fax : 04-7136-3441
E-mail : contact@cms-initiative.jp

計算物質科学研究センターの役割



CMSI 運営体制





2011年4月 神戸分室を開設しました

2011年のISC11におけるTOP500で、世界1位の性能獲得をしたスーパーコンピュータ「京」。この「京」が設置してある理化学研究所計算科学研究機構（AICS）内に物性研究所計算物質科学研究センターの分室を設置しました。この分室はHPCI戦略プログラム分野2を推進するCMSIの神戸拠点でもあり、多くの研究機関の計算物質科学研究者がここに集結して、2011年4月から活動を開始しています。2012年11月の「京」の本格利用開始に向けて、現在、試験的な利用により準備を整えているところです。

CMSIの役割は、「京」を中核とするHPCIを活用した大規模計算を共通のキーワードとして、物性科学、分子科学、材料科学の3分野の計算物質科学研究者が集い、学術的・社会的にインパクトの高い成果を創出し、同時に次の世代に向けた新しい研究体制を構築することにあります。特に神戸拠点では、他の戦略プログラムやAICSとの交流を深めることによって、計算機科学を含む異分野と連携した、これまでにない計算科学の融合発展を目指しています。

センター神戸分室の役割は、最新の大規模並列計算に関する情報の収集と展開に加え、神戸拠点を利用するCMSI研究者の技術的・事務的なサポート

を通じてCMSIの活動をサポートすることです。そのために物性研スタッフが常駐し、技術情報の収集やその展開に努めています。将来的には、並列化技術などに関する各種セミナーや講習会などの活動を通じて、実験研究者や企業研究者も含む一般の研究者に対して開かれた計算物質科学の情報発信拠点にしたいと考えています。

センター神戸分室は、天気によければ明石海峡も望める眺望の良い場所にあります。恵まれた研究環境の中で、新しい予測や発見がもたらされることを期待しています。

センター神戸分室では見学も歓迎いたします。
事前にご一報の上、お越しください。



〒650-0047 神戸市中央区港島南町7-1-26 R501
独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構内
東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター 神戸分室
Tel : 078-940-5681 Fax : 078-304-0170
E-mail : contact@cms-initiative.jp

スパコン歴史年表

物性研スパコンと主な計算物理

1960年
▼
1995年1月

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

- 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

1995年1月
▼
2000年3月

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

- 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年3月
▼
2005年3月

日立 SR8000/60 model F1
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リング理論の検証
- 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年3月
▼
2010年6月

日立 SR11000 model J1/48
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年7月
▼
現在

NEC SX-9
SGI Altix ICE 8400EX

- 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



富士通 FACOM 202 (PC2)



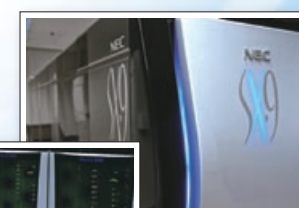
日立 SR8000/60 model F1



SGI Origin 2800/384



SGI Altix ICE 8400EX



NEC SX-9



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
計算物質科学研究センター

2012年 1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/>