



# 戦略ソフト & オーダーN計算

---

大野隆央

独立行政法人 物質・材料研究機構 (NIMS)

計算材料科学研究センター (CMSC)

文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」 (H14~H16)

文部科学省ITプログラム「戦略的革新シミュレーションソフトウェアの研究開発」 (H17~H19)

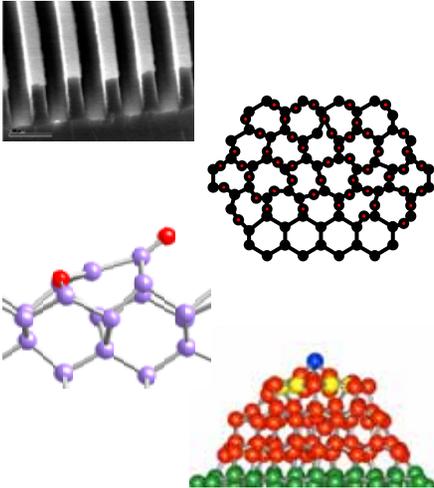


グループ名 「代表ソフトウェア名」	2003年6月公開ソフトウェア	
	名 称	機 能
次世代量子化学計算 「Protein DF」	Protein DF	大規模タンパク質の 量子化学計算
タンパク質・化学物質 相互作用解析 「ABINIT-MP BioStation」	ABINIT-MP BioStation Viewer	非経験的FMO法による 相互作用解析・可視化
ナノシミュレーション 「CHASE-3PT」	PHASE ※2003年9月公開	第一原理擬ポテンシャル バンド計算
次世代流体解析 「FrontFlow」	FrontFlow-blue FrontFlow-red	ターボ機械・流体音解析 燃焼・混相流解析
次世代構造解析 「NEXST」	NEXST-FMM-Fracture2D NEXST-MPS-Solid2D NEXST-FEM-Solid	2次元FMM破壊力学解析 2次元MPS法構造解析 3次元有限要素法構造解析
統合プラットフォーム 「RINDOW」	PSEワークベンチ	PSE対応ワークベンチ編集
HPCミドルウェア 「HPC-MW」	hpc-mw-solver-test	並列反復法ソルバー のテスト

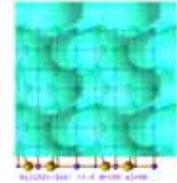
# ナノシミュレーション・システム： 戦略的革新ソフトウェア開発

目的： ナノ物質・材料の形成・構造・物性・機能の高精度な解析・予測

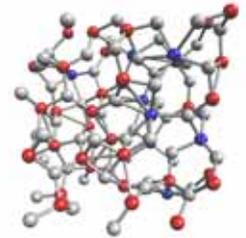
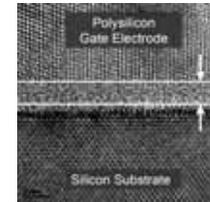
## ナノプロセス解析



## 実験解析



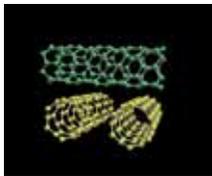
## 誘電体設計



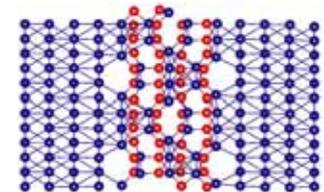
### CHASE-3PT

<p><b>基盤ソフト</b></p> <p>PHASE ABCAP CIAO</p> <p><b>大規模系</b></p> <p>CAMUS FXZTX</p>	<p><b>物性予測</b></p> <p>Phonon UVSOR ASCOT</p> <p><b>実験解析</b></p> <p>STM XPS</p>
---	--

## MEMS解析

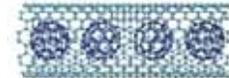


## 伝導特性解析



ソフト公開:

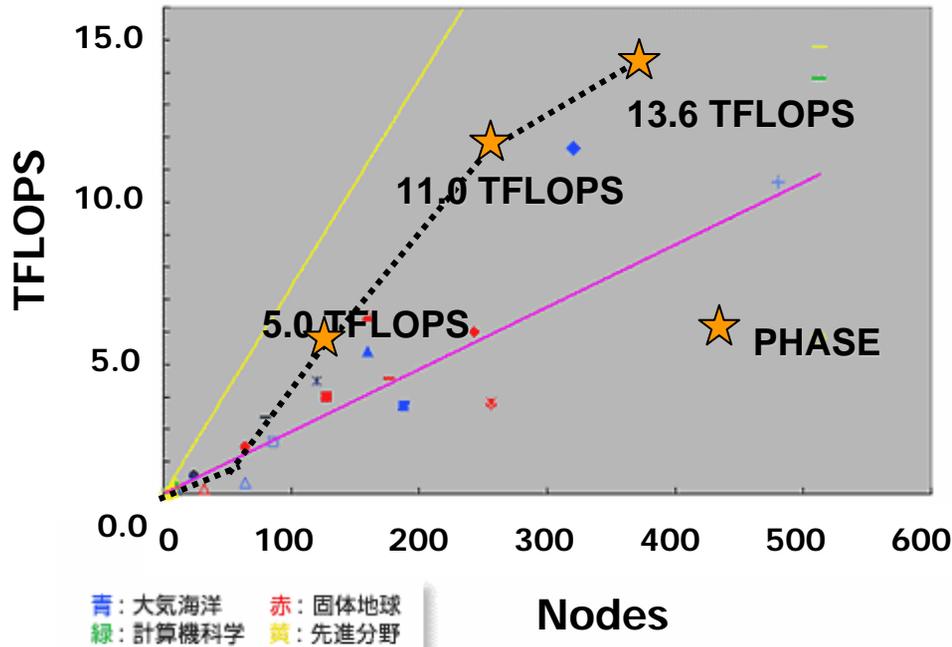
<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/theme/nanoscal/>



# PHASE 実行性能: ノード/Tflops

## 地球シミュレータ利用

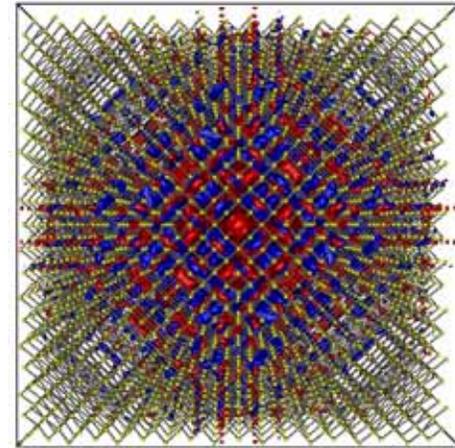
使用ノード数	実効性能(TFLOPS)	性能比
128	5.0	61%
256	11.0	67%
380	13.6	56%



原子数	ノード数	並列化率
2000原子	128ノード	99.939540%
3456原子	256ノード	99.956762%
5832原子	384ノード	99.992455%

ベクトル化率>99.4%

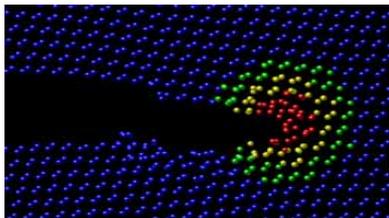
Si中の不純物  $\text{Si}_{5831}\text{As}$



## ハイブリッド手法

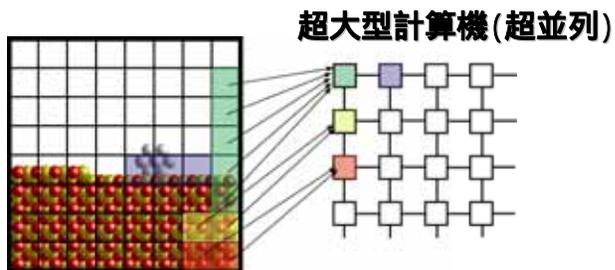
異なる手法を融合

量子力学 - 古典力学 - 連続体力学



## オーダーN手法

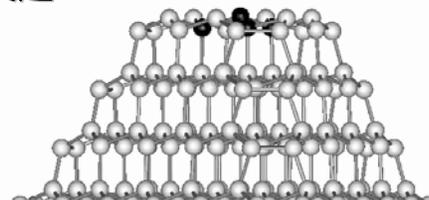
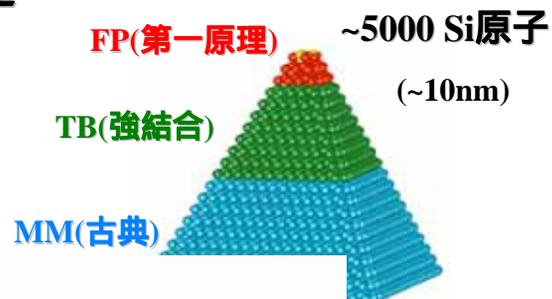
計算時間が原子数に比例



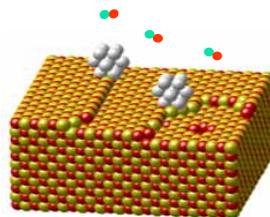
AFMチップ先端構造  
ナノ構造の観測、創成



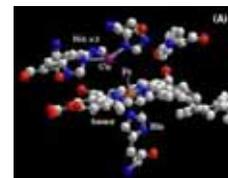
先端Si原子の突起?



ナノ触媒設計(燃料電池、生体触媒など)



金属ナノクラスター



生体酵素

# 第一原理オーダーN法: CONQUEST

UCL (英国), NIMSで共同開発

## 超大規模系に対する第一原理計算

- ・高い並列性能
- ・超並列機、ベクトル並列機、PC cluster

## 密度行列最適化

## 複数の基底

- ・Pseudo Atomic Orbitals (PAOs): 高効率
- ・Blip functions: 高精度(平面波基底と同程度)

## 精度の異なる計算手法を実現

## 対角化も可能



## オーダーN法の 現実系への適用

表面ナノ構造、生体物質、、、

## CONQUEST計算階層構造

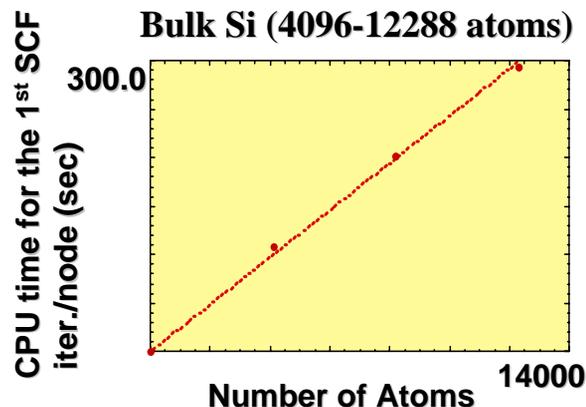
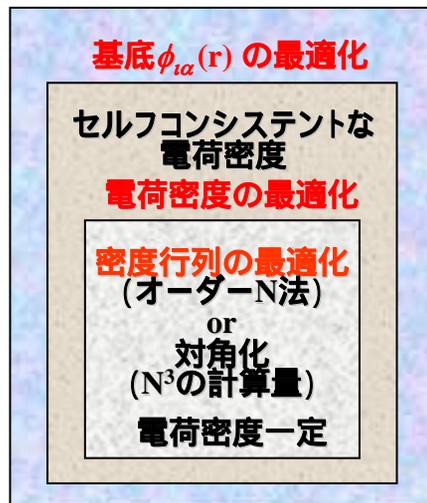
Full DFT計算



SCF-AITB計算



NSCF-AITB計算



# Si(001)表面上のGeクラスター

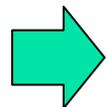
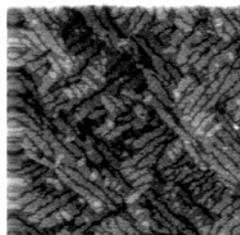
Ge/Si(001)

格子不整合による歪み

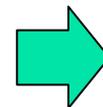
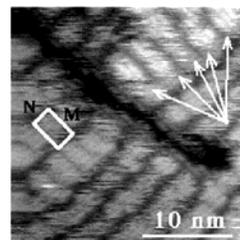
自己組織化ナノ構造  
Hetero-epitaxial系  
格子不整合

=> Stranski-Krastanow 成長

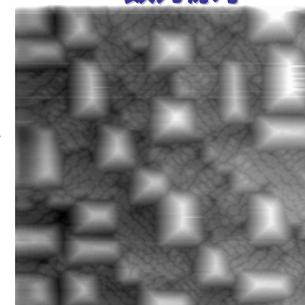
2 x N構造  
~100原子



M x N構造  
数千原子



“hut (山小屋)” クラスター  
数万原子

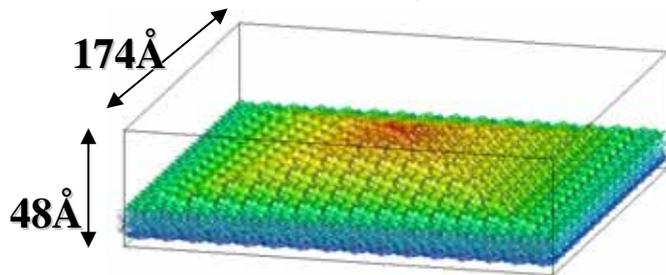


ナノ構造

数10nm x 数10nm

Hut cluster 28x28 (15.2nm x 15.2nm)  
on Si基板 (17.4nm x 17.4nm)

全22,746原子



ES (64node=512cpu、1/10 of the ES) で計算  
DMM: ~10min  
NSCF-AITB計算(密度行列及び構造の最適化)

**大規模系の構造緩和:** 約10万原子群

**長時間dynamics:** 連続的な計算

**自由energy計算**

**安定構造探索:** 拡張アンサンブル法等 (並列的な計算)

**反応経路探索:** NEB法、Meta-dynamics法

約10万原子群のナノ物質の構造緩和

約1万原子群のナノ物質の構造創成・触媒機能解析

膜タンパク質の構造緩和

タンパク質の安定構造・機能解析

第一原理法

オーダーN法

QM/MM法

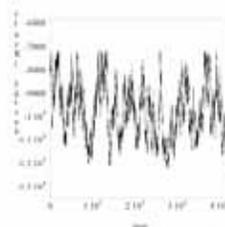
Hybrid法

オーダーN法/replica法

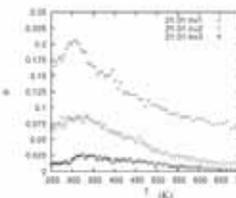
第一原理法/replica法

...

拡張アンサンブル法 (replica-exchange MD) による  $\beta 2$ -microglobulin の部分ペプチドの構造解析



replicaのエネルギー変化の例  
エネルギー空間上のrandom walk  
効率の良いサンプリングの実現



$\beta$ -hairpin形成確率の温度依存性  
上から順に1, 2, 3- $\beta$ bridgeに対応

- ・ランダム構造からの $\beta$ -hairpin形成(水中)。
- ・高い $\beta$ -hairpin形成の確率。
- ・ $\beta$ -hairpin形成確率は $\alpha$ -helixと異なり温度の非単調関数。



## 解析手法

量子論的 / 経験的解析手法の開発、大規模化・高精度化

## マルチスケール機能シミュレーション・システム

構造・物性の**解析** → 物性・機能の**設計**

単一構造 → 複合構造・階層構造

結晶、ナノ構造、生体高分子

デバイス素子、ナノ組織、ナノ複合体、生体系

数100原子の短時間MD計算 → 大規模構造の最適化 (数10万原子以上)  
長時間 (nsec以上) MD計算

高速計算機 (Tflops) → 次世代計算機 (PFlops)

## ナノテクノロジー

ナノ材料設計 / ナノ機能設計      新しいものづくり

## 産官学連携

知見の共有と創成