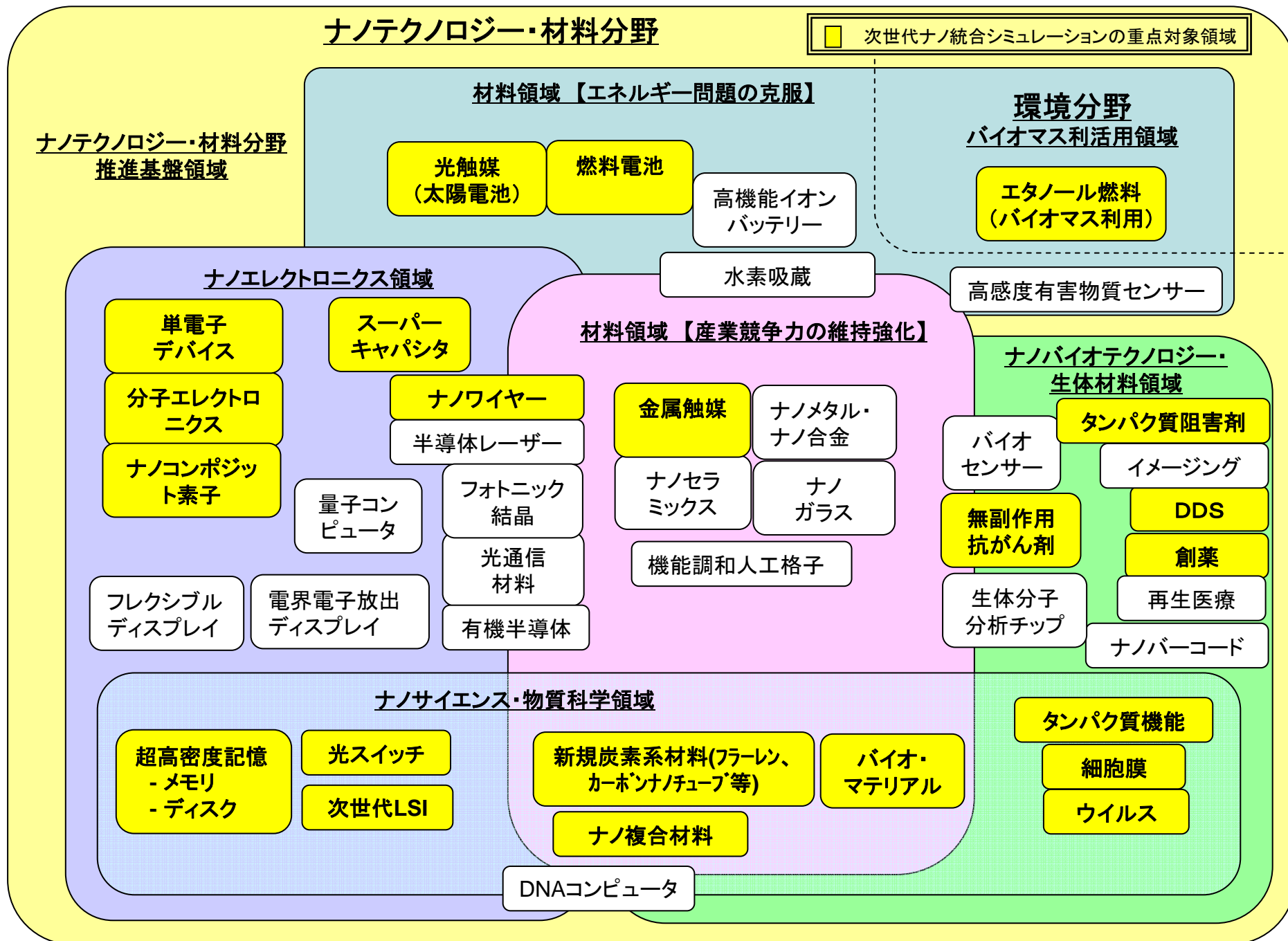


次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2007  
分科会E(ナノ統合シミュレーション)  
報告

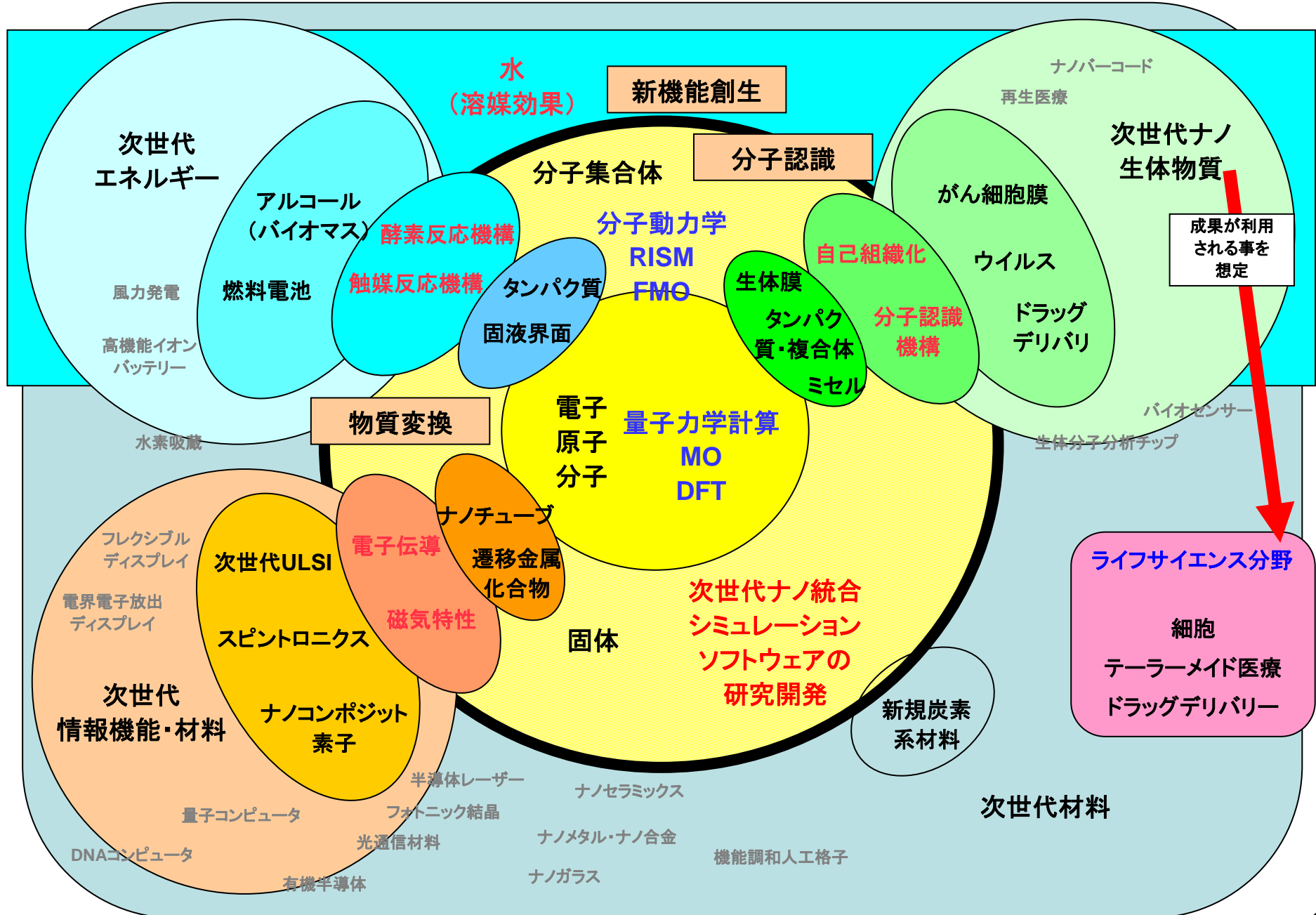
文部科学省、次世代スパコンプロジェクト  
「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発  
ーナノ分野のグランドチャレンジ研究開発ー」

分子科学研究所  
平田文男

# ナノ分野グランドチャレンジの構造化 ～応用分野～



# ナノ分野グランドチャレンジ領域の俯瞰と関連



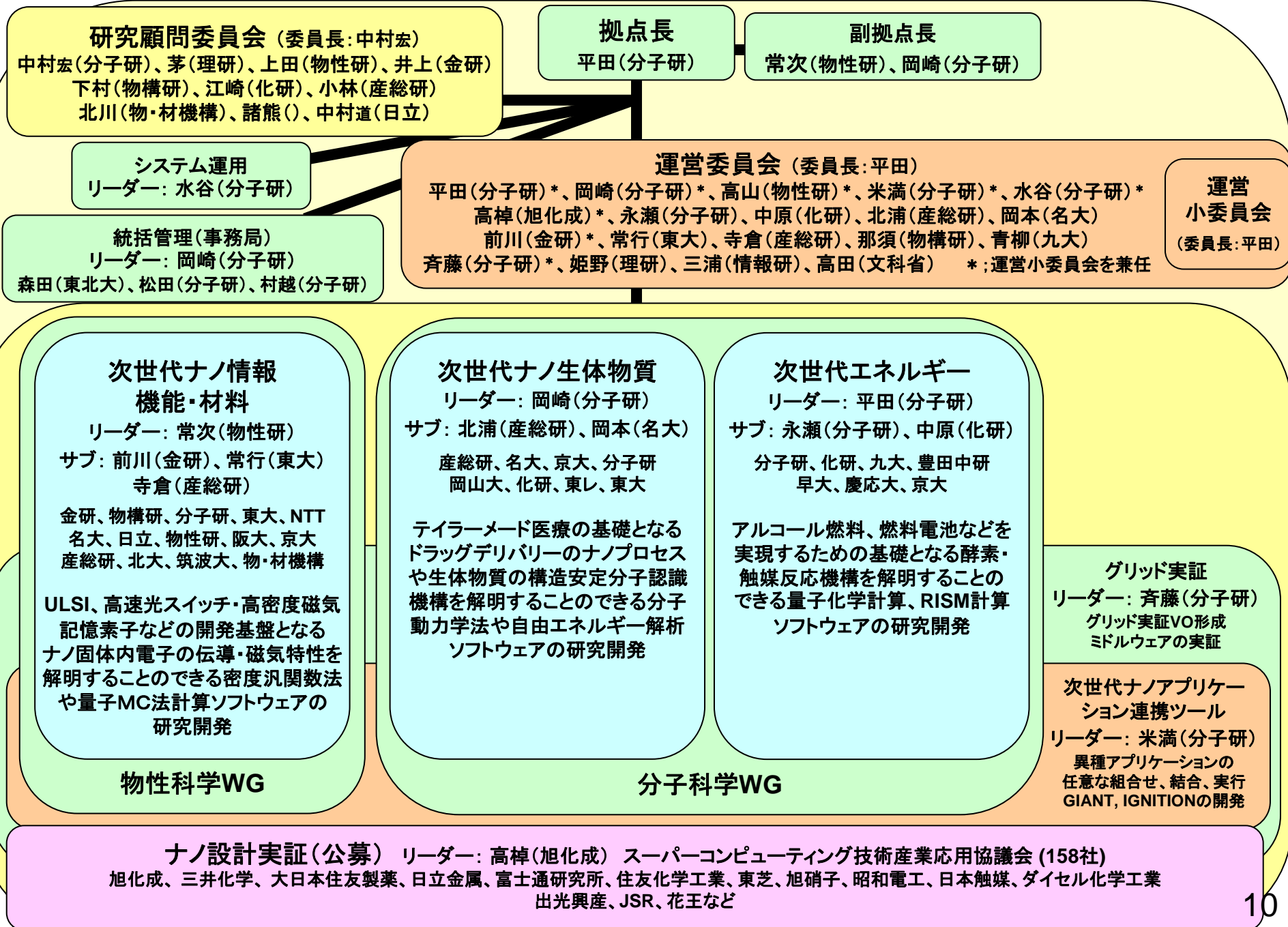
## グランドチャレンジ課題

次世代コンピュータでしか解決できない大規模計算

次世代コンピュータ(性能)だけでは解決できない問題  
(マルチスケール・マルチフィジックス)

これらの問題を解決する計算科学的方法論  
およびプログラムを開発

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発拠点



# 内容1 課題・方法1

## 次世代ナノ情報機能・材料

デバイスの更なる高密度実装を目指し、ボトムアップのナノテクノロジーを取入れた新規な電子デバイスの開発が求められている。実験だけでは困難なナノの世界での技術開発に資する計算科学方法論の確立に貢献する。

ナノスケール物質内電子系の新現象・新機能の探索のための計算科学的技術の構築



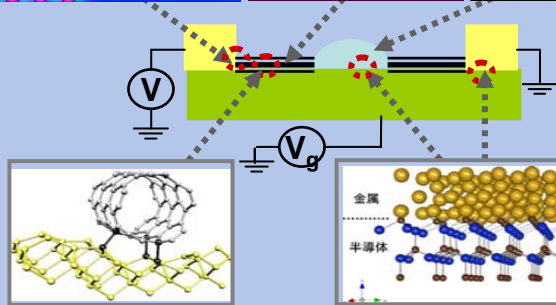
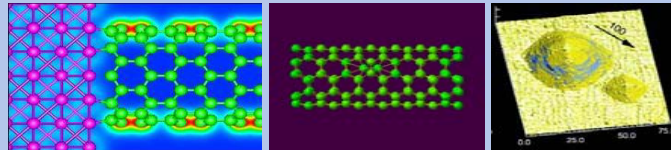
ナノアーキテクチャに対するマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション技術の開発



32nm技術ノードデバイスなど、高速応答・省エネルギーの次世代電子技術への貢献

### ナノ電子デバイス

1. 10nmレベルの基本ナノ部品(量子細線、量子ドット)の特性の解析と予測



2. 電極問題、ゲート作用等、デバイスとしての複合系の機能解析と予測

このような研究のためには

10万原子系第一原理計算、電子相関、自己組織化機構、非平衡状態での構造安定性、弾性・非弾性散乱の扱いが必要

しかしながら現時点では、従来の手法を用いても

超大規模電子状態計算のための実用的計算手法、および、電子応答特性における電子相関効果や非平衡状態での構造予測、伝導における散乱現象などの解析技術が不十分。

ボトルネックは

全電子数の3乗で増える計算時間、および、電子相関効果や電子散乱効果の正確な取り扱いの困難さのため、マルチスケールシミュレーションはほとんど不可能。

本グループにおける挑戦的問題解決

超並列計算とオーダーN法による大規模電子状態計算、非平衡グリーン関数法、さらに、マルチスケール法の開発、採用により、次世代スーパーコンピュータの性能をフルに活用

さらには、新規方法論を用いて

電極と量子細線の接合抵抗の解析やナノデバイスのゲートの機構の解明のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションが可能となる。

これらにより、従来は不可能であった

超高密度実装、高速応答、省エネルギーなどを旨とする電子デバイス設計の計算科学的方法論を構築。



## 内容2 課題・方法2 次世代ナノ生体物質

生命体を構成するナノ物質のシミュレーションを可能とする方法論を確立することにより、テーラーメイド医療を目指した次世代生命体シミュレーションのナノ基盤を構築する。

ナノスケールの生体物質の構造や機能を分子レベルで理解するための分子科学、計算科学方法論の確立



ナノ生体物質の複合系であるウイルスの分子プロセスを解析することのできる方法論の確立



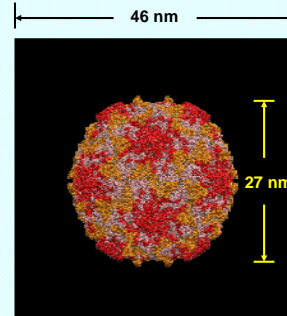
ウイルスカプシドの自由エネルギーレベルでの相互作用、動的なふるまいをシミュレートできる方法論

### ウイルスの全原子シミュレーション

分子レベルの安定構造と熱運動  
構成タンパク質間の接合構造

熱やpHがウイルスに与える影響  
水や空気などの環境とウイルス  
化学物質とウイルス構造

細胞膜、タンパク質との相互作用  
認識



小児マヒウイルス

ウイルスを分子科学、計算科学の俎上に  
将来的には感染機構、免疫機構への展開の可能性  
予防法、治療法の開発に寄与

このような研究のためには

ウイルス(溶媒である水も含めると1000万原子系)のグローバルな構造変化、長時間運動を追跡する必要

しかしながら現時点では、分子動力学法を用いても

せいぜいが、10万原子系に対して100ナノ秒の計算、決まった構造の周りの限られた運動が追跡可能なだけ

ボトルネックは

計算機能力が低い、高度に並列化、汎用化した1000万原子系のクーロン相互作用系の実用的な計算方法がない

本グループにおける挑戦的問題解決

大規模系のクーロン相互作用の厳密な評価法の開発や新規アルゴリズムによる完全領域分割化により、次世代スーパーコンピュータの性能をフルに活用

さらには、新規方法論を用いて

RISM法による溶媒効果の評価、エネルギー表示、熱力学的積分法による自由エネルギー計算

これらにより、従来は不可能であった

1000万原子系に対するマイクロ秒の計算により、自由エネルギーレベルでの相互作用、動的なふるまいの解析を実現

# 内容3 課題・方法3 次世代エネルギー

化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、利用、貯蔵技術、特に、草木質系バイオマスによってエタノールを生成するうえで本質的なプロセスである「酵素反応」の計算科学的方法論を確立する。

酵素反応機構を解明する理論的方法論の構築



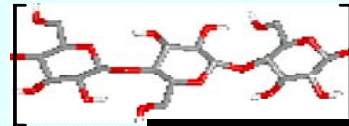
セルロース分解などの酵素反応へ展開



エタノールの生成機構等解明  
草木質系バイオマスエネルギー利用技術に貢献

セルロースからアルコールを生成するプロセス

セルロース



セルロース  
分解酵素



セルロース分解酵素

グルコースなどの単糖類

アルコール発酵  
(酵素:チマーゼ)

エタノール

このような研究のためには

酵素反応の特徴として、水の中で働くため水を取り扱える理論が不可欠である。また、化学反応に関する分子(基質)をタンパク質内に取り込ませる分子認識の問題の解決が必要。

しかしながら現時点では、量子化学を用いても

水がない環境下での化学反応、あるいは水中の小分子(100原子程度)しか解析することができない。

ボトルネックは

酵素・触媒反応においては、すべて溶液界面(例:水とタンパク質)の化学反応が関わっている。従来、この種の問題に適用できる方法論は皆無。

本グループにおける挑戦的問題解決

RISM理論(溶液)と量子化学(化学反応)の組合せやFFTの新規アルゴリズムなどの採用により、次世代スーパーコンピュータの性能をフルに活用。

さらには、新規方法論を用いて

RISM理論と3D-RISM理論の組合せより分子認識の問題を解決、両者と量子化学(FMO)の組合せより現実の溶媒中( $10^{23}$ 個)での酵素(1万原子)の電子状態計算を実現

これらにより、従来は不可能であった

セルロースからブドウ糖などの単糖類を生成するプロセスや単糖類からエタノールを生成する等の計算科学的方法論を構築。<sup>6</sup>



# ナノ分野グランドチャレンジ課題

次世代エネルギー

次世代ナノ生体物質

次世代ナノ情報機能・材料



## 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

連携ツール  
GIANT, IGNITION

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

フェイズ・フィールド法

量子非線形応答

熱力学的積分法

自由エネルギー

化学反応

量子伝導

強相関効果

量子古典混合近似

エネルギー表示法

フラグメントMO法

非平衡状態

経路積分法

自己組織化

粗視化モデル

非断熱遷移

オーダーN

量子モンテカルロ法

拡張アンサンブル法

分子認識

励起状態

密度汎関数法

厳密対角化法

モンテカルロ法

溶媒効果

相対論的CI計算

実空間第一原理  
ナノ物質シミュレータ

動的密度行列  
繰り込み群法

高並列  
汎用分子動力学  
シミュレーションソフト

RISM/3D-RISM

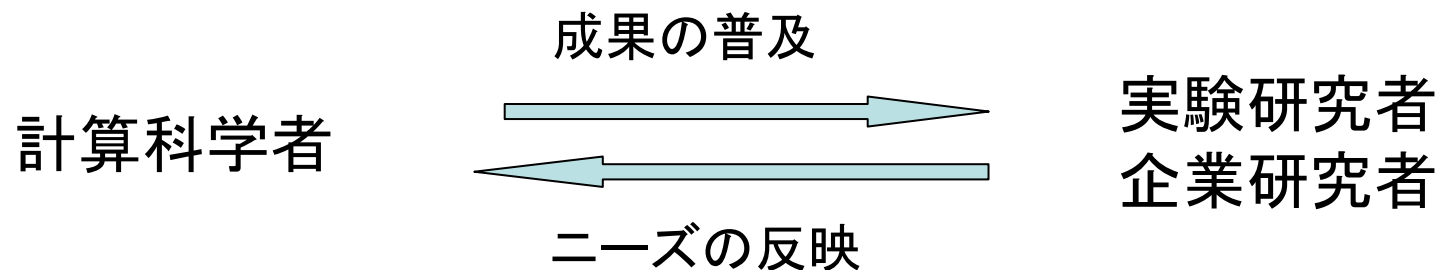
高速量子化学  
計算ソフト

中核アプリケーション

方法論開発・超並列化によりペタフロップス級性能を実現

## ワーキンググループ(分子科学、物性科学)の設置

プロジェクト外の計算科学者、実験科学者、企業研究者  
+プロジェクトのコアメンバー



## プロジェクトの企画への参加

コアメンバーとの共同研究、勉強会、研究会、講習会  
(勉強会、研究会、講習会への参加について旅費を支給)

(1) アプリケーショングループとハードウェアグループとの密接な連携

(2) 次世代スパコンを中核としたCSIに基づくコミュニティーVO形成