

研究成果展開事業 研究成果最適展開支援プログラム
本格研究開発ステージ シーズ育成タイプ 事後評価報告書

研究開発課題名	: ナノスケール材料向け超大規模電子構造計算プログラムの実用化研究開発
プロジェクトリーダー	: (株)ヒューリンクス
所属機関	: (株)ヒューリンクス
研究責任者	: 藤原毅夫 (東京大学)

1. 研究開発の目的

100 ナノスケール材料の量子力学的振る舞いをシミュレーションするための実用的プログラムを研究開発する。東京大学藤原教授グループが研究開発したオーダーN アルゴリズムに基づく強結合法プログラム (ELSES) をシーズとし、産業界が材料開発時に実用的に用いることを可能にするために必要な以下の機能を研究開発する。(1)強結合パラメータ自動算出プログラムの研究開発、(2)MPI 並列による超高速計算機能の研究開発 (3)操作性に優れた GUI 機能の研究開発、(4)実用的な適用事例を蓄積。

これらにより従来の第一原理計算では取り扱えなかった高分子材料、非晶質材料、界面、欠陥等の大規模かつ長時間の量子力学的挙動のシミュレーションを可能とする。

2. 研究開発の概要

①成果

本研究開発では LDA によるバンド構造と全エネルギーを基礎にした新しい強結合理論 (Total Energy assisted Tight Binding method based on local density approximation of density functional theory: TE-TB) の定式化を考案し、これに基づいたパラメータ自動算出プログラムを完成させた。このプログラムコードを、Si の格子定数の変化を含めた結晶多形 (ダイヤモンド構造、面心立方、単純立方格子など) 構造に適用し、バンド構造だけでなく全エネルギーも高精度に再現可能な強結合パラメータセットを決めることを可能にした。すなわち、バンド構造と全エネルギーに関する Transferable な強結合理論の定式化、実用化を実現した。

シーズプログラム ELSES を MPI 並列化した。京コンピュータ全ノード (67 万コア) で並列効率 70% 以上を実現し、また INTEL 系のクラスター計算機でも数 1,000 コア並列まで線型に高速化が実現できた。

以上の 2 つの課題が解決されたことにより、はるかに大きな系においてははるかに長時間にわたる動的現象を、第一原理手法と同一の精度でシミュレーションできる方法が確立され、具体的な系に関する開発現場での研究が可能となる糸口を付けることができた。

また、実用化に向けた入力・可視化支援 GUI の研究開発を進め、超大規模系、長時間シミュレーション結果を、様々な観点から (例えば、原子位置、波動関数、電荷分布、温度や各種エネルギーなどの変化を) 同時可視化し、超大規模系、長時間シミュレーションに伴うビッグ・データ処理に関する対応策を実現した。

研究開発目標	達成度
①強結合パラメータ自動算出プログラムの研究開発 (目標達成度100%)	①新しい強結合理論 TE-TB 法を開発し、それに基づきパラメータ自動計算プログラムパッケージ TB-PAC を完成した。 結晶多形かつ格子定数の異なる Si 固体について、一つのパラメータセットにより第一原理計算と全エネルギー、バンド構造を完全に再現し、構造変化を

	<p>含む未知な環境まで含めて、定性的・定量的に十分信頼できるナノ材料シミュレーションが実行可能であることを確認した。以上により、超大規模系の長時間動的振舞いのシミュレーションを行う強力なツールを開発した。</p>
<p>②MPI 並列による超高速計算機能の研究開発(目標達成度100%)</p>	<p>②京コンピュータ全ノード(67万コア)を使って1億原子系で並列効率 73%を達成し、当初目標を凌駕する成果を出した。INTEL クラスタ計算機に対しても 960 コア計算機で 1 万原子~100 万原子系についてほぼ線型の並列性能を計測した。</p>
<p>③操作性に優れたGUI機能の研究開発(目標達成度100%)</p>	<p>本プログラムの並列性能は極めて高く、100万原子を超える大規模計算が実現可能であることを確認した。</p> <p>③計算パラメータの設定、構造データの入力、および計算対象となる分子データの編集(原子の追加・削除、原子種の変更等)を可能とする GUI を作成した。</p>
<p>④実用的な適用事例を蓄積(目標達成度50%)</p>	<p>可視化機能では通常分子、結晶構造アニメーション、電荷分布、力場、電子状態表示に加え、大規模・長時間 MD 計算結果の分析機能として、原子構造状態と物理量の時間変化の「同期表示」、指定原子の経路追跡機能を開発した。</p> <p>さらに WINDOWS 向けの ELSESES 計算結果可視化ソフト VisVAR を開発し、初心者でも原子構造、電子構造の可視化を可能とした。</p>
<p>④実用的な適用事例を蓄積(目標達成度50%)</p>	<p>④実用的な適用事例</p> <p>Si 結晶多形、化合物半導体(SiC、GaAs 等)、分子性固体(固体水素、固体酸素、氷)の電子状態、全エネルギー計算、Li 固体 LISICON の動的特性、拡散経路、活性化エネルギー等、様々な固体の計算を行った。</p> <p>また、電気伝導度計算、ロンドン分散力計算機能を研究開発した。</p> <p>計画した MD 計算については、主に時間的制約のため期間内には間に合わなかった。</p>

②今後の展開

我々は、本プロジェクトにより下記 3 点においてシーズプログラム ELSESES(Extra Large Scale Electronic Structure calculation)を実用化に向け大きく発展させた。即ち、①新しい強結合理論を構築し LDA に相当する信頼性を持つプログラムを研究開発し、②京コンピュータ全ノードで並列効率 70%超を達成という超高速計算機能を実現し、③大規模計算結果の分析を可能にするユニークな可視化ツールを開発した。

100mn、1nsec という大規模、かつ長時間の量子力学計算を LDA と同程度の精度で実現可能なシミュレ

一歩は世界的にも存在せず、本プロジェクトにより、我々は量子力学計算の未知の領域の端を開いた。今後これをさらに発展させソフトウェアの実用化に取り組む。

3. 総合所見

概ね目標を達成し、次の研究開発フェーズに進むための成果が得られており、今後の取り組み次第ではイノベーション創出の可能性がある。

中核技術の構築に関しては十分に目標を達成したが、計算手法の適用事例は少ない。この手法が得意とする物性計算の範囲をより明確にする必要がある。

今後はより具体的な戦略を掲げ、企業が強いリーダーシップを発揮して事業化を目指していただきたい。