JAIST Repository
https://dspace.jaist.ac.jp/

Title	北陸先端科学技術大学院大学　共有計算サーバ使用成果報告2007
Author(s)	太田, 理; 尾崎, 泰助; 佐藤, 幸紀 ほか
Citation	Technical memorandum (School of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology), IS-TM-2008-002: 1-37
Issue Date	2008-05-09
Type	Others
Text version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/10119/4412
Rights	
Description	テクニカルメモランダム（北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科）

JAIST
JAPAN
ADVANCED INSTITUTE OF
SCIENCE AND TECHNOLOGY

Japan Advanced Institute of Science and Technology

北陸先端科学技術大学院大学
共有計算サーバ使用成果報告 2007

太田理, 尾崎泰助, 佐藤幸紀 編

2008 年 5 月 9 日

IS-TM-2008-002

北陸先端科学技術大学院大学

情報科学研究科

〒923-1292 石川県能美市旭台 1-1

要旨

本編，2007 年度に北陸先端科学技術大学院大学において情報科学センター，知識科学教育研究センターの提供する計算サーバおよび並列計算機を用いて行われた研究のうち，各著者のご協力によって集めることが出来た研究の概要および文献リストを紹介する.

目次

1 JAIST における共有計算サーバ環境 3

2 情報科学分野の計算サーバ利用研究 7

2.1 鼻腔内における熱流体解析……7
2.2 ステントを含む血管内流れ……8
2.3 3 層レイヤーにおける血流解析……9
2.4 大規模計算のリアルタイム可視化……9
2.5 強化学習を用いたコンピュータ将棋における局面評価関数の設計……10
2.6 量子モンテカルロ法による第一原理電子状態計算:Cr_2 分子の試行節生成……11
2.7 オセロの定石の評価……15
2.8 自然言語処理のための大規模機械学習……16
2.9 Model-based investigation of the activation patterns of the tongue muscles in articulation……17

3 材料科学分野の計算サーバ利用研究 18

3.1 生物系のプロトントランスファに関する理論的解析 ー酵素触媒機構の解明ー……18
3.2 オーダーN 大規模密度汎関数法コード:OpenMX の開発と応用……20
3.3 ノンコリニア磁気相関をもった $Pr_2Ir_2O_7$ の電子構造計算……22
3.4 自己無撞着 GW 法の開発……23
3.5 第一原理計算による表面光学応答解析……24
3.6 光受容タンパク質の水和構造とダイナミクス……25
3.7 Gaussian03 を用いたシクロファンの最適構造計算……28
3.8 Variety of MO calculations from energy and geometry optimization to calculation on excited states……29
3.9 Theoretical analysis of magnetic coupling in sandwich clusters $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ 30
3.10 First principles calculations of nitrogen doped carbon nanostructures……31
3.11 Annual Report about Using Computational Servers……32
3.12 Effects of Carbon Supports on Pt Nano-cluster Catalyst……33
3.13 有機エレクトロニクス分野における共有計算サーバ利用研究……34

4 知識科学分野の計算サーバ利用研究 35

4.1 密度汎関数法による白金-カーボンナノチューブ新規材料探索と物性評価……35
4.2 a great effort to experimentally synthesize size-controlled nanoparticles on carbon nanotube……36

5 謝辞 37

1. JAIST における共有計算サーバ環境

情報科学センター 助教 佐藤幸紀
情報科学研究科 博士課程後期 太田 理

北陸先端科学技術大学院大学(JAIST)では、全学で共有利用可能な計算サーバは、その利用者組織である mpc グループ(超並列計算機 Massively Parallel Computing systems に由来)と計算機の実務的な運用を担当する情報科学センターとが連携を取りながら運用が行われている。図 1 に情報科学センターと mpc グループの概要を示す。mpc グループは情報科学センターとは独立した利用者組織であり、ユーザー相互の情報交換や共有計算機リソース利用の調整を自主的に行う。現在のところ mpc グループの活動はメーリングリスト(mpc@jaist.ac.jp)での議論が中心である。情報科学センターは並列計算機の導入、H/W や S/W の保守、各種サポートを担当する。また、情報科学センターは各計算機に対して半期に 1 度程度の利用者講習会を主催し、ユーザーの技術レベル向上へのサポートを行っている。

2007 年 3 月現在の学内に提供されている計算サーバの概要を表 1 にまとめた。分散メモリ型の Cray XT-3、分散共有メモリ型の Altix4700、そしてベクトル型の SX-8 など, 近年の主要なアーキテクチャを網羅した構成になっている。情報科学センター所有の計算サーバは学内ユーザー全てに解放され、学内のアカウントを持つ者であれば課金管理などは特に行われずに自由に使える。また、知識科学教育研究センターの管理する Hitachi SR11000 も学内での利用を行うことが可能である。

JAIST における計算サーバ利用状況は、高利用率を示している。特に、xt-3 は、2008 年 1 月以降においては連日フル稼働しており、新規のユーザーが利用できないという問題点が mpc グループのメーリングリストにて話し合われた。これは、既にジョブを投入している固定ユーザーが自分のジョブが終わった直後に再度ジョブを投入するため、新規のユーザーが新しくジョブを投入できないことに由来する。この問題を打破するために、mpc グループのコアなユーザーらがバッチシステムの導入を呼びかけ、2008 年 2 月末に実験的に xt3 の片方のシステム(xt-3b)へのバッチシステムの導入を行った。これにより、従来からの mpc メーリングリストを通じたユーザー間の自主的な CPU 利用調整による運用から、バッチシステムによるジョブ管理という方向を試行している。

2007 年末には SGI Altix3700 から同社製の Altix4700 へのリプレースが行われた。導入当初はメモリ障害などによるシステムの緊急停止が多かったが、現在は安定稼動が行われ、利用率も非常に高い水準となっている。Alitx4700 のサービス開始直前に High Performance Linpack というベンチマークプログラムを用いた性能評価を行った。HPLinpack は近年の世界的なスーパーコンピュータのランキングをまとめた Top500 のベンチマークとしてしても利用されている。Intel コンパイラ 10.0 と Intel MKL により生成したバイナリコードを用いて問題サイズ N=240000 にて実行したとき、理論性能(1.2TFlops)の 89%に相当する 1.067TFlops を記録した。このような非常に高

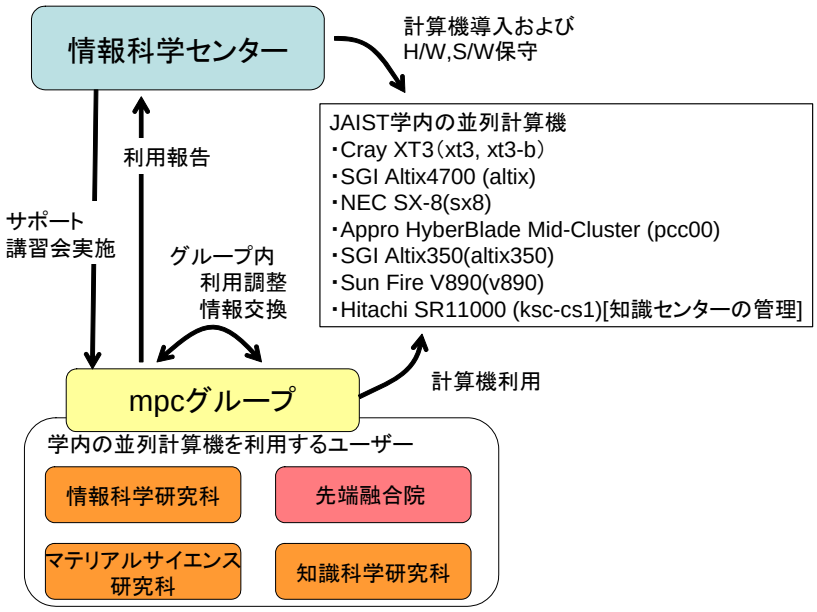

図 1　情報科学センターと mpc グループ

い実効性能比を達成したのは Altix4700 の大規模な共有メモリ（2.25TB）と CPU 高速なネットワークのためと推測される。

本報告「北陸先端科学技術大学院大学　共有計算サーバ使用成果報告 2007」は情報科学センターから提供されている共有計算サーバを利用した研究の概要とその成果報告である。各ユーザーのニーズを的確に把握し、さらに充実した計算機環境を構築することを目的として、mpcグループの有志と情報科学センターにより mpc メーリングリストにおいて本報告への協力の依頼を行った。その結果、各著者のご厚意によって情報科学分野から 9 件、材料科学分野から 13 件、知識科学分野から 2 件の報告の提出をいただいた。これらの報告より依然として数値流体力学および材料科学分野において多数の研究が共有計算サーバを用いて行なわれていることがわかる。また、近年の傾向として、情報科学分野での人工知能や自然言語処理といった JAIST において広く研究されているテーマに関しても共有計算サーバの利用が広がっている。また材料科学分野における汎用的なアプリケーションを実行する環境としても共有計算サーバが広く利用されている。以上のように、共有計算サーバは基礎的な研究環境の一つとしてますます重要性を増しているといえる。

表 1:JAIST で利用可能な計算サーバ(2008 年 3 月)

機種名	主な仕様
SGI Altix4700	分散・共有メモリ型 CPU:インテル(R) Itanium2(R) プロセッサ 192CPU コア メモリ: 2304GB (24GB×96 台) メモリ空間は NUMAlink4(6.4GB/秒)ファブリック結合により共有される OS:SUSE Linux Enterprise Server 10 SP1 2007 年 12 月よりサービス開始。SGI Altix3700 は 2007 年 12 月でサービス終了。
Cray XT3	分散メモリ型 CPU: AMD Opteron 150(2.4GHz, 4.8GFLOPS) ×360 メモリ: 2.88TB (32GB×90 ノード) CPU 間接続: 3D トーラス結合 帯域幅: CPU-CPU 間 7.68GB/s(双方向) CPU-メモリ間 5.3GB/s ノードから外部へのデータ転送 7.68×18 = 138.24GB/s(双方向)
NEC SX-8	ベクトル型 CPU: ベクトル型 CPU ×8 (合計 128GFLOPS) メモリ:64GB(共有メモリ) メモリバンド幅:1CPU あたり 64GB/s (合計 612GB/s) ディスク装置:5TB(RAID5) OS:SUPER-UX(UNIX System V 準拠)
Sun Fire V890	CPU:Sun UltraSPARC-IV (1.35GHz) ×8 メモリ:64GB interconnection Sun Fireplane (9.6GB/s) ディスク装置:(/work) 400GB network:1000Base-SX, 1000Base-T OS:Solaris 10
SGI Altix350	CPU:Intel(R)Itanium(R)2(1.5GHz) ×12CPU, メモリ: 16GB NUMAlink ファブリック結合させた共有メモリ型
Apollo PC クラスタ	CPU:AMD Opteron DP Model 250(2.4GHz)×32 メモリ:4GB×32 ディスク装置:160GB×32 OS:SuSE Linux Enterprise Server 8, SCore 5.8
Hitachi SR11000 モデル K1	[知識センターの管理] CPU:POWER5(2.1GHz)×4 メモリ:128GB ディスク装置/work0, /work1:730GB, 1073GB OS:AIX

参考文献

[1] 佐藤 理史(編),"JAIST における超並列関連研究:1992 年度-1993 年度", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-94-0001, (1994).
[2] 佐藤 理史(編),"JAIST における超並列関連研究:1994 年度-1996 年度", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-97-3, (1997).
[3] 佐藤 理史(編),"JAIST における超並列関連研究(1997 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-98-1, (1998).
[4] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(1998 年度-2000 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-003, (2002).
[5] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2001 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-004, (2002).
[6] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2002 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2003-001, (2003).
[7] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2003 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2004-002, (2004).
[8] 林 亮子(編),"JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2004 年度)", 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2005-001, (2005).

2. 情報科学分野の計算サーバ利用研究

2.1. 鼻腔内における熱流体解析

情報科学研究科 博士前期課程 松澤研究室 工藤 之義

使用計算機:Altix4700

本研究では人間の鼻腔を研究対象している. 鼻腔とは人の頭部の前面に存在する鼻の入口から喉に続く空間のことで呼吸において空気の通り道になっている. 吸引した空気を適度な温度に加温・冷却する温度調整機能, 空気に適度な湿り気を与える湿度調整機能, 空気によって運ばれた匂いを感知する嗅覚機能, 声をきれいに響かせる清音機能などがある. 本研究では, 吸い込んだ空気を適度な湿り気を与える湿度調整機能に着目した. この機能は温度調整機能とともに人が生命活動をするには欠かせない重要な機能である.

これまでに人間の鼻腔を対象とした熱流体解析は行われてはいるが、湿度を考慮していない評価となっている. 本研究では鼻腔内では温度調整と湿度調整が同時に行われているため, 温度と湿度を同時に計算する必要がある. そこで湿度を考慮した熱流体解析を行った. その結果, 鼻腔内における湿度分布を明らかにし鼻腔の湿度調整機能を確認した. また湿度を考慮してない場合の計算結果と比較して鼻腔内における温度と湿度の関係を確認した[1][2].

熱流体解析には Fluent 社の汎用熱流体解析ソルバである Fluent6.2.16 を用いた. また Altix3700 上で並列計算を行うことで計算負荷を軽減し, 短時間でより多くのケースを解析することが出来て様々な検証を行うことができた. これにより様々なケースを比較することができ, より適切な湿度を考慮した計算を行うことができた.

研究実績

[1] 工藤之義, 堀内佑至, 中山敏男, 石川滋, 松澤照男:”湿度モデルを適用した鼻腔内熱流体解析”, 第 21 回 数値流体力学シンポジウム(2007)

[2] 工藤之義:“数値流体力学による鼻腔内湿度調整機能に関する研究”本学修士学位論文 2008.3

2.2. ステントを含む血管内流れ

情報科学研究科　博士後期課程　松澤研究室　森太志

使用計算機:Altix4700

近年，大動脈瘤や動脈硬化症などの循環器系疾患の治療方法として低侵襲的であるステント治療が注目されている．ステント治療は，閉塞または狭窄した血管疾患部位にステントと呼ばれる医療器具を配置することで血管を拡げ，内腔空間を保持する．しかし，ステント治療後，生体に異物であるステントを留置することで血液中の血小板がステント周辺に集まり血栓を生成し，治療部分で再狭窄を引き起こす可能性がある．また，ステント治療による病変部局所の診断は困難で，その診断方法はエコーによる血管造影が一般的である．これらのことより，ステント挿入後のシミュレーションをおこなうことで病変の発症・進展のメカニズムの解明や予防・治療の臨床支援に有効である可能性がある．

ステント挿入後の解析として，モデル形状を用いてステント挿入後の再疾患に血流がステントと直交する方向の壁ずり応力分布および壁ずり応力の空間勾配が関係していることが述べられている．しかし，ステント挿入後の血栓成長の可能性や流れの変化による影響について力学的要因との関係は明らかにされていない．

ステントを挿入した患者の Computed Tomography(CT)などの医療画像から血管形状の再構築をおこなう．しかし，ステントからのアーチファクトの影響によって血管部分の情報が失われるため形状の抽出をすることが難しい．そこで，本研究では Computed Tomography(CT)などの医療画像から血管部分を抽出し，実際の血管形状を再構築する．次に，ステント形状のモデル化をおこない，モデル化したステント形状を医療画像から再構築した血管形状に挿入し解析をおこなう．計算手法として，市販の汎用流体解析ソルバである Fluent6.3 を使用した．また，超並列計算機である SGI 社の Altix4700 を用いて計算をおこなった．その結果より，non-stent と stent の比較をおこないステントを挿入した効果を検証した．また，ステント近傍の流れの変化や壁ずり応力分布を明らかにすることで血栓成長の可能性を検討した．

研究業績

1. Futoshi MORI, Teruo MATSUZAWA, ”Blood Flow Analysis in the Aorta with a Stent Reconstructed Using Medical Images”, APCOM'07 in conjunction with EPMESC XI, pp.243, 2007.
2. Futoshi MORI, Teruo MATSUZAWA, ” Influence of Stent Implantation on Wall Shear Stress in the Aortic Arch”, The 7th International Symposium on Advanced Fluid Information and The 4th International Symposium on Transdisciplinary Fluid Integration AFI/TFI 2007, pp.52-p53, 2007
3. 森太志，松澤照男、”医療画像から再構築したステントを含む大動脈内流れ”，第 20 回バイオエンジニアリング講演会講演論文集，pp.255-pp256,2008

2.3. 3 層レイヤーによる血管内流れの連成解析

情報科学研究科 博士後期課程 松澤研究室 太田 理
使用計算機:Altix4700, Altix350

血管の構造は多層構造となっており, それぞれの層で, 特徴を有している. そのため, 物理パラメータが異なる. 一方, 大動脈解離が発症することがある. 解離の現象は血管壁の内層に傷が出来, その傷から血流が入り込み, 内層が剥がれることにより, 解離が進展していくと言われている. そこで, 血流と血管壁との流体構造連成計算し, 血管壁は多層構造とし, Altix4700 や Altix350 を使用して, 定常解析[1][2], 非定常解析[3]を行った. 解析ソルバには CFD-ACE+ V2007.2 を使用した. 定常解析では, 瘤が大動脈弓の中心にあり, また, 非定常解析においては, 下行大動脈に紡錘状瘤が発症したと想定し計算を行った. 瘤の出入り口付近で, 圧力が高いことや時間による振動が起こることが確認された.

研究業績

[1] Osamu Ohta, Feng Gao, Msahiro Watanabe, Ryuhei Yamaguchi, Teruo Matsuzawa: "Simulation of Aortic Aneurysm by Coupled Analysis in The Three-layers Structure", 2007 XIth INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON COMPUTER SIMULATION IN BIOMECHANICS, P84-85, 2007

[2] F. Gao, O. Ohta and T. Matsuzawa: "Fluid-structure interaction in layered aortic arch aneurysm model: assessing the combined influence of arch aneurysm and wall stiffness", Australasian Physical & Engineering Sciences in Medicine Volume 31 Number 1, P32-41, 2008

[3] O. Ohta, F. Gao, T. Matsuzawa: "The Descending Aortic Aneurysm under Vascular Structure having Three-layered using FSI", ICCES'08, pp.804-808, 2008

2.4. 大規模計算のリアルタイム可視化

情報科学研究科 博士後期課程 松澤研究室 太田 理
使用計算機:Altix4700, Altix350

計算科学において, 計算し結果を可視化する事までが一連の作業となる. 計算規模が大規模になると, この作業は時間を要することになる. 計算が発散したり, また, 計算結果を可視化したりする際, 多大な時間を要することになる. そのため, 計算と同時に可視化を行い, 計算状況の可視化する要求が生まれる. そこで, 我々は VisTrace を使用し, PC クラスタを使用して, 領域分割されたシミュレーションに対し, リアルタイム可視化を行った[1]. また, Altix4700 を使用し, 超大規模計算におけるリアルタイム可視化のコードを開発している.

研究業績

[1] Osamu Ohta, Hiroshi Oiwa, Teruo Matsuzawa: "A Real-time visualization system for numerical simulation that divides regions", ICCM2007, pp.239, 2007

2.5. 強化学習を用いたコンピュータ将棋における局面評価関数の設計

情報科学研究科　博士前期課程　飯田研究室　松井　利樹

使用計算機：Altix4700

本研究は名人に勝つ将棋プログラムの作成を目標としている．コンピュータ将棋が持つ大きな課題のひとつとして局面の形勢判断を行う評価関数の設計の難しさがあげられる．従来の手法では人間によって手動調整が行われてきたが、複雑な将棋の局面評価を人間が調整するのは困難を極める。そこで過去の対局データから強いプレイヤと同一の指し手を選択する評価関数の構築を目指し古典的な勾配法を用いて設計する。

モデルは非線形システムであり、考慮すべき評価項目は膨大である。また値を精度よく収束させるためには複雑な拘束条件が必要である。さらに目的関数が十分に滑らかでないため優秀な二次収束性を持ったニュートン法や最急降下法などの手法は適用できず収束速度は絶望的である。よって並列化により高速な環境を実現できなければ研究の進行は大きく阻害される。この並列化によって従来は三ヶ月かかっていた時間を一日に短縮する事ができた。設計した評価関数を飯田研究室で開発しているコンピュータ将棋TACOSに実装し有効性を確かめた。その結果、人間が九年もの歳月を掛けて作り上げた評価関数と同等のものを作る事に成功した。現在はさらに優れた評価関数を目指し実験中である。その結果、3万の棋譜からおよそ二億四千万のサンプルを使用し、八万程度の評価項目を最適化する事ができた。これは従来のCPUでは不可能だった規模である。またたくさんのデータを得ることにより様々な問題点や改善すべき点を知ることになり、従来の手法とは違った収束法を考案した。新たな収束法によって従来を上回る収束速度を実現した。

2.6. 量子モンテカルロ法による第一原理電子状態計算：Cr_2分子の試行節生成

情報科学研究科　前園涼，本郷研太，矢口裕，対馬孔聖

使用計算機：SX-8

2.6.1. はじめに

本研究グループは，電子物性（電子が担う物質の性質）に関する基礎理論に取り組んでいる．特に電子間の多体相互作用の扱いの難しさに起因して見解の一致を見ない数々の問題を意識して，基礎方程式の大規模並列計算機シミュレーションをできる限り恣意性を排除した形で実現することを主務とする．研究対象の数理的側面を強調すれば，多変数関数の零点位置（多体波動関数節面）のトポロジー構造の解析や多変数パラメータの最適化問題などが対象である．このような物性物理学と数理科学・情報科学との境界上に位置する問題について幅広い興味を持って研究を推進している．またこれに関連した高速科学技術計算の周辺領域を研究上の興味としている．特に，計算アルゴリズムの実装において，MPI 並列プログラミングに興味がある．この報告書では，多体波動関数節面のトポロジー構造を解析していく第一歩として，クロム分子（Cr_2）の量子モンテカルロ（QMC）試行節の生成について報告する．QMC 試行節の生成法を説明する前に，当該研究分野（第一原理計算）について簡単に触れておく．

第一原理計算では，シュレーディンガー方程式と呼ばれる固有値方程式を物理的に妥当な境界条件下で解いて，量子力学的定常状態を同定し，各種物性量を評価・解析することが主務である．しかしながら，相互作用する多数の電子に対して，シュレーディンガー方程式を連立させるという「量子多体問題」をまともに解くことは凡そ不可能である．そこで，変分原理「任意の試行関数λに対して，エネルギー汎関数$E[\lambda]$は真のエネルギーE_0の上限を与えるので，$E[\lambda]$が低いほどλは良い近似である」に基づき，固有値問題を変分形式「$\delta E[\lambda]/\delta\lambda = 0$」に焼き直して，近似計算を見通しよく実行して近似解を求める枠組みを採用する．近似精度と計算コストとの間にはトレードオフがあるので，実現可能な計算コストでいかにλあるいは$E[\lambda]$を精度よく近似するかが重要な問題となる．現在，広く用いられている第一原理計算手法は，多電子波動関数$(\lambda = \Phi(\mathbf{R}))$を扱う波動関数理論と電子密度$(\lambda = n(\mathbf{R}))$を扱う密度汎関数理論（DFT）である．本研究グループで扱っている量子モンテカルロ（QMC）法は前者に分類される．

QMC 法は，確率論的アルゴリズムに基づき，$\Phi(\mathbf{R})$を直接数値的に取り扱おうとする手法である．QMC 法の中でも特に高精度特性の点で注目されている拡散モンテカルロ（DMC）法は，時間依存多体シュレーディンガー方程式を虚時間方向の多次元拡散方程式と捉え，乱数による拡散シミュレーションにより固有関数を数値評価する．このとき，虚時間依存波動関数$\Phi(\mathbf{R}, \tau)$を拡散粒子分布とみなすので，Φは正定値でなければならない．しかし，Φは方程式$\Phi(\mathbf{R}) = 0$で表される節面（零点）を持ち，正領域と負領域に分割される．多次元拡散粒子に正負の符号を割り当てるような DMC アルゴリズムを採用しても，シグナル・ノイズ比が指数関数的に減衰するために，数値的に不安定な結果となる．DMC 法の実装では数値計算の安定性を確保するた

めに，従来法で求めた試行関数$\Phi_T(\mathbf{R})$の節位置を固定して，各節面領域内で拡散シミュレーションを行う節固定近似が採用される．節固定近似では節位置の近似精度に関して変分原理が存在するので，$\Phi_T(\mathbf{R})$の改良が DMC エネルギー精度の向上に直結する．そのため，多電子波動関数節面の構造解析が DMC 法における最重要課題のひとつとなっている．最後に，計算技術的側面について付言しておくと，QMC 計算は大規模並列計算アプリケーションとしての側面を持つ：QMC 法のアルゴリズムは本質的に並列的であり，プログラミングには通常 MPI (Massage-Passing Interface) を用いている．我々の利用している QMC 計算パッケージ (CASINO/Q-Walk) では，その並列化効率は 99%以上であり，並列化のスケーラビリティーが非常に高い．

Cr_2 分子の基底状態は，従来精度の第一原理手法ではその結合状態の再現は非常に困難であり，量子化学分野の難問として有名である．この点で，Cr_2 は QMC 計算の性能評価のためのベンチマーク計算として最適である．本研究の目的は，Cr_2 分子の QMC 計算を行うのに必要となる試行節を生成することである．

2.6.2. 計算手法

本研究では，量子化学計算で広く用いられている B3LYP を交換・相関汎関数E_{Xc}とする DFT 計算を行う．DFT 計算における基礎方程式である Kohn-Sham 方程式を解く上で，Kohn-Sham (KS) 軌道$\left\{\varphi_i^{\mathrm{KS}}(\mathbf{r})\right\}$を空間関数とスピン関数の積$\left\{\phi_i^{\alpha}\alpha,\ \phi_i^{\beta}\beta\right\}$で記述する．本研究では，空間関数に制限$\phi_i^{\alpha}=\phi_i^{\beta}$を課す DFT 計算（RB3LYP）と制限を外して $\phi_i^{\alpha}\neq\phi_i^{\beta}$とした DFT 計算 (UB3LYP) の２つの量子化学計算を，SX-8 上にインストールされている量子化学計算プログラム *Gaussian 03* (G03) を用いて実行した（1CPU，1GB メモリ）．KS 軌道の可視化には，SX-8 上にインストールされている *GaussView* を用いた．

2.6.3. 結果

RB3LYP 計算および UB3LYP 計算は，平衡核間距離の実験値($R_{\mathrm{eq}}=1.7019\,\text{Å}$)において実行した．RB3LYP および UB3LYP による Cr_2 分子の結合エネルギー値（孤立原子系と分子系の全エネルギー差）はそれぞれ，-2.88 eV および-0.22 eV であった．この結果は，解離原子状態の方が分子状態よりも安定であり，分子の結合状態を再現していないことを意味する．しかしながら，非制限計算によって約2.6 eV ほど結合エネルギーが改善しており，このことから，制限計算と非制限計算には大きな違いがあると思われる．制限計算と非制限計算の違いを示すために，図１に KS 占有軌道の等値面(±0.07)を示す．図中の左列は制限軌道$\left(\phi^{\alpha}=\phi^{\beta}\right)$，中列は非制限$\alpha$軌道$\left(\phi^{\alpha}\right)$，右列は非制限$\beta$軌道$\left(\phi^{\beta}\right)$である．図から分かるように，制限軌道と非制限軌道には非常に大きな違いが見られる：制限軌道は２つの原子核の中心を通る鏡映面に関して

対称であるのに対して，非制限軌道は非対称であり，α軌道およびβ軌道はそれぞれ，右側および左側の Cr 原子核の方に偏っている．

2.6.4. 今後の課題

QMC 試行節は，本研究で得られた KS 軌道から構成されるスレーター行列式として生成される．今後は，B3LYP を出発点として各種 E_{Xc} を構成し，QMC 試行節の E_{Xc} 依存性を検証する．QMC エネルギーの評価とともに，節のトポロジー構造を解析することで，多体波動関数節について幾何学的理解を深める．

2.6.5. 使用計算機

SX-8

2.6.6. 研究業績

なし

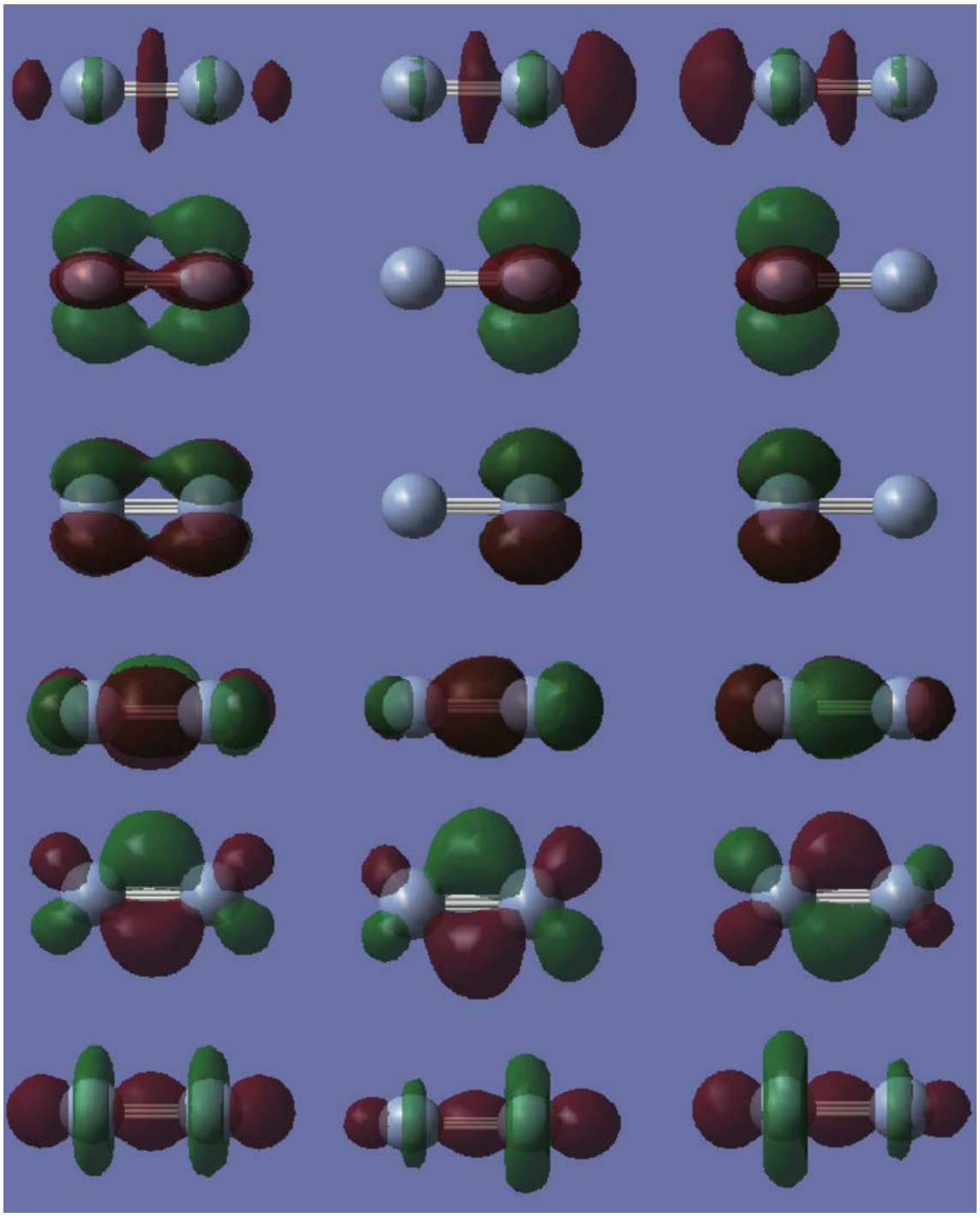

図 1: B3LYP に基づく DFT 計算によって算出した KS 軌道の等値面． 2 つの水色の球は Cr 原子核を表す．制限軌道（左列）は下から $6\sigma_g$, $3\pi_u$, $3\pi_u$, $1\delta_g$, $1\delta_g$, $7\sigma_g$ で，各行の中列と右列は対応する非制限軌道である．

2.7. オセロの定石の評価

情報科学研究科　助教　清見礼

使用計算機:Altix4700

オセロはかなり研究の進んだゲームであり，人間の世界チャンピオンでも良く書かれたプログラムには勝つことができない．ただし，双方が最前手を打った場合，先手と後手のいずれが勝つのか,あるいは引き分けになるのかは知られていない．現在の強いオセロプログラムは多かれ少なかれ Micheal Buro の一連の研究を参考にしている．そこでは Micheal Buro が公開している 120000 局の実戦譜をもとに，各局面の評価値を与えるパラメータ，読みの高速化を可能にするためのパラメータ，定石等を学習する．定石の学習は基本的には 120000 局それぞれの 60 局面(オセロは 1 局 60 手である) の評価値を計算し，それをもとに行う．今回は 120000 局の終盤 25 手をすべて読みきり，正確な評価値をえるという実験を行った．実験はそれぞれの局面を 1 つの CPU に割り振るかたちで,複数の CPU を用い並列に読むという単純な方法で行った．この実験によりえられた結果から，より正確な評価値用のパラメータも計算することが可能になる．本実験でえられた各局面の正確な評価値は[1] に公開している．また，読みきりに使用したプログラムは[2] に公開している．

成果物等

[1] http://members.jcom.home.ne.jp/masashi777/examples.gz

[2] http://members.jcom.home.ne.jp/masashi777/o8.tar.gz

2.8. 自然言語処理のための大規模機械学習

情報科学研究科　助教　風間　淳一

使用計算機：pcc

系列タグ付け器の大規模学習

固有表現認識など多くの重要な自然言語処理は、与えられた入力列に対してタグの列を出力するという系列タグ付け処理に分類される。この処理には、CRF などに代表されるような、入力中の種々の手がかり（素性）に対する適切な重みを機械学習によって求める方法がよく用いられる. これらの学習には、適度に大きなメモリ（4GB 以上）と計算パワーが必要とされ, また, 研究のためにはパラメータを様々に変えて多数の実験を行う必要がある。我々は、CRF などを用いた研究のため日常的にPC クラスタ「pcc」を利用している。

単語クラスタリングの分散・並列化

語の類似度を求めたり、語のクラスタリングを行う処理は、自然言語処理において基本的で重要な処理である。その方法の一つに、語が係る動詞の共通性をもとにしてクラスタリングを行う方法がある。しかし、この方法は語彙数が大きい場合、まず第一に大量のメモリ（40GB 以上）を必要とするため、通常の計算機では実行することができない。そこで、我々はクラスタリングアルゴリズムをMPI を用いて分散・並列化し、それをPC クラスタ「pcc」上で実行することで、50万語規模の大規模なクラスタリングを可能にした。

使用計算機

pcc

研究成果

[1] Jun'ichi Kazama and Kentaro Torisawa, A New Perceptron Algorithm for Sequence Labeling with
Non-local Features, *Proceedings of the 2007 Joint Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and Computational Natural Language Learning (EMNLP-CoNLL 2007) (Poster)*, pp. 315–324 (2007) [査読あり].

[2] Jun'ichi Kazama and Kentaro Torisawa, Exploiting Wikipedia as External Knowledge for Named
Entity Recognition *Proceedings of the 2007 Joint Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and Computational Natural Language Learning (EMNLP-CoNLL 2007)*, pp. 698–707 (2007). [査読あり].

[3] 風間淳一鳥澤健太郎, Web の資源から構築した複数の固有表現辞書を用いた日本語固有表現認識, 言語処理学会第14 回年次大会(2008) [査読なし].

2.9. Model-based investigation of the activation patterns of the tongue muscles in articulation

School of Information Science DANG-Lab Qiang FANG

Used Machine: xt3-a, xt3-b

Abstract

Speech scientist devoted themselves to exploring the mystery of how speech is produced for number of year via either acoustic or articulatory data measured during speech production. However, it has come to consensus that in continuous speech, the anticipation and carry over effect together render the final articulatory movement and corresponding acoustic consequences according to the input phonetic targets. Among them, carry over effects in mainly concerned with the mechanical properties of the articulatory system, while anticipation effects mainly concerned with the planning process in the brain. Hence, if we could separate these two effects involved in speech production, it will greatly help us understand the detail mechanism of speech production, such as what the phonetic targets are, and how they are organized. Physiological articulatory model is a powerful tool that helps people to achieve such goal. In the past few years, we have constructed a 3-dimensional (3D) physiological articulatory model. The key problem is how to efficiently control the model to generate speech. Typically, there are three kinds of control strategies: EMG signal, dynamic force-target mapping, and static force-target mapping. As to the EMG signals, it is difficult to measured. As for the dynamic-force mapping, it is difficult to evaluate the difference between the current configuration and the target configuration because it only describes the point targets of the tongue tip/dorsum which is not sufficient for controlling the 3D shape of the tongue. Hence, we use the static force-target mapping the construct the control module. It requires a number sample which gives the corresponding relationship between tongue shape and associated muscle force combinations, which need to be extracted from the simulations. So in recent several months, we conduct model simulations on the parallel computing servers.

Publications

Qiang FANG, Akikazu Nishikido, Satoru Fujita, Xugang LU, Jianwu DANG, “Investigation of 3D tongue shape for model control”, The 2008 Spring Conference of The Acoustical Society of Japan

Qiang FANG, “Model-based investigation of the activation patterns of the tongue muscles in articulation”, International Symposium on Biomechanics, Healthcare and Information Science

Qiang FANG, Satoru Fujita, Xugang LU, Jianwu DANG, “Investigation of functional relationships of the tongue muscles for model control”, submitted to PCC_2008

Qiang FANG, “Model-based investigation of the activation patterns of the tongue muscles in articulation”, Interspeech2008, submitted

3. 材料科学分野の計算サーバ利用研究

3.1. 生物系のプロトントランスファに関する理論的解析 －酵素触媒機構の解明－

ナノマテリアルテクノロジーセンター 助教 島原秀登

使用計算機：sx8, v890

目的：これまで,実験手法により「ヒスチジンの互変異性平衡は水素結合に支配される」という規則性を見出し,その経験則を用いて炭酸脱水酵素活性部位の亜鉛-His64 間の水素結合の作用様式を明らかとし,その結果触媒反応にみられるプロトントランスファのメカニズムを解明するという研究を行ってきた。今回,量子化学的計算機手法を用いて,その水素結合作用様式を観察し,実験-理論間の整合性を図ることでメカニズムを完全に記述することを目的とする.

概要：一般に酸・塩基が関わる化学反応を進行させるために,硫酸,水酸化ナトリウム等の苛酷な条件が必要とされる.しかし,生体でおこる酵素反応の多くは中性でうまく進行する.何故かといえば,活性中心にあるアミノ酸の官能基がプロトン(H^+)を一時的に供給する酸触媒になったり,受けとる塩基触媒になったりするからである.特に,中性に p*K*a をもつヒスチジン(His)は,その役割を担う能力が高く,酸(imidazolium)になったり,塩基(imidazole)になったりして触媒を行う.これらのことは多くの教科書においてとてもよく知られている.

この His の挙動は,古くから知られる炭酸脱水酵素の反応($CO_2+H_2O \Leftrightarrow HCO_3^- + H^+$)に,当てはめられている.生成される H^+が酵素活性中心から溶媒に移動するプロトントランスファの経路について説明を得るためである.その様子は,His 残基(His64)の酸塩基平衡が Zn-HOH の解離と対をなすように表現されることによって,分子内の水架橋を経由しておこる H^+の移動が説明される.酵素内の酸塩基触媒をうまく表すように思える.しかしながら,これは生成物である H^+が Zn と His64 の間をいったりきたり移動するだけで,これがどのようにして酵素の外へ放出されるかという問いに答えない.反応に関わる H+の情報が少ない中でメカニズムの予想が行われた状況だったのである.

これまでに,NMR 実験手法を用いて,この残基の平衡は酸塩基平衡の他に,互変異性平衡の特徴を際立ってもつことを発見した.これは,2 つの窒素が共に酸・塩基触媒としてはたらくことを示すものである.「His の互変異性平衡は水素結合相互作用に支配される」という規則性,つまり Nδ1-窒素と水素供与基の間に水素結合が形成されると,平衡は Nδ1-H 異性体に,そのような結合がないとNε2-H 異性体に偏るという経験則,を適用している. 著者は,この規則を His 類似化合物,酵素や蛋白質の His が置かれる環境とその互変異性をそれぞれ比較することから,発見した.その結果,互変異性平衡が Zn-HOH の解離と対をなすというような一時的に水架橋を構成する水分子に束縛がない描像が顕となった.これを,パズルのように, 反応における水素結合を形成しない段階にはめ込むと,触媒が繰り返されることで,生成物 H^+が放出される様子が確認された.

今回行う計算機実験では,His 互変異性を支配する水素結合を完全に読み解くことがメカニズムの完全記述に必要である.本年度,互変異性平衡が Zn-HOH の解離と水架橋を経由して対をなすモデル系を構築し,この間の水素結合の形成状態を確認してきた。この系は,量子化学的計算としては,相当大きな系であるため,高速ベクトル機能を有する計算機マシンを必要とし,そこに本大学の Gaussian03 実装 SX-8 マシンを使用することで,国際的に興味の高いこの領域に対し競争力の高い研究を行うことが可能となった.またデータ処理に Mathematica を v890 にて使用した。得られた自由エネルギーを評価した結果,実験理論間合理性の高い結果が収集された.以下は,本年度,上述計算機を使って出した成果を利用した研究および論文である.

発表論文・講演リスト

1.Tautomerism of histidine 64 associated with proton-transfer in catalysis of carbonic anhydrase., Shimahara H, Yoshida T, Shibata Y, Shimizu M, Kyogoku Y, Sakiyama F, Nakazawa T, Tate SI, Ohki SY, Kato T, Moriyama H, Kishida KI, Tano Y, Ohkubo T, Kobayashi Y., *J Biol Chem.*, 282, 13, 9646-56, 2007 査読あり論文

2. NMR Approach to His-64 Involved in Proton-Transfer Mechanism in Catalysis of Carbonic Anhydrase, Shimahara, H., Yoshida, T., Nakazawa, T., Ohkubo, T., & Kobayashi, Y., 12th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules, Paris, France, 2007.09.1-6 国際学会発表

3.Free Energy Calculation of Docking Structure of Azurin(I)-Cyto- chrome c551(III) Complex Systems by using the Energetic Representation, Nishikawa K, Yamamoto T, Sugiyama A, Purqon A, Mizukami T, Shimahara H, *Nagao H, Nishikawa K, AIP Conference Proceedings, 982, 331-336 国際学会紀要

4.Theoretical Study of Free Energy in Docking Stability of Azurin(II)-Cytochrome c551(II) Complex System, Yamamoto T, Nishikawa K, Sugiyama A, Purqon A, Mizukami T, Shimahara H, *Nagao H, Nishikawa K, AIP Conference Proceedings, 982, 784-787 国際学会紀要

5. 炭酸脱水酵素 II の触媒機構－His64 の互変異性とプロトントランスファ機能の相関－, 島原秀登、吉田卓也、水上卓、中沢隆、長尾秀実、大久保忠恭、小林祐次, 第3回日本炭酸脱水酵素研究学術集会 東京, 2007.09.22 国内学会学術奨励賞受賞

6.Carbonic Anhydrase の反応機構－His64 の互変異性とプロトントランスファ機能の相関－, 島原秀登,吉田卓也,水上卓,中沢隆,長尾秀実,大久保忠恭,小林祐次, 第 30 回日本分子生物学会年会第 80 回日本生化学会大会合同大会, 横浜, 2007.12.11-15 国内学会口頭講演

7.分子生物学的シミュレーションによるアズリン－シトクロム c551 複合体のドッキング構造に関する研究, 西川佳吾, 山本哲徳,杉山歩,Acep Purqon,水上卓,島原秀登,長尾秀実,西川清, 第 21 回分子シミュレーション討論会, 金沢, 2007.1126-28 国内学会 (金沢大学修士論文研究に使用)

8.自由エネルギー計算による Azurin(I)-Cytochrome c551(III)複合体のドッキング構造安定性に関する研究, 西川佳吾,山本哲徳,杉山歩,Acep Purqon,水上卓,島原秀登,長尾秀実,西川清, 第 45 回日本生物物理学会, 横浜, 2007.12.21-23 国内学会(金沢大学修士論文研究に使用)

9.Free Energy Calculation of Spaghetti-like Nanoclusters by Using the Energetic Representation, Purqon Acep, 西川圭吾, 山本哲徳, 水上卓, 島原秀登, 長尾秀実, 西川清, 第 45 回日本生物物理学会, 横浜, 2007.12.21-23 国内学会(金沢大学博士論文研究に使用)

3.2. オーダーN 大規模密度汎関数法コード:OpenMX の開発と応用

先端融合領域研究院　尾崎泰助

使用計算機:xt3-a, xt3-b

計算規模: 1～128 プロセッサ, 計算時間は最大で 20 日程度

研究の概要;『オーダーN 大規模密度汎関数法コード:OpenMX の開発と応用』

密度汎関数理論は金属、半導体、生体分子等の広範囲の物質群に適用可能な汎用性の高い手法であるが、その計算時間は系のサイズ(基底関数もしくは原子数)の三乗に比例しており、ナノメーターサイズの系を取り扱うことは実際上、困難である。我々は大規模系への密度汎関数理論の適用限界を拡張するために計算量が原子数に単に比例したオーダーN 法と呼ばれる新しい計算手法を開発している。開発された新しい計算手法はプログラムパッケージ:OpenMX (http://www.openmx-square.org/) に組み込み、GNU-GPL の規約の下で無償公開している。本年度の研究内容を以下に要約する。

(1) クリロフ部分空間法の開発とプログラムの高度並列化

密度汎関数法の枠組みにおいて計算時間が単に原子数に比例した新しいオーダー(N)クリロフ部分空間法を開発した[1]。クリロフ部分空間法に基づいた本手法は各原子に対して定義されたクリロフ部分空間内で有効ハミルトニアンを対角化する手法であり、これまで提案されたリカージョン法と分割統治法の利点を併せ持つ手法である。本手法は本質的に並列計算に適した手法であり、超大規模並列計算においても高い並列性能を持つことが期待される。本年度は並列特性をルーチン毎に詳細に解析し、ルーチン群を高並列ルーチン、中並列ルーチン、低並列ルーチンの三種に分類した。OpenMX Ver.3.36 における並列化効率は、4096 原子のダイヤモンド格子を 128 プロセッサー(Cray XT3)で計算した場合、およそ 76%である。さらに並列化効率を向上させるためには低並列化ルーチンの改良が必要であるが、これらのルーチンはグリッド上の電子密度の通信を含んでおり、計算時間より通信時間が律速となっている。現在の一次元領域分割法による並列化ではこれ以上の並列化向上は困難である。現在、通信量の減少が期待できる三次元領域分割法を検討中である。

(2) マルチフェロイック $GaFeO_3$ の磁気特性に関する第一原理計算

強磁性、強誘電性等の強的秩序を示すマルチフェロイック系の一つである $GaFeO_3$ のノンコリニア磁気秩序を考慮した第一原理計算を行い、disorder のない理想構造において反強磁性が基底状態であることを見出した[2]。さらに八面体サイトのガリウム原子と鉄原子間で置換型の disorder が起こった状態もエネルギー的にほぼ縮退していた。この場合には系全体ではフェリ磁性となり、本来のガリウムサイトを占めている鉄原子がこのフェリ磁性に寄与していることが分かった。$GaFeO_3$ 中の鉄原子は化学量論的には d^5 の電子状態であり、軌道磁気モーメン

トはクエンチされていると考えられるが、八面体周辺の構造歪みのために 0.02 μ_B 程度の軌道磁気モーメントが生じることが分かった。

(3) 有限要素法による原子の超高精度 LDA 計算とビリアル定理

局所密度近似(LDA)や一般化勾配近似(GGA)に基づく第一原理計算の数値精度はミリ eV のオーダーであり、用いる計算手法・コードによって基底状態ですら相違することがしばしばである。精度保証の方法が確立していないため、与えられた近似の範囲内でどの計算結果が“数値的”に正しい解であるのか判別することは一般に容易ではない。本研究では精度保証の方法を確立するための準備段階として、有限要素法によって原子の超高精度 LDA 解を求め、水素からローレンシウム(Z=1～103)までに亘る参照データベースを作成した[3]。さらに virial 定理を利用し、数値解の精度を見積もる方法を提案した。データベースにおける水素からローレンシウム(Z=1～103)までに亘る数値解が virial 定理(2T+V=0)を 10^{-10} Hartree 以上の精度で満たしている。LDA、GGA を改良するためにはそれらの数値厳密解を知る必要があるため、高精度数値解は密度汎関数理論の改良の基盤データとなり得るものでもある。

(4) 効率的な構造最適化法の開発

これまでに大規模密度汎関数計算を実施するために OpenMX の開発を進めているが、その構造最適化法は Direct Inversion in the Iterative Subspace (DIIS)法を使用しており、しばしば収束が困難で最適化構造が得られない場合があった。今回、擬ニュートン法である Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)法、その拡張版である Rational Funtion(RF)法、さらに BFGS 法による近似ヘシアン行列における ill-condition 成分を取り除く Eigenvector Following(EF)法の三種類の手法を新たに組み込み、EF 法が安定で高速な最適化手法であることを見出し、多くの系で容易に最適化構造が得られるようになった。

[1] “O(N) Krylov subspace method for large scale ab initio electronic structure calculations”, T. Ozaki, Phys. Rev. B 74, 245101 (2006).
[2] “Magnetic ordering and exchange interactions in multiferroic GaFeO3”, M. J. Han, T. Ozaki, and J. Yu, Phys. Rev. B 75, 060404(R) (2007).
[3] “有限要素法による原子の超高精度 LDA 計算とビリアル定理”, 尾崎泰助, 文部科学省次世代スーパーコンピュータープロジェクト/次世代ナノ統合シミュレーションソフトウエアの研究開発、次世代ナノ情報機能・材料」成果報告会

3.3. ノンコリニア磁気相関をもった $Pr_2Ir_2O_7$ の電子構造計算

理化学研究所　小野田繁樹
（先端融合領域研究院　尾崎　泰助　准教授との共同研究）
使用計算機：xt3-a, xt3-b

パイロクロア格子系 $Pr_2Ir_2O_7$ は、およそ Pr イオンに 4f電子 2 個、Ir イオンに5d電子 5 個をそれぞれ持った金属結晶である。Pr イオンに局在磁気モーメントが誘起されるにもかかわらず、幾何学的フラストレーションのために最低温においても非自明な磁気秩序を示さず、また、20K 付近に近藤効果を彷彿させる電気抵抗の対数的増大が観測されている。さらに、これより低温で、通常の理論では説明できない異常ホール効果が観測されている。このような非自明な強い電子相関を示す $Pr_2Ir_2O_7$ の物性を理解するために、Linear Combination of Pseudo-Atomic Orbitals 法に基づいた LDA＋U 法（OPENMX 法（http://www.openmx-square.org/））により電子構造を計算した。cubic unit cell で88原子、特に、Pr f, g 軌道、Ir f 軌道の大自由度を考慮する必要性があるため、20~30CPU の並列計算で xt3 および xt3-b を断続的に半年間使用した。4f 電子、5d 電子に対してはスピン軌道相互作用が極めて大きいことから、これを考慮に入れた。その結果正四面体の頂点に位置する Pr サイトに大きな磁気モーメントを持った状態が実現されることがわかった。ただ、実験値と比較すると軌道磁気モーメントの大きさが過小評価されるという問題が残った。この Pr サイトの磁気モーメントは、正四面体の中心かその反対を向く傾向があり、強磁性的に自発磁化をもつとエネルギーが上昇することから、反強磁性的な相関があることがわかった。より詳細な磁気構造については、All-in, all-out と 2-in, 2-out の構造を持った状態がともに少なくとも準安定で、エネルギーがほぼ縮退していることがわかった。しかし、どちらの磁気相関が実現されているかを判別することは難しい。2-in, 2-out の構造は結晶の並進対称性を破るため、中性子散乱の Bragg ないし Diffusive scattering から検出できる可能性が高い。論文を投稿準備中である。

3.4. 自己無撞着 GW 法の開発

マテリアルサイエンス研究科 五味広喜

使用計算機:xt3-a, xt3-b

第一原理計算分野において、高温超伝導の発見以来、強相関電子系に対し、標準的な第一原理計算手法である局所密度波近似(Local Density Approximation - LDA)を超えた手法の開発に多くの興味が注がれている。しかしながら、有効な理論は皆無に等しい状況であり、強相関物質に対しては満足できる結果を得ていない。

第一原理計算分野において、最も成功したLDAは、一般的に電子の遮蔽効果を過大評価しているため、強相関電子系に対して適用する事ができない。また、LDAを越える手法の一つとして注目されている、一電子グリーン関数:G と遮蔽クーロン相互作用:W から成る GW(非自己無撞着 GW)近似は、半導体など多くの物質のバンド構造を LDA よりも精度良く説明する事を可能にした。しかしながら、強相関物質においては、LDA より改善されてはいるが信頼のおける結果が得られていない。この要因として、(1) 近似の出発点として採用する LDA の強相関電子系に対する貧弱さ、(2) 自己無撞着な方法では無いために、出発点に採用された波動関数が大きく改善される事が期待できない、(3) GW 近似そのものの問題、などが挙げられる。

そこで、これらの問題を解決するために、以下に述べる GW プログラムの開発に取り組んでいる。科学技術振興機構戦略的事業「複合手法を用いた電子構造計算技術の開発」(代表者:東京大学 藤原毅夫 教授)において、産業技術総合研究所 ARYASETIAWAN Ferdi 博士の下で、"1電子描像と多電子描像を結びつけた第一原理電子構造理論"の「GW 近似と動的平均場理論(DMFT)のハイブリット法(GW+DMFT)」を行うための、GW 近似の有限温度化、自己無撞着 GW プログラムの開発、及びこれらの大規模並列計算を可能にするための並列コード化である。これにより、強相関電子系のより高精度な解析とシミュレーションの高速化が実現可能になる。

現在、これらのコーディングがほぼ終了し、デバッグ計算を実施している。

使用計算機:XT3

3.5. 第一原理計算による表面光学応答解析

マテリアルサイエンス研究科 界面物性講座水谷研究室 助教 佐野陽之

使用計算機:Altix3700, Altix4700, sx8

＜目的＞

本研究では、表面の非線形光学応答を第一原理計算により求める手法を開発し、表面電子状態を反映した非線形光学応答の起源を探ると共に、実験結果の解析方法を確立することによりSHG法の応用分野を開拓することを目指す。

＜計算手法について＞

密度汎関数を用いた第一原理計算であるFLAPW (full-potential linearized-augmented-plane-wave)法によって系の電子状態を求め、さらに光による電子の遷移確率を摂動法により求めることによって、2次の非線形感受率(非線形光学応答の大きさを表す物理量)を計算する。

＜主要な結果＞

(1) Cu(001)清浄表面及び窒素吸着表面の電子状態に関する知見を得ることを目的に光第二高調波発生(SHG)測定を行った[1]。この実験結果を解析し表面 SH 応答の起源を明らかにするため、局所密度近似(LDA)に基づくFLAPW法を用いた第一原理計算を行いCu表面の非線形感受率を求めた。清浄表面及び窒素吸着表面(c(2x2))は、それぞれ19及び21 原子層のスラブでモデル化し、表面構造として Yoshimoto らの計算結果[2]を用いた。清浄表面及び窒素吸着表面の SH 光強度入射偏光角依存性の実験結果の主要な特徴(偏光角依存性の形状と窒素吸着によるSH応答の増大現象)を理論計算で概ね再現することが出来た。清浄表面のS偏光とP偏光の相対強度に関して理論計算の再現性がよくないが、これは計算では考慮されていないバルクの電気四重極子を起源とするSH応答が実験値に含まれているためと考えられる。窒素吸着による SH 応答の増大は、表面非線形感受率の2つの成分($\chi^{(2)}_{113}$, $\chi^{(2)}_{311}$)の変化によることが分かった。

[1] 宮岡秀治ら、物理学会第60回年次大会2005年3月24日(24aPS-168).

[2] Y. Yoshimoto and S. Tsuneyuki, Surf. Sci. 514, 200 (2002).

(2) バルクの電気四重極子を起源とするSH応答を計算する手法の開発を行うため、計算表式の導出を行い、実際に計算コードの作成を行った。現在、酸化チタンを対象にしたバルク起源のSH応答の計算を始めている。

☆主に使用した計算機:SGI-Altix3700, SGI-Altix4700, NEC-SX8

☆国内学会発表

佐野陽之、水谷五郎、W. Wolf, R. Podloucky, 宮岡秀治、飯森拓嗣、河村紀一、小森文夫
"Cu(001)表面のSH応答の第一原理計算による解析"
表面・界面スペクトロスコピー2007 2007年12月14-15日 (東北大電気通信研究所、秋保リゾートホテルクレセント)

3.6. 光受容タンパク質の水和構造とダイナミクス

マテリアルサイエンス研究科 助教 水上卓

使用計算機:sx8

タンパク質は多くの場合、水素結合・疎水結合などの弱い相互作用によってその立体構造を保っている。生理的温度においては大きく構造がゆらぐ中で機能発現をおこなうが、一方タンパク質反応における高効率性・高選択性から、機能発現メカニズムとそのゆらぎとの間に大きな相関があると考えられている。

またタンパク質の多くは水中に存在しており、表面のアミノ酸は近傍に存在する水分子と(水素結合・疎水結合などの弱い)相互作用を示す。これらのことから、タンパクと水和水のダイナミクスに関係があることが示唆されている。

本研究の目的は、タンパク質の構造変化における水和構造変化の寄与を調べることである。

今回ターゲットに選んだ Photoactive Yellow Protein(PYP)は *Halorhodospira halophila* の走光性機能をつかさどる光受容タンパク質である。発色団 *p*-coumaric acid の *trans-cis* 光異性化をトリガーとし, 複数の中間体を経て元の PYP 基底状態に戻る(光サイクル). PYP の情報伝達部位は PAS ドメインと呼ばれ, 広い生物種にわたる大きなファミリーをなしている(*Biochemistry*,47,p4759(2003), *JBC,* 278, p18434(2003)). 光サイクルにおいてミリ秒領域であらわれる pB 中間体は, 情報伝達機能が発現した状態と考えらている. またこの中間体の生成崩壊にファネル機構が関与していると推測されている.

我々は、まず発色団 *p*-coumaric acid の力場パラメータを得るために、PDB データより周辺アミノ酸残基を含んだ発色団系を構築し、Gassian03 パッケージ、B3LYP 法による電子状態計算を行った。次に、得られた resp charge データから力場パラメータを算出し、Amber パッケージを用いて基底状態 pG の分子動力学計算を行った。得られたトラジェクトリーデータ(10 ns)から、タンパク周辺に存在する水分子の挙動を検討した。

1.タンパク質表面と長時間水素結合をしている水分子を同定し、その中間散乱関数を求め、タンパク-水の結合形態との相関を検討した。

2.タンパク質表面からの距離を定義し、各距離における水分子の時空相関関数を計算し、距離との関係を検討した。

3.タンパク質と、表面に長時間安定に結合をしている水分子との主成分解析(PCA)を行い、その動的相関を検討した。

以上の研究において、タンパク-水の動的相互作用を見出した。コストの大きい Gaussian による電子状態計算および、水分子の相関関数の計算を sx8 で実行し、他のグループに先駆けて新しい成果を得ることができた。

学会発表;

==========

EABS & BSJ 2006
Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan
Date ：November 12-16, 2006
Venue ：Okinawa Convention Center, Okinawa, Japan
Organized by ：The Organizing Committee of EABS & BSJ 2006
Co-Organized by: Regional Biophysics Societies of China Beijing, China Taipei, Hong Kong, Japan and Korea
Molecular Dynamics Study of Hydrated Water Behavior in Photoactive Yellow Protein
Taku Mizukami1, Ayumu Sugiyama2, Hidemi Nagao2
1School of Materials Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology, Nomi, Ishikawa, Japan
2Division of Mathematical and Physical Science, Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University, Kakuma, Kanazawa, Japan
発表日:November 15 & 16
形式:ポスター発表

==========

International Symposium on " Molecular Theory for Real Systems"
27 -29 July, 2007
Kyoto Univ. (Katsura campus), Japan
"Dynamic properties and structure of hydration water in Photoactive Yellow Protein"
Taku Mizukami, Ayumu Sugiyama and Hidemi Nagao (JAIST, Kanazawa U)
発表日:27 日
形式:ポスター発表

==========

第 14 回 日本光生物学協会 年会
会期:2007 年 7 月 30 日～31 日
会場:奈良先端科学技術大学院大学ミレニアムホール
共催:奈良先端科学技術大学院大学
発表日:7 月 31 日(月)
P-16 光受容蛋白質 PYP 表面近傍に存在する水分子のダイナミクス
○水上 卓 1、杉山 歩 2、長尾秀美 2(1 北陸先端大・マテリアル、2 金沢大・自然)
形式:ポスター発表

==========

International Soft Matter Conference 2007
1 - 4 October 2007
Eurogress
Aachen, Germany
Protein-water interactions in photoactive yellow protein: A molecular dynamic study
Taku Mizukami1, Ayumu Sugiyama2, Hidemi Nagao2
1School of Materials Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology, Nomi, Ishikawa 923-1211, Japan
2Division of Methematical and Physical Science, Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University, Kakuma, Kanazawa, Ishikawa 920-1192, Japan
発表日:4 October
形式:口頭発表

==========

第 21 回分子シミュレーション討論会 講演プログラム
主催:分子シミュレーション研究会、分子科学研究所
共催:金沢大学理学部計算科学科
協賛:日本物理学会、日本化学会、日本薬学会、応用物理学会、生物物理学会、高分子学会、
溶液化学研究会。
会期:11 月 26 日(月) - 11 月 28 日(水)
会場:金沢歌劇座(旧観光会館) 石川県金沢市下本多町 6-27
http://cphys.s.kanazawa-u.ac.jp/~ms2007/index.html
209P Photoactive Yellow Protein と水和水のダイナミクス
(北陸先端大・マテリアル 1、金沢大・自然 2)
○水上卓 1、杉山歩 2、長尾秀実 2
発表日:28 日
形式:ポスター発表

==========

日本生物物理学会第 45 回年会
会期:2007 年 12 月 21(金)～23(日)
会場:パシフィコ横浜(横浜市西区みなとみらい一丁目)
分子動力学計算による Photoactive Yellow Protein の水和構造と自由エネルギー
○水上 卓 1、杉山 歩 2、西川 佳吾 2 、山本 哲徳 2 、長尾 秀実 1,2(北陸先端大・マテリアル 1、
金沢大院・自然 2)
形式:ポスター/口頭発表
発表日:23 日

==========

論文;"Protein-Water Interactions in Photoactive Yellow Protein: A Molecular Dynamic Study" Taku Mizukami, Ayumu Sugiyama, Hidemi Nagao, submitted.

3.7. Gaussian03 を用いたシクロファンの最適構造計算

マテリアルサイエンス研究科　辻本研究室　石川　乾

使用計算機:sx8

シクロファンとは、ベンゼン環(もしくは芳香環などの共役環系)が少なくとも一本の炭素鎖で架橋した輪状の有機化合物の総称である。これらシクロファンの輪の内部は中空になっているが、溶液中でシクロファンと金属イオン(例えばナトリウムイオン Na^+)や線状分子(例えばエチレングリコール $HOCH_2CH_2OH$)を混ぜ合わせると、シクロファンの中空にそれら金属イオンや線状分子が取り込まれることがある。この仕組みは、シクロファン内部の中空に発生している弱い力が、溶液中の金属イオンや線状分子と相互に引き合った結果、金属イオンや線状分子が溶媒分子に取り囲まれているよりもシクロファン内部に閉じ込められているほうがエネルギー的に安定であるからである。この内部に金属イオンや線状分子を取り込む性質を利用して、シクロファンは酵素のモデル物質としての研究や分子スイッチ・分子センサーへの利用などの研究がなされている。

シクロファンの、内部に分子を取り込む能力やその分子の選択性は、シクロファンの中空部の大きさや静電気的ポテンシャルによって予測することができる。つまり、分子構造からその分子の最適構造を計算させ、続いて中空部の電荷分布を求めることにより、そのシクロファンがどの種の分子を取り込むことができるかを予測することができると期待できる。この研究では新規に合成することに成功したシクロファンに関し、Gaussian03 を用いて最適構造計算をし、その立体構造を求めた。そしてこの計算によって求めた立体構造から取り込める可能性を持った分子の候補を選び出した。引き続き、候補分子がシクロファンに取り込まれることを実験的に示すことを試みる予定である。

研究成果リスト

平成 19 年度北陸地区講演会と研究発表会　ポスター発表

平成 19 年修士論文中間発表会　ポスター発表

平成 19 年現代 GP 科学技術英語シンポジウム　ポスター発表

3.8. Variety of MO calculations from energy and geometry optimization to calculation on excited states

Report from Dr. Atula S.D. Sandanayaka,
Host researcher: Dr Taku Hasobe
Used Machine: sx8

Our main purpose for heavily using of computational facilities in JAIST is Gaussian 03 calculation for supramolecular to get an overview of

(1) Physical and chemical properties of supramolecular analysis.

(2) Variety of MO calculations from energy and geometry optimization to calculation on excited states.

Performing of those computational studies of supramolecular are very important for us to get idea in advance for designing and synthesizing of supramolecular system for solar cell devices. These are our main goal for using large computational resources in JAIST. However, recently Gaussian 03 calculation for supramolecular system using ssh sx8 I have to wait for several weeks to complete calculation even I used several CPU. Sometime, I have to give up Gaussian calculation for big supramolecular (more than 1000 atoms) because of lengthy calculation period. If we have supercomputer facilities we can perform such calculation easily and get result shortly for solve important scientific questions that are being studied today with the use of large computational resources.

3.9. Theoretical analysis of magnetic coupling in sandwich clusters $V_n(C_6H_6)_{n+1}$

Research Center for Integrated Science
Hongming Weng, Taisuke Ozaki and Kiyoyuki Terakura
Using Machine: xt3-a and xt3-b

The mechanism of ferromagnetism stability in sandwich clusters $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ has been studied by first-principles calculation and model analysis. It is found that each of the three types of bonds between V and benzene (Bz) plays different roles. V $3dz^2$ orbital, extending along the molecular axis, is weakly hybridized with Bz's HOMO-1 orbital to form the σ-bond. It is quite localized and singly occupied, which contributes 1 μ_B to the magnetic moment but little to the magnetic coupling between neighboring V magnetic moments. The in-plane dx^2-y^2, dxy orbitals are hybridized with the LUMO of Bz and constitute the δ-bond. This hybridization is medium and crucial to the magnetic coupling though the δ states have no net contribution to the total magnetic moment. dxz, dyz and HOMO of Bz form a quite strong π-bond to hold the molecular structure but they are inactive in magnetism because their energy levels are far away from the Fermi level. Based on the results of first-principles calculation, we point out that the ferromagnetism stability is closely related with the mechanism proposed by Kanamori and Terakura [J. Kanamori and K. Terakura, J. Phys. Soc. Jpn. 70, 1433 (2001)]. However, the presence of edge Bzs in the cluster introduces an important modification and suppresses significantly the ferromagnetism stability. A simple model is constructed to explain the essence of the physical picture.

For this work, we employed OpenMX (Open source package for Material eXplorer) software package (http://www.openmx-square.org/) and performed the calculations on xt3 and xt3-b supercomputing machines.

This work has been published on J. Phys. Soc. Jpn. Volume: 77 Issue: 1 Article Number: 014301 (Jan. 2008)

3.10. First principles calculations of nitrogen doped carbon nanostructures

School of Materials Science, JAIST
Sheng Feng HUANG
Used Machine: xt3-a, xt3-b, altix4700

For typical proton exchange membrane fuel cell, platinum based catalysts are always used in the reaction. Since platinum is an extremely expensive metal of low abundance, how to reduce the usage and finding alternative catalytic material are very important for fuel cell development. One possible choice of these non-Pt catalysts is nitrogen-doped carbon, which shows enhanced catalytic activity more than carbon only.

In order to realize the detail mechanism of the catalytic reaction, a series of simulations for N-doped carbon are done by ab initio calculations based on density functional theories. A square graphite sheet with hydrogen terminated edges is used as model in the calculations. This system contains both zigzag and armchair type edges, so that different replacement sites for nitrogen atom and edge adsorption site for oxygen molecules can be performed. Also defects and curvature effects in the graphite sheet are consider in the simulations.

For atomic structure relaxation calculations, the OpenMX software package is used. This software uses norm-conserving pseudopotentials and pseudo-atomic localized basis functions, so it is more sufficient in large scale systems. In order to compare with experimental data, the X-ray adsorption spectrums are also calculated by HiLAPW code. This software uses FLAPW (full potential linearized augmented plane wave) method, which is more accurate in core states.

Used machine: xt3, xt3-b, altix

3.11. The role of ligands in controlling electronic and magnetic properties of the Mn4 Single-Molecule Magnets

School of Materials Science, JAIST

Nguyen Anh Tuan

Used Machine: Altix3700 (now is Altix4700), Cray xt3 and xt3-b

I usually perform the electronic structure calculations of materials by using DMol3 and OpenMX on SGI Altix3700 (now is Altix4700), Cray xt3 and xt3-b systems. These computer systems and these DFT codes support strongly for my study. The obtained results from the calculations on these systems were published in some journals and conferences as listed below.

Journals

1. D. H. Chi, N. T. Cuong, **N. A. Tuan**, Y. Kim, H. T. Bao, T. Mitani, T. Ozaki, H. Nagao, *Electronic structure of Pt clusters adsorbed on (5,5) single wall carbon nanotube,* Chem. Phys. Lett., **432** (2006) 213-217.

2. **Nguyen Anh Tuan**, Shin-ichi Katayama, Dam Hieu Chi, *The role of complex ligands in controlling ground-state spin of triangle pyramidal Mn_4O_3Cl Single Molecule Magnets*, VNU. Journal of Science, Mathematics-Physics Vol. **XXII**, No. 2AP, (2006) 206-209.

3. **Nguyen Anh Tuan**, Shin-ichi Katayama, Dam Hieu Chi, *The role of ligands in controlling electronic and magnetic properties of the Mn_4 Single-Molecule Magnets*, Computational Materials Science, **41** (2008) in press.

4. **Nguyen Anh Tuan**, Shin-ichi Katayama, Dam Hieu Chi, *A Novel Mn^{II} Spin Crossover System*, to be submitted.

Conferences

1. **Nguyen Anh Tuan**, Shin-ichi Katayama, Nguyen Huy Sinh, Nguyen Thanh Cuong, Dam Hieu Chi, *Electro-magnetic structures and the role of ligands in Fe_4 single-molecule magnet*, Proceedings of The 5th Joint Workshop on Advanced Materials Science and Technology (AMST'06) (2006) 12.

2. **Nguyen Anh Tuan**, Shin-ichi Katayama, Dam Hieu Chi, *A Systematic Study of The Tetrahedral Mn_4 Single-Molecule Magnets*: A First-Principles Calculation, Proceedings of The 10th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Hiroshima, Japan, Oct. 2007, p. 126.

3.12. Effects of Carbon Supports on Pt Nano-cluster Catalyst

School of Materials Science, JAIST
Nguyen Thanh Cuong, D2 Student, Fujiwara's Lab
Used Machine: XT3-a, XT3-b and Altix4700

Fuel cell is a promising alternative to environmentally friendly devices that are currently powered by fossil fuels. Platinum is the key catalyst of fuel cells because of its unusually high catalytic properties. Many researches focus on the development of electro-catalysts that make use of Pt nanoparticles on carbon nanotube (CNT) supports. Understanding and control of the geometric and electronic properties of Pt clusters adsorbed on CNTs will lead to control over the performance of the catalytic activities.

For this purpose, the use of theoretical calculations becomes an indispensable approach due to the complexity of the system. In this research, density functional theory (DFT), which is presently established as a standard tool for large system with a reliable compromise between accuracy and efficiency, is used to unravel the interplay between Pt clusters and CNTs in determining the catalytic activity.

My researches are using first-principles DFT method with OpenMX, Dmol^3 codes. The calculations require large scale and high speed computational environments – high performance computers. The calculations are therefore carried out on the parallel super-computers such as: Cray-XT3, Altix-4700 with a large number of CPUs and in a long computational time. In particularly, one calculated job usually runs on 2-4 weeks on Cray-XT3 system with 20 CPUs. In some cases, the calculations need larger CPUs and longer computational time.

Publications

1. N. T. Cuong, A. Fujiwara, T. Mitani, D. H. Chi, "Effects of Carbon Supports on Pt Nano-cluster Catalyst", Computational Materials Science, 2008 (in press).
2. D. H. Chi, N. T .Cuong, N. A. Tuan, Yong-Tae Kim, H. T. Bao, T. Mitani, T. Ozaki, H. Nagao, "Electronic structures of Pt_n clusters adsorbed on (5, 5) single wall carbon nanotube", Chem. Phys. Lett., 432 (2006) 213-217.

3.13. 有機エレクトロニクス分野における共有計算サーバ利用研究

マテリアルサイエンス研究科　博士課程後期 村田研究室　酒井平祐

利用計算機：SX8，Altix4700

私の研究分野は有機エレクトロニクスです。計算化学については素人ですので、ガイダンスや授業で習ったことの復習などにしか利用できておりません。個人的にはペンタセンといった一般的な有機半導体材料の構造最適化や MO の計算などを行いました。論文や研究結果としての報告に直結するような計算はまだおこなっておりません。

SX8 では 2007 年 11 月 5 日に JAIST でおこなわれた量子化学計算ソフトウェア「Gaussian03」講習会で習ったことの復習程度を行いました。Altix4700 では Material Studio は先端計算材料科学特論の授業（M621）で習ったことの復習を行いました。

4. 知識科学分野の計算サーバ利用研究

4.1. 密度汎関数法による白金-カーボンナノチューブ新規材料探索と物性評価

知識科学研究科 Dam 研究室 産学官連携研究員 杉山 歩

使用計算機:xt3-a, xt3-b

金属原子は凝集し金属クラスタを形成すると電子状態を劇的に変化させ金属独自の活性を現わす事から、その応用研究が実験・理論の両面で盛んに進められている。近年、カーボンナノチューブ(CNT)上にも超微細金属クラスタが形成されることが発見され注目を集めているが、我々は計算機によってそのメカニズムの解明と金属クラスタの制御による新規材料の探索を行なっている。これまでの研究で密度汎関数理論(DFT)に基づいた計算により(5,5)CNT 上に吸着された Pt から CNT への電荷移動の移動を確認している。CNT は伝導性を持つことから金属代替材料と期待されるが、CNT を新規材料として使用するためにはオーミック抵抗の低減が不可避な問題となっている為、その電気特性の理論解明と制御方法の開発は急務の課題である。 このナノスケール材料の電気特性、特に電気伝導率に対する理論的研究は今後の材料設計への利用、生体分子への応用も考えられ、現時点では非常に基礎的な研究ではあるが、今後より一層の発展がみこまれる。近年、電気伝導率に対する密度汎関数方と非平衡グリーン関数法を用いた計算手法が開発され、ベンゼン分子系、CNT 系等においてに界面構造と伝導特性に関する研究が行われた。これらの研究から電極と分子界面の結合構造、CNT の構造欠損が伝導率に強い影響を与えることが確認されるなど、伝導計算の有用性は高まりつつある。

本研究ではこの手法を用い、Pt 原子の吸着が CNT の伝導特性に与える影響に対する考察を行った。電極には CNT を使用し、Pt 吸着条件の変化による伝道特性の変化と Pt 原子の役割について下記の二つのモデルに対し考察を行った。

1.単一 CNT 電極モデル

(5,5)CNT 電極、単一 CNT モデル中の center パートに Pt 原子を吸着の有無による伝導特性の変化について解析を行った。

(5,5)CNT は Pt の吸着により伝導特性の低下が生じた、I-V 特性も同様に低下し、1V 時で約 20%の電流低下となった。

2.複数平行 CNT 電極モデル

2 本の平行 CNT 電極に対し、3 タイプのモデルの伝導計算を行った。単一 CNT 電極モデルでは Pt 原子の吸着により 20%程度の電流低下が確認されたが、2 本の平行 CNT 電極を使用し、2 本の平行 CNT の間に Pt 原子により架橋したモデルでは 5%程度の電流低下と低下は大幅に改善された。これは Pt 原子を介し、両 CNT 間で電流が流れている事を意味している。また、2 本の平行 CNT を Pt 原子で接着したモデルでも単一 CNT の 5%程度の電流が確認された。

以上、上述の計算は莫大な計算量を誇るナノスケールの第一原理計算であり、すべての計算は並列計算機 XT3 上で行なった。

4.2. a great effort to experimentally synthesize size-controlled nanoparticles on carbon nanotube

School of Knowledge Science, JAIST
Dam Hieu Chi
Used Machine: xt3, Altix4700

Complex materials consisting of metal and organic materials are attracting a great deal of interest from researchers in the field of nanoscience and nanotechnology. Coming to nanosize, the complex materials become too complicated so that it is impossible to understand without full exploiting of computational approaches. Complexes consisting of nanotubes and foreign metal nanoparticles are considered as idea materials for research due to the two main reasons: ① Nanotubes have well defined geometric structure and variety in electronic structure; ② Metal nano particles have flexibility in both geometric and electronic structures. Control of the geometric and electronic structure of nanoparticles adsorbed carbonanotube will leed to the control of its physical properties.

In our research, we have made a great effort to experimentally synthesize size-controlled nanoparticles on carbon nanotube supports and to theoretically clarify the physical properties of those materials systems by using computer simulation. The density functional theory based computer simulation is mainly used in our research. We are using OpenMX, Dmol^3, CPMD codes and performing dynamics simulations on JAIST's parallel computer (Cray-XT3, Altix-4700). Our dynamics simulations require a large number of CPUs and a long computational time. In particularly, each job usually runs on Cray-XT3 system with 60 CPUs for at least two weeks.

5. 謝辞

本報告は，並列計算機利用者メーリングリスト mpc において報告を依頼し，さらにメーリングリストのメンバから他のユーザに声をかけていただき，各著者のご厚意によって提出をいただいた文書をまとめたものである．ご多忙のところ，ご協力をいただいた著者，紹介者各位に感謝する．