九州大学情報基盤研究開発センター

民間利用成果報告書

提出日： 2024 年 4 月 26 日

<table>
<tr><td colspan="2">利 用 課 題 名</td><td colspan="5">超並列計算機利用の材料探索</td></tr>
<tr><td rowspan="3">課題責任者</td><td>企 業 名</td><td colspan="5">出光興産 株式会社</td></tr>
<tr><td>フリガナ
氏 名</td><td>ハラダ ヨウスケ
原田 洋介</td><td>部署名</td><td>次世代技術研究所
解析技術センター</td><td>職 位</td><td>主任研究員</td></tr>
<tr><td>連 絡 先</td><td colspan="3">住 所：〒299-0205
千葉県袖ケ浦市上泉 1280
E-mail：yosuke.harada.6280@idemitsu.com</td><td colspan="2">TEL 0438-75-2267
FAX 0438-75-7213</td></tr>
<tr><td colspan="2">利 用 期 間</td><td colspan="5">2024 年 2 月 8 日 ～ 2024 年 2 月 28 日</td></tr>
<tr><td colspan="2">利 用 成 果
公 開 延 期
希 望 の 有 無</td><td colspan="5">■ 即時公開 ・ □ 公開延期（成果公開予定： 年 月）</td></tr>
</table>

※利用成果報告書は原則公開ですが、課題終了後最大２年間公開を延期することが可能です。

- 本様式の変更はできません。
- 補足資料を付加することは可能です。

受 付 番 号		受付日 年 月 日

■利用計画全体の概略（申込書と同じ内容を記述してください）

1） 利用目的

第一原理計算による電子構造計算から、古典MD、それらの結果を利用するデータ解析に至るまで、超並列の利点を活かし効率的に材料探索を行い、イノベーションに資する技術確立を目的とする。尚、近年機械学習用途に使用頻度が増えているGPUについて一般プログラム（アプリ）への適用状況、適用可能性についての将来的使用計画の検討材料とした。使用アプリケーションは研究用計算機システムにて使用実績のあるものを中心に第一原理(：QUANTUM ESPRESSO, Phase/0)、MD(：AMBER, LAMMPS, OCTA)等の利用を予定した。

2） 利用意義

機能性物質探索にマテリアルズインフォマティクス(MI)要素を活用した効率的な材料探索の需要は高く、イノベーション実現を加速すると期待されている。多くの候補物質について大規模計算機を利用し基礎データを取得した後、狙いの特性に最適な物質を整理検討する為にベーズ最適化の手法で加速を後押し検討利用する一連の手順を踏襲する意義は高い。

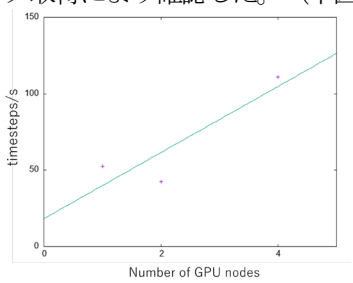
3） 必要性

第一原理計算によって強相関電子系を扱う場合、Hybrid汎関数など大メモリを搭載する大規模な計算機が必要である。また運動方程式を基にした古典MDは並列処理に適しており、相転移等の温度変化の探索の為にシステマティックに様々な温度で大規模に並列データ採取など、シミュレーションに大規模並列、高メモリのハイパフォーマンス計算機資源を必要とする。加えて機密性を求めるため、itoのように集中管理された安全なシステム上で実行する必要がある。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

オングストロームからサブマイクロメートル単位まで様々なサイズの系に対して各種アプリケーションの計算適用可能性の調査を行った。Å単位の分子に対してはQUANTUM ESPRESSO, GAMESSを利用した量子計算を行い、分子集合体のMD、10万粒子の古典MD, 100万粒子の粗子化MDに対し適宜、AMBER, LAMMPS等を利用し、必要計算機資源量の推算を併せて行った。またGPU利用において、並列処理をノード間並列による拡張によっても、並列化効率が得られる系等についての知見を、ベンチマーク取得により確認した。（下図参照）



2） 社会・経済への波及効果の見通し

継続的なデータの集積によるマテリアルズインフォマティクス(MI)要素を活用した解析は、効率良い材料探索につながることで、イノベーション実現を加速することが期待される。

3） その他

■利用アンケートにご協力ください

1) 利用に関して有益であった事項

利用したアプリケーション（計算コード）は予めプレコンパイルされてModule化されたものを利用した。コンパイルに時間を要することが無く有益であった。

2) 利用に関して生じた問題点など

3) ユーザーサポートとして必要と考えられることについて

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

サポートも手厚く、有意義に利用させて頂きました。Moduleとしてプレコンパイルされたアプリケーションが随時最新のバージョンであるとなおありがたいと思います。

5) 本事業で得られた成果や公表する予定の成果があれば以降に記述をお願いします