

2020年8月6日

計算物質科学関連の科学技術政策に関する提言

計算物質科学協議会 代表
東京大学 物性研究所
尾崎泰助

我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し、高いレベルでの成果創出と、シミュレーション技術、材料情報科学技術の社会実装を速やかに実現するため、計算物質科学技術に関わる全ての方々に開かれた、計算物質科学協議会を2020年5月に設立致しました。本協議会は、物質科学分野向けのスーパーコンピュータ共同利用・共同研究拠点である、東北大学金属材料研究所(金研)、東京大学物性研究所(物性研)、自然科学研究機構分子科学研究所(分子研)と、教育拠点である大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター(阪大ナノ)を運営機関とし、その他の産学官の機関からの参加者も含め、2020年7月末時点で約100名(内企業会員約20名)の会員で構成されています。

この協議会では、学界や産業界のニーズと計算物質科学界のシーズを常に対比させ、国際動向を含めた情報交換を行い、ソフトウェアやツールの新たな研究開発の方向性を導き、それらを駆使したシミュレーション技術、データ解析技術の開発と活用の促進、および、将来必要となる研究開発の方向性についての意見集約と国や関係諸機関への提言を行っていきます。

本提言は、計算物質科学協議会の運営委員と一般会員の有識者に協力をお願いして作成し、下記の資料にまとめました。スーパーコンピュータ「富岳」で最先端をリードし、HPCI などによる大規模超並列計算が普及期に入る時代において、それらを用いた計算により創出される膨大な高精度の計算データの価値は実データとの同化技術などにより飛躍的に高まることが予想されています。まさしく今が、日本で開発されている最先端の計算物質科学シミュレーション手法やそのソフトウェア群、またデータを駆使した材料情報科学技術を学界や産業界が一体となって迅速に活用し、物質・材料分野の優位性をさらに高め、世界をリードしていくことが重要だと考えています。

記

<提言書1> 「HPCI 関連事業」、「マテリアル革新力強化戦略事業」の実施課題

<提言書2> 計算物質科学分野の動向と今後のありかた

参考: 「提言書」作成協力者

以上

< 提言書1 >

「HPCI 関連事業」、「マテリアル革新力強化戦略事業」の実施課題

計算データの戦略的なリポジトリを行い、その利活用を促進するための調査研究、パイロット事業、本格事業を推進することを提言いたします。具体的には、下記の3つの事業を並行して推進することを推奨いたします。

1. 計算データのリポジトリと利活用促進事業

マテリアルズインフォマティクス的手法により優れた特性を持った新物質を探索するためには、構造と機能の相関関係の機械学習による解析と広大なパラメータ空間における網羅的な探索計算が有効である。その際には十分なデータが必要であり、そのデータは計算で生成する場合と実験(計測)データを活用する場合がある。実験のデータベースは NIMS の MatNavi をはじめ国内外に多様なデータベースが存在する。計算データも、海外の特定ソフトを用いたデータベースや、多様なアプリによるリポジトリサイトは存在する。しかし、実験データと照らすために戦略的に計算フォーマットを揃え、データを保存・提供する計算データベースは欧州 NOMAD 等でその試みが始まった段階であり、これからが勝負となっている。この競争を制するためには、計算物質科学コミュニティを牽引する金研、物性研、分子研において、「富岳」、HPCI、それぞれの分野スパコンを活用し、特徴のあるソフトウェアを用いて創出したデータのレポジトリ事業を推進・連携し、戦略的にデータの利活用を促進すべきである。具体的には、データベースの公開に加えて、実験データと照らしてデータ同化による物質材料探索などに利活用できる仕組みを mdx(データ創成社会活用プラットフォーム)等のシステムを活用して構築し、継続的に発展させていくことを推奨する。さらに、計算、実験のデータベースを集約するポータルサイトを構築し、データベース間のフォーマットを容易に変換する仕組みも導入し、ユーザーの利便性も継続的に向上させていく必要がある。

2. 戦略的データ利活用のためのソフトウェア開発事業

マテリアルズインフォマティクスを活用した材料探索手法は企業の中でも積極的に取り入れられている。実験や計測データに加え、計算データも活用されているが、ほとんどが海外の汎用ソフトを用いている。そのソフトは誰でもが入手して計算できるため、計算データによる差別化は困難である。材料の課題は多様であり、本質的な問題を解くためには、その現象を理論的に考察して定式化し、ソフトウェアに組み入れていく必要がある。この機能追加の工程は、物質材料分野の産業をリードしていくために、今後より重要な要件となっていく。そこで、戦略的に国産の基盤ソフトウェアを選定し、必要な機能追加を産官学が一体となって戦略的に実施すべきである。そして、「富岳」から PC まで幅広い計算資源を活用し、そのソフトウェアにより得られるデータを活用する研究システムを構築し、継続していく必要がある。基盤ソフトウェアから創出されたデータは基本的にオープンレポジトリとして蓄積し、さらなる研究資源として拡張していくことになる。

3. 実験研究者のスパコン利活用促進事業

「京」で培った高並列計算技術は、今や一般的なスパコンでも実現できるようになっている。また、コロナの影響で実験を一時ストップした実験研究者が物質科学シミュレーションを学ぶケースが急増しており、今後、スパコンを活用する段階まで導くことで、スパコンユーザーは急増する可能性が高い。「富岳」から PC レベルまで多様なユーザー層をかかえる計算物質科学の分野コミュニティを総体的に増加させ、計算、計測、実験の研究を一体的に考え、戦略的に開発するソフトウェアを利用した計算データのレポジトリ事業を推進する人材を育成していくことで、わが国の物質科学分野のコミュニティの厚みが増していくであろう。そのような環境を構築するため、産官学のコミュニティメンバーが利用可能な計算資源の提供、および、阪大ナノや、金研、物性研、分子研が実施している産官学の人材育成のための講習会等の活動に関する支援が必要となる。

< 提言書2 >

計算物質科学分野の動向と今後のありかたに関する提言

【計算物質科学分野の動向】

計算物質科学分野は、「京」コンピュータ関連プロジェクトの取り組みにおいて、大規模高並列計算機を活用した計算手法の開発が進み、現実に近いシミュレーションができるようになった。これらのプロジェクトで開発されたオープンソフトウェアを活用することで、計算の専門家でない方でも大規模超並列計算を実施できる環境が徐々に整ってきている。また、データ科学の進展とともに日本を始め、近隣諸国や欧米でのデータ科学を駆使した物質材料探索手法もここ数年で浸透してきている。スパコン「富岳」の時代においては、計算により創出される膨大な高精度の計算データの価値は実データとの同化技術などにより飛躍的に高まることが予想される。

HPCI 戦略プログラム、ポスト「京」重点課題においては、特定大型研究施設である SPring-8 や J-PARC との連携、さらには文部科学省ナノ材室が推進する元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>とも連携し、計算・計測・実験の3つの科学の歯車を連結させた研究推進システムの構築に貢献してきた。さらにここ数年は3つの歯車をデータで繋ぐマテリアルズインフォマティクスの研究も進められている。今後、物質材料の国際的な開発競争に勝つには、超並列計算によるパラメータサーチにより得られるデータの蓄積価値を高め、物質科学コミュニティ全体を巻き込んだデータリポジトリの仕組みと継続的な利活用体制の構築が急務であり、特に遅れている計算データのレポジトリ事業は加速して実施していく必要性が高まっている。

with コロナの影響で、計算物質科学分野へ興味を持つ実験研究者の急増が、WEB 講習会への参加状況から確実に見て取れるようになってきている。これは、今後、多くの実験研究者が多くの計算資源を必要とする可能性を示唆している。しかし、実験研究者がすぐにスパコンを活用することは困難であり、サーバ・クラスターの活用から附置研や HPCI のスパコンの活用へ導く人材育成活動が必要である。また、実験研究者は実験データを精度の高い計算データに照らして検証することを必要としているので、今後のデータレポジトリのユーザーとして有望である。その観点からも、実験研究者との連携活動は戦略的に重要になっている。また、阪大ナノや、金研、物性研、分子研では、産学を問わず計算物質科学の人材育成活動を実施しており、この活動への継続的な支援の必要性が高まっている。さらに、産官学の幅広いコミュニティへの計算資源の確保も重要な課題となっている。

【計算物質科学分野の今後のありかた】

以下の7つの観点で提言させて頂く。

1. 基礎・基盤科学技術としての計算物質科学
2. 合成・計測・計算の連携
3. マテリアルズインフォマティクス
4. 計算物質科学の産業応用・展開
5. コミュニティソフトウェアの開発・普及
6. 若手人材の育成
7. 計算物質科学の裾野を広げる計算機環境

1. 基礎・基盤科学技術としての計算物質科学

計算物質科学は量子力学の基本原則と我々の日常生活を繋ぐ学際的な学問領域であり、基礎研究から産業応用まで裾野が広く、研究課題も多岐に渡っている。物質科学の深化を図るために、物質構造の成り立ちや電子状態、また化学的・物理的な諸特性の解明に計算科学は基盤的な役割を果たしている。さらに大規模シミュレーションの解析からこれまでに知られていない協奏現象を見出し、また解析的な研究と併せて新しい物理・化学現象を提案する上でも計算物質科学は重要かつ欠かすことの出来ない役割りを担っている。基礎研究から産業応用までの研究課題は多段階の階層構造を成しており、また階層構造間にも密な相互作用が存在することが常である。ここでの階層構造とは物質内に内在するそれに加えて、研究課題の設定にも階層構造があることに注意されたい。用いられる計算手法もミクロスケール、メゾスケール、マクロスケールとそれぞれの階層構造に応じて適切な手法が適材適所で活用されている。これは取りも直さず、物質構造及びその機能の多様性と階層性を反映したものに他ならない。我が国における計算物質科学の将来の発展を考える際には、計算物質科学に内在する重厚な多階層性とその裾野の広がり十分に配慮して課題の設定を行うことが望ましく、さらに学理の解明と社会実装の両面から研究を進めることが将来の大きな成果につながるであろう。

2. 合成・計測・計算の連携

優れた特性を持つ新しい材料を創生するためには合成、計測、計算の三つ巴の協力体制が不可欠である。合成→計測→計算の順方向の研究(順問題)は従来から行われており、新規に合成した材料の構造や特性を理解するために、計測・計算が実施される。今後も順方向の研究はさらに発展させていくべきであり、合成、計測、計算のそれぞれの手法のさらなる精緻化が求められる。一方で、計算→合成→計測の逆方向の物質デザイン研究(逆問題)も近年、盛んに試みられるようになってきた。合成に先立ってシミュレーションにより所望の特性を持つ新物質をデザインし、新材料探索の試行錯誤性を軽減することが目的である。さらにはその合成経路やプロセス制御まで含めて新材料を創生していくことが、近い将来の大きな目標となるであろう。合成、計測、計算のそれぞれのレベルアップと三つ巴の協力体制が有機的に機能することで、従来の試行錯誤的な材料探索が大きく変容していくと考えられる。三つ巴の協力体制はフラッグシップ型の大型計算機施設や大型実験施設を介した協力体制の構築だけを想定するのではなく、研究室レベルでの協力体制の構築促進にも配慮するべきである。それによって、多岐に渡る分野において多くの成果が創出され、我が国における物質科学研究の底上げに貢献することが出来る。

3. マテリアルズインフォマティクス

マテリアルズインフォマティクス(MI)とは情報・データ科学の手法を活用し、効率的に物質の機能を予測したり、新しい物質の探索を試みたりする、近年の大きな研究の潮流のことである。入力(構造等)と出力(機能等)の間の相関関係を機械学習により推定し、効率的に逆問題を解くことで物質デザインが可能となると期待されている。合成・計測・計算の連携においても MI は重要な役割を担うであろう。今後、汎用ツールの開発を進めると共に、ユーザーの利便性向上を考慮した場合、物質群と機能に応じた特化型ツールの開発・整備も重要な課題であり、その開発には長期的な視点からの支援が必要である。さらに新規材料の探索の際には広大なパラメータ空間の探索が必要となり、組み合わせ爆発の問題が顕在化する。効率的な探索には物理的な考察に基づき問題サイズの縮約を行い、またベイズ最適化や遺伝的アルゴリズム等が適用される。探索空間の中に問題の本質的なパラメータを欠落させずに問題サイズの次元圧縮を行う手法と、効率的な網羅的探索手法の開発が、新規材料の発見に繋がっていくであろう。また機械学習の手法はシミュレーションの計算手法自体の開発においても新しいパラダイムを開く可能性がある。

MI の手法により隠れた関係性を見出し、また網羅的な探索計算を行うためには十分なデータが必要である。デ

データベースのありかたはコミュニティの意見に照らしながら試行錯誤を重ね、研究者が利用したいものを構築していく必要がある。そのため、トップダウンでフォーマットを先に決めるのではなく、産官学コミュニティの意見を吸い上げてフィードバックが可能な仕組みを、協議会等を通して金研、物性研、分子研に浸透させていくことが必要である。また、物質の多様性を考慮し、データベースの構築・維持・管理は材料、物性、分子を専門とする金研、物性研、分子研で行うことが望ましい。各機関の専門分野に特化したデータベースを開発し、広く一般公開していくことが望ましい。実験のデータベースも国内外で構築・維持・管理されており、これらの複数のデータベースを活用しながら、MIの研究を推進するべきである。その際に情報集約を行う機関を設け、データベースの情報を集約するポータルサイトやシステムを構築し、さらにデータベース間のフォーマットを容易に変換する仕組みを作ることで、ユーザーの利便性が向上し、大いに活用が進むと期待される。

4. 計算物質科学の産業応用・展開

企業での研究開発において、計算科学的手法は合成された材料の評価、実験結果の解釈、実験方針の立案のためにすでに重要な役割を担っている。現実のデバイス材料や機能性化学品等は複雑な構造を持っており、全ての系・現象を量子力学の第一原理からシミュレーションすることは一般に困難である。それゆえ問題を適切に切り分け、系のサイズ、時間スケール、現象に応じて原子・電子レベルからのシミュレーションからマクロスケールの連続体シミュレーションまでが適材適所で活用されている。これらのシミュレーションの実行には欧米で開発された商用もしくはオープンソースソフトウェアの使用が一般的であり、我が国のプロジェクトで開発されたソフトウェアの使用は限定的である。企業での計算科学的な研究は今後もさらに強化推進するべきであるが、シミュレーションを単なるツールとして用いるだけでは、長期的には物質科学の空洞化につながる恐れがある。わが国では学官において新しい手法やソフトウェアが開発されており、産業界における研究開発と連携しながら開発を推進することが望ましい。学官の基礎研究が企業での応用研究に活用され、また応用研究が基礎研究の推進を刺激する姿が一つの望ましい姿である。現実的には海外ソフトウェアやプロジェクト開発のソフトウェアを最大限に活用し、成果創出を図りながら物質科学の深化と産学官を巻き込んだコミュニティ形成を同時に進めるべきであろう。また項目3で議論した「マテリアルズインフォマティクス」の応用に関しては企業における応用事例が学官より先行している面もある。そのため、企業のニーズから本質的な問題を抽出して学官において基礎研究を実施する体制の構築も検討すべき課題である。

5. コミュニティソフトウェアの開発・普及

高精度、高効率、また現実を反映した高度なシミュレーションを実現するためには、基礎理論の構築、高速で高並列性を持った計算アルゴリズムの開発、さらにプログラムの高度チューニングを実施したソフトウェアの開発が必要である。ソフトウェアには論文には記載されていない様々な情報が有機的に集積されており、価値を生み出す情報集積のハブとしての役割も担っている。世界的に広く用いられているソフトウェアにはユーザーコミュニティが形成され、高度な使用方法がコミュニティ内で共有されており、また書籍やインターネット上にも多くの関連情報が集積されている。そのため、新規開発者の参入や新規ユーザーの獲得にも有利な状況が生み出されている。これらのソフトウェアの多くは欧米で開発され、20~40年程度の開発期間を要しており、今なお活発に開発が続けられている。我が国においても各種プロジェクトにおいてコミュニティソフトウェアを開発する努力がなされており、そのいくつかは広くコミュニティで活用されるソフトウェアに育ちつつある。これらのソフトウェアを基盤とすることで新しい手法やアルゴリズムの開発が容易となり、またユーザーコミュニティが形成され、より高度で現実を反映したシミュレーションが実現されている。最近ではコミュニティソフトウェアの結果を利用し、さらに上位階層のシミュレーションを実行することも盛んに試みられており、そのためのソフトウェア群の整備も進んでいる。つまりソフトウェアの開発においても多階層性が生じており、コミュニティソフトウェアの開発は一朝一夕では出来ないことを示している。コミュニティで共有できるソフトウェアの開発・普及が計算物質科学の深化を図るうえで不可欠であり、産

学官が一体となって継続的な開発と醸成されたユーザーコミュニティの形成に向けて戦略的かつ長期的な視点で取り組む必要がある。

6. 若手人材の育成

今後のさらなる計算物質科学の発展のためには、分野の進展を牽引する若手人材の育成を継続的に行うことが重要である。計算物質科学に内在する多階層性とその裾野の広がり十分に配慮し、(i) 基礎理論やコミュニティソフトウェアの開発を実施する人材、(ii) 様々な階層の手法を連結し、系全体を丸ごと扱うマルチスケールシミュレーションが実施できる人材、(iii) 既存のシミュレーションと機械学習・データサイエンスの手法を高度に組み合わせ、隠れた相関を発見し、さらに物質のデザインが自在にできる人材、(iv) 実験グループと密に連携を取りながら、新しいサイエンスを開拓できる人材、(v) 計算の専門家と実験グループのマッチングを先導し、新しい共同研究を生み出す研究コーディネータなどが求められる。ここで例示したいいずれの人材に対しても、物理、化学、材料工学等の専門性を持ちながら、計算科学に関連した体系的な教育を受けることが必要である。大阪大学、東京大学、東北大学、分子科学研究所では他大学とも連携・協力しながら、このような体系的な教育体制を整備し、計算物質科学の専門性を高める教育を行っており、今後もさらに充実させていくことが求められる。また計算物質科学分野の博士課程学生を含めた若手人材のキャリアパスの多様化に関してもコミュニティとして努力が必要である。企業における計算物質科学の高度化を進め、さらなる普及を進めるためにも、産業界においても高度な計算物質科学を実践できる若手人材の積極的な登用が求められる。また学官においても長期的な視点に立って有為な若手人材の登用枠を拡充し、新しい潮流を生み出すことのできる澁刺とした研究体制を築くことが必要である。政府機関、産業界、本コミュニティが一体となって意識を共有化することで、分野を牽引する若手人材の育成が可能となるであろう。

7. 計算物質科学の裾野を広げる計算機環境

スーパーコンピュータ「富岳」に代表される大型計算機を十二分に活用することで、計算物質科学のフロンティアが拓かれ、現実の実験系に近いシミュレーションが実現するであろう。さらに統計性を十分に考慮した計算により、有限温度での物理量が議論され、実験との精緻な対応付けも可能となる。また網羅的な探索計算により、所望の特性を持った新材料の提案も多数、実現するに違いない。これらの先端的な研究は計算物質科学の専門家によって実施されており、スーパーコンピュータ「富岳」、HPCI システム、情報基盤センター・大型計算機等を用いて、今後も大いに推進されるべき研究である。一方、近年の計算物質科学の裾野の拡大により、計算物質科学の専門家のみならず、実験グループにおいても自らシミュレーションを実施する事例も顕在化してきている。昨今のコロナ禍の状況下で多くの実験家がシミュレーションに新たに取り組んでおり、計算物質科学に携わる研究者人口は増大している。しかしこれらの潜在的なユーザー層が本格的なシミュレーションを開始するには大規模計算機の使用が必須となり、それが普及を阻害する大きな要因となっている。東京大学物性研究所、東北大学金属材料研究所、岡崎国立共同研究機構計算科学研究センターにおいては計算物質科学のシミュレーション研究に特化した大型計算機が設置されており、それらは新規ユーザー層の受け皿となり得るものであるが、現状では計算物質科学の専門家によるシミュレーション研究のために占有的に使用されており、新規ユーザー層の受け入れは物理的容量を勘案し、困難な状況にある。計算物質科学の裾野の拡大が進展する中で新たなユーザー層を受け入れる計算機環境が十分に整備されておらず、コミュニティの底上げを図るためにも、ユーザーの利便性を十分に考慮した、計算物質科学に特化した計算機環境の拡充を緊急に考える時期にある。フラッグシップ型の大型計算機の開発を推進するのと同時に、実験グループを含めた潜在的ユーザーに向けた計算機環境の整備も、我が国の計算物質科学の普及・振興に向けて重要な課題である。

参考

「提言書」作成協力者

計算物質科学協議会運営委員(2020年8月6日時点)と一般会員(有識者)

■運営委員

| | |
|-------------|--------------------------------------|
| 伊藤 聡 | 計算科学振興財団(FOCUS) |
| 江原 正博 | 自然科学研究機構分子科学研究所 計算科学研究センター |
| 岡崎 進 | 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 |
| 小口 多美夫 | 大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター |
| 尾崎 泰助(委員長) | 東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター |
| 川勝 年洋 | 東北大学大学院理学研究科(兼 金属材料研究所 計算材料学センター) |
| 川島 直輝 | 東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター |
| 久保 百司(副委員長) | 東北大学金属材料研究所 計算材料学センター |
| 斉藤 真司 | 自然科学研究機構分子科学研究所 計算科学研究センター(岡崎共通研究施設) |
| 常行 真司 | 東京大学大学院 理学系研究科 |
| 天能 精一郎 | 神戸大学大学院 科学技術イノベーション研究科 |
| 森川 良忠 | 大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター |

■一般会員(有識者)

| | |
|-------|-----------------------------------|
| 赤井 久純 | 東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター |
| 旭 良司 | 株式会社豊田中央研究所 |
| 尾方 成信 | 大阪大学大学院基礎工学研究科 機能創成専攻 |
| 片桐 孝洋 | 名古屋大学 情報基盤センター 大規模計算支援研究部門 |
| 茂本 勇 | 東レ株式会社 先端材料研究所研究兼研究・開発企画部 |
| 田中 功 | 京都大学大学院 工学研究科 材料工学専攻 |
| 藤井 幹也 | パナソニック株式会社 テクノロジーイノベーション本部 |
| 松林 伸幸 | 大阪大学大学院 基礎工学研究科 化学工学領域 |
| 三宅 隆 | 産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター |

以上