

「ナノバイオ分野における計算科学の戦略」 ディスカッション

< オーガナイザ >

押山 淳 (筑波大学計算科学研究センター)

< 講演者・コメンテータ >

赤井 久純 (大阪大学)

笠井 秀明 (大阪大学)

広瀬 喜久治 (大阪大学)

押山 淳 (筑波大学)

朴 泰祐 (筑波大学)

大野 隆央 (物質材料研究機構)

斉藤 晋 (東京工業大学)

川添 良幸 (東北大学)

常行 真司 (東京大学)

今田 正俊 (東京大学)

前園 涼 (物質材料研究機構)

高田 俊和 (NEC)

櫻井 鉄也 (筑波大学)

総括：寺倉清之 (北海道大学)

本セッションでは、計算科学的アプローチにより物性科学、物質科学の分野での研究を推進している研究者が集い、活発なディスカッションが行われた。最初に、赤井久純(大阪大学)による、keynote talk が行われた。赤井を代表者とする科研費特定領域「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」が紹介され、シミュレーション(模倣)からデザイン(創造)への質的転換を目指すこと、DFT 及びポスト DFT への新計算手法開拓の重要性、ナノ世界では量子性が本質的であること、サブミクロンサイズの構造体がターゲットになること、などが強調された。質疑応答では、過去に計算主導で、物質デザインが成された例があるかとの質問が出た。それぞれの物質の物性に対する予測の例は多々あるが、例えばそれをデバイスデザインまでに統合した例はないのではないか、とのコメントが成された。またサブミクロンサイズをターゲットとするなら、ハイブリッドな計算手法が必要ではないか、とのコメントがなされた。

続いて笠井秀明（大阪大学）による電池応用の実例が紹介され、量子エンジニアリングの重要性が指摘された。会場より、ペタ級マシンでの莫大なデータ量を量子エンジニアリングにどう生かすかの質問があり、議論が行われた。ついで、広瀬喜久治（大阪大学）より、ナノ伝導における量子シミュレーションの計算例とシリコンテクノロジーへの寄与についての説明があった。押山淳（筑波大学）は1万原子スケールのDFT計算の必要性とそれへ向けての方法論（実空間での密度汎関数法計算）が紹介された。続いて朴泰祐（筑波大学）から、そうした1万原子DFT計算を実行するプラットフォームとしての、筑波大学計算科学研究センター超並列計算機システム PACS-CS の開発計画が説明された。IBM Blue Gene との相違点等について、主に計算機工学の観点から、実質的な議論が展開された。渡辺貞（文部科学省）より、午前の地球環境/気象分野に比べて、このナノ分野では科学のフェーズが若干異なり、より躍動的であること、それは逆にコンピューティングのターゲットを絞りにくくしていること、などの指摘があった。

大野隆央（物質材料研究機構）から文部科学省ITプログラムでの、ナノグループでの成果と取り組み、さらにはオーダー(N)手法の開拓について説明があった。オーダー(N)法の現状について質疑応答が行われた。密度行列の実空間トランケーションによるオーダー(N)では、成功する物質とうまくいかない物質があることが指摘された。ついで斎藤晋（東京工業大学）から、炭素科学が次世代の物質科学の中心になるだろうとの予測と、その観点からの次世代コンピュータへの期待が語られた。また、川添良幸（東北大学）より、基礎物性物理の概念のひとつであるフント則の解釈に対する計算科学の寄与が語られた。会場の佐藤三久（筑波大学）より、ナノ分野では、次世代コンピュータに向けての戦略的課題の設定が不足しているのではないか、との指摘が成された。

コーヒブレークの後、常行真司（東京大学）より、次世代コンピュータにおける3つの重要なタスク（コンビナトリアルな物質探索、高精度物性予測、統計力学的諸量の計算）についての提言が成された。質疑応答で、このタスクに対して、どのような性能のコンピュータが必要であるかの議論が行われた。ついで、今田正俊（東京大学）が、強相関物質の科学におけるdown-foldingの手法（広範なエネルギー領域を分割し、各々のエネルギー領域での電子状態の解法に最適な手法を適用するアプローチ）を紹介し、強相関エレクトロニクス的重要性を指摘した。さらに前園涼（物質材料研究機構）は、現在の理論手法としては、もっとも正確な量子モンテカルロ法の実際の物質への応用の現状が紹介された。次世代へ向けてのフィーザビリティについて質問が出た。

二つ目のkeynote talkとして高田俊和（NEC）により、光合成において重要な $10^3 - 10^4$ 原子群から成る蛋白質に対する、QM/MMハイブリッド手法による、電子構造MD計算が紹介された。プログラム開発に関しては、今までのダウンロード的プログラム共有ではなく、各自が自己の成果物をアップロードしていき、各部品をアセンブルしていくような

アプローチが提唱された。質疑応答において、その功罪が議論された。京速プロジェクトにおいて、そのような開発センターを設立する計画について質問が出た。

櫻井鉄也（筑波大学）より、量子化学計算、特に FMO 法を用いた大規模固有値計算における新しいアルゴリズムの紹介があった。

最後に寺倉清之（北海道大学）より、科学的ターゲットの多様性と各々の重要性、次世代コンピュータでのそのフィーザビリティ、コミュニティとして戦略を練ることの必要性などについての「まとめ」られ、質疑応答が行われた。議論すべき課題はいくつか残されたが時間切れとなった。

会場からのコメント、質問も豊富で、充実したセッションとなった。この分野の科学の多様性から、次世代コンピュータに向けた科学的ターゲットの絞り方に難しさがあり、無理やり絞ると物性科学の面白みを損なうことにもなってしまうことも、セッション後の当事者の間では認識された。一方、次世代のコンピュータ、次世代のテクノロジーにおいて、当分野の研究者が貢献すべきことも多々あるはずで、次世代コンピュータを見据えた、注意深い戦略を策定することは間違いなく大事だろう。

以上、本セッションの様子を抜粋した。記述について、発言された皆様に確認を取ってはいない。できるだけ忠実に再現するように努めたが、もし間違いがあるとしたら、それはひとえに私の責任である。

文責 押山淳