

岡崎 進 名古屋大学大学院工学研究科 教授

計算科学の昨今あれこれ

おかざき・すすむ

1982年 京都大学大学院工学研究科工業化学専攻博士課程修了（工学博士）
同 通産省工業技術院大阪工業技術試験所研究員
1987年 東京工業大学大学院総合理工学研究科電子化学専攻助手
1995年 同 助教授
2001年 分子科学研究所教授（現在も兼任）
2008年 名古屋大学大学院工学研究科化学・生物工学専攻教授



早いもので、分子研から名古屋大に移って6年半が過ぎた。分子研でも同じく6年半を計算科学研究センターで過ごし、研究はもちろんのこと、計算機の共同利用やプロジェクトのお世話などもさせていただいていた。そのせいか、計算科学という意味ではずっと分子研のお世話になっており、今でもしばしば岡崎にお邪魔しているところである。

この間、計算科学も大きく変わってきているように思われる。ここでは、純粋学問以外のことも含めて、計算科学の昨今のあれこれについて勝手な私見を述べてみたい。

「京」コンピュータ

分子科学に関わる計算科学には、大きく分けて量子化学計算と分子動力学計算の二つの分野があるが、変化という意味では、これら両方の分野に共通なことも多い。その最たるものが「京」コンピュータ（図1）の登場であり、計算の高速化である。これに伴って研究対象とする系の大規模化、また現象に対する大きな統計量に基づいた議論が可能となっており、分野に飛躍的進展をもたらしている。分子研も茅元所長時代に参画した文科省「グリッドコン

ピューティングシステムの研究開発」以来、「京」コンピュータのためのアプリケーション開発プロジェクトである「ナノサイエンスグランドチャレンジ研究」を経て、現在の「京」コンピュータの中核プロジェクトである「HPCI戦略プログラム」においても戦略機関のひとつとして参加し、分子科学の分野振興も含めて積極的に推進してきている。

これらの中で、特に対象とする系の大規模化の意味は大きい。大規模計算は世上ではしばしば「頭の悪い計算」と言われ、ある意味揶揄の対象ともなっているが、何といたっても計算対象にできなかった系や現象を研究できることは非常に魅力的である。これまで、マ

クロには観察可能であったがマイクロには何が起きているのか何も分かっていなかった系、あるいはマイクロであってもある特定の切り口から部分的にしか見えていなかった現象は、むしろ新しいサイエンスの宝庫であり、計算科学が大いに活躍できる領域である。

「京」コンピュータを用いた最近の研究例として、図2に岡山大の田中グループによるメタンハイドレートの融解に伴う気泡生成のシミュレーション^[1]を挙げる。これは、固相と液相、そして気相が混在する非平衡系のシミュレーションであり、大規模計算で初めて可能となる。これら三つの相が同時に関わる非平衡な相変化現象は、準安定状態からの相転移現象に物質移動やエネ



図1 「京」コンピュータ。(理研計算科学研究機構の好意による)

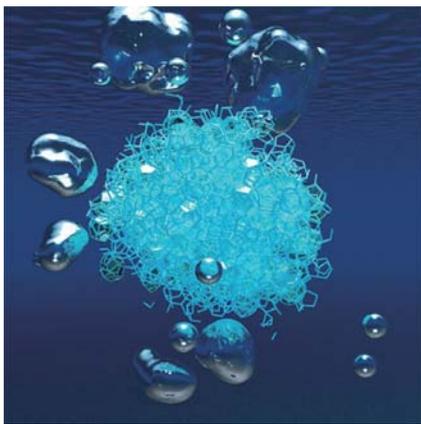


図2 メタンハイドレートの融解と気泡生成の分子動力学計算^[1]。気泡は泡状に表現。実際の計算は水も含めた全原子計算。(岡山大田中教授の好意による)

ルギー移動が絡んだ極めて複雑な現象であり、日常的にはごく普通に見られる物質の振る舞いでありながら、これまでその分子論には全く触れられていなかったものである。

図3には、私どものグループによる小児マヒウイルスカプシドの全原子シミュレーション^[2]からのスナップショットを示す。図3(a)は外観、(b)は内部から見た壁面である。いずれも正二十面体回転対称性を反映して、2回、3回、5回回転対称軸の周りなど、美しい絵模様が浮き出ている。作図では水分子は省いているが、計算系は水も含めると約650万原子で構成されている。このような計算から、カプシドの安定

性に加えて、熱平衡において水分子はカプシド内外で自発的に交換しカプシドが半透膜として機能すること、またカプシド内部は負圧となっていることなどが見出され、さらにレセプターとウイルスの平均力の計算から、感染初期過程における結合プロセスも明らかになりつつある。

ソフト開発の重要性

しかしながら、このような計算を実現するためには相当な努力が要求される。これは、これまでは計算機のクロック数が大きくなることにより演算性能が向上してきていたものが、「京」を含む近年のスーパーコンピュータでは並列演算により性能向上を目指しているためである。つまり、前者ではプログラムの書き換えは一切不要であったものが、後者で性能を出すためには大変な作業が必要となるということである。低並列であればさして大きな問題とはならないが、例えば「京」コンピュータの場合だと、システムは82,944ノード、663,552コアで構成されており、これらの中で相互にデータを通信しながら効率よく同時に演算を実行させるためには、極めて高度な並列化技術が必要となる。ベクトル計算機の際にもプログラムの修正は必要であったが、

並列計算の場合はこれと比較にならないくらいの作業量に加えて、新たなアルゴリズム開発そのものも要求される。以前はほとんど必要のなかったこれらの作業を、研究者が担わなければならないのである。

国からもこの部分は強力に支援されており、前述した「ナノサイエンスグランドチャレンジ研究」もその一環であり、分子研が中心となって量子化学計算や分子動力学計算ソフトなどを「京」コンピュータに必要な主要アプリケーションとして開発を進めた。しかしながら、これには平成18年度から23年度まで6年間にもわたるソフトの開発、高度化が必要であり、この開発期間を見るだけでもいかに大変な作業であったか理解していただけたと思う。同様なソフト開発は、CRESTにおいても行われている。そして、これらの成果として、GELLAN、FMO、MODYLASなどの量子化学、分子動力学計算ソフトが現在「京」コンピュータにおいて活躍していることを特に強調しておきたい。例えばMODYLASは^[3]、1000万原子系という巨大な分子動力学計算ですら、「京」65,536ノードを用いるとわずか5msで1ステップ分をすべて計算してしまう。

並列化がいかに大変であっても、や

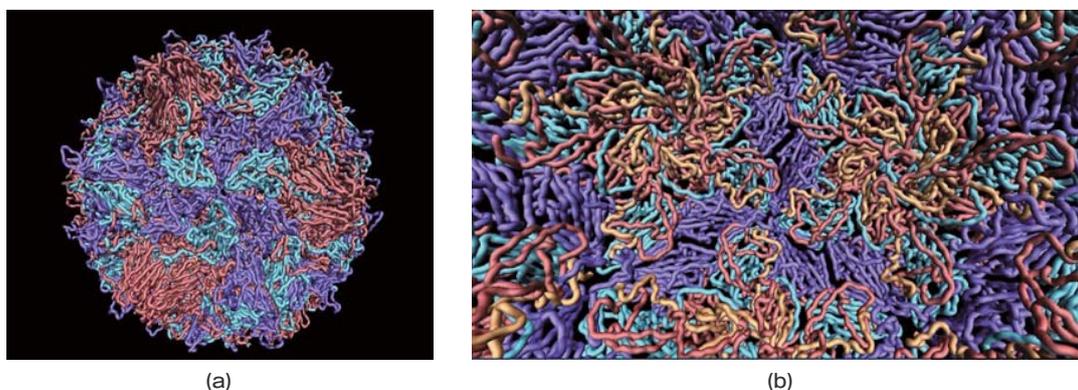


図3 小児マヒウイルスカプシドの分子動力学計算。(a) 外観図、(b) 内部から見た内壁。実際の計算は電解液も含めた全原子計算。色はタンパク質の種類を表す。茶色：VP1、紫色：VP2、水色：VP3、黄色：VP4。名古屋大の計算に基づいて、九州工大入佐准教授作成。

はり開発はしなければならない。なぜなら、この努力を行わないということは、巨大計算機の恩恵を享受できないということの意味しているからである。努力をしている海外の分子科学研究者や他分野の研究者が巨大計算機を思う存分使って大展開を果たしている時に、日本の分子科学だけが旧式の計算機で行き詰っているというわけにはいかないのである。この方向に沿って、共同利用機関の果たすべき役割には重いものがあると理解しており、分子研に対する我々の期待も大きい。また、開発したソフトの普及、展開についても、共同利用の一環としての活動に大きな期待を寄せたい。

ポスト「京」に向けて

現在、国家主要技術として、「京」コンピュータの100倍近い性能を持つポスト「京」コンピュータの開発が進められつつある。そして、この準備としてすでに、ポスト「京」で用いるアプリケーションソフトの開発プロジェクトが始まろうとしている。ポスト「京」を用いて行うべき研究については、文科省の「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会」で議論されたが、委員会答申の形で9課題が提示されている。それらの中で、分子科学に関係した課題としては「革新的創薬基盤」、「エネルギー新規基盤技術」、「新機能デバイス・高性能材料」などがあり、これら

の中で「エネルギー新規基盤技術」の確立に関しては、分子研を代表機関とする提案が採択され、現在、新たなプロジェクトがスタートしようとしているところである。

重要なことは、課題名からも分かるように、これらにおいては社会的意義、国家的意義が特に求められていることである。つまり、産業界への貢献である。「京」においても産業界への貢献は重要項目であるが、それがさらに徹底されているように思われる。また、実験研究者との連携も強く要請されており、これは計算科学者による単独研究一般に対するひとつの評価を反映しているものであると理解せざるを得ない。プロジェクトに参加する際には、これらの要請は真摯に受け止めて、まじめに考えていく必要がある。

このような中で、ポスト「京」プロジェクトにどのように向き合っていくか、その方向性が極めて重要となる。特に産業界との連携については、やみくもに反対するのではなく、いい意味でお互いのプラスになるように前向きに進んでいくことができると願っている。産業界のニーズには共通基盤として学術的に興味深い問題も多いはずで、ニーズからどのように学術的意味を発掘していくか、これについては我々の力量が問われているところである。

以上、昨今の計算科学分野にまつわる種々の状況の中で、特に国の大型プロジェクトがらみのことについて述べ

てきた。最後に、これらプロジェクトの推進力は、まぎれもなく助教層、ポスドク、大学院生等の若手である。現に「ナノサイエンスグランドチャレンジ研究」、「HPCI戦略プログラム」においては、分子科学分野も若手のがんばりで何とか存在感を示し得て来ているように思われる。その彼らが次のステップでさらに活躍できるように研究環境を整備し、広くチャンスを準備していくのは、我々シニアの役割である。一方で、計算科学分野においても、いわゆるポスドク問題が顕在化しつつある。分子科学研究やソフト開発をさらに大きく発展させるためにも、これらに人生をかけている若い人たちの処遇、ポストの確保については、分野を挙げて考えていかなければならないことである。

参考文献

- [1] T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, H. Tanaka, *J. Phys. Chem. B* **118**, 1900(2014).
- [2] Y. Andoh, N. Yoshii, A. Yamada, K. Fujimoto, H. Kojima, K. Mizutani, A. Nakagawa, A. Nomoto, S. Okazaki, *J. Chem. Phys.* **141**, 165101(2014).
- [3] Y. Andoh, N. Yoshii, K. Fujimoto, K. Mizutani, H. Kojima, A. Yamada, S. Okazaki, K. Kawaguchi, H. Nagao, K. Iwahashi, F. Mizutani, K. Minami, S. Ichikawa, H. Komatsu, S. Ishizuki, Y. Takeda, M. Fukushima, *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 3201(2013).