

## 2.6.4 物質・材料シミュレーション

### (1) 研究開発領域の定義

量子力学や統計力学の諸知見を活かし、物質の構造、物性、材料組織、化学反応機構などを高精度に解析・予測する技術の確立をめざす研究開発領域である。原子・電子レベルの現象の解明に加えて、それらがミクロな組織や物性に与える影響、メソスコピックレベルの非線形現象とマクロな特性・機能との関係性など、マルチスケールの階層構造を明らかにすることで諸現象の制御方法を見出し、新材料の設計指針を提供する。また、実験的手段による解析が困難な極限環境下の現象予測などにおいても、非経験的で予言能力の高いシミュレーション技術が大きな役割を果たす。近年、マテリアルズ・インフォマティクスによる材料探索の高効率化や、量子コンピュータを利用する量子化学計算アルゴリズムの開発が新たな潮流を形成しつつある。

### (2) キーワード

計算物質探索・材料設計 (コンピュータシミュレーションマテリアルデザイン: CMD)、第一原理電子状態計算、量子化学、分子シミュレーション、(第一原理)分子動力学法、(量子)モンテカルロ法、フェーズフィールド法、粒子法、マルチスケールシミュレーション、マテリアルズ・インフォマティクス、ケム・インフォマティクス、データ同化、量子コンピュータ

### (3) 研究開発領域の概要

#### [本領域の意義]

物質の性質の大部分はその電子状態で決まるため、原子配列の自由度に加えて電子状態における電荷自由度、スピン自由度、軌道自由度の4つの自由度を自在に操る方法を明らかにすることが、新規機能性物質の開発で重要となる。また“材料組織”の制御も重要である。これは顕微鏡で観察されるメソスケール(数十nm~数百 $\mu\text{m}$ )の不均一パターンであり、その形態やサイズがマクロスケールの材料の機械的・熱的・電氣的・磁氣的特性、そして各種機能の発現に影響を及ぼす。したがって、メソスコピック現象をいかに正しく理解し制御するかが、多くの材料開発・設計において重要となる。

物質・材料シミュレーション分野は、近年の計算機の大幅な性能向上と、計算プログラムの高度化により、10年前と比較して格段の進歩を遂げた。今や実験結果の解釈ばかりでなく、実験の計画段階におけるスクリーニングや物性予測にも用いられる。実験研究者が自身で計算機を用いてモデリングを行う事例も増えており、計算物質科学の専門家と実験研究者の距離が縮まっている。したがって、これからの物質・材料シミュレーションには、実験で扱う系により近い大規模なシミュレーション技術の開発、実験的に解明が困難なナノメゾ、マクロの異なるスケールが複雑に絡み合った現象の解明、化学反応や物理現象、材料組織が絡み合ったマルチフィジックス現象の解明や予測などが求められる。また、近年著しい発展を遂げている機械学習をはじめ、データ科学の手法と物質・材料シミュレーションの連携による、材料探索や反応経路探索の高効率化、帰納的・経験的推論の効率化が新潮流となってきている。

グローバルな研究開発競争が激化するなか、ナノテクノロジー・材料分野で日本がこれまで同様に先導的な役割を果たせるか、予断を許さない状況にある。このような背景から、計算物質科学やデータ科学を駆使したハイスループットな材料開発に大きな期待が寄せられている。2019年末に発生した新型コロナウイルス感染症(COVID-19)の拡大は研究開発のデジタルトランスフォーメーション(DX)に拍車をかけており、本研究領域の役割はますます大きくなっていくものと考えられる。

## [研究開発の動向]

計算物質科学ではさまざまなプログラムが開発され、それらを用いた応用計算が数多く行われている。東京大学物性研究所は、物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps を運営しており、目的にあったソフトウェアを簡単に検索できる環境が整備されている。MateriApps には2020年8月現在、273件のアプリケーションソフトウェアが登録されている。以下では個々の分野において広く使われるプログラム、および特に顕著な進展を示す。なお、人名、所属が明記してあるものは、日本の研究者によるものである。

### • 分子系電子状態計算分野

海外製の有償ソフトウェア Gaussian がもっとも広く使われている。他の有償ソフトウェアとして Spartan、Jaguar、Q-Chem、molpro、molcas、AcesIII、TURBOMOLE、ADF などがある。無償のソフトウェアには Gamess、NWChem、Orca、Columbus、Firefly、BAGLE、NTChem (中嶋：理化学研究所)、SMASH (石村：クロスアビリティ)、GELLAN (天能：神戸大学)、ABINIT-MP (望月：立教大学)、PAICS (石川：鹿児島大学) などがある。新しい手法の開発も進んでおり、SAC-CI 法 (中辻：量子化学研究協会)、Devide&Conquer (DC) 法、および DC 法と密度汎関数強結合近似 (DFTB) を融合した大規模半経験的分子動力学計算手法 (中井：早稲田大学)、Fragment Molecular Orbital (FMO) 法 (北浦：理化学研究所、望月：立教大学、石川：鹿児島大学)、Matrix Product State (MPS) 波動関数法を用いた密度行列繰り込み群 (DMRG) 法 (柳井：名古屋大学、倉重：京都大学) など、当該分野の発展に日本が大きく貢献している。

### • 固体系量子状態計算分野

海外製の有償ソフトウェア VASP がもっとも普及している。他の有償ソフトウェアとして Wein2K、Sienta、Castep、Crystal14 など幅広く用いられる。無償のプログラムとして、Quantum Espresso、CPMD、CP2K、exciting、xTAPP (山内：慶應義塾大学、吉本：東京大学)、RSDFT (岩田：Advance Soft)、RSPACE (小野：神戸大学)、State (森川：大阪大学)、QMAS (石橋：産業技術総合研究所)、Conquest (宮崎：物質・材料研究機構)、PHASE/0 (物質・材料研究機構)、SALMON (矢花：筑波大学) などがあり、OpenMX (尾崎：東京大学) は非平衡グリーン関数電気伝導計算にも対応する。最近では、スピン系の有効モデルに対する統合ソフトウェア HΦ の開発 (山地ら、東京大学)、テンソルネットワーク法やテンソル繰り込み群等の新規手法の開発が進められている。

### • 分子シミュレーション分野

無機材料ソフトマター系のシミュレーションでは LAMMPS が、生体分子系のシミュレーションでは GROMACS がもっとも広く使用されている。この他、有償ソフトウェアとして Amber、CHARMM、無償ソフトウェアとして NAMD、MODYLAS (岡崎：名古屋大学)、myPrest (中村：大阪大学)、GENESIS (杉田：理化学研究所)、CafeMol (高田：京都大学)、Marble (池口：横浜市立大学) などがある。分子動力学計算 (MD) では、汎用グラフィカルボード (General purpose graphical processing unit : GPGPU) や Intel Xeon Phi などのメニーコア型演算加速器向けプログラムの開発が進んでいる。また近年、機械学習を使って分子動力学の長時間シミュレーションの結果を予測する MD-GAN、第一原理計算の結果から分子力場を機械学習する方法の開発が進められている。

### • モンテカルロシミュレーション分野

格子系に関しては無償ソフトウェア DSQSS (川島：東京大学) がある。実装やカスタマイズがしやすい定番ソフトウェアといえるものはないが、ALPS プロジェクト (藤堂：東京大学) などモンテカルロ計算に関するさまざまなライブラリを提供する取り組みがある。モンテカルロ法は、アモルファス構造の生成や第一原理

計算への応用、Boltzmann輸送方程式にもとづく輸送シミュレーションなど、計算科学のさまざまな場面で用いられる有用な方法である。

#### • 統計力学理論にもとづくシミュレーション分野

積分方程式理論にもとづいて溶液中の溶媒和効果を扱うRISM-SCFや3D-RISM (吉田:九州大学)などのプログラム開発が行われている。エネルギー表示法にもとづいて溶媒和自由エネルギーを簡便に計算できるERmod (松林:大阪大学)は、小分子から高分子まで幅広く適用できる。さらに、固体の電子状態計算と融合させた、第一原理電気化学界面シミュレーションの開発も進んでいる (大谷:産業技術研究所、西原:Advance Soft)。

#### • 連続体シミュレーション分野

Micress、MMSP、OpenPhase、OCTA (土井:北京航空航天大学)などのソフトウェアがあり、主に混晶構造の解析や、ソフトマターの構造転移などの問題に適用されている。特にOCTAはミクロスケールからメソスケールまで幅広い系を扱うことができるプラットフォームであり、物質のマルチスケールシミュレーションの草分けのプログラムである。流体力学解析ツールボックスのOpenFormは、化学反応、燃焼、超伝導、乱流などのシミュレーションに広く用いられている。また、高分子の第一原理計算 (前述、FMO) を連続体モデルと接続する望月・土井らの試みなど、マルチスケールシミュレーションの高度化が進められている。

#### • 量子コンピュータによる量子化学計算

トロント大 (カナダ) のAlan Aspuru-Guzikらが量子コンピュータによる量子化学計算手法を提示して以来、基礎的な研究が進められている。量子ゲートマシン向けの量子化学計算ライブラリOpenFermionをはじめ、波動関数を最適化する変分量子固有値法 (Variational Quantum Eigensolver: VQE) を含む開発環境がGoogle、IBM、MicroSoftなどから提供されるなど、ソフトウェア開発の環境整備が進んでいる。世界中でベンチャー企業が立ち上がっており、国内でもQunaSys、blueqat (旧 MDR) などが注目を集めている。ただし誤り耐性を有する量子コンピュータの実用化は数十年以上先ともいわれ、NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) デバイスなど、早期実現が期待されるハードウェアを想定したソフトウェア開発が進められている。

#### • その他

第一原理計算や分子動力学計算の応用手法として、反応経路ネットワークを探索するGRRM/AFIR法 (前田:北海道大学)、TSMD (津田:東京大学)、マルチカノニカル分子動力学法 (岡本:名古屋大)、カスケード型分子動力学法 (原田:筑波大)、分子振動やフォノン分散を解析するSindo (八木:理化学研究所)、Phonopy (東後:京都大学)、ALAMODE (只野:東京大学) があげられる。機械学習を用いたケム・インフォマティクスのツールも無償で公開されており、iqsprおよびXenonPy (吉田:統計数理研究所)、化学構造式のための深層学習ツールChainer Chemistry (Preferred Networks) などがある。

また、励起状態間の遷移を取り扱うsurface hopping (SH) 法など非断熱ダイナミクスに関しても、MCTDH、Newton X、PIMD、CPMDなど汎用ソフトウェアが無償で提供されており、さまざまな電子状態計算ソフトウェアと組み合わせることで光化学反応の解析などが可能である。SH法に関しては台湾交通大のZhuらによって開発された方法により、計算時間を要していた非断熱結合定数が不要になるなど、光化学分野のダイナミクスに道がつけられつつある。

#### (4) 注目動向

##### [新展開・技術トピックス]

データ科学の手法と物質・材料シミュレーションの連携による効率的な材料探索を進める取り組みが、近年ますます活発化している。国内初のマテリアルズ・インフォマティクス関連プロジェクト「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI<sup>2</sup>I)」は2020年3月に終了したが、JSTさきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」、JST-CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」が進行中であり、さらに2018年から産業技術総合研究所によって、世界最大規模の人工知能処理向け計算インフラストラクチャであるAI橋渡しクラウド(ABCI)が運用されている。理論化学および計算化学にインフォマティクスを適用するケム・インフォマティクス領域では、半経験的量子化学計算におけるパラメータの構築、密度汎関数理論における運動エネルギー汎関数および交換相関汎関数の構築、波動関数理論における電子相関エネルギーの予測などに応用されている。

国内では運動エネルギー汎関数の開発(中井:早稲田大学)、電子相関モデル(同左)、交換相関汎関数の開発(常行:東京大学)など、優れた成果があがっている。分子動力学および粗視化分子動力学法においては、系のエネルギーの見積もりや力場の構築、自由エネルギー曲面や運動エネルギーの計算、平衡構造のほか観測したい構造のサンプリングなどに活用されている。ケム・インフォマティクスを活用したソフトウェアの開発・公開も進んでおり、英国のブリストル大学およびスイスのバーゼル大学を中心として開発されたQML、ドイツのベルリン工科大学を中心として開発されたSchNetPackなどが有力である。また、シミュレーションと実測データを融合し相乗効果を生み出す「データ同化」の技術を物質・材料シミュレーションへ導入する研究も活発化している。従来はゲリラ豪雨の予測などの気象分野で活用されてきた技術であるが、近年はX線回折実験とシミュレーションのデータ同化による結晶構造解析、フェーズフィールド法のシミュレーション結果に合致するように分子動力学シミュレーションの原子間パラメータを最適化する技術などの新たな試みが行われている。シミュレーションで得られる物理量を記述子として実験データを機械学習させる未知化合物の物性や反応を予測する技術の開発や、自動有機合成機械と計算データを融合しリアルタイムに機械学習を行うことで自動的に未知反応を予測する技術の開発も進められている。

もう1つ、注目すべき新潮流として、量子コンピュータの利用があげられる。2019年、Googleが53量子ビットの量子コンピュータを作製し、量子優位性を達成したことは大きな話題を呼んだ。誤り耐性を持たない数十から数百量子ビットの量子コンピュータ(NISQデバイス)の時代が到来しつつある。NISQデバイスを活用するため、量子コンピュータと従来型の古典コンピュータを組み合わせた量子古典混合アルゴリズムが現在さかんに研究されている。なかでも計算物質科学は特に有望な応用先と目されており、量子古典混合アルゴリズムの中で波動関数を最適化するVQEに加え、量子回路学習など機械学習に向けたアルゴリズムも提案されており、マテリアルズ・インフォマティクスへの応用も期待されている。物質シミュレーションに向けた量子古典混合アルゴリズムの研究開発は、公的研究機関や大企業だけでなく、国内外のベンチャー企業も積極的に取り組んでおり、1つのムーブメントを形成している。

##### [注目すべき国内外のプロジェクト]

2014年度から開始された文部科学省ポスト「京」重点課題、2016年度から開始されたポスト「京」萌芽的課題が2020年3月に終了したことに伴い、2020年4月から新たに文部科学省補助事業・「富岳」成果創出加速プログラムがスタートした。このプログラムでは、①精密・広域・長時間のシミュレーションによるブレイクスルー、②膨大な組み合わせや多様・複雑な条件下でのシミュレーションによる新たな知見の獲得、

③大量データ処理・ビッグデータ解析による新たな研究・開発の展開など、フラッグシップスーパーコンピュータ「富岳」で初めて可能となる超大規模計算・データ解析が求められている。

計算物質科学領域からは、「富岳」成果創出加速プログラムに下記の6課題が採択されている。

#### [領域① 人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓]

- 1) 量子物質の創発と機能のための基礎科学—「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学 (今田 正俊: 早稲田大学理工学術院総合研究所)
- 2) 全原子・粗視化分子動力学による細胞内分子動態の解明 (杉田 有治: 理化学研究所生命機能科学研究センター)

#### [領域③ 産業競争力の強化]

- 3) 省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション (押山 淳: 名古屋大学未来材料・システム研究所)
- 4) 次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究 (館山 佳尚: 物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点)
- 5) 環境適合型機能性化学品 (松林 伸幸: 大阪大学大学院基礎工学研究科)
- 6) 大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発 (三宅 隆: 産業技術総合研究所 材料・化学領域 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター)

2015年度よりJSTによる支援の下、NIMSにおいて情報統合型物質・材料開発研究拠点 (拠点長: 伊藤聡) が設立され、また、それと連携する形で戦略的創造研究推進事業 (さきがけ)「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ・インフォマティクスのための基盤技術の構築」(2015~2020年度) および、CREST「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」(2017~2024年度)の研究領域が発足し、情報科学の研究手法を物質設計に活用し、データベースの構築や機械学習により新規物質、高性能化のための物質設計指針の導出の自動探索に向けた取り組みを牽引している。また、有機材料を対象としたマテリアルズ・インフォマティクスとして、NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」(2016~2021年度)が進められ、産業技術総合研究所を中心に化学メーカー企業も参画した産学連携研究が推進されている。

2019年10月から、JST-ERATOプログラムで初の計算物質科学分野のプロジェクトとして「ERATO前田化学反応創成知能プロジェクト」(2019~2024年度)がスタートした。北大の前田らが開発した反応経路自動探索技術 (AFIR法) と組み合わせ最適化技術を基盤として、量子化学計算、情報科学、さらにはマテリアルズ・インフォマティクスの技術を組み合わせることで、化学反応における原子の動きを予測し、未知の化学反応を提案する技術を開発している。また2018年から世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI) の拠点として化学反応創成研究拠点 (ICReDD)が北大に設置され、AFIR法で算出した化学反応経路ネットワークを用いて計算科学、情報科学、実験科学の3分野融合の研究を推進している。

その他、文部科学省の元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型> (2012~2021年度)においては、磁性材料 (拠点長: 広澤哲、NIMS)、触媒・電池材料 (拠点長: 田中庸裕、京都大学)、電子材料 (拠点長: 細野秀雄、東京工業大学)、構造材料 (拠点長: 田中功、京都大学) の各拠点において、さまざまな実験・計測、および計算・理論研究が有機的に連携した取り組みが精力的になされている。

計算物質科学分野の人材育成およびコミュニティ形成活動として、東北大学、東京大学、分子科学研究所、大阪大学の4機関によって2015年に設立された計算物質科学人材育成コンソーシアム (Professional development Consortium for Computational Materials Scientists: PCoMS)、ならびに2020年5月

に組織された「計算物質科学協議会 (Computational Materials Science Forum : CMSF)」がある。

産学官連携の取り組みとして、2018年から運営が始まった「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」が注目されている。電気化学界面シミュレーション技術を普及し、高性能デバイス開発 (電池、キャパシタ、電気メッキ、腐食、防食、電気化学センサ) を促進することをめざした産学官連携組織で、現在18社の企業が法人会員として参画している。

量子コンピュータによる量子化学計算への支援も始まっている。2018年に発足した文部科学省の「光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP)」では、「量子情報処理」技術領域において量子コンピュータのアプリケーション研究が進められており、その中で材料シミュレーションに向けたアルゴリズム開発も行われている。2019年にはJSTさきがけ「革新的な量子情報処理技術基盤の創出」(2019～2024年度)の研究領域が立ち上がり、量子コンピュータを物性物理や量子化学計算に応用する研究も支援している。内閣府の戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 第2期「光・量子を活用したSociety 5.0実現化技術」においても量子アルゴリズムの実行時間も含めた評価・検討が進められている。情報処理推進機構 (IPA) が進める未踏ターゲット事業においても、2018年度から3年続けて「量子コンピューティング技術を活用したソフトウェア開発」がテーマとして設定されており、材料シミュレーションと関連したテーマが採択されている。民間では、blueqat (旧MDR)、QunaSys、Quemixなどのスタートアップ企業が量子コンピュータの物質科学への応用に向けた取り組みを行っている。2020年には量子コンピュータの材料開発への応用をめざすコミュニティ「QPARC」が開設され、材料系メーカーを中心に数十社が参画している。産学の協力も進んでおり、IBMの量子コンピュータにアクセスできるハブ拠点が2018年に慶應義塾大学に開設され、量子コンピュータの実機を用いた量子化学計算の検証も試みられている。2020年には東京大学を中心として「量子イノベーションイニシアティブ協議会 (QII協議会)」が立ち上がり、化学メーカーを含む複数の企業が参加している。

### [米国]

2011年に発表された「Materials Genome Initiative (MGI)」を契機に、物質・材料分野へ5年間で5億ドルの巨費が投入され、マテリアルズ・インフォマティクス分野を牽引した。現在は、MITのMaterials Project、Duke大学のAFLOW、Harvard大学のClean Energy Projectなどで、第一原理計算結果のデータベース開発や材料探索が行われている。Aspuru-Guzikを計画責任者とするベンチャー企業Kebotixが2018年に発足し、人工知能による分子や材料の効率探索や設計、次々に資金調達に成功している。同社は、MIT Technology reviewの“10 Breakthrough Technologies list”や、World Economic Forumの“Technology Pioneer”に選出されるなど注目を集めている。米IBM社もケム・インフォマティクス研究に乗り出しており、産業界からのアプローチも今後増えると予想される。

量子コンピュータを用いた計算化学技術の開発も活発化している。2018年に署名されたNational Quantum Initiative Actでは、量子コンピュータ分野に5年間で1400億円相当の拠出が約束されている。NFSによるQuantum Leap in Chemistry (QLC)をはじめ、DOEも量子情報に関連する材料・化学研究予算をサポートしている。2019年にはNIST (National Institute of Standards and Technology、米国立標準技術研究所) 主導のコンソーシアムQuantum Economic Development Consortium (QED-C)が発足し、100社を超える企業と30以上の大学等の研究機関が参加している。

### [欧州]

EUのHorizon 2020 (2014～2020年) にもとづいて、インフラ (PEACE)、テクノロジー (ETP4HPC)、

アプリケーション (CoE) を3つの軸にして、スーパーコンピュータのシステム開発、ソフトウェア開発、そして利用拡大が推進されている。PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) は2012年に組織され、現在も計算科学の諸分野への支援を行っている。参加国は26カ国で、特に、計算機システムに関してはBSC (スペイン)、CINECA (イタリア)、GCS (ドイツ)、GENCI (フランス)、CSCSおよびETH (スイス) の各国研究機関が担当する。また、ICMEg (Integrated Computational Materials Engineering expert group) を中心に物質、構造材料、機械などの産業分野における計算科学分野の連携研究も重層的に進められている。マテリアルズ・インフォマティクス関連ではNOMAD CoE (Novel Materials Discovery Center of Excellence) が推進されている。Glasgow大学のL. Croninのグループは、実験化学とインフォマティクスの融合により、実験の計画から実験操作まで自動で行うロボットおよびシステムを開発し、高インパクトジャーナルに次々と成果を発表している。量子コンピュータ関連では、2018年にQuantum Flagshipプログラムが設立され、10年間で10億ユーロ (約1400億円) が投じられる。

### [アジア諸国]

中国では、計算物質科学研究に関する論文が格段に増加し、質の高さでも日本を凌駕している。これは、論文発表に対して給与外の金銭的なインセンティブがあることにも起因していると考えられる。超並列計算機環境も世界で上位を占めており、応用計算に多くの資源が供給されている。プログラム開発に関してはまだ途上にあるが、千人計画で欧米から戻った研究者が増加しており、さらには欧米でリタイアした研究者を研究室ごと引き抜くなど、大胆な政策を行なっている。今後、計算物質科学分野においても、中国の存在感はますます高まることが予想される。マテリアルズ・インフォマティクス関連の動向として、例えば2012年に上海大学に設置されたMaterials Genome Instituteがある。量子コンピュータに対しても科学技術イノベーション5カ年計画にもとづき、10年で1200億円以上の投資が行われる計画であり、この枠組みのなかで量子コンピュータを利用した物質シミュレーションの研究開発も進行すると考えられる。

シンガポールでは、国外の研究者にインセンティブを与えて積極的に誘致している。アジアでいち早く大学のグローバル化を進めてきたことが奏功し、近年、研究のレベルが格段に向上している。

韓国、台湾においても当該分野への関心が高まっており、中国やシンガポールと同様に海外からの研究者の積極的な獲得を通じ、研究レベルの向上を図っている途上にあると考えられる。特に韓国では電気・電子材料に、台湾では基礎研究への投資が多くなされている。

西アジアにおいては、サウジアラビアが海外の研究者の積極的誘致や計算機環境の向上に力を入れており、質の高い論文が発表され始めている。

### (5) 科学技術的課題

近年の計算機環境、計測・分析機器の進展および理論・計算手法の向上により、ナノ、メゾ、マクロのそれぞれのスケールにおける物質・材料の組織や特性の理解は着実に進んでいる。今後は第一原理にもとづく分子シミュレーションや統計力学理論 (溶液論、フェイズフィールド法) との融合によって、より高度なマルチスケールモデリング計算手法を開発し、より現実の系に則したナノ構造体における反応や物性の制御がシミュレートできる環境を整えていくことが重要である。そのためには、物理・化学・材料科学の諸分野の力を結集するだけでなく、数学、化学工学、機械工学、さらには情報科学分野との融合を進める必要がある。

マテリアルズ・インフォマティクスに関しては、日本の強みである基礎理論と計算プログラム開発を、実際の材料開発・合成技術と融合する取り組みが一部で進んでおり、今後のさらなる研究開発投資により材料開

発のハイスループット化が進むことが期待される。ただし、異分野融合の盛り上がりは依然として欧米の後塵を拝している。特に国内のケム・インフォマティクスは歴史的な経緯から化学工学や創薬研究が主流で、分子科学系研究者のコミュニティが醸成していない。化学系を含む理論・実験・計算科学の連携は限定的である。

量子コンピュータ技術に関して、NISQデバイス向けの量子古典混合アルゴリズムについて、ノイズの混入や量子回路自体の最適化の難しさなど、この数年で課題が認知されるようになってきた。現在のところ量子コンピュータの応用に向けた研究は古典アルゴリズムの延長線上にあるものが多い。今後は柔軟な発想のもと、既存の物質・材料シミュレーションの枠組みを超えた方向性を見つけることが肝要である。量子コンピュータ技術はまだ萌芽段階にあり期待先行の面が強い。そのため、期待と現実との乖離が大きいくほど反動が生じやすく、これが長期的な研究開発の継続をはばむ恐れがある。ムーアの法則の限界が近づきつつある状況と既存の物質シミュレーションの成熟度に鑑みると、量子コンピュータ技術の開発は持続的に取り組むべき基礎的研究課題である。

計算物質科学の裾野は広がっており、宇宙・惑星科学、地球科学、海洋科学領域などにおける極限環境下での特異な物質・物性に関して、その基礎研究に計算物質科学の研究手法をもっと適用していくべきである。他にも、分子生物学、構造生物学、薬学、医学などの生命科学の諸分野でも計算物質科学との共同研究は可能である。これらの分野においては、従来の研究領域とは異なる条件や要請があり、それらを解決するための手法開発が必要となるであろう。

## (6) その他の課題

計算物質科学の分野における「個々」の日本の研究者の層は非常に厚く、研究の独自性やプログラムの機能も欧米に引けを取らない一方で、研究のフォロワーやユーザーが少なくシェアが小さいことが一番の難点である。現状を打破するためには、個々の研究を1つに束ねる核となる施策と、国際共同研究への支援策が課題である。また、計算物質科学分野内のコミュニティにとどまらず、実験研究分野のコミュニティとの連携を支援する研究プロジェクトを継続することで、実験側のニーズに即した課題解決が可能になると考えられる。特定の研究者に集中投資するファンディング体制だけでなく、少額で短期間のファンディングの機会を増やすことも重要であり、これによって多くのトライアルがなされ、欧米や中国に負けない速いサイクルで材料開発が進むことが期待される。

一方で、発想を大きく転換し、海外の主要オープンソースの開発に積極的に参入する、という戦略も取りうる。これらは多国籍で開発されており、そこに日本が入り込むことは十分に可能である。欧米で頻繁に開催されているコード開発の研究会に積極的に参加し、パッケージの一部でもわが国が主導権を握れば、欧米諸国から日本で研究を行うことを希望する研究者も増えると期待され、それによって日本の計算物質科学分野の底上げが期待される。そのためには、グローバルで活躍できる人材育成・活用体制の構築が必要である。特にイノベーションの本質は人であることから、グローバルな視点を備えた計算物質科学のエキスパートが、産業の強化・革新、新産業の創出を担う企業において活躍できる場を設けることが政策的にみて極めて肝要であると考えられる。

データ科学と物質・材料シミュレーションの連携で研究データが爆発的に増加していくことが見込まれ、今後は計算物質科学領域においても「研究データリポジトリ整備・運用ガイドライン」に沿ったデータマネジメントを行うことが求められている。計算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の体制を構築していく必要がある。東京大学物性研究所では、「富岳」成果創出加速プログラムの参画者を対象としたデータリポジトリ事業をいち早く進めている。研究データの可用性と完全性の確保だけでなく、サービスレベルに合わせて機密性を確保する仕組みを整備することが、国内の産学連携を促



進めるために重要な課題となる。

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> <li>従来から電子状態計算法の開発がさかんで高い独自性を発揮している。</li> <li>ポスト「京」重点課題・萌芽的課題で開発された超並列計算ソフトウェアが「富岳」成果創出加速プログラムに引き継がれ世界を牽引。</li> <li>反応経路自動探索プログラム GRRM が注目を集めている。</li> <li>マテリアルズ・インフォマティクスの研究が活発化している。</li> <li>量子コンピュータによる物質計算の研究者が増加しており、論文の質も欧米と比較して遜色ないレベルにある。</li> </ul>
	応用研究・開発	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> <li>国の大型プロジェクトが物質・材料シミュレーションの応用研究を牽引。計算、実験、計測、さらにはデータ科学の合同プロジェクトが増え、出口を見据えた応用研究の取り組みが強化されている。</li> <li>材料系・製薬系のメーカーから物質・材料シミュレーションが重要視され、コンソーシアムやプロジェクトが拡大している。</li> <li>スタートアップ企業を中心に量子コンピューティングのアルゴリズム開発が進められている。</li> </ul>
米国	基礎研究	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> <li>Gaussian、LAMMPSをはじめ、商用・無償プログラムが充実し、新理論の導入やバージョンアップがさかんに進められている。</li> <li>マテリアルズ・インフォマティクス分野について、さまざまな研究がなされており、世界を大きくリードしている。</li> <li>GoogleとIBMなどのIT大手企業が量子コンピュータ研究を推進しており、CaltechのChanのグループやVirginia TechのMayhallのグループが量子コンピュータによる物質計算で優れた成果をあげている。</li> </ul>
	応用研究・開発	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> <li>GPU化への対応を含めてプログラム開発および公開などが活発。</li> <li>物質・材料シミュレーションのソフトウェア開発自身が1つの産業として定着している。タミフルの薬剤設計の例にみるように、産業界においてシミュレーション分野の貢献が大きくなっている。</li> <li>材料組織のデータベースの分野で、材料組織の3次元解析ソフトのDREAM.3Dが定番ソフトの地位を確立しつつある。</li> <li>Materials Project、AFLOWに代表されるように、第一原理計算結果のデータベースの開発に加えて、データベースとマテリアルズ・インフォマティクス技術を活用した材料探索など活発に応用研究・材料設計を推進している。</li> </ul>
欧州	基礎研究	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> <li>EU全体としてプロジェクトを推進し、活発な研究開発を行っている。</li> <li>固体系電子状態計算ソフトウェアVASPに代表されるように、計算の高速化や高精度化をめざした電子状態計算ソフトウェアが充実している。</li> <li>反応解析ソフトウェア開発も進んでいる。</li> <li>マテリアルズ・インフォマティクス分野の人事公募案件が増えている。</li> <li>NISQに向けた化学計算の先駆的論文が英国およびスイスを中心に数多く発表されている。オランダでは実機上での分子構造の最適化が初めて行われた。</li> </ul>
	応用研究・開発	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> <li>Horizon 2020で、スーパーコンピュータのシステム・ソフトウェア開発の成果を活用した応用研究が精力的に推進された。ソフトウェア開発そのものが産業の一部となっている。</li> <li>状態図分野では、スウェーデン王立工科大で開発したThermo-Calcが世界のスタンダードとなっている。</li> <li>フェーズフィールド法のソフト開発では、ドイツが先行。</li> </ul>

2.6  
俯瞰区分と研究開発領域  
共通基盤科学技術

中国	基礎研究	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> <li>・マクロスケールのシミュレーションが中心。</li> <li>・日欧米へ留学していた研究者が本国へ戻り活躍し始めており、今後は方法論およびプログラムの開発力が向上していく可能性がある。マテリアルズ・インフォマティクス分野の研究もさかんになってきている。</li> <li>・VQEなど量子古典混合アルゴリズムの研究報告例が増えている。</li> </ul>
	応用研究・開発	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> <li>・マクロスケールのシミュレーションの応用研究が中心。今後、ナノ・メゾスケールのシミュレーションも、日欧米から中国に帰国した研究者により活発化する可能性が高い。</li> </ul>
韓国	基礎研究	△	→	<ul style="list-style-type: none"> <li>・フェーズフィールド法関連の基礎研究に対する韓国の貢献度は大きいですが、一部の著名な研究者に限定されている。</li> <li>・Samsungが量子コンピュータ・ベンチャー企業に出資するなど量子コンピュータに関与しているが、物質シミュレーションに向けた具体的な成果は報告されていない。</li> </ul>
	応用研究・開発	△	→	<ul style="list-style-type: none"> <li>・エレクトロニクス関係の論文は多いが、今後さらに応用研究が活発化する兆候はみられない。</li> </ul>

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

### 関連する他の研究開発領域

- ・量子情報・通信 (ナノテク・材料分野 2.3.6)
- ・元素戦略・希少元素代替技術 (ナノテク・材料分野 2.5.2)
- ・マテリアルズ・インフォマティクス (ナノテク・材料分野 2.5.3)

### 参考・引用文献

- 1) 物質科学シミュレーションのポータルサイト「News/Event」『物質科学シミュレーションのポータルサイト』, <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/> (2021年1月27日アクセス).
- 2) 中嶋隆人「量子系分子科学研究チーム」『理化学研究所 計算科学研究センター』, <https://www.r-ccs.riken.jp/jp/overview/lab/cmsrt.html> (2021年1月27日アクセス).
- 3) Scalable Molecular Analysis Solver for High-performance computing systems (SMASH), “Welcome to SMASH Page”, SMASH, <http://smash-qc.sourceforge.net> (2021年1月27日アクセス).
- 4) 中辻博「研究所の主な研究活動とご寄付のお願い」『認定 NPO 法人量子化学研究協会研究所』, <http://www.qcri.or.jp> (2021年1月27日アクセス).
- 5) アドバンスソフト株式会社「To the Next Stage」『アドバンスソフト株式会社』, <http://www.advancesoft.jp> (2021年1月27日アクセス).
- 6) HPCI 戦略プログラム分野「予測する生命科学・医療および創薬基盤」(SCLS)「ソフトウェア一覧」

- 『SCLS』, <http://www.scls.riken.jp/scruise/software.html> (2021年1月27日アクセス).
- 7) ALPS WIKI, “Welcome to the ALPS project”, ALPS WIKI, [http://alps.comp-physics.org/mediawiki/index.php/Main\\_Page](http://alps.comp-physics.org/mediawiki/index.php/Main_Page) (2021年1月27日アクセス).
  - 8) フリーでオープンなマルチスケールシミュレーションプラットフォーム(OCTA)「What's New」『OCTA』, <http://octa.jp/jp/> (2021年1月27日アクセス).
  - 9) 大野公一「量子科学で世界を変える」『NPO法人量子化学探索研究所』, <https://iqce.jp/> (2021年1月27日アクセス).
  - 10) High performance computer infrastructure (HPCI)「ホームページ」『一般財団法人高度情報科学技術研究機構』, <http://www.hpci-office.jp> (2021年1月27日アクセス).
  - 11) 伊藤聡「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ(Mi<sup>2</sup>i)」『Mi<sup>2</sup>i』, <https://www.nims.go.jp/MII-I/> (2021年1月27日アクセス).
  - 12) 科学技術振興機構さきがけ研究領域「[革新材料開発]理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」『さきがけ』, [https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research\\_area/ongoing/bunyah27-4.html](https://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/bunyah27-4.html) (2021年1月27日アクセス).
  - 13) 科学技術振興機構CREST研究領域「[革新材料開発]実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」『戦略的創造研究事業推進機構(CREST)』, [https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research\\_area/ongoing/bunyah29-3.html](https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah29-3.html) (2021年1月27日アクセス).
  - 14) 国立研究開発法人産業技術総合研究所「機械学習処理ベンチマークMLPerf HPCにて最高レベルの速度を達成」『AI 橋渡しクラウド』, <https://abci.ai/ja/> (2021年1月27日アクセス).
  - 15) A. Aspuru-Guzik, R. Lindh and M. Reiher, “The Matter Simulation (R)evolution”, *ACS Cent. Sci.* 4, no. 2 (2018) : 144-152. doi : 10.1021/acscentsci.7b00550
  - 16) T. Lookman, F. J. Alexander and K. Rajan 『マテリアルズインフォマティクス～探索と設計～』(東京 : S&T出版, 2018), [http://www.stbook.co.jp/products/detail.php?product\\_id=392](http://www.stbook.co.jp/products/detail.php?product_id=392).
  - 17) Emily Grumbling and Mark Horowitz (eds.)『米国科学・工学・医学アカデミーによる量子コンピュータの進歩と展望』西森秀稔 訳(東京 : 共立出版, 2020), <https://www.kyoritsu-pub.co.jp/bookdetail/9784320124554>.
  - 18) A. Peruzzo et al., “A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor”, *Nature Communications* 5 (2014) : 4213. doi : 10.1038/ncomms5213
  - 19) スーパーコンピュータ「富岳」開発：フラッグシップ2020プロジェクト「スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムについて」『理化学研究所 計算科学研究センター』, <https://www.r-ccs.riken.jp/jp/fugaku/promoting-researches> (2021年1月27日アクセス).
  - 20) 新エネルギー・産業技術総合開発機構「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」『新エネルギー・産業技術総合開発機構』, [https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP\\_100119.html](https://www.nedo.go.jp/activities/ZZJP_100119.html) (2021年1月27日アクセス).
  - 21) 前田理, 岩田覚「前田化学反応創成知能プロジェクト」『戦略的創造研究推進事業』, [https://www.jst.go.jp/erato/research\\_area/ongoing/jpmjer1903.html](https://www.jst.go.jp/erato/research_area/ongoing/jpmjer1903.html) (2021年1月27日アクセス).
  - 22) 計算物質科学協議会「NEWS」『計算物質科学協議会』, <https://cms-forum.jp/> (2021年1月27日アクセス).
  - 23) Materials Genome Institute of Shanghai University (MGI), “About MGI”, MGI, <http://en.mgi>.

shu.edu.cn/About\_Us/About\_MGI.htm (2021年1月27日アクセス).

- 24) 内閣府政策統括官(科学技術・イノベーション担当)・国際動向を踏まえたオープンサイエンスの推進に関する検討会「研究データリポジトリ整備・運用ガイドライン」『内閣府』,  
<https://www8.cao.go.jp/cstp/tyousakai/kokusaiopen/guideline.pdf> (2021年1月27日アクセス).

## 2.6