

戦略プロポーザル

計算物質科学の新展開

～デジタルツインによる材料創製基盤の革新～

STRATEGIC PROPOSAL

Advanced Computational Materials Science

～Innovation of Materials Development by Digital Twin～

研究開発戦略センター（CRDS）は、国の科学技術イノベーション政策に関する調査、分析、提案を中立的な立場に立つて行う公的シンクタンクの一つで、文部科学省を主務省とする国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）に属しています。

CRDSは、科学技術分野全体像の把握（俯瞰）、社会的期待の分析、国内外の動向調査や国際比較を踏まえて、さまざまな分野の専門家や政策立案者との対話を通じて、「戦略プロポーザル」を作成します。「戦略プロポーザル」は、今後国として重点的に取り組むべき研究開発の戦略や、科学技術イノベーション政策上の重要課題についての提案をまとめたものとして、政策立案者や関連研究者へ配布し、広く公表します。

公的な科学技術研究は、個々の研究領域の振興だけでなく、それらの統合によって社会的な期待に応えることが重要です。「戦略プロポーザル」が国の政策立案に活用され、科学技術イノベーションの実現や社会的な課題の解決に寄与することを期待しています。

さらに詳細は、下記ウェブサイトをご覧ください

<https://www.jst.go.jp/crds/>

エグゼクティブサマリー

本戦略プロポーザルでは、マテリアルの研究開発の効率を向上させイノベーションを実現するために「マテリアル創製のためのデジタルツイン」の構築と利用を提言する。ここでいうデジタルツインは、マテリアル開発プロセス全体をサイバー空間にモデル化し、可能な限りサイバー空間内で開発プロセスを進めるものであり、実際にこれを構築するためには、計算物質科学の革新が必要となる。

多くの産業分野で使われているマテリアルに対して、特性向上への期待が集まっている。しかし、現在用いられているマテリアルは、それぞれの用途に対して最も優れた働きをするように、長年の改良の結果として見出されたものであり、これらの性能を凌駕するマテリアルを、従来の研究開発方法により新規に発見することは極めて困難となっている。この状況を打破するために、2010年頃からは、実験や物質科学計算から得られるデータを元に、AI・機械学習を使って材料探索を行うマテリアルズ・インフォマティクス（MI）が世界中で勃興した。MIは多くの分野で、実際に効果が実証され始めてはいるものの、MIにより予測された材料を現実合成することができない、実際に合成できても期待した性能が得られないといった場合も多く、マテリアル研究開発の効率を根本的に改善するには至っていない。この原因として、MIの学習に用いられる物質科学の計算の結果が、現時点では実際の材料の性質と必要な精度では一致していないことが考えられる。

マテリアル創製のためのデジタルツインは、現実空間のマテリアル開発プロセスである「設計」－「合成」－「評価」のサイクルをサイバー空間にモデル化する必要があるため、マテリアルだけでなく、それを取り巻く環境そのものや環境とマテリアルの相互作用についても適切にモデル化する必要がある。実現のためには、現在の計算物質科学における以下の課題を解決しなければならない。

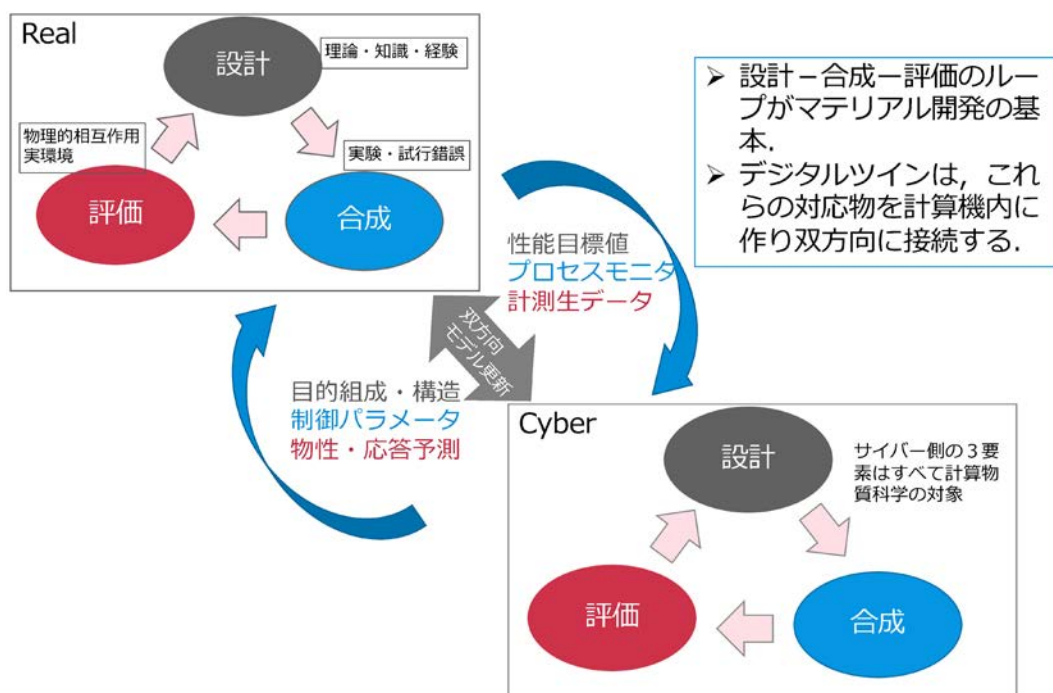


図 EX-1 マテリアル創製のためのデジタルツインの姿

研究開発課題 1. 現実系のモデリング手法の開発

現実系の適切なモデルをサイバー空間に構築すること。計算物質科学では、サイバー空間に作られた原子や分子、あるいはその集団のモデルに対して、何らかの計算処理を行い物質の状態や時間変化などの情報を得ようとする。適切なモデリングが実現できた場合、計算から得られた数値が、現実の世界の測定量や状態変化に対応付けることができる。モデリングが適切であるかどうかは、対象となるマテリアルと知りたい情報の関係によって異なるため、目的に応じたモデリング手法を開発することが課題である。

研究開発課題 2. フロンティア領域の計算手法の開発

計算物質科学の根底にある第一原理計算において、現実に近い計算結果を得ることが難しい対象や現象が存在する。そうした取り扱いが難しい対象・現象のうち、特に重要な「電子相関」、「励起状態」、「ダイナミクス」、「マルチスケール」を、本提言ではフロンティア領域と呼ぶ。フロンティア領域をサイバー空間上で取り扱うためには、これまでとは異なる新しい計算原理・手法の開発が必要である。

研究開発課題 3. マルチモーダル化手法の開発

単一の計算手法や手段では扱いの難しい対象に対しては、以下に示すような要素の組み合わせが課題となる。計算物質科学における異なる計算手法の組み合わせ（e.g., 複数のフロンティアの混成）、計算と実験・データ科学との組み合わせ（e.g., データ同化、機械学習モデル）、異なる種類の計算機の組み合わせ（e.g., CPUとGPU、古典コンピュータと量子コンピュータ）など。

以上のような研究開発課題に取り組む上での推進方策としては、各手法開発を行う研究開発プロジェクトの推進がベースとなる。また、研究開発プロジェクトを通じて開発した新しいソフトウェアを受け取り、継続的な改良やユーザーサポートを行うための持続的な組織（リサーチセンターと呼ぶ）の設置が求められる。新しい物質科学理論や計算手法・ソフトウェアの開発と、それらを普及させるための様々な技術的貢献をすることは、研究そのものとは異なるスキル・モチベーション、時間マネジメントが必要となるため、時限的な研究開発プロジェクトと中長期的に持続するリサーチセンター運用の両輪とすることが有効である。さらに、開発したソフトウェアが持続的に発展していくためには、商用展開することも必要となる。そこで、社会実装に向けたビジネス化の支援策、たとえば、ベンチャー支援やライセンスの仕組みをつくり、業界を育成する取り組みなどが必要である。また、それぞれの方策の中で、研究者、プログラム人材、ユーザー教育・プロモーション人材などの、多様な人材育成を行うことも極めて重要である。

Executive Summary

In this proposal, we show that the construction and utilization of a "digital twin for materials creation" is extremely effective in accelerating the materials R&D process and achieving innovation. In the digital twin, the entire materials development process is modeled in cyberspace, and the development process is carried out only in cyberspace as much as possible.

In most industrial fields, there is a growing expectation to improve the properties of the materials used in each field. However, the materials currently in use have been discovered because of improvement long time to provide the best performance for each application, and it has become extremely difficult to discover new materials that surpass the performance of these materials through conventional materials research and development methods. Materials Informatics (MI), which uses AI including machine learning to search for materials based on data obtained from experiments and materials science calculations, has been expected to be a key technique to overcome such situation since around 2010. Although MI has successfully provided its effectiveness in some fields, it has not yet fundamentally improved the efficiency of materials research and development, as it often fails to synthesize predicted materials or, when it does synthesize them, fails to achieve the expected performance. A reason for this is that the results of the material science calculations that MI uses for learning do not currently coincide the actual material properties with the desired accuracy.

The material development process in real space is executed by repeating the "design-synthesize-evaluate" cycle. Since the digital twin for material creation requires the cycle to be modeled in cyberspace, it is necessary to create appropriate model of not only the material itself, but also the environment surrounding the material and the interaction between the environment and the material. To achieve this, the following issues in current computational materials science must be resolved.

R&D Subject 1: Development of Modeling Methods for Realistic Systems

The first target is to build an appropriate model of the real system in cyberspace. In computational materials science, some kinds of computational processing are performed on models of atoms, molecules, or groups of atoms or molecules created in cyberspace to obtain information about the state of matter and its time variation. When proper modeling is obtained, the calculation results should predict the result of physical property measurement and state changes of materials in the real world. The appropriate modeling methods depend on the target material and the information we want to know, so modeling methods need to be developed for each purpose.

R&D Subject 2: Development of computational methods for frontier areas

In first-principles calculations, which are the basis of computational materials science, there are certain objects and phenomena for which it is difficult to obtain realistic calculation results. Among such difficult targets and phenomena, the particularly important "electronic correlation," "excited states," "dynamics," and "multiscale" are called frontier areas in this proposal. To handle

frontier areas in cyberspace, it is necessary to develop new computational principles and methods.

R&D Subject 3: Development of Multi modal Method

For objects that are difficult to handle with a single calculation method or modality, it is important to combine them. The combination approach includes the combination of different computational methods in computational materials science (e.g., mixing multiple frontiers), the combination of computation with experimental and data science (e.g., data assimilation, machine learning models), the combination of different types of computing machines (e.g., CPU and GPU, classical and quantum computers).

To promote R&D in this area, national research programs to develop the methods listed in the subjects 1 to 3 will be necessary. Moreover, a research center, which is a long-lived organization that takes in new software developed in R&D projects and continuously improves it and provides user support, will play a crucial role. Since developing new materials science theories, computational methods, and software and making various technical contributions to their dissemination require different kinds of skills, motivation, and time management, it is effective to have both short-term intensive R&D projects and long-term sustained research center operations. Furthermore, to ensure the permanence of developed software, commercialization in the broad sense of the term is necessary. It is necessary to take measures to support business development for social implementation, for example, by creating a framework for venture support and a licensing mechanism, as well as efforts to foster the industry. It is also extremely important to conduct the necessary human resource development within each of these measures.

目次

1	研究開発の内容	1
2	研究開発を実施する意義	3
2.1	現状認識および問題点	3
2.2	社会・経済的効果	7
2.3	科学技術上の効果	8
3	具体的な研究開発課題	11
3.1	現実系のモデリング手法の開発	11
3.2	フロンティア領域の計算手法の開発	12
3.3	マルチモーダル化手法の開発	14
4	研究開発の推進方法および時間軸	16
4.1	研究開発の推進方法	16
4.2	研究開発の時間軸	19
付録 1	検討の経緯	21
付録 2	国内外の状況	23
付録 3	専門用語説明	25

1 | 研究開発の内容

本提言は、現状のマテリアル開発における諸課題を「計算科学」の視点から解決することで、マテリアル産業の強化と、マテリアル研究開発の発展を目指すものである。具体的には、マテリアル開発における「設計」―「合成」―「評価」のサイクルを表現できるモデルを計算機上（サイバー空間）に構築する「マテリアル創製のためのデジタルツイン」の実現を目指し、それを利用してマテリアル開発の課題解決を加速する。そのためには、マテリアルだけでなく、それを取り巻く環境そのものや環境とマテリアルの相互作用についても適切にモデル化する必要があり、以下の計算物質科学上の研究開発課題の解決が必要となる。

研究開発課題1. 現実系のモデリング手法の開発

計算物質科学では、物質の状態やその時間変化などの情報を得るために、計算機の中に作られた原子や分子、あるいはその集団のモデルに対して、物理法則を表す何らかの計算処理を行う。「現実系のモデリング」とは、計算への入力となる対象の状態を適切に決定することである。適切なモデリングが実現できた場合、計算から得られた数値が、現実世界の測定量や状態変化に対応付けられる。そのためには実利用環境下におけるマテリアルの適切なモデリング手法の開発が必要である。

研究開発課題2. フロンティア領域の計算手法の開発

適切なモデリング（対象状態の決定）ができたとしても、そこから知りたい値（マテリアルの性能・物性値）が実際に計算できるとは限らない。計算物質科学の基盤にある第一原理計算において、取り扱いの難しい対象や現象が存在するためである。本提言では、そうした取り扱いの難しい対象・現象のうち、現在の計算物質科学において重要な問題である、「電子相関」、「励起状態」、「ダイナミクス」、「マルチスケール」をフロンティア領域と呼ぶ。フロンティア領域を計算機上で扱うためには、これまでとは異なる新しい計算原理・手法の開発が必要となる。

研究開発課題3. マルチモーダル化手法の開発

単一の計算手法や手段では扱いが難しい対象に対しては、以下に示す要素の組み合わせが重要になる。計算物質科学における異なる計算手法の組み合わせ（e.g., 複数のフロンティアの混成）、計算と実験・データ科学との組み合わせ（e.g., データ同化、機械学習モデル）、異なる種類の計算機の組み合わせ（e.g., CPUとGPU、古典コンピュータと量子コンピュータ）などが挙げられる。

これらの研究開発課題を実行する上で必要な推進方策は以下の通りである。

推進方策1. 計算物質科学の手法開発を行う研究開発プロジェクトの実施

研究開発課題1～3を対象とした新しい計算手法を開発する研究開発プロジェクトを実施すべきである。近年の計算物質科学に関する研究開発投資は、スーパーコンピュータのハードウェア開発プロジェクトに並行する形で、それらハードウェアを効率良く利用することに主眼が置かれているものが多い。あるいは、特定のマテリアル研究プロジェクトの中の一つのチームとして計算物質科学の研究チームが存在する形態をとっている。このような体制下でも、ある程度のプログラム開発は可能であるものの、従来のやり方を根本から刷新するような新しい計算手法の開発は困難である。現在、計算物質科学で広く使われている基盤的なプログラムは海外製が多いが、この状態では、ブラックボックスとしてこれらのソフトウェアを使わざるを得ない。マテリアル開発の生命線ともなりうる最先端の研究開発能力を保持できなくなる恐れや、計算物質科学を応用したマテリアル

アルイノベーションを我が国が生み出していく、競争力を失う恐れがある。

推進方策2. 計算物質科学リサーチセンターの構築

アカデミアにおいて、研究開発プロジェクトを通じて開発されたソフトウェアは、その研究開発プロジェクト内での使用に関しては問題なく性能を発揮する。しかし、そのソフトウェアを我が国の知的資産として普及させ継続的に発展させていくことは、5年程度の短い期間の研究開発プロジェクトでは困難である。プロジェクト終了とともに研究チームが解散すると、開発されていたソフトウェアの改善、機能追加などが停滞し、ソフトウェアは競争力を失っていく場合が多い。また、ソフトウェアを普及させるためには、新しい計算アルゴリズムの実装だけでなく、特定のハードウェア上で速く実行するための最適化や、多くの人に使いやすいインターフェースの作成、ユーザーへの教育などが必要である。しかし、それらをアカデミアの研究室単位で行うことは難しい。そこで、開発プロジェクトで作成された優れたソフトウェアを受け取り、継続的に改良を加えたり、ユーザーサポートを行ったりするための持続的な組織を設置することが有効である。本プロポーザルでは、この組織をリサーチセンターと呼ぶことにする。リサーチセンターは、移管されたソフトウェアの改良や普及活動を行うとともに、将来的にはそれらを組み合わせて、マテリアル創製のためのデジタルツインの基盤を構築するミッションを持つことが重要である。リサーチセンターは、必ずしも物理的な拠点を必要とはしないが、機能の核となる人材を持続的に育成する実雇用の環境が必須である。

推進方策3. 社会実装に向けたビジネス化の支援

推進方策1および2のプロセスを経た後に、ソフトウェアが持続的に発展していくためには商用展開することも必要となる。現在、世界的に広く使われているメジャーな海外製計算物質科学プログラムであるGaussianやVASPなどは、有償で提供されている。次々と開発される新たなプログラムを、リサーチセンターでインキュベートし続けることは現実的でなく、ある程度のユーザーベースを獲得し、商用展開の見込みが立ったソフトウェアから商用化の道を作っていくことが、社会実装には有効である。こうしたことを可能とするために、市場価値が見込めそうなものを適切な条件でライセンスし、資金をベンチャー支援に回すといった新しい枠組みをつくり、開発者と利用者が相互に発展するコミュニティを育成していくことが必要である。

推進方策4. 多様な人材の育成

人材育成の方策としては、推進方策1の研究開発プロジェクトの中で、当該分野を牽引する研究者を育成する。また、推進方策2のリサーチセンターで求められる多彩な人材の育成も必要である。分野としては物質科学・計算機科学・情報科学、職種としては研究者・プログラマー・システムエンジニア等を育てるために、アカデミアの教育課程に、主とする専門分野に加え、副とする分野を修得しうる教育システムを構築し、併せて、それぞれの職種に適したキャリアパスを構築し、若手や海外からの人材を呼び込むことが必要である。

また、こうしたマテリアルイノベーションの創出においてはサイバー空間と現実空間の密接な連携が不可欠であり、方策1～3の推進体制においても他プロジェクトとの連携が必要である。特に、文部科学省が推進するマテリアルDXプラットフォームの活用・連携が有効である。同プラットフォームにおいて、大学等の機器やデータを共用する事業としてはマテリアル先端リサーチインフラ（ARIM: Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan）等のプラットフォームが、データを核としたマテリアル研究開発としては、データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト（DxMT）が、活用・連携先として挙げられる。また、大学等の計算機資源を共用する事業としては、革新的ハイパフォーマンスインフラ（革新的HPCI）事業がある。

2 | 研究開発を実施する意義

2.1 現状認識および問題

マテリアルの性能は、そのマテリアルを組み込んだ機器・システムの性能の向上に大きな影響を与えるため、優れた特性を持つマテリアルを世界に先駆けて開発することは、わが国の産業競争力強化に極めて大きな意味を持つ。しかし、現在実用となっているマテリアルは長年の地道な研究開発の結果たどり着いたものであり、その性能をさらに飛躍的に向上させることは一般には困難である。この困難性は、マテリアルを開発する際の大きな指導原理は知られているものの、その細部に至る最適化は実際に「作ってみる」他はなく、その合成・評価に莫大な時間とコストがかかることに起因する。また、その指導原理自体も、従来から知られているマテリアルに関する知識から帰納的に得られたものであるため、新しい原理によって機能を発揮するような未知のマテリアルの発見のためには、ある種の僥倖に頼っている。高まり続ける応用側からの新規マテリアルへの渴望に対して、従来型のマテリアル開発手法での対応は非常に難しい。そこで、時間・コストの掛かる実験の代わりに可能な限り計算機を用いた予測をすることで、マテリアル開発を加速しようという発想が生まれてくる。以下、本節では、これまでに行われてきた計算機を活用したマテリアル開発の動きを概観したのち、それを推進する上での科学技術上および研究開発環境上の問題について述べる。

2.1.1 科学技術上の問題

◆新材料探索手段としての計算物質科学

物質・材料科学研究に計算機によるシミュレーションを利用することは、図2-1に示すように、計算機の普及とほぼ同時期から始まっている。計算機の性能向上や、物質科学理論の進展に伴ってその可用性は増大し、現在では、物質・材料の実用上で重要な物理量に関する情報を与える計算手法が、幅広い空間/時間スケールのマテリアルに対し活用でき、物質科学や材料エンジニアリングの根底を支えている。

マテリアルの創製に計算機を用いる場合、物質・材料を、それらを構成する原子・分子のレベルから記述するために、量子力学の原理に立脚した計算手法を用いる必要がある。実際に計算機上で量子力学に基づいた物質科学シミュレーションを行い材料開発に用いる動きは、スーパーコンピュータが登場した1980年代以降、急速に発展してきた。初期の頃は、対象が小さな分子や抽象的な物理模型に限られ、計算精度も低いものであったが、近年ではより大きな対象に対しより正確な値を算出するものへと進化を遂げた。さらに、マテリアル開発のツールとして市販ソフトウェアが登場することも相まって、それを使いこなすことができるユーザー層も厚くなってきた。この意味では、現在は新材料探索のスクリーニング手段として計算物質科学が利用できる状態にあるといえる。

量子力学の原理に基づく計算の中でも、基礎物理定数以外の実験的なパラメータを使わず、量子力学のみに基づいて計算を行う第一原理計算 (*ab initio* calculations) は、物質の性質を予測する有効な方法である。第一原理計算の場合も、計算機の能力の絶え間ない向上と計算手法 (アルゴリズムや計算モデル) の改良によって、その予測精度や適用範囲を徐々に拡大してきた。特に、優れた計算プログラムが提供されている量子化学の分野では、分子系の材料探索が化学や創薬などのスクリーニング手段として広く行われている。

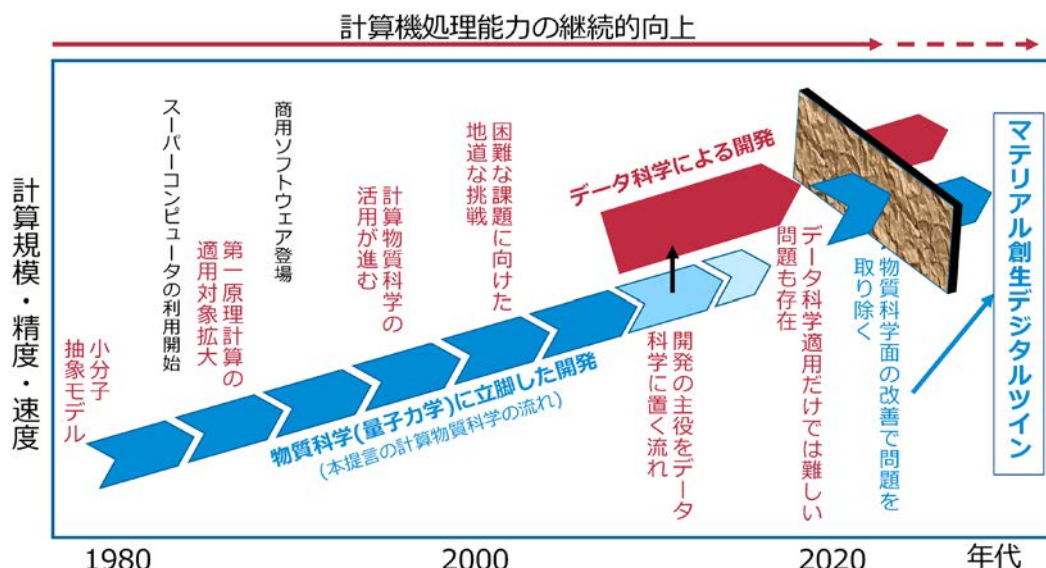


図2-1 計算機を利用したマテリアル開発

しかし、第一原理計算によって正確に実験を再現する計算が難しい対象があることが広く知られている。これらの対象は、コラムに記した現状の第一原理計算の計算手法に内包されている弱点が顕在化するような物質や物性である。この困難は、実験から得たパラメータを使うことで第一原理計算の弱点を緩和しようとする、半経験的量子化学計算であっても完全に払しょくすることはできない。物質科学に立脚した開発が徐々に適用範囲を広げていた2000年代以降も、これらの弱点を克服する試みは地道に続けられていたが、途上にある。

◆マテリアルズ・インフォマティクスの勃興と見えてきた課題

このような状況を打破するものとして、2010年代に入るとデータ科学を用いて材料開発を行う動きが脚光を浴びるようになった。過去の実験に基づいて蓄積されたデータベースや、様々な組成・結晶構造に対して、網羅的に第一原理計算を行って作られた大規模なデータベースを利用して、データ科学の手法に基づいて、物質探索を行おうとする試みである。そのような、マテリアル開発の嚆矢としては、2011年に米国が開始した国家イニシアティブ Materials Genome Initiative (MGI) がある。これは、膨大なDNAデータをコンピュータ解析技術やデータ処理技術を駆使して解析し、生命科学に一大革新をもたらしたヒトゲノム計画 (Human Genome Project) になぞらえ、情報技術や計算科学を用いてマテリアル開発技術を刷新し、新規マテリアル開発のスピードを2倍に早めることを目標としたものであった。長年、世界の材料開発のトップランナーであった日本に対し、これまでとは違うアプローチで挑戦しようとしたMGIは世界にも大きな衝撃を与え、世界的なマテリアルズ・インフォマティクス (Materials Informatics: MI) のブームを呼ぶことになった。日本でも、2015年に、JSTのイノベーションハブ構築支援事業に、物質・材料研究機構 (NIMS) が提案した「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I)」が採択され、従来の物質科学とデータ科学を融合させた材料開発手法の検討が行われた他、2016年にはNEDOの超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト (超超プロジェクト) に産業技術総合研究所 (AIST) が採択され、主に有機系機能性材料を対象に革新的な機能性材料の創成・開発の加速を目指した研究開発が行われた。

MIはいくつもの成功事例を生み出しているが、すべてのマテリアル開発の大幅な時間短縮を達成したわけではない。期待した通りの効果が得られていない理由としては、MIによって新物質候補を予測するスピードを加速しても、それらが実際に合成できる物質であるかどうかは、専門家の知識や実際の合成実験に拠る必要があり、その検証の時間を短縮することができていないことや、前述の計算物質科学側の弱点のために、

そもそも実験を再現する計算データ自体が得られないことなどが挙げられる。

◆マテリアル創製のためのデジタルツイン

デジタルツインは、デジタルデータを元に現実空間の物をサイバー空間上で仮想的に構築し、対象への刺激に対する応答や、時間経過に伴う変化をサイバー空間で精密に予測することを目指す技術である。

デジタルツインの中核となるアイデアは、製品のライフサイクル管理（Products Life-Cycle Management: PLM）の手法として、1990年代～2000年代にかけて幾度か提唱されたが、その実用的な定義は、米航空宇宙局（NASA）の2011年の論文によってなされた¹。これによれば、デジタルツインは物理的実体を正確に反映するように設計されたサイバー空間の仮想モデルである。JST-CRDSの2017年発行の戦略プロポーザル「革新的デジタルツイン」²では、物質を流体や固体などの連続体として捉えたモデルを用いて機器やデバイスの設計を行うことを提言した。その中で、デジタルツインにとって重要な3つの要素として、（1）現実空間のモデルをサイバー空間にきちんとマップしたモデルを形成すること、（2）サイバー空間のモデルが現実空間と同じ動作をするような正確なシミュレーションを実現すること、（3）現実空間とサイバー空間の間の双方向の接続によって、随時モデルの更新を行えるようにすること、を挙げた。

これら3つの要素をマテリアル創製プロセスの場合に当てはめると、現実空間でのマテリアル開発で行われている「設計」－「合成」－「評価」のサイクルのモデルを、サイバー空間に構築したものといえる（図2-2）。MIが直面した、「設計をしても合成ができない」問題は、合成を含むマテリアル開発サイクルがサイバー空間に置かれていることで解決することが期待されるが、現状の科学技術の範囲内でこれを実現することはまだできていない。

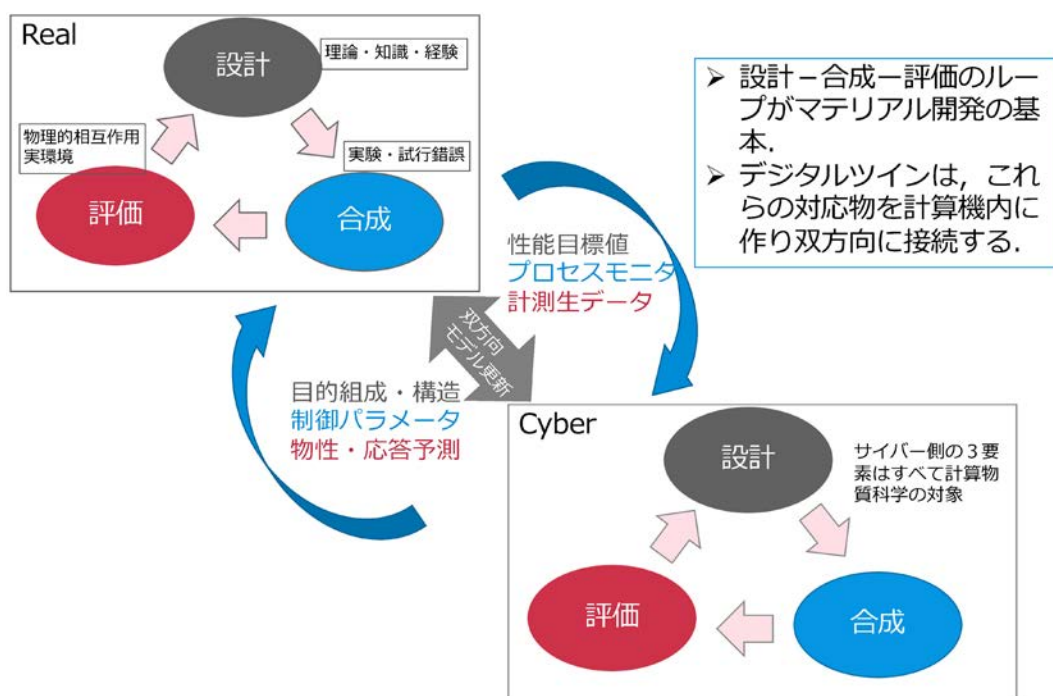


図2-2 マテリアル創製のためのデジタルツインのイメージ

- 1 Piascik, R., et al., Technology Area 12: Materials, Structures, Mechanical Systems, and Manufacturing Road Map. 2010, NASA Office of Chief Technologist.
- 2 CRDS-FY2017-SP-01, <https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2017/SP/CRDS-FY2017-SP-01.pdf>

2.1.2 研究開発環境の問題

以上に述べた科学技術上の問題を解決するためには、新たな物質科学上の学理構築と計算手法の開発が必要になる。開発した計算手法を実際に使うためには、計算を行うためのソフトウェア開発も求められるが、以下のような研究開発を取り巻く環境上の問題がある。

◆新規ソフトウェア開発環境

わが国では、2002年からのCREST/さきがけ複合領域「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」、2005年からのCREST「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」のように、2000年代には、新しい計算手法を開発するための研究開発が実行されていた。現在も広く使われているような国産の計算科学ソフトウェアの萌芽はこの時期に誕生している。しかし、スーパーコンピュータ「京」が完成する2010年前後から、「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」「HPCI戦略プログラム」「ポスト京重点プログラム」といった、スーパーコンピュータのハードウェア開発プロジェクトに付随したソフトウェア開発チームや、マテリアル関連の研究開発領域³の中の計算チーム、あるいは、MI²Iのようなマテリアルズ・インフォマティクスと関連した計算科学チームの何かの事業に付随するような形で、開発プロジェクトが行われることが多くなった。しかしこのような形では、既存ソフトウェアの改良や維持は行えても、全く新しいソフトウェアを開発することは難しく、開発を可能にする環境が整備されてこなかった。

◆ソフトウェアの維持

2000年代の研究開発では、いくつものユニークな新しいソフトウェアが開発されたが、現在まで継続的に活用されているものはごく一部に限られる。開発されたソフトウェアが継続的に発展するためには、ハードウェアや学理の発展と共に適切にバージョンアップし、開発者以外の研究者にも広く使われるようにしていく必要がある。しかし、開発を担ったプロジェクトの終了後に、大学等の研究室単位で最先端の研究を行いながら、ソフトウェアの発展に必要なメンテナンス活動を行っていくことは困難であった。そうした役割を担うことが組織的に可能である国立研究開発法人や一部の有力大学を除けば、せっかく開発したソフトウェアが継続的に活用されることなく消えていく問題が顕在化している。

◆必要な人材の不足

計算物質科学のソフトウェアが普及する条件の一つである、新規ハードウェアへの対応を行って行くには、物質科学・計算科学の知識に加え、計算機アーキテクチャーについての深い理解も必要となる。しかし、ソフトウェアを特定のハードウェア上で効率よく動作させるための取り組みは、論文などのアカデミアでの成果には認められにくい。新しい理論や計算アルゴリズムを開拓し難問に挑戦する研究者や、開発したソフトウェアを最大限活用して新しい応用を開拓した研究者に比べ、このような取り組みを担う人材が分野内でポジション獲得・キャリアアップすることは難しい現実がある。業界で誰もが優秀と認めていたような気鋭の研究者ですら、所属する研究開発プロジェクト終了後に、次のポストを見つけることができず、そうした事例は次の世代がこの分野を目指すモチベーションの低下にも影響してしまう。

3 例えば文部科学省の元素戦略プロジェクト（研究拠点形成型）、戦略目標「元素戦略を基軸とした未踏の多元素・複合・準安定物質探索空間の開拓」元で行われた、さきがけ、CREST、マテリアルズ・インフォマティクス、マテリアルDXプラットフォーム構築におけるデータ創出・活用型研究開発プロジェクトなど。

2.2 社会・経済的效果

カーボンニュートラル、医療・ヘルスケア、ICTデバイスの革新、社会インフラの強靱化など、あらゆる分野において、従来の性能を凌駕する新しいマテリアル開発への期待が寄せられている。そうしたマテリアルを利用する産業の競争力に加え、マテリアル自体を製造するマテリアル産業の国際的な地位の向上にも直結する。

マテリアル産業の強化について述べると、具体的には以下の2つの効果がある。

(1) 材料開発にかかる期間/コストの短縮

計算物質科学の発展、さらにはそれを土台としたマテリアル創製のためのデジタルツインが実現すれば、新材料発見や性能予測の効率が向上する。高速・高精度で物性を予測できるようになれば、候補となる物質群を網羅的に調べることができるだけでなく、見つかった候補物質を実際に合成して調べた時の、失敗の確率も低くなる。これにより、開発開始から上市までの時間が大幅に短縮されることが期待される。材料開発コストの多くの部分は開発期間に比例するため、トータルでの開発コストが削減され製品の価格競争力も強まる。米国のMGIは、新材料発見から製品化まで従来は20年以上と言われた開発期間を半減させることを掲げた。NEDOの超超プロジェクトも、試作回数・開発期間を従来の材料開発と比較して1/20に短縮することを目標としていたのもこのためである。

しかし、世界的にもマテリアル開発期間短縮が重要であるとの認識は共有されてきたものの、それらのプロジェクトによってすべてのマテリアル開発効率が一律に向上させられるようになったわけではない。その原因は、計算物質科学の物性予測能力が不十分であることや、ある程度正確に物性が予測できたとしても、予測した物質を実際に合成できるかについては、正しい予測がなされないことなどにあり、本提言はその根幹部分に手を入れていこうというものである。

(2) 実験が難しいマテリアルの性能予測

デジタルツインが構築できれば、マテリアル周囲の環境との相互作用もサイバー空間上に取り込むことができるため、実際の実験や計測が難しい事柄に関して予測が可能になる。高温高圧、腐食性、宇宙、深海といった極限環境に耐える材料開発は、その評価を行う実験環境構築に多大なコストを投入する必要がある。その部分のスクリーニングをサイバー空間上で行えることで、評価にかかるコスト・時間も大幅に節約することができる。加えて、合成や評価用設備の投資前にある程度正確な予測ができるようになれば、投資判断も容易に行えるようになる。

また、マテリアルの製造・販売を行う産業以外にも以下のような効果を及ぼす。

(3) 新規機能性材料の創出による市場開拓・産業育成

これまで僥倖に頼っていた材料の新規機能の発見を、ある程度網羅的に探索・予測することで、これまで存在しなかった新たな応用、市場の開拓や新産業育成につながる。例えば、「新しい電極触媒による水電解・燃料電池の効率向上（水素社会への貢献）」、「創薬の加速による新疾病・パンデミックへの迅速な対応」、「医療用MRI・核融合・電力輸送などに応用可能な新規な高温超伝導体を発見」などの期待がある。こうした期待に応えることで、地球環境保全、人々の健康寿命延伸、先端テクノロジーやそれを用いたサービスの進展、国土の強靱化、さらに、そうした事柄に貢献する国内産業の競争力の向上、などが期待できる。同時に、これら今後の成長が期待される材料市場に早期に参入する機会を獲得することで、装置システム産業と共に、日本のマテリアル産業の成長を拡大できる。

2.3 科学技術上の効果

(1) フロンティア領域の研究から新しい物質科学を拓く

研究開発課題2に挙げる4つのフロンティア領域、「強相関」、「励起状態」、「ダイナミクス」、「マルチスケール」は、マテリアル創製のためのデジタルツイン実現に必要な応用面でのフロンティアであると同時に、マテリアルサイエンスにおける未解決な問題に深く関係した科学のフロンティアでもある。コラムで述べるように、いずれの課題も現行の計算物質科学の中で正確な答えを出すことは困難であり、また、実験で観測して評価することも難しい対象でもある。これらを正しく扱い、任意の環境での物質の性質を予測できるような取り扱いができれば、物質に関する普遍的な理解を獲得したことを意味し、物質科学上の大きな進展に相当する。

(2) 新規物理現象の発見

マテリアル創製のためのデジタルツインは、マテリアルの設計、製造、運用・保守に貢献するものであるが、マテリアル研究そのものもサイバー空間で行える可能性がある。これまでの、マテリアルサイエンスにおける計算と実験は、図2-3の左側に示すように、(a) 実験的に発見された新奇な現象の原因を説明する理論モデルを構築し、そのモデルに対して数値計算を行い実験結果と合うことを確認する、あるいは、(b) 新しく提案された物理理論に基づいて測定可能な量の予測値を数値計算し、実験的にその予測値が得られるかを検証する、のどちらかのパターンを取る。図中の青色は現実空間での実験、緑色は人間の思考的活動、赤は計算機の中で行われるプロセスをそれぞれ表す。もし、デジタルツインが構築できれば、図2-3 (c) に示すような、マテリアル及びその様々な物理量をデジタルツインを用いて網羅的に発現させ、その中から既存の理論や実験から説明できない現象を見つけ出し、それを人間に報告するという、新しい学理構築の流れが生まれと考えられる。旧来の、実験→理論→計算→実験のサイクル（図2-3 (a)）にも、理論→計算→実験→理論のサイクル（図2-3 (b)）にも、人間による現実空間での実験や思考による発見のプロセスが含まれるため、サイクルを早く回すことが難しかった。これに対し、デジタルツインを使うサイクル（図2-3 (c)）は計算機の中だけで新奇現象を探すため、より速いサイクルが実現できる可能性がある。これにより、人間の能力を拡張し、新たな発見をしやすくなることが期待される。

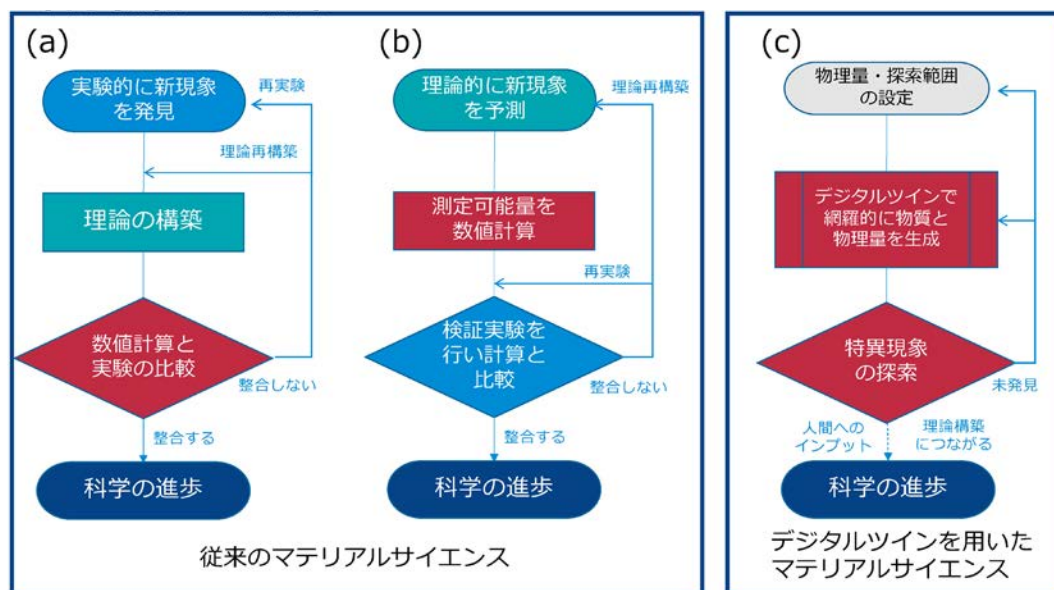


図2-3 これまでのマテリアルサイエンスと、デジタルツインを用いたマテリアルサイエンス

コラム

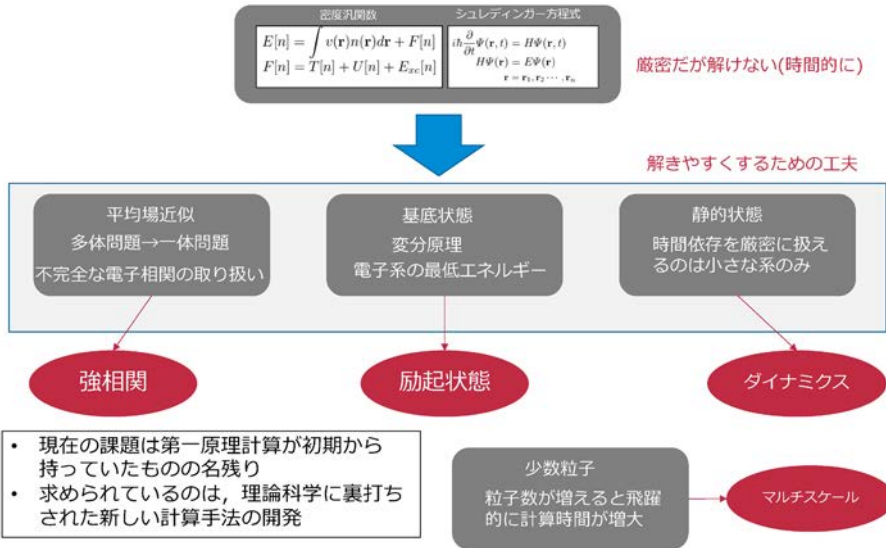
量子力学に基づく計算物質科学

現実の原子分子を記述する多電子系波動関数が満たすべき式は、シュレディンガー方程式として知られており、原理的にはこの方程式を解くことでその原子分子の性質を知ることができる。このような計算を第一原理計算という。しかし、シュレディンガー方程式は、電子1つの時にしか解析的には解が得られず、多電子の場合は何らかの近似を用いる必要がある。

現実の系の実験結果に合わせる近似の例としては、経験的に決められたパラメータを導入して計算結果を合わせ込むことが行われている。とくに大きな分子など、第一原理計算で現実的な計算時間で答えを得られないような系を対象にした科学計算がこれにより行われている。

また、原子数が決まっている分子よりもさらに多数の電子を含む固体の場合には、個々の電子に着目するのではなく電子系全体の振舞い、すなわち電子密度に着目し、系全体のエネルギーが電子密度の関数（汎関数）で表現される。実現する状態はその最低エネルギー状態に対応するとの原理に基づいて、電子系のエネルギーを求める密度汎関数法もよく使われている。シュレディンガー方程式も密度汎関数法の式も、偏微分連立方程式であり、それを解くことができれば、厳密に電子状態を決めることができる。しかし、それぞれの事情⁴から、多数の電子が存在する場合には厳密に解くことができず、解きやすくするための仮定（電子系に特定の条件を満たしているという制限）を課すことで初めて数値的に解ける方程式になる。この時に通常用いられる仮定は、「個々の電子同士の相互作用をすべて考える代わりに、考えている電子以外のすべての電子は平均密度を通してしか相互作用しない」「絶対零度における電子の基底状態だけを考える」「時間依存のない静的な状態を考える」というものである。こうした仮定から出発しているために、電子相関が強く他の電子との相互作用をあらわに考慮する必要がある強相関系や、基底状態よりも高いエネルギーを持った励起状態、状態が時間変化していて静的とは見做せないダイナミクスなどが、第一原理計算では取り扱いにくい対象となっている。また、考えなければならない原子の数が非常に多いため、スケールの異なる多階層に及ぶ物理モデルを相互に繋ぐ必要がある「マルチスケール」の問題は、現行の計算物質科学の枠内ではうまく答えを出すことが難しい。

4 シュレディンガー方程式の場合、電子数が大きくなると微分方程式の変数が非常に大きくなり、それを数値的に解くために非常に長い時間が必要になる。そこで、変数を減らす近似をして解きやすくする必要がある。密度汎関数法の場合には、全エネルギーを表す関数の中に関数形がわからない項（交換相関項）があり、この関数形を解きやすい形に仮定する必要がある。



本提言の4つのフロンティアは、第一原理計算が発展する過程で、解析対象である物質の側にある種の理想化を行うことでうまくすり抜けてきた初期からの問題である。しかし、現実系で計算の実現が期待される対象では、これまで使ってきたような理想化条件は成り立っておらず、今後真にマテリアルの創製に役立つ計算物質科学を構築するためには、これらの壁を乗り越え解決することが求められる。

3 | 具体的な研究開発課題

本章では、マテリアル創製のためのデジタルツインを構築するための計算物質科学の研究開発課題について述べる。2.1.1にも述べたように、デジタルツインには「(1) 現実空間のモデルをサイバー空間に構築」、「(2) サイバー空間のモデルが現実空間を物質科学的に正しく記述」、「(3) 現実空間—サイバー空間の間の情報交換で継続的にモデルを更新」の3つの要素が必要である。この3要素の中では、現実空間での情報の取得やマテリアルに対する詳細な操作の部分は、本提言の範囲を超えるが、それ以外の部分はすべて、計算物質科学が受け持つ部分になる。以下3.1～3.3に挙げる3つの研究開発課題を図2-2の上にマッピングしたものが図3-1である。

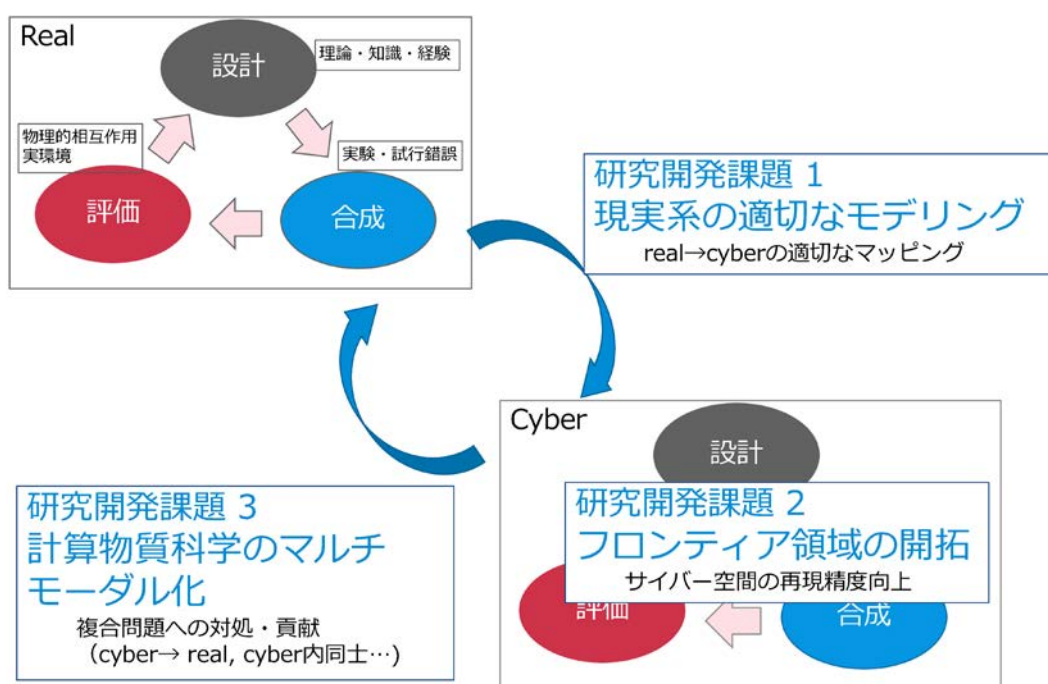


図 3-1 マテリアル創製のためのデジタルツインに必要な研究開発課題

3.1 現実系のモデリング手法の開発

サイバー空間での原子や分子、あるいはその集団に対して、物理原理を元にした何らかの数値的な計算処理を行い、得られた数値結果から、物質の状態や時間変化などの求める情報を得ようとするのが計算物質科学の一つの機能である。ここで述べる「現実系のモデリング」とは、対象となるマテリアルの性質や環境との相互作用を解析するために必要十分な物理的モデルをサイバー空間に構築することである。適切なモデリングが実現できた場合、数値計算から得られた値が現実の世界の測定量や状態変化に対応付けられる。

現実系のモデリングが「適切」であるかどうかは対象とする問題によって異なることに注意しなければならない。

例えば、第一原理計算で不均一触媒の活性を予測しようとする場合、初期の研究では計算時間の節約のために、計算対象となる固体の表面付近の少数原子だけを取り出したり、計算を行いやすくするためにそれを

周期的に並べたりした。こうした現実の触媒とは異なる構造のモデルに対して、電子状態の計算を行い、固体表面における原子や分子の吸着エネルギーや、吸着分子の振動エネルギーなどからその固体の触媒活性を議論することが行われてきた。現実と異なる構造や環境の元でのシミュレーション結果は、大まかに定性的な傾向を表すことができて、実験と比較しうる定量性のある議論を行うことは難しかった。これに対し近年では、計算機の計算能力の向上により、大きな対象の電子状態計算が可能になったうえ、原子分解能の電子顕微鏡写真から触媒ナノ粒子の原子の並びを直接知ることできるようになっている。このように、現実のナノ粒子の原子配列構造そのものに対して、計算を実行でき、分子の吸着・解離エネルギーや反応のメカニズムなどを議論することも可能になった⁵。この例では、実際の構造を計算モデルに採用したことで、実験値の再現や、反応メカニズムの理解や触媒改良への正しい示唆を与えることができるようになった。この例における「適切な」モデリングは、「精密な実験から得られた本物と同じ構造モデルのことを指している。

一方、電池の電極上での電気化学反応を例にとると、電極のすぐ近くでは、原子・分子レベルでの第一原理計算の適用が好ましいが、上述の触媒反応の場合と異なり、吸着した原子・分子のエネルギーが、電極の電位に依存する。電極の電位の影響が、電極からマクロスケールで離れた電解液の中にまで及んでいるため、正しく電気化学反応を理解するためには、このような電極表面から離れた領域までのすべてを計算対象とする必要がある。しかしそこに含まれる原子数はまさに膨大であるため、電極表面から電解液内すべての分子を対象とした計算を量子力学だけに基づいて行うことはできない。この問題に対し、電極近傍に関して正しく第一原理計算を行い、電極から離れた電解質に関しては古典溶液論で取り扱いながら、その間を上手くつなぐことで実験と比較可能な電気化学的物性値を求めた研究例⁶がある。この場合の適切なモデリングは、表面近傍の原子・分子が見える部分と電解質を連続体として取り扱う部分を上手くつなぐ工夫をしたことに相当する。

また、固体内の欠陥に起因する物性を調べたい場合や、摺動する固体の界面に摩擦によって生成する乱れた界面層を理解したい場合なども、すべての原子位置を与えるようなモデリングはおそらく適切でなく、それぞれの場合に、現実系を適切にモデリングする手法が存在すると考えられる。さらに、物質そのものについてだけでなく、合成プロセスや計測プロセスに関しては、そのプロセスに必要な周囲環境との相互作用を取り込んだモデリングを行う必要がある。

計算対象ごとに、計算したい物理量ごとに、対象となるシーンの適切なモデリングの例を増やしながら、それらの共通因子を抽出し一般化していくことが物質科学における学理構築には必要になる。

図3-1では、これらのモデリングに関する課題を現実空間からサイバー空間に繋ぐ右上の矢印で表している。

3.2 フロンティア領域の計算手法の開発

適切なモデリングができたとしても、それが実際に計算可能とは限らない。計算物質科学において実験結果の再現が難しい対象や現象が存在するためである。

本提言では実験を再現しにくい対象・現象のうち、現実系を取り扱う上でも重要な「電子相関」、「励起状態」、「ダイナミクス」、「マルチスケール」を計算物質科学のフロンティア領域としている。解析すべき対象が「電子であるか」、「原子分子であるか」、関連する物理が「一種類か」、「複数か」で分類すると図3-2の4象限にマップされ、それぞれの象限における主たる計算対象を示している。マップの中心に示したのが、フロンティ

5 Takayoshi Ishimoto*† and Michihisa Koyama, J. Phys. Chem. Lett. 2016, 7, 5, 736–740

6 S. Nishihara and M. Otani, Phys. Rev. B 96,115429 (2017), J. Haruyama, T. Ikeshoji, and M. Otani, Phys. Rev. Materials 2, 095801

アに関連する応用例であり、特に社会課題や産業競争力の観点からも重要な材料・デバイス群である。

電子相関が重要な役割を果たす強相関電子系は、遷移金属の酸化物や、希土類と遷移金属を含む磁性体などで典型的に見られる。電子が他の電子と強く影響を与え合い、固体の第一原理計算でよく使われる密度汎関数理論（DFT）⁷の局所密度近似（LDA）⁸が成り立たなくなった状態にある。このような系では、実験的には絶縁体となる物質が、電子状態計算では金属になってしまうという、著しい予測違いが起こる。これに対処するため、電子相関の効果を取り入れるためのパラメータを加えたハバードモデルなどが古くから利用されてきた。しかし、ハバートモデルを用いても記述が難しい物質や物性の存在があり、また、実験的に決めることが困難な人為的パラメータを導入することの妥当性などの点で批判も多いものであった。

励起状態は、系内の電子が基底状態よりも高いエネルギーを持っている状態で、物質に高いエネルギーの光が当てられた場合や温度が高い場合、磁性体の磁気秩序に揺らぎが生じている場合、外部からの電界によって電流が流れているなどの場合、が相当する。いずれも、実環境では一般的な状況であるが、コラムで述べているように、計算物質科学において計算を簡略化するための標準的な近似が適用できる状態とは異なっている。

原子よりも大きな対象に関するダイナミクスとマルチスケールは、原子・分子が力を受けながら動き回っている状態のシミュレーションやマクロな構造に関する性質を、構成する原子分子に関する情報とつなぐ際の課題である。ダイナミクスは、多数の原子・分子の運動を可能な限り正確に表し、得られた結果から実験と比較できる有益な情報をどれだけ引き出せるかが課題となる。マルチスケールは、異なる長さや時間スケール、異なる物理的モデルに対して行われるシミュレーションの結果を、うまくつないでいくことが課題となる。

フロンティア領域は、数多くの種類の物質、物理現象、材料物性と深い関係を持っているため、非常に多くの実問題に関係している。デジタルツインにおけるフロンティア領域の拡大は、図3-1においてはサイバー空間内の再現度の改良にあたり、サイバー空間のモデルがどれほどうまく現実系を再現しうかを改善することにつながる。

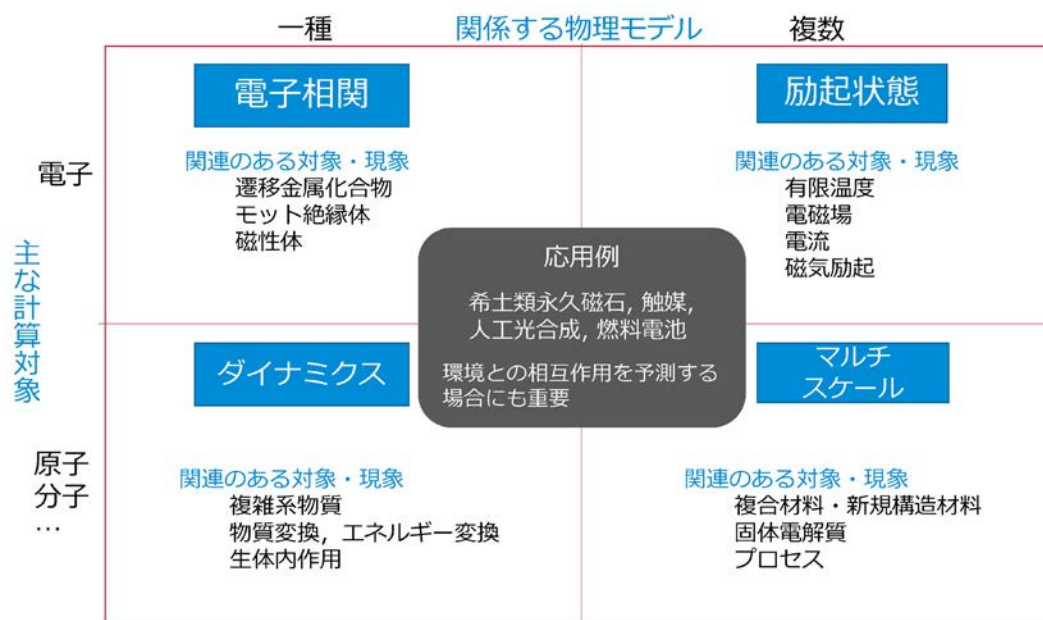


図3-2 計算物質科学の4つのフロンティア

7 DFT : Density Functional Theory
8 LDA : Local Densty Aproximation

今、これらのフロンティア領域に対する攻略の兆しがいくつか見え始めている。

強相関電子系については、2010年以降にはLDAの結果と低エネルギーソルバーを組み合わせる方法が開発され⁹、人為的パラメータを使わずに、ある種の強相関電子系の電子状態や物性を正しく予測した例が報告されるようになった。この手法をさらに発展させ、強相関電子系を取り扱うための一般的な手法が開発できれば、さらに広い対象に対して正しい予測が可能になると考えられる。

励起状態の取り扱いに関しては、近年進展してきたフォノンの第一原理計算により、従来型超伝導体の超伝導転移温度の定量予測が可能になったことで、硫化水素系の室温に近い温度での超伝導発見に貢献した例¹⁰や、シュレディンガー方程式とマックスウェル方程式を連成して解くことで、強い光が物質にあたっている状況下で電子と光の電磁場の両方を動的にシミュレートする例¹¹などがある。絶対零度の電子状態の計算から始まる電子状態計算を有限温度に拡張することは、実問題を取り扱う上で極めて強い要求となるため、さらなる発展に期待がかかる。また、光と物質の相互作用に関わる原子スケールのシミュレーションが可能となることで、ナノフォトニクスデバイスの開発やフォトニクス分野の新奇現象の予言などへの応用が期待できるため、さらなる対象の拡張が課題である。

ダイナミクス、マルチスケールに関しては、前述の電気化学系を正しく取り扱えた例や、CVD（Chemical Vapor Deposition）での半導体成膜を気相、表面拡散、結晶成長の異なる物理モデル間を繋いでシミュレートした例などが報告¹²されている。また、第一原理計算と機械学習を併用して大規模な原子集団の運動をシミュレートすることも様々な対象に対して行われるようになってきており、こうした研究例を積み上げ、適用可能性な対象を増やしていくことが必要となる。

データ科学を活用したMIがうまく機能しない原因は、そのような対象に関して現時点のマテリアルデータが不足しているためであり、データ科学の帰納的なアプローチだけではうまく解を求めることができないことによる。フロンティア領域の課題克服による計算物質科学の能力拡大により、信頼できる計算物性データが大量に得られれば、不足している部分のデータを演繹的に求めることに相当するため、データ科学利用のマテリアル開発を強化することにつながる。

3.3 マルチモーダル化手法の開発

計算物質科学の可能性を広げるためには、他の手段（モダリティ）との組み合わせが重要になる。組み合わせるモダリティとしては、計算物質科学の手法同士の組み合わせ以外に、計算と実験・データ科学の組み合わせ、異なる計算ハードウェアの組み合わせなどが考えられる。

こうしたモダリティの組み合わせ方は、デジタルツインにおいて2つの意味合いがある。計算手法の組み合わせは、研究開発課題2で述べたフロンティア領域における組み合わせなどが一つの例となるが、これはサイバー空間内での現実系再現能力の向上に貢献する。実際、対象としている実問題には、強相関電子系材料の多結晶体のように、2つ以上のフロンティア領域を同時に考えなければならないケースが存在する。フロンティア領域の一つ、マルチスケールも、計算物質科学内のマルチモーダル化の一種である。

9 Imada, Miyake, J.Phys. Soc. Jpn. 79 112011 (2010)

10 J.A. Flores-Livas et al., Phys. Rep. 856, 1 (2020)

11 K. Yabana et.al, Phys. Rev. B85, 045134 (2012), Y. Hirokawa et.al, Int. J. High Performance Computing Applications, 36, 182 (2022) など

12 T. Akiyama, T. Ito, Y. Kangawa, T. Nakayama, and K. Shiraishi, Springer Series in Materials Science, vol. 269, 2018

実験やデータ科学との組み合わせについては、ある理論に基づく数値計算結果を実験と比較して理論を検証することや、計算に用いるパラメータを実験値から取得すること、第一原理計算から得られたデータを機械学習の訓練データとして用いることなどが行われてきた。近年では、第一原理計算を用いて物質の最安定構造を求める際に、回折実験のデータ結果を制約条件として最安定構造を高速に探索・決定するシミュレーション手法も報告されている¹³。第一原理計算から求まるエネルギー計算だけから最安定構造を求めようとすると、非常に多くの極小値を持つエネルギー関数となるため、ほとんどの場合、真の構造とは異なる構造モデルに陥ってしまう。これに対し、実験結果をある程度加味した最適化関数を用いることで、実構造とは異なる極小値に陥ることなく、正しい構造を見つけることが可能となってきた。

これらの例は、現実系の状態をサイバー空間に反映させるという意味で、デジタルツインで必須となる「現実空間－サイバー空間の接続」「現実空間からの入力でサイバー空間のモデルを改良する」を実際に行ったものであり、マテリアル創製のためのデジタルツインの実現に向けた重要な試みであるといえる。

異なる手法の混合という点では、計算機のCPUだけによる計算ではなく、CPUとGPUを組み合わせたり、古典コンピュータと量子コンピュータを組み合わせたり、異なるアーキテクチャーの計算ハードウェアを合わせて使う試みも有効性が示されている。CPUだけを用いた計算物質科学の手法は高度に洗練されているだけに、改良していくことはかなりな難事業となるが、異なる性質を持つハードウェアの特性を最大限に引き出し組み合わせることで、計算能力を向上させることが期待される。

3つの具体的な研究開発課題がある程度進捗すれば、それらを用いたマテリアル創製のためのデジタルツインの実装が課題となる。前述のようにデジタルツイン化には、計算物質科学以外のテクノロジーも必要となるため、計測や合成に関する他のプロジェクトと連携することが必要である。これらについては第4章の推進方策の中で触れる。

13 N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo, and S. Tsuneyuki, PHYSICAL REVIEW MATERIALS 2, 053801 (2018)

4 | 研究開発の推進方法および時間軸

4.1 研究開発の推進方法

第3章に掲げた研究開発課題を実行する際には、主体、目的、時期の異なる3つの方策によって行うことが重要である。まずは、計算物質科学の手法開発を行う研究開発プロジェクトの実施（4.1.1）、計算物質科学リサーチセンターの構築（4.1.2）、社会実装に向けたビジネス化の支援（4.1.3）、について述べる。その後、3つの方策の実施において必要な、多様な人材の育成（4.1.4）について述べる。

4.1.1 計算物質科学の手法開発を行う研究開発プロジェクトの実施

現実系のモデリング、フロンティア領域の開拓、マルチモーダル化推進を対象とした新しい計算手法を開発するための、新たな研究開発プロジェクトを実施することが重要である。

本提言の3つの研究開発課題を解決するには、物質科学に立脚し、これを深耕する取り組みが必要となる。電子系や分子系の基礎理論の探求や、それを定量的に解析可能とするアルゴリズムの研究開発、現実空間での計測過程や合成過程を必要十分な制度で記述するフレームワーク・手順の設計手法など、計算物質科学そのものの研究開発プロジェクトである。こうしたプロジェクトは、従来までのような京／富岳といったフラッグシップマシンの研究開発と組み合わせた形のみで実装されるのではなく、より物性側での方法論の研究に立脚して建てる必要がある。プロジェクト規模としては、JSTの戦略的創造研究推進事業などが想定される。

過去、2000年代には、計算物質科学の手法開拓を目的としたJST CRESTが実施されたが、スーパーコンピュータ「京」の開発が行われた2010年頃からは、ハードウェア開発プロジェクトに並行する形で、スーパーコンピュータを効率良く利用することに主眼が置かれたプロジェクトが中心となってきた。また、マテリアルに関連するいくつかのプロジェクト（元素戦略、マテリアルズ・インフォマティクス、マテリアルDXプラットフォーム構築におけるデータ創出・活用型研究開発プロジェクトなど）の中にも計算物質科学を担当するチームが含まれているが、それぞれのプロジェクトの目的に沿って計算物質科学手法を開発・活用していくことが目的であるため、新しい計算手法を開発する試みは困難であった。

現時点において、計算物質科学で広く使われている基盤的なプログラムは海外製品が多く、わが国は研究開発実施に際しブラックボックスとしてこれらのソフトウェアを使い続けることしかできていない。マテリアル開発の生命線ともなりうる最先端の研究開発能力を我が国が確保することができない恐れや、計算物質科学を活用したマテリアルイノベーションを世界に先駆けて我が国が行っていくための力を獲得できない恐れがある。

4.1.2 計算物質科学リサーチセンターの構築

新しい計算手法を開発するだけでは、国内の計算物質科学分野の発展は望みにくい。アカデミアにおいて、研究開発プロジェクトを通じて開発したソフトウェアは、その研究開発プロジェクト内の専門の研究者・開発者自身が使用する限りは問題なく性能を発揮し優れた成果を上げる。しかしながら、世界で広く使われている著名なソフトウェアのように、ソフトウェアを普及させ継続的に発展させてくことを、比較的短い実施期間の通常の研究開発プロジェクト内で行うこと困難である。

新規手法、新規アルゴリズムに基づくソフトウェア等を開発した上で、次の段階ではそれを効率的に実行さ

せること、いわゆる計算機に合わせたチューニング作業が必要となる。チューニングによって処理速度が倍になれば、ハード設備が2台あることと同じであり、チューニング作業は非常に重要となる。この技術はハード毎に異なるので¹⁴、ハードを有する計算センター等に付随する技術である。したがってこうした実施内容に対応できるソフトウェアエンジニアは、計算物質科学リサーチセンターにしっかりと配備することが必要となる。

優れたソフトウェアは開発者グループだけでなく、第三者が使うことでさらにその分野の研究開発が発展する。そのためにはソフトウェアの維持、保守、管理、改善等が必要となるが、これを開発者グループで継続するには限界があり、とくにグループの解散によってそれまでのソフトウェア資産（とノウハウ）が散逸してしまうことも多くみられる。こうした事態を防ぐために、最近ではコミュニティーベースで維持、管理を行う方法もあるが、日本ではまったく遅れているのが実情である。また、大学等の研究者や学内の計算センターにおける活動、産学が連携したコミュニティーベースの普及促進活動など、要素的な活動は存在するものの、多くの場合、必ずしも研究組織の目的としては明記されていない自主的な活動や、研究者有志の献身によって支えられている。この要素的活動を括り、戦略化する仕組みが必要である。たとえば計算物質科学協議会（<https://cms-forum.jp/>）のような仕組みはあるものの、情報交換の場にとどまっているのが現状である。

こうした、ソフトウェアの継続的な維持、チューニング、普及促進活動等の要素的活動のある部分を集約化し、これを戦略化する計算物質科学リサーチセンターの設置が必要である。リサーチセンターには運営機能及び企画調整機能を担う専従スタッフの下、要素的活動を連携させてマテリアル創成デジタルツインに向けた融合的研究開発を推進すること、それを実現するためのプラットフォームの構築や実装、研究者のみならず技術者を併任し、デジタルツインの構成要素であるソフトウェアの維持・管理を一元化的に実施していくことが期待される。その結果としてリサーチセンターは、産官学共創の場ともなる。

ここで述べるソフトウェアのリサーチセンターは、ARIMなどの研究インフラとは異なり、物理的な集中拠点として形成する必要はない。すでに大型の計算物質科学拠点として存在するいくつかのアカデミアのサイトに跨る分散組織としての運用も可能であり、必ずしも専用の計算リソースを持つ必要がない。

リサーチセンターの運営が安定し、自主的な研究開発能力を備えることができた段階で、リサーチセンターに移管されたソフトウェアを組み合わせ、デジタルツインの基盤の構築に取り掛かることもミッションである。実際にデジタルツインを作るためには、材料科学や計算機科学の専門家、プログラマ・SEなど、多くの人材が必要になるが、本提言の計算物質科学リサーチセンターこそが、まさにそのような人材をすべて有する場所として機能することが期待される。

4.1.3 社会実装に向けたビジネス化の支援

「研究開発プロジェクトの実施」、「リサーチセンターの構築」を経た後を経た後に、ソフトウェアが継続的に発展していくためには、最終的には商用化が必要となる。

現在、世界的に広く使われている計算化学ソフトウェアである Gaussian は、1970年に米国カーネギーメロン大の J. A. Pople らによって開発され、しばらくは無償提供されたのち、Gaussian 社に著作権が移り、有償ソフトウェアとなった。以降は同社が継続して開発を続け、ほぼ4年ごとにバージョンアップを続けながら販売を行っている（最新版は Gaussian 16）。

密度汎関数法のプログラムとして世界的に利用者が多い、VASP（Vienna Ab initio Simulation Package）は、1993年にオーストリア ウィーン大の Jürgen Furthmüller、Georg Kresse らによって開発された。現在は、Kresse を中心とした開発チームが継続的にバージョンアップしながら、ウィーン大学か

¹⁴ 並列計算機なのか、量子コンピュータなのか。さらにはキャッシュメモリをどのくらい持っているのか、データ供給能力がどのくらいなのか、などの細かい計算機仕様を考慮してチューニングすることが行われている。

ら有償ソフトウェアとして提供されている。

アカデミアで生まれたソフトウェアを、上述の計算物質科学リサーチセンターでメンテナンスする構造は、ユーザーが少ない初期の段階では有効なインキュベーション手段であるが、ある程度普及した後には、開発やサポートは企業が担う方が効率的である。公的機関であるリサーチセンターでは、民間企業のように小回りの利く開発・販売は行いにくいことに加え、幅広い人材の雇用を維持することも、企業の方が柔軟に行える。従って、ある程度のユーザーベースを獲得し、商用化の見込みが立つソフトウェアから商用化の道を作っていくことが、その先の社会実装には有効である。そのような企業を現れやすくするためのベンチャー支援や、ソフトウェアライセンスの枠組みをつくり、ビジネス化を支援していくことが必要である。

大学等の研究者が公的資金によって開発したソフトウェアを普及促進するため、ビジネス化している事例はいくつかある。たとえば、東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センターでは国家プロジェクトを受託して流体解析や構造解析のソフトウェアを開発し、それを多くのソフトウェアベンダーにライセンス供与している。また、名古屋大学土井正男教授（当時）を責任者としたソフトマテリアルシミュレータ開発プロジェクトではOCTAを開発し、これも複数の企業からより利便性を高めた版が市販されている。一方、産業界でもこうした国家プロジェクトで開発されたアプリのビジネス化を専門とする企業（たとえばアドバンスソフト（株））なども現れている。しかし、これまでのビジネス化はソフトウェアの販売や受託解析が主であって、ソリューション提供はあまり見られなかった。マテリアル創成デジタルツインのビジネス化にはプラットフォーム化、とくにSaaS（Software as a Service）のプラットフォーム化は必須であり、これはIT企業のみならず、材料企業や計測機器企業の技術力・実装力も必要となる。

4.1.4 多様な人材の育成

本提言の推進体制には、それぞれ特徴的なスキル・指向を持つ人材が必要である。

計算物質科学のフロンティアの追求には、物質科学面での深い洞察と計算科学に関する知識が不可欠である。大学、大学院での卒業・修了研究を通じてその基礎的能力が習得されていくが、この分野で多くの研究者が挙げている危機感の中に、大学において計算物質科学を専攻する研究室が減少していることがある。その背景には、新しい分野を切り開き、独立して研究室を運営する若手研究者が育っていない問題がある。4.1.1の研究開発プロジェクトは、次世代を担う若手研究者の育成のためにも役立ち、実際に現在この分野を牽引している研究者の多くが、過去のCRESTなどの代表者を務めている。

リサーチセンターで行われるソフトウェアのチューニング（様々なハードウェア上でプログラムを効率的に走らせる技術）は、新しい計算理論やアルゴリズムを発見することとは異なる知識・スキルが必要である。また、ソフトウェアの普及を行うためのプロモーション、ユーザーサポート・教育などにも、研究者とは異なる専門性を持つ人材が求められる。リサーチセンターの機能を最大限に発揮するためには、こうした多彩なスキルや指向を持つ技術者を長期的に育成していく必要があるが、このような人材の教育は研究中心のアカデミアでは行うことが難しく、また、現状ではそのようなスキル・指向を持つ人が、アカデミックポジションを獲得することも難しい。リサーチセンターはその業務をこなしながら、多彩な人材を育成する機能を持つものにする必要がある。重要なスキルを持った人材を育成する教育を行いつつ、技術者のキャリアパスを確立するために、リサーチセンターには長期的な雇用を可能とする必要がある。この点においては、機器を管理する技術者の雇用を一定規模で実現している文科省のARIM（2021年度開始）などの事例を踏まえて制度設計を行うべきである。

本提言で扱っているような学際的な分野における人材育成では、アカデミアの教育課程において、主とする専門性に加え、副とする分野を修得しうるシステムが有効である。計算物質科学の最前線では、物質科学と計算機科学の最先端のサイエンスの融合が進展している。両分野のサイエンスをひとりですべて習得したスーパーマンの育成を目指すよりも、それぞれの専門分野をキッチリと修めたいうで、相手の分野の知識もごく基

本的な部分は併せ持ち、両者の間で互いに相手の意図を理解できるコミュニケーションを図ることが極めて重要である。主とする専門性の深さを損なわずに副となる専門性の教育を行うためには、インターネットを介したオンライン授業などを利用し、学校・学部・学科を跨いで単位認定が可能になるなどの制度上の改革などの方策が考えられる。

また、リサーチセンターのような様々な職種・専門性を持った人材を確保し続けるためには、それぞれの職種に適した（魅力的な）キャリアパスを構築し、若手や海外からの人材を呼び込むようにすることが必要である。このためにはリサーチセンターは自ら主体的・自律的に運営する組織とする必要がある。この意味でもリサーチセンターは、既存のサイトを跨る仮想組織としてではなく、戦略策定機能を持つヘッドクォーター機能を有する、専任職員からなる組織を設置する必要がある。

4.2 研究開発の時間軸

研究開発の時間軸を、図4-1に示す。3つの研究開発課題のうち、すべてのデジタルツイン化で欠かすことのできないモデリング手法の開発については、5年程度の研究開発プロジェクトの中で、いくつかの用途・分野ごとに使える方式を開発することが適切である。また、フロンティア領域とマルチモーダル化についても同時期に可能な限り進捗させることが必要である。5年後の進捗と分野の広がり次第によって、後継となる研究開発プロジェクトを立ち上げるとともに、この時点からそれらの成果を集めて分野ごとのデジタルツイン化に着手すべきである。研究開発プロジェクトの実施はアカデミアが中心となるが、デジタルツインを目指す活動は、国研にリサーチセンターを設置して担うことが望ましい。

研究開発の時間軸

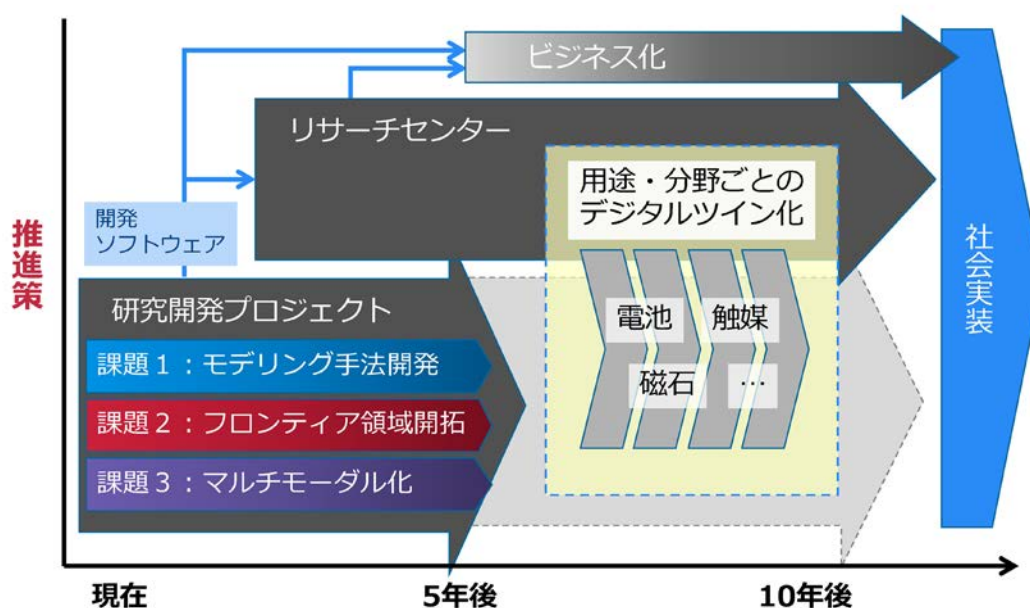


図4-1 研究開発と推進方策の時間軸

リサーチセンターは、準備期間を含めても、研究開発プロジェクト開始からそれほど遅れることなく、発足

させ、ユーザサービスなどのメインのミッションを行いながら、デジタルツイン化の基礎検討準備を行う。研究開発プロジェクトで開発された新しいソフトウェアを普及させるため、チューニングやユーザーインターフェース構築などの業務を行い、得られた知見を研究開発プロジェクトにもフィードバックし、次期バージョン開発への指針を与える。デジタルツインの実装には、中心となる計算物質科学ソフトウェア群の深い理解と、用いられる計算機のアーキテクチャーレベルに至る高度な知識が求められる。リサーチセンターの初期の活動の中で、必要な人材の確保・育成を行っていく。ビジネス化の検討は、それにつづくフェーズとなる。最初の研究開発プロジェクトの成果が出始めるあたりから、ビジネスを担う組織の選定・創設準備を始め、ライセンシング条件、取り扱うソフトウェアの選定、商用化形態などについて、十分に検討を行ったのちに開始する。

4

研究開発の推進方法
および時間軸

付録1 検討の経緯

- ・JST 研究開発戦略センター（CRDS）では、令和4年度に戦略プロポーザルを作成すべきテーマの候補をCRDS戦略スコープ2022検討委員会を経て指定し、令和4年5月に検討チームを発足させた。その後、検討チームにおいて提言作成へ向けた調査・分析・検討を重ねた。
- ・チームの活動では、調査によって国内外の研究開発動向・技術水準を明らかにしながらスコープの焦点を絞り、その過程において提言の方向性を検討するため、以下の有識者へのインタビュー・意見交換を実施した。
- ・その上で、計算物質科学の研究開発に関してCRDSが構築した仮説を検証する目的で、科学技術未来戦略ワークショップを開催した（詳細次ページ）。ワークショップの結果は報告書として発行を予定している。
- ・CRDSでは以上の調査・分析の結果と、ワークショップにおける議論等を踏まえて、令和5年11月に本戦略プロポーザルを発行するに至った。

■意見交換・インタビューを実施した識者（敬称略、所属・役職は実施時点）

赤木 和人	東北大学 材料科学高等研究所 准教授
大久保 毅	東京大学 大学院理学系研究科 特任准教授
大西 裕也	JSR株式会社 マテリアルズ・インフォマティクス推進室 次長
大場 史康	東京工業大学 科学技術創成研究院 教授
岡本 穂治	日本電気株式会社 セキュアシステムプラットフォーム研究所 主任研究員
寒川 義裕	九州大学 応用力学研究所 教授
川添 良幸	東北大学 未来科学技術共同研究センター 名誉教授
木元 正孝	株式会社 Preferred Computational Chemistry 取締役 技術営業部長
倉重 佑輝	京都大学 大学院理学研究科 准教授
古宇田 光	東京大学 リサーチ・アドミニストレーター推進室 プリンシパルURA
古山 通久	信州大学 先鋭領域融合研究群 環境・エネルギー材料科学研究所 教授
杉田 有治	理化学研究所 開拓研究本部 主任研究員
世古 敦人	京都大学 大学院工学研究科 准教授
都留 智仁	日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター 研究主幹
中井 浩巳	早稲田大学 理工学術院 教授
望月 祐志	立教大学 理学部化学科 教授
門馬 綱一	国立科学博物館 地学研究部 研究員
吉岡 信行	東京大学 大学院工学系研究科 助教

■科学技術未来戦略ワークショップ

「マテリアルイノベーションを実現する先進的計算物質科学」

開催日時：2023年2月4日（土） 9：00～16：40

場所：科学技術振興機構 東京本部別館 2階 セミナー室 および オンライン（Zoom）

招聘有識者（敬称略、所属・役職は開催時のもの）

（話題提供者）

三宅 隆	産業技術総合研究所 材料・化学領域 研究チーム長
中井 浩巳	早稲田大学 理工学術院 教授
青柳 岳司	旭化成株式会社 プリンシパルリサーチャー
乙部 智仁	量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所 上席研究員
古山 通久	信州大学 先鋭材料研究所 教授
大谷 実	筑波大学 計算科学研究センター 教授
水上 渉	大阪大学 量子情報・量子生命研究センター 准教授
藤堂 眞治	東京大学 大学院理学系研究科 教授
杉田 有治	理化学研究所 開拓研究本部 教授
福澤 薫	大阪大学 大学院薬学研究科 教授

（コメンテーター）

常行 真司	東京大学 大学院理学系研究科 教授
久保 百司	東北大学 金属材料研究所 教授
鷲津 仁志	兵庫県立大学 大学院情報科学研究科 教授
宇治原 徹	名古屋大学 未来材料・システム研究所 教授
古宇田 光	東京大学 リサーチ・アドミニストレーター推進室 プリンシパルURA
大淵 真理	富士通株式会社 富士通研究所 特任研究員

プログラム（敬称略）

9:00～9:20	趣旨説明	曽根純一、眞子隆志（JST-CRDS）
9:20～12:00	話題提供 1	
9:20～9:45	相関材料の第一原理電子状態計算	三宅 隆（産総研）
9:45～10:10	理論・プログラム開発と応用研究	中井 浩巳（早稲田大）
10:10～10:35	高分子材料シミュレーションの達成地点と課題	青柳 岳司（旭化成）
10:45～11:10	SALMONによるマルチスケール電子・光ダイナミクスシミュレーション	乙部 智仁（量研）
11:10～11:35	サイバー触媒科学 実在系構造に基づく物質探索から材料創製へ	古山 通久（信州大）
11:35～12:00	溶液論と第一原理計算によって見えてくる電極/電解液界面における化学反応と構造	大谷 実（筑波大）
13:05～14:45	話題提供 2	
13:05～13:30	計算物質科学の量子コンピュータへの期待	水上 渉（大阪大）
13:30～13:55	マテリアルイノベーションにむけた制度・拠点構築	藤堂 眞治（東京大）
13:55～14:20	計算物質科学のソフトウェアの開発・維持・普及についての考察：分子動力学ソフトウェア GENESIS 開発における経験から	杉田 有治（理研）
14:20～14:45	FMO創薬コンソーシアムにおける創薬研究と組織運営	福澤 薫（大阪大）
15:00～16:30	総合討論	ファシリテータ：伊藤 聡（JST-CRDS、計算科学新興財団）
16:30～16:40	挨拶	曽根 純一（JST-CRDS）

付録2 国内外の状況

【日本】

2000年代には計算科学ソフトウェア開発を目的としたプログラムが走っていたが、2010年代に以降はスーパーコンピュータ開発に付随したプロジェクトが中心となった。

計算物質科学のソフトウェア開発を目的としたプログラム

2002-2009 JST-CREST/ さきがけ複合領域「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」研究総括 土居範久 中央大学 教授

2005-2012 JST-CREST「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」研究総括 矢川元基 東洋大学 教授

2010-2016 科研費新学術「コンピューティクスによる物質デザイン」領域代表 押山淳 東京大学教授

スーパーコンピュータ活用に付随する研究プロジェクト

2006-2011 文部科学省「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア研究開発」研究代表者 平田文男 分子科学研究所 教授

2011-2015 文部科学省「HPCI戦略プログラム」プログラムマネージャ 土居 範久 慶応義塾大学 名誉教授

2015-2020 「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」(9個の重点課題と8個の萌芽的課題)

【米国】

大規模プロジェクトとしては、MGI以来のデータベース構築・利用が中心。デジタルツイン化を目指す露わな動きは見られない。

Materials Research Data Alliance: MaRDA

2019 オープン・アクセス可能・相互運用可能な材料データ

Center for Hierarchical Materials Design: CHiMaD2

Phase I: 2014-2018 Phase II: 2019-2023, NISTのCoEプログラム、2019年に継続が決定

Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future (DMREF)

2012-、ポリマー・有機物中心

Materials Project

元は蓄電池向けのデータベース。分子、無機材料のDFT計算の結果をCC 4.0で公開

AFLOW (Automatic Flow for Materials Discovery)

Duke大が運営、結晶構造、バンド構造、機械・熱特性

【欧州】

NOMADのような、計算物質化が全般を支える仕組みがある。デジタルツイン化を目指す動きはまだ見られない。

Novel Materials Discovery Center of Excellence: NoMAD-CoE

計算科学全般、Exascaleのcode、workflow、big data analysisが3本柱

Materials design at the eXascale:MAX

EPFL 中心、5つのHPCリソースを束ねコード開発

Fair Data Infrastructure for Physics, Chemistry, Materials Science, and Astronomy e.V. : Fair-DI

NOMAD プロジェクトの成果を公開するDB

NCCR MARVEL:Materials' Revolution: Computational Design and Discovery of Novel Materials

2014-、ハイスループット計算の結果を蓄積、活用、EPFL 中心 Swiss National Science Foundation

設立

【韓国】

マテリアルゲノム関係の動きはあるが、基礎面においては、韓国発の方法論およびソフトウェアは多くは無く、現状では今後、活性化して行く兆候は見られない。

Creative Materials Discovery Project

2015~2024、韓国科学技術院が中心 Material Genome 関係

【中国】

今のところマクロスケールシミュレーションが中心で、ナノ・メソを扱う方法論は多くない。日欧米への留学生在が帰国して今後活発化する可能性は大きい。デジタルツイン化に関して現状では動きはないが、応用や工学に特化しているため、近い将来その方向に向かう可能性がある。

Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering（北京科技大学）

Materials Genome Institute（上海大）

Materials Genome Initiative Center（上海交通大）

Material Genome 関連のセンター・研究所

付録3 専門用語説明

計算物質科学

物質に関する物理的・化学的理論に従って計算機を用いた計算を行い、物質の性質や変化を説明したり予測したりする科学の分野。目的や対象に応じて、用いられる理論は異なる。

デジタルツイン

現実空間にある装置・設備などを仮想空間（サイバー空間）に再現すること、もしくは、そのように再現したもの。デジタルツインを活用することで、現実空間の材料、装置などの寿命や劣化を予測や保守が容易になる。

第一原理計算

第一原理（first principles）は、最も基本的な原理の意味。原子、分子やそれを構成する電子や原子核が従う量子力学の原理のみを用いて、物質の諸性質を計算することを指す。

シュレディンガー方程式

量子力学における基礎方程式で、その解は波動関数と呼ばれ量子系の状態を表している。シュレディンガー方程式には、時間に依存するシュレディンガー方程式と時間に依存しないシュレディンガー方程式がある。時間に依存するシュレディンガー方程式は、波動関数の時間的変化を記述するもので、時間に依存しないシュレディンガー方程式は、系のエネルギーが一定に保たれる閉じた系に対する波動関数とそのエネルギー（エネルギー固有値）を決定する。

ハミルトニアン

量子力学におけるハミルトニアンは、シュレディンガー方程式の重要な構成要素である。物理系の全エネルギーを表しており、運動エネルギーやポテンシャルエネルギーなどの項を含む。ハミルトニアンは波動関数に作用する演算子である。

密度汎関数法（DFT: Density Functional Theory）

多体電子系の電子状態を調べるために用いられる量子力学の手法の一つ。多体系の基底状態は電子密度のみで決まるという原理に基づいている。電子密度が位置の関数であるため基底状態は関数の関数（汎関数）となる。凝集系物理学や計算物理・化学の分野で非常に幅広く使われているが、その理論中の項の一つである交換相関ポテンシャルの形がわかっていないため、その部分に関してはなんらかの近似を行う必要がある。

局所密度近似（LDA: Local Density Approximation）

DFT理論の中の交換相関ポテンシャルを、それぞれ場所での局所的（Local）な電荷密度（Density）で記述できるという近似手法。電子相関の強い系ではこの近似は成り立たない。一般化勾配近似（GGA）などの改良された近似の構築の出発点としても利用されている。

作成メンバー

総括責任者	曽根 純一	上席フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)(2023年3月まで)
リーダー	眞子 隆志	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
メンバー	石鉢 卓也	主査	(戦略研究推進部)
	伊藤 聡	特任フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
	岡部 成光	イノベーション推進マネージャー	(産学連携展開部)
	大山 みづほ	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)(2022年12月まで)
	佐藤 勝昭	特任フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)(2023年3月まで)
	嶋田 義皓	フェロー	(システム・情報科学技術ユニット)
	高村 彩里	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
	宮下 哲	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)(2023年3月まで)
	八巻 徹也	特任フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)

戦略プロポーザル

CRDS-FY2023-SP-02

計算物質科学の新展開

～デジタルツインによる材料創製基盤の革新～

STRATEGIC PROPOSAL

Advanced Computational Materials Science

～Innovation of Materials Development by Digital Twin～

令和 5 年 11 月 November 2023

ISBN 978-4-88890-879-5

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター

Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町

電話 03-5214-7481

E-mail crds@jst.go.jp

<https://www.jst.go.jp/crds/>

本書は著作権法等によって著作権が保護された著作物です。

著作権法で認められた場合を除き、本書の全部又は一部を許可無く複写・複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

なお、本報告書の参考文献としてインターネット上の情報が掲載されている場合には、本報告書の発行日の1ヶ月前の日付で入手しているものです。上記日付以降の情報の更新は行わないものとします。

This publication is protected by copyright law and international treaties.

No part of this publication may be copied or reproduced in any form or by any means without permission of JST, except to the extent permitted by applicable law.

Any quotations must be appropriately acknowledged.

If you wish to copy, reproduce, display or otherwise use this publication, please contact crds@jst.go.jp.

Please note that all web references in this report were last checked one month prior to publication.

CRDS is not responsible for any changes in content after this date.

FOR THE FUTURE OF
SCIENCE AND
SOCIETY



CRDS

<https://www.jst.go.jp/crds/>