

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名：大規模系への超高精度 $O(N)$ 演算法とナノ・バイオ材料設計

2. 研究代表者：青木 百合子（九州大学大学院総合理工学研究院 教授）

3. 研究概要

提案者のグループで高分子など一次元系の電子状態計算のために開発してきた超高精度オーダー N 計算方法—高分子の電子状態の理論的重合法（旧 **Elongation**）—を、超高精度で2次元・3次元系に適用可能となるように発展させ、高速かつ厳密にバルク系の電子状態を計算できる **Generalized Elongation** 法を開発した。本方法は、反応スポットに必要な **Active** 領域局在化軌道を自動的に検出して局所的に固有値問題を解き、新たな **Frozen** 軌道に随時置き換えていく方法を繰り返すもので、2次元・3次元でも計算精度が保たれていることを確認した。さらに電子相関効果を導入するために、領域局在化軌道 (**RLMO**) を基底とした **Local MP2** 法や **Local CI** 法の基礎方法論を構築し、**Generalized Elongation** 法に組み込み、**post-Hartree-Fock** における有効性を検証した。一方で機能設計のために、導電性評価のためのエネルギーバンド構造抽出法や非線形光学特性評価のための電場下での計算が可能となる解析手法を導入すると共に、磁性評価のための開殻系への計算アルゴリズムやエネルギー勾配法も現在開発を進め一部について動作確認を終えている。

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

本研究課題は、当初、その量子化学的方法論 (**Elongation** 法) が蛋白質など3次元的な系に対しても適用できるかどうか疑問視された。それは **Elongation** 法が一次元的に系を延ばして行く場合にのみ有効であり、3次元的に折り畳まれた蛋白質のように既に電子状態が「凍結」した部分に延長部分が接近してその電子状態のキャラクタを根本的に変えてしまう場合に対応できるかどうか不明だったからである。

当初の研究計画から見た進捗状況や達成度等に関しては、研究代表者等は、電子状態が凍結した部分を再活性化して、近接した部分全体のハミルトニアンに対角化を再度行うことにより、当初心配された上記問題を計画よりも早く解決した。しかも、様々なテスト計算によって、計算速度が、ほぼリニアにスケールすることを確認しており、研究の進捗状況は優秀と判断され、研究成果も高く評価できる。

新たな方向性や方針変更等、当初計画では想定されていなかった新たな展開が生じたかに関しては、当初必要とされていた **Fock** 行列の再利用や **RLMO** 基底全エネルギー計算が不要となる方法論を導入することに成功しており、望ましい展開と判断する。

成果の科学的・技術的インパクト、国内外からの類似研究と比較したレベルや重要度という点に関しては、蛋白質などの巨大分子の電子状態計算に関しては、**DFT** を含む様々な方法論が出されているが、非経験的分子軌道法に基づき、リニアスケーリングを達成している方法はそれほど多くない。他の有名な方法としてはフラグメント **MO (FMO)** があるが、**presentation** を聞いた限りでは、少なくとも、同レベルの精度と計算速度を達成しており技術的に優れていると判断される。今後さらなる科学的なインパクトが期待される。

研究実施体制については、計画的かつ密接な連携で進めており、代表者がリーダーシップを発揮してよくチームを運営していると思われる。しかし、外国人研究員への依存度が高く、日本の次世代スパコン利用人口増のための本プロジェクトの趣旨、並びに人材育成の観点からも、国内若手研究者の採用を推進すべきと考える。

研究費の執行については、これまでは特に問題なく、妥当である。但し、平成21年7月以降チームが九州大

学と中国の華南師範大学の二つに分かれたことから、今後の研究費の執行にあたっては、注意深く実施する必要がある。

4-2. 今後の研究に向けて

今後の研究の進め方については、現時点で、研究課題に残されている問題点等についての的確に把握していることから、今後も適切に研究が進められるものと考えられる。ただし、二つの面で改善が必要であると思われる。一つ目は構成メンバーの半分以上が外国人で占められており、日本人の若手の育成の面で疑問がある。二つ目は、研究チームが量子化学者のみであり、このため、開発した方法が最も有効であると思われる生体分子(蛋白質やDNA)に対する応用が極めて難しいと思われる。何故なら、それらの分子が働く環境は水溶液であり、「水」を正しく計算に取り入れなければ、酵素反応などの生物機能にこの方法論を応用することはできないからである。現在、GAMESS に連続媒体モデルが入っているため、それを使用して Elongation 法に組み込んでいるが、それでは物理を正しく反映していないことは数多くの例で示されている。マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションの真の目的がリアルなシステムを非物理的な近似を導入することなく解くことであるとすれば、連続媒体モデルの使用は避けるべきであると考えられる。

今後見込まれる成果、戦略目標に向けての貢献、成果の社会的なインパクトの見通しについては、下記2点について、良好な結果が得られ、且つ、専門家から一定の評価が得られるならば、本研究は、 $order(N)$ 計算を目指していることから、画期的な成果が得られるものと期待できる。

- ① 研究の最大の課題は、2、3次元系への展開である。報告では、Generalized Elongation 法について、開発は順調、3次元結晶系などに適用可能としているが、報告書に示されている誤差比較だけでは不十分と思われる。学会での発表などを更に行い、専門的な観点からの評価・意見を研究に取り入れて行くことが重要と考える。

- ② 大規模計算への適用に関しても、具体的な数値等による結果を示して、説得力ある説明が求められる。

研究代表者はこれまでの研究において、すでに、Elongation 法を蛋白質などの3次元的に巻き込んだ巨大分子に適用できるレベルにまで発展させている。その意味で、この方法はナノ・バイオ問題への展開が今後大いに期待できる。しかしながら、ナノ・バイオは単に電子状態(量子化学)だけの問題ではなく、それが「水」という無限系(多体系)の中に存在して、初めてその機能を発現する。すなわち、ナノ・バイオは「蛋白質」というマイクロな系が水というマクロな系の中に存在するマルチスケールの問題であり、量子化学(電子状態)と古典統計力学(水)とが相互作用するマルチフィジックスの問題でもある。もし、蛋白質の電子状態のみを取り扱うのであれば、それはシングルスケール・シングルフィジックスの問題に過ぎない。したがって、上で「大いに期待できる」としたのは、研究代表者が水の問題に真剣に取り組むことを前提としての評価である。

遷移構造、振動解析や並列化部分でやや遅れがみられるようであり、新たに発足したサブグループとの連携に懸案があるが、戦略目標に貢献できるものと評価される。

基礎的研究なので即効的な意味での社会的インパクトは高くないことは致し方ないが、やはり社会へのインパクトは大切であるので、一つでもよいからナノあるいはバイオの例題でピリリと辛い成果を出すことに専念してほしい。また、社会に受け入れられるためには優れたユーザーフレンドリーインターフェイスが必要であるので、この点に関する計画策定、推進にも期待したい。

4-3. 総合的評価

当初、その量子化学的方法論(Elongation 法)が蛋白質など3次元的な系に対しても適用できるかどうか疑問視されたが、2次元、3次元系への応用の中核技術となる Generalized Elongation 法が当初予定通り順調

に開発が進み、原理的にはほぼ完成された。

研究代表者等は、電子状態が凍結した部分を再活性化して、近接した部分全体のハミルトニアンの対角化を再度行うことにより、当初疑問視された上記問題を計画よりも早く解決した。しかも、様々なテスト計算によって、計算速度が、ほぼリニアにスケールすること(**order(N)**計算)を確認しており、研究の進捗状況は優秀と判断され、研究成果も高く評価できる。女性らしい真面目さ、几帳面さで研究に取り組んでおり、研究の進捗状況は上記のとおり期待以上に着実に進展しており、技術的にも優れていると判断される。今後さらなる科学的なインパクトが期待される。研究期間の後半では、基礎研究重視の現在の方針で進め、国際的な成果を挙げられることを期待する。また、新たに発足したサブグループや他の海外研究協力者との連携が一層緊密になるようぞまれる。