

# 金研物語

先達との  
出逢い

きんけんものがたり

第二部

## 計算材料学の旅立ち

東北大学未来科学技術共同研究センター

川添 良幸

### 1. 始まり

今からちょうど22年前、平成2年5月に、仁科先生に呼ばれて金研に雇っていただいた時に、私に与えられた研究テーマは、「計算機シミュレーションによる新材料設計と材料データベース構築」で、出迎えてくれたのは、中名生、伊藤、和田の3名の志願技官でした。彼等は仁科先生等の誘いで従来の金属加工等の業務を離れ、材料データベース構築という全く異なる新たなテーマに参加することになった人達でした。私を入れた4名の専任の職員と、木戸助教授等が中心となって、熱心にこの幅広いテーマで何が出来るのか、そのためには何が必用なのか、を考えました。

当時の将来計画委員会で、これだけの大きなテーマを成功裏に実施するには、3部門規模の体制が必用であるという結論となり、不足する2部門は現在の計算材料学センターと寄附研究部門を設置して賄うということになりました。これらの立ち上げは、自分の部門さえまだ神山助手1名であったのですが、川添が担当するしかありませんでした。何せ東北大学にはまだ寄附講座も寄附研究部門もなく、その規程を作ることから始めました。ナノ学会という名称も

私が主張して作ったものですが、計算材料学という言葉も私の造語で、それにもこだわりました。それは、短い程内容が広い、という私の持論によるものです。当時は何も無かったのですが、今では、一般に計算材料学と呼ばれるようになりました。しかし、この1文字の差が大きいのです。私は、やはり、自分の卒業した素粒子論・原子核理論が一番好きです。何かを論ずる、というレベルの研究こそ大学でやるべきテーマであると信じています。次のレベルが物理学等の広い範囲を網羅する分野別学問で、何とか科学とか何とか工学となれば、既に確立した分野を対象とするレベルになります。

計算材料学で、必用となる機材を検討すると、直ぐに専用のスーパーコンピューターがなければ何も出来ないことが明らかになりました。早速、2番目に参加してくれた大野助教授と概算要求書作成に当たり、新たなセンター設置を試みました。しかし、当時は大学附置の研究所には3施設しか認められておらず、断念せざるを得ませんでした。日本アイ・ビー・エム社からの寄附でいただいた中型汎用計算機とワークステーションを使って所内のネットワーク環境を整備しながら、独自の

第一原理シミュレーション計算プログラムの構築を始めました。当時は、フラレンが発見されたばかりで、それに対する精密シミュレーション計算は大変困難でした。我々は炭素の様な軽い元素に対しては従来の標準的バンド計算で用いられる擬ポテンシャルと平面波展開より、原子軌道と平面波で全電子を扱う方が得であると気づき、定式化から数値計算用プログラム作成までを開始しました。このシミュレーション計算プログラムは、現在、TOMBO (TOhoku Mixed Basis Orbitals *ab initio* Simulation Package) と呼ばれ、東北大学の知財に認定されるまでになりました。こうして研究成果も出始めた頃の平成4年に、やっと文部省から金研の概算要求が認められ、センターは設立出来ないが、スーパーコンピューターの買い取りが出来ることになりました。2年間の国際競争入札過程を経て、1ノードの処理速度が8GFLOPSで3ノード、トータル24GFLOPS(カタログ値)の水冷の日立S-3800システムが選ばれました。当時、世界ランキング26位に入り、届いた証明書に大喜びたのを覚えています。CPUのアドレスが31ビットだったため、メモリー量は2GBに制限され、それに比

べCPUの処理速度が速く、メモリーネットワークの状態でした。現在は、全く逆で、メモリーは64ビットアドレッシングで実質無限大に積めますが、CPUは数年来クロック数が上がっておらず、処理速度の方が追いつかない状態になっています。

## 2. 安定運用に向けて

初号機は買取でしたので、数年経つと他に比べて見劣りがして来ました。電気代の方が本体価格より高くなると、さすがにそれ以上の延命は困難でした。しかし、2号機の導入は至難の命題でした。安定した計算機利用環境を確立するため、レンタル化の概算要求を行いました。これはある意味、無限大の予算要求ですので、生やさしいものではありません。膨大な資料作成と頻りに計算材料学の重要性説明を行って、認められるまでに数年かかり、平成12年度に2号機のSR8000導入に成功しました。空冷のCMOS機で、64ノードで921.6GFLOPS、20倍の処理能力と20倍のノード数となり、膨大に膨れあがりつつあったジョブ処理に対応できる最適なシステムとして歓迎されました。3号機は51ノードで7.5TFLOPSを出せる空冷のSR11000になり、さらに、この4月から稼働を開始した第4号機は、水冷で300TFLOPSという処理速度(リンパック値)、42TBのメモリー量ですので、この約20年で約1万倍の高速化と2万倍のメモリー量増大が達成

されたこととなります。驚くべき技術の進展です。

図1. 4月16日に稼働を開始したばかりの本所の4代目スーパーコンピューター SR16000。10筐体並べるレイアウトは私の主張で、途中で変更したため、日立製作所には、1400本以上もある光ファイバーの束をもう1回作り直してもらうことになってしまいました。



一方、施設化の方は、途中で公式な施設数が3という制限はなくなったのですが、スーパーコンピューターがあるから良いのでは?と言われ、公式な施設の概算要求はなされず、他の新規案件が優先されたまま、現在に至っています。年間約7億円という膨大な予算が認められているのですから、早くきちんとした施設に格上げして欲しいものです。幸い、本年4月から佐原准教授が専任となって活躍していますので、従来の責任部門のみでの運用より格段にサービス体制が改善するとは思いますが、全国共同利用施設としてのサービス体制充実にはまだまだ人手不足です。より充実した人員体制実現を図っていただきたいと思います。

## 3. これまでの研究テーマ

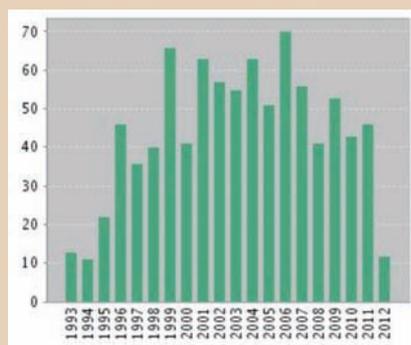
スーパーコンピューターとは言っても、計算機のハードはただの箱です。借り物ではなく、他では出来ない高度な処理を可能とする真に良いシミュレーションプログラムを作成し、実行しない限り、良い成果は得られません。画竜点睛とでも言うべきものです。我々は最初、TOMBOによって、当時、C<sub>60</sub>には原子を内包出来ないと言われていたのを、本学のプラズマの実験家である佐藤教授等と一緒にC<sub>60</sub>を加速して原子にぶつけることで可能であることを示しました。この成果は、当時、静的な物理量計算に止まっていた物性物理の世界で、トンボの様に軽く飛ぶTOMBOでは、第一原理分子動力学を実行するという離れ業が出来る、と高い評価を得ました。

自分が使い、良く知っているものでなければ、他の人には勧められない。そのため、スーパーコンピューターシステムの設計、導入、運用から、シミュレーションプログラム作成、実行と全てに関わりました。本所以前は本学情報処理教育センターで学生教育専門の計算機の運用に当たっていただけだったので、システム関係には既に10年の経験がありましたが、さらに、東北大学情報シナジーセンター長や本部事務機構情報部長を併任し、学内外の情報サービス全般も経験に加えて、本所の計算機サービスのグレードアップに努めました。

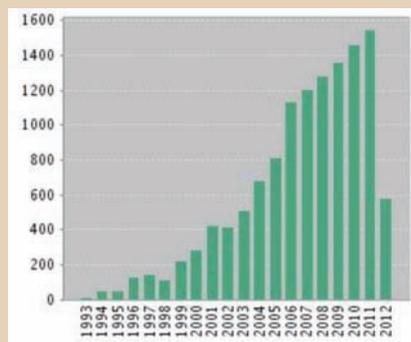
最近の計算材料学研究部門の出

版論文数と引用回数を、Web of Scienceで検索した結果を図2に表示します。数が多いのは共同研究者がたくさんいるからですが、引用回数が指数関数的に増大していて、自己引用が少ないことは自慢です。この中でも、図3に原子構造を示す、京都大学の北川先生と共著の金属-有機構造体でのアセチレンと二酸化炭素分離のNature論文は、600回を超える引用回数になっています。次に引用回数が多い論文は、ポーランドのParlinski教授と共同研究した成果である格子振動の第一原理計算法に関するPRLですが、この手法は今では理論計算の標準となっています。川添は、平成2年までは、教養部で物理の先生を生業としていましたので、このような世界には全く関係ありませんでした。あこがれの金研に入れていただき、最初にとまどったのは、辺りの教授の皆さんの素晴らしい業績でした。せっかく買ったもらったスーパーコンピューターですから、最大限に活用し、その元を取れるだけの業績を挙げたいと本気で仕事をしていました。プログラムが完成するまで徹夜で頑張ることが出来たのは若かったからですが、業績ゼロのままでは終わりがたくなかったからでもありました。

図2. 計算材料学研究部門の出版論文数と引用回数。平成2年にスタートした当時は、実験部門を引き継ぎ、合金設計制御工学研究部門を名乗らざるを得ず、辺りからも何をしているのか不明で、大変苦労しましたが、途中で計算材料学研究部門と名称変更出来た頃には、もう既に業績も挙げられるようになっていました。



計算材料学研究部門の年ごとの出版論文数。何もなかったところからの出発でしたが、数年で立ち上がりました。年間50報で打ち止め、インパクトファクターの大きい雑誌にのみ掲載することにし、最近では平均が3を超えています。



引用回数は、5月15日現在、総計12,598回ですが、自己引用を除いた11,070回が重要です。

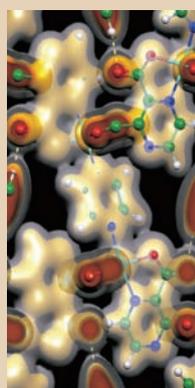


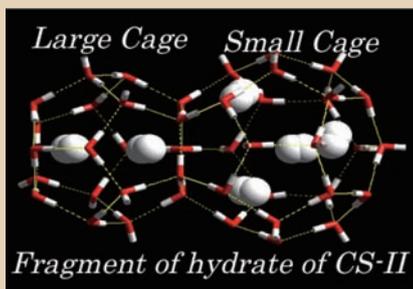
図3. アセチレンと二酸化炭素を分離出来る金属-有機構造体。有機物合成の基盤材料となるアセチレンは二酸化炭素とほぼ同じサイズのため分離が困難でした。それがこのMOFによって容易に分離でき、工業的にも大変役に立つ成果となりました。

計算材料学の学問内容は、従来の実験主体の材料研究を基盤から考え直すための理論の確立と、それを実際の実用材料に適用するための大規模シミュレーション計算の実行で

す。まず、本所の多くの実験部門と仲良くさせていただき、そのご要望に対応したシミュレーション計算を実施し、共著の論文を出版し始めることが出来ました。

現日立製作所の橋詰さん(当時、本所助教授)との分子エレクトロニクス研究が、我々の大規模予算獲得の最初でした。独自の電子伝導計算プログラムを開発し、他では出来ない高精度のシミュレーションを実行しました。現在もTOMBOに結合し、継続的テーマとして実施中です。水素貯蔵材料と省インジウムITO探索に関する2つのNEDOプロジェクトは、この2月に終了するまでの5年にわたって、多くの人員が関わって研究に当たりました。図4に、究極の水素貯蔵材料として我々が提案しているクラスレート水和物の構造を示します。何故、究極なのかというと、このクラスレート水和物が解け、水素が放出されて酸素と結合してエネルギーを生み出すと、残るのは水だけになるからです。現在、数学の小谷教授と実験の阿尻教授と実施しているCRESTは、数学者が代表の最初のプロジェクトで、 $sp^2$ 結合のK4対称性を有する新3次元炭素結晶の発見と存在可能性追求、実験家による安定化策の統合的な研究として大変興味あるテーマとなっています。多くの研究者がグラフェンの様な既にノーベル賞受賞となった対象を研究しているのに対し、我々は独自の分野を切り開こうと必死に努力中です。

図4. 究極のクリーンなエネルギーキャリアである水素輸送用のクラスレート水和物。自然界にはメタンガスを含むハイドレートが大量に存在し、次世代エネルギー源と考えられています。メタンガスの代わりに水素分子の貯蔵可能性を検討しています。もちろん、実用化を目指し、出来る限り、常温・常圧での貯蔵材料を探索しています。



#### 4. 国際化とアジア計算材料学コンソーシアム ACCMSの設立

金研で雇っていただいた平成2年、全国共同利用の研究者に外国人を入れて提出したところ、それは別枠で入れられない、と言われてびっくりしたのを覚えています。全国とは日本全国で世界ではない! 世界の金研だったのでは? この後、世界の金研のため、imr.eduドメイン取得に奔走することになります。それは、米国の大学が全てmit.edu、stanford.eduと世界の大学のドメインを所有しているのに対応した状態にしたからです。この業務実現は大変困難だったのですが、幸い、鈴木所長に呼ばれて天皇陛下ご参加の晩餐会に出た、という情報を米国のドメイン管理者に伝えて認めてもらうことに成功しました。計算機シミュレーションによって新材料を設計すると

いうテーマで、しかも、独自の定式化やプログラム作成を要求すると国内では人材は限られてしまいます。自然と諸外国との交流が広がって行きました。中国復旦大学の顧問教授、インド材料学会の名誉会員等にもしていただきました。このような一見意味のなさそうなことが実は功を奏して、相手方から極めて優秀な人材を派遣してもらえるようになったのが、研究室の一番大きな収穫です。一頃は助教授、助手、ポスドクから学生まで外人ばかりの研究室になりました。こうなると、英語はもうどうでも良くなり、イラン人同士はペルシャ語、北インド人はヒンズー語、南インド人同士はタミール語で話す、という状況になります。新入りには母国語が一番で、スーパーコンピューターの使い方からネットワーク接続まで各国語での入門がなされ、大変に効率的でした。この人達が松島の多国語案内板を作るのに協力してくれたり、インテリジェントコスモスの10カ国語パンフレットの作成も行ってくれました。

平成11年、仙台で開催された東北大学の一大イベントで、国際共同研究の充実が取り上げられました。国際会議とか言っても少人数の外国人の参加に止まることの多い日本で、我々は最初から外国人半分の状態でしたので、我々のアクティビティが認定されました。この機会に、アジア計算材料学コンソーシアムACCMSの立ち上げがなされました。欧米のソフトウェアの利用に止

まることの多いアジア地区で、独自の定式化とプログラム作成、さらにはスーパーコンピューター利用による共同研究推進というコンソーシアムであるACCMSはアジアの研究者に大変歓迎されました。最初は、日頃のインターネット上での共同研究と2年に1回の実際の会議(オフという)でスタートしたのですが、今年度は3回の国際会議が企画されるまでになりました。7月にインド国バンガロール、11月に本所、1月に台湾で開催予定です。特に、仙台での会議は、ACCMS-VO(仮想組織、計算機用語で、インターネット上での仮想的な研究組織を言う)のオフミーティングとして毎年開催されるようになりました。川添は創始者ということで全てに関わっていますが、実行は各国にお願いしています。今後、本所では水関准教授中心の開催となりますので、皆様、ぜひ、ご支援のほど、よろしく願います。

図5. アジア計算材料学コンソーシアムACCMS-VOのオフミーティングの集合写真。10年前に仙台で30名規模で始まった国際会議が、今では毎回100～300名を集めるまでに発展し、本所発のアジア地区の重要な集まりと認識されるようになりました。

