スパコンフル活用

東北大学金属材料研究所　川添良幸教授が語る

東北大学金属材料研究所。前身である東北帝国大学理科大学の臨時理化学研究所は、大正五年、KS磁石鋼の発明で有名な本多光太郎教授を研究主任として発足した。現在は同大の附置全国共同利用型研究所として広く国内外に開かれ、国際的な研究交流が活発に行われている。八十年以上もの歴史を持つ同研究所では、金属全般、そして非金属へと研究領域を広げ、物質・材料の学術研究において世界の中核拠点となっている。この伝統ある研究所において、最も新しい研究手法であるコンピューターシミュレーションを駆使し、新しい材料設計などに取り組んでいる川添良幸教授に話を聞いてみた。

川添良幸教授。後方はSGIシステム。すべてのコンピューター資源を徹底活用して新しい材料設計に取り組む

血税頼みの高価なマシン　徹底的に稼働率高める

――研究室ではどのようなことをしていますか。

川添　研究室の目標は、独自開発の手法に基づく高度な材料設計システムの開発です。また、スーパーコンピューターを使って超大規模シミュレーション計算を行い、新しい材料を実験以前にデザインすることです。そのために、本所としての概算要求を我々が中心となって行い、平成五年度に最初のスパコンシステムを導入することに成功しました。第一原理計算、分子動力学計算、モンテカルロ計算、流体計算などを行い、クラスター集合体や分子エレクトロニクスなどの新しい材料の開発に取り組んでいます。

今のシステムになって二年弱くらいですが、せっかく高価なスパコンを使わせていただいているので、フルに活用できるよう、常にコストパフォーマンスを考えています。すべてのコンピューター資源を徹底的に使っている世界有数のヘビーユーザーであると自負しています。

スパコンの稼働率というのは、演算時間の総和で言う場合が多いと思います。スパコンは通常の計算機より百倍早いのですが、一万倍も高価なので、多人数で分けて使うだけなら、スパコンを使うのはもったいないわけです。通常のスパコンセンターでは稼働率は五～六割程度でしょう。

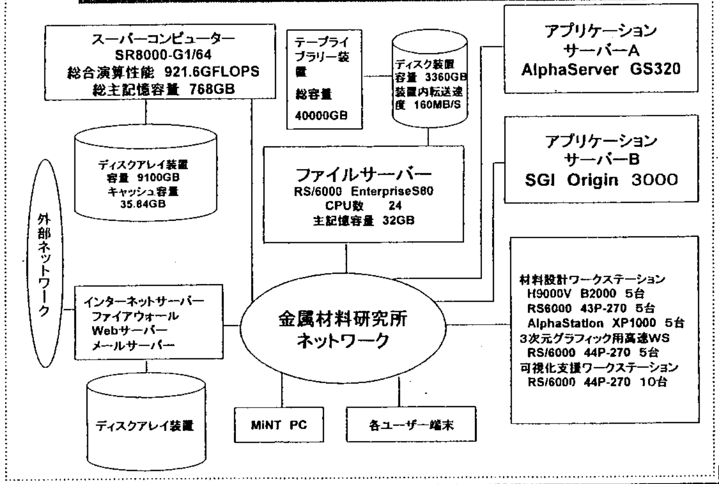
本研究所では、徹底的に九割まで利用し、さらに浮動小数点演算理論性能の何割まで使ったかというレベルで活用しています。そのため、センター長である私がスパコンの稼働率を机上の端末から常にリアルタイムでチェックしています。実行上どれだけ計算したかというのが本当の稼働率であり、そこまで稼働率を気にしているセンターはあまりありません。アメリカの軍事用のスパコンはすごい稼働率だと聞きます。

最近は、PCクラスターのほうが安くてスパコン並みの計算力があるという話を聞きますが、こういう人たちはスパコンにしかできない計算だけをスパコンでするという使い方をしていないのではないでしょうか。スパコンは車でいうならF1のようなものです。スペシャルファンクションであることをもっと自覚しないといけませんね。PCクラスターでできる程度の計算までスパコンで行うなら、当然コストパフォーマンスは悪くなるでしょう。

もう一つ、日本はお金持ちなので、コンピューターがありすぎる環境であることも確かです。使いきれていないのに、新しいものや必要以上の性能のものを欲しがる傾向が強いのかもしれません。その辺の意識や、危機管理能力が日本人には欠けていると感じることが多いですね。うちは、研究室のみんなで集まると日本語が通じないというくらい国際色豊かな研究室です。スパコンの所有率を見ると、圧倒的に欧米と日本が多く、その数とノーベル賞の受賞者の数は比例するといわれているくらいです。

スパコンの計算速度は、一年半で倍になるといわれています。高価なものほど長く使えないという困った状況にあります。先端の研究には先端の装置が必要になってきます。血税を使って高価なスパコンを購入していることを忘れずに大切に使っていきたいですね。

金属材料研究所　スーパーコンピューティングシステムの構成概要



「未知の物質」シミュレーションで予言する

――現在はナノテクバブルといわれるくらい、ナノ関係の研究費は増え、研究が活発になっています。材料でもナノレベルでの研究が進んでいるのでしょうか。

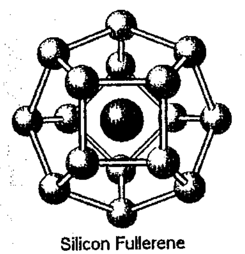
川添　コンピューターを使ったシミュレーションの研究は、化学系の人達の間では十年以上前から行われていました。ドラッグデザインを分子レベルで考えるのに有効な手段ですからね。材料系の研究はマクロなものが多かったので、精密な数値計算によるシミュレーションはあまり必要ありませんでした。扱うものがマクロで、しかも均一でないからです。おまけに実用的レベルで考えればいいので、汚い（不純物の入っている）材料を安く作ることが重要だったからです。

鉄を例に考えると、さびない鉄というのは材料として魅力的です。鉄は不純物が混ざるとさびるのであって、純粋な鉄はさびません。しかし、純粋な鉄はダイヤモンドよりも高価なものになってしまいます。すなわち、特殊用途にしか使えません。

材料のおもしろい面は、スケールが変わると性質が変わるということです。金属でもどんどん細かくしていくと突然違った性質が現れる場合があります。ナノのレベルまで小さくなると様々な物質でこうした現象がみられます。シリコンは半導体という認識が常識ですが、スケールを変えると絶縁体にもなることがわかっています。一ナノメートル以下のスケールになると量子効果が効いてくるということもわかっています。現在、コンピューター用集積回路の線幅は百ナノメートルになってきています。

しかし、「五十ナノメートルはナノテクか？」というと、本当の意味では違うと思います。ナノとはサイズの小さいものという意味ではないのです。そういう意味では、現在はまだサブミクロンの研究をしている段階といえるでしょう。本当のナノテクノロジーは、二〇一〇～二〇二〇年頃に確立されるのではと思います。大きいものを小さくする技術と小さいものを組み立てていく技術とが同じサイズの領域まできています。

そろそろ発想の転換が起こる時期です。この先は、機能性分子を組み立てて新材料を創製していく技術が主流になってくるでしょう。コスト的にもそのほうが安くなってくるでしょう。現在は、ナノテクバブルと世間でいわれるように、この分野の研究に集中投資しすぎのような気もします。今は無名でも将来性のある研究者に研究費が届くようなシステムが整備されないと、研究費のばらまきで終わってしまいます。



【図1】シリコンフラーレン。金属原子を内包すると安定化するかご型のシリコン分子でその構造の美しさや可視光発光性から、医療への応用研究などが活発化している

シリコンフラーレンで実績　計算結果の可視化も不可欠

――シミュレーションで、新しい材料は見つかりましたか。

川添　炭素のフラーレンは有名ですよね。周期表で見ると炭素のすぐ下はシリコンですから、シリコンにも炭素と同じような性質があると推測できます。ということは、シリコンでもフラーレンができる可能性は考えられます。しかし、炭素と違い、シリコンでは対称性の良いユニット（一つの小さな単位）ができないと理論でも実験でもいわれていました。

我々は、世界で最初に、金属原子を内包したかご型のシリコン分子をコンピューター上でシミュレーションしてみました。何と、極めて対称性が良く安定な構造を発見することができたのです。我々はこの新物質をシリコンフラーレンと命名しました。また、これらを接続するとシリコンナノワイヤーができることを予言しています。

数年前は、このようなシミュレーション結果を『Nature』に投稿すると、実験的に不可能であるという理由でよくリジェクトされました。しかし、今では『Nature Material』から原稿依頼を受けるなど、我々のシミュレーションによる新物質予言が高く評価されるようになりました。

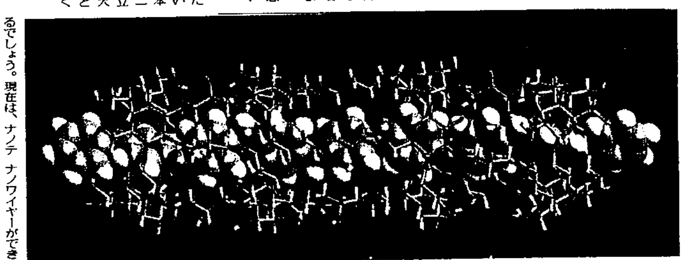
今年の秋になって、分子科学研究所の茅所長の研究チームが実際にシリコンフラーレンを作ることに成功しました。私たちがシミュレーションで予測したのと同じものだと思います。

シミュレーションの良いところは、現在の技術ではまだ作れないような材料をコンピューター上で作り出すことができることです。材料は作ってみないとわからないというのが今までの常識でした。また、実験には時間がかかるけれど、シミュレーションはスパコンが速くなればいくらでも速くできます。

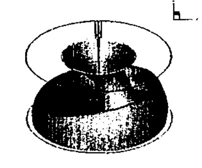
私たちが日常的に行っている第一原理計算は、実験のパラメーターは使いませんが、近似はたくさん使います。現在、従来からの標準理論である局所密度近似を越えた理論に基づくシミュレーションプログラムを、第一原理計算の開発でノーベル化学賞を受賞されたカリフォルニア大学のコーン教授との共同研究で構築中です。その実行のためには、現状より一層高速なスパコンが必須ですが、それは、ナノテクノロジーによって実現されると考えています。

また、これらの計算結果は、膨大な数値によって出力されますが、それを読み取って、新物質の構造や性質を考えるのは不可能です。そのため、高速で高精度な可視化支援装置が必須です。私たちは、計算結果の可視化にも力を入れています。そのため、通常のスパコンセンター以上に可視化の得意なサーバーやワークステーション群に可視化用のソフトウエアを用意し、研究者はそれを活用して迅速な新物質設計を行っています。

図1と2に示したのは、第一原理シミュレーション計算によって得られた最終結果であり、通常、このような結果を得るためには、その数倍から数十倍の異なる計算を行い、比較検討しているのです。紙面では示せませんが、研究者はこのような三次元の分子構造図を回転させたりしながら、正確な構造を認識します。アニメーションで時間発展を追うこともよくやっています。化学反応の追跡には必須です。図3は、流体計算結果の一例です。チョクラルスキー法という単結晶育成法を数値的にシミュレートし、実験的には困難な最適引き上げ条件を提言できました。



【図2】分子エレクトロニクス用導線として期待されるシクロデキストリン被覆伝導性ポリマー。ナノスケールの電子回路中の配線として期待されている



【図3】レーザー用単結晶引き上げ法の流体計算シミュレーション。回転数や温度条件を変え、最適な引き上げ方法を予測したもの

理科離れ対策は周辺環境の整備から

――科学技術立国としての未来は明るいということでしょうか。

川添　子供達の理科離れは、理科が嫌いで興味がないということではないと思います。理科離れは高校生以上で深刻な状況なのかもしれません。大学のオープンキャンパスでも、中学生以下の子供達はたくさん来ます。ところが高校生は自分の受ける学部にしか行きません。受験勉強でゆとりがないからです。

うちの研究室もドクターまで進学することを前提に学部生を集めますが、途中で就職したいと言い出す学生がでてきます。研究は好きで楽しいと思っていても、将来の進路を考えたとき、研究者になろうとは思えないのでしょう。

研究者は大変な苦労をしている割に待遇は悪いと思います。基本的に超過勤務に手当はつきません。どんなに長時間研究しても、評価される研究をしなければ給料も待遇も良くなりません。今の若者に「武士は食わねど高楊枝」などという言葉が通じるでしょうか。

外国人ははっきりしてますね。契約した給料分だけ働くという考え方です。ところが、日本ではサービス残業ともいえる深夜の研究は当たり前です。合理的に考えると、研究職ほど割に合わない仕事はほかにないかもしれません。今の子供達に理科系に進むことを奨励しても、その気になりにくいでしょう。もっと楽で待遇のいい仕事があるなら、そっちに行きたいと考えるのが自然ですから。

また、研究や技術のレベルが上がっても、それだけでは社会貢献できません。よくR&Dといいますが、本当に大事なのはその先です。マーケティングを考えて、製品化することが大切なのです。今は、世界がグローバルスタンダードというアメリカ追従型になっているので、我が国独自の規格では製品が作れないという状況にもあります。

トータル的に考えると、理科離れの心配や研究費を増やすことも大事ですが、周辺の環境、法律、規制などを整備することのほうが重要ではないかと思います。いくら教育して、研究をしても、それをバックアップできる体制がなければ、社会に還元できないでしょう。

日本は潜在的能力を持っているが、このような環境によって生かしきれていないのだと思います。