

量子HPCハイブリッドコンピュータによる 材料開発についての展望と期待

JSR株式会社

リサーチフェロー

RDテクノロジー・デジタル変革センター

マテリアルズ・インフォマティクス推進室 次長

大西裕也

会社紹介

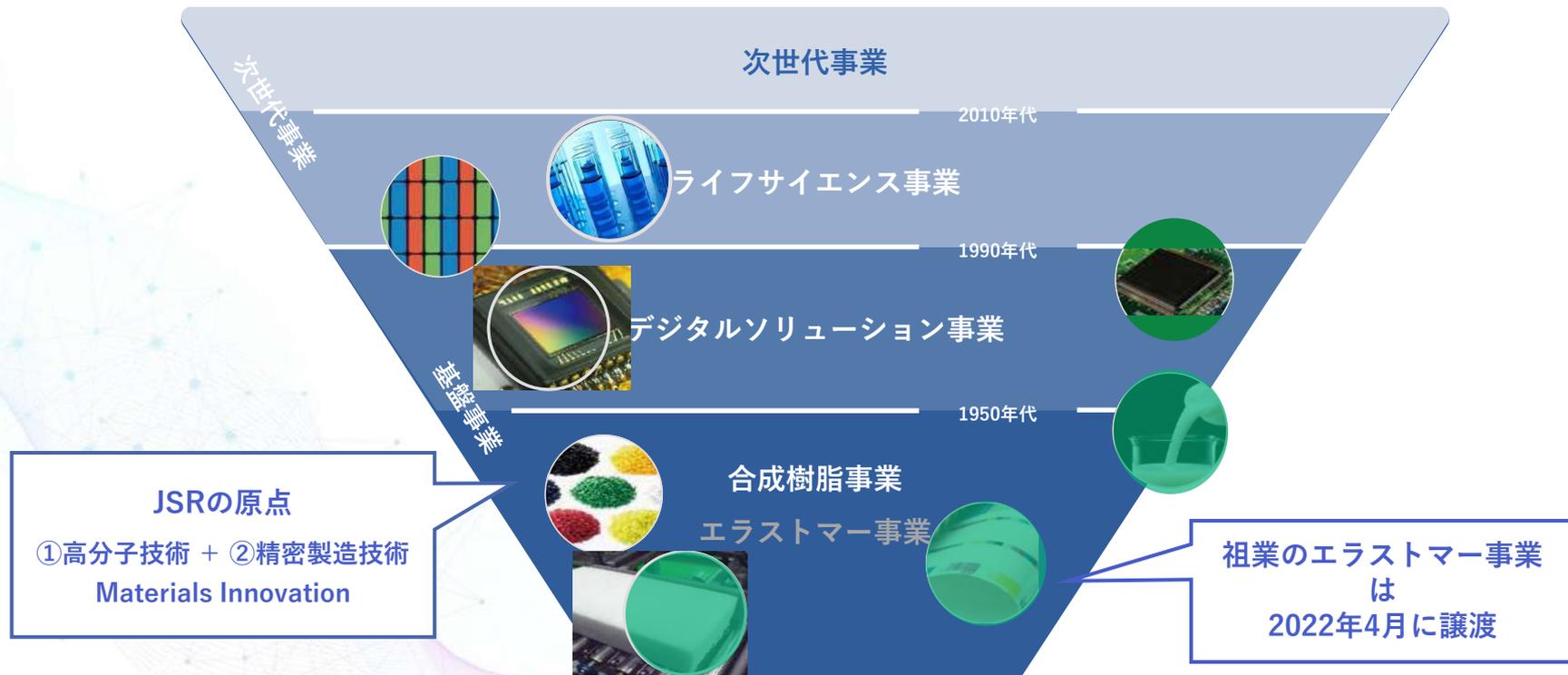
企業理念：Materials Innovation

JSRはBtoBのテクノロジーカンパニー
様々な所でJSRの「素材」が使われています



JSRの事業展開

創業時からの技術と経験を活かし、
多様化する社会のニーズに合わせ、常に新しい事業創出を繰り返してきました。

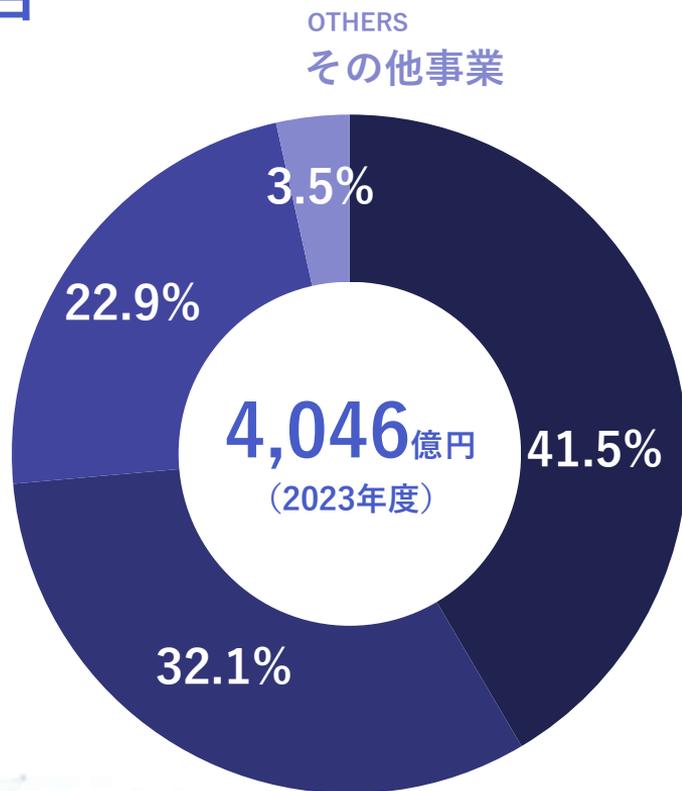


JSRの事業売上割合



海外売上率

60.4%



PLASTICS
合成樹脂事業
ABS樹脂 など



LIFE SCIENCES
ライフサイエンス事業

CDMO※1
CRO※2
診断薬材料
バイオプロセス材料



※1バイオ医薬品の開発・製造受託
※2医薬品の開発受託

DIGITAL SOLUTIONS
デジタルソリューション事業

半導体材料
ディスプレイ材料
エッジコンピューティング材料



自己紹介

大西 裕也

リサーチフェロー

JSR株式会社 RDテクノロジー・デジタル変革センター マテリアルズ・インフォマティクス推進室 次長

2009

Ph.D in Kyoto Univ.
Sakaki Group

遷移金属錯体による触媒反応の理論的研究と高精度計算の手法開発

2009-2011

Postdoctoral Researcher in UF & UIUC.
Hirata Group

周期系の高精度量子化学計算の手法開発

2011-2017

Postdoctoral Researcher & Assistant Professor in Kobe Univ.
Ten-no Group

高精度量子化学計算の手法開発と
大規模並列プログラムの実装

2017-

JSR Corporation

マテリアルズ・インフォマティクス手法の普及と
量子コンピュータに関する研究

専門：量子化学計算、物理化学、理論化学

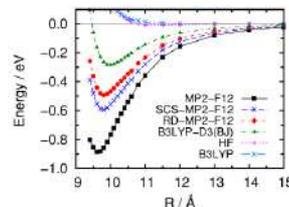
HPCと私



JCTC Journal of Chemical Theory and Computation
Article pubsacs.org/JCTC

Interaction Energy of Large Molecules from Restrained Denominator MP2-F12

Yu-ya Ohnishi,[†] Kazuya Ishimura,[‡] and Seichiro Ten-no^{*†}

HF, Selected MP2, and B3LYP-D3(BJ) methods

International Journal of QUANTUM CHEMISTRY

Software News and Updates

Massively parallel MP2-F12 calculations on the K computer

Yu-ya Ohnishi, Kazuya Ishimura, Seichiro Ten-no ✉

This numerical MP2-F12 program achieves more than 30% of the peak performance of the K computer and the calculation of C_{60} with aug-cc-pVTZ basis set finishes in less than 15 min using 8148 nodes (65,184 cores) of the K computer.

7月号 NO.7

TORRENT

10¹⁶が創り出す
新マテリアル

特集：CMSIの研究課題
重点研究代表者、特別支援領域代表者へ向く
重点研究員のプロフィール

第3回CMSIホスター賞



<https://torrent.cms-initiative.jp/backnumber/torrent7.html>

Fortran MPI/OpenMPプログラマー
をやっていました
コンパイルログを読んだり、
アセンブラを確認して、実行効率を
あげる余地を探す日々

重点研究代表者へ向く

電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と 分子論の新展開

執筆者：天後裕一郎、米取大博

重点研究代表者へ向く

重点研究員のプロフィール



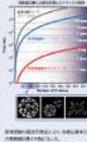
重点研究員のプロフィール

有機伝導体の結晶構造と分子間相互作用を 大規模計算で求める



大西哲也

重点研究員のプロフィール

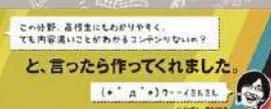


ハイサコ
ブツシツ
カガク

計算物質科学

この分野、高橋君にもわかりやすく、でも内容濃いことばかりです。どうやって勉強すればいい？

と、言ったら作ってくれました。



<https://torrent.cms-initiative.jp/index3858.html>

振り返ってみて思うこと

最先端のハードウェアを使いこなすためには、ハードウェア・ミドルウェアに対する知識が必要

京のときは、、、物理/論理トポロジー、キャッシュサイズ、SIMD幅、B/F、コンパイラの癖 etc...

可能であればユースケース（ソフトウェア）とハードウェアのコーデインができる嬉しい

実際には、ハードウェアのほうが制約が大きく更新が大変なので、ソフトウェア側で対応することになるが、それでもコーデインができる使いやすいものになると思う。

目的と手段の両方を縛りすぎると不幸なことになる

例) 「HPC/量子コンピュータを使って」「気候変動問題を解決」してくださいというPJは厳しい

技術研究者としては、目的が自由なのが一番ありがたいかも？

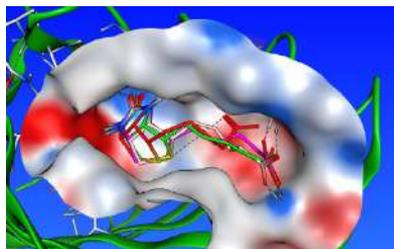
→ 「HPC/量子コンピュータを使って」何か新しいことをしてください。

目的が曖昧だとPJの後半に辛くなることはしばしば、、、

しかし、目的を後付けするのは絶対に避けるべき

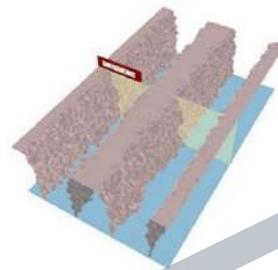
化学企業とコンピューテーション

Ligand-Protein Docking Simulation



From the website of MOLSIS Inc.

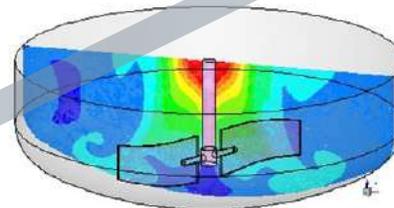
Lithography Simulation



From the website of Prolith

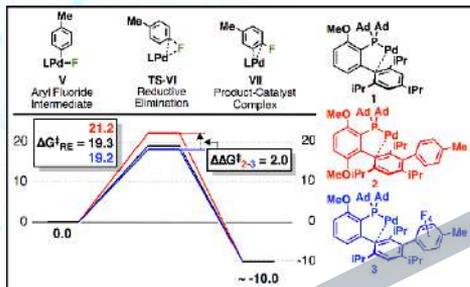
Plant Size

Fluid Simulation



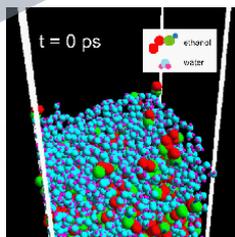
From the website of MicroWave Inc.

Mechanism of Catalytic Reaction



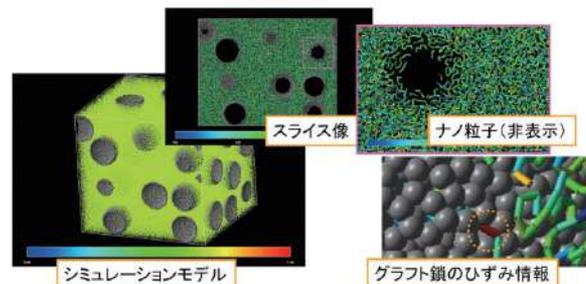
From the website of Schrödinger, Inc.

Adsorption Simulation



From the website of Yasuoka group in Keio Univ.

Structure Simulation of Elastomer



「ゴム中のナノ粒子ネットワーク構造のモデル構築による
高性能タイヤの開発」住友ゴム工業 地球シミュレータ報告書より

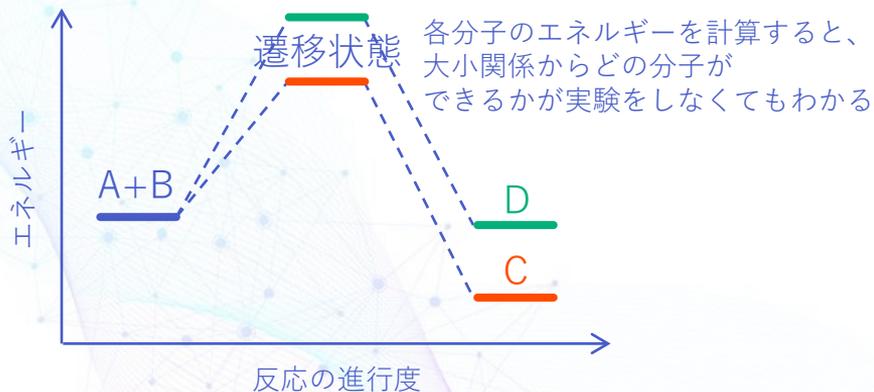
Molecular Size

量子化学計算のユースケース

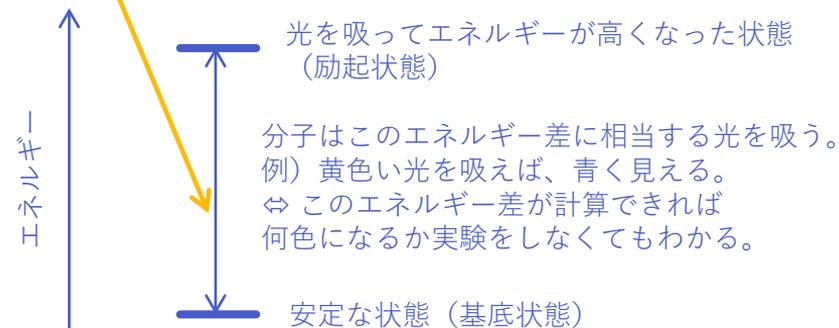
量子化学計算 = 材料のシミュレーションのうち、もっとも小さいサイズのシミュレーション
分子のあらゆる性質を「原理的には」予測可能。主に物質のエネルギーの算出に使われる。

材料開発現場での量子化学計算の実用例

反応経路探索



色素の設計

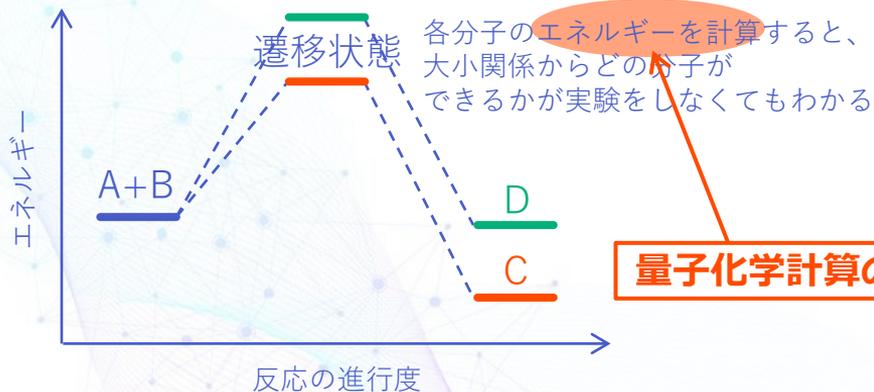


量子化学計算のユースケース

量子化学計算 = 材料のシミュレーションのうち、もっとも小さいサイズのシミュレーション
分子のあらゆる性質を「原理的には」予測可能。主に物質のエネルギーの算出に使われる。

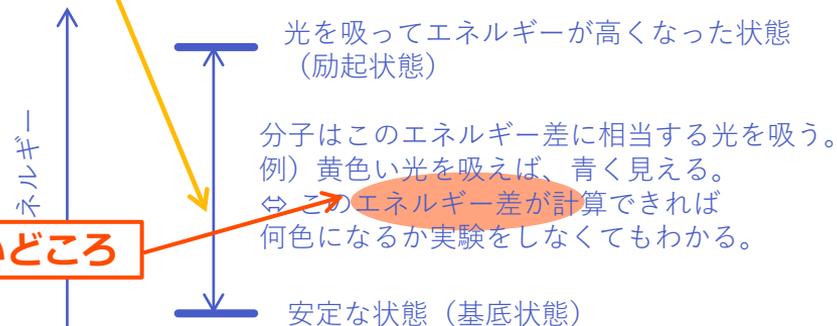
材料開発現場での量子化学計算の実用例

反応経路探索



量子化学計算の使いどころ

色素の設計

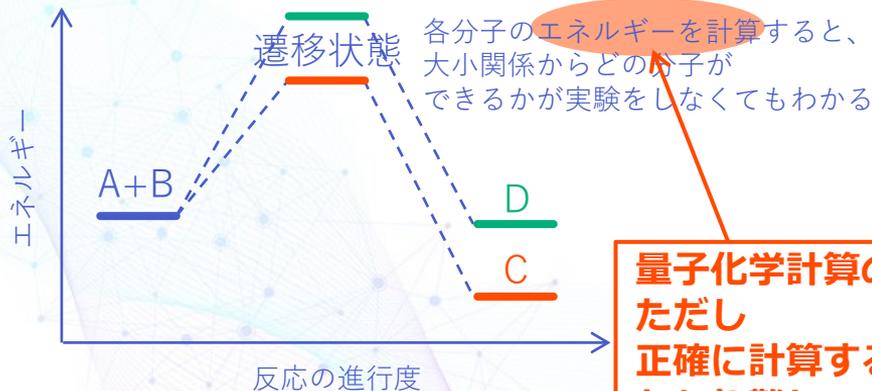


量子化学計算のユースケース

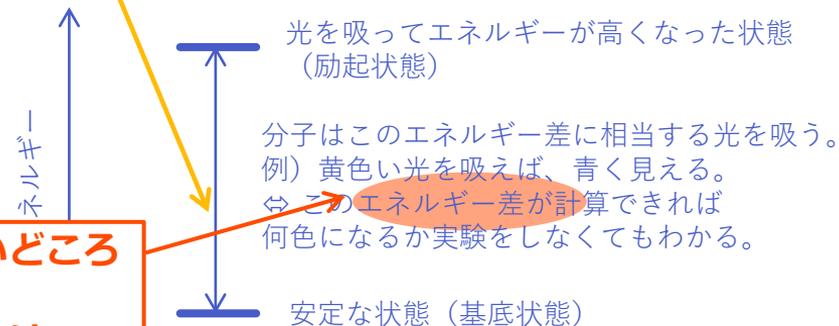
量子化学計算 = 材料のシミュレーションのうち、もっとも小さいサイズのシミュレーション
分子のあらゆる性質を「原理的には」予測可能。主に物質のエネルギーの算出に使われる。

材料開発現場での量子化学計算の実用例

反応経路探索



色素の設計

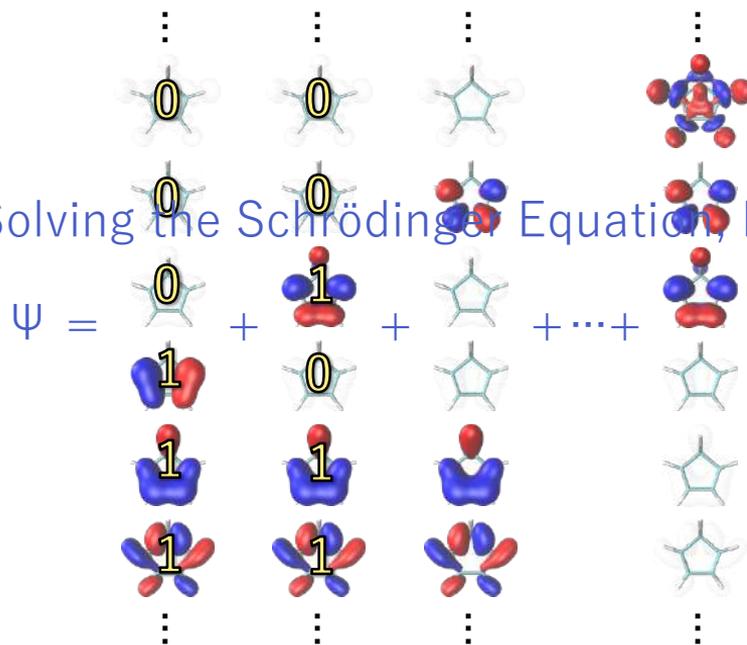


量子化学計算の使いどころ
ただし
正確に計算することは
かなり難しい

高精度量子化学計算の難しさ

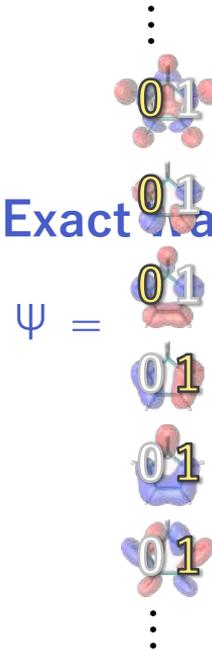
On Traditional Computer (FEC)

Solving the Schrödinger Equation, $H\Psi = E\Psi$, = Obtaining **Exact Wave Function Ψ**



Combinatorial Explosion \rightarrow Classical Hard

On Quantum Computer



Superposition \rightarrow Quantum Possible(?)

量子コンピュータでの量子化学計算で期待される領域

Accurate calculations of ...

light absorption

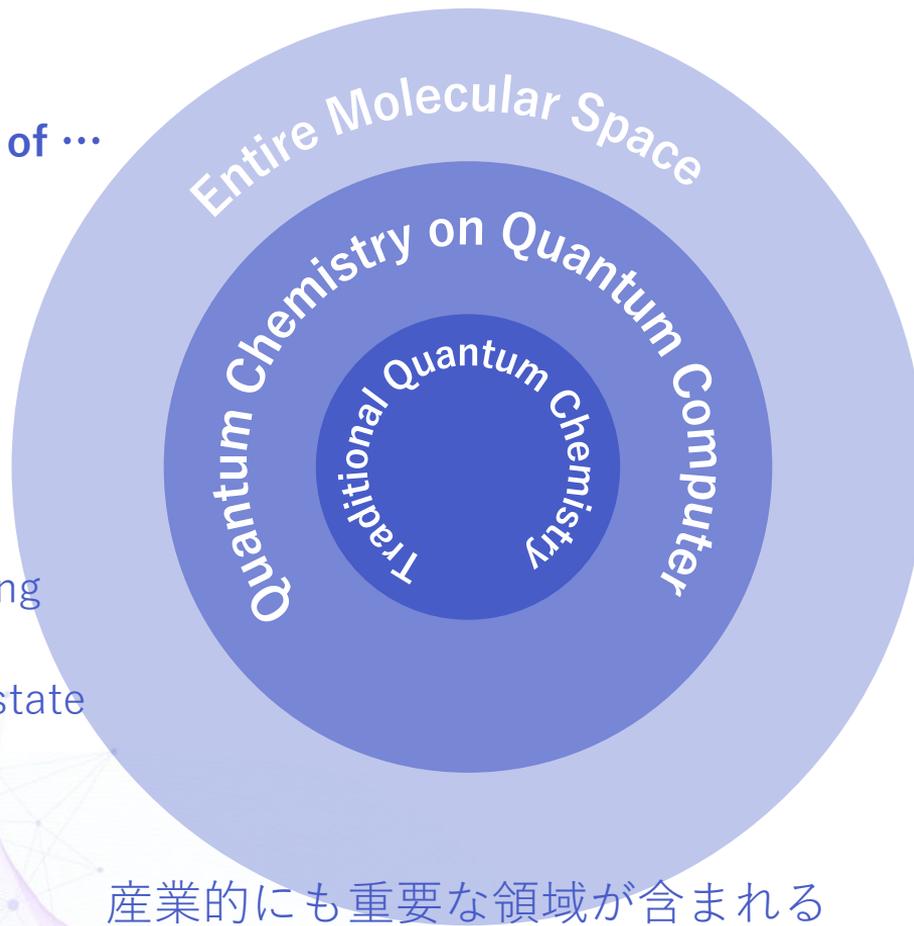
light emission

spin polarizability

multiple-bond breaking

complicated transition state

etc...



Applied to ...

solar energy conversion

light emitting devices

molecular magnets

metalloenzyme

oxidization

etc...

産業的にも重要な領域が含まれる

量子 x HPCによる定量的量子化学計算への展望と期待

量子 x HPCによる高精度量子化学計算への道は険しく、暗中模索はつづく

- HPCのみでの高精度量子化学計算を超えないといけない (?)
- 量子アルゴリズムのスケールアップ問題に正面から向き合う必要がでてくる
プリ/ポスト処理、サンプリング問題 etc...
- 量子アルゴリズム側の改善もまだまだ必要
初期波動関数をどうやって作るか、エラーの影響を受けにくい手法、実機トポロジー etc...

それでも量子 x HPCではじめて計算できる領域があってほしい

願わくば産業的にも意味がある課題で、、、

- Capability Computing: 大規模対角化、Capacity Computing: 並列処理による実時間短縮
- HPCプリプロセッシングによる良い初期波動関数の作成 etc...

整備された高速道路を走るだけではつまらない

荒地を開拓しながら進むことが破壊的イノベーションにつながる