

文部科学省

最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト
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

プロジェクトの今後の進め方について(案)
— 外部評価報告を受けて —

2008年7月23日

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの
研究開発拠点
(ナノ統合拠点)

内容

本提案書は、文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクトにおける次世代スパコン利活用の一環として推進している「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ーナノサイエンスグランドチャレンジ研究」に対して行った外部評価の評価報告における指摘、提言を受けて、ナノ統合拠点として取るべき本プロジェクトの今後の進め方について取りまとめたものである。

1. 開発された統合ソフトを用いて可能になるグランドチャレンジ課題の明確化について
2. 統合ソフトの開発について
3. 統合ソフトの将来的な運用について
4. 実験研究者、企業研究者との連携について
5. 人材育成について
6. 広報活動の強化について
7. 対応スケジュール



1. 開発された統合ソフトを用いて可能になる グランドチャレンジ課題の明確化について

- (1) 社会的要請が高くまたサイエンスとしても夢のあるチャレンジングなテーマ、シンボリックなテーマの設定

具体例:「セルロースからのエタノール製造」、
「ウイルスの克服」、「ナノデバイス設計」

分野外、専門家以外の人々、つまり一般の研究者、一般の国民にもわかりやすい説明資料を、今年度概算要求スケジュールに合わせ早急に作成していく。

同時に、ナノ分野の今日的な課題についても、後述するような実験研究者、企業研究者との連携も視野に入れながら検討を開始する。

例.「分子素子」、「燃料電池」、「DDS」、「固体表面・界面」、
「新材料」

未来社会へ向けた ナノ分野グランドチャレンジ課題

(1) 高速、高機能、省エネルギー電子デバイスの
開発へ

– 複合的ナノ電子デバイスシミュレーション

(2) 感染症の克服に向けて

– ウィルス全原子シミュレーション

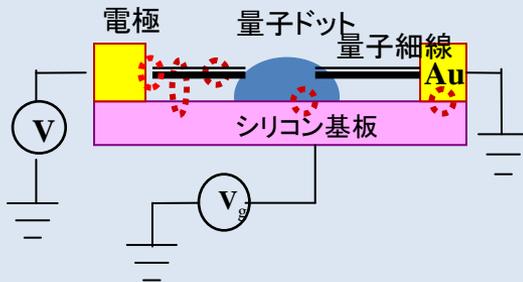
(3) セルロースからバイオマスエタノール生成へ

– 酵素反応のまるごと解析

(1) 高速、高機能、省エネルギー電子デバイスの開発へ

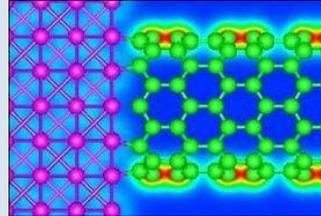
複合的ナノ電子デバイスシミュレーション

部品間の接合の解析が重要な課題。
ナノ電子デバイス全体、
10万原子系の電子状態計算が必要。

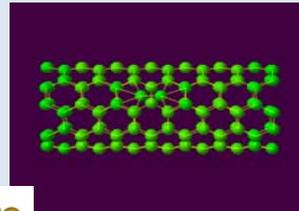


量子ドットの構造

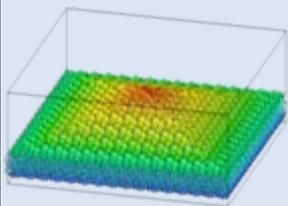
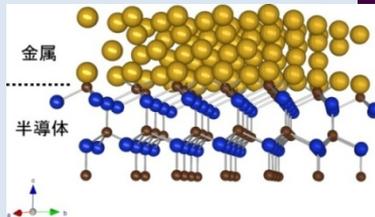
接合の簡単なモデル



量子細線と欠陥



金属半導体界面



☆次世代スパコン☆

ナノ電子デバイス全体
(10万原子系)の計算が
2ヶ月程度で可能
(実効性能1ペタフロップス)

↓
電子デバイスの高速応答
・高機能、省エネルギー、
環境負荷の低減を可能に。
新たなデバイス創製に寄与する。

現状

- 2千原子程度の複合系(量子細線と電極)の計算が可能
- 10万原子の系を扱うには800年(実現不可能)。
(実効性能 1テラフロップス)

中核アプリ: 実空間差分密度汎関数法 (HP-RSDFT)
付加機能ソフト: オーダー-N法、量子伝導計算、拡張アンサンブル法

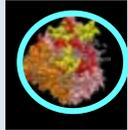
(2) 感染症の克服に向けて

ウイルス全原子シミュレーション

現状の研究

断片のひとつ

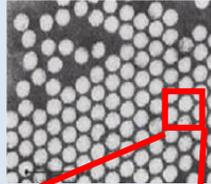
100,000原子



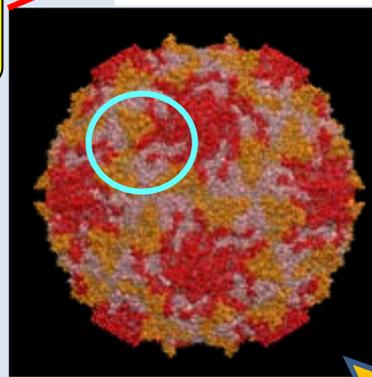
断片のタンパク質が
60個集まって1個の
ウイルスを構成

小児麻痺
ウイルス

"Medical Virology",
edited by D. O. White and
F. Fenner, Academic Press

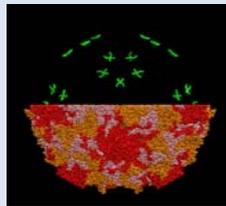


10,000,000原子



ウイルス全体1000万原子系の
分子動力学計算が必要

小児麻痺ウイルスのカプシド
(タンパク質でできたウイルスの殻)



ウイルスカプシドに吸収さ
れた抗ウイルス剤
(カプシド上部は透明にして表示)
PDF database

現状

1マイクロ秒の原子の動きをシミュ
レーションする: 500年(解析不可能)
(実効性能 0.5テラフロップス)

☆次世代スパコン☆

ウイルスと抗ウイルス剤の結合
による不活性化、抗体との特異
な相互作用の解析を実現。

1マイクロ秒の原子の動きを
シミュレーションする: 3ヶ月
(実効性能: 1ペタフロップス)

未克服のウイルスに対する
予防法と治療法の開発、しいては
創薬の効率化に寄与

中核アプリ: 高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
付加機能ソフト: 熱力学的積分法、拡張アンサンブル法等

1. 開発された統合ソフトを用いて可能になる グランドチャレンジ課題の明確化について

(2) この中で、特に若い人たちが次世代スパコンを使いたくなるよう、着実により一層アトラクティブな課題の提示に留意する。



(3) さらに、開発したソフトを用いて何ができるようになるのか、計算科学を企業における研究に取り込もうとするとき、経営者としての判断に資することのできる説明を行う。



2. 統合ソフトの開発について

- ・ 3年後の統合ソフトの完成へと至るマイルストーンを明示する。
- ・ 利用の観点から中核アプリのみならず組み合わされたソフトウェアによって何ができるようになるのか、何に役立つのかについてより具体的に示す。
- ・ 統合ソフトの全体構造については統合ソフトWGが調整しながら、個々のアプリは中核アプリ高度化WGが中心となって、より一層強力に開発を推進する。

(1) 中核アプリ

十分な高性能が期待、より一層の高度化
最適な開発計画を個別に設定、着実な開発

(2) 付加機能ソフト

多様なニーズへの対応、柔軟な開発

(3) 連携ツール

密結合GIANTへの注力
ペタスケール環境下での稼働

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

ナノ分野グランドチャレンジ課題

次世代ナノ情報機能・材料

次世代ナノ生体物質

次世代エネルギー

- ・ナノ分野グランドチャレンジをカバー
- ・ナノ分野計算科学の学術基盤の形成

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

連携ツール

疎結合GIANT

IGNITION

密結合GIANT

- ・電子・原子・分子から出発した最先端の理論・方法論
- ・高度並列化アルゴリズム、ソフトウェア
- ・任意のソフトの任意な結合・連成

主な付加機能ソフト

電子伝導、機能評価

第一原理量子輸送計算

量子伝導シミュレーション

非平衡グリーン関数

スピン流解析

光応答相転移

電子格子系時間発展計算

乱雑速度場法

磁気特性

厳密対角化

量子マスター方程式

磁気応答関数

動的平均場法

ループアルゴリズム

自己組織化・分子認識 (自由エネルギー計算)

熱力学積分法

粒子挿入法

エネルギー表示法

摂動法

overlapping distribution法

プロトン移動(量子化)

経路積分法

量子古典混合法

電子移動反応 酵素・触媒反応

溶媒和自由エネルギー計算

二次のMøller-Plesset摂動法

配置間相互作用法

一般化ランジェバンダイナミクス

非線形分光理論

フラグメント分子軌道法

Surface-Hopping法

効率的サンプリング

マルチカノニカル法

レプリカ交換法

実空間
第一原理
ナノ物質
シミュレータ

動的
密度行列
繰り込み群法

大規模並列
量子
モンテカルロ法

高並列汎用
分子動力学
シミュレーション
ソフト

RISM/
3D-RISM

高速
量子化学
計算ソフト

中核アプリケーション

方法論開発・超並列化によりペタフロップス級性能を実現

3. 統合ソフトの将来的な運用について

(1) プロジェクト終了後も持続性を持ってソフトを維持、管理、改訂、公開していくことのできる仕組みを確立するために取るべき方策、特に拠点の果たすべき役割については運営委員会等で十分に検討し、速やかに文科省に提言する。

(2) 特に、将来の産業界へのバトンタッチに際しては、産業側が主体性を持って研究を推進していく体制が必要であるが、その際にも、学術的、方法論的に企業研究者を継続的に支援する。

(3) なお、必ずしも計算科学の専門家でない研究者がある程度の簡単なトレーニングで利用できるインターフェースについては、統合ソフトWGを中心に十分に検討し、早急に提案する。一方で、不特定多数の一般技術者による利用は本プロジェクトの対象外ではあるが、拠点として行うべき協力等については運営委員会等で議論し、提案する。



4. 実験研究者、企業研究者との連携について

計算科学においては実験との連携が不可欠であり、プロジェクトとしての実験研究者との連携の仕組みを分子科学WG, 物性科学WGに確立し、強化する。

また、産業との連携も不可欠であり、将来のプロジェクト成果の企業における研究への展開も視野に入れつつ、上記WGを中心に、産業応用協議会等と連絡を取りながらより一層の連携、協力体制を強化しつつあるところである。

- (1) 統合ソフト講習会の開催
- (2) 連続研究会の開催
- (3) アプリケーション実証研究
- (4) ナノ統合産学連携プログラム

4. 実験研究者、企業研究者との連携について

(1) 統合ソフト講習会

中核アプリ、主な付加機能ソフト、連携ツール等

(2) 連続研究会

実験研究者、企業研究者、計算科学研究者の共同討議

今年後半より、専門家による少人数で実施

テーマ例:分子エレクトロニクス、DDS、燃料電池等



(3) アプリケーション実証研究 — 実験研究者との共同研究

緊急に解決すべき重要課題の設定

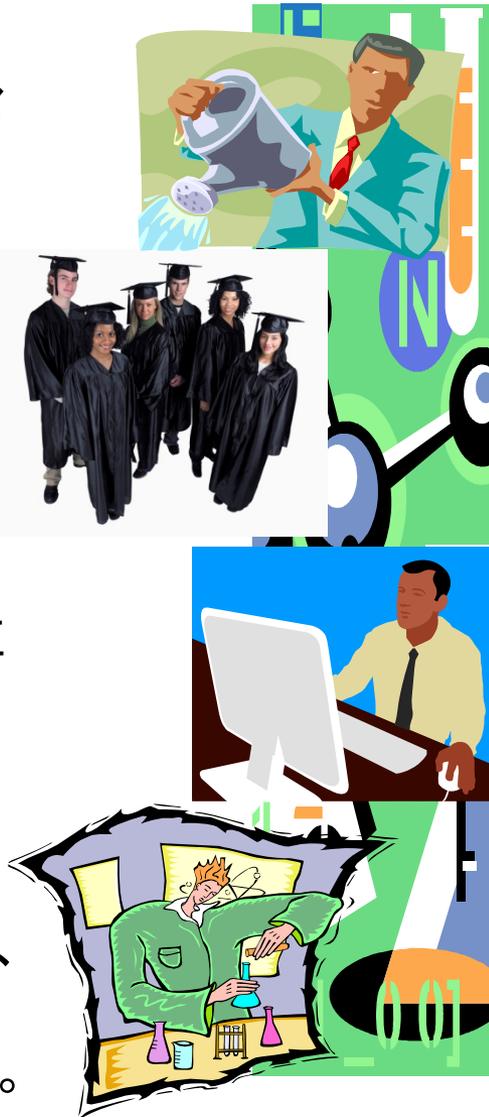
今年度、2～3課題を先行実施、来年度より公募

(4) 産学連携ナノ統合プログラム — 企業との共同研究

研究成果の企業研究への普及、利用促進をはかるため継続実施、公募

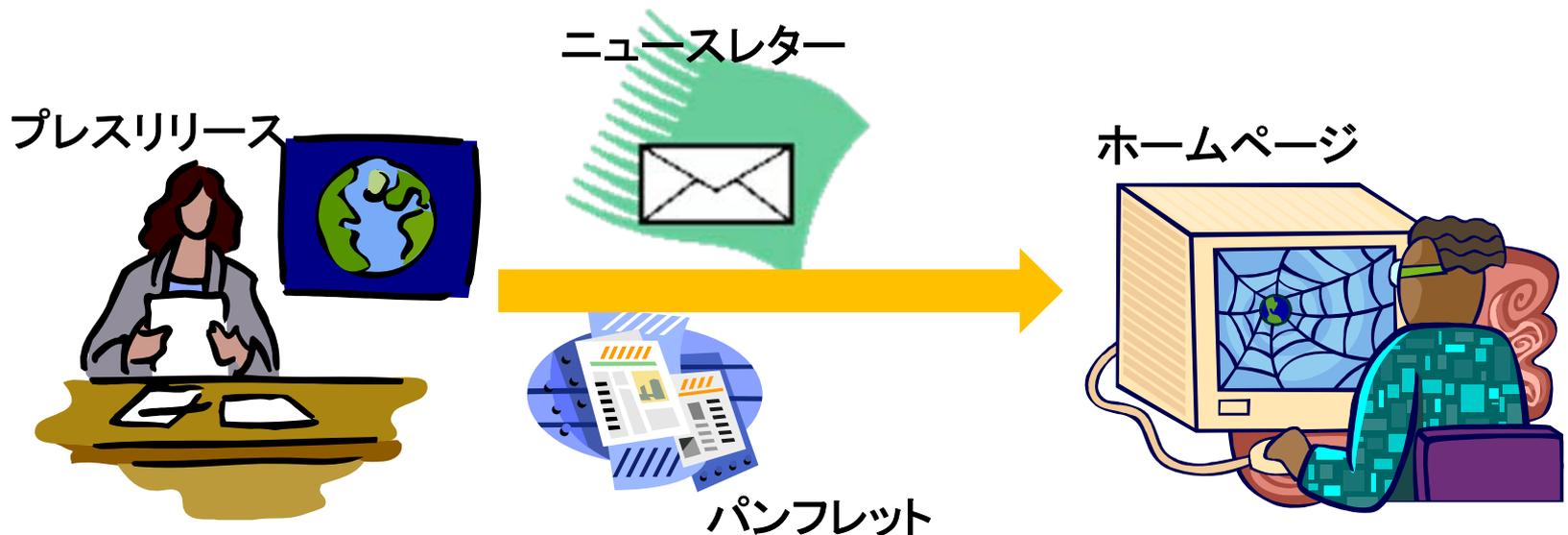
5. 人材育成について

- (1) 若手の育成は特に重要であり、大学と協力しながら、ナノ統合拠点としてより一層強化する。具体的には、ポスドクの計算科学分野へ定着を一層促進するという観点から、プロジェクト終了後の追跡調査も含めてさらに対応を充実させていく。
- (2) また、計算科学研究者とシステムの間位置する技術者、技術職員は計算科学の発展、普及において不可欠な存在であり、極めて高い計算工学、情報工学的能力を有する技術者の育成についてもより一層の注力を行う。
- (3) 一方で、計算科学研究者に限らず、実験研究者等の周辺も含めたナノサイエンス分野全体の研究者のレベルアップに貢献できるよう、たとえば上述した研究会、講習会、また共同研究等を通して、計算科学を自身の研究の一環として使いこなせる実験研究者を育成する。



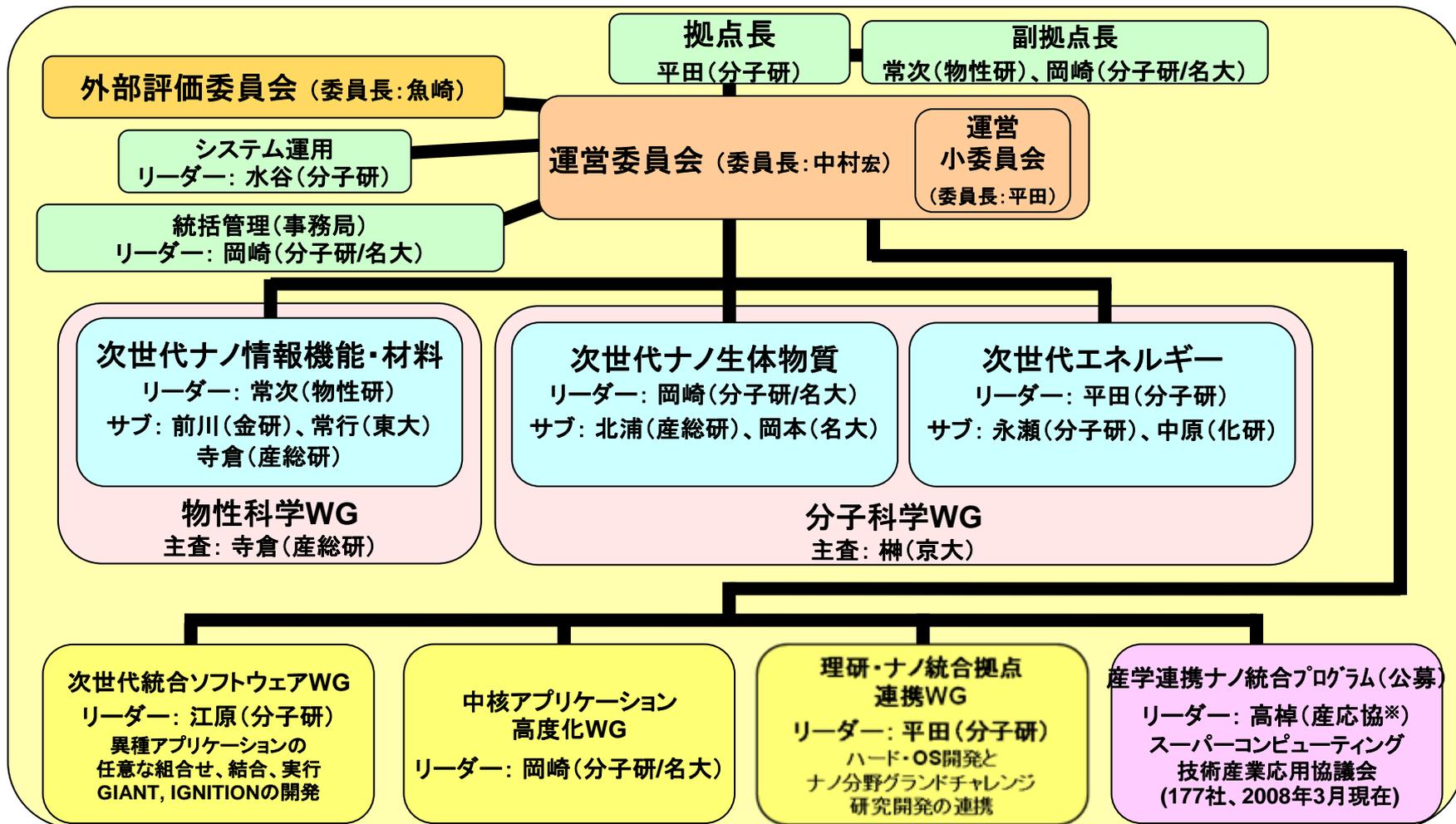
6. 広報活動の強化について

若手の育成、産業への普及、また国民への周知という面からも、拠点に広報組織を確立し、強力な支援体制の下に重点的に取り組んでいく。特に、より広い分野やより多くの研究者層への普及を目的に、プロジェクト外の研究者でもいつでも情報にアクセスできるような体制を、ホームページ等を活用しながら確立する。また、電子メールを用いたニュースレターによる広報をさらに強化し、プロジェクト内の情報の共有、プロジェクト参加者の認識の共通化を一層促進する。



プロジェクト推進体制の整備

外部性の確保、連携の強化



7. 対応スケジュール

項番	対応策	現状	2008年度	2009年度	2010年度	2011年度
1.	開発された統合ソフトを用いて可能になるグランドチャレンジ課題の明確化について					
	シンボリックな将来的なテーマ	対応中	課題明確化、資料作成			
	今日的な課題	検討中	調査	研究会で検討		
2.	統合ソフトの開発について	継続中	開発・高度化			
3.	統合ソフトの将来的な運用について	今後	提言			
4.	実験研究者、企業研究者との連携について					
	(1) 統合ソフト講習会の開催	企画検討中	企画		講習会開催	
	(2) 連続研究会の開催	企画検討中	企画	研究会		
	(3) アプリケーション実証研究	今後	先行		実証研究	
	(4) ナノ統合産学連携プログラム	継続中				
5.	人材育成について	継続中				
6.	広報活動の強化について	強化済み	★			