

研究開発課題の事後評価結果 (案)

【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】

平年 25 年 1 月

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に係る

事後評価検討会 構成員名簿

	氏名	所属・職名
主査	榊 裕之	豊田工業大学 学長
主査代理	魚崎 浩平	(独)物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス拠点 コーディネータ
	栗原 和枝	東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授
	小池 康博	慶應義塾大学 理工学部 教授
	志賀 昭信	ルモックス技研 主宰
	高尾 正敏	大阪大学 特任教授
	塚田 捷	東北大学 特任教授
	樋渡 保秋	金沢大学 名誉教授

「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」

1. 課題実施期間及び評価時期

平成18年度～平成23年度

(中間評価:平成20年度に実施)

2. 研究開発概要・目的

ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性について、ペタフロップス超級最先端・高性能汎用スーパーコンピュータを利用することにより解析、予測することが可能となる計算科学理論・方法論を確立するとともに、そのためのソフトウェアの開発を行う。これにより、ナノテクノロジー・材料分野はもとより、ライフサイエンス分野やエネルギー分野等との融合領域も対象とし、飛躍知の発見・発明及び産業力の強化につなげることを目的とする。

具体的には、以下の三つのグランドチャレンジアプリケーションの開発（（１）～（３））及びこれらに共通する項目（（４））に係る開発等を行う。

（１）次世代ナノ情報機能・材料

次世代情報化社会に必要とされる新たな原理による超高集積回路、光・電流等に対する超高速応答素子、さらには超高密度磁気記憶素子に対する計算科学的開発基盤の確立を目指して、

- ① 超高集積デバイス、高強度情報材料等の次世代ナノ複合材料
- ② 新機能スピントロニクス材料、光スイッチ等の次世代ナノ電子材料
- ③ 超高密度磁気記録デバイス等の次世代ナノ磁性材料

等の次世代ナノ情報機能・材料について、その探索、設計を可能とする理論を構築し、実空間密度汎関数法、密度行列繰り込み群法や量子・古典モンテカルロ法を中心とした計算手法の高速化を探るとともに、シミュレーションソフトウェアの開発を行う。

（２）次世代ナノ生体物質

生命現象が示す多様な階層構造の中で、分子スケールの生体物質が携わるナノプロセスを解明し、難病の克服、創薬、ドラッグデリバリー等バイオ分野の課題解決に資するため、生体物質にかかわる計算科学のナノ基盤を確立する。このため、タンパク質、イオンチャンネル高度シミュレーション技術の確立、ウイルスの分子科学、がん細胞の細胞膜、生体物質輸送のナノプロセス、新規ナノ生体物質の創製等、次世代ナノ生体物質にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行う。

（３）次世代エネルギー

化石燃料からの脱却を目指して、アルコール燃料サイクルの確立、燃料電池、光触媒や光合成による太陽エネルギーの固定、スーパーキャパシタの開発、高効率物質変換等の課題を解決するために、ペタフロップス超級スーパーコンピュータを活用する高精度・大規模量子化学計算、統計力学計算を

中軸として、分子動力学法等とも連携した次世代エネルギー技術にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行う。

(4) 共通項目

次世代ナノアプリケーション連携ツール：開発された多様なアプリケーションソフトを、プログラムに変更を加えることなく任意に組み合わせ、これを容易に連携・結合し、効率的に実行するための疎結合型の連携ツールの開発を行う。

① システム運用（平成18年度～平成20年度）

平成15年度に導入された実証研究用スーパーコンピュータにグリッドミドルウェア等を導入し、グリッド環境を整備し、運用する。また、システムの効率的な運用を実現するために、ハードやソフトの構成から利用ルール等にいたるまで、実際のナノシミュレーションに即して、実運用レベルでの最適化を行う。

② 次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用（平成21年度～平成23年度）

本プロジェクトで開発されたソフトウェアを統合した次世代ナノ統合ソフトウェアの開発と管理運用を行う。

3. 研究開発の必要性等

【必要性】

ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性を解明するシミュレーション技術を確立し、次世代情報機能・材料分野、次世代生体物質分野、次世代エネルギー分野、及びこれらの融合領域において、飛躍知の発見・発明にとどまらず、産業力の強化をもたらすことが求められている。その実現のために、超並列プロセッサを組み込んだペタフロップス規模の次世代スーパーコンピュータ性能をフル発揮することを目標とした、超並列処理を効率よく利用することを可能とする計算科学の新しいアルゴリズム開発や方法論の研究開発が必要である。

【有効性】

本プロジェクトは、次世代情報機能・材料分野では、超高密実装を実現するナノ電子デバイス、光スイッチ、磁気記録など、次世代生体物質分野では、ウィルスの克服、ドラッグデリバリーシステム、タンパク質制御など、次世代エネルギー分野では、バイオマスからのエタノール生成などの実現に活用できる計算科学の確立を研究開発の目標としており、これらを通じて、我が国の産業競争力や豊かな未来社会の実現に貢献するものである。

【効率性】

従来にない設計思想である超並列コンピュータに適合するソフトウェアの構築を効率的に実行するために、先行事業である超高速コンピューター網形成プロジェクトの中で実施されてきた、ナノテクノロジー分野の計算科学に資するソフトウェア開発成果を継承し、その中から最終的に六つの中核アプリケーションと、これらと連携する38の付加機能ソフトウェアを抽出し、開発に取り組むこととしている。さらに、これらのアプリケーションを連携して運用するために二つの連携ツールの開発に取り組むこととし、これらは全て開発完了時には公開とし、速やかに成果を社会還元する体制を構築することとしている。

4. 予算(執行額)の変遷

プロジェクト予算(執行額)額(単位:百万円)

年度	H18	H19	H20	H21	H22	H23	総額
執行額	496.0	650.5	612.7	594.0	369.5	288.0	3,010.7
内訳 (間接経費含)	分子研 東大 東北大 産総研	分子研 東大 東北大 産総研	分子研 東大 京大 東北大 名大 産総研	分子研 東大 京大 東北大 名大	分子研 東大 京大 名大	分子研 東大 京大 名大	分子研 東大 京大 東北大 名大 産総研

5. 課題実施機関・体制

研究代表者: 平田 文男

研究機関: 自然科学研究機構 分子科学研究所

業務項目	担当機関等	研究担当者
(1)次世代ナノ情報機能・材料	東京大学 物性研究所 理学系研究科 京都大学(H20~H23) 東北大学(H18~H21) 産業技術総合研究所(H18~H20)	○高山 一(H18) ○常次 宏一(H19~H20) 川島 直輝(H21~H23) ○常行 真司(H21~H23) 遠山 貴己(H20~H23) 前川 禎通(H18~H21) 寺倉 清之(H18~H20)
(2)次世代ナノ生体物質	分子科学研究所 名古屋大学(H20~H23)	平田 文男 ○岡崎 進
(3)次世代エネルギー	分子科学研究所	○平田 文男
(4)課題共通・統括管理	分子科学研究所 名古屋大学(H20~H23)	◎平田 文男 ○岡崎 進

◎課題代表者、○サブテーマ代表者

事後評価票

1. 課題名 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

2. 評価結果

(1) 課題の進捗状況

ナノテクノロジー分野及びその融合領域を対象としたグランドチャレンジアプリケーションの開発において、以下のとおり、6本の中核アプリケーションが開発され、次世代ナノ材料の解析やナノ生体物質の挙動のシミュレーション等でその有効性が示されるとともに、38本の付加機能ソフト及び2本の連携ツールが開発された。

① 次世代ナノ情報機能・材料

中核アプリ：「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT)」、「動的密度行列繰り込み群法 (DDMRG)」、「大規模並列量子モンテカルロ法 (ALPS/looper)」

付加機能ソフト：20本

② 次世代ナノ生体物質

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-Modylas-」、「高速量子化学計算ソフト (FM0/MP2)」(③との共同開発)

付加機能ソフト：6本 (うち1本は、③と共通)

③ 次世代エネルギー

中核アプリ：「液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM」、「高速量子化学計算ソフト (FM0/MP2)」(②との共同開発)

付加機能ソフト：13本 (うち1本は、②と共通)

中間評価における指摘事項に対しては、おおむね必要な対応がなされている。その中で、実験研究者、企業研究者との連携については、これらの研究者及び計算科学者を含む「連続研究会」を実施するなど評価される取組がなされているが、その結果が実際の研究に反映されるまでには至っておらず、今後の課題である。

(2) 研究成果の評価と今後の研究開発の方向性

次世代コンピュータは、従来の計算機とは全く異なる超並列プロセッサであり、これを効率よく利用する超並列処理を可能とする計算科学の新しい方法論やアルゴリズム開発が必要とされてきた。本プロジェクトではこの課題を十分に解決して、特に「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT)」(ゴードン・ベル賞最高性能賞を受賞) や「液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM」など、中核アプリケーションの高度化を中心に卓越した成果が達成された。

なお、現時点で完成とされているソフトウェアについても、今後更なる改良や最適化に努めることが重要である。また、本プロジェクトの成果を大きな経済的・社会的波及効果につなげる上で、開発されたソフトウェアを活用した研究開発課題の目標設定を計算科学者主導ではなく、実際に産業界や実験科学者が抱えている大きな課題の解決につなげるという観点から行うべきである。

(3) 今後の展望

プロジェクトで開発されたソフトウェアをより多くの研究者が活用できるようにするためには、優れた中核アプリケーションに加えて、それらの付加機能ソフト、連携ツール、ユーザーインターフェースなどを更に整備するとともに、ソフトウェアの利用に係る専門的サポートや情報発信等の利用促進に係る取組を充実させていくことが重要である。

「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」
事後評価報告書

1. 代表者（機関名）

平田 文男（自然科学研究機構 分子科学研究所、当時）

2. 課題の概要

次世代スパコンプロジェクトは我が国が IT 分野における国際的なリーダーシップを確保するために「旗艦」的コンピュータを構築し、それを下方展開することによって我が国に強固な IT インフラを整備することを目指す国家プロジェクトである。また、このプロジェクトの目的は単に「巨大なマシン」を構築することにとどまらず、同時に、我が国の計算科学における新しいパラダイムの創出を目指すものである。計算科学はこれまでも物質設計や地球環境などの分野で重要な役割を果たし、社会の技術基盤のひとつとして確固たる基盤を築きつつある。とりわけ、物質や生体分子の様々な機能が発現するナノスケールの現象をターゲットとする計算科学は 21 世紀の産業や医療を担うべき「知的ものづくり」の技術基盤としておおきな期待を集めている。

以上の観点から我々は本プロジェクトのナノ分野におけるグランドチャレンジ研究課題として、下記の 3 つの課題を設定した。

- (1) 次世代ナノ情報機能・材料：ナノ物質内の電子制御をシミュレートできる方法論を確立する。
- (2) 次世代ナノ生体物質：ナノスケールの生体物質に対して、自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化、また動的な振るまいを、シミュレートできる方法論を確立する。
- (3) 次世代エネルギー：化石燃料からの脱却を目指して、アルコール燃料サイクルの確立、燃料電池、光触媒や光合成による太陽エネルギーの固定等の課題を解決するために高効率の触媒・酵素の設計ができる方法論を確立する。

これらの研究課題は国の「重点推進 4 分野」の中において重要な技術・課題として位置付けられていることから明らかなように、21 世紀の「知的ものづくり」や難病の克服や創薬、化石燃料や原子力に代わる恒久的エネルギー源の確立、など産業・医療の技術基盤を確立する上で本質的であるばかりでなく、人類の存立基盤そのものにも関わる重要課題であり、「グランドチャレンジ課題」と呼ぶにふさわしいターゲットである。

上記のグランドチャレンジ課題は、伝統的な理論化学・物理の視点からも極めて挑戦的な課題である。それはナノスケールの現象が電子・原子レベルのミクロな現象から熱力学・流体力学・電磁気学が関わるマクロな現象を含む多階層の物理から成り立っているからである。それは、量子力学、統計力学、分子シミュレーションなどの理論・計算科学的方法論にとって、これまでの枠組みを大幅に越えること無くして決して達成し得ない研究課題であり、ただ、単に計算機の性能が飛躍的に向上すれば解決するという種類の問題ではなく、物理・化学における新しい理論・方法論の創出を要求している。同時に、「次世代コンピュータ」は従来の常識をはるかに超えるノード数からなる超パラレルプロセッサであり、プログラムの高並列化を始めとする「計算機科学」上のイノベーションをも要求している。

「ナノ統合拠点」は上記の三つのグランドチャレンジ課題を解決するために必要な理論・方法論およびプログラムの開発を進めた。我々が開発した「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア」は 3 つの階層構造から成り立っている。

- ・中核アプリ：ナノ分野の研究にとって基本的な量子力学、統計力学、分子シミュレーションに関する 6 本のアプリケーション。
- ・付加機能ソフト：上記 6 本のアプリケーションを様々な組み合わせで、マルチスケール・マルチフィジックス問題を解決したり、構造探索を効果的に行なうなどの目的に対応するプログラム群。

- ・連携ツール：「中核アプリ」と「付加機能ソフト」をシームレスに連結するためのツール群および蛋白質一次配列情報やポテンシャルパラメタなどの初期インプット情報を生成するためのプログラム。

我々は本プロジェクトにおいてこれらの課題に挑戦する上で必要な新しい理論や計算科学的方法論あるいは計算プログラムを構築し、そのことを通じて次世代スパコンプロジェクトの成功に貢献することを企図した。次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの構成を Fig.1 に示す。

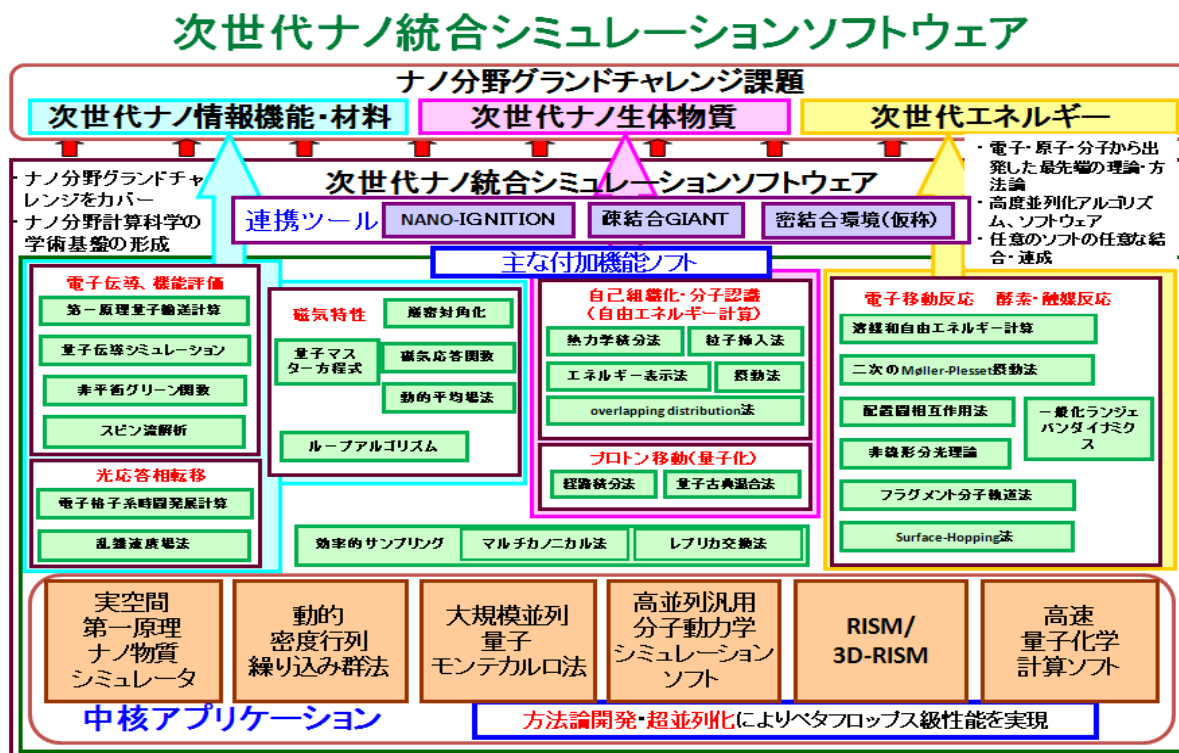


Fig.1 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの構成

上記のナノ統合ソフトの研究開発を進めると同時に、既存計算機環境において、その実証研究を進めた。

3. 研究開発目標

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

次世代情報化社会に必要なとされる新たな原理による超高集積回路や光、電流等に対する超高速応答素子、さらに超高密度磁気記憶素子に対する計算科学的開発基盤の確立を目指し、

- ① 超高集積デバイス、高強度情報材料等の次世代ナノ複合材料
- ② 新機能スピントロニクス材料、光スイッチ等の次世代ナノ電子材料
- ③ 超高密度磁気記録デバイス等の次世代ナノ磁性材料

など次世代ナノ情報機能・材料の探索、設計を可能とする理論の構築、および、実空間密度汎関数法、密度行列繰り込み群法や量子・古典モンテカルロ法を中心とした計算手法の高速化を探るとともに、シミュレーションソフトウェアの開発を行う。

中核アプリ：「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT)」、「動的密度行列繰り込み群法 (DDMRG)」、「大規模並列量子モンテカルロ法 (ALPS/looper)」

(2) 次世代ナノ生体物質

生命現象が示す多様な階層構造の中で、分子スケールの生体物質が携わるナノプロセスを解明し、難病の克服、創薬、ドラッグデリバリー等バイオ分野の課題解決に資するため、生体物質にかかわる計算科学のナノ基盤を確立する。このため、タンパク質、イオンチャンネル高度シミュレーション技術の確立、ウイルスの分子科学、がん細胞の細胞膜、生体物質輸送のナノプロセス、新規ナノ生体物質の創製等、次世代ナノ生体物質に

かかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行う。

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(modylas)」、「高速量子化学計算ソフト(FMO/MP2)」(次世代エネルギーとの共同開発)

(3) 次世代エネルギー

化石燃料からの脱却を目指して、アルコール燃料サイクルの確立、燃料電池、光触媒や光合成による太陽エネルギーの固定、スーパーキャパシタの開発、高効率物質変換等の課題を解決するために、ペタフロップス超スーパーコンピュータを活用する高精度・大規模量子化学計算、統計力学計算を中軸として、分子動力学法等とも連携した次世代エネルギー技術にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行う。

中核アプリ：「液体の統計力学理論計算(RISM/3D-RISM)」、「高速量子化学計算ソフト(FMO/MP2)」(次世代ナノ生体物質との共同開発)

(4) 課題共通・統括管理

次世代ナノアプリケーション連携ツール：開発された多様なアプリケーションソフトを、プログラムに変更を加えることなく任意に組み合わせ、これを容易に連携、結合し、効率的に実行するための疎結合型の連携ツールの開発を行う(連携ツール：2本)。

システム運用(平成18年度から平成20年度)：平成15年度に導入された実証研究用スーパーコンピュータにグリッドミドルウェア等を導入し、グリッド環境を整備し、運用する。また、システムの効率的な運用を実現するために、ハードやソフトの構成から利用ルール等にいたるまで、実際のナノシミュレーションに即して、実運用レベルでの最適化を行う。

次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用(平成21年度から)：本プロジェクトで開発されたソフトウェアを統合した次世代ナノ統合ソフトウェアの開発と管理運用を行う。上記の他、統括管理として、研究管理、分担調整、知的所有権、公募、情報交換、広報等の業務を行う。

中核アプリケーション6本の概要をTable. 1に示す。

Table 1. 中核アプリケーションの概要

中核アプリケーション名	責任者氏名	概要
実空間第一原理 ナノ物質 シミュレータ	押山 淳 (東大工)	10nm 以下の素子を利用した次世代エレクトロニクスのデバイス開発。 10万原子系を扱える電子状態計算と効率的位相空間探索プログラム。
動的密度行列 繰り込み群法	遠山 貴巳 (京大基研)	電子の強い相関効果に起因する光照射量子現象の解明。 動的に拡張された密度行列繰り込み群法。
大規模並列量子 モンテカルロ法	藤堂 眞治 (東大物性研)	ナノ磁性体や電子系などの量子格子モデルのシミュレーション。 並列化された量子モンテカルロ法、厳密対角化法などのプログラム。
高並列汎用 分子動力学 シミュレーションソフト	岡崎 進 (名大工/分子研)	1000万原子系の巨大システムや自由エネルギーの計算。 長距離力を考慮した高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト。
RISM/3D-RISM	平田 文男 (分子研)	蛋白質などナノ分子の水和構造や水合自由エネルギーの計算。 分子の分布関数に関する積分方程式理論。
高速量子化学 計算ソフト	永瀬 茂 (分子研) 北浦 和夫 (産総研/神戸大)	電子相関を取り組んだ超巨大分子の電子状態計算。 FMO法に基づいた高精度高速大規模量子化学並列計算。

4. 研究体制

研究体制を以下の Fig. 2 に示す。

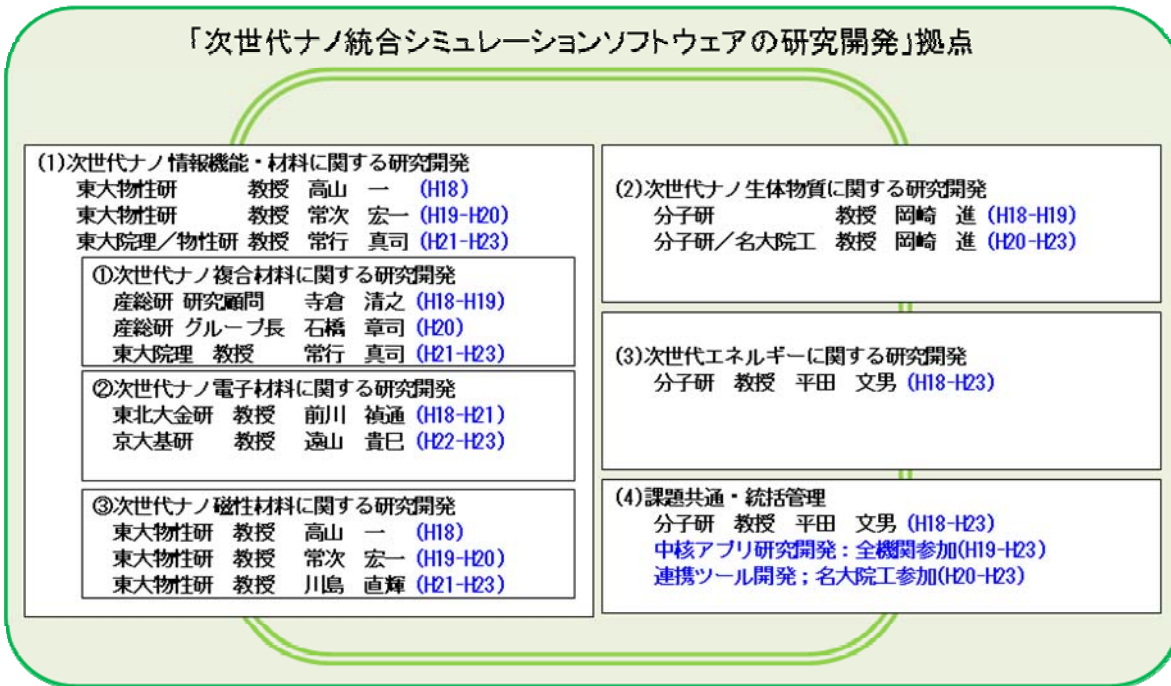


Fig. 2 研究開発体制

注. (H18-H23)等は担当年度を示す。所属・職名は当時のもの

尚、リーダー、サブリーダー研究者の異動などに伴い、以下のように業務委託契約対象機関を変更した。

(1)次世代ナノ情報機能・材料

東大物性研→東大院理、平成21年度から

①次世代ナノ複合材料

産総研→東大院理、平成21年度から

②次世代ナノ電子材料

東北大金研→京大基研、平成22年度から

(2)次世代ナノ生体物質

分子研→分子研及び名大院工、平成20年度から

5. 課題の達成状況等

(1) 研究開発計画 (当初)

項 目	平成 18 年度	平成 19 年度	平成 20 年度	平成 21 年度	平成 22 年度
1. 次世代ナノ 情報機能・材料	・分析・解析 ・計画策定 ・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・ソフト評価 (*)	・研究開発 ・ソフト評価 (*)	・研究開発 ・ソフト評価 (*)
2. 次世代ナノ 生体物質	・分析・解析 ・計画策定 ・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・ソフト評価 (*)	・研究開発 ・ソフト評価 (*)	・研究開発 ・ソフト評価 (*)
3. 次世代エネ ルギー	・分析・解析 ・計画策定 ・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・ソフト評価 (*)	・研究開発 ・ソフト評価 (*)	・研究開発 ・ソフト評価 (*)
4. 課題共通・ 統括管理	・連携ツール 開発 ・グリッド [®] 導 入・運用 ・統括管理	・連携ツール 開発 ・グリッド [®] 運用 ・統括管理	・連携ツール 開発 ・グリッド [®] 運用 及び開発環境 (*) 運用 ・統括管理	・連携ツール 開発 ・グリッド [®] 運用 及び開発環境 (*) 運用 ・統括管理	・連携ツール 開発 ・グリッド [®] 運用 及び開発環境 (*) 運用 ・統括管理
所要経費	4 9 6	5 0 0	5 0 0	5 0 0	5 0 0

所要経費 (百万円)

* : 合計 10 テラ FLOPS のスパコンシステムを用いる。

(2) 研究開発実績

項目	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度	平成23年度①
1. 次世代ナノ情報機能・材料	・分析・解析 ・計画策定 ・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・NAREGI 実証 ・中核アプリ高度化②	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究③	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究
情報機能・材料 ①複合材料 ②電子材料 ③磁性材料	【物性研】 【産総研】 【金研】 【物性研】	【物性研】 【産総研】 【金研】 【物性研】	【物性研】 【産総研】 【金研】 【物性研】	【東大院理】 【東大院理】 【金研】 【物性研】	【東大院理】 【東大院理】 【京大基研】 【物性研】	【東大院理】 【東大院理】 【京大基研】 【物性研】
2. 次世代ナノ生体物質	・分析・解析 ・計画策定 ・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・NAREGI 実証 ・中核アプリ高度化②	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究③	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究
【分子研】	【分子研】	【分子研】	【分子研】 【名大院工】	【分子研】 【名大院工】	【分子研】 【名大院工】	【分子研】 【名大院工】
3. 次世代エネルギー	・分析・解析 ・計画策定 ・研究開発 ・NAREGI 実証	・研究開発 ・NAREGI 実証 ・中核アプリ高度化②	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究③	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究	・研究開発 ・中核アプリ高度化 ・連続研究会、アプリ実証研究
【分子研】	【分子研】	【分子研】	【分子研】	【分子研】	【分子研】	【分子研】
4. 課題共通・統括管理	・連携ツール開発 【分子研】 ・グリッド [®] 導入・運用 【分子研】 ・統括管理 【分子研】	・連携ツール開発 【分子研】 ・グリッド [®] 運用 【分子研】 ・統括管理 【分子研】	・連携ツール開発 【名大院工】 【分子研】 ・開発環境運用④ 【分子研】 ・統括管理 【分子研】	・連携ツール開発 【名大院工】 【分子研】 ・ソフト管理運用⑤ 【分子研】 ・統括管理 【分子研】	・連携ツール開発 【名大院工】 【分子研】 ・ソフト管理運用 【分子研】 ・統括管理 【分子研】	・連携ツール動作確認 【名大院工】 【分子研】 ・ソフト管理運用 【分子研】 ・統括管理 【分子研】
所要経費	496	651	613	414	370	288

【】は担当機関を示す。

所要経費（百万円）

・ 事業開始当初の研究開発目標

①プロジェクトの完了時期が、次世代スパコンの開発計画の確定に合わせて、H23年度末までに変更された（H19年度）。

・ 事業開始当初の研究開発計画

②当初、このプロジェクト外で行う予定であった中核アプリの高度化（高並列化・チューニング）

を、プロジェクト内で行うことになった (H19年度から)。

③中間評価の結果、実験研究者、企業研究者との連携を強化し、連続研究会で重要課題を抽出し、アプリケーション実証研究を行うことになった。(H20年度から)。

④「システム運用」は、NAREGI プロジェクト (H15年度から H17年度) で導入したマシンが老朽化したため、H20年度末で設備を廃却し、終了した。その後は、外部計算機 (筑波大 T2K、京大 T2K、名大 FX1) を利用して研究開発を行った。

⑤H21年度からは「次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用」として、ナノ統合ソフト公開のためのポータル(PAL)の開発を継続するとともに、公開に向けた環境整備を開始した。

(3) 目標達成状況

研究開発項目	達成状況
1. 次世代ナノ情報機能・材料	<p>次世代情報化社会に必要なとされる新たな原理による超高集積回路や光、電流等に対する超高速応答素子、さらに超高密度磁気記憶素子に対する計算科学的開発基盤の確立を目指し、① 超高集積デバイス、高強度情報材料等の次世代ナノ複合材料、② 新機能スピントロニクス材料、光スイッチ等の次世代ナノ電子材料、③ 超高密度磁気記録デバイス等の次世代ナノ磁性材料など次世代ナノ情報機能・材料の探索、設計を可能とする理論の構築、および、実空間密度汎関数法、密度行列繰り込み群法や量子・古典モンテカルロ法を中心とした計算手法の高速化を探るとともに、シミュレーションソフトウェアの開発を行い、目標を達成した。</p> <p>中核アプリ：「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT)」、「動的密度行列繰り込み群法 (DDMRG)」、「大規模並列量子モンテカルロ法 (ALPS/looper)」</p> <p>付加機能ソフト：20本</p> <p>HP-RSDFTは2011年11月米国で開催されたハイ・パフォーマンス・コンピューティング (高性能計算技術) に関する国際会議SC2011において、最高の荣誉であるゴードン・ベル賞最高性能賞を受賞した。</p>
2. 次世代ナノ生体物質	<p>生命現象が示す多様な階層構造の中で、分子スケールの生体物質が携わるナノプロセスを解明し、難病の克服、創薬、ドラッグデリバリー等バイオ分野の課題解決に資するため、生体物質にかかわる計算科学のナノ基盤を確立した。このため、タンパク質、イオンチャンネル高度シミュレーション技術の確立、ウイルスの分子科学、がん細胞の細胞膜、生体物質輸送のナノプロセス、新規ナノ生体物質の創製等、次世代ナノ生体物質にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行った。これらにより目標を達成した。</p> <p>中核アプリ：「液体の統計力学理論計算RISM/3D-RISM」、「高速量子化学計算ソフト (FM0/MP2)」（次世代エネルギーとの共同開発）</p> <p>付加機能ソフト：13本（1本、次世代エネルギーと共通）</p>
3. 次世代エネルギー	<p>化石燃料からの脱却を目指して、アルコール燃料サイクルの確立、燃料電池、光触媒や光合成による太陽エネルギーの固定、スーパーキャパシタの開発、高効率物質変換等の課題を解決するために、ペタフロップス超スーパーコンピュータを活用する高精度・大規模量子化学計算、統計力学計算を中軸として、分子動力学法等とも連携した次世代エネルギー技術にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行い、目標を達成した。</p> <p>中核アプリ：「液体の統計力学理論計算RISM/3D-RISM」、「高速量子化学計算ソフト (FM0/MP2)」（次世代ナノ生体物質との共同開発）</p> <p>付加機能ソフト：13本（1本、次世代生体物質と共通）</p>

4. 課題共通・統括管理	<p>次世代ナノアプリケーション連携ツール：開発された多様なアプリケーションソフトを、プログラムに変更を加えることなく任意に組み合わせ、これを容易に連携、結合し、効率的に実行するための疎結合型の連携ツール（2本）の開発を行行い、目標を達成した。各プログラムを結合する GIANT 及び原子分子の初期配置を発生させる NANO-IGNITION を公開した。</p> <p>システム運用（平成18年度から平成20年度）：平成15年度に導入された実証研究用スーパーコンピュータにグリッドミドルウェア等を導入し、グリッド環境を整備し、運用した。また、システムの効率的な運用を実現するために、ハードやソフトの構成から利用ルール等にいたるまで、実際のナノシミュレーションに即して、実運用レベルでの最適化を行った。これらにより当初3年間の目標を達成した。</p> <p>次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用（平成21年度から）：本プロジェクトで開発されたソフトウェアを統合した次世代ナノ統合ソフトウェアの開発と管理運用を行い目標を達成した。公開のためのポータルサイト PAL を開発し、管理規約、公開用ライセンスのひな型を用意し、ナノ統合ソフトの公開を実現した。</p> <p>上記の他、統括管理として、研究管理、分担調整、知的所有権、公募、情報交換、広報等の業務を行行い、目標を達成した。</p>
--------------	--

(4) 中間評価指摘事項への対応

中間評価指摘事項	対応
1. 開発された統合ソフトで可能になるグランドチャレンジ課題の明確化	<ul style="list-style-type: none"> ・今日的な課題への対応：分子素子、燃料電池、元素戦略など具体的な課題設定を行った。 ・具体的な例として、複合的ナノ電子デバイスシミュレーション、ウイルス全原子シミュレーション、酵素まるごと解析をプロジェクト紹介パンフレットにも記載した。
2. 統合ソフト開発の一層の推進	<ul style="list-style-type: none"> ・中核アプリについては高度化WGを設置し、理研、筑波大学及び富士通（業務委託）の計算科学の専門家と共同で高度化を推進した。 ・京の試験利用開始前においても、10000 コア並列の実行環境を利用して超並列化の準備を行った。
3. 統合ソフトの将来的な運用体制の整備	<ul style="list-style-type: none"> ・公開する仕組みとしてポータル(PAL)を開発整備し、標準的なライセンス契約ひな型も整備し、公開した。 ・現状、戦略機関における戦略課題研究に活用されている。 ・民間企業への利用も図るため、計算科学振興財団(FOCUS)とも契約を締結した（平成24年度）。
4. 実験研究者、企業研究者との連携	<ul style="list-style-type: none"> ・統合ソフト講習会・連続研究会を平成20年度後半より順次開催した。特に連続研究会は、通算21回開催し、実験研究者、企業研究者との連携が実現した。 ・統合ソフトの実証研究として、アプリケーション実証研究を、平成20年度から開始し、27件の実証研究を行った。 ・企業での普及・利用を図るためナノ統合産学連携プログラムを推進し、通算21社27件の研究が行われた。
5. 人材育成の推進	<ul style="list-style-type: none"> ・計算科学と 計算機科学(計算機活用の基礎理論)の学際連携と人材育成を中核アプリ高度化WGを通じて推進した。 ・計算科学を自身の研究に活用できる実験研究者の育成を研究会、講習会、統合ソフトの実証を通じて推進した。 ・ポスドク62名は、アカデミックへ就職25名、民間企業へ就職4名、海外へ8名、残りが他予算のポスドク等に異動。

6. 広報活動の強化	<ul style="list-style-type: none"> 平成20年度、広報要員として民間企業からの出向者2名を採用し、ホームページでの情報提供、パンフレットの作成（和文、英文）、産業界との情報交流を強化した。 統合ソフト説明会、ソフト講習会を実施し、国民向けのプロジェクト紹介ビデオを作成し配布した。
7. 開かれた視点に立った取り組み	<ul style="list-style-type: none"> 平成20年度に、ノーベル賞受賞者2名を含む26名を海外から招聘し、国際シンポジウムを東京で開催し、最新情報と意見を交換した。 研究員として、留学生も受入れて研究開発を推進した。 英語ホームページも整備した。

(5) 研究開発成果

プロジェクト全体としての成果：以下のソフトを開発し公開。また、アプリ実証研究を実施した。

↓課題グループ	次世代ナノ統合ソフトウェア		アプリ実証研究	
	中核アプリ	付加機能ソフト	通算	H23年度 (内数)
(1) 次世代ナノ情報機能・材料	3本	20本	10件	5件
(2) 次世代ナノ生体物質	2本(*1)	6本(*2)	8件	7件
(3) 次世代エネルギー	2本(*1)	13本(*2)	9件	4件
	連携ツール			
(4) 課題共通・統括管理	2本			
合計	46本		27件	16件

*1: 1本は、次世代ナノ生体物質と次世代エネルギーの共同開発。

*2: 1本は、次世代ナノ生体物質と次世代エネルギーとの間で共通。

1) 次世代ナノ情報機能・材料

1～10万原子からなる半導体デバイスの第一原理電子状態計算をめざして、実空間差分法による密度汎関数法プログラム HP-RSDFT の開発、高度化を実施し、55,296 ノードを用いて実行性能 3.08PFLOPS (理論ピーク性能比 44%) の世界最高性能を実現した。2011年度の Gordon Bell Prize (Peak Performance) を受賞した。

同じく本研究で開発、高度化を行った強相関電子系モデルの光学応答計算を可能にする動的密度行列くりこみ群法プログラム DDMRG は、12288 ノードで理論性能比 27.09%、量子スピン系のシミュレーション手法であるループアルゴリズムのプログラム ALPS/looper は 24576 ノードで対 12288 ノード比 98.66%の並列性能と整数演算性能 0.164PIPS (理論ピーク性能比 10.4%)を実現した。スピン軌道相互作用を含む高精度第一原理電子状態計算を実現する QMAS、1000 原子程度の高速度第一原理電子状態計算が可能な OpenMX など、中核アプリを補う特徴的機能を持った付加機能ソフトと合わせ、開発されたソフトは高速デバイスや省エネデバイスなど、これまでにない新しいデバイスや材料の開発、その基礎研究に有用であると期待される。

2) 次世代ナノ生体物質

ウイルスの分子科学の展開を目指して、modylas ならびに FM0/MP2 の開発を行い、前者では 65,536 ノードで目標である理論ピーク性能比 10%、1 Pflops を大幅に上回る 41.1%、3.45 Pflops を達成し、

1,000万原子系で1ステップ5msの全原子MDシミュレーションを実現、後者では24,576ノードを用い、約24,000原子系に対して11分の実用的な計算速度の全電子計算を実現した。また、付加機能ソフトにおいてはREM(レプリカ交換法)、ermod(エネルギー表示分布関数理論)等のソフト開発を行い、ナノ生体物質に対して電子状態から全原子運動に至るまでの自由エネルギーレベルでの計算科学研究を可能とした。これにより、ウイルスカプシドやタンパク質、細胞膜、界面活性剤、またDDS等の飛躍的な展開が期待される。

3) 次世代エネルギー

高効率セルロース分解酵素の設計を目指して、3D-RISM法の超高並列化(10000ノード)を実現し、セルロース-酵素複合体中の水分子(加水分解反応の中間体)を同定することに成功した。また、3D-RISMとQM/MM法(量子化学)の連成計算、および3D-RISMと分子動力(MD)を結合する新たな付加機能ソフトを開発した。さらに、酸化チタンなどの固体表面の電子状態を解析する分割統治量子化学計算プログラムの並列化を行い94パーセント(36→72ノード)の並列化効率を達成した。また、MDと量子化学を組み合わせ界面和周波発生(SFG)分光を解析する新しい手法を開発した。これらは、酵素反応や電極界面での化学反応を追跡する上で、強力な武器となることが期待される。

4) 課題共通・統括管理

次世代ナノアプリケーション連携ツールとして、連携ツール(NANO-IGINATION、GIANT)を開発し、公開した。

システム運用として、グリッドβ版ソフトウェアを導入し、グリッド環境を実現・運用した。

次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用として、ナノ統合ソフト公開のためのポータルPALを開発し、ナノ統合ソフト46本の公開を実現した。また、京の試験利用開始前、筑波大の協力も得て、10000コア並列の実行環境を構築・運用し、超並列化の準備を可能とし、京の試験利用期間中は、理研における限られた座席の有効利用と情報共有に努めた。

統括管理として、研究管理、分担調整、知的所有権、公募、情報交換、広報などを行い、プロジェクト紹介ビデオを作成した。

(6) 独創性・優位性について

現在、いわゆるペタフロップス級コンピュータ・プロジェクトとしては、わが国以外に米国および中国が挙げられるが、その中で、「ナノ科学」分野のアプリケーション開発をグランドチャレンジャーゲットとして明確に掲げているのは、我が国と米国(BlueWatersプロジェクト)である。したがって、ここでは、BlueWatersプロジェクトとの比較において、本研究開発の「独創性」および「優位性」を記述する。

[独創性] 国際的に我が国から「発信」し、それ故に「独創的」であると同時に、本研究開発を通じてその「国際的優位性」を確固たるものとしたアプリケーションとしては「3D-RISM法」(開発者:平田)および「動的密度行列繰り込み群法」(開発者:遠山)が挙げられる。平田は自らが開発した「3D-RISM法」を蛋白質やDNAなどの「生体ナノ分子」の溶媒和の問題に応用し、創薬を含む「分子認識」を解決する理論的武器を与えると同時に、筑波大学計算科学研究センターとの共同研究により、「3D-RISM法」の核となる3D-FFTの高並列化(10000ノード)を達成した。これは、3D-FFTに関する現在の国際的なスタンダード(~100コア)を遥かに超える並列化である。遠山は自らが開発した「動的密度行列繰り

込み群法」により、これまで不可能であった、格子振動まで含めた 16 電子系のハバードモデルの非線形光学応答の計算を可能にした。

また、フラグメント分子軌道 (FMO)法は、北浦らが発案した方法であり、高速量子化学計算ソフト (FMO/MP2) は巨大分子の全系量子化学計算法として数ある類似法の中でも実用面で世界で最先端にある。特に、並列計算の規模では比較すべき類似法がないほど突出している。FMO 計算プログラムとしては、ABINIT-MP (東大・生研) が地球シミュレータで高速計算の実績をあげているが、我々は並列度において約 5 倍の規模を達成し、先行している。

加えて、分子動力学シミュレーションの「付加機能ソフト」として開発した「レプリカ交換法」(岡本) および「エネルギー表示法」(松林) は、その独自性において注目に値する。「レプリカ交換法」は蛋白質構造空間の探索範囲を飛躍的に拡大し、生命科学諸分野における分子シミュレーション手法のスタンダードとしての位置を確立した。また、「エネルギー表示法」は MD のトラジェクトリから溶媒和自由エネルギーを高速に求める手法として、国際的な注目を集めつつある。

[優位性] 本プロジェクトを通じて、ペタフロップス級の超高並列化を達成し、プログラムの性能の点で国際的に絶対的優位性を確立したアプリケーションとしては「実空間密度汎関数法 (HP-RSDFT)」(押山) および「分子動力学シミュレーション (MODYLAS)」(岡崎) が挙げられる。押山は筑波大学(計算科学研究センター) 及び理研との共同研究により、大規模並列化に適した実空間差分法と高速化アルゴリズムを用いることにより、オーダーN 法等の近似を用いずに、世界にも類のない 10,000 原子を超える系の第一原理電子状態計算を実現した (H24 年度ゴードン・ベル賞最高性能賞受賞)。また、岡崎は粒子間のクーロン相互作用の計算に宇宙科学で開発されたアルゴリズムを導入することにより、分子動力学における、現在、世界最速の計算速度を達成している。これは、BlueWaters プロジェクトにおける類似のプログラムに比して、長距離力の計算のためのプログラムの 10 倍の演算速度を達成している。

加えて、大規模並列量子モンテカルロ法(ALPS/looper) も、新しい基礎理論に基づき先例のない大規模ハイブリッド並列ソフトウェアを作成し、数千~数万並列規模の並列計算で京コンピュータの性能を引き出すことに成功した。

6. 研究成果の発表状況 (本課題で得られた成果と一部本課題を利用して得られた成果を分けて記載のこと)

<主として本課題で得られた成果>

(1) 研究発表件数

査読付き論文: 1, 887 件

査読無し論文等:

口頭発表: 3, 536 件 (国内: 1, 888 件、国際: 1, 648 件)

(2) 知的財産権等出願件数(出願中含む)

0 件 (*1)

(3) 受賞等

82 件 (国内: 61 件、国際: 21 件)

* 1. 公開のための著作権確認と公開ポリシーの策定を行った。

1) 著作権確認について

弁護士に相談して以下のように行う方針を定めた。

①各プログラムについて管理責任者を決め、著作権者全員から管理責任者に公開の方法・条件を委託する。

②各管理責任者から拠点長宛てに、著作権者から委任を受けた旨の報告を貰う。

2) 公開ポリシーについて

- 国家プロジェクトとあり、成果の公開が要請されていること。
- 最先端の研究であり、研究のクレジットを尊重すること。

これらの2点のバランスを取るため、公開の条件については統一せず、各管理責任者が自由に決定することにした。オープンソースなどで公開する場合を除いて、公開のためライセンスのひな型を作成した。その中で標準的な選択条件として、以下を挙げて、管理責任者が自由に選択できる様式とした。

- ①事前相談、②引用・謝辞、③論文共著、④使用禁止（悪意利用）

これらについては、公開用ポータルサイト PAL 上で各プログラムについて確認することを可能としている。

<成果の利用について>

ナノ統合で開発されたプログラムは以下で活用されている。

利用場所	利用状況	備考
HPCI 戦略分野 2	46 本中 33 本	必要な研究開発も継続
京 戦略利用課題	優先課題	2 課題
	重点課題	全 7 課題
京 一般利用課題	アカデミック	5 課題
	産業利用	4 課題
京を除く HPCI 利用課題	7 課題	
分子研、東大物性研、東北大金研	必要に応じて利用予定	
計算科学振興財団	当初 4 本をインストール予定	

<問い合わせ状況>

	利用中・利用予定（共同研究を含む）	引き合い（単なる問い合わせを含む）
アカデミック	41	29
産業	18	10
合計	59	39

注. 産業の業界としては、電機、化学、製薬、鉄鋼、自動車、電力。

また、あるソフトでは、上記とは別に、公開サイトでのダウンロードが 2012 年 2 月からで約 100 回あったが、同じユーザが繰り返しダウンロードしている可能性があるため、上記には含めていない。

7. 今後の展望と課題

本研究開発で設定した 3 つの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）は、とりもなおさず、医療や環境・エネルギーなど、現在、人類が直面している課題である。これらの課題解決に対して本研究開発成果が如何に利活用されるか、その可能性について述べる。尚、本プロジェクトで開発されたソフトウェア群は、HPCI 戦略プログラム分野 2 戦略機関「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)」を通じて、国内の計算物質科学コミュニティでの利活用と継

続的な機能強化が進められている。

(1) 次世代ナノ情報機能・材料

半導体デバイスにおける微細加工技術の進歩に伴い、CPUに代表される電子デバイスの性能はムーアの法則に従って向上を続けてきた。ところが国際半導体ロードマップ (ITRS) も指摘するように、線幅 22nm を切るポストスケーリング時代においては先端デバイス開発を裏打ちする科学的成果が枯渇し、デバイス開発は大きな困難に直面している。本研究で開発されてきた計算手法は、10,000 原子を超える系の第一原理計算を実現することによって、量子干渉効果の顕著なナノ構造デバイスの特性解析や設計支援を可能にし (HP-RSDFT)、また強相関電子系の光応答特性を利用した新しい光学デバイスや量子効果を駆使した磁気デバイスの基礎物理を確立することで (DDMRG, ALPS/looper)、高速デバイスや省エネデバイスなど、これまでにない新しいデバイスの開発につながるであろう。また QMAS や OpenMX など中核アプリを補う数多くの付加機能ソフトにより、情報産業分野にとどまらない広い分野で、電子論に基づいた (無機) 材料の設計開発に貢献できると期待される。

(2) 次世代ナノ生体物質

細胞膜やタンパク質、そしてその複合体であるウイルスなどナノ生体物質の分子論的理解と、これらに關与する薬剤など様々な分子との相互作用の設計、制御は医療、創薬の物質的基盤であり、それを担う計算科学的研究手法の確立は我が国の将来にとって不可欠なものとなっている。対象とする系は数十万原子から 1,000 万原子を越える大規模系であり、このような大規模系を取り扱い得る分子動力学計算や量子化学計算、そして統計力学に基づいたさまざまな理論計算の開発は我々に要求された急務であった。本研究で開発されてきた中核アプリである高並列汎用分子動力学計算ソフト modylas、大規模量子化学計算 FMO/MP2、そして自由エネルギー計算で力を発揮する付加機能ソフトの ermod や REM は、京コンピュータを用いて十分性能を発揮できるものであり、上述の研究を行う計算科学的基盤となりつつある。特にウイルスなどの巨大系に対する分子動力学シミュレーションを可能とした modylas は、世界でも最高の性能を有し、今後も大いに高度化、高機能化が望まれている共通基盤のソフトである。ここで開発したこれらのソフトを用いて、単にナノ生体物質にとどまらず、分子機能と物質変換、そしてエネルギーなどの広範な分野において実験研究者との協働を可能にしながら計算科学が強力なパワーを発揮し、産業応用にも大きく貢献できるものと期待される。

(3) 次世代エネルギー

人類が直面している環境・エネルギー問題を解決する鍵は太陽エネルギーの固定 (太陽光発電、光触媒)、変換 (燃料電池、セルロース分解)、貯蔵 (二次電池)、および利用技術を確立することである。これらのプロセスの本質は電子の化学ポテンシャルの変化であるが、その多くのプロセスにおいて「水」が深い関わりをもっており、水と他の物質 (電極や蛋白質など) との界面における化学過程を解析することが重要な課題となる。これらのプロセスにはミクロからマクロに至る様々な階層の物理が関わっており、単一の理論・方法でこれを解くことはできない。本プロジェクトで開発した 6 本の「中核ソフト」およびそれらを「付加機能ソフト」により有機的に結合することにより、これらのプロセスの設計が可能になると考える。ここでは、その一例として、セルロース分解酵素の知的設計に対する応用を展望する。

酵素によるセルロース分解反応は大きく、(1) 酵素-基質 (セルロース+水) 複合体の形成 (分子認識) および (2) 酵素内の化学反応 (電子状態変化) から成る。過程 (1) に関しては本プロジェクトで開発した中核ソフト 3D-RISM と MODYLAS を組み合わせることにより、酵素-基質複合体の結合モードおよび親和力 (自由エネルギー) を解析することができる。また、過程 (2) は 3D-RISM、量子化学 (例

えば、分割統治法)、および MODYLAS プログラムを連成させることにより、追跡することができる。これらのプログラムを結合する付加機能ソフトもすでに完成し、また「次世代スパコン」へのプログラムの高度化も終了しており、現実的な展望だと考える。

8. 特記事項

(1) 機関を超えた計算科学者と計算機科学者間の連携による計算アルゴリズムの開発およびプログラムの高度化

計算機(情報)科学分野の研究者との共同で、これまで「困難」あるいは「不可能」といわれていた数値計算アルゴリズムの超高並列化を達成した。まず、押山グループ(東大)は佐藤グループ(筑波大)及び理研との共同により実空間密度汎関数法(RSDFT)の開発した。この成果は2012年度のゴードン・ベル賞に輝いている。また、平田グループ(分子研)は佐藤グループ(筑波大)との共同により3D-FFTの一万ノードの超高並列化を達成した。これは、従来、3D-FFTの高並列化は不可能と考えられていたが、その常識を打ち破ったものである。

(2) 実験研究者および企業研究者を含む「実証研究」および「連続研究会」

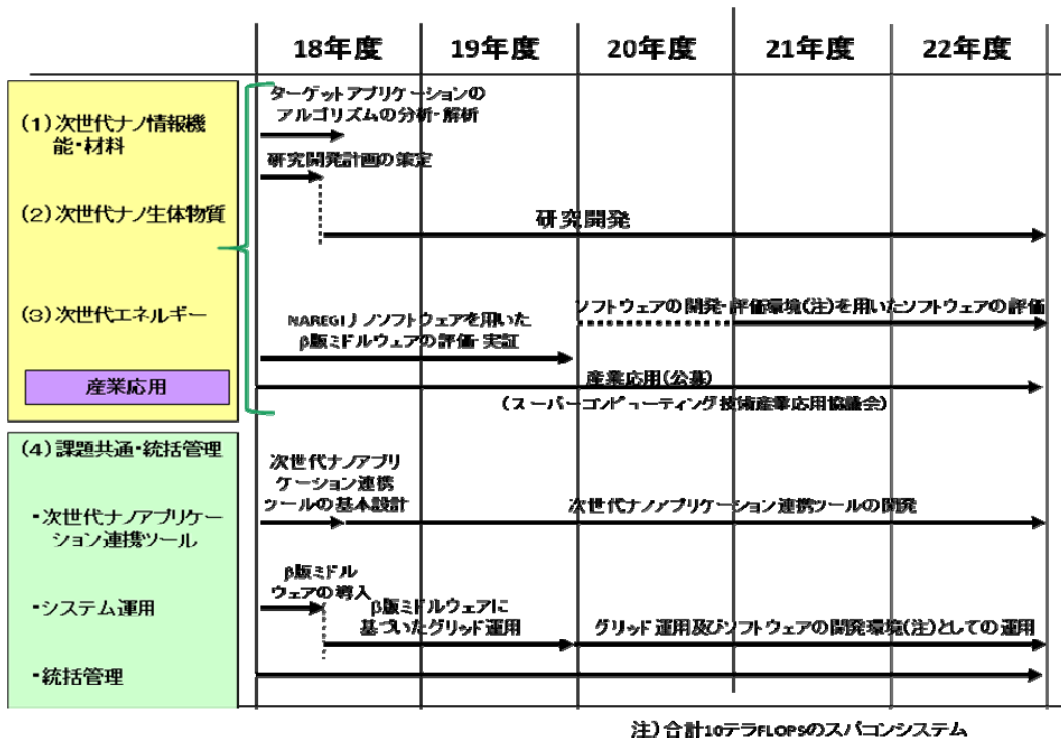
本研究開発は「ナノ分野」のグランドチャレンジ課題の解決を目指して、「次世代スパコン」上で最大限の性能を発揮するアプリケーション群の開発を目標としてきた。したがって、その成果を真に問うためには「次世代スパコン」上でアプリケーションを走らせる必要がある。しかし、次世代スパコンの本格稼働は本研究開発が終了した後の2012年度からであり、本計画期間中にその評価を行うことができなかった。一方、本開発拠点で開発して来た多くの方法論やアプリケーションプログラムは、既存(当時)のワークステーションやスーパーコンピュータ上でも、ナノ分野の多くの実験結果の解析に威力を発揮する可能性があり、また、そうした研究自身が将来の「次世代スパコン」での研究課題の開発にも結びつく。以上のような「外部評価委員会(魚崎浩平委員長)」での指摘に基づき、ナノ分野における「アプリケーション実証研究」および「連続研究会」を実施した。そこで、まず、解決を迫られている「ナノ分野」の課題を抽出するため、大学における実験研究者、企業研究者、および計算科学者を含む「連続研究会」を電子デバイス、ナノ生体物質、環境・エネルギーの広汎な分野で企画した。この連続研究会は21回におよぶ。その規模と広がりから、研究者の中に全国的な反響を巻き起こすと同時に、その中からすでに実験研究者と計算科学者間で、いくつかの共同研究が生まれ、具体的な成果に結びついている。例えば、「抗がん剤を使わない癌治療法(上岡教授)に関する計算科学的サポート(岡崎グループ:上岡教授(崇城大学)との共同研究)」、あるいは、「カリウムチャンネルのイオン選択性に関する3D-RISM計算(平田グループ:老木教授(福井医科大)との共同研究)は、その例である。また、大日本住友製薬との向精神薬の作用機構の解明を行っている。

(3) プログラム公開とアプリケーション説明会・講習会

本プロジェクトは国家プロジェクトであり、そこで開発されたプログラムは「公開」を原則とする。一方、本プロジェクトで開発されたプログラムの多くは過去の履歴をもっており、公開に関して様々な制約を帯びている。同時に、本プロジェクトで解決を目指している課題の多くは新規の理論や方法論の開発など基礎研究の要素をもっており、研究者(開発者)のクレジットやプライオリティが保証されなければならない。我が国のアプリケーション開発研究ではこの問題に関する蓄積がほとんど無かったため、本研究開発において、「産・学・官」の間で協議を積み重ね「プログラム公開」に関する「原則」および「規則」を作り上げた。また、本開発拠点で開発されたアプリケーション情報を企業研究者を含めた多くの研究者に発信するため、全国規模の「アプリケーション説明会・講習会」を数度に渡って実施した。

<詳細資料>

・当初の目標・計画



・最終的な目標・計画～6年間での情勢変化と対応して

