

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

外部評価報告書 概要

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
外部評価委員会

内容

0. 評価概要

I. はじめに

II. 評価の進め方

III. 評価項目

IV. 評価報告(要旨)

添付 ナノ統合拠点 外部評価委員会名簿

0. 評価概要

研究開発計画は概ね適切なものであり、また順調に進捗している。ただし、以下について改善が必要である。

(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

分野外、専門家以外の人々、つまり一般の研究者ひいては一般の国民にもわかるようにチャレンジングなテーマ、シンボリックなテーマの具体例を提示していくことが必要である。今日的な課題にもある程度目配りしながら進めていく必要がある。

(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しつつ、より計画的に、またより一層強力に開発を推進していく必要がある。

(3)統合ソフトの将来的な運用について

プロジェクト終了後には、この議論に基づいて、これらの成果をパッケージ化して維持、管理、改訂、公開していく仕組みを整備していくことが望ましい。

0. 評価概要

(4)実験研究者、企業研究者との連携について

このプロジェクトを広く実験研究者に知ってもらうこと、また逆に、実験家が持っているデータの利用等、プロジェクトとしての実験研究者との連携の仕組みを強化する必要がある。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研究への展開も視野に入れつつ、より一層の連携、協力体制の強化が必要である。

(5)人材育成について

若手の育成は特に重要であり、大学と協力しながら、より一層推進していく必要がある。

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、さらなる努力が必要である。

(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必要がある。

I . はじめに

本評価は、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、平成18年度にプロジェクトを開始した後ほぼ2年を経過した現時点において、プロジェクト開始当初に設定された課題や目的、目標の妥当性、その後の研究開発の進捗、またマネジメント、人材育成への貢献等についてプロジェクト外部から評価、点検を行い、最終年度へと向けて本プロジェクトがとるべき方針について指摘、提言を行い、今後の運営に反映させるためのものである。

Ⅱ．評価の進め方

本評価においては、評価の客観性、外部性を確保するために、計算、実験の双方にわたるプロジェクト外の学識経験者、産業界の委員をもって外部評価委員会を構成し、メール等による意見、コメントの収集を行いながら下記のように三回の委員会を開催し、報告書として取りまとめた。

第一回外部評価委員会

日時：平成20年2月16日(土)13:00～16:00

場所：東京ガーデンパレス会議室

第二回外部評価委員会

日時：平成20年2月28日(木)16:00～19:00

場所：学士会館会議室

第三回外部評価委員会

日時：平成20年5月15日(木)10:00～12:00

場所：学士会館会議室

Ⅲ. 評価項目

1. 設定目標の妥当性、研究開発の進捗

- ① 設定した当初目標、研究開発計画は、研究開始後2年経過した現在においても妥当か。
- ② 基礎科学への貢献が充分になされているか。また将来、産業技術への貢献が充分見込めるか。
- ③ アルゴリズム開発、プログラム開発等の研究開発は、順調に進捗しているか。
 - (i) 中核アプリの選定とその開発計画は妥当か。
 - (ii) 付加機能ソフトは広くナノサイエンス研究に必要な機能を十分にカバーしているか。
 - (iii) 連携ツールは中核アプリや付加機能ソフトが充分効果を発揮できるように設計されているか。

2. プロジェクトマネジメントの妥当性

- ① 研究開発計画の実現に向けた適切な体制が整備されているか。また、研究開発計画の実現に向けて、理研開発実施本部、また実験研究者、産業界等との連携、協力は適切になされているか。
- ② 目標の実現に向けて適切な資源配分が行われているか。

3. 人材育成への貢献・成果の普及の妥当性

- ① 次世代を担う世界水準の研究者の育成に対する貢献は、適切になされているか。
- ② 成果の公表や情報発信など研究開発成果の普及に向けた取り組みは適切に行われているか。

IV. 評価報告(要旨)

総論

本プロジェクトにおいては、次世代スパコンにおける計算機能力の飛躍的向上を最大限活用し、計算科学を質的に発展させ、ナノサイエンスのルネッサンスを先導する意義深いプロジェクトである。ナノサイエンスのブレークスルーを通して我が国の国際競争力を強化する正しく時代に適切なものであり、オールジャパン体制で取り組むべき重要な課題である。このプロジェクトを契機として、実験と理論に次ぐ第三の研究の方法論としてのシミュレーションをはじめとする計算科学をしっかりと確立して行くことが強く期待される。

研究開発計画は概ね適切なものであり、また順調に進捗している。今後とも、分子科学研究所を拠点とした推進体制の下、実験研究者や産業との連携を強化するという観点から委員会体制等の一部改善を図りつつ、また若手育成に注力しながらより一層強力に推進していくことが妥当である。

IV. 評価報告(要旨)

1. 設定目標の妥当性、研究開発の進捗

①設定した当初目標、研究開発計画は、研究開始後2年経過した現在においても妥当か。

(1)ナノを基盤とした次世代ナノ情報・機能材料、次世代ナノ生体物質、次世代エネルギーの各課題の設定は妥当か。

概ね妥当である。(中略)一方で、社会的要請に応じていくことも重要である。課題の明確化という意味も含めて、分野外、専門家以外の人々、つまり一般の研究者ひいては一般の国民にもわかるようにチャレンジングなテーマ、シンボリックなテーマの具体例を提示していくことが必要である。ここでは夢を語ると同時に、わかりやすさという面から今日的な課題にもある程度目配りしながら進めていく必要がある。またこのとき、何ができるようになるのか、計算科学を企業研究に取り込む経営判断もできるような説明が望ましい。

若い人たちが次世代スパコンを使いたくなるような計算科学等、着実により一層アトラクティブな課題を示していくことも重要である。

(2)上記の課題に対して設定されている目的および具体的な目標の設定は妥当か。

妥当である。(中略)ただ、専門外の人々の理解を進めるために、イラストを含めてわかり易くアピールすることも必要である。

IV. 評価報告(要旨)

1. 設定目標の妥当性、研究開発の進捗

①設定した当初目標、研究開発計画は、研究開始後2年経過した現在においても妥当か。

(3)次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアはグランドチャレンジ課題を解決するための統合ソフトとして妥当なものとなっているか。その開発計画は妥当か。

(中略) 中核となるアプリケーション(以下中核アプリ)をより一層高度化し、さらには、様々なニーズに対応するためにこの中核アプリと組み合わせて用いることのできる付加機能ソフトの開発も確実に行っていく必要がある。(中略)

上述のような目標の達成にあたっては、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しつつ、より計画的に、またより一層強力に開発を推進していく必要がある。

(i)中核アプリの選定とその開発計画は妥当か。

妥当である。(中略)

(ii)付加機能ソフトは広くナノサイエンス研究に必要な機能を十分にカバーしているか。

概ね妥当であるが、(中略)実験研究者との連携の過程においてもさらに広く意見を求めていく姿勢が必要である。(中略)

(iii)連携ツールは中核アプリや付加機能ソフトが充分効果を発揮できるように設計されているか。

妥当である。ただし、連携ツールについても付加機能ソフトと同様、今後とも広く意見を求めながら柔軟に開発を進めていくことが望まれる。

IV. 評価報告(要旨)

1. 設定目標の妥当性、研究開発の進捗

②基礎科学への貢献が充分になされているか。また将来、産業技術への貢献が充分見込めるか。

(1)これまで不可能であったナノの現象をシミュレートする新しい理論・方法論の開発がなされつつあるか。

順調に進捗している。(中略)

(2)ナノ物質の新規な振る舞いが見出されつつあるか。また、これまで不明であった現象が、原子、分子レベルで明らかになりつつあるか。

順調に進捗している。(中略)

IV. 評価報告(要旨)

1. 設定目標の妥当性、研究開発の進捗

③アルゴリズム開発、プログラム開発等の研究開発は、順調に進捗しているか。

(1)中核アプリは、次世代スパコンの性能を充分発揮できる見込みのものとなっているか。

順調に進捗している。(中略)いずれの中核アプリに対しても次世代スパコンを用いた性能として十分な高性能が期待できる。(中略)

動的密度行列繰り込み群法は、(中略)性能的には行列演算の部分が最も重要であり、ナノサイエンスのより広範な分野での課題解決を目指すためには、理研から提供される共通数学ライブラリの中で、特に行列演算用の高並列、高性能ライブラリの充実が不可欠である。(中略)

また、上述したような各中核アプリの高度化においては、計算工学研究者の協力が必須であり、今後の開発において協力体制の整備が不可欠である。

(2)付加機能ソフトの開発は順調に進捗しているか。特に、グランドチャレンジ課題を解決するための機能を備えたものが実現しつつあるか。

順調に進捗している。(中略)

(3)連携ツールの開発は順調に進捗しているか。特に、中核アプリ間、また中核アプリと付加機能ソフトの結合を円滑に行える見通しとなっているか。

順調に進捗している。ただし今後のことを考えると、計算工学者との連携をさらに積極的に取り入れていく仕組みを考えておく必要がある。

IV. 評価報告(要旨)

2. プロジェクトマネジメントの妥当性

①研究開発計画の実現に向けた適切な体制が整備されているか。また、研究開発計画の実現に向けて、理研開発実施本部、また実験研究者、産業界等との連携、協力は適切になされているか。

(1)ナノ統合拠点において、グループ、WG、委員会等の構成は妥当なものとなっているか。

一部、改善を要する。特に、下記(3)の項目で述べる実験研究者との連携、産業との連携を強化すべく、委員会体制等についても再編を含めた再検討が必要である。

(2)中核アプリの高度化に際して、高度化WGを核とした拠点内の開発体制は適切か。また、理研開発実施本部との連携も適切になされているか。

計画、体制の基本形としては適切である。今後の実績に期待する。

(3)オールジャパン体制が実現されているか。コミュニティ、実験研究者、産業との連携、協力が適切になされているか。また、それらのニーズを取り込む体制が確立されているか。物性科学WG、分子科学WGの活動は適切か。

改善を要する。(中略)このプロジェクトを広く実験研究者に知ってもらうこと、また逆に、実験家が持っているデータの利用等、プロジェクトとしての実験研究者との連携の仕組みを強化する必要がある。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研究への展開も視野に入れつつ、より一層の連携、協力体制の強化が必要である。(中略)

これら実験研究者、企業研究者との連携の推進については、具体案を示すとともに現時点で可能なところから実際に活動に着手して行く必要がある。

IV. 評価報告

2. プロジェクトマネジメントの妥当性

②目標の実現に向けて適切な資源配分が行われているか。

(1)配分額の決定方法は適切か。

適切である。特に問題を感じていない。

3. 人材育成への貢献・成果の普及の妥当性

①次世代を担う世界水準の研究者の育成に対する貢献は、適切になされているか。

かなりよく貢献している。しかしながら、若手の育成は特に重要であり、大学と協力しながら、より一層推進していく必要がある。(中略)

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、さらなる努力が必要である。(中略)

②成果の公表や情報発信など研究開発成果の普及に向けた取り組みは適切に行われているか。

概ね適切である。作成したプログラムの第三者への利用など、努力が認められる。しかしながら、プロジェクトの広報活動という視点からは不十分な点があり、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必要がある。また、著作権の扱いについても現在の時点から整理しておくべきである。

IV. 評価報告

4. その他

多様なシミュレーション機能とそれらを連携させるツールが開発されつつあり、ナノサイエンス研究の現場で必要とされる計算ソフトが一通りそろった、専門の研究者にとって使い勝手のいい統合ソフトが用意されつつある。一方で、計算科学の専門家でない研究者に対しても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、ここで十分に議論しておくべきである。プロジェクト終了後には、この議論に基づいて、これらの成果をパッケージ化して維持、管理、改訂、公開していく仕組みを整備していくことが望ましい。

特に、将来の産業界へのバトンタッチに際しては、産業界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、方法論的に産業界を継続的に支援していくことが期待される。

ナノ統合拠点 外部評価委員会名簿

#	氏名	所属	備考
委員長			
1	魚崎 浩平	北海道大学 大学院理学研究科 教授	ナノ学識経験者 (分子科学) ナノテク・材料委員
委員			
2	栗原 和枝	東北大学 多元物質科学研究所 教授	ナノ学識経験者 (分子科学) ナノテク・材料委員
3	塚田 捷	早稲田大学 先進理工学研究科 教授	ナノ学識経験者 (物性科学)
4	樋渡 保秋	金沢大学 自然科学研究科 名誉教授	ナノ学識経験者 (分子科学)
5	平尾 公彦	東京大学 大学院工学系研究科 教授	ナノ学識経験者 (分子科学)
6	矢川 元基	東洋大学 計算力学研究センター センター長・大学院教授	情報科学技術委員
7	高尾 正敏	松下電器産業 中尾研究所 総括担当参事	民間の有識者
8	志賀 昭信	ルモックス技研 主宰 (元 住友化学工業㈱ 筑波研究所所長)	民間の有識者