

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トゥクス拠点 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3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、更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6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2つの連携ツールの開発に取り組み、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

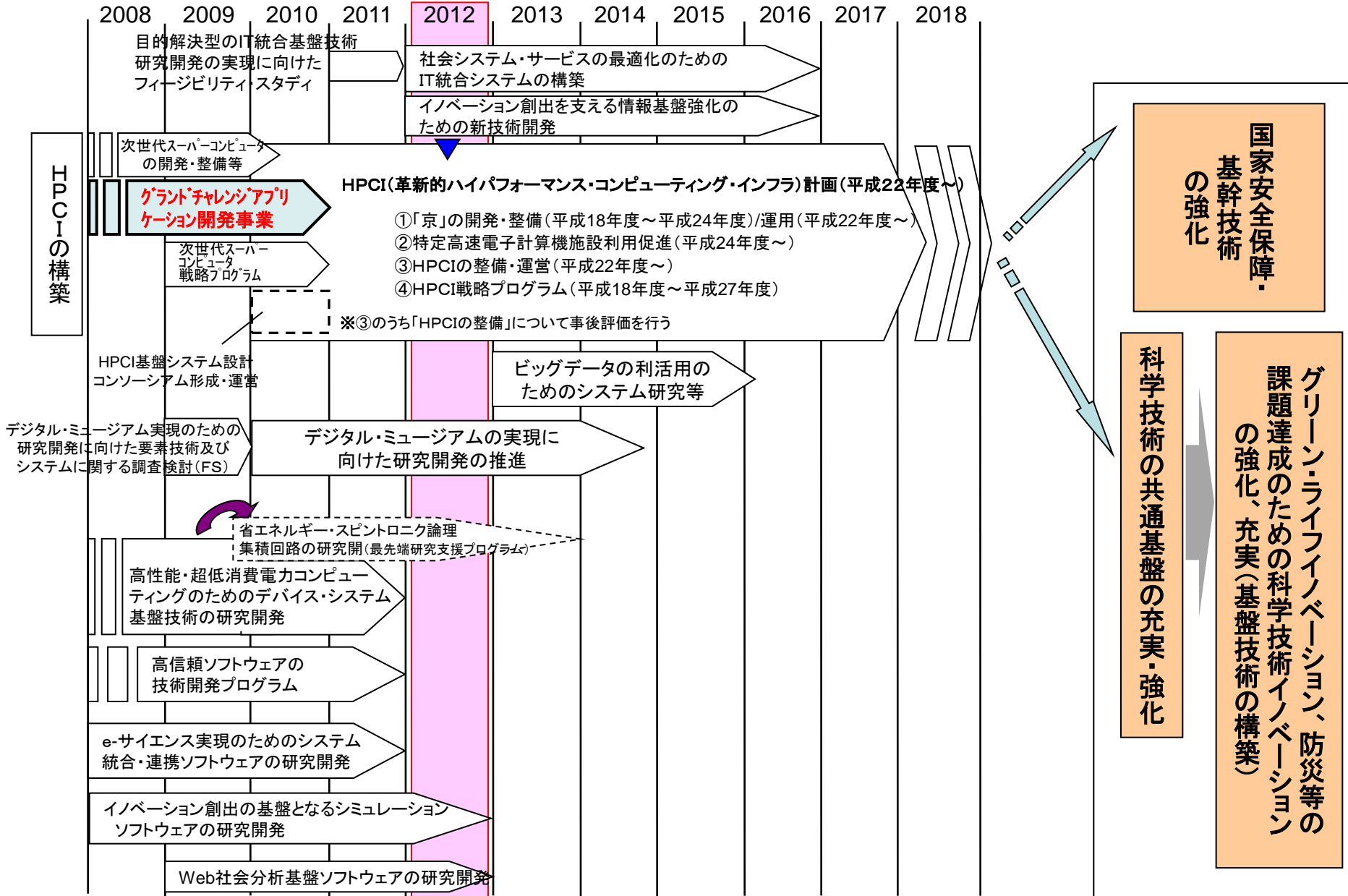
次世代コンピュータは、従来の計算機とは全く異なる超並列プロセッサであり、これを効率よく利用する超並列処理を可能とする計算科学の新しい方法論やアルゴリズム開発が必要とされてきた。本プロジェクトではこの課題を十分に解決して、特に「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT)」(ゴードン・ベル賞最高性能賞を受賞) や「液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM」など、中核アプリケーションの高度化を中心に卓越した成果が達成された。

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みを充実させていくことが重要である。

【情報科学技術関連】 グリーン・ライフイノベーション、防災等の課題達成のための科学技術イノベーションの強化、充実(基盤技術の構築)



▼ :事後評価