

5-6 最先端・高性能スーパーコンピュータの開発利用

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 (文部科学省)

2006年4月より開始した表記のプロジェクトは本年度末(2012年3月31日)で終了した。我々は「次世代スパコン」プロジェクトの一環として、わが国の近未来の学術、産業、医療の発展に決定的なブレークスルーをもたらす可能性をもつ三つのグランドチャレンジ課題を設定し、その解決を目指して、理論・方法論およびプログラムの開発を進めてきた。

(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、また動的な振る舞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

高効率の触媒・酵素の設計ができる方法論を確立する。

これらのグランドチャレンジ課題はいずれも従来の物理・化学の理論・方法論の「枠組み」あるいは「守備範囲」をはるかに超えた問題を含んでおり、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。さらに、構築が予定されている「次世代マシン」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ると同時に、その実証研究を進めてきた。本稿ではその成果をまとめた。

5-6-1 中核アプリを中心とする「次世代ナノ統合ソフトウェア」開発

我々が開発しているアプリケーションは次の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に組み合わせて, 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。(資料1)



「次世代ナノ統合ソフトウェア」の開発においては、中核アプリ（6本）、付加機能ソフト（38本）、連携ツール（2本）の開発を行い、いずれも「京」システム向けにポータルを利用して公開した。このうち、6本の中核アプリに関する成果を下記の表にまとめた。

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 — 豊かな未来社会に貢献するナノ分野グランドチャレンジ — 具体的な研究開発と成果		
中核アプリ	2013年度末の達成目標	「京」により可能となる波及効果
実空間第一原理 ナノシミュレータ HP-RSDFT	優先的使用が可能な場合には、10万超コアでの実効速度10%の達成を目指す。同時に10万原子系のナノ電子デバイス全体の実行確認を行う。	高速応答・高機能、省エネルギーのこれまでにないデバイスの設計を可能とする。
動的密度行列繰り込み群法 DDMRG	約100原子からなる格子振動を十分含んだ強相関一次元ナノ電子系の非線形光学応答、特にパルス電場照射直後緩和ダイナミクスシミュレーションを実行し、緩和プロセスに対する格子振動の効果を解明する。	強相関効果を用いた新しいタイプの光スイッチ素子の開発につながる。
大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper	量子反強磁性体における指数関数的に小さなエネルギーギャップの精密測定・量子一次相転移現象の解明。	新奇な磁気秩序状態と量子相転移現象の解明につながる。
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS	全原子シミュレーション(1000万原子系)によるウイルスの安定構造、カプシドタンパク質間の接合構造と熱ゆらぎ、熱安定性、環境依存性等の解明に向けた試験的短時間シミュレーションを行う。	ウイルス性疾患に対する予防法と治療薬の開発、創薬の効率化につながる。
液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM	無数の分子を含む混合溶液中の蛋白質(5万原子)の構造揺らぎに関する実行確認を行う。	高効率のセルロース分解酵素などの開発につながる。
高速量子化学計算ソフト FMO-MP2	FMO法による高精度電子状態計算を行い、インフルエンザ治療薬標的タンパク質の分子間相互作用を詳細に解析し、医薬品分子設計に向けての基礎的知見を得る。	計算による論理的・効率的な医薬品分子設計につながる。

5-6-2 学術的研究成果

本開発研究の過程で、それぞれの段階の方法論やプログラムの有効性を実証するための研究を行ってきた。以下に、プロジェクト開始時からの学術的研究成果を表にまとめた。

成果の公表や情発信など研究開発成果の普及に向けた取り組み						
① 学術活動の成果1(学術論文、総説解説、受賞)						
	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
学術 論文	278	344	326	326	306	294
総説 解説	59	67	55	80	66	81
受賞 など	13	18	20	18	12	16
② 学術活動の成果2(招待講演、口頭発表)						
	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
招待講演 (国内会議)	103	97	98	127	103	113
招待講演 (国際会議)	137	131	164	182	139	170
口頭発表 (国内会議)	174	194	261	279	275	261
口頭発表 (国際会議)	124	103	143	108	144	100
学術論文の 代表的発表先						
J. Chem. Phys.	31	33	33	29	30	29
J. Am. Chem. Soc.	8	9	9	12	5	12
J. Phys. Chem.	20	18	23	13	27	14
Chem. Phys. Lett.	17	13	17	13	17	10
Phys. Rev.	27	63	51	52	42	32
Phys. Rev. Lett.	14	14	12	13	16	5
J. Phys. Soc. Jpn.	31	22	22	26	28	27
他	130	172	159	168	141	165
合計	278	344	326	326	306	294

5-6-3 プログラム公開に向けた取り組み

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、公開に関しては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。「産」「学」「官」の間で、これらの二つの要素を考慮した「プログラム公開」の原則を確立するための意見調整を行ない2012年3月1日に公開した。

5-6-4 本プロジェクトにおける注目すべき成果

[計算科学上の成果]

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。

(1) 押山グループ(東大)と佐藤グループ(筑波大)及び理研との共同による実空間密度汎関数法(RSDFT)の開発。

この成果は2011年度のゴードン・ベル賞に輝いている。

- (2) 平田グループ(分子研)と佐藤グループ(筑波大)との共同による3D-FFTの超高並列化(一万ノード)。従来、3D-FFTは並列化が不可能と考えられていたが、その常識を打ち破った。
- (3) 遠山グループ(京大)と町田グループ(原研:クレスト)との共同で、巨大粗行列の対角化に関する超高並列化を達成した。

[学術上の成果]

平田グループは3D-RISM理論に基づき、「生命現象」の統計力学とも呼べる新しい学問分野を創出した。

[社会貢献]

少なくとも、3つの方法(3D-RISM, Replica exchange, FMO)が具体的に知的創薬研究に応用され、社会的注目を集めつつある。