

## 5-7 「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」 HPCI 戦略分野 2 「新物質・エネルギー創成」 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)における計算分子科学研究拠点 (TCCI)の活動について(文部科学省)

### 5-7-1 はじめに

#### (1) CMSI について

次世代スパコン京の戦略的活用を目指す5つの戦略分野において公募の結果、分野2新物質・エネルギー創成を担う戦略機関として東大物性研(代表)、分子研、東北大金研が選定された。この3機関を纏める形で、計算物質科学拠点(CMSI)が設置され、物性研に事務局が設置された(統括責任者:常行真司東大教授)。詳しくは、分子研レターズ64 P56-P57をご覧ください。

分子研では、この戦略機関の責務を担うため、計算分子科学研究拠点(TCCI)を設置し、平成23年度より5年間の活動を開始した。

#### (2) 戦略課題研究と計算科学技術推進体制構築について

CMSIの担う大きな責務として、京を利用する戦略課題研究の推進と計算科学技術推進体制の構築がある。前者については、大きく4つの部会が設置され研究が進められている。各部会には、当面重点的に推進する重点課題と、次の重点課題たる特別支援課題が選定されている。各部会の課題は、以下の通りである。

第1部会:「新量子相・新物質の基礎科学」

第2部会:「次世代先端デバイス科学」

第3部会:「分子機能と物質変換」

第4部会:「エネルギー変換」

これらの部会で、分子科学が担当する重点課題を図1に示す。TCCIが支援する特別支援課題を図2に示す。

重点課題(分子科学関係)	
第1部会	超高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測 代表者:天能 精一郎(神戸大院シス情報)
	分子における電子の動的過程と多体量子力学 代表者:高塚 和夫(東大院総合文化)
	凝縮分子科学系における揺らぎとダイナミクス 代表者:齊藤 真司(分子研)
第3部会	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開 代表者:岡崎 進(名大院工)
第4部会	水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性 代表者:田中 秀樹(岡山大理)

図1 分子科学が担当する重点課題

TCCIで支援する特別支援課題	
第2部会	ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクスと光・電子機能性量子デバイスの開発 代表者：信定 克幸（分子研）
第3部会	拡張アンサンブル法による生体分子構造・機能の解明 代表者：岡本 祐幸（名大院理）
	ポリモルフから生起する分子集団機能 代表者：松林 伸幸（京大化研）
	ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス 代表者：中井 浩巳（早大先進理工）
第4部会	機能性分子設計-光機能分子と非線形外場応答分子の光物性 代表者：江原 正博（分子研）
	太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算 代表者：山下 晃一（東大院工）
	バイオマス利用のための酵素反応解析 代表者：吉田 紀生（分子研）

図2 TCCIで支援する特別支援課題

計算科学技術推進体制の構築では、幅広く分野振興を行うもので、TCCIとしては、分子科学の分野において計算科学の推進体制の構築と戦略課題研究の推進を行うことが求められている。以下、本稿では、TCCIにおける平成23年度のこの活動の報告を行う。

## 5-7-2 TCCIの活動について

### (1) 推進体制について

平成23年度の活動を推進するにあたって図3のような推進体制を構築した。左側は、研究部門であり、特別支援課題、重点課題を支援するための組織である。右側が、TCCIとしての執行部門であり、各先生にお願いして拠点として必要な活動を分担して頂いている（図4）。その多くは、上部組織であるCMSIの小委員会の機能に対応するもので、TCCIの責任者は、CMSIの委員も兼務して、CMSIとTCCIで風通しのよい活動をねらっている。特に執行の要となる運営委員会では、これらの執行部門と前記の部会の分子科学の責任者などから構成し、TCCIの運営に必要な審議・決定を行うようにしている。

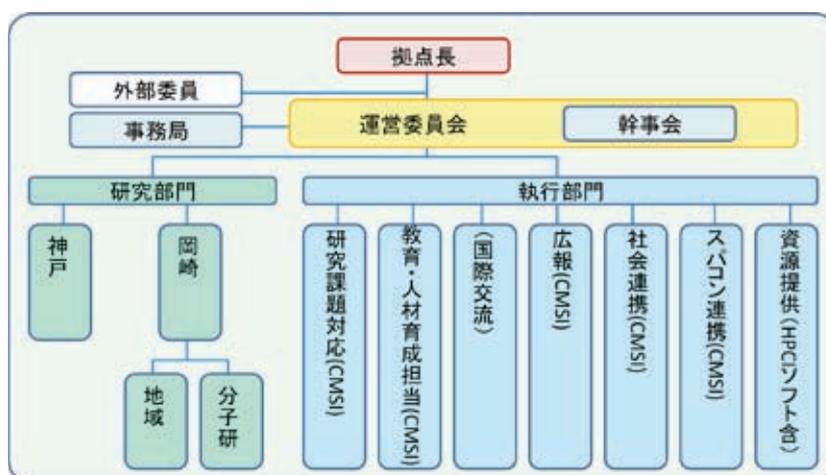


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

会議体	委員(○委員長または責任者)
運営委員会 (3ヶ月に1回)	○高塚、天能、信定、岡崎、山下、長岡、関野、奥村、柳井、兵頭、永瀬、平田、斉藤、江原、榊
幹事会(2ヶ月に1回) (運営委員会の一部)	○高塚、永瀬(主幹会議担当)、平田、斉藤、江原、榊、岡崎
外部委員	(未定)
事務局	榊、岡崎、石谷
人事検討委員会	○高塚、榊、岡崎、天能、山下
教育・人材育成委員会	○信定、天能、長岡、関野、岡崎
国際交流	(未定)
広報	○奥村、柳井
社会連携	○兵頭、高塚、榊、太田、岡崎、江原
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原

図4 TCCIの委員会など

(2) 平成23年度の実績について

今年度はTCCI立ち上げの年であり、分子科学分野での立ち位置の確立を目指して以下の活動を行った。

拠点立ち上げと人材の確保

分子研に本部事務局を、東大駒場に地域拠点を、神戸では理研計算科学研究機構内に神戸拠点を設置した。また、人材育成・教育担当の教員、研究支援に必要なCMSI研究員の採用などを行った(図5)。残念ながら、平成23年度内に採用できなかったポジションも若干残っているが、平成24年度からは要員体制は整う見込みである。

		第1部会	第2部会	第3部会	第4部会
分子科学	重点課題	天能(2) 笹井(1)		岡崎(1) 北浦(1) 北尾(1)	田中(1)
拠点関係 分子研(1) 東大総合文化(1) 神戸大(1)* 名大工(1)*	特別支援課題		信定(1)	岡本(1) 松林(1) 中井(1) 岡崎・北浦(1)	山下(1) 吉田(1) 長谷川・三浦(1)

\*:教員

図5 CMSI研究員・教員配置

人材育成・教育

前述のように担当する教員の公募を行い採用した。そして、TCCIでは、CMSIの人材育成・教育活動の一環として、図6の教育コースを企画推進、或いは共催した。また、平成24年度以降の計画についても企画・検討を行った。

### CMSI人材育成・教育の一環として企画・実施

行事名	開催日程	場所	備考
第15回分子シミュレーション夏の学校	2011年9月9日(金)～11日(日)	岡山大学理学部附属牛窓臨海実験所	共催
	参加者27名、講師4名		
TCCIウィンターカレッジ(分子シミュレーション)	2011年12月12日(月)午後～15日(木)	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	
	参加者86名(内、民間企業9名)、講師ほか18名		
TCCIウィンターカレッジ(量子化学)	2011年12月19日(月)、20日(火)	自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンター	
	参加者46名(内、民間企業4名)、講師・座長8名		
量子化学超並列プログラミング国際ワークショップ	2012年2月28日(火)	東大駒場ファカルティハウス	
	参加者64名(内、民間企業13名)		

図6 人材育成・教育

人的ネットワークの形成(研究会, シンポジウムの開催)

図7に示す研究会・シンポジウムを開催した。

TCCI第2回研究会:TCCIの全体シンポジウムである第2回研究会を理研・計算科学研究機構で開催した。100名を超える研究者が集り、「京」用プログラム開発の状況や研究の進捗についての発表・議論を行った。今後も、毎年1回は公開の全体シンポジウムの開催を予定している。

TCCI第1回実験化学との交流シンポジウム:TCCIの関わる有機化学, 物理化学, 生命科学の実験サイドから計算科学への期待・要望等に関する交流シンポジウムを開催した。優れた講演者の参加によって、非常に興味深く有意義なシンポジウムとなった。今後は、TCCIにおける実験研究者との交流の進捗に合わせて公開シンポジウムを開催していく予定である。また、文科省からCMSIへ元素戦略に関する支援要請を受け、TCCIでもその対応を進めている。そこで、「電池材料」および「触媒」に関する実験および理論計算研究の研究紹介を実験計算連携検討会にて行った。平成23年度にまとまる予定の新元素戦略に計算化学の立場から積極的に関与していく予定である。

TCCI第1回産学連携シンポジウム:企業における計算科学の利用と学術研究への期待,TCCIにおける研究状況等の紹介・意見交換を通じた産学連携を目的に産学連携シンポジウムを開催した。半数近くが民間からの参加であり、この分野における産学連携への期待の高さが垣間見られる。TCCIでは、今回のシンポジウムを切掛けに産学連携のより具体的な活動を継続的に実施していく予定である。

行事名	開催日程	場所
TCCI第2回研究会	2011年8月11日(木)～12日(金)	理研計算科学研究機構(AICS) 6F 講堂
	参加者数:107名(内、民間企業16名)	
TCCI第1回 実験化学との交流シン ポジウム	2011年11月10日(木)～11日(金)	京大 福井謙一記念研究センター
	参加者数:84名(内、民間企業9名)	
TCCI第1回 産学連携シンポジウム	2011年11月24日(木)午後	野村コンファレンスプラザ日本橋、5 階 大ホール
	参加者数:70名(内、民間企業30名)、民間企業役員2名が講演	
CMSI 元素戦略WG「電 池材料の部」実験計算 連携検討会	2011年11月9日(水)	東大 小柴ホール
	参加者数:94名(内、民間企業45名)	
CMSI 元素戦略WG「触 媒の部」実験計算連携 検討会	2011年11月12日(土)	京大 福井謙一記念研究センター
	参加者数:56名(内、民間企業10名)	

図7 研究会・シンポジウム

#### 計算機資源の提供

自然科学研究機構計算科学研究センターでは、TCCI 活動の一環として、戦略機関向けに平成 23 年度から計算機資源の 20% の提供を開始した。センターの計算機システムの更新にともない、平成 24 年度からは、より多くの計算機パワーが提供される見込みである。

#### ナノ統合ソフトの継承について

平成 23 年度で終了する「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」で開発されたソフトウェア(分子科学)については、継承すべく関係者で打合せを行った。

### 5-7-3 今後の課題と取組みについて

関係者のご尽力のおかげで、平成 23 年度は、拠点の立ち上げと、上記のような各種の活動を行うことができた。感謝したい。平成 24 年度後半からは、京の本格利用が開始される。この世界最速のスーパーコンピュータを利用して如何に成果を出していくかが、戦略機関全体に関わる課題である。TCCI としても、重点課題、特別支援課題を担当される先生方を支援助し、少しでも成果創出のお手伝いができればと考える次第である。

また、実験化学との交流及び産学連携は今後も継続発展させていく予定である。特に、産学連携については、学生のキャリアパス拡大に向けて、シンポジウムでの新規課題の発掘・相談、社会人の再教育の場の提供など、産に対する一貫性のある対応システムの確立を目指して行く所存である。