

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ている（統括責任者：常行真司東大教授）。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ている。

(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、以下のとおりである。

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。尚、平成25年度からは、材料科学が第5部会として独立する予定である。

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）
	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）
第3部会	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）
	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）
第4部会	バイオマス利用のための酵素反応解析 代表者：吉田 紀生（九大高理）

図2 TCCIで支援する特別支援課題

TCCIとしては、分子科学の分野において計算科学技術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。この内、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、以下、本稿では、主にTCCIにおける平成24年度の分野振興活動の報告を行う。

5-7-2 TCCIの活動について

(1) 推進体制について

今年度の推進体制を図3に示す。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。支援を行う研究員・教員の配置を図4に示す。図3の右側が、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5）。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。

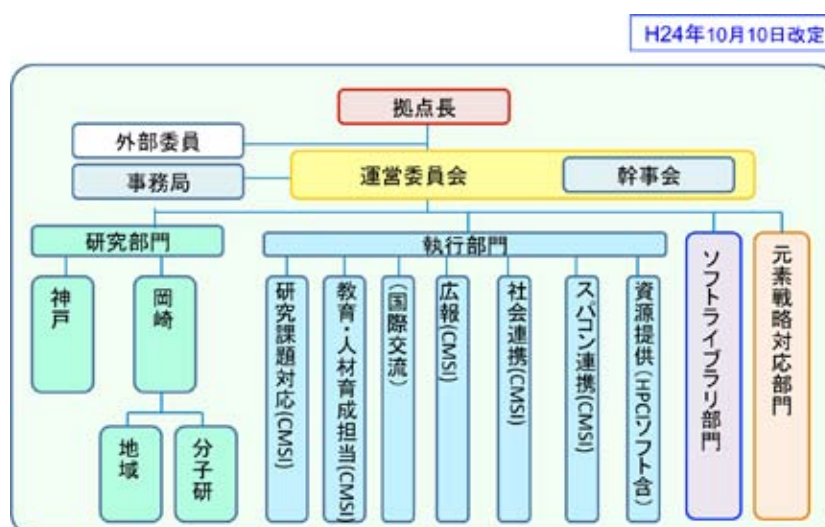


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制



*:教員

図4 CMSI 研究員・教員配置

H24年5月12日改定

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、斉藤、江原、榊、佐藤、田中
幹事会(2ヶ月に1回) (運営委員会の一部)	○高塚、斉藤(主幹会議担当)、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	(改めて設置)
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、佐藤
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原

図5 TCCI の委員会など

今年度、正式なプロジェクトとして発足した「新・元素戦略」への支援を行うための「元素戦略対応部門」と、平成23年度で終了した「次世代ナノ統合シミュレーションソフトの研究開発」(ナノ統合)の成果であるナノ統合ソフトも含め、分子科学アプリの普及対応のための「ソフトライブラリ部門」を創設した。

(2) 平成24年度の活動について

①サイエンスロードマップについて

汎用計算機として世界最高速のスーパーコンピュータ「京」は、平成24年9月28日に共用が開始されたばかりであるが、文部科学省では、次々世代スパコン開発を目指した「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」という調査研究プロジェクトを開始した。これは、平成23年度、京に関係する有志で次々世代スパコン設計に向けてまとめた計算科学ロードマップ白書(サイエンスロードマップ)が評価され、文部科学省の正式調査研究として始まったものである。この調査研究にTCCIからも参加し、平成32年度頃までを見通した分子科学の将来像についてまとめを行っている。このまとめた結果をコミュニティの皆様にご披露すべく、日本化学会第93春季年会特別企画として「超巨大計算機時代の化学」を、3月25日(月)13:30～16:30 立命館大学びわこ・くさつキャンパ

スにて開催する予定である。文部科学省では、本調査研究の結果に基づき、次々世代のスーパーコンピュータの開発を開始する計画である。

②人材育成・教育

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。特に、超並列化技術国際ワークショップのために米国アルゴンヌ国立研究所から招聘した Jeff Hammond 博士には、国際ワークショップ以外でも、豊橋技術科学大学、分子研、理研 AICS でセミナー講演をお願いし、参加者に、米国での最新状況と日本の状況とを比較できる機会を提供した。

また、懸案となっていた関係大学間での計算科学に関する教育コースの単位互換については、実施可能なものから開始した。

行事名	開催日程	場所
第52回分子科学若手の会 夏の学校	2012年8月20日(月)～24 日(金)	東京大学本郷キャンパス
	講師7名、参加者103名、特別企画を中心に支援	
第16回分子シミュレーション夏の 学校	2012年9月6日(木)～8日 (土)	慶應義塾 立科山荘
	講師3名、ポスター発表15名、参加者約50名	
TCCI ウィンターカレッジ (分子シミュレーション)	2012年12月11日(火)～14 日(金)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
	講師15名、参加者91名(内、民間企業9名)	
TCCI ウィンターカレッジ (量子化学)	2012年12月17日(月)、 18日(火)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
	講師5名、参加者48名	
第2回超並列化技術国際ワー クショップ	2013年1月28日(月)	早稲田大学理工学部
	講師5名、参加者46名(内、民間企業5名)	

図 6 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施

③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 3 回研究会：TCCI の全体シンポジウムである第 3 回研究会を岡崎コンファレンスセンターで開催した。今年度は、若手研究員全員が発表する企画で、若手の成長を再確認する場となった。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 2 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。今年も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。早速、ご講演頂いた研究者との共同研究の話も持ち上がっている。
- TCCI 第 2 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としているが、今回は、卒業生からも意見を聞くことも企画し、4 人の卒業生に講演をお願いした。共通の課題の一つは、社内の関係者に計算化学に関する理解を深めて頂くことであった。今年度も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が継続していることが感じられる。

行事名	開催日程	場所
TCCI第3回研究会	2012年10月9日(火)～10日(水)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター (岡崎市)
	参加者数:82名(内、民間企業4名)	
TCCI第2回 実験化学との交流シン ポジウム	2012年11月16日(金)～17日(土)	京都大学 福井謙一記念研究セン ター (京都市)
	参加者数:85名(内、民間企業5名)	
TCCI第2回 産学連携シンポジウム	2013年1月24日(木)午後	大阪大学中之島センター (大阪市)
	参加者数:58名(内、民間企業28名)	
日本化学会第93春季年 会特別企画「超巨大計 算機時代の化学」	2013年3月25日(月)午後	立命館大学びわこ・くさつキャンパス (草津市)

図7 研究会・シンポジウム

④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%の提供を開始している。センターの計算機システムの更新にともない、今年度からは、より多くの計算機パワーを提供することが可能となった。今後も継続していく予定である。

⑤分子科学アプリの普及に向けて

平成23年度で終了したナノ統合で開発されたナノ統合ソフトを含む分子科学アプリの民間企業の利用に向けて、計算科学振興財団のスーパーコンピュータへ分子科学アプリをインストールするなどの連携を進めた。

5-7-3 今後の課題と取組みについて

平成24年9月から、京の本格利用が開始されている。この世界最速のスーパーコンピュータを利用した成果も、少しずつ見通しが見えて来ている。今後は、その成果を分かり易くマスメディアなどを通して国民に報告していくことも課題である。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し、成果創出・報告のお手伝いを今後も行っていく予定である(図8)。

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継続して活動して行く所存である。

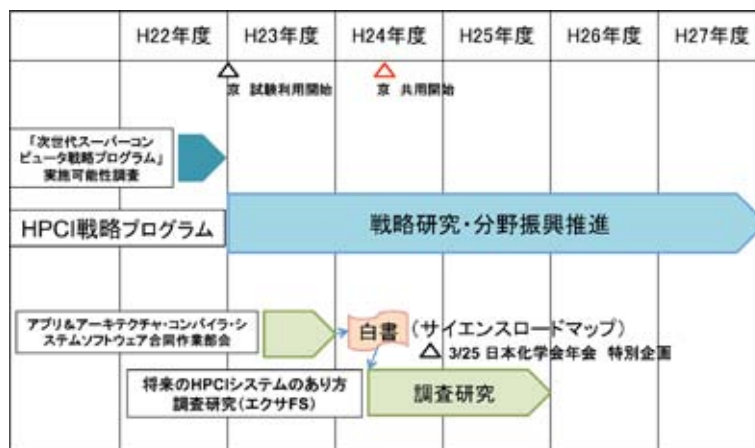


図8 TCCI 研究計画