

5-6 「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)

5-6-1 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年間の活動を推進している。

(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5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」

第5部会:「マルチスケール材料科学」

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、第5部会が第4部会から独立した。また、第4部会の重点課題と特別支援課題の内、「燃料電池」と「リチウムイオン電池」に関する課題が統合されて重点課題「エネルギー変換の界面科学」に再編成された。

重点課題(分子科学関係)	
第1部会	新量子相・新物質の基礎科学 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開 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動力学 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:斉藤 真司(分子研)
第3部会	分子機能と物質変換 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)
	エネルギー変換 エネルギー変換の界面科学(物性科学・分子科学共通課題) 代表者:杉野 修(東大物性研)
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）
	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）
第4部会	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（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25年度の分野振興活動の報告を行う。

5-6-2 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。

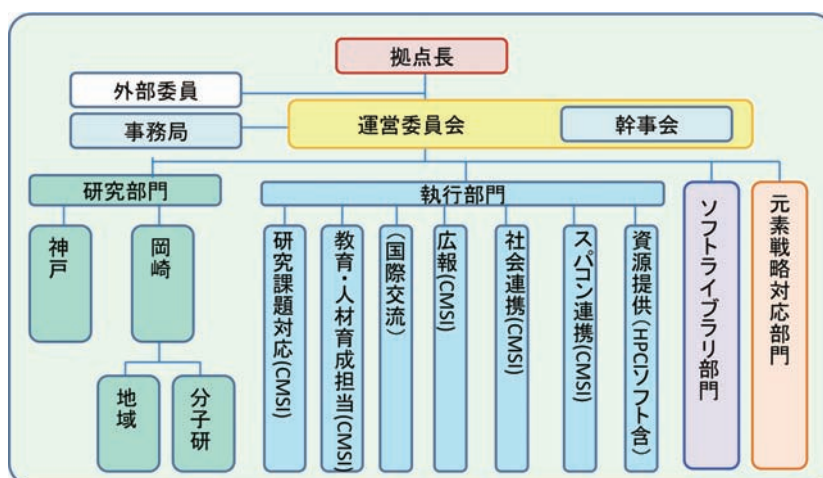


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

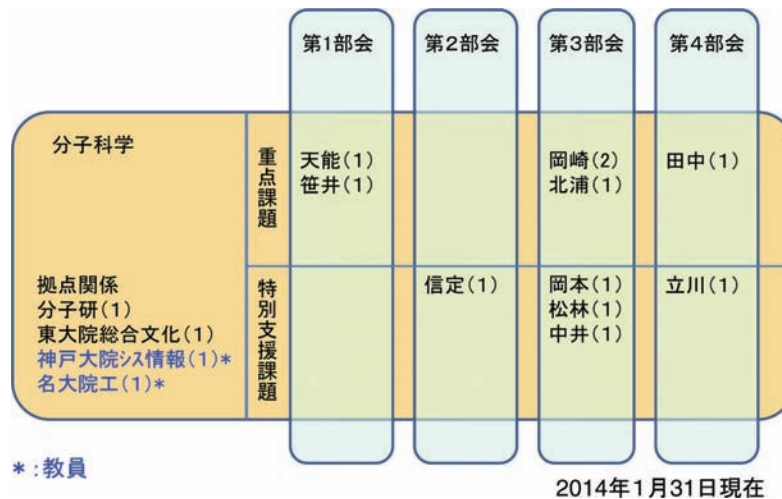


図4 CMSI 研究員・教員配置

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	○高塚、榊、斉藤、佐藤、岡崎、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	○柳井、松本
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
ソフトウェア部門	○岡崎、北浦、奥村、石村

図5 TCCI 委員会など

(2) 平成 25 年度の活動について

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。これに伴い、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、文部科学省の平成 24 年度から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た。

7 月には、「計算科学ロードマップ 概要」(案)が公表されパブリックコメントの募集が行われ、12 月に「計算科学ロードマップ」が公開された。この中で「今後の HPC が貢献しうる社会的課題」として大きく 4 課題、「分野連携による新しい科学の創出」として 3 課題が提案された。これらの課題に対応するアプリケーションプログラムの計算機資源要件の洗い出しも行われた。

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招聘した海外研究者 3 名については、国際ワークショップ以外でも、豊橋技術科学大学、東大、京大、理研 AICS でセミナー講演をお願いし、参加者に、欧米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、阪大が中心となって計算機科学に関する授業（ネットワーク配信）が開催され、多数の大学生、研究員などが参加した。TCCI も授業を分担した。

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
第17回分子シミュレーション夏の学校	2013年9月2日(月)～4日(水)	湯沢ニューオータニホテル(新潟県)
	講師3名、参加者42名(内、民間企業6名)	
TCCI ウィンターカレッジ (分子シミュレーション)	2013年10月23日(水)～25日(金)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	講師15名、参加者83名(内、民間企業22名)	
TCCI ウィンターカレッジ (量子化学)	2013年12月16日(月)、17日(火)	自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター(岡崎市)
	講師5名、参加者46名(内、民間企業7名)	
第3回超並列化技術国際ワークショップ	2014年2月4日(火)	東京大学山上会館(東京都文京区)
	参加者数:34名(内、民間企業3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

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 4 回研究会：TCCI の全体シンポジウムである第 4 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、重点課題，特別支援課題について成果を報告する会とし，併せて次世代のエクサスケールに向けた議論を始めるべく，エクサスケールについてシステムを検討している 3 グループからもご講演をお願いした。今後とも，年 1 回は全体シンポジウムの開催を予定している。

TCCI 第 3 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。今年度も実験化学者による招待講演 10 件，TCCI からの報告 6 件を行った。情報交換，議論を通して興味深く有意義なシンポジウムとなった。

TCCI 第 3 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・意見交換を通して産学連携を目的としている。今回は，民間企業の京利用のご講演，TCCI からは，産業利用に向けた基盤ソフト（後述）に関する報告，ポスター展示を行った。また，特別講演では橋本昌隆氏より「理工系ポスドクのキャリアパスにおける現状と課題」が行われ，鋭い分析結果の報告と提案が行われた。今年度は，民間企業からの参加者は減っているが，半数以上の質問は民間企業の参加者から行われており，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4回研究会	2013年9月10日(火)、11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:68名(内、民間企業8名)	
TCCI第3回 実験化学との交流シンポジウム	2013年11月5日(火)、6日(水)	京都大学 福井謙一記念研究センター(京都市)
	参加者数:61名(内、民間企業3名)	
TCCI第3回 産学連携シンポジウム 「HPCの利用と 成果と人材」	2014年1月31日(金)13:20から	名古屋大学 野依記念学術交流館(名古屋市)
	参加者数:68名(内、民間企業15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(RCCS)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。今後も継続していく予定である。

基盤ソフト(分子科学アプリ)の普及に向けて(図8, 図9)

今年度は、平成24年度補正予算を活用して、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利用に向けて、RCCSと協力して環境整備を行った。その中で要望の強い基盤ソフトの試用を、TCCI所有のマシンにて実現した。

プログラム	機能	開発責任者
Calnos	界面分光計算ソフト	(東北大)森田明弘
ERmod	エネルギー表示法に基づく自由エネルギー計算ソフト	(京大)松林伸幸
FMO in GAMESS	高速量子化学計算ソフト	(神戸大)北浦和夫
MODYLAS	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト	(名大)岡崎進
REM	レプリカ交換法	(名大)岡本祐幸
SMASH(仮称、H26年度予定)	大規模並列量子化学計算ソフト	(分子研)石村和也

図8 基盤ソフトウェア一覧

項番	利用内容	利用可能なマシン環境	
		民間企業	アカデミック
1	ソフト試用	B,C	A,B,C
2	研究利用	C,K	A,C,K
3	共同研究	(開発者主体)	
4	ソフト講習会	○	

A, B, C, Kは利用環境(以下)を示す。

	利用環境	民間企業	アカデミック
A	計算科学研究センター(RCCS)マシン*1	X	○
B	TCCIマシン(15ノード) *2	○(無償、試用がメイン)	
C	公益財団法人計算科学振興財団(FOCUS) スパコン *3		○
K	理研計算科学研究機構 京 *4		○

*1 RCCSセンターの利用については、RCCSセンターにお問い合わせください。

*2 TCCIマシンの利用については、TCCIIIにお問い合わせください。

*3 FOCUSスパコンの利用については、FOCUSにお問い合わせください。

*4 京の利用については、高度情報科学技術研究機構(RIST)にお問い合わせください。

○:利用可、
X:利用不可

図9 基盤ソフトの利用環境について

5-6-3 今後の課題と取組みについて

京の本格利用が開始されてから早1年半となる。この世界最速の汎用スーパーコンピュータを利用した成果が確実に始めている。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することを継続していくことが課題である。また、次のエクサスケールに向けて、分子科学分野に必要な技術・人材を養成していくことも重要である。これらに注力していく(図10)。

更に、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に向けて今後も活動を継続して行く所存である。

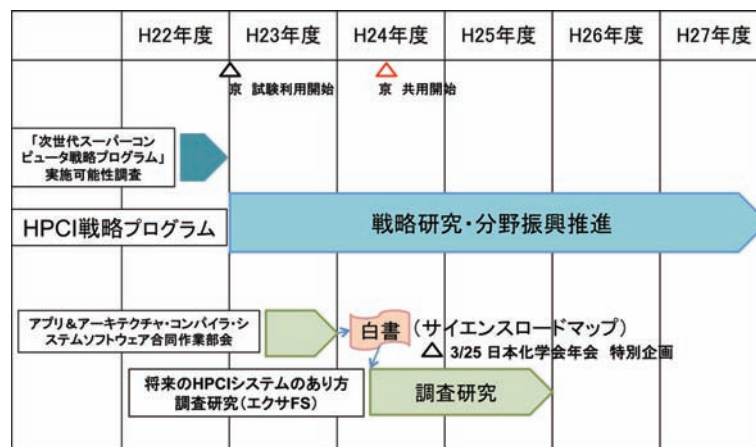


図10 TCCI 研究計画