

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。平成27年度が最終年度となる。

(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。また、第2部会の重点課題の見直しも行われ、平成26年度から重点課題が「密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現」に変更となり、従来の特別支援課題「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」の発展したものを統合する形になった。

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26年度の分野振興活動の報告を行う。

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）
第2部会	次世代先端デバイス科学
	密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現（一部分子科学担当）
	代表者：押山 淳（東大院工）、分子科学課題担当：信定 克幸（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）
第4部会	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）、研究担当：山下 晃一（東大院工）他
	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
第4部会	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

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。

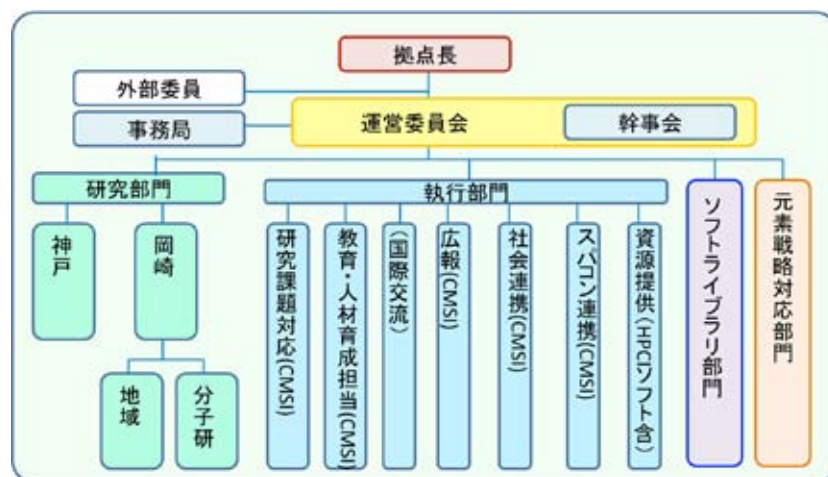


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

		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) 河野(1)	信定(1)	岡崎(2)	田中(1) 長岡(1)
拠点関係 分子研(1) 東大院総合文化(1) 神戸大院シス情報(1)* 名大院工(1)*	特別支援課題			志賀(1) 北尾(1) 中井(1) 奥村(1)	立川(1)

*:教員
()内は員数を示す。

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、斉藤、江原、榊、佐藤、田中、松本
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	○太田、高塚、榊、岡崎、江原、佐藤
スパコン連携	○斉藤
資源提供	○江原
ソフトウェアライブラリ部門	○岡崎、北浦、奥村、石村

図5 TCCI 委員会など

(2) 平成 26 年度の活動について

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は 2 日間の開催とし、海外研究者 3 名、国内研究者 9 名の招待講演とともにポスター発表も行った。講演者・参加者の間で活発な議論が行われた。

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、今年度も開催され、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18回分子シミュレーション夏の学校	2014年9月1日(月)～3日(水)	大原温泉 湯元のお宿 民宿大原山荘(京都府)
	講師3名、参加者約30名	
TCCI ウィンターカレッジ (分子シミュレーション)	2014年10月14日(火)～17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88名(内、民間企業6名)	
第4回超並列化技術国際ワークショップ	2014年11月23日(日)、24日(月)	東京大学工学部6号館64講義室(東京都文京区)
	講演者12名、参加者26名(内、民間企業1名)	
TCCI ウィンターカレッジ (量子化学)	2014年12月15日(月)、16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、世話人7名、参加者37名(内、民間企業3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。

行事名	開催日程	場所
ポスト京に向けたTCCIインフォーマル研究会	2014年5月21日(水)	名古屋大学(東山キャンパス)ES総合館 ESホール(名古屋市)
	参加者数: 81名(内、民間企業7名)	
第2回TCCIインフォーマルミーティング	2014年9月27日(土)	名古屋大学(東山キャンパス)ES総合館 ES会議室(名古屋市)
	参加者数: 43名(内、民間企業3名)	
TCCI 第5回研究会 (実験化学との交流シンポジウム 兼)	2014年10月17日(金)、18日(土)	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: 69名(内、民間企業3名)	
第3回TCCIインフォーマルミーティング	2014年10月12日(日)	イオンコンパス名古屋駅前会議室 5F ROOM A (名古屋市)
	参加者数: 24名(内、民間企業1名)	
TCCI 第4回産学連携シンポジウム／産応協第31回産応協スパコンセミナー	2015年1月23日(金)午後	東大弥生講堂一条ホール (東京都文京区)
	参加者数: 85名(内、民間企業48名)	

図 7 研究会・シンポジウム

- TCCI 第 5 回研究会：TCCI の全体シンポジウムである第 5 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、予算削減などの影響のため、「実験化学との交流シンポジウム」も兼ねて開催した。このため、実験研究者 5 名、ポスト「京」開発リーダー 1 名の招待講演を行い、TCCI からの報告 9 件を行った。実験サイドが

ら計算科学への期待・要望等も含めて、情報交換、議論が行われ、興味深く有意義なシンポジウムとなった。来年も、この研究会（全体シンポジウム）の開催を予定している。

- TCCI 第 4 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、「触媒研究開発における理論・計算化学の貢献について」をテーマとし、民間企業の団体であるスーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協）と、共同開催することになった。また、京大触媒・電池元素戦略拠点（ESICB）も協賛を頂き、ESICB からの講演を中心に、三井化学からは民間企業からの事例紹介のご講演が行われた。産応協との共同開催としたこと、民間企業の関心の高いテーマであったため、従来以上の多くの民間企業の方々にご参加頂いたことは収穫であった。
- 「京」からポスト「京」に向けたインフォーマルミーティング：平成 25 年度まで、文部科学省が行ってきた調査研究を基に、次のスーパーコンピュータとしてのポスト「京」プロジェクトが開始された。これに対応してポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の検討に向けて、インフォーマルミーティング等を開催し、分子科学コミュニティの意見の集約を図った。

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 年度補正予算により実現し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向け環境を維持し、民間企業のサポートを行った。また、開発中であった大規模並列量子化学計算ソフト「SMASH」が 9 月に公開された。

アウトリーチ活動について

理研 AICS 及び CMSI からの要請もあり、以下の展示会などにおいて、TCCI 関係者が作成した「京コンピュータを用いた小児マヒウイルスの全原子分子動力学シミュレーション」（3D CG）及びメタンハイドレートに関する「これからシミュレーションで分子の世界をのぞきにいきましょう」（2D CG）をその解説ポスターとともに展示し、小学生を含む一般国民に対して成果として紹介した。

- ・「未来をひらくスーパーコンピュータ～「京」からその先へ限りなき挑戦～」

理研 AICS ほか主催，8 月 23 日，24 日，科学技術館，東京

- ・ 2014 年計算科学研究機構一般公開，10 月 25 日，理研 AICS
- ・ サイエンスカフェ「3D とコンピュータと分子世界」，12 月 5 日，6 日，九州工大

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(H26年9月1日公開)	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

分子科学における基盤ソフトウェアとして、上記のソフトを用意しています。ダウンロード先のご紹介の他、TCCI マシン等で試用して頂くことが可能です。但し、ライセンスは、ソフト毎に異なりますので、ご確認をお願い致します。

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マシンの利用については、RCCSにお問い合わせください。
 *2 TCCIマシンの利用については、TCCI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

本プロジェクトも後半に入り，京を利用した成果が確実に出て来ている。今後も，その成果を，分り易く直接またはマスメディアなどを通して国民に紹介していくことが課題である。また，次のポスト「京」に向けて成果の引き継ぎと，分子科学分野に必要な技術・人材の養成を継続していくことも重要である。

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少しでも近づくことができれば幸甚である。

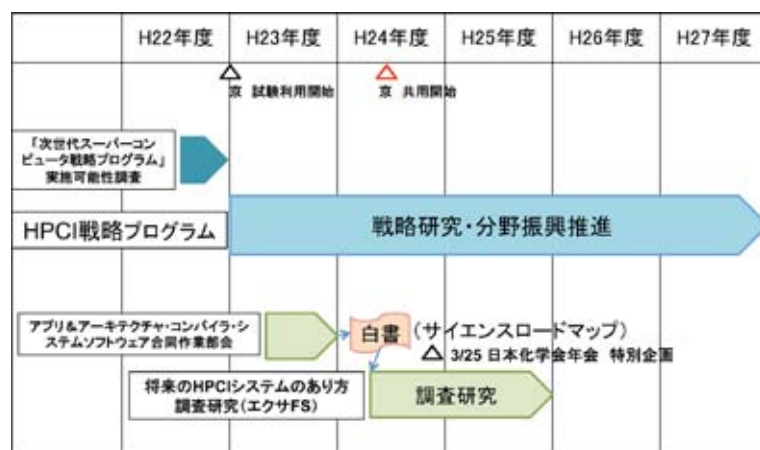


図 10 TCCI 研究計画