

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

スーパーコンピュータ「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年度より活動を開始し、平成27年度で5年間の活動を完了した。

(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27年度を中心に5年間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

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（阪大院基礎工）
	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。

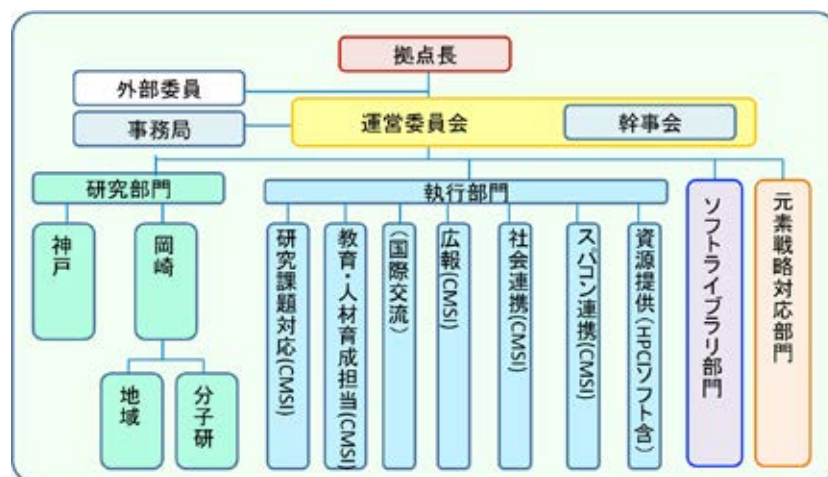


図3 計算分子科学研究拠点（TCCI）体制

		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	-
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	-
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 27 年度の活動について

①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 6-1 から図 6-4 までの教育コースを企画推進、或いは共催した。平成 27 年度、超並列化技術国際ワークショップは、CMSI 若手国際ワークショップと合わせて実施することにより、昨年同様 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。

平成 27 年度も人材育成の一環として、国際 HPC サマースクールに研究員 1 名を派遣した（図 6-5）。

平成 27 年度、阪大が中心となって計算科学技術特論 A（ネットワーク配信）が上期に開催され、下期には東大を中心にソフト開発者のための計算科学技術特論 C が開講され、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。

行事名	開催日程	場所
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（岡山県）
	講師4名、参加者27名（内、民間企業0名）	
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（東京都）
	講師7名、参加者103名（内、民間企業0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（長野県）
	講師3名、参加者52名（内、民間企業1名）	
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）	
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24名（内、民間企業2名）	
第19回分子シミュレーション夏の学校	2015年9月2日（水）～4日（金）	美浜・海鮮料理旅館かざりや（愛知県）
	講師3名、参加者34名（内、民間企業3名）	

図 6-1 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施
夏の学校をサポート

行事名	開催日程	場所
第5回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	2011年12月12日（月）～15日（木）	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9名）	
第6回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	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（岡崎市）
	講師15名、参加者89名（内、民間企業9名）	
第7回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	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86名（内、民間企業22名）	
第8回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	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90名（内、民間企業12名）	
第9回分子シミュレーションスクール ー基礎から応用までー	2015年10月13日（火）～16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76名（内、民間企業10名）	

図 6-2 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施
「TCCI ウィンターカレッジ——分子シミュレーション」としてサポート

行事名	開催日程	場所
第1回量子化学ウインタースクール ～基礎理論を中心として～	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(岡崎市)
	講師5名、参加者44名(内、民間企業5名)	
第2回量子化学ウインタースクール ～基礎理論と生体系の理論～	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(岡崎市)
	講師5名、参加者52名(内、民間企業0名)	
第3回量子化学ウインタースクール ～基礎理論と分子物性の理論～	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45名(内、民間企業7名)	
第4回量子化学ウインタースクール ～大規模系を目指した基礎理論～	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、参加者数42名(内、民間企業2名)	
第5回量子化学ウインタースクール ～基礎理論～	2015年11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、参加者数61名(内、民間企業4名)	

図 6-3 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施
「TCCI ウィンターカレッジ：量子化学」としてサポート

行事名	開催日程	場所
International Workshop on Quantum Chemistry Massively Parallel Programming Now in Supercomputers	2012年2月28日(火)	東大駒場ファカルティハウス(目黒区)
	参加者61名(内、民間企業11名)	
2nd International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	2013年1月28日(月)	早稲田大学理工学部(新宿区)
	参加者51名(内、民間企業5名)	
3rd International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	2014年2月4日(火)	東大山上会館(文京区)
	参加者35名(内、民間企業4名)	
4th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics – Toward post-K computers	2014年11月23日(日)、24日(月)	東大工学部6号館64講義室(文京区)
	参加者42名(内、民間企業4名)	
5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics – Toward exascale computing (CMSI若手国際WS兼)	2015年11月26日(木)、27日(金)	東大工学部6号館セミナー室AD 東大工学部8号館84講義室(文京区)
	参加者36名(内、民間企業0名)	

図 6-4 人材育成・教育
CMSI 人材育成・教育の一環として企画・実施
International Workshop on Massively Parallel Programming Now

参加者(所属)氏名、職名	開催日程	場所
(名大)安藤 嘉倫、特任研究員※	2013年6月23日～30日	ニューヨーク大学 (米国)
(慶応大)野村昂太郎、大学院生	2014年5月31日～6月8日	ブダペスト工科大学 (ハンガリー)
(東北大)Wilfredo Credo Chung、産学官連携研究員	2015年6月21日～26日	トロント大学 (カナダ)

※ 職名は派遣当時のもの

図 6-5 人材育成・教育
International Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences へ派遣

②人的ネットワークの形成(研究会、シンポジウムの開催)

図 7-1 から図 7-3 に示す研究会・シンポジウムを開催した。平成 27 年度については以下の通り。

行事名	開催日程	場所
TCCI第1回研究会	2011年2月4日(金)、5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: 106名(内、民間企業12名)	
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 (神戸市)
	参加者数: 96名(内、民間企業11名)	
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: 80名(内、民間企業4名)	
TCCI第4回研究会 (実験化学との交流シンポジウム兼)	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: 74名(内、民間企業8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: 73名(内、民間企業5名)	
TCCI第6回研究会 (実験化学との交流シンポジウム兼)	2016年3月14日(月)、15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)
	参加者数: 69名(内、民間企業4名)	

図 7-1 TCCI 研究会
全体シンポジウムとして開催

行事名	開催日程	場所
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6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)	

※ 第4回以降は、TCCI研究会に併合

図 7-2 実験化学との交流シンポジウム

行事名	開催日程	場所
TCCI第1回産学連携シンポジウム	2011年11月24日(木)	野村コンファレンスプラザ日本橋、5階 大ホール (東京都中央区)
	参加者数: 66名(内、民間企業28名)、民間企業役員2名が講演	
TCCI第2回産学連携シンポジウム 「大学の何が役に立ったか? 卒業生に聞く」	2013年1月24日(木)	大阪大学 中之島センター (大阪市)
	参加者数: 67名(内、民間企業31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)	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16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(共同開催) 「触媒研究開発における理論・計算化学の貢献について」	2015年1月23日(金)	東京大学 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)	
TCCI第5回産学連携シンポジウム/産応協第34回産応協スパコンセミナー/計算物質科学人材育成コンソーシアム(分子科学)(共同開催) 「次世代電池」(ポストLIB)の取り組みについて	2016年1月19日(火)	東京大学 武田ホール(東京都文京区)
	参加者数: 66名(内、民間企業36名)	

図 7-3 産学連携シンポジウム

○ TCCI 第 6 回研究会：TCCI の全体シンポジウムである第 6 回研究会を最終報告会として 3 月に岡崎コンファレンスセンターで開催した。今年度も、「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 4 名の他、関係機関からの来賓を含めて合わせて 10 名の方々に招待講演をお願いし、TCCI からの成果報告

11件を行った。活発な議論は勿論のこと、併せて実験サイドから、また、高所・大所からコメントを頂いた。

○ TCCI 第5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。平成27年度は、「次世代電池」(ポストLIB)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)及び平成27年度から始まった計算物質科学人材育成コンソーシアムと、共同で開催した。また、京大触媒・電池元素戦略拠点(ESICB)も協賛を頂き、ESICBからのご講演に加えて、民間企業の事例紹介として豊田中研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、昨年度同様、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。

③ 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%の提供して、研究推進に貢献してきた。

④ 基盤ソフト(分子科学アプリ)の普及に向けて(図8)

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、平成27年度も維持した。

⑤ アウトリーチ活動について

3年に一度開催される分子研の一般公開において、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」(3次元CG)及び「メタンハイドレートの分解(純水と塩水中の比較)」(3次元CG)をその解説ポスターとともに展示し、小学生を含む多くの一般国民に対し成果として紹介した。

・ 2014年分子研一般公開、10月17日(土)

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	(阪大)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。

5-6-3 謝辞

本プロジェクトで計画以上の成果を挙げる事ができた。これは一重に関係者の皆様のご尽力の賜物であり、深く感謝したい。また、本プロジェクトが、次のポスト「京」や、分子科学分野に必要な技術・人材の養成に、少しでもお役に立てたとすれば幸甚である。人材育成、実験化学との交流及び産学連携は、今後も重要と思われるため、何かの形で継続して頂くよう是非お願いしたい。