

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

- ナノ分野グランドチャレンジ -

説明資料

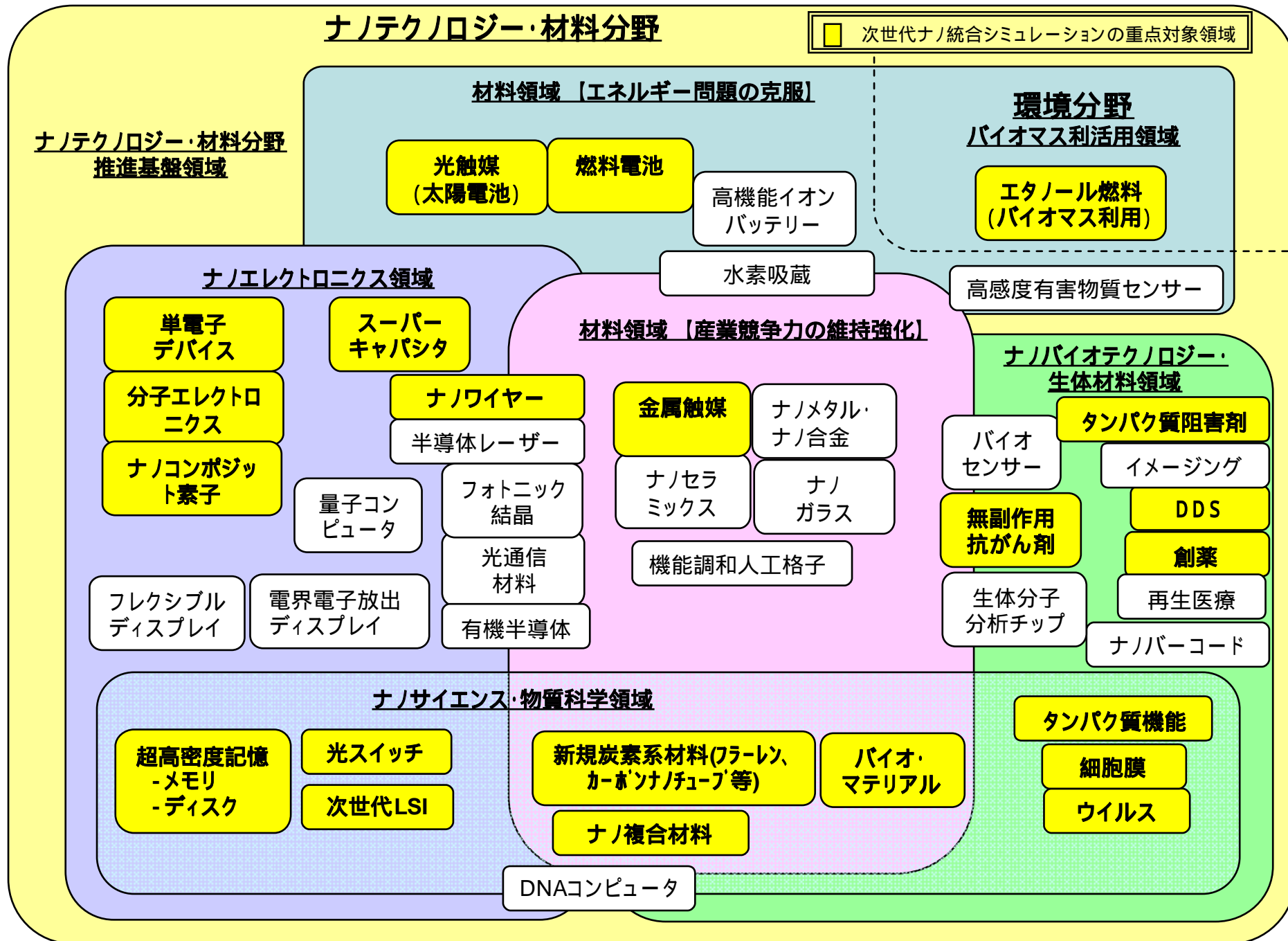
平成18年9月11日

自然科学研究機構・分子科学研究所
東京大学物性研究所
東北大学金属材料研究所
京都大学化学研究所
高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所
産業技術総合研究所

目次

ナノ分野グランドチャレンジの構造化 ～応用分野～	1
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の概要	2
グランドチャレンジ課題：次世代ナノ情報機能・材料（重点推進4分野との関連）	3
グランドチャレンジ課題：次世代ナノ情報機能・材料	4
グランドチャレンジ課題：次世代ナノ生体物質（重点推進4分野との関連）	5
グランドチャレンジ課題：次世代ナノ生体物質	6
グランドチャレンジ課題：次世代エネルギー（重点推進4分野との関連）	7
グランドチャレンジ課題：次世代エネルギー	8
研究推進体制	9
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拠点	10
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究計画	11
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの年次計画	12
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（俯瞰図）	13

ナノ分野グランドチャレンジの構造化 ~ 応用分野 ~



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の概要

WHAT? どのような分野が重要か?

ナノ分野グランドチャレンジ研究

(1)次世代ナノ情報機能・材料、(2)次世代ナノ生体物質、(3)次世代エネルギー

WHY? 何故、グランドチャレンジか?

これらの問題は、目指すべき国の姿である3つの理念への寄与が大きいとされる**重点推進4分野**の中の、**ナノテクノロジー・材料分野**及び**環境分野**の重要な技術・課題として位置付けられている。

何故、シミュレーションが必要か?

ナノ分野では、従来の試行錯誤的な実験だけでは、問題解決は不可能。計算による知的設計・開発指針が不可欠。同時に、計算科学における方法論と計算機性能の向上如何でその本質的課題の解決が十分に可能な段階にある。

HOW? グランドチャレンジ課題を解決するためには何が不可欠か?(具体的には何を)

最先端の理論に基づいた計算科学方法論を構築する。

どのような計算科学方法論を確立する必要があるのか?(どこまで)

- (1)次世代ナノ情報機能・材料: ナノ物質内の電子制御をシミュレートできる方法論。
- (2)次世代ナノ生体物質: ナノスケールの生体物質に対して、自由エネルギーレベルでの相互作用、自己組織化、また動的な振るまいをシミュレートできる方法論。
- (3)次世代エネルギー: 高効率の触媒・酵素の設計ができる方法論。

どのような理論・計算科学的背景が必要か?

量子化学、液体の統計力学、分子シミュレーション、固体電子論

WHO? & WHERE? どのような研究体制を構築するか?

我が国の分子・物質科学(分子科学、物性科学)の総力を結集(オールジャパン)

(分子研、東大物性研、東北大金研、産総研、京大化研、高エネ研、物・材機構、等)。

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(158社)と協力・連携。

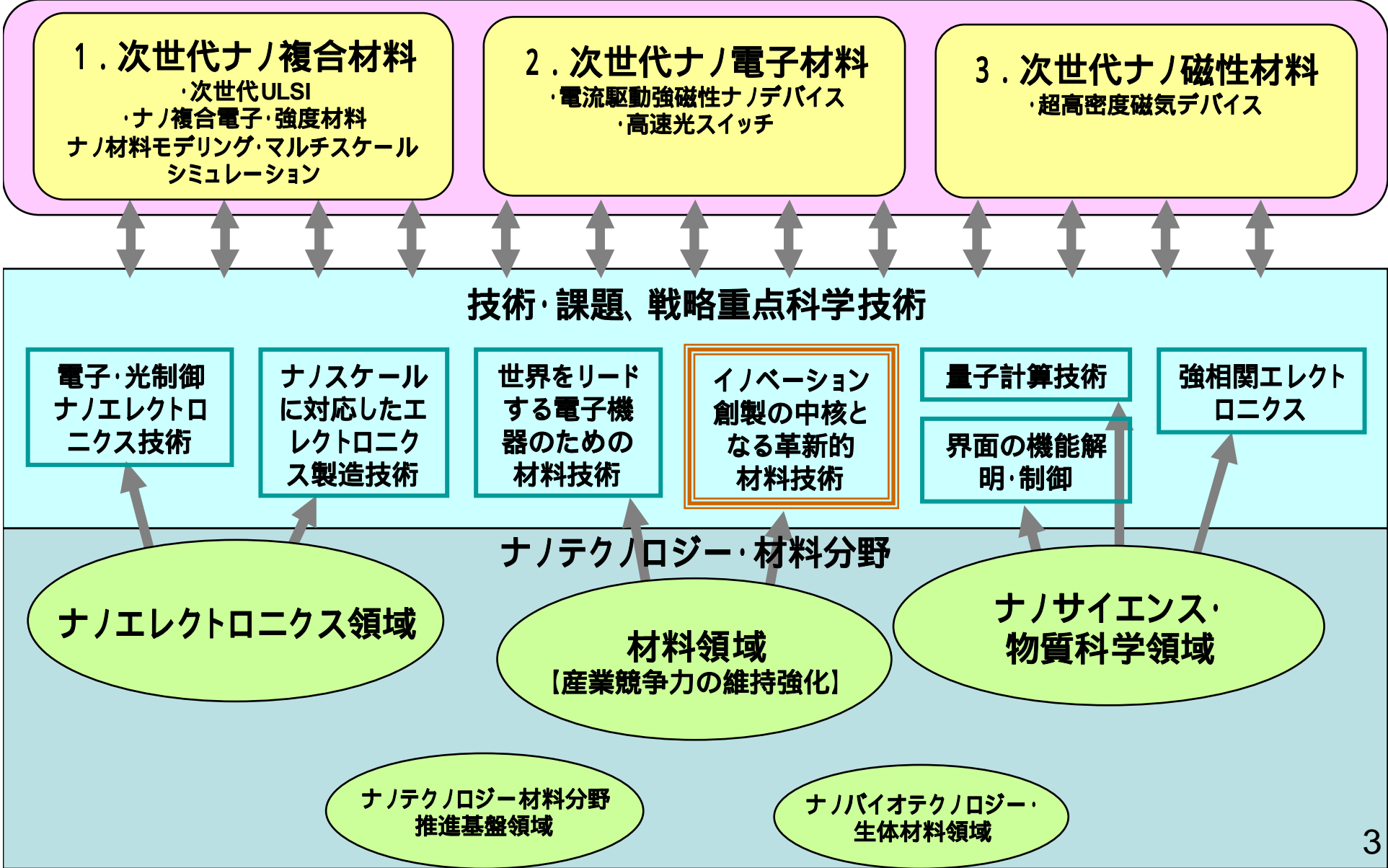
プロジェクト内計算科学者、プロジェクト外計算科学者、実験科学者、産業、からなるWGを構築。

WHEN? 期間は?

2006年度～2010年度の5年間

「知の創造と活用により世界に貢献できる国」、「国際競争力があり持続的発展ができる国」、「安心・安全で質の高い生活のできる国」

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
- 次世代ナノ情報機能・材料 -



次世代情報機能・材料

デバイスの更なる高密度実装を目指し、ボトムアップのナノテクノロジーを取入れた新規な電子デバイスの開発が求められている。実験だけでは困難なナノの世界での技術開発に資する計算科学方法論の確立に貢献する。

ナノスケール物質内電子系の新現象・新機能の探索のための計算科学的技術の構築



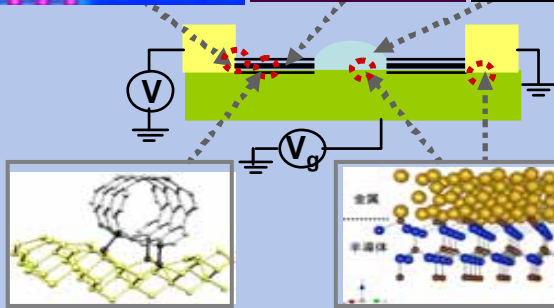
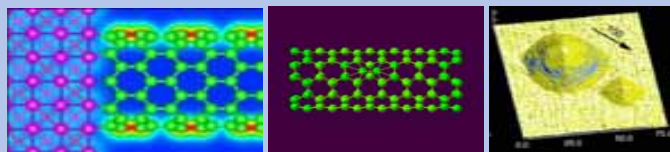
ナノアーキテクチャに対するマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション技術の開発



32nm技術ノードデバイスなど、高速応答・省エネルギーの次世代電子技術への貢献

ナノ電子デバイス

1. 10nmレベルの基本ナノ部品(量子細線、量子ドット)の特性の解析と予測



2. 電極問題、ゲート作用等、デバイスとしての複合系の機能解析と予測

このような研究のためには

10万原子系第一原理計算、電子相関、自己組織化機構、非平衡状態での構造安定性、弾性・非弾性散乱の扱いが必要

しかしながら現時点では、従来の手法を用いても

超大規模電子状態計算のための実用的計算手法、および、電子応答特性における電子相関効果や非平衡状態での構造予測、伝導における散乱現象などの解析技術が不十分。

ボトルネックは

全電子数の3乗で増える計算時間、および、電子相関効果や電子散乱効果の正確な取り扱いの困難さのため、マルチスケールシミュレーションはほとんど不可能。

本グループにおける挑戦的問題解決

超並列計算とオーダーN法による大規模電子状態計算、非平衡グリーン関数法、さらに、マルチスケール法の開発、採用により、次世代スーパーコンピュータの性能をフルに活用

さらには、新規方法論を用いて

電極と量子細線の接合抵抗の解析やナノデバイスのゲートの機構の解明のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションが可能となる。

これらにより、従来は不可能であった

超高密度実装、高速応答、省エネルギーなどを旨とする電子デバイス設計の計算科学的方法論を構築。

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
- 次世代ナノ生体物質 -

1. タンパク質
・高度シミュレーション新規方法論
・イオンチャンネルの分子過程
・ウイルスの分子科学

2. 細胞膜
・癌細胞の分子科学

3. ナノ生体物質輸送
・ミセル、リボソームの化学物質担持
・ミセル、リボソームと細胞膜の相互作用

技術・課題、戦略重点科学技術

生体内の構造・機能などを解明する分子イメージング技術

生体内の分子を操作する技術

DDS・イメージング技術を核とした診断・治療法

超早期診断と低侵襲性治療の実現と一体化を目指す先端的なナノバイオ・医療技術

生体ナノシステムの機構解明

ナノテクノロジー・材料分野

ナノバイオテクノロジー・生体材料領域

ナノサイエンス・物質科学領域

材料領域

ナノテクノロジー・材料分野推進基盤領域

ナノエレクトロニクス領域

次世代ナノ生体物質

生命体を構成するナノ物質のシミュレーションを可能とする方法論を確立することにより、テーラーメイド医療を目指した次世代生命体シミュレーションのナノ基盤を構築する。

ナノスケールの生体物質の構造や機能を分子レベルで理解するための分子科学、計算科学方法論の確立



ナノ生体物質の複合系であるウイルスの分子プロセスを解析することのできる方法論の確立



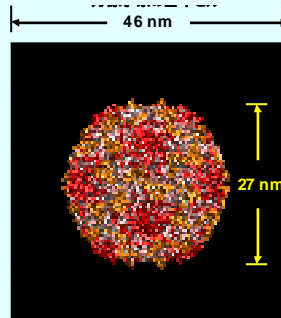
ウイルスクプシドの自由エネルギーレベルでの相互作用、動的なふるまいをシミュレートできる方法論

ウイルスの全原子シミュレーション

分子レベルの安定構造と熱運動
構成タンパク質間の接合構造

熱やpHがウイルスに与える影響
水や空気などの環境とウイルス
化学物質とウイルス構造

細胞膜、タンパク質との相互作用
認識



小児マヒウイルス

ウイルスを分子科学、計算科学の俎上に
将来的には感染機構、免疫機構への展開の可能性
予防法、治療法の開発に寄与

このような研究のためには

ウイルス(溶媒である水も含めると1000万原子系)のグローバルな構造変化、長時間運動を追跡する必要

しかしながら現時点では、分子動力学法を用いても

せいぜいが、10万原子系に対して100ナノ秒の計算、決まった構造の周りの限られた運動が追跡可能なだけ

ボトルネックは

計算機能力が低い、高度に並列化、汎用化した1000万原子系のクーロン相互作用系の実用的な計算方法がない

本グループにおける挑戦的問題解決

大規模系のクーロン相互作用の厳密な評価法の開発や新規アルゴリズムによる完全領域分割化により、次世代スーパーコンピュータの性能をフルに活用

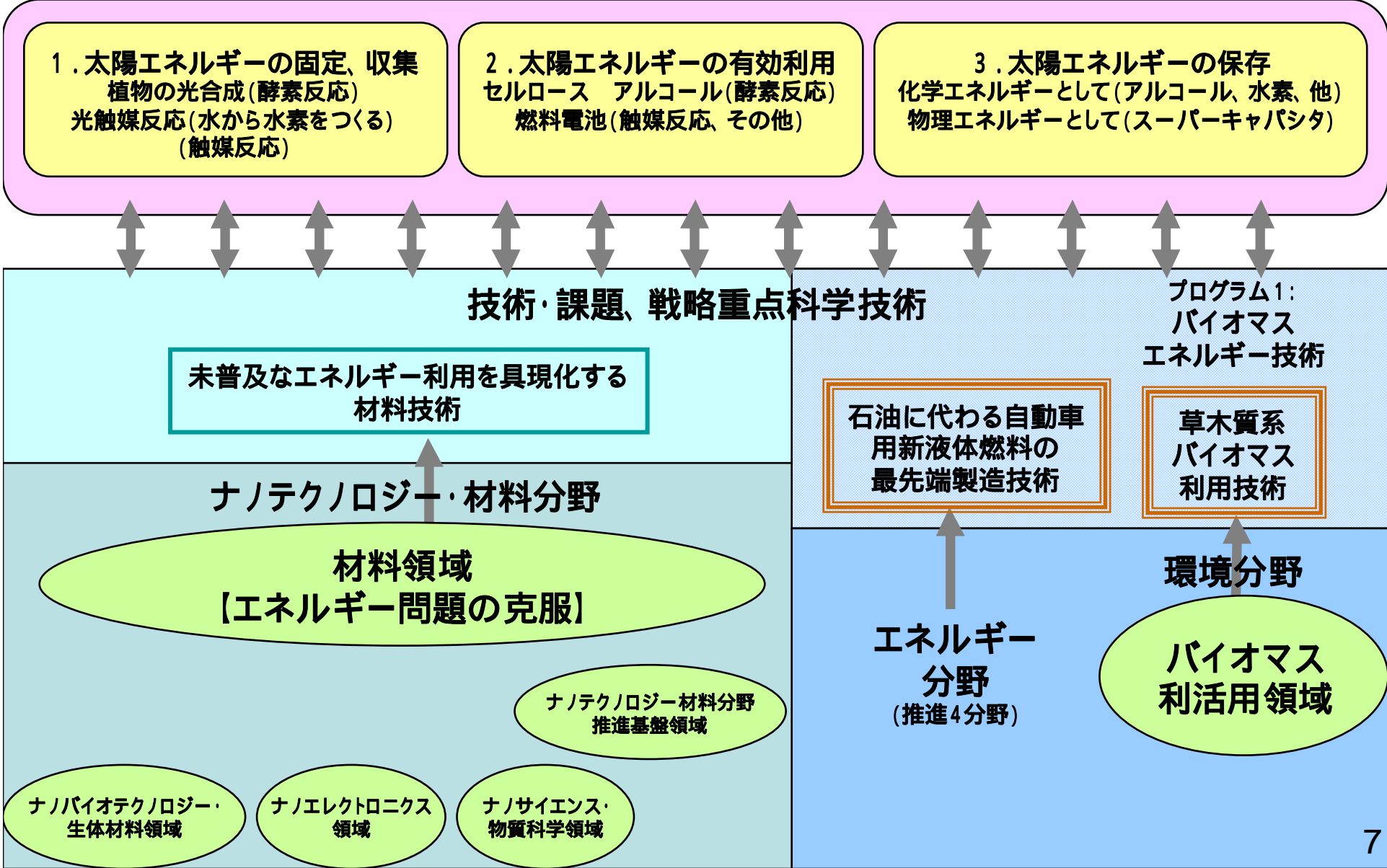
さらには、新規方法論を用いて

RISM法による溶媒効果の評価、エネルギー表示、熱力学的積分法による自由エネルギー計算

これらにより、従来は不可能であった

1000万原子系に対するマイクロ秒の計算により、自由エネルギーレベルでの相互作用、動的なふるまいの解析を実現

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
 - 次世代エネルギー -



次世代エネルギー

化石燃料に代わる恒久的エネルギー源として太陽エネルギーの固定、利用、貯蔵技術、特に、草木質系バイオマスによってエタノールを生成するうえで本質的なプロセスである「酵素反応」の計算科学的方法論を確立する。

酵素反応機構を解明する理論的方法論の構築



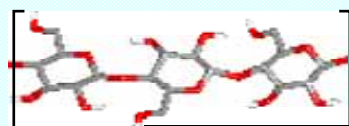
セルロース分解などの酵素反応へ展開



エタノールの生成機構等解明
草木質系バイオマスエネルギー利用技術に貢献

セルロースからアルコールを生成するプロセス

セルロース



セルロース分解酵素



セルロース分解酵素

グルコースなどの単糖類



アルコール発酵
(酵素:チマーゼ)

エタノール

このような研究のためには

酵素反応の特徴として、水の中で働くため水を取り扱える理論が不可欠である。また、化学反応に関する分子(基質)をタンパク質内に取り込ませる分子認識の問題の解決が必要。

しかしながら現時点では、量子化学を用いても

水がない環境下での化学反応、あるいは水中の小分子(100原子程度)しか解析することができない。

ボトルネックは

酵素・触媒反応においては、すべて溶液界面(例:水とタンパク質)の化学反応が関わっている。従来、この種の問題に適用できる方法論は皆無。

本グループにおける挑戦的問題解決

RISM理論(溶液)と量子化学(化学反応)の組合せやFFTの新規アルゴリズムなどの採用により、次世代スーパーコンピュータの性能をフルに活用。

さらには、新規方法論を用いて

RISM理論と3D-RISM理論の組合せより分子認識の問題を解決、両者と量子化学(FMO)の組合せより現実の溶媒中での酵素(1万原子)の電子状態計算を実現

これらにより、従来は不可能であった

セルロースからブドウ糖などの単糖類を生成するプロセスや単糖類からエタノールを生成する等の計算科学的方法論を構築。8

文部科学省
最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト

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

- ナノ分野グランドチャレンジ -

研究推進体制

我が国の分子・物質科学(分子科学、物性科学)の総力を結集(オールジャパン)(分子研、東大物性研、東北大金研、産総研、京大化研、高エネ研、物・材機構、等)。

計算機工学、情報科学分野と連携。

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(158社)と協力・連携。

プロジェクト内計算科学者、プロジェクト外計算科学者、実験科学者、産業、からなるWGを構築(分子科学WG、物性科学WG)。

計算機工学

理化学研究所
「次世代スーパーコンピュータ」
開発実施本部

情報科学

国立情報学
研究所、等

SINET 3

ナノ分野計算科学

大学等

北大、筑波大、東大、
名大、京大、阪大、
岡山大、九大、早大、
慶応大、物・材機構、
等

分子科学 研究所

東北大学
金属材料
研究所

東京大学
物性研究所

京都大学
化学研究所

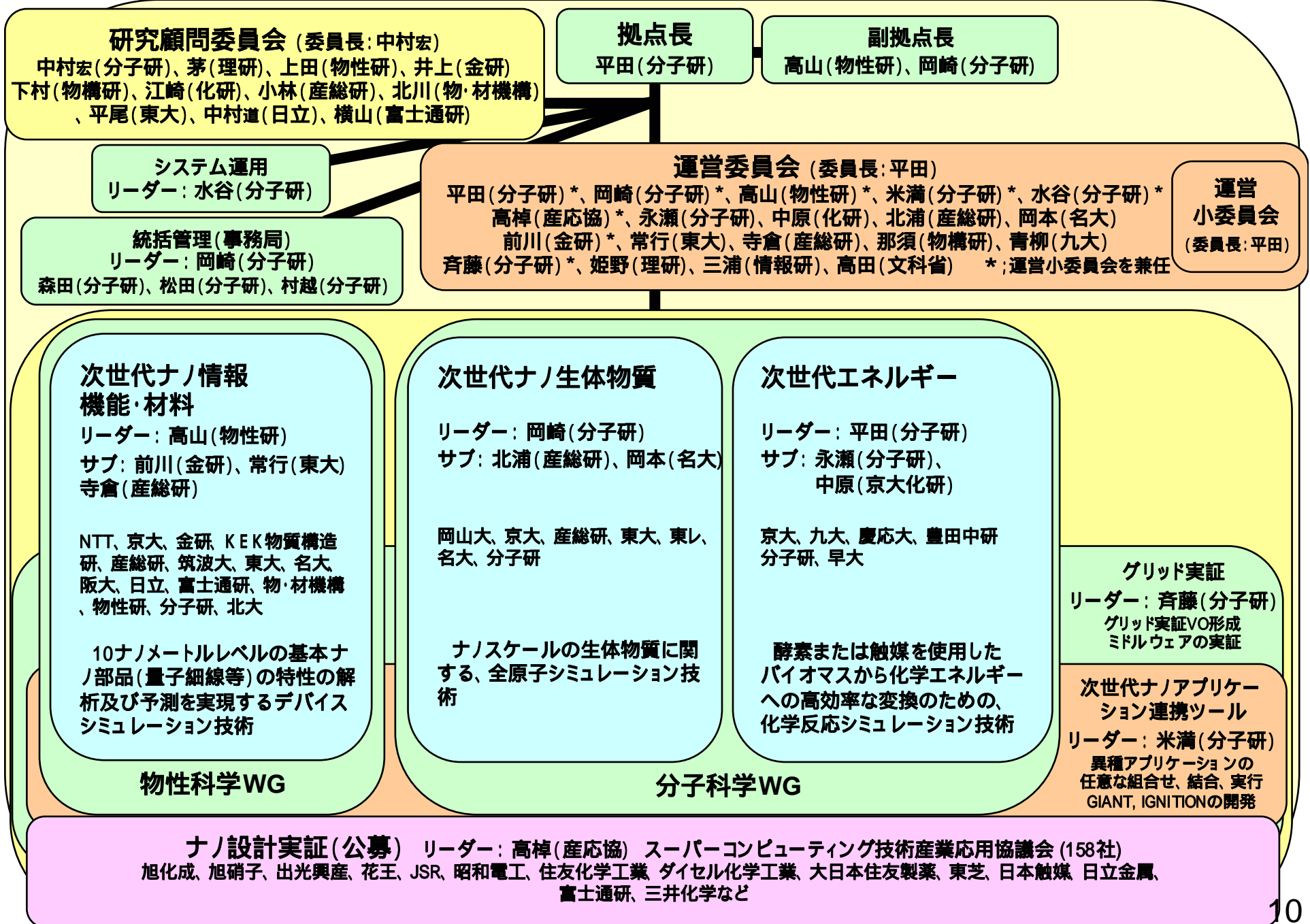
高エネルギー
加速器
研究機構
物質構造
科学研究所

産業技術
総合研究所

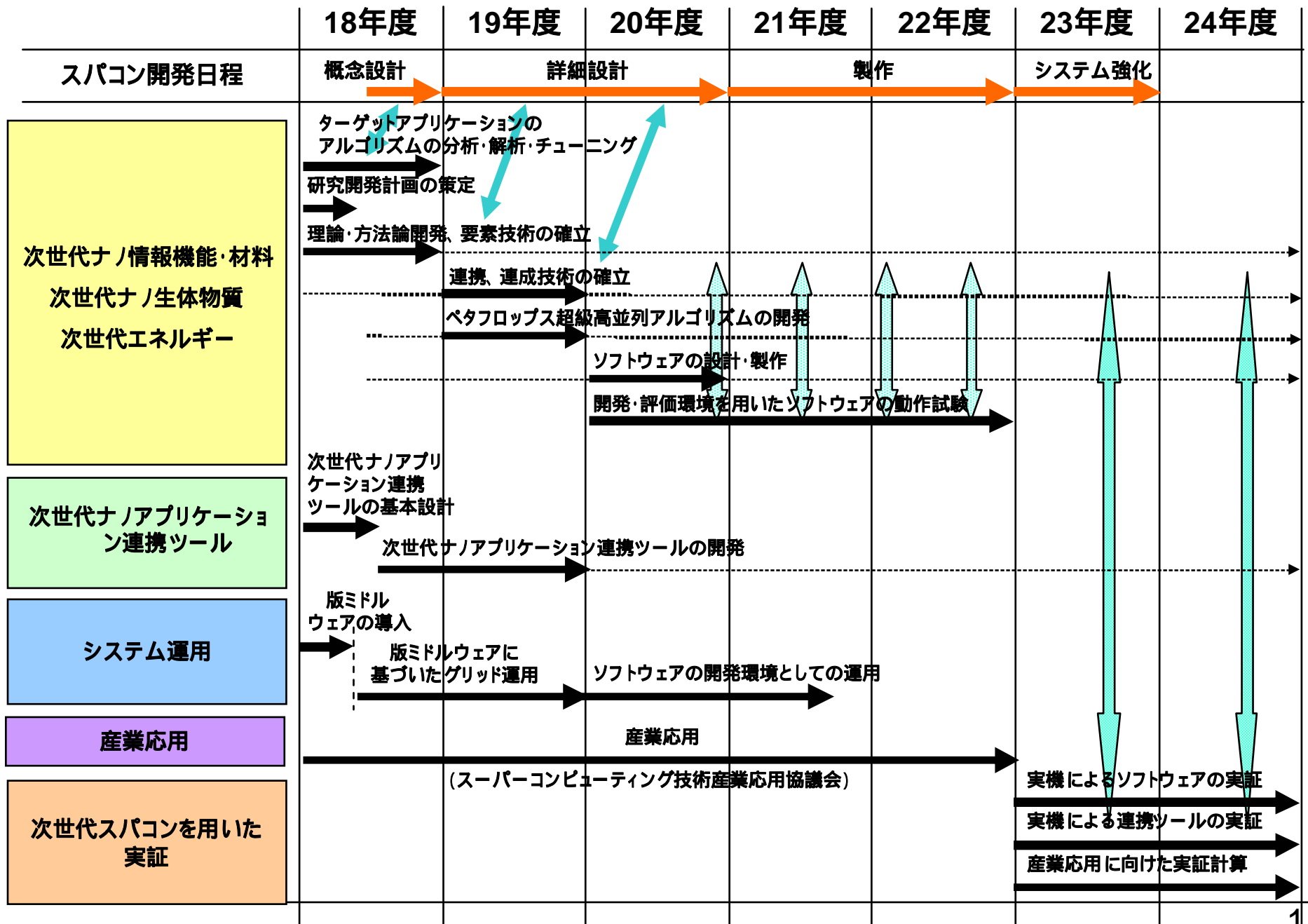
産業

スーパーコンピューティング
技術産業応用協議会
(158社)

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拠点



次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究計画



次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの年次計画

テーマおよびサブテーマ	18年度	19年度	20年度	21年度	22年度
次世代ナノ情報機能・材料	次世代ナノ複合材料、次世代ナノ電子材料、次世代ナノ磁性材料において大規模第一原理電子状態計算や量子モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法、厳密対角化法等の大規模多体電子状態計算手法等を中心にペタフロップス超級スーパーコンピュータの性能が発揮できる方法論や計算アルゴリズム等の開発に着手する。	平成18年度の研究成果を進展させるとともにペタフロップス超級スーパーコンピューティングを実現する高並列アルゴリズムの研究開発を行う。	平成19年度までに研究開発した要素技術をベースに次世代ナノ複合材料、次世代ナノ電子材料、次世代ナノ磁性材料におけるシミュレーションソフトウェアのプロトタイプ開発を行う。	シミュレーションソフトウェアのプロトタイプの実験・評価を行いつつ、改良を行う。	シミュレーションソフトウェアの評価・改良を行うとともに産業応用に向けた実証計算に着手する。 次世代スパコンでの実行に向けた準備を行う。
次世代ナノ生体物質	分子動力学法、モンテカルロ法、RISM法を基軸に、拡張アンサンブル法、FMO-ONIOM法等の方法論やペタフロップス超級スーパーコンピュータの性能が発揮できる計算アルゴリズム等の開発に着手する。	平成18年度の研究成果を進展させ、それらを連成する方法論を確立するとともにペタフロップス超級スーパーコンピューティングを実現する高並列アルゴリズムの研究開発を行う。	平成19年度までに研究開発した要素技術をベースにシミュレーションソフトウェアのプロトタイプ開発を行う。	シミュレーションソフトウェアのプロトタイプの実験・評価を行いつつ、改良を行う	シミュレーションソフトウェアの評価・改良を行うとともに産業応用に向けた実証計算に着手する。 次世代スパコンでの実行に向けた準備を行う。
次世代エネルギー	相対論的効果を含む電子相関を考慮した厳密電子状態計算、FMO法、DFT法、RISM法等の方法論やペタフロップス超級スーパーコンピュータの性能が発揮できる計算アルゴリズムの開発に着手する。	平成18年度の研究成果を進展させ、それらを連成する方法論を確立するとともにペタフロップス超級スーパーコンピューティングを実現する高並列アルゴリズムの研究開発を行う。	平成19年度までに研究開発した要素技術をベースにシミュレーションソフトウェアのプロトタイプ開発を行う。	シミュレーションソフトウェアのプロトタイプの実験・評価を行いつつ、改良を行う	シミュレーションソフトウェアの評価・改良を行うとともに産業応用に向けた実証計算に着手する。 次世代スパコンでの実行に向けた準備を行う。
次世代ナノアプリケーション連携ツール	ナノ初期情報生成ツール (IGNITION)、アプリケーション間データ変換ツール (GIANT) 等の連携ツールの改良を行う。 量子化学計算、分子動力学法、RISM法、固体電子論等の開発プログラムに対し、ペタフロップス超級スーパーコンピュータを利用する連携ツールの機能仕様について検討を行う。	平成18年度の研究成果に基づき、開発を継続実施、進展させるとともにペタフロップス超級スーパーコンピューティングに対する連携ツールの要素技術開発を行う。	平成19年度までに研究開発した要素技術をベースにペタフロップス超級コンピューティング向け連携ツールのプロトタイプ開発を行う。	ペタフロップス超級コンピューティング向け連携ツールの動作試験・評価を行いつつ、改良を行う	ペタフロップス超級コンピューティング向け連携ツールの評価・改良を行うとともに次世代スパコンでの実行に向けた準備を行う。

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(俯瞰図)

