

グランドチャレンジアプリケーションの研究開発について

目次

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 説明資料

ナノ分野グランドチャレンジの目的	1
具体的な達成目標	2
次世代スパコンでの達成目標の例示	3
課題・方法	4
次世代ナノ情報機能・材料	5～6
次世代ナノ生体物質	7～8
次世代エネルギー	9～10
シミュレーションソフトウェアの研究計画	11
ナノ分野グランドチャレンジ	12
シミュレーションソフトウェアの研究開発	13
平成18年度の進捗	14
次世代ナノ情報機能・材料	15
次世代ナノ生体物質	16
次世代エネルギー	17
国際的に見た研究の水準（学術的活動の成果）	18
補足資料（中核アプリケーション研究開発計画）	19
中核アプリケーション一覧	20
中核アプリケーションの概要	21
中核アプリケーションの計画と課題	
（解決すべき問題点）（1）～（6）	22～28

2. 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発 説明資料

目的：背景と目指す方向（1）	29
目的：背景と目指す方向（2）	30
具体的な達成目標	31
分子スケール	32
細胞スケール	33
臓器全身スケール	34
データ解析融合	35
期待される成果	36
具体的な科学技術的な課題	37
研究開発スケジュール（1）	38
研究開発スケジュール（2）	39
平成18年度の進捗状況	40

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

説明資料

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

ナノ分野グランドチャレンジの目的

背景: 科学技術基本計画における重点推進分野で、かつ、計算科学技術の成果の幅広い活用が期待できるナノテクノロジー分野を対象としてグランドチャレンジ・アプリケーションの開発を行う。また、具体的な研究開発課題は、分野別推進戦略において戦略重点科学技術として位置づけられている。なお、研究開発拠点に産学連携体制を構築し、研究成果の産業界への展開を図っていく。

目的: ペタスケールのシミュレーション技術により、ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性を解明し、予測することのできる計算科学理論・方法論を確立することで、ナノテクノロジー・材料分野はもとより、ライフサイエンス分野やエネルギー分野等との融合領域において、飛躍知の発見・発明にとどまらず、産業力の強化に繋げることを目的とする。

- (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を確立する。
- (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を確立する。
- (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を確立する。

具体的な達成目標

次世代スパコンの能力をフルに活用し、電子・原子・分子からのアプローチに基づき、ナノスケールでの物質のふるまいについてのシミュレーションによって、革新的な新材料等の創出を可能とすべく以下を実現するソフトウェアを開発する。

()次世代ナノ情報機能・材料

超大規模電子状態計算のための実用的計算手法等の確立により、10ナノメートルレベルの基本ナノ部品(量子細線等)及びそれらの複合系の特性の解析及び予測を実現するデバイスシミュレーション技術を開発する。

()次世代ナノ生体物質

ナノスケールの生体物質(例えば、ウイルス等)について、原子レベルから、構成する物質全体に至るまで、その動きや構造を現実の状態をふまえて解析を行う全原子シミュレーション技術を開発する。

()次世代エネルギー

バイオマスから化学エネルギーへの酵素または触媒を使用した高効率な変換のために、電子・原子レベルでの高速量子化学計算や現実の溶媒効果を採り入れた統計力学的理論等を踏まえた、化学反応シミュレーション技術を開発する。

()異種アプリケーション連携

上記()、()、()のシミュレーション実行に必要な異種アプリケーション連携ツールを開発する。

達成時期:平成22年度

次世代スーパーコンピュータでの達成目標の例示

() 次世代ナノ情報機能・材料

例えば、ポストシリコンデバイスを創出するため、10万原子系の電子・格子集団の電子状態の第一原理計算。

実効1ペタフロップス

() 次世代ナノ生体物質

例えば、ウイルスの感染機構解明につながるウイルスとタンパク質・細胞膜との相互作用の解析のための1000万原子系の1 μ 秒の全原子シミュレーション。

実効1ペタフロップス

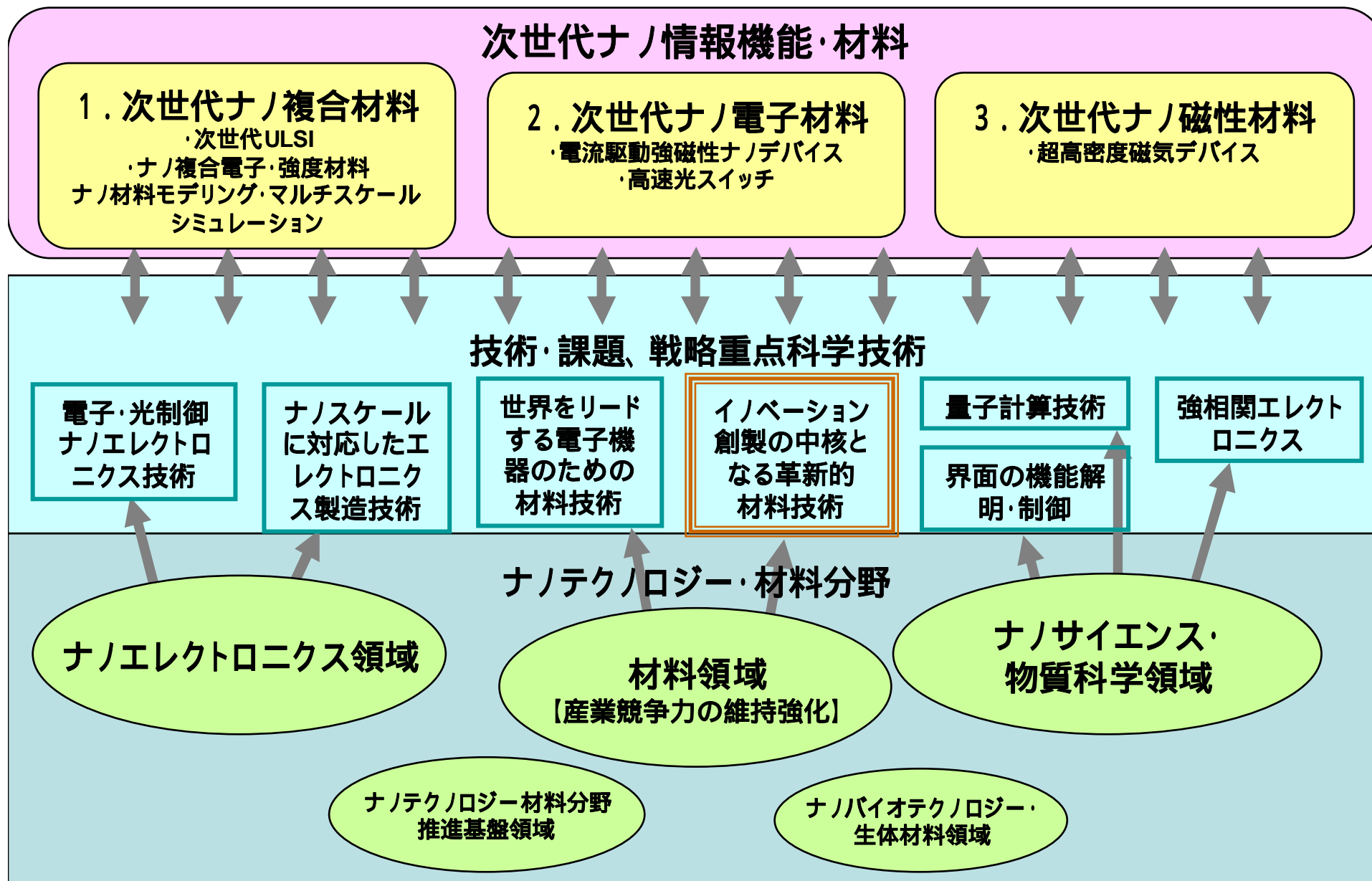
() 次世代エネルギー

例えば、植物セルロースをエタノールに変換する酵素を設計するため、水中1万原子の酵素反応シミュレーション。

実効1ペタフロップス

課題・方法

次世代ナノ情報機能・材料(1)



次世代ナノ情報機能・材料(2)

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



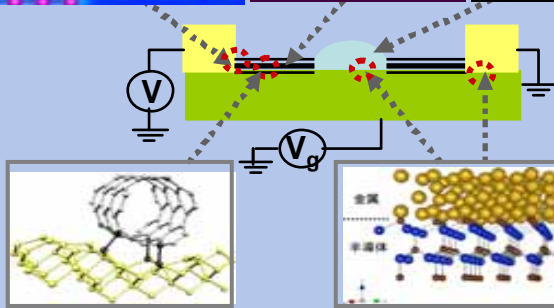
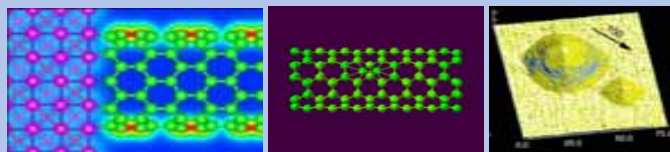
ナノアーキテクチャに対するマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション技術の開発



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

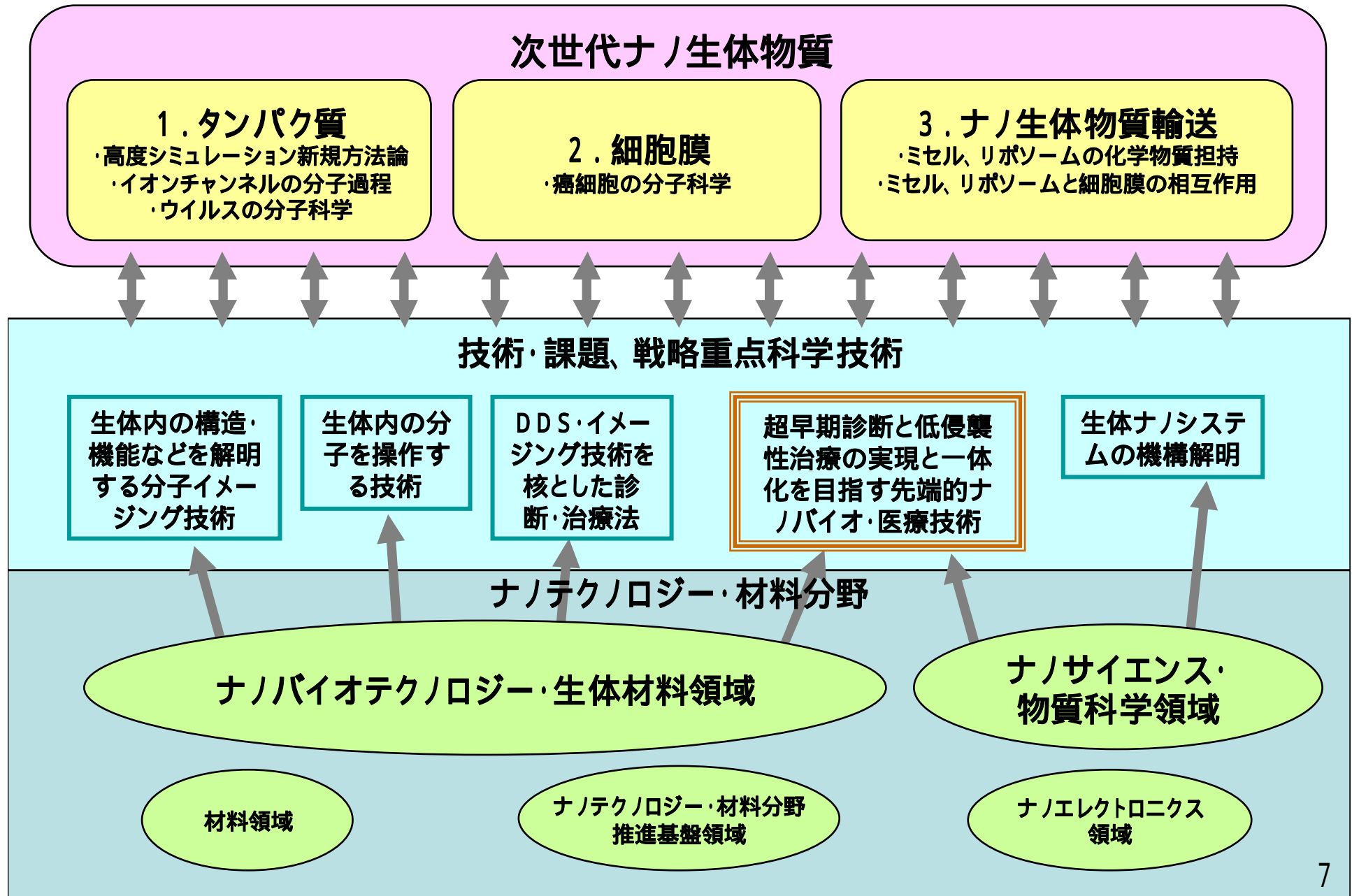
さらには、新規方法論を用いて

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。

次世代ナノ生体物質(1)



次世代ナノ生体物質(2)

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



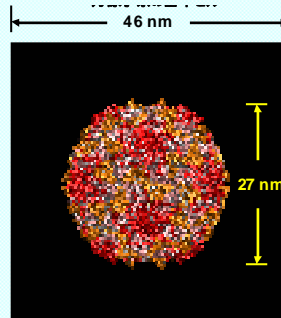
ウイルスカプシドの自由エネルギーレベルでの相互作用、動的なふるまいをシミュレートできる方法論

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

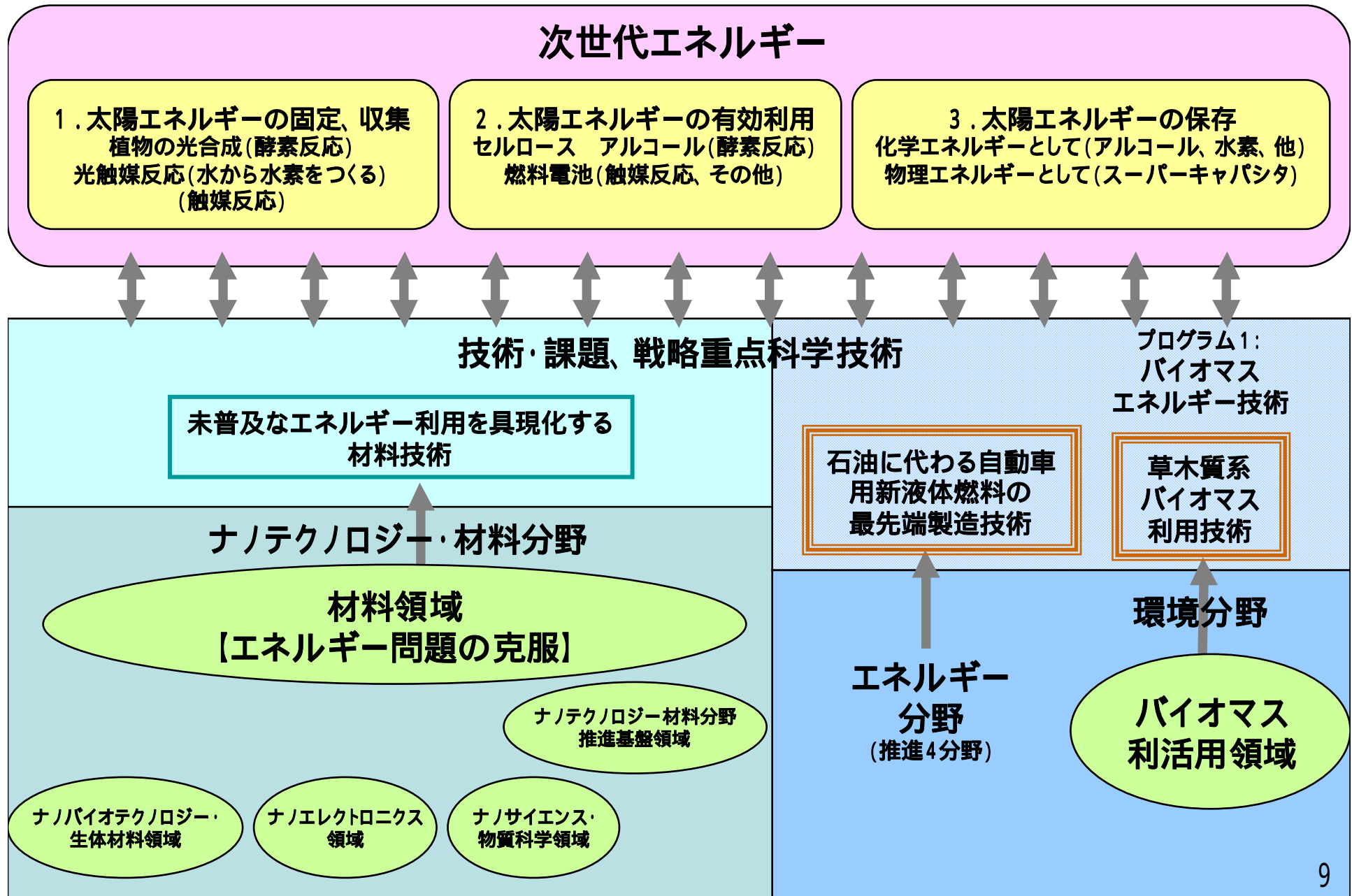
さらには、新規方法論を用いて

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

次世代エネルギー(1)



次世代エネルギー(2)

酵素反応機構を解明する理論的方法論の構築



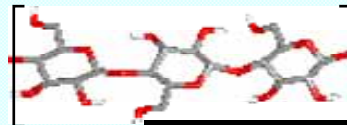
セルロース分解などの酵素反応へ展開



エタノールの生成機構等解明
草本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。

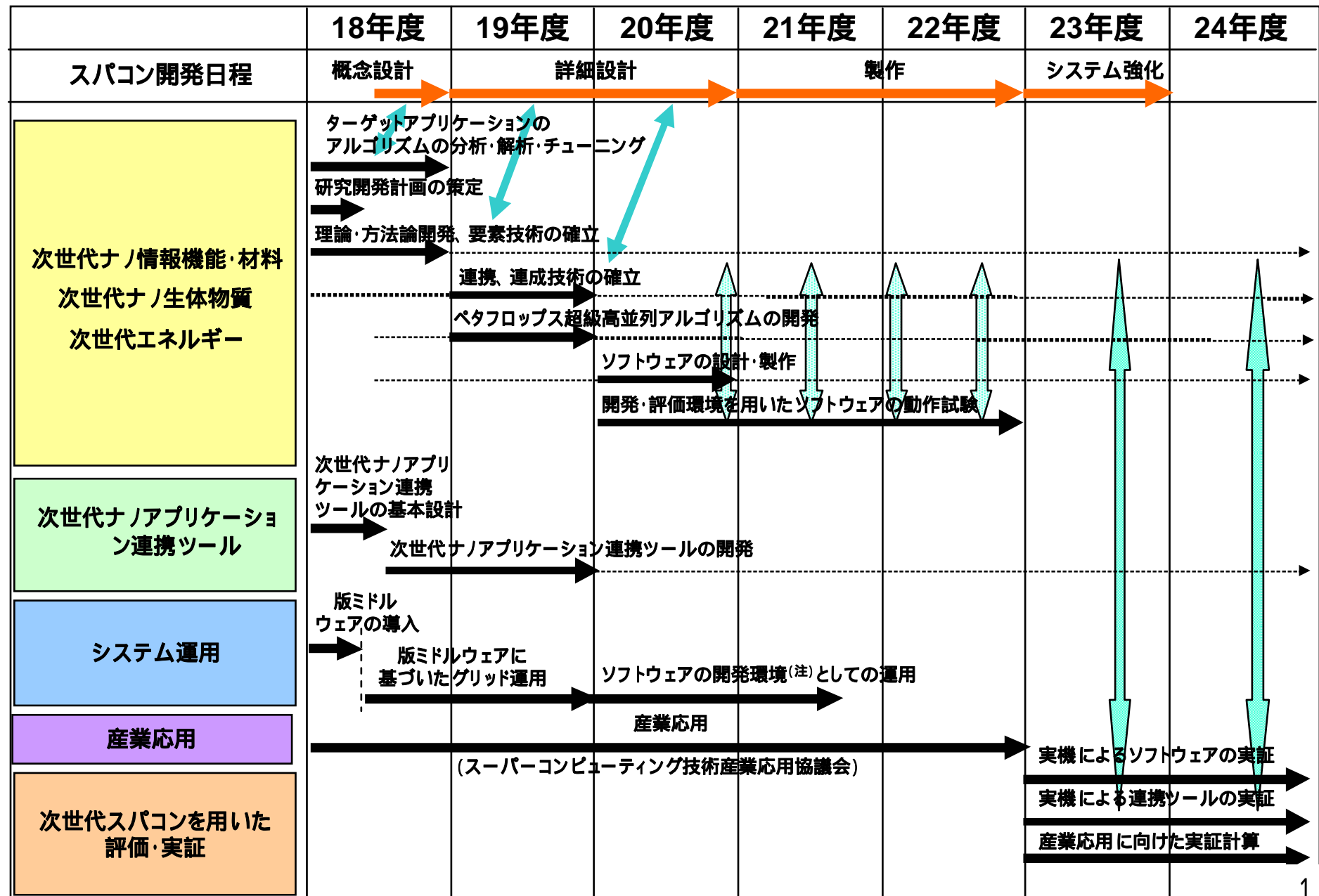
さらには、新規方法論を用いて

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(10^{23} 個)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。

シミュレーションソフトウェアの研究計画



ナノ分野グランドチャレンジ課題

次世代ナノ情報機能・材料

次世代ナノ生体物質

次世代エネルギー



連携ツール

GIANT, IGNITION

次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェア

- ・ナノ分野グランドチャレンジをカバー
- ・ナノ分野計算科学の学術基盤の形成
- ・電子・原子・分子から出発した最先端の理論・方法論
- ・高度並列化アルゴリズム、ソフトウェア
- ・任意のソフトの任意な結合・連成

フェイズ・フィールド法

量子非線形応答

熱力学的積分法

自由エネルギー

化学反応

量子伝導

強相関効果

量子古典混合近似

エネルギー表示法

フラグメントMO法

非平衡状態

経路積分法

自己組織化

粗視化モデル

非断熱遷移

オーダーN

量子モンテカルロ法

拡張アンサンブル法

分子認識

励起状態

密度汎関数法

厳密対角化法

モンテカルロ法

溶媒効果

相対論的CI計算

実空間
第一原理
ナノ物質
シミュレータ

動的
密度行列
繰り込み群法

大規模並列
量子
モンテカルロ法

高並列汎用
分子動力学
シミュレーション
ソフト

RISM/
3D-RISM

高速
量子化学
計算ソフト

中核アプリケーション

方法論開発・超並列化によりペタフロップス級性能を実現

シミュレーションソフトウェアの研究開発(俯瞰図)

