

第1回「戦略的基盤ソフトウェアの開発」シンポジウムを開催

12月12日に東京千代田区にある学士会館において、第1回「戦略的基盤ソフトウェアの開発」シンポジウムが、東京大学生産技術研究所主催、日本学術会議、日本経団連及び東京大学国際・産学共同研究センターの後援で開催されました。文部科学省ITプログラムの一環としての本プロジェクトの目指す方向や取組みについて理解が深まって来たこともあり、参加者は280名、参加企業や機関の数は約140に上り、参加定員150名を大きく上回りました。冒頭の文部科学省研究振興局の石川局長様のご挨拶から会場の学士会館講堂はほぼ満席となり、各講演の中では具体的な質問や意見が参加者から多数出されるなど、活発なシンポジウムとなりました。

実施報告

冒頭のご挨拶に立たれた文部科学省の石川局長は、先ず「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトが生まれた背景について話された。文部科学省では、新たな発展の源泉となる知の創出と新産業の創出を目指して、ITを初めとする4分野を



重点分野として、戦略的かつ重点的に研究開発を推進している。IT分野では、5年以内に一定の成果を見込み実用化・企業化を目指した9つの研究開発課題を設定し、実施機関を公募形式で選定した。「戦略的基盤ソフトウェアの開発」はこの9課題の一つである。戦略的基盤ソフトウェアの開発は、東京大学生産技術研究所を核として、本プロジェクト推進のために新設したベンチャー企業のアドバンスソフト(株)と共同し、さらに広く産官学の研究機関の参画により、ITの計算科学の手法を活用し、ナノ・バイオ流体や構造の解析、製造技術といった重点分野の効率的な推進を図ることを目的としている、と詳しく紹介された。

また、本プロジェクトでの期待する成果についても述べられた。本プログラムの実施を通じて、(1)これらの分野の将来を担う実践的な人材が数多く輩出されること、(2)本プログラムの開発成果が国内外に広く普及し我が国科学技術の発展と産業技術力の強化に大いに寄与すること、等の成果を期待すると話された。

最後に、本プロジェクトにおいては、大学を核とする成果の実用化を複数企業出資によるベンチャー企業設立により推進し企業家の先行的な事例になっており、ここでのノウハウが広く社会

に提供されて、文部科学省が現在進めている産学連携のよきモデルになって頂くことを念願していると締めくくられた。

シンポジウム主催者である東京大学生産技術研究所の西尾所長からは、産学連携の実情と、産学連携の必要性やあるべき姿について講演された。



産学連携ないし産学官連携の必要性は声高に叫ばれているが、一般的に大学の先生にはこの連携に向かって進もうと言う気持ちは必ずしも出来ていない。大学の本来使命は「先導的・普遍的な知の創造」であり、従来からこれを「好奇心から発する研究」という軸足で捉えられているのが実情であると課題提起された。この好奇心を少し分析すると、単に個人の好奇心だけでなく社会課題からの情報があり、これに対する好奇心も含まれ「社会課題から発する研究」も片方の軸足である。これを「二足歩行の大学」と定義され、現在の社会産業と科学技術とが強い相関がある中では、大学は二足歩行をすべきであり、産学連携は当然の帰結であると強調された。他方、企業・産業界に対しては、産学連携の中でグランドデザインやロードマップの共有が重要となり、企業側も大局的な情報発信が肝要であると述べられた。

生産技術研究所は1949年に設立され約50年となるが、その間、基礎研究に止まらず実技術への結実を図るをモットーに運営され、体制や運営面で多面的に取り組んで来た。今後においては「育成型の産学連携」の考え方で進め、本シンポジウムでテーマとしているプログラムに関しては最大限のサポートをしていきたい、と結ばれた。

続いて日本経団連 産業技術委員会 重点化戦略部会長の中村道治氏からは、日本経団連の中で議論してきた内容を踏まえて、(1)これからの産業にとってシミュレーション技術がたいへん大事であること、(2)これを育てるためには産学連携が無くてはならない、一という主旨で基調講演がなされた。



(1)については、半導体、バイオ、創薬、磁気ディスクからの電子機器や新幹線までの豊富な適用事例とともに、米国の国家機関の取組み動向などを含めてシミュレーション技術の産業界での重要性を具体的に説明された。(2)では、シミュレーション技術を中心とする高度コンピューティング・ソフトウェアにおける我が国の現状について、基礎研究では欧米と互角であるが実用ソフトでは大きく遅れをとり、産業界で使用されているのは欧米ソフトがほとんどである、という分析があり、その要因の一つには実証ソフトウェア開発の欠如があると指摘された。この問題解決には、大学等にある優れた基礎研究段階のソフトウェアを産業界が積極的に生かす取組みが必要となり、そのために、産学連携は無くてはならないものであり、仕掛けとしてベンチャー企業を立ち上げていくことも重要であると強調された。



本プロジェクトのリーダーである東京大学生産技術研究所の小林教授からは、プロジェクトの背景・意義、目標、それに具体的な推進についても報告された。例えば、目標については、(1)5つの科学技術計算分野と2つの基盤ソフト分野で100万ステップに上る世界水準のソフトを開発し公開すること、(2)この取組みでドクターを10名作るなど人材を育成すること、(3)大学と企業が連携できる研究拠点を作ること、(4)事業化、改良メンテナンスも含めて戦略的基盤ソフト開発を担えるベンチャー企業を設立すること。一に要約された。



全体の取組みは18年度を完成とする5か年計画であるが、15年度中頃には一部は第1バージョンとしてご利用できる形にまとめていくことや、シンポジウムやワークショップを定期的開催し、FSISNEWSやプロジェクトのホームページ等を通じて、進行状況を逐一報告する旨を紹介された。

午後からは、本プロジェクトの内容について、5つのシミュレーション分野と2つの基盤ソフトをテーマに、各サブグループのリーダーから報告された。

(1)佐藤文俊氏(東京大学生産技術研究所 客員助教授)から『次世代量子化学計算システム』、(2)中野達也氏(国立医薬品食品衛生研究所 主任研究官)から『タンパク質-化学物質相互作用解析システム』、(3)大野隆央氏(独)物質・材料研究機構 計算材料科学研究 副センター長)から『ナノシミュレーション・システム』、(4)谷口伸行氏(東京大学生産技術研究所 助教授)から『次世代流体解析システム』、(5)矢川元基氏(東京大学大学院 教授)から『次世代構造解析システム』、(6)奥田洋司氏(東京大学大学院 助教授)から『HPCモデルウェア』、(7)小池秀耀氏(アドバンスソフト株式会社 副社長)から『統合プラットフォーム』と題して、各々取組み内容について詳細の報告があった。

シンポジウム終了後の懇親会では、文部科学省研究振興局情報課の古西室長から挨拶があり、毎年度ごとに評価を実施するなど、成果を確認しながら着実に推進する、と話された。

今回のシンポジウムの講演内容は、後日に講演集として冊子が発行されますので、詳細は講演集をお読みください。(4ページ末尾に資料請求お問合わせ先を記載しています)

展示デモ会場では、大型の50インチディスプレイを使い裸眼3次元表示により、『タンパク質-化学物質相互作用解析システム』によるエストロゲン受容体の相互作用エネルギー解析結果や『次世代流体解析システム』による燃焼室内流れ解析の結果を分かり易く表現するなど、本プロジェクトの成果を紹介するデモを行った。

● ナノシミュレーション グループの取組み概要

大野 隆央 (独)物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター
副センター長

ナノシミュレーショングループでは、量子力学に基づいた第一原理的な解析手法を用いて、次世代半導体ナノデバイス開発に必要な材料設計、ナノスケールで発現する物性予測・機能設計を行うシステムを研究開発します。ナノプロセス解析、誘電体物性解析、ナノ構造機能解析などの機能を組み込み、ナノテクノロジーを支援するシステムとしての普及を目指します。

次世代半導体ナノデバイス開発を実現するためには、ナノスケールに微細化された表面・界面に関する抜本的な技術的ブレークスルーが必要とされます。特に、ナノスケールに薄膜化された界面構造の形成・制御、ゲート絶縁膜に用いる高品質な高誘電体薄膜の材料探索、ナノ界面構造での電気伝導特性の解明は、シリコンナノデバイス発展の鍵を握っています。また、シリコンナノデバイスの他にも様々なナノ構造のデバイス応用が考えられていますが、そのためには、ナノ構造で初めて発現する新奇な機能の探索、その機能を実現するためのナノ構造の制御に関する新たな知見が必要です。そこで、本グループでは、第一原理計算手法を主な解析手法として用いて、ナノ構造の形成過程と構造安定性、ナノ構造の物性と機能を高精度に解析・予測するシミュレーション・システムを開発する計画です。具体的な開発内容は、次のようなものです。

(1) 共通基盤解析手法: ナノ構造を解析するためには共通基盤となる解析手法が必要です。擬ポテンシャル法(価電子のみを取り扱う手法)を用いた第一原理計算手法、全電子(内殻電子と価電子)による第一原理計算手法に加えて、非周期的境界条件をもつ開放系に対する電子状態計算手法、計算量が系のサイズに比例して増大するオーダーN計算手法などを開発します。

(2) ナノプロセス解析: ナノ構造の形成過程、原子構造、構造安定性、電子状態などを解析します。(a)半導体表面や半導体・酸化物界面などでの反応過程を原子スケールで探索する(14)、(b)形成されたナノスケールの表面・界面の構造、欠陥、吸着物質などに対する実験、すなわち、操作トンネル顕微鏡(STM)像の解析、X線光電子スペクトル(XPS)などを解析する、(c)半導体・絶縁体界面などのナノ表面・界面の電子状態、バンドの不連続性などを解析する、(d)ハイブリッド手法、オ

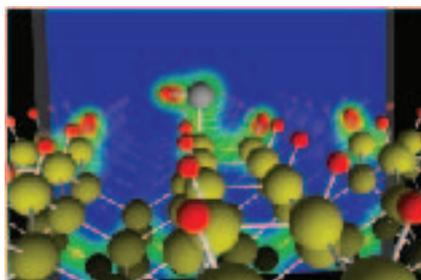
ーダーN手法などの大規模解析手法を用いてメソスケール構造を解析する、などを行います。

(3) 誘電体物性解析: 金属酸化物などの誘電体の誘電応答を解析します。誘電体の誘電応答は周波数に依存して変化し、半導体デバイスの動作周波数領域(数10MHz~数GHz)では、誘電体の電子状態と格子振動状態に起因します(15)。擬ポテンシャル及び全電子第一原理計算手法を用いて、電子系の分極による誘電関数を計算します。また、線形応答理論などで誘電体の格子振動構造を求め、格子系の誘電応答を計算します。バルク結晶ではなく、ゲート絶縁膜に用いる薄膜構造での誘電体の誘電応答も解析します。

(4) ナノ構造機能解析: 電極間のコヒーレントな量子伝導(バリスティック伝導及びトンネル伝導)、ゲート絶縁膜を通してのトンネル電流などを第一原理に基づいて解析します。開放系の境界条件に対する第一原理的な電子状態計算手法を用いて、ランダウアーの公式から量子伝導による電流電圧特性を計算します(16)。

(5) 統合環境構築: ナノシミュレーションのための解析プログラム群の実行制御・実行のために必要なパラメータ・原子座標の設定、計算結果の表示・解析を容易にするためのインタラクティブなインターフェース(GUI)を整備します。

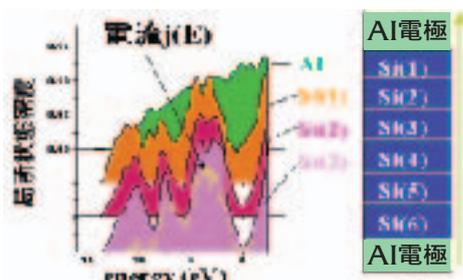
以上のように、本システムは、擬ポテンシャル法及び全電子法の第一原理計算手法、周期的及び解放系境界条件での計算手法、大規模計算手法、線形応答計算手法など、ナノ物質に対する量子論的解析の基盤解析手法を含んでいます。今後立ち上げるユーザー会からの助言・要望に応じて内容の充実を図り、ナノテクノロジー研究開発に有用なシステムとして公開する計画です。



14 水素終端Si(001)表面上でのSi吸着過程

誘電率解析例				
誘電率	SiO ₂		ZrSiO ₄	
	計算	実測	計算	実測
電子系	2.5	2.4	4.8	3.8
格子系	1.1	1.5	未計算	8.8
全誘電率	3.6	3.9	未計算	12.6

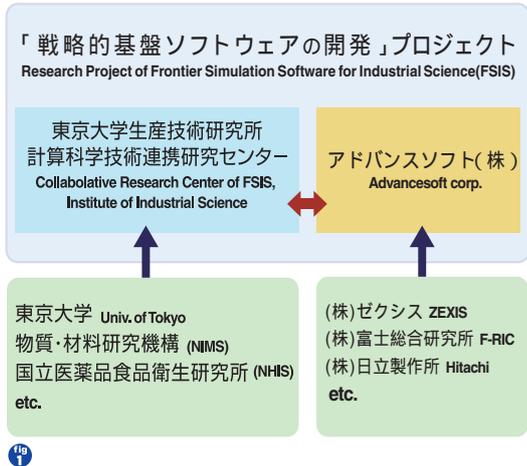
15 誘電体の誘電率計算



16 金属/半導体界面のショットキー障壁

文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」は世界水準の戦略的基盤ソフトウェアを開発すると共に、我が国の高度コンピューティング(HPC)用ソフトウェア開発・保守体制の確立を目標としており、次の目標を達成することを目指しています。(1)重点4分野をカバーする複雑・大規模な世界水準の戦略的基盤ソフトウェアを開発し公開する。(2)戦略ソフトを開発できるトップレベルの人材を世界最先端のソフトウェア開発を通じて育成する。博士10人以上、トップクラスの大規模ソフトウェア開発プロジェクトマネージャー5人以上、戦略的ソフトウェア開発技術者・研究者100名以上を育成する(3)HPC用戦略的基盤ソフトウェア開発の大学と企業の連携による研究拠点の構築する。(東京大学生産技術研究所に計算科学技術連携研究センターを設立しました)(4)我が国のHPC戦略的基盤ソフトウェア開発を担えるベンチャー企業を設立する。(アドバンスソフト株式会社が設立されました)

本プロジェクトの特徴のひとつは人材の育成にあります。本年度はプロジェクト推進の運営体制(19)を構築するとともに、人材の確保に力を注ぎ、多くの人材を育成する体制(20)を確立しました。



- 代表者 小林敏雄(東京大学) • 運営委員 矢川元基、山本良一(東京大学) 村上周三(慶応義塾大学)
- 次世代量子化学計算 佐藤文俊、吉廣保、田原才静、上野哲哉、恒川直樹、牟田元(東京大学) 柏木浩、西川宜孝、村松伸哉、稲葉亨、小池聡(アドバンスソフト(株))
- タンパク質-化学物質相互作用解析 中野達也、中田琴子(国立医薬品食品衛生研究所) 北浦和夫(産業技術総合研究所) 愛澤昌弘(東京大学) 佐藤智之、福澤薫、大河内郁雄、山口貴史、阿部行伸、谷森奏一郎、小谷野和郎、岩澤義郎、雨宮克樹(アドバンスソフト(株))
- ナノシミュレーション 大野隆央(独)物質・材料研究機構) 宇田毅(株)日立製作所) 杉野修(東京大学) 山内淳(株)東芝) 山崎隆浩(富士通(株)) 浜田典昭(東京理科大学) 濱田智之、近藤恒、中村美道(東京大学) 佐々木一郎、斎藤肇雄、岡本政邦、前一樹、溝内秀男、別役潔、伊藤信(アドバンスソフト(株))
- 次世代流体解析 谷口伸行、加藤千幸、大島まり、佐賀徹雄、伊藤裕一、大石正道、富永卓司、Md.Ashrat,Uddin、井田真人、弘畑幹鐘、王宏、Guo,Yang(東京大学) 森西洋平(名古屋工業大学) 坪倉誠(東京工業大学) 都築浩一(株)日立製作所) 山田敏生(トヨタ自動車(株)) 笈雅行、張会来、Byvaltsev,Petr、北村修、後藤伸寿、山出吉伸(アドバンスソフト(株))
- 次世代構造解析 矢川元基、吉村忍、越塚誠一、Dennis,Brian、張允碩、宋武燮、高橋昭如、石原大輔、藤澤智光(東京大学) 関東康祐(豊橋技術科学大学) 金山寛、塩谷隆二(九州大学) 菊池正紀(東京理科大学) 中林靖(東洋大学) 野口裕久(慶応義塾大学) 和田義孝(諏訪東京理科大学) 三好昭生(株)インサイト) 秋葉博(株)アライドエンジニアリング) 稲葉正和(アドバンスソフト(株)) 淀薫(株)インサイト) 大窪敏裕(株)アライドエンジニアリング)
- 統合プラットフォーム 小池秀耀(アドバンスソフト(株)) 姜玉雁(東京大学) 松原聖、加藤昭史、板井久美(株)富士総合研究所)
- HPCミドルウェア 中村壽、中島研吾、飯塚幹夫、松井宏晃、陳莉、ブラバカレ・ギリ、江連真一、上ノ山憲博、殷峻(財)高度情報科学技術研究機構) 奥田洋司(東京大学)
- プロジェクト管理 小池秀耀、畑田敏夫、山本義行、間吾純男、堀内秀雄、榎山あかね(アドバンスソフト(株))
- 知的財産権 畑田敏夫 • 計算機管理 谷口伸行、坂井洋志、小野広一郎 • 事務局 谷口伸行、武原稔子、皆川広司

ワークショップ開催予定

第4回「HPCミドルウェア」・「統合プラットフォーム」

平成15年2月21日(金) 13:30~17:00 東京大学生産技術研究所 第1会議室

- 「地震波の伝播と強震動の数値シミュレーション」
大規模並列計算環境とミドルウェア
古村 孝志 東京大学地震研究所 助教授
- 「HPC-MWプロジェクトの概要」
奥田 洋司 東京大学大学院工学系研究科 助教授
- 「並列プログラミングモデルの動向 Flat MPI vs. Hybrid」
中島 研吾 (財)高度情報科学技術研究機構 主任研究員
- 「材料設計統合システム開発プロジェクト」
二瓶 正俊 (独)物質・材料研究機構 主席研究員
- 「PSEの現状と動向」
松原 聖 (株)富士総合研究所 計算科学技術研究センター 室長
- 「統合プラットフォームの開発」
小池 秀耀 アドバンスソフト(株) 副社長

参加費無料

お申し込みは下記URLにてお願いします。

ワークショップお申し込み、資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661 FAX : 03-5452-6662 E-mail : office@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp URL : http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/