

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名:凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発
—大規模原子情報の疎視化・再構成技法・疎視的理論の開発—

2. 研究代表者:長岡 正隆(名古屋大学大学院情報科学研究科 教授)

3. 研究概要

本研究課題においては、凝集化学反応系シミュレーションの基盤技術を開発することを大きな狙いとする。H18年度～H20年度現在までの研究期間を通して、非経験的 QM/MM-MD シミュレーションを可能とする 3 つの基盤技法と QM/MM インタフェース(QM/MM-IF) (H20 年度末公開予定)を開発した。また、並行コンピューティング技法による凝集化学反応系シミュレーションの実現を目的として、アンサンブル MD(EMD)法と、そのための並行コンピューティング技法の開発を進めた。その結果、本課題における研究開発の第 1 段階が達成でき、H20 年度後半以降の第 2 段階への基礎が確立した。

一方、H19年度からは、モデル作成も含めた、新しい粗視化理論の開発を目的として、大規模原子運動情報から粗視化パラメータを取り出す粗視化変換技法の開発と粗視化理論の構築を進めている。本開発は基礎的かつ理論的な研究開発であるため、残りの全研究開発期間を費やす予定である。

全研究期間の半分を経過した現時点で、予定した研究項目の開発工程は順調な進捗を示しており、第 1 段階の基礎的研究開発の成果を踏まえて、今後(H21 年度以降)の第 2 段階では、現実系への応用とフィードバックなどの評価研究も並行して進め、汎用システム化のための最適な設計と開発を調整していく予定である。

4. 中間報告結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

本研究課題は、気体における気体運動論とナビエ・ストークス方程式の関係を凝集化学反応系において求めようとする計画で、誰もが挑戦したいアルゴリズムの開発である。この微視的化学反応を粗視化するパラメータの発見を統計的手法の開発に求めている。この方向は古典的な手法と言える。これまでの成果は、最も重要な粗視化パラメータの探索にはまだ至っていないものの、QM/MM-MD インタフェースの開発、アンサンブル MD 法(非平衡解析システムを含む)の開発と、ある程度順調に推移しており、全体的にはほぼ当初計画どおり進捗している。

新たな展開の観点からは、一部計画よりも延長、一部前倒しもあったが、新たな展開というほどのことでもない。

成果の科学的・技術的インパクトでは、本研究は、新しい手法の研究開発や知見を得るための研究ではなく、凝集化学反応系シミュレーションの基盤技術の開発であり、科学的インパクトは標準的なものである。しかし、粗視化変換技法の開発は、この分野の大きな課題であり、成果が出るならば、技術的なインパクトは大きい。類似研究との比較では、実用性や目指すところは理解できるが、国際競争から見た本研究の位置付けや、計算技術上の優位性・独創性が必ずしも明らかでないように思われる。

研究実施体制については、名大中心に実施されており、プロジェクト推進という点では、効率的である。しながら、研究テーマが広範囲の応用を含むので、他分野あるいは同種研究分野との研究交流や連携の機会を設けることにより、一層の成果が期待できると思われる。

研究費の執行については、当初計画どおりであり、特に問題となる事項は無い。

現在までの研究成果としては、QM/MM-MD インタフェースの開発、アンサンブル MD 法(非平衡解析システムを含む)の開発が挙げられる。

4-2. 今後の研究に向けて

今後の研究の進め方については、研究テーマとしては大きく3つあるが、各々現状の進め方で大きな問題は無いと思われる。研究計画に沿って着実な研究の進展を図り、現実系への応用並びに汎用システム化のための最適設計を早急に図ることが肝要であると考ええる。異分野或いは同種分野との研究交流も必要であろう。この一環として、国際シンポジウム開催を薦める。最も重要なことは原子・分子の微視的情報に基づく統計理論を確立することであり、その実現に向けて開発予定のインタフェースが役立つことを期待する。なお、もう少し計算科学としての冒険的要素があると、より望ましい。

今後見込まれる成果については、第一のテーマである基盤技術の開発においては、広く流布されている汎用アプリケーション(Gaussian, Amber)のインタフェース開発であり、これについては既に成果が出ていると言える。アンサンブル MD の手法も超並列コンピュータ向きであり、実用的という観点での成果が期待できる。粗視化理論については、成果は今のところ不明確である。

戦略目標に向けての貢献、成果の社会的なインパクトの見通しについては、マルチスケールシミュレーションという観点から本領域に貢献でき、粗視化パラメータの発展方程式が発見されれば非平衡現象の解明への大きな貢献となると考えられる。三つのテーマ共、実用的な観点からは応用分野が広いので、社会的なインパクトはかなり期待できる。

4-3. 総合評価

成果の積分値は充分高く、情報科学で拓く chemistry で評価が高い点が良い。応用分野との密接な連携でさらに成果も期待でき、シミュレーション科学の領域で一つのインパクトを生み出している。

研究の進め方、進捗状況、達成目標など、妥当である。本研究は、新しい手法の研究開発や知見を得るというものではなく、現存の手法を組み合わせたり、そのインタフェースを開発するものであるため、成果はこの研究開発が終了した後に出てくるものである。その為に、本研究開発の後半では、終了後の先を見た準備をしておくことも必要であろう。アンサンブル MD、粗視化技法共、実用的価値は大きいと思われるので、今後の研究開発に期待したい。