

## 論 説

# 文部科学省 IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」 の目指すもの

Destination of RR 2002 Project on Frontier Simulation Software for Industrial Science

小林 敏 雄\*

Toshio KOBAYASHI

2002年5月に“戦略的ソフトウェアの開発”プロジェクトが文部科学省 IT プログラムの一環としてスタートした。ソフトウェア中心のプロジェクトとしてはわが国で初めての大型プロジェクトであると認識しており、プロジェクトの立ち上げに従事したものとして関係各位に謝意を表するとともに責任の重さを痛感している。

計算科学技術は、科学技術の発展、産業生産力の強化、環境・安全のための技術開発等を支える共通基盤であり、21世紀の key technology のひとつである。2002年11月に米国 Baltimore においてスーパーコンピュータ 2002 が開催され、高速コンピュータを中心とするハードウェアの発達・普及の現状が詳細に披露されている。しかしながらこれらのハードウェアを活用し得る高度なソフトウェアの実現がなければハードウェアの進展も意味をなさないことになる。特に新しい産業の創出や環境・安全の飛躍的な改善には計算科学技術ソフトウェアの関与が不可欠である。現在の計算科学技術のレベルは実際の事業に役立てるには十分な高さにあるとは必ずしもいえないが、今後、高度のソフトウェア技術の発展は必ず産業の推進力になるものと信じる。そのためには、長期的ビジョンに基づく戦略的な取り組みが重要である。

計算科学技術は20世紀後半の産業においても技術革新のひとつの原動力になってきた。このことを推進したのは

米国であり、1980年代の後半から国家戦略として計算科学技術の開発に取り組み、その技術は多くの分野で、特に実証レベルでのソフトウェアという面で世界をリードしているといえる。図1に示すように、わが国では、大学などにおける先進的基礎研究は欧米に引けをとらないレベルにあるものが少なくないが、産業活用につながる実証的な開発作業がなされていないところに重大な欠陥がある。創出されるであろう新しい産業分野においては、この轍を踏んではならない。“戦略的ソフトウェアの開発”プロジェクトはこのような背景のもとで東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターにおいてスタートした。このプロジェクトの目標は次の4項目である。

- (1) 科学技術の重点分野において産業や環境・安全に直接寄与することのできる世界水準の実用的科学技術計算ソフトウェアを、量子化学計算、タンパク質・化学物質相互作用解析、ナノシミュレーション、次世代流体解析、次世代構造解析の5つを対象として開発し、公開する。
- (2) 実用的科学技術計算ソフトウェアの開発を通じて、新たに大規模計算ソフトウェアを開発できる人材を育成する。
- (3) 実用的科学技術計算ソフトウェアをより広範囲に、より高度に進展させるための開発研究拠点を構築する。

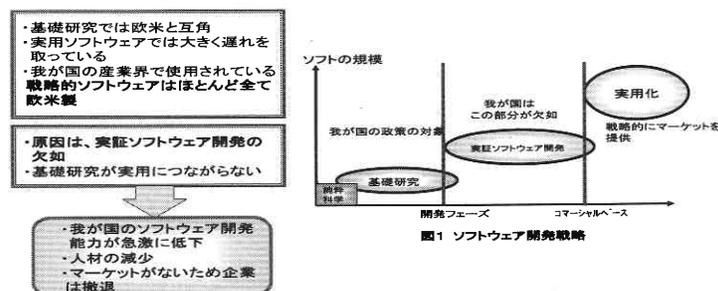


図1 計算科学技術ソフトウェア開発の課題

\*東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター

(4) 実用的科学技術計算ソフトウェアの開発・運用を担える産業組織を設立する。

すなわち、開発するソフトウェアの対象としては、新しい産業分野であるバイオテクノロジーとナノテクノロジーに係わるコンピュータシミュレーション技術を、また人間生活の根幹である環境・安全に直接的に係わる基盤的シミュレーション技術を想定して、上記の5つの選定した。また、科学技術計算ソフトウェアが実用技術として産業に受け入れられるには、実証データが完備され、かつ絶えず改良され、メンテナンスの継続がなされることが肝要であり、そのため、本プロジェクトは先端的科学技術計算ソフトウェアの開発にとどまらず、それを産業における基盤ツールとして自立的に発展できる態勢を作ることを大きな目標とした。

さて、上述のようにこのプロジェクトでは5つの物理化学シミュレーションを対象とするが、その内容とグループ長は次の通りである。

- ① 次世代量子化学計算グループ (グループ長：佐藤文俊・東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター客員助教授)：タンパク質のための精密な量子化学アプリケーションソフトウェアを構築し、ポストゲノム時代のバイオテクノロジーに寄与する。
- ② タンパク質・化学物質相互作用解析グループ (グループ長：中野達也・国立医薬品食品衛生研究所主任研究官)：量子論に基づいたタンパク質と化学物質との相互作用を *in silico* で解析するシステムを開発し、医薬品等の効率的な分子設計を可能にする。
- ③ ナノシミュレーショングループ (グループ長＝大野隆央・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)：第一原理計算手法を主な解析手法として用い、ナノ構造の形成・構造・物性・機能を高精度に解析予測することのできるシミュレーションシステムを開発する。
- ④ 次世代流体解析グループ (グループ長＝谷口伸行・東京大学生産技術研究所 助教授)：ラージエディシミュレーションに基づく高品質の乱流予測によって動力・エネルギー・環境のデジタルデザインシステムを開発する。

⑤ 次世代構造解析グループ (グループ長＝矢川元基・東京大学大学院工学系研究科教授)：複合現象を自由自在に解析し最適設計のための逆解析をも可能とする大規模連成構造解析システムを開発する。

これらグループはいずれも実証データを備えた実用ソフトウェアを提供することになる。さらに、このプロジェクトでは、

- ⑥ 総合プラットフォームグループ (グループ長＝松原聖・富士総合研究所計算科学技術センター室長) と
- ⑦ HPC ミドルウェアグループ (グループ長＝奥田洋司・東京大学大学院工学系研究科助教授)

を置いて、上述の5つの大規模計算を将来のコンピュータネットワーク環境で効果的に運用するための基礎情報技術を併せて開発することを目指している。

前述したようにこのプロジェクトの特徴は産業に直結するソフトウェアの開発、すなわち、実証データをもち、実現象に適用できるソフトウェアを開発することにある。そのために図2に示すように計算科学技術ソフトウェアを開発、保守する専門会社との連携を実現している。

2002年度はプロジェクト初年度であり、研究体制の確立が課題であったが、2002年度末における参画者は100名規模となった。2002年10月に第1回ワークショップ、“次世代流体解析・次世代構造解析”を開催したのを皮きりに、11月に第2回ワークショップ“次世代量子化学計算・タンパク質—化学物質相互作用解析”を、2003年1月に“ナノシミュレーション”を、2月に“HPC ミドルウェアと統合プラットフォーム”、また、2002年12月には第1回シンポジウム“IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」”を開催した。さらに2003年5月にはそれぞれのグループから、ProteinDF, BioStation, PHASE, Front Flow/blue, Front Flow/red, NEXST, PSE Workbench, HPC-MW の8つのソフトウェアを公開するまでに至った。プロジェクト開始の2002年6月から約1年を経た現在、プロジェクトを軌道に乗せることができたことに対して、文部省情報課、東京大学および東京大学生産技術研究所、東京大学国際産学共同研究センターに重ねて感謝する。

(2003年4月11日受理)

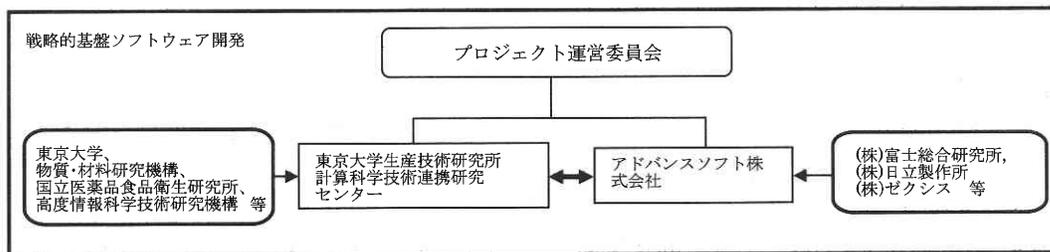


図2 プロジェクトの研究開発実施体制