

中間評価報告書

研究課題名: 仮想実験技術を活用した材料設計統合システムの開発

研究責任者: 二瓶正俊 材料研究所主席研究員

評価委員会日時: 平成15年12月2日14時—17時

評価委員会委員長及び委員名:

島崎眞昭 京都大学大学院工学研究科 教授 (委員長)

高田俊和 日本電気(株)基礎研究所 主席研究員

小池秀耀 アドバンスソフト(株) 代表取締役

笠井秀明 大阪大学大学院工学研究科 教授

記入年月日: 平成15年 12 月 23 日

| 評価の観点 | 評 価 結 果 |
|--|---|
| <p>[課題の設定] 中間評価段階における新規性・独創性、科学的・技術的重要性、社会的・経済的重要性、国家・社会・産業界の要請、新規産業分野、緊急性、波及効果など</p> | <p>GRID 環境は科学技術の研究の進め方に大きな変革をもたらす可能性が高く世界各国が緊急的国家的プロジェクトとして競って研究開発を行っているが、科学技術の研究や産業界で具体的に有効性を発揮するためには、関連情報基盤技術だけでなく、個別の応用システムの開発が欠かせない。この場合、個別のソフトウェアを多数組み合わせ、大規模システムとして容易に統合化できかつ WEB ブラウザ等の使いやすいユーザーインターフェースを備えていることがきわめて重要である。本プロジェクトは物質材料の分野で、仮想実験プラットフォームと材料設計アプリケーションの同時開発を目標とし、'タスクフロー'という考え方で計算プロセスを柔軟に制御できる融通性に富む統合化システムを実現しようとしており、この分野での先進性は極めて高いと認められる。従来の実験主導と比較して、計算主導の物質・材料設計は経済性が高く、効率的であり、環境負荷の点からも望ましく、本研究のシステムが成功し広く使われれば、今後の産業界の要請に答えられ、その波及効果は極めて大きいと期待できる。</p> |
| <p>[課題への取組状況] ・研究手法・実験方法の新規性・独創性、精密さ・緻密さ、妥当性 ・研究・実験の進捗状況の観点からみた、年次計画、予算規模、人員規模、研究設備購入計画、計画外事象の発生の有無とその対応の適否 ・推進・運営体制の観点から、研究責任者の裁量、国際的展開、学協会との連携・協力など</p> | <ul style="list-style-type: none"> ・ GRID 等の異機種並列分散環境での計算機シミュレーションでは、個別に開発されたプログラムの協調、統合が重要である。計算機シミュレーションプログラムを部品化し、タスクフローの考え方で計算プロセスを組み立てる手法を採用し、プロトタイプ稼動に成功していることは極めて高く評価できる。 ・ ソフトウェア間でのデータ共有に先進的な XML の方式を物質・材料設計の分野として採用している事も評価できる。プログラムの部品化は、計算機能の付加、改良をしやすくし、したがって多くの外部の研究者の協力を得る可能性を高めている。それゆえ多くの研究者が参画できるような場が設定され、材料設計アプリケーションモジュールの充実が加速されることが望まれる。 ・ 計画として中間段階では順調と判断されるので、年次計画問題がないと考えられる。 ・ WEB での公開等の民間への技術移転促進の努力、ITBL 機関との連携等推進・運営体制上の適切な努力が行われている。ただし、人員規模についてみると、プログラムの開発には、多くの工数が必要であり、且つ集中的に投入することが求められることを考えたとき、本プロジェクトの推進体制には、問題があると指摘せざるを得ない。30名程度のスタッフが開発に関与しているが、その多くが兼任であり、且つ一割程度の工数しか本開発に割いていないことは、如何にコンポーネント化を主体とするシステム開発でも、問題であると思われる。また、専任の研究者が、1名というのも意外な感を拭えない。統合プラットフォームの備えるべき基本機能を実現しているので、中間成果として評価されるべきと考えるが、今後の2カ年で開発すべき課題も多々あるはずであり、本成果の幅広い活用のためにも、開発体制の再検討を求めたい。 ・ 国際的展開については SC における発表などの努力がなされ妥当であるが、さらに材料分野での国際的展開の可能性も検討することが望まれる。 |

| | | | | |
|--|--|----------------------------|------------------------------|------------------------|
| <p>[研究の成果] 研究成果の内容について、中間段階として期待通りの成果が十分出ているか？ 研究成果の発表状況は十分であるか？</p> | <p>予定通り、材料設計システムのプロトタイプが完成し、WEB を通じて公開されている。本システムでは、計算材料科学の分野における Multi-Scale Simulation システムを構築し、インターネットから制御する基本機能を実現しているため、<u>中間段階としては十分な成果と考えられる</u>。また、GUI による可視化や数値データのグラフ表示など、ユーザーインターフェースも備えており、統合プラットフォームとして必要な機能が備えられている点も、評価される。また、GRID が今日程認知されていない、本プロジェクト発足時に、“Taskflow” という考え方を採用し、ワークフロー的視点に立ったプログラム制御を推進した点も、重要な成果として評価されるべきと思われる。最終段階に向けて、材料設計アプリケーションモジュールの一層の充実が望まれる。</p> <p>研究発表の状況としては、本材料設計システムとの関連が必ずしも明示されていないが、シミュレーションによる材料基礎研究の成果を含めると、十分な数の研究発表がなされている。統合プラットフォームに関する学术论文の数は少ないが、これは、ソフトウェア開発は実験装置の開発と同様に論文を多数生産することが本質的に難しいためである。この種の研究成果の発表は開発されたソフトウェアの公開、普及状況を重視し評価すべきであり、本研究においては材料設計システムが WEB で公開されており、評価できる。今後この機能の一層の充実を求めたい。</p> | | | |
| <p>[総合評価] 今後の研究方向、発展性、応用分野など</p> | <p>本プロジェクトは GRID 等の異機種分散並列計算環境における、1) 多数ソフトウェア部品の融通性に富む統合化を可能にするシステムの実現、2) 材料設計分野のソフトウェア間での XML による中間データの共有化の実現、3) 実用的材料設計システムの開発という学術的重要性も高く、産業技術にも直結する課題に挑戦し、中間段階として、順調な成果を挙げている。このような基盤技術は事前評価でも強調されているように、産業界に広く普及し、多くのユーザーにより継続的に強化、発展していくことが重要である。そのためには、既に採用されている WEB による公開、産業界への技術移転のための NPO やコンソーシアムの活用、リナックスのようなソースの公開などが考えられる。ソースが公開されれば、学界、産業界の誰でも自由に利用し、改良することが可能であり、リナックスの場合のようにシステムそのものの発展につながれば、極めて有効である。</p> <p>本システムで採用された物質材料分野のデータ共有を XML で記述する方式については、データの共有化の標準の確立のため極めて重要であり、<u>物質材料分野でのプロトコル確立への努力を望みたい</u>。</p> | | | |
| <p>右記のS,A,B,Fに○を付けてください。</p> | <p>S: 当初の計画以上に成果を上げており、計画を前倒しして継続すべきである。</p> | <p>A: 当初の計画通り継続すべきである。</p> | <p>B: 計画を変更した上で継続すべきである。</p> | <p>F: 計画を中止すべきである。</p> |