

事後評価報告書

評価委員会開催日：平成18年9月11日

評価委員：（敬称略、順不同）

城 和貴 奈良女子大学理学部情報科学科・学科長 教授 （主担当）

松宮 徹 新日本製鐵（株）技術開発本部 フェロー （主担当）

関村直人 東京大学大学院工学系研究科 教授

野中 勇 石川島播磨重工業（株）技術開発本部 主幹

記入年月日：平成19年1月3日

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
研究責任者名及び所属・役職	二瓶 正俊 材料研究所 所長付 主席研究員 （現在：材料ラボ 主席研究員）
【実施期間、使用研究費、参加人数】	実施期間：平成13年度～平成17年度 使用研究費（期間合計）：運営費交付金：375百万円、外部資金：0百万円 参加人数：（平成17年度）10人（専任：1人、併任：8人、事務補助員：1人）
【研究全体の目的、目標、概要】	<p>研究目的及び具体的な研究目標：</p> <p>本研究は、平成13年度日本新生特別枠として政府により認められたITBL (IT Based Laboratory) 関連研究のひとつとして位置づけられる。これは、旧科技庁傘下6機関（物材機構、JAXA、理研、防災科研、原研、JST）の共同開発として行われたもので、各機関が所有する計算資源の共有を目指したもので、スパコンのGrid環境や、ポータルサイトなどのITBL環境上でのアプリケーション利用を目的としたものである。物材機構は、アプリケーションを開発し、それをITBL環境に提供するための技術開発を目的とした研究開発を実施した。この研究開発では、新規物質・材料の創生や探索に欠かせない計算材料科学を、専門家のみならず技術者や教育関係者が容易に利用可能な環境をシステムとして構築し、ITBL環境を利用して提供することを目的としている。</p> <p>研究計画概要：</p> <p>当機構における研究開発は、当初3年間はITBL研究との密接な連携を薄め、機構独自の研究開発を行うことにした。これは、ITBL環境構築にも時間を要し、機関毎にそれぞれ予算的、体制的な事情が異なることから、各機関合意の上のことである。当機構が目指したシステム開発は、インターネットからのアクセスを前提に、誰もが使えるグラフィカルなユーザインタフェースと、各種計算材料科学アプリケーションを実行するシステムのコアの部分の開発を行うことにある。システムの開発と、そのシステムの上で動かすアプリケーションソフトウェアの開発を並行して行った。後半の2年間はITBLとの連携を強めた。</p>
【全研究期間の成果等（研究全体）】	<p>研究成果（アウトプット）、成果から生み出された効果・効用（アウトカム）、波及効果（インパクト）：</p> <p>情報科学技術的側面：</p> <p>GRID環境は科学技術の今後の方向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。本研究は、日本がこの分野で初めて取り組んだ国家的プロジェクトであるITBLプロジェクトのひとつとして実行された。そこで重要視されたのがアプリケーションの充実であった。そのアプリケーションの要件としては、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インタ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することは、この分野</p>

	<p>での先進性は極めて高いと考えられる。 物質・材料科学的側面： 本研究は、計算機の中に物質・材料のあるいくつかの断面でのコンピュータモデルを構築し、ユーザがそれを自由自在に取り扱える環境の構築を目指したものである。そのため、新規に物質や材料を開発するといったこの分野の他のプロジェクトとは性格を異にしている。最新の計算材料科学研究の成果をソフトウェアとしてシステムに組み込み、これをユーザが利用することにより従来の実験主導の物質・材料研究開発に代わる、計算主導の物質・材料設計への道が拓けたと考えられる。本研究で開発したシステムにより、研究と実用との架け橋になるものが初めて実現できたと位置づけられる。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、従来から多くの科学分野で試みられてきたが、物質・材料設計分野では初めての試みであった。本研究で開発したシステムが今後広く使われれば、産業界の要請にも答えられ、その波及効果は極めて大きいと思われる。</p> <p>論文：26+25. 9件*、プロシーディングス：8+5. 15件*、解説・総説：7+11. 3件*、招待講演数：0+23. 45件*（*：+の前の数値は平成13年の数値、+の後ろは研究の寄与率を考慮した平成14-17年の値） 特許出願：0件、登録：0件、実施許諾：0件</p>
【評価項目】	コメ ント お よ び 評 価 点
<p>マネジメント 実施体制 (サブテーマ間関係、外部との共同研究の有効性)</p>	<p>コメント： 本プロジェクトは、国のITBL関連研究の一つであり、課題そのものが物材機構のミッションとしては難しい面があった。そのような状況で、物材機構のミッションも踏まえて、それなりの実施体制を構築し、計算材料工学を目指して考えられるマルチフィジックスのアプリケーションソフトの開発がシステムティックに進められた。しかし、専任職員が1名で他はすべて併任職員ということになり、マンパワーが不足していた感は否めない。ただ、このように多くの研究者が併任で、材料開発に携わりながら、アプリケーションソフトの開発に取り組む組織もあってよいと考える。</p>
<p>*評価点（10点満点）：9 評価基準</p>	<p>9点：研究の効率向上に明確に寄与している 7点：よく考えられている 5点：平均的な体制 3点：もう少し考慮の余地があった 1点：プロジェクト遂行の支障となった</p>
<p>アウトプット (論文、特許等の直接の成果。費用対効果を考慮)</p>	<p>コメント： 材料設計統合プラットフォーム(MatEX)構築が一つのフィロソフィーのもとに成されたことが、本プロジェクトの最大のアウトプットである。開発はITBLのミドルウェアを有効利用して行われており、最小限の負荷で大きな成果を挙げている。また、計算材料工学を目指して、考えられる一通りのソフトウェアを開発しており、今後の発展の十分なベースを構築したと評価できる。しかし、各参画機関との共同研究の成果が必ずしも十分には見えてこない。 研究寄与率を考慮した、論文数や招待講演数には問題はない。専任職員1名のプロジェクトとしては、成果は極めて優れている。ただし、個々のテーマの論文数は多いが、全体システムのオリジナリティが不足している印象がある。</p>
<p>*評価点（10点満点）：8 評価基準</p>	<p>9点：質・量共に平均的プロジェクトの水準を大きく上回っている 7点：平均的水準より優れる 5点：平均的水準 3点：少ない 1点：問題がある</p>

目標の達成度 その他アウトカム、波及 効果	コメント： 計算材料科学のツールが常にサイエンスの先端を捉えて整備され、NIMSの材料設計部門の充実に貢献した。これにより、材料関係研究におけるシミュレーションの価値を高め、認識させたと評価できる。このようにツールやシステムが開発された一方で、材料設計そのものへの寄与については必ずしも十分には検討されていない。この他、成果を普及させるためにMatEXを一般公開して、教育分野での利用も図るべきであると考え。
* 評価点（10点満点）：9 評価基準	9点：一つの分野を形成した 7点：目標は十分達成され、当該分野に影響を与えた 5点：目標はなんとか達成された 3点：目標の部分的な達成 1点：目標達成にはほど遠い
総合評価 研究全体に対する総合的な所見を記入。 また上記設定評価項目に含まれないその他の評価ポイントがあれば追加してコメント。	コメント： 材料設計システムとしては、初めての試みであり、統合されたところに新しさがある。今後はサイエンスの領域を超えて、実用化に向けての取り組みを進め、本システムの有効性を継続的に高めて行くことが重要である。そのための基盤は十分に形成されている。モデル構築支援システムをどうするのかとか、タスクフローとどう結びつくかについての検討も必要である。 今後も材料開発を目的とした国のプロジェクトに参画して、実際に活かされる計算材料科学システムが強化され発展することが、日本にとって重要である。オリジナルなソフトウェアを開発することで、国際的な貢献も果たせると思う。また、MatEXを最先端研究で使うため、京速計算機への拡張を検討してもらいたい。
* 総合評価点（10点満点）：8 評価基準	9点：すべての点において模範的に優れている 7点：総合的に優れている 5点：平均的 3点：期待されたほどではなかった 1点：税金の無駄遣いである

なお評価点は、公表時一般にもわかり易いように、以下のようにS, A, B, Cを併記します。

9、10 S
8 A+
6、7 A
5 A-
3、4 B
0～2 C

評価点まとめ

マネジメント実施体制 (内外連携)	アウトプット	目的達成度、アウトカム 波及効果	総合評価
S	A+	S	A+