

## 21世紀COEプログラム 平成16年度採択拠点中間評価結果

<b>機関名</b>	名古屋大学	<b>拠点番号</b>	K17
<b>申請分野</b>	K<革新的な学術分野>		
<b>拠点プログラム名称 (英訳名)</b>	計算科学フロンティア (Frontiers of Computational Science)		
<b>研究分野及びキーワード</b>	<研究分野: 計算科学>(計算アルゴリズム)(計算流体力学)(ナノサイエンス) (バイオインフォマティクス)(複雑システム)		
<b>専攻等名</b>	工学研究科計算理工学専攻、工学研究科マテリアル理工学専攻(平成16年4月1日付けで工学研究科応用物理学専攻等から改組)、工学研究科航空宇宙工学専攻、情報科学研究科複雑系科学専攻、情報科学研究科計算機数理科学専攻、経済学研究科社会経済システム専攻、情報連携基盤センター、理学研究科物質理学専攻		
<b>事業推進担当者</b>	(拠点リーダー一名) 金田 行雄 他17名		

### ◇拠点形成の目的、必要性・重要性等：大学からの報告書（平成18年4月現在）を抜粋

#### <本拠点がカバーする学問分野について>

科学・技術、社会の諸分野に現れる複雑で多様な現象を、日進月歩で進化飛躍するコンピュータを高度に駆使して解明する計算科学分野。超多自由度を持つ系に挑戦し、非経験的な計算科学手法を開拓する革新的な学術分野。

#### <本拠点の目的>

本拠点の目的は、アルゴリズムやソフトコンピューティングなどの計算科学の基盤分野とナノサイエンス、ゲノム科学、流体力学など広範な応用諸分野の研究者の連携の基に、超多自由度系の現象、とくに従来、不確実な直感や想像に基づき経験的にしか扱えなかった複雑・多次元・非線形な現象や、現実の制約により実験や観測が不可能な現象を、より下位レベルの原理からシミュレーション世界を構築することによって解明する計算科学を推進することである。また、そのセンスと技術を身につけた若手研究者・技術者を育成することを目的とする。

#### <計画・当初目的に対する進捗状況等>

当初目的に沿って、拠点形成は概ね順調に進んでいる。超多自由度系に対する非経験的な計算科学の確立に向けて、国内外で評価の高い研究成果が順調に出ている。その例として、乱流の世界最大規模の直接数値シミュレーションデータ解析に基づくエネルギー輸送の統計法則の解明、計算科学的方法による精密結晶構造解析法の開発と応用、分子シミュレーションによる生体分子システムの動作機構の解明、蛋白質立体構造の新予測法の開発、量子力学と古典力学を組み合わせた動力学シミュレーションによる光受容蛋白質の機能発現機構の解明、非対称線形方程式の解法(Bi-CR法)が挙げられる。また、複数専攻共通の大学院履修科目の新規開講など、計算科学教育のカリキュラム作成を進めている。国際会議や国際共同研究への若手研究者・大学院生の参加を通して、次代の計算科学を担う若手研究者が順調に育ちつつある。

#### <本拠点の特色>

本拠点の特色は計算機高度利用技術の基盤形成、計算科学の応用展開分野、およびそれらの融合に実績をもつ研究グループを全学横断的に組織し、基盤と応用各分野の強い連携による計算科学の研究教育を目指す点に特色がある。これによって、個別断片的に散在しがちな計算科学研究教育の現状を改め、計算科学をより強力に推進することができる。さらに、超多自由度系に挑戦し得る量的革新によって現象認識の計算科学的非経験化という質的革新を実現し、計算科学のフロンティアを開拓するところに大きな特色がある。

#### <本拠点のCOEとしての重要性・発展性>

コンピュータの高度利用による科学技術を推進し、社会のさまざまな課題に応えることは、高度情報化社会にとって最重要課題の一つである。我が国は欧米に比べて、先進的コンピュータが広く学術研究に利用されるという学術優位性を持っている。本拠点はその利点を活用し、基盤と応用各分野の連携の基に、超多自由度系に挑戦する計算科学における量から質への転換と、現象認識の非経験化の進展を国際的にリードできる発展性を有している。

#### <本プログラム終了後に期待される研究・教育の成果>

超多自由度系に対する新しい非経験的計算科学手法の展開が期待される。とくに基盤研究分野では、(1)高精度・超高速計算アルゴリズム、(2)多次元非線形データのためのソフトコンピューティング・高性能プログラミング技術手法が開発され、応用展開分野では、(A)超多自由度流体系のシミュレーション技術の開発と乱流の非経験的モデルの開発・応用、(B)複雑な超多自由度マイクロ系の非経験的解析手法の開発とナノテクノロジーへの応用、(C)ゲノムワイドの網羅的構造解析、(D)データの蓄積が不十分な分野の非経験化手法の構築などが期待される。また、計算科学教育体系の構築に資するとともに、次世代の計算科学を担う研究者・技術者を育成する研究教育拠点として発展することが期待される。

#### <本拠点における学術的・社会的意義等>

本COEプログラムは、今日の高性能コンピュータと計算科学技術を縦横に駆使・展開して、自然・社会現象をそのまま超多自由度系として捉え、量から質への転換と、現象認識の非経験化とを達成しようとする学術的意義の高いものである。計算科学技術が生む学術的変革と概念的変革の一般社会への普及・浸透という面から見ても、極めて社会的意義が大きい。また、基礎から応用まで広範な知識をもった、次世代を担う若手研究者・技術者を養成する点でも意義は大きい。

## ◇ 21世紀COEプログラム委員会における所見

### (総括評価)

当初計画は順調に実施に移され、現行の努力を継続することによって目的達成が可能と判断される。

### (コメント)

本拠点における研究活動は活発で、各分野でそれぞれ見るべき成果を挙げている。また、計算科学という共通の目的に向けて、手法の開発、知識の共有、相互の交流が進んでいる。コンピュータそのものの速度と容量は今後さらに大きく進展することが予想される今、非線形多自由度複雑系の解明に向けて、ペタ級のコンピュータを利用して計算科学がどのような方法論を提供できるのかを確かめること、それに向けてアルゴリズムを開発することはきわめて重要と考える。本COEは、人材育成をも含めて、そのための活動を積極的に展開しており、十分に評価できる。