

21世紀COEプログラム 平成16年度採択拠点事業結果報告書

1. 機関の 代表者 (学長)	(大学名)	名古屋大学	機関番号	13901
	(ふりがな<ローマ字>) (氏名)	HAMAGUCHI MICHINARI 濱口 道成		

## 2. 大学の将来構想

名古屋大学は、我が国の基幹的総合大学の一つとして、「ものづくり」の地域的伝統のうえに、輝かしい学術上の成果を挙げ、多くの優れた人材を輩出してきた。全国に先駆けて、大学の理念・長期目標とも言うべき「名古屋大学学術憲章」を制定し、研究教育と社会貢献の基本目標、研究教育体制と大学運営の基本方針を定めた。この長期目標を達成するために、研究教育の高度化・国際化と、学術の発展に伴う教育研究組織の再編・整備の大枠を定め、申請時の将来構想とした。その詳細は、以下のとおりである。

### 1) 研究教育組織の整備

**1-1) 高等研究院の役割:** 本学における国際的に優れた研究者を選び、その研究をさらに伸ばすことによって、その知的存在感を世界と一般社会に向けて強く発信する任務を負う学内アカデミーとして、平成14年度に設置した。21世紀COEプログラムとの強い連携の下に、本学を代表する研究プロジェクトの優先的支援を行う。

**1-2) 研究教育組織の再編・新設:** 学術の発展に伴い、融合型分野の学術的重要性が増大している。これに伴い、教育研究組織の再編を行う。平成13年度に環境学研究科、平成15年度に情報科学研究科を設置し、本COE申請時点(平成16年1月)では、平成16年度のエコトピア科学研究機構設置が予定されていた。

**1-3) 全学共通基盤組織の整備:** 研究教育基盤整備のために、すでに博物館、核燃料管理施設、情報連携基盤センター、評価企画室、学生相談総合センター、セクシャル・ハラスメント相談所、災害対策室、AC21推進室、男女共同参画室、大学文書資料室、全学技術センター等を設置した。引き続き、大型基盤研究の推進を支援する組織の設置などを順次進める。

### 2) 社会連携推進体制の整備

本学は、研究成果を社会に還元する大学作りを目指している。その一つが社会連携推進体制であり、「点から面へ」(個人から組織へ)をキャッチフレーズに進めている。そのために、平成14年度に、社会連携推進室、産学官連携推進本部を学内措置により設置するとともに、平成15年度に、知的財産部を学内措置により設置し、積極的な外部人材の登用、知的財産に関する諸規定の整備等を含む体制の整備を行ったが、今後、機能強化を図る。

### 3) 国際学術コンソーシアム(AC21)の展開

国際学術交流活動は、各部署の日常的業務ではあるが、全学的な取り組みとして「国際学術コンソーシアム(AC21)」を平成14年度に創設した。これは、世界各国の25大学(機関)からなり、大学が社会に対する使命を国際的に果たすことを目的とする組織であり、本学に事務部(AC21推進

室)が設置されている。AC21を通じて学生・教職員の交流、ベンチマーキング、連携教育プログラムの開発等を日常的に行い、本学の国際戦略立案に結びつける。

### 4) 学長を中心としたマネジメント体制

総長を補佐するために、副総長5名、総長補佐15名の体制を整備し、この責任体制によって21世紀COEプログラムを遂行する。今般の研究教育拠点申請は、総長を中心とする大学執行部とその補佐機関が、申請プログラムの学術的水準及びその遂行体制、並びに大学の中期目標・中期計画との整合性を精査し、決定したものである。

21世紀COEプログラムとして採択される各研究教育拠点に対しては、大学として総長のマネジメント体制に基づき、以下の措置をとり、その拠点形成を全面的に支援する。

**4-1) 予算措置:** 現在、全学の校費等の約12%を留保し、優先順位を付して重点配分している。競争的資金に伴う間接経費の70%は、総長裁量により全学の研究活動に重点配分している。この重点配分に際し、拠点に特段の配慮を行う。

**4-2) 研究スペースの確保:** 世界水準の研究成果を目指す研究専念共用ラボラトリとして新築する高等総合研究棟(6,820m<sup>2</sup>)を、優先的に利用させる。

**4-3) 人的支援措置:** 全学的に留保した教官定員を活用して研究者を措置し、併せて外部資金等の運用によって研究支援者の措置を行う。

**4-4) 高等研究院の活用:** 高等研究院は、研究教育拠点の支援を行うと同時に、拠点形成の進捗状況を国際的なレベルで点検評価し、適切なアドバイスを行う。若手研究者が独立して研究を遂行できる財政支援と研究スペースを提供する。

拠点形成終了後も、研究教育拠点が継続・発展するように、大学として支援する。さらに、研究教育拠点形成に関係した若手研究者については、研究教育拠点形成終了後も関連分野の研究を発展的に続けられるように特段の配慮を行う。

## 3. 達成状況及び今後の展望

本拠点プログラムへの申請直後、国立大学の法人化が実施され、大学の運営体制が大きく変更された。平成21年度は、新総長の下で、5名の理事、4名の副総長による執行部体制を取っている。総長を中心とする執行部の特命事項についての調査・企画などを行う総長補佐を16名配置し、研究教育・国際化の推進、学内環境の整備、計画評価に関して総長をサポートする体制の一層の強化を図った。研究担当の副総長の下に、研究推進室を設置し(H18)、学内外の研究情報の収集と分析、研究推進計画の立案・推進、外部資金獲得支援、研究者倫理を含む研究費の不正使用防止に係わる活動を行っている。

将来構想及び研究拠点形成のための支援方策は、中期目標・中期計画に具体化し、総長のリーダーシップと強力なマネジメント体制により着実に実施してきた。このことは、21世紀COE中間評価における全般的に高い評価となって現れてきている。以下は、具体的な達成状況と今後の展望である。

#### 1) 研究教育組織の整備

**1-1) 高等研究院の役割強化:** ノーベル賞受賞者3名を含む総長の国際諮問機関である International Advisory Board (平成17年度設置)からの提言に基づき、学内アカデミーとしての高等研究院の機能を強化した。名誉院長に野依良治博士、李遠哲博士を迎え、益川敏英博士、小林誠博士、下村脩博士を含む高等研究院アカデミー会員7名を任命し、本学の教育研究活動に対する指導助言を得ている。若手研究者育成プログラムとして名古屋大学高等研究院研究者育成特別プログラムを開始し、15名のテニュアトラック教員を採用した。なお、平成20年10月に益川敏英博士、小林誠博士、下村脩博士がノーベル物理学賞、化学賞をそれぞれ受賞したことに伴い、各先生方の講演会を名古屋大学レクチャーとして実施した。

**1-2) 教育研究組織の再編・新設:** 平成16年度設置のエコトピア科学研究機構は、17年度にエコトピア科学研究所に改組し、18年度から附置研究所として研究活動を進めている。本研究所と環境学研究科と併せ、環境学の学術研究・応用研究の両面での推進体制を整えた。すでに終了した21世紀COEの推進を通じて、プラズマナノ工学研究センター (H18)、構造生物学研究センター (H19) など7センターなどが設置された。

**1-3) 全学共通基盤組織の整備:** 研究教育環境整備の一環として、大型基盤研究を推進することを目的とした名古屋大学小型シンクロトン光研究センターを平成19年度に設置した。21年度には、全国共同利用施設である情報連携基盤センターと情報メディア教育センターを情報基盤センターに統合・改組した。17年度は、国内外に積極的な広報を展開する広報室、教職員・外国人研究者等が利用できる学内保育所、国際戦略を企画・推進する国際企画室を設置した。

#### 2) 社会連携推進体制の整備

本学は、社会連携推進体制の確立を目指して、社会連携室、産学官連携推進本部、知的財産部を設置し、積極的な外部人材の登用、知的財産に関する諸規定の整備等を含めた体制の整備を行ってきた。平成17年度に、地域の産業界との更なる連携強化を目的に地元企業等を会員とする「名古屋大学協力会」を設立した。また、本学の研究成果を結集し組織的かつ強力な産学官連携・社会貢献を推進し、国際的な貢献をも推進できる体制を整備するため、産学官連携推進本部を見直し、知的財産部に加え、起業推進部、連携推進部、国際連携部を置き、専任教員を配置した。

#### 3) 国際学術コンソーシアムの展開

国際学術交流活動の全学的な取り組みである国際学術コンソーシアム (AC21) を基盤に、本学が主導的役割を果たして国際学術フォーラム

(H18, 20)、世界学生フォーラム (H19) を開催した。なお、中国の大学等との国際学術交流を積極的に推進するため「名古屋大学上海事務所」を平成17年度設置した。また、国際学術交流の展開を更に積極的に推進するためには、各部局のミッション達成を支援するとともに、全学的な連携による組織的な国際学術交流活動のできる体制を図るため「国際交流協力推進本部」を18年度に設置した。

#### 4) 21世紀COE拠点に対する学内資源の配分

**4-1) 予算措置:** 重点配分に際し、1拠点あたり5年間で計900万円を配分し、拠点事務体制の構築を支援した。

**4-2) 研究スペースの確保:** 高等総合研究館、総合研究棟の1,105㎡を拠点に措置した。さらに、新築・改修した総合研究棟の20%の全学共通スペースについて優先的利用を認めた。

**4-3) 人的支援措置:** 全学的に留保した教員定員を活用し、特に必要度の高い拠点に対して研究者を措置することが可能な体制を整えた。

#### 5) 研究拠点形成の促進

**5-1) 高等研究院の活用:** 高等研究院には、研究に専念する流動教員ポジションが設定されており、学内公募を行い厳正な審査により39名を任命した。このうち、21世紀COE研究拠点メンバーは31名に上る。これら流動教員については、授業や管理運営の実務を免除ないし大幅に軽減するなど研究に専念できる環境を提供し、今後、研究拠点化の核となる研究推進を支援した。

**5-2) 若手研究者の育成:** 若手研究者が独立して研究を遂行できる財政的援助と研究スペースを用意し、平成16年度以降8名が支援を受けている。

**5-3) 評価体制:** 21世紀COEプログラム研究拠点を含む本学の世界最高水準の研究に対する評価・助言を得るため、International Advisory Boardから評価・助言を得た。

#### 6) 成果の発信・活用と研究拠点の継続性

**6-1) 成果の発信・活用:** 平成15年に東京で、平成16年に大阪で、21世紀COEプログラムの研究テーマを主題とした「フォーラム」を開催し、拠点リーダーによるプレゼンテーション、拠点のビデオ紹介、展示ブースによる研究成果の説明等を行った。

**6-2) 研究拠点の継続性:** 21世紀COE拠点プログラムの実績に基づき、新たに開始されたグローバルCOEにも積極的応募し、20年度現在、6件が採択され、若手育成と国際的な研究拠点のさらなる発展を目指している。また、COE研究拠点形成に関係した若手研究者については、研究拠点形成終了後も関連分野の研究を発展的に継続できるよう、特段の配慮を行った。研究拠点でRAとして雇用されていた大学院博士後期課程の院生に対して、総長裁量経費により雇用を1年間継続した。

名古屋大学は、世界レベルのより高度な研究能力を有する人材育成の場として、一層の充実と発展を目指している。そのために、21世紀COE及びグローバルCOE拠点、関連学内研究所・センター等を集合させ「グローバル高等教育研究機構」を設置し、活動を開始している。



## 6. 拠点形成の目的

### 1) 本拠点がカバーする学問分野

本拠点がカバーする学問分野は、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である。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である。

### 2) 本拠点の特色と目的

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、およびそれらの融合に実績をもつ研究グループを従来部局の枠を超えて横断的に組織し、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強い連携による計算科学の研究教育を目指す点にある。これによって、個別分断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。

本拠点の目的はその連携の基に、超多自由度系の現象、特に従来、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（非経験的）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。

### 3) 本拠点の目指すもの、そのユニークさ

近年、コンピュータの急成長に伴い、学術諸分野で計算科学的研究手法が急速に浸透している。しかしながら、それらの分野は皆その中核部分で本質的共通性を持つにも関わらず、個別独立に発展してきた。今や、これらの学術諸分野がより強力に進展するには、計算科学の応用諸分野とその核となる基盤分野との連携が不可欠である。

本拠点は、計算機高度利用技術の基盤形成と応用展開の融合を目指す専攻として発足し世界的な成果をあげてきた計算理工学専攻を初めとして、情報科学研究科、工学研究科、経済学研究科などに属する複数専攻群の協力によ

り、個別専門化して散在する計算科学研究教育の現状を打破し、基盤と応用各分野の研究教育の強い連携を目指すユニークな試みである。国際的にも、計算科学的非経験化を目標に幅広い分野の統合を目指す点で特色を持つ拠点である。

### 4) 本拠点の重要性と発展性

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。我が国は諸外国に比べて、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進展を国際的にリードできる発展性を有している。

### 5) 期待される成果

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。特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、本拠点は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し、その活動は計算科学教育体系の構築にも資すると期待される。

### 6) 学術的、社会的意義、波及効果

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を目指す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、次世代計算科学を担う若手研究者・技術者を養成する点でも意義は大きい。

## 7. 研究実施計画

### 1) 拠点の組織

右図のように拠点を組織する。以下に示す研究部門・研究者間の連携・統合を実のあるものとするため、全学的支援の下に計算科学研究教育推進センターを設ける。このセンターを中心に事業推進担当者会議(毎月)や計算科学フロンティアセミナーを開催する。

また、外部委員によるアドバイザリー委員会を設置し、毎年度アドバイスを得て外部の意見・要望を拠点形成に反映させる。さらに外部評価委員会を設置して評価を受ける。

### 2) 研究部門とその研究計画

基盤研究分野に2部門、応用展開分野に4部門を設置し、それぞれにサブリーダーを置く。

#### 【基盤研究分野】

#### (1) 数値計算アルゴリズム部門

応用展開分野において非経験的アプローチで研究を進めるのに不可欠な、超大規模計算のための数値計算アルゴリズムを開発する。また、アルゴリズムを計算機上に実装するための高性能プログラミング技術(並列化技術、グリッド技術)を研究開発する。

#### (2) ソフトコンピューティング部門

応用展開分野、特に複雑系部門において基礎方程式が未確立の現象に取り組むために不可欠な、多次元データの可視化・モデル化手法の研究開発を行なう。また、超多自由度系の最適化手法(遺伝的アルゴリズム等を含むメタ戦略手法)を開発する。

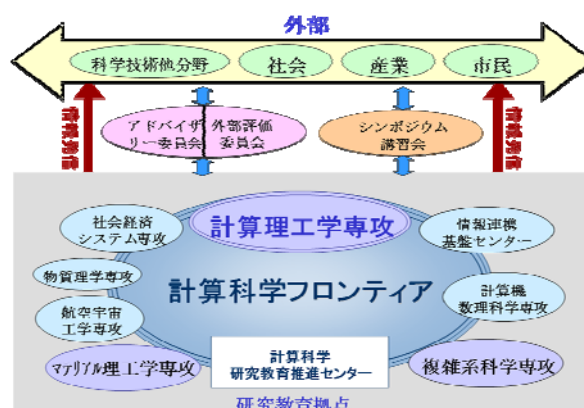
#### 【応用展開分野】

#### (A) マクロ系部門

超多自由度複雑流動現象を計算科学的に解明・予測・制御するための基礎となる非経験的な方法論を展開する。具体的には乱流の世界最大規模直接数値シミュレーションのさらなる高度化、そこから得られるデータに基づく乱流の非経験的な理論の構築、複雑形状まわりの流れの効率的計算手法の開発と応用などを行なう。

#### (B) ミクロ系部門

電子から原子分子そして超分子の階層に及ぶ計算科学の展開により、従来とは桁違いに複雑な超多自由度ミクロ系の非経験的解析を



可能にし、高機能ナノ物質の設計を行なう。具体的には、ナノ物質における新規な量子現象の予測と量子デバイスの設計、大規模化学反応系の非経験的シミュレーションによる革新的反応設計、数千アミノ酸残基を含む蛋白質超分子系のシミュレーションによる遺伝子ネットワークの動作の解明(ゲノム系部門との連携)などを行なう。

#### (C) ゲノム系部門

超多自由度の塩基配列空間から構造空間への写像を物理の考え方に基づいて可能にする。具体的には、大量の情報の中にある物理的必然性を抽出するための配列解析手法を開発し、ゲノム産物の全蛋白質について、配列からの高速な構造分類を可能にする。また、分子シミュレーションにより、蛋白質と基質との結合状態を非経験的に推定できる方法を開発する。

#### (D) コンプレックス系部門

経済現象、知能の創発現象、ソフトマターなど、基礎方程式が未確立の分野の非経験化に挑戦する。多階層・多自由度系のモデリング手法の開発をソフトコンピューティング部門と連携して行ない、応用展開分野の他部門でのモデル化へと展開する。また、高齢化社会に対応する福祉・防災ネットワークの構築手法を開発する。

### 3) その他の実施計画

若手研究者を対象として、拠点形成の目的に添った新たな研究課題を公募し、優れた提案に対し研究費を助成する。内外の研究者との共同研究を推進し、本拠点を世界をリードする拠点とする。平成18年度と20年度に計算科学国際シンポジウムを開催する。(注:それぞれ平成17年度、20年度に開催した。)

## 8. 教育実施計画

本拠点は、アルゴリズムなど基盤分野の研究者と広範な応用諸分野の計算科学者が融合・協力し、非経験的計算法を従来分野の枠を超えて発展させる全国唯一のCOE研究教育拠点であり、教育の面でも名古屋大学の力を結集し、拠点の学生へはもちろん国内外に対して教育の発信を行なう。そして、計算科学のフロンティアにおいて世界をリードする能力を持つ若手研究者を育成する。

### 1) 教育拠点のコア形成

教育組織としては、計算科学研究教育推進センターと計算理工学専攻・複雑系科学専攻・マテリアル理工学専攻により、教育コア組織を形成する。それに、基礎から応用分野の協力専攻を加えて、新しい「計算科学フロンティア教育組織」を構成することによって、次世代領域を創生する。

### 2) 最先端の研究への参加

多くの大学院生を拠点での研究に参加させる。世界トップレベルの研究者との協力・共同研究を含む最先端の研究に参加することは、大学院生にとって学問的に大きな刺激になり、すぐれた教育効果が期待できる。

### 3) 計算科学フロンティア教程

数値計算アルゴリズム、ソフトコンピューティングの基盤教育とマクロ系、ミクロ系、ゲノム系、コンプレックス系、の応用教育からなる計算科学フロンティア教育を、非経験的手法を軸に構築・実施する。主な教育対象者は計算科学フロンティア拠点事業推進担当者や協力者の研究室に所属する大学院生であるが、計算科学フロンティア領域において教育の機会を望む学生や企業の技術者などは、全国に広がっている。それも意識した教程として、概論(全体、各応用分野)についてe-Learningコンテンツを作り、教育の発信を行なう。

### 4) 研究課題の公募と最先端の研究への参加

拠点形成の目的に沿った新たな研究課題を公募する若手研究者助成プログラムに大学院生も積極的に応募させ、すぐれた提案に対してまとまった額の研究費を配分する。これにより、拠点における研究の進展を図るとともに、若手研究者の創造性や自主性を養う。

## 5) 議論の場の確保

拠点の多様性を生かし、博士前期課程および博士後期課程の大学院生に対して(指導教員のほかに)専門分野の異なる複数の担当教員が副指導教員を務めるアドバイザー制度を設け、大学院生が異なる視点の複数の研究者と研究結果について随時議論できる体制を整える。また、計算科学フロンティア(FCS)セミナーを行ない、大学院生、博士研究員、教員がそれぞれの研究についての講演、議論をする。さらに、拠点内で年に2回の合同研究成果報告会を開き、拠点メンバーおよび若手研究者が研究成果について報告・議論する。

## 6) 国際性の涵養

研究遂行に占める英語力の重要性に鑑み、現在行なっている外国人講師による科学技術英語に関するセミナー(英語によるプレゼンテーション技術を含む)をさらに充実する。また、大学院生の国際会議や国際共同研究等への参加をこれまで以上に促進する。特に、大学院生については、博士前期課程在籍中に1回以上、博士後期課程在籍中に2回以上参加することを目標とする。

海外の大学・研究機関と共同・協力研究を進めるにあたっては、海外から研究者を招聘すると同時に、若手研究者を積極的に海外に派遣する。また、若手研究員の短期留学制度を設ける。このような国際交流は、研究を進展させるだけでなく、若手研究者の国際性を養う上でも大きな効果がある。

## 7) 若手研究者の研究環境の整備

拠点で博士研究員を雇用する。また、博士後期課程の大学院生は原則RA(リサーチアシスタント)として雇用する。海外の大学や研究機関(共同・協力研究の相手方)への派遣や国際会議等への参加の際には、拠点が費用を補助する。

## 8) 「計算科学若手の会」の設立

本拠点を中心として若手研究者が集まる「計算科学若手の会」を設立する。「夏(あるいは冬)の学校」を開催し、共に勉強・議論する場とする。

## 9) 「計算科学最前線」の出版

「夏(冬)の学校」の講演内容等を「計算科学最前線」として出版する。

## 9. 研究教育拠点形成活動実績

### ① 目的の達成状況

#### 1) 世界最高水準の研究教育拠点形成計画全体の目的達成度

計算科学の先導的研究・教育を担う拠点形成は当初の計画に沿って順調に進められ、以下の2)～7)に示すように教育・研究両面で多くの着実な成果をあげることができた。

2008年11月に実施した第一線の研究者7名による国際外部評価においても“*I am very much impressed by the first class research as well as your successful efforts in nurturing new generation of young researchers in computational science*”や“*I am genuinely impressed by the breadth and diversity of the research, education and public activities within the COE program*”などのコメントに代表されるように高い評価を得た。

これらにより、本拠点形成の目的は十分に達成されたと判断される。

#### 2) 人材育成面での成果と拠点形成への寄与

教育実施計画に基づき、人材育成を行なった。特に、各分野間の連携を推進するため、計算科学インタラクションと総称する、既存の分野にとらわれないFCSセミナーなどの一連の分野横断型の取り組みを実施した。また、外国人講師による英語プレゼンテーション指導、計算科学フロンティア連続講義、複数の専攻・研究科に共通する履修科目の設定、スーパーコンピュータを利用する並列計算実習、計算科学教育のための日本語・英語のe-Learning講座の公開、などを行なった。さらに、若手研究者の研究支援を目的とする研究環境整備として若手研究者研究助成、海外派遣、スーパーコンピュータ利用支援を行なった。本プログラムが支援した若手研究者の海外渡航は102件となっている。

これらの取り組みの結果、従来の既存分野の枠組みにとらわれない計算科学若手研究者が育ち、たとえばソフトコンピューティングの手法の生体化学における情報可視化への適用(特許申請)やその手法の気候変動の解析への応用(地球環境研究総合推進費に採択、IEEE CIS Young Researcher Awardを受賞)などの融合研究の進展をもたらした。これらの成果はCOEのRAとして採用した大学院生及びPD(ポスドク)

の161報におよぶ論文掲載、182件の国際会議発表、8件の招待講演、また若手研究者(事業推進担当者および協力者が指導した院生も含む)の国際会議5件、国内会議26件、その他2件の受賞にも表れている。

事業推進担当者を指導教員として平成16年度以降博士課程を修了あるいは単位取得後退学した院生の就職先は名大、エジプトアシュート大、東北大などの大学教員12%、PD35%、公的研究機関・企業(研究開発部門)37%、その他17%となっている。PDは修了後、名大助教、名大特任准教授、一橋大講師、慶応大専任講師、愛知淑徳大助教、青山学院大助教などに採用された。COE特任准教授4名は名大准教授(2名)、1名は工学院大准教授などに採用された。また、PD1名がMadrid自治大サバティカル教授に採用された。

以上に見られるように人材育成の成果が十分に示され、本事業は拠点形成に寄与した。

#### 3) 研究活動面での新たな分野の創成や、学術的知見等

本拠点では、日進月歩で進化するコンピュータの高度利用に基づいて、超多自由度系の解明を行なう新しい非経験的計算科学の分野を開拓した。従来の各分野における研究の深化に加えて、異なる複数の分野にまたがるアプローチによる研究を推進した。その結果、たとえば、(i)ハイパフォーマンスコンピューティングによる乱流の非経験的研究、(ii)非経験的量子力学・古典力学ハイブリッド計算による化学反応研究、(iii)全原子モデル・粗視化モデル・バイオインフォマティクス手法の総合による蛋白質の構造研究、(iv)ソフトコンピューティング計算法による超多自由度分子のX線構造解析、などの新たな研究分野が開拓された。

特筆すべき成果あるいは学術的知見には(i)大量データ可視化のための、超速学習法の開発(JACIII 2007)、(ii)世界最大規模の乱流数値シミュレーションデータ解析による乱流の階層的微細構造・統計の解明(Annu. Rev. Fluid Mech. 2009)、(iii)蛋白質のマルチコンフォマーの計算科学的検出(Acta Crystallographica Sec. D 2008)、(iv)乱雑位相近似に基づいた計算による超伝導発現機構

の提案 (Phys. Rev. Lett. 2008)、(v)蛋白質解析システムの高度化、(vi)ナノスケール電子状態計算のための高速アルゴリズムの開発、などがある。(iii)では、理研の研究者との共同研究により、当時実用計算としては世界最速の281Tflopsの計算を実現し、2007年ゴードン・ベル賞ファイナリストに選出された。

#### 4) 事業推進担当者相互の有機的連携

本拠点は4つの研究科と1つのセンターからなる、部局横断組織である。それ故、既存の組織にとらわれずに融合・連携を強力に推進するため、拠点内の中核として計算科学研究教育推進センター (FCSセンター) を設置した。FCSセンターでは(1)専任の特任教員1~2名/年、および事務支援者3~5名/年を雇用、(2)全事業推進担当者による月例拠点会議を開催、(3)リーダーとサブリーダーを中心とする事務局会議を随時開催することによって拠点の効率的運営を図り、リーダーを中心とする事業推進担当者相互の有機的連携を行なうことができた。

研究面では特に各分野間の連携を組織的に促進する体制を構築した。その結果、例えば、2)で述べたソフトコンピューティングの手法の生体化学や気候変動の解析への応用の他、(i)分子動力学計算とバイオインフォマティクス手法の統合による蛋白質立体構造予測、(ii)大規模非線形固有値問題の解法による乱流における相関関数のスケーリング指数解析、(iii)並列計算法の変分モンテカルロ計算の銅酸化物超伝導体発現機構解明への応用、有機超伝導体における金属絶縁体転移の解明、(iv)分子シミュレーションにおける多重極展開法の金融工学への応用、など有機的連携に基づく活発な研究活動が展開された。

#### 5) 国際競争力ある大学づくりへの貢献度

本プログラムでは海外の大学や研究機関との積極的な共同研究・交流や若手研究者の派遣・受け入れを行ない、国際的ネットワークの構築、海外研究機関との連携を進めた。

具体的には、学術振興会2国間交流事業共同研究(対象国、イギリス)に基づくCambridge大学、学術振興会2国間交流事業共同研究(対象

国、ロシア)に基づくロシア科学アカデミーコンピュータ支援設計研究所との共同研究をはじめ、Ecole Normal Supérieure、Provence大学、California大学SanDiego校、Twente大学など23の大学および研究機関の研究者との共同研究を行ない、大学院生、若手研究者も積極的に参加した。

また、中国科学院力学研究所および大連理工大学応用数学科とは共同研究(教育)についての協定を結び、相互交流を促進した。

PDの採用に当たっては国際公募を行ない、若手外国人研究者を5名採用した。また、国際的に第一線の研究者の招聘を積極的に行なった。

#### 6) 国内外に向けた情報発信

本拠点の研究成果は530報以上(事業推進担当者・協力者を含む拠点メンバーによる)に及ぶ論文発表等で公表された。この中にはScience, Phys. Rev. Lett., J. Am. Chem. Soc., Proc. Natl. Acad. Sci. USA, Annu. Rev. Fluid Mech., J. Phys. Soc. Jpn.などの著名な学術雑誌への掲載が多く含まれている。本拠点が主催した16件(他組織との共同主催を含む)の国際会議等を通じてその成果は紹介され、計算科学の国際交流が促進された。

また、夏の学校の講義資料をまとめた「計算科学最前線」の発行の他、「多言語防災情報発信システム」、乱流シミュレーションデータベースや蛋白質予測システムSOSUIのWeb公開、日本語と英語によるe-Learningコンテンツの発信を行なった。

さらに、スーパーコンピュータの高度利用研究会、名古屋大学東京、関西および上海フォーラム、ホームカミングデイなどでも情報発信を行なった。特に第14回名古屋大学博物館企画展「計算機シミュレーションで解き明かされる世界—計算科学の最前線—」では一般向けの講演とパネル展示を行ない、期間中延べ約2,900名の来場者へ情報発信を行なった。

#### 7) 拠点形成費等補助金の使途について(拠点形成のため効果的に使用されたか)

若手研究者の育成、研究環境整備、研究活性化のために、拠点形成費補助金予算の大部分を充当した。具体的には、特に(i)本プログラム



期間中PD延べ51名、RA延べ119名の雇用と(ii)若手研究者の自発的研究支援に、COE期間中全予算の約57%を充当し、研究の活性化を図った。また、国際会議発表および研究打ち合わせ等のための旅費として、海外および国内旅費それぞれに残りの予算の13%、7%を充当し、国内外の研究交流・情報発信を活発化させた。

そのほか、平成16年度に計上したFCSセンターおよび事務支援室の整備、各年度に計上した計算機使用料(スーパーコンピュータ利用支援)は、拠点形成・研究環境向上のために非常に有効な役割を果たした。

以上のように拠点形成費等補助金は拠点形成のために有効に使用された。

## ②今後の展望

名古屋大学では国際的に高い研究水準、および人材育成の実績に基づき、計算科学推進の組織的体制を整備してきた。特に、複数の学問分野の融合を推進する流動型教育システムを担う複合領域専攻としての計算理工学専攻に加え、スーパーコンピュータを運営する情報基盤センターなど、計算科学のための教育研究体制を構築している。また、海外との共同研究も組織的精力的に行なわれており、さらに次世代スーパーコンピュータ利用に関して分子科学研究所との連携が進みつつある。

本プログラムでは、高い研究実績を基に、特に非経験的計算科学を推進してきた。今後は経験に基づく帰納的方法(経験的方法:例えばデータベースの処理・検索、可視化)をも取り入れることによって、両者をダイナミックに行き来する、研究の螺旋的進化が期待される。この構想に基づいて、生命、ナノマテリアル、環境・エネルギーなど超多自由度の複雑な現象の解明へ向けた研究教育を展望する議論が行なわれた。

平成20年10月には、複数専攻・複数部局をまたがって本拠点の経験と成果を継承し発展させるための計算科学連携教育研究センターが工学研究科に新設され、計算科学を展望する研究会や国際ワークショップの企画、国際連携の推進、教育カリキュラムの検討などの活動を開始した。

以上から本COEの成果を引き継いで、計算科学の持続的発展がなされると期待される。

## ③その他(世界的な研究教育拠点の形成が学内外に与えた影響度)

名古屋大学では、本拠点を軸にした計算科学の部局横断的連携が着実に進み、異分野の融合によって新たな知を生み出す仕組みの重要性の認識がさらに深まり、新たな連携の機運が高まった。たとえば、学内の計算科学研究者の連携をさらに促進するため、当COEメンバーが中心となって名古屋大学計算科学サロンが立ち上げられた。

国内的には計算科学教育研究の機運が高まってきており、その先導的教育研究を行ってきた、東京理科大学および東洋大学の拠点と連携し、計算科学フォーラムを共同開催した。一方、海外においても計算科学の研究教育の重要性が認識されつつある。たとえばドイツでは、日本のCOEに類似したプログラムとして計算科学拠点(ダルムシュタット工科大学)が2008年度に採択され、本拠点と連携が進展した。

本拠点の研究成果には、例えば「蛋白質の変形動画」(倭)、「高温超伝導の構造解明」(大成)、「交通渋滞」(杉山)、「医薬品の結晶構造決定」(坂田、西堀)などについての54件の新聞等への掲載(うち19件英文/国際報道)に見られるように社会的インパクトの高いものが多い。Web上に公開した膜蛋白質予測ツールSOSUI(論文被引用680回以上)はより大きなシステムにも標準ツールとして組み込まれつつあり、その高度化及び拡張が現在行なわれている。

また、三菱重工、トヨタ、NECなどとの産学連携が進み、本拠点より発信された「多言語防災・生活情報システム」、「看護師スケジューリング支援システム」、「データ解析統合プラットフォーム」は企業との共同研究を通じて実用化され、高い評価を得た。

なお、現在、「計算科学講座」(全10巻)の執筆が進行中である。このような計算科学の体系的な教育講座は国際的にも特色のあるものであり、国内外の計算科学の新しい学問分野としての確立に資すると期待される。

## 21世紀COEプログラム 平成16年度採択拠点事業結果報告書

機 関 名	名古屋大学	拠点番号	K17
拠点のプログラム名称	計算科学フロンティア		
<p>1. 研究活動実績</p> <p>①この拠点形成計画に関連した主な発表論文名・著書名【公表】</p> <p>・事業推進担当者（拠点リーダーを含む）が事業実施期間中に既に発表したこの拠点形成計画に関連した主な論文等〔著書、公刊論文、学術雑誌、その他当該プログラムにおいて公刊したもの〕</p> <p>・本拠点形成計画の成果で、DP（ディスカッション・ペーパー）、Web等の形式で公開されているものなど速報性のあるもの</p> <p>※著者名（全員）、論文名、著書名、学会誌名、巻(号)、最初と最後の頁、発表年（西暦）の順に記入</p> <p>波下線 (~~~~~) : 拠点からコピーが提出されている論文</p> <p>下線 (_____) : 拠点を形成する専攻等に所属し、拠点の研究活動に参加している博士課程後期学生</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <u>T. Ishihara, T. Gotoh, Y. Kaneda, Study of High-Reynolds Number Isotropic Turbulence by Direct Numerical Simulation, <i>Annu. Rev. Fluid Mech.</i>, <b>41</b>, pp.165-180, (2009)</u></li> <li>• <u>N. Okamoto, K. Yoshimatsu, K. Schneider, M. Farge, Y. Kaneda, Coherent vortices in high resolution direct numerical simulation of homogeneous isotropic turbulence: A wavelet viewpoint, <i>Phys. Fluids</i>, <b>19</b>, pp.115109_1-13, (2007)</u></li> <li>• <u>Y. Kaneda, K. Morishita, Intermittency of Energy Dissipation in High-Resolution Direct Numerical Simulation of Turbulence, <i>J. Phys. Soc. Jpn.</i>, <b>76</b>, pp.073401_1-4, (2007)</u></li> <li>• <u>M. Ishigaki, K. Kuzuu, S. Adachi, K. Ishii, Temperature Distribution in a Two-dimensional Closed Tube with Taconis Oscillation, <i>Theor. Appl. Mech. Jpn.</i>, <b>57</b>, pp.351-362, (2008)</u></li> <li>• <u>石垣将宏, 石井克哉, 閉管内タコニス振動の直接シミュレーションによる安定性の解析, <i>低温工学</i>, <b>43</b>(12), pp.566-570, (2008)</u></li> <li>• <u>清水正宏, 高橋正康, 川勝年洋, 石黒章夫, 制御系と機構系の有機的カップリングを活用したモジュラーロボットの創発的形態制御, <i>日本ロボット学会誌</i>, <b>23</b>, pp.718-724, (2005)</u></li> <li>• <u>清水正宏, 川勝年洋, 石黒章夫, 多粒子系の動力学解析手法を応用した群ロボットの自律分散的形態制御, <i>計測自動制御学会論文集</i>, <b>41</b>, pp.126-134, (2005)</u></li> <li>• <u>T. Ishihara, Y. Kaneda, M. Yokokawa, K. Itakura, A. Uno, Small-scale statistics in high-resolution direct numerical simulation of turbulence: Reynolds number dependence of one-point velocity gradient statistics, <i>J. Fluid Mech.</i>, <b>592</b>, pp.335-366, (2007)</u></li> <li>• <u>Y. Kaneda, T. Ishihara, High-resolution direct numerical simulation of turbulence, <i>J. Turbul.</i>, <b>7</b>, pp.1-17, (2006)</u></li> <li>• <u>S. Honda, H. Itoh, J. Inoue, H. Kurebayashi, T. Trypiniotis, C. H. W. Barnes, A. Hirohata, J. A. C. Bland, Spin polarization control through resonant states in an Fe/GaAs Schottky barrier, <i>Phys. Rev. B</i>, <b>78</b>, pp.245316_1-6, (2008)</u></li> <li>• <u>J. Inoue, H. Ohno, Taking the Hall effect for a spin, <i>Science</i>, <b>309</b>, pp.2004-2005, (2005)</u></li> <li>• <u>C.H. Suresh, N. Koga, An isodesmic reaction based approach to aromaticity of a large spectrum of molecules, <i>Chem. Phys. Lett.</i>, <b>419</b>, pp.550-556, (2006)</u></li> <li>• <u>A. A. Dahy, N. Koga, Theoretical Study on the Transformation of Bis(acetylene)cobalt to Cobaltacyclopentadiene and the Regioselectivity in this Transformation, <i>B. Chem. Soc. Jpn.</i>, <b>78</b>, pp.781-791, (2005)</u></li> <li>• <u>T. Koto, Stability of IMEX Runge-Kutta methods for delay differential equations, <i>J. Comput. Appl. Math.</i>, <b>211</b>, pp.201-212, (2008)</u></li> <li>• <u>E. Nishibori, T. Ogura, S. Aoyagi, M. Sakata, Ab initio structure determination of a pharmaceutical compound, prednisolone succinate, from synchrotron powder data by combination of a genetic algorithm and the maximum entropy method, <i>J. Appl. Crystallogr.</i>, <b>41</b>, pp.292-301, (2008)</u></li> <li>• <u>Y. Kubota, M. Takata, R. Matsuda, R. Kitaura, S. Kitagawa, K. Kato, M. Sakata, T.C. Kobayashi, Direct observation of hydrogen molecules adsorbed onto a microporous coordination polymer, <i>Angew. Chem. Int. Edit.</i>, <b>44</b>, pp.920-923, (2005)</u></li> <li>• <u>K. Itoh, M. Sasai, Cooperativity, connectivity, and folding pathways of multidomain proteins, <i>Proc. Natl. Acad. Sci. USA</i>, <b>105</b>, pp.13865-13870, (2008)</u></li> <li>• <u>M. Yoda, T. Ushikubo, W. Inoue, M. Sasai, Roles of noise in single and coupled multiple genetic oscillators, <i>J. Chem. Phys.</i>, <b>126</b>, pp.115101_1-11, (2007)</u></li> <li>• <u>T. Hotta, M. Sasai, Fluctuating hydration structure around nanometer-size hydrophobic solutes II - Caging and drying around single-wall carbon nanotubes-, <i>J. Phys. Chem. C</i>, <b>111</b>, pp.2861-2871, (2007)</u></li> <li>• <u>Y. Okabe, Y. Yagi, M. Sasai, Effects of the DNA state fluctuation on single-cell dynamics of self-regulating gene, <i>J. Chem. Phys.</i>, <b>127</b>, pp.105107_1-8, (2007)</u></li> <li>• <u>Y. Okabe, M. Sasai, Stable stochastic dynamics in yeast cell cycle, <i>Biophys. J.</i>, <b>93</b>, pp.3451-3459, (2007)</u></li> <li>• <u>M. Sugihara, T. Matsuo, Recent developments of the Sinc numerical method, <i>J. Comput. Appl. Math.</i>, <b>164-165</b>, pp.673-689, (2004)</u></li> <li>• <u>R. Ke, N. Sakiyama, R. Sawada, M. Sonoyama, S. Mitaku, Vertebrate genomes code excess proteins with charge periodicity of 28 residues, <i>J. Biochem.</i>, <b>143</b>(5), pp.661-665, (2008)</u></li> <li>• <u>R. Sawada, R. Ke, T. Tsuji, M. Sonoyama, S. Mitaku, Ratio of membrane proteins in total proteomes of prokaryota, <i>BIOPHYSICS</i>, <b>3</b>, pp.37-45, (2007)</u></li> </ul>			

- K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka, H. Kontani, H. Aoki, Unconventional pairing originating from the disconnected Fermi surfaces of superconducting LaFeAsO<sub>1-x</sub>Fx, *Phys. Rev. Lett.*, **101**, pp.087004\_1-4, (2008)
- T. Yokoyama, C. Iniotakis, Y. Tanaka, M. Sigrist, Chirality sensitive effect on surface states in chiral p-wave superconductors, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, pp.177002\_1-4, (2008)
- T. Yokoyama, S. Onari, Y. Tanaka, Enhanced triplet superconductivity in noncentrosymmetric systems, *Phys. Rev. B*, **75**, pp.172511\_1-4, (2007)
- T. Sogabe, M. Sugihara, S.-L. Zhang, An extension of the conjugate residual method to nonsymmetric linear systems, *J. Comput. Appl. Math.*, **226**, pp.103-113, (2009)
- R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, T. Fujiwara, Linear algebraic calculation of Green's function for large-scale electronic structure theory, *Phys. Rev. B*, **73**, pp.165108\_1-9, (2006)
- K. Abe, S.-L. Zhang, A variable preconditioning using the SOR method for GCR-Like methods, *J. Numerical Analysis and Modeling*, **2**, pp.147-162, (2005)
- I. Yu, M. Takavanagi, M. Nagaoka, Intrinsic alteration in the partial molar volume on the protein denaturation: Surficial Kirkwood-Buff approach, *J. Phys. Chem. B*, **113**, pp.3543-3547, (2009)
- M. Takavanagi, H. Okumura, M. Nagaoka, Anisotropic structural relaxation and its correlation with the excess energy diffusion in the incipient process of photodissociated MbCO: High-resolution analysis via ensemble perturbation method, *J. Phys. Chem. B*, **111**, pp.864-869, (2007)
- M. Nagaoka, Y. Ohta, H. Hitomi, Theoretical Characterization of Coordination Space: Adsorption State and Behavior of Small Molecules in Nanochanneled Metal-Organic Frameworks via Electronic State Theory, Molecular Mechanical and Monte Carlo Simulation, *Coordin. Chem. Rev.*, **251**, pp.2522-2536, (2007)
- M. Nagaoka, Y. Nagae, Y. Koyano, Y. Oishi, Transition-state characterization of the ammonia ionization process in aqueous solution via the free-energy gradient method, *J. Phys. Chem. A*, **110**, pp. 4555-4563, (2006)
- T. Uemura, R. Kitaura, Y. Ohta, M. Nagaoka, S. Kitagawa, Nanochannel-promoted polymerization of substituted acetylenes in porous coordination polymers, *Angew. Chem. Int. Edit.*, **45**, pp.4112-4116, (2006)
- 北村圭一, 中村佳朗, 極超音速衝撃波干渉流れにおける空力加熱の数値解析, 日本航空宇宙学会論文集, **56**, pp.269-277, (2008)
- 河村耕平, 上野陽亮, 中村佳朗, 数値流体力学と数値飛行力学の連成に基づく竹とんぼのフライトシミュレーション, 日本航空宇宙学会論文集, **56**, pp.324-330, (2008)
- E. Nishibori, T. Nakamura, M. Arimoto, S. Aoyagi, H. Ago, M. Miyano, T. Ebisuzaki, M. Sakata, Application of maximum-entropy maps in the accurate refinement of a putative acylphosphatase using 1.3 angstrom X-ray diffraction data, *Acta Crystallogr. D*, **64**, pp.237-247, (2008)
- Y. Ohno, E. Nishibori, T. Narumi, T. Koishi, T.H. Tahirov, H. Ago, M. Miyano, R. Himeno, T. Ebisuzaki, M. Sakata, M. Taiji, A 281 Tflops calculation for X-ray protein structure analysis with special-purpose computers MDGRAPE-3, CD-ROM, <http://sc07.supercomputing.org/schedule/pdf/gb103.pdf>, (2008)
- J. Nemoto, M. Goto, Measurement of Technical and Allocative Efficiencies Using a CES Cost Frontier: a Benchmarking Study of Japanese Transmission - Distribution Electricity, *Empirical Economics*, **31**(1), pp.31-48, (2006)
- K. Tachibana, T. Furuhashi, Self-Organizing Map with Generating and Moving Neurons in Visible Space, *J. Adv. Comp. Intelligence and Intelligent Informatics*, **11**(6), pp.626-632, (2007)
- H. Tanizawa, G. D. Ghimire, S. Mitaku, A high performance prediction system of coiled coil domains containing heptad breaks: SOSUIcoil, *Chem-Bio Informatics J.*, **8**, pp.96-111, (2008)
- R. Ke, N. Sakiyama, R. Sawada, M. Sonoyama, S. Mitaku, Human Genome Includes Many Proteins with Charge Periodicity of 28 Residues, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **46**, pp.6083-6086, (2007)
- 美宅成樹, 生きもの探検! 親から子へ伝わる遺伝の仕組み, 数研出版, pp.1-159, (2007)
- 美宅成樹, 広川貴次, 即活用のためのバイオインフォマティクス入門, 中山出版, pp.1-182, (2004)
- E. Hairer, G. Wanner 原著, 三井斌友監訳, 常微分方程式の数値解法 II 発展編, シュプリンガー・ジャパン, 東京, pp.1-621, (2008)
- S. Hasegawa, K. Fujikake, M. Omori, M. Miyao, Readability of characters on mobile phone liquid crystal displays, *Int. J. Occu. Safety Ergonomics*, **14**, pp.293-304, (2008)
- S. Hasegawa, K. Sato, S. Matsunuma, M. Miyao, K. Okamoto, Multilingual disaster information system: Information delivery using graphic text for mobile phones, *AI & Society*, **19**, pp.265-278, (2005)
- Y. Miyazawa, H. Nishioka, K. Yura, T. Yamato, Discrimination of class I Cyclobutane Pyrimidine Dimer photolyase from blue light photoreceptors by single methionine residue, *Biophys. J.*, **94**, pp.2194-2203, (2008)
- K. Kawaguchi, T. Yamato, Theoretical prediction of optical absorption maxima for photosensory receptor mutants, *Chem. Phys. Lett.*, **430**, pp.386-390, (2006)
- T. Mivata, Y. Yamamoto, S.-L. Zhang, A Fully Pipelined Multishift QR Algorithm for the Parallel Solution of Symmetric Tridiagonal Eigenproblems, *IPSI Transactions on Advanced Computing System*, **1**(3), pp.14-27 (2008)
- M. Broadie, Y. Yamamoto, A Double-Exponential Fast Gauss Transform Algorithm for Pricing Discrete Path-Dependent Options, *Oper. Res.*, **53**, pp.764-779, (2005)
- 山代大輔, 吉川大弘, 古橋武, 可視化手法を用いた多目的最適化問題における満足解の選択支援, 知能と情報(日本知能情報フレンジ学会誌), **20**(6), pp.850-859, (2008)
- P. M. Tuan, 橘完太, E. Hitzler, S. Buchholz, 吉川大弘, 古橋武, 幾何データからのGeometric Algebraを用いた特徴抽出, 統計数理, **56**(2), pp.185-198, (2008)
- K. Kakamu, W. Polasek, H. Wago, Model Choice for Panel Spatial Models: Crime Modeling in Japan, (H.-J. Lenz and R. Decker eds.) *Advances in Data Analysis*, Springer, pp.237-244, (2007)

## ②国際会議等の開催状況【公表】

(事業実施期間中に開催した主な国際会議等の開催時期・場所、会議等の名称、参加人数(うち外国人参加者数)、主な招待講演者(3名程度))

- ・ 2004.11.23-26, Nagoya Garden Palace Hotel, The 8<sup>th</sup> Membrane Research Forum, 148名(10名), P. van Bergen en Henegouwen (Utrecht Univ.), R. Morris (King's college London), J. F. Hancock (Univ. of Queensland)
- ・ 2005.5.23-27, 名古屋国際会議場, 2005 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations (SciCADE05), 253名(172名), P. Barton (MIT), Y. Oyanagi (東京大), C. Schütte (ベルリン大)
- ・ 2005.6.12-15, 名古屋大学ベンチャービジネスラボラトリー, International Workshop on Advanced Robotics and its Social Impacts (ARSO'05), 81名(29名), T. Ikoma (JST), T. J. Tarn (ワシントン大), R. C. Arkin (ジョージア工科大)
- ・ 2005.10.11-13, 名古屋大学野依記念学術交流館, Computational Science Symposium, 126名(12名), X. Yao (バーミンガム大), P. Horton (AIST), Y. M. Xie (RMIT)
- ・ 2005.12.12-13, 名古屋大学野依記念学術交流館, International Symposium on Frontiers of Computational Science (FCS2005), 232名(20名), M. Farge (ENSパリ), D. E. Goldberg (イリノイ大), S. Kim (UCバークレー), M. H. Gutknecht (ETH) (東京理科大学計算科学フロンティア研究センターとの共同主催)
- ・ 2006.3.16-17, 名古屋大学, Japan-Russia Workshop on joint project "Investigation of hydrodynamic instabilities and turbulence in fundamental and technological problems by means of mathematical modeling on supercomputers" 2006, 17名(10名), V. A. Gushchin (ICAD RAS), M. N. Antonenko (ロシア科学アカデミー), O. V. Troshkin (ロシア科学アカデミー)
- ・ 2006.9.11-14, 名古屋大学, IUTAM Symposium 2006 NAGOYA "Computational Physics and New Perspectives in Turbulence", 106名(38名), C. Meneveau (Johns Hopkins Univ.), J. Jimenez (Univ. Politecnica), R. Narasimha (Indian Institute of Science)
- ・ 2006.10.26-27, Universitat Autonoma de Madrid (Spain), Computational Methods for 1st-Principles Calculations of Complex Systems (COMMETH2006), 20名(15名), H. Ishio (Univ. Autonoma Madrid), I. Yu (Nagoya Univ.) ※
- ・ 2006.12.12-16, 舞子ピラ神戸, Discussion on "Theory and simulations of biomolecular nano-machines", 68名(21名), Y. Q. Gao (Texas A&M Univ.), W. Wang (Nanjing Univ.), J. N. Onuchic (Univ. of California)
- ・ 2007.2.14-21, 名古屋大学, International Workshop for Computational Science with Geometric Algebra, 35名(7名), S. Buchholz (Univ. of Kiel), E. M. S. Hitzer (福井大), D. Hildenbrand (TU Darmstadt) ※
- ・ 2007.11.20-21, 名古屋大学, Workshop on Computational Biophysics, 46名(3名), J. Lee (KIAS), D. Leitner (Univ. of Nevada), 由良敬 (日本原子力研究開発機構)
- ・ 2008.3.3-4, 名古屋大学, FCSシンポジウム, 58名(7名), 大林茂 (東北大), D. Fontijne (Univ. of Amsterdam), 廣瀬明 (東京大)
- ・ 2008.3.24, 名古屋大学, Nagoya-COE and Beijing-LHD Joint Workshop on "Frontiers of Computational Sciences", 42名(12名), J. Zonglin (Chinese Academy of Sciences), H. Guilai (Chinese Academy of Sciences), X. Yabin (Chinese Academy of Sciences)
- ・ 2008.3.26, 名古屋大学, COE Frontiers of Computational Science - Macroscopic Systems / Fluid Mechanics, 38名(4名), X. Chang (Chinese Academy of Sciences), R. Krasny (Univ. of Michigan), 岩本薫 (東京農工大)
- ・ 2008.9.17-21, 名古屋大学, Joint Int'l Conf. on Soft Computing and Intelligent Systems and Int'l Symposium on advanced Intelligent Systems (SCIS&ISIS2008), 450名(80名), 高間康史 (首都大), M. Margaliot (Tel Aviv Univ.), Y. S. Kim (Daejeon Univ.)
- ・ 2008.11.27-29, 名古屋大学, International Symposium on Frontiers of Computational Science 2008 (FCS2008), 155名(24名), Z. Z. Bien (KAIST), 諸熊奎治 (京大), C. W. Shu (Brown Univ.), 塚田捷 (早大), O. Lichtarge (Baylor College of Medicine)

を主催した。(ただし、他組織との共同主催も含む。) ※印は比較的小規模であるが、拠点の若手研究者が主体となって萌芽的研究をテーマに企画、開催した会議である。

また、名古屋大学関西フォーラム(参加者約600名)、名古屋大学上海フォーラム(参加者約350名)、名古屋大学東京フォーラム(参加者約430名)にて情報発信を行なった。上海フォーラムにおいては、中国語による展示・説明も行なった。

下記3件は国内会議であるが、計算科学の先進的研究・教育を行なっている国内の組織(東京理科大学計算科学フロンティア研究センター、東洋大学計算力学研究センター; 1.では筑波大学計算科学研究センターも参加)との共同主催による計算科学フォーラムである。

1. 2005.9.30, 東京ガーデンパレス, 第1回計算科学フロンティアフォーラム, 139名, 佐藤哲也(地球シミュレータセンター), 戎崎俊一(理研), 矢川元基(東洋大), 上村洸(東京理科大)
2. 2007.2.27, 東京ガーデンパレス, 第2回計算科学フロンティアフォーラム, 131名, 木寺詔紀(横浜市大), 田村哲郎(東工大), 前川透(東洋大)
3. 2008.9.9, 東京ガーデンパレス, 第3回計算科学フロンティアフォーラム, 130名, 矢川元基(東洋大), 渡辺一之(東京理科大), 美宅成樹(名大)

## 2. 教育活動実績【公表】

博士課程等若手研究者の人材育成プログラムなど特色ある教育取組等についての、各取組の対象（選抜するものであればその方法を含む）、実施時期、具体的内容

### 1) 教育取組み

本拠点における広範な分野の計算科学者による協体制の下、ひとつの専門分野にとらわれない広い視野と高い研究能力を持ち、次世代の計算科学を担う若手研究者育成を目的に、以下の制度設定および講義・実習・助言を行なった。

- ・アドバイザー制度 対象：拠点の博士後期課程大学院生。目的：異なる視点の研究者と随時議論できる体制を整備。具体的内容：異なる専門分野の教員2名をアドバイザー教員として任命し、研究の遂行に関して助言を与える。平成19年度からは、アドバイザー教員の補助的位置付けとして、異分野のPDも大学院生に助言を行なった。
- ・コンピュータサイエンス実習 対象：拠点の大学院生。目的：計算科学の基礎となる超高速並列計算機および並列プログラミングの学習。具体的内容：世界的にも珍しいスーパーコンピュータによる実習・講義を専攻科目として実施。スレッド並列及びプロセス並列によるプログラミングをFUJITSU HPC2500に則した形で行なった。毎回のスーパーコンピュータを使用した課題により、応用数理工学特論とも連携し、受講者が超高速計算技術を習得し活用できるようにした。
- ・計算科学フロンティア連続講義 対象：拠点の関連部局の大学院生。目的：計算科学の関連分野基礎教育。具体的内容：事業推進担当者らによるオムニバス講義を開講。受講者へのアンケートでは、異分野の研究概要が理解でき知識の幅が広がった、COEプログラム終了後も連続講義を継続してほしい、などの感想があった。
- ・外国人講師による英語プレゼンテーション指導 対象：大学院生（講義）、大学院生およびPD（各年度後期FCSセミナー）。目的：国際会議等において研究論文を発表・討論できる実践的な英語力の養成。具体的内容：受講生が各自の研究内容を国際会議と同様の形式で発表し、外国人講師が質問や、発表スキルについてのコメントを与えた。各年度の後期FCSセミナーでも、発表・質疑応答・進行を英語で行ない、外国人講師による英語技術指導を実施した。受講者へのアンケートでは、英語での発表やその準備の機会が増え英語力が向上した、などの肯定的回答が多かった。
- ・応用分野の研究内容に応じた計算科学フロンティア教程として、カリキュラムコースツリーを提示した。

### 2) 計算科学インタラクション

異分野横断型研究、広範分野の本質の共通性の追及を目的に、計算科学インタラクションを実施した。計算科学インタラクションとは、若手研究者が主体的に企画・運営・開催を行なうセミナーなどの総称である。発表、参加の中心は拠点関係者およびその研究室に所属する大学院生であるが、Webの公開、案内の送信により、外部からの一般参加も可能とした。計算科学インタラクションには、以下の活動がある。

- ・FCSセミナー 計64回開催。後期課程大学院生およびPDによる、部局横断的なセミナー。アドバイザー教員による指導に加え、異なる分野の研究者との交流により、広い視野を持つ研究者を育成。当初、大学院生のセミナー発表が必要以上に専門的となる傾向があったため、平成19年度以降、専門外の研究者に分かりやすく異分野間の議論を促す発表となるよう、大学院生による発表には、準備段階から異分野のPDが助言した。
- ・FCS研究会 計8回開催。ポスター・パネルセッション等を基にした、全員参加型フリーディスカッション中心の研究会。毎回長時間にわたり異分野融合の視点から議論が交わされた。
- ・計算科学「春・夏の学校」「計算科学若手の会」により春（平成16年度）、夏（平成17年度以降の毎年）に開催。著名な計算科学研究者による講演およびディスカッション、参加者によるポスターセッションを行なう若手勉強会。
- ・FCSコロキウム 計52回開催。他大学など外部の講師による講演会。
- ・FCS社会連携フォーラム 計12回開催。最先端研究に従事する企業の研究者・技術者による講演会。
- ・FCE (Frontiers of Computational Economics) 研究会 計8回開催 文理融合型研究会、PDが中心に企画。
- ・合同成果発表会/FCSコンテスト それぞれ平成17-20年度および平成16-20年度の毎年1回開催。FCSの若手研究者の1年の成果を発表/異分野の若手研究者が互いを評価する機会を設けた。

### 3) 人材育成のための研究活性化と研究環境整備

若手研究者に対し、研究の活性化と、研究に専念できる環境整備、国際性の涵養を目的に、COE予算にて、PD・RAの雇用および研究費・国内外の学会渡航支援を行なった。事業推進担当者で構成される運営委員会により、研究計画書の書類審査並びに面接を行ない、本拠点の目的との整合性の観点から、選考を行なった。特にPDについては、広く国内外に対する公募により募集し、厳正な審査の上、採用を決定した。また、年次報告書（RAは学期ごと）の提出を義務付け、成果の評価を行なった。以下の経済的支援により、研究体制の強化を図った。

- ・若手研究助成プログラム 対象：37歳以下の若手教員、研究員および博士後期課程大学院生。目的：自発的研究の支援ならびに萌芽的研究を立ち上げる環境作り。支給人数：延べ153名
- ・研究員（PD）制度、RA制度 対象：PDは国内外博士学位取得者、RAは博士後期課程大学院生。雇用人数：PD計21名（内外国人5名）、RA計59名（内外国人8名）
- ・海外・国内学会派遣 対象：拠点関係若手研究者。目的：若手の学会発表奨励。派遣数：92件（海外分のみ）
- ・研究者招聘助成 対象：拠点関係者。目的：拠点の研究の活性化・国際化。外国人研究者招聘件数：66件
- ・若手研究者の海外派遣（短期・中期） 対象：拠点関係若手研究者。目的：国際性の涵養の観点から、若手研究者の海外派遣を積極的に支援。具体的内容：Cambridge大学、Provence大学、California大学、ENS(Paris)、Michigan大学等での共同研究など。期間：約1週間から1年間。主に科研費等の外部資金、学内経費などにより支給。
- ・大学院生の海外派遣（中期） 対象：博士後期課程院生。目的：2ヶ月程度の海外共同研究を支援。具体的内容：学会参加派遣のみでは困難な海外研究者との長期の共同研究を支援するため平成19年度に制度を新設し、大学院生1名がArizona大学に60日間滞在した。
- ・研究インターンシップの推進 対象：前期・後期課程大学院生。目的：大学院生の進路に対する意識の明確化。受入企業：東芝、三菱重工、デンソーなど。期間：2週間から6ヶ月間

21世紀COEプログラム委員会における事後評価結果

(総括評価)

設定された目的は十分達成された

(コメント)

拠点形成計画全体については、非線形多自由度複雑系に対する「計算科学」の在り方について、新しい原理的な発展があったとは必ずしも言い難いが、並列アルゴリズムの開発、ソフトコンピューティングとの連携、さらに広い範囲の応用課題への適用と、目に見える成果をあげたと評価できる。また、学問としての体系化に向けても、「計算科学講座」の出版などの努力が認められ、大学院学生の自主性を引き出す活動、計算科学インタラクションなどに目覚しい努力をし、設定された目標は十分に達成されたと評価できる。

人材育成面については、基礎と応用の双方にまたがる大学院学生の養成、国際性の涵養など、大きな成果をあげたと評価できる。

研究活動面については、全分野に通ずる共通の計算理念の構想が成熟したとは言い難く、また、各分野の研究活動の集合体であるという宿命的な壁は破り難いが、それぞれの分野については、世界的なレベル、あるいはそれに準ずる成果をあげており、基礎と応用の交流も密接になり、全体としては高く評価できる。

補助事業終了後は、「計算科学連携教育研究センター」を中核として、基礎と応用の有機的な連携を保ちつつ、本事業の理念がさらに発展していくことが期待される。