

## CREST・さきがけ複合領域「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」 追跡評価報告書

### 総合所見

本研究領域は2002年の発足であるが、その当時、超並列シミュレータの時代の到来が予想される中で、それを使いこなす高性能計算技術の開発、統合的シミュレーション技術の開発が必須であった。2010年の本研究領域終了時点における研究領域事後評価では、医療・情報産業という計算科学として先進的な分野を特定し、掲げた4つの目標（マルチスケール・シミュレーション技術の確立、マルチフィジックス・シミュレーション技術の確立、データベースシステム技術の確立、革新的アルゴリズムの開発）は先見性があり、時代を見据えた的確で意義深いものであり、特に計算科学と計算機科学の融合促進を目指した基礎・基盤研究の促進という研究領域のねらいは的確であった。時代は確実に本研究領域が目指した方向に向かっており、本研究領域がその先鞭をつけたことが高く評価された。また個々の研究課題については、心臓シミュレーション、マルチスケール、マルチフィジックス・シミュレーション等で学術的な成果を十分達成しており、また、システムバイオロジー等新しい分野の活性化を促したものもあり、全体として優れた成果を挙げたと評価されていた。一方で、実用化基盤としての完成度からみると、研究課題ごとにバラツキがあること、実用化基盤の構築が目標であったが、その先の本格的実用化との間には大きなギャップが存在し、課題終了後も長期にわたる追跡調査、定期的な支援などを行うことが望ましいと指摘された。この点を念頭において追跡評価を行った。

研究領域期間終了後の展開については、CREST、さきがけともに、研究期間中に得られた優れた成果が科研費の基盤研究、CREST研究助成の獲得、あるいは京コンピュータの戦略分野への参加による大規模シミュレーション計算への発展など、それぞれの領域での研究の持続的発展が認められ、研究領域終了時点で評価された先見性があり、的確な研究領域のねらいが一層、現実化している。物質・材料・生体のミクロからマクロに至る様々な現象をシームレスに扱う統合的シミュレーション技術の開発という新たな潮流は引き続き維持されており、また、分散したデータベースを統合化する技術の開発は、その後の統合データベースのプロジェクトやビッグデータ、データ科学のプロジェクトに活かされている。各分野のネットワークの広がりや人材育成も総合的に進展しており、この点も成果として評価できる。総じて、この研究領域は一定の効果があつたと判断できる。

CRESTとさきがけの別種のスキームの併行が効果をもたらしたかについては、CRESTとさきがけの連携が結果的には多くの若い研究者を育て、研究領域終了後もこの研究分野全体の研究者人口の増加と領域の活性化に貢献していると評価できる。CRESTとさきがけを同時に実施したことによる相乗効果については、CRESTのグリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションにさきがけの水素系量子シミュレーション技術が取り込まれたこと、あるいは、CRESTのフラグメント分子軌道法（FMO法）にさきがけ研究の量子モンテカルロシミュ

レーションが導入されたこと等、連携の成果が見られる。しかしながら、研究領域以降は比較的長い期間を経ても連携の成果が新たに顕著に現れたということは表れておらず、特段に優れた相乗効果が得られたとまで言える段階にはないと判断される。

研究レベルの世界的位置づけの視点からみると、本領域の研究、技術のレベルは高いと認められる。研究領域終了後も継続されている多数の学術論文発表や国際会議での招待講演等が、その表れである。研究領域終了後の発表学術論文数に関しては、CREST 研究者の学術論文数の減少とさきがけの若手研究者の学術論文数の増加が特徴的である。本研究領域は少人数ではあるが卓越した研究者が輩出され、国際的に高い評価を得て、領域全体の高いレベルを維持していると感じられる。

## 1. 研究成果の発展状況や活用状況

(CREST)

研究期間終了後も新たな研究資金獲得などが順調に進んでおり、本研究領域で培われた研究は途切れることなく継続している。加えて、一部には京コンピュータに関わる戦略分野に参加し、より大規模なシミュレーション計算への発展に結びついており、総じて本研究領域が有効であったことを示唆している。研究活動や人材育成を意識した活動を通じて、各分野のネットワークの広がりや人材の育成が進展しており、各研究課題の成果の一部は、これらの人材に受け継がれ、発展していると思われる。

一方で、研究領域終了後の資金については基盤研究(S)や学術創成研究費のような大型の研究に移行したものがあまり見られない。また、本 CREST の具体的な達成目標がシミュレーション技術やデータベースシステム技術を確立することであるので、確立された手法を応用し新たな問題に挑戦する場合や新学術領域研究のような展開であれば問題ないが、CREST 終了後に今一度基礎的な研究を行う科研費の基盤研究に戻るの本来の姿ではないと考える。

CREST での研究期間中の論文数はどの課題においても比較的多いものの、終了後は数課題を除いて関連する論文の数が大幅に減少している。終了後も論文数を維持している課題では、特許も継続的に出願されており、研究が継続・発展していることが読み取れる。

個別の研究については、研究領域終了後に産業界との共同研究を開始しているものもあり、研究成果の今後の展開が期待される。特に粒子法や多階層的バイオレオシミュレーション、ナノ物性計測シミュレータ、材料の組織・特性の設計統合、心臓シミュレータ、システムバイオロジー、データ同化等は、プロジェクト終了後も大きく発展していると認められる。粒子法や多階層的バイオレオシミュレータではベンチャー企業も設立され、産業界で広く支持されるようになってきている。ナノ物性計測シミュレータと材料の組織・特性設計統合では期間中の論文数も多かったが、終了後も関連する論文が出ており、発展の様子がみえる。心臓シミュレータは京の開発やその効果の説明でも分かりやすい例として必ず取り上げられるほどとなり、また、システムバイオロジーに関しては分野自体が開拓され、

発展を続けていると認識できる。データ同化技術もバイオ分野の応用やビッグデータ解析の技術として脚光を浴びている。この他にも、数値・数式ハイブリッド計算に基づくロバスト最適化プラットフォームも特許が期間終了後も出続けているなど、発展している様子が見られる。

研究期間中の論文については高いレベルの論文が多数発表されていたことが理解される。しかし、研究終了後に相対的に少なくなった研究チームも相当数みられ、論文の数だけから見ると必ずしも全ての研究チームの成果が発展したとは認めにくい。

(さきがけ)

研究期間終了後は科研費の基盤研究や新学術領域研究、CREST、NEDO、厚労省科研費等の研究資金獲得が順調に進んでおり、本さきがけで培われた研究は途切れることなく継続している。また、京コンピュータに関わる戦略分野に参加し、本さきがけの成果がより大規模なシミュレーション計算に発展した例もあり、総じて本研究領域が有効であったことを示している。論文数も本研究期間終了後に大きく増加しているものが多く、研究発展のきっかけとして十分機能したと考えられる。

個別の研究では、たとえば、量子分子動力学法に基づく化学反応対応型連成現象シミュレータの開発では領域を越えた応用を進め、産業応用にも積極的に取り組んでいる。また、相関電子系の新しい大規模計算アルゴリズムではさきがけでの成果を更に高度に発展させ、強相関電子系物質の電子状態を高精度に解明することに繋げている。また、骨リモデリングシミュレーションで挑むテーラーメイド再生医療は、シミュレーションと細胞、動物実験を組み合わせた研究を展開し、計算機による特異的抗体設計法の確立では、抗原を認識するための最適な抗体の形状とそれを構築するアミノ酸配列情報を与える計算技術の開発から抗体の設計、実証実験まで行う等、シミュレーションから実験までを組み合わせた研究が展開されている。研究課題によっては、ソフトウェアの公開や普及には重点を置かず、特定用途向けのシミュレーション技術を開発し、それを利用して実験を発展させ、実験結果で科学や産業に貢献する例もあり、研究成果の展開状況も多様である。

特徴的なことは、多くの課題で研究期間中の論文数よりも期間終了後の論文数が増大しており、研究期間終了後に大きく発展している。各種の受賞、メディアでの報道等、研究領域終了後も続いており、学術的評価、社会的評価が高く、発展しているようすが顕著である。

一方で、一部の研究課題では、開発されたプログラムが自らの研究に適用されてはいるものの、より汎用性があり普及度の高い他のプログラムへの部分的乗り換えの例もある。シミュレーション技術の開発経験がその後の研究に役に立ったものとは思われるが、ある程度の規模のグループで行わない限り、自前のプログラムを管理し発展させ続けることは難しく、さきがけの場合は規模が小さいため、CREST と比べて困難さを感じる。

## 2. 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果

### (1) 研究成果の科学技術の進歩への貢献

(CREST)

科学技術上の発見・発明、新理論の提唱、新分野や潮流の創出への貢献という視点からみると、個々の研究成果が研究期間終了後にさまざまな賞を受賞していることからわかるように、全体的には学術的に高く評価されており、新分野の潮流の創出に貢献している。研究領域全体として、これまでの個別事象のシミュレーション技術という形から、物質・材料・生体のミクロからマクロに至る様々な現象をシームレスに扱うシミュレーション技術という新たな潮流を創成した。この潮流は京コンピュータの開発を進める概念のひとつとして継承されている。また、分散したデータベースを統合化する技術の開発を通して、以降の統合データベースのプロジェクトやビッグデータ、データ科学といった領域にいち早く先鞭をつけた。システムバイオロジーは、その言葉自体がわが国で生まれたものであるが、新たな学術分野を生み出し、それを世界が追従するという流れを創り、その状況を維持している。さらに、医療創薬のためのマルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレータの開発等は、シミュレーション技術の発展が医療技術の高度化に深く関与するような潮流も生み出している。

世界における研究レベルという視点からみると、計算科学分野の研究と技術のレベルは国際的にも高く、多くの論文や国際会議への招待講演等からそのレベルの高さが示されている。ただし、研究領域全体のレベルが高いというわけではなく、数人の卓越した研究者の国際レベルが突出しているという印象を受ける。学術論文についても英文とはいえ国内学会の学会誌なども多く、研究の国際性については若干の課題があると思われる。受賞も国内などが多く、国際的なものについても、シンポジウムレベルや日本を活動の中心とする組織からの受賞が多い。

(さきがけ)

科学技術上の発見や発明、新理論の提唱、新分野や潮流の創出への貢献という視点からみると、現時点ではCRESTに比して量的に小さいが、スポット的に新しい理論、技術の提案がなされている。例えば、相関電子系の新しい大規模計算アルゴリズムでは新しく開発した経路積分繰り込み群法と従来の計算手法とをハイブリッド的に組み合わせた方法によって、現実の物質を対象としたハイブリッド型大規模計算が可能になるような第一原理計算手法とシミュレーション技術を開発し、強相関物質での精度の高い計算手法を確立した。また、後継のプロジェクトにおいて、低エネルギー側と高エネルギー側での物理の橋渡しを行い、低エネルギー側に要求される高精度と高エネルギー側全体の計算効率の両方を実現する手法を開発し、現実の多彩な物質群(鉄系超伝導体、芳香族超伝導体、フルーレン超伝導体、窒化物超伝導体、スピン軌道相互作用の強い物質群や有機導体など)への広範な実証研究の展開を進めており、一つの領域を形成している。さきがけ研究者の受賞等

を見ると、複数の研究者が高い評価を受けており、今後の新分野や潮流の創出等への貢献が期待できる。受賞等は研究の一定期間後に生ずるものであるから、これらのことは、さきがけにおける研究が効果的であり、研究総括やアドバイザーの貢献も大きいものと思われる。

## (2) 研究成果の応用に向けての発展状況

(CREST)

研究成果の実証および応用に向けての技術開発の波及効果については、ベンチャーの立ち上げや企業との連携、地域や臨床現場との連携、あるいは国際会議での招待講演の数や海外の応用分野における学会での高い評価を鑑み、総じて十分に効果が出ていると考えられる。たとえば、ベンチャー起業では心臓シミュレーションから発展した(株)UT-Heartが設立され、細胞シミュレーションから研究支援受託サービスを行う(株)アーティセル・システムズも設立された。また、粒子法シミュレーション技術・CG技術を結集したプロメテック・ソフトウェア(株)も設立されている。さらに研究課題で得た成果とプログラムの普及、発展のためにNPO法人を設立した例もあり、研究課題終了後の取り組みとして高く評価できる。

社会・経済への波及効果については、多くの新聞が各研究課題の研究期間中から研究期間終了後の成果を報道しており、シミュレーション技術の高度化とその応用に対する社会からの期待が大きいことが客観的に示されている。これらは、京コンピュータおよびポスト京プロジェクト立ち上げの基盤となる社会的背景を作る一助になっているし、ビッグデータおよびデータ科学を推進する潮流にも大きな影響をおよぼしている。たとえば、データ同化シミュレーションの研究は広範な分野において、基礎研究から応用に至るまで広い波及効果を持ち、また、放射線治療高度化のための超並列シミュレーションシステムの開発、高度放射線医療のためのシミュレーション基盤の開発、医療創薬のためのマルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレータの開発等はシミュレーション技術の発展が医療技術の高度化に比較的直接につながるテーマでもあり、シミュレーションの基盤研究が社会に貢献する好例である。

(さきがけ)

総合的な潮流を創るという視点からはCRESTの成果には及ばないが、個々の研究は総じて応用に向けての技術開発の取り組みが十分である。具体的な問題解決のため企業との共同研究を行っている研究者もあり、さきがけの研究成果を基に現実的な系への応用が積極的になされていると評価できる。また、京コンピュータのプロジェクト推進の実働的中核プレーヤーとして多くのさきがけ研究者が参加している。技術として継続的に発展中のものもあり、例えば、量子分子動力学法に基づく化学反応対応型連成現象シミュレータの開発では、多様な応用分野に対して開発したこのシミュレータの適用を試み、それぞれの領

域の専門家との連携を深めることにより、シミュレーション利用の新しいスタイルとして発展する可能性をみせている。また、超効率的な高分子物性機能計算システムの開発は継続的に研究が続いており、今後の計算機のハードウェアの性能向上や並列計算を考慮した開発により飛躍することも期待できる。

さきがけ研究は、個人研究であるためか、研究者ごとに発展性にバラツキがあることは否めない。産業界との連携では一部を除いて、多くの研究者がまだ連携を模索している段階にあり、今後のさらなる発展を期待したい。

### (3) その他の特筆すべき波及効果

(CREST)

本研究領域のねらいとした基盤技術に関して、個々の研究の発展、長期的な研究基盤の形成という意味で十分な成果があり、この動きがこの5年～10年の間に継続的に繋がっていることは十分に評価できる。特に医療・情報産業における原子・分子レベルの現象に基づく次世代統合シミュレーション技術の確立という視点において、医療と計算科学をつなぐマルチフィジックス・シミュレーションは、基礎レベルから応用レベルまで展開されており、さらに企業との連携による事業化も視野に入れており、その持続的成果は特筆すべきものとする。また、データ同化手法が広範な分野において基礎から応用までの広がりを見せている点、多階層シミュレータが継続的努力によって維持・管理され、新たな分野への展開が試みられている点も特筆に値する。

(さきがけ)

「京コンピュータ」の5つの戦略分野が設定され、本さきがけの若手研究者が実質的なプロジェクトの推進役として活躍した点も評価できる。

### 3. その他

個別の研究の中には大きく発展したものもあり、本CREST、さきがけの制度上の意義は十分に感じる。その上で、今後の研究推進および追跡評価等を改善するために評価委員の意見を列挙する。

シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築においては、統合解析シミュレーション技術の実用化を目指すことを目標としているが、多くの課題で実用化への道筋は必ずしも見えているとは言えない。シミュレーションのコア技術の実用化には、ソフトウェアだけを考えても、整備、維持・管理、解析技術の拡大、可視化技術等多岐にわたる課題解決が必要であり、更には、実証実験のグループとの連携およびそのフィードバックの仕組みも必要である。シミュレーション技術の革新だけで終わるのではなく、実用化への道筋を作る仕組みにもより一層の努力が必要である。

国際性に関しては、海外とのコミュニケーションや連携を考慮する必要がある。例えば、事前評価、中間評価、事後評価等において国際評価を実施する機会を考慮すること等があげられる。

シミュレータ等のソフトウェアについては、その後のメンテナンス、バージョンアップをいかに継続、開発されたソフトを発展・普及させていくかも重要であり、その方策について、特に応用範囲がある程度広く、大学や企業の基礎研究に役立つソフトについては、国の支援制度の拡充（例えば、ユーザー会支援のための人員派遣やそのための費用負担等）も含め議論が必要と思われる。

追跡評価では以下を考慮すると、より有効な情報が得られると思われる。①研究グループ間の連携について調査し、各研究課題を俯瞰し、有機的に結びつけることで、より大きな発展が展望できる。②研究成果の波及効果を見るには、発展・普及段階がどのレベルにあるのか、例えば、基礎研究レベルから応用段階までステージを何段階かに分類するなどして定量性を持たせる等の工夫があるとよい。③社会的・経済的なインパクトは長期的な視点で見る必要があり、評価は難しいが、例えば、産業界、それも産業界内の経営側有識者の評価を考慮するのも一案である。④招待講演は分野における研究者の評価に繋がっていることが多く、評価指標として意味があるが、国際会議全体での基調講演とセッション内招待講演は位置づけが大きく異なるので、これらを区別した記載を取り入れることで評価の精度が高まる。⑤研究の継続性・発展性について評価する場合、研究の中心が若い研究者に移行する場合があるので、研究を引き継いだ研究者の実績等の情報も調査するとよい。