

戦略的創造研究推進事業

－CRESTタイプ－

研究領域「シミュレーション技術の革新と
実用化基盤の構築」

研究領域中間評価用資料

平成19年3月19日

1. 戦略目標

「医療・情報産業における原子・分子レベルの現象に基づく精密製品設計・高度治療実現のための次世代統合シミュレーション技術の確立」（平成 14 年度設定）

1) 具体的な達成目標

計算機内で微視的(ミクロ)現象から巨視的(マクロ)現象までを統合的に解析することで、2010 年頃を目処に、物質材料・デバイス等の原子・分子レベルの現象に基づく精密製品設計開発や、細胞内タンパク質の挙動解析、生体機能シミュレーションによる高度治療等を可能とする、統合解析シミュレーション技術の実用化を目指し、以下を達成目標とする。

- ・マルチスケール・シミュレーション技術の確立

原子・分子のミクロスケール、無数の原子・分子を扱うマクロスケール、その間のメゾスケールの現象全体を統合して解析するマルチスケール・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

熱、構造、流体、化学反応、電磁気的現象等の連成現象(マルチフィジックス現象)を統合解析できるマルチフィジックス・シミュレーション技術の確立。

- ・ネットワーク上に分散した多数のソフトウェア・データベース等を有機的に統合し、複雑問題を解析するシステム構築手法(データベースシステム技術等)の確立

一ネットワーク上に分散した大規模データに自由にアクセスし、データを収集・分析可能とするデータベースシステム技術の確立。

一複雑現象が連成して同時並行的に生じる事象の並列シミュレーション技術(タスク並列技術、収束化技術等)の確立等。

- ・革新的アルゴリズムの開発

逆問題解析、高速最適化計算手法(収束化技術等)の確立等。

2) 目標設定の背景及び社会経済上の要請

近年のコンピュータ、ネットワークの驚異的進歩を背景に、ミクロ現象からマクロ現象にいたる多様な現象を統合的に解析できる技術が確立すれば、ナノ材料や生体高分子機能等を物理化学の法則に基づき正確に把握でき、開発に精密性が求められるナノデバイス設計や精度の高さが恒常的課題として求められる最適治療が可能になる等、医療・情報産業における精密製品設計・高度治療等の飛躍的發展を実現できる。これにより、研究開発や医療現場における高い成功率・スピード化を実現し、ナノ、バイオ市場の拡大速度を加速するとともに、製品化に至るまでの開発ステップの簡略化、治療期間の短縮化等による時間的・経済的な効率化が図られる。また、高度なシミュレーション技術には、スパコン、サーバー、データベース等の計算資源をネットワーク上に共有化する

ための技術開発や環境整備が不可欠となることから、次世代の IT 基盤への貢献も期待でき、社会的・経済的な波及効果は極めて大きいと考えられる。

以上の理由から、当該目標の達成に向けた研究開発を推進することに対し、社会的、経済的要請が大きいと判断した。

3) 目標設定の科学的裏付け

シミュレーション技術は、従来の理論、実験とは異なる新しい研究手法を実現し、科学技術のブレークスルー・国際競争力の強化に資する基盤技術として、その重要性が高まっている。欧米では、従来から積極的な取組みが進められており、特に、米国では、ASCI (Accelerated Strategic Computing Initiative) プロジェクト(※1)等の国家プロジェクトの中で、コンピュータの高速化とともにシミュレーション技術の研究開発が集中的に行われている。

また、現在のシミュレーション技術は、流体や構造の特定の物理現象の解析、量子化学計算に基づくミクロ現象の解析、古典論に基づくマクロ現象の解析等に止まっており、ミクロからマクロにいたる多様な現象を統合的に解析できるシミュレーション技術は確立されていない。

我が国は、実用シミュレーションソフトウェアでは大きく遅れを取っているものの、研究者の基礎的研究の水準では、欧米と互角、一部では優位な分野もある。例えば、量子化学計算を用いたタンパク質の機能・構造解析では、我が国は 100 残基(1500 原子)以上の大規模タンパク質の電算計算に成功して世界をリードしており、循環器系の血流のシミュレーション技術では世界の最高水準にある。更に、新しいアルゴリズムや並列計算技術等の研究も進められており、タンパク質の機能解析等、特定の研究テーマにおいては、統合シミュレーション技術の研究も取組まれはじめている。

また・地球シミュレータの本格的運用やスーパーSINET の整備が進む等、必要なハードウェアの環境が整いつつあるとともに、Grid 技術等、ネットワーク上の計算資源を共有化するミドルウェア技術の研究も急速に進展している。

以上の理由から、当該戦略目標の達成に向けた研究開発を推進するために十分な科学的ポテンシャルがあると考えられ、当該目標の下、国内の最高峰の研究者の総力を結集し、研究の体系的取組みを行うことで、技術の飛躍的進展が期待できる。

(※1)1994 年～2004 年の 10 年間に約 1,400 億円を投入し、超並列コンピュータの実現と大規模シミュレーション技術等開発を目標とした米国家プロジェクト。

4) 重点研究期間

平成 14 年度から 16 年度までに研究体制を順次整備しつつ、1 研究課題は、概ね 5 年の研究を実施する。(なお、優れた研究成果を挙げている研究課題については、厳正な評価を実施した上で、研究期間の延長を可能とする。)

2. 研究領域

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」（平成14年度発足）

（領域の概要）

この研究領域は、計算機科学と計算科学が連携することにより、シミュレーション技術を革新し・信頼性や使い易さも視野に入れて、実用化の基盤を築く研究を対象とするものである。

具体的には、物質、材料、生体などのミクロからマクロに至るさまざまな現象をシームレスに扱える新たなシミュレーション技術、分散したデータベースやソフトウェアをシステム化する技術、また、計算手法の飛躍的な発展の源となる革新的なアルゴリズムの研究や、基本ソフト、情報資源を取り扱いやすくするためのプラットフォームあるいは分野を越えて共通に利用できる標準パッケージの開発などが含まれる。

3. 研究総括

土居 範久

（中央大学理工学部 教授）

4. 採択課題・研究費

(百万円)

採択年度	研究代表者	中間評価時 所属・役職	研究課題	研究 費*
平成 14年度	越塚 誠一	東京大学・教授	粒子法によるマルチフィジクスシミュレータ	278
	斎藤 公明	日本原子力研究開発機構・研究主席	放射線治療の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	481
	土井 正男	東京大学・教授	多階層的バイオレオシミュレータの研究開発	451
	西田 晃	中央大学・助教授	大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの開発	221
	渡邊 聡	東京大学・教授	ナノ物性計測シミュレータの開発	181
平成 15年度	穴井 宏和	富士通㈱・研究員	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の構築	209
	石田 清仁	東北大学・教授	材料の組織・特性設計統合化システムの開発	546
	佐々木 節	高エネルギー加速器研究機構・助教授	高度放射線医療のためのシミュレーション基盤の開発	343
	高野 直樹	立命館大学・教授	生体骨医療を目指したマルチプロフェッショナル・シミュレータ	223
	長嶋 雲兵	産業技術総合研究所・主幹研究員	グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発	265
	久田 俊明	東京大学・教授	医療・創薬のためのマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータの開発	348
平成 16年度	大石 進一	早稲田大学・教授	数値線形シミュレーションの精度保証に関する研究	134
	田中 成典	神戸大学・教授	フラグメント分子軌道法による生体分子計算システムの開発	385
	田中 高史	九州大学・教授	リアルタイム宇宙天気シミュレーションの研究	104
	富田 勝	慶應義塾大学・教授	システムバイオロジーのためのモデリング・シミュレーション環境の構築	371
	樋口 知之	情報・システム研究機構・教授	先端的データ同化手法と適応型シミュレーションの研究	175
	藤原 毅夫	東京大学・教授	複合手法を用いた電子構造計算技術の開発	155
総研究費				4,848

* 研究費：平成17年度までの実績額に平成18年度以降の計画額を加算した金額

4. 研究総括のねらい

シミュレーション技術は、従来の理論・実験とは異なる新しい研究手法を実現し、科学技術のブレークスルー、国際競争力の強化に資する基盤技術として、その重要性が高まっている。現在のシミュレーション技術は、計算科学として各研究分野において研究および実用化が進められているが、さらなる発展のためには、計算機科学や数学、特段、計算機科学分野の研究者との連携が求められている。計算機科学分野の研究者との連携を図ることにより、シミュレーションや可視化のための新しいアルゴリズムの開発、高機能、高性能でしかも信頼性や安全性の高いシステムの開発が期待できる。

この研究領域では、10年程度後に医療分野における高度治療や情報産業における精密製品設計等の「ものづくり」に役立つ次世代統合シミュレーション技術を確立するという戦略目標の達成に向けて貢献できる基盤整備として必要となる、基礎的・共通的な実用化の基盤を構築する研究を対象とした。

具体的には、ミクロからマクロに至るさまざまな現象をシームレスに扱える新たなシミュレーション技術、分散したデータベースやソフトウェアをシステム化する技術、また、計算手法の飛躍的な発展の源となる革新的なアルゴリズムの研究や、基本ソフト、情報資源を取り扱いやすくするためのプラットフォームあるいは分野を越えて共通に利用できる標準パッケージの開発などが含まれます。また、アルゴリズム等の研究では、個人の独創的な発想にも期待する。

特に、計算科学分野の研究者と計算機科学分野の研究者とが協同して進める研究提案で、個別研究領域では採れない分野横断的な共通基盤に寄与する研究開発を含むシミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築に係る広い範囲での研究提案を期待する。

6. 選考方針

本研究領域は、チーム型研究（CRESTタイプ）と個人型研究（さきがけタイプ）の混成領域であり、選考においては研究のねらい、独創性、主体性、研究計画の他、特に、分野横断的な共通基盤に寄与する研究開発を含み、シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築に貢献が期待できる研究提案を重視し採択した。

採択課題については計算科学、物性物理学、物質材料、生化学、生体医療、地球科学など広範囲に渡る分野からの採択となり、いずれも研究目標を明確に定めており、計画も具体的であることから十分な成果が期待できるものと考えている。

今後、分野横断的な研究がシミュレーション技術の基礎基盤構築を担い、将来のシミュレーション技術として医療分野や情報産業へ大きな貢献がなされることを強く期待する。

7. 領域アドバイザーについて

領域アドバイザー	所属	役職	任期
大蒔 和仁	産業技術総合研究所	研究コーディネーター	平成14年4月～平成22年3月
小柳 義夫	工学院大学	学部長/教授	平成14年4月～平成22年3月
武市 正人	東京大学	研究科長/教授	平成14年4月～平成22年3月
寺倉 清之	北海道大学	特任教授	平成14年4月～平成22年3月
東倉 洋一	国立情報学研究所	副所長/教授	平成14年4月～平成22年3月
三浦 謙一	国立情報学研究所	教授	平成14年4月～平成22年3月
宮原 秀夫	大阪大学	総長	平成14年4月～平成18年3月
矢川 元基	東洋大学	教授	平成14年4月～平成22年3月

領域アドバイザーとしては、計算機科学、物性物理学、計算力学、人間情報等の分野で先端的な研究を行い国際的にも高い業績をあげ、幅広い視野を有する経験豊富な方々であり、当研究領域の発展のために研究者を指導・育成していただける、上記の方々にお願いした。

8. 研究領域の運営について

当研究領域は、計算機科学と計算科学が連携することにより、シミュレーション技術を革新し・信頼性や使い易さも視野に入れて、実用化の基盤を築く研究を対象としており、計算科学、物性物理学、物質材料、生化学、生体医療、地球科学など様々な領域の研究テーマが対象となっている。

毎年1回、研究報告会を開催し、各研究チームの情報交流や研究進捗状況の把握を行ってきた。初年度、次年度は研究代表者および各研究チームのメンバーが参加し、口頭発表を中心に議論を行った。また3年目以降は公開シンポジウムとして一般の参加者も含め口頭発表とポスター発表にて議論を行った。また本研究領域は、チーム型研究（CREST タイプ）の他に個人型研究（さきがけタイプ）の混成領域であるためシンポジウムではCREST 研究者とさきがけ研究者の間でも活発に議論を深めることができた。

各研究チームは研究成果がある程度顕著になってきた時点で研究会、ワークショップ、シンポジウムを行っており、技術参事が参加しその内容を研究総括に連絡することで研究進捗状況の把握を行っている。また年一回、技術参事を各研究チームの研究機関に伺わせ、年度研究実施報告書と研究計画書をもとに研究進捗状況の報告、詳細な研究計画等の内容把握を行っている。

以上の研究進捗状況を確認を行った結果、優れた研究成果が期待できる研究チームに

は研究費の予算配分への配慮を行っている。また中間評価報告会等の機会を利用した研究テーマの転換、支援を行っている。

9. 研究の経過と所見

(1) 生体・医療シミュレーション技術（マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション技術）

越塚チームはマイクロ生化学システムの研究開発能力の向上に寄与することを目的として、粒子法による多相流体構造連成解析手法に基づいた汎用マルチフィジックスシミュレータを開発している。さらに、それをマイクロ生化学システムの各種デバイスに実際に適用し、精密な計測実験結果と比較・検討して十分な定量的評価を行うことによって粒子法によるマルチフィジックスシミュレータの有効性を実証している。当初の対象であったマイクロ生化学システムでは、再生医療のための細胞培養やマイクロ液滴生成を対象としており、医療・情報に関する新しい分野におけるシミュレーション技術を生み出すものである。近い将来、さらにマイクロ流路中の赤血球の変形挙動に解析など、生体の分野にも展開を図っていくことを期待する。

土井チームは生体および生体工学に関連する微小流動領域のレオロジー現象を取り扱う理論とシミュレータの開発、検証を行っている。特に、本プロジェクトがすでに開発してきたソフトマテリアルのための統合的シミュレータ OCTA の成果を引き継ぎ、(1) シミュレーション GUI 環境(GOURMET)の改良 (2) バイオゲル、バイオ流体、微粒子分散系などの生体関連の複雑流体を扱う新規シミュレーションエンジンの開発 (3) 摩擦現象、乾燥・塗布の現象などに対する多階層的シミュレーション手法の構築および検証を行っている。現在、他のプロジェクトで開発しているプログラムを本研究のプラットフォームとのインタフェースをとる例もできており、本ソフトウェアを使用するユーザの更なる拡大を期待したい。

久田チームは計算科学における新たな理論開発と計算機科学による高速化・並列化のための実装とを組み合わせることにより、ミクロからマクロまで生理学的に最も研究が進んでいる心臓をターゲットとして、世界で初めてのマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータを開発し、実際の不整脈や心筋梗塞の診断・治療さらには創薬への適用を図っている。血液と心臓収縮の流体構造達成問題とのシミュレーションは本プロジェクト特有の成果であり、また、シームレスなマルチスケールシミュレーションの理論の提案という本プロジェクトの目標が達成できればインパクトが大きい。緻密な心臓シミュレータの構築を通して、計算科学的技術向上、医療や創薬への貢献など多方面において高く評価できる。

高野チームは増加傾向にある骨粗鬆症の予防・治療の診断補助のみならず、骨再生研究やインプラント研究開発に貢献すべく、海綿骨の微視構造を考慮したマルチスケール・シミュレータを開発した。特に、骨梁内の生体アパタイト結晶配向も考慮した

点で世界初のシミュレータとなる。均質化法と重合メッシュ法を併用し、医師向けに、高分解能イメージベース自動モデリング法、モルフォロジー分析法、骨梁内生体アパタイト結晶配向の可視化法、マイクロ応力に基づく骨質評価法、通信機能を組み込んだマルチプロフェッショナル・シミュレータを開発した。また同時に異分野の研究者の連携のため、マルチプロフェッショナル・シミュレータを構築することで、医学、生体力学、材料科学、計算工学の共通プラットフォームとして広範囲な利用が期待されている。

（２）ナノ計測シミュレーション技術

渡邊チームはナノ物性計測の中でも特に重要な、電氣的刺激（バイアス電圧を含む）を印加する計測に焦点をあて、外場やプローブの影響を取り込んで電流などの計測量を予測するシミュレータを開発している。さらに、このシミュレータを用いた解析により微視的な物理現象・ナノ構造物性と計測量との相関を明らかにし、計測量からナノ構造の物性やナノ領域での物理現象に関する情報を信頼性高く導出するための解析手法を確立する事を目指す。本研究におけるシミュレータ開発はすべてナノ物性計測における先駆的な研究であり、近い将来、それらソフトウェアの公開という形で有益的に社会還元できると考えられる。

（３）放射線医療シミュレーション技術

斉藤チームは放射線がん治療を対象として、詳細人体モデルと電磁カスケード・モンテカルロ法を用いた超並列計算により、患者に与えられる線量を短時間に高精度で計算し、治療を支援するシステムを開発している。さらに、高度な放射線治療を実現するために、本システムを強度変調型放射線治療（IMRT）やCT集光治療へ適用する研究を行うとともに、レーザー駆動陽子線治療を実現するための計算システムの構築と検討を実施する。放射線治療の品質保証と高度化を目的として、シミュレーション技術を活用して要素技術の開発が進展していることが認められる。

佐々木チームは今後放射線医療で重要となる陽子線、重粒子線まで含めた放射線医療シミュレータの開発を行っている。既に、放射線医学研究所、兵庫県粒子線医療センター、国立がんセンター東病院の施設に関してシミュレーションを行い、結果の正当性の検証を行ってきた。本研究成果のソフトウェアは特定の治療装置や既存のコードに依存しないため、複数の放射線治療装置に対して事前に精密な検証が可能となり放射線治療法の最適化を行うことができ、放射線医療の発展に貢献できるものと期待される。

（４）物質材料シミュレーション技術

石田チームはスタティクスからダイナミクスまで包括できる材料設計に関する統合

化シミュレーションシステムの開発を行っている。具体的な研究対象は（i）エレクトロニクス実装における材料接合技術シミュレーション（ii）磁気記録媒体、ナノ軟質磁性材料及び強磁性形状記憶合金のシミュレーション（iii）鉄鋼材料の組織及び材質予測シミュレーションである。またシミュレーション方法は（i）第一原理計算と CALPHAD 法を組み合わせた熱力学データベースの構築と（ii）Phase field 法による組織形成計算システムの開発に大別される。本研究の成果は材料学における永遠のテーマである材料の特性・材質予測の実現の突破口を開くものと期待される。

（5）大規模分子シミュレーション技術

田中成チームは巨大分子の電子状態を非経験的に計算する効率的な手法であるフラグメント分子軌道法のプログラム ABINIT-MP を基に、金属を含んだ酸素反応や光励起反応も扱えるように機能を拡張し、汎用の第一原理生体分子シミュレーションシステムを開発している。これにより、中規模の PC クラスタでも溶液中の蛋白質や核酸に関する現実的な生体化学反応の分子シミュレーションが可能となり、生体の機能解明や創薬等に大きく寄与すると期待される。

藤原チームは計算物理および数理科学における複数手法を組み合わせ、大規模原子系の量子力学的プロセスおよび強相関電子系を対象とした、物理的あるいは数理的な計算効率と誤差制御可能を備えた新しいシミュレーション技術を開発している。本研究の成果により 100 万原子あるいはそれ以上の原子からなるナノ・モデル系、および今後重要な材料となる強相関電子系に対するシミュレーションが可能となり、物質材料設計のためのシミュレーション基盤技術が確立できる。

長嶋チームは金属クラスターやタンパク質等の大規模分子系の現象を取り扱える系のサイズ拡大とパラメータの網羅的探索を可能とする分子シミュレーション環境の構築を目指し、グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発を行っている。新規物質設計・製造や遺伝子治療の活性化ならびに医薬品開発において、分子シミュレーション技術の高度化を図ることで開発時間の短縮や低コスト化が可能となり、収益率の向上が期待できる。

（6）バイオシミュレーション技術

富田チームは知識工学・ソフトウェア工学的手法を導入し、システムバイオロジーのための、本格的な実用に耐えられる細胞モデリング・シミュレーションソフトウェア環境を開発している。これまでに統合環境フレームワークの基礎的な部分を開発し、現在はこれをベースとしたプラグインの開発、改良を継続している。本研究が目指している実用的な細胞モデリング・シミュレーション環境の完成により、システムバイオロジーの研究が発展する結果、バイオテクノロジーや創薬研究の進展、更にはこれからの生物学研究に対するシミュレーション技術の一般化が大いに期待できる。

(7) 地球科学シミュレーション技術

樋口チームは先端的なデータ同化手法を開発し、さらにこの技法をもとに、シミュレーションモデルを複数走らせ、データ適応的に数値モデルを切り替え、あるいはそれらを統合するようなメタシミュレーションモデルを創出するプラットフォームを提供する。本研究チームでは現在主に、大気・海洋、津波、宇宙空間（リングカレント）の3つの領域における具体的テーマに取り組んでいる。

田中高チームは宇宙天気現象を再現するシミュレーションモデルを開発し、人類の宇宙活動のための予報に役立つようなレベルにまで発展させることを目指すと共に、形を持った自然の複雑性をシミュレーションによって研究する方法を確立し、複合系の科学を開拓している。本研究により、我々の周りの自然を本来複雑なものと捉え、数値空間上に作られた自然のコピーから現実世界の複雑性を解明することができる。

(8) ソフトウェア基盤シミュレーション技術

西田チームは従来それぞれの分野において別個に進められてきた並列アルゴリズムや実装に関する知見をもとに、大規模化が予想される今後の計算環境に対応したスケラブルなソフトウェア基盤を整備することを目指し、反復解法、高速関数変換、及びその効果的な計算機上への実装手法を中心に研究を進めている。現在、汎用性の高いソフトウェアとしてユーザの要望を反映した更新を適宜行っており、実問題への適用に耐え得る移植性に優れたソフトウェア基盤を提供していく予定である。

穴井チームはものづくりにおける設計・製造の効率化・高品質化・高付加価値化実現のための新しいシミュレーション技術の確立を目指し、これまでの数値計算手法に数式処理計算を融合した数値・数式融合計算に基づく最適化手法の開発及びツール化を行っている。本研究の成果である設計支援ツールにより、制御系設計をはじめとする他の様々なエンジニアリングプロセス、システム解析・設計への適用が可能となり、そのことはものづくりにおけるシステムティックで高精度な設計を実現する次世代のシミュレーション技術の確立へと繋がる。

大石チームは、数値線形シミュレーションツールを精度保証付きシミュレータへと性能向上させる理論とアルゴリズムの開発を行っている。また、高精度内積計算アルゴリズムを用いた、悪条件線形問題の解決アルゴリズムとポータブルな高精度精度保証アルゴリズムを開発する。本研究の成果により、従来取り扱えなかった悪条件な数値線形代数の問題もシミュレータで必要最小限に近い手間で解け、得られた数値解の精度もほぼ過大評価なしに評価できるようになる。

10. 総合所見

シミュレーション技術は、従来の理論・実験とは異なる新しい研究手法を実現し、科学技術のブレークスルー・国際競争力の強化に資する基盤技術として、その重要性が高まっている。しかし、さらなる技術の発展のためには、シミュレーションや可視化のための新しいアルゴリズムの開発、高機能・高性能でしかも信頼性や安全性の高いシステムの開発が必要である。

本研究領域は、計算機科学と計算科学の連携によるシミュレーション技術の革新と、信頼性や使いやすさを視野に入れた実用化の基盤を築くことを目標とした。

本研究領域は CREST 研究（チーム型）とさきがけ研究（個人型・ポスドク参加型）が混成する特殊な領域であるため CREST とさきがけ研究でのバランスの良い課題選定を行った。またシミュレーション技術ということで種々の研究領域があるため、なるべく広い分野からの採択を行うべく中型規模予算の研究提案を中心に選考を行った。その結果、分野横断的な共通基盤に寄与する研究開発を含む、シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築に貢献が期待できる 17 の研究課題を採択した。

研究開始後は領域アドバイザーの協力のもと、研究報告会、領域シンポジウム、中間評価会を通して各チームの研究サポート・支援を行った。特に領域シンポジウムでは、各分野の研究チームがお互いに気兼ねなく情報交流できるようにポスター発表も同時に開催した。またシンポジウムではさきがけ研究者も同時に参加しており、CREST 研究者とさきがけ研究者間での意見交換や議論も活発に行われた。シンポジウムをきっかけとしてその後共同研究に発展した例も多々あることは非常に望ましい結果である。

予算の配分については領域シンポジウムや中間評価において個々の研究の進展を把握し、更なる発展が十分期待できる研究課題への重点的な配分を行っている。また、研究開始当初では見えなかった発展的応用課題への研究推進支援も行っている。

生体医療シミュレーション技術においては国際的に計算科学をリードしているマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータの開発を行っている。これらは心臓疾患治療における新薬の効果評価、除細動装置開発、合理的手術計画などの実例を通じて「社会経済上の要請」に応えることが出来ると期待できる。また本シミュレータ開発の過程で進められた計算技術は、マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション技術の典型例であり、計算科学としての意義が大きいとともに、社会的意義も非常に大きい。

物質材料シミュレーション、物質材料の熱力学データベースの開発では、新しい材料の発見等、著名な国際誌への研究成果の発表、および国内外の特許申請を多数行っており大きな成果が出ている。また、すでに国内外の企業と実用化に向けた研究開発を行う

など、実用的観点においても成果が出ている。

CREST 研究とさきがけ研究で新たな共同研究へと発展しつつある例では、さきがけプロジェクトで開発しているプログラムを CREST 研究のプラットフォームとのインタフェースをとっている例があり、ソフトウェアを使用するユーザの更なる拡大に貢献している。また、大規模分子シミュレーション技術においては CREST 研究の分子シミュレーション技術にさきがけ研究成果の分子シミュレーション技術を組み合わせ計算精度を向上させる共同研究を行っている。

放射線医療シミュレーション技術などすでにシミュレーションシステムの構築が完了しつつあり、医療現場からのフィードバックを考慮し医療診断の一判断材料として実用化にむけた更なる研究推進を期待する。

ソフトウェア基盤シミュレーション技術においてはスケーラブルな数値計算ソフトウェア基盤が整いつつある。また数値・数式融合計算に基づく最適化手法の開発ではすでにツール化を実現している。さらに高精度精度保証アルゴリズムの開発では既存の計算機環境への展開が期待できる。

本研究領域では実用化基盤の構築ということを重視しているが、H18 年度から JST の産学共同シーズイノベーション化事業にて基礎研究を顕在化させイノベーションの創出に繋げる事業が開始され、本領域の研究チームの研究者は積極的に参加、取り組んでいる。