

戦略的創造研究推進事業

研究領域事後評価用資料

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」

研究領域事後評価用資料

2010. 3. 16

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」

(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、電磁氣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子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。

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)

本研究領域は、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

氏名 土居 範久 (所属 中央大学理工学部情報工学科 教授)

4. 採択課題・研究費

(1) CRESTタイプ

(百万円)

採択年度	研究代表者	研究（開始）／終了時の所属・役職	研究課題	研究費＊)
平成 14年度	越塚誠一	(東京大学 助教授) 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	270
	斉藤公明	(日本原子力研究所 主任研究員) 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	473
	土井正男	(名古屋大学 教授) 東京大学 教授	多階層バイオレオシミュレータの研究開発	448
	西田 晃	(東京大学 助手) 中央大学 客員研究員	大規模シミュレーション向け基盤ソフトウェアの開発	226
	渡邊 聡	(東京大学 助教授) 東京大学 教授	ナノ物性計測シミュレータの開発	182
平成 15年度	穴井宏和	(富士通 研究員) 富士通 統括部長付	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	204
	石田清仁	(東北大学 教授) 東北大学 教授	材料の組織・特性設計総合化システムの開発	578
	佐々木節	(高エネルギー加速器研究機構 助教授) 高エネルギー加速器研究機構 教授	高度放射線医療のためのシミュレーション基盤の構築	364
	高野直樹	(大阪大学 助教授) 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	221

	長嶋雲兵	(産業技術総合研究所 総括研究員) 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	285
	久田俊明	(東京大学 教授) 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	397
平成 16年度	大石進一	(早稲田大学 教授) 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	199
	田中成典	(神戸大学 教授) 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	463
	田中高史	(九州大学 教授) 九州大学 教授	リアルタイム宇宙転記シミュレーションの研究	121
	富田 勝	(慶應義塾大学 所長/教授) 慶應義塾大学 所長/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	399
	樋口知之	(統計数理研究所 副所長/教授) 統計数理研究所 副所長/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	220
	藤原毅夫	(東京大学 教授) 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	178
総研究費				5228

*) 各研究課題とも5年間の総額

ただし立命館大高野チームのみ3年間の総額

(2) さきがけタイプ

(百万円)

採択年度	研究代表者	研究（開始）／終了時の所属・役職	研究課題	研究費＊)
平成 14年度	青木百合子	(広島大学 助教授) 九州大学 教授	超効率的な高分子物性機能計算システムの開発	94
	今田正俊	(東京大学 教授) 東京大学 教授	相関電子系の新しい大規模計算アルゴリズム	88
	中嶋隆人	(東京大学 助手) 東京大学 准教授	相対論的分子理論プログラムの開発	48
	中村佳正	(京都大学 教授) 京都大学 教授	特異値分解法の革新による実用化基盤の構築	87
	松本純一	(産業技術総合研究所 特別研究員) 産業技術総合研究所 研究員	マイクロ流体デバイス開発のための流体－構造連成共振現象逆解析	44
	室田一雄	(東京大学 教授) 東京大学 教授	離散・連続複合系の分散最適化シミュレーション	27
	山本量一	(京都大学 講師) 京都大学 准教授	ハイブリッド型分子動力学シミュレーションの開発	73
平成 15年度	劉 浩	(理化学研究所 前任研究員) 千葉大学 教授	生物型飛行の力学シミュレータの構築	97
	川野聡恭	(東北大学 助教授) 大阪大学 教授	DNAナノデバイス創製におけるシミュレーション技術の確立	56

	久保百司	(東北大学 助教授) 東北大学 准教授)	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	42
	立川仁典	(横浜市大 助教授) 横浜市大 教授	水素量子シミュレーション技術の構築	45
	渡邊孝信	(早稲田大学 客員講師) 早稲田大学 准教授	ダイナミックボンド型大規模分子動力学法の開発	45
平成 16年度	有田正規	(東京大学 助教授) 東京大学 准教授	分子スケール差を統合する代謝シミュレーション	33
	大武美代子	(東京大学 特任教授) 東京大学 准教授	神経系双方向マルチスケールシミュレータの開発	40
	手塚建一	(岐阜大学 助教授) 岐阜大学 准教授	骨リモデリングシミュレータで挑むテーラーメイド再生医療	46
	星野忠次	(千葉大学 助教授) 千葉大学 准教授	計算機による特異的抗体設計法の確立	42
	前園 涼	(物質・材料研究機構 研究員) 北陸先端科学技術大学院大学 講師	遷移金属イオンを含む生化学分子の電子論的精密計算	36
			総研究費	943

*) 各研究課題とも3年間の総額

5. 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. 選考について

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（CREST タイプ・さきがけタイプ共通）

領域アドバイザー氏名	終了時の所属	役職	任期
大蒔和仁	東洋大学総合情報学部	教授	平成 14 年 4 月～平成 22 年 3 月
小柳義夫	工学院大学情報学部	学 部 長 / 教授	平成 14 年 4 月～平成 22 年 3 月
武市正人	東京大学大学院情報理工学系研究科	教授	平成 14 年 4 月～平成 22 年 3 月
寺倉清之	北陸先端科学技術大学院大学先端融合領域研究院	特別招聘教授	平成 14 年 4 月～平成 22 年 3 月
東倉洋一	国立情報学研究所情報社会相関研究系	副 所 長 / 教授	平成 14 年 4 月～平成 22 年 3 月
三浦謙一	国立情報学研究所リサーチグリッド研究開発センター	センター長/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	東洋大学計算力学研究センター	センター長/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

当研究領域の研究課題は、計算科学、物性物理学、物質材料、生化学、生体医療、地球科学など様々な領域の研究テーマが対象となっており、さらに CREST 研究チームとさきがけ研究者（個人研究型、ポスドク参加型）が混在することになるため研究領域の運営に工夫が必要であった。

研究の開始に当たって特にさきがけ研究者についてはさきがけ研究がスムーズに行えるように研究実施場所を訪問してさきがけ研究者の上司に当たる方と打合せを行い、さきがけ研究の趣旨等について理解をいただき合わせて研究環境の確認を行った。

CREST 研究では年に 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た。またさきがけ研究では半年に 1 回、領域会議を開催して各研究者の進捗

状況の把握および研究アドバイスをを行った。さきがけ研究は年2回、領域会議を開催することになるが、その内の1回はCREST研究の研究報告会と合同で行うこととした。研究報告会は公開シンポジウムとして口頭発表とポスター発表にて行い、口頭発表の順番は関連ある研究をまとめてCREST研究とさきがけ研究の発表を混載して行った。

さきがけ領域会議ではさきがけ研究者と研究総括、領域アドバイザーが参加し活発な質疑・討論が行われた。また、領域会議の中で領域アドバイザーによる講演を行い、さきがけ研究者にとって貴重なアドバイスになった。領域会議を通して、シミュレーションという範囲が広い研究領域ではあるが、各研究課題の進捗状況の発表のみでなく、自由討論会等も行ったことで研究者同士の交流が図れたと感じている。

各CREST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いるが、その内容を確認することで各研究チームの節目における研究成果の把握を行った。

年一回、各研究チームの研究機関を訪問し、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た。また毎月、技術参事からの業務報告を基に研究チームのタイムリーな研究成果状況の把握を行った。

以上の研究進捗状況の確認を行った結果、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、支援を行った。

9. 研究を実施した結果と所見

表1に当領域におけるシミュレーション研究の適用領域とCREST研究とさきがけ研究の各研究課題のシミュレーション一覧を示す。ここで示すように当領域でのシミュレーション技術の適用領域は広い範囲に亘っている。また図1、2はそれぞれCREST研究、さきがけ研究における各研究課題の位置づけを示す。グラフの縦軸はミクロ領域からマクロ領域まで、横軸は基礎領域から応用領域までを表している。これらの図からも当領域の研究課題がミクロからマクロ、基礎から応用までのシミュレーション技術の研究を対象としていることがわかる。

(1) CREST・さきがけ混合領域としてのねらいに対するCREST・さきがけへの効果

当領域ではCREST研究チームとさきがけ研究者（個人研究型、ポスдок参加型）が混載しており、チーム研究と個人研究が有益な相互作用を引き起こしお互いの研究が発展していくことを期待した。

- ・CREST研究のグリッド技術を用いた大規模分子シミュレーション研究ではさきがけ研究の水素系量子シミュレーション技術を取り込むことで、タンパク質のフォールディングに欠かせない分子内水素結合などの相互作用を高精度に計算できるようにした。水素・重水素置換に伴う構造の安定性や反応性、溶媒との相互作用に関する実験的解析に対して

表 1. シミュレーション一覧

シミュレーション適用領域		シミュレーション名(略称)	CREST	さががけ
医療シミュレーション技術		心臓シミュレーション	久田チーム	
		放射線治療シミュレーション	斉藤チーム	
		重粒子線治療シミュレーション	佐々木チーム	
		骨医療シミュレーション	高野チーム	手塚研究者
大規模分子シミュレーション技術	バイオ分子シミュレーション	FMO 法による生体分子シミュレーション	田中成チーム	
		量子モンテカルロシミュレーション		前園研究者
		グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーション	長嶋チーム	
		水素系量子シミュレーション		立川研究者
		Elongation 法による高分子シミュレーション		青木研究者
		特異的抗体設計シミュレーション		星野研究者
	物性分子シミュレーション	電子構造計算シミュレーション	藤原チーム	
		相関電子系大規模シミュレーション		今田研究者
		相対論的分子シミュレーション		中嶋研究者
		化学反応対応シミュレーション		久保研究者
		ダイナミックボンド型大規模シミュレーション		渡邊研究者
材料シミュレーション技術		材料設計シミュレーション	石田チーム	
ナノ計測シミュレーション技術		ナノ計測シミュレーション	渡邊チーム	
ソフトマター・流体シミュレーション技術		粒子法によるマルチフィジックスシミュレーション	越塚チーム	
		多階層バイオレオシミュレーション	土井チーム	
		ハイブリッド型ソフトマターシミュレーション		山本研究者
		マイクロ流体デバイスシミュレーション		松本研究者
		DNA 流動シミュレーション		川野研究者
生物・飛行シミュレーション技術		生物・飛行シミュレーション		劉研究者
生体・行動シミュレーション技術		生体・行動シミュレーション		大武研究者
細胞・代謝シミュレーション技術		細胞シミュレーション	富田チーム	
		代謝シミュレーション		有田研究者
地球・環境シミュレーション技術		データ同化シミュレーション	樋口チーム	
		宇宙天気シミュレーション	田中高チーム	
ソフトウェア基盤シミュレーション技術		数値計算向け基盤ソフトウェアシミュレーション	西田チーム	
		精度保証シミュレーション	大石チーム	
		特異値分解法シミュレーション		中村研究者
最適化シミュレーション技術		数値・数式ハイブリッドシミュレーション	穴井チーム	
		離散・連続最適化シミュレーション		室田研究者

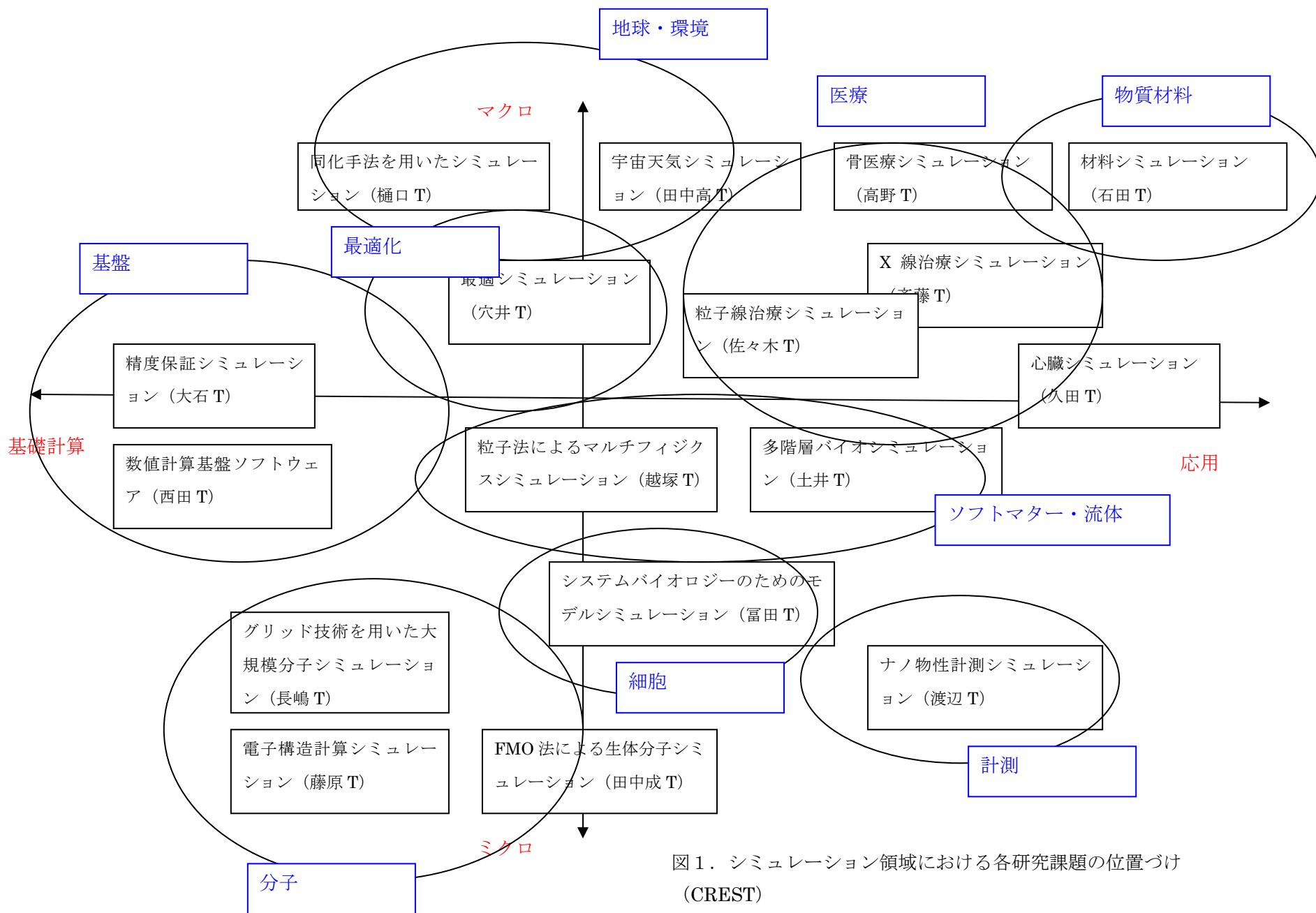


図1. シミュレーション領域における各研究課題の位置づけ (CREST)

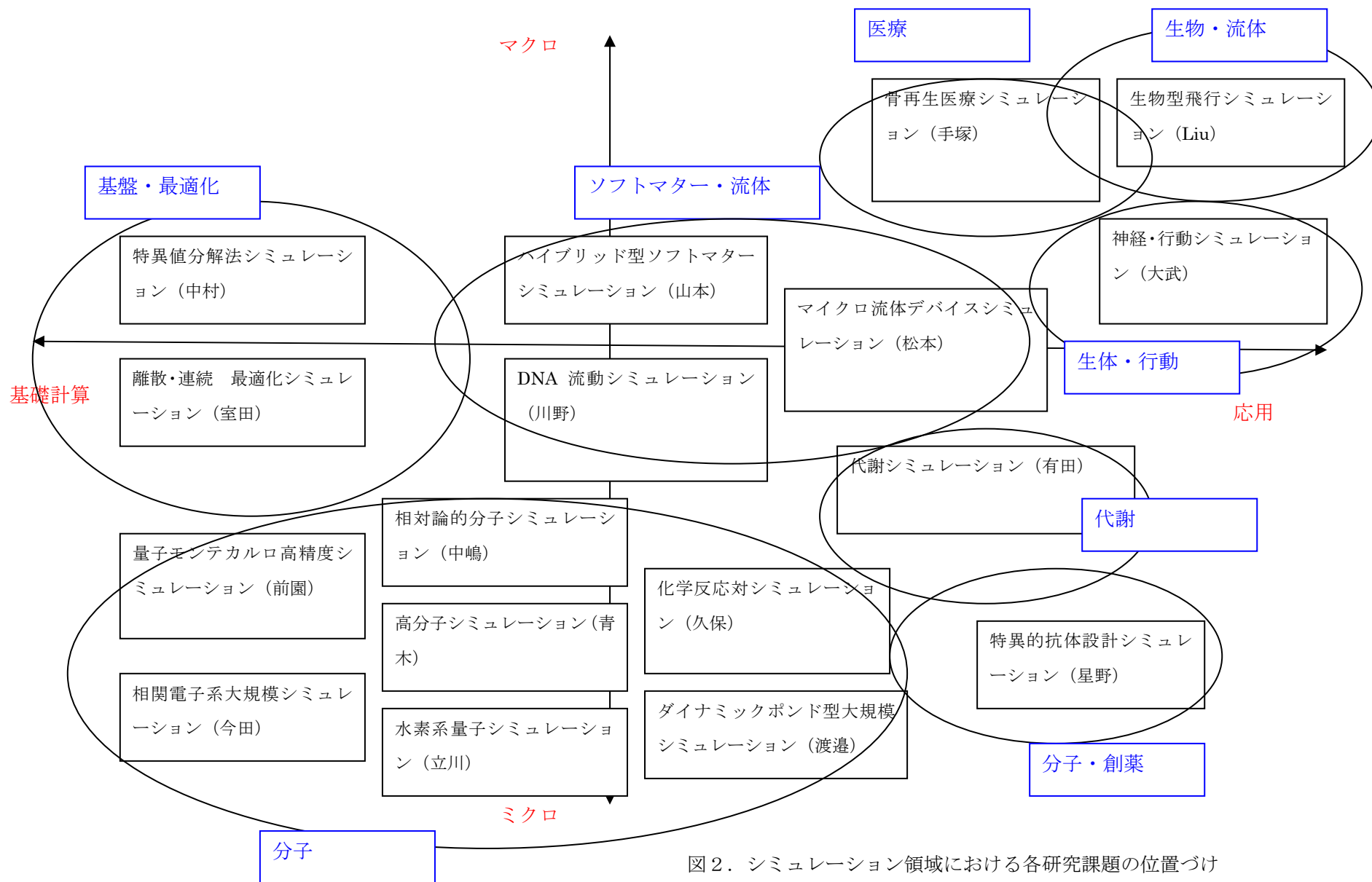


図2. シミュレーション領域における各研究課題の位置づけ

シミュレーションが検証の有効な手段になり、水素結合が重要な役割を担っているタンパク質などの生体内分子の機能解明に向けて今後の研究の進展が期待できる。

- ・CREST 研究の FMO 法による生体分子シミュレーション研究ではさきがけ研究の量子モンテカルロシミュレーションを取り込むことで、電子相関の精密な記述法を取り入れた FMO-QMC 法の開発を行った。FMO-QMC 法は、今後、次世代スーパーコンピュータによる大規模並列計算で有効活用されることが期待される。

- ・CREST 研究の多階層バイオレオシミュレータはシミュレーションプラットフォームに開発した微粒子分散系シミュレータなどの個々のシミュレータを搭載して全体のシステムが構成されているが、さきがけ研究のハイブリッド型ソフトマターシミュレーションにおけるシミュレータもこのシミュレーションシステムに搭載できるように対応を行っている。

- ・CREST 研究の数値・数式ハイブリッドシミュレーションでは最適化の研究についてさきがけ研究の離散・連続最適化シミュレーション研究との研究交流を行っている。

- ・その他、シミュレーション適用領域内での研究者間の情報交流はもちろんであるが、シンポジウムでの発表や交流会を通して異種適用領域での研究交流が活発に行われた。

(2) 領域全体として見た場合の特筆すべき研究成果

- ・心臓シミュレーションの研究では心筋細胞レベルから心臓全体までのマルチスケール、および血流、心臓壁、僧帽弁の変形などを考慮したマルチフィジックスシミュレーションが可能になった。特に高度な流体構造連成解析手法を新たに開発し並列計算機に実装したこと、また従来大規模非線形問題では不可能と思われていた均質化マルチスケール解析の効率的な計算手法を考案したことなど計算科学技術への貢献は多大である。

- ・放射線・重粒子線治療シミュレーションの研究では施設や装置によらない包括的な放射線治療シミュレーションのソフトウェアを開発したことの意義は非常に大きい。これまでは個々の施設、装置毎に放射線治療ソフトウェアの実装が行われてきたが、放射線シミュレーションに関して施設間での結果の不一致が議論されることも多かった。今後は共通のツールを用い知見を共有するという方向性が見えてきた。

- ・データ同化シミュレーションの研究ではプロジェクトを開始当初は数少ない研究者間で行われていた研究を、日本国内において先導的な立場で研究推進しデータ同化手法シミュレーションの方向付けをしてきた。特に本手法をゲノム情報分野や“ものづくり”の分野など未踏の領域を拓き新しい魅力あるデータ同化適用分野を先導的に多数開拓した。

- ・細胞シミュレーションの研究ではシステムバイオロジー研究に必要と考えられる多数の機能を盛り込みつつ、実用性の観点から高いレベルでの品質を提供するモデリング・シミュレーション環境の構築を行った。本シミュレーション環境は従来のソフトウェアでは実現できなかったウェットラボの生物学者であってもシミュレーションモデルを取り扱える高い

操作性と拡張性を実現しており、今後さらにウェット、ドライの研究者の融合研究が進展することが大いに期待される。

- ・精度保証シミュレーションでは既存の数値計算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向上させるための数値計算精度保証アルゴリズムを確立した。本研究成果のアルゴリズムはまさに革新的なシミュレーション技術を切り開くものであり国際的にも極めて高く評価されている。本研究成果は、応用分野が極めて広範囲であるため科学的・技術的インパクトは非常に高く、今後の情報産業の重要な基盤技術になると大いに期待できる。

- ・材料シミュレーションの研究成果が発端となって現在米国をはじめ海外においてCo基スーパーアロイの研究が急速に進んでいるなど新規材料研究に影響を与えている。さらに本研究で発見したメタ磁性型形状記憶Ni-Mn-In基合金は海外でも高く評価され、ドイツ、ロシア、インドでは強磁性形状記憶合金の新しいプロジェクトが発足し活動が始まっている。実用的観点からみると、材料の熱力学的データベースは3件商品化しており、また研究成果の実用化展開としてすでに国内外の企業と研究契約等の締結を行っている。

(3) 今後の研究発展への期待や課題、科学技術、国民生活、社会・経済への寄与の展望

- ・ソフトマター・流体シミュレーションにおいては研究成果であるソフトウェア資産の公開を行い社会還元を行っている。粒子法によるマルチフィジックスシミュレータのソフトウェアは財団法人ソフトウェア情報センターにプログラム著作権として登録しており、Webを通じて学術研究での利用が可能となっている。また、バイオレオシミュレータのシミュレーションプラットフォームはシミュレータの連携ということだけではなく、表示ツールとしての便利さ、データ解析の容易さ、他のシミュレータの計算結果との比較の容易さ、プログラム管理のしやすさなど、さまざまな工夫を行い多くの研究者や企業ユーザに受け入れられている。

- ・骨医療シミュレーションは骨粗しょう症の治療に有効活用されることが期待できる。また本シミュレータにより、骨の力学特性の詳細が理解できるようになりつつあり、生体骨の物理化学的特性という基礎的な知見が得られ科学的なインパクトがある。実用的には歯科医用での応用が進みつつある。

- ・物性分子シミュレーションでは第一原理計算に基づいたモデル系や量子分子動力学法に基づいた方法等大規模の分子シミュレーションが可能となるアルゴリズムの開発を行った。その結果、量子論に基づき非経験的に材料設計、デバイス設計を行うことが可能になった。

- ・大規模並列アプリケーション向け数値計算基盤ソフトウェアの開発では固有値解法、連立一次方程式解法、高速関数変換に関する数値計算基盤ライブラリの開発を行った。ネットワーク上でのソースコード公開を前提とした開発モデルを採用することにより、商用もしくは非公開であることの多かった大規模科学技術計算用ソフトウェア開発手法の公開を行った。

- ・数値・数式最適化シミュレーションでは数値・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を構築し、さまざまな“ものづくり”の現場へ、より系統的な設計手法・ツールを提供することが可能となった。また離散・連続最適化シミュレーションでは離散凸解析の理論を手掛かりとして、連続系を離散系の最適化手法を開発し数学的取り扱いの統合を行い、連続系と離散系を含む複合システムのシミュレーション技術の基礎を確立した。

- ・宇宙天気シミュレーションでは超並列化による巨大シミュレーションが可能になり、シミュレーションと観測データとの統合分析が進み、この分野の研究がさらに発展していくことが期待できる。
- ・ナノ物性計測シミュレータの開発では計測結果の理論解析により、新しい計測モードの提案につながる可能性や、強い相互作用が存在する局所領域で発現する新規な物理現象の発見につながることを期待される。
- ・特異値分解法シミュレーションではさきがけ研究後の発展研究によりさらに大規模データの情報処理が行え、より高い並列処理が可能なアルゴリズムに発展させた。
- ・Elongation 法による高分子シミュレーション、相関電子系大規模シミュレーション、相対論的分子シミュレーション、ハイブリッド型ソフトマターシミュレーションの各さきがけ研究についてはさきがけ研究が終了後、CREST「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」研究領域の研究代表者または主な研究担当者として研究を継続している。

(4) 各研究課題の成果

①医療シミュレーション技術

・心臓シミュレーション

CREST 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。

細胞のイオンチャンネルや収縮タンパクの数理モデルから出発し心筋の巨視的構成則(応力・歪関係式)をベースとして全心臓を拍動させ、血液の拍出までを再現する有限要素モデルを開発した。並行して、細胞内の主要な微小器官を有限要素法でモデル化し電気化学・力学現象を再現できる数値心筋細胞を開発してきた。この数値心筋細胞を独自のマルチスケール解析技術を用いて全心臓モデルに組み込むことにより、細胞下のタンパク質の事象から心臓の拍動を再現することに成功した。

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、このように世界でも前例の無いシームレスな 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は近年の分子生物学の成果を医療・創薬へ繋げることを

可能とする。また本研究過程で開発された 種々の計算理論や手法は計算科学の分野に広く応用可能であると考えられる。

・放射線治療シミュレーション

CREST 斉藤チームは、詳細人体モデルと高速モンテカルロ手法を用いて、高精度線量計算をセンターで一括して行い、高度計算科学技術を活用したシミュレーション計算を駆使し、現在広く使われている X 線を用いた放射線治療における患者体内の線量分布を高速・高精度で計算するシステム (IMAGINE システム) を開発し、放射線治療の高精度化、高信頼性化 (品質管理・品質保証) に貢献した。また、従来の X 線を用いた放射線治療と比べより安全で効果的な放射線治療として注目を集めている陽子線治療技術の開発を行った。

近い将来、「放射線治療遠隔支援のための線量計算システム」の実用化により、QC/QA の基準として日本の放射線治療の品質を改善でき、先端的治療の普及も大幅に促進できる。また、低コストでコンパクトな陽子線治療装置が実現すれば、今までの放射線治療では治療の難しい、すい臓がん等の治療に最適な陽子線治療を普及させることができ、我が国のがん治療全体のレベルを飛躍的に向上させることができる。他にも、放射線治療装置のハード、ソフトに関しては、これまで外国の技術にほぼ完全に依存してきたが、本システムの実用化が進むことで国産の技術を育てることに繋がり、国内産業の育成、経済の活性化に貢献できる。

・重粒子線治療シミュレーション

CREST 佐々木チームはがんの放射線治療のうち粒子線治療に焦点を絞り、そのシミュレーションに必要なソフトウェアの開発を世界で初めて包括的に行った。本研究の成果物は現在用いられている治療計画装置の妥当性の検証、治療の有効性の検証、新たな治療法、治療装置の開発に用いることが可能である。さらに画像診断装置とのインターフェース、シミュレーション結果の可視化、グリッド技術への対応も行った。

CREST 研究終了後も、放射線の生物学的効果のシミュレーションを実現すること、ガンマ線や X 線治療装置への対応と結果の妥当性の検証などに取り組む予定である。患者が、治療効果や有効性を事前に知った上で、治療法を検討し選択できるよう、シミュレーション技術による「根拠に基づいた医療 (EBM)」の確立を目指している。

・骨医療シミュレーション

CREST 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。

さきがけ手塚研究者は、骨の疾患によって変形した骨内部の力学状態と、それに適応しようとする細胞の働きをコンピュータで再現し、患部を適切に治療する戦略を計算によって求める方法を探った。さらに、次世代の医療として注目されている幹細胞治療についても、細胞生物学的手法を用いて研究し、シミュレーションと細胞工学を融合させた新たな治療戦略の構築を行った。

今後は成長や手術後の骨の外形変形に対する検討を行うことにより、さらに実用性の高い治療シミュレータへと発展させることを期待する。また、幹細胞による硬組織再生研究ではヒトの歯から再生医療に利用可能な細胞の取り出し、保存を可能とした。実際の再生医療には大量かつ安定的に細胞を得ることが重要であり、今後の研究の進展に期待したい。

②大規模分子シミュレーション技術

(a) バイオ分子シミュレーション

・ FMO 法による生体分子シミュレーション

CREST 田中（成）チームはタンパク質や核酸等の電子状態をフラグメント分割により高速・高精度で計算できる極めて有用な手法であるフラグメント分子軌道（Fragment Molecular Orbital; FMO）法に基づく生体分子計算システムの構築を行った。応用の現場でも活用できる実用的なシミュレーション技術として提供するために、①Post-HF（Hartree-Fock）法による電子相関の導入や重元素・励起状態・ダイナミクスの取り扱い、応答法による物性値の算定などのプログラム開発、②大規模計算のためのプリポスト GUI 機能の開発、③医療・創薬・ナノテク分野等における先導的・実証的な応用計算の遂行、の3つのアプローチを軸として複合的に展開し、生体分子系の第一原理計算という基礎科学としての点でも、その高速性と精度において世界最先端の研究成果を得た。

本研究においては当研究領域のさきがけ前園研究者との共同研究により、電子相関の精密な記述法として知られている量子モンテカルロ（QMC）法と FMO 法を組み合わせた FMO-QMC 法を開発した。本方法は今後次世代スーパーコンピュータによる大規模並列計算で有効活用されることが期待される。

・ 量子モンテカルロ高精度シミュレーション

さきがけ前園研究者は未整備基盤となっていた遷移金属列元素芯の模型ポテンシャルを用いることによって、ヘモグロビン、クロロフィル、ビタミンBなど遷移金属イオンを含む興味深い生化学活性物質群の高精度シミュレーションを可能とする基盤の構築を行った。本研究の結果、Zn ポリフィリン、Ni 錯体、Cu 錯体に適用を進め拡散モンテカルロ計算を成功させ、さらにコアサイズや元素種の異なる系への運用を進めた。特に本手法のノウハウを持っている海外研究者との積極的な交流により本手法の国内でのシミュレーション技術の向上に大きく貢献した。他のさきがけ研究者や CREST の研究チームのシミュレーション手法の中にも取り入れられるなどその影響・効果は非常に大きく、今後はさらにいろいろな分野への研究技術の展開が期待できる。

・グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーション

CREST 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ために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めざし、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 FMO-MO(フラグメント分子軌道法に基づいた分子軌道法)の開発を行った。本研究では広域ネットワークを利用するグリッド化を視野に入れ、階層的な動的負荷分散並列計算手法を新たに開発した。その結果、上皮成長因子受容体 (EGFR) 二量体について世界最大規模の全電子分子軌道計算を行うことができた。その他 DNA の電子状態の計算や細菌の細胞膜を分解するリゾチーム酵素の溶媒効果による電子軌道エネルギーの計算などを行った。また当研究領域のさきがけ立川研究者がさきがけ研究終了後に本研究チームのメンバーになり、たんぱく質などの巨大分子系に対する同位体効果解析法確立に向けて、フラグメント分子軌道(FMO)法と多成分分子軌道法 (MC_MO) 法に基づいた FMO-MC_MO 法を開発した。本研究により生体系やナノサイズ系の現象の理解が格段にすすむばかりでなく、分子シミュレーションの可用性の拡大が加速され、新規材料開発や創薬の効率を上げることが期待される。

・水素系量子シミュレーション

さきがけ立川研究者は電子だけでなく水素原子核自身の量子揺らぎも含めた、新たな「水素系量子シミュレーション技術の構築」を目指した。具体的には水素原子核の量子効果を直接含めた計算手法の開発、本手法と従来手法を融合させた高精度分子理論プログラム (MC_MO) の作成、および本手法の具体的検証を行った。特に本研究者が初めて提唱した多成分系分子軌道法をより高精度で大規模な系に適用可能となるようシミュレーション手法の構築を行った。本手法・プログラムにより、水素系が引き起こす様々な科学現象の起源を理論的に抽出し、分野を跨いだ横断的な理解が可能となった。さらに、当領域のさきがけ前園研究員との共同研究で、量子モンテカルロ法を利用した、多成分系量子モンテカルロ (MC_QMC) 法の開発に着手するなど積極的に研究の進展を行った。

- ・高分子シミュレーション

さきがけ青木研究者はタンパク質あるいは DNA のような生体高分子を含む巨大高分子系に対して、原子数の 1 次比例した計算時間で効率よく、しかも精度よく計算できる手法 (Elongation 法) を開発した。また Elongation 法に半経験的、非経験的分子軌道計算、および密度汎関数法等に組み込むことでその効率性と信頼度の向上を実証した。

この計算手法を用いると単に高分子の電子状態を計算するだけでなく、高分子の重合反応をシミュレーションしながら効率よく電子状態を計算できるので、機能性高分子材料や生体材料を原子・分子レベルで分子設計するための強力な手段になりえる。

- ・特異的抗体設計シミュレーション

さきがけ星野研究者は免疫療法において抗体として適合する分子を人為的に設計作成するシミュレーションシステムを構築した。具体的には計算技術と薬効評価理論の構築、実際の抗体設計、実験検証を行い、抗体設計ソフトウェアとして完成させた。本研究により、特定の疾患を抗体作用により治療する場合に、マウスなどの生物体に頼らずに適切な抗体を確実に設計し産生できるようになった。特に癌治療に有効な極めて特異性の高い抗体の創製に役立つ技術として期待できる。

(b) 物性分子シミュレーション

- ・電子構造計算シミュレーション

CREST 藤原チームは第一原理電子構造シミュレーションの基盤的技術を構築するため、超大型 1 万~1000 万原子系量子力学分子動力学シミュレーション技術の確立と量子論的プロセスシミュレーターの基盤技術の構築と 1 電子バンド抽象と多電子抽象を融合した第一原理電子構造計算手法の構築を行った。前者では新たな数値手法の開発が必須であると考え、Krylov 部分空間に基づいた、Krylov 部分空間対角化法、shifted-COCC 法、分割統治法 (Devide and Conquer) と Krylov 部分空間法の融合による手法、という複数の方法を開発した。後者では GW 近似の並列化・新アルゴリズム開発、LDA+DMFT 法 (IPT)、LDA+Cluster DMFT 法 (IPT)、GWA+DMFT 法など多数の新たな手法を開発した。本研究の第一原理計算に基づいたモデル系構築は、今後ますます重要になる遷移金属酸化物そのほかの強相関物質設計、特にその低エネルギー励起 (磁性など) の新たな物質機能解析・設計に欠かせない手法となると期待している。

- ・相関電子系大規模シミュレーション

さきがけ今田研究者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 DFT-PIRG 法によって、現実物質の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した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。本手法により、今までシミュレーションでは解析できなかった金属と絶縁体の境目にある強相関物質の電子状態を定量的に正しく証明した。さらにまだ実験的に分かっていない電子スピンと電子軌道の秩序状態を予測することに成功した。

・ 相対論的分子シミュレーション

さきがけ中嶋研究者は相対論的分子理論を展開することで、幅広い種類の元素を含む分子系を取り扱うことのできる理論化学を構築し、周期表のあらゆる元素から構成される大規模な分子系を高精度に計算することのできる分子理論プログラムを完成させた。独創的な各種の高速計算法、領域分割法によって構成される本研究成果プログラムにより、今まで実験値のみで計算が不可能であった重原子を含む大規模分子や重原子を局所的に持つ分子などのシミュレーションが可能になった。本研究が目指した相対論的分子理論の開発は、重元素を含む分子系の理論計算に新たな道を拓くことができた。

・ 化学反応対応シミュレーション

さきがけ久保研究者は独自に考案した **SCF-Tight-Binding** 量子分子動力学法と非平衡分子動力学法を統合化することで、量子論的に「化学反応ダイナミクス」を扱いながら、摩擦、衝撃、応力、流体、伝熱、電場との連成現象を解明可能な化学反応対応型連成現象シミュレータを開発することに成功した。本研究成果のシミュレータを用いることにより、数百原子からなる大規模系において量子論に基づくマルチフィジックス現象のシミュレーションが可能となった。

本シミュレータは市販化の対応も行っており、材料設計を主な目的としてきた従来の量子化学に対して、量子論によりプロセス設計が可能であることが新たに示された。量子論に基づき非経験的に材料設計、プロセス設計、デバイス設計の全てを可能とするデジタルエンジニアリング技術の確立に向けて大きな第一歩が踏み出されたものとする。

・ ダイナミックボンド型大規模シミュレーション

さきがけ渡邊研究者は多くの元素から構成される化合物系においても化学反応を表現できる万能の原子間相互作用モデルを実現する新しい分子動力学法を開発した。本研究成果は今後更にパラメータを増やしていくことで、他の様々な物質の化学反応に応用できると考えられる。これまで複雑な量子化学計算でなければ解けなかった分子の振る舞いも、本シミュレーション手法であれば計算精度をあまり損なわずに大規模に再現することが可能となるため、次世代の革新的な分子シミュレーション技術として今後大いに発展していくと期待される。

③材料シミュレーション技術

CREST 石田チームは汎用的な“材料の組織と特性を予測”する統合化システムの開発と、合金組成自動探索システムの開発をおこなった。ここでは社会的ニーズが大きくかつシミュレーションするためのデータベースや基本パラメータが整備されているターゲットに的を絞り(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)鉄鋼材料の材質予測シミュレーションを研究対象とした。本研究成果は、著名国際誌に発表しており、多くの国内外の企業からは本プロジェクトの成果について共同研究等の申込みがあるなど社会的インパクトは非常に大きい。特許出願も数多く、特に海外出願を積極的に実施した点は、海外の新規研究プロジェクトへの展開や、海外企業との契約締結において重要である。

本研究で構築したシミュレーションは、多くの人に利用してもらう事が重要であり、熱力学データベースは材料開発に有用な武器として今後国内外でさらに利用されると考えられる。また材料組織形成計算統合化システムは、多くの機能を持ったプログラムとして、企業だけでなく大学の材料教育にも利用できるのも大いに期待できる。

④ナノ計測シミュレーション技術

CREST 渡邊（聡）チームはこれまでに電場中の電子状態を計算する方法の開発と、それを用いた種々の物理現象の解析を行った。そしてその研究実績を基に、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）を印加する計測について、計測量を理論計算によって予測するシミュレータの作成に取り組んだ。このシミュレータは単なる電子状態計算や原子構造計算を超え、外場やプローブの影響を取り込み、電流などの計測量のシミュレーションを行うことができる。これを用いて解析を行い、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における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の確立を目指した。その過程で、プローブ、電極、外場などとの強い相互作用が集中する局所領域における新規物理現象発現の可能性を予測し、また新しい計測手法を探索することも視野に入れた。

プローブや局所外場との強い相互作用下で、ナノ構造物性や局所物理現象を扱う方法論は、未開拓な分野のため、シミュレーションの方法論の確立・発展の点においても貢献が大きいと考えられる。また、ナノ物性計測シミュレータの開発および計測結果の理論解析により、新しい計測モードの提案につながる可能性や局所高電界場やプローブとの強い相互作用が存在する局所領域で発現する新規な物理現象の発見につながることも期待される。

⑤ソフトマター、流体シミュレーション技術

・粒子法によるマルチフィジックスシミュレーション

CREST 越塚チームは流体構造連成問題や複雑な界面変化を伴う多相流問題等の解析を得意とする粒子法を用いて、マイクロスケールに適用できる多相流体構造連成解析手法

を確立すると同時に、このマルチフィジクスシミュレータを微量液体操作技術あるいはマイクロバルブ等のマイクロ生化学システムの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、その有効性を実証した。

将来的には本研究で開発したマルチフィジクスシミュレータを基に、熱、化学反応、電磁場の連成解析機能を整備し、マイクロ生化学システム全体の挙動を統合解析できる設計ツールを開発する。他にも、心臓壁、血管壁および赤血球の変形と血流との相互作用などの流体・構造連成問題に着手し、生体シミュレーションへの応用分野を開拓して行く。

・多階層バイオレオシミュレーション

CREST 土井チームは 1998 年～2002 年に経済産業省のプロジェクトで当プロジェクトが開発した“ソフトマテリアルのための統合化シミュレータ OCTA”を生体系に応用し、これまでの生体现象シミュレーションでは取り扱えなかったメゾスコピックレベルに関する現象の解明に取り組み、既存のシミュレーションとの連携を考えながら、細胞の集合体である生体組織やバイオマテリアルに対する多階層的なシミュレーションの開発を行った。具体的には、(a) 微粒子分散シミュレータ、(b) バイオゲルシミュレータ、(c) ブロック高分子シミュレータの単位系とスケールの異なる 3 種類のシミュレータを個別に構築し、これらを共通のシミュレーションプラットフォーム上で連携させ、生体組織に対する多階層的なシミュレーションを構築した。

本研究の多階層的バイオシミュレータは、従来のバイオメカニクスやバイオシステムでは取り扱えなかったメゾ階層のレオロジー現象を解明するために力を発揮でき、近い将来、再生医工学をはじめとする先端的治療法の開発に貢献できる。

・ハイブリッド型ソフトマターシミュレーション

さきがけ山本研究者は粒子と溶媒の界面に滑らかなプロファイルを用いて連続的に取り扱うという従来とは全く視点を変えたアイディアで、これまで解明できなかった多粒子分散系の数値計算における問題を解決し、世界で初めて液晶溶媒に対する多粒子分散系のシミュレーションに成功した。その結果、これまでは限られた人のみが使用可能な超並列スーパーコンピュータを用いて行っていたシミュレーションが、安価で高性能な PC 単体で実施できるため、ソフトマターを対象とした MD シミュレーションが一部の大学や研究所だけでなく、企業でも多くの人々が利用できるようになり、産業界の活性化と発展に貢献している。

・マイクロ流体デバイスシミュレーション

マイクロ流体デバイスは医療・情報産業への応用が期待されている。さきがけ松本研究者は、マイクロ流体デバイスの技術開発に応用するために、コンピュータを用いた三次元実モデルの数値シミュレーションにより、共振をうまく利用して小さな力のアクチュエー

タ源で構造物を駆動させ、流体を大きく動かすことを可能にする共振制御解析手法の確立を行った。複雑な連成挙動を数値解析手法にて計算するためには、精度がよく安定であり、流体—構造連成の正確な相互作用を表現でき、高効率な大規模解析への適用が可能な手法が必要となる。本研究では新しい流体解析方法である、直交基底気泡関数要素安定化方法を用いた強連成手法を開発し、高精度を保ちながら計算効率が高く、省メモリ化を実現した大規模並列解析を行った。

・ DNA 流動シミュレーション

さきがけ川野研究者は DNA の自己集合化機能を有効に利用したナノデバイス製造法について、最適設計手法の確立を目指した研究開発を理論ならびに実験の両面から行った。シミュレーション研究では、広く知られている AMBER 力場を改良し、生体高分子の大変形や高温条件にも対応した力場ポテンシャルを提案し、並列化 MD シミュレーションにおいて、その有用性を確認した。また、DNA の粗視化モデルを用いた流動シミュレーションではマイクロ流路と微小電極を用いて、DNA の分離を高速・安価に行うことが可能であることを示している。今回のさきがけ研究を基に実用に供する DNA ナノデバイス設計法の開発を進展させ、分子流体工学を基盤とした各種融合的研究への展開を期待する。

⑥ 生物飛行シミュレーション技術

さきがけ劉研究者は生物の羽ばたき飛行を厳密な幾何学、運動学および力学のモデルに基づき、静止飛行、前進飛行および急旋回のような自由飛行をコンピュータの中に再現できるシミュレータを構築した。その結果、生物の羽ばたき飛行における力の発生メカニズムが明らかになり、特に昆虫飛行時の力の発生メカニズムに関わる前縁渦の効果、回転効果、および後流捕獲など、生物飛行に潜んでいるまったく斬新な力学現象や生物の自由飛行メカニズムの解明がはじめて可能となった。今後、鳥や昆虫サイズのマイクロ飛翔体の開発等に、画期的な設計方針を提供できることが大いに期待される。

⑦ 生体行動シミュレーション技術

さきがけ大武研究者は大武研究者は、脳神経科学を中心とする諸分野で得られた知見を統合して、分子・細胞・組織・個体の階層を含む詳細な神経系モデルを構築し、ヒトの運動など外界からの計測情報を用いて駆動することができる実世界に開かれた脳神経系シミュレータ「神経系の双方向マルチスケールシミュレータ」を開発した。本研究により、外部入力が神経系の内部状態に与える影響の予測が可能となり、神経疾患の診断や治療への展開に必要な技術基盤が得られた。

⑧ 細胞・代謝シミュレーション技術

・ 細胞シミュレーション

CREST 富田チームは大規模化する細胞モデリングに対応した新しい統合環境ソフトウェアの開発を主目的として、細胞シミュレーション統合環境 (E-Cell IDE) の開発、E-Cell システムの改良、アルゴリズムモジュール群の開発、物理シミュレーションとの連成も視野に入れた計算アルゴリズムの研究を実施した。システムバイオロジーという分野は新しく開拓された分野であり、今後、収穫が期待できる分野である。当初は小規模なシステム、モデルに関する理論的な研究が中心であったが、実用的なレベルでの統合環境ソフトウェアの構築がなされ、従来のソフトウェアでは実現できなかったウェットラボの生物学者であってもシミュレーションモデルを取り扱える高い操作性と拡張性を実現している。その結果、システムバイオロジーの研究を行うユーザーとの共同研究にも発展しつつある。このようにこの実用的な統合環境ソフトウェアをモデリング・シミュレーションの基盤として、ますます大規模化し、データドリブン化するシステムバイオロジー研究において、ウェット、ドライの研究者の融合研究が進展することが大いに期待される。

・代謝シミュレーション

さきがけ有田研究者は低分子化合物から脂質、糖鎖、二次代謝物といった中一高分子化合物まで、シームレスに物質変換経路を追跡できる機能を備えた電子代謝マップの構築を行った。これまでユーザがウェブ等で物質の代謝の仕組みを検索する場合、非常に専門的な結果や健康食品等の結果が検索され適当な結果が見つからないことが多かったが、本研究により脂質やフラボノイド等の二次代謝物の検索が代謝マップを介して簡単にかつ使いやすいデータベースシミュレーションシステムを構築した。また日本脂質生化学会の脂質データベース構築委員会を結成し、脂質データである **LipidBank** の全データを再整理、データベースの再構築を行った。以上のようにメタボロームという分野を広め、国内の研究組織をまとめるデータベースの構築を行ったが、今度はこれら研究成果の広報にも注力し多くのユーザ利用が実現するよう研究を進めていく。

⑨地球・環境シミュレーション技術

・データ同化シミュレーション

シミュレーションなどの数値モデルによる対象状態の時間発展更新と、装置からの部分的な観測量に基づく状態補正の二つを適切に組み合わせる作業はデータ同化と呼ばれる。CREST 樋口チームで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の構築を行った。本研究の成果として世界で初めて、アンサンブルベースの逐次データ同化手法を大気・海洋結合モデルに適用した成功例を示した。磁気圏領域のグローバルモデルにおいて逐次データ同化を適用した成果も他に前例を見ない。また、超高次元の状態空間モデルに対する粒子フィルタを新規に開発し、大規模なシミュレーションモデルを用いた逐次データ同化手法の未踏の領域を拓いた。さらに本研究では逐次データ同化手法の特徴である、

実用性と汎用性の高さに早くから注目し、新しい適用分野を先導的に次々と開拓した。特に、生物学的知見にもとづく数値モデル（イン・シリコモデル）を統計モデルに援用することで、統計的推測と生物学的知見への直接的な橋渡しを担う、ゲノム情報分野における基盤技術を創生したことは大変な功績である。“ものづくり”データ同化プロジェクトにおいては、製造業の製品性能の向上や均一化のための作業工程の効率化にデータ同化を用い大きな効果を上げている。

以上に示すように逐次型データ同化手法の高度化により、広い分野のシミュレーション研究に重要な貢献をした。そのことにより、多くの分野においてデータ同化が今後の重要な手法であることを認識させることとなった。

・宇宙天気シミュレーション

CREST 田中（高）チームは宇宙天気の再現をめざして太陽から大気圏に亘る全領域でのシミュレーションモデルの構築を進め、また領域間の相互作用を調べるための結合システムを開発した。これらの開発から、太陽風変動に対する磁気圏—電離圏系の応答の再現、オーロラと磁場の変動が突然発生する現象であるサブストームの再現、磁気圏変動に対する粒子効果の再現、磁気圏変動と大気圏変動に対する電離圏応答の再現、電離圏電子密度が赤道でなく磁気緯度 ± 15 度で最大となる現象である赤道異常の再現、コロナ構造と地球軌道での太陽風の同時再現などを得て宇宙天気現象の理解を進めた。また数値モデルの応用として、金星や木星など惑星プラズマ環境の再現、ボエジャー宇宙船で観測した太陽風の果ての構造（太陽圏）の再現を行った。本研究では宇宙シミュレーションという大規模なシミュレーションにチャレンジし、研究の全体的な枠組みが形成された。本研究成果によりこのような宇宙スケールのシミュレーションが可能であるということを示しこの分野の研究開拓に大いに貢献した。今後、超並列化による巨大シミュレーションが可能になり、シミュレーションと観測データとの統合分析が進み、この分野の研究がさらに発展していくことは大いに期待できる。

⑩ソフトウェア基盤・最適化シミュレーション技術

(a)ソフトウェア基盤

・数値計算向け基盤ソフトウェアシミュレーション

CREST 西田チームは従来それぞれの分野において個別に進められていた並列アルゴリズムや実装に関する研究をもとに、理論的な背景を考慮した標準的なソフトウェア基盤を整備し、そして多様化する計算環境での利用に十分耐え、頑健かつ高性能な基本演算ライブラリを構築するとともに、国内の需要に応え得るレベルの高い成果を挙げることを目指した。ここでは、主に固有値解法、連立一次方程式解法、高速関数変換の三分野を想定し、常に最新の環境を提供できるよう、多様なアーキテクチャから構成される計算機群を導入した。また計算機環境に依存しない行列計算ライブラリインタフェースの提案も行った。

今後も計算機の能力は飛躍的に発展し、それに伴って計算機を利用する数値シミュレーションはより広い分野で活用されるようになる。本研究の大規模並列アプリケーション向け基盤ソフトウェアは、国内外での長期間の利用に耐えるものとして設計され、またその内容についても、十分な理論的検討が行われた完成度の高いものである。本システムは、従来海外の研究成果に依存してきた大規模並列アプリケーション向けのソフトウェア基盤を国内で実現するさきがけとなると期待される。

・精度保証シミュレーション

CREST 大石チームは、従来精度保証がされていなかった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た。ここでは以下の2つを目標に研究を実施した。

- (a) 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を確立して、主要なシミュレータに実装して有効性を示す。
- (b) 悪条件線形問題の解法アルゴリズムとポータブルかつ高速・高精度な精度保証アルゴリズムを開発し、既存有力シミュレータに実装して有効性を確認する。

ここでは実問題に対して精度保証付きシミュレータを適用するために大規模な線形問題を高速に精度保証付きで解く方法の開発を行い、「密行列の精度保証理論」、「疎行列の精度保証理論」をそれぞれ構築した。また、大規模問題を取り扱うため、「PC クラスタ上での精度保証」についても研究を推進した。その結果、従来精度保証がされていなかったシミュレーションツールに対して精度保証ができるようになった。本研究により、各種大規模問題に対して所望する精度まで高効率に数値計算の精度保証ができるようになったことの意義は大きい。特に精度保証付きシミュレータに適用する高精度内積演算、高精度行列演算に関して、この分野において世界最高レベルの成果を出している。これらはあらゆる科学技術計算の基本演算であり、その重要性は高く、本研究の成果がシミュレーション技術に与えるインパクトも大きい。本研究成果は、応用分野が極めて広範囲であるため科学的・技術的インパクトは非常に高く、今後の情報産業の重要な基盤技術となると大いに期待できる。

・特異値分解法シミュレーション

行列の特異値計算、特異値分解は様々な情報処理、情報検索の基礎となる重要な線形数値演算である。また、最近では、大規模な疎行列に限定した特異値を求めるために、新たな近似計算法が研究されてはいるものの、数値不安定性や精度悪化の問題が残り、その対処法は今のところ確立されていない。さきがけ中村研究者は、これらの問題を解決するために、新しい特異値計算・特異値分解法の改良、実装、並列化等の研究開発を行った。

本アルゴリズムは並列化が容易なので、計算の一層の高速化に顕著な効果が期待できる。並列化の実現により、ネットワーク・データベースにおいて、web の narrative タグ検索

による検索精度向上や、画像検索、動画検索などの大規模な情報検索のためのソフトウェア開発に役立つ。さらに、動画像から画像中の物体の3次元形状を推定するなどへの応用も考えられるなど、高精度の特異値分解アルゴリズムは信頼性の高いマルチメディアデータの実現につながり、広く情報の可視化に革命をもたらすと考えられる。

(b)最適化シミュレーション

・数値・数式最適化シミュレーション

さまざまな「ものづくり」において、シミュレーション技術は設計・製造の効率化、高品質化、高付加価値化実現に不可欠な技術である。CREST穴井チームでは、計算機パワーをフルに活用して効率的に高品質な処理を実現する技術の確立を目的として、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を構築した。ものづくりにおける設計問題など理工学・産業上の広範な問題は制約問題・最適化問題に帰着されるが、それら进行处理する技術は現在のところ数値計算技術がベースとなっている。しかし、実用上重要な多くの問題が数値的計算法では取り扱いが困難な非線形や非凸な問題となることが明らかになってきている。本研究ではこれらの問題に対し有効な解を効率的に提供するために、非線形性や非凸性に囚われない記号・代数計算に基づく制約問題・最適化問題の処理技術を発展させ、これまでの数値計算ベースの技術と相補的に融合させていくことで、今後の設計とシミュレーションを支える新しい一般的方法論とツールの構築を進めた。

本研究プロジェクトの成果により、さまざまなものづくりの現場へより系統的な設計手法・ツールを提供することが可能となり、日本のものづくり力の強化に貢献できる。また、バイオロジーをはじめとする自然科学分野への適用により新しい知見の発見も期待できる、さらには数学モデルで記述される現象であれば適用可能であることから、経済、社会科学などの分野への展開も想定可能であると考えてられる。本研究において開発する技術は記号・代数計算と数値計算を融合する新しい計算技術パラダイム創設にも繋がっていく。

・離散・連続最適化シミュレーション

現在使われている多くのシステムは、連続的に変化する現象によって組み立てられているシステム（連続系システム）と、独立的に変化する現象から成り立っているシステム（離散系システム）が混在する複合システムである。さきがけ室田研究者は連続変数の最適化を行うための凸解析と、離散変数の最適化を行うためのマトロイド理論を融合した最適化方法、すなわち離散凸解析の理論を手掛かりとして、連続系と離散系の数学的取り扱いの統合手法を確立した。本研究の成果は、競合的にエージェントを含む地球規模の環境問題や独立に開発された多数のコンポーネントから成る工学・医療システムなどの広範なシミュレーション問題を取り扱うためのプラットフォームを与えるために有効であり、実用ソフトウェア開発の活性化、効率化、信頼性向上に貢献する。

10. 総合所見

(1) 混合型研究領域としての成果

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り、ミクロ現象を扱う分子シミュレーションから地球環境や宇宙現象というマクロ現象まで、また革新的なアルゴリズム等の基礎基盤技術から医療技術やものづくりなどの応用技術まで幅広い研究課題が採択されており、研究チームや研究者間での研究交流も頻繁に行われた。

CREST・さきがけ共同研究例はすでに前述しているがグリッド技術を用いた大規模分子シミュレーション研究（CREST）と水素系量子シミュレーション研究（さきがけ）との共同研究や、FMO 法による生体分子シミュレーション研究（CREST）と量子モンテカルロシミュレーション（さきがけ）の共同研究があげられる。その他、ソフトマター・流体シミュレーション、骨医療シミュレーション、細胞・代謝シミュレーションでも研究者間の研究交流が行われた。

さらに当領域では異分野間の研究チームや研究者の交流による研究の進展があったこともあげておく必要がある。数値・数式ハイブリッドシミュレーション（CREST）では離散・連続最適化シミュレーション（さきがけ）との研究交流の他、精度保証シミュレーション（CREST）との交流も行った。また地球・環境シミュレーション技術分野におけるデータ同化シミュレーション（CREST）と宇宙天気シミュレーションは複雑なものを複雑なまま扱う科学という点において共通認識のもと合同研究会を開いて研究交流を行った。

(2) 研究領域のマネジメントについて

課題選考においては CREST 研究（チーム型）とさきがけ研究（個人型・ポスドク参加型）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、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 CREST 研究課題、17 のさきがけ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、領域会議（さきがけ）、中間評価会（CREST）を通して各 CREST 研究チームおよびさきがけ研究者の研究サポート・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。各 CREST 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、その情報は領域内 HP またはメールによりさきがけ研究者にも連絡しており CREST・

さきがけ研究の情報を領域内で共有化している。

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た。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た。

(3) 本研究領域を設定したことの意義、科学技術に対する貢献、問題点等

心臓シミュレータは計算機内にミクロからマクロまでの多階層の生命現象を統合した仮想のヒト心臓を再現することにより、新たな医学を創出し医療や創薬に役立てることが期待される。すでに植え込み型除細動装置への応用を行っており、また JST の産学協同シーズイノベーション化事業にてさらに精密な細胞モデルに基づく心臓シミュレーションを行うため数万コア以上の超並列計算に向けた研究開発が進められている。

放射線・重粒子線短時間かつ高精度で計算し治療するシステムを構築した。日本人の主要死因別死亡者数がシミュレーションでは人体に対する放射線の影響をシミュレーションにより 1 位であるがんの治療に有効な放射線・重粒子線治療の進展に多大に貢献するものと思われる。

データ同化シミュレーションは研究化開始時には主たる適用分野が大気・海洋を中心に限定されていたが、宇宙空間、ゲノムデータおよび“ものづくり”やサービスサイエンスまで応用を拡張し、当初は予想できなかった分野にまでもデータ同化が有効な手法となることを示した。

システムバイオロジーという分野は新しく開拓された分野であり、今後、収穫が期待できる分野である。細胞シミュレーションは当初小規模なシステム、モデルに関する理論的な研究が中心であったが、本プロジェクトにより実用的なレベルでの統合環境ソフトウェアの構築がなされた。今後、細胞シミュレーションとメタボローム解析を組み合わせた研究への発展が期待される。

精度保証シミュレーションは今後の数値解析の方法における変革をもたらす新たな展開が期待される。この手法が適用可能な分野は多くあり、様々な数値シミュレーション分野での展開が予想できる。さらに現在、精度保証の研究は線形計算の範囲であるが研究の範囲を非線形にまで拡張することも期待される。

材料シミュレーションの研究では材料の熱力学データベースの開発を含む、材料設計の統合化システムの開発により、材料接合技術、強磁性形状記憶材料をはじめとする磁性材料、鉄鋼材料などの新規材料研究の成果が顕著であり、実用的観点からみると、材料の熱力学的データベースの商品化や、国内外の研究機関や企業との共同研究への展開など社会的インパクトが大きい。

(4) 今後への期待や展望

大規模分子シミュレーション技術では CREST・さきがけ研究で 11 の研究が推進された。

FMO 法による生体分子シミュレーションはその構成からして大規模プロセッサによる超並列計算に向いており、現在建設中の次世代スーパーコンピュータのように数万を超えるコア数での超並列計算が可能となれば FMO 法の有用性はますます高まっていくと期待される。そのようになれば水溶液中での第一原理分子動力学計算も可能となり、生体高分子シミュレーションの世界も従来とは質的に変わっていくものと考えられる。

またグリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションでは超並列環境における大規模一般化固有値問題解法を組み込んでおり、グリッド計算環境など超並列計算環境の広まりによってますますその重要度が増すものと期待している。

強い電子間相互作用のある系に対する物性分子シミュレーションでは、遷移金属酸化物や有機化合物などの新しい強相関物質群におけるわずかなパラメータの変化による大きな物性の変化を捉えることができるようになった。これらの成果により磁気光学素子、スイッチング素子などの電子相関や波動関数の位相などの量子制御が可能になる。大規模系に対する物性分子シミュレーションでは量子分子動力学に基づくシミュレーションの成果があり、化学反応を伴う連成現象を解明し新しい製造プロセス設計、材料設計を実現させた。

大規模並列アプリケーション向け数値計算基盤ソフトウェアの開発では公開した数値計算基盤ライブラリが数値解析の基盤ソフトウェアとして広く用いられるようにするために今後さらに普及に向けた活動を行なう必要がある。

最適化シミュレーションはさまざまな“ものづくり”における設計過程の効率化、コスト削減、さらに設計結果の高付加価値化を実現していく上で鍵となる手法である。また、“ものづくり”だけでなくシステムバイオロジーをはじめ理工学のさまざまな領域への適用も期待されている。

ソフトマター・流体シミュレーション技術の各シミュレーションはマイクロ流体制御デバイス、粘着剤、インクジェットプリントなどの液滴効果、液晶などの実用化技術として有効な手段となる。

シミュレーション領域全体としての共通の成果としては物理法則に従ったコンピュータグラフィックスがあげられる。医療シミュレーション、ソフトマター・流体シミュレーション、地球環境シミュレーション、生物・飛行シミュレーションなど物理現象に忠実なコンピュータグラフィックスが実現でき、映像制作はもちろんいろいろな用途において効果を発揮できる。

(5) 感想、その他

シミュレーション技術の研究成果を一般に幅広く広報し実用化に結びつけるため以下の施策を行った。

当領域のシミュレーション技術は情報処理学会の学会誌(2007. 10)に特集“次世代統合シミュレーション技術”として掲載した。ここでは「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」研究領域の研究成果を紹介するとともに、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解説をしている。

また JST 基礎研究事業の多くの研究成果の技術移転を促進するため研究者から企業を対象として研究成果を紹介する基礎研究シーズ報告会が毎年行われるが、当領域からはこの仕組みを積極的に利用してこれまでのべ 10 件の研究成果の発表を行った。その結果、これまでに骨医療シミュレーションの歯科インプラント応用や、精度保証シミュレーションの携帯計算機への応用など実用化が具体的になりつつある。

2012 年完成予定の次世代スーパーコンピュータ上での利用を目指して、当領域の各研究課題も以下に示すような取り組みを行っている。

心臓シミュレーションではすでに数千コアを用いた超並列計算のプログラムテストを行っており、今後はさらに精密な細胞モデルに基づく短時間でのマルチスケールシミュレーションを実現するための準備を進めている。

また、データ同化シミュレーションのプロジェクトではゲノム情報分野へのデータ同化適用の成功を受けて、次世代スーパーコンピュータ上での利用を目指した「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」にも参画しており、本プロジェクトの成果は継続的に発展されていくと考える。

以上、「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」の戦略目標に沿って CREST 研究およびさがけ研究の各研究課題の推進を行ってきた。その結果、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、実用化の基盤を築いた。