

# 戦略的創造研究推進事業

－CRESTタイプ－

## 研究領域

「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」

## 研究領域事後評価用資料

平成25年3月19日

# 目次

1. 研究領域の概要 .....	1
(1) 戦略目標 .....	1
(2) 研究領域 .....	3
(3) 研究総括 .....	3
(4) 採択課題・研究費 .....	4
2. 研究領域および研究総括の選定について .....	5
3. 研究総括のねらい .....	5
4. 研究課題の選考について .....	7
5. 領域アドバイザーについて .....	8
6. 研究領域の運営について .....	8
7. 研究を実施した結果と所見 .....	12
8. 総合所見 .....	22

## 1. 研究領域の概要

### (1) 戦略目標

「次世代高精度・高分解能シミュレーション技術の開発」

#### 具体的な達成目標

マルチスケール・マルチフィジックス（超大規模・複雑）なシミュレーションを実現する効率的な計算手順を確立し、最適化設計問題・連成解析などの先端シミュレーション技術を我が国の最先端のコンピューティング環境を駆使して開発することを目的とする。

想定される研究開発対象としては、以下のようなものが考えられる。

- ▼ 地球規模の循環・環境変動の予測や地球環境と社会・生産活動の相互影響の予測・評価のための先進的技術の創出
  - ・ 異常気象の原因と考えられる数年から数十年スケールの気候変動を予測する先進的な技術を創出。また、数時間から数日程度の気象現象の飛躍的な予測精度向上を実現する画期的なシミュレーション技術を創出。
  - ・ 気候モデルや生態系モデル等と、社会・生産活動モデルを統合するなど、地球環境変動と社会・生産活動とが相互に及ぼす影響を予測・評価するシナリオ・モデル等の先進的技術を創出。
- ▼ 次世代材料のデジタルエンジニアリング技術等を実現するシミュレーション技術の確立
  - ・ カーボンナノチューブやテラヘルツ発振超伝導素子などの開発に必要な先進的な材料設計技術やそれらの開発・設計～試作、テスト、製品化に至るすべてをシミュレーションにて行うデジタルエンジニアリング技術。
- ▼ 生命現象シミュレーションの医療への応用
  - ・ タンパク質の全電子計算によって、薬候補物質との結合活性を精度良く予測し、効率的な創薬のプロセスを創出。さらには、個人毎に最適な薬剤や治療法を見出す、テーラーメイド医療の実現を目指した技術の創出。
- ▼ 自然災害予測・防災シミュレーション技術の確立
  - ・ 地震による被害の予測、ハザードマップの作成などの自然災害・防災シミュレーションを創出。

#### 目標設定の背景および社会経済上の要請

計算機によるシミュレーションに代表される計算科学技術は、伝統的な科学技術研究の方法であった理論と実験に加え、新たに「第3の方法」として、現代科学技術の発達

に大きな役割を果たしており、我が国が科学技術分野で真に諸外国を先導するためには、世界最先端の研究開発を創造し続けるための先進的シミュレーション技術を確立することが重要である。

高速・大規模である先進的シミュレーションを実施することにより、ナノ・材料やバイオ・創薬分野を始めとする広範な科学研究への活用や自動車・ジェットエンジン等の高性能化やコストダウンなどを通じた国際競争力の強化に資するとともに、気象・災害予測、災害のライフラインへの影響予測、都市環境の改善といった安全・安心な社会の構築に貢献することが社会的に大きく期待されている。

例えば、地球温暖化の問題については、その予測および影響評価に含まれる不確実性と、各国の温室効果ガス排出や社会活動・経済活動による自然破壊といった要因に対する各地での気象変動や生態系崩壊、自然災害などの結果の一対一対応の困難さなどのため、世界的なコンセンサスを得ることができていない状況であり、この問題に対処するには数十年から百年規模にわたる地球各地の大域的な気候変動に関する信頼性の高い予測シミュレーションが必要である。

#### 目標設定の科学的裏付け

2005年現在、最先端のスーパーコンピュータの性能はテラフロップス超級のものとなった。さらに、ハードウェア技術のトレンドから、2010年にはペタフロップス超級の性能になると予測されている。このようなスーパーコンピュータのハードウェアの性能向上により、今後は超大規模・複雑な系全体、いわばマルチスケール・マルチフィジックスなシミュレーションを指向する方向性が見えている。そこでは、現在最も高性能なスーパーコンピュータを駆使して、将来のペタフロップス超級スーパーコンピュータを視野にいたした先進的なシミュレーションに挑戦することが必要である。

地球環境問題については、気候変動に関する政府間パネル（IPCC）の下で様々な地球環境プロジェクトが実施され、各種の地球温暖化モデルによる予測結果が出ているが、大きな仮定と簡略化を含んだモデルがほとんどであり、結果にもかなりばらつきがある。また、そうした地球環境プロジェクトの一つである地球圏－生物圏国際共同研究計画（IGBP）では、大気・海洋と生態系の炭素循環・水循環等の相互作用をモデル化する試みが進められつつある。一方、地球シミュレータを利用した上記のような長期的な温暖化予測に加え、詳細な大気・海洋変動のモデルを開発し、全球シミュレーションを行って数時間から数日の短期的な気象予測についての研究開発が開始されている。また、二酸化炭素の排出や水の蒸発といった気候予測にかかわる観測拠点が各地に設置されつつあり、さらに、全球的な温室効果ガスの排出、挙動を観測するため2007年には米国および日本でそれぞれ観測衛星の打ち上げが予定されているなど、モデル開発のためのより質の良いデータが期待できる。

## (2) 研究領域

「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」

(平成17年度発足)

本研究領域は、世界最先端レベルの超高速・大容量計算機環境と精緻なモデル化・統合化によって、複数の現象が相互に影響しあうようなマルチスケール・マルチフィジックス現象の高精度かつ高分解能の解を求めることを研究の対象とする。

具体的には、地球環境変動、異常気象、およびそれに起因する災害予測、人工物の安全性・健全性の評価、複雑な工業製品の設計・試作、ナノレベルの材料挙動、生体内たんぱく質構造と生体内薬物動態など、支配因子が未知あるいは不確定性を含む現象やスケールが極度に異なる現象等のモデル化の研究、そのようなモデルの統合数値解析手法の研究、モデルや入力データの妥当性・結果の信頼性の評価方法の研究などが含まれる。

## (3) 研究総括

矢川 元基 (東洋大学大学院教授、前計算力学研究センター長)

## (4) 採択課題・研究費

(百万円)

採択年度	研究代表者	研究終了時の 所属・役職	研究課題	研究費*)
平成 17年度	尾形 修司	名古屋工業大学 教授	ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析	192
	押山 淳	東京大学 教授	計算量子科学によるナノアーキテクチャ構築	255
	佐藤 正樹	海洋研究開発機構 チームリーダー	全球雲解像大気モデルの熱帯気象予測への実利用化に関する研究	340
	高田 俊和	理化学研究所 コーディネーター	QM(MRSCI+DFT)/MM法による生体電子伝達メカニズムの理論的研究	140
	高橋 桂子	海洋研究開発機構 プログラムディレクター	災害予測シミュレーションの高度化	280
	天能 精一郎	神戸大学 教授	生体系の高精度計算に適した階層的量子化学計算システムの構築	318
	平尾 公彦	理化学研究所基幹研究所 特任顧問	ナノバイオ系のシミュレーションとダイナミクス	336
	松浦 充宏	統計数理研究所 特任教授	観測・計算を融合した階層連結地震・津波災害予測システム	341
平成 18年度	長岡 正隆	名古屋大学 教授	凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発 ー大規模原子情報の疎視化・再構成技法・疎視的理論の開発ー	267
	羽角 博康	東京大学大気海洋研究所 准教授	海洋循環のスケール間相互作用と大規模変動	231
	町田 昌彦	日本原子力研究開発機構 研究主幹	超伝導新応用のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションの基盤構築	287
	三上 益弘	産業技術総合研究所 主任研究員	DDS シミュレータの研究開発	226
	諸熊 奎治	京都大学福井謙一記念研究センター リサーチリーダー	複雑分子系の複合分子理論シミュレーション	313
	山中 康裕	北海道大学 教授	海洋生態系将来予測のための海洋循環シミュレーション研究	175
	山本 量一	京都大学 教授	ソフトマターの多階層/相互接続シミュレーション	379
平成 19年度	青木 百合子	九州大学 教授	大規模系への超高精度 O(N) 演算法とナノ・バイオ材料設計	177
	今田 正俊	東京大学 教授	高精度多体多階層物質シミュレーション	151
	臼井 英之	神戸大学 教授	惑星間航行システム開発に向けたマルチスケール粒子シミュレーション	180
	北尾 彰朗	東京大学分子細胞生物学研究所 准教授	バイオ分子間相互作用形態の階層的モデリング	171
	中辻 博	量子化学研究協会 理事長	超精密予測と巨大分子設計を実現する革新的量子化学と計算科学基盤技術の構築	318
	吉村 忍	東京大学 教授	原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション	346
			<b>総研究費</b>	5,423

\*) 各研究課題とも5年間の見込み総額

## 2. 研究領域および研究総括の選定について

### 研究領域選定にあたっての背景や理由

以下のような検討結果に基づいて本研究領域が選定された。

本研究領域は、環境、ナノ・材料、諸工学、ライフサイエンス、防災などの多岐に渡る応用分野を対象として、超大規模・複雑現象あるいはマルチスケール・マルチフィジックスと総称される分野のシミュレーション技術の研究が提案されるよう設定されている。また、この研究領域では、単に現象のモデル化や統合数値解析手法の研究だけでなく、入力データや結果の妥当性・信頼性の評価・検証までを視野に入れており、最先端の超高速・大容量計算機環境での実用的なシミュレーション技術の研究開発を指向している。

以上のように、最先端の超高速・大容量計算機環境への展開を図った、マルチスケール・マルチフィジックス（超大規模・複雑現象）分野における次世代の高精度・高分解能シミュレーション技術の開発を目指す戦略目標の達成に向けて適切に設定されている。

### 研究総括の選定にあたっての背景や理由

以下のような検討結果に基づいて研究総括が選定された。

矢川元基氏は、原子力工学を中心とする工学分野における計算力学、有限要素法、並列計算法などの研究において世界をリードする研究を行ってきており、我が国における計算科学や並列コンピューティング、大型計算機の利用・発展に大きく貢献してきた。さらに、世界に先駆けて超並列計算機用有限要素プログラムを開発するなど国際的に知られる多くの成果をあげている。このように、本研究領域において、基礎科学に基づきつつ、超高速・大容量計算機環境への超大規模・複雑な統合シミュレーション技術の展開を図る先見性・洞察力を有していると見られる。また、日本学術会議第17期、第18期メカニクス・構造連絡委員会 計算力学専門委員会 委員長、日本原子力研究所計算科学技術推進センター センター長等を歴任しており、本研究領域のマネジメントを行うに適した経験・能力を有している。さらに、次世代超音速機技術開発評価分科会、革新技术活性化委員会評価部会、振興調整費委員会など多くの審査や評価に参画している。これらを総合すると関連分野の研究者から信頼され、公平な評価を行いうると見られる。

## 3. 研究総括のねらい

### 研究領域の位置づけを受けて総括はどのようにねらいを定めたか

本研究領域は、近い将来のペタフロップス超スーパーコンピュータ利用を視野に入れながら、最先端の超高速・大容量計算機環境と精緻なモデル化・統合化によって、複

数の現象が相互に影響しあうようなマルチスケール・マルチフィジックス現象の高精度かつ高分解能の解を求める研究を対象とした。

具体的には、地球環境変動とその影響、異常気象およびそれに起因する災害予測、人工物の安全性・健全性の評価、複雑な工業製品の設計・試作などのシミュレーション、ナノレベルの材料挙動・生体内たんぱく質構造・生体内薬物動態の解析など、支配因子が未知あるいは不確定性を含む現象やスケールが極度に異なる現象等のモデル化の研究、そのようなモデルの統合数値解析手法の研究、モデルや入力データの妥当性・結果の信頼性の評価方法の研究などが含まれる。

### 研究領域で実現をねらったことや研究成果として目指したこと

本研究領域で実現をねらったことや研究成果として目指したことは、第一に、ペタフロップス超級スーパーコンピュータによる大規模計算アルゴリズムの開発である。具体的には、次世代スーパーコンピュータがその能力を最大限発揮するためには優れたアプリケーションソフトウェアの存在が必須であることから、本研究領域においても、世界最高水準の超高速・大容量計算機環境下で高精度かつ高分解能の解を求められるようなソフトウェア技術の基盤確立を視野に入れた取り組みを、より一層強化する必要があると判断して、本領域開始後の3年目と4年目には、21研究課題の中からペタフロップス超に適合する可能性があると考えられるコンピュータソフトウェア開発を6課題選出して、理化学研究所とのコラボレーションを図りながら開発を進めた。

第二に、研究対象を計算科学の基礎のみならず、工学、医学、薬学、安全・安心・防災などの応用的テーマにも広げて、基礎的な科学技術のみならず、国民生活、社会・経済等に対してインパクトある研究を目指したことである。超伝導応用のためのシミュレーション、体内薬剤搬送シミュレータの研究開発、惑星間航行システム開発シミュレーション、原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション、漁業資源シミュレーション等の研究課題がこれに相当する。

第三に、異なる専門家同士、海外の最先端グループとの共同提案、実験、理論、あるいは情報数理・計算科学の専門家などとのタイトな協力を促すような分野融合的・領域融合的な研究課題を募ったことである。具体的には、①「原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション」における、地盤・地震・建築・構造・熱流力・核の異なる専門家同士の協力、②「海洋循環のスケール間相互作用と大規模変動」と「海洋生態系将来予測のための海洋環境シミュレーション研究」間のデータ授受による領域間協力、③「計算量子科学によるナノアーキテクチャ構築」における、海外の最先端グループ（Car-Parrinello）との共同研究、④「災害予測シミュレーションの高度化」における、風波気液界面における顕熱および潜熱（水分）の輸送速度実験とのタイトな協力が挙げられる。また、上記の有望なコンピュータソフトウェア開発に関する理化学研究所とのコラボレーション研究は、情報数理・計算科学の専門家などとのタイトな協力を十分に



満たしたと考えている。

#### 科学技術の進歩への貢献や科学技術イノベーション創出に向けて目指したこと

本領域が研究対象とする計算科学は、実験、理論と並ぶ第3の科学と言われており、イノベーション創出に向けて、基礎的な科学技術のみならず、安全・安心や医療への貢献、新物質の創生、新しい計算手法の創出等、国民生活、社会・経済等に対してインパクトある研究を目指した。

#### 4. 研究課題の選考について

##### 研究課題の選考方針

数テラフロップスからペタフロップス級、あるいはそれに準ずる計算機環境（グリッドを含む）を基盤として、マルチフィジックス、マルチスケール現象のシミュレーションを対象とする、高度かつ大規模ソフトウェアの研究を対象とした。世界をリードする研究であるかどうか、コンセプト、アイディアのユニークさ、有効性がどのようなものであるかどうかに重きをおいて判断した。解の信頼性を保証する意味において、精度評価・検証を十分に配慮した研究、大規模な入出力データの効率化・処理の高速化を図った研究、コストパフォーマンスが高い研究を選考した。

具体的に目に見える成果、産業や実社会への応用性とそのインパクトの大きさ、成果として出来上がったソフトウェアが研究終了後も長期間、自立成長を継続できる枠組みを勘案した提案かどうかについても十分配慮した。

異なる専門家同士、海外の最先端グループとの共同提案、実験、理論、あるいは情報数理・計算科学の専門家などとのタイトな協力を促すような分野融合的・領域融合的な研究課題を募った。この場合、研究者間の連携に十分な必然性・説得性があるかどうかを選考の判断にした。

##### 選考結果

書類審査および面接審査を行って総括とアドバイザーの採点をもとに合議して採択テーマを決定した。応募件数、採択件数などの選考結果は以下のとおりであった。

採択年度	応募件数 (件)	採択件数 (件)	採択率 (%)
17	73	8	11.0
18	40	7	17.5
19	45	6	13.3
全体	158	21	13.3

## 5. 領域アドバイザーについて

この研究領域が対象とする科学技術分野は、非常に多岐に渡る。このため、研究提案の選考等に関して研究総括を補佐する領域アドバイザーの委嘱にあたっては、研究総括および領域アドバイザーが相互に専門分野を相補い、対象分野全般にわたって円滑な運営がなされるよう配慮することが適切である。

以上の理由から、JST 研究領域総合運営部が、JST 研究開発戦略センター（CRDS）の意見を参考にしながら、ヒヤリングを進めて、計算科学の分野で高度で広範な判断ができる第一人者の候補者を複数名選び、総括の選考を経て以下のように決定した。

領域アドバイザー名	終了時の所属	役職	任期
石谷 久	慶應義塾大学	教授	平成 17 年 4 月～平成 20 年 3 月
戎崎 俊一	理化学研究所	室長	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月
遠藤 守信	信州大学	教授	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月
岡本 祐幸	名古屋大学	教授	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月
佐藤 哲也	兵庫県立大学	教授	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月
寺倉 清之	北陸先端科学技術 大学院大学	特別招聘教授	平成 17 年 4 月～平成 20 年 7 月
土居 範久	中央大学	教授	平成 17 年 4 月～平成 20 年 3 月
萩原 一郎	明治大学	教授	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月
久田 俊明	東京大学	教授	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月
平田 文男	立命館大学	教授	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月
藤谷 徳之助	日本気象協会	顧問	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月
渡辺 貞	理化学研究所	統括役	平成 17 年 4 月～平成 25 年 3 月

## 6. 研究領域の運営について

### 研究総括の研究領域運営方針

課題選考および、研究期間の中間期（具体的には開始 2 年後）に実施した中間評価、並びに、研究期間の終了期（具体的には開始 5 年後）に実施した事後評価では、アドバイザーの意見をもとに総括が判断して、トップダウン的に厳しく評価を下した。また、中間評価の直前、並びに事後評価の直前には、アドバイザーとともに研究代表者の元を訪れ、研究現場の状況を把握するとともに、研究の詳細な進展度合いを理解し、必要な

問題点を指摘して、期間後半の研究推進、並びに、研究のまとめと将来への展開を図るように努めた。一方、研究の実施自体に関しては、研究者のボトムアップの精神を尊重して進めるのが最も研究成果が得られると判断して、いわゆるソフトマネジメントの手法で臨んだ。ただし、1年に1度は研究代表者とアドバイザー全員が一同に会する公開シンポジウムを開催して、共同研究者、研究担当者等も交えて、意見交換を行う場を設けて、意思の疎通を図るように心掛けた。

### バーチャルラボとしての研究領域のマネジメント

本研究領域のマネジメントに関しての第一の特質は、理化学研究所のペタフロップス超級の次世代のスーパーコンピュータの稼動が近づくことを見据えて、ペタフロップス超に適合したコンピュータソフトウェアの開発を進めることが重要な課題と考え、ペタフロップス超に適合する可能性があると考えられるコンピュータソフトウェア開発に対して、研究総括裁量経費（1億8,000万円）を付けることに決し、本研究領域の第3年度と第4年度（平成19年度と20年度）には、21課題の研究課題の中から6研究課題（高橋、平尾、羽角、町田、臼井、吉村の各チーム）を選択して、コンピュータソフトウェア研究開発の進展を図ることとしたことである。

第二の特質は、成果の社会への普及、社会との共有を目的として、国際シンポジウムを含む公開シンポジウムの開催を各研究チームに強く促したことである。その結果、添付資料の5.2 研究チーム主催のシンポジウムに示すように、研究代表者が主催して多くの公開シンポジウムが開催された。例えば、三上チームと山本チーム {「生体・ソフト物質のマルチスケールシミュレーションの国際シンポジウム (Interatinal Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials)」2008年6月18日～20日、秋葉原ダイビル}、平尾チーム {「ナノバイオ系のシミュレーションとダイナミクス」堀場国際会議}2009年3月4日～3月6日、東京大学武田先端知ビル}、北尾チーム {「蛋白質複合体形成と機能のマルチスケールダイナミクスに関する国際シンポジウム (International Symposium on Multi-Scale Dynamics of Protein Complex Formation and Function)」2009年7月14日～16日、東京大学山上会館}、諸熊チーム {「複雑分子系の理論とシミュレーションに関する国際シンポジウム (International Symposium on Theory and Simulations of Complex Molecular Systems)」2009年7月19日～21日、福井謙一記念研究センター}、町田チーム {7th International Symposium on Intrinsic Josephson Effects and Plasma Oscillations in High-Tc Superconductors (PLASMA2010)」2010年4月29日～5月2日、弘前大学50周年記念会館}、松浦チーム {「第7回 ACES 国際ワークショップ (7th ACES International Workshop)」2010年10月3日～8日、グランドパーク小樽}、中辻チーム {「International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII)」2011年9月2日～9月8日、早稲田大学}、吉村チーム {「国際ワークショップ “Lectures on

Computational Fluid-Structure Interaction”」2012年3月5日～3月6日、東京大学本郷キャンパス内工学部8号館}のように、各研究代表者が主体となって国際シンポジウムを開催した。

第三の特質は、本領域全体としても、本領域活動の内外社会との共有のために、21の全研究課題が決定した直後の第3年度（2007年）に、全研究課題に関する国際会議（National project on "High Performance Computing for Multi-scale and Multi-physics Phenomena", APCOM'07-EPMESC XI, 2007年12月3日～6日、京都国際会議場）で紹介を行い、本研究領域の活動を国内外に広く知らせたことである。また、第5年度（2009年）には、総括が主体となって、気象災害、地球温暖化、地震災害などに関係する研究3課題を選んで、安全・安心のテーマで国際シンポジウム「安全・安心とそのシミュレーション科学（International Symposium on Simulation Science for Safety）」2009年6月19日、東洋大学}を東洋大学および読売新聞社と共催し、この方面のシミュレーション研究の役割と成果を、非専門家を含む一般社会と共有するように努めた。さらに、本CREST研究の終了に際してのまとめとして、第7年度（2011年）には、第1回 大規模計算科学国際シンポジウム（マクロ問題対象）を、第8年度（2012年）には、第2回 大規模計算科学国際シンポジウム（マイクロ問題対象）を、総括が主体となって、日本学術会議と共催し、本CREST研究の成果と関連する分野の海外研究者の招待講演を含めて、計算科学の研究動向を世間に広く知らせるよう努めた。

### 研究課題の指導について

1年に1度は研究代表者とアドバイザー全員が一同に会する公開シンポジウムを開催して、研究代表者による口頭発表に加えて、共同研究者、研究担当者等によるポスターセッションも同時に実施して、アドバイザーや総括と意見交換を行う場を設けて、意思の疎通を図るように心掛けた。また、研究活性化に向けたアドバイザーからのコメントを、研究代表者に送付してフィードバックするようにした。

中間評価会直前と事後評価会直前には、アドバイザーおよび総括が研究代表者の研究室を訪問して、進捗状況を確認するサイトビジットを開催し、研究代表者のみならず共同研究者、研究担当者等と意見の疎通を図るように心がけた。

先にも述べたが、本領域開始後の3年目と4年目には、21研究課題の中からペタフロップス超に適合する可能性があると考えられるコンピュータソフトウェアを6課題選出して、理化学研究所とのコラボレーションを図りながらチューニングを進めた。各研究者間の横の連携を図るべく、平成22年度と23年度には、総括と関連アドバイザーが出席のもと研究報告会を開催し、進捗状況に関する評価結果を研究代表者にフィードバックするようにした。

## 研究費の配分について

選考課題の決定時に、研究代表者から全期間に渡る研究費の要求額を提出してもらい、この内容につき、総括とアドバイザーが必要性を協議して研究費の配分を決定した。その後、以下の3点につき、配分の変更を行った。

(1) 年度末には、JST から本 CREST 研究課題に対する予算増額要求の募集がある年度があり、これに呼応して、研究代表者から希望を提出してもらい、その必要性と緊急性を考慮して、総括が要求の可否および優先順位付けを決定した。最終的に JST で追加予算が決定されるが、多くの場合認められた。

(2) ペタフロップス超に適合する可能性があると考えられるコンピュータソフトウェア開発に対して、研究総括裁量経費（1億8,000万円）を付けることに決し、本研究領域の第3年度と第4年度（平成19年度と20年度）には、21課題の研究課題の中から6研究課題を選択して、コンピュータソフトウェア開発の進展を図ることとした。この6研究課題の選択に際しては、全研究代表者を対象に募集をかけ、書類審査の上、内容が画期的でかつ期間内での成果が期待できるものに絞ることとして、総括と大型計算機専門のアドバイザーが協議の上、決定した。

(3) 次の項目で説明する、領域中間評価の評価結果を踏まえて新たに設定した横断的研究実施にあたり、アドバイザーからの推薦により、まとめ担当を指定した研究代表者のチームに対して、研究実施中の全研究チームから予算の定率（2%以内）額を減額いただき配分（総額1,090万円）した。

## 領域中間評価の評価結果を踏まえて改善した点

領域中間評価の評価結果を踏まえて改善した点は、新たに横断的研究を実施したことである。

平成21年度末に実施された領域中間評価の評価結果では、3. 研究領域のマネジメントの章で、

- ・領域全体を見渡して、各課題におけるマルチフィジックスおよびマルチスケール解析を実現する共通の手法について、領域全体の成果としてまとめる必要があるように思われる。

という指摘を受け、また、4. 研究進捗状況 の章で、③懸案事項・問題点 として、

- ・領域全体を俯瞰した場合、課題を横断的に見ることですらに大きな成果を引き出せる可能性があるのではないかと思われる。

との同様の指摘を受けた。この指摘を踏まえて、平成22年度に、研究総括とアドバイザー全員が集合する機会毎に改善策を協議し、下記2件の領域全体を俯瞰的に眺めた場合の横断的研究として立ち上げ、予算措置の調整を経て平成23年度から実施した。

- テーマ 1. マルチ研究領域各チームの研究内容と位置づけを明確にする取り組み
- テーマ 2. マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションのペタコン向けチューニング手法

テーマ 1 は、昨年平成 23 年度末に終了し、全 21 チームの課題全体を見通す目的で、各課題の位置づけを明確にすべく研究内容や成果を取りまとめた冊子を作成した。この冊子は、本領域内の課題研究を、①地球・環境、②マクロ・情報・工学、③ナノレベル物質・材料科学、④ナノレベル生体科学、の 4 分野に分けて編纂されている。広く情報を知らせるべく、本領域アドバイザー全員（9 名）、21 課題の研究代表者、および次世代スーパーコンピュータ・コンソーシアムの機関代表者（約 80 名）に配布した。

テーマ 2 は、平成 24 年度末に終了する予定で現在報告書作成中である。本領域においては、平成 20 年度からは次世代スパコン向けのチューニング対応の 6 課題を選定し、理化学研究所と連携してチューニングを行い、一定の成果を得た。しかし、これらの取り組みでは、個々のシミュレーションソフトウェア毎に次世代スパコン向けチューニング研究がなされており、マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション分野全体について次世代スパコン向けチューニングを加速するには、それらの取り組みを分野として横断的にとりまとめ、それらの成果を関係者が参照し活かせるようにしておくことが重要である。

そこで、横断的課題研究「マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションのペタコン向けチューニング手法」では、上記 6 課題の取り組みを中心に、各チームが発表した次世代スパコン向けチューニング手法等に関する学会発表や学術論文を調査・分析する。その結果、有限差分法、有限要素法などの数値解法から見たアプリケーションの分類ごとに、または最も演算を必要とするそれぞれのソフトウェアのコア部分の特徴ごとに、次世代スパコン上で有効と思われるチューニング手法を分類し、それらをまとめた報告書を平成 24 年度末までに作成することとした。

## 7. 研究を実施した結果と所見

### 研究総括のねらいに対する研究成果の達成度

近い将来のペタフロップス超級スーパーコンピュータ利用を視野に入れながら、最先端の超高速・大容量計算機環境と精緻なモデル化・統合化によって、複数の現象が相互に影響しあうようなマルチスケール・マルチフィジクス現象の高精度かつ高分解能の解を求める研究を目指した研究総括のねらいは、以下の理由により達成されたと考える。

ペタフロップス超級スーパーコンピュータ利用を視野に入れた研究という意味では、次世代のスーパーコンピュータ「京」の仕様を決定するために 2007 年に選ばれた 21

本のターゲット・アプリケーションの内、5本が本研究領域の研究チーム(羽角、三上、佐藤、押山、松浦の各チーム)からのコンピュータソフトウェアであったことも、このことを物語っていると言えよう。また、ペタフロップス超に適合する可能性があると考えられるコンピュータソフトウェア6課題を選出し、そのチューニングを理化学研究所とコラボレーションを図りながら進めたが、このことも「京」コンピュータ開発に極めて良い影響を与えたと考えている。

「京」コンピュータの稼働に際しては、グランドチャレンジアプリケーションおよびHPCI戦略プログラムで採用された本領域のソフトウェアは、21研究課題中14研究課題にも達しており、使用経験を含めると18研究課題と、殆どの研究課題が何らかの関与をしている{参照:添付資料の6. その他の重要事項(新聞・雑誌・テレビ等)の京コンピュータ利用への関与}。

以上述べたとおり、大きな国家プロジェクトに成長した、理化学研究所のペタフロップス超級の次世代のスーパーコンピュータ「京」の開発に関して、本CREST領域がコンピュータソフトウェアの開発を通して大きな推進役として貢献したと自負している。

本領域の研究対象は、小は量子力学が支配するナノ・バイオの世界から、大は、ニュートン力学等の古典力学が支配する地球環境、宇宙ロケットにいたるまで、文字どおりマルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション研究であったが、全課題とも順調に進み、諸熊奎治チーム研究代表の平成24年度文化功労者の顕彰をはじめとして大きな成果が得られた(参照:添付資料の3. 主要業績 および 4. 受賞等)。中には、松浦チームの津波解析ソフトウェアや、青木チームのELG法の三次元化などの、当初に期待した以上の研究成果が出たものもあり、複数の現象が相互に影響しあうような、マルチスケール・マルチフィジックス現象の高精度かつ高分解能の解を求める研究を目指した研究総括のねらいは、達成されたと考える。

### 領域全体として見た場合の特筆すべき研究成果

小は量子力学が支配するナノ・バイオの世界から、大は、ニュートン力学等の古典力学が支配する地球環境、宇宙ロケットにいたるまでの広範囲に及ぶ21研究課題の成果はいずれも優れたものであったと思うが、この中から、特筆すべき研究成果としては以下の7分野を挙げたい。

#### (1) 3.11 東日本大震災関連(松浦チーム、吉村チーム)

特に連続体力学を基礎とするマクロ解析のシステムコード開発においては、実際の場に使われなければ最終的な成果とは言えない面がある。2011年3月11日の東日本大震災以降、以下の2研究課題の重要性が一層認識されたと理解する。

- ①観測・計算を融合した階層連結地震・津波災害予測システム（研究代表者：松浦充宏）  
②原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション（研究代表者：吉村忍）

①では、地震発生物理学に基づくプレート運動による応力蓄積と地震発生、地震動と津波発生、地震波による構造物の振動等の一連の過程を、超並列計算機を用いて再現・予測する、観測・計算融合階層連結型シミュレーションシステムを開発し、これを用いて、シミュレーションが実施された。シミュレーション対象が、今回の東日本ではなく、当時重要視されていた東南海地震であったことを、研究代表者は残念がっていたが、手法自体は完成しており、十分特筆すべき成果と判断する。特に、古村孝志グループ代表が新たに開発したナビエ・ストークス方程式の直接解法による津波計算コードは、東日本大震災以降、その実力を遺憾なく発揮し、NHKをはじめとして多くの民法各局のテレビ報道でその解析結果が放映され、計算機シミュレーション科学の有用性を世に知らしめた。例えば、NHK スペシャル／MEGAQUAKE 巨大地震（2010/1/7、2010/1/14）、日本テレビ・世界一受けたい授業／未知の揺れ新型地震が日本を襲う（2010/7/10）等では、成果の社会的なインパクトを十二分に発揮したと高く評価したい。今後は、東日本大地震時の津波発生メカニズムの解明や、東南海地震災害の予測と対策に反映されることを期待したい。

②では、直下型地震による地震発生から地殻を伝搬し、建屋に至るまでの地震動の波動解析、地震動による建屋・原子炉容器・炉内構造機器に至る地震応答解析、炉容器や冷却材の流体構造連成解析などの、一連のマルチスケール・マルチフィジックス領域の大規模シミュレーションシステムを完成させた。これは世界的にも初めての試みでもあり、十分特筆すべき成果と判断する。なお、社会的関心が高い東日本大震災時の福島第一原子力発電所の地震応答解析に関しては、HPCI 戦略分野4の中で「京」コンピュータでの解析を行える見通しが立っていると聞いており、今後に期待したい。

## （2）オーダーN法（平尾チーム、青木チーム）

物質を構成している個々の分子の性質をミクロな立場から明らかにする方法として、非経験的（*ab initio*）分子軌道（MO）法がある。実際の分子系に対してSchrödinger方程式をそのまま解くことは不可能なので（以下の（4）で示す中辻博研究代表はこれに果敢に挑戦している）、実際には一電子近似のもとで解ける形に定式化したHartree-Fock（HF）方程式を解く。この近似を超え、さらに、電子と電子の相互作用（電子相関）の効果を導入するpost HF法（代表的なものとしてMøller-Plesset摂動法、配置間相互作用法など）があり、計算精度を上げるに従って計算コストは飛躍的に増大する。Nを系の原子の数とした時、HF法でNの2.5～3乗、post HF法で4～7乗で増加すると言われている。大規模系に対して実用可能にするにはNの一乗に比例した計算時間、



いわゆるオーダーN [O(N)]、別名Linear Scalingとも言われる計算時間で演算可能となる超効率的計算法の開発が強く望まれる。

一方、巨大分子（系）の量子化学計算法としては、密度汎関数法（DFT法）が実際に用いられる手法の中で、もっとも使われていて汎用性の高い手法である。この理論では多体系の全ての物理量は空間的に変化する電子密度の汎関数（すなわち関数の関数）として表され、多くの固体でDFT法を用いた計算は実験結果との十分な一致を得ることができ、しかも計算コストもHF法やpost HF法と比べて小さく、Nを系の原子の数とした時、計算時間はNの4乗に比例して増加すると言われている。ただし、分子間相互作用（特にファンデルワールス力）や、電荷移動励起、ポテンシャルエネルギー面、強い相関を持った系を表現すること（この課題に対しては、以下の（7）で示す今田チームの「高精度多体多階層物質シミュレーション」のダウンフォールディング法で克服している）や、半導体のバンドギャップを計算することは、未だに密度汎関数理論を用いた手法での扱いが難しいと言われている。

上記の現状認識のもと、以下の2研究課題の成果が特筆すべき研究成果を上げたと思われる。

- ①ナノバイオ系のシミュレーションとダイナミクス（研究代表者：平尾公彦）
- ②大規模系への超高精度 O(N)演算法とナノ・バイオ材料設計（研究代表者：青木百合子）

①では、Gauss型基底を用いた密度汎関数法（DFT）において最も計算時間を必要とする部分は、四中心二電子反発積分を要するCoulomb積分であるが、この積分法として高速に計算できるGauss型-有限要素Coulomb積分法（GFC法）という方法を開発し、これにより、オーダーNを達成できた。また、長距離補正（LC）法を開発し、これ（LC）を用いた密度汎関数法が、歴史上はじめて軌道エネルギーの定量的再現を実現することを明らかにできた。さらに、従来の密度汎関数法は大規模分子の構造決定要因であるファンデルワールス結合を全く再現できなかったが、LC法 + ファンデルワールス相関により、希ガス二量体、ファンデルワールス錯体、ベンゼンやナフタレンの二量体の計算を行ったところ、ファンデルワールス結合の密度汎関数法による精密再現に成功した。これら、密度汎関数法のオーダーNの達成、並びに歴史上はじめて軌道エネルギーの定量的再現を実現した成果は、いずれも本領域の特筆すべき研究成果と言える。

②では、1991年に今村教授および青木研究代表らが発表したElongation法（ELG法）はオーダーNであるが、本研究当初ELG法の最大の難点として、蛋白質などの「三次元系への拡張」が指摘されていた。その問題を、いったんは凍結した部分を再解凍して計算しなおすことを可能としたことにより克服し、ELG法の「三次元系への拡張」を達成した。また、Orbital shift法を考案し、非局在化した必要最低限の軌道を自動的

に選択して対角化に含める手法を ELG 法プログラムに導入したことで、 $\pi$  電子非局在化系でも高精度で演算を可能とした。相互作用の領域が次元性（一次元  $\Rightarrow$  二次元  $\Rightarrow$  三次元）とともに広がるに従い、なかなか高い  $O(N)$  性が実現できなかったが、AO-cutoff 法により不要な積分計算を削除することによって、複雑三次元系に対してでも高い Linear scaling [ $O(N)$ ] を達成できた。これら、ELG 法の三次元化およびオーダー  $N$  の達成は特筆すべき研究成果と言える。

なお、研究代表者と類似の課題（巨大分子（系）の量子化学計算）に対していくつかの方法論が提案されている。それらは、（１）密度汎関数法、（２）Divide & Conquer 法、（３）フラグメント MO 法、および（４）Elongation 法がその代表的なものであるが、その中で代表者が提案した（４）以外は、外国の研究者によって提案されたものであり、オリジナルではない。日本発の量子化学計算方法論としても、本成果は特筆に値する。

### （３）ミクロ・マクロ連成解析（尾形チーム、山本チーム）

量子効果を主たる研究対象とするナノスケールの研究が多い中で、より応用に視点を置くシミュレーションを行うためには、ミクロなレベルの量子化学とマクロな熱力学や流体力学をつなぎ、真のマルチスケール・マルチフィジックスを可能にする方法論が必要と考える。

この困難な課題に果敢に挑戦した以下の２研究課題が特筆すべき研究成果を上げたと思われる。

①ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析（研究代表者：尾形修司）

②ソフトマターの多階層/相互接続シミュレーション（研究代表者：山本量一）

①では、排気ガス触媒コンバーターやMEMS等に見られる、複雑（多孔質、微細加工、応力集中、超薄膜を含む）固体と液体/気体との間の、ナノメートルからマイクロメートルを超える規模のワイドレンジな動的界面現象や輸送現象への直接的応用を目指し、電子状態計算から流体計算（粗視化を含む）までの様々な計算手法を適切に組み合わせたハイブリッドコードのセットを開発する等、本領域の目的に最も忠実に挑戦した意欲的な研究が行われた。なお、電子状態計算に用いた密度汎関数法では、大規模計算のために同時並列的な考えによるオーダー  $N$  化にも成功する成果も上げている。

②では、高分子や固体粒子を含んだ複雑な物質（ソフトマター）は機能性材料として重要であるが、性質を理論的に予測することは大変困難である。この問題を解決するために、ミクロ階層（原子・分子）・メゾ階層（濃度分布や界面など）・マクロ階層（材料の形や製造プロセスなど）が物理的に矛盾なく相互に影響し合う画期的な多階層/相

互接続シミュレーション手法を確立し、全く新しい包括的材料・プロセス設計ソフトウェアの開発を行い、世界的にも初めての手法を開発するなど、大きな成果を上げた。

学術的成果を重んじる研究者やその集団が闊歩する日本のシミュレーション学界の中で、より現実の製品への応用を心がけた、上記 2 研究チームの存在は貴重であった。

#### (4) 新しい方法論の開発 (中辻チーム)

中辻博研究代表は「超精密予測と巨大分子設計を実現する革新的量子化学と計算科学基盤技術の構築」において、シュレーディンガー方程式に基づく予言的量子科学の構築として、原子、分子レベルの法則を支配する最も基本的な方程式である **Schrödinger** 方程式の解法に関する世界初の全く新しい方法論を提案し、本研究により、ベンゼンレベルまでの解析が出来るようになった。これは、我が国では数少ない貴重な哲学と信念を持った研究課題で、その学術的価値は極めて高いものがあり、特筆すべき成果と言える。

上記 (2) の初めに記載した、「物質を構成している個々の分子の性質をミクロな立場から明らかにする方法として、非経験的 (*ab initio*) 分子軌道 (MO) 法がある。実際の分子系に対して **Schrödinger** 方程式をそのまま解くことは不可能なので」に、果敢に挑戦したユニークな研究と言えるもので、今後の発展に期待したい。

#### (5) 大賞の受賞等 (諸熊チーム)

諸熊奎治研究代表の「複雑分子系の複合分子理論シミュレーション」においては、本研究以前に、代表・共同研究者たちによって開発されていた多層ハイブリッド理論 (ONIOM 法)、RISM-SCF 理論、その他の複合分子理論をさらに大きく発展させ、これらの方法を用いてナノシステム、生命分子系、並びに溶液系など複雑分子系の構造、反応、ダイナミックスなどのシミュレーションが可能であることを示した。また、これらの分野でのいくつかの重要な問題の理論的解明を目指した研究を遂行し {例えば、DFTB QM/MD 法を用いた分子動力学計算により、遷移金属クラスター上でカーボンナノチューブ (CNT) の生長を、世界ではじめて 計算機上で実現した}、世界的に高く評価される極めて優れた成果を上げた。これらの成果の学術的価値は極めて高いものがあり、特筆すべき成果と言える。

これらの業績に対して、諸熊奎治研究代表は、2008 年 6 月には、「分子の構造・機能・反応設計に関する理論的研究」で、日本学士院から日本学士院賞恩賜賞を受賞、2010 年 4 月には、内閣府から瑞宝中綬章を受賞、2012 年 11 月には、「複雑分子系の理論研究の発展に多大な貢献をした」との業績により、文部科学省から文化功労者に顕彰された。

#### (6) Science、Nature 掲載 (佐藤チーム)

佐藤正樹研究代表の「全球雲解像大気モデルの熱帯気象予測への実利用化に関する研究」において、開発した NICAM コードにより、地球シミュレータを使ってマッデン・ジュリアン振動 (従来モデルでは再現が困難であった熱帯の雲のゆっくりとした東進) をシミュレートできたことが特筆すべき成果と言える。これは、マッデン・ジュリアン振動に伴う雲集団が発生から 1 ヶ月間先まで予測できる可能性を世界で初めて実証したもので、週間予報から季節予報の精度向上への見通しを示すとともに、世界的な大気モデル開発の方向性にも影響を与えることが予想される (2007 年 12 月 14 日 米国科学誌 *Science* に掲載、2008 年 5 月 14 日 *Nature news* に掲載)。

本研究課題は、平成 22 年度の CREST 終了後も、HPCI 戦略プロジェクト分野 3「防災・減災に資する地球変動予測」の主要課題として、NICAM により地球温暖化に伴う台風の変化予測、2 週間以上先の延長予報に対してアプローチしているとのことであり、頼もしい限りである。

#### (7) ナノ高速計算法 (押山チーム、今田チーム)

ナノシミュレーションで、今後「京」コンピュータによる超並列計算による成果が期待出来る見通しのあるものとしては、

①押山淳研究代表の「計算量子科学によるナノアーキテクチャ構築」における、並列計算に適した実空間電子密度汎関数法開発の開発  
および、

②今田正俊研究代表の「高精度多体多階層物質シミュレーション」における、3 段階法による強相関電子系のシミュレーションの開発  
の 2 件を挙げたい。これらは、社会的に、あるいは新産業創出の観点でインパクトの大きな成果が得られるものと期待している。

①では、従来の平面波基底関数系を用いた密度汎関数法計算では、 $k$  空間と実際の実空間の間の頻繁な変換が必要になるため、超並列アーキテクチャの計算機では良いパフォーマンスは望めなかったため、実空間に格子を導入し、各電子軌道、電子密度、ポテンシャルなどの諸量を格子点上で計算していく RSDFT コードを開発した。RSDFT では、全演算ノード間の重い通信タスクが生じないことで、「京」コンピュータのような超並列アーキテクチャの計算機での計算高速化を実現できる。この成果により、2011 年 11 月には、米電気電子学会より 2011 年ゴードンベル賞 (最高性能賞) を受賞しており、特筆すべき成果と言える。

②では、第一段階は大局的な電子構造を密度汎関数法に基づいて求め、第二段階はダウンフォールディングと呼ばれ、大局構造から最局在ワニエ軌道の構成を行ったうえで、

このワニエ基底に対する低エネルギー有効模型を導出し、最後に第三段階でこの有効模型を量子ゆらぎや強相関多体効果を十分に高精度で取り込んだ「低エネルギーソルバー」によって解く手法である。固体物性分野で話題となっている高温超伝導に代表される強相関電子系の物性を統一的に解析する、汎用的な電子状態計算手法 **Multi-scale Ab initio scheme for Correlated Electrons (MACE)** の開発・改良を行った。実際の場合で本手法を適用し、特に、新たに発見された鉄超伝導体群で電子相関が重要な働きを果たしていることを第一原理から定量的に見出したことや、磁気秩序の大きさを第一原理模型で定量的に再現させたことは、特筆すべき成果と言える。

### この分野の今後の研究発展への期待や科学技術イノベーション創出への展望について

今後、研究の発展と科学技術イノベーション創出が特に期待される研究分野を以下に示す。

#### (1) 創薬（北尾チーム、三上チーム）

北尾彰朗研究代表の「バイオ分子間相互作用形態の階層的モデリング」は、今後の研究発展への期待や科学技術イノベーション創出への展望が大きいものとして、特筆したい。

本研究は、タンパク質-タンパク質、あるいはタンパク質-低分子化合物の立体構造予測、さらに、それら相互の作用形態モデリングを高精度にかつ効率よく行うための一連の手法開発と、その創薬への応用を目指すものであり、分子動力学のほぼ限界までつきつめた方法論をつくり上げた。一連の手法を一通り完成させ、がん抑制因子などをターゲットにして、相互作用の予測とモデルの精度検証および実験検証までも行った。

プロジェクトに対して最も大きく評価する点は、創薬の研究において創薬開発に直結する可能性がある具体的な成果（p53、インフルエンザRNAポリメラーゼ、化学シャペロン、動的アロステリック等）を出していることであり、これは特筆に値するところである。このプロジェクトは、現実の社会が直面しているガンやインフルエンザ等の基本的な病からの解放を目指しているという意味で、頼もしい研究である。

この世代の研究者が **CREST** の枠組みで切磋琢磨し国際的研究成果を挙げたことは、我が国の将来の科学技術の発展に繋がるように思われ、大いに期待が持てる。

三上益弘研究代表の「**DDSシミュレータの研究開発**」は、**DDS**が今後、医学・生理学での検証を経て、薬効の向上・副作用の軽減をもたらす、実情に則した医療技術として確立すると考えられており、その医学的期待は極めて大きく、今後の研究発展への期待や科学技術イノベーション創出への展望が大きいものとして、特筆したい。

研究対象は他にほとんど例がない未開拓の分野で、かつ研究の内容や目標が極めて高いレベルであったが故に、成果ということでは、大きなものが得られたとはいえなかつ

たが、ここで開発した分子レベルシミュレーションから流体解析に至る方法論は、今後のDDSデザインだけでなく、他の同種の創薬開発の可能性を示すものと期待が持てる。

本CREST終了後も、「京」コンピュータで、インフルエンザHA3量体-シアロ糖脂質複合体モデル計算で、HA阻害剤の計算分子設計に向けて十分な高速計算が可能なことを確認したとのことで、今後の楽しみである。

## (2) 地球温暖化（羽角チーム、山中チーム）

地球温暖化に伴う気候の中・長期変動や大規模変動において重要となる、海洋の中・深層循環をターゲットとした①羽角博康研究代表の「海洋循環のスケール間相互作用と大規模変動」および、地球温暖化などに伴う気候変動による水産資源への影響評価のために、気候モデルから水産資源モデルまでを統合したモデリングを実施した②山中康裕研究代表の「海洋生態系将来予測のための海洋環境シミュレーション研究」の2件を、地球温暖化問題という社会的に与えるインパクトが大きな課題であることから、今後の研究発展への期待や科学技術イノベーション創出への展望が大きいものとして、特筆したい。

①では、海洋の中・深層水の形成・変質・輸送過程に関して、微小プロセスから全球大循環までの様々なスケールごとのシミュレーションとそれらの相互作用のシミュレーションを行い、中・深層循環をコントロールする物理的メカニズムを明らかにした。その理解に基づき、様々な気候変動がもたらす海洋の大規模変動や、それが沿岸海況等の局所的現象に及ぼす影響を評価するための、効果的かつ効率的なモデリング手法を確立し、さらに、新たに得られた観測データに、開発したシミュレーションシステムを適用して、その有効性を示すなど、国際的にも存在感を示す成果を出すことができた。

北極域研究プロジェクトおよび東北マリンサイエンス拠点への参加が予定されており、今後の活躍が大いに期待される。

②では、人間活動に伴い放出されたCO<sub>2</sub>が、大気中CO<sub>2</sub>濃度を上昇させ地球温暖化を引き起こすとともに、海洋によって吸収され海洋酸性化を引き起こし、海洋生態系などに影響を与えると予想されているが、この地球温暖化や海洋酸性化による海洋生態系や水産資源への影響などの将来予測のために、その基盤技術となる海洋科学の各分野でのモデルを統合した海洋環境シミュレーション技術を開発した。将来の食糧問題を考えるとき、我々の生活に直結した、社会的に与えるインパクトの大きな研究であった。

基本微分方程式に支配されたシミュレーション科学ではなく、生態という普遍法則をもたない要素の集団運動に基づくシミュレーションを対象としているという意味で、今後のシミュレーション研究に新しい風を吹かせる取り組みとして将来が楽しみである。

海洋生態系モデル開発で世界をリードしている日英米仏4グループによる海洋生態

系モデル相互比較研究計画 (MAREMIP) を主体的に立ち上げ、IGBPコアプロジェクトAIMESの公式プロジェクトとして採用される等、国際的にも認められたことにより、活躍が大いに期待される。

なお、②の研究では、①の研究成果である海洋データを入手するなど、羽角チームと山中チームのネットワークの良さが見られた。これは、両研究代表者のリーダーシップの賜物と考えられる。今後の研究においても、緊密なコラボレーションに期待する。

### (3) 安全・安心・防災関連

この分野は、(1) の地球温暖化と並んで、特に社会的関心が高い分野であり、その意味でも研究発展が期待されている。

この分野で、今後の研究発展が期待される課題研究チームとしては、特筆すべき研究成果で示した、松浦チーム、吉村チーム、佐藤チームに加えて、高橋桂子研究代表の「災害予測シミュレーションの高度化」が挙げられる。

高橋チームの研究では、適応型動的メッシュ (AMR) による大気・海洋結合モデルや、放射も考慮にいれた都市型気象予測モデルが入った、気象・防災への貢献に関し十分な機能を有する全球スケールから都市スケールまでを単一のモデルでシミュレーションが可能なMSSGコードを開発しており、「京」コンピュータのようなペタフロップス級の高性能コンピュータ上で実行することにより、今後十分な成果が見込まれる。

### (4) 「京」コンピュータからエクサコンピュータへの展開

「京」コンピュータが実用段階に至った現在、グランドチャレンジアプリケーションおよびHPCI戦略プログラムで採用された本領域のソフトウェアは、21研究課題中14研究課題にも達しており、使用経験を含めると18研究課題と、殆どの研究課題が何らかの関与をしている。これらのソフトウェアの多くは、2020年完成が計画されている、「京」コンピュータの100倍速いと言われている次世代のエクサコンピュータでの活用を目指して、さらなる発展を遂げていくことが期待される。

このような研究チームとしては、特筆すべき研究成果等で挙げた研究課題に加えて、以下が挙げられる。

生体系の階層的量子化学計算法研究に関しては、高田俊和研究代表の「QM(MRSCI+DFT)/MM法による生体電子伝達メカニズムの理論的研究」と、天能精一郎研究代表の「生体系の高精度計算に適した階層的量子化学計算システムの構築」が挙げられる。高田チームのソフトウェアは、ライフ分野のグランドチャレンジで開発・整備されたPlatypus-QM (量子化学計算)、Platypus-QM/MM (量子化学計算/分子動力学連成計算) プログラムのコンポーネントとして採用されており、天能チームのソフトウェアは、HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」で重点課題「電子状態・動力学・熱揺ら

ぎの融和と分子理論の新展開」を展開している。

微視的化学反应を粗視化するパラメータの発見を統計的手法の開発に求めようとする研究に関しては、長岡正隆研究代表の「凝集反応系マルチスケールシミュレーションの研究開発」の成果が HPCI 戦略分野 2 「新物質・エネルギー創成」で使用されている。

町田昌彦研究代表の「超伝導新奇応用のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションの基盤構築」では、研究成果である量子問題解析用行列対角化ソルバーと、超並列密度行列繰り込み群コードが、「京」コンピュータ上で高速動作するように改良され、前者が HPCI 戦略プログラム分野 2 の各コード (RSDFT、PHASE、VQMC) のソルバーに、後者が HPCI 戦略プログラム分野 2 のコード (dex-DMRG) として登録され、研究に利用されている。

臼井英之研究代表の「惑星間航行システム開発に向けたマルチスケール粒子シミュレーション」では、研究成果である適合格子細分化法を導入したマルチスケール粒子シミュレーションコード (PARMER) につき、計算科学研究機構 (AICS) との共同研究で、「京速コンピュータ「京」システムにおけるプラズマ粒子シミュレーションコード Parmer の性能評価と高性能化」という研究題目で PARMER の単体性能評価およびスレッド並列性能向上に取り組んでいる。

## 8. 総合所見

### 研究領域のマネジメントについて（課題選考、領域運営）

課題選考では、まず、専門分野毎に領域アドバイザーによる書類審査を行い、次に、この審査結果を持ち寄って、総括とアドバイザー全員での討議会により、採択予定数の 2 倍程度の数の面接審査対象研究課題を選定し、最後に、総括とアドバイザー全員での審査会により、採択課題候補を決定した。場合によっては、補欠候補を選定することもあった。その後、審査会の中で、採択課題候補の研究代表者から提出されている全期間に渡る研究費の要求額の内容につき、総括とアドバイザーがその必要性を協議して研究費の配分を決定した。この研究費の配分を採択課題候補の研究代表者に伝え、書類で確認が得られた場合、採択課題に決定した。

本領域は、これまでの多くの研究領域と比して、提案される分野が極めて広範にわたる分野横断型の領域であるために、異なる分野の研究に対して厳密に序列をつけることに困難を極めた。審査に当たっては、研究の成果がそれぞれの専門領域において世界をリードするものでなければならないことは当然であるが、この種の研究タイプでは、研究代表者の役割や責任が大きいことを考え、当該分野における研究代表者の力量や実績をできるだけ把握して判断材料に加えることにした。一方、本研究領域の趣旨からかけ離れた提案、すでに開発が済んでいる要素技術を単に複合化する提案、提案それ自体は先進的であっても実現可能性が低いと思われるような提案は不採択とした。



領域運営では、本研究領域の第3年度と第4年度（平成19年度と20年度）に、ペタフロップス超に適合したコンピュータソフトウェアの開発を進めることが重要な課題と考え、6研究課題を選択して、コンピュータソフトウェアの研究開発をスタートさせた。

また、成果の社会への普及、社会との共有を目的として、国際シンポジウムを含む公開シンポジウムの開催を各研究チームに強く促した。

本研究領域全体としても、領域活動の内外社会との共有のために、21の全研究課題が決定した直後の第3年度（2007年）に、全研究課題に関する国際会議で紹介を行って本研究領域の活動を世間に広く知らしめ、第5年度（2009年）には、気象災害、地球温暖化、地震災害などに関係する研究3課題を選んで安全・安心のテーマで国際シンポジウムを開催して、この方面のシミュレーション研究の役割と成果を一般社会と共有するように努めた。さらに、最後の2年間には本CREST研究の終了に際してのまとめとして、第7年度（2011年）に第1回 大規模計算科学国際シンポジウム（マクロ問題対象）を、第8年度（2012年）に第2回 大規模計算科学国際シンポジウム（ミクロ問題対象）を開催して、本CREST研究の成果と関連する分野の海外研究者の招待講演を含めて、計算科学の研究動向を世間に広く知らしめるように努めた。

### 研究領域としての成果

科学技術の進歩に貢献する成果としては、大きな国家プロジェクトに成長した、理化学研究所のペタフロップス超級の次世代のスーパーコンピュータ「京」の開発に関して、コンピュータソフトウェアの開発を通して大きな推進役になり、本領域の進展が多大な影響を与えてきたことである。

具体的には、次世代のスーパーコンピュータの仕様を決定するために2007年に選ばれた21本のターゲット・アプリケーションの内、5本が本研究領域の研究チーム（羽角、三上、佐藤、押山、松浦の各チーム）からのコンピュータソフトウェアであったことも、このことを物語っていると言えよう。また、ペタフロップス超に適合する可能性があると考えられるコンピュータソフトウェアを、理化学研究所とコラボレーションを図りながらチューニングを進めたが、このことも本日にいたる「京」の成功に極めて良い影響を与えたと考えている。さらに、「京」コンピュータが実用段階に至った現在、グランドチャレンジアプリケーションおよびHPCI戦略プログラムで採用された本領域のソフトウェアは、21研究課題中14研究課題にも達しており、使用経験を含めると18研究課題と、殆どの研究課題が何らかの関与をしている事実を見ても、このことは明らかだと言えよう。

具体的応用に繋がった成果としては、3.11東日本大震災関連への応用に繋がった「観測・計算を融合した階層連結地震・津波災害予測システム（研究代表者：松浦充宏）」

と「原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション（研究代表者：吉村忍）」が挙げられる。前者では、古村孝志グループ代表が新たに開発したナビエ・ストークス方程式の直接解法による津波計算コードが、東日本大震災以降、その実力を遺憾なく発揮し、NHKをはじめとして多くの民法各局のテレビ報道でその解析結果が放映され計算機シミュレーション科学の有用性を世に知らしめた。後者では、社会的関心が高い東日本大震災時の福島第一原子力発電所の地震応答解析に関しては、HPCI 戦略分野4の中で「京」コンピュータでの解析を行える見通しが立ったと聞いており、今後に期待したい。

科学技術イノベーションに資する成果としては、「ナノバイオ系のシミュレーションとダイナミクス（研究代表者：平尾公彦）」の密度汎関数法のオーダーNの達成、並びに歴史上はじめて軌道エネルギーの定量的再現を実現した成果、「大規模系への超高精度O(N)演算法とナノ・バイオ材料設計（研究代表者：青木百合子）」の日本発の量子化学計算方法論であるElongation法の三次元化およびオーダーNの達成、「ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析（研究代表者：尾形修司）」と「ソフトマターの多階層/相互接続シミュレーション（研究代表者：山本量一）」のマイクロ・マクロ連成解析、「超精密予測と巨大分子設計を実現する革新的量子化学と計算科学基盤技術の構築（研究代表者：中辻博）」のSchrödinger方程式の解法に関する世界初の全く新しい方法論、「複雑分子系の複合分子理論シミュレーション（研究代表者：諸熊奎治）」の世界的に高く評価される極めて優れた量子科学の成果、「全球雲解像大気モデルの熱帯気象予測への実利用化に関する研究（研究代表者：佐藤正樹）」のマッデン・ジュリアン振動を世界で初めてシミュレートできたこと、「計算量子科学によるナノアーキテクチャ構築（研究代表者：押山淳）」の並列計算に適した実空間電子密度汎関数法開発の開発、「高精度多体多階層物質シミュレーション（研究代表者：今田正俊）」の3段階法による、従来の密度汎関数法では解けなかった強相関電子系のシミュレーションの成功が挙げられる。

### 科学技術イノベーション創出への展望

今後への期待や展望についてであるが、理化学研究所がHP上で「次世代スーパーコンピュータを最大限に利活用するためのソフトウェア（ライフサイエンス分野およびナノテクノロジー分野のグランドチャレンジアプリケーション）を開発し、普及させることは、次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトの目標の一つです。」と言っているように、本研究領域で研究・開発されたコンピュータソフトウェアおよびその理論と技術は、今後益々、重要度を増していくものと期待しており、また、その可能性は大きいと見ているが、その社会への普及展開が今後の大きな課題となろう。そのための仕組みを、研究者に任せるだけでは不十分であることは過去の経験からわかっており、国レベ

ルとしても何らかのサポート体制構築を考えるべきと思う。

科学技術イノベーション創出が期待できる具体的なテーマとしては、創薬、地球温暖化、安全・安心・防災関連、「京」コンピュータからエクサコンピュータへの展開などが挙げられる。

### 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

本 CREST 領域が、スーパーコンピュータ「京」の開発に先んじてタイミングよく活動を開始し、「京」の開発の機運を応用ソフトウェアの面から後押ししてきた。また、結果として「京」のこれまでの成功を導いた。さらに、2020 年を目標に「京」の後継機としてのエクサコンピュータが開発されようとしており、これも本 CREST 領域が育ててきた応用ソフトウェア群の成功が深く関係している。このように、本研究領域を設定した意義は、我が国の計算科学技術のために極めて大であり、研究開始以前よりも現時点の方がより大きくなっていると思われる。

科学技術に対する貢献としては、本領域のもとに採択された 21 課題が切磋琢磨したことにより、世界一となる多くの成果を得ることができた。その証拠として、ゴードンベル賞受賞、サイエンスへの掲載、新聞や放送での報道などがあった。また、「京」コンピュータのソフトウェアの多くを、本領域の採択課題で開発したソフトウェアで占めることができたことも証拠として挙げられる。

我が国は「ソフトウェアが遅れている」という話を良く聞くが、決してそのようなことはない。計算科学分野で、我が国で開発されたソフトウェアが国際的に流通していないということである。問題点は、折角このようなソフトウェアが開発されているにも関わらず、(1) 開発後のソフトウェアの維持・保守・改善の仕組み、体制がないこと（作りっぱなし）、(2) ソフトウェアを普及させる仕組みがないこと、(3) プリ・ポストを含む周辺ソフトウェアが整備されないこと、(4) ユーザに対する支援体制が無いこと等であると思う。以前からもこのようなことがずっと言われているが、一向に進んでいないように見える。今後の大きな課題である。

### 今後への期待や展望

このプロジェクトに参加した方々には、これからも、これらのソフトウェアを維持発展させ、アプリによる研究成果を継続的に出すことにより、社会へ貢献していくことを望むものである。

コンピュータ性能の高度化にともない計算科学の分野に携わっている研究者数は増大し続けている。本 CREST 領域はここで終了するので、この分野の研究を対象とした新しい CREST 領域が開始されることを望む。

## 感想、その他

8年間の長期にわたる研究の遂行は、アドバイザー各位の幅広い知識や経験、また、自由闊達な意見なくして成り立たなかったと思っており、研究総括として大変有り難く感謝している次第である。JST本部の本領域主担当の渡辺信彦氏、永井智哉氏、吉岡寛二氏、丹治彰氏には事務的な面で多大なサポートと臨機応変の処置を受けることができた。総括とアドバイザー間、並びに、研究代表者間の技術的な面での調整を本領域参事の中川雅俊氏に担当していただいた。また、現在大きな関心を呼んでいるスーパーコンピュータ「京」の開発に先んじて、平成17年度に本研究領域を発足させたことは、文部科学省とJSTの関係者に先見の明があったからだと感じている。これらの方々に心より感謝する。

課題選考では、専門分野が量子化学から地球物理までと多岐に渡っており、困難を感じなくはなかったが、7年半が経過した現時点になってみると、「地球・環境」、「マクロ・情報・工学」、「ナノレベル材料科学」、「ナノレベル生体科学」、の4分野にバランスよく選考されたように思われる。これはアドバイザー各位の洞察力と選眼力に負うところが大きかった。

領域運営では、本研究領域の第3年度と第4年度（平成19年度と20年度）に、ペタフロップス超に適合したコンピュータソフトウェアの開発を進めることが重要と考え、21課題の中から6課題を選択して、コンピュータソフトウェアのチューニング活動をスタートさせたことは、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」の能力発揮を促進するために、誠に時宜を得た判断であったと考えている。

以 上