

中間評価指摘事項への対応状況一覧

平成27年3月10日資料

HPCI戦略プログラム 中間評価指摘事項への対応状況(HPCI戦略プログラム推進委員会)

参考資料4

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)
(2) 各観点の再評価と今後の研究開発の方向性		
<p>【必要性】 統括責任者等の更なるリーダーシップの下に、分野内の連携はもちろんのこと、必要に応じて分野を越えた連携や他の研究開発プロジェクトの活用も図りながら、本質的に新しい現象の解明や真に革新的な技術開発等を通じて、戦略目標の達成や社会的・科学的課題の解決に資する、「京」や本プログラムならではの成果を創出していく必要がある。その際、「京」でなければ成し得ない成果はどの部分か、どこまで超並列化を進めるとどの様な成果が期待できるのか、という視点をこれまで以上に強く意識する必要がある。</p>	<p>・戦略プログラム全体ならびに各分野において以下の取組を進め、分野内連携、分野を越えた連携、他の研究開発プロジェクトの活用、「京」や本プログラムならではの成果を創出する取組を進める。</p> <p>【戦略プログラムとしての取組】</p> <ul style="list-style-type: none"> 重点課題追加配分枠や加速枠の選定において、従来以上にメリハリをつけた課題選定や資源配分を行う。 実験系研究者との連携を含め、他の研究開発プロジェクトとの連携強化を促す取組を進める。 <p>【分野1】多様な動作原理、多階層のシミュレータを連成し、臓器、全身レベルのシミュレーションを実現することで、医療応用につなげるなど、各課題において階層を越える試みを進める。</p> <p>【分野2】物性課題と分子課題の融合による電子機能予測に関する研究の推進等、物質・エネルギー関連課題を加速、推進する。</p>	<p>【戦略プログラムとしての取組】</p> <ul style="list-style-type: none"> 戦略プログラム全体としては、「京」や本プログラムならではの成果を創出できる課題に追加資源を配分できるように、H26年度加速枠選定の申請条件及び選定基準の見直しを行った。具体的には、申請条件として「京」の利用実績(申請時点の消費率35%以上:当初配分を使い切る見込みとなる目安)を追加しつつ、選定基準として直接的な成果(アウトプット)だけではなく、波及効果(産業競争力強化、経済や社会への波及効果、科学技術のプレゼンス向上等のアウトカム)が期待できるかどうかについても評価の観点に加えた。 また、H27年度については、戦略プログラムの事業最終年度であることから、戦略プログラム利用枠の全てを分野配分枠(各分野の裁量で資源を配分)に設定し、各分野・各課題の最終目標達成に向けて各分野の裁量分を多くするとともに、追加配分の申請に係る研究者の負担を削減した。 他の研究開発プロジェクトとの連携強化を促すため、他の研究開発プロジェクトにおいて戦略プログラムの計算資源を利用することを可能とした。 各分野の取組状況は以下のとおり。 <p>【分野1】生命科学における最大の課題は、生命現象における階層を越えた理解、予測、操作であり、「京」レベルの大規模な計算資源を要求する。課題2の創薬と課題4のデータ解析は、分子レベルから疾病などの巨視的現象を扱おうとするものであるが、そのほかの課題でも以下の取組を行っている。</p> <p>(課題1) 細胞内混雑: マイコプラズマを模した1億原子系でのシミュレーションで原子レベルから細胞レベルへの接続を試みている。 クロマチン: マルチスケールモデルを用いて、全原子シミュレーションでヌクレオソームを、粗視化モデルで多数ヌクレオソームを扱い、構造と転写因子との相互作用のシミュレーションを行い、原子モデルをクロマチンの高次構造レベルに接続している。 (課題3) 心臓: 分子レベルのモデルに基づいた心臓シミュレーターにおいて、サルコメア動力学モデルの高度化、線維構造のリモデリング機構の組み込みなどによりさらなる精緻化を行っている。 脳神経-筋骨格: 脳から筋骨格、全身を接続したモデルが完成し、パーキンソン病の解明に向けた統合シミュレーションに取り掛かっている。</p> <p>【分野2】 (物性課題と分子課題の融合による課題の推進) 課題3(押山)に特別支援課題(信定)を統合して課題融合によりノウハウを共有し、2万~3万電子系規模について、実効効率10-11%(参考:理論限界値14-15%)の実時間・実空間光励起電子ダイナミクスを計算可能にした。これにより、触媒効果等が期待される4-メルカプトピリジンSERSスペクトルの銅電極表面上の電極電位依存性計算が可能となり、電圧印加環境下での光応答や機能制御の可能性を示した。 (量子化学計算連携による新たな取組の推進) 課題2(天能)と課題4(岡崎)とで計算手法連携を図り、光合成複合体の構造と電子状態に関する研究を推進。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)
	<p>【分野3】気象気候分野については、雲のモデル化が共通テーマであり、それに関する連携をすでに進めているが、さらに強化する。地震津波分野では、各課題が連携して「統合地震シミュレーション」の開発を進める。</p> <p>【分野4】多目的設計探査の課題については、先進的な設計最適化の手法であることとその応用範囲が極めて広いことから、他の課題と連携した取組を実施することにより、より効果的に適用事例を増やすことを検討する。</p> <p>【分野5】素粒子・原子核・宇宙の融合研究(QCDからハドロン相互作用、ハドロン相互作用から原子核の性質・核物質状態方程式、原子核の性質・核物質状態方程式から超新星爆発・元素合成)を実現するための土台となる実証研究の完成を優先させるよう、統括責任者がリーダーシップを発揮するよう努力するとともに、課題間連携については、研究会等を充実し、共同研究や相互の計算結果データの利用促進を図る。</p>	<p>【分野3】 (分野内の連携) 「地球規模の気候」課題の研究者が「メソスケール気象」課題の研究会に参加して、発表・議論を行うとともに、2014年9月国際非静力学ワークショップ等の機会を通じて、連携の可能性を探った。 地震・津波・都市災害の課題では、各課題が連携して「統合地震シミュレーション」の開発を進めている。2014年8月には分野3全体の成果報告会を開催し、連携を促進した。今後も継続して課題間や分野全体としての連携を図る。 (分野を越えた連携) 分野4との連携は、定期的に会合を設け議論を進めている。 (他の研究開発プロジェクトの活用) 上記のプロジェクトなどに加え、ポスト「京」重点課題とも連携を図る。 (「京」ならではの成果) 上述の成果のほか、「台風発生2週間予測が実現可能であることを実証」、「高解像度大気海洋結合モデルにより台風強度の予測精度が大きく向上することを実証」といった「京」ならではの成果を創出した。</p> <p>【分野4】 (課題4と課題1との連携) 高迎角時の翼周り流れのプラズマアクチュエータによる制御方法に関する設計探査を実施。有益な知見を得ること成功し、日本機械学会第11回最適化シンポジウム、アメリカ航空宇宙学会国際会議Scitechなどで成果を発表済み。(現在ジャーナル論文を準備中。) (課題4と課題3との連携) 自動車タイヤのフィン形状の空力多目的設計探査を実施中である。2015年度中に成果をあげ、横浜ゴムからプレスリリースを出すことが目標。</p> <p>【分野5】今年度は、「京」の計算資源の重点課題2課題(課題1・2)に対し、進捗の加速を支援し、「京」の追加資源の獲得を後押しした結果として、審査の結果、研究開発課題2に今年度880万ノード時間が追加配分された。また、全体予算から東大FX10の計算機利用料を付与して、研究の加速を図った。 また、体制構築で研究会やレクチャーを通じて、重点的取組として課題間連携を行っている。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)
<p>得られた成果の情報発信については、社会に分かりやすく伝えることはもちろんのこと、時には社会の期待や研究者の士気を高めるための大きな目標を示しながら、「京」や本プログラムが社会の「役に立つ」、「役に立った」という国民の実感が得られるようにしていく必要がある。その際、特に、国民の生命・健康や安全・安心に直結する分野については、反動を生みかねない過剰な期待を防ぐため、現在「京」を用いて到達可能な成果とその限界も正確に社会に伝える必要がある。</p>	<p>・各分野において以下の取組等を進めるとともに、戦略プログラム全体としても、最終年度に成果報告会を開催し、その際は指摘事項を踏まえた内容とする。</p> <p>【分野1】課題間を超えた問題解決を図るべく、少人数の関係者による議論をする場を設け、対話を重ねることで、新たな研究方向を探り、解決すべき問題点を明らかにする活動を進める。また、医療及び創薬における現場との連携を密に進めているが、現場の意見を踏まえつつ、慎重かつ適切な情報発信に努める。</p> <p>【分野2】研究成果を社会に理解してもらうためにどうすれば良いかを検討する、見える化シンポジウムを今後も開催し、専門家を交えて議論する。</p> <p>【分野3】研究活動と広報活動のバランスに配慮するとともに、成果発表については等身大の発表を心がける。</p> <p>【分野4】分野4の最新情報をタイムリーに分かりやすく広報する仕組み(アウトリーチ専用サイト:計算工学ナビ)を構築済みであり、今後は、PR効果の高い情報(「京」による先端的事例を含む具体的解析事例、ベンチマーク結果等)の蓄積を継続的に実施し発信して行く。</p> <p>【分野5】これまで、ホームページ上に若手研究者の研究を特集する「月刊JICFuS」や「月刊JICFuSムービー」を掲載してきたが、今後は戦略課題の「京」による成果を動画つきで掲載するなど、充実を図る。</p>	<p>・最終年度に各分野個別の成果報告会(一部、分野共通の統一企画を検討中)を実施するとともに、5分野合同の成果報告会を開催予定(詳細検討中。別紙を参照)。</p> <p>・各分野の取組状況は以下のとおり。</p> <p>【分野1】課題間を超えた問題解決を図るべく、少人数の関係者による議論をする場を設定し、以下の議論を行った。 課題1-課題3:神経細胞シミュレーション(一分子粒度シミュレーションと脳神経系シミュレーション) 課題1-課題4:脂肪細胞の褐色化(一分子粒度シミュレーションとネットワーク解析) 課題2-課題4:エビゲノム創薬(自由エネルギー計算と網羅的エビゲノム解析) 特に、課題1と課題3の連携によるサルコメアの分子レベルモデルの構築とその心臓シミュレータへの応用では、心臓の拍動時のATP消費をより正確に見積もるためのモデル構築を行うなど、一定の成果を挙げるに至った。</p> <p>また、広報活動については、研究活動を進めている研究者(含む医療従事者)や製薬企業の研究者等の意見を踏まえつつ進めている。特に、基礎研究の成果から医療現場や創薬現場での利活用に至る道は長く、各現場からの意見を十分に踏まえることが必須と考えている。</p> <p>【分野2】見える化シンポジウムを開催し、広報の専門家を交え、最先端の技術を社会にどのように伝えていくかを検討。引き続き正確かつ分かりやすい成果発信を心がける。(見える化シンポジウム等での専門家の主な意見) ・受け取る側の気持ちを考えて伝える ・正しくデフォルメする ・感情に訴えて情報を受け入れるきっかけを作る ・伝えるメディアの深化を把握し、ターゲットに合わせた戦略を練る</p> <p>【分野3】 (安全・安心に直結する分野での過剰な期待) 成果報告会、プレスリリース等では、等身大の発表を心がけ、国民に過剰な期待を抱かせないように配慮している。この後もこの点に注意して、成果の発信を行う。 (研究活動と広報活動の両立) 引き続き、研究者の過度の負担にならないよう、引き続き、研究者の研究活動と広報活動のバランスに配慮しながら成果発信に取り組む。</p> <p>【分野4】解析結果については、すでに「京」を中核とするHPCI利用成果をわかりやすく解説した事例約200件をDB化し、順次アウトリーチサイトに発信している。今までに、5000人程度のアクセス数があり、社会から大きな関心が寄せられている。</p> <p>また、広報活動については、上記以外に、比較的一般向けのシンポジウムと、技術分野別に分類した専門家向けワークショップの両方を開催するなど、研究者自らが社会の多様なレベルに対して理解が得られるように配慮した取り組みを実施している。</p> <p>【分野5】今年度、若手研究者の研究を特集するウェブマガジン「月刊JICFuS」を5本制作。うちホームページ上に3本を掲載(2/25時点)。動画「月刊JICFuSムービー」を2本制作。うち1本を掲載した(2/25時点)。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)
<p>【有効性】「京」を用いて予測された結果、あるいは、理解された結果を実証するため、実験系研究者との連携を図りつつ、結果の検証作業も強化していく必要がある。</p>	<p>・分野別作業部会においても同旨の指摘がなされている分野1及び分野2を中心として、以下のような実験系研究者との連携を進めるとともに、各分野において、他の研究開発プロジェクトを活用するなどして、指摘を踏まえた取組を進める。</p> <p>【分野1】血栓シミュレーションでは実験情報を取り込む体制を課題内に作ることや、パーキンソン病シミュレーションでは臨床データを取り込む体制を作るなど、医療応用を目指して実験系研究者との連携を図る。</p> <p>【分野2】元素戦略PJの各拠点に多くの計算物質科学研究者が参加し、実験系研究者と連携しながら課題を進めている。今後も引き続き連携を図り、実証研究を進める。</p>	<p>・分野別作業部会においても同旨の指摘がなされている分野1と分野2の取組状況、及び他の分野の取組状況は以下のとおり。</p> <p>【分野1】実験、臨床研究者との連携が、プロジェクトの体制として定着し、以下のような成果が出てきている。 課題1: クロマチン・ヌクレオソーム研究における連携、細胞内混雑、信号伝達におけるNMR、一分子計測等での連携などで着実に成果をあげている。 課題2: 製薬企業との密接な連携により、数例について前臨床試験に進むことができた。 課題3: 心臓シミュレーションでは先天性心疾患外科手術のシミュレーション解析、拡張型心筋症に対する新たな治療法の解析など着実に成果を重ねている。脳神経-筋骨格連成系では、臨床研究による患者の観測データの再現を目指している。 課題4: がん研究での臨床からのがんゲノムデータによる連携、脂肪細胞研究での実験家との連携によって、新たなメカニズムを解明するなどの成果が得られている。</p> <p>【分野2】引き続き、元素戦略PJ等での実験系研究者との連携を通じて、結果の検証作業を強化するとともに、大規模研究施設連携として計算科学勉強会等も開催し、実験・計算連携のコンサルができる場を設定している。</p> <p>【分野3】運営委員会に、気象庁数値予報課長、田中淳センター長(東京大学大学院情報学環 総合防災情報研究センター)に参画してもらい、本プロジェクトを通じて得られた成果を防災・減災にどう役立てていくかの議論を深めている。</p> <p>【分野4】各課題で利用しているソフトウェアごとに、産業界と連携して信頼のおける実験結果の取得と精度の検証を行っている。また、大規模データのポスト処理ソフトウェアについては、理研AICSの可視化チームと連携した取り組みを実施し、その機能をHPC/PFに実装した。すでに、HPC/PFハンズオンセミナーを通して産業界ユーザーの高い評価を得ている。高精度なHPC対応アプリと大規模データポスト処理ソフトウェアの連携が進んでおり、「次世代ものづくり」を支えるスピーディーで完成度の高い設計を可能にするシステムの装備が整いつつある。</p> <p>【分野5】 課題1: 原子核の多体理論を専門とするヨーロッパの研究者チームと、格子QCDによる第一原理核力・ハイペロン力を用いた原子核の構造計算の共同研究を開始した。 課題2: 理研RIBF加速器を始めとして世界各地で得られた新しいデータの解析や研究方針の策定にさらに深く関与し、共同の論文も出版された。 課題3: 属する研究者の多くは、日本の重力波検出計画KAGRAIに参画し、重力波の理論波形の提供、重力波源に対する電磁波対応天体の予言、およびデータ解析研究を通じて側面支援を行っている。 課題4: ダークマターシミュレーションについて、理論および観測研究で利用するためのハローカタログを整備し、公開の用意をしている。</p>
<p>研究開発及び計算科学技術推進体制は共に、分野全体から見た位置付け、社会的・科学的要請、科学技術動向、国内の計算資源、海外との比較優位性等を意識し、プロジェクト後半における成果の取りまとめに向けて、マイルストーン目標の設定を含めた進捗管理をこれまで以上にやっていく必要がある。</p>	<p>・分野別作業部会の開催頻度(現状、年一回程度)を増やすとともに、分野別作業部会や戦略プログラム推進委員会において、指摘事項の観点からのフォローアップを行う。</p>	<p>・分野別作業部会の開催頻度を増やすことにより、実施者側の負担が増すことを避けるため、分野別作業部会の開催頻度を増やすことはせずに、分野マネージャ等が分野の運営委員会等に出席し進捗状況の確認を行った。また、分野別作業部会(H27年2月)、戦略プログラム推進委員会(H27年3月)において、中間評価指摘事項に対する対応のフォローアップを実施。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)
<p>本プログラムに参画する研究者等の育成に関しては、プロジェクト後半に入る中で、統括責任者等は、本プログラムを通じた研究者等のキャリアアップをこれまで以上に意識していく必要があり、特に、本プログラムで雇用している研究者等のその後のキャリアパスを明確化していく必要がある。</p>	<p>・今後、分野別作業部会や戦略プログラム推進委員会において、フォローアップを行う。</p>	<p>・セミナーや広報誌等での若手研究者の登用や、若手主導での分野間交流、分野内での若手研究者のキャリアパスについての意見交換等を通じて、優れた研究者を積極的に押し上げる取組を行っている。また、アカデミアだけではなく、共同研究を実施している企業等もキャリアパスの候補として、人材交流を促進している。</p> <p>・後継プロジェクト(ポスト「京」重点課題)においても、同様の指摘を受け、実施機関にて具体的な計画を検討しているところであり、本プロジェクト終了後についても引き続き検討・対応を行っていく。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)
<p>【効率性】大学・研究機関のスーパーコンピュータ、さらには民間のクラウドサービス等のコンピュータの性能が向上していることも認識し、「京」や本プログラムならではのインパクトのある成果を迅速に創出する観点に立って、本プログラムに割り当てられた「京」の計算資源をこれまで以上に重点的に配分するとともに、「京」以外の計算資源の更なる有効活用を図る必要がある。</p>	<p>・各分野において以下の取組等を進めるとともに、戦略プログラム全体としても、重点課題追加配分枠や加速枠の選定において、従来以上にメリハリをつけることにより、指摘事項を踏まえた資源配分を行う。</p> <p>・平成27年度の戦プロ利用枠の配分設定の見直しについても検討する。</p> <p>【分野1】これまで、課題内のサブテーマの整理、集約化を行い、研究内容の集中化を図ってきた。今後も、計算法としては十分に実績があり、目的としての研究対象としてはチャレンジングなものに取り組む方針で研究を進める。「京」の計算資源については、年度途中で柔軟に再配分できるようにするために、当初配分を調整した。また、「京」を必ずしも使う必要のない準備計算等に関しては、積極的に他の計算資源を活用するため、HPCI資源への応募を積極的に行う。</p> <p>【分野2】研究内容の進捗等を考慮し、毎年度、課題の見直しを実施しており、これまでも、エネルギー研究における電池課題を統合した取組を行っているが、今後、物性課題と分子課題の融合による研究推進、量子科学計算連携も実施していく。また、計算資源については、戦略課題内で優先順位をつけるとともに、分野内で提供している計算資源を含めた計算リソースの効果的活用を強化する。</p> <p>【分野3】これまでの利用実績や計画の進捗状況を考慮し、提供される計算資源を最大限活用できるように配分を決める。分野3の研究者は、地球シミュレータをはじめ、他の大学等の大型計算機も積極的に利用しており、今後も積極的な活用を行う。</p> <p>【分野4】各課題の準備状況や今までの解析の実績、更に今後の計画を踏まえて、計算機資源のより効果的な利用法について抜本的な見直しをしており、その結果をH26年度からの計画に反映させる。各課題は独自の技術課題を有しており、基本的な研究開発体制そのものは維持するが、課題間のより効率的・効果的な連携(例えば課題4と課題1、課題3)については今後一層積極的に進める。</p> <p>【分野5】運営委員会や課題報告会等によりプロジェクト進捗状況の把握を行い、上期・下期の途中での「京」の計算資源配分見直しや、分野として借用している基盤センター等の計算資源の追加配分を行い、計算資源の重点化と進捗による優先化を図る。</p>	<p>・戦略プログラム全体としては、「京」や本プログラムならではの成果を創出できる課題に追加資源を配分できるように、H26年度加速枠選定の申請条件及び選定基準の見直しを行った。具体的には、申請条件として「京」の利用実績(申請時点の消費率35%以上:当初配分を使い切る見込みとなる目安)を追加しつつ、選定基準として直接的な成果(アウトプット)だけではなく、波及効果(産業競争力強化、経済や社会への波及効果、科学技術のプレゼンス向上等のアウトカム)が期待できるかどうかについても評価の観点に加えた。</p> <p>・また、H27年度については、戦略プログラムの事業最終年度であることから、戦略プログラム利用枠の全てを分野配分枠(各分野の裁量で資源を配分)に設定し、各分野・各課題の最終目標達成に向けて各分野の裁量分を多くするとともに、追加配分の申請に係る研究者の負担を削減した。</p> <p>・各分野の取組状況は以下のとおり。</p> <p>【分野1】計算資源の重点的配分については、重点課題追加配分枠や加速枠の制度を利用しつつ、毎月の運営委員会での決定に基づいて年度途中での効果的な資源再配分を行っている。また、「京」以外の計算資源についても、各所属機関の計算資源などを準部研究や分割可能な計算内容などで有効に活用している。</p> <p>【分野2】これまでの進捗や最終年度の成果等も踏まえ、課題間の優先順位をつけて「京」の計算資源を配分するとともに、戦略機関側のスパコン更新に伴う計算資源増加も有効に活用しながら、計算リソースの効果的活用を図っている。</p> <p>【分野3】(計算資源の重点的な配分) これまでの利用実績や計画の進捗状況を考慮し、提供される計算資源を最大限活用できるように配分を決めている。平成26年度は「地球規模の気候・環境変動予測に関する研究」、「超高精度メソスケール気象予測の実証」を重点課題として設定し、重点課題追加配分枠を得たほか、下期には戦略プログラム加速枠を取得している。 (「京」以外の計算資源) 分野3の研究者は、地球シミュレータをはじめ大学等の大型計算機も積極的に利用しており、今後も積極的な活用を予定している。</p> <p>【分野4】重点課題追加配分枠、加速枠を戦略的に活用したメリハリある取り組みを実施している。その成果も創出されつつあり、今後論文発表、プレス発表を強化するとともに、事例DBを作成・公開して広く利活用への拡大にむけて貢献して行く。 また、「京」以外の計算資源の活用については、特にFOCUSスパコンを利用して、HPC対応人材の育成施策(トライアル利用、ハンズオンセミナー等)を精力的に実施している。</p> <p>【分野5】今年度は、「京」の計算資源の重点課題2課題(課題1・2)に対し、進捗の加速を支援、「京」の追加資源の獲得を後押しし、審査の結果、研究開発課題2に今年度880万ノード時間が追加配分、全体予算から東大FX10の計算機利用料を付与して研究の加速を図った。また、「京」の下期追加配分140万ノード時間中、課題1に100万ノード時間を割り当て、進捗による優先化を行っている。 課題間の連携の基礎となる課題1のハドロン間相互作用の決定をより進めるために、ゲージ配位生成に尽力した蔵増氏からハドロン間相互作用の決定の中心にいる初田氏に課題責任者を交代し、課題間連携を加速させる予定。</p>

中間評価での指摘事項	対応案(平成26年3月時)	フォローアップ状況(平成27年3月時)
<p>分野によっては企業参加の状況は限定的であることから、実用化と応用へ向けた展開のために企業との更なる連携を深める必要があるが、その際、企業のHPC利用を促進する観点から、「京」や本プログラムが企業活動をどの様に効率化したのか、あるいは今後効率化するのかを定量的に評価し、トップマネジメント層等に示していくことを心がけるべきである。</p>	<p>・各戦略機関において、企業からのHPC利用に関する相談に応じる取組を行う。 ・文部科学省において、経済団体等との意見交換会や勉強会を実施する。 ・成果報告会では、産業界向けのセッションを設ける。 ・産業界との関係が深い分野(分野1、2、4)において、指摘事項を踏まえた対応を進め、企業トップマネジメント層等への効果的なアピールを推進する。</p> <p>【分野1】課題内における産業界との連携をさらに深めるとともに、製薬企業コンソーシアムへの支援を通して参画企業の拡大を図る。</p> <p>【分野2】元素戦略PJ等の各種国家プロジェクトも活用し、実用化に向けた企業との連携促進に取り組むとともに、開発したアプリの普及・展開活動を通じて、企業からのニーズも取り込み、産業界との連携強化を図る。また、産業界を交えたシンポジウムを今後も開催し、課題を共有する産官学研究者が席を交えて議論する場を設け、人材交流や共同研究への発展を図る。</p> <p>【分野4】経営的な視点を考慮したPR活動の強化については、まずは実際の設計業務に活用した場合の具体的な効果を明確にすることが重要で、現在それを評価するための設計システムを検討中であり、これを構築する部品群の整備や機能評価の準備を実施している。今後、企業での利用シナリオを想定した設計システムを構築し、まずその利活用により得られるメリットなどをより明確にする。その上で、開発提供システムのメリットや展開シナリオの説明資料を整理し、企業意思決定マネジメント層にフォーカスした効果的な情報発信を検討する。</p>	<p>・企業も含め、「京」や「京」以外のHPCI資源を利用している(利用しようと考えている)一般ユーザに対して、各戦略機関が各研究分野個別の専門的な支援ができるような取組を登録機関(RIST)と協力して開始。 ・文部科学省において、経済団体等との意見交換会や勉強会の実施、企業が多く参加するイベントでの講演等を通じて、スパコン活用事例やHPCIの利用について情報発信を行った。 ・最終年度に開催予定の成果報告会(戦略プログラム全体または各分野で実施するもの)については、産業界への効果的なアピールができる内容となるように検討を行う。 ・産業界との関係が深い分野(分野1、2、4)における取組状況は以下のとおり。</p> <p>【分野1】分野1では2つの創薬コンソーシアムの立ち上げとその研究支援を進めている。一つは「京」の産業利用枠で研究開発が進められている「新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築」であり、参加製薬企業数は2013年度の11社から、2014年度には23社にまで拡大し、日本において新薬開発を行っているほとんどの企業を巻き込んだ活動となってきている。 また、2015年度からは、「京」の産業利用枠で新たに「HPCIを活用したFMO創薬プラットフォームの構築」が製薬企業のコンソーシアムを形成して推進されることになっている。(現時点での参加製薬企業数は11社。) これらの2つの研究に参加している製薬企業の研究者らは、その研究成果を評価し、その結果を社内で展開しており、上層部へボトムアップ方式で研究成果の評価結果が上がっていくものと考えている。</p> <p>【分野2】開発したアプリを「京」以外のユーザも使えるように、Webサイトの整備を進めている。その際、ユーザが解析したことからアプリを検索できるような工夫も行っている。また、企業との共同研究も進んでおり、企業内での製品開発に貢献している事例が産まれつつある。</p> <p>【分野4】「京」を利用した成果がどのように企業活動を変革するか等については、経営層等を意識し、成果を平易に解説したコンテンツや事例DBを多数作成して、専門のアウトリーチサイト(「計算工学ナビ」)より積極的に発信しており、すでに多数のアクセス数を得ている。例えば、自動車のエンジンルーム内熱設計システムにおいて時間短縮効果を実証するなど、具体的な事例を示しつつある。</p>

●分野全体

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>【必要性】 今後は、各研究開発課題を融合させるような一段ステップアップした方向性への発展が必要であるとともに、更に実験系の生命科学研究者や臨床研究者との連携を密にし、研究開発成果をどのように生命現象の解明につなげ、実際の創薬開発や医療戦略に役立てていくかを検討していく必要がある。</p> <p>生物という非常に複雑で難しい対象を統一的に理解するためには、これまでの個別の問題解決を超えて、生物の原理に基づく考え方を提出するためのブレイン・ストーミングを行える体制も必要である。</p>	<p>1. これまでに行ってきたことをさらに発展させる (1) 各課題での階層を超える試み 課題1: 量子化学、全原子モデル、粗視化モデル、一分子粒度、というマルチスケールな取り組みによって、分子から細胞へ接続し、分子レベルからの細胞機能理解をめざす。 課題3: 多様な動作原理、多階層のシミュレータを連成することで、臓器、全身レベルのシミュレーションを実現することで、医療応用につなげる。 (2) 実験系、臨床研究者、製薬企業との連携 課題1: 細胞内混雑、信号伝達、クロマチン・ヌクレオソームの研究では、それぞれ実験研究者との密接な連携のもと研究を進め、計算と実験の双方向の研究のありかたをさぐる。 課題2: 製薬企業との密接な連携で創薬研究をすすめることで、複数のリード化合物を創製し、前臨床試験にまですすめたい。 課題3: 心臓シミュレーションではすでに臨床応用にむけて進めており、血栓シミュレーションでは実験情報を取り込む体制を課題内に作り、パーキンソン病シミュレーションでは臨床データの取り込む体制を作り、医療応用をめざす。 課題4: がん研究では臨床からのゲノム解析データに基づき研究を行い、脂肪細胞研究では実験との密接な連携で研究を行っている。 2. 課題間連携の試み: 個別の問題解決を超えた研究方向の模索 ・課題1と課題3の連携によるサルコメアの分子レベルモデルの構築とその心臓シミュレータへの応用を目的として、新たな研究者の雇用による連携ユニットを来年度に設置し、研究を開始する。 ・個別の問題に関して、プロジェクト終了後の展開も見据え、少人数の関係者による議論をする場をもうけ、対話を重ねることで、新</p>	<p>1. 本プロジェクト研究のさらなる発展 (1)各課題での階層を超える試み 課題1: 細胞質混み合い環境のシミュレーションでは、マイコプラズマを模した1億原子系でのシミュレーションに成功した。クロマチンのマルチスケールモデルでは、ヌクレオソームの全原子シミュレーションでカノニカルとバリエーションの違いを明らかにし、粗視化モデルでより多くのヌクレオソームを含む系について、構造と転写因子との相互作用のシミュレーションを行っている。着実に単一分子レベルから高次機能の理解に向けて成果を上げつつある。 課題3: 心臓シミュレータでは、分子レベルのサルコメア動力学モデルの高度化、線維構造のリモデリング機構の組み込みなどより精緻な多階層のシミュレーションが可能となってきている。脳神経-筋骨格連成系では、モデル化が完了し、パーキンソン病の解明に向けた統合シミュレーションが始まった。 (2)実験、臨床、製薬企業との連携促進 実験、臨床研究者との連携が、プロジェクトの体制として定着しその成果がでてきた。 課題1: クロマチン・ヌクレオソーム研究における連携、細胞内混雑、信号伝達におけるNMR、一分子計測等での連携などで着実に成果をあげている。 課題2: 製薬企業との密接な連携により、数例について前臨床試験に進むことができた。 課題3: 心臓シミュレーションでは先天性心疾患外科手術のシミュレーション解析、拡張型心筋症に対する新たな治療法の解析など着実に成果を重ねている。脳神経-筋骨格連成系では、臨床研究による患者の観測データの再現を目指している。 課題4: がん研究での臨床からのがんゲノムデータによる連携、脂肪細</p>

<p>【有効性】 今後、研究成果を普及させるためには、細胞レベル、創薬、臓器・全身レベル、ゲノム医療に向けた大規模データ解析の四課題を階層的につなぎ、構造化して見せるとともに、それらのモデルを用いた数値解析において、どのような隘路があるのか、問題点を明らかにしていくことが必要である。</p>	<p>たな研究方向を探り、解決すべき問題点を明らかにする。 これまでに開始した議論 課題1-課題3: 神経細胞シミュレーション(一分子粒度シミュレーションと脳神経系シミュレーション) 課題1-課題4: 脂肪細胞の褐色化(一分子粒度シミュレーションとネットワーク解析) 課題2-課題4: エピゲノム創薬(自由エネルギー計算と網羅的エピゲノム解析)</p>	<p>胞研究での実験家との連携によって、新たなメカニズムを解明するなどの成果が得られている。 (3)研究開発成果の創薬、医療への展開の具体化 さらにプロジェクトの成果を、以下のポスト京の重点課題につなげていく。 重点課題1 生体分子システムの機能制御による革新的傷薬基盤の構築 重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 萌芽的課題 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用 2. 階層接続の試み: 生命系の全体像へ迫る研究方向の模索 階層を越えた研究の芽は確実に育ちつつある。 現状の認識では、シミュレータの連成等による階層接続の以下の困難さがあり、それらに対するは試みがなされはじめています。 1. 時間スケールの乖離: 分子とそれ以上の間一サルコメア力学モデルの高度化 2. 実験情報の欠如: モデル構築の困難さー運動ニューロンと筋紡錘の数など 3. システムと物理系の接続ー血流中での抗血小板薬の効果</p>
<p>本分野の計算科学技術推進体制の構築では、大学等の研究機関と連携し、計算生命科学における若手人材の育成に取り組んでおり、引き続き有効性は高いと評価できる。他方で、生命科学分野から輩出された計算科学研究者はまだ少数であり、今後も積極的な取組が必要である。</p>	<p>・生命科学分野の研究者を対象とした座学と実習の機会を継続的に増やしていく(SCLS計算機システムを活用した座学&実習、および分野1研究者等による座学)。 ・生命科学の実験系研究者の参加障壁を低くするため、人材育成コンテンツのe-ラーニング化をさらに推進する。</p>	<p>・生命科学分野の研究者を対象とした座学と実習(CafeMol、μ2lib、GENESIS、MARBLE、GHOST-MP)を継続的に行ってきた。新たな取り組みとして、神戸大学において遠隔授業「計算生命科学の基礎」を実施した。 ・生命科学の実験系研究者の参加障壁を低くするため、人材育成コンテンツのe-ラーニング化(産総研)とともに研究成果の映像化(UT-HEART)を行ってきた。</p>
<p>【効率性】 今後も、計算生命科学分野の発展のために、本分野の研究開発で培われた計算科学的スキルやノウハウを、多数の研究者に提供し、継続的に発展させられる取組が必要である。</p>	<p>・戦略分野1のHPを通して、ソフトウェアの公開・普及を促進する。ノウハウについてのコンテンツを充実させていく。 ・京およびSCLS計算機システムでのソフトウェアの公開と普及を進める。(AICS、GCライフとも密接に連携)</p>	<p>・戦略分野1のHPを通して、ソフトウェアの公開・普及を促進してきた。ノウハウについてのコンテンツを充実させてきた(温度レプリカ交換法のチュートリアルやQ&Aなど)。 ・京およびSCLS計算機システムでのソフトウェアの公開と普及を進めてきた(GENESIS、MARBLE、CafeMol、GHOST-MPなど)。</p>

<p>【その他】 ○分野内での情報交換を密にして研究開発課題間で柔軟に再配分することや、「京」以外の計算資源を活用することも検討する必要がある。 ○分野全体としての成果を考えた場合、本プログラムの趣旨からすると必ずしも十分でない規模にとどまってしまうことが懸念点である。 本プログラムも後半に入り、戦略目標の達成に向けて研究開発の加速が求められる一方で、各課題で大規模計算が増えて今以上に計算時間が確保しづらくなることが想定される中では、「京」以外の計算機の活用も進めるとともに、分野として戦略目標を達成するという観点で全体を見通し、トップダウンで、課題の統合も含めて計算資源を大胆に傾斜配分すること、課題間の進捗に優先順位を付けて実計算時間を有効利用することなども検討する必要がある。その際、信頼できる確実な理論、具体的な標的、シミュレーション結果と直接比較しうる実験データの三つがそろっている課題を優先的に選択し、計算資源の集中的な配分を行う必要があり、またそれを支えるガバナンスを確立すべきである。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・来年度は、課題1と課題2を重点課題として、最大限の追加配分枠を取れるよう努力する。 ・計算資源に関しては、分野1で可能な範囲内(一般課題、重点課題、加速枠の範囲)で、運営委員会の決定に基づいて、年度途中で柔軟に再配分できるようにする。そのために、当初配分を年度途中に変更が容易に行えるよう当初配分を調整した。 ・今年度は、課題2と課題4で、大幅なサブテーマの整理、集約化を行い、研究内容の集中化を図った。来年度はさらに、課題1でテーマの集中化を図る。 ・計算法としては十分に実績のあるものを、目的としての研究対象はしかしチャレンジングなものをこれまでに選定し、実験との連携による検証可能な体制を取るよう努めてきた。今後ともその方針を徹底する。 ・プロジェクトの完了を2年後に控え、それぞれの課題で達成すべきことを完遂していくこと、さらに、プロジェクト終了後の展開を見据えることが大切であると考え。課題内部での優先順位付けは、研究の進捗を見ながら、最終年度に達成できることを最大化するよう調整していきたい。 ・京を必ずしも使う必要のない準備計算に関しては、積極的にHPCIの他の計算資源を活用する。そのために、他のHPCI資源への応募を積極的に行う。 ・次世代機での計算生命科学分野の展開を見据えて、状況に従って適切に対応していく必要があると考えている。 	<p>(1)重点課題 H26の重点課題である課題1、課題2は可能な計算資源を100%利用し、成果をあげている。H27(計画)は、目標の達成度、準備状況を踏まえて、課題1、課題3を選定する。</p> <p>(2)柔軟な資源配分 H26 重点課題に対して、加速枠、追加配分によって追加的な資源配分をし、また、毎月、アプリごとの利用実績をチェックし、8月に再配分を実施した。 過去の配分実績によると、結果として、重点課題とそれ以外で2倍程度の資源配分の差が生じている。 各年度毎に準備状況、目標の達成度を勘案し、重点課題を設定し、柔軟な資源配分を実施することで、資源を有効に活用し、目標に向け着実に成果を積み重ねてきた。 本年度は、既に「京」の計算資源を100%利用した課題も出てきているが、各大学や研究機関の計算資源を有効に活用し、H27への準備を進めつつあるところである。</p>
---	---	--

●研究開発課題

指摘事項	対応案	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>課題1:「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」(杉田GL)</p> <p>分子レベルと細胞レベルをつなげる方針について再度検証するとともに、測定系の研究者との更なる連携を期待したい</p>	<p>[1] 分子レベルと細胞レベルをつなげるために3つの点に留意して研究を行いたい。 A) EGF信号伝達系のMEK/ERK反応機構に集中し、実験家も巻き込んだ形で、細胞環境が信号伝達に与える影響を調べること、 B) 細胞環境の影響を検討する際に、トップダウン的アプローチ(細胞や細胞環境を露に取り込んだ実験や計算)とボトムアップ的アプローチ(重要な要素のみを取り込んだ実験と計算)を組み合わせること、 C)生体超分子複合体としてヌクレオソームからクロマチンに至る構造モデリングを実験と連携して行うことである。</p> <p>[2] 測定系の研究者との連携については、 A) MEK/ERK複合体の構造解析や生化学実験と、モデリングを組み合わせるための議論を重ねること、 B) ヌクレオソームからクロマチンに至る構造のモデリングを、X線結晶構造、電子顕微鏡、X線小角散乱などを組み合わせて行い、構造とダイナミクスの観点からDNA転写やエピジェネティクスなどの理解につなげることである。</p>	<p>[1] 分子レベルと細胞レベルをつなげるための基本的な考えという方向性がようやく見えてきた。従来の計算では、計算機能力の不足によって細胞レベルの計算はおろか細胞環境を考慮した計算は全く不可能であった。また、分子レベルの研究といっても徹底的な構造探索や精度の高い自由エネルギー計算などができていたとは言えない。この課題では、「細胞環境を考慮する大規模計算」と「1分子の自由エネルギー計算」などを比較することによって、分子レベルだけの理解では到達できない、細胞環境での分子dynamicsと機能の関係が議論できるようになってきた。最終年度にはこの方向性を進めて、細胞環境中での信号伝達とヌクレオソームとクロマチンという2つの具体的テーマに関して新しい知見を得たい。 [2] 測定系の研究者とは計算結果と実験結果を比較するための具体的な検討会を重ねてきた。 A) 信号伝達経路については、特にMEK/ERK複合体の構造解析に向けて、QBiCのNMR研究者と共同研究を行うとともに、1分子計測や生化学を行う研究者と検討会を行ってきた。これについては最終年度も継続する。 B) ヌクレオソームとクロマチンのモデリングについては、MD/SAXS法の開発によって実験データを直接くりこんだ構造モデリングを実現した。また、自由エネルギー解析法も一分子解析との直接比較ができるようになった。このサブテーマについても新学術領域などとの連携が活発に行われている。</p>
<p>課題2:「創薬応用シミュレーション」(藤谷GL)</p> <p>製薬企業とのさらなる連携強化や、実際の創薬プロセスに役立った事例作りによる産業界への理解促進への取組を期待したい。</p>	<p>これまで、製薬企業との連携で、標的タンパク質に対する薬剤候補化合物の探索を行ってきた。その連携研究の中で、現在までにコンピュータ設計した化合物から実験で薬物活性が実証されたものが複数個出て来た。これらの化合物に関して、最適化を更に進めて前臨床に持ち込める化合物の発見に繋げ、薬設計の成功例を作ることに努める。そればかりでなく、MP-CAFEE計算法のさらなる普及、教育を、高度化推進グループが中心となって行い、数多くの製薬企業で利用してもらえるよう、努力をしている。</p>	<p>製薬企業、富士通、東京大学の三者連携で薬設計を行うプロジェクトを三つ独立で進めて来たが、一つ目は動物実験の結果が悪く平成26年4月にプロジェクト中止を決め、二つ目は平成26年10月より動物実験に入り、三つ目はまだ薬候補化合物の探索中である。最先端研究支援プロジェクトの終了に伴い、平成25年9月より戦略研究に引き継いでいた抗体医薬研究で、開発した抗体薬が動物実験でヒトのがん細胞に集積する事が本年1月に初めて実証された。これによりがん抗体医薬の基本特許が出せる見通しが立った。</p>

課題3:「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」(高木GL)

目指す成果とそのためのアプローチを明確にしつつ、個々の研究テーマの成果をどのように階層統合していくのかについて、俯瞰的な構図を描いて取り組んでいくことが必要である。

本課題では、グランドチャレンジプログラムにて開発されたソフトウェアを活用して、神経細胞、筋繊維レベルからの脳神経系-筋骨格系の統合のように、さらに上のクラスでの階層統合を目指している。そのため、より大規模な計算を行うためには、階層統合の過程で適切な粗視化モデルの導入が必要であり、得られた結果の実験的検証が重要となる。この点をベースに、本課題では実際の疾患(パーキンソン病、心筋梗塞)を事例として、これまでは扱えなかった事象の再現を通して、メカニズムの解明から薬効評価、現象を予測した精緻な治療の支援までを行えるツールの開発を目指す。俯瞰的な構図に関しては、巨視的な症状を再現する患者のデータに加え、シミュレーションで用いられる種々のミクロスケールパラメータを決定するための精緻な実験系を準備し、シミュレーションのための実験を遂行しながらシミュレータを開発していくことが重要と考え、密に連携をとっていく。

脳神経系は、パーキンソン病の病態再現のために大脳基底核の淡蒼球外節-淡蒼球内節-視床下核から視床を介して大脳皮質運動野に結びつける連成計算を達成しドーパミン欠損に伴う大脳基底核内のベータバンドの振動と、大脳皮質の異なる部位へのシグナル伝達を再現。さらに全身筋骨格系-神経系では、脊髄に沿った筋紡錘やニューロンプールの空間的分布と全身筋肉の分布、さらに、姿勢制御の再現に向けた足裏のセンサリングニューロンの分布と三半規管のモデリングに向け、いよいよ脳と全身の統合により静止立位姿勢の制御破綻についてシミュレートするための準備が整ってきた。この全身モデルは、まさしく、従来は統合されて来なかった神経細胞レベルからの脳と筋繊維レベルからの全身筋肉の階層統合シミュレータであり、最終年度に向けて27年度は大きな進展があった。その他の階層統合シミュレータ(マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータ、マルチスケール血栓症シミュレータ)については、すでに階層統合に成功していたが、その機能を拡張し、より複雑な系を扱うことにより、臨床応用に向けた試みが行われている。

課題4:「大規模生命データ解析」(宮野GL)

臨床分野とのさらなる連携強化や、シーケンサーなどでデータを取得している研究者の課題に密着したデータフローの仕組みを作っていくことを期待したい。

これまでに臨床系・医学系研究分野の研究者とは、名古屋大学医学研究科高橋隆教授(肺がん)、京都大学医学研究科小川誠司教授(血液疾患、他多種類のがん)、九州大学病院別府病院長三森功士教授(消化器がん)、国際がんゲノムコンソーシアム、並びに課題4代表者が領域代表をしている新学術領域研究「システムがん」の研究者と連携して、主に次世代シーケンサーデータ及びトランスクリプトームデータの解析によるがんの網羅的システム異常の解析を行ってきた。そしてこれまでにデータ解析に必要なソフトウェアの移植を京に行ってきた。データ解析に不可欠のRも平成25年度中に「京」で利用できるように整備した。この研究過程の中で、「京」の運用ポリシーと利用状況からこうした大規模なデータ解析を「京」のみで実施することには無理があり、さらに本課題で利用可能な「京」の高速ストレージ量にも限界があることが判明した。一般論として、こうした困難を克服していくことは、生命ビッグデータ対応には不可欠であるが、その解決は課題4の範囲を超えていると考える。そのため、これらの臨床系分野と密着して連携をより強化するために、「京」の有用性が発揮できる部分は「京」で行い、そうでない部分は東大医科学研究所ヒトゲノム解析センターのスーパーコンピュータ等を使ってデータ解析のフローを構築し、人で繋いでいくことが現実的であり、臨床系研究分野に研究者を高頻度に派遣し、協働していく。さらに甲状腺がんについてはバイオマーカーが発見されておらず、その病理判定は、がんの浸潤が起きていることを見て判定しており、より早期の診断法が切望されている。そこで別府市野口病院内野眞也外科部長の協力を得て、悪性度の強い未分化甲状腺がん(希少がんのひとつ)の臨床検体の全ゲノムシーケンサーデータを取得している。前述の三森教授と協働してこの全ゲノム等の解析を行うことで、甲状腺がんの臨床家へ解析の結果を繋いでいく道を作る。これらにより、ゲノム、エピゲノム、トランスクリプトーム(融合遺伝子の網羅的解明など)、遺伝子ネットワーク、がんの進化等、網羅的にがんのシステム異常並びにがんのシステムのヘテロ性の全貌を大規模データ解析により明らかにしていく。その結果と知見は本課題に協力している臨床系・医学系研究者により、それぞれのがんの臨床及び研究の指針となることが期待できる。

対応案に沿って研究を進めた結果、臨床系分野でシーケンサーデータを取得している研究者とデータフローの仕組み(人も含めた)がうまく流れ多くの優れた研究成果を生み出している。ただし、小川誠司教授との共同研究では、RISTの運用対応、利用可能なプログラミング言語の制約、ストレージ量、I/Oの脆弱さ、プレポストマシンへの負荷、ソフトウェアの書き直しにかかる時間、国際連携、倫理審査のやり直しにかかる時間などから判断して、過激な世界的競争に勝つために現時点では「京」を利用せず、最適な運用を行っている東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センターのスーパーコンピュータのみを用いた。H27年度内にこの課題を解消したい。

●計算科学技術推進体制の構築(再掲)

指摘事項	対応案	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>生命科学分野から輩出された計算科学研究者はまだ少数であり、今後も積極的な取組が必要である。</p>	<p>(再掲) ・生命科学分野の研究者を対象とした座学、実習の機会を継続的に増やしていく(SCLS計算機システムを活用)。 ・生命科学の実験系研究者の参加障壁を低くするため、人材育成コンテンツのe-ラーニング化をさらに推進する。</p>	<p>(再掲) ・生命科学分野の研究者を対象とした座学と実習(CafeMol、μ 2lib、GENESIS、MARBLE、GHOST-MP)の機会を継続的に行ってきた。新たな取り組みとして、神戸大学において遠隔授業「計算生命科学の基礎」を実施した。 ・生命科学の実験系研究者の参加障壁を低くするため、人材育成コンテンツのe-ラーニング化(産総研)とともに研究成果の映像化(UT-HEART)を行ってきた。</p>
<p>計算生命科学分野の発展のために、本分野の研究開発で培われた計算科学的スキルやノウハウを、多数の研究者に提供し、継続的に発展させられる取組が必要である。</p>	<p>(再掲) ・戦略分野1のHPを通して、ソフトウェアの公開・普及を促進する。ノウハウについてのコンテンツを充実させていく。 ・京(AICSとの連携)およびSCLS計算機システムでのソフトウェアの公開を進める。(GCライフとも密接に連携)</p>	<p>(再掲) ・戦略分野1のHPを通して、ソフトウェアの公開・普及を促進してきた。ノウハウについてのコンテンツを充実させてきた(温度レプリカ交換法のチュートリアルやQ&Aなど)。 ・京およびSCLS計算機システムでのソフトウェアの公開と普及を進めてきた(GENESIS、MARBLE、CafeMol、GHOST-MPなど)。</p>

●分野全体

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>【必要性】 今後さらに、三分野の密接な情報交換を行い、三分野の研究者が合同で推進する重要課題を検討していくことが必要である。</p>	<p>研究課題を推進する5つの部会は、分野ではなく戦略課題単位の部会で構成しており、各分野の研究者がそれぞれの部会に参加し情報の共有は進んでいる。「京」が稼働して1.5年を経過し、「京」で動作するプログラム開発は順調に進んでいる。プロジェクト後半は、分野や部会を越えて、物質・エネルギー関連課題を加速、推進していく。平成26年度は、第1部会の天能グループと、第3部会の岡崎グループ内北浦課題との計算手法連携、第2部会内の押山物理課題と信定分子課題の連携課題の提案が行われている。</p>	<p>平成25年度末に提案した、第1部会の天能グループと、第3部会の岡崎グループ内北浦課題との計算手法連携、第2部会内の押山物理課題と信定分子課題の連携課題をH26年度推進中。平成26年度から平成27年度にかけては、各課題ともプロダクトランによる成果の刈り取り時期にあたるため、課題入れ替え等は実施しないが、H27.2スタート予定のポスト「京」P]提案時には、「エネルギー課題」と「材料・デバイス課題」に対して、三分野が連携した体制でそれぞれの課題に提案し、採択された。</p>
<p>【有効性】 成果が最終的にどのように国民に還元されるのかといった成果目標の位置付けが分かりにくい面もあり、今後は、専門外の人間にも理解されるような説明の努力が必要である。</p>	<p>平成26年度も引き続き社会発表を強化促進していく。研究成果を社会に理解していただくためにどうすればよいかを検討する、見える化シンポジウムをH26年度も開催し、専門家を交えて議論する。AICSや物性研の一般公開、SC14会議に参画し、「京」で行っている成果を紹介する。また、AICSの広報活動にはとくにリチウムイオン電池関連の成果としてNIMS館山氏に協力いただき、一般国民を対象とした「京の集いで講演」、「京」成果ビデオ制作」を実施中。さらに、平成26年春の応用物理学学会、物理学学会の展示会にMateriAppsを出展し、CMSIアプリの利用促進普及をめざしている。この活動を平成26年度も継続する。</p>	<p>AICS広報と協力して作成したリチウムイオン電池広報ビデオは、「京」の成果を国民に説明する際に多用され成果を上げている。また、スパコン議員連盟勉強会でリチウムイオン電池を取り上げられ、スパコン予算確保に向けた政治家、役人への説明を実施した。AICS主催のスパコンを知る集いなどで、リチウムイオン電池、計算物質科学全般、水の科学を講演している。また、エネルギー関連課題の記者勉強会を開催し、記事に結びついた。一般公開では、3Dプリンタによる分子模型の作成等を活用し、スパコン成果の親しみやすい公開方法を試みている。第3回見える化シンポジウムは「物質と社会をつなぐ」というテーマで実施し、一般の方も交えて議論する予定。平成27年度に「京」が拓いた計算物質科学を一般国民向けの冊子としてまとめる企画を開始している。</p>
<p>【有効性】今後、若手研究者のキャリアパスの可能性を広げる努力が一層必要である。</p>	<p>コミュニティー誌のTORRENTを平成26年度も継続して出版し、若手研究者を主体で記事として取り上げ、活動を広く紹介する。TCCIでは、第3回産学連携シンポジウム「HPCの利用と成果と人材」を開催し、若手が活躍できる場を産官学の広い視野で検討した。平成26年度も若手が培った研究開発成果を社会貢献につなげるための、セミナー等を実施予定である。</p>	<p>共同研究を実施している企業等もキャリアパスの候補とし、企業に滞在して研究を推進する等の人材交流を促進していく。アプリ講習会等を通しアプリニーズ発掘とともに、人材ニーズも吸い上げていきたい。インターンシップやキャリアアップ研修受講等の仕組みを、プロジェクト雇用ポスドクに適用できるようにする等の仕組みを提言していく。アプリケーションの普及活動として、大学学部や大学院の教育への展開も推進している。教育ニーズが高まれば、計算科学が基礎科学教育の中に取り込まれ、教員のニーズも増加することが想定される。人材育成教育活動に携わる各機関において、計算科学教育教員の増員要望を継続して実施する。</p>
<p>【効率性】 今後は、実験グループや産業界との連携を更に深め、実験グループや産業界から吸い上げたニーズを研究開発課題に取り込むための仕組み作りが必要である。</p>	<p>元素戦略拠点に多くの計算物質科学研究者が参加して、企業を含めた連携を可能としている。平成25年度はエネルギーWGを実施し、物質とエネルギーの関係において計算物質科学が成すべき課題を、各種の国家プロジェクトと連携して検討し、電池の根本的な課題である界面のエネルギー科学に産官学の連携体制で取り組んでいる。CMSIやTCCI、CMRIでは、産業界を交えたシンポジウムを開催し、課題を共有する産官学研究者が席を交えて議論する。平成26年度はMateriApps登録アプリの利用講習会や普及活動から得られるアプリケーションニーズより、共同研究への発展や社会ニーズの課題への取り組み等を、具体的に実施していく。</p>	<p>継続してきたエネルギー関連研究課題や産官学連続研究会活動が実を結び、平成27年度より産総研にて企業の方を中心とした電池関連のコンソーシアムを立ち上げる。培ってきた計算技術を広く産業界に紹介して利活用を促進し、同時に社会ニーズに即した研究開発を推進していく。元素戦略各拠点とCMSIの共同研究として、磁石材料は物性研内にサブ拠点を設けてよりタイトな連携を推進している。触媒・電池拠点にはCMSIメンバーが多く参加し、理論分野を支えている。電子材料拠点とは、計算結果を繁栄させた実験を実施する等、具体的な連携が開始されている。構造材料拠点とは研究とともにアプリケーション利用の観点で、アドバイスやチューニング等で連携している。計算物質科学ポータルMateriApps活動は、毎月1回の講習会やWEBからのQ&A対応等の実施で、順調にアプリ利用者を増やし、ニーズが把握されつつある。「京」動作アプリのPCでの試験利用を可能とした「Materiapps Live!」の教育利用ニーズも急増している。</p>

<p>【その他】 各課題の成果が統合されて分野としての成果に昇華していく構図が見えにくいことや、各課題が内向き傾向にあることが懸念点である。各課題で大規模計算が増えて今以上に計算時間が確保しづらくなることが想定される中では、「京」以外の計算機の活用も進めるとともに、分野として戦略目標を達成するという観点で全体を見通し、トップダウンで、課題間連携を重点的取組とすること、課題間の進捗に優先順位を付けて実計算時間を有効利用することなども検討する必要がある。</p>	<p>プロジェクト当初にスタートした重点6課題に関し、第1部会の2課題とも、3つの項目を束ねて1つの課題に集約し、方向性を絞った。第2部会は次世代のデバイスとして、実験科学の方からのフィードバックを基にし、パワー系の半導体など、今後日本が勝てる領域で貢献していく方向性に舵をきっている。ウイルスは順調に開発したアプリケーションが多くの企業で活用されており、MODYLAS、FMOを中核としたコミュニティーが形成されている。エネルギーは電池課題を統合した取り組みは上記に述べた。メタンハイドレートは実社会での開発への貢献を模索中である。あらたに設けた材料科学の重点課題は、元素戦略Pjとタイトに連携しながら推進しており、計算物質科学の次の世代をマテリアルズインフォマティクスも含めて発展させる。計算物質科学は幅が広く、どれも「京」を必要とする重要課題に発展している。戦略課題内で優先順位をつけるとともに、分野2内で提供している計算資源を含めた計算リソースの効果的活用を強化する。</p>	<p>平成27年度の「京」計算資源配分は、これまでの実績とともに、最終年度に得られる成果に対する必要な計算資源をヒアリングし、成果の実現性や重要性を分野内で評価し、プライオリティーをつけて、配分案を作成した。CMSIで提供している計算資源のうち、物性研スパコンは更新にともなう計算容量増大が見込まれる。また、「京」以外のHPCI資源の性能も「京」に近づいてくる。それらの配分も考慮して、分野2として最大限の成果が得られるよう、検討する。最終年度は、個々の重点課題目標の達成とともに、分野全体への貢献として、開発されたアプリケーションを分野の基盤アプリケーションとして昇華していく活動も実施する。</p>
---	--	---

●研究開発課題

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>課題1: 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明</p> <p>今後は、本分野の源流として、他の研究開発課題への波及にも取り組むことを期待したい。</p>	<p>成果が非専門の人にも伝わっていくよう、努力を続ける。最終項目にもあるように、国際会議での成果発表など専門家への情報発信はもとより、より啓蒙的な解説誌での紹介執筆、さらには分野外の研究者との交流、記者発表などを通じての一般への情報発信はこれからも一層進める。この基礎課題で得られた成果に注目してさらなる発展を生み出していただくよう、他部会への働きかけを続ける。これは開発された計算手法と解明された物理を展開していくという2つの面で両方必要であると考えている。計算手法については、高精度の計算を追求する一方で、多くの人が簡便に使える手法、汎用性の高いパッケージの開発も進められるよう、プロジェクト提案を行なう。プロジェクトのスタートによって、階層的第一原理強相関電子状態計算法(MACE)の普及を計画する。MACEの基本理念は研究代表者らが10年程前に提唱し、電子相関の強い系の第一原理的な研究という物性科学の世界的な潮流を生み出した。この手法には計算負荷がまだ重いという課題があるので、簡便にも使えるバージョンの開発を行ない、より広範な普及と汎用的に使えるようにすることによって、この分野の発展に資するところは大きい。また電子だけでなく、格子(原子)も同時に第一原理的に扱うことの意義は大きく、手法の開発を進めており、開発を加速する。これらが他課題への波及効果を増やすと考えている。</p> <p>テンソルネットワーク(密度行列繰り込み群を特殊な場合として含む)は物性基礎論研究と量子情報理論研究の接点から生まれ、量子系の物性に対して量子エンタングルメントという新しい視点を提示しただけでなく、基底状態計算として実用に耐えることが近年になって示され、従来計算が困難であった多くの物理系に対するプレイクスルとなる期待がもたれている。この方法は、最近では分子科学計算にも用いられ成果を挙げつつある。FMOなど他部会で利用されている方法に対して、量子エンタングルメント効果の系統的な取り込みが可能な発展形を示唆している。第一部会では、現在十分にはその特性が理解されていないこの新しい方法論に対して、分子科学計算などへの展開も視野にいれつつ、スピン軌道相互作用系に対する応用などを通じて精度検証などを進め、波及効果の大きな成果を挙げることができると期待している。成果の共有化・深化を促進するための、分子科学計算分野などとの合同研究会・合宿などにも従来以上に力を注ぐ。</p> <p>また今までも行っているが、量子多体計算の手法は素粒子、原子核、量子化学と共通の課題があり相互に方法論の交流は役に立つことも多い。既に原子核分野との国際ワークショップを開催するなど、交流に努めているが、今後も続ける。</p> <p>解明された物理の展開については、超伝導、磁性など実験研究者との議論交流(各種散乱実験、光電子分光、物質開発など多岐にわたる)をさらに積極的に進める。源流としてエネルギー課題への取り組みを始める。他項目も参照。</p>	<p>波及効果の大きな手法開発とコード公開</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 電子格子相互作用を扱えるように低エネルギーソルバー(変分モンテカルロ法コード)を拡張し、低エネルギー有効模型を導出するダウンフォールディングコードを有田グループの協力により導入した。これらによって、電子と格子を含めて第一原理的に強相関系を扱う手法が確立し、多くの課題に対応して波及効果が期待できる。実際フォノンが重要な役割を果たす強相関電子系の現象への適用を始めた。 2. テンソルネットワークの手法開発のために国際会議や分野5と合同の検討会を行なうとともにコードの並列化の検討を開始した。この高精度手法の整備は量子化学、素粒子・原子核分野への波及効果を持つと期待できる。 3. アプリケーションのソースコードの公開を進めた。ALPSはMateriApsおよびhttp://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/Main_PageなどでMVMCはGitHub上で公開されている。MVMCについては拡張版のMateriApsでの公開も今年度末をめどに進めている。テンソルネットワークコードもコードの整備に応じて公開していく。 <p>他分野との連携</p> <ol style="list-style-type: none"> 4. 分子科学との連携、エネルギー課題との連携を目的として、夏の学校を開催し、若手の交流を進めた。 5. 量子多体計算の手法開発は分野を超える波及効果を持つ。分子科学、素粒子原子核分野と合同で2月に国際ワークショップを主催し、手法を学際的に議論する。招待講演者23名(うち外国人14名)とともに、我々のプロジェクトの成果を発信して、議論を深める。 <p>大型実験設備を含む実験分野との連携</p> <ol style="list-style-type: none"> 6. 時間分解光電子分光の実験技術が急速に発展しているが、顕著に非平衡な現象を扱う理論が必要とされている。この背景のもとにポンププローブ分光の大規模数値計算と理論構築により、今後の実験研究による検証を提唱した。これに関連して高効率太陽電池のための励起子の長寿命化のための原理構築と計算による実証をカーボンナノチューブを例に進めた。今後この設計指針をもとにする実験への刺激と、他の研究開発課題であるエネルギー課題への貢献・波及効果が期待できる。 7. 第一原理強相関手法(MACE)にスピン軌道相互作用を扱えるよう拡張を行なった。適用範囲の拡大によりより広範な需要に応えられるようになった。新たなトポロジカル物質と新たな機能性を発見する目的の研究が進んだ。磁壁がトポロジカルなエッジ状態を生み出す可能性が明らかとなり、この提案をもとにした実験検証が進んでいる。強相関トポロジカル物質の第一原理計算を可能にし、実行してイリジウム化合物に適用した。トポロジカル相(量子スピン液体相)実現へ向けた実験結果の謎の解明に貢献した。 8. 超伝導およびトポロジカル物質に関する実験家とのフォーラムを立ち上げる作業を始めた。産業界との情報交換も検討している。 9. J-PARCや放射光施設で行われた電子ドーピング型銅酸化物高温超伝導体の磁気・電荷励起ダイナミクス実験に理論からのサポートを行い、実験研究者との共同研究を実施。 <p>情報発信</p> <ol style="list-style-type: none"> 10. 高温超伝導機構を解明に成功(鉄系超伝導体)し、論文が出版されたので、プレスリリースした(2104年12月末)。新聞等で取り上げられ、「京算百景」での特集企画も進行中。さらに超伝導の高温化のための要素を抽出することで、実験研究との連携や検証で波及効果が期待できる。 11. 強相関電子系の第一原理計算アルゴリズムについて雑誌「固体物理」での解説連載を継続した。

<p>課題2: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開</p> <p>今後は、開発された手法を基盤技術として、現実的に問題となっている系への展開や分野横断への展開を期待したい。</p>	<p>分子設計という観点では、フラレンールイス塩基アダクトに関して、ルイス塩基と原子種を換えた網羅的な研究を行い、生成効率に優れたデバイス材料の予測を行う予定である。第4部会との連携も重要である。更に、植物を模した人工光合成系やルテニウム触媒系での酸素発生の機構を密度行列繰り込み群とモデル空間量子モンテカルロ法を用いて研究を行いたいと考えている。それに伴う実験グループとの連携も進めたい。</p>	<p>フラレンールイス塩基アダクトに関しては、複数のヘテロ環状カルベンの付加に対するサイト依存性等の興味深い成果が出ている。更に、東北大と連携してC60とカーボンナノチューブからなる分子ベアリングの高精度F12計算を行い、実験から得られる回転障壁との比較を行っている。「京」の追加配分枠を用いた光システムIIの課題については、フラグメント分子軌道法とモデル空間量子モンテカルロ法の両面からの研究が進んでおり、リガンド効果や超微細構造定数の結果が得られている。</p>
<p>課題3: 密度汎関数理論によるナノ構造の電子機能予測に関する研究</p> <p>今後は、半導体テクノロジー関連の企業活動への情報発信や、企業からの要望引き出しを行い、社会的にインパクトの強い課題遂行を期待したい。</p>	<p>複数ソフトウェアの連携については、一例として、IV族ナノワイヤーのゲート酸化膜に対する10万原子規模のCONQUESTによる構造決定とその安定構造に対するRSDFT電子状態計算が計画されている。デバイス構造丸ごと計算の例である。関連企業活動との相互作用については、複数チャンネル(東京大学産学連携本部、つくばイノベーションアリーナ、第二分野作業部会等)を活用した情報収集・発信に努めたい。</p>	<p>パワーエレクトロニクスの基幹材料と目されており、日本のメーカーがまだ優位性を保っている炭化珪素に傾注し、そのデバイス界面での欠陥の特定を行っている。情報交換については、つくばイノベーションアリーナ主催の研究会における、メーカー側からの情報収集の段階にとどまっている。</p>
<p>課題4: 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開</p> <p>今後は、分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」との積極的な連携を期待したい。</p>	<p>これまでも分野1の分子に関わる課題と分野2の生体物質に関わる課題間では、国際会議サテライトミーティングや国内研究会等において共催等一定の連携の下でプロジェクトの推進を行って来ている。今後はさらに積極的に働きかけ、プログラム開発や研究等においてもより深く協力しながら研究を推進する。連携については分野1の該当する課題との間ですでに共通認識となつてはいるが、具体化について早急に協議を始めたい。</p>	<p>連携のあり方については、分野1の分子に関わるシミュレーショングループと協議、検討を進めてきており、「京」の次のステップとして位置付けられているポスト「京」においては、連携、協力からさらに一歩踏み込んで、分野間連携の下、共同で重点課題の解決にあたる準備を進めている。具体的には、ポスト「京」の重点課題①「生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築」のサブ課題B「次世代創薬計算技術の開発」において、本課題をさらに展開し「ウイルス標的創薬計算技術」の構築をはかる。さらには、ソフト開発という側面からも、課題①のターゲットアプリ GENESISを対象としたCo Designに課題間連携として協力する。</p>

<p>課題5: エネルギー変換の界面科学</p> <p>今後は、本分野における位置づけを明確にするともに、エネルギー課題をより俯瞰的に検討し、エネルギー問題へのより強いインパクトを与える取組を期待したい。</p>	<p>第四部会での課題設定はご指摘のように限定的です。エネルギー創生に関連した研究が他部会でも始動しており、これらを総合的な活動に束ねていくことを考えています。これにはエネルギーWG等と連携して体制を作り、その下での第四部会の役割を拡張するようなことが必要になります。その方向での活動が後半の課題です。</p>	<p>■本分野における位置づけ: 物質科学とエネルギー変換(本課題では電池)の関連、すなわち、化学反応や物質移動、物質変化などの起電力(電位)との関わりを、電子論・統計物理学に基づき解明し、電池技術につなげるべく取り組んでいる。■エネルギー課題をより俯瞰的: 燃料電池やリチウムイオン二次電池から次世代型の電池に研究対象を広げると共に、アブローチの幅も広げて取り組んでいる。■より強いインパクトを与える: より汎用的かつ実効的な研究手法の開発、実験との連携の強化により、より強いインパクトを与えられるよう取り組んでいる。</p>
<p>課題6: 水素・メタンハイドレートの生成・融解機構と熱力学的安定性</p> <p>今後は、本分野の中における位置づけやエネルギー・資源問題にどのように貢献できるかを明確にして取り組む必要がある。</p>	<p>メタンハイドレートは、将来の主要なエネルギー資源の候補であり、試掘も開始されている。シミュレーションが関与していくことは、エネルギー・環境問題の解決につながると考えられる。日本で試掘を行なっているグループとの情報交換等のために、シンポジウムなどを計画している。</p>	<p>ハイドレートの生成・融解過程は、準安定状態も深く関与しているが、ハイドレートが共存する溶液の性質、また熱伝導やその他の境界条件に、大きく依存している。そのために、より実在に近い共存系についてのシミュレーションおよび大規模なシミュレーションを実施することは、実用化に寄与する。特に、本年は共存する溶液の性質による解離の機構と速度に関する知見を得ることができた。産総研メタンハイドレート研究センターとは、共同でシンポジウムを開催し、またメタンハイドレートの研究会などに相互に参加している。これにより、実用面での課題に関する情報を得て、京によるシミュレーションとその解析法に活かしている。</p>
<p>課題7: 金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発</p> <p>今後は、材料科学でのマルチスケール解析への取組を具体化することや、鉄鋼材料の重要性に鑑みて有限温度の磁性への関わりについて取り組むことも期待したい。</p>	<p>・第一原理計算をPhase Field法に繋げることでマルチスケールの計算技術を構築していく方策について、第5部会のPhase Field法の専門家を含めたメンバーで、11月25日、1月10日に2回の勉強会を行った。継続して、第5部会全体の主要課題として、検討を行っていく。 ・鉄鋼材料のfcc高温相の磁性の取扱い等について、現在、元素戦略構造材料拠点(京大)においても検討をスタートしており、連携して議論を進める。なお、本重点課題に含めるよりも、可能ならば第5部会の新規の特別支援課題として推進する方向で議論している。</p>	<p>大規模第一原理計算をPhase Field法に繋げる手法について、10月6日の重点課題研究会、11月10-11日の東北大金研でのCMRI Workshopで、最新動向の調査、手法確立の検討を進めた。第5部会全体でも研究開発を進めるため、横浜国大拠点に第一原理Phase Field法を専門とするポスドクを雇用し、12月8-10日のCMSI meetingで議論を進めた。</p>

●計算科学技術推進体制の構築

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>・最先端の実験活動との連携体制の構築を目指し、元素戦略プロジェクトへの貢献、大型実験施設との合同研究会などが行われている。</p>	<p>元素戦略Pjに加わっているCMSIメンバーは、「京」やHPCIで得られた研究成果を迅速に実験、計測研究者にフィードバックできる環境を活かし、成果を創出する。</p>	<p>平成26年度は、RISTと共催、JASRI、CROSS、KEKの協力で、連携シンポジウムを開催し、連携利用課題紹介とアプリ紹介を実施した。その会議での議論の結果、「計算科学勉強会」の実施に発展し、H27.2に実験家の課題に応える公開コンサルティング的イベントを開催する。平成27年度も、研究者間と同時に施設支援者間での交流も促進し、大型施設連携利用による成果創出を導く活動を継続する。</p>
<p>・各拠点機関を中心に成果報告会や研究会が精力的に行われている。一方、本分野全体としてイベント開催回数が多すぎるようにも見受けられ、イベント開催の有効性を検証するとともに、開催するイベントの絞り込みも併せて必要である。</p>	<p>イベントが多いことによる研究推進の遅れがないよう、イベントの目的と効果を吟味しながら実施していく。平成26年度予算が10%削減されたことに伴い、国際会議や協賛関連イベントの回数は減る。</p>	<p>イベント実施による効果を見極めながら、予算削減に見合ったイベントを実施している。一般社会に対して広く効果的、効率的に示すイベントやアプリの普及活動に関するイベントは、できる限り実施していく予定。</p>
<p>・他の戦略機関との連携については、分野5「物質と宇宙の起源と構造」と複数回の合同研究会を開催し、特に研究手法に関してのノウハウの交換を図るなど、適切に進められている。</p>	<p>分野5とは一般からのQ&Aサイトの共同運用、合同研究会を実施。また、分野2主催の若手技術交流会、配信講義に分野5の若手が参加しており、H26年度も継続する。分野1とは記者勉強会や合同研究会も開催しており、H26年度も継続する予定。</p>	<p>平成26年度は、従来から開催していた分野5との連携研究会を国際WSに発展させて開催する。また、若手技術交流会、アプリケーション講習会、大規模実験施設シンポをRISTと共催で実施し、超並列計算の普及促進を加速して実施した。また、今年度は、次の世代のスパコンに向けた萌芽的課題に対する分野連携課題の検討会を分野2が中心となって実施。基礎課題分野間連携の検討を平成27年度も継続する。</p>

●分野全体

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>今後は、各研究開発課題の発展に加えて、各研究開発課題間の連携や分野全体としての連携を一層強化し、分野としてより戦略的かつ有機的に活動していくことが必要である。</p> <p>分野全体としての成果を考えた場合、各課題の成果が統合されて 分野としての成果に昇華していく構図が見えにくい。</p> <p>分野として戦略目標を達成するという観点で全体を見通し、トップダウンで、課題間連携を重点的取組とすること</p>	<p>気象気候分野については、雲のモデル化が共通テーマであり、それに関する連携をすでに進めているが、さらに強化する。地震津波分野では、各課題が連携して「統合地震シミュレーション」の開発を進める。詳しくは、「地震・津波の予測精度の高度化に関する研究」の説明資料で示す。</p> <p>分野全体として取組みとしては、課題間の情報交換を密にし、浸水防災等に関しての連携が可能かどうか検討を行う。</p>	<p>分野全体としての取組みとして、2014年8月12日に、分野3関係研究者を主な対象とした、分野3全体についての成果報告会を開催し、課題間の情報交換を行った。また、同報告会を通じて、浸水防災等に関しての連携が可能かどうか検討した。</p> <p>今後も継続して各課題間の連携や分野全体としての連携を図る。</p>
<p>今後は、得られた成果を、経済学者や社会学者も巻き込んだ上で、世間の注目が高い防災・減災分野を始めとして社会にどう役立てていくかを強く意識していく必要がある。</p>	<p>運営委員会のメンバーに、社会・経済科学の有識者を加えて、得られた成果を防災・減災にどう役立てていくかの議論を深めることを検討している。また、シンポジウムのパネリスト等として、社会・経済科学の有識者の参加を求め、防災・減災の視点からのコメントを得ることを検討している。</p>	<p>運営委員会のメンバーに、田中淳センター長(東京大学 大学院情報学環 総合防災情報研究センター)に参画いただき、本プロジェクトを通じて得られた成果を防災・減災にどう役立てていくかの議論を深めている。特に、2014年8月の分野3成果報告会では、社会への情報発信の在り方に関して貴重なコメントをいただいた。</p>
<p>今後は、統括責任者や研究開発課題責任者など、分野全体を束ねる立場にある者がリーダーシップを発揮できるよう、運営委員会の機能を強化することや研究者間が率直に意見を出し合う機会を設けるなど、一層の体制上・運営上の工夫が必要である。</p>	<p>運営委員会は年2回程度開催する予定である。実施責任者会合は年4回程度を目処に定期的に開催し、研究者間の意見交換を積極的に行う。</p>	<p>今年度中に運営委員会を2回開催し、各委員と情報共有を行うとともに、プロジェクトの推進にあたり助言をいただいている。実施責任者会合を定期的に開催(ただし、今年度は都合により、2回の開催となった)するとともに、分野3成果報告会を通じて研究者間の意見交換を行った。</p> <p>今後も継続して、情報交換の場を積極的に設けるなどして、委員・研究者間の意見交換を促す。</p>
<p>「京」の有効活用が必ずしも十分ではないことが懸念点である。本プログラムも後半に入り、戦略目標の達成に向けて研究開発の加速が求められる一方で、各課題で大規模計算が増えて今以上に計算時間が確保しづらくなるのが想定される中では、「京」以外の計算機の活用も進める必要がある。</p>	<p>分野3の研究者は、地球シミュレータをはじめ、他の大学等の大型計算機も積極的に利用しており、今後も積極的な活用を予定している。</p> <p>例えば、「超高精度メソスケール気象予測の実証」では、東京大学大型計算機センターのFX10や、JAMSTEC横浜研に設置したPCクラスタなどを活用している。</p>	<p>分野3の研究者は、地球シミュレータをはじめ大学等の大型計算機も積極的に利用しており、今後も積極的な活用を予定している。</p>
<p>課題の統合も含めて計算資源を大胆に傾斜配分すること、課題間の進捗に優先順位を付けて実計算時間を有効利用することなども検討する必要がある。</p>	<p>これまでの利用実績や計画の進捗状況を考慮し、提供される計算資源を最大限活用できるように配分を決めている。平成26年度は「地球規模の気候・環境変動予測に関する研究」、「超高精度メソスケール気象予測の実証」を重点課題としている。</p>	<p>これまでの利用実績や計画の進捗状況を考慮し、提供される計算資源を最大限活用できるように配分を決めている。平成26年度は「地球規模の気候・環境変動予測に関する研究」、「超高精度メソスケール気象予測の実証」を重点課題とし、重点課題追加配分枠を得たほか、下期には戦略プログラム加速枠を取得している。</p>

●研究開発課題

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>課題1:地球規模の気候・環境変動予測に関する研究 今後は、「超高精度メソスケール気象予測の実証」との連携を期待したい。 全球7kmモデルによる台風変化予測結果に期待。今年度、特別枠で実施された全球subkmランの解析は、課題1-2との連携が期待できる</p>	<p>課題1-2の研究集会で本成果を発表し、連携の方向性について検討中。(1/7気象庁「高解像度モデルにおける対流の表現に関する検討会」、3月7日メソ研究会参加)</p>	<p>両指摘について、対応案に示したとおり、メソサブ課題の研究会に参加して、発表・議論を行うとともに、2014年9月国際非静力学ワークショップ等のさまざまな機会を通じて、連携の可能性を探った。また、subkmランのデータを希望者に提供し、連携研究を促進した。</p> <p>14km, 7km, 3.5km のデータセットを整備し、解像度依存性について解析結果をまとめている。特に、7kmモデルについては、10年分の計算を実施しており、その結果の解析を平成27年度に進める予定である。</p>
<p>課題2:超高精度メソスケール気象予測の実証 今後は、気象庁の気象予測の質的向上に向けた取組にも期待したい。</p>	<p>気象庁開発部門との連絡を密にしていく。戦略プログラム研究成果について、気象庁数値予報課でのコロキウムでの発表を推奨し、現場開発者との情報交換を促進する。</p>	<p>京を使った研究成果(高解像度大気海洋結合モデルによる台風強度の大規模予測実験について、気象庁予報部数値予報課でコロキウムを実施、九州北部豪雨実験などについても今後実施</p> <ul style="list-style-type: none"> ・分野3成果報告会(2014年8月)に気象庁数値予報課長参加 ・気象研究所と気象庁予報部・観測部との研究懇談会(2014年12月)において、戦略メソ課題の研究(平成26年8月広島での豪雨実験など)を紹介 ・昨年度予報部と気象研究所の研究懇談会での本庁要望事項に基づき、局地豪雨事例を対象としたデータ同化比較実験を開始 ・名古屋大学での超高解像度メソスケール気象予測研究会で気象研究所長が挨拶
<p>課題3:地震の予測精度の高度化に関する研究 【研究開発課題「地震・津波の高度化に関する研究」全体へのコメント】 全体として、成果を実際の防災・減災にどのように役立てていくかの議論が必ずしも十分ではない。</p>	<p>これまで個々の課題での成果を、内閣府防災関係や文科省地震調査推進本部の委員会と報告するとともに、地方行政やライフライン事業者の方々等が参加される研究会を行う他研究プロジェクトと連携して紹介することで、国や地方の防災計画等に活用されてきた。また、防災意識の向上ならびに次世代育成のために、一般向けならびに学校でも成果を紹介している。その際、従来よりも高解像度の計算が可能になったことで、極めて現実感のある可視化画像を紹介することができるようになっている。</p> <p>今後は、さらに地震課題、津波課題、都市課題の統合解析によって、様々な地震発生シナリオにもとづく揺れや津波の遡上評価および、建物損壊や津波襲来下の避難最適化検討等が可能となり、こうした成果も上記のような形で役立てていく。</p>	<p>地震・津波の予測精度高度化に関する研究課題では、研究成果の社会実装に向けて、具体的に以下の活動を研究と並行して実施している。</p> <ul style="list-style-type: none"> ○内閣府防災関係会議や文部科学省地震調査推進本部の各種委員会への成果の提供 ○文部科学省委託事業「南海トラフ広域地震防災研究プロジェクト」において地域防災力の強化の観点で進めている地域研究会(東海・関西・四国・九州)での各種予測・避難シミュレーション結果を話題提供の一部として報告 ○小中高をはじめとする、各種学校で講演することにより防災意識の向上に効果的な情報を提供 <p>以上のような活動により、地域の具体的防災対策や避難方法の策定に資する活動を進めている。</p>
<p>今後は、得られた結果を整理・分析し、有効活用を促す取組に期待したい。</p>	<p>東北地方太平洋沖地震の地震津波同時シミュレーションの結果は、これをグリーン関数とする震源モデル再解析に用いられており、また国土地理院との共同研究では、GEONET観測網と海底津波観測網のデータを用いた即時震源域推定の模擬データとして活用されている。</p>	<p>議事資料参照</p>

<p>課題4: 津波の予測精度の高度化に関する研究</p> <p>今後は、観測データだけに寄らない新たな検証方法に期待したい。なお、「京」の利用率が低いため、利用計画の再検討が必要である。</p>	<p>リアルタイム予測ならびに高精細予測の両方とも大規模計算への対応が整ったため、次年度は計画通り使用できる予定である。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・京コンピュータの活用により、大量の小波源についての高計算コスト・高精度の伝播計算を現実的な時間内で実施可能になり、データベースの高精度化が実現に近づいてきた。(4236ノード同時使用で約20時間→ 南海トラフ沿いの全計算が完了(計算時の最適パラメータ調査のため上記計算の数回実施が必要))。 ・津波浸水計算については、仙台市の港湾部を5mでモデル化した、2時間分のシミュレーションを96秒で完了。 ・非線形分散波理論の超高並列可能な津波計算コードの開発及び現地適用 ・大規模三次元計算による高精度の被害予測の可能性。 ・複合的な津波被害像の構築にむけた取り組みとして、津波による漂流物、土砂移動、または、構造物との連成計算モデルの精度検証及び現地適用。 ・津波課題グループへの平成26年度における割当資源量が順調に利用。
<p>課題5: 都市全域の地震等自然災害シミュレーションに関する研究</p> <p>今後は、研究成果を実態に近づけていくことや、実利用する方策に期待したい。</p>	<p>シミュレーション結果の妥当性確認として、E-DefenseのRC橋脚実験の再現と東日本大震災の再現を計画している、どちらも2014年度の研究目標である。実利用に関しては、このプロジェクトとは別のプロジェクトを進めている。次の二つが代表である。</p> <p>(1) 理化学研究所AICSの総合防災・減災研究ユニットでの兵庫県・神戸市での次世代ハザードマップ作成</p> <p>(2) 東京大学地震研究所の全国共同利用による主要都市の地震災害シミュレーション(東工大:東京、新潟大:新潟市、山梨大:甲府市、高知工大:高知市、香川大:高松市等)</p>	<p>シミュレーション結果の妥当性確認の二つの課題の内、E-DefenseのRC橋脚実験の再現に関しては、解析モデルと解析条件を改良することで、再現精度が大幅に改善した。全過程の計算が終了次第、詳細な検討に入る予定である。東日本大震災の再現に関しては、女川地区で地震動推定と構造物応答計算を実行し、成果を取りまとめ中である。</p> <p>実利用に関しては、対応案で述べた二つのプロジェクトを進めている他、ポスト「京」の重点課題に、「地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築」が選定された。タイトルが示すように、開発中の地震津波予測システムの実用化も重視した課題であり、内閣府等の協力機関としての参加を特徴としている。</p>
<p>「京」の利用率が低いため、利用計画の再検討が必要である。</p>	<p>「京」の利用率は、2013年10月以降、劇的に改善したと考えている。2013年度前期は、重点課題「巨大地震・津波に対する大型プラントの安全性評価」を実施するため、大規模解析モデルの構築・改良等に集中した。解析モデルが完成したため、後期は利用が着実に進んでいる。地震課題内の調整で、新たな計算資源の配分をいただいた。</p>	<p>「京」の利用率は、2014年前期の実績として100%の利用を行い、2014年度後期も順調に利用している。2014年度後期には200万ノード時間の追加配分を受けたが、この配分も含めての利用状況である。</p> <p>なお、本課題には、解析コードを改良することで解析モデルの自由度が拡大、拡大された解析モデルを高速で計算するよう解析コードを改良、という研究のサイクルがある。したがって、一定速度で「京」を利用するのではなく、解析モデルの拡大ないし解析コードの改良が一段落すると、集中して「京」を利用する、という利用形態になる。</p>

●計算科学技術推進体制の構築

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>人材育成に関するワーキンググループについては、役割や機能のより一層の明確化が必要である。</p>	<p>平成25年度中に人材育成WGの第1回会合を設け、今後の人材育成の方針などについて意見交換を行う予定である。平成26年度以降も定期的に会合を設け、具体的な方策について検討を行う。</p>	<p>第1回会合(平成26年2月26日)では、中高生の教育環境から若手研究者のキャリアパスまで幅広く意見交換が行われ、「中高生から理系学部への進学が敬遠されている」、「学生がアカデミアでも産業界でも活躍できるような教育が必要」といった点が指摘された。以降の会合においては、本会合の議論を前提にして分野3の研究分野に関する問題点に注目して、議論を行うことを確認した。</p> <p>分野3成果報告会および、第7回運営委員会(平成26年8月12日)においては、外部有識者および人材育成WG委員に今後の議論の方向性と委員の増員について説明を行い、承認を得た。同報告会では、「フラッグシップシステムのレベルになると、専門同士をつなぐ人材が必要になってくるが、そういう人材をどう育て、どうキャリアアップしていくのかというのはかなり大きな問題と思われる。」といった意見が出された。</p> <p>第2回会合(平成27年1月23日)では、「実際にプログラムを書ける研究者は貴重で、そのような研究者をこの研究分野に引き付けることも重要である。」等の分野3の研究分野における人材育成に特有の問題点を明らかにした。ここでの議論をまとめ、提案書を作成し、平成27年度の計画を検討する予定である。</p>
<p>今後は、防災・減災に対する世間の注目の高さを踏まえ、過去の震災の教訓を活用するような・分かるような形で世界へ情報発信していく必要がある。</p>	<p>平成26年度以降も、SC14などの国際的な展示会において研究成果の発信を行うと共に、分野3HP英語版をより充実させ、国際的な情報発信を積極的に行う。</p>	<p>分野3ウェブサイト(英語版)のリニューアルし、ISC'14、SC'14では理研AICSブースにおいてポスター展示を行った。</p> <p>また、積極的にプレスリリースを行うことによって研究成果を分かりやすく、発信した。</p> <p>2013年8月30日:京コンピュータによる平成24年7月九州北部豪雨の予測について 2013年9月20日:「京」を利用した世界初の超高解像度全球大気シミュレーションで積乱雲をリアルに表現～台風や集中豪雨などの発生メカニズムの解明に寄与～ 2014年5月 7日:熱帯域におけるマッデン・ジュリアン振動の1か月予測が実現可能であることを実証～スーパーコンピュータ「京」×次世代型超精密気象モデル～ 2015年1月20日:台風発生2週間予測が実現可能であることを実証—台風発生予測の実用化に向けた第一歩—</p> <p>さらに、分野3成果報告会や地震津波WS等を通じて、研究成果を広く成果を発信した。</p> <p>2014年8月12日:分野3成果報告会(イノカンファレンスセンター) 2015年2月13日:地震津波シミュレーションワークショップ(イノカンファレンスセンター) 2015年3月 9日:第5回超高精度メソスケール気象予測研究会(名古屋大学)</p>

●分野全体

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>(1)課題の進捗状況 (課題4、課題5) 手法としての先進性や独創性は一部みられるものの、「京」の利用によりブレークスルーを創出し、それをものづくり産業へ波及させるという戦略目標を踏まえ、本分野の研究開発課題としての方向性について今一度検討する必要がある。</p>	<p>①課題4について 従来の最適化技術で対応できない大規模な設計最適化を実現するための先進的な手法を開発・提供するものであり、広範囲わたる製品設計に適用できる共通基盤的技術として産業界からの期待が極めて大きい。今までは特定の事例を対象とした手法の実証を行ってきたが、今後、ものづくり産業における適用事例を増やすことにより、「京」を利用したブレークスルーのエビデンスを多く創出するとともに波及効果を高めて行く。</p> <p>②課題5について 大規模プラントに共通した、大規模アセンブリ構造体の耐震信頼性評価を高精度に行うという目標設定であり、極めてタイムリーで社会的ニーズの高いテーマである。この構造体の高精度評価には、多様な複数の締結部の正確なモデリング等の準備が不可欠である。今まで、このモデリング技術の開発等に相当な時間を費やした関係で、「京」による具体的事例の解析作業がやや遅れている。今後、開発したモデリング技術をベースに、「京」を活用したブレークスルー事例の創出を加速して進める。</p> <p>(課題4、課題5の具体的対応は各課題の説明の中で補足して説明する)</p>	<p>①課題4について 自動車車両構造設計(マツダ(株)との共同研究)、自動車タイヤ空力形状設計(横浜ゴム(株)および課題3との共同研究)、高速鉄道車両の空力音響設計(東海旅客鉄道(株)および課題1との共同研究)について昨年度から検討を進めてきた。今年度はこれらについて「京」を用いた本格的な多目的設計最適化計算を開始した。これら実問題での検証計算は平成27年度まで継続の予定であるが、今年度から有益な知見が得られ始めており、マツダ(株)では次世代の自動車の車体開発への適用のフィージビリティスタディを開始している。</p> <p>②課題5について 大規模アセンブリ構造体の耐震信頼性評価を高精度に行えることを実証するために、ものづくり産業界と協力し、実機問題で「京」による具体的事例の解析作業を遂行した。原子力機構では、高温工学試験研究炉の再稼働に向け、安全審査対応に協力し、当該技術を活用して耐震評価解析を実施した。(株)荏原製作所とは、従来解析手法と大局的な挙動解析結果が一致することを確認し、詳細な挙動解析も同時に可能なことを確認した。これにより、高性能計算機を利用すれば、俯瞰的な耐震裕度評価と各部ごとの詳細な評価を可能であることを確認した。地震に対する信頼性を高めたインフラ整備貢献するために、結合部を有するターボ機械の解析の先駆的事例解析を継続し、評価していく。</p>
<p>(2)各観点の差評価と今後の研究開発の方向性 【必要性】 一部の研究開発課題を融合することも視野に入れ、研究開発課題間の連携を強化して効果的に研究開発を進めることが必要である。</p>	<p>①基本的な推進体制について 現在推進中の5つの研究課題は、当初応募のあった12課題から課題評価委員会を設置してより社会ニーズの高い、プロダクトイノベーション対応2課題、プロセスイノベーション対応2課題、安心・安全対応1課題を厳選した経緯があり、各課題ごとの成果に対する産業界等からの期待は依然として極めて大きい。また、各課題はそれぞれ独自の目標をもっているため、現在の基本的な推進体制は維持して、必要に応じて分野内のサポート体制を強化することによりそれぞれに期待されているインパクトのある成果創出を着実に実現することを優先したい。</p> <p>②課題間連携について 特に課題4(多目的設計探査)については、先進的な設計最適化の手法であることとその応用範囲が極めて広いことから適用事例の増強に対する期待が大きい。そこで本分野では、課題1や多くのサブテーマを有する課題3と連携した取り組みを実施することによって、より効果的に適用事例を増やすことを検討する。</p> <p>(課題間連携強化については、体制構築の説明の中で補足して説明する)</p>	<p>課題4と課題1との連携では、高迎角時の翼周り流れのプラズマアクチュエータによる制御方法に関する設計探査を実施。有益な知見を得ることに成功し、日本機械学会第11回最適化シンポジウム、アメリカ航空宇宙学会国際会議Scitechなどで成果を発表済み。現在ジャーナル論文を準備中。また、課題4と課題3の連携では、自動車タイヤのフィン形状の空力多目的設計探査を実施中である。2015年度中に成果をあげ、横浜ゴムからプレスリリースを出すことが目標。</p>

<p>【有効性】 実証に基づく優位性の比較として、先進性が高いと評価されている他ソフトウェアとのベンチマーク比較を進めることや、これらのベンチマーク比較結果や各課題の進捗状況を踏まえて重点的に開発すべき機能を絞り込み分野全体としての成果を最大化する必要である。</p>	<p>①各課題で利用されている先端的な基盤アプリケーションについては、その機能の特徴を明確にするために、すでに今年度後半から研究機関や産業界で多用されているソフトウェア（オープンソース中心）とのベンチマーク比較する準備を進めている。今年度末から来年度にかけてそれらの結果をとりまとめて評価を行う。 ②本件については、ユーザーである産業界からの様々な角度からの評価を得るために、産応協（スーパーコンピューティング技術産業応用協議会）と連携した、「HPC次世代ものづくりワークショップ」を設置して情報の共有化を進めており（すでに1回実施済み）、ここでの評価も参考にして重点的に開発すべき機能の確認を行う。</p> <p>なお、成果としての先端的基盤アプリケーション群は、分野4の統合情報基盤であるHPC/PFに実装して公開し、産業界等へ広く展開する。</p>	<p>◆ 本分野の主要なソフトウェアである、FrontFlow/blue、FrontFlow/violet、OpenFORM、FrontISTR、FrontCOMP、PHASE等について、他流通ソフトウェアとのベンチマーク比較を進めている。 その結果については、成果報告書に記載するとともに可能な情報に限りアウトリーチサイト等を通して公表をする。また、多目的設計最適化アルゴリズムCheetahに関しては現在最も普及しているNSGA-IIアルゴリズムや最新の設計最適化手法の1つであるMOEA/Dと比較し、優れていることを確認</p> <p>◆ また、結果については、産応協の「HPC次世代ものづくりワークショップ」で順次報告を行って（2回実施）、産業ニーズサイドからみた評価を得、重点的に開発すべき機能の確認を行いながら進めている。</p>
<p>産業界の関心が高いプリ・ポスト開発の成果を活用する人材育成への取組が必要である</p>	<p>①大規模格子生成のプリプロセスについては、現在、階層的直交格子の自動生成プログラムを整備中である。生成した階層直交格子を元に非構造格子へ変換するプログラム開発を進めている。これらのプログラム整備により、直交格子系、非構造格子系の流体シミュレータについては、計算準備が整う。 ②ポストプロセスについては、並列で計算・出力された多数の計算結果をハンドリングし、イメージ生成（可視化）、分析などの処理にデータを受け渡す仕組み（ライブラリ）を、AICSと協力してH25年度に開発予定である。このファイル入出力ライブラリを各アプリで共通に利用することによって、格子生成から可視化までのデータの一貫性が担保される。 イメージ生成部である可視化システム開発は、プロジェクト当初からAICSで分担し（分野4の体制構築では人員・費用面などの点で賄えないため）、協力体制で進めている。H26上期にβ版をリリース予定で、これを受けてHPC/PFへと機能連携を実施する予定である。</p> <p>人材育成の観点では、HPC/PF利活用のセミナーの一環として実施を計画する。</p>	<p>【課題間連携について】 ◆ プリプロセス：格子生成支援システムの整備はやや遅れているが、今年度中に非構造格子対応を実施予定。 ◆ ポストプロセス：AICSからリリースの大規模並列可視化システムをHPC/PFとシームレスに利用可能なように整備中で、利用者の利便性を向上させている。</p> <p>【人材育成について】 ◆ HPC/PF利活用セミナー第1回を実施済（H25年12月）。ポスト機能（可視化）等について高評価を得ている。</p>
<p>【効率性】 より具体的な事例の情報発信、企業の経営的な視点（費用効果など）も考慮した広角的な説明会の実施、企業トップマネジメント層へのPR活動など、産業応用をより強く意識した取組が必要である。</p>	<p>①情報発信活動については、昨年11月にアウトリーチ専用サイト（計算工学ナビ）を設けて、分野4の最新情報をタイムリーにわかりやすく広報して行く仕組みができていく。今後は、PR効果の高い情報（「京」による先端的事例を含む具体的解析事例、ベンチマーク結果等）の蓄積を継続的に実施し発信して行く。 ②経営的な視点を考慮したPR活動の強化については、まずは実際の設計業務に活用した場合の具体的な効果を明確にすることが重要で、現在それを評価するための設計システムを検討中であり、これを構築する部品群の整備や機能評価の準備を実施中。今後、企業での利用シナリオを想定した設計システムを構築し、まずその利活用により得られるメリットなどをより明確にする。その上で、開発提供システムのメリットや展開シナリオの説明資料を整理し、企業の意味決定マネジメント層にフォーカスした効果的な情報発信を検討する。</p>	<p>【事例情報の拡充と効果的PR活動】 ◆ 特に産業界等から大きな関心が寄せられている「京」の事例については、企業経営層等の専門家でない意思決定層の理解を得ることが先決であり、インパクトのある要点を平易に解説した事例DBを作成中。4件程度／アプリ 目標。 ◆ 上記事例DBの他、HPC対応アプリやその活用例、普及行事、ニュースター（3～4か月おき）を専用サイト（計算工学ナビ）にて配信中心。新規アクセス数が増加中。（関連施策の中でも状況報告）</p>

<p>(3)その他</p> <p>分野全体としての「次世代ものづくり」の姿を示せていないことや各課題の成果を統合して分野としての成果を昇華させるに当たって一部課題の位置付けが見えにくい。</p>	<p>我が国の今後のものづくりの課題は、得意技の高品質・高信頼設計(プロセスイノベーション)に加えて、よりインパクトの大きい機能の開発(プロダクトイノベーション)であり、この両者をいかにスピーディーに実現する仕組みをつくるかが重要である。本分野では、まず各研究開発課題の推進でその先駆的事例を創出し、次いで、その共通基盤的成果を体制構築施策において推進するHPC/PFIに実装して広く普及させるというシナリオになっている。一部課題でかなりの準備作業が必要な事情もあり(前記指摘事項で回答)、成果の足並みがやや不揃いで全体がまだ見えにくいことは否めないが、上記シナリオをベースとする成果は、HPCによる「次世代ものづくり」を牽引する仕掛けとして極めて効果的であり、産業界からの期待も大きい。</p>	<p>◆「次世代ものづくり」の先導的事例として掲げている5つの代表的課題については、その位置づけ/役割を一層明確にした上で、「京」で初めて達成できる成果を創出しつつある。また、ものづくり全体への成果普及については、技術分野別の代表的アプリケーション(約10本)と共通基盤技術(数件)をHPC/PFIに実装する作業が進んでいるとともに、ハンズオンセミナー等を通してその利用効果についても産業界で実感しつつある。このように、既存のシミュレーション技術と計算機インフラの限界をブレークスルーできる、HPCシミュレーション主導型の「次世代ものづくり」の姿を実践を通して示している。</p>
<p>「京」以外の計算機の活用も進めるとともに、戦略目標を達成するという観点で全体を見直し、トップダウンで、課題間連携を重点的取組とすること、課題の統合も含めて計算資源を大胆に傾斜配分することなど検討する必要がある。</p>	<p>各課題の準備状況や今までの解析の実績、更に今後の計画を踏まえて、計算機資源のより効果的な利用法について抜本的な見直しをしており、その結果をH26年度からの計画に反映させる。前述の通り、各課題は独自の技術課題を有しており、基本的な研究開発体制そのものは維持するが、課題間のより効率的・効果的な連携(例えば課題4と課題1、課題3)については今後一層積極的に進めていく。</p>	<p>◆「京」ならではのインパクトのある成果創出のため、すでに重点枠、加速枠を戦略的に活用したメリハリある取り組みを実施している。その成果も創出されつつあり、今後論文発表、プレス発表を強化するとともに、事例DBを作成・公開して広く活用への拡大にむけて貢献して行く。</p> <p>また、「京」以外の計算資源の活用については、特にFOCUSスパコンを利用して、HPC対応人材の育成施策(トライアル利用、ハンズオンセミナー等)を精力的に実施している。</p>

●研究開発課題

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
課題1: 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発		
<p>ロバスト性を評価対象に加えるとともに産業界への発信と対話を含めてより実用化を見据えた展開を期待したい。</p>	<p>①平成25年12月に日本機械学会流体工学部門に「プラズマアクチュエータ研究会」を立ち上げた。平成26年3月に第1回研究会の開催を予定しており、今後年間数回の開催を予定している。本研究会には多数企業が参加しており、この研究会を利用してこれまでの成果を産業界へ展開するとともに新たな応用先などが生まれることを期待している。また、この中から新たな共同研究が生まれることも期待している。</p> <p>②実問題への適用として、大スケールの回転機器の流体制御の計算を進めており、あわせて小スケールの応用についても適用可能性を確認した。予備的な計算から一定レベルの性能向上が見られており、結果を公表することで、実用化の可能性をより広く認知していただく。</p> <p>③残り2年間、一定期間ごとの具体的マイルストーンを設定し、実用化に向けた研究を着実に進める。回転機器以外への応用については、次年度草々に検討を開始する。</p>	<p>①産業利用展開に関するマイルストーンを補足資料5に記載する。5つのテーマに対して計算機と人的資源の範囲内で個々のテーマに即して進めている。</p> <p>②研究会は第1回に引き続きH26.12に鳥取にて第2回を開催、参加約50名のうち10名以上の産業界の方の参加を得た。この場を通じて、技術の現状を共有するとともに、誘電体の特性理解や電源の小型化、プラズマアクチュエータ機器の標準的など、実用化に向けた研究が進行している。</p> <p>③企業の協力により、実際の小型ファン形状を対象としたシミュレーションを開始するなど新たな適用がはじまった。次年度に向け、更なる適用先についても議論を進めている。</p>
<p>ロバスト性を評価対象に加えるとともに産業界への発信と対話を含めてより実用化を見据えた展開を期待したい。</p>	<p>①動的なフィードバック制御によるロバスト性向上に関する研究は既に開始している。今後、制御効果に関して、信頼性・ロバスト性という評価項目を追加する。具体的には、以下の方法で気流の変化・外乱(迎角、速度、乱れ度)へのロバスト性向上を実現・確認する。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・翼面圧力のセンシングによるフィードバック制御を利用して様々な条件へ対応する。 ・複数のプラズマアクチュエータを利用することで、制御が難しい条件での制御可能性を高める。 ・流体制御を前提とした新たな翼型を提案し、性能、ロバスト性が高い翼型と制御方法を示す。 	<p>①シミュレーション結果の妥当性確認として、プラズマモデルおよび体積力モデルの信頼性を詳細に検討し、現在利用しているプラズマモデルや誘起流れモデルの有効性を確認した。</p> <p>②定量的なロバスト性評価は膨大なケースの計算を必要とする。限られた計算機資源の範囲でできることとして、新たな対応策によりこれまで制御できなかったケースに対応するなど適用範囲を広げている。今後、複数アクチュエータ、フィードバック制御、得られた知見(設置位置、3つのメカニズムを効果的に利用)を活かして適用先を広げ、さらなるロバスト性を示して行く予定である。</p> <p>③計算機資源の関係から、H26におけるフィードバック制御は2次元計算により実施した。H27は本格的な3次元計算を行う。</p> <p>④「新たな翼型の提案」に向けた準備計算を開始している。難しい課題であるが、何らかのアイデアをH27で示したい。</p>

<p>課題2: 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発</p> <p>企業、大学等との連携による早期の成果普及や計算結果の定量的検証方法の検討が期待される。</p>	<p>①現在進行している連携を含めて、ナノエレクトロニクス、パワーデバイス等のものづくり現場(企業、大学、デバイス研究開発プログラム等)との連携を強化し、ナノ構造プロセス・ナノ界面特性に関する成果の早期普及に努める。</p> <p>②ものづくり現場との連携・フィードバックにおいて、ナノ構造形成の主要因子、ナノ界面特性等の解析評価結果とナノ構造形態、界面抵抗等の実験結果との対比等により、計算結果の検証を図る。</p> <p>③ものづくり現場における新規材料探索に資する解析手法、方法論等の知的基盤を構築し、産業界が使える形で提供することを図る。古典手法も含めたマルチスケールのシミュレーションの有効性を検証する。</p> <p>④また、解析プログラムの普及活動(利用セミナー、WS開催、ポータルサイト等)を強化する。</p>	<p>①東芝からSiC酸化膜構造に関する特許申請を予定(社内手続きが完了)。</p> <p>②実験グループとの連携において、ナノ界面構造に関する解析結果(C-C結合の形成など)と実験結果とを対比し、計算結果の検証を進めた。</p> <p>③SiC酸化過程に対してマルチスケールのシミュレーション(古典MD解析を援用した第一原理解析)を実施し、従来予想にない新しい構造、反応を見出すなど、その有効性を示した。</p> <p>④プログラム公開(H26年5月)、WS開催(80名程度の参加者)、利用講習会開催(H26年度3回開催:毎回20名程度の参加者)、ポータルサイト運営などを実施し、普及活動を強化した。</p>
<p>課題3: 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発</p> <p>他のアプリケーションに対する優位性や解析事例を企業トップマネジメント層等に分かり易く伝え、産業界等への成果の展開を加速することが期待される</p>	<p>本PJで開発を進めているアプリの優位な点は、先進的な計算技術を導入し、大規模な計算機の性能を引き出せる高性能なソフトウェアであること、その結果高い信頼性をもつ計算結果が得られる点である。加えて、大規模シミュレーションを企業の設計業務に容易に導入できるような技術も同時に提供する点が挙げられる。これらの枠組みにより、大規模並列シミュレータ導入のハードルが下がり、技術者は少ない工数でシミュレーションを活用できる。これは、技術者が本来の業務に専念でき、生産性の向上につながることを意味する。これまでは、システム開発や整備を中心にプロジェクトを推進してきた。現在、設計システムを構築する部品群が揃いつつあり、機能評価も進みつつある。今後、企業での利用シナリオを想定して設計システムを構築・評価するとともに、その利活用により得られるメリットなどをより明確にしていいく。また、開発提供システムのメリットや展開シナリオの説明資料を作成し、企業の上層意思決定層にフォーカスした情報発信を検討する。成果の展開については、各種コンソーシアム、共同研究、各種発表・セミナーなどのチャネルを通じて実施する。加えて、本PJで保有するクラスタシステム、およびFOCUSシステムに対して、開発したHPC/PFシステムおよび派生設計システムをインストールし、テストベッドとして活用する。</p>	<p>①情報発信 企業の意思決定マネジメント層への情報発信として計算工学ナビを発行し、先端的な成果をアピールしている。</p> <p>②成果の展開 ターボ: コンソーシアムで使用するクラスタシステムに解析システムをインストールし、コンソーシアム参加企業がシステムを簡易に利用できる環境を整備 船体: 本プロジェクトで開発した抵抗予測技術を、日本造船技術センターを中心に、中小造船メーカーへ展開する。</p>

<p>実証に基づく優位性の比較として、先進性が高いと評価されている他ソフトウェアのとのベンチマーク比較を進めることや、これらのベンチマーク比較結果や各課題の進捗状況を踏まえて重点的に開発すべき機能を絞り込み分野全体としての成果を最大化する必要があります。</p>	<p>本PJでの開発ソフトと市販ソフトとの関連性については、シミュレーション対象や機能の点から得意分野が異なる。この観点からは、市販ソフトと本PJ開発ソフトは棲み分けになると思われる。したがって、競合するという観点よりも、相補的に使えるようにインターフェイスを整備するなど協力関係を模索していきたい。</p> <p>大規模計算を考えた場合、他の競合と比較してプリポストを含めたスループット、また高解像度計算による高い信頼性の点では優位である。ご指摘のように他ソフトとのベンチマークによる定量的評価は必要である。今後、順次ベンチマークを行い、検証結果を検証データベースで公開していくことを計画している。また、具体的な事例の実証を行いながら、エビデンスとなるデータを示していく。得られたデータは、利用ガイドラインとして活用できるように、本PJで推進しているHPC/PFのコンポーネントである知識データベースへ登録し、広く活用できるようにする。また、このデータベースは、開発するシミュレータの性能や機能を示すものであると同時に、そのパラメータは類似計算の雛形としての役割も果たす。このデータベースを充実させること自体がシステムとしての価値を高めていくことに繋がる。</p> <p>開発ソフトの維持管理については、基本的には、開発者側の主体性が第一に必要と考えている。継続的な開発が可能のように、外部資金あるいは企業ユーザからの収入などでの運用を考慮していく。ものづくりアプリは継続的なユーザサポートがないと利用が難しいのえ、サポートのためにはベンダーとの協力体制を構築するスキームを検討する。</p> <p>機能の開発項目については、コンソーシアムなどのから意見を吸い上げて順次実施を予定している。</p>	<p>①ベンチマークテスト ターボ：一部の実証テーマにおいて市販ソフトとの定量比較を実施した。本PJでは非定常特性の予測精度に優位性があるが、乱流モデルをベースとする市販ソフトのほうが有利である側面も確認し、各ソフトの棲み分けを明確にした。 船体：ワークショップ等で公開されている市販ソフトによる計算結果と比較し、本PJのソフトの優位性を確認。</p> <p>②ソフトウェアの開発維持 ターボ：分野毎(圧縮機、ポンプ、ファン等)にわかれて各WGにおいて、今後のソフトウェア利用について検討中。</p>
<p>手法としての先進性や独創性は一部みられるものの、「京」の利用によりブレークスルーを創出し、それをものづくり産業へ波及させるという戦略目標を踏まえ、本分野の研究開発課題としての方向性について今一度検討する必要がある。</p>	<p>課題4：多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発</p> <p>実問題での適用が不十分であるという点が指摘いただいた大きな点であると思えます。JAXA内での問題(射点設計やDESTINY軌道設計)や課題1との連携に加えて、現在は、横浜ゴムとのタイヤ開発、JR東海との高速車両開発、マツダとの車両開発、HOYAとのレンズ開発に取り組んでおり、平成26年度末にはその成果もご報告できると考えております。</p> <p>【企業との共同研究の現状】 横浜ゴムとのタイヤ開発:「京」での多目的最適化計算(ファーストトライアル)を実施中 JR東海との高速車両開発:「京」での多目的最適化計算(ファーストトライアル)を実施中 マツダとの車両開発:平成26年度第1四半期に「京」での多目的最適化計算を実施予定 HOYAとのレンズ開発:性能評価のためのソフトウェア開発中(平成26年度中に計算開始予定)</p>	<p>自動車車両構造設計(マツダ(株)との共同研究)、自動車タイヤ空力形状設計(横浜ゴム(株)および課題3との共同研究)、高速鉄道車両の空力音響設計(東海旅客鉄道(株)および課題1との共同研究)について昨年度から検討を進めており、今年度は「京」を用いた本格的な多目的設計最適化計算を開始した。</p> <p>自動車車両構造設計:「京」での多目的最適化計算を実施中。 自動車タイヤ空力形状設計:「京」での多目的最適化計算を実施中。 高速鉄道車両空力音響設計:「京」での多目的最適化計算を実施中。</p>

<p>課題5: 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発</p> <p>手法としての先進性や独創性は一部みられるものの、「京」の利用によりブレークスルーを創出し、それをものづくり産業へ波及させるという戦略目標を踏まえ、本分野の研究開発課題としての方向性について今一度検討する必要がある。</p>	<p>①手法としての先進性や独創性(従来のMPCとの比較)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・第一の使用法であるメッシュ不整合(細分化)結合に対し、精度問題解決の為、汎用的なメッシュ整合技術を確立。 ・第二の使用法である節点間の結合とジョイントを経験的に条件入力するのに対し、部品間接続技術を提案。 <p>②「京」の利用によりブレークスルーを創出するため組立構造解析による固有値解析等を計算中</p> <p>③ものづくり産業へ波及させるという戦略目標を踏まえ、</p> <ul style="list-style-type: none"> ・荏原製作所殿/千代田化工建設殿の設計課題取組中 <p>④本分野の研究開発課題としての方向性について</p> <ul style="list-style-type: none"> ・原子力プラント:時刻歴応答解析の試算に着手 ・化学プラントへの応用展開 	<p>① 組立構造解析手法と従来手法との比較/改良点を国際会議にて報告(ICONE22) > 論文化(Mechanical Journalに採択)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・JAEA(HTTR)、(株)荏原製作所殿(ターボ機械)、千代田化工建設(株)殿(石油プラント)で「京」の計算資源を活用し実践中 <p>② 長時間(従来不可能だった揺れ時間3分/15,000ステップ)の3万超の部品集合体(組立物)解析を実施</p> <ul style="list-style-type: none"> ・8,192ノードの利用による安定的なプロダクションランを確認。16,384、24,576ノード超利用を展開中。 <p>③ものづくり産業へ普及活動を加速</p> <ul style="list-style-type: none"> ・(株)荏原製作所殿(ターボ機械)と千代田化工建設(株)殿(石油プラント)の実機で実証解析 <p>④ものづくり産業への具体的な貢献</p> <ul style="list-style-type: none"> ・HTTR:バックチェック協力による早期再稼働化へ寄与(従来解析を補完するためにデータを提出/観測値を参照して計算結果の妥当性を分析/再稼働の為に安全性解析の一助) ・化学プラントの将来基準の先取
--	--	--

●計算科学技術推進体制の構築

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>(1)課題の進捗状況 一部研究開発課題については、研究開発課題間の更なる積極的な連携が図れる体制作りが望まれる。</p>	<p>特に課題4(多目的設計探査)については、先進的な設計最適化の手法であることとその応用範囲が極めて広いことから適用事例の増強に対する期待が大きい。そこで本分野では多くのサブテーマを有する課題3と連携した取り組みを実施することによって、より効果的に適用事例を増やすことを検討する。 また、課題4の研究成果を体制構築で整備しているHPC/PFへ機能移植し、パラメータを変えて計算した多くのケースから最適値パラメータを得る検証事例を創出して検証データベースへコンテンツ登録を行う。一方、高度なチューニング技術(JAEAで共通基盤技術として実施中)等の知見については、論文や説明資料とともに、サンプルコードの共有を行うことにより、分野内での成果の共有を図る。また、共通的に利用できるライブラリーなどは、マニュアルなどを整備し、ダウンロード可能にする。必要に応じて、利用説明会やHand Onセミナーを実施する(AICSや他分野とも協力)。</p>	<p>【課題間連携について】 ◆ 課題4と課題1との連携では、高迎角時の翼周り流れのプラズマアクチュエータによる制御方法に関する設計探査を実施。有益な知見を得ることに成功し、日本機械学会第11回最適化シンポジウム、アメリカ航空宇宙学会国際会議Scitechなどで成果を発表済み。現在ジャーナル論文を準備中。 また、課題4と課題3の連携では、自動車タイヤのフィン形状の空力多目的設計探査を実施中である、2015年度中に成果をあげ、横浜ゴムからプレスリリースを出すことが目標。 ◆ 課題4の多目的設計探査技術については、HPC/PFへの導入テストを実施中。</p> <p>【課題間の情報共有について】 ◆ 高度なチューニング技術(共通基盤)については、HPC/PFに事例を実装して成果の共有を図っている。さらに、共通的利用が可能な遠隔可視化システムは、平成27年度にオープンソース化の予定。</p>
<p>(2)各観点の差評価と今後の研究開発の方向性 産業界の関心が高いプリ・ポスト開発の成果を活用する人材育成への取組が必要である</p>	<p>①大規模格子生成のプリプロセスについては、現在、階層的直交格子の自動生成プログラムを整備中である。生成した階層直交格子を元に非構造格子へ変換するプログラム開発を進めている。これらのプログラム整備により、直交格子系、非構造格子系の流体シミュレータについては、計算準備が整う。 ②ポストプロセスについては、並列で計算・出力された多数の計算結果をハンドリングし、イメージ生成(可視化)、分析などの処理にデータを受け渡す仕組み(ライブラリー)を、AICSと協力してH25年度に開発予定である。このファイル入出力ライブラリーを各アプリで共通に利用することによって、格子生成から可視化までのデータの一貫性が担保される。 イメージ生成部である可視化システム開発は、プロジェクト当初からAICSで分担し(分野4の体制構築では人員・費用面などの点で賄えないため)、協力体制で進めている。H26上期にβ版をリリース予定で、これを受けてHPC/PFへと機能連携を実施する予定である。</p> <p>人材育成の観点では、HPC/PF利活用のセミナーの一環として実施を計画する。</p>	<p>【課題間連携について】 ◆ プリプロセス:格子生成支援システムの整備はやや遅れているが、今年度中に非構造格子対応を実施予定。 ◆ ポストプロセス:AICSからリリースの大規模並列可視化システムをHPC/PFとシームレスに利用可能なように整備中で、利用者の利便性を向上させている。</p> <p>【人材育成について】 ◆ HPC/PF利活用セミナー第1回を実施済(H25年12月)。ポスト機能(可視化)等について高評価を得ている。</p>
<p>【効率性】 より具体的な事例の情報発信、企業の経営的な視点(費用効果など)も考慮した広角的な説明会の実施、企業トップマネジメント層へのPR活動など、産業応用をより強く意識した取組が必要である。</p>	<p>①情報発信活動については、昨年11月にアウトリーチ専用サイト(計算工学ナビ)を設けて、分野4の最新情報をタイムリーにわかりやすく広報して行く仕組みができていく。今後は、PR効果の高い情報(「京」による先端的事例を含む具体的解析事例、ベンチマーク結果等)の蓄積を継続的に実施し発信して行く。 ②経営的な視点を考慮したPR活動の強化については、まずは実際の設計業務に活用した場合の具体的な効果を明確にすることが重要で、現在それを評価するための設計システムを検討中であり、これを構築する部品群の整備や機能評価の準備を実施中。今後、企業での利用シナリオを想定した設計システムを構築し、まずその利活用により得られるメリットなどをより明確にする。その上で、開発提供システムのメリットや展開シナリオの説明資料を整理し、企業的意思決定マネジメント層にフォーカスした効果的な情報発信を検討する。</p>	<p>【事例情報の拡充と効果的PR活動】 ◆ 特に産業界等から大きな関心が寄せられている「京」の事例については、企業経営層等の専門家でない意思決定層の理解を得ることが先決であり、インパクトのある要点を平易に解説した事例DBを作成中。4件程度/アプリ目標。 ◆ 上記事例DBの他、HPC対応アプリやその活用例、普及行事、ニュースレター(3~4か月おき)を専用サイト(計算工学ナビ)にて配信中。新規アクセス数が増加中。(関連施策の中でも状況報告)</p>

●分野全体

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>課題間のメリハリの付け方や課題間連携によるシナジー効果など、分野としてより戦略性のある取組が必要である。</p>	<p>課題間のメリハリについては、年度毎に従来から行っている京の計算資源の重点課題を2課題に対し、それらの課題の進捗の加速を支援し、また京の追加資源の獲得を後押しする。 また、課題ごとに均等にほぼ配分された予算だけではなく、全体予算から東大FX10などの計算機利用料を、必要とする課題へ追加配分を従来から行っているが、メリハリのある追加計算資源を付与して、課題全体の研究の加速を諮る。 課題間連携に関しては、体制構築により従来行っている研究会やレクチャーを充実し、共同研究や相互の計算結果データの利用を促すなど、統括責任者を中心に、リーダーシップを発揮して進めて行く。</p>	<p>今年度は、京の計算資源の重点課題2課題(課題1・2)に対し、進捗の加速を支援し、京の追加資源の獲得を後押しした結果として、審査の結果、研究開発課題2に今年度880万ノード時間が追加配分された。また、全体予算から東大FX10の計算機利用料を付与して、研究の加速を諮った。 また、体制構築で研究会やレクチャーを通じて、重点的取組として課題間連携を行っている。</p>
<p>プロジェクトの自己評価や数値目標の設定など、有効性が見える化が必要である。</p>	<p>3年がたち中間評価を終えて今回、最終成果の指標の見直しを行い、プロジェクト終了後の有効性を自己評価する予定である。また、京での経験や計算結果を踏まえて、研究対象や結果の誤差など数値目標を再検討する。</p>	<p>プロジェクト終了後の有効性の自己評価や、京での経験や計算結果を踏まえた研究対象や結果の誤差など数値目標の再検討を開始した。</p>
<p>アプリケーションの実行効率を高める最適化技術やアルゴリズムなどを他分野にも普及させることにより、分野間を有機的に発展させる取組が必要である。</p>	<p>RISTおよびAICSが12月に開催した「京」における高速化ワークショップなどで分野5から発表(AICS、RIST以外の発表4件中3件)を行うなど他分野への普及にも取り組んでいるが、今後も引き続き、他4分野およびRIST、AICSと協力してワークショップで発表や交流などを通じて取り組む予定である。</p>	<p>10月に開催されたRIST主催の第1回成果発表会にブース出展し、体制構築の中で行っている、並列化・最適化等のアドバイスを行うユーザ支援、有益な情報を蓄積する高性能計算の扉の成果などを中心に他分野への普及を行った。(体制構築での同指摘事項への対応案、フォローアップ状況の内容も参照)</p>
<p>分野全体としての成果を考えた場合、限られた計算資源の中で何を優先して攻めるべきか、各課題の成果を、必要に応じて統合し、どのように物理学の成果に昇華させていくか、といった戦略性が見えにくいことが懸念点である。</p>	<p>最終的には、京を使って分野融合的な研究成果を得る事を目標としたい。それを達成するために、何が必要かを吟味し、優先的に進める研究を精査して行きたい。現状の計算資源量を考えると、残り2年間で、当初挙げた計画を最大限達成する事が目標であるが、課題1、2、3に関しては京の次を使って計算で3分野の真の融合研究(QCDからハドロン相互作用、ハドロン相互作用から原子核の性質・核物質状態方程式、原子核の性質・核物質状態方程式から超新星爆発・元素合成)を達成するための、土台となる実証研究の完成を優先させたい。課題4に関しては、世界最高精度の計算を完成させることに力を傾注する。</p>	<p>左記にに掲げた優先事項に従って、研究を進めている。ポスト「京」の重点課題の採択も決まり、より一層戦略的に進める予定である。</p>
<p>「京」以外の計算機の活用も進めるとともに、分野として戦略目標を達成するという観点で全体を見直し、トップダウンで、課題間連携を重点的取組とすること、課題間の進捗に優先順位を付けて実計算時間を有効利用することなども検討する必要がある。</p>	<p>統括責任者を中心として、運営委員会や課題報告会などによりプロジェクト進捗状況把握を常に行い、東大FX10などの計算機利用料として全体予算から課題に追加配分することや、さらに京については前・後期の途中に資源配分見直しを行うことにより計算資源の重点化と進捗による優先化を充実して行っていくこと、体制構築では研究会やレクチャーを通じて、課題間連携を重点的取組として行い、分野として戦略目標を達成することを実現していく。 繰り返しになるが、特に、課題1、2、3に関しては、3分野の真の融合研究(QCDからハドロン相互作用、ハドロン相互作用から原子核の性質・核物質状態方程式、原子核の性質・核物質状態方程式から超新星爆発・元素合成)を達成するための、土台となる実証研究の完成を優先させるよう、統括責任者がリーダーシップを発揮するよう努力したい。課題4に関しては、世界最高精度の計算を完成させるとともに、ダークマターの性質等、素粒子標準理論の基礎となる結果を提供し、宇宙物理学と素粒子物理学の連携を推進して行きたい。</p>	<p>今年度は、京の計算資源の重点課題2課題(課題1・2)に対し、進捗の加速を支援し、京の追加資源の獲得を後押しし、審査の結果、研究開発課題2に今年度880万ノード時間が追加配分、全体予算から東大FX10の計算機利用料を付与して研究の加速を諮った。また、京の下期追加配分140万ノード時間中、課題1に100万ノード時間を割り当て、進捗による優先化を行っている。 課題間の連携の基礎となる課題1のハドロン間相互作用の決定をより進めるために、ゲージ配位生成に尽力した蔵増氏からハドロン間相互作用の決定の中心にいる初田氏に課題責任者を交代し、課題間連携を加速させる予定(詳細は別紙を参照)。</p>

●研究開発課題

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
<p>課題1: 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定</p> <p>あらかじめ数値目標を設定するなどして常に達成目標を意識して取り組み、限られた計算資源の中で物理学としての成果を創出していくことが期待される。</p>	<p>以下のように定量的数値目標の設定し取り組む。</p> <ul style="list-style-type: none"> 2013年版PDGデータにおけるクォーク質量 $\mu=2.3(+0.7/-0.5)$ MeV, $m_d=4.8(+0.5/-0.3)$ MeV, $m_s=95(\pm 5)$ MeV 軽い安定原子核(質量数4まで)の束縛エネルギー 20~30%の精度(当初目標のFS) バリオン間ポテンシャルの決定 重陽子などの既知の束縛エネルギーを10%程度の精度(当初目標のFS) Hダイバリオンなどの未知の粒子の性質を20%程度の精度(当初目標のFS) 	<ul style="list-style-type: none"> (2+1)フレーバーQCDのゲージ配位生成を京を用いて完了(H26年6月) ⇒ (1+1+1)フレーバーQCDは、今後は他資源を用いて精度の改善を目指す。 (2+1)フレーバーQCDでのハドロン質量などの物量測定 ⇒ 他資源(HA-PACS)を用いて実行中である。 軽い安定原子核(d, 3He, 4He)の直接計算の実行(課題1資源の65%使用) ⇒ H27年度は行わず、将来の課題とする。 バリオン間ポテンシャルの予備計算開始(課題1資源の15%使用) ⇒ H27年度に、課題1の全資源を投入して実行する。
<p>ハドロン物理学の種々の局面に対する理解</p>	<ul style="list-style-type: none"> 2体・3体バリオン間ポテンシャルの決定 ⇒ ハイパー核を含む原子核計算へのインプット ハドロン間ポテンシャルの決定 ⇒ 共鳴状態(ρ、Hダイバリオンなど)の研究 	<ul style="list-style-type: none"> H26年度は計算資源不足により、2体バリオン間ポテンシャルは予備計算(NN,YN,YY)のみ。 ⇒ H26年度: 大サイズ格子・物理点近傍で、バリオン間相互作用の初めての(定性的)導出。 ⇒ H27年度: 京資源+他資源を用い、統計誤差を1/10にして、S=0,-1,-2,-3,-4の NN, YN, YY相互作用の系統的研究を行いハイパー核、中性子星へのインプット。 3体バリオン間ポテンシャルは、計算資源不足によりH27年度は行わず、将来の課題とする。 物理点近傍でのエキゾチックダイバリオン(H, ΩNなど) ⇒ H27年度の本格計算に含む。(重いクォーク質量での予備計算は既に他資源で実行済。)
<p>課題2: 大規模量子多体計算による核物性説明とその応用</p>	<p>偶偶核以外の計算の進展が期待される。</p>	<p>平成26年度からは奇核も研究対象とする方向で順調に準備が進められている。</p>
<p>追加された三体力効果の研究や、現実的核力による有効相互作用の構築にもさらに京を活用してほしい。</p>	<p>平成26年度からは奇核も研究対象とする方向で順調に準備が進められている。</p> <p>三体力についても平成25年度から研究を開始し、これまで三体力効果を含んだ有効二体力を構築してきた。平成26年度にはこれを用いて京で原子核構造計算を行うことを計画している。大規模計算からのフィードバックにより、現実的核力による有効相互作用を精密に構築する計画である。</p>	<p>中性子過剰Cu(陽子数29)同位体などの奇核の計算を開始、中性子過剰核における殻構造の進化を議論している。長寿命核分裂生成物の奇核の構造計算も実行中。</p> <p>三体力効果を繰り込んだ有効二体力を用いた京による大規模殻模型計算が、質量数40程度の中性子過剰核で始まっている。軽い核に関しても、同様な有効二体力による計算が進行している。</p>

<p>課題3に対して、今後は(…中略…)課題2と協力した研究展開が期待される。</p>	<p>中間評価票で指摘された課題3との協力関係の構築については、鈴木俊夫氏(日本大学)、梶野敏貴氏(国立天文台)の貢献のもとで核ニュートリノ反応の計算をすすめている。平成25年度には和南城伸也氏(国立天文台)セミナーを開催するなどして、最近可能になった重い原子核の計算と元素合成の物理との接点を探っている。課題3との共同研究に結びつけるべく、交流を深めていく。</p>	<p>r過程核の初期にかかわる中性子過剰原子核の構造計算をおこなった。ニッケル78の二重魔法性を定量的に解明。RIBF実験とも比較。また、鈴木俊夫氏(日本大学)、梶野敏貴氏(国立天文台)との共同研究のもとで核ニュートリノ反応の計算を引き続きすすめている。</p>
<p>プロジェクトの自己評価や数値目標の設定など、有効性の見える化が必要である。</p>	<p>“見える化”についての適切な方法を探求している中で、社会貢献に関しては、課題2では原子力への応用という観点に於いて有意義な計算を計画している。特に、放射性核種を安定な核種へ変換する核変換について、必要な基礎データを計算することを重点課題の一つとしている。東京大学工学系研究科と連携して定期的に核変換反応に関する勉強会などを開催し、応用の観点からの評価、検討を今の段階から進めている。</p>	<p>基礎科学データとしての有効性は実験データとの比較で検証される。多くの計算結果に対し、有効性が実証され、国際コミュニティで高く評価されている。さらに、実験グループの論文に共著者として加わり、積極的に「有効性の見える化」を進めている。核変換研究で重要な長寿命核分裂生成物のうち、79Se, 90Sr, 93Zr, 107Pdに対して光吸収断面積の計算が実行できるように計算理論を発展させた。ImPACT Program(核変換)との連携を図っている。</p>
<p>課題3: 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明</p>		
<p>観測装置による観測可能性を踏まえた重力波の強度や波形の定量的計算や、「大規模量子多体計算による核物性解明とその応用」と協力した研究展開が期待される。強みを持つ理論物理学との協働による人材育成・交流を意識し、国際レベルでの貢献を目指すこと。</p>	<p>・本課題のシミュレーションで得られるデータは、元素合成研究、ニュートリノ放射過程研究、重力波研究を行う理論研究者に非常に有用なデータを供給するので、これらの研究者との連携を促進するとともに、新しい学問分野の開拓に寄与する。具体的には、連星中性子星の合体で放射される物質の情報が、分野をまたいで、突発的天体サーチや元素合成の研究に応用され始めており、今後の発展も期待できる。その際、原子核計算で導出された原子核反応率などのデータが有効活用される。 ・数年後からアメリカLIGO、日本KAGRAなどの重力波検出器が本格稼働し、またそれらと協働で大型光学望遠鏡が重力波源の対応天体サーチを大規模に進める。それに対して、重力波観測で用いられる重力波波形テンプレートや重力波源に対応する電磁波対応天体の予言に対する計算を通して、大型国際プロジェクトに貢献する。</p>	<p>・本課題に属する研究者の多くは、日本の重力波検出計画KAGRAに参画し、重力波の理論波形の提供、重力波源に対する電磁波対応天体の予言、およびデータ解析研究を通じて側面支援を行っている。 ・日本における元素合成研究の第一人者である和南城伸也氏と重元素合成に関する共同研究を推進中。 ・最も有望な重力波源である中性子星連星の合体の電磁波対応天体の研究において日本をリードすべく、本年度研究会を主催(2月12-14日)。重力波研究者、光赤外観測研究者、元素合成研究者を招待し、交流を深める計画。 ・中性子星連星の合体、重力波放射、元素合成に対する若手理論・計算宇宙物理学研究者の強化を進めている。</p>
<p>課題4: ダークマター密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成</p>		
<p>磁気輻射流体計算においては、輻射輸送計算もスコープに入れ、放出される電磁波スペクトルも計算し、観測と比較できるようにしていただければ素晴らしいと思う。</p>	<p>内部ではもちろん輻射輸送計算をおこなっている。輻射の扱いはFLDないしM1-closureなので、そこから直接観測と比較できるスペクトルが得られるわけではないが、得られた流体の速度・温度からより精密な輻射計算を行うことで観測と直接比較できるスペクトルを得ることは原理的に可能であり、手法も確立している。そのような研究はもちろんおこなっていく。</p>	<p>実際に計算を進めている。</p>
<p>標準ライブラリでも原因不明のエラーが起きるとのことであるが、それを教訓として、次世代のエクサスパコン開発においては、早い段階からヘビーユーザーである研究者が設計に参加するのが良いのではないかと？</p>	<p>これは分野5としての回答ではないが、AICS内に設置されるエクサスケールコンピューティング開発プロジェクト(2014/4/1発足予定)では「コデザイン推進チーム」がおかれる予定である。チームリーダーは牧野が担当する予定である。</p>	<p>課題4としての対応ではないが、ポスト「京」開発では既にアプリケーション開発者、AICSプロジェクトチーム、システムソフトウェア開発グループ、システム開発ベンダが協議しながら開発を進める「コデザイン検討会」をもち、アプリケーションからの要求、フィードバックを取り入れた開発体制になっている。</p>

●計算科学技術推進体制の構築

指摘事項	対応案(平成26年2月時)	フォローアップ状況(平成27年2月時)
より広い社会・一般国民に対し、成果をより分かりやすい形で情報発信することが必要である。	これまで、ホームページ上に若手研究者の研究を特集する「月刊JICFus」や「月刊JICFusムービー」を掲載してきた。今後は戦略課題の京による成果を動画つきで掲載するなど、充実を図る。	月刊JICFus 5件、月刊JICFusムービー 3件をホームページに掲載し、成果公開を行った。
今後は、アプリケーションの実行効率を高める最適化技術やアルゴリズムなどを他分野にも普及させることにより、分野間を有機的に発展させる取組が必要である。	中間評価以降、分野2との連携を進めるために、 <ul style="list-style-type: none"> ・双方の体制構築の取組を紹介して議論する打ち合わせを開催 ・分野5のユーザ支援で分野2からの依頼を受付開始 ・分野2の若手技術交流会に分野5から5名が参加して相互乗り入れを始めた。今後はこれらの取組を強化すると同時に、研究面での交流をさらに積極的に進める。 	左記に加えて分野2との連携して双方の計算手法に関する情報交流を行う取組を始めた。H26年11月に行った研究会を契機に、若手主導での交流促進を図る予定。 [コメント] 分野間の交流は一方からの働きかけだけでは進みにくい。AICSやHPCIコンソーシアムの主導による取組の検討が必要ではないか。