

ポスト「京」で重点的に取り組むべき 社会的・科学的課題に関する意見募集の 結果概要

文部科学省 研究振興局

参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する 意見募集（平成26年4月10日～平成26年5月12日）の結果概要（1/3）

- **意見総数：106件** <内訳> ①取り組むべき課題について：88件
 【医療・創薬】23件、【防災・環境問題】16件、【エネルギー問題】31件、
 【輸送機器設計】4件、【社会科学】5件、【その他】9件
- **意見の概要**
 - ②課題選定方針について：7件
 - ③計算科学インフラについて：11件

①取り組むべき課題について

【医療・創薬】

(医薬品設計)	<ul style="list-style-type: none"> ・創薬標的として重要な膜タンパク質など複数分子間の相互作用解析や、長時間(ミリ秒オーダー)の構造変化解析。 ・膨大な対象分子のビッグデータ解析とシミュレーションとの連携と、実際の創薬工程への展開。
(脳科学)	<ul style="list-style-type: none"> ・霊長類の脳プロジェクトの実験データと連携したモデル開発による全脳の神経系の解析。
(臨床応用)	<ul style="list-style-type: none"> ・医療現場から生み出され、蓄積される生命ビッグデータを活用した多階層での生命現象の解明と、患者ごとのデータに基づく個別化医療への展開。
(医療機器開発)	<ul style="list-style-type: none"> ・疾患の早期発見と低侵襲な治療を可能とする高機能な診断・治療機器開発につながる、細胞レベルの微細構造から臓器レベルまでのスケール差を取り込んだ解析。

【防災・環境問題】

(地震災害)	<ul style="list-style-type: none"> ・予測の不確実性を定量化し、科学的根拠に基づいた多様なシナリオの提示。 ・総合的かつ地域詳細なハザードマップ整備。
(気象・気候)	<ul style="list-style-type: none"> ・超高解像度大気モデルと超高解像度海洋モデルを結合した超精密気候モデルによる地球環境変動の将来予測の高度化。 ・高精細シミュレーションと新型センサー等から得られるデータを活かしたビッグデータ同化によるゲリラ豪雨のピンポイント予測。
(環境汚染)	<ul style="list-style-type: none"> ・原子・分子レベルから生態系等までを考慮した放射性物質の環境動態、汚染土壌の減容等の解析。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する 意見募集（平成26年4月10日～平成26年5月12日）の結果概要（2/3）

①取り組むべき課題について（つづき）

【エネルギー問題】

(電池材料)	・量子・統計力学の基礎の下、複雑なエネルギー変換現象や、蓄電池等の普遍的な原理を計算科学主導で解明。
(半導体材料)	・低消費電力化に有効なスピン電界効果トランジスタの実現につながるデバイス性能の定量的解析。 ・現実材料の機能や特性を左右する異種界面や材料の微細組織の多様な構造の解析。
(触媒材料)	・二酸化炭素、窒素等を高効率で固定化する技術の確立につながる高精度電子状態計算等による微視的反応機構の解明。 ・従来多く用いられてきた貴金属や希少元素の代替材料の機能解析、新規触媒材料の理論設計。
(構造材料)	・多結晶体で異種物質の析出や添加元素を含む複雑な内部構造が性質を支配する構造材料の高精度解析。
(燃焼プラント)	・実用燃焼器規模での大規模直接計算による火力発電用燃焼器等の効率的設計。

【輸送機器設計】

- ・フラッグシップシステムでは、忠実度の高い高精度解析を実施して、実験の代替となるようなリファレンスデータを作成し、そのデータを使ってモデル化を行い産業界に還元。そのモデルを用いて、下位のシステムでパラメトリック計算を行い設計に反映。
- ・現状では試作・実験でしか実施できない検証や、現状施設では実験することが困難な事象をシミュレーションで解明し、試作・実機レスの製品開発を推進。

【社会科学】

- ・動産・不動産、知的財産権、債権の経済的価値の評価を、将来の売上高の予測に基づいて行う手法の高度化。

【その他】

- ・ものづくりプロセスにおける原材料等、種々の製品で扱われる粉粒体の挙動解析の高度化。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する 意見募集（平成26年4月10日～平成26年5月12日）の結果概要（3/3）

②課題選定方針について

- ・日本の国際競争力強化につながるということを第一の判断材料とし、リスクや時間もかかるかもしれないが、大きなブレークスルーが期待される課題を設定していただきたい。
- ・国民の役に立つかという視点で考える必要がある。
- ・各府省において社会的な問題解決を目的とした実験・開発主体の研究開発プロジェクトが進められており、これらのプロジェクトと無関係に企画立案する事には無駄が多く、これらの既存の実験・開発を主体とした研究開発プロジェクトのテーマの中から課題を抽出するのが有効。
- ・単に実験を説明するために大規模・高速シミュレーションを行うのではなく、予測の科学や機能の予言能力により独創的な知識を生み出したり、他の追随を許さないような問題解決法の具体的な提案やデザインを可能とする研究開発にしていきたい。
- ・大きなデータや計算量を必要とするプロジェクトとの相乗的な効果を期待する。

③計算科学インフラについて

- ・社会的・科学的課題を解決する直接的なアプリケーション開発だけでなく、その開発の基盤となるソフトウェア構築技術や利用技術などのソフトウェア技術も重要。
- ・多数のシミュレーションケースを短期で実施できるようなCapacity Computingを大規模に実行できる環境の整備が必要。
- ・エクサスケールのフラグシップマシンの構築と同時に、デスクトップからより大規模計算へシームレスな拡張を可能にする多レベルでの計算資源の整備・共用と、そのためのソフトウェア開発、チュートリアル、専門チームによる最適化等、ユーザー視点での環境整備が必要。
- ・多分野へ適用可能な1つの大規模計算機ではなく、各分野に特化した複数の小規模計算機の構築可否について検討いただきたい。
- ・先鋭化してゆく各学問分野と計算科学の有機的進展を促すために、人材育成、分野間交流、対一般社会広報等を更に積極的に行うことが必要。