

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（意見一覧）

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【医療・創薬】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
1	疾患治療のための標的分子の立体構造を明らかにして薬分子を設計するStructure Based Drug Designが更に進んで、水中で標的分子が揺らいでいる構造を計算機で再現して、薬を設計する技術が欧米で急激に普及している。創薬産業を日本に残すために計算機技術基盤を強化する事が求められる。	現在の計算速度では水中に孤立して浮遊している標的分子に対して設計が行なえるのみで、核内受容体や膜タンパク質など複数の分子が協調して作用している状況を計算機で再現するにはポスト「京」の演算能力が必要である。現在は簡単な系で一マイクロ秒の計算が可能であるが、ポスト「京」では複雑な系で秒オーダーの計算を可能にする必要がある。	計算基盤の差が創薬能力の差に直結する時代が到来しつつあり、計算機能力で優位に立つ事が日本の技術力の国際競争力を高めることになる。
2	創薬への計算科学技術の応用は長年言われ続けられ期待されているものの、製薬企業の現場レベルで実用化されているとは言いがたい。この原因は、生体をシミュレートする技術が完成していないこともあるが、徹底的な計算条件の検討(最適化)がなされておらず、計算科学の有用性を具体的に説明できない点が大い。また、計算技術が完成してしまえば、後は計算機パワーの競争となり中国などには対抗が困難と考えられるため、完成していない技術を使いこなすノウハウを持つことが国内企業の競争力につながると考えられる。科学技術的な面からすると、エクサコンを使用しなければ達成できない計算を実施することは重要であるが、産業面からすると、チャンピオンデータを出すのではなく、安定な計算手法を構築して有用性を証明することが必須である。	現在私たちは、製薬企業のコンソーシアムとして京を利用し、蛋白質と化合物の結合力を予測する手法について、4種類の可溶性蛋白質(各10化合物程度)を様々な条件で計算し、高い精度で結合力を予測するノウハウを得ている。但し、京を用いても4種類の可溶性蛋白質についてノウハウが得られただけであり、創薬標的として重要な膜タンパク質(GPCR、チャネル)については課題が残っている。さらに、創薬では蛋白質と化合物の結合予測のほかにも、ADME/T、製剤、など計算手法に期待されている領域は多い。これらの課題について、現在最も有望と考えられる計算技術について条件検討を徹底的に行い、ノウハウを蓄積して実用レベルの手法を構築することを希望する。京で1回しか計算できないものがエクサコンでは100回計算できる。数多くの条件検討を行い、失敗しながら成功要因を見極める。この積み重ねなくして最適な計算をするためのノウハウを蓄積することはできず実際の創薬現場での活用は困難なままである。	エクサコンのような大規模計算機を用いてノウハウを蓄積し、最適な計算条件が確立できれば、実際の創薬現場では、より少ない計算リソースで活用が可能である。その結果、京やエクサを有償利用できない中小の製薬企業でも計算科学への取組みが可能となる他、IT企業が受託サービスを提供できるようになるなど、創薬に対する計算分野の裾野が大きく広がる事が期待できる。
3	創薬と医療の2分野におけるビッグデータ解析とシミュレーション技術の開発と社会実装に重点をおくべきである。新薬開発は、10年以上の期間と平均1000億円以上の費用を要し、そのコスト削減が急務である。医療においても、ゲノム特性に基づく個人に最適な医療(個別化医療)の促進が近々の課題となっている。現在、我々は製薬会社18社、IT会社2社との共同で「京」による医薬品開発の効率化に取り組んでいる。また、医療応用として理研・計算機構との共同で、抗がん剤の個別化薬剤治療のシミュレーションを「京」で行っている。	上述の通り、我々は創薬・医療分野における「京」を用いた研究開発をすでに行っているが、「京」のスペックではまだまだ十分とは言えない。特に、生命科学分野の計算は、対象分子の種類が膨大であることや予測精度がヒト安全性や開発コストに直結することから、創薬・医療分野におけるビッグデータ解析とシミュレーション研究のポスト「京」による継続的高度化が必須である。また、創薬・医療においてはアカデミアの基礎研究のみでは不十分であり、社会実装をより明確化し、製薬会社や医療機関との具体的なコラボレーションをベースにした実施体制も重要である。	「計算による新薬開発の効率化によるコスト削減」、「ヒトでの薬物作用の早期予測による新薬開発の促進」、「個別化医療シミュレーションによる、より効果的でより安全な医療の実現」等が期待され、国民の健康と福祉に貢献する。
4	コンピュータを用いたドッキングシミュレーションは、創薬開発コストを効率化・迅速化させるための基盤技術として用いられて久しいが、未だこれら技術による新規薬剤の開発・実用化には至っていない。これは対象とする化合物と標的タンパク質との組み合わせの膨大さと、用いている計算手法の精度不足に起因する。これら課題の解決には、計算手法の深化とスーパーコンピュータへの応用・展開が急務といえよう。 このことから分子間相互作用の高精度化や溶媒と効果の導入、分子会合過程における構造変化(induced-fitモデル)を導入した新規計算手法の開発・適用が精度向上のための具体的な課題となる。薬剤スクリーニングには数十万種類の化合物を、複数の類似構造を有する標的タンパク質へドッキングシミュレーションする必要があり計算量が膨大になる。また計算手法の高度化により要求される計算時間はさらに多くなる事から、エクサスケールスパコンの活用が有効となるであろう。さらに、これを効率よく実行するためのソフトウェア開発も重要課題である。 これら研究の実地により本格的なインシリコ創薬の研究が展開され、新薬開発コストの革新的な効率化・迅速化が期待される。そして、実際にインシリコによる新薬が開発された場合の日本の医薬・産業分野への社会的・経済的波及効果は計り知れないであろう。		

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【医療・創薬】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
5	生体機能を司るタンパク質の機能発現機構の詳細を理解するために、系の自由エネルギー変化に着目した研究が行われてきた。精度の高い自由エネルギー計算を実現するために、効率的なサンプリングのための様々な計算手法が提案されており、低分子系や小規模なタンパク質系では一定の成果を上げてきた。より大規模な系においては、エクサスケールスパコンを用いて、より多くの統計量を取ることが必要である。一方で、タンパク質の機能発現過程においてはタンパク質の構造揺らぎに起因する、自由エネルギーの揺らぎも重要な要素となる。タンパク質の構造空間を十分にサンプリングし、自由エネルギーの揺らぎを議論するためには、エクサスケールスパコンによる大規模なシミュレーションが必須である。大規模なタンパク質系における自由エネルギーの揺らぎを考慮することで、タンパク質複合体の機能発現機構を明らかにできる。それにより、例えば、ウイルスの感染メカニズム解明による感染症の克服や、人工光合成系技術の発展などが期待できる。		
6	我が国が国際社会で優位な領域はモノづくりと創薬である。しかしながら、我が国の新薬創生力には大きな飛躍がないのが現状で、多くの医薬品を欧米より輸入しており、昨今の医薬品の輸入超過額は深刻な状況である。新薬創生力を高めるにはポスト「京」の大規模計算機システムを用いた精緻なシミュレーションやシステムズバイオロジーの手法による解析などが必要である。現在、我々は多くの製薬企業とコンソーシアムを組み創薬における「京」の最大利用を試みている。国際競争力の向上に取り組むためには創薬に特化したハードとアプリの開発が重要である。	ポスト「京」を活用して、創薬に特化したアプリケーションとして研究から開発に至る一連の創薬工程を処理するパイプラインの開発を提案する。例えば、研究段階では化合物のファーストスクリーニングを行い、分子動力学計算により化合物を実験可能な100個程度に絞り込む。また、最適化のための量子化学計算も行う。さらには、開発段階の臨床予測を向上させるためシステムズバイオロジーのソフトウェア、レセプトデータ、オミックスデータなども統合したビッグデータの解析ソフトを充実させる。これらのアプリを簡単に使えるツール群も開発すれば創薬への参入障壁が低減し創薬ベンチャーの参入など製薬業界の活性化にも寄与できる。	新薬を開発することでアンメットニーズ（治療薬のない疾患）に対応でき、国民ひいては人類の健康と福祉に貢献する。我が国が医薬品研究開発の費用軽減と期間短縮の技術的基盤を整備することにより世界の創薬拠点となることで世界中から叡智が集積し、我が国の産業競争力、科学技術力が向上する。
7	わが国が直面している高齢化社会では、アルツハイマーなどの疾患を対象とした医薬品の開発は、社会的な側面からも特に期待されている。新薬の開発には10年以上という長期間を必要とし、成功確率も3万分の1と言われるほど極めて低い。この成功確率の低さを2倍改善するだけでも、かなりの効率化につながると考えられる。成功確率を改善させるための一つのアプローチとして、スパコンの活用が必須である。		
8	基礎研究、安全性試験など、多くの分野で、生きた動物を利用した実験が行われている。安全性試験の分野では、基本的に動物に対して麻酔や鎮痛剤などは使われず、死に至る場合などで苦痛度が高い。これらの動物の苦痛や命の犠牲をなくしていくことは人類にとって非常に重要な課題である。また、動物を用いた試験の結果は、結局のところ、その動物種においてどういう作用をもたらすかということしかわからない。ヒトへの外挿には限界があり、動物実験を経てヒト試験に至った化合物のうち、9割以上が人での問題が判明することによって製品化に至っていない。ヒトでどのように作用するのかを直接予測する方向に科学は向かっていくべき。	既に「京」においても取り組まれているところではありますが、創薬や安全性試験の分野で動物実験の代替となるシミュレーション技術に取り組んでほしい。	動物の苦痛を減らすことができる。このことはすでに国際的要求であり、日本が国際社会で取り残されないようにするためにも重要。EUは科学技術政策の中で動物実験の代替技術の開発をうたっており、アメリカも環境分野などで取り組みが進んでいる。日本は意識的にも予算的にも後れを取っている。人での作用を直接予測することは、人間の医療・健康にも寄与する。
9	疾患の原因因子となる蛋白質やその複合体の機能を解明することは、科学的のみならず社会的課題を解決するために重要である。従来、X線結晶構造解析に基づく生体分子原子構造を基盤とした機能解明が進んできたが、細胞内外の生体環境や蛋白質の柔らかさを含んだ解析は機能と密接に関係するにも関わらず、現状では計算機によるシミュレーションなしでは解明することができない。	「京」を用いたシミュレーションにより、全原子モデルでの数十万原子から数千万原子を含む巨大な生体系の分子動力学計算が現実的に実行できるようになった。これにより、細胞環境を含む計算が実現し、生体超分子複合体の分子運動も計算できるようになりつつある。しかし、計算で到達する時間が高々「マイクロ秒」程度であり、蛋白質の柔らかさに起因する構造変化をシミュレーションするのに必要な「ミリ秒」の分子動力学は「ポスト京」を用いることなしには、容易に実行することができない。	細胞内での蛋白質の機能構造解析および動的構造解析がシミュレーションによって進むことで、「新たな創薬ターゲット」の探索につながる可能性がある。また、創薬のみならず診断薬の開発にも応用できる可能性がある。また、疾患の原因因子を科学的に解明することで、従来法では全く考えられなかった新たな治療方法を創出できる可能性を秘めている。

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【医療・創薬】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
10	細胞内機能性複合体の立体構造予測と機能制御 ポストゲノム時代に突入して10年余りで、様々なオミックス研究から大量のバイオ情報が明らかにされてきた。細胞内では機能性複合体が離合集散して生命機能を担っているが、これらの複合体の機能機序を実験だけ解明することは難しい。「京」では創薬に関連してタンパク質—低分子複合体の研究が推進されたが、より難易度が高い大きな複合体(タンパク質—タンパク質複合体など)の研究は十分進められていない。タンパク質—タンパク質複合体予測は、世界的なコンテストCAPRIが行われるなど、大量の予測が可能段階に入っている。細胞内で形成される機能性複合体の立体構造の予測と機能制御をポスト「京」を用いて研究すること提案する。	オミックス研究からは、生命機能の上で鍵となるタンパク質でありながら、構造が変化しやすく実験だけで立体構造解明が進めにくいターゲットが浮き彫りになってきた。例えばガン抑制因子など、多種類の分子と相互作用して機能するタンパク質を主なターゲットとして、立体構造予測シミュレーションを実行し、立体構造予測法の確立と複合体の機能原理を解明する。立体構造予測は並列性が高いので、ポスト「京」での実効効率が高いと期待される。	これはバイオ機能の制御・産業応用・医療の応用に向けた重要な課題である。創薬は従来型の低分子創薬から、より特異性が高く副作用が少ないと期待される抗体創薬へとシフトしつつある。タンパク質—タンパク質複合体の立体構造予測は、新たな創薬ターゲットの発見と抗体創薬の基盤技術として科学的にも社会的にもインパクトが見込まれる。
11	分子性結晶の構造予測が出来るようになると、非常にインパクトが大きいと思います。		
12	国家的さらには地球規模の課題であり、その緊急の対策が望まれる課題に取り組むべきである。感染症の克服もそのような課題の一つと考えられ、特に京コンピュータによりウイルスの分子シミュレーションが可能となった次のステップとして、増殖機構の解明とその阻害について、本格的な検討を行う好機であると考えられる。計算機シミュレーションによって、効率的なワクチンや治療薬の開発にイノベーションをもたらす挑戦的課題であり、波及効果も大きい。	ウイルス性感染症を対象とし、ウイルスの全体像(カプシド、エンベロープを含む)を分子レベルで明らかとすることにより、効率的なワクチンや治療薬の開発への貢献を目指す。分子レベルでのマルチスケールシミュレーションを展開することにより、ウイルスの増殖機構の分子論的な理解を実効的に進め、ワクチン・治療薬の分子設計における指針を与える。	ウイルス全体の分子論、増殖機構を踏まえたワクチン・治療薬開発により、これまでの各タンパク質機能の阻害剤開発とは質的に異なる感染症対応が可能となる。
13	100nm~1μmの範囲での全原子ないし粗視化粒子シミュレーションにより生物界での自然現象のサイエンスを解明する。たとえば、細胞への物質取り込み過程(エンドサイトーシス)、High Density Lipoprotein (HDL)などのリポタンパク質形成およびHDLによる血中コレステロールの吸収、ウイルス粒子の細胞への侵入過程など。	全原子、粗視化粒子どちらにも臨機応変に対応できるような独自開発のコードをベースとして、エクサ級のスーパーコンピューター全体をフルに活用した100nm超のシステムを1μ秒計算する。必要に応じて1/10規模での計算を複数本実施することにより計算の精度を確保する。	エンドサイトーシス、HDL、ウイルスといった生物界での輸送過程にまつわるサイエンスを理解することは、薬剤の効率的な輸送、代謝異常に由来する病理の解明など、医療分野への学問的かつ商業的に大きな波及効果をもたらす。これらに限らず計算機シミュレーションによるナノサイエンスの理解は、省エネルギー化、低コスト化が必須な工業全体を牽引する先端知識となる。
14	脳は、人間の精神をつかさどる器官です。そして、人間の生み出す価値あるもののほとんどは、人間の精神によって生み出されるものだと思っています。このため、脳をシミュレートすることができれば、それにより多くの価値を生み出すことができると見込まれます。現在、脳の研究や情報技術の開発等が盛んに行われていますが、未だ脳をシミュレートするといったレベルには及んでいないと思われます。	コンピュータは、人間の脳に類似する性質を有していることから、高度の能力を有するポスト「京」を活用することにより、人間の脳をシミュレートすることが可能になると思われます。確かに、ポスト「京」をもってしても、人間の脳を完全にシミュレートすることは、困難であると思われます。しかし、例えば、「文字や図表を見て理解し、それに基づき適切に事務を処理する」といった特定の脳の機能に限定すれば、十分可能性があると思います。	人間の脳をシミュレートすることは、それ自体大きな学術的価値がある上、現在人間が行っている知的労働をコンピュータが行うことができるようになれば、大きな社会的インパクトがあると思います。

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【医療・創薬】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
15	理研を中心とする研究グループは、「京」をもちいて、17億3000万個の細胞からなる世界最大の神経回路シミュレーションに成功した(2013年8月2日報道発表)。これはマーモセットなどの新世界ザルの脳よりも大きな回路である。しかし、細胞数1000億個ともいわれるヒト脳のシミュレーションに基づく、脳の正常機能の再現と精神神経疾患など異常脳機能の解明は、必要となる解剖学的知見が全て揃っていたとしても、計算科学的な技術が不十分なためできない。	ヒトのモデルである霊長類の全脳レベルでの構造機能マップの構築がスタートした現状に鑑みて、2020年頃までにはそのマップが一部利用可能となることを想定し、ヒトの全脳レベル回路のシミュレーションを可能とする超高度化ソフトウェアを開発し、また、それをベースにすることで、現在我が国のみならず世界中で集められている神経細回路情報(いわゆるコネクティクス情報)をモデル上で統合するシステムの構築が必要である。	構造機能マップに基づくエクサスケールシミュレーション技術と、MRIなどによる非侵襲脳構造機能計測データとシミュレーションとの橋渡しを行う技術により、例えば生活支援ロボットなど正常脳機能の人工物搭載による生活支援、および、ヒトの精神神経疾患の機序の解明・治療に関する知見の獲得が期待できる。
16	脳がどのように我々の知的活動を実現しているかはまだわかっておらず、それを解明することは、医療、教育、産業への多大な波及効果や、我々自身の理解などを考慮すると、社会として取り組まねばならない究極の課題といえるでしょう。これまで京を用いても不可能であった「人の詳細な全脳規模の神経回路シミュレーション」は、試算ではエクサフロップスの計算機性能で可能と推定されており、脳の解明に向けて是非取り組むべき課題であるといえます。	京で開発してきた大規模神経回路シミュレーションの技術を基に、次世代計算機の計算リソースと日本の霊長類の脳のプロジェクトの実験データを連携させることで、霊長類の全脳モデル開発が可能であると考えられます。その実現には、京での約百倍となる脳のモデル規模にあわせ、脳の各部位のモデル開発従事者、脳データの情報技術者、大規模並列の神経シミュレータ開発者を集め、組織し開発を行う施策が必要ではないかと考えます。	全脳規模かつ、神経細胞レベルのシミュレーションによって、感覚認識処理、運動制御、知的情報処理、脳疾患の機構の理解を進め、脳の情報処理機構の解明と脳医療へ寄与をすることが期待できます。
17	スーパーコンピュータの利用分野として人間の身体の生理、神経、行動に関わる大きなフロンティアとして残されている。病気がさまざまな症状を起こす経過をシミュレーションすること、運動やリハビリテーションが機能を変化させること、神経と運動の連携で接近する情動の解明など人間の生活、生命から文化までをむすびつける情報処理の究極の課題の一つである。このためには現在に10ペタの計算能力はまだそのきっかけをつかむまでに達していない。全脳の神経系、蛋白質から組み立てた全身の身体などを計算するためには現在の100倍の計算能力を持つエクサ規模のスーパーコンピュータを科学技術は使いこなす必要がある。		
18	今後の医療はゲノムの理解も進み徐々に個別化の方向に向かって行くと考えられる。ゲノムの理解を人間の一個体全体の事象として理解するためには、コンピューターシミュレーションが不可欠であり、個人差を反映するような詳細なシミュレーションを行うためには、高速なコンピューターが不可欠である。詳細なシミュレーションを行えば行うほど、計算量は膨大となり、通常の高速コンピューターでは生体内の短時間の事象を計算するためにも膨大な時間(人の一生を超えるような)がかかってしまう。これを解消するため、ヘキサフロップスのコンピューターは今後の医療発展のためには必ず必要となると考える。		
19	ポスト「京」(エクサスケールスーパーコンピュータ)では、医学、医療を重点分野として取り入れるべきである。現在の臨床医学はランダム化比較試験の結果に基づくEvidence Based Medicineの体系に従っている。世界中にて医学的仮説の検証に必要な多くのランダム化比較試験が施行され膨大なEvidenceが構築されている。集積されたEvidenceは診療ガイドラインとして専門家によりまとめられているが、診療ガイドラインすらも各国、各地域にて別個に発表されており統合性がない。臨床医が診療に当たって参照すべき知識は断片的であり、相互に関連がない。また、情報量は爆発的に増加しており、個々の医師の頭脳に納めることが不可能な量に達している。コンピューター上では全ての情報は均一化される。世界各地にて産生される臨床医の経験を統合的に整理し集積することも可能になる。最終的に個別の医師の経験などの専門的スキルが必要な部分が残るとしても、標準的情報を刻々と呈示するシステムを構築することができれば医療のボトムアップを期待できる。現在の医学は医師の経験を数値として整理するEvidence Based Medicineを拠り所としている。人体はあまりに複雑、精妙な調節系であるため、人体を調節する基本原理が理解されていない。人体といえども、物理、化学の諸法則の集合体として理解されるべき部分が相当程度存在する。コンピューター上では情報が均一化されるため、人体の向上性維持の基本原理の理解についてもスーパーコンピューターが役立つ可能性がある。現時点では医師、医学者とコンピューター専門家には接点が少ない。医師、医学者の感覚的理解をデジタル情報に変換することができないことによる。スーパーコンピューター上では医師が扱う情報もデジタル情報に変換される。スーパーコンピューターを介して、医師、医学者とコンピューター専門家、物理学者、化学者、数学者などが議論する共通基盤ともなり得る。ヘキサスケールコンピューターを用いた、医学、医療の情報工学化に期待している。		

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【医療・創薬】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
20	血栓症によりもたらされる心筋梗塞・脳梗塞においては、動脈硬化を起こした血管壁で成長する血栓の振る舞いが最終的に血管を閉塞させるかどうかを決定する。これまでのシミュレーションでは、留意された血管形状や実験系に合わせた流路によるシミュレーションが主であったが、今後は、血管形状や血液の成分などが患者ごとのデータに基づいている血栓症のシミュレーションと治療法の検討が、疾患の早期発見・早期治療には重要となってくる。	血栓症に関しては、これまでも抗血小板薬や抗凝固薬として様々な薬剤の開発が行われてきた。薬剤の選定は、通常は医師の経験に基づく判断に依っており、個々の患者の特性に合わせてシステマティックに選定が行われる方法は確立していない。そこで、これまで「京」向けに開発してきたマルチスケール血栓症シミュレータを、患者ごとのデータに対して適用できるものへと開発を進め、少なくともシミュレーション上で根拠を持って適切な薬剤の選定ができるシステムを作りあげる。今後は、iPS細胞由来の血小板なども医療応用への期待が持たれており、生理学的な効果だけでなく、力学的特性が少し異なるiPS細胞に対してどのような違いが生じ得るかなど、成功事例の再現に留まらず、コンピュータ上で問題の洗い出しを行うようなシステムを作りあげることを考える。	患者ごとの疾患の状態や血流の状態、さらには、ゲノム情報なども利用して、必要最低限の介入で最大限の効果を上げるのに、シミュレーションが利用されるようになること自身、医療の分野では画期的なことである。
21	生命科学、医療、創薬の分野では、生命現象の理解と健康の増進、回復を目的として、不断の営為を重ねている。近年、より多面的な情報取得のための新たな計測技術の発展と、個人ごとの生物学的差違に基づいた個別化医療の展開によって、さらなる発展を遂げつつある。そのなかで、研究、医療現場から生み出され、蓄積される生命ビッグデータは、これら分野をデータドリブンサイエンスに変容させ、データ解析、その結果に基づく予測シミュレーションを行うための巨大な計算資源を必要とするようになってきている。	研究、医療現場から生み出される生命ビッグデータの網羅的な解析を行い、速やかに現場に結果をフィードバックする。それらの解析結果に基づいてモデルを構築し、シミュレーションの手法を用いることによって多階層の生命現象を予測する。これらの生命情報解析、多階層にわたる生体とその要素モデルのシミュレーションは、巨大な計算資源と同時に、多様な入出力の情報操作と計算手法を必要とする。	加速的に増大する生命、医療情報の速やかで精密な解析と、複雑で巨大なモデル系のシミュレーションによる生命現象の予測は、生命科学、医療、創薬で期待されている役割を、停滞させることなく、実現していくことが可能となる。
22	<分子シミュレーションと臓器シミュレーションの融合> UT-Heartでは個々の収縮タンパク分子をばねモデルで表し統計力学の法則に基づき確率的運動を再現するところから心臓の拍動を実現することに成功している。一方、分子シミュレーションの分野ではより大規模な時間・空間スケールの問題を取り扱うことが出来るようになり、また粗視化の研究も進んでいる。ポスト京では従来独立に行われて来た両分野の研究を融合させる。	<超並列計算機を活用するマルチスケールシミュレーション> 上記の課題を達成するには、時間・空間スケールの異なる物理現象を合理的に接続する理論と、超並列計算機を有効に活用する計算技術が必要となる。UT-Heartでは既に分散処理を前提としたマルチスケールシミュレーション手法の開発に成功しており、この概念と理論を拡張すれば、現在のUT-Heartのサルコメアモデルの中に分子シミュレーションを取り込むことが可能と考えている。	<分子生物学の成果を臨床医学へ> 世界でも前例がない挑戦的計算科学としての学術的価値にとどまらず、実用面でも分子生物学の成果を臨床医学に直接的に結び付けることが可能となり、難病の解明や治療法の開発さらには創薬における不連続な進歩をもたらすことが期待される。
23	超高齢化社会へと向かう我が国における健康寿命の延伸にとって、高機能な診断・治療機器による疾患の早期発見と低侵襲な治療が極めて重要な意味を持つ。従来、医療機器の開発は、動物実験を含め、多くの時間とコストを費やして進められてきたが、スーパーコンピュータ上で可能な限りのIn Silico実験を行うことにより、機器開発のコストと時間の大幅短縮を目指す。	自動車産業では、開発・設計の時間およびコストの削減にスパコンによるシミュレーションは大きく貢献してきた。ここでは、人体を対象とした治療器に対しても、同様のことを目指す提案である。人体を対象とした場合、細胞サイズから臓器サイズまでのスケール差を取り込む必要があり、現在「京」向けに開発されているソフトでは、細胞レベルで何らかの粗視化を取り込んでいる。ポスト「京」においてはこの制限を緩和でき、例えば、超音波診断・治療や重粒子線治療において、細胞レベルの微細構造の影響を考慮した腫瘍位置の正確な把握とターゲティングを行うための知見を得ることが出来る。	現在、欧米の企業のシェアが大きい医療機器の分野、特に治療器の分野で、比較的少ない投資で、日本企業が競争力を持って参入していくための手段となり得る。特に、超音波や放射線など照射型の診断機・治療器の開発・設計で効果が期待できる。

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【防災・環境問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
24	<p>固体地球科学が関わる社会的課題は、計算科学ロードマップ白書にもあるように、地震・津波等による災害からの防災・減災である。従来、過去の経験にもとづく統計的予測をもとに対策が検討されてきたが、東日本大震災でその限界が明らかになり、自然災害誘因に対して、科学的根拠にもとつき多様なシナリオを提示するとともに、モデルの不完全さやデータの誤差等に起因する予測の不確定性を定量化することが重要な課題となっている。</p>	<p>自然災害誘因の予測のため、地震発生、強震動、建物震動、津波発生・伝播・遡上のシミュレーションを行うことになるが、観測データの持つ解像度での計算の収束性等を保証する計算は、「京」全体でようやく実現できるレベルである。多様なシナリオを提示し、予測の不確実性を定量化するためには、同様な規模の計算を千や万のオーダーで行う必要があり、「京」の100倍といわれるポスト「京」を用いて、初めて実現可能といえる。</p>	<p>その時点の科学的知見にもとづいて自然災害誘因を網羅的に予測するとともに、データさえあれば身近な場所での想定（我がこと化）をする手段になる。</p>
25	<p>固体地球科学が関わる科学的課題は、究極的には「生きている地球を計算機の上で再現すること」にある。地球内部は、現状はもとより、その形成から進化の過程に至るまで、未解明なことばかりと言える。その中で、ポスト「京」で扱える重点的課題としては、地球内部対流現象としてのプレートテクトニクスの再現、小地震から巨大地震まで幅広い時空間スケールにわたる発生の物理的解明、高周波伝播に対する地殻・マントルのモデル化などが挙げられる。</p>	<p>プレートテクトニクスの再現では、地質学的時間スケールで生じる対流と破壊現象（地震発生）を扱う必要があるなど、上記のいずれの課題も時空間スケールの乖離を何らかの形で克服する必要がある。その克服のためには、100倍の計算速度向上では直接的に対応できないので、階層的な空間解像度を持つモデル化や連続体と粒状体を混在させるモデル化を行うなど、モデルの高度化を並行して進めながら、計算で実現できるスケール乖離内での物理を扱うことになる。</p>	<p>いずれの課題も「生きている地球を計算機の上で再現すること」に近づくために必要な新たな科学的知見をもたらす効果がある。さらに、これらの課題への取り組みを確実に進めることが、別の大きな目標である社会的課題（防災・減災）の解決を導くことにもなる。</p>
26	<p>物理ベースの防災のシミュレーション。 物理ベースのシミュレーションと空間情報を融合した防災シミュレーションを行えば、transparencyとcredibilityに優れた防災計画を立案できると期待される。しかし、莫大な計算資源が必要とされ現実的でないことから、過去の地震被害の統計処理により被害想定を現在行っているため、防災想定に誤差が大きい。物理ベースの防災のシミュレーションの実現に向けた準備研究を京コンピュータ上で行っており、ようやく実現可能性が見えてきた段階にある。京フルノード計算等もすでに実行しているが、全く足りないことが分かっている。</p>	<p>「ポスト京のための物理ベース防災シミュレーションプロジェクト」を立ち上げ、国際的に1位となるコードを開発し、ポスト京上での実稼働を目指す。計算科学的な改良はポスト京で、物理的な改良と実装は地域拠点大学と国研で、という役割分担を明確に。「防災に関する研究は日本がすすんでいる」と言われているが、団塊世代の研究者・技術者の引退に伴い、蓄積された技術の散逸が懸念されている。これらの貴重な知見をコード上で統合化することで、散逸を防ぐという意味合いもある（いまやらないと間に合いません...）。</p>	<p>防災計画のtransparencyとcredibilityを著しく向上することができる。国内だけではなく国際的な貢献が期待される。</p>
27	<p>＜長期スパンの地球シミュレーションに基づく災害対策とエネルギー開発の両立＞ 大地震や火山噴火などの大災害の発生や、化石燃料やメタンハイドレートの生成メカニズム、あるいは地球上の生命活動の将来などについての解明が不十分のため、人類の将来に対する見通しが立てにくい。これらの問題を複合的に解決するための長期スパンで地球の変動をシミュレートするシステムの開発が必要である。</p>	<p>地球に関する長いスパンでのシミュレーションを行うシステムの開発に必要な諸分野の科学的な知見を集約し、プレートやマグマの物理的な動き、地中での高圧高温化での化学変化、地上での生命活動などを複合的に扱えるモデル化を行い、長期スパン地球シミュレーションプログラムを開発する。</p>	<p>大地震や火山噴火などの自然大災害の発生可能性についての理解が深まり、メタンハイドレートの生成機構を明らかにすることによりエネルギー問題への見通しを与えられ、将来の地上の生命の状況が予測できることにより人類の未来への見通しが立つようになる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【防災・環境問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
28	意見と言うより要望だが、東北の地震・津波災害以降、「どこに住まいを構えるべきか?」「いかに予想される災害や社会の変化に備えるべきか?」「被災時また災害が目前に予測されたときにどういう行動をとるべきか?」は、国民にとって、大変悩ましい問題になっていると思うので、様々な方面のシミュレーション技術や、ビッグデータの収集・活用技術等を底上げ&統合して、下記のような情報の提供を可能とする技術開発を行って頂きたい。 気象(大小さまざまな規模の豪雨・強風等)、洪水等の水災害、深層崩壊を含む土砂災害、地震、津波など、あらゆる種類の自然災害に対するリスク 原発・原子力空母等々の人工物の大規模事故に伴う被災リスク 大気&水質汚染、様々な感染症、危険生物に伴うリスク 医療・教育・保育・介護・住居・交通・物流インフラ等の社会サービスの持続性に関するリスク 等々、挙げた例には不足があると思いますが、あらゆるリスク情報を総括した総合的かつ地域詳細なハザードマップの全国版(将来の気候変動や人口変化等にもなるリスクの変化傾向も含めて!)を整備し、「危険地域」とよ意味での「スイートスポット」が、簡単に手に取るように分かるようにして欲しい。 (現状それらの情報の一部断片は自治体のホームページや雑誌やネットの特集記事等で得られなくもないが、信頼性バラバラかつ非常に面倒。結局、総合したお手軽な情報といえば、限定的な口コミでしか得られないのは情けない!)	内容によっては、数時間先、数日先、あるいは数か月、数年先のもっともらしい「予測」情報をオンデマンドで取得でき、あるいは自動配信され、かつ国民ひとりひとり、目的に応じて、「本人が自覚していない部分を補い、注意を促すようなお節も含めて」、価値判断を的確に支援してくれるような、情報をなるべく「ユーザー側からのこと細かな情報入力などなしに」手軽に取り出せるような技術開発を行ってほしい。	様々な種類の災害や事故の発生が目前に予測されたときに、個人+家族にとって、過去の経験だけでなく、状況把握+2次災害+各種被害の拡大&回復の的確な予測なども含めて、最適な避難行動、安否確認、(連絡の取れた家族に対する)行動の指示など、時々刻々、とるべき最適な行動を教えてくれるような、現状は気象庁を含めた官公庁・自治体・各種報道メディアの連携に、信頼性に疑いのあるツイッター等の情報が混在しているのを、なんとかして飛躍的に進歩させて頂きたいと思います。
29	大規模自然災害や大規模事故などの予測や発生時の対応方法など防災、減災の観点からの超高速大規模ならではの計算を行ってほしいと思います。		
	<ul style="list-style-type: none"> 超大型台風による被害予測と防災対策の効果の予測 メガクウェークによる津波予測と対策効果の予測 地震発生時の正確な津波予測 首都圏直下型地震に対する安全な避難経路&方法の究明 首都圏直下型地震時に麻痺しない社会インフラ(通信、電気、水道、軌道交通etc)の検討 		
30	気候予測研究における気候モデル解像度の向上がもたらすメリットを見極め、将来可能となる長期予測(月～季節～年々～数十年)を、その機構も含めて明らかにする。また、今回の戦略プログラム分野3の研究で実証したメソ現象予報に関する高解像度化の威力について、その限界の見極めへの挑戦や、超高解像度全球大気モデルによる、気象衛星データを活用した気候感度推定を含む様々な気象(災害)予測研究に取り組む。		
31	HPCI戦略プログラムにより、京を用いて熱帯低気圧の温暖化による将来変化についての実験が行われている。この実験は水平解像度14kmであり、対流システムを解像することはできるが、対流システムの構成要素である個々の対流雲を解像するには不十分である。米国などによる観測的、もしくは領域雲解像モデルを用いた研究によれば、個々の対流雲が台風発生過程に非常に密接に関わっていることが指摘されている。従って、水平解像度2km程度の全球雲解像モデルを開発し、それを用いて台風の発生予測研究を行うこと、また温暖化時による将来変化を調べることは、世界的に見ても非常に科学的意義が大きい。	京では全系を使って水平解像度870mでの計算が行われたが、計算時間が12時間程度と短いため気候変動を議論するのは不可能である。上で示した課題を解決するために個々の雲を解像するぎりぎりの解像度である水平解像度2km程度にモデルを設定し、実験を行う。京に比べ100倍高速なポスト「京」の全系を用いて実験を行えば数年程度の実験が可能である。ただし解析のためには高頻度の大容量データの出力が必要であるため、大容量高速のディスクシステムと高速な解析サーバーが必要であることに注意が必要である。	この課題は世界初の真の全球雲解像計算を用いて、気候変動を議論するという意味で、科学的意義が非常に大きい。また、この課題で得られた知見を元に既存の対流雲を解像しない数値モデルの開発改良を進めることにより、発生を含めた台風予測が高度化されることが期待され、社会的インパクトも非常に大きい。

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【防災・環境問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
32	<p>地球環境変動の将来予測において、数値シミュレーションは欠くことのできない研究手法となっている。このことは、現在の地球環境は唯一のものであり、“実験”によって様々な要素がどのような影響を及ぼすかを実際に試すことができないことによる。仮に非常に精密な現実的な大気-海洋-陸面の数値モデルが手に入るならば、二酸化炭素やメタンなどの温室効果ガスの効果だけでなく、太陽変動の影響の定量化などを通して地球環境変動の理解は大幅に進むであろう。しかしながら、現状、一般に気候モデルと呼ばれる大気-海洋-陸面(など)の数値モデルは、非常に精密とは言いがたく、数値モデルに内在する様々な不確実性を理解し、少しでも有用な数値シミュレーションとその結果の解釈が可能となるよう、多くの研究が進められている。</p> <p>上記のような不確実性を把握する努力の一方で、数値モデルの精度そのものを大幅に高めることのできる革新的なモデルの開発も進められている。現在の気候モデルにおいて、気候変動計算で最も不確実性の大きい要素は雲の気候応答であると考えられているが、その不確実性の原因となる雲微物理過程を直接計算し、信頼度を高めることのできる全球モデルが最先端のスーパーコンピュータを利用することで実用化されつつある。およそ10年前に稼働した地球シミュレータを利用することで、積乱雲をぎりぎり解像することのできる水平解像度3.5kmの大気シミュレーションが可能になり、さらに、「京」の利用は水平解像度870mの計算を可能とした。また、「京」によって水平解像度7kmや14kmを用いた大気モデル単体での擬似気候実験が可能となり、現在、モデルの性能評価が進んでいる。</p> <p>しかしながら、現状の計算リソースでは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、現在の気候モデルとは一線を画す超精密気候モデルによる計算は未だ実現が不可能であり、ポスト「京」においては、その実現が期待される。現在利用可能な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としても、エネルギー収支をはじめとして現在気候の再現に大きな問題が生じることは容易に想像されるのだが、近い将来に世界に先駆けて画期的な高信頼度気候計算を可能とするためにも、地球シミュレータ以降の高解像度モデル開発の成果を統合し、真の次世代気候モデルを作るべき時期にあると考える。</p> <p>世界的に見ると、日本における地球シミュレータを利用した超高解像度計算に10年ほど遅れて、水平解像度数キロを用いた単独の、かつ短期間の、全球大気シミュレーションや全球海洋シミュレーションは実用化されつつあるが、大気・海洋・陸面などを結合した超高解像度気候計算の例はない。そのため、既存の気候モデルを用いた研究に対し、雲解像大気モデル・渦解像海洋モデルを結合した超高解像度気候モデルをりようした気候研究は、国際的なインパクトも十分である。また、ポスト「京」あるいはその次の世代のスーパーコンピュータを利用した、気候予測の不確実性の大幅な低減を通じて社会に対しても研究成果をフィードバックできるものと考えられる。</p>	<p>竜巻・メソ・台風予測のアンサンブル予測システムの高度化、全球スケールでのメソスケール現象の数値天気予報や、1ヶ月後の天気予測・台風発生予測等が視野に入る。</p> <p>人工衛星データを全球kmメッシュ高解像度モデルにデータ同化することにより、時空間的な精緻なデータベースを作成、気候監視に役立てる。</p> <p>ポスト京を活用するためには、現在の京を活用するとともに、GPUやメニーコアに対応したプログラムの改変を図る必要がある。HPCI戦略プログラムで育成した人材を活用し、継続的なプロジェクト継続を図る必要がある。</p>	<p>東南アジア・熱帯域の気象災害予測に貢献。1ヶ月後の天候予測の精緻化により、国民ニーズに応える。</p> <p>地球観測衛星データを高解像度モデルに同化し、異常気象や気候変動をリアルタイムにモニタリングし、その原因をモデル計算により解明する。</p>
34	<p>ゲリラ豪雨は予測できないことが最大の問題であり、予測できれば生命・財産を守るための対策が可能になる。ゲリラ豪雨を引き起こす単独の積乱雲は30分から1時間程度で一を生を終えるため、これをピンポイントに予測するには、高精細シミュレーションとフェーズドアレイレーダーなどの新型センサによるビッグデータを最大限生かすための「ビッグデータ同化」の技術革新が求められ、「京」を使った研究が進んでいる。これをリアルタイムに実現するにはエクサスケールのスパコンが必要となる。</p>	<p>天気予報は気象庁が実施するが、2030年代に実現可能となる天気予報を、ポスト「京」を使うことで10年先行して実証し、その意義や実現可能性などを確かめることが可能である。具体的には、現在「京」を用いて研究を進めている「ビッグデータ同化」ゲリラ豪雨予測システムを、ポスト「京」を使って2020年東京オリンピックで実証的に運用することが考えられる。30秒毎に1時間先までの予報を更新し、空中の雨粒をピンポイントに予測、ゲリラ豪雨に備える「緊急豪雨速報」の他、雨が降る前に傘を上げたり雨宿り先を探したりできるようになる。</p>	<p>ゲリラ豪雨の防災・減災につながるほか、気象学的なブレークスルーが期待できる。また、東京オリンピックで実証することは、積乱雲が発達しやすい夏季の大会運営に資するほか、世界が注目する場で、我が国が世界に誇る最先端技術を組み合わせて初めて可能となるゲリラ豪雨予測「ビッグデータ同化」システムを披露することの国際的社会的インパクトは大きいものと考えられる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【防災・環境問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
35	高精度な雲微物理モデルを用いた豪雨をもたらすような対流のシミュレーション 現在までの豪雨をもたらすような活発な対流のシミュレーションに用いられている雲微物理モデルは主にバルク法と呼ばれているもので、その中には経験的に決められた多くのパラメタリゼーションが使われており、現在の豪雨予測の不十分性の一つの要因がそれらの不確かさにあると考えられる。現在、レーダー観測などの発達により、雲微物理学的により詳細な観測がおこなわれるようになっており、それを十分に生かせるモデルの開発が期待されている。	現在、より正確な雲微物理モデルが開発されつつあり、「京」の上でも簡単な設定で試験的な計算がおこなわれているが、計算機の制約上、十分にその性能を調べることができない状況である。より高性能な計算機の上で十分な開発を行うことで、より正確な予測につなげることができる。	豪雨に関して、より正確な予測を行うことができるようになり、また、将来気候での豪雨の変化などもより正確に推測することができるようになる。データ同化などの手法も高度化することができる。
36	地球規模の環境問題への対応が国際政治・国際交渉の主要議題となっている現在、地球規模の環境変化について産業革命以降約150年の過去と、2100年頃までの今後100年について、気候、植生、潜在的再生可能エネルギー、潜在的食料生産、利用可能な水資源等がどのように変化し、今後どのように変化すると想定されるかを世界規模で超高解像度に推計し、地球規模環境課題への対処の政策立案・施策実現に資する知識ベースを構築することが喫緊に求められている。その実現には、情報通信技術、地球環境学、地球観測技術の総力を結集する必要がある。例えば全陸地1km格子で1850年からの経緯を推計し、2100年までの将来推計を気候変動予測の不確実性や想定されるいくつかの社会経済シナリオに関して計算するためにはTB規模の変数を数十用いる数値シミュレーションモデルを時間差分(タイムステップ)数分から1時間で、アンサンブル分を考慮すると1万年分程度計算する必要があり、こうした大規模大容量計算には次世代スーパーコンピュータだけではなく、大量の入出力とストレージ、転送などの技術実装に関して非連続なイノベーションが必要とされ、これには先端的なナノテクノロジーの貢献も必須であると想定される。非静力学全球大気モデルや動的植生モデル、人間活動も考慮できる統合的水資源モデルや氾濫も考慮可能な河川流下モデルなどにおいて日本は世界をリードしており、こうした研究を通じ、ソフトとハードにおける日本の強みを生かした地球規模課題の解決へ向けた取り組みが可能となると期待される。また、開発される超高解像度地球環境推計システム構築技術は、地球観測技術と組み合わせることによって、実時間での地球環境監視、さらには森林火災や干ばつ、洪水氾濫などの発生の探知や予測、適切な食糧生産管理などに生かすことも可能となり、その一部は2020年の東京オリンピックでも、地球環境の保全と積極的な回復に貢献する環境立国日本のアピールを支える強力なツールとして利用可能となるものと期待される。こうした「超高解像度地球環境推計システム」のように、ポスト「京」ならでは実現可能で、しかも社会的貢献が大きく、負の影響やリスクを軽減することによって持続的な経済発展に資する課題での利用をぜひご検討いただきたい。		
37	新材料の開発及び気候研究や温暖化対策への利用を提案します。 工業国である日本の経済は輸出に頼っている。世界での競争力を身に着けるためにはサービス(アプリケーション)の向上はもとより、魅力的な性能の付加が必要である。(たとえば青色ダイオードなど)新規材料開発は画期的な低コスト、高性能化、または新しい性能の付加を可能としてきた。 また、工業の発展は地球環境の悪化という側面をも伴っている。2013年のフィリピンにおける大型台風の甚大な被害を始めて、主に発展途上国が温暖化リスクに対して十分な対策を取れる事は疑わしい。温暖化リスク情報を世界に向けて発信する事は国際貢献の一環として先進国の責務である。	・有機物の化学合成シミュレーションモデルの開発・改良・実行 ・地球シミュレーションモデルの開発・改良・実行 ・IPCC等の国際的な気候研究の取り組み ・温暖化に伴う世界中のリスク情報の把握と発展途上国への情報提供	・国際競争力のある付加価値が付いた新商品の製造・輸出 ・研究機関が新材料の特許を取得する事で税金に依存しない長期的な研究資金の確保が可能となる ・先進国の責務としての国際社会貢献

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

実施期間:平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【防災・環境問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
38	世界人口が70億を越え今後地球環境は、人類の生存に取って非常に厳しいものになっていくことが予想されている。このような状況下、人類の生存にとっての最適解を見出ししていくことは喫緊の課題であるといえよう。人類がどこまで幸福に地球上に存在し続けていけるかは、ひとえにこの最適解をいかに正しく見積もれるかによっている。ポスト「京」でこの最適解を求めていく。	現在、京では地球温暖化にともなう気候の長期変化予測の精度向上が進められているが、これをより総合的な「地球環境」の変化予測に転換する。すなわち現行気候モデルの高精度化に加え、このモデルに人類の生存にとって本質的に重要な大気汚染・海洋汚染・土壌汚染・水質汚染・森林破壊・都市化などの環境問題の重要因子を組み込んでいく。そしてこれらが相互に関連しつつ地球環境をどのように破壊していくかを予測する。	我々のみならず、我々の子孫も健康かつ幸福に生きていく権利を有している。我々は今その権利を奪っているといえる。そのせめても償いに我々の子孫が健康かつ幸福に生きていくことに役立つツールを開発することは我々の責務ではないか。
39	東京電力福島第一原子力発電所の事故の発生以来、放射性物質の環境動態、汚染土壌の減容、過酷事故過程の解析等が重要な課題となっている。これらの課題を抜本的に解決するためには、原子・分子レベルから生態系や工学システム等の系全体までを考慮した現実複雑現象のエクサスケールシミュレーションが必須である。 現在は、原子・分子レベルを中心に基本的な現象を高精度にシミュレートする技術を開発し、実験では観測困難なデータを取得してきたところである。 (例1:環境動態)セシウムと代表的土壌(粘土鉱物結晶)との化学反応を解析し、化学結合形態として共有結合性を持つことを発見。 (例2:事故過程)燃焼前の核燃料や炉構造材料の物性変化を解析し、比熱・熱膨張率・機械的特性等を正確に定量評価。	これまでに開発してきた原子・分子レベルの高精度シミュレーション技術を発展させて、様々な要因が相互に作用し合う複雑な系を高精度に再現するエクサスケールシミュレーション技術を開発し、環境・生態系や工学システム等、系全体としての挙動を解析する。 (例1:環境動態)現実環境中での放射性物質の化学形態変化の他、現実的土壌成分、植生等を考慮し、精細な地形情報を基にした河川輸送と海底土への吸着と再浮遊を解析。 (例2:事故過程)核燃料・炉構造材料に含まれる様々な元素の影響を評価するとともに、燃料や燃料被覆材の周辺環境(蒸気圧、温度)等を考慮し、界面での詳細な反応過程を含めた炉全体を解析。	長期的な環境動態予測に基づく生活圏等への放射性セシウムの移動挙動及び原子炉の高温高圧環境から環境放出に至る種々の物質材料の化学変化まで考慮したリアルな事故進展シナリオ等が予測可能となり、福島環境回復及び原子炉の安全性向上に向けた取組み等が進展する。

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
40	エネルギー利用のスマート化とそれに資する技術革新は向う何十年の課題であり、長期的な視点からその基盤となる科学の充実化に取り組むことが極めて重要である。堅牢な量子・統計物理学の基礎の下、複雑なエネルギー変換現象をいかに捉えるか、そこから普遍的な蓄電池や太陽電池等の原理をいかに見出すか、まだ十分に掘り下げられていない難問であり、計算科学が答えを出すべき課題である。現在、新規計算手法を構築しながら、ブレークスルーを狙っている。	基礎科学の各分野で独自に発展している様々なレベルの計算手法から、ポスト「京」に適合し得るものを見出し、それをまとめて既存のシミュレーション（第一原理計算や古典計算、あるいはデータマイニング）を刷新することが起爆剤となる。かなりの試行錯誤を要するがそれを強力に推し進め、様々な計算グループや実験グループが連携して当たれる体制を現在以上に強化してこの問題に取り組む。	長期的ビジョンに立って、明確な応用（特にエネルギー問題などのグローバル問題）を想定して計算手法や研究アプローチを組み上げて、突き抜けた成果を狙うことは新規的である。そのシミュレーションにより、技術開発に必要な情報を限られた時間内に提供できるようになれば、第三の確固たるツールとなる。
41	半導体の微細化が限界に近づいており、新しいトランジスタ開発が喫緊の課題である。特に、低消費電力化に有効である電子スピン自由度を用いたスピン電界効果トランジスタ(Spin-FET)の実現が待たれている。これまで研究されてきた化合物半導体は実現に必要な微細化が難しいとされてきた。Spin-FET物質デザインのため、デバイス性能予測まで含めた大規模シミュレーションが必要であるが、計算規模とソフトウェアの問題があり、これまで実現されていない。	スピンの性質を予測する上で必須の相対論的電子状態計算手法で大規模計算が可能な物質デザインソフトウェアOpenMX(国産)の磁氣的、電氣的性質の予測精度を向上させ、デバイス性能予測まで含めたSpin-FET用マルチスケールシミュレーションソフトウェアを開発・整備する。ポスト「京」ではじめて可能となる、計算負荷の大きな、遷移金属を含む酸化物Spin-FETの物質デザインをおこなう。理論家、実験家とともに、三位一体となり共同でSpin-FET実現をめざす。	低消費電力デバイスは社会的なニーズが高く、スピントロニクスによる低消費電力化が実現されれば爆発的に普及する。Spin-FET物質デザイン国産ソフトウェアを開発・整備・普及させることで、研究開発の国際競争で優位となる。
42	高度情報化社会は、先進国から発展途上国へ急速に確実に広がり、後者のエネルギー消費は人口に比例し、拡大の一途をたどると予想される中で、生活の利便性を低下させずに全体のエネルギー消費量を増大させないためには、高度情報技術のための物質・材料開発が不可欠である。目指す先は、熱エネルギー散逸を免れない電氣的材料から、状態保持エネルギーを必要としない磁気材料へのパラダイムシフトである。先行する分野は、スピントロニクス材料、特に磁気メモリ材料の開発研究である。	産業界へ直接貢献するスピントロニクス材料開発は、磁気メモリ材料開発であり、電流駆動型から電界駆動型へ開発の中心が移っている。核心部分の材料を数ナノメートル厚にすることで超省エネを実現できる。量子力学に基づいた第一原理電子状態計算を用いて、このような素子を膜厚方向に丸ごとシミュレーションすることが可能である。磁気異方性についての並列計算技術開発も進んでおり、理論計算から電界駆動型素子開発へ有用な設計指針を提供できる。ポスト「京」を活用しスピントロニクス材料開発の研究を加速することを提案する。	物質・電子構造に対する非経験的手法（第一原理計算手法）を用いるため、定性的または定量的設計指針の確度が非常に高く、国内の開発研究グループ（産業技術総合研究所等）と共同して、スピントロニクス材料開発の国際的競争力を格段に高める効果がある。
43	今日のIT社会を支える半導体技術は微細化の観点から限界を迎えつつあり、半導体デバイスの多大な電力消費が大きな問題となっている。そこで、極低消費電力型デバイスを実現するため、スピントロニクスの基礎研究が必要である。そのため、シミュレーションにより、スピントロニクスを実現する具体的材料の探索が必要である。	スピン軌道相互作用を考慮した、第一原理電子状態計算プログラムを整備し、スピントロニクスに適した材料を探索する。探索は、多数の候補から有用な物性を持つ材料を選出する必要があり、電子状態計算を多数回繰り返す。その効率化のため、ポスト「京」向けのアルゴリズムを実装する。また、スピン計測に関する大型実験施設との共同研究を行う。	基礎科学の成果（スピン軌道相互作用由来の新奇現象・デバイス動作原理の解明）が見込め、将来の実社会への応用（省エネルギー、機器を感じさせないウェアラブルコンピュータの実現等）が期待できる。
44	新規物質探索や異種物質ドーピング等の材料工学的アプローチではなく、光と物質の相互作用によって生み出される光励起電子ダイナミクスを利用した高効率・広帯域光エネルギー変換デバイス（太陽電池、光触媒、光導波路、化学・バイオセンサー、LED）を超並列大規模計算に基づいて理論設計する。入手が容易であり環境調和性の高いシリコンや炭素等からなるナノ構造体の高次構造化と光と物質の相互作用の効果を積極的に取り込むことによって、従前と異なる新規光エネルギー変換デバイスの理論設計を目指す。	極端に単純化した数値モデルではなく、実在に即した数～数十nmサイズの物質系を対象としてデバイスの理論設計を行うことが必須である。最近、京において超並列光電子ダイナミクス法プログラムが開発され、数nm程度のナノ構造体の計算が可能になってきた。この研究をポスト京にも展開し、最終目標である実在系光エネルギー変換デバイスの理論設計を行い、工学・産業レベルでのデバイス開発と密接に協力して、新規光エネルギー変換デバイスの研究を一気に促進する。	デバイス開発においては、貴金属代替や毒性の高い物質使用の回避が極めて重要であるが、本研究課題は材料工学的アプローチではなく、光励起電子ダイナミクスが引き起こす機能性を積極的に利用することが大きなポイントである。入手容易かつ環境調和性の高い物質を使い、種々の光エネルギー変換デバイス設計の指導原理を提案することが可能である。

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

実施期間:平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
45	次世代デバイス、エネルギー創成、高効率社会を実現する物質材料の開発に寄与する計算科学を推進することが重要。今までは原子が規則的に並んでいる理想化された物質に対するシミュレーションが主である。しかし、現実材料の機能、特性は表面や界面、そして材料の微細組織に特有な構造と電子状態に強く依存する。数十ナノメートルからサブミクロンスケールに対する構造や電子状態を明らかにする大規模シミュレーションは「京」により最近可能となりつつある。しかし、異種界面や材料の微細組織の構造には多様性があり、今後、構造探索を含めた多くのシミュレーションが重要となる。	異種界面や材料の微細組織の構造には多様性があり、1つの系に対しても数多くのシミュレーションが必須である。材料が使われる温度での構造安定性なども明らかにする必要がある。手法としては、密度汎関数法などに基づいた定量的な電子状態計算手法が中心となる。数十万原子から場合によっては1億原子程度の大規模第一原理計算が必要となる。また、多様性を網羅するために、環境に依存した原子間ポテンシャルを電子状態計算の結果から構築すること、インフォマティクスの導入などが重要になってくる。	実験との協力により、実際の材料設計に貢献できる計算技術の確立と実践が行われる。その結果、ものづくりの分野での優位性、エネルギー問題の解決、高エネルギー効率社会が実現される。
46	ポスト京では、再生可能エネルギー資源としての太陽電池開発において電子のダイナミクスからの解析が求められる。このようなシミュレーションは計算コストが莫大にかかりポスト京のような強力なマシンが求められる。	時間発展密度汎関数法は多体効果を取り込みながら、電磁場のような外場を同時に扱えるため、デバイス内の光と電子のダイナミクスを記述できる。並列計算に適した実空間法をベースとすることで実際のナノ構造体スケールでのシミュレーションが可能となる。	電子の実時間発展を記述することで、デバイス内での電子状態の変化がシミュレートできるようになり、実験では見ることのできない情報を提供できるため理論的に設計指針を与え、太陽電池開発に大きな進歩をもたらすと予測される。
47	ナノ構造体の柔軟な電子構造や化学的性質の多様性を利用した光・電子機能性量子デバイスは、これまでの電子デバイスや光デバイスとは異なる有望な量子デバイスであると考えられる。この機能の理解には数十ナノメートル程度のナノ構造体の光励起電子ダイナミクスの解明が重要な役割を果たすと考えられるが、第一原理計算によってその詳細を明らかにした研究例は殆ど存在しない。	電子・電磁場ダイナミクス法プログラム(GCEED)を用いて数十ナノメートル程度のナノ構造体の光吸収・発光特性についての計算を行う。この方法論では、時間依存コーンシャム方程式を差分法に基づきながら実時間・実空間で解くため、固有値対角化や高速フーリエ変換を必要としない。そのため、数十ナノメートル程度の系を高並列効率を保ちながら、通常の差分法の実行効率で解くことができる。	ナノ構造体の光・電子機能性が解明され、プラズモン導波路、化学・バイオセンサー、分子イメージング、光触媒や太陽電池などの光・電子機能性量子デバイス開発への展開が予想される。
48	光デバイスの開発及び改良は情報化社会の発展に不可欠であり、更なる高密度集積化並びに微小化を達成するために、ナノメートルレベルでの設計が現在進められている。しかしながら、応用工学的な研究が数多く行われている一方で、基礎科学的な研究は殆ど進んでいない。その為現状では絨毯爆撃的に設計開発が行われており、今後の更なる開発や改良の為に理論的な知見が求められている。 光デバイスの開発に貢献する知見を得るには、現実の系がどのように動作しているのか、その機構を解明する事が不可欠である。その為には、光に対して物質がどのように応答するのか、そのダイナミクスを検討する事が求められる。そこで、ポスト「京」コンピューターを用いて現実のデバイスに対応する数十nm程度の物質の光誘起電子ダイナミクスの計算を行う事を提案する。 提案した計算により得られる光デバイスの設計指針はその開発の急激な促進に繋がる為、その社会的な意義は大きい。さらに得られる知見は他に類を見ない全く新規なものであり、その科学的なインパクトも極めて大きいと期待される。		

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
49	カーボンナノチューブ(CNT)を使ったコンパウンドの製品が今後開発されていくものと期待されているが、一方でCNTを使ったコンパウンドのマクロの物性予測は難しい。理由としては、そもそもCNTが凝集しやすく、均一分散したものが作れないという材料作成側の問題と、CNTのように微小なものを含むコンパウンドの材料のマクロの物性を予測する構成則などが存在しないためであると考えられる。また、有限要素法における陽解法のクーラン条件もボトルネックとなっていると考えられる。	マルチスケールの解析ができるハードウェアの構成とし、且つマルチスケール解析のソフトウェアを拡充する(国産の開発と商用の活用含む)。トヨタ中央理研の菊池先生や東北大学の寺田教授らが提唱されている均質化法の理論を用いたマルチスケールの解析が行えるシステムをつくる。行列演算を含むため、GPGPUのような計算高速化手法も導入する。また、CNTは分散不良で、凝集体が偏在する可能性が高いため、マクロの物性としては、CNT偏在を考慮した解析機能や、X線CTなどの撮像イメージを活用できる解析機能を盛り込む。	現在、国策PJで量産を目指しているCNTを使った複合材の物性予測による、製造業におけるCNT複合材の普及。
50	エネルギー問題・環境問題は人類が直面する大きな課題であり、人類は、これまで築き上げてきた「物質科学」を戦略的に結集してその解決に向けて動き出さなければならない時期に来ている。ポスト京は、日本が世界を先導してこの問題に取り組む姿勢を示す一つの象徴となり得る。より具体的に、重要度の高い課題として窒素固定、二酸化炭素固定、水素エネルギーが挙げられる。これらの課題を解く鍵は「触媒」である。実験研究は各課題に対し個別であるが、理論計算手法は汎用性が高く、理論グループが個々の実験研究をつなぐ支柱となって推進すべき課題である。	上に挙げた3つの課題について、生体酵素を含む既知触媒の微視的反応機構とダイナミクスを解明して高活性な触媒能を与える原理を抽出し、既知触媒修飾による触媒能向上の可能性を探るとともに、大規模理論計算が実験研究を先導して高機能性を有する革新的触媒の開発へと繋げるため、分子理論科学の分野で開発されてきた電子状態理論(高精度・大規模系・励起状態)、反応経路自動探索法、第一原理分子動力学法、QM/MMといった広範囲にわたる計算手法を結集する。	窒素固定は食糧問題、二酸化炭素固定は環境問題、水素エネルギーはエネルギー問題に直結し、社会的意義は大きい。また、科学的には、理論計算科学に個別の実験結果の再現や解釈を超え、俯瞰的視点から実験研究を先導するという役割を付与するという意義がある。
51	ポスト京での社会的・科学的課題：二酸化炭素の固定化技術の確立 温室効果ガスとして有害廃棄物と見做される二酸化炭素は、C1化合物として捉えれば炭素資源でもある。二酸化炭素を化成品として固定化する技術が確立できれば、有害廃棄物を資源に転ずる革新的な炭素循環経路を得ることができる。従って、自然界における二酸化炭素固定のメカニズムを解明と工学的手法による効率の改良は、社会的に重要な研究課題である。これまで化学現象を詳細に解明することにおいて実績を上げてきた理論・計算化学分野による貢献が期待されている。	光合成においては、RubisCOと呼ばれる酵素が二酸化炭素固定を担うが、意外にもRubisCOの反応効率は極めて悪いことが知られている。他方で、有機合成化学的に二酸化炭素固定を行う触媒の開発が盛んに行われており、実用化への発展が期待されている。次世代計算機を活用すれば、これらの反応プロセスをシミュレーションすることができ、光合成における酵素の機能を模した高効率な二酸化炭素固定化触媒の理論設計が可能となると期待される。	人類が生存する上で、二酸化炭素の排出を避けることはできない。この排出過程を資源生産過程へと変革することができれば、地球温暖化問題の解決に寄与できるばかりでなく、資源小国である我が国に限られた国土で人口を維持するための課題解決にも寄与できると考える。

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
 実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
52	<p>理論・計算科学研究による二酸化炭素吸着・変換反応系の開発</p> <p>地球温暖化が懸念されて久しいが、依然として、二酸化炭素問題は解決の糸口さえ見えていない。特に、我が国は、原発稼働が停止してことにより石炭火力や天然ガス火力発電の比率が増大し、二酸化炭素削減は極めて困難である。むしろ、増加基調であり、世界に対して責任ある対応が取れていない。</p> <p>このような状況を考えると、二酸化炭素の吸着・吸収が喫緊の研究課題である。また、吸着・吸収した二酸化炭素をそのままにしておかず、有用な物質に変換することが出来れば、二酸化炭素問題の解決は一層進展する。</p> <p>効率良く二酸化炭素を大気中あるいは排気ガス中から吸着・吸収するには、現在、2級アミンの混合溶液が使用されているが(三菱重工など)、これは二酸化炭素を遊離させ、再利用するために、非常に大きい熱量が必要とされ、エネルギー効率が極めて悪い。従って、新しい吸収・吸着技術の開発が必要である。最近北川(進)らによりMOF (Metal-Organic-Framework)を用いた二酸化炭素の選択吸着・濃縮の実験が成功している。このMOFを用いた二酸化炭素選択吸着は脱着のエネルギーが小さく、アミンによる濃縮に比べて効率が良い。</p> <p>二酸化炭素を有用な化学物質に変換する触媒反応は、現在、活発に研究されている。例えば、野崎京子教授(東大)によるエポキシドと二酸化炭素の経重合反応は非常に効率が高い。しかし、生成するポリマーの強度が低いなどの理由で、未だ、実用に供する段階に至っていない。最近二酸化炭素をもちいた芳香族カルボン酸の合成も報告され(京大・辻教授)、二酸化炭素利用技術の進展は著しい。</p> <p>二酸化炭素吸着・変換反応の理論化学・計算科学研究は、1990年代から始められ、多くの二酸化炭素金属錯体の構造と安定性、遷移金属錯体に依る触媒的二酸化炭素変換反応の反応機構が解明されている。辻らによる二酸化炭素を用いた芳香族カルボン酸合成の特徴ある反応機構の理論的解明も為されている。また、アミンによる二酸化炭素の濃縮についても溶媒和を考慮した理論計算が行われており、微視的理解が進んでいる。MOFへの二酸化炭素選択吸着についても電子状態計算が行われ、静電相互作用が重要なことが示された(いずれも京大・榊教授ら)。</p> <p>以上のように、現状でも二酸化炭素吸着・変換反応についての理論化学・計算科学研究は成功裏に行われ、成果を上げている。しかし、全体としてみると、実用に供するほどに成長していない。二酸化炭素吸着・変換反応を研究している実験化学者は一様に、理論化学・計算化学の助けが必要と言っている。これは二酸化炭素と触媒との相互作用が従来の考え方では理解出来ない部分が大いいためである。</p> <p>従って、二酸化炭素吸着・変換反応の研究のためには、実験化学と理論化学・計算化学の一層の共同研究が必要である。理論化学・計算化学の面からは、電子状態計算による触媒反応の解析・予測、MOFやアミンへの二酸化炭素吸収・濃縮過程の分子動力学シミュレーションによる解析・予測が必要である。これらの研究には理研AICSのNTChemなどの電子状態計算ソフト、岡崎(名大)らのMODYLASなどの分子動力学計算ソフトが開発され、それらの練成も現在進んでいることから、エクサへ向けての準備は十二分に整っている。</p> <p>世界的な課題である二酸化炭素問題の解決に向けて、エクサを利用する研究課題の設置が強く望まれる。</p>		

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
53	<p>ヒドロゲナーゼ・ニトロゲナーゼの触媒作用解明と水素発生、窒素固定触媒の開発</p> <p>現在、社会はエネルギー、環境、資源問題の解決を求めていることは周知の事実である。しかし、それだけでなく、地球上の人口の著しい増加、特に、発展途上国での著しい増加を見ると、それらの諸問題に加え、食糧問題も早晚重要な課題になるであろう。これらの諸問題の解決は化学の役割無くしては不可能である。我々の身の回りの物質を見て、化学が関係しているものを消して行くと、衣類はぼぼなくなり、家具のほとんどは無くなる。自動車は排気ガスを垂れ流し、我々は深刻な大気汚染にさらされるようになり、住宅は鉄骨とコンクリートのみとなり、人類が住む環境で無くなってしまふ。何よりも、化学が成し遂げたハーバー・ボッシュ法による窒素からのアンモニア合成が、第1次世界大戦後の人口増加を可能にしたことも想起しなくてはならない。化学の貢献が無ければ、人類は食糧も大半を失ってしまう。</p> <p>同時に、化学分野において、理論計算の寄与は、近年、増加の一途をたどり、益々、大規模計算が求められている。各企業は、計算化学チームを抱え、研究開発を行おうとしている。以上を考えると、エネルギー・環境・資源・食料問題の基盤的解決に寄与する理論化学・計算化学研究の推進が必要不可欠である。</p> <p>特に、窒素固定によるアンモニア合成は1906年に開発されたハーバー・ボッシュ法が今なお使用されているが、高温・高圧を必要とするため、人類の年間消費エネルギーの1%以上がハーバー・ボッシュ法によるアンモニア合成に使用されているともいわれられており、ハーバー・ボッシュ法に代わる高効率な触媒の開発は食糧問題やエネルギー問題の解決にも直結する。最近、いくつかのモデル金属化合物による温和な条件下での窒素固定化反応が報告されているが、100年以上前のハーバー・ボッシュ法に代わり得ていない。</p> <p>一方、自然界ではニトロゲナーゼが窒素固定を温和な条件下で行っている。その作用メカニズムは、鉄の多核錯体であるため、現時点では明らかになって居ない。そのメカニズム解明は、窒素固定の化学に、革新をもたらすと期待される。</p> <p>実験化学分野でも、細野らはエレクトロライトにRu微粒子を担持すると、温和な条件下でアンモニア合成が可能であることを報告した。また、金属微粒子をナノサイズ以下にサイズコントロールすると新しい触媒活性が発現することが春田らにより、また、そのような微粒子を混合微粒子化することに依り新しい機能が発揮されることが、北川(宏)らにより報告されている。細野らのエレクトロライトとこのような混合微粒子触媒を組み合わせると窒素固定あるいは類似の高活性触媒の開発が期待される。このような触媒系の研究で最も大きな弱点は、活性種、その窒素分子との相互作用、窒素結合の切断メカニズムが分かっていないことであり、そのため、どのような方向性で触媒開発を行えば良いのか、経験に頼るしか道がない点である。しかし、エクサ級の計算機による大規模理論計算が可能になれば、ニトロゲナーゼの電子状態や機能、窒素分子との相互作用などを解明することが可能となり、それに基づいて、エレクトロライトと組み合わせた混合微粒子の電子状態、反応性や触媒作用を解明することも可能であり、新しい窒素固定触媒の理論予測が可能に結び付けることが出来る。</p> <p>ヒドロゲナーゼの触媒作用は水からの水素の発生であり、この触媒作用は燃料電池電極反応の逆反応であるのと共に、水素ガスのon-demand生成反応にも応用できる。現在、人工的な錯体触媒に依るモデル構築が盛んに行われているが、実用には達していない。ヒドロゲナーゼも鉄・ニッケル多核錯体であり、電子状態や触媒メカニズムは明らかでない。メカニズムを解明し、on-demand水素発生触媒の開発が可能になれば、水素エネルギー利用が進展することは確実である。</p> <p>以上の理論化学・計算化学の研究には、電子状態計算、分子動力学計算、電子移動に関する電子ダイナミクス計算の融合が必要である。現在、スーパーコンピュータ京で運用されている高速、高精度、大規模電子状態計算プログラム(SMASHやNTChem)と分子動力学計算プログラム(Modylas)を、さらに、エクサ計算機用にレベルアップすることにより、このような研究に利用可能である。</p> <p>このように、ニトロゲナーゼやヒドロゲナーゼのメカニズム解明は科学的にも価値高く、同時に、そこで得た知見を実際の窒素固定や水素発生の触媒開発に生かすことが可能である。基礎的にも、工業的にも価値のある研究である。</p>		
54	<p>ニトロゲナーゼの窒素固定化メカニズムの解明と高効率窒素固定化触媒の分子設計</p> <p>1世紀前に発明されたHaber-Bosch法は、空気中の窒素から肥料として重要なアンモニアを直接合成するプロセスである。このプロセスは、「空気からパンを作る」と形容されるように、当時の人口増加による食糧問題を先事に解決し、現在でも世界中で用いられている。しかし、反応には高温・高圧条件が必要であり、このプロセスだけで世界のエネルギー消費の1%以上を占めている。そのため、Haber-Bosch法に代わる高効率窒素固定化プロセスの開発が望まれている。</p>	<p>ニトロゲナーゼと呼ばれる酵素は、生体内の温和な条件化で窒素分子を効率的にアンモニアへ変換する。したがって、ニトロゲナーゼの窒素固定化メカニズムの解明は、高効率窒素固定触媒の開発に繋がる重要な課題である。しかし、複雑な多核鉄クラスターから成る活性中心の電子構造を正確に捉えることは難しく、高精度電子状態理論による検討が必須である。次世代計算を用いれば、多核金属錯体の高精度計算が現実的な時間スケールで可能になり、高効率窒素固定化反応の本質が抽出できると期待される。</p>	<p>ニトロゲナーゼの窒素固定化メカニズムの解明は、Haber-Bosch法に代わる高効率窒素固定化触媒の分子設計へ繋がる。これは、近年顕著になりつつある食糧問題やエネルギー問題の解決に大きく寄与すると考えられる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
55	<p>ポスト「京」を用いて解決すべき社会的・科学的課題の一つとして、計算化学主導による新規窒素固定触媒の開発を挙げたい。</p> <p>窒素は水素、酸素、炭素に次ぐ生体内多量元素であるもののその源は元来一部の細菌による生物学的窒素固定に限られていた。鉄触媒を用いて空気中の窒素からアンモニアを合成するハーバー・ボッシュ法の確立は、農業に革命をもたらし、世界人口の増加を加速したが、この反応は高温高圧により進行させるために非常にエネルギー効率が悪い。現在では全世界のエネルギー消費の1%以上が人工的窒素固定に用いられている。そのため、持続可能な社会の中で人類が安定的発展を維持するために、温和な条件で反応が進行する新規触媒の開発が急がれている。</p> <p>具体的な研究には、二つの方向性があると考えている。一つは、生体中常温常圧で窒素固定を行うニトロゲナーゼの模倣である。ニトロゲナーゼによる窒素固定の反応中心の構造がMoFe7S9Cクラスターであることが近年明らかになってきたが、どのサイトが窒素を活性化するかなど、反応機構の多くが未解明のままである。この電子状態をポスト「京」をもちいた大規模高精度量子化学計算により解明し、メカニズムを究明することにより、人工的窒素固定を可能とする触媒の指針を得ることが期待される。もう一つの方向性は、多様な元素を利用することにより生体では実現できない方法を模索することである。特にこれまでRuを触媒に用いる方法が一定の成功を収めているが、触媒のナノクラスター化や担持による触媒性能の変化などが報告されており、そのメカニズムを分子論的に解明することにより触媒のさらなる最適化が可能になると期待される。</p> <p>現在、人類は多様な命題に直面しており、一つの命題だけを解決することが求められているわけではない。本課題は、近年の人口の増加に伴う食糧不足、地球温暖化、さらには超低エネルギー社会に向けての対応などの喫緊の問題を、日本が世界を先導してきた物質科学の視点から解決するものであり、現在の「京」、さらにはポスト「京」を用いて加速すべき研究であることは間違いない。</p>		
56	<p>水素エネルギー社会に向けた高機能水素発生触媒開発</p> <p>クリーンエネルギーとしての水素は、将来的なエネルギー通貨としての利用が期待されており、水素発生触媒の開発は極めて重要な課題である。水素発生触媒としては、ロジウムやコバルト、白金の単核及び複核金属錯体やヒドロゲナーゼなどの酵素が挙げられる。金属錯体触媒では、元素活用的な観点から白金などの貴金属に頼らず、安価な鉄などを利用することが重要となる。また、ヒドロゲナーゼは鉄やニッケルなどの金属多核錯体を活性中心とするが、その触媒メカニズムについては未だ推定の域を出ておらず、生物模倣触媒の開発に向けて、微視的反応機構の解明が求められている。</p>	<p>安価な中心金属を用いた金属錯体触媒の実現のためには、中心金属のみではなく、配位子の酸化還元能を積極的に利用した新しい錯体構築の開発が期待される。また、生物模倣触媒の開発にむけては、ヒドロゲナーゼの活性点と各種酵素の役割を解明することは、新規触媒設計を行う上で越えなければならない重要な課題である。これらの解決のためには、分子理論科学の分野で開発されてきた広範囲にわたる計算手法を集結する必要がある。</p>	<p>これらの課題の解決は、人類が直面するエネルギー問題・環境問題への根本的解決へ資する触媒開発となる。また、大規模理論計算が実験研究を先導し、高機能性を有する革新的触媒の開発を進める次世代型の触媒開発研究への道が拓かれる。</p>
57	<p>生命体として全ての活動の源泉となるエネルギーの確保へ向け、安定感を表出する科学政策の実行が急務であるが、候補として多様なエネルギー創成を準備することがある。再生可能エネルギー創成において、廃棄物が出ないためには、エネルギー循環として創成だけでなく、変換・貯蔵・伝送、消費、回収の4部門の効率化が柱となる。生命体内の触媒反応は、エネルギー循環の障壁を低減させ、循環の効率化を実現しうる候補であり、特に低エネルギー励起を実現している磁性に関係する反応は取り組むべき最重要反応である。</p>	<p>エネルギー循環効率向上のための設計・予測を可能とするため、例えば磁性をもつ酸素の循環に着目して創成(光合成など)、貯蔵・運搬、消費(呼吸など)および老廃物分解に関する生化学的エネルギーを見積もる、量子力学と統計物理学を基礎とした非経験的自由エネルギー計算(第一原理分子動力学を用いた自由エネルギー計算)手法および並列計算アルゴリズムの開発が進んでいる。ポスト「京」を活用し、金属・磁性イオンをもつ蛋白、膜などの活性中心で発現する触媒反応に関する大規模自由エネルギー計算を提案する。</p>	<p>生命体内の触媒反応について、生化学エネルギーを高い確度で評価できるようになり、いくつかの必要な要素反応を組み合わせて、エネルギー循環のモデル化、およびこれを用いたエネルギー循環に関するシミュレーションが可能となる。将来的に「スマートアグリ(植物工場・IT等を利用した次世代農業)」の発展に資する効果も期待される。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
58	<p>金属微粒子のサイズ・構造・組成制御と触媒作用の理論・計算科学と元素戦略的実用触媒開発</p> <p>現在、元素戦略研究が、活発に行われているが、これこそが資源の乏しい我が国が世界に先んじて開発して行かなくてはならない研究課題である。貴金属の使用は、自動車排気ガス触媒、磁石、鉄鋼などの構造材料などである。</p> <p>どのように白金やパラジウムのような貴金属触媒を卑金属、あるいは、汎用金属触媒で置きかえることが可能か、開発研究の道筋を立てることが重要である。その道筋を考える上で、春田らによる金の微粒子触媒の発見と開発、佃らによる金微粒子の精密サイズ制御と混合微粒子化、北川(宏)らによるロジウム-銀混合微粒子に依るパラジウム微粒子機能の発現などが参考になる。また、町田らは金属酸化物担体を工夫することでロジウム触媒量を激減することに成功し、細野らはエレクトロライトとルテニウム微粒子を組み合わせることで窒素固定に成功した。同様に田中(庸)・宍戸らは金属担体の相違により、白金微粒子の成長過程の相違が顕著であることを見出している。以上の結果を考えると、金属微粒子のサイズ、構造の制御法の確立、複合金属微粒子の開発、金属微粒子の担体との相互作用による制御が、新しい触媒開発のキーポイントになる。</p> <p>これらの基本的技術は、しかし、現在手探りであり、また、どのような種類の金属微粒子で、どのようなサイズが、どのような触媒機能を発揮するのか、また、どのような複合化により、どのような反応性を発揮することが出来るのか、担体とどのような相互作用が重要で、なぜ、触媒作用が大きく左右されるか、全く分かっていない。</p> <p>これらについては、電子状態計算が解答を与えてくれるはずである。現在、この種の電子状態計算はVASPやSIESTA、CASTEPなどを使った平面波基底のDFT計算(LDA、GGA近似汎関数使用)が行われている。しかし、金属微粒子については、スピン多重度や構造を正しく考える必要があることから、高度な汎関数を使用したDFT計算を行う必要がある。現在、そのようなプログラムとして分子研ではSMASHが、理研のAICSではNTChemが開発され、我々も「京」を用いて、金属微粒子の計算を開始している。しかし、現時点では数ナノメートルサイズの金属微粒子の計算しか実行できない。</p> <p>これらのプログラムをエクサ級計算機に載せ、一層大規模な計算が可能になれば、10ナノから30ナノ程度の実際に存在する金属微粒子の電子状態計算が可能となる。</p> <p>当面のターゲットは、白金、パラジウムなどの自動車排気ガス浄化触媒と燃料電池電極触媒であるが、より一般的に、多くの触媒系の革新につながる事が期待される。</p> <p>現時点では、触媒開発は多分に経験に基づいて行われている。この種の計算が担体を含めて、高精度の行うことが可能になれば、触媒開発の指針が得られ、理論先導的に金属微粒子触媒の開発が可能となり、我が国の技術は大きく進展すると期待される。</p>		
59	<p>理論・計算科学による担持金属微粒子触媒の解明と触媒開発</p> <p>近年の触媒開発では、多くの場合、貴金属や希少元素を使用することにより、高性能化してきている。例えば自動車排気ガス触媒では、白金、ロジウム、パラジウムが使用されている。そこでは貴金属の低減や汎用元素の利用による触媒の高性能化、所謂触媒の元素戦略研究の進展が求められている。例えば、町田らはリン酸添加によってロジウム低減に成功し、清水らは担持銀微粒子触媒によって特異的水素活性化を実現した。これらの触媒では、担持金属微粒子触媒が主役であり、理論によって、担持金属微粒子の触媒作用を解明し、新規触媒開発の指針を示すことは、極めて重要な課題である。ポスト「京」では、大規模・複雑系の理論計算が可能となり、固体触媒や担持微粒子触媒などの理論研究は急速に進展できると期待できる。</p> <p>これまでに元素戦略拠点の研究を実験と協力して推進してきたが、触媒研究において共通する課題は、金属酸化物に担持された金属微粒子の触媒作用である。そこでは金属微粒子のサイズ、熱力学的安定性(シタリング)、界面反応活性点等が重要であるとの認識がある。理論では固体電子論や量子化学に基づく理論計算によって、これらの対象を研究し、実験と協力して様々な問題に取り組み、成果を出しつつある。しかしながら、金属酸化物に担持された粒径数ナノメートル金属微粒子の複雑な電子状態と反応活性点を記述するには大規模な精密理論計算が必要である。また、金属の代替には、理論スクリーニングが必須である。これらの研究には、「京」を超えるポスト「京」の計算機が極めて重要な役割を果たすと期待している。</p> <p>そこで我々は、その準備段階として、「京」を用いた金属微粒子の触媒作用の研究を今年度から開始した。理論・方法としては、固体電子論ではハイブリッド汎関数を用いたより精密な方法、量子化学では、超並列計算が可能であるプログラム、例えばAICSで開発しているNTChemや分子研で開発しているSMASHを用いて進めている。さらに、反応中心には高精度な理論を適用し、周辺部分にはより計算効率の高い方法を適用するハイブリッド計算法を用いることにより、効率的な計算を実施する。さらにモデル化を行い、スルーブットの高い方法に基づいて、触媒機能のシミュレーションだけでなく、新規触媒の理論設計にまで到達することを目指している。これらの研究はポスト「京」の計算機に基づく研究に引きつぎ、実験と協力しつつ、理論スクリーニングによって汎用金属による代替化や新規触媒システムを提案することを目的とする研究を展開する。とくに、大規模系のスクリーニングにはポスト「京」が必須となる。</p> <p>本課題による金属微粒子触媒の理論設計やその設計に基づく新規触媒は、自動車排気処理触媒に代表される環境触媒技術として、世界規模で地球環境保全に資する研究成果となる。また、医薬品等のファインケミカルズからバルクケミカルズまで化学製品製造の基盤となり得る。これらの研究は、我が国の主要産業に密接に関連し、その開発は科学技術に立脚した日本経済の発展に必要不可欠な研究となることは間違いない。</p>		

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
60	<p>エネルギー・環境問題解決に資する革新的触媒の量子化学的探索</p> <p>量子化学は、既知または容易に推定可能な反応機構について障壁の高さや遷移状態を可視化できる。しかし、全く未知の反応を予測することはできてこなかった。計算機技術の進歩に伴い、コンピュータで未知の反応を「探索」できる技術が待たれている。そのような技術は、エネルギー・環境問題解決に資する革新的触媒の探索へとつながる。近年開発が進んでいる反応経路自動探索法によりこれを実現することは、重要課題の一つである。</p>	<p>近年、系統的な反応経路自動探索が可能となってきた。そのような「探索」は、与えられた反応物や触媒の組み合わせからエネルギー的に実現し得る(実際に起こる)反応のみならず、障壁が少しだけ高いがためにその系では起こらない未知反応の可能性をも網羅的に見出すことができる。得られる未知反応は、それらを実現する反応設計の手がかりを与える。このとき、反応物と触媒に加え、溶媒やカウンターイオンなど反応系に含まれる様々な要素の膨大な組み合わせを考慮するために、高度な計算機の利用が求められる。</p>	<p>触媒開発は実験的にどんどん進められており、有用なものが次々と発見されている。コンピュータと量子化学計算を用いた未知反応の網羅探索は、触媒開発を大きく加速する起爆剤になると期待できる。つまり、エネルギー・環境問題解決に資する革新的触媒を早期に発見する一助となると考えられる。</p>
61	<p>触媒反応は工業生産および環境浄化での物質変換の中核をなすものであり、二次電池・燃料電池・太陽電池などエネルギー貯蔵・変換材料はこれからのエネルギー問題解決の一翼を担うと期待され、新規材料及び機能開発が活発に行われている。これらで重要となるのは化学反応、そして電子移動を理解することであり、大規模電子状態計算プログラム開発と京コンピュータを利用した計算が現在進められている。さらに発展させるためには、短時間で幅広く材料を探索する必要がある。</p>	<p>巨大分子系の化学反応を解明するためには、電子状態及び様々な分子特性を理解することが重要であり、金属を含む場合は計算コストが大きい高精度計算手法が必要となる。並列効率及び実行効率の高いプログラムを用いて、ポスト「京」で元素や形、大きさを変えて電子状態計算を数多く行い、電池や触媒などの機能の起源を突き止め、貴金属を用いない材料開発、性能向上、新規機能設計を進めていく。</p>	<p>より少ない資源で、また汎用元素への置き換えで希少元素の使用を大幅に減らすことによって資源リスク低減に寄与できるとともに、性能向上により大規模なエネルギー貯蔵や環境負荷の少ない材料設計につながると見込まれる。</p>
62	<p>高機能高分子材料の分子設計</p> <p>我が国の化学産業は10兆円に迫る付加価値(2012年)を生み出す主要産業であり、中でも高機能高分子材料は、光学フィルム・二次電池電解質・逆浸透膜・医療材料・炭素繊維複合材料など、世界市場で支配的なシェアを占める。材料への要求機能が高度化・多様化する状況において、高分子材料が将来にわたって高付加価値を生み続けるには、機能発現メカニズムの理解に基づく論理的な分子設計が不可欠であるが、現在の戦略拠点では、高分子設計への取り組みは必ずしも十分ではない。</p>	<p>高分子は、一次構造(化学式)から高次構造に至る階層的な構造から構成される。また、機能発現メカニズムを支配する基礎理論は、ミクロ(量子力学)からマクロ(連続体力学)まで幅広いスケールにわたる。従って、高機能高分子材料の設計には、量子化学・分子動力学・高分子物理学といった既存の学問的枠組みを統合した方法論の構築が求められる。中でも、高分子物理に立脚したシミュレーション技術は、我が国が世界をリードする分野でありながら、超並列計算環境への対応が遅れており、重点的な強化を要する。</p>	<p>我が国の化学産業が新興国による追い上げをかわし、競争力を強化し続けるには、より高付加価値な材料をより迅速に市場に送り出す必要がある。統合シミュレーション技術に立脚した分子設計は、研究開発の高付加価値化・迅速化の強力な手段となる。</p>
63	<p>飛躍的に優れた構造材料を開発するための大規模第一原理計算強度と耐久性や耐熱性、加工性を併せ持つ構造材料の開発は、高効率で安全な発電装置、輸送機器の軽量化、長寿命・高信頼性の大型構造物など、安心・安全の社会基盤や持続可能社会実現に不可欠。希少元素使用量も膨大で、低減化・代替化も急務。大規模第一原理計算を通じて、構造材料の構造や機能を原子・電子挙動から高精度に解明することで、飛躍的に高性能な構造材料を開発し、且つそのための設計技術を開発することが重要です。</p>	<p>構造材料は、多結晶性で、異種物質の析出や添加元素を含む複雑な「内部組織」が性質を支配します。極めて大規模な第一原理計算でなければ、高精度解明は困難で、他の材料に比して設計技術は遅れている。「京」でオーダーN法を用いて、異相界面や転位、粒界といった「内部組織の構成要素」の第一原理計算が開始されていますが、転位と界面、転位と粒界の相互作用など、現実的な複雑構造、現象を扱うには、さらに数百倍近い大規模構造の取り扱いが必須で、ポスト「京」による解明が期待されます。</p>	<p>大規模第一原理計算のデータを、メソスコピックの理論・シミュレーションと組み合わせることで、内部組織全体の構造や性質の解明することが可能となり、高度の設計技術が確立できる。実験観察やメソスコピックの理論・シミュレーションの研究者、企業の開発研究者と連携することで、飛躍的な展開が可能となる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
64	人間の文明社会は有用な物質の創製によって飛躍的な進歩を遂げてきた。21世紀においても新しい物質の創製は経済発展の起爆剤であるだけでなく、人間社会の発展にとっても重要なインフラ的な研究課題であることは疑う余地がない。現代における物質創製の研究とはナノスケールにおける原子配置の精密な制御とほぼ等価である。量子力学に立脚した大規模シミュレーションによって、望みの機能を持った原子配置を予め設計する本当の意味での物質デザインの実現が、今後の物質材料科学における最重要な課題である。	量子力学に立脚した第一原理計算と呼ばれるシミュレーション手法によって、電池、磁石、熱電変換素子、電子デバイス、構造材料等の機能性材料の物質構造と機能の相関関係が原子・電子構造のレベルから詳細に理解されつつある。次の大きな目標は、実際の実験に先立って所望の化学的・物理的性質を持つ物質をコンピュータ上で設計した後に、物質合成を行うことである。この目標を実現するためには結晶構造の予測手法の高度化が必要である。新規結晶構造を予測した上で物質特性を計算し、目的の物質特性が最大化するまで、コンピュータ上ではほぼ乱暴的にシミュレーションを繰り返す必要がある。その際に機械学習の手法を組み合わせて、シミュレーションの結果を人工知能が解釈しながら、シミュレーションの実験計画を立てて、自動的に実行していくシミュレーションソフトウェアを開発する必要がある。現段階でも要素技術の開発は進んでおり、それらの高度な統合化により、物質デザインへの一歩が踏み出されるものと考ええる。	有用な物質の創成は文明社会の基盤的研究である。次世代コンピュータを用いた物質デザインが実現されたならば、エネルギー効率の極めて高い新しい電池、磁石、熱電変換素子、電子デバイス、構造材料等の機能性材料が創出され、経済発展への影響力が大きいものと考えられる。また物質デザインを実現するその手法自体(ソフトウェア)も科学的な重要性だけでなく、知的財産として日本が国際的なイニシアティブを握るための鍵となるものであろう。
65	「IV族元素とその酸化物からの錬金術」として、IV族元素(炭素、シリコン等)とシリコン酸化物(SiO ₂)などのその酸化物の派生物質によりナノテクノロジーの新展開の活性化を狙う。多くの動植物に含まれる炭素(C)、地殻に多く含まれるシリコン(Si)など資源の枯渇を考えずに利用できる利点を持ち、さらには炭素はグラフェンなど形状の多種バリエーションを持ち、シリコンやシリコン酸化物は様々なナノ構造の展開が可能である。	物質科学をコンピュータでシミュレーションをする一つの方法に第一原理計算がある。原子1個1個に対して量子力学的に方程式を解き、実験を用いずに物性予測を行う。多くの場合は、プログラムパッケージを利用する。しかしながら、海外のプログラムの躍進に比べ、この10年の間の日本の第一原理計算プログラムの地盤低下が著しい。そのため、国産プログラムの再整備と強化が必要である。日本では多くのプログラムが乱立しているため、開発者の統廃合も視野に入れるべきである。	新物質発見、新物性発見による、ナノデバイスの高性能化が効果の1つに挙げられる。そして、太陽光発電材料としての応用を考えると、エネルギー政策にも効果がある。そして、ナノテク実験との比較にも有用な手段なので、第一原理計算による物質探索は国家研究費のコスト低下にも繋がる。
66	火力発電用燃焼器や自動車用エンジンなどの効率的な設計のためには、その内部の燃焼場の予測が極めて重要です。それらの燃焼場では燃料と酸化剤の間に複雑な物理機構や化学反応過程が現れますが、現在の数値シミュレーションでは、主に計算機能力の制限から実現象を大きく単純化した物理モデルや化学反応モデルを用いねばならず、また計算規模も実機に対して非常に小さいものとなっています。今後、燃焼場の数値シミュレーションの大規模高度化を強く推進すべきであると考えます。	現在の燃焼場の数値シミュレーションでは、噴霧液滴や微粉炭粒子であればせいぜい数千万～数億程度の分散を模擬し、単純化された空間領域で化学反応等のモデルを用いた解析が行われているものの、経験的な係数を随所に用いる必要があり、いまだ実規模の高精度な予測はほとんど行えていないと思います。この状況を打開するために、物理モデルを可能な限り排した大規模直接計算を実施し、現状のモデルの検証とより厳密な物理モデルの構築を行う必要があると考えます。	化石燃料の枯渇と世界的な大気汚染は社会問題として年々大きく取り上げられるようになってきました。そこで、高精度なシミュレーションによる実際の燃焼場の予測が可能となれば、工業的な価値は非常に高いと思われます。

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【エネルギー問題】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
67	地球温暖化やPM2.5等の環境問題に対処する必要がある一方で、エネルギーセキュリティの観点から、今後も化石資源を主たるエネルギー源として活用せざるを得ない状況が数十年という単位で続くと思います。そこで、よりクリーンで高効率な化石資源の有効活用技術を開発する必要があると思います。特に、シェールガスの普及により、石炭価格の下落が起こっている状況において、我が国のみならず、途上国においても、さらなる石炭利用促進が図られるものと考えられます。石炭は他の化石資源に比べて、二酸化炭素排出量原単位が高いだけでなく、NOxやSOx、さらには重金属成分など、様々な環境影響物質を高い濃度で排出するため、その燃焼やガス化の技術には、常に最先端のものを導入していく必要があると思います。しかしながら、電力会社には研究開発を行う余裕がない上、メーカーにとっても新設案件の極端な減少や火力入札制度により、新規技術開発にコストを割く余裕が失われつつある状況です。そこで、この分野の研究開発を促進し石炭利用技術の格段の高度化を図るには、コンピュータシミュレーションの活用が有効だと考えられますが、石炭用のボイラやガス化炉は極めて大型の反応容器であるため、内部の現象を正確に再現することは、京コンピュータをもってしても計算負荷の観点から不可能だと思われる。ついで、エクサスケールスーパーコンピュータを早期に導入して頂き、是非とも本分野の技術開発を加速させ、国内のみならず、海外案件にも活用できるような知見を得て、環境問題の緩和に貢献するだけでなく、日本の技術輸出加速にも貢献できるような技術開発を進めて頂きたいと思っております。		
68	東日本大震災以降、発電用資源として、化石燃料に頼らざるをえないのが実情である。しかし、化石燃料は途上国を中心に利用が拡大し続けており、価格も上昇する一方である。我が国の安定的な産業の発展のためには安価な電力は欠かすことができない。そのため、エクサコンピュータを用いて、劣質な化石燃料を利用した発電技術に関する課題を解決することにより、他国に先駆けた技術開発とそれらインフラの輸出、また、燃料調達コストの低減が達成出来ると考える。	流体計算の分野においては、京コンピュータにより、数値シミュレーションが、自動車車両の風洞試験を代替する段階まで発展してきた。しかし、これは流れが空気だけの場合であり、化学エネルギーを電気エネルギーに変換する機器の内部においては、微細な粒子、反応、輻射等、様々な現象が混在している。現時点で、これらの現象に対して、実用燃焼器規模スケールの大規模計算モデルは確立されていない。そこで、これらの大規模計算モデルを確立することにより、数値シミュレーションが燃焼試験を代替する段階まで発展させる。	本課題を解決することにより、電気料金の大幅な値下げを達成でき、産業分野から家庭まで、幅広く国民の益とすることができる。また、燃料調達コストの低減により、貿易収支の黒字安定化が図られる。さらに、産業分野においては技術の高度化と開発スピードの短縮が見込まれ、発電機器の世界的シェアの向上が見込まれる。
69	<有効なエネルギー組み合わせの設計技法の開発と原発の廃炉方法の開発> 化石燃料に代わる様々な代替エネルギーが開発されているが、社会全体としてのその最適な利用方法が十分検討されていない。また、原子力発電は、仮に将来利用を続けるにしても、個々の原発の廃炉が必要になるが、その方法が確立されていない。これを解決するために、エネルギー利用のベストミックスモデルの開発と原発の廃炉方法の開発を可能にするシミュレーションツールの開発が必要である。	社会の中で、種々のエネルギー源をどのように組み合わせるのかがベストか、また将来に向かってそれをどのように変化させて行くことが有効かをシミュレーションによって明らかにすることができ、エネルギーのベストミックスモデルを開発する。また、原発の廃炉を実現するための廃炉過程をシミュレートするための廃炉設計モデルを開発する。	短期的および中・長期的に、エネルギーの組み合わせをどのように変化させていけばよいか明らかにし、エネルギー政策に資することができる。また、原発の廃炉方法を明らかにすることで、社会の中の不安を取り除くことができる。
70	石油業界における高度化法の施行により重質油の処理が重要となっています。この処理は製油所ではRFCC装置で行っております。この装置が数値シミュレーションできれば、運転条件の改善、設備改造、新設等が可能となり、競争力強化につながります。このシミュレーションは粉体とガスの解析および反応と相変化が重要であり、大規模解析が必要です。これらを阪大田中・辻先生のDEMコードで実施できないでしょうか。		

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【輸送機器設計】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
71	<p>「航空機の非定常空力解析と乱流モデルの自動構築(フラッグシップシステムの成果を下位システムへ展開する技術)」</p> <p>航空機はレイノルズ数が高いため、全機をLESで非定常空力解析するには膨大な数の格子を必要とする。そのため、実用的には、RANSモデルを用いた定常解析を用いて航空機的设计は行われている。しかし、RANSではモデルの限界があるため、失速等の剥離を伴う複雑な流体現象を正確に再現できない。それにより、CFDでフライトエンベロープ全体をカバーすることは困難であり、風洞試験が手放させない状態が続いている。一方で、全部LESで解いてしまえば良いかというと、それは計算コストを考えると非現実的であり、LESの結果をベースにRANSモデルを自動構築して計算することが望ましい。現在、JAXAでは、高速非構造格子ソルバFaSTARの非定常コード開発、およびデータ同化を用いた乱流モデル構築技術に取り組んでいる。</p>	<p>今までの「京」の解析でもそうだが、大規模解析の成果を産業界(社会)に展開することは容易ではない。フラッグシップシステムを使って、今までにない大規模な解析ができたとしても、それを使って何十ケースも計算して設計に反映させるのは困難である。そこで、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する。さらに、そのデータを使ってモデル化し、一般の人に使いやすい形にして、社会に還元する。そのモデルを使って、下位のシステムでパラメトリック計算をすることも可能である。空力解析で言えば、フラッグシップで大規模LESを実施し、データ同化等でRANSモデルをチューニングし、下位のシステムで改良されたRANSモデルによる大規模パラメトリック計算を実施すべきである。</p> <p>実現可能性に言及すると、RANS-LESハイブリッドを使用すれば、エクサスケールで航空機のLES解析が初めて可能になる。また、データ同化等のモデリング技術は急速に発展しており、実用的に使えるレベルに達する見込みである。万能な乱流モデルではなく、問題に即したモデルを構築することを目指す。</p>	<p>CFDでカバーできる範囲が飛躍的に拡大し、風洞試験や飛行試験に頼らずに、CFDだけで航空機が設計できるようになる世界が広がる。また、フラッグシップの結果をモデル化することで、その成果を広く社会に還元することができる。</p>
72	<p>燃焼は高出力密度、自動車、ロケット、工業炉、発電所などあらゆる場所で活用されている。</p> <p>これまでの研究によって、省エネやエミッションの低減が果たされてきたが、原子力利用の低下や出力が不安定な自然エネルギーの導入にともなって、信頼性の高い燃焼が再び着目されている。燃焼は流れ、反応、固体・液体・気体がお互いに影響しあうため、実験のみでは現象の要因分析が不十分であり、計算による支援が欠かせない。ポスト京を用いて、産官学が連携し、ガスタービンやエンジンの燃焼シミュレーションコードを構築し、燃焼機器開発の促進を狙う。</p>	<p>自動車や航空機用のエンジン実験を再現する計算を行う。これによりエンジンの最適化(ピストン形状、噴射機構)にかかる時間を短縮し、高効率エンジンの開発を促進する。</p>	<p>社会全体で利用する化石エネルギーの消費量を低減できる。</p>
73	<p>近年、環境保全の観点から、航空用ジェットエンジン、産業用ガスタービン、および自動車エンジンからのCO₂、NO_xおよびスモークの排出量削減が強く要求されており、その技術開発を進める上で、燃焼数値シミュレーション技術を確認することが極めて重要である。現在、「京」による燃焼数値シミュレーション技術(主にLES)の開発がHPCI戦略プログラム(分野4)の下で積極的に進められているが、計算機資源の制限から燃焼反応を簡易化した乱流燃焼モデルの使用は必須であり、それが燃焼器内の温度や各種化学濃度の予測精度を低下させる原因になっている。</p>	<p>ポスト「京」を活用することにより、航空用ジェットエンジン、産業用ガスタービン、および自動車エンジンに使用可能な乱流燃焼モデルの高度化、およびそれを用いた燃焼数値シミュレーション(LESおよびDNS)により様々な実機内乱流燃焼場の高精度かつ迅速な予測が可能になると考えられる。</p>	<p>産業界における燃焼器の開発設計は、研究者および技術者の経験とトライ&エラー作業に完全に頼り切っているのが現状である。本課題解決により、開発期間およびコストの大幅な削減も可能になるため、燃焼器開発の大きなパラダイムシフトが起こると期待できる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【輸送機器設計】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
74	<p>試作・実験レス研究開発 現状では、試作・実験でしか実施できない検証をシミュレーションにより行う。または、現状施設においては実験すら困難な事象をシミュレーションにより解明する。</p> <p>例)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・実走行状態での衝突シミュレーション ・自動車まるごとシミュレーション ・材料の合成・劣化における素反応シミュレーション ・高分子材料・複合材料の高次構造形成および物性シミュレーション 	<p>①ハードウェア面において あらゆる現象解析に対して高速なスパコンの実現は困難であり、使い方に合わせた多種多様なスパコンを準備する必要がある。下記のような産業利用で実績のあるソフトの稼働が必須である。 Capability・Capacityどちらも考慮した上でコストパフォーマンス最大化を検討して欲しい</p> <p>②ソフトウェアについて</p> <ul style="list-style-type: none"> ・産業界でHPC使用実績のある主な市販、オープンソースソフトの動作保証があること ・実績のあるアプリケーションベンダーの参画 <p>③その他 このような環境整備完了が2020年では遅いと思われる。数年後から2030年頃までを見据えた継続的なスパコン能力の増強が必要と考える。</p>	<p>経済競争力の向上 一番の効果は、経済競争力の向上と考えている。 具体例として、自社スパコンでは5年後にしか実施できない技術開発を先行実施し、実際の製品開発への適用までの時間を短縮できる効果が期待される。 欧米では、既に技術開発にスパコンを積極的に活用しており、このままでは欧米有利の状態になる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【社会科学】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
75	資産性のある有体物(動産・不動産)、無体物(知的財産権)及び債権(金銭債権、契約)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が求められる。例えば、DCF法をより精緻化するシミュレーション手法の開発である。	(1)DCF法は、不動産の価値評価、担保価値の評価、金銭債権の評価、減損会計、M&Aの企業価値評価、知的財産権の価値評価等で多様されているが、手法が提案されてから数十年、ほとんど進化せず、DCF法の使い手は見込む額に合わせるようにパラメータを調節してしまうことすらできるようになってしまっており、経済的価値の測定手法としての科学性、客観性が失われつつある。つまり、DCF法を補完または精緻化するシミュレーション手法の開発を各界に促す施策が必要と思われる。 (2)例えば、入力データの種類ごとに確率分布の判定し、確率分布の積と、その分散(不確実性、予測からの乖離率)を求めることのできるシミュレーション手法の選定と一般化が求められる。入力データの種類としては、売上高の予測分布(または過去の変化)、利益率の予測分布、ストレスの発生頻度とその影響等がある。シミュレーション手法の研究者と、経済学、会計学の研究者の対話等により、DCF法を精緻化するシミュレーション手法を開発し、入力データの標準化を提案できるのではないだろうか。一般化するシミュレーション手法の選定に際して、スーパーコンピュータでのシミュレーション結果との整合性が高さを考慮すると良い。	このDCF法を精緻化するシミュレーション手法の開発は、量子力学や天体物理学での応用と比較しておそらくは単純だろうが、会計基準の設定や、金融商品の高度化に関する日本の存在感を高めることに極めて有用な研究開発となる。
76	<歴史・古代史「過去から学ぶ」：今までの人の歴史・実際にあったことから学んでいく> 歴史・古代史など、過去にあった事の資料(史料)を大量収集・大量解析することにより、人間の行動パターンや心理パターンを明らかにし、人間の文化の生成過程や行動原理を明らかにする。また、地質や地震の記録などの自然科学的なデータと照合することにより、予測の信頼性向上と射程の拡大を実現し、説得力のある未来予測をできるようにすること。	歴史上の過去の人間の行動の諸事例を史料渉獵によってデータベース化する。その史料の中から、人間行動や心理パターンを見出すためのアルゴリズムとアプリケーションを開発する。さらに、その解析結果により明らかにされた相関やパターンを理解するためのモデルを構築する。	人々の行動パターンを明らかにすることで、災害への対応や国際紛争の解決などにつながる。また、歴史という多くの人が興味を持つことを取り上げることにより、必ずしも科学好きでない一般の人や若い人にもスーパーコンピュータについて興味を持ってもらえるようになる。
77	<制度の再設計を含む社会システム設計とシミュレーションの有機結合システム> 年金問題に象徴されるように、従来のさまざまな社会システム(制度)はその設計段階において社会状況の変化の可能性が十分に考慮されておらず、硬直的な形で作られているために、社会の状況が大きく変化した時に適切な対応がなされない場合が多い。21世紀の社会は、人口構造の変化、グローバル化、高度情報化の進展、国際政治状況の変化など、さまざまな変化がこれまでも増して急速に進展することが予想され、それらに適切に対応してゆけるシステムが必要となる。	高性能のコンピュータを利用した優れたシミュレーションと社会システムの設計を有機的に結びつけ、社会状況の把握と変化予測を社会システムの点検・再設計に動的に結びつけてゆくような革新的なしくみを検討、整備する。具体的には、政府の政策設計を行う部署とポスト「京」の設計・運営(研究を含む)を担う機関双方に、インターフェイス機能をもつ部門を置き、上記のような新しい社会システム設計のあり方について、研究開発をすすめ、その成果を実装する。	社会状況が急速に変化する時代にふさわしい社会システム設計の革新的なシステムが生み出され、さまざまな社会課題へのより適切な対応が可能になるとともに、国際社会に対して先駆的なシステムを提示することができる。

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【社会科学】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
78	<p><ビッグデータを活用した人間理解の深化> 持続可能な社会の実現、国際平和の実現、防災、安心・安全な社会の実現など、さまざまな社会的課題に適切に対応し解決を図る上で、人間そのものの理解を深めることが重要である。高性能のコンピュータ(ポスト「京」)により、人間の行動や外部からの情報への応答などに関する多様で広範なビッグデータの分析・活用が可能となると期待されることから、それらを活用し、社会的課題解決への応用を念頭において、人間理解の深化につながる研究を進めることが重要である。</p>	<p>(1)人間行動等に関する広範で多様なビッグデータの集積とデータベース化を促進する。 (2)高性能のコンピュータ(ポスト「京」)を利用し、上記のデータベースの活用・分析を行って、社会・文化的側面を含めて人間の行動・心理パターンを解明し、人間理解の深化につながるような基礎研究および社会的課題解決につながる応用研究を推進する。 (3)それらの領域の基礎的研究および具体的課題への応用を推進する中核的機関を同定または新設し研究・応用を推進する。</p>	<p>急速に重要性が増すビッグデータは営利目的の利用が進んでいるが、これを活用した人間理解の深化を多様な公共的課題の解決につなげる新しい枠組みが構築されることが期待される。</p>
79	<p><ビッグデータ解析による人間研究に関する社会的・倫理的検討> ポスト「京」で取り組むべき課題として、別途、さまざまな社会的課題解決に資する横断的な重要性を持つ研究課題として、高度な計算能力と「ビッグデータを活用した人間理解(行動・心理パターンなど)の深化」を提案したが、このような課題を推進するにあたっては、個人情報保護などに加えて、個人の行動予測などに伴う新しい社会的、倫理的問題が生じることが予想される。このような問題について予め検討を行い、ガイドラインを設定することが必要であると考えられる。</p>	<p>ポスト「京」の利用による進展を念頭において、ビッグデータを活用した人間(行動・心理等)の研究について、(1) その成果の社会的、倫理的意味と新たに生じうる問題、(2) それらに対する適切な対応のあり方について、計算科学などに加えて、心理、哲学、倫理、法律などを含む人文・社会科学の研究者などで構成される研究チームを形成し、研究・検討を進める。また、研究プロジェクトの公募・支援などを行い、多様な検討が行われることを促す。さらに、これらの問題と対応について、国民的議論を喚起し、社会的合意を形成する。</p>	<p>HPCの能力向上と、人間理解の深化という新たな課題領域への展開に伴って生じる社会的問題について、事前に社会的合意・ルールを形成することができる。さらにそれらの問題に関して国際社会に向けて先駆的モデルを提示することができる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【その他】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
80	<p>固体粒子の集合体である粉粒体の力学的な振る舞いは、多くの工業装置設計や自然現象を考える上において極めて重要です(例えば、石炭/バイオマス流動層ガス化炉・燃焼炉、触媒反応炉、造粒、セラミック、燃料電池、フォトニック結晶、火砕流・土石流、火山灰、PM、地震など)。これまでも離散要素法(DEM)などを用いた粉粒体のシミュレーションが行われてきていますが、実際の問題を考えると、主に計算機能力の制限からモデルは大きく簡単化されており、また計算規模もあまりに小さいと言わざるを得ません。今後、粉粒体力学シミュレーションの大規模高度化を強く推進すべきであると考えます。</p>	<p>粉粒体シミュレーションでは、粒子濃度が高くなるにつれ、近接粒子間の接触を取り扱う必要があります。これが膨大な計算負荷となります。現時点で取り扱える粒子数は、せいぜい数～数十億程度であり、実際の工業装置や自然現象と比べるとあまりに少ないです。一見MDなどの分子計算と似ていますが、粉粒体の場合、形状・サイズなど個々の粒子に個性があり、さらにこれらが全体の挙動に影響するマルチスケール現象となります。また、多くの場合、流体力、静電気力、液架橋力など異なる物理が介在する複雑なマルチフィジックス現象となります。今後これらの問題を解決するために、(i) 超並列計算機に適したアルゴリズムの検討 (ii) 粉粒体問題を効率良く扱える計算機ハードウェアの開発 などを行う必要があると思います。</p>	<p>私達の身の回りにある工業製品の50wt%以上は、その製造過程で、もしくは最終プロダクトとして一度は粉粒体の形態を取ると言われています。高精度なシミュレーションを実施出来るようになれば、その影響範囲は極めて広く、価値は計りしれません。これはひいては、産業競争力の強化、エネルギー・環境問題の解決や減災などに貢献するものであると思います。</p>
81	<p>粉体を対象としたシミュレーションに取り組むべきだと考えます。粉体とは、いわゆる「粉」であり、食品や医薬品として我々の生活に身近であり、ものづくりプロセスでは種々製品の原材料が粉の状態です。現在、原材料のナノサイズ化が図られていますが、サイズが小さくなると小麦粉のようにサラサラ感がなくなり、凝集性も高まるために取扱いが困難となります。その他にも粉体の特徴把握にはまだまだ課題がある状況であり、実験では克服できない課題にポスト「京」で取り組むことで、日本の産業レベルを向上させるべきだと考えます。</p>	<p>上記の粉体のナノサイズ化に対応し、より多くの粒を対象としたシミュレーションを行うためには、一般的な処理能力を持つ汎用コンピュータでは不可能な状況です。粉体を対象としたシミュレーション手法は複数存在しますが、中でも離散要素法(DEM, Distinct Element Method)は大阪大学の研究グループが世界に先駆けて開発した日本独自の計算ツールであり、そのさらなる改良、および実プロセスを想定したシミュレーションが求められています。そこで、処理能力に長けた「京」と離散要素法を活用し、ナノサイズの粉体を対象としたシミュレーションの実施を提案したいと思います。</p>	<p>日本は、ナノ粒子をつくることは得意ですが、実用利用の点には課題が多い状況です。実験では明らかにできないナノサイズの粉体の特徴(付着性・かさ高さ・低いかさ密度など)を解明することで、ナノ粒子の実用利用の推進が見込まれます。</p>
82	<p>固体粒子群集合体である粉体の挙動は、個々の構成粒子が隣接する粒子間でのみ力を伝達し、さらにその接触点には摩擦力が働くため、離散性が強い。この離散性により連続体理論に基づいた理論構築は難しく、離散要素法(Discrete Element Method)が粉体挙動のシミュレーションとして化学工学、機械、エネルギー・環境、地盤工学・テラメカニクス等の幅広い分野で利用されている。しかし、本手法は粒子を個々に扱うために計算負荷が非常に大きいことが問題となっており、実スケールでの計算が困難な状況である。よって、粉体挙動の解析は、ポスト「京」で重点的に取り組むべき課題としてふさわしいと考えられる。</p>	<p>現時点では、上記に示した粒子数の壁を打破するため、粒子数個を1つの粉体挙動として表すモデルや、粒子挙動に影響を及ぼす周辺流体の計算を簡略化したモデルなどを用いることにより計算を行っているケースが多い。しかし、粉体挙動は粒子の平均径だけではなく、その粒子径分布にも影響を及ぼすことが知られており、上記のモデルではこの問題に対応することができない。一方、ポスト「京」を用いれば、これらのモデルを用いなくても粒子挙動の計算が可能になると考えられる。この計算結果と従来モデルの結果の比較により、現在のモデルを精査でき、さらに有用なモデルの構築が期待できる。本モデルの構築により、実スケール等の大規模粉体シミュレーションが実現可能となる。</p>	<p>一般に、物質は気体、液体、固体の三態を呈するが、常温・常圧下では無機物質の約75%、有機物質の約60%が固体である。工業プロセスでは、低コストでの運転が期待されるため、固体が望ましい。ただ、固体は流動性を有しないため、反応、混合、輸送等を連続的に行うことが要求されるため、固体粒子群集合体である「粉体」として扱われることが多い。一方で、粉体プロセスでは、その挙動の予測が難しいためトラブルが頻発しているのが現状である。よって、本課題の解決により、日本のものづくり技術の発展が期待できる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【その他】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
83	粉体シミュレーションの発展に「京」の活用が肝要であると思います。		
	<p>固体粒子の集合体である粉体を原料、中間製品あるいは最終製品とする高機能性材料の開発・製造がいつの時代も盛んであり、我々に今日の豊かな生活をもたらしてくれています。その材料の特性は、その組成だけではなく、材料中の粒子集積構造にも大きく依存し、粒子集積構造は粉体粒子の物性・特性値に大きく左右されます。したがって、原料となる粉体の生成などの粉体プロセスを精緻に制御し、所望する粒子を取得し、かつ所望する機能を発現させるために、粉体混合や粉体成形、粒子複合化などの粉体プロセスを自在に制御する必要があります。粉体プロセスを精緻にかつ自在に制御するためには、それぞれのプロセスでの粉体現象を予測することが重要であり、それを可能にする粉体動力学は確立されておらず、経験に大きく依存しているのが現状であります。したがって、試行錯誤を繰り返しながら、操作条件の決定や、プロセスの設計が行われています。そこで、粉体関連分野におきましては、実験、理論的モデルに加え、第3のアプローチとしてコンピュータシミュレーションが導入され、粉体現象の本質を捉え、それを数理モデルとして展開し、粉体現象の解析・予測を可能にするシミュレーションモデルが構築されてきました。本分野でもっとも代表されるシミュレーション法である、DEM(個別要素法、離散要素法)の妥当性・信頼性が確認され、粉体プロセスの最適化や設計に大きな役割が果たせる環境が整い、粉体プロセスの設計にも適用され、新しい粉体機器が設計され、商品化にも至っており、粉体関連分野においても、シミュレーションに大きな期待が寄せられています。しかしながら、大規模計算に問題があります。現在通常のパーソナルコンピュータで計算可能な粒子数は1000万個程度であり、これは、コーヒースプーン10杯程度の砂糖の量に過ぎません。たとえば製鉄で使用される高炉においては数億個の粒子が関与するプロセスであり、残念ながら現在のPCでは現実的な時間では計算が不可能な状況にあります。あるいは積層コンデンサーの原料の粉碎・分散に使用されるビーズミルにおいては、数十億個の粒子が関与していると言われております。このような粉体の挙動のシミュレーションを「京」によって可能にすれば、粉体が関係する、微粒子化、高分散、均一粉体混合、分級など各種粉体プロセスの飛躍的高効率化など革新的な変化をもたらすものと考えられます。</p>		
84	<p>化学産業におけるものづくりにおいて、重合の缶内の流動を確認する手法として流体解析が用いられている。しかし、流体解析で追跡できる解像度に対して、重合の鍵となるエマルションは非常に小さく、エマルションの大きさを考慮した流体解析は実施できていない。一方、仮にスーパーコンピュータで強引にメッシュ数を作成したとしても、クーラン条件の制約を受け、流体解析できる実時間が非常に短いものになってしまう。</p>	<p>マルチスケールの解析ができるハードウェアの構成とし、且つマルチスケール解析のソフトウェアを拡充する(国産の開発と商用の活用含む)。エマルションの微細化が起こる場所は、重合の缶内において攪拌翼やパッフル(邪魔板)付近であると思われる。その他の場所では、微細化されたエマルションが合するものと推定される。仮定・推測にはなるが、流体解析で実時間を意識しつつ、エマルションの大きさの解析を行うためには、マルチスケールの解析手法が必須であると考え。また、これによって、エマルションの大きさを決定する重要な因子である界面活性剤の効果も解析に含むことができる。また、これによって、エマルションの大きさを決定する重要な因子である界面活性剤の効果も解析に含むことができる。</p>	<p>重合に用いる界面活性剤の適量の予測による資源の有効活用(無駄の削減)。攪拌による強いせん断場でのエマルションの凝集物(コアキュラム)の生成予測による攪拌翼及びパッフルなどの構造の最適化及び攪拌条件の最適化(重合缶は投資として数億～数十億円かかるため、化学産業において予測は必須)。コアキュラム削減による重合缶のクリーニング費用の削減及びジェットクリーニング作業(危険作業)の時間短縮。</p>
85	<p>テーブルトップ型基礎科学実験におけるパラメータ最適化に対する数値計算アルゴリズムでの支援。テーブルトップ型基礎科学実験は日本中の多くの大学・研究機関で盛んに行われてきたが、実験計画や設計段階において必ずしもパラメータ最適化を行わずに研究が進められてきた結果、当初の計画を変更せざるを得ない事態をこれまでに引き起こしてきた。プロジェクト型研究が主導となる現在の研究計画において、実験計画や設計を数値計算側から支援するというのが本研究目的である。</p>	<p>これまでに集積型とも呼べる基礎科学実験(例えば、巨大加速器など設計など)には緻密な設計プロセスを経て、巨大プロジェクトを完遂してきた。結局、作ってからやり直すということが出来ない巨大実験設備に関してはあらかじめ多くの工程を数値計算と融合させながら進めてきた。そのプロセスをテーブルトップ型基礎科学実験にも落とし込めるようなソフトウェアの開発を進める。同時に大勢の人たちがインプット出来、並列計算させることが出来るのはポスト「京」スケールのコンピュータの特徴ではないかと思う。</p>	<p>テーブルトップ型基礎科学実験においては、これまで勤と経験を頼りに実験が進められてきたものをあらかじめ数値計算やデータ科学の力により、制御しようという試み自体、新しい科学・技術分野を拓く可能性がある。また、パラメータ最適化を行うことにより、実験コストの低減につながり、基礎科学実験における費用対効果を引き上げる効果があると見込まれる。</p>

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

実施期間: 平成26年4月10日～平成26年5月12日

①取り組むべき課題についての意見【その他】

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
86	コンピュータは、科学技術や産業において有用な機械です。しかし、娯楽の分野における、コンピュータゲームの存在を無視することはできないと思います。 既に1950年代前半には、Whirlwindにおいて「Bouncing Ball」というゲームが動いたといわれています。その後、「ファミリーコンピュータ」の登場等によりコンピュータゲームが一般化し、現在では、インターネットを介したオンラインゲームが盛んに行われています。	高度の能力を持つポスト「京」をインターネットに接続することにより、今まであり得なかったような魅力的なオンラインゲームを実現することが可能になると思います。 例えば、高度の能力を持つポスト「京」を活用すれば、世界中の数百万人単位のゲーマーが同時に一つの戦場において戦うオンラインゲーム等を実現することが可能になると思います。	スーパーコンピュータといってもあまりなじみのない国民が大多数だと思いますが、この課題解決により、一般国民がポスト「京」に親しむ機会を得ることができると期待できます。
87	人間の利便性のために生体動物を使用・使役することを、極力減らす社会の実現を叶えてください。 現在も医療や福祉などの名目で多くの動物が使用・使役されていますが、この状況は科学技術の進歩により、変えられるはずだと確信します。 驕れる人間至上主義を改め、すべての命を尊ぶ社会の構築に、ポスト「京」を役立ててください。		
88	天文の脅威への備えに用いるべき。 つまり、全天の小惑星などの星々の位置、動きをすべて登録して計算し、地球に衝突する確率や危険地域を計算して、国民や外国の人びとに注意報や警報を伝達し、直接的な被害の回避を試みるために用いるべき。 経済が豊かになり、人が繁栄しても、恐竜のように絶滅する危険は伴っている。回避できなければ、無念ながら必滅してしまう。 先祖代々の知恵を、子々孫々へと伝えていく。ポスト京もまた、京から継いでいくことで、億年に一度の大きな災いを、回避できるようになっていくのではないのでしょうか。		

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

②課題選定方針についての意見

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
89	<p>どのような課題であれ、課題設定・選定にあたっては、日本の国際競争力強化につながる、ということを一の判断材料にさせていただきたいです。現状でも意識されているのかもしれませんが、より明確にさせていただきたいと思います。</p> <p>世界最高のスパコンを使って、世界を先導する成果が出ました、との目標設定は、アカデミアとしてはそれでよいのかもしれませんが、税金を払う国民としては不満が残ります。このスパコンに税金を投入して、日本が幸せになりました、と実感できる課題設定をぜひお願いしたいです。</p> <p>このように期待しますが、科学ですから、成果が約束される必要はありません。リターンを予測可能な投資は企業などがやればよく、それでは手の出しにくい、リスクや時間もかかるかもしれませんが、しかし大きなブレイクスルーが期待される分野から課題を設定させていただきたいと思います。</p>	<p>課題募集にあたって、その成果が日本の国際競争力強化にどのように貢献するのか、との説明を要件のひとつとし、審査の対象としていただきたいと思います。</p> <p>また、現状の一般利用では成果公開が原則だと思いますが、これは修正し、国際的な公開は限定されて良いと思います。</p> <p>また、課題設定と関係ないのですが、世界一のスパコンを設置する取り組みは、必ず継続していただきたいです。</p> <p>世界最速のスパコンを使おうと、日本に世界の英知が集まってくる、と考えれば、世界一の称号があったかどうかで、運用期間中にそのスパコンから生み出される成果は、全く異なったものになるでしょう。一度でも1位を取ったか、2位以下でしかないか、は、本質的に異なるのです。「京」も世界一を取りましたので、世界中のスパコン関係者に名前は知れ渡りましたが、2位以下ではその他大勢と大差ない認知度に終わっただろうと思います。</p> <p>設置の計画も、10年に1回ずつというのではなく、常に世界トップクラスのスパコンが日本にある状態を目指し、複数の計画を平行させるなどの施策をお願いしたいと思います。</p>	日本の国際競争力強化
90	我が国のスパコン施策を、米国や中国等のそれと分かつ大きな分かれ目は、国民の役に立つものかどうかである。性能のトップ争いも良いが、スパコン先進国を自負するのであれば、単に大学の先生方やメーカーの権威付けではなく、国民の役に立つかという視点で考える必要がある。国レベルの喫緊の課題は、原発の廃炉問題である。人間が近づけない以上、ロボットや(スパコンによる)シミュレーションが課題の重要な解決手段となる。また、実際に解析結果を現場で試さざるを得ないという点で計算技術の進歩にもつながる。一見、後ろ向きのように見えるが、世界からは賞賛されるであろう。		
91	<p>1) 既に文科省、経産省をはじめ各府省において社会的な問題解決を目的とした実験・開発を主体とした研究開発プロジェクトが進められております。これらの研究開発プロジェクトの立案においては、社会的な問題の分析が充分に行われ、その観点から候補プロジェクト課題が精査されていると思われます。特に、経産省プロジェクトにおいては、多くの企業が参加し、課題解決を事業化を通じて実現する事が計画されていると聞いておりますので、社会的な問題解決の観点からは非常に良く練られたものが多いのではないかと思います。【ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的課題】に関して言えば、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であろうかと思ひ、ご進言させて頂きたく意見提案させて頂きます。幾つか例を挙げるならば、エネルギーキャリア、高性能磁石、熱マネジメント材料、構造部材・・・などの課題があります。また現状では国内のエレクトロニクス産業は苦境にありますが、将来の再興を期す意味で、ナノエレクトロニクスの基礎分野における計算シミュレーション(例えば、量子デバイスシミュレーション)などにフォーカスを当てるのも必要かと思ひます。</p> <p>2) 科学的課題に関しては、上記のような研究開発プロジェクトにおいては充分に取り入れられていない可能性が高く、またその重要性に関して、必ずしも予見が見えない事を鑑み、科研費における研究者同士の審査のような仕組みを通じて(理想的には実験研究者に審査を委ねるものが良かろうと思ひます)、創発的な課題提案の中から採択して行くのが適当と思ひます。その意味で、こちらの方には具体的な課題候補をリストしません。</p>		
92	工業化社会から知識社会へと産業構造が転換した先進欧米諸国と比較して、我が国のものづくり(製造業)産業の労働生産性が低く(米国と比較すると70%以下)、また、利益率が数%程度と欧米先進諸国に籍を置く製造業(15~30%)と比較し、一桁近く低く、世界の中で低迷し、埋没している。その理由は、過去の工業化社会時代における先進諸国に追従する研究開発における成功体験にまだに固執し、知識社会へと変化した産業構造において、生み出す独創的な知識に価値をおく産業構造への変化に対応できていないことによる。これらは基礎研究、応用開発研究、事業化においても共通の問題であり、これらの解決なしに、我が国の社会に未来はない。基礎研究、応用開発研究、事業化という三階層を含む、多階層連結を視野に入れた、社会のかかえる問題解決型の環境調和問題、低コスト・高効率創省エネルギー問題、少子高齢化問題、省エネルギー一次世代スピントロニクス・デバイス、などの基礎研究⇒研究開発研究⇒事業化を視野に入れて、過去の20世紀における工業化社会において主流であった、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い電力や資源を無駄に使用するのではなく、21世紀の科学技術にふさわしい、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、また、他の追従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にする研究開発と、それらの結果をステージゲートをもった実証実験を行うことをセットにし、社会的・科学的課題を解決することにより、知識社会にふさわしいプロジェクトが望まれる。		

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

②課題選定方針についての意見

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
93	<p>ポスト「京」に、以下のように、自然科学、とくに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します。 大規模実験・観測のデータ解析は、世界的な必要性と同時に、国家間の競争でもあります。日本の国際的な寄与を示し、科学の最前線で競争するには、計算機関連のサポートが、決して恵まれていません。 また、まだまだ相乗効果を狙う計算機利用があると思います。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・国家的な科学実験に利用できる計算機資源としての位置づけを加える。実際に、利用できるようにする。 ・その結果、計算機技術だけでなく、基礎科学分野での成果もとりこめる。ポスト「京」の成果を相乗的に増やすことが出来る。 ・多様な科学実験をとりこむことで、異なる計算機技術の開発の強い動機になり、新たな発展を促進しうる。 ・宇宙や基礎科学に使われることで、単なる技術的目標を超えて、国民に「夢」を与えることが出来る。 	<p>「ポスト「京」」を推進するには、計算機を利用するより広い社会、科学コミュニティからの支持をとりつけることも必要と思います。また、その結果、相乗的に成果を得ることが出来ることは、両者にとってメリットであると思います。</p>
94	<p>京を使った研究の中で科学的成果に関して、高速で計算できるようになったとか、大規模計算が可能になったと言う点を強調しているものがあるが、それが、文科省やスパコン関係者の期待する科学的成果でしょうか？社会的出口のための計算であれば、そのようなものでも良いであろうが、その程度のレベルの科学的成果を求めているのであれば、これほどの税金を投入するのは無駄だと思う。</p> <p>あなた方が、真に取り組むべき科学的課題を見だしたいのであれば、計算速度や大規模計算にとらわれず、また、誰でも言うような課題を取り上げているようでは不十分でしょう。また、そこが課題を選定する人の能力が見えるところでもある。</p> <p>提案するほうも、あまりアイデアもなく、自分の地位や目立つことだけを目的に課題を提案している人が非常に多い。計算機を使った論文を書いても、国外の外国人が責任著者になっているような研究も情けない限りである(このようなことが、理研にいる生体分子シミュレーション行っている人の論文にみられる)。</p>		
95	<p>巨大スパコン自身を用いて次世代マシンの仮想的な最適設計を行う。様々な仕様の中から与えた評価を最適にするものを探索する。その際、あらゆる分野にとって有利になる評価式を自動推定させ、コスト及び成果とのバランスを総合判定する。具体的な例としては、大型から中規模使用混合型のアーキテクチャを仮想的に最適化する。この作業に費やすリソースを必ず一定枠を設け、京、ポスト京、その次、と順々に自己触媒的な形で次世代マシン開発につなげていく。</p>	<p>特定の分野のみ有利になる事が無く、幅広い計算科学分野に従事する研究者が、その分野における必要性に重点をおいた査定の下に、リソースの申請、確保を行えるような、超大型計算機統合機構の設立。使用申請に対する、分野毎の独立した評価機関の設立。</p>	<p>科学にとり、より望ましい巨大スパコンの継続的構築につながる。特定分野の成長による硬直化を避ける事が出来、科学分野の多様性維持、計算機を本格しようする科学分野の総合的發展に繋がる。巨大で密な科学分野ネットワークの形成は本質的に未知の要素を持つブレークスルーの出現をささえる重要な要素である。</p>

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

実施期間:平成26年4月10日～平成26年5月12日

③計算科学インフラについての意見

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
96	<p>スーパーコンピュータの規模の増大、構成の複雑さにより、高性能かつ高機能なアプリケーション開発がますます困難になってきています。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極めて重要です。様々な施策によりこれら基盤技術開発も推進されていますが、システム規模の増大に伴う新たな技術開発に取り組むことも肝要です。</p>	<p>ポスト「京」、さらにそれ以降のシステムでのシミュレーション技術の発展のために、大規模なシステムを有効に活用する利用技術、大規模システムでの高性能シミュレーションのための計算アルゴリズムの開発、シミュレーションの結果生じるビックデータを取り扱う技術など、アプリケーションとハードウェアの間をつなぐ基盤技術開発を広く取り上げ、それらの研究開発に活用することも必要です。</p>	<p>具体的な課題を解決するアプリケーション開発に必要なソフトウェア基盤技術の発展が期待でき、様々な分野の高性能なアプリケーション開発を促し、将来の重要なソフトウェア資産を生むことが期待できます。</p>
97	<p>シミュレーション適用技術開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・シミュレーション利用を商品力向上に活かす技術の開発を進める必要がある。 ・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重要と考える。 <p>例)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・安全、環境性能を最適化した車の開発手法検討 ・各種材料の組成最適化、バーチャルスクリーニング 	<p>①ハードウェア面において</p> <p>あらゆる現象解析に対して高速なスパコンの実現は困難であり、使い方に合わせた多種多様なスパコンを準備する必要がある。下記のような産業利用で実績のあるソフトの稼働が必須である。Capability・Capacityどちらも考慮した上でコストパフォーマンス最大化を検討して欲しい</p> <p>②ソフトウェアについて</p> <ul style="list-style-type: none"> ・産業界でHPC使用実績のある主な市販、オープンソースソフトの動作保証があること ・実績のあるアプリケーションベンダーの参画 <p>③その他</p> <p>このような環境整備完了が2020年では遅いと思われる。数年後から2030年頃までを見据えた継続的なスパコン能力の増強が必要と考える。</p>	<p>経済競争力の向上</p> <p>一番の効果は、経済競争力の向上と考えている。</p> <p>具体例として、自社スパコンでは5年後にしか実施できない技術開発を先行実施し、実際の製品開発への適用までの時間を短縮できる効果が期待される。</p> <p>欧米では、既に技術開発にスパコンを積極的に活用しており、このままでは欧米有利の状態になる。</p>

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

実施期間：平成26年4月10日～平成26年5月12日

③計算科学インフラについての意見

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
98	<p>スーパーコンピュータで実現する技術が、幅広く教育分野及び産業分野で利用可能としていくフレームワーク・工程表自体を研究すべきである。例えば、現在、弾道計算は関数電卓で実現できる。コンピュータ・グラフィックスは10万円以下のハードウェアで、無料または数万円のアプリケーションソフトで実現できるようになっている。シミュレーションも、その手法の改良を先端研究として取り組みつつ、成熟した手法については、表計算ソフトの利用法程度に一般に浸透させること自体が、社会的・科学的課題であり、このシミュレーションの一般化を国家目標として欲しい。</p>	<p>(1)オープンな(中が見えて、いじれる)システムの開発。(範囲を決めて、ソースコード自体をオープンとすると良い) (2)使いやすいユーザ・インターフェースの開発、汎用化。インタフェース・ガイドラインの構築。 (3)入力データ、出力データの標準化(例えば、総務省・経済産業省の統計である「経済センサス」は、極めて有用な統計データだが、表計算ソフトでのデータ提供であり、高度な統計処理をするには使いづらい。スパコンで扱いやすいデータ形式を総務省・経済産業省に提案してみてもどうか) (4)シミュレーション用ソフトウェアを案内する団体又はサイトの設立・管理。(例えば、物質科学の研究者向けにhttp://ma.cms-initiative.jp/jaがあるが、こういった仕組みを、中学・高校の理科・科学教員向け、産業界向け、経済金融分野向けのものがあると良い) (5)シミュレーション結果を一般に公表する団体・サイトの設立・管理。(例えば、天体物理学の成果に中学・高校生やその教員・保護者がアクセスしやすいようにする。)</p>	<p>成熟したシミュレーションが一般に浸透する効果は、我が国の生徒、経営者、従業員、生活者の「予測する能力」が向上する点にあり、様々な局面での「目利き能力」が高まる点にその素晴らしさがある。個人、法人、行政の適正なリスク・テイクを促進し、学習、経済政策、経営戦略、外交交渉などの期待収益を高め、安定させる。それは、スマートフォンの浸透以上の生産性向上効果がある。</p>
99	<p>基礎科学、産業応用、社会的課題の解決のすべてにおいて、大規模シミュレーションおよびデータ解析の需要は今後さらに高まりエクサスケールの計算能力を保持することは当然の課題である。ただし、現実の研究開発においては、エクサスケールの計算資源が必要かつ有用になるまでには、テラスケール、ペタスケールでのモデルの検証と最適化が不可欠である。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など、ユーザー視点での環境整備が求められる。これまでありがちな「作ってしまった計算機をいかに効率良く走らせるか」という発想ではなく、「いかに効率良い研究開発を可能にする計算環境を作るか」という発想が必要である。また、現在のTop 500の上位3機種は軍事研究が主目的であり、オープンな科学技術計算では「京」は世界トップの計算資源であることはもっと社会的にアピールしてよいはずである。</p>		
100	<p>私は民間企業から研究所へ外向し、生物学物理学分野でスーパーコンピュータ用のプログラムを開発している者です。エクサスケールに向けて、全ての分野の基盤技術となる、応用数学とソフトウェア工学への注力を要望します。 どんなに速い計算機があっても、時代後れのアルゴリズムを使っているは無意味です。私が学生の頃に勉強したクヌース大先生の「The art of computer programming」などは、今では「旧約聖書」と呼ばれています。今世紀に入ってから書かれた「Numerical Recipe」も、最先端ではありません。並列計算機のための応用数学とアルゴリズム理論を研究開発し、社会人向けのセミナーの開催、通信教育、書籍の刊行などによって、HPC業界のプログラマーに広く知らせてください。 CPUの性能とコンパイラの性能は、かけ算で効きます。日本製のCPUで構築した計算機のハードウェアが世界で何位かになっても、コンパイラの性能とのかけ算でインテルに負ければ、使う側にとって無意味です。残念ながら、現在の富士通コンパイラはいまいちです。世界一のハードウェアを目指すならば、世界一のコンパイラも開発してください。 エクサスケールのハードウェアが実現できても、グランドチャレンジ級のプログラムを開発できる人が、日本に何人いるでしょう。MPIプログラミングは難解です。インターコネクのアーキテクチャに応じて最適なMPIプログラミングをチューニングすることは、さらに困難です。それに加えて、大規模なプログラムの保守も難問です。XMPとOpenACCに少し期待しています。並列処理を前提とした、新しいプログラミング言語を開発するべきかもしれません。エクサスケールのためのソフトウェア工学に人材と資金を投入してください。</p>		

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

実施期間: 平成26年4月10日～平成26年5月12日

③計算科学インフラについての意見

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
101	<p>・ポスト京では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ご検討いただきたい。それにより巨大な一つの大規模計算機以上の効率を生み出し、各分野でより早い成果の創出、投資に対する高い効果が期待できる。</p> <p>・たとえば海外事例によると、規模では京に及ばないものの、分子動力学ツールに最適化された計算機を活用し、京以上の成果を生み出し創薬分子デザインへの応用が進められている。創薬研究に有効な計算基盤として、本例のように創薬研究に使用される個別ツールにて最大のパフォーマンスを発揮できるようなシステム構成をお願いしたい。</p>		
102	<p>私はソフトウェアエンジニアです。京、地球シミュレータなどのプログラムも開発しております。その現場から率直な意見ですが、決して京の100倍の計算機は必要ありません。100倍というのはLinpackベンチマークで100倍の性能を言われているのだと思いますが現状でも京のフルパワーを必要とする計算などないはずで、というか実際には必要とするシミュレーションは存在するのですが、そうしたプログラムがありません。計算機開発よりソフトウェア開発や環境整備が必要です。どうか使い物にならない高性能コンピュータを作るより、使い易いコンピュータとソフトウェア開発環境の整備をお願いします。</p> <p>京は自動車であれば直線道路を真っ直ぐ高速に走れることだけを目標にしたものです。自動車は高速性能も大切ですが、荷物を積む、居住性、燃費など実用のためには異なる要請があるはずで、しかも現状の日本の置かれた立場を見るとそのドライバーがおらず、海外に頼っている状況です。ヨーロッパの国々は1位を一度もとっていません。しかしHPCは日本よりはるかに進んでいます。トップをとることは何の意味もないことはそこからも見てとれると思います。</p> <p>方向性を間違わずどうかよいHPC政策によりものづくり大国の地位を発展させてください。</p>		
103	<p>最初に以下の点を強調したい。</p> <p>エクサスケールのコンピュータを建設する予算は、単なる建設費だけではなく、人件費、運用費も含めば、小さな大学の予算をはるかに越える規模になると思われる。したがって、多様な分野で利用され、効率よく成果が創出されるべきである。単に「計算機」科学のプロジェクトとして成功させるのみならず、科学技術の様々な分野で利用されなくてはならない。しかしこのような大プロジェクトにおいて、非常に気になるのは、計算機科学分野で働くごく一部の人間の既得権を保持することにばかり力が注がれていないかということである。私は近隣分野の理論研究者だが、この懸念を強く持っている。具体的には、計算機科学分野の人間の好みで計算機が作られ、ゴードンベル賞のようなマスコミ受けする賞の受賞ばかりに注意が払われ、実際に計算機をシミュレーションやデータ解析に用いて科学技術成果を出す側に配慮せず使い勝手の悪い計算機が作られるのであれば、国家予算の無駄である。</p> <p>国家予算を無駄にしないためには、まず、京コンピュータのような汎用コンピュータを一台作るような手法は辞めることが賢明だと思われる。現代のコンピュータ需要は多岐に渡り、計算目的によって要求される計算機の性質は大きく異なる。ノードごとに高い演算速度が要求される計算があれば、通信に時間がかかるため、単体性能をさほど要求しない計算もある。したがって、まずはどのようなニーズが必要であるのか、関連研究者に広く問いかけるのが重要であり、このようなアンケート調査は優れた試みだと思う。おそらく多数の研究者が多様な要望を述べるであろう。その際には、複数の異なるタイプの計算機を作成するのがよいと考える。</p> <p>ここでは特に基礎科学研究者に携わる者として意見の述べたい。上で書いたように、エクサスケールコンピュータは巨額を投資して作られる莫大な計算機である。これを今までのように、ごく一部の既得権者(計算機科学研究者、シミュレーションを生業にする研究者)にのみ独占させるのは、財政の効率的運用という点からも賢明とは思えない。これらの既得権者以外にも、大型観測・実験に携わり、大量データのデータ解析を行っている研究者も大型計算機と大量の計算機資源を必要としている。例えば、物理学や天文学分野では、加速器実験で得られるデータの解析とそれに付随する理論シミュレーション、重力波望遠鏡KAGRAのデータ解析とそれに付随した理論シミュレーション、30m望遠鏡に対応したデータ解析や理論シミュレーションなどが、国家的規模の大型観測・実験に付随して必要とされる。このような大型基礎科学実験とエクサスケールコンピュータが共同してノーベル賞級の成果が創出されれば、エクサスケールコンピュータの大きな業績になるとともに、新たな分野に役立つことが示され、非常に有意義なことと思われる。同時に、大型基礎科学実験では慢性的に予算も計算機資源が不足しているため、エクサコンピュータの一部でも使用が可能になれば、大きな助けとなる。このように、これまで協働してこなかった「国家プロジェクト」同士は縦割りの考え方をやめ今後連携し、成果を効率よくあげながらかつ、国家財政の効率的運用に資することが必要だと考える。国家的な大型観測実験プロジェクトを、計算機資源の面で支え、画期的科学的成果の効率的創出を促進するような取り組みを期待したい。</p>		

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

実施期間: 平成26年4月10日～平成26年5月12日

③計算科学インフラについての意見

	【社会的・科学的課題の概要】	【課題解決に向けた施策の具体的内容】	【課題解決による効果】
104	<p>京では少なくともこれまでの所、京でなくては実現できなかった重要な科学的成果は残念ながら得られていないという印象を受ける。これが正しいならば、なぜそうだったかを清算することなしに次世代の計画を掲げることは無意味である。次世代に進む前に現状を確認し、その反省点を整理しなければならない。</p> <p>また京ではハードウェアの開発が重視されていたという印象があるが、ハードウェアは数年で旧式化するのに対し、ソフトウェアこそが継続的に利用可能な重要な資産である。単純な性能の数字で勝負するのではなく、明瞭な科学的な目標を設定しその目標を達成するために計算機的设计や人員の配置を行うべきだと考える。計算機だけではなく科学的成果を達成するのに必要なソフトウェアを整備し共同利用に供することが必要であり、その開発や支援のために人員を投入しなければならない。</p> <p>また京関係では多くの人員が雇用されたが、私の知る限りでは既存の人材(=身内)を雇用するばかりで新たに人材を育成するという観点が不足していたと言わざるを得ない。人材を育成しなければ継続的に科学的成果を挙げ、業界を発展させることは不可能である。そのため、ユーザーや開発者を育成するために基盤を整備しリソースを投入することを強く要望する。この目的のために教材として有用なソフトウェアを開発することは、前項と合わせ次世代の計算機の開発に合わせて推進すべき重要なテーマである。</p> <p>単なる科学風味の公共事業ではなく、真に科学的発展に直結する研究資源として、また次世代に繋がる教育環境として、有意義に運営されることを期待したい。</p>		
105	<p>10年後科学理論の展開の予想は困難である。現在有効であると判断できない理論が異なる計算環境で強力なものとなる(またはその逆も)ことは、われわれが常に体験してきた。常に進化する科学理論は専門家の間でも理解されるのに時間とエネルギーが費やされるため、やはり急速に進化展開する計算機環境にのせるのに特別な努力が必要となってきた。筆者が所属する計算物質科学(CMSI)ではこうした専門家間ですら理解が困難となってきた現代物質科学理論を紹介、また学生・社会人研究者人材育成、一般社会への広報活動など分野振興の努力を行いつつ、それなりの成果を得てきた。更に先鋭化してゆく各学問分野と計算科学の有機的進展をうながすために、人材育成・分野間交流・対一般社会広報などを更に積極的に行うことが重要と考えられる。</p>		
106	<p>私は米国で研究している研究者ですが、私の分野(物理学)において海外では京の科学的成果は全くと言ってもいいほど認知されていません。TOP500の性能競争ばかりが目標になってしまい、科学的成果を上げるための戦略が不足していたのではないかと強く危惧します。次期システムでは科学的成果を上げること、それに加えて次世代の人材を育成することを目標に明確な戦略を計画することが必要なのではないかと思ます。政治ショーや公共事業などではなく、真に科学の発展に寄与するプロジェクトを構築して頂きたいと思ます。</p>		