

HPCI 戦略プログラムの事後評価に係る点検結果
報告書

平成 2 8 年
文部科学省研究振興局
HPCI 戦略プログラム推進委員会

目次

1. はじめに	3
2. 確認結果	4
(1) 課題の達成状況等	4
(2) 成果	5
(3) 今後に向けて	9
3. おわりに	11
○補足資料	
(補足1) 5戦略分野の個別点検結果	13
○参考資料	
(参考1) HPCI 戦略プログラム概要	32
(参考2) 25課題の成果概要	38
(参考3) 25課題の達成状況一覧	51
(参考4) HPCI 戦略プログラム推進委員会の設置について	61
(参考5) 事後評価に係る点検経緯	62
(参考6) 委員名簿	63

1. はじめに

- HPCI 戦略プログラムは、スーパーコンピュータ「京」による先導的なアプリケーション開発とその利用による画期的成果を創出するため、平成 23 年度から平成 27 年度まで 5 年間のプログラムとして実施したものである。
- 本点検結果（報告）は、本プログラムを終了するに際し、本プログラムの推進に係る全体統括を行ってきた「HPCI 戦略プログラム推進委員会」として、各戦略分野の自己点検結果を踏まえ、HPCI 戦略プログラム全体としての事後評価に係る点検結果を報告するものである。

<事業概要>

- 社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる 5 つの「戦略分野」において、
 - a. 達成すべき「戦略目標」を定め、その目標に沿った研究開発を推進する。
 - b. 我が国の計算科学技術推進体制を構築するため、スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメントや研究支援体制の確立、人材育成と人的ネットワークの形成、研究成果の普及等を図る。

<目的>

- HPCI（理化学研究所の「京」と、国内 11 機関のスーパーコンピュータで構成されるハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ）を最大限活用して、重点的・戦略的に取り組むべき研究分野で画期的な成果を創出することを目的とする。

<予算>

- 平成 23 年度～平成 27 年度：国費総額約 122 億円（補正予算を含む）
（補足）
 - 平成 21 年度（フィージビリティースタディー）：0.3 億円
 - 平成 22 年度（準備研究）：3 億円

<確認方法>

- 各戦略分野において、自己点検報告書（案）及び補足説明資料を作成し、分野マネージャ及び外部有識者からなる各分野作業部会において検討。
- プログラムマネージャ、分野マネージャ及び理化学研究所計算科学研究機構長からなる HPCI 戦略プログラム推進委員会において、各戦略分野からヒアリングを実施し、提出された自己点検報告書及び補足説明資料を確認。
- HPCI 戦略プログラム推進委員会において、本点検結果（報告）をとりまとめ。

<事業の経緯等>

- 平成 19 年度：文部科学省の「次世代スーパーコンピュータ作業部会（科学技術・学術審議会）」で基本的方針を検討。
- 平成 20～21 年度：「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」を計 16 回開催。社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる 5 つの戦略分野を決定。
- 平成 21 年度：公募を経て、実施可能性調査実施機関を決定。
- 平成 22 年度：「戦略機関」を決定。
研究開発目標を設定。
- 平成 23 年度：事業を開始。
- 平成 25 年度：中間評価を実施。
- 平成 27～28 年度：事後評価を実施。

2. 確認結果

(1) 課題の達成状況等

① 研究開発目標の達成状況について

- 研究開発については、全ての戦略分野で目標に沿った研究開発が推進され、全ての研究開発目標が着実に達成されたと判断する。 HPCI 戦略プログラムの立ち上げ当初（「京」の共用開始前から直後）は、大規模並列化などの技術的課題をクリアすることが主要な活動であったが、本プログラムの後半には、各戦略分野において「京」を活用した成果が次々と創出されるとともに、初期には考えられていなかった新たな進展があり、新規の科学的発見や成果の社会的応用がなされた例も数多く見られた。
- 計算科学技術推進体制については、各戦略分野において大きな広がりを持って構築され、当初の想定以上に機能していると評価できる。 大規模計算科学の手法の高度化について、目標は着実に達成され、幾つかの戦略分野では新しい科学技術の潮流を創り出すことに成功している。また、社会に対する情報発信及び大規模計算に携わることのできる人材の育成についても、目標は着実に達成されたと判断する。
- また、中間評価等における指摘事項については、各戦略分野とも適切に対応していると言える。「必要性」「有効性」「効率性」については、以下のとおりである。
 - ✓ 「必要性」について、全ての戦略分野で HPCI 戦略プログラム無しには実現できなかった「京」の利活用を先導する多くの成果が報告された。「京」によって実現した大規模シミュレーションの高い独創性と優位性をもつ科学的成果及び実用的成果は、本プログラムの必要性を示している。また、一部の戦略分野では他のプロジェクトとの連携も積極的に行われ、先導的な研究開発を共同で実施するコンソーシアムが形成されるなど、体制構築において本プログラムが果たした役割は極めて高く、必要性を示している。
 - ✓ 「有効性」について、各戦略分野で開発された先端的应用ソフトウェアの公開やデータベースの構築による成果の普及・展開が進められた。新しい科学技術の潮流の創造事例や国際的にも優位性のある成果創出等は本プログラムの有効性を示している。また、本プログラムによる体

制構築においては、本プログラムの予算とは別に共同研究という形で多くの企業等が参画し、新たなコンソーシアムが形成されるなど、波及効果も認められる。

- ✓ 「効率性」について、本プログラムの成果は、各研究開発分野や産業界等における実用にも道を開きつつあり、本プログラムの実装面での効率性を示している。また、本プログラムにより、これまでは個別に取り組んでいた研究が結びつけられ、共同研究体制が構築された。ほかにも、大学等の計算資源も有効利用することで大規模計算は「京」で行うなど、「京」の計算資源の有効活用が図られ、効率的・効果的に研究開発が推進された。
- ✓ プロジェクトの推進や評価体制について、課題実施者以外の各分野の専門家が集まった本 HPCI 戦略プログラム推進委員会は、研究者に対する緊張感を継続的に与えつつ、社会に対しては研究者への支援を行う立場でもあり、目標に向けたかじ取りとして本プログラムを効率的に推進する観点から、効果的であったと言える。

(2) 成果

① 研究開発成果等について

○ 研究開発成果等については、5つの戦略分野全てで「京」の性能を生かした数多くの成果が創出されており、独創性も高く、優位性にも富んでいると評価でき、適切であると判断する。

○ 国際会議等での特別講演、招待講演、学術発表論文も多く、アプリケーション分野で最高峰のゴードンベル賞など計算科学における国際的な受賞もなされており、計算科学のみならず各分野に対する貢献も大きいと言える。特に医療、創薬等の計算科学の適用としては新しいと言える分野においては、これまで国産ソフトウェアが少なかった中、世界的にも先進的な水準の多くの優れたソフトウェアが新たに開発され、これを利用した大規模シミュレーションによって独創的で優れた科学的成果が創出されるとともに、社会に応用された事例も出された。

○ 研究事例における特筆すべき点は以下のとおり。

【戦略分野 1】

◇ 分子レベルから細胞・臓器までを階層的に接続したマルチフィジックス心臓シミュレーション (UT-Heart) は、エビデンスに基づく世界初の画期的な計

算科学の成果であり、非常に高いレベルのシステムとなっている。他分野においてもその方法論等はターゲットとなるものであるとともに、臨床現場との連携が既に進められており、医療応用に道を開いたと言え高く評価できる。また、細胞内にタンパク質や核酸分子をリアルなイメージで取り込み、そのダイナミクスをシミュレートする計算において、世界最大規模（細胞内タンパク質 1 億原子系）を実現したことは世界に誇ることができるものである。

【戦略分野 2】

◇密度汎関数法（RSDFT）によるナノ構造時空場での電子機能予測において、世界に例のない大規模な高精度計算を行い、量子論に基づくデバイス設計計算を可能とし、シリコンナノワイヤの電子状態シミュレーションではゴードンベル賞を受賞するなど科学的成果としての世界的評価が高い。また、ウイルスカプシドの全原子分子動力学シミュレーションでは、当初の期待を超えた高度な科学的成果を上げ、基礎的な多くの知見を得るとともに、B 型肝炎の抗ウイルス剤開発を目指す厚生労働省のプロジェクトとの連携につながるなど今後の期待も大きい。

【戦略分野 3】

◇全球雲解像モデルを用いて、世界で初めて 1 km 以下の格子解像度での全球大気のシミュレーションに成功したほか、台風発生について 2 週間先まで予測が可能であることを示したことは、高く評価できるものである。また、東京 23 区内の 10 km 四方の地域を対象とした、時空間分解能の極めて高い地震災害評価を行い、計算手法の潜在能力を示すとともに、ゴードンベル賞のファイナリストに選出されるなど世界的評価を得ている。新しく開発された地盤・建物・避難を連成して都市地震解析を行う統合地震シミュレーション（GAMERA）はすばらしい成果であり、高く評価できる。

【戦略分野 4】

◇自動車実車風洞代替シミュレーションや曳航水槽試験代替シミュレーションは、従来の実験的手法に匹敵する、あるいはそれをしのぐ手法として自動車メーカーや造船業界において利用され始めており、国際的に高く評価されている。ものづくり分野は対象とする現象の複雑さゆえに多数のパラメータが存在し、最適化のためのアンサンブル・コンピューティングが必須であるが、パラメータ間の最適値を見出す手法を構築し、複雑現象の解明に寄与する統計的手法を確立したことは今後につながるすばらしい成果であり、高く評価できる。

【戦略分野 5】

◇ブラックホールのシミュレーションは、つい最近米国で発見された重力波の観測を予言できる数少ない手段として欠かせない技術であり、また太陽対流

圏シミュレーションでは、謎の11年周期を代表とする太陽活動を解くための数値実験の強力な手段として世界をリードする成果をあげている。世界最大級のダークマターシミュレーションでは、5,500億個の粒子の運動を高い実効性能で計算することで、2012年のゴードンベル賞を受賞するという実績を残すなど、これらの取組は国際的評価も高い。

②研究開発体制について

○研究開発体制については、多くの参画機関で構成された体制においてその役割分担と連携は概ね適切であり、適切に機能したと判断する。

○「京」の性能を生かした有意義な成果を創出することが研究者の共通した認識となっており、これを実現するために各戦略分野の特色に合わせて工夫した体制が構築され、活動が進められた。各統括責任者のリーダシップにより、本プログラムの予算範囲を超えて、多くの参画企業との共同研究や他のプロジェクトとの連携が推進される体制が構築された。各戦略分野では、計算資源の高度利用や効率的マネジメントに力を入れており、「京」の有効利用に寄与した。また、人材の確保・育成、研究成果の発信や普及に責任を持つ体制は的確に機能したと評価できる。更に、各戦略分野とともに、「京」を中心とする大規模計算技術の効用の社会に対する情報発信についても、独自の工夫を考案し、着実に推進した。

○研究開発体制に係る特筆すべき点は以下のとおり。

【戦略分野1】

◇成果の普及活動として、視覚的に非常に分かりやすい、心臓シミュレータやタンパク質のシミュレーション結果の可視化等を活用した、一般市民等に対するアウトリーチ活動が活発に行われ、高く評価できる。特に、UT-Heartやタンパク質のシミュレーション結果の可視化（クロマチン）はアウトリーチ活動として特筆され、心臓シミュレータはこのような取組の一つとして国際的な賞（SIGGRAPH(2015) BEST VISUALIZATION OR SIMULATION 賞）を受賞しており、動画はこれまで世界219の国・地域から29万回の再生を記録している。

【戦略分野2】

◇人材育成として、計算科学技術特論を作成・配信しており、講義アクセス数は3万件を越えている。また、超並列計算に関する新たな講義を立ち上げるなど、特に若手研究者の教育や人材育成には目を見張るものがあり、高く評

価できる。

【戦略分野 3】

◇計算資源の効率的マネジメントとして、「京」のみならず大学の大型計算機センター及び地球シミュレータも戦略的に有効活用することで、分野全体として高い成果を上げている。また、延べ51本ものアプリケーションの最適化・高速化支援が行われていることは、高く評価できる。

【戦略分野 4】

◇利用者層の拡大及び人的ネットワークの形成として、「京」を使うためのハンズオンセミナー、産業利用スクール、解析結果200件の公表データベース化やアウトリーチサイトである「計算工学ナビ」の開設など、多くの有効な取組が行われており、高く評価できる。また、企業との連携やコンソーシアムの形成、開発したアプリケーションの公開・普及の取組は、高く評価できる。

【戦略分野 5】

◇研究成果の普及・知的基盤の構築として、開発されたコードの共用化体制を構築し、世界中の研究者と協力しコンフィギュレーションデータを蓄積・公開していることは先駆的であり、高く評価できる。また、難しい科学の世界をクオーク・カード・ディーラなるカードゲームにより啓発するなど、小・中学生を含めた次世代育成等に工夫を凝らしている。

○研究開発体制における、今後に向けた指摘事項は以下のとおり。

- ✓ 各分野での連携体制を越えて、分野間での更なる研究連携が期待される。各事業主体のみならず、事業全体を統括する文部科学省の委員会等の運営においては、このことを考慮すべきである。
- ✓ なお、総括責任者が一部の研究課題においてその役割を十分果たせなかったと言える事例があり、後継事業においては、総括責任者等の権限と役割分担の明確化や、担当者の変更も含めた事業の評価・確認の在り方について検討がされることを期待したい。
- ✓ 開発された技術やソフトウェアの普及については、引き続き更なる実用への普及が期待され、本プログラムで構築された体制の維持・発展が期待される。

③成果の利活用について

○成果の利活用については、産業界や実験研究者、臨床現場、他分野との連携も着実に進んでおり、また開発したプログラムの公開や成果の広報、利用支

援等の活動が積極的に行われており、各分野における計算科学を用いる研究者層も拡大しているなど、着実に進展したと判断する。

○成果の利活用における、今後に向けた指摘事項は以下のとおり。

- ✓ 研究開発成果の更なる利活用に向けては、これまでも各戦略分野において多大な努力が成されているが、成果の展開の方法等においては更なる努力や工夫が必要と言える。
- ✓ ソフトウェアはその性質上、利用が短期で終わるものから長期に渡るものまであり、この利用支援の在り方についてはそれぞれの特徴等を十分に考慮する必要がある。
- ✓ 多くの予算と計算資源が投じられて開発されたソフトウェアが、プロジェクト終了に伴う研究者の移動とともに散逸してしまうことがないように、また広く利活用を推進していくために、ソフトウェアの公開・維持管理とシミュレーション結果のアーカイブ構築を分野横断的に対応する仕組みが必要である。
- ✓ 開発された優れたソフトウェアについては、世界標準となるよう各分野において持続的に改良・発展させていくことが重要であり、成果が今後も追加されていくよう本プログラム終了後の展開も追跡し支援していく必要がある。
- ✓ 産業界での利活用の促進においては、例えば産業界が求める今日的効果と研究開発側が追う構造変革的效果とのギャップについて率直な意見交換等によって相互理解を深めていくことも重要である。

(3) 今後に向けて

○本プログラムを通して、生命科学や医療・創薬、新物質や材料、気候予測や防災、ものづくりや設計などにおいて、HPC（ハイパフォーマンス・コンピューティング）が広く貢献することを社会的に意識づけられたと言えるが、経済的波及効果も含め、成果等を実感できる形で分かりやすく広報し、社会的理解を得ていく努力が引き続き必要である。

○学術的には相当な成果が多数創出されているが、各戦略分野における成果適用の対象や実用化に向けた計画・展望等については、具体的実効性に課題や潜在的な困難さを伴うものもあり、今後、ポスト「京」の開発プロジェクトにおけるアプリケーション開発を含め、成果の適用対象や実用化対象の拡大に

ついて、継続して戦略的な検討を行っていくことが必要である。

- 人材育成については、プロジェクト終了後のキャリアアップも含め、我が国全体の計算科学技術人材の育成確保の観点も念頭に置きつつ、ポスト「京」での取組も含め、継続的に取り組んでいくことが重要である。
- シミュレーションによる様々な分野での画期的な成果創出を広めていく観点からも、最先端のスーパーコンピュータで可能となった技術やソフトウェアを普及・展開していく体制や仕組みを構築することが重要である。
- 「京」でなければ実施できない計算は必然的に多くのノード数を必要とし、このようなプログラムは、運用上、計算実行までの待ち時間が長くなる傾向がある。また、限りある計算資源の有効利用を図る観点からも、可能な限り少ないノード数で計算できるよう、メモリの利用方法や演算器の利用の仕方などプログラムの改良・改善を利用者に促していくことも必要である。
- 計算機性能の向上により、今後、超大規模シミュレーションが「京」以外の大学情報基盤センター等のスーパーコンピュータにおいても実施できるようになることを見据え、本プログラムの成果を普及・展開していくことが重要である。
- また、産業界においては、フラッグシップシステムにおける本プログラムでの研究開発は、例えば、自動車業界においては5年から10年先に企業において実用化することを念頭に研究活動に参画しており、本プログラムで構築された研究開発体制やコンソーシアムを、引き続き、我が国の先端的な計算科学技術の研究開発の場として有効に機能させていくことが重要である。

3. おわりに

- HCPI 戦略プログラムにより、我が国のフラッグシップシステムである「京」の性能を生かした世界を先導する画期的な成果が多数創出された。
- シミュレーションの高性能化には、アプリケーションの改良とともに、ハードウェアの高性能化が必須である。「京」においても実現できなかった限界を超えて、世界を先導する画期的な成果を継続して創出していくためには、次世代スーパーコンピュータは必要不可欠なものであり、我が国の研究開発力を強化していくことが重要である。
- 文部科学省においては、「京」の後継機となるポスト「京」の開発プロジェクト（フラッグシップ 2020 プロジェクト）を平成 26 年度から開始しており、この中で、社会的・科学的課題の解決に向けたアプリケーション開発も進められている。本点検結果（報告）で指摘した今後の課題等について、十分に検討し、我が国全体の計算科学の発展と科学技術の発展や産業競争力の強化等に貢献していくことを強く期待する。
- 最後に、スーパーコンピュータを含め計算科学技術の役割や中長期的な効果については、基礎科学への貢献や社会的貢献とともに、国益・国力という面を十分に考える必要がある。シミュレーション自体がサイエンスに新たな視点を与える第三の科学的手法であり、また計算科学技術は、宇宙開発技術や海洋開発技術などと同様、国の存立に関わる極めて重要な基幹技術である。科学技術立国である我が国の在り方として、改めてその意味をよく理解し、また広く認識を共有することが極めて重要であり、計算科学技術を我が国で展開・推進するに当たっては、このような視点が常に今後も必要である。

以上。

○補足資料

(補足 1) 5 戦略分野の個別点検結果

○参考資料

(参考 1) HPCI 戦略プログラム概要

(参考 2) 2 5 課題の成果概要

(参考 3) 2 5 課題の達成状況一覧

(参考 4) HPCI 戦略プログラム推進委員会の設置について

(参考 5) 事後評価に係る点検経緯

(参考 6) 委員名簿

HPCI 戦略プログラム推進委員会における分野別点検結果 (報告案)

戦略分野 1

「予測する生命科学・医療及び創薬基盤」
(統括責任者：理化学研究所・柳田敏雄)

■ 研究開発課題達成状況

○ 研究開発課題については、「京」を最大限活用することで、様々な分野での信頼性が高い「予測」が可能となり、その予測に基づいた生命科学の研究が行われるようになり、医療・創薬に直接結びつく成果が出ている。いずれの課題も「京」の能力の及ぶ範囲で高いレベルに達しており、以下のとおり、着実に達成されたと評価できる。

【課題 1：細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション】

- ✓ 科学的な成果として、細胞内にタンパク質や核酸分子をリアルなイメージで取り込み、そのダイナミクスをシミュレートするという世界最大規模の計算が行われた。GENESIS による細胞内タンパク質 1 億原子系の MD シミュレーションの実現は世界に誇ることができる。
- ✓ DNA とタンパク質の複合体の構造と挙動の解析では、対応する X 線解析や電子顕微鏡観察とも整合を図られており研究の基盤が整った状況である。

【課題 2：創薬応用シミュレーション】

- ✓ 実用的成果として、受容体タンパク質に対する低分子化合物の結合能を定量的に算出する計算手法を確立して応用し、前臨床実験まで持ち込むことができる薬物候補を得ることができた。

【課題 3：予測医療に向けた階層統合シミュレーション】

- ✓ 科学的な成果として、分子レベルから細胞・臓器までを階層的に接続したマルチフィジックス心臓シミュレーション (UT-Heart) は、エビデンスに基づく世界初の画期的な計算科学の成果であり、非常に高いレベルのシステムとなっている。他分野においてもその方法論等はターゲットとなるものであるとともに、臨床現場との連携が既に進められており、医療応用之道を開いたと言え高く評価できる。

【課題 4：大規模生命データ解析】

- ✓ 次世代シーケンサにより生み出される臨床ゲノムデータに基づいた大規模生命データ解析により、全く新たな科学的発見がなされ医科学的な実験による証明も行われた。また、ゲノム解析は、成果が直ちに臨床応用に結びつくものである。

○全体を通し、必要なソフトウェアが開発、広く利用され、医療・創薬に直接結びつく成果が出ており、今後の発展が期待される。また、マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーションに世界で初めて成功、パーキンソン病の解明に向けた脳神経系-筋骨格系シミュレーションの統合、臨床ゲノムデータに基づいた大規模生命データ解析による病因の同定など、いずれの課題も極めて高い独創性と世界の追随を許さない優位性を達成しており、高く評価できる。

○今後は、本プログラムで種々出てきている科学的成果の社会への貢献をより明確にすべく、実際の薬品開発などへの応用等、具体的な成功事例を例示していくことが重要である。UT-Heart については、医療機器の認可を受けて医療現場での実用化に期待する。また、マルチフィジックスの知見や方法論、経験を生かして他の臓器にも広げていくことを期待する。この方法論は、生命科学以外にも適用できると期待する。GENESIS によるタンパク質の MD シミュレーションは、Klaus Schulten の NAMD をしのぐキラーソフトウェアになり得ると考える。生命科学の科学的成果を創出することを期待する。

○この分野は、国の予算で計算科学技術を 10 年あるいはそれ以上かけて推進されているが、生命科学に計算科学を導入し利用できることを十分理解する生命学者は日本国内では未だに多くなく、生命科学コミュニティに対する粘り強い働きかけと計算生命科学のさらなる進展が必要である。

■計算科学技術推進体制の構築

○計算科学技術推進体制の構築については、ライフサイエンス分野における計算科学の振興のため、HPCI 環境を効果的に利用するための環境整備、「京」及び HPCI 利用に際しての研究支援、多様な人材育成の取組が活発に実施されており、これまで必ずしも多くなかった計算生命科学分野の若手人材について、他の分野からの参入も含めて増やすことができたと言える。また、高校生や

一般市民に対するアウトリーチ活動として、ムービーの作成や広報活動が活発に行われており、着実に達成されたと評価できる。

○具体的な取組は、以下のとおり。

- ・ 計算機資源の効率的マネジメントについては、年度ごとの重点化、月次の進捗管理を実施しており、また「京」と互換性のあるシステムを整備することにより、大学や製薬関連企業等の研究者の、HPCI 環境への導入を実施するなど、着実に遂行されている。
- ・ 「京」及び HPCI 利用に際しての研究支援については、理化学研究所計算科学研究機構等が開催する会合での意見交換、研究者のソフトウェアの高度化支援、講習会の実施など、着実に遂行されている。
- ・ 人材育成の取組については、「京」と互換性のあるシステムを活用した、アプリケーション普及のための利用者講習会、社会人や大学院学生を対象とした講義、セミナー、e-ラーニングシステム、遠隔インタラクティブ講義など多様で活発な活動が行われている。
- ・ 成果の普及活動として、視覚的に非常に分かりやすい、心臓シミュレータやタンパク質のシミュレーション結果の可視化等を活用した、高校生や一般市民に対するアウトリーチ活動が活発に行われ、高く評価できる。特に、UT-Heart やタンパク質のシミュレーション結果の可視化（クロマチン）はアウトリーチ活動として特筆され、心臓シミュレータはこのような取組の一環として国際的な賞（SIGGRAPH(2015) BEST VISUALIZATION OR SIMULATION 賞）を受賞しており、動画はこれまで世界 219 の国・地域から 29 万回の再生を記録している。
- ・ 推進体制については、4 課題の責任・推進体制は独立して強力に機能した。また、医療関係者や製薬企業と連携した大きなグループを構成して研究を進めた推進体制は評価できる。他にも、産業界を巻き込んだ 2 つのコンソーシアムの構築と運用は、今後の発展につながる取組である。

○今後は、この分野の後継者を育てるという点から見た人材育成について、更なる努力が必要である。また、大学や大学院における授業や人材育成プログラムは、必ずしも日本国中の多くの学生が参加して単位を取る、という形までにはならなかった。大学の講座は伝統的な学問で占められているため、今後の課題として考えていく必要がある。

○人的ネットワーク形成については、2 件の企業コンソーシアムの設立や、生命科学者による「京」と互換性のあるシステムの利用研究の公募がなされたが、

さらなる対象の拡大等，積極的なネットワーク形成が期待される。

- 推進体制については，4つの課題のそれぞれは大きな成果を出しているが，分野を超えての連携の進展等，統括責任者のリーダーシップが発揮される体制作りが期待される。
- 基礎科学的な成果については，分かりやすい説明とその機会の増加については，一層の努力が必要である。

■その他

- ポスト「京」に向けた課題として，生命系のような複雑系を十分な精度で取り扱うにはアルゴリズムやソフトの開発とともに，より高度な計算資源が必要であり，ポスト「京」に期待するところが大きい。
- 戦略分野において開発した日本発のすばらしいソフトウェアを「京」以外でも活用できるような形で公開してその利用を促進し，また本プログラムが達成した成果がポスト「京」だけに引き継がれるのではなく，更に広く引き継がれることを期待する。産業界が通常に使えるレベルの計算機によっても，「京」で達成した成果のレベルの仕事ができるようなシステムを今後整備していくことが必要である。
- 大学教育の改革や分野融合にとっては，この分野の研究は良いテーマであり，うまく活用することで，若手研究者が今後とも活躍できる場を提供していくことが重要である。
- 心臓シミュレータ（UT-Heart）については，医療機器の認可をうけて，医療現場での実用化につなげていくことや，そのマルチフィジックスの知見，方法論や経験を生かして他の臓器にも広げていくことを期待する。また，この方法論は生命科学以外にも適用できると期待する。GENESISによるタンパク質のMDシミュレーションは，生命科学の科学的成果を創出していくことを期待する。

戦略分野 2

「新物質・エネルギー創成」

(統括責任者：東京大学・常行真司)

■ 研究開発課題達成状況

○ 研究開発課題については、「京」を最大限活用することで、計算物質科学においてこれまで不可能であった領域までシミュレーションを実現し、理論的にも実用的にも重要な成果を上げた。以下のとおり、目標を大幅に達成した課題も多く、着実に達成されたと評価できる。

【課題 1： 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明】

- ✓ 科学的成果として、科学的基盤研究であるが、物質科学における根幹的課題である電子相関を扱う方法論的開発とそれに基づくソフトの作成において著しい成果を上げた。多階層第一原理強相関電子状態計算法を基盤とする計算技術の展開は、鉄系超伝導の高温機構の解明等に結び付いている。また、これらの成果の利活用は期待される度合いは高いが、今後の努力に待つものが多い。

【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に関する研究】

- ✓ 科学的成果として、科学的基盤研究であるが、物質科学における根幹的課題である電子相関を扱う方法論的開発とそれに基づくソフトの作成において著しい成果を上げた。開発された高度な量子化学計算の並列化により、複雑な分子の機能の解析を可能とした。また、光合成酸素発生中心の計算科学的解析が現実的な課題として取り上げられるレベルに至った。

【課題 3： 密度汎関数法によるナノ構造時空場での電子機能予測とその実現】

- ✓ 科学的成果として、密度汎関数法 (RSDFT) によるナノ構造時空場での電子機能予測において、世界に例のない大規模な高精度計算を行い、量子論に基づくデバイス設計計算を可能とし、シリコンナノワイヤの電子状態シミュレーションではゴードンベル賞を受賞するなど科学的成果としての世界的評価が高い。

【課題 4： 全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開】

- ✓ 科学的成果として、ウィルスカプシドの全原子分子動力学シミュレーションでは、当初の期待を超えた高度な科学的成果を上げ、基礎的な多くの知

見を得るとともに、B型肝炎の抗ウイルス剤開発を目指す厚生労働省のプロジェクトとの連携につながるなど今後の期待も大きく、高く評価できる。

【課題5：エネルギー変換の界面科学】

- ✓ 実用的成果として、リチウムイオン二次電池の電解液の劣化過程が明らかとなるなど、電解液開発へ貢献し、社会的要請にも応えることができた。また、電気化学界面シミュレーションコンソーシアムへの計算技術の展開がなされている。

【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】

- ✓ 科学的成果として、ハイドレート分解機構の解明に資するシミュレーションが行われた。

【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】

- ✓ 鉄鋼材料中の異相界面の構造や諸現象を大規模第一原理計算により高精度に解明している。

○今後は、開発した最先端のアプリケーションを公開するだけでなく、関連する企業との共同研究の深化を期待する。

○また、「課題IV：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」について、高性能の分子動力学計算ソフトウェアの開発は高く評価できるものだが、課題間の連携などの観点から、本戦略分野の中で実施することが最適であったかは課題が残る。今後、画期的なテーマを各分野と連携してチャレンジすることを期待する。

○物性物理、分子科学、材料科学間の交流は促進されているが、更なる連携に向けた研究開発課題の実施、基礎科学と応用化学の連携、シミュレーションと実験科学との連携が期待される。

■ 計算科学技術推進体制の構築

○計算科学技術推進体制の構築については、物性、分子化学、材料の3つの分野が協働的な体制を構築し、新しいコミュニティが形成された。また、若手研究者の教育、配信講義や講義の立ち上げによる次世代人材育成の基盤構築

や、研究支援としてのアプリケーションケーショントータルで成果の利用が促進されるなど、多大な努力によって分野振興が推進されており、着実に達成されたと評価できる。

○具体的な取組は、以下のとおり。

- ・ 計算機資源の効率的なマネジメントについては、東京大学物性研究所、分子科学研究所、東北大学金属材料研究所の、共同利用スーパーコンピュータの資源の20%が、本プログラムの遂行のために充てられており、「京」の計算資源は「京」でなければならぬ計算に集中されており、評価できる。
- ・ 「京」及びHPCIの利用に対する研究支援については、計算科学研究機構内にCMSI（計算物質科学イニシアティブ）分室を設置し、高度化支援体制を強化するなどして、「京」の一般・産業利用等の採択に36件の課題を導くなど、分野振興には多大の努力がなされた。
- ・ 人材育成については、計算科学技術特論の配信講義のアクセス数が3万件を超えている。また、特任教員が、超並列計算に関連した新たな講義を立ち上げており、特に若手研究者の教育、人材育成には目を見張るものがあり、高く評価できる。
- ・ 人的ネットワークの形成については、物性、分子、材料の枠を超えた計算物質科学イニシアティブを結成し、分野融合体制で本プログラムに取り組んでいる。また、他戦略分野（1、4、5）との共同の研究会等が開催された。統括責任者が、多くの分野・組織・研究者の活動を極めてうまくまとめあげた。
- ・ 研究成果の普及については、ソフト普及と教育のためのポータルサイトMateriAppsを運用している。
- ・ リチウムイオン電池課題には、産業界を巻き込んだコンソーシアムが立ち上がり運用されており、評価できる。

○今後は、計算物質科学という分野が広く社会へ周知され、一般国民の理解を得られる取組を期待する。産業界への貢献に対しても、一層の努力が期待される。また、欧米諸外国に対して遅れているマテリアルズインフォマティクス研究につながる早期の成果形成を期待する。

○本プログラムで形成された物質科学コミュニティを更に発展させていくことを期待する。物性、分子、材料分野の研究者が「京」の利活用について協議する体制の構築がなされたが、基礎と応用の連携、実験とシミュレーションの連携を更に一層強めていくことを期待する。課題間の学術面での連携や他の分野やプロジェクトの連携も更に推進していく必要がある。

○多数のソフトが開発されたが、それらの維持、管理、発展、普及の仕組みの構築が必要である。

■その他

○通常のワークステーションクラスターによっても、「京」の成果に匹敵する成果が出せるようなシステムを作り上げていく必要がある。

戦略分野 3

「防災・減災に資する地球変動予測」

(統括責任者：海洋研究開発機構・今脇資郎)

■研究開発課題達成状況

○研究開発課題については、「京」を最大限活用することで、「減災・防災に資する気象・気候・環境予測研究」並びに「地震・津波の予測精度の高度化に関する研究」いずれも高い精度の予測を可能にした。期待通りの成果が上がっており、以下のとおり、目標を着実に達成されたと評価できる。

【課題 1：減災・防災に資する気象・気候・環境予測研究】

- ✓ 全球雲解像モデルを用いて、世界で初めて 1 km 以下の格子解像度での、全球大気のシミュレーションに成功したほか、台風発生について 2 週間先まで予測が可能であることを示したことは、高く評価できるものである。

<課題 1-1：地球規模の気候・環境変動予測に関する研究>

- ✓ 科学的成果として、世界に例のない大規模で高精度のシミュレーションが行われた。特に、全球の 1 km 未満の高解像度シミュレーションでは「京」の能力を十分に発揮し、積雲対流の構造を再現することに成功した。また、雲をあらわに表現した世界初の予測・実証では、台風の変化や予測精度を上げることができた。

<課題 1-2：超高精度メソスケール気象予測の実証>

- ✓ 実用的成果として、広島県での土石流時の集中豪雨についても再現シミュレーションに成功している。実用に必要となる精度に大幅に近づいたように思われる。

【課題 2：地震・津波の予測精度の高度化に関する研究】

- ✓ 地震・津波の予測精度が格段に上がり、被害予測や避難シミュレーションまで結びつけることができた。

<課題 2-1：地震の予測精度の高度化に関する研究>

- ✓ 科学的成果として、地震・津波分野では、南海トラフ地震について、地震発生～地震波伝播～強震動・長周期地震動の発生の連成シミュレーションに成功し、成果を国の中央防災会議等に提供したことは、高く評価できる。

<課題 2-2 : 津波の予測精度の高度化に関する研究>

- ✓ リアルタイム波源推定のための理論津波波形データベースを高度化し、そこで得られたデータベースを用いた津波伝搬計算を可能にする津波波形モデルの高度化などが行われた。

<課題 2-3 : 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>

- ✓ 科学的成果として、東京 23 区内の 10 km 四方の地域を対象とした、時空間分解能の極めて高い地震災害評価を行い、計算手法の潜在能力を示すとともに、ゴードンベル賞のファイナリストに選出されるなど世界的評価を得ている。新しく開発された地盤・建物・避難を連成して都市地震解析を行う統合地震シミュレーション (GAMERA) はすばらしい成果であり、高く評価できる。

○気象分野、地震・津波分野ともキーワードは予測である。再現シミュレーションではなく、未来への予測、それによる減災であり、国民の期待の大きい分野である。「京」で得られた成果をもとに、一層、国民の期待に応えていくことを期待する。

○今後は、検証計算から予測計算に移行するための課題の洗い出しが必要である。シミュレーション結果の社会へ与える影響が極めて大きいことから、シミュレーション結果の信頼性に対する指標を自ら構築し、その指標とともに計算結果が示せる仕組み作りが求められる。

○また、5年後、10年後の気象、気候、防災、地球環境にかかわる基礎的研究や実証研究も重要であるが、あわせて、社会の期待に応えるべく、現業へ適用するための技術開発項目を明確化し、現実問題への対応も強める取組も期待する。

■計算科学技術推進体制の構築

○計算科学技術推進体制の構築については、大学の大型計算機センター及び地球シミュレータも活用して、当分野の全体的な成果を上げている。また、防災、減災に関連して省庁、自治体との連携の取組がなされている。人材育成、人的ネットワークの形成、研究成果の普及広報活動等も進められており、着実に達成されたと評価できる。

○具体的な取組は、以下のとおり。

- ・ 計算資源の効率的なマネジメントについては、「京」のみならず大学の大型計算機センター及び地球シミュレータも戦略的に有効活用することで、分野全体として高い成果を上げており、また延べ 51 本ものアプリケーションの最適化・高速化支援が行われていることは、高く評価できる。
- ・ 人材育成については、理化学研究所計算科学研究機構、高度情報科学技術研究機構及び、他の戦略分野と連携し、神戸大学の集中講義や、International HPC Summer School に講師を派遣し、計算科学分野における人材育成が推進されている。
- ・ 人的ネットワークの形成については、防災、減災に関連して大学、研究機関、国、地方自治体、民間、NPO 法人等を対象に研究会やセミナーを開催し、分野間、分野内のコミュニケーションの場が創出されている。
- ・ 研究成果の普及広報活動については、ウェブページを開設、シンポジウムの開催、パンフレットの制作、研究施設一般公開等が行われた。

○今後は、本プログラムで上げた成果や、計算技術、ソフトウェアを社会的にどのように活用するか、その仕組みをしっかりと構築する必要がある。この分野は、一般国民に対し「京」の存在を強くアピールできる分野であるため、更なる広報活動の工夫を図っていくことが重要である。信頼性を高めることや情報の公開で難しい問題もあるものの、シミュレーションやモデルによる限界も含めて、これまで以上に成果を正確に伝えることが求められる。また、検証と妥当性確認 (V&V)、特に妥当性確認の合理的な説明が望まれる。

○人材育成については、より実践的な後継者の育成を目指した取組とともに、より積極的な他分野交流を期待する。例えば、都市地震応答解析手法の開発研究については、地盤と建物群の連成解析が対象となっており、分野 4 との連携が模索されたものの実現に至っていない。

○また、気象庁のような現業センターと本プログラムとの関わりについて、大規模シミュレーション活動が現業センターと密接に共有できる体制で今後とも進めていただきたい。

○得られた成果や開発された手法について、国や自治体との更なる共有が進むことを期待する。ハザードマップ作成など、一部自治体との連携からの拡大を期待する。

■その他

- ・地震は国民的関心が強いが、どのようにすれば誤差はあるにしても何らかの地震発生の予測ができるのかなど、議論が進められることを期待する。

戦略分野 4

「次世代ものづくり」

(統括責任者：東京大学・加藤千幸)

■ 研究開発課題達成状況

○ 研究開発課題については、「京」を最大限活用することで、ものづくり産業全体への波及効果が大きい研究開発課題とその実証が産学連携体制により行われた。特に、ものづくりの上流工程強化への HPC 適用に焦点を絞って計算手法の高度化を実現し、高い実用的成果を上げた。以下のとおり、全ての課題が着実に達成されており、目標を着実に達成されたと評価できる。

【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】

- ✓ 科学的成果として、大規模で多数のパラメトリック研究により新たなメカニズムを発見でき、その応用による実証がなされた。マイクロデバイスによる流体制御技術を「京」によって構築できることを示すなど科学的にも高く評価できる。

【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】

- ✓ グラフェン創成プロセスの実成長温度でのダイナミクス解析を実施し、従来型の絶対零度での静的結果と定性的に異なる有益な知見を得た。他にも、SiC 酸化プロセスの実プロセス温度でのダイナミクス解析等が実施された。

【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】

- ✓ 科学的成果、実用的成果として、自動車実車風洞代替シミュレーションや曳航水槽試験代替シミュレーションは、従来の実験的手法に匹敵する、あるいはそれをしのぐ手法として自動車メーカーや造船業界において利用され始めており、国際的に高く評価されている。

【課題 4：多目的設計探索による設計手法の革新に関する研究開発】

- ✓ 実用的成果として、膨大な設計変数の組合せからの、最適製品構造の究明に新たな手法提案をして、「京」を用いての自動車車両の設計最適化に活用されており、種々の企業において実証された。

【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】

- ✓ 高温工学試験研究炉の安全審査申請に協力し、9万解析部品を対象に、組立て構造解析で、結合部を有する機械構造物の振動解析、耐震性評価等を行い、俯瞰的な耐震裕度計算とプラント各部の詳細な計算結果を提示した。

- 全体を通して、研究を、「革新技術創出」、「次世代設計」、「次世代信頼性評価」の3段階とすることにより、課題が明確になっている。
- 産業界で使われる複雑大規模な対象が、コンピュータシミュレーションによって取り扱えることを示した意義は大きい。ものづくりは多岐にわたる分野であるが、ものづくりにおいては上流工程での役割が重要で、シミュレーションの果たす役割は大きい。例えば、シミュレーションで風洞実験や水槽試験をはじめとする実験を代替することを目標に、アプリケーションの整備に努め、この目標は達成されつつある。
- また、課題3、課題5の多くはいずれも有限要素法を基盤としており、課題1と課題3はいずれも流体力学という共通性を持っている。これらの課題については、計算機の演算速度、メモリーに関する進歩とアルゴリズムの進歩により、現実的な問題への適用が進んだことが明確に示された。
- 今後は、既に産業界で利用されているソフトウェアを入れ替えるだけのコストパフォーマンスを出せたのか、評価する仕組みを構築し、どこまで達成すれば真のイノベーションへつながるか、提示されることが期待される。
- 多岐にわたるものづくりの分野で、「京」、ポスト「京」の必要性の高い課題を設定していくことが望まれる。

■計算科学技術推進体制の構築

- 計算科学技術推進体制の構築については、課題推進責任者のもと、強力な推進体制を維持し、ものづくり分野におけるトップランナーの輩出と同時に、産業界のスーパーコンピュータ利用は大きく進展した。多くの企業との連携を実現し、産業界に貢献する多くの成果を上げている。ソフトの整備、公開、普及など多面的に活動が推進され、人材育成、情報発信にも取り組んでいる。本分野は、実証研究の成果とともに、いかに多くの産業界の人々を本プログラムに引き込み、スーパーコンピュータの産業利用を促進したかが重要であ

るが、着実に達成されたと評価できる。

○具体的な取組は、以下のとおり。

- ・研究成果の普及については、プラットフォームを構築し、開発したシステムを国のプロジェクトで開発した多数のシミュレータに適合させ、実証事例を示した。基盤アプリケーションの開発やその利用法のドキュメントの整備、産業界での人材育成で大きな成果がある。また、開発したコードのチューニングを系統的に行い、プログラムの高速化を実現していることは評価できる。
- ・利用者層の拡大・人的ネットワークの形成については、「京」を使うためのハンズオンセミナー、産業利用スクール、解析結果 200 件の公表データベース化やアウトリーチサイトである「計算工学ナビ」の開設など、多くの有効な取組が行われており、高く評価できる。特に、ほぼすべての課題に対し、企業との連携を図り、開発したアプリケーションの公開と普及の強化あるいはコンソーシアムを形成していることは、高く評価できる。
- ・人材育成については、教科書、参考書を作成し、大学や企業におけるシミュレーションソフトウェア開発者や人材育成を目指した、全く新しい教育プログラムが構築されている。
- ・プロジェクトの統合的推進については、特に、課題「多目的設計探査」と課題「輸送機器・流体機器の流体制御」、課題「乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システム」との連携は、多目的設計探査手法の対象を広範囲に展開した。

○今後は、プロジェクトで整備開発されたソフトウェアの、ものづくりの現場での利用を進めるための取組を期待する。企業は ISV（パッケージ ソフトウェア開発企業）プログラムに頼っており、この状況を変えねばならない。

○ものづくりの現場で使われているパッケージを、「京」あるいはポスト「京」で使えるようにするための対策も早急に考える必要がある。

○また、企業とアカデミアとの共同研究が、多くの大学で行われることを期待する。成果のすばらしさをもっと産業界の現場から発信すれば、より多くの波及効果が期待できるのではないだろうか。また、「京」を利用した実証利用とプロダクションランの関係をはっきりさせる事が望まれる。

○戦略分野 4 がカバーする分野は広く、総合的分野と言える。多岐にわたる産業をものづくりとして一くりにするのは困難かもしれないが、他の戦略分

野との共同研究や連携が進むことを期待する。

■その他

- 民間、特に大企業はソフトウェアを含む技術の継続性を重視しており、民間にとっては一過性のソフトウェアでないことが最重要である。その意味から、ここで開発されたソフトウェアが半永久的に維持・成長することを何らかの形で示す必要がある。そうでなければせっかくのすばらしいソフトウェアであっても民間に浸透することはなかなか困難である。また、その背景にはソフトウェアの維持管理は経済的に見て特に大企業では難しいという現状がある。

- 自社の製品開発においては、共同利用の計算資源を利用するには抵抗があると思われるので、実用的に十分な精度でシミュレーションを行うことのできる最小限の計算資源を見積もることも重要である。乱流シミュレーションなどは、まさに実問題をシミュレーションで置き換えることが非常に大きいスケール（例えば、大型船など）にまで適用されることになった。これらのことが、通常の企業レベルの資源で実行可能とすることが今後の重要な課題である。

戦略分野 5

「物質と宇宙の起源と構造」

(統括責任者：筑波大学・青木慎也)

■ 研究開発課題達成状況

○ 研究開発課題については、いずれも「京」を駆使して成果をあげており、世界的競争の先頭集団にある。宇宙の歴史における、素粒子、原子核、星、銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、「京」の能力で可能な範囲で、計算科学的手法で統一的に理解するという目標を、期待以上に達成した。個々の科学的成果の多くは実験・観測のデータと比較できる段階に達しており、目標を着実に達成されたと評価できる。

【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】

- ✓ 科学的成果として、格子 QCD の結果から得られる核力が、原子核の研究に活用されるレベルになったことは印象的である。

【課題 2：大規模量子多体計算による核物性解明とその応用】

- ✓ 科学的成果として、原子核のモンテカルロ殻モデルの適用範囲が大幅に拡大された。

【課題 3：超新星爆発及びブラックホールの誕生過程の解明】

- ✓ 科学的成果として、超新星爆発及びブラックホールに係るシミュレーション波形データは重力波望遠鏡による宇宙観測計画へ活用される可能性をもち、世界的評価が高い。また、世界初の空間 3 次元ニュートリノ輻射流体計算により、ニュートリノ加熱機構が、超新星爆発に有効であることが示された。一般相対論的輻射流体コードは、観測重力波の分析に力を発揮することが期待される。

【課題 4：ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第 1 世代天体形成】

- ✓ 科学的成果として、特にダークマターにおけるハローのシミュレーションコード開発においてはと世界最大級の大空間における高分解能計算を高い実行効率で実施し（ゴードンベル賞を受賞）、世界的評価は高く、5,500 億個のダークマター粒子の計算を可能にしたコード開発もすばらしいと言える。また、太陽対流圏シミュレーションでは、世界をリードする成果があげられた。

- 全体を通して、世界でも最先端の物理学研究の活動を行っている研究者が組織を作って目標を定め、新たな大規模ソフトウェアを開発して多くのサイエンスの成果を上げている。
- 今後は、戦略分野5は国際的評価も高く、国際協力の実績もあり、ポスト「京」に向けても現在のレベルを更に向上させることを期待する。また、更なる自然の本質に迫る発見を期待する。
- 20世紀後半に天体宇宙研究者が編み出した粒子法が現在、土木、機械など工学分野で多用されるようになったことを考えると、戦略分野5については、バイオや工学など他分野の研究者との交流により、何らかの新展開が生まれることも期待される。

■計算科学技術推進体制の構築

- 計算科学技術推進体制の構築については、基礎科学における計算科学の研究において実績のある計算基礎科学連携拠点が中心となった取組が実施されている。研究ネットワークの構築として、データグリッドJLDGを構築して、世界中の研究者と協力しコンフィギュレーションデータを蓄積・公開していることは先駆的であり、高く評価できる。また、難しい科学の世界をクオーク・カード・ディーラなるカードゲームにより啓発するなど、小・中学生を含めた次世代育成や、拠点内の計算機資源と連携した効率的な資源の有効利用、分野を超えた連携などに取り組んでおり、着実に達成されたと評価できる。
- 具体的な取組は、以下のとおり。
 - ・計算資源の効率的マネジメントについては、コンピュータ科学の研究者と協力してシミュレーションプログラムの高速化・高並列化に力を入れ、物理学研究者との共同体制を構築したことは画期的である。高性能計算の扉なる情報サイトの整備等によるユーザ支援体制も確立している。また、開発されたコードの共用化の体制も作っている。特に、QCDについてデータグリッドJLDGを構築して、世界中の研究者と協力しコンフィギュレーションデータを蓄積・公開していることは、計算科学全体にとっても先駆的である。そのほか、萌芽的研究課題から Science 誌に2本の学術論文が採録されたことは、高く評価できる。
 - ・人的ネットワークの形成については、素粒子・原子核・宇宙にまたがる横断

的人材の育成が行われている。量子多体問題という観点では、分野2と共通点があり、分野2との合同の研究会が頻繁に開かれ、アルゴリズムの共通性から連携を深められた。

- ・研究成果の普及については、クオーク・カード・ディーラなるカードゲームによる小・中学生を含めた次世代育成等に工夫を凝らしており、成果を社会に広めるための努力に力を入れるようになったことは評価できる。この分野は、特に国際的な連携が進んでいるが、国内でのこうした広報は、知的基盤の構築として重要である。戦略プログラムの実施によって、分野振興も一層進んだと言える。

○今後は、更に他の分野との連携・交流が進められ、特に理論開発やアルゴリズム研究での連携をもっと進めていくことを期待する。データグリッド技術などでは、他分野との連携が可能であったと思われる。戦略分野5はスーパーコンピュータのパワーユーザーによるコミュニティであり、以前から分野内の連携、研究推進体制の構築が他分野に比べると進んでいたと言えるが、こうした優れた経験を他の分野にも波及させていくことを期待する。

○研究成果の普及活動については、基礎的な分野であることから、一般国民に広く成果を知らしめるのは難しい面もあるが、「重力波」や「ニュートリノ」などのニュースは多くの日本人が関心を持っているものであり、シミュレーション技術によるムービーの作成など、得られた成果を国民に分かりやすく説明する工夫に力を入れ、本分野のアウトリーチ活動を進めていくことを期待する。

■その他

○最近の重力波発見にもみられるように、宇宙科学や素粒子論研究を推進しているのは大型装置による実験研究であるが、現在ではシミュレーション研究は必須なものとなっており、両者の連携によりこの分野のサイエンスは発展している。シミュレーションによる予測が、実験に先行することを期待する。

○「京」にしかできない計算は多くのノードを必要とするので、「京」の運用上待ち時間が多くなることが多い。世界的な研究競争を遅延なく進めるためにも、計画的な計算の実施とあわせて、運用上の工夫を更に図っていくことが望まれる。

以上。

HPCI戦略プログラム 概要

本事業の位置付け

- 【政策目標】 基礎研究の充実及び研究の推進のための環境整備
- 【施策目標】 科学技術振興のための基盤の強化
- 【達成目標】 平成24年9月末の共用開始を目指し、スーパーコンピュータ「京」を中核とするHPCIを構築するとともに利用体制を整備する。また共用開始後、画期的な研究成果の創出に向けた利用が図られる。



HPCI戦略プログラム

【目的】 HPCI(理化学研究所の「京」と、国内11機関のスーパーコンピュータで構成されるハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)を最大限活用して、重点的・戦略的に取り組むべき研究分野で画期的な成果を創出することを目的とする。

【事業概要】
社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる5つの「戦略分野」において、
a. 達成すべき「戦略目標」を定め、その目標に沿った**研究開発を推進**する。
b. 我が国の**計算科学技術推進体制を構築**するため、スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメントや研究支援体制の確立、人材育成と人的ネットワークの形成、研究成果の普及等を図る。

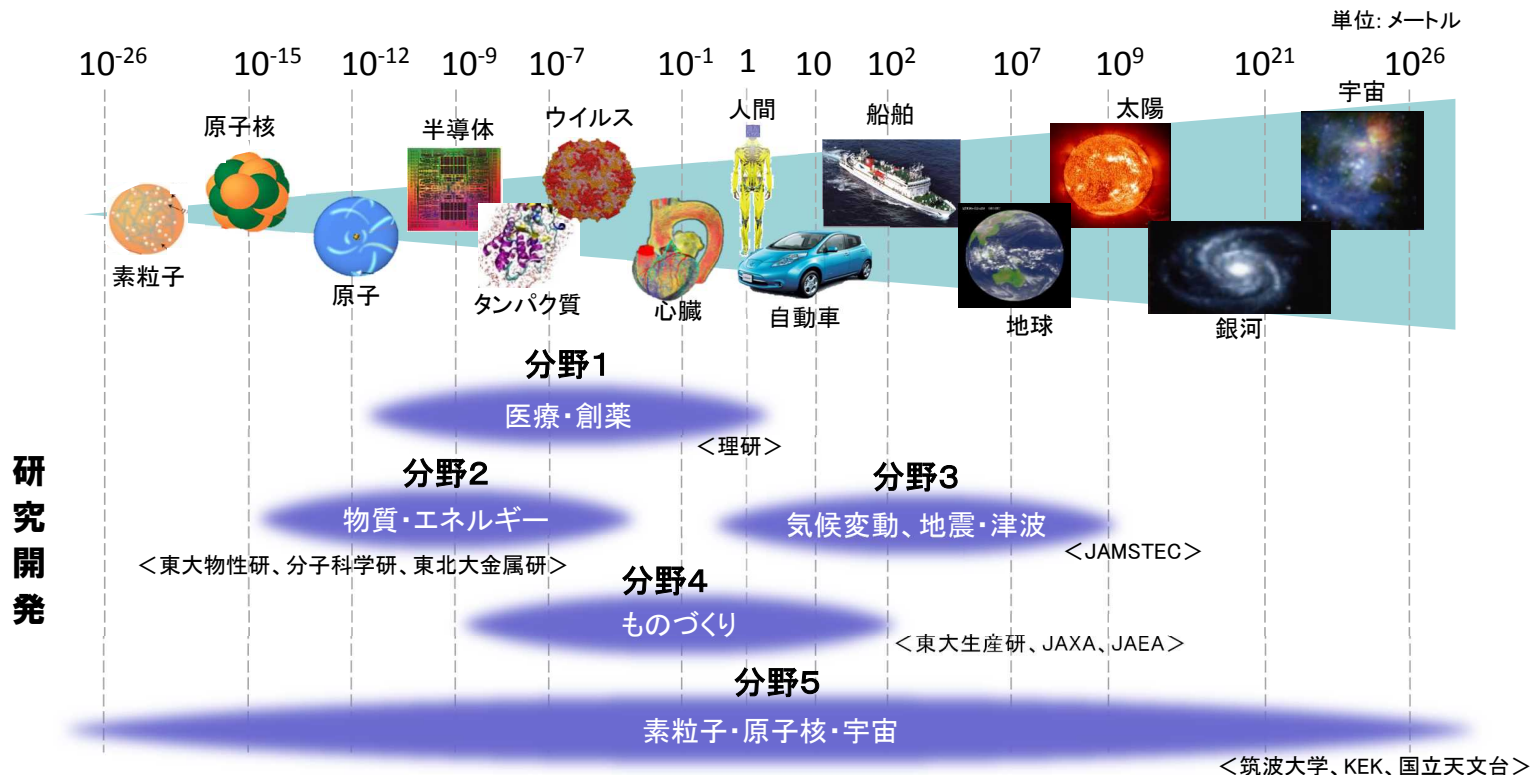


HPCIを最大限活用した
研究開発プロジェクト

アウトカム	【定量的な成果目標】					
	a. 各戦略分野の「戦略目標」を具体化した「研究開発目標」(計25目標)を達成する。 b. 各戦略分野における計算科学技術推進体制を構築する。					
予算	【成果指標】					
	a. 「研究開発目標」の達成数 b. 計算科学技術推進体制の構築状況					

	H23	H24	H25	H26	H27	合計
予算	25億	25億 (他、補正5億)	26億	22億	20億	122億 (補正込み)

戦略分野での研究開発と体制構築



- ### 体制構築
- 研究支援
 - ・アプリケーションの利用支援 等
 - 研究成果の普及
 - ・開発したアプリケーションの公開 等
 - 人材育成と人的ネットワークの形成
 - ・教育プログラムや研究会の開催 等
 - スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメント
 - ・複数機関による効率的利用と最適配分 等

経緯と推進体制

経緯

平成19年度 : 文部科学省の「次世代スーパーコンピュータ作業部会(科学技術・学術審議会)」で基本的方針を検討

平成20～21年度 : 「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」を計16回開催。社会的・学術的に大きなブレイクスルーが期待できる5つの戦略分野を決定

平成21年度 : 公募を経て、実施可能性調査実施機関を決定

平成22年度 : 「戦略機関」を決定
研究開発目標を設定

平成23年度 : 事業を開始

平成25年度 : 中間評価を実施

平成27・28年度 : 事後評価

推進体制



(補足) 推進体制 (HPCI戦略プログラム推進委員会)

国として、5つの戦略分野の進捗状況を定期的に把握し、評価を行うために、全体を統括する「推進委員会」を設ける。その下に、分野ごとの状況を把握し、指導・助言を行う「作業部会」を設置している。

HPCI戦略プログラム推進委員会

○プログラムマネージャ

土居 範久 慶應義塾大学 名誉教授

○分野マネージャ

[分野1] 中村春木(大阪大学 蛋白質研究所 所長/教授)

[分野2] 寺倉清之(物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 フェロー)

[分野3] 矢川元基(原子力安全研究協会 評議員会長)

[分野4] 小林敏雄(日本自動車研究所 顧問)

[分野5] 小柳義夫(神戸大学 計算科学教育センター 特命教授)

○理化学研究所

平尾 公彦 理化学研究所計算科学研究機構 機構長

プログラムマネージャ	: 全体的な観点からプロジェクトの実施計画や進捗に関し提言を行う。
分野マネージャ	: 統括責任者等のプロジェクト実施者との意見交換とプロジェクト実施に係る指導・助言を行う。
計算科学研究機構長	: 機構と戦略プログラムの連携・協力の観点からプロジェクト実施に係る意見を述べる。

中間評価や事後評価を行う場合、上記委員会での議論の後、文部科学省の「科学技術・学術審議会」における外部評価を受けることで評価結果が確定する。

(補足) 推進体制 (分野別作業部会 委員一覧)

分野1	(分野マネージャ) 中村 春木	大阪大学蛋白質研究所所長/教授	分野3 (続き)	住 明正	国立環境研究所理事長	
	茅 幸二	理化学研究所研究顧問		萩原 一郎	明治大学研究・知財戦略機構・特任教授 先端数理学インスティテュート所長	
	児玉 龍彦	東京大学先端科学技術研究センター教授		長谷川 昭	東北大学名誉教授	
	分野2	菅野 純夫	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授	分野4	(分野マネージャ) 小林 敏雄	日本自動車研究所顧問
		長田 重一	大阪大学免疫学フロンティア研究センター教授		天野 吉和	富士通顧問
		松本 洋一郎	理化学研究所理事		奥田 基	一般財団法人高度情報科学技術研究機構 神戸センター副センター長
		美宅 成樹	豊田理化学研究所客員フェロー		押山 淳	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻教授
(分野マネージャ) 寺倉 清之		物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点フェロー	笠 俊司		IHI技術開発本部技術企画部部長	
粟野 祐二		慶應義塾大学理工学部電子工学科教授	後藤 彰		荏原製作所風水力機械カンパニー理事 企画管理技術統括技術開発統括部長	
幾原 雄一		東京大学大学院工学系研究科総合研究機構教授	澤田 隆		日本工学会(工学系学協会連合)事務局長	
分野3	魚崎 浩平	物質・材料研究機構 フェロー	分野5	(分野マネージャ) 小柳 義夫	神戸大学計算科学教育センター特命教授	
	加藤 雅治	東京工業大学大学院総合理工学研究科教授		相原 博昭	東京大学大学院理学系研究科教授	
	高梨 弘毅	東北大学金属材料研究所所長		海老沢 研	宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所教授	
	中村 振一郎	理化学研究所社会創生事業 イノベーション推進センター特別招聘研究員		延與 秀人	理化学研究所仁科加速器研究センター長	
分野4	福山 秀敏	東京理科大学総合研究院院長	岡 真	東京工業大学大学院理工学研究科教授		
	(分野マネージャ) 矢川 元基	原子力安全研究協会評議員会長	川合 光	京都大学大学院理学研究科教授		
	鬼頭 昭雄	筑波大学生命環境系主幹研究員	佐藤 勝彦	自然科学研究機構長		

(補足)「戦略分野」「戦略機関」と「研究開発目標」の設定

【「戦略分野」の決定】

○ 「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」での16回の検討を通じて、平成21年7月、5つの「戦略分野」を決定。

- 【判断軸】
- ・次世代スパコンの能力を必要とする課題があること
 - ・社会的・国家的見地から高い要請があること
 - ・稼働後5年間で具体的な成果を出す見通しがあること

【「戦略機関」の公募と決定】

○ 平成21年8～10月に公募を行い、書類審査・ヒアリングを経て、平成22年7月「戦略機関」を決定。

(分野によっては、成果の最大化のため、研究機関の合同化を指示)

- 【審査の観点】
- ・事業の目標が「戦略分野」の趣旨に沿っていること
 - ・稼働後5年間で世界最高水準の成果を出せる可能性が高いこと
 - ・次世代スパコンの能力を効果的に活用すること
 - ・実施体制が適切であること
 - ・実施体制として、戦略分野において一定のコミュニティを代表できること
 - ・その分野のコミュニティを取りまとめるための実績と可能性があること

【「研究開発目標」の設定】

○ 平成22年度に「HPCI戦略プログラム推進委員会」の作業部会が、各「戦略機関」を強く指導・助言しながら「研究開発課題」を策定。平成23年度から事業開始。

- 【検討の観点】
- ・スパコンを最大に活用して成果に結びつけるべく「研究開発課題」の項目数と内容を検討する。
(「作業部会」の指摘により「研究開発課題」の修正もなされた。)

5つの戦略分野と戦略機関

<戦略分野>

<戦略機関>

分野1	<p>予測する生命科学・医療および創薬基盤</p> <p>ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測を行う。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。</p>	<p>・理化学研究所</p>
分野2	<p>新物質・エネルギー創成</p> <p>物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。</p>	<p>・東京大学物性研究所(代表) ・分子科学研究所 ・東北大学金属材料研究所</p>
分野3	<p>防災・減災に資する地球変動予測</p> <p>高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。</p>	<p>・海洋研究開発機構</p>
分野4	<p>次世代ものづくり</p> <p>先端的要素技術の創成～組合せ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。</p>	<p>・東京大学生産技術研究所(代表) ・宇宙航空研究開発機構 ・日本原子力研究開発機構</p>
分野5	<p>物質と宇宙の起源と構造</p> <p>物質の究極的微細構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。</p>	<p>・筑波大学(代表) ・高エネルギー加速器研究機構 ・国立天文台</p>

25の研究開発目標

戦略目標

研究開発目標

【分野1】

大規模シミュレーションとデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、そして薬剤・医療のデザインの実現

- ① 細胞内の複雑な分子シミュレーションにより、細胞内のタンパク質の挙動を理解
- ② 創薬標的タンパク質と薬剤化合物との結合を高精度に予測し、計算創薬を確立
- ③ 分子から臓器までの統合シミュレーションにより、疾患を解明
- ④ ゲノムやがん等の関連を大規模データ解析することにより、そのメカニズムを理解

【分野2】

計算物質科学：基礎科学の源流からデバイス機能とエネルギー変換を操る奔流へ

- ⑤ できるだけ高い温度で超伝導になる物質を探索するための手法開発
- ⑥ 光合成を通して光からエネルギーを得る化学反応の仕組みの解明
- ⑦ 半導体微細構造の制御で発現する電子デバイス機能の予測
- ⑧ ウイルス1個の丸ごとシミュレーションによる感染過程の理解
- ⑨ 燃料電池、リチウムイオン電池の性能向上に向けた電極上化学反応の解明
- ⑩ メタンハイドレートを効率的で安全に採掘するための基礎特性の解析
- ⑪ 鉄鋼材料に亀裂が生じる仕組みを原子レベルから解明

【分野3】

地球温暖化時の台風の動向の全球的予測と集中豪雨の予測実証、そして次世代型地震ハザードマップの基盤構築と津波警報の高精度化

- ⑫ 全球で雲を露わに表現するモデルにより、2週間以上先の天候予測可能性を実証
- ⑬ 雲を精緻に表現する数値予報技術を開発し、集中豪雨などの高精度な予測を実証
- ⑭ 過去の地震被害の発生要因を解析し、短周期地震動を再現するモデルを開発
- ⑮ 広域での津波の遡上を高速、高解像度で予測する手法の開発
- ⑯ 都市の全構造物の地震応答を計算する大規模シミュレーションの実現

【分野4】

21世紀のものづくりを抜本的に変革する計算科学技術の戦略的推進

- ⑰ 流体機器の性能を飛躍的に向上させる新しい製品概念の実証と実用可能性の検証
- ⑱ ナノ構造創製の原子レベルでの解析とデバイス開発での有効性の実証
- ⑲ 従来よりも格段に精度の高い、流れの予測を実現し、その産業上の効果を実証
- ⑳ 大規模設計問題のための設計探索手法を開発し、実際の設計における有効性を実証
- ㉑ 地震時の大型プラントや機器系統の挙動を俯瞰的かつ詳細に分析する手法を確立

【分野5】

宇宙の歴史における、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、計算科学的手法で統一的に理解

- ㉒ 4次元時空シミュレーションによるクォーク力学と核力の解明
- ㉓ 多粒子シミュレーションによる、核力から原子核の構造解明と核変換などへの応用
- ㉔ 超新星爆発と中性子星合体の解明
- ㉕ ダークマターの密度ゆらぎからの天体形成過程の解明

予算額の推移

[千円]

	H23年度	H24年度	H24年度 (補正予算) (※2)	H25年度	H26年度	H27年度
分野1	493,529	493,530	61,000	493,674	441,910	397,910
分野2	493,529	493,530	60,000	493,674	441,910	397,910
分野3	493,529	493,530	161,000	597,674	441,910	397,910
分野4	493,529	493,530	112,500	493,674	441,910	397,910
分野5	493,529	493,530	92,000	493,674	441,910	397,910
総計(※1)	2,467,643	2,467,650	486,500	2,572,370	2,209,550	1,989,550

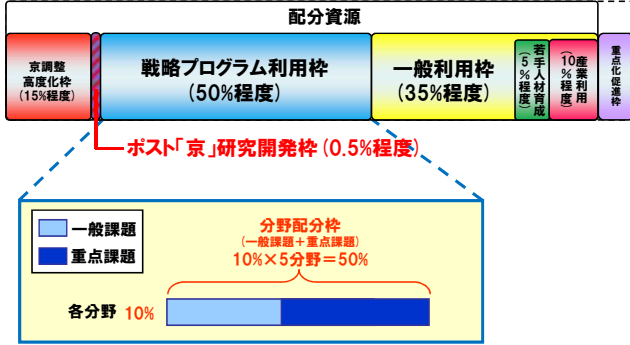
(※1) 四捨五入のため、合計値が一致しない場合がある。

(※2) 分野内での「京」活用環境の基盤整備、開発したアプリケーションの利用促進(産業界やコミュニティへの普及)のための環境整備、人材育成のための教育配信システムの整備。

「京」の計算資源配分（「京」の共用開始後）

画期的な科学的成果や社会的課題の解決に資する成果を創出するため、分野ごとのボトムアップの計算資源配分と、プログラム全体を通じたトップダウンの計算資源配分を両立させ、「京」の計算資源を戦略的に配分

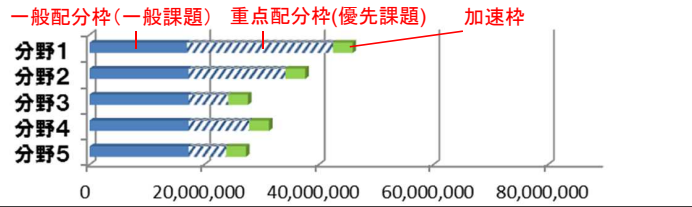
「京」の利用枠(以下の利用枠は、H27年度上期のもの)



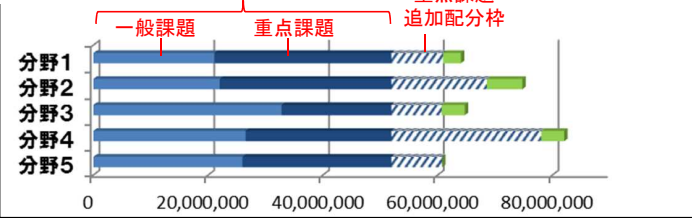
- ①各分野に計算資源を均等配分し、各課題への基礎的配分は分野内で決定(H24年度:一般配分枠/H25年度以降:一般課題)
- ②分野ごとに重点課題を選定。(H25年度以降:重点課題)
- ③その上で、プログラム全体を通して重点課題の一部に計算資源を追加配分。(H24年度:重点配分枠(優先課題)/H25年度以降:重点課題追加配分枠)
- ④さらに、プログラム全体を通して早期の成果創出が期待される課題に計算資源を追加配分。(加速枠)

なお、戦略プログラムの事業最終年度は、最終目標の達成にむけて、分野の裁量分を多くし、追加配分の申請に係る研究者の負担をなくす観点から、各分野に計算資源を均等配分。

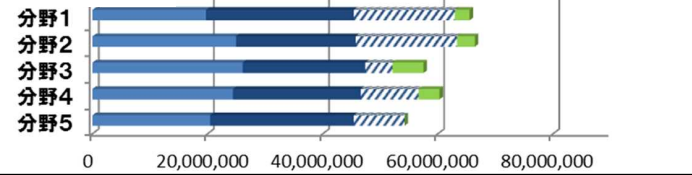
平成24年度下期



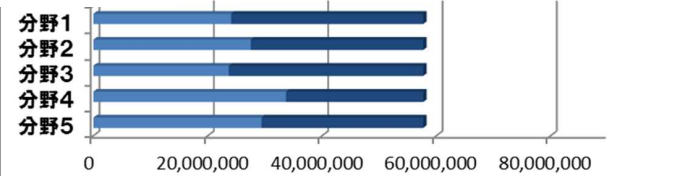
平成25年度



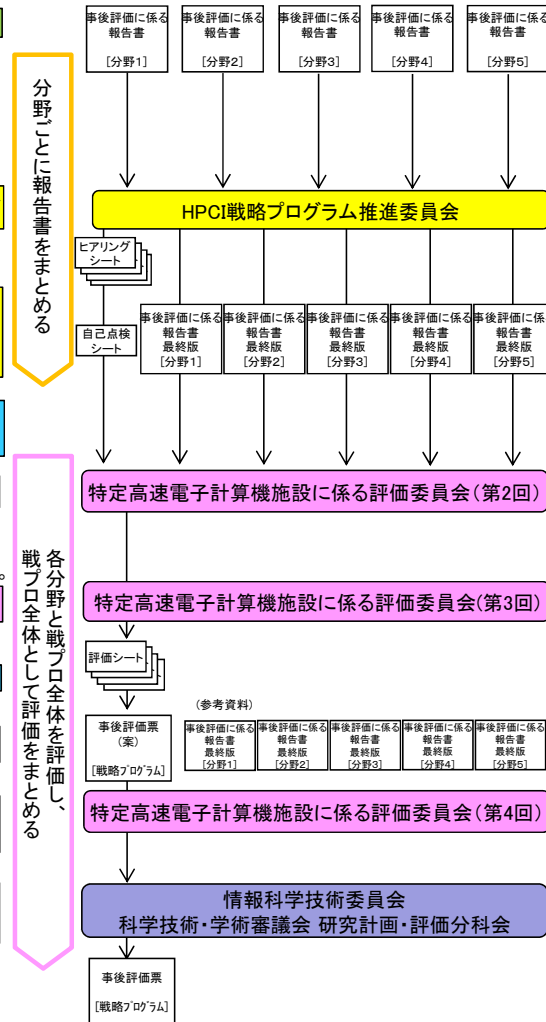
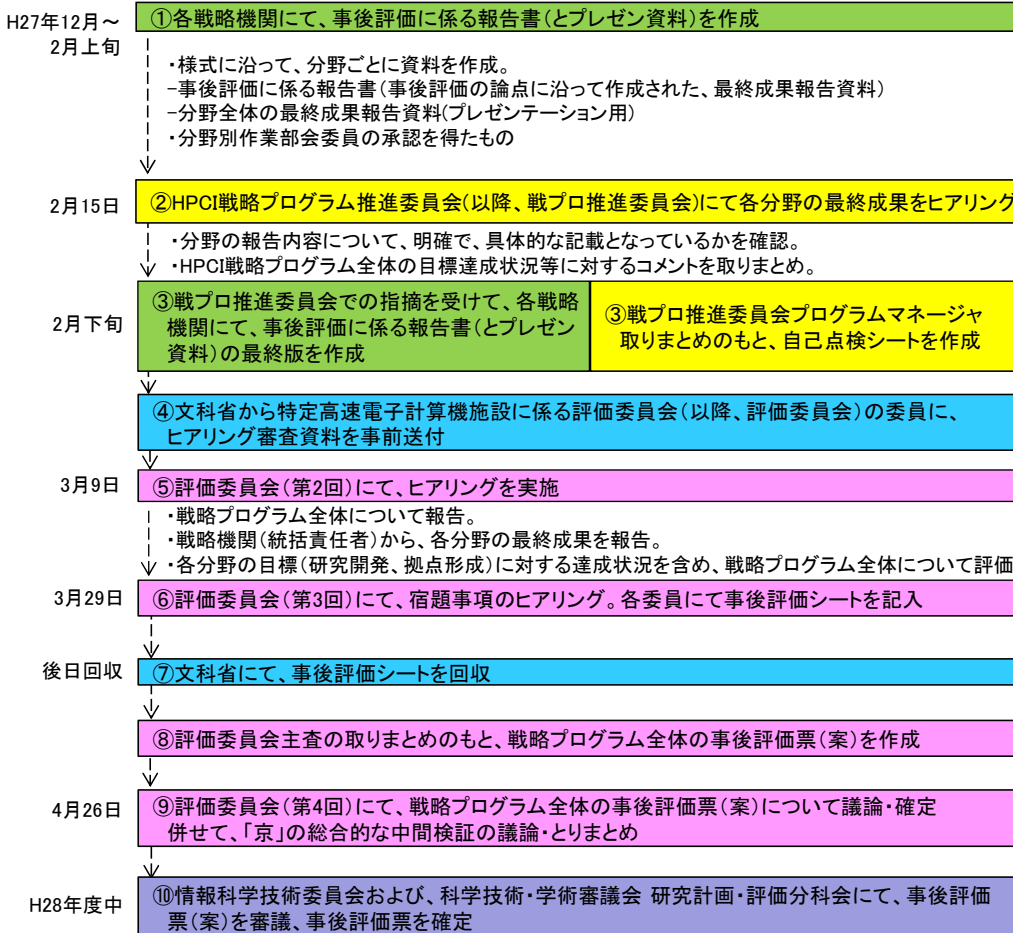
平成26年度



平成27年度



事後評価の進め方



HPCI戦略プログラム 25課題の成果概要

分野1 研究開発課題1： 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション(課題代表者:理化学研究所・杉田有治)

達成目標

「京」を活用した大規模な分子動力学シミュレーション、粗視化ダイナミクス、一分子粒度シミュレーションを可能とし、細胞環境を露わに考慮した生体分子の動力学(細胞内分子ダイナミクス)を実施する。それにより、細胞質での分子混雑環境がタンパク質構造や信号伝達に及ぼす影響や、核内のヌクレオソームやクロマチンなどの機能発現の分子機構について、X線結晶構造解析だけでは不可能な動力学的理解と予測を実現する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

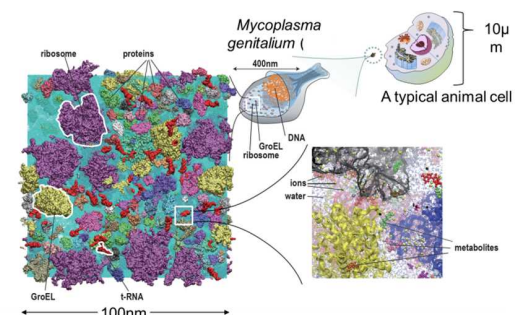
- 成果①細胞内の分子混雑環境に関する世界最大級の1億原子系全原子分子動力学シミュレーションに成功。
成果②ヌクレオソーム、クロマチンの機能発現機構に関するマルチスケールシミュレーションに成功。

①の成果は、細胞環境の重要な要素の一つである分子混雑に注目し、分子混雑環境がタンパク質のダイナミクス、安定性、水和、分子認識などに与える影響を明らかにすることを目的として、**細菌の細胞質の約10%を約1億個の原子で表現した全原子モデル**を構築した。自主開発した分子動力学プログラムGENESIS高度に並列化し、世界最大級の分子動力学シミュレーションを実現した。タンパク質と代謝物の相互作用、タンパク質間相互作用などを網羅的に解析し、**複数の分子のかかわる詳細な分子間相互作用が細胞内環境でのタンパク質の構造・機能・ダイナミクスを決定していることを示した**(ソフトウェア: GENESIS, WIREs computational molecular science 2015)。

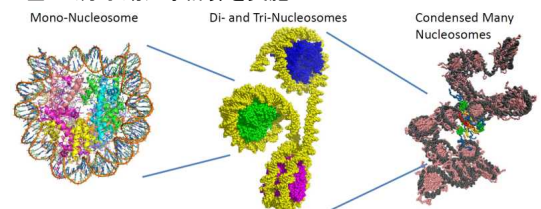
本成果によりはじめて、細胞内の分子拡散を含めた原子レベルの細胞質ダイナミクスの実像を理解する道が拓かれた。細胞内での低分子化合物の移動や分布なども計算されており、今後さらに研究を進めることで創薬分野での活用につながる成果である。

②の成果は、遺伝情報の読み出し(転写)を制御するDNAとヒストンタンパク質からなるヌクレオソームとその複合体であるクロマチンの構造とダイナミクスについて、粗視化分子モデルと全原子分子モデルとを用いたマルチスケールシミュレーションを実施することで得られた。自主開発した高度に並列化された分子動力学プログラムSCUBA、MARBLE、粗視化モデル計算プログラムCafeMolを用いた。計算結果は対応する実験、X線結晶構造解析、溶液X線小角散乱、電子顕微鏡などとの整合的な計算結果を得ており、**転写制御という重要な細胞機能に関する多くの知見を得た**(Accounts of Chemical Research 2015)。

本成果は、エピジェネティクス(DNAの配列変化によらない遺伝子発現を制御・伝達するシステム)に関して、スーパーコンピュータにより原子、分子レベルからの機構解明を行うものであり、将来は創薬や再生医療にもつながる成果である。



細菌細胞質の約10%を表現する全原子モデルに基づく分子動力学計算を実施



真核生物のヌクレオソームを全原子分子動力学で計算し、粗視化モデルでヌクレオソーム複合体の長時間ダイナミクスを計算した。

分野1 研究開発課題2: 創薬応用シミュレーション(課題代表者:東京大学 先端科学技術研究センター・藤谷秀章)

達成目標

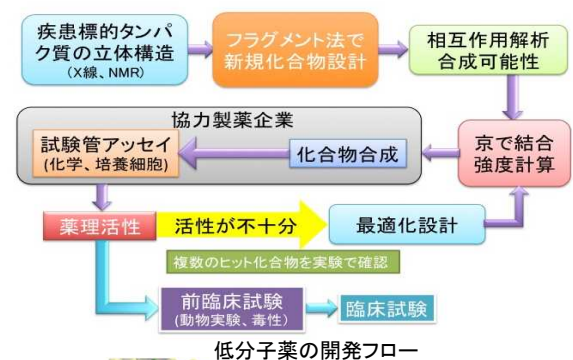
疾患治療標的タンパク質と薬候補化合物の結合定数を、「京」で高速かつ高精度に評価する方法を実現して新規薬剤開発のパラダイムを確立する。(結合自由エネルギーシミュレーションの計算誤差を従来の5kcal/molから1kcal/mol以下に)
 「京」を使って設計した候補化合物を、実際の化合物合成とウェットアッセイで検証してスーパーコンピューター創薬設計の有効性を実証する。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

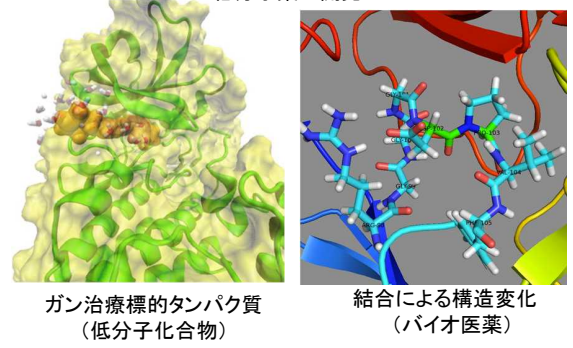
成果内容と科学的・社会的意義

成果①創薬応用シミュレーションの高速化・高精度化を実現してスーパーコンピューター創薬設計の有効性を実証

「京」のSPARC-HPC-ACEアーキテクチャに対するSIMD intrinsic accelerated kernelを開発してGROMACSの正式リリース版で平成25年に一般公開した。これにより「京」上の分子動力学計算を高速化して効率的な超並列結合自由エネルギー計算(MP-CAFE)を実現した。疾患治療標的タンパク質のX線立体構造に基づいて薬候補化合物をフラグメント最適化法を用いて合成可能性を考慮した設計を行い、分子動力学でタンパク質との相互作用解析や結合構造の安定性を精査して有望と推測される新規化合物に対してMP-CAFE計算で結合自由エネルギーを求めた。この計算データから新薬として市場価値がありそうな新規化合物を選択して化合物合成を行いウェット実験で薬理活性を測定した。その結果、**計算値と実験値の誤差が1kcal/mol以内に収まる事を確認すると共に、ガン治療標的キナーゼで薬理活性が高い化合物を発見した。**平成26年10月より連携する製薬企業でこの化合物に対する**動物実験を進めている**(Chem. Pharm. Bull. 2014, 2015)。



バイオ医薬品ではマウス抗体のヒト型化と結合力を増強する為のアミノ酸置換を設計し、平成26年末より**先端研で動物実験を進めている**。応用面だけではなく、抗原に抗体が結合する時にCDRループが大きな構造変化を起こすメカニズムや、抗原抗体反応で測定されるエントロピーとエンタルピーの変化の起源を突き止めて、**どのような要素が抗原と抗体の結合強度に影響しているかを明らかにした**(J. Biol. Chem. 2016)。



本成果は、「京」によって薬剤候補化合物の高精度評価を高速に数多くの化合物に対して行うことによって、創薬のプロセスを大幅に加速することができ、その結果、低分子化合物医薬品と抗体医薬品の二つの薬剤候補が前臨床試験に到達するなど、**計算による創薬設計手法の有用性を実証し、新規薬剤開発のパラダイムを確立するものである。**

分野1 研究開発課題3: 予測医療に向けた階層統合シミュレーション(課題代表者:東京大学・高木周)

達成目標

分子、細胞、臓器、脳神経系、筋骨格系などを連成した階層統合シミュレータを構築することにより、複雑な生命現象の理解や医療への応用を行う。具体的には、分子、細胞レベルからの心臓シミュレーションの実現と医療への貢献、全身筋骨格-神経系統合シミュレーションの実現と神経疾患による運動機能障害の検証 等を行う。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

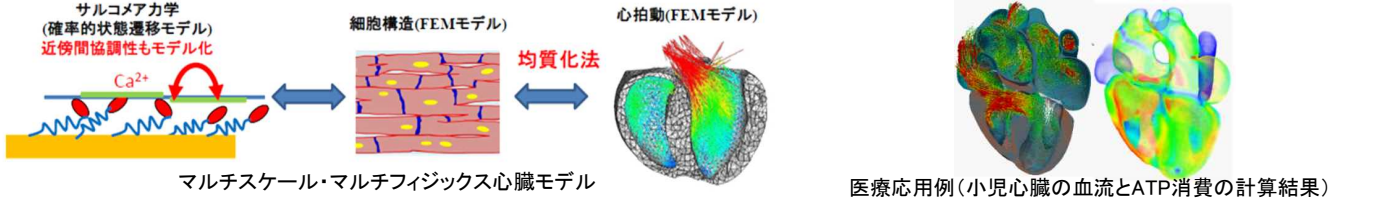
成果①疾患の治療法・薬効評価のためのマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーションの実現と医療応用
成果②神経疾患による運動機能障害解明のための全身筋骨格-神経系統合シミュレーションの実現と症例の検証

成果①: マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heartは、**サルコメア分子のレベルから心筋細胞、心臓全体までの3階層統合シミュレーションに世界で初めて成功(SIAM MMS 2013)**し、計算科学の分野に大きなインパクトを与えた。すでに**医療分野での応用に向けた医療機関等との共同研究が複数進められている**。具体的には、**分子レベルの変異がもたらす肥大型心筋症のシミュレーション、心臓の形質異常を持つ小児先天性心疾患に対する手術の術後予測のシミュレーション、薬剤の心毒性の予測シミュレーション等**(Science Advances 2015)に及び、臨床現場での利用に向け、**薬事承認を目指して研究開発が進められている**。また、計算結果を基に制作したビデオは国際学会SIGGRAPH(2015)でBEST VISUALIZATION OR SIMULATION賞を受賞し、全世界で29万人に視聴されている。

本成果は、世界で最も精密な心臓シミュレーションを可能としたものであり、今後さらに心臓に関する様々な面での医療応用が期待されている。

成果②: パーキンソン病は、大脳基底核におけるドーパミン欠損により、手足のふるえ(振戦)、筋固縮、動作緩慢、歩行障害などの運動障害を示す神経変性疾患の一つである。その病態の再現のために、**世界最大級の細胞数の脳神経系シミュレーションに成功したNESTと、筋線維の集合体として筋肉の振る舞いを再現するHi-MUSCLE(JBSE 2014)、全身筋骨格シミュレータK-Bodyを、Musicによって統合して行った**(IEEE TNSRE 2015)。ドーパミンの不足から生じる大脳基底核での約15ヘルツの振動を再現することに成功し、そのシグナルが視床で約半分の周波数になり、大脳皮質、脊髄から筋線維へと伝わり、**パーキンソン病特有の手の震えを起こすことを見出すことに成功した**。

本成果は、国立病院機構 刀根山病院の協力により、シミュレーションの結果に関する検証を実施している。今後さらに研究を進めることで、パーキンソン病のメカニズムの解明、投薬と電気刺激のコンビネーションなど最適な処方などの治療法の検証に役立てることができる。



達成目標

大規模生命データ解析を行う基盤を構築する。そして、がんの遺伝子発現データに関する世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析、知見の少ない重要ながん腫について多数の臨床データに基づく解析、ヒトメタゲノムの全ゲノム解析を実施し、医療、創薬に貢献する知見を得る。また、大規模ネットワーク解析により、白色脂肪細胞が、寒冷刺激により大量の熱を産生するアンチメタボ細胞に転換するメカニズムに関する知見を得る。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果①大規模データ解析によるがんのシステム異常の網羅的解析と医療に向けた応用
成果②大規模生体分子ネットワーク解析による脂肪細胞の刺激応答の網羅的解析とその応用

成果①: 600以上の様々ながんの遺伝子発現データと100以上の薬剤に対する感受性・耐性データから、世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析(ソフトウェア: SiGN-L1)を実施し、世界最高精度の個別化抗がん剤投薬基盤を構築した(PLoS One 2014, 2015)。これにより個人ごとの遺伝子発現プロファイルデータからの最適な抗がん剤の予測が可能となった。

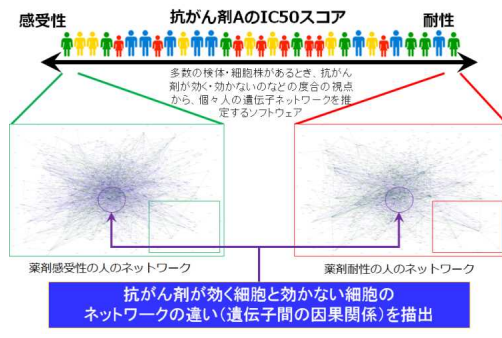
また、過去最大規模の成人T細胞白血病・リンパ腫(ATL)症例(426例)を用いて、大規模オミクスデータ解析(ソフトウェア: Genomon)を行い、ATLのシステム異常の全容を解明するとともに新規治療薬剤の開発に向けた標的候補を発見した(Nature Genetics 2015)。これはがんという極めて複雑なシステム異常を背景とする病気に対する新たな薬剤開発、最適な薬剤処方につながる極めて重要な成果である。

この成果は、薬効、薬剤耐性遺伝子や創薬ターゲット探索などにブレークスルーを喚起し、個別化医療の基礎となる診断技術、オーダーメイド投薬、予後予測などの応用にも貢献するものである。

成果②: 白色脂肪細胞が、寒冷刺激により大量の熱を産生するベージュ脂肪細胞に転換する過程で働く約1万個の遺伝子の制御ネットワークを「京」を使って解析した(ソフトウェア: BENIGN)。ネットワーク解析により、マクロファージが分泌する生理活性物質IL-1βが熱産生を行うベージュ細胞への転換を抑制することを初めて発見した(Cytokine 2016)。

本成果は、「京」による大規模遺伝子ネットワーク解析により、IL-1βという炎症に関与する生理活性物質と熱産生のメカニズムが初めてつながり、白色脂肪細胞がアンチメタボ細胞へ変身する分子メカニズムの全容を解明するという、生命プログラムの解明に方法論も含めたブレークスルーを起こした。

本成果は、脂肪細胞の肥大化を抑制し、糖尿病など生活習慣病を削減につながる成果である。



個人ごとの遺伝子発現プロファイルデータからの最適な抗がん剤の予測

達成目標

高温超伝導、スピン液体やトポロジカル相等の未知の量子相や、従来の枠組みを超える相転移、強い非平衡が生む高励起ダイナミクスなど、強相関電子系の基礎科学を発展させる。特に電子相関が生む創発的新原理の発見、新現象の解明を行い、これに基づく予言と実験検証との間のサイクルで進展を図る。得られた知見をもとに将来の応用に繋がりうる、電荷・スピン伝導における高機能の発見や物質設計を推進する。強相関量子系物性の第一原理予測を可能にする手法開発により研究を加速し、同時に世界の強相関学理・エレクトロニクス研究に資する汎用手法を提供する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果①既存高温超伝導体である鉄系および銅酸化物超伝導体に共通する超伝導の基本発現機構を抽出し普遍性を解明
成果②高機能・可動トポロジカル界面の存在を予言し、予言と合致する実証で、実験とのサイクルと高機能化への研究加速
成果③強相関電子系の第一原理的な物性解明・予測を可能にする汎用手法の開発と改良およびその精度検証

①の成果により、1. 鉄系高温超伝導体の超伝導を含む実験相図を第一原理計算で再現することに初めて成功した。2. さらに鉄系超伝導が密度ゆらぎと相分離を伴う超伝導であることを示し、強相関特有の発現機構を特定した。3. 銅酸化物でも超伝導機構を特定し、鉄系超伝導体との共通性から、強相関高温超伝導の普遍的機構を抽出した。4. 銅酸化物が高温超伝導となる主因である、隠れたフェルミオンが存在するという全く新しい機構を導き、実験的な予言検証を提案し、3.の機構との関連も明らかにした。5. さらに銅酸化物界面に予想外に優れた超伝導特性が見られるという謎が、3.で解明した普遍的な機構に由来する「層間相分離メカニズム」によって説明できることを明らかにした。この結果は、界面がバルクの持つ欠点を克服し、超伝導を増幅・安定化させる理想的なツールを提供することを示しており、今後のデバイス設計指針を与えた。

本成果は30年来の難問である、強相関電子系の高温超伝導の機構の理解を大きく前進させ[1]、それに基づいて超伝導増幅指針を抽出し超伝導研究の展望を切り開いた。

②の成果により、バルク中の磁壁が金属的となってトポロジカルな伝導を担い得ることを初めて予言し、イリジウム酸化物の例で詳細に予測した[2]。トポロジカル絶縁体は、表面のみが頑強で金属的な電気・スピン伝導を持つことからデバイス応用への期待が高まっているが、一方で表面は制御が難しいという問題があったが、その後この予測と一致する結果が実験で実証され、さらにヘリカル金属としての円二色性などの機能特性予言へと発展して計算・実験のサイクルを生み出した。

本成果は、従来のトポロジカル絶縁体表面と異なり、磁場、温度、圧力などで磁壁を動かしたり、存在を制御できることから、新しい機能を持つ伝導・スピントロニクス・記憶素子への展望を与えている。

③の成果により、強相関電子系の第一原理計算の汎用手法(MACE)を提案、改良、普及し、実験家・産業界も使えるアプリケーションをめざして整備と順次公開を始めた。①、②の成果はこの手法開発によって可能になった。さらに非平衡や薄膜・界面の高機能性・優位性解明・物質設計へと展望が開かれつつある。

他に、量子計算につながる量子スピン液体の候補物質の第一原理計算を行ない、スピン液体実現の指針を明らかにした成果、太陽電池高効率化のための散逸利用による常識と異なる探索指針の提案、従来の相転移の常識を変える機構の検証などを含め、基礎科学的に常識を打ち破る成果が新しい潮流を生み、J-PARCや放射光施設の実験との連携も加速した。

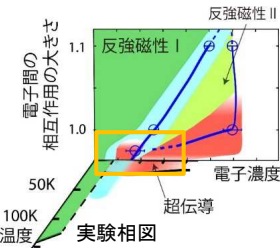


図1: 鉄系超伝導体で得られた計算相図(側面)とこれに一致する実験相図(下面)。

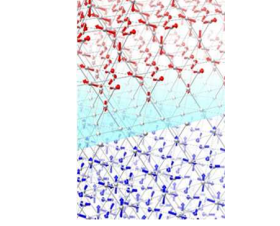


図2: イリジウム酸化物の磁壁。この磁壁に初の金属的可動トポロジカル界面が実現されることを予言し、その後実験で実証された。

関連受賞7件 国際会議開催4件 査読付き成果論文 123編 国際会議基調・招待講演66件

[1] T. Misawa et al. Nat. Commun. 5 (2014) 5738 ; Phys. Rev. B 90 (2014) 115137, S. Sakai et al. Phys. Rev. Lett. 116 (2016) 057003.

[2] Y. Yamaji et al. Phys. Rev. X 4 (2014) 021035.

分野2 研究開発課題2: 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開(課題代表者:神戸大学・天能精一郎)

達成目標

斬新な計算手法の発展と超並列計算環境の援用により、高精度ポストハートリー・フォック計算によるナノスケールの材料設計を可能とし、炭素材料分子やかさ高い官能基による新規な物質の発現原理の解明と設計を行う。新規電子相関理論と複数の物理原理が協働した実在系分子理論により、有機太陽電池や光合成活性中心の機構解明へと発展させる。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果①高精度F12電子状態理論でナノ有機電子材料や分子ベアリングの回転運動の定量的計算を可能にした。
成果②フラグメント分子軌道と新規の強相関理論によりマンガクラスタに対するリガンドとスピン混入効果を明らかにした。

①の成果は、完全基底関数極限を与えるポストハートリー・フォック法であるF12電子状態理論を利用した、ナノスケールの高精度物質計算を可能とした[1]。二次摂動F12法では、無触媒で合成可能なルイス塩基-フラーレン複合体への応用を行い、電子材料として有望な有機物質の候補を幾つか見出した。更に、分子ベアリング(図1)の二種類の回転運動のエネルギー障壁の高精度計算を行い、実験研究者と連携してNMRの温度依存性と回転運動のメカニズムを解明した。グリーン関数F12法の超並列実装では、種々の有機分子のイオン化ポテンシャルを従来の一電子描像よりもはるかに高精度に計算可能となり、重要な電子的性質の一つを大規模分子系においても定量的に算出することを可能にした。

本成果は、分子同士の配向や分子間の距離が重要となる有機薄膜太陽電池や微妙なエネルギー差が分子機械・分子スイッチなどの微視的な構造を決定しているシステムや、物質の安定性や活性の指標であるイオン化ポテンシャルを利用したナノ電子材料分子の設計に有用な高精度計算からの研究指針を与えたという意義がある。

②の成果は、光化学系IIの光合成酸素発生中心(OEC)であるマンガクラスタの電子状態に与えるリガンドとスピン混入の効果を明らかにした。「京」でスピン射影を施したハートリー・フォック(PHF)法を開発し、マンガクラスタの厳密なスピン固有状態での最適化構造を得ることに成功した。これに基づく超微細構造定数は、ENDORスペクトルによる実験値を定量的に再現し、ESRの評価におけるスピン状態の取り扱いの重要性を数値的に示した。又、フラグメント分子軌道法を使用することによってリガンドタンパク質から活性中心への電子移動量とその部位を特定し、定量的な議論に必要なリガンドの領域を明らかにした。更に、従来の量子モンテカルロ法では困難な電子相関の強い物質の励起状態の取り扱いを可能にしたモデル空間量子モンテカルロ(MSQMC)法の開発にも成功した。

本成果は、天然の光合成系における酸素発生の理解のみならず、高効率な光エネルギー変換を目指した物質設計と反応機構に対する計算手段と指針を与えたという意義がある。PHF法とMSQMC法は強相関電子系ソルバとして有用であり、人工光合成における光触媒の候補物質として検討されている多核遷移金属錯体や金属を担持した半導体光触媒の理論設計に繋がると期待できる。

[1] S. Ten-no(Kobe University), J. Noga(Comenius University), Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 2 114-125

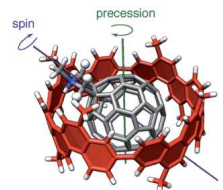


図1: 分子ベアリングの二種類の回転運動

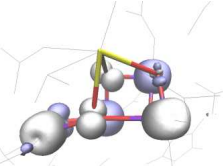


図2: PSIIマンガクラスタ: S₂基底状態スピン密度

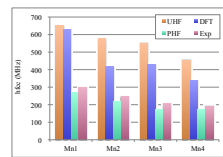


図3: 超微細構造定数(S₂)

分野2 研究開発課題3: 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測(課題代表者:東京大学・押山淳)

達成目標

次世代テクノロジーを支えるナノ材料・構造体に対する、量子論に立脚した大規模・高速電子構造計算を可能にするHigh Performance Computing (HPC) 技術を京コンピュータ上で確立する。それにより、さらなる微細化に突入したCMOS技術およびbeyond-CMOS技術、さらには持続する社会を支えるパワーエレクトロニクス技術の根幹となる材料・構造群、すなわちSi/Geナノ構造、広バンドギャップナノ界面、ナノ原子層材料等での、原子構造と電子機能の相関を解明し、物質科学の先端を切り開くと同時に、次世代テクノロジーの技術基盤の形成に資する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果① 京のアーキテクチャに最適な実空間手法の高度化により、10万原子群量子論電子構造計算に成功
成果② 実空間量子論計算により、SiC表面界面、グラフェン原子層でのナノ形状による新機能の予測に成功

①の成果は、物質科学分野とコンピュータ(情報)科学分野の共同により達成された。マルチコア・超並列アーキテクチャに最適な実空間手法(コード名: RSDFT)に、新たなアルゴリズムを組み込み、行列積計算のBLAS3の活用により、107,292原子から構成されるSiナノワイヤの第一原理計算に成功し、次世代FETチャネル構造であるナノワイヤの形状と電気的特性を解明した(図1)[1]。従来の第一原理計算が、高々1000原子系をターゲットとしていたことに比べると前人未達の成果であり、ナノ構造の電子機能の量子論的解明の道を拓いた。RSDFTコードは、github およびMateriAppsでソースコードが公開されている。また、本成果の核である、物質科学と情報科学の学融合は、新たな学術分野「コンピューティクス」として発展している[2]。

②の成果は、①のHPC技術開発の果実を物質科学分野に適用し、従来は不可能であった大規模な電子構造計算によって得られた[3]。以下に二例を示す。(i) 次世代チャネルあるいは配線材料として期待されている原子層グラフェンは、相対論的方程式に従うディラック電子の存在により、科学的にも注目を集めている。現実的な二層グラフェンの積層ずれにより、このディラック電子が局在化することを発見。これにより、僅かな構造的ねじれを制御することにより、電子機能のスイッチが可能になることを予測。(ii) SiCは堅牢な広ギャップ半導体であり、次世代パワーデバイス材料として有望視。このSiC表面では、ナノファセット構造が自己組織化されるが、その組織化の機構を計算で解明。さらに、ナノファセット構造の端にそった電子雲が出現し、これが磁性を担うことが明らかとなった(図2)。

[1] 2011年度IEEEゴードンベル賞(最高性能賞)を受賞。現在では82,944ノードを用いた10万原子計算で、実行性能5.48PFLOPS(実効効率51.7%)を記録。10,000原子第一原理計算は、京の1%のリソースで数十時間で実行可能。
 [2] 文科省新学術領域研究「コンピューティクス」 <http://computics-material.jp/>
 [3] 実空間手法による物質科学計算は、多数の学術誌での原書論文、国際会議基調および招待講演として公表。

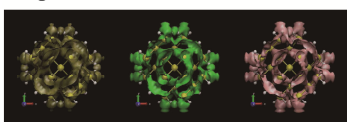
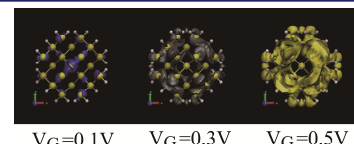


図1 SiナノワイヤFETでのチャネルを流れる電流密度のチャネル断面での分布。ゲート電圧変化により、界面の影響が異なる。

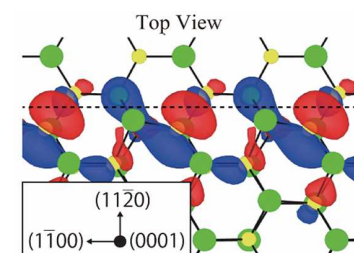


図2 SiC表面ナノステップ端でのスピン新機能を発現する電子状態雲。赤く示した炭素ダングリングボンド雲が磁性を担う。

分野2 研究開発課題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(課題代表者:名古屋大学・岡崎 進)

達成目標

ウイルスの全原子シミュレーションやウイルスタンパク質の全電子計算等を実行することにより、感染機構や免疫機構、また抗ウイルス剤との相互作用などを自由エネルギーレベルで明らかにし、計算科学によるウイルスの分子科学を世界に先駆けて確立する。このため、高並列汎用分子動力学シミュレーションの高度化を完成させ、またFMO法による大規模電子状態計算を完成させる。これにより、分子動力学計算を1,000万原子系で可能とし、また全電子計算を10万原子系で実現する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果① 丸ごと計算により、ウイルスの安定性の分子論的起源や感染初期過程におけるレセプターとの相互作用を解明
成果② 抗ウイルス剤開発に貢献できる開発基盤を確立。1,000万原子系に対する効率的な自由エネルギー計算を可能に

①の成果により、カプシドの内部と外部での水の高速な交換とウイルスの圧力耐性、乾燥に対する不活化の関係を解明した。また、カプシド内の電解液圧力は負の値を示し、empty capsidの不安定性の要因を明らかにした。さらに、感染の初期過程であるレセプターとウイルスの結合において、空気中であれば斥力になるはずの両者間の相互作用が、生理学的な電解液中では引力として作用していることを証明した。この力は弱く、レセプターがウイルスを認識し接近する際には確率的な過程が含まれていることを見出した。

本成果は、人類にとって重要なウイルス研究を分子科学として分子論的に展開することに成功しており、これは世界的にも本研究のみである。

②の成果により、1,000万原子系に対する効率的な分子動力学計算やそれに基づいた自由エネルギー計算、また2万4千原子系の全電子計算を、任意の分子系に対して可能とした。計算の実行は、本課題において開発したMODYLASならびにFMOによってのみ可能である。この技術により、抗ウイルス剤開発の開発基盤が確立され、これまでに、たとえばAMEDプロジェクト「B型肝炎創薬実用化等研究事業」と連携して、B型肝炎ウイルスの逆転写酵素阻害剤のウイルスカプシド内部への薬剤送達の研究へと展開され、抗ウイルス剤開発への貢献が見込まれる。さらに、本技術はウイルスに限ることなく、高分子、界面活性剤など産業的に重要な様々な物質系のシミュレーション基盤としても活用でき、たとえば、ImPACTプロジェクト「しなやかタフポリマー」と連携して、高分子の破壊機構の分子論的解明に向けた研究を展開中である。

その他、企業との共同研究8件。

[1] MODYLAS: A Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation Program for Large-Scale Systems with Long-Range Forces Calculated by Fast Multipole Method (FMM) and Highly Scalable Fine-Grained New Parallel Processing Algorithms, Y. Andoh et al. *J. Chem. Theory Comput.*, 9, 3201(2013).

[2] All-atom molecular dynamics calculation study of entire poliovirus empty capsids in solution, Y. Andoh et al. *J. Chem. Phys.* 141, 165101(2014). 論文誌表紙、featured article, JCP 2015 most read articles in Biological Molecules and Networks, 米国一般誌 Physics Today に紹介記事 2014

[3] 日経など新聞報道6件

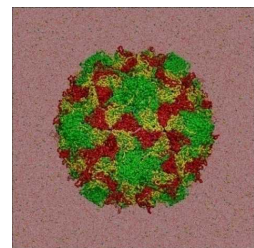


図1 電解液中における小児マヒウイルスの全原子分子動力学計算

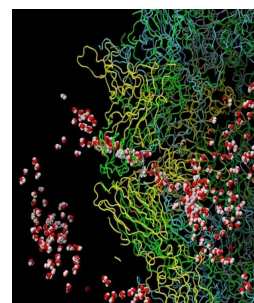


図2 小児マヒウイルスカプシドを横切る水分子の軌跡

分野2 研究開発課題5: エネルギー変換の界面科学(課題代表者:東京大学物性研究所・杉野修)

達成目標

二次電池や燃料電池等の再生エネルギー・デバイスの開発に資する科学を創出する。この目的のために、電極界面における化学エネルギーと電気エネルギーの間の変換にかかわる物質科学過程を、先進のシミュレーション技術を用いて解明する。このことにより、これまで理解が進んでいなかった電極反応と材料物性の関連を明らかにし、その知見を用いて次世代電池の開発に資する材料設計指針を提示する。特に、実験や開発企業と連携したシミュレーション研究体制を構築して、我が国の技術開発の向上に貢献する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果① 二次電池におけるイオン輸送・酸化還元反応・界面保護膜形成の解明とそれを用いた次世代電池機能の示唆
成果② 燃料電池における酸化還元反応の微視的説明とそれを可能にした先進シミュレーション技術の開発

①の成果により、Liイオン二次電池における、電極・電解液界面を通したLiイオンの輸送過程、電解液の還元分解過程、還元分解における添加物の影響(耐久性向上への貢献)、還元分解後の界面保護膜の形成過程が明らかになった。

本成果は実験グループとの共同研究を促し、それが充放電の高速化が可能な電解液の開発につながった[1]。また、計算技術を発展させて第一原理計算と古典分子動力学計算をつなげたシミュレーションを可能にし、それを用いることにより、次世代二次電池の一つであるLi空気電池における電解液の物性と電池機能(充放電速度や劣化反応速度)に関する計算予測をおこなった。さらに、全固体電池における界面抵抗の発現機構の提案なども行った。

②の成果により、白金電極と水溶液界面(モデル触媒界面)における燃料電池反応機構が明らかになった。この研究を可能にするために、電極界面に電位差を印可しそれを制御するためのシミュレーション技術を世界に先駆けて開発し[2]、第一原理計算と反応速度論を組み合わせた先進的研究を展開した。

本成果は、電極界面の科学の発展を目指した実験グループとの連携ならびに、白金代替電極触媒の開発を目指した企業等との連携を促した。また、開発したアプリケーションソフトウェアは、電気化学コンソーシアム(主宰:大谷実)を設立して広く実験・企業研究者に普及させるための体制を構築した。連携研究から、白金電極の面方位と反応活性の関連や、白金代替電極触媒(ジルコニア)におけるドーパントと活性の関連を明らかにし、燃料電池活性向上に資する材料開発に資する知見を得た。

[1] ゴットフリード・ワグネル賞(エネルギーとインダストリー分野)「スパコンの高効率利用によるリチウムイオン電池電解質界面反応の理論的機構解明」が技術革新を重視するドイツ企業と在日ドイツ商工会議所により2008年に創設された財団から与えられた。

[2] First-Principles Molecular Dynamics at a Constant Electrode Potential, N. Bonnet, T. Morishita, O. Sugino, and M. Otani, *Phys. Rev. Lett.* 109, 266101 (2012)等の先進的手法が開発され世界的に注目されている。

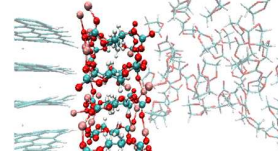


図1:Liイオン二次電池負極界面における界面保護膜(中央部)形成のシミュレーション。左側は炭素電極、右側は電解液。

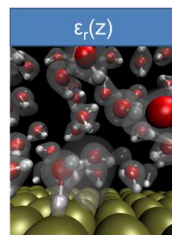


図2:燃料電池負極界面における水素酸化のシミュレーション。下側は白金電極、中央部は酸性水溶液、上側は電位制御のために導入された連続体。

分野2 研究開発課題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(課題代表者: 岡山大学・田中秀樹)

達成目標

分子動力学法を用いたハイドレートシミュレーションを高精度化し、メタンハイドレートや水素ハイドレートの制御に関する知見を得る。これにより、効率的なメタン採取法の探索や水素の安全で安価な貯蔵法としてのハイドレート利用に関する指針を得る。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果① メタン、水素ハイドレートに関する、これまで未解決であった様々な統計熱力学的問題を解決
 成果② 大規模長時間シミュレーションに基づいた、ハイドレート生成融解機構解明によるメタン採取貯蔵実用化への橋渡し

①の成果により、水素やメタンハイドレートの物性を予測するための統計熱力学理論の発展がなされ、実験・測定が困難である高压で生成する水素やメタンハイドレートの熱力学的安定性の計算、籠の中の分子の量子力学的な扱いや多重占有の記述、並びにハイドレートやfilled iceの物性予測が可能となった。

②の成果により、水およびハイドレートの熱力学的生成阻害剤であるアルコールや塩を溶質とする水溶液中での「京」を用いたメタンハイドレート分解過程の大規模長時間シミュレーション、ハイドレート分解における速度論的阻害剤存在下のシミュレーションを実施して、以下の3点の成果が得られた。

- 1)メタン泡生成に至る融解の速度に対する様々な分子レベルの機構を解明 [1]
- 2)熱力学的阻害分子による大きな溶質効果の存在を明らかにして、分解の各過程の自由エネルギーに基づく明確な機構を提示
- 3)速度論的阻害機構を包括的に解析することにより、阻害がエントロピ的引力による吸着に起因することの発見[2]

これらの成果は、海底からのハイドレート採掘や、ガスの貯蔵・輸送過程におけるハイドレート分解の巨視的なモデル作成、阻害機構における官能基の役割の分子論的な理解に基づいた、より自由な発想の阻害剤の設計に資する。

[1] T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, and H. Tanaka, *J. Phys. Chem. B*, **118**, 1900 (2014)

* 上記の成果は同年4月16日の朝日新聞(全国版)に紹介された。

[2] T. Yagasaki, M. Matsumoto, H. Tanaka *J. Amer. Chem. Soc.*, **137**, 12079 (2015))

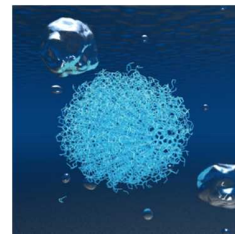


図1 メタンハイドレートが水中で分解する様子

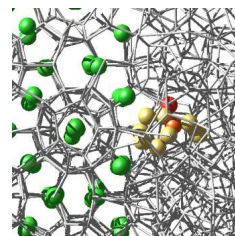


図2 ハイドレート表面に吸着する速度論的阻害剤

分野2 研究開発課題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(課題代表者: 産業技術総合研究所・香山正憲)

達成目標

金属系構造材料は、産業や社会基盤を支える材料である。飛躍的な高性能化のためには、性能を支配する微細組織(異相界面、転位、粒界、合金元素etc.)を原子・電子まで掘り下げて解明することが必要である。大規模第一原理計算(オーダーN法)を用いて、金属材料中の異相界面や結晶粒界、転位の安定構造やエネルギー、それらへの合金元素の効果を電子・原子挙動から解明する。さらにフェーズフィールド法とも組み合わせることで微細組織の構造や性質を明らかにし、優れた構造材料の設計や開発、希少元素代替の研究に貢献する。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果① Fe/TiC界面の整合構造→部分整合構造の遷移の臨界粒子サイズを大規模第一原理計算から初めて解明。析出強化機構の解明と設計に貢献。
 成果② Fe中の転位と各種固溶原子との相互作用エネルギーを大規模第一原理計算から定量的に解明。固溶強化機構の解明と設計に貢献。

①の成果により、鉄鋼材料では、TiC等遷移金属炭化物・窒化物の粒子を析出させ、転位移動の障害にして強化する(析出強化)。析出初期には、Fe/TiC界面は整合界面だが、析出粒子が成長するとmisfit歪のため界面周囲の歪エネルギーが増加し、部分整合界面に遷移する。遷移の臨界サイズが強度設計上重要。部分整合界面の大規模構造(4319原子/セル)の第一原理計算をOpenMXで実現し、界面エネルギーと歪エネルギーの和を整合界面、部分整合界面で比較することで、遷移する析出粒子の臨界サイズの高精度計算に成功した。

Fe/析出物界面は微細組織の主要構成要素で、格子misfitから大規模構造を扱わねばならない。OpenMXは、金属的な系のオーダーN計算を実現させる唯一のコードで、「京」で高度の並列計算を実現することで、金属系の大規模構造の第一原理計算が可能となった。金属系構造材料の微細組織の大規模構造を高精度に解明する道が開けた。フェーズフィールド法等に繋げることでマルチスケール設計技術を確立することが期待できる。

②の成果により、鉄鋼材料では、異種原子を固溶させ、転位移動の障害にして強化する(固溶強化)。Feの転位(らせん転位)と一連の遷移金属や典型元素などの添加原子との相互作用エネルギーをOpenMXによる大規模第一原理計算で定量的に求めた。引力の働く元素についてFeの固溶強化能の実験と合致する。また、元素によっては、低温で変形しやすくする効果(キンク形成を促進)も持つことが分かった。

Feの転位の動き易さへの添加原子の効果を電子構造から解明した値は極めて大きい。相互作用が添加元素の周期表の位置に依存する傾向も見いだされ、相互作用を電子挙動から統一的に理解できる可能性を示唆する。材料科学を新たなステージに引き上げる成果である。合金設計や希少元素代替の有効な添加元素を見つけることへの貢献も期待できる。

[1] H. Sawada, S. Taniguchi, K. Kawakami and T. Ozaki, *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **21**, 045012 (2013)

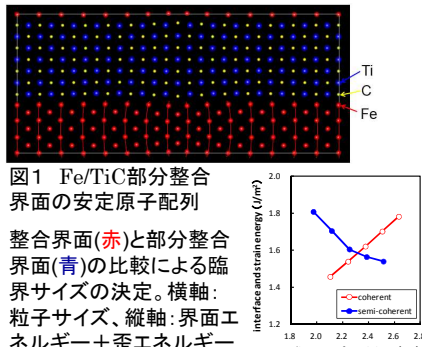


図1 Fe/TiC部分整合界面の安定原子配列
 整合界面(赤)と部分整合界面(青)の比較による臨界サイズの決定。横軸: 粒子サイズ、縦軸: 界面エネルギー+歪エネルギー

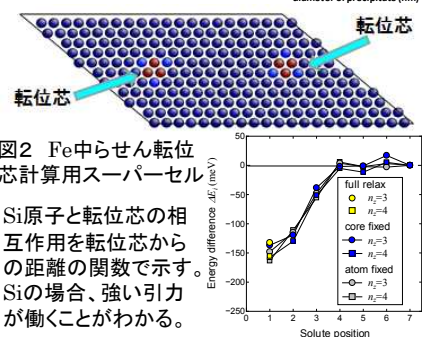


図2 Fe中らせん転位芯計算用スーパーセル
 Si原子と転位芯の相互作用を転位芯からの距離の関数で示すSiの場合、強い引力が働くことがわかる。

分野3 研究開発課題1: 地球規模の気候・環境変動予測に関する研究(課題代表者: 東京大学大気海洋研究所・木本昌秀)

達成目標

全球雲解像モデルを用いたシミュレーションの高度化により、地球温暖化による台風への影響に関する知見を得る。また、同じモデルにより、2週間以上の延長予測可能性について検討する。少数例について地球シミュレータで得られた萌芽の結果を、例数を増やし、科学的知見へと引き上げることを目標とする。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果① 全球雲解像モデル(NICAM)の長期積分により、温暖化時には、強い台風で強風域が拡大することを示した。
- 成果② 熱帯季節内変動の1ヵ月先、台風発生時の2週間先までの延長予測可能性を示した。

① 地球温暖化による台風の変化について、発生数の減少、強い台風の発生数の増加、台風強度の増加、台風に伴う降水の増加という既存の知見を高解像度モデルで再確認するとともに、台風内部の構造変化について、強い台風(中心気圧が980 hPa以下)で強風域が拡大することを見出した。

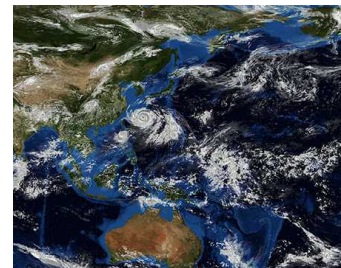
台風の重要な構成要素である積乱雲を直接計算できる高解像度モデルの長期積分により、温暖化時の変化について、台風の強度別に統計的に有意な結論を得た。積乱雲を直接計算する今回の計算で、従来型の気候モデルの結果と同様の傾向が予測されたことは科学的に大きな進歩である。また、台風の構造変化については、今回の計算で初めて見出された。強風域の拡大をもたらすメカニズムについても提案した。また、同モデルを用いて、短期間ながら世界初となる1 km以下の格子の超高解像度の全球大気シミュレーションを行い、個々の雲の表現に必要な解像度や、気象擾乱ごとの雲の形態の違いを明らかにし、世界の気象学界に大きなインパクトを与えた。

本成果は、社会・経済に重大な影響を持つ台風の今後の地球温暖化適応策への貢献が見込まれる。

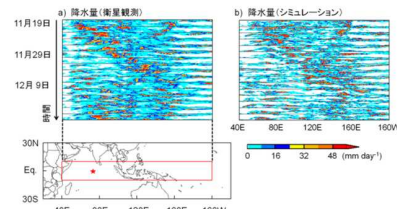
② 2週間以上の延長天気予測について、全球雲解像モデルを用いた多数事例の実験により、熱帯季節内振動またはマッデン・ジュリアン振動(MJO)と呼ばれる熱帯域の巨大雲塊の変動については1ヵ月先まで、西太平洋での台風発生については2週間先まで予測が可能であることが明らかになった。

主に14 km格子の全球雲解像モデルを用いて、2003年以降の約20のMJO事例と、2004年と2007-2012年の約20の台風発生事例について、様々な初期時刻から多数の計算を行った。その結果、MJOについては約1ヵ月先、台風発生については約2週間先まで予測可能であることを実証した。これらの予測スキルは世界最高レベルである。「京」により、多数例の実験が可能になったことで、科学的に有意な結論を得ることができた。

本成果は、熱帯とその影響を受ける中緯度地域での延長予測の可能性を示すものであり、今後、気象庁の予報改善への貢献が見込まれる。



全球雲解像モデルで計算された雲と台風



MJO予測の検証例
赤道上の降水量
経度(横軸)ー時間(縦軸)断面図
(左)観測 (右)シミュレーション

分野3 研究開発課題2: 超高精度メソスケール気象予測の実証(課題代表者: 気象研究所/海洋研究開発機構・斉藤和雄)

達成目標

- ① 4次元同化技術を雲解像モデルに適用し、雲スケールの詳細な観測データを同化して顕著気象現象の力学的な直前予測の可能性を実証する。
- ② データ同化技術とアンサンブル予測手法を適用した雲解像解析予報システムを開発し、顕著気象現象の定量的な確率予測の可能性を実証する。
- ③ 雲解像モデルに用いられている各種物理過程のパラメタ化に伴う誤差を評価するとともに、顕著気象現象の構造・発達過程を詳しく調べる。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

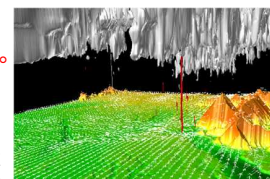
- 成果① 雲スケールの詳細な観測データを同化し2012年のつくば竜巻を伴ったメソ対流系の力学的短時間予測に成功した。
- 成果② アンサンブル解析予測システムにより2012年の九州北部豪雨の定量的確率予測が可能であることを実証した。
- 成果③ 世界に類を見ない超高解像度での数値実験を行い、台風境界層内のロール構造や竜巻の詳細構造を解析した。

台風・集中豪雨・竜巻などの顕著気象現象の予測は、防災・減災上きわめて重要であるが、現在の数値予報の予測精度は十分ではない。これらの問題を克服するには、高精度の雲解像モデルの開発と、データ同化を用いた初期値の高精度化が非常に重要である。また十分なリードタイムを確保した予測には、初期値や数値モデルの誤差を考慮したアンサンブル予報が欠かせない。

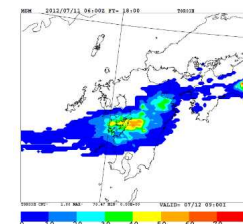
① 通常の観測データに加え、二重偏波ドップラーレーダのデータと稠密な地上観測データを、水平格子間隔350 mで、雲解像アンサンブルカルマンフィルタを用いて高頻度で同化し、2012年5月のつくば竜巻をもたらしたメソスケール対流系の再現に成功した。これらのデータを用いることにより、竜巻に対応するメソサイクロンの位置が改善することを示した。水平格子間隔50 mのダウンスケール実験では竜巻と言ってよい強い渦も表現された。このレベルで観測データを同化して、実際に被害を出した竜巻を再現したのはおそらく世界初であり、将来の、局地豪雨に関する現業的な力学的短時間予測に向けた画期的な成果である。この目標では、将来の実用化も見据えた先端的なデータ同化技術についての開発も大きく進展した。

② 非静力学モデルと局所アンサンブル変換カルマンフィルタに基づく領域解析予測システムを開発し、豪雨事例に適用した。平成24年7月九州北部豪雨の例を対象に、アンサンブル予報に基づいて3時間降水量が50 mmを超える確率分布を求めた。24時間予報で50%程度の確率で豪雨が捕捉され、リードタイムを持った顕著気象現象の確率予測の可能性を実証した。顕著気象現象の確率予測は遠くない将来、気象庁の現業予報に必要となることが確実な技術であり、実用上も大きな成果である。この目標では、台風強度予報の改善のための技術開発と数値モデルによる検証、2013年の伊豆大島や2014年の広島での豪雨事例を対象とする超高解像度の数値予報も行い成果を挙げている。洪水や土石流についての水文モデルの開発なども大きく進展した。

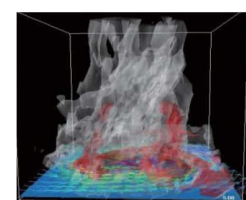
③ 2012年5月6日に発生したつくば竜巻の事例について、水平格子間隔10 mでの再現実験を行った。現実の竜巻事例に関する世界最高解像度の実験であり、竜巻渦の多重渦への変化や詳細構造について多くの知見を得た。この目標では、台風全域を対象とするLES実験も行い、境界層内のロール構造などについての知見を得た。ピン法雲物理過程モデルの開発なども大きく進展した。



雲解像データ同化によるメソ対流系の直前予測



九州北部豪雨についての大雨確率予測分布図



格子間隔10 mの超高解像度実験による竜巻の詳細構造

分野3 研究開発課題3: 地震の予測精度の高度化に関する研究(課題代表者:東京大学地震研究所・古村孝志)

達成目標

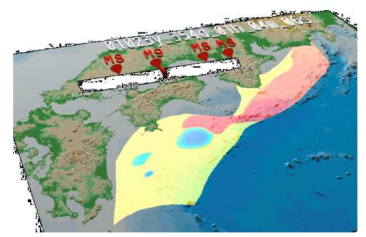
地震・地殻変動観測データと、「京」を最大限に活用して、日本周辺で起こる大地震の緊迫度・発生確率と、地震の多様な発生・連動パターンを詳しく評価するとともに、大地震発生直後に、次の地震の連動・誘発が起こる過程を、観測データのモニタリングに基づき予測する防災シミュレーション技術を開発する。海溝型巨大地震に伴う、短周期から長周期までの強震動と地殻変動、津波の発生を時間を追って予測し、多様な構造物を有する現代社会の複合災害を的確に評価して、現実的で費用対効果の高い防災対策に役立つシミュレーション技術を確立する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果① 南海トラフで起こりうる地震シナリオの詳細評価と、海・陸地殻変動観測に基づく地震緊迫度、次の地震の誘発・推移の予測可能性を提示した。
 成果② 有効かつ費用対効果の高い防災施策に貢献できる、巨大地震発生に伴う広帯域強震動・地殻変動・津波の同時予測手法を確立した。

①の成果により、30年以内の発生確率が70%と緊迫度が高く、かつ人的・経済的影響がきわめて大きい南海トラフ巨大地震について、その多様な連動発生パターンの可能性を、高度な地震・測地学に基づくシミュレーションから推測することに成功した。日本が世界に誇る海・陸の地震・地殻変動観測網のリアルタイムデータを用いてプレート境界の状態をモニタリングすることで、巨大地震の緊迫度の予測と、地震後の地殻変動(余効変動)データを同化して推移予測を行うシミュレーション技法を開発し、誘発地震・連動地震への推移予測の可能性を提示した。本成果により、これまでの、史料や地質データなどの限られた経験に基づく地震発生予測に代わる、シミュレーションに基づく大地震発生予測の方法を提示した。さらに、地震発生の多様性の知見が格段に高まったことや、多数の地震シミュレーションに基づいて、**地震発生とその連動条件を、確率という指標を導入して適切に評価できるようになる**など、**日本の高精度地震観測と大規模シミュレーションに基づく独自の地震発生予測の方向性を導いた。**



「京」で予測された、南海トラフ巨大地震の発生シナリオ

②の成果により、海溝型巨大地震に伴って発生する、**短周期から長周期までの強震動と地殻変動、津波を一つのシミュレーションで同時に評価する手法を世界に先駆けて開発した**ことで、**巨大地震に伴う諸現象が複雑に相互関連した、現実的な複合災害の予測を可能にした**。本成果は、南海トラフと日本海溝沿いに現在敷設中の海底ケーブル地震・津波計で捉えられるリアルタイム観測データを活用した防災システムの事前検証に役立てられた。さらに東北地方太平洋沖地震の再現シミュレーションを通じて、**海溝付近の浅部断層運動による巨大津波の発生原因の解明に大きく貢献した**。同時に実施した地下構造モデル推定シミュレーションの結果と、上記①の成果を合わせることで、南海トラフ地震の多様な地震発生シナリオに対する地震・津波被害の可能性について、地震の不確実性に伴うパラツキを含めた評価が可能になった。本成果は、地震防災に向けた建物の耐震化や避難計画において、不確実性が大きいことによる過度な想定を回避し、**費用対効果が高く確実な防災対応につながる適切な想定の設定に貢献するもの**と期待される。



予測地震シナリオに基づく、強震動・地殻変動・津波の同時シミュレーション

分野3 研究開発課題4: 津波の予測精度の高度化に関する研究(課題代表者:東北大学災害科学国際研究所・今村文彦)

達成目標

津波の波力を考慮した津波ハザード予測法を開発するとともに、漂流物・土砂移動・海面変動など複合的な津波被害の予測手法を開発し、複合的な影響を考慮した津波被害予測を可能とする。さらに、津波被害の軽減対策のための基礎データを作成し、津波予・警報システムの改善および津波災害の軽減戦略の策定に資する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

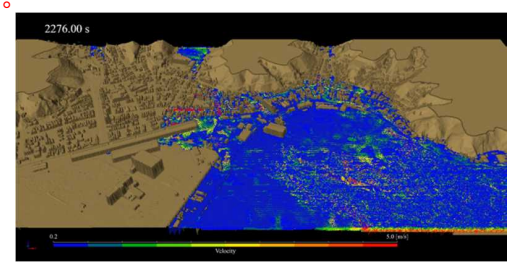
成果① 詳細な陸上地形を用いた遡上および波力などの評価を含む津波ハザードの高精度モデルを提案した。
 成果② 津波氾濫・漂流物移動・土砂移動を複合的に予測・評価する津波統合モデルを開発した。

① 従来の津波氾濫計算モデルであるTUNAMI-N2の「京」への移植・最適化により、**27.3%の実行効率を達成した**。適用事例として、仙台平野を5 m格子でモデル化した2時間分の津波浸水解析が2分以内で計算できることを示した。また、階層型津波シミュレータ(STOC-CADMAS)およびSPH法による3次元流体計算の大規模並列の効率化(動的負荷分散)に成功するとともに、**構造・流体連成解析プログラムと避難シミュレーションの連成解析手法を開発した**。

以上の成果により、津波の遡上や建物毎に作用する津波波力を従来よりも格段に高精度に評価することが可能となった。これによって、**様々な状況における被害の最適な予防・低減、避難計画を検討できるシステムが構築され、人的・物的被害を最小限に食い止めるための具体的で詳細な対策を支援できると期待される**。

② 津波による複合的な被害への対応としては、**津波による漂流物の移動や衝突、土砂移動による浸食・堆積に伴う地形変動などを高精度に予測する手法(統合モデル)を世界で初めて開発した**。さらに、現地被害(気仙沼)の再現計算に成功したことにより、**複合的な影響を考慮した津波被害予測の可能性が大いに高まった**。

これにより、**瓦礫などの漂着物の分布、津波堆積物の発生量の推定が可能となり、複合被害の予防措置や事後の対応計画の策定に貢献するデータを提供できる**。さらに、津波複合被害に対するハザード・防災マップの作成を支援するとともに、リスクコミュニケーション・防災啓発・教育へも活用できる。現在、被災地である気仙沼市において、一般参加型のワークショップを企画中であり、その中で、リスクコミュニケーション・防災啓発を図るために、**統合モデルのコンピュータグラフィックス(右図)を活用する予定である**。



2011年東北地方太平洋沖地震による津波の釜石市の再現計算(高解像度3D計算により津波波力を高精度に評価する)



2011年東北地方太平洋沖地震による津波の気仙沼市の再現計算(複合的な被害である津波土砂移動と船舶漂流の連成解析)

分野3 研究開発課題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 (課題代表者: 東京大学地震研究所・堀宗朗)

達成目標

地震による都市災害シミュレーション、都市内全建造物の応答に基づく被害シミュレーション、そしてその結果を受ける避難シミュレーションのプログラムをそれぞれ「京」用に開発する。さらに、開発したソフトを結合し、実際の都市を対象としたシミュレーションを実施し、これまで不可能であった、シミュレーションに基づく地震ハザードマップの構築に必要な基盤技術を開発する。

成果内容と科学的・社会的意義

成果① 超大規模解析モデルと「京」を使うことで、E-ディフェンスでの耐震実験の再現に成功した。
 成果② 「京」の全系までスケーリングする、都市全域の地震動を計算する数値解析手法を開発した。

①の成果により、1,000万超のソリッド要素を使う解析モデルの非線形地震応答解析が実行可能であること、実験との比較により解析が有効であることを示した。「京」で初めて可能となった、詳細な解析モデルを使う大規模数値計算によって、建造物の耐震性を高い時・空間分解能で評価できることは、地震工学にとって大きな意義を持つ。

科学技術上の革新性: 材料・幾何非線形に対応する動的有限要素法を開発した。E-ディフェンス(大型震動台)を使った実験との比較などから、開発した有限要素法の有用性を示した。

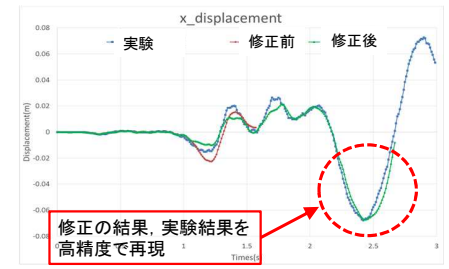
社会的インパクト: 原子力発電所建屋のような重要建造物の耐震性の評価に関して、「高性能計算による地震応答解析」を適用していくという、実用に向けた取組みに繋がっている。

②の成果により、物理過程などのシミュレーションに基づく地震ハザードマップの構築に必要な基盤技術を開発した。従来の経験式に代わる、科学的合理性の高いシミュレーションに基づく手法は、都市全域の地震動・被害推定を一新することが期待される。

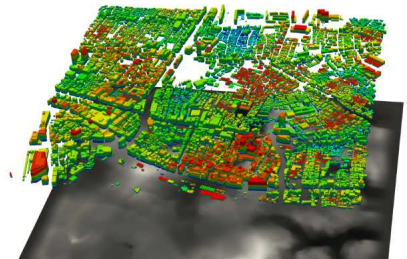
科学技術上の革新性: 東京23区内の10 km四方の領域を対象とした計算に成功し、10 Hzと1 mという高い時・空間分解能の地震災害・被害の評価を例示した。大規模数値計算による物理過程などのシミュレーションに基づく災害・被害評価手法の潜在的有効性を示した。「京」の全系を使う優れた計算性能は計算科学の分野でも高く評価された(SC14とSC15で、2年連続してゴードン・ベル賞の最終候補となった)。このため、ポスト「京」に向けた実用化を目指す研究が開始された。

社会的インパクト: 実際の都市に対し、物理過程などのシミュレーションに基づく地震ハザードマップは、首都直下地震や南海トラフ地震への備えが必要な日本にとって、より合理的な地震防災・減災に繋がることが期待される。また、群集避難が象徴する地震被害への対応に関する社会科学のシミュレーションの有用性が示されたことも重要である。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



E-ディフェンス実験で計測された建造物の地震応答の再現



東京を対象とした地震動と建物地震応答の連成シミュレーション

分野4 研究開発課題1: 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率・低騒音化に関する研究開発 (課題代表者: 東京理科大学・藤井孝蔵)

達成目標

マイクロデバイスによる流体制御を「新たな流体機器設計の概念」として提案、数値シミュレーションによって高い有効性を実証することで、流体制御技術確立し、将来の機器設計の指針を示すとともに実用化に向けた道を示す。

成果内容と科学的・社会的意義

成果① 概念・初期設計段階におけるHPC利用による高度な数値シミュレーションの必要性を実証した。
 成果② 流れ制御の鍵となるメカニズムを世界で初めて明らかに、条件に応じたデバイス実利用の指針を提供した。
 成果③ 産業界と連携した実利用展開を通じて、本技術が流体機器設計変革のポテンシャルを有することを示した。

①の成果

京を利用したシミュレーションにより、既存の手法では正しく評価できなかった流れメカニズムを明らかにした。本研究課題の対象であるマイクロデバイスが高い流れ制御性能を発揮するのは、流体の持つ非線形性を上手に利用していることに起因している。企業等に広く普及している乱流モデルを利用した解析ではその効果を正しく評価できない。一連のシミュレーションを通じて、このような将来型デバイスに関しては、概念・初期設計段階においても、簡易モデルではなく「HPC等を利用する高度な数値シミュレーション」が必要であることを示した。(Philosophical Transaction A(2014) など)

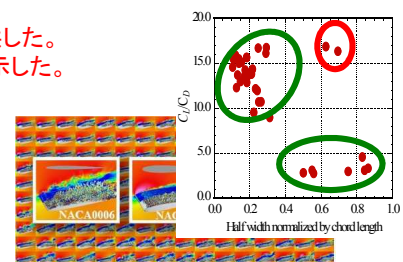
②の成果

実形状を対象とした圧倒的な空間高解像度手法(世界中で数カ所のみが有する技術)を利用し、京による大規模かつ多数のパラメトリックスタディを行った。これまで見えなかった制御パターンの存在が明らかになることで、3つの流れメカニズムが存在し、それが本マイクロデバイスが高い制御能力を発揮する背景にあることをはじめて明らかにした。さらに、その知見を元にして、世界ではじめて流れと形状に応じた制御デバイス設定指針を明示、産業界における本デバイスの利用ガイダンスとした。(5件の国際会議基調講演、海外先端研究者3名による国際レビュー、Fluid Science Award、APACOM Senior Scientist Awardなど)

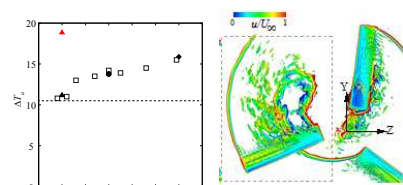
③の成果

企業と連携して、当該デバイスを利用した各種流体機器の実利用シミュレーションを実施した。航空機の翼型の失速時性能向上(小型においてデバイス不利用時の5倍以上、大型において2倍程度)風力発電機器の性能向上(小型実験機器で20%程度)、小型ファンの性能向上などの効果があることを示した。流路損失の低下、自動車への適用なども示しつつある。上記の知見が活かして、応用先となる各企業との共同研究(別途実施)の元で、現在試験や実験が進行中である。(TBS番組「夢の扉」など)

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



実験による予測の実証(緑枠内)に加え、別の現象(赤枠内)が当該デバイスの制御効果を高めていたことが多数大規模シミュレーションによってはじめて明らかになった。



小型回転機器への適用: 実験データを再現するとともに成果②を活用した特定パラメータを利用することで大幅な性能改善が見られた。

分野4 研究開発課題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 (課題代表者: 物質・材料研究機構・大野陸央)

達成目標

非シリコン系新規材料の次世代ナノデバイス応用への計算科学的評価とナノ界面構造・形成プロセスの最適化指針を構築することを目指す。また新規ナノ材料探索に関する解析手法、方法論等の知識基盤を構築し産業界が使える形で提供することを図る。

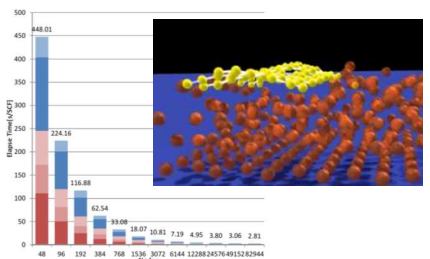
成果内容と科学的・社会的意義

- 成果① 次世代ナノデバイス材料のプロセス最適化における実温度ダイナミクス解析の重要性を実証した。
- 成果② SiC酸化膜界面構造を初めて明らかにし、SiCパワーデバイス界面構造の最適化指針を提供した。

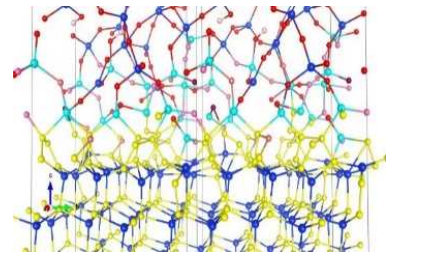
①の成果
第一原理分子動力学プログラムを「京」計算機に対して最適化して、全82,944ノード利用で2.25 PFLOPS (効率21.6%)の高い実行性能と全ノードまでの強スケーリング性を実現し、高効率な大規模ダイナミクス解析を可能とした。最適化したプログラムを用いて、グラフェンの成膜プロセス(金属表面でのCVD成長法、SiC基板の熱分解法など)の実成長温度でのダイナミクス解析を実施し、従来型の絶対零度での静的な解析とは大きく異なるプロセス特性を明らかにした。この成果は、グラフェンをはじめ、次世代ナノデバイス材料のプロセス最適化のためには実温度でのダイナミクス解析が重要であること、また解析ソフトウェアが有効であることを示したものである。解析ソフトウェアPHASE/OIは、プログラム公開、利用講習会開催、などの普及活動を通して、「京」産業利用枠での利用をはじめ、産業界、大学、研究機関などでの利用が進んでおり、デバイス開発現場でのシミュレーション活用を促進するものと期待される。(Japanese Journal of Applied Physics (2014) など)

②の成果
東芝研究開発センターとの共同研究のもとで、SiCパワーデバイスにおけるSiC酸化膜形成プロセスに対する実プロセス温度での大規模・高精度な第一原理ダイナミクス解析を実施した。その結果、SiC酸化膜界面に関して従来想定されていなかった新規な欠陥構造及び酸化プロセスを見出し、SiCのデバイス応用に資する有益な知見を得ることに成功した。SiCパワーデバイスは、電気自動車、太陽電池などあらゆる電力機器の電力変換器に利用し、電力損失を大幅に低減することが期待されている。この成果により、SiCパワーデバイスの開発における重要な技術課題である欠陥の少ない良好なSiC酸化膜界面を作製する指針を提供し、SiC酸化膜に関する特許出願に繋げることができ、SiCパワーデバイス開発の加速に貢献した。(特許出願2015年7月29日、他に特許出願手続き中、日刊工業新聞2015年4月20日号に掲載 など)

緑: 科学的成果 青: 実用的成果



第一原理プログラムPHASE/OIは「京」全ノードまでの優れた並列性能を示し、グラフェン成膜プロセスの実温度でのダイナミクス解析により静的計算では獲得できない特性を明確にした。



実温度によるダイナミクス解析により、SiC酸化膜界面における従来想定されていなかった欠陥構造をはじめて明らかにし、層状酸化による欠陥低減の可能性を提示した。

分野4 研究開発課題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 (課題代表者: 東京大学生産技術研究所・加藤千幸)

達成目標

最大1000億グリッドの計算格子を用いて、複雑な形状を有する機器まわりの乱流の直接計算を実現する。これにより、計測(風洞試験・水槽試験等)と同程度以上の精度で製品の性能や信頼性を予測する。

成果内容と科学的・社会的意義

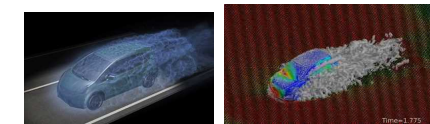
- 成果① 自動車の空気抵抗を対風洞実験値に対して誤差2%以内で予測する技術、並びに実走行状態を模擬できる車両運動連成解析システムを構築
- 成果② 船体まわりの乱流の直接計算により水槽に匹敵(誤差1%以内)の船体推進抵抗予測技術を確立
- 成果③ 実機燃焼器の出口における温度およびNOx濃度をそれぞれ10%、30%程度以下の精度で予測可能な数値解析技術を確立

①の成果
非構造格子に基づく大規模非定常乱流シミュレーション技術を確立し、自動車運動との連成解析システムを開発した。これにより実車複雑形状に対して数十億セル規模の空力解析を実現し、対風洞実験値に対して誤差2%以内で空気抵抗を予測することに成功。また車両運動と空力解析を連成させると、従来の風洞実験では難しかった横風時の安全性や操縦安定性予測を可能とした。(米自動車学会論文集2編(2014年4月))
現在、自動車OEM、サプライヤー14社で構成するコンソーシアムで、実用化を目指した検証が進められている。(2014.2.3 産経新聞朝刊 空気のカ予測 新車開発、2015.10.4 サイエンスZERO(NHK Eテレ)など)

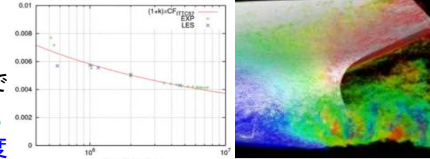
②の成果
従来の船体の推進抵抗の予測では船体タイプ毎に乱流モデルのチューニングが必要であったが、本研究では船体まわりの渦を直接計算することによりモデルチューニングの必要のない抵抗予測技術を開発した。300億グリッド(世界最大規模)の計算により船体抵抗を予測し水槽試験に匹敵(予測誤差1%以内)する精度を実証。(Compt Award 2015の受賞)一般財団法人日本造船技術センターを中心に水槽の一部代替を目指した実用化のための検証も同時に進められている。(2015.2.2日刊工業5面もの乱流「京」で計算)

③の成果
実機、実圧のガス燃焼、噴霧燃焼、および石炭燃焼の燃焼器を対象に、温度、NOx濃度、およびすす濃度を高精度で予測可能な数値解析技術を開発した。燃焼器の出口における温度およびNOx濃度をそれぞれ10%、30%程度以下の精度で予測可能であることを実証。(日本燃焼学会論文賞やコージェネレーション・エネルギー高度利用センター コーエネ大賞 特別賞(技術開発部門)の受賞)日本燃焼学会において、産学連携研究事業の燃焼解析プラットフォームとしての検討が進められている。(ASME Turbo Expo 2015など)

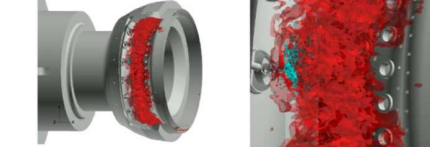
緑: 科学的成果 青: 実用的成果



高精度空力解析 提供: 理研、ホンダ、神戸大、北大
横風運動挙動解析 提供: 日産、神戸大、北大



推進抵抗の比較 提供: 一般財団法人
船体まわりの渦構造 提供: 日本造船技術センター



JAXA航空エンジン用アニュラ燃焼器(噴霧燃焼) 提供: 京大, JAXA

分野4 研究開発課題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(課題代表者:宇宙航空研究開発機構・大山聖)

達成目標

大規模多目的設計最適化問題のための多目的設計探査手法を開発するとともに、京を用いた大規模多目的設計探査が実問題において設計開発を革新できることを実証する

成果内容と科学的・社会的意義

成果①……大規模多目的設計最適化問題のための多目的設計探査手法を開発
 成果②……開発した多目的設計探査手法を用いて、実問題において京を用いた多目的設計探査の有効性を実証

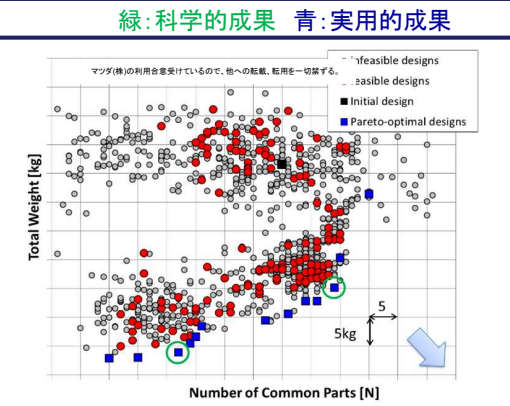
① 大規模並列計算可能な世界初の多目的設計最適化アルゴリズムCheetahなどを開発。現在世界で最も性能が良いと言われている手法の一つであるMOEA/Dよりも性能がよいことを実証。(進化計算学会誌2015, 国際会議ALALCI2016で基調講演)HPC/PFとして一般にも公開。新しい概念を用いて大規模データを効率的に分析するアプリSPMを開発。現在18社9大学で利用されている。また多数目的設計最適化問題を応答曲面法を用いて効率的に解くための新しい探査指標を開発。(Mathematical Problems in Engineering 2015)

②においては、宇宙航空研究開発機構が抱える実設計問題(ロケット射点形状空力音響設計および深宇宙探査機DESTINYの軌道設計)、マイクロデバイスの代表であるプラズマアクチュエータ設計、産業界における実設計問題において京を用いた多目的設計探査が設計開発を革新できることを実証した。産業界における実設計問題での成果を下記に示す。

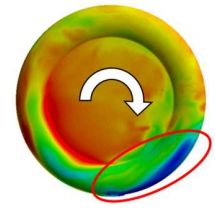
(1)マツダとの共同研究として、車両構造の多目的設計探査を実施。従来よりも短期間で優れた設計が多数発見され、車両構造重量最小化と共通部品点数最大化の間のトレードオフ関係が初めて明らかにされた。また、得られた知見により、大幅な開発・製造コストの削減と、重量を削減したことによる燃費の向上及びCO2排出量の削減が見込まれている。(2015.2.16 日刊工業新聞5面最適解を「京」で分析)

(2)東海旅客鉄道との共同研究として、現在開発中の超電導リニアの空力音響多目的設計探査を実施。得られた知見により、車内騒音を低減しつつ、0.1%程度の空気抵抗を削減できることが期待され、これにより超電導リニアの運航経費の削減が見込まれる。(神戸産業メッセ2015で発表)

(3)横浜ゴムとの共同研究として、自動車用タイヤ空力形状の多目的設計探査を実施。その結果、抵抗と同時に揚力も低減できる形状に関する革新的な知見を得ることに成功。これにより自動車の燃費の向上及びCO2排出量の削減が見込まれている。(横浜ゴムからニュースリリース(2015.10.15)とともに試作品が2015年の東京モーターショーで公開)



自動車車両構造設計: 従来設計よりも優れた設計を多数発見するとともに、共通部品点数最大化と重量最小化の間のトレードオフを示すことにはじめて成功



自動車用タイヤ空力形状設計: 空気抵抗と揚力を同時に低減できる画期的な形状を発見。右図は東京モーターショー2015で展示された試作品

分野4 研究開発課題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(課題代表者:日本原子力研究開発機構・中島憲宏)

達成目標

強固な産学官連携体制の下、大型プラントのものづくりで必要とされる、実験では不可能な詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術(丸ごとシミュレーション技術)を研究開発し、開発した技術の機能確認と動作検証及び具体事例での適用実証を行う。

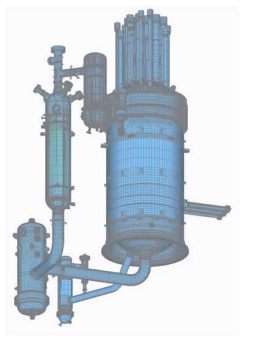
成果内容と科学的・社会的意義

成果① 詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術(丸ごとシミュレーション技術)を組立構造解析技術により実現
 成果② プラント全体での俯瞰的な耐震裕度評価、各部ごとの詳細な評価技術を実現し、観測値と計算解を具体的に照合

①の成果により、従来ボトルネックとされた大規模構造物の入力データ準備過程を、部品ごとに集積解析する技術[1]により簡略化するとともに、従来はプラント規模を扱う場合、周波数領域で計算した結果を時刻歴に変換して観測値と比較する術しかなかった方法論を、京を用いることにより時刻歴における観測記録との照合を直接的にできるように、初めて可能とした[2]。

②の成果により、従来の保守的な解析結果に加えて、安全性や健全性を具体的かつ合理的に説明可能になった[3]。

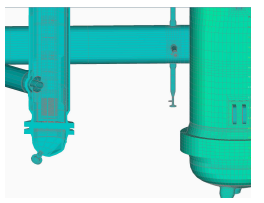
緑: 科学的成果 青: 実用的成果



高温工学試験研究炉の時刻歴応答解析結果

本成果の意義は、従来の保守的な解析に加えて、一層合理的な俯瞰的かつ詳細な解析が有効であることを示せたことにあり、本成果によって従来の計算結果の信憑性を高めるための有効な手段となったことにもある。当該成果である①と②から、詳細な計算結果は、高温工学試験研究炉の安全審査申請活動等の補助資料として活用されたことから、事業上有意義と認知されたとともに、その技術的意義や安全分析/評価上の技術的意義も示せた。

本技術は、原子力分野で実践する前に、一般社会インフラ・プラントの機器や石油化学プラントにおいて技術的实践を行い、その具体的な設計案において検証するとともに、有効性を確認した[3, 4]。今後このような産業界との連携を継続し、更なる波及効果として国際競争力強化につなげられるような共同研究等を新たに立ち上げていく。



高温工学試験研究炉の機器内の挙動可視化

高温工学試験研究炉が今後、再稼動していくことになれば、その過程で補助的に示してきた計算の成果の有効性が一層、認知されることになり、その安全性や健全性分析における社会的インパクトは大きく、原子力施設の抱える社会的課題解決への貢献の一助となっていくと考えられる。

[1] Structural analysis for assembly by integrating parts, ICON-22, 30251, 2014
 [2] Time domain response analysis for assembly by integrating components, Transactions of SMiRT-23, 377, 2015
 [3] Numerical modeling assistance system in finite element analysis for the structure of an assembly, ICON-23, 1136, 2015
 [4] 2015年2月10日化学日報(一面)、2015年2月12日日刊工業新聞朝刊13面

分野5 研究開発課題1: 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定(課題代表者:理化学研究所・初田哲男)

達成目標

平成27年度末には、格子QCDシミュレーションによるハドロン質量の計算精度を1%に引き上げる。さらに、バリオン間の中心力やテンソル力の決定、エキゾチックバリオンに対する予言を行う。

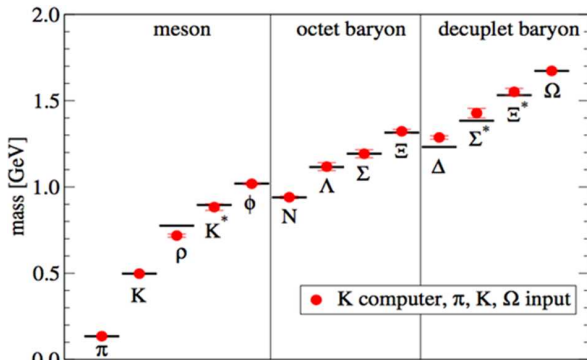
緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

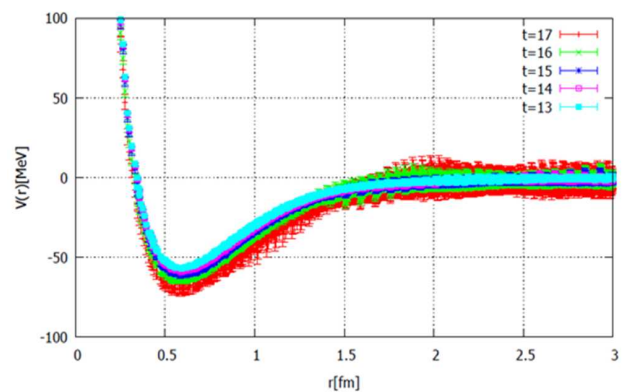
- 成果① 世界最大級の物理体積でゲージ配位を生成し、ハドロン質量の精密決定(計算制度1%)に成功。
- 成果② 世界最大級の物理体積でバリオン間の中心力・テンソル力の計算による決定、エキゾチックバリオンの予言にはじめて成功。

①の成果により、世界最大級の物理体積(一辺が8.2fm)かつ物理点近傍(パイ中間子質量146MeV)でのQCDゲージ配位が生成され、ハドロン質量について1%の精度での定量的予言が可能になった。本成果は、京を用いて初めて可能になった大規模計算であり、生成されたゲージ配位は、ハドロン質量だけでなく、ハドロンの電磁的性質やハドロン間相互作用を定量的に計算する上での基礎データとなっている。

②の成果により、世界最大級の物理体積かつ物理点近傍でのバリオン間相互作用が世界で初めて求められた。核力・ハイペロン力については、その中心力とテンソル力成分が統計誤差の範囲で有意に導かれたと同時に、最も多くストレンジネスを含むダイバリオンである $\Omega\Omega$ 系に束縛状態があることが示された。本成果は、京を用いて世界で初めて可能になった計算であり、原子核物理学・ハイパー核物理学の基礎を与えるだけでなく、国内外の加速器実験に対して有用な予言を与えている。



① 京を用いたハドロン質量の計算値(赤)が実験値(黒)を完全に再現



② 京を用いて精密決定された $\Omega\Omega$ 相互作用と $\Omega\Omega$ 束縛状態の予言

分野5 研究開発課題2: 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用(課題代表者:東京大学理学系研究科・大塚孝治)

達成目標

京に向けた大規模量子多体計算コードを開発し、大規模量子多体計算によって、中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造の進化を明らかにする。元素合成過程の解明、長寿命核分裂生成物、二重ベータ崩壊核、という応用につなげる。さらに、いまだ未開拓な3体核力の姿を明らかにする。軽い原子核の第一原理計算においては、20個程度の核種の計算を、より困難なものを加え40個程度へ広げる。

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

成果内容と科学的・社会的意義

- 成果① 核廃棄物処理に問題となる長寿命核分裂生成物核種の基礎データ計算・原理実証研究に成功。
- 成果② 中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造とその発現メカニズムを解明し、核力中のテンソル力成分や3体力の役割を明らかにした。
- 成果③ 軽い原子核の第一原理的な構造計算の適用領域を拡大、クラスター構造の発現・消滅メカニズムを解明。

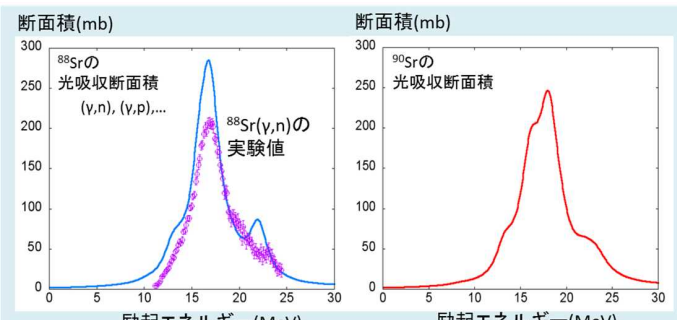
成果①においては、長寿命核分裂生成物(79Se, 90Sr, 93Zr)の電気的励起モードによる高い励起エネルギーへの光吸収過程の断面積の計算に成功した。当初計画ではエネルギーの低い状態の計算のみが考えられていたが、全く新しい方法を見出して、高いエネルギーの連続状態に対応する励起スペクトラムの計算ができるようになったのは、当初計画になかった成果である。

本成果は、将来的には、得られた基礎データの提供により、核変換研究の様々な局面に貢献が期待される。

成果②においては、中性子過剰ニッケル同位体などの構造計算に成功し、三つの原子核の形が同時に低エネルギー領域に現れる「形の共存」現象と、それを引き起こすメカニズムを解明した(Physical Review C 2014)。核力中のテンソル力成分が主要な役割を果たしていることを示し、「第2種殻進化」という概念を提唱した。また、カルシウム48のゼロニュートリノ二重ベータ崩壊の核行列要素を求めた(Physical Review Letters 2016 印刷中)。さらに、新しい多体摂動計算手法により、3体力効果も含めて有効相互作用を第一原理的に計算する新しいアプローチを確立し、中性子数20近傍の中性子過剰核の「反転の島」の記述に成功した。

以上の成果は、中性子過剰核の元素合成「r過程」の解明につながるものである。また、ゼロニュートリノ二重ベータ崩壊の核行列要素を得たことは、ニュートリノの質量決定、マヨラナ粒子性の解明につながる。

成果③においては、現時点でネオン20までの41個の核種についての計算を完了した。当初目標では、6主殻模型空間までの計算だったが、一部7主殻模型空間までの計算に届いた。有限サイズの模型空間から無限に広い空間でのエネルギー期待値の推定を可能とする方法を得た。これらの計算を用いて、ベリリウム同位体のクラスター構造解明をおこなった。



上図は光吸収断面積の計算例(原理実証研究の成果) 右側にあるストロンチウム-90は長寿命核分裂生成物の一つ

分野5 研究開発課題3: 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明(課題代表者: 京都大学・柴田 大)

達成目標

- (1) ニュートリノ加熱機構を考慮した空間3次元のニュートリノ輻射流体計算によって、これまで再現されていない重力崩壊型超新星爆発過程を解明する。
- (2) 一般相対論的な磁気流体計算や輻射流体計算により中性子星連星の合体過程を解き明かし、近い将来の観測研究に資する。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

- 成果①: 世界初の空間3次元のニュートリノ輻射流体計算により、ニュートリノ加熱機構による超新星爆発機構の有効性を示した。
 成果②: 世界初の一般相対論的なニュートリノ輻射流体計算により、中性子星合体が重元素合成の有力機構であることを示した。

①の成果により、重力崩壊型超新星爆発は、基本的にはニュートリノ加熱機構により駆動されることが示された (Astrophysical Journal 2014)。

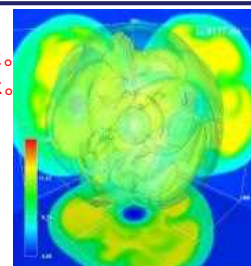
太陽の8倍を超える質量を持つ恒星は進化の最後に重力崩壊型超新星爆発を起こすとされている。しかし、重力崩壊型超新星の爆発機構の解明は長年の課題であった。そこで本研究では、空間的な対称性を仮定しない一般的な問題設定のもとで、ニュートリノ加熱機構に基づく超新星爆発の可能性を、ニュートリノ輻射流体シミュレーションを実行して検証した。これ以前の超新星爆発研究では、計算機資源の不足のため、軸対称性を課す必要があり、現実とは異なった理想化された設定でシミュレーションが限定的に実行されてきた。そのため、得られた結果に疑問があった。しかし、京コンピュータのおかげで、扱える空間次元、空間自由度が飛躍的に増したため、対称性を過程しない高解像度計算が初めて可能になった。そして、この現実的な設定のもとで爆発に至る信頼できるモデルを構築することに成功した。

本成果により、ニュートリノ加熱機構が重力崩壊型超新星爆発の基本的機構であることが理解されることになり、50年来の謎である超新星爆発機構に対する理解が一段階進んだ。

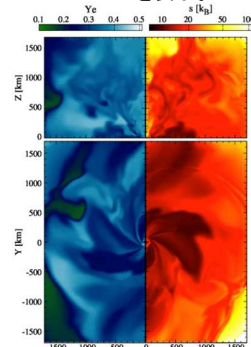
②の成果により、中性子星同士の合体が、速い中性子捕獲を経て生成された元素の起源天体である可能性が示された (Physical Review D 2015)。

中性子星連星の合体は、現在稼働中の重力波望遠鏡の最も有望な重力波源の1つであり、合体現象の予言が喫緊の課題である。そこで世界初の一般相対論的なニュートリノ輻射流体計算を行い、連星中性子星の合体過程やその際に放出・放射される物質、ニュートリノ、重力波の特徴を明らかにした。特に合体時に放出される中性子過剰物質は、放出後に速い中性子捕獲反応による不安定重元素合成を起こすと推測されてきたが、実際にこれが正しいことを示すのに成功した。また生成される不安定重元素は放射性崩壊過程を通じて光度の高い突発的天体現象を引き起こし、重力波の対応光源になることが予想されるが、その仮説を支持する結果を得た。

本成果により、速い中性子捕獲による重元素合成に対する有力仮説を支持する根拠を得た。また中性子星連星の合体とそれに伴って起こる現象に対する標準的なシナリオが構築できた。今後は、重力波望遠鏡や光学望遠鏡により、この現象の観測的検証が進むと予想されるが、それに対する予言を与えることになった。



ニュートリノ加熱機構により超新星爆発が進む様子。エントロピーを表示。



中性子星の合体後に物質が飛び散る様子。左が電子の豊富さを、右がエントロピーをあらわす

分野5 研究開発課題4: ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第一世代天体形成(課題代表者: 理化学研究所・牧野淳一郎)

達成目標

宇宙構造形成の骨組を作るダークマターによる構造形成について、現在の世界レベルに比べて2桁大きな粒子数でシミュレーションを行うことで、世界で初めて最小質量から銀河団スケールまで適用可能な理論モデルを構築する。さらに、このモデルをベースにして第一世代天体形成、銀河形成の過程をシミュレーションによって明らかにする。

成果内容と科学的・社会的意義

緑: 科学的成果 青: 実用的成果

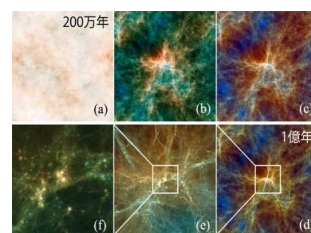
- 成果① ダークマターハローのシミュレーションコード開発は、目標以上の実行効率50%以上を実現した。
 成果② 当初計画になかった太陽対流圏シミュレーションでは世界をリードする極めて大きな成果をあげた。

①の成果により、「京」を用いた宇宙論的多体計算で、米国の「セコイア」システムの3倍相当の速度を実現した(ゴードン・ベル賞 2012)。また、この高い実行効率により、従来不可能であった 8192³の粒子数でのハロー統計を得ることができた。この結果はデータベース化され、観測計画の作成他様々な研究に利用されている。

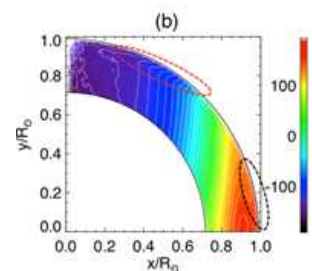
本成果は、科学的に有用であるだけでなく、「京」のような大規模並列計算機で極めて高い計算効率(50%を超える)を実用計算で初めて実現した、という点でも意義深い。本課題で高効率を実現したアプローチは宇宙物理以外の様々な分野に適用可能であり、本課題の成果に基づいてそのような多目的のアプリケーション開発フレームワークを開発した。これは様々な分野でのシミュレーションの効率化に貢献すると期待できる。

②の成果により、太陽全体の対流層のシミュレーションを従来の5倍の空間分解能で行うことに世界で初めて成功した(Astrophysical Journal 2014)。これにより、世界で初めて、小スケールでダイナモが卓越する効果を正しく取り入れて大規模計算を行うことが可能になり、太陽表面付近での回転角速度の急激な変化を初めて再現した。これにより、(緑) 磁場構造、黒点数の変化や、より長周期の太陽活動の変化を理解する糸口がえられた。

本成果は、従来対流計算で標準的であった陰解法を、新規に開発した音速抑制法による陽解法で置き換えることで可能になったものである。この新しい方法により、「京」で高い実行効率を実現できた。本成果は、科学的に重要というだけでなく、人類の社会経済活動に対して大きなインパクトをもつ太陽活動の変動を理解するための重要な一歩である。



最小質量ハローの形成過程



シミュレーションで得られた太陽の回転速度分布。楕円で囲んだ領域で回転速度が急激に変化している。

HPCI戦略プログラム 25課題の達成状況一覧

参考3

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
1		細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション 研究代表者: 杉田有治(理研)	マルチスケール分子ダイナミクス・シミュレーションと一分子粒度シミュレーションを高度化し、細胞内環境下における生体分子の挙動をシミュレーションすることにより、生体膜を介した物質輸送、タンパク質/DNA相互作用、シグナル伝達機構を解明する。これにより、細胞機能の理解や薬剤設計等に貢献する。	平成27年度末までに、京を活用した大規模な分子動力学シミュレーション、粗視化ダイナミクス、一分子粒度シミュレーションを可能とし、細胞環境を露わに考慮した生体分子の動力学(細胞内分子ダイナミクス)を実施する。 それにより、細胞質での分子混雑環境がタンパク質構造や信号伝達に及ぼす影響や、核内でのヌクレオソームやクロマチンなどの機能発現の分子機構について、X線結晶構造解析だけでは不可能な動力学的理解と予測を実現する。	「京」以外では不可能な世界最大級の1億原子を含むバクテリア細胞質内分子混雑の全原子分子動力学に成功し、細胞内の分子混雑環境が蛋白質のダイナミクス、安定性、水和、分子認識などに与える影響などについて原子レベルでの解明につながる知見を得た。ヌクレオソーム、クロマチンの自由エネルギー計算もレプリカを並列化して初めて実現した超大規模計算であり、転写制御という重要な細胞機能に関する多くの知見を得た。 (補足) また、粗視化分子モデルや一分子粒度モデルを併用することで、計算の規模ではなく、研究対象の規模の拡大と長時間の振る舞いのシミュレーションに成功した。さらに、実験とシミュレーションを組み合わせるために、MD/SAXS法を提案し、X線溶液散乱プロファイルを利用することで溶液中のヌクレオソームの構造を正確に予測した。 以上をまとめると、京を用いた分子動力学計算の大規模化と自由エネルギー計算による定量的な評価、全原子と粗視化モデルの利点を組み合わせたマルチスケールシミュレーション、さらに実験と計算のタイトな連携を実現し、生体分子シミュレーションの可能性を大きく広げる結果となった。	○着実に達成
		創薬応用シミュレーション 研究代表者: 藤谷秀章(東大先端研)	分子動力学を用いた結合自由エネルギーシミュレーションを高度化し、薬候補化合物の設計方法の構築、及び化合物とタンパク質の結合部位同定法を確立する。これにより、シミュレーションによる創薬設計手法の確立に貢献する。	平成27年度末までに、結合自由エネルギーシミュレーションの計算誤差を従来の5kcal/molから1kcal/mol以下にすることで、薬候補化合物の活性比較を可能にする。これにより、実際の薬開発における計算創薬法の有用性検証を行う。	標的タンパク質と薬候補化合物の安定構造を分子動力学計算で求めた後に、「京」上でMP-CAFEE法を用いて1kcal/molの精度で結合自由エネルギーを計算する事が可能となり、ガン治療標的キナーゼで薬理活性が高い化合物を発見することができた。さらにバイオ医薬品(抗体医薬品)の設計も行い、どちらも前臨床試験を実施中である。 (補足) 疾患治療標的タンパク質に結合する薬候補化合物をフラグメント最適化法で設計し、分子動力学計算で標的タンパク質との結合構造の安定性を調べて、「京」上でMP-CAFEE法を用いて結合自由エネルギーを計算した。この計算データから新薬として市場価値がありそうな新規化合物を選択して合成を行いウェット実験でその薬理活性を測定した。その結果、計算値と実験値の誤差が1kcal/mol以内収まる事を確認すると共に、ガン治療標的キナーゼで薬理活性が高い化合物を発見した。平成26年10月より連携する製薬企業でこの化合物に対する動物実験を進めている。バイオ医薬品ではマウス抗体のヒト型化と結合力を増強する為のアミノ酸置換を設計し、平成26年末より先端研で動物実験を進めている。この様に二つの創薬標的の薬設計で分子動力学計算の有用性を示した。また応用面だけではなく、抗原に抗体が結合する時にCDRループが大きな構造変化を起こすメカニズムや、抗原抗体反応で測定されるエントロピーとエンタルピーの変化の起源を突き止めて、どの様な要素が抗原と抗体の結合強度に影響しているかを明らかにした。	○着実に達成
		予測医療に向けた階層統合シミュレーション 研究代表者: 高木周(東大工)	階層統合シミュレータを構築し、細胞レベルから組織、器官の挙動をシミュレーションすることにより、複雑な生命現象の理解と幅広い疾患の検証を行う。これにより、わずかな兆候からの将来の病態予測や、負荷の少ない治療法の検討、薬効の評価等々に貢献する。	平成27年度末までに、分子、細胞レベルからの心臓シミュレーションを実現し、医療分野での検証を行う。また、筋骨格シミュレータ、脳神経系シミュレータを統合し、医療機関と連携して神経疾患による運動機能障害(パーキンソン病)の症状の再現によって検証を行う。	マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heartは、分子から細胞、心臓全体までの3階層統合シミュレーションに世界で初めて成功し、現在、臨床データを用いた病態予測の段階に進んでいる。また、脳神経系シミュレータと筋骨格系のシミュレータと統合し、全身の脳神経-筋骨格系統合モデルを構築。パーキンソン病で見られる脳波の振動の再現することに成功している。 (補足) マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heartは、サルコメアレベルから心筋細胞、心臓全体までの3階層統合シミュレーションに世界で初めて成功し、計算科学の分野に大きなインパクトを与えた。このシミュレータはすでに臨床データを用いた病態予測の段階に入っており、小児先天性心疾患の手術後の予測が精度よく行えることなどが臨床結果との比較で示されている。 脳神経系シミュレータNESTは、「京」上で17億3,000万個の神経細胞、10兆4,000億個のシナプス結合を有する世界最大の神経ネットワークシミュレーションに成功。このNESTを筋骨格系のシミュレータと統合し、全身の脳神経-筋骨格系統合モデルを構築。パーキンソン病の脳モデルが振戦や固縮などの病態を引き起こすかどうかシミュレーションを実施し、パーキンソン病サルの実験で観測されている脳波の振動(15ヘルツβバンド)を再現することに成功。そのシグナルが視床で約半分の周波数になり、大脳皮質、脊髄から筋線維へと伝わり、パーキンソン病特有の手の震え(振戦)に繋がることを発見した。	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
	4	大規模生命データ解析 研究代表者:宮野悟(東大医科研)	次世代シーケンサーから得られる大規模データを解析するための計算手法を開発し、がんの原因となる機能的突然変異、大規模な生体分子ネットワークの解析、メタゲノム解析等を行う。これにより、個別化医療の理解、ゲノム情報の産業利用等に貢献する。	平成27年度末までに、大規模生命データ解析を行う基盤を構築し、がんの遺伝子発現データに関する世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析、及び、知見の少ないがん腫400サンプル以上を解析、ヒトメタゲノムの全ゲノム解析を10分程度で実施し、医療、創薬に貢献する知見を得る。さらに、白色脂肪細胞が、寒冷刺激により大量の熱を産生するベージュ脂肪細胞に転換する過程における1万遺伝子以上からなる大規模ネットワーク解析を実施し、生活習慣病の防止に向けて、そのメカニズムに関する知見を得る。	<p>主ながん腫について多数のがん試料の薬剤に対する感受性・耐性データ等から、全遺伝子ネットワーク解析を実施し、個々人に対する感受性予測とバイオマーカー同定法を構築した。426例の成人T細胞白血病・リンパ腫症例(ATL)データを網羅的に解析し、ATLのシステム異常の全貌を明らかにし、新規治療薬の開発に向けた標的を発見した。ヒトメタゲノム解析により、海外渡航歴がなくコレラ毒素Bフクチン摂取歴もないが、コレラ毒素B抗体をもつ人の謎を解明した。大規模遺伝子ネットワーク解析により、マウスの白色脂肪細胞がアンチメタボ細胞へ変身する分子メカニズムの全容を解明した。</p> <p>(補足) サンガー研究所のGenomics of Drug Sensitivity in Cancerデータは、主ながん腫について700以上のがん試料の遺伝子発現データと138の薬剤に対するそれぞれのがん試料の感受性・耐性を表すIC50データを提供している。このデータから6万以上の全遺伝子を対象とした世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析を実施し、世界最高精度の個別化抗がん剤投薬基盤を構築した(PLoS One 2014,2015)。ATLは西日本の風土病ともいわれ、これを過去最大規模で解析し(426試料、内48試料は全ゲノム解析を実施)、ATLのゲノム、RNA、エピゲノム、ウイルス挿入等のシステム異常の全容が世界で初めて明らかになり、T細胞受容体/NF-κB経路の異常(90%)や新規治療薬の開発に向けた標的を発見した(Nature Genetics 2015)。ヒト糞便メタゲノムの全ゲノム解析が10分以内に可能になったことで、コレラに対する交差抗原を誘導出来る常在菌の同定が急速に進み、これまで原因不明であったコレラ毒素B抗体をもつ人の謎を解明した(通常の16s解析では解明不可能)(論文準備中)。 さらに、<i>vivo</i>及び<i>vitro</i>データで、1万遺伝子規模の遺伝子ネットワーク解析を実施し、IL-1βという炎症に関与する生理活性物質と熱産生のメカニズムが初めてつながり、白色脂肪細胞がアンチメタボ細胞へ変身する分子メカニズムの全容を解明した(Cytokine 2016)。</p>	◎大幅に達成
	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 研究代表者:今田正俊(東大)	電子を含む量子多体系の物性を解明する強相関第一原理電子状態計算法を開発・整備し、超流動や超伝導のように特異な状態である量子スピン液体や非フェルミ液体などの新しい量子状態や量子相転移を解明する。これにより、他の課題と連携し、高温超伝導、高効率熱電素子等の探索に貢献する。	平成27年度末までに、強相関第一原理電子状態計算法を開発し、強相関フェルミ格子において従来の100自由度から1,000自由度以上、また量子スピン格子において従来の10,000自由度から20万自由度以上の計算を可能にし、新しい電子状態や量子相転移に関する知見を得る。特に量子スピン液体、非フェルミ液体などの特異な量子状態や量子相転移を解明し、強相関超伝導体の物性解明の知見を得る。	<p>物性物理学の大きなテーマである強相関電子系の難問に対して、高精度な量子多体状態計算手法を開発し、第一原理的に解明して答える道筋を確立した。これを用いた銅酸化物高温超伝導体および鉄系超伝導体の非経験的計算で多くの実験結果の説明に成功し、超伝導発現機構を解明して、高特性超伝導を得る指針を示すなど、高温超伝導研究を大きく前進させた。また進展著しい非平衡実験の解析手法やエネルギー変換の高効率化原理も見出し、新たなトポロジカル状態を予言し、量子相転移についても未踏の大規模計算で理解が進んだ。</p> <p>(補足) (1) 高温超伝導機構解明や制御法の開拓に関する研究 鉄系超伝導体の第一原理有効模型を用いて、実験相図の再現に成功し、これをもとに電荷ゆらぎが超伝導を引き起こす機構であることを解明。 銅酸化物の電子構造(ギャップ構造)を超伝導相と常伝導相で解明。超伝導と常伝導で定説と異なるギャップ構造を発見し、高い転移温度を生み出す隠れたフェルミオンの存在を発見。 鉄系超伝導体と銅酸化物に共通する双安定構造による超伝導機構を提唱。 銅酸化物界面を含む界面・薄膜の実験での超伝導特性がバルクより優れている原因が界面での不均一性の回避にあることを発見し、超伝導設計指針を提供。 (2) 新量子相発見(予言)や機構解明に関する研究 反強磁性絶縁体中の磁壁が可動トポロジカル界面(位置を制御可能な、トポロジカルに保護された金属状態)となる例を初めて予言し、実験で実証された。トポロジカル相の新たな機能の発見と概念の革新で応用の可能性を広げた。 (3) 強相関電子系の励起ダイナミクスの研究 ① 強い非平衡状態に置くことで平衡状態の物性を解明するための新たな実験手法とその解析法の理論を構築した。② 散逸が太陽電池におけるエネルギー変換の効率化に寄与する機構を解明した。③ 大型実験施設の実験との連携解析が進んだ。 (4) 量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究 新量子相転移である脱閉じ込め転移の様相、特に転移の次数、臨界指数、隠れた対称性などを前人未踏のサイズの計算により明らかにした。 (5) スピン軌道相互作用系の解明 量子スピン液体の典型例であるキタエフスピン液体の候補物質がなぜスピン液体にならずに磁気秩序が生じるかを第一原理的に解明。これをもとにスピン液体への近さの特徴を実験的に捉える方法を提案。さらにスピン液体実現の指針を提唱。 以上の成果は第一原理手法と大自由度格子ソルバーの開発応用により得られた。</p>	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
	2	電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開 研究代表者:天能精一郎(神戸大)	分子の超微細量子構造を予測可能な高精度電子状態計算法を開発・整備し、磁性体やナノ金属クラスターの電子状態、電子構造を解明する。これにより、他の課題と連携し、ナノ炭素材料の分子設計やレアアースの代替合金探索に貢献する。	平成27年度末までに、一電子基底関数展開を超えて電子相関を捉えられるジェミナル(高精度F12電子状態理論)を分子軌道法によるナノスケールの高精度電子状態計算を可能にする。これにより、磁性やナノ金属クラスターの電子状態、電子構造の高精度予測を可能とし、炭素材料や含金属ナノ材料の構造や電子物性を解明する。	高精度量子化学計算手法(F12法)の高効率な超並列実装を行い、世界最大規模のポストハートリー・フォックレベルの計算を実現した。これをルイス塩基-フラーレン複合体に適用し、有機電子材料として有望な物質候補を複数発見した。またこれまで経験的な計算で示唆されていた分散相互作用による物質の形成機構を、高精度量子化学計算で数値的に示した。高並列化したフラグメント分子軌道法等により、光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究も大きく進展した。 (補足) (1)高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測に関する研究 分子求積法を用いることにより、完全基底関数極限に近い結果を与えるF12電子状態理論の高効率な超並列実装を行い、京コンピュータによる世界最大規模の計算を実現した。さらに、高次電子相関手法の整備の一環として、これまで符号問題が顕著で取り扱いが困難であった強相関系や一般的な励起状態のための手法開発を行い、エネルギー依存する有効ハミルトニアン の定式化を用いて、一般的な励起状態が厳密解に収束する全く新しいモデル空間量子モンテカルロ法の開発に成功した。 (2)光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究 柳井グループが「京」を用いずに行った、光合成酸素発生中心であるマンガンクラスターの量子多体計算を受けて、「京」を用いた複数の理論研究を行った。フラグメント分子軌道計算により、リガンドタンバク質から活性中心への電子移動量とその部位が特定され、定量的な議論に必要なリガンドの領域も明らかになった。モデル空間量子モンテカルロ法を用いて活性中心のスピン状態も得られた。また、スピン射影を施した射影ハートリー・フォック(PHF)法による構造最適化に成功し、スピン混入による顕著な構造変化が存在することを見出したほか、ENDORスペクトルの実験結果を定量的に正しく再現する事を示した。本研究は、人工光合成系の開発にも繋がる成果である。	◎大幅に達成
	3	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究 研究代表者:押山淳(東大)	密度汎関数法を用いたシミュレーションを高度化・大規模化し、ナノ構造デバイスの電子構造・特性の解析や、構造体生成の機構を予測する。これにより、ナノワイヤーや電界効果トランジスタの設計・性能予測、新材料探索、新規デバイス材料設計等 に貢献する。	平成27年度末までに、密度汎関数法での密度行列最適化法を完成させ、現在の2,000原子程度から100万原子系に対する構造最適化計算を実現する。これにより、ナノワイヤー等のナノ構造デバイスの特性、構造安定性や形成過程のシミュレーションを行い、新材料探索や新規デバイス開発に必要な電子構造・特性や構造体生成に関する知見を得る。	密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算を、並列化に有利な実空間差分法を用いて高効率実装し、半導体ナノ構造の第一原理電子状態計算を実現して、2011年のゴードンベル賞を受賞した。開発したコードRSDFTは、「京」全ノードを使用した10万原子超のSiナノワイヤモデルに対するベンチマークにおいて、最終的に実行効率51.7%を達成した。また、オーダーN法によるCONQUESTにより、100万原子超の半導体構造の計算を可能とした。また、時間密度汎関数理論に基づき、電子状態変化と電磁場の時間変動と組み合わせた第一原理動力学計算を、世界で初めて実現した。 (補足) (1)RSDFTは、SCF計算、原子構造最適化、バンド計算などの基本的な機能に、バンドアンフォールディング計算、孤立系境界条件計算などの追加機能を含めたバージョンをgithub上で公開した。同じく差分法を用いる第一原理分子動力学法プログラムRS-CPMDも、大幅な高度化に成功した。 (2)伝導計算の可能な差分法プログラムRSPACEも「京」用に改良した。SiC-MOS界面のキャリア伝導特性計算は、SiCパワーデバイス開発研究の方向性を決めるなど、実験グループとの議論に活用されている。 (3)構造計算に適したオーダーN法による第一原理計算プログラムCONQUESTの並列化効率向上も、ほぼ目標通りに達成された。「京」を全ノード用いて、数百万原子系に対する第一原理計算が実用的な速さ(1ステップ5分程度)で計算可能となった。これにより、Geナノ構造ハット(小屋型)クラスターの成長における重要な過程を明らかにした。 (4)ナノ構造時空場に対する実空間手法の適用 孤立分子系から3次元周期系、更に表面・界面系に至るまで、種々のナノ構造体における光励起電子ダイナミクスを記述する超並列大規模計算法(GCEED及びARTED)を独自開発した。電子・電磁場ダイナミクスをカップルさせて実在系の光励起電子ダイナミクスを扱うことができるプログラムは殆ど存在せず、世界に先駆けて新奇光・電子機能デバイスのメカニズム提案と理論設計を進めることが期待できる。	◎大幅に達成
2						

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
	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 研究代表者: 岡崎進(名大)	分子動力学シミュレーションを高度化し、また大規模全電子計算を実行可能とすることにより、ウイルスの感染機構や抗ウイルス剤とウイルスタンパク質との相互作用等を解明する。これにより、ウイルスの殻であるウイルスカプシドやウイルスのタンパク質の解析が可能となり、カプシドに注目した新しいタイプの小児麻痺の抗ウイルス剤の探索やインフルエンザウイルスの新規阻害化合物の設計に貢献する。	平成27年度末までに、高並列汎用分子動力学シミュレーションの高度化を完成させ、またFMO法による大規模電子状態計算を完成させる。これにより、従来5万原子系程度であった分子動力学計算を1,000万原子系で可能とし、また従来数百原子系であった全電子計算を10万原子系で実現する。これにより、抗ウイルス剤の探索や新阻害化合物の設計のために小児麻痺ウイルスのウイルスカプシドやインフルエンザウイルスのウイルスタンパク質の構造安定性や構造変化に関する知見を得る。	クーロン相互作用を高精度に取り扱った最速の高並列分子動力学プログラムMODYLASを開発し、小児マヒウイルスカプシドと溶液からなる1000万原子系の計算を実現して、その構造安定性をもたらし分子機構を解明した。また感染初期過程であるレセプターCD155との引力相互作用を、自由エネルギーレベルで明らかにした。また、FMOによる2.4万原子系での全電子計算より、目標としていたインフルエンザウイルスのたんぱく質構造安定性に関する知見を得た。他プロジェクトや企業に開発したアプリケーションの利用と共同研究が広がり、大きなインパクトを与えた。 (補足) (1)小児マヒウイルスカプシドの分子科学 ウイルスカプシドの構造安定性の分子機構を解明し、さらに感染初期過程であるレセプターCD155との引力相互作用を自由エネルギーレベルで明らかにした。さらには、新規に設定したB型肝炎ウイルスについても、RNAを含む系の準備が順調に進んでおり、AMEDでの共同研究、ポスト「京」における重点課題①での研究が円滑にスタートしつつある。 (2)インフルエンザウイルス阻害剤の分子設計に関する研究 新規候補化合物の提案までには至っていないが、化合物との相互作用の全電子計算を可能とし、方法的には十分目標を達成した。	◎大幅に達成
	5	エネルギー変換の界面科学 研究代表者: 杉野修(東大)	電子状態を密度汎関数法で、原子・分子の反応を分子動力学法で解析する第一原理分子動力学法を高精度化し、電極物質と水溶液界面における酸化還元反応過程の解析により、燃料電池反応機構に関する知見を得る。これにより、高効率の燃料電池の設計や白金に替わる電極物質の探索等に貢献する。	平成27年度末までに、第一原理分子動力学シミュレーションの高精度化を完成させ、従来の133原子から5,000原子相当に対する電極での酸化還元反応過程を解析する。これにより、高効率の燃料電池の設計や白金に替わる電極物質の探索に必要な燃料電池反応機構に関する知見、および、リチウムイオン2次電池の電極と電解質の界面の電子移動と性能劣化、変換効率の関連を解明する。	電極-溶液界面に電位差を印加する独自の手法を、世界に先駆けて高並列第一原理分子動力学プログラムに実装し、燃料電池の現実的な電極界面モデルを用いたエネルギー変換過程の分子動力学シミュレーションを初めて実現して、反応機構の解析に成功した。リチウムイオン二次電池の電解液の劣化過程を明らかにし、添加剤の設計指針に資する知見が得られた。また、実験で明らかになった高濃度電解液の優れたイオン輸送特性や耐久性に関する、理論的裏付けを与えた。尚、時間発展計算の重要性が増したため、計算規模は最大2000原子相当で実施した。 (補足) (1)ESM法による電極界面計算 電極界面に電位差を印加する方法(ESM)とそれを制御する方法(ポテンシオスタット)に関しては世界に先んじて開発することができ、現在応用計算が進んでいる。反応自由エネルギー計算の並列化が進み計算の効率化に大きく貢献した。 (2)STATEによる多自由度系の反応経路探索 stat-CPMD, STATEの並列化は着実に達成させた。stat-CPMDを用いた大規模計算を果したが、STATEはサイズの増加と共に数値的不安定化するためサイズを縮小しての応用計算となった。 (3)第一原理分子動力学計算 stat-CPMDを用いたリチウムイオン二次電池の研究が著しく進み、反応機構や膜形成機構に関して多くの知見を得ることができた。	○着実に達成
	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 研究代表者: 田中秀樹(岡大)	分子動力学法を用いたメタンハイドレートシミュレーションを高精度化し、メタンハイドレートや水素ハイドレートの熱力学的安定性や生成解離過程を解析することにより、メタンハイドレートや水素ハイドレートの制御に関する知見を得る。効率的なメタン採取法の探索や水素の安全で安価な貯蔵法としてハイドレート利用の研究に貢献する。	平成27年度末までに、メタンハイドレートシミュレーションの高精度化を完成させ、従来の1,000分子以下から100万分子に対する熱力学的安定性や生成解離過程の解析を実現する。これにより、メタンハイドレートや水素ハイドレートの効果的活用に必要な生成解離過程や安定性の知見を得る。	本プロジェクトで開発された高精度高並列分子動力学プログラムMODYLASを用いて、メタンハイドレート分解の従来にない大規模なシミュレーションを行い、水中でのメタンの泡の生成が融解速度に大きな影響を与えるという機構を解明した。さらに、塩やアルコールなどの溶質が分解機構に与える効果を明らかにし、メタンハイドレートの効果的活用に必要な知見を得た。尚、MODYLASは1000万原子系の計算は可能であるが、本研究では10万原子系程度が効率よく計算できることがわかった。 (補足) 水素ハイドレートに関する統計学的な理論を完成させ、その相図を描くことに成功した。生成過程については、水素の代用としてテトラヒドロフランやエチレンオキシドをゲストとした大規模計算を実行しており、それらについての論文を執筆、投稿中である。メタンハイドレートの分解については、主にMODYLASパッケージを用いて、従来にない大規模な計算を行い、水中でのメタンの泡の生成が融解速度に大きな影響を与えるという機構を解明した。さらに、塩やアルコールなどの溶質が分解機構に与える効果を明らかにした。	○着実に達成

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
	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 研究代表者: 香山正憲(産総研)	大規模第一原理計算(オーダーN法)を用いて、金属材料中の異相界面や結晶粒界、転位の安定構造やエネルギー、強度を電子・原子挙動から解明する。フェーズフィールド法とも組み合わせることで金属系構造材料の特性を支配する「微細組織」の構造や性質を明らかにし、優れた構造材料の設計や開発の研究に貢献する。	平成27年度末までに、5万原子程度のセルでの鉄/炭化物界面、鉄/窒化物界面、鉄中の結晶粒界、転位の構造最適化計算を行う。さらに応力下での原子・電子挙動やレアメタル等の添加効果を探る。フェーズフィールド法と組み合わせることで微細組織の構造と性質を明らかにし、優れた構造材料の設計・開発の指針、鉄鋼材料中の添加レアメタル削減の指針を得る。	金属に適用可能な高並列化されたオーダーN法第一原理電子状態計算プログラム(OpenMX)を開発して、これまでにない、5,000原子程度の大規模な鉄鋼材料の計算を実現し、目標としていた鉄鋼材料中の異相界面(鉄/析出物界面構造の整合・部分整合遷移)や転位(鉄中のらせん転位芯と添加元素との相互作用)の物性を解明した。また、ミクロ情報をフェーズフィールド法でメゾ・マクロに連結する手法開発についても初期段階の定式化を行うことができた。(本課題は平成24年4月に新設されたものである) (補足) (1)析出物と母相金属の異相界面の大規模第一原理計算 Fe/TiCの部分整合界面について、金属系で大規模第一原理計算を、わが国独自のOpenMXコードで達成し、整合界面と比較することで整合→部分整合の遷移の臨界サイズを高精度に見積もることに成功した。初めて得られた部分整合界面の水素の捕獲について、新規の情報が得られた。また、局所エネルギー・局所応力法(QMASコード)により、異相界面の結合やmisfit応力の起源について掘り下げた情報が得られた。 (2)転位の構造や転位と固溶原子との相互作用の大規模第一原理計算 Fe中のらせん転位芯と添加元素の相互作用の大規模第一原理計算(OpenMXコード)をsystematicに行い、周期表の一連の元素で相互作用が特徴のある変化を示すことを見出した。材料設計上、極めて有益な成果である。 (3)添加元素の偏析した粒界の構造や力学挙動の大規模第一原理計算 Fe中の粒界での一連の添加元素の偏析について、局所エネルギー・局所応力法(QMASコード)を適用し、偏析機構と元素依存性について、従来にない掘り下げた解明に成功した。 (4)フェーズフィールド法に繋げる手法の検討 第一原理解析からのミクロ情報をメゾ・マクロのフェーズフィールド法に連結する手法開発について、第一原理から基礎方程式の定式化に成功した。今後の発展に繋がる成果である。	◎大幅に達成
	1	地球規模の気候・環境変動予測に関する研究 研究代表者: 木本昌秀(東大気海洋研)	全球雲解像モデルを用いたシミュレーションの高精度化によって、地球温暖化時の台風の変化を計算し、温暖化による台風への影響に関する知見を得る。また、同じモデルを長時間の予測計算に適用させ、長期間の予測(延長予測)の可能性を検討する。これにより、温暖化時の適応策の策定や、2週間以上の天気予報精度向上への貢献が期待される。	平成27年度末までに、全球雲解像モデルの全球大気のシミュレーション解像度を従来の20 kmから7 kmに引上げ、これを用いて地球温暖化時の台風変化に関する知見を得る。また、熱帯域における延長予測の可能性と共に、熱帯域の影響が中・高緯度域の延長予測に及ぼす効果も含めて明らかにする。	全球雲解像モデルを用いて、温暖化時には台風の強風域が広がることを示したほか、マッデン・ジュリアン振動については1ヵ月先、台風発生については2週間先まで予測が可能であることを示した。さらに世界で初めて1 km以下の格子での全球大気のシミュレーションに成功した。 (補足) 14~3.5 kmメッシュの全球雲解像モデルによる、地球温暖化時の台風の変化を計算しデータセットを整備した。解析の結果、地球温暖化により台風の強風域が広がるなど、構造が変化することが示されており、今後地球温暖化適応策への貢献が見込まれる。 全球雲解像モデルを用いて、マッデン・ジュリアン振動については1ヵ月先、台風発生については2週間先まで予測が可能であることが明らかになった。今後気象庁の予報改善への貢献が見込まれる。 全球14~0.87 kmメッシュの全球雲解像モデルによる計算を実行し、個々の雲の表現に必要な解像度や、気象擾乱ごとの雲の形態の違いを明らかにし、世界の気象学界に大きなインパクトを与えた。 超高解像度全球大気モデルNICAMの効率化・高度化にむけた開発を行った。特に、今後の計算機環境での高速化・調整に資するため、全球非静力学モデルの力学コアを分離し、2条項BSDライセンスで公開した。また地球変動予測パッケージの基盤となるカプラー開発やそれを用いたフレームワークの設計を行った。	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
3	2	超高精度メソスケール気象予測の実証 研究代表者: 斉藤和雄(気象研)	データ同化技術およびアンサンブル予測技術に雲解像モデルを組み入れて高精度化し、集中豪雨などのシミュレーションを行って、解析予測システムの計算精度を検証する。これにより、雲解像モデルによる気象予測の精度向上への貢献が期待される。	平成27年度末までに、積乱雲を表現できるように、領域データ同化や領域アンサンブル予測の解像度を従来の15 kmから2 kmに引き上げ、大規模実証試験により、集中豪雨などの力学的直前予測や定量的確率予測の可能性を実証する。	最先端の4次元データ同化技術を雲解像モデルに適用し、雲スケールの詳細な観測データを同化する実験を行い、メソスケール対流系の力学的直前予測の可能性を実証した。非静力学モデルに基づくアンサンブル解析予測システムを開発し、時間・場所・強度を特定して定量的に集中豪雨を確率予測する可能性を実証した。 (補足) 2重偏波レーダーデータや高密度の地上観測データを水平格子間隔350 mで同化し、2012年5月につくばに竜巻を発生させたメソスケール対流系の力学的短時間予測実験を行い、ダウンスケール実験により竜巻に対応する強い渦が再現されることを示した。ハイブリッド4次元変分法、アンサンブル変分同化法を開発し、従来の4次元変分法や局所アンサンブル変換カルマンフィルタとの精度比較を行った。 非静力学モデルに基づくアンサンブル解析予測システムを開発し、平成24年7月九州北部豪雨の事例について、3時間に50 mmを超える強雨が発生する確率分布を求め、定量的に集中豪雨を確率予測する可能性を示した。伊豆大島や広島での豪雨事例を対象とする水平格子間隔250 mでの広領域の超高解像度予測実験を行った。また分布型降雨流出・洪水氾濫モデルやラグランジュ土石流モデルの「京」への最適化を進めた。 台風全域を対象とするLES実験、水平格子間隔10 mでの竜巻の再現実験など世界に類を見ない超高解像度での数値実験を行い、台風に伴う境界層内のロール構造や竜巻の詳細構造の解析を行った。ピン法雲物理過程モデルを開発しバルク法モデルとの比較を行った。	○着実に達成
	3	地震の予測精度の高度化に関する研究 研究代表者: 古村孝志(東大地震研)	東日本大震災を踏まえて、地震波伝播や地震発生サイクルを見直し、また、震源モデルと地下構造モデルを高度化し、地震の揺れのシミュレーションを行い、巨大地震発生による強震動と津波の発生予測精度を格段に向上する。これらの結果は、現代社会が有する多様な建築物の被害予測と耐震設計のため入力地震動として活用されることが期待される。	平成27年度末までに、現行モデルの分解能を数倍に高め、短周期地震動を含む広帯域の地震動評価を行う。これにより、木造家屋などの短周期構造物から超高層ビルなどの長周期構造物まで、多様な建築物の被害予測と耐震設計に活用できるシミュレーション技術を開発する。	地震発生予測、地下構造推定、地震波伝播・強震動予測の三つの要素に関するシミュレーションを結合して、地震発生～地震波伝播～強震動・長周期地震動発生との連続シミュレーションに成功したほか、南海トラフ地震の強震動・長周期地震動、地殻変動、津波発生予測などの成果を国の中央防災会議などに提供した。 (補足) 南海トラフなどでの海溝型巨大地震の発生と、それに伴う強震動・地殻変動・津波の高精度予測に向け、①地震発生予測シミュレーション、②地下構造推定シミュレーション、③地震波伝播・強震動予測シミュレーション、の三つの要素シミュレーションの高精度モデルを整備し、「京」の高い性能を引き出すための性能チューニングを実施して、数万CPUを用いた大規模・高性能シミュレーションを開発した。これにより、従来の地球シミュレータによる計算に比べて、計算規模が50倍、分解能が2.6倍の高精度シミュレーションが実用化した。 「京」の高い計算性能を背景に、上記三つの地震シミュレーション要素モデルを結合して、それぞれの予測結果を入力として連成し、地震発生～地震波伝播～強震動・長周期地震動の発生との連続シミュレーションに初めて成功した。「京」を用いて南海トラフ地震の強震動・長周期地震動、地殻変動、そして津波発生との予測シミュレーションを実施し、国の中央防災会議や文科省地震調査研究推進本部に成果を提供した。	◎大幅に達成
	4	津波の予測精度の高度化に関する研究 研究代表者: 今村文彦(東北大災害科学国際研)	東日本大震災における津波挙動および被災状況を考慮し、津波シミュレーションを詳細化し、またリアルタイムの観測データとの融合により、津波ハザード予測法を高精度化し、被害予測を行う。これにより、津波の第1波の高波だけでなく、複合的な影響を考慮した津波被害予測へ貢献することが期待される。	平成27年度末までに、津波の波力を考慮した津波ハザード予測法を開発すると共に、漂流物・土砂移動・海面変動など複合的な津波被害の予測手法の開発を行い、複合的な影響を考慮した津波被害予測を可能とする。さらに、津波被害の軽減対策のための基礎データを作成する。	2次元および3次元流体モデルによる高解像度で大規模な浸水計算を効率化し、建物に作用する津波の波力を考慮した津波ハザードの評価手法を高度化した。また、津波氾濫・漂流物移動・土砂移動を高精度に予測する手法(統合モデル)を開発し、現地被害(気仙沼)の再現に成功した。 (補足) 日本海溝および南海トラフ沿いを対象として、分散波理論を適用したグリーン関数群の構築を達成したことにより、リアルタイム波源推定のための理論津波波形データベースの高度化を達成した。得られたデータベースを用いた津波伝播計算を可能にする津波計算モデルを高度化した。また、従来の津波氾濫計算モデルを「京」に移植して最適化を図ったことにより、仙台平野を5 m格子でモデル化した2時間分の津波浸水解析が2分以内で計算できることを示し、リアルタイム津波ハザード予測の実現に向けて大きく前進した。津波の遡上過程を高精度に解析するための3次元流体計算の大規模並列計算に成功し、市街地における局所的な津波挙動のみならず建物に作用する流体力をも高精度に捉えることが可能とした。さらに、漂流物の移動や衝突、土砂移動による侵食・堆積に伴う地形変化を扱う計算モデルの高度化に成功した。そして、津波氾濫・漂流物移動・土砂移動を統一的に解析することができる統合モデルを開発した。	○着実に達成

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
	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 研究代表者:堀宗朗(東大地震研)	東日本大震災における地震動による建造物の破壊・損傷、津波との複合災害を考慮し、また、E-Defenseの実験結果も取り入れ、高精度の建造物の地震応答モデルを構築し、都市全体の建造物の被害シミュレーションを行う。これにより、想定される地震・津波に応じた新たなハザードマップの作成に貢献することが期待される。	平成27年度末までに、地震による都市災害シミュレーション、都市内全建造物の応答に基づく被害シミュレーション、そしてその結果を受ける避難シミュレーションのプログラムをそれぞれ「京」用に開発する。さらに、開発したソフトを結合し、実際の都市を対象としたシミュレーションを実施し、これまで不可能であった、シミュレーションに基づく地震ハザードマップの構築に必要な基盤技術を開発する。	鉄筋コンクリート橋脚や超高層ビル、原子力発電所建屋などの建造物の高性能地震応答解析の有用性を示したほか、地盤・建物・避難を連成して行う統合地震シミュレーションを開発して、東京23区内の10 km四方の領域を対象とした計算に成功し、極めて高い時・空間分解能の地震災害・被害評価を例示した。 (補足) 建造物の地震応答解析手法の開発に関しては、材料・幾何非線形に対応する動的有限要素法を開発した。鉄筋コンクリート橋脚・超高層ビル・原子力発電所建屋の解析を行い、大型震動台を使った実験との比較などから、高性能計算を利用した建造物地震応答解析の有用性を示した。重要建造物の耐震性の評価という実用に向けた取組みに繋がっている。 都市地震応答解析手法の開発に関しては、地盤・建物・避難を連成して行う統合地震シミュレーションを開発した。東京23区内10 km四方の領域を対象とした計算に成功し、極めて高い時・空間分解能の地震災害・被害評価を例示した。従来の経験式に基づく災害・被害評価手法とは異なる、大規模数値計算による、シミュレーションに基づく災害・被害評価手法の潜在的有効性が示された。全「京」を使う優れた計算性能は計算科学の分野でも高く評価された。このため、ポスト「京」に向けた実用化を目指す研究も開始された。	◎大幅に達成
	1	輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率・低騒音化に関する研究開発 研究代表者: 藤井孝誠(東京理科大)	マイクロデバイスを有する非定常乱流場を解析する高解像度基盤ソフトウェアを開発し、幅広いレイノルズ数(10 ⁴ から10 ⁶)の大規模シミュレーションを進め、輸送機・流体機器における流体制御マイクロデバイスの動的流れ制御メカニズムを明らかにする。これにより、輸送機・流体機器に「流体制御マイクロデバイスによる流体機器設計」という新たな設計概念の導入を目指す。	平成27年度末までに、高速流体フィードバック制御機構を組み込んだシミュレータを完成させ、実際の製品開発に必要な基盤ソフト・知的基盤として整備する。また、流体制御マイクロデバイスが、輸送機器・流体機器における格段の性能向上や低騒音化に有効であることを実証する。	高い性能を有するシミュレータを開発、大規模シミュレーションにより、対象デバイスが優れた制御性能を有する背景を明らかにし、それを産業実用におけるデザインガイドラインとした。この知見を活かし、複数の企業が試験を開始している。海外先端研究者による評価、多数の学術論文や基調講演が本研究の学術的意義を証明している。以上から、本デバイスが格段の性能向上や低騒音化に有効であることを実証できた。 (補足) ・本課題で用いるプログラムの高速化、周辺ツールの作成を予定通り行い、本課題で実施すべきシミュレーションを実施可能とした。本課題の利点でもある空間高分解能を有する解析手法の汎用化、および必要となる周辺ソフトウェアの整備を行った。 ・京の利用によってこれまで困難であったケース数や、より困難な条件でのシミュレーションを実施し、世界に先駆け、主たる3つの流体制御メカニズムを明らかにした。これは限られたケース数のシミュレーションでは見出しなかったと考えられる。その結果を活かして、形状や流れ条件に応じた流体制御パラメータの設定指針(デバイスデザインガイド)を明示した。この成果は学術面も含めて海外の同分野を先導する研究者からも高く評価されている(報告書添付の評価文書参照)。 ・小型から大型の回転機器などを対象として本デバイスによる流体制御が有効であることおよび各種パラメータの効果を明らかにした。輸送機器成果は、現在進行中の産業界との共同研究下での実験や試験に活かされている。また、高い性能を有する翼形状を凌駕する性能が実現可能であることを示すことによって本デバイスによる性能向上の価値を示した。	○着実に達成
	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 研究代表者: 大野隆央(物材機構)	第一原理電子状態計算シミュレーションを高精度化し、カーボン系ナノ材料による次世代配線プロセス設計解析、カーボン系ナノ構造デバイスの素子特性解析を実施し、従来の素材が持たない新しい機能を持つ炭素材料を用いたデバイスの設計を可能とする。これにより、炭素材料を利用した高性能・低消費電力半導体デバイスやエネルギー変換デバイスの開発に貢献する。	平成27年度までに、非シリコン系新規材料の次世代ナノデバイス応用への計算科学的評価とナノ界面構造・形成プロセスの最適化指針を構築することを旨とし、また、新規ナノ材料探索に関する解析手法、方法論等の知識基盤を構築し産業界が使える形で提供することを図る。	SiC酸化膜形成プロセスの実温度でのダイナミクス解析により、SiCパワーデバイスのナノ界面構造の最適化指針を提供した。また、グラフェン創成プロセスのダイナミクス解析などにより、実プロセス温度での解析の重要性と解析ソフトウェアPHASE/0の有効性を提示した。 (補足) ・SiC酸化膜形成プロセスの実プロセス温度での大規模・高精度な第一原理ダイナミクス解析を実施し、SiC酸化膜に関する新規な界面構造及び酸化プロセスを見出し、界面構造と界面欠陥準位などデバイス応用に対する有益な知見を得ることに成功した。この成果は、東芝との共同研究により得られたものであり、日刊工業新聞 2015年4月20日号にも掲載された。この成果により、SiCパワーデバイスの開発における重要な技術課題である欠陥の少ない良好なSiC酸化膜界面を構築する指針を提供し、SiC酸化膜に関する特許出願にも繋げ、省エネルギー社会構築のキーデバイスであるSiCパワーデバイス開発の加速に貢献した。 ・グラフェン創成プロセスの実成長温度でのダイナミクス解析等を実施し、従来の絶対零度での静的な解析では獲得が困難であったプロセス過程に関する新たな知見を獲得し、実温度ダイナミクス解析の重要性と解析ソフトウェアの有効性を示した。解析ソフトウェアPHASE/0は、ソフトウェア公開、利用講習会開催などの活動を通して、「京」産業利用枠でのPHASE/0利用をはじめ、産業界などでの利用が進んでおり、デバイス開発の現場でのシミュレーション活用を促進するものと期待される。	○着実に達成

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
4	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 研究代表者:加藤千幸(東大生産研)	乱流のシミュレーションを高精度化・大規模化し、自動車、ターボ機械、燃焼・ガス化装置などを対象に高空間解像度のシミュレーションを行うことにより、次世代流体設計システムの研究開発及びその実証を行う。これにより、流体関連機器の設計・開発プロセスの大幅な高速化とコストダウンに貢献する。	平成27年度末までに、最大で1,000億点規模の計算格子を用いて、複雑な形状を有する機器に対してレイノルズ数 10^6 オーダー以下で乱流の直接計算を実現し、このような流れに対し、従来の風洞試験やループ法試験と同程度以上の精度で製品の性能や信頼性を予測する。	自動車、ターボ機械、船舶、燃焼器等を対象に最大1千億グリッド規模の計算を1日で実行できるシステムを開発した。本システムにより、レイノルズ数 10^6 オーダーの乱流の直接計算が可能となり、風洞試験、水槽試験に匹敵する精度をもつ製品の予測技術が確立された。各ものづくり分野のコンソーシアム等において、本課題で開発したシステムの実証計算を実施しその有用性を確認した。 (補足) 開発したシステムを活用することにより、従来の計算技術では実現できなかった製品の予測技術が実証された。例えば、自動車に対しては、空気抵抗1.2%の予測精度を達成するとともに、走行安定性、振動・騒音等の製品性能予測技術を確立した。ターボ機械の分野では送風機・ファン内部の音源である渦の運動を全て計算することにより発生する空力騒音を数dBの精度で予測する技術を確立した。船舶の推進抵抗予測では300億グリッド(世界最大)の解析により予測精度1%以下を達成し水槽代替計算の目的を立えた。また、燃焼器に対しては実機燃焼器出口における温度およびNOx濃度、それぞれの予測精度10%、30%程度以下を達成した。これらの実証計算はもの国内の主要ものづくりメーカーと連携して実施しており、今後はものづくりメーカーで構成されるコンソーシアム等を介して開発したシステムの利活用が広がることが期待される。	○着実に達成
	4	多目的設計探索による設計手法の革新に関する研究開発 研究代表者:大山聖(JAXA)	大規模設計最適化問題のための多目的設計探索フレームワークを開発する。製品の設計において頻りに直面する多くの設計目的(性能、重量、コスト、信頼性など)間のトレードオフの関係を明らかにし、全体を最適化する手法を開発するとともに、得られた最適解から設計情報を効率的に抽出する新しいデータマイニング手法を開発する。企業との共同研究によりその有効性を実証することで設計期間の大幅な短縮を目指す。	平成27年度末までに、大規模設計最適化問題のための高効率多目的設計探索フレームワークを開発・実証し、製品開発プロセスにおいて、新しく開発したフレームワークによる高性能化かつ高信頼性を有する製品の設計手法を確立する。また、現実の設計最適化問題に多目的設計探索フレームワークを適用し、従来設計よりも優れた設計候補を発見し、設計問題に関する有益な知見を抽出できることを実証する。	平成27年度までに京を用いた大規模多目的設計探索のためのアプリ群を開発した。また、京および開発されたアプリ群を利用して、JAXA、マツダ(株)、東海旅客鉄道(株)、横浜ゴム(株)が取り組んでいる実設計問題をとき、革新的な設計を得ることに成功した。 (補足) 平成27年度末までに、MOEA/D(現在世界で最も性能が良いと言われている手法の1つ)よりも性能がよい多目的設計最適化アプリCheetahなどを開発。HPC/PFとして一般にも公開。本課題で開発した設計データ解析アプリSPMIは現在18社9大学で利用されている。また多数目的設計最適化問題を応答曲面法を用いて効率的に解くための新しい探索指標も開発。 (1)マツダとの共同研究として車両構造の多目的設計探索を実施。優れた設計が多数発見され、車両構造重量最小化と共通部品点数最大化の間のトレードオフ関係が初めて明らかにされた。得られた知見により、大幅な開発・製造コストの削減と、重量を削減したことによる燃費の向上及びCO2排出量の削減が見込まれる。これらの結果は日刊工業新聞2015年2月16日号にも掲載された。(2)東海旅客鉄道との共同研究として現在開発中の超電導リニアの空力音響多目的設計探索を実施。得られた知見により、車内騒音を低減しつつ、0.1%程度の空気抵抗を削減できることが期待され、これにより超電導リニアの大幅な運航経費の削減が見込まれる。(3)横浜ゴムとの共同研究として自動車用タイヤ空力形状の多目的設計探索を実施。その結果、抵抗と同時に揚力も低減できる形状に関する革新的な知見を得ることに成功。得られた成果は横浜ゴムからニュースリリースとして発信されると共に試作品が2015年の東京モーターショーにおいて公開された。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
	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 研究代表者: 中島憲宏 (JAEA)	大型プラントの耐震シミュレーションを高精度化し、施設全体を丸ごとシミュレーションすることにより、地震時の大型プラントシステムの安全性を高精度に評価する。これにより、安全面やコスト面において国際的に競争力の高い大型プラントの実現に貢献する	平成27年度末までに、大型プラントの丸ごとシミュレーションを行い、プラント内における大きな応力が発生する箇所、及びその分布などに基づき、プラント全体での俯瞰的な耐震裕度評価とプラント各部ごとの詳細な評価を可能とする。	平成27年度2月、高温工学試験研究炉の丸ごとシミュレーションを行い、プラント内における大きな応力が発生する箇所、及びその分布などに基づき、プラント全体での俯瞰的な耐震裕度評価とプラント各部ごとの詳細な評価を可能とした。この成果である詳細な計算結果は、高温工学試験研究炉の安全審査申請活動等の補助資料として活用されている(今後も計画を継続)ことから、事業的貢献も含めて、大幅に目標達成できたと考える。 (補足) 産業応用においては、㈱荏原製作所殿が設計・製作する、一般社会インフラ・プラント向けターボポンプの一例であるビットパレル型立軸ポンプ(約9万解析部品)を対象に、 (1) 「京」を使って、「組立構造解析」で「結合部を有する機械構造物」の振動解析/耐震性評価を実施し、解析結果を確認した。 (2) ビットパレル型立軸ポンプの「あるがまま」状態を丸ごとシミュレーションで実現。従来の俯瞰的な分析に加えて、局所や詳細な部位の分析を同時に可能とした。 また、千代田化工建設㈱殿が設計・施工する石油化学プラントのストラクチャと呼ばれるプラント機器を支える構造体(約15万解析部品)を対象に、 (1) 「京」を使って、「組立構造解析」で耐震性評価に不可欠な数値分析計算結果の「確かさ」を大幅に向上する原理を確立した。 (2) 組立品の「あるがまま」状態を丸ごとシミュレーションで実現。従来の俯瞰的な分析に加えて、局所や詳細な部位の分析を同時に可能とした。 (3) 東北地方太平洋沖地震などの地震波を使って、機器の揺れをシミュレーションで再現し、機器や施設の開発・設計に生かし、国内外の耐震性の高いインフラ整備に貢献した。	○着実に達成
	1	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定 研究代表者: 初田哲男 (理研)	格子量子色力学(QCD)の高精度シミュレーションにより、クォークから核子、さらに核子から多種の原子核を構成する「強い力」の基礎理論を検証する。それに基づいて陽子などクォーク3個からなる複合粒子(バリオン)間に働く有効相互作用を決定する。これにより、新粒子の存在や中性子星の上限質量の信頼できる予言への貢献が期待される。	平成27年度末には、格子QCDシミュレーションによるハドロン質量の計算精度を1%に引き上げる。さらに、バリオン間の中心力やテンソル力の決定、エキゾチックハドロンに対する予言を行う。	世界最大級の物理体積でゲージ配位を生成し、ハドロン質量の精密決定(計算制度1%)に達成し、バリオン間の中心力・テンソル力の計算による決定、エキゾチックバリオンの予言にはじめて成功した。 (補足) ・物理点近傍におけるゲージ配位生成(格子サイズ=96 ³)を行い、安定なハドロン質量に対して、当初目標の統計誤差0.1%レベルを達成した。 ・バリオン間相互作用の中心力およびテンソル力について、京で生成した物理点近傍でのゲージ配位を用いた定量的計算を進め、核力のテンソル力、ハイベロン力の中心力とテンソル力に関して統計的に有意な結果を得ている。 ・物理点近傍でのストレンジネスを含むエキゾチックダイバリオン(HおよびΩ)に関する定量的予言を行える統計精度に達している。	○着実に達成
	2	大規模量子多体計算による核物性解明とその応用 研究代表者: 大塚孝治 (東大)	酸素位までの質量のアイソトープについては、第一原理計算を用い、より重い原子核については、QCDから得られる有効核力を用いた手法を用い、原子核の量子多体シミュレーションを実施し、それぞれの原子核をこれまでにない精度で計算する。その結果から、実験的に未知なエキゾチック原子核の存在限界・構造・反応を解明し、予言する。これにより、学術的・社会的に重要な原子核の計算への貢献が期待される。	平成27年度末には、京に向けた大規模量子多体計算コードを開発し、大規模量子多体計算によって、中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造の進化を明らかにする。元素合成過程の解明、長寿命核分裂生成物、二重ベータ崩壊核、という応用につなげる。さらに、いまだ未開拓な3体核力の姿を明らかにする。軽い原子核の第一原理計算においては、20個程度の核種の計算を、より困難なものを加え40個程度へ広げる。	京に向けた大規模量子多体計算コードを開発し、大規模量子多体計算によって、中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造とその発現メカニズムを解明し、核力中のテンソル力成分や3体力の役割を明らかにした。長寿命核分裂生成物などの応用に繋げることに成功した。軽い原子核の第一原理計算においては、現時点でネオン20までの41個の核種についての計算を完了した。 (補足) ・大規模量子多体計算コードは、モンテカルロ殻模型計算コード開発・高度化に成功した。京で12000ノードを超える並列性能・理論性能比30%を超える高い実行効率を示した。 ・軽い原子核の第一原理計算において、目標では6主殻までだったが、一部7主殻模型空間までの計算が実行でき、模型空間にとらわれないエネルギー期待値の推定を可能とした。さらに、ペリウム同位体のクラスター構造解明をおこなった。 ・エキゾチック原子核の量子構造の進化に関して、中性子過剰ニッケル同位体などの構造計算に成功し、「形の共存」現象とメカニズムを解明した。長寿命核分裂生成物の電気的励起モードによる高い励起エネルギーへの光吸収過程の断面積の計算に成功した。連続状態に対応する励起スペクトラムの計算を可能にしたのは、方法論における革新的進歩による計画にない発展である。また、カルシウム48のニュートリノレス二重ベータ崩壊核行列要素を求めることに成功した。 ・追加した3体核力に関して、3体力効果を2体近似によって有効相互作用にとりこむ手法を確立し、マグネシウム近傍の中性子過剰核の「反転の島」の記述に成功した。	○着実に達成
5						

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
	3	超新星爆発およびブラックホール 誕生過程の解明 研究代表者:柴田大(京大)	ニュートリノ加熱機構に関する様々な観点を考慮しながら、高精度な一般相対論的(磁気、非磁気)流体計算及びニュートリノ輻射輸送計算によって、これまで再現されていない重力崩壊型超新星爆発及びブラックホールの誕生過程を解析する。特に、ニュートリノ加熱機構がもたらす爆発への寄与を定量的に評価する。これにより、ブラックホールや中性子星の誕生過程、ガンマ線バースト機構の解明への貢献が期待される。	平成27年度末には、ニュートリノ加熱機構を考慮した空間3次元のニュートリノ輻射流体計算によって、これまで再現されていない重力崩壊型超新星爆発過程を解明する。一般相対論的な磁気流体計算や輻射流体計算により中性子星連星の合体過程を解き明かし、近い将来の観測研究に資する。	世界初の空間3次元のニュートリノ輻射流体計算により、ニュートリノ加熱機構による超新星爆発機構の有効性を示した。世界初の一般相対論的なニュートリノ輻射流体計算により、中性子星合体が重元素合成の有効機構であることを示した。 (補足) ・空間3次元、エネルギー空間1次元を考慮した超新星爆発に対する輻射流体計算を当初の目標通り平成25年までに当時世界で初めて実行し、ニュートリノ加熱機構が超新星爆発に有効であることを示した。 ・中性子星合体に対する一般相対論的磁気流体計算を、それ以前の世界最高解像度よりも3倍高い解像度で当初の目標通り実行し、合体時に発生するケルビン・ヘルムホルツ不安定性により1016ガウス以上の強磁場を持つ大質量中性子星が誕生することを明らかにした。 ・中性子星合体に対する一般相対論的輻射流体計算を当初の目標通り平成26年度に実行した。特に合体時に放出される中性子過剰物質が速い中性子捕獲による重元素合成に適した性質を持つことを世界で初めて示した。 ・当初の予定通り平成27年度に、超新星爆発に対する空間軸対称の輻射流体計算をボルツマン方程式を解きながら世界で初めて実行した。	○着実に達成
	4	ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第一世代天体形成 研究代表者:牧野淳一郎(理研)	ダークマター構造形成シミュレーション、銀河形成シミュレーションの計算コードを開発し、それらを使って大規模数値シミュレーションを実現する。その結果から、第一世代天体形成、銀河形成の過程を明らかにする。これにより、宇宙の構造形成の統一的理解への貢献が期待される。	平成27年度末には、宇宙構造形成の骨組を作るダークマターによる構造形成について、現在の世界レベルに比べて2桁大きな粒子数でシミュレーションを行うことで、世界で初めて最小質量から銀河団スケールまで適用可能な理論モデルを構築する。さらに、このモデルをベースにして第一世代天体形成、銀河形成の過程をシミュレーションによって明らかにする。	ダークマターハローのシミュレーションコード開発は、目標以上の実行効率50%以上を実現した。第一世代天体形成、銀河形成の過程をシミュレーションによって明らかにした。当初計画になかった太陽対流圏シミュレーションでは世界をリードする極めて大きな成果をあげた。 (補足) ・ダークマターハローのシミュレーションコード開発は、目標以上の実行効率50%以上を実現できた。(この結果、2012年度のゴードン・ベル賞を受賞した。) ・他の課題(銀河中心ブラックホール、惑星形成、初期銀河形成)は、基本的に当初計画通りの成果を実現した。 ・当初計画になかった太陽対流圏シミュレーションでは世界をリードする極めて大きな成果をあげた。	◎大幅に達成

HPCI 戦略プログラム推進委員会の設置について

平成 22 年 12 月 22 日
文 部 科 学 省
研 究 振 興 局

1. 設置の趣旨

HPCI 戦略プログラムにおいては、世界最高水準の次世代スーパーコンピュータ「京」を中核とする革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（以下、HPCI という）を、最大限有効に利用し科学的・社会的なブレークスルーを得るという研究開発における戦略性が求められるとともに、我が国の計算科学技術推進体制構築というこれまでにない取組を行うことが求められる。また、以上を行うにあたっては計算科学研究機構との連携・協力も必須であり、その運営には相当程度の困難があると予想される。このため、分野ごとに定常的かつ強力にフォローアップすることが必要であり、この一環として、1名のプログラマネージャ（PM）、各分野を担当する分野マネージャ（FM）1名ずつ計5名と計算科学研究機構長からなる HPCI 戦略プログラム推進委員会を設置する。

2. 対応事項

- (1) 戦略機関より提出された実施計画等の改善提言・指導
- (2) HPCI 戦略プログラムに係る戦略機関の事業進捗状況の把握、提言・指導
- (3) その他 HPCI 戦略プログラムの推進に関すること

3. 構成及び運営

- ・ HPCI 戦略プログラム推進委員会は、研究振興局長の私的諮問機関として設置する。
- ・ HPCI 戦略プログラム推進委員会の構成員は、別紙のとおりとする。
- ・ プログラマネージャ及び分野マネージャの求めに応じて、HPCI 戦略プログラム推進委員会等を開催する。

4. 設置期間

平成 22 年 12 月 22 日～平成 28 年 9 月 30 日

5. その他

- ・ HPCI 戦略プログラム推進委員会の庶務は、研究振興局情報課計算科学技術推進室が処理する。

HPCI戦略プログラム事後評価に係る点検経緯

HPCI戦略プログラム作業部会（戦略分野主催）

- ・事後評価に係る報告書について
- ・最終成果報告資料（プレゼンテーション資料）について

分野1（メール審議） 平成28年1月26日（火）～平成28年2月3日（水）

分野2（メール審議） 平成28年2月7日（日）～平成28年2月12日（金）

分野3 平成28年2月9日（火） 13時30分～16時30分

分野4 平成26年2月3日（水） 14時～18時

分野5（メール審議） 平成28年2月6日（土）～平成28年2月10日（水）

HPCI戦略プログラム推進委員会

第12回

日時：平成28年2月15日（月） 15時30分～18時10分

- (1) 戦略プログラム事後評価について
- (2) 戦略機関からのヒアリング
- (3) 全体審議

特定高速電子計算機施設（スーパーコンピュータ「京」）に係る評価委員会

第2回

日時：平成28年3月9日（水） 13時～16時

- (1) 「京」の運営について
- (2) HPCI戦略プログラムについて
- (3) その他

HPCI 戦略プログラム推進委員会 委員名簿

○プログラムマネージャ

土居 範久 慶應義塾大学 名誉教授

○分野マネージャ

(分野1)

中村 春木 大阪大学 蛋白質研究所 所長/教授

(分野2)

寺倉 清之 物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 フェロー

(分野3)

矢川 元基 原子力安全研究協会 評議員会長

(分野4)

小林 敏雄 日本自動車研究所 顧問

(分野5)

小柳 義夫 神戸大学 計算科学教育センター 特命教授

○計算科学研究機構長

平尾 公彦 理化学研究所計算科学研究機構 機構長

(合計7名)

(平成28年3月現在)