

## CREST 研究領域「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」 追跡評価報告書

### 総合所見

「次世代マルチスケール・マルチフィジックス・高精度・高分解能シミュレーション技術の開発」を戦略目標とした本研究領域では、研究代表者や共同研究者の多くが、研究領域終了の2012年に本格運用されたペタフロップス超スーパーコンピュータ「京」の開発に関わり、本研究課題で開発されたシミュレーションコードが「京」利用における成果の主力を担い、計算手法やソフトウェアの開発を一層進めてきた。実際に、いくつかの研究課題は「京」の戦略プログラムに選定され、「京」を利用したことで得られる画期的な成果を挙げることで世界的な賞(ゴードン・ベル賞、シュレーディンガーメダル)を受賞している。他にも、多くの研究代表者は受賞の機会を得ており、目覚ましい活躍が伺える。また、研究領域終了後も、研究代表者や共同研究者の多くが国のプロジェクトやCREST等に参画し、また科学研究費助成事業に採択され、精力的な研究活動を継続している。更に、本研究領域から、次世代エクサスケール級スーパーコンピュータ「ポスト京」構築に向け中心的な働きをしている人材の多くを輩出している点や、若手の育成の面に関しても十分役割を果たしていることも特筆に値する。その結果として、科学技術基本計画での重点分野である、「ものづくり、創薬・バイオ、宇宙、気象・海洋・地球温暖化、地震・防災」といった多岐にわたる分野において、「計算科学」がその威力を発揮している状況を創出した原動力となっているという点で、本研究領域の果たした役割は高く評価できる。

研究終了後の研究成果や科学技術の進歩への貢献には二つの側面があるように見受けられる。一つは、物理モデルや計算方法として新たなものを開発、それをコンピュータ上に実装して、それまで不可能だった計算を可能にして見せたものである。受賞の多くはこういった主として計算科学としての学問上の貢献が評価されたものと言える。もう一つは、応用分野に特化し、モデル化を含めた計算精度の向上を果たしたものが挙げられ、全球雲解像モデル、全球規模から都市規模までのマルチスケール現象のシミュレーション、大気・海洋・陸面・海氷結合モデル、また地震発生モデルおよび災害予測シミュレーションなどは、その研究分野のみならず、一般の社会にも大きなインパクトを与えている。「京」の稼働から「ポスト京」構築へ向けて、シミュレーションによる物理現象の解明と自然災害の予測に対する要求は高まってきており、特に2011年の東日本大震災後は、自然災害や環境に対する貢献が強く求められている。本研究領域においては、関連する多くの研究課題で大きな貢献が見られ、その成果も国際的に高い水準にある。

以上のように、研究終了時期が「京」の稼働した時期でもあり、計算手法やソフトウェアの開発などにおいて顕著な成果が得られ、また研究成果は幅広い分野において進展しており、本研究領域は非常に成功したと言え高く評価できる。

## 1. 研究成果の発展状況や活用状況

本研究領域の研究代表者および共同研究者の多くが、研究領域終了の2012年に本格運用されたペタフロップス超級スーパーコンピュータ「京」の開発に関わり、また研究終了後も、本研究領域で開発されたコードが「京」利用における成果の主力を担い、更に計算手法やソフトウェアの開発を一層進めてきた。また本研究領域で扱った課題は、「ものづくり、創薬・バイオ、宇宙、気象・海洋・地球温暖化、地震・防災」といった幅広い分野にわたっているが、研究終了後も、こういった幅広い研究分野における我が国のシミュレーション科学で重要な位置をしめている。更に、次世代エクサスケール級スーパーコンピュータ「ポスト京」構築に向け中心的な働きをしている人材の多くを輩出していることも、特筆に値する。

研究代表者や共同研究者の多くは、研究終了後においても、多くの国のプロジェクトやCREST等に参画し、また多くの科学研究費助成事業に採択され、精力的な研究活動を継続している。研究内容も、本研究領域でのキーワードである「シミュレーション」としてではなく、シミュレーションを使った各々の研究内容に関する発展的な研究テーマとして資金の獲得をしており、本研究領域で培った解析手法やソフトウェア開発の上での展開である。

CRESTの研究の継続と発展に関する研究成果は、研究者によって多少の数の違いはあるものの、概ね多くの論文で発表している。

研究終了時期が「京」の稼働した時期でもあり、研究成果は幅広い分野において進展しており、更に「ポスト京」へとつながる計算手法やソフトウェアの開発などにおいて、顕著な成果が得られている。

## 2. 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果

### (1) 研究成果の科学技術の進歩への貢献

研究成果の科学技術への波及として、研究代表者のうち2005年度開始の8名中の4名が受賞、2006年度開始の7名中の5名が受賞、2007年度の6名中の3名が受賞しており、優れた成果を通して科学技術の進歩への貢献が伺える。押山は、「京」を用いた優れた計算手法の開発による高速計算の成果により、ゴードン・ベル賞(実効性能部門最高性能賞)を受賞している。「京」の非常に高い実行性能を世界に知らしめたと同時に計算科学の研究者に大きな目標と希望を示したと言える。中辻は、WATOCの2016年度シュレーディンガーメダルを受賞している。また、諸熊は、複雑分子系の理論研究の発展に対する多大な貢献で「2012年度文化功労者」の顕彰、また分子の構造・機能・反応を設計するための理論科学・計算化学の構築に対して「2015年度日本学士院会員」に選定されており、本研究結果を含めて国際的にも高い水準にある研究と評価できる。

研究成果の科学技術の進歩への貢献には二つの側面があるように見受けられる。一つは、新たな物理モデルの提唱や計算方法として新たな手法を開発、それをコンピュータ上に実装して、それまで不可能だった計算を可能にして見せたものである。上述した受賞の多くはこういった貢献が評価されたものと言える。もう一つは、応用分野に特化し、モデル化を含

めた計算精度の向上を果たしたものが挙げられ、新たな物理モデルの提唱や計算アルゴリズムの改良など、研究成果の科学技術の進歩への貢献が伺える。例えば、バイオ分子間相互作用形態の階層的モデリングを進めた研究は、生体分子に特化したモデル化により、実際の結合自由エネルギーを精度良く予測できることを示し、インパクトを与えている。一方、気象や地震といった自然災害に対しては、全球雲解像モデル、全球規模から都市規模までのマルチスケール現象のシミュレーション、大気・海洋・陸面・海氷結合モデル、地震発生モデルおよび災害予測シミュレーションなども、一般の社会にも大きなインパクトを与えている。「京」の稼働をうけて、シミュレーションによる物理現象の解明と自然災害の予測に対する要求が高まっており、特に2011年の東日本大震災後には、自然災害や環境に対する貢献が強く求められている。本研究領域においては、関連する多くの研究課題で大きな成果が見られ、関連分野の科学技術の進歩に大きな貢献をし、また国際的に高い水準にある。

## (2) 研究成果の応用に向けての発展状況

研究終了後の研究成果の応用分野への適用として、以下の様々な材料の構造解析や自然現象の解明などに取り組み、より大規模なシミュレーションを効率的に実施できる計算手法の開発と、「京」などのスパコン性能の大幅な向上による信頼度の高いシミュレーションが実施されている。

ものづくり分野への応用として、ナノ材料(Si/Ge系ナノ構造、SiC-MOS界面層、グラフェン、シリセン等)、超電導材料、また機能性材料(リチウムイオン二次電池、ナトリウムイオン電池、太陽電池など)など、産業上で重要な材料やデバイスにもシミュレーションが適用され、原子・分子レベルの計算技術が、実験では観測が難しい時間・空間スケールの現象の理解に有用であり、分子・材料の設計に役立つことを示した。

創薬・バイオ関連では、大規模計算をより効率的に実施できる手法を開発し、DNA 光回復酵素、べん毛モーター、アクチンの圧力耐性メカニズム、創薬に関わるタンパク質の構造などのシミュレーションを実施した。

宇宙関連では、超大規模モデルによる宇宙プラズマ粒子シミュレーションを適用し、宇宙船の設計に貢献した。

気象・海洋・地球温暖化については、シミュレーションの高分解能化・高精度化を継続的に実施し、台風や集中豪雨などの予測精度を飛躍的に向上させた。例えば、高分解能化・高精度化した「全球雲解像度モデル」を適用することにより、将来、気象庁などの気象予報スパコンが「京」の1/4~1/2程度の性能に達すれば、ある日時の高精度なアンサンブル予測が可能になると期待される。また、全球規模から都市規模までのマルチスケール現象のシミュレーションモデルでは、全球と焦点を当てた地域を階層的に連結して、全球と地域を同じ計算手法で解析することが可能になり、大気大循環、海洋中の運動、台風、ゲリラ豪雨、都市の温度分布など、全球から都市スケールに至るシミュレーションを行い、都市におけるヒートアイランドや豪雨などの生活環境に直結する現象の解明に貢献している。更に、海洋の

中・深層循環について、北極航路の開閉時期を予報できる北極海氷況予報システムの開発により、海運業などへの貢献が大きい。

地震・防災関連では、観測と計算を融合した地震発生予測シミュレーションにより、30～40年程度で繰り返し発生する宮城沖地震と、数百年の繰り返し間隔を持つ2011年東北地方太平洋沖地震を引き起こす階層的アスペリティモデルを提示した。また、実験では不可能な詳細で一体的な耐震シミュレーション技術を開発し、原子炉等のプラントなどを対象として統合的な耐震裕度評価を実施した。更に、福島原子力発電所事故で環境中に放出された放射性セシウムの粘土鉱物やゼオライトへの吸着メカニズムについて、第一原理計算を用いた解析を行っている。

以上のように様々な研究成果の応用がなされている。特に、気象や災害のシミュレーションは直接的に社会的・経済的なインパクトを与え、実際に研究成果の応用がなされていると言える。しかしながら、ものづくり、創薬・バイオといった分野では、基礎科学としての成果が主であり、まだ現状では産業応用で大きな社会的波及効果をもつまでにはいたっていないように見受けられる。今後の地道で継続的な研究発展や、またアカデミア側が民間企業との協働研究も積極的に行い、シーズ研究が結果的に社会的なニーズにも応えられる研究体制の整備が必要と思われる。

### (3) その他の特記すべき波及効果

昨今頻発する台風・集中豪雨などの異常気象に関連して、全球雲解像モデル開発と全球超高解像度シミュレーションは、国際的な熱帯域の観測実験プロジェクトと連携しており、これによって国際的な研究者ネットワークが形成されただけでなく、観測とモデルの連携により、熱帯気象の研究や「京」を中心とした計算科学における人材育成に大きく貢献するなどの波及効果が見られる。また、全球マルチフィジックス・マルチスケールのシミュレーションモデルは、地球温暖化等のグローバルな問題だけでなく都市スケールの詳細なシミュレーションを実行可能であり、民間企業との協力で現地情報処理をする「エッジコンピューティング」技術と地球シミュレータを組み合わせた局地気象予測システムの開発を行っている点が特筆できる。これはゲリラ豪雨や猛暑時の暑熱環境予測の高精度化に寄与するもので、2020年の東京オリンピックにおける実利用が望まれる。

一方、巨大地震とそれに伴う津波はわが国における最も大きな自然災害リスクと言えるが、特に南海トラフなどの海溝型巨大地震発生の危険性が切迫しているといわれる昨今、本研究課題で開発された地震・津波の高精度シミュレーション・システムは、それらの予測において大きな社会的な波及効果があると期待される。

ものづくり分野では、Webサイトで研究成果である一部のシミュレーションソフトの公開などが行われている。また研究室単位でもgithubの利用によるソースコードの公開、TwitterなどのSNSなどで成果物公開の告知、さらに高度情報科学技術研究機構(RIST)などが主催する成果ソフトの講習会等(京コンピュータなどでの利用法)など、研究成果のシミュ

ュレーションソフトのユーザを広げる努力がされている。開発者以外に広く利用されているソフトはまだ少数だが、このような技術の普及への地道な努力が、シミュレーション技術の材料設計への積極活用やアカデミアと企業との接点となりえ、近年の機械学習と併用したマテリアル・インフォマティクス(M. I)などの技術への人材提供や、その技術の裾野の広がりにつながると期待される。

関連した事項として、研究課題に関わる多くの学生も含めて「京」の利用が広がるとともに産業界におけるスーパーコンピュータの利用促進が活発化している。「京」の稼働を受けて多くの利用者が生まれ、まだ十分とは言えないが、HPCI(「京」と全国の大学や研究機関に設置されたスーパーコンピュータ等を多様なユーザーニーズに応える革新的な共用計算環境基盤)や JHPCN(学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点)の活動が産業界へのスーパーコンピュータの普及を後押しすることで、一部の大学の利用にとどまらない開かれたシミュレーション技術の普及が進んできている。

### 3. その他

研究分野の範囲が非常に広く、このような幅広い分野を横断的にテーマとして選び、研究領域終了後も「京」および「ポスト京」へとつながる我が国における「シミュレーション科学」の中核となる人材を輩出し、国際的にも高い評価を得ている点は、高く評価できる。

科学技術や計算科学的な側面での成果は大きく、論文数や受賞件数は多い一方で、特許の数や、民間企業との共同研究による実際的な社会への貢献が必ずしも十分でないように思えるのは、ものづくりや創薬・バイオといった分野での問題点と言える。このことは、今後の更なる発展のために、課題があることを示している。

また、開発したソフトウェアを維持・発展させてゆく仕組みや普及させてゆく仕組みが、諸外国に比べて我が国はまだ弱く、多くは研究者の努力によって支えられている現状に対して、十分な制度上の支援への検討が必要であろう。