

## 事後評価票

(平成 25 年 3 月現在)

1. 課題名 スーパーコンピュータ「京」の開発・整備

2. 評価結果

(1) 課題の達成状況

### ○研究開発目標

スーパーコンピュータの開発については、Linpack 性能 10 ペタフロップスを所期の目標である平成 24 年 6 月よりも早い平成 23 年 11 月に達成したことは非常に高く評価できる。また、平成 23 年 6 月及び 11 月にスーパーコンピュータの世界ランキングである TOP500 で第 1 位を獲得するとともに、平成 23 年 11 月に HPCG Award (多角的でより現実的なスーパーコンピュータの性能指標となる 4 項目のベンチマークテストランキング) の全項目で最高性能を達成し、最終的な目標のみならず当初の目標も達成していることは特筆すべき成果である。

研究教育拠点 (COE) の形成については、平成 22 年 7 月に理化学研究所において「計算科学研究機構」を発足させ、その後「京」の運用にあたる運用技術部門 4 チーム、計算科学及び計算機科学の研究にあたる研究部門 16 チームを整備し、海外の研究機関等と MOU を締結する等、国際的な研究開発拠点として活動を開始している。戦略機関とも連携して連携推進会議、国際シンポジウム等を度々開催しており、所期の目標を十分に達成している。

中間評価における指摘事項についても、システムの変更に伴う影響への対処について、ベクトル向けアプリケーションのチューニング支援を実施することなどにより、利用者への影響を最低限にする方策がとられているなど、適切に対応できており、全体として十二分に研究開発目標を達成したと評価できる。

### ○研究開発体制

スーパーコンピュータの開発については、開発主体である理化学研究所内に「次世代スーパーコンピュータ開発実施本部」を設置し、プロジェクトリーダーの下で開発グループが実際のシステム開発を、企画調整グループがプロジェクト進行に関わる企画調整を行う体制を構築した。スーパーコンピュータの開発に経験と実績のある企業との委託契約に基づき、綿密な連携の下、開発が進められたことは研究開発体制として妥当であった。システム構成の大幅な変更の際にも、中間評価の指摘を踏まえ、マネジメント体制を強化するため、プロジェクトリーダーへの助言を行う「次世代スーパーコンピュータ技術諮問委員会」を設置するなどプロジェクトの推進体制を見直すことにより、この困難な状況乗り越えて所期の目標を達成した研究開発体制は高く評価できる。

また、戦略機関との協力体制の下、早い時期からアプリケーションの最適化作業を実施することにより、「京」の共用開始後早期に成果創出が可能な環境を整えることができ、「京」の利用研究が平成 23 年 11 月及び平成 24 年 11 月に 2 年連続のゴードンベル賞受賞につながったことは、システムの整備のみならずアプリケーション開発の観点からも研究開発体制として評価できる。

## (2) 成果

### ○研究開発成果

「京」は高性能・低消費電力の CPU (SPARC64 VIIIfx) や Tofu インターコネクト (6 次元メッシュ／トラス結合) など高い独創性・優位性を有するハードウェアにより、Linpack において 29 時間以上の連続実行で 93% を超える実行効率を実現するなど、計算速度のみならず、優れた実行効率、信頼性を誇っている。特に消費電力については、12.7MW という汎用性の高いスーパーコンピュータとして優れた性能を達成しつつ、世界に先駆けて Linpack10 ペタフロップスを達成したことは非常に高く評価できる。

また、平成 23 年 6 月及び 11 月に TOP500 で第 1 位を獲得、HPC Award 全 4 項目で最高性能を達成、「京」の利用研究がゴードンベル賞を 2 年連続で受賞したことは、汎用性の高いスーパーコンピュータであることを実証しており、我が国の技術力の高さを世界に発信するとともに、震災からの復興に向けて歩み始めていた国民を科学技術の面から勇気づけることとなった点についても高く評価できる。

### ○研究開発成果の利活用

「京」の利用については、これまで戦略機関を中心にアプリケーションの整備が進められてきており、世界的に見て優れた成果が出つつあり、今後、早期に先導的な成果の創出が期待されている。また、戦略機関の利用に加えて、産業利用・若手人材枠を含めた公募による一般利用枠で門戸を広げ、幅広い利用者・分野での成果創出が期待される利用の仕組みとされていることは評価できる。今後、利用者支援体制をさらに充実させることにより、成果創出の更なる加速が期待される。

技術の波及効果については、富士通が、「京」に適用した技術をさらに向上させ、高性能、高拡張性、高信頼性を合わせ持ち、かつ省電力性に優れたスーパーコンピュータ PRIMEHPC FX10 の販売を平成 23 年 11 月より開始し、国内の研究機関や海外に販売しており、学術や産業等の多くの分野で基盤装置としての利用が期待されている。

また、今回開発された高い計算性能と信頼性を有する「京」のハードウェアの技術は、今後の IT 技術全般に活用できるものであり、得られた特許をはじめとする知的財産の戦略的な活用にも期待したい。

### ○人材育成

本プロジェクトに参画した理化学研究所においては大型研究開発プロジェクトを通して、世界最先端の研究施設の開発という国家プロジェクトの開発を担う高度な人材が育

成された。特に当初の概念設計からのシステム変更や事業仕分けによる計画の変更などプロジェクトの幾度の状況変化にも柔軟かつ的確に対応し、プロジェクトを完遂したことにより、マネジメント面での貴重な人材が育成されたと言える。

また、富士通においても独創性・優位性を有するハードウェア等の開発を通じて有能な人材が育成されている。また、様々な重責に堪えて世界一位を獲得した成功体験も人材育成という観点で大きな意味がある。

今後は今回のプロジェクトで育成された幅広い人材が「京」の運用や今後のスーパーコンピュータの開発に参画していく体制を整えることが重要である。

### (3) 今後の展望

#### (総論)

「京」は所期の目標を十二分に達成し、昨年 9 月に共用を開始しており、その利用による成果創出が期待される段階となりつつある。

「京」の利用については、文部科学省において取り組んでいる戦略プログラムの利用枠や産業利用枠を含めた一般利用により、成果創出に向けた利用の枠組みが構築されるとともに、計算科学技術の研究教育拠点である理化学研究所計算科学研究機構において利用の高度化研究を進める体制が整えられている。それに加え、「京」の利用の推進にあたっては、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に基づき、登録施設利用促進機関がなお一層の利用者支援を行うことにより、早期の画期的な成果創出につなげることを期待したい。なお、「京」の第一回の一般公募については、共用開始の前倒しの影響もあり、公募期間が十分でなかったとの意見もあったことから、今後改善が望まれるところである。

また、スーパーコンピュータは計算科学技術の発展のみならず科学技術の発展を牽引する基盤であり、産業競争力の強化にも寄与するものであることから、今後とも我が国としてもスーパーコンピュータの開発・整備を行っていくことが重要である。今後のスーパーコンピュータの開発・整備に際しては、本プロジェクトを通じて得られた技術や経験、人材や体制を維持・強化し、戦略的に進めていくことが必要である。

#### (HPCI 計画への発展)

事業仕分けの指摘等を踏まえた計画の変更により、「京」の開発計画は、利用者などからなるコンソーシアムの主導の下、「京」を中核として国内の主要なスーパーコンピュータ等をネットワークで結び、多様な利用者ニーズに応える高度な計算環境を実現するインフラである HPCI（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）を構築する計画の一部と位置づけられた。これにより、大学等のスーパーコンピュータと連携し、「京」を幅広く共同利用するための体制を整備するという、プロジェクト開始当初の目標をさらに発展させ、全国の幅広い利用者が国内の計算資源を効率よく利用できる仕組みにより、スーパーコンピュータの幅広い利用と成果創出に資する体制が構築されたことは特筆すべき成果である。今後もコンソーシアム及び HPCI を維持し、ネットワー

クの強化も含め、有効に機能させることにより、我が国の計算科学技術の発展に寄与することを強く期待する。

#### （システム構成の変更）

「京」のシステム構成については、平成 21 年 4 月に実施した中間評価作業部会において、①米国の開発が加速している中、現行計画ではプロジェクトの目標達成は困難、②複合システムの将来的な可能性は認めるものの、現時点の開発状況を踏まえれば複合システムとしての性能は十分でなく、一定の見直しを行うことが必要、と認識され、理化学研究所に対し、複合システムの在り方を含めプロジェクトの目標達成を念頭に置いた最適なシステム構成の再検討を要請した。これを受けて、理化学研究所において再検討が実施され、その過程で、ベクトル部の開発を担う NEC から、経営環境の悪化などを総合的に考えた上での経営判断として、製造段階への不参加が表明された。その後、新たなシステム構成案として、平成 23 年 11 月のスーパーコンピュータサイト TOP500 で Linpack 性能 10 ペタ FLOPS を達成するスカラ型単一のシステムが提案され、同作業部会において、プロジェクトの目標達成を念頭に置いたシステム構成として妥当であると評価されたことから、スカラ型単一システムに変更されることとなった。プロジェクト開始段階でその後の様々な状況変化をすべて見通すことは難しいという事情はあるものの、今後同様のプロジェクトを実施する場合には、技術動向等について十分見通し、計画を立案することが望まれる。

また、このシステム変更により、ベクトル部を含む複合システムの構築はできなかったが、一方、HPCI の構築により、全国の利用者は HPCI を通じて、それぞれのニーズに応じてベクトル型のスーパーコンピュータも利用できるようになっている。また、「京」の高性能なスカラプロセッサの中に演算加速機構という形でベクトル部の理念が一部反映される形になっている。さらに、文部科学省が実施している「将来の HPCI システムのあり方の調査研究」においても、ベクトル型システムの調査研究がなされており、将来に向けた技術的検討も進められている。こうした状況も踏まえ、ベクトル型スーパーコンピュータも含めた今後の我が国のスーパーコンピュータシステムのあり方について、利用者ニーズも勘案し、さらに検討がなされることを期待する。

#### （コスト・消費電力）

なお、消費電力に対する厳しい制約の中で、目標を達成したことは高く評価できるが、一方で、海外の最新のシステムと比較して、演算性能あたりのコストが高価であることや、性能あたりの消費電力が多いとの意見もあった。「京」は海外のシステムと比較して、優れた実行効率、信頼性、汎用性を有していることや、海外のシステムがその開発・整備にどの程度の国費を投入しているか正確には把握できないなどの状況もあり、全体としてのコストパフォーマンスを、一概に比較することは困難であるが、コストや消費電力は今後のスーパーコンピュータの開発において重要な技術的課題であることも事実である。この点については、海外の企業は、これまで継続的に開発を続けてきたことにより経験や技術が蓄積されていることによるとの指摘もあり、今後とも我が国としてスー

パーコンピュータの開発を継続するのであれば、今回の「京」の開発で培った経験や技術的蓄積を適切に維持・強化することによって、これらの課題が解決されることを期待したい。

(その他の課題等)

また、プロジェクトの進め方に関し、以下のいくつかの指摘があった。これらについて、今後の「京」の運営またはスーパーコンピュータの開発・整備に適切に反映をされていくことを期待する。

- ・国内には SPring-8、SACLA、J-PARC など世界最高水準の大規模実験施設が多数あり、これらの施設と連携し、膨大なデータの情報処理・シミュレーション等で「京」の活用を図るべきである。
- ・プロジェクトの意義、研究開発のあり方や開発の進捗について国民に十分伝えられたといえず、納税者に対する責任として、次世代を担う子どもたちや若者の関心を喚起する上でも、そうした点について十分伝えられるよう取り組んでほしい。
- ・企業機密等を適切に管理しつつ、理化学研究所のみならず幅広い人材が開発に参画できる開発体制の構築を図るべき。
- ・超高速ネットワーク技術の取り組みが遅れており、今後の研究開発ではこれを含めたシステム本体、アプリケーション技術、システムソフトウェア技術、超高速ネットワーク技術の研究開発を総合的に推進してほしい。
- ・システムソフトウェアやアプリケーションの開発については、国際標準とするために、論文発表などの成果の発信とともに、米国などとの国際協力を進めることも検討すべき。

# 研究開発課題の事後評価結果

## 【次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発】

平年 25 年 1 月

ナノテクノロジー・材料科学技術委員会

## ナノテクノロジー・材料科学技術委員会 委員名簿

|         |                                |
|---------|--------------------------------|
| 伊丹 敬之   | 東京理科大学大学院イノベーション研究科教授          |
| 射場 英紀   | トヨタ自動車株式会社電池研究部長               |
| 潮田 浩作   | 新日本製鐵株式会社技術開発本部フェロー            |
| 大林 元太郎  | 東レ株式会社研究本部顧問                   |
| 岡野 光夫   | 東京女子医科大学先端生命医科学研究所長・教授         |
| 長我部信行   | 株式会社日立製作所中央研究所長                |
| 片岡 一則   | 東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻教授       |
| ◎ 川合 知二 | 大阪大学産業科学研究所特任教授                |
| 北川 進    | 京都大学物質－細胞統合システム拠点副拠点長          |
| 栗原 和枝   | 東北大学原子分子材料科学高等研究機構教授           |
| 小池 康博   | 慶應大学理工学部教授                     |
| 小長井 誠   | 東京工業大学大学院理工学研究科電子物理工学専攻教授      |
| 小林 昭子   | 日本大学文理学部化学学科教授                 |
| ○ 榊 裕之  | 豊田工業大学学長                       |
| 袖岡 幹子   | 独立行政法人理化学研究所基幹研究所主任研究員         |
| 曾根 純一   | 独立行政法人物質・材料研究機構理事              |
| 田中 一宜   | 独立行政法人科学技術振興機構研究開発戦略センター上席フェロー |
| 中村 栄一   | 東京大学大学院理学系研究科化学専攻教授            |
| 橋本 和仁   | 東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻教授          |
| 松下 祥子   | 東京工業大学大学院理工学研究科准教授             |

(◎主査、○主査代理)

## 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発に係る

### 事後評価検討会 構成員名簿

|         |                         |
|---------|-------------------------|
| ○ 魚崎 浩平 | (独) 物質・材料研究機構           |
|         | 国際ナノアーキテクトニクス拠点 コーディネータ |
| 栗原 和枝   | 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授  |
| 小池 康博   | 慶應義塾大学 理工学部 教授          |
| ◎ 榊 裕之  | 豊田工業大学 学長               |
| 志賀 昭信   | ルモックス技研 主宰              |
| 高尾 正敏   | 大阪大学 特任教授               |
| 塚田 捷    | 東北大学 特任教授               |
| 樋渡 保秋   | 金沢大学 名誉教授               |

(◎主査、○主査代理)

# 「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」の概要

## 1. 課題実施期間及び評価時期

平成18年度～平成23年度

( 中間評価:平成20年度に実施 )

## 2. 研究開発概要・目的

ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性について、ペタフロップス超級最先端・高性能汎用スーパーコンピュータを利用することにより解析、予測することが可能となる計算科学理論・方法論を確立するとともに、そのためのソフトウェアの開発を行う。これにより、ナノテクノロジー・材料分野はもとより、ライフサイエンス分野やエネルギー分野等との融合領域も対象とし、飛躍知の発見・発明及び産業力の強化につなげることを目的とする。

具体的には、以下の3つのグランドチャレンジアプリケーションの開発（（１）～（３））及びこれらに共通する項目（（４））に係る開発等を行う。

### （１）次世代ナノ情報機能・材料

次世代情報化社会に必要とされる新たな原理による超高集積回路、光・電流等に対する超高速応答素子、更には超高密度磁気記憶素子に対する計算科学的開発基盤の確立を目指して、

- ① 超高集積デバイス、高強度情報材料等の次世代ナノ複合材料
- ② 新機能スピントロニクス材料、光スイッチ等の次世代ナノ電子材料
- ③ 超高密度磁気記録デバイス等の次世代ナノ磁性材料

等の次世代ナノ情報機能・材料について、その探索、設計を可能とする理論を構築し、実空間密度汎関数法、密度行列繰り込み群法や量子・古典モンテカルロ法を中心とした計算手法の高速化を探るとともに、シミュレーションソフトウェアの開発を行う。

### （２）次世代ナノ生体物質

生命現象が示す多様な階層構造の中で、分子スケールの生体物質が携わるナノプロセスを解明し、難病の克服、創薬、ドラッグデリバリー等バイオ分野の課題解決に資するため、生体物質にかかわる計算科学のナノ基盤を確立する。このため、タンパク質、イオンチャネル高度シミュレーション技術の確立、ウイルスの分子科学、がん細胞の細胞膜、生体物質輸送のナノプロセス、新規ナノ生体物質の創製等、次世代ナノ生体物質にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行う。

### （３）次世代エネルギー

化石燃料からの脱却を目指して、アルコール燃料サイクルの確立、燃料電池、光触媒や光合成によ

る太陽エネルギーの固定、スーパーキャパシタの開発、高効率物質変換等の課題を解決するために、ペタフロップス超級スーパーコンピュータを活用する高精度・大規模量子化学計算、統計力学計算を中軸として、分子動力学法等とも連携した次世代エネルギー技術にかかわるシミュレーションソフトウェアの開発を行う。

#### （４）共通項目

次世代ナノアプリケーション連携ツール：開発された多様なアプリケーションソフトを、プログラムに変更を加えることなく任意に組み合わせ、これを容易に連携・結合し、効率的に実行するための疎結合型の連携ツールの開発を行う。

##### ① システム運用（平成１８年度～平成２０年度）

平成１５年度に導入された実証研究用スーパーコンピュータにグリッドミドルウェア等を導入し、グリッド環境を整備し、運用する。また、システムの効率的な運用を実現するために、ハードやソフトの構成から利用ルール等にいたるまで、実際のナノシミュレーションに即して、実運用レベルでの最適化を行う。

##### ② 次世代ナノ統合ソフトウェアの研究開発・管理運用（平成２１年度～平成２３年度）

本プロジェクトで開発されたソフトウェアを統合した次世代ナノ統合ソフトウェアの開発と管理運用を行う。

### ３．研究開発の必要性等

#### 【必要性】

ナノスケールの領域で初めて発現する特有の現象・特性を解明するシミュレーション技術確立し、次世代情報機能・材料分野、次世代生体物質分野、次世代エネルギー分野、及びこれらの融合領域において、飛躍知の発見・発明にとどまらず、産業力の強化をもたらすことが求められている。その実現のために、超並列プロセッサを組み込んだペタフロップス規模の次世代スーパーコンピュータ性能をフル発揮することを目標とした、超並列処理を効率よく利用することを可能とする計算科学の新しいアルゴリズム開発や方法論の研究開発が必要である。

#### 【有効性】

本プロジェクトは、次世代情報機能・材料分野では、超高密実装を実現するナノ電子デバイス、光スイッチ、磁気記録など、次世代生体物質分野では、ウィルスの克服、ドラッグデリバリーシステム、タンパク質制御など、次世代エネルギー分野では、バイオマスからのエタノール生成などの実現に活用できる計算科学の確立を研究開発の目標としており、これらを通じて、我が国の産業競争力や豊かな未来社会の実現に貢献するものである。

#### 【効率性】

従来にない設計思想である超並列コンピュータに適合するソフトウェアの構築を効率的に実行するために、先行事業である超高速コンピューター網形成プロジェクトの中で実施されてきた、ナノテクノロジー分野の計算科学に資するソフトウェア開発成果を継承し、その中から最終的に六つの中核アプリケーションと、これら

と連携する38の付加機能ソフトウェアを抽出し、開発に取り組むこととしている。さらに、これらのアプリケーションを連携して運用するために二つの連携ツールの開発に取り組み、これらは全て開発完了時には公開とし、速やかに成果を社会還元する体制を構築することとしている。

#### 4. 予算(執行額)の変遷

プロジェクト予算(執行額)額(単位:百万円)

| 年度            | H18                     | H19                     | H20                                 | H21                          | H22                   | H23                   | 総額                                  |
|---------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------------------|------------------------------|-----------------------|-----------------------|-------------------------------------|
| 執行額           | 496.0                   | 650.5                   | 612.7                               | 594.0                        | 369.5                 | 288.0                 | 3,010.7                             |
| 内訳<br>(間接経費含) | 分子研<br>東大<br>東北大<br>産総研 | 分子研<br>東大<br>東北大<br>産総研 | 分子研<br>東大<br>京大<br>東北大<br>名大<br>産総研 | 分子研<br>東大<br>京大<br>東北大<br>名大 | 分子研<br>東大<br>京大<br>名大 | 分子研<br>東大<br>京大<br>名大 | 分子研<br>東大<br>京大<br>東北大<br>名大<br>産総研 |

#### 5. 課題実施機関・体制

研究代表者: 平田 文男

研究機関: 自然科学研究機構 分子科学研究所

| 業 務 項 目         | 担当機関等                                                                            | 研究担当者                                                                                                                    |
|-----------------|----------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (1)次世代ナノ情報機能・材料 | 東京大学 物性研究所<br><br>理学系研究科<br>京都大学(H20～H23)<br>東北大学(H18～H21)<br>産業技術総合研究所(H18～H20) | ○高山 一(H18)<br>○常次 宏一(H19～H20)<br>川島 直輝(H21～H23)<br>○常行 真司(H21～H23)<br>遠山 貴己(H20～H23)<br>前川 禎通(H18～H21)<br>寺倉 清之(H18～H20) |
| (2)次世代ナノ生体物質    | 分子科学研究所<br>名古屋大学(H20～H23)                                                        | 平田 文男<br>○岡崎 進                                                                                                           |
| (3)次世代エネルギー     | 分子科学研究所                                                                          | ○平田 文男                                                                                                                   |
| (4)課題共通・統括管理    | 分子科学研究所<br>名古屋大学(H20～H23)                                                        | ◎平田 文男<br>○岡崎 進                                                                                                          |

◎課題代表者、○サブテーマ代表者

## 事後評価票

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. 課題名 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| 2. 評価結果                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| <p>(1) 課題の進捗状況</p> <p>ナノテクノロジー分野及びその融合領域を対象としたグランドチャレンジアプリケーションの開発において、以下のとおり、6本の中核アプリケーションが開発され、次世代ナノ材料の解析やナノ生体物質の挙動のシミュレーション等でその有効性が示されるとともに、38本の付加機能ソフト及び2本の連携ツールが開発された。</p> <p>① 次世代ナノ情報機能・材料<br/>         中核アプリ：「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT)」、「動的密度行列繰り込み群法 (DDMRG)」、「大規模並列量子モンテカルロ法 (ALPS/looper)」<br/>         付加機能ソフト：20本</p> <p>② 次世代ナノ生体物質<br/>         中核アプリ：「高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト-Modylas-」、「高速量子化学計算ソフト (FM0/MP2)」(③との共同開発)<br/>         付加機能ソフト：6本 (うち1本は、③と共通)</p> <p>③ 次世代エネルギー<br/>         中核アプリ：「液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM」、「高速量子化学計算ソフト (FM0/MP2)」(②との共同開発)<br/>         付加機能ソフト：13本 (うち1本は、②と共通)</p> <p>中間評価における指摘事項に対しては、おおむね必要な対応がなされている。その中で、実験研究者、企業研究者との連携については、これらの研究者及び計算科学者を含む「連続研究会」を実施するなど評価される取組がなされているが、その結果が実際の研究に反映されるまでには至っておらず、今後の課題である。</p> |
| <p>(2) 研究成果の評価と今後の研究開発の方向性</p> <p>次世代コンピュータは、従来の計算機とは全く異なる超並列プロセッサであり、これを効率よく利用する超並列処理を可能とする計算科学の新しい方法論やアルゴリズム開発が必要とされてきた。本プロジェクトではこの課題を十分に解決して、特に「実空間第一原理ナノ物質シミュレータ (HP-RSDFT)」(ゴードン・ベル賞最高性能賞を受賞) や「液体の統計力学理論計算 RISM/3D-RISM」など、中核アプリケーションの高度化を中心に卓越した成果が達成された。</p> <p>なお、現時点で完成とされているソフトウェアについても、今後更なる改良や最適化に努めることが重要である。また、本プロジェクトの成果を大きな経済的・社会的波及効果につなげる上で、開発されたソフトウェアを活用した研究開発課題の目標設定を計算科学者主導ではなく、実際に産業界や実験科学者が抱えている大きな課題の解決につなげるという観点から行うべきである。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |

### （３）今後の展望

プロジェクトで開発されたソフトウェアをより多くの研究者が活用できるようにするためには、優れた中核アプリケーションに加えて、それらの付加機能ソフト、連携ツール、ユーザーインターフェースなどを更に整備するとともに、ソフトウェアの利用に係る専門的サポートや情報発信等の利用促進に係る取組を充実させていくことが重要である。



# 研究開発課題の事後評価結果

【次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発】

平成25年3月

次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

事後評価委員会

**「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」  
事後評価委員会 委員名簿**

|        |                                        |
|--------|----------------------------------------|
| 青柳 睦   | 国立大学法人九州大学情報基盤研究開発センター<br>センター長        |
| 甘利 俊一  | 独立行政法人理化学研究所脳科学総合研究センター<br>特別顧問        |
| 小原 雄治  | 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構<br>国立遺伝学研究所 特任教員 |
| 佐久間 一郎 | 国立大学法人東京大学大学院工学系研究科<br>教授              |
| 清水 謙多郎 | 国立大学法人東京大学大学院農学生命科学研究科<br>教授           |
| 富田 勝   | 学校法人慶應義塾大学先端生命科学研究所 所長<br>環境情報学部 教授    |
| ○長洲 毅志 | エーザイ株式会社<br>理事                         |

○ 主査                      計 7 名（敬称略 50 音順）

# 「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」の概要

## 1. 課題実施期間及び評価実施時期

平成18年度～平成24年度

中間評価 (第1回) 平成20年10月, (第2回) 平成22年12月,

事後評価 平成25年3月

## 2. 研究開発概要・目的

基礎方程式に基づく解析的アプローチと大量の実験データから未知の経路と法則に迫る実験的アプローチの二つを同時に進めることで、ペタスケールという桁違いの性能を持つスーパーコンピュータの性能をフルに発揮できるソフトウェアを開発し、従来の計算機性能では不可能であった規模で計算することで、生体现象の深い理解と新たな発見を目指すと同時に、医薬品や医療機器、診断や手術方法の開発につなげることを目的とする。

具体的には、以下の六つの研究開発チーム・ワーキンググループを設置し、グランドチャレンジアプリケーションの開発等を行う。

### (1) 分子スケール研究開発

量子化学、全原子分子動力学、粗視化モデルの三つの階層のソフトウェアとそれらの階層を接続するソフトウェアを完成させ、これらのソフトウェアを「京」上で大規模に動作するように高度化することによって、タンパク質系のマルチスケールシミュレーションを実現する。

具体的には、以下のソフトウェア開発を行う。

- (i) 密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算 (ProteinDF)
- (ii) 量子化学計算 (Platypus-QM), 量子化学計算/分子動力学計算 (Platypus-QM/MM)
- (iii) ハイブリッド QM/MM 反応自由エネルギー計算 (Platypus-QM/MM-FE)
- (iv) 全原子分子動力学計算 (MARBLE)
- (v) レプリカ交換分子動力学計算インターフェイス (Platypus-REIN)
- (vi) マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法開発の基盤となるクラスライブラリ (Platypus-MM/CG)
- (vii) 粗視化モデル計算 (CafeMol)

### (2) 細胞スケール研究開発

これまでは、細胞内を均一な場と仮定した解析がなされていた細胞シミュレーション研究に対し、細胞内に存在するオルガネラなどの不均一な場を有する細胞モデルを構築し、そのモデル中において代謝や物質の移動等の現象を統一的に記述し、様々なシミュレーション機能を搭載して、細胞内の時空間シミュレーションを実現することを目指す。

具体的には、以下のソフトウェア開発を行う。

- (i) 肝細胞シミュレータの開発
- (ii) 肝小葉シミュレータの開発と病態予測解析への応用
- (iii) 細胞シミュレーション統合プラットフォーム (RICS) の開発

### (3) 臓器全身スケール研究開発

病態の予測や治療法の検討のための生体力学シミュレーションを行い、シミュレーションによる次世代型治療器の設計支援や、より低侵襲な治療法の開発支援を目標とする。

具体的には、以下のソフトウェア開発を行う。

- (i) 血栓シミュレータ (ZZ-THROM (=ZZ-EFSI + Kinetic MC+MD))
- (ii) 超音波治療シミュレータ (ZZ-HIFU)
- (iii) 心臓シミュレータ (UT-Heart)
- (iv) 全身血管網シミュレータ (ZZ-VASC)
- (v) 重粒子線シミュレータ (ZZ-DOSE)

### (4) データ解析融合研究開発

ゲノムと疾患の間にあるシステムと薬剤応答を解析するソフトウェアを、ゲノムデータ解析、遺伝子ネットワーク解析、タンパク質ネットワーク解析、及びデータ同化によるシミュレーションの観点から開発し、最適な数十遺伝子規模のネットワークからゲノムワイドネットワークまで、動的・静的・パーソナルネットワークの推定することで疾患の理解と新たな知見を見いだすことを目標とする。

具体的には、以下のソフトウェア開発を行う。

- (i) 大規模遺伝子ネットワーク推定プログラム (SiGN)
- (ii) 網羅的タンパク質ドッキング解析プログラム (MEGADOCK)
- (iii) 大規模ゲノム関連解析 (ParaHaplo, EXRat, NGSAnalyzer)
- (iv) 生命体データ同化プログラム (LiSDAS)
- (v) データ解析融合プラットフォーム (SBiP: Systems Biology integrative Pipeline)

### (5) 脳神経系研究開発

神経細胞、局所回路レベルでの情報処理、また、脳全体レベルでの入出力（刺激－運動）変換の処理及びその処理の学習を対象としたソフトウェアの研究開発を実施、具体的には下記の項目を目標とする。

具体的には、以下のソフトウェア開発・シミュレーションを行う。

- (i) 神経細胞シミュレーション (NeuroMorphoKit)
- (ii) 局所回路シミュレーション (NEST, CMDN)
- (iii) 視覚系シミュレーション (NEST)
- (iv) 昆虫嗅覚系シミュレーション (IOSSM)

### (6) 生命体基盤ソフトウェア開発・高度化

本プロジェクトが完了するまでの期間、特に「京」の性能実証、及び他チームのアプリケーション

高速化への貢献に注力し、以下の目標のため、ソフトウェア開発等を行う。

- (i) 2012 年のゴードンベル賞を目標に、本プロジェクトで開発するアプリケーションの中でも第一優先度で「京」上での走行を計画している第一走者アプリケーションの高度化を進め、「京」での科学的成果創出・性能デモンストレーションに貢献する。
- (ii) プロジェクトで開発されたアプリケーションの「京」への移植支援、性能チューニングを実施する。
- (iii) 10 億化合物規模の大規模仮想化合物ライブラリの開発を行う。また、その公開・実利用を推進する。

### 3. 研究開発の必要性等

#### 【必要性】

過去においては、生命科学分野では他の分野（物理、工学、気象など）に比べて計算科学技術、とりわけスーパーコンピュータの活用が行われてこなかった。生命科学では他分野と異なり、その複雑さゆえに基礎方程式から出発して計算で到達できる範囲で今まで生命現象を計測できなかった、若しくは基礎方程式が明らかになっていなかった。しかし、次世代スーパーコンピュータの開発や計測技術の進歩によって、これらの問題が解決されるのではないかという期待が高まっていた。

解析的アプローチと大量の実験データから未知の経路と法則に迫る実験的アプローチの二つを同時に進めることで、ペタスケールという桁違いの性能を持つスーパーコンピュータの性能をフルに発揮できるソフトウェアを開発し、従来の計算機性能では不可能であった規模で計算することで、生体現象の深い理解と新たな発見を目指すと同時に、医薬品や医療機器、診断や手術方法の開発につなげることができる期待される。

#### 【有効性】

生命科学に関連した分野において分子・細胞・臓器全身・データ解析・脳神経系などの計算科学は、このプロジェクト以前はそれぞれ別々の研究領域であった。次世代スーパーコンピュータ「京」のソフトウェア開発のために、これらの研究領域を統合して一つのプロジェクトとして実施することにより、複雑な現象が多階層で関連する生命体の本質に迫っていく上で、大変意義がある。世界的に見てもこれだけの領域が一つにまとまったプロジェクトは過去に類がなく、我が国が「京」によって開発された計算技術によってリードしていく上でも、生命科学を統合的にシミュレーションするためにも、貢献するものである。

#### 【効率性】

そのような背景の中で、本プロジェクトでは、集中的に「京」に向けて、生命科学分野の計算科学技術の研究開発を行い、他の科学技術分野を凌駕するソフトウェア群を開発する。これはスーパーコンピュータの専門であるソフトウェアの高度化チームが各研究者と密接に連携し、始めてなし得ることである。このように開発されたソフトウェア群は、高速なスーパーコンピュータを生命科学分野で活用する上で重要な資産となっていくことと考える。

また開発ソフトウェアについては、ホームページ等での公開を行うとともに、代表機関である独立

行政法人理化学研究所において HPCI 計算生命科学推進プログラム及び情報基盤センターが協力して、今後も引き続き利用者への提供、利用支援を行っていくことで、社会還元、計算生命科学分野に貢献する体制を構築することとしている。

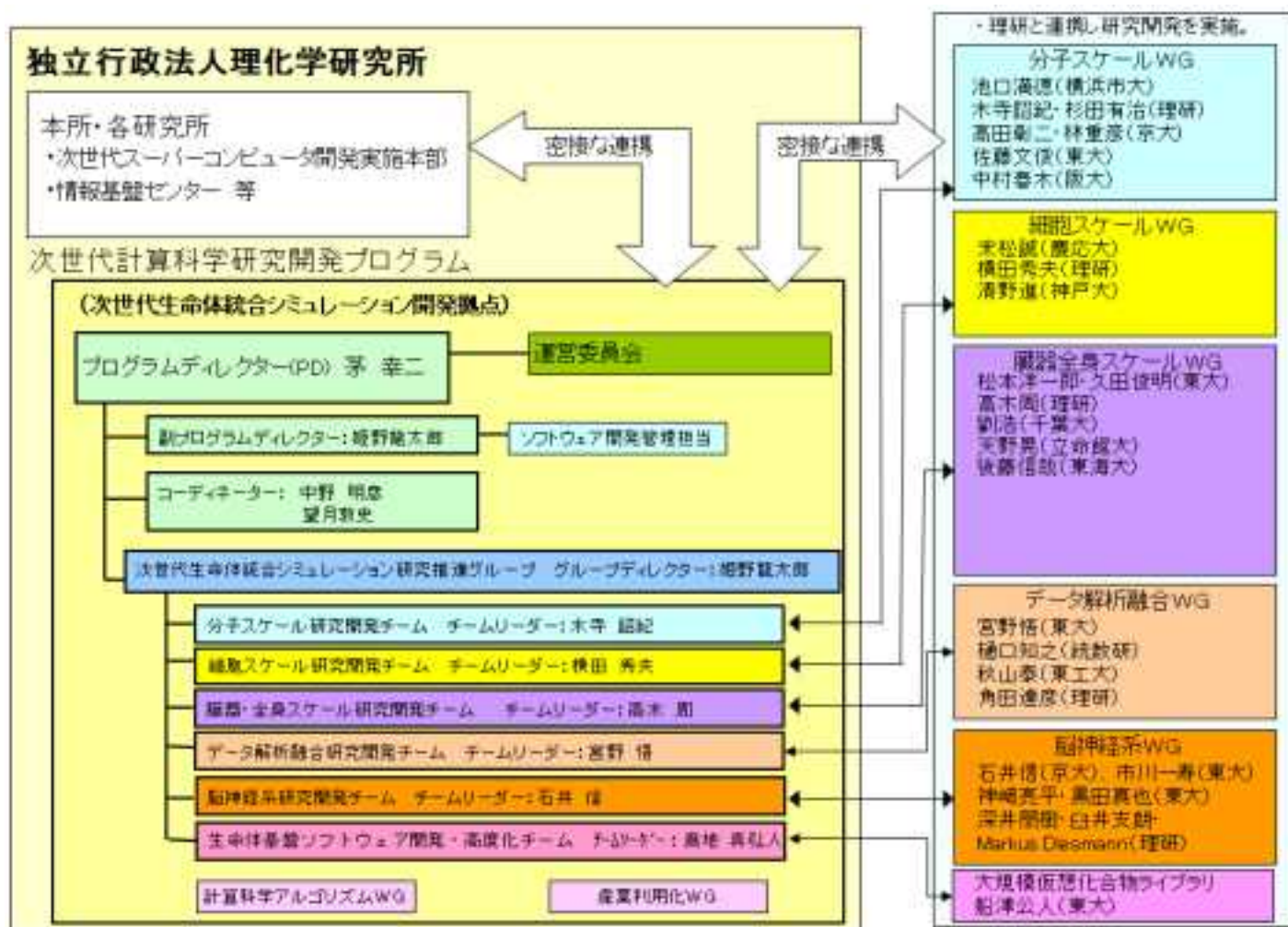
#### 4. 予算の変遷

| 年度       | 18年度   | 19年度                                                                                                                             | 20年度                                                                                                                             | 21年度                                                                                                                                      | 22年度                                                                                                                                      | 23年度                                                                                                     | 24年度                                                                                                     |
|----------|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 予算額(百万円) | 166    | 1,600                                                                                                                            | 1,500                                                                                                                            | 1,423                                                                                                                                     | 1,095                                                                                                                                     | 675                                                                                                      | 552                                                                                                      |
| 実施機関     | 理化学研究所 | 理化学研究所<br>横浜市立大学<br>京都大学<br>東京大学<br>大阪大学<br>慶應義塾大学<br>神戸大学<br>千葉大学<br>東海大学<br>統計数理研究所<br>東京工業大学<br>北陸先端科学技術大学院大学<br>東北大学<br>広島大学 | 理化学研究所<br>横浜市立大学<br>京都大学<br>東京大学<br>大阪大学<br>慶應義塾大学<br>神戸大学<br>千葉大学<br>東海大学<br>統計数理研究所<br>東京工業大学<br>北陸先端科学技術大学院大学<br>東北大学<br>広島大学 | 理化学研究所<br>横浜市立大学<br>京都大学<br>東京大学<br>大阪大学<br>慶應義塾大学<br>神戸大学<br>千葉大学<br>立命館大学<br>東海大学<br>統計数理研究所<br>東京工業大学<br>北陸先端科学技術大学院大学<br>東北大学<br>広島大学 | 理化学研究所<br>横浜市立大学<br>京都大学<br>東京大学<br>大阪大学<br>慶應義塾大学<br>神戸大学<br>千葉大学<br>立命館大学<br>東海大学<br>統計数理研究所<br>東京工業大学<br>北陸先端科学技術大学院大学<br>東北大学<br>広島大学 | 理化学研究所<br>横浜市立大学<br>京都大学<br>東京大学<br>大阪大学<br>慶應義塾大学<br>神戸大学<br>千葉大学<br>立命館大学<br>東海大学<br>統計数理研究所<br>東京工業大学 | 理化学研究所<br>横浜市立大学<br>京都大学<br>東京大学<br>大阪大学<br>慶應義塾大学<br>神戸大学<br>千葉大学<br>立命館大学<br>東海大学<br>統計数理研究所<br>東京工業大学 |

## 5. 課題実施機関・体制

研究代表者 茅 幸二 (独立行政法人理化学研究所  
次世代計算科学研究開発プログラム プログラムディレクター)

【平成 22 年度 12 月 第 2 回中間評価後の体制】



# 事後評価票

(平成25年3月現在)

1. 課題名 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

2. 評価結果

## (1) 課題の達成状況

ライフサイエンス分野及びその融合領域を対象としたグランドチャレンジアプリケーションの開発において、以下のとおり、31本のアプリケーションが開発され、細胞や全身での統合的なシミュレーション、データの高度な解析が可能となり、ライフサイエンス分野における計算科学技術を大きく発展させ、医用工学等への計算科学技術を駆使した新技術へ道筋を明らかにした。

具体的に6つの研究開発チームを設置し、以下のアプリケーションを開発した。

- ① 分子スケールでは密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算 (ProteinDF-K) をはじめとする8本のアプリケーション
- ② 細胞スケールでは、統合解析プラットフォーム (RICS-K) の1本の統合アプリケーション
- ③ 臓器全身スケールでは、心臓シミュレータ (UT-Heart) をはじめとする4本のアプリケーション
- ④ データ解析融合では、ハプロタイプ関連解析における統計検定ソフト (ParaHaplo-K) をはじめとする9本のアプリケーション
- ⑤ 脳神経系では、神経細胞シミュレーションツール (NEST) をはじめとする5本のアプリケーション
- ⑥ 生命体基盤ソフトウェアとして大規模並列用 MD コアプログラム (cppmd-K) をはじめとする4本のアプリケーション

産業利用化ワーキンググループを設置し、計31本中25本のアプリケーションについて、一般公開・ダウンロード可能としており、利用マニュアル等の利用者へ提供、利用支援を行っていることは高く評価できる。またチームリーダーを中心にマネジメントがよく機能しており、チーム内の効果的な連携を行っている。また並列化を指標とした進捗管理を導入し、進捗に応じた技術支援を行う等プロジェクトとしてのマネジメントが発揮されている。これは中間評価結果への対応の努力が見られるところである。

技術支援チームを設置したことは、プロジェクト全体の成果に大きく貢献したと言える。このようなグループは必要であり、プロジェクト開始後速やかに設置したことは評価されるべきである。また一部アプリケーションについては、固有のテーマを扱うため研究開発チーム内での孤立が見られるため、チームの枠を越えた解析に対する連携、マルチスケール解析等による統合的な解析まで発展させ、有機的な連携を更に進めてほしかった。

中間評価結果を受け階層固有のテーマを絞った結果、個別アプリケーションの完成度が飛躍的に高まり、「京」のライフサイエンス分野への応用のための先駆けとして十分機能するものとなった。この意

味で、公募時の課題は十分達成していると言える。

## （２）成果

「京」で使用するアプリケーションの開発としては、並列化が難しい問題に対し、並列度を上げることに努力し、一定の成果を上げている。臨床という重要な応用に貢献する成果があり、更に成果が産業応用されている点など高く評価できる。

ライフサイエンス分野のモデリング、シミュレーション手法についてはまだ開発途上の技術でありもう少し長いスパンでの研究が必要である。継続的なプロジェクトなどのもとで、さらなる展開に期待したい。

特にビッグデータ時代を迎えるバイオインフォマティクスにとってはライフサイエンスのための新しいアルゴリズムは非常に重要である。本プロジェクトにおいては、既存の確固としたアルゴリズムが存在する中での超並列化がほとんどであり、例えばベイズ解析と非線形解析との結合を行って新規アルゴリズムへのチャレンジが見られた点などは評価できるが、本格的なビッグデータの時代に向けてさらなる努力が必要である。

全体として、応用を意識したシミュレーションと出口にこだわりつつも、基礎的検証が必要な部分については地についた深掘りした研究姿勢が随所に見られ、プロジェクトとして今後の広がり期待が持てる。適切なシミュレーションモデルを設定し、並列計算の効果を有効に活用して、生命現象の一端の再現・解析が可能となっており、高く評価できる。

開発したアプリケーションによるシミュレーションについて、十分な計算時間を確保することで、ライフサイエンス全体に影響を与えるような計算結果を出すようなプロジェクトが推進されることを期待する。今後の、アプリケーションプログラムのさらなる改善・発展と社会への還元をこれから期待したい。

本プロジェクトで雇用した研究員 69 名は、プロジェクト終了後、アカデミックへ 46 名（うち 9 名が研究所 PI 職、24 名が大学教員）、民間企業へ 5 名、残りが他プロジェクトの研究員として輩出しており、多くが関連分野での研究者として研究を継続することとなっており、人材育成は良好であったと言える。

## （３）今後の展望

アプリケーション開発については、HPCI 戦略プログラム分野 1 で一部課題の継続が決まっている。また HPCI 戦略プログラムの課題からはずれたテーマでも今後も着実に進めていく展望を述べており、今後の継続・発展に期待できる。

今後、更に発展するには現状の延長線だけでなく、各シミュレータの基本的な構想から高度化・発展させる必要がある。現時点でできることは達成したと考えるが、さらなる発展の可能性を秘めているため、新たなモデルを構築する等の取組を行い、ライフサイエンスとしての予測を超えたメカニズムの理解や原理の発見まで期待したい。しかし、HPCI や新しいバイオインフォマティクスに裏打ちされたライフサイエンス分野の研究は基礎だけでなく直接ヒトの健康医療に結びつく知見を生み出すものである。

したがって、社会への還元についても企業との共同研究によるシミュレーション結果の応用を継続するよう期待したい。

HPCI 戦略プログラムでの継続課題については、産業応用として、創薬・医療へと更に結びつくことを期待したい。また、スーパーコンピュータの利活用は今後も継続・発展させていく必要があるため、今回実施した並列化支援の技術、ノウハウをどのように生かし発展させていくかも重要な課題である。開発した「京」及び「京」以外のスーパーコンピュータに対するアプリケーションの公開・利用者支援については、代表機関である独立行政法人理化学研究所で行うことが決まっているが、アカデミアばかりでなく応用分野を担う産業界の利用がカギとなるので情報発信等の利用促進のさらなる充実も重要である。