

今後取り組むべき計算科学課題について

～「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」アプリ分野からの報告～

理化学研究所 計算科学研究機構
富田浩文

2014年4月4日 @ 第1回ポスト京で重点的に取り組むべき
社会的・科学的課題についての検討委員会

アプリケーション分野・計算科学ロードマップ

文部科学省HPCI計画推進委員会の下、2011年に「今後のHPCI計画推進のあり方に関する調査検討WG」からの提言により設置された作業部会において「計算科学ロードマップ白書」をとりまとめ。2012年7月より、「将来のHPCIのあり方調査研究(アプリケーション分野)」として、白書での議論の更なる精査を実施。

目標: 我が国にとって重要で、近々に解決を要する社会的課題、科学的ブレークスルーとなりうる課題の抽出

- 社会的課題遂行のためには、戦略5分野間あるいはそれ以外の分野との連携が必要
- この課題を遂行するには既存のHPC使用分野だけでは不十分

- 理論・実験・観測研究者の意見を十分に聞く
 - 各分野では、彼らを交えて議論、執筆
 - 全体ミーティングにおいて招待講演
- 学会等の学術コミュニティとの意見交換
 - 各主要学会で特別セッションを設けるなどして広く意見を聞く。

各学術コミュニティの第一線で活躍する大学・研究機関、企業等の現役研究者約100名が一同に会する検討会を2012年7月～2014年2月までに合計12回開催。



まとめ方:

- 掲げた課題について、HPCIはどのように貢献するのか？
 - ・手法やアプローチ、計算科学外分野との連携
 - ・これまで行われてきた個別の計算科学分野の底上げが必須
- その結果サイエンスはどのように質的变化するか？
- 2018～2020年ごろに要求される計算機資源は？

「計算科学ロードマップ」

・10年後を見据えた社会的・科学的課題

計算科学ロードマップの構成

社会的課題への貢献 (2章)

創薬・医療
(2.1)

総合防災
(2.2)

エネルギー・
環境問題 (2.3)

社会経済予測
(2.4)

新しい科学の創出 (3章)

基礎科学の統一
(3.1)

ビッグデータの
有効利用 (3.2)

実験施設との
連携 (3.3)

分野間の
連携・統合

生命科学
(4.1)

物質科学
(4.2)

地球科学
(4.3)

ものづくり
(4.4)

基礎物理
(4.5)

社会科学
(4.6)

従来からの計算科学の分野

新しい
計算科学分野

2.1 創薬・医療

健康で長寿な社会を目指して

ビッグデータ
ゲノム解析

計算創薬による
コストダウン

ナノバイオ分子
材料開発

大規模実験施設連携による
生命科学の底上げ

疾患機構の詳細メカ
ニズムの解明

「生命」と「物質」の両面からヒトを理解し、大容量ゲノムデータ・実験データの高速処理と計算創薬など的高速計算により、テーラーメイド医療の実現を総力戦で挑む。

科学的企画・技術項目での連携

生命科学／物質科学／モノづくり分野／計算機科学／大規模実験施設

社会的・科学的課題

計算科学が貢献する具体的内容

次世代DNAシーケンサーからの大規模個人ゲノムデータの超高速処理

例えば、がんの種類に応じたゲノム上の特徴を抽出

複数の因子が複合的に関わる疾患の解明

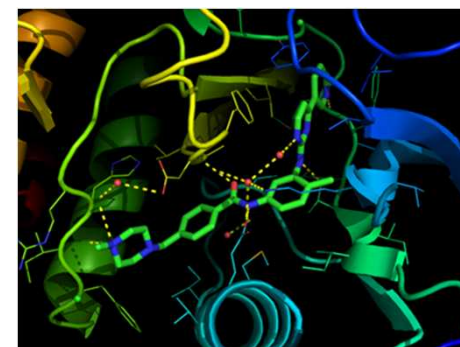
ゲノム情報をもとに遺伝子ネットワーク解析を行う。

計算創薬により創薬過程での大幅なコスト低減・開発期間短縮

高精度高信頼性シミュレーションによる計算スクリーニングを大量に行い、候補となる薬物の同定

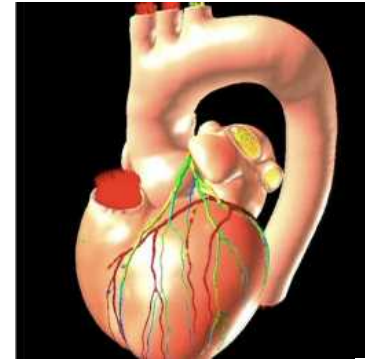
より現実に近い大規模生命要素環境の中での現象・イベントの本質的理解

物質科学分野の手法などを応用し、細胞環境、ウイルス全体など巨大系を計算で解き、その理解を深め、副作用の少ない創薬に資する。



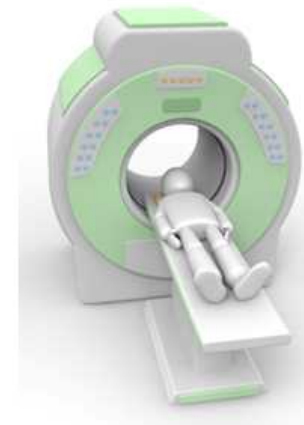
タンパク質と薬の結合

社会的・科学的課題	計算科学が貢献する具体的内容
生体分子を応用した新しい機能性ナノ分子材料開発支援	タンパク質を用いた次世代デバイス・バイオセンサー開発： ドラッグデリバリーシステム、高親和性の生体インプラントの開発、バイオフィルム形成阻止する洗浄表面の開発に資する。
血栓症などの疾患機構の解明	血流シミュレーションによる血栓形成理解により、心筋梗塞・脳梗塞などの発生イベントの解明
患者のQuality of Lifeの向上のための低侵襲治療支援	超音波シミュレーションによる痛みを伴わない治療法への貢献。
脳のメカニズム解明	脳機能の詳細なモデル化やリアルタイムシミュレーション
タンパク質や生体分子の立体構造の把握による創薬分野への基礎資料の提供	X線自由電子レーザー-SACLAとの連携により、タンパク質構造の4次元イメージング処理、それに基づく、動的構造のモデリング



HPCI戦略プログラム分野1
 東京大学 久田・杉浦・鷺尾・岡田研究室
 協力 富士通株式会社

臓器の精密シミュレーション(京)



X線自由電子レーザー施設(SACLA)

2.2①総合防災(地震・津波)

災害予測を科学的知見に基づきシステム化

大量の地震シナリオにもとづく被害想定

地震発生直後の被害状況の予測の迅速化

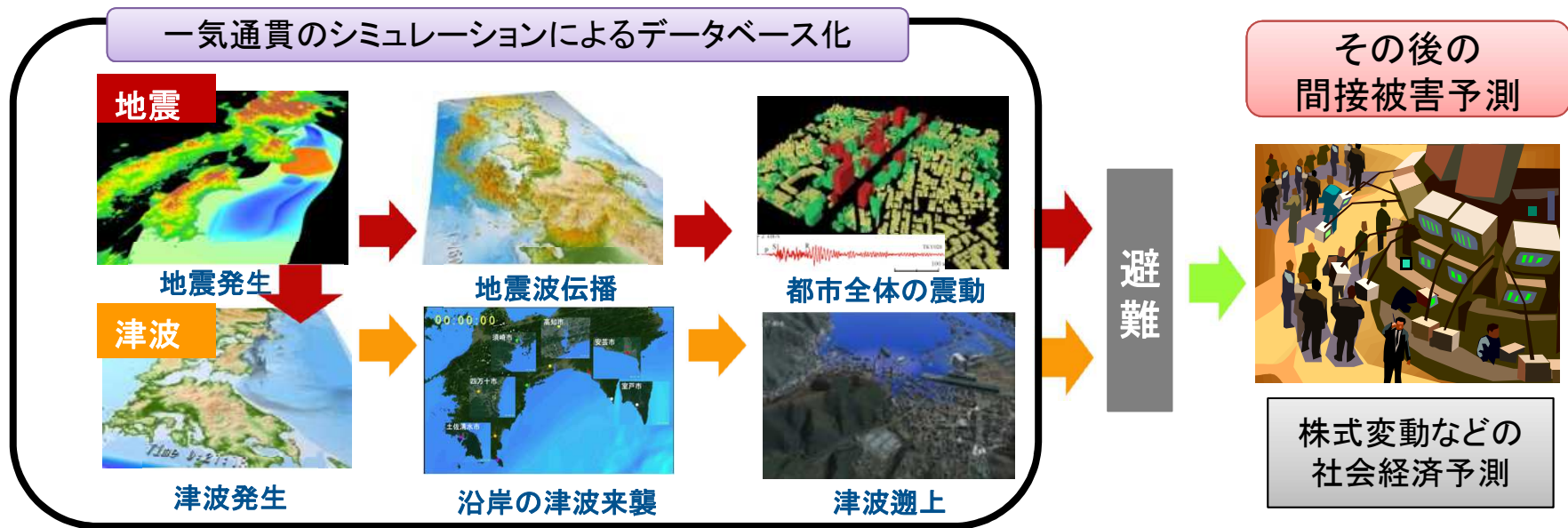
その後の、社会への間接的被害の評価

科学的企画・技術項目での連携

実務レベルへの下方展開による地域レベルでの被害想定的高度化へ(次世代への現業を見据える)

地震学／土木建築工学／社会経済学・数理科学／観測

社会的課題	計算科学が貢献する具体的内容
長期的減災対策と地震直後の被害対応のためのデータベースを構築	1000を超える多様な地震シナリオに対する大規模シミュレーションにもとづく災害予測をデータベース化し、多角的な検証を行う。
地震直後の複合的・連鎖的に被害を拡大させる「複合災害」への迅速な対応	地震発生後の津波・火災からの避難誘導の効率化し、適切な初動対応により被害の最小化を目指す。
地震発生後の、間接的被害のシミュレーション手法の開発	計算科学と数理経済学との協調により、マルチエージェントシミュレーションを精緻化し、長期的な減災対策に資する。



2.2②総合防災(気象災害)

高度な予測情報による災害対策のために

気候変動評価

様々な時空間スケールの
気象現象の予測精度向上

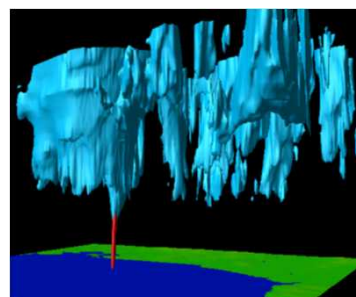
観測データの有効利用

竜巻などの小さな気象現象から、地球規模での気候変動を予測し、防災・減災に資する。

科学的企画・技術項目での連携

気象学／海洋学／計算機科学／データ同化技術／観測

社会的・科学的課題	計算科学が貢献する具体的内容
気候変動による顕著現象リスク評価	地球温暖化などの気候変動を予測し、将来気候における台風などの極端現象の動向を把握する
気温・水資源等の傾向把握に資する季節予報精度の向上	全球高解像度実験等により、季節予報精度に関わる季節内振動や季節変動の予測精度向上のための技術開発を行う
台風・豪雨・豪雪等の予測精度向上	アンサンブルシミュレーションやデータ同化技術により、誤差評価を伴う予測を行い、予測精度を向上させる
ゲリラ豪雨・雷・竜巻等の局地的極端現象の予測技術開発	物理過程の精緻化などにより、局地的な気象現象の予測を目指す
より正確な大気状態の把握	数値シミュレーションや観測から得られた情報をもとに大気状態を推定するためのデータ同化手法を高度化し、より正確な大気状態の把握および予測のための初期値作成を行う



局地的大雨や竜巻



台風予測、気候変動



ゲリラ豪雨
(C)株式会社フジ・ホーム



2.3 エネルギー環境問題

エネルギー利用と環境の調和

エネルギーを生み出す技術の開発

エネルギーを変換・貯蔵・伝送する技術の理解開発

エネルギーを効率的に利用する技術の開発



エネルギー消費に対する環境負荷の監視

エネルギーを「作る」「変換・貯蔵する」「使う」のサイクルの最適化を目指す。同時に環境への負荷をアセスメント。

科学的企画・技術項目での連携

物質科学／モノづくり分野／気象学／計算機科学／衛星など観測データ

社会的・科学的課題	計算科学が貢献する具体的内容
再生可能エネルギー(太陽光発電や風力発電、バイオマス)の有効利用のための研究	高精度・高分解能な気象モデルにより再生可能エネルギー効率利用のためのメガソーラー・集合的風力発電所立地条件アセスメントを行う。
メタンハイドレートやバイオマス利用技術の高度利用のための研究	分子動力学法によるメタンハイドレートの熱力学過程の解明、および有効媒質法と第一原理計算の連成によるバイオマス利用における酵素反応過程の解明
次世代半導体デバイスの開発	第一原理計算により、ナノ構造体の電子機能、構造安定性を解析し、新しい材料を使った高速動作・高集積・低エネルギー損失の半導体デバイスの開発
太陽電池・人工光合成素子の開発のための機構解明の本質的理解	第一原理計算による光吸収過程、電子・ホールキャリアのダイナミクスの理解および太陽電池・人工光合成素子の設計

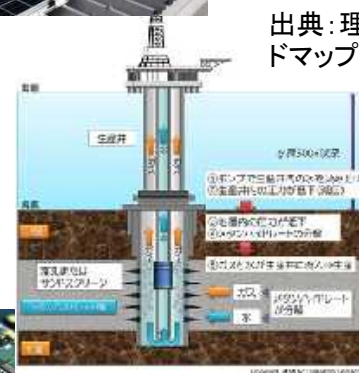


太陽光発電



風力発電

出典: 理化学研究所編『計算科学ロードマップ』,平成26年3月,27頁より



メタンハイドレート

出典: メタンハイドレート資源開発研究コンソーシアム



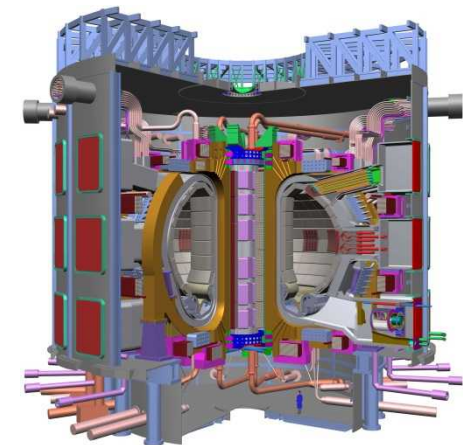
次世代電子デバイスの開発



バイオマス発電

提供: (株)吾妻バイオパワー

社会的・科学的課題	計算科学が貢献する具体的内容
触媒や電極として用いられる希少元素の代替物の探索	電気化学過程の詳細解明のため、第一原理に基づく電子状態計算による探索
二次電池や燃料電池など電力を効率的に貯蔵し取り出す技術開発	第一原理計算に基づき、燃料電池などの材料劣化機構の解明と予測やデバイス・材料の内部組織(界面・転移・不純物等)の理解をもとに設計や制御
強相関物質の理解による全く新しいエネルギー変換・伝送技術の開拓	全く新しいエネルギー変換・伝送技術への基礎理論の構築とその応用を目指す。電流に代わり電子の磁氣的性質を用いた高速・省エネルギーな情報伝送技術を開拓。現在の半導体デバイスを超える新たな原理に基づいたデバイス素子の開発
長期代替エネルギー・核融合炉の科学的・技術的実証	燃料プラズマの閉じ込め性能を左右するプラズマ乱流現象の解明が鍵となり、シミュレーションによって明らかにする。(ITER規模での数値シミュレーション)
シミュレーションによる革新的ものづくり	自動車等輸送機器の省エネルギー化を目指す。一つの鍵は、乱流輸送現象の解明。計算科学により、種々の設計パラメータを理論的に最適化できる最適設計技術を開拓。
高信頼性の気候システムモデルによる現状把握と予測	エネルギー利用による地球環境への影響の監視を観測と連携し、近未来的な予測システムを構築する。



国際熱核融合炉 (ITER) の概念図

出典: 文部科学省ホームページ



自動車のフルスケール詳細空力解析。自動車の燃費向上に貢献。

提供: 理研AICS、協力:スズキ(株)

2.4 社会経済予測

社会経済活動に柔軟に対応する 予測システム

社会構成要素のエージェントモデル化

ビッグデータマイニングとデータ同化によるモデル精緻化

シミュレーションモデルによる予測・最適化

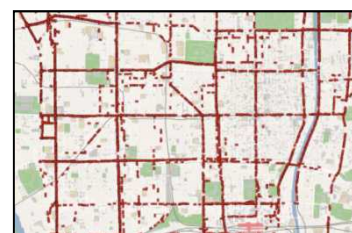
萌芽的であるものの他の科学分野とタイアップすることによる応用範囲は莫大

最終的な目標: 過去から現在までのデータに基づいて一瞬先から遠い未来までの予測を行うことができる複合的社会経済予測システムの実現

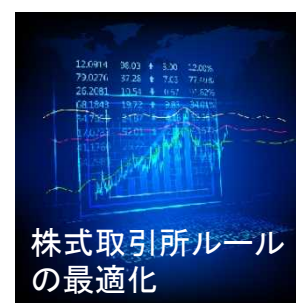
科学的企画・技術項目での連携

社会科学／データ同化技術／気候学(例えば)／計算機科学／ビッグデータ

社会的・科学的課題(いくつかの例)	計算科学が貢献する具体的内容
自動車交通流のリアルタイムシミュレーションシステムの構築	GPSデータからの情報に基づくエージェントモデルによるデータ同化およびシミュレーションによって、交通渋滞の緩和、また、これを地球レベルで拡張することによりCO2削減に貢献
株式取引所ルールの最適化	株式取引所全体のダイナミクスをトレーダーエージェントモデルによりシミュレートし、取引参加者にとって魅力的な競争力のある取引所の実現および株価の異常な変動の予防を目指す
電力・上下水道・ガスなどのインフラネットワークの最適化・効率化	交通・経済現象と連携した社会インフラのシミュレーションを行い、さらなる生産性・安全性の向上に向けて多角的な検証を行う
気象天候や地震・火山噴火といった地球物理的事象の予測との連携	例えば、気候学や地球物理学と協調した社会現象のシミュレーションにより、防災・減災の高度化に資する



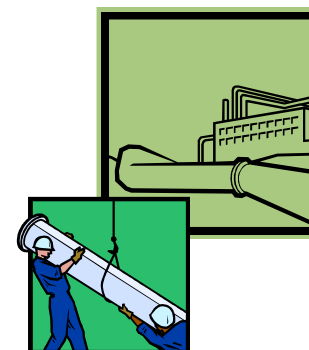
目的を持って移動する自動車の交通シミュレーション



株式取引所ルールの最適化



場所: インドネシア・バイナン
上図黄色の道路網について群衆のシミュレーションを行った。



電力・上下水道・ガスなどのインフラネットワークの最適化・効率化

3.1 基礎科学の統一的理解

宇宙・物質・生命分野の連携による 新しいパラダイムへの期待

素粒子・原子核・宇宙科学の連携:

— 究極的な物理法則の発見とそれに基づいた現象の理解

宇宙・地球科学の連携:

— 惑星系一般の起源と進化をできるだけ連続的に扱い、普遍性と特殊性を理解する。

課題

計算科学が貢献する具体的内容

素粒子標準理論を超えた物理法則の探究

高エネルギー加速器や高輝度加速器の超精密実験結果と、標準理論を高精度に計算した結果との間の微妙な“ズレ”を見極める。このことで、重力の量子化への道を開き、新しい理論の発見を促す。

自然界における重元素合成の定量的過程の理解

素粒子・原子核・宇宙天体物理学の連携による問題の定式化により、鉄より重い原子の生成シナリオの有力仮説である超新星爆発シミュレーションを行う。これにより、どのような比率で各元素が生成されるのかを高い精度で予測する。

惑星系の起源と進化の理解

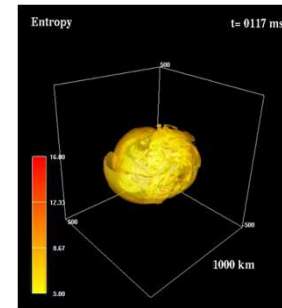
原子惑星系円盤の形成から惑星の形成にいたる統一的なシミュレーションを行い、太陽系をはじめとした惑星系の起源と進化の歴史やメカニズムを明らかにする。

地球・木星など惑星形成過程の解明

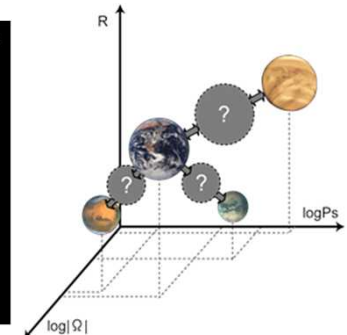
惑星形成シミュレーションにより惑星の形成過程を解明し、太陽系外惑星の多数発見にともない明らかになってきた惑星の多様性の要因を明らかにする。

惑星表層環境(気象・気候)の多様性・普遍性・特殊性の理解と生命の起源の探究

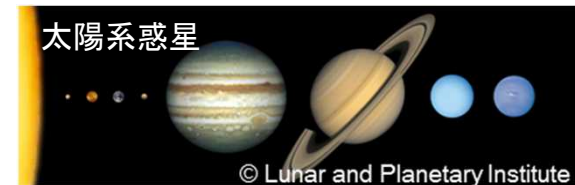
惑星の質量や軌道要素、中心恒星の活動度などのパラメータに対する惑星の表層環境の依存性を調べ、その多様性や普遍性の要因を明らかにする。また、生命が存在可能な環境に必要な条件を明らかにし、生命の起源の解明に資する。



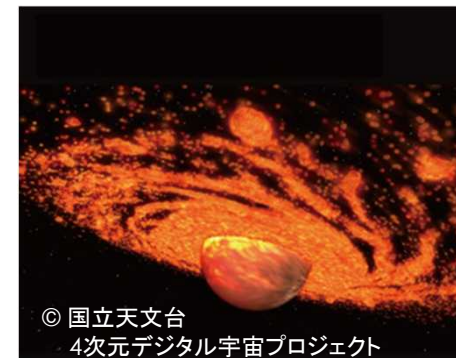
超新星爆発と物質の起源



惑星表層環境の多様性



太陽系惑星 © Lunar and Planetary Institute



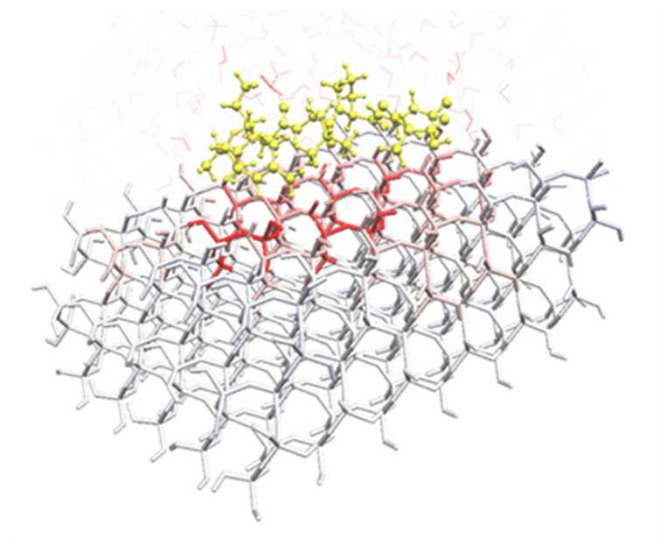
© 国立天文台
4次元デジタル宇宙プロジェクト

巨大衝突による地球・月形成シミュレーション¹⁰

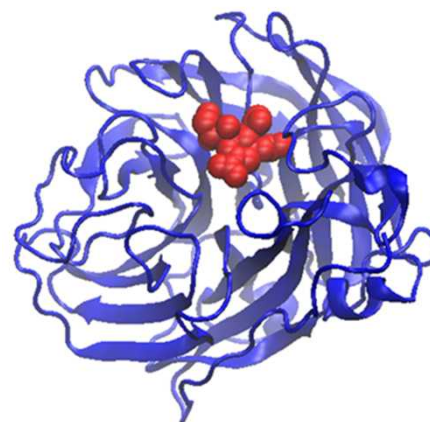
生命・物質科学の連携:

— 生体分子・複合体の立体構造に基づく解析により、原子・分子レベルの解像度で生命科学を再構築

課題	計算科学が貢献する具体的内容
リガンドータンパク質結合能予測の高精度化	量子化学計算など物質科学的方法を取り入れた高精度創薬シミュレーションによる高い効果・低い副作用の計算創薬の加速
ナノテクノロジーとバイオテクノロジーの境界に位置するものづくりシミュレーション	生体親和性の高いインプラントや抗原を検知するセンサーの設計 固体表面と、生体分子(タンパク質・ペプチドなどの)の相互作用計算 生体分子分光、テラヘルツ分光など。
ウィルスや細胞環境などの超巨大分子システムの動力学解析の実現	巨大粒子系分子動力学シミュレーションによるドラッグデリバリーシステム・ 解明やウィルス全原子シミュレーション・細胞環境シミュレーションによるタンパク質の電子状態や原子レベルの機能構造の解明に資する。



表面と生体分子の相互作用



医薬品(リレンザ、赤)とインフルエンザウィルスのタンパク質(青)が結合している様子

3.2 ビッグデータ有効利用

増え続けるデータ爆発の積極利用

ゲノム解析:

— 計算機科学との連携による、飛躍的に増加した大量実験データ(ハイスループットデータ)から生物学的な発見を目指す。また、遺伝子間の関係を予測・推定する遺伝子ネットワーク解析

衛星・観測データの有効利用

— 高分解能な観測データ、多様化した観測変数を利用した気象予測
— 地球環境観測データのデータ同化システムを通じた時空間的に均質なデータセットの作成

計算科学基盤技術の創出と高度化:

— データ同化、可視化、ビッグデータ処理、知識処理を計算科学の共通基盤的研究として、大量、多様、リアルタイム、そしてファイルI/O負荷の高いビッグデータへの対応、システム化

課題

計算科学が貢献する具体的内容

データ同化による多様な衛星観測データの統合化、高度利用

現在は一部の情報しか利用出来ていない衛星観測データを、より多くの情報を有効に利用できるようにし、さらにその情報をより使いやすいデータセットの形に加工し提供する。

次世代型観測データの高度利用によるゲリラ豪雨等極端現象の高度予測

次世代の観測システムデータの利用およびシミュレーションの高分解能化・精緻化により、ゲリラ豪雨や竜巻といった小スケールの極端現象の再現を可能にする。

次世代DNAシーケンサーからの大規模個人ゲノムデータの超高速処理

解析対象を絞らず、多くのデータセットとそれに対して網羅的に推定ソフトウェアを適用するゲノム情報検索。効率的な解析法の確立をもとに、個人ゲノム医療を実現させる。

複数の因子が複合的に関わる疾患の解明

遺伝子発現データから複雑な計算によって遺伝子間の関係を予測・推定する遺伝子ネットワーク解析を行う。



全球雲解像による熱帯擾乱の予測可能性

新技術によるゲノム読み取りの高速化

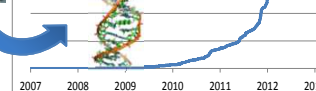
増え続ける膨大なゲノム配列データ

計算機科学との連携による研究手法の高度化

新たな医療へ



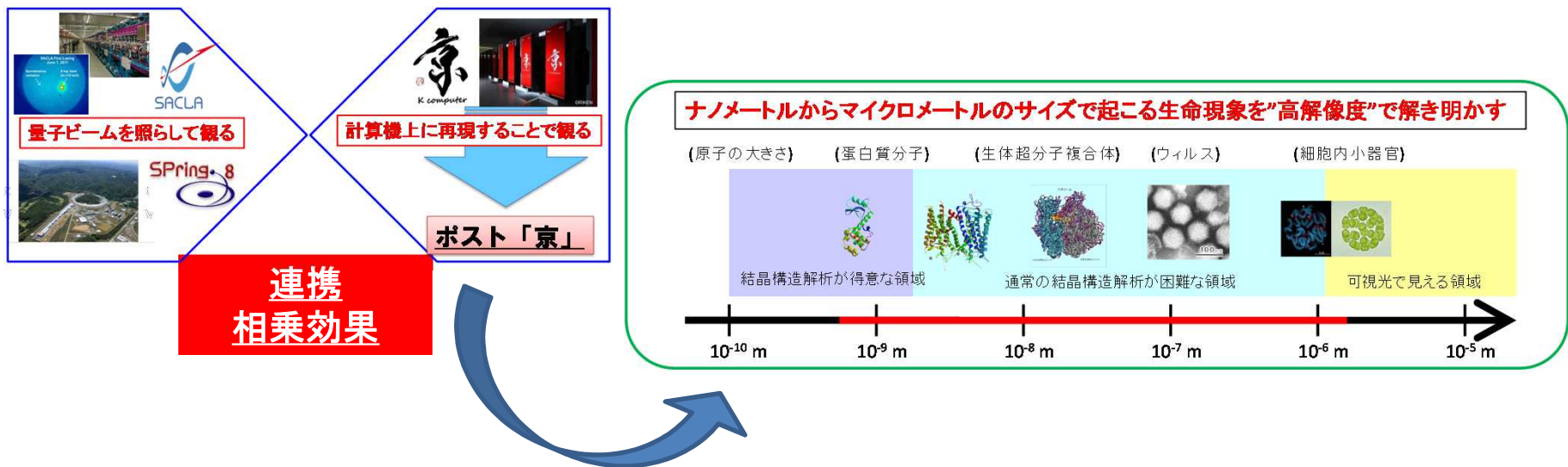
公開データベース中の配列断片登録数



3.3 大規模実験施設との連携

SACLA等大型研究施設との連携が切り拓く生命科学

- ナノメートルからマイクロメートルのサイズで起こる生命現象の”高解像度”での解明
- XFEL施設SACLA(SPring-8 Angstrom Compact free electron LAsEr)と「京」の連携等による新規ナノサイエンスの開拓



課題	計算科学が貢献する具体的内容
非結晶粒子や微細結晶の構造解析や生体粒子の階層的ダイナミクスの解析	X線自由電子レーザーSACLAとの連携により、タンパク質構造の4次元イメージング処理、それに基づく、動的構造のモデリング

注： 生命科学・物質科学連携課題／医療創薬課題に括られる。

実行時間目安(参考)

	総演算量(EFLOP)	占有実行時間(日)*
2.1 創薬医療	16,000,000	1,260日
2.2 総合防災	1,570,000	122日
2.3 エネルギー環境問題	8,800,000	680日
2.4 社会経済予測	180,000	14日
3.1 基礎科学の統一的理解	31,000,000	2,400日
3.2 ビッグデータ有効利用	980,000	76日
3.3 実験施設との連携	850,000	66日
計 (重複は除く)	53,000,000	約4,000日

次期フラグシップ機(1EFLOPSと仮定):

- 1年間300日稼働するとして5年間で1500日のリソース

※ 実効0.15EFLOPS(1EFLOPS計算機の15%実効効率に相当)を仮定すると、2章3章の課題遂行で、要求している計算リソース総量は、大幅に超えている。

参考資料: 2章3章での各課題における具体的なアプリケーション例

創薬・医療の具体的なアプリケーション例(参考)

要求されているアプリケーション	総計算量 (EFLOP)	1ケースあたりの問題規模	ケース数
個人ゲノム解析	2,700	200,000人分	200,000
疾患遺伝子発見のための統計的解析(ゲノムワイド連鎖解析(GWAS))	25,000	ヒトゲノム4万人分	5
遺伝子ネットワーク解析	780,000	4万転写物	26,000
大規模計算創薬・スクリーニング	4,300,000	10万原子規模	1000,000
高精度創薬	300	500残基タンパク質	100
血栓形成メカニズム解明のための血流シミュレーション	2,500,000	1兆格子規模	10
バイオデバイス設計	400	10万電子軌道	100
超音波シミュレーション	33,000,000	200兆格子規模	10
大量実験データ解析による4次元イメージング	200	2つの画像の相関計算	1,000,000,000,000
実験解析結果に基づく動的構造モデリング	850,000	1億粒子規模	10
細胞環境・ウイルスシミュレーション	850,000	1億粒子規模	10
細胞内信号伝達経路シミュレーション	3,600,000	1,000から10,000細胞	100
脳神経系シミュレーション(ヒト全脳簡約モデル)	700	1000億ニューロン	100
脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル 神経回路パラメータ推定・生理実験とシミュレーションの通信	140,000	1000ニューロン、100万遺伝子、100世代	20

総合防災(地震・津波)の具体的なアプリケーション例(参考)

要求されているアプリケーション	総計算量 (EFLOP)	1ケースあたりの問題規模	ケース数
防災連携シミュレーション(地震直後の被害状況予測)	310,000		
地震発生	48	1000万面要素規模	5,000
波動伝搬	1,400	1000億格子規模	100
地震動増幅	130,000	30億節点規模	5,000
地震動増幅	130,000	30億節点規模	5,000
建物震動	500	100万棟構造物規模	5,000
津波遡上	50,000	10億格子規模	5,000
避難誘導シミュレーション	60,000	30万エージェント	5,000

総合防災(気象災害)の具体的なアプリケーション例(参考)

要求されているアプリケーション	総計算量 (EFLOP)	1ケースあたりの問題規模	ケース数
高解像度気象予測(全球)	150,000	1兆格子規模	1
高解像度気象予測(領域)	160,000	10億格子規模	2700
局所的・集中的大雨・熱帯気象の高度予測	900,000	100億格子規模	2

エネルギー環境問題具体的なアプリケーション例(参考)

要求されているアプリケーション	総計算量 (EFLOP)	1ケースあたりの問題規模	ケース数
プラズマ乱流計算・マルチスケール乱流	430,000	1兆格子規模	50
プラズマ乱流計算・大域的非定常乱流	610,000	1兆格子規模	10
第一原理分子動力学計算($O(N)$)による電子材料の電子状態	860,000	1億原子規模	10
実空間基底 $O(N^3)$ 第一原理計算電子材料の電子状態	350,000	10万原子規模	10
強相関電子系の理解	5,500,000	1万原子規模	100
太陽光発電・風力発電立地条件アセスメント	760,000	10億格子規模	100
熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題)	41,000	100億格子規模	100
熱流体シミュレーション(自動車、ハイエンドベンチマーク)	100,000	1兆格子規模	10
近未来地球環境予測システム	120,000	1億格子規模	1

社会経済科学具体的なアプリケーション例(参考)

要求されているアプリケーション	総計算量 (EFLOP)	1ケースあたりの問題規模	ケース数
自動車交通流のリアルタイムシミュレーションシステムの構築	0.1	1億台規模	1,000
株式取引所ルールの最適化	180,000	1000銘柄規模	10,000

基礎科学の統一的理解のための具体的なアプリケーション例(参考)

要求されているアプリケーション	総計算量 (EFLOP)	1ケースあたりの問題規模	ケース数
カイラル対称性とQCDに基づく有効バリオン間相互作用の決定とその応用	16,000,000	10億格子規模	10
閉殻を仮定しない殻模型計算	1,000,000	8主殻規模	100
相対論的輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの探究	780,000	100億格子規模	10
惑星系形成のシミュレーション	1,500,000	1億粒子規模	100
地球・惑星の形成シミュレーション	4,500,000	10億粒子規模	100
惑星表層環境の形成と進化シミュレーション	2,000,000	10億格子規模	1,000
創薬などMD・自由エネルギー計算	4,300,000	10万原子規模	1,000,000
高精度創薬	300	500残基規模	100
バイオデバイス設計	400	10万電子軌道規模	100
細胞環境・ウイルス	850,000	1億粒子規模	10

ビッグデータ課題の具体的なアプリケーション例(参考)

要求されているアプリケーション	総計算量 (EFLOP)	1ケースあたりの問題規模	ケース数
ゲリラ豪雨・熱帯気象の高度予測	900,000	100億格子規模	2
統合地球環境再解析	48,000	10億格子規模	240
個人ゲノム解析	2,700	200,000人分	200,000
疾患遺伝子発見のための統計的解析 (ゲノムワイド連鎖解析(GWAS))	25,000	ヒトゲノム4万人分	5

大規模実験施設連携課題の具体的なアプリケーション例(参考)

要求されているアプリケーション	総計算量 (EFLOP)	1ケースあたりの問題規模	ケース数
大量実験データ解析による4次元イメージング	200	2つの画像の相関計算	1,000,000,000,000
実験解析結果に基づく動的構造モデリング	850,000	1億粒子規模	10

4章 各分野でのアプリケーションとその内容

(2、3章で記載されていないその他の課題)

生命科学

細胞内信号伝達経路シミュレーション (格子法、粒子法共通)	1分子粒度細胞シミュレーションにより、1細胞での1分子粒度での計算を実現、精密化することで、細胞の分化、癌化、増殖などの機序に信号伝達経路のダイナミクスからアプローチすることを目指す。
脳神経系シミュレーション・ヒト全脳簡約モデル	人間の全脳規模の神経回路を用いた、比較的単純なモデルを用いた神経回路シミュレーション。
脳神経系シミュレーション・ヒト全脳詳細モデル	人間の全脳規模の神経回路を用いた、入力から出力までの信号処理を単一ニューロンレベルから詳細に調べることができる詳細なモデルを用いた神経回路シミュレーション。
脳神経系シミュレーション・昆虫脳全脳詳細モデル リアルタイム	昆虫脳の全脳規模の神経回路を用いた、入力から出力までの信号処理を単一ニューロンレベルから詳細に調べることができる詳細なモデルを用いた神経回路シミュレーション。
神経系シミュレーション・昆虫脳全脳詳細モデル 神経回路パラメータ推定	昆虫脳の全脳規模の神経回路を用いた、入力から出力までの信号処理を単一ニューロンレベルから詳細に調べることができる詳細なモデルを用いた神経回路シミュレーション。シミュレーションの状態推定・パラメータ推定を行う。
脳神経系シミュレーション・昆虫全脳詳細モデル 生理実験とシミュレーションの通信	昆虫脳の全脳規模の神経回路を用いた、入力から出力までの信号処理を単一ニューロンレベルから詳細に調べることができる詳細なモデルを用いた神経回路シミュレーション。リアルタイムな実験とのデータ同化や生体コントロールの可能性を追求する。

物質科学

次世代先端デバイス([70,71: $O(N^3)$)法平面波基底])	物質の個性に即した第一原理計算を大規模高精度化することで、高速動作/高集積/低エネルギー消費な高性能化半導体デバイスを実現させ、更には次世代量子デバイスの開発に繋げる。
強相関電子系の機能解明 [79: クラスタールゴリズム量子モンテカルロ法]	量子および温度ゆらぎ効果が顕著な強相関系に対して超大規模なシミュレーションを行い、新機能発現機構の解明を目指す。
強相関電子系の機能解明 [87, 厳密対角化(ランチョス法)]	摂動論や平均場近似が破綻するような強相関系に対して、数値的に厳密な解を求めることで近似によらない物性解明を目指す。
熱交換デバイスの安全性向上・特性解析	熱交換デバイスにおいて混在する気相と液相、いわゆる気液混相流の全粒子計算を実行し、より安全かつより高効率な熱交換デバイスの非経験的な設計・開発を目指す。
物質・エネルギー変換	高精度自由エネルギー計算を実行し、複雑な構造を持つ物質変換系における化学反応の微視的理解と予測・制御を目指す。
分子機能と物質変換	(分子や分子集団系における構造形成と機能発現・機能制御の分子科学の確立を目指し、)自己組織化により形成されるナノスケールの分子・分子集団の構造に基づき創成される機能の解明、環境との相互作用下での分子の電子状態に立脚した機能発現メカニズムの解明を行う。
高精度分子軌道法: 光・電子デバイス	内容: 相対論、露わに相関した電子状態理論、多参照理論などによる高精度量子化学計算を行い、分子の基底状態および励起状態の電子状態を分光学的精度で予測するとともに、有機・無機複合分子を基本とする機能性材料の理論設計を行う。
大規模分子軌道法: 分子機能	Hartree-Fock法、密度汎関数法による大規模量子化学計算を行い、金属原子を含む巨大有機分子系の分子の相互作用と化学反応過程の解明を行うとともに、物質変換過程の開発、触媒や電池などの機能分子の理論設計、創薬を行う。
フラグメント分子軌道法: 分子機能	フラグメント分子軌道(FMO)法による量子化学計算レベルでの構造最適化およびタンパク質ーリガンド間相互作用解析を行い、より高い解像度のタンパク質の3次元構造情報およびタンパク質ーリガンド間相互作用情報を得るとともに、創薬(阻害剤設計)へと活用する。
ナノ構造体電子・電磁波ダイナミクス法: 光・電子材料	超並列電子・電磁場ダイナミクス法による計算を行い、光と電子のダイナミクスの結合による新奇機能発現過程の解明を行うとともに、高い光・電子機能性を持った次世代ナノデバイスの理論設計を実現する。
クラスター展開法(第一原理計算): 新物質探索	クラスター展開法による第一原理計算を行い、メゾスケールの材料内部組織の結晶相・化合物相、粒界・界面・欠陥の安定性・強度特性を解明し、強度や耐久性、耐熱性を併せ持つ材料や軽量高強度の材料の理論開発を行う。
変分モンテカルロ: 強相関電子系の機能解明	強相関物質材料について1万格子点規模のシミュレーションを行い、高温超伝導体等の高精度の理論予測、および新機能発現機構の解明を行う。
分子動力学法(feram): 分子構造・分子機能	分子構造や分子機能を非経験的な計算から解析・予測し、創薬、触媒や電池の分子レベルの設計、ナノスケールで露になる効果を利用した機能や構造の提案を行う。
凍結フォノン法: 熱物性の第一原理計算: 新材料	非経験的計算から熱物性を明らかにし、強度や耐久性、耐熱性を併せ持つ材料や軽量高強度の材料の開発を行う。
フェーズフィールド法: 新物質探索	合金材料の組織形成をシミュレートすることで材料の安定性・強度特性を予測し、強度や耐久性を併せ持つ材料や軽量高強度の材料を提案する。

地球科学

データ同化を用いた気象予測精度向上	データ同化技術および気象シミュレーションモデルの高度化により、気象予測の精度向上を計る
プレート運動とマントル対流シミュレーション(マントル対流)	マントルの流れによって駆動される地球内部の熱輸送や物質循環の過程を明らかにする。またプレート境界の沈み込み帯周辺での対流と火山分布の関係や、マントル対流からプレートの運動が自発的に発生・維持されるメカニズムを明らかにする。
地球コアダイナミクスシミュレーション(ダイナモ)	3次元球殻内で電磁流体力学方程式を解く地球ダイナモシミュレーションについて、現在よりも低いエクマン数での実験を行い、地球中心核内部における対流パターンや乱流構造、磁場生成メカニズムなどを明らかにする。

ものづくり分野

熱流体分野	航空機の翼設計、機体設計、エンジンや機体の空力・騒音解析	航空機設計に必要な課題各項目に関する差分法による乱流計算。格子規模 10^{11} 格子。
熱流体分野	宇宙機の熱流体設計、推進系解析、全機システム解析	宇宙機設計に必要な課題各項目に関する差分法による乱流計算。高圧燃焼流動。格子規模 10^{12} 格子。
熱流体分野	ターボ機械の熱流動、振動、音響解析	乱流の微細構造まで高精度に予測し、より良い製品設計に生かす
熱流体分野	熱流体シミュレーション(自動車、実際の設計、最適化問題)	乱流の微細構造まで高精度に予測し、より良い製品設計に生かす
熱流体分野	電子機器の熱流体解析、騒音解析	乱流の微細構造まで高精度に予測し、より良い製品設計に生かす
構造解析	衝突解析	自動車に代表される構造物どおしの衝突解析。他に、機械・電子部品やバイオメカニクスによる衝撃耐性評価など。
構造解析	弾塑性解析	塑性加工やプレス成型を再現した解析。他に、航空機や船舶、建築物の構造健全性評価など。
構造解析	丸ごと詳細解析	大規模プラントや建物・橋梁や高速道路などの耐震解析。鉄筋コンクリート壁、配管、圧力容器、燃料集合体などが丸ごと含まれた原子力プラント全体の耐震解析など。
機械材料分野	電子部品用機能性材料に関する強度評価	電子構造が支配する電気的特性や磁気特性と機械的ひずみや変形が連動する問題を、マルチフィジックスポテンシャル手法を用いて分子動力学計算で取り組む手法の構築と超並列計算技術の開発を進める。
機械材料分野	炭素繊維強化プラスチック開発	炭素繊維を1万本程度束ねた繊維束のレベルでのモデル化による炭素繊維強化プラスチック製高圧水素容器の破壊評価の高度化。燃料電池自動車の基盤部品である超高圧水素蓄圧器の開発に必須の事項である。
電磁界解析	サーバの装置全体レベル解析	電子機器の様々なデジタルノイズ源に起因するLSI動作への電磁界影響を回路シミュレーションと電磁界解析の時間領域連成によりシミュレーションする。大規模解析の高速化によって、高度な三次元実装を適用した装置のノイズ解析を実現する。

基礎物理学分野

宇宙研究	自己重力 N 体/ 流体シミュレーション	ダークマターの構造形成から惑星形成にいたる宇宙における多様なスケールでの構造形成をN体と粒子法による流体コードで解明する。
宇宙研究	輻射流体力学による銀河と巨大ブラックホール形成のシミュレーション	銀河内の星形成と巨大ブラックホール形成のダイナミクスを同時に解く計算を行い、銀河-ブラックホールの共進化を解明する。
宇宙研究	6次元位相空間上の Boltzmann 方程式による自己重力系、宇宙プラズマの数値シミュレーション	宇宙大規模構造におけるニュートリノのダイナミクスを正確な取り扱い、宇宙プラズマでの無衝突衝撃波における粒子加速を解明する。
宇宙研究	宇宙暗黒時代の進化と中性水素の宇宙論的分布の解明	初期宇宙の進化と全宇宙にわたる中性水素の分布の進化を明らかにし、初期宇宙の構造形成やインフレーションモデルを解明する
宇宙研究	自己重力輻射流体シミュレーションによる銀河スケール星間ガスシミュレーション	星間ガスの多相構造を分解する銀河スケールのシミュレーションから銀河形成を物理的に理解し、宇宙の物質循環を解明する。
宇宙研究	天体降着流・噴出流の輻射磁気流体計算	降着円盤の時間変動とジェット形成機構を現象論的な粘性パラメータを導入しない3次元輻射磁気流体計算によって解明する
宇宙研究	ブラックホールの形成と強重力現象の解明	ブラックホール形成、中性子星連星の合体のような強重力・極限状態下の現象の解明し、これらの現象で放出される重力波をKAGRAで観測することに寄与する
宇宙研究	超新星爆発のシミュレーション	重元素などの物質の起源である超新星爆発のメカニズムを解明し、大口径望遠鏡、カミオカンデ、重力波干渉計など次世代観測機器と比較可能なデータを提供する。
宇宙研究	超高エネルギー現象と粒子加速	10^{15}eV を超える高エネルギー粒子の起源と加速メカニズムを輻射減衰を組み込んだプラズマ粒子シミュレーションを行うことにより解明する
宇宙研究	6次元ブラソフシミュレーションによるプラズマ非熱的分布形成の解明	非熱的分布を構成する高エネルギー粒子の生成メカニズムを明らかにすることで、宇宙物理学の最大の謎の一つである宇宙線の起源を解明する
宇宙研究	惑星系形成のシミュレーション	太陽系のように、恒星を中心としてその周囲を回る複数の惑星からなるシステムの形成過程を明らかにする。
宇宙研究	地球・惑星形成のシミュレーション	地球をはじめ、太陽系内外の多様な惑星の形成過程を明らかにする。
宇宙研究	惑星表層環境の形成と進化シミュレーション	地球をはじめとする太陽系内外の惑星表層環境の形成と進化を明らかにする。
宇宙研究	宇宙アミノ酸の量子計算	生命を構成しているL-アミノ酸の過剰生成が原始太陽系における光(円偏光)によって起こった可能性を第一原理計算によるシミュレーションによって検証する。
宇宙研究	太陽恒星ダイナモ	天体プラズマ活動のエネルギー源である磁場の生成維持物理機構を太陽恒星を対象として明らかにする。
宇宙研究	無衝突衝撃波:太陽圏から宇宙まで	衝撃波における非熱的電子の生成をマッハ数によって整理することで、太陽圏から宇宙までの高エネルギー粒子の生成メカニズムを統一的に理解する。
宇宙研究	太陽系環境科学の推進	太陽活動と太陽地球システムダイナミクスのメカニズムを理解し、衛星・通信・電力網など高度な社会基盤への宇宙天気擾乱の影響の最小化を可能にする。

基礎物理学分野 続き

素粒子	量子電磁気学(QED)の高次補正計算(多倍精度演算)	実験精度の飛躍的向上に対応すべく、電子およびミュオン粒子の異常磁気能率に対するQEDの高次摂動計算を行い、理論計算の高精度化を行う。
素粒子	ファインマン振幅の自動計算(4倍精度演算)	国際リニアコライダー(ILC)における超精密測定実験に対応した高次の量子補正効果を入れた理論計算を行い、素粒子標準模型などの超精密な理論分析を行う。
原子核物理	原子核殻模型計算の適用領域の拡張	原子核殻模型の精密化と汎用性向上を行い、重元素合成過程やベータ崩壊寿命を含めたさまざまな物理量を明らかにする。
原子核物理	原子核構造・反応の統一的解明	核分裂現象の記述を目的として提案された生成座標法(GCM)を複雑な相関を取り入れた手法へと拡張し、原子核構造・反応の統一的解明を行う。
原子核物理	核分裂現象の微視的記述	核分裂反応等の多粒子が関与する物理過程の計算に必要な分裂経路、ポテンシャルエネルギー、集団質量パラメータ、散逸(摩擦)係数などに対し、密度汎関数理論に基づいた計算を行う。
原子核物理	原子核応答関数の系統的記述と計算核データ構築	線形応答レベルでは変形核や超流動核を扱えるコードが開発済みであり、光吸収断面積等の系統的計算が進行中で、実験データの取得が困難な莫大な数の計算核データが蓄積される。 今後、基底状態の性質に関する制限を取り除いた計算、連続状態を厳密に扱う線形応答計算、1体密度の線形効果を超えた高次効果を取り扱った計算などが遂行すべき課題である。
原子核物理	核分裂現象の微視的記述	核分裂の巨視的モデルによる記述において、分裂経路、ポテンシャルエネルギー、集団質量パラメータ、散逸(摩擦)係数など、微視的な計算によるインプットが必要とされており、これらに対して密度汎関数理論に基づいた計算を行う。
原子核物理	相対論的重イオン衝突とクォーク・グルーオン・プラズマ物性の解明	クォーク・グルーオン・プラズマについて、理論的予言と実験データを数値計算により結びつけ、その物性を解明する
原子核物理	多粒子生成反応で探るハドロン共鳴と相互作用の新たな展開	高いエネルギー領域における多粒子生成反応の解析を行い、ハドロン生成機構とそこから引き出せるハドロン状態の理解および理論基盤の構築を目指す
基礎物理(原子核物理)	ハイペロンを含む軽い核の構造・反応の解明	ハイペロン(ストレンジクォークを含むがチャームクォーク、ボトムクォークおよびトップクォークを含まない重粒子。陽子や中性子より重い。)を含む多体系の構造と反応を明らかにし、重粒子間の強い相互作用や中性子星内部構造等を解明する。
基礎物理(原子核物理)	核物質の相構造・状態方程式の解明	中性子星の構造や超新星爆発などの天体現象解明においても求められている、核物質の相構造・状態方程式を解明する。