

ポスト「京」で重点的に取り組むべき 社会的・科学的課題（案）

文部科学省 研究振興局
参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室

○ 課題選定の考え方

- 「計算科学ロードマップ（文部科学省委託研究「将来のHPCIシステムのあり方の調査研究（アプリケーション分野）」をベースに、本委員会での委員からのご意見、「関係府省庁における計算科学技術に対するニーズ」、「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する意見募集の結果」等を踏まえ、計算科学の有識者も交え、「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の選定方針」を満足する、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題』の事務局案を作成。
- 本委員会（第3回、第4回）での委員からの意見も踏まえ、『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題』を決定する。

○ 留意事項

- 各課題の研究開発内容（サブ課題等）については、あくまでも例示であり、実際に実施する研究開発内容、実施体制等については、今後の公募により決定するものとする。
- 『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題』に選定されなかった課題については、重点課題枠以外のポスト「京」の計算資源（ポスト「京」の計算資源配分（案）は資料3を参照）を利用して研究開発を推進することや、ポスト「京」以外の計算資源を利用して研究開発を推進することを想定している。

○ 議論の論点

以下の観点を中心に、委員のご意見を頂戴したい。

1. 「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の選定方針」と照らし合わせ、各課題候補は適切な課題か？
 - (1) 社会的・国家的見地から高い意義があるか。【必要性の観点】
 - (2) 世界を先導する成果の創出が期待できるか。【有効性の観点】
 - (3) ポスト「京」の戦略的な活用が期待できる課題か。【戦略的活用の観点】
2. 各課題の研究開発内容は、例示として適切か？他に適切な研究開発内容が考えられるか？
3. 他に課題候補は考えられるか？

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(案) (1/2)

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築 ポスト「京」で初めて実現される分子シミュレーションの高速化によって、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、安全で有効性の高い創薬を実現する。
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれによって得られる最適なモデルを用いた生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。
防災・環境問題	③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。
	④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。
エネルギー問題	⑤ エネルギーの高効率創出と利用の新規基盤技術の開発 複合物質の電子・分子レベルでの全系シミュレーションを行い、エネルギー採取・変換・貯蔵・利用時における未解明現象を実験と連携して解き明かし、エネルギーの高効率な創出と利用のための新規基盤技術を確立する。
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(案) (2/2)

カテゴリ	重点課題
産業競争力の強化	⑦ 社会の発展を支える高機能物質・材料の創成 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料等の開発を、大規模超並列計算と、計測・実験からのデータやビッグデータ解析手法との連携によって加速し、社会に飛躍的发展をもたらす高機能物質・材料を創成する。
	⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計プロセスの開発 製品コンセプトを初期段階で最適化・定量評価し、意思決定を迅速化する革新的設計手法と、その核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現し、競争力強化に貢献する。
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 自然界の基本法則と宇宙の進化過程には多くの謎が残されている。ポスト「京」で可能となる精密計算や異なるスケール間の現象の計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせて宇宙と物質の創成史を解明する。
	⑩ 惑星系と生命の起源の探究 惑星、地球、生命、物質分野等の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取り組みにより、観測・実験結果と直接比較可能な大規模計算を実現。惑星形成の多様性と生命の起源及び太陽系環境を探究する。
	⑪ 基礎科学のフロンティア ― 知の衝突と共創による複合現象の理解 分野を超える複合人類課題を、基礎科学の学際連携によってトップダウンで機動的に追究し、極限環境、破壊とカタストロフィ、量子力学と情報、脳機能のような新しい科学創成によって科学のフロンティアを前進させる。
社会経済問題	⑫ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究 複雑且つ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済など社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。

① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点
- (2) 有効性の観点
- (3) 戦略的活用の観点

ポスト「京」で可能となる長時間ダイナミクス計算により、副作用因子を含む 多数の生体分子の機能を予測し、さらに安全で有効性の高い創薬を実現

創薬関連ビッグデータ(疾病、副作用等に関わるタンパク質群や医療情報)を活用し、製薬企業およびその関連団体との密接な連携体制で新たな創薬基盤を構築

ポスト「京」をフルに活用した生体分子シミュレーションにより、創薬計算の大幅な加速を実現。さらに創薬の阻害から制御への革新(タンパク質の機能阻害から生体分子システムの制御へ)を目指す。

内容の詳細

単純な阻害剤をめざす創薬ターゲットが枯渇

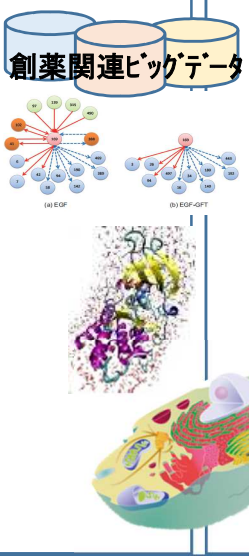
生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)のダイナミクスを考慮した機能制御をめざす創薬が必要

創薬関連ビッグデータを解析することで、多数のタンパク質からなる疾患原因、副作用、薬剤輸送に関わる生体分子システムを同定し、薬剤による制御対象を網羅する

ポスト「京」を駆使する分子シミュレーション法を開発

ポスト「京」を駆使して、多数のタンパク質の創薬計算を大幅に加速、さらにそれらのダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用を予測し、機能制御をする薬剤を設計

細胞環境を考慮したシミュレーションを行うことで、細胞に対する最先端計測実験と定量的に比較する



ポスト「京」利用の必要性

今後の創薬には、ポスト「京」ではじめて可能となる、疾患に関わる多数のターゲットからなる生体分子システム(疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等)の同定とそれらの長時間シミュレーションによるダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用予測が不可欠

ポスト「京」分子シミュレーションによって、細胞環境における長時間シミュレーションがはじめて可能となり、先端計測機器からもたらされる情報に対応する情報を与えることができ、細胞機能発現の機構がはじめて原子レベルのモデルから明らかとなる

必要な計算資源

生体分子システムの動的構造予測等に約45日
創薬の結合自由エネルギー計算に約35日(10万ケース)



期待される成果・波及効果

多数タンパク質を含んだ網羅的なターゲットシステムの選択、膨大な計算量による超高精度相互作用予測、単純な機能阻害ばかりでなくより複雑な機能制御、合理的な薬剤動態予測による副作用の回避を可能にする。これらによって、創薬プロセスを革新し、製薬産業の活性化に貢献する。

様々な生体分子システムの最先端計測データ(SACLA, SPring8 等の大規模施設からの情報ばかりでなく、一分子計測情報などのin-house実験によるものまで)に対して、ポスト「京」を用いた分子シミュレーションは原子レベルでそれら実験情報に対する機能発現モデルを提供することができ、生体分子システムの理解、予測、操作に大きく貢献することができる。

② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

概要・意義・必要性	ポスト「京」によるビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合することにより、革新的な予防法や早期診断法の開発、安全で有効性の高い治療の実現などを推進し、国際社会の先駆けとなる 健康長寿社会の実現に貢献
(1) 必要性の観点	
(2) 有効性の観点	史上最大規模のビッグデータ解析と、心臓シミュレータ、脳神経シミュレータなど世界最先端の生体シミュレーション技術を医療機関、医療プロジェクト等と密接に連携した体制で推進することで、 着実に医療応用を実現
(3) 戦略的活用の観点	ポスト「京」による膨大な演算能力とストレージを活用し、 ビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合して利用することで、個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開

内容の詳細
統合計算生命科学(ビッグデータ解析とそこから得られるモデルを用いる生体シミュレーション)による個別化・予防医療の支援

サブ課題A: エクサスケールデータ解析

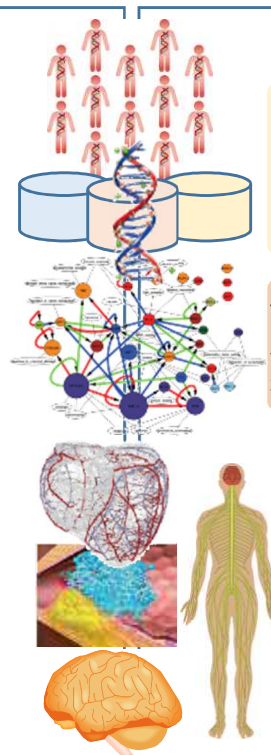
巨大なストレージと演算能力を活用した**健康・医療ビッグデータ**(大規模パーソナルオミクスデータ※)(数百ペタバイト以上)と医療情報などを一挙に解析する技術を開発し、その基盤を確立

それらを活用し、**個々人にフィットした薬、病気の予測・予防・治療法**を見出し、個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開

サブ課題B: マルチフィジックス生体シミュレーション

多様な医療分野のシミュレータを連成した**マルチフィジックス生体シミュレーション法**(分子、細胞から臓器・脳・全身)を確立

エクサスケールデータ解析の結果に基づいた**個々人に合わせたモデルを用いた生体シミュレーション**による**疾患の予測と治療法**の検討を実施し、さらに**新しい医療機器の開発**に応用



ポスト「京」利用の必要性

今後の個別化・予防・参加型医療には、大規模パーソナルオミクスデータの解析とマルチフィジックス生体シミュレーションにより、がんなどの疾患における多数の遺伝子システムの異常の解明と生活習慣病などにおける正確なリスク評価が不可欠。

個別化・予防医療には、個人ごとの健康・医療ビッグデータの解析と個人ごとの違いに応じた生体シミュレーションによる手術や治療法の適用が必要になる。

必要な計算資源

マルチフィジックス生体シミュレーションに約45日
遺伝子ネットワーク解析等に約35日(1万5千ケース)



※) パーソナルオミクスデータ: 個人毎に異なる遺伝情報およびその働きによる転写物、タンパク質、代謝物などの細胞内の状態を示す網羅的な分子情報

期待される成果・波及効果

大規模なトランスオミクスデータの解析と階層統合生体シミュレーションにより、恒常性破綻と疾患の関係、がんなどの疾患における多数の遺伝子異常と遺伝子ネットワークの関係を解明し、予防・個別化型の医療に貢献し、さらに参加型医療への展開を図る。

分子、細胞レベルから、血管・組織、さらには臓器レベルまでの連成シミュレーションにより、病態予測を可能にして、疾患の早期発見、最適な治療法の選択に寄与するとともに、世界最先端の医療機器開発に寄与する。

③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点 過去の被害経験からでは予測困難な複合災害の統合的予測手法の構築は国土強靱化のために必要不可欠。
- (2) 有効性の観点 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った自然災害・被害シミュレーションの解析手法を開発する。
- (3) 戦略的活用の観点 多数シナリオの考慮は、地震の確率評価ならびに非線形性の高い複合災害の予測にとって必要不可欠。地形・地下構造を考慮した1シナリオの計算で京の全系が必要なため、ポスト「京」は必須。

内容の詳細

サブ課題A: 地震津波災害予測システムの実用化研究

- ・確率評価に必要な1000を超える地震シナリオでの地震波伝搬、地盤・建物震動、津波被害等のコンポーネントを統合したシステムを構築し、統合シミュレーションを実施することで、被害予測データベースを構築。
- ・シナリオを左右する物理モデル、高周波生成・伝播、地下・地上構造物震動・破壊、津波堆積物移動、液状化モデル等を用いた大規模シミュレーションにおける世界的かつ緊急の課題解決を目指す。

サブ課題B: 社会科学と地球科学的事象との連携による社会シミュレーションシステムの構築

- ・二次災害に大きく影響する都市全体を対象とした避難や道路・鉄道交通網のシミュレーションの開発
- ・効果的・効率的な国土強靱化に向けたインフラ整備や情報発信のあり方に関して様々なシナリオを用いた被害予測にもとづく提言を行う。

ポスト「京」利用の必要性

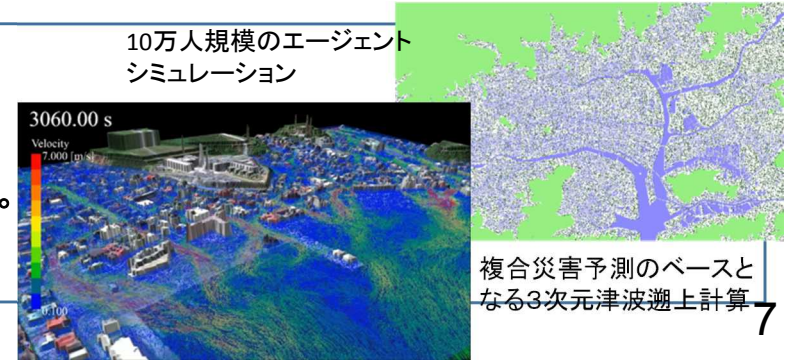
- ・地形・地下構造を考慮した変形・地盤震動・構造物の震動の計算を行うために、億を超える自由度の非線形有限要素計算が必要。京の全系でスケールするコードは開発済みだが、1回の計算に1日程度かかるため、震源や地下構造の不確定さを考慮した多数計算は、京では数年以上かかる課題であり、ポスト「京」が必要。
- ・避難・交通シミュレーションについても、多数ケースの計算が重要であり、リアルタイムデータにもとづいて制御するために必要。

必要な計算資源

ポスト京では、5領域(千島海溝、日本海溝、南海トラフ、伊豆・小笠原海溝、琉球海溝)で行ったとして、1EFLOPS機15%実効効率で算出して、占有日数は、30日程度。

期待される成果・波及効果

- ・地震津波災害予測データベースの構築。
- ・経済的な波及効果: 直接効果だけでも6500億円(三菱総研調べ)。
- ・将来的にリアルタイムシミュレーションへの展開(現業への下方展開の可能性)が期待される。
- ・個々の被害要因モデルの高度化による地震津波災害予測システムの持続的改善。
- ・ハザードマップ、避難計画、復旧計画。各自治体の都市計画施策への反映。



④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点: 竜巻、局地的豪雨等の予測高精度化への社会からの強い要望、環境政策立案のための科学的基盤提供
- (2) 有効性の観点: 安全な避難のための時間的余裕確保、観測研究・シミュレーション研究が一体となった研究体制の構築
- (3) 戦略的活用の観点: 十分なモデルと観測データ取り込みの解像度、アンサンブル数を確保し、予測高度化につなげる

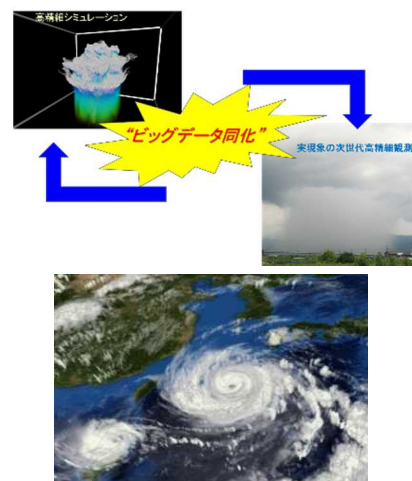
内容の詳細

サブ課題A: 革新的な数値天気予報による高度な気象防災
雲、雨、雪などを桁違いの高解像度で忠実にシミュレーションし、次世代の観測によるビッグデータを、応用数学的手法によりモデル計算に組み入れることで、現状では予測が困難な局地的豪雨や竜巻などを高精度に予測する。また、台風の発生を予測する新しい天気予報システムを構築する。

サブ課題B: 総合的な地球環境の監視と予測

人間活動に起因する環境変化の影響を、生物・化学的側面を含んでより正確に予測し、常にモニタリングを行うシステムの基盤を、地球規模の気候モデルを用い構築する。これにより、今後の政策や防災、健康対策に貢献する。

ポスト「京」利用の必要性



大気中の対流を再現できる解像度で、現状では10-100程度のアンサンブル数を10倍以上に増やし、かつ人工衛星観測などによる膨大なデータを、可能な限り情報量を保持しながら応用数学的手法によりモデル計算に取り込むため、ポスト「京」の計算能力が必要。

必要な計算資源

ポスト「京」の占有日数換算で、「高解像度気象予報(全球、領域)」に20日、「局所的・集中的大雨、熱帯気象の高度予測」に70日、「近未来地球環境予測システム」に10日必要。

期待される成果・波及効果

- ・予報技術の飛躍的向上による人命と財産の保護
- ・省庁、自治体の作成する防災計画・環境政策への貢献、地球規模環境変化の予測情報の社会への迅速な提供
- ・極端現象の成因・将来変化や、地球環境のサブシステム間・スケール間相互作用の科学的理解
- ・多様な時空間スケールを対象にすることによる、モデリング・データ同化手法改良の加速

⑤ エネルギーの高効率創出と利用の新規基盤技術の開発

概要・意義・必要性

(1) **必要性の観点** 新規エネルギー源の確保、効率的な変換、貯蔵、利用技術の開発は我が国喫緊の重要課題であり、既存の多数の国家プロジェクトとの連携や発展途上国でのエネルギー施策などへの国際貢献が強く期待されている。

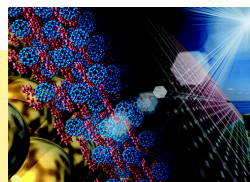
(2) **有効性の観点** 電子と分子の動きが関与した複雑な現実系の全系シミュレーション技術の開発は、我が国の基盤技術のブレークスルーである。大規模プロジェクト、実験・企業研究者や計算機科学者との強力な研究体制が育ちつつある。

(3) **戦略的活用の観点** 複雑な要素が相互に相関する複合系での電子、分子の微視的挙動を解明する大規模、長時間の全系シミュレーションは、ポスト「京」を駆使して初めて可能である。小規模系などへの適用で産業への展開が可能、大きな波及効果となる。

内容の詳細

サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保

光をエネルギーに変換する過程の電子論を解明し、新しい有機系太陽電池や高性能人工光合成系を設計・開発する。



ペロブスカイト太陽電池
ACSから許可: H. Imahori and T. Umeyama
J. Phys. Chem. C, 113, 9029–9039(2009)

サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵

電池内で起こる全過程を物質構造と直接関連させるシミュレータを開発し、低コストの汎用元素を用いた二次電池や燃料電池開発の基盤技術を確立する。



メタンハイドレートの分解

サブ課題C エネルギー・資源の有効利用

高効率触媒の理論設計・開発や効率的な物質の分離技術により、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。特にメタンハイドレートの分離・精製、二酸化炭素の効率的な捕集・変換系を設計・開発する。

ポスト「京」利用の必要性

経験に頼ったエネルギー関連複合材料の開発では革新的新材料は生み出せない。物理と化学の基礎方程式から出発した大規模計算に基づく計算科学的な設計・制御が必要。

「京」では、部分系、モデル系に対する計算に止まる。エネルギー問題の解決には複合物質の全系シミュレーションが必須。また、工業的に使用される条件や実験条件下での多数の統計量に基づいた解析も重要。

これらの計算を実施するには、「京」で10~50年はかかると考えられ、ポスト「京」の使用が不可欠。

必要な計算資源

ポスト「京」で占有日数は、1EFLOPS機15%実効効率で算出して、最低でも80日程度必要。

期待される成果・波及効果

- ・ 変換効率の高い太陽電池を安価な元素や有機系で実現し、実用化を促進、また人工光合成系の確立により新規エネルギー源を確保する。
- ・ 安価な高速充電、高容量の二次電池や高効率の燃料電池の開発を可能とする。
- ・ 白金などの貴金属を使用しない高機能触媒の開発により、エネルギー多消費型物質生産の革新を達成する。
- ・ ハイドレートの生成・分解過程の解明により、メタンの効率的な分離、精製方法、安全な貯蔵技術を確立する。
- ・ 二酸化炭素を低コストで捕集・変換する技術を開発し、地球規模での二酸化炭素抑制、化石燃料の有効利用に貢献する。

⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点: ポスト「京」を用いた第一原理解析により、超高効率・低環境負荷な**革新的クリーンエネルギーシステムの実用化**を大幅に加速する。
- (2) 有効性の観点: 産業界の大型プロジェクト(SIP等)と連携し、ポスト「京」の超高精度解析を駆使することで、鍵となる物理現象を解明し、**世界最先端のエネルギーシステムを実現する**。
- (3) 戦略的活用の観点: エネルギー変換の中核をなす、燃焼等の複雑な物理現象を高精度に予測するためには、**第一原理解析**が必須となる。実問題に対する第一原理解析にはポスト「京」の能力が必要となる。

内容の詳細

具体的なサブ課題として以下のようなものが想定されるが、**波及効果の大きなもの**、解析基盤技術が共有できるものを**優先して実施**。

- **サブ課題A: 超臨界タービン燃焼器:**
 - 超臨界燃焼挙動を詳細に解明し、高熱効率・低環境負荷(CCS, ゼロNOx)に寄与する超臨界タービン燃焼器の実用化を加速。
- **サブ課題B: ICエンジン:** エンジン内の乱流噴霧燃焼挙動を解明し、熱効率の飛躍的向上(40%→50%以上)に貢献。
- **サブ課題C: 超大型風車:** 最重要課題である立地アセスメントに必要な100ケース/アセスメントの高精度風況予測を実現し、実用化を加速。
- **サブ課題D: 核融合炉:** 核融合炉の実用化に必須となる核燃焼プラズマ挙動の解析技術を確認し、国際熱核融合実験炉ITERの炉心設計に貢献。



ポスト「京」利用の必要性

- 超臨界タービン燃焼器では亜臨界状態に比べて雰囲気圧が10倍(300気圧)になり**解析規模が約100倍**になるため。
- ICエンジンでは予測精度を飛躍的に向上させることが可能な気筒内噴霧燃焼の第一原理解析(**DNS解析**)が必要なため。
- 超大型風車の立地アセスメントでは、**100ケース以上**の詳細な風況予測シミュレーションを実施することが必要なため。
- 核融合炉心の核燃焼プラズマ挙動の解析では、「京」の成果を重水素など多種イオン系、かつ、**長時間スケール**(10ms→1s)に拡張することが必要となるため。

必要な計算資源

ピーク性能1EFLOPS・実効効率10%で算出すると、占有日数は10日～80日程度と見積もられるが、詳細は具体的な研究課題に依存する。

期待される成果・波及効果

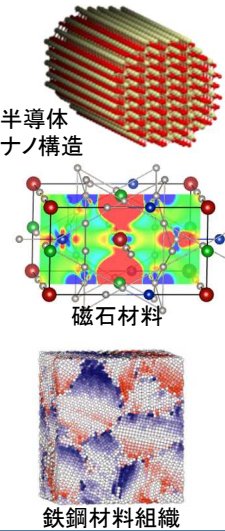
- 超高効率・低環境負荷な産業機器・コンシューマ製品の実現による我が国の**産業競争力の強化**、低炭素社会・省エネルギー社会の実現に向けた**世界的リーダーシップの発揮**。
- 「**エネルギー基本計画**」で重要性が指摘される省エネルギー・低環境負荷技術、中長期クリーンエネルギー源等の技術開発に貢献。
- 具体的な成果としては、高熱効率・低環境負荷の超臨界タービン燃焼器の実用化、ICエンジンの熱効率の飛躍的向上(10%以上向上)、超大型風車の実用化、核融合炉の炉心設計への貢献などが期待される。

⑦ 社会の発展を支える高機能物質・材料の創成

概要・意義・必要性

- (1) 必要性 これからの社会に不可欠な先端電子デバイスや高機能物質・材料の開発と機能創出を図る。電子材料、磁性材料、構造材料、革新的電子デバイス等が主な研究対象。
- (2) 有効性 元素戦略プロジェクト、最先端大型実験施設と連携して基礎研究のブレークスルーを図り、産業界と共に国際競争の激しい新デバイス・新材料の研究開発を加速。
- (3) 戦略的活用 ポスト「京」で初めて実現される精密、大規模、長時間のシミュレーションと系統的探索により、新材料・デバイス開発を革新。

内容の詳細



- サブ課題A ナノ構造体やパワーエレクトロニクス向け新材料の大規模高精度シミュレーションによる「次世代高機能半導体デバイスの開発」
- サブ課題B 強相関物質の高精度計算による「新奇超伝導体、新機能スピン電荷デバイス材料の開発」
- サブ課題C ナノ界面での光と電子のダイナミクスシミュレーションによる「電子デバイスを代替・補完する光・電子デバイスの開発」
- サブ課題D 電子論に基づく磁石機能の解明と「希少金属を代替する永久磁石、軟磁性材料の開発」
- サブ課題E 材料特性と製造プロセスの関係に着目する「次世代構造材料の強靱化の設計・制御」

ポスト「京」利用の必要性

「京」では理想的なナノ構造や高温超伝導体の大規模計算が行われ、電子状態や物理現象の解明・理解が進展。ポスト「京」では、これまで不可能だった複雑界面や不均一系の精密、大規模、長時間のシミュレーション、多数の化学組成、多様な条件下でのシミュレーションなどにより、実験だけでは困難な物性解明や系統的な材料探索、デバイスデザインを実現。

必要な計算資源

計画されている全ての計算を実行すると、ポスト「京」での占有日数は、1EFLOPS機15%実効効率で算出して、最低でも80日程度は必要。量子ダイナミカル計算、複雑な強相関物質の設計などさらに高度な計算を行うと最大400日程度必要。（京では、10～50年分に相当）

期待される成果・波及効果

- 多様なナノ構造デバイスのデザイン、強相関系新奇物質の高精度物性予測と物質探索、複雑な界面や不均一性を考慮した材料特性の予測と製造プロセスの提案が可能に。
- 物質・材料の性質の予測だけでなく、ほしい物性を実現するための物質設計も加速。
- 最先端大型実験施設で得られる膨大な実験データの解析と有効利用。
- 新しい半導体材料、超伝導材料、磁性材料、構造材料、ナノ構造デバイス等において、日本の産業競争力を一層強化し、社会基盤を形成するための、高機能物質・材料創成技術が確立。
- 物質科学の深化と自然観の革新を通して基礎科学に貢献。

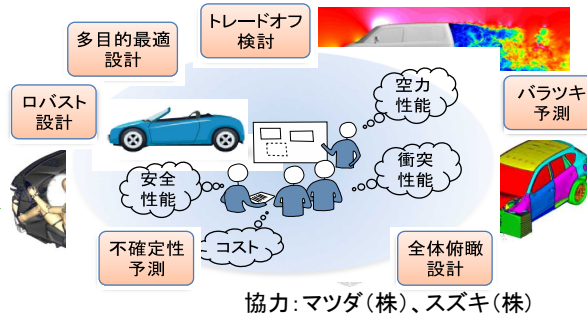
⑧近未来型ものづくりを先導する革新的設計プロセスの開発

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点: 社会ニーズを踏まえた付加価値を有する競争力のあるものづくりを実現するには、**上流設計プロセスの革新**(2012～2013ものづくり白書)と、その核となる**超高速統合シミュレーション**が必須。
- (2) 有効性の観点: 機能・コスト・性能などの**製品コンセプトを上流設計段階で最適化**する革新的な設計手法(コンセプトドリブン型ものづくり)の開発と広範の製品分野への展開により、我が国ものづくりの国際競争力強化に貢献。
- (3) 戦略的活用の観点: 設計・検討の基礎となる**信頼性の高い膨大なデータをシミュレーションにより生成**するため、京の数十倍から百倍程度の計算機能力が必要。

内容の詳細

- 設計上流で活用する**概念設計プラットフォーム**と、製品設計に必要な様々な物理シミュレーションによる評価**プロセスを統合した設計シミュレーションシステム**を開発する。
- 高付加価値を有するものづくりの要となる、**革新的要素技術(材料、デバイス、制御法等)の開発**を実施する。
- 実証事例として、具体的な設計シナリオをもとにした検証を実施し、本提案の有効性を実証する。
- 実証で用いたツール群を再利用可能な形で整備し、他分野へ普及展開を図る。



ポスト「京」利用の必要性

製品コンセプトを詳細に検討する上流設計には、様々な領域の物理シミュレーションのエビデンスに基づいたパラメータ空間での検討や、設計の各フェイズに対応した検討が必要であり、バックエンドのシミュレーション数は膨大になる。このため、京の数十倍から百倍程度の性能をもつ計算機が必要となる。

必要な計算資源

- 超ストロングスケイリング技術開発による計算時間の飛躍的短縮(数日⇒数時間内)
- 実機スケールのパラメトリックスタディ(20EFLOPS×200時間)
- 新規材料に対して、1000を超えるプロセス要素反応・要素構造を設定(ポスト京の3～5%を占有)

期待される成果・波及効果

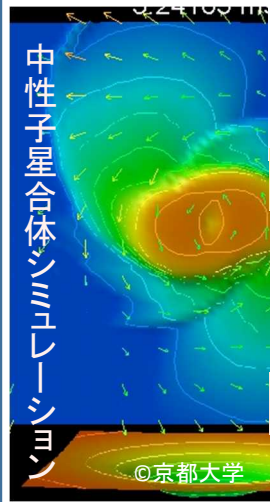
- 高品質に加えて社会ニーズや新しい提案を取り込んだ新製品コンセプトが、高度シミュレーション技術を駆使したアプローチにより実現性のある具体的姿として設計段階において提示できるため、極めて**費用対効果が高く競争力のある新製品開発に貢献**できる。
- エクサスケールで動作する、ものづくりに有用な基盤アプリケーションが数多く輩出されるため、**広範なものづくり産業分野への応用展開が可能**であり、我が国ものづくり産業全体への波及効果は極めて大きい。
- 研究開発段階から産官学一体となった体制を構築するため、高度シミュレーション技術を習得した**産業界のリーダーを育成**できる。

⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明

概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点**: 自然界の基本法則と宇宙の進化過程には多くの謎が残されている。実験・観測だけでは到達できない情報を得るための精密計算や、素粒子から宇宙まで複数の階層にまたがるシミュレーションを実現し、未解決問題を解明できる。
- (2) **有効性の観点**: 「京」を通じて計算機科学者、応用数学者との連携体制が確立。更なる成果創出に向けて実験・観測との連携も進んでいる。計算科学を軸として分野を横断し研究手法を超えて連携する世界にも類のない体制が構築されつつある。
- (3) **戦略的活用の観点**: ポスト「京」で初めて可能になる精密計算や階層をまたぐ現象の計算を大型実験・観測のデータと合わせることで、計算科学のみならず素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史解明へのブレークスルーが得られる。

内容の詳細



- サブ課題A「究極の物理法則と宇宙開闢の解明」**
 - 素粒子の精密実験と呼応する精密計算を実現し、標準模型を超える物理法則の発見を目指す。実現すれば、素粒子物理全体のブレークスルーとなる。物質と時空の究極理論として期待される超弦理論を解析して、将来的に基本法則の解明につなげる。
- サブ課題B「物質創成史の解明と物質変換」**
 - 元素合成機構を明らかにするため、バリオン間相互作用、原子核の構造・中性子星の形成、超新星爆発・中性子星合体という複数の階層をシミュレーションで橋渡しする。放射性核廃棄物の核変換の基礎的データを与え、社会貢献につなげる。
- サブ課題C「現代物理学が紐解く宇宙進化の謎」**
 - 初代星、銀河、巨大ブラックホールなどの異なる階層をつなぐシミュレーションを実現し、宇宙の進化を明らかにする。

ポスト「京」利用の必要性

- 計算の精密化や複数の階層をまたがる大規模計算を実現するには、「京」の能力を大幅に超える計算量が必要。
- 計算の高速化・効率化を進めて、ポスト「京」の能力により最大限の科学的成果を得られるようにする。
- アプリケーションの内容に応じ、HPCI全体で最適な資源配分の実現を検討。

必要な計算資源

サブ課題A 60日、サブ課題B（バリオン間相互作用60日／原子核・核変換60日／超新星爆発60日）、サブ課題C 60日、を目安。全300日のうち100日をポスト「京」で、残りは他のHPCI資源の活用を想定。

期待される成果・波及効果

- 素粒子標準理論を超える**新しい物理法則の発見**や、究極理論の理解に貢献
- 多様な元素が生まれた宇宙における**物質創成過程を統一的に理解**
- 宇宙進化において**天体が階層的に形成された仕組み**や、銀河中心に**巨大ブラックホールが存在する起源**を解明
- 核変換の基礎データ提供を通じて、**放射性核廃棄物の削減に向けた社会貢献**が可能

⑩ 惑星系と生命の起源の探究

概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点**: 地上観測(すばる, ALMA, TMT), 衛星観測(Kepler, ひので, ERG), 宇宙実験(はやぶさ2, たんぽぽ)と直接比較可能な第一原理計算を行い, **生命の起源と太陽系環境学**を探究
- (2) **有効性の観点**: 宇宙, 地球・惑星, 気候, 生命, 物質分野の計算科学と宇宙観測・実験が有機的に連携する学際的な取り組みにより, **生命誕生の普遍性と特殊性**を探究し, 人類共通の知を創出
- (3) **戦略的活用の観点**: 地球型惑星形成過程, 星間空間の有機物生成, 太陽系の物理環境の変化について, ポスト京でなければ達成できない大規模第一原理シミュレーションを世界に先んじて実現



地球型系外惑星の発見
(Credit: PHL@UPR
Arecibo, NASA)

内容の詳細

サブ課題A: 惑星の形成と進化の多様性の探究

宇宙物理学, 惑星科学, 地球科学, 気候等の研究者, 及び計算科学研究機構等が参画する体制を組み, ダストから微惑星形成に至る成長過程, 中心星への惑星落下問題, 地球型惑星の表層環境形成を解き明かし, **惑星とその大気の起源と進化を解明する。**

サブ課題B: 宇宙における生命誕生の普遍性と特殊性の探究

宇宙, 惑星, 生命, 物質分野連携により, 宇宙ダストにおける有機物質生成過程, 太陽系外惑星上における生命誕生の可能性について, 第一原理計算を行い, **生命誕生の条件を明らかにする。**



サブ課題C: 太陽活動の解明と太陽系環境科学の探究

100年以上にわたる太陽ダイナモの計算により, 太陽の長期時間変動のメカニズムを明らかにし, 宇宙観測・実験との連携による**「宇宙天気予報」**の実現によって, 地球環境と地上生命への影響を予測する。

ポスト「京」利用の必要性

惑星形成統合シミュレーション, 惑星大気計算において, 3次元大規模シミュレーションをポスト「京」で実現する。また, 宇宙環境下での化学反応シミュレーションおよびスペクトル計算においては, 様々な条件下において, 非常に大規模な系の**第一原理分子動力学シミュレーション**を必要とする。光合成系などの吸収スペクトルの計算には, 京で行ってきた基底状態の計算ばかりではなく, より高度な励起状態計算が必要なことから, ポスト「京」が必須となる。**「宇宙天気予報」を実現する輻射輸送を入れたシミュレーション**には, ポスト「京」の計算能力が必要になる。

必要な計算資源

惑星形成について, 惑星軌道計算, 乱流計算, 輻射流体計算に, 計30日程度。生命計算においては, アミノ酸20種類, 核酸5種類, ポリペプチド合成・分解機構解明に計20日程度。太陽対流層計算では40kmの解像度で分解するため 10^{11} 格子点を用い, 10^{23} 演算が必要で計30日間。

期待される成果・波及効果

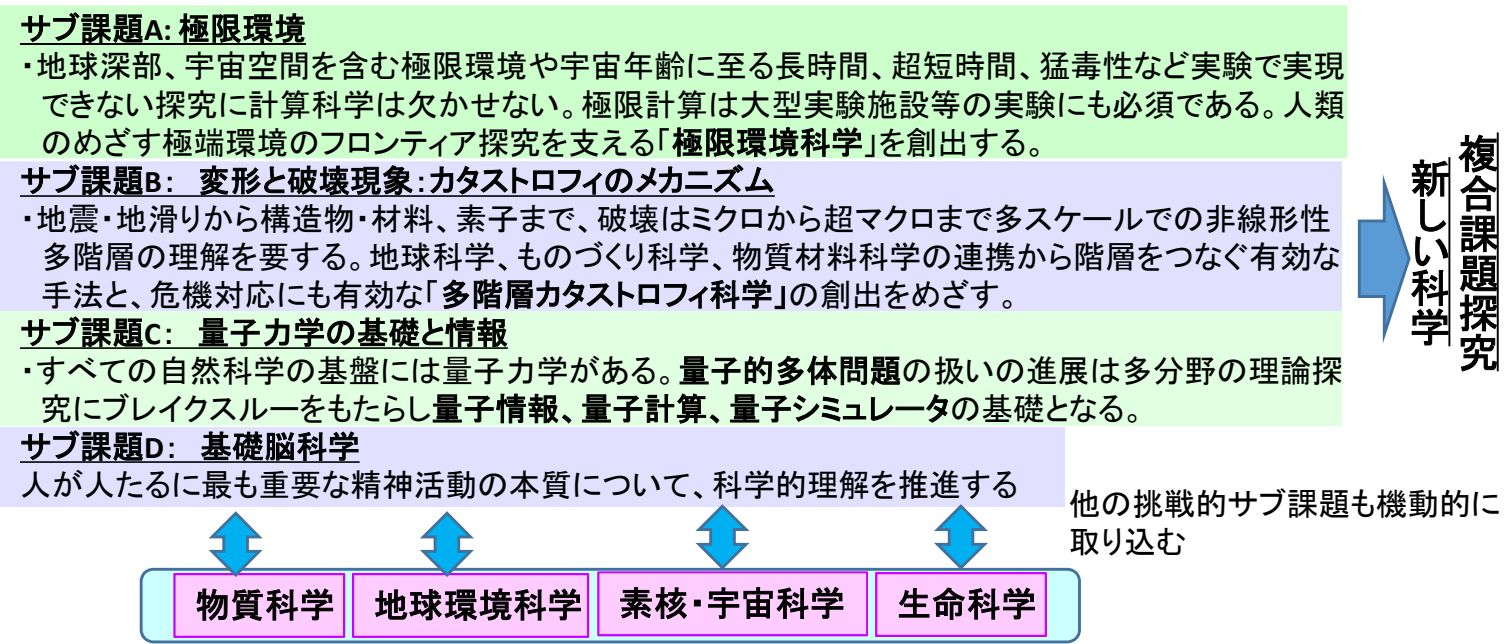
- ・太陽系外惑星に関する, すばる, ALMA, TMT計画, Kepler衛星の観測, 太陽, 地球磁気圏について, ひので衛星, ERG衛星観測, 太陽系始原物質について“はやぶさ2計画”, “たんぽぽ計画”などの宇宙実験, と**直接比較可能な第一原理計算を実現。**
- ・大規模計算と観測・実験と突き合わせることで**生命誕生の条件を解明。**
- ・**生命現象の本質に迫る**とともに, 人類共通の知を創出することで, 広く一般の自然科学への知的好奇心を醸成する。

⑪ 基礎科学のフロンティア ― 知の衝突と共創による複合現象の理解

概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点 特定の学問領域だけでは理解できない人類課題、複合課題をトップダウンで組織的・機動的に追究し、基礎科学の学際連携の中から、ポスト「京」のみがなし得る、新しい科学分野の共創をめざす。
- (2) 有効性の観点 人類の直面する課題解決には、生命、物質材料、地球環境、宇宙・素粒子原子核分野等基礎科学の連携が極めて有効である。連携の進展から、分野と階層を繋ぐ新しい基礎科学分野を紡ぎだされる。極限環境、カタストロフィ、量子力学と情報、脳機能のような複合課題のための科学創成が世界をリードする日本の科学の活性化とフロンティアの前進をもたらす。
- (3) 戦略的活用の観点 複合課題、マルチスケール問題は個別分野を超え、ポスト「京」でなければ困難な大規模計算を多数含む。

内容に含まれる連携課題(これは一例であるが、課題選定や連携が進む中で課題を絞り込み、深化発展させる。)



ポスト「京」利用の必要性

極端条件、複雑な要素の絡み合う問題、不安定に近い非線形問題。異なる階層をつなぐ問題においてはポスト「京」でようやく可能になる大規模な計算を要する問題が多数存在する。また分野を超える共通の方法論開発には、多数の試行錯誤を伴う大規模検証によってはじめて有効性が検証できる。

必要な計算資源

計画されている全ての計算を実行すると、ポスト「京」での占有日数は、1EFLOPS機15%実効効率で算出して、最低でも70日程度は必要。高度な計算、大規模計算を行うと最大200日程度必要となる。(京では、10～50年分に相当)

- 期待される成果・波及効果
- ・各自然科学分野、計算科学課題が活性化し、極限条件等人類のフロンティアや複合課題を探究するための学際的な新しい学問分野が創出される。
 - ・ポスト「京」により初めて可能となる計算科学的な共通手法が生まれる。
 - ・実験不可能な極限環境や多スケール事象を扱う、多重分野横断の概念と理解に到達する。
 - ・最先端大型実験施設で得られる膨大な実験データの解析法が確立する。
 - ・10年、20年後を見据えた科学の成果創出が行なわれ、いくつかのテーマでは、将来的に産業応用や社会的課題の解決につながる可能性が高まる。

⑫ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究

概要・意義・必要性	
(1) 必要性の観点:	急速に変化し複雑化する現代社会で生じる問題に対して、政策・施策が俊敏に対応するため、社会の構成要素が互いに影響し合う効果を取り入れて捉え、分析し、予測する技術が必要。
(2) 有効性の観点:	各「構成要素モデル」の高度化自体が社会的課題の解決の直結するだけでなく、社会の構成要素が互いに影響しあう効果を取り入れて社会経済現象全般を予測するシステムが先駆的。
(3) 戦略的活用の観点:	各「構成要素モデル」の有効性検証は、ビッグデータを捌ききるポスト「京」があって初めて可能。包括的シミュレーションは現時点では萌芽的だが、実社会に直結する問題を扱うため、早期に着すべき課題。

内容の詳細	
各社会要素モデルの統合化とその有効性実証研究 - 交通や経済など社会要素の相互の影響を考慮した社会経済統合モデルを構築し、社会・経済で生じる多様な可能性を、「想定外」を含めて網羅的に検証することにより安定性・信頼性の高い制度や方法を提示する基盤を確立する。 - 統合モデルの応用として、敵対的リスクの発生を低減化し、経済破綻といった人為的なカストロフの発生を抑止し、社会的課題の安定的解決手段の探索を目標とする。	
サブ課題: 各社会構成要素モデルの高度化 例: 交通システムの高精度高信頼予測の実現、およびそれによる最適化の実現 交通の運行状況・運行目的をリアルタイムでデータ同化し、混雑緩和から非常時対策を講ずる - 莫大な数のモデル・シナリオを自動生成してシミュレーションを実行し、最適な交通システム設計を支援 - 特定の鉄道路線、一部地域の交通ではなく、トータル交通システムとして問題を捉える。 (注) 上記は、構成要素を「交通システム」としたときの例、このほか、株式・為替、災害避難、情報伝達など、構成要素は多岐にわたる。	
ポスト「京」利用の必要性 京では少数のパラメータセット、少数のシナリオ・制度下でのシミュレーションが実現されつつある。「想定外」を含めた現実的な社会現象の探索には、ポスト京の計算力は必須。 必要な計算資源 - 自動車交通の典型的な時間スケールは数時間。数種パターンで試みるには、1EFLOPS効率15%を仮定して、2日間。 - 為替・証券取引所群のエージェントシミュレーションによるモンテカルロサンプリングには、先物取引まで含めて1日。全体で10日間。	

期待される成果・波及効果 - 包括的に社会経済活動をシミュレートすることで、制度の設計・社会経済の統御の効率性・安定性・信頼性を高める。 - 従来の主観的・一面的な社会問題解決方法から脱却し、社会科学に基づいた客観的な解決方法を提示。(温暖化問題施策などがこれまでの例) - 今後のトリリオンセンサーの有効利用につながる手法が期待される。 - 各要素の高度なモデル化検証技術は、防災避難シミュレーションなどにも応用される。	
--	--