

# 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アプリケーション開発・研究開発について

平成27年9月7日

研究振興局参事官（情報担当）付  
計算科学技術推進室

# 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

## ○趣旨

スーパーコンピュータ「京」の次を担うポスト「京」については、大規模な研究開発プロジェクトであり、そこから高いインパクトのある成果を創出することが期待される。スーパーコンピュータで解決できる問題は、基礎科学から産業利用まで幅広いものであるが、ポスト「京」においては、国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に優先的に取り組むべきである。

こうした状況を踏まえ、ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題や課題解決による早期の成果創出に向けた研究開発体制等を検討するため、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を設置する。

## ○検討スケジュール

### ●第1回（平成26年4月4日）

検討委員会の設置について

ポスト「京」プロジェクトについて

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

関係府省庁における計算科学技術に対するニーズについて

### ●第2回（平成26年5月30日）

ポスト「京」の社会的・科学的課題の考え方

アプリケーションの研究開発体制について

### ●第3回（平成26年6月19日）

ポスト「京」の計算資源配分の考え方

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

### ●第4回（平成26年7月24日）

ポスト「京」の社会的・科学的課題の取りまとめ案

### ●第5回

報告書取りまとめ

## ○検討委員会メンバー

安西 祐一郎（日本学術振興会理事長）

内山田 竹志（スーパーコンピューティング技術産業応用協議会運営委員長

トヨタ自動車代表取締役会長）

大隅 典子（東北大学大学院医学系研究科教授）

◎小宮山 宏（三菱総合研究所理事長）

城山 英明（東京大学大学院法学政治学研究科教授

政策ビジョン研究センター長）

住 明正（国立環境研究所理事長）

関口 和一（日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員）

瀧澤 美奈子（科学ジャーナリスト）

土屋 裕弘（田辺三菱製薬代表取締役社長）

○土居 範久（慶應義塾大学名誉教授）

土井 美和子（東芝研究開発センター首席技監）

林 春男（京都大学防災研究所巨大災害研究センター教授）

平尾 公彦（理化学研究所計算科学研究機構長）

（◎：主査、○：主査代理）（合計13名）（50音順）

# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

## <重点課題（9課題）>

- ①社会的・国家的見地から高い意義がある、
- ②世界を先導する成果の創出が期待できる、
- ③ポスト「京」の戦略的活用が期待できる課題を「重点課題」として選定。

カテゴリ	重点課題	実施機関
健康長 寿社会 の実現	<b>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</b> 超高速分子シミュレーションを実現し、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、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。	代表機関: <u>理化学研究所</u> (課題責任者: <u>奥野 恭史・客員主管研究員</u> ) 分担機関: 京都大学、東京大学、横浜市立大学、名古屋大学、産業技術総合研究所
	<b>② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学</b> 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる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。	代表機関: <u>東京大学</u> (課題責任者: <u>宮野 悟・教授</u> ) 分担機関: 京都大学、大阪大学、株式会社UT-Heart研究所、自治医科大学、岡山大学
防災・ 環境問 題	<b>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</b> 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。	代表機関: <u>東京大学</u> (課題責任者: <u>堀 宗朗・教授</u> ) 分担機関: 海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学
	<b>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</b> 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。	代表機関: <u>海洋研究開発機構</u> (課題責任者: <u>高橋 桂子・センター長</u> ) 分担機関: 理化学研究所、東京大学、東京工業大学

# <重点課題（9課題）>（つづき）

カテゴリ	重点課題	実施機関
エネルギー問題	<p><b>⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発</b></p> <p>複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。</p>	<p>代表機関：<u>自然科学研究機構</u>（課題責任者：<u>岡崎 進・教授</u>）</p> <p>分担機関：神戸大学、理化学研究所、東京大学、物質・材料研究機構、名古屋大学、岡山大学、北海道大学、早稲田大学</p>
	<p><b>⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化</b></p> <p>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。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学</u>（課題責任者：<u>吉村 忍・教授</u>）</p> <p>分担機関：豊橋技術科学大学、京都大学、九州大学、名古屋大学、立教学院立教大学、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構、物質・材料研究機構、自然科学研究機構核融合科学研究所、みずほ情報総研株式会社、株式会社風力エネルギー研究所</p>
産業競争力の強化	<p><b>⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成</b></p> <p>国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、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との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学</u>（課題責任者：<u>常行 真司・教授</u>）</p> <p>分担機関：筑波大学、大阪大学、自然科学研究機構分子科学研究所、名古屋工業大学、東北大学、産業技術総合研究所、東京理科大学</p>
	<p><b>⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発</b></p> <p>製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれら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する。</p>	<p>代表機関：<u>東京大学</u>（課題責任者：<u>加藤 千幸・教授</u>）</p> <p>分担機関：神戸大学、東北大学、山梨大学、九州大学、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所、東京理科大学</p>
基礎科学の発展	<p><b>⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明</b></p> <p>素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせて、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。</p>	<p>代表機関：<u>筑波大学</u>（課題責任者：<u>青木 慎也・客員教授</u>）</p> <p>分担機関：高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学、理化学研究所、大阪大学、自然科学研究機構国立天文台、千葉大学、東邦大学、広島大学</p>

## <萌芽的課題（4課題）>

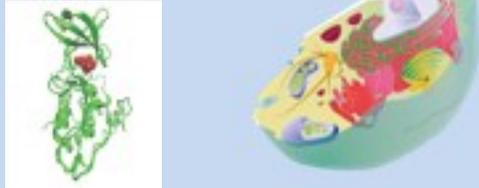
萌芽的課題	
将来性を考慮し、 今後、実現化を 検討する課題	<b>⑩ 基礎科学のフロンティア – 極限への挑戦</b> 極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答の出 ていない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。
	<b>⑪ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究</b> 複雑且つ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済など 社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。
	<b>⑫ 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明</b> 宇宙、地球・惑星、気象、分子化学分野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・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子化学を探究する。
	<b>⑬ 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用</b> 革新技术による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」での大規模シミュレ ーションにより人間の精神活動を脳の物理的実体にねざして再現し、人工知能への応用をはかる。

# ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム (1/3)

## 医療・創薬

### ポスト「京」で実施する計算

多数のタンパク質、多数の候補物質を使用したシミュレーションや、健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーションを実施。



スパコンを活用し、候補物質の探索だけでなく、副作用の原因も分析。さらに、個人の医療計測データに基づくシミュレーション手法を構築。

### 社会への貢献内容

薬のつくり方そのものを革新する薬剤設計技術確立するとともに、個別化・予防医療を支援。  
✓ 個人ごとのがんの予防と治療戦略の支援を実現し、がんによる死亡者を減少する。

**治療困難な  
疾病の克服**

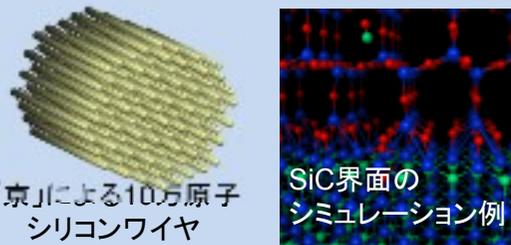


個々人のがんがわかる！

## デバイス

### ポスト「京」で実施する計算

10万原子以上からなる、SiC（シリコンカーバイド）等の異種物質の界面の構造などに対し、多様な条件下で計算を実施。



「京」による10万原子シリコンワイヤ

SiC界面のシミュレーション例

ナノデバイスをコンピュータ上で設計・解析し、特性を把握。

### 社会への貢献内容

マテリアルズ・インフォマティクス等を活用しつつ、新奇機能デバイスを先行開発。  
✓ 半導体市場(30兆円)の一角確保。(2025年頃まで)

**ポストシリコンテクノロジーで  
半導体ビジネスの復権へ**

三菱電機  
パワー半導体



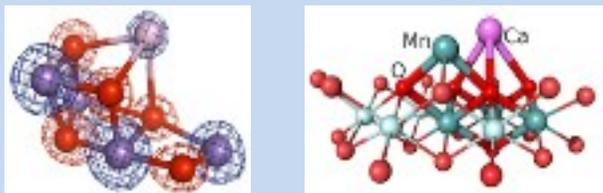
TOYOTA EV

# ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム (2/3)

## 人工光合成

### ポスト「京」で実施する計算

天然光合成系における酸素発生の状態について、タンパク質の影響を考慮した、数十万原子を取り扱う計算を実施。



天然光合成の酸素発生前中心のX線結晶構造 (左), 人工光合成の候補触媒の構造 (右) 引用: 大阪市大・神谷信夫教授, CALTEC・Agapie教授

天然光合成系の原理をシミュレーションで解明。

### 社会への貢献内容

CO<sub>2</sub>と水から人工光合成でプラスチック原料等基幹化学品を製造。

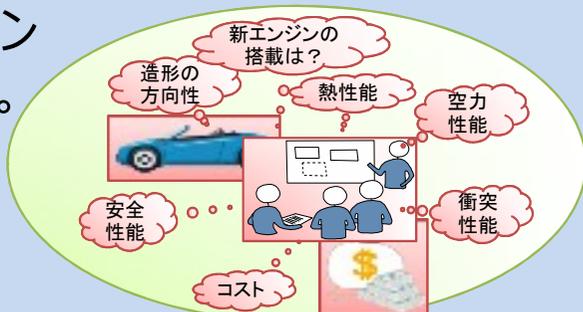
- ✓ 基幹化学品の20% (250万トン/年) を製造。(2030年)  
→ 約3,500億円/年規模に相当。
- ✓ 約800万トン/年のCO<sub>2</sub>削減。  
(経済産業省ARPCHEM資料より)

人工光合成によるエネルギー・環境問題の解決

## ものづくり

### ポスト「京」で実施する計算

試作試験では実現不可能な実走行データや人体損傷モデルを活用したシミュレーションや、試作実験(風洞実験等)を代替するシミュレーションを実施。



全体俯瞰設計

車のコンセプトから構造・機能・性能設計にいたる主要な設計フェーズのシミュレーションを統合的に実施。

### 社会への貢献内容

生産性を引き上げる新しいものづくりシステムを構築。(2025年頃まで)

- ✓ 実験ではできない解析により、性能の高い製品開発が可能に。
- ✓ 抜本的な開発工数削減により、安価・短期間での製品開発が可能に。(日本の自動車メーカー全体で、試作車削減・実験費用削減効果は数百億円/年)

革新的な車(デザイン、品質、性能)ができる!



エンジニア・デザイナーの働き方が変わる!

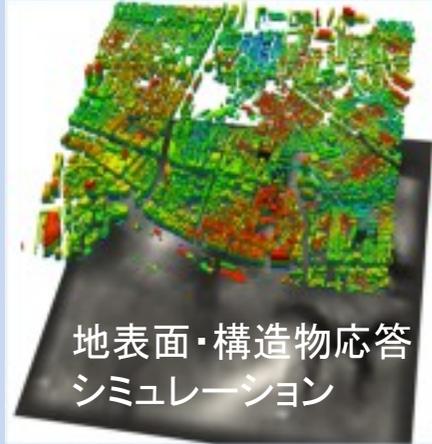
産業競争力強化に貢献

# ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム (3/3)

## 防災 (地震・津波)

### ポスト「京」で実施する計算

地震の不確定さをも考慮し、津波の遡上、建造物の被害、避難・交通・経済活動の影響などを詳細な都市モデルを使って計算。



都市全体の一次・二次被害のシミュレーションを行い、地震・津波の災害の影響を統合的に予測。

### 社会への貢献内容

地震・津波による複合災害についての予測システムを構築。

- ✓ 行政(内閣府・自治体)の防災・減災計画への反映。
- ✓ 約6,500億円の経済的な波及効果。(直接効果・三菱総研調べ)

**国土強靱化に貢献**



## 防災 (気象)

### ポスト「京」で実施する計算

新型センサ・観測衛星によるビッグデータを融合した予測シミュレーションを実施。(台風の進路予測だけでなく、確率に基づいて発生も予測。また、ゲリラ豪雨・竜巻の突発的極端気象を予測。)



観測ビッグデータを用いた、高解像度・高速での気象予測。

### 社会への貢献内容

台風からゲリラ豪雨・竜巻等のグローバルからローカルまでの気象災害シームレス予測技術の革新により、安全・安心の確保の礎を築く。

- ✓ 例えば、局所的ゲリラ豪雨予測では100m以下の解像度で30秒毎に更新するリードタイム1時間の予測手法を確立(ポスト「京」開始後5年以内)

**防災・危機管理に貢献**

# 健康長寿社会の実現

## アウトカム

### 「京」以前(過去)

### 「京」時代(現在)

### ポスト「京」時代(将来)

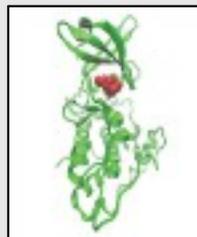
#### 重点課題

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

シミュレーションは、創薬化学者による実験の補助的役割にとどまっていた。(薬剤の候補物質とタンパク質の結合シミュレーションを高い精度で行うことは極めて困難。)



はじめて薬剤の候補物質とタンパク質の結びつきやすさをシミュレーション。製薬会社と連携し、新薬の候補物質の探索につながる研究を実施。



多数のタンパク質、多数の候補物質を使用したシミュレーションが実施可能。さらに、副作用の原因等も分析可能に。

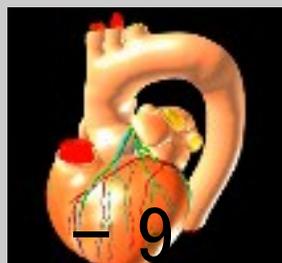


② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

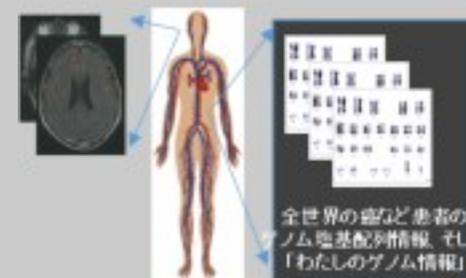
人の体を構成する脳・神経や筋肉・骨、心臓、血管といった個々の要素に対し、ばらばらに粗いシミュレーションを実施。成果の応用は限定的。



心臓や血管について、分子・細胞レベルのシミュレーションを実施。医療機関との連携により、治療への応用を進めている。



膨大な量の臨床データやゲノム情報から、個人ごとの健康・疾患の予測が可能。疾患の早期発見・早期治療、また、健康寿命の延伸に貢献できる。



# 防災・環境問題

## アウトカム

### 「京」以前(過去)

### 「京」時代(現在)

### ポスト「京」時代(将来)

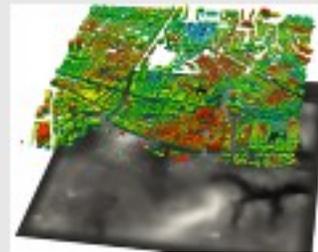
#### 重点課題

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

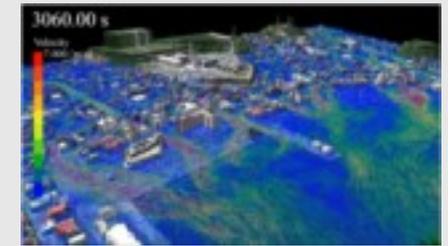
地震や津波による被害予測のシミュレーションを行うことを目指し、分野別かつ部分的な技術開発を実施。



強い揺れによる**大津波の生成原因を解明**し、特定の限定された数例のシナリオに基づく被害予測を実現。また、建造物の振動や被害、津波の遡上、避難時の人の流れなどをシミュレーション。



現実の震源や地下構造の違いによる**不確定さ**をも考慮したシナリオに基づく被害予測を実現。また、被害の相互作用をも考慮した**都市全体の防災予測**、現実的な**避難状況等の予測**が可能に。

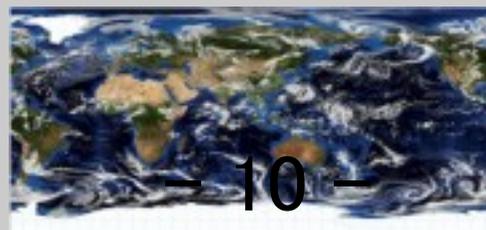


④ 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

地球シミュレータによって原理的な気象の計算手法（全球雲解像解析）を確立。また、熱帯域の大規模積乱雲集合（台風発生源の大きな）の再現に成功。



**全球（地球全体）規模で、台風の源となる大気の大規模な乱れが再現**し、一ヶ月予報の可能性を示した。また、半日から一日前に、**地域レベルの集中豪雨を予測**できる可能性も示した。



リアルタイムの**人工衛星データの同化**により、大気の流れを**詳細に再現**し、一か月後の台風発生確率が高精度で予測可能に。また、高機能レーダーの**観測データの同化**により、**ゲリラ豪雨の30分から数時間前の予測**が現実的に。



# エネルギー問題

## アウトカム

### 「京」以前(過去)

### 「京」時代(現在)

### ポスト「京」時代(将来)

#### 重点課題

⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

リチウムイオン電池について、正極や負極の固体電極材料の100原子程度を取り扱う計算が限度。化学反応の予測は不可能。



高性能と高安全を両立する材料設計はほぼ不可能。

1000原子レベルの電子状態計算が可能。界面に電位を加えた計算や化学反応を予測する高精度計算が可能に。安全や性能にかかわる電極上被膜の添加剤効果など長年の謎を解明。

数十万原子レベルの計算が可能。実験と連携してインフォーマティクス手法を取り込み、**新型電池材料の開発期間を短縮**。高性能と高安全を両立する電池材料特許の先行取得を目論む。

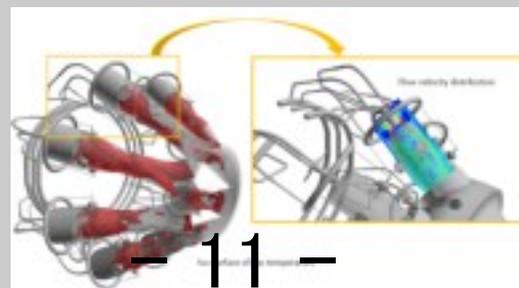


⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

実機燃焼器（タービン）内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES（Large Eddy Simulation）解析は行われていたが、対象は大気圧（0.1MPa）条件下の単缶もしくは燃焼器の一部に限られていた。



**タービンの実利用環境**（3.0MPa程度までの亜臨界状態）**における**実機燃焼器内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES**解析が可能**となった。



**より高圧条件**（30MPa程度までの超臨界状態）**下における**実機燃焼器内の燃焼のLES**解析が可能**。燃焼挙動の把握、燃焼器の設計、および最適操作条件の選定を支援し、クリーンエネルギーシステムの実用化に貢献。

# 産業競争力強化

## 想定アウトカム

### 「京」以前(過去)

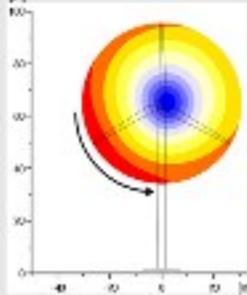
### 「京」時代(現在)

### ポスト「京」時代(将来)

#### 重点課題

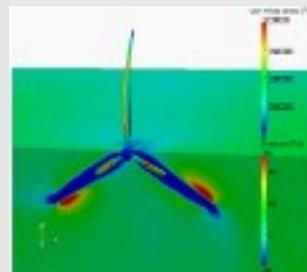
#### ⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

風車の設計には実験・観測データに基づく経験則が利用されており、数値解析は補助的な役割で利用。風車の定常解析が中心であり、実験の代替には至らなかった。



FAST  
(実験データベース)に  
基づく風車騒音予測

風車単体の大規模な非定常解析として、風車の後流や地形の影響を考慮した解析が可能。しかし、ウィンドファームのような風車群の最適設計のための解析は実現できていない。



大規模ウィンドファームにおける風車間の流れの相互干渉の解析が可能に。発電量の向上、ブレードの寿命改善、低コスト化に貢献。



洋上ウィンドファームにおける風車後流のイメージ

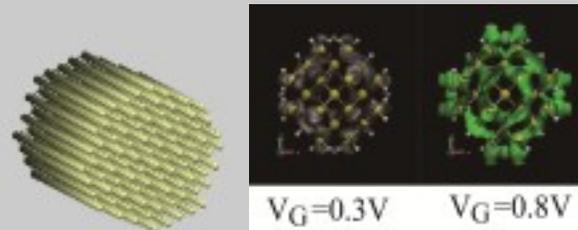
#### ⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

計算量が膨大であるため、次世代のナノデバイスのシミュレーション（数十nm程度のサイズで生じる電子の量子化の問題）を行うことはできなかった。



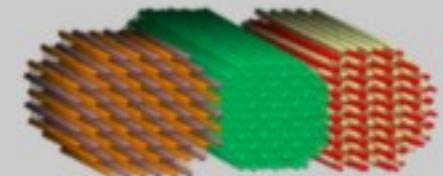
回路幅が数10ナノになると  
リーク電流が急増

構造が単純なナノスケールの次世代材料について、はじめて電子構造や電気伝導特性を解明。



ワイヤ構造 12断面での電流分布

多種多様なナノスケールの次世代材料について、はじめて電子の動的な状態や特性から生じる物理現象の解明が可能に。



多種多様なナノワイヤ

# 基礎科学の発展

## アウトカム

### 「京」以前(過去)

### 「京」時代(現在)

### ポスト「京」時代(将来)

#### 重点課題

⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

実験の代替手法として期待されていたが、精度が不十分なため、補助的手段として利用。(時間的・空間的解像度が十分でなく、現象の解明に用いることはできなかった。)

風洞実験



従来不可能であった**試作実験(風洞実験)**に匹敵する精度での空気抵抗等の予測が可能となり、実験の代替手法となりえることを実証し、一定程度、既に活用されている。



シミュレーション

より複雑で現実的な状況の解析が可能となることで、はじめて車のコンセプトから構造・機能・性能設計にいたる主要な設計フェーズの**シミュレーションで統合的に扱う**ことが可能に。(開発期間短縮・コスト低減・品質向上に貢献)

#### ⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明

超新星爆発などの爆発的天体現象は、地上実験では再現不可能な超高密度状態である一方、重力・核力・ニュートリノ輸送など重要な科学的成果に繋がるものである。ただし、「京」以前では大幅に簡略化した模型を使わざるを得ず、現実的な計算は困難。

回転や対流効果を考慮した超新星爆発シミュレーションが可能になり、**爆発の再現に初めて成功**。また、一般相対論的重力効果等を取り入れたより精密な計算も実現しつつあり、多様な爆発現象の解析が進みつつある。



「京」を用いた超新星爆発の再現

多様な効果が考慮された高精度の計算や、大型光学望遠鏡や重力波望遠鏡による観測との連携により、**多様な超新星爆発や中性子星連星合体過程の解明**と、それらに付随して進む重元素合成の理解が進む。



ジェットを伴う超新星爆発の想像図 (NASA)

# ポスト「京」で期待される成果

## 出口を見据え戦略的にアウトカムを導出

### 例:ものづくり

- “製品の企画段階から、デジタル化・自動化”  
企業の開発コスト・期間を削減。  
世界に先駆けて、高性能な製品を開発。
- 多数の企業と協働して社会実装。



### 例:地震・津波対策

- “地震が起きたとき、街がどうなるのか”  
建物の損壊や人の流れも考慮した、  
現実的な防災計画が実現。
- 自治体と協働して社会実装。



## 分野横断的・国際的に、将来につながる技術の波及を実現

### 最先端スパコンの利用で培う技術

#### ビッグデータ同化

観測・実験ビッグデータを  
効率よく分析・活用

特性予測  
シミュレーション

リアルタイム  
シミュレーション

統合  
シミュレーション

リアルワールド  
シミュレーション

不確実性を考慮した  
シミュレーション



災害対策



ものづくりの  
デジタル化

科学研究  
の深化



社会・経済分析  
への適用



サービス産業での利活用  
(データセンターへの適用等)



etc..

### 最先端スパコンの開発で培う技術

#### システム運用管理技術

#### 高密度実装技術

#### 省電力技術

#### システム冷却技術

#### 高速ネットワーク技術

# スパコンが果たす役割

☆ 超サイバー社会において、**ビッグデータとシミュレーションは社会的・科学的課題解決の鍵**

☆ **スーパーコンピュータを含む情報科学技術は、そのために欠かせない社会基盤技術**



我が国の世界最高水準のコンピューティング技術の継承・発展  
それを支える人材の継続的な育成・確保

**自主開発が必須**