

HPCI戦略プログラムに係る 説明資料

平成28年6月7日

プログラムマネージャ

土居 範久

- ◆戦略プログラムの計算資源の分配及びメンバー
- ◆「京」での成果とポスト「京」について
- ◆参考資料(ポスト「京」の必要性に関して)

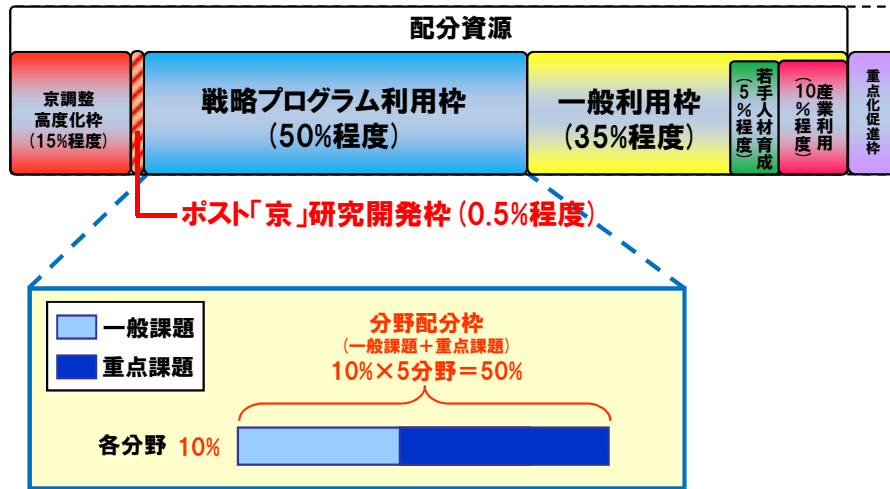
戦略プログラムの計算資源の 分配及びメンバー

「京」の計算資源配分（「京」の共用開始後）

平成28年2月 特定高速電子計算機施設に係る評価委員会（第一回）資料より

画期的な科学的成果や社会的課題の解決に資する成果を創出するため、分野ごとのボトムアップの計算資源配分と、プログラム全体を通じたトップダウンの計算資源配分を両立させ、「京」の計算資源を戦略的に配分

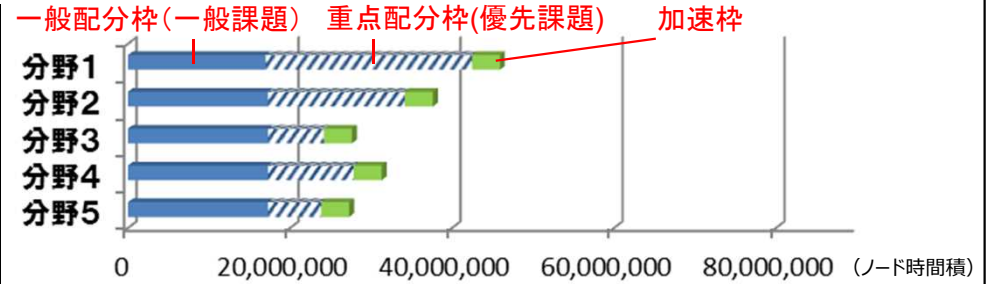
「京」の利用枠（以下の利用枠は、H27年度上期のもの）



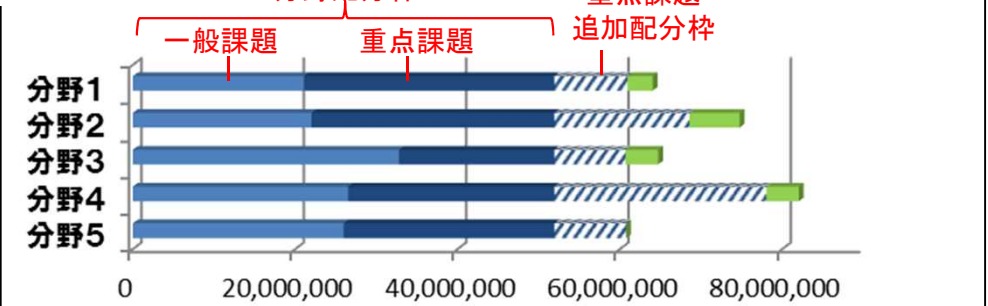
- ①各分野に計算資源を均等配分し、各課題への基礎的配分は分野内で決定（H24年度：一般配分枠/H25年度以降：一般課題）
- ②分野ごとに重点課題を選定。（H25年度以降：重点課題）
- ③その上で、プログラム全体を通して重点課題の一部に計算資源を追加配分。（H24年度：重点配分枠（優先課題）/H25年度以降：重点課題追加配分枠）
- ④さらに、プログラム全体を通して早期の成果創出が期待される課題に計算資源を追加配分。（加速枠）

なお、戦略プログラムの事業最終年度は、最終目標の達成にむけて、分野の裁量分を多くし、追加配分の申請に係る研究者の負担をなくす観点から、各分野に計算資源を均等配分。

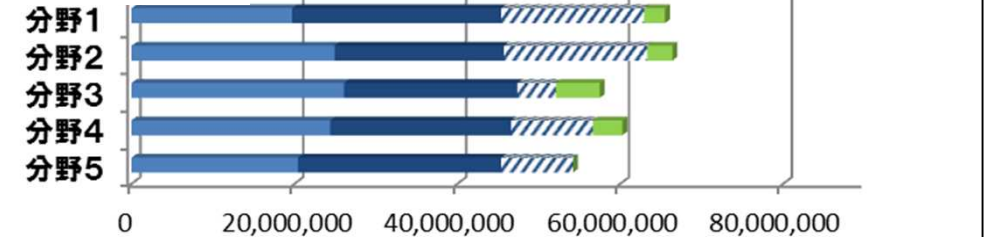
平成24年度下期



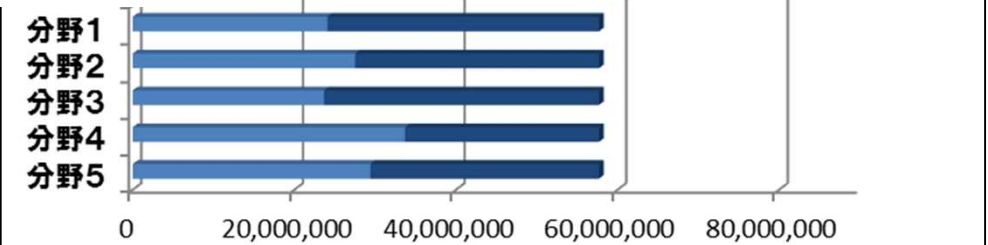
平成25年度



平成26年度



平成27年度



(補足) 推進体制 (HPCI計画推進委員会)

「京」を中核とする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(以下、HPCIという)の構築については、ユーザ機関等からなるコンソーシアムの主導で行うこととしている。

このコンソーシアム主導の進め方を有効かつ円滑に機能させていくためには、国が適切に関与することが必要であり、HPCI計画について、国として必要な検討等を行うHPCI計画推進委員会を設置している。

HPCI計画推進委員会 (平成24年2月10日時点)

主査 土居 範久(慶應義塾大学 名誉教授)

小柳 義夫(神戸大学 特命教授)

笠原 博徳(早稲田大学理工学術院 教授)

関口 和一(株式会社日本経済新聞社産業部 編集委員兼論説委員)

鷹野 景子(お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科 教授)

所 眞理雄(株式会社ソニーコンピュータサイエンス研究所 代表取締役社長)

土井 美和子(株式会社東芝研究開発センター 首席技監)

根元 義章(東北大学 理事)

村上 和彰(九州大学大学院システム情報科学研究院 教授)

矢川 元基(東洋大学計算力学研究 センター長)

- (1) HPCI計画の推進にあたり国として必要な事項の検討
- (2) コンソーシアムより提出されたHPCI計画案等の評価
- (3) HPCI計画に係る進捗状況の評価
- (4) その他HPCI計画に関すること

平成24年2月10日のHPCI計画推進委員会において、「京」の利用可能な資源のうち、50%程度を戦略プログラム利用枠とすることが決定された。

国として、5つの戦略分野の進捗状況を定期的に把握し、評価を行うために、全体を統括する「推進委員会」を設ける。
その下に、分野ごとの状況を把握し、指導・助言を行う「作業部会」を設置している。

HPCI戦略プログラム推進委員会

○プログラムマネージャ

土居 範久(慶應義塾大学 名誉教授)

○分野マネージャ

[分野1] 中村春木(大阪大学 蛋白質研究所 所長/教授)

[分野2] 寺倉清之(物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 フェロー)

[分野3] 矢川元基(原子力安全研究協会 評議員 会長)

[分野4] 小林敏雄(日本自動車研究所 顧問)

[分野5] 小柳義夫(神戸大学 計算科学教育センター 特命教授)

○理化学研究所

平尾 公彦(理化学研究所計算科学研究機構 機構長)

プログラムマネージャ	: 全体的な観点からプロジェクトの実施計画や進捗に関し提言を行う。
分野マネージャ	: 統括責任者等のプロジェクト実施者との意見交換とプロジェクト実施に係る指導・助言を行う。
計算科学研究機構長	: 機構と戦略プログラムの連携・協力の観点からプロジェクト実施に係る意見を述べる。

中間評価や事後評価を行う場合、上記委員会での議論の後、文部科学省の「科学技術・学術審議会」における外部評価を受けることで評価結果が確定する。

(補足) 推進体制 (分野別作業部会 委員一覧)

平成28年2月 特定高速電子計算機施設に係る評価委員会(第一回)資料より

分野1	(分野マネージャ) 中村 春木	大阪大学蛋白質研究所所長/教授
	茅 幸二	理化学研究所研究顧問
	児玉 龍彦	東京大学先端科学技術研究センター教授
	菅野 純夫	東京大学大学院新領域創成科学研究科教授
	長田 重一	大阪大学免疫学フロンティア研究センター教授
	松本 洋一郎	理化学研究所理事
	美宅 成樹	豊田理化学研究所客員フェロー
分野2	(分野マネージャ) 寺倉 清之	物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点フェロー
	栗野 祐二	慶應義塾大学理工学部電子工学科教授
	幾原 雄一	東京大学大学院工学系研究科総合研究機構教授
	魚崎 浩平	物質・材料研究機構 フェロー
	加藤 雅治	東京工業大学大学院総合理工学研究科教授
	高梨 弘毅	東北大学金属材料研究所所長
	中村 振一郎	理化学研究所社会知創生事業 イノベーション推進センター特別招聘研究員
福山 秀敏	東京理科大学総合研究院院長	
分野3	(分野マネージャ) 矢川 元基	原子力安全研究協会評議員会長
	鬼頭 昭雄	筑波大学生命環境系主幹研究員

分野3(続き)	住 明正	国立環境研究所理事長
	萩原 一郎	明治大学研究・知財戦略機構・特任教授 先端数理学インスティテュート所長
	長谷川 昭	東北大学名誉教授
分野4	(分野マネージャ) 小林 敏雄	日本自動車研究所顧問
	天野 吉和	富士通顧問
	奥田 基	一般財団法人高度情報科学技術研究機構 神戸センター副センター長
	押山 淳	東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻教授
	笠 俊司	IHI技術開発本部技術企画部部長
	後藤 彰	荏原製作所風水力機械カンパニー理事 企画管理技術統括技術開発統括部長
	澤田 隆	日本工学会(工学系学協会連合)事務局長
分野5	古川 雅人	九州大学大学院工学研究院機械工学部門教授
	(分野マネージャ) 小柳 義夫	神戸大学計算科学教育センター特命教授
	相原 博昭	東京大学大学院理学系研究科教授
	海老沢 研	宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所教授
	延與 秀人	理化学研究所仁科加速器研究センター長
	岡 眞	東京工業大学大学院理工学研究科教授
	川合 光	京都大学大学院理学研究科教授
	佐藤 勝彦	自然科学研究機構長

「京」での成果とポスト「京」について

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)

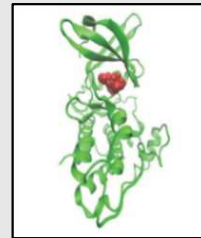
重点課題

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。

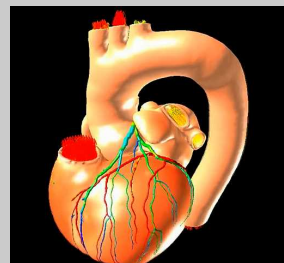


② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

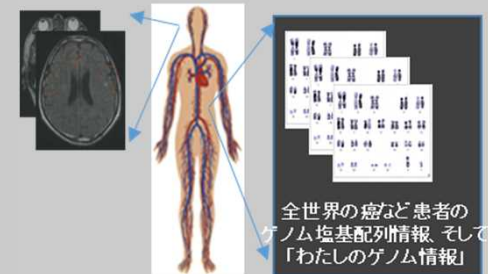
人の体を構成する脳・神経や筋肉・骨、心臓、血管といった個々の要素に対し、ばらばらに粗いシミュレーションを実施。成果の応用は限定的。



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)

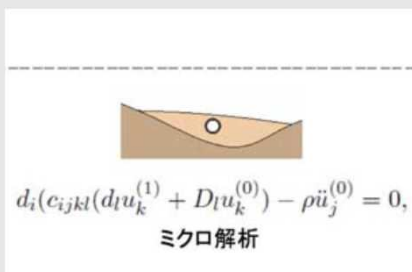
「京」時代(現在)

ポスト「京」時代(将来)

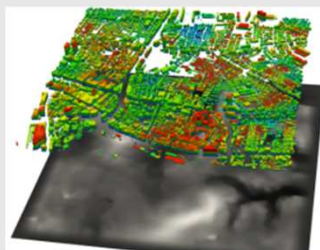
重点課題

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

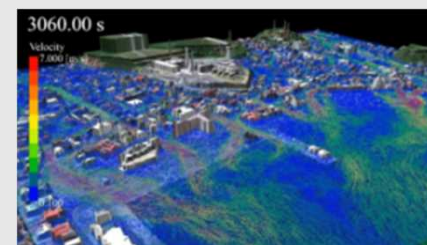
地震や津波による被害予測のシミュレーションを行うことを目指し、分野別かつ部分的な技術開発を実施。



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

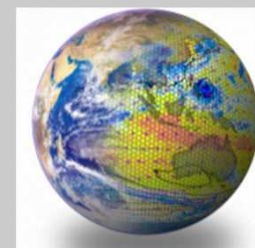
地球シミュレータによって原理的な気象の計算手法（全球雲解像解析）を確立。また、熱帯域の大規模積乱雲集合（台風発生の大きな源）の再現に成功。



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)

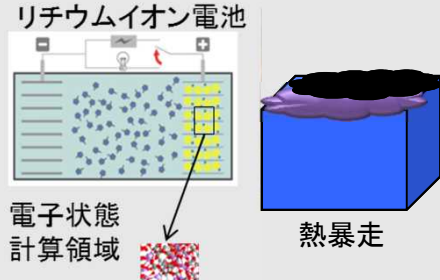
「京」時代(現在)

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。

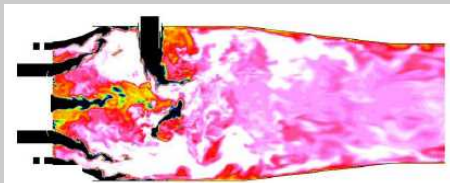
1000原子レベルの電子状態計算が可能。界面に電位を加えた計算や化学反応を予測する高精度計算が可能に。安全や性能にかかわる電極上被膜の添加剤効果など長年の謎を解明。

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。

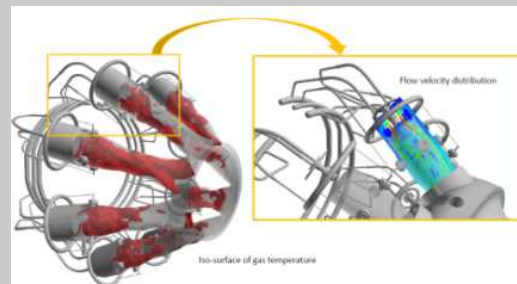


⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

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

アウトカム

「京」以前(過去)

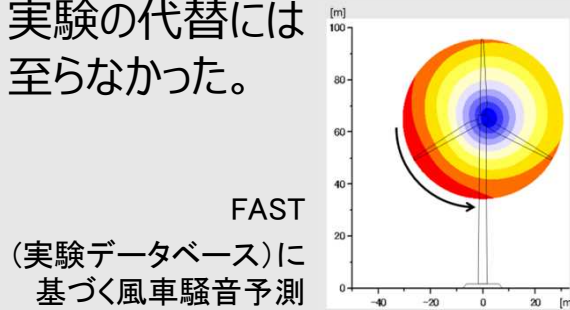
「京」時代(現在)

ポスト「京」時代(将来)

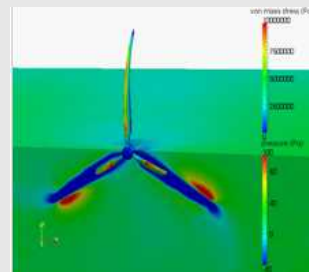
重点課題

⑥ ギー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。



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。



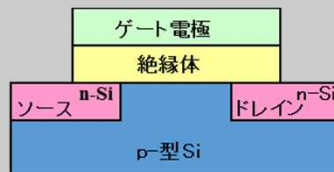
大規模ウィンドファームにおける風車間の流れの相互干渉の解析が可能に。発電量の向上、ブレードの寿命改善、低コスト化に貢献。



洋上ウィンドファームにおける風車後流のイメージ

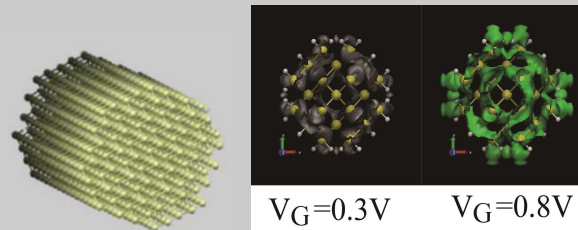
⑦ デバイス・高性能材料の創成

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。

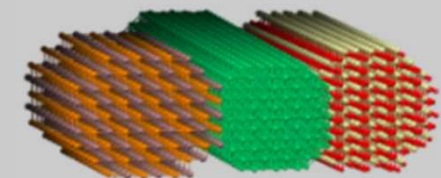


ワイヤ構造

$V_G=0.3V$ $V_G=0.8V$

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

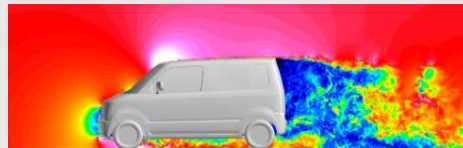
⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

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。



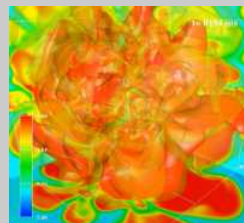
シミュレーション

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)

参考資料

(ポスト「京」の必要性に関して)

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

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、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現**

(2) 有効性の観点

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)や最先端計測データを活用し、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

(3) 戦略的活用の観点

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

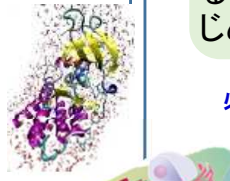
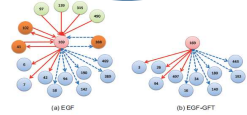
創薬関連ビッグデータを解析することで、多数のタンパク質からなる疾患原因、副作用、薬剤輸送に関わる生体分子システムを同定し、**薬剤による制御対象を網羅する**

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**

創薬関連ビッグデータ



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データに対応する情報を与えることで、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 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

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、副作用因子を含んだより複雑な**機能制御**による有効性の高い創薬を可能にする。これによって、**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や、一分子計測情報などのin-house実験によるものなど)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。

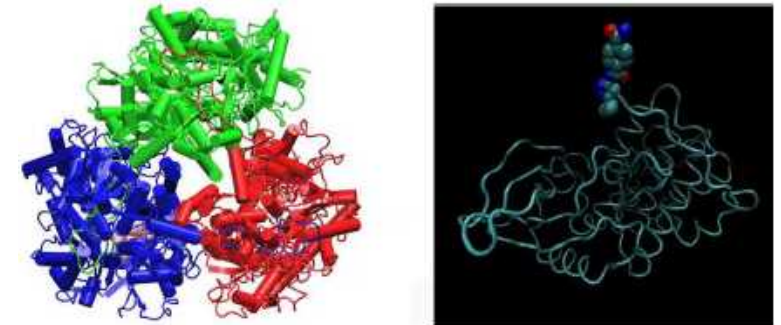
重点課題① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

● 重点課題① 概要： **ポスト「京」による創薬イノベーションを目指す**

- **長時間の分子シミュレーション技術の開発** ⇒ 病気の原因分子と薬の候補物質が作用する全ての様子が予測できるようになり、より効果的な新薬の開発が可能になる。
- **大規模分子システムのシミュレーション技術の開発** ⇒ 細胞内環境などの多数の分子からなる生体分子システムの創薬シミュレーションを実現し、より安全な医薬品開発を可能にする。
- **ポスト「京」を用いた革新的創薬計算基盤の構築** ⇒ 製薬会社等の利用による産業促進

● **ポスト「京」で出来るようになる事**

- 科学的な観点：**構造生命科学の革新**－ポスト「京」によりミリ秒のタンパク質やDNAの動きが解析できるようになる。
（「京」ではマイクロ秒であった）
- 社会的な観点：**医薬品開発の革新**－ポスト「京」により、がん、認知症、精神疾患、希少疾患など今まで困難であった薬の開発に新たな道を拓く。さらに、薬の副作用を予測したり、個人個人の体質に最適な薬を選択することが可能になる。
- 経済的な観点：**新薬開発による日本経済の牽引**－医薬品開発の期間短縮（約2年間短縮）と費用削減（一品目当たり約200億円削減）



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

(1) 必要性の観点

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**

(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

エクサスケールデータ解析

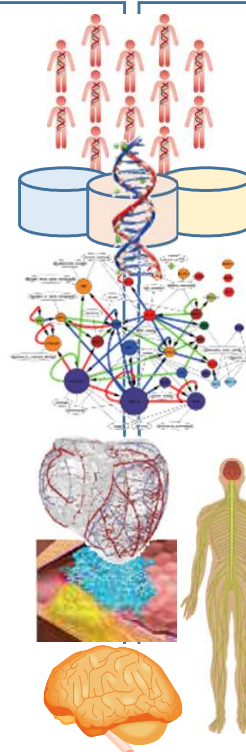
巨大なストレージと演算能力を活用した**健康・医療ビッグデータ**(個人ごとのオミックスデータと医療・計測情報など)を一挙に解析する技術を開発し、その基盤を確立

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

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

健康・医療ビッグデータの解析結果に基づいた**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、大規模な個々人のオミッ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 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)



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

期待される成果・波及効果

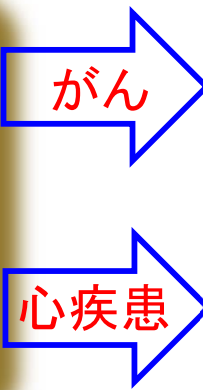
大規模なオミックスデータ解析により、恒常性破綻と疾患の関係、がんなどの疾患における多数の遺伝子異常と遺伝子ネットワークの関係を解明し、予防・個別化型の医療に貢献し、さらに参加型医療への展開を図る。

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生体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。

重点課題② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

ポスト「京」の社会的背景とで目指す成果

超高齢化社会が迫る中、加齢とともに生じる様々な病気



進化する複雑なゲノム異常情報との勝負

生体分子から心機能に至る病態の一貫理解が勝負



ポスト「京」とビッグデータで、個々人に対する的確ながんの個別化予防・治療戦略を創出

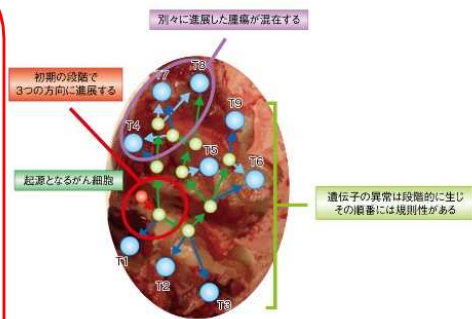
ポスト「京」での心臓シミュレーションで心臓疾患の創薬・治療の中心的戦略技術を創出

大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明

ビッグデータ解析

「個々人のがん」を捉えるには全ゲノム解析に基づき、1%以下の頻度の変異を網羅的に見いだすことが必須であり、50のがん腫では「京」では5000日を要する。ポスト「京」では、700検体(1検体データ5TB)/日のデータ解析を達成し、個々人のがんの起源とその多様性を捉え、がん治療戦略、がんの予防法と超早期発見にイノベーションを起こし、副作用に優しく個人ごとに効き目のよい薬を創出する戦略を作る。

低悪性度のグリオーマに高い多様性を発見

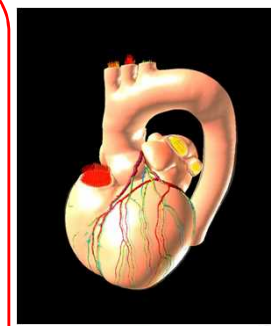


世界最大規模で網羅的に遺伝子変異を解析することにより、低悪性度のグリオーマにおける遺伝子変異の全体像を解明(小川等提供: Nature Genetics 2015)

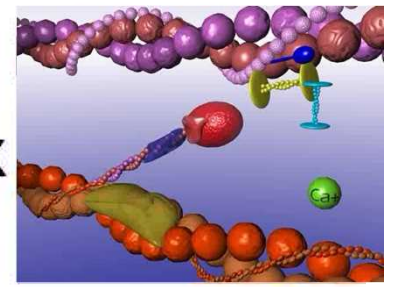
超大規模物理シミュレーション

心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合

心臓シミュレータUT-Heartと分子シミュレータCafeMolを融合させることにより、ミクロ・マクロ間の相互作用から病態が進行する心不全の解明と最適治療を可能とする世界でも例を見ないマルチスケール心臓シミュレーションを実現する。



UT-Heart



CafeMol

ポスト「京」に相応しい計算科学のマイルストーンを築くと共に、医療への実用化を展開する。

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 被害経験からでは予測困難な複合災害に対する、統合的予測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・自治体等で利用できる、HPCを使った地震・津波、一次被害、二次被害の統合的予測システムは、高度な被害予測を実現し、防災・減災対策を合理化。
- (3) 戦略的活用の観点 多数地震シナリオの想定は、不確実性の高い地震・津波の複合災害の予測にとって必要不可欠であり、1シナリオの計算に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

- ・ 自然災害・一次被害・二次被害の計算コンポーネントを統合した予測システムを構築し、多様性を考慮し想定外を無くす1000以上の地震シナリオ(*)で、大規模シミュレーションを実施することで、確率評価の可能な複合災害予測データベースを構築する。
- (*)断層広がり12x4通りxすべり不均質 ${}_5C_2$ 通りx振幅3通り=1440通り
- ・ 各計算コンポーネントに関する科学的課題を解決し、予測システムの信頼度を向上

サブ課題B: 統合的予測のための社会シミュレーションの開発

- ・ 二次被害に大きく影響する都市全体を対象とした交通シミュレーション等を実施する社会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て、多数地震シナリオを用いた被害予測を行い、行政に発信する。

ポスト「京」利用の必要性

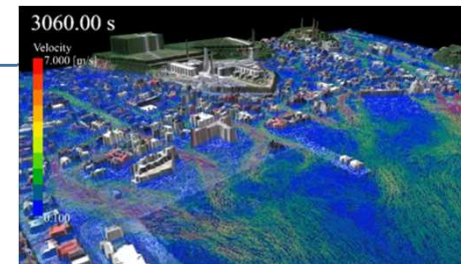
- ・ 詳細な幾何形状等を考慮した地震・津波・構造応答の計算を行うために、億を超える自由度の非線形有限要素計算が必要。
- ・ 京の全系でスケールするコードは開発済みだが、1回の計算に1日程度かかるため、不確定さを考慮した多数計算は、京では数年以上かかる課題であり、ポスト「京」が必要。
- ・ 交通シミュレーションについても、地震以外の状況も考慮した多数ケースの計算が必要。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

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、占有日数は、最低で70日程度(避難シミュレーションでのシナリオを最小限に絞った場合)。絞らないと最大4倍必要となる。

期待される成果・波及効果

- ・ 地震津波の複合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。
- ・ 計算コンポーネントの高度化を継続し、統合的予測システムを持続的に利用。
- ・ 行政(内閣府・自治体)の防災・減災計画への反映。



複合災害予測のベースとなる3次元津波遡上計算

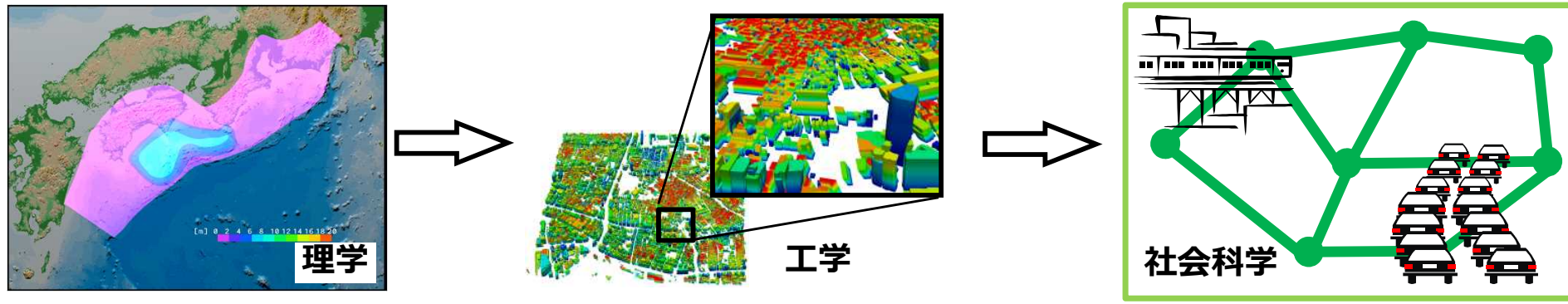


10万人規模のエージェントシミュレーション

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

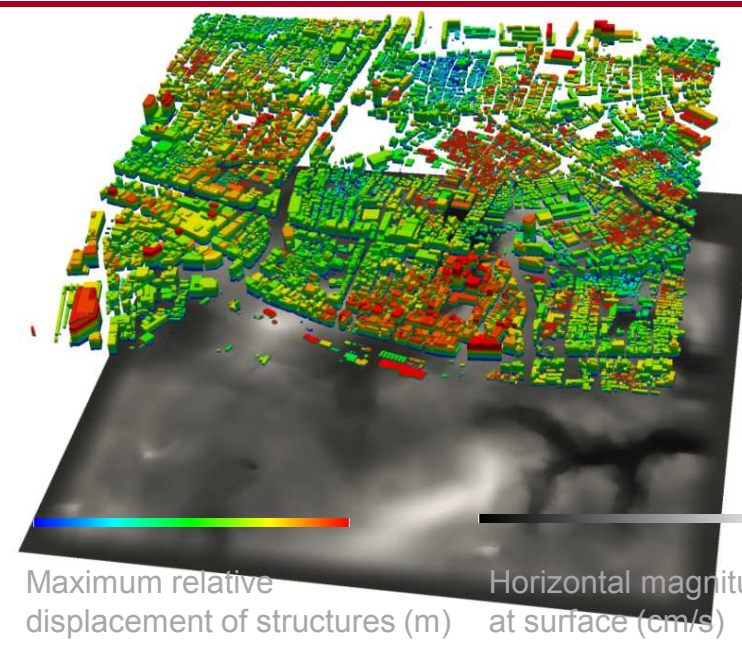
● 重点課題③ 概要

地震・津波が引き起こす都市の災害・被害の過程と避難等の被害対応の過程を、精緻な都市モデルを使った数値解析を組み合わせて予測する「統合的予測システム」を構築する。



● ポスト「京」で出来るようになる事

- ① 科学的な観点：地震・津波の複合災害を、超大規模都市モデルを使ったシミュレーションで予測
- ② 社会・経済的な観点：首都直下地震・南海トラフ地震を対象に、より合理的な予測を行うことで防災・減災に貢献



「京」で開発した都市丸ごとの地震シミュレーションの例。東京を対象に、精緻な都市モデルを使って地盤と建物の揺れを計算。SC14とSC15のゴードンベル賞ファイナリストに選出され、国際的にも高く評価。

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

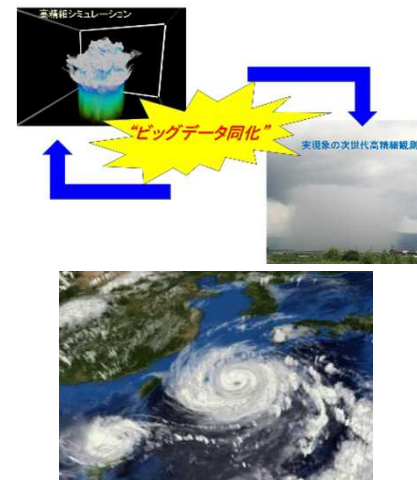
- (1) 必要性の観点: 竜巻、局地的豪雨等の予測高精度化への社会からの強い要望、環境政策立案のための科学的基盤提供
- (2) 有効性の観点: 安全な避難のための時間的余裕確保、観測研究・シミュレーション研究が一体となった研究体制の構築
- (3) 戦略的活用の観点: 十分なモデルと観測データ取り込みの解像度、アンサンブル数を確保し、予測高度化につなげる

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、国内および東アジアなど広域の大気質改善等への貢献を通し、今後の政策や防災、健康対策に寄与する。



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観測ビッグデータを、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 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

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、自治体による防災計画・環境政策への貢献、地球環境予測情報の発信を通じた持続可能な国際社会構築への貢献
- ・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

重点課題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

● 重点課題④概要

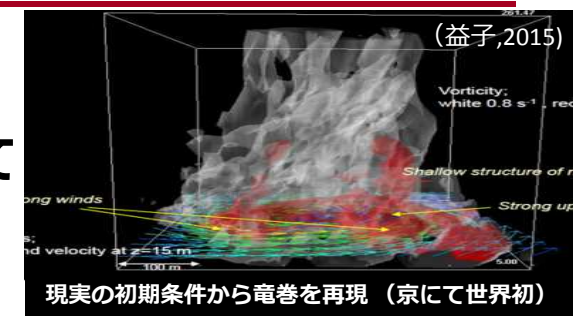
「予報をしてから現象が発生するまでの時間（リードタイム）をいかに長くできるか」その実現可能性を追求します。以下の3つの研究テーマを推進します。

- 1) 豪雨や局所的大雨を対象に、その発生・発達など現象の寿命を決定する物理的要因を解明することにより、予測精度の向上とより長いリードタイムを確保し、さらに突風や土石流の被害に直結する要因を明らかにする研究開発を行います。
- 2) 季節内振動の大規模熱帯擾乱によりモジュレートされる台風発生メカニズムを解明することにより、台風の長期予測精度を向上させる研究開発を行います。
- 3) 黒色炭素粒子エアロゾルや温室効果ガス、PM2.5等の大気中の化学的動態特性を明らかにすることにより、エアロゾルの気候への影響を明らかにする研究開発を行います。

● ポスト「京」で出来るようになる事

- ひまわり8号のデータなどの観測ビッグデータを天気予測に初めて使用してさらなる予測精度向上とより長いリードタイムを提示します。

- ① **科学的観点**：豪雨や局所的大雨の寿命を決める要因や風被害をもたらす要因を明らかにする。
- ② **社会的観点**：きめ細かい情報による被害、災害の減少、避難対策の選択肢を広げたり、より万端な備えへ。
- ③ **経済的観点**：経済活動麻痺の回避、物流や保険業界、計画生産、計画農業等への貢献。



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

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。

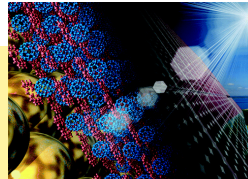
(2) **有効性の観点** エネルギーの創出、変換・貯蔵、利用に関する複雑な現実系の全系シミュレーション技術の開発は、我が国のエネルギー基盤技術のブレークスルーに繋がる。大規模プロジェクト、実験・企業研究者や計算機科学者との強力な研究体制が育ちつつある。

(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の微視的挙動を対象とした大規模、長時間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。



フラーレン太陽電池
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 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト「京」で占有日数は、最低でも80日程度必要。

期待される成果・波及効果

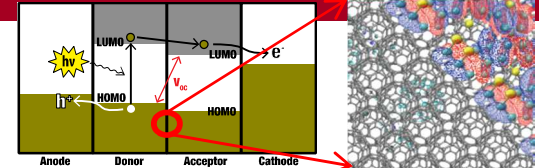
- ・ 変換効率の高い太陽電池を安価な元素や有機系で実現し、実用化を促進、また人工光合成系の確立により新規エネルギー源を確保する。
- ・ 安価で高速充電、大容量の二次電池や高効率の燃料電池の開発を可能とする。
- ・ 白金などの貴金属を使用しない高機能触媒の開発により、エネルギー多消費型物質生産の革新を達成する。
- ・ ハイドレートの生成・分解過程の解明により、メタンの効率的な分離、精製方法、安全な貯蔵技術を確立する。
- ・ 二酸化炭素を低コストで捕集・変換する技術を開発し、地球規模での二酸化炭素抑制、化石燃料の有効利用に貢献する。

重点課題⑤ エネルギーの高效率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発

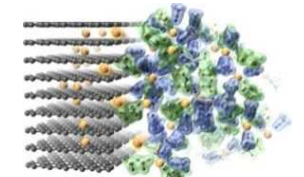
平成28年1月「スーパーコンピュータの今とこれから」シンポジウム公表資料より

● **重点課題⑤ 概要**：ポスト「京」を駆使することにより、太陽光、電気や化学エネルギーにおける複雑かつ複合的な分子・物質過程に対する全系シミュレーションを行い、実験研究者・産業界と連携して、エネルギー新規基盤技術を確立する。

- サブ課題A：新エネルギー源の創出・確保－太陽光エネルギー：光触媒による水分解反応の解明や高效率太陽電池の実現に向けたシミュレータにより新エネルギー源の創出を目指す。
- サブ課題B：エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー：二次電池の充放電曲線や燃料電池の電圧曲線を予測できる手法を確立し、信頼性の向上に貢献する。
- サブ課題C：エネルギー・資源の有効利用－化学エネルギー：メタンやCO₂の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発する。



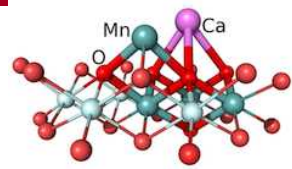
高效率な太陽電池設計 (エネルギー変換効率要因の特定)



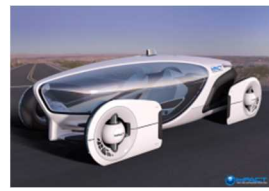
電極被膜・電解液界面



メタンハイドレート分解



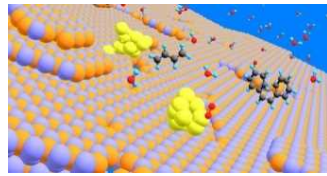
人工光合成の候補触媒の構造
大阪市大・神谷信夫教授, CALTEC・Agapie教授



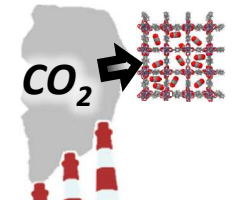
「しなやかなタフポリマー」との連携。コンセプトカー

● ポスト「京」で出来るようになる事

- a)天然と人工光合成のリアルなスピン状態計算や反応機構解析
- b)有機系太陽電池における現実系界面シミュレーション
- c)1-10億原子系のMD計算による高分子電解質膜設計
- d)電極、電解質をカバーした蓄電池反応統合シミュレーション
- e)ハイドレートの生成過程とセミクラステートの平衡過程研究
- f)千原子の不均一触媒表面反応経路の探索
- g)CO₂の化学反応吸着法最適化と固体吸着材の設計



高性能触媒



MOFへのCO₂の吸収

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で必要な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立し、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 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

占有日数は7日～53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。

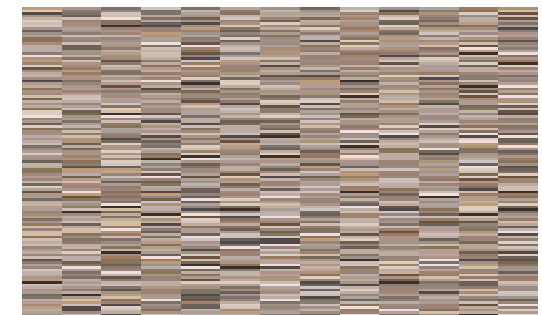
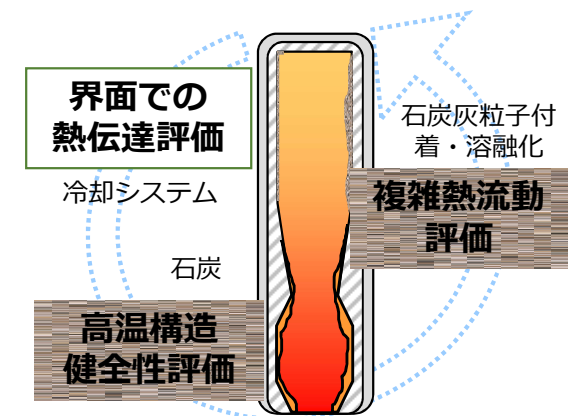
重点課題⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

● 重点課題⑥ 概要

- 超高効率・低環境負荷の革新的クリーンエネルギーシステムとして、**CO₂分離・回収・貯留を導入する石炭ガス化炉、洋上ウインドファーム、核融合炉、燃料電池**を取り上げる。それらの実用化の鍵を握る複雑非線形物理現象の第一原理的大規模超精密解析を、ポスト「京」の計算性能を駆使し、短時間で繰り返し行うことを実現し、実機環境（50～100万kWの石炭ガス化炉、数10基の洋上ウインドファーム、ITER等）での最適な設計条件や稼働条件を効率的に探索し、実用化のスピードアップに貢献する。

● ポスト「京」で出来るようになる事

- **石炭ガス化炉** ①科学的な観点：世界初のガス化・粒子分散・燃焼・灰溶融・壁面付着の乱流燃焼解析と炉構造・冷却の連成解析 ➔ 出口温度予測誤差10%未満、灰分量予測誤差20% ②社会的な観点：豊富な化石燃料を活用しつつCO₂及び環境汚染物質のゼロエミッションの実現 ③経済的な観点：5年で400万kW級（1400億円）のプラント売り上げ5基上積。5年で2850万トンのCO₂削減効果、81億円の燃料費削減効果
- **洋上ウインドファーム** ①科学的な観点：風車後流・大気境界層の変動風が発電性能や翼荷重に及ぼす影響を考慮した世界初の設計・疲労寿命解析システム ➔ ウインドファーム性能予測誤差10%未満 ②社会的・経済的な観点：ウインドファームの開発・設計を支援し、日本の風力発電産業の国際競争力強化に貢献

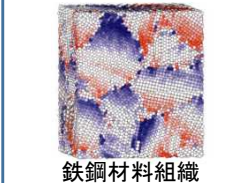
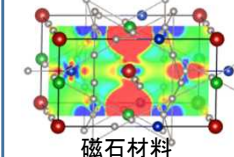
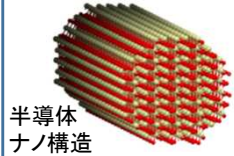


⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

概要・意義・必要性

- (1) 必要性 次世代の産業を支える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。新機能を持つ電子デバイス、高性能な永久磁石、信頼性の高い構造材料、次世代の機能性化学品等が主な研究対象。
- (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、新デバイス・新材料開発を革新。

内容の詳細



サブ課題A 新機能電子デバイス

微細加工限界のナノ構造半導体デバイスや新奇超伝導材料、光エレクトロニクスデバイスなど、新原理により新機能を提供する電子デバイスと電子デバイス材料の開発

サブ課題B 高性能永久磁石・磁性材料

電子論に基づく磁石機能の解明と希少金属を代替する高性能永久磁石、軟磁性材料の開発

サブ課題C 高信頼性構造材料

材料特性と製造プロセスの関係に着目した構造材料の強靱化の設計・制御と新材料開発

サブ課題D 次世代機能性化学品

凝集系の構造や電子状態の解明に基づく次世代機能性化学品の分子設計

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 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

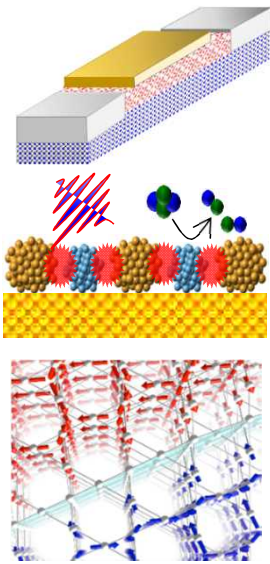
計画されている全ての計算を実行すると、ポスト「京」での占有日数は、最低でも80日程度は必要。量子ダイナミカル計算、複雑な強相関物質の設計などさらに高度な計算を行うと最大400日程度必要。(京では、10~50年分に相当)

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、複雑な界面や凝集構造、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、機能性化学品、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。

重点課題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

概要

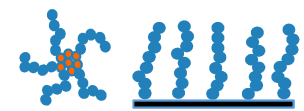
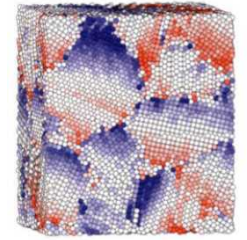


マイクロな基礎方程式にもとづくデバイスと材料の大規模シミュレーション

大規模系電子状態計算を基幹技術とした 界面・薄膜のサイエンスと新デバイス開発 マルチスケール手法・インフォマティクスを用いた材料開発

- (a)高機能半導体デバイス
- (d)高性能永久磁石・磁性材料
- (b)光・電子融合デバイス
- (e)高信頼性構造材料
- (c)超伝導・新機能デバイス材料
- (f)次世代機能性化学品
- (g)共通基盤シミュレーション手法

構造シミュレーション手法や数理科学的手法の開発

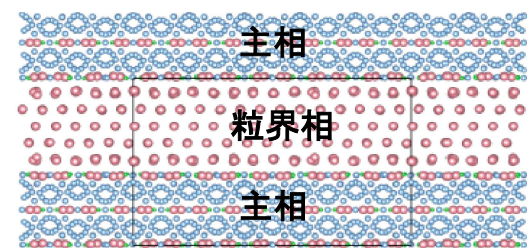
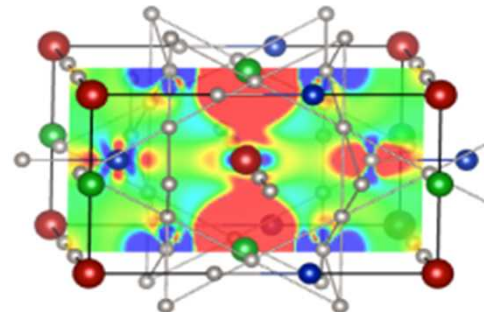


ポスト「京」で出来るようになる事

磁石材料

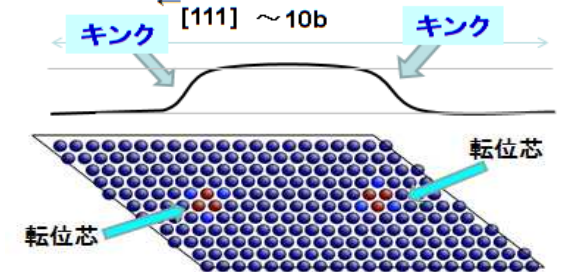
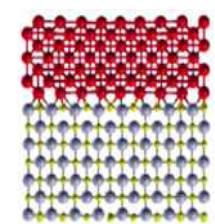
◆電子論とデータ科学手法を利用した磁石材料探索

◆磁石の主相・粒界相界面の電子状態・構造計算



構造材料

◆高温高圧下を含めた構造材料微細組織の安定構造や挙動のマルチスケール計算



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

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、並びに製造プロセスの革新**（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：**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）と**コストを最小化する革新的製造プロセス**を研究開発し、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・製造プロセスの最適化の基礎となる**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

サブ課題A：上流設計プロセスの革新

設計上流で活用する**概念設計プラットフォーム**と、製品最適化のための様々な物理シミュレーション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。



サブ課題B：製造プロセスの革新

製造コスト削減のポイントとなる**成形問題（溶接、樹脂成型、金属付加製造等）を迅速に解決**するための第一原理シミュレーションシステムを開発。

サブ課題C：革新的要素技術の創出

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、流体、デバイス、制御法等）を開発**。

ポスト「京」利用の必要性

上流設計では、パラメータの最適化のために様々な領域の物理シミュレーションが必要となり、製造プロセスでは、最小コストの加工条件等を見出すために第一原理計算が必要となり、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（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

超ストロングスケール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
（約28日間占有）

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
（ポスト京の占有日数：約17日間）

【課題全体で計算資源量（ポスト京の占有日数）】約45日間

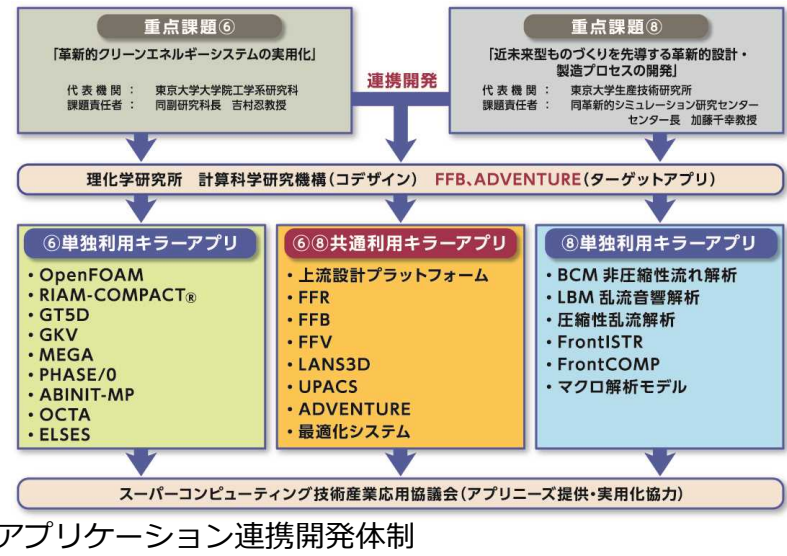
期待される成果・波及効果

- 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。
- ポスト京を用いた第一原理計算により、加工プロセス等の詳細が解明され、最適な加工条件を見出すことが出来れば、**製造コストの大幅な低減が期待**される。
- ポスト京を用いた実スケールシミュレーションにより、開発・検証される革新的な技術が格段に広い利用範囲に適用可能となる。
- 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。

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

平成28年1月「スーパーコンピュータの今とこれから」シンポジウム公表資料より

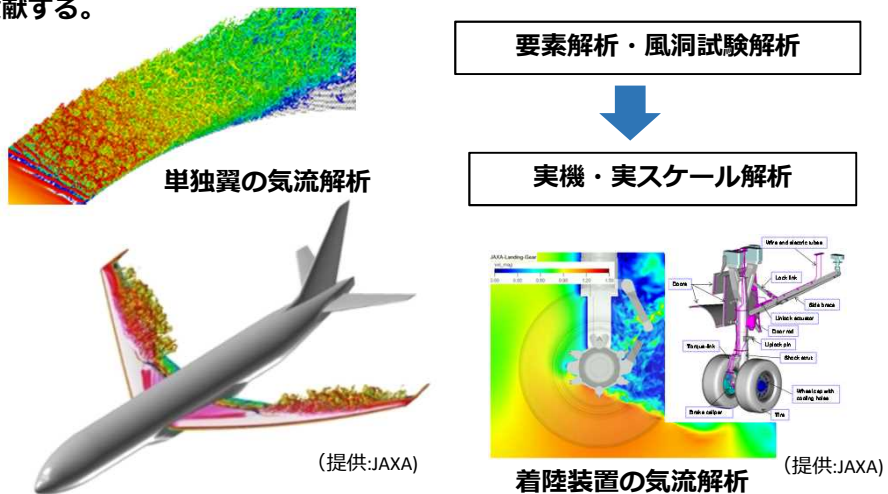
製品コンセプトを初期段階で定量評価し最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、及びそれらの核となる超高速統合シミュレーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりを実現します。



航空機の全機・非定常解析

大規模超高精度解析

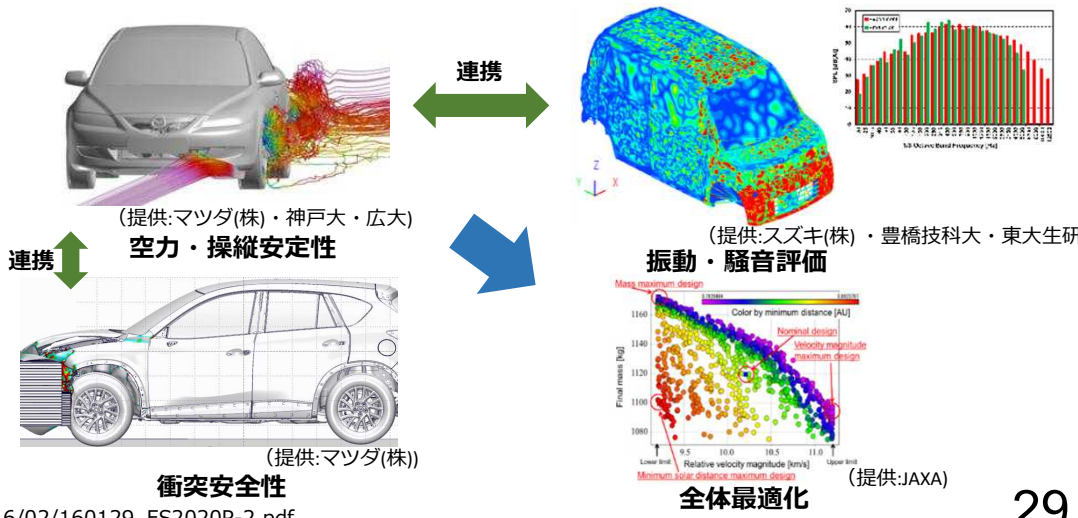
単独翼の風洞試験など要素レベルの高精度解析は京で実現した。ポスト京では、実機・実スケールの超高精度解析を実施し、航空機の燃費改善や安全性の向上に貢献する。



自動車CAE統合設計システム

連携・超多数ケース解析

「京」で実現した個別の超高精緻シミュレーションを相互連携し、1万ケースにも上るケーススタディを設計上流工程で実施し、最適設計を実現する。



資料出典：理化学研究所計算科学研究機構ウェブサイト https://www.aics.riken.jp/aicssite/wp-content/uploads/2016/02/160129_FS2020P-2.pdf

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」

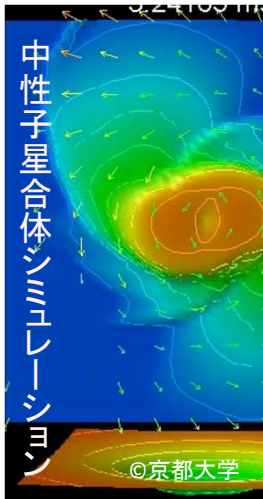
- 素粒子の精密実験と呼応する精密計算を実現し、標準模型を超える物理法則の発見を目指す。実現すれば、素粒子物理全体のブレークスルーとなる。物質と時空の究極理論として期待される超弦理論を解析して、将来的に基本法則の解明につなげる。

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 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)
 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

重点課題⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明

● 重点課題⑨ 概要

- 素粒子・原子核・宇宙分野にまたがる物質創成史の解明を目指します。素粒子から宇宙まで極端にスケールが異なる現象の精密シミュレーションを実現させ、J-PARC、KAGRA、TMTといった大型実験・観測装置のデータと組み合わせて、宇宙進化の謎に挑みます。
- 素粒子標準模型の検証、超弦理論の探求、素粒子間相互作用や重原子核構造の決定、爆発的天体現象の解明、宇宙進化の解明などを可能にするコード開発を行います。

● ポスト「京」で出来るようになる事

- 小林益川理論を検証し、素粒子標準模型を超える新しい物理法則の手がかりを見つけます。超弦理論シミュレーションによって宇宙開闢の謎に迫ります。
- 重元素合成や核変換反応などの解明を目指します。素粒子反応、原子核の構造と反応、超新星爆発など天体現象をシミュレーションでつなぎます。
- 世界最高分解能の天体疑似カタログを作成し、ニュートリノの分布を計算します。すばる望遠鏡などの観測データと融合したビッグデータ宇宙論を展開します。