

## 2. 将来想定される研究目標について(1)

研究分野	アプリケーション	概要	目的	期待されるブレイクスルー	波及効果	必要な実行性能
ライフサイエンス	高精度スクリーニング、巨大生体分子の動作機構解明、タンパク質の立体構造予測	分子動力学計算に基づく、タンパク質と基質の結合自由エネルギー計算 ( $10^4\sim 10^5$ 原子)、分子モーターなどの機構解明 ( $10^6\sim 10^7$ 原子)、タンパク質の立体構造予測	医薬品開発、バイオナノテクノロジー、発病機構解明	創薬の効率向上、機能材料開発、遺伝子変化による病気の発病機構解明、テーラーメイド医療への応用	我が国医薬品業界の国際競争力がトップクラスになる	10-100Pflops級
ライフサイエンス	生体高分子の量子化学計算	第一原理分子動力学、QM-MM法などによる酵素反応の解析	生体分子の動作原理解明、生体分子ネットワークの解明、医薬品開発、機能分子開発	医薬品開発、機能材料開発	製薬産業、ナノテク等への応用	1Pflopsから1000Pflops級
ライフサイエンス	生体分子ネットワークのモデリングとシミュレーション	生体分子ネットワークの推定	医薬品開発	創薬の効率向上	我が国医薬品業界の国際競争力がトップクラスになる	1-10Pflops級

## 将来想定される研究目標について(2)

研究分野	アプリケーション	概要	目的	期待されるブ レークスルー	波及効果	必要な 実行性能
ライフサイエ ンス	生体力学・生理 学シミュレー ション	人の固体全体の 力学的・生理学的 シミュレーション	医療応用 (診断・手術計 画立案・イン フォームドコンセ ント)	誰でも名医に	医療ミスを防ぐ、 分かりやすい 手術の説明(イン フォームド・コ ンセント)	1-10Pflops級
ライフサイエ ンス	生命現象のシ ミュレーション	実験に頼らず高度 好熱菌をマルチレ ベル・分子ネット ワーク・シミュレー ション	生命現象の理 解	最も深遠な生命 現象に迫ること ができる。人類 にとって画期的	医薬品開発に 画期的な方法 を提供	10-1000Pflops級
ライフサイエ ンス	生体シミュレー ション	人のマルチレベル シミュレーション	医療応用 (診断・治療)	医療の革新	医療の革新	1-1000Pflops級
ものづくり	V - CAD	全ての構成部品を 含めた全体・製造 組み立ての履歴を 持つ・構造流体熱 化学反応などのマ ルチ・フィジクス シミュレーション	設計製造の高 度化	設計方法の変革	日本の製造業 の産業競争力 の強化	0.1-1PFlops

### 将来想定される研究目標について(3)

研究分野	アプリケーション	概要	目的	期待されるブレークスルー	波及効果	必要な実行性能
原子核及び高エネルギー物理学・実験	大規模加速器実験におけるデータ処理及びシミュレーション	次世代大規模加速器実験では1秒間あたり1TByte以上のデータが生成される。その解析処理を生成速度の数倍以上の速度で処理する。また解析結果の理論的検証のためには同等の量のシミュレーションが必要であり、シミュレーションデータ生成及びその解析にも実験データ解析処理以上の計算能力が必要となる。	この宇宙の時間的極限であるビッグバン時の宇宙の状態、また空間的極限である陽子内部のクォーク・グルーオンの状態を実験室内で再現、探査し、この宇宙を支配する根源的な法則を解明する。	地球規模での大容量データ移動、分散データの統合的な管理、十万台を超える計算ノード管理及び効率的なジョブ割り振りの実現	学術分野ばかりでなく経済活動等あらゆる分野で進行するデータの大容量化を先取りすることによって、計算機産業の競争力を直接向上させる。	総CPU能力: PFlops級、CPUへの総データ供給能力: 10TByte/s級 データ保持容量: 百PByte級
素粒子物理学・理論	格子QCDシミュレーション	物質の基本構成粒子であるクォーク・グルーオンのダイナミクスを、第一原理である量子色力学(QCD)に基づいて取り扱い、理論計算を行うこと。その際、一切の近似を排除すること。	我々の住む宇宙を根源的に記述する素粒子標準理論の理解をより深めること。	他の手法では成し得ない計算により、宇宙創成の謎・物質起源の謎の解明に迫る。また、計算能力の不足により現在は予め限界を設けて計算を行っているが、数百TFlops級になれば限界を設けずに完全計算が可能となる。	唯一の、真の意味での第一原理計算であり、科学の手法としてのひとつの到達点となる。斯界における我が国のイニシアティブを揺るぎないものにする。	Pflops級

## 将来想定される研究目標について(4)

研究分野	アプリケーション	概要	目的	期待されるブレークスルー	波及効果	必要な実行性能
天体物理学	銀河形成シミュレーション	粒子数100億個を用いて、銀河の現実的な(超新星による加熱、重力崩壊など)過程に基づいた形成シミュレーションを行う	宇宙を構成する物質の基本単位である銀河がどのように形成されたかを明らかにする	史上初めて、星を構成要素として直接取り込んだ銀河シミュレーションができ、予言性が高くすばる望遠鏡やハッブル宇宙望遠鏡の観測と直接比較可能になる。	銀河の形態分類いわゆるハッブルの音叉系列の意味を明らかにする。	10 Pflops
	惑星形成シミュレーション	1000万個の粒子を用いて、原始太陽系円盤の中の微惑星が相互に散乱と衝突・合体を繰り返しながら成長し、現在の姿になるまでをシミュレーションする	地球を含めた太陽系惑星・衛星の起源を明らかにし、その宇宙における発生頻度を評価する。	人間の居住可能な地球型惑星が太陽系近傍にどれくらいの数あるかがはっきりする。 ボーデの法則を再現する	土星の環の起源とそのダイナミクスを明らかにして、カッシーニミッションの観測と比較する。	10 Pflops