

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題一覧

ポスト「京」のアプリケーション開発

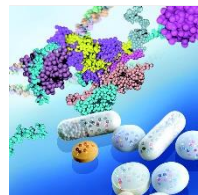
ポスト「京」において、国家的に解決を目指す社会的・科学的課題として、健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等の社会的・科学的課題を選定。

健康長寿社会の実現

高速・高精度な創薬
シミュレーションの実現による
新薬開発加速化

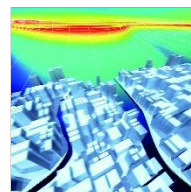


医療ビッグデータ解析と生体
シミュレーションによる病気の早期
発見と予防医療の支援実現



防災・環境問題

気象ビッグデータ解析により、
竜巻や豪雨を的確に予測

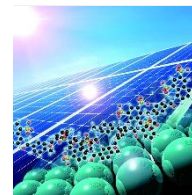


地震の揺れ・津波の進入・
市民の避難経路をメートル
単位でシミュレーション



エネルギー問題

太陽電池や燃料電池の低コスト・
高性能化や人工光合成メタン
ハイドレートからメタン回収を実現

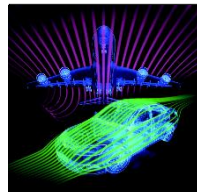


電気自動車のモーターや
発電機のための永久磁石を
省レアメタル化で実現



産業競争力の強化

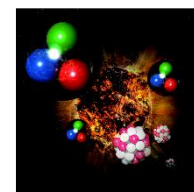
次世代産業を支える新デバイスや
材料の創成の加速化



飛行機や自動車の実機試験を
一部代替し、開発期間・コストを
大幅に削減

基礎科学の発展

宇宙でいつどのように物質が
創られたのかなど、科学の
根源的な問いへの挑戦



【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（平成26年4月～8月）】

安西 祐一郎	（日本学術振興会理事長）	関口 和一	（日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員）
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）	瀧澤 美奈子	（科学ジャーナリスト）
大隅 典子	（東北大学大学院医学系研究科教授）	土屋 裕弘	（田辺三菱製薬代表取締役社長）
◎小宮山 宏	（三菱総合研究所理事長）	○土居 範久	（慶應義塾大学名誉教授）
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）	土井 美和子	（東芝研究開発センター首席技監）
住 明正	（国立環境研究所理事長）	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（50音順、敬称略、肩書は当時）	

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）

<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。

	重点課題	実施機関（平成30年4月末時点）
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 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。	理化学研究所（奥野 恭史・客員主管研究員） 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 共同研究参画企業：24社
	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。	東京大学（宮野 悟・教授） 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 共同研究参画企業：5社
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。	東京大学（堀 宗朗・教授） 分担機関：海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学 共同研究参画企業：1社
	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。	海洋研究開発機構（高橋 桂子・センター長） 分担機関：理化学研究所、東京大学、東京工業大学 共同研究参画企業：7社

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）

	重点課題	実施機関（平成30年4月末時点）
エネルギー問題	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 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。	自然科学研究機構（岡崎 進・教授） 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 共同研究参画企業：17社
	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。	東京大学（吉村 忍・教授） 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、自然科学研究機構核融合科学研究所、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、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 共同研究参画企業：11社
産業競争力の強化	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 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。	東京大学（常行 真司・教授） 分担機関：筑波大学、大阪大学、名古屋工業大学、東北大学、東京理科大学、産業技術総合研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、 共同研究参画企業：6社
	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 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。	東京大学（加藤 千幸・教授） 分担機関：神戸大学、東北大学、山梨大学、九州大学、東京理科大学、理化学研究所、宇宙航空研究開発機構 共同研究参画企業：30社
基礎科学の発展	⑨宇宙の基本法則と進化の解明 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、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。	筑波大学（青木 慎也・客員教授） 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、千葉大学、東邦大学、広島大学、自然科学研究機構国立天文台、 共同研究参画企業：1社

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題（萌芽的課題）

4つの萌芽的課題（テーマ）を設定し、公募により8つの課題を選定。

①基礎科学のフロンティア – 極限への挑戦
（1）基礎科学の挑戦- 複合・マルチスケール問題を通した極限の探求 （久保百司 東北大学金属材料研究所） 〔分担機関〕理化学研究所、東北大学大学院理学研究科、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所
（2）極限の探求に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成 （萩田武史 東京女子大学現代教養学部）
（3）複合相関が織りなす極限マテリアルー原子スケールからのアプローチ （松下雄一郎 東京工業大学科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所） 〔分担機関〕東京大学大学院工学系研究科、東京大学大学院理学系研究科、東京大学光量子科学研究センター
②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
（1）多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発 （伊藤伸泰 理化学研究所計算科学研究機構） 〔分担機関〕兵庫県立大学大学院、理化学研究所、東京工業大学科学技術創成研究院、東京大学大学院工学系研究科、産業技術総合研究所人工知能研究センター、神戸大学経済経営研究所
（2）堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現 （藤井孝藏 東京理科大学工学部）
③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
（1）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 （牧野 淳一郎 神戸大学大学院理学研究科） 〔分担機関〕東京工業大学、神戸大学、名古屋大学、筑波大学
④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
（1）脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ （銅谷賢治 沖縄科学技術大学院大学神経計算ユニット） 〔分担機関〕京都大学情報学研究科、京都大学情報学研究科、理化学研究所生命システム研究センター、東京大学情報理工学研究科、沖縄科学技術大学院大学学園、京都大学、理化学研究所、電気通信大学
（2）ボトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション （神崎亮平 東京大学先端科学技術研究センター）

ポスト「京」を用いた成果創出について

ポスト「京」で出来ること（健康長寿社会の実現）

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

目 標

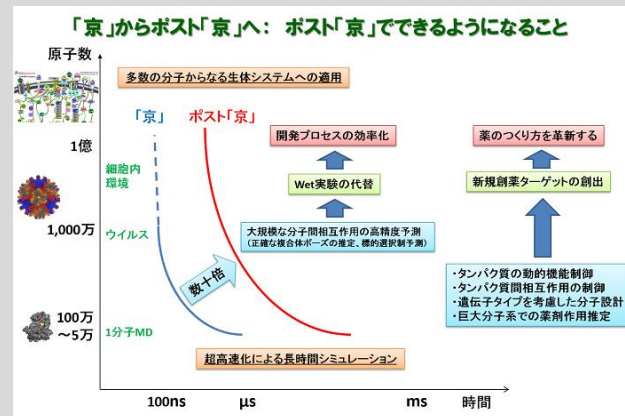
コンピューター技術により、労働集約的な医薬品開発を加速化し、画期的新薬を創出する基盤を構築

- ・ポスト「京」の演算能力を最大化するソフトウェア開発、アルゴリズム深化



- ・次世代創薬計算技術の開発

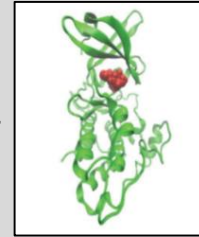
- ・創薬ビッグデータ統合システム開発



「京」

薬としての効果が期待できる物質の生体内の挙動をコンピュータ上で解析することにより、実験に依存していた薬の開発を効率化

- ・**薬と標的タンパク質** (数万から数十万原子の分子系) について、**数10マイクロ秒のシミュレーション**が可能



- ・数千万から数億原子を含む巨大な生体分子系（細胞内分子混雑系、ウィルスなど）の全原子計算を実現し、**巨大生体分子系の100ナノ秒の動き**を捕捉

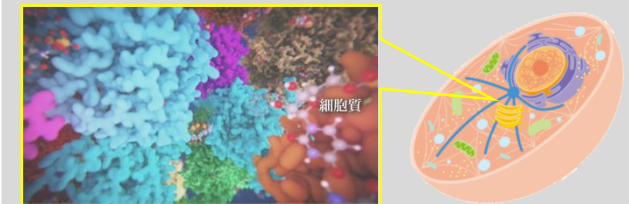
- ・**1週間に数100個の化合物と標的タンパク質の結合シミュレーション**が可能

ポスト「京」

「京」の約100倍の高速化、分子数スケールアップが可能になり、創薬標的分子の**ダイナミックな動きの制御を指向した、より効果的な新薬開発に貢献**

- ・**薬と標的タンパク質**について生体の現実の反応時間である**ミリ秒以上の動きのシミュレーション**が可能

- ・数千万から数億原子を含む**巨大生体分子系**については**10マイクロ秒の動き**を捉えることが可能

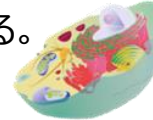


- ・**標的タンパク質の結合シミュレーション**では、**100倍以上、1週間に数万個の結合計算**が可能

ポスト「京」を用いた成果創出イメージ ～重点課題 1～

ポスト「京」成果創出フェーズ

細胞内の大規模な分子群と薬剤の作用、動態をシミュレーションすることで、革新的創薬、ゲノム創薬、ゲノム医療、再生医療、生殖医療へ貢献する。



「革新的創薬」への貢献：

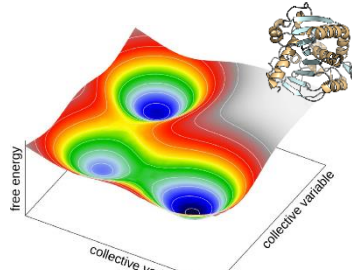
- ・疾患原因タンパク質の長時間分子シミュレーションにより動的な分子構造変化を解明することで、新たな薬剤作用点の発見と、それを制御する新規医薬品を設計
- ・低分子医薬品にとどまらず、中分子医薬（ペプチド医薬品等）、バイオ医薬品（抗体医薬等）、ドラッグデリバリーシステム（DDS）など新たなモダリティ医薬品の設計

「ゲノム創薬」への貢献：

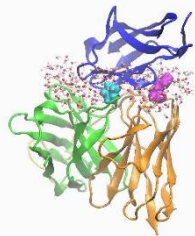
- ・がん・認知症・難病などの様々な疾患ゲノム情報からの新薬候補の網羅的探索
- ・がんや感染症などの薬剤耐性を克服できる頑強な薬剤の合理的設計

「ゲノム医療、再生医療、生殖医療」への貢献：

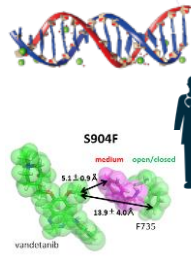
- ・患者個人の遺伝子タイプを反映したタンパク質と薬剤とのシミュレーションにより、対象患者に最適な（薬効最大、副作用最小の）薬剤選択を行うことで、ゲノム医療に貢献
- ・ゲノム（クロマチン）の遺伝子発現制御をシミュレーションにより、細胞分化の効率化や異常判定を行うことで、再生医療、生殖医療に貢献



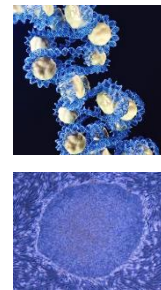
動的構造制御薬剤



バイオ医薬設計



ゲノム創薬・ゲノム医療・再生医療・生殖医療応用



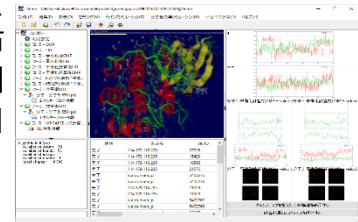
文部科学省、AMED、医薬基盤健康栄研、各大学病院、医療機関

- ・新学術領域、BINDS事業、臨床ゲノム統合事業、各医療機関との研究連携
- ・産学連携コンソーシアム（KBDDやLINC）とのAI創薬連携、計算結果の活用連携

成果創出の担い手

製薬企業・アカデミア創薬研究組織

- ・ポスト「京」により推定された候補化合物からの医薬品開発
- ・ポスト「京」で創薬計算を容易に行うためのGUIツールを神戸医療産業都市推進機構と共同開発し、製薬企業自らのポスト「京」利用を促進する



産学連携コンソーシアム

- ・スパコン創薬の共同研究を行っているKBDDコンソ（製薬19社、IT2社）を通じて、ポスト「京」での創薬計算アプリを普及
- ・100社以上の製薬・IT企業からなるLINCコンソは世界に類を見ない創薬AIを開発しており、ポスト「京」とAIの融合を計画している



大学病院・医療機関

- ・ポスト「京」によって推定されたゲノムに基づく最適な薬剤選択、細胞分化の効率化、異常判定の知見の提供

ポスト「京」で出来ること（健康長寿社会の実現）

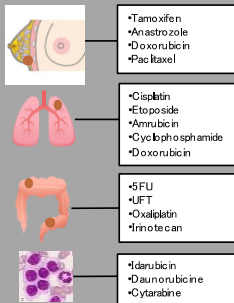
重点課題 2：個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

目 標

がん、循環器系、神経系など、全身の疾患に対して、統合計算生命科学による個別化・予防医療を実現

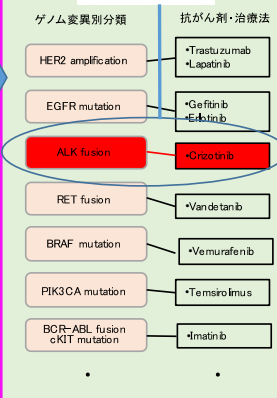
- ・薬剤選択および治療法選択の最適化
- ・創薬ターゲットの探索、治療法開発

大腸がん患者さんでは、肺がんの原因遺伝子の変異は無視される



臓器別による抗癌剤の選択のみ

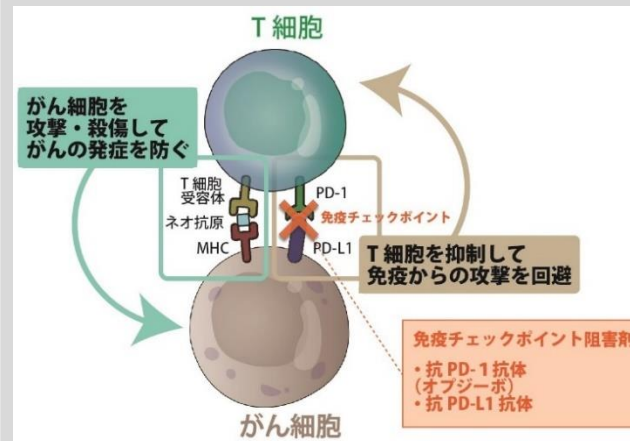
私のがんにぴったりあった副作用の無い抗がん剤と治療法がありました！



「京」

稀な原因遺伝子の変異の解析により、効果的な治療や創薬が可能

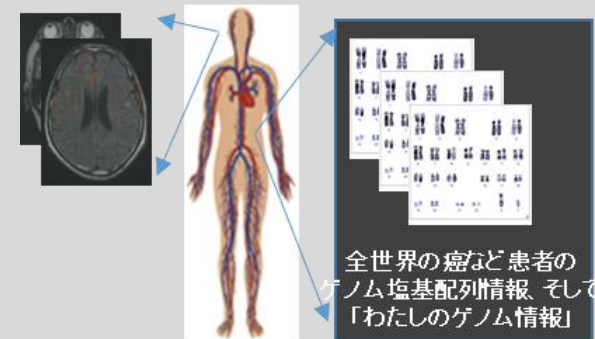
- ・100日で1000検体のがんに関連する原因遺伝子の変異の同定が可能
- ・免疫チェックポイント阻害薬「オプジーボ」等が顕著に効果を表す患者のスクリーニングが可能となるなど先行的な成果を創出



ポスト「京」

遺伝子の変異に関する情報やゲノム塩基配列情報のデータベース、治療薬の治療実績等を組み合わせることにより、がんのプレシジョン・メディシン（精密医療）を実現し、疾患の早期発見、画期的治療法の開発、健康寿命の延伸に貢献

- ・1日で1000検体のがんに関連する原因遺伝子変異を解析することにより、適切な治療方法の選択が可能



個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 ～重点課題2～

ポスト「京」成果創出フェーズ

- ・大量シーケンスデータ解析システムにより、がんの個性と時間的・空間的多様性・起源を解明し、超高齢社会において、がんの早期診断、予防、個別化治療に貢献。
- ・患者個別の医用画像データに基づいた全脳循環代謝シミュレータの開発により、脳機能障害に関わる個別化医療を支援。
- ・心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合により、心不全の解明と治療に貢献。さらに心毒性スクリーニングシステムの開発により、創薬を加速。

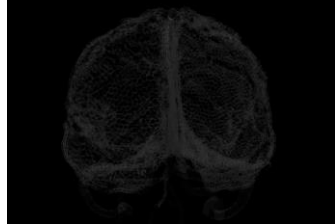
Genomon + Virtual Grid
Engine + ポスト「京」

大量がんゲノムデータ

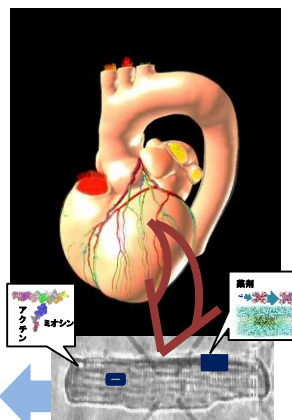
1000全ゲノム解析/日を達成

がんゲノム研究世界常勝

個別化全脳シミュレーション



計算・データ解析が
個別化・予防医療学
のインフラ



心臓・分子シミュレーションの融合

- ・新学術領域「システム癌新次元」、AMED難治疾患オミクス解析拠点プロジェクトによって収集されるデータを随時活用
- ・阪大等医学系協力機関によって収集されるデータをモデルに反映
- ・国立循環器病研究センター心臓サンプルデータをモデルに反映

成果創出の担い手

・文科省・厚労省・経産省関係の研究機関・大学附属病院

・本課題の心臓・全脳循環の最先端シミュレーションとがんの超大規模ゲノムデータ解析技術等にAIとデータプラットフォームを融合させた新研究開発体制で超高齢社会にも対応した診断・予防・治療の創出。

・製薬企業・医療機器産業

・統合計算生命科学によってドライブされる新たな研究開発のパラダイムの創出。

大学病院・国
がん・国循等
の中核病院

- ・国民に「その医療・予防、時代遅れです」といわれない医療の実装。
- ・統合計算生命科学とAIのパワートーツを装着した病院の登場。

製薬・医療機
器製造業・
サービス行

- ・新たながんバイオマーカー・治療法、心臓・脳循環系の治療技術に反映。
- ・「私失敗しないので」を支える技術に反映。

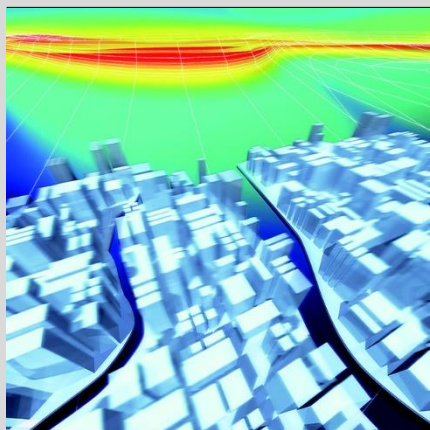
ポスト「京」で出来ること（防災・環境問題）

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

目 標

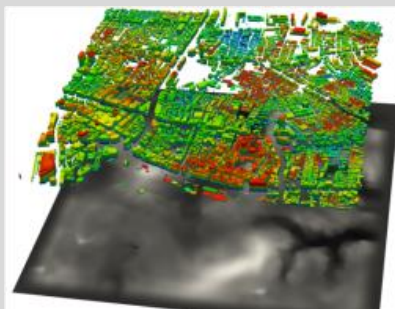
- ・地震と津波が引き起こす複合災害
(地盤の揺れ、津波の侵入)
- ・災害が引き起こす被害
(建物、インフラ施設の傷)
- ・被害への対応
(人々の避難、交通障害、経済活動復旧)

を、都市全体で全部合わせて丸ごと計算することにより、「地震が来たとき何が起るか」を予測

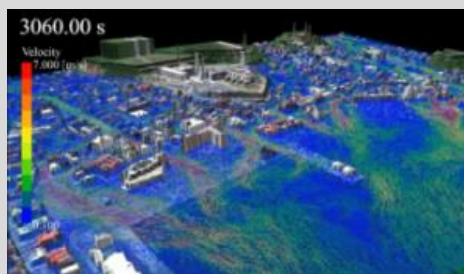


「京」

- ・1つの地震シナリオを想定した災害発生・被害発生過程の解析が可能
- ・津波侵入が引き起こす一部領域(10キロ平米)の被害予測が可能



地盤の揺れと建物の被害

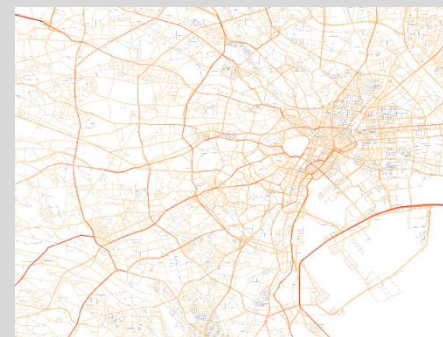


津波の侵入

ポスト「京」

複数の災害予測や、都市全体の複合災害の予測により、合理的な防災計画の立案が可能

- ・複数の地震シナリオを想定した災害・被害予測により幅のある予測が実現
- ・都市全体(数10キロ平米)で地震と津波が複合する災害予測が実現
- ・群集避難・交通障害等の被害対応の予測を実現

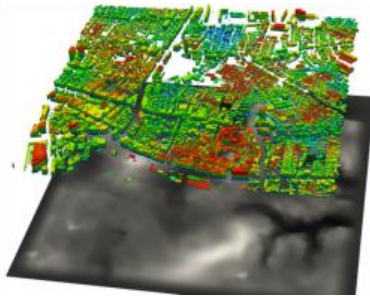


建物被害が引き起こす交通障害

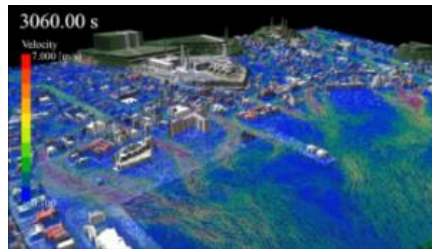
ポスト「京」を用いた成果創出イメージ ～重点課題3～

ポスト「京」成果創出フェーズ

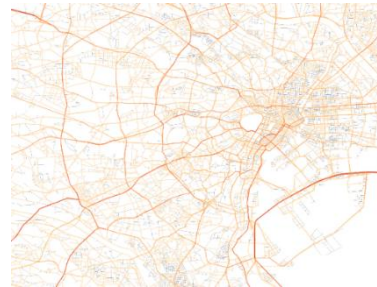
- 地震と津波が引き起こす複合災害、災害が引き起こす都市の被害、さらにその被害に対する社会の対応（群集避難、交通障害、経済活動復旧）の一連の過程をシミュレーションすることで、より合理的な防災計画の立案と、災害対応の高度化に貢献。
- ポスト「京」を用いて、複数の地震シナリオを想定し、複合災害・被害・対応のシミュレーションを実施。災害全般の情報を国に、個々のシミュレーションを自治体・企業に提供。



地盤の揺れと都市の被害



津波の侵入と都市の被害

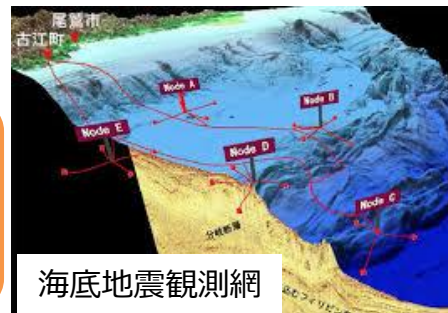


被害が引き起こす交通障害

災害・被害・対応の一連の過程を都市全体でシミュレーション

文科省・国交省

- 海底地震観測網等によって収集される地殻データをモデルに随時反映
- インフラデータ構築に際して収集される都市データをモデルに随時反映

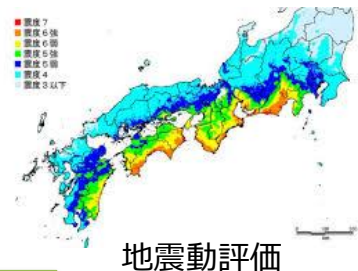


海底地震観測網

成果創出の担い手

内閣府

- 最先端の知見に基づくシミュレーション結果等を踏まえ、被害想定を作成。



地震動評価

民間コンサル等

- 最新の数値解析手法を利用する地震動を、構造物の耐震評価・各種リスク評価に活用。
- レジリエンス向上のために被害対応のシミュレーションを利用。

行政防災担当

- 各種防災計画等に反映。



防災計画

民間企業

- 耐震評価に利用し、補強等へ反映。
- リスクを評価し、事業継続計等に反映。

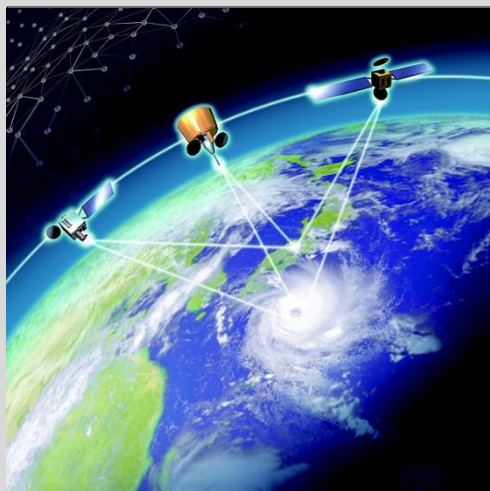
ポスト「京」で出来ること（防災・環境問題）

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

目 標

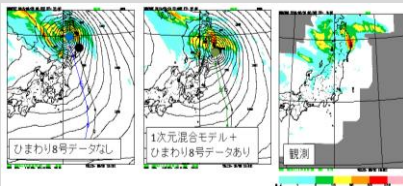
気象衛星や新しいレーダーで得られる大量の観測データを用いたデータ同化によって、局地的大雨や竜巻、台風等を高精度に予測する手法を開発

人の活動の環境への影響を予測し、監視するシステムの基盤を構築し、環境政策や防災、健康対策へ貢献



「京」

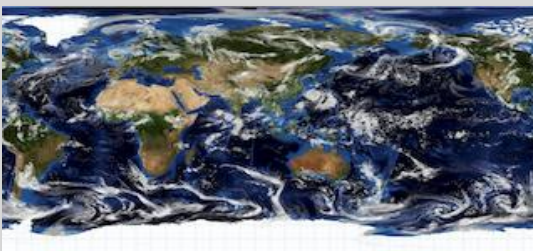
- ・ひまわり 8 号の雲などの移動から計算した**高頻度な大気追跡風や海面水温を用いたデータ同化**により、台風の強度や位置の予測精度が向上し、従来よりも 6 時間程度早く予測が可能



黒線：ベストトラック
青・赤線：予測した台風の経路

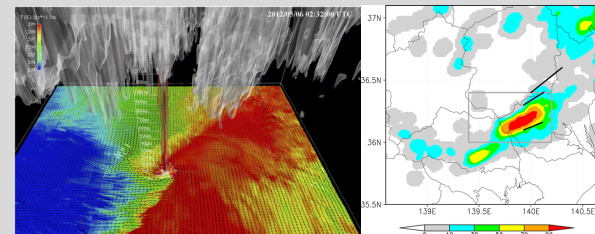
ひまわり8号の高頻度観測データを用いた台風10号の予測結果。データ同化により、経路の誤差が減少。

- ・一ヶ月予報の実現に向けて、全地球規模で台風の源となる**大気の大規模な乱れを再現**



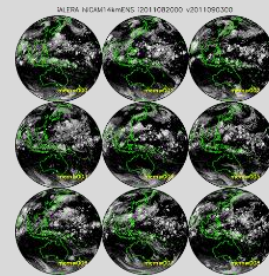
ポスト「京」

- ・**より多くの観測ビッグデータをデータ同化**し、高分解能かつ多数のアンサンブル予報によって、豪雨などの現象について、**約12時間前から「京」よりさらに高精度の予測が可能**



竜巻の雲とメソ渦の予測（左）、将来の考えられる予測情報としての竜巻の発生予測確率分布（右）

- ・**人工衛星データ等のリアルタイムのデータ同化による大気の乱れを詳細に再現**し、大規模アンサンブル計算によって、**一ヶ月後の台風の発生確率の予測が可能**



ポスト「京」を用いた成果創出イメージ ～重点課題4～

ポスト「京」 成果創出フェーズ

●「予測精度の向上」と「より長いリードタイムの獲得」

高解像度モデル・大アンサンブル・観測ビッグデータを活用した確率分布予報の本格実験を実施。メソスケールや積乱雲スケール12時間や1時間のリードタイムの実現を確実なものにする。

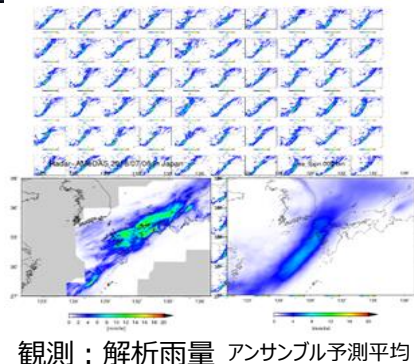
● 特別観測を行うプロジェクトや気象庁と実連携の試み(下左図)

新しい同化技術開拓を視野、気象庁へのアンサンブルデータ提供。。。



● 3.5km水平格子・大アンサンブル (1000メンバー)による全球雲解像スケールでの確率予測による豪雨等の1週間～1か月予報の実現。

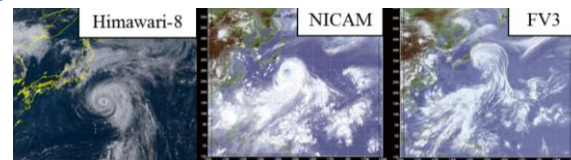
● 短寿命気候因子 (黒色炭素粒子、メタンなど)の高解像度計算の実現と静止衛星を用いた放出量時間変動推定の実現。



全球雲解像モデル 国際比較プロジェクト

- ・現業を含む9モデルグループが参加。
- ・水平5km格子以下の超高解像度
全球雲解像モデルの実利用化を先導。

国際プロジェクトによる
モデル出力の比較例



成果創出の担い手

気象庁

「2030年に向けた数値予報
技術開発重点計画」へ貢献
(将来方向性は完全に一致)

① 豪雨防災の開発の方向性

- ・キロメートル以下の高解像度局地モデル
- ・集中豪雨の不確実性を捕捉可能なアンサンブル

② 台風防災の開発の方向性

- ・全球・領域モデル、高潮等海関連モデル、及びアンサンブル予報等を組み合わせた、最適な階層的モデル・システムの開発
- ・衛星データ等の観測ビッグデータを、雲域を含む全ての天候において、かつ高解像度・高頻度利用

③ 社会経済活動への貢献

- ・陸面、海洋、海氷、エーロゾルなど地球システムのデータ
同化の高度化

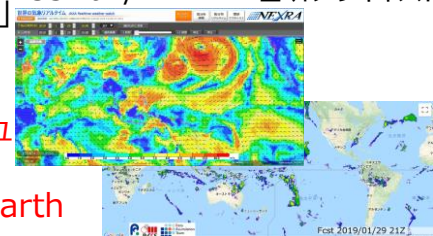
	2020	2025年	2030
数値予報	・メソスケール以下の高解像度モデルの開発 ・数値予報の精度向上とリードタイムの延長	・数値予報の精度向上とリードタイムの延長 ・数値予報の精度向上とリードタイムの延長	・数値予報の精度向上とリードタイムの延長 ・数値予報の精度向上とリードタイムの延長
観測	・観測データの活用と、気象庁との連携 ・観測データの活用と、気象庁との連携	・観測データの活用と、気象庁との連携 ・観測データの活用と、気象庁との連携	・観測データの活用と、気象庁との連携 ・観測データの活用と、気象庁との連携
社会経済活動への貢献	・社会経済活動への貢献 ・社会経済活動への貢献	・社会経済活動への貢献 ・社会経済活動への貢献	・社会経済活動への貢献 ・社会経済活動への貢献

JAXA・理研 etc

「人工衛星x数値モデル」
によるビッグデータ
「理研天気予報」

実時間全球 km メッシュ
気象データの提供
洪水予測：Today's Earth

GSMaP/NEXRA・理研ナウキャスト



国・地方自治体の
防災担当部局
防災情報に寄与

官庁・民間企業
多様な気象環境情報・
気象防災情報の提供

ポスト「京」で出来ること（エネルギー問題）

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

目 標

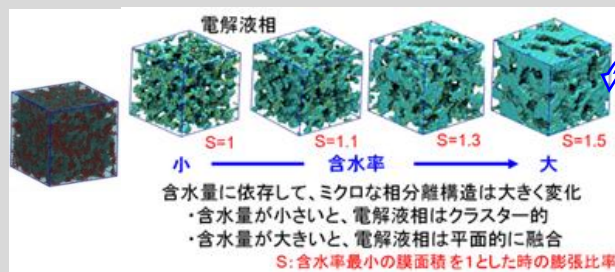
循環型エネルギー社会の実現のため、二次電池、燃料電池などの原子・分子・電子レベルのマイクロ機構を計算科学により解明し、高効率、低コスト、環境にやさしく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立



「京」（現在）

電極界面や高分子電解質膜におけるマイクロ機構の解明により、高効率、長寿命、高信頼性等、燃料電池の性能を向上

・高分子電解質膜の100万原子のシミュレーションが1日で可能となり、高分子電解質膜の様々な候補物質等の検討によって、燃料電池の性能向上に向けた実用化研究が進展



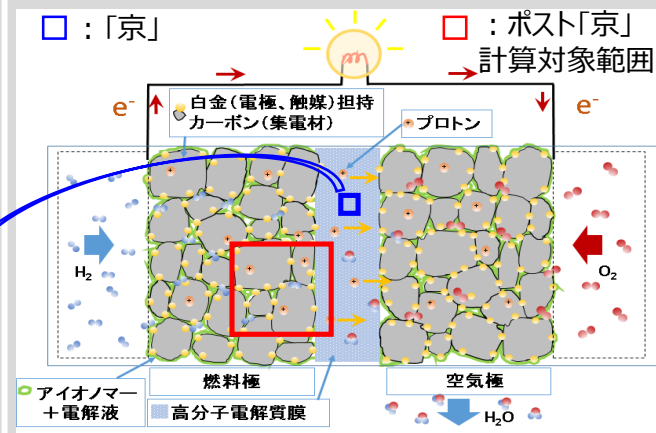
高分子電解質膜と水層の含水率依存性

J. Phys. Chem. C 120, 25832–25842 (2016).

ポスト「京」（将来）

・1億原子のシミュレーションが1日で可能となり、燃料電池の性能を決定する電極4相界面※の構造や物質輸送などの実態を解明し、より高性能な燃料電池が実用化

※ 集電材、電極（触媒）、アイオノマー、電解液



動作中の燃料電池セルの模式図

ポスト「京」を用いた成果創出イメージ ～重点課題5～

ポスト「京」成果創出フェーズ

- 新規エネルギー資源の確保
 - 化石エネルギーからの脱却
 - ゼロエミッション社会の実現
- に貢献

原子・分子・電子のミクロな振る舞いの理解が課題解決に必須なエネルギー技術

- 人工光合成・太陽電池
- 二次電池・燃料電池
- 二酸化炭素固定化

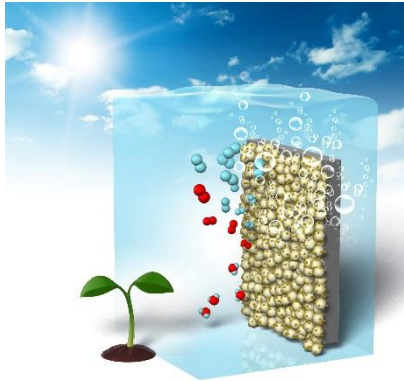
シミュレーション

データ科学活用

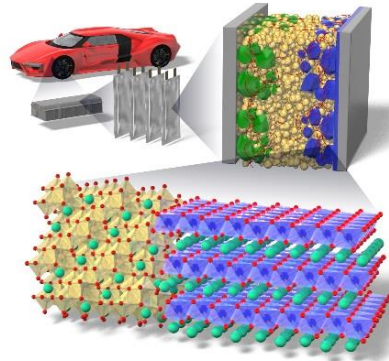
ミクロ機構の解明

の
確立
基盤
技術

- ソフトウェア
- 方法論
- モデリング



人工光合成



全固体電池



二酸化炭素固定化

国家プロジェクト、企業、データ科学

- 国家プロジェクト: ARPCHEM、JST-ALCA-SPRING、元素戦略(触媒・電池)等18件
- 企業26件の共同研究
- データ科学および大型実験施設(SPring-8)の活用

成果創出の担い手

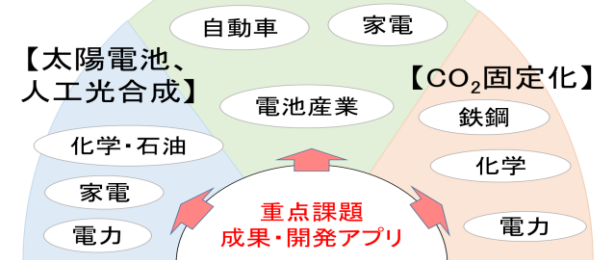
成果の社会実装

製品開発に必要な

- マイクロ機構の解明と開発指針の獲得
- シミュレーション・データ科学に基づいた高精度・高効率な材料探索

重点課題の成果の社会実装

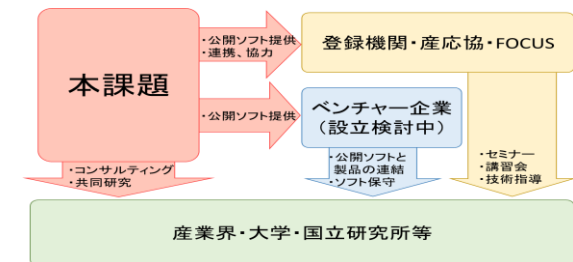
【二次電池、燃料電池】



アプリの普及展開

- 登録機関、産応協、FOCUSへの連携・協力
 - 開発ソフト提供
 - セミナー、講習会、技術指導等
- ベンチャー企業との連携
 - 公開ソフトと製品の連結
 - ソフト保守

重点課題アプリの普及展開



ポスト「京」で出来ること（エネルギー問題）

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

目 標

次世代の実機石炭ガス化炉・超臨界圧CO₂タービンの設計と操作条件の適切化により、早期商用化を実現し、日本の次世代火力発電技術の国際競争力強化に貢献

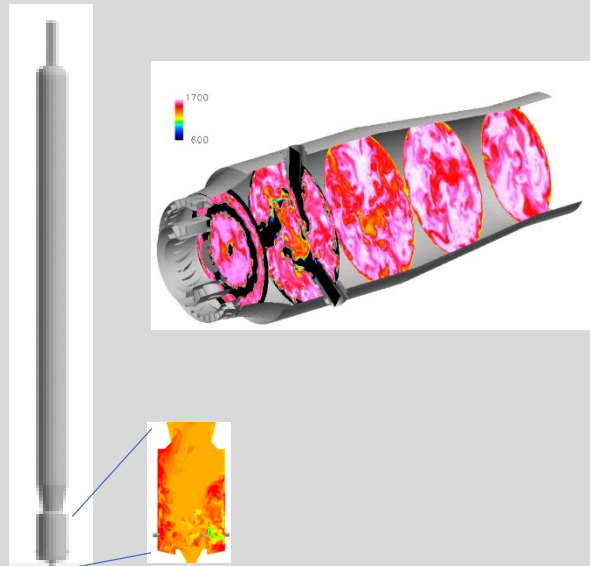
・炉全系における反応-炉構造伝熱・高温損傷-冷却のマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムの研究開発

・先行している空気吹きガス化炉に加えて、O₂吹き炉、O₂-CO₂吹き炉の商用化を加速

「京」

・**実機の数分の1スケールである実証試験機**の亜臨界状態での燃焼解析、熱伝導解析、非線形構造解析等の**小規模な単一現象解析**※が可能

※ 燃焼解析規模：2億節点



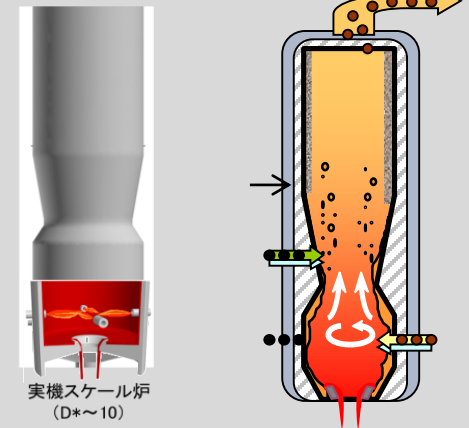
石炭ガス化炉と燃焼器の実証試験機における燃焼解析の様子

ポスト「京」

・**実機スケールによる炉全系の反応-炉構造伝熱・高温損傷-冷却連成シミュレーション**により、実際の現象を高精度で再現し、バーナ形状、燃焼器形状、冷却設備配置等の**設計**や炭種に応じた空気比等の**操作条件の適切化、構造信頼性の向上**を実現

※ 燃焼解析規模：100億節点

・商用化時期の大幅な短縮に貢献



- 革新的クリーンエネルギーシステムの丸ごとマルチスケール・マルチ
フィジクス統合シミュレーション（デジタルツイン）の構築・実活用

成果創出の担い手

ソフトウェアの普及展開戦略

- 17

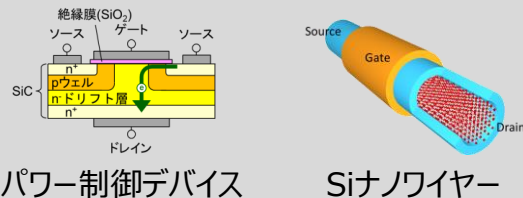
ポスト「京」で出来ること（産業競争力の強化）

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

目 標

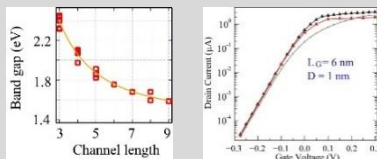
現代社会に不可欠な先端電子デバイスや高機能物質・材料について、
・微細化による量子効果や形状、不純物影響予測
・化合物・異種物質接合界面での物性発現予測
による新しい物理原理に基づく機能の創出

①デバイスの電子状態を第一原理計算



電子状態入力

②デバイスの特性を統計や実験値を参照し予測



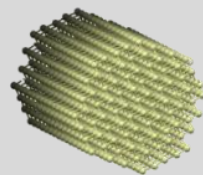
「京」

微細化に伴う量子効果を考慮した特性予測により、小型省電力に向けた半導体デバイスの微細化開発が進展

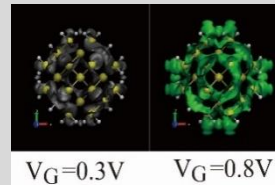
・最大100時間での10万個のシリコン原子シミュレーションによるナノワイヤ半導体の極限性能の予測によって、小型省電力化に向けて半導体デバイス微細化開発が進展

「超微細デバイスを構成する原子全てをシミュレーション」

10万原子結晶の第一原理計算



シリコン(Si)10万原子群ナノワイヤ構造



ナノワイヤ断面電流分布によるデバイス特性予測

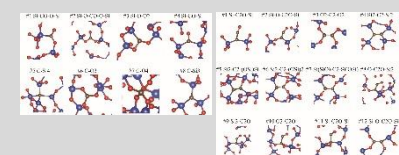
ポスト「京」

新構造による特性の向上や複雑界面のシミュレーションによる半導体デバイスの性能向上を実現

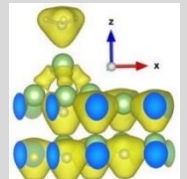
・化合物複雑界面の計算によって、ワイドギャップ半導体の特性の向上や製造プロセスを革新

「異種物質接合界面を含むリアルデバイスシミュレーション」

現実の複雑界面の第一原理計算



SiC/SiO₂界面の未解決トラップ準位の解明



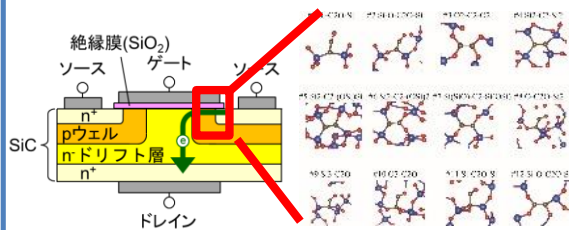
GaN結晶成長の機構解明

ポスト「京」を用いた成果創出イメージ ～重点課題7～

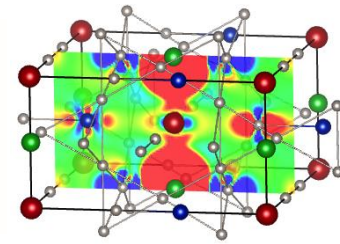
一次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

ポスト「京」成果創出フェーズ

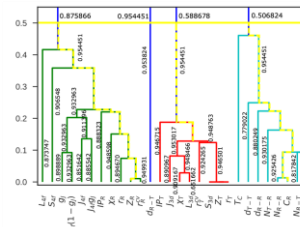
- ・EVやエアコン、発電機などエネルギー消費・創成機器の主役デバイス、パワー半導体とモーター。そのキー材料である、化合物半導体と永久磁石の性能向上、新材料開発を行い、産業課題解決に貢献。
- ・ポスト「京」を用いて実施する課題
 - (1) パワー半導体SiC、GaNの特性向上に必要な界面電子トラップを抑制する構造を設計し、その界面を製造可能とする、結晶成長プロセスシミュレーション技術を開発。
 - (2) モーターの利用環境に応じた最適特性の材料組成・構造で、実験的に製造可能となる新磁石を設計する材料開発手法を、計算と機械学習を駆使して開発。



パワー半導体のSiC/SiO₂界面
計算による構造解析



超高精度電子密度分布
計算による磁石物性予測



機械学習による
新物質探査

これらを実験結果と同化させながらシミュレーションし精度向上

成果創出の担い手

実験Pj連携

- ・名大天野センターとの実験研究コラボにより、パワー半導体結晶成長実験との連携を実施
- ・元素戦略Pj（アドバイザで磁石メーカー参画）実験グループ連携で、製造可能な最高性能磁石を試作へ

企業フォーラム等

- ・産業界とのフォーラム等で先端成果の意見交換実施し共同研究に展開へ
- SiC各種メーカー/自動車メーカー/NEC・東芝・富士通など

HPCI

- ・開発アプリを運用
- ・企業利用を促進



民間企業

- ・磁石製造会社
- ・半導体メーカー



高性能モータ

パワー半導体



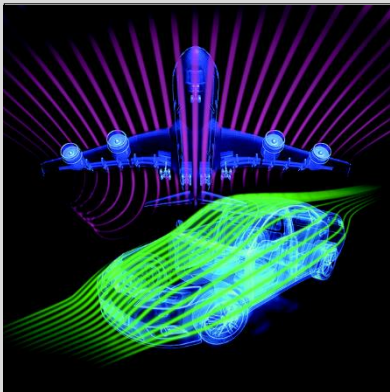
ポスト「京」で出来ること（産業競争力の強化）

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

目 標

短時間での定常空力予測を行うアプリケーションの開発により、風洞試験の代替、形状最適化の実現

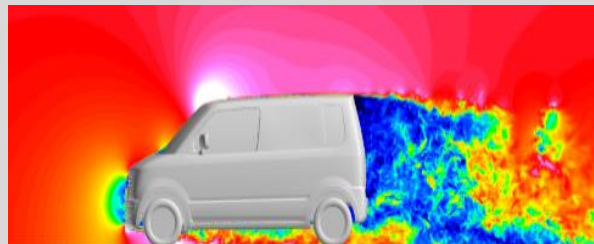
時々刻々と変化する運転条件変化を考慮した構造解析機能、圧縮性熱流体解析機能、移動境界解析機能を備えたアプリケーションの開発により、操縦安定性、車室内環境を同時に考慮した空力設計の実現



「京」

風洞試験の代替や、操縦安定性や車室内騒音の予測により、産業界において付加価値を持たせた商品の展開が進展

- ・風洞実験値に対して、1～2%の差で空気抵抗を予測
- ・空力と車両運動を考慮した解析による高速走行安定性の評価や、空力・車体の振動・音響を考慮した解析による車室内騒音を予測

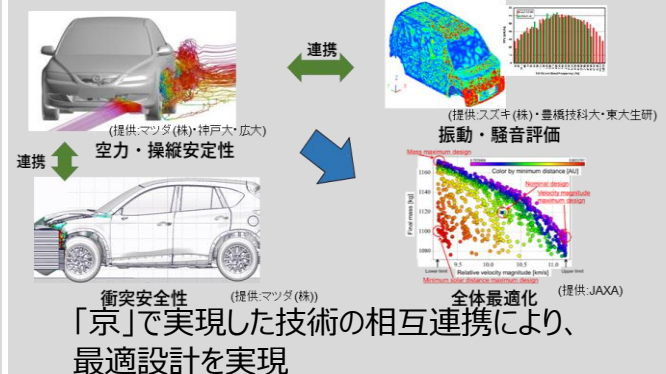


自動車周りの空力解析

ポスト「京」

空力・強度・音・熱・振動などを同時に考慮した最適設計により、新素材や新たな動力を用いた次世代自動車を、早急にかつ高い品質で実現

・「京」の時代には十数日必要であった一つの車体形状に対する評価が12時間以内で可能となり、次世代自動車の性能が飛躍的に向上し、大幅なコストダウンが実現



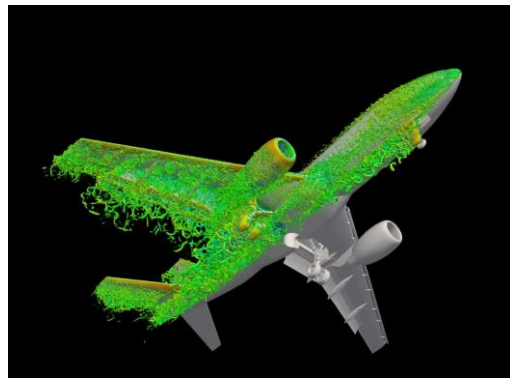
ポスト「京」成果創出フェーズ

産業界の研究者と連携して、開発したアプリの、ポスト「京」を利用した効果の実証と実用化

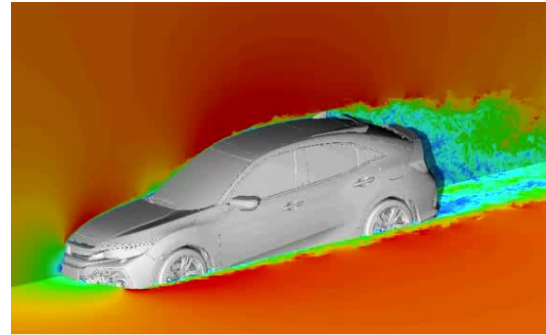


(提供：(一財)日本造船技術センター)

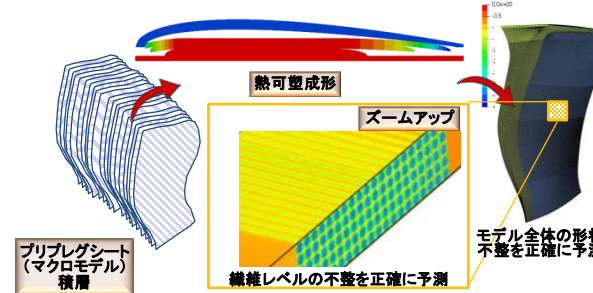
約100倍高速化されたシミュレーションによって、はじめて実現される船舶の操縦性能試験・波浪中性能試験に係る、船体抵抗予測に利用できることを実証



約8,000億の計算格子を用いた、前脚、主脚、高揚力装置も考慮した実機丸ごとシミュレーションを実施し、離着陸時の最大揚力係数の推算や飛行限界の評価に利用できることを実証



従来の風洞実験では不可能な実走行状態における各種性能評価の予測を、従来の数十分の一の時間で実現し、国際基準燃費認証に寄与すると共に、設計上流側での多目的最適化を行うことで、実設計環境での俯瞰的設計が可能となることを実証



厚み100μmの熱可塑CFRPのプリプレグシートが200層程度積層されたジェットエンジンファンブレードを対象に、約60億自由度規模のマクロスケール解析およびミクロスケールズーミング解析により、強度に深刻な影響を与える炭素繊維のうねり等の成形誤差を正確に予測できることを実証

実証されたアプリを産業界に展開

成果創出の担い手

産業界の研究者・開発者

HPCを活用した自動車用次世代CAEコンソーシアム (2017年11月6日設立)

- 企業会員 (13社)
アイシン精機株式会社、カルソニックカンセイ株式会社、スズキ株式会社、株式会社SUBARU、株式会社デンソー、東洋ゴム工業株式会社、トヨタ自動車株式会社、日産自動車株式会社、日野自動車株式会社、株式会社ブリヂストン、株式会社本田技術研究所、マツダ株式会社、三菱自動車工業株式会社
- 大学・研究機関会員 (8大学)
理化学研究所、北海道大学、東京大学、山梨大学、豊橋技術科学大学、神戸大学、広島大学、九州大学

引用：http://www.riken.jp/pr/topics/2017/20171107_1/

ターボ機械HPC実用化分科会 (2016年10月1日設置)

- 参加企業 (32社)
(株)荏原製作所、(株)荏原エリコット、(株)IHI、川崎重工業(株)、三菱重工業(株)、三菱重工コンプレッサ(株)、三菱電機(株)、(株)東芝、(株)神戸製鋼所、(株)日立製作所、(株)日立製作所インダストリアルプロダクツビジネスユニット、日立三菱水力(株)、新日本造機(株)、新菱工業(株)、タイキン工業(株)、千代田化工建設(株)、富士電機(株)、(株)本田技術研究所、(株)デンソー、(株)三井造船昭島研究所、ソニーグローバルマニュファクチャリング & オペレーションズ(株)、テラル(株)、テラルクリタ(株)、一般財団法人日本造船技術センター、富士通(株)、日本電気(株)、日本アイ・ビー・エム(株)、日本マイクロソフト(株)、(株)ヴァイナス、(株)CD-adapco、(株)ソフトウェアクレイドル、NUMECAジャパン(株)、ビジュアルテクノロジー(株)、みずほ情報総研(株)
- 研究機関 (15研究機関26研究室)
東京大学、九州大学、横浜国立大学、早稲田大学、豊橋技術科学大学、宇宙航空研究開発機構、室蘭工業大学、大阪大学、海上技術安全研究所、東北大学、東京工業大学、富山大学、日本大学、長野工業高等専門学校

航空機メーカー (国産航空機の開発に貢献)

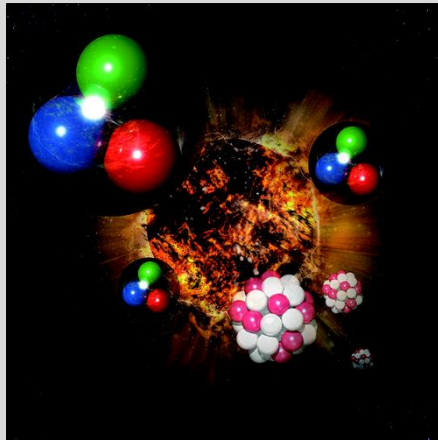
三菱重工 (株) など

ポスト「京」で出来ること（宇宙）

重点課題 9：宇宙の基本法則と進化の解明

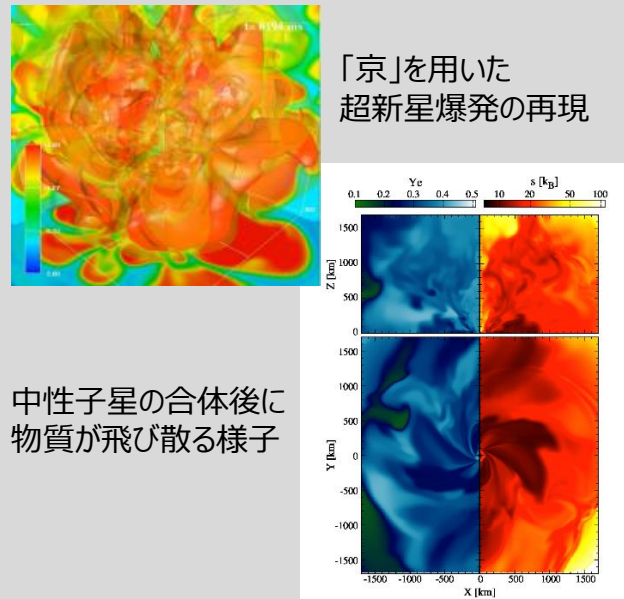
目 標

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精密計算を実現し、大型実験・観測のデータとの組み合わせにより、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



「京」

- ・**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により、超新星爆発の再現に成功し、メカニズムの解明に貢献
- ・一般相対論的重力効果等を取り入れたより精密な計算の進展によって、多様な爆発現象の理解が進展



中性子星の合体後に物質が飛び散る様子

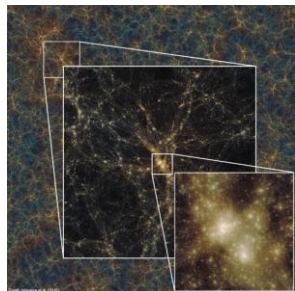
ポスト「京」

- ・**多様な効果を考慮した高精度の計算を、様々な条件で実行し**、大型光学望遠鏡や重力波望遠鏡による観測との連携が可能になることで、**多様な超新星爆発や中性子星連星合体や、重元素合成のメカニズムを解明**

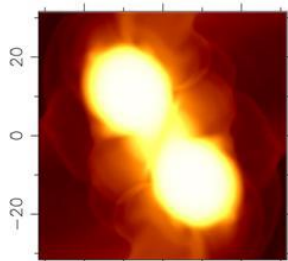


ポスト「京」成果創出フェーズ

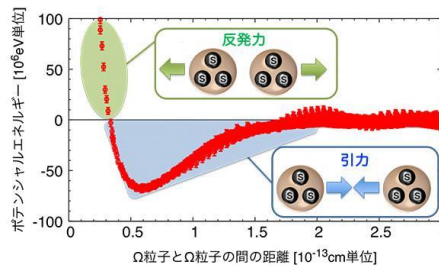
- ・実験で再現することが不可能な宇宙のはじまり、中性子星の合体などの現象をシミュレーションによって再現。素粒子の反応、原子核の構造を大規模計算で精密に計算。実験と組み合わせで宇宙と物質の成り立ちを解明する。
- ・具体的には、ビッグバン直後のわずかな密度のゆらぎが銀河に成長する様子や、太陽の 10^{14} 倍もの密度をもつ中性子星が衝突して大量の物質が放出される様子、素粒子の間にはたらく力などを精密に計算する。



宇宙に銀河が生まれる様子



中性子星の合体



素粒子間にはたらく力

実験・観測プロジェクトのデータから得られる成果を最大化

国立天文台、東大宇宙線研、
高エネ機構など

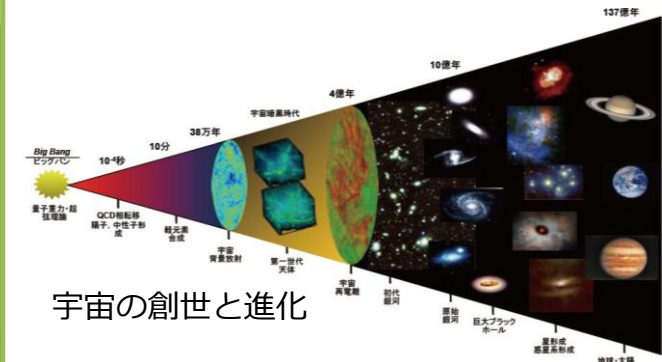


・J-PARC, SuperKEKB, すばる望遠鏡, KAGURA 等で得られるデータの解釈

成果創出の担い手

人類の知見

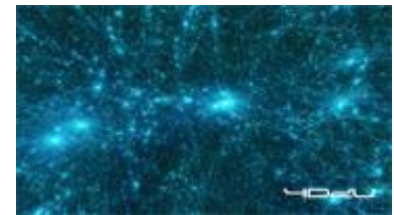
- ・宇宙がどのように生まれ、どう進化して現在に至ったのか、物質はどこでどうやって作られたのか、根源的な謎の解明に近づく。



宇宙の創世と進化

科学教育

- ・中高生から一般まで、科学に関心のある国民の知的好奇心に応える。



4D2U(4次元デジタル宇宙プロジェクト)

HPCとAIの連携例

ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI ＜健康長寿社会の実現＞

HPCとAIの協調がもたらす分子生命科学・創薬の進化

＜分子シミュレーションの高度化＞

- AIによるMDの計算条件（パラメータ）の効率的探索
- AIを用いたMD計算結果の解釈
- MD計算結果のAI学習によるMD過程の自動生成
- MD×AI×実験の融合によるデータ同化の高精度・効率化

＜AIの弱点の克服＞

- 実験データの代替として、シミュレーション結果をAIの学習に利用（実験データ不足問題の解消）
- AIの予測結果に合致するシミュレーションモデルからAIの学習過程を外装する（AIのブラックボックス問題の克服）

＜分子シミュレーションの未踏領域への連携＞

- AI力場
- AIによる化合物構造の自動生成
- ADMET（薬物動態・毒性）のAI予測

＜産学連携コンソーシアム＞

- 100社以上の製薬・IT企業からなるAI創薬コンソーシアムを設立し、30種の創薬AIを開発中



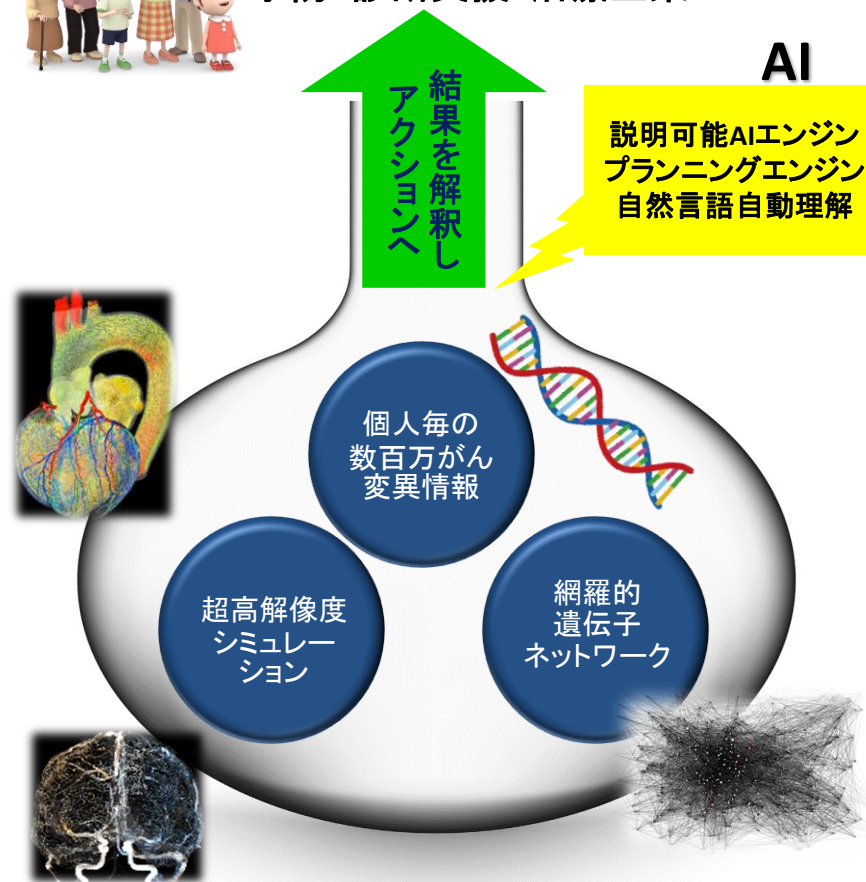
AIパワード個別化・予防医療 —ビッグデータ・シミュレーションBEYOND—



AIによる
予防・診断支援・治療立案

AI

説明可能AIエンジン
プランニングエンジン
自然言語自動理解

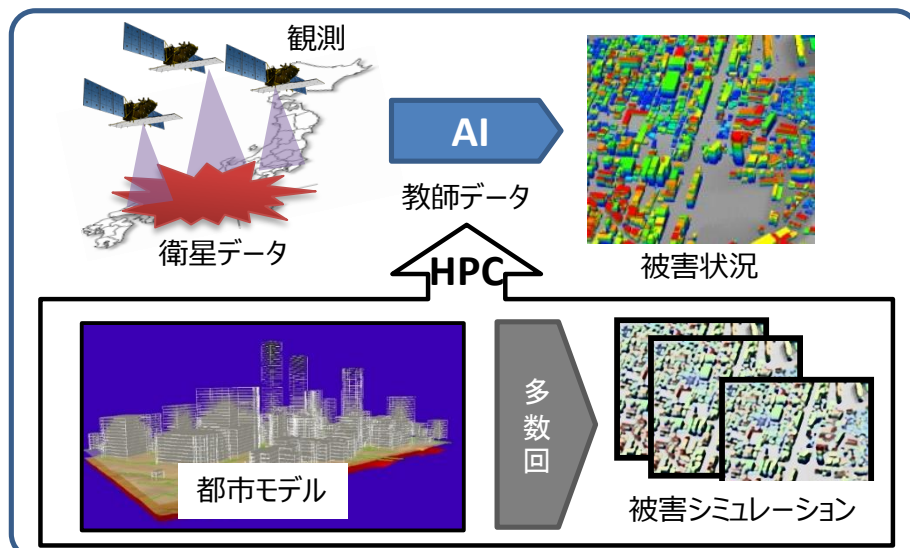


ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI
＜防災・環境問題＞

衛星データから被害状況を推定するAI

背景：大規模地震・津波災害に対し、効果的な初動体制を敷くためには、衛星コンステレーションを使う広域の被害状況の推定が重要

方法： HPCの被害シミュレーションを教師データとしたAIを利用することで、多数の衛星データから、被害状況を高精度・高分解能・短時間で推定.



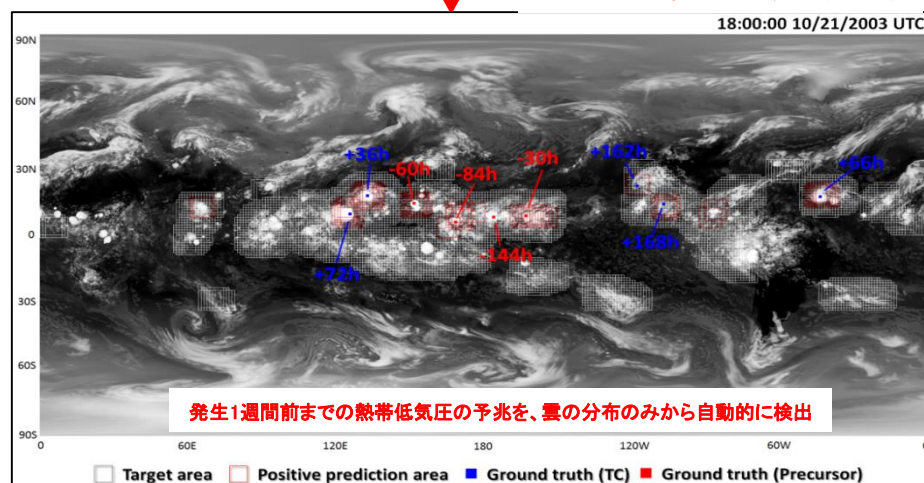
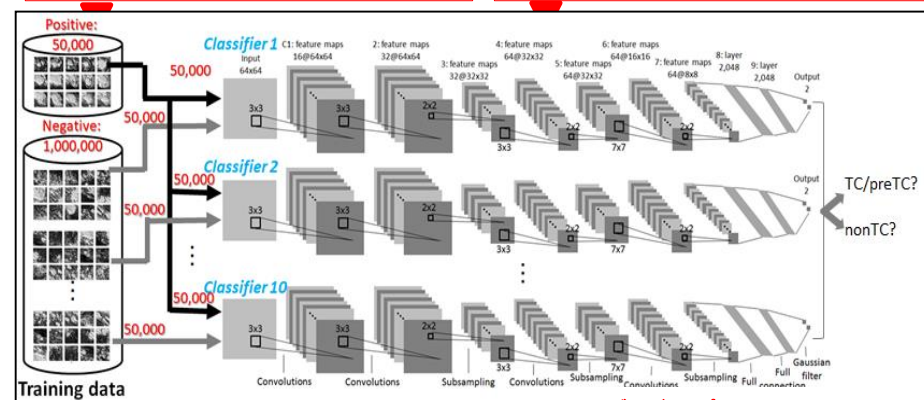
都市毎に超詳細な都市モデルを構築し、地震・津波のHPCシミュレーションを実行。シミュレーション結果を衛星データに変換し、これを「衛星データから被害状況を推定するAI」の教師データを生成。各都市の構造物の特徴を取り込むことで、都市毎にチューンアップしたAIが開発。

ディープラーニングによる台風の予兆検出

-より早く台風の発生を予測し、安全・安心と経済効果に役立てる-

超大規模シミュレーション結果から熱帯低気圧
トラッキングによる教師付き学習データを生成

熱帯低気圧の予兆となる雲のパターンをシミュレーションによって巨大なデータから学習



ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI ＜エネルギー問題＞

ミクロな視点からのエネルギー関連材料の探索・開発の加速

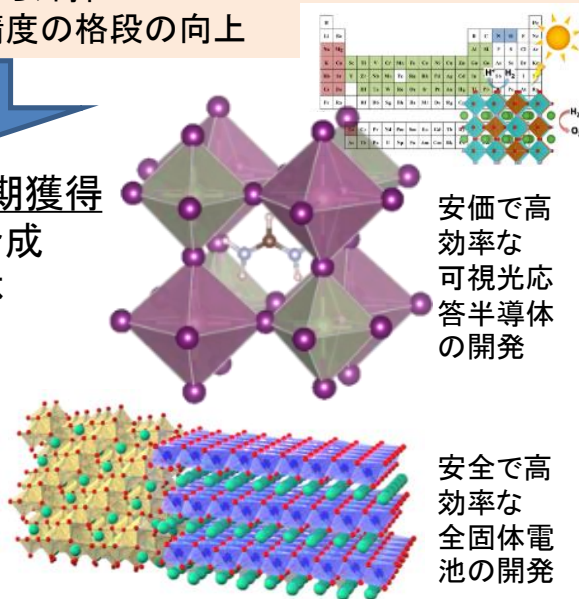
第一原理・量子化学計算による詳細で大規模な学習用データセット生成

京 x AI ・小規模データセット(数万規模)
→ 基本的機械学習技術による材料探索

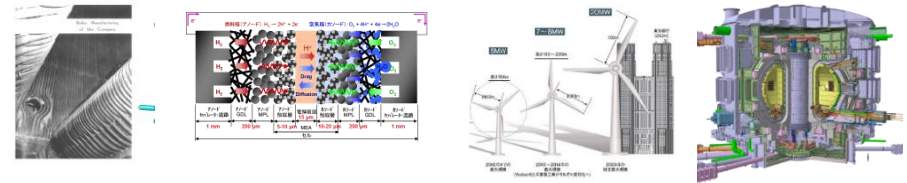
ポスト京 x AI ・詳細で大規模なデータセット(数百万から数千万規模)

データの質・量ともに飛躍的に増大
・高度AI技術を活用した材料探索の展開
・巨大なデータセットにより高精度な記述子抽出
・内挿から外挿へ
・予測精度の格段の向上

新規材料指針の早期獲得
太陽電池・人工光合成
: 可視光応答半導体
二次電池
: 固体電解質
燃料電池
: 白金代替触媒
二酸化炭素
: 吸収液材料



革新的クリーンエネルギーシステム（石炭ガス化炉, 燃料電池, 洋上風力発電, 核融合炉）の実現



種々の部分シミュレーションモデル

↓ HPC(標準計算機)とAI(機械学習等)の連携活用に基づく低自由度モデルのパラメータ同定
ROM(Reduced Order Modeling)技術に基づく低自由度高精度モデル構築と、統合シミュレーションへの組み込み

↓ 各エネルギーシステムのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション(高自由度デジタルツイン)の構築と実機的设计・運用・保全へのポスト「京」の直接活用

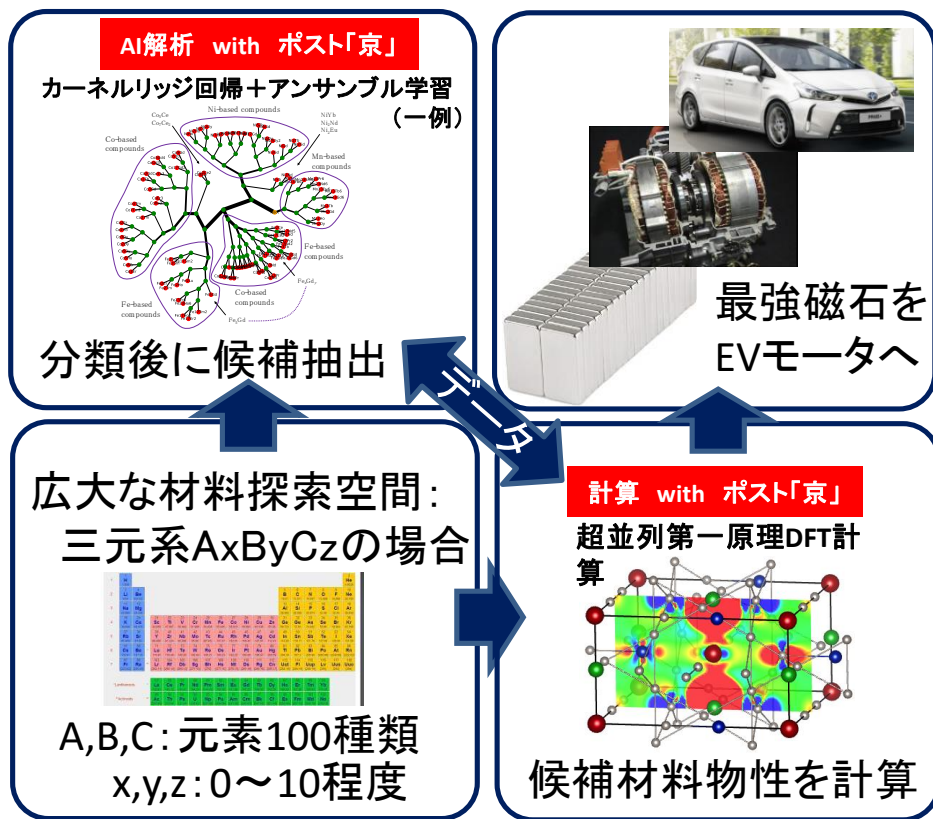
↓ HPC(ポスト「京」)とAI(AIマシン)の連携活用に基づく低自由度モデルのパラメータ同定
ROMに基づく低自由度高精度モデル構築

↓ HPC(標準計算機)上の各エネルギーシステムの低自由度高精度モデル(低自由度デジタルツイン)を用いた実機的设计最適化、オンライン運用最適化・保全最適化

ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI ＜産業競争力の強化＞

エネルギー消費・創成の主役 モータ／発電機用永久磁石の新材料提案

無限の組み合わせから候補材料をAIで抽出
⇒物性値計算で候補を絞り込み、実験で検証へ



パワー半導体、超伝導、構造材料等でもAI活用

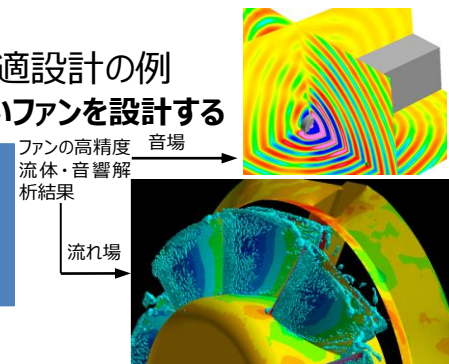
近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

ポスト「京」のHPC能力とAI能力を駆使し、シミュレーションによるものづくりの設計方法を変革し、付加価値の高いものづくりを実現する。

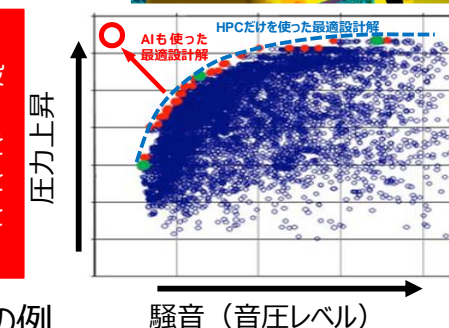
1) 冷却ファンの性能・騒音最適設計の例

目的：圧力が高く、騒音が小さいファンを設計する

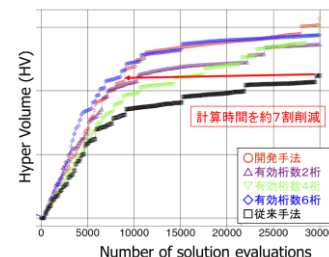
HPC (のみ) を駆使した最適設計:
ポスト「京」のHPC能力を駆使して、多ケースの高精度シミュレーションを短時間に実行し、最適設計解を得る。



HPCとAIを駆使した最適設計:
ポスト「京」のAI能力を駆使して、設計変数-流れ場/音場-ファンの性能・騒音といった目的関数の因果関係を抽出し、リアルタイムに、設計空間を無制限に拡大した多目的最適化を実現する。



2) 自動車の空力最適設計の例

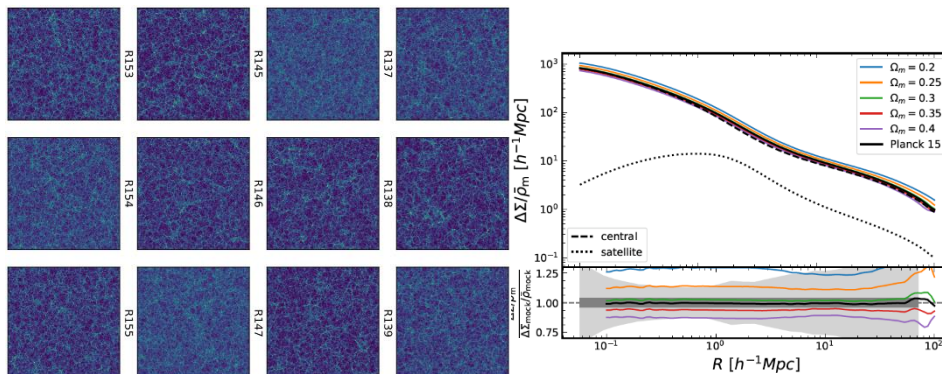


走行燃費と高速走行操縦安定性の両立を目的とした自動車の多目的最適化²⁸

ポスト「京」成果創出フェーズで想定されるHPCを用いたAI ＜基礎科学の発展＞

宇宙観測データとエミュレータによる精密宇宙論

宇宙論分野では、広域宇宙観測データを統計解析することにより、宇宙の物質密度などの基本的な「宇宙論パラメータ」を高い精度で測定する研究開発が世界中で行われている。観測データ解析のためには、宇宙の構造形成の大規模シミュレーションを数百から数千回実行して得られる高精度の統計量が必要となる。最新の統計学と機械学習の手法を適用し、大規模シミュレーションのデータを効率よく学習し、様々な理論宇宙モデルに対する各種統計量を高精度で予測できる「エミュレータ」の開発し、多次元空間パラメータ推定を加速する。



多数の大規模シミュレーションによって再現された宇宙の大域的物質分布 (左) と、エミュレータにより得られる銀河周辺の物質密度分布(右)。