

H P C I 計画推進委員会  
ポスト「京」に係るシステム検討ワーキンググループ（平成29年度）  
コスト及び性能の評価に係る報告書別冊

（平成29年9月4日 第1回 配付資料 資料1-3）

# ポスト「京」の開発プロジェクト について

**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」の開発について

# ポスト「京」の開発

平成30年度要求額：5,630百万円  
 (平成29年度予算額：6,700百万円)

## 背景・課題

- スーパーコンピュータは、理論、実験と並ぶ科学技術第3の手法であるシミュレーションの強力なツールであり、国民生活の安全・安心や国際競争力の確保のための先端的な研究に不可欠な**研究情報基盤**である。

【成長戦略等における記載】(未来投資戦略2017)

- 高精度・高速シミュレーションを実現する最先端スーパーコンピュータの利用に係る研究開発とその産業利用の促進

## 事業概要

### 【事業の目的】

- 我が国が直面する課題に対応するため、2021年～22年の運用開始を目標に、世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指す。

### 【事業の概要】

- システムとアプリケーションを協調的に開発することにより、世界最高水準の汎用性、最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能を目指す。
- アプリケーションの対象として、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。
- 消費電力：30～40MW（「京」は12.7MW） ○国費総額：約1,100億円

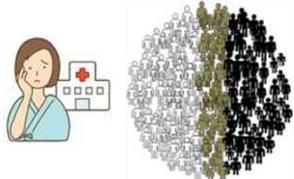
### 【期待される成果例】

高速・高精度な創薬シミュレーションの実現



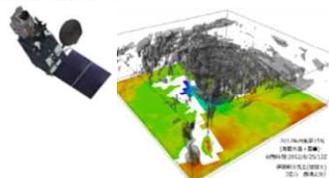
創薬基盤

医療ビッグデータ解析により、個人個人のがん予防と治療支援を実現



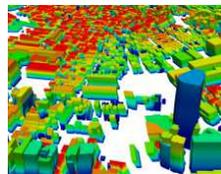
個別化医療

気象ビッグデータ解析により、局地的豪雨を的確に予測



気象・気候

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



地震・防災



### 【システムの特徴】

世界最高水準の

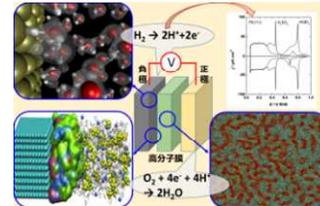
- ★消費電力性能
- ★計算能力
- ★ユーザーの便利・使い勝手の良さ
- ★画期的な成果の創出

★平成30年度秋頃(予定)の中間評価を踏まえ、製造段階への移行を最終的に判断。



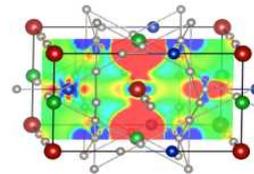
理化学研究所  
 計算科学研究機構  
 (兵庫県神戸市)

燃料電池の電流・電圧性能を予測・高性能化



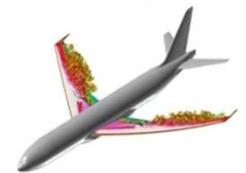
燃料電池

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



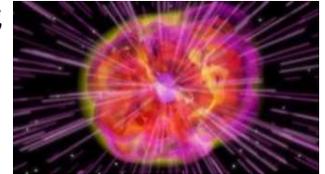
高性能材料

飛行機の実機試験を一部代替し、開発期間・コストを大幅に削減



航空宇宙

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



宇宙

# ポスト「京」開発 最近の主な動き

## 【システム開発等】

平成27年	1月	総合科学技術・イノベーション会議(CSTI)本会議（評価の決定）
	8月～	HPCI計画推進委員会次期フラッグシップシステムに係るシステム検討ワーキンググループ（平成27年度）開催（計7回）・・・p.5
	11月	（行政事業レビュー）
平成28年	1月	HPCI計画推進委員会（基本設計評価のとりまとめ）
	1月	試作・詳細設計について、理化学研究所が富士通株式会社と契約締結
	2月	CSTI評価検討会（評価の確認）
		科学技術・学術審議会情報科学技術委員会（評価の報告）
	3月	CSTI評価専門調査会（確認のまとめ）
		CSTI本会議（確認のまとめの報告）・・・p.6
		科学技術・学術審議会研究計画・評価分科会（評価の報告）
	8月	HPCI計画推進委員会（ポスト「京」開発スケジュールの遅延を公表）・・・p.7
平成29年	7月	CSTI本会議（国家的に重要な研究開発の評価の改定）・・・p.8

## 【アプリケーション開発】

平成26年	12月	重点課題実施機関の決定
平成27年	4月	重点課題のアプリケーション開発（準備研究）の開始
	9月	重点課題推進ワーキンググループの設置
平成28年	3月	萌芽的課題の公募開始
	4月	重点課題の本格的な研究開発の開始
	6月	萌芽的課題実施機関の決定
	8月	萌芽的課題のアプリケーション開発（準備研究）の開始
平成29年	4月	萌芽的課題の本格的な研究開発の開始
	8月～	中間評価（進行中）

## 【経緯】

- 今後10年程度を見据えた我が国の計算科学技術インフラの在り方等が議論され、我が国が直面する社会的・科学的課題の解決に貢献するために、共用法を踏まえ、平成26年度からポスト「京」の開発に着手。
- 平成27年8月から、開発主体より計7回ヒアリングを行い、評価実施。

## 【概要】

- 開発方針：課題解決型、国際競争力、国際協力、「京」の資産の継承、性能拡張性
- 開発目標：
  - ・最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
  - ・30～40MWの消費電力(参考:「京」12.7MW)
- 予算：総経費約1,300億円(国費約1,100億円)

## 【システムの特徴】

- 2020年代のシステムによってのみ解決し得る社会的・科学的課題について戦略的に取り組むことで、我が国の成長に寄与し世界を先導する成果の創出が期待されるスーパーコンピュータであり、

①消費電力性能、②計算能力、③ユーザーの利便・使い勝手の良さ、④画期的な成果の創出

をそれぞれ世界最高水準で備えた、2020年頃において世界の他のシステムに対して総合力で卓抜するもの。  
(計算能力(リンパック性能)のみで世界最高性能を目指すものではない)

## 【評価結果】

- 基本設計については、予算等の様々な制約条件がある中で、課題解決型であり国際競争力のある、**世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現**という開発目標に向けた設計がなされており、**概ね妥当**。

## <留意事項>

- ✓ 電力性能が根幹となる部分であり、最新の情報に基づく迅速な検討・対応が必要。
- ✓ ハードとアプリの協調的開発(コデザイン)により、引き続き目標の最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能に達するよう開発を進める。

# CSTI評価専門調査会 基本設計評価結果の確認（平成28年3月）【概要】

## 事業概要

＜実施期間＞平成26(2014)年度～平成31(2019)年度 ＜予算額＞国費総額:約1100億円

**2020年をターゲット**とし、幅広いアプリケーションソフトウェアを高い実効性能で利用できる**世界最高水準のスーパーコンピュータ**と、我が国が直面する課題の解決に資する**アプリケーション**を協動的に**開発**する。

## 開発目標

- ・最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
- ・30～40MWの消費電力（「京」は12.7MW）

## システムの特徴

①消費電力性能、②計算能力、③ユーザーの利便・使い勝手の良さ、④画期的な成果の創出を、それぞれ世界最高水準で備え、世界の他のシステムに対して**総合力で卓抜**するもの

## 評価経緯

○：有益と認められた点 ×：指摘事項

### 事前評価（平成25年度）

- 我が国の競争力の源泉となる最先端の研究成果を創出する強力なツールであり、**国として主導的に開発に取り組むべき**。
- ×**システム構成や工程表などを早期に具体化**すべきであることから、**平成26年度に再度の評価**を行う。

### 再評価（平成26年度）

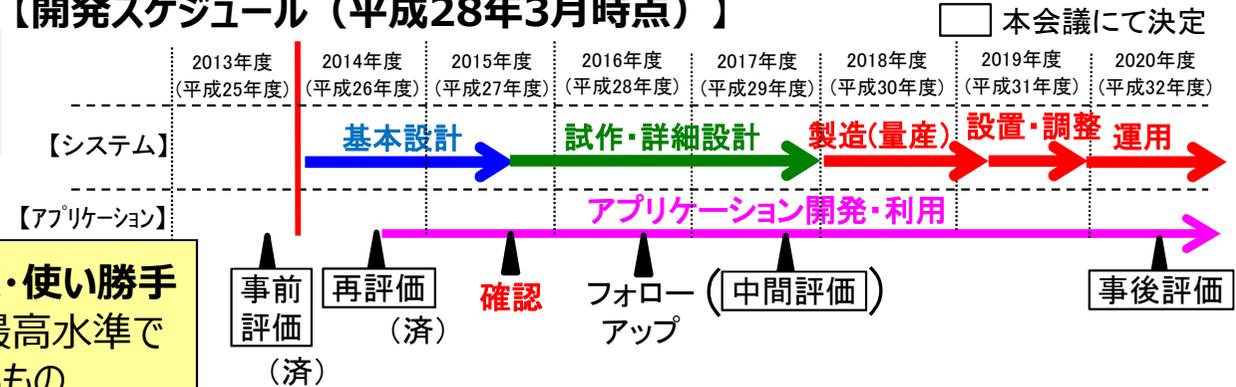
- 世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指すもの**であり、**意義・必要性は改めて認められる**。
- ×開発の意義、有効性を一般国民も実感できるよう、**アウトカムを更に具体化、明確化**すべき。また、製造段階を前に、
  - ・**平成27年度**に文部科学省における**基本設計評価結果の確認**を行うとともに、
  - ・**平成28年度**に**事前評価・再評価結果に対するフォローアップ**を行う。
  - ・**平成29年度**には、文部科学省の中間評価結果を踏まえ、CSTIによる**中間評価**の実施要否を判断。

## 確認結果

### 基本設計評価結果の確認（平成27年度）

- 開発目標の達成に向け、**基本設計の内容は概ね妥当**なものと認められる。
- ×エレクトロニクス電力消費量の増大に鑑みた**電力性能の向上、総合力を国際的に比較検証する方法の検討**に取り組むべき。

## 【開発スケジュール（平成28年3月時点）】



# ポスト「京」の開発状況 (開発スケジュールの変更について)

平成28年8月10日  
HPCI計画推進委員会(第30回)資料

## 【現況】

- 最先端の半導体の設計・製造については、微細化の進展に伴う加工技術開発の困難さや、製造コストの上昇により、これまでの、いわゆる「ムーアの法則」※に沿った進歩が鈍化し、近年、世界的な遅延が生じている状況にある。
- そのような状況を踏まえ、文部科学省は、外部有識者により、メモリ及びCPU(中央演算処理装置)に係る半導体技術に関して、ポスト「京」の開発目標、開発スケジュール及びコスト(予算)への影響を含めたシステム開発に係る技術的な検証を行った。

※ムーアの法則:1965年、ゴードン・ムーア博士が発表。同じ面積の半導体チップの上に搭載できるトランジスタ、ひいてはコアの数が毎年2倍になるという経験則(近年では”18か月で2倍”に修正)

## 【検証結果】

- メモリ及びCPUに係る半導体技術について、新たな技術を採用する。
- ポスト「京」のコスト(予算)及びその開発目標に変更はない。  
(開発目標を達成する見込み。)
- 12か月から24か月間、システム開発スケジュールに遅延が生じる。

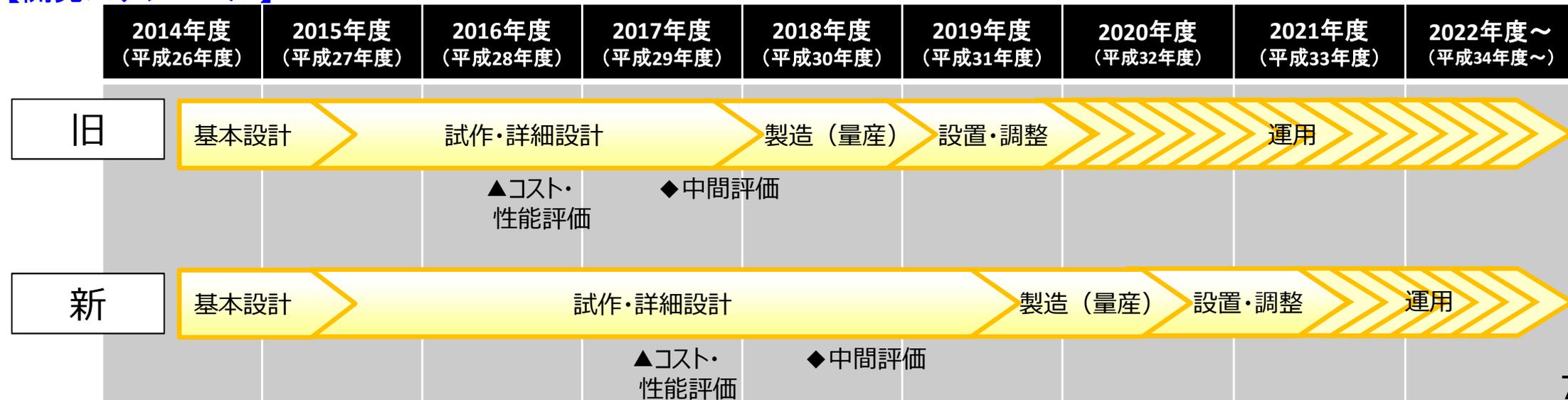
### <開発目標>

- ・最大で「京」の100倍のアプリケーション実効性能
- ・30~40MWの消費電力(参考:「京」12.7MW)

### <予算>

- ・国費総額約1,100億円

## 【開発スケジュール】



# 評価専門調査会によるフォローアップの中間評価への統合

第31回 総合科学技術・イノベーション会議(平成29年7月26日)資料2-1

資料2-1

## 国家的に重要な研究開発の評価の改定(案)の概要

より実効性の高いCSTI評価にするため、「総合科学技術・イノベーション会議が実施する国家的に重要な研究開発の評価について(本会議決定)」を以下のとおり改定。

### ●科学技術政策上の観点から評価対象とする案件を判断する

#### 2. 評価対象 (1) 大規模研究開発 ①新規の研究開発(事前評価)

新たに実施が予定される国費総額が約300億円以上の研究開発

新たに実施が予定される国費総額が約300億円以上の研究開発のうち、**科学技術政策上の重要性等に鑑み、評価専門調査会において評価すべきと認めたもの**

#### 2. 評価対象 (2) 指定する研究開発

総合科学技術・イノベーション会議が必要性を認め指定する研究開発

**評価専門調査会**が必要性を認め指定する研究開発

### ●評価結果に対するフォローアップ機能の強化を行う

#### 2. 評価対象 (1) 大規模研究開発 ②継続中の研究開発(中間評価)

事前評価を実施した研究開発のうち、関係府省等による中間評価の実施状況等を踏まえ**評価専門調査会が中間評価の必要を認めたもの**

事前評価を実施した研究開発  
**中間評価を原則実施**

#### 4. その他(事前評価の指摘事項の確認)

新規の研究開発については、事前評価における指摘事項への各府省及び研究実施機関の対応状況等について、研究開発が開始された後に評価専門調査会がフォローアップを行う。

(廃止)

**中間評価に統合することで廃止**

中間評価を「必要に応じて実施」から「原則として実施」へ  
フォローアップ(通常2年目に実施)は廃止、中間評価に統合

# アプリケーション開発等について

# 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）

# HPCI計画推進委員会 ポスト「京」重点課題推進WGについて

## ○趣旨

「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」（以下「本プロジェクト」という。）は、ポスト「京」を活用し、国家的に取り組むべき社会的・科学的課題の解決に資するアプリケーション開発及び研究開発を行うものである。本プロジェクトは、アプリケーション開発および研究開発に取り組み、ポスト「京」運用開始後に世界を先導する成果の創出を目指すものであり、開発から利用の推進までの戦略性が求められる。このため、アプリケーションとポスト「京」のシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を協調的に設計開発するコデザインが必要である。

こうした状況を踏まえ、本プロジェクトの実施機関が設ける推進体制について、全体的な観点から本プロジェクトの運営を定常的かつ強力でフォローアップするために、HPCI計画推進委員会のもとに、「ポスト「京」重点課題推進WG」（主査：小柳義夫 神戸大学特命教授）を設置。

## ○検討スケジュール（案）

平成27年9月7日	第1回
10月～11月頃	第2,3回（実施機関の実施計画をヒアリング）
平成28年1月頃	第4回（翌年度の実施内容を検討）

## ○WGメンバー（平成27年8月現在）

相原 博昭	（東京大学大学院理学系研究科副学長・教授）
安達 泰治	（京都大学再生医科学研究所副所長・教授）
宇川 彰	（理化学研究所計算科学研究機構副機構長）
大石 進一	（早稲田大学理工学術院長・教授）
小柳 義夫	（主査, 神戸大学計算科学教育センター特命教授）
河合 理文	（株式会社 I H I 技術開発本部技師長）
栗原 和枝	（東北大学原子分子材料科学高等研究機構教授）
白井 宏樹	（アステラス製薬株式会社バイオサイエンス研究所専任理事）
住 明正	（国立環境研究所理事長）
福和 伸夫	（名古屋大学減災連携研究センター長・教授）
松岡 聡	（東京工業大学学術国際情報センター教授）

（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>

# 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)

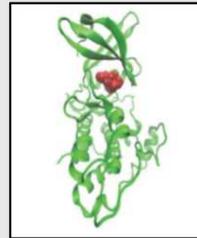
#### 重点課題

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。

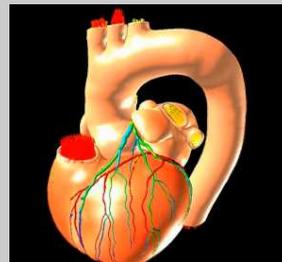


② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

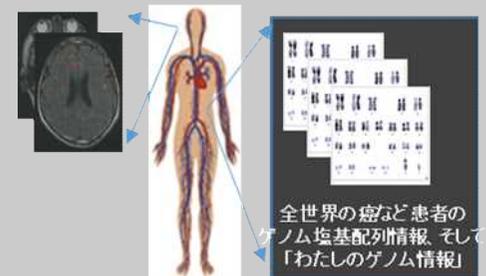
人の体を構成する脳・神経や筋肉・骨、心臓、血管といった個々の要素に対し、ばらばらに粗いシミュレーションを実施。成果の応用は限定的。



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。



全世界の癌など患者のゲノム塩基配列情報、そして「わたしのゲノム情報」

# 防災・環境問題

## アウトカム

### 「京」以前(過去)

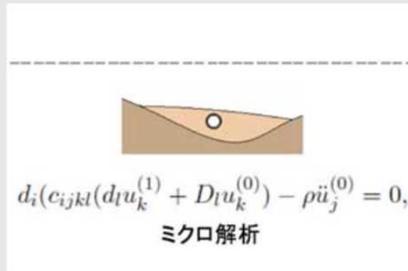
### 「京」時代(現在)

### ポスト「京」時代(将来)

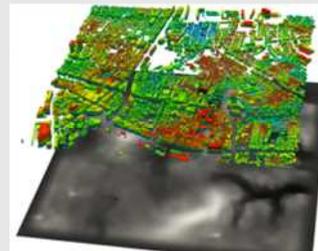
#### 重点課題

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

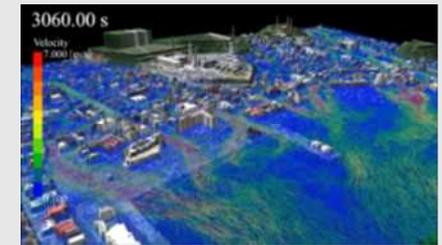
地震や津波による被害予測のシミュレーションを行うことを目指し、分野別かつ部分的な技術開発を実施。



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、大気の乱れを**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)

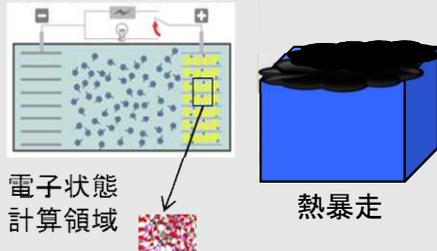
### ポスト「京」時代(将来)

#### 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。

リチウムイオン電池



高性能と高安全を両立する材料設計はほぼ不可能。

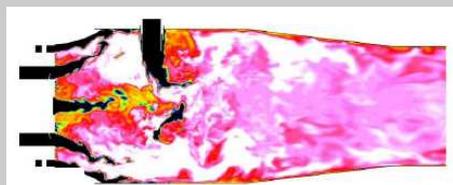
1000原子レベルの電子状態計算が可能。界面に電位を加えた計算や化学反応を予測する高精度計算が可能に。安全や性能にかかわる電極上被膜の添加剤効果など長年の謎を解明。

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。

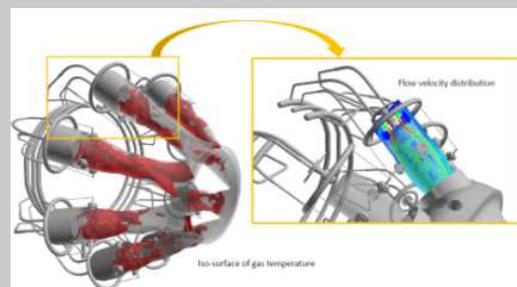


⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

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)

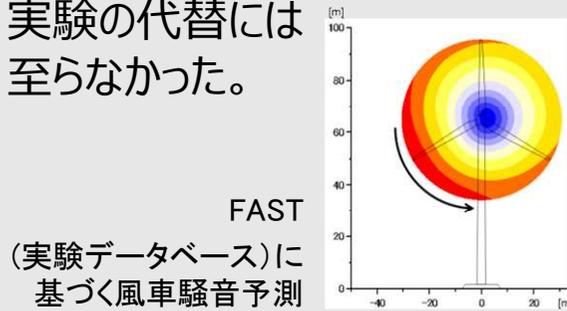
### 「京」時代(現在)

### ポスト「京」時代(将来)

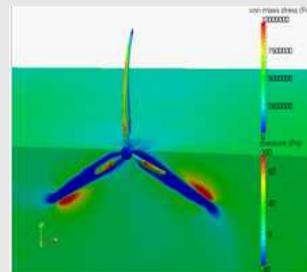
#### 重点課題

#### 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。



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

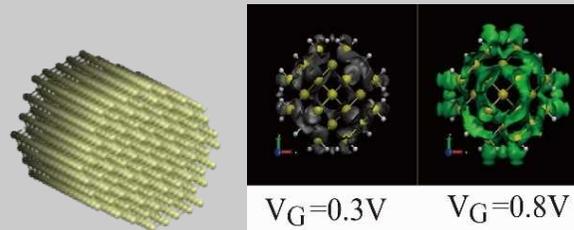
#### ⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

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。

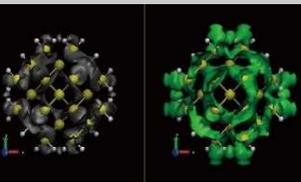


回路幅が数10ナノになるとリーク電流が急増

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。

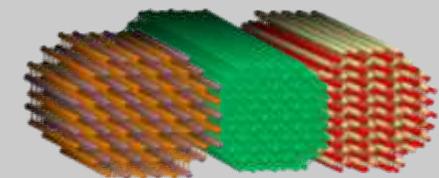


ワイヤ構造



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

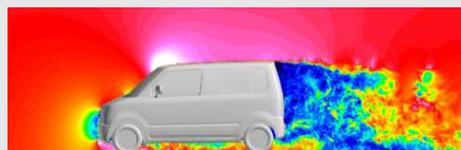
⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

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。



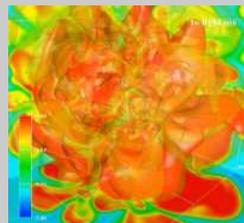
シミュレーション

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

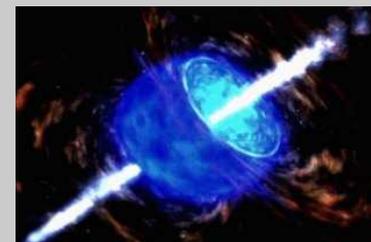
超新星爆発などの爆発的天体現象は、地上実験では再現不可能な超高密度状態である一方、重力・核力・ニュートリノ輸送など重要な科学的成果に繋がるものである。ただし、「京」以前では大幅に簡略化した模型を使わざるを得ず、現実的な計算は困難。

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」萌芽的課題の実施機関決定について

■ 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(課題の統合含む)。

■ 平成28～29年度は調査研究・準備研究を実施し、中間評価の後、平成30～31年度の本格実施フェーズに移行する予定。

① 基礎科学のフロンティアー 極限への挑戦	<p>(1) <b>基礎科学の挑戦ー 複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求</b> (課題責任者:久保百司 東北大学金属材料研究所) 〔分担機関〕 大阪大学、海洋研究開発機構、金沢大学、筑波大学、東京大学地震研究所、東京大学物性研究所、日本原子力研究開発機構、理化学研究所、横浜国立大学</p> <p>(2) <b>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</b> (課題責任者:荻田武史 東京女子大学現代教養学部) 〔分担機関〕 芝浦工業大学、名古屋大学、早稲田大学</p> <p>(3) <b>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</b> (課題責任者:松下雄一郎 東京大学大学院工学系研究科)</p>
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	<p>(1) <b>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</b> (課題責任者:伊藤伸泰 理化学研究所計算科学研究機構) 〔分担機関〕 海洋研究開発機構、経済産業研究所、京都大学、神戸大学、産業技術総合研究所、東京大学、東京工業大学、新潟大学、日本大学、兵庫県立大学、立正大学、立命館大学</p> <p>(2) <b>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</b> (課題責任者:藤井孝藏 東京理科大学工学部) 〔分担機関〕 大阪大学、海上・港湾・航空技術研究所、東京大学</p>
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	<p>(1) <b>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> (課題責任者:牧野淳一郎 神戸大学大学院理学研究科) 〔分担機関〕 大阪大学、京都大学、千葉大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、理化学研究所</p>
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	<p>(1) <b>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</b> (課題責任者: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、電気通信大学、東京大学、理化学研究所</p> <p>(2) <b>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</b> (課題責任者:神崎亮平 東京大学先端科学技術研究センター)</p>