

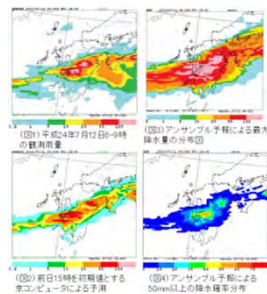
# ポスト京で期待できる成果（京との比較） <安全・安心な社会の構築>

## 「京」での成果

### 防災のための気象予測モデルの精度向上

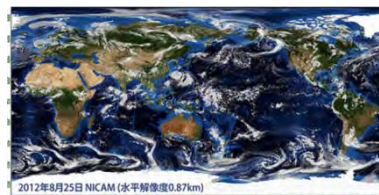
将来的な集中豪雨の予測の改善や新しい豪雨予測システムの構築、台風・集中豪雨などの発生メカニズムの解明や雲の気候への影響の研究などへの寄与が期待。

平成24年7月九州北部豪雨による大雨について、発生半日～1日前からの計算で高い確率で予測できる例があることが気象研究所による研究で判明。



世界初の水平格子間隔 1 km未満の超高解像度の全球帯域シミュレーション。一つ一つの積乱雲から全球規模の積乱雲群との相互の関係をより正確に調べることが可能に。

論文：Miyamoto et al (2013), Geophys. Res. Lett., 40, 4922-4926, doi:10.1002/grl.50944. ※ジャーナルインパクトファクター 3.982

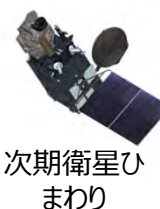


図：2012年8月25日12時（世界標準時）の全球の雲分布

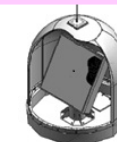
## ポスト「京」で期待できる成果

### ビッグデータ同化による革新的ゲリラ豪雨予測

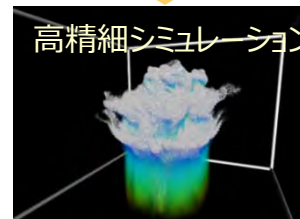
次世代の高精細シミュレーションと複数の新型センサによる「ビッグデータ」を高速処理することでゲリラ豪雨のリアルタイム予測の実現が期待。



2014年～



2013年  
500MB/30sec x 2@神戸



データ同化は、シミュレーションと実世界の観測・実験データを融合し相乗効果を生み出す統計数理に基づく基盤技術

近年、発生頻度が増加している集中豪雨予測において「京」では数時間毎の観測データを使った数km解像度のシミュレーションにより10数時間後の天気を予測する可能性が開けた。ポスト「京」では、次世代の高精細シミュレーションと複数の新型センサによるビッグデータを高速処理することで、数100m解像度で30秒毎に更新するリードタイム30分の天気予報という従来では考えられない革新的なゲリラ豪雨のリアルタイム予測を実現する。その実現にはエクサスケールの計算能力が必要となる。

## 計算時間の比較例

より精緻な天気予報の為には、メカニズムと過去に起こった事例の解析によるモデル構築が重要。全球における1週間の雲の動きを解析するための計算を行う場合、「京」では約11か月必要であるが、ポスト「京」であれば約8日で計算可能になる。研究期間の大幅な短縮により、モデルの構築が進み、将来的には精緻な天気予報に繋がる。

# ポスト京で期待できる成果（京との比較） <安全・安心な社会の構築>

## 「京」での成果

### 津波シミュレーション (地震・津波の予測への応用)

高精度な地震・津波シミュレーションの実現により、きめ細かなハザードマップが作成されるようになり、災害に強いまちづくり等の防災対策等への貢献が期待

都市全域に対し、災害と被害の物理過程を高い時空間分解能で数値計算するシミュレーションを利用した次世代型ハザードマップの作成が実現しつつある。群集避難のような、被害対応過程のシミュレーションも可能となった。



シミュレーションによる地震・津波の被害予測

2011年の東北地震の地震動・津波の同時シミュレーションを実施し、詳細を解析。

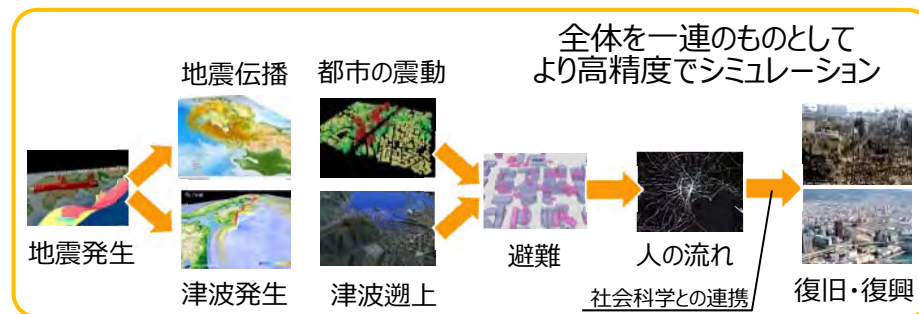
Maeda, T et al. (2013), Bull. Seism. Soc. Am, 103(2B), 1456-1472※  
※ジャーナルインパクトファクター 1.940

## ポスト「京」で期待できる成果

### 広域複合災害に対する総合防災・減災対策

「想定外」を無くすための多数の複合災害のシナリオに対し、災害・被害・被害対応を統合した広域複合災害を予測し、きめ細やかな防災・減災対策、さらには社会科学との連携により復旧対策に貢献

巨大地震と巨大津波、高潮と集中豪雨のような複合災害に対しても機能する総合防災・減災が必要とされる。「想定外」を無くすため、1,000を超える複合災害のシナリオに対し、災害・被害の物理過程のシミュレーションを実行するには「エクサ」の計算能力が必要である。



全体を統合した詳細な広域シミュレーションを仮に「京」で計算したとすると、数千時間以上かかることが見込まれ、それを数時間で行うようにするためには「京」の100倍以上の性能が必要。

## 計算時間の比較例

例えば地震に対しては、不確実性を考慮した1000を超えるシナリオに対して計算が必要である。この計算は「京」の場合に約2年必要であるが、ポスト「京」であれば7日で計算可能となる。このような計算を全国の主要地域毎、さらには地震・津波と高潮・集中豪雨の複合災害のシナリオに対しても必要である。

# ポスト京で期待できる成果（京との比較） <安全・安心な社会の構築>

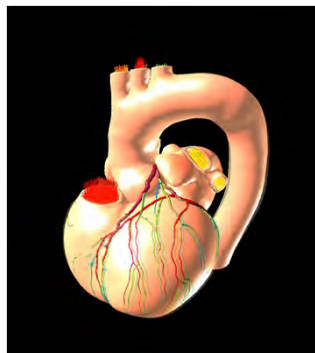
## 「京」での成果

### 細胞モデルからの心臓シミュレーション

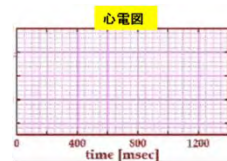
心筋細胞内のたんぱく質の確率的運動から細胞の収縮、心拍動、血液駆出、冠循環までを一貫してシミュレート。

シミュレーションから超音波エコー、流速ドップラー、心電図、カテーテル検査などの精緻なデータが再現。そのデータを基に病態の解析が可能になり、実用段階に移りつつある。

例) 分子レベルでの異常によって引き起こされる家族性肥大型心筋症の解析など。



東京大学 久田、杉浦、鷺尾、岡田研究室  
協力: 富士通株式会社



「京」の活用により、2年近く掛かっていた細胞内の構造を精密に再現した心臓モデルの1回収縮分の計算が1日できるよう。

## 計算時間の比較例

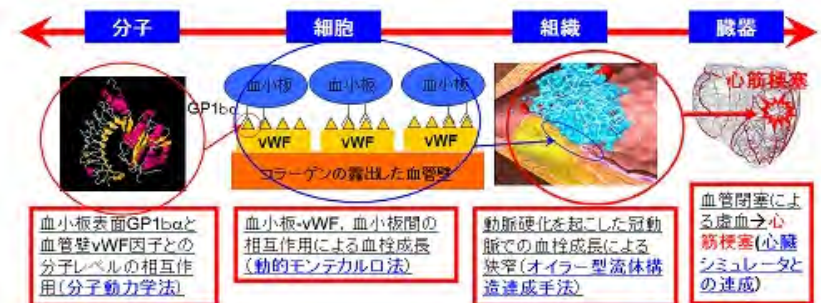
「京」では心臓の1心拍の計算に1日程度必要であるが、ポスト「京」であれば数十分で計算可能になる。

## ポスト「京」で期待できる成果

### シミュレーションに基づく新しい医療技術の創出

分子、細胞レベルから、血管さらには臓器レベルまでの連成シミュレーションにより、生体に近い状態での病態予測等が可能になる。また、最適な治療方法の検討等の実用への進展が期待される。

「京」では分子レベルの挙動を取り入れた心臓シミュレータや血栓形成シミュレータの開発が進められ、病態解明や医療応用が進められつつある。「京」では心臓シミュレーションを実行する際に一拍動につき一日程度を要する。ポスト「京」では100拍動程度のシミュレーションにより、血栓が急速に成長し血管を閉塞させるプロセスを再現し、心筋梗塞の進む過程を調べることが可能となる。また、長時間シミュレーションを複数行うことにより、最適な薬剤投与量の検討など治療計画に利用することができる。



# ポスト京で期待できる成果（京との比較） <地球規模の人类的課題の解決>

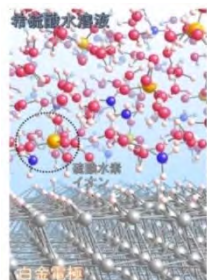
## 「京」での成果

### 燃料電池等の材料・デバイス設計に期待

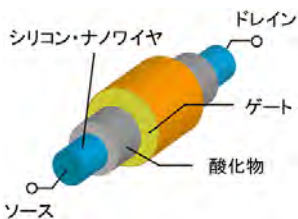
燃料電池の開発上重要な電極触媒反応を、原子スケールの量子シミュレーションから明らかにするための基盤が構築された。「京」が行う先端的物質科学計算がナノデバイスの設計指針に大きく貢献することを示した。

第一原理分子動力学計算において、新たな計算手法を開発し、界面に電位差を与えて電極触媒反応を扱うことが可能に。これにより、電位差を入れた計算がより精巧に行えるようになった。また、この方法論は、世界的にも注目されており、海外の主要アプリに導入されている。

参考文献：N. Bonnet et al, Phys.Rev.Lett. 109, 266101(2012).※  
※ジャーナルインパクトファクター 7.943



図：水素原子で被覆された白金電極と希硫酸水溶液界面のシミュレーション



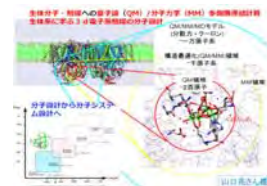
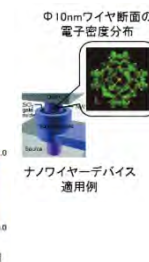
シリコン・ナノワイヤ材料の電子状態の計算において、実効性能3.08ペタフロップス（実行効率43.6%）を達成（2011年度ゴードン・ベル賞を受賞）。次世代デバイスのサイズであるナノレベルの高精度シミュレーションが可能に。

## ポスト「京」で期待できる成果

### 次世代デバイスによる消費エネルギーの削減と新たなエネルギー源の開発

ナノ形状がもたらす電子状態・電子分布の詳細な違いが明らかに。画期的な次世代ナノデバイスの開発に貢献。また、天然光合成のメカニズムの理解が進み、人工光合成を制御するためのエネルギー原理の確立や次世代エネルギー源の開発に貢献。

「京」では、シリコン・ナノワイヤの10万原子レベルの電子状態計算で、今まで見えなかった電子分布を世界で初めて提示。ポスト「京」では、100万原子レベルの精緻なシミュレーションにより、ナノ形状がもたらす複合材料や化合物半導体の特異な物性を予測・解明。



人工光合成の実現にはシミュレーションによる天然光合成メカニズムの理解、人工光合成の制御のためのエネルギー原理の確立が必要。「京」では、天然光合成系の酸素発生中心の高精度電子状態計算等が可能になったが、光合成系に対する部分的なシミュレーションに留まっている。ポスト「京」によって、マイクロからマクロの多階層に渡る連成計(QM/MM/MD)が可能となり、光合成の全系のメカニズム解明とともに、効率的な光合成を実現する触媒の分子設計の探索が可能となる。次世代エネルギー源の開発に貢献。

## 計算時間の比較例

シリコンナノワイヤやカーボンナノワイヤなどのナノデバイスの設計を行う場合、「京」では約1年半必要なものが、ポスト「京」であれば約2週間で計算可能になる。