

⑩ 基礎科学のフロンティア – 極限への挑戦

概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点** 極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の大きな成果にもかかわらず答の出ない難問に大規模数値計算を軸とした学際連携で挑み、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創で解決。
- (2) **有効性の観点** 材料の破壊や大気・海洋の変動、観測困難な極限物性など、極限を探究する科学は、「京」等を使った大規模計算により、各分野で大きく進展した。この個別理解を基に、トップダウンで学際連携を促し、分野の壁を越えた普遍的な課題や境界領域の課題を解決するための機が熟している。フロンティア開拓により、基礎科学の進展と人類課題の解決につながる。
- (3) **戦略的活用の観点** 「京」の成果で整備された個別アプリを、複合・マルチスケール問題に活用しポスト「京」のみで可能な成果へ。

A: 破壊とカタストロフィ: 材料、人工物から地球まで

・ナノ素子から構造材料、人工物の機能喪失、地震・地滑りまで、破壊現象は対象とプロセス及び環境が複雑に絡み合っており、ミクロから超マクロまでマルチスケールでの非線形性、多階層の理解を要する。「京」等で進んだ個別現象の理解から階層を繋ぐブレイクスルーへ。

B: 相転移と流体が織り成す大変動: ナノバブルから火山噴火まで

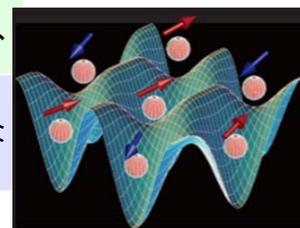
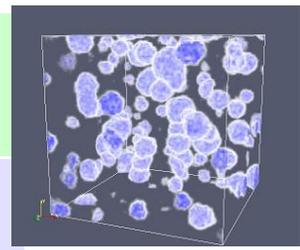
・竜巻、台風、噴火の発生発達機構、産業機器中の気液固混相流の解明につながる、相変化が生み出す時空構造の基礎科学を個別手法成果の発展から創出し、制御手法を開拓。

C: 極限環境での状態変化: 物質の理解から惑星深部へ

・惑星深部、宇宙空間など、実験で実現できない極限環境における物質の状態変化を探究し、大型実験施設等の実験解析を支え、人類のフロンティア開拓に貢献。

D: 量子力学の基礎と情報: 計算限界への挑戦

・「京」までに大きな成果の出た量子多体問題解法の継承発展で、ポスト「京」計算機で可能な計算処理量と精度の限界に挑戦し、量子計算、量子シミュレータ、量子暗号の基礎を構築。



ポスト「京」利用の必要性

極端条件、複雑な要素の絡み合う問題、不安定に近い非線形問題は個別分野で「京」利用の大きな成果を生み、高効率アプリも開発された。未解決に残された異なる階層をつなぐ問題は人類的課題にも直結し、ポスト「京」でようやく可能になる大規模な計算を要する問題が多数存在する。また分野を超える共通の方法論開発には、多数の試行錯誤を伴う大規模検証によってはじめて有効性が検証できる。

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70日程度は必要。高度な計算、大規模計算を行うと最大140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

- ・各自然科学分野、計算科学課題が活性化し、実験・観測と個別計算科学分野の協調だけでは解決できない課題の解決が学際連携で飛躍的に進む。
- ・ポスト「京」により初めて可能となる計算科学的な共通手法が生まれる。
- ・人類のフロンティアや複合課題の探究、実験不可能な極限条件やマルチスケール事象を扱う、学際的な新しい学問分野が創出される。
- ・最先端大型実験施設や観測で得られる膨大な実験データの解析法が確立する。
- ・10年、20年後を見据えた科学の成果が創出され、個別計算科学では解決困難な産業応用や社会的課題も、将来の解決につながる可能性が高まる。

⑪ 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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点:

急速に変化し複雑化する現代社会で生じる問題に対して、政策・施策が俊敏に対応するため、社会の構成要素が互いに影響し合う効果を取り入れて捉え、分析し、予測する技術が必要。

(2) 有効性の観点:

各「構成要素モデル」の高度化自体が社会的課題の解決の直結するだけでなく、社会の構成要素が互いに影響しあう効果を取り入れて社会経済現象全般を予測するシステムが先駆的。

(3) 戦略的活用の観点:

各「構成要素モデル」の有効性検証は、ビッグデータを捌ききるポスト「京」があって初めて可能。包括的シミュレーションは現時点では萌芽的だが、実社会に直結する問題を扱うため、早期に着すべき課題。

内容の詳細

各社会要素モデルの統合化とその有効性実証研究

- 交通や経済など社会要素の相互の影響を考慮した社会経済統合モデルを構築し、社会・経済で生じる多様な可能性を、「想定外」を含めて網羅的に検証することにより安定性・信頼性の高い制度や方法を提示する基盤を確立する。
- 統合モデルの応用として、敵対的リスクの発生を低減化し、経済破綻といった人為的なカストロフィの発生を抑止し、社会的課題の安定的解決手段の探索を目標とする。

サブ課題:各社会構成要素モデルの高度化

例: 交通システムの高精度高信頼予測の実現、およびそれによる最適化の実現

交通の運行状況・運行目的をリアルタイムでデータ同化し、混雑緩和から非常時対策を講ずる

- 莫大な数のモデル・シナリオを自動生成してシミュレーションを実行し、最適な交通システム設計を支援
- 特定の鉄道路線、一部地域の交通ではなく、トータル交通システムとして問題を捉える。

(注)上記は、構成要素を「交通システム」としたときの例、このほか、株式・為替、災害避難、情報伝達など、構成要素は多岐にわたる。

ポスト「京」利用の必要性

京では少数のパラメータセット、少数のシナリオ・制度下でのシミュレーションが実現されつつある。「想定外」を含めた現実的な社会現象の探索には、ポスト京の計算力は必須。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

- 自動車交通の典型的な時間スケールは数時間。数種パターンで試みるには、2日間。
- 為替・証券取引所群のエージェントシミュレーションによるモンテカルロサンプリングには、先物取引まで含めて1日。全体で10日間。

期待される成果・波及効果

- 包括的に社会経済活動をシミュレートすることで、制度の設計・社会経済の統御の効率性・安定性・信頼性を高める。
- 従来の主観的・一面的な社会問題解決方法から脱却し、社会科学に基づいた客観的な解決方法を提示。(温暖化問題施策などがこれまでの例)
- 今後のトリリオンセンサーの有効利用につながる手法が期待される。
- 各要素の高度なモデル化検証技術は、防災避難シミュレーションなどにも応用される。

⑫ 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境

概要・意義・必要性

- (1) **必要性の観点**: ポスト「京」で可能になる惑星系形成・進化シミュレーションにより、多数発見された太陽系外惑星の起源を解明し、地球を含む**地球型惑星**の形成条件を理解、さらに人類への太陽活動の影響の理解と予測を通して**宇宙防災**を推進する。
- (2) **有効性の観点**: 観測・実験と宇宙・地球・惑星科学分野の有機的連携を強化し、地球型惑星の形成に至る条件を解明すると共に太陽の高解像度全球シミュレーションにより黒点周期と太陽活動の長期変動を再現。地球環境への影響の予測を可能にする。
- (3) **戦略的活用の観点**: ポスト「京」により、ダストを含む惑星形成過程の高解像度輻射流体計算、微惑星成長の粒子多体計算、黒点周期(11年)より十分長い期間の太陽活動と地球磁気圏の磁気流体・プラズマ計算を世界に先駆けて実現する。

内容の詳細

サブ課題A: 地球と地球型惑星(第二の地球)の誕生条件の解明

宇宙物理学、惑星科学、地球科学、気象学等の研究者、及び計算科学研究機構等が参画する体制を組み、微惑星形成過程、中心星への惑星落下問題、地球型惑星の表層環境形成を解き明かし、**太陽系及び太陽系外の惑星形成とその大気の起源と進化を解明する。**

サブ課題B: 太陽活動による地球環境変動の解明

100年以上にわたる太陽ダイナモの計算により、太陽の長期時間変動のメカニズムと地球環境への影響を明らかにすると共に、衛星観測との連携により、太陽フレアと太陽風の数値予測を実現し、「**宇宙天気予報**」の高度化を推進。

サブ課題C: 太陽系における物質進化の解明

惑星間ダスト上の分子生成の量子化学計算により、“はやぶさ2”等による太陽系始原物質のデータを理解し、**太陽系における物質進化を探究すると共に、磁気乱流中のダスト集積計算によって、地球型惑星(第二の地球)形成の初期条件を明らかにする。**

ポスト「京」利用の必要性

惑星形成計算において、「京」で30万粒子の粒子多体計算を実行。ポスト「京」で**3次元輻射流体計算**を実現。**太陽活動**については、「京」で $512 \times 1024 \times 3072 \times 2$ の対流層全球計算を実行。ポスト「京」では100年以上の太陽磁場変動の再現と太陽フレア・太陽風予測の高解像度計算を実現。**乱流計算**については、「京」で 12288^3 メッシュの直接計算を実施。ポスト「京」では、磁場とダストを考慮した 60000^3 メッシュの計算により**ダスト集積過程**を解明。**量子化学計算**では、「京」で、10万原子第一原理計算を実行。ポスト「京」では、様々な条件下において、大規模な第一原理分子動力学シミュレーションにより分子進化を解明。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

惑星形成について、惑星軌道計算、輻射流体計算に、計20日程度。太陽磁場変動と太陽フレア・太陽風の数値予報に計30日間。高精度乱流計算に10日間。惑星間物質の量子化学計算に計10日程度。**合計70日。**

期待される成果・波及効果

- ・太陽系外惑星の観測と**直接比較可能な第一原理計算**を実現し、地球型惑星(第二の地球)の誕生条件を明らかにする。
- ・太陽、地球磁気圏の衛星観測との連携により、宇宙天気予報の精度と信頼性が格段に向上し、**宇宙防災**に資することができる。
- ・金星、火星との比較惑星環境学により、**太陽系惑星気候変動のメカニズム**を解明し、太陽系スケールでの地球の安定性の理解を深める。
- ・太陽系始原物質の採取・実験と計算との突合せにより、太陽系の誕生と進化の歴史を明らかにする。

⑬ 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

概要・意義・必要性
(1) 必要性の観点
(2) 有効性の観点
(3) 戦略的活用の観点

ポスト「京」により、複雑な神経回路を再現し、「考える」という脳機能の解明に挑むことは現代科学の最大のチャレンジであり、「健康・医療戦略」にもあるように新しい情報処理技術の確立や精神神経疾患の克服に向け社会的期待も高い。
脳科学の革新的プロジェクトと連携し、そのビッグデータのモデル化と大規模シミュレーションにより、新たなブレークスルーが期待できる。脳の機構にならった人工知能は、人の心を理解するロボットなど新たなイノベーションを可能にする。
思考の神経回路の実体の解明には、大量の実験データに基づく大規模、マルチスケールのモデルの構築と、さらにリアルな感覚行動データによる長期の学習が不可欠であり、ポスト「京」の超大規模計算により初めて実現可能である。

内容の詳細:「革新的技術による脳機能ネットワークの全容解明プロジェクト」等により得られる脳構造と活動の高スループット計測によるボトムアップデータと、認知を実現する機械学習によるトップダウン設計論を融合し、思考を実現する脳の大規模神経回路を、ニューロンの特性や回路の結合構造などの実験データに基づいた多階層モデルにより再現し、その応用をはかる。

サブ課題A: 思考を実現する神経回路機構の解明

細胞形態と回路結合、活動のイメージングなど異種大規模データを、機械学習手法をもとにモデル統合しその動作機構を解明する。
ポスト京により様々な規模と詳細度のシミュレーションを実現する:
・細胞内分子シグナルを含む局所神経回路の詳細モデル
・自動縮約したニューロンモデルによる全脳規模シミュレーション

サブ課題B: 脳アーキテクチャにもとづく人工汎用知能

大脳皮質の階層的確率推論、大脳基底核の報酬評価、小脳による定型的行動制御など脳の機能アーキテクチャを参考に、環境との相互作用のもとで学習し続ける知能エージェントを実現する。
ポスト京のキャパシティにより、ネット上で得られる膨大な情報のもとで学習させることにより、動的に発達し続ける人工知能システムを実現する。

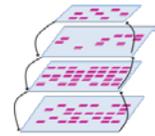
ポスト「京」利用の必要性



脳に関して特定の仮定のもとに抽象化したモデルは多数提案されているが、実験データにもとづく詳細モデルによってはじめて、脳の物理化学的な実体がいかに精神機能を実現し得るのかという問題に迫ることが可能になる。



実時間シミュレーションにより、センサやロボットを通じた外界や人とのインタラクションが可能になり、運動制御、意思決定、コミュニケーションなどの脳機構をリアルに検証することが可能になる。



必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

- ・コネクトミクス等データ集中計算: 10日
- ・マルチスケール局所回路モデル: 5日
- ・マーモセット全脳詳細モデル: 15日
- ・人全脳縮約モデル: 30日
- ・脳型人工汎用知能シミュレーション: 20日



期待される成果・波及効果

マーモセットなど霊長類の脳データにもとづく詳細大規模シミュレーションにより、脳内シミュレーションと思考、他者認知とコミュニケーションなど、人の精神活動の基盤となる脳機構の実体の解明が期待される。

そのモデルの解析は、精神神経疾患や発達障害のメカニズムの理解、それらの診断、治療、予防法の開発、また人の心を理解し行動するロボットなど、より人間的な人工知能の応用への道を開く。