② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

概要・意義・必要性	
(1) 必要性の観点	**ポスト「京」によるビッグデータ解析と生体シミュレーションを統合すること**により、革新的な予防法や早期診断法の開発、安全で有効性の高い治療の実現などを推進し、国際社会の先駆けとなる**健康長寿社会の実現に貢献**
(2) 有効性の観点	**史上最大規模のビッグデータ解析**と、心臓シミュレータ、脳神経シミュレータなど**世界最先端の生体シミュレーション技術**を**医療機関、医療プロジェクト等と密接に連携した体制**で推進することで、**着実に医療応用を実現**
(3) 戦略的活用の観点	ポスト「京」による膨大な演算能力とストレージを活用し、**ビッグデータ解析**と**生体シミュレーションを統合して利用**することで、**個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開**

内容の詳細

統合計算生命科学（ビッグデータ解析とそこから得られるモデルを用いる生体シミュレーション）による個別化・予防医療の支援

エクサスケールデータ解析

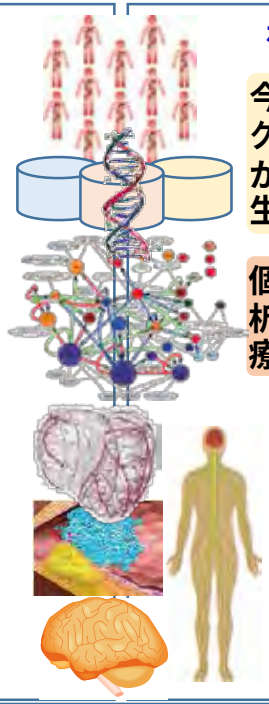
巨大なストレージと演算能力を活用した**健康・医療ビッグデータ**（個人ごとのオミックスデータと医療・計測情報など）を一挙に解析する技術を開発し、その基盤を確立

それらを活用し、**個々人にフィットした薬、病気の予測・予防・治療法**を見出し、個別化・予防医療、さらに参加型医療に展開

マルチフィジックス生体シミュレーション

多様な医療分野のシミュレータを連成した**マルチフィジックス生体シミュレーション法**（分子、細胞から臓器・脳・全身）を確立

健康・医療ビッグデータの解析結果に基づいた**個々人に合わせたモデルを用いた生体シミュレーション**による**疾患の予測と治療法**の検討を実施し、さらに**新しい医療機器の開発**に応用



ポスト「京」利用の必要性

今後の個別化・予防・参加型医療には、大規模な個々人のオミックスデータの解析とマルチフィジックス生体シミュレーションにより、がんなどの疾患における多数の遺伝子システムの異常の解明と生活習慣病などにおける正確なリスク評価が不可欠。

個別化・予防医療には、個人ごとの健康・医療ビッグデータの解析と個人ごとの違いに応じた生体シミュレーションによる手術や治療法の適用が必要になる。

必要な計算資源　（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

遺伝子ネットワーク解析等に約35日（1万5千ケース）
マルチフィジックス生体シミュレーションに約45日

期待される成果・波及効果

大規模なオミックスデータ解析により、恒常性破綻と疾患の関係、がんなどの疾患における多数の遺伝子異常と遺伝子ネットワークの関係を解明し、予防・個別化型の医療に貢献し、さらに参加型医療への展開を図る。

分子、細胞レベルから、血管・組織、さらには臓器レベルまでの生体シミュレーションにより、病態予測を可能にして、疾患の早期発見、最適な治療法の選択に寄与するとともに、世界最先端の医療機器開発に寄与する。

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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点	被害経験からでは予測困難な複合災害に対する、統合的予測は国土強靭化のために必要不可欠。
(2) 有効性の観点	内閣府・自治体等で利用できる、HPCを使った地震・津波、一次被害、二次被害の統合的予測システムは、高度な被害予測を実現し、防災・減災対策を合理化。
(3) 戦略的活用の観点	多数地震シナリオの想定は、不確実性の高い地震・津波の複合災害の予測にとって必要不可欠であり、1シナリオの計算に京の全系が必要なため、ポスト「京」は必須。

内容の詳細

サブ課題A：地震津波災害予測システムの実用化研究

- 自然災害・一次被害・二次被害の計算コンポーネントを統合した予測システムを構築し、多様性を考慮し想定外を無くす1000以上の地震シナリオ(*)で、大規模シミュレーションを実施することで、確率評価の可能な複合災害予測データベースを構築する。

(*)断層広がり12x4通りxすべり不均質$_5C_2$通りx振幅3通り=1440通り

- 各計算コンポーネントに関する科学的課題を解決し、予測システムの信頼度を向上

サブ課題B：統合的予測のための社会シミュレーションの開発

- 二次被害に大きく影響する都市全体を対象とした交通シミュレーション等を実施する社会シミュレーションの開発。
- 効果的・効率的な国土強靭化に向けて、多数地震シナリオを用いた被害予測を行い、行政に発信する。

ポスト「京」利用の必要性

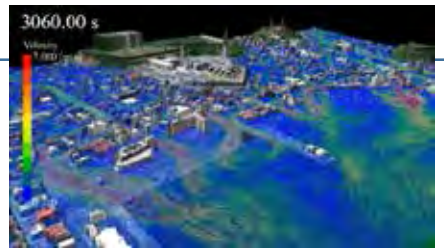
- 詳細な幾何形状等を考慮した地震・津波・構造応答の計算を行うために、億を超える自由度の非線形有限要素計算が必要。
- 京の全系でスケールするコードは開発済みだが、1回の計算に1日程度かかるため、不確定さを考慮した多数計算は、京では数年以上かかる課題であり、ポスト「京」が必要。
- 交通シミュレーションについても、地震以外の状況も考慮した多数ケースの計算が必要。

必要な計算資源　(実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト京では、5領域（千島海溝、日本海溝、南海トラフ、伊豆・小笠原海溝、琉球海溝）で行ったとして、占有日数は、最低で70日程度（避難シミュレーションでのシナリオを最小限に絞った場合）。絞らないと最大4倍必要となる。

期待される成果・波及効果

・地震津波の複合災害予測データベースの構築。
・経済的な波及効果：直接効果だけでも6500億円（三菱総研調べ）。
・将来的にリアルタイムシミュレーションへの展開。
・計算コンポートネントの高度化を継続し、統合的予測システムを持続的に利用。
・行政（内閣府・自治体）の防災・減災計画への反映。



複合災害予測のベースとなる3次元津波遡上計算

10万人規模のエージェントシミュレーション

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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点：竜巻、局地的豪雨等の予測高精度化への社会からの強い要望、環境政策立案のための科学的基盤提供

(2) 有効性の観点：安全な避難のための時間的余裕確保、観測研究・シミュレーション研究が一体となった研究体制の構築

(3) 戦略的活用の観点：十分なモデルと観測データ取り込みの解像度、アンサンブル数を確保し、予測高度化につなげる

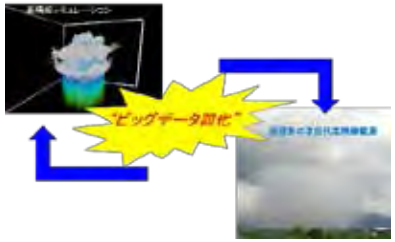
内容の詳細

サブ課題A：革新的な数値天気予報による高度な気象防災

雲、雨、雪などを桁違いの高解像度で忠実にシミュレーションし、次世代の観測によるビッグデータを、応用数学的手法によりモデル計算に組み入れることで、現状では予測が困難な局地的豪雨や竜巻などを高精度に予測する。また、台風の発生を予測する新しい天気予報システムを構築する。

サブ課題B：総合的な地球環境の監視と予測

人間活動に起因する環境変化の影響を、生物・化学的側面を含んでより正確に予測し、常にモニタリングを行うシステムの基盤を、地球規模の気候モデルを用い構築する。これにより、国内および東アジアなど広域の大気質改善等への貢献を通し、今後の政策や防災、健康対策に寄与する。



ポスト「京」利用の必要性

大気中の対流を再現できる解像度で、現状では10-100程度のアンサンブル数を10倍以上に増やし、かつ人工衛星観測などによる観測ビッグデータを、可能な限り情報量を保持しながら応用数学的手法によりモデル計算に取り込むため、ポスト「京」の計算能力が必要。

必要な計算資源　(実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト「京」の占有日数換算で、「高解像度気象予報（全球、領域）」に20日、「局所的・集中的大雨、熱帯気象の高度予測」に70日、「近未来地球環境予測システム」に10日必要。

期待される成果・波及効果

- 予報技術の飛躍的向上による人命と財産の保護
- 省庁、自治体による防災計画・環境政策への貢献、地球環境予測情報の発信を通した持続可能な国際社会構築への貢献
- 極端現象の成因・将来変化や、地球環境のサブシステム間・スケール間相互作用の科学的理解
- 多様な時空間スケールを対象にすることによる、モデリング・データ同化手法改良の加速

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

概要・意義・必要性

(1) **必要性の観点**　新規エネルギー源の確保、効率的な変換、貯蔵、利用技術の開発は我が国喫緊の重要課題であり、既存の多数の国家プロジェクトとの連携や発展途上国でのエネルギー施策などへの国際貢献が強く期待されている.

(2) **有効性の観点**　エネルギーの創出、変換・貯蔵、利用に関する複雑な現実系の全系シミュレーション技術の開発は、我が国のエネルギー基盤技術のブレークスルーに繋がる。大規模プロジェクト、実験・企業研究者や計算機科学者との強力な研究体制が育ちつつある。

(3) **戦略的活用の観点**　複雑な要素が相互に相関する複合系の微視的挙動を対象とした大規模、長時間シミュレーションは、ポスト「京」を駆使して初めて可能である。小規模系などへの適用で産業への展開が可能、大きな波及効果となる。

内容の詳細

フラーレン太陽電池
ACSから許可：H. Imahori and T. Umeyama, J. Phys. Chem. C, 113, 9029–9039(2009)

サブ課題A　新エネルギー源の創出・確保

光をエネルギーに変換する過程の電子論を解明し、新しい有機系太陽電池や高性能人工光合成系を設計・開発する。

メタンハイドレートの分解

サブ課題B　エネルギーの変換・貯蔵

電池内で起こる全過程を物質構造と直接相関させるシミュレータを開発し、低コストの汎用元素を用いた二次電池や燃料電池開発の基盤技術を確立する。

サブ課題C　エネルギー・資源の有効利用

高効率触媒の理論設計・開発や効率的な物質の分離技術により、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。特にメタンハイドレートの分離・精製、二酸化炭素の効率的な捕集・変換系を設計・開発する。

ポスト「京」利用の必要性

経験に頼ったエネルギー関連複合材料の開発では革新的新材料は生み出せない。物理と化学の基礎方程式から出発した大規模計算に基づく計算科学的な設計・制御が必要。

「京」では、部分系、モデル系に対する計算に止まる。エネルギー問題の解決には複合物質の全系シミュレーションが必須。また、工業的に使用される条件や実験条件下での多数の統計量に基づいた解析も重要。

これらの計算を実施するには、「京」で10~50年はかかると考えられ、ポスト「京」の使用が不可欠。

必要な計算資源　（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

ポスト「京」で占有日数は、最低でも80日程度必要。

期待される成果・波及効果

- 変換効率の高い太陽電池を安価な元素や有機系で実現し、実用化を促進、また人工光合成系の確立により新規エネルギー源を確保する。
- 安価で高速充電、高容量の二次電池や高効率の燃料電池の開発を可能とする。
- 白金などの貴金属を使用しない高機能触媒の開発により、エネルギー多消費型物質生産の革新を達成する。
- ハイドレートの生成・分解過程の解明により、メタンの効率的な分離、精製方法、安全な貯蔵技術を確立する。
- 二酸化炭素を低コストで捕集・変換する技術を開発し、地球規模での二酸化炭素抑制、化石燃料の有効利用に貢献する。

⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点：ポスト「京」を用いた第一原理解析により、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。

(2) 有効性の観点：産業界の大型プロジェクト(SIP等)と連携し、ポスト「京」の超高精度解析を駆使することで、鍵となる物理現象を解明し、**世界最先端のエネルギーシステムを実現する**。

(3) 戦略的活用の観点：エネルギ変換の中核をなす、燃焼等の複雑な物理現象を高精度に予測するためには、**第一原理解析**が必須となる。実問題に対する第一原理解析にはポスト「京」の能力が必要となる。

内容の詳細

具体的なサブ課題として以下のようなものが想定されるが、**波及効果の大きなもの**、解析基盤技術が共有できるものを**優先して実施**。

- **サブ課題A：超臨界タービン燃焼器**：超臨界燃焼挙動を詳細に解明し、高熱効率・低環境負荷(CCS, ゼロNOx)に寄与する超臨界タービン燃焼器の実用化を加速。
- **サブ課題B：ICエンジン**：エンジン内の乱流噴霧燃焼挙動を解明し、熱効率の飛躍的向上(40%→50%以上)に貢献。
- **サブ課題C：超大型風車**：最重要課題である立地アセスメントで必要な100ケース/アセスメントの高精度風況予測を実現し、実用化を加速。
- **サブ課題D：核融合炉**：核融合炉の実用化に必須となる核燃焼プラズマ挙動の解析技術を確立し、国際熱核融合実験炉ITERの炉心設計に貢献。

ポスト「京」利用の必要性

- 超臨界タービン燃焼器では亜臨界状態に比べて雰囲気圧が10倍(300気圧)になり**解析規模が約100倍**になるため。
- ICエンジンでは予測精度を飛躍的に向上させることが可能な気筒内噴霧燃焼の第一原理解析(**DNS解析**)が必要なため。
- 超大型風車の立地アセスメントでは、**100ケース以上**の詳細な風況予測シミュレーションを実施することが必要なため。
- 核融合炉心の核燃焼プラズマ挙動の解析では、「京」の成果を重水素など多種イオン系、かつ、**長時間スケール**(10ms→1s)に拡張することが必要となるため。

必要な計算資源　(実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)
占有日数は7日～53日程度と見積もられるが、詳細は具体的な研究課題に依存する。

期待される成果・波及効果

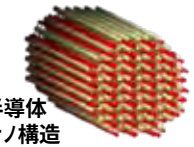
- 超高効率・低環境負荷な産業機器・コンシューマ製品の実現による我が国の**産業競争力の強化**、低炭素社会・省エネルギー社会の実現に向けた**世界的リーダーシップの発揮**。
- 「**エネルギー基本計画**」で重要性が指摘される省エネルギー・低環境負荷技術、中長期クリーンエネルギー源等の技術開発に貢献。
- 具体的な成果としては、高熱効率・低環境負荷の超臨界タービン燃焼器の実用化、ICエンジンの熱効率の飛躍的向上(10%以上向上)、超大型風車の実用化、核融合炉の炉心設計への貢献などが期待される。

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

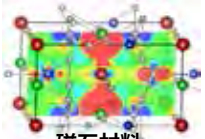
概要･意義･必要性

(1) 必要性	次世代の産業を支える先端電子デバイスや高機能物質･材料の開発と機能創出を図る。新機能を持つ電子デバイス、高性能な永久磁石、信頼性の高い構造材料、次世代の機能性化学品等が主な研究対象。
(2) 有効性	元素戦略プロジェクト、最先端大型実験施設と連携して基礎研究のブレークスルーを図り、産業界と共に国際競争の激しい新デバイス･新材料の研究開発を加速。
(3) 戦略的活用	ポスト「京」で初めて実現される精密、大規模、長時間のシミュレーションと系統的探索により、新デバイス･新材料開発を革新。

内容の詳細



半導体
ナノ構造



磁石材料

鉄鋼材料組織

サブ課題A　新機能電子デバイス
微細加工限界のナノ構造半導体デバイスや新奇超伝導材料、光エレクトロニクスデバイスなど、新原理により新機能を提供する電子デバイスと電子デバイス材料の開発

サブ課題B　高性能永久磁石･磁性材料
電子論に基づく磁石機能の解明と希少金属を代替する高性能永久磁石、軟磁性材料の開発

サブ課題C　高信頼性構造材料
材料特性と製造プロセスの関係に着目した構造材料の強靭化の設計･制御と新材料開発

サブ課題D　次世代機能性化学品
凝集系の構造や電子状態の解明に基づく次世代機能性化学品の分子設計

ポスト「京」利用の必要性

「京」では理想的なナノ構造や高温超伝導体の大規模計算が行われ、電子状態や物理現象の解明･理解が進展。ポスト「京」では、これまで不可能だった複雑界面や不均一系の精密、大規模、長時間のシミュレーション、多数の化学組成、多様な条件下でのシミュレーションなどにより、実験だけでは困難な物性解明や系統的な材料探索、デバイスデザインを実現。

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80日程度は必要。量子ダイナミカル計算、複雑な強相関物質の設計などさらに高度な計算を行うと最大400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

- 多様なナノ構造デバイスのデザイン、強相関系新奇物質の高精度物性予測と物質探索、複雑な界面や凝集構造、不均一性を考慮した材料特性の予測と製造プロセスの提案が可能に。
- 物質･材料の性質の予測だけでなく、ほしい物性を実現するための物質設計も加速。
- 最先端大型実験施設で得られる膨大な実験データの解析と有効利用。
- 新しい半導体材料、超伝導材料、磁性材料、構造材料、機能性化学品、ナノ構造デバイス等において、日本の産業競争力を一層強化し、社会基盤を形成するための、高機能物質･材料創成技術が確立。
- 物質科学の深化と自然観の革新を通して基礎科学に貢献。

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

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点：社会ニーズを踏まえた付加価値を有する競争力のあるものづくりを実現するには、**上流設計プロセス、並びに製造プロセスの革新**（2012～2013ものづくり白書）と、その核となる**超高速統合シミュレーション**が必須。

(2) 有効性の観点：**製品コンセプトを上流設計段階で最適化**する革新的な設計手法（コンセプトドリブン型ものづくり）と**コストを最小化する**革新的製造プロセスを研究開発し、我が国ものづくりの国際競争力強化に貢献。

(3) 戦略的活用の観点：設計・製造プロセスの最適化の基礎となる**信頼性の高い膨大なデータをシミュレーションにより生成**するため、京の数十倍から百倍程度の計算機能力が必要。

内容の詳細

サブ課題A：上流設計プロセスの革新

設計上流で活用する**概念設計プラットフォーム**と、製品最適化のための様々な物理シミュレーション**プロセスを統合した設計シミュレーションシステム**を開発。

協力：マツダ（株）、スズキ（株）

サブ課題B：製造プロセスの革新

製造コスト削減のポイントとなる**成形問題（溶接、樹脂成型、金属付加製造等）を迅速に解決**するための第一原理シミュレーションシステムを開発。

サブ課題C：革新的要素技術の創出

高付加価値を有するものづくりの要となる**革新的要素技術（材料、流体、デバイス、制御法等）を開発**。

ポスト「京」利用の必要性

上流設計では、パラメータの最適化のために様々な領域の物理シミュレーションが必要となり、製造プロセスでは、最小コストの加工条件等を見い出すために第一原理計算が必要となり、京の数十倍から百倍程度の性能をもつ計算機が必要となる。

必要な計算資源　（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

超ストロングスケーリング技術開発による計算時間の飛躍的短縮
（数日⇒数時間内）

実機スケールのパラメトリックスタディ
（約28日間占有）

新規材料に対して、1000を超えるプロセス要素反応・要素構造を設定
（ポスト京の占有日数：約17日間）

【課題全体で計算資源量（ポスト京の占有日数）】約45日間

期待される成果・波及効果

- 高品質に加えて社会ニーズや新しい提案を取り込んだ新製品コンセプトが、高度シミュレーション技術を駆使したアプローチにより実現性のある具体的姿として設計段階において提示できるため、極めて**費用対効果が高く競争力のある新製品開発に貢献**できる。
- ポスト京を用いた第一原理計算により、加工プロセス等の詳細が解明され、最適な加工条件を見い出すことが出来れば、**製造コストの大幅な低減が期待**される。
- ポスト京を用いた実スケールシミュレーションにより、開発・検証される革新的な技術が格段に広い利用範囲に適用可能となる。
- 研究開発段階から産官学一体となった体制を構築するため、高度シミュレーション技術を習得した**産業界のリーダーを育成**できる。

⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明

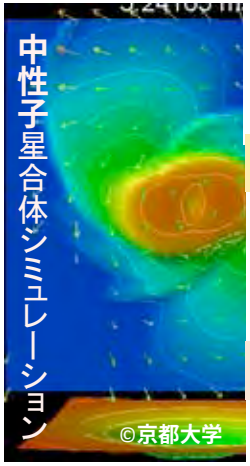
概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点：自然界の基本法則と宇宙の進化過程には多くの謎が残されている。**実験・観測だけでは到達できない情報を得るための精密計算**や、**素粒子から宇宙まで複数の階層にまたがるシミュレーション**を実現し、未解決問題を解明できる。

(2) 有効性の観点：「京」を通じて計算機科学者、応用数学者との連携体制が確立。更なる成果創出に向けて実験・観測との連携も進んでいる。**計算科学を軸として分野を横断し研究手法を超えて連携する世界にも類のない体制が構築**されつつある。

(3) 戦略的活用の観点：ポスト「京」で初めて可能になる精密計算や階層をまたぐ現象の計算を大型実験・観測のデータと合わせることで、**計算科学のみならず素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史解明へのブレークスルー**が得られる。

内容の詳細



サブ課題A「究極の物理法則と宇宙開闢の解明」

- 素粒子の精密実験と呼応する精密計算を実現し、標準模型を超える物理法則の発見を目指す。実現すれば、素粒子物理全体のブレークスルーとなる。物質と時空の究極理論として期待される超弦理論を解析して、将来的に基本法則の解明につなげる。

サブ課題B「物質創成史の解明と物質変換」

- 元素合成機構を明らかにするため、バリオン間相互作用、原子核の構造・中性子星の形成、超新星爆発・中性子星合体という複数の階層をシミュレーションで橋渡しする。放射性核廃棄物の核変換の基礎的データを与え、社会貢献につなげる。

サブ課題C「現代物理学が紐解く宇宙進化の謎」

- 初代星、銀河、巨大ブラックホールなどの異なる階層をつなぐシミュレーションを実現し、宇宙の進化を明らかにする。

ポスト「京」利用の必要性

- 計算の精密化や複数の階層をまたがる大規模計算を実現するには、「京」の能力を大幅に超える計算量が必要。
- 計算の高速化・効率化を進めて、ポスト「京」の能力により最大限の科学的成果を得られるようにする。
- アプリケーションの内容に応じ、HPCI全体で最適な資源配分の実現を検討。

必要な計算資源　（実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定）

サブ課題A 60日、サブ課題B（バリオン間相互作用60日／原子核・核変換60日／超新星爆発60日）、サブ課題C 60日、を目安。全300日のうち100日をポスト「京」で、残りは他のHPCI資源の活用を想定。

期待される成果・波及効果

- 素粒子標準理論を超える新しい物理法則の発見や、究極理論の理解に貢献
- 多様な元素が生まれた宇宙における物質創成過程を統一的に理解
- 宇宙進化において天体が階層的に形成された仕組みや、銀河中心に巨大ブラックホールが存在する起源を解明
- 核変換の基礎データ提供を通じて、放射性核廃棄物の削減に向けた社会貢献が可能

⑩ 基礎科学のフロンティア　ー 極限への挑戦

概要・意義・必要性

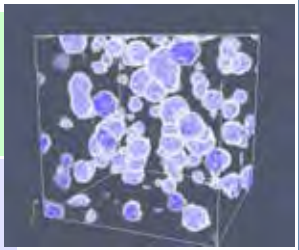
(1) 必要性の観点　極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の大きな成果にもかかわらず答の出ていない難問に**大規模数値計算を軸とした学際連携**で挑み、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創で解決。

(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。

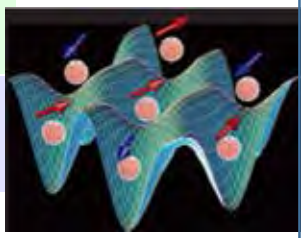


B:　相転移と流体が織り成す大変動：ナノバブルから火山噴火まで

・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。

↕　↕　↕　↕

物質科学	地球環境科学	素核・宇宙科学	ものづくり

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・経済で生じうる多様な可能性を、「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タ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変動の解明

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512×1024×3072×2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	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。
(2) 有効性の観点	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。
(3) 戦略的活用の観点	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

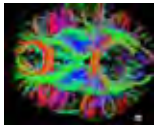
サブ課題B：脳アーキテクチャにもとづく人工汎用知能

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。

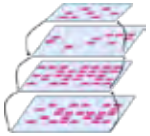
ポスト京のキャパシティにより、ネット上で得られる膨大な情報のもとで学習させることにより、動的に発達し続ける人工知能システムを実現する。

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し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。