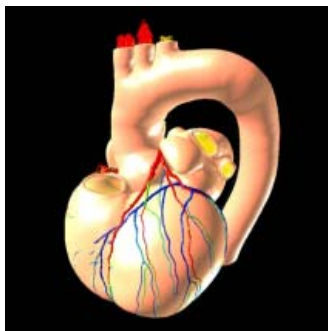


# HPCI戦略プログラムによって期待される成果の例

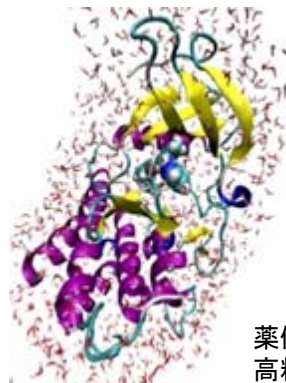
- **心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション** (研究代表者: 東京大学・久田俊明)



心臓シミュレーション

細胞・組織・臓器を部分ではなく、**心臓全体をありのままに再現**し、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価に貢献

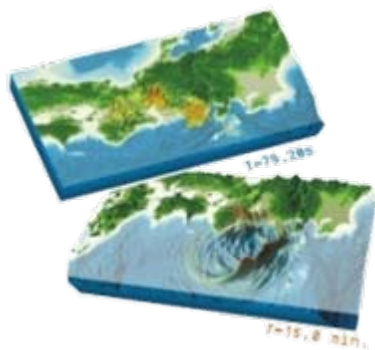
- **創薬応用シミュレーション** (研究代表者: 東京大学・藤谷秀章)



薬候補のタンパク質への高精度結合シミュレーション

新薬の候補物質を絞り込む**期間を半減**(約2年から約1年)して画期的な新薬の開発に貢献

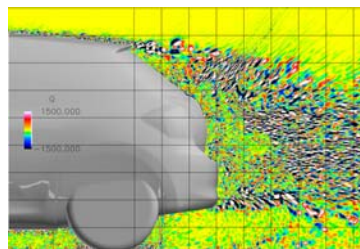
- **地震・津波の予測精度の高度化に関する研究** (研究代表者: 東京大学・古村孝志、東北大学・今村文彦)



シミュレーションによる地震・津波の被害予測

50m単位(ブロック単位)での予測から地盤沈下や液状化現象等の影響も加味した**10m単位(家単位)の詳細な予測**を可能とし、都市整備計画への活用による**災害に強い街作りやきめ細かな避難計画の策定**等に貢献

- **乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発** (研究代表者: 東京大学・加藤千幸)



車両挙動を解明する全乱流渦のシミュレーション

乱流の直接計算を工業製品の熱流体設計に適用することにより、従来行われていた**風洞実験などを完全にシミュレーションで代替**し、設計の**効率化**に貢献

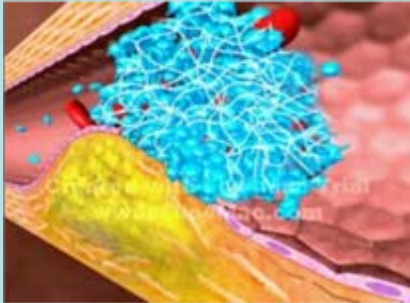
# HPCI戦略プログラム 各分野の研究開発課題(1/5)

## 分野1: 予測する生命科学・医療および創薬基盤(戦略機関: 理化学研究所)

| 課題名  | 研究の概要   | 達成目標と達成時期   |
|--|---|---|
| 細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション<br><br>研究代表者:<br>杉田有治(理研) | マルチスケール分子ダイナミクス・シミュレーションと一分子粒度シミュレーションを高度化し、細胞内環境下における生体分子の挙動をシミュレーションすることにより、生体膜を介した物質輸送、タンパク質/DNA相互作用、シグナル伝達機構を解明する。これにより、細胞機能の理解や薬剤設計等に貢献する。 | 平成27年度末に、細胞内分子ダイナミクスシミュレーションを従来のマイクロ秒オーダーからミリ秒以上に拡張する。これにより、細胞内環境下での生命現象を再現し、一分子計測等の最先端の実験と連携して、物質輸送、タンパク質/DNA相互作用、シグナル伝達に関する予測法を確立する。                  |
| 創薬応用シミュレーション<br><br>研究代表者:<br>藤谷秀章(東大先端研)      | 分子動力学を用いた結合自由エネルギーシミュレーションを高度化し、薬候補化合物の設計方法の構築、及び化合物とタンパク質の結合部位同定法を確立する。これにより、シミュレーションによる創薬設計手法の確立に貢献する。  | 平成27年度末に、結合自由エネルギーシミュレーションの計算誤差を従来の5kcal/molから1kcal/mol以下にすることで、薬候補化合物の活性比較を可能にする。これにより、実際の薬開発における創薬設計手法の有用性検証を行う。                                      |
| 予測医療に向けた階層統合シミュレーション<br><br>研究代表者:<br>高木周(東大工) | 階層統合シミュレータを構築し、細胞レベルから組織、器官の挙動をシミュレーションすることにより、複雑な生命現象の理解と幅広い疾患の検証を行う。これにより、わずかな兆候からの将来の病態予測や、負荷の少ない治療法の検討、薬効の評価等に貢献する。                         | 平成27年度末に、血栓シミュレータ、心臓シミュレータ、筋骨格シミュレータ、脳神経系シミュレータを統合し、様々な疾患のシミュレーションを行う。これにより、患者ごとのデータをもとにした幅広い疾患への対応や治療法の検討、薬効の評価等を行う。                                   |
| 大規模生命データ解析<br><br>研究代表者:<br>宮野悟(東大医科研)         | 次世代シーケンサーから得られる大規模データを解析するための計算手法を開発し、未知の遺伝子が多い海洋微生物等のメタゲノム解析、がんの原因となる機能的突然変異、大規模な生体分子ネットワークの解析等を行う。これにより、個別化医療や生物進化の理解、ゲノム情報の産業利用等に貢献する。       | 平成27年度末に、次世代シーケンサーデータ解析システムの性能を従来の18万リード/時から1,000万リード/時に引き上げる。これにより、ゲノム由来の生命データを大規模・網羅的に解析し、生命プログラム・パーソナルゲノムの理解を深化させ、細胞・疾患の本態をシステムとして暴き出し、個別化医療介入予測を行う。 |

# 「京」によって期待される主な成果(1/5)

## 階層統合シミュレーションによる予測医療(1)

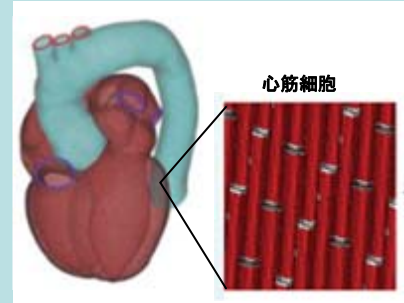


血栓成長による血管閉塞シミュレーション

- 心疾患や脳血管疾患の原因となる血栓について、血液の凝固から血管閉塞にいたるまでの、血栓成長プロセスを細胞レベルでシミュレーションする。
- 薬剤を投与した場合の効果や、病態の予測など、治療支援への貢献が期待できる。

細胞、組織、器官の個別でしかできなかったシミュレーションの統合が可能となり、生体に近い状態での病態予測ができるようになる。

## 階層統合シミュレーションによる予測医療(2)

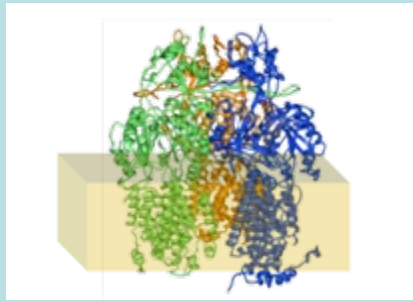


心臓シミュレーション

- 心臓の機能を細胞レベルからシミュレーションし、細胞内のタンパク質の機能、心臓の拍動、血液の拍出を再現する。
- ミクロレベルの異常と心臓疾患との関係を解明することにより、医療への応用、創薬への応用が期待できる。

細胞、組織、器官の個別シミュレーションから統合された心臓全体のシミュレーションが可能となり、心臓疾患の病態予測ができるようになる。

## シミュレーションによる創薬設計(1)

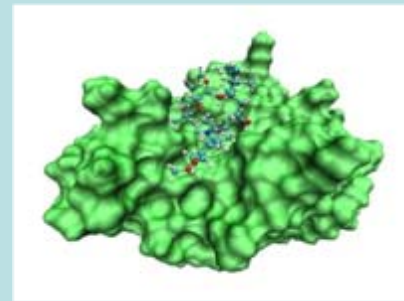


多剤排出トランスポーターにおける薬剤排出シミュレーション

- 医療現場で問題になっている多剤耐性菌(薬剤への耐性を有する菌)の耐性化メカニズムを、原因タンパク質の原子レベルのシミュレーションで解明する。
- 多剤排出トランスポーターの排出機構の解明によって、その働きを止める薬剤の開発に貢献することが期待できる。

部分的な過程のシミュレーションから薬剤排出過程全体のシミュレーションに拡大することにより、巨大タンパク質の構造変化と薬剤排出過程を再現することが可能になる。

## シミュレーションによる創薬設計(2)



薬候補のタンパク質への結合シミュレーション

- 新しい治療薬が待望されている病気の標的タンパク質と、薬の候補となる化合物との結合を分子動力学計算によりシミュレーションする。
- シミュレーションによる創薬プロセスの有用性を検証することにより、薬剤の開発に貢献することが期待できる。

シミュレーションの精度が5kcal/molから1kcal/molになることにより、これまでの精度ではできなかった分子の結合状態が再現でき、薬効の予測が可能になる。



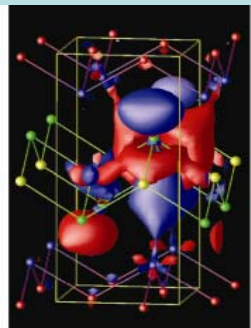
# HPCI戦略プログラム 各分野の研究開発課題(2/5)

## 分野2:新物質・エネルギー創成(戦略機関:東大物性研(分子研、東北大金材研))

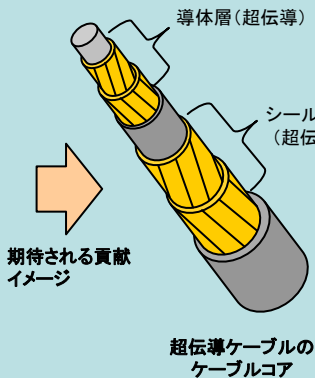
| 課題名   | 研究の概要  | 達成目標と達成時期   |
|---|--|---|
| <p>                     関連の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明<br/>                     研究代表者:<br/>                     今田正俊(東大)                 </p>            | <p>                     電子を含む量子多体系の物性を解明する強相関第一原理電子状態計算法を開発・整備し、超流動や超伝導のように特異な状態である量子スピン液体や非フェルミ液体などの新しい量子状態や量子相転移を解明する。これにより、他の課題と連携し、高温超伝導、高効率熱電素子等の探索に貢献する。                 </p>  | <p>                     平成27年度末までに、強相関第一原理電子状態計算法を開発し、強相関フェルミ格子において従来の100自由度から1,000自由度以上、また量子スピン格子において従来の10,000自由度から20万自由度以上での計算を可能にし、新しい電子状態や量子相転移に関する知見を得る。特に量子スピン液体、非フェルミ液体などの特異な量子状態や量子相転移を解明し、強相関超伝導体の物性解明の知見を得る。                 </p>                                     |
| <p>                     電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開<br/>                     研究代表者:<br/>                     天能精一郎(神戸大)                 </p>          | <p>                     分子の超微細量子構造を予測可能な高精度電子状態計算法を開発・整備し、磁性体やナノ金属クラスターの電子状態、電子構造を解明する。これにより、他の課題と連携し、ナノ炭素材料の分子設計やレアアースの代替合金探索に貢献する。                 </p>  | <p>                     平成27年度末までに、一電子基底関数展開を超えて電子相関を捉えられるジェミナル(高精度F12電子状態理論)を分子軌道法によるナノスケールの高精度電子状態計算を可能にする。これにより、磁性やナノ金属クラスターの電子状態、電子構造の高精度予測を可能とし、炭素材料や含金属ナノ材料の構造や電子物性を解明する。                 </p>  |
| <p>                     密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究<br/>                     研究代表者:押山淳(東大)                 </p>                                      | <p>                     密度汎関数法を用いたシミュレーションを高度化・大規模化し、ナノ構造デバイスの電子構造・特性の解析や、構造体生成の機構を予測する。これにより、ナノワイヤーや電界効果トランジスタの設計・性能予測、新材料探索、新規デバイス材料設計等に貢献する。                 </p>   | <p>                     平成27年度末までに、密度汎関数法での密度行列最適化法を完成させ、現在の2,000原子程度から100万原子系に対する構造最適化計算を実現する。これにより、ナノワイヤー等のナノ構造デバイスの特性、構造安定性や形成過程のシミュレーションを行い、新材料探索や新規デバイス開発に必要な電子構造・特性や構造体生成に関する知見を得る。                 </p>  |
| <p>                     全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開<br/>                     研究代表者:<br/>                     岡崎進(名大)                 </p>            | <p>                     分子動力学シミュレーションを高度化し、また大規模全電子計算を実行可能とすることにより、ウイルスの感染機構や抗ウイルス剤とウイルスタンパク質との相互作用等を解明する。これにより、ウイルスの殻であるウイルスカプシドやウイルスのタンパク質の解析が可能となり、カプシドに注目した新しいタイプの小児麻痺の抗ウイルス剤の探索やインフルエンザウイルスの新規阻害化合物の設計に貢献する。                 </p> | <p>                     平成27年度末までに、高並列汎用分子動力学シミュレーションの高度化を完成させ、またFMO法による大規模電子状態計算を完成させる。これにより、従来5万原子系程度であった分子動力学計算を1,000万原子系で可能とし、また従来数百原子系であった全電子計算を10万原子系で実現する。これにより、抗ウイルス剤の探索や新阻害化合物の設計のために小児麻痺ウイルスのウイルスカプシドやインフルエンザウイルスのウイルスタンパク質の構造安定性や構造変化に関する知見を得る。                 </p> |
| <p>                     燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究<br/>                     研究代表者:杉野修(東大)                 </p>                                     | <p>                     電子状態を密度汎関数法で、原子・分子の反応を分子動力学法で解析する第一原理分子動力学法を高精度化し、電極物質と水溶液界面における酸化還元反応過程の解析により、燃料電池反応機構に関する知見を得る。これにより、高効率の燃料電池の設計や白金に替わる電極物質の探索等に貢献する。                 </p>   | <p>                     平成27年度末までに、第一原理分子動力学シミュレーションの高精度化を完成させ、従来の133原子から5,000原子相当に対する電極での酸化還元反応過程を解析する。これにより、高効率の燃料電池の設計や白金に替わる電極物質の探索に必要な燃料電池反応機構に関する知見を得る。                 </p>  |
| <p>                     水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性<br/>                     研究代表者:<br/>                     田中秀樹(岡大)                 </p>         | <p>                     分子動力学法を用いたメタンハイドレートシミュレーションを高精度化し、メタンハイドレートや水素ハイドレートの熱力学的安定性や生成解離過程を解析することにより、メタンハイドレートや水素ハイドレートの制御に関する知見を得る。効率的なメタン採取法の探索や水素の安全で安価な貯蔵法としてハイドレート利用の研究に貢献する。                 </p>                               | <p>                     平成27年度末までに、メタンハイドレートシミュレーションの高精度化を完成させ、従来の1,000分子以下から100万分子に対する熱力学的安定性や生成解離過程の解析を実現する。これにより、メタンハイドレートや水素ハイドレートの効果的活用に必要な生成解離過程や安定性の知見を得る。                 </p>  |
| <p>                     金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発<br/>                     研究代表者:<br/>                     香山正憲(産総研)                 </p> | <p>                     大規模第一原理計算(オーダーN法)を用いて、金属材料中の異相界面や結晶粒界、転位の安定構造やエネルギー、強度を電子・原子挙動から解明する。フェーズフィールド法とも組み合わせることで金属系構造材料の特性を支配する「微細組織」の構造や性質を明らかにし、優れた構造材料の設計や開発の研究に貢献する。                 </p>  | <p>                     平成27年度末までに、5万原子程度のセルでの鉄/炭化物界面、鉄/窒化物界面、鉄中の結晶粒界、転位の構造最適化計算を行う。さらに応力下での原子・電子挙動やレアメタル等の添加効果を探る。フェーズフィールド法と組み合わせることで微細組織の構造と性質を明らかにし、優れた構造材料の設計・開発の指針、鉄鋼材料中の添加レアメタル削減の指針を得る。                 </p>  |

# 「京」によって期待される主な成果(2/5)

## 相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明



第一原理からの強相関物質機能予測



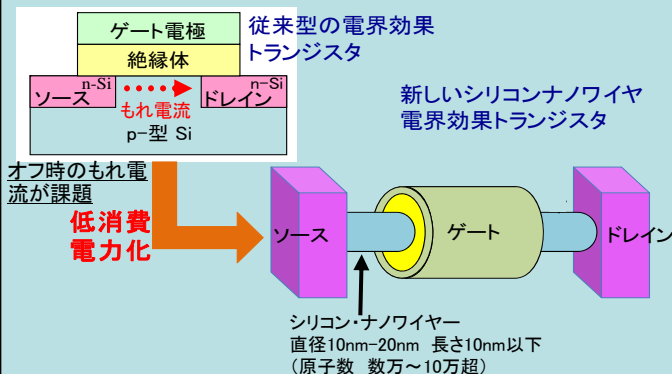
期待される貢献イメージ

超伝導ケーブルのケーブルコア

- ・強相関第一原理電子状態計算により、超流動や超伝導のように特異な状態である量子スピン液体や非フェルミ液体などの新しい電子状態や量子相転移を解明する。
- ・高温超伝導、高効率熱電素子等の探索に貢献する。

量子スピン格子の自由度が1万から20万以上に、強相関フェルミ格子の自由度が100から1,000以上になることにより、これまでの計算精度ではできなかった電子状態や量子相転移が解明できる。

## ナノ構造デバイスの電子機能予測



- ・密度汎関数法を用いたシミュレーションにより、ナノ構造デバイスの電子構造・特性の解析や、構造体生成の機構を予測する。
- ・ナノワイヤーや電界効果トランジスタの設計・性能予測、新材料探索、新規デバイス材料設計等に貢献する。

現在の2,000原子系から10万原子系の構造最適化計算を可能にし、これまでできなかったナノ構造デバイスの電子構造・特性や構造体生成に関する知見が得られる。

## 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学的解明



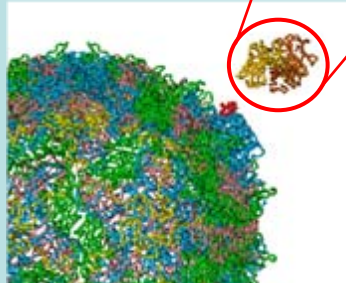
インフルエンザウイルスの膜タンパク質HA, NA, M2  
Frauquet et al. "Virus Taxonomy", Elsevier

レセプターの先端



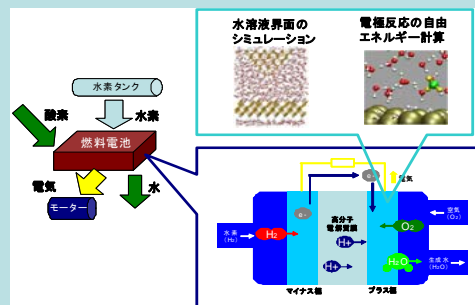
- ・分子動力学シミュレーションにより、ウイルスカプシド等の全原子計算を行い、ウイルスの感染機構や抗ウイルス剤との相互作用等を解明する。
- ・新しい作用原理に基づく小児麻痺抗ウイルス剤の探索やインフルエンザウイルスの新規阻害化合物の設計に貢献する。

現在の5万原子から1,000万原子の分子動力学計算を可能にし、ウイルスカプシドの構造安定性や感染の初期過程が解明できる。



小児麻痺ウイルス

## 燃料電池関連物質における基礎過程の解明



固体高分子形燃料電池における電極反応と水溶液界面のシミュレーション

現在の約100原子から5,000原子での反応過程の解析を可能とし、燃料電池反応機構に関する知見が得られる。

- ・電子状態を密度汎関数法で、原子・分子の反応を分子動力学法で解析する第一原理分子動力学法により、電極物質と水溶液界面における酸化還元過程を解析し、燃料電池反応機構に関する知見を得る。
- ・高効率の燃料電池の設計や白金に替わる電極物質の探索等に貢献する。

# HPCI戦略プログラム 各分野の研究開発課題(3/5)

## 分野3:防災・減災に資する地球変動予測(戦略機関:JAMSTEC)

|                             | 課題名   | 研究の概要  | 達成目標と達成時期   |
|-----------------------------|---|--|---|
| 防災・環境予測研究に資する気象・気候・減災に関する研究 | 地球規模の気候・環境変動予測に関する研究<br>研究代表者:<br>木本昌秀(東大CSR) | 全球雲解像モデルを用いたシミュレーションの高精度化によって、地球温暖化時の台風の変化を計算し、温暖化による台風への影響に関する知見を得る。また、同じモデルを長時間の予測計算に適用させ、長期間の予測(延長予測)の可能性を検討する。これにより、温暖化時の適応策の策定や、2週間以上の天気予報精度向上への貢献が期待される。 | 平成27年度末までに、全球雲解像モデルの全球大気のシミュレーション解像度を従来の20kmから7kmに引き上げ、これを用いて地球温暖化時の台風変化に関する知見を得る。また、熱帯域における延長予測の可能性と共に、熱帯域の影響が中・高緯度域の延長予測に及ぼす効果も含めて明らかにする。 |
|                             | 超高精度メソスケール気象予測の実証<br>研究代表者:<br>斉藤和雄(気象研)      | データ同化技術及びアンサンブル予測技術に雲解像モデルを組み入れて高精度化し、集中豪雨等のシミュレーションを行うことにより、解析予測システムの計算精度が向上する。これにより、雲解像モデルによる気象予測の精度向上への貢献が期待される。  | 平成27年度末までに、積乱雲程度以上の雲形状を考慮できるように、領域データ同化や領域アンサンブル予報の解像度を従来の15kmから2kmに引き上げ、大規模実証試験により、集中豪雨等の力学的直前予測や定量的確率予測の検証を確立する。                          |

地震及び津波の予測精度の向上、地震、津波及び液状化などが複合的におよび都市全域の被害予測、災害発生時の避難計画のためのシミュレーション技術を確立する。さらに精細な被害予測シミュレーションとそこから得られた知見を防災減災対策のための基礎資料として活用することを目指す。

|                     | 課題名  | 研究の概要   | 達成目標と達成時期   |
|---------------------|--|---|---|
| 地震津波の予測精度の高度化に関する研究 | 地震の予測精度の高度化に関する研究<br>研究代表者:<br>古村孝志(東大院情報学環)       | 東日本大震災を踏まえて、地震波伝播や地震発生サイクルを見直し、また、震源モデルと地下構造モデルを高度化し、地震の揺れのシミュレーションを行い、巨大地震発生による強震動と津波の発生予測精度を格段に向上する。これらの結果は、現代社会が有する多様な建築物の被害予測と耐震設計のため入力地震動として活用されることが期待される。 | 平成27年度末までに、現行モデルの分解能を数倍に高め、数Hzまでの高周波数地震動を含む広帯域の地震動評価を行う。この広帯域の強震動評価は、短周期構造物から木造家屋、超高層ビルなどの長周期構造物など、現代社会が有する多様な建築物の被害予測と耐震設計に活用できるシミュレーションソフトを開発する。                                |
|                     | 津波の予測精度の高度化に関する研究<br>研究代表者:<br>今村文彦(東北大)           | 東日本大震災における津波挙動および被災状況を考慮し、津波シミュレーションを詳細化し、またリアルタイムの観測データとの融合により、津波ハザード予測法を高精度化し、被害予測を行う。これにより、津波の第1波の高波だけでなく、複合的な影響を考慮した津波被害予測へ貢献することが期待される。                    | 平成27年度末には、津波の波力を考慮した津波ハザード予測法を開発すると共に、漂流物・土砂移動・海面変動など複合的な津波被害の予測手法の開発を行い、複合的な影響を考慮した津波被害予測を可能とする。さらに、津波被害軽減対策の基礎データを作成する。   |
|                     | 都市全域の地震等自然災害シミュレーションに関する研究<br>研究代表者:<br>堀宗朗(東大地震研) | 東日本大震災における地震動による構造物の破壊・損傷、津波との複合災害を考慮し、また、E-Defenseの実験結果も取り入れ、高精度の構造物の震動応答モデルを構築し、都市全体の構造物の被害シミュレーションを行う。これにより、想定される地震・津波に応じた新たなハザードマップの作成に貢献することが期待される。        | 平成27年度末には、地震・津波による都市複合災害シミュレーション、都市内全構造物の応答に基づく被害シミュレーション、そしてその結果を受ける避難シミュレーションのソフトをそれぞれ京用に開発する。更に開発したソフトを結合し、上記2つの課題の結果を反映させたシミュレーションを実施し、従来では不可能であったシミュレーションに基づく地震ハザードマップを構築する。 |



# 「京」によって期待される主な成果(3/5)

## 地球規模の気候・環境変動予測に関する研究

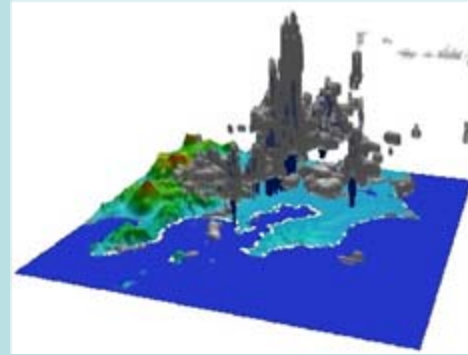


温暖化時の台風や熱帯季節内振動の予測

全球雲解像モデルの全球大気のシミュレーション解像度を20kmから7kmに引上げ、地球温暖化時の台風変化に関する知見を得る

- ・全球雲解像モデルを用いたシミュレーションの高精度化によって、地球温暖化時の台風の変化を計算し、温暖化による台風への影響に関する知見を得る。また、長期間の予測(延長予測)の可能性を検討する。
- ・温暖化時の適応策の策定や、2週間以上の天気予報精度向上への貢献が期待される。

## 超高精度メソスケール気象予測の実証

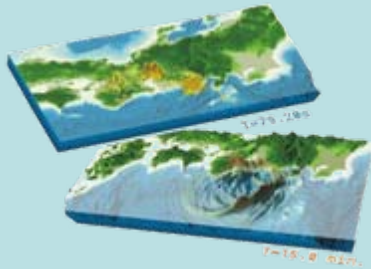


集中豪雨や局地的大雨の予測

データ同化技術やアンサンブル予報技術を領域雲解像モデルに適用し、集中豪雨等の力学的直前予測や定量的確率予測の可能性を実証する

- ・領域雲解像モデルにデータ同化技術を適用し、集中豪雨等の再現予測実験を行う。
- ・雲解像アンサンブル解析予測システムを開発し、その精度を検証する。
- ・超高解像度数値実験に基づいて、雲解像モデルの改良や顕著現象の機構解明を行う。

## 地震の予測精度の高度化

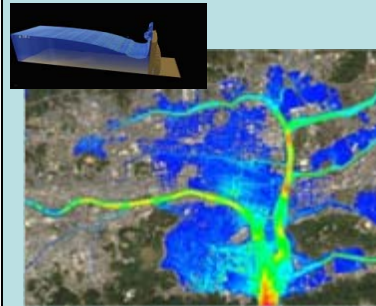


地震波伝播計算と津波発生伝播の連成シミュレーション

震源モデルと地下構造モデルの分解能を現行の数倍に高め、数Hzまでの高周波数地震動を含む広帯域の地震動評価を行う

- ・地震の揺れのシミュレーションを行い、巨大地震発生による強震動と津波の発生予測精度を格段に向上させる。
- ・これらの結果は、多様な建築物の被害予測と耐震設計のための入力地震動として活用される。

## 津波の予測精度の高度化

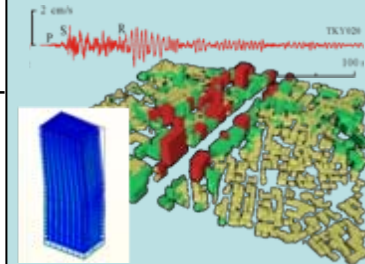


津波被害予測のシミュレーション

複合的な影響(漂流物・土砂移動・海面変動など)を考慮した津波の被害予測を行い、津波被害軽減対策の基礎データを作成する

- ・東日本大震災の津波挙動および被災状況を考慮し、津波シミュレーションを詳細化する。
- ・リアルタイムの観測データとの融合により、津波ハザード予測法を高精度化し、被害予測を行う。

## 都市全域の地震等自然災害のシミュレーション



地震による都市全構造物被害予測と構造物の損壊シミュレーション

地震・津波による都市複合災害や都市内全構造物の被害を考慮した避難シミュレーションを行い、その結果を反映させた地震ハザードマップの基盤を構築する

- ・高精度の構造物の震動応答モデルを構築し、都市全体の構造物の被害シミュレーションを行う。また、避難行動の予測シミュレーションを行う。
- ・都市の損傷、避難の予測を行う。これにより、想定される地震・津波に応じた新たなハザードマップ作成に貢献する。

# 戦略プログラム 各分野の研究開発課題(4/5)

## 分野4:次世代ものづくり(戦略機関:東大生産研(JAXA、JAEA))

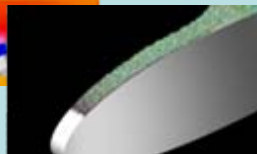
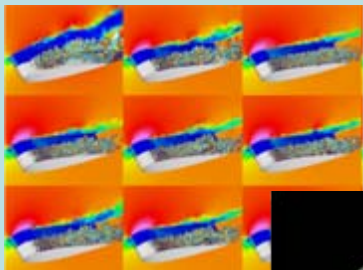
|               | 課題名   | 研究の概要  | 達成目標と達成時期   |
|---------------|---|--|---|
| プロダクトイノベーション  | <p>輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化の実現</p> <p>研究代表者:<br/>藤井孝蔵(JAXA)</p>            | <p>マイクロデバイスを有する非定常乱流場を解析する高解像度基盤ソフトウェアを開発し、幅広いレイノルズ数(10<sup>4</sup>から10<sup>6</sup>)の大規模シミュレーションを進め、輸送機・流体機器における流体制御マイクロデバイスの動的流れ制御メカニズムを明らかにする。これにより、輸送機・流体機器に「流体制御マイクロデバイスによる流体機器設計」という新たな設計概念の導入を目指す。</p> | <p>平成27年度末までに、高速流体フィードバック制御機構を組み込んだシミュレータを完成させ、実際の製品開発に必要な基盤ソフト・知的基盤として整備する。また、流体制御マイクロデバイスが、輸送機器・流体機器における格段の性能向上や低騒音化に有効であることを実証する。</p>  |
|               | <p>次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発</p> <p>研究代表者:<br/>大野隆央(物材機構)</p> | <p>第一原理電子状態計算シミュレーションを高精度化し、カーボン系ナノ材料による次世代配線プロセス設計解析、カーボン系ナノ構造デバイスの素子特性解析を実施し、従来の素材が持たない新しい機能を持つ炭素材料を用いたデバイスの設計を可能とする。これにより、炭素材料を利用した高性能・低消費電力半導体デバイスやエネルギー変換デバイスの開発に貢献する。</p>                              | <p>平成27年度までに、第一原理電子構造解析ツールから分子動力学法、モデリング、可視化までのツール群を統合したシミュレーション環境を構築し、カーボン系ナノ構造のプロセス・物性に関する原子レベルの知見の獲得と理解、及びチャンネル材料、配線材料としての最適化に関する知見等を獲得するとともに、新しい炭素材料の設計指針の獲得、素子特性評価手法を確立する。</p>               |
| プロセスイノベーション   | <p>乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発</p> <p>研究代表者:<br/>加藤千幸(東大生産研)</p>                | <p>乱流のシミュレーションを高精度化・大規模化し、自動車、ターボ機械、燃焼・ガス化装置などを対象に高空間解像度のシミュレーションを行うことにより、次世代流体設計システムの研究開発及びその実証を行う。これにより、流体関連機器の設計・開発プロセスの大幅な高速化とコストダウンに貢献する。</p>   | <p>平成27年度末までに、最大で1兆点規模の計算格子を用いて、複雑な形状を有する機器に対してレイノルズ数10<sup>6</sup>オーダー以下で乱流の直接計算を実現し、このような流れに対し、従来の風洞試験やループ法試験と同程度以上の精度で製品の性能や信頼性を予測する。</p>  |
|               | <p>多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発</p> <p>研究代表者:<br/>大山聖(JAXA)</p>                    | <p>大規模設計最適化問題のための多目的設計探査フレームワークを開発する。製品の設計において頻繁に直面する多くの設計目的(性能、重量、コスト、信頼性など)間のトレードオフの関係を明らかにして、全体を最適化する手法を開発するとともに、得られた最適解から設計情報を効率的に抽出する新しいデータマイニング手法を開発する。企業との共同研究によりその有効性を実証することで設計期間の大幅な短縮を目指す。</p>     | <p>平成27年度末までに、大規模設計最適化問題のための高効率多目的設計探査フレームワークを開発・実証し、製品開発プロセスにおいて、新しく開発したフレームワークによる高性能化かつ高信頼性を有する製品の設計手法を確立する。また、現実の設計最適化問題に多目的設計探査フレームワークを適用し、従来設計よりも優れた設計候補を発見し、設計問題に関する有益な知見を抽出できることを実証する。</p> |
| 社会の構築<br>安全安心 | <p>原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発</p> <p>研究代表者:<br/>山田知典(JAEA)</p>         | <p>大型プラントの耐震シミュレーションを高精度化し、施設全体を丸ごとシミュレーションすることにより、地震時の大型プラントシステムの安全性を高精度に評価する。これにより、安全面やコスト面において国際的に競争力の高い大型プラントの実現に貢献する</p>  | <p>平成27年度末までに、100億自由度規模で大型プラントの丸ごとシミュレーションを行い、プラント内における大きな応力が発生する箇所、及びその分布などに基づき、プラント全体での俯瞰的な耐震裕度評価とプラント各部ごとの詳細な評価を可能とする。</p>   |



# 「京」によって期待される主な成果(4/5)

## 輸送機器・流体機器の流体制御による

### 革新的な高効率化・低騒音化の実現

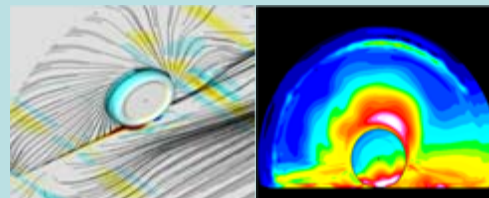


プラズマアクチュエータによる翼の剥離制御に関する数値シミュレーション

解析時間の短縮(1年 → 1日程度)により  
革新的アイデアの検証が可能になる

- ・マイクロデバイスを有する非定常乱流場解析用の高解像度基盤ソフトウェアを開発し、輸送機・流体機器における流体制御マイクロデバイスの動的流れ制御メカニズムを明らかにする。
- ・輸送機・流体機器の設計に、これまでの形状工夫ではなく、「流体制御マイクロデバイスによる」設計という新たな概念を創造する。

## 多目的設計探査による設計手法の革新



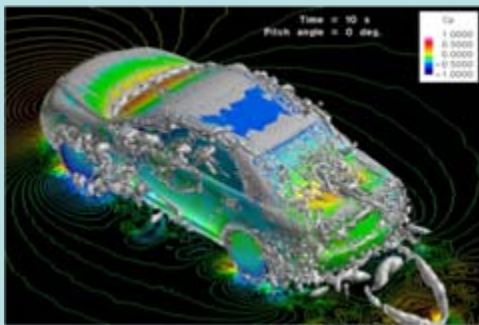
↑空力 ↑音圧

空力特性と騒音の多目的設計

設計最適化問題解析の可能性が小規模から大規模となることで  
従来より優れた設計候補を発見する

- ・製品の設計において頻繁に直面する多くの設計目的(性能、重量、コスト、信頼性など)間のトレードオフの関係を明らかにして、全体を最適化する手法を開発する。さらに、得られた最適解から設計情報を効率的に抽出する新しい手法を研究開発する。
- ・企業との共同研究により本研究開発の有効性を実証することで、設計期間の大幅短縮を目指す。

## 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの実現

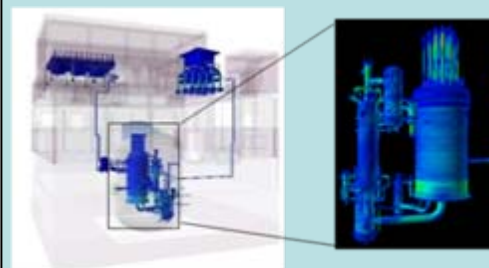


自動車用空力設計システム

シミュレーションの高精度化(格子:1,000万 → 1,000億)  
により実機検証が大幅に削減

- ・乱流のシミュレーションを高精度化・大規模化し、自動車、ターボ機械、燃焼・ガス化装置などを対象に高空間解像度のシミュレーションを行うことにより、次世代流体設計システムの研究開発及びその実証を行う。
- ・流体関連機器の設計・開発プロセスの大幅な高速化とコストダウンに貢献する。

## 大型プラントの次世代耐震シミュレーションの実現



大型プラントの丸ごとシミュレーション

プラントの丸ごとシミュレーション(100億自由度規模)により、プラント全体での俯瞰的な耐震裕度評価とプラント各部の詳細な評価を可能とする

- ・大型プラントの施設全体を丸ごとシミュレーションすることにより、地震時の大型プラントシステムの安全性を高精度に評価する。
- ・安全面やコスト面において国際的に競争力の高い大型プラントの実現に貢献する。

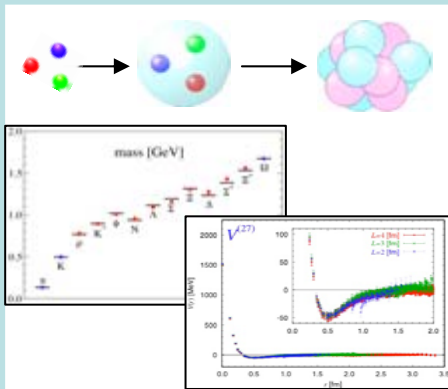
# HPCI戦略プログラム 各分野の研究開発課題(5/5)

## 分野5:物質と宇宙の起源と構造(戦略機関:筑波大(高エネ研、国立天文台))

| 課題名  | 研究の概要  | 達成目標と達成時期  |
|--|--|--|
| 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定<br>研究代表者:<br>蔵増嘉伸(筑波大)   | 格子量子色力学(QCD)の高精度シミュレーションにより、クォークから核子、さらに核子から多種の原子核を構成する「強い力」の基礎理論を検証する。それに基づいて陽子などクォーク3個からなる複合粒子(バリオン)間に働く有効相互作用を決定する。これにより、新粒子の存在や中性子星の上限質量の信頼できる予言への貢献が期待される。                                  | 平成27年度末には、格子QCDシミュレーションの計算精度を従来の10%台より1桁引き上げる。これにより、精密なクォーク質量の決定し、「強い力」の基礎理論を検証する。さらに、バリオン間力の精密決定や軽い原子核の束縛エネルギー計算を行う。  |
| 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用<br>研究代表者:<br>大塚孝治(東大)       | 酸素位までの質量のアイソトープについては、第一原理計算を用い、より重い原子核については、QCDから得られる有効核力を用いた手法を用い、原子核の量子多体シミュレーションを実施し、それぞれの原子核をこれまでにない精度で計算する。その結果から、実験的に未知なエキゾチック原子核の存在限界・構造・反応を解明し、予言する。これにより、学術的・社会的に重要な原子核の計算への貢献が期待される。   | 平成27年度末には、殻模型でのエネルギー固有値計算をすべき行列の次元が拡大され、計算可能な原子核の範囲を質量数70領域から質量数120領域まで引き上げる。そのような大規模計算により、セシウム・ヨウ素等の天然には存在しないアイソトープの定量的な知見を得て、中性子過剰核種の理解により重元素の起源を解明するとともに、素粒子物理の重要課題であるニュートリノ質量決定に必要な係数や放射性廃棄物処理の知見を得る。                            |
| 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明<br>研究代表者:<br>柴田大(京大)        | ニュートリノ加熱機構に関する様々な観点を考慮しながら、高精度な一般相対論的(磁気、非磁気)流体計算及びニュートリノ輻射輸送計算によって、これまで再現されていない重力崩壊型超新星爆発及びブラックホールの誕生過程を解析する。特に、ニュートリノ加熱機構がもたらす爆発への寄与を定量的に評価する。これにより、ブラックホールや中性子星の誕生過程、ガンマ線バースト機構の解明への貢献が期待される。 | 平成27年度末には、従来10万程度であった計算格子数を1000万程度に引き上げ、また計算の空間次元を上げることで、全物理素過程を考慮した超新星爆発シミュレーションを世界で初めて空間的対称性を仮定せずに実行し、超新星爆発に対するニュートリノ加熱機構の寄与に関する知見を得る。   |
| ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第一世代天体形成<br>研究代表者:<br>牧野淳一郎(東工大) | ダークマター構造形成シミュレーション、銀河形成シミュレーションの計算コードを開発し、それらを使って大規模数値シミュレーションを実現する。その結果から、第一世代天体形成、銀河形成の過程を明らかにする。これにより、宇宙の構造形成の統一的理解への貢献が期待される。  | 平成27年度末には、ダークマター構造形成について、従来の計算(粒子数で $2048^3$ 、最小質量で $10^5 \times$ 太陽質量)に比べて粒子数、最小質量でそれぞれ2ないし3桁高精度のシミュレーションを実行することで、世界で初めて最小質量から銀河団スケールまで適用可能な理論モデルを構築し、観測可能性について予言をする。1つの星から中心ブラックホール・銀河全体までをシームレスにつなぐ理論シミュレーションを実現し、銀河形成の過程を明らかにする。 |

# 「京」によって期待される主な成果(5/5)

## 格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定

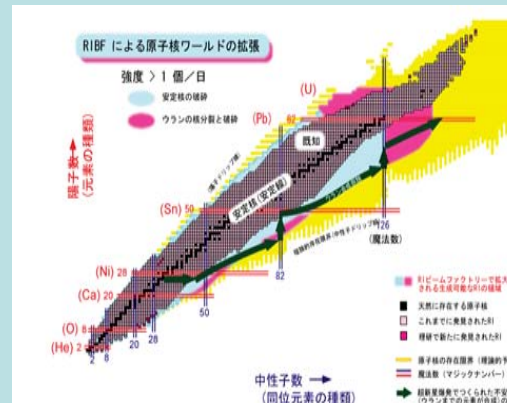


ハドロン質量とハドロン間ポテンシャル

- 高精度な格子量子色力学(QCD)シミュレーションで、クォークや核子を結びつける「強い力」の基礎理論を検証し、クォーク3個からなる陽子などの複合粒子(バリオン)の間に働く有効相互作用を決定する。
- 新粒子の存在や中性子星の上限質量の信頼できる予測に貢献する。

シミュレーションの計算精度を10%レベルから数%に向上させることで基礎理論を検証し、バリオン間有効相互作用を決定する。

## 大規模量子多体計算による核物性解明とその応用

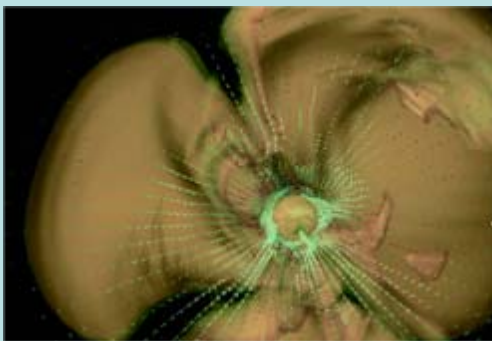


エキゾチック原子核の存在範囲

- 第一原理計算や格子QCDから得られる有効核力を用いた手法を用いた原子核の量子多体シミュレーションにより、原子核の状態を従来以上の精度で計算する。
- 実験的に未知なエキゾチック原子核の存在限界・構造・反応を解明し、予測し、学術的・社会的に重要な原子核の計算に貢献する。

計算可能な原子核の質量数を70領域から120領域へ拡大することで、放射性アイソトープ等の特性を予測可能となる。

## 超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明



超新星爆発の3次元シミュレーション

- ニュートリノ加熱機構を様々な考慮し、高精度な一般相対論的流体計算及びニュートリノ輻射輸送計算で、従来成功していない重力崩壊型超新星爆発及びブラックホール誕生過程を解析、評価する。
- ブラックホールや中性子星の誕生、ガンマ線バースト機構解明に貢献する。

計算格子数を10万程度から1,000万程度に、空間次元を2次元から3次元にすることにより、超新星爆発の詳細を明らかにできる。

## ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第一世代天体形成



銀河形成シミュレーション

- ダークマター構造形成シミュレーション、銀河形成シミュレーションの計算コードを開発し、大規模数値シミュレーションにより、第一世代天体形成、銀河形成の過程を明らかにする。
- 宇宙の構造形成の統一的理解に貢献する。

粒子数を約80億から約8,000億~8兆に、精度を太陽質量の10万倍から太陽質量の100~1,000倍にすることで、銀河形成の過程を明らかにできる。