

# “ポスト「京」スーパーコンピュータとポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題” 記者勉強会

スパコン「京」がひらく社会と科学

シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」

2016年1月29日  
よみうり大手町小ホール

スパコン「京」がひらく社会と科学シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」記者勉強会 2016年1月29日

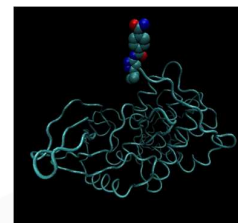
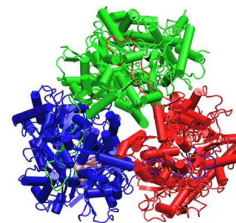
## 重点課題① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

### ● 重点課題① 概要： **ポスト「京」による創薬イノベーションを目指す**

- **長時間の分子シミュレーション技術の開発** ⇒ 病気の原因分子と薬の候補物質が作用する全ての様子が予測できるようになり、より効果的な新薬の開発が可能になる。
- **大規模分子システムのシミュレーション技術の開発** ⇒ 細胞内環境などの多数の分子からなる生体分子システムの創薬シミュレーションを実現し、より安全な医薬品開発を可能にする。
- **ポスト「京」を用いた革新的創薬計算基盤の構築** ⇒ 製薬会社等の利用による産業促進

### ● **ポスト「京」で出来るようになる事**

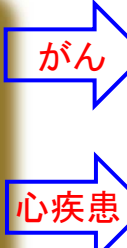
- 科学的な観点：**構造生命科学の革新**－ポスト「京」によりミリ秒のタンパク質やDNAの動きが解析できるようになる。  
（「京」ではマイクロ秒であった）
- 社会的な観点：**医薬品開発の革新**－ポスト「京」により、がん、認知症、精神疾患、希少疾患など今まで困難であった薬の開発に新たな道を拓く。さらに、薬の副作用を予測したり、個人個人の体質に最適な薬を選択することが可能になる。
- 経済的な観点：**新薬開発による日本経済の牽引**－医薬品開発の期間短縮（約2年間短縮）と費用削減（一品目当たり約200億円削減）



## 重点課題② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

### ポスト「京」の社会的背景と目指す成果

超高齢化社会が迫る中、加齢とともに生じる様々な病気



進化する複雑なゲノム異常情報との勝負  
生体分子から心機能に至る病態の一貫理解が勝負



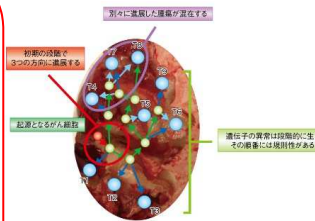
ポスト「京」とビッグデータで、個々人に対する的確ながんの個別化予防・治療戦略を創出  
ポスト「京」での心臓シミュレーションで心臓疾患の創薬・治療の中心的戦略技術を創出

### 大量シーケンスによるがんの個性と時間的・空間的多様性・起源の解明

#### ビッグデータ解析

「個々人のがん」を捉えるには全ゲノム解析に基づき、1%以下の頻度の変異を網羅的に見いだすことが必須であり、50のがん腫では「京」では5000日を要する。ポスト「京」では、700検体(1検体データ5TB)/日のデータ解析を達成し、個々人のがんの起源とその多様性を捉え、がん治療戦略、がんの予防法と超早期発見にイノベーションを起こし、副作用に優しく個人ごとに効き目のよい薬を創出する戦略を作る。

#### 低悪性度のグリオーマに高い多様性を発見

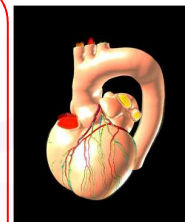


世界最大規模で網羅的に遺伝子変異を解析することにより、低悪性度のグリオーマにおける遺伝子変異の全体像を解明(小川等提供: Nature Genetics 2015)

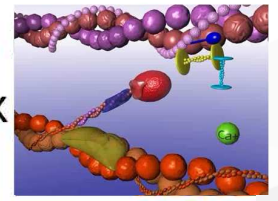
#### 超大規模物理シミュレーション

### 心臓シミュレーションと分子シミュレーションの融合

心臓シミュレータUT-Heartと分子シミュレータCafeMolを融合させることにより、マイクロ・マクロ間の相互作用から病態が進行する心不全の解明と最適治療を可能とする世界でも例を見ないマルチスケール心臓シミュレーションを実現する。



UT-Heart



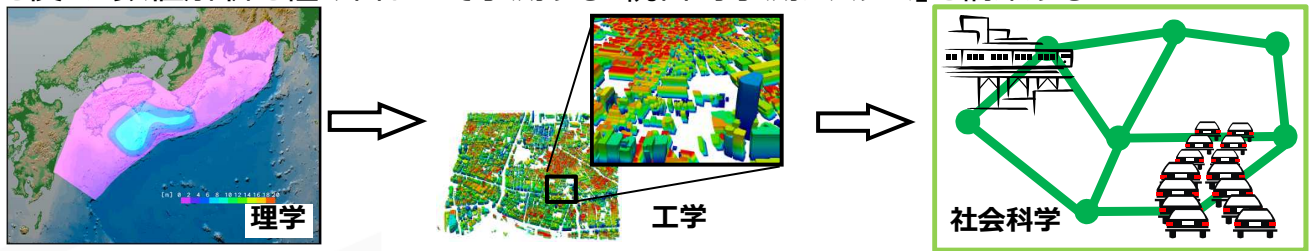
CafeMol

ポスト「京」に相応しい計算科学のマイルストーンを築くと共に、医療への実用化を展開する。

## 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

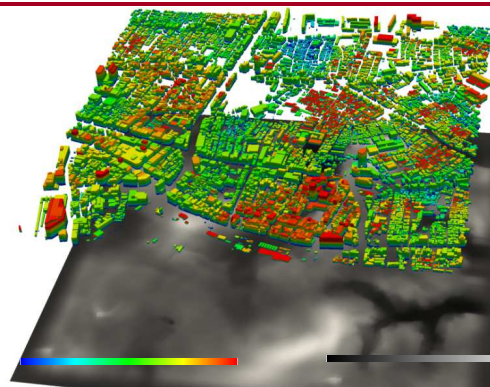
### 重点課題③ 概要

地震・津波が引き起こす都市の災害・被害の過程と避難等の被害対応の過程を、精緻な都市モデルを使った数値解析を組み合わせる「統合的予測システム」を構築する。



### ポスト「京」で出来るようになる事

- 科学的な観点：地震・津波の複合災害を、超大規模都市モデルを使ったシミュレーションで予測
- 社会・経済的な観点：首都直下地震・南海トラフ地震を対象に、より合理的な予測を行うことで防災・減災に貢献



Maximum relative displacement of structures (m) Horizontal magnitude of S1 at surface (cm/s)

「京」で開発した都市丸ごとの地震シミュレーションの例。東京を対象に、精緻な都市モデルを使って地盤と建物の揺れを計算。SC14とSC15のゴードンベル賞ファイナリストに選出され、国際的にも高く評価。



# 重点課題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

## ● 重点課題④概要

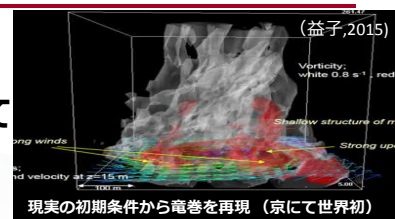
「予報をしてから現象が発生するまでの時間（リードタイム）をいかに長くできるか」その実現可能性を追求します。以下の3つの研究テーマを推進します。

- 1) 豪雨や局所的大雨を対象に、その発生・発達など現象の寿命を決定する物理的要因を解明することにより、予測精度の向上とより長いリードタイムを確保し、さらに突風や土石流の被害に直結する要因を明らかにする研究開発を行います。
- 2) 季節内振動の大規模熱帯擾乱によりモジュレートされる台風発生メカニズムを解明することにより、台風の長期予測精度を向上させる研究開発を行います。
- 3) 黒色炭素粒子エアロゾルや温室効果ガス、PM2.5等の大気中の化学的動態特性を明らかにすることにより、エアロゾルの気候への影響を明らかにする研究開発を行います。

## ● ポスト「京」で出来るようになる事

● ひまわり8号のデータなどの観測ビッグデータを天気予測に初めて使用してさらなる予測精度向上とより長いリードタイムを提示します。

- ①科学的観点：豪雨や局所的大雨の寿命を決める要因や風被害をもたらす要因を明らかにする。
- ②社会的観点：きめ細かい情報による被害、災害の減少、避難対策の選択肢を広げたり、より万端な備えへ。
- ③経済的観点：経済活動麻痺の回避、物流や保険業界、計画生産、計画農業等への貢献。

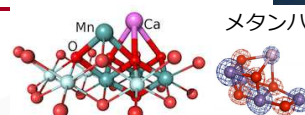
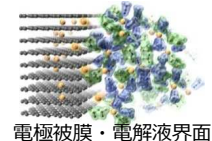
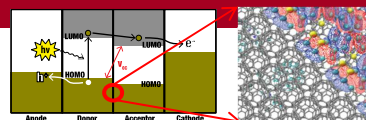


スパコン「京」がひらく社会と科学シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」記者勉強会 2016年1月29日

# 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

● 重点課題⑤ 概要：ポスト「京」を駆使することにより、太陽光、電気や化学エネルギーにおける複雑かつ複合的な分子・物質過程に対する全系シミュレーションを行い、実験研究者・産業界と連携して、エネルギー新規基盤技術を確立する。

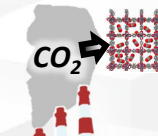
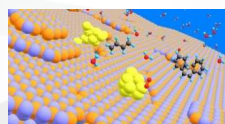
- サブ課題A：新エネルギー源の創出・確保－太陽光エネルギー：光触媒による水分解反応の解明や高効率太陽電池の実現に向けたシミュレータにより新エネルギー源の創出を目指す。
- サブ課題B：エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー：二次電池の充放電曲線や燃料電池の電圧曲線を予測できる手法を確立し、信頼性の向上に貢献する。
- サブ課題C：エネルギー・資源の有効利用－化学エネルギー：メタンやCO<sub>2</sub>の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発する。



大阪市大・神谷信夫教授, CALTEC・Agapie教授



IMPACT  
「しなやかなタフポリマー」との連携。コンセプトカー



## ● ポスト「京」で出来るようになる事

- a)天然と人工光合成のリアルなスピン状態計算や反応機構解析
- b)有機系太陽電池における現実系界面シミュレーション
- c)1-10億原子系のMD計算による高分子電解質膜設計
- d)電極、電解質をカバーした蓄電池反応統合シミュレーション
- e)ハイドレートの生成過程とセミクラスレートの平衡過程研究
- f)千原子の不均一触媒表面反応経路の探索
- g)CO<sub>2</sub>の化学反応吸着法最適化と固体吸着材の設計

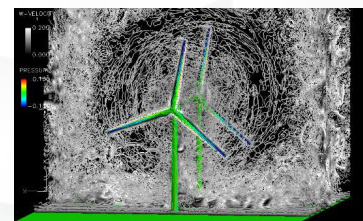
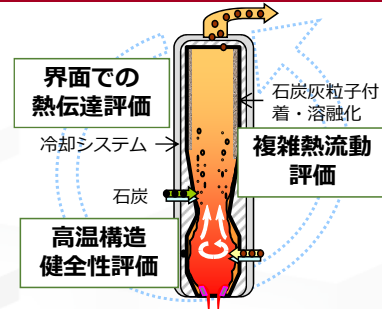
# 重点課題⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

## ● 重点課題⑥ 概要

- 超高効率・低環境負荷の革新的クリーンエネルギーシステムとして、CO<sub>2</sub>分離・回収・貯留を導入する石炭ガス化炉、洋上ウインドファーム、核融合炉、燃料電池を取り上げる。それらの実用化の鍵を握る複雑非線形物理現象の第一原理的大規模超精密解析を、ポスト「京」の計算性能を駆使し、短時間で繰り返し行うことを実現し、実機環境(50~100万kWの石炭ガス化炉、数10基の洋上ウインドファーム、ITER等)での最適な設計条件や稼働条件を効率的に探索し、実用化のスピードアップに貢献する。

## ● ポスト「京」で出来るようになる事

- **石炭ガス化炉** ①科学的な観点：世界初のガス化・粒子分散・燃焼・灰溶融・壁面付着の乱流燃焼解析と炉構造・冷却の連成解析 → 出口温度予測誤差10%未満、灰分量予測誤差20% ②社会的な観点：豊富な化石燃料を活用しつつCO<sub>2</sub>及び環境汚染物質のゼロエミッションの実現 ③経済的な観点：5年で400万kW級(1400億円)のプラント売り上げ5基上積。5年で2850万トンのCO<sub>2</sub>削減効果、81億円の燃料費削減効果
- **洋上ウインドファーム** ①科学的な観点：風車後流・大気境界層の変動風が発電性能や翼荷重に及ぼす影響を考慮した世界初の設計・疲労寿命解析システム → ウインドファーム性能予測誤差10%未満 ②社会的・経済的な観点：ウインドファームの開発・設計を支援し、日本の風力発電産業の国際競争力強化に貢献



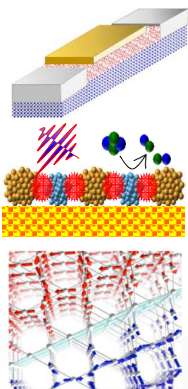
7 スパコン「京」がひらく社会と科学シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」記者勉強会 2016年1月29日

# 重点課題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

ミクロな基礎方程式を用いた**デバイスと材料**の大規模シミュレーション  
【実施機関：東京大学物性研究所（代表）、他13機関】

大規模系電子状態計算を基幹技術とした **マルチスケール手法・インフォマティクス**を用いた材料開発



(a)高機能半導体デバイス

(b)光・電子融合デバイス

(c)超伝導・新機能デバイス材料

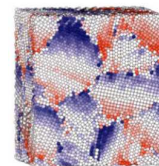
(d)高性能永久磁石・磁性材料

(e)高信頼性構造材料

(f)次世代機能性化学品

(g)共通基盤シミュレーション手法

構造シミュレーション手法や数理科学的手法の開発

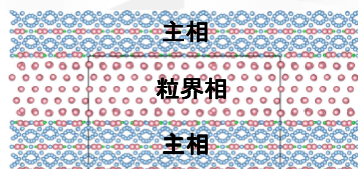
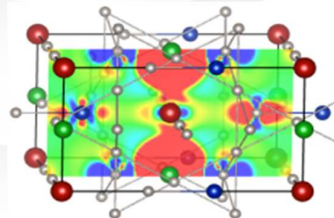


## ● ポスト「京」で出来るようになる事

### 磁石材料

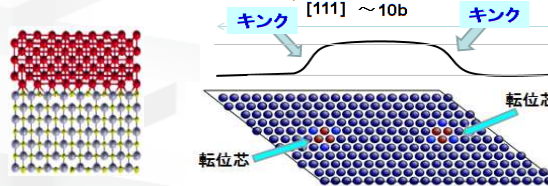
◆電子論とデータ科学手法を利用した磁石材料探索

◆磁石の主相・粒界相界面の電子状態・構造計算



### 構造材料

◆高温高圧下を含めた構造材料微細組織の安定構造や挙動のマルチスケール計算

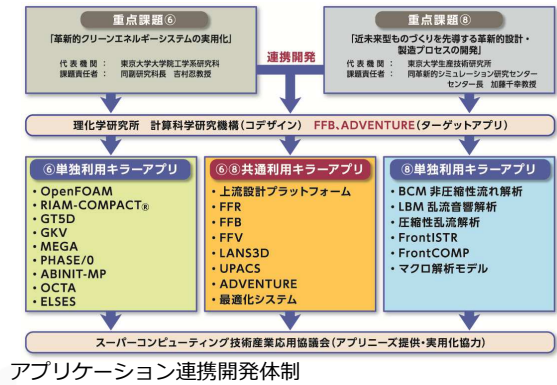


8 スパコン「京」がひらく社会と科学シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」記者勉強会 2016年1月29日



# 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

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、及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します。



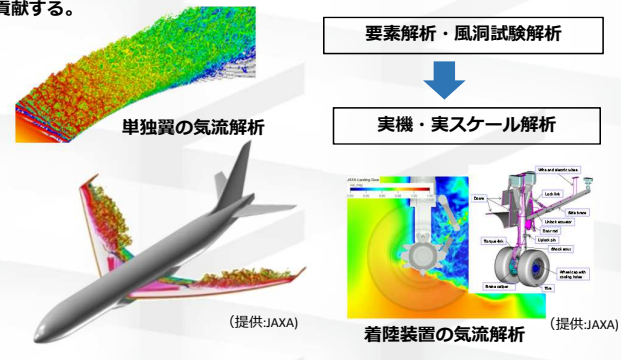
## 航空機の全機・非定常解析

## 大規模超高精度解析

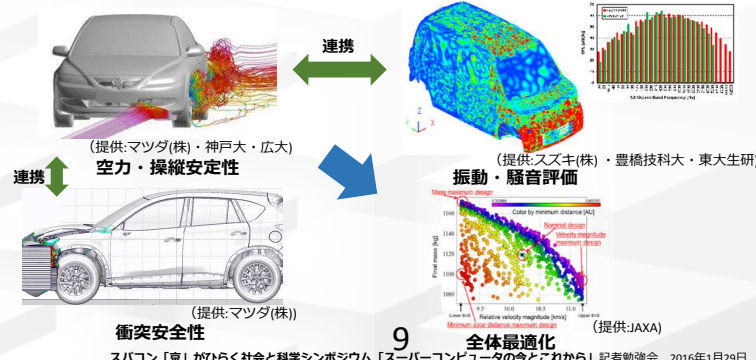
## 自動車CAE統合設計システム

## 連携・超多数ケース解析

単独翼の風洞試験など要素レベルの高精度解析は京で実現した。ポスト京では、実機・実スケールの超高精度解析を実施し、航空機の燃費改善や安全性の向上に貢献する。



「京」で実現した個別の超高精細シミュレーションを相互連携し、1万ケースにも上るケーススタディを設計上流工程で実施し、最適設計を実現する。



# 重点課題⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明

## 重点課題⑨ 概要

- 素粒子・原子核・宇宙分野にまたがる物質創成史の解明を目指します。素粒子から宇宙まで極端にスケールが異なる現象の精密シミュレーションを実現させ、J-PARC、KAGRA、TMTといった大型実験・観測装置のデータと組み合わせ、宇宙進化の謎に挑みます。
- 素粒子標準模型の検証、超弦理論の探求、素粒子間相互作用や重原子核構造の決定、爆発的天体現象の解明、宇宙進化の解明などを可能にするコード開発を行います。

## ● ポスト「京」で出来るようになる事

- 小林益川理論を検証し、素粒子標準模型を超える新しい物理法則の手がかりを見つけます。超弦理論シミュレーションによって宇宙開闢の謎に迫ります。
- 重元素合成や核変換反応などの解明を目指します。素粒子反応、原子核の構造と反応、超新星爆発など天体現象をシミュレーションでつなぎます。
- 世界最高分解能の天体疑似カタログを作成し、ニュートリノの分布を計算します。すばる望遠鏡などの観測データと融合したビッグデータ宇宙論を展開します。

