

# 本事業の位置付け

- 【政策目標】 基礎研究の充実及び研究の推進のための環境整備
- 【施策目標】 科学技術振興のための基盤の強化
- 【達成目標】 平成24年9月末の共用開始を目指し、スーパーコンピュータ「京」を中核とするHPCIを構築するとともに利用体制を整備する。また共用開始後、画期的な研究成果の創出に向けた利用が図られる。



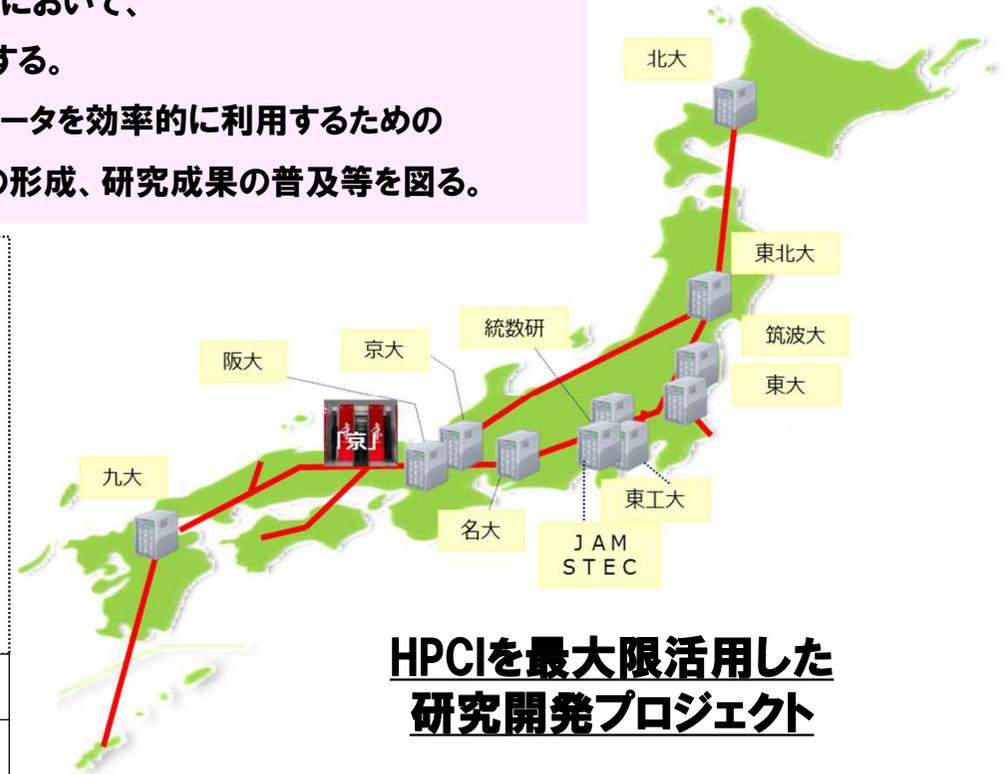
## HPCI戦略プログラム

【目的】 HPCI(理化学研究所の「京」と、国内11機関のスーパーコンピュータで構成されるハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)を最大限活用して、重点的・戦略的に取り組むべき研究分野で画期的な成果を創出することを目的とする。

### 【事業概要】

社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる5つの「戦略分野」において、

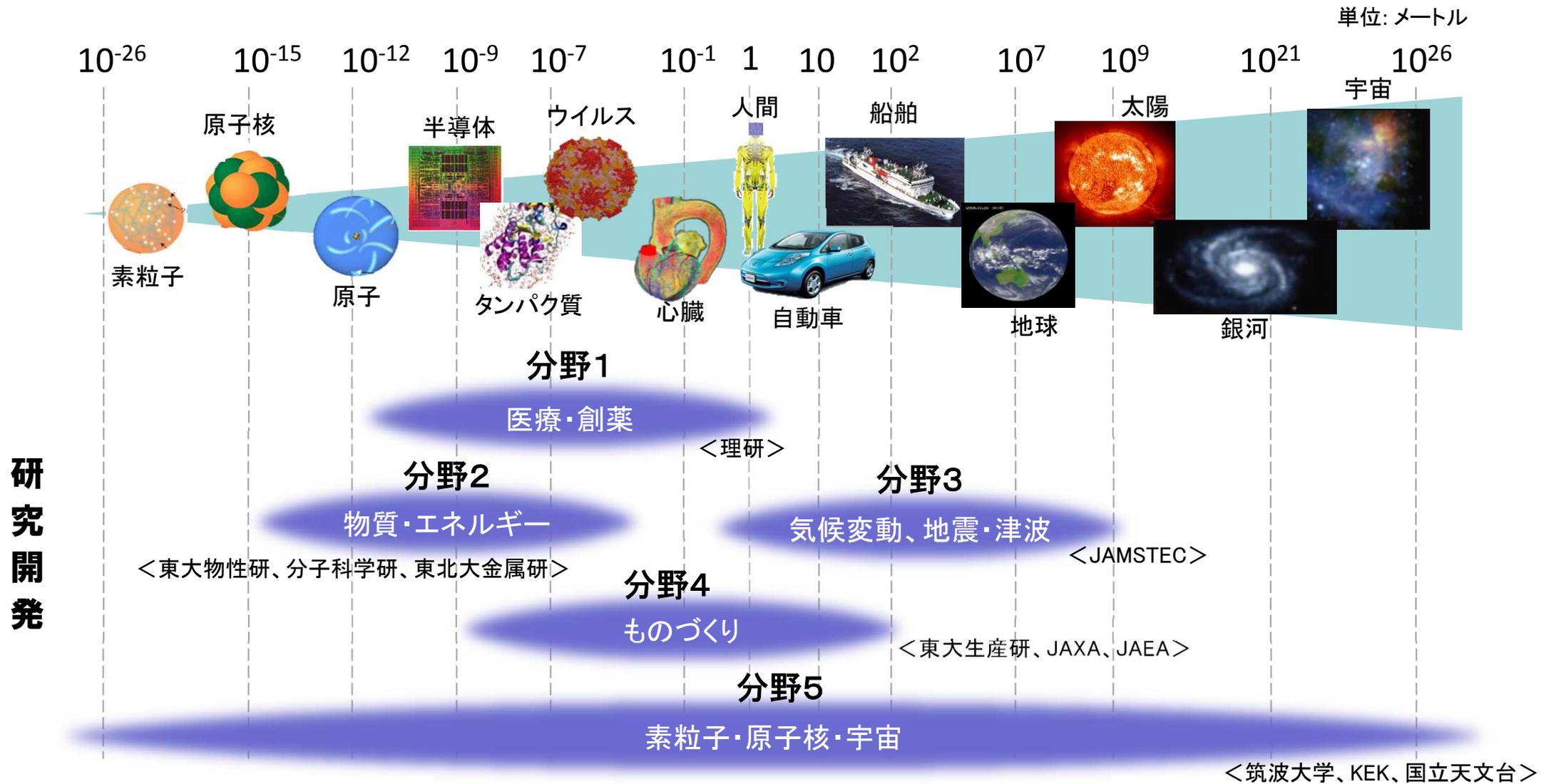
- a. 達成すべき「戦略目標」を定め、その目標に沿った研究開発を推進する。
- b. 我が国の計算科学技術推進体制を構築するため、スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメントや研究支援体制の確立、人材育成と人的ネットワークの形成、研究成果の普及等を図る。



### HPCIを最大限活用した研究開発プロジェクト

アウトカム	【定量的な成果目標】					
	a. 各戦略分野の「戦略目標」を具体化した「研究開発目標」(計25目標)を達成する。					
予算	b. 各戦略分野における計算科学技術推進体制を構築する。					
	【成果指標】					
	a. 「研究開発目標」の達成数					
	b. 計算科学技術推進体制の構築状況					
	H23	H24	H25	H26	H27	合計
	25億	25億 (他、補正5億)	26億	22億	20億	123億 (補正込み)

# 戦略分野での研究開発と体制構築



研究  
開発

体制  
構築

## ○研究支援

・アプリケーションの利用支援 等

## ○研究成果の普及

・開発したアプリケーションの公開 等

## ○人材育成と人的ネットワークの形成

・教育プログラムや研究会の開催 等

## ○スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメント

・複数機関による効率的利用と最適配分 等

# 25の研究開発目標

## 戦略目標

## 研究開発目標

### 【分野1】

大規模シミュレーションとデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、そして薬剤・医療のデザインの実現

- ① 細胞内の複雑な分子シミュレーションにより、細胞内のタンパク質の挙動を理解
- ② 創薬標的タンパク質と薬剤化合物との結合を高精度に予測し、計算創薬を確立
- ③ 分子から臓器までの統合シミュレーションにより、疾患を解明
- ④ ゲノムやがん等の関連を大規模データ解析することにより、そのメカニズムを理解

### 【分野2】

計算物質科学：  
基礎科学の源流からデバイス機能とエネルギー変換を操る奔流へ

- ⑤ できるだけ高い温度で超伝導になる物質を探索するための手法開発
- ⑥ 光合成を通して光からエネルギーを得る化学反応の仕組みの解明
- ⑦ 半導体微細構造の制御で発現する電子デバイス機能の予測
- ⑧ ウイルス1個の丸ごとシミュレーションによる感染過程の理解
- ⑨ 燃料電池、リチウムイオン電池の性能向上に向けた電極上化学反応の解明
- ⑩ メタンハイドレートを効率的で安全に採掘するための基礎特性の解析
- ⑪ 鉄鋼材料に亀裂が生じる仕組みを原子レベルから解明

### 【分野3】

地球温暖化時の台風の動向の全球的予測と集中豪雨の予測実証、そして次世代型地震ハザードマップの基盤構築と津波警報の高精度化

- ⑫ 全球で雲を露わに表現するモデルにより、2週間以上先の天候予測可能性を実証
- ⑬ 雲を精緻に表現する数値予報技術を開発し、集中豪雨などの高精度な予測を実証
- ⑭ 過去の地震被害の発生要因を解析し、短周期地震動を再現するモデルを開発
- ⑮ 広域での津波の遡上を高速、高解像度で予測する手法の開発
- ⑯ 都市の全構造物の地震応答を計算する大規模シミュレーションの実現

### 【分野4】

21世紀のものづくりを抜本的に変革する計算科学技術の戦略的推進

- ⑰ 流体機器の性能を飛躍的に向上させる新しい製品概念の実証と実用可能性の検証
- ⑱ ナノ構造創製の原子レベルでの解析とデバイス開発での有効性の実証
- ⑲ 従来よりも格段に精度の高い、流れの予測を実現し、その産業上の効果を実証
- ⑳ 大規模設計問題のための設計探索手法を開発し、実際の設計における有効性を実証
- ㉑ 地震時の大型プラントや機器系統の挙動を俯瞰的かつ詳細に分析する手法を確立

### 【分野5】

宇宙の歴史における、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、計算科学的手法で統一的に理解

- ⑳ 4次元時空シミュレーションによるクォーク力学と核力の解明
- ㉑ 多粒子シミュレーションによる、核力から原子核の構造解明と核変換などへの応用
- ㉒ 超新星爆発と中性子星合体の解明
- ㉓ ダークマターの密度ゆらぎからの天体形成過程の解明

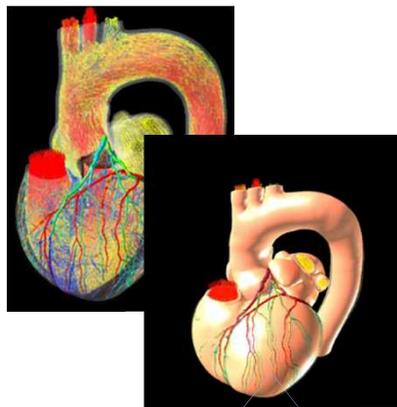
# HPCI戦略プログラムを通じた成果の例

## 目標③(分子から臓器まで通じた統合的な心臓シミュレーション)

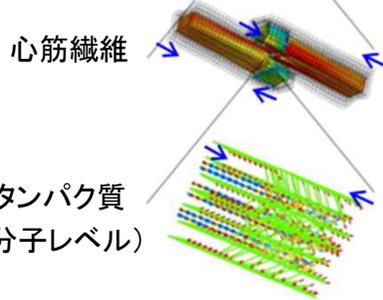
### これまで

#### 心臓シミュレーション

- 診断データをもとに、(1兆個の分子の振る舞い～心臓の鼓動までつなげる)マルチスケール・シミュレーションを実施。  
→ 患者の心臓を世界で初めてコンピュータ上に再現。



- 血流、血圧を単一スケールで個別に見るなど限定的な解析のみ。



分子レベルで心臓全体の動き(筋繊維の収縮、血流等)を解析

### この事業の成果

- ① 患者の心臓を分子レベルで解析し、肥大型心筋症の病態を明らかにした。
- ② 医療機関や製薬企業と共同で心臓シミュレーションの実用化に向けた検証を実施。
- ③ 手術手法をコンピュータ上で事前確認できることを実証。



心臓手術の「ゴッドハンド」と言われる岡山大・佐野教授とも連携。

### 今後の展開

他の難病の病態を解析

薬や治療法の開発



臨床の現場に適用  
(最適な治療法の提示)



2年後の先進医療承認を目指す

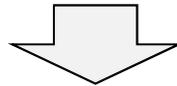
# 試行錯誤を通じた成果の例

## 目標②のうち「標的タンパク質と薬剤候補化合物の結合予測」

- がん治療のための創薬を目指して、標的タンパク質と薬剤候補化合物の結合予測を行う際も、数多くのシミュレーションと実験・前臨床試験を繰り返しながら取り組んでいる。「京」を用いることで、開発期間の短縮が可能となっている。(結合自由エネルギーの計算精度を1kcal/mol以下とする目標を達成)

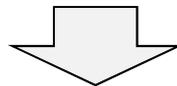
- 研究2年目(H24年度)までに、創薬応用シミュレーションにおいて、約300の薬剤候補化合物に対し、がん治療のための標的タンパク質との結合度合い(くっつきやすいかどうか)を分子レベルでシミュレーション(限られた期間でこれだけのシミュレーションを行うには「京」の性能が不可欠)。

→ 11個の薬剤候補となる化合物(特に結合しやすいもの2つ、その他9化合物)を選別。

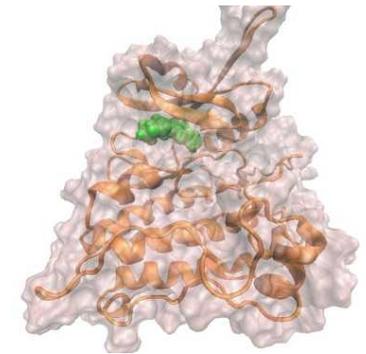


- 翌年(H25年度)までに、製薬企業の積極的協力により、数か月の期間をかけ、実験を通じて、上記11の候補化合物を合成。

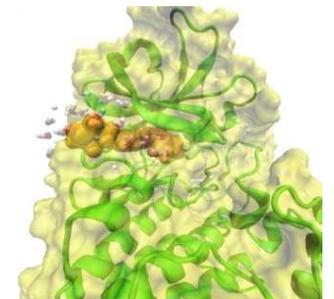
これらの化合物を用いて、前臨床試験を行ったところ、標的タンパク質の機能を止めると、副作用が生じると判明して試験を断念。検証作業を通じて、標的タンパク質の構造(形)が水中で変化することを十分に考慮する必要があったと判明。



- H26年度に、シミュレーション手法を改良して改めて多くのシミュレーションを実施した結果、別の標的タンパク質に関して、抗がん剤候補化合物1個を選定。さらにがん細胞に関する抗体医薬1個を選定。現在、前臨床試験の対象として試験中。



当初想定した標的タンパク質  
(リン酸化酵素の一種)



水中での構造変化を考慮した  
標的タンパク質

# 試行錯誤を通じた成果の例

## 目標⑱のうち「格段に精度の高い流れの予測の実現と産業上の効果実証」

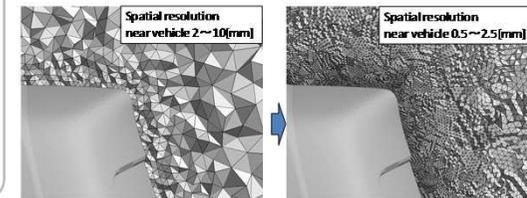
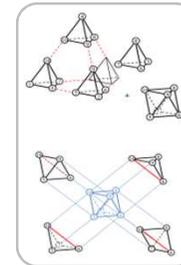
- 自動車製造で空気抵抗を1%刻みで低減することは、燃費向上に不可欠。空力測定のための風洞実験の経費削減と、更なる性能・信頼性向上には、「京」レベルのスパコンによるシミュレーションが有効であることを、企業との連携による研究を通じて実証。

- 初年度(H23年度)に、空力設計を効率化させるシステムの目標を設定。並行して、企業や研究機関に「空力設計のためのシステムプラットフォーム」への参加を呼びかけ。参加企業の負担で、風洞実験を実施。



企業とのコンソーシアムを形成

- 2・3年目を通じて、空気の流れを計算する格子数を、従来のスパコンで用いた3500万要素から23億要素に増やしてシミュレーションを実施。「京」でなければ不可能であるため、独自アプリケーションを開発(流体ソルバー(Front Flow Red HPC)に自動格子細分化機能を附加)。



自動格子細分化機能による  
超大規模格子の生成

- 企業との根気強い議論を行いつつ、超大規模格子の極めて困難な生成を実現。

- 自動車の車体上部の傾斜角を+0.5度から-12.5度まで変化させた場合の空気抵抗の増減を研究。

- 従来のスパコンの場合と異なり、「京」によるシミュレーションは風洞実験の結果と同じ。(当初目標である、風洞実験に匹敵する誤差(1~2%を達成))  
シミュレーションが実用化されれば、風洞実験の大幅削減により、将来的なコスト削減が可能。

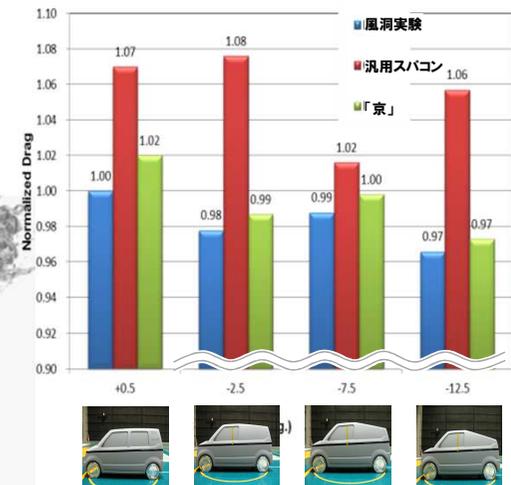
- 風洞実験をシミュレーションで代替する効果の試算例(1車種当たり)

風洞実験:約12億円 ←→ シミュレーション:3000万円

- 実験代替にとどまらず、実験が難しい横風を受けた際の車の動きをシミュレーションすることで、自動運転に向けた性能・信頼性向上にも生かせる。



シミュレーションによる空気の流れ



風洞実験と「京」の計算結果が同じ

## ① 「京」でなければできない「限界突破」

- それぞれの学問分野において、「京」でなければ得られないデータが生まれ、科学技術に関する様々な研究成果が出ている(これまでの技術的な限界(制約)を突破)。
- 特に、計算速度の高速化はもとより、研究対象に関し、従来のシミュレーションが、部分的な計算に限られたのに対し、「京」ではより高い精度で「丸ごと計算」出来るものができた(近似を減らせるため、信頼性が高い)。

### 【シミュレーションの対象例】

- ・ 半導体素子1つ丸ごと(従来は素子の1/10規模)
- ・ 小児麻痺ウイルス1個丸ごと(従来はウイルスの一部のみ)
- ・ 電池において分子と電子の動きを一緒に計算(従来は別々に計算していた)

## ② オープンイノベーションの実現

- それぞれの分野で、事業に直接に携わる研究者だけでなく、多くのステークホルダーが参画するプラットフォームが形成され、共同で成果創出を目指すオープンイノベーションの環境が創出されている。

### 【例】

- ・ 理論や実験・観測に携わる研究者
- ・ 産業界・自治体・病院の関係者
- 産業界との連携に当たっても、事業開始前の想定を上回り、個別企業との共同研究や、コンソーシアムを通じた業界全体との連携など、多様な取組が進展している。
- 同様に、想定以上に、様々な学問分野間の連携も進展。  
【例】
  - ・ 生物物理、ゲノムデータ解析、医療工学の連携
  - ・ 物性物理、分子化学、材料科学の連携
  - ・ 流体-構造連成計算を通じた連携(心臓・血流と自動車・空気)

## ③ 成果の実用化への展望

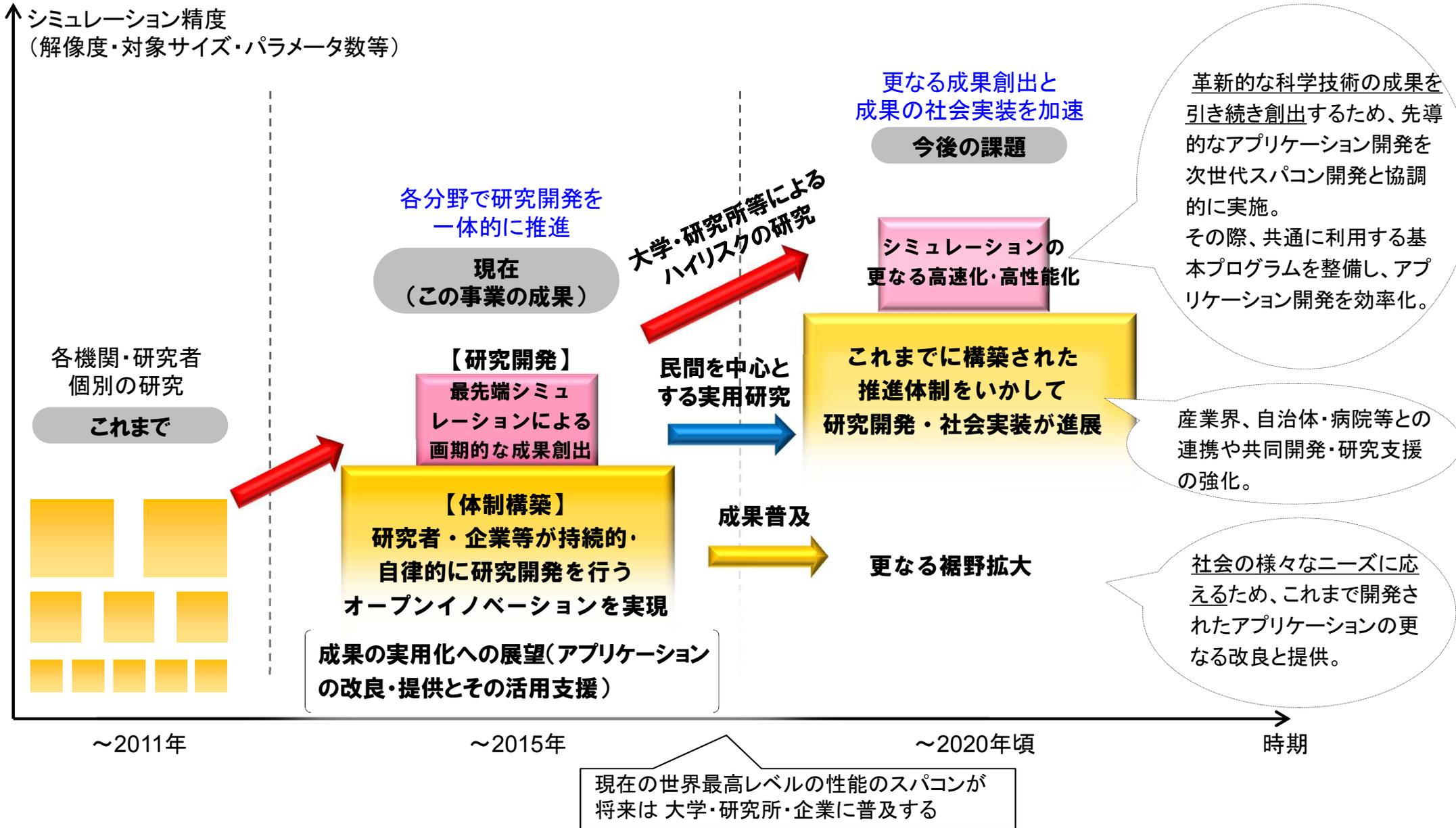
- 左の研究成果の創出とプラットフォームの形成を受けて、
  - ・ 様々な分野の産業界
  - ・ 病院や気象・防災など公的部門などへの波及が具体化しつつある。
- 成果の産業化・社会実装を通じて、経済好循環、国民の生命・身体の保護など国家的な課題の解決に向けた行程ができつつある。
- そうした中で、HPCI戦略プログラム開始後に、高速計算機のユーザーも増加し、裾野も広がっている(大学の高速計算機利用者は、1.46万人(H22)から1.62万人(H25)に増)。

# HPCI戦略プログラムの成果の例

<b>この事業による研究成果の例</b> <b>① 「京」でなければできない「限界突破」</b>	<b>これまでに構築した体制</b> <b>② オープンイノベーションの実現</b>	<b>今後の波及効果</b> <b>③ 成果の実用化への展望</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 分子レベルで心臓全体の動きを解析。 → 肥大型心筋症の病態を明らかにしたほか、心臓手術を事前に検証できることを確認。</li> <li>○ ゲノムデータをもとに網羅的にがん異常を解析。</li> <li>○ シミュレーションによる、新薬候補の選別。 → がん新薬候補として前臨床試験に到達。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 企業が実用化を進められる体制を構築 創薬コンソーシアム(当初、製薬企業11社で発足し、現在、23社に増加)や医療関係者と連携。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ <b>手術前のシミュレーションにより、術後効果を確認。</b> (心疾患による死亡者は年19万人)</li> <li>○ <b>10年以上、数百億円を要するとされる新薬開発の短縮化。</b> (がん罹患者は98万人。抗がん剤の輸入額は年5000億円)</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 電池の中の化学反応を原子レベルで解析。 → 高安全・高性能な電池材料の探索を可能にする計算手法を開発。</li> <li>○ ナノサイズ半導体デバイスの設計手法を開発。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 企業が実用化を進められる体制を構築 (企業15社と研究機関による「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」を設置)</li> <li>○ 半導体産業研究所(国内主要10社参加)で検討開始。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ <b>電池メーカーが電池材料のデファクト製品を開発。</b> (リチウムイオン電池市場は、数年後、年1兆円を超えると想定される)</li> <li>○ <b>化合物系半導体の開発。</b>(市場は、現在の年150億円が5年後、年3000億円と予測)</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 地震の揺れ、津波による浸水だけでなく、都市の建物被害まで解析。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 自治体等の防災計画策定への活用が検討できる体制を構築(自治体と連携)。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ <b>地震等の自然災害に対応した防災・減災対策の実施。</b> (南海トラフ巨大地震による経済被害は220兆円と想定)</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 走行時の自動車の空気の流れを忠実に再現。 → 自動車の風洞実験が代替可能であることを実証。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 自動車企業を中心とするコンソーシアム「空力設計のためのシステムプラットフォーム」のほか、中小企業を含む多くの企業との研究開発を進める環境を構築。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ <b>実験の代替による自動車の開発期間短縮・コストの削減。</b> (現在、国内自動車企業で年間百億円規模のコスト)</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 2つの中性子星の合体を計算で再現。 → これまでどこで合成されたか不明であった、鉄より重い元素が合成されることを確認。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 素粒子・原子核・宇宙分野を融合した研究が進められる拠点が構築。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ <b>最先端の観測装置による理論の検証。</b> (専門の教科書を書き換えるレベルの発見)</li> </ul>

# 計算科学技術の進展について

## ポスト「京」に向けた アプリケーション開発の課題



# 経緯と推進体制

経緯

平成19年度 : 文部科学省の「次世代スーパーコンピュータ作業部会(科学技術・学術審議会)」で基本的方針を検討。  
 平成20～21年度 : 「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」を計16回開催。社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる  
**5つの戦略分野を決定。**

平成21年度 : **公募を経て、実施可能性調査実施機関を決定。**

平成22年度 : 「**戦略機関**」を決定  
 研究開発目標を設定

平成23年度 : **事業開始**

平成25年度 : 中間評価

平成27・28年度 : 事後評価を実施予定

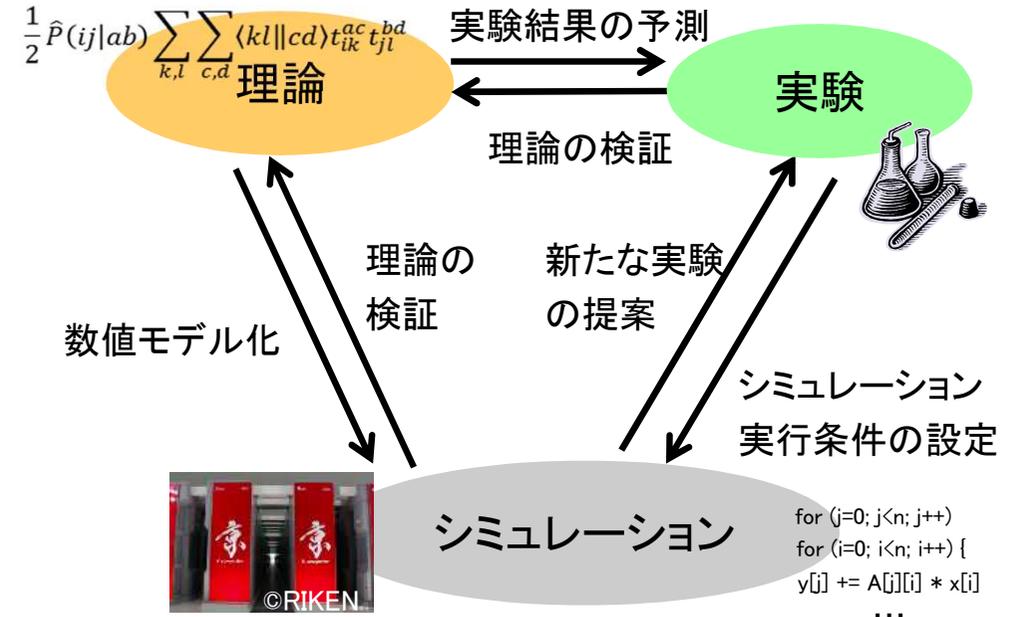
推進体制



# 参 考

## <シミュレーションとは>

- ・ 自然現象や社会現象について、理論から得られる数式を数値モデル化し、コンピュータ上で数値計算を行い、模擬的に実験を行うこと。
- ・ 理論、実験と並ぶ第3の科学的手法である。



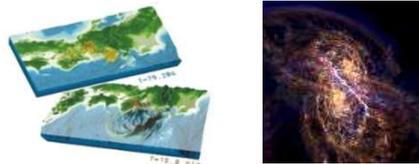
## <シミュレーションにより実現できる「限界の突破」>

### ① 実験・観測上の限界を突破する

- 物理的に実験・観測困難なもの
- 実際の実験にリスクが伴うもの
- 実験・観測にコストがかかりすぎるもの

例)

- ・ 顕微鏡で見ることのできない分子・原子レベルの材料解析
- ・ 超新星爆発の様子再現
- ・ 地震・津波の被害予測

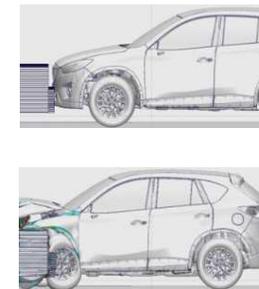


### ② コストと精度・信頼性の限界を突破する

- 実験回数・開発期間・開発コストを削減
- より精密な結果を得る

例)

- ・ 自動車の衝突シミュレーション
- ・ 心臓手術をコンピュータ上で再現し、術後の状態を予測



# 計算機シミュレーションの概要(流体の一例)

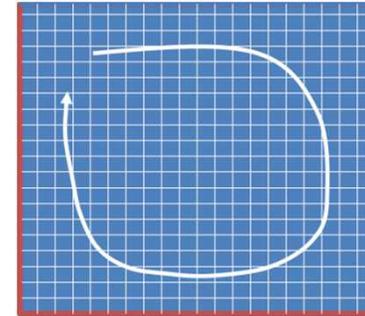
## 運動方程式

cf. 流体の基礎方程式

$$\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla)v = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 v + F$$

運動方程式を解き、結果を得る手段として、シミュレーションを利用

## 格子生成の例

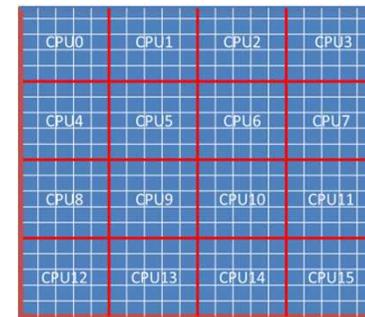


小さな渦の振る舞いを観測するには、格子間隔を狭くする必要あり  
(格子より小さな渦は再現できない)

## 初期条件・境界条件の設定

空間を格子に分割

## 領域分割による並列化



計算領域を分割し、各領域をCPUに割り当てて、同時に計算が可能

「京」では最大で64万並列まで可能

## 求めるべき量の計算

並列化により高速化

時間の更新  
(繰り返し計算)

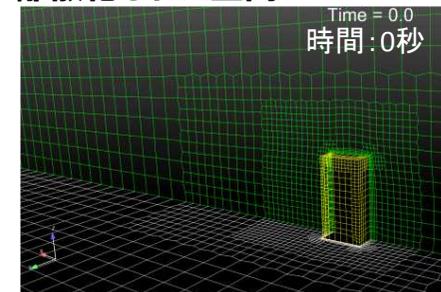
end

結果の表示  
可視化

## 計算例

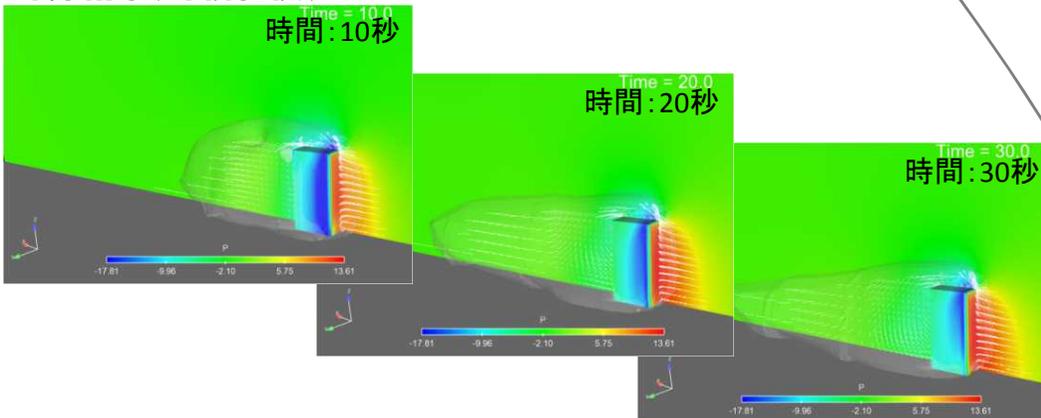
### ◆ 四角柱周りの風の流れ

### 離散化された空間



格子数: 8208

### 計算結果(可視化後)



# スパコンで用いられるアプリケーションについて

- 「京」は8万2千個のCPU（ノード）を持つ。市販のアプリケーションには、1万個以上のCPUを超並列で効率よく処理できるものはない。そのため、「京」のフルノードクラスで用いるアプリケーションは、多くの場合、**研究の目的に応じて開発**する必要が生じる。（既存のアプリケーションを改良・拡充する場合と、まったく新規に開発する場合の2種類がある）
- 各分野では、各種のアプリケーションを開発しながら、その実証実験を行い、科学技術の画期的な成果創出に取り組んでいる。**スーパーコンピュータで用いられるアプリケーションは、1万～30万程度の行数を要する**。本事業では、平均的に一つのアプリケーションにつき、各分野に精通し、かつプログラムの高度化に秀でた1～2人のプロジェクト雇用者が開発に携わっており、プロジェクト雇用者以外の研究者と協力しながら取り組んでいる。  
（一般に、アプリケーション開発は、10万行だと6～10人により2～3年、100万行では50～100人により3～5年を要すると言われる。行数が増えるほど、動作テストが格段に難しくなる。（「アドバンスシミュレーション」2014.4 Vol.11））
- これまでに作成されたアプリケーションは、合計89本。これらのうち、科学技術の戦略上公開に適さないものを除き**基本的に無償で公開**、もしくは、プロジェクト終了時まで公開される予定である。  
現時点で、これらのアプリケーションは、各分野の関係者以外の**1,000人以上に活用**されていることが確認されている。また、WEBページからアプリケーションをダウンロードした人数を含めると6,800人以上となる。

## 【開発されたアプリケーションの例】

- ・ **UT-Heart**：細胞下の分子レベルの電気化学・力学現象を再現した心筋細胞モデルを使って心臓を組み上げて、心臓の鼓動・血流などを再現。（→将来的には、心臓疾患の患者のために、手術前シミュレーションの実現を視野）
- ・ **OpenMX**：電気伝導計算やスピン軌道相互作用などを計算する。  
（世界20カ国以上で応用計算に活用され、OpenMXを用いた約300報の学術論文が出ている）
- ・ **NICAM**：地球全体の雲の振る舞いを最小870メートル間隔で計算。従来の数百キロ間隔より大きく改善し、地球温暖化予測の確実性の向上が見込まれる。（NHKスペシャルMEGA DISASTERなどテレビ・新聞で多数取り上げられた）

- 最先端の研究開発に必要なアプリケーションはより行数が増え、高度で複雑になってくるため、ポスト「京」に向けた先導的なアプリケーション開発については、より効率的に進める仕組みを検討する必要がある。その試みとして、分野2で開発した量子化学計算ソフト（SMASH）の一部機能を分野1と分野4のアプリケーションに取り入れている。今後、分野横断的に利用可能な機能単位のプログラムを統合してアプリケーションを作成することになっている。

# 「京」の計算資源の利用内訳

【平成26年度】



○研究開発目標: 合計25目標

- 分野1: 4目標
- 分野2: 7目標
- 分野3: 5目標
- 分野4: 5目標
- 分野5: 4目標

636人(82機関)が  
 直接に「京」に  
 アクセスして利用  
 (参画する研究者総数は  
 約1100人(226機関))

「京」のシステム調整や  
 ユーザ支援のための研  
 究に利用

○実施課題数: 計85課題(公募により選定)

- 一般課題: 24課題
- 産業利用: 51課題
- 若手人材育成: 10課題

578人(119機関)  
 が「京」にアクセス  
 して利用

○産業利用には、以下も含まれる

- トライアル・ユース(お試し利用): 6課題
- 成果非公開での利用(有償): 17課題

政策的に重要かつ緊急な課題  
 に利用(文部科学省の有識者会  
 議で審査)等

- 平成26年度利用実績  
 内閣府政策統括官(防災担当)  
 「南海トラフ巨大地震及び首都直  
 下地震による被害予測」

# HPCIの直接の利用者数

- 「京」と国内11機関のスーパーコンピュータの利用者数は、共用開始初年度（平成24年度下半期～平成25年度）1,316人から平成26年度で1,562人と、約250人増加している。
- 「京」の利用者は、戦略プログラムの参加者のほか、産業界の者の利用が206人から381人に増えている。

（単位：人）

	「京」							国内11機関 のスパコン	合計
	(本事業) 戦略 プログラム	(公募)				その他	合計		
		一般 課題	若手 人材 育成 課題	産業 利用 課題	計				
平成26年度	636	187	10	381	578	2	1,216	346	1,562
平成24年度 下半期～25年度	539	398	8	206	612	-	1,151	165	1,316

○HPCIのための共通アカウントを持つ人数を集計している。

○「京」の共用開始が平成24年度下半期であり、平成24年度には、平成25年度を含む1年半にわたる利用が募集されたため、表下段は、その人数を掲載している。なお、共用開始前である平成23年度と平成24年度上半期の間、HPCI戦略プログラムは、一部稼働中の「京」を用いていた。

○「国内11機関のスパコン」には、HPCIのための共通アカウント者と別に、各機関で登録された利用者がある。そうした者を含めて、国内大学の高速計算機（最大理論性能1.5TFLOPS以上）の利用者の合計は、約1.6万人となっている（文部科学省「平成26年度学術基盤実態調査」）。

# HPCI戦略プログラムにおけるスパコン使用実績(平成26年度)

1. 「京」 約2.9億ノード時間

2. 国内11機関のスーパーコンピュータ等

(単位:ノード時間)

	平成26年度	(参考)平成25年度
北海道大学	13.4万	23.0万
東北大学	133.1万	0.3万
筑波大学	84.6万	133.7万
東京大学	2475.9万	1968.0万
東京工業大学	37.2万	19.8万
名古屋大学	69.0万	24.8万
京都大学	147.6万	85.4万
大阪大学	32.4万	46.7万
九州大学	136.3万	49.4万
統計数理研究所 ※	2.0万	—
海洋研究開発機構	5.6万	4.4万
その他 (例:気象研究所、 分子科学研究所など)	854.8万	623.8万
合計	3991.9万	2979.4万

・ ノード…演算装置(CPUやメモリで構成)のこと。スパコンの計算を行う最小単位。

・ 1ノード時間…一つのノードを1時間使用すること。

※統計数理研究所は平成26年度よりHPCIに参画。

# HPCI戦略プログラムにおけるスパコン使用実績(分野別・平成26年度)

(単位:ノード時間)

	分野1	分野2	分野3	分野4	分野5	合計
「京」	0.60億	0.62億	0.54億	0.58億	0.52億	2.9億
国内11機関の スーパーコンピュータ等	1237.4万	1037.0万	85.7万	726.7万	905.1万	3991.9万
(内訳)						
北海道大学	—	13.4万	—	—	—	13.4万
東北大学	—	133.1万	—	—	—	133.1万
筑波大学	—	13.9万	—	—	70.7万	84.6万
東京大学	1078.5万	508.7万	31.2万	691.0万	166.6万	2475.9万
東京工業大学	10.0万	24.2万	—	—	3.0万	37.2万
名古屋大学	—	37.2万	—	—	31.8万	69.0万
京都大学	—	50.0万	—	14.4万	83.2万	147.6万
大阪大学	—	—	—	—	32.4万	32.4万
九州大学	50.4万	56.4万	2.0万	—	27.5万	136.3万
統計数理研究所	—	2.0万	—	—	—	2.0万
海洋研究開発機構	—	—	5.6万	—	—	5.6万
その他	98.5万	198.0万	47.0万	21.3万	489.9万	854.8万
(例:気象研究所、 分子科学研究所など)						

- ・ ノード…演算装置(CPUやメモリで構成)のこと。スパコンの計算を行う最小単位。
- ・ 1ノード時間…一つのノードを1時間使用すること。

# 戦略プログラムと企業との連携について

○HPCI戦略プログラムでは、将来の社会実装や商用化も見据えて、産業界（企業や企業の研究所の者）が参画している。

こうした活動により、HPCI戦略プログラムでの企業との連携として、

- ・創薬の分野では、国内製薬企業によるコンソーシアム「バイオグリッドHPCIプロジェクト」が組織化 [11社（平成24年）⇒23社（平成27年）]
- ・エネルギーの分野では、平成27年4月に、企業15社と研究機関による「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」が組織化
- ・ものづくりの分野では、中小企業も含む多くの企業が研究開発を進められる環境が整備（平成23年度～）など、個別の共同研究や、組織化された共同研究の枠組みが整ってきた。

○更に、心臓シミュレーション技術の波及を目指し、企業（株式会社UT-Heart研究所）が立ち上げられた事例もある。

○一方こうした連携は、実証研究（基礎研究の成果を基に、アプリケーションが求められる性能を出すか確認する研究）として取り組まれているものであり、これがただちに社会実装や商用化に至るものではない。

（企業が研究成果を基に実用化を見据えたシミュレーションを行う場合は、戦略プログラムの外で行われることになる。具体的には、企業は、①自社のスパコンを用いる、②「京」等のスパコンを有償で利用する、のいずれかとなる。）

○また、戦略プログラムでの共同研究を通じて、研究開発において、シミュレーションを取り入れる企業が増加してきている。

※「京」では、産業界からの利用者は、平成24年度→平成26年度で1.7倍に増加。有償利用件数も約3倍に増加。

# 戦略プログラムにおける国の推進体制

国として、5つの戦略分野の進捗状況を定期的に把握し、評価を行うために、全体を統括する「推進委員会」を設ける。その下に、分野ごとの状況を把握し、指導・助言を行う「作業部会」を設置している。

## HPCI戦略プログラム推進委員会

### ○プログラムマネージャ

土居 範久 慶應義塾大学 名誉教授

### ○分野マネージャ

(分野1)中村 春木 大阪大学蛋白質研究所 所長

(分野2)寺倉 清之 北陸先端科学技術大学院大学 シニアプロフェッサー

(分野3)矢川 元基 原子力安全研究協会 理事長／東京大学 名誉教授  
／東洋大学 名誉教授

(分野4)小林 敏雄 アイシン精機 取締役／日本自動車研究所 顧問／  
東京大学 名誉教授

(分野5)小柳 義夫 神戸大学システム情報学研究科 特命教授

### ○理化学研究所

平尾 公彦 理化学研究所計算科学研究機構 機構長

## 作業部会（分野1の場合）

茅 幸二 理化学研究所 研究顧問

児玉 龍彦 東京大学先端科学技術研究センター  
教授(医師)

菅野 純夫 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

長田 重一 京都大学大学院医学研究科 教授

松本 洋一郎 理化学研究所 理事(前 東京大学 副学長)

美宅 成樹 豊田理化学研究所 客員フェロー  
(分野2～5も同様に設置)

中間評価や事後評価を行う場合、上記委員会での議論の後、文部科学省の「科学技術・学術審議会」における外部評価を受けることで評価結果が確定する。

# 「戦略分野」「戦略機関」と「研究開発目標」の設定

## 【「戦略分野」の決定】

○ 「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」での16回の検討を通じて、平成21年7月、5つの「戦略分野」を決定。

- 【判断軸】
- ・ 次世代スパコンの能力を必要とする課題があること
  - ・ 社会的・国家的見地から高い要請があること
  - ・ 稼働後5年間で具体的な成果を出す見通しがあること

## 【「戦略機関」の公募と決定】

○ 平成21年8～10月に公募を行い、書類審査・ヒアリングを経て、平成22年7月「戦略機関」を決定。

（分野によっては、成果の最大化のため、研究機関の合同化を指示）

- 【審査の観点】
- ・ 事業の目標が「戦略分野」の趣旨に沿っていること
  - ・ 稼働後5年間で世界最高水準の成果を出せる可能性が高いこと
  - ・ 次世代スパコンの能力を効果的に活用すること
  - ・ 実施体制が適切であること
  - ・ 実施体制として、戦略分野において一定のコミュニティを代表できること
  - ・ その分野のコミュニティを取りまとめるための実績と可能性があること

## 【「研究開発目標」の設定】

○ 平成22年度に「HPCI戦略プログラム推進委員会」の作業部会が、各「戦略機関」を強く指導・助言しながら「研究開発課題」を策定。平成23年度から事業開始。

- 【検討の観点】
- ・ スパコンを最大に活用して成果に結びつけるべく「研究開発課題」の項目数と内容を検討する。  
（「作業部会」の指摘により「研究開発課題」の修正もなされた。）

# 戦略プログラムの「中間評価」とその対応について

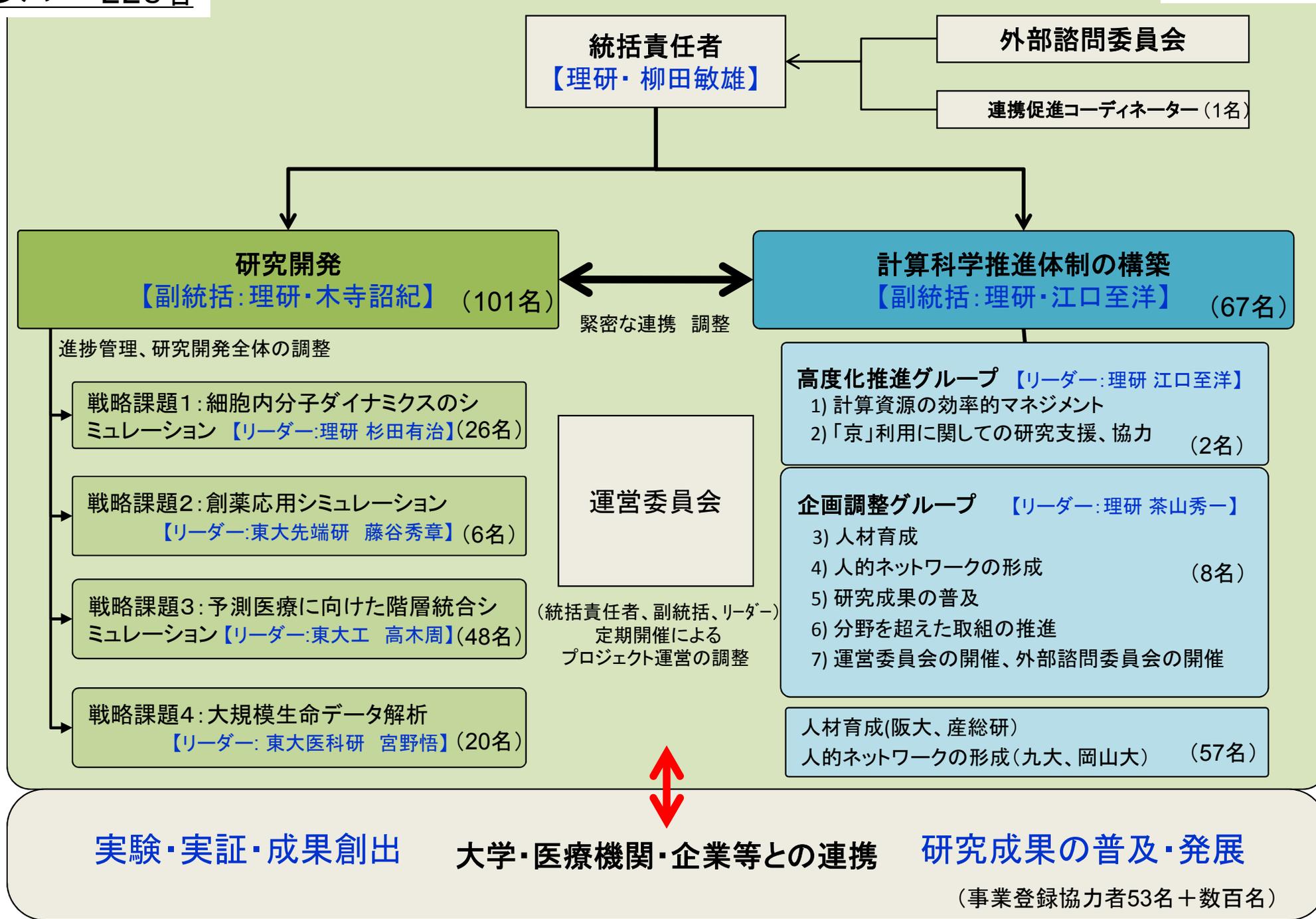
○HPCI戦略プログラムは、平成23年度に開始しており、平成25年度に「中間評価」を実施した。  
評価結果を踏まえて、事業の改善を行っている。

中間評価（改善すべき事項のポイント）	中間評価後の改善
<p><b>【必要性】</b></p> <p>○「京」でなければ成し得ない成果を更に強く意識する必要がある。</p>	<p>○従来からの課題間の優先付けを強化し、戦略プログラム全体及び分野内でさらにメリハリをつけた重点課題選定や計算資源配分を推進（申請条件の厳格化・選定基準見直し、分野内計算資源の柔軟な再配分等）。</p>
<p><b>【有効性】</b></p> <p>○実験系研究者との連携を図りつつ、結果の検証作業を強化すること。</p> <p>○本プログラムを通じた研究者等のキャリアアップをこれまで以上に意識していく必要があること。</p>	<p>○各分野において、実験系研究者及び産業界との連携をさらに強化し、結果の検証作業を推進（前臨床試験（2件）が進行中、大型実験・観測施設（SPRING-8、J-PARC、すばる望遠鏡等）による検証作業等）。</p> <p>○計算科学技術推進体制の構築のために、大学定年ポストを獲得（3件）、企業との共同研究への若手研究者の参加推進。</p>
<p><b>【効率性】</b></p> <p>○大学・研究機関のスーパーコンピュータの性能が向上しており、「京」以外の計算資源の更なる有効活用を図ること。</p> <p>○実用化と応用へ向けた展開のために企業との更なる連携を深めること。</p>	<p>○成果の最大化に向け、各分野において大学情報基盤センター等のスパコンも有効活用（課題間の優先順位付けをし、「京」、大学情報基盤センタースパコン、戦略機関スパコンの計算資源を配分）。</p> <p>○企業が実用化を進められる体制や中小企業も含めた多くの企業が研究開発を進められる環境を構築（創薬コンソーシアム（製薬企業23社）及び電気化学界面シミュレーションコンソーシアム（企業15社及び研究機関）の構築、専用サイトを通じた解析事例やソフトウェア等の提供等）。</p>

# 戦略機関の実施体制(分野1(生命科学・医療・創薬基盤)の場合)

2015年4月1日時点

総メンバー 223名



# 戦略機関の実施体制(詳細)(分野1(生命科学・医療・創薬基盤)の場合)

2015年4月1日時点



# 経費の内訳(分野1(生命科学・医療・創薬基盤)の場合)

平成27年度

項目	金額	備考
<b>研究開発の課題</b>	<b>257百万円</b>	
細胞内の分子ダイナミクスのシミュレーション	68百万円	(雇用者：研究者8名、補助者2名) 旅費、備品、消耗品
創薬応用のシミュレーション	43百万円	(雇用者：研究者4名) 旅費、備品、消耗品
予測医療に向けた階層統合シミュレーション	92百万円	(雇用者：研究者10名、補助者3名) 旅費、備品、消耗品
大規模生命データ解析 (癌とメタボ)	54百万円	(雇用者：研究者5名) 旅費、備品、消耗品
<b>推進体制の構築</b>	<b>141百万円</b>	
効率的マネジメント	27百万円	アプリ高度化支援等(3~4アプリ/年、講習会17回)(雇用者：技術者1名)
人材育成	31百万円	人材育成プログラム、講習会(大学院生や社会人等70名が参加、講座単位取得者10名、eラーニング250名以上参加)(雇用者：教育担当3名、補助者3名)
人的ネットワーク形成	6百万円	シンポジウム(製薬企業等から延べ150名以上が参加) 創薬コンソーシアム(20社以上)の支援
研究成果の普及(ポータルサイト、成果の出版)	11百万円	パンフレット、ニュースレター、ウェブサイト
事務体制	65百万円	事務職員5名
<b>合計</b>	<b>398百万円</b>	

## 【雇用者数】

研究者27人、教育担当3人、  
補助者8人、事務職員5人、  
技術者1人

(これはプロジェクトに専従義務がある者であり、指導的立場に当たる大学・研究機関の教員は雇用対象ではない)

○「合計」は、平成26年度の442百万円から、398百万円に効率化した。

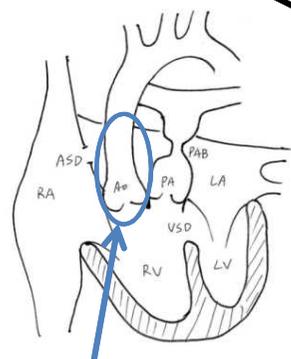
○しかしながら、メリハリある配分のため、進展著しい「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」は、88百万円から92百万に増額した。

○こうした方針は、分野内の「外部諮問委員会」の議論を踏まえ、統括責任者が判断し、文部科学省の「分野別作業部会」等に諮って決定。

# HPCI戦略プログラムを通じた成果の例

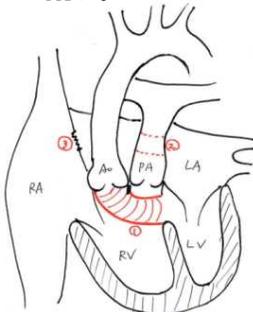
## 目標③のうち、心臓外科手術のシミュレーションによる術後予測

### 【手術前】

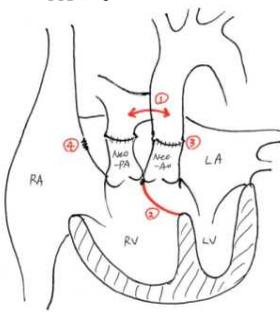


大動脈が右心室から出ている（本来は左心室）

### 術式1



### 術式2



手術手法をコンピュータ上で事前確認できることを実証した事例。

○小児先天性心疾患に対し、外科医が事前に2つの術式（「術式1」と「術式2」）を比較検討。

○医師自らの経験に基づいて「術式1」を採用して手術を実施。

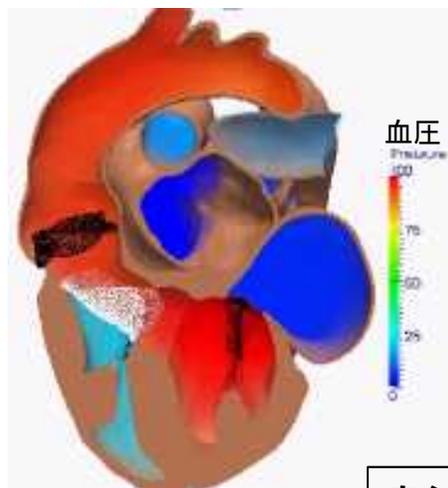


○手術後に、「術式1」と「術式2」を、シミュレーションで比較（「京」で培った研究成果を元に、東大の計算機で再現）。

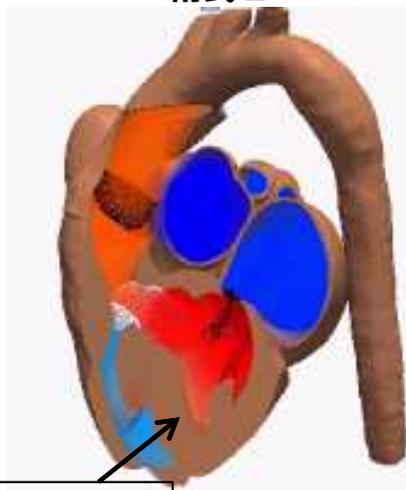
○シミュレーションでも「術式2」は「術式1」に比べ、左心室に高い負荷がかかっていることが分かり、手術方法の判断が正しかったことが確認される。

### 【シミュレーション結果】

#### 術式1



#### 術式2



左心室に高い負荷  
→心臓肥大の原因に

#### ○これまで

「術式1」と「術式2」のどちらが適切かという判断は、長年の手術経験を積まないと困難と言われる。

#### ○将来

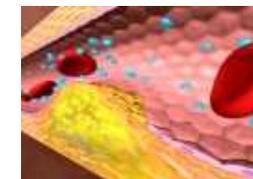
手術前のシミュレーションが可能となれば、何千人もの手術経験を持つ医師と同等の知見が得られる。

（関係者は、手術前の判断に利用できるよう2年後の先進医療承認を目指している）

## 達成状況

### (1)画期的な成果創出【目標4つ】※全て達成(見込み含む)

- ①世界最大規模の1億原子系分子シミュレーションにより、細胞内のタンパク質の挙動に関する重要な知見を獲得
- ②創薬応用シミュレーションにより2種類のがん治療薬候補が前臨床実験へ
- ③世界初の心臓の階層統合シミュレーションによる術後予測を可能に
- ④大規模・網羅的データ解析によりがんや脂肪細胞に関する新たなメカニズムを解明



### (2)計算科学技術推進体制の構築

**企業が実用化を進められる体制を構築** (創薬コンソーシアム(創薬企業20社以上で構成)や医療関係者と連携)

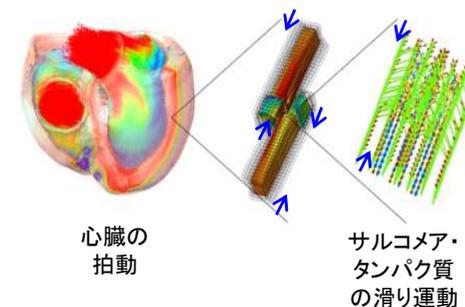
- 約40機関・約220名が参画(平成27年度現在)
- 15の独自開発アプリケーションを提供(本事業外での利用本数:45件)
- 年間3~4のアプリ高度化を実施し、講習会等を17回開催(参加者200名以上)
- 大学院生や社会人等300名を育成、講座単位取得者50名
- 「計算生命科学」について、配信講義(30大学・80社以上から250名以上受講)、eラーニング(1000名以上受講)、シンポジウム(製薬企業等から延べ600名以上)

## 代表的な成果例

### 心臓シミュレーション

心臓シミュレータ「UT-Heart」により、心臓の動きを分子レベルから細胞・心臓レベルまで解析。難病の一つである「肥大型心筋症」が引き起こされる過程を明らかに。

今後、他の疾患の解析にも応用することを目指す。



## 今後の課題等

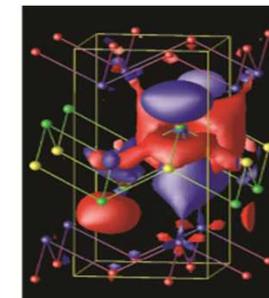
企業等との緊密な連携の強化や、分野を越えた共同研究による「計算生命科学」の普及、アプリケーション高度化・汎用化等による利用者の拡大、事例の蓄積など、成果の実用化(創薬・医療を実現)に向けて更なる発展が必要。

# 成果と課題(分野2:新物質・エネルギー創成)

## 達成状況

### (1)画期的な成果創出【目標7つ】 ※全て達成(見込み含む)

- ⑤電子状態が関与する物性探索の高度な手法を開発 → 銅系と鉄系の二つの物質で超伝導を発現するしくみを解明
- ⑥分子間力のように弱い結合までも考慮した量子化学計算手法を開発 → 光合成などの化学反応の仕組みを解明する手段となる
- ⑦10万原子レベルのシリコンの電子状態計算手法を開発 → シリコンナノワイヤー中の電流分布の予測に成功
- ⑧1000万原子の超並列分子動力学計算手法を開発 → ウイルス1個の丸ごとシミュレーションに成功し、感染過程を理解
- ⑨電池の電極間に電圧をかけた状態での化学反応計算手法開発に成功 → 化学反応とそれによる生成物の予測も可能に
- ⑩メタンハイドレートが分解する際にメタンの泡の大きさが分解速度を律速することを発見 → 泡の制御が採掘に影響を与えることを示唆
- ⑪鉄鋼材料中のマイクロな欠陥と亀裂の生じやすさの関係の説明に成功 → 実験結果と計算結果の整合も確認



### (2)計算科学技術推進体制の構築

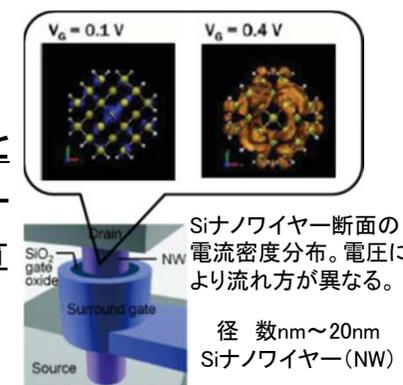
**企業が実用化を進められる体制を構築** (企業15社と研究機関による「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」を設置)

- 約45機関・約190名が参画する、物性、分子、材料が結集した“計算物質科学イニシアティブ(CMSI)”を構築
- 25の独自アプリケーションを開発・改良し、公開アプリ群をUSBで利用できるパッケージソフトを開発(約400本USB配布、700件以上ダウンロード) 大学院教育等で継続的に活用する体制を構築
- H26年度:講習会等31回開催(参加者873名(内100名企業)参加)。支援してきた課題12件が「京」一般・企業利用に採択
- 大学院2講座と講義7コマ実施し年100名以上の院生育成。14地点への配信講義2講座30コマを実施し、のべ664名(内52名企業)参加 45の講座をWEB配信。合計3万件以上のアクセスあり。CMSIの教育活動が認められ東大に定年制教員2名のポジションを確保
- 元素戦略プロジェクトの3拠点からCMSIへ委託研究(H24年度より開始(50百万円/年))。大型研究施設(SPring-8、J-PARC)との連携イベント定着

## 代表的な成果例

### ナノサイズの半導体デバイス丸ごと計算で性能を予測。設計手法で世界に先行

国際競争が激しい半導体技術開発の中で、次世代デバイス設計技術でイニシアティブを取るための鍵となる、電子の粒子と波の両方の性質を考慮した設計手法を開発。世界最大規模のシリコンナノワイヤー全原子計算でその実力を示しH23年にゴードンベル賞(最高性能賞)を受賞。雇用者1名が第一原理計算の第一人者J. Chelikowsky(テキサス大)からの要望で異動するなど、手法は世界から注目。



## 今後の課題等

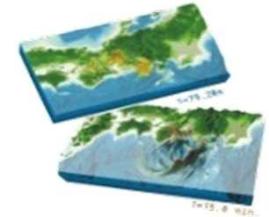
実験研究との連携強化とともに、大規模計算の敷居を下げ、開発したアプリの堅牢性・信頼性の向上や利便性の向上など改良等を進め、更に普及させていくことが必要。

# 成果と課題(分野3:防災・減災に資する地球変動予測)

## 達成状況

### (1) 画期的な成果創出【目標5つ】※全て達成(見込み含む)

- ⑫雲の塊まで再現できる全球雲解像モデルにより、台風の温暖化時の動向や積乱雲群の予測等を可能に
- ⑬雲を解像するデータ同化技術を開発し、豪雨の確率予測につながる成果を獲得
- ⑭大地震の被害予測のために、強い揺れ、地殻変動、津波を一度に計算する画期的なシミュレーション手法を世界に先駆けて開発、東北地方太平洋沖地震を再現し有効性を検証
- ⑮仙台の東北地方太平洋沖地震津波による2時間の詳細な浸水予測(解像度5m)を2分以内で完了、津波避難などの対策を講じるための基礎データ取得
- ⑯都市全域の地震動・地震応答計算により、世界で初めて地震災害と建物被害を統合した大規模シミュレーションを実現【ゴードンベル賞ファイナリスト】



### (2) 計算科学技術推進体制の構築

#### 自治体等の防災計画策定への活用が検討できる体制を構築(自治体と連携)

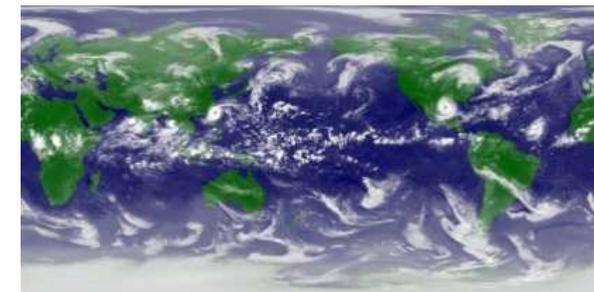
- 約45機関・約280名が参画(平成27年度現在)
- 16のアプリケーションを開発(本事業外での利用本数:17件)
- 年間15~20個のアプリ高度化を実施し、講習会等を年1回開催(参加者20名程度)
- 大学院生や社会人等10名を育成
- 成果報告会、シンポジウム等(約50回・延べ3000名以上)

## 代表的な成果例

### 2週間以上先の大気状態を予測

全球雲解像モデルを用いて、熱帯の巨大積雲群の発達・移動を予測。2週間以上先の天気予報の可能性を切り開くことに成功。

将来、気象庁における2週間以上先の天気予報の精度向上へ貢献。



全球雲解像モデルNICAMIによるシミュレーション

## 今後の課題等

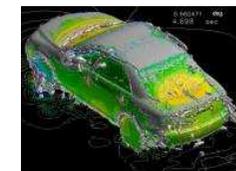
減災計画や避難計画に資する被害予測と軽減対策への具体的な活用が必要。  
また、将来的には気象庁の予報業務の精度向上に貢献することが重要。

# 成果と課題(分野4:次世代ものづくり)

## 達成状況

### (1)画期的な成果創出【目標5つ】※全て達成(見込み含む)

- ⑰流体制御メカニズムを詳細に解明することにより、悪条件下における流体性能を数十%~数倍向上できることを明示し、産業利用展開を開始
- ⑱実温状態における、原子の運動、電子の状態の正確な予測に成功し、パワーデバイス製造プロセスの最適化指針の提供を可能に
- ⑲1mm以下の微細な渦の運動も再現したシミュレーションを実現し、風洞実験に匹敵する誤差(1~2%)での空気抵抗の予測やレーンチェンジ時の車の挙動(走行安定性)解析を可能に
- ⑳画期的な高効率多目的設計探索アルゴリズムを考案し大規模設計最適化問題の多目的設計探索を可能に
- ㉑部品点数が数万点に及ぶ系の一体解析技術を開発し、高温工学試験研究炉、石油プラントなどの安全裕度を俯瞰的かつ詳細に分析できることを立証



### (2)計算科学技術推進体制の構築

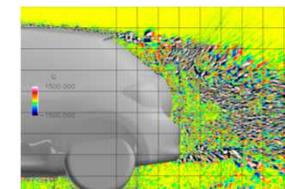
#### 中小企業も含めた多くの企業が研究開発を進められる環境を構築

- 約70機関・約260名が参画(平成27年度現在)、多くの企業が参画する研究推進体制の構築
- 17のアプリケーションを開発(本事業外での利用本数:377件)
- 大学院生や社会人等10名以上を育成、産業界向けスクール等による技術者育成(約300名)
- 産業ニーズを採り込んだ実証課題研究やトライアルユース、講習会の実施
- 企業訪問(50社)や実践セミナー(年2回)等によるユーザー開拓、データベース公開
- 成果報告会、シンポジウム等(約50回・延べ3000名以上)
- 分野専用サイト(計算工学ナビ)を構築して、アプリケーション、解析事例、ニュースレター等を公開(訪問者12,000名以上)

## 代表的な成果例

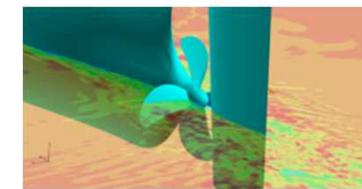
### 次世代流体設計システムの研究開発

自動車が行く際、車体周りには複雑な空気の流が発生している。「京」を用いた流体シミュレーションにより、世界で初めて、その空気の流を忠実に再現。風洞実験をシミュレーションで代替できることを実証。また、船舶についても、スクリューの回転やそれによる気泡の発生も含め、船体周りの流を忠実に再現し、曳航水槽試験を代替する可能性を実証。



車両挙動の全乱流渦のシミュレーション

(財団法人日本造船技術センター 提供)



プロペラ回転や波の影響も考慮した超大規模実用計算

## 今後の課題等

製品丸ごとで実験と同等以上の精度を確保し、現実的な開発・設計期間内に実施可能な計算が必要。

# 成果と課題(分野5:物質と宇宙の起源と構造)

## 達成状況



### (1)画期的な成果創出【目標4つ】※全て達成(見込み含む)

- ②物質の根源であるクォークから、陽子・中性子の質量や80年間未解明であった核力を導出可能に
- ③従来不可能であった原子核の構造解明によるエキゾチック原子核に関する予言や核変換基礎データの創出
- ④ニュートリノ加熱機構で超新星爆発すること、二重中性子星の合体による重元素合成を明らかに
- ⑤世界最大約2兆個のダークマター粒子の大規模シミュレーションにより、宇宙の成長過程を明らかに【ゴードンベル賞(※)受賞】

※ファイナリストには、同じくダークマター粒子のシミュレーションを行った米国グループがあったが、日本グループのアプリケーションが優れ、計算速度が約2.4倍上回り、本賞を受賞。

### (2)計算科学技術推進体制の構築

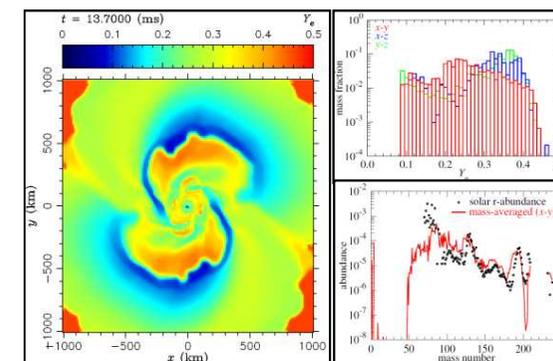
#### 素粒子・原子核・宇宙分野を融合した研究が進められる拠点構築

- 約30機関・約170名が参画(平成27年度現在)、ポスドク研究者を雇用(40名)、計算基礎科学連携拠点としての推進体制の構築
- 16のアプリケーションを開発(本事業外での利用本数:61件)
- 大学院生等(スクール参加者600名以上)を育成
- 全国からの計算機利用に関する支援(42件)
- 研究会・セミナー等(100回以上、6,000名以上参加)の開催
- 一般向けイベント(50件以上開催、延べ17,000名以上参加)を開催

## 代表的な成果例

### 二重中性子星の合体による重元素合成

重元素合成起源の解明、将来の大型望遠鏡による観測的予言を目指し、世界最高の空間精度および物理的詳細さで二重中性子星合体のシミュレーションを実施。現実的な仮定のもとで速い中性子捕獲による重元素合成が起こり宇宙の元素組成を説明しうることを発見。重力波など、次世代観測機器がターゲットとする信号がどの程度の量、地球にやってくるのか予想可能となった。



## 今後の課題等

育成人材のポスト確保などキャリアパスをどう描くかが課題。また、研究教育拠点としての連携強化や開発アプリケーション公開(現在は海外との競争の観点から一部のみ公開)の在り方について検討が必要。

# 本事業の成果と将来の社会への活用(例)

医療

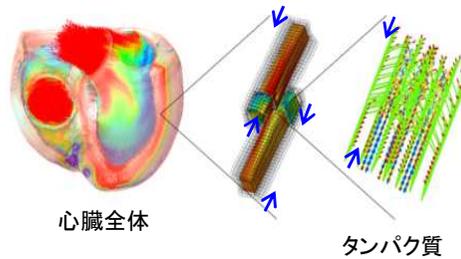
## 科学技術の現状

神経・筋肉や血管など、人体の一部機能の限定的な再現



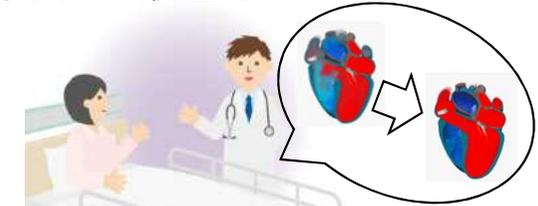
## HPCI戦略プログラムによる成果

心臓の動きを精密に再現  
→ **肥大型心筋症の病態を明らかにした**



## 将来の社会への活用

シミュレーションによる手術手法の最適化



心疾患(死亡者数年19万人)に取り組む医療への貢献

個別化医療

一部のがんで原因遺伝子を特定するも、局所的な原因把握まで

局所的にしか見えなかった



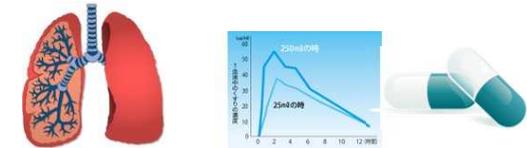
がんは変化する→薬が効かなくなる

## ゲノムデータをもとに 網羅的にがんの異常を解析

がんの全体像がやっと見えた



がんの個別化医療及び創薬基盤にがんの最適な薬の処方が可能に



がん罹患者(98万人)への最適医療  
疾病発症時期の高齢化  
生活習慣病治療の個別最適化による医療費削減

創薬

シミュレーションでは、新薬候補の選定できず

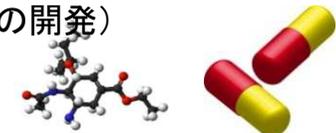


シミュレーションによる新薬候補の選別



→ **がん新薬候補として前臨床試験に到達(2種類)**

・がん新薬の実用化  
・シミュレーションによる創薬の普及(開発期間・コストの短縮、今まで開発が難しかった薬の開発)



医薬品輸入超過額 2.9兆円  
(抗がん剤 輸入額5000億円)の縮減

医療費(39兆円)の抑制・効率化

# 本事業の成果と将来の社会への活用(例)

## 科学技術の現状

実験の代替を目指したシミュレーションはあるものの、誤差が大きい



## HPCI戦略プログラムによる成果

**自動車の風洞実験をシミュレーションが代替可能であることを実証**

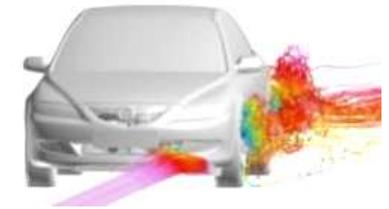


→自動車メーカーが有効性を実証

## 将来の社会への活用

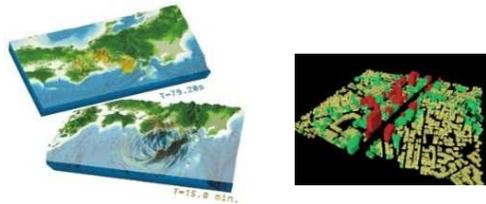
自動車開発期間の短縮  
コストの削減

(自動車メーカー全体で年間数百億円規模)

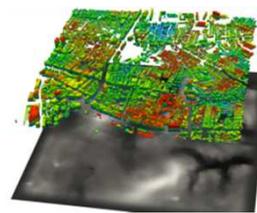


ものづくり

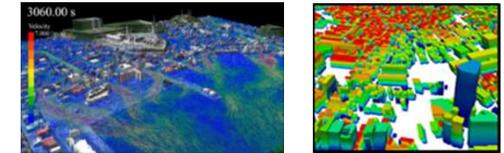
地震動、津波、建物振動の個々の評価にとどまる



地震発生、津波そして建物被害までの一連のプロセスが評価可能に



地震等の自然災害に対応した防災・減災対策の実施



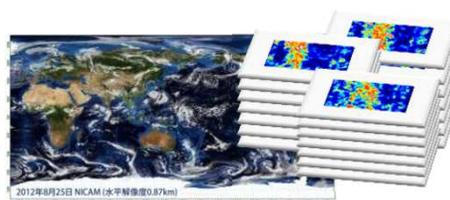
将来起こりうる被害の低減(南海トラフ巨大地震による経済被害は220兆円と想定)

地震・津波

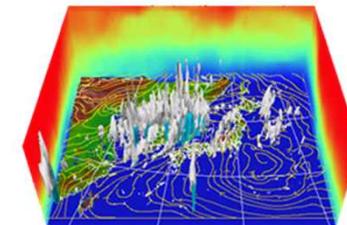
全球モデルでは雲を大きな塊として再現するにとどまるため、予測精度に更なる改善が必要



雲一つひとつを再現できる解像度のシミュレーションにより、**熱帯の巨大積雲群の発達・移動を予測**



気象庁の予報の精度向上に貢献  
(2週間以上先の台風等を予測)



気象災害による被害(過去20年間で年平均約5,000億円の経済被害)の低減に貢献。

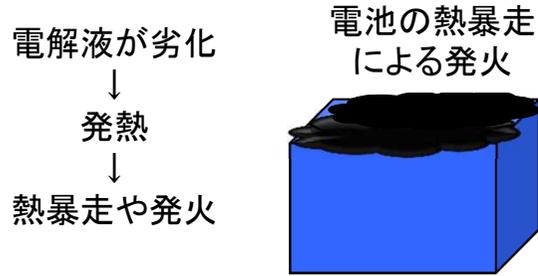
気象・気候

# 本事業の成果と将来の社会への活用(例)

エネルギー創成

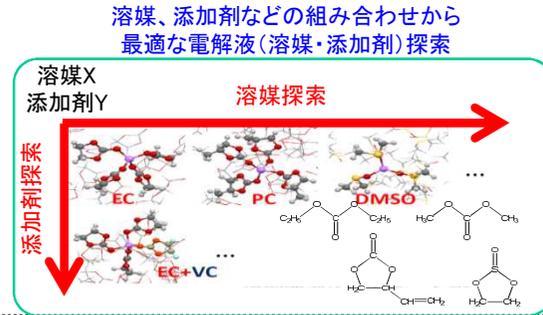
## 科学技術の現状

リチウムイオン電池の安全性に影響を及ぼす現象が理論的に解明されておらず、性能向上と安全性向上を手さぐりで実施



## HPCI戦略プログラムによる成果

電池の中の化学反応を原子レベルでシミュレーションし、生成物を予測・解析  
→ **高安全・高性能な材料の探索**が可能に



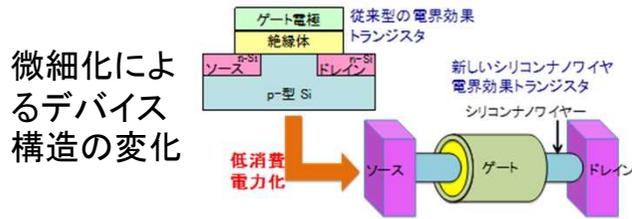
## 将来の社会への活用

電池メーカー・自動車メーカー等がシミュレーション技術を駆使し、世界に先駆け高性能電池材料を開発しデファクト化を目指す(数年後1兆円を超える市場に育つ電池のシェアを確保)

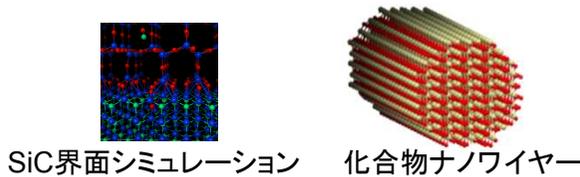


新物質創成

デバイス設計技術には、量子効果や欠陥による熱の効果等を考慮する必要があるが、そこまで至っていない



微細化された**デバイス1素子を丸ごと計算し特性をシミュレーション**する技術を開発(世界市場で巻き返しを目指し半導体産業研究所で検討開始(国内主要10社参加))

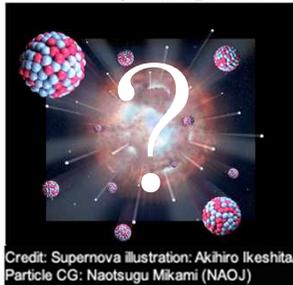


市場の急成長が予想される化合物系半導体(H26:150億円⇒H32:3000億円予測)をコンピュータ上で設計し開発先導へ

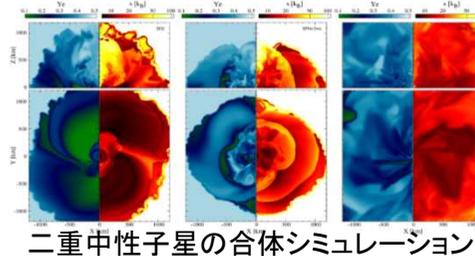


宇宙

金やウランなど鉄より重い元素は超新星爆発でできたとされているが、実際はどこで合成されたか不明



現実に即した条件での計算により、**鉄より重い元素が合成される現象を再現**



最先端の観測装置による理論の検証



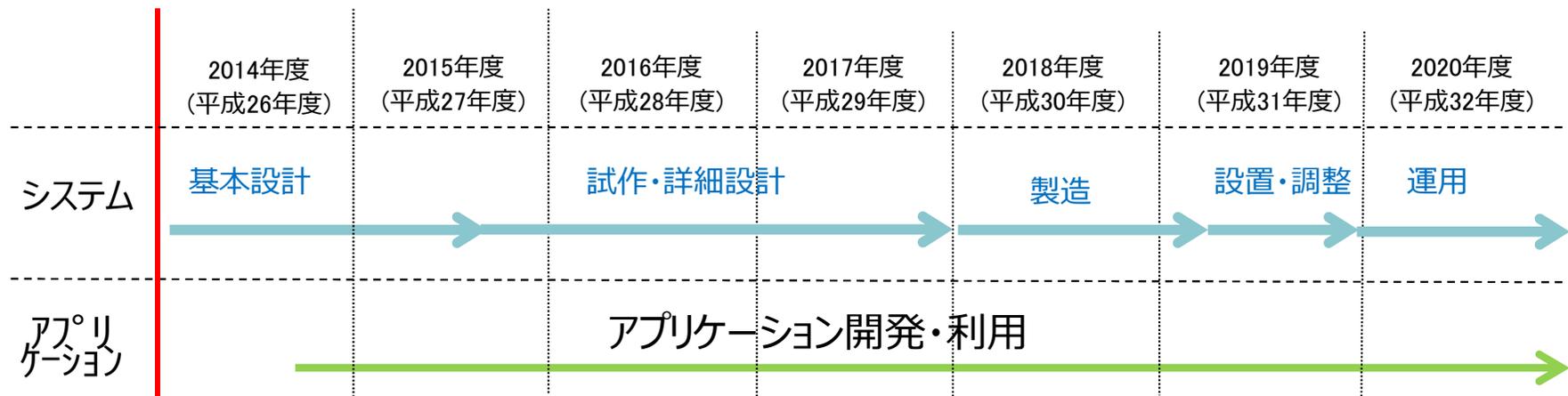
# ポスト「京」の開発

## 背景

- ◆世界最高水準のスーパーコンピュータは、理論、実験と並ぶ科学技術の第3の手法であるシミュレーションのための強力なツールとして、我が国の競争力の源泉となる先端的な研究成果を生み出す研究開発基盤である。  
(総合科学技術・イノベーション会議による国家的に重要な研究開発の評価(平成27年1月)より抜粋)

## 開発の概要

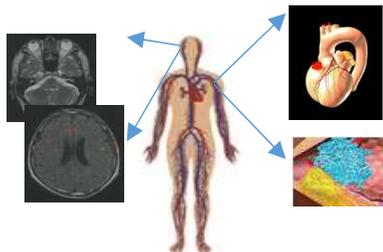
- ◆我が国が直面する課題に対応するため、2020年をターゲットに、世界最高水準の汎用性のあるスーパーコンピュータの実現を目指す。
- ◆汎用性の高いシステムとアプリケーションを協調的に開発。
- ◆健康長寿、防災・減災、エネルギー、ものづくり分野等から選定された重点的に取り組むべき社会的・科学的課題について、アプリケーションを開発。(重点的な応用分野の明確化として、9つの重点課題と、新たに取り組むべきチャレンジングな課題である4つの萌芽的課題を設定)



# 「シミュレーションの更なる高速化・高性能化」で重点的に取り組む課題

## 医療

膨大な量の臨床データに基づき  
生体シミュレーションを実施し  
疾患の予測と治療法を検討



ゲノムから臓器の機能まで結びつける

## 個別化医療

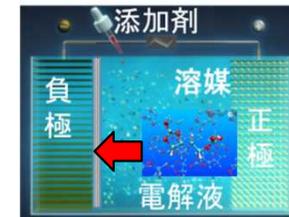
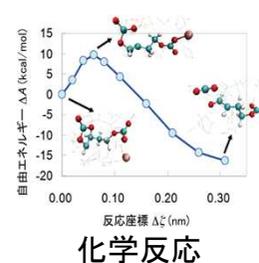
医療ビッグデータ解析等により、  
個人ごとのがんの予防と治療戦略を実現

個々人のがんがわかる！



## エネルギー創成

正負両極と電解液を含むリチウムイオン電池  
全体の化学反応を計算してエネルギー創成  
の全容を解明。その手法で、飛躍した性能を  
有する電池材料を設計



リチウムイオン電池構成材料

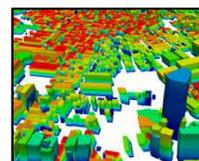
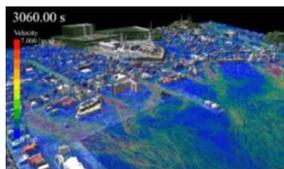
## 創薬

薬の効果だけでなく、  
副作用を回避するための  
シミュレーションを実施



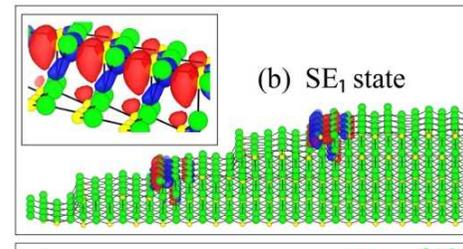
## 地震・津波

地震、津波の被害と  
都市の建物被害、人の  
避難までを統合的に予測



## 新物質創成

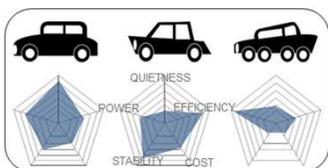
シリコンカーバイド等の次世代化合物デバイ  
スの特性を予測するシミュレーターを開発



シリコンカーバイド表面のナノ構造の電子状態

## ものづくり

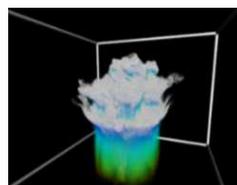
設計者がデザインした製品を  
即座に性能予測



設計者の先入観や勘に  
とられない最適設計

## 気象・気候

観測ビッグデータを活用した高速シミュレ  
ーションで、リアルタイム・ピンポイントな豪雨  
予測を実施



## 宇宙

宇宙の進化に関する多数の大規模シミュ  
レーションと観測結果を比較。  
宇宙論パラメータの精密決定により  
宇宙の将来への理解が深まる

