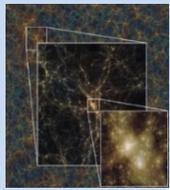


# 「京」の成果 (一例)

令和2年10月14日(水)  
第44回HPCI計画推進委員会  
資料4-5

○世界最大規模のダークマターシミュレーションによるダークマターの進化過程の解明



(戦略プログラム利用枠)

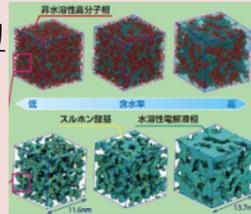
○“EigenExa”開発による行列固有値計算の高速化



○月の起源

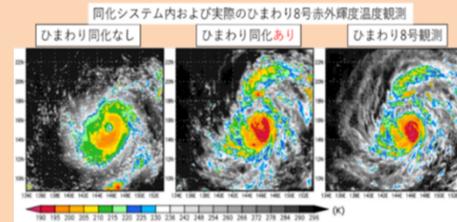
(京調整高度化枠)

○燃料電池として有力な水素電池の電解質膜の構造を明らかに



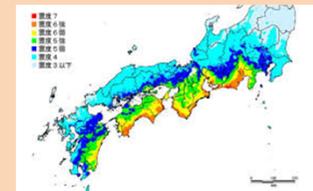
(ポスト「京」研究開発枠 / 一般利用枠)

○10分ごとに更新する気象予測 – 「京」と気象衛星ひまわり8号による天気予報の革新 –



(ポスト「京」研究開発枠 / 一般利用枠)

○長周期地震動シミュレーションと内閣府防災計画への貢献



(重点化促進枠)

HPCI戦略プログラム / ポスト「京」重点・萌芽的課題  
採択課題

理研

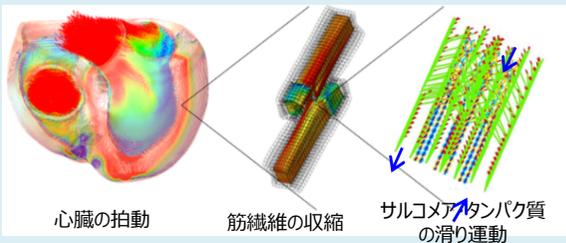
公募

枠外

政策対応

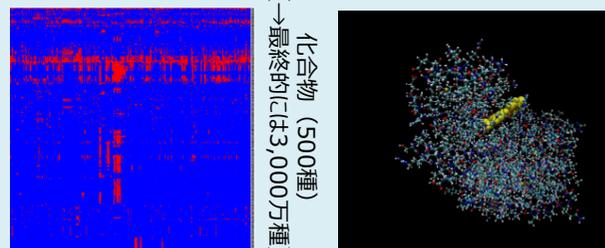
<p>京調整高度化枠 (15%程度)</p>	<p>ポスト「京」研究開発枠 (旧:戦略プログラム利用枠、40~50%程度)</p>	<p>一般利用枠 (一般利用,若手人材育成,産業利用,調査研究) (30~45%)</p>	<p>(成果創出加速枠)</p>	<p>重点化促進枠</p>
----------------------------	--	---	------------------	---------------

○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



(戦略プログラム利用、ポスト「京」研究開発枠)

○インシリコ創薬基盤の構築



タンパク質 (388種) (→最終的には631種)  
化合物 (500種) (→最終的には3,000万種)  
タンパク質と化合物の結合シミュレーション

(ポスト「京」研究開発枠 / 産業利用枠)

○SPRING-8、J-PARC、「京」を連携活用させた新材料開発技術を採用したタイヤが製品化



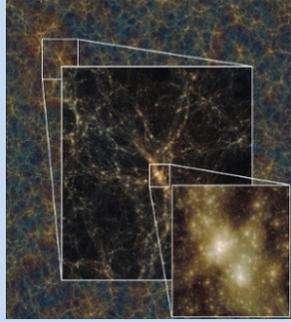
(産業利用枠)

# 「京」の成果 具体例①

## 基礎研究分野

### ○世界最大規模のダークマターシミュレーションによるダークマターの進化過程の解明

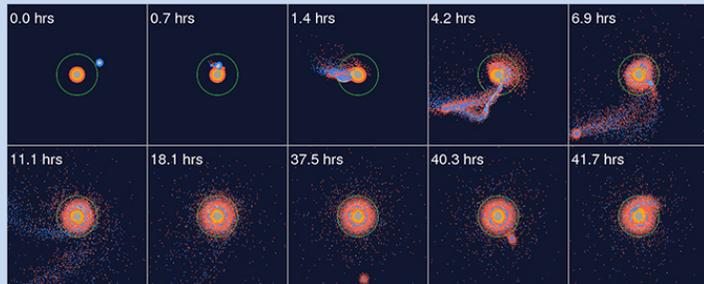
※ダークマター：宇宙における、質量は持つが、光学的に直接観測できない物質の総称



現在の宇宙でのダークマター分布

宇宙初期から現在に至る約5,500億個のダークマター粒子の重力進化を、一辺が約54億光年の空間サイズでシミュレーション。これは2015年当時で世界最高分解能、世界最大規模であり、当時としては「京」でなくては実行困難。これにより、まだ詳しく観測できていない範囲の宇宙における銀河や活動銀河核などの所在を推定し、観測チームに公開。  
 (「京」以前：演算困難 → 「京」：約3か月)

### ○月の起源



巨大衝突の数値計算結果



令和元年5月7日  
The New York Times

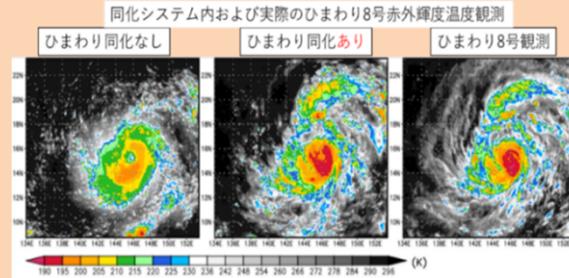
令和元年7月21日  
日本経済新聞

巨大衝突仮説と呼ばれる現象のコンピュータシミュレーションを行い、月が原始地球のマグマオーシャンと呼ばれるマグマの海から作られた可能性があると突き止めた。大規模粒子計算法のためのコード開発の知見があって初めて成された物であり、今後は惑星科学分野のみならず、同技術の幅広い応用(防災・工学分野等)が期待される。  
 (「京」以前：約20日 → 「京」：半日)

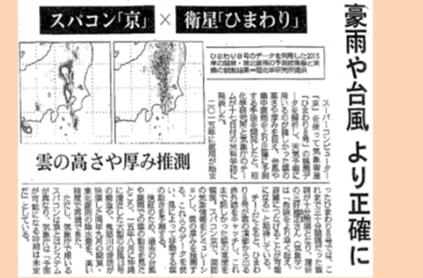
## 防災分野

### ○10分ごとに更新する気象予測

#### —「京」と気象衛星ひまわり8号による天気予報の革新—



2015年8月の台風第13号のシミュレーション

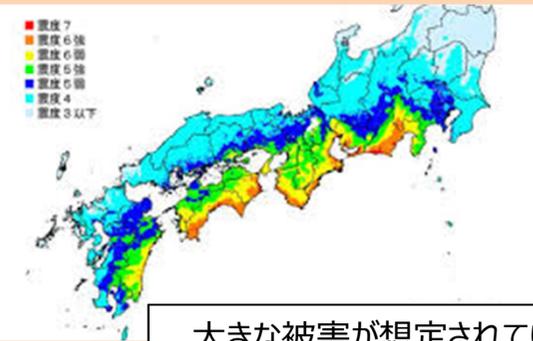


平成30年1月18日 東京新聞

気象衛星「ひまわり8号」のデータと、シミュレーションを融合する「データ同化」による数値天気予報。1時間ごとに更新されていた気象予測が10分ごとに更新できるようになり、将来の予報に革新をもたらすと期待。

本研究チームの参加機関として気象庁気象研究所が所属しており、2年前、気象庁でも新たなスパコンを導入。本研究成果の社会実装が見込まれる。

### ○「京」を用いた長周期地震動シミュレーションと内閣府防災計画への貢献



南海トラフ地震の地表の揺れのシミュレーション

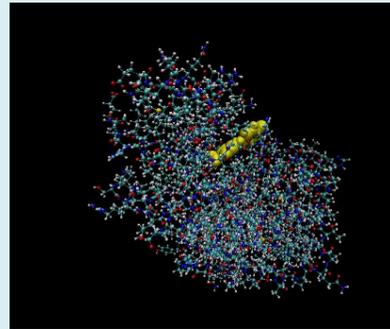
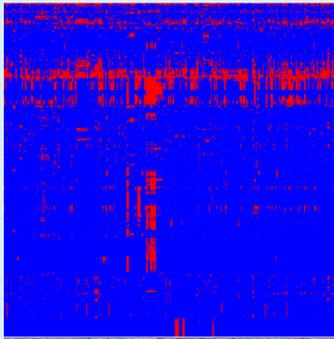
大きな被害が想定されている南海トラフ地震が発生した際の長周期地震動の揺れが各地にどのように伝わるか、特に超高層建築物に対する影響について、「京」を用いて詳細にシミュレーション。超高層建築物の揺れは沿岸や内陸の一部地域で最大250cm/秒になることを推定。内閣府防災に置かれた「南海トラフの巨大地震検討会」においても当該シミュレーションが活用され、国の南海トラフ地震対策が推進されている。(「京」以前：演算困難)

# 「京」の成果 具体例②

## 医療分野

### ○インシリコ創薬基盤の構築

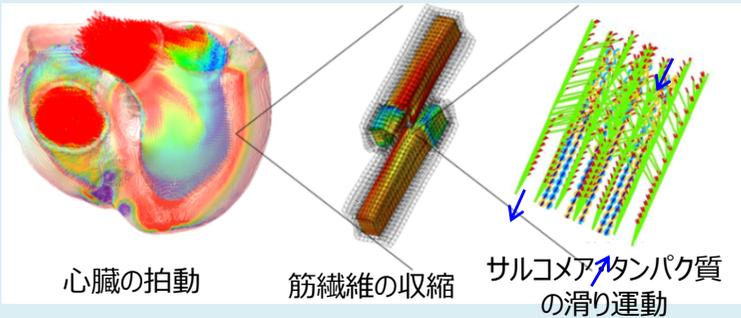
※インシリコ創薬：計算機による創薬。製薬業界の課題である開発費を抑えながら効率的な新薬開発に寄与



タンパク質と化合物の結合シミュレーション

「京」を用いた創薬研究に製薬企業11社が参画。たんぱく質と化合物の結合予測を世界最大規模で達成し、医薬品開発の成功確率向上と迅速化により、我が国製薬産業の競争力向上に貢献。現在、この成果が各企業で活用され、独自の医薬品開発が進められている。  
(「京」以前：約17年 → 「京」：約1週間)

### ○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



「京」で心臓全体の詳細なシミュレーションを実現。心臓の難病の一つである肥大型心筋症の病態解明に向け、サルコメア内の収縮タンパクから細胞・心臓の動き、血行動態までを統合して解析することに成功。  
(「京」以前：約2年 → 「京」：1日 ※拍動1回分の計算)

## 産業分野

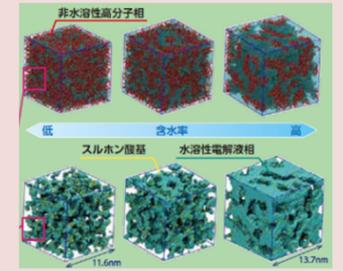
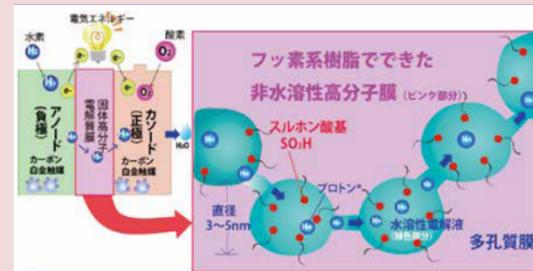
### ○SPring-8、J-PARC、「京」を連携活用させた 新材料開発技術を採用したタイヤが製品化



平成30年3月5日  
日経新聞 (全面広告)

SPring-8、J-PARC、「京」を活用した高度なシミュレーション解析により、低燃費性能とグリップ性能を高次元で維持しながら耐摩耗性能を従来品から51%向上することに成功。  
住友ゴム工業が、耐摩耗性能を大幅に向上させた低燃費タイヤ「エナセーブ NEXT II」を発売。

### ○燃料電池として有力な水素電池の電解質膜の構造を明らかに



名古屋大学と旭硝子が連携し、水素電池の電解質膜における原子の挙動を「京」を通じて1,000万個レベルでシミュレーションし、多孔質の複雑な構造をもつことを確認。この結果が企業による、より理想的な電解質膜 (薄くて強靱、プロトン伝導性が高い等) の開発に活用されている。  
(「京」以前：数か月 → 「京」：16日)