

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
1	1	細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション 研究代表者: 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年度末までに、京を活用した大規模な分子動力学シミュレーション、粗視化ダイナミクス、一分子粒度シミュレーションを可能とし、細胞環境を露わに考慮した生体分子の動力学(細胞内分子ダイナミクス)を実施する。 それにより、細胞質での分子混雑環境がタンパク質構造や信号伝達に及ぼす影響や、核内でのヌクレオソームやクロマチンなどの機能発現の分子機構について、X線結晶構造解析だけでは不可能な動力学的理解と予測を実現する。	「京」以外では不可能な世界最大級の1億原子を含むバクテリア細胞質内分子混雑の全原子分子動力学に成功し、細胞内の分子混雑環境が蛋白質のダイナミクス、安定性、水和、分子認識などに与える影響などについて原子レベルでの解明につながる知見を得た。ヌクレオソーム、クロマチンの自由エネルギー計算もレプリカを並列化して初めて実現した超大規模計算であり、転写制御という重要な細胞機能に関する多くの知見を得た。 (補足) また、粗視化分子モデルや一分子粒度モデルを併用することで、計算の規模ではなく、研究対象の規模の拡大と長時間の振る舞いのシミュレーションに成功した。さらに、実験とシミュレーションを組み合わせるために、MD/SAXS法を提案し、X線溶液散乱プロファイルを利用することで溶液中のヌクレオソームの構造を正確に予測した。 以上をまとめると、京を用いた分子動力学計算の大規模化と自由エネルギー計算による定量的な評価、全原子と粗視化モデルの利点を組み合わせたマルチスケールシミュレーション、さらに実験と計算のタイトな連携を実現し、生体分子シミュレーションの可能性を大きく広げる結果となった。	○着実に達成
	2	創薬応用シミュレーション 研究代表者: 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年度末までに、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計算創薬法の有用性検証を行う。	標的タンパク質と薬候補化合物の安定構造を分子動力学計算で求めた後に、「京」上でMP-CAFE法を用いて1kcal/molの精度で結合自由エネルギーを計算する事が可能となり、ガン治療標的キナーゼで薬理活性が高い化合物を発見することができた。さらにバイオ医薬品(抗体医薬品)の設計も行い、どちらも前臨床試験を実施中である。 (補足) 疾患治療標的タンパク質に結合する薬候補化合物をフラグメント最適化法で設計し、分子動力学計算で標的タンパク質との結合構造の安定性を調べて、「京」上でMP-CAFE法を用いて結合自由エネルギーを計算した。この計算データから新薬として市場価値がありそうな新規化合物を選択して合成を行いウェット実験でその薬理活性を測定した。その結果、計算値と実験値の誤差が1kcal/mol以内に収まる事を確認すると共に、ガン治療標的キナーゼで薬理活性が高い化合物を発見した。平成26年10月より連携する製薬企業でこの化合物に対する動物実験を進めている。 バイオ医薬品ではマウス抗体のヒト型化と結合力を増強する為のアミノ酸置換を設計し、平成26年末より先端研で動物実験を進めている。この様に二つの創薬標的の薬設計で分子動力学計算の有用性を示した。また応用面だけではなく、抗原に抗体が結合する時にCDRループが大きな構造変化を起こすメカニズムや、抗原抗体反応で測定されるエントロピーとエンタルピーの変化の起源を突き止めて、どの様な要素が抗原と抗体の結合強度に影響しているかを明らかにした。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
1	3	予測医療に向けた階層統合シミュレーション 研究代表者: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年度末までに、分子、細胞レベルからの心臓シミュレーションを実現し、医療分野での検証を行う。また、筋骨格シミュレータ、脳神経系シミュレータを統合し、医療機関と連携して神経疾患による運動機能障害(パーキンソン病)の症状の再現によって検証を行う。	マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heartは、分子から細胞、心臓全体までの3階層統合シミュレーションに世界で初めて成功し、現在、臨床データを用いた病態予測の段階に進んでいる。また、脳神経系シミュレータと筋骨格系のシミュレータと統合し、全身の脳神経-筋骨格系統合モデルを構築。パーキンソン病で見られる脳波の振動の再現することに成功している。 (補足) マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heartは、サルコメアレベルから心筋細胞、心臓全体までの3階層統合シミュレーションに世界で初めて成功し、計算科学の分野に大きなインパクトを与えた。このシミュレータはすでに臨床データを用いた病態予測の段階に入っており、小児先天性心疾患の手術後の予測が精度よく行えることなどが臨床結果との比較で示されている。 脳神経系シミュレータNESTは、「京」上で17億3,000万個の神経細胞、10兆4,000億個のシナプス結合を有する世界最大の神経ネットワークシミュレーションに成功。このNESTを筋骨格系のシミュレータと統合し、全身の脳神経-筋骨格系統合モデルを構築。パーキンソン病の脳モデルが振戦や固縮などの病態を引き起こすかどうかシミュレーションを実施し、パーキンソン病サルの実験で観測されている脳波の振動(15ヘルツ:βバンド)を再現することに成功。そのシグナルが視床で約半分の周波数になり、大脳皮質、脊髄から筋線維へと伝わり、パーキンソン病特有の手の震え(振戦)に繋がることを発見した。	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
1	4	大規模生命データ解析 研究代表者: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、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、メタゲノム解析等を行う。これにより、個別化医療の理解、ゲノム情報の産業利用等に貢献する。	平成27年度末までに、大規模生命データ解析を行う基盤を構築し、がんの遺伝子発現データに関する世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析、及び、知見の少ないがん腫400サンプル以上を解析、ヒトメタゲノムの全ゲノム解析を10分程度で実施し、医療、創薬に貢献する知見を得る。さらに、白色脂肪細胞が、寒冷刺激により大量の熱を産生するベージュ脂肪細胞に転換する過程における1万遺伝子以上からなる大規模ネットワーク解析を実施し、生活習慣病の防止に向けて、そのメカニズムに関する知見を得る。	主ながん腫について多数のがん試料の薬剤に対する感受性・耐性データ等から、全遺伝子ネットワーク解析を実施し、個々人に対する感受性予測とバイオマーカー同定法を構築した。426例の成人T細胞白血病・リンパ腫症例(ATL)データを網羅的に解析し、ATLのシステム異常の全貌を明らかにし、新規治療薬の開発に向けた標的を発見した。ヒトメタゲノム解析により、海外渡航歴がなくコレラ毒素Bワクチン摂取歴もないが、コレラ毒素B抗体をもつ人の謎を解明した。大規模遺伝子ネットワーク解析により、マウスの白色脂肪細胞がアンチメタボ細胞へ変身する分子メカニズムの全容を解明した。 (補足) サンガー研究所のGenomics of Drug Sensitivity in Cancerデータは、主ながん腫について700以上のがん試料の遺伝子発現データと138の薬剤に対するそれぞれのがん試料の感受性・耐性を表すIC50データを提供している。このデータから6万以上の全遺伝子を対象とした世界最大規模の遺伝子ネットワーク解析を実施し、世界最高精度の個別化抗がん剤投薬基盤を構築した(PLoS One 2014,2015)。ATLは西日本の風土病ともいわれ、これを過去最大規模で解析し(426試料、内48試料は全ゲノム解析を実施)、ATLのゲノム、RNA、エピゲノム、ウイルス挿入等のシステム異常の全容が世界で初めて明らかになり、T細胞受容体/NF-κB経路の異常(90%)や新規治療薬の開発に向けた標的を発見した(Nature Genetics 2015)。ヒト糞便メタゲノムの全ゲノム解析が10分以内に可能になったことで、コレラに対する交差抗原を誘導出来る常在菌の同定が急速に進み、これまで原因不明であったコレラ毒素B抗体をもつ人の謎を解明した(通常の16s解析では解明不可能)(論文準備中)。 さらに、vivo及びvitroデータで、1万遺伝子規模の遺伝子ネットワーク解析を実施し、IL-1βという炎症に関与する生理活性物質と熱産生のメカニズムが初めてつながり、白色脂肪細胞がアンチメタボ細胞へ変身する分子メカニズムの全容を解明した(Cytokine 2016)。	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
2	1	相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明 研究代表者: 今田正俊(東大)	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。	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。	物性物理学の大きなテーマである強相関電子系の難問に対して、高精度な量子多体状態計算手法を開発し、第一原理的に解明して答える道筋を確立した。これを用いた銅酸化物高温超伝導体および鉄系超伝導体の非経験的計算で多くの実験結果の説明に成功し、超伝導発現機構を解明して、高特性超伝導を得る指針を示すなど、高温超伝導研究を大きく前進させた。また進展著しい非平衡実験の解析手法やエネルギー変換の高効率化原理も見出し、新たなトポロジカル状態を予言し、量子相転移についても未踏の大規模計算で理解が進んだ。 (補足) (1) 高温超伝導機構解明や制御法の開拓に関する研究 鉄系超伝導体の第一原理有効模型を用いて、実験相図の再現に成功し、これをもとに電荷ゆらぎが超伝導を引き起こす機構であることを解明。銅酸化物の電子構造(ギャップ構造)を超伝導相と常伝導相で解明。超伝導と常伝導で定説と異なるギャップ構造を発見し、高い転移温度を生み出す隠れたフェルミオンの存在を発見。鉄系超伝導体と銅酸化物に共通する双安定構造による超伝導機構を提唱。 銅酸化物界面を含む界面・薄膜の実験での超伝導特性がバルクより優れている原因が界面での不均一性の回避にあることを発見し、超伝導設計指針を提供。 (2) 新量子相発見(予言)や機構解明に関する研究 反強磁性絶縁体中の磁壁が可動トポロジカル界面(位置を制御可能な、トポロジカルに保護された金属状態)となる例を初めて予言し、実験で実証された。トポロジカル相の新たな機能の発見と概念の革新で応用の可能性を広げた。 (3) 強相関電子系の励起ダイナミックスの研究 ① 強い非平衡状態に置くことで平衡状態の物性を解明するための新たな実験手法とその解析法の理論を構築した。② 散逸が太陽電池におけるエネルギー変換の効率化に寄与する機構を解明した。③ 大型実験施設の実験との連携解析が進んだ。 (4) 量子モンテカルロ法による新しい量子相・量子臨界現象に関する研究 新奇量子相転移である脱閉じ込め転移の様相、特に転移の次数、臨界指数、隠れた対称性などを前人未踏のサイズの計算により明らかにした。 (5) スピン軌道相互作用系の解明 量子スピン液体の典型例であるKitaエフスピン液体の候補物質がなぜスピン液体にならずに磁気秩序が生じるかを第一原理的に解明。これをもとにスピン液体への近さの特徴を実験的に捉える方法を提案。さらにスピン液体実現の指針を提唱。 以上の成果は第一原理手法と大自由度格子ソルバーの開発応用により得られた。	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
2	2	電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開 研究代表者:天能精一郎(神戸大)	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。	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。	高精度量子化学計算手法(F12法)の高効率な超並列実装を行い、世界最大規模のポストハートリー・フォックレベルの計算を実現した。これをルイス塩基-フラーレン複合体に適用し、有機電子材料として有望な物質候補を複数発見した。またこれまで経験的な計算で示唆されていた分散相互作用による物質の形成機構を、高精度量子化学計算で数値的に示した。高並列化したフラグメント分子軌道法等により、光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究も大きく進展した。 (補足) (1) 高精度電子状態計算による分子の微細量子構造予測に関する研究 分子求積法を用いることにより、完全基底関数極限に近い結果を与えるF12電子状態理論の高効率な超並列実装を行い、京コンピュータによる世界最大規模の計算を実現した。さらに、高次電子相関手法の整備の一環として、これまで符号問題が顕著で取り扱いが困難であった強相関系や一般的な励起状態のための手法開発を行い、エネルギー依存する有効ハミルトニアン の定式化を用いて、一般的な励起状態が厳密解に収束する全く新しいモデル空間量子モンテカルロ法の開発に成功した。 (2) 光合成酸素発生中心の構造とスピン状態に関する研究 柳井グループが「京」を用いずに行った、光合成酸素発生中心であるマンガンクラスターの量子多体計算を受けて、「京」を用いた複数の理論研究を行った。フラグメント分子軌道計算により、リガンドタンパク質から活性中心への電子移動量とその部位が特定され、定量的な議論に必要なリガンドの領域も明らかになった。モデル空間量子モンテカルロ法を用いて活性中心のスピン状態も得られた。また、スピン射影を施した射影ハートリー・フォック(PHF)法による構造最適化に成功し、スピン混入による顕著な構造変化が存在することを見出したほか、ENDORスペクトルの実験結果を定量的に正しく再現する事を示した。本研究は、人工光合成系の開発にも繋がる成果である。	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
2	3	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 研究代表者: 押山淳(東大)	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。	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。	密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算を、並列化に有利な実空間差分法を用いて高効率実装し、半導体ナノ構造の第一原理電子状態計算を実現して、2011年のゴードンベル賞を受賞した。開発したコードRSDFTは、「京」全ノードを使用した10万原子超のSiナノワイヤモデルに対するベンチマークにおいて、最終的に実行効率51.7%を達成した。また、オーダーN法によるCONQUESTにより、100万原子超の半導体構造の計算を可能とした。また、時間密度汎関数理論に基づき、電子状態変化と電磁場の時間変動と組み合わせた第一原理動力学計算を、世界で初めて実現した。 (補足) (1) RSDFTは、SCF計算、原子構造最適化、バンド計算などの基本的な機能に、バンドアンフォールディング計算、孤立系境界条件計算などの追加機能を含めたバージョンをgithub上で公開した。同じく差分法を用いる第一原理分子動力学法プログラムRS-CPMDも、大幅な高度化に成功した。 (2) 伝導計算の可能な差分法プログラムRSPACEも「京」用に改良した。SiC-MOS界面のキャリア伝導特性計算は、SiCパワーデバイス開発研究の方向性を決めるなど、実験グループとの議論に活用されている。 (3) 構造計算に適したオーダーN法による第一原理計算プログラムCONQUESTの並列化効率向上も、ほぼ目標通りに達成された。「京」を全ノード用いて、数百万原子系に対する第一原理計算が実用的な速さ(1ステップ5分程度)で計算可能となった。これにより、Geナノ構造ハット(小屋型)クラスターの成長における重要な過程を明らかにした。 (4) ナノ構造時空場に対する実空間手法の適用 孤立分子系から3次元周期系、更に表面・界面系に至るまで、種々のナノ構造体における光励起電子ダイナミクスを記述する超並列大規模計算法(GCEED及びARTED)を独自開発した。電子・電磁場ダイナミクスをカップルさせて実在系の光励起電子ダイナミクスを扱うことができるプログラムは殆ど存在せず、世界に先駆けて新奇光・電子機能デバイスのメカニズム提案と理論設計を進めることが期待できる。	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
2	4	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 研究代表者：岡崎進(名大)	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。	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。	クーロン相互作用を高精度に取り扱った最速の高並列分子動力学法プログラムMODYLASを開発し、小児マヒウイルスカプシドと溶液からなる1000万原子系の計算を実現して、その構造安定性をもたらす分子機構を解明した。また感染初期過程であるレセプターCD155との引力相互作用を、自由エネルギーレベルで明らかにした。また、FMOによる2.4万原子系での全電子計算より、目標としていたインフルエンザウイルスのたんぱく質構造安定性に関する知見を得た。他プロジェクトや企業に開発したアプリケーションの利用と共同研究が広がり、大きなインパクトを与えた。 (補足) (1)小児マヒウイルスカプシドの分子科学 ウイルスカプシドの構造安定性の分子機構を解明し、さらに感染初期過程であるレセプターCD155との引力相互作用を自由エネルギーレベルで明らかにした。さらには、新規に設定したB型肝炎ウイルスについても、RNAを含む系の準備が順調に進んでおり、AMEDでの共同研究、ポスト「京」における重点課題①での研究が円滑にスタートしつつある。 (2)インフルエンザウイルス阻害剤の分子設計に関する研究 新規候補化合物の提案までには至っていないが、化合物との相互作用の全電子計算を可能とし、方法論的には十分目標を達成した。	◎大幅に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
2	5	エネルギー変換の界面科学 研究代表者: 杉野修(東大)	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。	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、および、リチウムイオン2次電池の電極と電解質の界面の電子移動と性能劣化、変換効率の関連を解明する。	電極-溶液界面に電位差を印加する独自の手法を、世界に先駆けて高並列第一原理分子動力学法プログラムに実装し、燃料電池の現実的な電極界面モデルを用いたエネルギー変換過程の動力学シミュレーションを初めて実現して、反応機構の解析に成功した。リチウムイオン二次電池の電解液の劣化過程を明らかにし、添加剤の設計指針に資する知見が得られた。また、実験で明らかになった高濃度電解液の優れたイオン輸送特性や耐久性に関する、理論的裏付けを与えた。尚、時間発展計算の重要性が増したため、計算規模は最大2000原子相当で実施した。 (補足) (1)ESM法による電極界面計算 電極界面に電位差を印加する方法(ESM)とそれを制御する方法(ポテンシオスタット)に関しては世界に先んじて開発することができ、現在応用計算が進んでいる。反応自由エネルギー計算の並列化が進み計算の効率化に大きく貢献した。 (2)STATEによる多自由度系の反応経路探索 stat-CPMD, STATEの並列化は着実に達成させた。stat-CPMDを用いた大規模計算を果たしたが、STATEはサイズの増加と共に数値的不安定化するためサイズを縮小しての応用計算となった。 (3)第一原理分子動力学計算 stat-CPMDを用いたリチウムイオン二次電池の研究が著しく進み、反応機構や膜形成機構に関して多くの知見を得ることができた。	○着実に達成
	6	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 研究代表者: 田中秀樹(岡大)	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。	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。	本プロジェクトで開発された高精度高並列分子動力学法プログラムMODYLASを用いて、メタンハイドレート分解の従来にない大規模なシミュレーションを行い、水中でのメタンの泡の生成が融解速度に大きな影響を与えるという機構を解明した。さらに、塩やアルコールなどの溶質が分解機構に与える効果を明らかにし、メタンハイドレートの効果的活用に必要な知見を得た。尚、MODYLASは1000万原子系の計算は可能であるが、本研究では10万原子系程度が効率よく計算できることがわかった。 (補足) 水素ハイドレートに関する統計力学的な理論を完成させ、その相図を描くことに成功した。生成過程については、水素の代用としてテトラヒドロフランやエチレンオキシドをゲストとした大規模計算を実行しており、それらについての論文を執筆、投稿中である。メタンハイドレートの分解については、主にMODYLASパッケージを用いて、従来にない大規模な計算を行い、水中でのメタンの泡の生成が融解速度に大きな影響を与えるという機構を解明した。さらに、塩やアルコールなどの溶質が分解機構に与える効果を明らかにした。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
2	7	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 研究代表者：香山正憲（産総研）	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。	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。	金属に適用可能な高並列化されたオーダーN法第一原理電子状態計算プログラム（OpenMX）を開発して、これまでにない、5,000原子程度の大規模な鉄鋼材料の計算を実現し、目標としていた鉄鋼材料中の異相界面（鉄／析出物界面構造の整合・部分整合遷移）や転位（鉄中のらせん転位芯と添加元素との相互作用）の物性を解明した。また、ミクロ情報をフェーズフィールド法でメゾ・マクロに連結する手法開発についても初期段階の定式化を行うことができた。（本課題は平成24年4月に新設されたものである） （補足） (1)析出物と母相金属の異相界面の大規模第一原理計算 Fe/TiCの部分整合界面について、金属系で大規模第一原理計算を、わが国独自のOpenMXコードで達成し、整合界面と比較することで整合→部分整合の遷移の臨界サイズを高精度に見積もることに成功した。初めて得られた部分整合界面の水素の捕獲について、新規の情報が得られた。また、局所エネルギー・局所応力法（QMASコード）により、異相界面の結合やmisfit応力の起源について掘り下げた情報が得られた。 (2)転位の構造や転位と固溶原子との相互作用の大規模第一原理計算 Fe中のらせん転位芯と添加元素の相互作用の大規模第一原理計算（OpenMXコード）をsystematicに行い、周期表の一連の元素で相互作用が特徴のある変化を示すことを見出した。材料設計上、極めて有益な成果である。 (3)添加元素の偏析した粒界の構造や力学挙動の大規模第一原理計算 Fe中の粒界での一連の添加元素の偏析について、局所エネルギー・局所応力法（QMASコード）を適用し、偏析機構と元素依存性について、従来にない掘り下げた解明に成功した。 (4)フェーズフィールド法に繋げる手法の検討 第一原理解析からのミクロ情報をメゾ・マクロのフェーズフィールド法に連結する手法開発について、第一原理から基礎方程式の定式化に成功した。今後の発展に繋がる成果である。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
3	1	地球規模の気候・環境変動予測に関する研究 研究代表者：木本昌秀（東大大気海洋研）	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20 kmから7 km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。	全球雲解像モデルを用いて、温暖化時には台風の強風域が広がることなどを示したほか、マッデン・ジュリアン振動については1ヵ月先、台風発生については2週間先まで予測が可能であることを示した。さらに世界で初めて1 km以下の格子での全球大気のシミュレーションに成功した。 (補足) 14～3.5 kmメッシュの全球雲解像モデルによる、地球温暖化時の台風の変化を計算しデータセットを整備した。解析の結果、地球温暖化により台風の強風域が広がるなど、構造が変化することが示されており、今後地球温暖化適応策への貢献が見込まれる。 全球雲解像モデルを用いて、マッデン・ジュリアン振動については1ヵ月先、台風発生については2週間先まで予測が可能であることが明らかになった。今後気象庁の予報改善への貢献が見込まれる。 全球14～0.87 kmメッシュの全球雲解像モデルによる計算を実行し、個々の雲の表現に必要な解像度や、気象擾乱ごとの雲の形態の違いを明らかにし、世界の気象学界に大きなインパクトを与えた。 超高解像度全球大気モデルNICAMの効率化・高度化にむけた開発を行った。特に、今後の計算機環境での高速化・調整に資するため、全球非静力学モデルの力学コアを分離し、2条項BSDライセンスで公開した。また地球変動予測パッケージの基盤となるカブラ開発やそれを用いたフレームワークの設計を行った。	◎大幅に達成
	2	超高精度メソスケール気象予測の実証 研究代表者：斉藤和雄（気象研）	データ同化技術およ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、集中豪雨などのシミュレーションを行って、解析予測システムの計算精度を検証する。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、積乱雲を表現できるように、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15 kmから2 kmに引き上げ、大規模実証試験により、集中豪雨など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。	最先端の4次元データ同化技術を雲解像モデルに適用し、雲スケールの詳細な観測データを同化する実験を行い、メソスケール対流系の力学的直前予測の可能性を実証した。非静力学モデルに基づくアンサンブル解析予報システムを開発し、時間・場所・強度を特定して定量的に集中豪雨を確率予測する可能性を実証した。 (補足) 2重偏波レーダーデータや高密度の地上観測データを水平格子間隔350 mで同化し、2012年5月につくばに竜巻を発生させたメソスケール対流系の力学的短時間予測実験を行い、ダウンスケール実験により竜巻に対応する強い渦が再現されることを示した。ハイブリッド4次元変分法、アンサンブル変分同化法を開発し、従来の4次元変分法や局所アンサンブル変換カルマンフィルタとの精度比較を行った。 非静力学モデルに基づくアンサンブル解析予報システムを開発し、平成24年7月九州北部豪雨の事例について、3時間に50 mmを超える強雨が発生する確率分布を求め、定量的に集中豪雨を確率予測する可能性を示した。伊豆大島や広島での豪雨事例を対象とする水平格子間隔250 mでの広領域の超高解像度予報実験を行った。また分布型降雨流出・洪水氾濫モデルやラグランジュ土石流モデルの「京」への最適化を進めた。 台風全域を対象とするLES実験、水平格子間隔10 mでの竜巻の再現実験など世界に類を見ない超高解像度での数値実験を行い、台風に伴う境界層内のロール構造や竜巻の詳細構造の解析を行った。ピン法雲物理過程モデルを開発しバルク法モデルとの比較を行った。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
3	3	地震の予測精度の高度化に関する研究 研究代表者: 古村孝志(東大地震研)	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、短周期地震動を含む広帯域の地震動評価を行う。これにより、木造家屋などの短周期構造物から超高層ビルなどの長周期構造物まで、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技術を開発する。	地震発生予測、地下構造推定、地震波伝播・強震動予測の三つの要素に関するシミュレーションを結合して、地震発生～地震波伝播～強震動・長周期地震動発生連成シミュレーションに成功したほか、南海トラフ地震の強震動・長周期地震動、地殻変動、津波発生予測などの成果を国の中央防災会議などに提供した。 (補足) 南海トラフなどでの海溝型巨大地震の発生と、それに伴う強震動・地殻変動・津波の高精度予測に向け、①地震発生予測シミュレーション、②地下構造推定シミュレーション、③地震波伝播・強震動予測シミュレーション、の三つの要素シミュレーションの高精度モデルを整備し、「京」の高い性能を引き出すための性能チューニングを実施して、数万CPUを用いた大規模・高性能シミュレーションを開発した。これにより、従来の地球シミュレータによる計算に比べて、計算規模が50倍、分解能が2.6倍の高精度シミュレーションが実用化した。 「京」の高い計算性能を背景に、上記三つの地震シミュレーション要素モデルを結合して、それぞれの予測結果を入力として連成し、地震発生～地震波伝播～強震動・長周期地震動の発生連成シミュレーションに初めて成功した。「京」を用いて南海トラフ地震の強震動・長周期地震動、地殻変動、そして津波発生予測シミュレーションを実施し、国の中央防災会議や文科省地震調査研究推進本部に成果を提供した。	◎大幅に達成
	4	津波の予測精度の高度化に関する研究 研究代表者: 今村文彦(東北大災害科学国際研)	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年度末までに、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、津波被害の軽減対策のための基礎データを作成する。	2次元および3次元流体モデルによる高解像度で大規模な浸水計算を効率化し、建物に作用する津波の波力を考慮した津波ハザードの評価手法を高度化した。また、津波氾濫・漂流物移動・土砂移動を高精度に予測する手法(統合モデル)を開発し、現地被害(気仙沼)の再現に成功した。 (補足) 日本海溝および南海トラフ沿いを対象として、分散波理論を適用したグリーン関数群の構築を達成したことにより、リアルタイム波源推定のための理論津波波形データベースの高度化を達成した。得られたデータベースを用いた津波伝播計算を可能にする津波計算モデルを高度化した。また、従来の津波氾濫計算モデルを「京」に移植して最適化を図ったことにより、仙台平野を5 m格子でモデル化した2時間分の津波浸水解析が2分以内で計算できることを示し、リアルタイム津波ハザード予測の実現に向けて大きく前進した。津波の遡上過程を高精度に解析するための3次元流体計算の大規模並列計算に成功し、市街地における局所的な津波挙動のみならず建物に作用する流体力をも高精度に捉えることが可能とした。さらに、漂流物の移動や衝突、土砂移動による侵食・堆積に伴う地形変化を扱う計算モデルの高度化に成功した。そして、津波氾濫・漂流物移動・土砂移動を統合的に解析することができる統合モデルを開発した。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
3	5	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 研究代表者：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年度末までに、地震による都市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プログラムをそれぞれ「京」用開発する。さらに、開発したソフトを結合し、実際の都市を対象としたシミュレーションを実施し、これまで不可能であった、シミュレーションに基づく地震ハザードマップの構築に必要な基盤技術を開発する。	鉄筋コンクリート橋脚や超高層ビル、原子力発電所建屋などの構造物の高性能地震応答解析の有用性を示したほか、地盤・建物・避難を連成して行う統合地震シミュレーションを開発して、東京23区内の10 km四方の領域を対象とした計算に成功し、極めて高い時・空間分解能の地震災害・被害評価を例示した。 (補足) 構造物の地震応答解析手法の開発に関しては、材料・幾何非線形に対応する動的有限要素法を開発した。鉄筋コンクリート橋脚・超高層ビル・原子力発電所建屋の解析を行い、大型震動台を使った実験との比較などから、高性能計算を利用した構造物地震応答解析の有用性を示した。重要構造物の耐震性の評価という実用に向けた取組みに繋がっている。 都市地震応答解析手法の開発に関しては、地盤・建物・避難を連成して行う統合地震シミュレーションを開発した。東京23区内10 km四方の領域を対象とした計算に成功し、極めて高い時・空間分解能の地震災害・被害評価を例示した。従来の経験式に基づく災害・被害評価手法とは異なる、大規模数値計算による、シミュレーションに基づく災害・被害評価手法の潜在的有効性が示された。全「京」を使う優れた計算性能は計算科学の分野でも高く評価された。このため、ポスト「京」に向けた実用化を目指す研究も開始された。	◎大幅に達成
4	1	輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率・低騒音化に関する研究開発 研究代表者：藤井孝藏（東京理科大）	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(10^4 から 10^6)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。	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。	高い性能を有するシミュレータを開発、大規模シミュレーションにより、対象デバイスが優れた制御性能を有する背景を明らかにし、それを産業実利用におけるデザインガイドラインとした。この知見を活かし、複数の企業が試験を開始している。海外先端研究者による評価、多数の学術論文や基調講演が本研究の学術的意義を証明している。以上から、本デバイスが格段の性能向上や低騒音化に有効であることを実証できた。 (補足) ・本課題で用いるプログラムの高速化、周辺ツールの作成を予定通り行い、本課題で実施すべきシミュレーションを実施可能とした。本課題の利点でもある空間高分解能を有する解析手法の汎用化、および必要となる周辺ソフトウェアの整備を行った。 ・京の利用によってこれまで困難であったケース数や、より困難な条件でのシミュレーションを実施し、世界に先駆け、主たる3つの流体制御メカニズムを明らかにした。これは限られたケース数のシミュレーションでは見出しなかったと考えられる。その結果を活かして、形状や流れ条件に応じた流体制御パラメータの設定指針（デバイスデザインガイダンス）を明示した。この成果は学術面も含めて海外の同分野を先導する研究者からも高く評価されている（報告書添付の評価文書参照）。 ・小型から大型の回転機器などを対象として本デバイスによる流体制御が有効であることおよび各種パラメータの効果を明らかにした。輸送機器成果は、現在進行中の産業界との共同研究下での実験や試験に活かされている。また、高い性能を有する翼形状を凌駕する性能が実現可能であることを示すことによって本デバイスによる性能向上の価値を示した。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
4	2	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 研究代表者: 大野隆央(物材機構)	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。	平成27年度までに、非シリコン系新規材料の次世代ナノデバイス応用への計算科学的評価とナノ界面構造・形成プロセスの最適化指針を構築することを目指し、また、新規ナノ材料探索に関する解析手法、方法論等の知識基盤を構築し産業界が使える形で提供することを図る。	SiC酸化膜形成プロセスの実温度でのダイナミクス解析により、SiCパワーデバイスのナノ界面構造の最適化指針を提供した。また、グラフェン創成プロセスのダイナミクス解析などにより、実プロセス温度での解析の重要性和解析ソフトウェアPHASE/0の有効性を提示した。 (補足) ・SiC酸化膜形成プロセスの実プロセス温度での大規模・高精度な第一原理ダイナミクス解析を実施し、SiC酸化膜に関する新規な界面構造及び酸化プロセスを見出し、界面構造と界面欠陥準位などデバイス応用に対する有益な知見を得ることに成功した。この成果は、東芝との共同研究により得られたものであり、日刊工業新聞 2015年4月20日号にも掲載された。この成果により、SiCパワーデバイスの開発における重要な技術課題である欠陥の少ない良好なSiC酸化膜界面を作製する指針を提供し、SiC酸化膜に関する特許出願にも繋げ、省エネルギー社会構築のキーデバイスであるSiCパワーデバイス開発の加速に貢献した。 ・グラフェン創成プロセスの実成長温度でのダイナミクス解析等を実施し、従来の絶対零度での静的な解析では獲得が困難であったプロセス過程に関する新たな知見を獲得し、実温度ダイナミクス解析の重要性和解析ソフトウェアの有効性を示した。解析ソフトウェアPHASE/0は、ソフトウェア公開、利用講習会開催などの活動を通して、「京」産業利用枠でのPHASE/0利用をはじめ、産業界などでの利用が進んでおり、デバイス開発の現場でのシミュレーション活用を促進するものと期待される。	○着実に達成
	3	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: 加藤千幸(東大生産研)	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。	平成27年度末までに、最大で1,000億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 10^6 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。	自動車、ターボ機械、船舶、燃焼器等を対象に最大1千億グリッド規模の計算を1日で実行できるシステムを開発した。本システムにより、レイノルズ数 10^6 オーダーの乱流の直接計算が可能となり、風洞試験、水槽試験に匹敵する精度をもつ製品の予測技術が確立された。各ものづくり分野のコンソーシアム等において、本課題で開発したシステムの実証計算を実施しその有用性を確認した。 (補足) 開発したシステムを活用することにより、従来の計算技術では実現できなかった製品の予測技術が実証された。例えば、自動車に対しては、空気抵抗1~2%の予測精度を達成するとともに、走行安定性、振動・騒音等の製品性能予測技術を確認した。ターボ機械の分野では送風機・ファン内部の音源である渦の運動を全て計算することにより発生する空力騒音を数dBの精度で予測する技術を確認した。船舶の推進抵抗予測では300億グリッド(世界最大)の解析により予測精度1%以下を達成し水槽代替計算の目途を立てた。また、燃焼器に対しては実機燃焼器出口における温度およびNOx濃度、それぞれの予測精度10%、30%程度以下を達成した。これらの実証計算はものづくりの国内の主要ものづくりメーカーと連携して実施しており、今後はものづくりメーカーで構成されるコンソーシアム等を介して開発したシステムの利活用が広がることが期待される。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
4	4	多目的設計探索による設計手法の革新に関する研究開発 研究代表者: 大山聖 (JAXA)	大規模設計最適化問題のための多目的設計探索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。	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索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索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。	平成27年度までに京を用いた大規模多目的設計探索のためのアプリ群を開発した。また、京および開発されたアプリ群を利用して、JAXA、マツダ(株)、東海旅客鉄道(株)、横浜ゴム(株)が取り組んでいる実設計問題をとき、革新的な設計を得ることに成功した。 (補足) 平成27年度末までに、MOEA/D(現在世界で最も性能が良いと言われている手法の1つ)よりも性能がよい多目的設計最適化アプリCheetahなどを開発。HPC/PFとして一般にも公開。本課題で開発した設計データ解析アプリiSPMは現在18社9大学で利用されている。また多数目的設計最適化問題を応答曲面法を用いて効率的に解くための新しい探索指標も開発。 (1)マツダとの共同研究として車両構造の多目的設計探索を実施。優れた設計が多数発見され、車両構造重量最小化と共通部品点数最大化の間のトレードオフ関係が初めて明らかにされた。得られた知見により、大幅な開発・製造コストの削減と、重量を削減したことによる燃費の向上及びCO2排出量の削減が見込まれる。これらの結果は日刊工業新聞2015年2月16日号にも掲載された。(2)東海旅客鉄道との共同研究として現在開発中の超電導リニアの空力音響多目的設計探索を実施。得られた知見により、車内騒音を低減しつつ、0.1%程度の空気抵抗を削減できることが期待され、これにより超電導リニアの大幅な運航経費の削減が見込まれる。(3)横浜ゴムとの共同研究として自動車用タイヤ空力形状の多目的設計探索を実施。その結果、抵抗と同時に揚力も低減できる形状に関する革新的な知見を得ることに成功。得られた成果は横浜ゴムからニュースリリースとして発信されると共に試作品が2015年の東京モーターショーにおいて公開された。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
4	5	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 研究代表者: 中島憲宏 (JAEA)	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	平成27年度末までに、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。	平成27年度2月、高温工学試験研究炉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した。この成果である詳細な計算結果は、高温工学試験研究炉の安全審査申請活動等の補助資料として活用されている(今後も計画を継続)ことから、事業的貢献も含めて、大幅に目標達成できたと考える。 (補足) 産業応用においては、(株)荏原製作所殿が設計・製作する、一般社会インフラ・プラント向けターボポンプの一例であるビットバレル型立軸ポンプ(約9万解析部品)を対象に、 (1)「京」を使って、「組立構造解析」で「結合部を有する機械構造物」の振動解析/耐震性評価を実施し、解析結果を確認した。 (2) ビットバレル型立軸ポンプの「あるがまま」状態を丸ごとシミュレーションで実現。従来の俯瞰的な分析に加えて、局所や詳細な部位の分析を同時に可能とした。 また、千代田化工建設(株)殿が設計・施工する石油化学プラントのストラクチャと呼ばれるプラント機器を支える構造体(約15万解析部品)を対象に、 (1)「京」を使って、「組立構造解析」で耐震性評価に不可欠な数値分析計算結果の「確かさ」を大幅に向上する原理を確立した。 (2) 組立品の「あるがまま」状態を丸ごとシミュレーションで実現。従来の俯瞰的な分析に加えて、局所や詳細な部位の分析を同時に可能とした。 (3) 東北地方太平洋沖地震などの地震波を使って、機器の揺れをシミュレーションで再現し、機器や施設の開発・設計に生かし、国内外の耐震性の高いインフラ整備に貢献した。	○着実に達成
5	1	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定 研究代表者: 初田哲男(理研)	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シミュレーションによるハドロン質量の計算精度を1%に引き上げる。さらに、バリオン間の中心力やテンソル力の決定、エキゾチックハドロンに対する予言を行う。	世界最大級の物理体積でゲージ配位を生成し、ハドロン質量の精密決定(計算制度1%)に達成し、バリオン間の中心力・テンソル力の計算による決定、エキゾチックバリオンの予言にはじめて成功した。 (補足) ・物理点近傍におけるゲージ配位生成(格子サイズ=96 ⁴)を行い、安定なハドロン質量に対して、当初目標の統計誤差0.1%レベルを達成した。 ・バリオン間相互作用の中心力およびテンソル力について、京で生成した物理点近傍でのゲージ配位を用いた定量的計算を進め、核力のテンソル力、ハイペロン力の中心力とテンソル力に関して統計的に有意な結果を得ている。 ・物理点近傍でのストレンジネスを含むエキゾチックダイバリオン(HおよびΩ)に関する定量的予言を行える統計精度に達している。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
5	2	大規模量子多体計算による核物性解明とその応用 研究代表者: 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で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、京に向けた大規模量子多体計算コードを開発し、大規模量子多体計算によって、中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造の進化を明らかにする。元素合成過程の解明、長寿命核分裂生成物、二重ベータ崩壊核、という応用につなげる。さらに、いまだ未開拓な3体核力の姿を明らかにする。軽い原子核の第一原理計算においては、20個程度の核種の計算を、より困難なものを加え40個程度へ拡げる。	京に向けた大規模量子多体計算コードを開発し、大規模量子多体計算によって、中性子過剰なエキゾチック原子核の量子構造とその発現メカニズムを解明し、核力中のテンソル力成分や3体力の役割を明らかにした。長寿命核分裂生成物などの応用に繋げることに成功した。軽い原子核の第一原理計算においては、現時点でネオン20までの41個の核種についての計算を完了した。 (補足) ・大規模量子多体計算コードは、モンテカルロ殻模型計算コード開発・高度化に成功した。京で12000ノードを超える並列性能・理論性能比30%を超える高い実行効率を示した。 ・軽い原子核の第一原理計算において、目標では6主殻までだったが、一部7主殻模型空間までの計算が実行でき、模型空間にとらわれないエネルギー期待値の推定を可能とした。さらに、ベリリウム同位体のクラスター構造解明をおこなった。 ・エキゾチック原子核の量子構造の進化に関して、中性子過剰ニッケル同位体などの構造計算に成功し、「形の共存」現象とメカニズムを解明した。長寿命核分裂生成物の電気的励起モードによる高い励起エネルギーへの光吸収過程の断面積の計算に成功した。連続状態に対応する励起スペクトラムの計算を可能にしたのは、方法論における革新的進歩による計画にない発展である。また、カルシウム48のニュートリノレス二重ベータ崩壊核行列要素を求めることに成功した。 ・追加した3体核力に関して、3体力効果を2体近似によって有効相互作用にとりこむ手法を確立し、マグネシウム近傍の中性子過剰核の「反転の島」の記述に成功した。	○着実に達成
	3	超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明 研究代表者: 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、ニュートリノ加熱機構を考慮した空間3次元のニュートリノ輻射流体計算によって、これまで再現されていない重力崩壊型超新星爆発過程を解明する。一般相対論的な磁気流体計算や輻射流体計算により中性子星連星の合体過程を解き明かし、近い将来の観測研究に資する。	世界初の空間3次元のニュートリノ輻射流体計算により、ニュートリノ加熱機構による超新星爆発機構の有効性を示した。世界初の一般相対論的なニュートリノ輻射流体計算により、中性子星合体が重元素合成の有力機構であることを示した。 (補足) ・空間3次元、エネルギー空間1次元を考慮した超新星爆発に対する輻射流体計算を当初の目標通り平成25年までに当時世界で初めて実行し、ニュートリノ加熱機構が超新星爆発に有効であることを示した。 ・中性子星合体に対する一般相対論的磁気流体計算を、それ以前の世界最高解像度よりも3倍高い解像度で当初の目標通り実行し、合体時に発生するケルビン・ヘルムホルツ不安定性により1016ガウス以上の強磁場を持つ大質量中性子星が誕生することを明らかにした。 ・中性子星合体に対する一般相対論的輻射流体計算を当初の目標通り平成26年度に実行した。特に合体時に放出される中性子過剰物質が速い中性子捕獲による重元素合成に適した性質を持つことを世界で初めて示した。 ・当初の予定通り平成27年度に、超新星爆発に対する空間軸対称の輻射流体計算をボルツマン方程式を解きながら世界で初めて実行した。	○着実に達成

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	達成目標と達成時期 (中間評価時の設定目標)	達成状況	評価 ◎大幅に達成 ○着実に達成 △おおむね達成 ×未達成
5	4	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 研究代表者: 牧野淳一郎 (理研)	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、宇宙構造形成の骨組を作るダークマターによる構造形成について、現在の世界レベルに比べて2桁大きな粒子数でシミュレーションを行うことで、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する。さらに、このモデルをベースにして第一世代天体形成、銀河形成の過程をシミュレーションによって明らかにする。	ダークマターハローのシミュレーションコード開発は、目標以上の実行効率50%以上を実現した。第一世代天体形成、銀河形成の過程をシミュレーションによって明らかにした。当初計画になかった太陽対流圏シミュレーションでは世界をリードする極めて大きな成果をあげた。 (補足) ・ダークマターハローのシミュレーションコード開発は、目標以上の実行効率50%以上を実現できた。(この結果、2012年度のゴードン・ベル賞を受賞した。) ・他の課題(銀河中心ブラックホール、惑星形成、初期銀河形成)は、基本的に当初計画通りの成果を実現した。 ・当初計画になかった太陽対流圏シミュレーションでは世界をリードする極めて大きな成果をあげた。	◎大幅に達成

(参考)

HPCI戦略プログラム
25課題のターゲットとなるマーケット

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	ターゲットとなるマーケット	市場規模・出典	得られた効果・今後期待される効果
1	1	細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション 研究代表者: 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。	—	—	得られた効果: 細胞内の分子拡散を含めた原子レベルの細胞質ダイナミクスの実像の理解 転写制御という重要な細胞機能に関する多くの知見を得た 今後期待される効果: 新たな治療薬の開発、再生医療などへ活用に向けたさらなる研究の促進
	2	創薬応用シミュレーション 研究代表者: 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。	医薬品市場(抗がん剤等)	市場規模:(億円) 医薬品市場規模(日本):93,105億円(2011年) 医薬品市場規模(世界)<販売額>:9,530億ドル(2011年) 出典: 医薬品産業ビジョン2013 資料編 - 厚生労働省 抗がん剤市場(日本):8,523億円(2014年) 出典: 富士経済 https://www.mixonline.jp/Article/tabid/55/artid/52313/Default.aspx	得られた効果: 新薬開発における計算創薬の有効性の実証 (3つの薬剤候補化合物が前臨床試験に) 今後期待される効果: 今まで開発が困難であった治療薬の開発への計算創薬の応用
	3	予測医療に向けた階層統合シミュレーション 研究代表者: 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。	心臓に関する外科手術、医療機器開発 (「心臓再同期療法(CRT)」と「先天性心疾患の外科手術」における個別最適医療)	市場規模:(億円) CRT:264億円~690億円(日本) 先天性心疾患:86億円~768億円(日本) 出典: 一般社団法人日本不整脈デバイス工業会 都道府県別ペースメーカー、CRT-P、ICD、CRT-D植込台数 年次推移 http://www.jadia.or.jp/medical/index.html 日本胸部外科学会 http://www.jpats.org/modules/investigation/index.php?content_id=6 公益財団法人 日本心臓血圧研究振興会附属榊原記念病院 病名別医療費表.xlsx http://www.jhf.or.jp/topics/upload_images/%E7%97%85%E5%90%8D%E5%88%A5%E5%8C%B%E7%99%82%E8%B2%BB%E8%A1%A8.xlsx	得られた効果: 先天性心疾患の外科手術における有効性の実証。 心臓再同期療法における有効性の実証。 今後期待される効果: PMDA「先進医療」の認可取得
	4	大規模生命データ解析 研究代表者: 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、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、メタゲノム解析等を行う。これにより、個別化医療の理解、ゲノム情報の産業利用等に貢献する。	がん治療関連市場	市場規模:(億円) 抗がん剤市場(日本):8523億円(2014年) 再掲 出典: 富士経済 抗癌剤市場(日・米・欧)4兆3,794億円(2011年度) 出典: TPCビブリオテック http://www.tpc-osaka.com/fs/bibliotheque/mr310130095	得られた効果: 成人T細胞白血病リンパ腫(ATL)における遺伝子異常の解明 大腸がんの進化原理の解明 今後期待される効果: 発症の仕組みの解明や新たな治療薬、治療法の開発

分野	研究開発課題番号	課題名	研究の概要	ターゲットとなるマーケット	市場規模・出典	得られた効果・今後期待される効果
2	1	相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明 研究代表者: 今田正俊(東大)	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。	下記3の製品に要素技術を提供	市場規模:(億円) 出典:	得られた効果: 今後期待される効果:
	2	電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開 研究代表者: 天能精一郎(神戸大)	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。	下記4, 5の製品に要素技術を提供	市場規模:(億円) 出典:	得られた効果: 今後期待される効果:
	3	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 研究代表者: 押山淳(東大)	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。	・シリコンデバイス ・パワーデバイス	市場規模:30兆円(世界2012年) 出典:経産省「我が国企業の国際競争ポジションの定量的調査」調査結果(富士キメラ総研、2014年)	得られた効果: 量子効果を考慮したデバイスシミュレーション手法(電流特性)が学会や業界に認知された。 今後期待される効果: 個別に開発してきたDFT計算手法と非平衡グリーン関数法、フルバンド・モンテカルロ法、量子流体法電子論とを結合し、量子論デバイスシミュレータを開発してその動作特性を提示することにより、産業側のデバイスシミュレータ活用が本格化し、国際競争力強化に貢献する。
	4	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 研究代表者: 岡崎進(名大)	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。	・抗ウイルス剤	市場規模:100兆円(製薬世界2012年) 出典:経産省「我が国企業の国際競争ポジションの定量的調査」調査結果(富士キメラ総研、2014年)	得られた効果: 小児麻痺ウイルスの丸ごと計算によるカプシドの特性を示すことで実験家の興味を引き、厚労省の「肝炎等克服政策研究事業」B型肝炎抗ウイルス剤開発プロジェクトでの共同研究へと展開した。 今後期待される効果: 上記プロジェクトにおいて、抗ウイルス剤の製造課程に、開発してきた計算手法が応用される可能性がある。
	5	エネルギー変換の界面科学 研究代表者: 杉野修(東大)	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。	・リチウムイオン電池 ・燃料電池	市場規模: (リチウム)4兆円/2020年 出展:㈱日本制作投資銀行「蓄電池産業の現状と発展に向けた考察(2013)」 (燃料電池)6.5兆円/2030年 出典:富士経済グループ「燃料電池システム・主要スタック部品の世界市場を調査(2015)」	得られた効果: (リチウム)共同研究を実施する富士フィルムでの材料探査への利用が本格化。 (燃料電池)実験家との共同提案に発展し、NEDOのPjに採択。 今後期待される効果: (リチウム)産総研で立ち上げた産学連携の「電気化学界面コンソーシアム」の活動を活性化させることで、計算手法を普及させ、電池産業の競争力を強化 (燃料電池)白金代替電極の候補材料を計算で推測し実験で試作して特性を示すことで、計算科学が実験をリードすることが定常化される。

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	ターゲットとなるマーケット	市場規模・出典	得られた効果・今後期待される効果
2	6	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 研究代表者：田中秀樹（岡 大）	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。	・メタンハイドレート	市場規模：3.3兆円 出典：経済産業省（2016.3発表）	得られた効果： 産総研メタンハイドレート研究センターとシンポジウム実施し関 係構築 今後期待される効果： メタンハイドレート採掘条件等への計算結果のフィードバック等
	7	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 研究代表者：香山正憲（産 総研）	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。	・鉄鋼材料	市場規模：100兆円（世界2012年） 出典：経産省「我が国企業の国際競争ポジ ションの定量的調査」調査結果（富士キメラ 総研、2014年）	得られた効果： 新日鉄住金と共同で、鉄の性質を第一原理計算によるミクロな 視点からの説明を可能とし、大規模計算の威力を示すことがで きた。 今後期待される効果： 製造プロセスを考慮したマルチスケール計算による材料特性予 測と新材料探索を、データインフォーマティックスの手法を用いて実 施することで、世界最先端の材料開発手法を確立し、国際競争力 強化につなげる。
3	1	地球規模の気候・環境変 動予測に関する研究 研究代表者：木本昌秀（東 大大気海洋研）	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。	気象予報、気象情報提供事業 地球温暖化適応事業	自然災害による被害総額：10,000億円 防災関連予算：32,000億円 【出典】平成26年度 特許出願技術動向調査報告書（概要）防 災・減災関連技術（特許庁） https://www.jpo.go.jp/shiryou/pdf/gidou-houkoku/26_5.pdf 気象情報提供事業市場規模：300億円 【出典】 気象情報の 産業的活用の拡大 - 三井物産 戦略研究所 http://mitsui.mgssi.com/issues/report/r1305q_hirata.pdf	得られた効果： 戦略プログラムの研究成果について、日本を含む世界の気象機 関の予報データと比較する等気象庁開発部門との連絡を密に 行っている。 今後期待される効果： 次期IPCC報告書等を通じた成果の発信により、国内外の温暖化 適応策推進への貢献が期待される。 気象庁の次世代気象予測システムの設計に貢献が期待される。 熱帯諸国への延長予測の発信が加速されると期待される。

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	ターゲットとなるマーケット	市場規模・出典	得られた効果・今後期待される効果
3	2	超高精度メソスケール気象予測の実証 研究代表者：斉藤和雄（気象研）	データ同化技術およ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、集中豪雨などのシミュレーションを行って、解析予測システムの計算精度を検証する。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。	気象と水文の高精度予測に防 災・減災対策（事前避難、ダム管理等治水） 交通（航空、道路、鉄道）、農業生産、再生可能エネルギー（太陽光、風力）、熱中症対策、大気汚染	自然災害による被害総額：10,000億円 防災関連予算：32,000億円 【出典】平成26年度特許出願技術動向調査報告書（概要）防災・減災関連技術（特許庁） https://www.jpo.go.jp/shiryou/pdf/gidou-houkoku/26_5.pdf 風水害等による保険金の支払い（自動車）：60～270億円 【出典】風水害等による保険金の支払い（一般社団法人日本損害保険協会調べ） http://www.sonpo.or.jp/archive/statistics/disaster/ 農業総産出額（平成26年）：8.36兆円 【出典】農林水産基本データ集（農林水産省） http://www.maff.go.jp/j/tokei/sihyo/pdf/kihon_160301.pdf 再生可能エネルギーの電力コスト（2013年度）：5000億円 【出典】再生可能エネルギー投資の現状と課題（三井住友トラスト基礎研究所） https://www.smti.jp/report_column/infra_iv/st/pdf/InfraUPDATES_Renewable.pdf	得られた効果： 戦略プログラムには気象研究所を含む気象庁開発部門が中心的メンバーとしても参加しており、気象庁との研究懇談会や施設等研究発表会、数値予報課コロキウムなどで随時情報提供を行っている。 これまでに平成26年12月15日に気象庁大会議室で開催された「平成26年度観測部・予報部と気象研究所の研究懇談会」において「HPCI戦略プログラム 超高精度メソスケール気象予測の実証」の演題で実施責任者が講演を行い、当該プログラムでの科学目標について説明するとともに、アンサンブルカルマンフィルタを用いた平成24年九州北部豪雨と平成24年5月のつくば竜巻についての同化・アンサンブル予報実験、平成26年8月広島での土石流災害の豪雨についての超高解像度数値予報実験に関する成果を紹介した。また平成28年1月13日に気象庁講堂で行われた「平成27年度気象庁施設等機関研究報告会」においても同様の演題で講演を行い、上記に加えて大気海洋結合モデルによる多数例の台風強度予報の結果、平成25年10月の伊豆大島での土石流災害の豪雨についての超高解像度数値予報実験を含む当該プログラムの成果について講演した。これらの会合には、気象庁長官・予報部長など気象庁幹部および予報部数値予報課長・数値予報班長を含む気象庁開発部門の責任者が出席している。また数値予報課コロキウムや気象庁技術開発推進本部モデル部会メソモデルグループ会合などでも、大気海洋結合モデルや観測空間での局所化を取り入れたアンサンブル変分同化法などに関して実務者間でより詳細な技術情報の提供を行っている。
	3	地震の予測精度の高度化に関する研究 研究代表者：古村孝志（東大地震研）	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。	高性能スパコンを用いた国（文科省地震本部、内閣府地震火山防災）や地方自治体が進める地震被害想定と適切な被害軽減施策の策定のための、大地震の地震発生シナリオ（震源断層モデル）の設定や、これによる地震動の評価シミュレーションへの活用が期待される。その他、構造物の安全評価のために、地震動シミュレーションは建設・設計会社、コンサルタント、ゼネコン等で必要とれており、高性能スパコンの活用により、計算精度の大幅な向上が期待できる。	南海トラフでの最大級の地震による経済損失：220兆円 【出典】南海トラフ巨大地震の被害想定について（第二次報告）～ 経済的な被害 ～（中央防災会議 防災対策推進検討会議 南海トラフ巨大地震対策検討ワーキンググループ） http://www.bousai.go.jp/jishin/nankai/taisaiku_wg/pdf/20130318_shiryo3.pdf 国は、被害の半減を目標に掲げており、その想定的前提となる震源モデルと地震動の予測精度の高度化が果たす効果は大きい。	得られた効果： 地震発生確率を、従来の限られた地震履歴からの評価から、地球活動データを入力とするシミュレーションに基づいて適切に予測する、新たな地震ハザード評価の道筋を示すことができた。また、現代社会の多様な構造物の被害評価に不可欠な、短周期～長周期の広帯域の地震動シミュレーションが実用化した。 今後期待される効果： 大地震発生の緊迫度と引き起こされる揺れの特性をシミュレーションから事前に適切に予測することができるようになり、防災に向けた適切な事前対応と高い費用対効果が期待できる。

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	ターゲットとなるマーケット	市場規模・出典	得られた効果・今後期待される効果
3	4	津波の予測精度の高度化に関する研究 研究代表者：今村文彦（東北大災害科学国際研）	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。	気象庁(津波予警報システム) 保険業界(地震津波リスク評価に基づく地震津波保険) 自治体・地域(ハザードマップ、リスクコミュニケーション、防災啓発、防災教育)	東日本大震災に地震保険の支払い金額：1.2兆円 出典： http://www.sonpo.or.jp/news/information/2012/1206_01.html	得られた効果： リアルタイム津波解析実現への期待、建物を含めた詳細地形における津波ハザード評価、津波による複合被害の予測・評価が可能になった。 今後期待される効果： 本課題で構築したリアルタイム波源推定手法をもとに、気象庁の津波予警報システムの改善を支援することにより、観測結果に基づいたより高精度な津波ハザード情報を提供できることが期待される。また、本課題で高度化された計算モデルを用いれば、世界での津波リスク評価をより正確に把握することができる。これによって、科学的根拠に基づいた津波保険を提供することが可能となり、世界各地での経済損失を縮小できる。また、本課題で得られた成果を見える化して、地域防災(ハザード・防災マップの作成支援や、リスクコミュニケーション・防災啓発・教育)へ活用すれば、地域の災害に対する強靱化を図れる。
	5	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 研究代表者：堀宗朗（東大地震研）	東日本大震災における地震動による建造物の破壊・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、高精度の建造物の震動応答モデルを構築し、都市全体の建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。	建設業界(重要建造物の耐震性評価) コンサルティング業界(都市の地震災害評価)		得られた効果： 地盤・建物・避難を連成して行う統合地震シミュレーションが開発された。東京23区内10km四方の領域を対象とした計算に成功し、時間分解能10Hz、空間分解能1mという現状の分解能とは桁違いに高い分解能で計算された地震災害・被害の評価を例示することに成功した。得られた成果は「統合的予測システム」と称し、ポスト「京」重点課題③でその実用化を図っている。具体的な実用化の取り組みとして、2015年度より、内閣府防災・関連コンサルティング企業に、地震動評価のための高性能計算を利用する数値解析手法の技術提供を開始した。 今後期待される効果： 重要建造物の耐震性評価(ないし耐震設計)に、開発された構造物地震応答解析手法が利用される効果は期待できる。同様に、都市の地震被害推定に、開発された都市地震応答解析手法ないしその数値解析コンポーネントが利用される効果は期待できる。
4	1	輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率・低騒音化に関する研究開発 研究代表者：藤井孝蔵（東京理科大）	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(10^4 から 10^6)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。	航空機、自動車、流体機器です。風力発電装置がありますが、現時点では大きな市場ではないので、回転機器に含めてよいと考えます。	市場規模(億円) 出典： 課題3と同じ回転機器	得られた効果： 今後期待される効果： 「流体機器の設計革新」ですが、数値的な評価ができる段階にはありません

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	ターゲットとなるマーケット	市場規模・出典	得られた効果・今後期待される効果
4	2	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 研究代表者:大野隆央(物材機構)	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。	パワーデバイス市場 パワー半導体は、家電、PC、自動車、鉄道等あらゆる機器の電力を制御するデバイスで、電力変換損失を大幅に低減するための特性向上が強く求められている。エネルギー産業に使われる機器では、半導体に占めるパワー半導体の割合が50%を超える場合も多い。SiCを利用した次世代パワーデバイスに関して、大手自動車メーカーが2020年までに実車に搭載する計画を発表したことから注目度を強めている。 (http://www.rohm.co.jp/web/japan/gd3)	市場規模:(億円) パワーデバイス市場(世界):1.5兆円(2013年実績)、3兆円規模(2020年予測)、この内、SiC、GaN等を利用した次世代パワーデバイス市場は1/10程度の3,000億円(2020年予測) 出典:矢野経済研究所 http://www.yano.co.jp/	得られた効果: 次世代パワーデバイス開発の大きな技術課題である酸化膜界面等のナノ構造形成プロセスの最適化に計算機シミュレーションが有用であることを実証。 今後期待される効果: SiC、GaN等の新材料を利用した次世代パワーデバイスの開発を加速し開発コストを削減するとともに、パワーデバイス性能向上による電力変換損失の大幅な低減にも効果が期待される。
	3	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:加藤千幸(東大生産研)	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。	自動車、ポンプ、船舶市場	市場規模:(億円) 自動車市場 196.8兆円(2012年) 出典:経済産業省「我が国企業の国際競争ポジションの定量的調査」調査結果(富士キメラ総研)、JEITA「電子情報産業の世界生産見通し」等 http://www.meti.go.jp/meti_lib/report/2014fy/E004082.pdf ポンプ市場 2009年に約194億ドル(約1兆5,500億円)だった市場規模は、2016年には、262億ドル(約2兆1,000億円)にまで増えたと予測されています。 出典:Frost & Sullivan http://www.torishima.co.jp/jp/ir/inv-pumps-market.html 船舶市場 世界の既発注船舶の価格合計額4,420億ドル(2009年末) 出典:国土交通省海事局船舶産業課「造船市場と造船業の現状について」 http://www.mlit.go.jp/common/001035550.pdf	得られた効果: 乱流の直接シミュレーションにより、風洞試験や水槽試験の代替え、および機器の性能・品質の向上に資する解析に成功した。 今後期待される効果: 実験の代替による自動車の開発期間短縮・コストの削減。

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	ターゲットとなるマーケット	市場規模・出典	得られた効果・今後期待される効果
4	4	多目的設計探索による設計手法の革新に関する研究開発 研究代表者: 大山聖 (JAXA)	大規模設計最適化問題のための多目的設計探索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。	ものづくり産業界全般	市場規模:(億円) 57兆7,339億円 出典: 経済産業省「工業統計調査」2013年速報 http://www.strike.co.jp/car/research/research_2015_maker.html	得られた効果: 大規模な多目的設計探索が実設計問題において有効であることを実証 今後期待される効果: ものづくり分野全般における設計開発期間の短縮, 設計開発コストの削減, 製品品質の向上
	5	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 研究代表者: 中島憲宏 (JAEA)	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。	地球温暖化対策市場	市場規模:(億円) 100基 × 300,000kWe/基 × 25万円/kWe=750兆円 出典: CIGS 地球温暖化国際シンポジウム 2016「地球温暖化問題における原子力エネルギーの役割」 (http://www.canon-igs.org/event/report/20160315_3549.html)	得られた効果: あるがままの状態解析を耐震分野で実現。安全・安心社会へ向けた一つの合理的分析・評価手段の提供に寄与した。 今後期待される効果: 日本の耐震安全性を喧伝し、国際競争市場における競争力強化に資する。
5	1	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定 研究代表者: 初田哲男 (理研)	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。	—	—	—
	2	大規模量子多体計算による核物性解明とその応用 研究代表者: 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で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。	—	—	—

分野	研究開発 課題番号	課題名	研究の概要	ターゲットとなるマーケット	市場規模・出典	得られた効果・今後期待される効果
5	3	超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明 研究代表者: 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。	—	—	—
	4	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 研究代表者: 牧野淳一郎(理研)	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。	—	—	—

(参考)

「HPCI戦略プログラム推進委員会」における
事後評価に係る点検結果(報告案)のポイント

【総論】 プログラム全体として、戦略目標を着実に達成している。

■ 研究開発目標の達成状況

- 研究開発については、全ての戦略分野で目標に沿った研究開発が推進され、全ての研究開発目標が着実に達成されたと判断する。
- 計算科学技術推進体制については、各戦略分野において大きな広がりを持って構築され、当初の想定以上に機能していると評価できる。

■ 研究開発成果および、成果の利活用

- 研究開発成果等については、5つの戦略分野全てで、「京」の性能を活かした数多くの成果が創出されており、独創性も高く、優位性にも富んでいると評価でき、適切であると判断する。
- 成果の利活用については、産業界や実験研究者、臨床現場、他分野との連携も着実に進んでおり、また開発したプログラムの公開や成果の広報、利用支援等の活動が積極的に行われ、各分野における計算科学を用いる研究者層も拡大しているなど、着実に進展したと判断する。

■ 今後に向けて

- 経済的波及効果も含め、成果等を実感できる形で分かりやすく広報し、社会的理解を得ていく努力が引き続き必要である。
- 今後、ポスト「京」の開発プロジェクトにおけるアプリケーション開発を含め、成果の適用対象や実用化対象の拡大について、継続して戦略的な検討を行っていくことが必要である。
- 人材育成については、プロジェクト終了後のキャリアアップも含め、我が国全体の計算科学技術人材の育成確保の観点も念頭に置きつつ、ポスト「京」での取組も含め、継続的に取り組んでいくことが重要である。
- 最先端のスーパーコンピュータで可能となった技術やソフトウェアを普及・展開していく体制や仕組みを構築することが重要である。
- 本プログラムで構築された研究開発体制やコンソーシアムを、引き続き、我が国の先端的な計算科学技術の研究開発の場として有効に機能させていくことが重要である。

■ 計算科学技術推進体制の構築における主な取組事例

研究支援 「京」等のHPCIシステムの利用支援、アプリケーションの高度化支援を実施

- ・ 計算科学研究機構等が開催する会合での意見交換、研究者のソフトウェアの高度化支援、講習会を実施(分野1)
- ・ 計算科学研究機構内にCMSI(計算物質科学イニシアティブ)分室を設置し、高度化支援体制を強化(分野2)
- ・ 情報サイト「高性能計算の扉」の整備等によるユーザ支援体制を確立(分野5)

研究成果の普及 各種媒体を用いた情報発信を実施

- ・ 視覚的に非常に分かりやすい、心臓シミュレータや蛋白質のシミュレーション結果の可視化等を活用した、一般市民等に対するアウトリーチ活動を実施(分野1)
- ・ プラットフォームを構築し、開発したシステムを国のプロジェクトで開発した多数のシミュレータに適合させ、実証事例を示した(分野4)
- ・ 開発コードの共用化体制を構築し、世界中の研究者と協力しコンフィギュレーションデータを蓄積・公開(分野5)

人材育成と人的ネットワークの形成 大学・研究所と連携した教育プログラムを実施

- ・ 計算科学技術特論を作成・配信(講義アクセス数3万件)。また、超並列計算に関する新たな講義の立ち上げを実施(分野2)
- ・ 防災、減災に関連して大学、研究機関、国、地方自治体、民間、NPO法人等を対象に研究会やセミナーを開催し、分野間、分野内のコミュニケーションの場を創出(分野3)
- ・ 利用者層の拡大及び人的ネットワークの形成として、「京」を使うためのハンズオンセミナー、産業利用スクール、解析結果200件の公表データベース化やアウトリーチサイトである「計算工学ナビ」の開設などを実施(分野4)

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

「京」利用の進捗状況の把握、分野内計算機環境の整備を実施

- ・ 年度毎の重点化、月次の進捗管理を実施。また「京」と互換生のあるシステムを整備することにより、大学や製薬関連企業等の研究者のHPCI環境への導入を実施(分野1)
- ・ 東京大学物性研究所、分子科学研究所、東北大学金属材料研究所の共同利用スーパーコンピュータの資源を、本プログラムの遂行のために割当て、「京」の計算資源を「京」でなければならぬ計算に集中(分野2)
- ・ 「京」のみならず大学の大型計算機センター及び地球シミュレータを戦略的に有効活用(分野3)

主な研究成果事例(分野1)

超並列計算によるマルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション

世界初の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

課題代表者:

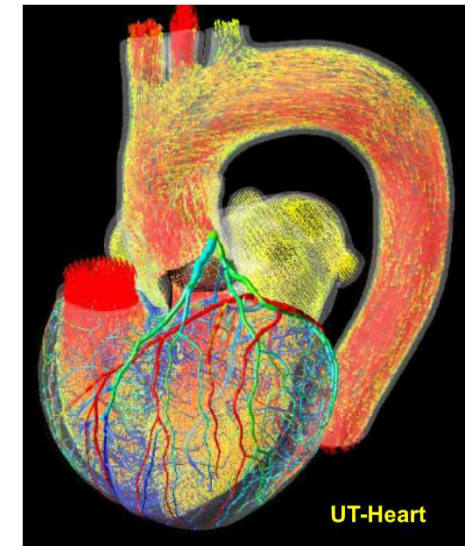
東京大学大学院工学系研究科 高木周

【背景】

- 心臓血管病は人類最大の死因であり、我が国においても65歳以上の医療費の26.5%を占め、2位のガンの約2倍にもなっている(平成25年政府統計)。このため合理的な診断と治療法の開発が望まれている。
- 根本的な解決には分子細胞レベルでの異常とマクロな現象である病態の因果関係を明らかにすることが必要であるため、計算科学的アプローチは大規模にならざるを得ず、「京」の開発が待たれていた。

【「京」による成果】

- 心臓の拍動を分子レベルからコンピュータ上に精密に再現することに成功。シミュレーション結果は超音波エコー、流速ドップラー、心電図、カテーテル検査など臨床医学的データとも一致。
- 肥大型心筋症の病態を再現。(従来はサルコメア分子の異常と病気との相関のみが示されていたが、病態発生のメカニズムを「京」を用いたシミュレーションで世界で初めて明らかにした)
- 先天性心疾患など患者の個別心臓を世界で初めてコンピュータ上に再現し仮想治療することに成功。
- CG分野で最も権威のあるSIGGRAPH2015で“BEST VISUALIZATION and SIMULATION”を受賞。



【今後の課題】

- 心臓は負荷に適応して変化していくため、10年後、20年後の長期にわたる予後予測を行うには、さらなるモデルの精緻化と「京」のパワーを超えた計算機が必要。

【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

主な研究成果事例(分野2)

「京」による100,000原子シリコン・ナノワイヤの電子状態の第一原理計算

次世代半導体の新しい設計基本技術を確立

課題代表者:
東京大学大学院工学系研究科 押山淳

【背景】

- 半導体材料は、高分子材料とともに精密機器や電化製品等の現代社会の産業基盤を形成しており、半導体は微細化(集積度を上げる)することで、その性能を向上させてきた。しかし、微細化がこれ以上困難となってきた現在、微細化限界を突破する新しい技術の確立が不可欠となっている。
- 「京」以前は、デバイス設計のために必要な、実際にデバイスを構成するシリコン原子10万个規模の計算をすることは不可能であった。

【「京」による成果】

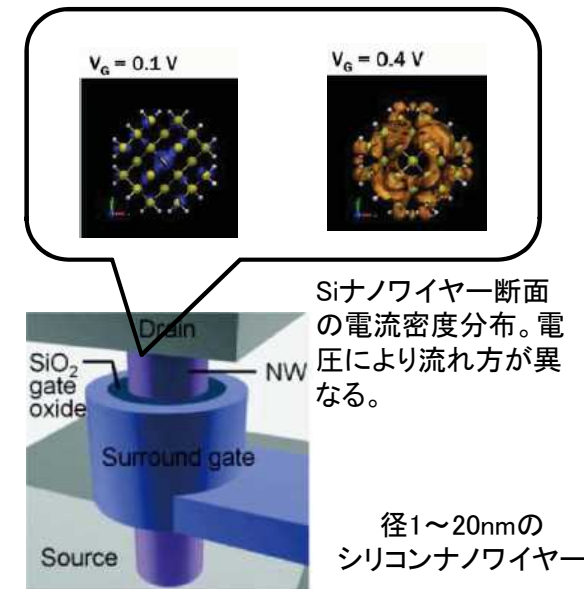
- 微細化で生じる電子の粒子性と波動性の両方の効果(量子効果)を考慮した、従来にないデバイス設計の基本技術を確立。
- 「京」を最大減活用した大規模な計算により、ナノワイヤー(10万個のシリコン原子で構成)に流れる量子効果を考慮した電流密度分布を世界で初めて計算。
- これにより、微細化限界を突破したデバイス設計に道筋をつけた。
- シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞を受賞。(平成23年度)

【今後の課題】

- 複雑な界面や不均一性を考慮したより現実的なデバイスを扱うためにより大規模計算が必要となる。

【社会への活用】

- 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。



主な研究成果事例(分野3)

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

地震等の自然災害シミュレーションの開発

課題代表者:
東京大学地震研究所・堀宗朗

【背景】

- 具体的な防災・減災対策を講じるためには、さまざまなケースの地震が起こったときにどのような災害が発生するかを、科学的・合理的に予測しておくことが必要。
- 「京」以前は、地盤の揺れ、建物の振動など個々の限定的なシミュレーションにとどまっていた。

【「京」による成果】

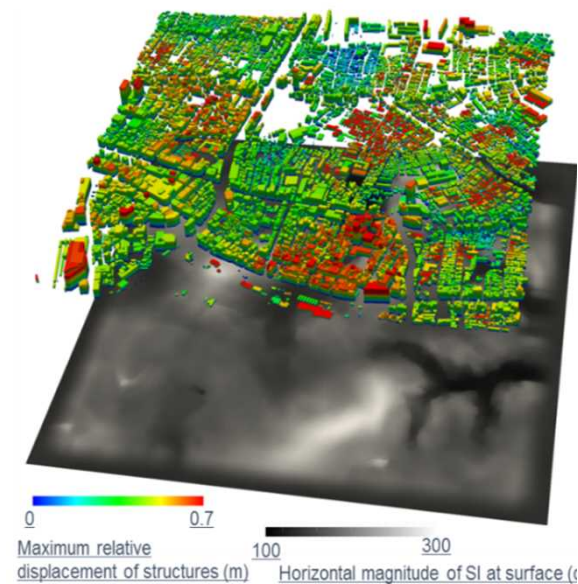
- 「京」を最大限活用し、地盤の揺れ・地震による建物などの振動の計算により、世界で初めて、地震災害と建物被害を統合した大規模シミュレーションを実現。
- 東京23区の一部(3.5km四方)に対し、約10m間隔で地盤の揺れを再現。地盤と建物などの揺れを複合的に計算し、地盤の揺れや建物の振動などの複合的なシミュレーションが、実用的なレベルで可能であることを証明。
- シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞ファイナリストに。(平成26年、平成27年)

【今後の課題】

- 地震・津波の発生や伝播、建物の振動、津波遡上などの広域かつ高精度な計算をそれぞれ実施している。地震発生から避難予測までを統合した予測には更に大規模な計算が必要。

【社会への活用】

- 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)



最大層間変位(各階の相対的な変形)の分布

主な研究成果事例(分野4)

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

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

課題代表者:
東京大学生産技術研究所 加藤千幸

【背景】

- 従来より、乱流の計算は行われていたが、製品試作の代替となり得るような信頼性の高い予測を行う事に限界があった。そのため、設計した製品の最終的な性能確認のためには、製品を実際に試作し、風洞試験等の実施により性能や信頼性を評価する事が必須であった。

【「京」による成果】

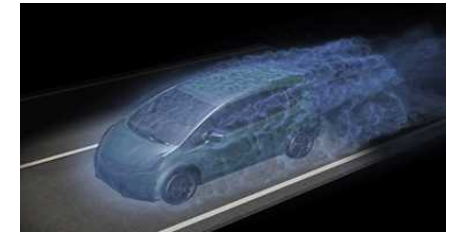
- 自動車が走行する際、車体回りには複雑な空気の流れが発生している。「京」を用いた流体シミュレーションにより、世界で初めて、その空気の流れを忠実に再現。風洞実験をシミュレーションで代替できることを実証。
- 具体的には、自動車の空気抵抗を対風洞実験値に対して誤差2%以内で予測する技術、並びに実走行状態を模擬できる車両運動連成解析システムを構築。
- また、車両運動と空力解析を連成させることで、従来の風洞実験では難しかった横風時の安全性や操縦安定性予測を可能とした。

【今後の課題等】

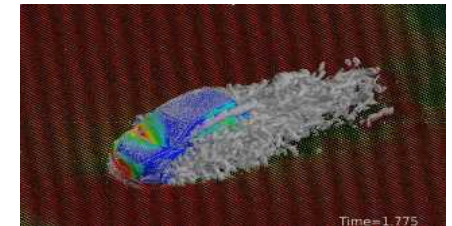
- 民間利用を進めていく為には、製品丸ごとで実験と同等以上の精度を確保し、現実的な開発・設計期間内に実施可能な計算が必要。

【社会への活用】

- 自動車コンソーシアムを形成し、開発中のシステムに関するディスカッション、試用などを進めている。
- 開発コスト・開発期間の大幅な削減が期待される。



高精度空力解析
提供: 理研、ホンダ、
神戸大、北大



横風運動挙動解析
提供: 日産、神戸大、北大

主な研究成果事例(分野5)

「京」によるダークマターシミュレーション

課題代表者:
理化学研究所 牧野淳一郎

ダークマターシミュレーションによる天体形成過程の理解

【背景】

- 銀河団の運動から目に見えない物質であるダークマターの存在が示唆され、宇宙誕生から星・銀河が生まれるためにはこの未知の物質「ダークマター」の役割が不可欠と言われているが、直接観測することが極めて困難。

【「京」による成果】

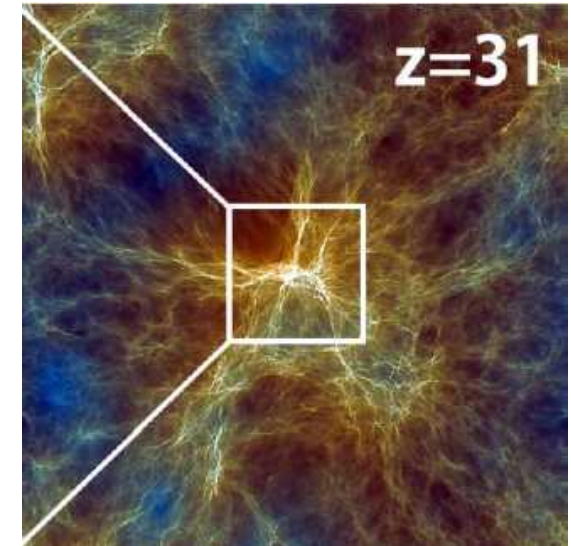
- 「京」を最大限活用し、世界最大規模の数千億から約2兆個のダークマター粒子の運動をシミュレーションすることで、宇宙の構造形成過程を計算。(パソコン1台で数百年かかる計算が「京」では3日で実現)
- 詳細なダークマター構造のシミュレーションにより、今後、ダークマター粒子の探査に貢献。
- シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞を受賞(2012年)。

【今後の課題等】

- ダークマターだけでなく、星や銀河が生まれる過程を含んだ宇宙モデルをシミュレーションするには、さらに高速・大規模のスーパーコンピュータが必要。

【社会への活用】

- 開発したシミュレーション手法・「京」を高効率で利用する方法は他分野への応用、シミュレーションの高度化に大きく寄与している。
- 多数の大規模シミュレーションにより観測と比較、宇宙論パラメータの精密決定が可能になる。



宇宙誕生から1億年後のダークマター空間分布

(参考)

ポスト「京」におけるアプリケーション開発

ポスト「京」の開発

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。

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。
- ◆ 科学技術の振興、産業競争力の強化、国民生活の安全・安心の確保等に不可欠な基幹技術であり、国の競争力等を左右するため、各国が熾烈な開発競争。

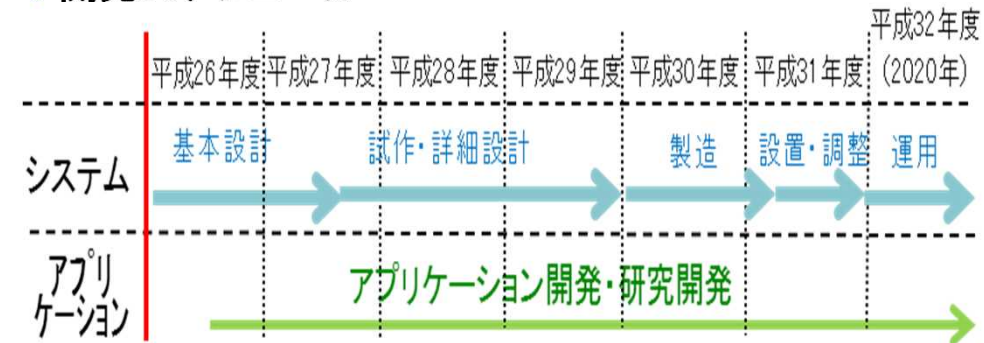
概要

- ◆ 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、九つの重点課題と、新たにに取り組むべきチャレンジングな課題である四つの萌芽的課題を設定)
- ◆ 総事業費 約1,300億円(うち国費分 約1,100億円)



理化学研究所計算科学研究機構
(兵庫県神戸市)

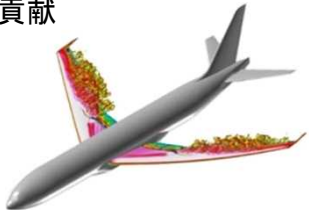
開発スケジュール



期待されるアウトカム例

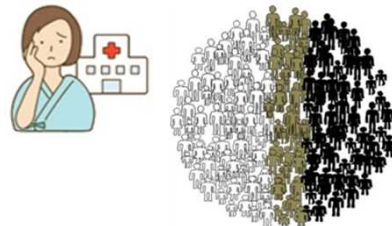
ものづくり

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



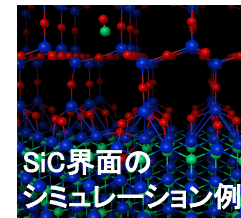
個別化医療

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！



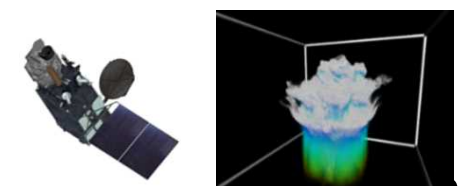
新物質創成

ナノスケールでの特性を予測し、最適な材料の探索・創製により次世代のデバイス进行設計

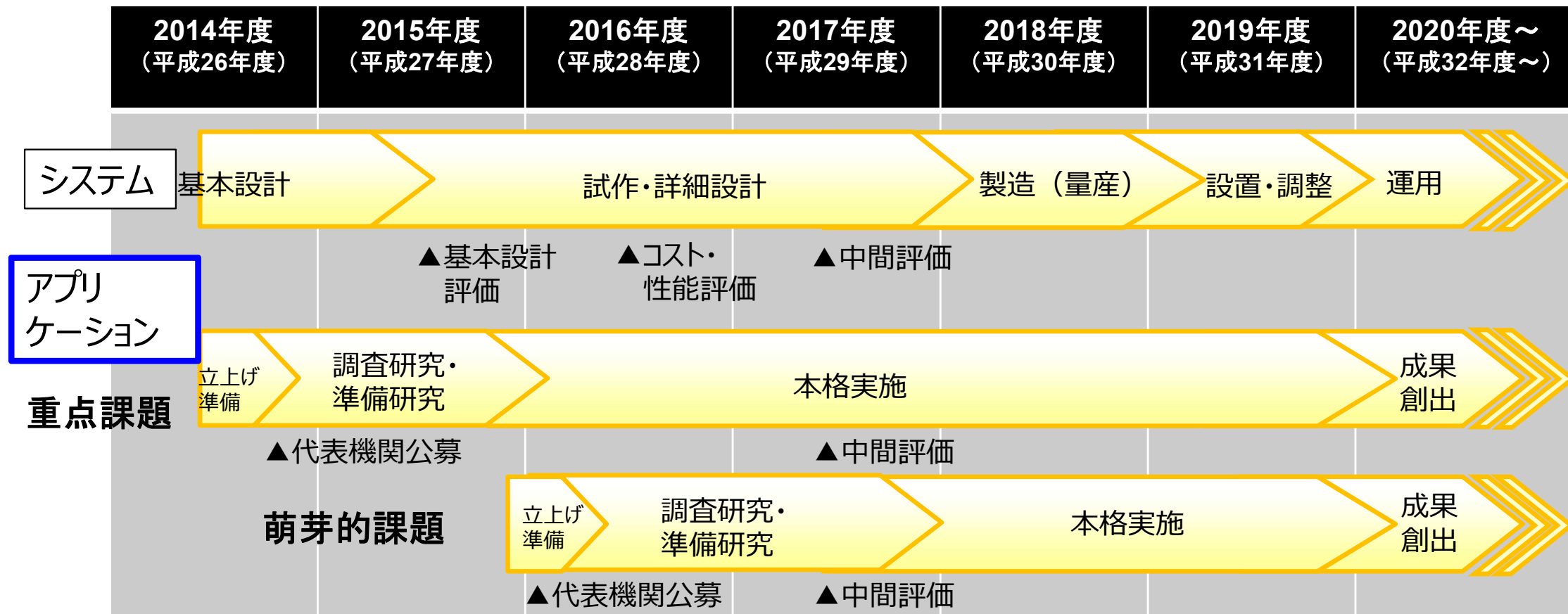


気象・気候

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



ポスト「京」の開発スケジュール等



【システム開発等】

平成 2 7 年 1 1 月

行政事業レビュー

平成 2 8 年 1 月

試作・詳細設計開始（理化学研究所が富士通株式会社と契約締結）

【アプリケーション開発】

平成 2 6 年 1 2 月

重点課題実施機関の決定

平成 2 7 年 4 月

重点課題のアプリケーション開発（準備研究）の開始

平成 2 8 年 3 月～

萌芽的課題の公募（夏頃に準備研究の開始予定）

4 月～

重点課題の本格的な研究開発の開始

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題(重点課題)

<重点課題（9課題）>

- ①社会的・国家的見地から高い意義がある、
- ②世界を先導する成果の創出が期待できる、
- ③ポスト「京」の戦略的活用が期待できる課題を「重点課題」として選定。

カテゴリ	重点課題	実施機関（平成28年1月末時点）
健康長 寿社会 の実現	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 超高速分子シミュレーションを実現し、副作用因子を含む多数の生体分子について、機能阻害ばかりでなく、機能制御までも達成することにより、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現する。	代表機関： <u>理化学研究所</u> （課題責任者：奥野 恭史・客員主管研究員） 分担機関：京都大学、東京大学、横浜市立大学、名古屋大学、産業技術総合研究所 共同研究参画企業：24社
	② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学 健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーション（心臓、脳神経など）により、個々人に適した医療、健康寿命を延ばす予防をめざした医療を支援する。	代表機関： <u>東京大学</u> （課題責任者：宮野 悟・教授） 分担機関：京都大学、大阪大学、株式会社UT-Heart研究所、自治医科大学、岡山大学 共同研究参画企業：5社
防災・ 環境問 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 内閣府・自治体等の防災システムに実装しうる、大規模計算を使った地震・津波による災害・被害シミュレーションの解析手法を開発し、過去の被害経験からでは予測困難な複合災害のための統合的予測手法を構築する。	代表機関： <u>東京大学</u> （課題責任者：堀 宗朗・教授） 分担機関：海洋研究開発機構、九州大学、神戸大学、京都大学 共同研究参画企業：1社
	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 観測ビッグデータを組み入れたモデル計算で、局地的豪雨や竜巻、台風等を高精度に予測し、また、人間活動による環境変化の影響を予測し監視するシステムの基盤を構築する。環境政策や防災、健康対策へ貢献する。	代表機関： <u>海洋研究開発機構</u> （課題責任者：高橋 桂子・センター長） 分担機関：理化学研究所、東京大学、東京工業大学 共同研究参画企業：7社

<重点課題（9課題）>（つづき）

カテゴリ	重点課題	実施機関（平成28年1月末時点）
エネルギー問題	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 複雑な現実複合系の分子レベルでの全系シミュレーションを行い、高効率なエネルギーの創出、変換・貯蔵、利用の全過程を実験と連携して解明し、エネルギー問題解決のための新規基盤技術を開発する。	代表機関： <u>自然科学研究機構</u> （課題責任者：岡崎 進・教授） 分担機関：神戸大学、理化学研究所、東京大学、物質・材料研究機構、名古屋大学、岡山大学、北海道大学、早稲田大学 共同研究参画企業：17社
	⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 エネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を第一原理解析により、詳細に予測・解明し、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。	代表機関： <u>東京大学</u> （課題責任者：吉村 忍・教授） 分担機関：豊橋技術科学大学、京都大学、九州大学、名古屋大学、立教学院立教大学、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構、物質・材料研究機構、自然科学研究機構核融合科学研究所、みずほ情報総研株式会社、株式会社風力エネルギー研究所 共同研究参画企業：11社
産業競争力の強化	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 国際競争力の高いエレクトロニクス技術や構造材料、機能化学品等の開発を、大規模超並列計算と計測・実験からのデータやビッグデータ解析との連携によって加速し、次世代の産業を支えるデバイス・材料を創成する。	代表機関： <u>東京大学</u> （課題責任者：常行 真司・教授） 分担機関：筑波大学、大阪大学、自然科学研究機構分子科学研究所、名古屋工業大学、東北大学、産業技術総合研究所、東京理科大学 共同研究参画企業：6社
	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、およ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する。	代表機関： <u>東京大学</u> （課題責任者：加藤 千幸・教授） 分担機関：神戸大学、東北大学、山梨大学、九州大学、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所、東京理科大学 共同研究参画企業：30社
基礎科学の発展	⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明 素粒子から宇宙までの異なるスケールにまたがる現象の超精密計算を実現し、大型実験・観測のデータと組み合わせ、多くの謎が残されている素粒子・原子核・宇宙物理学全体にわたる物質創成史を解明する。	代表機関： <u>筑波大学</u> （課題責任者：青木 慎也・客員教授） 分担機関：高エネルギー加速器研究機構、京都大学、東京大学、理化学研究所、大阪大学、自然科学研究機構国立天文台、千葉大学、東邦大学、広島大学 共同研究参画企業：1社

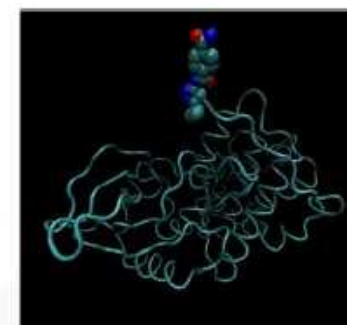
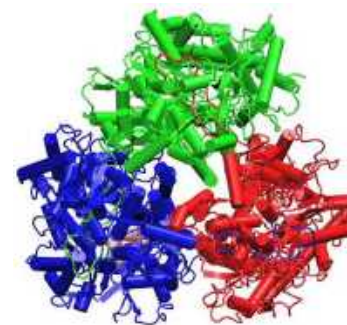
重点課題① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

● 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」の社会的背景とで目指す成果

超高齢化社会が迫る中、加齢とともに生じる様々な病気

がん

進化する複雑なゲノム異常情報との勝負

心疾患

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」

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

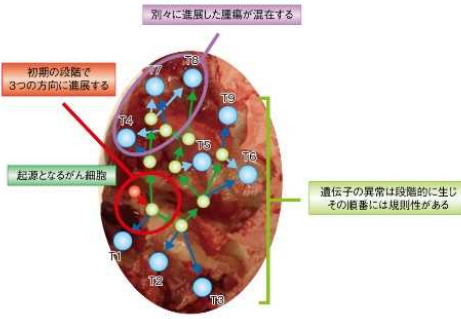
ポスト「京」での心臓シミュレーションで心臓疾患の創薬・治療の中心的戦略技術を創出

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。

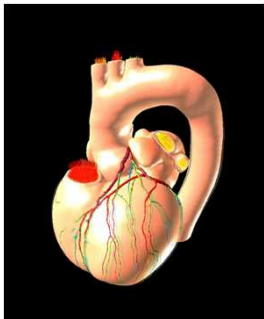
低悪性度のグリオーマに高い多様性を発見



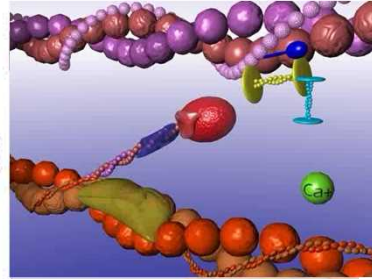
世界最大規模で網羅的に遺伝子変異を解析することにより、低悪性度のグリオーマにおける遺伝子変異の全体像を解明(小川等提供: *Nature Genetics* 2015)

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、ミクロ・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



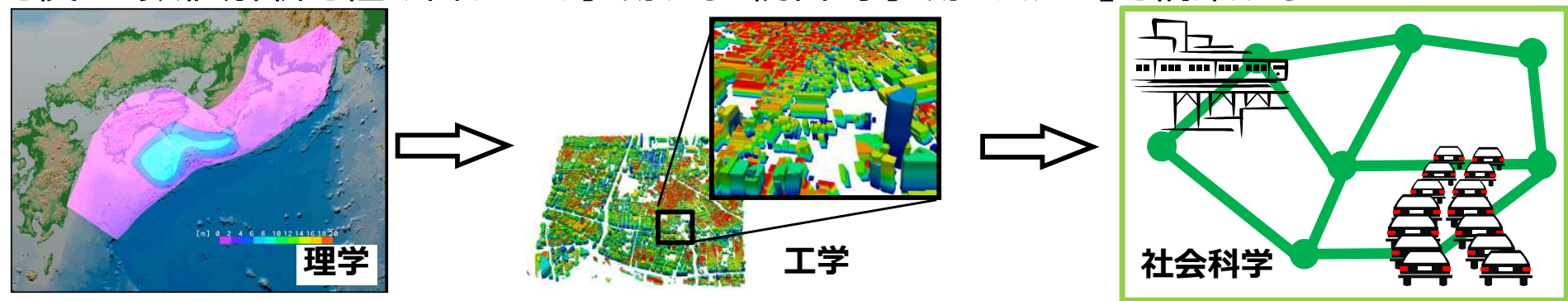
CafeMol

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

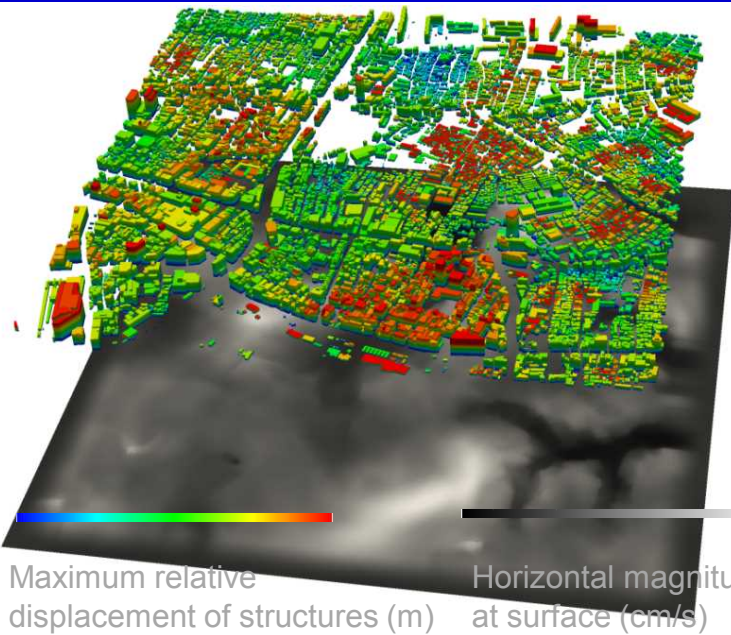
● 重点課題③ 概要

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

- ① 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
- ② 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



「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

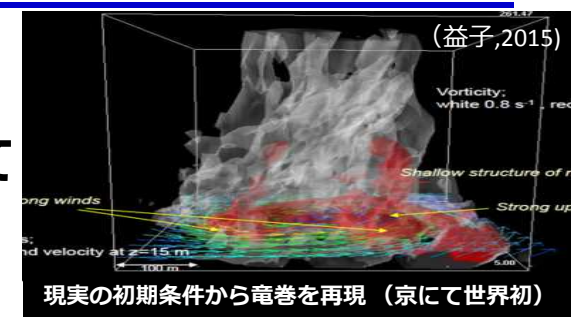
「予報をしてから現象が発生するまでの時間（リードタイム）をいかに長くできるか」その実現可能性を追求します。以下の3つの研究テーマを推進します。

- 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。

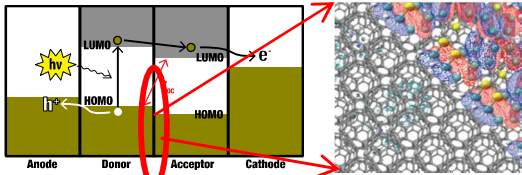
- ①**科学的観点**：豪雨や局所的大雨の寿命を決める要因や風被害をもたらす要因を明らかにする。
- ②**社会的観点**：きめ細かい情報による被害、災害の減少、避難対策の選択肢を広げたり、より万端な備えへ。
- ③**経済的観点**：経済活動麻痺の回避、物流や保険業界、計画生産、計画農業等への貢献。



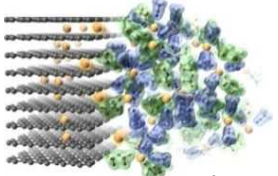
重点課題⑤ エネルギーの高効率な創出, 変換・貯蔵, 利用の新規基盤技術の開発

● **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CO₂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。



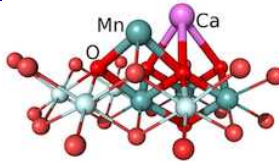
高効率な太陽電池設計
(エネルギー変換効率要因の特定)



電極被膜・電解液界面



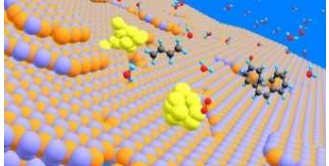
メタンハイドレートの分解



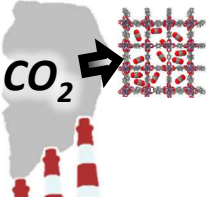
人工光合成の候補触媒の構造
大阪市大・神谷信夫教授, CALTEC・Agapie教授



「しなやかなタフポリマー」
との連携。コンセプトカー



高性能触媒



MOFへのCO₂の吸収

● ポスト「京」で出来るようになる事

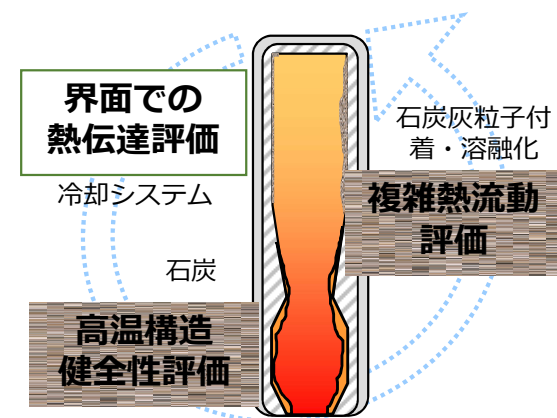
- a)天然と人工光合成のリアルなスピン状態計算や反応機構解析
- b)有機系太陽電池における現実系界面シミュレーション
- c)1-10億原子系のMD計算による高分子電解質膜設計
- d)電極、電解質をカバーした蓄電池反応統合シミュレーション
- e)ハイドレートの生成過程とセミクラスレートの平衡過程研究
- f)千原子の不均一触媒表面反応経路の探索
- g)CO₂の化学反応吸着法最適化と固体吸着材の設計

● 重点課題⑥ 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、**CO₂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。

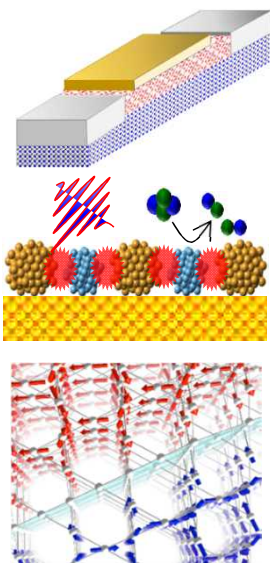
● ポスト「京」で出来るようになる事

- **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CO₂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CO₂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



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にもとづくデバイスと材料の大規模シミュレーション

大規模系電子状態計算を基幹技術とした 界面・薄膜のサイエンスと新デバイス開発

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

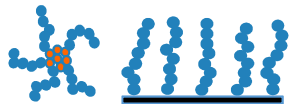
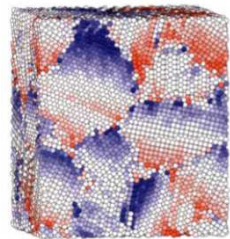
(d)高性能永久磁石・磁性材料

(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

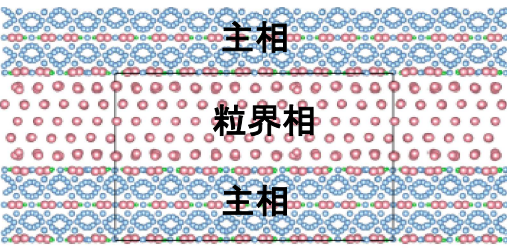
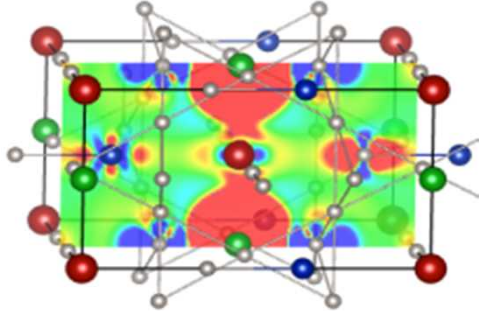


● ポスト「京」で出来るようになる事

磁石材料

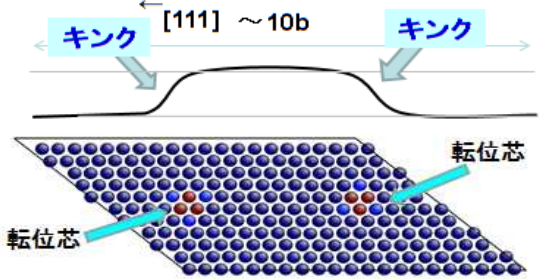
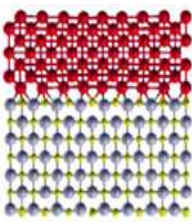
◆電子論とデータ科学手法を利用した磁石材料探索

◆磁石の主相・粒界相界面の電子状態・構造計算



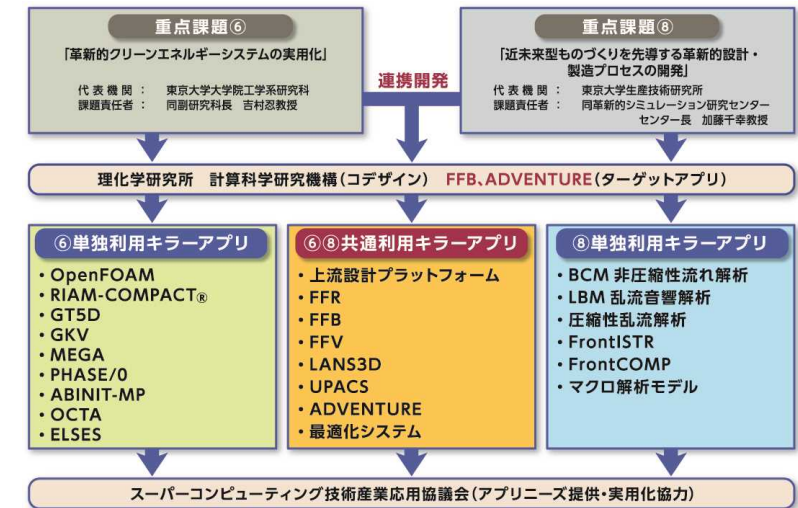
構造材料

◆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



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。

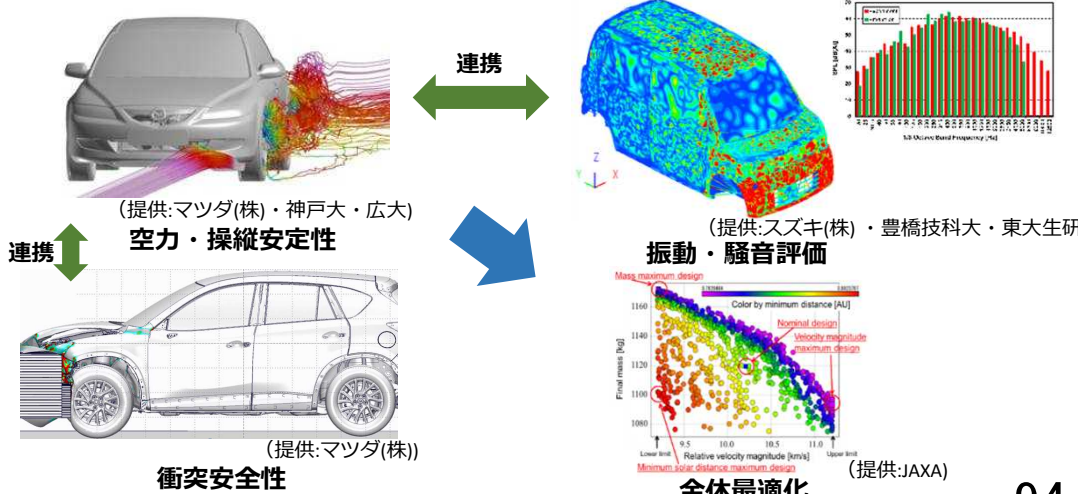
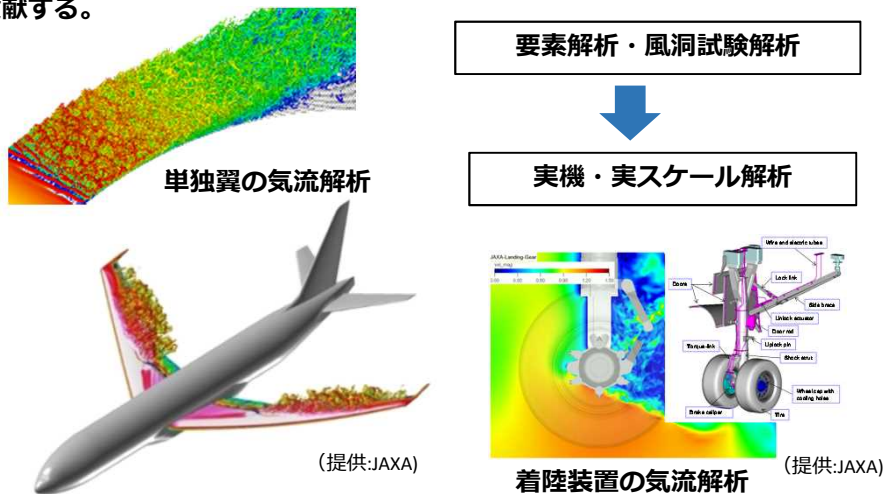


アプリケーション連携開発体制

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緻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。



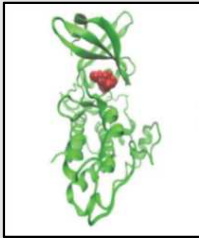
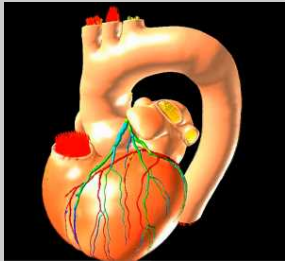
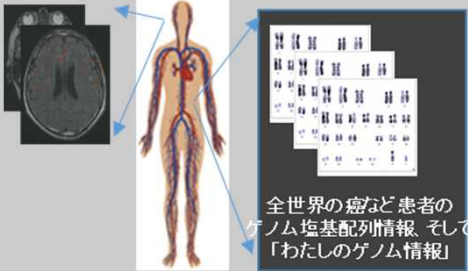
● 重点課題⑨ 概要

- 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て、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。

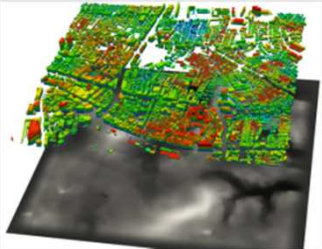
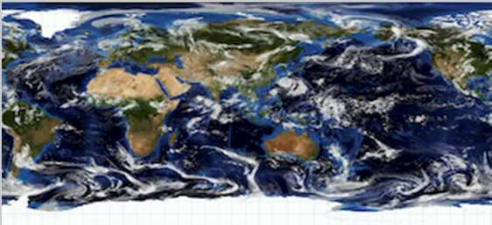
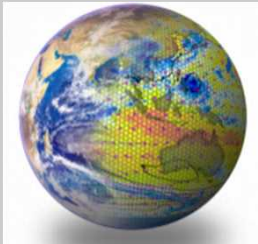
● ポスト「京」で出来るようになる事

- 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。

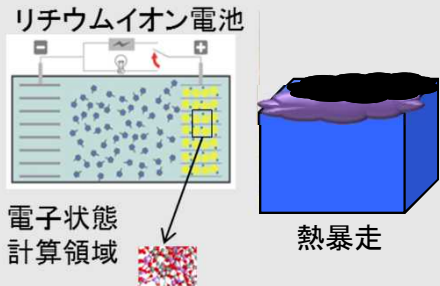
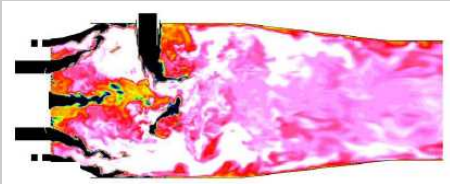
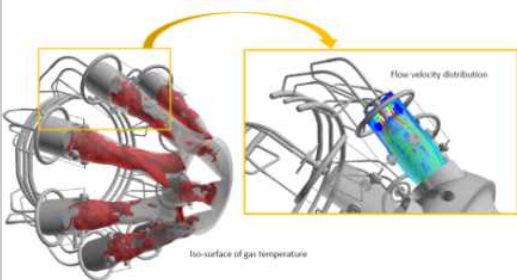
(参考) 健康長寿社会の実現

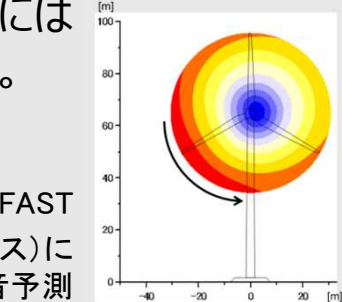
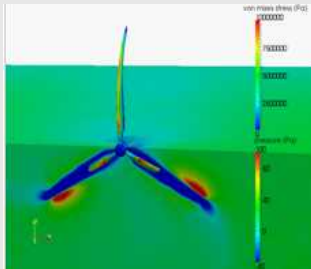
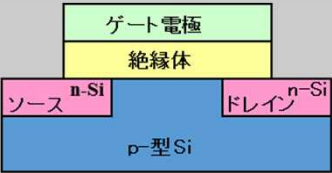
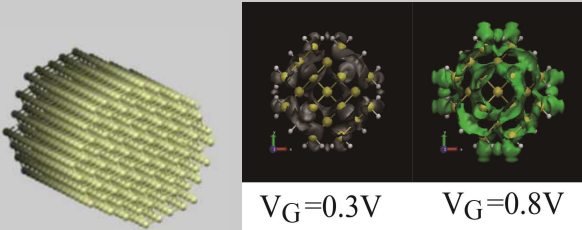
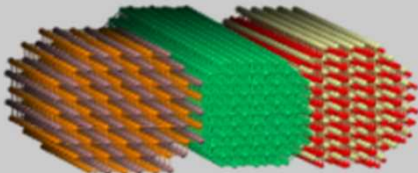
重点課題	アウトカム		
	「京」以前(過去)	「京」時代(現在)	ポスト「京」時代(将来)
① 生体分子システムの機能制御 による革新的創薬基盤の構築	シミュレーションは、創薬化学者による実験の補助的役割にとどまっていた。(薬剤の候補物質とタンパク質の結合シミュレーションを高い精度で行うことは極めて困難。) 	はじめて薬剤の候補物質とタンパク質の結びつきやすさをシミュレーション。製薬会社と連携し、新薬の候補物質の探索につながる研究を実施。 	多数のタンパク質、多数の候補物質を使用したシミュレーションが実施可能。さらに、副作用の原因等も分析可能に。 
② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	人の体を構成する脳・神経や筋肉・骨、心臓、血管といった個々の要素に対し、ばらばらに粗いシミュレーションを実施。成果の応用は限定的。 	心臓や血管について、分子・細胞レベルのシミュレーションを実施。医療機関との連携により、治療への応用を進めている。 	膨大な量の臨床データやゲノム情報から、個人ごとの健康・疾患の予測が可能。疾患の早期発見・早期治療、また、健康寿命の延伸に貢献できる。 

(参考) 防災・環境問題

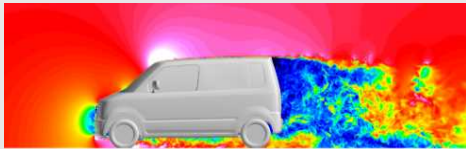
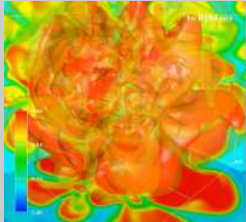
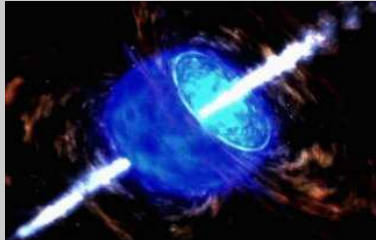
重点課題	アウトカム		
	「京」以前(過去)	「京」時代(現在)	ポスト「京」時代(将来)
③ 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	地震や津波による被害予測のシミュレーションを行うことを目指し、分野別かつ部分的な技術開発を実施。 	強い揺れによる大津波の生成原因を解明し、特定の限定された数例のシナリオに基づく被害予測を実現。また、構造物の振動や被害、津波の遡上、避難時の人の流れなどをシミュレーション。 	現実の震源や地下構造の違いによる不確定さをも考慮したシナリオに基づく被害予測を実現。また、被害の相互作用をも考慮した都市全体の防災予測、現実的な避難状況等の予測が可能に。 
④ 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	地球シミュレータによって原理的な気象の計算手法（全球雲解像解析）を確立。また、熱帯域の大規模積乱雲集合（台風発生源）の再現に成功。 	全球（地球全体）規模で、台風の源となる大気の大規模な乱れが再現し、一ヶ月予報の可能性を示した。また、半日から一日前に、地域レベルの集中豪雨を予測できる可能性も示した。 	リアルタイムの人工衛星データの同化により、大気の乱れを詳細に再現し、一か月後の台風発生確率が高精度で予測可能に。また、高機能レーダーの観測データの同化により、ゲリラ豪雨の30分から数時間前の予測が現実的に。 

(参考) エネルギー問題

重点課題	アウトカム		
	「京」以前(過去)	「京」時代(現在)	ポスト「京」時代(将来)
⑤ 変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	リチウムイオン電池について、正極や負極の固体電極材料の100原子程度を取り扱う計算が限度。化学反応の予測は不可能。 リチウムイオン電池  高性能と高安全を両立する材料設計はほぼ不可能。	1000原子レベルの電子状態計算が可能。界面に電位を加えた計算や化学反応を予測する高精度計算が可能に。安全や性能にかかわる電極上被膜の添加剤効果など長年の謎を解明。	数十万原子レベルの計算が可能。実験と連携してインフォーマティクス手法を取り込み、新型電池材料の開発期間を短縮。高性能と高安全を両立する電池材料特許の先行取得を目論む。 
⑥ ギーシステムの実用化	実機燃焼器（タービン）内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES（Large Eddy Simulation）解析は行われていたが、対象は大気圧（0.1MPa）条件下の単缶もしくは燃焼器の一部に限られていた。 	タービンの実利用環境（3.0MPa程度までの亜臨界状態）における実機燃焼器内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES解析が可能となった。 	より高圧条件（30MPa程度までの超臨界状態）下における実機燃焼器内の燃焼のLES解析が可能。燃焼挙動の把握、燃焼器の設計、および最適操作条件の選定を支援し、クリーンエネルギーシステムの実用化に貢献。

重点課題	想定アウトカム		
	「京」以前(過去)	「京」時代(現在)	ポスト「京」時代(将来)
⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	風車の設計には実験・観測データに基づく経験則が利用されており、数値解析は補助的な役割で利用。風車の定常解析が中心であり、実験の代替には至らなかった。  FAST (実験データベース)に 基づく風車騒音予測	風車単体の大規模な非定常解析として、風車の後流や地形の影響を考慮した解析が可能。しかし、ウィンドファームのような風車群の最適設計のための解析は実現できていない。 	大規模ウィンドファームにおける風車間の流れの相互干渉の解析が可能に。発電量の向上、ブレードの寿命改善、低コスト化に貢献。  洋上ウィンドファームにおける風車後流のイメージ
	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 計算量が膨大であるため、次世代のナノデバイスのシミュレーション（数十nm程度のサイズで生じる電子の量子化の問題）を行うことはできなかった。  回路幅が数10ナノになるとリーク電流が急増	構造が単純なナノスケールの次世代材料について、はじめて電子構造や電気伝導特性を解明。  ワイヤ構造 断面での電流分布	多種多様なナノスケールの次世代材料について、はじめて電子の動的な状態や特性から生じる物理現象の解明が可能に。  多種多様なナノワイヤ

(参考) 基礎科学の発展

重点課題	アウトカム		
	「京」以前(過去)	「京」時代(現在)	ポスト「京」時代(将来)
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	実験の代替手法として期待されていたが、精度が不十分なため、補助的手段として利用。(時間的・空間的解像度が十分でなく、現象の解明に用いることはできなかった。)  風洞実験	従来不可能であった試作実験(風洞実験)に匹敵する精度での空気抵抗等の予測が可能となり、実験の代替手法となりえることを実証し、一定程度、既に活用されている。  シミュレーション	より複雑で現実的な状況の解析が可能となることで、はじめて車のコンセプトから構造・機能・性能設計にいたる主要な設計フェーズのシミュレーションで統合的に扱うことが可能に。(開発期間短縮・コスト低減・品質向上に貢献)
⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明	超新星爆発などの爆発的天体現象は、地上実験では再現不可能な超高密度状態である一方、重力・核力・ニュートリノ輸送など重要な科学的成果に繋がるものである。 ただし、「京」以前では大幅に簡略化した模型を使わざるを得ず、現実的な計算は困難。	回転や対流効果を考慮した超新星爆発シミュレーションが可能になり、爆発の再現に初めて成功。また、一般相対論的重力効果等を取り入れたより精密な計算も実現しつつあり、多様な爆発現象の解析が進みつつある。  「京」を用いた超新星爆発の再現	多様な効果が考慮された高精度の計算や、大型光学望遠鏡や重力波望遠鏡による観測との連携により、多様な超新星爆発や中性子星連星合体過程の解明と、それらに付随して進む重元素合成の理解が進む。  ジェットを伴う超新星爆発の想像図 (NASA)