

# ポスト「京」で期待できる成果

## ●副作用を考慮した創薬シミュレーション

【現状】「京」では、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し、**単純な機能阻害を考慮した10種類以上の薬候補のスクリーニングができた。**(多数のタンパク質からなる生体分子システムと薬剤の相互作用予測には至っていない)



「京」による結合シミュレーション (MP-CAFE)  
画像提供: 京都大学 奥野恭史

【将来】ポスト「京」では、長時間かつ大規模高精度計算によって、**多数のタンパク質からなる生体分子システムと薬剤の相互作用を予測して、副作用の原因等も考慮した有効性の高い創薬が期待される。**

## ●観測ビッグデータを活用した気象予測

【現状】「京」では、**全球規模では、台風の源となる熱帯における大気の大規模な乱れの一か月予報の可能性を示した。また、地域レベルで大雨となる集中豪雨を半日から一日前に予測できる可能性を示した。**(ゲリラ豪雨のような局地的な災害の高精度予測には至っていない)



平成25年度「京」を中核とする  
HPCIシステム利用  
研究課題 中間報告会 戦略プログラム分野3

【将来】ポスト「京」では、人工衛星データを同化することにより、**全球規模での予報が更に向上される可能性があり、高機能レーダーの観測データを同化することによりゲリラ豪雨予測の技術を開発し有効性の検証を行い次世代現業予報の礎を築く。**

## ●次世代高機能半導体デバイスのデザイン

【現状】「京」では、**ナノメートルスケールの次世代材料について、電子構造や電気伝導特性を解明。**(多様な構造体・材料に対する、系統的計算とそれに基づくデバイスデザインは困難)



Siナノワイヤ(ナノメートルスケールの次世代材料)

【将来】ポスト「京」では大規模高精度シミュレーションを実行し、**多種多様なナノ構造体・材料の電子状態や物理現象を解明し、次世代半導体の製造に必要な、ナノスケールでの微細加工技術の構築に貢献。**



多種多様なナノワイヤ

## ●地震・津波による総合災害予測システムの構築

【現状】「京」では、東北地方太平洋沖地震における、強い揺れと大津波生成原因を解明。**巨大地震による複合災害予測へのシミュレーションの活用において大きな前進があった。**(限られたシナリオに基づく被害予測しか実施できず、将来の想定を網羅するまでには至っていない。)また、**構造物と都市の直接被害の予測・評価、地盤と構造物の振動、津波の遡上、避難時の人の流れのシミュレーションによる避難誘導の改善で成果。**(災害発生後の経済活動などの間接被害まで含めたシミュレーション事例は少ない)

【将来】ポスト「京」では、地震・津波による複合災害について、震源や地下構造の**不確定さを考慮した予測システムを構築し、自治体等の防災・減災計画に活用**することが期待される。また、**都市全体を対象とした避難や鉄道交通網のシミュレーションを含む統合的予測により、国土強靱化に貢献。**



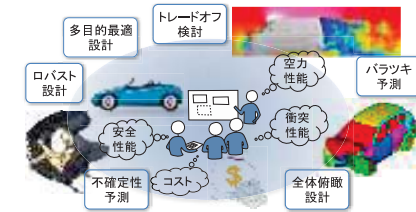
10万人規模のエージェントシミュレーション



複合災害予測のベースとなる3次元津波遡上計算

## ●ものづくりを先導する設計・製造プロセスの開発

【現状】「京」では、試作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、実験代替手法となりえることを実証した。**(まだ数日程度かかり、プロセス間協調設計の実現には至っていない)



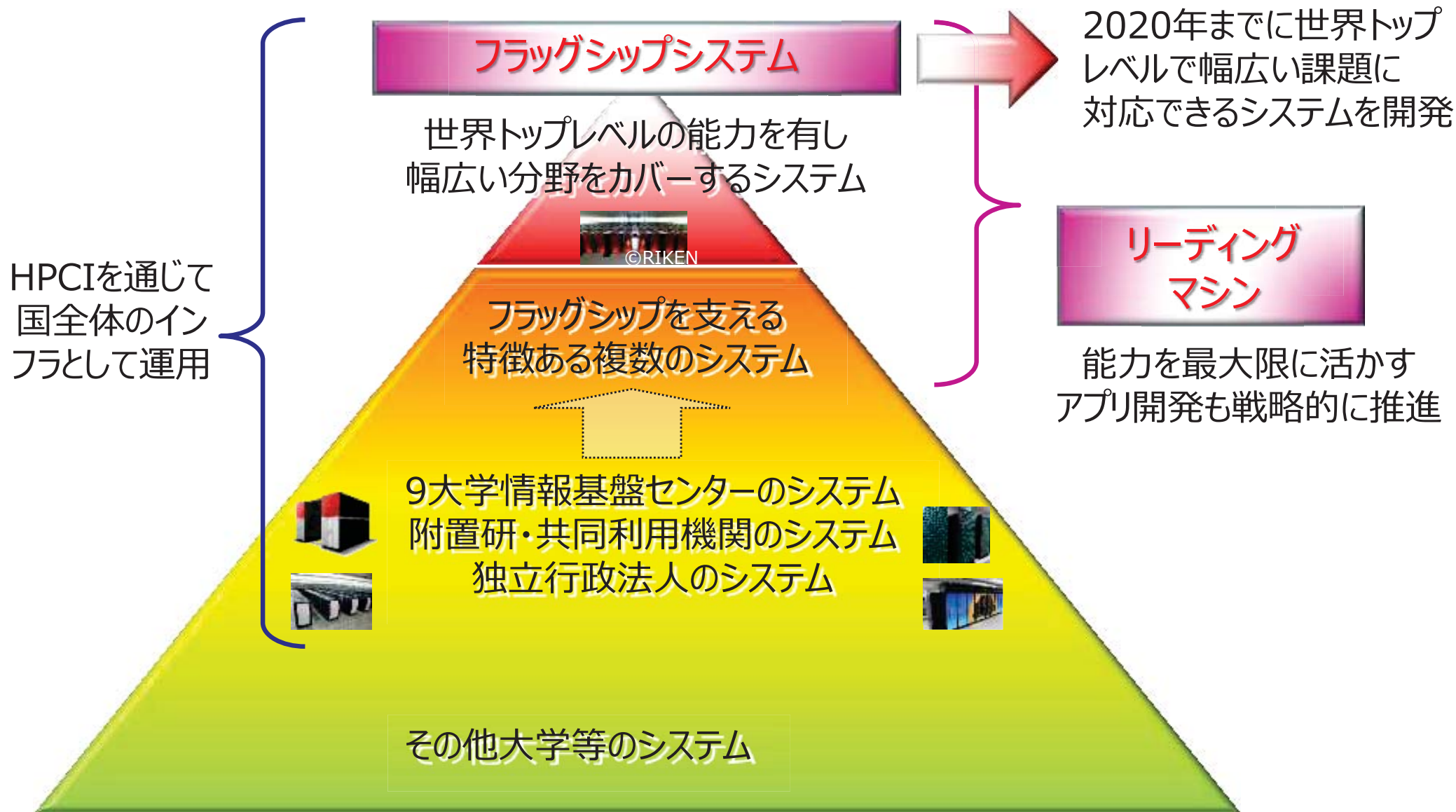
協力: マツダ(株)、スズキ(株)

【将来】ポスト「京」では、**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を統合的に扱い、開発期間短縮・コスト低減・品質向上に貢献。**

# 參考資料

# 我が国の次期スーパーコンピュータ開発の方向性

## <我が国の計算科学技術インフラのイメージ>



# 文部科学省における事前評価結果

科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会決定（平成25年8月）

- 世界最高水準のスーパーコンピューティング技術は競争力の源泉たる国家の基幹技術であり、また、国際的にもスーパーコンピュータやアプリケーションの自主開発が拡大している。そのような状況の中で、本プロジェクトは、我が国の計算科学技術インフラを発展させ、科学技術の振興、産業競争力の強化、安全・安心の国づくり等の実現に貢献するとともに、我が国として必要な技術や経験の継承・発展及びそれを支える人材の育成・確保、さらには広い意味での安全保障にも貢献するものであることから、国として着実に推進することが適当である。ただし、相当額の国費が投入されるプロジェクトなので、その内容、必要性、期待される成果等について、引き続き、合理的かつ分かりやすい説明に努める必要がある。
- ハードウェアの開発のみならず、当該ハードウェアを最大限活用して様々な社会的・科学的課題の解決に貢献するアプリケーションの開発を協調的に進めることで、相当額の国費が投入されるプロジェクトとして、その成果を国民に見える形で早期に創出していく必要がある。
- 本プロジェクトを開始するに当たっては、開発主体候補の提案を引き続き精査し、また、「将来のHPCIシステムのあり方に関する調査研究」の結果等も踏まえ、現段階で最善の選択をすることは当然のことであるが、スーパーコンピューティングの分野は技術的な進展が早いため、プロジェクトの推進に当たっては、解決すべき社会的・科学的課題とそれに必要な仕様、国内外の動向、開発体制、自主開発すべき要素技術、下方展開した場合の競争力、開発スケジュール、開発コスト、コスト/パフォーマンス等について引き続き検討を続け、HPCI コンソーシアム等のユーザーをはじめとして幅広い意見を踏まえながら、当該検討事項について段階ごとにHPCI 計画推進委員会の評価を受ける必要がある。