

# スーパーコンピュータ「京」の成果例

計算性能が桁レベルで飛躍するスパコンにより、シミュレーションの全く新たな地平を拓く成果が輩出されてきている。

## ● 台風強度の予測精度の向上

研究代表者：気象庁気象研究所/海洋研究開発機構・斉藤和雄

研究期間：平成23年～平成27年

概要：高解像度大気海洋結合モデルにより台風強度の予測精度が大きく向上することを「京」を用いた大規模実験により実証

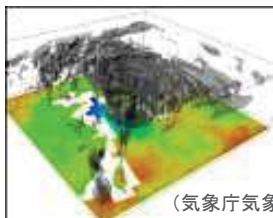
### 従来（「京」以前）

台風の強度を正確に再現するためには大気の状態と海洋の状態を両方同時に予測する**大気海洋結合システム**が望まれていたが、**多くの計算機資源が必要となる**ため、定量的な影響評価が困難

### 現在（平成26年度）

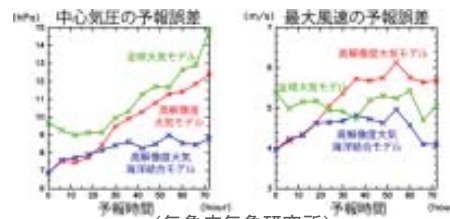
雲などの台風の内部構造を詳細に表現することが可能な気象庁モデルに、海洋内部の混合を考慮できる海洋モデルを結合した**高解像度大気海洋結合モデル**を開発。「京」を用いて、日本近傍を通過した**台風強度の2-3日予報の誤差が20-40%低減**することを実証。

平成27年度までに台風強度の数時間～1日予報に関しても、予報誤差を低減させる基盤技術を構築し、「京」による**科学的成果を世界に発信**するとともに、気象庁など現業防災官庁の数値計算予測システムの将来的な高度化に貢献。



（気象庁気象研究所）

2012年台風第15号の通過に伴う海面水温の低下



（気象庁気象研究所）

台風の中心気圧と最大風速の予報誤差（従来モデルとの比較）

## ● 心臓や血管シミュレーションによる医療分野への貢献

研究代表者：東京大学・久田俊明

研究期間：平成23年～平成27年

概要：「京」の活用による分子レベルの挙動を取り入れた心臓シミュレータや血栓形成シミュレータの開発が進められ、病態解明や医療応用に貢献

### 従来（「京」以前）

細胞内の構造を精密に再現した**心臓モデルの1回収縮分の計算に2年**近く掛かっていた

### 現在（平成25年度）

同様の計算が**1日で再現可能**になり、心筋細胞内のたんぱく質の確率的運動から細胞の収縮、心拍動、血液駆出、冠循環までを一貫してシミュレートすることが出来るようになり、心臓疾患の原因を解明できるようになった。

最近では、京を使った心臓シミュレータと比べて簡素化したモデルを用いて、**患者ごとの心臓モデルを基にしたシミュレーション（仮想手術）によって手術をする前に最善の手術方法を探ることや、ペースメーカーの電極の最適な取り付け位置の算出**など、臨床への応用が期待されている。



HPCI戦略プログラム 分野1  
ISLiM, SCLS



HPCI戦略プログラム 分野1  
東京大学 久田・杉浦・鷺尾・岡田研究室  
協力 富士通株式会社

# 産業界における「京」の利用成果

最先端スパコンの開発を着実に進め、我が国の計算科学技術全体を進展させることで、将来的に計算性能当たりの価格が安くなり、高い計算性能を持つスパコンを企業が安価に利用できるようになる。

## 1. 自動車用次世代空力設計システムの研究開発

コンソーシアム（企業13社、研究機関5機関）による共同研究  
（参画企業（13社））

トヨタ、日産、ホンダ技研、スズキ、マツダ、富士重工業、三菱自動車、三菱ふそう、日野自動車、デンソー、ブリヂストン、ダイハツ、横浜ゴム



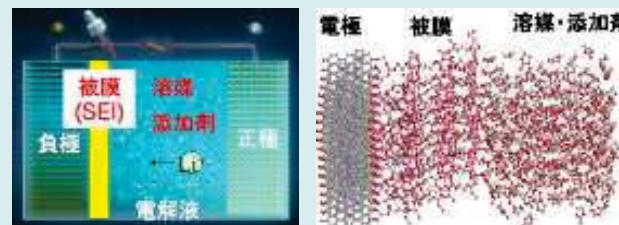
車の空気抵抗のシミュレーション

**従来の実験費用の大幅削減や精度の大幅向上により**  
自動車産業の競争力強化に大きく貢献

## 2. リチウムイオン電池の材料開発

リチウムイオン電池内部の電極付近で起こる化学反応過程を分子レベルで再現。

（参画企業）富士フイルム（株）



リチウムイオン電池の分子レベルのシミュレーション

**リチウムイオン電池の高性能化・高安全性化につなげ、**  
部材産業の発展と国際競争力強化に貢献

## 3. 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築

製薬企業11社、IT企業2社ほかが参画し、タンパク質と化合物の結合予測を約190億規模で達成。

（参画企業（13社））

アスピオファーマ、イーザイ、小野薬品工業、キッセイ薬品工業、参天製薬、塩野義製薬、大日本住友製薬、田辺三菱製薬、日本新薬、科研製薬、杏林製薬ほか



タンパク質と化合物の結合シミュレーション

**医薬品開発の成功確率向上と迅速化により**  
医薬品産業の競争力強化に大きく貢献

## 4. 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発

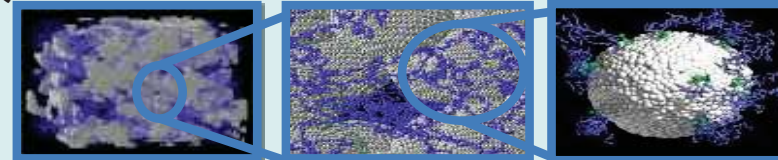
「京」により大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションを実現。

（参画企業）住友ゴム工業（株）

ゴムの性質が分かるレベル

分子・原子レベル

大 ← → 小



タイヤの分子・原子レベルのシミュレーション

**タイヤの大幅な高性能化・低燃費化・長寿命化により**  
化学産業の競争力強化に大きく貢献

# 企業におけるスパコンの利活用による事業展開について

スパコンを活用した研究開発が、企業の事業展開を促進している。

- 富士通では、スパコンを活用したインシリコ創薬技術の開発や心臓シミュレータの開発などの事業を含む、医療/ヘルスケア事業における売上高について、**2018年には2000億円**とする目標としている。この他、同社では「京」や各種サーバ等の製造で培ったノウハウ、ツール、人材を用いた製造業向けの支援サービスにより、**2016年度までに1,500億円**の売上を目標としている。



- 住友ゴム工業株式会社では、**低燃費タイヤの開発**の為、地球シミュレータ等を用いた技術を確認し、2012年に同技術を活用した製品を販売している。また、「京」の活用により、2015年には更なる新技術「ADVANCED 4D NANO DESIGN」を確認し、2016年以降の新品に採用するとしている。同社のタイヤ事業は**2013年度6,811億円（実績）、2015年度7,800億円（目標）**であり、低燃費タイヤの国内販売本数シェアの32%を占める。



- 三菱重工業では国産小型旅客機「三菱リージョナルジェット（MRJ）」の開発において、**スパコンによる流体解析（CFD）技術を用いて、低燃費に貢献する高い空力特性を持つ機体を開発**し、燃費性能を他社機種より2割向上させることに成功した。同クラスの機体の燃料コストは年間6億円前後ともいわれ、**年間1億円以上のコスト削減**が可能になると言える。エンジン、装備品等を含めた機体全体としては約7割が海外製部品であるが、**日本独自の技術を生かした航空機**として期待される。MRJは2017年の納入を目指して開発が進められており、2014年8月時点で既に国内外の航空会社7社から400機以上を受注している。**MRJの定価は1機4,200万ドルとされていることから、総額168億ドル以上（オプション分を含む）の売上が見込まれる。**



(提供:三菱航空機株式会社)

1. 国として取り組む意義・必要性

2. **ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題**

3. ポスト「京」のシステム

4. 開発体制とスケジュール

5. プロジェクトの開発目標



# ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

## 昨年度の御指摘

総花的な目標設定とならないよう、重点的な応用分野を早急に明確にし、ターゲットアプリケーションを設定した上で開発を進めるべきである。



有識者会議において、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題を（重点課題）と、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題（萌芽的課題）を選定。

## ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会

### ○趣旨

スーパーコンピュータ「京」の次を担うポスト「京」については、大規模な研究開発プロジェクトであり、そこから高いインパクトのある成果を創出することが期待される。スーパーコンピュータで解決できる問題は、基礎科学から産業利用まで幅広いものであるが、ポスト「京」においては、国家基幹技術として国家的に解決を目指す社会的・科学的課題に優先的に取り組むべきである。

こうした状況を踏まえ、ポスト「京」で重点的に取り組む社会的・科学的課題や課題解決による早期の成果創出に向けた研究開発体制等を検討するため、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題についての検討委員会を設置。

### ○メンバー

- |  |                             |
|--|-----------------------------|
| 安西 祐一郎（日本学術振興会理事長）                                   | 関口 和一（日本経済新聞社論説委員兼産業部編集委員）  |
| 内山田 竹志（スーパーコンピューティング技術産業応用協議会運営<br>委員長トヨタ自動車代表取締役会長） | 瀧澤 美奈子（科学ジャーナリスト）           |
| 大隅 典子（東北大学大学院医学系研究科教授）                               | 土屋 裕弘（田辺三菱製薬代表取締役会長）        |
| ◎小宮山 宏（三菱総合研究所理事長）                                   | ○土居 範久（慶應義塾大学名誉教授）          |
| 城山 英明（東京大学公共政策大学院院長）                                 | 土井 美和子（独立行政法人情報通信研究機構監事）    |
| 住 明正（国立環境研究所理事長）                                     | 林 春男（京都大学防災研究所巨大災害研究センター教授） |
|  | 平尾 公彦（理化学研究所計算科学研究機構長）      |

（◎：主査、○：主査代理）（合計13名）（50音順）

# 重点課題（1/2）

## <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。
- 重点課題の中からターゲットアプリケーションを選定の上、コデザイン及び性能目標の明確化に活用する。公募による代表機関決定後、代表機関により実施計画を策定し、平成27年度からアプリケーション開発に着手する。

カテゴリ	重点課題
健康長寿社会の実現	<b>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</b> 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、機能制御までを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。
	<b>② 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学</b> 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。
防災・環境問題	<b>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</b> 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。
	<b>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</b> 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。

# 重点課題 (2/2)

## <重点課題 (9 課題) > (つづき)

カテゴリ	重点課題
エネルギー問題	<b>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</b> 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。
	<b>⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化</b> 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。
産業競争力の強化	<b>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</b> 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。
	<b>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</b> 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。
基礎科学の発展	<b>⑨ 宇宙の基本法則と進化の解明</b> 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。

# 萌芽的課題

## <萌芽的課題（4課題）>

ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、今後、調査研究を通じて実現化を検討する。調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定する。

萌芽的課題	
将来性を考慮し、今後、実現化を検討する課題	<b>⑩ 基礎科学のフロンティア – 極限への挑戦</b> 極限を探究する基礎科学のフロンティアで、実験・観測や「京」を用いた個別計算科学の成果にもかかわらず答の出していない難問に、ポスト「京」のみがなし得る新しい科学の共創と学際連携で挑み、解決を目指す。
	<b>⑪ 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究</b> 複雑且つ急速に変化する現代社会で生じる様々な問題に政策・施策が俊敏に対応するために、交通や経済など社会活動の個々の要素が互いに影響し合う効果を取り入れて把握・分析・予測するシステムを研究開発する。
	<b>⑫ 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明</b> 宇宙、地球・惑星、気象、分子科学分野の計算科学と宇宙観測・実験が連携する学際的な取り組みにより、観測・実験と直接比較可能な大規模計算を実現し、地球型惑星の起源、太陽系環境、星間分子科学を探究する。
	<b>⑬ 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用</b> 革新技术による脳科学の大量のデータを融合した大規模多階層モデルを構築し、ポスト「京」での大規模シミュレーションにより思考を実現する脳の大規模神経回路を再現し、人工知能への応用をはかる。



# 成果の早期創出及び最大化に向けた取組

## <重点課題に関する今後の取組>

- 各課題ごとに、アプリケーション開発の実施機関を公募し、平成27年度から課題解決に資するアプリケーション開発の準備研究を実施予定。

## <Co-designの実施>

- ポスト「京」は、多くの社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムであることが必要。
- その実現に向け、ポスト「京」開発主体と重点課題の実施機関との間で、システムアーキテクチャ、システムソフトウェア等とアプリケーションを協調的に設計開発（Co-design）することで、幅広いアプリケーションを高速かつ効率的に実行可能なシステムアーキテクチャ、システムソフトウェア等を開発するとともに、これらの性能を最大限に引き出すアプリケーションの開発を通じて、成果の早期創出及び最大化を目指す。

## <ターゲットアプリケーションの選定>

- 戦略的かつ効率的にCo-designを進めるため、重点課題の中からCo-designのターゲットとするアプリケーション（ターゲットアプリケーション）を選定し、ターゲットアプリケーションの目標性能を設定する。
- 重点課題ごとにひとつのターゲットアプリケーションを選定。全ターゲットアプリケーション群は計算科学的手法を網羅することが必要。

※萌芽的課題については、調査研究終了後に、ポスト「京」における研究開発実施について決定が行われた後、改めてターゲットアプリケーションの選定について検討する。

# ターゲットアプリケーションの選定

## ＜ターゲットアプリケーションの選定基準＞

### 1) 各重点課題の要となる計算手法を有するアプリケーションであること

(補足) 各重点課題のアプリケーションはサブ課題に対応して複数から構成されると想定されるが、戦略的かつ効率的にCo-designを進めるため、重点課題ごとに要となるアプリケーションを一つずつ選定する。

### 2) アプリケーションの開発体制やライセンス形態が、Co-designができるものであること

(補足) 早期の成果最大化のため、Co-designに責任を持つポスト「京」開発主体とアプリケーション開発元が一体となって、システムとアプリケーションのCo-designに取り組み、Co-designにより得られたノウハウを展開できるようにする。

### 3) 全ターゲットアプリケーション群は、計算科学的手法の網羅性を有しており、Co-designおよびチューニングのノウハウのドキュメント化ができること

(補足) 幅広い分野でのアプリケーションをカバーし、Co-designにより得られたノウハウを効率的に展開する。

※ターゲットアプリケーションの選定は、Co-designに責任を持ち、また、課題間の連携や共通基盤技術の整備を行うポスト「京」開発主体が中心で行うものとする。

# ターゲットアプリケーション候補と今後の流れ

- 各重点課題において要となると想定される計算手法を有するアプリケーションから、暫定的にターゲットアプリケーション候補を選定。

重点課題	主な計算手法	Co-design観点 (重要なアーキテクチャパラメータ)	ターゲットアプリ 候補名称	グループ
①	分子動力学法	局所および集団通信レイテンシ、 演算性能	GENESIS	グループ I
②	大容量データ解析	入出力	Genomon	グループ II
③	非構造・構造格子ステンシル複合の有限要素法	通信・メモリバンド幅	GAMERA	グループ I
④	構造格子ステンシル有限体積法 + 局所アンサンブル変換カルマンフィルター法	通信・メモリバンド幅、 入出力、SIMD幅	NICAM + LETKF	NICAMはグループ I、 LETKFはグループ II
⑤	高精度分子軌道法 (疎 + 密行列計算)	演算性能/SIMD幅/集団通信レイテンシ	NTChem	グループ I
⑥	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅SIMD幅	FFB	グループ I
⑦	密度汎関数法 (密行列計算)	演算性能/集団通信レイテンシ	RSDFT	グループ I
⑧	非構造格子・有限要素法	通信・メモリバンド幅、SIMD幅	Adventure	グループ I
⑨	構造格子経路積分モンテカルロ法	通信・メモリバンド幅、局所および集団通信レイテンシ	CCS-QCD	グループ I

(※) グループ I ……ハードウェアの根幹に関わるため詳細に取り組むべきアプリケーション、グループ II ……グループ I 以外のアプリケーション

- 今後、公募による重点課題の代表機関決定後、代表機関の意見や選定基準等も踏まえ、必要に応じて見直しを行い、ターゲットアプリケーションを決定する。
- 重点課題決定後速やかに、各ターゲットアプリケーション候補の目標性能を設定。この際、問題規模等は、「計算科学ロードマップ」を参考にする。
  - ・重点課題代表機関決定後ターゲットアプリケーションの見直しが行われた場合でも、先に進めているCo-designやチューニングのノウハウが新しく選定されたターゲットアプリケーションへ反映できるよう留意してCo-designを進める。
  - ・選定基準を遵守することにより、ターゲットアプリケーションの入れ替えがあったとしても、掲げた目標性能が大幅に下方修正されることがないようにする。

1. 国として取り組む意義・必要性

2. ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題

3. **ポスト「京」のシステム**

4. 開発体制とスケジュール

5. プロジェクトの開発目標