

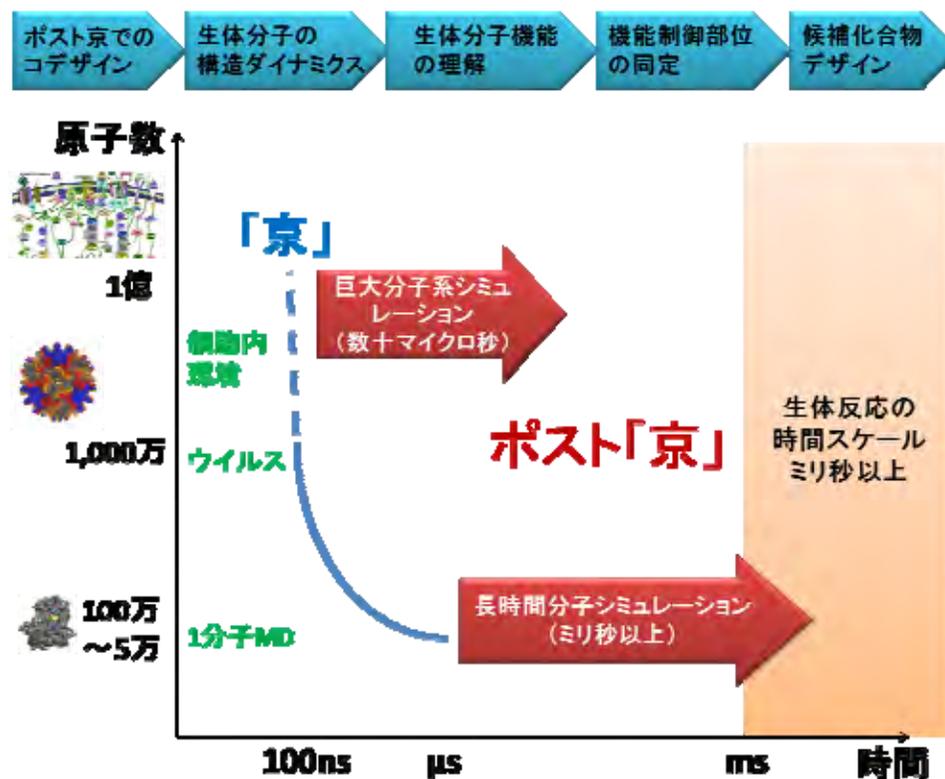
生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築(重点課題)

ポスト「京」で目指す成果

- **長時間分子シミュレーション技術の開発**：タンパク質が機能発現している時間スケール(ミリ秒以上)の分子シミュレーションを実現し、動的機能に着目した新たな構造生命科学を革新するとともに、創薬標的分子の動的機能制御を指向したより効果的な新薬の開発を可能にする。
- **巨大分子系シミュレーション技術の開発**：多数の生体分子(タンパク質や核酸など)からなる巨大分子系のシミュレーションを実現し、単独のタンパク質のみの環境とは異なる多種多様な生体分子が複雑に混みあった細胞内環境のダイナミクスを解明する。
- **ポスト「京」を用いた革新的創薬計算基盤の構築**：大規模な候補化合物と複数の創薬標的・副作用関連タンパク質の莫大な組み合わせから、ポスト「京」を用いることで、より効果的で副作用の少ない医薬品候補物質を高精度かつ超高速にデザインする創薬計算基盤を開発し、製薬会社等に提供する。

実施内容

- **長時間分子シミュレーション技術の開発**：分子動力学計算の高速化と長時間ダイナミクス法を開発し、ミリ秒以上のタンパク質の動きを捉えることで、標的タンパク質の動的機能を理解し、それを制御する新たな創薬手法につなげる。「京」では数十マイクロ秒までしか到達できなかった。
- **巨大分子系シミュレーション技術の開発**：超並列MD計算法やマルチスケール(全原子および粗視化)MDを駆使し、細胞内環境やウイルスなど超巨大分子系の数十マイクロ秒のシミュレーションを実現する。「京」ではサブマイクロ秒しか到達できなかった。
- **ポスト「京」を用いた革新的創薬計算基盤の構築**：ポスト「京」を用いた各種創薬計算手法を創薬計算フローに沿って連結した創薬ビッグデータ統合システムを開発する。



ポスト「京」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、個々人に対して的確ながんの個別化予防・治療戦略を創出

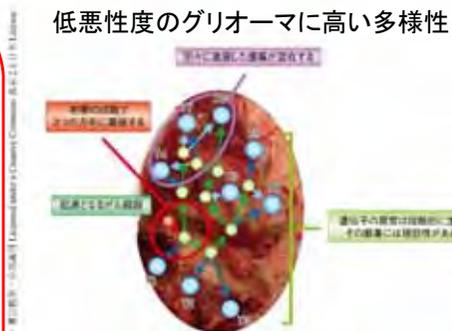
ポスト「京」での心臓シミュレーションで心臓疾患の創薬・治療の中心的戦略技術を創出

実施内容

ビッグデータ解析

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

「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。



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)

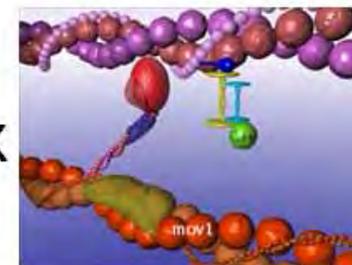
超大規模物理シミュレーション

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



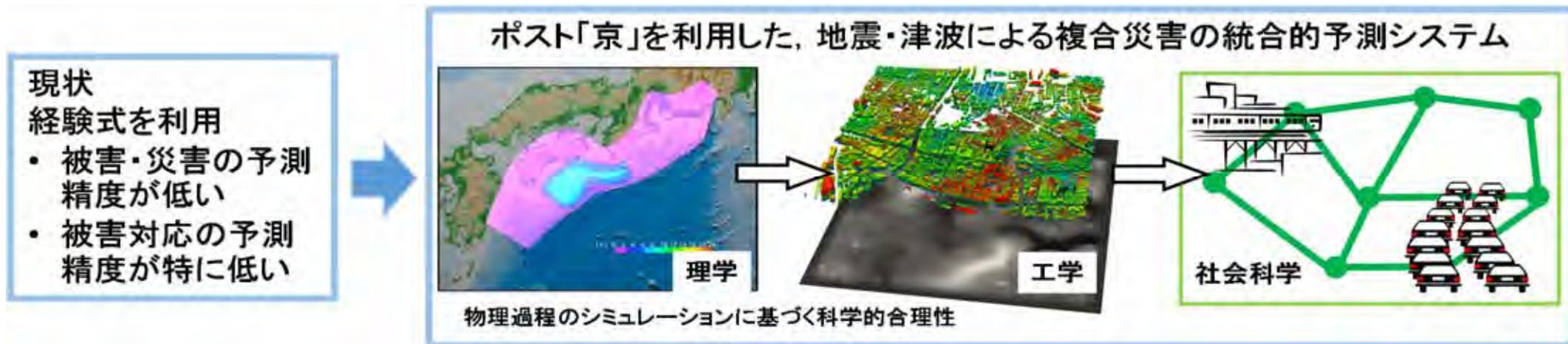
CafeMol

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。

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)

ポスト「京」で目指す成果

- 地震・津波による複合災害に対し、精緻な都市モデルを構築し、災害発生・被害発生・災害対応を予測するシステムを開発する。
- 現状の経験式に比べ科学的合理性を格段に向上させる、災害・被害の物理過程や災害対応の社会科学的過程のシミュレーションに基づく予測を実現する。



実施内容

- 実用化を目指した地震・津波の災害被害予測システムを開発する。「京」ではできなかった東京23区の地震動予測のため、1兆自由度の非線形解析手法と、社会基盤施設のモデルの自動構築手法を開発する。
- 災害対応のための社会科学シミュレーションを研究開発する。「京」では未着手であった交通・経済活動の大規模数値解析手法を開発する。

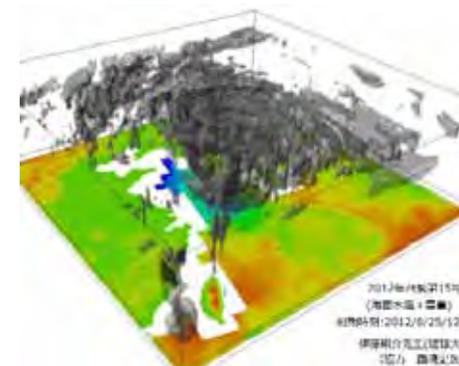
被災の有無による避難の差のシミュレーション



ポスト「京」で目指す成果

- 豪雨や局所的大雨を対象に、その発生や発達などの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を向上し、より長いリードタイムを実現する。
- 大気境界層乱流、固液混相乱流の流動特性を明らかにすることによって、突風や土石流の被害に直結する要因を明らかにする。
- 季節内振動の大規模に組織化した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する。
- 黒色炭素粒子エアロゾルや温室効果ガス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評価する。

観測ビッグデータ



実施内容

- ひまわり8号など天気予測に初めて活用するデータを含む観測ビッグデータを同化する技術確立し、かつ豪雨や局所的大雨の発生や寿命を決める水蒸気の供給・収束メカニズムや鉛直シアの持続メカニズムを明らかにする。これにより同化手法とメカニズムを導入した高精度予測モデルを構築する。このモデルを用いて、「京」では実現できなかった水平解像度100m以下・100メンバーのシミュレーションの実施と検証から、より長いリードタイムを実現するための高精度予測技術確立する。
- 突風解析モデルによる突風シミュレーションを行うことで、建造物の周りの乱流場解析から被害要因を明らかにするとともに、土石流モデルにより、固液混相流の巨礫挙動や流動する水と細粒土の相互作用挙動をシミュレーションすることにより土砂災害の特性を明らかにする。
- 「京」では実現できなかった3.5km格子、100アンサンブル実施することにより、2週間後から数ヶ月の数値予報に伴う極端現象や台風予測を実施し、世界初の全球雲解像モデルによる月～季節予測技術確立する。
- 大気中で疎水性から親水性へ遷移する化学的特性や表面に付着した水滴の光に屈折に伴うレンズ効果を導入したエアロゾルの精緻な化学輸送モデルを構築し、そのモデルを用いてエアロゾルの気候への影響評価技術確立する。

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)

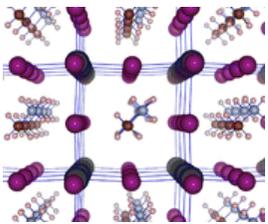
ポスト「京」で目指す成果

- 太陽電池、人工光合成による新エネルギーの創出・確保、燃料電池、二次電池によるエネルギーの変換・貯蔵、また、メタンやCO₂の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用など、太陽光エネルギー、電気エネルギーや化学エネルギーにおいて中心的な役割を担う**複雑で複合的な分子・物質過程に対する電子・分子レベルでの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、高効率、低コスト、また環境に優しく持続可能なエネルギー新規基盤技術を確立する。

共同研究

NEDO
「高性能・高信頼性太陽光発電の発電コスト低減技術開発」
(東大)瀬川浩司 教授
—2030年までに
発電コスト7円/kWhを目指す—

ARPChem
「ソーラー水素製造(光触媒、助触媒及びモジュール化技術)」
(東大)堂免一成 教授
—化石資源に依存しない基幹化学品製造基盤技術を確立へ—



共同研究

ImPACT
内閣府ImPACT 超薄膜化・強靱化「しなやかなタフポリマー」の実現
(東大)伊藤耕三 教授
—コンセプトカーの製作を目指す—

京コンピュータ 計算科学

破壊機構の解明 → 構造解析 → 分子設計・材料設計の指針 → 先端化学 → 短期間で事業化

硬いけど脆い SPring-8 → しなやかなタフネス

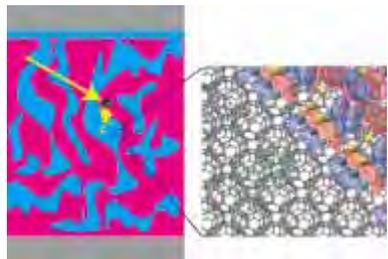


実施内容

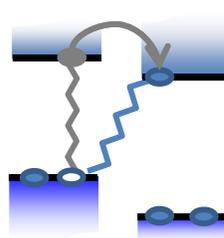
実施例1

- 太陽電池シミュレータを開発し高効率太陽光エネルギー変換による新エネルギー源の創出

- 太陽電池のエネルギー変換効率要因の特定
- 理論限界を超える、太陽電池の新機構提案



高効率太陽電池のための界面制御



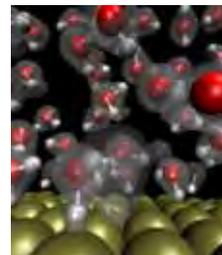
太陽電池の全系シミュレーション



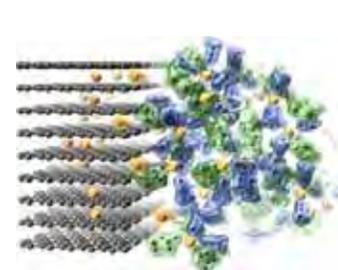
実施例2

- 全電池プロセスシミュレータを開発し二次電池・燃料電池の高性能化、高信頼化の提案

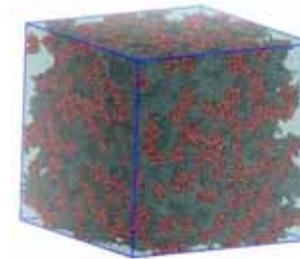
- 電極・電極被膜・電解質膜・電解液界面挙動の解明
- 各電池部材の最適材料設計・探索



白金電極・電解質界面での燃料電池反応のシミュレーション



電極被膜・電解液界面



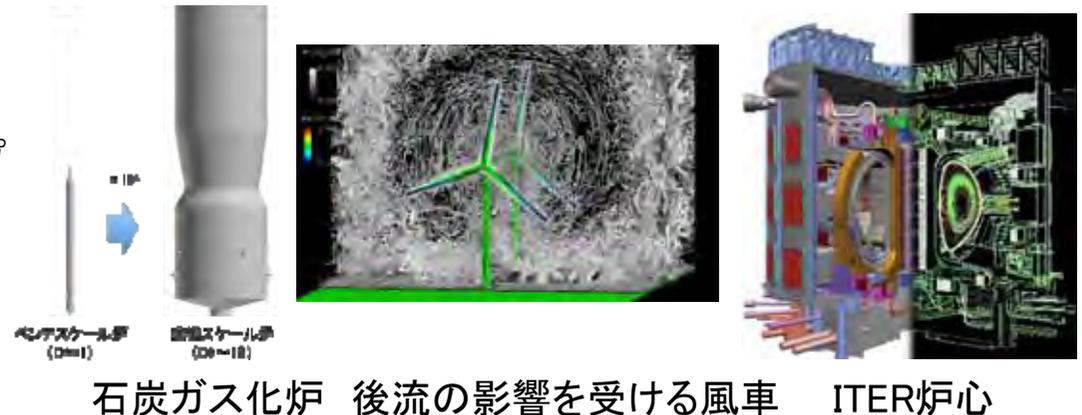
高分子電解質膜

ポスト「京」で目指す成果

- 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、核融合炉等を取り上げる。
- 従来不可能であった、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。

<実用化に向けて懸念される従来の課題>

- 中核物理現象が大変複雑で強い非線形性を有する
 - ⇒ 小規模実験→実証試験→実機(商業炉)へとスケアアップする過程で、前段階で実験結果に基づき経験的に適正化した設計条件や稼働条件ではうまく作動しない
 - ⇒ 開発コスト増大／実用化遅延／国際競争力低下



実施内容

- **石炭ガス化炉**: 固気液三相燃焼LES解析と炉構造・冷却の連成解析
 - ⇒ 出口温度予測誤差10%未満、化学種組成・灰分量予測誤差20%未満
- **洋上ウインドファーム**: 風車後流・大気境界層の変動風が発電性能やブレード荷重に及ぼす影響を考慮した設計システム。
 - 空力・構造連成解析に基づくブレード疲労寿命解析
 - ⇒ 風況を考慮した洋上ウインドファーム性能予測誤差10%未満
- **核融合炉炉心**: 多種イオン系プラズマ乱流解析、高エネルギー粒子輸送等の核燃焼プラズマ解析
 - ⇒ ITER設計で用いられた多数のトカマク実験で得られた閉じ込め時間スケーリング則の再現

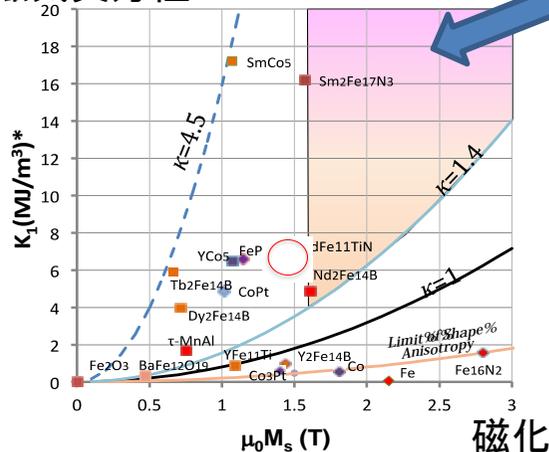
ポスト「京」で目指す成果

希少金属を使わない高性能永久磁石の開発

目標: このエリアの特性を持つ新規永久磁石の開発

目指す特性: 高飽和磁化(J)、高動作温度(T_c)、高保磁力(H_a)

磁気異方性



■ 戦略1: 磁化反転機構の解明

- ・界面・表面の電子論
- ・有限温度磁性
- ・磁化ダイナミクス
- ・形状磁気異方性

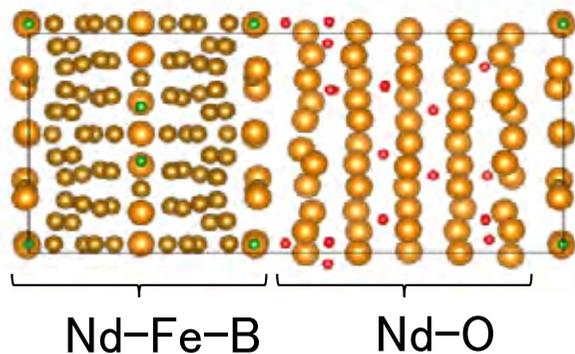
■ 戦略2: 材料科学的アプローチ

- ・熱力学的安定性
- ・マルチスケール材料開発
- ・マテリアルズ・インフォマティクス(データ科学手法)

実施内容

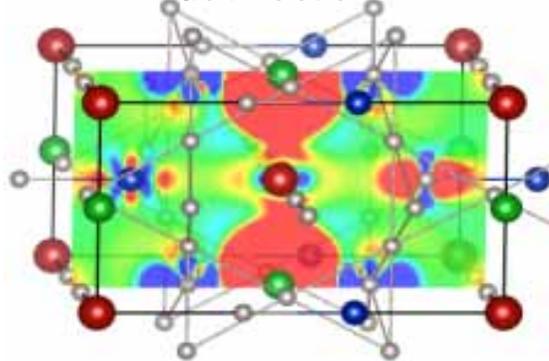
「京」実績

- ◆ 2000原子粒界面で3週間計算
⇒ 磁化反転ダイナミクス、元素添加効果を解明



ポスト「京」実施内容

- ◆ データ科学手法を利用した新材料探索
- ◆ 主相・粒界相界面の計算のため、30万原子系計算実施



- ◆ 電子状態計算で特性予測



ポスト「京」で目指す成果

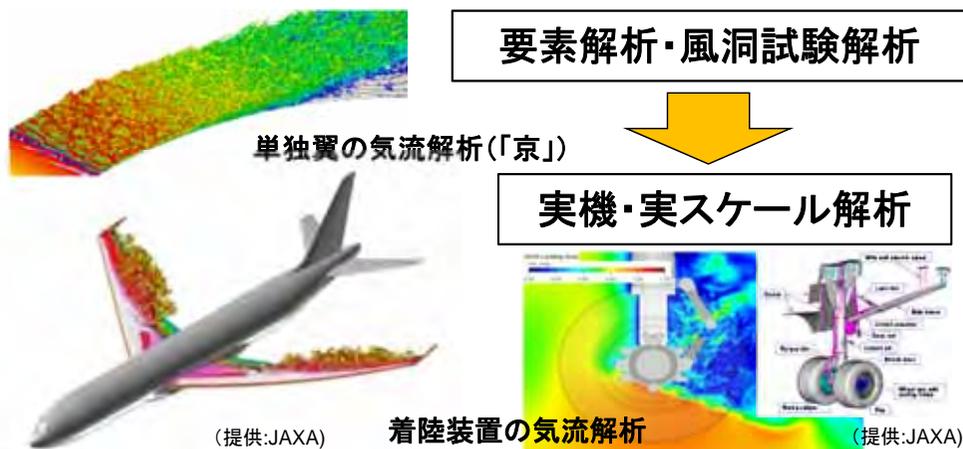
- ものづくり分野で目指す重要な技術成果は、航空機に代表される部品点数規模の極めて大きい製品の実機・実スケール解析(高速高精度乱流解析・非線形飛行力学モデル)により燃費改善や安全性向上を図ること、ならびに自動車に代表される性能評価指標の極めて多い製品の複合領域・多目的最適化(超大規模連携・連成解析)を、現実的な設計期間内で実施して製品開発期間の抜本的短縮を図ることである。

実施内容

航空機の全機・非定常解析

大規模超高精度解析

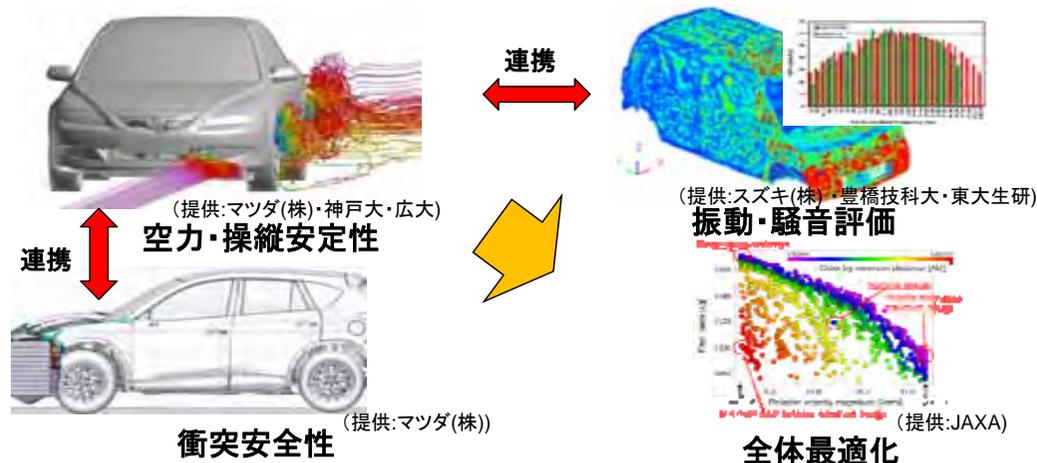
- 単独翼の風洞試験($Re=10^6$)など要素レベルの高精度解析は京で実現した。
- ポスト「京」では、実機・実スケール($Re=10^7$)に対する準第一原理的な超高精度解析を可能とすることで、従来実験でしか評価できなかった設計項目の解析による評価を可能とする。
- この高度な解析をベースとした新しい開発・運用プロセス(全体俯瞰設計、非線形飛行制御)を実現する。



自動車CAE統合設計システム

連携・超多数ケース解析

- 「京」で実現した自動車の様々な設計プロセスの超高精緻シミュレーションを相互連携し、数百～千ケースにも上るケーススタディを実施することで最適設計を実現する。
- これにより、従来はなしえなかった、設計上流側での設計プロセスを横断する多目的最適化が可能となり、より短い期間で安全性を確保した高性能なものづくりに貢献することができる。



ポスト「京」で目指す成果

- 素粒子標準理論を検証し、新しい物理法則の発見に貢献する。
- 多様な元素が生まれた宇宙における重元素合成など物質創成・変換過程を統一的に理解する。
- 観測データを融合したビッグデータ宇宙論を展開し、宇宙進化において天体が階層的に形成された仕組みや、銀河中心に巨大ブラックホールが存在する起源を解明する。

実施内容

＜ポスト京で初めて可能となる以下を実現する手法・コード開発＞

- SuperKEKBと連携し**標準理論を超える物理を探索**のため、重いbクォークの直接計算を実現する、格子間隔(時空間解像度)を従来の0.1から0.03 fmの高精細にした格子QCD計算
- 素粒子間に働く力の謎の解明、原子核・宇宙物理学研究の基盤を強固にする、**陽子、中性子、ハイペロン間に働くバリオン間力**を世界最高精度で求める格子QCD計算
- 中性子星連星の合体による**重元素合成の定量的な理解**に一般相対論、磁気流体、輻射流体などあらゆる効果を取り入れた高解像度かつ長時間にわたるシミュレーション
- 広域サーベイ観測データ解析に必要な統計量を得るための**構造形成シミュレーションライブラリ**
- 宇宙論パラメータ測定の一つである**残存ニュートリノ質量決定**のため、 256^6 個の格子数で宇宙論的ボルツマンシミュレーション
- **巨大ブラックホールの形成および進化過程解明**のため、高解像度相対論的輻射磁気流体シミュレーション

標準模型 or 新物理 ⊗ QCD補正 = 実験値

