

○検討の経緯（補足）	・・・ 2
○重点課題・萌芽的課題について（補足）	・・・ 5
○「京」について（補足）	・・・30
○春の行政事業レビュー公開プロセス （平成27年6月）資料	・・・67

# 本事業の位置付け

- 【政策目標】 基礎研究の充実及び研究の推進のための環境整備
- 【施策目標】 科学技術振興のための基盤の強化
- 【達成目標】 平成24年9月末の共用開始を目指し、スーパーコンピュータ「京」を中核とするHPCIを構築するとともに利用体制を整備する。また共用開始後、画期的な研究成果の創出に向けた利用が図られる。



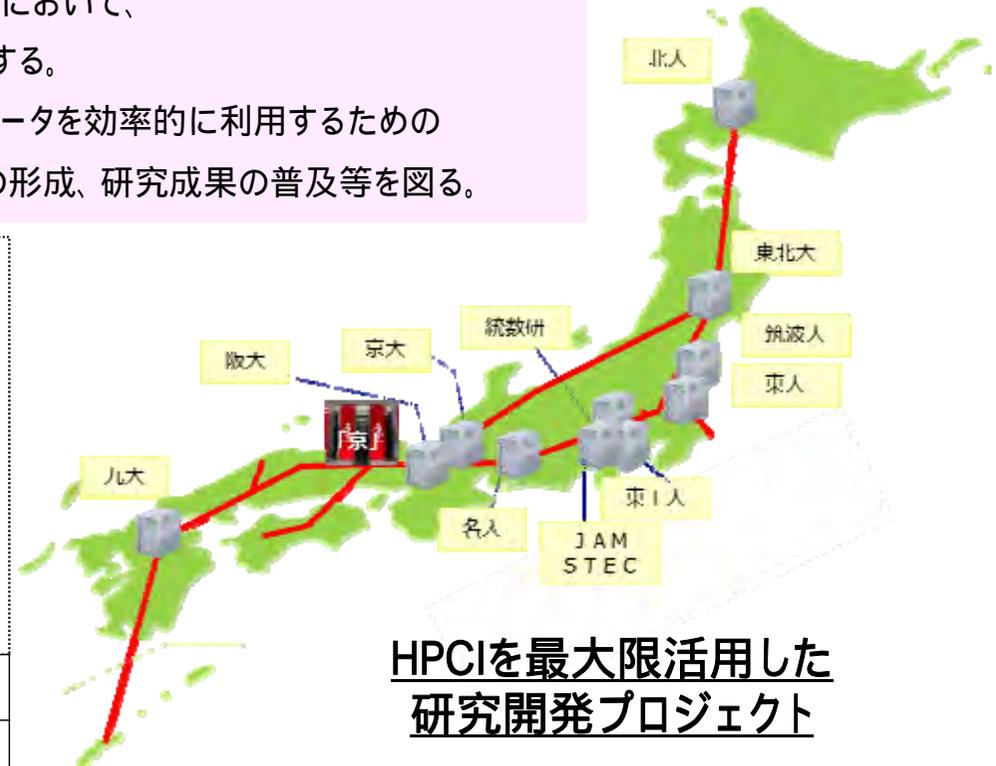
## HPCI戦略プログラム

【目的】 HPCI(理化学研究所の「京」と、国内11機関のスーパーコンピュータで構成されるハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)を最大限活用して、重点的・戦略的に取り組むべき研究分野で画期的な成果を創出することを目的とする。

### 【事業概要】

社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる5つの「戦略分野」において、

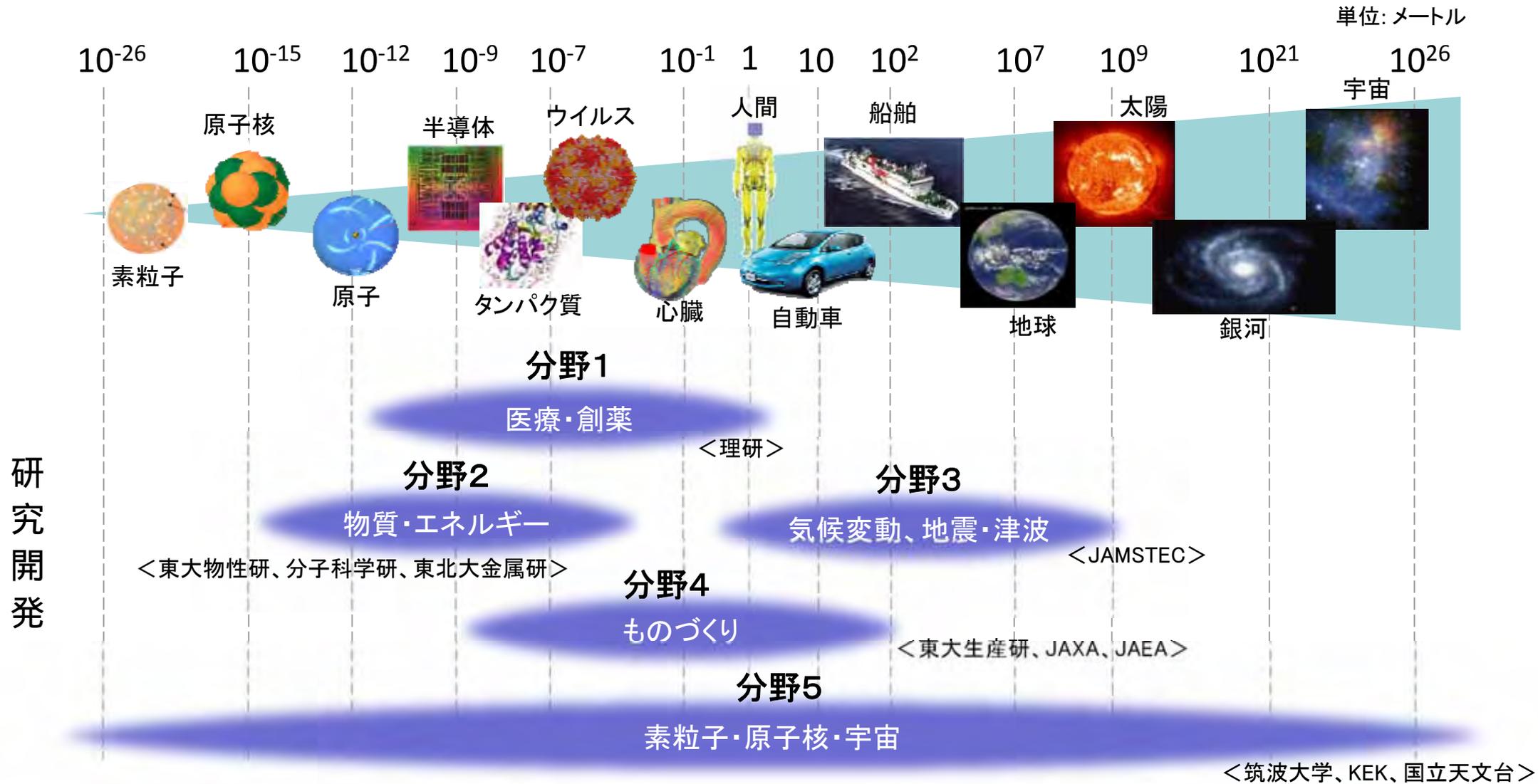
- a. 達成すべき「戦略目標」を定め、その目標に沿った研究開発を推進する。
- b. 我が国の計算科学技術推進体制を構築するため、スーパーコンピュータを効率的に利用するためのマネジメントや研究支援体制の確立、人材育成と人的ネットワークの形成、研究成果の普及等を図る。



**HPCIを最大限活用した  
研究開発プロジェクト**

アウトカム	【定量的な成果目標】					
	a. 各戦略分野の「戦略目標」を具体化した「研究開発目標」(計25目標)を達成する。					
予算	b. 各戦略分野における計算科学技術推進体制を構築する。					
	【成果指標】					
	a. 「研究開発目標」の達成数					
	b. 計算科学技術推進体制の構築状況					
	H23	H24	H25	H26	H27	合計
	25億	25億 (他、補正5億)	26億	22億	20億	123億 (補正込み)

# 戦略分野での研究開発と体制構築



## 体制構築

### 研究支援

- ・アプリケーションの利用支援 等

### 研究成果の普及

- ・開発したアプリケーションの公開 等

### 人材育成と人的ネットワークの形成

- ・教育プログラムや研究会の開催 等

### 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

- ・複数機関による効率的利用と最適配分 等

# 25の研究開発目標

## 戦略目標

## 研究開発目標

### 分野 1

大規模シミュレーションとデータ解析に基づく生命現象の理解と予測、そして薬剤・医療のデザインの実現

- ① 細胞内の複雑な分子シミュレーションにより、細胞内のタンパク質の挙動を理解
- ② 創薬標的タンパク質と薬剤化合物との結合を高精度に予測し、計算創薬を確立
- ③ 分子から臓器までの統合シミュレーションにより、疾患を解明
- ④ ゲノムやがん等の関連を大規模データ解析することにより、そのメカニズムを理解

### 分野 2

計算物質科学：  
基礎科学の源流からデバイス機能とエネルギー変換を操る奔流へ

- ⑤ できるだけ高い温度で超伝導になる物質を探索するための手法開発
- ⑥ 光合成を通して光からエネルギーを得る化学反応の仕組みの解明
- ⑦ 半導体微細構造の制御で発現する電子デバイス機能の予測
- ⑧ ウイルス1個の丸ごとシミュレーションによる感染過程の理解
- ⑨ 燃料電池、リチウムイオン電池の性能向上に向けた電極上化学反応の解明
- ⑩ メタンハイドレートを効率的で安全に採掘するための基礎特性の解析
- ⑪ 鉄鋼材料に亀裂が生じる仕組みを原子レベルから解明

### 分野 3

地球温暖化時の台風の動向の全球的予測と集中豪雨の予測実証、そして次世代型地震ハザードマップの基盤構築と津波警報の高精度化

- ⑫ 全球で雲を露わに表現するモデルにより、2週間以上先の天候予測可能性を実証
- ⑬ 雲を精緻に表現する数値予報技術を開発し、集中豪雨などの高精度な予測を実証
- ⑭ 過去の地震被害の発生要因を解析し、短周期地震動を再現するモデルを開発
- ⑮ 広域での津波の遡上を高速、高解像度で予測する手法の開発
- ⑯ 都市の全構造物の地震応答を計算する大規模シミュレーションの実現

### 分野 4

21世紀のものづくりを抜本的に変革する計算科学技術の戦略的推進

- ⑰ 流体機器の性能を飛躍的に向上させる新しい製品概念の実証と実用可能性の検証
- ⑱ ナノ構造創製の原子レベルでの解析とデバイス開発での有効性の実証
- ⑲ 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
- ⑳ 大規模設計問題のための設計探索手法を開発し、実際の設計における有効性を実証
- ㉑ 地震時の大型プラントや機器系統の挙動を俯瞰的かつ詳細に分析する手法を確立

### 分野 5

宇宙の歴史における、素粒子から元素合成、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を、計算科学的手法で統一的に理解

- ⑳ 4次元時空シミュレーションによるクォーク力学と核力の解明
- ㉑ 多粒子シミュレーションによる、核力から原子核の構造解明と核変換などへの応用
- ㉒ 超新星爆発と中性子星合体の解明
- ㉓ ダークマターの密度ゆらぎからの天体形成過程の解明

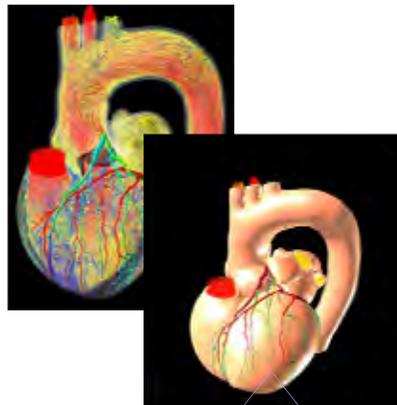
# HPCI戦略プログラムを通じた成果の例

## 目標 (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)

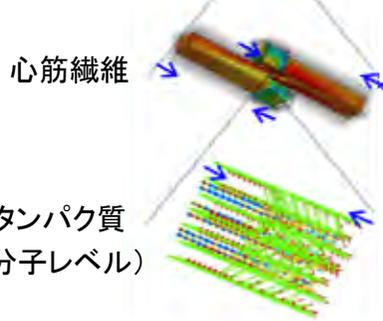
これまで

### 心臓シミュレーション

- 診断データをもとに、(1兆個の分子の振る舞い～心臓の鼓動までつなげる)マルチスケール・シミュレーションを実施。  
→ 患者の心臓を世界で初めてコンピュータ上に再現。



- 血流、血圧を単一スケールで個別に見るなど限定的な解析のみ。



分子レベルで心臓全体の動き(筋繊維の収縮、血流等)を解析

この事業の成果

- ① 患者の心臓を分子レベルで解析し、肥大型心筋症の病態を明らかにした。

- ② 医療機関や製薬企業と共同で心臓シミュレーションの実用化に向けた検証を実施。

- ③ 手術手法をコンピュータ上で事前確認できることを実証。



心臓手術の「ゴッドハンド」と言われる岡山大・佐野教授とも連携。

今後の展開

他の難病の病態を解析

薬や治療法の開発



臨床の現場に適用(最適な治療法の提示)



2年後の先進医療承認を目指す

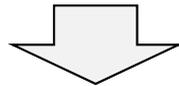
# 試行錯誤を通じた成果の例

## 目標のうち「標的タンパク質と薬剤候補化合物の結合予測」

- がん治療のための創薬を目指して、標的タンパク質と薬剤候補化合物の結合予測を行う際も、数多くのシミュレーションと実験・前臨床試験を繰り返しながら取り組んでいる。「京」を用いることで、開発期間の短縮が可能となっている。(結合自由エネルギーの計算精度を1kcal/mol以下とする目標を達成)

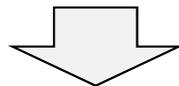
- 研究2年目(H24年度)までに、創薬応用シミュレーションにおいて、約300の薬剤候補化合物に対し、がん治療のための標的タンパク質との結合度合い(くっつきやすいかどうか)を分子レベルでシミュレーション(限られた期間でこれだけのシミュレーションを行うには「京」の性能が不可欠)。

→ 11個の薬剤候補となる化合物(特に結合しやすいもの2つ、その他9化合物)を選別。

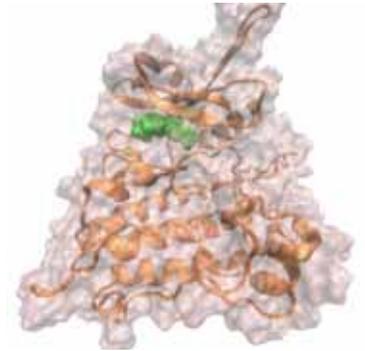


- 翌年(H25年度)までに、製薬企業の積極的協力により、数か月の期間をかけ、実験を通じて、上記11の候補化合物を合成。

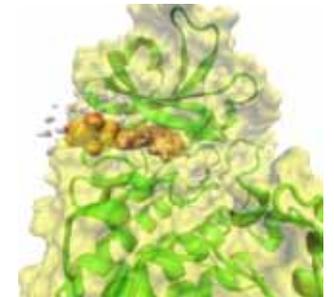
これらの化合物を用いて、前臨床試験を行ったところ、標的タンパク質の機能を止めると、副作用が生じると判明して試験を断念。検証作業を通じて、標的タンパク質の構造(形)が水中で変化することを十分に考慮する必要があったと判明。



- H26年度に、シミュレーション手法を改良して改めて多くのシミュレーションを実施した結果、別の標的タンパク質に関して、抗がん剤候補化合物1個を選定。さらにがん細胞に関する抗体医薬1個を選定。現在、前臨床試験の対象として試験中。



当初想定した標的タンパク質  
(リン酸化酵素の一種)



水中での構造変化を考慮した  
標的タンパク質

# 試行錯誤を通じた成果の例

## 目標のうち「格段に精度の高い流れの予測の実現と産業上の効果実証」

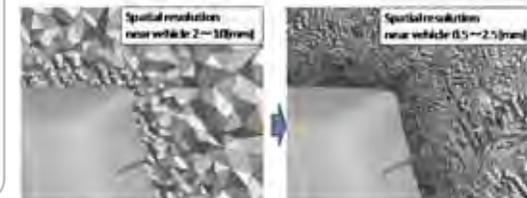
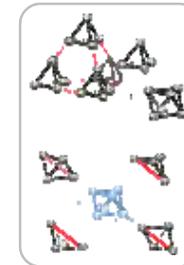
- 自動車製造で空気抵抗を1%刻みで低減することは、燃費向上に不可欠。空力測定のための風洞実験の経費削減と、更なる性能・信頼性向上には、「京」レベルのスパコンによるシミュレーションが有効であることを、企業との連携による研究を通じて実証。

- 初年度(H23年度)に、空力設計を効率化させるシステムの目標を設定。並行して、企業や研究機関に「空力設計のためのシステムプラットフォーム」への参加を呼びかけ。参加企業の負担で、風洞実験を実施。



企業とのコンソーシアムを形成

- 2・3年目を通じて、空気の流れを計算する格子数を、従来のスパコンで用いた3500万要素から23億要素に増やしてシミュレーションを実施。「京」でなければ不可能であるため、独自アプリケーションを開発(流体ソルバー(Front Flow Red HPC)に自動格子細分化機能を附加)。



自動格子細分化機能による  
超大規模格子の生成

- 企業との根気強い議論を行いつつ、超大規模格子の極めて困難な生成を実現。

- 自動車の車体上部の傾斜角を+0.5度から-12.5度まで変化させた場合の空気抵抗の増減を研究。

- 従来のスパコンの場合と異なり、「京」によるシミュレーションは風洞実験の結果と同じ。(当初目標である、風洞実験に匹敵する誤差(1~2%を達成))  
シミュレーションが実用化されれば、風洞実験の大幅削減により、将来的なコスト削減が可能。

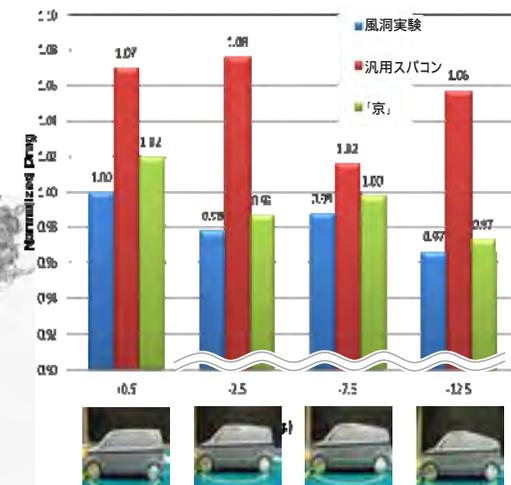
- 風洞実験をシミュレーションで代替する効果の試算例(1車種当たり)

風洞実験:約12億円 ←→ シミュレーション:3000万円

- 実験代替にとどまらず、実験が難しい横風を受けた際の車の動きをシミュレーションすることで、自動運転に向けた性能・信頼性向上にも生かせる。



シミュレーションによる空気の流れ



風洞実験と「京」の計算結果が同じ

## 「京」でなければできない「限界突破」

- それぞれの学問分野において、「京」でなければ得られないデータが生まれ、科学技術に関する様々な研究成果が出ている(これまでの技術的な限界(制約)を突破)。
- 特に、計算速度の高速化はもとより、研究対象に関し、従来のシミュレーションが、部分的な計算に限られたのに対し、「京」ではより高い精度で「丸ごと計算」出来るものができた(近似を減らせるため、信頼性が高い)。

### 【シミュレーションの対象例】

- ・ 半導体素子1つ丸ごと(従来は素子の1/10規模)
- ・ 小児麻痺ウイルス1個丸ごと(従来はウイルスの一部のみ)
- ・ 電池において分子と電子の動きを一緒に計算(従来は別々に計算していた)

## オープンイノベーションの実現

- それぞれの分野で、事業に直接に携わる研究者だけでなく、多くのステークホルダーが参画するプラットフォームが形成され、共同で成果創出を目指すオープンイノベーションの環境が創出されている。

### 【例】

- ・ 理論や実験・観測に携わる研究者
- ・ 産業界・自治体・病院の関係者
- 産業界との連携に当たっても、事業開始前の想定を上回り、個別企業との共同研究や、コンソーシアムを通じた業界全体との連携など、多様な取組が進展している。
- 同様に、想定以上に、様々な学問分野間の連携も進展。  
【例】
  - ・ 生物物理、ゲノムデータ解析、医療工学の連携
  - ・ 物性物理、分子化学、材料科学の連携
  - ・ 流体-構造連成計算を通じた連携(心臓・血流と自動車・空気)

## 成果の実用化への展望

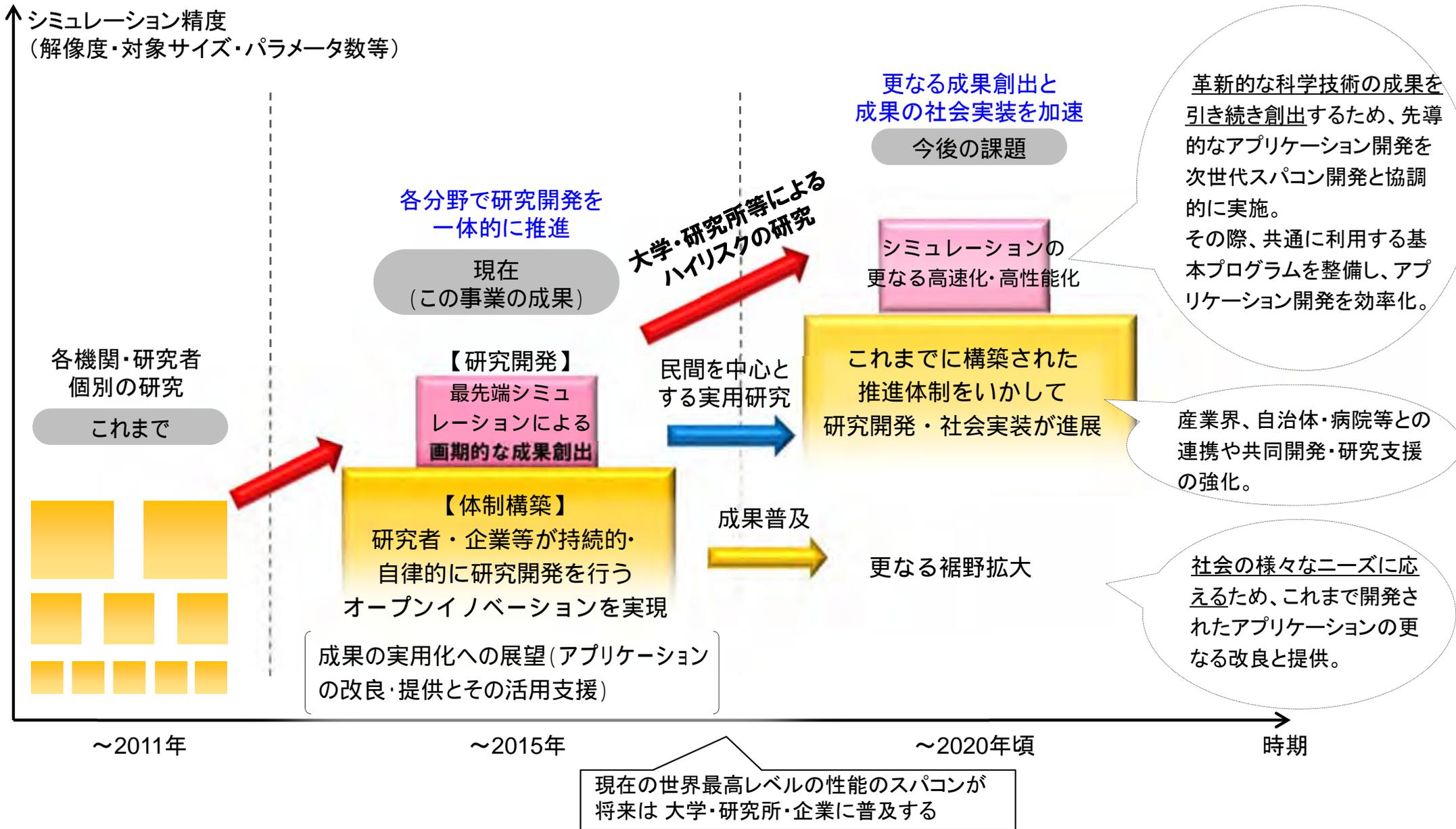
- 左の研究成果の創出とプラットフォームの形成を受けて、
  - ・ 様々な分野の産業界
  - ・ 病院や気象・防災など公的部門などへの波及が具体化しつつある。
- 成果の産業化・社会実装を通じて、経済好循環、国民の生命・身体の保護など国家的な課題の解決に向けた行程ができつつある。
- そうした中で、HPCI戦略プログラム開始後に、高速計算機のユーザーも増加し、裾野も広がっている(大学の高速計算機利用者は、1.46万人(H22)から1.62万人(H25)に増)。

# HPCI戦略プログラムの成果の例

この事業による研究成果の例 「京」でなければできない「限界突破」	これまでに構築した体制 オープンイノベーションの実現	今後の波及効果 成果の実用化への展望
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 分子レベルで心臓全体の動きを解析。 → 肥大型心筋症の病態を明らかにしたほか、心臓手術を事前に検証できることを確認。</li> <li>○ ゲノムデータをもとに網羅的にがん異常を解析。</li> <li>○ シミュレーションによる、新薬候補の選別。 → がん新薬候補として前臨床試験に到達。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 企業が実用化を進められる体制を構築 創薬コンソーシアム(当初、製薬企業11社で発足し、現在、23社に増加)や医療関係者と連携。</li> </ul>	<p>手術前のシミュレーションにより、術後効果を確認。 (心疾患による死亡者は年19万人) 10年以上、数百億円を要するとされる新薬開発の短縮化。 (がん罹患者は98万人。抗がん剤の輸入額は年5000億円)</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 電池の中の化学反応を原子レベルで解析。 → 高安全・高性能な電池材料の探索を可能にする計算手法を開発。</li> <li>○ ナノサイズ半導体デバイスの設計手法を開発。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 企業が実用化を進められる体制を構築 (企業15社と研究機関による「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」を設置)</li> <li>○ 半導体産業研究所(国内主要10社参加)で検討開始。</li> </ul>	<p>電池メーカーが電池材料のデファクト製品を開発。 (リチウムイオン電池市場は、数年後、年1兆円を超えると想定される) 化合物系半導体の開発。(市場は、現在の年150億円が5年後、年3000億円と予測)</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 地震の揺れ、津波による浸水だけでなく、都市の建物被害まで解析。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 自治体等の防災計画策定への活用が検討できる体制を構築(自治体と連携)。</li> </ul>	<p>地震等の自然災害に対応した防災・減災対策の実施。 (南海トラフ巨大地震による経済被害は220兆円と想定)</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 走行時の自動車の空気の流れを忠実に再現。 → 自動車の風洞実験が代替可能であることを実証。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 自動車企業を中心とするコンソーシアム「空力設計のためのシステムプラットフォーム」のほか、中小企業を含む多くの企業との研究開発を進める環境を構築。</li> </ul>	<p>実験の代替による自動車の開発期間短縮・コストの削減。 (現在、国内自動車企業で年間百億円規模のコスト)</p>
<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 2つの中性子星の合体を計算で再現。 → これまでどこで合成されたか不明であった、鉄より重い元素が合成されることを確認。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>○ 素粒子・原子核・宇宙分野を融合した研究が進められる拠点が構築。</li> </ul>	<p>最先端の観測装置による理論の検証。 (専門の教科書を書き換えるレベルの発見)</p>

# 計算科学技術の進展について

ポスト「京」に向けた  
アプリケーション開発の課題



# 経緯と推進体制

平成19年度 : 文部科学省の「次世代スーパーコンピュータ作業部会(科学技術・学術審議会)」で基本的方針を検討。  
 平成20～21年度 : 「次世代スーパーコンピュータ戦略委員会」を計16回開催。社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる5つの戦略分野を決定。

平成21年度 : 公募を経て、実施可能性調査実施機関を決定。

平成22年度 : 「戦略機関」を決定  
 研究開発目標を設定

平成23年度 : 事業開始

平成25年度 : 中間評価

平成27・28年度 : 事後評価を実施予定

経緯

推進体制

