HPCI戦略プログラムを通じた成果の例
目標③のうち、心臓外科手術のシミュレーションによる術後予測

【手術前】

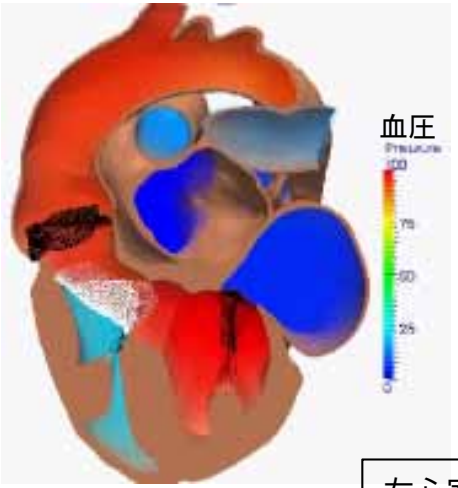
大動脈が右心室から出ている（本来は左心室）

術式１

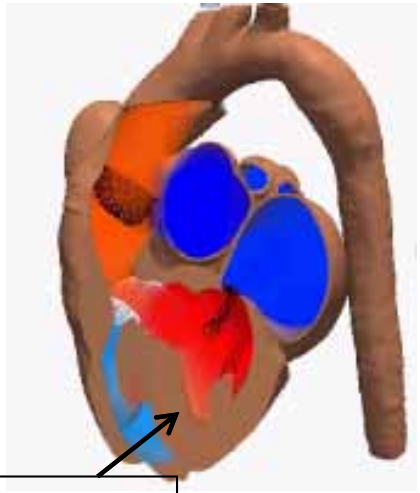
術式２

【シミュレーション結果】

術式１



術式２



左心室に高い負荷
→心臓肥大の原因に

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した事例。

〇小児先天性心疾患に対し、外科医が事前に２つの術式（「術式１」と「術式２」）を比較検討。

〇医師自らの経験に基づいて「術式１」を採用して手術を実施。

〇手術後に、「術式１」と「術式２」を、シミュレーションで比較（「京」で培った研究成果を元に、東大の計算機で再現）。

〇シミュレーションでも「術式２」は「術式１」に比べ、左心室に高い負荷がかかっていることが分かり、手術方法の判断が正しかったことが確認される。

〇これまで
「術式1」と「術式2」のどちらが適切かという判断は、長年の手術経験を積まないと困難と言われる。

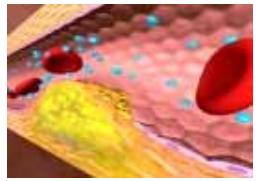
〇将来
手術前のシミュレーションが可能となれば、何千人もの手術経験を持つ医師と同等の知見が得られる。
（関係者は、手術前の判断に利用できるよう２年後の先進医療承認を目指している）

成果と課題（分野１：予測する生命科学・医療および創薬基盤）

達成状況

（1）画期的な成果創出 【目標4つ】 ※全て達成（見込み含む）

①世界最大規模の1億原子系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に関する重要な知見を獲得
②創薬応用シミュレーションにより2種類のがん治療薬候補が前臨床実験へ
③世界初の心臓の階層統合シミュレーションによる術後予測を可能に
④大規模・網羅的データ解析によりがんや脂肪細胞に関する新たなメカニズムを解明



（2）計算科学技術推進体制の構築

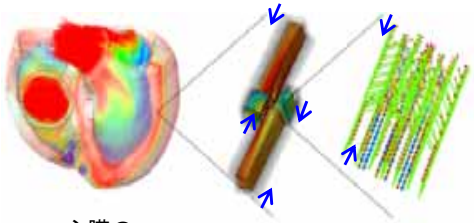
企業が実用化を進められる体制を構築（創薬コンソーシアム（創薬企業20社以上で構成）や医療関係者と連携）

- 約40機関・約220名が参画（平成27年度現在）
- 15の独自開発アプリケーションを提供（本事業外での利用本数：45件）
- 年間3～4のアプリ高度化を実施し、講習会等を17回開催（参加者200名以上）
- 大学院生や社会人等300名を育成、講座単位取得者50名
- 「計算生命科学」について、配信講義（30大学・80社以上から250名以上受講）、eラーニング（1000名以上受講）、シンポジウム（製薬企業等から延べ600名以上）

代表的な成果例

心臓シミュレーション

心臓シミュレータ「UT-Heart」により、心臓の動きを分子レベルから細胞・心臓レベルまで解析。難病の一つである「肥大型心筋症」が引き起こされる過程を明らかに。
今後、他の疾患の解析にも応用することを目指す。

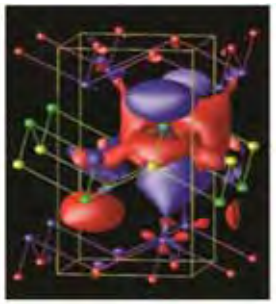


今後の課題等

企業等との緊密な連携の強化や、分野を越えた共同研究による「計算生命科学」の普及、アプリケーション高度化・汎用化等による利用者の拡大、事例の蓄積など、成果の実用化（創薬・医療を実現）に向けて更なる発展が必要。

成果と課題（分野2：新物質・エネルギー創成）

達成状況



（1）画期的な成果創出 【目標7つ】 ※全て達成（見込み含む）

⑤電子状態が関与する物性探索の高度な手法を開発 → 銅系と鉄系の二つの物質で超伝導を発現するしくみを解明
⑥分子間力のように弱い結合までも考慮した量子化学計算手法を開発 → 光合成などの化学反応の仕組みを解明する手段となる
⑦10万原子レベルのシリコンの電子状態計算手法を開発 → シリコンナノワイヤー中の電流分布の予測に成功
⑧1000万原子の超並列分子動力学計算手法を開発 → ウイルス1個の丸ごとシミュレーションに成功し、感染過程を理解
⑨電池の電極間に電圧をかけた状態での化学反応計算手法開発に成功 → 化学反応とそれによる生成物の予測も可能に
⑩メタンハイドレートが分解する際にメタンの泡の大きさが分解速度を律速することを発見 → 泡の制御が採掘に影響を与えることを示唆
⑪鉄鋼材料中のミクロな欠陥と亀裂の生じやすさの関係の説明に成功 → 実験結果と計算結果の整合も確認

（2）計算科学技術推進体制の構築

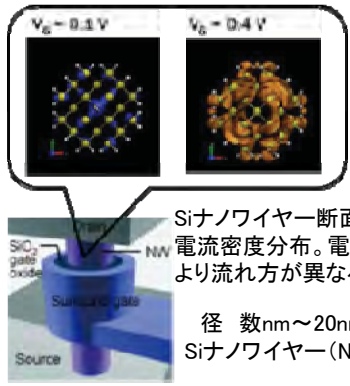
企業が実用化を進められる体制を構築（企業15社と研究機関による「電気化学界面シミュレーションコンソーシアム」を設置）

- 約45機関・約190名が参画する、物性、分子、材料が結集した“計算物質科学イニシアティブ（CMSI）”を構築
- 25の独自アプリケーションを開発・改良し、公開アプリ群をUSBで利用できるパッケージソフトを開発（約400本USB配布、700件以上ダウンロード）
  大学院教育等で継続的に活用する体制を構築
- H26年度：講習会等31回開催（参加者873名（内100名企業）参加）。支援してきた課題12件が「京」一般・企業利用に採択
- 大学院2講座と講義7コマ実施し年100名以上の院生育成。14地点への配信講義2講座30コマを実施し、のべ664名（内52名企業）参加
  45の講座をWEB配信。合計3万件以上のアクセスあり。CMSIの教育活動が認められ東大に定年制教員2名のポジションを確保
- 元素戦略プロジェクトの3拠点からCMSIへ委託研究（H24年度より開始（50百万円/年））。大型研究施設（SPring-8、J-PARC)との連携イベント定着

代表的な成果例

ナノサイズの半導体デバイス丸ごと計算で性能を予測。設計手法で世界に先行

国際競争が激しい半導体技術開発の中で、次世代デバイス設計技術でイニシアティブを取るための鍵となる、電子の粒子と波の両方の性質を考慮した設計手法を開発。世界最大規模のシリコンナノワイヤー全原子計算でその実力を示しH23年にゴードンベル賞（最高性能賞）を受賞。雇用者1名が第一原理計算の第一人者J. Chelikowsky（テキサス大）からの要望で異動するなど、手法は世界から注目。



Siナノワイヤー断面の電流密度分布。電圧により流れ方が異なる。

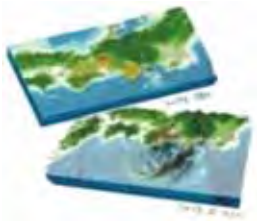
径　数nm～20nm
Siナノワイヤー（NW）

今後の課題等

実験研究との連携強化とともに、大規模計算の敷居を下げ、開発したアプリの堅牢性・信頼性の向上や利便性の向上など改良等を進め、更に普及させていくことが必要。

成果と課題（分野３：防災・減災に資する地球変動予測）

達成状況



（１）画期的な成果創出 【目標5つ】 ※全て達成（見込み含む）

⑫雲の塊まで再現できる全球雲解像モデルにより、台風の温暖化時の動向や積乱雲群の予測等を可能に

⑬雲を解像するデータ同化技術を開発し、豪雨の確率予測につながる成果を獲得

⑭大地震の被害予測のために、強い揺れ、地殻変動、津波を一度に計算する画期的なシミュレーション手法を世界に先駆けて開発、東北地方太平洋沖地震を再現し有効性を検証

⑮仙台の東北地方太平洋沖地震津波による2時間の詳細な浸水予測（解像度5m）を2分以内で完了、津波避難などの対策を講じるための基礎データ取得

⑯都市全域の地震動・地震応答計算により、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【ゴードンベル賞ファイナリスト】

（２）計算科学技術推進体制の構築

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）

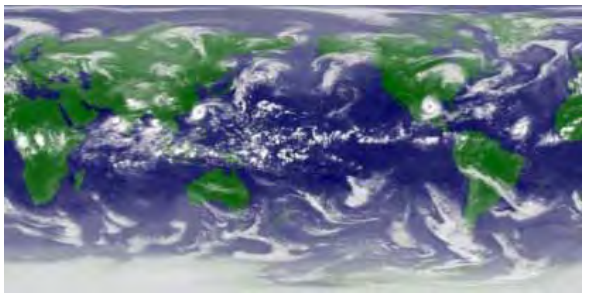
- 約45機関・約280名が参画（平成27年度現在）
- 16のアプリケーションを開発（本事業外での利用本数：17件）
- 年間15～20個のアプリ高度化を実施し、講習会等を年1回開催（参加者20名程度）
- 大学院生や社会人等10名を育成
- 成果報告会、シンポジウム等（約50回・延べ3000名以上）

代表的な成果例

２週間以上先の大気状態を予測

全球雲解像モデルを用いて、熱帯の巨大積雲群の発達・移動を予測。2週間以上先の天気予報の可能性を切り開くことに成功。

将来、気象庁における2週間以上先の天気予報の精度向上へ貢献。



全球雲解像モデルNICAMによるシミュレーション

今後の課題等

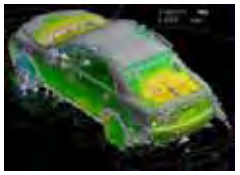
減災計画や避難計画に資する被害予測と軽減対策への具体的な活用が必要。
また、将来的には気象庁の予報業務の精度向上に貢献することが重要。

成果と課題（分野４：次世代ものづくり）

達成状況

（１）画期的な成果創出 【目標5つ】 ※全て達成（見込み含む）

⑰流体制御メカニズムを詳細に解明することにより、悪条件下における流体性能を数十%～数倍向上できることを明示し、産業利用展開を開始
⑱実温状態における、原子の運動、電子の状態の正確な予測に成功し、パワーデバイス製造プロセスの最適化指針の提供を可能に
⑲1mm以下の微細な渦の運動も再現したシミュレーションを実現し、風洞実験に匹敵する誤差（1～2%）での空気抵抗の予測やレーンチェンジ時の車の挙動（走行安定性）解析を可能に
⑳画期的な高効率多目的設計探索アルゴリズムを考案し大規模設計最適化問題の多目的設計探査を可能に
㉑部品点数が数万点に及ぶ系の一体解析技術を開発し、高温工学試験研究炉、石油プラントなどの安全裕度を俯瞰的かつ詳細に分析できることを立証



（２）計算科学技術推進体制の構築

中小企業も含めた多くの企業が研究開発を進められる環境を構築

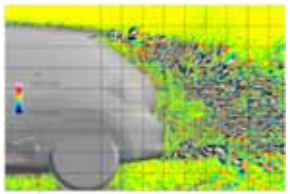
- 約70機関・約260名が参画（平成27年度現在）、多くの企業が参画する研究推進体制の構築
- 17のアプリケーションを開発（本事業外での利用本数：377件）
- 大学院生や社会人等10名以上を育成、産業界向けスクール等による技術者育成（約300名）
- 産業ニーズを採り込んだ実証課題研究やトライアルユース、講習会の実施
- 企業訪問（50社）や実践セミナー（年２回）等によるユーザー開拓、データベース公開
- 成果報告会、シンポジウム等（約50回・延べ3000名以上）
- 分野専用サイト（計算工学ナビ）を構築して、アプリケーション、解析事例、ニュースレター等を公開（訪問者12,000名以上）

代表的な成果例

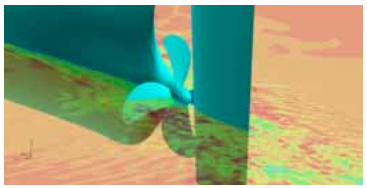
次世代流体設計システムの研究開発

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実現。風洞実験をシミュレーションで代替できることを実証。また、船舶についても、スクリューの回転やそれによる気泡の発生も含め、船体周りの流れを忠実に再現し、曳航水槽試験を代替する可能性を実証。

（財団法人日本造船技術センター 提供）



車両挙動の全乱流渦のシミュレーション



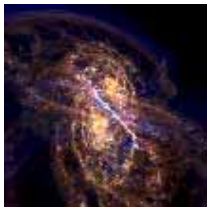
プロペラ回転や波の影響も考慮した超大規模実用計算

今後の課題等

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。

成果と課題（分野５：物質と宇宙の起源と構造）

達成状況



（１）画期的な成果創出 【目標４つ】 ※全て達成（見込み含む）

㉒物質の根源であるクォークから、陽子・中性子の質量や80年間未解明であった核力を導出可能に
㉓従来不可能であった原子核の構造解明によるエキゾチック原子核に関する予言や核変換基礎データの創出
㉔ニュートリノ加熱機構で超新星爆発すること、二重中性子星の合体による重元素合成を明らかに
㉕世界最大約2兆個のダークマター粒子の大規模シミュレーションにより、宇宙の成長過程を明らかに 【ゴードンベル賞（※）受賞】

※ファイナリストには、同じくダークマター粒子のシミュレーションを行った米国グループがあったが、日本グループのアプリケーションが優れ、計算速度が約2.4倍上回り、本賞を受賞。

（２）計算科学技術推進体制の構築

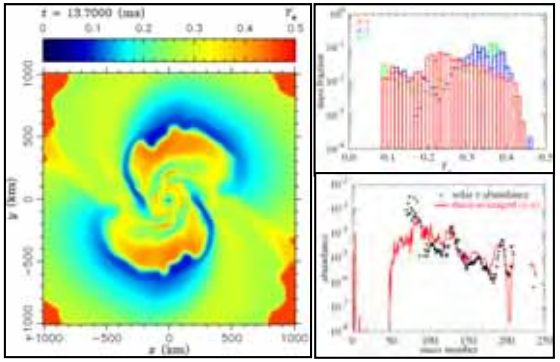
素粒子・原子核・宇宙分野を融合した研究が進められる拠点構築

- 約30機関・約170名が参画（平成27年度現在）、ポスドク研究者を雇用（40名）、計算基礎科学連携拠点としての推進体制の構築
- 16のアプリケーションを開発（本事業外での利用本数：61件）
- 大学院生等（スクール参加者600名以上）を育成
- 全国からの計算機利用に関する支援（42件）
- 研究会・セミナー等（100回以上、6,000名以上参加）の開催
- 一般向けイベント（50件以上開催、延べ17,000名以上参加）を開催

代表的な成果例

二重中性子星の合体による重元素合成

重元素合成起源の解明、将来の大型望遠鏡による観測的予言を目指し、世界最高の空間精度および物理的詳細さで二重中性子星合体のシミュレーションを実施。現実的な仮定のもとで速い中性子捕獲による重元素合成が起こり宇宙の元素組成を説明しうることを発見。重力波など、次世代観測機器がターゲットとする信号がどの程度の量、地球にやってくるのか予想可能となった。



今後の課題等

育成人材のポスト確保などキャリアパスをどう描くかが課題。また、研究教育拠点としての連携強化や開発アプリケーション公開（現在は海外との競争の観点から一部のみ公開）の在り方について検討が必要。