

「京」のこれまでの代表的な成果例

■次世代半導体の新しい設計基本技術を確立

(理由)世界初・ゴードンベル賞

(価値)

- ・微細化で生じる電子の粒子性と波動性の両方の効果(量子効果)を考慮した、従来にないデバイス設計の基本技術を確立。
- ・「京」を最大減活用した大規模な計算により、ナノワイヤー(10万個のシリコン原子で構成)に流れる量子効果を考慮した電流密度分布を世界で初めて計算。
- ・これにより、微細化限界を突破したデバイス設計に道筋をつけました。
- ・シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞を受賞。(平成23年度)

■リチウムイオン電池の材料開発

(理由)社会的インパクトが大きい・世界初

(価値)

- ・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世界で初めて分子レベルで再現。
- ・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。

■ダークマターシミュレーションによる天体形成過程の理解

(理由)世界初・ゴードンベル賞

(価値)

- ・「京」を最大限活用し、世界最大規模の数千億から約2兆個のダークマター粒子の運動をシミュレーションすることで、宇宙の構造形成過程を計算。(パソコン1台で数百年かかる計算が「京」では3日で実現)
- ・詳細なダークマター構造のシミュレーションにより、今後、ダークマター粒子の探査に貢献。
- ・シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞を受賞(平成24年)。

■地震等の自然災害シミュレーションの開発

(理由)社会的インパクトが大きい・世界初

(価値)

- ・「京」を最大限活用し、地盤の揺れ・地震による建物などの振動の計算により、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。
- ・東京23区の一部(3.5km四方)に対し、約10m間隔で地盤の揺れを再現。地盤と建物などの揺れを複合的に計算し、地盤の揺れや建物の振動などの複合的なシミュレーションが、実用的なレベルで可能であることを証明。
- ・シミュレーション分野で世界最高のゴードンベル賞ファイナリストに。(平成26年、平成27年)

■全球雲システム解像モデルによる気象予測

(理由)社会的インパクトが大きい・世界初

(価値)

- ・細かな雲のはたらきまで再現できる解像度のシミュレーションにより、熱帯の巨大積雲群の発達・移動を予測。
- ・2週間以上前から熱帯の天候や台風発生を予測できる可能性を世界に先駆けて実証。

■ウイルス1個の丸ごとシミュレーションにより感染機構を解明へ

(理由)社会的インパクトが大きい・世界初

(価値)

- ・世界で初めて、小児マヒウイルスを原子レベルで丸ごとシミュレーションすることに成功。
- ・具体的には、1000万原子レベルの小児マヒウイルスの全原子シミュレーションを実施することで、ウイルスを形作っているカプシド(殻)の振る舞いが明らかになり、ウイルスが乾燥に弱い一方で高圧に耐え、真水や海水中、ひいては下水中でも安定であることの分子論的な仕組みを解明。
- ・この技術を基に、感染の初期過程である人間のレセプターとの結合の仕組みを分子レベルで解明中。
- ・これにより、方法論としてワクチンや抗ウイルス剤開発にも繋がる有効性が認められ、喫緊の課題であるB型肝炎ウイルスの新規抗ウイルス剤開発に向けた共同研究が開始。

■標的タンパク質と薬剤候補化合物の結合予測

(理由)産業的インパクトが大きい・世界初

(価値)

- ・「京」により高精度のシミュレーションを数多く実施することを可能とし、その結果がん治療標的タンパク質に関して、薬剤候補化合物1個を選定し、前臨床試験を実施中。
- ・さらに、がん細胞に結合すると構造転移を起こし、作用する抗体医薬1個を世界で初めて選定。現在、前臨床試験を実施中。

■世界初の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

(理由)社会的インパクトが大きい・世界初

(価値)

- ・心臓の拍動を分子レベルからコンピュータ上に精密に再現することに成功。シミュレーション結果は超音波エコー、流速ドップラー、心電図、カテーテル検査など臨床医学的データとも一致。
- ・肥大型心筋症の病態を再現。(従来はサルコメア分子の異常と病気との相関のみが示されていたが、病態発生のメカニズムを「京」を用いたシミュレーションで世界で初めて明らかにした)
- ・先天性心疾患など患者の個別心臓を世界で初めてコンピュータ上に再現し仮想治療することに成功。
- ・CG分野で最も権威のあるSIGGRAPH2015で“BEST VISUALIZATION and SIMULATION”を受賞。

■10兆個結合の神経回路のシミュレーション

(理由)社会的インパクトが大きい・世界初

(価値)

- ・「京」を最大限活用し、神経細胞の発火と学習を考慮した世界最大の神経回路シミュレーションを実現。
- ・17億個の神経細胞が、10兆個のシナプスで結合された神経回路で、自然な活動を再現。
- ・これは、小型霊長類の全脳の神経回路を超える規模であり、ヒト脳の神経回路の全容解明に向けた大きな一歩。
- ・これにより、今後のヒト脳全体の本格的なシミュレーションに向けたハードとソフトの開発にも貢献。

■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

(理由)産業的インパクトが大きい・世界最大規模

(価値)

- ・自動車の空力評価のための風洞実験に係る経費の削減と、開発期間の短縮、空力性能や信頼性向上のために、「京」を用いて世界最大規模の空力シミュレーションを実現し、それが有効であることを、企業との連携研究により実証した(コンソーシアム(企業13社、研究機関7機関)による共同研究)。

◆なお、「京」を含むHPCIにおけるこれまでの代表的な成果事例としては、上記の他に以下の成果が挙げられます。

『「京」を中核とする HPCI利用研究課題 成果事例集』http://www.hpci-office.jp/pages/k_jirei