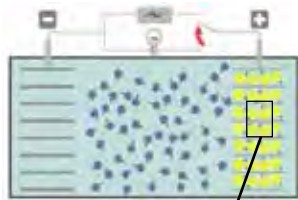


想定されるポスト京の成果（重点課題 エネルギー）

京以前（過去）

リチウムイオン電池について、従来のスパコンでの典型的な電子状態計算サイズは、電池の中の正極や負極の固体電極材料で100原子程度。電解液は勿論、電極電解液界面における化学反応を予測することはできず、高性能と高安全を両立する材料設計はほぼ不可能。

リチウムイオン電池



電子状態計算領域

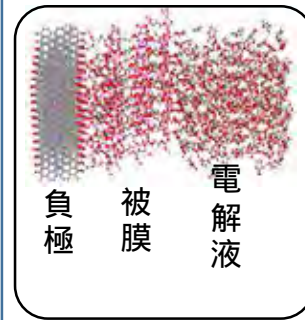


熱暴走

©NTSB

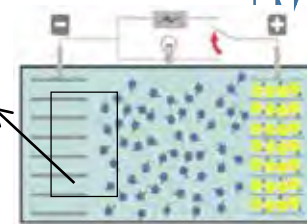
京時代（現在）

「京」では負極と電解液等の材料界面を含む1000原子レベルの電子状態計算が可能。界面に電位を加えた計算手法も開発。結果、化学反応を予測する高精度計算が可能となり、安全や性能にかかわる電極上被膜の添加剤効果など長年の謎を解明。材料探索も実施中。



負極 被膜 電解液

電子状態計算領域

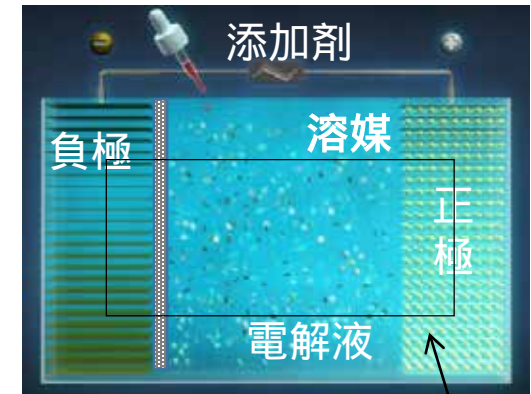


高機能電解液開発



ポスト京時代（将来）

ポスト「京」では正極・電解液から負極まで複数界面を取り込んだ領域の数十万原子レベルの計算にトライ。実験と連携してインフォーマティクス手法を取り込み、新型電池材料の開発期間を短縮。高性能と高安全を両立する電池材料特許の先行取得をもくろむ。



電子状態計算領域



新しい高性能・高安全性電池材料設計
→ 電気自動車、スマートグリッドなどの革新

想定されるポスト京の成果（重点課題 創薬）

京以前（過去）

従来の汎用コンピューターでは、標的タンパク質と薬の候補化合物の結合シミュレーションを高い精度で行うことは、極めて困難であった。

このため、新規骨格化合物の設計や、有効性の指標となる標的タンパク質との結合予測を行うシミュレーションは、創薬化学者による探索研究実験の補助的役割にとどまっていた。



実験に頼る創薬

京時代（現在）

「京」では特定のタンパク質に対する大量の高精度な結合予測が可能となり、効率的な薬剤探索が可能になった。

これにより、いまだ合成されなかった多くの新規薬剤の効率的な計算スクリーニングが実現し、その結果を基に、製薬会社が新規薬剤を合成し、標的タンパク質との結合アッセイを行うという、民間企業との連携が実現できた。



シミュレーションにより
候補の選定を実現

ポスト京時代（将来）

ポスト「京」では多数のタンパク質、多数の結合箇所について高精度な結合予測が可能となる。細胞環境も取り入れた大規模で長時間の生体分子シミュレーションにより、生体分子システムの大規模な構造変化を含めた動的構造を明らかにする。薬剤の結合によるタンパク質の機能制御まで含めた効率的な薬剤探索が可能になると期待される。



創薬におけるタンパク質の機能阻害から
機能制御への革新

想定されるポスト京の成果（重点課題 生体シミュレーション）

京以前（過去）

これまでは、人の体を構成する脳・神経や筋肉・骨、心臓、血管といった個々の要素を、ばらばらに計算して研究を行っていた。粗いシミュレーションであったため、成果の応用は限定的であった。



（血管の硬さが分かる高機能血圧計への応用例）

器官毎の粗いシミュレーションを実現。

京時代（現在）

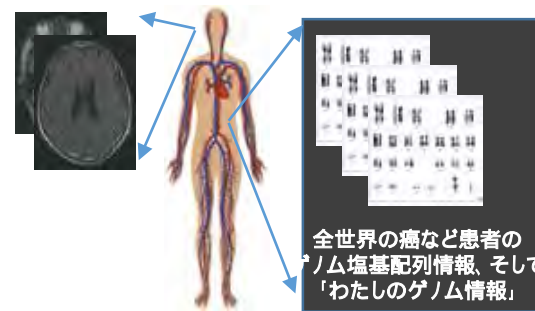
「京」を用いて人の体を構成する心臓や血管のシミュレーションを連成し、分子、細胞レベルから精緻に計算できるようになった。これにより、実際に医療機関との連携により、実際に治療への応用を進めているところである。



分子、細胞、組織、器官の連成を行い精緻なシミュレーションを実現。

ポスト京時代（将来）

ポスト「京」を用いると、ビッグデータ処理が可能となり、膨大な量の臨床データやゲノム情報から、個人ごとの健康・疾患の予測が可能となる。これにより、疾患の早期発見・早期治療、また、健康寿命の延伸に貢献できる。



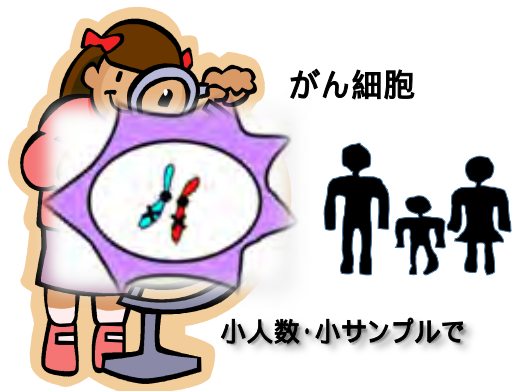
個人医療への貢献が可能に。

想定されるポスト京の成果（がんの個別化・予防医療支援）

京以前（過去）

個々の研究では、数十検体のがんゲノムの2%ほど(エクソーム)を解析し、主要ながんのドライバー遺伝子と変異を同定。抗がん剤応答遺伝子ネットワーク解析は1000遺伝子程度まで。全世界で実施された全ゲノムシーケンス解析数は2桁程度。

局所的にしか見えなかった



一部の主要ながんの原因遺伝子と変異を抽出。

京時代（現在）

ヒト全ゲノム解析が1000ドル。1検体の全がんゲノムシーケンスデータの解析と全遺伝子ネットワーク解析を平均1時間で実現。ゲノム異常や遺伝子制御異常のカタログができ、医療への応用が展開中。欧米では100万人ゲノム/健康医療情報プロジェクトが始まった。

がんの全体像がやっと見えた



網羅的にがんのヘテロ性とシステム異常の本態を計算科学技術で解明。

ポスト京時代（将来）

ヒト全ゲノム解析は100ドル以下。1細胞ゲノム・RNA解析や血液・尿中のがんゲノム解析が普及。個々人のがんを時空間でとらえることが現実に。ゲノム関連情報と臨床データからなるビッグデータ解析やがんの進化シミュレーションで、1日平均数千検体規模の統合解析を目指す。

個々人のがんがわかる！



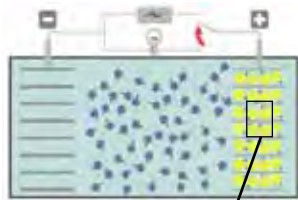
個人ごとのがんの予防と治療戦略の支援を実現。

想定されるポスト京の成果（重点課題 エネルギー）

京以前（過去）

リチウムイオン電池について、従来のスパコンでの典型的な電子状態計算サイズは、電池の中の正極や負極の固体電極材料で100原子程度。電解液は勿論、電極電解液界面における化学反応を予測することはできず、高性能と高安全を両立する材料設計はほぼ不可能。

リチウムイオン電池



電子状態
計算領域

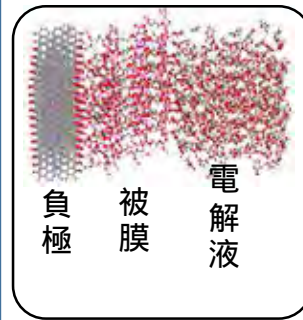


熱暴走

©NTSB

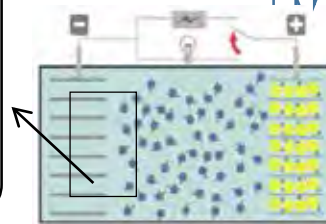
京時代（現在）

「京」では負極と電解液等の材料界面を含む1000原子レベルの電子状態計算が可能。界面に電位を加えた計算手法も開発。結果、化学反応を予測する高精度計算が可能となり、安全や性能にかかわる電極上被膜の添加剤効果など長年の謎を解明。材料探索も実施中。



負極
被膜
電解液

電子状態
計算領域

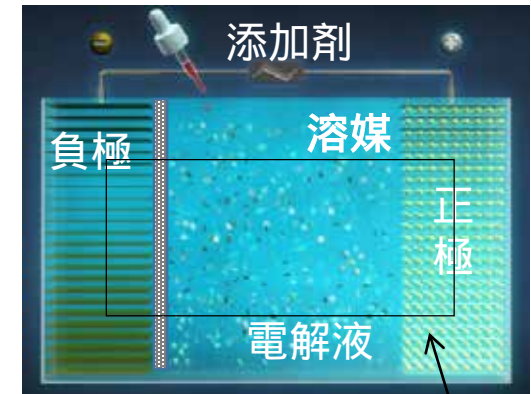


高機能電解液開発



ポスト京時代（将来）

ポスト「京」では正極・電解液から負極まで複数界面を取り込んだ領域の数十万原子レベルの計算にトライ。実験と連携してインフォーマティクス手法を取り込み、新型電池材料の開発期間を短縮。高性能と高安全を両立する電池材料特許の先行取得をもくろむ。



電子状態
計算領域

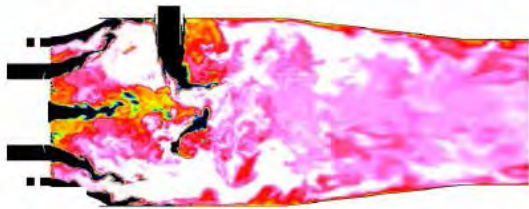


新しい高性能・高安全性電池材料設計
→ 電気自動車、スマートグリッドなどの革新

想定されるポスト京の成果（重点課題 クリーンエネルギー）

京以前（過去）

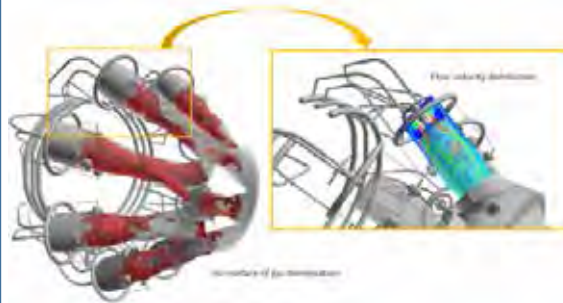
実機燃焼器内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES解析は行われていたが、対象は大気圧(0.1MPa)条件下の単缶もしくは燃焼器の一部に限られていた。



単缶型ガスタービン燃焼器のLES
(提供 京大)

京時代（現在）

3.0MPa程度までの亜臨界状態における実圧の実機燃焼器内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES解析が可能となった。

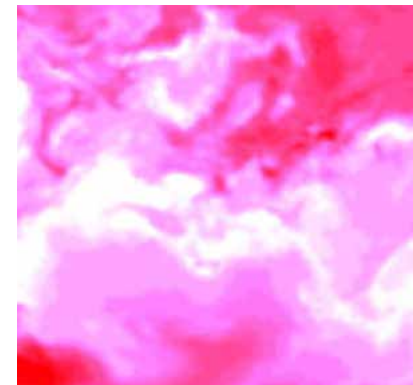


8缶型ガスタービン燃焼器のLES
(提供 京大、川崎重工)

ポスト京時代（将来）

30MPa程度までの超臨界状態における実圧の実機燃焼器内の燃焼LES解析が可能となる。これにより、あらゆる条件下における燃焼挙動の把握、燃焼器の設計、および最適操作条件の選定を支援し、クリーンエネルギーシステムの実用化に貢献する。

←→ 数十 μm



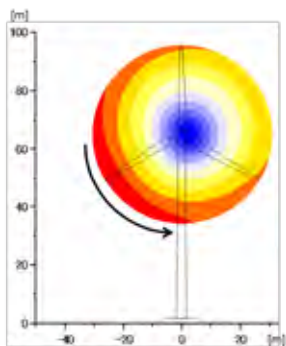
乱流燃焼のイメージ(ガス温度)：圧力の上昇に伴い乱流の最小スケールが小さくなる
(提供 京大)

想定されるポスト京の成果（重点課題 クリーンエネルギー）

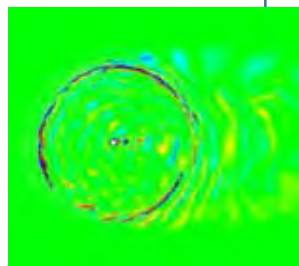
「高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析」が拓く次世代風力発電システム

京以前（過去）

風車の設計には実験・観測データに基づく経験則が利用されており、数値解析は補助的な役割として利用されていた。風車単体の定常解析が中心であり、風況や地形の影響を考慮した数値解析は限られた条件のみで実施されており、実験の代替には至らなかった。



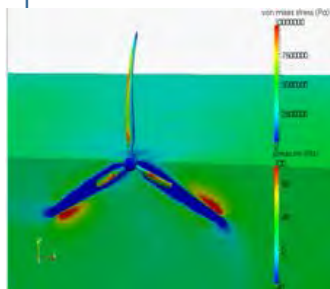
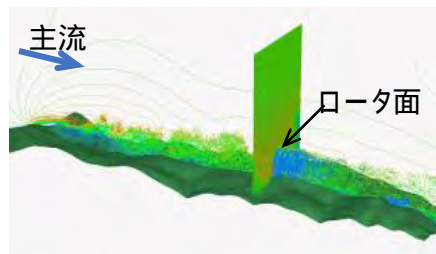
FAST
(実験データベース)に
基づく風車騒音予測



風車単体解析

京時代（現在）

風車単体の大規模な非定常解析が可能となり、さらに空力・構造連成解析による風車の構造解析も可能となった。風車の後流の影響や地形の影響を考慮した非定常解析が可能となった。しかし、ウィンドファームのような風車群の流れ解析最適設計のための解析は実現できていない。



複雑地形上に
設置された
風車後流の可視化

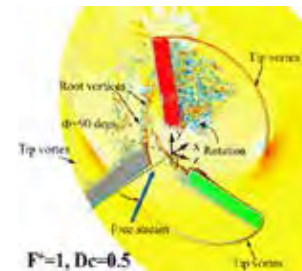
流体・構造連成解析
(風車単体)

ポスト京時代（将来）

大気境界層、地形を考慮した大規模ウィンドファームにおける風車間の流れの相互干渉を解析することにより、発電量の向上、ブレードの寿命改善、低コスト化が可能となる。これらの技術によって環境に優しい安定した電力供給を実現すると共に我が国の風力発電産業の競争力向上に貢献する。



洋上WFにおける風車後流(DK)
ポスト京で対象とする流れ

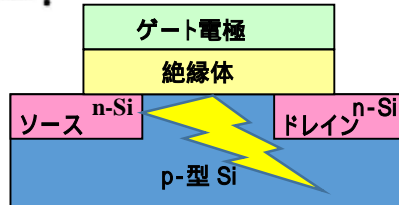
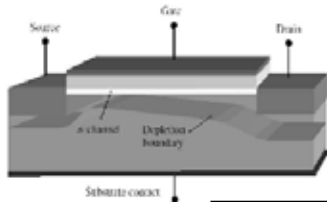


風車性能改善のため
の制御技術の開発

想定されるポスト京の成果（重点課題 デバイス）

京以前（過去）

従来の汎用コンピューターでは、数十ナノメートル程度のサイズで生じる電子の量子化の問題を計算することが困難であった。そのため、この量子効果を考慮した次世代のナノデバイスのシミュレーションを行うことはできなかった。



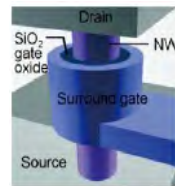
回路幅が数10ナノになるとリーク電流が急増



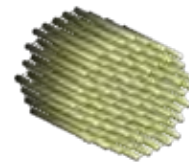
平面トランジスタ

京時代（現在）

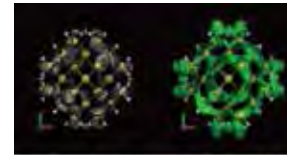
「京」により、数万原子レベルのナノデバイスが実物大で計算可能に。シリコンナノワイヤをはじめとする次世代ナノデバイスの有力ターゲットに対して、その安定性と電子状態を量子論で解明することに成功。形状に依存する電子構造や伝導特性等を明らかにした。



電極を周囲に設けリーク電流抑制



ワイヤ構造



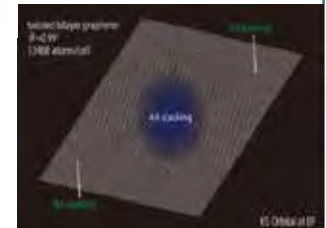
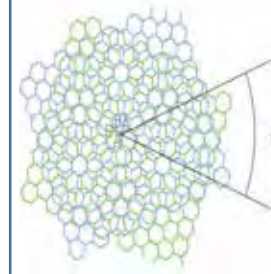
$V_G=0.3V$ $V_G=0.8V$

断面での電流分布

3Dトランジスタ Siナノワイヤ

ポスト京時代（将来）

ポスト「京」では、数十万原子レベルの計算が可能となり、様々なナノ構造体の電子機能や安定性の量子論に基づく予測、さらにはダイナミクスまでもが扱える。これにより量子シミュレータの構築と、新機能を創出するナノ界面科学の深化を目指す。また、インフォマティクス技術を活用した大規模高精度計算を実行し、用途指向の新材料・新ナノ構造を探索する。

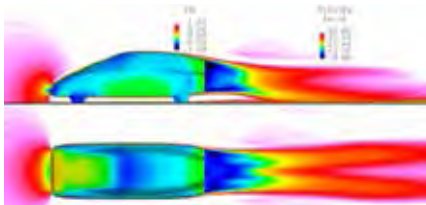


多彩なナノ構造と新機能の創出

想定されるポスト京の成果（重点課題 ものづくり）

京以前（過去）

実験の代替手法として期待されていたが、精度が不十分で補助的手段として用いられていた。また時空間解像度が十分でなく、現象の解明に用いることはできなかった。



Reynolds-averaged Navier Stokes (RANS)

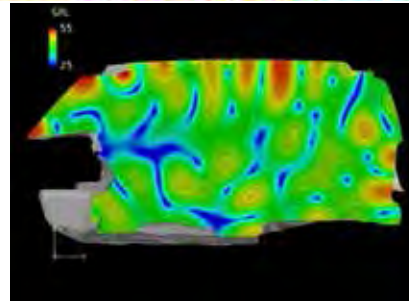
風洞実験による自動車設計

京時代（現在）

時空間解像度を高めることで、実験値に匹敵する精度での予想が可能になり、実験の代替手法となりえることを実証した。さらに連成解析により実験では難しい現象の予測も可能になった。一方で、プロセス間の協調設計には至らなかった。



高精度空力予測



車室内騒音の予測

個々の設計プロセスにおける
実験代替手法の実証

ポスト京時代（将来）

構造・機能・性能等の個々のシミュレーション結果を総合的に判断して、最適な方向性の判断を支援する自動車の上流設計を実現し、期間短縮・コスト低減・品質向上を実現し、日本の自動車メーカーの国際競争力向上に貢献する。

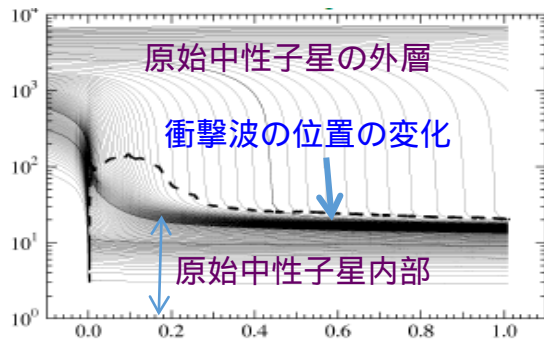


異なる性能項目を俯瞰して
開発方向を判断する上流設計

想定されるポスト京の成果（重点課題 宇宙）

京以前（過去）

超新星爆発などの爆発的天体現象では、地上実験では解明不可能な超高密度状態が実現し、重力、核力、ニュートリノ輸送など多様な効果全てが重要な役割を果たす。京以前の計算では、大幅に簡略化したモデルを使わざるを得ず、現実的な計算は困難であり、その解明は難しかった。

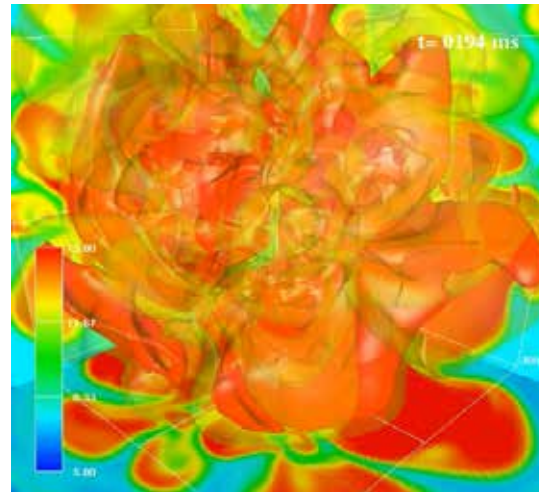


衝撃波発生後からの経過時間(秒)

球対称性を仮定した計算例。
非球対称効果がなく衝撃波が成長せず爆発しない。住吉ほか(2005)。

京時代（現在）

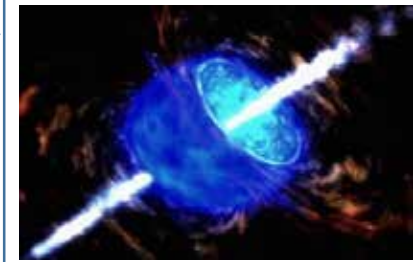
空間的対称性を仮定せず、回転や対流効果を考慮した超新星爆発計算が可能になり、爆発の再現に初めて成功した。また、輻射磁気流体、一般相対論的重力効果を取り入れたより精密な計算も実現しつつあり、多様な爆発現象の予言が進みつつある。



京を用いた3次元計算により超新星爆発の再現に成功。滝脇ほか(2012)。図は爆発面が非一様に膨張する様子を表す。

ポスト京時代（将来）

多様な効果が考慮された高精度の計算が多数実現され、多様な超新星爆発や中性子星連星合体過程の解明と、それらに付随して進む重元素合成の理解が進む。さらに、大型光学望遠鏡や重力波望遠鏡による観測との連携により多様な爆発現象の本格解明の時代が初めて導かれる。



ジェットを伴う超新星爆発の想像図 (NASA)



史上初の重力波検出を目指す KAGRA望遠鏡 (東大宇宙線研)