

1 . 追加の説明を求める事項 (3) < 1 >

(3) 利活用と効果 (有効性)

エクサスパコンで開発する個別の新規技術の他分野への波及効果として、どのようなものが期待されると考えているのか？

スパコン自主開発を通じて得られる様々なハードウェア・ソフトウェア最先端技術、人材・ノウハウ、テクノロジーブランドは、スパコンビジネスのみならず、スパコン以外への技術転用など、多くの波及効果をもたらす。



1 . 追加の説明を求める事項 (3) < 2 >

スパコンの開発により得た省電力技術・手法は商用機への展開やサーバ等の情報システムへの展開のみならず、電気製品等の半導体設計全般に幅広く応用されている。また、「京」の開発で得られた技術を他分野へ応用・製品化された具体例は以下の通り。

(1) スマートフォン (ネットワーク機器)

「京」を開発するにあたり、如何に排熱を処理するかが問題となった。排熱を処理するには排熱自体の量を少なくする手法と排熱を効率良く放出する手法のいずれかである。そこで京では排熱を効率良く放出するため、チップとチップを覆うプラスチック製のカバーとを接合する接合材の改良を行い、より放熱機能に優れた接合材を開発した。開発された技術はスマートフォンでも利用されており、これまで用いられていた接合材より放熱機能に優れているため、スマートフォンの排熱をより効率よく放熱することでスマートフォンの故障率の低下に貢献している。

(2) デジタルカメラ (デジタル家電)

「京」を開発するに当たり、より小さな半導体を用いたチップを開発することで、計算ラックを縮小する必要があったため、微細化している半導体に必要な情報を焼き付ける技術を開発した。開発されたこの技術はデジタルカメラにも利用されている。家電製品のサイズが小さくなるに従って、搭載されている半導体も微細化している。その微細化している半導体に必要な情報を焼き付ける技術に京の開発で得た技術を用いている。特にデジタルカメラでは画像処理用の半導体に情報を焼き付ける際にこの技術が適用されており、デジタルカメラ本体のサイズの縮小化に貢献している。

1 . 追加の説明を求める事項 (3) < 1 >

(3) 利活用と効果 (有効性)

産業応用について追加資料をお願いしたい。エクスサの開発・利用によりどのように産業競争力が強化されるのかを説明する資料を出してほしい。

基本的認識

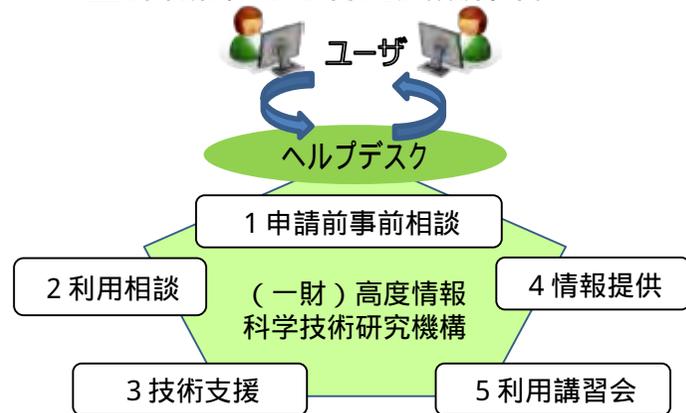
スーパーコンピュータは、ものづくりの現場において試作・試験・評価のプロセスをシミュレーションで代替させることにより、効果的・効率的に新しい製品の開発を進めるとともに、新しい材料の性質や薬候補物質の効果などの詳細な予測を現実のものとする。さらに、ビッグデータのような膨大なデータの処理・解析やデータ同化などに関しても利用が進みつつあり、新たなイノベーション創出に不可欠なツールである。我が国としても、その様な状況を踏まえ、以下の認識でスーパーコンピュータの産業利用を推進している。

- ・スーパーコンピュータの高度な利用により、我が国の国際的な産業競争力の強化が期待される。
- ・産業界でのスーパーコンピュータ利用が進むことにより、スーパーコンピュータ本体事業、アプリケーション事業及び利用に関連する事業が進展し、全体として、我が国のスーパーコンピューティング技術の競争力の強化に資することが期待される。
- ・スーパーコンピュータの産業利用が進むことで将来的な社会的・科学的課題が明確になり、それをアカデミアへフィードバックをかけることによって、大学等における研究のさらなる進展が期待される。

「京」における産業利用の高まり

スーパーコンピュータの産業利用を推進するため、「京」に関しては、共用法に基づく登録機関が利用支援を行っており、課題申請における産業利用の割合は1年で3倍に伸びている。

登録機関による利用支援体制



これまで80企業以上が京を利用

今後も産業界による活用は十分見込まれる。

課題申請における産業利用の割合

課題種別	申請件数		構成比	
	H24	H25追加	H24	H25追加
京一般利用	138	28	62%	46%
京 若手人材育成利用	58	12	26%	20%
京 産業利用	27	21	12%	34%
うち実証利用	22	18	10%	30%
うち成果非公開	5	3	2%	5%
合計	223	61	100%	100%

別途、産業利用についてはトライアルユースとして19件が実施中

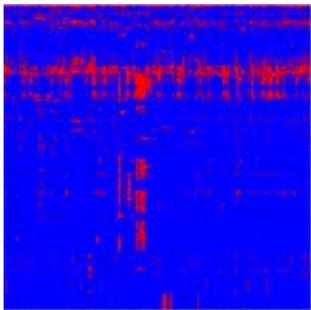
「京」の産業利用における成果事例

● 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築 (研究代表者：京都大学・奥野恭史)

製薬企業11社が参画し、タンパク質と化合物の結合予測を世界最大規模で達成。医薬品開発の成功確率向上と迅速化に貢献。

医薬品の開発には10年以上の長い年月と500億円以上の巨額の費用が掛かると言われており、シミュレーションによる開発期間・コスト縮減が期待されている。

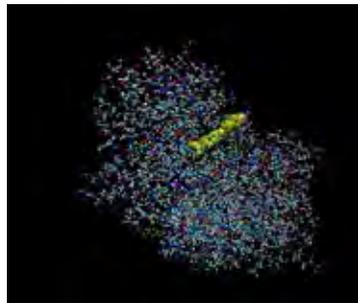
そこで、製薬企業11社と共同で「京」を用いた医薬品開発の研究プロジェクトを推進。論文等で結合することが分かっているタンパク質と化合物の結合ペア (12万ペア) をもとに、大量のタンパク質と化合物の結合データを学習し、結合パターンの統計ルール化を行い、「京」による超高速計算で、世界最大規模 (189.3億ペア) の結合予測に成功。今後は、予測結果をもとに、各製薬企業が独自に医薬品開発につなげる。



化合物 (500種)
(最終的には3000万種)

タンパク質 (388種)
(最終的には631種)

「京」による結合予測結果
(赤色が相互作用あり)



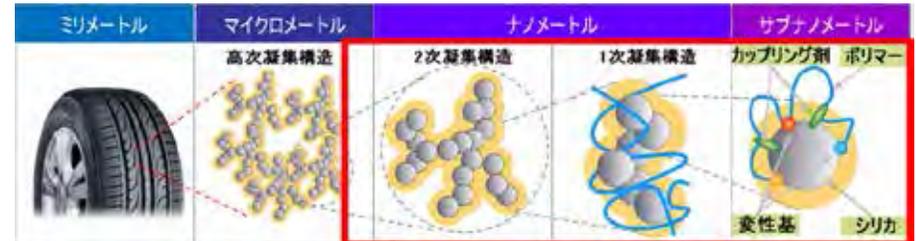
タンパク質と化合物の
結合シミュレーション

● 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発 (研究代表者：住友ゴム工業(株)・岸本浩通)

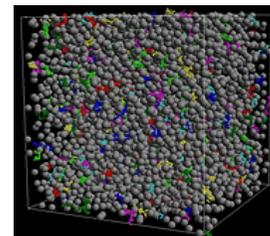
「京」による大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションにより、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。

低燃費・安全性 (グリップ性能) ・省資源 (ゴム強度) といった相反するタイヤ性能を両立させ、タイヤゴムを高機能化させるためには、分子・ナノレベルでの構造解析が必要となるが、企業レベルでのスパコン性能の制限から従来は困難であった。

「京」を用いることで、大規模でありながら、分子レベルの詳細なシミュレーションが可能となり、ゴム内部の複雑な構造を大スケールでシミュレーション。タイヤを高機能化させるための研究に活用し、低燃費・高グリップ性能を両立させる新しいタイヤ用ゴム素材の開発に成功。



この領域すべてを分子レベルで丸ごとシミュレーション



タイヤ材料のナノレベルでのシミュレーション

1 . 追加の説明を求める事項 (3) < 3 >

産業利用から見た世界最高水準のスーパーコンピュータの必要性

産業界では、基本的に、その時代の世界最高水準のスーパーコンピュータの1/10から1/100程度の能力を用いて、数年後に実用化（プロダクトラン）することを目指した実証研究を行い、同程度の能力のマシンが下方展開する数年後に、自社に整備した当該マシン等を用いて実用化（プロダクトラン）する。そのため、世界最高水準のスーパーコンピュータが存在しなければ、そこを実証の場とするような先端的産業利用は生まれず、我が国の将来の産業利用はじり貧になるおそれがある。

したがって、我が国として世界最高水準のスーパーコンピュータを開発・整備することは、アカデミアだけでなく産業界にとっても、将来の競争を勝ち抜くための先行投資である。

文部科学省 HPCI計画推進委員会 今後のHPCI計画推進のあり方に関する検討WG 産業利用アプリケーション検討サブWG報告書をもとに要約

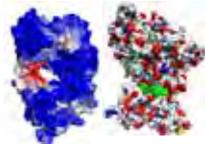
ポスト「京」で期待される産業競争力強化の例

日本再興戦略（平成25年6月14日閣議決定）

・革新的な医薬品・医療機器の研究開発、再生医療等の先端医療研究を推進するとともに、人材育成や革新的医薬品・医療機器・再生医療製品の安全性と有効性の評価法の確立に資する研究の充実、スーパーコンピュータを活用したシミュレーション手法による医療、創薬プロセスの高度化及びその製薬会社等による利用の促進等の基盤強化を図る。

● 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

新薬候補物質の病気への効果を、副作用も含めて詳細に解析することで、画期的な新薬の早期開発に貢献。



複数タンパク質への新薬候補物質の作用を解析



超大型医薬品の年間売上高は数千億円～1兆円規模。スパコンにより画期的な新薬が世界に先駆けて開発できれば、数千億円規模の経済効果が期待。

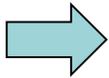
1 . 追加の説明を求める事項 (3) < 4 >

スーパーコンピュータの開発による経済波及効果は
スーパーコンピュータ開発自体の波及効果
開発によってもたらされる各分野の成果創出による効果 により、数兆円規模にも及ぶ。

スーパーコンピュータ「京」 (開発期間：平成18年～24年)

本資料のデータは株式会社三菱総合研究所情報通信政策研究本部「計算機の開発及び利用による波及効果調査」調査報告書(2013年8月)をもとに作成

- n 「京」開発(本体、施設等含む)そのものによる経済波及効果は総額2861億
- n 「京」開発による各分野()の成果創出による経済波及効果は直接効果1.27兆円含む総額3.44兆円
各分野：創薬・医療、エネルギー・新物質、防災・減災、ものづくり、基礎物理等
例：創薬医療分野における「京」の直接効果3997億円
(新薬による市場創出効果：1449億円、新治療法開発により1748億円、医薬品開発コスト削減による200億円)



「京」の波及効果は直接効果総額1.38兆円、間接効果含め総額3.73兆円

【「京」の技術の波及効果(身近な例)】

(1) スマートフォン(ネットワーク機器)

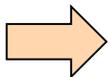
より放熱機能に優れた接合剤を開発。スマートフォンに利用されることで、排熱を効率よく放熱して故障率の低下に貢献。

(2) デジタルカメラ(デジタル家電)

微細化している半導体に必要な情報を焼き付ける技術を開発。デジカメの画像処理用半導体この技術が適用されることで、本体のサイズの縮小化に貢献。

ポスト「京」 (開発予定期間：平成26年～31年)

- n ポスト「京」開発そのものによる経済波及効果は総額3143億円
- n ポスト「京」開発による各分野()の成果創出による経済波及効果は直接効果2.00兆円含む総額5.33兆円
各分野：創薬・医療、総合防災、エネルギー・環境問題、社会経済予測等
例：エネルギー環境問題におけるポスト「京」の直接効果は4800億円(太陽光発電、燃料電池システム、バイオマス発電)



ポスト「京」で期待される波及効果は直接効果総額2.12兆円、間接効果含め総額5.65兆円

スパコン開発による波及効果は開発そのものはもちろん、それによる成果創出により情報通信分野だけでなく、医療・創薬、ものづくり、環境問題等 **国民生活に直結した多岐にわたる分野において数兆円規模の効果**をもたらす。「京」の効果はいままさに発揮されているところであり、この **経済波及効果を継続かつ拡大するために、ポスト京の開発が必要不可欠**

1 . 追加の説明を求める事項 (3) < 5 >

株式会社三菱総合研究所情報通信政策研究本部「計算機の開発及び利用による波及効果調査」調査報告書概要版（2013年8月）より抜粋

スパコン「京」開発による経済波及効果

	評価区分	直接効果 (投資、需要)	1次波及効果	2次波及効果	経済波及効果	
					金額	(比率)
「京」開発自体の波及効果	計算機	793	1,206	543	2,861	(7.7%)
	ソフトウェア	126				
	施設建物	193				
「京」開発成果の応用分野の波及効果	生命科学・医療および創薬	3,397	2,990	1,979	8,366	(22.4%)
	新物質・エネルギー創成	2,279	2,678	1,202	6,159	(16.5%)
	防災・減災に資する地球変動予測	2,610	2,919	1,486	7,015	(18.8%)
	次世代ものづくり	2,428	2,692	1,143	6,263	(16.8%)
	物質と宇宙の起源と構造	506	604	295	1,405	(3.8%)
	その他分野	1,511	2,790	922	5,223	(14.0%)
合計		13,843	15,879	7,570	37,292	(100.0%)

ポスト「京」開発による経済波及効果

	区分	直接効果 (投資、需要)	1次波及効果	2次波及効果	経済波及効果	
					金額	(比率)
「ポスト京」開発自体の波及効果	計算機	1,200	1,423	520	3,143	(5.6%)
「ポスト京」開発成果の応用分野の波及効果	創薬・医療	4,111	3,654	2,370	10,136	(17.9%)
	総合防災	6,506	7,393	3,662	17,562	(31.1%)
	エネルギー・環境問題	4,800	5,729	2,796	13,326	(23.6%)
	社会経済予測	2,400	2,355	1,587	6,341	(11.2%)
	ものづくり・その他	2,140	2,705	1,114	5,959	(10.6%)
合計		21,157	23,260	12,050	56,466	(100.0%)

- 1 本調査では、一般的な産業連関分析による経済波及効果に対して、基礎的な研究成果によるイノベーション効果を含む波及効果を算出しているため、その違いを区別するため「イノベーション型経済波及効果」と呼ぶ。
- 1 波及効果は、平成17年(2005年)産業連関表(確報)の逆行列係数表[I-(I-M)A]-1を用いて、「逆行列係数」×「新規需要額」で計算した。
- 1 新規需要額に対して商業マージン、運輸マージン等は考慮しないこととした。

1. 追加の説明を求める事項 (3)

(3) 利活用と効果 (有効性)

ケイパビリティ、アンサンブル、ビッグデータという3つのコンピューティングの各々に対してインパクトのあるアプリケーションが何か分かりにくい。もう少し分かりやすく纏めて提出してほしい。

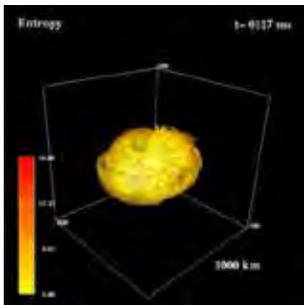
◆ ケイパビリティ計算の例 : 宇宙進化

【現状】

「京」をフルに使うと(まだソフトウェア開発中だが)1つ1つの星を表現した計算程度は可能。星ができる場所は確率モデル。星形成率や星の質量分布は観測からモデル。現状、粒子数 100億程度

【将来】

ガスから星ができる場所を分解、星の質量分布や形成率を第一原理的に計算、モデル仮定によらずにどのような初期条件からはどのような銀河ができるかがわかる。粒子数は1兆程度(星形成については質量分解能を局所的に上げる)。



超新星爆発と物質の起源。大規模計算により定性的理解から定量的理解へ

◆ アンサンブル計算の例 : 計算創薬での分子動力学計算

【現状】

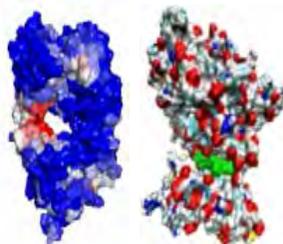
特定の標的タンパク質(病気の原因物質)に対するシミュレーションにより、数百個の新薬候補物質の絞り込みを効率化。



新薬候補物質の標的タンパク質への高精度結合シミュレーション(10万原子系)

【将来】

複数タンパク質(病気の原因物質と必須機能物質)に対する10万個程度の新薬候補物質の影響解析行う。計算規模は、同程度から10倍程度までであるが、アンサンブル数は100倍以上になる。



必須機能タンパク質への新薬候補物質の作用も解析(10万~100万原子系)

◆ ビッグデータ利用の例 : ゲリラ豪雨予測

【現状】

1~数時間毎の観測データを使った数km解像度のシミュレーションにより、10数時間後の天気を予測



次期衛星
ひまわり



次世代高精細
観測



フェーズアレイ
気象レーダー

【将来】

提案システムの性能により、次世代の高精細シミュレーションと複数の新型センサによる「ビッグデータ」を高速処理することで、数100m解像度で30秒毎に更新するリードタイム30分の天気予報という従来では考えられない革新的なゲリラ豪雨のリアルタイム予測の実現。



高精細シミュレーション

データ同化は、シミュレーションと実世界の観測・実験データを融合し相乗効果を生み出す統計数理に基づく基盤技術