

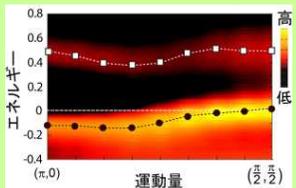
参考資料

「京」の成果事例

様々な分野における「京」の成果①

材料・エネルギー

▶ 銅酸化物が超電導になる直前の電子状態を世界で初めて解明。高温超電導理論を確立することで、今後、損失のない送電線や電力貯蔵装置、冷却コストの低いリニアモーターカーなど様々な応用が考えられる高温超電導物質の開発を加速。

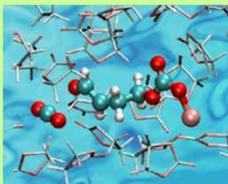


電子の分布強度の理論計算

2013年8月26日
日刊工業新聞(16面)

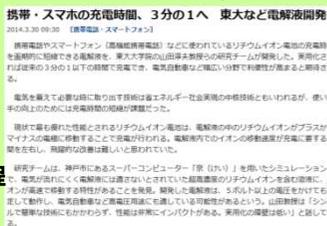


▶ リチウムイオン電池の急速充電、高電圧作動を可能とする新しい電解液を開発し、「京」を用いた高精度な分子動力学計算により、その作動メカニズムを解明。この電解液を応用することで、従来の3分の1以下の時間での急速充電や、電気自動車等への実用に耐えうる5V級の高電圧で作動するリチウムイオン電池の実現につながる。



充電中の電解液の分解過程 (電極・電解液界面付近)

2014年3月30日
産経ニュース



ライフサイエンス

▶ 製薬業界での「京」の本格利用により創薬研究期間の短縮や画期的な新薬開発を加速。既に新しい化合物の設計も開始し、有望そうな化合物の合成も始められている。(精神病治療薬や抗がん剤等)



標的タンパク質への薬候補化学物の精密解析

2013年8月9日
日経産業新聞



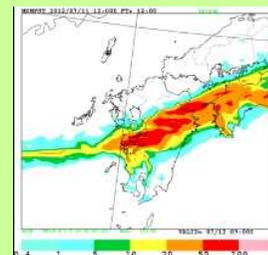
▶ 「京」を用いて、世界最大の脳神経回路のシミュレーションに成功 (小型霊長類のサル全脳規模)。今後、シミュレーションと実験的基礎研究とを積み重ね、将来的には、ヒトの脳の学習機能などを精密かつ自在に表現するシミュレーションの開発につながる。



2013年8月23日
神戸新聞NEXT

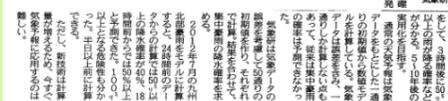
防災・減災

▶ 従来出来なかった、集中豪雨の降水確率を予測する技術を「京」を用いて開発。発生半日~1日前からの計算で高い確率で予測できることを実証。将来的な集中豪雨の予測改善につながる。



雨量予測

2013年9月2日
日経産業新聞(11面)



2013年9月21日
毎日新聞(夕刊10面)

▶ 「京」を活用した世界初の超高解像度全球大気シミュレーションにより、従来は表現が難しかった積乱雲を、リアルに表現することに成功。台風や集中豪雨のもととなる積乱雲を現実に近い形でシミュレートできることで、台風や集中豪雨等の発生・発達過程の解明につながる。



台風シミュレーション (左:従来の解像度、右:「京」での高解像度計算)

スパコン「京」世界の雲を再現



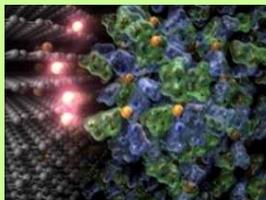
様々な分野における「京」の成果②

材料・エネルギー

リチウムイオン電池 充電時間1/3に高濃度電解液の動作原理を解明

2014年3月30日 産経新聞
2014年3月27日 日経産業新聞等、多数誌に掲載

リチウムイオン電池の新規電解液について、「京」による分子レベルの解析を行った。従来の1/3以下の急速充電や、5V以上の高電圧下での動作が可能になることが分かった。高性能電池の開発に大きく貢献する。



東京大学プレスリリース

メタンハイドレートからメタン発生仕組みを解明

世界で初めて、メタンハイドレートが分解してメタンが発生する仕組みを分子レベルで解明。「京」を用いることで、合計10万原子系のシミュレーションが可能に。この成果は効率的にメタンを採取する方法の開発につながる。



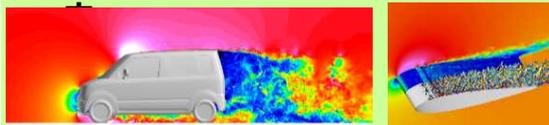
2014年4月16日
朝日新聞に掲載

ものづくり

大規模空力シミュレーションで自動車開発を加速

2014年2月3日
産経新聞等、多数誌に掲載

「京」による大規模数値計算で、これまでの風洞実験では難しかった実際の運転状況下でのシミュレーションを実現した。強力な産学連携体制で進行



北海道大学 協力：スズキ

宇宙航空研究開発機構

流体制御シミュレーションで輸送機器開発を推進

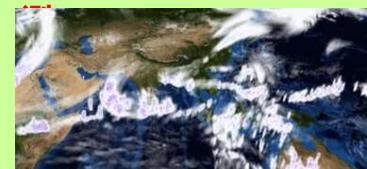
「京」を用いて特殊条件下における多パターンの流体制御計算を行い、航空機をはじめとする輸送機器の性能向上や低騒音化に必要な多数の知見を得た。

防災・減災

地球規模の大気変動現象の1カ月予測の実現可能性を実証

2014年5月7日
日本経済新聞に掲載

「京」による大規模計算で、地球規模の気候・異常気象に影響を及ぼすマッデン・ジュリアン振動(MJO)の1カ月予測



海洋研究開発機構

の実現可能性を実証した



地震動、地殻変動、津波を同時にシミュレーション

「京」の利用で、地震動、地殻変動、津波をまとめてシミュレーションすることが可能になった。将来的には、大地震に伴う、強震動、地殻変動、津波襲来の総合的な災害予測が期待される。

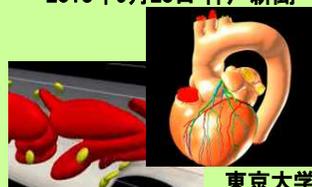
HPCI戦略プログラム 分野3
東京大学地震研究所
前田拓人・古村孝志

ライフサイエンス

血流シミュレーション、心臓シミュレーションで医療支援

「京」の活用により、2年近く掛かっていた細胞内の構造を精密に再現した心臓モデルの1回収縮分の計算が1日のできるようになった。「京」を用いて、直径約100μmの大きさの血管で、赤血球の変形や血小板の粘着などを考慮に入れたシミュレーションを実施した。医療分野への貢献が期待される。

2014年2月3日 産経新聞
2013年9月23日 神戸新聞



ISLIM, SCLS 東京大学 久田研究室

血流や心臓の階層統合シミュレーション

2013年7月4日 WIRED.jp



東京大学 藤谷研究室
タンパク質と化合物の相互作用シミュレーション

高速シミュレーションでIT創薬を支援

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ために、20年かかっていた。京の登場でタンパク質と化合物の結合計算が、約1週間までできるようになった。創薬のスピードが加速し、田辺三菱製薬など民間企業の本格的な参入も始まった。

宇宙

世界最高解像度で太陽の対流層計算を実現「京」を用いて従来の6倍以上の高解像度で、太陽内部の熱対流・磁場生成の構造の詳細を明らかに。太陽の黒点生成の仕組みの解明や太陽活動変動の予測への貢献が期待される。

2014年4月17日
マイナビニュースに掲載



東京大学 堀田英之



国立天文台
2014年4月25日
マイナビニュースに掲載

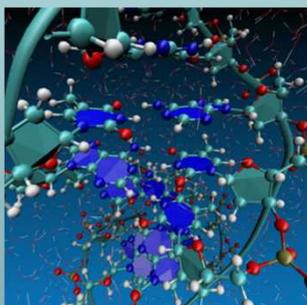
超新星爆発の大規模計算を実現

「京」を用いて初めて現実に近い形で超新星爆発を計算。ニュートリノ加熱説を支持する強い証拠を示した。超新星爆発の詳細な研究の進展につなげる。

様々な分野における「京」の成果③

2014年12月8日プレスリリース

「京」を用いて巨大分子のシミュレーションを実現 ～創薬や次世代デバイスの開発に期待～

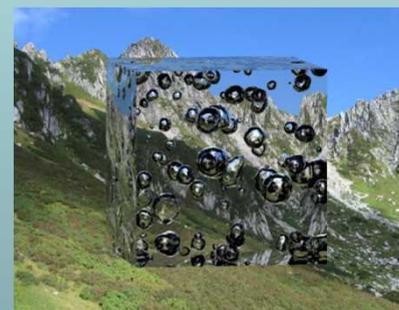


水中のDNAのシミュレーション
(理研QBiC大塚氏との共同研究、
物質・材料研究機構プレスリリースより)

巨大な生体分子の一つであるDNAに対して、シミュレーション。大きな分子の中で動く、原子や電子の振る舞いを正確に再現している。

2014年12月18日プレスリリース

大規模な気泡ができる過程のシミュレーションに成功 ～さまざまな工業分野への応用に期待～



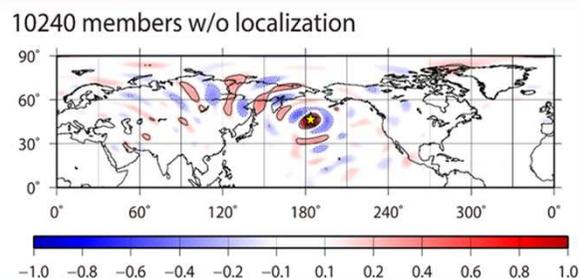
気泡生成のシミュレーション
(東京大学物性研究所 渡辺宙志、理
研計算科学研究機構 稲岡創)

多数の小さな気泡ができた後、気泡同士がつぶしあって、最後に一つの大きな気泡にまとまる。

2014年7月23日プレスリリース

「京」を使い1万個の全球大気データの取り込みに成功 ～遠方の気象観測で大気状態を推定できる可能性も～

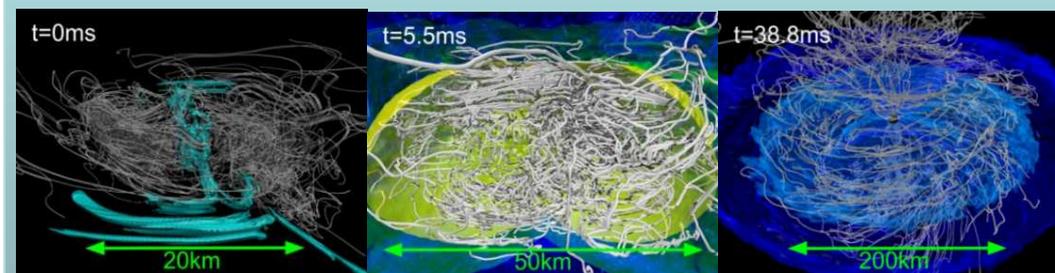
アンサンブルデータ同化による18日目の水蒸気量の相関マップ
(理化学研究所プレスリリースより)



10,240個のアンサンブルを使うと、北部太平洋にある黄色い星の場所(図の中心付近)で水蒸気量が多いときに、遠くロシア西部(図の左上)で、水蒸気量が多くなったり(赤)、少なくなったり(青)する傾向があることが分かる。

2014年9月1日プレスリリース

「京」を用いて、2つの中性子星の合体とブラックホールへの進化過程で磁場が増える仕組みを解明



2つの中性子星の合体とブラックホールへの進化
(右) 出展: 京都大学プレスリリース

様々な分野における「京」の成果④ (産業界)

様々な分野において数多くの企業の利用により画期的な成果が産み出されている

1. 自動車用次世代空力設計システムの研究開発

コンソーシアム（企業13社、研究機関5機関）による共同研究
(参画企業(13社))

トヨタ、日産、ホンダ技研、スズキ、マツダ、富士重工業、三菱自動車、三菱ふそう、日野自動車、デンソー、ブリヂストン、ダイハツ、横浜ゴム



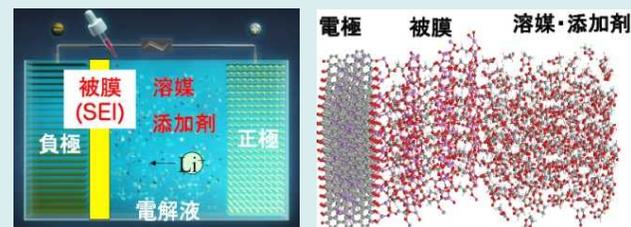
車の空気抵抗のシミュレーション

従来の実験費用の大幅削減や精度の大幅向上により
自動車産業の競争力強化に大きく貢献

2. リチウムイオン電池の材料開発

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分子レベルで再現。

(参画企業) 富士フィルム(株)



リチウムイオン電池の分子レベルのシミュレーション

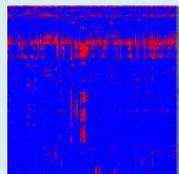
リチウムイオン電池の高性能化・高安全性化につな
げ、部材産業の発展と国際競争力強化に貢献

3. 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築

製薬企業11社、IT企業2社ほかが参画し、タンパク質と化合物の結合予測を約190億規模で達成。

(参画企業(13社))

アスピオファーマ、エーザイ、小野薬品工業、キッセイ薬品工業、参天製薬、塩野義製薬、大日本住友製薬、田辺三菱製薬、日本新薬、科研製薬、杏林製薬ほか



タンパク質と化合物の結合シミュレーション

医薬品開発の成功確率向上と迅速化により
医薬品産業の競争力強化に大きく貢献

4. 大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発

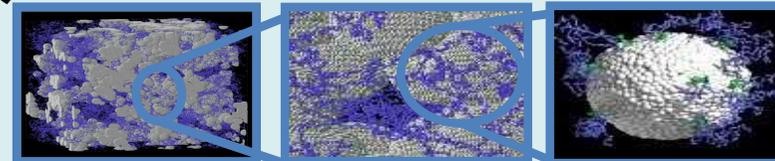
「京」により大規模かつ分子レベルでの詳細な材料シミュレーションを実現。

(参画企業) 住友ゴム工業(株)

ゴムの性質が分かるレベル

分子・原子レベル

大 → 小



タイヤの分子・原子レベルのシミュレーション

タイヤの大幅な高性能化・低燃費化・長寿命化により
化学産業の競争力強化に大きく貢献

参考資料

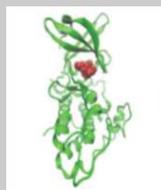
ポスト「京」に期待される成果例

ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム

医療・創薬

ポスト「京」で実施する計算

多数のタンパク質、多数の候補物質を使用したシミュレーションや、健康・医療ビッグデータの大規模解析とそれらを用いて得られる最適なモデルによる生体シミュレーションを実施。



スパコンを活用し、候補物質の探索だけでなく、副作用の原因も分析。さらに、個人の医療計測データに基づくシミュレーション手法を構築。

社会への貢献内容

薬のつくり方そのものを革新する薬剤設計技術確立するとともに、個別化・予防医療を支援。

- ✓ 個人ごとのがんの予防と治療戦略の支援を実現し、がんによる死亡者を減少する。

治療困難な
疾病の克服

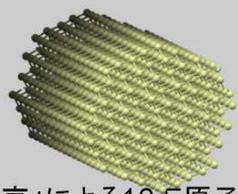


個々人のがんがわかる！

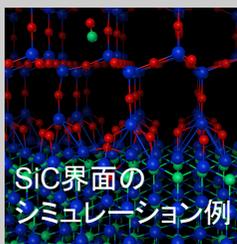
デバイス

ポスト「京」で実施する計算

10万原子以上からなる、SiC（シリコンカーバイド）等の異種物質の界面の構造などに対し、多様な条件下で計算を実施。



「京」による10万原子シリコンワイヤ



SiC界面のシミュレーション例

ナノデバイスをコンピュータ上で設計・解析し、特性を把握。

社会への貢献内容

マテリアルズ・インフォマティクス等を活用しつつ、新奇機能デバイスを先行開発。

- ✓ 半導体市場(30兆円)の一角確保。(2025年頃まで)

ポストシリコンテクノロジーで
半導体ビジネスの復権へ

三菱電機
パワー半導体



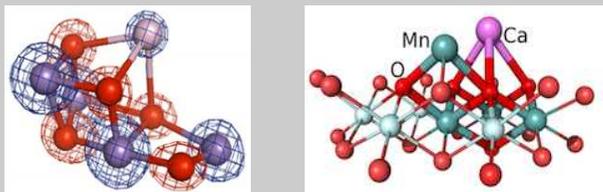
TOYOTA EV

ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム

人工光合成

ポスト「京」で実施する計算

天然光合成系における酸素発生の状態について、タンパク質の影響を考慮した、数十万原子を取り扱う計算を実施。



天然光合成の酸素発生前中心のX線結晶構造 (左), 人工光合成の候補触媒の構造 (右) 引用: 大阪市大・神谷信夫教授, CALTEC・Agapie教授

天然光合成系の原理をシミュレーションで解明。

社会への貢献内容

CO₂と水から人工光合成でプラスチック原料等基幹化学品を製造。

- ✓ 基幹化学品の20% (250万トン/年) を製造。(2030年)
→ 約3,500億円/年規模に相当。
- ✓ 約800万トン/年のCO₂削減。
(経済産業省ARPCChem資料より)

人工光合成によるエネルギー・環境問題の解決

ものづくり

ポスト「京」で実施する計算

試作試験では実現不可能な実走行データや人体損傷モデルを活用したシミュレーションや、試作実験(風洞実験等)を代替するシミュレーションを実施。



全体俯瞰設計

車のコンセプトから構造・機能・性能設計にいたる主要な設計フェーズのシミュレーションを統合的に実施。

社会への貢献内容

生産性を引き上げる新しいものづくりシステムを構築。(2025年頃まで)

- ✓ 実験ではできない解析により、性能の高い製品開発が可能に。
- ✓ 抜本的な開発工数削減により、安価・短期間での製品開発が可能に。(日本の自動車メーカー全体で、試作車削減・実験費用削減効果は数百億円/年)

産業競争力強化に貢献

革新的な車(デザイン、品質、性能)ができる!



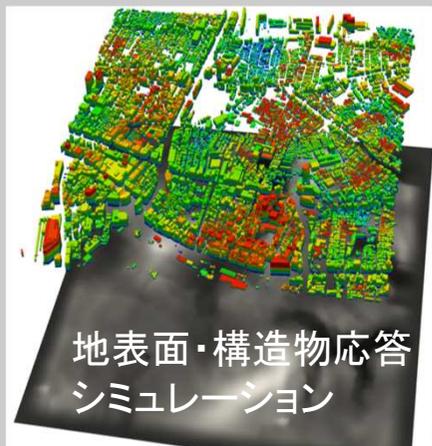
エンジニア・デザイナーの働き方が変わる!

ポスト「京」の将来的な貢献が期待できるアウトカム

防災（地震・津波）

ポスト「京」で実施する計算

地震の不確定さをも考慮し、津波の遡上、建造物の被害、避難・交通・経済活動の影響などを詳細な都市モデルを使って計算。



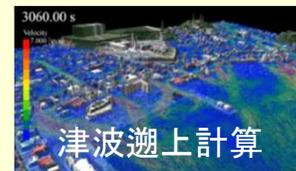
都市全体の一次・二次被害のシミュレーションを行い、地震・津波の災害の影響を統合的に予測。

社会への貢献内容

地震・津波による複合災害についての予測システムを構築。

- ✓ 行政（内閣府・自治体）の防災・減災計画への反映。
- ✓ 約6,500億円の経済的な波及効果。（直接効果・三菱総研調べ）

国土強靱化に貢献



防災（気象）

ポスト「京」で実施する計算

新型センサ・観測衛星によるビッグデータを融合した予測シミュレーションを実施。（台風の進路予測だけでなく、確率に基づいて発生も予測。また、ゲリラ豪雨・竜巻の突発的極端気象を予測。）



観測ビッグデータを用いた、高解像度・高速での気象予測。

社会への貢献内容

台風からゲリラ豪雨・竜巻等のグローバルからローカルまでの気象災害シームレス予測技術の革新により、安全・安心の確保の礎を築く。

- ✓ 例えば、局所的ゲリラ豪雨予測では100m以下の解像度で30秒毎に更新するリードタイム1時間の予測手法を確立（ポスト「京」開始後5年以内）

防災・危機管理に貢献

想定されるポスト京の成果（重点課題①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、いまだ合成されたことのない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②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。

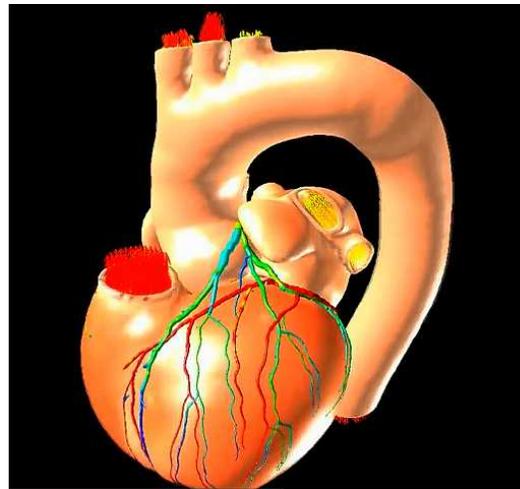


（血管の硬さが分かる高機能血圧計への応用例）

器官毎の粗いシミュレーションを実現。

京時代（現在）

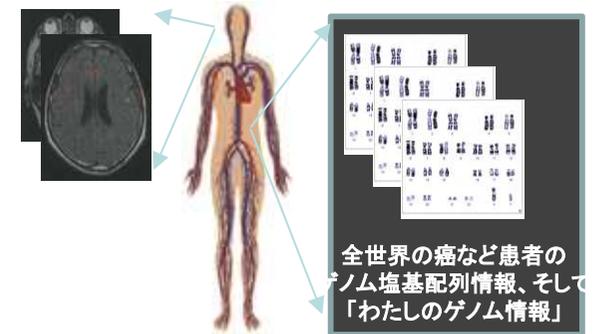
「京」を用いて人の体を構成する心臓や血管のシミュレーションを連成し、分子、細胞レベルから精緻に計算できるようになった。これにより、実際に医療機関との連携により、実際に治療への応用を進めているところである。



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。



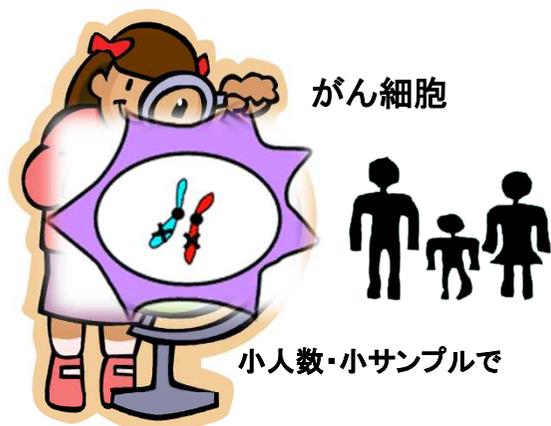
個人医療への貢献が可能に。

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！

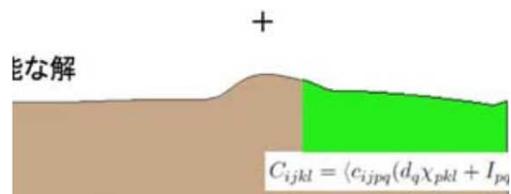


個人ごとのがんの予防と治療戦略の支援を実現。

想定されるポスト京の成果（重点課題③地震・津波）

京以前（過去）

技術的指標としての地盤増幅計算、理学・工学の地震被害予測の連成により、経験則に依存した地震や津波による被害の予測にシミュレーション技術を導入するための分野別技術開発・部分的な連成技術開発を実現した。



$$d_i(c_{ijkl}(d_l u_k^{(1)} + D_l u_k^{(0)}) - \rho \ddot{u}_j^{(0)}) = 0,$$

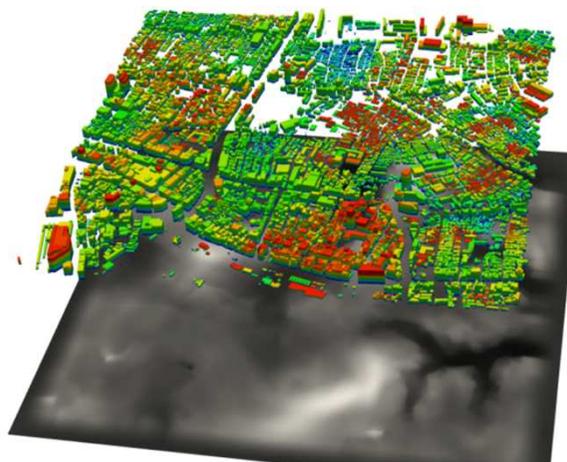
ミクロ解析

* 地震波動計算と都市構造物連成シミュレーション高度化のための階層型解析

京時代（現在）

技術的指標としての地盤増幅計算、理学・工学の地震被害予測の統合により、地震・津波による被害予測のうち、物理シミュレーション(理学・工学分野)の統合を実現した。

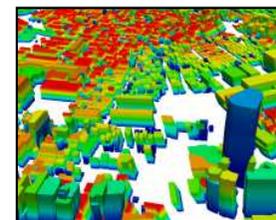
※ [SC14 Gordon Bell prize finalist](#)



* 3次元地盤構造と各構造物の特性を反映した複雑な地表面・構造物応答を計算
(100億自由度・3万time step)

ポスト京時代（将来）

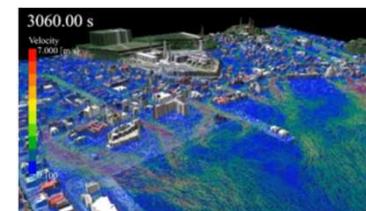
技術的指標としての地盤増幅計算、理学・工学・社会科学の地震被害予測統合により、物理シミュレーションによる被害予測の分解能向上により、避難・交通・復旧等の社会科学の領域へ



構造物応答計算



エージェントシミュレーション



津波遡上計算

想定されるポスト京の成果（重点課題④気象）

京以前（過去）

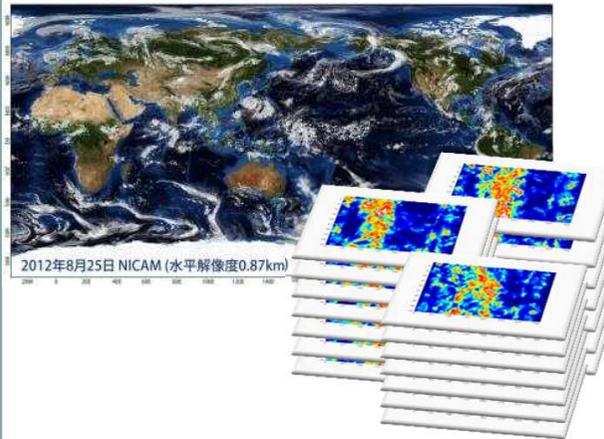
地球シミュレータによって原理的な気象の計算手法（全球雲解像）を確立した。また、水平3.5kmの計算によりこれまで困難であった、熱帯域の大規模積乱雲集合（台風発生の大きな源）の再現に成功した。これにより、より原理的なシミュレーション方法の確立と従来困難であった現象の再現に成功した。

2006-12-31 00:00



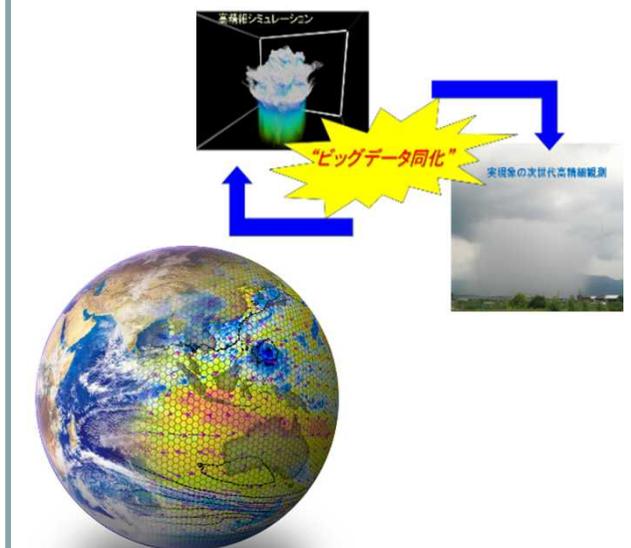
京時代（現在）

大量の全球雲解像計算が可能となり、熱帯域の大規模積乱雲集合の延長予測可能性を実証した。データ同化のための革新的初期値作成手法の有効性を実証した。超高解像度全球計算（水平1km以下）により、一つの積乱雲の全球描像が明らかになるなど、モデルの現象表現能力のポテンシャルの高さを実証した。大規模高解像度シミュレーション技術及び革新的観測データ同化技術をそれぞれ個別に確立した。



ポスト京時代（将来）

京で培った超高解像度全球計算技術、革新的初期値作成技術を統合させた予測システムを構築する。また、予測システムと人工衛星等からのビッグデータを用い、台風の進路予測だけでなく発生が確率に基づいて予測可能にする。これにより、観測ビッグデータを用いた次世代天気予報システムの礎を築き、グローバルな防災減災へ貢献！

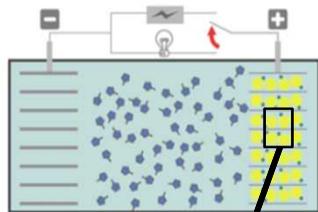


想定されるポスト京の成果（重点課題⑤エネルギー）

京以前（過去）

リチウムイオン電池について、従来のパソ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

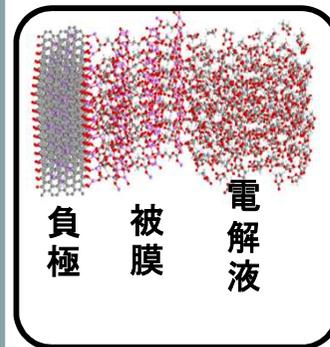


熱暴走

©NTSB

京時代（現在）

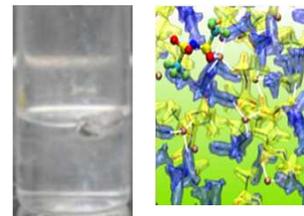
「京」では負極と電解液等の材料界面を含む1000原子レベルの電子状態計算が可能。界面に電位を加えた計算手法も開発。結果、化学反応を予測する高精度計算が可能となり、安全や性能にかかわる電極上被膜の添加剤効果など長年の謎を解明。材料探索も実施中。



負極
被膜
電解液

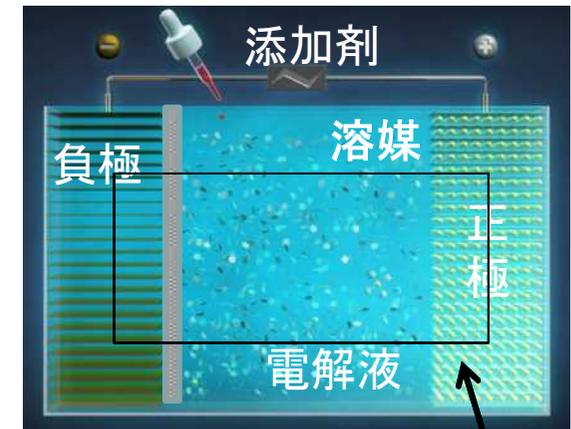
電子状態
計算領域

高性能電解液開発



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。



添加剤
溶媒
負極
電解液
正極

電子状態
計算領域

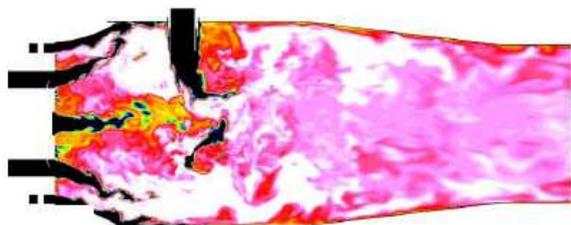


新しい高性能・高安全性電池材料設計
→電気自動車、スマートグリッドなどの革新

想定されるポスト京の成果（重点課題⑥クリーンエネルギー）

京以前（過去）

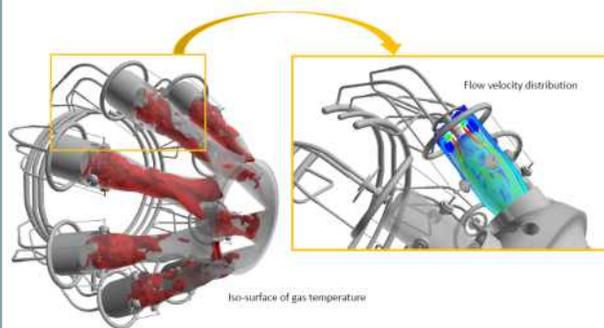
実機燃焼器内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES解析は行われていたが、対象は大気圧(0.1MPa)条件下の単缶もしくは燃焼器の一部に限られていた。



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。

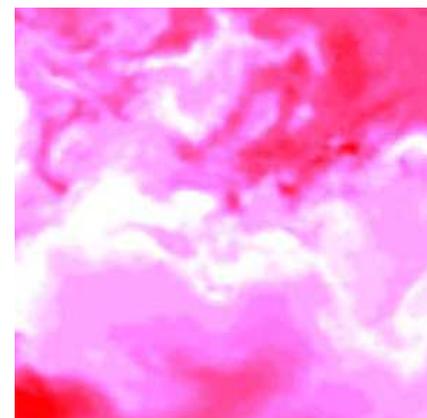


8缶型ガスタービン燃焼器のLES
(提供 京大、川崎重工)

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 μ m



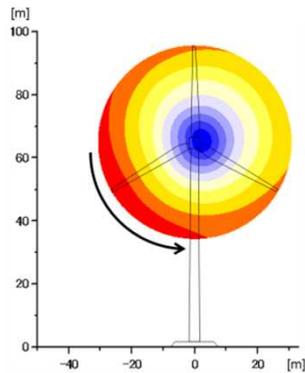
乱流燃焼のイメージ(ガス温度): 圧力の上昇に伴い乱流の最小スケールが小さくなる
(提供 京大)

想定されるポスト京の成果（重点課題⑥クリーンエネルギー）

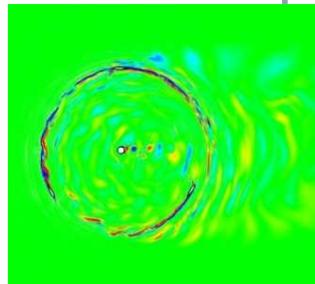
「高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析」が拓く次世代風力発電システム

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。



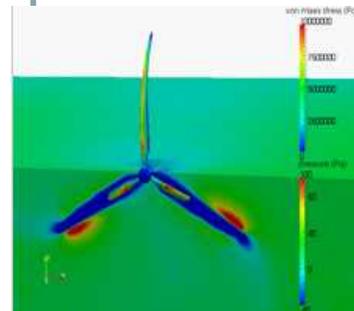
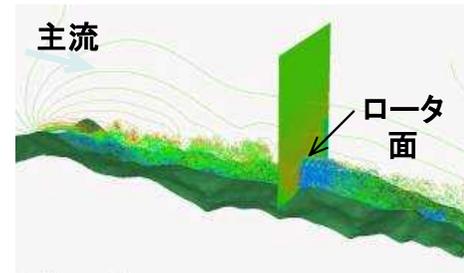
FAST
(実験データベース)に
基づく風車騒音予測



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

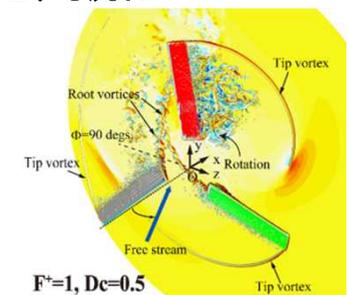
流体・構造連成解析
(風車単体)

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

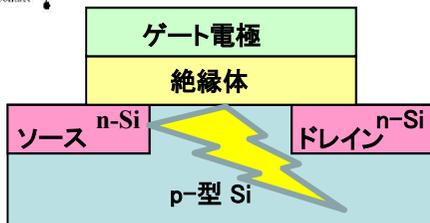
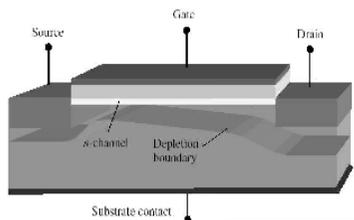


風車性能改善のため
の制御技術の開発

想定されるポスト京の成果（重点課題⑦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。



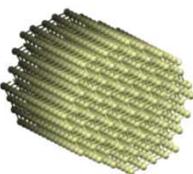
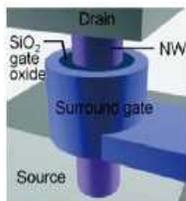
回路幅が数10ナノになるとリーク電流が急増



平面トランジスタ

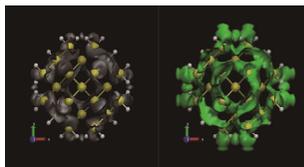
京時代（現在）

「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カ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。



ワイヤ構造

電極を周囲に設けリーク電流抑制



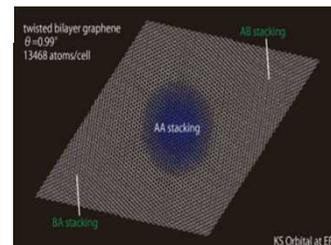
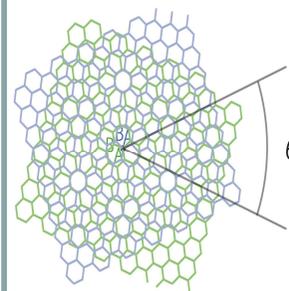
$V_G=0.3V$ $V_G=0.8V$

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。

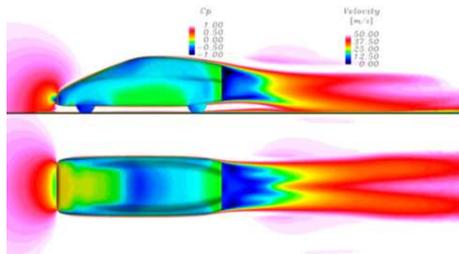


多彩なナノ構造と新機能の創出

想定されるポスト京の成果（重点課題⑧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)

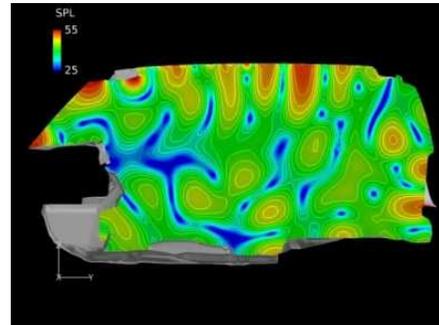
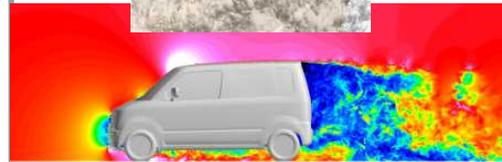
風洞実験による自動車設計

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。

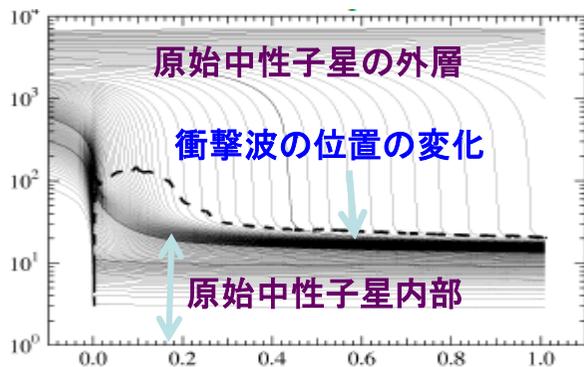


異なる性能項目を俯瞰して
開発方向を判断する上流設計

想定されるポスト京の成果（重点課題⑨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。

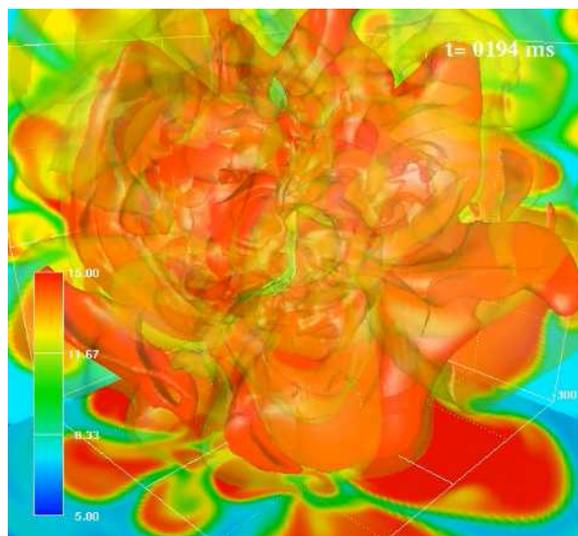


衝撃波発生後からの経過時間(秒)

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)