

H P C I 戦略プログラム 全体説明資料

平成25年12月4日

プログラムマネージャ

土居 範久

- ◆ 「京」の計算資源配分
- ◆ H24年度優先課題、加速枠課題一覧
H25年度重点課題、加速枠課題一覧
- ◆ 主な研究成果事例
- ◆ 計算科学技術推進体制の構築における主な取組事例
- ◆ まとめ

「京」の計算資源配分（「京」の共用開始後）

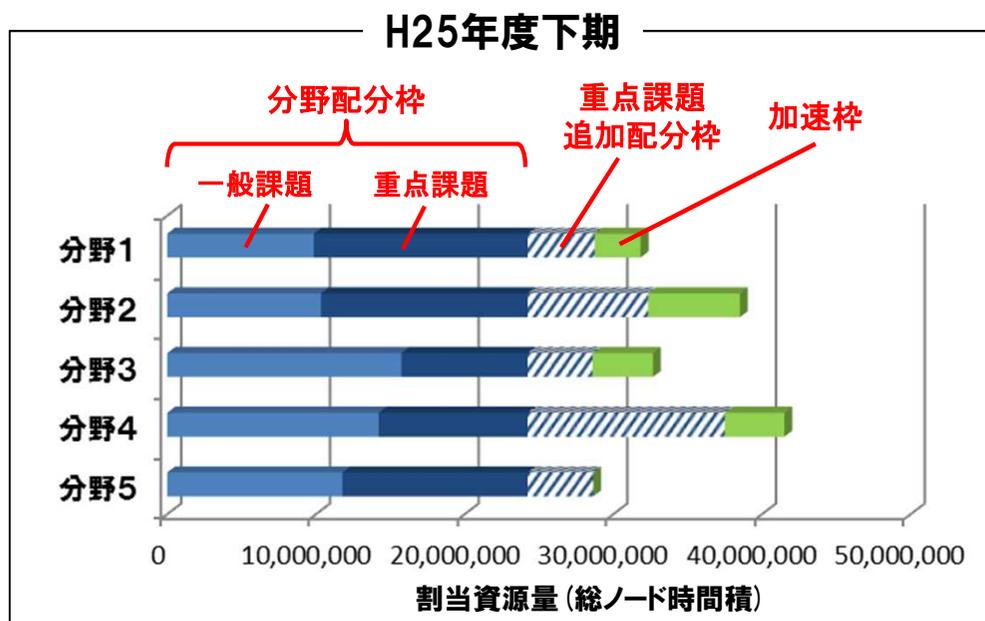
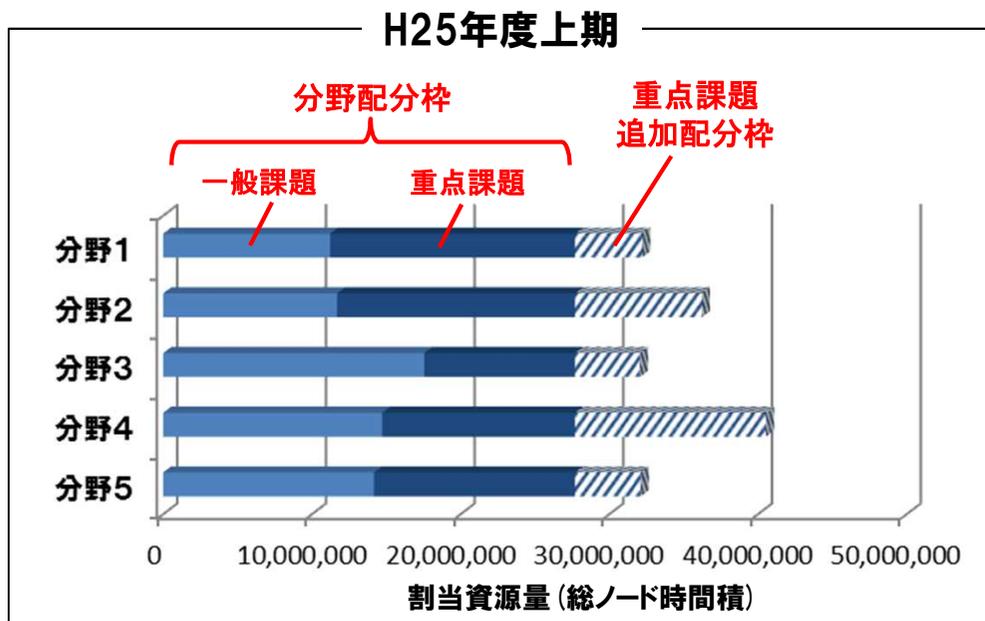
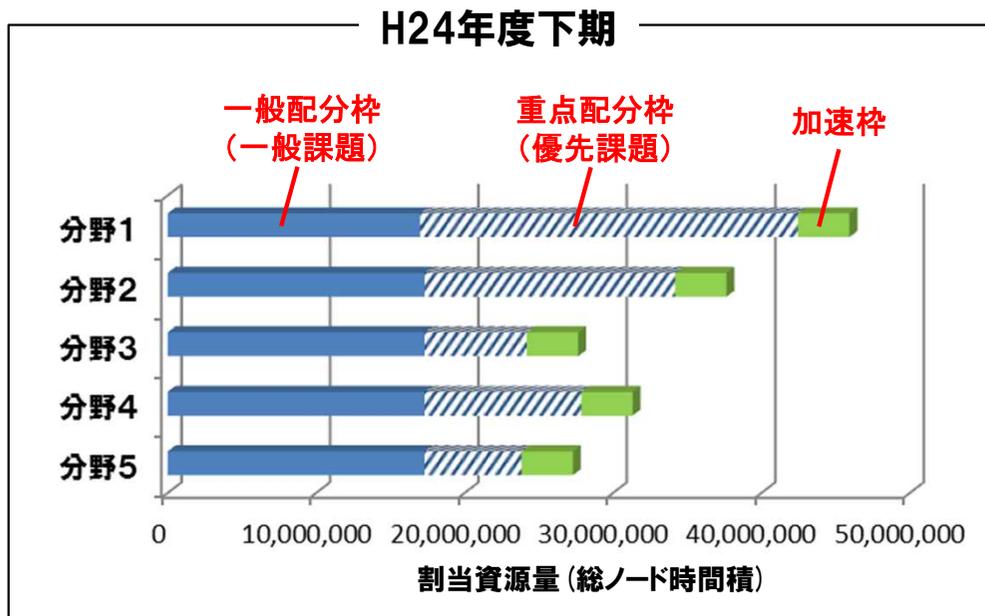
画期的な科学的成果や社会的課題の解決に資する成果を創出するため、分野ごとのボトムアップの計算資源配分と、プログラム全体を通じたトップダウンの計算資源配分を両立させ、「京」の計算資源を戦略的に配分

H24年度：

- ✓ 各分野に計算資源を均等配分し、各課題への基礎的配分は分野内で決定。
- ✓ その上で、プログラム全体を通して優先課題を選定し、計算資源を追加配分。

H25年度：

- ✓ 各分野に計算資源を均等配分し、各課題への基礎的配分は分野内で決定するとともに、分野ごとに重点課題を選定。
- ✓ その上で、プログラム全体を通して重点課題の一部に計算資源を追加配分。
- ✓ さらに、プログラム全体を通して早期の成果創出が期待される課題に計算資源を追加配分。



H24年度 優先課題、加速枠課題

	H24年度優先課題	研究代表者
分野1	心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション	東京大・高木周
	創薬応用シミュレーション	東京大・藤谷秀章
分野2	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	名古屋大・岡崎進
	密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	東京大・押山 淳
分野3	全球雲解像モデルによる延長予測可能性の研究	東京大・木本昌秀
分野4	乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発	東京大・加藤千幸
分野5	ニュートリノ加熱による超新星爆発シミュレーション	国立天文台・滝脇知也

	H24年度加速枠課題	研究代表者
分野1	細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション	理研・杉田有治
	大規模生命データ分析	東京大・宮野悟
分野2	相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミクスの解明	東京大・今田正俊
	電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子理論の新展開	神戸大・天能精一郎
	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開	名古屋大・岡崎進
	金属系構造材料の高性能化のためのマルチスケール組織設計・評価手法の開発	産総研・香山正憲
分野3	超高精度メソスケール気象予測の実証	気象研・斉藤和雄
	地震の予測精度の高度化に関する研究	東京大・古村孝志
	津波の予測精度の高度化に関する研究	東北大・今村文彦
	都市全域の地震等自然災害シミュレーションに関する研究	東京大・堀宗朗
分野4	乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発	東京大・加藤千幸
分野5	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定	筑波大・藏増嘉伸
	ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第一世代天体形成	東工大・牧野淳一郎

H25年度 重点課題、加速枠課題

(★)は重点課題追加配分枠に選定された課題

	H25年度重点課題	研究代表者
分野1	予測医療に向けた階層統合シミュレーション(★)	東京大・高木周
	大規模生命データ解析	東京大・宮野悟
分野2	相関の強い量子系の新量子相探究とダイナミックスの解明	東京大・今田正俊
	全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開(★)	名古屋大・岡崎進
	エネルギー変換の界面科学(★)	東京大・杉野修
分野3	地球規模の気候・環境変動予測(★)	東京大・木本昌秀
	都市全域の地震等自然災害シミュレーションに関する研究	東京大・堀宗朗
分野4	輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発(★)	JAXA・藤井孝藏
	乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発(★)	東京大・加藤千幸
分野5	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定	筑波大・藏増嘉伸
	ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成(★)	東工大・牧野淳一郎

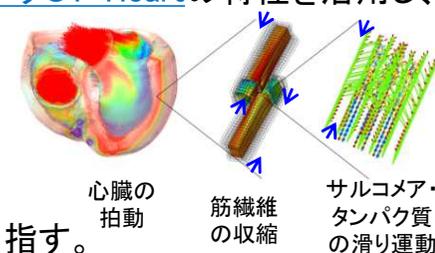
	H25年度加速枠課題	研究代表者
分野1	細胞内分子ダイナミックスのシミュレーション	理研・杉田有治
分野2	相関の強い量子系の新量子相探求とダイナミックスの解明	東京大・今田正俊
	密度汎関数理論によるナノ構造の電子機能予測に関する研究	東京大・押山淳
分野3	地球規模の気候・環境変動予測に関する研究	東京大・木本昌秀
分野4	乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発	東京大・加藤千幸

これまでの主な研究成果事例（H24年度優先課題）（1/3）

● 心疾患のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション（研究代表者：東京大学・高木周、久田俊明）

心臓の難病の一つである肥大型心筋症の病態を、サルコメア・タンパク質という分子レベルの変異から細胞、心臓の動きまでを計算して解析することに成功。

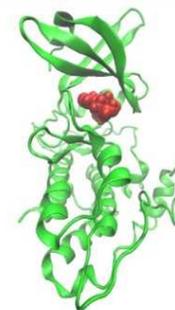
突然死・心不全などを引き起こす**肥大型心筋症**の病態メカニズムには不明な点が多く残されているが、ヒトの臓器（心臓）内の特定の分子の性質を自由に改変し、その挙動を拍動する心臓の中で測定できるという**マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレータUT-Heart**の特性を活用し、肥大型心筋症に認められる変異ミオシンの機能異常と多彩な臨床病態との関係についての検討を行い、**変異ミオシンが拡張不全や錯綜配列などの特有な病態を引き起こす過程を明らかにすることができた**。今後、実験では分析が困難である心臓の巧妙なポンプ機能の本質解明に関わる新知見を得ると共に、ミオシン以外のタンパクの機能異常が引き起こす疾患の解析にも応用することを目指す。



● 創薬応用シミュレーション（研究代表者：東京大学・藤谷秀章）

約300種類の新規化合物について、ガン治療の標的タンパク質の働きを妨げる強さを高精度で計算し、新薬の候補となる結合特性をもった化合物を11個見いだすことに成功。

新しい治療医薬品が待望されている疾患の標的タンパク質に有効に作用する薬候補化合物の設計に「京」を活用し、画期的な新薬開発期間の短縮に貢献する。ガンの標的タンパク質のX線結晶構造解析から得られた**ガン治療の候補化合物**（約700個）について、分子動力学計算で安定性を検証し、候補化合物の絞り込みを実施（約300個）。絞り込まれた約300個の薬候補化合物に対して、**タンパク質との結合自由エネルギーをMP-CAFFEE法を用いて「京」で計算し、11化合物が医薬品として必要なナノモラー以上の結合強度を持つ結果を得ることに成功**。今後は計算で得られた化合物を中心にウェット実験と連携してガン治療薬の開発を推進する。

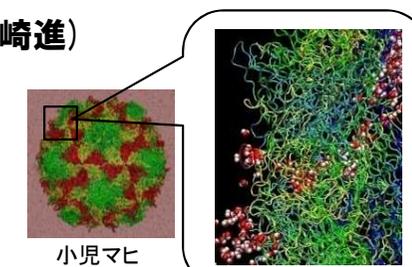


標的タンパク質（緑）と薬候補化合物（赤）

● 全原子シミュレーションによるウイルスの分子科学の展開（研究代表者：名古屋大学・岡崎進）

ウイルスの丸ごと全原子シミュレーションに成功し、ウイルスカプシドの安定性の起源を分子レベルで解明。理想的な人工ワクチンや抗ウイルス剤開発への貢献が期待。

「京」を用いて、**小児マヒウイルスの1000万原子レベルでの丸ごと分子動力学シミュレーションに成功し、小児マヒウイルスがなぜ乾燥に弱いのか、なぜ真水だと活性を失うのか等についての分子論的な仕組みを解明**。ウイルス増殖の元となるRNA（リボ核酸）を持たないカプシドだけの理想的な人工ワクチンや、ウイルスの感染を阻害する新しい作用原理を持つ抗ウイルス剤開発の第一歩となる。



小児マヒウイルスカプシド

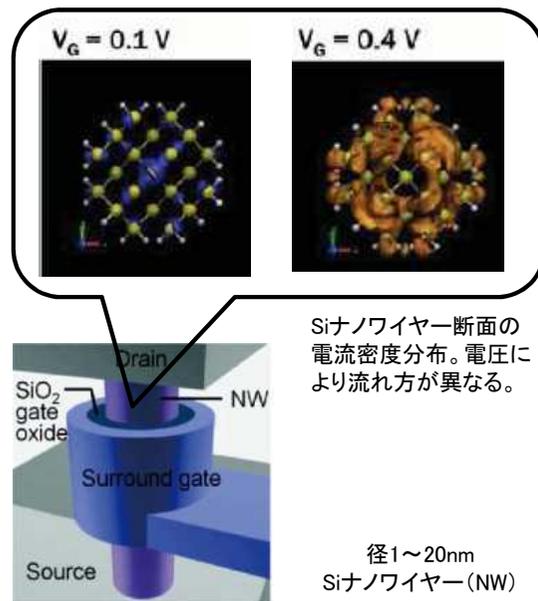
小児マヒウイルスカプシドの殻を横切る水の軌跡

これまでの主な研究成果事例（H24年度優先課題）（2/3）

● 密度汎関数法によるナノ構造の電子機能予測に関する研究（研究代表者：東京大学・押山淳、岩田潤一）

ナノレベルの精密な電子状態シミュレーションにより、次世代半導体として期待されているシリコンナノワイヤーに流れる電子分布を世界で初めて解明することに成功。

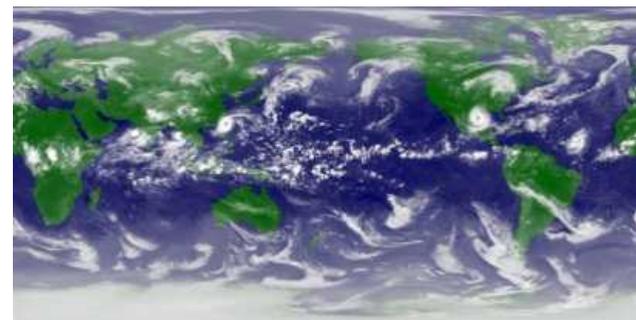
ポストスケール時代を迎えた半導体テクノロジーにおいては、ワイヤー、チューブなどの新奇ナノ構造、ナノ物質を起爆剤とするテクノロジーの新たな展開が望まれており、シリコンナノワイヤーは、微細化限界を打破する次世代半導体として期待されている。今回、数万個のシリコン原子からなる径1~20nmのワイヤーの電子状態計算を、実空間第一原理ナノ物質シミュレータHP-RSDFTを用いたシミュレーションで世界で初めて実現した。その結果、電圧や断面形状により流れる電子の密度分布が異なる等の特性が分かり、量子論を考慮したナノサイズの最適なデバイス構造を設計できることがわかった。また、同様の計算手法でシリコン上ゲルマニウムナノドット自己形成過程の実験結果を再現できることも明らかとなった。今回開発した計算手法を活用し、ナノ構造デバイスのものでづくりを演繹知に基づくものにシフトさせ、研究開発の競争力強化につなげる。



● 全球雲解像モデルによる延長予測可能性の研究（研究代表者：東京大学・木本昌秀、佐藤正樹）

世界初の雲まで解像できる高解像度の大気モデルを用いて、熱帯の巨大積雲群の発生・発達を予測。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。

夏季の台風の多くは、季節内振動に伴う北進する雲群から発生することが知られている。解像度を高めた全球非静力学モデル(NICAM)によるシミュレーションにより、季節内振動の予測とそれに伴う台風発生ポテンシャル予測により、2週間以上先の台風の発生・発達を予測することができた。この結果により、今後の現業センターにおける2週間以上先の天気予報・天候予測向上へ貢献。



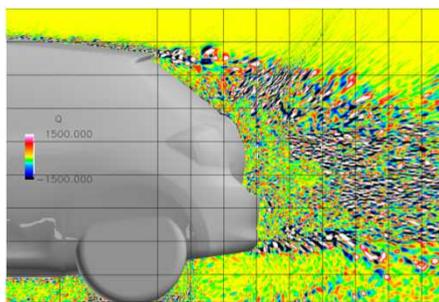
全球雲解像モデルNICAMによるシミュレーション

これまでの主な研究成果事例（H24年度優先課題）（3/3）

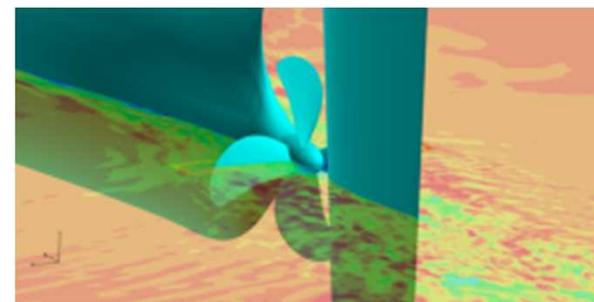
● 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発（研究代表者：東京大学・加藤千幸）

複雑な車両形状と実車走行状態を忠実に再現した空力シミュレーションに世界で初めて成功。風洞実験をシミュレーションで代替えし、開発コスト・開発期間の大幅な削減が期待される。

自動車、船舶等を対象として、直接シミュレーションの設計適用可能性を参画企業（主要自動車メーカー、電機メーカー等計26社）から風洞実験データなどの検証データを提供してもらい、精度検証を実施。自動車に関しては、複雑な車両形状を忠実に再現し、実車の走行状態を忠実に考慮した、世界初の自動車空力シミュレーションを実施し、船舶に関しては、スクューの回転やそれによる気泡の発生影響も含め、船体周りの流れを完全に再現し、曳航水槽試験を数値計算に置換する目的が出来た。



車両挙動の全乱流渦のシミュレーション



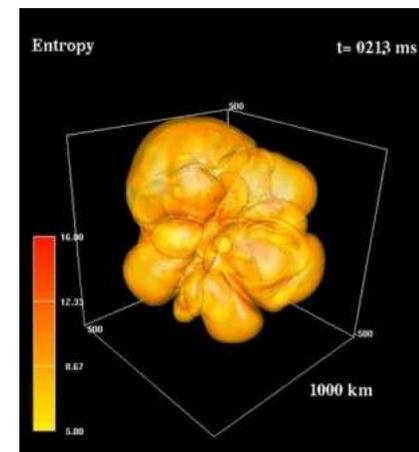
プロペラ回転や波の影響も考慮した超大規模実用計算

（財団法人日本造船技術センター 提供）

● ニュートリノ加熱による超新星爆発シミュレーション（研究代表者：国立天文台・滝脇知也）

超新星爆発機構の解明を目指し、世界最高の空間精度で超新星爆発シミュレーションを実施し、現実的な仮定の下で超新星が爆発する例を初めて示すことに成功。

銀河進化等に関わり宇宙物理で重要な存在である超新星の機構は未だ解明されていないが、「京」を用いた現実的な仮定の下での空間3次元高解像度シミュレーションにより、これまでの2次元の計算とは大きく異なる爆発を確認することに成功。この結果を用いることにより、ニュートリノや重力波など、次世代観測機器がターゲットとする粒子がどの程度の量、地球に降りそそぐのか予想可能であり、これらを用いた天体物理学のモデルケースになることが期待できる。



超新星爆発シミュレーション

計算科学技術推進体制の構築における主な取組事例

若手人材の育成支援

全国の大学等研究機関と協力して、人材育成プログラムを提供し、 将来の計算科学を担う人材を育成

- 大学への講師派遣や講義開設を行い、各専門分野において基礎理論からシミュレーションの活用についての教育を実施。また、計算機工学から本格的なシミュレーションソフトウェア設計までを一貫的に行う実践的な先端的ソフトウェア開発者教育を実施。[東京大、京都大、大阪大、神戸大等]
- 各専門分野において、学生や若手研究者向けのセミナーや合宿を開催し、最先端の研究活動やシミュレーションの活用について議論できる環境を提供。[生命科学、物質科学、素粒子・原子核・宇宙物理]

大規模計算技術の習得支援

大規模な系や大規模なデータを扱えるようになった現在の計算機環境において、 プログラミングの実習や支援を通じて、HPCIを積極的に活用しうる人材を育成

- 既にシミュレーションを活用している研究者への大規模並列プログラミング実習を行うとともに、実験研究者にもシミュレーションを普及させることを目的に、シミュレーション手法や解析テクニックの事例紹介などを実施。
- 産業界向けに、実際に使われているアプリケーションを用いた講習会やトレーニングを開催。

アウトリーチ活動によるHPCIの利用普及

戦略分野を超えたアウトリーチ活動を通して、人的ネットワークの形成、研究成果の発信、 企業や実験グループとの連携を図り、効果的なHPCIの利用普及を推進

- 各分野のコミュニティや産業界向けにシンポジウムや研究会を開催し、最先端の研究成果を紹介。
- 研究成果の実用を目指した企業との連携・支援の実施。[創薬、自動車、船舶等]
- 元素戦略PJや大型実験施設を利用した研究者と連携会議を開催し、取り組むべき課題を共有。
- 分野間でシミュレーション技術を共有し、連携。

まとめ

● プログラム全体としては、戦略目標の達成に向けて着実に進捗している。

- 研究開発については、「京」の計算資源を戦略的に配分し、プログラム全体として成果創出を加速することで、多くの課題で「京」でなければ実現できない最先端の成果が得られつつある。
- 計算科学技術推進体制の構築については、戦略機関を中心に、大学等の研究機関と連携した若手人材の育成や、成果の活用・普及に向けた最先端の実験研究や産業界との連携体制構築を図るなど、分野振興に向けて積極的に取り組んでいる。

- 一方で、個別の研究開発課題は全体として着実に進捗しているものの、分野内での各課題の位置付けが明確ではないことや、課題間連携が十分ではないこと等から、分野として、各課題の成果を統合し、戦略目標をいかにして達成していくかという絵姿が見えにくいといった懸念点が挙げられる。
- 今後、分野全体を見通し、トップダウンで、課題間連携を重点的取組とすることや、課題間の進捗に優先順位をつけること等の検討を行い、戦略目標の達成や我が国を取り巻く社会的・科学的課題の解決に資する成果創出を加速する必要がある。