



平成 24 年 9 月 3 日

スーパーコンピュータ「京」^{けい}の戦略プログラム利用枠を利用して実施される 優先課題・研究開発課題の選定について

このたび、文部科学省が推進している戦略プログラムに関し、平成 24 年 9 月末から平成 25 年 3 月までスーパーコンピュータ「京」の戦略プログラム利用枠（「京」の利用可能資源の約 50% に相当）を利用して実施される優先課題 7 件・研究開発課題 24 件が、登録施設利用実施機関（登録機関）である一般財団法人高度情報科学技術研究機構において初めて選定されました。9 月末の「京」の共用開始後、「京」を利用した科学的・社会的に画期的な成果を創出するための研究開発を進めてまいります。

1. 事業の概要

文部科学省においては、「京」を活用することにより、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる 5 つの戦略分野を定め、戦略機関を中核に関係機関が連携して研究等を行う戦略プログラムを実施しています（戦略プログラムの概要については、参考資料 1 をご参照ください）。

戦略プログラムには「京」の利用可能資源の約 50% を割り当てることにより、「京」を活用し、早期に画期的な成果の創出を目指すこととしています。

特に、戦略プログラム枠のうちの約 40%（「京」全体の約 20%）を「重点配分枠」とし、戦略プログラムで実施中の課題の中から、「京」の能力を最大限利用しなければできない大規模計算であって、平成 24 年度内又は平成 25 年度早期に画期的な科学的成果又は社会的課題の解決に資する成果があげられると見込まれる「優先課題」（10 課題程度）を選定し、重点的研究開発を進めることとしています。

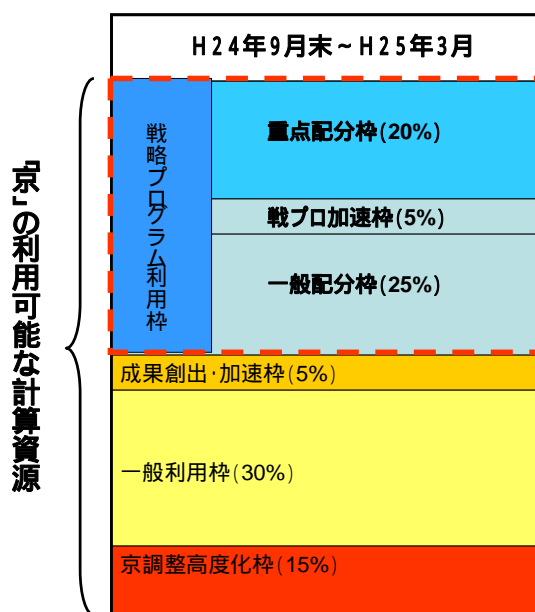


図 「京」の計算資源配分について

2. 選定した優先課題及び研究開発課題

今般、登録機関において、「京」の一般利用枠の研究課題として62件が選定されましたが、それに併せて戦略プログラム利用枠の重点配分枠で実施される優先課題及び一般配分枠で実施される研究開発課題については、以下の31件が選定されました。

具体的には重点配分枠については、HPCI 戦略プログラム推進委員会に外部有識者を加えた審査会（委員等については、参考資料2をご参照ください）を設け課題を決定するとともに、一般配分枠については同委員会において各分野への配分割合を決定した後、分野マネージャーの意見も踏まえ課題を決定し、登録機関の下におかれた利用者選定委員会における、これらのプロセスに関する審査を経て、以下の課題が選定されました。

重点配分枠の優先課題（7 課題）

課題名	研究代表者	
	所属	氏名
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	東京大学	久田 俊明
創薬応用シミュレーション	東京大学	藤谷 秀章
全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開 (対象:小児マヒウイルスの感染機構)	名古屋大学	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 (対象:シリコンナノワイヤー/シリコン上ゲルマニウムハットクラスター)	東京大学	押山 淳
全球雲解像モデルによる延長予測可能性の研究	東京大学	木本 昌秀
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 (対象:自動車、船舶、ポンプ水車)	東京大学	加藤 千幸
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

一般配分枠の研究開発課題（24 課題）

	課題名	研究代表者	
		所属	氏名
戦略分野1 「予測する生命科学・医療 および創薬基盤」	細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション	理化学研究所	杉田有治
	予測医療に向けた階層統合シミュレーション	東京大学	高木周
	大規模生命データ分析	東京大学	宮野悟
戦略分野2 「新物質・エネルギー創成」	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	東京大学	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	神戸大学	天能精一郎
	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	東京大学	押山淳
	全原子シミュレーションによるウィルスの分子科学の展開	名古屋大学	岡崎進
	燃料電池関連物質における基礎過程の大規模計算による研究	東京大学	杉野修
	水素・メタンハイドレートの生成、融解機構と熱力学的安定性	岡山大学	田中秀樹
	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	産業技術総合研究所	香山正憲
戦略分野3 「防災・減災に資する 地球変動予測」	地球規模の気象・気候・環境予測研究	東京大学	木本昌秀
	超高精度メソスケール気象予測の実証	気象研究所	斉藤和雄
	地震の予測精度の高度化に関する研究	東京大学	古村孝志
	津波の予測精度の高度化に関する研究	東北大学	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	東京大学	堀宗朗
戦略分野4 「次世代ものづくり」	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	宇宙航空研究開発機構	藤井孝蔵
	次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発	物質・材料研究機構	大野隆央
	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	東京大学	加藤千幸
	多目的設計探索による設計手法の革新に関する研究開発	宇宙航空研究開発機構	大山聖
	原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発	日本原子力研究開発機構	山田和典
戦略分野5 「物質と宇宙の起源と構造」	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定	筑波大学	藏増嘉伸
	大規模量子多体計算による核物性解明とその応用	東京大学	大塚孝治
	超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明	京都大学	柴田大
	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	東京工業大学	牧野淳一郎

上記の課題の他、計算科学技術推進体制構築枠として各分野における「京」利用の裾野拡大等に活用するために計算資源を配分。

3. 今後の予定

9月28日の「京」の共用開始後、「京」を利用した科学的・社会的に画期的な成果を創出するための研究開発を進めてまいります。

なお、期待される成果の具体例につきましては、参考資料3をご覧ください。

以上

（お問い合わせ先）

文部科学省 研究振興局 情報課 計算科学技術推進室

村松、太田（内線4287）

電話03-5253-4111（代表）

「京」を中核とするHPCIを最大限活用し、①画期的な成果創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略機関を中心に戦略分野の「研究開発」及び「計算科学技術推進体制の構築」を推進する。

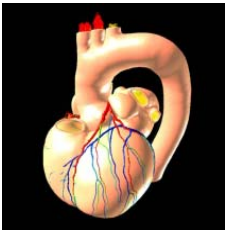
	<戦略分野>	<戦略機関>
分野1	<p>予測する生命科学・医療および創薬基盤</p> <p>ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解することにより、疾病メカニズムの解明と予測をおこなう。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・理化学研究所
分野2	<p>新物質・エネルギー創成</p> <p>物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、新規機能性分子や電子デバイス、更には各種電池やバイオマスなどの新規エネルギーの開発を目指す。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・東大物性研(代表) ・分子研 ・東北大金材研
分野3	<p>防災・減災に資する地球変動予測</p> <p>高精度の気候変動シミュレーションにより地球温暖化に伴う影響予測や集中豪雨の予測を行う。また、地震・津波について、これらが建造物に与える被害をも考慮した予測を行う。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・海洋研究開発機構
分野4	<p>次世代ものづくり</p> <p>先端的要素技術の創成～組み合わせ最適化～丸ごとあるがまま性能評価・寿命予測というプロセス全体を、シミュレーション主導でシームレスに行う、新しいものづくりプロセスの開発を行う。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・東大生産研(代表) ・宇宙航空研究開発機構 ・日本原子力研究開発機構
分野5	<p>物質と宇宙の起源と構造</p> <p>物質の究極的微細構造から星・銀河の誕生と進化の全プロセスの解明まで、極微の素粒子から宇宙全体に至る基礎科学を融合し、物質と宇宙の起源と構造を統合的に理解する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・筑波大(代表) ・高エネ研 ・国立天文台

※ スーパーコンピュータ「京」で、社会的・学術的に大きなブレークスルーが期待できる分野を「戦略分野」(5分野)とする。
 ※ 各戦略分野の研究開発、分野振興等を牽引する機関を「戦略機関」とする。

HPCI戦略プログラム推進委員会および重点配分枠の審査に参加した外部有識者

	氏名	所属
HPCI戦略プログラム推進委員会		
プログラムマネージャ	土居 範久	慶應義塾大学 名誉教授
分野マネージャ(分野1)	中村 春木	大阪大学理事補佐/大阪大学蛋白質研究所筆頭副所長
分野マネージャ(分野2)	寺倉 清之	北陸先端科学技術大学院大学 シニアプロフェッサー
分野マネージャ(分野3)	矢川 元基	東洋大学計算力学研究センター長
分野マネージャ(分野4)	小林 敏雄	財団法人日本自動車研究所長
分野マネージャ(分野5)	小柳 義夫	神戸大学大学院システム情報学研究所 特命教授
計算科学研究機構長	平尾 公彦	理化学研究所計算科学研究機構長
外部有識者		
ライフ関係	松田 道行	京都大学大学院生命科学研究所 生体制御学分野 教授
物質・材料関係	小池 康博	慶應義塾大学理工学部 物理情報工学科・慶應義塾大学フォトニクス・リサーチ・インスティテュート 教授・所長
気象・気候関係	住 明正	東京大学サステナビリティ学連携研究機構 教授
地震・防災関係	目黒 公郎	東京大学・生産技術研究所 教授
産業関係	半沢 宏之	第一三共(株)研究開発本部 機能分子第二研究所 第五グループ長 薬学博士
	大冨 浩一	(株)東芝 研究開発センター 参事
基礎物理関係	武田 廣	国立大学法人神戸大学・本部 理事・副学長
基盤センター・数理科学関係	中島 研吾	東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティング研究部門 教授
	関口 智嗣	独)産業技術総合研究所副研究統括 情報通信・エレクトロニクス分野担当
研究者以外	瀧澤 美奈子	科学サイエンスジャーナリスト

● **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・久田俊明)

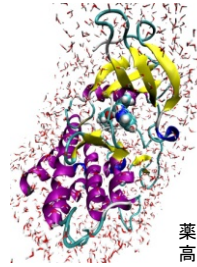


心臓シミュレーション

細胞・組織・臓器を部分ではなく、**心臓全体をありのままに再現し**、心臓病の治療法の検討や薬の効果の評価に貢献

● **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)

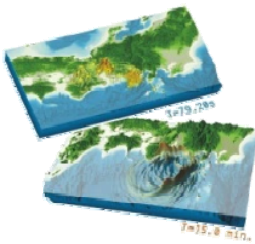


新薬の候補物質を絞り込む期間を半減(約2年から約1年)して画期的な新薬の開発に貢献

薬候補のタンパク質への高精度結合シミュレーション

● **地震・津波の予測精度の高度化に関する研究**

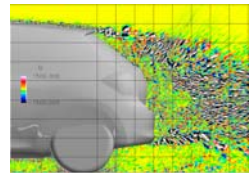
(研究代表者: 東京大学・古村孝志、東北大学・今村文彦)



シミュレーションによる地震・津波の被害予測

50m単位(ブロック単位)での予測から地盤沈下や液状化現象等の影響も加味した**10m単位(家単位)の詳細な予測**を可能とし、都市整備計画への活用による**災害に強い街作りやきめ細かな避難計画の策定等**に貢献

● **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)



車両挙動を解明する全乱流渦のシミュレーション

乱流の直接計算を工業製品の熱流体設計に適用することにより、従来行われていた**風洞実験などを完全にシミュレーションで代替し**、設計の効率化に貢献