

## 事業概要

「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。※HPCI計画への変更に伴い、平成23年度からHPCI戦略プログラムとして、利用推進施策を統合

### ①グランドチャレンジアプリケーション開発 (H18~24) (事業費: 予算額559百万円)

**(ナノ分野)** ナノ電子デバイスの設計やバイオ燃料生成用の酵素設計等に役立つシミュレーションソフトウェアを開発。

【期待される成果(例)】

- ・10万原子スケールのナノ電子デバイス解析
- ・セルロース分解酵素の分解過程の統合的解析手法の確立

**(ライフ分野)** タンパク室の分子の反応や、細胞・臓器の働きの詳細な解析により、製薬・医療に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発。平成24年度も前年度より進めている「京」での実証を行う。

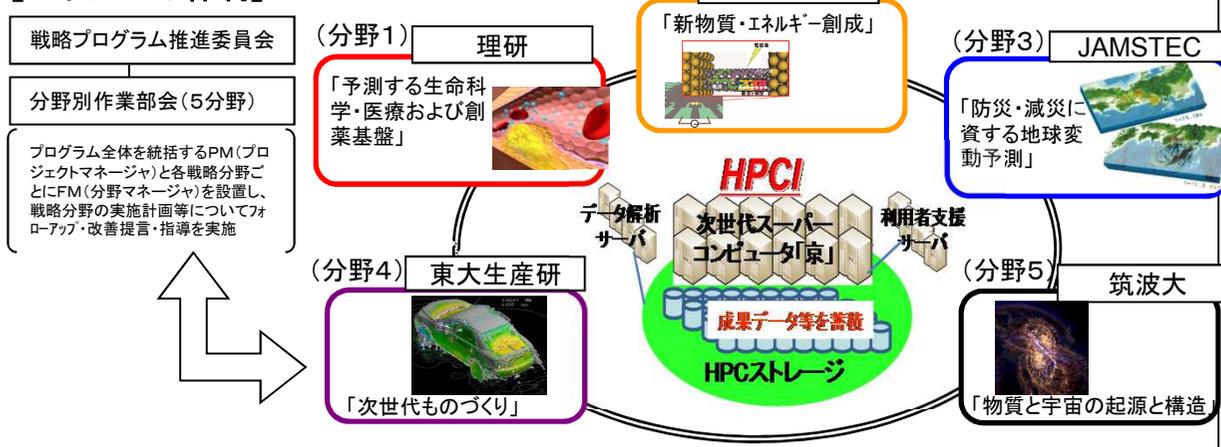
【期待される成果(例)】

- ・薬剤が細胞外へ排出されるメカニズムを解明
- ・肝組織における一連の代謝機能を解明

### ②戦略プログラム (H21~H27) (事業費: 予算額2,468百万円)

準備研究を通じ課題の絞り込みを実施。平成23年度からの本格実施において各分野5~6の研究開発課題に取り組むとともに、計算科学技術推進体制の構築のため研究支援体制整備、HPCI資源の効率的なマネジメント、人材育成等を実施。

#### 【マネジメント体制】



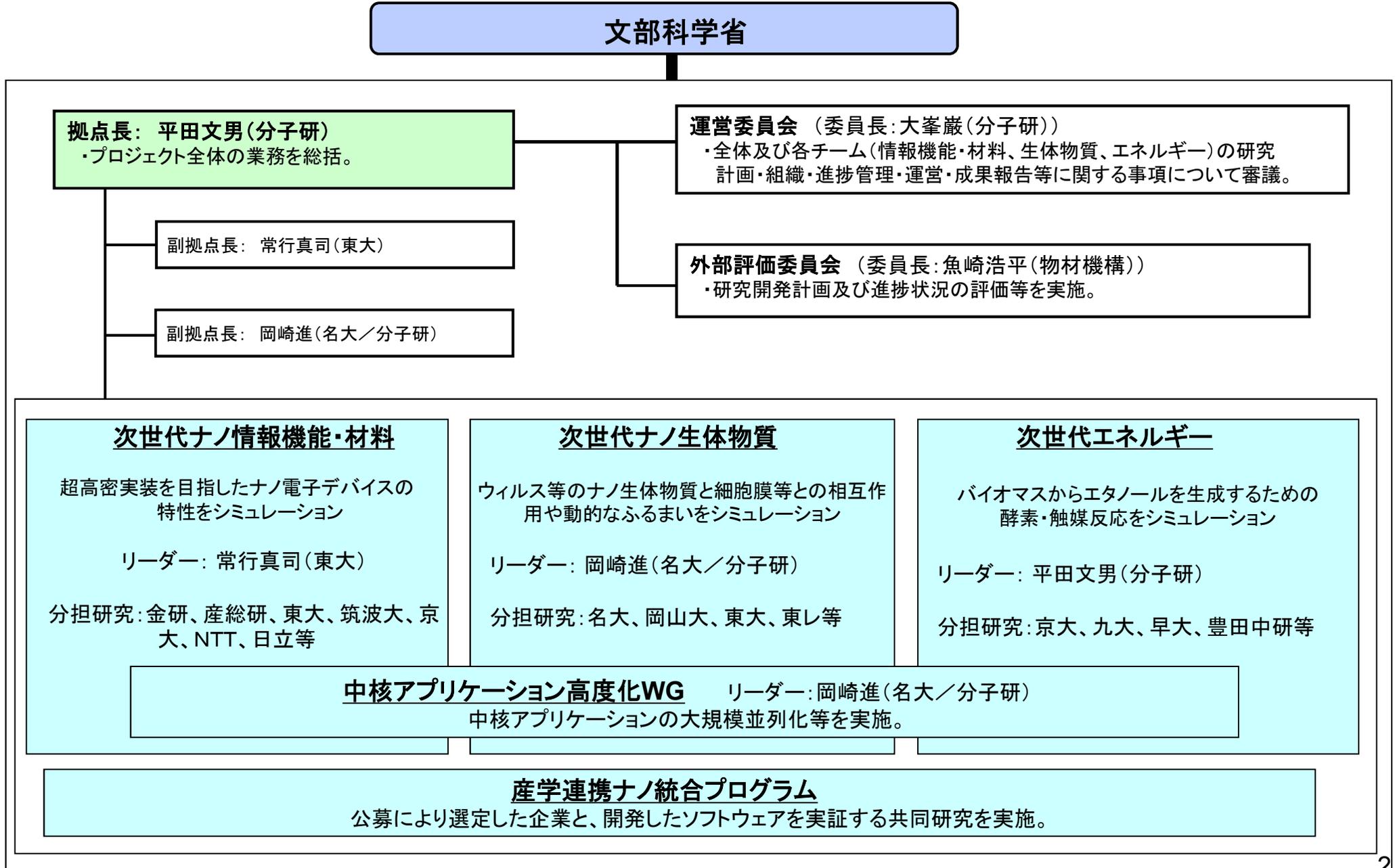
**戦略的な計算科学技術基盤の構築により画期的な成果を創出**

→地震・津波の予測精度の向上などの画期的な成果の創出により、日本の緊急課題に対応するとともに、科学技術の底力を向上!

スケジュール	H22	H23	H24	H25	H26	H27
グランドチャレンジアプリケーション開発	3.5億	2.8億	ナノ	ライフ		
戦略プログラム	11億	6.8億	5.6億			
	準備研究 3億	5億 × 5分野	↑			

5億 × 5分野

# 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発体制



# 次世代ナノ統合シミュレーション 開発ソフトウェア(全46本)

次世代ナノ情報機能・材料(次世代ナノ複合材料)	
※ RSDFT	実空間第一原理ナノ物質シミュレータ
QMAS	Quantum MAterials Simulator
CDCVM	連続変位クラスター変分計算プログラム
Electron_Transport_Simulator	オーダー-N 量子伝導プログラム
QMC_strong_correlated_electron_system	量子モンテカルロ計算(強相関電子系)
FPSEID	ナノ物質および固体表面での光励起キャリアーダイナミクスと高速化学反応
実時間・実空間TDDFTコード	周期系(結晶)に対して振動外場を与えたときの線形および非線形応答、及びフォノン励起を調べる
OpenMX	擬ポテンシャル法と数値局在基底に基づく第一原理電子状態計算プログラム
TOMBO	全電子混合基底法
FMO-LCMO	巨大分子全系の1電子エネルギースペクトルと波動関数を簡便かつ高精度に計算
M2TD	モデル原子間ポテンシャルを構築するソフトウェア
次世代ナノ情報機能・材料(次世代ナノ電子材料)	
※ Dynamical_DMRG	動的密度行列繰り込み群法
Time_evolution_in_electron-lattice_systems	電子格子系時間発展計算プログラム
Numerical_simulation_of_Keldysh_Green_function	実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェア
VMC	変分モンテカルロ法
LDA-QMC	磁性半導体中の磁気相関
Quantum_conductance_of_disordered_systems	不規則系コンダクタンス
spin-accu-FEM	有限要素法によるスピン蓄積の解析
次世代ナノ情報機能・材料(次世代ナノ磁性材料)	
※ ALPS/looper	大規模並列量子モンテカルロ法
quantum-dynamics-simulator	電子スピン共鳴解析ソフト
MachikaneyamaScreen	オーダーN遮蔽グリーン関数法コード
McDMFT	磁性体の電子状態および磁気的性質を強相関効果に起因した量子揺らぎ・熱揺らぎを取り入れた方法により計算
DSQSS	世界線ワーム更新法に基づく量子モンテカルロ法をベースとした量子格子モデルソルバ
次世代ナノ生体物質	
※ modylas	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト
※ MP2-FMO	高速量子化学計算ソフト
REM	既存の分子動力学シミュレーションプログラムに、レプリカ交換法の機能を付加するプログラム
E-Force	エントロピーカの統計力学理論解析ソフトウェア
PIMD	経路積分法に基づき原子・分子集団の有限温度での性質を量子力学的に計算
Trajan	生物物理、理論化学分野におけるシミュレーション研究用のライブラリ群
ermod	溶液系における溶媒和自由エネルギーの計算
CPOL	高精度自由エネルギー計算
次世代エネルギー	
※ 3D-RISM	3D-RISM理論の超高速高並列ソルバ
※ MP2-FMO	高速量子化学計算ソフト
DC	分割統治量子化学計算プログラム
Etrans	励起エネルギー移動速度および電子移動速度の評価
PIQUANDY	時間依存密度汎関数理論に基づく実空間電子ダイナミクスシミュレーションソフトウェア
Multireference_Electronic_Simulator	多参照電子状態計算法
q-x	多核金属含有分子用GSOプログラム
3D-RISM/MD	3D-RISMと分子動力学シミュレーションの連成計算ソルバ
3D-RISM-SCF	3D-RISMと量子化学計算手法との連成計算ソルバ
ermod	溶液系における溶媒和自由エネルギーの計算
Calnos	分子動力学シミュレーションによって界面和周波発生分光のスペクトルを計算し解析
Semi-Classical_MD_Simulations	半古典分子動力学プログラム
SO-SC-CI	電子相関理論で得られた波動関数に対してスピン軌道相互作用を計算
MWDYN	分子の電子・核非断熱ダイナミクスシミュレーション
OpenFMO	Hartree-Fock法に基づいたフラグメント分子軌道計算
共通	
NANO-IGNITION	電子状態計算・分子動力学計算などの初期入力ファイルを生成するためのユーティリティ
GIANT	アプリ間の汎用的なデータ変換機能を提供するツール

※中核アプリ

# 次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発体制

文部科学省

**プログラムディレクター(PD): 茅 幸二(理研)**  
・開発プログラムの業務を総括。

**運営委員会** (委員長: 茅幸二(理研))  
・プログラムの研究計画・組織・進捗管理・運営に関する事項を審議。

副プログラムディレクター: 姫野龍太郎(理研)

コーディネーター: 中野 昭彦、望月 敦史(理研)

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループディレクター: 姫野龍太郎(理研)

## 分子スケール

計算手法を連携させタンパク質の機能発現過程を詳細にシミュレーション

チームリーダー:  
木寺 詔紀(理研)

分担研究:  
京大、東大、阪大、  
横浜市大等

## 細胞スケール

肝細胞をモデルとした細胞内の物質の動きを考慮したシミュレーション、複数の細胞で構成される組織(肝小葉)モデルの開発

チームリーダー:  
横田 秀夫(理研)

分担研究:  
慶応大、理研、阪大、神  
戸大、東海大等

## 臓器全身スケール

心臓・血管網を含む血流モデルに血栓形成モデルを統合した血栓症シミュレータの開発

チームリーダー:  
高木 周(理研)

分担研究:  
東大、理研、東北大、  
京大、北陸先端大、阪大、  
千葉大、広島大等

## データ解析融合

肺がんと薬をテーマに、薬の効きやすさなどについて、データに基づいたモデルを創出する技術の開発

チームリーダー:  
宮野 悟(理研)

分担研究:  
東大医科研、理研、  
統数研、東工大等

## 脳神経系

神経細胞からなる大脳の情報処理等をシミュレーション

チームリーダー:  
石井 信(理研)

分担研究:  
東大、京大等

## 生命体基盤 ソフトウェア 開発・高度化

可視化ライブラリ、共通基盤ライブラリ、ワークフローツール開発。

チームリーダー:  
泰地 真弘人(理研)

# 次世代生命体統合シミュレーション 開発ソフトウェア(全31本)

<b>分子スケール</b>		
Platypus-MM/CG	マルチコピー・マルチスケール分子シミュレーション法開発の基盤となるクラスライブラリ	
Platypus-REIN	レプリカ交換分子動力学計算インターフェイス	
MARBLE	全原子分子動力学計算	
CafeMol	粗視化モデル計算	
ProteinDF	密度汎関数法に基づくタンパク質全電子波動関数計算	
Platypus-QM/MM-FE	ハイブリッドQM/MM反応自由エネルギー計算	
Platypus-QM	量子化学計算	
Platypus-QM/MM	量子化学計算/分子動力学計算	
<b>細胞スケール</b>		
RICS	細胞シミュレーションプラットフォーム	
<b>臓器全身スケール</b>		
ZZ-EFSI	全身ボクセルシミュレーション(ボクセル構造流体連成解析プログラム)	
ZZ-DOSE	重粒子線治療シミュレーション	
HIFU	低侵襲治療シミュレーション(ボクセル超音波伝播プログラム)	
UT-Heart	マルチスケール・マルチフィジックス心臓シミュレーション	
<b>データ解析融合</b>		
ParaHaplo	ハプロタイプ関連解析に於ける統計検定を行うためのソフトウェア	
NGS analyzer	次世代シーケンズ解析プログラム	
ExRAT	拡張RAT法による2SNP組合せの全ゲノム関連解析ソフトウェア	
SiGN-BN	大規模遺伝子制御ネットワーク推定プログラム	
SiGN-L1	再帰的正則化法による生体内分子の大規模ネットワーク推定プログラム	
SiGN-SSM	状態空間モデルによる時系列データからの遺伝子ネットワーク推定プログラム	
SBiP	データ解析融合プラットフォーム	
LiSDAS	生命体データ同化プログラム	
MEGADOCK	網羅的タンパク質ドッキング解析プログラム	
<b>脳神経系</b>		
NEST	Neural Simulation Tool	
CMDN	Cortical Microcircuit Developed on NEST	
VSM	全視覚系モデルによる視覚情報処理の解析(視覚系シミュレーションのための共有プラットフォーム)	
NeuroMorphoKit	神経細胞形態シミュレーションキット	
IOSSIM	昆虫嗅覚系全脳シミュレータ	
<b>生命体基盤ソフトウェア</b>		
cppmd	大規模並列用MDコアプログラム	
LSV	分散並列大規模データ可視化システム	
SPHERE	アプリケーションミドルウェア	
VLSVL	大規模仮想化合物ライブラリ	

※中核アプリ

# HPCI戦略プログラム戦略分野

「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>
<b>分野1</b>	<p><b>予測する生命科学・医療および創薬基盤</b></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"> <li>・理化学研究所</li> </ul>
<b>分野2</b>	<p><b>新物質・エネルギー創成</b></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"> <li>・東大物性研(代表)</li> <li>・分子研</li> <li>・東北大金材研</li> </ul>
<b>分野3</b>	<p><b>防災・減災に資する地球変動予測</b></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"> <li>・海洋研究開発機構</li> </ul>
<b>分野4</b>	<p><b>次世代ものづくり</b></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"> <li>・東大生産研(代表)</li> <li>・宇宙航空研究開発機構</li> <li>・日本原子力研究開発機構</li> </ul>
<b>分野5</b>	<p><b>物質と宇宙の起源と構造</b></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"> <li>・筑波大(代表)</li> <li>・高エネ研</li> <li>・国立天文台</li> </ul>

※ 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。

# 分野1: 予測する生命科学・医療および創薬基盤

分野マネージャ: 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)

戦略機関: 理化学研究所

統括責任者: 柳田敏雄

副統括: 木寺詔紀、江口至洋

## 研究開発実施機関

- ・名古屋大学情報科学研究科
- ・日本原子力研究開発機構
- ・東京大学大学院工学系研究科
- ・沖縄科学技術大学院大学
- ・東京工業大学大学院情報理工学研究科
- ・産業技術総合研究所 生命情報工学研究センター
- ・国立遺伝学研究所 生命情報・DDBJ研究センター
- ・東京大学大学院理学系研究科
- ・東京大学先端科学技術研究センター
- ・東京大学大学院情報理工学系研究科
- ・東京大学医科学研究所
- ・大阪大学大学院情報科学研究科

## 調査等実施機関

- ・産業技術総合研究所生命情報工学研究センター
- ・大阪大学大学院基礎工学研究科

## 分野2:新物質・エネルギー創成

分野マネージャ: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)

戦略機関:東京大学物性研究所(代表機関)

統括責任者:常行真司

分子科学研究所、東北大学金属材料研究所

### 研究開発実施機関

- ・分子科学研究所
- ・東北大学金属材料研究所
- ・東北大学原子分子材料科学高等研究機構
- ・産業技術総合研究所
- ・名古屋大学大学院工学研究科
- ・京都大学基礎物理学研究所
- ・京都大学大学院薬学研究科
- ・大阪大学大学院工学研究科
- ・大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター
- ・産業技術総合研究所関西センター
- ・神戸大学大学院システム情報学研究科
- ・岡山大学自然科学研究科

### 協力機関

- ・金沢大学
- ・総合研究大学院大学
- ・豊橋技術科学大学
- ・物質・材料研究機構
- ・大阪府立大学
- ・九州工業大学
- ・兵庫県立大学
- ・日本原子力研究開発機構
- ・関西学院大学
- ・仙台高等専門学校
- ・ロンドン大学
- ・理化学研究所計算科学研究機構
- ・横浜国立大学
- ・首都大学東京
- ・北陸先端大先端融合領域研究院
- ・筑波大学計算科学研究センター
- ・北海道大学
- ・電気通信大学
- ・早稲田大学
- ・九州大学
- ・東京理科大学
- ・(株)富士通研究所
- ・新日本製鐵(株)
- ・旭硝子(株)
- ・日産自動車(株)
- ・東レ(株)
- ・旭化成(株)
- ・鳥取大学
- ・慶應義塾大学
- ・名古屋工業大学
- ・ルイパスツール大学

# 分野3:防災・減災に資する地球変動予測

分野マネージャ: 矢川元基 (東洋大学計算力学研究センター長)

戦略機関: 海洋研究開発機構

統括責任者: 今脇資郎

## 研究開発実施機関

- ・東京大学大気海洋研究所
- ・東京大学大学院情報学環
- ・京都大学
- ・名古屋大学
- ・広島大学
- ・東京大学地震研究所
- ・東北大学大学院理学研究科
- ・神戸大学
- ・東北大学大学院工学研究科
- ・日本大学

## 協力機関

- ・気象庁
- ・気象研究所
- ・横浜国立大学
- ・筑波大学
- ・防災科学技術研究所
- ・慶応義塾大学
- ・防衛大学
- ・関西大学
- ・早稲田大学
- ・統計数理研究所
- ・理化学研究所計算科学研究機構
- ・港湾空港技術研究所
- ・北海道大学
- ・国立環境研究所
- ・福岡教育大学
- ・九州大学応用力学研究所
- ・中央大学
- ・工学院大学
- ・産業技術総合研究所
- ・核融合科学研究所

# 分野4:次世代ものづくり

分野マネージャ:小林敏雄(日本自動車研究所長)

戦略機関:東京大学生産技術研究所(代表機関)  
日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構

統括責任者:加藤千幸

## 研究開発実施機関

- ・宇宙航空研究開発機構
- ・物質・材料研究機構
- ・東北大学
- ・日本原子力研究開発機構
- ・北海道大学
- ・京都大学

## 調査等実施機関

- ・計算科学振興財団

## 協力機関

- ・東京農工大学
- ・信州大学
- ・広島大学
- ・国立医薬品食品衛生研究所
- ・IHI
- ・スズキ
- ・デンソー
- ・富士通研究所
- ・電業社機械製作所
- ・スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
- ・東洋大学
- ・豊橋技術科学大学
- ・九州大学
- ・旭硝子
- ・JR東日本
- ・東芝
- ・ブリヂストン
- ・日本大学
- ・名古屋大学
- ・高エネルギー加速器研究機構
- ・産業技術総合研究所
- ・NTT
- ・JR東海
- ・トヨタ自動車
- ・本田技術研究所
- ・日立プラントテクノロジー
- ・東京都市大学
- ・大阪大学
- ・理化学研究所
- ・荏原製作所
- ・新日本製鐵
- ・日産自動車
- ・三菱自動車工業
- ・法政大学
- ・神戸大学
- ・海洋研究開発機構
- ・電力中央研究所
- ・キヤノン
- ・三菱ふそうトラック・バス
- ・日立製作所
- ・三菱重工業
- ・立教大学
- ・鳥取大学
- ・川崎重工業
- ・富士重工業
- ・横浜ゴム

# 分野5:物質と宇宙の起源と構造

分野マネージャ:小柳義夫(神戸大学大学院システム情報学研究科特命教授)

戦略機関:筑波大学(代表機関)

統括責任者:青木慎也

高エネルギー加速器研究機構、国立天文台

## 研究開発実施機関

- ・高エネルギー加速器研究開発機構
- ・国立天文台
- ・理化学研究所仁科加速器研究センター
- ・京都大学基礎物理学研究所
- ・千葉大学
- ・東京工業大学
- ・大阪大学核物理研究センター
- ・東京大学

## 協力機関

- ・北海道大学
- ・東北大学
- ・名古屋大学
- ・大阪大学
- ・広島大学
- ・九州大学
- ・鹿児島大学
- ・滋賀大学
- ・甲南大学
- ・早稲田大学
- ・法政大学
- ・会津大学
- ・日本大学
- ・東京理科大学
- ・青山学院大学
- ・海洋研究開発機構
- ・日本原子力研究開発機構
- ・自然科学研究機構
- ・沼津高専