

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)

(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。(H18~23)

【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) タンパク質の分子の反応や、細胞・臓器の動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。(H19~24) (事業費: 予算額559百万円)

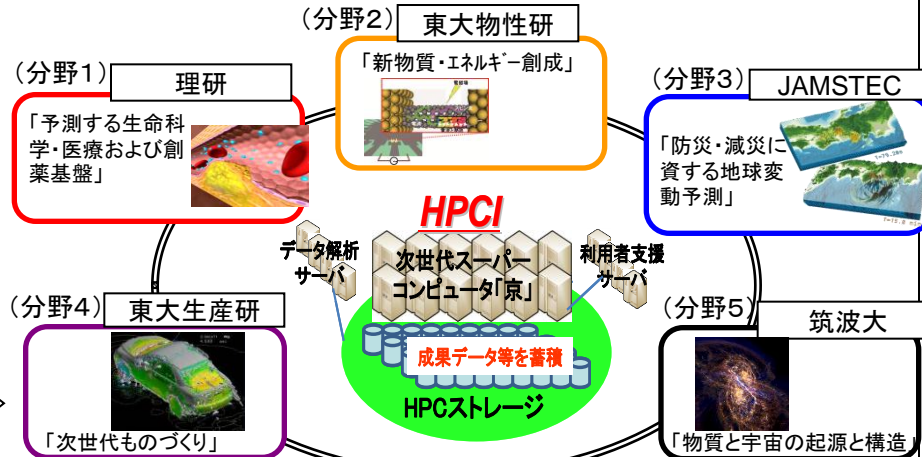
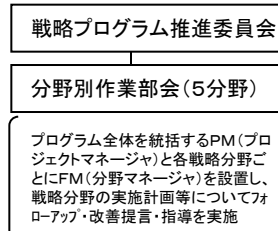
【期待される成果(例)】

- ・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)

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】

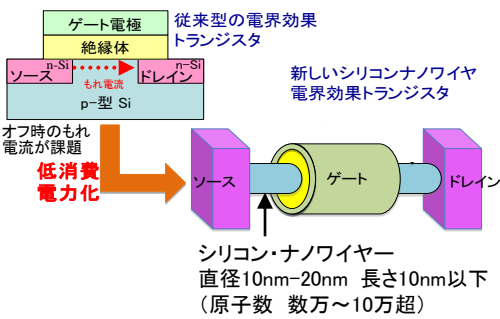
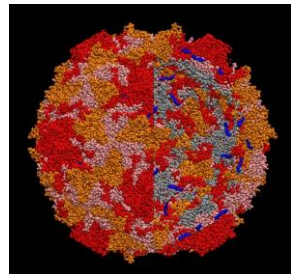
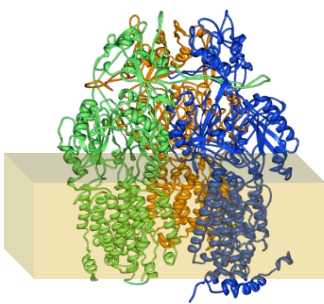



戦略的な計算科学技術基盤の構築により画期的な成果を創出

→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		
	11億	6.8億	5.6億			
戦略プログラム	準備研究 3億	5億×5分野	5億×5分野			

次世代スーパーコンピュータを最大限利活用するための ソフトウェアの研究開発(グランドチャレンジアプリケーション)

	<p style="text-align: center;">ナノテクノロジー分野 〔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〕</p>	<p style="text-align: center;">ライフサイエンス分野 〔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〕</p>
<p>概要</p>	<p>ナノ電子デバイスの設計や高効率の触媒・酵素の設計等に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発(46本のシミュレーションソフトを開発)</p>	<p>タンパク質分子の反応や、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(34本のシミュレーションソフトを開発)</p>
<p>応用例</p>	<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 45%;">  <p>ゲート電極 従来型の電界効果トランジスタ 絶縁体 ソース p-Si もれ電流 ドレイン n-Si 新しいシリコンナノワイヤ電界効果トランジスタ p-型 Si オフ時のもれ電流が課題 低消費電力化</p> <p>シリコン・ナノワイヤ 直径10nm-20nm 長さ10nm以下 (原子数 数万~10万超)</p> </div> <div style="width: 45%;"> <p>実空間第一原理ナノシミュレータ(HP-RSDFT) ナノワイヤ等の原子構造、電子状態の量子論的計算を10万原子系(現状は2,000原子程度が限界)で可能とし、高速・高機能、省エネルギーなどの特長を持つ新しいデバイスの設計に貢献する。</p> </div> </div> <p>画像提供: 理研・筑波大</p> <p>高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト(MODYLAS) ウイルスとレセプタや抗体の特異な相互作用の解析を、1,000万原子系(現状は5万原子程度が限界)で可能とし、ウイルス性疾患に対する予防法と治療薬の開発、創薬の効率化に貢献する。</p>  <p>画像提供: 名古屋大院工学研究科</p>	<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 45%;">  <p>資料提供: 理化学研究所</p> </div> <div style="width: 45%;"> <p>多剤排出トランスポーターにおける薬剤排出シミュレーション (MARBLE/Platypus/CafeMol) 多剤排出トランスポーターについて動作過程を、長時間のサブミリ秒(現状はサブマイクロ秒が限界)での解析を可能とし、薬剤の排出(薬剤の取込、輸送、排出)を再現し、抗生物質等の薬剤が効かなくなるメカニズムの解明に貢献する。</p> </div> </div> <p>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(UT-Heart) 細胞レベルから心臓の拍動や血液の拍出などの再現を可能とする心臓シミュレーションを実現し、今までは推測の域を出なかった、マイクロ事象(例えば機能タンパクの異常)とマクロ事象(例えば拡張型心筋症など)の関係を合理的に解明し、医学・医療に貢献する。</p>  <p>資料提供: 東京大学大学院新領域創成科学研究科</p>
<p>体制</p>	<p>分子科学研究所を中核に、東京大学物性研究所、京都大学、名古屋大学等、6機関が連携した研究開発体制を構築</p>	<p>理化学研究所を中核に、東京大学医科学研究所、大阪大学、慶應義塾大学等、15機関が連携した研究開発体制を構築</p>