

ポスト「京」で期待できる成果

●副作用を考慮した創薬シミュレーション

[現状] 「京」では、薬剤の候補物質とタンパク質の結びつきやすさをシミュレーションし、**単純な機能阻害を考慮した10種類以上の薬候補のスクリーニングができた。**(多数のタンパク質からなる生体分子システムと薬剤の相互作用予測には至っていない)



「京」による結合シミュレーション
(MP-CAFE)
画像提供: 京都大学 奥野恭史

[将来] ポスト「京」では、長時間かつ大規模高精度計算によって、**多数のタンパク質からなる生体分子システムと薬剤の相互作用を予測して、副作用の原因等も考慮した有効性の高い創薬が期待される。**

●観測ビッグデータを活用した気象予測

[現状] 「京」では、**全球規模では、台風の源となる熱帯における大気の大規模な乱れの一か月予報の可能性を示した。また、地域レベルで大雨となる集中豪雨を半日から一日前に予測できる可能性を示した。**(ゲリラ豪雨のような局地的な災害の高精度予測には至っていない)



平成25年度「京」を中核とする
HPCシステム利用
研究課題 中間報告会 戦略プログラム分野3

[将来] ポスト「京」では、人工衛星データを同化することにより、**全球規模での予報が更に向上される可能性があり、高機能レーダーの観測データを同化することによりゲリラ豪雨予測の技術を開発し有効性の検証を行い次世代現業予報の礎を築く。**

●次世代高機能半導体デバイスのデザイン

[現状] 「京」では、**ナノメートルスケールの次世代材料について、電子構造や電気伝導特性を解明。**(多様な構造体・材料に対する、系統的計算とそれに基づくデバイスデザインは困難)



Siナノワイヤ (ナノメートルスケールの次世代材料)

[将来] ポスト「京」では大規模高精度シミュレーションを実行し、多種多様なナノ構造体・材料の電子状態や物理現象を解明し、次世代半導体の製造に必要な、**ナノスケールでの微細加工技術の構築に貢献。**

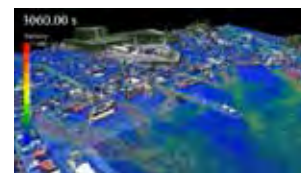


多種多様なナノワイヤ

●地震・津波による総合災害予測システムの構築

[現状] 「京」では、東北地方太平洋沖地震における、強い揺れと大津波生成原因を解明。**巨大地震による複合災害予測へのシミュレーションの活用において大きな前進があった。**(限られたシナリオに基づく被害予測しか実施できず、将来の想定を網羅するまでには至っていない。) また、**構造物と都市の直接被害の予測・評価、地盤と構造物の振動、津波の遡上、避難時の人の流れのシミュレーションによる避難誘導の改善で成果。**(災害発生後の経済活動などの間接被害まで含めたシミュレーション事例は少ない)

[将来] ポスト「京」では、地震・津波による複合災害について、震源や地下構造の**不確定さを考慮した予測システムを構築し、自治体等の防災・減災計画に活用**することが期待される。また、都市全体を対象とした**避難や鉄道交通網のシミュレーションを含む統合的予測により、国土強靱化に貢献。**



10万人規模のエージェント
シミュレーション



複合災害予測のベースとなる3次元津波遡上計算

●ものづくりを先導する設計・製造プロセスの開発

[現状] 「京」では、試作実験に匹敵する精度での空気抵抗等の予測が可能となり、**実験代替手法となりえることを実証した。**(まだ数日程度かかり、プロセス間協調設計の実現には至っていない)



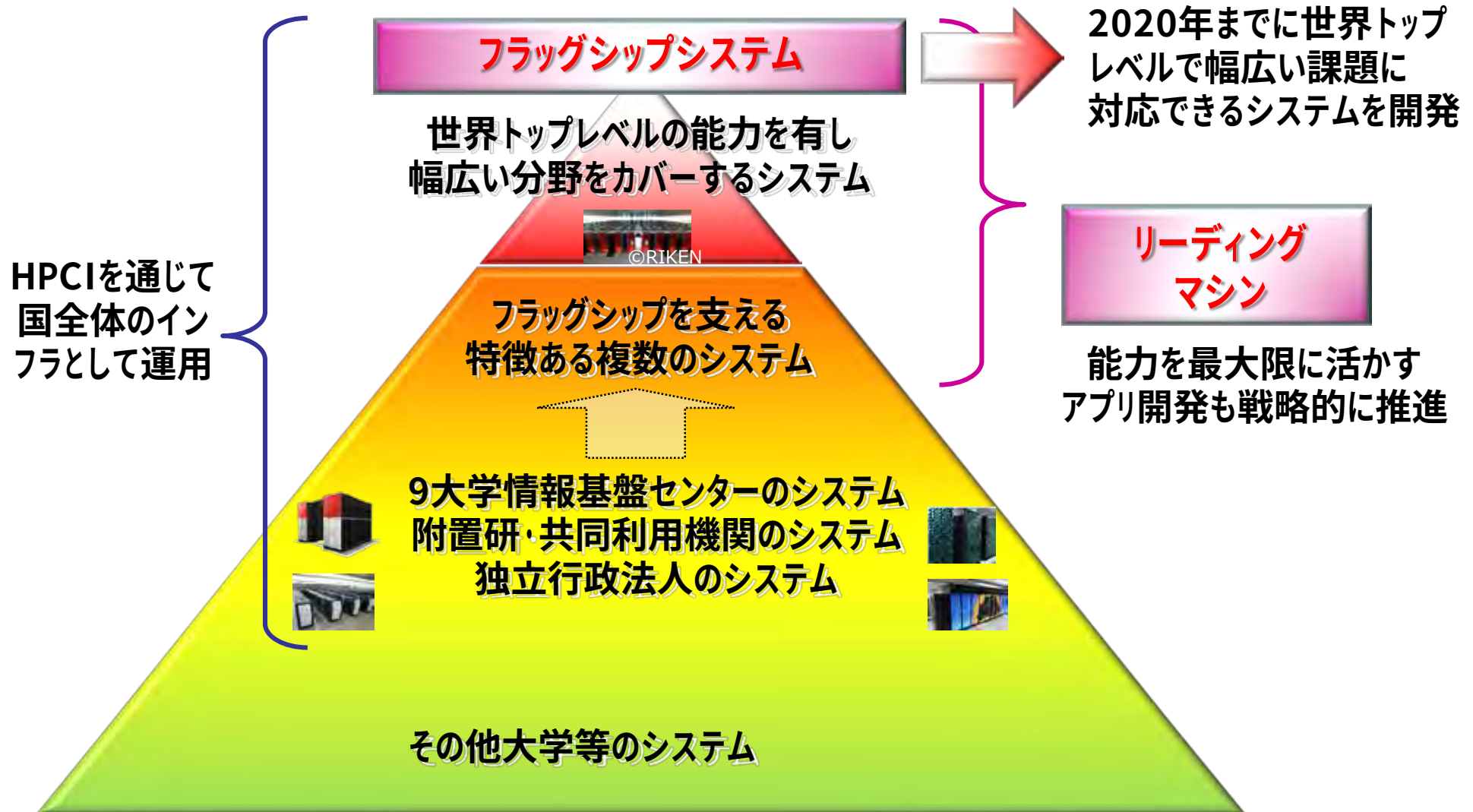
協力: マツダ (株)、スズキ (株)

[将来] ポスト「京」では、**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を統合的に扱い、開発期間短縮・コスト低減・品質向上に貢献。**

参考資料

我が国の次期スパコン開発の方向性

<我が国の計算科学技術インフラのイメージ>

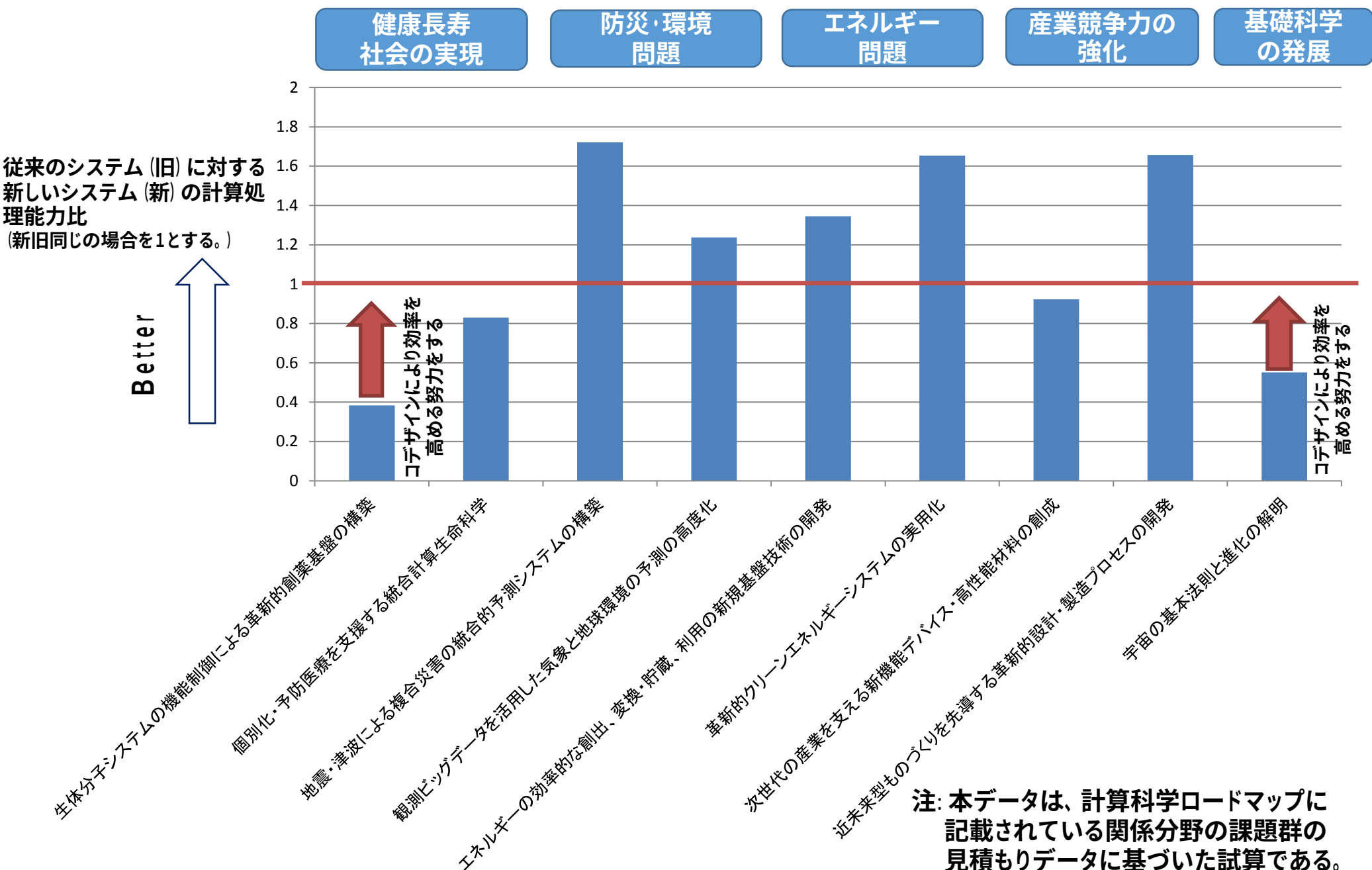


文部科学省における事前評価結果

科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会決定（平成25年8月）

- 世界最高水準のスーパーコンピューティング技術は競争力の源泉たる国家の基幹技術であり、また、国際的にもスーパーコンピュータやアプリケーションの自主開発が拡大している。そのような状況の中で、本プロジェクトは、我が国の計算科学技術インフラを発展させ、科学技術の振興、産業競争力の強化、安全・安心の国づくり等の実現に貢献するとともに、我が国として必要な技術や経験の継承・発展及びそれを支える人材の育成・確保、さらには広い意味での安全保障にも貢献するものであることから、国として着実に推進することが適当である。ただし、相当額の国費が投入されるプロジェクトなので、その内容、必要性、期待される成果等について、引き続き、合理的かつ分かりやすい説明に努める必要がある。
- ハードウェアの開発のみならず、当該ハードウェアを最大限活用して様々な社会的・科学的課題の解決に貢献するアプリケーションの開発を協調的に進めることで、相当額の国費が投入されるプロジェクトとして、その成果を国民に見える形で早期に創出していく必要がある。
- 本プロジェクトを開始するに当たっては、開発主体候補の提案を引き続き精査し、また、「将来のHPCIシステムのあり方に関する調査研究」の結果等も踏まえ、現段階で最善の選択をすることは当然のことであるが、スーパーコンピューティングの分野は技術的な進展が早いため、プロジェクトの推進に当たっては、解決すべき社会的・科学的課題とそれに必要な仕様、国内外の動向、開発体制、自主開発すべき要素技術、下方展開した場合の競争力、開発スケジュール、開発コスト、コスト/パフォーマンス等について引き続き検討を続け、HPCI コンソーシアム等のユーザーをはじめとして幅広い意見を踏まえながら、当該検討事項について段階ごとにHPCI 計画推進委員会の評価を受ける必要がある。

計算処理能力の新旧構成比較 (重点課題別の試算)



システムの評価結果

- H P C I 計画推進委員会 次期フラッグシップシステムに係るシステム検討WGにおいて、理研の提案システムを評価しているところ、以下の見解が中間的に取りまとめられている。

- ・システムとアプリケーションのCo-designにより、社会的・科学的課題の解決に貢献できるシステムを実現する、との基本方針は妥当である。
- ・重点課題が幅広い分野にわたることから、2020年までに、世界トップレベルで多くの課題に対応できる汎用のシステムを、国際競争力のあるシステムとして実現し、エクサスケールを目指す、との方向性は現時点で妥当である。

- 今後、同基本方針や方向性に従い、ポスト「京」が、成果を最大化できるシステムとなるよう、また、国際競争力のあるシステムとなるよう、その技術的詳細等については基本設計の中でしっかりと検討していく。

【次期フラッグシップシステムに係るシステム検討WG メンバー】

浅田 邦博	(東京大学大規模集積システム設計教育研究センター長・教授)
梅谷 浩之	(スーパーコンピューティング技術産業応用協議会企画委員会委員／トヨタ自動車株式会社エンジニアリング IT部主幹)
小柳 義夫	(主査，神戸大学計算科学教育センター特命教授)
笠原 博徳	(早稲田大学理工学術院教授)
加藤 千幸	(東京大学生産技術研究所教授)
工藤 知宏	(産業技術総合研究所情報技術研究部門研究部門長)
小林 広明	(東北大学サイバーサイエンスセンター長)
善甫 康成	(法政大学情報科学部教授)
中島 浩	(京都大学学術情報メディアセンター教授)
平木 敬	(東京大学大学院情報理工学系研究科教授)
藤井 孝藏	(HPCIコンソーシアム理事長／宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部宇宙輸送工学研究系教授)
松岡 聡	(東京工業大学学術国際情報センター教授)
宮内 淑子	(メディアスティック株式会社代表取締役社長)

理論ピーク性能とアプリケーション実効性能

○システムの理論ピーク性能を向上したとしても、アプリケーション実効性能が同様に向上するわけではない。

- 実効性能向上比が理論ピーク性能向上比に揃わないのは、メモリ、通信、ファイルI/Oといった要素部品の性能向上がピーク性能(CPU性能)の向上と異なるためである。
- アプリケーションとハードウェアとのCo-designによって、アプリ自体のデータの取り込み方や取り込み量、処理方法を改善することによって対応する予定である。

○米国においても、理論ピーク性能やLINPACK性能ではなく、**実アプリケーションの実効性能を見据えたスパコン開発を実施。**

例1：「Trinity」（ロスアラモス国立研究所に2016年に設置予定）

[HPCwireの記事（2014年8月22日）より引用 →<http://www.hpcwire.jp/archives/4965>]

- ・ ロスアラモス国立研究所のHPC部門のリーダーであるGary Griderと深い議論をする機会を持つことができた。（中略）彼はFLOPSは気にしておらず、彼らの「Cielo」マシンの6倍から8倍の性能を気にしているだけだ
- ・ 業者が頼んで来ない限り、彼らはLINPACKを計画していない

例2：「Cori」（国立エネルギー研究スーパーコンピュータセンターに2016年に設置予定）

[HPCwireの記事（2014年8月20日）より引用 →<http://www.hpcwire.jp/archives/3515>]

- ・ LINPACKのような計算ベースのベンチマークをアピールするためではない
- ・ 本当の魅力は、実際のアプリケーションの要件であり、計算馬力では全くない

例3：「CORAL」（国立エネルギー研究スーパーコンピュータセンターに2018年に設置予定）

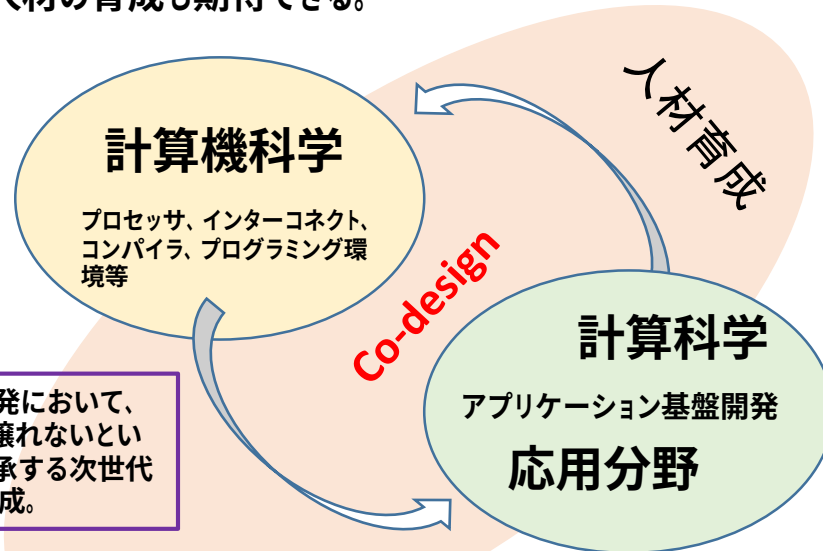
[米国先端計算科学諮問委員会提出資料（2014年3月31日）より引用 → http://science.energy.gov/~media/ascr/ascac/pdf/meetings/20140331/CORAL_Update_for_ASCAC_March_31_2014_V31.pdf]

- ・ アプリケーション性能要求を満たすのが最優先
- ・ 現行マシンの4～8倍の大規模単一問題型計算性能、6～12倍の多重ケース処理型計算性能

人材育成

人材育成については、「京」の開発・整備等を通して、以下のとおり数々のノウハウや技術が蓄積されるとともに、そうしたノウハウや関連技術を有する人材が育成された。フラッグシップ2020プロジェクトにおいても、プロジェクトを通して同様の人材育成の効果が期待できる。「京」の完成後実施してきた研修生の受け入れやスクール・講習会を引き続き実施し、ポスト「京」についても取り上げていくことで、計算科学・計算機科学の最先端研究を牽引する人材育成に貢献する。

本プロジェクトにおいては、プロセッサ等の中核となる技術について、Co-designの観点から、ハードウェアの開発とアプリケーションの開発を密接に連携して進めることで、計算機科学分野と計算科学分野の双方あるいは計算科学分野と応用分野の双方に精通する人材の育成も期待できる。



AICSでの大学院生・若手研究者向け計算科学・システム開発のインターンシップ・スクールを若手に広げる

1. インターンシップ

大学院生を対象として、実習・体験により将来の最先端の計算科学研究開発の担い手を育成。

2. サマースクール

スパコンを駆使して新しい課題に挑戦したいと考えている大学院生・若手研究者等を育成。

- ① AICSサマースクール・AICSスプリングスクール
 - ・ 大学院生・若手研究者向け
- ② HPC国際サマースクール
 - ・ 米国及び欧州のHPC機関と共同開催

3. e-learningアーカイブ

計算科学と高性能計算のためのe-learningアーカイブの公開を準備中。

① 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

概要・意義・必要性

(1) 必要性の観点

ポスト「京」で可能となる長時間ダイナミクス計算により、**副作用因子を含む多数の生体分子の機能を予測し、有効性が高く、さらに安全な創薬を実現**

(2) 有効性の観点

創薬関連ビッグデータ (疾病、副作用等に関わるタンパク質群や医療情報) や最先端計測データを活用し、製薬企業およびその関連団体との密接な連携体制で新たな創薬基盤を構築

(3) 戦略的活用の観点

ポスト「京」をフルに活用した生体分子シミュレーションにより、**創薬計算の大幅な加速を実現**。さらに創薬の**阻害から制御への革新** (タンパク質の機能阻害から生体分子システムの制御へ) を目指す。

内容の詳細

単純な阻害剤をめざす
創薬ターゲットが枯渇

生体分子システム (疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等) のダイナミクスを考慮した機能制御をめざす創薬が必要

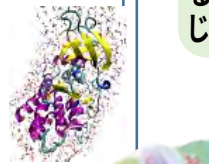
創薬関連ビッグデータを解析することで、多数のタンパク質からなる疾患原因、副作用、薬剤輸送に関わる生体分子システムを同定し、**薬剤による制御対象を網羅する**

ポスト「京」を駆使する分子シミュレーション法を開発

ポスト「京」を駆使して、多数のタンパク質の創薬計算を大幅に加速、さらにそれらのダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用を予測し、**機能制御をする薬剤を設計**

細胞環境を考慮したシミュレーションを行うことで、細胞に対する**最先端計測実験と定量的に比較する**

創薬関連ビッグデータ



ポスト「京」利用の必要性

今後の創薬には、ポスト「京」ではじめて可能となる、疾患に関わる多数のターゲットからなる生体分子システム (疾患関連因子、副作用因子、輸送・代謝タンパク質等) の同定とそれらの長時間シミュレーションによるダイナミクスを考慮した薬剤との相互作用予測が不可欠

ポスト「京」分子シミュレーションによって、細胞環境における長時間シミュレーションがはじめて可能となり、先端計測機器からもたらされるデータに対応する情報を与えることで、細胞機能発現の機構がはじめて原子レベルのモデルから明らかとなる

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

生体分子システムの動的構造予測等に約45日
創薬の結合自由エネルギー計算に約35日 (10万ケース)



期待される成果・波及効果

多数タンパク質を含んだ網羅的なターゲットシステムの選択、膨大な計算量による超高精度相互作用予測、単純な機能阻害ばかりでなく、副作用因子を含んだより複雑な機能制御による有効性の高い創薬を可能にする。これによって、**創薬プロセスを革新し、製薬産業の活性化に貢献する**。

様々な生体分子システムの最先端計測データ (SACLA, SPring8 等の大規模施設からの情報や、一分子計測情報などのin-house実験によるものなど) に対して、ポスト「京」を用いた分子シミュレーションは原子レベルでそれら実験情報に対する機能発現モデルを提供することができ、生体分子システムの理解、予測、操作に大きく貢献することができる。