

## 分野連携による新しい科学の創出

大規模実験施設との連携      SACLA等大型研究施設との連携

**目標・目的、克服すべき学術的課題**

- ナノメートルからマイクロメートルのサイズで起こる生命現象の“高解像度”での解明
- XFEL施設SACLA(SPring-8 Angstrom Compact free electron LAser)と「京」の連携等による新規ナノサイエンスの開拓

**従来の研究**

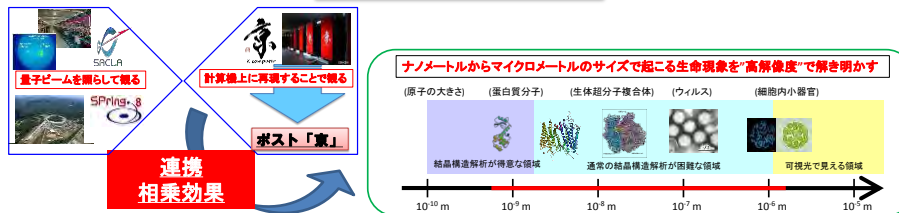
- 非結晶粒子や微細結晶の構造解析が困難
- 高解像度で試料を観察できるためには、周期構造をもつ結晶試料に限定

**分野連携の方策**

- 大量のデータ解析による、4次元イメージング
- 分子レベルシミュレーションとの連携

**大規模計算で実現されること**

- 非結晶粒子や微細結晶の構造解析
- 生体粒子の階層的ダイナミクスの解析



ロメートルのサイズの生体粒子の姿を、ナノメートル程度の解像度で捉えることが可能である。この空間スケールは、粗視化 MD 法<sup>3</sup>など分子シミュレーションのよいターゲットとなる。大規模分子シミュレーションを用い、SACLA の実験データを解析することで、生体粒子の階層的ダイナミクスの研究が進み、この空間スケールで起こる生命現象の理解につながる。

大型研究施設と計算科学の連携により、新規ナノサイエンスが開拓され、ナノメートルからマイクロメートルのサイズで起こる生命現象の高解像度での解明へとつながっていく。

大規模実験施設との連携において今後、必要となる計算機性能を下表に示す。

課題	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ/バンド幅 (PB/s)	要求ファイル/I/O性能 (TB/s)	メモリ量/ケース (PB)	ストレージ量/ケース (PB)	計算時間/ケース (hour)	ケース数	総演算量 (EFLOP)	概要・計算手法	問題規模	備考
大量実験データ解析による4次元イメージング	2	10	0.01	1	1	28	1	200	構造分類、3次元構造構築、時間軸推定のための統計処理	百万~千万 images	
実験解析結果に基づく動的構造モデリング	200	100	0.002	0.004	2	240	10	1,700,000	全原子/粗視化分子動力学シミュレーション	~1億粒子	創薬・医療と連携

※ 本見積もりは、9月末日での見積もりである。未だ精査の余地があり、最終版では、より精度の高い数値を記載する予定である。

<sup>3</sup> 数から数十の原子を1つの単位として表現したモデルを用いて計算を行う手法。目的に応じて、どのくらいの原子数を粗視化の一単位とするかが決定される。