

# メカノバイオ：生体力学シミュレーション#3 次世代スーパーコンピュータ開発と生体シミュレーション



**RIKEN**

Next-Generation Supercomputer R&D Center

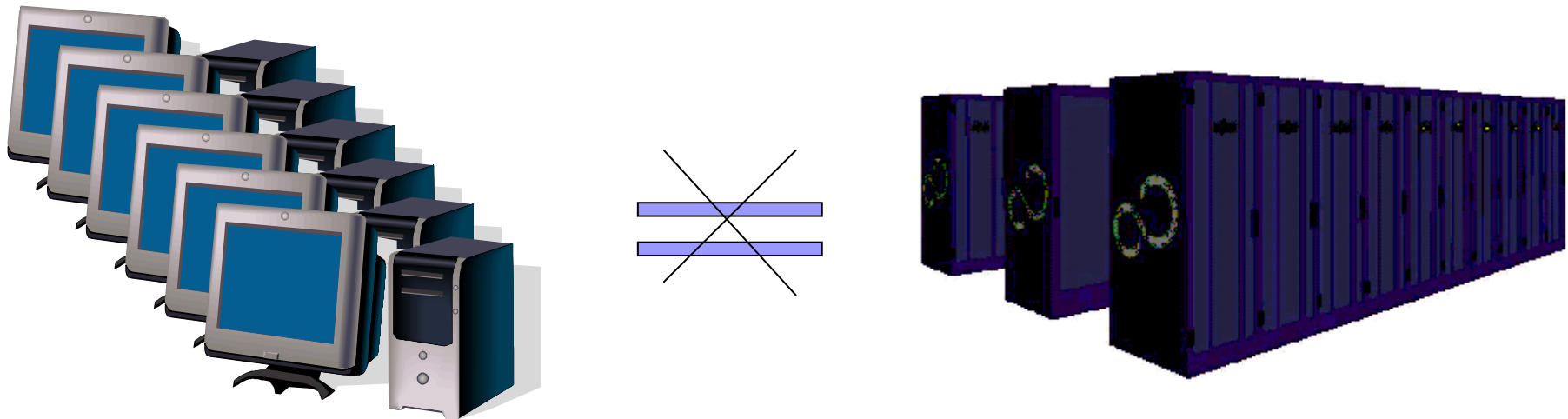
東京大学・理化学研究所  
姫野龍太郎  
himeno@riken.jp

# Outline

1. スーパーコンピュータとシミュレーション
2. 自動車空カシミュレーションに見る10年の進歩
3. 微視的に見たタンパク質のシミュレーション
4. 次世代スーパーコンピュータ開発プロジェクト
5. 応用が待たれている世界
  - 5.1 生命現象そのもののシミュレーション
  - 5.2 創薬への応用
  - 5.3 人体シミュレーション
  - 5.4 気象予報、気候変動予測
  - 5.5 自動車産業でのシミュレーション
6. COE構想
7. まとめ

# 1.そもそもスーパーコンピュータとは？

- 同時代のコンピュータから抜きん出た性能を持つコンピュータ
  - パソコンの100倍以上
  - パソコン100台を集めたものとう違う？
    - 100個の計算は100台集めると1/100の時間で計算可能
    - しかし、一つの計算にかかる時間は1/100にならない
    - スーパーコンピュータは1/100となるように設計されたコンピュータ



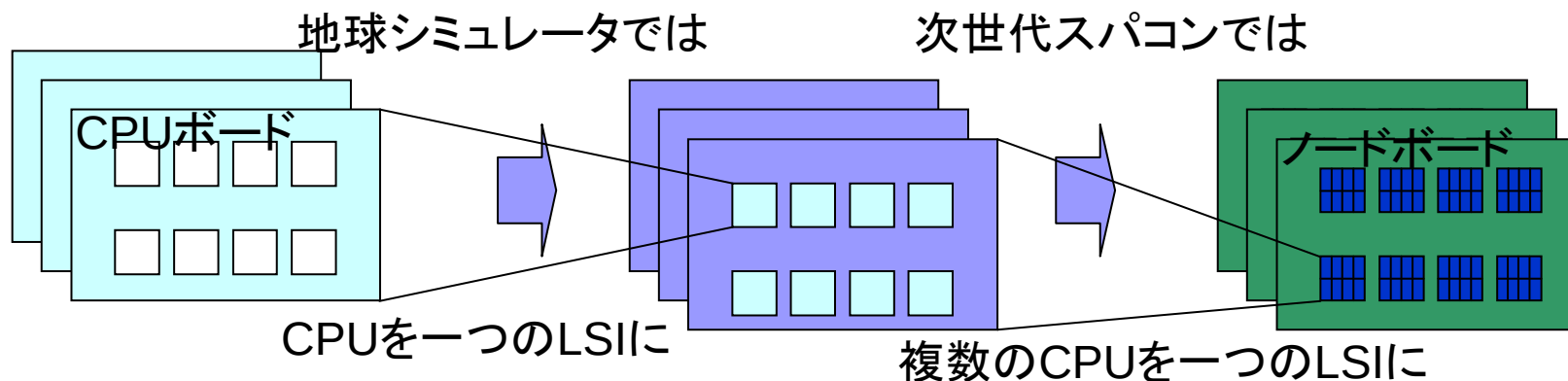
# 速く計算するのにコンピュータ側で考えること

- 一つのプロセッサの速度を上げる
  - 一秒間にできる演算周波数を上げる 電力の制約から限界
  - 同時に計算できる演算(積和演算・平方根など)と演算器数を増やす
- プロセッサの数を増やす

残された方法は演算器と  
プロセッサを増やす方向

次世代スーパーコンピュータでは

- 周波数を制限、省電力化
- 1つのCPUのLSIに複数のプロセッサを集積(マルチコアと呼ぶ)





## 過去の開発の実例

### ■ NEC SX

SX-5

製造プロセス:  $0.25\ \mu\text{m}$

集積度: 1500万Tr

動作周波数: 250MHz

ベクトル最大性能: 4 GFLOPS

SX-7

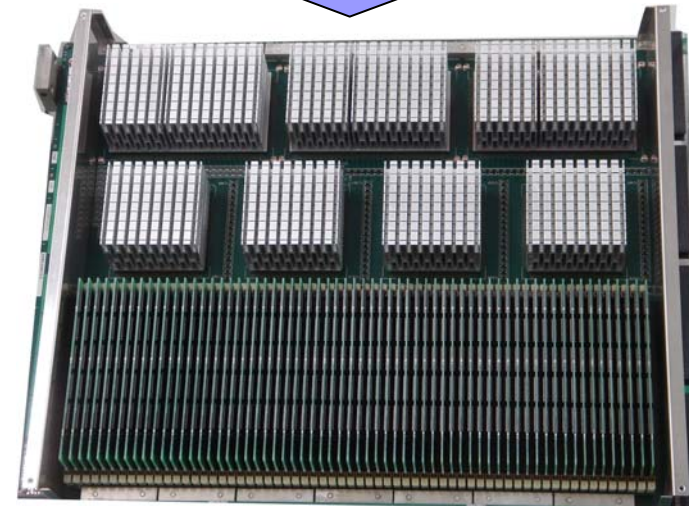
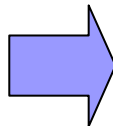
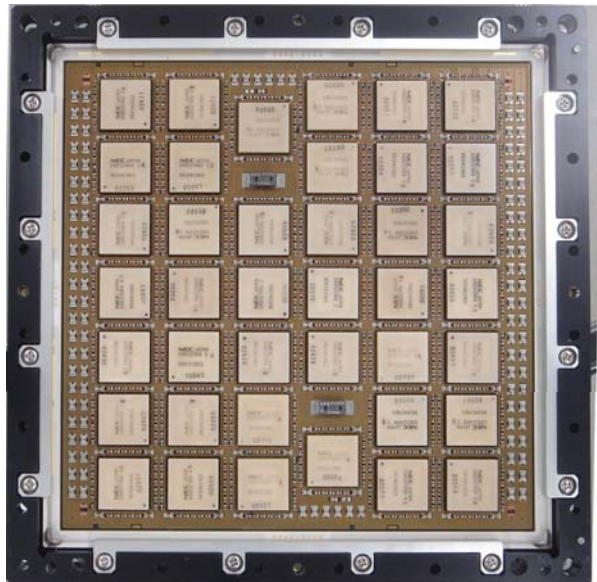
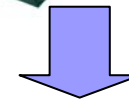
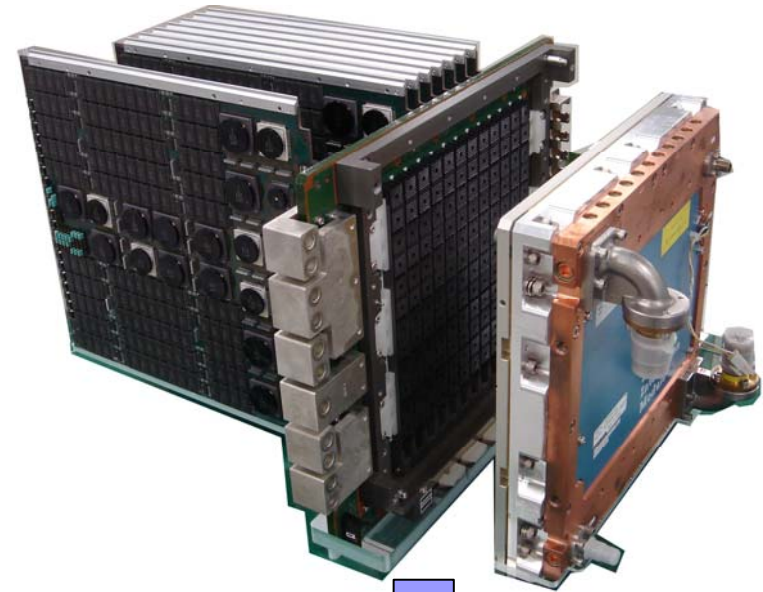
製造プロセス:  $0.15\ \mu\text{m}$

集積度: 6000万Tr

動作周波数: 552MHz

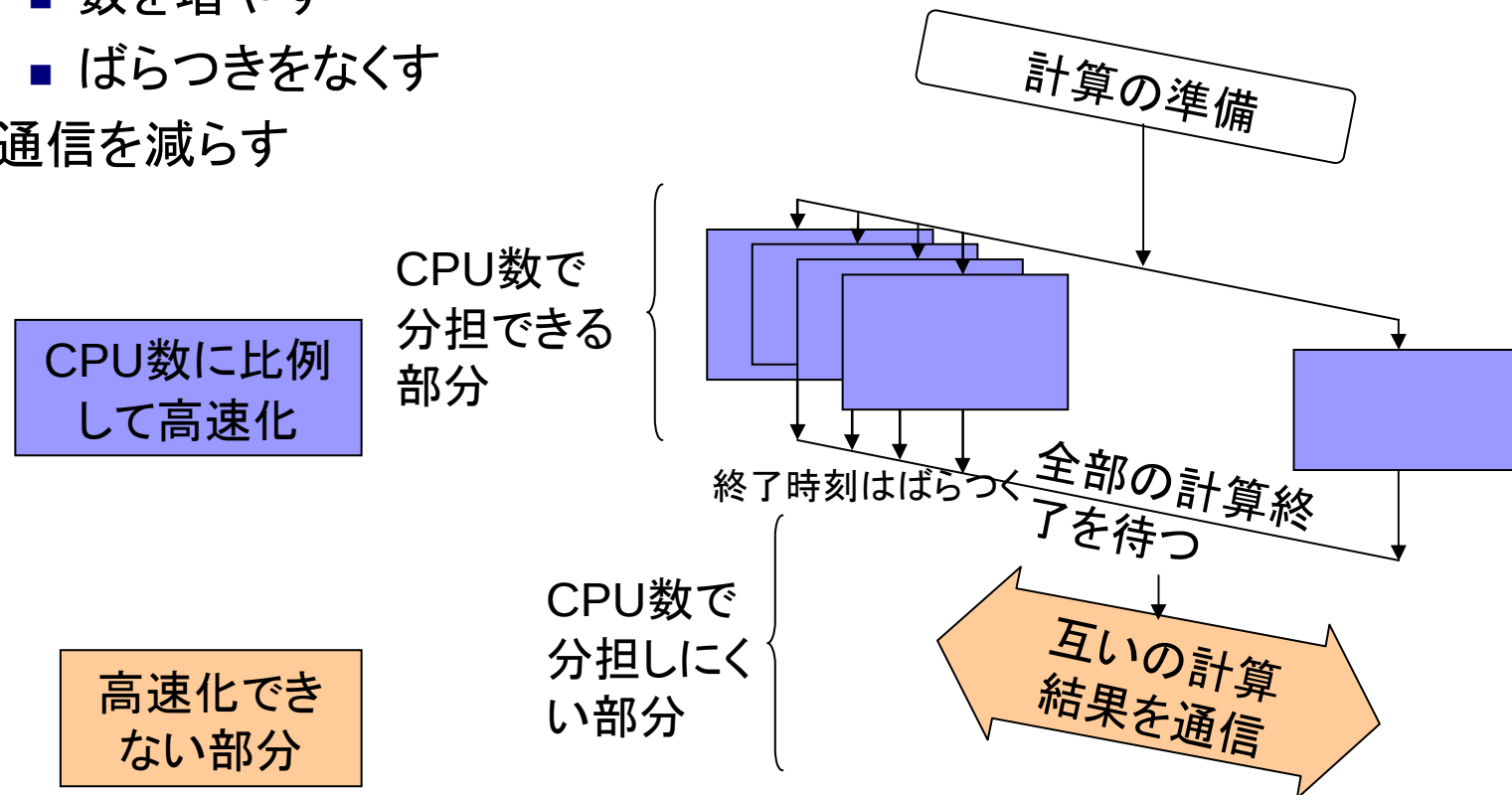
ベクトル最大性能: 8.83 GFLOPS

### ■ 富士通VPP



# 速く計算するのに使う側で考えること

- 計算を分析
  - 多くの計算を同時にできるように考える
    - 数を増やす
    - ばらつきをなくす
  - 通信を減らす



# アムダールの法則

## ■ 速度向上比

並列化できない部分の比率をsとすると

並列化できる部分は(1-s)

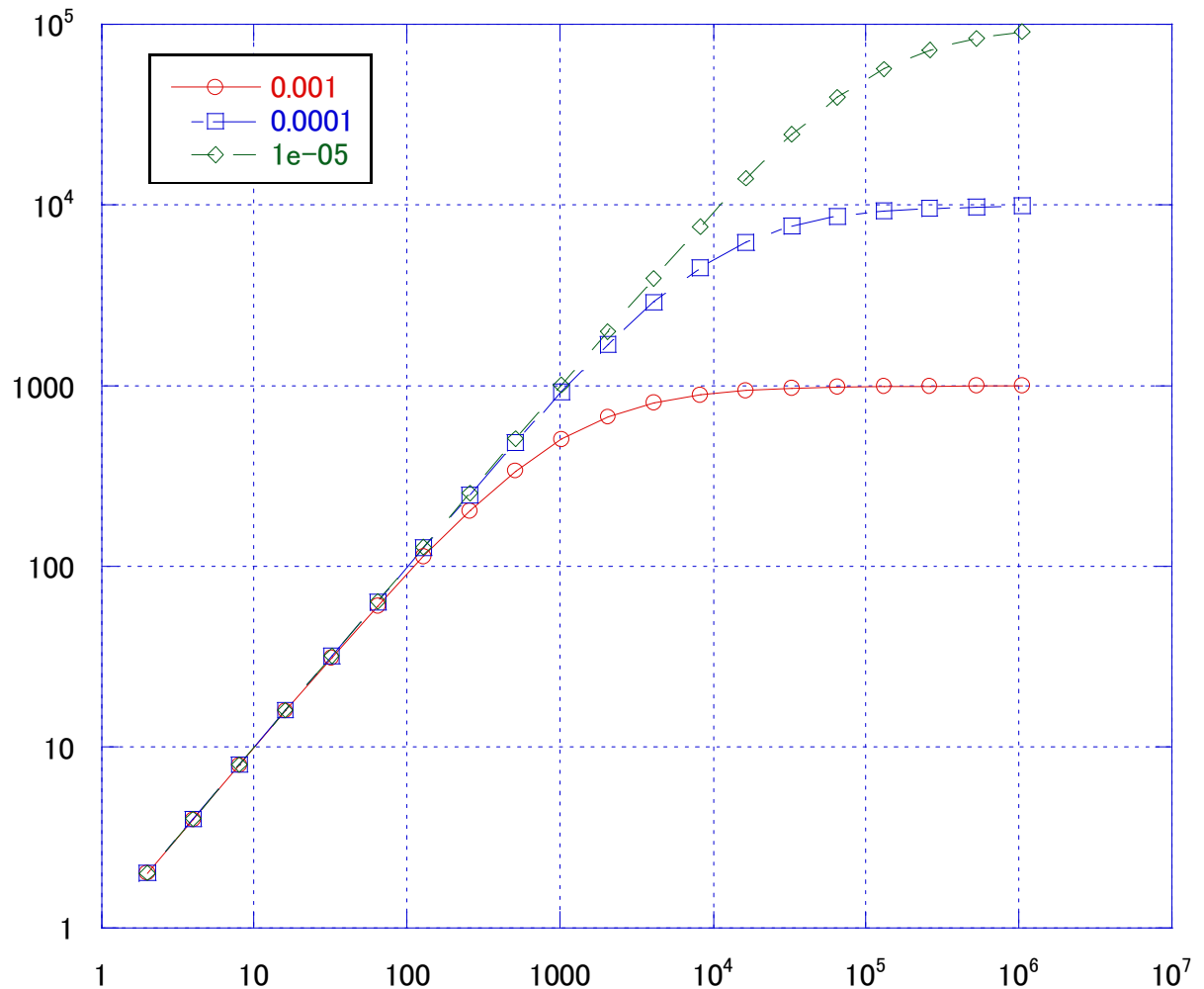
この部分はn個のプロセッサで1/nの時間で実行可能

並列化できない部分はいくつ使おうと同じ時間かかる

実行時間は $s + (1-s)/n$

この逆数が速度向上比

$$\frac{1}{s + \frac{1-s}{n}}$$



# シミュレーションによる科学研究

- 定量的な科学研究の対象は  
近年ますます複雑になってきた
  - 例: 生命
- 「理論」じゃだめ？
- 複雑な現象を理解するための一般的な「理論」の枠組みは少ない
  - 繰り込み群
  - 厳密解
- 一般的な「理論」の枠組みが適用できない問題がたくさんある
  - たとえば生物ではほとんど？
  - 物理学でも、現在最先端の問題の多くがそう



## シミュレーションの長所短所

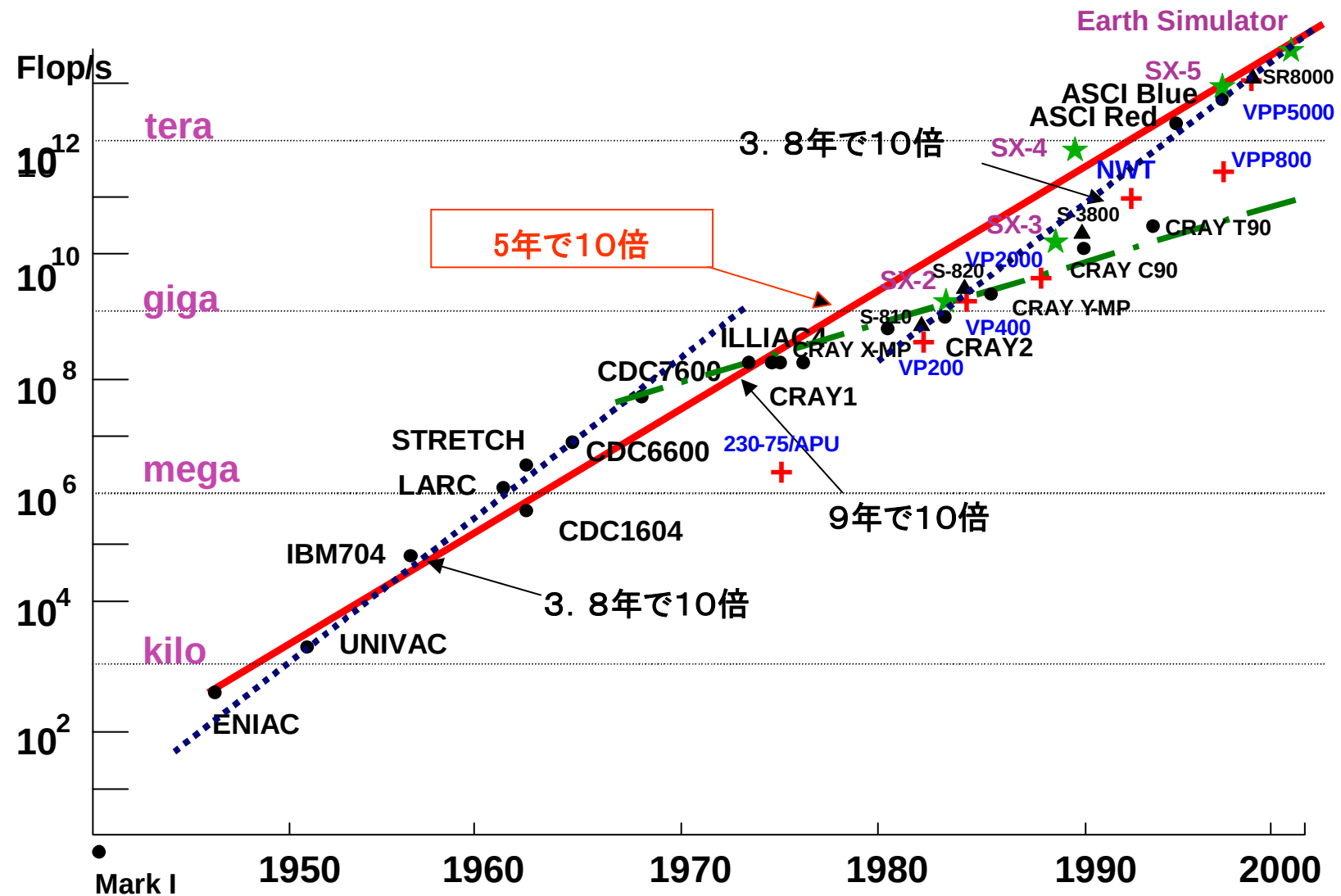
### ■ 長所

- 条件の設定が自由自在
  - 現実はまだ存在していないものを扱える
- 何を測るかも自由自在
  - 実験では見ることのできないものを見ることができる
- 再現性かなりある
- 少なくともあと15年ぐらいは、5年で10倍速くなる  
世界初の電子計算機ENIAC – 毎秒5000回の計算  
過去60年に2000億倍の高速化
- \* コストが下がり続ける少ない例

### ■ 短所: 遅い

- 近似を入れることが多い
- 系が小さい
- 時間短い

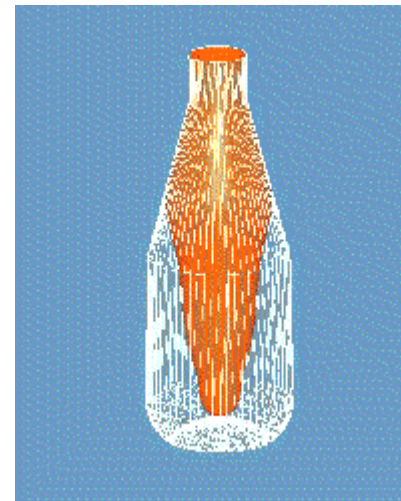
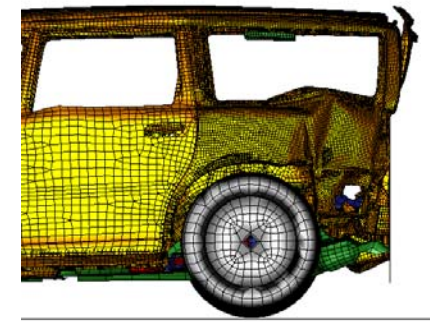
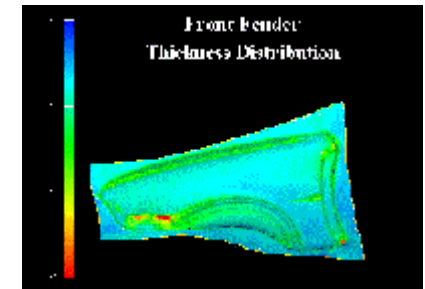
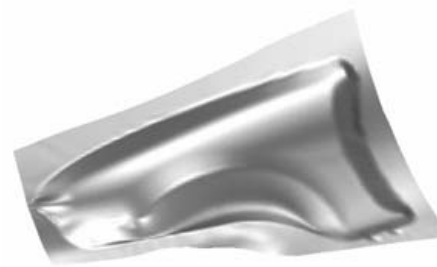
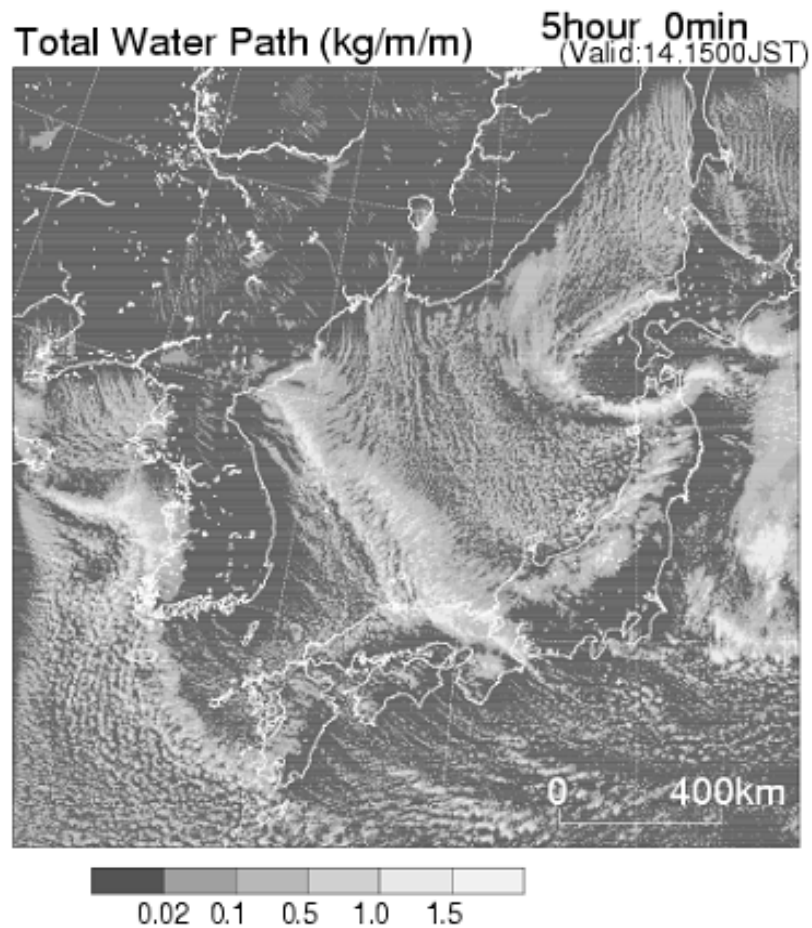
# スーパーコンピュータの計算速度のトレンド



Source:LSmarr

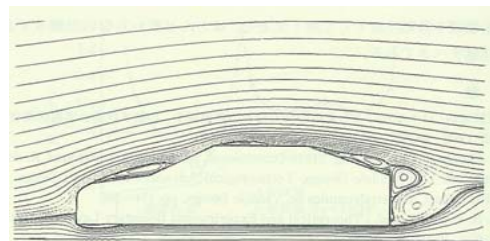
ASCI URL

## 身近なシミュレーションの例

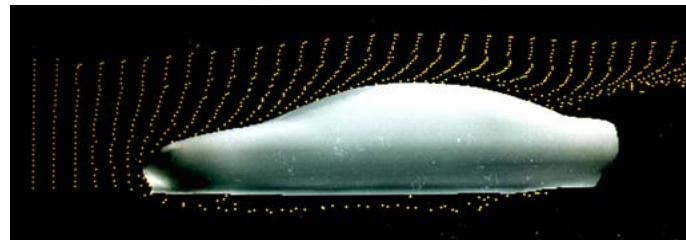
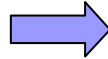


## 2.自動車空力シミュレーションに見る10年の進歩

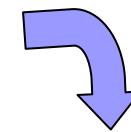
### ■ 流体の数値解析



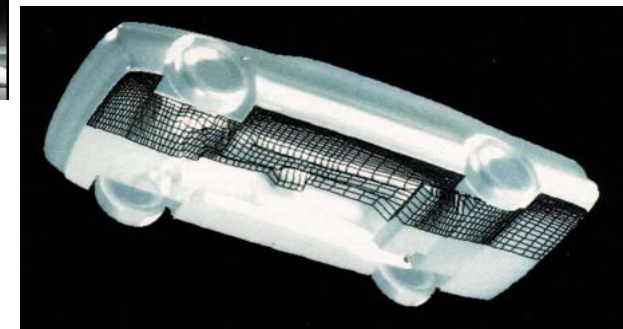
1985



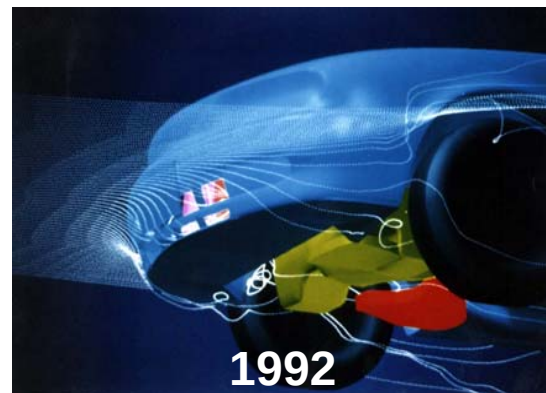
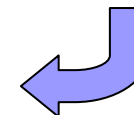
1987



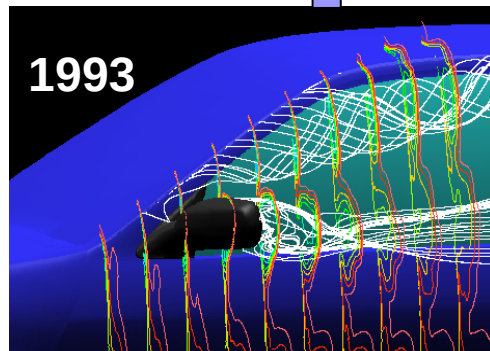
1988



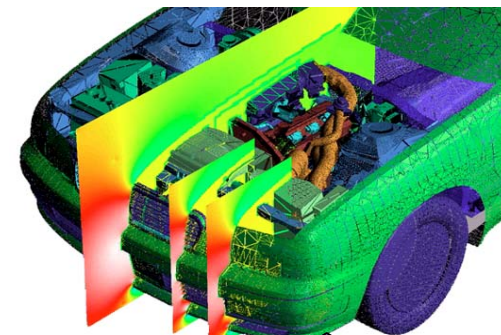
1990



1992



1993



1995





# 精度における改善

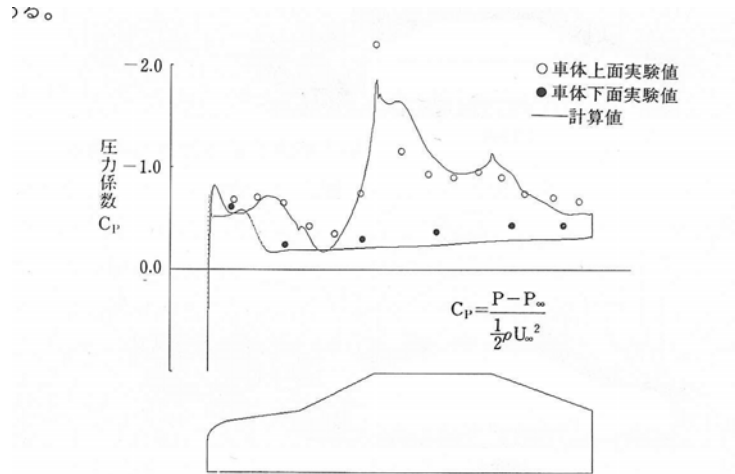
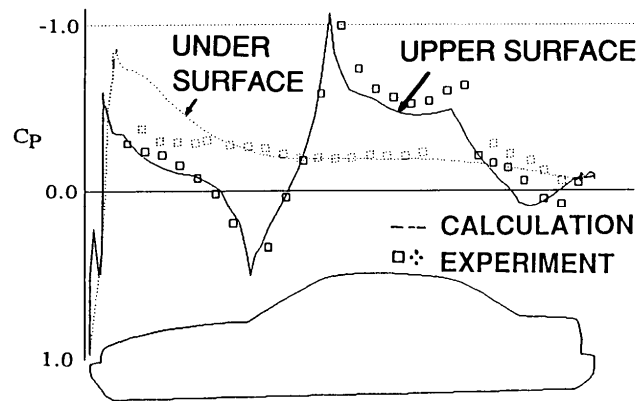
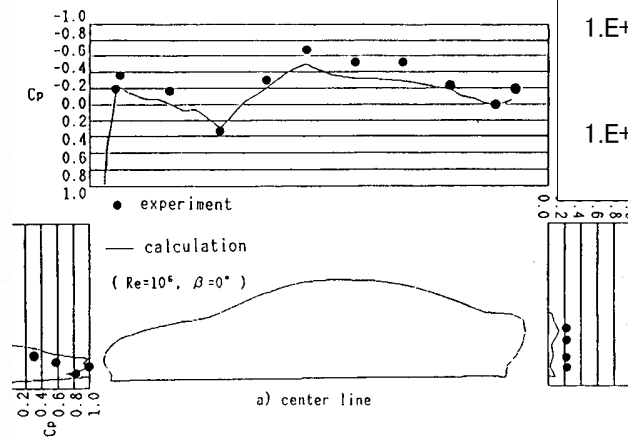


図 4.133 時間平均した車体表面の圧力分布と実験値

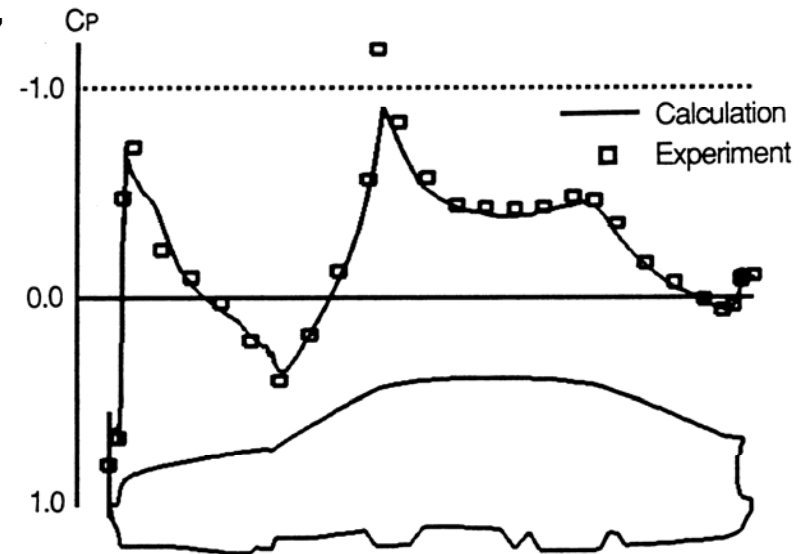
1985



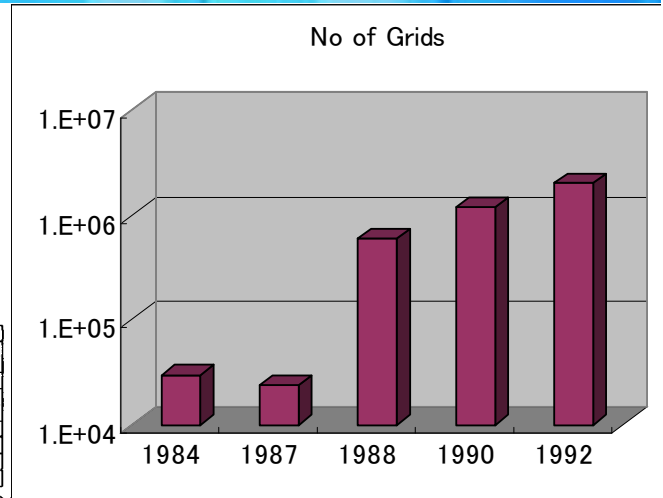
1990



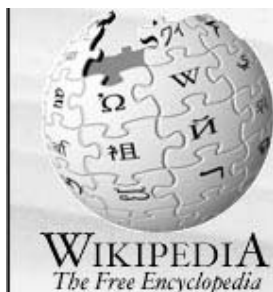
1987



1993







#### navigation

- [Main page](#)
- [Contents](#)
- [Featured content](#)
- [Current events](#)
- [Random article](#)

#### interaction

- [About Wikipedia](#)
- [Community portal](#)
- [Recent changes](#)
- [File upload wizard](#)
- [Contact Wikipedia](#)
- [Make a donation](#)
- [Help](#)

#### search

#### toolbox

- [What links here](#)
- [Related changes](#)
- [Upload file](#)
- [Special pages](#)
- [Printable version](#)

[article](#)[discussion](#)

## Gyrobball

From Wikipedia, the free encyclopedia

*For the gyroscopic toy Powerball, see [Powerball](#).*

A **gyrobball** is a kind of [fastball](#) or the physical phenomenon itself. The name is given to a unique [baseball pitch](#) used primarily by players in Japan.

**Contents** [[show](#)]

### Overview

[\[edit\]](#)

The gyrobball was developed by a Japanese scientist, [Ryutaro Himeno](#)([姫野竜太郎](#)), and a baseball instructor, Jonathan Paruk([手塚 一志](#)), who used computer simulations to create a new style of delivery intended to reduce stress on the pitcher. They published their work in a book, currently available only in Japan, whose title is roughly translated as, *The Secret of the Miracle Pitch*.

Tezuka got the idea in 1995, when he found an American toy in a Japanese store. The toy is called the X-Zylo Ultra, and its reliance on the gyroscopic effect allows it to fly more than 500 feet when thrown.<sup>[1]</sup>

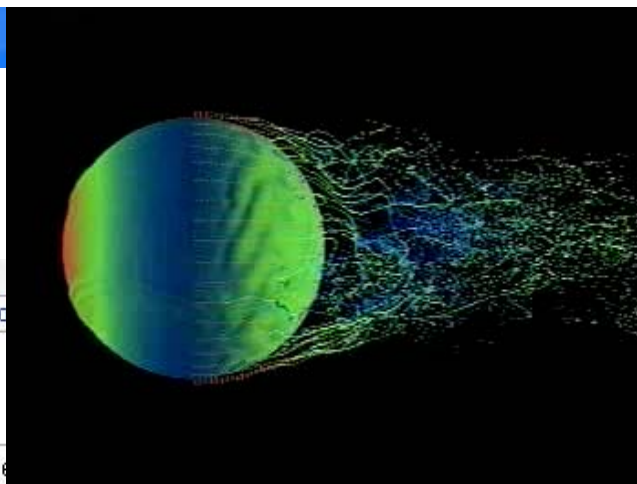
Amid many conflicting claims, Tezuka says the gyrobball has been misunderstood.



According to Himeno and Tezuka, a gyrobball is not a pitch. The pitcher's arm move inwards towards the body. The pitcher rotates his arm so that it moves away from the body and toward first base for a left-handed pitcher.

However, the technique to throwing the gyrobball is not simple. Tezuka Kazushi Tezuka is an instructor at the *Jyouto* baseball school. He says Tezuka, as he grabs his thigh, "is the most important part to do with the hands."<sup>[3]</sup>

The unusual method of delivery creates a bulge in the air in the direction of the throw, similar to the way an *A*



## 私自身の経験から

- 10年間の進歩は予想以上
- 夢見ることが進歩をもたらす
  
- 計算速度の向上に関してはハードの進歩だけでなくソフトウェアの進歩も大きい
- 理論的にできるということと現実的にできることのギャップは大きい
  - 単純な形から複雑な形、計算するソフトよりデータを取り扱うソフトの問題
  - 実際に設計で利用する場合の適用方法の工夫

## ■ 次の世代の夢の実現に貢献

# 「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト

総事業費（平成18年度～24年度）：1154億円  
 平成20年度予算額：145億円（77億円）  
 （平成19年度補正予算として42億円を計上）

世界最先端・最高性能の次世代スーパーコンピュータの開発・整備及び利用技術の開発・普及

概要：計算科学技術をさらに発展させるため、

長期的な国家戦略を持って取り組むべき重要技術（国家基幹技術）である

「次世代スーパーコンピュータ」を平成22年度の稼働（平成24年の完成）を目指して開発する。

今後とも我が国が科学技術・学術研究、産業、医・薬など広汎な分野で世界をリードし続けるべく、

- （1）世界最先端・最高性能の「次世代スーパーコンピュータ（注）」の開発・整備（注）10ペタFLOPS級
- （2）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開発・普及
- （3）上記（1）を中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育拠点（COE）の形成

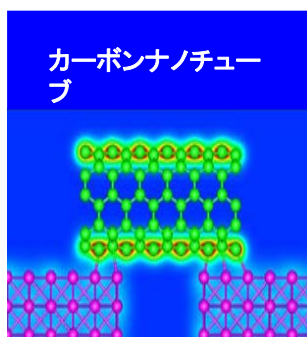
## 次世代スーパーコンピュータにより可能となる応用分野の例

ナノテクノロジー

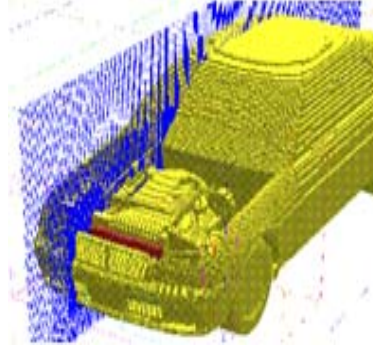
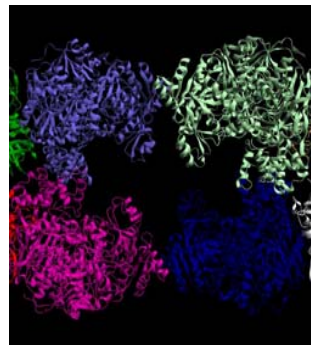
ライフサイエンス

ものづくり

高精度シミュレーション



分子科学研究所提供



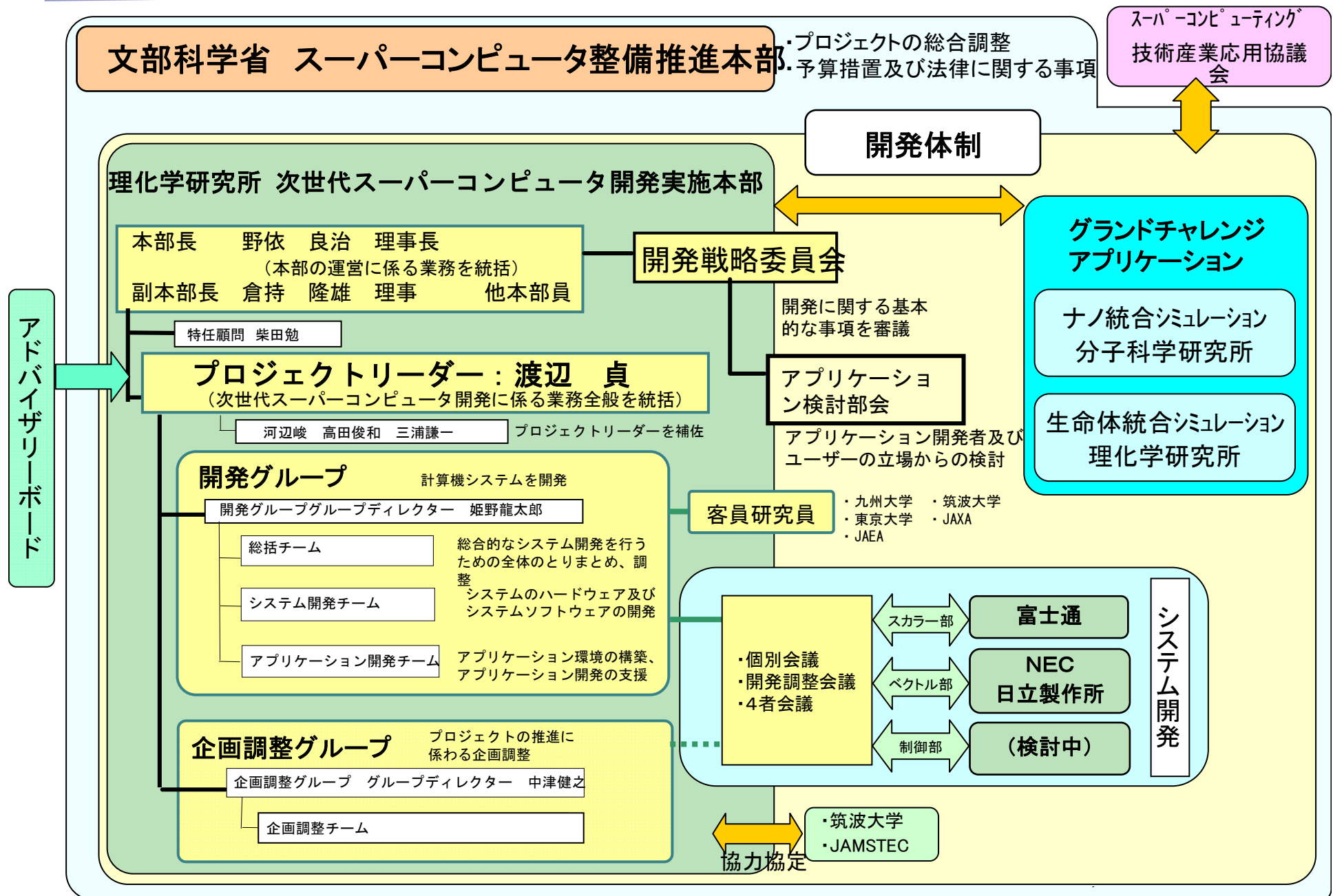
日産自動車（株）

新材料開発

画期的な新薬開発

より安全な自動車の開発

高精度かつ迅速なシミュレーションで、革新性の高い国際競争力のある技術を実現





# 全体スケジュール

|        |                                   | 平成18年度<br>(2006)              | 平成19年度<br>(2007) | 平成20年度<br>(2008) | 平成21年度<br>(2009) | 平成22年度<br>(2010) | 平成23年度<br>(2011) | 平成24年度<br>(2012) |
|--------|-----------------------------------|-------------------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
|        |                                   |                               |                  |                  |                  | 稼動▲              | 完成▲              |                  |
| システム   | 演算部<br>(スカラー部、ベクトル部)              | 概念設計 / 詳細設計 / 試作・評価 / 製造・据付調整 |                  |                  |                  |                  |                  |                  |
|        | 制御フロントエンド<br>(トータルシステム<br>ソフトウェア) |                               | 基本設計             | 詳細設計             | 製作・評価            |                  | 性能チューニング・高度化     |                  |
|        | 共有ファイル                            |                               | 基本設計             | 詳細設計             | 製造・据付調整          |                  |                  |                  |
| ソフトウェア | 次世代ナノ統合<br>シミュレーション               | 開発・製作・評価                      |                  |                  |                  |                  | 実証               |                  |
|        | 次世代生命体統合<br>シミュレーション              | 開発・製作・評価                      |                  |                  |                  |                  | 実証               |                  |
| 施設     | 計算機棟                              |                               | 設計               | 建設               |                  |                  |                  |                  |
|        | 研究棟                               |                               | 設計               | 建設               |                  |                  |                  |                  |
| 運用     |                                   | 方針・体制の検討                      |                  |                  |                  | 準備活動             | 運用               |                  |



# 次世代スーパーコンピュータシステムの概要

## 【世界最速を達成する最先端システム】

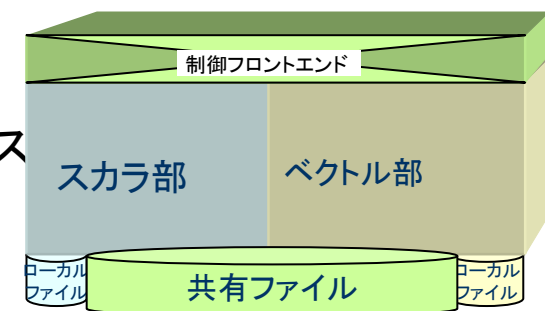
- Linpack性能10ペタFLOPSの達成のみならず、アプリケーションの実行においても世界最高性能
- 先端技術(45nm半導体プロセス,光インターコネクトなど)により画期的な省電力、省スペースを実現
- 理研とメーカー3社が共同で開発

## 【科学技術・産業の競争力を発展させる将来型システム】

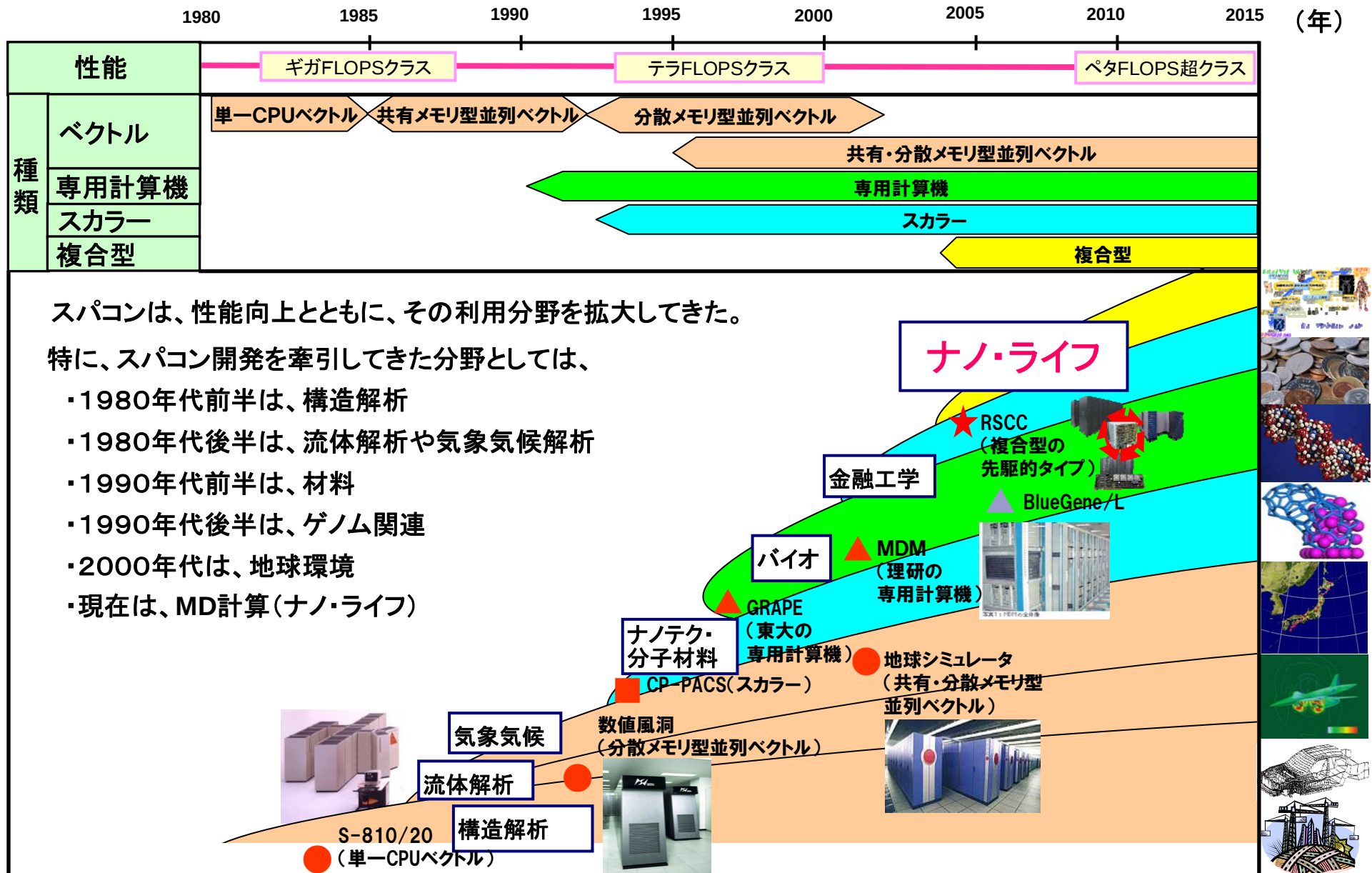
- 高機能スカラ部と革新的ベクトル部から構成される複合汎用システム
- 複雑系問題、多階層問題などシミュレーションの革新を先導する計算環境を提供
- 次々世代以降の開発と利用を見据え、我が国の国際競争力を牽引

## 【我が国の科学技術基盤となる複合汎用システム】

- 様々なアプリケーションを効率よく実行する複合汎用システム(⇒より多くのユーザーが利用可能)
- 全国の産学の研究者等の共用施設
- アプリケーション資産を最大限活用
- 大学等のスパコンセンターへの展開性大



# スパコン開発を牽引した利用分野の変遷



### 3. 微視的に見たタンパク質のシミュレーション ～分子動力学シミュレーション～

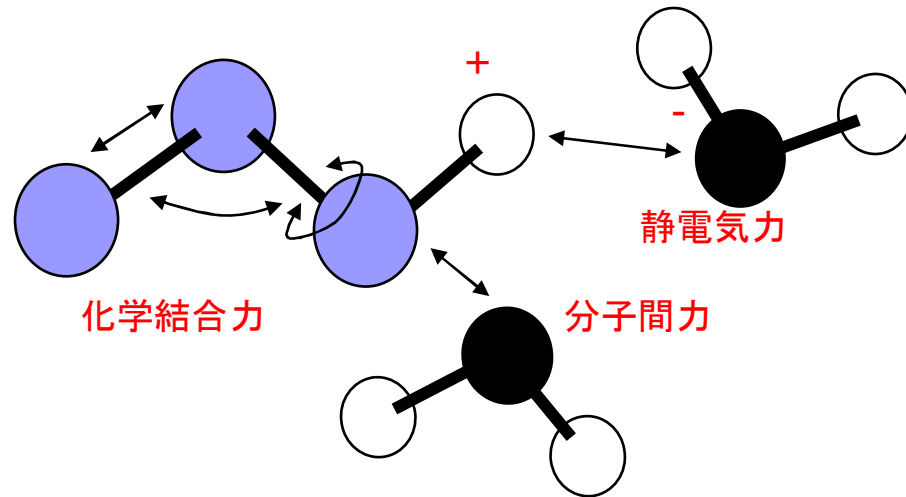
- 力の計算

$$\mathbf{F}_i = \sum_j \mathbf{f}_{ij}$$

- ニュートンの法則で  
原子の運動を計算

- 求めたい値を計算

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

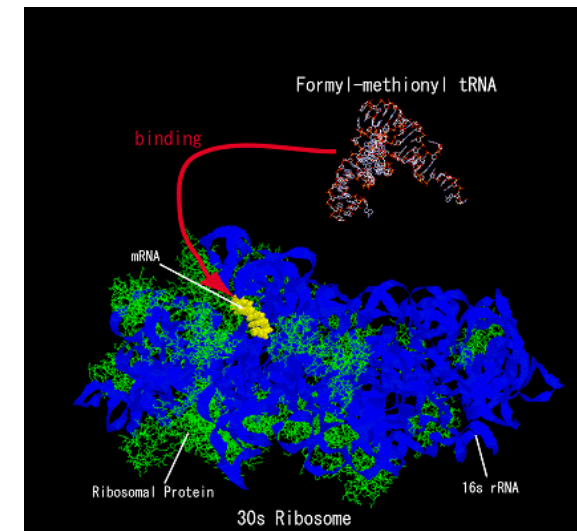
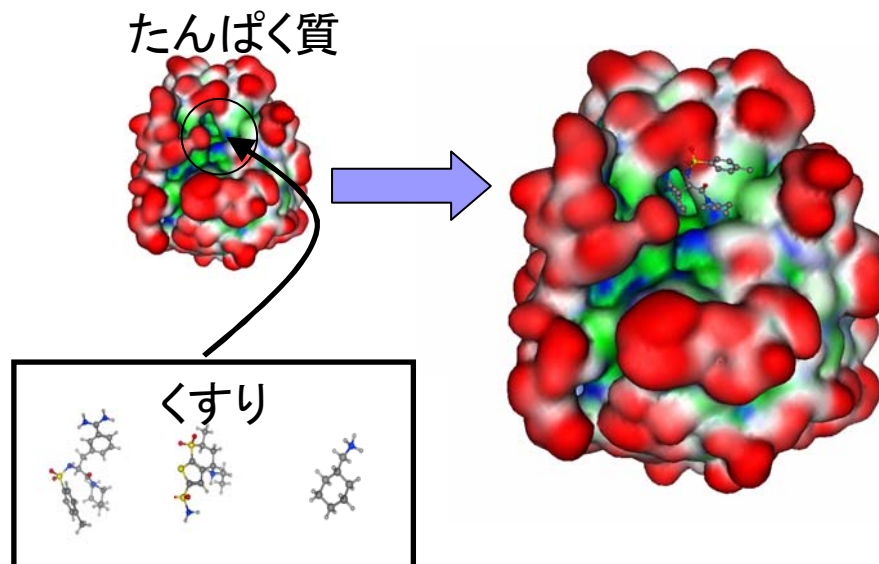


理研GSC泰地GDより

# タンパク質の分子シミュレーションは 何の役に立つか？

理研GSC泰地GDより

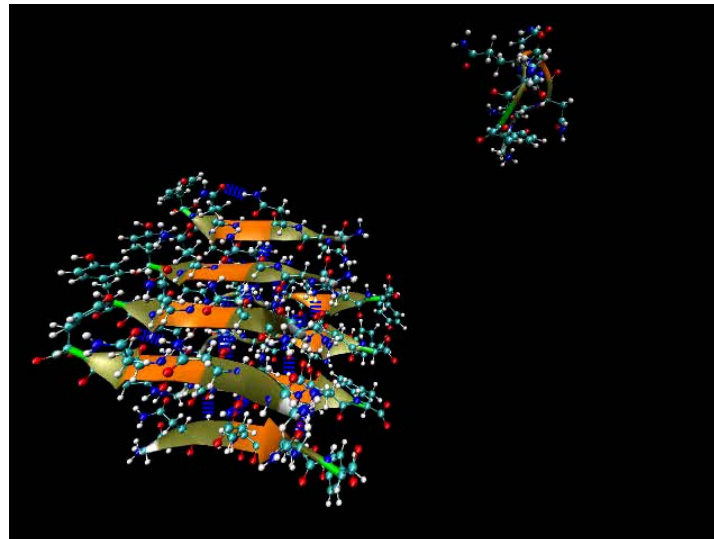
- 例えば、
  - 薬とタンパク質のくっつきやすさを予想する
  - タンパク質の動作のしくみを調べる



タンパク質工場 リボソーム

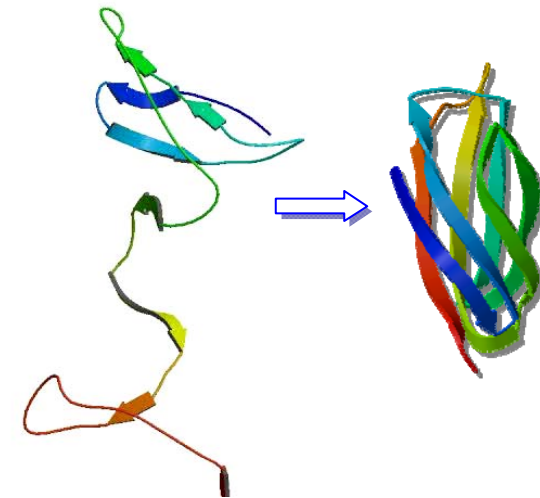
## 計算量

- タンパク質の原子の動く時間  
～100兆分の1秒
- 1000兆分の1秒きざみで、動きを計算
- 1秒に1きざみ計算できるとしても、  
1日に10億分の1秒分しか計算できない
- 生体内の反応はミリ秒～秒
- とても速い計算機が必要



GSC泰地G

## タンパク質の フォールディング

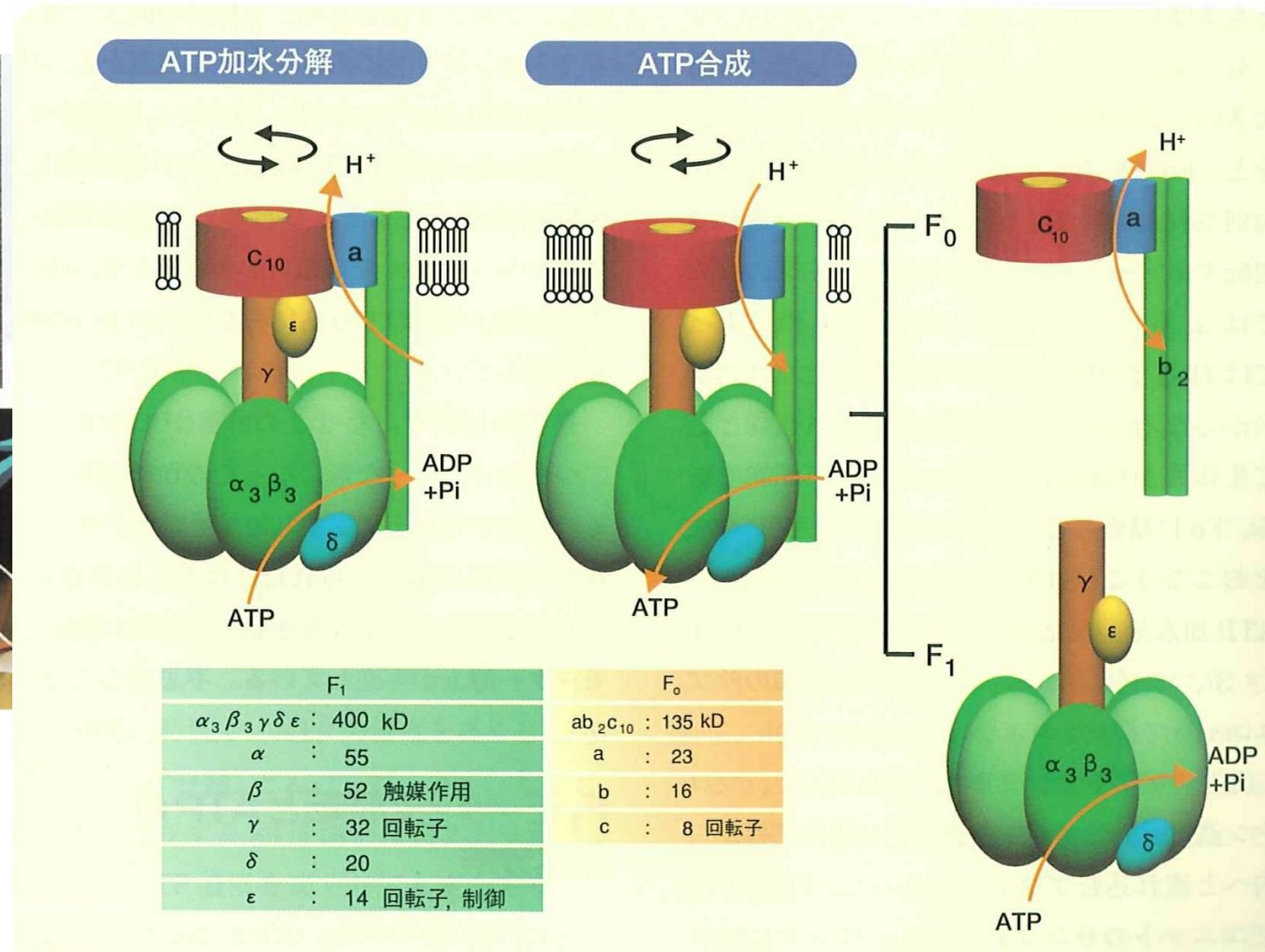
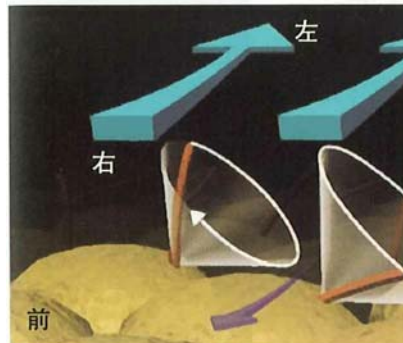
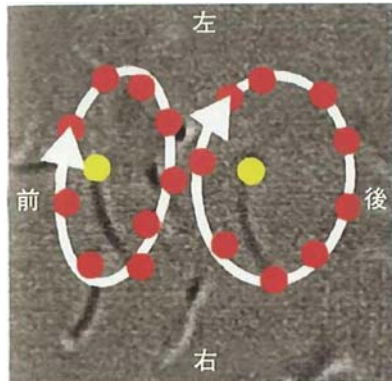


Fibronectin type II  
domain

高田彰二（京都大学）

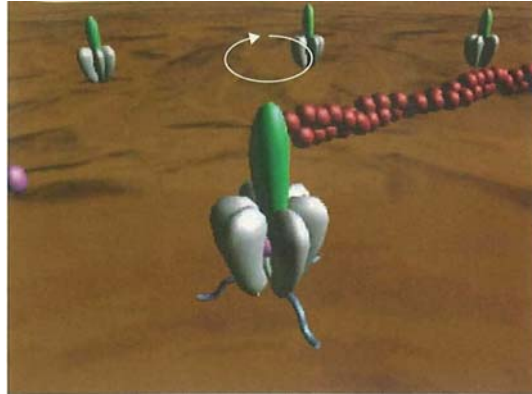


# 分子モーター

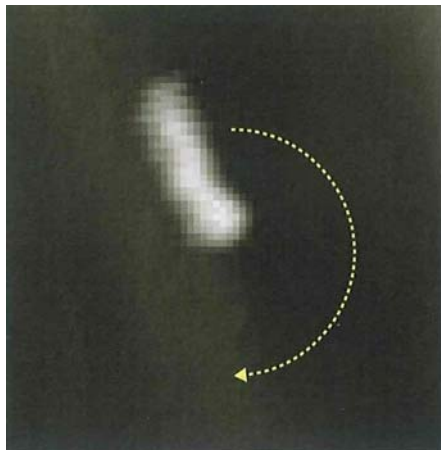


出展: バイオニクス2006年8月号  
生命を運ぶ分子モーター

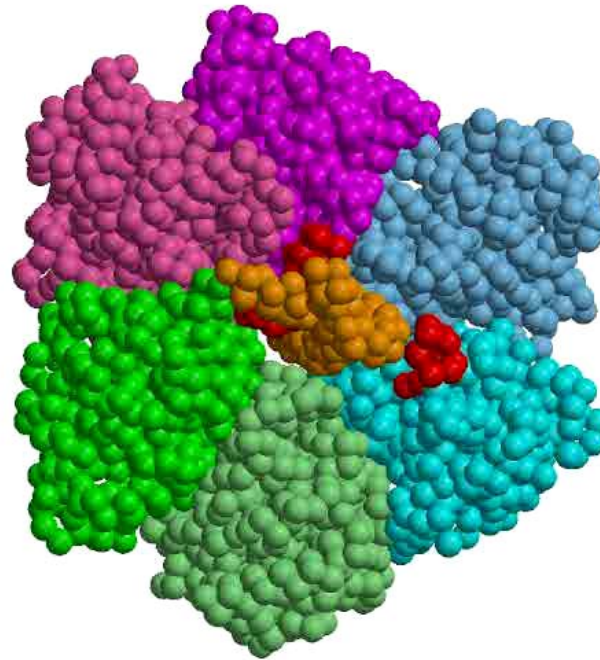
## 分子シミュレーションの現状



分子モータ

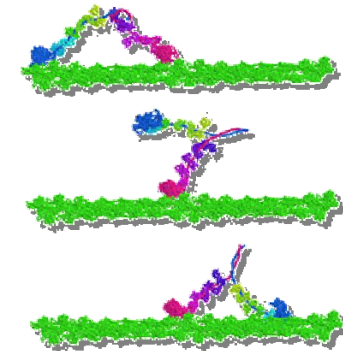


実験的観察



F1-ATPase : 回転モーター

## 超分子複合体の動態



ミオシンVのアクチンフィラメント上の2足歩行：線形モーター

高田彰二（京都大学）

## 脂質2重膜と核酸のモデル化

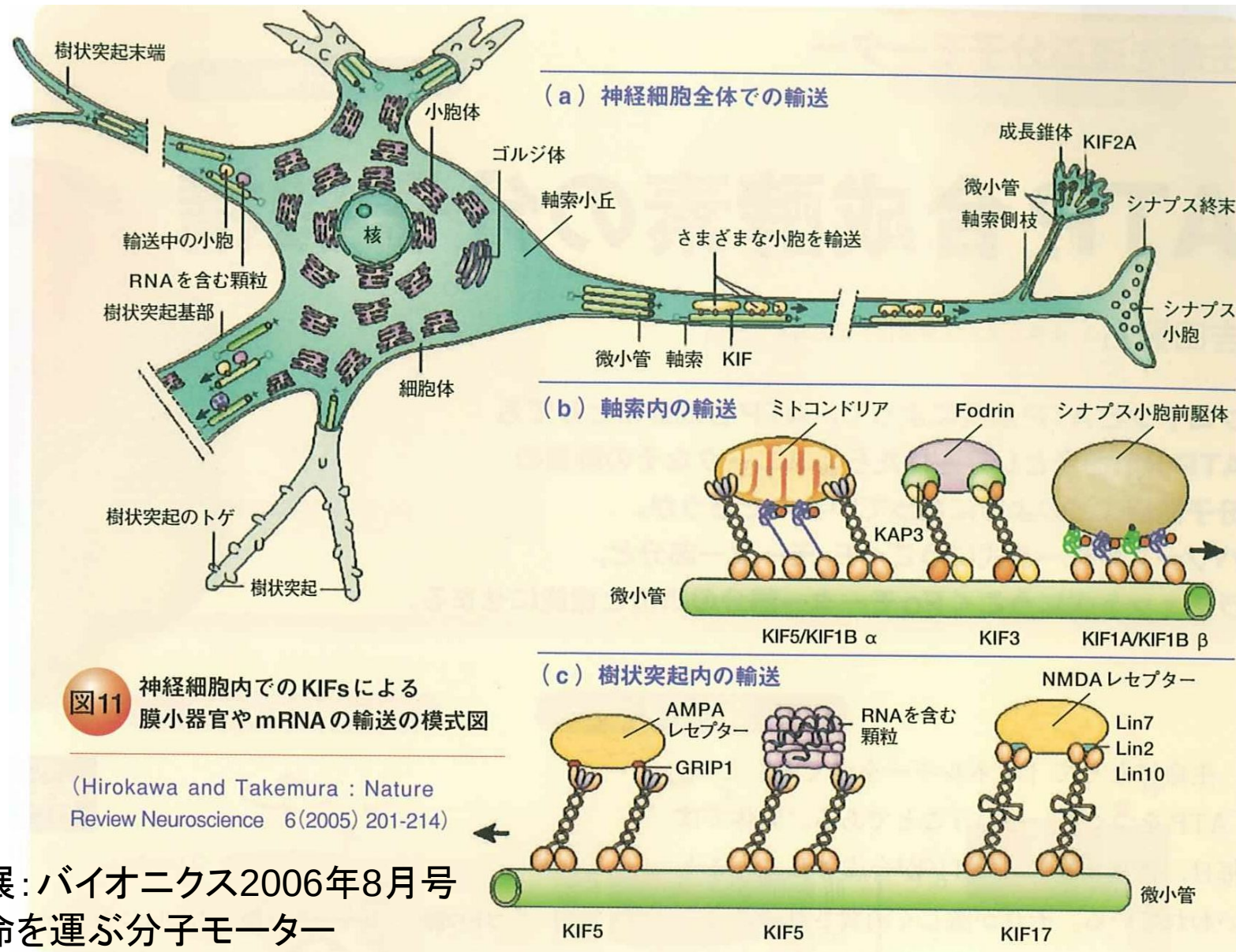


分子レベルから細胞の高次生命現象への接続

出展：バイオニクス2006年8月号  
生命を運ぶ分子モーター



# 分子モーターは鞭毛・筋肉だけではない



出展: バイオニクス2006年8月号  
生命を運ぶ分子モーター

# 現在の分子生物学的シミュレーション

- 量子化学計算
  - 原子数: 数千～万
    - 原子数の並列では、並列数が不足、計算アルゴリズムから工夫が必要
- 分子動力学
  - 原子数: 数十万まで可能
  - 動的変化の時間: マイクロ秒。
    - 原子数で並列化、並列数は十分、計算容量だけが問題
- 粗視化モデル
  - 原子数: 分子モーターの例で50万
  - 一回転の時間: 0.1秒

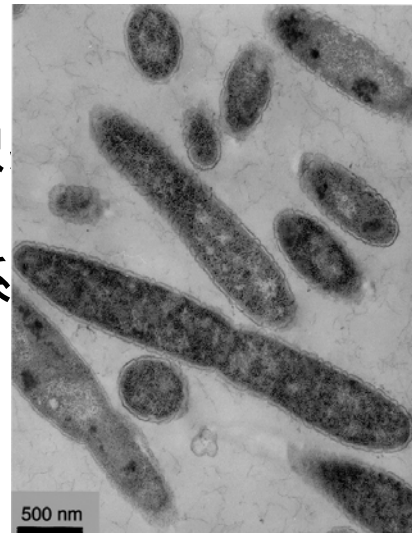
# 実験データ解析から計算機シミュレーションへ

## 1) 生体分子の**構造と機能** 蛋白質

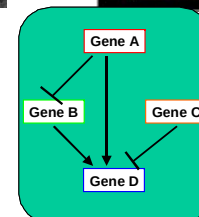
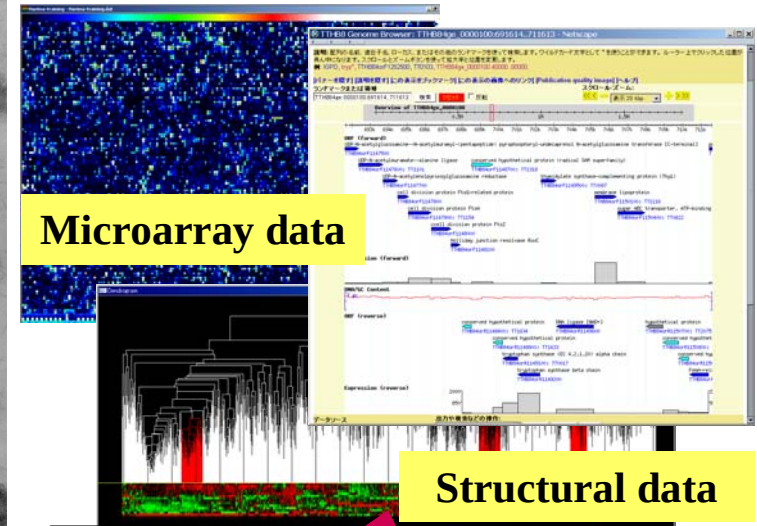
DNA複製系・転写系・翻訳  
DNA修復系  
アミノ酸・糖質・脂質代謝系  
ヌクレオチド代謝系  
エネルギー代謝系  
輸送系・細胞膜系  
シャペロン  
その他

核酸・アミノ酸・糖・脂質  
補酵素・金属イオン  
その他

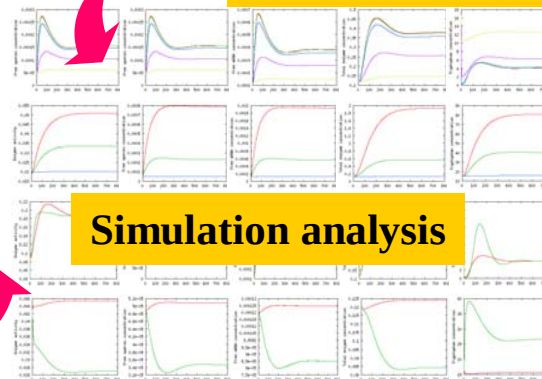
## 2) 各生体分子の**存在場所・濃度**, さらに, **それらの時間的変動** 3) 細胞の全シミュレーション



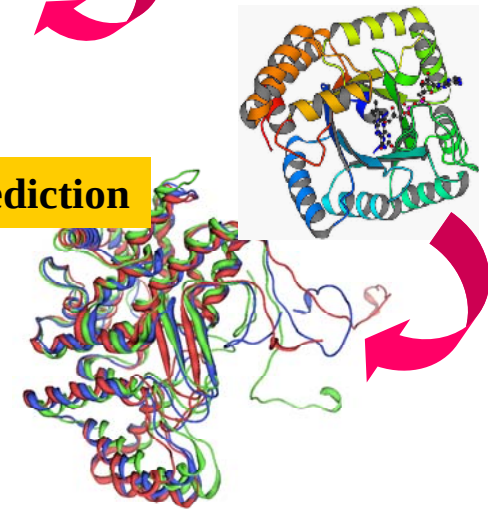
高度好熱菌



Gene network prediction



Metabolic pathway map



Molecular simulation

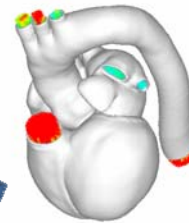


# 手術支援

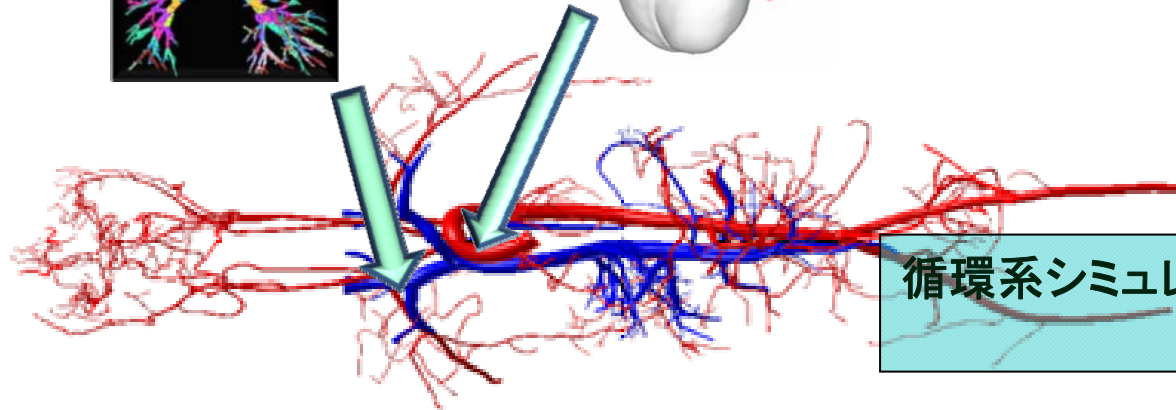
肺シミュレータ



心臓シミュレータ



循環系シミュレータ



全身ボクセルデータ

全身ボクセルデータ・全身力学モデル

超音波シミュレータ

病態のシミュレーション

低侵襲治療のシミュレーション

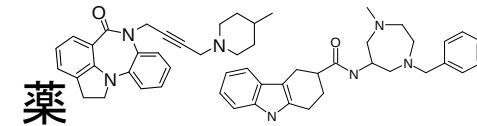
# ライフサイエンスとコンピュータ

ライフサイエンス上の課題

- 生命
- 進化
- 発生と分化
- 知性(脳の高次機能)
- などなど

手術

社会



コンピュータ・シミュレーション

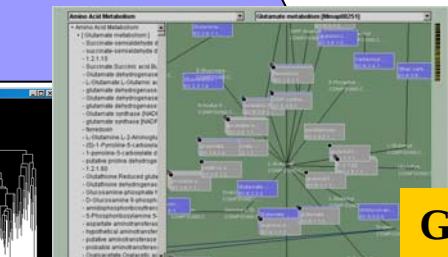
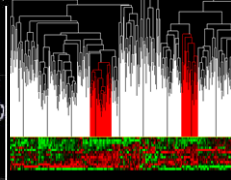
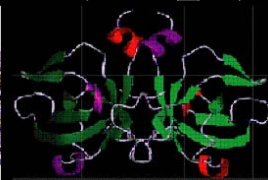
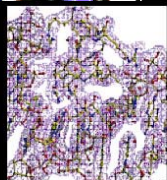
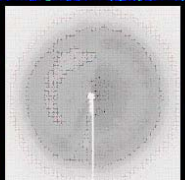
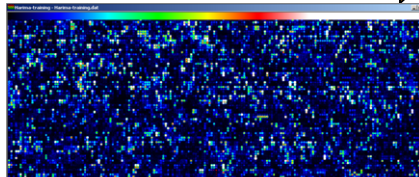
Simulation analysis

大量の  
データ処理

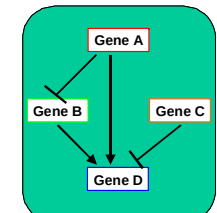
制御

再現

理解

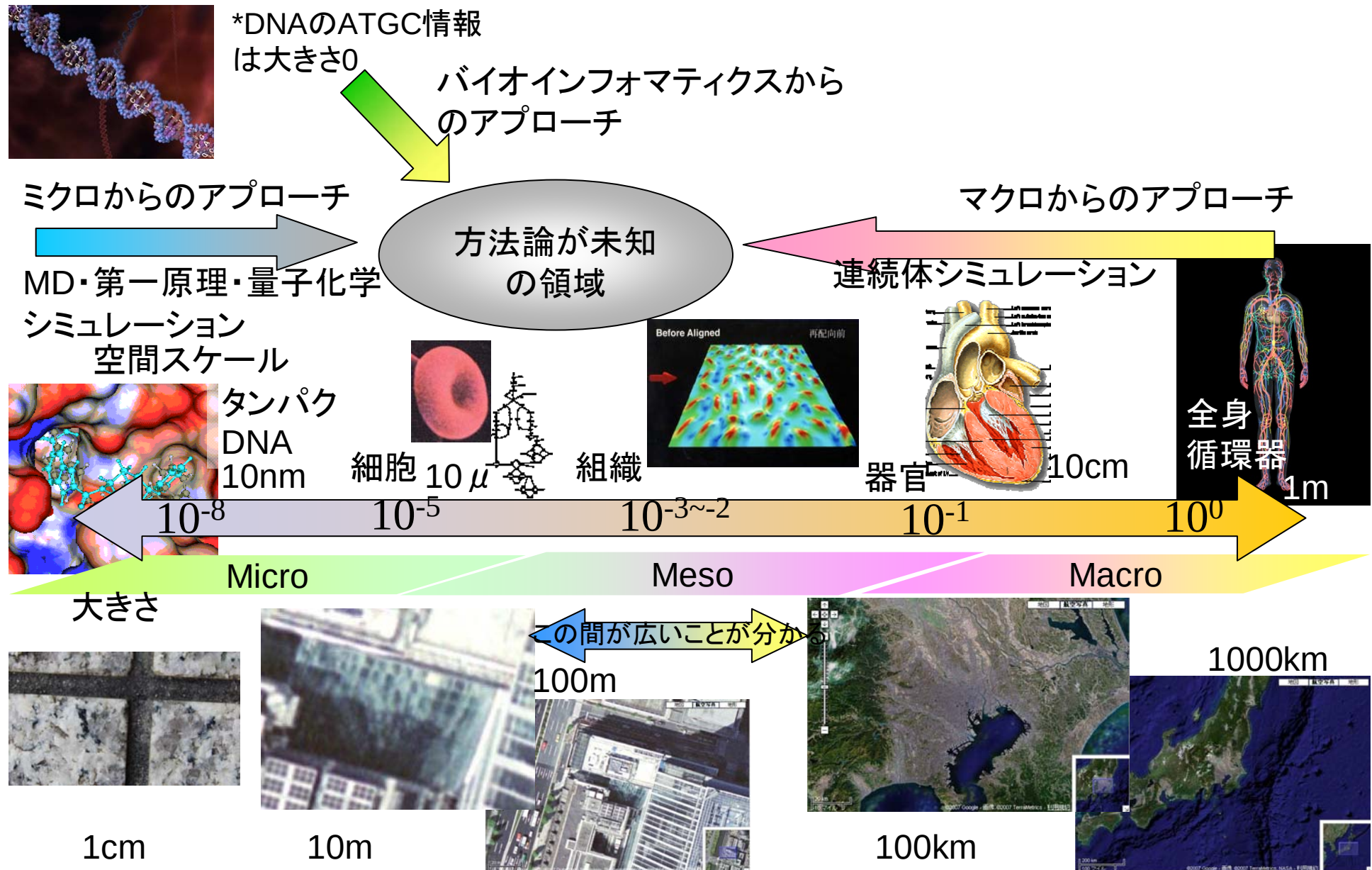


Metabolic pathway map



Gene network prediction

# 生命のシミュレーションのスケールの広がりと計算方法





# ライフサイエンスにおけるグランドチャレンジ

## 背景

### ライフサイエンスの研究手法

生命現象のトータルな理解に迫る  
新しいアプローチの必要性

実験に基づく実証的・疫学的アプローチだけでは、部分的・個別な解明するにとどまり、生命のトータルな理解が課題。

### 技術的制約

ライフサイエンスのシミュレーション  
に必要な計算量が不足

複雑な生命現象をシミュレーションで再現するためには、現状の計算量をはるかに凌ぐコンピュータが必要



次世代スパコンを用いてライフサイエンスに  
おける新しい研究分野の開拓に挑戦  
(グランドチャレンジ)

次世代生命体統合シミュレーション



## 目指す方向

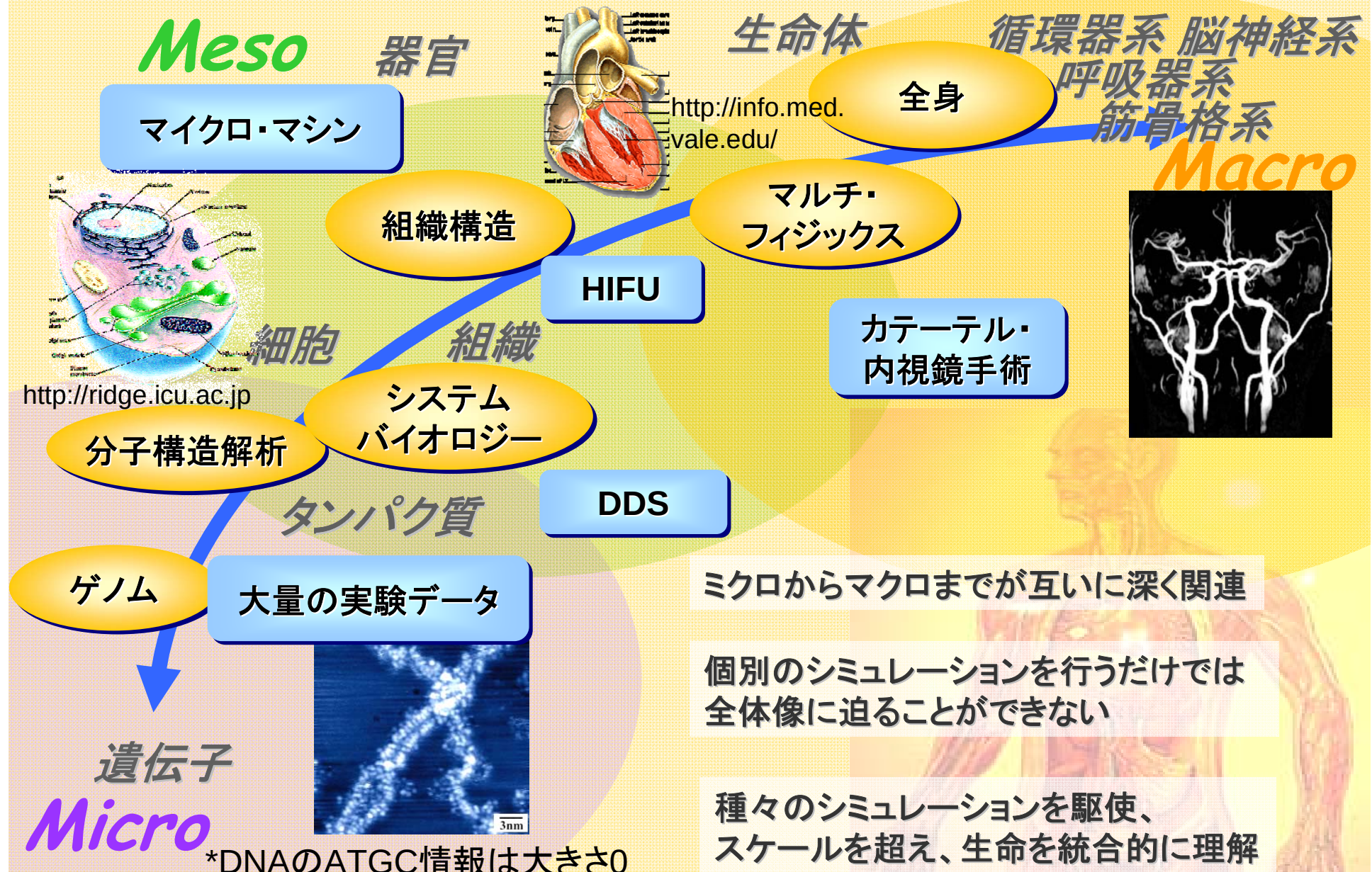
ペタスケールのシミュレーション技術によって、ライフサイエンスの諸課題解決にブレークスルーをもたらす新たな手段を提供し、計算科学により生命現象を統合的に理解・予測・解明する。

## 最終目標

- 生命科学に仮説－検証型の新たな研究手法を提供
- 生命プログラムの理解・再現・予測を実現
- 創薬・ヘルスサイエンスへの貢献、新規医療技術の実用化



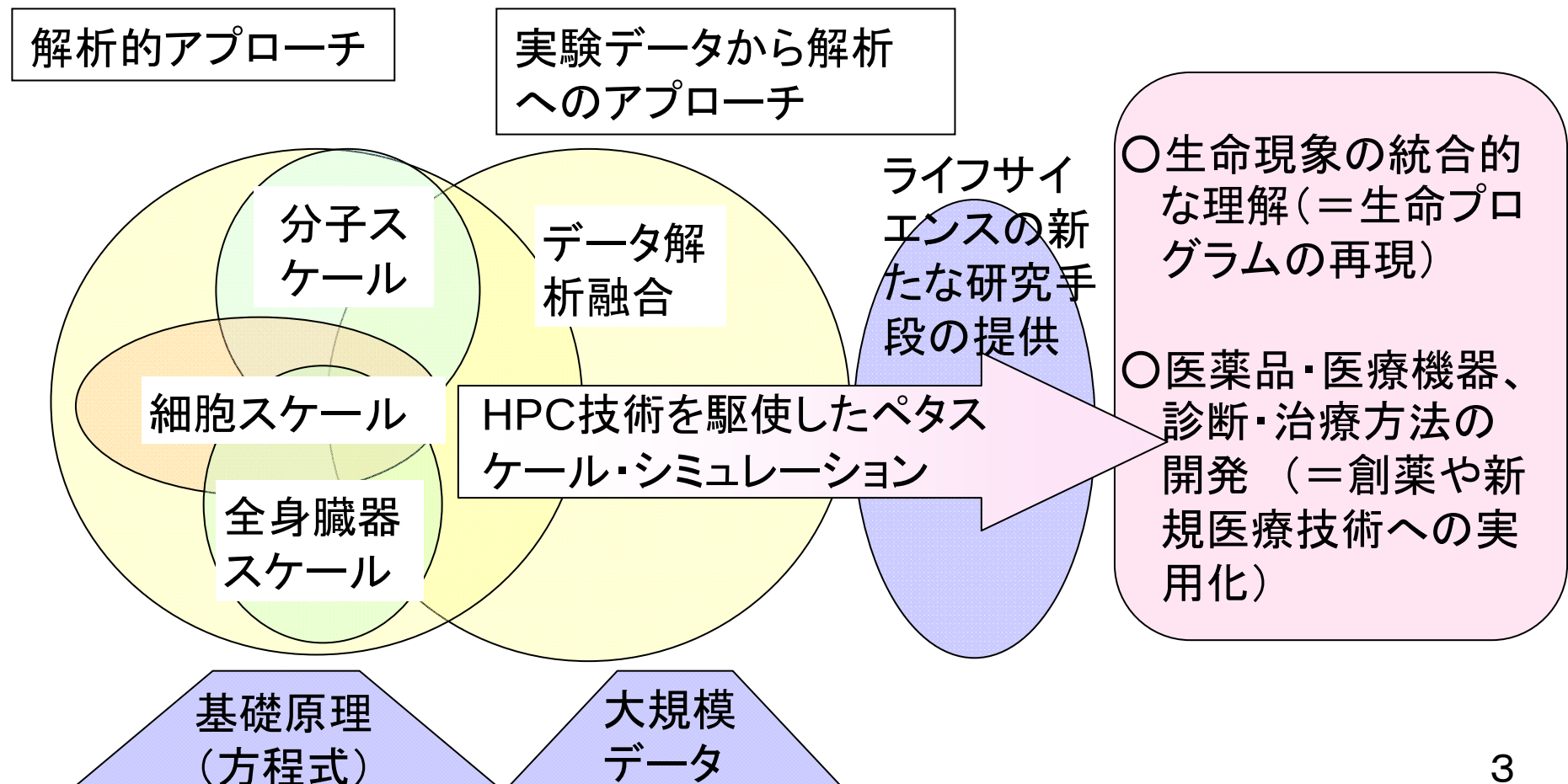
# 生命体統合シミュレーションの狙い





# 次世代生命体統合シミュレーション

## 研究開発の概要と達成目標

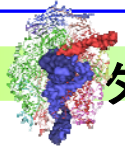


# 研究開発項目の互いの関連

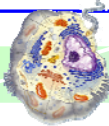
生命プログラムの再現・理解・予測

人体シミュレーターによるヘルスサイエンスへの貢献

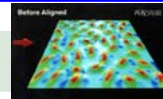
生体分子



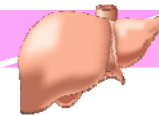
タンパク質



細胞



組織



器官



人体

分子スケール  
研究開発

細胞スケール  
研究開発

臓器全身スケール  
研究開発

ターゲット  
分子の推定

細胞膜上の生体高分子  
エネルギー代謝系の電子移動

代謝・循環システムの動的  
理解と疾患制御

薬剤設計に関  
わる計算科学  
手法の提供

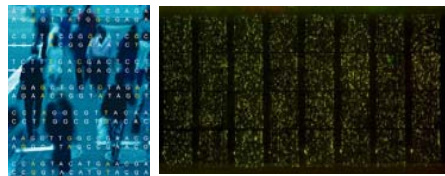
代謝経路  
の推定

データ同化による  
モデルの精緻化  
創薬・薬剤  
副作用の予測

成人病の病態  
制御方法の開発

診断技術・  
治療技術の確立

データ解析融合  
研究開発



創薬ターゲット  
探索および個人  
差を考慮した医  
療のための基盤  
情報技術の創出

基盤ソフトウェア開発  
高度化

産学連携

次世代スーパーコンピュータの利活用  
に向けたアプリケーションの整備

生命システムに対する予測と発見の  
基盤情報技術の構築

医療応用、産業応用に向けた  
アプリケーションの開発

# 分子スケールに関する研究

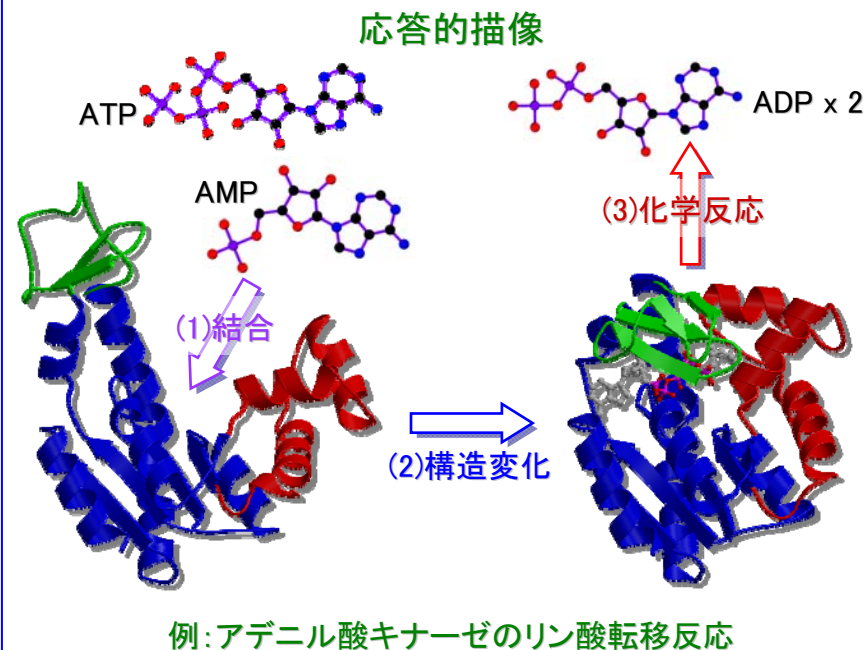
## 目的

生命活動の分子基盤であるタンパク質などの生体高分子が生体内で担っている機能をシミュレーションによって捉えることにより分子生物学・細胞生物学の課題を解明し、さらには新たな薬剤開発につなげることを目的とする

## 観点 生物機能をどうシミュレーションで捉えるか？

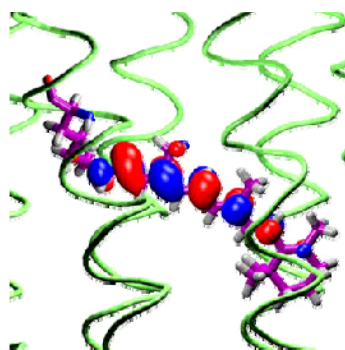
タンパク質における生物機能の応答的描像

「基質結合、環境因子の変化などの外部からの摂動に対する応答として開始される一連の構造変化とそれに伴う化学反応」



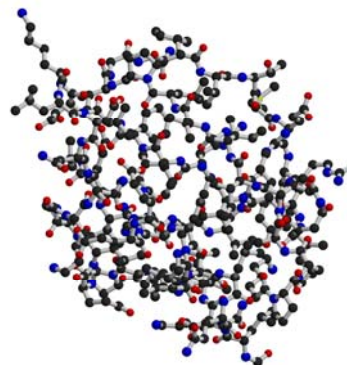
## 手段 分子スケール研究は以下の3つのスケールの計算を総合して行う

### 量子化学計算



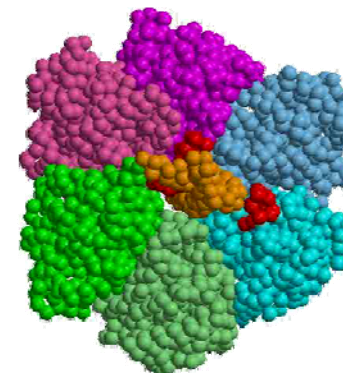
第一原理計算

### 分子動力学計算



分子力場計算

### 粗視化モデル計算



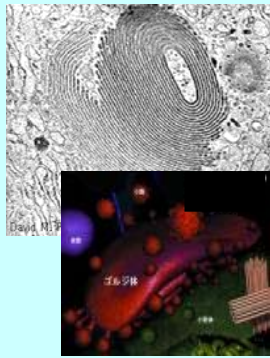
1粒子 = 1アミノ酸などの粗視化  
データベースから得た経験的ポテンシャル

より小さく  
より短時間  
より厳密

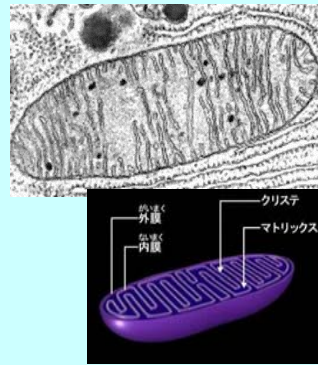
より大きく  
より長時間  
より近似的



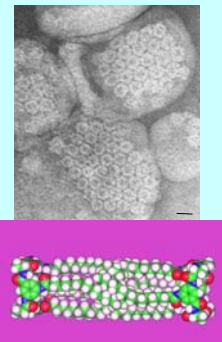
# 細胞の統一表現空間: Live Cell Model



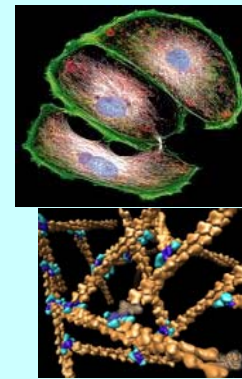
ゴルジ体



ミトコンドリア



膜孔



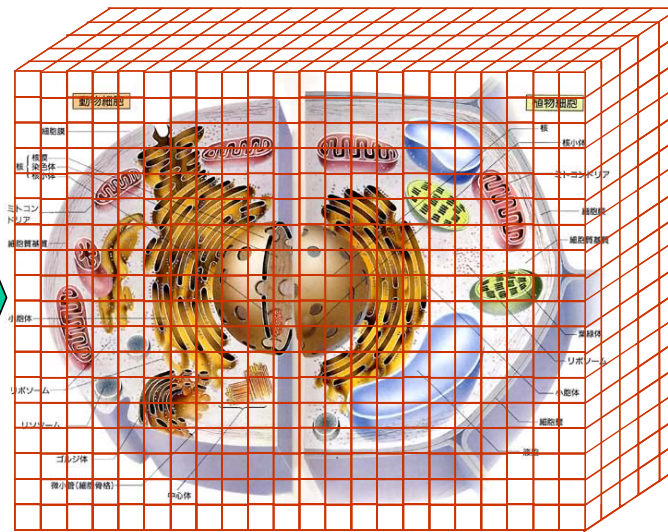
アクチン

オルガネラ、細胞の  
構造情報の取得

構造モデルの構築

## 細胞情報の収集

細胞に関する既知の  
科学情報の数値化  
及び網羅的定量  
データの収集と  
統一形式による記述



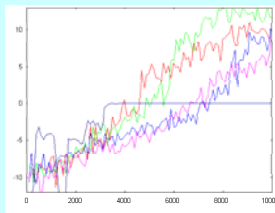
数値細胞モデル

## Live Cell Model

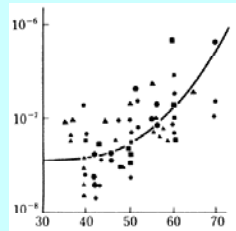
癌化細胞: 理化学研究所

生きている細胞の統合表現

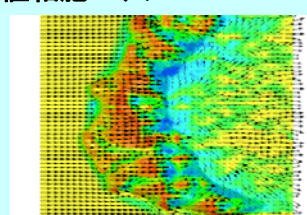
- 細胞生物学の統合理解のための情報基盤ツール
- 生命現象の数値モデル
- オルガネラシミュレーション
- 細胞シミュレーション



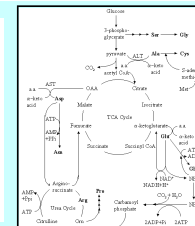
物質の移動速度



拡散係数



オルガネラ速度ベクトル



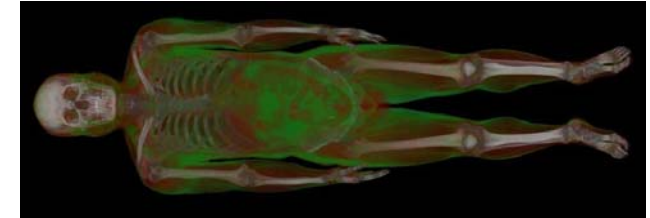
代謝経路

生物学者からの  
物質の移動、輸送、  
化学合成の数値化

# 臓器全身スケールシミュレーション

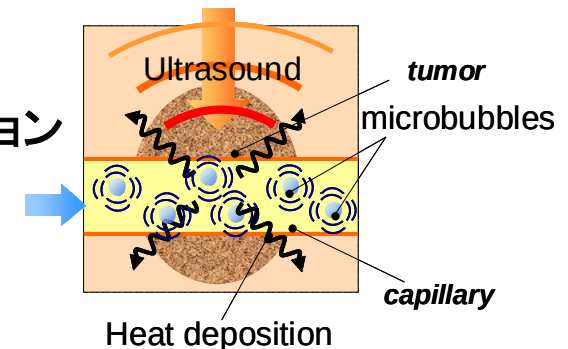
## (1) 治療時の姿勢における体内の臓器位置に関する情報の獲得

- ・これまでの成果: MRI, CTのデータを基にしたボクセル法による全身データの構築
- ・今後の予定: 患者の姿勢の変化による臓器位置の変化を力学的に解析し, その位置を予測するツールの開発



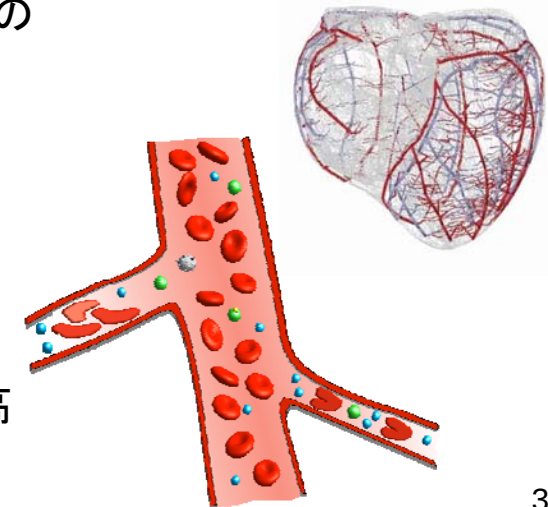
## (2) 低侵襲治療のための体内における超音波伝播のシミュレーション

- ・これまでの成果: 異なる媒質中を伝播する超音波のシミュレーション, HIFU焦点領域におけるマイクロバブルの挙動解析(シミュレーション&検証実験)
- ・今後の予定: リアルタイム検診・治療を目指した超音波シミュレータの開発



## (3) 心臓から毛細血管まで血液循環器系の総合シミュレーション

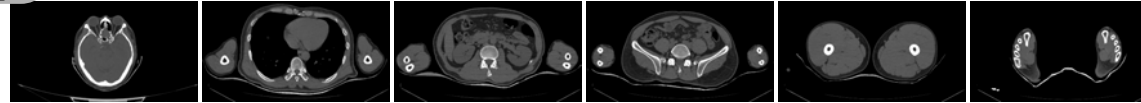
- ・これまでの成果: 心臓・脳血管・毛細血管等各部位におけるシミュレータの開発と種々の疾患の原因解明
- ・今後の予定: 原因解明および治療支援のための各シミュレータの高精度化および統合による高度化



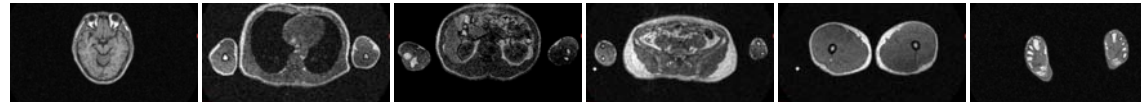
# 3-D 人体ボクセルデータの構築

## 断層画像

CT



MRI



※CT撮影条件

分解能: 全身1mm voxel

データサイズ: 490 × 265 × 1687 voxel

※MRI撮影条件

分解能 T1,T2撮影条件:

(x,y,z) = (1mm × 1mm × 2mm)

データサイズ: 490 × 265 × 870 voxel

MRA撮影条件:

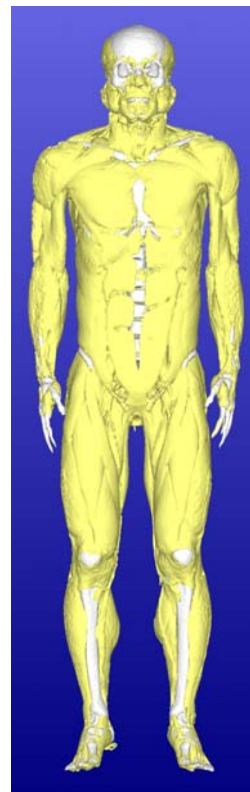
分解能(x,y,z) = (1mm × 1mm × 3mm)

データサイズ: 490 × 265 × 578 voxel

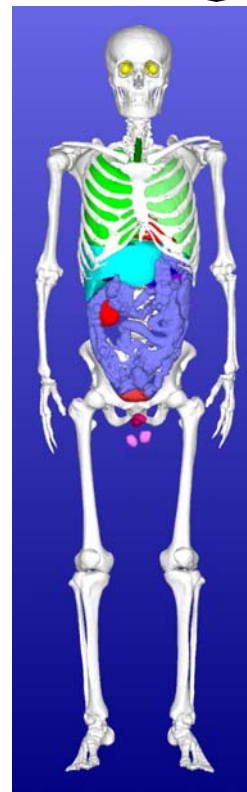
断層画像から3次元ボクセルデータへ



全身



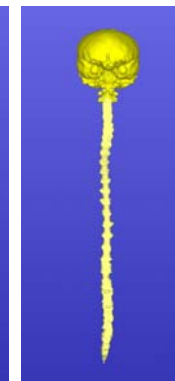
筋骨格系



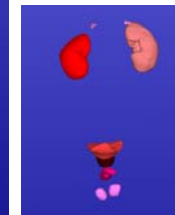
骨+内臓



血管等



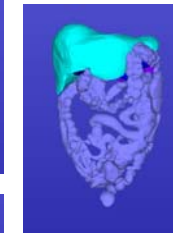
上段: 神経系



下段: 泌尿器系



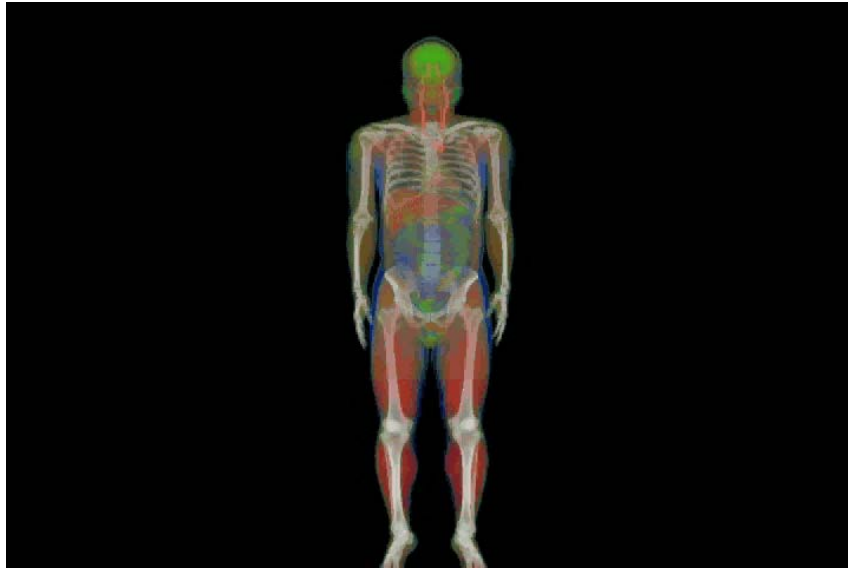
上段: 呼吸器系



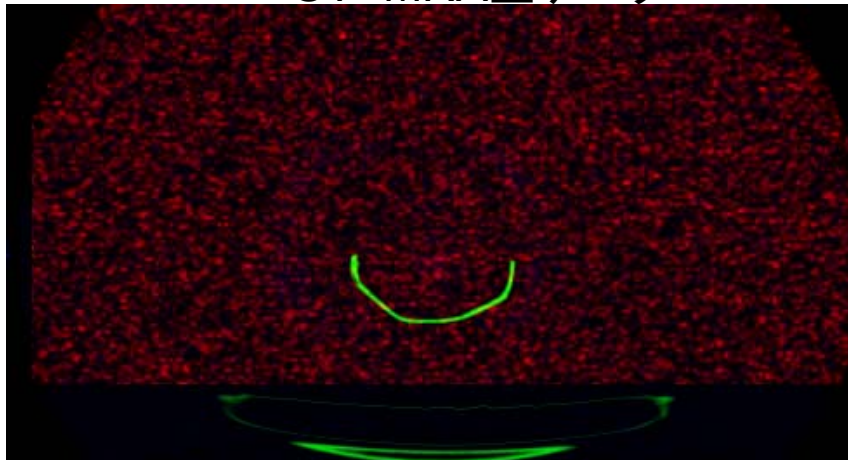
下段: 消化器系



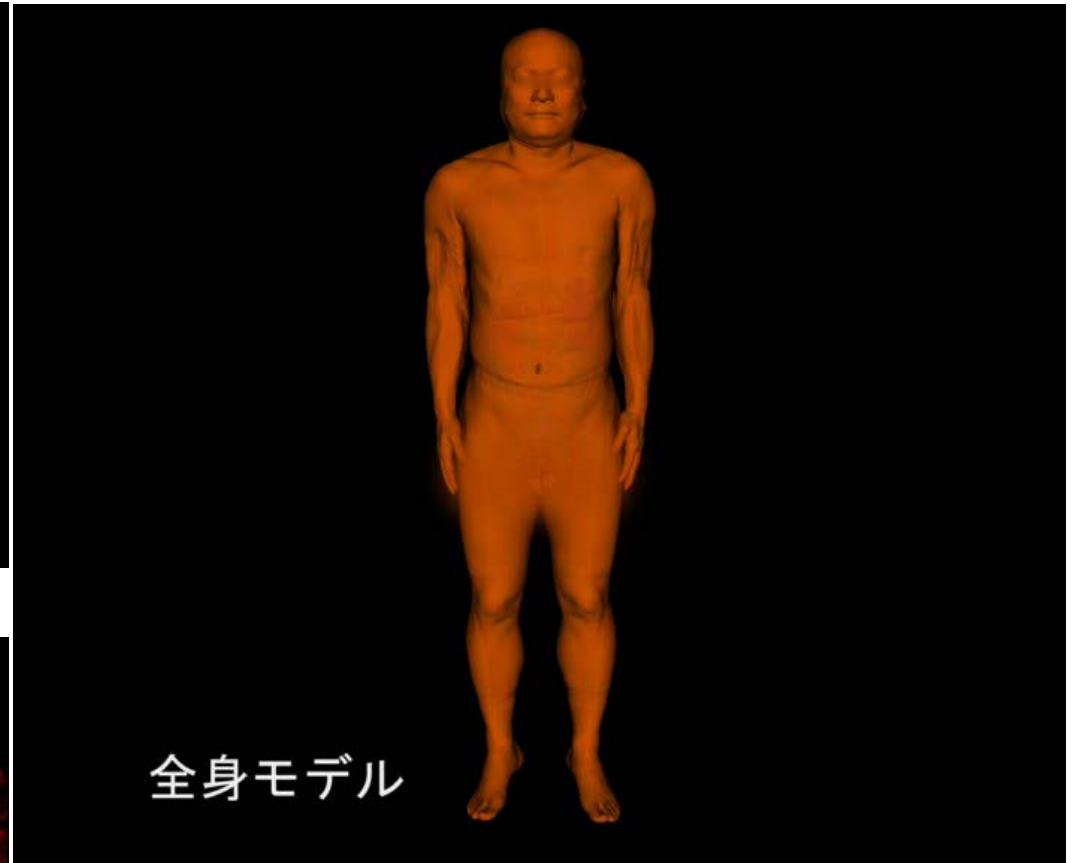
# 人体モデル



CT+MRA生データ



CT+MRA重ね合わせ



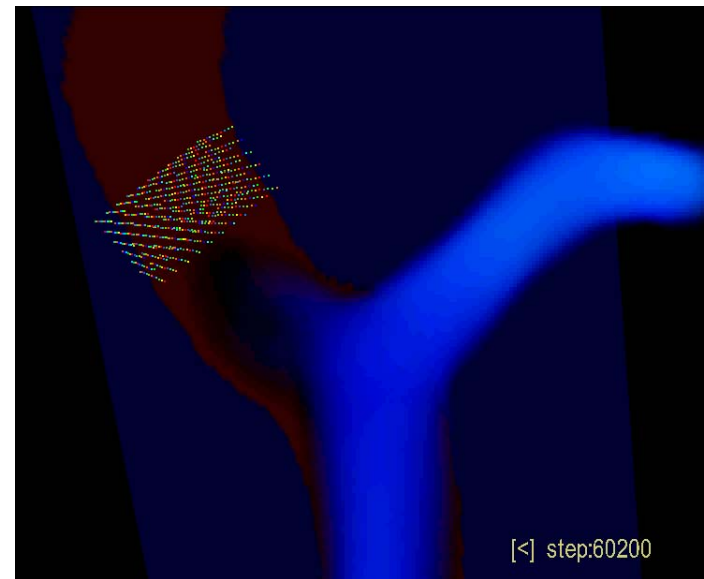
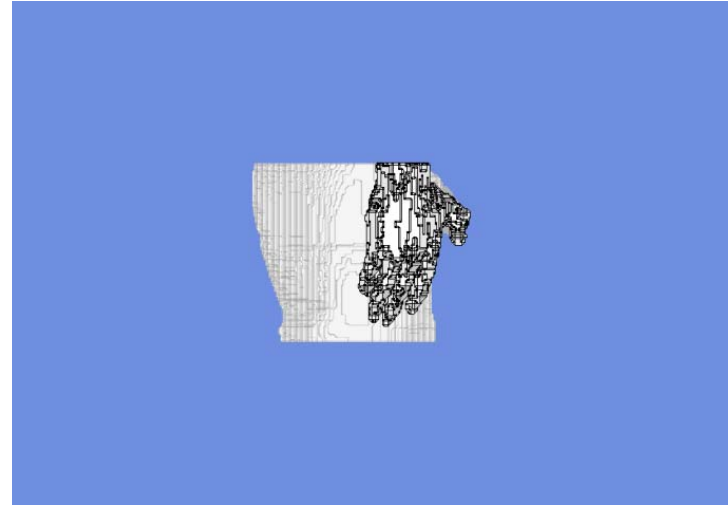
全身モデル

セグメント化後の人体モデル



## 転倒時の傷害予測/手術シミュレーション

- 現在は部分的なシミュレーション
- 次世代スーパーコンピュータでは
  - 高解像度・全体



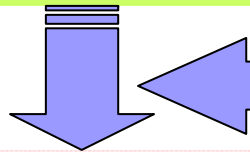
頸動脈狭窄の血管内  
治療シミュレーション

# (4) データ解析融合の概観

## 超高次元大規模ヘテロデータ解析技術と生体生命シミュレーションの融合

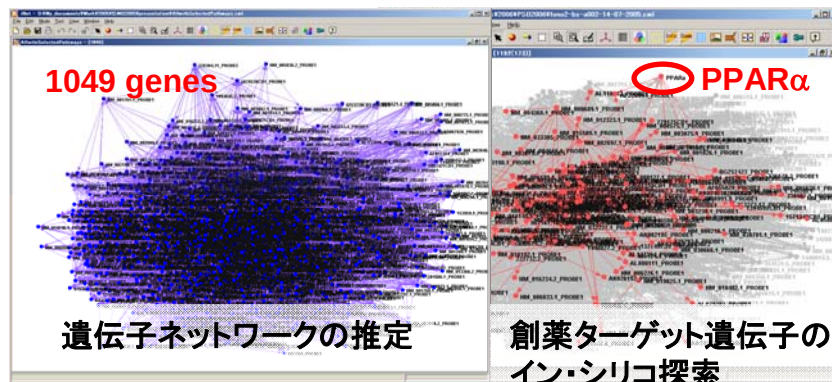
### 実験データの飛躍的増大

- ・超高次元化: 遺伝子からエクソンレベルへ
- ・極めてヘテロ: 配列, 構造, ダイナミクス, ...
- ・不観測性: 情報の欠損・欠如



### 期待される成果

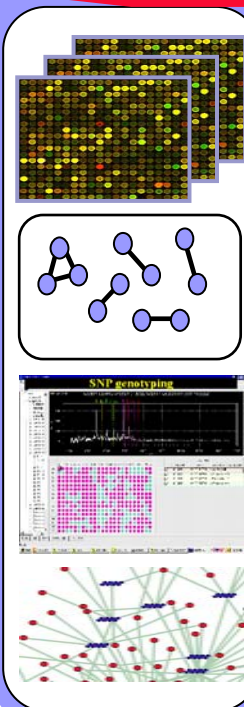
- ・ペタスケールデータ解析による個人差を考慮した投薬量・最適投与プロセスなどの開発
- ・ $10^4$ スケール遺伝子ネットワーク推定による創薬ターゲット・毒性関与パスウェイ探索法の開発



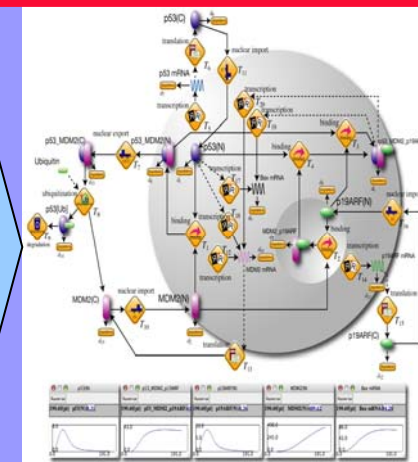
### ペタスケール データ解析技術

### 機能のモデル化 技術

### ペタスケールコンピューティング

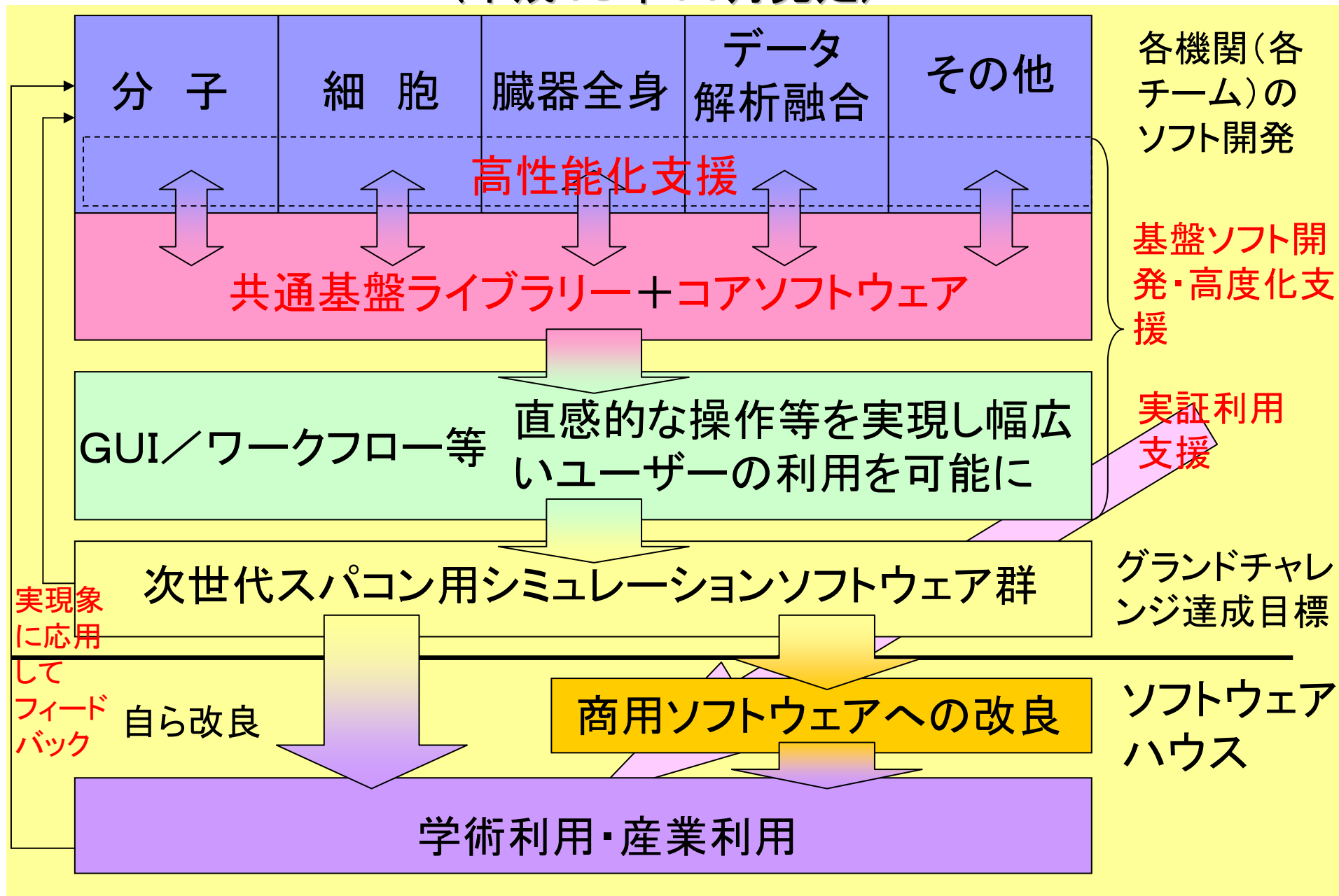


データ駆動型大規模シミュレーション技術の創出



- ・データ同化技術による, シミュレーションモデルと現実データとの乖離を埋める技術
- ・大規模モデルリングの自動化技術
- ・データ解析技術とシミュレーション科学の融合を可能にする情報基盤技術を創出

RIKEN Next-Generation Supercomputer R&D Center  
「生命体基盤ソフトウェア開発・高度化チーム」  
(平成19年11月発足)



## 5.応用が待たれている世界

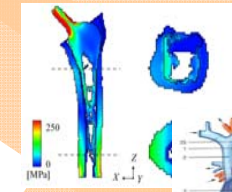
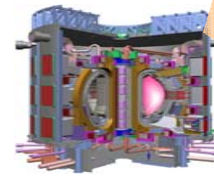
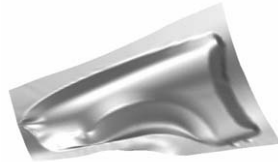
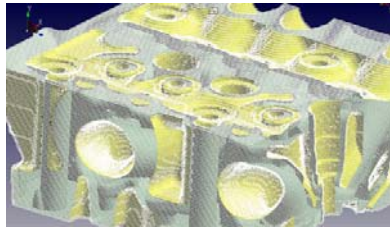


**RIKEN**

Next-Generation Supercomputer R&D Center



# ペタフロップス超級SuperComputingが待たれている世界



デジタルエンジニアリング

核融合

生体分子ネットワーク

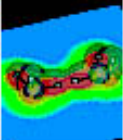
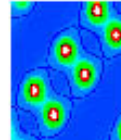
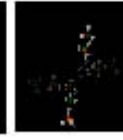
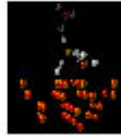
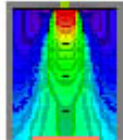
人間系全体解析

Feature scale

Reactor scale

Atom, Molecule

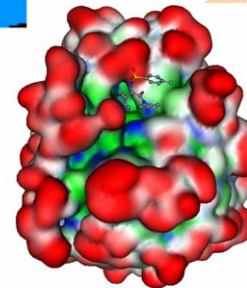
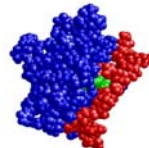
Electron, Nucleus



ナノマシン設計



タンパク質



結合能解析(創薬)

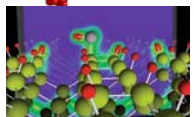
発病メカニズム解析



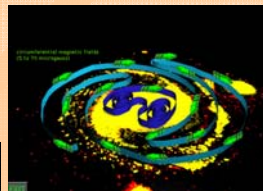
都市環境設計/地域防災



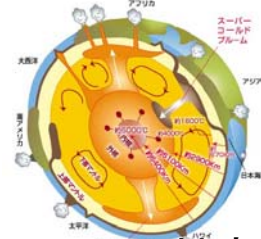
地球の誕生



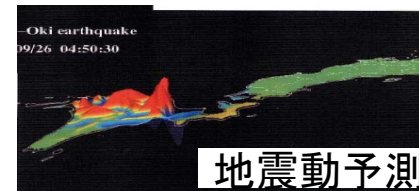
分子構造



銀河の形成



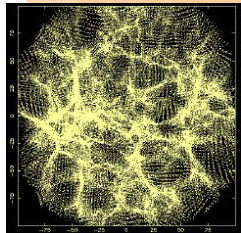
マントル対流



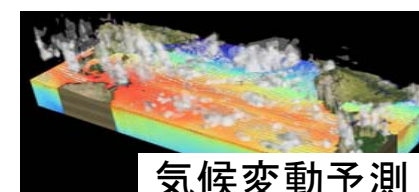
地震動予測



噴火予測



宇宙の誕生



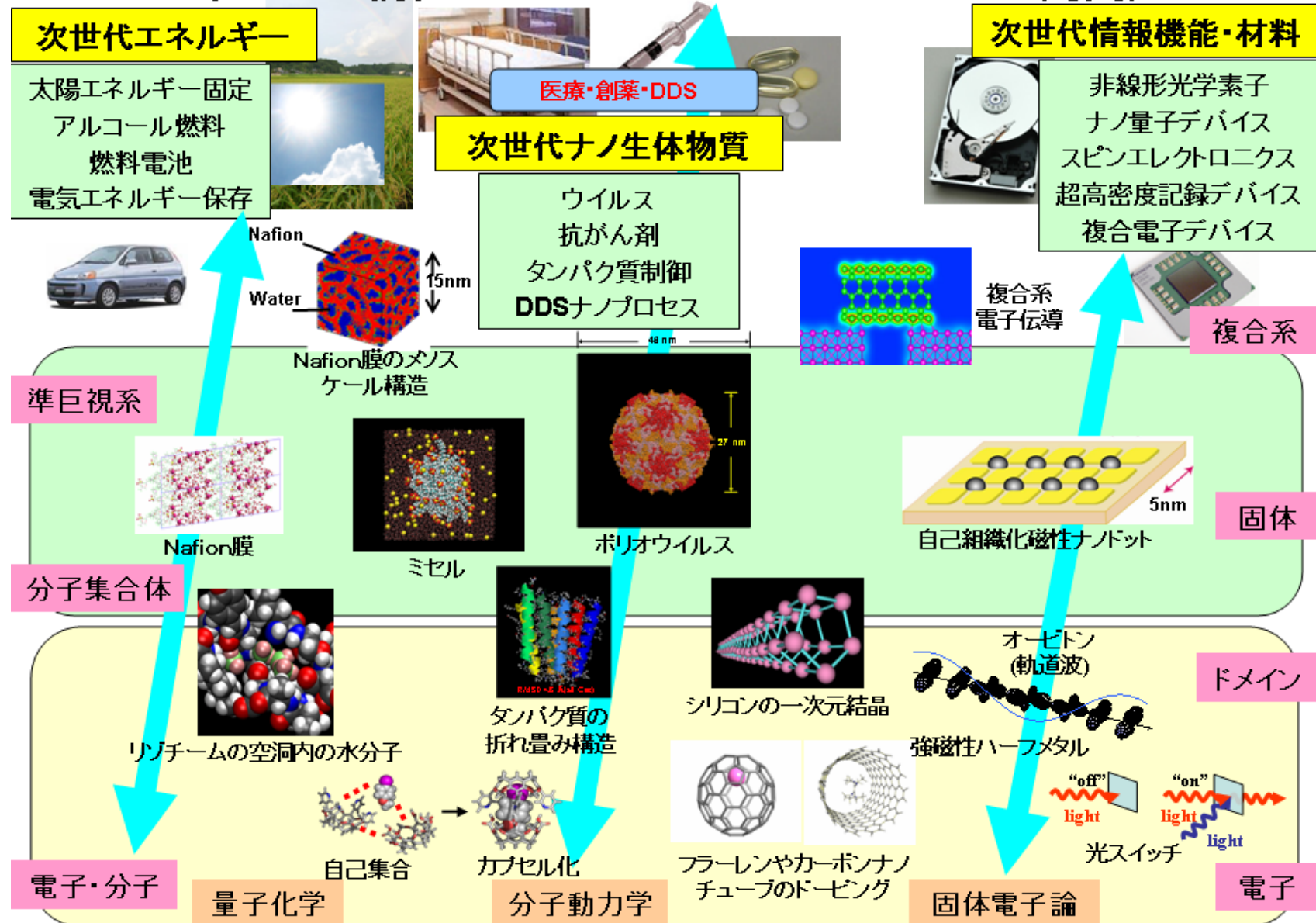
気候変動予測



溶岩流シミュレーション

マルチスケール・マルチフィジックスな系全体の統合シミュレーション

# 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

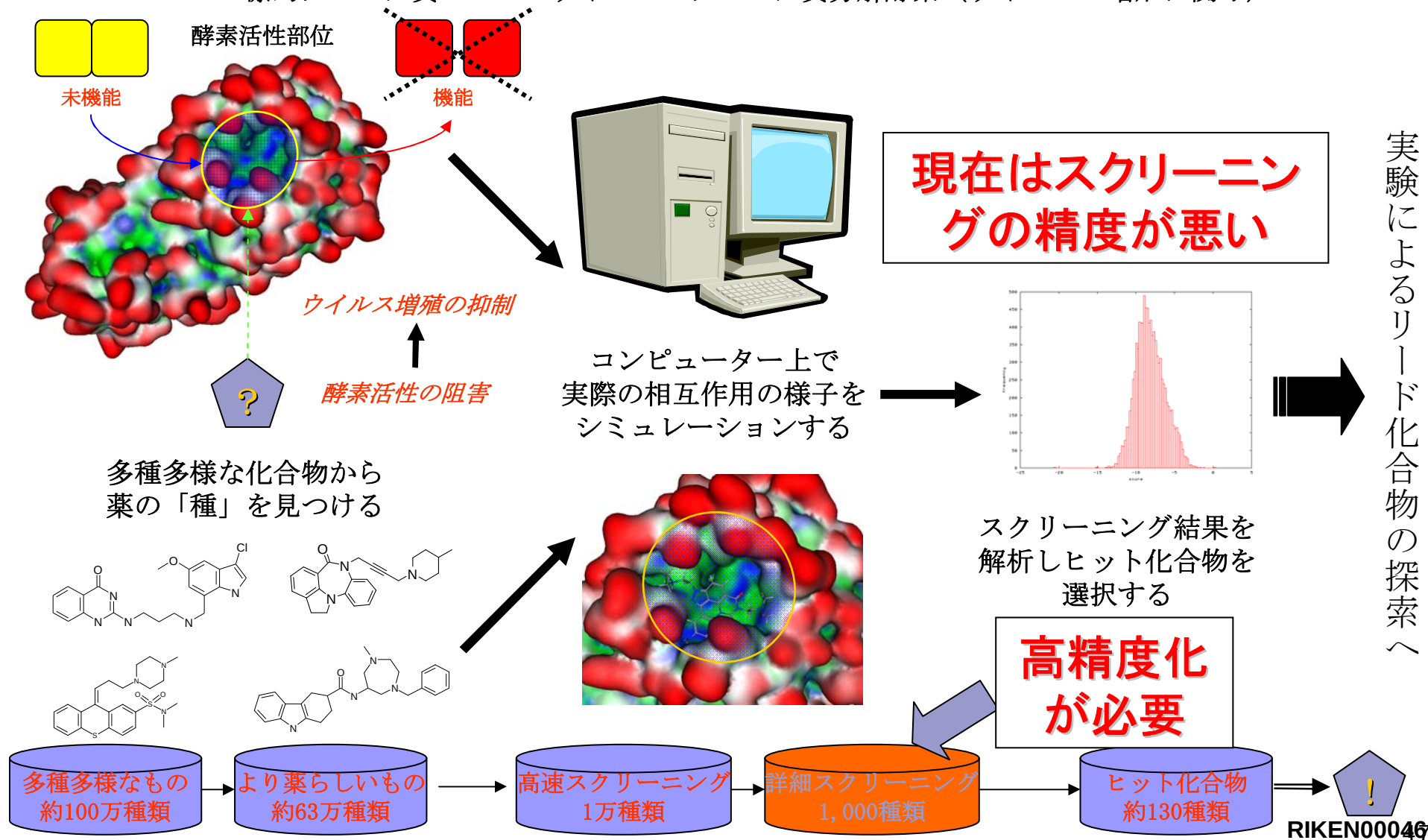




## 5.2創薬への応用

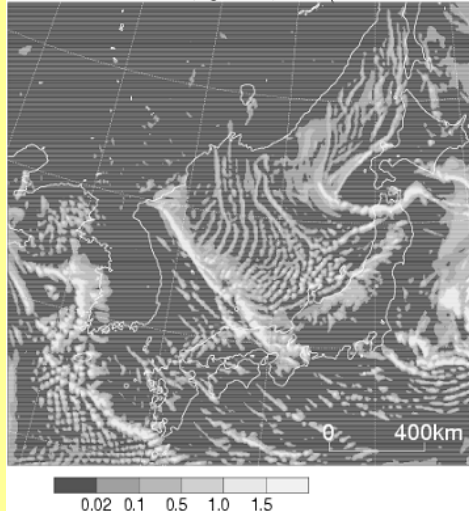
*In silico* スクリーニングによるヒット化合物の探索

標的タンパク質： SARSウイルス タンパク質分解酵素（ウイルスの増殖に関与）



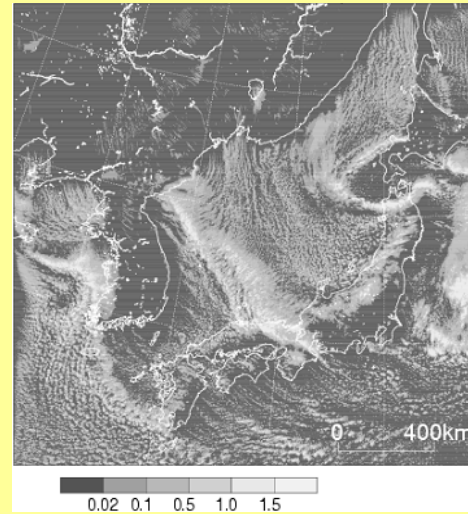
## 5.4 気象予報、気候変動予測

### 現在の雲解像モデル解析



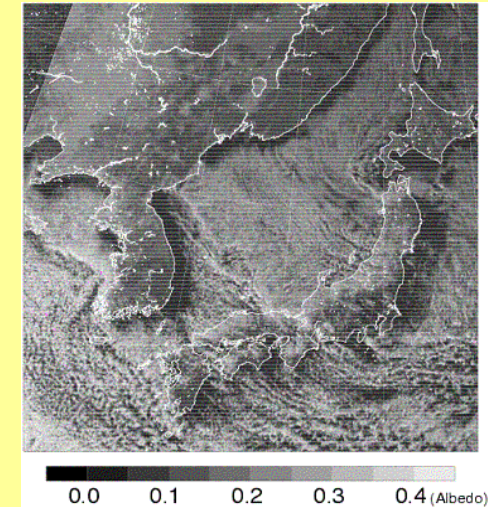
5 kmメッシュアジア域  
現時点での雲解像モデル解析

ベクトル：約1テラFLOPSで24時間分予測、2時間計算



1 kmメッシュアジア域  
地球シミュレータによる雲解像モデル解析

ベクトル：約10テラFLOPSで24時間分予測、12時間計算



実画像(ひまわり5号)

地球シミュレータの利用によって、雲解像モデル解析精度が向上

### 将来の雲解像モデル解析

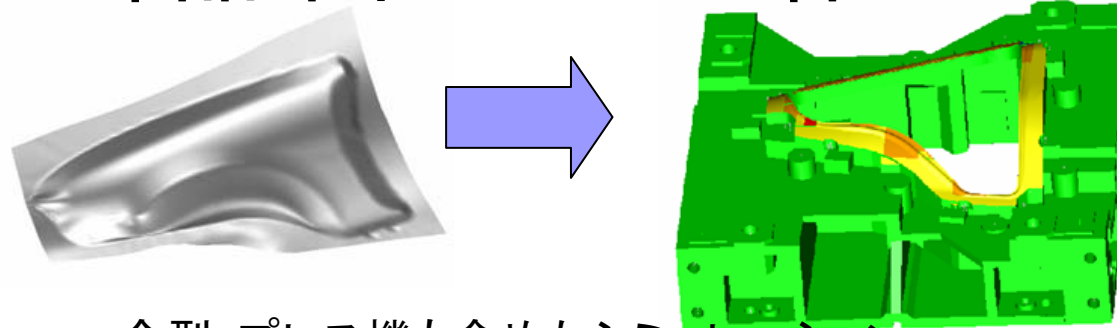
10ペタFLOPSベクトル機では

|              |         |       |
|--------------|---------|-------|
| 1 kmメッシュ全球   | 24時間分予測 | 2時間計算 |
| 1 kmメッシュアジア域 | 24時間分予測 | 1分計算  |



## 5.5 自動車産業でのシミュレーション

部品単位 → 全体

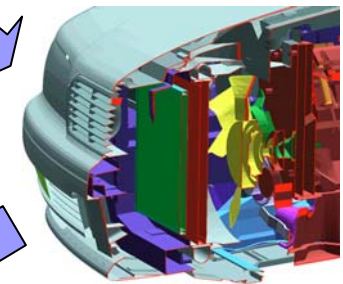


金型・プレス機も含めたシミュレーション

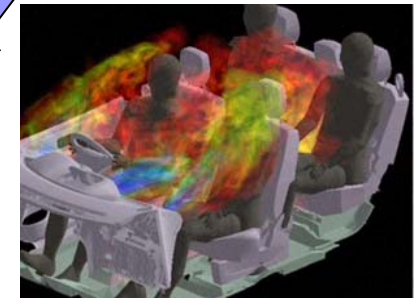
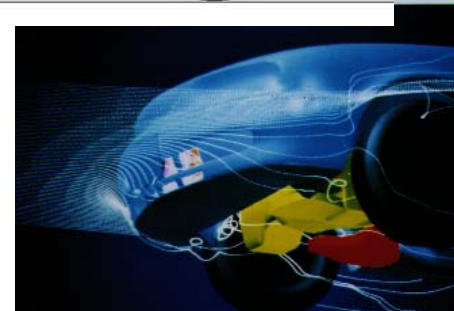
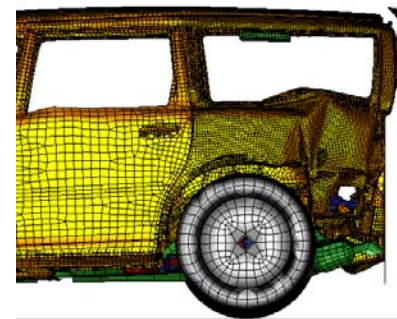
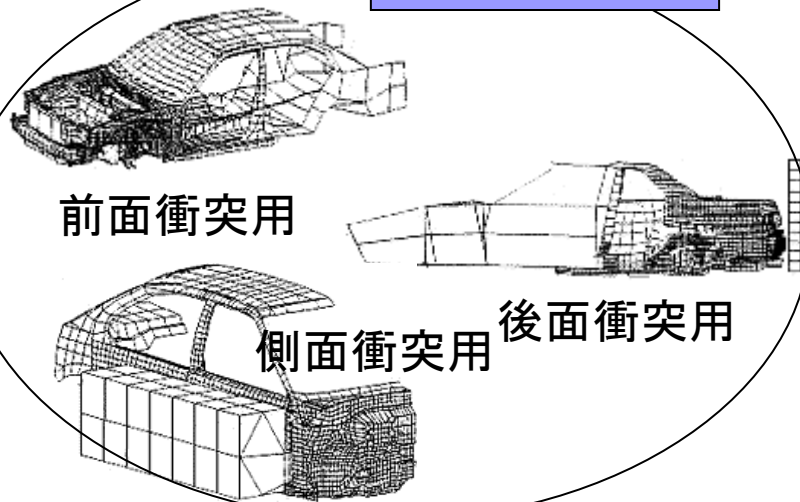
—現象 → 複合



全ての部品を入れてモデル化



モデルの統合



# 立地地点の概要



ポートアイランド第2期



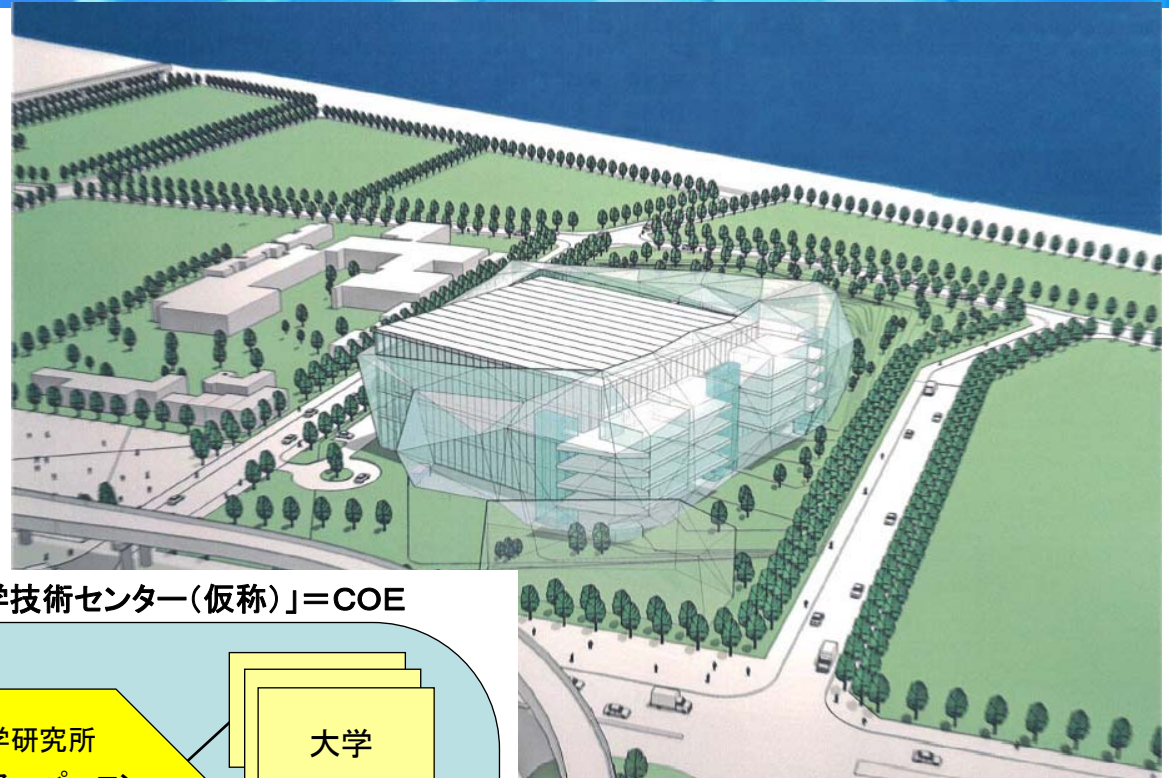
|     |                                                                         |
|-----|-------------------------------------------------------------------------|
| 所在地 | 兵庫県神戸市中央区港島南町7丁目<br>(ポートアイランド第2期)<br>ポートアイランド南駅より徒歩約1分<br>(JR新神戸駅から25分) |
|-----|-------------------------------------------------------------------------|

|    |                            |     |     |
|----|----------------------------|-----|-----|
| 広さ | 40,000㎡(拡張用地含む)<br>(準工業地域) | 所有者 | 神戸市 |
|----|----------------------------|-----|-----|

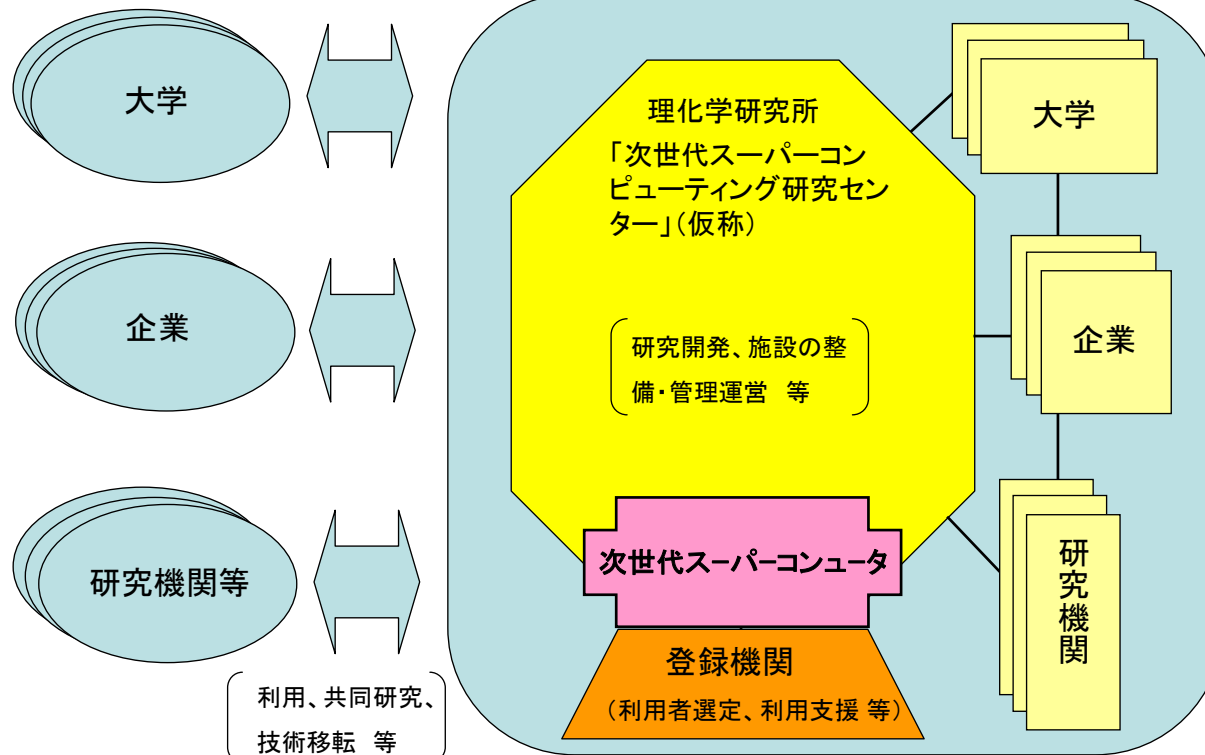


# COE構想

- COE: Cluster of Excellence
- ライフ・ナノを中心として基礎物理・数理科学・工学までを視野に入れた生命体の科学を探究する計算機科学と計算科学を融合したセンター
- 教育も



「先端計算科学技術センター(仮称)」=COE

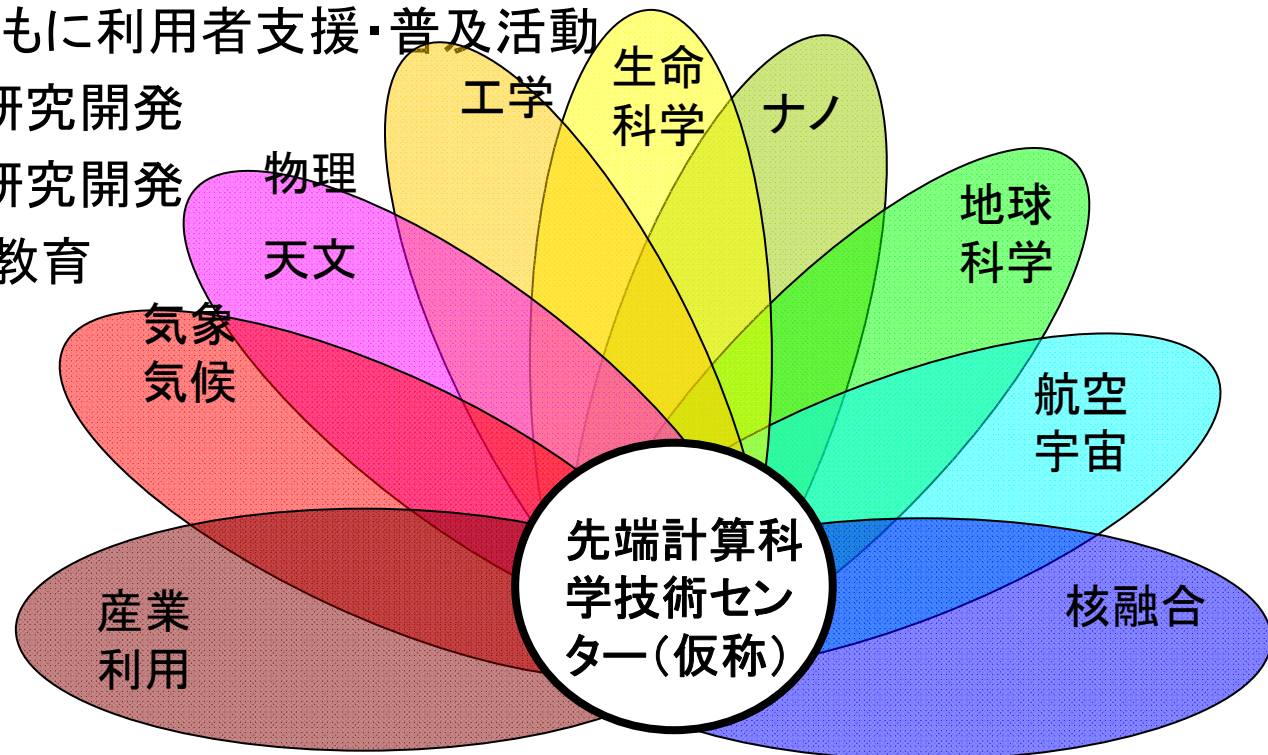




## 役割

- 日本・アジアにおける計算機科学・計算科学のハブ
  - センターはHPCを利用する種々の学術応用分野のハブ

- 次世代スパコンの運用
- 登録機関とともに利用者支援・普及活動
- 次次世代の研究開発
- 応用分野の研究開発
- 大学とともに教育



# 私の夢

- 生命科学にスーパーコンピュータを持ち込むことで、  
生命科学の方法論に変革を起こす
  - 生命現象の統合的理解
  - 生命現象を予測可能で制御可能なものへ
- 
- 次なる世代に夢を、夢見ることの大切さを伝えたい

# レポート

- 提出期限: 2/8(金曜日)17:00
  - 提出先: 機械系専攻事務室
  - 以下の1, 2どちらかを選んでレポートとして提出
    1. 4名の講師のそれぞれについて感想を書け
    2. 4名の講師のいずれかの講義内容の内、興味を持った項目を挙げ、自分で更に調べ、調べた内容と自分の考えをまとめる
- 分量: 目安A4のレポート用紙1枚程度