

**以下 参考**

# スーパーコンピュータ「京(けい)」の概要

- ・2011年6月と11月の二期連続で世界スパコン性能ランキング(TOP500)において1位を獲得
- ・「京」の利用研究が2年連続でゴードン・ベル賞（コンピュータシミュレーション分野での最高の賞）を受賞

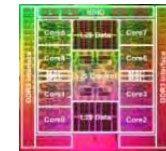
## ○概要

- ◆平成23年11月にLINPACK性能※1 10ペタフロップス※2達成。
- ◆平成24年6月システム完成済（兵庫県神戸市の理化学研究所に設置）
- ◆平成24年9月28日に共用開始
  - ※1 スーパーコンピュータの性能を測るための世界的な指標（ベンチマークプログラム、
  - ※2 10ペタフロップス：一秒間に1京回（=10,000兆回=10<sup>16</sup>回）の足し算、掛け算が可能な性能

○プロジェクト経費 約1,110億円（H18~H24）

## ○特長

- ◆全CPUフル稼働時の連続実行時間は29時間以上で世界最高水準の**信頼性**
- ◆最新（平成25年6月）の世界トップ10の**実行効率**（理論性能に対する実際の性能の比率）平均が77%のところ、「京」は93%
- ◆アプリケーションプログラムの**実行性能や使いやすさ**に関して高い性能
- ◆**水冷システム**の導入により消費電力の削減や故障率の低減に寄与
- ◆**六次元メッシュ/トーラス**結合の採用による高い利便性・耐故障性・運用性
- ◆**共用法**に基づき、登録機関（高度情報科学技術研究機構）と理化学研究所が連携し、「京」を利用する体制を構築。

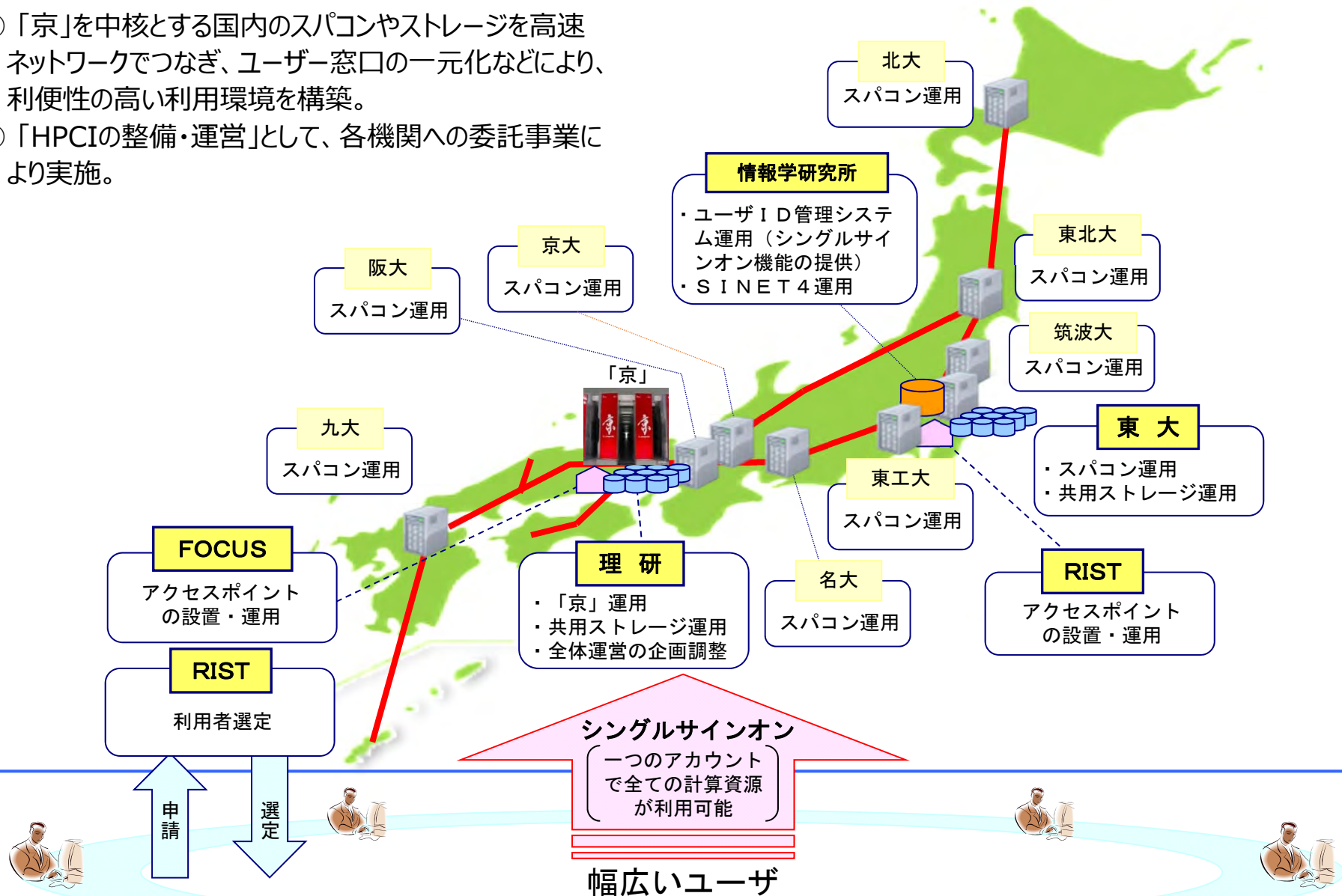


CPU(富士通製)  
8万個以上を使用



# HPCIの枠組み

- 「京」を中核とする国内のスパコンやストレージを高速ネットワークでつなぎ、ユーザー窓口の一元化などにより、利便性の高い利用環境を構築。
- 「HPCIの整備・運営」として、各機関への委託事業により実施。



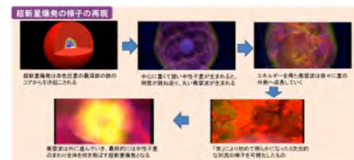
# ポスト京で期待できる成果（京との比較） <科学的卓越性>

## 「京」での成果

超新星爆発のシミュレーションやダークマター粒子の宇宙初期における重力進化の計算が可能

「京」を用いることで超新星爆発のシミュレーションが可能になり、その爆心地の様子が再現された。  
また、宇宙の構造形成過程に関して、より複雑な物理を扱うアルゴリズムと組み合わせることで、科学的成果の創出に貢献し、微細なダークマター構造の解明によるダークマター粒子の探査、正体解明に貢献。

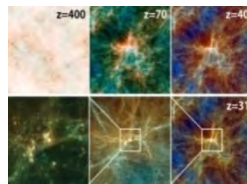
超新星爆発の仕組みは未だ解決されない天文学の大問題である。問題解明には爆発の瞬間に発生するニュートリノの影響を含んだ超高詳細三次元シミュレーションが必要。今回、「京」を用いることでこの超新星爆発のシミュレーションが可能になり、その爆心地の様子が再現された。



HPCI戦略プログラム 分野5 シミュレーション：滝崎知也 國政慶 諏訪雄大  
可視化：国立天文台4次元デジタル宇宙プロジェクト  
国立天文台4次元デジタル宇宙プロジェクト

「京」専用のアプリケーションを開発した上で、実効性能5.67ペタフロップス（実行効率約55%）を達成し、約2兆個のダークマター粒子の重力計算に成功。この成果によりゴードン・ベル賞を受賞（2012年11月16日プレスリリース）。

- ・1兆粒子を越す規模のダークマターシミュレーションは世界最大
- ・パソコン1台で数百年かかる計算が「京」では約3日で可能



明るさはダークマターの空間密度を表し、明るいところは密度が高い

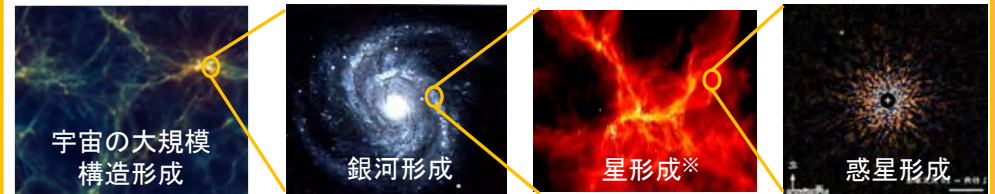
## ポスト「京」で期待できる成果

### 宇宙の起源と進化の探究

宇宙の大規模構造形成から惑星形成にいたる複数階層のシミュレーションにより、宇宙科学における重要課題の一つである銀河系や惑星系の多様性の起源や進化を解明し、天文学・宇宙物理学の発展に貢献。

「京」では、ダークマター構造形成等については概ね物理法則に基づく計算が実現できるようになったが、銀河形成や星形成といった天体形成・進化については半経験的モデルによる計算に留まっている。  
ポスト「京」によって、銀河形成や星形成といった複数階層において概ね物理法則に基づく計算が可能となり、これらを統合した天体計算が可能となる。

宇宙の大規模構造形成、銀河形成、星形成、惑星形成にいたる複数階層を一連のものとしたシミュレーション



※ Matthew Baw (エクセター大学)

## 計算時間の比較例

200兆粒子の銀河形成計算を行った場合、「京」では約2年弱必要であるが、ポスト「京」であれば約6日で計算可能になる。

# ポスト京で期待できる成果（京との比較） <産業の国際競争力の強化>

## 「京」での成果

### 新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築

新薬候補化合物の高精度薬理活性予測を行い、創薬プロセスを加速。

約300種類の新規化合物について、ガン治療の標的タンパク質に対する効果を高精度で計算し、新薬の候補となる結合特性をもった化合物を11個見いだすことに成功。

計算で得られた化合物を中心に実験と連携してガン治療薬の開発を推進。



標的蛋白質（緑）と薬剤候補化合物（赤）

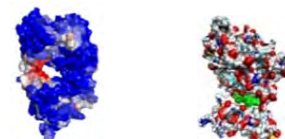
## ポスト「京」で期待できる成果

### 最適な治療を実現する画期的な新薬開発

複数タンパク質(病気の原因タンパク質と生命機能に必須なタンパク質)に対する新薬候補物質の影響解析を、複雑な細胞環境下で行い、副作用の少ない画期的な新薬の早期発見に貢献。

- ・「京」では、一つのタンパク質のみが存在する環境で結合シミュレーションを実施し、数百種類の化合物を対象とした新薬候補化合物の絞り込みを可能とした。
- ・ポスト「京」では、複数タンパク質が存在する環境での結合シミュレーションが可能になることから、絞り込みの精度（副作用の有無の検証精度等）が格段に向上する。
- ・さらに、ポスト「京」では、10万種類の化合物を対象とした絞り込みが可能となり、これまでの結合シミュレーションでは扱っていなかった化合物も探索対象に広がる。

これらにより、副作用を抑えた画期的新薬につながる候補物質を高い精度で効率的に探索することが期待できる。



複数タンパク質への新薬候補物質の作用を解析

※超大型医薬品の年間売上高は数千億円～1兆円規模。スパコンにより画期的な新薬が世界に先駆けて開発できれば、数千億円規模の経済効果が期待。

## 計算時間の比較例

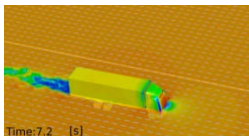
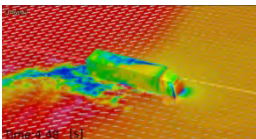
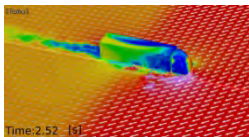
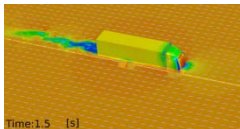
創薬でよく用いられる分子動力学シミュレーション（原子間相互作用に基づいて分子運動を計算する方法）によって100万原子の系に対して1万薬剤候補化合物のスクリーニングを行う場合、「京」では約**2.4年**必要であるが、**ポスト「京」**であれば**約5.5日**で計算可能になる。

# ポスト京で期待できる成果（京との比較） <産業の国際競争力の強化>

## 「京」での成果

### プロダクトと設計プロセスのイノベーション

「京」によりスパコンを用いた設計プロセスの変革とそこから生まれる製品の革新を図る



設計プロセスイノベーションの一例として、自動車の安全性の向上がある。

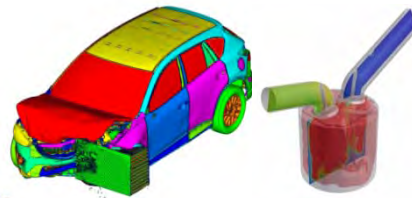
横風にあおられた自動車の運動安定性解析では、走行中の自動車遭遇する様々なリスク（追い越し、追い抜き、突風、急なハンドル操作）に対しては、既存の風洞実験では予測が難しかった。

こういった状況を大規模シミュレーションで予測できるようになると、今までの風洞実験を中心にした自動車空力設計プロセスに大きな変化をもたらし、自動車の安全性の向上に寄与することができる。

## ポスト「京」で期待できる成果

### スパコンを用いたものづくりのパラダイムシフト

短期間・低コストの設計開発による産業競争力の強化のみならず、従来のものづくりとは根本的に異なるプロセス統合や多目的最適化等の劇的な変革により斬新設計・アイデアを創出



マツダ（株）提供

自動車設計について、「京」では個別のプロセス（空力設計、エンジン設計、構造設計など）についてスパコンによるイノベーションが可能となった。

ポスト「京」では、スパコン上でこれらのプロセスを統合し、全体設計の最適化が効率的に行えるようになるため、デザイナーがイメージする革新的なデザインでかつ、高性能・安全な車を低コストかつ短期間で開発できるようになる。



スズキ（株）・北大提供

形状最適化による高性能自動車の開発



スズキ（株）提供

## 計算時間の比較例

自動車の空力・騒音・熱解析について、仮に「京」で数百ケースを行うには約 1.4 年を要するが、**ポスト「京」では多数のパラメータスタディの最適設計が 3 日で可能となる。**開発期間短縮や信頼性の向上のみならず、新しいメカニズムを取り入れた設計が可能になり、質的な向上による競争力強化が期待される。