

スーパーコンピューティング分野の既存プロジェクト(2)

文部科学省

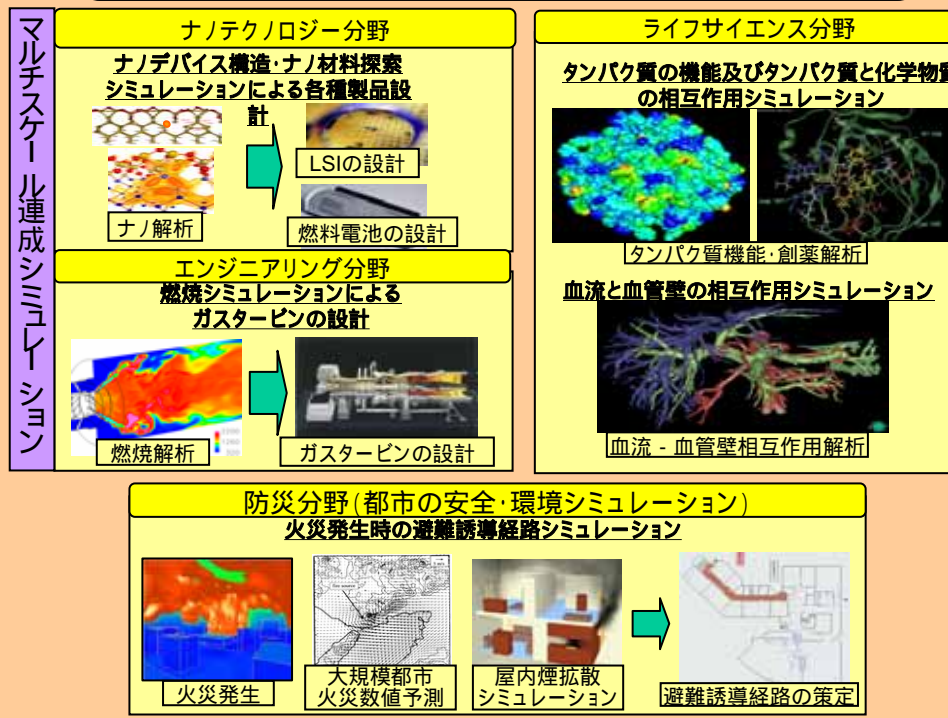
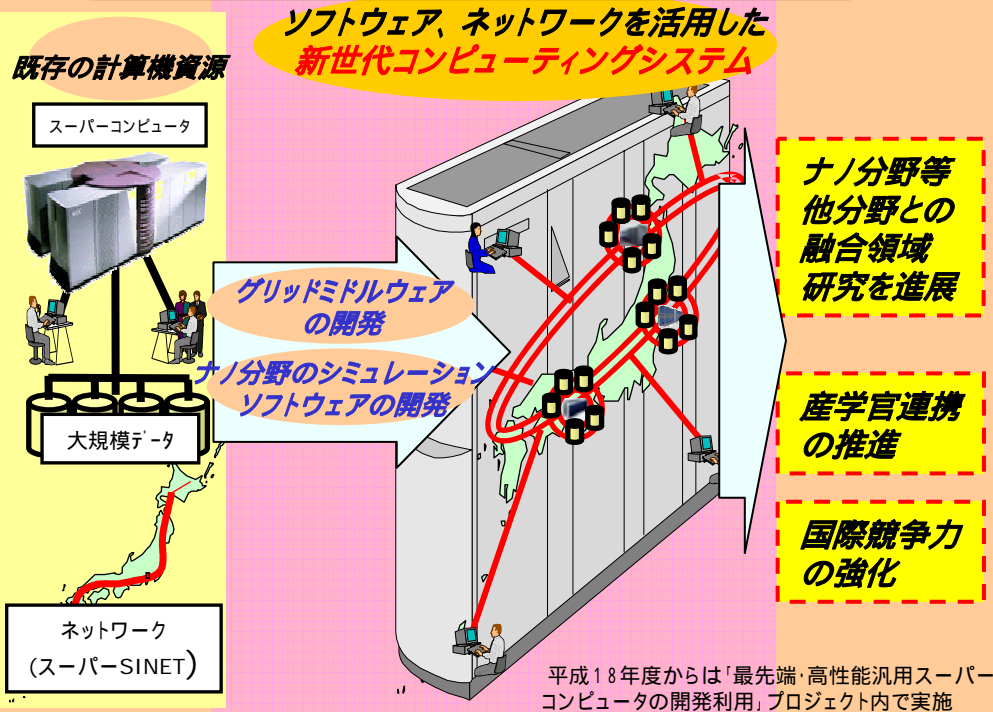
ソフトウェアの革新

超高速コンピュータ網形成プロジェクト(NAREGI)

(平成15~19年度) 文部科学省

革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発

(平成17~19年度) 文部科学省



国際水準のグリッドミドルウェアとして導入

産業界ユーザーの開拓に活用



(注) MMR: Nuclear Magnetic Resonance(核磁気共鳴)。物質の構造を同定するのに用いる装置

SPring8: 兵庫県播磨科学公園都市にある第三世代の大型放射光施設

目標

京速計算機システムが目指すグランドチャレンジ

あらゆる産業や生活の基盤技術となる次世代ナノ材料（新半導体材料、酵素、触媒等）の創出による知的ものづくり

- (1)化石エネルギーから脱却を目指した
化学エネルギー転換技術の確立に貢献
- ・バイオマスからのエタノール生成、光触媒による水素生成などコスト性能比の優れた自動車用燃料や発電用燃料などを実現

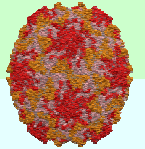
10ペタFLOPS級の計算機性能が必須



従来不可能な酵素(触媒)反応の解析の実現



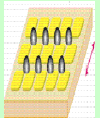
- (2)細胞膜やタンパク質、ウイルスの全原子シミュレーションにより、分子機能を解明し、難病治療に貢献
- ・副作用のない抗がん剤
 - ・ウイルスの克服
 - ・病因タンパク質の制御
 - ・ドラッグデリバリー



10ペタFLOPS級の計算機性能が必須

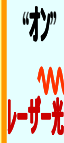
従来不可能な大規模分子複合体、分子集合体の長時間計算の実現
(1,000万原子・1マイクロ秒)

- (3)新しい物性原理の解明による革新的に高性能な情報機器用材料を実現
- ・ナノ磁性の原理解明による高記録密度媒体(約5テラbits/インチ²)及び既存技術の100~500倍の速度で読み書きするスピン検出型超高速アクセス機構の実現
 - ・光誘起相転移の原理の解明による500テラbits/インチ²の記憶容量実現
 - ・半永久的な電池寿命や大容量の電池を実現する材料の実現(スーパーキャパシタ)
 - ・テラHz周波数で動作する超高速光スイッチ
 - ・カーボンナノチューブ分子回路部品・機能化



10ペタFLOPS級の計算機性能が必須

- ・未だ確立されていないナノスケールの分子物性を明らかにする革新的ナノ科学理論の確立と最先端計算科学技術との融合により、電子、原子、分子から、ナノスケールの分子複合デバイスに至る丸ごと解析するナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
(従来のテラFLOPS級の計算機性能では不可)
- ・多種多様なアプリケーションソフトウェア
(市販ソフトウェアなど)との容易な連携、統合



従来不可能な新しい現象の解析の実現

