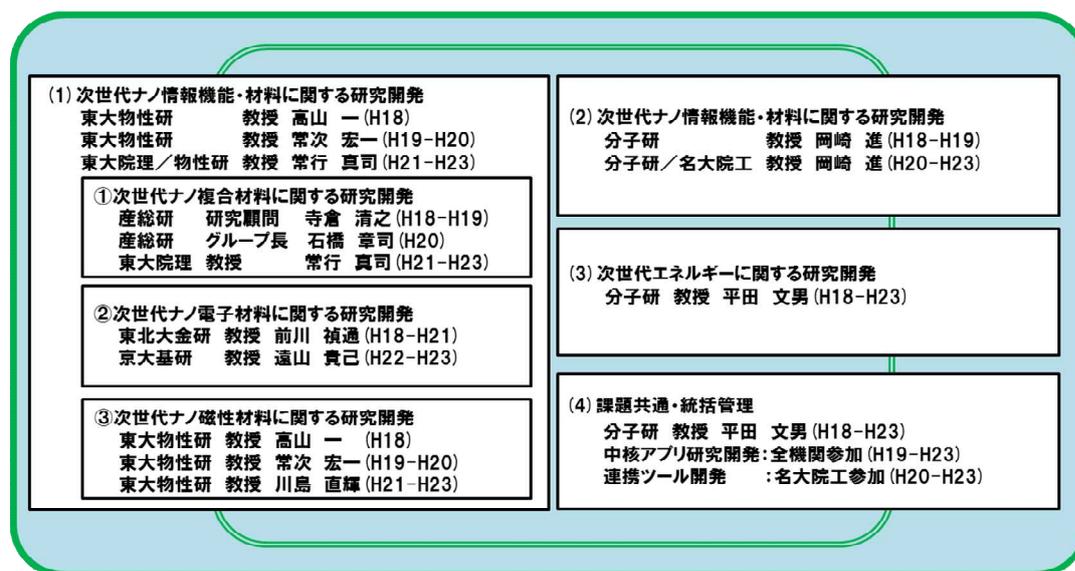
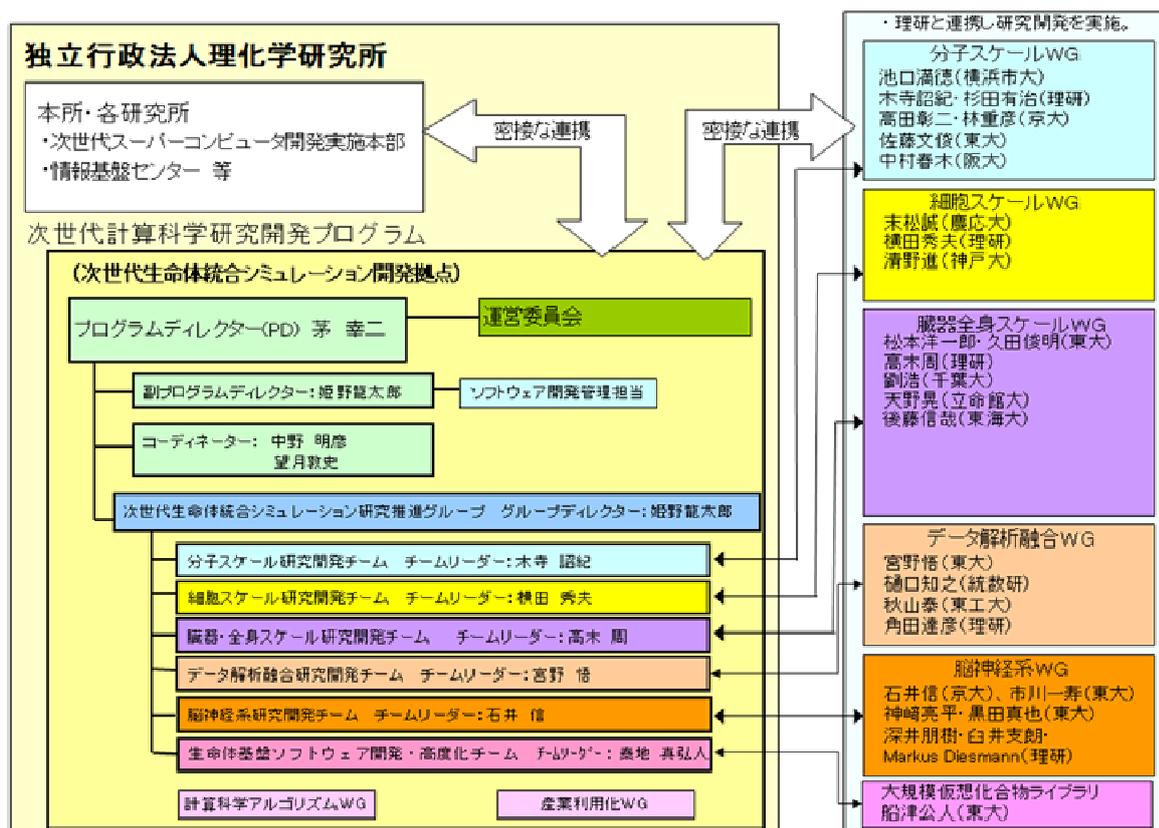


## <次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発>



## <次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発>



# HPCI計画

参考

	平成18年度	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度	平成23年度	平成24年度	合計	
スーパーコンピュータ「京」	概念設計		詳細設計			試作・評価・製造		稼働 フェーズ	Linpack 10PFLOPS達成 1日 24年6月—実績 H23年11月
	12億	53億	111億	110億	353億	110億	45億	合計 793億円	
「京」施設	1億	34億	設計 67億 / 稼働 61億	29億	完成			合計 193億円	
「京」ソフトウェア 開発・評価	22億	32億	開発・製作・評価 22億	19億	15億	10億	実証 6億	合計 126億円	
費用	35億	120億	200億	190億	597億	119億	60億	1,111億円	
「京」の運用等経費					14億	65億	97億		
「京」の利用者 論文・材料支援							0億	実用性に基づく受取経費が実施。	
HPCIの構築					HPCIシステム基本設計・詳細設計 / 整備・構築			※日本初HPCIシステムの立ち上げの調査 研究のための経費4.4億円を要す。	
HPCI構築 プログラム				0.3億	3億	HPCI構築プログラム			
	H18予算 35億円	H19予算 120億円	H20予算 200億円	H21予算 190億円	H22予算(前期): 228億(23予算 H22補正: 186億円 211億円)		H24予算 169億円		

1

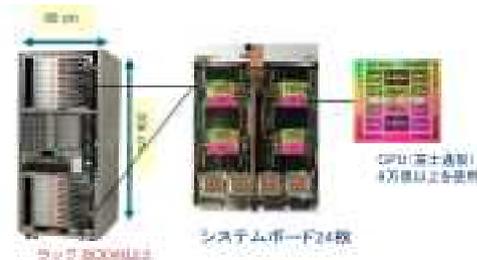
## スーパーコンピュータ「京(けい)」について

### <概要>

- ◆平成18年度からプロジェクトを開始し、平成23年11月に性能目標のLINPACK10ペタフロップス<sup>※</sup>達成
- ◆平成23年6月、11月と連続で世界スーパーコンピュータ性能ランキング(TOP500)において1位を獲得  
(平成24年11月のTOP500では3位)
- ◆平成24年6月にシステム完成、平成24年9月28日に共用開始
- ◆これまでに産業利用28件を含む合計100件の課題が採択されている。(平成25年3月現在)  
※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

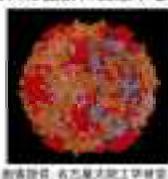
### <特徴>

- ◆「京」の開発により、世界最高水準の技術力を獲得し、我が国の技術力の高さを世界に発信
  - ・高い演算性能:世界に先駆けて10ペタフロップスを達成
  - ・高い信頼性: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
  - ・高い実行効率(理論性能に対する実際の性能の比率):世界トップ10の平均約78%に対し「京」では93%
- ◆世界に先駆け10ペタ級のスパコンを用いたシミュレーションを実現し、様々な研究成果を創出。ハイパフォーマンスコンピューティング分野で最も権威あるゴードン・ベル賞を平成23年・24年と2年連続で受賞



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 ソフトウェアの研究開発(グランドチャレンジアプリケーション)

	ナノテクノロジー分野 〔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	ライフサイエンス分野 〔次世代生物体統合シミュレーション〕 ソフトウェアの研究開発
概要	ナノ電子デバイスの設計や高効率の触媒・酵素の設計等に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発(46本のシミュレーションソフトを開発)	タンパク質分子の反応や、細胞・臓器の働きの詳細な解析により、薬業・医療に役立つシミュレーションソフトウェアを研究開発(31本のシミュレーションソフトを開発)
応用例	 <p>実空間第一原理ナノシミュレータ(HF-RSDFT) ナノワイヤー等の原子構造、電子状態の量子論的計算を10万原子系(現状は2,000原子程度が限界)で可能とし、高速・高精度、省エネルギーなどの特長を持つ新しいデバイスの設計に貢献する。</p> <p>高生体汎用分子動力学シミュレーションソフト(MODYLAS) ウイルスとレセプターや抗体の特異な相互作用の解明を、1,000万原子系(現状は5万原子程度が限界)で可能とし、ウイルス性疾患に対する予防法と治療薬の開発、創薬の効率化に貢献する。</p> 	 <p>多刺抽出トランスポーターにおける薬剤抽出シミュレーション (MARBLE/Platypus/CafeMol) 多刺抽出トランスポーターについて動作過程を、長時間のサブミクロ秒(現状はサブマイクロ秒が限界)での解明を可能とし、薬剤の抽出(薬剤の取込、輸送、排出)を再現し、抗生物質等の薬剤が効かなくなるメカニズムの解明に貢献する。</p> <p>マルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレーション(JT-Heart) 細胞レベルから心臓の拍動や血液の拍出などの再現を可能とする心臓シミュレーションを実現し、今までには推測の域を出なかった、ミクロ事象(例えば細胞タンパクの異常)とマクロ事象(例えば拡張型心筋症など)の関係を合理的に解明し、医学・医療に貢献する。</p> 
体制	分子科学研究所を中核に、東京大学物性研究所、京都大学、名古屋大学等、6機関が連携した研究開発体制を構築	理化学研究所を中核に、東京大学薬科学研究所、大阪大学、慶應義塾大学等、15機関が連携した研究開発体制を構築

3

## 理化学研究所 計算科学研究機構(運営主体)について

### 基本コンセプト

- 利用者視点に立った共用施設としての「京」コンピュータの運用
- 計算機科学と計算科学の連携により科学技術のブレークスルーを生み出す国際的な研究開発拠点の構築

< 設立 > 2010年7月1日  
< 職員数 > 167人(2013年1月1日現在)  
(業務および常勤を中心)



### 組織

機構長	
副機構長	
運用技術部門	基幹運用技術チーム
	システム運用技術チーム
	ソフトウェア開発チーム
	HPCシステム技術チーム
研究部門	システムソフトウェア研究チーム
	プログラミング環境構築チーム
	プロセス研究チーム
	大規模並列計算基盤研究チーム
	利用高度化研究チーム
	連続系場の理論研究チーム
	離散系場のシミュレーション研究チーム
	量子系分子科学研究チーム
	量子系物質科学研究チーム
	量子系生物物理研究チーム
	量子系シミュレーション研究チーム
	複合系機械科学研究チーム
	複合系材料・応用材料研究チーム
	プログラム構成モデル研究チーム
	可視化技術研究チーム
データ解析研究チーム	
半導体計算科学研究ユニット	
創発研究・発見研究ユニット	
計算機連体物理学研究ユニット	
事務部門	

4