

さあ、計算をしよう！

たくさんのCPUを持つスーパーコンピュータを使いこなすには、ソフトウェアやプログラミングにも工夫が必要なんだ。スーパーコンピュータの持つ力を最大限引き出すよ！

● チューニング技術ユニット

研究チームが開発した「富岳」用のソフトウェアを、「富岳」の能力をより引き出せるようにチューニングを行います。

ユニットリーダー 庄司 文由

● プログラミング環境研究チーム

「富岳」や将来の高性能な計算システムを使って計算をするときに、簡単にプログラミングでき、性能を得ることができる、新しいプログラミング言語を開発しています。

チームリーダー 佐藤 三久

● 大規模並列数値計算技術研究チーム

「富岳」で複雑な計算をしたいときに、方程式を適当な数式に分けて、より速く正確に計算ができるように新しいアルゴリズムを開発しています。

チームリーダー 今村 俊幸

● 高性能ビッグデータ研究チーム

「富岳」でビッグデータを高速に効率よく処理するための研究を行っています。大規模ビッグデータ処理の高速化は、人工知能(AI)の発展にも役立ちます。

チームリーダー 佐藤 賢斗

● 利用環境技術ユニット

「富岳」のユーザーが「富岳」のポテンシャルをより簡単に引き出せるように利用環境を改良します。また、実際の利用状況の分析に基づいた、運用の効率化にも取り組んでいます。

ユニットリーダー 庄司 文由

用語解説

● CPU

メモリに置いてある指示書(命令の列、プログラム)から命令を順番に取り出し、その命令に従ってコンピュータの各部分に指令(指示)を出す、コンピュータの頭脳。コンピュータの最も重要な部品で、たし算やかけ算をする演算装置も含まれている。

● ハードウェア

コンピュータを形作っている金属部品やプラスチック部品を全部(機械部分)合わせてハードウェアと呼ぶ。ハードウェアだけではコンピュータとしての能力が発揮できない。ソフトウェアと合わせて初めてコンピュータが動作する。

● システムソフトウェア

コンピュータの最も基本的で重要な動作(複数の人のプログラムをどういふ順番で処理するか、コンピュータのどの部分でどのプログラムに使わせるか、いろいろなデータをどこに保存するかなどの手順が書かれたプログラム。人間がコンピュータの基本的な動作を指示するのは大変なので、それを代わりにやってくれる。

● アプリケーションソフトウェア

人がコンピュータに仕事をさせるときに使う、最も身近なプログラムのこと。計算機のしくみを知らなくても、そのプログラムの使い方がわかれば利用できる。完成している(市販の)プログラムや、自分で作るプログラムがある。アプリケーション、アプリと言うことも。

● プログラミング

コンピュータにどういふ動作をさせるか、その動作をどういふ順番で行わせるかの指示書(命令の列、プログラム)を作ること。この指示書は計算機が理解できる言葉(プログラミング言語)で作られる。R-CCSの研究者は、FORTRAN、C、Python等のプログラミング言語をよく利用している。

● コンピュータシミュレーション

雲や惑星などの動き、建物や自動車など人工物の動き、心臓や筋肉などの臓器の動き、タンパク質やウイルスなどミクロな分子の動きを、数式を使って表し、それを計算機で解ける形に変形して、求める方法のこと。それらの動きをコンピュータでまねる。

計算科学研究センター チーム一覧

2021年4月現在

研究チーム

プログラミング環境研究チーム	佐藤 三久	チームリーダー
プロセッサ研究チーム	佐野 健太郎	チームリーダー
大規模並列数値計算技術研究チーム	今村 俊幸	チームリーダー
連続系場の理論研究チーム	青木 保道	チームリーダー
離散事象シミュレーション研究チーム	伊藤 伸泰	チームリーダー
量子系分子科学研究チーム	中嶋 隆人	チームリーダー
量子系物質科学研究チーム	柚木 清司	チームリーダー
粒子系生物物理研究チーム	杉田 有治	チームリーダー
粒子系シミュレータ研究チーム	牧野 淳一郎	チームリーダー
複合系気候科学研究チーム	富田 浩文	チームリーダー
複雑現象統一的解法研究チーム	坪倉 誠	チームリーダー
次世代高性能アーキテクチャ研究チーム	近藤 正章	チームリーダー
高性能ビッグデータ研究チーム	佐藤 賢斗	チームリーダー
データ同化研究チーム	三好 建正	チームリーダー
総合防災・減災研究チーム	大石 哲	チームリーダー
計算構造生物科学研究チーム	フロハンス タマ	チームリーダー
高性能人工知能システム研究チーム	松岡 聡	チームリーダー

運用技術部門

施設運転技術ユニット	塚本 俊之	ユニットリーダー
システム運転技術ユニット	宇野 篤也	ユニットリーダー
チューニング技術ユニット	庄司 文由	ユニットリーダー
利用環境技術ユニット	庄司 文由	ユニットリーダー
先端運用技術ユニット	山本 啓二	ユニットリーダー

HPC/AI駆動型医薬プラットフォーム部門

バイオメディカル計算知能ユニット	奥野 恭史	ユニットリーダー
創薬化学AIアプリケーションユニット	本間 光貴	ユニットリーダー
分子デザイン計算知能ユニット	池口 満徳	ユニットリーダー
AI創薬連携基盤ユニット	奥野 恭史	ユニットリーダー

各チームの研究内容についてさらに詳しく知りたい方は、ホームページをご覧ください。



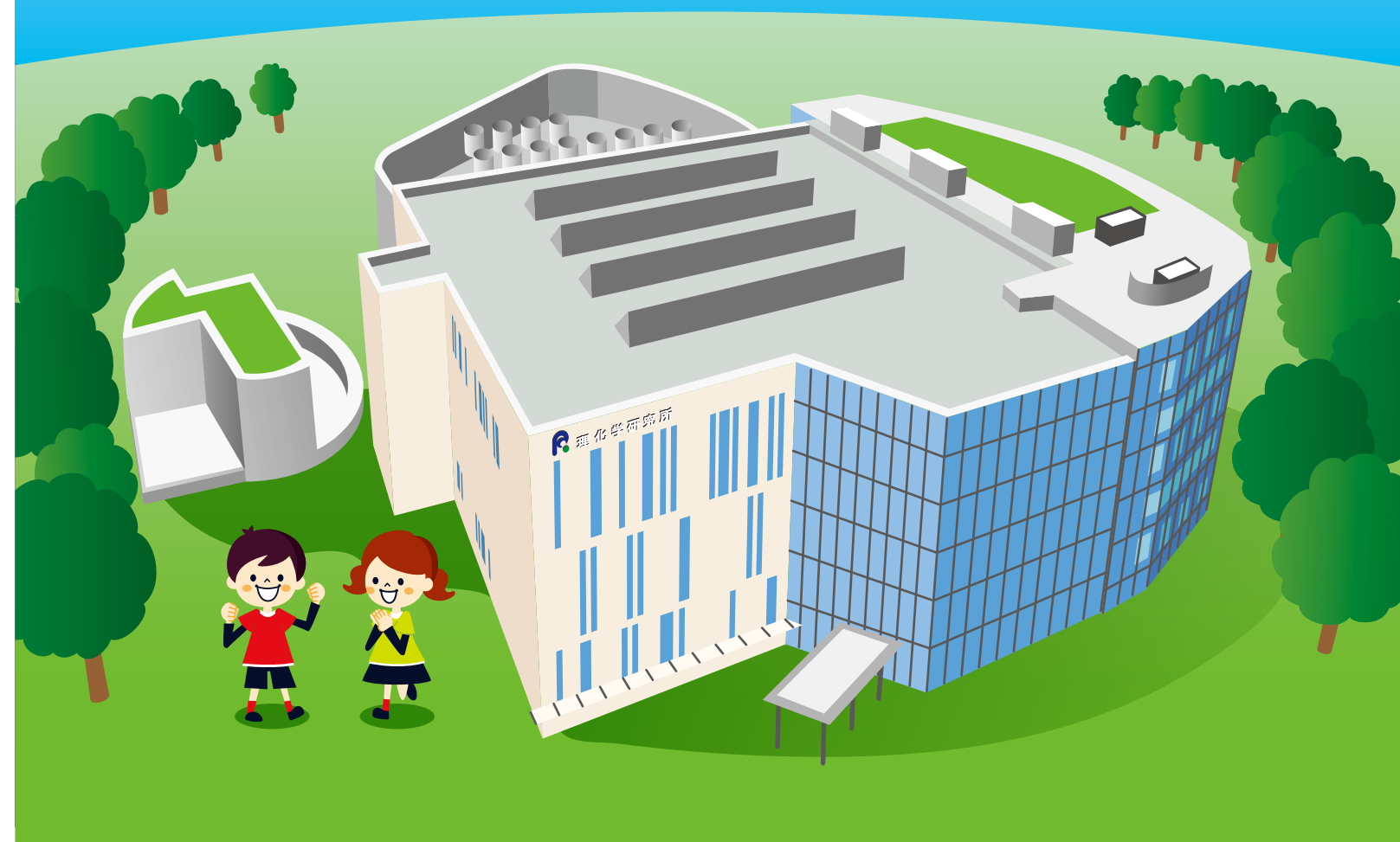
2017年10月(初版)/2021年4月(第7版)

〒650-0047
兵庫県神戸市中央区
港島南町7-1-26
TEL:078-940-5555(大代表)
Email:r-ccs-koho@ml.riken.jp
<https://www.r-ccs.riken.jp/>



RIKEN2019-013

理化学研究所 計算科学研究センター R-CCS まるわかりガイド



「富岳」を動かすのは私たち!

巨大な「富岳」を安定的に、かつ無駄なく
高速に計算させるために、私たちは「富岳」を支えます。

● プロセッサ研究チーム

「富岳」でたくさんの計算をするときに、離れたCPU同士ではなく近くのCPU同士でのやりとりを増やし計算を速く行えるような方法と、そのための回路のしくみを研究しています。

チームリーダー 佐野 健太郎

● 先端運用技術ユニット

「富岳」の設備やネットワークのはたらきを分析・改善し、最先端のデータセンターとして運用できるよう研究開発を行います。

ユニットリーダー 山本 啓二

● 施設運転技術ユニット

スーパーコンピュータが毎日安定的に動くように、計算機室内の温度から電力設備や冷却設備の大きな装置まで、厳しく管理を行っています。

ユニットリーダー 塚本 俊之

● システム運転技術ユニット

システムが正常に動いているか、ユーザーのプログラムがきちんと動いているかチェックをしています。プログラムが実行されるまでの待ち時間を短くする研究や、システムを使う人の手助けも行います。

ユニットリーダー 宇野 篤也

● 次世代高性能アーキテクチャ研究チーム

「京」や「富岳」よりもさらに計算速度が速く、かつ電力効率のよい次世代のコンピュータのしくみをハードウェア・ソフトウェアの両面から研究しています。

チームリーダー 近藤 正章

スーパーコンピュータ「富岳」って何? 家のパソコンとどう違うの?



スーパーコンピュータ「富岳」は、理化学研究所と富士通株式会社が共同で開発をしたスーパーコンピュータだよ。2021年3月9日、本格稼働が始まったんだ!
実は、「富岳」もパソコンも、CPUやメモリ、ハードディスク、電源、冷却装置など、基本的なつくりは同じなんだ。大きな違いはCPUの数とCPUをつなぐネットワーク。パソコンは普通CPUが1個しかないけれども、「富岳」は15万個以上のCPUがつつながるんだ。それぞれのCPUが同時に計算できるから、「富岳」は速く、たくさんの計算をすることができるようになるんだよ。

ここにも?そこにも!広がる計算の世界

「富岳」で行う計算は、私たちの暮らしにどのように関わっていくのでしょうか?
「富岳」は身近な所から基礎研究までさまざまなシミュレーションを行うとともに、人工知能(AI)の研究にも活用されます。

● 複合系気候科学研究チーム

天気や気候のしくみを明らかにするための研究をしています。より詳細に雲をシミュレーションするための計算方法の開発を行っています。

チームリーダー 富田 浩文

● 量子系物質科学研究チーム

物質の中で電子の動きを「富岳」でシミュレーションして、物質の性質がどのように決まるのかを調べる研究をしています。

チームリーダー 楠木 清司

● 粒子系生物物理研究チーム

「富岳」を使って細胞の中でのタンパク質のシミュレーションを行うために、分子動力学計算という方法にもとづくプログラムを開発しています。

チームリーダー 杉田 有治

● 計算構造生物学研究チーム

実験データと「富岳」を使ったシミュレーションを組み合わせることにより、生体分子の形や動きを詳しく知るための方法の開発・応用研究をしています。

チームリーダー フロバンス タマ

● バイオメディカル計算知能ユニット

私たちは、体の中の細胞や分子が放散することで病気になることがあります。本ユニットでは、「富岳」や人工知能(AI)を利用して、病気の原因を探り、効果的な治療法の開発を目指しています。

ユニットリーダー 奥野 恭史

● 創薬化学AIアプリケーションユニット

病気の治療薬は数億個を超える化合物の中から設計しています。本ユニットでは、人工知能(AI)を利用することによって治療薬設計の効率化を目指しています。

ユニットリーダー 本間 光貴

● 分子デザイン計算知能ユニット

分子シミュレーションと人工知能(AI)を組み合わせて、薬と標的のタンパク質の結合の様子や、どのような動きをするかといった計算を行う方法を開発し、薬の設計に役立っています。

ユニットリーダー 池口 満徳

● AI創薬連携基盤ユニット

薬の開発には長い年月と多くの開発費がかかります。私たちは「富岳」や人工知能(AI)を用いることで、より早く、より安く、より効果的な薬を開発することを目指しています。

ユニットリーダー 奥野 恭史

● 連続系場の理論研究チーム

スーパーコンピュータを使った場の理論のシミュレーションから素粒子の基本法則を探り、宇宙の歴史と物質のなりたちを研究しています。またそのための計算方法の開発も行っています。

チームリーダー 青木 保道

● 離散事象シミュレーション研究チーム

交通渋滞や人の流れ、経済活動など、さまざまな社会現象を「京」「富岳」ほかのスーパーコンピュータによるシミュレーションにより解析するための技術の開発をしています。

チームリーダー 伊藤 伸泰

● 総合防災・減災研究チーム

地震、津波、集中豪雨などの災害が街で起こった時、どのような被害があるかをシミュレーションし、防災・減災計画に役立てる研究をしています。

チームリーダー 大石 哲

● 高性能人工知能システム研究チーム

これからの社会に不可欠な人工知能(AI)・機械学習の高性能化を目指し、スーパーコンピュータ上でこれら大規模かつ高速に計算できるシステムの研究をしています。

チームリーダー 松岡 聡

● 量子系分子科学研究チーム

大きな分子や複雑な分子を、「富岳」で速く計算するためのソフトウェアを開発して、新しい材料のシミュレーションをしています。

チームリーダー 中嶋 隆人

● データ同化研究チーム

シミュレーションに観測データの情報を追加して、シミュレーションの精度を高める研究をしています。天気予報の精度向上などに役立ちます。

チームリーダー 三好 健正

● 複雑現象統一的解法研究チーム

空気の流れ、熱、音などの現象を「富岳」で一度にシミュレーションし、データ科学と融合したフレームワークを開発することで、自動車設計などのものづくりに役立っています。

チームリーダー 坪倉 誠