

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！

● ソフトウェア開発技術ユニット
「富岳」の能力を引き出せるようなソフトウェアを開発・整備します。
ユニットリーダー 村井 均
#ソフトウェア開発 #プログラミング #「富岳」の運用

```
m = min(m_orig, n)
!SOMP MASTER
call eigen_prd_init(a(1,1), nm, n,
& d_out(1), e_out(1,1), ne,
& u_t(1), v_t(1), nv)
!SOMP END MASTER
```

● 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、より速く正しく計算ができるように新しいアルゴリズムを研究開発しています。
チームリーダー 今村 俊幸
#大規模計算 #並列計算 #計算方法

● 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
#システムソフトウェア #ビッグデータ #性能評価・解析

● 材料・物性アブリンターフェース基盤開発ユニット
AIを用いて量子化学や物質科学の新しい計算方法やソフトウェアを自動的に考案・生成するための技術開発をしています。
ユニットリーダー 中嶋 隆人
#材料 #分子 #人工知能(AI)

● 生命・医科学アブリンターフェース基盤開発ユニット
「富岳」を用いたシミュレーションとさまざまな実験データをデータ同化・AIなどを用いて組み合わせ、医療や創薬に活用します。
ユニットリーダー 杉田 有治
#機械学習 #データ同化 #自動化

● データ連携技術ユニット
「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 甲斐 俊彦
#大量データ #高速ネットワーク #「富岳」と他システムとのデータ連携

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。

● ソフトウェア
コンピュータに命令を出すためのプログラムのこと。コンピュータの最も基本的で重要な動作手順が書かれたシステムソフトウェアと、人がコンピュータに仕事をさせるときに使うアプリケーションソフトウェア(アプリとも)がある。

● 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。

● AI
AIはArtificial Intelligenceの略で、人工知能のこと。事例をもとに訓練され、新しい問題の解決に向けた認識、推論、言語運用および創造などの知的行動を人間に代わって行う。現在では日常的にも応用されている。

● 量子コンピュータ
0と1を重ね合わせた特殊な状態(量子状態)をつくり、それを量子ビットという情報単位にして計算を行うコンピュータ。量子コンピュータは未知の計算可能領域を拡大する技術として期待されているが、従来のスパコンに代わるものでなく、連携して利用することによって、有効に利用できることが期待されている。

計算科学研究センター チーム一覧

2024年4月現在

研究チーム		
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
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
計算構造生物学研究チーム	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	モハマド ワヒブ	チームリーダー
高性能計算モデリング研究チーム	イェンス ドンケ	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
大規模デジタルツイン研究チーム	山口 弘純	チームリーダー

運用技術部門		
施設運転技術ユニット	三浦 信一	ユニットリーダー
システム運転技術ユニット	井口 裕次	ユニットリーダー
ソフトウェア開発技術ユニット	村井 均	ユニットリーダー
データ連携技術ユニット	甲斐 俊彦	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

量子HPC連携プラットフォーム部門		
量子HPCソフトウェア環境開発ユニット	辻 美和子	ユニットリーダー
量子計算シミュレーション技術開発ユニット	伊藤 伸泰	ユニットリーダー
量子HPCプラットフォーム運用技術ユニット	三浦 信一	ユニットリーダー

AI for Scienceプラットフォーム部門		
AI学習最適化基盤開発ユニット	モハマド ワヒブ	ユニットリーダー
AI学習・推論データ管理基盤開発ユニット	佐藤 賢斗	ユニットリーダー
次世代AIデバイス開発研究ユニット	佐野 健太郎	ユニットリーダー
AI開発計算環境運用技術ユニット	三浦 信一	ユニットリーダー
生命・医科学アブリンターフェース基盤開発ユニット	杉田 有治	ユニットリーダー
材料・物性アブリンターフェース基盤開発ユニット	中嶋 隆人	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。

〒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/

2017年10月(初版)/2024年5月(第13版)

理化学研究所
計算科学研究センター
RIKEN Center for Computational Science

QRコード

「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。

●量子HPCソフトウェア環境開発ユニット

スーパーコンピュータと量子コンピュータが連携して計算をするためのプログラミング言語、モデルやシステムソフトウェアを開発しています。

ユニットリーダー 辻 美和子

#量子コンピュータとスーパーコンピュータの連携

#連携のためのソフトウェア

#連携のためのプログラミング環境

●量子計算シミュレーション技術開発ユニット

量子コンピュータや量子アルゴリズム等を開発するために、スーパーコンピュータや高性能GPUシステム上で動く量子計算シミュレーション技術の開発・高度化等を行います。

ユニットリーダー 伊藤 伸泰

#量子コンピュータ

#量子計算

#シミュレーション

●量子HPCプラットフォーム運用技術ユニット

量子コンピュータはまだ一般的ではなく、ユーザが利用するためには多くの課題があります。ハードウェア・ソフトウェア両面からユーザの利用環境を整備しています。

ユニットリーダー 三浦 信一

#量子コンピュータの運用

#ス/パソコン・量子コンピュータの連携

●AI開発計算環境運用技術ユニット

AI技術の開発には多くのGPUを使用したスバコンが欠かせません。また、スバコンのみならず多くのデータを蓄積・活用する技術も必要です。AI技術を科学技術の発展につなげるため、ハードウェア・ソフトウェア両面からユーザの利用環境を整備しています。

ユニットリーダー 三浦 信一

#AI用スバコンの運用

#AI用データ連携

●次世代AIデバイス開発研究ユニット

「確かし」も提示できるような新しいAIの基盤モデルや、それを効率良くかつ高速に処理するためのAI向けアクセラレータの研究開発を行います。

ユニットリーダー 佐野 健太郎

#次世代基盤モデル

#AI向けアクセラレータアーキテクチャ

#AIデバイス

●AI学習・推論データ管理基盤開発ユニット

AI学習・推論やAIの利活用を効率よく行うためのデータ基盤の研究開発を行っています。データ基盤の利便性向上は AI for Science の発展にも役立ちます。

ユニットリーダー 佐藤 賢斗

#人工知能 (AI)

#データ基盤

#データ圧縮

●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

#コンピュータの構造

#問題に特化した計算回路の設計

#並列計算方法

#エラーの少ない量子計算機

●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

#データセンター運用

#ビッグデータ

#クラウド

●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 三浦 信一

#「富岳」の運用

#大型施設

#省エネ

●システム運転技術ユニット

みんなが安心して「富岳」を使うように日々チェックをしたり、壊れたところがあれば直しています。「富岳」を使っている皆さんの質問に答えたり、お話をうかがったりして、より使いやすくするにはどうすればよいのか、トラブルが発生しないよう未然に防ぐのはどうすればよいのかを研究しています。

ユニットリーダー 井口 裕次

#「富岳」の安定運用

#ユーザーサポート

#ソフトウェアの充実

#節電対策

●高性能計算モデリング研究チーム

高度な専門知識がないユーザにも快適に「富岳」や他の最先端のマシンを使ってもらえるようにするため、いろいろな仕組みのソフトウェア・ハードウェアから最適なものを選ぶための方法を研究・開発しています。

チームリーダー イエンス ドンケ

#コンピュータのしくみ

#コデザイン

●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・開発しています。

チームリーダー 近藤 正章

#コンピュータのしくみ

#計算方法

#ソフトウェア

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で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、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

#大気

#雲

#気候

#シミュレーション

●量子系物質科学研究チーム

物質の中での電子の動きを「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 保道

#素粒子

#物理

#シミュレーション

#材料

#生物物理

#分子動力学計算

#タンパク質

#機械学習

#計算物理

#量子コンピュータ

#社会現象

#自然現象

#シミュレーション

#災害

#デジタルツイン

#システムソフトウェア

#ビッグデータ

#人工知能 (AI)

#化学

#分子

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

●粒子系生物物理研究チーム

「富岳」を使って細胞の中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いてプログラムを開発しています。

チームリーダー 杉田 有治

#生物物理

#分子動力学計算

#タンパク質

#機械学習

#計算物理

#量子コンピュータ

#社会現象

#自然現象

#シミュレーション

#災害

#デジタルツイン

#システムソフトウェア

#ビッグデータ

#人工知能 (AI)

#化学

#分子

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

●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故障することで病気になってしまいます。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

#医療

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

●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

#創薬

#人工知能 (AI)

#量子化学

#化学情報学

#データサイエンス

#データベース

#創薬

#人工知能 (AI)

#量子化学

#化学情報学

#データサイエンス

#データベース

#創薬

#人工知能 (AI)

●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、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、薬の設計に役立てます。

ユニットリーダー 池口 満徳

#創薬

#生体分子

#シミュレーション

#人工知能 (AI)

#創薬

#生体分子

#シミュレーション

#人工知能 (AI)

#創薬

#生体分子

#シミュレーション

#人工知能 (AI)

#創薬

#生体分子

●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

#天気予報

#ビッグデータ

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

●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

#社会現象

#自然現象

#シミュレーション

#計算物理

#量子コンピュータ

#社会現象

#自然現象

#シミュレーション

#計算物理

#量子コンピュータ

#社会現象

#自然現象

#シミュレーション

#計算物理

●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

#災害

#デジタルツイン

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

#創薬

#人工知能 (AI)

#シミュレーション

●大規模デジタルツイン研究チーム

都市の人や車、イベントなどの情報をIoTに取り込み、仮想空間上にリアルタイム再現する都市デジタルツインを「富岳」に作る研究をしています。未来社会をAI予測し、その改善に役立ちます。

チームリーダー 山口 弘純

#未来社会

#社会科学

#デジタルツイン

#人工知能 (AI)

#未来社会

#社会科学

#デジタルツイン

#人工知能 (AI)

#未来社会