

# スパコンとは

スパコンとはスーパーコンピュータの略称で、科学技術計算を主要目的とする大規模コンピュータシステムです。複数のCPUを高速なネットワークで結合し、並列処理機能を用いることで、仮想実験(シミュレーション)を効率的に実現します。

## スパコンを使用するメリット

パソコンとスパコンを比較すると、スパコンはパソコンに比べてCPU数やメモリ容量などの規模が遥かに大きいです。そのため、**今までのパソコンでは扱うことができなかった大規模な計算が可能となり、複雑な物理現象の解明や製品開発における設計コストの削減などができる**ようになります。

### ■ パソコンとスパコンの比較

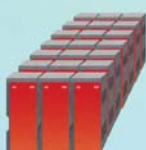


パソコン

4

4 GB

500 GB



スパコン

(パソコン数千~数万台に相当)

663,552

1.26 PB

30 PB

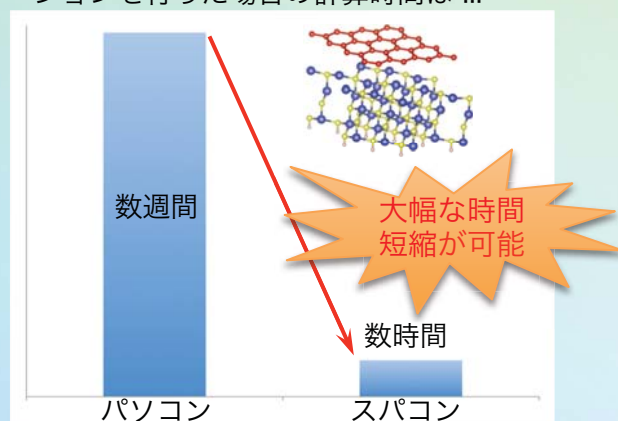
CPU(コア)数

メモリ容量

ハードディスク容量

※ スーパーコンピュータ「京」紹介スライドより引用  
(<http://www.aics.riken.jp/jp/k/system.html>)

例えば同じ条件(数百原子)の分子動力学シミュレーションを行った場合の計算時間は ...



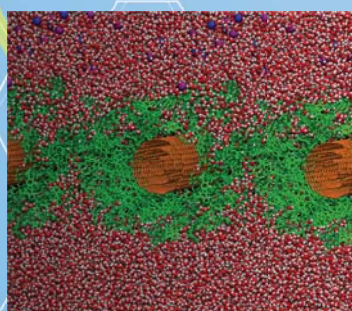
※ パソコンとスパコンの処理イメージ  
(実際には内容により異なります)

## シミュレーションプログラム

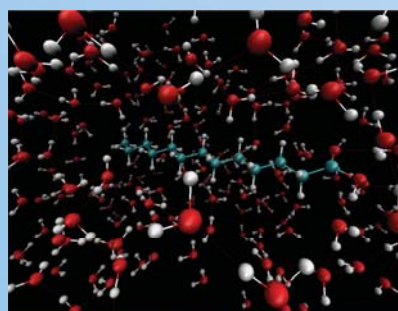
RISTでは、次の物質科学シミュレーションをはじめ、さまざまな科学技術計算分野のプログラムを利用しています。

プログラム名	プログラムの概要
LAMMPS	オープンソースの汎用古典分子動力学アプリケーション。ソフトマター、個体、メゾスコピック系などの多くの系で動力学計算を行うことができる。
DFTB+	DFTB(Density Function based Tight Binding)法による量子化学計算アプリケーション。通常のエネルギー計算の他、DFTB力場による構造最適化や分子動力学計算が可能。
PHASE/O	密度汎関数理論に則った平面波基底・擬ポテンシャル法電子計算プログラム。未知の物質に対する様々な物性予測のほか、STM像、EELSなどの実験測定を再現することが可能。

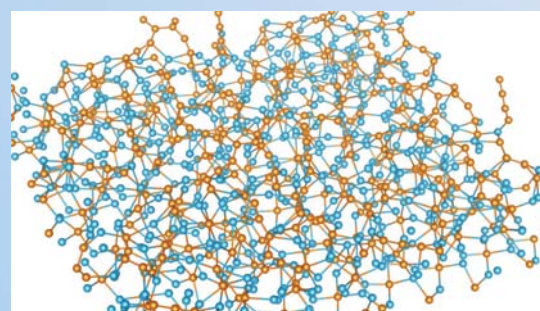
※ MateriApps(<http://ma.cms-initiative.jp/ja/>)より引用



LAMMPS



DFTB+



PHASE/O

