

<補足説明>

(1) スーパーコンピュータ「京(けい)」

文部科学省が推進する「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」プログラムの中核システムとして、理化学研究所と富士通が共同で開発を行い、2012年9月に共用を開始した計算速度10ペタフロップス級のスーパーコンピュータ。

「京」の持つシミュレーション精度や計算速度の飛躍的な高さを活かした世界最高水準の成果が期待され、HPCI 戦略プログラムの他、産官学を問わずあらゆる分野の課題を公募して、「京」で初めて実現できる研究課題を厳選して実施している。

(2) HPCI 戦略プログラム

「京」を中心としたHPCIを最大限に活用することによって、①画期的な成果の創出、②高度な計算科学技術環境を使いこなせる人材の創出、③最先端コンピューティング研究教育拠点の形成を目指し、戦略的に取り組むべき5つの研究分野(戦略分野)において「研究開発」および「計算科学技術推進体制の構築」を推進する文部科学省のプログラム。

5つの研究分野(戦略分野)

- ・分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤(戦略機関:理化学研究所)
- ・分野2 新物質・エネルギー創成
(戦略機関:東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所)
- ・分野3 防災・減災に資する地球変動予測(戦略機関:海洋研究開発機構)
- ・分野4 次世代ものづくり
(戦略機関:東京大学生産技術研究所、宇宙航空研究開発機構、日本原子力研究開発機構)
- ・分野5 物質と宇宙の起源と構造
(戦略機関:筑波大学、高エネルギー加速器研究機構、国立天文台)

戦略機関とは、各戦略分野における研究開発等を牽引する機関

(3) HPCI 戦略プログラム 分野1

理化学研究所が戦略機関となり、全国の大学、研究機関が参画し共同して研究を行なっている。研究課題をそれぞれ「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」、「創薬応用シミュレーション」、「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」そして「大規模生命データ解析」の4つの課題を設定しており、各課題では「京」で動作するアプリケーションの研究開発も行っている。ゲノム・タンパク質から細胞・臓器・全身にわたる生命現象を統合的に理解する事により、疾病メカニズムの解明と予測を行う。医療や創薬プロセスの高度化への寄与も期待される。

参加機関:東京大学、日本原子力研究開発機構、沖縄科学技術大学院大学学園、東京工業大学、産業技術総合研究所、九州大学、岡山大学、大阪大学、横浜市立大学、京都大学、東海大学(順不同)

(4) 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

HPCI 戦略プログラム 分野2を推進する研究ネットワーク。物性科学、分子科学、材料科学のコミュニティを母体とし、大規模計算でサイエンスのブレークスルーを目指す全国の計算科学研究者で構成されている。

物質を原子・電子レベルから総合的に理解することにより、超伝導物質、新機能性分子や電子デバイス、さらには各種電池やメタンハイドレート、構造材料など、新物質やエネルギーの創成に関する研究を戦略的に推進している。一方、将来「京」を活用する候補となる研究を幅広く支援し、また、開発したアプリケーションソフトの利用を促進する等、計算物質科学分野の振興活動を実施している。