

SS研科学技術計算分科会(第2回会合)

次世代スーパーコンピュータが 拓く計算化学の世界

平成19年11月29日

理化学研究所

高田俊和

内容

計算化学手法による分子レベルでの生体機能の解明

自律的發展機能を内在する連成プログラムの開発

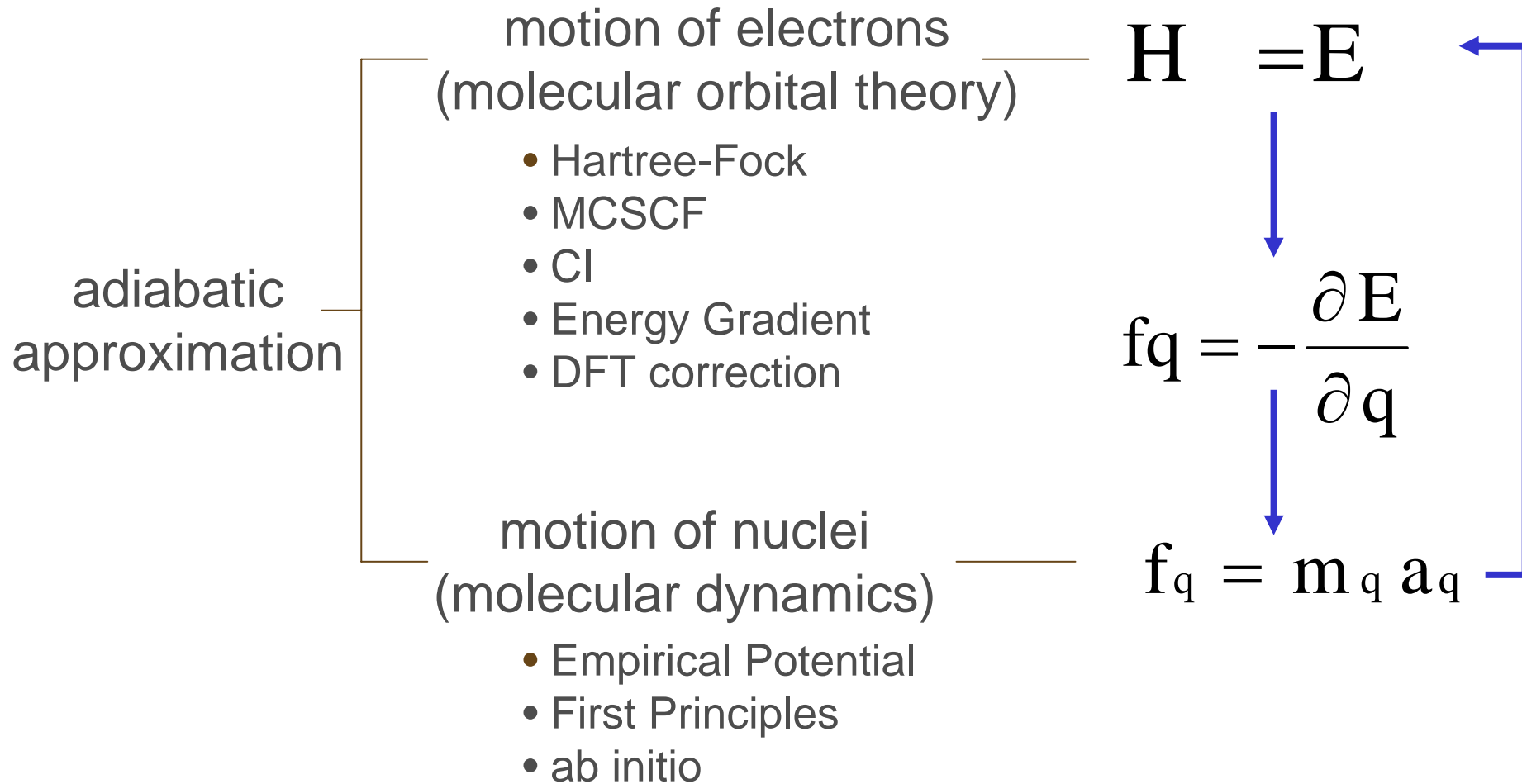
IT利用によるシミュレーション技術の確立と産業応用

マテリアルシミュレーションの原点

The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations much too complicated to be soluble.

P. A. M Dirac, Proc. Roy. Soc. (London), 123, 714 (1929)

マテリアルシミュレーションの理論的枠組み



What is AMOSS ?

An ab initio Molecular Orbital System for Supercomputers,
newly developed by NEC quantum chemistry group,
specially designed for large scale MO calculations,
in order to aim at bio material simulations,
by taking advantage of vector computers first,
then now by using parallel computers

自然に学ぶものづくり



Published in 1976

30 years later since then

New Structure Biology

X-Ray, NMR, Mass and so on

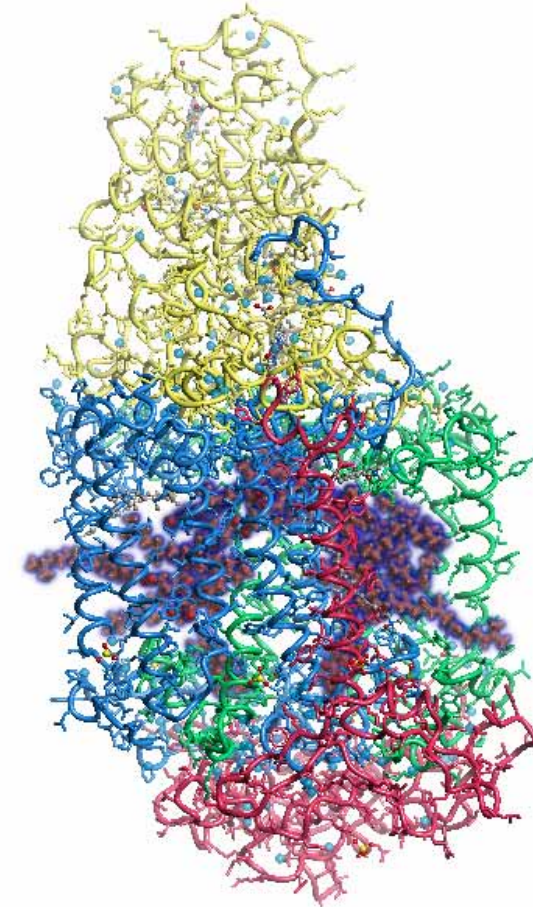
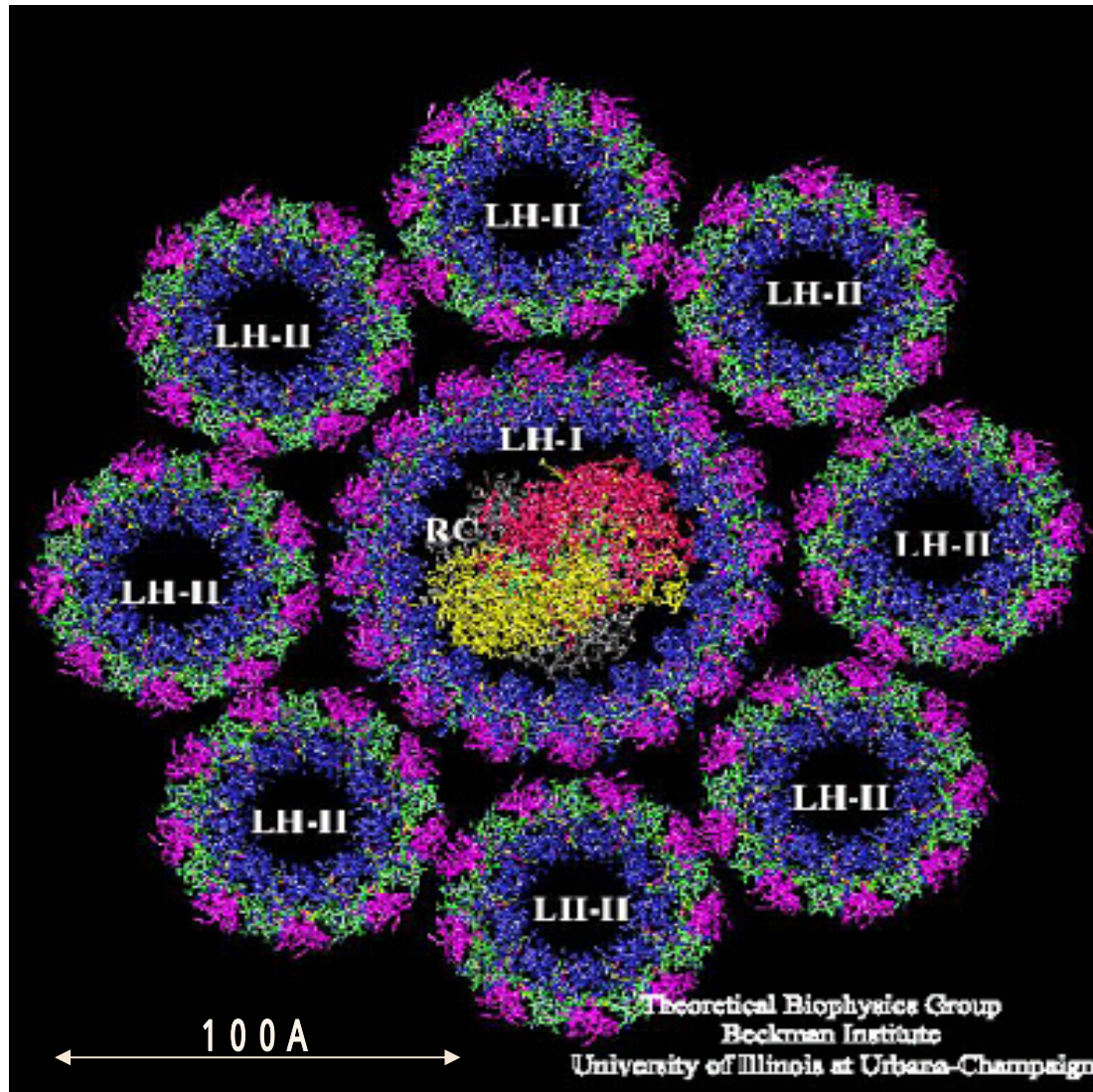
Advanced IT Technology

Molecular Simulations, Data Base,
GRID, Internet and so on



Ready to Learn from Nature

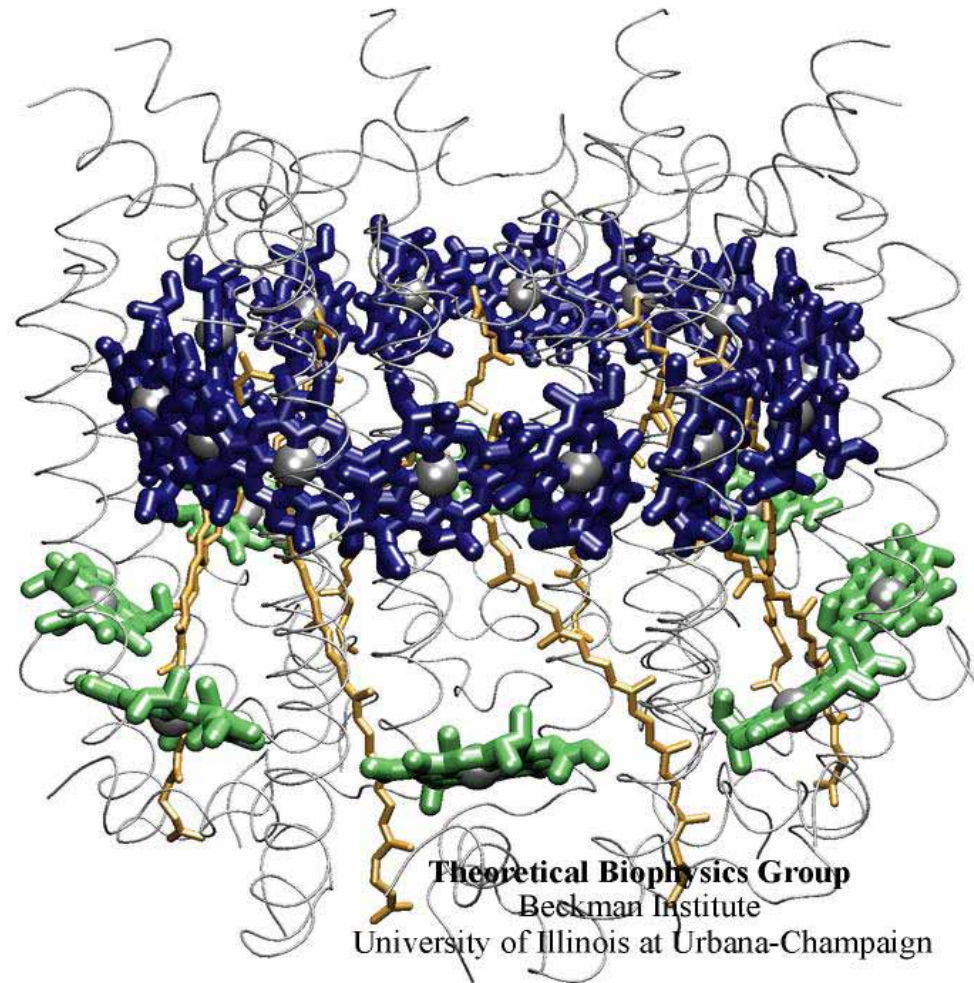
光合成反応中心とアンテナクロロフィルの構造



Chlorophyll Dimer and its Electron Distribution

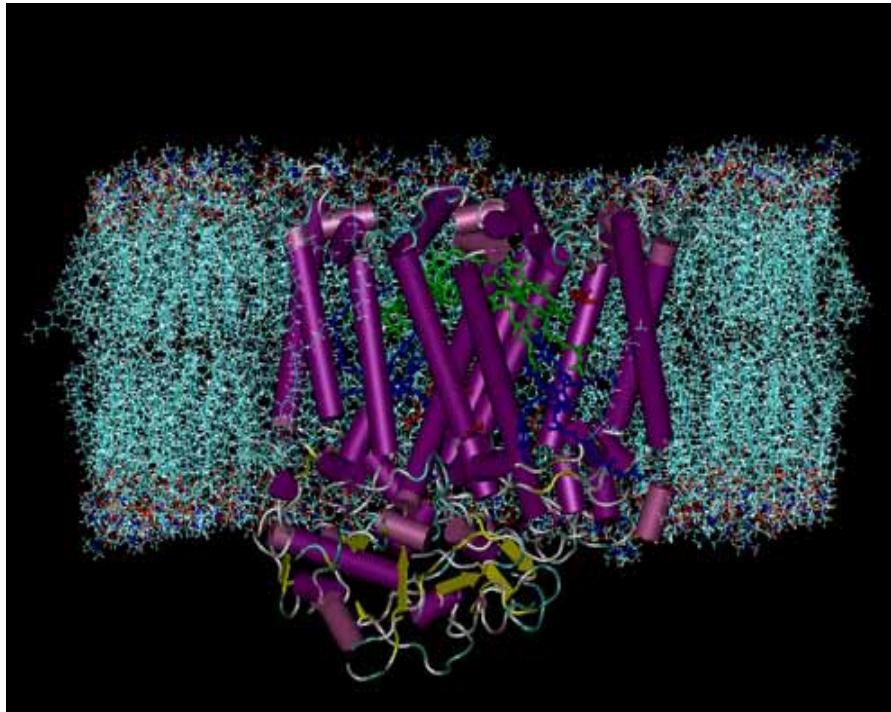
これらの分子系では、エネルギー伝達(左)と電子移動(右)がほぼ100%の効率で起きることが、知られている。

アンテナクロロフィルの構造と太陽光捕獲メカニズム



JST - CRESTプロジェクトの目的

QM(MRSCI+DFT)/MM法による生体電子伝達メカニズムの理論的研究



紅色非硫黄細菌光合成反応中心の構造

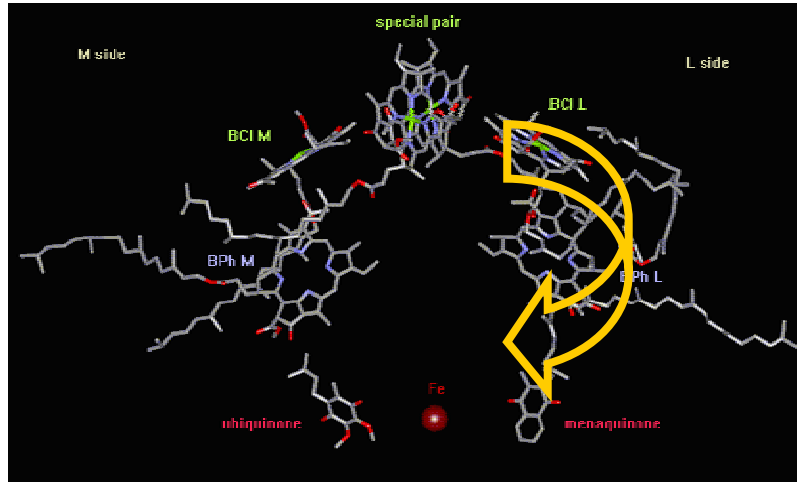
研究目的(1)

光合成初期過程における電荷分離のメカニズムを分子レベルで解明し、高効率太陽電池開発のための基本原理をさぐる。

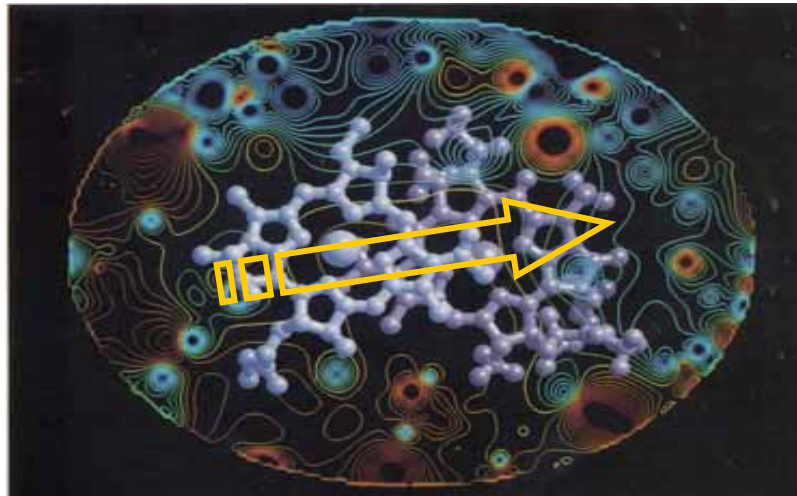
研究目的(2)

生体電子伝達メカニズム解明に資する、大規模生体分子シミュレーションプログラムを開発する。

光合成初期電荷分離過程の概略



活性中心における色素分子



クロロフィル2量体周辺タンパク質の作る静電ポテンシャル

T. Sakuma et al, Int. J. Quant. Chem., 61, 137(1997)

科学的興味

- 1) ほぼ C_2 の対称性を持つが、右側のチャンネルのみを使用
- 2) アクセサリChlまでの電荷分離を、3ピコ秒という高速・高効率で実現

これまでの計算結果

- 1) 周辺タンパク質が、電子を左から右に押すポテンシャル場を形成

本プロジェクトでの計算

- 2) のメカニズムを、本計算で説明



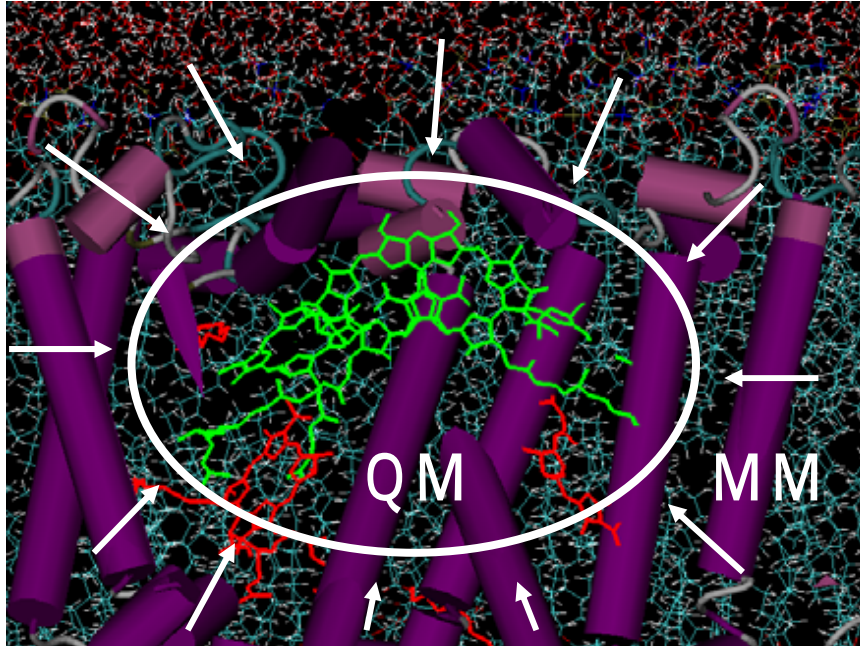
太陽電池開発に向けた基本原理の理解

Chl: Chlorophyll

10

QM / MM法の概略と課題

(QM / MM: Quantum Mechanics / Molecular Mechanics)



$$E = E_{QM} + E_{MM} + E_{QM/MM}$$

QM空間: 化学反応の起こる領域
小さくして、高速化

MM空間: QM以外の2次的領域
近似式で、高速化

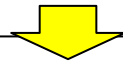


特徴: 化学事象に対する計算精度を保持しつつ、大幅な計算時間短縮が可能

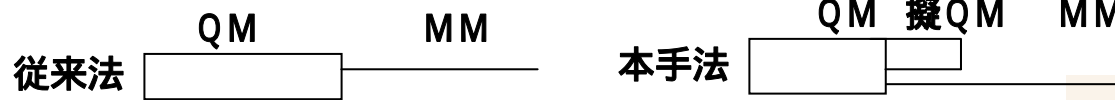


米国・欧州でソフト開発競争

新たな課題: QM・MM境界領域の記述が困難



MMポテンシャルをQM空間に染み込ませる独自理論(阪大Bio Grid)



QM / MM法における計算手法と分担

1) MRSCI法による励起状態波動関数の正確な記述

理化学研究所高田グループ

2) 動的電子相関記述のためのDFT法との融合

大阪大学極限量子科学研究センター山口グループ

3) 周辺蛋白質の影響を考慮するための分子力場法との統合

大阪大学蛋白質研究所中村グループ

M R S C I プログラム開発における課題と対策

1) ベクトル法をベースとした**ダイレクト方式**の採用

$$\sigma_I = \sum_J H_{IJ} C_J$$

$$H_{IJ} = \langle \Phi_I | \hat{H} | \Phi_J \rangle = \sum_{ij} \gamma_{ij}^{IJ} h_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \Gamma_{ijkl}^{IJ} (ij | kl)$$

並列化アルゴリズムの開発が中心課題

2) 計算規模

・基底関数 > 1 ~ 2万、固有値問題 > 数億次元

3) 基本方針とアルゴリズム

・MO積分: **独自開発の並列アルゴリズム** (特許3990130号)

$$(ij | kl) = \sum_r^N \sum_s^N \sum_t^N \sum_u^N c_{ra} c_{sb} c_{tc} c_{ud} (rs | tu)$$

・固有値問題: Davidson法

3000万次元を解くのに、PC1台で10秒程度

・ハミルトニアン行列要素: **SGA** (Symmetry Group Approach)
グラフ理論との併用により、効率化に成功

2 電子積分変換並列化アルゴリズム

< first step >

```
do t
  do u
    do d
      (RS|td) = (RS|td) + cud (RS|tu)
    end do
  end do
end do
```

< second step >

```
do d
  do t
    do c
      (RS|cd) = (RS|cd) + ctc (RS|td)
    end do
  end do
end do
```

< third step >

```
do d
  do c
    do B
      (RB|cd) = (RB|cd) + cSB (RS|cd)
    end do
  end do
end do
```

< fourth step >

```
do d
  do c
    do B
      do A
        (AB|cd) = (AB|cd) + cRA (RB|cd)
      end do
    end do
  end do
end do
```

このアルゴリズムでは、大文字で示されたRとSで、並列化しているのが、特徴である

Ref: K Nakata et al, J. Computational and Applied Mathematics, 149 (2002) 351-357

Maltopentaose計算におけるスピードアップ (128ノード)

MINI-4 332AO's

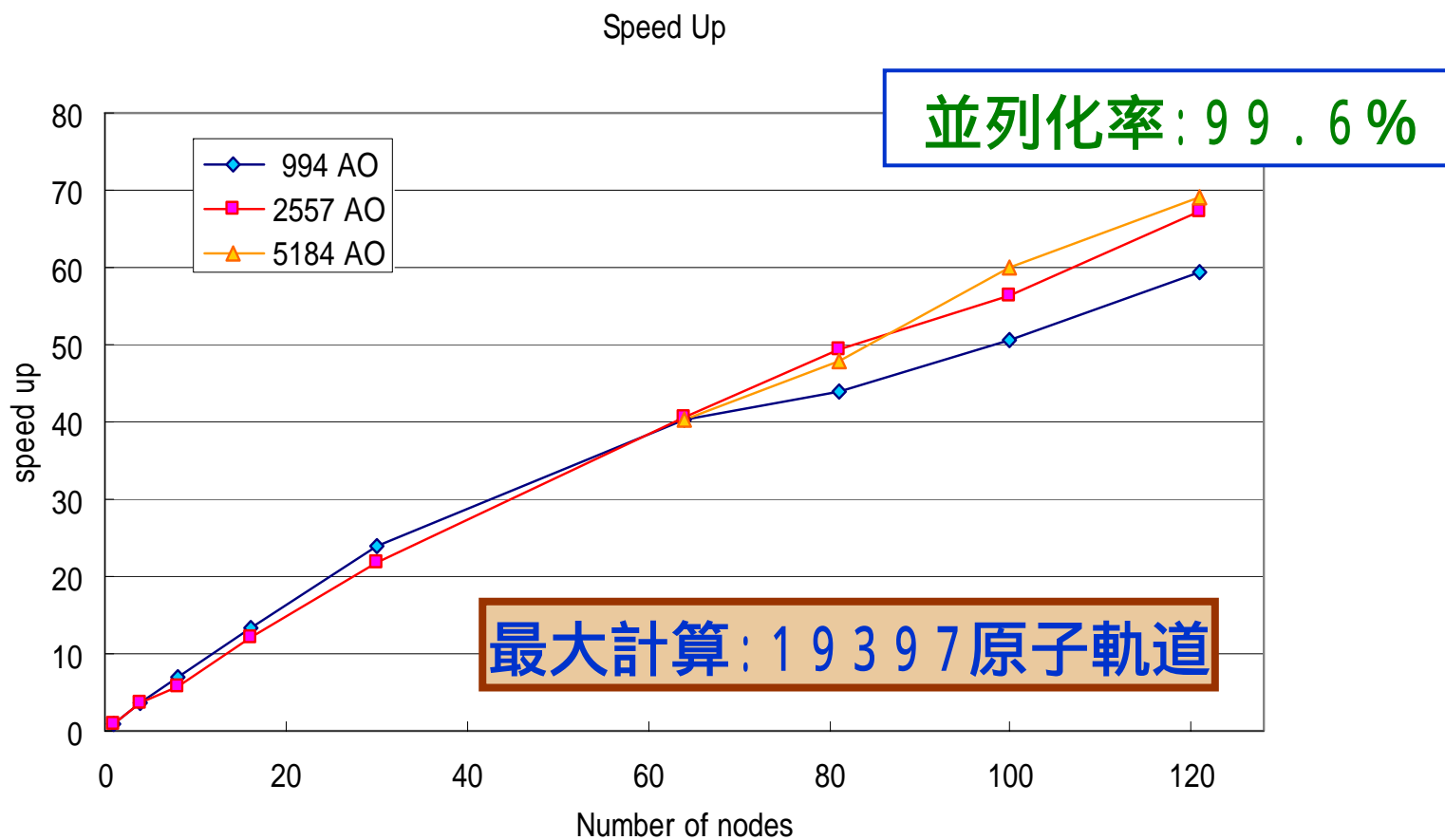
Proc	(m, n)	Time (sec)	speedup	ratio(%)	(m, n)	Time (sec)	speedup	ratio(%)
1	1,1	12097.920						
4	4,1	3055.838	3.959	99.654	1,4	3059.077	3.955	99.619
16	16,1	806.942	14.992	99.552	4,4	769.102	15.730	99.886
64	64,1	248.562	48.672	99.500	16,4	211.011	57.333	99.815
128	128,1	144.956	83.459	99.580	32,4	119.012	101.653	99.796

MIDI-4 608AO's

Proc	(m, n)	Time (sec)	speedup	ratio(%)	(m, n)	Time (sec)	speedup	ratio(%)
1	1,1	48434.930						
4	4,1	12281.310	3.944	99.525	1,4	12266.150	3.949	99.567
16	16,1	3115.090	15.548	99.806	4,4	3100.000	15.624	99.840
64	64,1	865.877	55.937	99.771	16,4	800.681	60.492	99.908
128	128,1	454.811	106.495	99.841	32,4	419.875	115.356	99.914

PC cluster: Pentium 4, 129 Nodes, RedHat Linux 6.2 and LAM/MPI 6.5.4

Hartree-Fock計算における並列化効率(121ノード)



PC cluster: Pentium 4, 129 Nodes, RedHat Linux 6.2 and LAM/MPI 6.5.4

山本純一他、“PCクラスタによる大規模分子軌道計算”、分子構造総合討論会、京都、2004

CASCIとMRSCIプログラム開発の進捗状況

CASCI

SGAとDavidson法の基本計算部は完成

```
Iter  MaxNormResidue  MaxDiffEnergy
  0   3.49487558e-01  1.00000000e+00
  1   2.71841345e-01  1.85794722e-03
  2   8.43113649e-02  1.79027104e-03 .....
 12   3.33158777e-08  1.13995245e-15
```

	State	Energy	No.	CI-Coef	CSF
1	-7.54349966e+01	1	9.82542797e-01	22110,110101>	
		4	4.43874654e-02	21120,110101>	
		14	-1.21817796e-01	12111,110101>	
		16	-6.48867101e-02	12111,011101>	
		27	3.97570956e-02	11121,011101>	
		31	6.92639976e-02	21102,110101>	
		36	-3.52398073e-02	20112,110101>	
		40	-7.33217441e-02	02112,110101>	

MRSCI

開発中

分子:水 活性軌道数:5 活性電子数:6 スピン多重度:triplet 電子状態数:10

新規MRCI + DFT理論構築の基本的考え方

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{1}{r_{12}} [\rho_1(\mathbf{r}_1)\rho_1(\mathbf{r}_2) + \rho_1(\mathbf{r}_1)\rho_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)] \\ &+ \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{1 - e^{-\lambda r_{12}}}{r_{12}} [\rho_1(\mathbf{r}_1)\rho_C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)] \\ &+ E_{RC}[\rho(\mathbf{r})] \end{aligned}$$

量子多体レベル

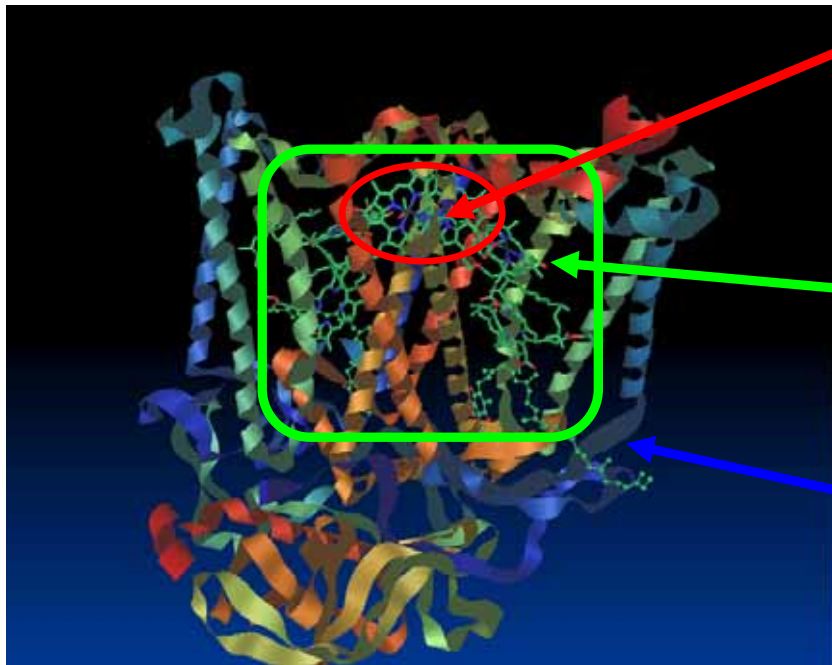
擬縮重状態・励起状態・化学反応等明白な量子多体効果を担う活性電子は多配置波動関数(MRCI)で

量子平均場レベル

量子平均場的に活性電子に影響を与える電子は密度汎関数(DFT)で

古典(分子)力学レベル

活性電子との量子的相互作用(化学結合)をしない周囲の蛋白質等の効果は分子力学(MM)で



新規MRCI-DFT理論の有効方程式導出

CI波動関数で期待値を取った時に古典クーロン、交換項、長距離走間項を再現するような有効二電子演算子を定義

$$\langle \Psi_K^{CI} | \hat{V}_{clmb} | \Psi_K^{CI} \rangle = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\rho_K^{CI}(\mathbf{r}_1) \rho_K^{CI}(\mathbf{r}_2)}{r_{12}} \quad \langle \Psi_K^{CI} | \hat{V}_{ex} | \Psi_K^{CI} \rangle = -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\rho_K^{CI}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) \rho_K^{CI}(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1)}{r_{12}}$$

$$\hat{V}_C^{\lambda:Long} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} [a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{l\sigma}^+ a_{k\sigma'} - a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma} \sum_d^{\text{deg energy}} | \Psi_{K,d}^{CI} \rangle \langle \Psi_{K,d}^{CI} | a_{l\sigma}^+ a_{k\sigma'} + a_{k\sigma}^+ a_{i\sigma} \sum_d^{\text{deg energy}} | \Psi_{K,d}^{CI} \rangle \langle \Psi_{K,d}^{CI} | a_{l\sigma}^+ a_{j\sigma} \delta_{\sigma\sigma'}]$$

$$\times \int \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{r_{12}} (1 - e^{-\lambda r_{12}}) \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_k(\mathbf{r}_2) \phi_j(\mathbf{r}_1) \phi_l(\mathbf{r}_2)$$

“有効2電子演算子”

$$\hat{V}_{ee}^{eff} = \sum_K^{States} |K\rangle \langle K| \hat{V}_{clmb} + \hat{V}_X + \hat{V}_C^{\lambda:Long} |K\rangle \langle K|$$

電子ガス系での量子モンテカルロ計算結果(Savin1995,1996)から短距離相関部分を抽出する有理汎関数を構築

$$E_{RC}[\rho(\mathbf{r})] = C_{prefactor} [\lambda : \rho(\mathbf{r})] E_C[\rho(\mathbf{r})]$$

“残余相関ポテンシャル”

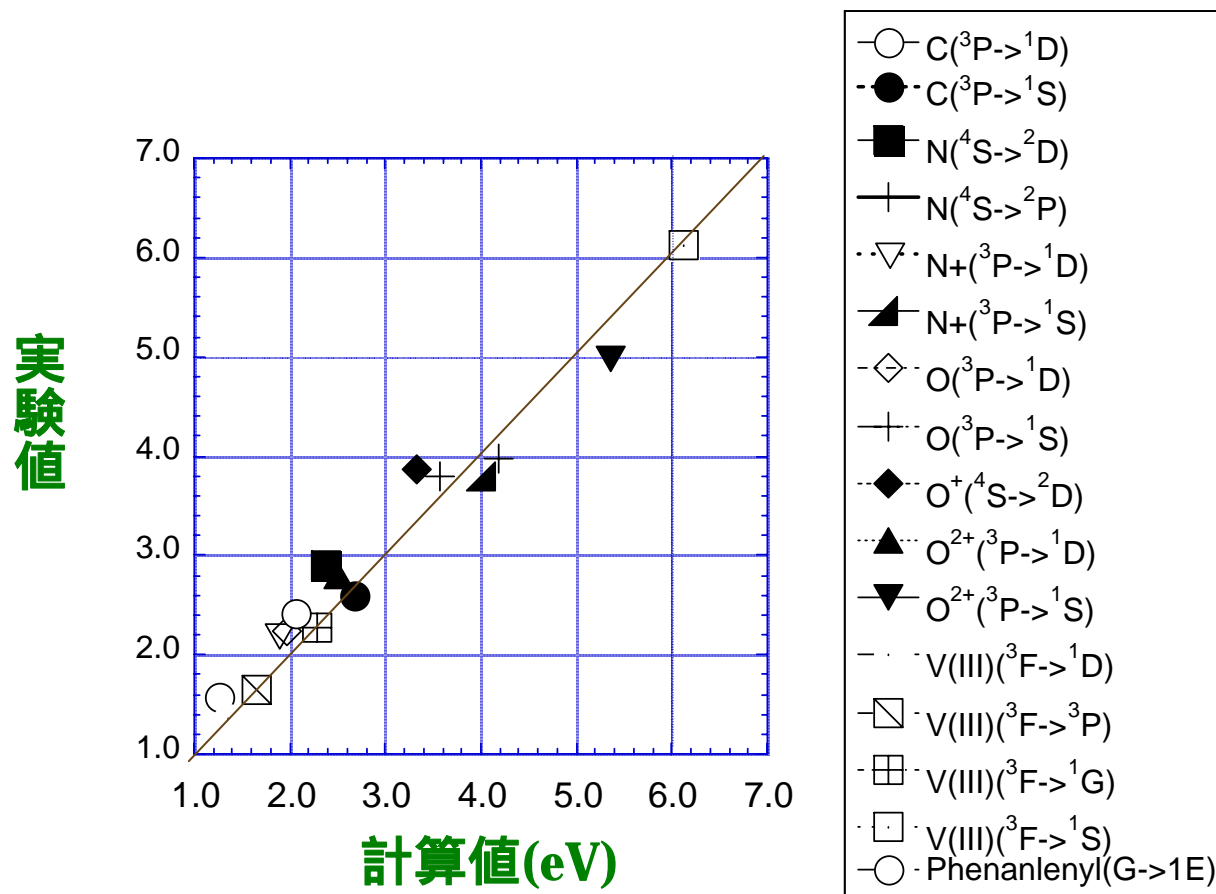
$$V_{RC} = \delta E_{RC} / \delta \rho$$

$$\hat{H}_{CI-DFT} = \sum_{I,J}^{CI \text{ expansions}} |I\rangle \langle I| \hat{H}_{core} + \hat{V}_{ee}^{eff} + \hat{V}_{RC} |J\rangle \langle J|$$

$$\hat{H}_{CI-DFT} | \Psi \rangle = E_{CI-DFT} | \Psi \rangle$$

有効MRCI-DFT方程式

新規MRCI + DFT法による擬縮重系・開殻分子系の 励起スペクトルの計算結果



原子分子の縮退系・擬縮退系の励起スペクトルをModest CI-DFTでよく再現

膜蛋白質のQM/MM連成シミュレーションに適した MMポテンシャルの評価と実装

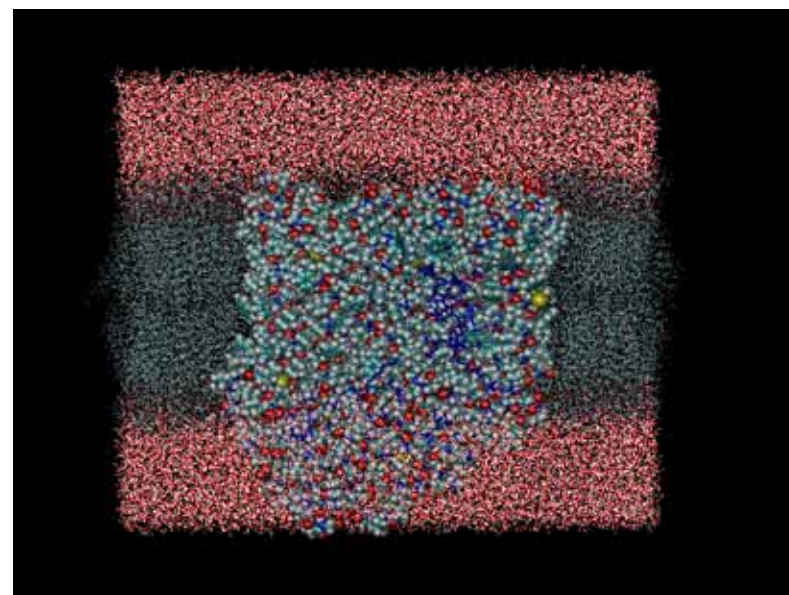
課題: Particle-Mesh-Ewald法の

QM/MM法への適用限界

対策: 1) Wolf型ポテンシャルの改良型

Fennell型ポテンシャルの採用

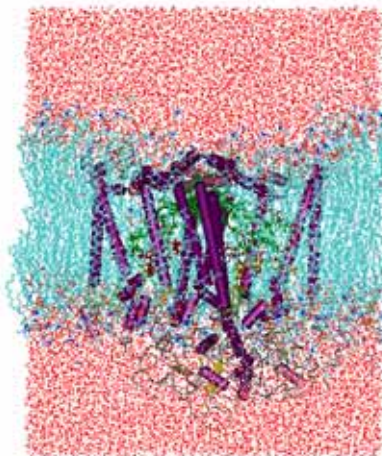
2) cutoff法による高並列化



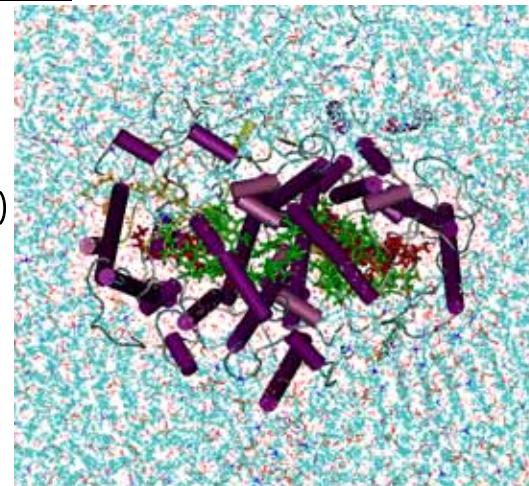
$$V_{Fennell} = \sum_{i>j}^N q_i q_j \left\{ \frac{\operatorname{erfc}(\alpha |\mathbf{r}_{ij}|)}{|\mathbf{r}_{ij}|} - \frac{\operatorname{erfc}(\alpha R_c)}{R_c} + \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha R_c)}{R_c^2} + \frac{2\alpha \operatorname{erfc}(-\alpha^2 R_c^2)}{\pi^{1/2} R_c} \right) (|\mathbf{r}_{ij}| - R_c) \right\}$$

$$\mathbf{F}_{Fennell}^i = q_i q_j \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha |\mathbf{r}_{ij}|)}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} + \frac{2\alpha \operatorname{erfc}(\alpha^2 |\mathbf{r}_{ij}|^2)}{\pi^{1/2} |\mathbf{r}_{ij}|} - \left(\frac{\operatorname{erfc}(\alpha R_c)}{R_c^2} + \frac{2\alpha \operatorname{erfc}(-\alpha^2 R_c^2)}{\pi^{1/2} R_c} \right) \right) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \quad |\mathbf{r}_{ij}| \leq R_c$$

膜蛋白質のQM/MM連成シミュレーションに適した MMポテンシャルのベンチマーク



蛋白質部分 (PDBID: 1AIJ 12899原子)
 脂質2重膜 (POPC分子: 384分子)
 溶媒 (水分子: 24355分子、Clイオン6個)
 全原子 138372原子
 Force Field Amber 96
 Rigid Model を水素原子に使用
 Time step 2 fsec
 系の大きさ 100x100x120 Å³



光合成反応中心の分子動力学シミュレーション

	Particle Mesh Ewald Cutoff=12Å =0.35Å⁻¹	Fennell Potential Cutoff=16Å =0.1Å⁻¹
Electro-static Potential(kcal/mol)	-387877.019236436	-388201.661363778
ratio	(1.0)	(1.00084)
Timing 16node parallel(sec)	2.9*	0.31

*FFT-part was not parallelized

Fennell型ポテンシャルの精度と高速性能

日本応用物理学会・エネルギー・環境研究会新設

持続可能な社会の構築が21世紀最大の人類の課題と考えられており、とりわけ「温暖化と資源枯渇からの脱却」が、持続可能性の実現には必須です。そのためには、画期的な省エネ・省資源技術と、エネルギー源の太陽(自然)エネルギーへの転換技術の実現が不可欠と考えられます。

応用物理学会の高度なナノ・材料・デバイス・技術等を生かして、これらの困難な課題に正面から継続的に取り組んでいくために、新たに研究会を設け、エネルギー・環境問題の大きな技術ブレークスルーを生み出す活動を、学会の内外の活動も有機的に結びつけながら効果的に育成・支援し、もって当学会が持続可能性の達成に顕著な貢献を果たす一助にしたいと考えます。

1.自然エネルギー利用技術(太陽光, 風力, バイオマス 水素, 電気) 光触媒, 光合成機構活用等による太陽光からの水素生成, など.

2.CO2排出 1/4 を可能とする画期的な省資源・省エネ技術
希少金属代替(燃料電池用 Pt の代替等: ナノ物性, 量子効果活用)
電気自動車 / 自然エネルギー発電デバイス(制御, 蓄電)
エネルギーの高効率変換・貯蔵技術
電子制御・ITC機器の画期的省エネ技術, など.

- 1.学術講演会における, シンポジウム, 合同セッション等の開催を通じ, 学会内の関連文科・研究会の連携強化を図り, 学会全体の中から, 新しい芽を発掘し, 伸ばすべき方向の提案なども行う(横申し機能)。
- 2.他学会・研究機関との連携を通じ, 当領域の新領域・境界領域を育成(エコデザイン学会連合や社会科学系の活動との連携を含む)。
- 3.その他, 効果的活動のために, 環境改善効果の定量的評価や, 研究開発の状況変化に応じた柔軟な運営を心がける。

代表(責任者):

内田晴久 東海大学教授

運営委員(以下暫定, 順次追加予定):

和泉茂一 住友電工

磯村雅夫 東海大学教授

上松敬禧 千葉大学名誉教授

小原宏之 玉川大学教授

岸田俊二 日本電気特許技術情報センター

木村英樹 東海大学教授

首藤直樹 東芝研究開発センター

高井吉明 名古屋大学教授

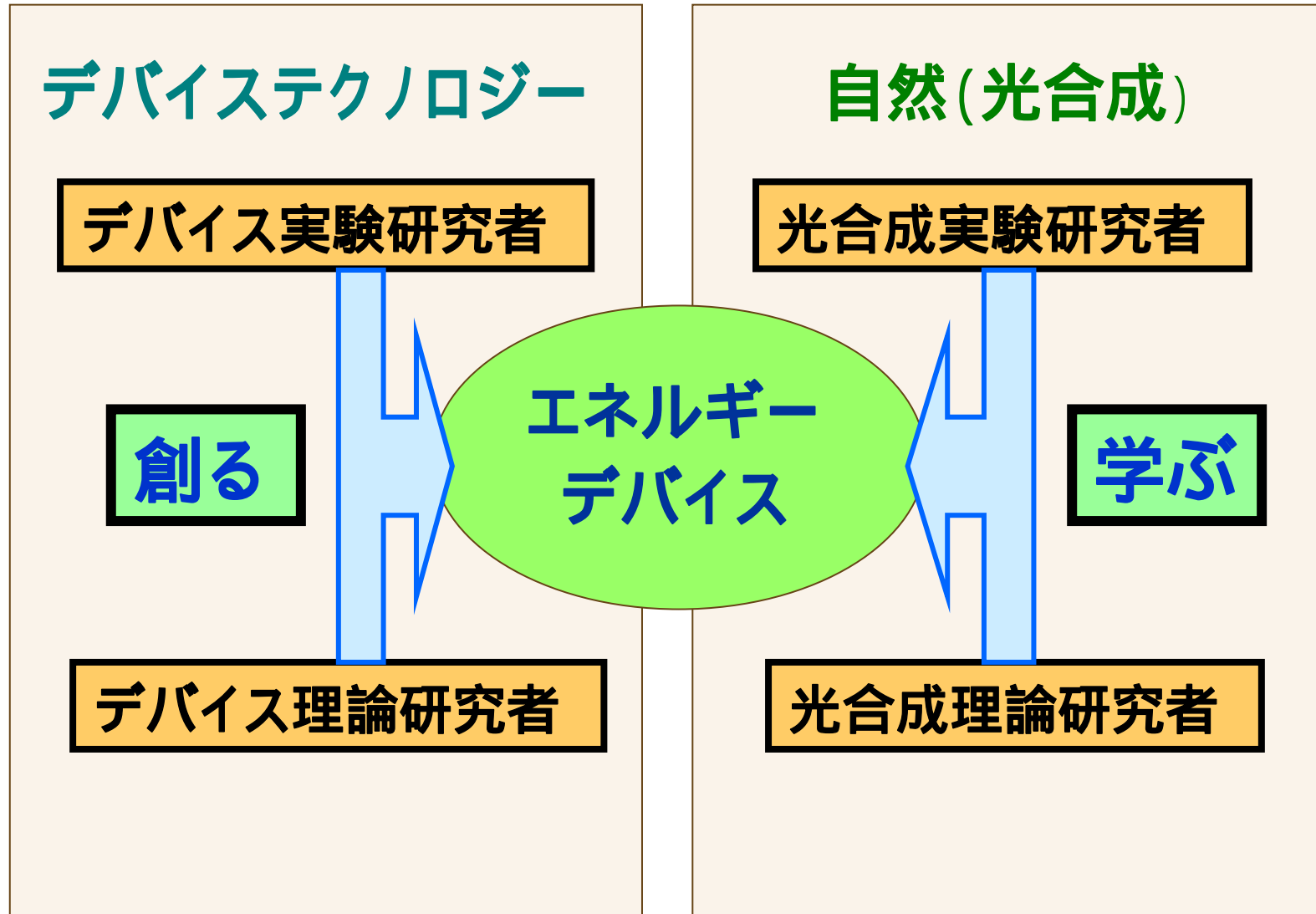
高田俊和 日本電気基礎・環境研

応用物理学会

エネルギー・環境研究会

<http://annex.jsap.or.jp/apee/>

望まれる共同研究開発体制



自律的發展機能を内在する連成プログラムの開発

- 取得(download)型から参加(upload)型への移行を目指して -

背景と狙い

背景: 米国のようなアプリケーションプログラムの継続的な開発は、国内では小規模な開発グループのため困難で、世界に通用する完結型のアプリケーションプログラムが育ちにくい。

狙い: アプリケーションプログラムを、それを構成する計算単位に部品(コンポーネント)化し、研究者個人々人による参加型のプログラム開発を推進することにより、継続的で且つ競争原理に基づく自律的な発展機能を内在するアプリケーションプログラムを整備する。

基本方針

方針1: 計算単位に対応するプログラムユニットを、コンポーネント化

研究者個々人で開発できるレベルまで、プログラムを細分化

方針2: 中間データのXMLによる国際標準化と共有化

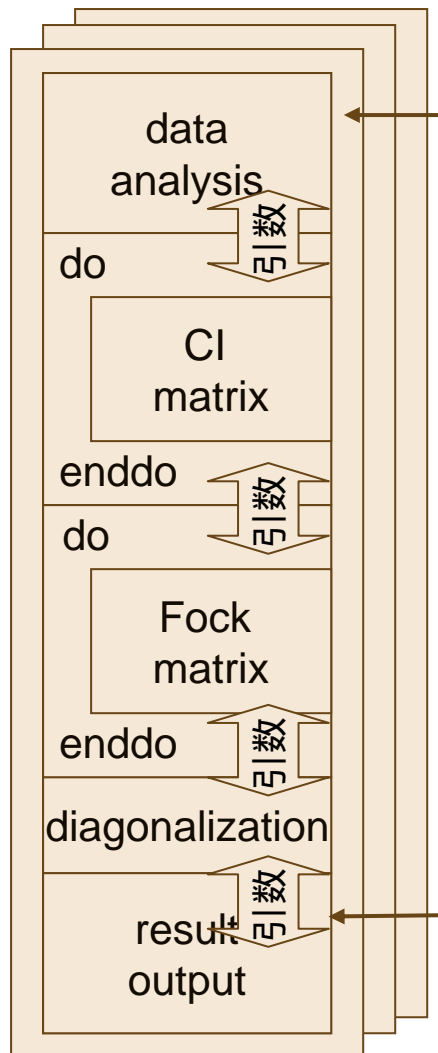
個別データのリーダビリティの向上と、分野間での利用促進

方針3: ワークフローによる、明確な計算手順の表現方法の確立

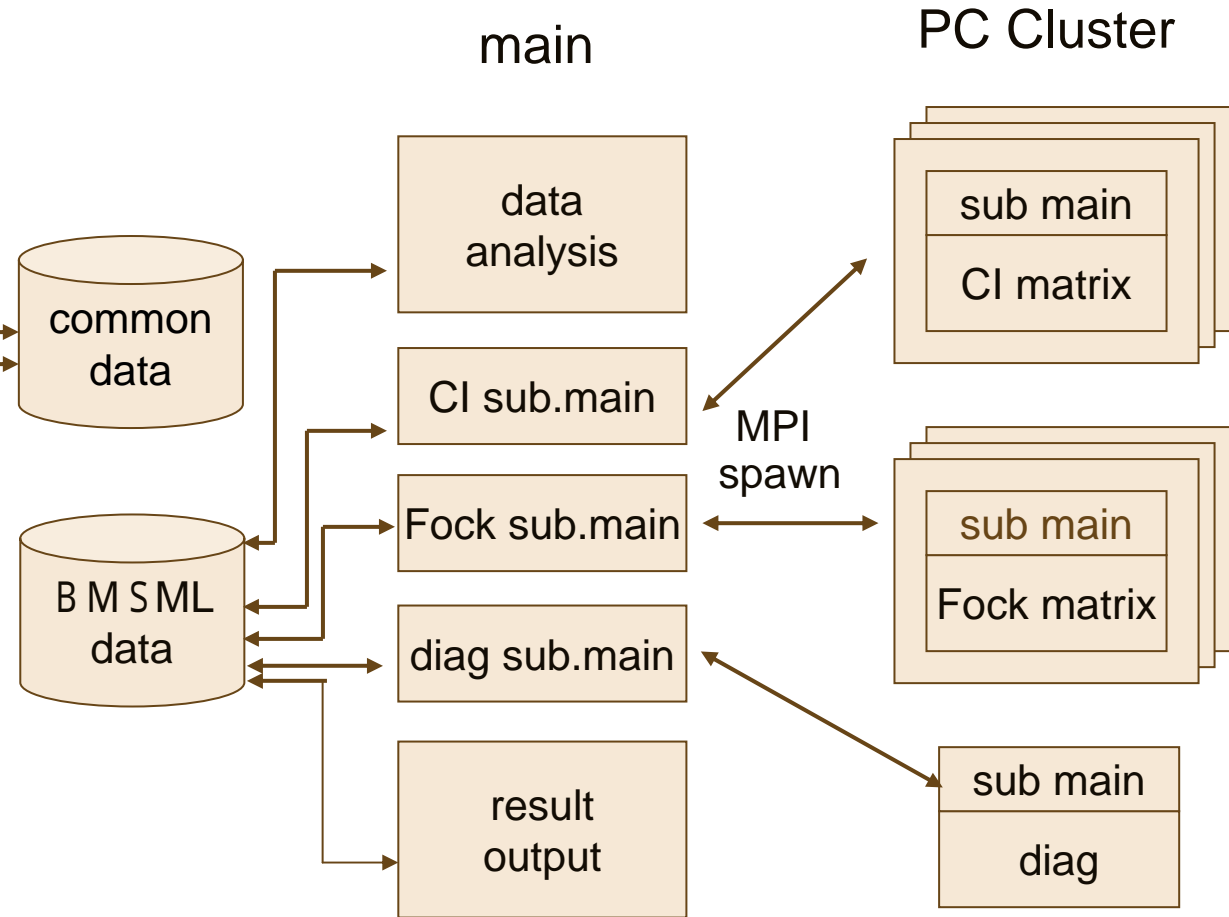
開発研究者の参加促進と、一般ユーザによる利用拡大

密結合から疎結合へのプログラミングスタイルの移行

密結合型の完結システム

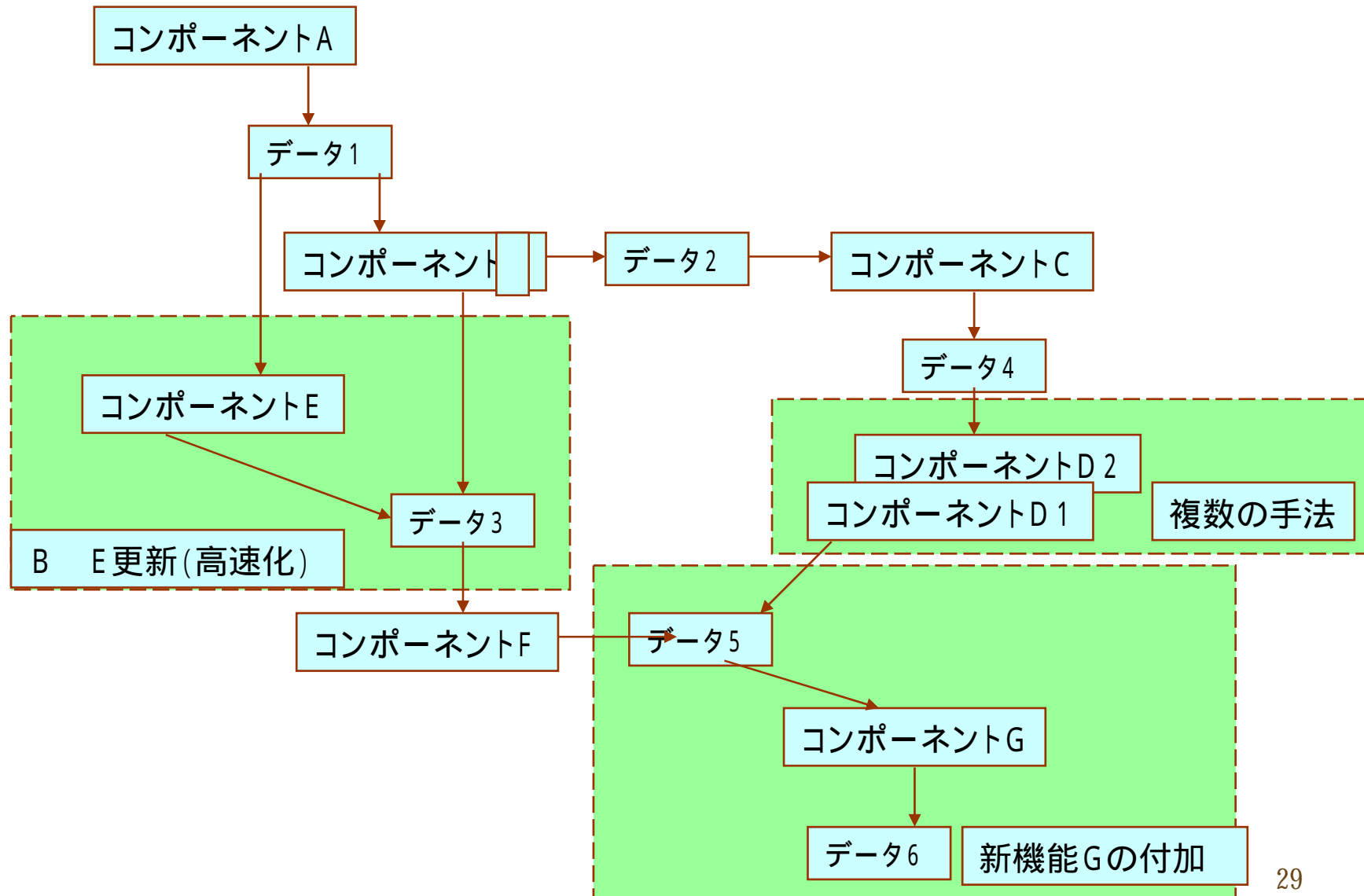


部品化による疎結合システム



BMSML: Bio Molecular Simulation Markup Language (後述)

コンポーネントベースプログラミングとワークフロー



共有化する中間データのリスト(例示)

- ・基底関数
 - ・初期分子軌道係数
 - ・収束分子軌道係数(RHF, ROHF, UHF)
 - ・自然軌道係数
 - ・電子占有数
 - ・全エネルギー
 - ・初期分子構造(QM / MM / それ以外)
 - ・最適化分子構造(QM / MM / それ以外)
 - ・力場パラメータ
 - ・結合情報
 - ・静電ポテンシャル(格子データ)
 - ・静電場(格子データ)
 - ・重なり積分
 - ・電子運動エネルギー積分
- など

⇒ これら個々のXML名と内部項目の決定(BMSML)

⇒ これらは、バイオ、ナノマテリアルシミュレーションに共通

シェルスクリプトによる実行イメージ

```
#!/bin/sh
```

1. LAM/MPIの起動

```
lamboot -v ~/lamhost-4
```

2. HF用初期MO係数の生成

```
mpirun -lamd -O h uds_mpi_initmo_gbe > zzlog_uds_mpi_initmo_gbe
```

3. CASSCF用MO係数の生成

```
mpirun -lamd -O h uds_mpi_rhf > zzlog_uds_mpi_rhf
```

4. CASSCFの実行

```
mpirun -lamd -O h uds_mpi_casscf > zzlog_uds_mpi_casscf
```

5. 自然軌道によるMullikenポピュレーション解析

```
mpirun-lamd -O h uds_mpi_pop_mulliken > zzlog_uds_mpi_pop_mulliken
```

6. LAM/MPIの解除

```
wipe -v ~/lamhost-4
```

コンポーネントプログラミングの利点

1. 新規計算機能の付加が容易

必要なXMLデータの情報のみで、機能付加が可能

2. 計算機能の更新が容易

コンポーネントが疎結合のため、修正箇所が限定

3. 複合した計算機能の実現が容易

コンポーネントの組み合わせによる多彩な計算機能の実現

4. システムのメンテナンスが容易

プログラム単位が小さく、修正箇所が明瞭

5. GRIDやWEBサービスなど、分散処理に適合

プログラム単位が小さく、GRIDなどの新技術に対応可能

Bio Pfuga (大阪大学 Bio Grid) での実施例

1. MM計算部: prestoX-basic

阪大蛋白研(中村G)、日立(何G)

MD - Grape2による高速化

2. DFT計算部: GDFT

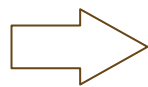
阪大理(山口G)

多中心Fuzzy Cell法の採用

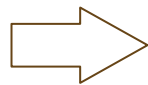
3. MO計算部: AMOSS

NECグループ

HF、CASSCF



コンポーネント化など準備に時間がかかっているが、プログラムの結合自体は1日で完了し、正常動作を確認



コンポーネント化と中間データ共有化の有効性を実証

XMLによるプログラムインターフェース

米国CMLComp in CML

<http://cml.sourceforge.net/schema/cmlComp/>

イタリアQCML (Quantum Chemistry ML) in AbiGrid

<http://www.cineca.it/abigrid/workArea/QCMLdoc.html>

日本BMSML(Bio-Molecular Simulation ML): 阪大 BioGrid

<http://www.biogrid.jp/>

For a large matrix which can not be stored at a time in memory

1.1 1.2 | 1.3 1.4

2.1 2.2 | 2.3 2.3

3.1 3.2 | 3.3 3.4

4.1 4.2 | 4.3 4.4

```
<blockMatrix matrixID="001" content="blockContainer" numElement="4">
<bmsDouble2D content="block1" blockID="1" dataNum1D="2" dataNum2D="2"
startBlock1D="1" startBlock2D="1">1.1 1.2 2.1 2.2</blockMatrix>
<bmsDouble2D content="block2" blockID="2" dataNum1D="2" dataNum2D="2"
startBlock1D="1" startBlock2D="3">1.3 1.4 2.3 2.4</blockMatrix>
<bmsDouble2D content="block3" blockID="3" dataNum1D="2" dataNum2D="2"
startBlock1D="3" startBlock2D="1">3.1 3.2 4.1 4.2</blockMatrix>
<bmsDouble2D content="block4" blockID="4" dataNum1D="2" dataNum2D="2"
startBlock1D="3" startBlock2D="3">3.3 3.4 4.3 4.4</blockMatrix>
</blockMatrix>
```

プログラミングパラダイムの変更

取得 (download) 型から参加 (upload) 型へのプログラム開発スタイルの変更

コンポーネント間の競争を促進し、自律的な機能強化を図る。

プログラム開発者の参加を募り、継続的な開発を可能にする。

ユーザ自身が、求める計算機能を自在に実現することを可能にする。

プログラム開発と教育利用の世界拠点としての活動を図る。

民間企業の実験研究者のインターネット環境下での利用促進

企業研究者にとって、最小の負担で計算環境を入手できる。

ASPベンチャー企業にとっての参入障壁の撤廃を図る。

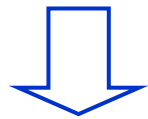
ASP事業者サービスにより、実験研究者の利用障壁の最小化を図る。

IT利用によるシミュレーション技術の確立と産業応用

GRIDによる計算環境と社会的要請の変化

大学・国立研究所

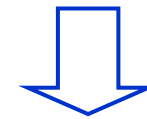
独立行政法人化による
独立性への要請



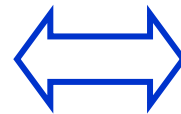
コンピューターリソースの
利用有償化

民間企業研究所

マテリアルシミュレーションへの
期待とアウトソーシングへの基
本的な移行



インターネットによる利用



ここに、ひとつの接点が
生まれつつある。

SPring-8と地球シミュレータの活用プログラムで試行

科学技術情報をコンテンツとする新ITビジネス

シミュレーション内容の充実

マテリアルシミュレーション(ナノ・バイオ)

流体関連(自動車、飛行機、気象)

教育プログラムの整備

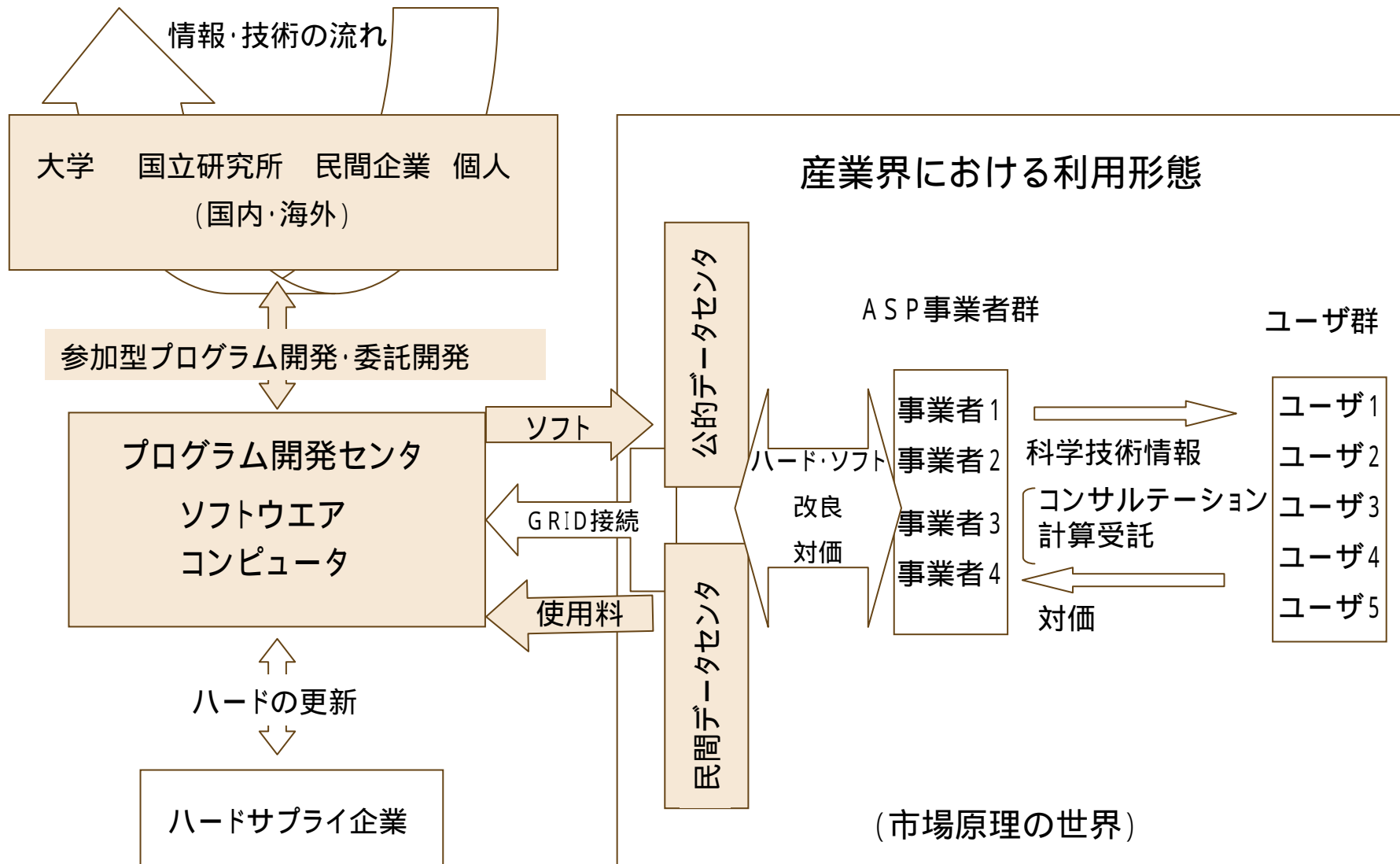
実験研究者にとって日々使う研究雑貨としての提供が主眼

セキュリティの確保

インターネット通信におけるセキュリティ

サーバ内のセキュリティ(中間データの暗号化など)

プログラム開発とビジネス化における情報と資金の流れ



文部科学省先端研究施設共用イノベーション創出事業

MEXT is conducting a project to stimulate use of public high-tech facilities for industrial R&D



Earth Simulator and computer centers of major universities provide their computer resources for industries

test use for free and productive use for charged



Computer Center of Tokyo University

Fields of about 40 applicants from industries

drug design semi conductors aerodynamics

functional materials banking system fuel cell

noise control of cars and bullet train catalyst

internet search engine audio interpretation

先端的大規模計算シミュレーション プログラム利用サービス

東京大学 情報基盤センター

北海道大学情報基盤センター

東北大学情報シナジーセンター

名古屋大学情報連携基盤センター

京都大学学術情報メディアセンター

大阪大学サイバーメディアセンター

九州大学情報基盤研究開発センター

問い合わせ先: kyoyo@itc.u-tokyo.ac.jp

WEB: <http://kyoyo.itc.u-tokyo.ac.jp/>

結論

1. 計算化学の実用的な時代の到来
これを逃すともう来ないかも！
2. インターネット時代にあったプログラミング手法が必要
コンポーネント主体に移行すべき！
3. 科学技術情報をコンテンツとしたITビジネスの創出
ASPこそ、企業への普及の鍵！
4. 次世代スーパーコンピュータの情報発信力に期待
計算科学のメッカに！

共同研究者及び研究支援

大阪大学極限科学センタ: 山口兆、山中秀介

大阪大学理学研究科: 鵜飼健史

大阪大学蛋白質研究所: 中村春木、米澤康滋

NECソフト: 中田一人、坂倉耕太、山本純一

研究支援: JST - CREST “マルチスケール・マルチフィジックス
現象の統合シミュレーション領域”