



FSIS NEWS発刊に際して

■ あいさつ

小林 敏雄 東京大学生産技術研究所 教授

2002年の文部科学省ITプログラムの一環として、“戦略的ソフトウェアの開発”プロジェクトが2002年5月にスタートしました。このプロジェクトの活動状況はシンポジウム、ワークショップで集中的に報告され、また、ホームページで公開されています。しかしながら、このプロジェクトがさまざまな理工学分野に関連していること、また広く産業界や教育・研究機関に関わったものであることからこのたびFSIS NEWSを定期的に発行することになりました。発刊に際してこのプロジェクトの目指すところを述べさせていただきます。

計算科学技術は、科学技術の発展、産業生産力の強化、環境・安全のための技術開発等を支える共通基盤であり、21世紀のkey technologyのひとつであります。11月に米国Baltimoreにおいてスーパーコンピュータ2002が開催されましたが、高速コンピュータを中心とするハードウェアの発達・普及は今後も急速に進むものと思われます。しかしながらこれらのハードウェアを活用し得る高度なソフトウェアの実現がなければハードウェアの進展も意味をなさないこととなります。特に新しい産業の創出や環境・安全の飛躍的な改善には計算科学技術ソフトウェアの関与が不可欠であり、この分野の長期的ビジョンに基づく戦略的な取り組みが重要であります。

“戦略的ソフトウェアの開発”プロジェクトはこのような背景のもとで東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターにおいてスタートしました。このプロジェクトの目標は、

- (1) 科学技術の重点分野において産業や環境・安全に直接寄与することのできる世界水準の実用的科学技術計算ソフトウェアを、量子化学計算、タンパク質・化学物質相互作用解析、ナノシミュレーション、次世代流体解析、次世代構造解析の5つを対象として開発し、公開する。
- (2) 実用的科学技術計算ソフトウェアの開発を通じて、新たに大規模計算ソフトウェアを開発できる人材を育成する。
- (3) 実用的科学技術計算ソフトウェアをより広範囲に、より高度に進展させるための開発研究拠点を構築する。

1. 次世代量子化学計算サブグループ(佐藤文俊・東京大学生産技術研究所)
タンパク質のための精密な量子化学アプリケーションソフトウェアを構築し、ポストゲノム時代のバイオテクノロジーに寄与する。
 2. タンパク質・化学物質相互作用解析サブグループ(中野達也・国立医薬品食品衛生研究所)
量子論に基づいたタンパク質と化学物質との相互作用をin silicoで解析するシステムを開発し、医薬品等の効率的な分子設計を可能にする。
 3. ナノシミュレーションサブグループ(大野隆央・物質材料研究機構)
第一原理計算手法を主な解析手法として用い、ナノ構造の形成・構造・物性・機能を高精度に解析予測することのできるシミュレーションシステムを開発。
 4. 次世代流体解析サブグループ(谷口伸行・東京大学生産技術研究所)
ラージエディシミュレーションに基づく高品質の乱流予測によって動力・エネルギー・環境のデジタルデザイン。
 5. 次世代構造解析サブグループ(矢元元基・東京大学大学院)
複合現象を自由自在に解析し最適設計のための逆解析をも可能とする大規模連成構造解析システムを開発。
 6. 総合プラットフォームサブグループ(小池秀輝・アドバンスソフト(株))
 7. HPCミドルウェアサブグループ(奥田洋司・東京大学大学院)
- 6と7のサブグループでは、上述の5つの大規模計算を将来のコンピュータネットワーク環境で効果的に運用するための基礎情報技術を併せて開発することを目指している。



(4) 実用的科学技術計算ソフトウェアの開発・運用を担える産業組織を設立する。以上であります。

科学技術計算ソフトウェアが実用技術として産業に受け入れられるには、実証データが完備され、かつ絶えず改良されメンテナンスの継続がなされることが必須です。したがって、本プロジェクトは先端的科学技術計算ソフトウェアの開発にとどまらず、それを産業における基盤ツールとして自立的に発展できる態勢を作ることを目指しています。

さて、本プロジェクトでは5つの物理化学シミュレーションを対象とし、それぞれがサブグループを構成しています(④)。

本プロジェクトを遂行する計算科学技術連携研究センターは既に97名規模の構成となり、10月に第1回ワークショップ、“次世代流体解析・次世代構造解析”を、11月に第2回ワークショップ“次世代量子化学計算・タンパク質—化学物質相互作用解析”を、さらに12月に第1回シンポジウム“文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」”を開催しています。実用ソフトウェアの開発には作る側と使う側が課題を共有し、連携することが不可欠であると確信しています。今後、このニュースを通じてプロジェクトの進行状況やユーザー例での成果事例あるいは関連分野における先端的取り組み等をお伝えする所存です。皆様方のご支援とご鞭撻を願ひし、FSIS NEWS発刊のごあいさついたします。

●次世代量子化学計算グループの取組み概要

佐藤文俊 東京大学生産技術研究所
客員助教授

次世代量子化学計算グループでは、タンパク質の全電子計算用に開発されたソフトウェア ProteinDFをベースに、反応解析に必要な新機能を組み込み、使いやすいインターフェースを提供することによって、精密で実用的な、タンパク質のシミュレーションシステムを研究開発します。いくつかの重要なタンパク質の波動関数データベースもあわせて公開し、本システムの普及を目指しています。

タンパク質は数千から数万個の原子からなる巨大分子である。これを量子化学の理論で解き明かすことは永年の夢である。本グループは密度汎関数法によるタンパク質全電子計算プログラムProteinDF (Fig. 1) を開発し、15台のワークステーションクラスで、金属を持つ104残基の本格的なタンパク質シクロクロムcの計算 (9,600軌道) を達成した (Fig. 2)。これにより、タンパク質においても低分子と同じ精密な手法で計算できることが実証された。そこで、本グループではProteinDFをベースにして、新たに以下の5つの項目について研究開発を行い、使いやすく実用的なシステムとして発展させて、これを公開する計画である (Fig. 3)。

- (1) 自動計算法：方程式は自己無撞着 (SCF) 法で解かれるが、タンパク質の電子状態は複雑で、大変よい初期値を用いないと全電子計算が達成できない。本グループは一種の局在化軌道 (QCLO) から初期値を作成する方法を開発し、誤差を従来の数十分の一にすることに成功した (Fig. 3)。これを自動的に実行する機能を本システムに組み込んで、ほぼ全ての全電子計算を自動計算する仕組みを提供する。
- (2) 大規模タンパク質計算：これまでの研究結果から、倍精度演算で100,000軌道の全電子計算が可能であると見積もられている。これは1,000残基規模のタンパク質に相当し、大部分の重要なタンパク質が計算対象に含まれることになる。本システムを超大規模計算・超大型計算機サーバにも対応させる。
- (3) 量子分子動力学計算：全電子計算を解析した結果、同じアミノ酸残基でもタンパク質中の三次元配置によって、電荷が0.1以上も異なることが判明

した。この差は10⁻⁴ 遠方で0.1eVもの差を生む。タンパク質反応解析のために波動関数から得られた情報を基に分子動力学計算を行う方法を研究開発する。

- (4) タンパク質波動関数データベース：100残基規模のいくつかの重要なタンパク質の全電子計算を系統的に実施し、タンパク質の高精度の電子状態データベースを構築する。これらの情報はタンパク質の実験結果の理解のみならず、タンパク質の新たな物理化学的知見の獲得、新規タンパク質の設計、機能および反応性の評価に大いに役立つ。

- (5) プロテイン・エディタ：本グループはすでに富士総研と共同でタンパク質全電子半自動計算のためのインターフェース (シナリオ・エディタ) を開発し、ユーザ会で公開した実績がある (Fig. 5)。本研究開発ではさらに、タンパク質の反応解析に役立つツールを作り込み、全機能を容易かつ直感的に操作することができる統括環境へとバージョンアップさせ、ユーザに提供する。

このような大掛かりなタンパク質のシミュレーションが無理のない時間で実行できるかどうかは、今後のハードウェアの進歩に依るところが多い。

- (Fig. 3)に2002年現在世界最高速のスーパーコンピュータ 40TFlops) を使用した場合の、タンパク質全電子計算SCF計算1回にかかる実時間予測を載せた。計算機の高速化の動向から、近い将来、本格的なシミュレーションが比較的手軽に実行できることが予想される。そのとき、本システムは、ポストゲノム時代のバイオおよびナノテクノロジー研究に役立つ実用的なツールとなるものと期待できる。

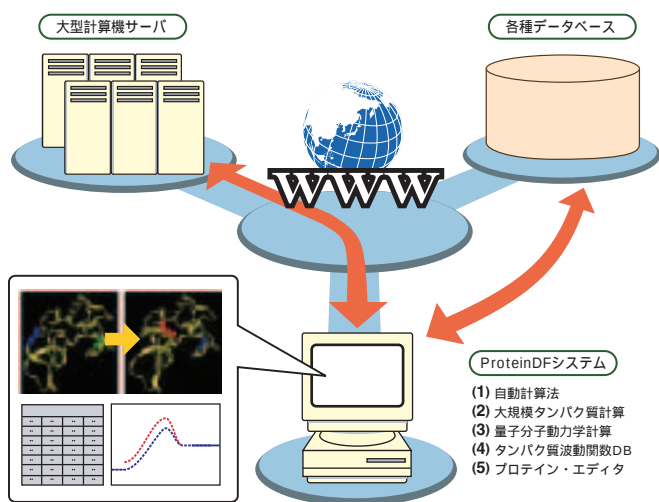


Fig. 2 次世代量子化学計算概念図

1. F. Sato, et al, Int. J. Quant. Chem. 63 (1997) 245.
2. F. Sato, et al, Chem. Phys. Lett., 341 (2001) 645.
3. H. Kashiwagi, et al, J. Mol. Phys. (2002) in press.
4. T. Yoshihiro, et al, Chem. Phys. Lett. 346 (2001) 313.
5. <http://www.fuji-ric.co.jp/ccse/ProteinDF/>

Fig. 3 参考文献

	cytochrome c (秒)	10万軌道(1,000残基相当)のタンパク質(秒)
全エネルギー計算	7	1,646
Kohn-Sham行列生成	7	1,540
電子密度フィッティング	4	1,270
XCポテンシャルフィッティング	1	76
行列対角化	3	8,804
行列積	2	1,926
合計	24	15,262

Fig. 3 40TFlopsスーパーコンピュータによる1SCFの実時間予測 (Fig. 4) のデータを改変

●タンパク質 - 化学物質相互作用解析 グループの取組み概要

中野 達也 国立医薬品食品衛生研究所
主任研究官

タンパク質-化学物質相互作用解析グループでは、量子論に基づいたタンパク質と化学物質との分子間相互作用をin silicoで解析するシステムの開発に取り組んでいます。このシステムは4つのサブシステム 1) In silico詳細スクリーニング 2) Ab initio FMO法による相互作用解析 3) 標的データベース 4) Javaによる統合システム から構成され、分子間の相互作用エネルギーを高精度で予測することにより効率的な分子設計を可能にすることを目的としています。

タンパク質 - 化学物質相互作用解析システムを構成する4つのサブシステムの内容は、

- (1) In silico詳細スクリーニング: 分子間相互作用解析用力場及びレプリカ交換法を用いたin silicoスクリーニング
- (2) Ab initio Fragment MO (FMO)法相互作用解析: 量子論に基づいた受容体・リガンド分子の結合エネルギーの予測及びフラグメント間の相互作用解析
- (3) 標的データベース: 医薬品を中心とした化学物質、及び化学物質の標的となる生体分子(受容体タンパク質等)の情報に関する統合データベース機能の提供
- (4) Javaによる統合システム: Java及びJava3Dを用いた、入力データの作成、計算結果の可視化及び解析のための統合環境である。

平成15年夏には、ab initio FMO法プログラムABINIT-MP(数百残基のタンパク質の6-31G(d)基底関数を用いた部分構造最適化が可能なバージョン)と可視化プログラムであるABINIT-MP Viewerの正式版の公開を行う予定である。In silico詳細スクリーニングについては平成15年度

末には、電荷平衡法に基づいた分子間相互作用解析用力場を含む正式版を公開する予定である。また標的データベースについても、核内受容体について平成15年度中に公開する予定である。

最終年度までには1)リガンド結合部位の予測まで含めたドッキングシステムの開発 2)MP2によるタンパク質のエネルギー計算の組み込み 3)Ab initio FMO-MD法によるタンパク質の分子動力学シミュレーションの組み込み4)核内受容体・膜受容体・酵素・チャネル・トランスポーター等の100種類の標的タンパク質の入力を行い、公開する予定である。

また開発したシステムを用いて、1)モデリングで作成したタンパク質の3次元立体構造を用いたタンパク質 - 化学物質相互作用解析2)タンパク質の側鎖の解離状態等に関する溶媒効果の影響についても研究を行う予定である。タンパク質 - 化学物質相互作用解析システムは、平成14年度から積極的に公開を行っており <http://moldb.nihs.go.jp/abinitmp/> 及び <http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/> (予定) 平成14年度中にはユーザー会を立ち上げ、優先的な情報の提供、個別の質問に対する回答、ユーザーの要望に応じたシステムの評価といった活動を行っていく予定である。

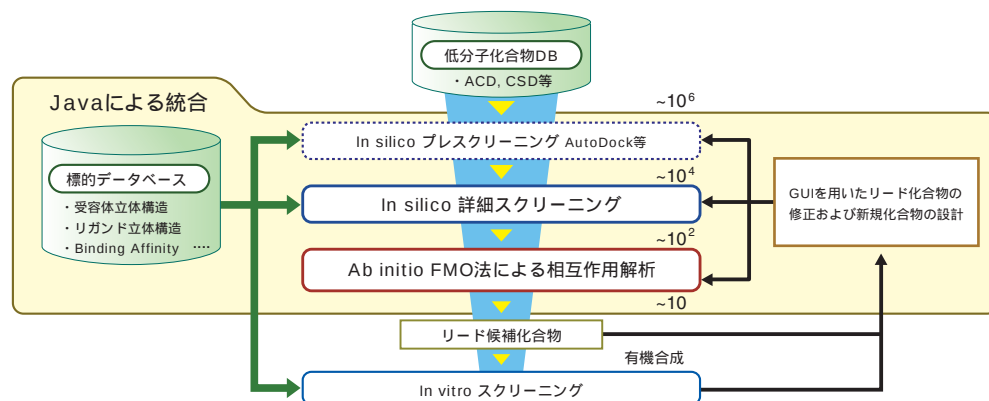


Fig. 1 タンパク質 - 化学物質相互作用解析システムの概念図

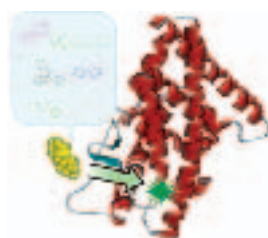


Fig. 2 In silico詳細スクリーニングのイメージ

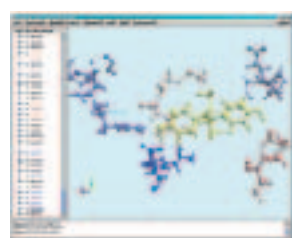


Fig. 3 Ab initio FMO法による相互作用解析



Fig. 4 標的データベースのイメージ

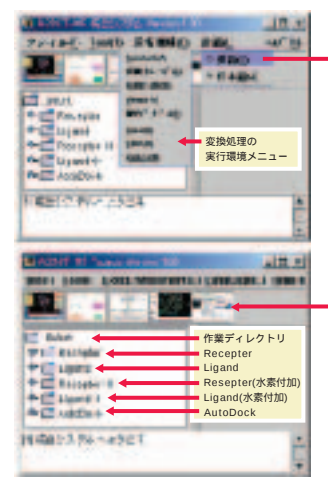


Fig. 5 Javaによる統合システムのイメージ

<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>

プロジェクトのホームページを8月1日に開設致しました。研究目的、研究体制や各サブテーマの計画内容を紹介しており、プロジェクト主催のシンポジウム、ワークショップの予定等の最新情報をご案内しています。シンポジウム、ワークショップへの参加申し込みもこのホームページにて可能です。また、プロジェクトの研究成果や研究者紹介が随時アップデートされるほか、今年度開発予定のソフトウェアの公開情報や、ユーザ会案内なども近日中に掲載される予定です。本プロジェクトにご関心の皆様には是非、ご参照・ご利用いただけますようご案内いたします。



「戦略的基盤ソフトウェアの開発」ワークショップ

実施報告

「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトでは各サブグループの活動状況の報告の場として毎月1回程度「ワークショップ」を開催し、本プロジェクトの目的である「実用」ソフトウェアの開発を目指して開発側とご利用者側の連携や課題共有に取り組んでいます。既に10月10日には「次世代流体解析・次世代構造解析」をテーマに、11月1日には「次世代量子化学計算・タンパク質・化学物質相互作用解析」をテーマに以下の内容で開催し、各回とも定員オーバーとなる盛況で、関心の高さが示されました。

第1回ワークショップ 平成14年10月10日開催

「次世代流体解析」「次世代構造解析」

- 「「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの紹介」
小林 敏雄 東京大学生産技術研究所 教授
- 「車両開発におけるCAE活用戦略」
斎藤 公則 (株)トヨタコミュニケーションシステム 執行役員
- 「次世代流体解析ソフトウェアの開発計画」
谷口 伸行 東京大学生産技術研究所 助教授
- 「次世代構造解析ソフトウェアの開発計画」
矢川 元基 東京大学大学院 教授

報告集(資料)請求は下記宛にお問合わせ下さい。

東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター事務局

TEL: 03-5452-6661 E-mail: office@fsis.iis.u-tokyo.ac.jp

第2回ワークショップ 平成14年11月1日開催

「次世代量子化学計算」「タンパク質・化学物質相互作用解析」

- 「タンパク質全電子計算の将来」
柏木 浩 東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター 研究員
- 「次世代量子化学計算プロジェクト」
佐藤 文俊 東京大学生産技術研究所 客員助教授
- 「ProteinDFにおけるオブジェクト指向と並列処理」
吉廣 保 東京大学生産技術研究所 産学官連携研究員
- 「タンパク質・化学物質相互作用解析プロジェクト」
中野 達也 国立医薬品食品衛生研究所 主任研究官
- 「In Silico 詳細スクリーニング」
佐藤 智之 アドバンスソフト(株) プロジェクトリーダー
- 「標的データベース」
中田 琴子 国立医薬品食品衛生研究所 化学物質情報部 室長

開催予定

第3回「ナノシミュレーション」

平成15年1月16日(木) 13:30~17:00

東京大学生産技術研究所 第1会議室

- 「ナノシミュレーション・プロジェクト」
大野 隆央 (独)物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター 副センター長
- 「表面・界面ナノ構造の第一原理予測」
宇田 毅 (株)日立製作所 基礎研究所 主任研究員
- 「次世代半導体素子用誘電体の第一原理設計」
濱田 智之 東京大学生産技術研究所 産学官連携研究員
- 「ナノ領域における量子伝導特性の予測・解析システム」
杉野 修 日本電気(株) 基礎研究所 課長



お申し込みは
上記URLから

第4回「HPCミドルウェア」「統合プラットフォーム」

平成15年2月21日(金) 13:30~17:00

東京大学生産技術研究所 第1会議室

- 「地震波の伝播と強震動の数値シミュレーション：大規模並列計算環境とミドルウェア」
古村 孝志 東京大学地震研究所 助教授
- 「HPC-MWプロジェクトの概要」
奥田 洋司 東京大学大学院工学系研究科 助教授
- 「並列プログラミングモデルの動向 Flat MPI vs. Hybrid」
中島 研吾 (財)高度情報科学技術研究機構 主任研究員
- 「材料設計統合システム開発プロジェクト」
二瓶 正俊 (独)物質・材料研究機構 主席研究員
- 「PSEの現状と動向」
松原 聖 (株)富士総合研究所 計算科学技術研究センター センター長
- 「統合プラットフォームの開発」
小池 秀耀 アドバンスソフト(株) 副社長

東京大学生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター 産学官連携研究員(ポスドク)の募集案内

1. 募集人員 若干名 計算科学技術用の先端ソフトウェアの開発に意欲ある研究者を幅広く募集します。
2. 応募資格 博士号取得者またはこれらと同等の能力を有すると認められる者。
3. 着任時期と任期 2003年4月1日着任。任期は1年(2002年度の着任や任期延長は個別相談)
4. 待遇 東京大学の規定による。
5. お問い合わせ先 TEL:03-5452-6196 担当:谷口伸行



本プロジェクトの募集情報はホームページにも掲載しています。