

# 超高速コンピュータ網形成プロジェクトとナノサイエンスシミュレーション

## 九州大学 情報基盤センター 青柳 睦

平成15年度より文部科学省の産学官連携研究プロジェクトのひとつとして、「超高速コンピュータ網形成プロジェクト(NAREGI:National Research Grid Initiative)」が開始されました。グリッド研究開発推進拠点(国立情報学研究所)は、21世紀の情報技術の礎となるグリッド用基盤ソフトウェアやネットワーク技術の研究・開発を目指しています。本プロジェクトのもう一端を担うアプリケーション研究開発拠点(岡崎国立共同研究機構分子科学研究所)では、最先端のナノサイエンス・ナノテクノロジー技術を活用した新素材や次世代超微細デバイス等の研究開発に不可欠な応用ソフトウェアやシミュレーションの研究を行います。グリッド研究開発推進拠点とアプリケーション研究開発拠点とは超高速の学術情報ネットワーク(スーパーSINET)で接続されています。NAREGIプロジェクトには、我が国を代表する産学官諸機関が参加しており、九州大学では、グリッド基盤を活用したナノシミュレーションソフトウェアのグリッド対応に関わる研究開発、ナノアプリケーションのプレ・スケジュール情報の解析と実行環境の整備、連成および連携ミドルウェアの開発とグリッド環境における応用研究を行うことを目指しています。

本稿では、NAREGIプロジェクトの概要を紹介させて頂いた後、(1)FMO(産総研 北浦博士の理論)とRISM(分子研 平田教授の理論)を例に挙げ(図1)、これらの連成および連携ミドルウェアの開発とグリッド環境における応用研究について、その研究計画と進捗状況の報告を行い、次に(2)グリッド基盤技術を用いた電子構造計算用ポータル(図2)の開発について紹介させて頂きます。

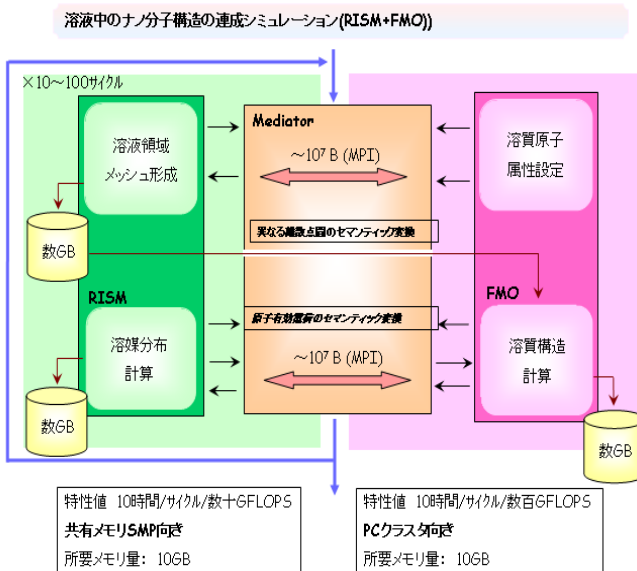


図1 グリッド・アプリケーション連成

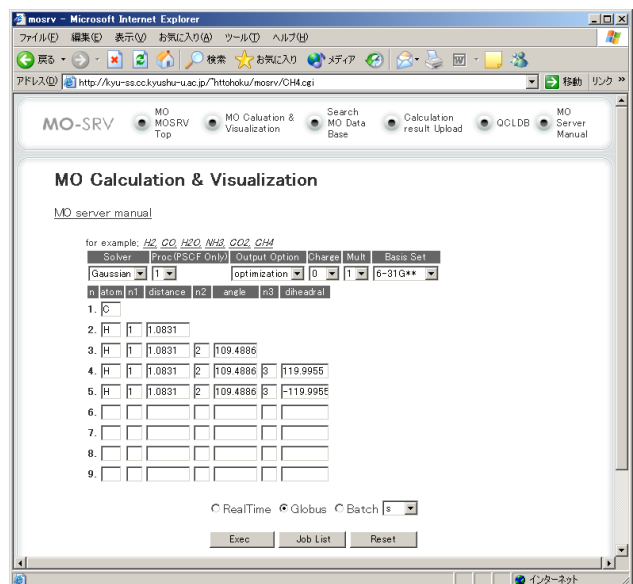


図2 グリッド・電子構造ポータル