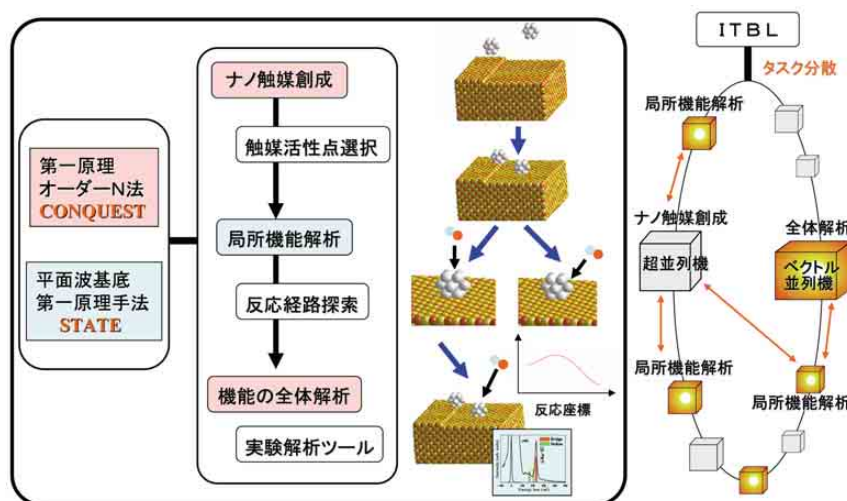


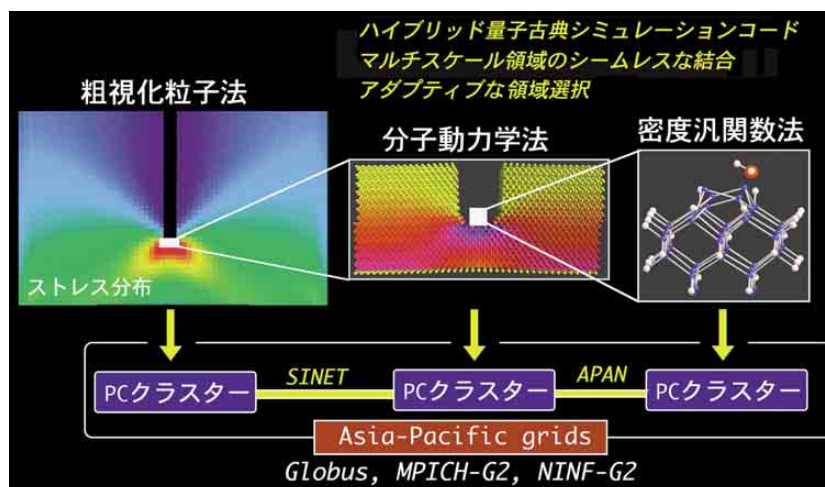
A1 ナノスケール触媒創成シミュレータの開発

物質・材料研究機構 計算材料科学研究センター 大野 隆央



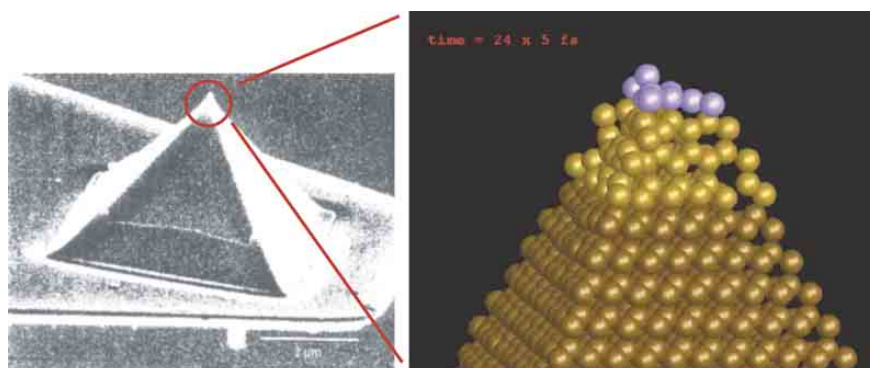
A2 並列計算グリッドを用いたハイブリッド量子/古典数値解析法の開発

名古屋工業大学 大学院工学研究科 尾形 修司



A3 ナノ物質・量子シミュレータの開発

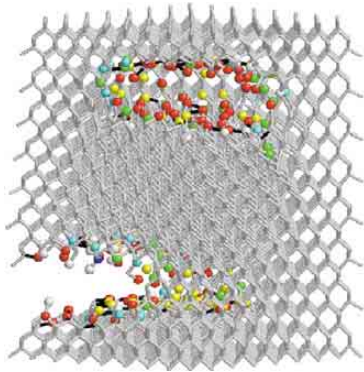
筑波大学 数理物質科学研究科 押山 淳



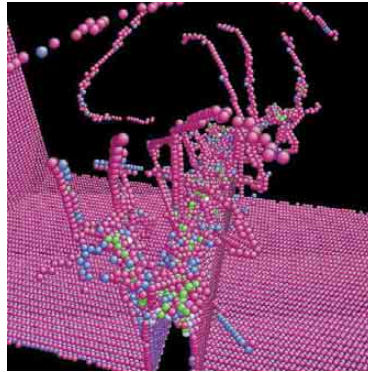
左はAFM探針のSEM像。丸で囲んだ部分だけでも100000個以上の原子が存在する。原子像が得られるためには探針の先端には原子1個が突出していることが重要とされている。右はハイブリッド・シミュレータによる、室温での探針先端構造の時間変化のスナップショット。先端は熱的に振動しているが、各時間でほぼ1個の原子が突出していることがシミュレーションで解明された。紫色と黄色の原子が量子論で扱った領域。

A4 第一原理計算によるハイブリッド分子動力学シミュレーション

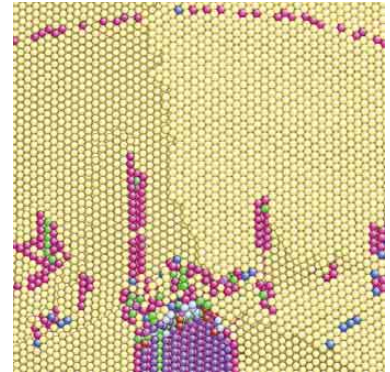
日本原子力研究所 計算科学技術推進センター 蕪木 英雄



シリコンナノ結晶の引張り試験における3次元き裂面

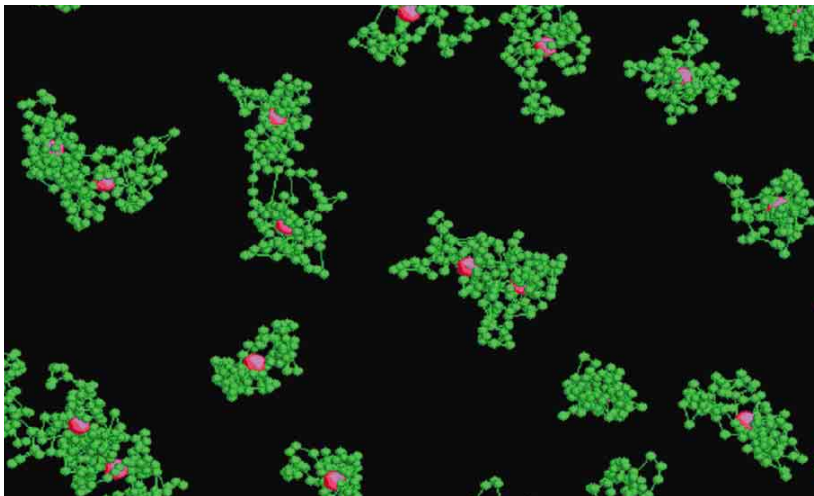


Cuの破壊過程におけるき裂先端の転位放出及び転位同士の間合いによる不動(ステアロッド)転位の形成



A5 量子多分子系ダイナミクス・シミュレーションの確立と応用

奈良女子大学 理学部 衣川 健一

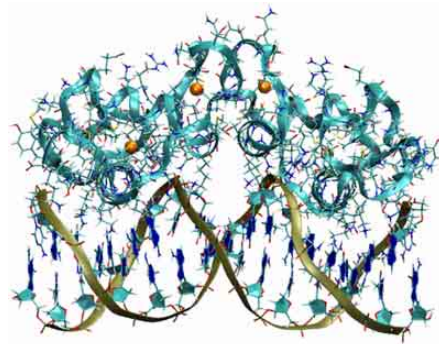


図． 液体パラ水素(14.7 K, 0 atm)のCMDシミュレーションで得られたスナップショット

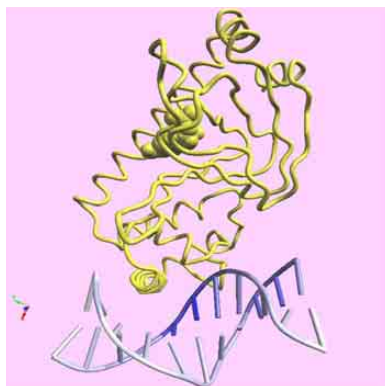
赤紫色：セントロイド座標、緑色：ファインマン虚時間経路(この空間的な広がりが量子的な波動性を表す)。セントロイドは虚時間経路(観測される粒子分布)の平均位置に相当する。見やすくするために各座標点には人為的な大きさを付加して描画している。

A6 DNAのナノ領域ダイナミクスの第一原理的解析

神戸大学 大学院自然科学研究科 田中 成典



ERダイマーとDNAの複合体



FMO法によるDNAとcAMP-CRP複合系のフラグメント間相互作用解析の結果(青と赤はそれぞれエネルギーの安定化と不安定化を示す)

B1 自己組織化地図によるゲノム情報の包括的視覚化

総合研究大学院大学 葉山高等研究センター 池村 淑道

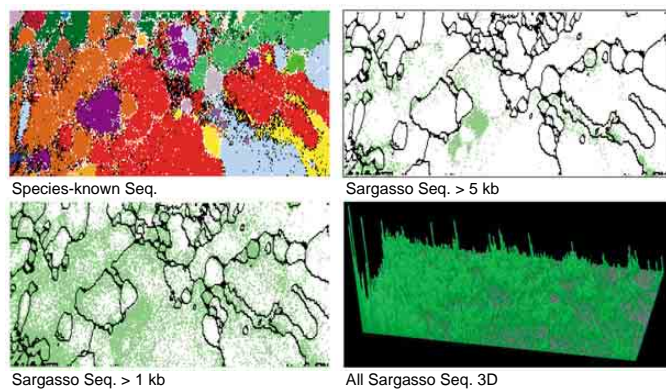


図1

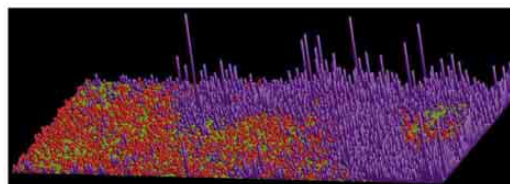


図2A Mous完全長cDNAについてのTetranucleotide-SOM
protein-coding cDNA : ncRNA

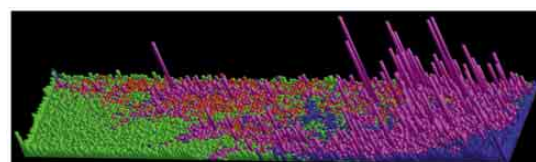
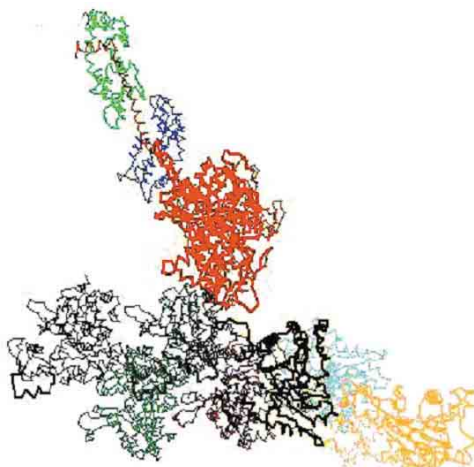


図2B 5 UTR : CDS : 3 UTR : ncRNA

B2 配列から機能への蛋白質ダイナミカルモデリング

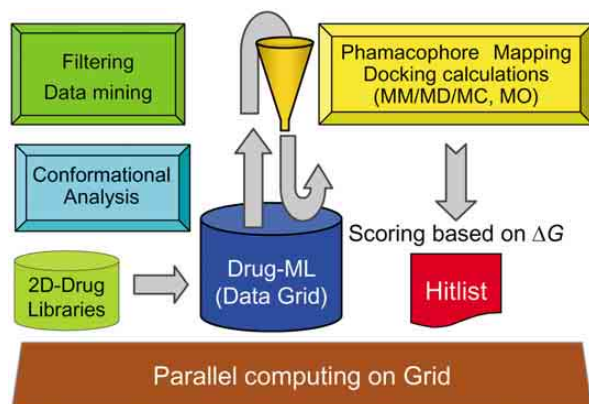
名古屋大学 大学院情報科学研究科 笹井 理生



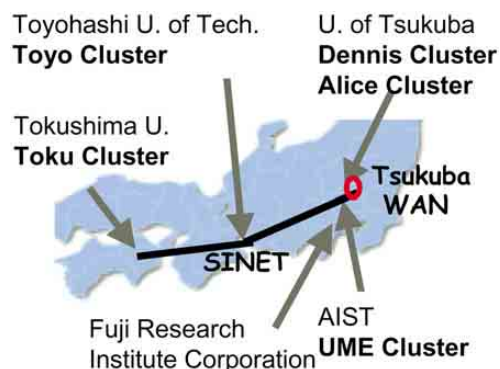
長時間分子動力学法を用いたシミュレーションによる、
アクチン系のスナップショット。

B3 Gridテクノロジーを用いた創薬プラットフォームの構築

徳島大学 大学院ヘルスバイオサイエンス研究部 中馬 寛



Platform for Drug Discovery



Grid Network for Drug Discovery

B4 心臓血管臨床リスク評価生体力学シミュレータ

東北大学 大学院工学研究科 バイオロボティクス専攻 山口 隆美



図 3 a 大動脈MRA 画像

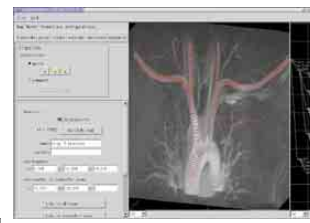


図 3 c 微分幾何法による計算格子生成

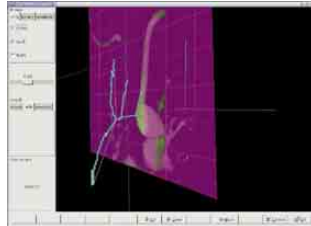


図 3 b 3次元細線化

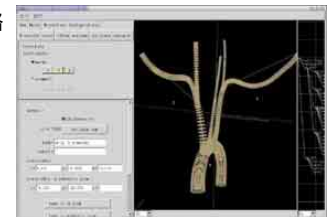
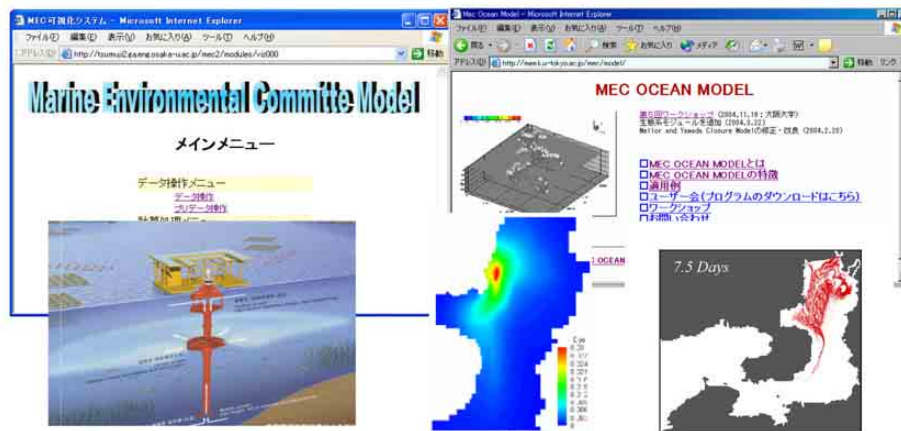


図 3 d 計算格子の外郭表示

C1 マルチスケール海洋環境シミュレータの開発と実用化

九州大学 大学院総合理工学研究院 経塚 雄策



マルチスケール海洋環境シミュレータの開発と実用化

C2 地震災害予測のための大都市圏強震動シミュレータの開発

東京大学 地震研究所 嶺 一 起

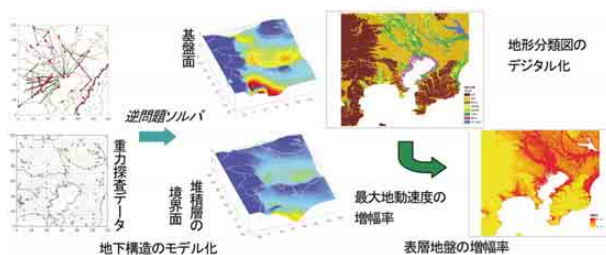


図 1 地下構造モデル化モジュール

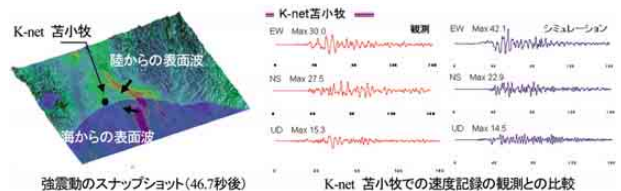
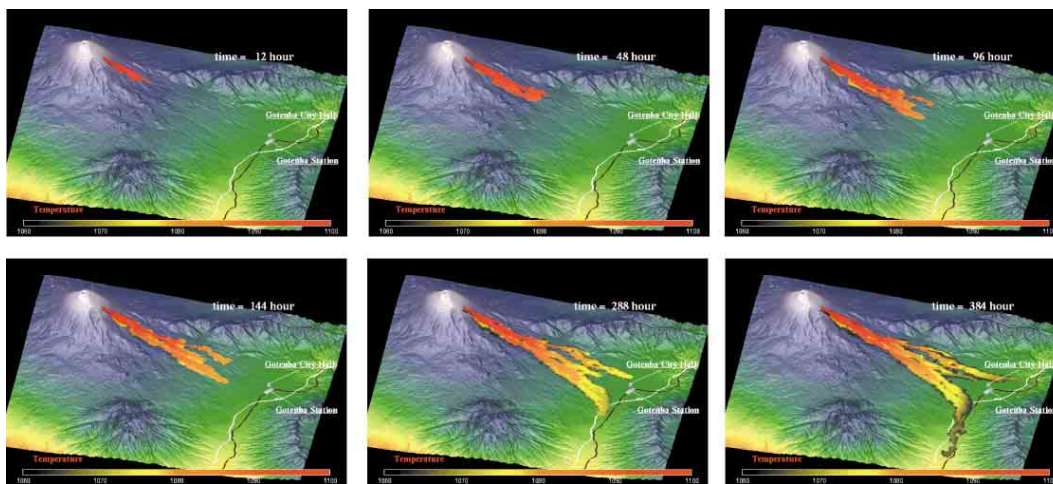


図 2 平成15年(2003年)十勝沖地震の解析例

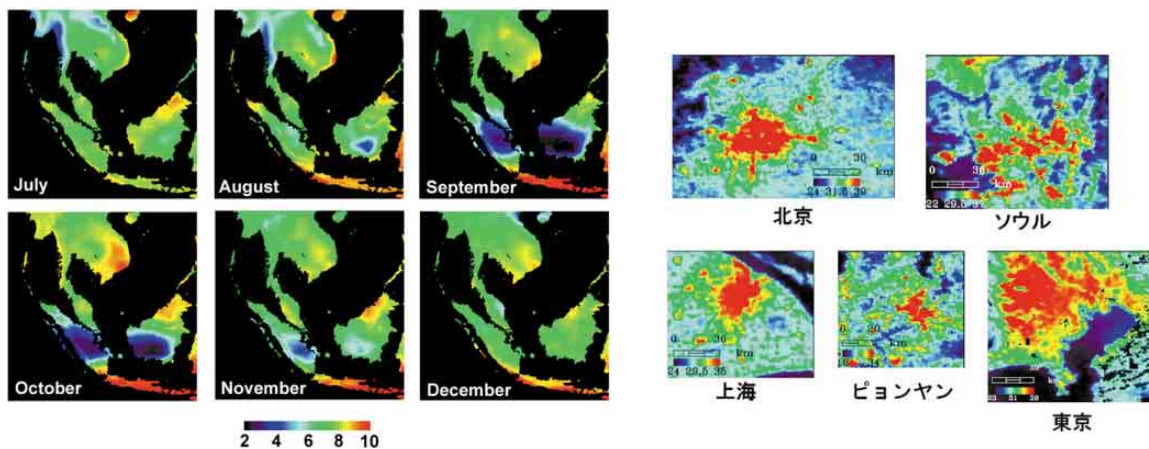
C3 火山熱流体シミュレーションと環境影響予測手法の開発

防災科学技術研究所 固体地球研究部門 藤田 英輔



C4 環境・災害監視のためのアジア衛星観測ネットワークの構築

東京大学 生産技術研究所 安岡 善文

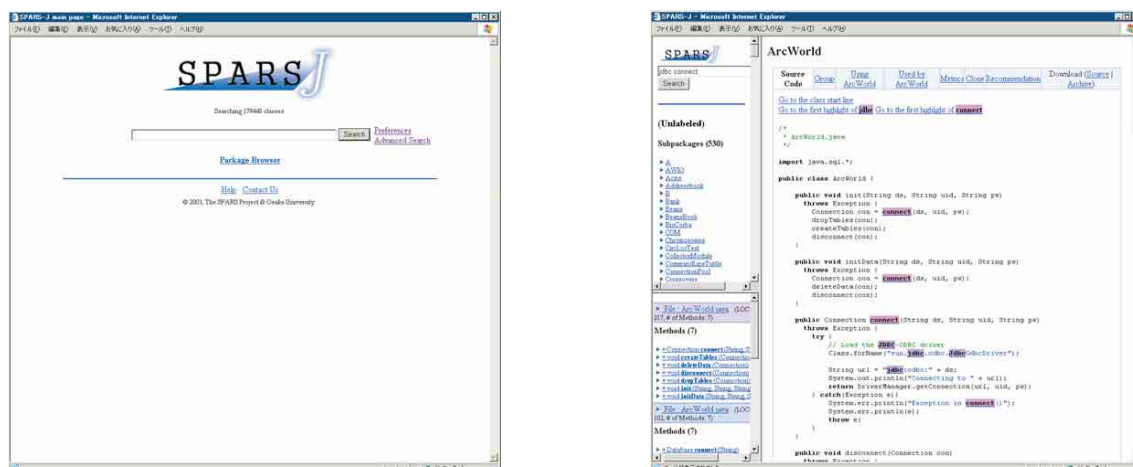


東南アジアのPAR分布図 (1997年、単位: MJ/m²/day)

東アジアにおける大都市の地表面温度分布

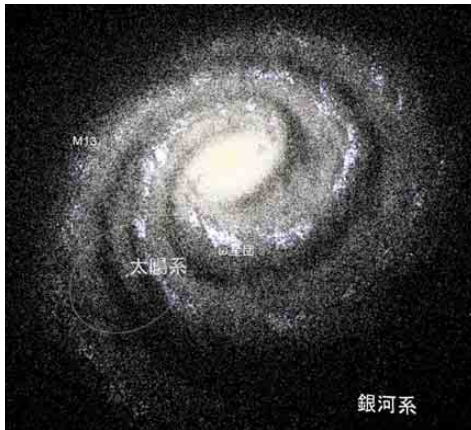
D1 ソフトウェアプロダクトの収集・解析・検索システム

大阪大学 大学院情報科学研究科 井上 克郎



D2 4次元デジタル宇宙データの構築とその応用

自然科学研究機構 国立天文台 海部 宣男



銀河系の3次元モデル

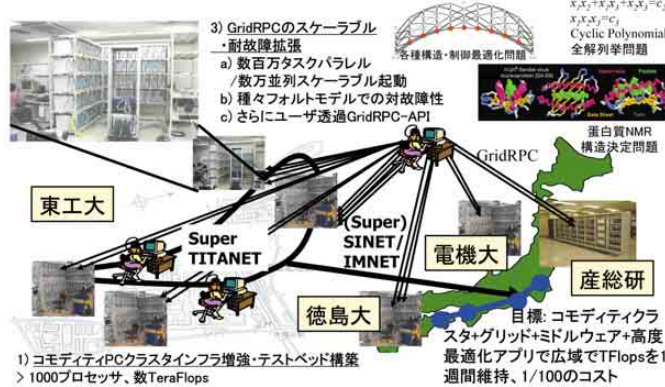


立体ムービー「月の起源」

D3 コモディティグリッド技術によるテラスケール大規模数理最適化

東京工業大学 学術国際情報センター 松岡 聡

- 2) コモディティクラスタの高信頼性ミドルウェア
 - a) 柔軟でユーザ等価、かつpartial faultに対応する高性能な耐故障性
 - b) クラスタの動的な更新: Plug&Play性
 - c) 異機種実行時の性能の可搬性
- 4) 高度数理最適化ライブラリ・テラスケール最適化アプリ
 - SCRM方による非凸二次最適化
 - 高次方程式のホモトピー法による全解探索
 - BMI制御最適化
 - 並列GAとゲノム最適化応用

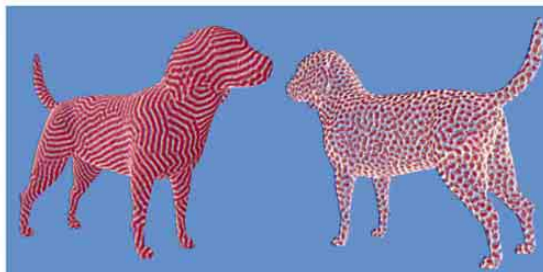


D4 広域ビジュアルコンピューティング技術

産業技術総合研究所 脳神経情報研究部門 栗田 多喜夫



VGクラスタシステム (17ノード)



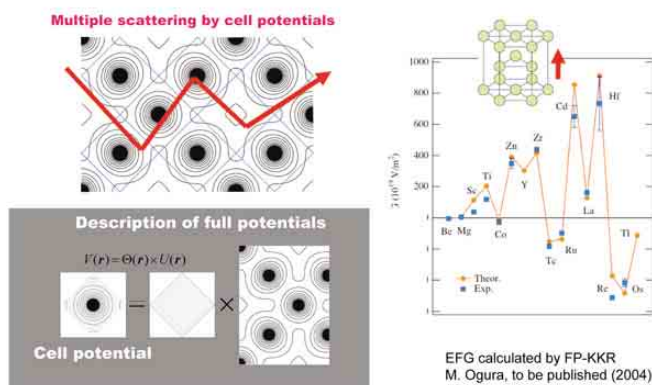
反応拡散シミュレーション

E1 計算機ナノ材料デザイン手法の開発

大阪大学 大学院理学研究科 赤井 久純

Full-Potential KKR Method

One of the most powerful methods for COMPUTATIONAL MATERIALS DESIGN (CMD)



E2 蛋白質の量子化学反応解析システムの開発

アドバンスソフト株式会社 小池 秀耀

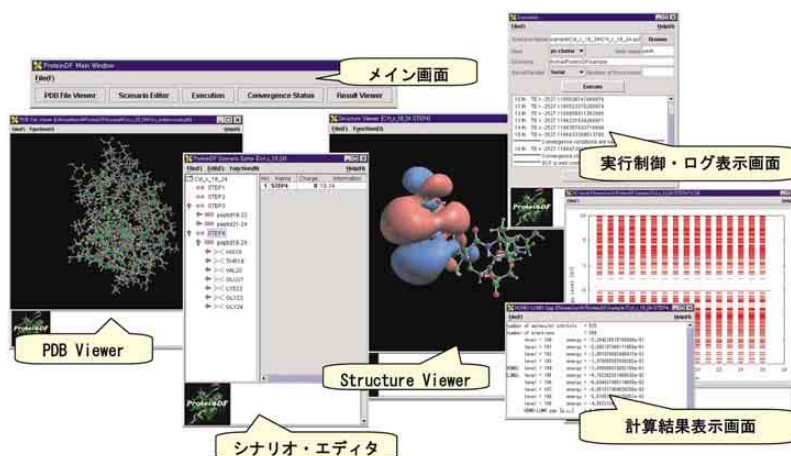


図2 ProteinDFシステム GUIとシナリオ・エディタ

E3 仮想スーパーコンピュータセンタ利用環境GridLibの構築

産業技術総合研究所 グリッド研究センター 関口 智嗣

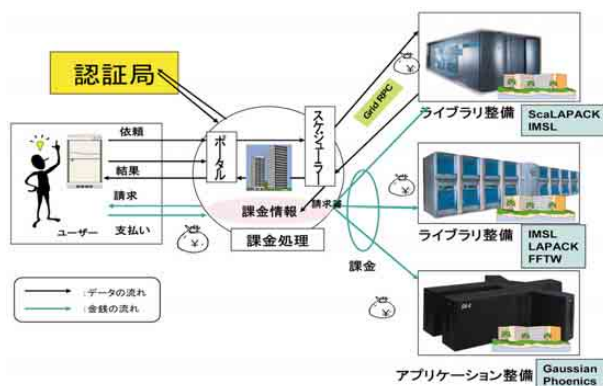


図1 GridLibによる仮想スーパーコンピュータセンター



図2 グリッドポータル構築ツールを用いたポータル構築例