



http://www.cenav.org/ で公開中!

計算工学ナビ

文部科学省「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくりでは、先導的研究開発課題の成果を広く普及するアウトリーチ活動の一環として、Webサイト「計算工学ナビ」(http://www.cenav.org/)を10月31日より公開しています。

「計算工学ナビ」は、産業界の現場で活躍する研究者や設計技術者、および研究開発における意思決定者をメインターゲットと位置づけ、これら読者層に対して分野4で研究開発を進めるソフトウェアを中心にその活用事例などを紹介し、産業界におけるものづくり系国プロソフトウェアの普及展開を目指すことを主な目的としています。

具体的な施策として、(1)ニュースレター(季刊)の発行(2)解析ソフトウェアのダウンロード提供(3)各解析ソフトウェアによる具体的な解析事例データベースの提供などを実施します。特に解析事例データベースでは基礎的なV&V事例の充実と、再現計算可能なファイル一式の提供を行うことで、本サイトが提供するソフトウェアを産業界の潜在的ユーザー層に「まず一度使ってもらおう」ことを当面の目標としています。

さらに、解析事例データベースは、現在開発中のHPC/PF(HPC次世代ものづくりプラットフォーム)解析実行環境と連動させることで、事例データベースからユーザーがダウンロードした再現計算用ファイルセットを使って、GUI操作のみで解析実行できる機能を準備中です。これが実現すると、「まず一度使ってもらおう」ためのハードルが一層低くなり、国プロソフトウェアの普及展開の後押しができるものと考えます。

WEBトップページ



WEBページ抜粋

「計算工学ナビ」ではこの他にも、分野4の研究課題トピックスやHPCにまつわる話題や動画など、随時掲載していく予定です。サイトにユーザー登録をしていただくと、アップデート情報などを載せたメールマガジンをお送りしますので是非ご登録下さい。(川鍋友宏)

HPCアプリケーションソフトウェアラインナップの最新状況

「京」の上でFMO計算が可能に!

当グループでは、フラグメント分子軌道(FMO)計算のためのプログラムABINIT-MPの開発を行っており、今年度から「京」への移植作業をRIST神戸の協力を得つつ進めています。来年度の初めには「京」のアプリケーションライブラリとしてABINIT-MPを登録し、製薬企業から関心を集めている、高解像度の相互作用解析が可能なFMO4-MP2の計算機能などを提供する予定です。図1は、残基数198のHIV-1プロテアーゼを取り、それにリガンドのロピナビルを結合させた複合体のFMO4-MP2/6-31Gジョブのタイミングです。

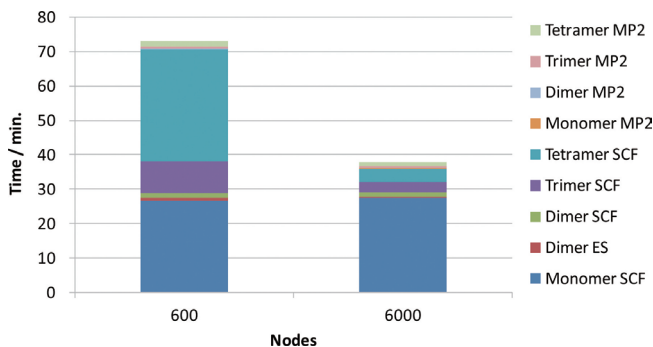


図1 HIV-1プロテアーゼとロピナビルの複合体のFMO4-MP2計算の「京」上でのタイミング

ABINIT-MP

どちらの場合も繰返し計算を要するHF-SCFのステップが支配的となっていますが、改良の用途は立っており、時間的には半減される見込みです。数百ノードで実タンパク質の解析が1時間弱で可能であれば、創薬の現場での利用が進むと期待されます。

実験施設との連携機能

今年度は、「京」への対応と併せてSPring-8などのX線実験施設から得られるタンパク質の構造や電子密度のデータとの連携機能を開発する作業も行っています。MP2レベルのFMO計算により、薬品分子と周りの残基群といった重要領域の構造最適化や複数の配座を考慮した電子密度の生成が容易に可能となり、実験の精緻化と効率化に貢献出来ます。

利用者との交流

バイオWGやCBI学会などを通じて製薬関係の利用者との交流を図ると共に、新化学技術推進協会の研究会で講演するなど、一般の化学工業の分野へもABINIT-MPをアピールする努力を始めています。また、来年度の下期にはオープンソース化を計画しており、普及に弾みを付けたいところです。(望月祐志)



11月17～22日の1週間、SC13が開催されました。本センターではExhibitionブースに於いて「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくりの各研究成果をポスターや動画などを用いて展示しました。AICSブースでのショートレクチャーでは、(独)物質・材料研究機構理論計算科学ユニットの大野隆央ユニット長が分野4を代表して研究開発の内容について発表されました。



Colorado Convention Center



本センター展示ブース

## HPC四半世紀 – SC13 (Denver, Colorado)

High Performance Computing (HPC) に関する最も権威ある国際会議であるSC13が米国コロラド州デンバー (Colorado Convention Center) にて開催されました。1988 Orlandでの第1回会議から数えて26回目にあたり、25周年 (銀婚式相当) を迎えて一層盛況を呈する会議となりました。この会議はTechnical Program、HPC Interconnections、Exhibitsの三つの柱からなり、学術と技術、さらには社会を束ねる会議としての意図が端々に見受けられる会議です。

Technical Program では学術ベースの講演に加えて、双方向的講演であるBirds-of-a-Feather Sessions (BOFs) が特徴的イベントとなっています。Blue Gene/Q 100万コア並列で行う量子化学MDや786K coresで行う乱流計算など、「京」のライバルとなる成果が続々と発表されていました。Keynote講演では、文化人類学者でもあるIntel Fellowがスーパーコンピューティングの将来を論じていました。最大のイベントであるACM Gordon Bell PrizeはETH Zurichらのグループによる“11 PFLOP/s Simulations of Cloud Cavitation Collapse”の研究に対して授与されました。

HPC Interconnectionsは、今後の技術発展を担う学生向けのプログラムであり、チュートリアルなどと合わせて、若者をエンカレッジする雰囲気醸成を醸し出していました。

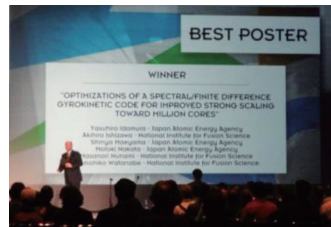
Exhibitは363ブースにのぼり、世界のHigh Performance Computing Technologyを俯瞰するには十分な規模となりました。本センターのブースではMRによる計算成果の



賑わう展示ブース



MR体験中



SC13 Best Poster Award受賞



表彰台の前山伸也氏 (中央)

展示を初めて試み、好評を博しました。

また、投稿論文約200件、採択論文約80件、最終受賞候補6件の中から、分野4次世代ものづくりの計算科学技術推進体制構築の研究課題の一つである核融合に関する論文“Optimizations of a Spectral/Finite Difference Gyrokinetic Code for Improved Strong Scaling Toward Million Cores” S.Maeyama, T.Watanabe, Y.Idomura, M.Nakata, M.Nunami, A.Ishizawa がSC13 Best Poster Awardを受賞しました。

(吉川暢宏)

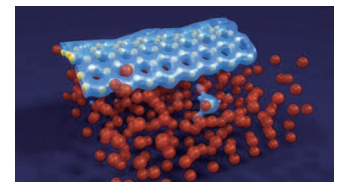
## Short lectureを終えて

“Process simulation of carbon based nanostructures in next-generation semiconductor integrated elements”

### 発表概要

微細化の進む半導体デバイスにおいては、従来の延長線上にない新規な材料・プロセスを用いたデバイス開発が必須である。本研究課題では、ナノスケール世代の半導体デバイスにおいて要求されるチャネル材料、配線材料等への適用が期待される、カーボン系材料を代表とした非シリコン系材料のナノ構造プロセスの共通要素的な部分に関する知見基盤を構築し、“次世代ものづくり”における研究開発の高度化、高速化に貢献することを目指す。

「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくりの概要と研究課題1から5を簡単に紹介した後、課題2に関して、半導体デバイスの現状、次世代半導体デバイスへの期待と問題点、研究課題の目的を説明し、基本ソフトウェアであるPHASEの特徴と実効性能を紹介しました。具体的なシミュレーション成果として、CVD法によるグラフェン成長過程の第一原理ダイナミクス解析を紹介し、スライドでの説明の後、研究紹介の動画を流しました。研究内容は十分に理解されたと感じました。特に、動画は興味深く受け取られ、今後、ナレーションを加えることも検討したいと考えています。



CVD法によるグラフェン成長過程の第一原理MDシミュレーション



講演中の大野教授



盛況な講演中風景

(大野隆央)

## 神戸拠点

平成23年4月に本センターの神戸拠点が「京」の施設である(独)理化学研究所計算科学研究機構(AICS)内と、それに隣接する高度計算科学研究支援センター内の(一財)計算科学振興財団(FOCUS)との2か所に開設されてから本年度2年を迎えました。本拠点では、スーパーコンピュータ「京」用にチューンアップされた先進的なソフトウェア群の産業普及のために、本センターとFOCUSが連携し利用促進をはかってきました。現在は、AICS内拠点に研究員が常駐し産業利用推進と「京」利用のための研究を行っており、多くの成果を上げています。



拠点が入っているAICS全景

## 国際フロンティア産業メッセ2013



本センター展示ブース

9月5日(木)・6日(金)神戸国際展示場にて開催された「国際フロンティア産業メッセ2013」に昨年同様出展し、「分野4 次世代ものづくり」の研究成果を展示しました。「京」の成果利用について多大な関心が寄せられているところ、過去最大級規模の展示となった今回のメッセでの本センターのブースには、職種も年齢も様々な方たちが2日間で約100名来場されました。大規模な実用問題解析に対応したシミュレーションの最新の成果を紹介したポスターや動画を、来場者の方々は興味深くご覧になっていました。

9月5日(木)・6日(金)神戸国際展示場にて開催された「国際フロンティア産業メッセ2013」に昨年同様出展し、「分野4 次世代ものづくり」の研究成果を展示しました。「京」の成果利用について多大な関心が寄せられているところ、過去最大級規模の展示となった今回のメッセでの本センターのブースには、職種も年齢も様々な方たちが2日間で約100名来場されました。大規模な実用問題解析に対応したシミュレーションの最新の成果を紹介したポスターや動画を、来場者の方々は興味深くご覧になっていました。

## AICS 一般公開

10月19日(土)に開催された(独)理化学研究所計算科学研究機構の一般公開での分野4のブースでは、自動車、航空機などのものづくり分野における「京」などを利用したシミュレーションの研究内容を多くの方に紹介しました。空気の流れを体験する子ども向けに作った「ミニ実験コーナー」では、送風機の風で浮かぶ紙風船の地球儀が特に人気でした。



食い入るように実験を見つめる来場者



実験コーナー

## HPC産業応用オータムスクール

10月18日(金)・19日(土)の2日間にわたり、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)主催のHPC産業利用スクール「HPC産業応用オータムスクール」が、多摩永山情報教育センターにて開催されました。

初日には、本センター長である加藤千幸教授によるHPCを利用した先進的シミュレーションの産業応用例の紹介や、AICS可視化技術研究チームリーダーの小野謙二博士による

HPC/PFの紹介などが行われました。二日目は産応協メンバーを含む参加者全員によるグループ討議が行われ、主に「産業界へのHPC環境を普及させるためには？」をテーマにブレインストーミングが行われました。

スクール参加者は産業界での計算実務者でしたので、経営層がHPC環境の必要性を理解することの重要性について、熱心に討議する姿が印象的でした。

## イベント案内

- ワークショップ**
  - 「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくり 第1回 統合ワークショップ 開催予定  
日時：①平成26年3月6日(木) 「熱・伝熱・燃焼」「材料・構造」 ②平成26年3月13日(木) 「先端アプリ・共通基盤・PF部門」  
場所：東京大学生産技術研究所
- セミナー**
  - 第4回クラウドコンピューティング環境に対応したFrontFlow/blueの設計実務セミナー  
日時：平成25年12月10日(火) 10:00～16:20 場所：東京大学生産技術研究所 As棟3F中セミナー室4
  - 第5回クラウドコンピューティング環境に対応したFrontFlow/blueの設計実務セミナー  
日時：平成26年1月17日(金) 開催予定 場所：神戸
- 関連団体のイベント**
  - 第6回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム  
日時：平成25年12月18日(水) 13:00～17:30 場所：日本科学未来館 みらいCANホール  
主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協/ICSCP)
  - HPC産業利用スクール「京」特別コース  
日時：平成26年1月15日(水) 開催予定 場所：東京  
主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協/ICSCP)
  - 第6回トップセミナー  
日時：平成26年2月13日(木) 13:00～17:00 場所：グランフロント大阪 ナレッジキャピタル カンファレンスルーム  
主催：公益財団法人計算科学振興財団

## 編集後記

革新センターが本年度より新規に始まり、今回が2号目のNEWSとなります。6月開催の生研公開で初めてお披露目したMR技術を用いたシミュレーションの3D映像の可視化体験コーナーを、SC13のブースでも実演し、多くの方に体験していただくことが出来ました。SC13では、ノベルティグッズとして用意した150個のホッチキスと100部のパンフレットが、初日にほぼ無くなるほどの盛況ぶりです。革新センターの展示は大変好評でした。この場を借りてご協力いただいた皆様に感謝申し上げます。

## 資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661  
FAX : 03-5452-6662  
E-mail : office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp  
URL : http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

## 編集発行

東京大学生産技術研究所  
革新的シミュレーション研究センター  
〒153-8505  
東京都目黒区駒場4-6-1