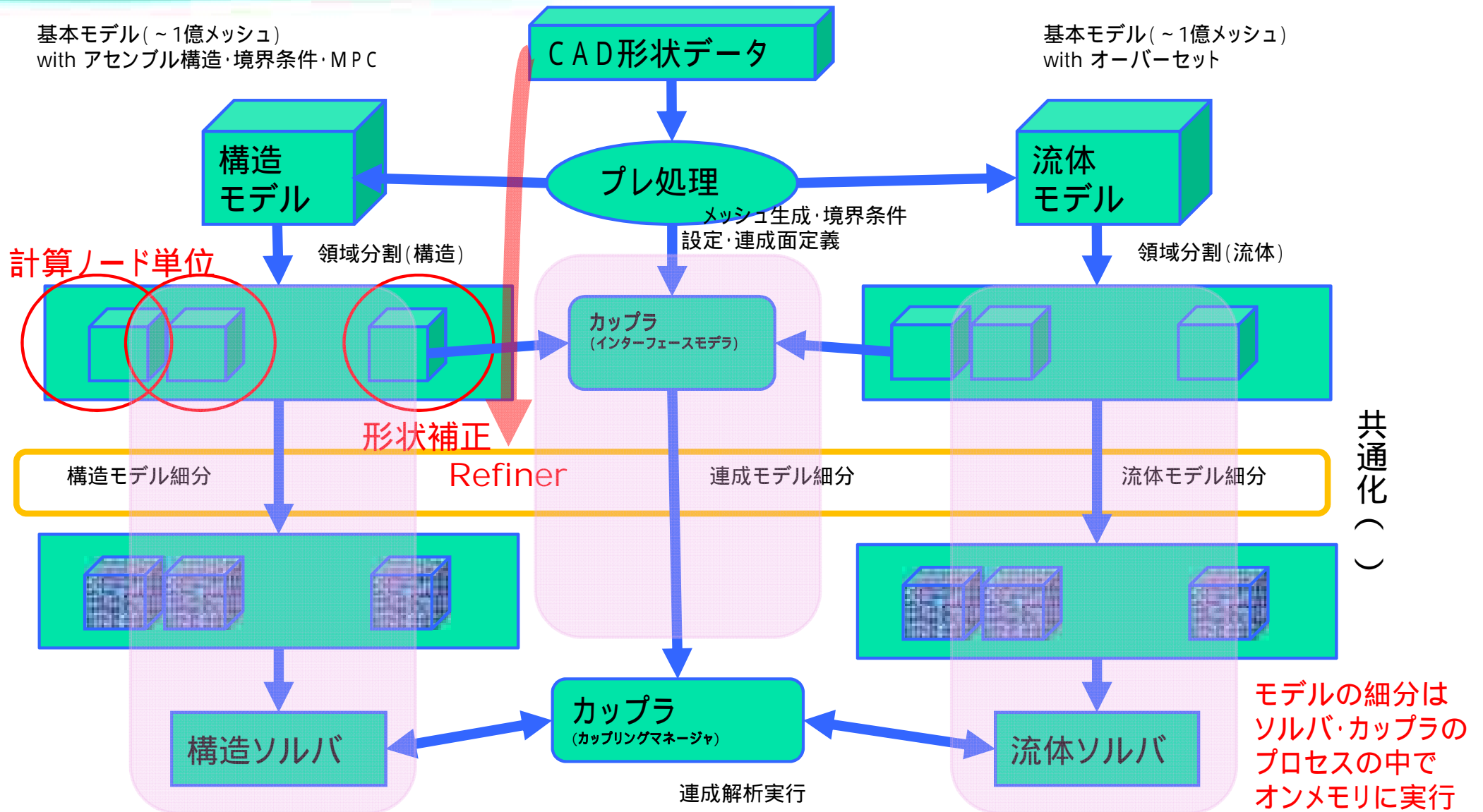


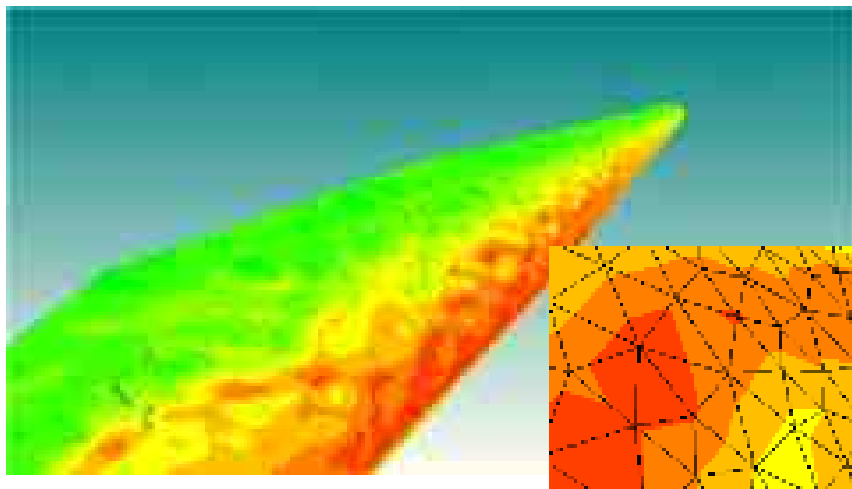
REVOCAP

REVOCAP_Refiner : 並列ソルバへライブラリーとして組込、 大規模メッシュ生成と解析を大幅に効率化

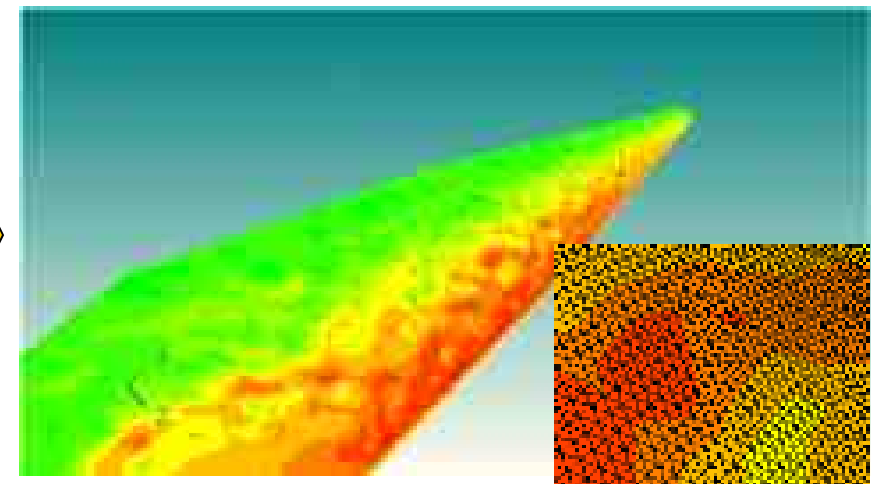


異なるメッシュ、領域分割での物理量の補間、並列連成

- 異なる解析モデルの節点間における物理量の補間
 - 補間可能な物理量は、牽引力、変位、速度、加速度、熱流速、温度
 - 対応ソルバーは、流体/構造/磁場/音響解析ソルバー
- 並列ソルバーとの同期
 - プロセス間通信



流体解析



構造解析

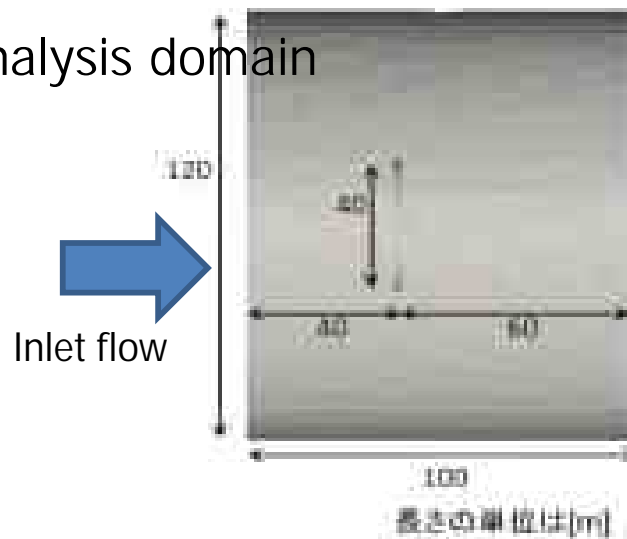
REVOCAPシステムを使った実証解析

- 発電用**風車**の流体構造連成振動解析
(MHIと協力)
- 自動車の流体構造連成**車室内騒音**解析
(スズキ自動車と共同)
- **縦軸斜流ポンプ**の流体構造連成振動解析
(日立プラントテクノロジーと共同)
- 簡易**医療用MRI**モデルの磁場構造連成振動解析
- 一般ユーザーが、本格利用するのはこれから

風力発電用風車の流体構造連成振動解析

CFD Model

Analysis domain

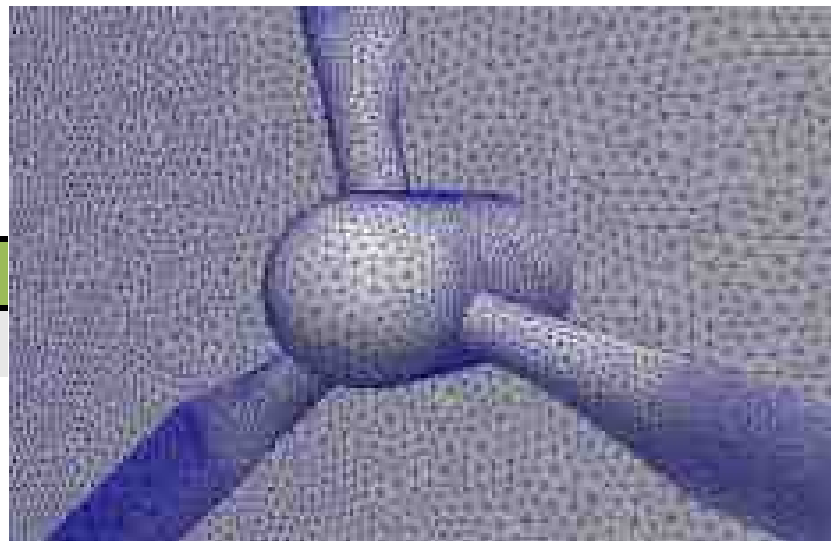


Overset mesh
(Outer + Inner)



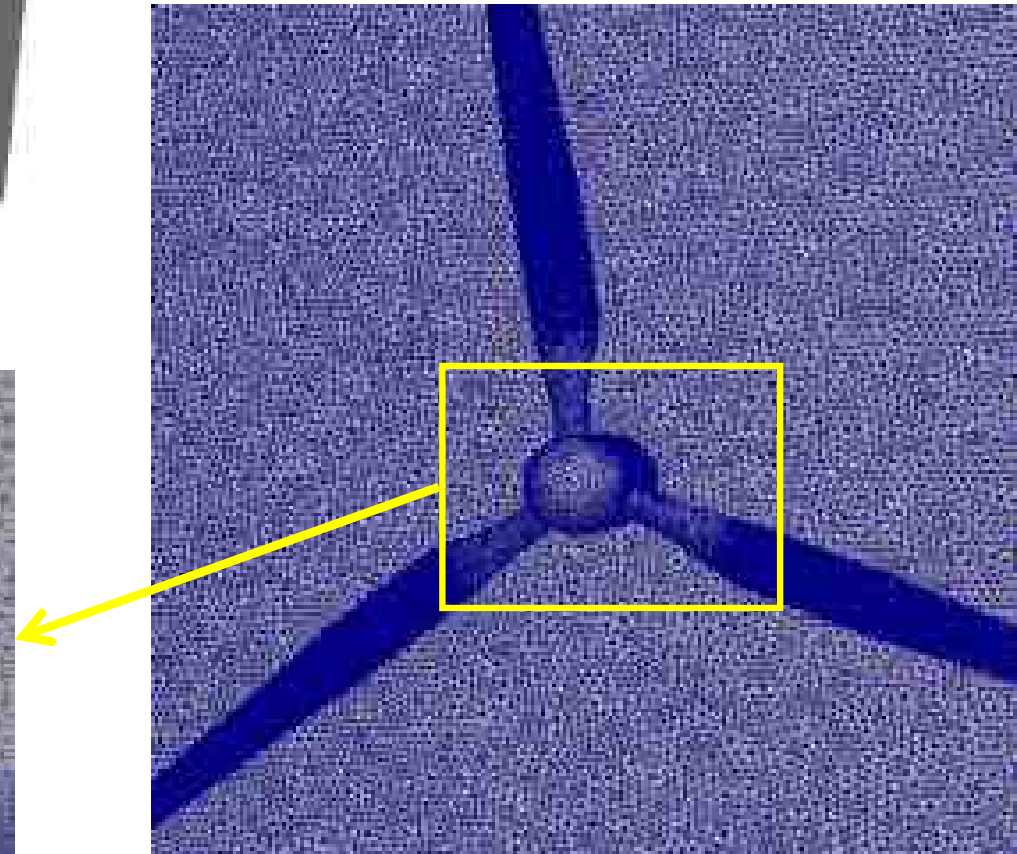
Domain	Nodes	Elements
Outer	9.4×10^5	5.46×10^6
Inner	1.79×10^6	9.50×10^6

CFD mesh

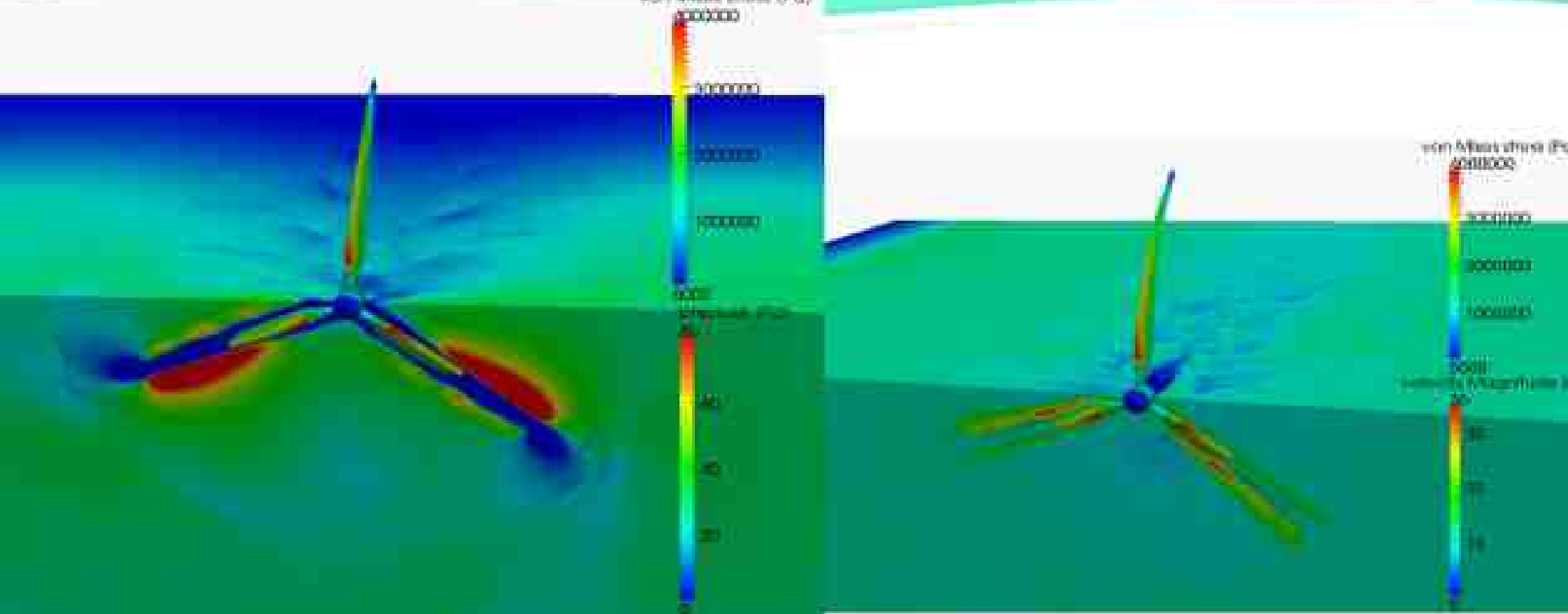


Coupling Surface

Elements 74242



風力発電用風車の流体構造連成振動解析



Blade : von Mises stress & deformation
 Fluid : Equi-pressure surface

Blade : von Mises stress and deformation
 Fluid : Equi-velocity surface

Central horizontal surface and vertical surface along blades' rotating plane

ProteinDF

ProteinDFの特徴

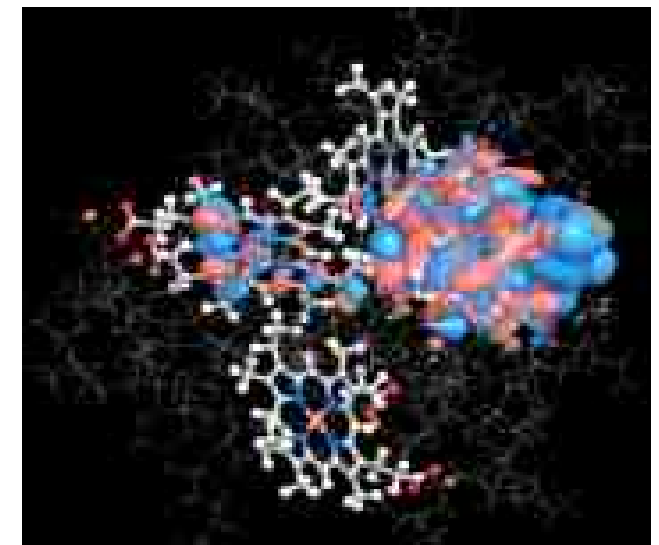
- 金属を含むタンパク質の全電子カノニカル波動関数計算が可能なソフトウェアとして設計・開発
- ガウス型基底関数を用いた密度汎関数(DF)法に基づく分子軌道計算プログラム
- RI(Resolution of Identity)法、CD(Cholesky decomposition)法を採用
- 大規模複雑SCF計算を達成するためのQCLO法と計算シナリオ
- 超並列化対応(MPI/OpenMP hybrid)
- オブジェクト指向言語C++で開発
- 計算事例: 数百残基クラスが可能
 - 2000年: 金属タンパク質シトクロム c ¹⁾
 - 2006年: インスリン6量体²⁾
 - 2010年: 金属タンパク質ミオグロビンCO³⁾
 - 2010年: 金属タンパク質シトクロム c_3 ⁴⁾
 - 2011年: 光合成反応中心部分系

1) F. Sato, et. al., Chem. Phys. Lett., 341, 645 (2001).

2) T. Inaba, et. al., Chem. Phys. Lett., 434, 331 (2007).

3) K. Chiba, et. al., Int. J. Quant. Chem., In press

4) 投稿準備中

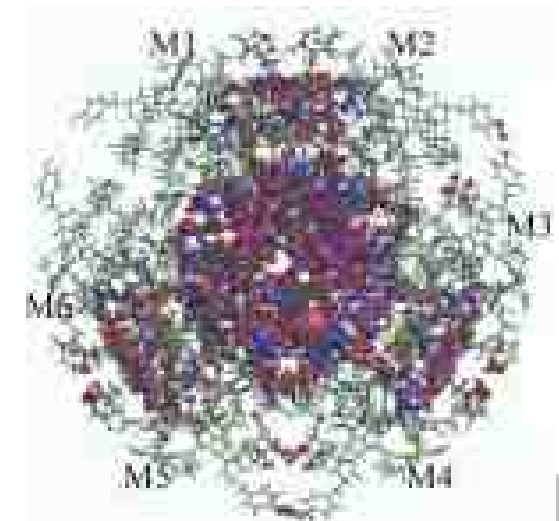
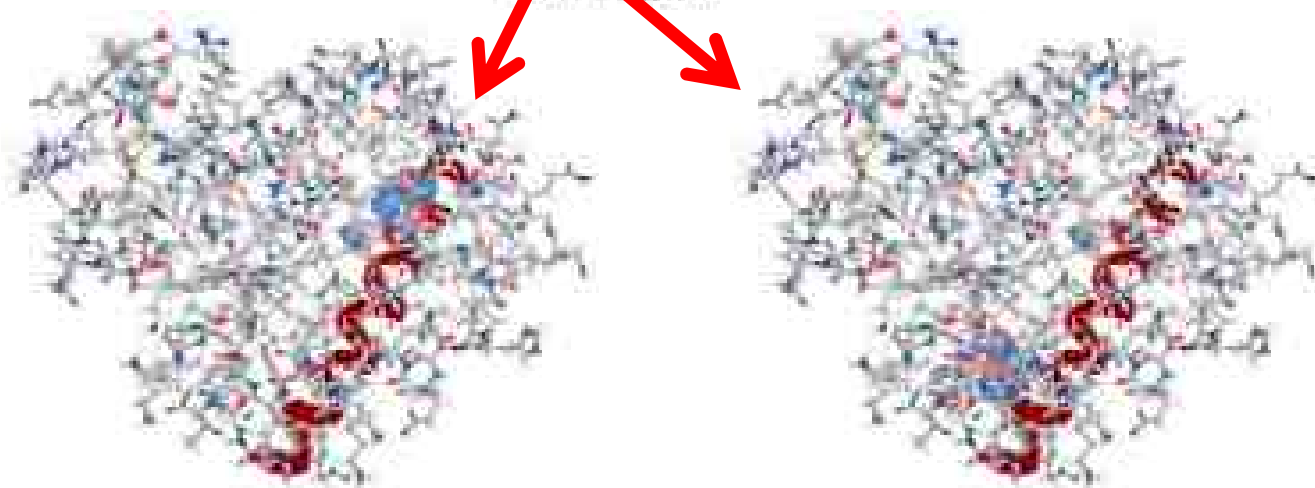
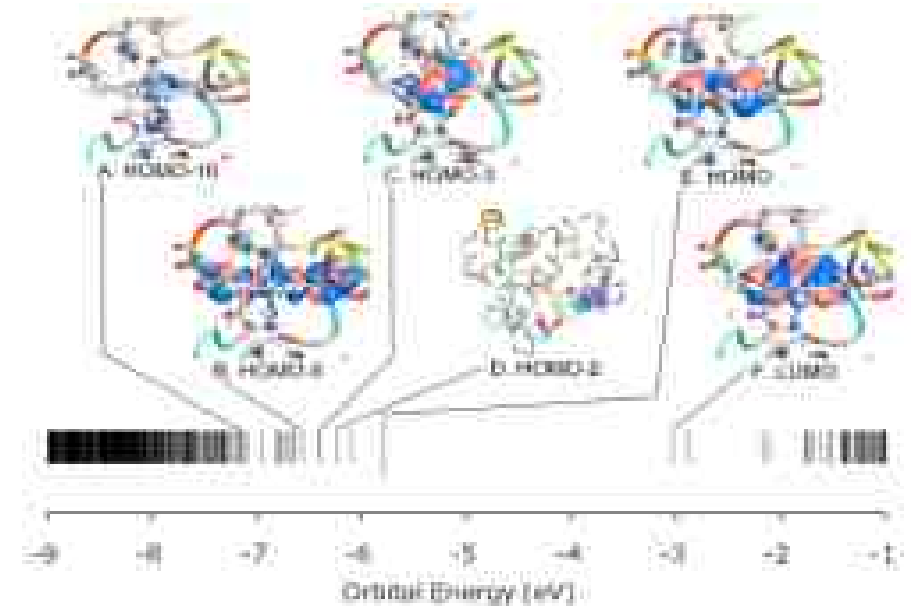
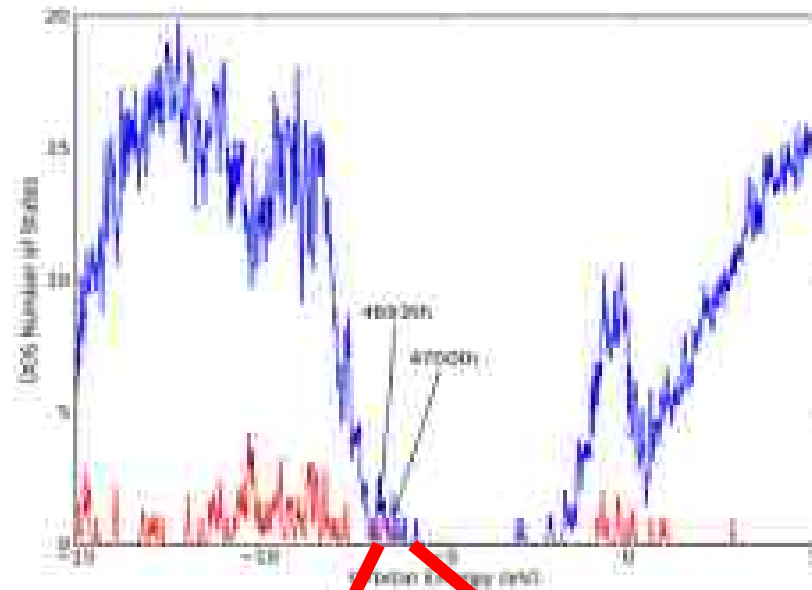


シトクロム c_3 の分子軌道

ProteinEditor 主要機能

分子軌道、電子密度、状態密度解析:

タンパク質の階層構造と電子状態との間で, 詳細かつ直接的な解析

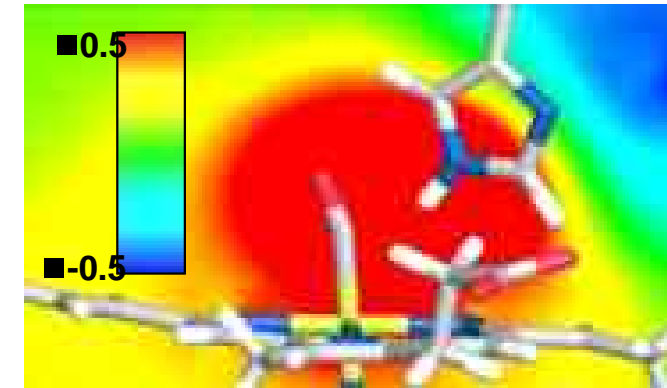
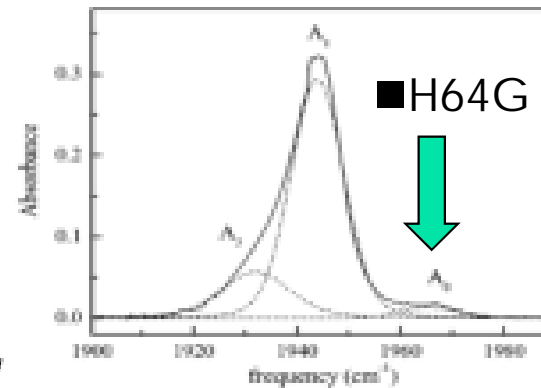


実証事例 1/2 : 基礎解析事例

● IRスペクトル解析

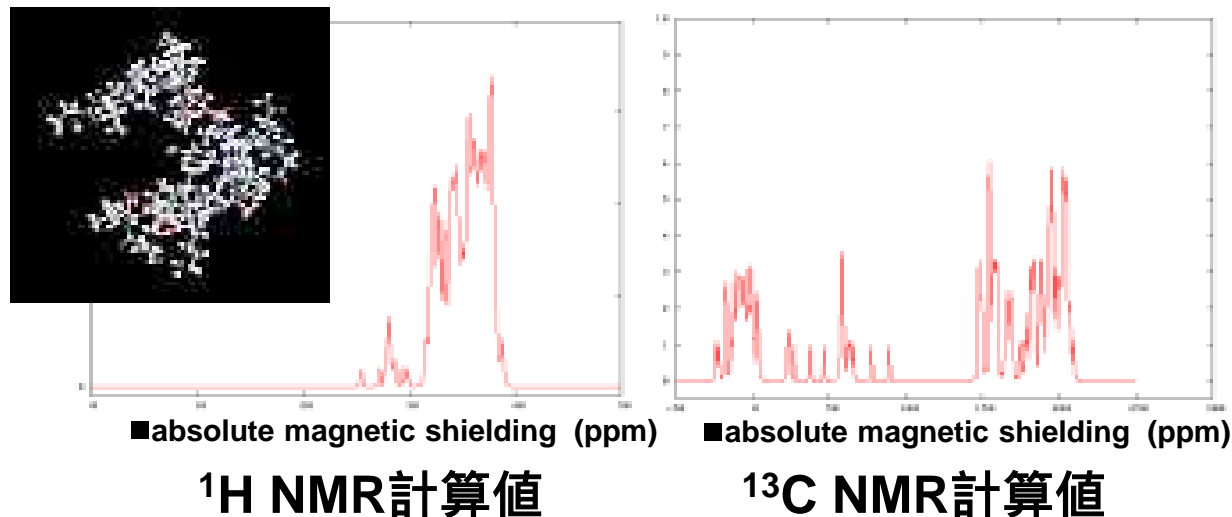
- 伸縮振動解析
- X線構造解析では見えない
水素位置の帰属

K. Chiba, T. Hirano, F. Sato, M. Okamoto,
Int. J. Quant. Chem., in press.

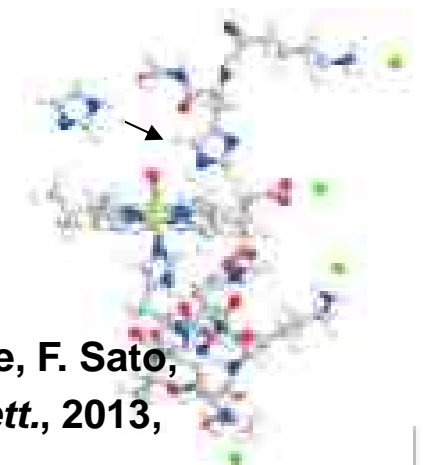


● NMRケミカルシフト解析

- 原子核が置かれる化学的環境や
分子構造に関する情報の解析



	$R_{CO} / \text{Å}$	$\nu_{CO} / \text{cm}^{-1}$
Heme+92-98-HIE	1.174	1978
Heme+92-98	1.167	1988
Heme+92-98-HID	1.167	2034
Minimal	1.160	2059
CO	1.142	2210

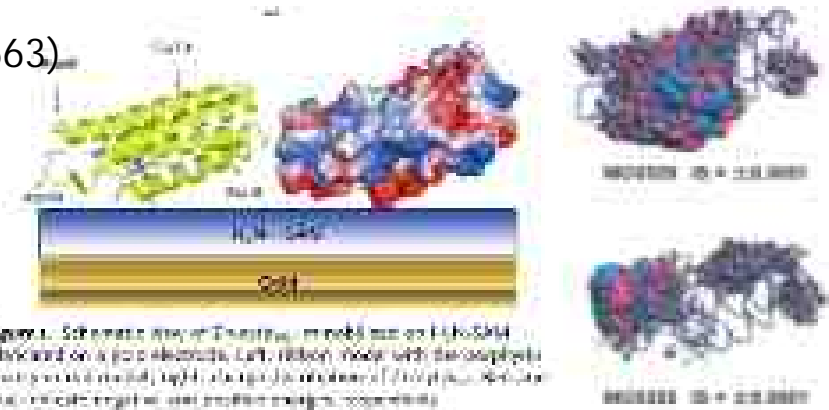


T. Abe, Y. Sekine, F. Sato,
Chem. Phys. Lett., 2013,
557, 176.

実証事例 2/2 : 応用解析事例

- シトクロムを使ったフォトコンダクタ、フォトダイオード解析

- ソニー (Y. Tokita, et. al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, 50, 11663)
- 実験値と計算値の直接比較
望みの性能を持つ素子の設計へ



- 甘味タンパク質解析

- 岡山理科大
- 中性アミノ酸残基(TYP8)が大きな正の静電ポテンシャルを持つことで、強烈な甘味が生み出されることが明らかに

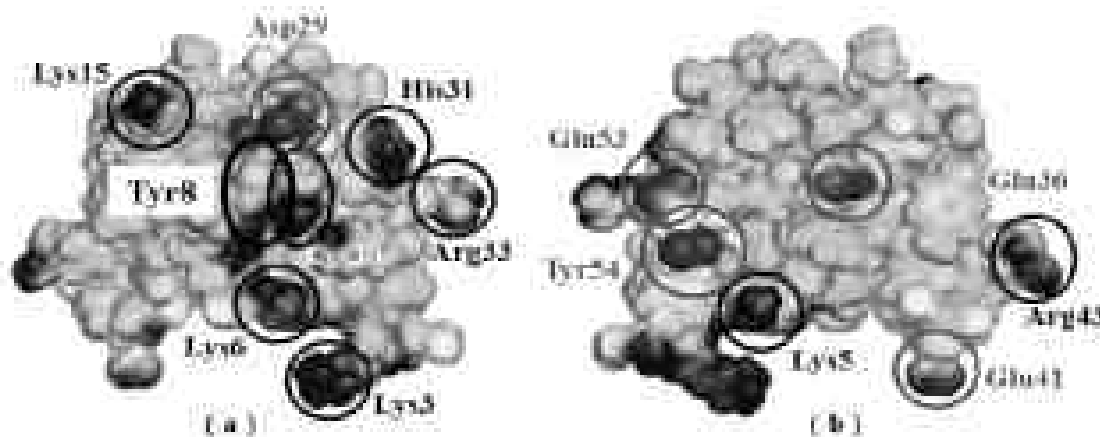
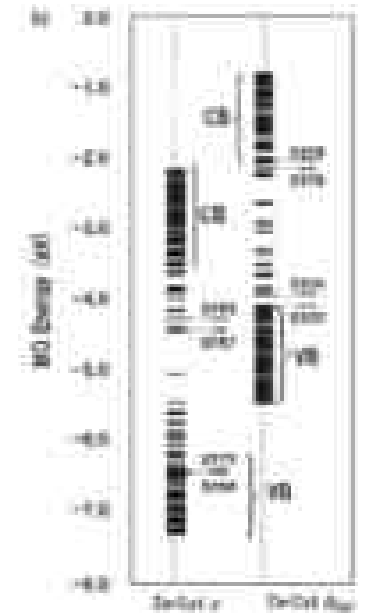


Fig. 2 Electrostatic potential maps (a and b) of des-pGlu-bravaisin.

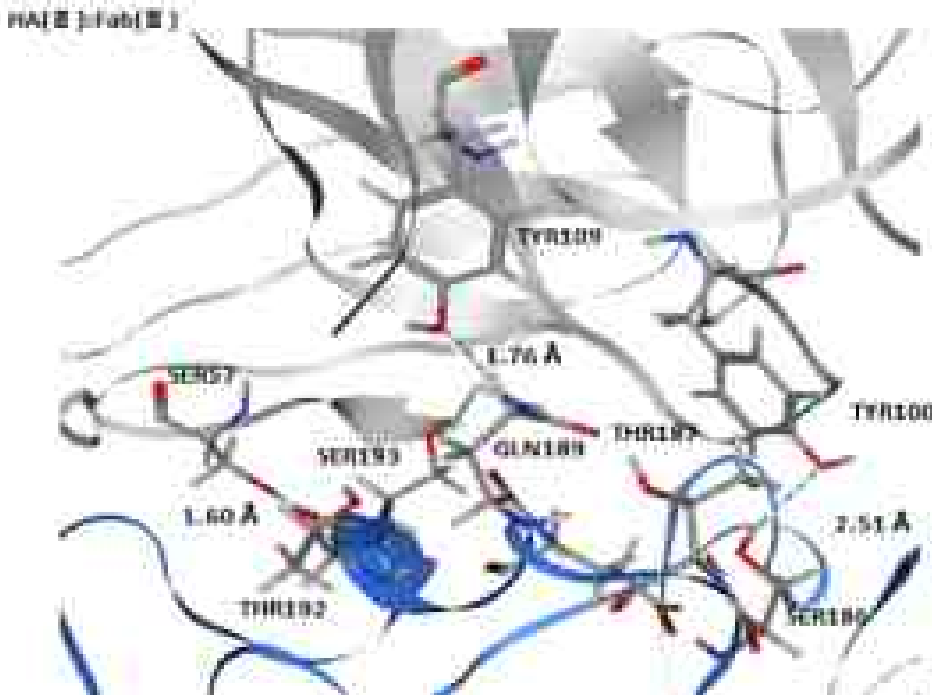


ABINIT - MP

インフルエンザ表面タンパク質のベンチマーク @ ES2

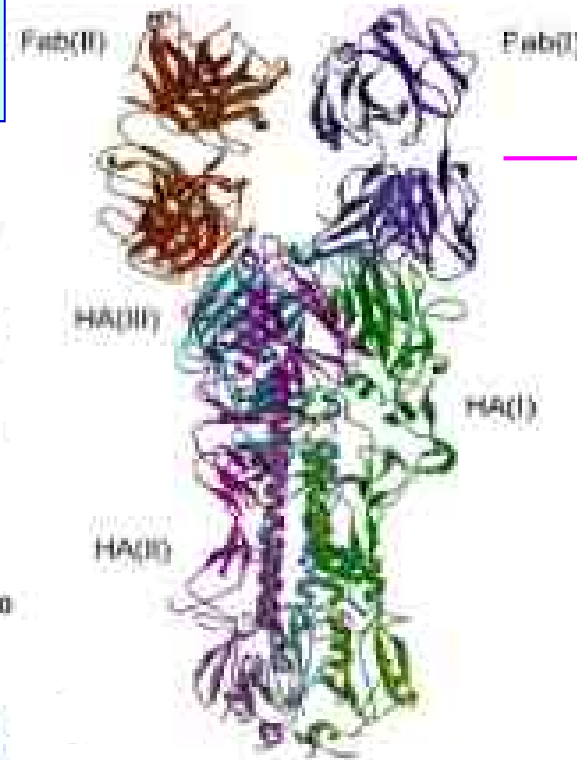
Ref.; Mochizuki et al., *Chem. Phys. Lett.* 493 (2010) 346.

HA3量体-抗体2量体複合体 (2351残基)
 FMO2-MP3/6-31Gジョブは
 128ノードで5.8時間で完了

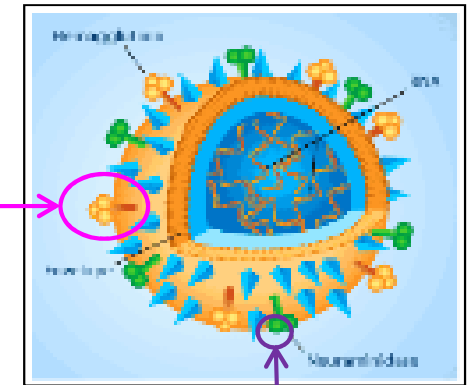


【HAとFabのコンタクト部位】

ヘマグルチニン



【HA3とFab2抗体】



ノイラミニダーゼ



【NAとタミフル】

インフルエンザ関係の研究に貢献
 HA; 変異(アミノ酸置換)の予測
 NA; 新規阻害剤(新薬)の開発

ABINIT - MP / BioStationの主な機能 (2013年3月版)

・エネルギー

FMO4: HF, MP2, MP3

FMO2-PB: HF, MP2

ポイント: 高解像度のFMO4-MP2による詳細解析

・エネルギー微分

FMO4: HF, MP2

FMO-MDも可能(暫定)

FMO2: MP2部分構造最適化

ポイント: 重要領域の構造リファインが可能に

・その他

CAFI再実装

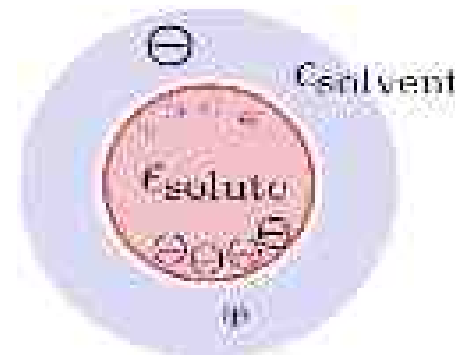
遮蔽考慮のIFIE

ナノバイオへの対応

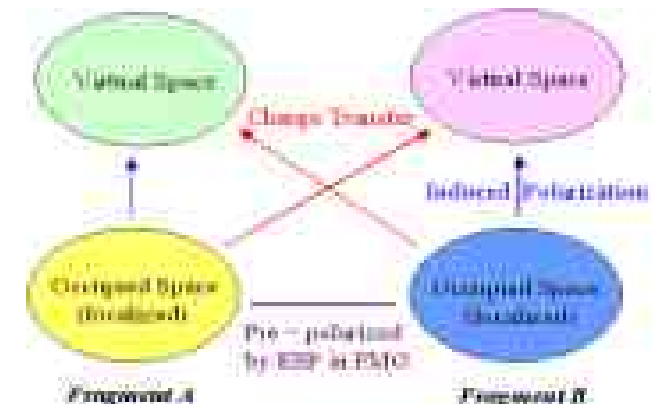
Ref.; Nakano et al., *Chem. Phys. Lett.* 523 (2012) 128.

$$\begin{aligned}
 E^{\text{FMO4}} &= \sum_{I>J>K>L} E_{IJKL} - (N-4) \sum_{I>J>K} E_{IJK} + \frac{(N-3)(N-4)}{2} \sum_{I>J} E_{IJ} \\
 &\quad - \frac{(N-2)(N-3)(N-4)}{6} \sum_I E_I \\
 &= \sum_{I>J>K>L} \{ \Delta E_{IJKL} - \Delta E_{IJ} - \Delta E_{IK} - \Delta E_{IL} - \Delta E_{JK} - \Delta E_{JL} - \Delta E_{KL} \\
 &\quad - [\Delta E_{IJK} - \Delta E_{IJ} - \Delta E_{IK} - \Delta E_{JK}] - [\Delta E_{IJL} - \Delta E_{IJ} - \Delta E_{IL} - \Delta E_{JL}] \\
 &\quad - [\Delta E_{IKL} - \Delta E_{IK} - \Delta E_{IL} - \Delta E_{KL}] - [\Delta E_{JKL} - \Delta E_{JK} - \Delta E_{JL} - \Delta E_{KL}] \} \\
 &\quad + \sum_{I>J>K} [\Delta E_{IJK} - \Delta E_{IJ} - \Delta E_{IK} - \Delta E_{JK}] \\
 &\quad + \sum_{I>J} \Delta E_{IJ} + \sum_I E_I
 \end{aligned}$$

【FMO4の展開式】



【PB水和モデル】

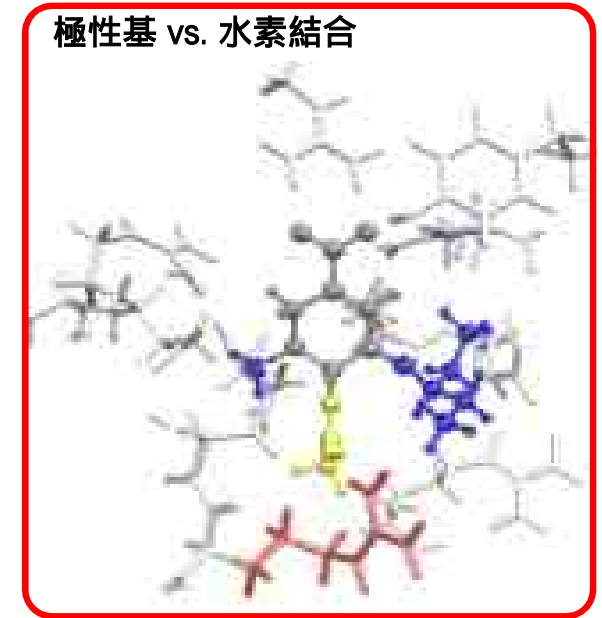
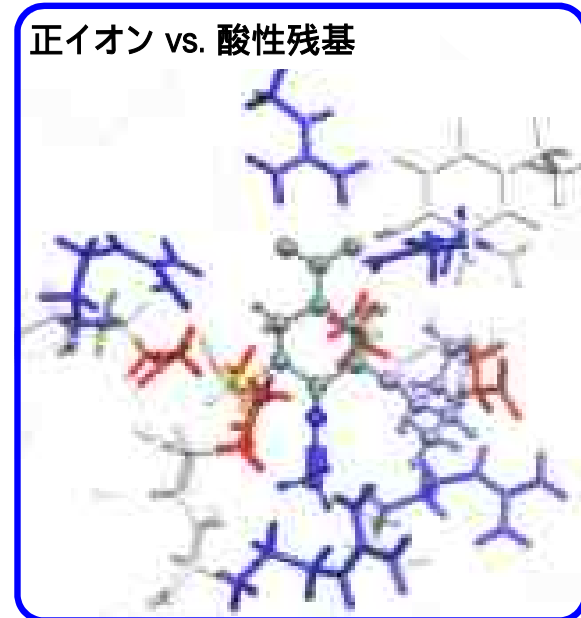
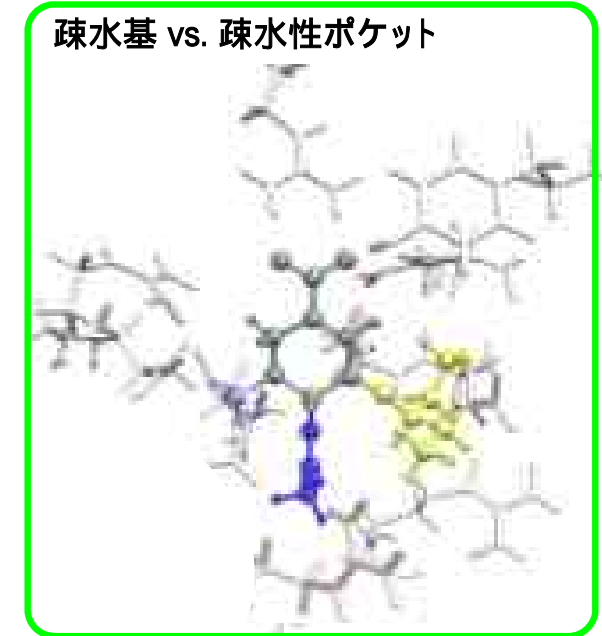
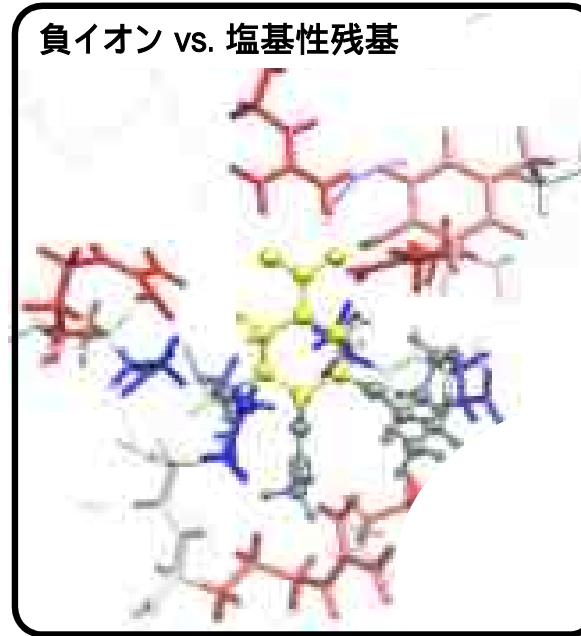
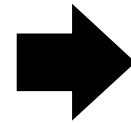
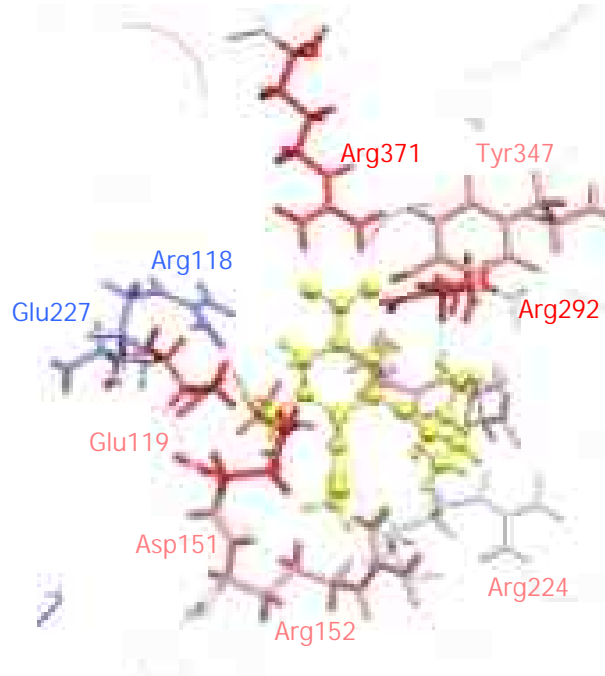


【CAFIの模式図】

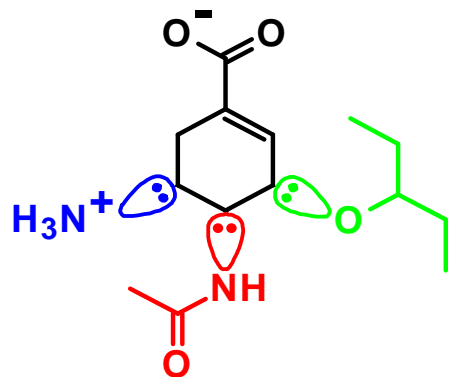
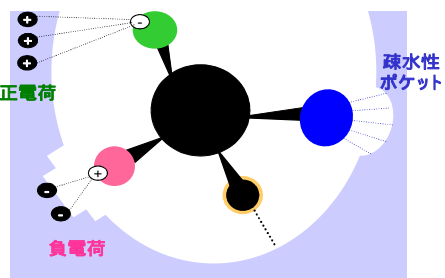
FMO4-MP2法による高解像度の解析 (NA-タミフル)

新規分割法: 官能基ごとの相互作用を可視化

従来分割法: リガンド全体が均一化された描像



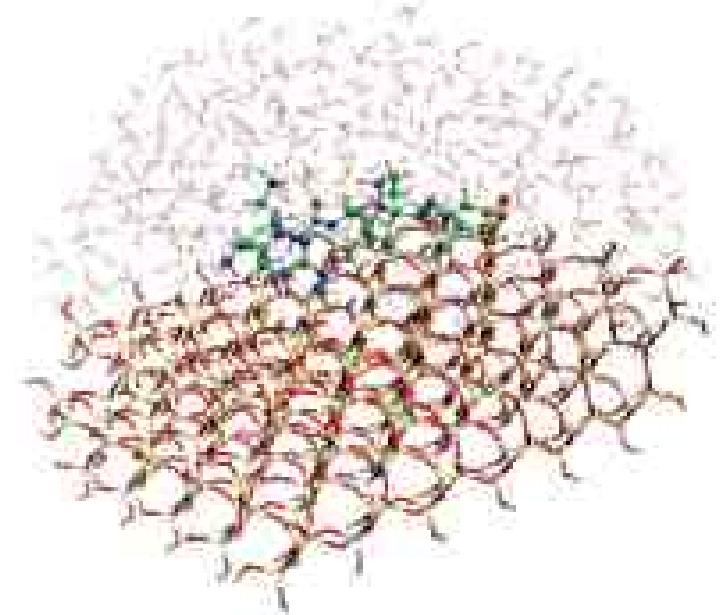
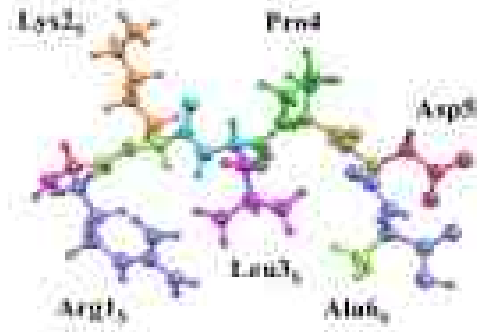
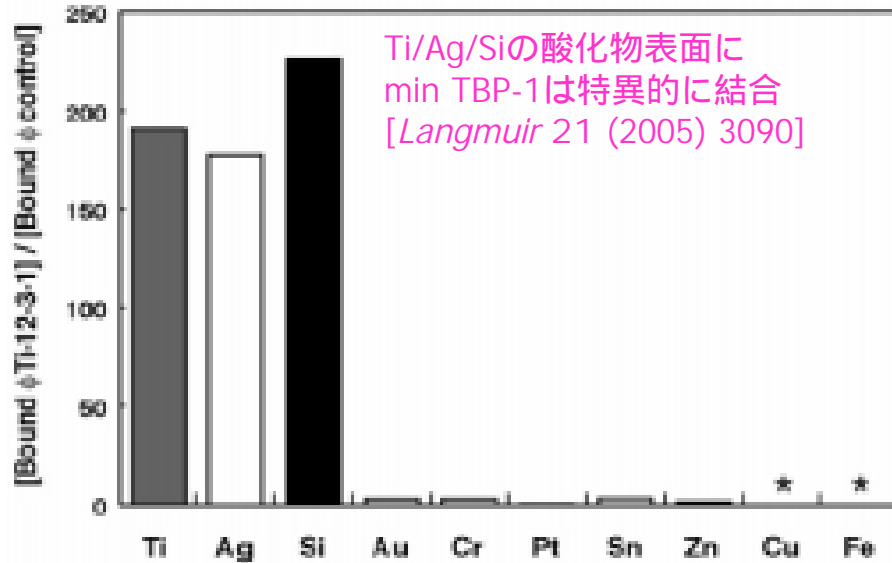
FMO4-IFIE [kcal/mol]



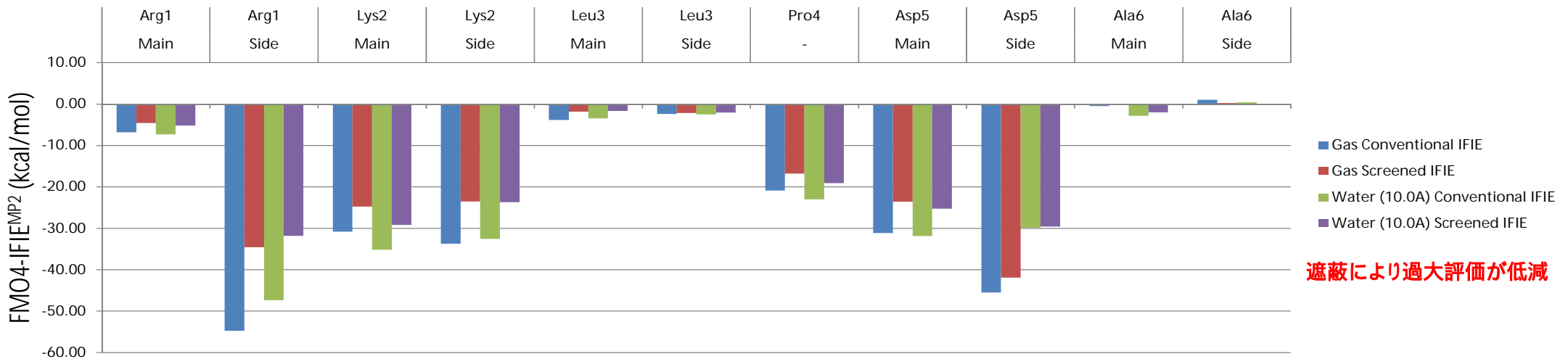
タミフルを官能基で4分割

ナノバイオ系のFMO4計算の例

Ref.; Okiyama et al., *Chem. Phys. Lett.* 566 (2013) 25.



【芝らのmin TBP-1ペプチドとシリカのクラスター: Si原子を257個含む】



【ペプチドとシリカのIFIE解析(遮蔽効果有り): FMO4-MP2/CDAM】

利用者・コミュニティ

民間(製薬)企業

大正製薬(株)、キッセイ薬品工業(株)、エーザイ(株)、帝人ファーマ(株)、日本たばこ産業(株)、旭化成ファーマ(株) など

大学・研究所

神戸FOCUS、(独)海洋機構ESC、豊橋技科大、岡山理大、九大、(独)産総研、(独)原子力機構 など

バイオWGでの活動 (ProteinDF と共同)

- ・ 解析事例の紹介
- ・ 新しい機能のアナウンス

2013年度以降の予定

- ・ バイオWGコミュニティの継続 (コア利用者の保持)
- ・ スパコン産応協との連携
- ・ **非バイオ分野(ものづくり系)へのアピール**
一般の化学企業への広がり (ポリマー系など)
- ・ **コンソーシアム化**
内部ではソースを共有、開発/改良を継続 (一般はバイナリ公開)

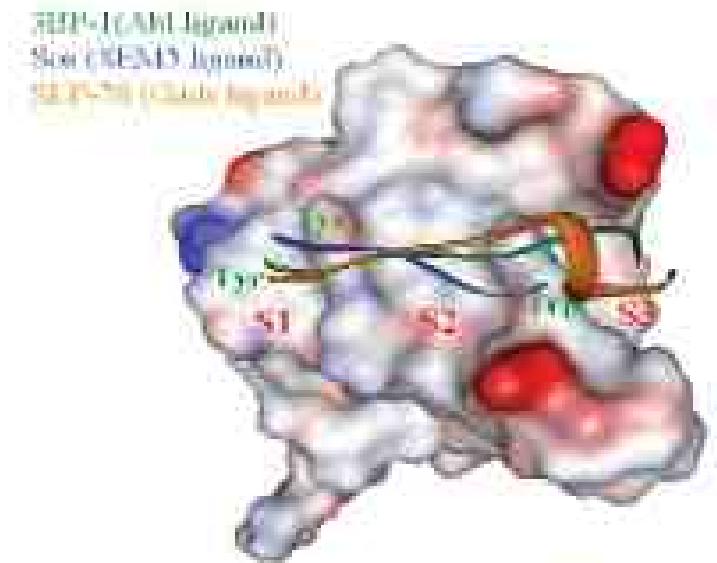


Figure 1. Graphical representation of GPCR domain with ligand peptides.

【キッセイ 小沢氏らの Proline 認識に関する論文; *J. Comp. Chem.* 32 (2011) 2774】

今後の展開・方向性

創薬分野における実用性の強化

- ・ 電子状態計算に基づく詳細な相互作用解析ツールとしての地位を確保 (FMO4)
- ・ インフルエンザ、生活習慣病、AZなど**社会的 중요性の高い問題**への応用
- ・ 他の応用分野への展開
- ・ さらなる高速化と省資源化 PCクラスターでの実行性

HPCIへの対応

- ・ **京での実行** (「体制構築」の中で整備)
- ・ エクサ計算機を睨んだ展開

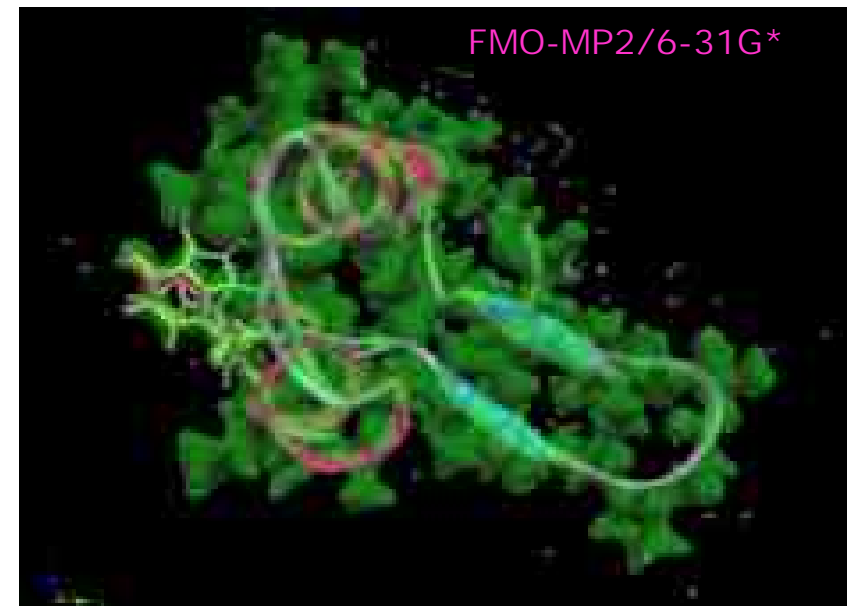
X線実験との連携強化

- ・ 電子密度の直接比較 立体配置確定
- ・ 構造最適化 構造データのリファイン
- ・ GUIの強化 実験家でも使いやすく

構造生命科学全般に対するインパクトは大！

その他の改良

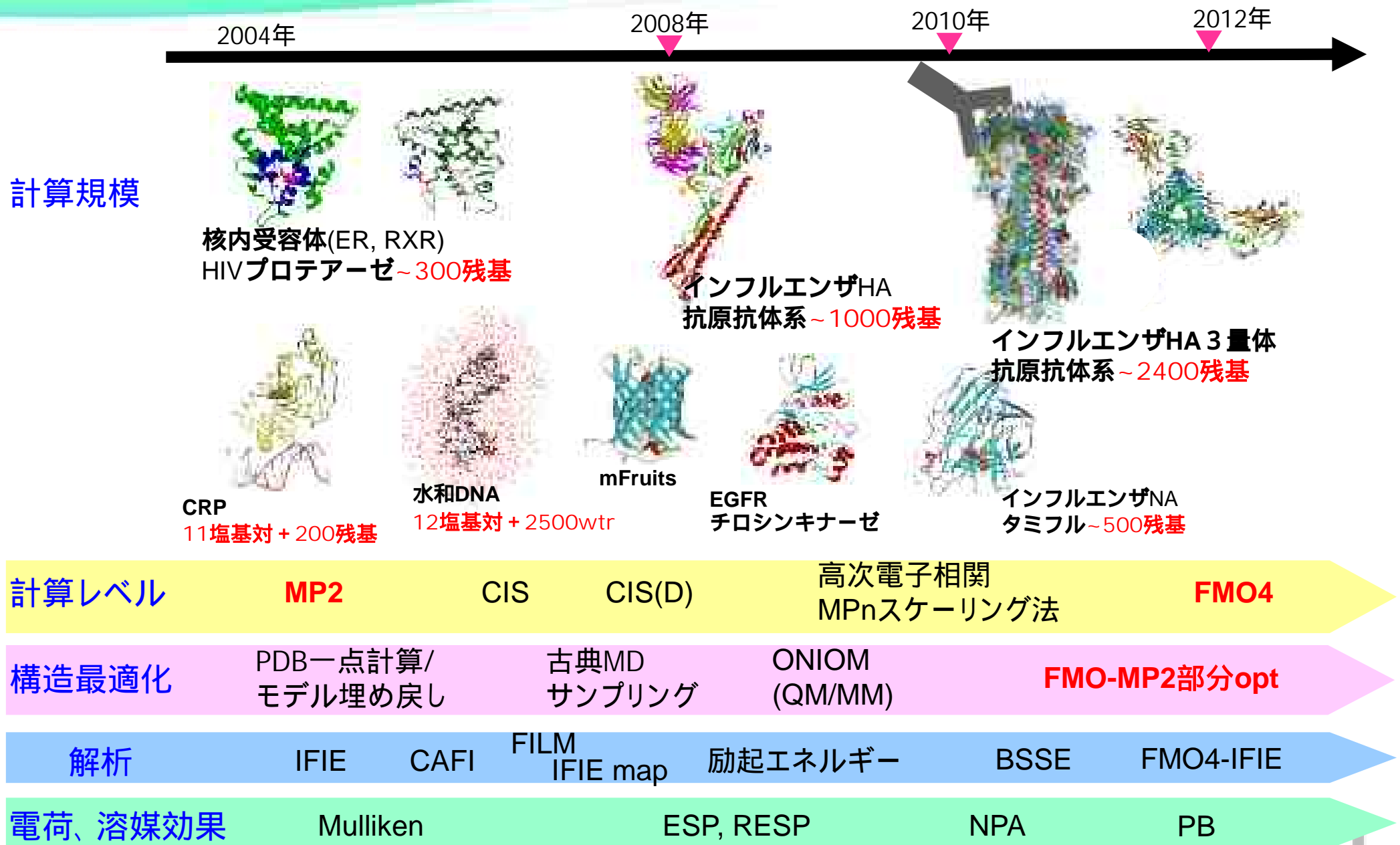
- ・ **構造ゆらぎの考慮** 複数サンプルの扱い
- ・ さらなる計算法/機能の追加



【クランピンの電子密度の計算】

国産の計算システムとしての“存在価値”を高めていく！

FMO計算の発展 (ABINIT-MP系)



PHASE - SYSTEM

第一原理分子動力学プログラム: PHASE

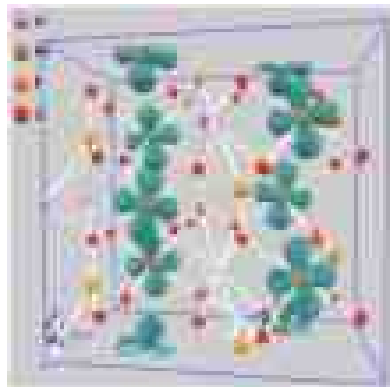
PHASE ver. 11.01

密度汎関数理論に基づく擬ポテンシャル法による平面波基底の電子状態解析ソフト

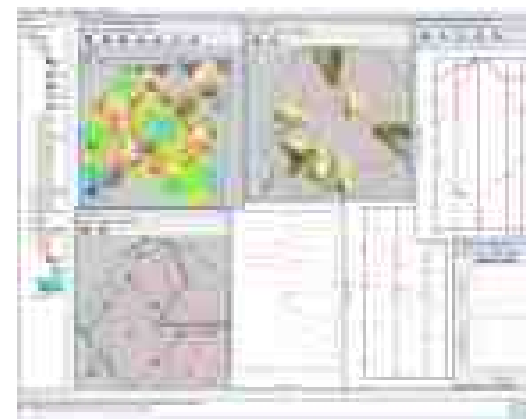
PHASEの特徴

- 金属・絶縁体・半導体など、あらゆる材料の取り扱いが可能 (計算対象を選ばない)
- 高精度な電子状態解析 (Hybrid汎関数、vdW相互作用を含む) を提供
- 充実した機能解析 (誘電応答、反応解析、実験解析など) を提供
- Hybrid並列 (MPI並列+スレッド並列) により超並列計算環境に対応
(従来は、平面波基底はFFT計算量が多く、超並列計算環境には不利と考えられていた)
- 数万原子規模の系に対応可能な高並列性能と強スケーリング性能を実現
- 幅広い計算機プラットフォーム (ノートPC、PCクラスタから、スパコンまで) に対応
- 付属GUIと支援スクリプトにより、容易に実行が可能

LiFePO₄ フェルミレベル近傍
における電荷密度



付属GUI PHASE - Viewer



PHASE: 並列性能

京計算機に向けた最適化

多次元並列化: k点、バンド、Gベクトル
 BLAS適用: 行列・行列積へ書き換え
 FFT対応: 多次元並列による全体通信の局所化
 部分対角化: ScaLAPACK, Eigen利用

実測結果

全体: 20%以上の実行効率
 BLAS箇所: 40%以上の実行効率
 ・12,288並列まで、**強スケーリング**
 (3,800原子規模では)

SiC - 20,440原子: 82,944並列 2.1PFLOPS (20.2%)

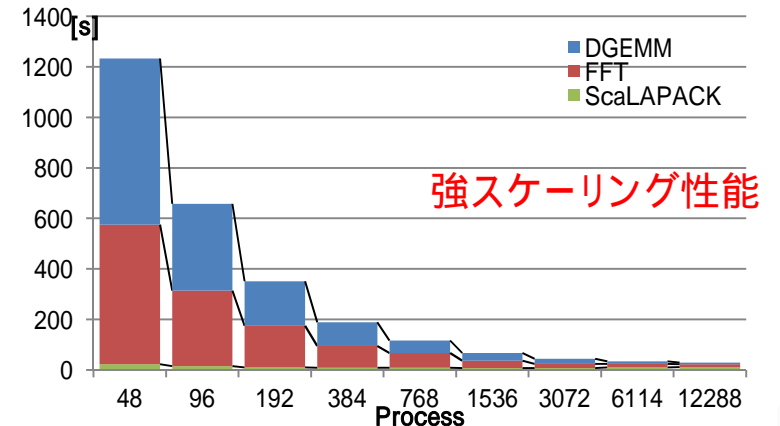
更なる最適化

- ・高度な機能の多次元並列化
電子相間functional等
- ・フリ・ホスト処理の多次元並列化
LDOS, 可視化等
- ・計算量の削減・高速化
非局所項の実空間化, FFT, 直交化
新規アルゴリズムの導入

HfSiO4 - 6,144原子系 3,480並列での区間毎の性能

区間名	実行時間[sec]	浮動小数点演算ピーク比
SCF	238.73	21.52%
区間1(FFT)	0.11	0.36%
区間2(BLAS)	32.91	61.46%
区間3(FFT)	10.58	1.74%
区間4(BLAS)	30.44	50.98%
区間5(BLAS,通信)	45.48	12.64%
区間6(FFT)	14.28	1.44%
区間7(FFT)	12.70	2.49%
区間8(FFT,BLAS)	18.33	10.41%
区間9(BLAS,ScaLAPACK)	55.01	3.37%
区間10(BLAS)	10.41	49.69%
区間11(FFT)	8.50	2.91%

SiC - 3,800原子の並列性能



ベンチマーク・テスト (1)

PHASE - 2D vs. VASP

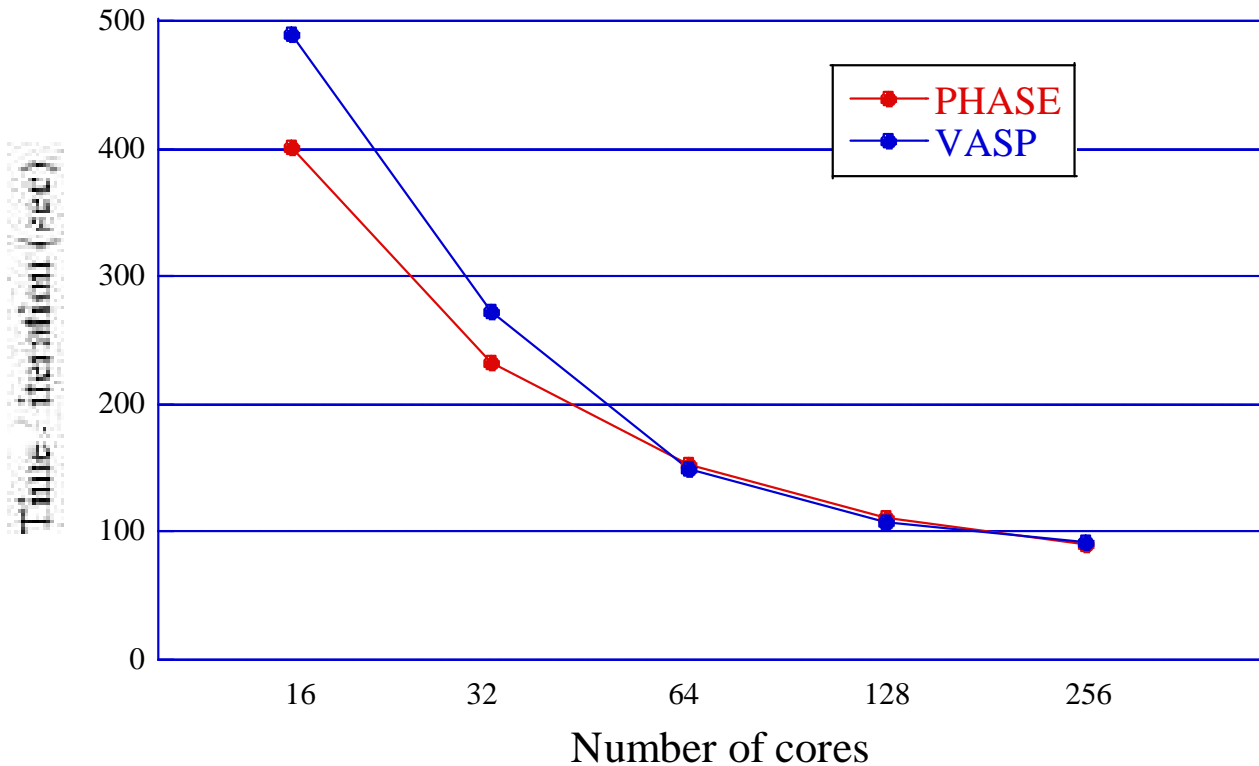
NIMS - SGI計算機における
PHASE - 2DとVASPの比較

PHASE - 2D: バンド並列
VASP : バンド並列 + G並列

(注) PHASE - 3D版のベンチマーク環境への対応
が遅れたため、PHASEは2D版で測定した。

SiC 1,000原子系: 16 core ~ 256 core

SCF計算1回当たりの計算時間



収束法: 修正DAVIDSON法
Ec = 16Ry (WF),
Ec = 144Ry (CD)

(参考データ)
構造緩和に関しては、
PHASE: 12回で167 SCF計算
VASP: 10回で111 SCF計算

PHASE - 2Dは、バンド並列のみでも、多次元並列のVASPと比較して、
ほぼ同等の並列性能と実行性能(計算時間)を持つ。

ベンチマーク・テスト (2)

PHASE - 2D vs. PHASE - 3D

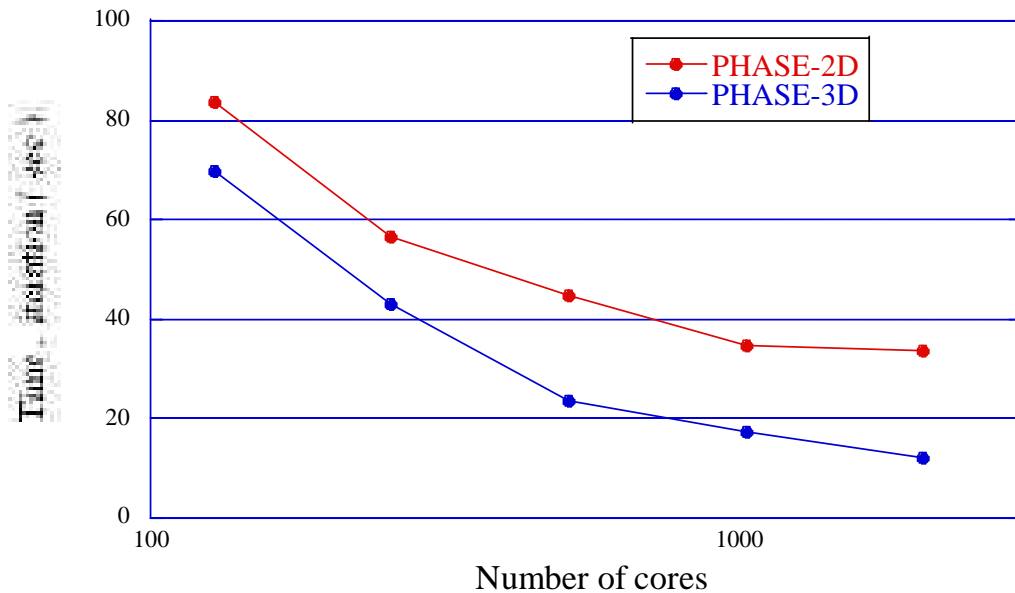
「京」計算機における
PHASE - 2DとPHASE - 3Dの比較

PHASE - 2D : バンド並列
PHASE - 3D : バンド並列 + G並列

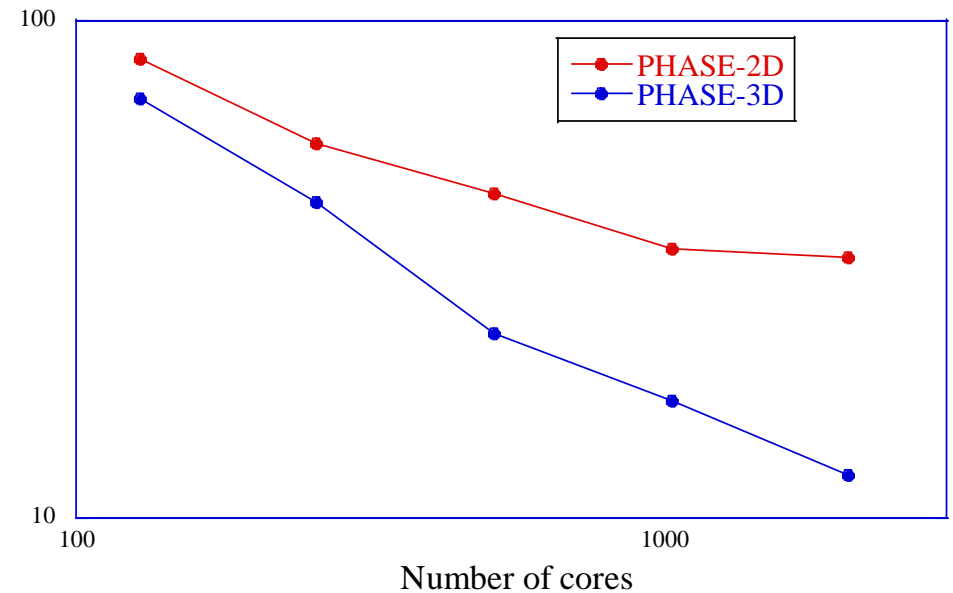
収束法 : **Im+MSD法**
Ec = 16Ry (WF),
Ec = 144Ry (CD)

SiC 1,000原子系 : 128 core ~ 2048 core

SCF計算1回当たりの計算時間



左図の両対数プロット

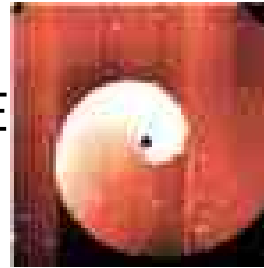


PHASE - 3Dは、1,000原子程度の中規模系に対しても、
2,048 coreまで良好に**スケール**する。

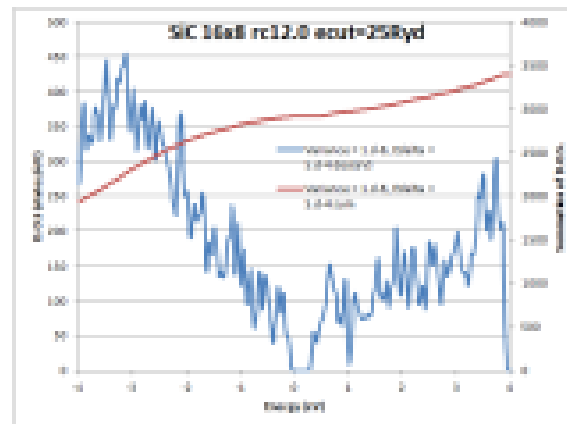
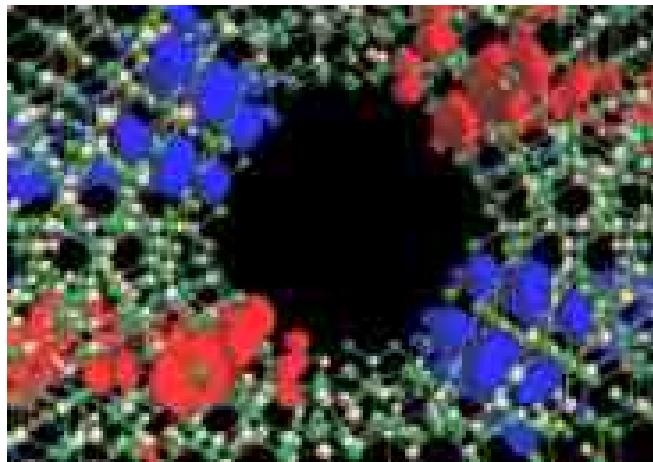
PHASE : 大規模解析

● SiC中のらせん転位欠陥

SiCパワーデバイス中の主要欠陥
 転位芯での原子構造
 電子準位 : ギャップの存在



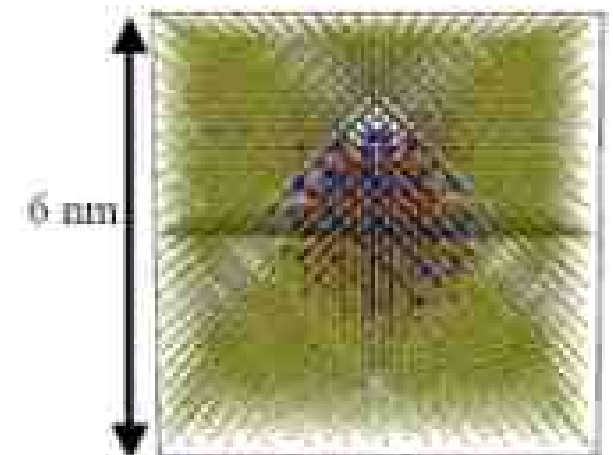
SiC - 20,440原子 :
 京計算機 - 82,944 node 利用
 2.1PFLOPS (20.2%)



● Si中の浅い不純物準位

Siデバイス中の主要ドーパント
 不純物準位の高精度な計算

Si - 10,648原子 :
 ES1 - 4096 CPU利用 :
 16.2TFlops (50%の実効効率)



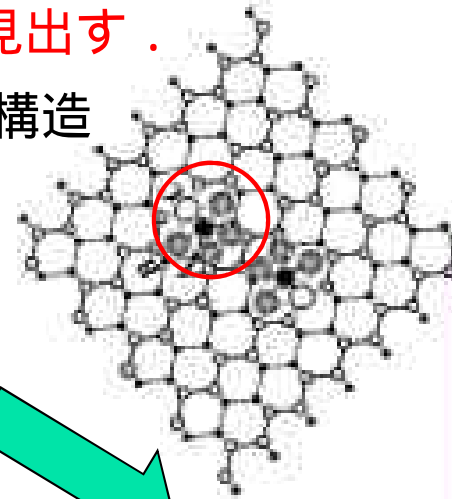
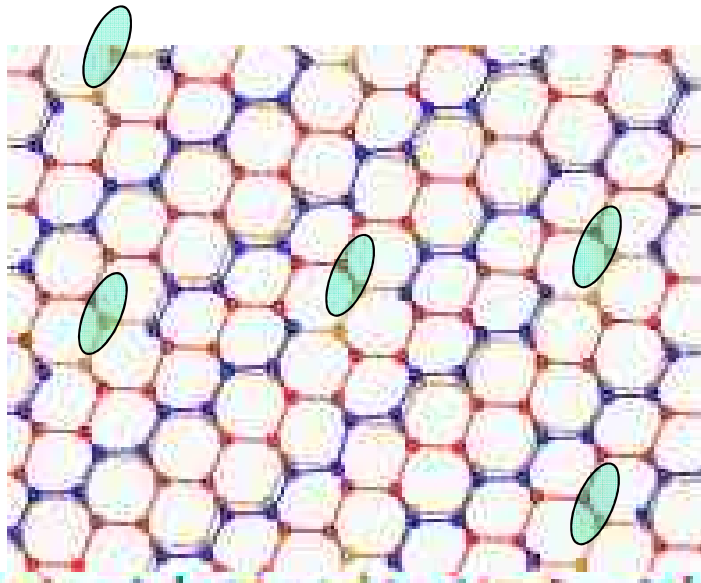
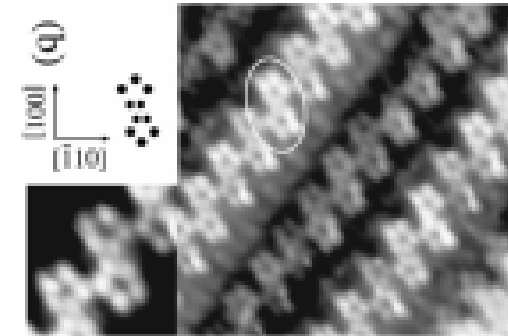
PHASE : 実証事例 - 1 (大規模・構造探索)

Si(110) - (16x2) 再構成構造

従来と大きく異なる表面モデルを見出す。

清浄表面からSi原子を抜いた初期構造

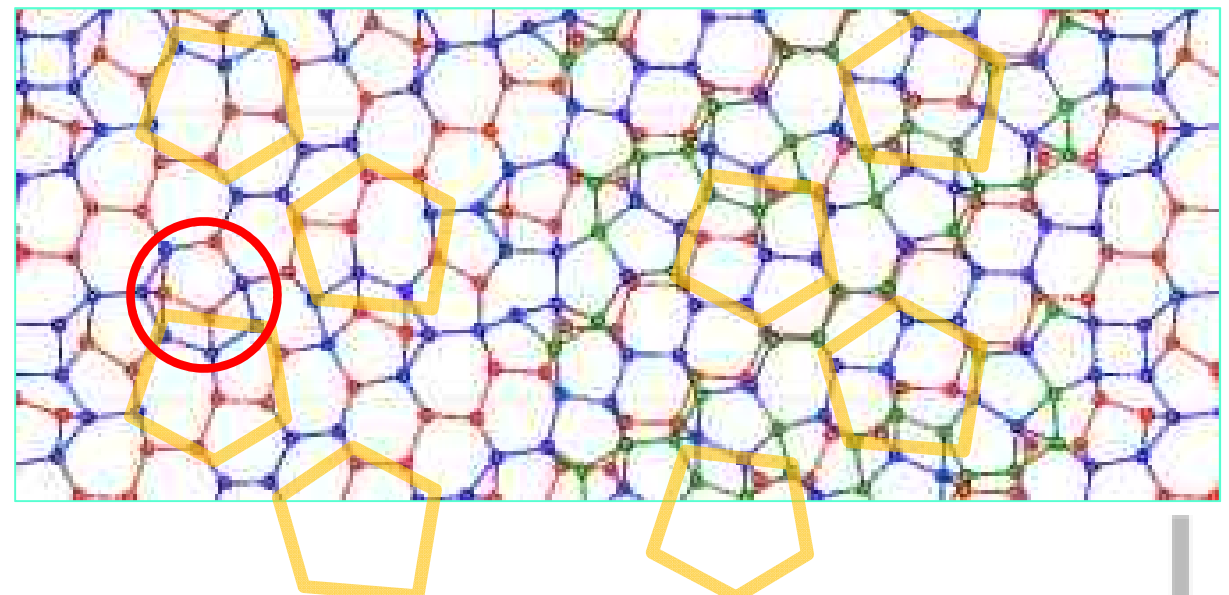
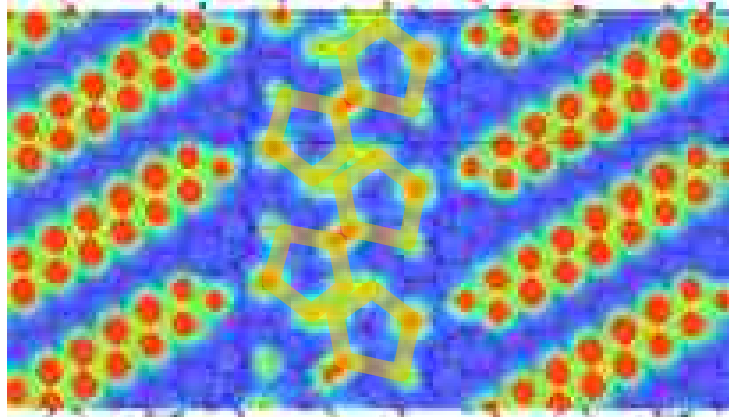
従来モデル :
Tetramer-Interstitial model



次の課題

- ・良好な酸化膜界面構造をつくる処方は？
- ・ステップ構造は必然的にできるのか？
- ・平坦表面をつくる処方があるのか？
- ・Geの場合は？

計算で得られた5員環モデル構造

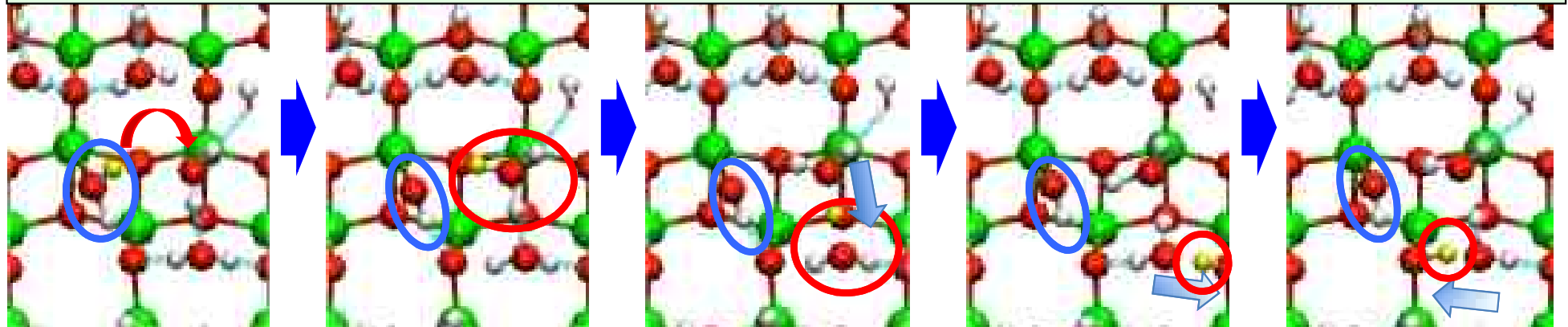
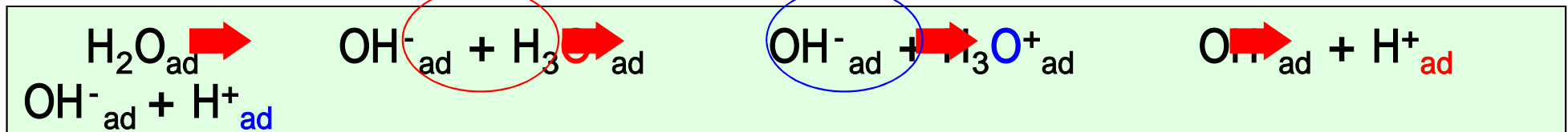
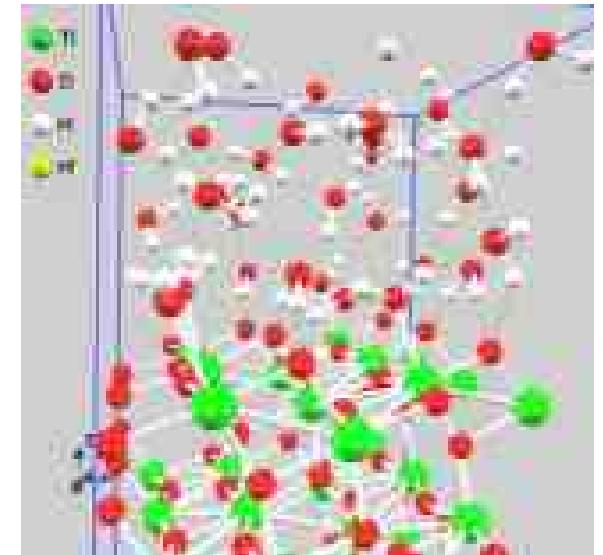
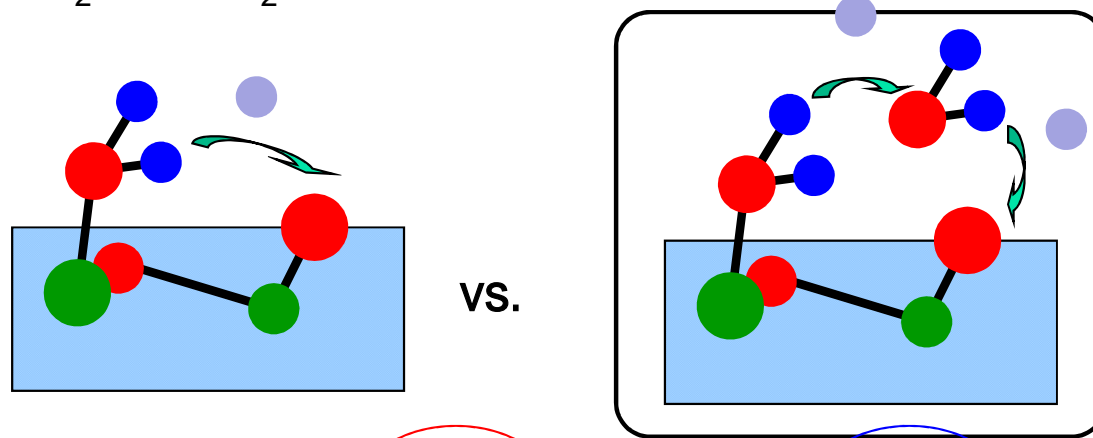


PHASE : 実証事例 - 2 (反応解析)

光触媒材料と水溶液の界面 (TiO₂/H₂O界面) における水分子の分解過程

新しい分解過程を提案

水中の複数の水分子を経由してプロトン (H) が移動、最終的に、TiO₂表面にH₂Oが解離吸着する過程



成果の広報・普及状況

学術的成果等一覽

	H20	H21	H22	H23	H24	合計
講演発表 (国内会議)	19件	41件	67件	33件	69件	229件
講演発表 (国際会議)	4件	17件	8件	19件	20件	68件
学術論文 (国内誌)	8件	8件	6件	5件	9件	36件
学術論文 (国際誌)	7件	8件	7件	6件	7件	35件
マスコミ報道	0件	3件	6件	13件	0件	22件

その他の成果広報（シンポ、WS等）

開催日	内容	参加者数(延べ)
2009.3.12	第1回、統合ワークショップ ナノデバイス分野 於：東京大学生産技術研究所	50名
2009.3.16	第1回、統合ワークショップ ものづくり分野 於：東京大学生産技術研究所	110名
2009.3.17	第1回、統合ワークショップ 量子バイオ分野 於：東京大学生産技術研究所	48名
2009.6.11	第1回HPC産業利用スクール 入門編 於：東京大学生産技術研究所	40名
2009.7.28、 7.29	第1回、「イノベーション基盤シミュレーションの研究開発」 シンポジウム 於：東京大学生産技術研究所	502名
2009.10.15 2009.10.16	第1回HPC産業利用スクール 実践編(流体A) 於：東京大学生産技術研究所	20名
2009.12.10 2009.12.11	第1回HPC産業利用スクール 実践編(構造B) 於：東京大学生産技術研究所	17名
2010.3.2	第2回、統合ワークショップシンポジウム - 量子バイオ・ナノデバイス分野ー 於：東京大学生産技術研究所	75名
2010.3.10	第2回、統合ワークショップシンポジウム - 次世代ものづくり分野 ー 於：東京大学生産技術研究所	127名

その他の成果広報（シンポ、WS等）（続き）

開催日	内容	参加者数(延べ)
2010.7.30	第2回「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」 シンポジウム 於：東京大学生産技術研究所	290名
2011.2.24	第3回 統合ワークショップ 量子・バイオ分野 於：東京大学生産技術研究所	91名
2011.2.25	第3回 統合ワークショップ 次世代ものづくり 於：東京大学生産技術研究所	141名
2011.7.14 2011.7.15	第3回「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」 シンポジウム 於：東京大学生産技術研究所	489名
2011.10.5	「FOCUSスパコンを利用したFrontFlow/blueのためのPointwise・ FieldView設計実務セミナー」 於：高度計算科学研究支援センター	16名
2012.3.9	第4回 統合ワークショップ 量子・バイオ分野 於：東京大学生産技術研究所	84名
2012.3.15	第4回 統合ワークショップ 次世代ものづくり 於：東京大学生産技術研究所	143名
2012.7.5 2012.7.6	第4回「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」 シンポジウム 於：東京大学生産技術研究所	456名
2012.7.13	FrontFlow/blueの設計実務セミナー 於：大阪国際会議場	22名

その他の成果広報（シンポ、WS等）（続き）

開催日	内容	参加者数(延べ)
2012.8.22	FrontFlow/blueの設計実務セミナー 於:東京大学生産技術研究所	19名
2012.11.8	FrontFlow/blueの設計実務セミナー 於:高度計算科学研究支援センター	22名
2013.6.6 2013.6.7 (予定)	「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」成果報告会 於:東京大学生産技術研究所	250名 (定員)

成果普及体制の強化

背景・必要性

前身のプロジェクト成果を含め、本プロジェクトで開発対象としているソフトウェアのダウンロード総数(フリーウェア公開版)は平成21年度末時点で67,000件を越え、知名度が顕著に増加するとともに、学术界、産業界等の専門家による利活用は着実に伸びてきている。スパコン利用環境の充実が図られつつある中で、HPC対応ソフトウェアの利用層(一般技術者へ)の拡大を図る絶好の機会を迎えており、普及体制の一層の強化を図ることが重要。

HPCユーザ会の立ち上げとその役割・特徴

公的資金により開発され東大生研 革新的シミュレーション研究センターで管理するHPCシミュレーションソフトウェアを対象とし、産業界を中心とする広範のユーザ層(分野・レベル)への普及促進を図る。このための仕組みとして「HPCユーザ会」を組織する。

本ユーザ会組織の基本単位は個別のアプリケーションとし、それぞれ、研究開発責任者、幹事会社(複数可)、普及協力ベンダー(複数可)、一般会員で構成する。また、全体の活動を支援する事務局を設ける。

本ユーザ会の特徴的行事・サービス内容

- ・公募等による会員の課題研究の継続的推進と成果公表の実施
- ・HPCソフトウェアの利用に関する相談窓口の設置とコンサルの実施
- ・NEWS LETTERの定期的発行
- ・会員サービスの主な内容
 - 1)対象とするソフトウェアの定期的バージョンアップとユーザ会内への公開
 - 2)個別ユーザ対応カスタマイズサービスの実施(共同研究、協力ベンダーによるビジネス)

HPCユーザ会の基本構成

HPCソフトウェア利用者のためのユーザー会活動

東京大学大学院の研究所、研究センター、シミュレーション研究センター
<http://www.riss.tky.ac.jp/>

理工学・工学

FrontFlow 分科会

ソフトウェアファミリー

- FrontFlow/blue
- FrontFlow/blue-ACOUSTICS
- FrontWorkBench
- REVOCAP_Coupler
- REVOCAP_Refiner

ソフトウェアの特徴

- Large Eddy Simulation(LES)による大規模・高精度・高次元
- 乱流計算の各種応用・発展研究

加藤千幸
 東京大学大学院工学系研究科 教授

chs-ef@chslab.tky.ac.jp

FrontISTR 分科会

ソフトウェアファミリー

- FrontISTR
- HEC-MW
- REVOCAP_Coupler
- REVOCAP_PrePost
- REVOCAP_Refiner

ソフトウェアの特徴

- 大規模並列計算環境での最適構造設計の自動化・高度化
- FEM解析, MLC, 可視化等の並列解析用ライブラリ群

奥田洋司
 東京大学大学院工学系研究科 教授

istr_seminar@mail.tky.ac.jp

FrontCOMP 分科会

ソフトウェアファミリー

- FrontCOMP_mold
- FrontCOMP_cure
- FrontCOMP_damage

ソフトウェアの特徴

- 製造現場/製造システムのデジタルモデル
- 製造現場での運用と連携するモデル
- 製造現場による設備構築のデジタルモデル

吉川暢宏
 東京大学大学院工学系研究科 教授

yoc@chslab.tky.ac.jp

バイオ・ナノ系

ProteinDF 分科会

ソフトウェアファミリー

- ProteinDF
- ProteinEditor

ソフトウェアの特徴

- 世界最大規模のタンパク質データベース
- タンパク質・タンパク質電子構造解析に向けた大規模データベース

佐藤文俊
 東京大学大学院工学系研究科 教授

pdf-devel@chslab.tky.ac.jp

ABINIT-MP 分科会

ソフトウェアファミリー

- ABINIT-MP
- BioStation Viewer

ソフトウェアの特徴

- FMO法による巨大分子系の電子状態計算
- タンパク質-化学物質相互作用の結合解析・可視化

望月祐志
 東京大学大学院工学系研究科 教授

abinitmp-office@chslab.tky.ac.jp

PHASE 分科会

ソフトウェアファミリー

- PHASE
- UYSOR
- PHASE-Viewer
- ASCOT

ソフトウェアの特徴

- ナノ材料のマルチスケール多相結合解析・設計最適化
- PCから最先端計算機まで多様な環境でのシミュレーション

大野隆央
 産学官共同研究拠点 東京大学大学院工学系研究科 教授

phase.systems.toronto.gu.jp

人材育成

HPC開発・利活用人材の育成

- **利用者教育と開発者教育の系統的推進**
 - 大学・研究機関・産業界との間の積極的な連携
- **HPC利用者教育**
 - HPC標準ソフトウェアを利用した実践的教育
 - 使いこなす能力はもとより、モデリング能力、知見の抽出能力、問題解決能力の育成
 - 情報基盤センター、次世代スパコンを利用
- **実践的シミュレーションソフトウェアの開発教育**
 - チーム制によるシミュレーションソフトウェア開発・HPC教育
 - 計算機科学者と連携したソフトウェア開発教育(神戸のCOEを中核)

HPC利用者教育の実施状況

ICSCP、CISS、JAMSTEC、東京大学情報基盤センター、の四者は、人材を育成するため、HPC技術を習得する機会としてHPC産業利用スクールを開講



6/11 入門コース (参加者38名)

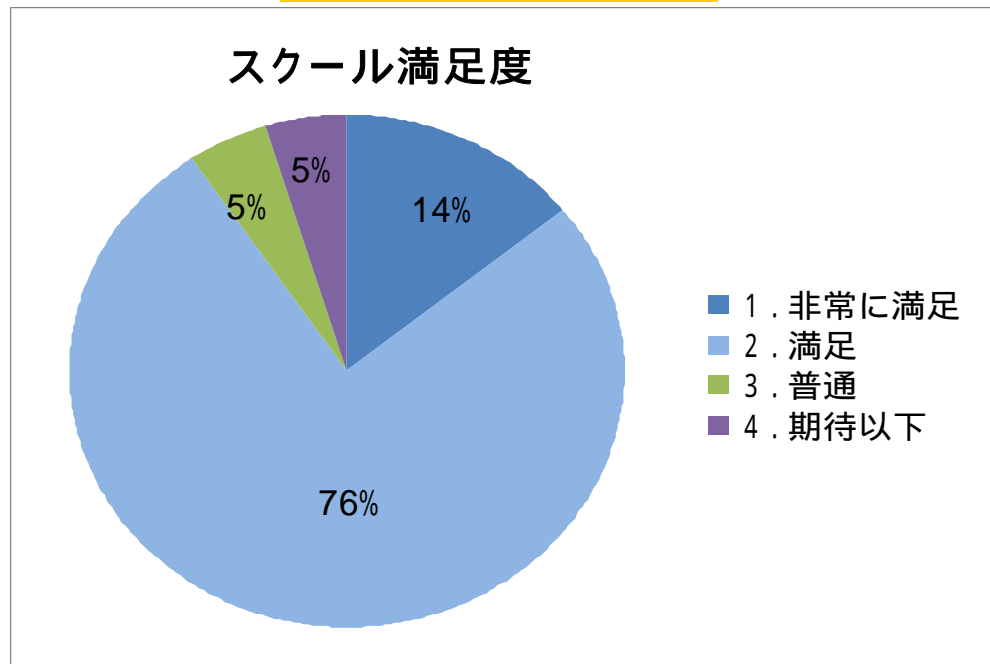


10/15,16 実践コース(参加者19名)

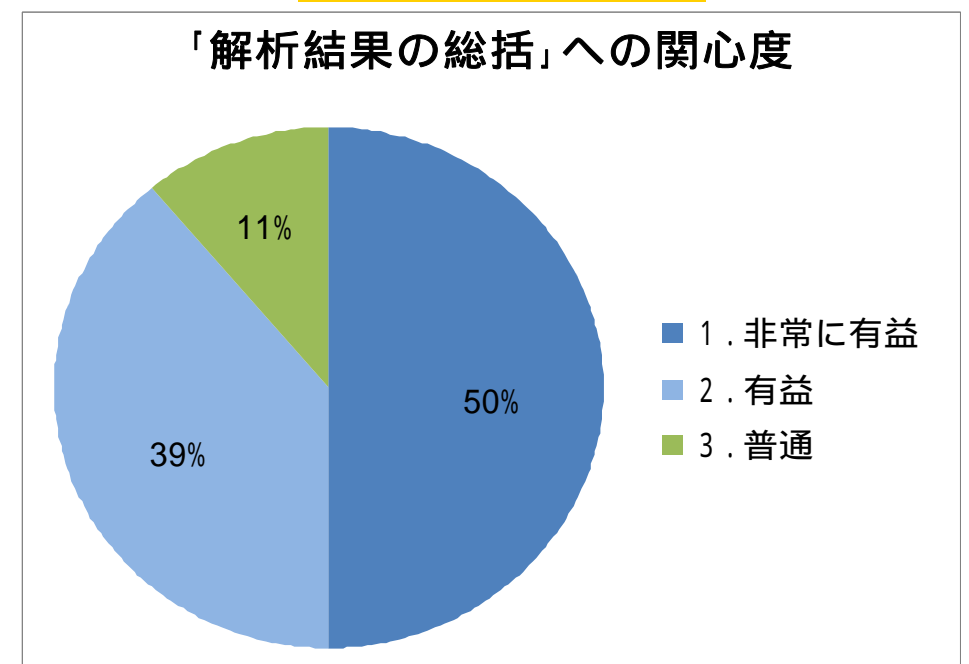
HPC利用者教育の実施状況（続）

■ HPC産業利用スクールアンケート結果

入門コース



実践コース



実践コースの参加者の声

今回、解析デザインという考え方が非常に勉強になりました。
メッシュ数、サイズの決めかた良く分かり、とても有意義でした。
512コアまで体験できたのは良かったです。

非常に刺激を受けました。並列化の早さを体感できた。
今後は、Front FlowとREVOCAPを使ってみたい。ぜひ、連成解析ができるようになりたい。
グループディスカッションに専念できる時間を長め確保してほしい。

HPCソフトウェア開発者教育

■ 大学院教育

- ◆ チーム制によるシミュレーションソフトウェア開発・HPC教育
 - ソフトウェア工学教育: チケットを活用した、プロジェクト計画、進捗管理、設計工程、コーディング工程、テスト工程、など
 - HPC教育: 計算機科学に基づく性能を引き出すためのコーディング技術
 - ソフトウェア工学の作法とHPCの技術を実践的に両立させる訓練
 - 東大工学系研究科で実習講義を平成21年度冬学期新設(産業界の講師を招聘)
 - 平成22年度より夏学期で継続
- ◆ 計算機科学者と連携したソフトウェア開発教育(神戸の計算科学機構を中核として推進)

先端的ソフトウェア開発者教育(続)

- HPC産業プログラム開発スクール
 - ◆ 産業界に向けたHPCシミュレーションソフトウェア開発教育
 - 基礎コース:大学院教育レベル
 - 専門コース:より個別問題に特化・本格化させたレベル
 - イノベーションPJソフト関連に限られるだろう(以外は指導できない)
 - ペタコンが具体化する平成24年度開催を目指す
 - ◆ 以下の問題点の解決が必要
 - 需要の有無・ターゲット層
 - 産業界からの講師招聘に伴う諸問題(特に情報開示関連)
 - HPC産業プログラムスクールを業務とする企業との間の関係
 - 専門コースの場合、イノベーションPJソフト開発チームに課す内容・与える環境など

中間評価指摘事項への対応

■産業界との一層の強力な連携

サブテーマ毎に、産業界の具体的な製品を対象とした事例研究を強力に推進することにより、ソフトウェア機能の実証と完成度向上を図った。事例研究成果については、シンポジウム、成果報告会などにおいてユーザー利用報告会を併設し、産業界側から報告する機会も設けた。また、スパコン利用環境の充実が図られつつある中で、HPC対応ソフトウェアの利用層(一般技術者へ)の拡大を図る絶好の機会を迎えており、普及体制の一層の強化を図ることにした。その中心となる組織としてHPCユーザー会やコンソーシアムを通じた普及活動を実施している。

■国際展開

- ・SC11、SC12での発表・展示等を通し、海外でのPR活動を強化した。
- ・公開ソフトウェアの英文マニュアルを作成し、要求に応じて提供した。