

# 神戸大学における シミュレーション教育への取組

平成25年11月13日

学長補佐 賀谷信幸  
kaya@kobe-u.ac.jp

平成19年度～21年度

文部科学省大学院教育改革支援プログラム

大学院GP (Good Practice)

## 「大学連合による計算科学の 最先端人材育成」の取組み

文部科学省 大学院教育改革支援プログラム  
大学連合による計算科学の最先端人材育成

トップページ | 活動の紹介 | 参加メンバー | イベント情報 | e-learningコンテンツ | メンバー専用

### ごあいさつ

「計算機シミュレーションは時空間を超越できる望遠鏡」と呼ばれるように、未来に起こる現象を予測したり、過去にさかのぼって現象を検証したり、到達できない場所での現象を観測することができる有力な研究方法です。計算機の異なる発達に伴い、計算機シミュレーションは、理論と実験に並ぶ第3の科学技術手法として位置付けられるようになりました。さらに、単なる物理現象の解明に留まらず、経済・社会現象の検証など幅広い研究分野における重要な地位を築いています。

本教育プログラムでは、それぞれの研究分野での深い理解と、最新の研究成果を基に新たな可能性を追求する能力、分野を横断した多様な計算機シミュレーションに習熟し、現状を迅速・的確に掌握する能力を有する若手技術者・研究者の育成を目的としています。

代表 神戸大学 賀谷 信幸

### お知らせ

■ 平成20年度第2回神戸シミュレーションスクールを開催いたします

Homepage address: [www.e-k3.jp](http://www.e-k3.jp) (え-計算)

賀谷信幸(神戸大学)  
青柳 睦(九州大学)  
長尾秀実(金沢大学)  
村田健史(愛媛大学  
現:NICT)

# 大学院GPの取組

## Simulation Schoolでの講義

講義で学ぶ

1. 網羅的な研究の紹介
2. 他の研究分野の講義
3. プログラム手法の演習 (MPI、openMP.....)
4. 計算手法 (差分、有限要素法.....) の講義

自ら学ぶ

## 教材の制作

1. 自習用e-Learning教材
2. e-Learning教材での講義 (方法の開発)

指導して  
学ぶ

## プログラム演習

1. 他人のプログラムの理解
2. プログラム手法を学ぶ演習問題
3. 計算精度を理解する演習問題
4. プログラムの性能評価する演習問題

## TA、質問室などでの指導

質問に答えられて修了

平成22年度 科学技術戦略推進費 (旧:科学技術振興調整費)  
地域再生人材創出拠点の形成

企業を牽引する計算科学高度技術者の  
養成プロジェクト

神戸大学  
賀谷信幸

office@phobos.cs.kobe-u.ac.jp

## 受講者 (企業の計算機シミュレーション担当技術者)

企業A, 企業B, ………、企業Z



## ティーラー相談室

室長  
ティーラーメイド  
カリキュラム作成、提案

企業Aさんは、  
・ 計算科学演習、数値解析学  
の講義・演習に加えて、  
・ MPI基礎、可視化基礎  
シミュレーションスクールを取ってくださいね。

企業Bさんは、  
・ 計算化学基礎、プログラミング演習II  
の講義・演習に加えて、  
・ MPI応用編  
シミュレーションスクールを取ってくださいね。

皆さん、適時、プログラム相談室も利用ください。

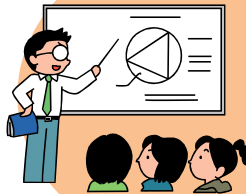
## ティーラーメイドカリキュラムに従って受講開始

### 大学の講義・演習 e-コンテンツ

・ 神戸大学の計算科学  
関連講義、演習のピン  
ポイント受講  
・ e-コンテンツ  
利用した  
ネット学習



### シミュレーションスクール



・ 並列化、可視化  
データ解析、に関  
する基礎スクール  
(必修科目)

### シミュレーション相談室

具体的なプログラムに関する相談  
・ 自社ソフトを並列化したいけど、  
具体的にどうすればいい? など。



## 基礎コース

## シミュレーション・スクール

### 計算機の基本的な使用方法

- ・ 1日 計算機の使用方法(UNIX)/Fortranの解説

### 基本的なシミュレーション手法

- ・ 2日 基本的なシミュレーション(熱伝導)
- ・ 3日 計算結果の表示と解析

### 高度なシミュレーション手法

- ・ 4日 並列化プログラミングの講義
- ・ 5日 並列化プログラミングの演習

演習主体、課題Reportの提出 ⇨ 基礎修了者

# 京速コンピュータ π-Computer

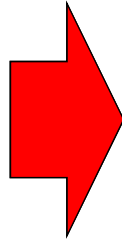


「京」の一筐体:富士通FX-10  
それでも地球シミュレータの半分

「京」一筐体富士通FX-10を活用した講習会と  
最速に挑戦するコンペティション



京を使いこなせる人材養成  
全国の大学と企業で教育に活用

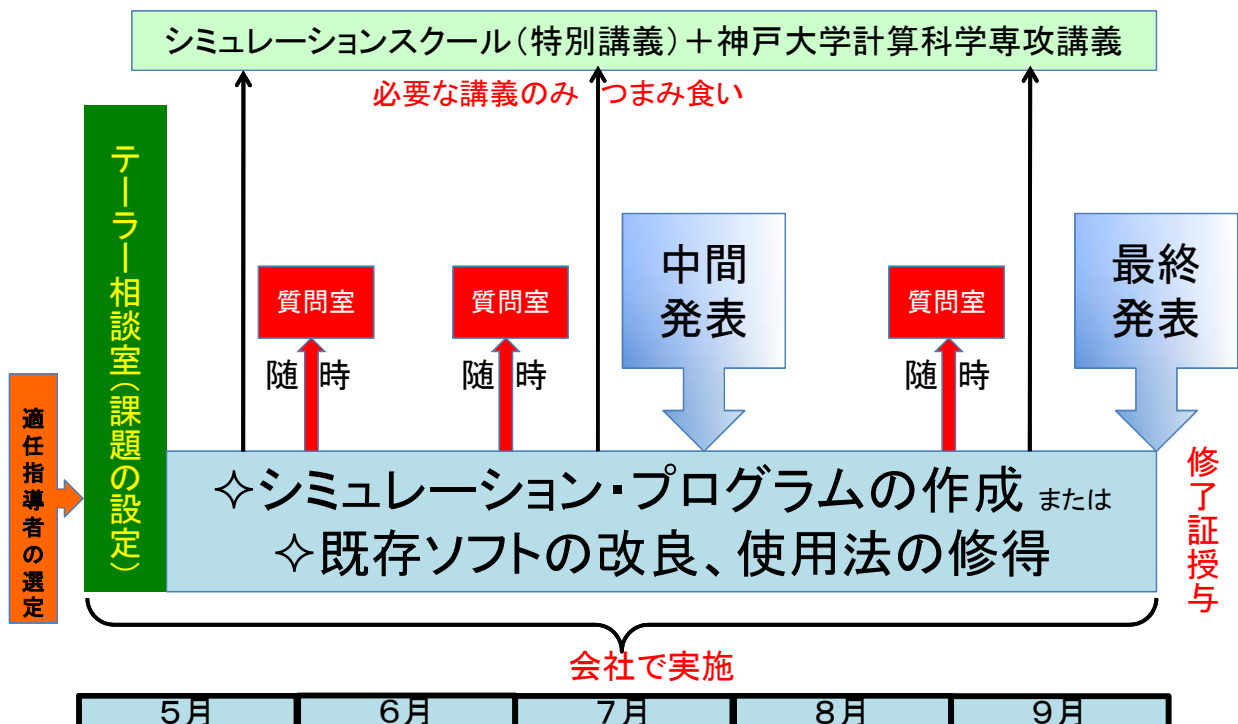


FX-10を計算科学  
研究機構で演習に  
使用



平成24年8月6日～10日  
計算科学研究機構での  
サマースクール  
東大、阪大、鳥取、早稲田  
東京理科大、中央大、同志社  
学生 19名、企業9名、大学17名

## 応用コース



前期(5月から)／後期(10月から)

# 神戸ポートアイランド 神戸大学統合研究拠点

神戸大学総合研究部

〒650-0047 神戸市中央区港島中町7丁目1-1  
TEL: 078-509-5

平成23年4月竣工



研究棟

コンベンションホール

計算科学研究機構の横に建つ神戸大学統合研究拠点



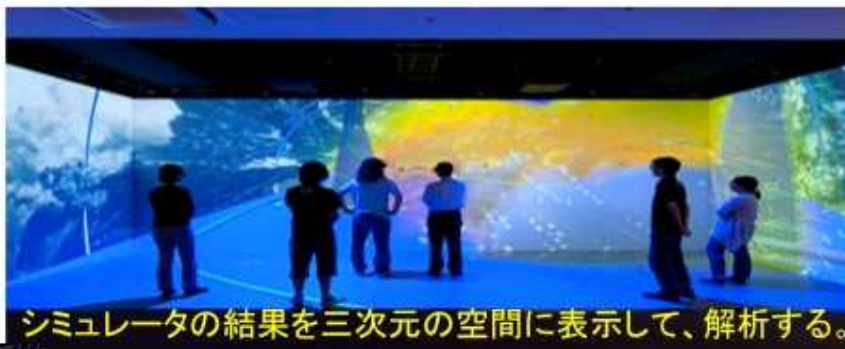
理化学研究所  
計算科学研究機構



## 没入型三次元可視化システム π-CAVE

三次元表示を教育して、新たな発見を導く。

アメリカでは、スパコンセンターの横には必ず可視化センター



シミュレータの結果を三次元の空間に表示して、解析する。

使用講習会とコンペティション

全国の大学と共同利用共同研究



網膜のタンパク質構造



地震波の地中を伝搬



体感シミュレーション

神戸大学統合研究拠点（神戸市）で、3次元可視化システムを使い、コンピューターのシミュレーション結果を3D映像化する研究が進められている。幅約8m、高さ3m、奥行き3mの部屋に、正面と左右、足元にスクリーンがあり、3Dメガネをかけて映像を見ると、シミュレーション結果を体感出来る。

例えば、小惑星探査機「はやぶさ」にも搭載されていたイオンエンジン（イオンエンジン）のシミュレーションデータを3Dにすると、噴出口から出るイオンや電子が、目の前を流れるように見られる。写真。担当する理化学研究所のスーパーコンピューター「京」と連携、地震や津波が起こった状態を3D映像で体感出来るようにし、防災に役立てることも検討している。（小林裕幸）

朝日新聞  
第一面  
平成24年4月17日

# 三次元可視化 π-Hall

350名収容コンベンションホールに三次元プロジェクター



- ・ シミュレーションの成果を三次元表示で発表  
(国際シンポジウムの開催)
- ・ 小中高校生、一般の方々へ科学技術への理解増進  
(大学間でのコンペティション、一般公開)

## 計算科学教育センター

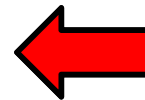
計算科学研究機構:世界の計算科学研究拠点 → 隣に計算科学の教育拠点  
将来を担う計算科学の優れた研究者、企業でプロダクト・イノベーションを牽引する人材

1. 全国の大学の研究指導
  - ・ AICSとの共同研究
2. 企業への計算科学教育
  - ・ 基礎からテラー教育
3. 大学・企業への遠隔授業
  - ・ 分野拡大/最先端研究
4. シミュレーション演習
  - ・ 「京」-筐体FX-10
5. 海外共同研究
  - ・ 海外派遣
6. 企業との連携
  - ・ インターンシップ
  - ・ 就職センター

神戸大学統合研究拠点



最先端研究  
最先端授業



理化学研究所  
計算科学研究機構



5分野戦略機関  
大学・研究機関

自治体からの支援  
神戸市、兵庫県  
計算科学振興財団



三次元可視化による  
シミュレーション解析

京速コンピュータ「京」-筐体  
FX-10によるプログラム開発

高度な教育資源の共同利用

シミュレーション相談室  
リタイアした研究者の教師陣  
大・中高生への理解増進

大学院GP: 大学連合  
科学技術戦略推進費: 企業

シミュレーションという第3の研究手法を教育することにより  
専門分野の枠を超えて社会的課題の解決に導く高度な人材育成

# 計算科学教育センターの役割

1. 学内(他大学・企業)への遠隔授業
  - ・ 神大、AICS、理研、JAMSTEC、JAXA、戦略5分野などの遠隔授業の配信
2. FX-10を用いたシミュレーション演習
  - ・ 新演習:モデリングと解析に重点
3. 学内参加のシミュレーション・スクール
  - ・ AICS-夏冬Simulation School → 「京」の使用
  - ・ 「 $\pi$ -CAVE」による可視化演習 & コンペティション
4. シミュレーション相談室・テラー相談室
  - ・ シミュレーションへの学内窓口
5. 国際共同研究・国際連携教育
  - ・ 学生のための国際会議
  - ・ 海外大学とのSimulation School → Brown-U(H25.8実施)
6. 企業との連携
  - ・ 国内・国際インターンシップの窓口
  - ・ 就職センター(修士修了就職後の博士への社会人入学)
7. Outreach活動
  - ・ 小中高大・高専・一般
8. FX-10、3次元可視化とプリポスの運営・管理



FX-10



Outreach用三次元映像



三次元可視化によるシミュレーション解析

# TV会議(PC通信)を用いた授業



神戸大学の講義



信州大学での受講

インターネット



企業での受講

神戸大学 計算科学概論

月曜日5限 17:00-18:30、教室：システム情報学研究科棟5階セミナー室

4月15日	小解義夫	計算によって科学の研究を進める歴史を概観する。コペルニクスやケプラーは高い精度の計算により太陽系の運動を解明した。ラプラスも天体の運動を精密に計算し、宇宙が計算可能であると主張した。コンピュータ初期の科学への応用についても論述する。
4月22日	横川三津夫	スーパーコンピュータの歴史、アーキテクチャの変遷、地球シミュレータ&京など日本のスーパーコンピュータ開発を概説する。
5月13日	山本有作	計算科学における行列計算の役割について論じる。特に、偏微分方程式の離散化により生じる連立1次方程式や行列の固有値問題を取り上げ、それらの基本的な数値解法と高性能化の技法を紹介する。
5月20日	谷口隆博	偏微分方程式の有限要素法を用いた数値解法の基礎について講義する。また、混合型有限要素法を用いた場合の注意点についても、単純な具体例とともに紹介する。
5月27日	隈山聡	地磁気の起源解明を目指した地球ダイナモシミュレーション研究を紹介する。また、そのシミュレーションデータの解析のために使われているパーシャルリアリティ技術を利用した可視化手法についても紹介する。
6月3日	田中成典	生命現象をできるだけ第一原理からボトムアップ的に記述する分子シミュレーション技術について論じる。HPC技術の利用、解析的手法との関係、マルチスケール・シミュレーションの考え方等についても議論する。
6月10日	北浦和夫	巨大分子・分子系の量子化学計算について、計算量のシステムサイズ依存性と並列計算の観点から問題を整理し、これまでに提案されているさまざまな計算法の特徴と応用例を紹介する。
6月17日	天能裕一郎	物質の構造と機能はその電子状態によって支配されている。その電子状態を数値的に取り扱う基本原理から物質設計、超並列計算環境での応用例までを含む計算科学の概論を行う。
6月24日	藤本和宏	タンパク質やDNAのような生体高分子を取り扱うための電子状態理論について論じる。ここでは、マルチスケール法や分割統治法について主に取り上げる。また、分子間に働く相互作用に関して量子力学に基づいた説明を行い、生体高分子に対する適用法について議論する。
7月1日	富樫祐一	生命現象の計算物理：細胞は、生物の基本単位でありながら、極めて複雑である。このような複雑システムをどうモデル化していくか。細胞内の化学反応を例に、その方針と落とし穴について考える。1分子計測等の実験と連携した取り組みについても紹介する。
7月8日	日井英之	地球を取り巻く宇宙プラズマ環境を概説するとともに、スーパーコンピュータによる大規模計算機シミュレーションを駆使した宇宙環境およびその衛星への影響評価に関する研究およびその数値手法の基礎について紹介する。

理化学研究所 生体シミュレーション

火曜日5限 17:00-18:30、教室：システム情報学研究科棟5階セミナー室

4月16日	人体のシミュレーション・概要	姫野龍太郎	人体シミュレーションの基礎理論と現状を紹介し、授業で学ぶべきポイントを示す。
4月23日	人体のシミュレーション・血流解析の基礎と応用	姫野龍太郎	血流解析の基礎理論と計算方法（差分法が主）を学ぶ。
4月30日	人体のシミュレーション・構造解析の基礎と応用	杉山和靖	生体組織の構造解析の基礎理論と計算方法を学ぶ。
5月7日	人体のモデリング・データ取得	横田秀夫	人体シミュレーションに必要なデータ取得方法について学ぶ。
5月14日	人体のモデリング・画像処理の基礎と演習	横田秀夫	人体シミュレーションのモデル化に必要な医療画像の処理方法を学ぶ。
5月21日	医療画像からの血流解析演習・モデリングと血流計算	野田茂穂	人の血流解析に応用する場合に必要な医療画像からのモデリングと計算を、演習を通して学ぶ。
5月28日	医療画像からの血流解析演習・結果の可視化	野田茂穂	血流解析の計算結果からの可視化の演習を行う。
6月4日	細胞シミュレーション・細胞構造のシミュレーション	大波修一	発生・再生のシミュレーションは生体シミュレーションの最大の挑戦の一つである。本講義では、発生・再生のシミュレーションの現状を解説し、今後の展望を紹介する。
6月11日	細胞シミュレーション・発生のシミュレーション	大波修一	生命現象の計算物理：細胞は、生物の基本単位でありながら、極めて複雑である。このような複雑システムをどうモデル化していくか。細胞内の化学反応を例に、その方針と落とし穴について考える。1分子計測等の実験と連携した取り組みについても紹介する。
6月18日	細胞シミュレーション・情報伝達のシミュレーション	大波修一	細胞の情報伝達は細胞の運命の決定や環境への応答に重要である。本講義では、細胞の情報伝達のシミュレーションの基礎を解説し、更に最新の話題を紹介する。
6月25日	細胞シミュレーション・代謝のシミュレーション	横田秀夫	細胞における代謝反応のモデル化とシミュレーションの現状について学ぶ。
7月2日	細胞計測最前線	中野明彦	細胞計測と可視化の最新トピックスを学ぶ



計算科学研究機構 大規模シミュレーション総論 I

木曜日 5 限 17:00-18:30、教室：システム情報学研究科棟 5 階セミナー室

4月11日	ガイダンスと大規模並列流体計算	小野謙二
本講義の概要を説明する。また、数十万を超えるようなMPPシステムにおいて、高性能な大規模な流体計算を行うためには、格子生成から並列アルゴリズム、可視化に至るまで様々な課題がある。これらの課題とその対処法について述べる。		
4月18日	大規模シミュレーションのエンジニアリングへの応用	小野謙二
最先端のシミュレーション技術を使い、工業製品の設計にどのように役立つのか、また問題点などを、自動車や航空機、流体機械などの実例とともに紹介する。		
4月25日	気象・気候モデル概論	富田浩文
リチャードソンの夢以降、気象予測を数値的に行われる試みが断々と続けられている。現在では、各国の気象機関で数値天気予報が欠かせないものになっているが、その計算手法は、コンピュータとともに発展してきた。本講義では、これまでの気象・気候モデルをレビューする。		
5月2日	先端気象・気候モデルを使った応用	富田浩文
ヘタスケール時代を迎え、またエクサスケールを見越したとき、気象・気候モデルはあらたな転換期にあると考えられる。現状の数値計算手法を紹介するとともに、将来を見据えた気象・気候モデルのあり方を議論したい。		
5月9日	量子化学シミュレーションの基礎	中嶋隆人
量子化学は物質科学や生命科学の基礎をなす学問であり、そのシミュレーションは材料設計や創薬に重要な役割を果たす。本講義では量子化学シミュレーションがどのようなものであるか理解するため、その基礎を講義する。		
5月16日	量子化学シミュレーションの応用	中嶋隆人
本講義では、量子化学シミュレーションの最近の進展を概観し、実際に材料設計や創薬にどのように役立っているか実例を踏まえながら講義する。		
5月23日	計算物性物理の基礎	曾田繁利
物性物理の分野では、その基礎研究から最先端の科学技術に至る応用研究まで行われており、今日の科学技術を支える重要な柱のひとつとなっている。本講義では、この物性物理の分野を概観し、この分野で大規模シミュレーションがどのように用いられているかについて解説する。		
5月30日	計算物性物理における大規模数値シミュレーション	曾田繁利
本講義では、物性物理の分野で用いられている最先端の数値的研究手法とその大規模シミュレーションを解説し、この分野の大規模シミュレーションの現状と今後期待される進展について講義する。		
6月6日	計算基礎物理学 1	中村直文
素粒子・原子核の大規模シミュレーションについて解説する。		
6月13日	計算基礎物理学 2	中村直文
宇宙分野における大規模数値シミュレーションについて解説する。		
6月20日	大規模粒子系ならびに核融合等シミュレーション分野	今村俊幸
第10回までで取り上げられなかった分野のシミュレーション技術（社会科学分野、原子力特に核融合等のエネルギー分野）について解説する。また、大規模粒子系で利用される代表的な相互作用計算アルゴリズムや計算スキーム等について講義する。		

計算科学研究機構 大規模シミュレーション総論 II

木曜日 5 限 17:00-18:30、教室：システム情報学研究科棟 5 階セミナー室

10月3日	講義の全体概要 - ガイダンスと京の開発概要	小野・庄司
本講義のアウトラインを説明する。また、京コンピュータの開発についてその概要を説明する。		
10月10日	分野1 予測する生命科学・医療および創薬基盤	木寺
生命科学分野における主要な研究課題は「細胞内分子ダイナミクスのシミュレーション」、「創薬応用シミュレーション」、「予測医療に向けた階層統合シミュレーション」そして「大規模生命データ解析」の4つがある。本講義では、各テーマで進められている研究内容と成果について講義する。		
10月17日	分野4 次世代ものづくり	大西
大規模なシミュレーションの産業分野への応用として、自動車や航空機などへの適用事例を説明する。		
10月24日	分野3 防災・減災に資する地球変動予測	宮川
CO <sub>2</sub> 排出による地球温暖化の科学的コンセンサスはほぼ取れている現在、温暖化時の極端現象（集中豪雨、台風）がどのように変動するかを明らかにすることが防災上、今後の大きな課題となる。特に台風は、日本に直接被害をもたらすが、発生や進路予測は、実は熱帯気象がカギを握っている。本講義では、京を使った最先端気候科学の一端を紹介する。		
10月31日	分野2 新物質・エネルギー創成	藤堂
スーパーコンピュータ「京」の持つ巨大な計算資源を利用することで、これまでのコンピュータでは計算の実行が非現実的であった巨大な系や複雑な系などの大規模数値シミュレーションが可能となり、物質科学分野におけるブレークスルーが期待されている。本講義では物質科学分野における基礎研究から応用研究に至る最先端の研究と、その研究で用いられている大規模シミュレーション手法について解説する。		
11月7日	分野5 物質と宇宙の起源の構造	青木
HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」の目標は、ビッグバンに始まる宇宙の歴史の中で素粒子から原子核、星・銀河形成に至る物質と宇宙の起源と構造を統一的理解することである。そのために選ばれた4つの研究開発課題(1)格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定、(2)大規模量子多体計算による核物性解明とその応用、(3)超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明、(4)ダークマター密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成について解説する。		
11月14日	京のアーキテクチャ	庄司
超並列計算機の代表的な計算機のひとつである京のアーキテクチャ、ネットワーク、ファイルシステムについて説明する。		
11月21日	京のシステムソフトウェア	前田
京コンピュータの性能を引き出す各種のシステムソフトウェアについて説明する。		
11月28日	京のチューニング	今村
まず、マイクロプロセッサのアーキテクチャをふまえた上でSIMDやキャッシュの再利用等の最適化技術、マルチコア並列を行う際の技術項目について解説する。続いて、通信最適化や高性能ファイルIOなど分散並列チューニングに関して講義する。		
12月5日	大規模数値計算ライブラリ・ミドルウェア	今村
大規模シミュレーションコード開発に欠かせない数値計算ライブラリ・ミドルウェアについて解説する。代表的なライブラリの利用方法を中心にして、他に開発フレームワークや性能プロファイリングツールに至る各種有用ソフトウェアについても紹介する。		

## BAY AREA &amp; JAPAN RELATED NEWS



## "Brown-Kobe Joint Simulation School 2013"

Six students from each university, twelve in total, participated in a two-week joint summer school designed for graduate students from Brown University of the U.S. and Kobe University of Japan. During the first week from August 15 to August 21, 2013, the students took lectures and training courses at Brown University in Providence, Rhode Island, in a variety of disciplines including basic computer simulation, methodologies, advanced research in simulation, and practical simulation training using the FX-10, a supercomputer with the same architecture as the K computer. From August 26 to 30, they moved to Kobe University where they continued their studies. Specifically, they developed three-dimensional images of the simulation results using Kobe's 3D Visualization System.

The first objective of this program was to provide students with opportunities to acquire fundamental knowledge and skills in computer simulation as well as learning about the most advanced simulation research both in Japan and the U.S., which enables them to enhance their ability in applying what they learned to their own research. The second objective of this program was to provide students with opportunities to develop cooperative projects through which they can enhance their communication skills in English and deepen mutual understanding in this highly technical area.

The program consisted of three distinctive features: a) small-sized class with an effective curriculum which provided individually tailored instruction and support, b) a two-week intensive summer school to enhance multi-cultural competencies among students, and c) participation of distinctive researchers as guest lecturers. In order to stimulate communication among students, the program provides the students with opportunities to develop collaborative projects under facilitation techniques which enable students to organize events by themselves. In addition, Kobe invited outstanding researchers from the RIKEN Advanced Institute for Computational Science (RIKEN AICS) to give special lectures for this program. AICS is an independent research center, established in 2010, with the objective of advancing scientific research through computer simulation using one of the world's most powerful computers, the K computer.

This simulation school brought together students from five countries: Japan, the U.S., Germany, Chile and China who worked together as project team members. It was a great success not only in intensively training the students to acquire the fundamentals of computer simulation, but also in providing a global perspective amongst the participants in the field of simulation technology and beyond.

Nobuyuki KAYA and Yukari MITSUHASHI, Kobe University and Björn SANDSTÈDE, Brown University



Collaborative workings on the 3-dimensional displays of the simulation results

Collaborative presentations on the simulation projects at Kobe University

JAPSS Newsletter Vol.11 (October 2013)

# 学生プロジェクト

## 参加者集合写真



## 2対2のプロジェクト

## 1対1の対話

