

HPCI戦略プログラム分野2 計算物質科学イニシアティブ(CMSI) 人材育成・教育活動と課題

平成25年11月13日(水)

CMSI人材育成・教育担当
大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター
下司雅章(げしまさあき)



1. CMSI組織の中の人材育成・教育機関

◆人材育成・教育担当(9大学)

基礎から応用までの計算物質科学教育を実施

◆産官学連携担当(2機関)

産官学連携シンポ等で産業界からのニーズを吸い上げる

CMSIの構成機関



2. H23年度;CMSI教員7名採用と活動準備

教育カリキュラム・講習会等の活動計画立案と試験的運用実施

- ◆若手研究員の技術交流会等で超並列計算に向けた課題を把握
- ◆産官学連続研究会等から産業界からの要望やニーズを把握
- ◆学生、院生との座談会等による教育ニーズや要望の吸い上げ

CMSI神戸拠点で分野・
産学連携教育・人材育
成を推進

北浦和夫
神戸大教授



藤堂眞治
東大教授



各大学計算物質科学
カリキュラム
作成・実施

吉井範行
名大准教授



下司 雅章
阪大准教授



寺田弥生
東北大
准教授



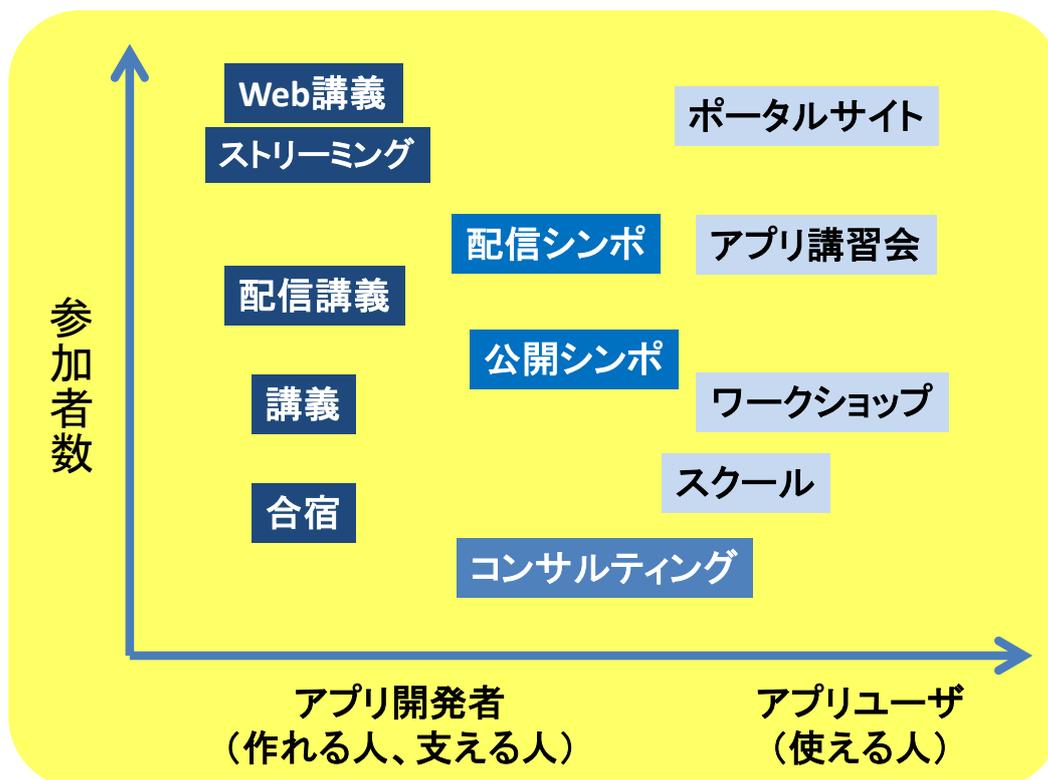
岩田潤一
東大講師



山地洋平
東大助教



3. CMSIの人材育成・教育活動



4. 講義配信施設の整備

教育コンテンツ配信事業

⇒ 計算物質科学の振興と社会へ貢献できる人材の育成

- ◆ H24までに教育機関9大学にビデオ配信設備設置
- ◆ H25補正予算で多地点会議システム購入(20接続)



◆ 計算物質科学特論A配信 ◆ 述べ165名が参加!! 内、企業11名

【日時】平成25年4~7月 (15回)
毎週木曜13:00~14:30

【場所】配信元: 大阪大学豊中
キャンパス基礎工G217



11か所で受講可能

(東大は本郷・柏、阪大は豊中と吹田)

* 産総研に追加設置予定

* 分野5との連携で筑波大配信予定

今後の予定

● H25下期: 配信シンポジウム3回開催

● H26計算物質科学特論B 開講

5

5. アプリケーションポータルサイトの整備

~ MateriApps ~

MateriApps

- ◆ H25年11月本格運用開始!
- ◆ 人材育成・教育活動に活用
- ◆ 実験と計算の橋渡し

五十嵐亮
東大
研究員



1. 「やりたいこと・興味」からアプリを検索できるシステム

検索タグ: 手法、物理量、開発者名、対象モデル・物質 etc.

⇒ **アプリ利用者: アプリへのアクセスをスムーズに。**

2. 開発者の声を利用者に届けるアプリ紹介

開発者ページの設置

(アプリ最大の魅力、アプリの将来性・応用性 etc.)

⇒ **アプリ開発者の見える化 ⇒ アプリ開発者・利用者の距離短縮。**

3. 共同研究・開発を支えるシステム

Web上でのソースコード開発(クローズド機能選択あり)

掲示板を利用した意見交換の促進

⇒ **アプリ開発者同士のクロッシング、横断的な研究のサポート**

6

人材育成・教育イベント 具体例

7

6. 人材育成・教育のポイント

院⇒若手⇒社会人向けに参加することで、
広い視野を持ったリーダー人材を創出

◆大学院教育⇒「計算科学技術特論」

・博士前期課程⇒計算科学の基礎となる考え方, 視野を広げるための知識, 基礎的な計算技術の習得

・博士後期課程⇒計算物質科学の研究手法, 専門知識, 計算機科学, 応用技術の習得

◆若手研究者⇒「若手技術交流会」

・若手研究リーダー育成⇒キャリアパス形成, ワークショップ, サマースクール等での教育及び人材交流, コミュニティとの連携

◆社会人教育

・産業界のニーズは幅広く、各分野、あるいは計算手法毎にカリキュラムを策定する。

8

7. 配信講義「計算科学技術特論A」

◆博士後期、PDクラスをターゲット

第1回	プログラム高速化の基礎	片桐孝洋(東大)	4月11日
第2回	MPIの基礎	片桐孝洋(東大)	4月18日
第3回	OpenMPの基礎	片桐孝洋(東大)	4月25日
第4回	Hybrid並列化技法(MPIとOpenMPの応用)	片桐孝洋(東大)	5月9日
第5回	プログラム高速化の応用	片桐孝洋(東大)	5月16日
第6回	線形代数演算ライブラリBLASとLAPACKの基礎と実践1	中田真秀(理研)	5月23日
第7回	線形代数演算ライブラリBLASとLAPACKの基礎と実践2	中田真秀(理研)	5月30日
第8回	高速化チューニングとその関連技術1	渡辺宙志(東大物性研)	6月6日
第9回	高速化チューニングとその関連技術2	渡辺宙志(東大物性研)	6月13日
第10回	行列計算における高速アルゴリズム1	山本有作(神戸大)	6月20日
第11回	行列計算における高速アルゴリズム2	山本有作(神戸大)	6月27日
第12回	古典分子動力学法の高速度化1	吉井範行(名大)	7月4日
第13回	古典分子動力学法の高速度化2	吉井範行(名大)	7月11日
第14回	量子化学計算の大規模化1	石村和也(分子研)	7月18日
第15回	量子化学計算の大規模化2	石村和也(分子研)	7月25日

計算物質科学のカリキュラム概要(案)

- ◆開発者養成コース／ユーザー養成コースに分ける
- ◆科目は共通、実習科目は両コース必須



8. 若手技術交流会

◆若手自ら企画立案実施で、リーダーシップやマネジメント能力養成

- 第6回 (2012年7月17日-19日 掛川)
 - 研究員・企業研究者・学生28人、サポート富士通4人
 - テーマ:京利用に向けた技術・情報の共有
 - 内容:FX10で各自のプログラムのコンパイルとチューニングもしくはフリーソフトのコンパイル
 - Wiki: <http://trac.cms-initiative.jp/wakate6>
- 第7回 (2013年2月14日-16日 金沢)
 - 研究員・学生30人、サポートRIST4人、富士通4人
 - テーマ:京の効率利用のための技術習得と共有
 - 内容:FX10で各自のプログラムの解析とチューニング
 - Wiki: <http://trac.cms-initiative.jp/wakate7>
- 第8回 (2013年7月1日-3日)
 - 研究員・学生33人、サポート富士通3人、招待講演者2人
 - テーマ:アプリケーションの開発と展開のための情報共有
 - 内容:MateriApps等で一般に公開されているアプリケーションを使い、公開方法、使用感、バグ、等をレポート
 - Wiki: githubのプライベートリポジトリ内に作成(非公開)

11

9. 2013年度TOKKUN!1-3

◆「京」、HPCIの一般利用枠申請に向けた強化合宿

- 毎回テーマを決めて、少人数(10名程度)で高度化作業
- 第1回(実行性能向上、6月)
- 第2回(並列性能向上、7月)
- 第3回(実行・並列性能向上9月)
- 富士通から毎日2名応援
- 毎回最後に成果発表と情報共有
- コンサルティングの富士通の方と長時間議論可能。
- アルゴリズムから見直すことができた参加者もいた
- ソースコードを大画面に映し、全員でチューニング作業を行う、プログラミングのノウハウ共有を行った

12

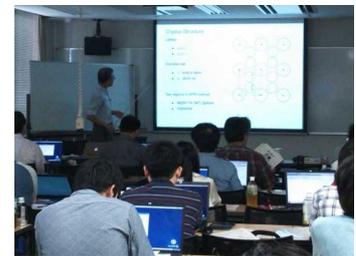
10. 阪大CMD[®]ワークショップ

◆ 院生, 若手研究者, 社会人の教育を同時開催

- ・密度汎関数理論第一原理計算手法習得が目的
- ・総修了者数は延べ1000名を突破.
- ・2010年9月CMSIの支援でスパコンコースを開始
- ・⇒State、RSPACEで講習を実施し、その後の利用も
続き共同研究に発展
- ・ビギナーズコースはKKR, 擬ポテンシャル法, FLAPW法
を一通り体験

(参加者の声)

- ・大学の先生に気軽に相談できる(産業界)
- ・何度も参加してノウハウを取得することができる(産業界)
- ・講習会で学んだ手法が論文になった。



詳しくは<http://phoenix.mp.es.osaka-u.ac.jp/CMD/13>

参考 阪大ナノプログラム

◆ 計算手法や具体的対象物の講義でニーズにミート

前 期					後 期						
回	日	テーマ	コード	題目	講師	回	日	テーマ	コード	題目	講師
1	4/8(月)	はじめに	1A-1-A	オリエンテーション	吉田博 (阪大・基礎工)	1	10/7(月)	はじめに	1B-1-A	オリエンテーション	吉田博 (阪大・基礎工)
			1A-1-B	量子シミュレーションとデザイン					1B-1-B	21世紀「買者の石」と計算機ナノメテリ アルデザイン (CMD)	
2	4/15(月)	量子力学の基礎	1A-2-A	量子力学1	中西寛 (阪大・工)	2	10/21(月)	ナノ混晶による新 機能デバイス	1B-2-A	ナノ混晶・超構造量子シミュレーション	小倉昌子 (阪大・理)
			1A-2-B	量子力学2					1B-2-B	ナノ混晶・超構造量子デバイスデザイン	
3	4/22(月)	固体中の電子	1A-3-A	固体中のほとんど自由な電子	浜田典昭 (東理大・理工)	3	10/28(月)	ナノ構造と輸送現 象デザイン	1B-3-A	ナノワイヤ	小野倫也 (阪大・工)
			1A-3-B	価電子と共有結合					1B-3-B	ナノ伝導	
4	5/13(月)	密度汎関数法	1A-4-A	ホーエンベルグ・コーンの定理	赤井久純 (阪大・本部)	4	11/11(月)	有限温度・圧力下 でのナノダイナミク	1B-4-A	拡散現象のナノシミュレーション	白井光雲 (東理大・理工)
			1A-4-B	コーン・シャム方程式とLDA					1B-4-B	高圧下での新規ナノ構造	
5	5/20(月)	電子状態計算	1A-5-A	電子状態計算の流れ	小口多美夫 (阪大・産研)	5	11/18(月)	光と熱の利用	1B-5-A	透明導電材料と太陽電池材料	浜田典昭 (東理大・理工)
			1A-5-B	プログラミング					1B-5-B	熱電材料	
6	5/27(月)	擬ポテンシャル法	1A-6-A	擬ポテンシャル法の概念	森川良忠 (阪大・工)	6	11/25(月)	励起状態ダイナミク スシミュレーション	1B-6-A	励起ダイナミクスシミュレーション手法	宮本良之 (産総研)
			1A-6-B	非経験的擬ポテンシャル法					1B-6-B	ナノスケール物質の高速現象への応用	
7	6/3(月)	FLAPW 法	1A-7-A	FLAPW 法の基礎	小口多美夫 (阪大・産研)	7	12/2(月)	省エネルギー・創 エネルギーデザイ	1B-7-A	高効率エネルギー変換	吉田博 (阪大・基礎工)
			1A-7-B	FLAPW 法的应用					1B-7-B	太陽電池	
8	6/10(月)	KKR 法	1A-8-A	KKR 法の基礎	赤井久純 (阪大・本部)	8	12/9(月)	半導体デバイスデ ザイン	1B-8-A	CMOS 絶縁膜材料デザイン	金田千穂子 (新富士通研)
			1A-8-B	KKR 法的应用とFPKKR 法					1B-8-B	Extended CMOS のためのナノシミュレ ーション	
9	6/17(月)	カー・パハリネロ法	1A-9-A	分子動力学法の基礎	白井光雲 (東理大・理工)	9	12/16(月)	半導体ナノスピント ロニクスデザイン	1B-9-A	希薄磁性半導体	佐藤和則 (阪大・基礎工)
			1A-9-B	分子動力学法的应用・発展					1B-9-B	ナノ超構造スピントロニクス	
10	6/24(月)	表面電子状態	1A-10-A	表面の電子状態計算	中西寛 (阪大・工)	10	1/6(月)	強誘電体・圧電体 デザイン	1B-10-A	強誘電体の量子シミュレーション	小口多美夫 (阪大・産研)
			1A-10-B	表面反応の電子状態計算					1B-10-B	強誘電体・圧電体の量子デザイン	
11	7/1(月)	輸送現象	1A-11-A	コーン・シャムエネルギーバンド	浜田典昭 (東理大・理工)	11	1/20(月)	カーボン系ナノ機能 材料	1B-11-A	カーボン系ナノ機能材料の基礎理論	草部浩一 (阪大・基礎工)
			1A-11-B	ブロッホ電子の動力学と輸送係数					1B-11-B	カーボン系ナノ材料のデザイン	
12	7/8(月)	磁性	1A-12-A	絶縁体と局在磁性	草部浩一 (阪大・基礎工)	12	1/27(月)	分子エレクトロニク スデザイン	1B-12-A	電荷移動過程	森川良忠 (阪大・工)
			1A-12-B	金属と遷移磁性					1B-12-B	有機分子エレクトロニクス	
13	7/22(月)	電子相関	1A-13-A	密度汎関数法と電子相関	草部浩一 (阪大・基礎工)	13	2/3(月)	表面反応デザイン	1B-13-A	触媒・燃料電池・水素貯蔵	笠井秀明 Wilson Dino (阪大・工)
			1A-13-B	電子相関による磁性・超伝導					1B-13-B	表面スピントロニクス	
14	7/29(月)	ディスカッション・ ディベート	1A-14-A	量子シミュレーションの現状	全講師	14	2/10(月)	ディスカッション・ ディベート	1B-14-A	ナノデザインの現状	全講師
			1A-14-B	量子シミュレーションの未来					1B-14-B	ナノデザインの未来	

11. 分野振興活動 ～広報誌Torrent出版～

- ◆若手研究者の見える化
- ◆産官学の若手の橋渡し
- ◆一般社会への活動、成果アピール

若手に取材を依頼し、交流を促進
アウトリーチの意識も向上！

年に2～3刊発行



若手とベテラン合宿レポート



若手研究者取材記事



No.8 CMSI見える化シンポジウム開催特集

零と計算科学映像
のコラボ



東大理広報
横山先生



NHK植松
ディレクター¹⁵

まとめ

- ◆効率的講義実施⇒全国的な大学間連携が必要かつ有効である(配信講義, 講習会, スクールなど)
- ◆配信講義には、情報基盤センターの積極的サポートが必要。(部局から独立した組織として, 誰でも利用できる会場を提供、サポート可能)
- ◆計算資源のサポートが必要(現状は分野スパコン利用)
- ◆分野間連携、例えば, 計算科学全体で配信講義のポータルサイトを構築するなど, 互いに関連する講義を共有する。
- ◆コンサルティング人材、マネジメント人材の育成に関する教育活動が課題。

第2回CMSI人材育成シンポジウム 「大規模計算に伴う数値誤差及び可視化」

日時： 2013年12月2日(月)

場所： 大阪大学大学院基礎工学研究科G217及びCMSI配信拠点で聴講可能

- 13:00-13:10 下司雅章(阪大ナノセンター)「趣旨説明」
- 13:10-13:50 大石進一(早大理工)「大規模計算における精度保証付き数値計算」
- 13:50-14:20 片桐孝洋(東大情報基盤センター)、黒田久泰(愛媛大)「連立一次方程式の反復解法ソルバーにおける並列処理と収束精度の問題について」
- 14:20-14:50 山本有作(電通大)「線形計算における誤差解析の事例」
- 14:50-15:20 Break
- 15:20-16:00 小野謙二(理研)「大規模な計算結果の可視化における課題とアプローチについて」
- 16:00-16:30 萩田克美(防大)「可視化と純粋数学に駆動された計算物質科学の一例～K4フェノール樹脂のDFT計算と古典MD計算へ～」
- 16:20-16:40 大綱英生(ユタ大)「生物学者のワークフローにフィットさせた可視化解析ソフトの開発と応用」
- 16:40-17:00 まとめ

参考資料

CMSI参画教育機関の人材育成・教育活動

◆社会人も受講可能な多彩なプログラムを実施(大学講義以外)

スタイル	実施機関	イベント名	補足説明	実施形態			対象者					
				最大人数 (人)	期間 日	年回数 回	人材教育・教育 社会人も含む			研究・応用(産官学)		
							学生	M院	D院 若手	利用者	支援者	研究・ 開発者
ポータルサイト	CMSI	MateriApps Live on web	WEB上でアプリ講習会受講(試験中)				○	○	○	○	○	○
ストーリーミング	CMSI	人材育成・教育シンポジウム	web配信H25中にテスト予定						○	○	○	○
Web講義	CMSI	計算物質科学特論	web上に動画・資料UP					○	○	○	○	○
配信シンポ	CMSI	人材育成・教育シンポジウム	阪大⇒8大学10拠点配信	200	1	~3				○	○	○
公開シンポ	CMSI	CMSI-TUT見える化シンポジウム	計算科学のアウトリーチ活動	120	1	1	○	○	○	○	○	○
配信講義	CMSI	計算物質科学特論	阪大⇒8大学10拠点配信	200	半年	15		○	○	○	○	○
連携講義	右記	金沢大-新潟大-神戸大	既存枠組み	50	半年	1/週	○	○	○			
	右記	名古屋大-総研大	既存枠組み	50	半年	1/週	○	○	○			
講義	CMSI	各協力機関の大学で実施	東大・名大H24講義開始。東北大H25開始予定	50	半年	1/週	○	○	○			
ワークショップ	共催	ASIA CMDワークショップ(阪大)	初心者~中級者	50	4	4	○	○	○	○		
	共催	CMDワークショップ(阪大)	初心者~高度利用者	100	5	2	○	○	○	○		
	CMSI	国際量子化学超並列WS	上級者	60	1	1			○			○
スクール	共催	分子シミュレーション夏の学校(分子研)	MD基礎から応用、実習	50	3	1	○	○	○			
	CMSI	TCCIウインターカレッジ(MD)	MD基礎から応用、実習	100	5	1	○	○	○			
	CMSI	TCCIウインターカレッジ(量子化学)	量子化学計算基礎から応用	50	2	1	○	○	○			
アプリ講習会	CMSI	CMRI MPI講習会	MPI利用方法	30	1	1	○	○	○			
	共催	OCTA講習会&トレーニング	企業利用アプリ講習会	50	1	1				○	○	○
	共催	HPC産業利用スクール(H24まで)	RSDF、OpenMX、FMO、QMAS	20	2	2				○	○	○
	CMSI	ハンズオン(CMSI神戸)	ALPS、FMO、feram、Matikaneyama、T	12	1	10		○	○	○		
合宿	CMSI	若手技術交流会(合宿)	アプリ高度化、ノウハウ共有	40	3	2			○		○	○
	CMSI	特訓合宿	「京」HPCI一般申請向け	12	3	2			○			○
コンサルティング	CMSI	個別コンサルティング	個人、グループで実施	12	年間	12						○