

March 2014

NO. 9

Torrent

10¹⁶が創り出す 新マテリアル

特集1：国際交流

CMSI国際シンポジウム

Tokyo Satellite Workshop
Nagoya Satellite Workshop
Kobe Satellite Workshop

特集2：戦略分野間の連携

分野1×分野2、分野2×分野5

第4回 CMSIポスター賞

CMSI 国際シンポジウム 2013

International Symposium 2013

Extending the power of computational materials sciences with K-computer



2013年10月21日、22日に東京大学・伊藤国際学術研究センターにおいて、第1回CMSI国際シンポジウムが開催されました。時期的に、京コンピュータの共用が開始された2012年9月28日から約1年が経過したところであり、“Extending the power of computational materials sciences with K-computer”をテーマに掲げて、京コンピュータの利用により得られた研究成果の発表を中心に、超並列計算機が切り開く物質科学の新時代を展望する議論が行われました。

京コンピュータ共用開始1年の成果

本シンポジウムは、下記の3つのサテライトワークショップと一体として企画され開催されたものです。

- 1) CMSI Tokyo Satellite Workshop 2013: Novel Electronic Structure Calculation Method
- 2) CMSI Nagoya Satellite Workshop

2013: Large-Scale Molecular Simulation for Understanding Molecular Mechanism

3) CMSI Kobe Satellite Workshop 2013: Recent Progress in Tensor Network Algorithms

ワークショップ1)と2)は、それぞれ、京コンピュータにより計算物質科学における大規模超並列計算の展望を切り開いたRSDFT(実

空間第一原理DFT計算ソフトウェア)とMODYLAS(大規模分子系の分子動力学シミュレーションソフトウェア)の成果を国内外の研究者に紹介し、今後の展望を議論することを目的として開催されました。ワークショップ3)はこれらとは性格が異なり、計算物質科学全般にかかわって、数理学との分野融合を推進し、新規アルゴリズムの創出のための礎を築き取り組みです。それぞれのワーク



歓談するV. Schauer氏(左)とJ. Enkovaara氏(CSC-IT Center for Science、フィンランド、右)

ショップの報告については別項で紹介していますので、そちらをご参照ください。

本会議の初日は、諸熊奎治氏(京都大学)による基調講演で始まり、続いてCMSIの部会代表者による成果発表が行われました。2日目は海外からの11件の招待講演とサテライトワークショップで取り上げたテーマの課題と成果を共有・深化するために3つの平行セッションが設けられました。タイミングよく、2013年のノーベル化学賞が「複雑な化学システムのマルチスケールモデル開発」、いわゆるQM/MMハイブリッド法の開発の功績に対して、Martin Karplus、Michael Levitt、Arieh Warshelの3氏に授与されると発表された直後であったことから、諸熊氏は、講演の冒頭で受賞対象となった研究の紹介とKarplus氏についてのエピソードを話されました。そのあと、ご自身のグループの最近の研究成果として、遷移状態の網羅的探索によって多数の新しい反応機構を見いだしたことを紹介され、スーパーコンピュータがもたらす計算物質科学の威力を展望されました。非常に感銘を覚えた講演でした。各部会の研究課題に関連した招待講演では、最先端の印象深い研究成果が発表され、活発な議論・情報交換が行われました。

ソフトウェア開発は どう変わっていくのか?

.....
以下は、本シンポジウムに参加して感じた雑感です。

計算物質科学の重要な研究課題の1つは、適用対象・現象を拡大できる新しい計算理論・計算モデルの開発です。QM/MMハイブリッド法は1970年代の初めに提案されましたが、(私の印象では)急速に普及したのは1990年代の半ばでした。この背景には、多数の研究者の貢献により計算法とソフトウェアの改良が行われ、加えてコンピュータの性能向上があり、その一方で、生命科学の発展に伴い生体分子の機能を解明するために、実験では観測することが困難な生体中(水溶液中)における分子の構造・ダイナミクスをシミュレーションにより“観測”したいという要求が高まったことがあると考えられます。この例だけでなく、1つの計算モデルが有用性を認められて普及するにはいくつかの条件がそろわなければなりません。しか



会場から質問するG. Klimeck氏

し、条件がそろわぬのを待って研究を始めては手遅れになる場合が多いのです。京コンピュータが実現した画期的な計算性能は、次世代の計算モデル・ソフトウェアが生みだされるきっかけになると期待されますが、これを現実のものにするには長期的視野をもった継続的な取り組みと、それをサポートする体制が不可欠です。

CMSIでは、プロジェクトで開発したソフトウェアの普及・促進をミッションの1つとして、ポータルサイトMateriAppsの運用、ソフトウェア講習会の開催、ソフトウェアの配布など精力的な活動を行っています。これに関連して、Gerhard Klimeck氏(Purdue大学)のNanoHUBについての講演が印象的でした。

Program

10/21 Monday

- 10:00 - 18:00 • Keynote : Keiji Morokuma (Kyoto Univ.)
- Invited Talk : Shiro Sakai (The Univ. of Tokyo)
- CMSI Priority Research Topics using the K computer
- 18:00 - 20:00 • Banquet (Event: KAGURA by KARAS and Hideo)

10/22 Tuesday

Special Topics “New Science Developed by New Massively Parallel Computation Approach”

- 9:00 - 12:20 • Invited Talks :
Glen Evenbly (Caltech), Weitao Yang (Duke Univ.),
Gerhard Klimeck (Purdue University)
- 12:20 - 15:00 • Parallel Sessions:
Recent Progress in Tensor Network Algorithms
Large MD Simulation
Novel Electronic Structure Method
- 15:15 - 17:15 • Invited Talks:
Jan Rossmeisl (CAMD), Blazej Grabowski (MPIE)

これは、2002年から2010年にかけてNSF(全米科学財団)のプロジェクトとして開発されたもので、ナノサイエンス/ナノテクノロジー分野のシミュレーションソフトウェア、プレゼンテーションツール、教育ツールなどをサイバースペースで共有するシステムとして、すでに世界的に展開されています。このようなシステムの進化形として(飛躍しすぎかもしれませんが)、何を計算すべきかを決めたあとは、入力データが(半)自動的に生成され、クラウドコンピューティングによって多数/大規模な計算が実行され、膨大な計算結果が(半)自動的に論文やレポートの形で出力されるようなシステムに近づいていくことを想像してしまいました(このような時代が来れば、計算のみに基づいた論文は意味を成さなくなる可能性があります)。このような時代においても、新しい計算モデルとその計算プログラムの開発は欠かせないものとして重要な仕事であり続けることでしょう。ただし、理論的な仕事は別として、計算モデルやプログラムの開発はソフトウェア会社、あるいは市場が十分大きくない場合は、フリーソフトウェアとして情報科学、数理科学と計算物質科学の専門家が連携したボランティアグループにより行われるようになっていくかもしれません。

(北浦和夫：神戸大学システム情報学研究所)

外国人研究者に聞く

サテライトワークショップに参加した外国人研究者の方々から、ワークショップの感想や日本人若手研究者の印象をうかがいました。

Volker Schauer

University of Stuttgart, Germany

Q1: Please tell us about your research briefly.

In my research, I create algorithms in order to calculate the electronic structure of clusters of atoms with the finite element method. In general such localized basis functions provide advantages in the efficiency on modern parallel hardware architectures.

Q2: How did you feel when you attended the satellite workshop in Tokyo?

The satellite meeting was an excellent chance to share my research ideas with other young international researchers, working on similar topics.

Especially the speakers and topics were thereby well chosen to give a nice overview over the newly developing real space methods in electronic structure calculations - so I enjoyed the seminar very much.

Q3: What is your impression about young researchers in Japan during your stay?

Young researchers seem to find an excellent academic environment in Japan, which provides various opportunities, as for example it is done by the CMSI.

Mikael Lund

Lund University, Sweden

Q1: Please tell us about your research briefly.

In the statistical mechanical group at Department of Theoretical Chemistry in Lund, we study materials such clay, cement, and cellulose fibres. We are also interested in more bio-oriented applications such as protein-protein interactions. Our main tools are Monte Carlo and atomistic molecular dynamics simulations as well as classical polymer density functional theory.

Q2: How did you feel when you attended the satellite workshop in Nagoya?

Due to the relatively small number of people at the Nagoya meeting, the discussions were informal and much more lively than at bigger conferences. This, combined with a diverse range of speakers of all ages and from different disciplines, made this meeting a very awarding experience for me and led to a collaboration with Kyoto University.

Q3: What is your impression about young researchers in Japan during your stay?

This was my first time in Japan and to be honest I didn't quite know what to expect other than high scientific quality. From the two meetings I attended I was very impressed by the level of research by the young researchers — especially the concerted efforts to maximize performance on the K computer.

Glen B. Evenbly

California Institute of Technology, USA

Q1: Please tell us about your research briefly.

My research is focused on the development and application of tensor network methods for the efficient simulation of quantum many body systems. In particular, I do a lot of work with a class of tensor network known as the multi-scale entanglement renormalization ansatz, and study its application to quantum critical systems.

Q2: How did you feel when you attended the satellite workshop in Kobe?

The Kobe meeting was attended by a variety of recognized figures from the tensor network community, both locally and from abroad. It was interesting to learn of the latest developments happening in tensor networks.

Q3: What is your impression about young researchers in Japan during your stay?

The young researchers I met in Kobe seemed enthusiastic and eager to learn, I had good experiences discussing my research with them, and learning of their own research.

Vladimir Kazeev

ETH Zurich, Switzerland

Q1: Please tell us about your research briefly.

I study the possibility of finding and representing solutions of large-scale problems in terms of relatively few parameters with the use of so-called tensor decompositions. The aim is achieving highly adaptive representations of this kind in computations and grounding them mathematically.

Q2: How did you feel when you attended the satellite workshop in Kobe?

The meeting was very inspiring in terms of the location, scope and participants. In the heart of the Japanese high-performance computing facilities. On important current topics in the numerical simulation of quantum systems. With experts of the field and eager young researchers.

Q3: What is your impression about young researchers in Japan during your stay?

The work presented by young researchers demonstrates a high scientific level and remarkable diligence. Also, I particularly appreciated the effort they made to let us enjoy an internationally-friendly professional environment on the Japanese soil.

CMSI Tokyo Satellite Workshop 2013

Novel Electronic Structure Calculation Method

新たな手法による 電子状態計算法の実装

2013年10月18日・19日の2日間にわたり、東京大学本郷キャンパス工学部6号館において標記のサテライトワークショップが開かれました。非経験的な電子状態計算法の実装手段として特に量子化学の分野で広く用いられているガウス型基底と固体物性物理の分野で広く用いられる平面波基底。この2つの主流以外にも、近年、実空間差分法、有限要素法、ウェーブレット基底といった新たな手法による電子状態計算の実装が増えつつあります。その理由の1つは計算機の超並列化への対応であり、例えば平面波基底を用いる固体のバンド計算コードにおいては高速フーリエ変換の利用が不可避であり、以前から超並列計算機への対応が懸念されていました。さらに、ガウス型関数や平面波基底は計算の境界条件を強くしぼるものであり、表面や界面、あるいはもっと複雑な物質をモデル化する際に大きな制約となることも問題でした。

本サテライトワークショップは、国内から6名、海外から3名の研究者に講演を依頼し、実空間差分法、有限要素法、ウェーブレット基底法について、それぞれの特徴を議論し、理解を深め、あわよくば各コードに生かせる技術を盗もうという趣旨で開催されました。実空間差分法については、日本からは筆者と、小野倫也氏、



講演するL. Genovese氏



野田真史氏、佐藤駿丞氏が講演を行い、海外からはGPAWパッケージの開発者の1人であるJussi Enkovaara氏が講演を行いました。有限要素法については、日本から土田英二氏、海外からはVolker Schauer氏の講演がありました。またウェーブレットについては、日本から関野秀男氏、海外からはBigDFTの開発者の1人であるLuigi Genovese氏の講演がありました。いずれの手法も、上述の問題点を克服する要素をもっており、さらに加えてadaptivityという、やはり旧来の手法にはない特徴を共通して有することも明らかとなりました。

全電子計算への道

Adaptivityとは、例えば原子核近傍のような関数の変化の激しい箇所重点的に計算点を配し、変化の緩やかな部分は粗い計算点ですませる、というような技法です。この技法を押し進めることで、内殻の電子までも陽に取り扱う、いわゆる「全電子計算」が可能となり、有限要素法とウェーブレット法では具体的な実装も進められていました。ガウス型関数は数学的には完全系を成しておらず、基底関数どうしが線形従属になってしまうために系統的に精度を向上させることが困難であることが

知られています。「ウェーブレットは完全系を成す量子化学計算の新たな基底になるかもしれない」という関野氏の講演は印象的でした。

現在主流となっているガウス型関数や平面波基底は、計算機そのものが生まれ育ってきた時代にできたものです。そのころから比べると、現在の計算機は大きく変貌を遂げています。初期に生まれた算法が、最新の計算機アーキテクチャにそぐわないものになりつつあるとしても、われわれはすぐに他の方法に乗り換えることができません。新手法を単純に実装するだけでも多大な時間と労力を要するからです。GPAWなどはPythonを取り入れて開発時間の短縮に成功しているという話もありました。しかし、なかにはPythonに馴染んで使いこなせるようになるまでの時間を惜しんでしまうという人もいないかと思いません。今後、計算機がより複雑な進化を遂げるに伴って、プログラム開発のコストも大幅に増大するであろうことが、エクサに向けた取り組みの中でもしばしば議論されています。今回のサテライトワークショップは、この点について改めて考えさせられる機会となりましたが、結局何をすべきかの答えは見つかっていないというのが正直なところでした。(岩田潤一：東京大学大学院工学系研究科)

CMSI Nagoya Satellite Workshop 2013

Large-Scale Molecular Simulation for Understanding Molecular Mechanism

内外の研究者が 最新の開発動向を紹介

2013年10月17～19日に名古屋で催されたCMSI国際シンポジウムのサテライトワークショップでは、超並列コンピュータを用いた分子動力学(MD)やQM/MM計算によるタンパク質、脂質膜などの生体分子についての最新の研究成果を、国内外の新進気鋭の若手研究者に講演していただきました。また、これらの大規模系の計算を実行するために必要不可欠となるソフトウェアに関しては、国内外で開発にあたっている研究者が、最新の開発動向を解説されました。そのときの様子を紹介します。

ワークショップ会場となった名古屋都市センターは、金山駅に隣接する高層ビルの14階に位置し、伊勢湾を一望できるなかなか良い場所でした。また、中部国際空港(セントレア)から名鉄にて乗り換えなくアクセス可能であり、JR名古屋駅からも近いので、海外からの招待者のみならず、国内から参加された研

究者にもそれほど不便をかけずにすんだのではないのでしょうか。

今回のサテライトワークショップには、海外から3名を招待しました。QM/MM計算を用いて生体分子の化学反応について精力的に研究を進めているQiang Cui氏(University of Wisconsin, USA)、pHを考慮に入れた独自の粗視化モデルを用いてタンパク質分子の混合状態についての大規模シミュレーションを実施しているMikael Lund氏(Lund University, Sweden)、著名な並列計算用の汎用分子動力学計算ソフトLAMMPSの開発メンバーであるTzu Ray Shan氏(Sandia National Laboratories, USA)です(密度汎関数理論で有名なWeitao Yang氏は東大での国際シンポのみ参加)。また、国内からは、タンパク質を中心とした生体関連分子について非常に精力的に研究を展開されている池口満徳氏(横浜市大)、松林伸幸氏(京大)、高橋英明氏(東北大)、山下雄史氏(東大)、粗視化モデルの開発を進めておられる篠田渉氏(名大)、界面系について幅広く研



会場の様子。発表者はLund氏

究されている石山達也氏(東北大)、藤本和士氏(立命館大)に講演していただきました。いずれも超並列マシンによる自由度の広がりを生かし、研究の地平を広げつつある先鋭的な研究ばかりであり、ディスカッションが盛んに行われていました。

MD計算の高速・超並列化の現状

特に本ワークショップの主題の1つであるMD計算の高速・超並列化に関して、理研で開発されているGENESISについてはJaewoon Jung氏、米国Sandia国立研究所にて開発されたLAMMPSについてはShan氏、そして名大岡崎研究室を中心に開発されたMODYLASについては安藤嘉倫氏が講演されました。超並列対応の最新MD計算ソフトについて、性能等の現状を知るうえで大変良い機会となりました。さらに、専用計算機によるMD計算の高速化に関しては、泰岡頭治氏から開発の歴史も含めた興味深い講演を伺うことができました。

会期中、夜は両日とも金山駅近くにて、定番ではありますが手羽先をはじめとした名古屋メシを堪能していただき、親睦を深める楽しいひと時を過ごしました。

(吉井範行:名古屋大学大学院工学研究科)



ミーティングを行った名古屋都市センターの会議室にて(10月18日撮影)。前列左より、小嶋、池口、安藤、Jung、山田、石山、後列左より吉井、林、松林、Lund、Shan、Cui、篠田、岡本、高橋(敬称略)

CMSI Kobe Satellite Workshop 2013

Recent Progress in Tensor Network Algorithms

計算手法の新しい枠組み 「テンソルネットワーク」

計算物質科学のシミュレーションでは、第一原理密度汎関数法、分子動力学法など、さまざまな計算手法が使われています。これらは、電子状態に対するシュレーディンガー方程式や分子の運動を記述するニュートン方程式などを高速かつ正確に解くために開発、改良されてきたアルゴリズムです。一方で、特定の問題や基礎方程式ではなく、広く一般的な問題に応用できるアルゴリズムも知られています。例えば、モンテカルロ法は単に「計算手法」と呼ぶよりむしろ、複雑な問題をコンピュータ上で現実的な時間で解くための別の表現を与える「枠組み」と呼ぶほうがふさわしいかもしれません。



京コンピュータを見学中

「テンソルネットワーク」は、そのような「枠組み」のひとつとして近年注目を集めています。量子力学にしたがう系の状態を厳密に表現するには、系のサイズ(体積)に対して指数関数的に多くの変数が必要となり、最高性能のスパコンをもってしても、メモリ容量や計算能力はまったく不十分です。しかしながら実際の系では、この膨大な数の変数すべてが一樣に重要なわけではありません。テンソルネットワークは、系の状態を次数の低いテンソル(行列の一般化)の積として書き表すことで、系

の性質に寄与する部分だけを小さなコストで精度良く表現する手法です。この「膨大な自由度の中から重要なものを見だし、系の本質を記述する」という考え方は、すべての科学に共通するものです。

分野間をつなぐ交流の場Kobe

CMSI国際ワークショップ「Recent Progress in Tensor Network」は、CMSIシンポジウムのサテライトワークショップの1つとして、2013年10月16日～18日の3日間、神戸の理化学研究所計算科学研究機構(AICS)で開催されました。スーパーコンピュータ京が設置されているAICSには、CMSI神戸拠点をはじめ、戦略5分野の拠点が結集しており、今回のような、分野の枠を超えたワークショップの開催に最もふさわしい場所です。

ワークショップでは、多体量子系の基底状態におけるエンタングルメント(量子的な相関)、行列積状態、密度行列繰り込み群、PEPS (Projected Entangled Pair State)、MERA (Multi-scale Entanglement Renormalization)など、テンソルネットワークの基礎理論から、量子化学計算、強相関量子系、相転移と臨界現象、光誘起相転移、ブラックホールとテンソルネットワーク繰り込み群との関連、機械学習、データマイニング、ウェーブレットにいたるまで、幅広い分野への応用が紹介されました。さらに、シミュレーションにおける演算量の最適化、テンソルネットワークの精度の詳細な解析、京における大規模並列化、テンソルネットワークライブラリの開発など、計算機科学的な観点からの興味深い講演も数多くありました。

ワークショップには、当初予定していた人数



講演中のV. Kazeev氏(中央)とG. Evenbly氏(右)

を大幅に超える40名以上の参加がありました。海外からも招待講演者を含め10名の参加があり、講演会場となったAICS 1階のセミナールームは連日熱気につつまれました。それぞれの講演には質疑応答の時間が十分に用意されていましたが、その後の休憩の間も活発な議論が続きました。また、セッションの合間には、京コンピュータの見学(写真)や、神戸花鳥園でのランチ、明石海峡大橋の夜景を眺めながらの懇親会などを通じて参加者同士、交流を深めました。

テンソルネットワークは、今世紀に入って急速に発展してきた新しいアルゴリズムです。今回のワークショップでも、講演者、参加者ともに若手の割合が高く、招待講演者の大部分は、20代あるいは30代の若手研究者でした。一方で、ポスターセッションでは、中堅の研究者が若手を相手に話題を提供し議論を深めていく光景も見られるなど、世代や分野の壁を超えて、この新しい手法をさらに発展させていこうという機運に満ちあふれたワークショップとなりました。講演でも、「ファインマンの経路積分に次ぐ量子力学の新しい枠組み」(G. Chan氏)、あるいは「計算科学のための新しい言語、構成要素」(R. Orus氏)といった言葉が強く印象に残りました。

(藤堂眞治：東京大学大学院理学系研究科/物性研究所)

生体複合システムの 協同現象から学んだこと

鎌田知佐 かまだ ちさ

理化学研究所 HPCI計算生命科学推進プログラム 企画調整グループチーム員



戦略分野1と戦略分野2の 連携シンポジウム

2013年12月17日(火)、名古屋大学 IB電子情報館大講義室にて、「HPCI戦略プログラム 分野1×分野2 シンポジウム in名大『生体分子複合システムを計算する-相互作用は何をもたらすのか-』」と題したシンポジウムを開催しました。

HPCI戦略プログラム戦略分野1では、民間企業を含む研究者や一般の方に戦略分野1の研究内容や活動を知ってもらうため、シンポジウムやセミナーを開催しています。この活動は、全国を北海道・東北、関東、中部、関西、中国、九州・沖縄の6ブロックに分け、各ブロックで行っており、今回のシンポジウムは、戦略分野1のメンバーである名古屋大学大学院の太田元規教授(情報学研究科)に世話人をお願いしました。名古屋大学には、戦略分野2の生体分子を対象とする研究者が多いことから、太田教授より「戦略分野2といっしょにシンポジウムを開催するほうがいいのではないか」との提案がありました。これを受けて、戦略分野2の名古屋大学大学院の笹井理生教授(工学研究科)にも世話人となっていただき、戦略分野2とのコラボレーションのシンポジウムとなりました。

生命現象の解明とハイパフォーマンス・コンピューティングの役割

今回のシンポジウムのキーワードは複合システム、相互作用、そしてハイパフォーマンス・コンピューティングです。太田教授は、

シンポジウムのオープニングで、「分子間の相互作用が生体複合システムにおける協同現象を理解するための最初の鍵ではないか」とその主旨を述べられ、続けて「ハイパフォーマンス・コンピューティングにより、データ量が増え、計算量が増えることが生命現象の質的な理解にどうつながっていくか、それを理解することが今後の課題である」と説明されました。各講演者はこのシンポジウムの主旨に沿って、それぞれの研究テーマを紹介されました。*1

講演を通して新鮮な感動を覚えました。というには、だれもが知っている中学生や高校生のときに生物の授業で習う、ヘモグロビンや、ヌクレオソームなどの微小な動き(振る舞いというべきでしょうか)に真理を見いだそうとされていること、また、1つの研究対象に対して、多くの研究者が多岐にわたるアプローチをされていたからです。ヘモグロビンの例でいうと、ヘモグロビンは鉄(ヘム)と結びつくことで酸素を血液中に運ぶものとして知られています。ところが、その仕組みを微細にみると、ヘモグロビンには、最初のサブユニット(分子の単位)のヘムに酸素が結合すると、2つ目、3つ目、4つ目となるにしたがい徐々に酸素に結合しやすくなる仕組みがはたっています。逆に、酸素を放出する場合も、1つ目、2つ目と順に離れていく「アロステリック機構」という協同現象があらわれるのです。

これらの微視的な仕組みを理解するためには非常に複雑な計算が必要で、ハイパ

フォーマンス・コンピューティングが果たす役割の大きいことをあらためて実感しました。

コンピュータシミュレーションと 実験とのコラボレーション

もう1つ印象的だったのは、太田先生の講演の質疑応答での、共同研究者の前田雄一郎特任教授(名古屋大学構造生物学研究センター)の説明でした。お二人が共同研究を始めたきっかけは、研究を進めるうえで構造動態を調べるために実験計測とコンピュータによる計算結果を突き合わせて、キャッチボールをする必要に迫られたことでした。コンピュータシミュレーションと実験とのコラボレーションという言葉は、プロジェクト内でも頻繁に交わされている言葉ですが、討論の場でその過程を聞くと、より明確にイメージすることができます。

講演後の質疑応答も活発に行われました。そして、クロージングで笹井教授は、「生体分子を対象としているが、戦略分野1と戦略分野2ではバックグラウンドが異なるが、この多様なスタイルを味わうことに意義がある」と締めくくられました。生体分子の協同現象と同じように、研究においても分野を超えた活動を今後とも続けていきたいという思いを強くしました。

*1：シンポジウムにおける講演の要旨は、戦略分野1のホームページに掲載しています。

<http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/index.html>

HPCI戦略プログラム分野1×分野2 シンポジウムin 名大

 「生体分子複合システムを計算する —相互作用は何をもたらすのか—」
 の講演

「CARMILが誘起する
アクチンキャッピングタンパク質の
動的構造変化」

太田元規

名古屋大学大学院情報学研究科教授<分野1>



「生体膜の形成する形態の多様性」

野口博司

東京大学物性研究所准教授<分野2>



「巨大生体超分子の
構造転移制御メカニズム」

北尾彰朗

東京大学分子細胞生物学研究所准教授<分野2>



「膜タンパク質の構造予測と
分子シミュレーション」

杉田有治

理化学研究所杉田理論分子科学研究室
主任研究員<分野1>



「超分子モデリング
パイプラインの構築」

白井 剛

長浜バイオ大学コンピュータ
バイオサイエンス学科教授



「ヒストンバリエントと
ヌクレオソーム構造の安定性」

河野秀俊

日本原子力研究開発機構分子シミュレーション
研究グループグループリーダー <分野1>



「生命科学者に開かれた
SCLS計算機システム」

鎌田知佐

理化学研究所HPCI計算生命推進
プログラムチーム員<分野1>



「分子機械と天然変性タンパク質に
通底する静電アロステリック機構」

高野光則

早稲田大学大学院先進理工学研究科教授



「タンパク質における緩和と反応の
統計的アプローチ」

長岡正隆

名古屋大学大学院情報学研究科教授<分野2>



「アクチンモーターの動作機構」

笹井理生

名古屋大学大学院工学研究科教授<分野2>



HPCI戦略プログラム分野1「予測する生命科学・医療および創薬基盤」SCLSの合言葉 —オチがないと!—

SCLSという名称はSupercomputational Life Scienceに由来しています。SCLSでは、複雑多岐な生命現象の振る舞いをシミュレートして、その動作原理を明らかにし医療、創薬を予測する、制御すること最終目標としています。

「"おち"のない落語はおもしろいやろ、サイエンスもおんなじや、ええ結果だけではあかん、おもしろい"おち"をつくらんと」と柳田敏雄統括責任者から、所属員全員が熱い激励を受け、日々奮闘しています。

異分野交流による ブレークスルーをめざす

入江敦子 いりえ あつこ

高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 研究支援員



異分野交流研究会

第3回の異分野交流研究会は2013年11月13～14日、岡崎市の自然科学研究機構 分子科学研究所(以下、分子研)にて開催されました。16組の発表があり、40人の参加者が活発に議論を繰り広げました。テーマは「量子多体系のダイナミクス計算」。この背景としては、物質科学の研究で近年、フェムト秒(10^{-15} 秒)やアト秒(10^{-18} 秒)単位で化学反応の過程を観測できるようになったことがあげられます。このために、時間領域で電子やイオンの量子ダイナミクスを計算することが求められています。一方、原子核物理学では、1970年代から時間依存平均場理論を用いた原子核衝突のシミュレーションが発展してきました。交流研究会では、分子科学・物質科学の分野からは光電子ダイナミクス計算や古典・量子混合ダイナミクス計算、原子核分野からは光応答や衝突現象に対する量子ダイナミクス計算を中心に発表がありました。

前回までの異分野交流研究会では大規模計算にもとづく発表が多く、数理学や計算機科学からの発表もありました。世話人であ

連携が進む戦略分野2と戦略分野5

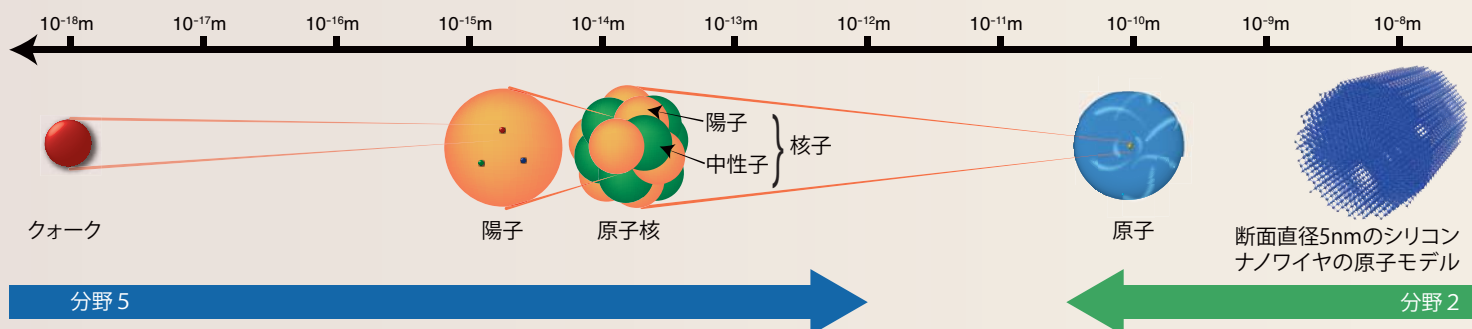
HPCI戦略プログラムが始まって早くも3年が経とうとしています。この間、戦略分野2と戦略分野5「物質と宇宙の起源と構造」の研究者が共通の課題について議論する「異分野交流研究会」が毎年開催されてきました。さらに、「研究支援」でも協力体制が整いつつあります。戦略分野2の研究対象は物性科学・分子科学・材料科学、戦略分野5は素粒子・原子核・宇宙。一見すると、対象分野もそのスケールも異なっているにもかかわらず、なぜこの2戦略分野間の連携が進んでいるのでしょうか。

戦略分野2と戦略分野5では研究対象となる系を構成する物質要素こそ異なりますが、さまざまな性質や変化を記述するための物理法則がとてよく似ています。そのため理論や計算手法に多くの共通する課題があります。2つの戦略分野が連携することにより、共通の課題を議論しあって解決をめざしていくことができます。

歴史を振り返ると、これまでも物質科学の研究者と素粒子・原子核科学の研究者との

交流により、多くのブレークスルーがおこっています。なかでも2008年にノーベル物理学賞を受賞した南部陽一郎博士が、物性現象である超伝導を説明する「BCS理論」をきっかけに、受賞理由となった「自発的対称性の破れ」のアイデアを思いついたのは有名です。

戦略分野2と戦略分野5に共通する具体的な課題には次のようなものがあります。まず、ミクロな世界に共通する量子性です。戦略分野2では物質中の電子とイオン、戦略分野5では原子核を構成する陽子や中性子といった核子、その核子を構成するクォークとグルーオンが対象となります。量子多体系の厳密計算手法や近似解法の開発、モデルの構築など、さまざまな試みの中に実に多くの共通する課題があります。また、宇宙で用いられている重力シミュレーションと物質科学の分子動力学シミュレーションには共通性があり、さらに素粒子の格子QCD計算や原子核の衝突現象にも分子動力学計算が使われています。このような課題の共通性は戦略分野2と戦略分野5に限られたものではありませんが、物理学を基礎にもち、互いを理解するうえで壁が低い2つの戦略分野でまずは連携を深めていくことが大切です。



筑波大学の矢花一浩教授は、「今回は必ずしも大規模計算にこだわらず、これから大規模計算が必要とされる種を探すことを意識しました。このため、計算とともに物理の話にも重きを置きました」と述べています。同じく世話人の分子研の信定克幸准教授は、「今後の大規模計算をするためのきっかけをつかんでいただければと思います」と研究会冒頭で挨拶しました。

研究支援

今回の異分野交流研究会では、研究支援に関する発表もありました。分子研の石村和也研究員からは、プログラミングやチューニングなどの技術および情報共有を目的としたCMSI若手技術交流会やCMSIアプリ高度化合宿“TOKKUN!”の報告と案内がありました。

戦略分野5では、素粒子・原子核・宇宙分野の研究者、計算機科学の研究者らからなるユーザー支援チーム*1が組織されており、全国の素核宇分野の研究者から依頼があると、依頼内容に詳しいメンバーが解決法の提示やアドバイスなどを行っています。これまで、効率の良い並列計算のアルゴリズム、可視化ソフトの紹介、微分方程式の解法ルーチン、特殊な対角化ルーチンの開発などを扱ってきました。今後は、戦略分野2の交流会などに戦略分野5の研究者が参加し、戦略分野5のユーザー支援で戦略分野2の研究者からの支援依頼を受けるなどにより、研究支援の面でも交



流を深めていきます。

戦略分野2と戦略分野5の連携によって、かつて南部博士がもたらしたようなブレークスルーが再び両分野にもたらされるかもしれません。今後の活動が期待されます。

(協力：矢花一浩・筑波大学)

<用語解説>

*1：ユーザー支援

戦略分野5が行っているユーザー支援について、詳しくはこちらのwebページをご覧ください。

<http://www.jicfus.jp/field5/jp/promotion/user/>

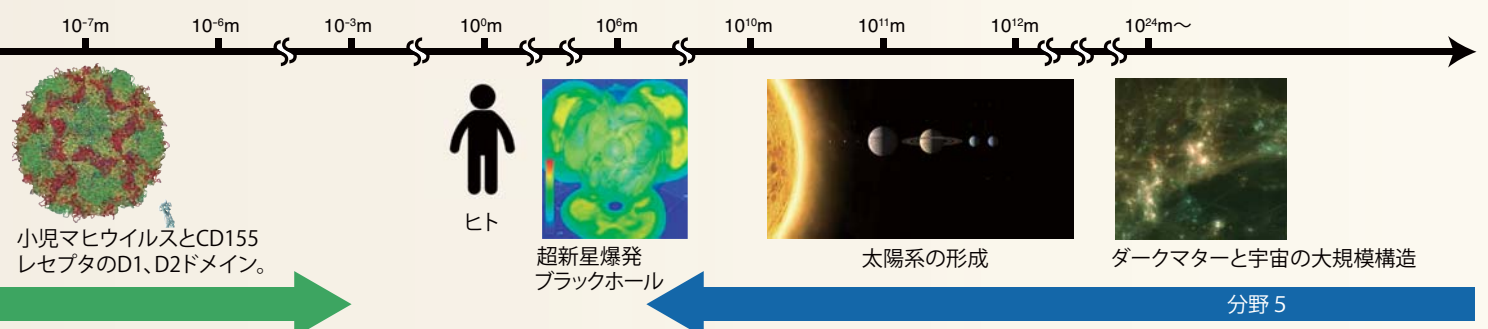
HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」

宇宙の歴史は、約138億年前にビッグバンとよばれる超高温・超高密度の状態から始まったと考えられています。その後、温度が下がるにつれて、クォークから陽子や中性子といったバリオンがつくられました。ついで、陽子と中性子が結合して軽い原子核が生成されていきました。

一方、宇宙には、正体不明のダークマター(暗黒物質)がバリオンよりもはるかに大量に存在するとされています。宇宙は、始めにダークマターが重力により集まって構造をつくり、それに引き寄せられて通常のバリオン物質が銀河

や星を形成し、現在の姿になったと考えられています。銀河では活発に星が誕生する一方で、重力崩壊・超新星爆発などで星が死滅しています。この過程で、より重い原子核が生成されます。

このように、物質の生成と宇宙の構造形成とは密接な関係があります。HPCI戦略プログラム分野5「物質と宇宙の起源と構造」は、計算科学に基づいて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统一的に理解することをめざしています。



4

卒業生を訪ねて

加嶋寛子 かしまひろこ

株式会社神戸製鋼所
アルミ・銅事業部門 技術部 解析技術研究室

京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科
で機械システム工学を専攻し、フェーズフールド法による対流内での凝固組織形成シミュレーションに関する研究で修士号を取得後、神戸製鋼所に入社



ものづくりの最前線に立つ 社会人2年生



澁田 靖 しぶた やすし

東京大学大学院工学系研究科
マテリアル工学専攻 講師

強度だけでなく 感覚までも設計する

澁田 現在、どのようなお仕事をされているのですか。

加嶋 アルミ・銅事業部門の解析技術研究室に所属し、材料メーカーの観点からアルミ材料を使用した構造物が強度、コストともにより効率的となる設計をしたり、成形方法の開発に取り組みだりしています。最近ではアルミ缶(ボトル缶)の強度設計をおこなっています。

澁田 アルミ缶の設計の際、いちばん求められる点はどのあたりですか。

加嶋 やはり軽量化の問題です。例えば1.0 μ mの単位で薄肉にするだけでアルミ缶は大分軽くなります。一方、上から200kg程度の荷重に耐える強度は保持しなくてはなりません。この両面を維持しつつ、コスト的にも有利となる構造の設計をめざしています。

澁田 軽量化以外で重視している点はありますか。

加嶋 例えば、人工衛星パネルの展開方法で有名な「ミウラ折り」を胴部分に採用したダイヤカット缶というのがあります。これは軸方向の圧力に強い構造で、缶を開けた際に圧力が解放されて「ミウラ折り」の凹凸が強調されます。このときに、ポンと大きな音が出ることで商品のイメージを演出しています。このように、強度だけでなく感覚的なものまでもが構造設計の中から生み出されるところが、とても面白いと感じています。

澁田 設計には解析的手法(シミュレーシ

ン)を用いられているのですか。

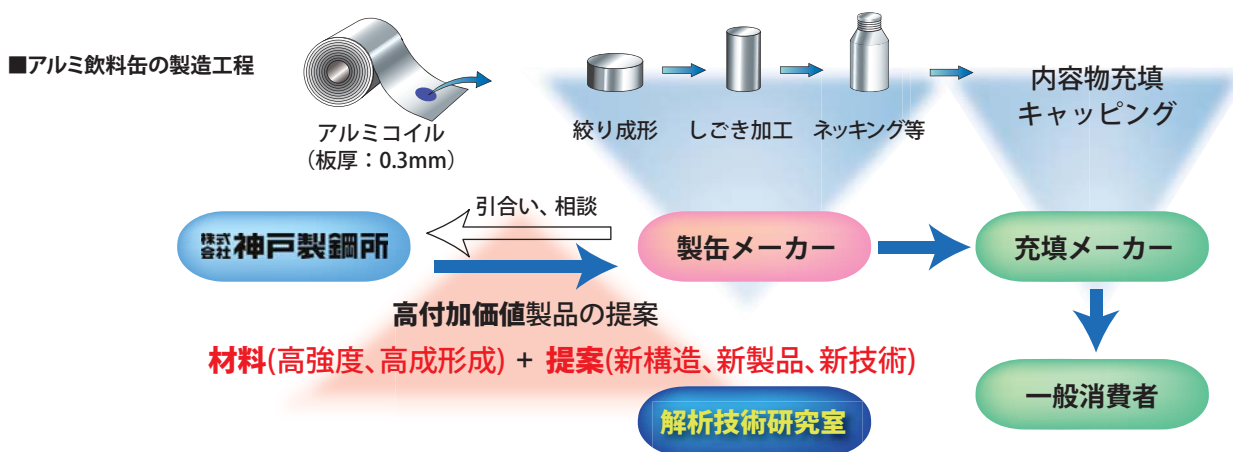
加嶋 実験と解析の両方です。解析としては有限要素法を用いた構造解析やトポロジーの最適化計算などをおこなっています。また、実際に設計した構造物の強度試験を行い、軸強度が求められる基準を満たしているかなどを試験しています。

澁田 シミュレーションを導入するメリットは何かですか。

加嶋 現在のアルミ缶の有限要素法解析はだいたい5~6時間程度ででき、現実的な時間の範囲内で構造物の強度予測ができます。

澁田 確かに、大学の研究だと数週間~数カ月のオーダーで大規模計算をやりましたというのを売りにする場合がありますが、企業で限られた納期内で「ものづくり」をするとなると、現実的な時間で所定の結果を得るという視点が重要になっていますね。逆に時間がかかっても計算機支援が求められている問題はありますか。

加嶋 例えば、圧延の過程において結晶異方性により強度にばらつきができ、缶に内圧がかかった際に一部分だけ潰れるという問題があります。これを解決するには材料組織の高精度制御が求められますが、冶金学的経験に基づいた実験には多くの労力がか



かります。現在、私は強度設計部分を担当していますが、材料組織の最適制御から構造設計までを一貫して計算機上でシームレスに解析し、所定の目的にあった材料組織を積極的に制御できるようになれば、材料メーカーとしての強みになるかなと思います。

材料科学はものづくりの基礎だと実感してメーカーへ

澁田 材料組織制御という言葉が出ましたが、学生時代は関連するテーマの研究に携わっていたそうですね。

加嶋 京都工芸繊維大学の高木知弘先生の研究室で対流内での凝固組織形成シミュレーションに関する研究をしていました。

澁田 もう少し詳しく内容を聞かせてください。

加嶋 鋳造時に発生する対流を考慮した凝固組織成長や、デンドライト(複数に枝分かれした樹枝状結晶)のフラグメンテーション(折れ)に対して対流が及ぼす力学的影響をフェーズフィールド法で解析していました。具体的には、流体の基礎方程式であるナビエーストックス方程式と、フェーズフィールド方程式を連成した数値解析をおこなっていました。

澁田 フェーズフィールド法は複雑な界面形状変化を秩序変数分布の時間発展で表現する解析手法として自由境界問題に広く導入されている方法ですよね。コードは自前で開発されていたのですか。

加嶋 研究室で開発されてきたコードを、自分のモデルに合わせて改良しながら使用し

てきましたので、プログラミングのスキルもそこで学びました。今はパッケージを使うことが多いですが、学生時代に学んだことは今の仕事に大いに役立っています。

澁田 学生時代に成果発表の機会はありましたか。

加嶋 はい。海外の国際会議での発表が2回と、国内での発表は数多くありました。もともと、私は人前で発表することが苦手だったので、何度も発表を経験したことで苦手意識を大分克服でき、とても良い機会になりました。また、最先端の研究をされている先生方とお話する機会が得られたことは良い刺激になりました。

澁田 学生時代の研究を通じて最も印象深かったことは何ですか。

加嶋 実際に鋳造時の凝固組織形成シミュレーションをやってみて、材料科学は「ものづくり」の最も基礎的な部分で周りに与える影響が幅広いと思いました。それが材料メーカーへの就職を決めるきっかけとなりました。

「ものを分解する」のが好きな少女でした

澁田 大学で機械系の学科を選ばれた理由は何か。

加嶋 小さいころからものをつくるのが好きで「ものづくり」に興味があったことです。

澁田 どんなものを作っていましたか。

加嶋 作るというよりも構造がどうなっているのかとか考えながら、ものをばらすことのほう

が面白かったですね。例えば、目覚まし時計を分解したりしました。それで元に戻せなくなって(笑)。

澁田 典型的な機械系ですね(笑)。ご家族の影響が大きかったですか?

加嶋 やはり父親の影響ですかね。父もいろいろ分解するのが好きで、それを横で見ているのが楽しくて。

澁田 実際、大学の機械系の学科に入ってから興味はどうですか。

加嶋 大学で講義を受けると、流体力学にも興味ができました。目に見えない流れという現象がナビエーストックス方程式という基礎方程式を介して、CFD(数値流体計算)により可視化できることがとても面白く感じました。

澁田 なるほど。確かにその視点は面白いですね。

加嶋 学生時代に流体力学と材料力学両方の分野から材料組織に関する研究に携わることができたのは、大きな経験になりました。

澁田 大学、企業と活躍の場が広がるにつれ、興味が様々な知識や経験と結びつきながら広がるのを実感できているのは大変心強いですね。今後の目標などを聞かせてください。

加嶋 海外での展示会や国際会議に積極的に参加し、グローバルな視点から設計や開発に取り組んでいきたいと思っています。

澁田 今後も幅広いご活躍を期待しています。(2014年1月20日 神戸製鋼所・神戸総合技術研究所にて)

(撮影:高木知弘・京都工芸繊維大学)



計算科学研究センター棟



Fujitsu PRIMERGY RX300S7 342nodes



自然科学研究機構 分子科学研究所

奥村久士 おくむら ひさし

自然科学研究機構 分子科学研究所 計算科学研究センター 准教授

分子科学拠点は高塚和夫拠点長のもと、分子科学分野における大規模計算の研究を推進するほか、実験研究者や産業界との連携、人材育成などを含めた分野振興の活動を行っています。分子科学研究所に設置されている分子科学拠点と、スーパーコンピュータの運用と維持管理を行っている計算研究センターを、奥村久士さんが紹介します。

若手の育成と 研究者間の交流に力を入れる

「計算分子科学研究拠点」(Theoretical and Computational Chemistry Initiative: 略称 TCCI)は自然科学研究機構分子科学研究所(以下「分子研」)内に設置されています。分子研は化学および化学に近い物理、材料科学分野の研究機関として世界的に有名な研究所です。2013年4月に発行された朝日新聞出版の「2014年度大学ランキング」には、トムソン・ロイター社による2007-2011年における論文引用度に関するランキングが掲載されていますが、分子研は「化学」「材料科学」分野で国内1位、「総合」でも2位にランクされています。

自然科学研究機構計算科学研究センターの前身である分子科学研究所電子計算機センターは1977年5月に分子研の研究施設として設立され、1979年1月からHitachi M-180により共同利用サービスを開始しました。現在ではFujitsu PRIMERGY、Fujitsu PRIMEHPC FX10、SGI UV2000からなる合計326.2TFlopsのシステムを有しており、計算性能は35年間で7桁向上しました。この計算資源を全国の研

究者に共同利用を通じて利用いただいています。利用者数は過去5年間増加傾向にあり、2012年度のグループ数は213、利用者数は807名に上っています。また、計算資源の20%をCMSI利用枠としてCMSIに参画している研究者に提供しています。これらのハードウェアだけでなく、分子シミュレーションや量子化学計算のソフトウェアも共同利用になっており、またCMSIの研究者にも提供しています。当センターの高速かつ大規模な計算環境は分子科学、物性科学、生物科学の研究に活用されており、分子理論・物性理論・生体シミュレーションに基づく多彩な研究が行われています。

計算科学研究センターでは単に計算環境を提供するだけでなく、若手研究者の育成、研究者間の情報交換や交流にも力を入れています。毎年冬には、分子研とTCCIとの共催で「分子シミュレーションスクール」と「量子化学ウインタースクール」を開催し、分子シミュレーション分野と量子化学分野それぞれにおいて先導的な活躍をされている先生方に講義していただいています。これらのスクールは、大学院生や若手研究者の育成の場として好評を博しています。また、毎年1月には「計算科学研究



水谷文保

みずたに ふみやす

愛知教育大学で物理を専攻しましたが、縁あって分子研と同じキャンパス内にある生理学研究所を経由して1995年より着任しました。コンピュータの魅力に取りつかれて30年目です。

センターワークショップ」を開催しています。分子科学とその周辺、物性物理学や材料科学など広い分野から精力的に取り組んでおられる研究者を講師に招き、理論および計算科学の視点から今後取り組むべき問題と必要とされる方法論などを議論しています。

「システムが変わっても、利用者が使いやすいように工夫しています」

計算科学研究センターは、斉藤真司センター長、江原正博教授をはじめ、准教授(私)1名、助教5名、技術職員6名、事務補佐員2名、合計16名のスタッフで運用しています。

TCCIおよび計算科学研究センターの多様な活動を支えてくださっているのが技術職員の皆さんです。今回は、計算科学研究センターの運営を長年支えてきた水谷文保さんに、当センターの紹介と日ごろ感じている仕事のやりがいを語ってもらいました。

「分子研計算科学研究センターは、メインのスパコンがHitachi、NEC、Fujitsu製と移り変わっただけでなく、早くから並列コンピューティングを意識してIBM、SGI製のサブシステムも導入してきました。このため計算機の博物館と揶揄されたこともあります。過去にとらわれずその時代の良いものを積極的に導入するという風土があったからだだと思います。その代償として利用者に不便を強いるわけにはいかないので、そこは運用側が苦労することになります。例えば、利用頻度が高い分子軌道法アプリであるGaussianには、インプットファイルを指定するだけでジョブ投入を行うツールを用意して、システムの差異を意識させないように工夫しています。このように、日常業務の中で技術的な開発要素を探して挑戦することにやりがいを感じています。

CMSI利用者の便宜を図るため、「京」用開発サーバとして商用1号機(Fujitsu PRIMEHPC FX10)を2012年度スパコン更新時に導入しま

した。通常の運用だけでなく、システム更新でも分子科学コミュニティの皆様のご意見を反映していますので、今後も引き続き積極的なご意見をお寄せください。

計算科学研究センターのさまざまな業務を行ううえで、技術職員の皆さんの力は欠かせません。特に水谷さんは班長として技術職員のまとめ役を務めるだけでなく、全ての業務に精通されており、当センターにとってなくてはならない存在です。今後も、教員と技術職員が密接に連携を取りながら、大規模高速計算環境を提供するとともに、理論・計算科学分野の人材育成や研究交流を通じて計算分子科学の発展の一翼を担うことができると考えています。



センターおよび研究室のスタッフ

後列左より、大野、澤(技術)、岩橋(技術)、森、松尾(技術)、田代、伊藤(助教)、石田(助教)、水谷(技術)。中列左より、戸谷(事務)、石原(事務)、川口、近藤、井本、長屋(技術)。前列左より、内藤(技術)、江原(教授)、福田(助教)、斉藤(センター長)、奥村(准教授)。背景は分子研実験棟



分子科学拠点長からのメッセージ

高塚和夫 たかつか かずお

私が最近気になっているのは、研究の「夢」ということです。夢は希求され、実現に向けて一步一步攻め落とされていくものです。その過程から、また新しい夢や挑戦が生まれてきます。「果てしない夢」とは、遠い夢というよりも、一歩進めばまた次の夢が現れるという、自然現象の階層構造にも似ています。私も最近、若いころから解きたくて仕方がなかった問題が大幅に解けたのですが、その地平の先にはまた

乗り越えたくなる次の山がありました。

「京」も、かつては「夢」の計算でした。完成した今、若い研究者や学生の夢が急速にしぼんで、妙に現実的になっているとしたら、残念に思います。計算できて可視化されたら、それで終わり？ 数値が出てくれば目的達成？ そんなはずはありませんよね？ 本当はもっとデカイ夢があるでしょう？

CMSIカレンダー

詳細は CMSI ホームページ
<http://cms-initiative.jp> をご覧ください。

●配信講義：計算科学技術特論B

日程：2014年4月10日(木)～7月24日(木)
 ※この期間の毎週木曜日。
 ※最大で20拠点に配信する予定。
 ※CMSI Webにて最新情報をご確認ください。

●CMSI神戸ハンズオン：FMOチュートリアル

日程：2014年4月(日程調整中)
 場所：CMSI神戸拠点
 ※これ以降5月～来年2月まで毎月1回程度開催予定。
 ※CMSI Webにて最新情報をご確認ください。

●CMSI柏ハンズオン

日程：4月～来年2月まで毎月1回程度開催予定
 場所：東京大学物性研究所
 ※CMSI Webにて最新情報をご確認ください。

●物性研国際ワークショップ「強相関係物理の新展開」

日程：6月16日(月)～7月4日(金)
 ※シンポジウム：6月25日(水)～27日(金)
 場所：東京大学物性研究所

●第1部会 CMSI夏の学校

日程：8月を予定(日程調整中)
 場所：神戸

●第25回CMD[®]ワークショップ

日程：9月1日(月)～5日(金)
 場所：国際高等研究所

●TCCI ウィンターカレッジ(分子シミュレーション)

日程：10月14日(火)～17日(金)
 場所：分子研岡崎コンファレンスセンター

●TCCI 第5回全体研究会(運営委員会)

日程：10月17日(金)・18日(土)
 場所：分子研岡崎コンファレンスセンター

●CMRIシンポジウム

日程：11月(日程調整中)
 場所：東北大学金属材料研究所

●第5回 CMSI 研究会

日程：12月8日(月)～10日(水)
 場所：東北大学金属材料研究所

●TCCI ウィンターカレッジ(量子化学)

日程：12月15日(月)・16日(火)
 場所：分子研岡崎コンファレンスセンター

●ACCMS-VO9国際会議

日程：12月20日(土)～22日(月)(予定)
 場所：沖縄

●第26回CMD[®]ワークショップ

日程：2005年2月23日(月)～27日(金)
 場所：大阪大学基礎工学研究棟

第4回 CMSIポスター賞

2013年12月10～13日に開催された第4回CMSI研究会(物性研スパコン共同利用との合同)における研究発表の中から、以下の方がポスター賞各賞の受賞者に選ばれました。

CMSI ポスター賞

渡辺宙志 わたなべ ひろし
東京大学物性研究所

研究課題：気泡の可視化
～「無い」ものを可視化する～

計算結果を適切に可視化することは、物理現象の直感的な理解を助けたり、新たな現象に気づききっかけになったりするなど重要であるが、大規模計算ではデータも大きくなるため扱いが難しい。そこで、重要な情報を失うことなく圧縮できるようにデータフォーマットを工夫し、データを軽くすることで解析、可視化を容易にした。



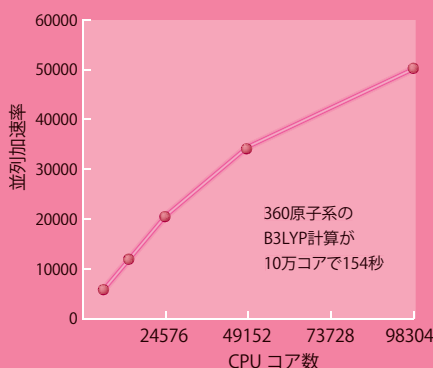
CMSI若手奨励賞 (口頭発表)

石村和也 いしむら かずや

自然科学研究機構
分子科学研究所

研究課題：ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索—大規模並列計算プログラムの効率的な開発—

大規模並列量子化学計算プログラムを開発し、京コンピュータ10万CPUコアで実証計算を行った。高い並列機能と実行性能の達成により、ナノサイズ分子の計算がルーチンワークで行えるようになった。また、分野2での開発の効率化を図るため、共通して使うことができる計算のライブラリ化とオープンソースでの公開準備を進めている。

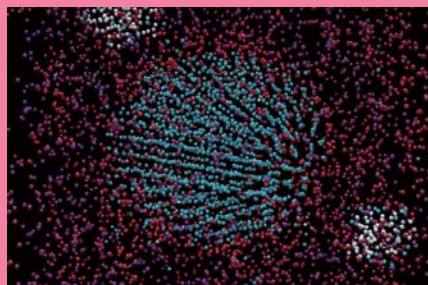


CMSI ビジュアル賞 (口頭発表)

矢ヶ崎琢磨 やがさき たくま
岡山大学

研究課題：メタンハイドレートの分解過程の分子動力学計算

水中のメタンハイドレートが分解すると、周囲にメタンが放出され、泡が生成する。京コンピュータを用いた解析によって、このメタンの泡がハイドレート分解を促進することが明らかになった。この機構は、ハイドレートによるエネルギー保存などの実用面で役立つ可能性がある。



Torrent No.9 March 2014

2 | 特集1：国際交流
CMSI国際シンポジウム
北浦和夫

4 | 外国人研究者に聞く

5 | Tokyo Satellite Workshop
岩田潤一

6 | Nagoya Satellite Workshop
吉井範行

7 | Kobe Satellite Workshop
藤堂真治

8 | 特集2：戦略分野間の連携
分野1×分野2 鎌田知佐
分野2×分野5 入江敦子

12 | 卒業生を訪ねて 第4回
ものづくりの最前線に立つ
社会人2年生
加嶋寛子×濂田 靖

14 | CMSIの拠点 第2回 分子科学拠点：
自然科学研究機構分子科学研究所
奥村久士

15 | CMSIカレンダー

16 | 第4回 CMSIポスター賞

表紙：もし月がなかったら？ もし巨大隕石が落ちていなかったら？ 科学者はいろんな「もし」を考えて楽しめます。シミュレーションなら、いろんな「もし」を目に見えるかたちにできます。もしあなたがメタンと一緒にハイドレートに取り込まれたら？ こんな風景が見えるかもしれません。(CG制作：松本正和・岡山大学)。

計算物質科学イニシアティブ広報誌 **Torrent** No.9, March 2014

© Computational Materials Science Initiative, 2014 All rights reserved
CMSI (計算物質科学イニシアティブ)は、文部科学省「HPCI戦略プログラム(SPIRE)」
分野2<新物質・エネルギー創成>を推進する研究ネットワークです。

発行 計算物質科学イニシアティブ

編集 CMSI 広報小委員会

事務局 東京大学 物性研究所内 〒277-8581 千葉県柏市柏の葉 5-1-5

tel. 04-7136-3279 fax. 04-7136-3441 <http://cms-initiative.jp> ISSN 2185-7091

制作協力：サイテック・コミュニケーションズ デザイン：高田事務所



Computational Materials Science Initiative