

兵庫県立大学 計算科学連携センター ニュースレター

第 5 号

令和 3 年 3 月 31 日発行

センター長挨拶



永野 康行（センター長, シミュレーション学研究科長 教授）

平素は、兵庫県立大学計算科学連携センターの活動に格別のご理解とご支援を賜り、心から感謝申し上げます。当センターは平成 26 年 4 月の設立以来、事業の柱である教育交流と研究交流を積極的に展開し、今年の 3 月末でいったん役目を終えることができました。これも関係者の皆様のご尽力の賜物と思います。重ねてお礼申し上げます。

理科学研究所計算科学研究センター(R-CCS)においても「京」から「富岳」に移行し、従来の計算科学にとどまらず、人工知能やビッグデータ解析等、データ科学の分野においてもスーパーコンピュータを積極的に活用していくことから、本年 4 月からはデータ計算科学連携センターへと発展的な改組をいたします。これまで、R-CCS との共催事業の実施や、“計算科学連携センター学術会議”の定期開催等による教育交流を推進してきました。また、計算科学振興財団(FOCUS)をはじめ、国内外の大学、研究期間及び民間企業と連携し、広範な分野での研究交流も実施してきたところです。

今後も、社会的要請の強いビッグデータ解析・DX(デジタルトランスフォーメーション)や様々な分野でのシミュレーションに資する人材育成を支援すべく、関係機関との教育交流を積極的に進めていくとともに、計算科学分野及び計算機科学分野における研究交流を一層深めてまいります。また、防災科学技術研究所兵庫耐震工学研究センターが保有する世界最大の震動台「E-ディフェンス」を活用した数値振動台研究において、情報科学の手法による高速化、高精度データ解析法や可視化技術の開発を進め、防災減災に資する様々な諸機関との連携もさらに進めていきます。

当センターでの人材育成の取組や、共同研究の成果等を広く発信するため、ニュースレターの第 5 号が完成しました。このニュースレターによって、より多くの方々が当センターの活動をご理解いただき、また次センターであるデータ計算科学連携センターの事業等にも参画いただく契機となれば幸いです。

関係機関及び関係者の皆様の一層のご支援をお願いいたします。

新スパコンの導入

鷲津 仁志 (シミュレーション学研究科 教授)

兵庫県立大学の神戸情報科学キャンパスは、2011年に京コンピュータの設置とともに同じ敷地に設立されたキャンパスです。ここで、大学院シミュレーション学研究科を新設して、スパコンを用いた教育および研究を推進して参りました。京コンピュータへの導入という意味で、それなりのスペックのスパコンが必要、ということで5年経過した2016年に更新されました。このたび、再び5年経過した2021年3月に新機種に更新されました。仕様は下記の通りです。



HPE クラスタ型計算機システム

- CPU ノード 64 ノード 2,560 コア
- 共有メモリノード 80 コア
- NVIDIA V100×8
- NEC VE×8 2 ノード
- 高速アクセス用分散ファイルシステム 2.9 PB

合計演算性能 346.1 TFLOPS

この計算機能力は、HPCI(旧帝大を中心とする全国共用スパコン群)の計算機を除いた全国の大学のスパコンの中では第4位となっています。また、タイルディスプレイシステムも導入されました。こちらは、6Kに相当し、プレゼンテーションや高解像度の表示のみならず、遠隔会議などでも有効です。



セミナー等の開催・受賞

LAMMPS 利用セミナー

本年は新型コロナ禍のため、LAMMPS 利用セミナーを計算科学振興財団 (FOCUS) 様との共催で2回リモートで開催しました。材料開発に用いる分子動力学シミュレータの LAMMPS は、京コンピュータで産業利用が最も多いアプリケーションであり、FOCUS スパコンでも多数の企業が利用しています。LAMMPS はオープンソースであり無料で使用できる反面、日本語マニュアルや文献、サポート体制は十分ではありません。そこで、大学院生や教員、企業研究者を対象に、「基礎的利用セミナー」、応用編である「仮想実験セミナー」を12月11日、12日に連続開催いたしました。会場および計算機は、FOCUS のものをお借りしました。講師および企画を担当いただきました防衛大 萩田先生、RIST 吉澤様、富山様、FOCUS 板倉様はじめスタッフの皆様のご協力で実現できました。ありがとうございます。

第 10 回 計算科学連携セミナー

2021 年 3 月 9 日にオンラインで開催しました。本年度は、日本トライボロジー学会会員提案型研究会の第 28 回 分子シミュレーションのトライボロジーへの応用研究会等との共催でした。題目は以下です。

石井 良樹 氏 (兵庫県立大学)

「輸送に関する分子動力学解析と界面への応用」

川井 茂樹 氏 (物質・材料研究機構)

「原子間力顕微鏡を用いた清浄表面および分子鎖の摩擦計測」

仙田 康浩 氏 (山口大学)

「分子動力学法による摩擦力顕微鏡のシミュレーション」

2020 年度 兵庫高等学校創造科学科 生徒への説明

12 月 18 日、県立兵庫高等学校創造科学科 1 年生の生徒 22 名、引率の先生 2 名、合計 24 名が計算科学振興財団(FOCUS)に来られました。最先端のスパコンを実際に見て、スーパーコンピュータの仕組みや応用について学びました。会に先立ち、兵庫家立大学の紹介を社会情報科学部の笹嶋准教授が実施しました。



工業高等専門学校との研究交流会

例年3月上旬には、高専の先生方に神戸にお越しいたいで、『工業高等専門学校との交流会』を開催しておりました。しかし、コロナウイルス感染拡大のために、予定した高専との交流会を中止いたしました。そこで本年度は会報を作成し、それを高専の先生方と共有することで交流を図ることいたしました。会報は、シミュレーション学研究科ホームページをご覧ください。

令和 2 年度研究活動教員表彰に本センター教員が 4 人受賞

兵庫県立大学では、本学の研究活動において、特に顕著な研究成果・研究実績を上げるなど研究力の向上等に貢献した教員を顕彰することにより、本学の研究活動の一層の進展を図ることを目的として、「兵庫県立大学研究活動教員表彰」を令和 2 年度から学長裁量経費で実施することとしました。表彰する教員は、著名学術誌への論文掲載、大型外部資金の獲得、著名学会からの表彰等の要件に該当し、各学部長、研究科長から推薦があったものについて、学長、副学長等からなる選考委員会で選考します。第 1 回目となる令和 2 年度は、11 名の教員を表彰することに決定し、令和 2 年 10 月 28 日に表彰式を開催しました。

当計算科学連携センターからは、優秀研究活動賞に鷲津教授、研究活動特別賞(若手研究者)に井上准教授、土居准教授、安田准教授の 3 名が受賞しました。

2021年度からは新組織 データ計算科学連携センターになります

計算科学連携センターは、兵庫県立大学の産学連携・研究推進機構 (<http://www.u-hyogo.ac.jp/research/>) に属する全学の組織です。2021年4月に、シミュレーション学研究科、応用情報科学研究科、社会情報科学部に所属する教員によって、大学院の組織改変により大学院情報科学研究科が発足します。これに伴い、当計算科学連携センターも、センター長挨拶にありますように、データ計算科学連携センターという形で、データ科学も含むこととなりました。

兵庫県立大学
データ計算科学連携センター
(神戸情報科学キャンパス経営部)

〒650-0047
神戸市中央区港島南町 7-1-28
Tel: 078-303-1901
Email: p-office@gsis.u-hyogo.ac.jp

計算科学連携センター
<http://www.simulation-studies.org/ccwcs>

データ計算科学連携センター
<https://u-hyogo.info/joint-research/>

あともがき:

当センターでは、皆様からの投稿やお知らせを募集しております。研究紹介や関連学会の案内、参加報告や、ご提案、企画等がございましたらお知らせいただけますと幸いです。ご依頼: 関係企業等へご参加をお誘いいたしますようお願い申し上げます。

