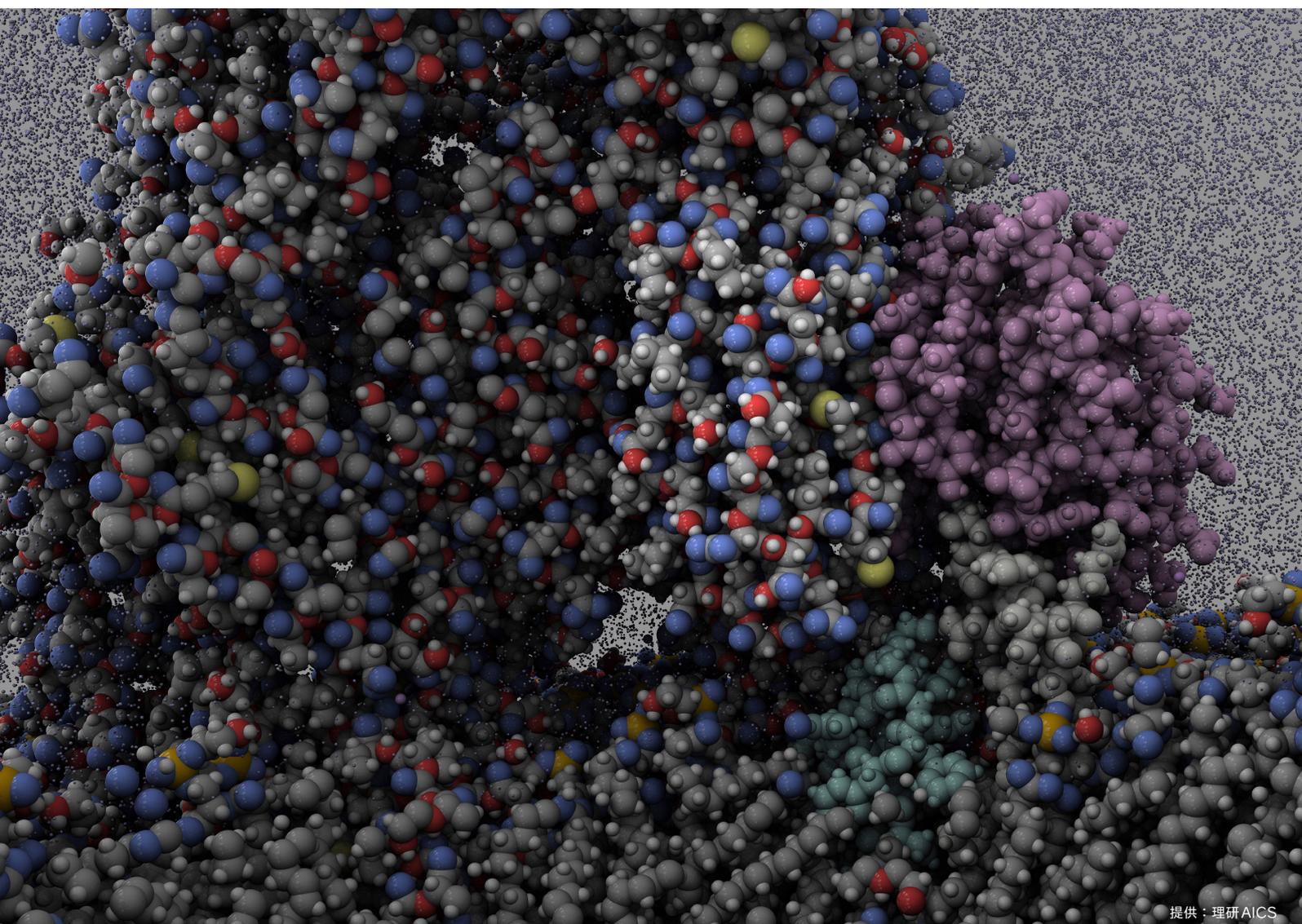


ものづくりにHPCを活用するためのツールとケーススタディー

# 計 算 互 学 ナ ビ

QUARTERLY NEWSLETTER / SPRING 2015



提供：理研AICS

## 非線形現象の理解から始まる プロダクトイノベーション

JAXA 藤井孝藏

## ポスト「京」時代のものづくり

東京大学 加藤千幸、吉村 忍

次世代並列可視化システム

HIVE

VOL.

6

# 非線形現象の理解からはじまる プロダクトイノベーション



宇宙航空研究開発機構  
宇宙科学研究所  
藤井孝藏 教授

ただの板が空を飛ぶ……そんなまったく新しい翼の設計手法を紹介します。JAXAで進められているプラズマアクチュエータを流体機器に適用する研究には京コンピュータ級のスーパーコンピュータが不可欠。非線形的な現象を理解するために、大規模なパラメトリックスタディを行い、その知見を活用して製品開発に革新をもたらす試みです。

このプロジェクトはプロダクトイノベーションであると宣言していますね。まず、その意味するところから教えてください。

今ある開発プロセスの効率化ではなく、まったく新しい製品を提案するのがプロダクトイノベーションです。京のように高性能な計算機を使うHPCが、その実現に有効であることを示すのが、我々の目的と言えるでしょう。

もちろん、まったく新しい製品を作るには長い時間が必要です。実現するのは10年先、いや30年先かもしれない。それでも最初の設計段階で数値シミュレーションを使うことで、事前にその製品をイメージし、アイデアを発展させることができます。我々の研究を通じて、その意義を理解してくれる企業の開発者が増えれば、それこそが重要な成果と考えています。

分野は空力設計。そこに新しいアイデアを持ち込む提案ですね。

航空機や流体機器の製品開発は性能向上の限界にきています。抵抗の1万分の1をいかに減らすかという議論になってきていて、それを翼の形状を工夫することで実現しようとしている。ものすごく努力がいくことです。

ブレークスルーを起こすには、翼の形状を工夫するだけでなく、何かもっと新しい考え方が必要で、この課題に対する我々の提案が、空力制御デバイスとしてDBDプラズマアクチュエータを利用した動的な空力設計です。

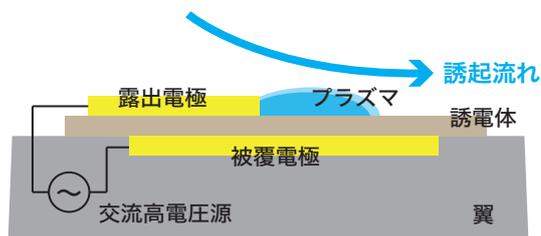
**DBD (Dielectric Barrier Discharge/誘電体バリア放電) プラズマアクチュエータの原理について説明してください。**

DBDプラズマアクチュエータは、翼に取り付ける厚さ数百マイクロン程度のデバイスです[図1]。絶縁体を挟んだ薄い電極で、これ自体は電力もほとんど消費しません。既存の翼に後から付けることができ、翼そ

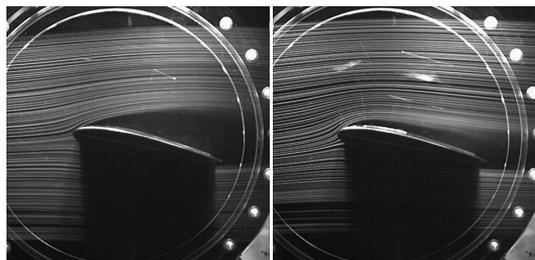
のものの設計は変えなくても使えます。

この電極に高い交流電圧をかけると、2つの電極間のバリア放電によってプラズマが発生してイオンが動き、それに引きずられて空気の流れが起こります。この流れにより、気流が翼から剥がれにくくなるわけです[図2]。状況に応じて流れを制御することができれば、従来の翼の性能を改善するだけでなく、単なる板を翼にすることも可能です。

では、どのように制御すればいいのか？単純に電圧を高くするなどして、流れを強くすれば制御できるだろうというのが自然な考え方です。しかし、我々は2006年頃、連続的に電圧をかけ続けて強い流れを誘起するのではなく、ちょっとだけ電圧をかけほとんどは止めるというように、パルス波を利用するほうが良いということを確認しました。そして、そのメカニズムをより詳しく理解し、デバイスの設計指針を作るために、大規模な数値シミュレーションを実行することにしました。



[図1] DBDプラズマアクチュエータの構造

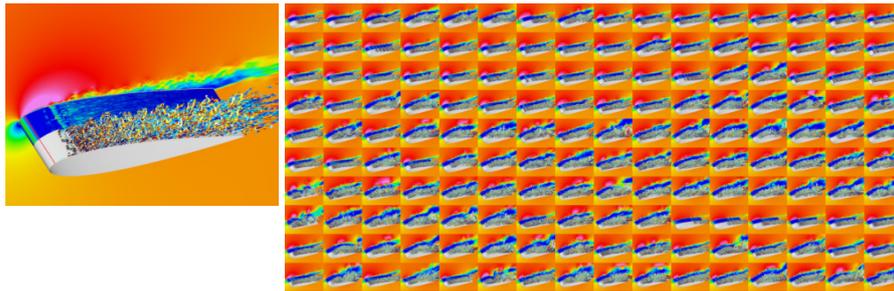


[図2] DBDプラズマアクチュエータの効果(右が有効時)  
提供: JAXA 宇宙科学研究所

## きっかけは火星飛行機

藤井教授がDBDプラズマアクチュエータに着目したのは2004年頃。火星探査用の飛行機に使えるのではないかと、というアイデアが発端だ。火星の大気は地球の1/100ほど。きわめて薄いので、通常の翼では十分な揚力を得られない。速度をあげると、音速が低いので、すぐ遷音速に入って衝撃波が発生し、性能がおちてしまう。火星ロケットへ積んでいくために翼を大きくすることも難しい。つまり、画期的に性能のいい翼型が必要となる。

「プラズマアクチュエータは絶対的に揚力を稼げます。同じ大きさで2倍にすることも可能。これは使える！と思ったのはノートルダム大学のT.C.Corke氏の発表を聞いたときです。直ちにノートルダムへ行って実験を観てきました。しかし、残念なことに、帰ってきてすぐ火星では使えないことに気がつきました。大気の密度が低いのでプラズマ領域が広がってしまうんですね。それでは力が伝わらない。結局、火星で使うことは諦めたのですが、プラズマアクチュエータの地上での利用の拡がりに期待が生まれました」



【図3】京によるパラメータスタディ  
プラズマアクチュエータの位置や周波数などの設定パラメータに対して解析を行い、その制御効果を予測した。  
提供：JAXA宇宙科学研究所

**京に対応するソフトウェアを整備し、多ケースのパラメータスタディを行うことが、新しい知見の獲得へ繋がりました。**

主に使用したソフトウェアは、我々が1980年代から開発を続けているLANS3Dという圧縮性流体ソルバーで、これを京で性能が出るようにチューニングしたものです。

最初に、低レイノルズ数 ( $10^4$ オーダー)での現象を理解するため、220ケースを超えるラージ・エディ・シミュレーションを行いました【図3】。これだけ多くのケース数を実行できるのが京の最大の威力であり、それによって以前は見つけれなかったパラメータを見つけることもできたと考えています。

現在わかっているのは、低レイノルズ数領域では表1で示すような3つの効果が重要だということです。

この3つの効果は常に共存していますが、上手に使い分けるパラメータ設定をすることで、もっとも効率の良い制御が可能となります。

もちろん、実際のものづくりに適用するためには、もっと高いレイノルズ数でのメ

カニズムも理解する必要があります。一般にレイノルズ数が10倍になると、計算量は100倍になるため、計算ケース数は減らさざるを得ません。すでに京を使って、十数ケースの計算を行いました。低いレイノルズ数（小さなスケール）のときほどは性能が上がりませんが、それでも効果があることは分かってきています。総じて言うと、一定の効果、たとえば揚力や揚抗比が数十パーセント上がるといったことはすでに実現できており、現在はさらに性能をよくするための工夫を進めているところです。

**実問題への適応も進められていますね。**

小型の機器については、すでに計算結果と試験結果がよい一致を示している例があります【図4】。

産業応用については、シンポジウムの発表などを参照いただきたいのですが、複数の企業との共同研究が動きはじめています。

今後は、さらに多分野の企業と協力して、実利用の可能性を示していきます。それによってプラズマアクチュエータによる空力性能の向上だけでなく、我々の手法が流体機器設計を革新する新たな芽となること

を実証したいと考えています。

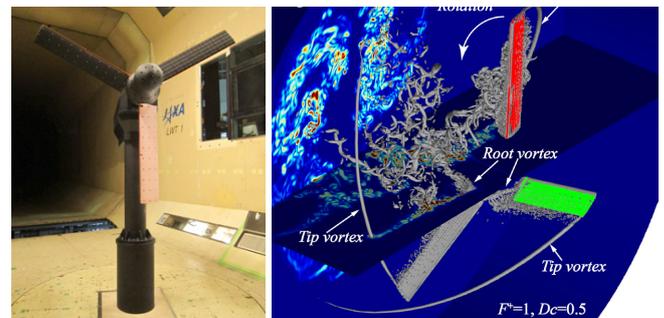
**流体以外の分野においても、大規模パラメトリックスタディによる現象理解というアプローチは適用可能なのでしょうか？**

可能だと考えています。乱流のように非線形性が強い現象は、他の分野でも観られます。そうした現象は性能向上を難しくするわけですが、計算科学によってピンチをチャンスに変えることができるかもしれない。概念設計や初期設計の段階でも、シミュレーションによって現象理解を深めることで、新しい手法を見つけるヒントが得られるはずです。

もちろんリスクはあるでしょう。結果的にそのアイデアは実現できないかもしれない。でも、リスクを取ってこそそのイノベーションではないでしょうか。高性能なコンピュータを持ったなら、従来の設計手法を覆すような使い方に、たくさんの挑戦が生まれることを期待しています。

プラズマアクチュエータの効果	動作モード
①乱れの投入による乱流遷移の促進	高周波数バースト 
②大規模渦構造の誘起とペアリング	低周波数バースト 
③直接的な運動量の投入	連続波と強い電圧印加 

【表1】低レイノルズ数領域での効果



【図4】実問題への適用とスケールモデルの解析

風車の効率向上のためのプラズマアクチュエータ効果評価試験(NEDO委託研究:東芝/JAXA)。DBDプラズマアクチュエータを小さな回転機器へ適用し、試験で得られた性能向上を確認した。  
提供：東芝、JAXA

# ポスト「京」時代のものづくり …… Part 1

## 近未来型ものづくりを先導する 革新的設計・製造プロセスの開発



東京大学生産技術研究所  
革新的シミュレーション研究センター  
加藤千幸 センター長・教授

スーパーコンピュータ「京」の次代を担うポスト「京」の開発計画が具体化してきました。2020年までに世界トップレベルの性能を有し、幅広い課題に対応できる計算機とアプリケーションを同時進行で開発する、総事業費1300億円の大プロジェクトです。

### ポスト京に向けてアプリケーション開発の実施態勢が決まりました。

文部科学省は9つの重点課題を設定し、公募によって実施機関を決定しました<sup>[表1]</sup>。我々のテーマは『重点課題8 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発』です。現在の戦略プログラム分野4で推進してきたようなものづくり分野を担当するのは、我々と重点課題6を担当する東京大学大学院工学系研究科の2チームとなります。

### 2012年にスタートした京のプロジェクトとこれから始まるポスト京のプロジェクトはその性格に違いがあるのでしょうか？

京のプロジェクトは実証研究が目的でし

た。つまり、ある程度できあがっていたアプリケーションソフトウェアを京向けにチューニングすることで、どういう計算ができ、どういう課題が解決可能なのかを実証してきたのです。

一方、2019年までのポスト京プロジェクトは、次のレベルのアプリを開発することが目的です。「課題」という言葉が前面に出てきているのは、ポスト京の目的が実証ではなく、科学的・社会的課題を実際に解決することだからです。それをするのに必要なアプリを、京での成果を踏まえながら開発していくのがこれからのフェーズと言えます。

### ポスト京の目標性能を京と比較すると、アプリ実効性能で100倍、消費電力は約3倍(30~40MW、京は12.7MW)とされて

### います。この「アプリ実効性能」とはどういう意味ですか？

今後、コンピュータの性能の伸びは鈍化することが予想されています。京までは3年で10倍、6年で100倍というペースでピーク性能が伸びてきました。京の運用開始が2012年ですから、仮にこれまでのペースで性能が向上したとしたら、2018年頃には100倍の性能が得られたはずなんです。しかし、半導体技術の限界が顕在化し、従来のような進歩はもう期待できないことがわかってきたんですね。

そうした状況のなか、ハードの開発とアプリの開発を連携して進めることで、アプリの実効的な性能を100倍に上げることを新たな目標に設定しました。これがアプリ実効性能100倍の意味です。

カテゴリー	重点課題名	実施機関
健康長寿社会の実現	①生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築	理化学研究所生命システム研究センター
	②個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学	東京大学医科学研究所
防災・環境問題	③地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築	東京大学地震研究所
	④観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化	海洋研究開発機構地球情報基盤センター
エネルギー問題	⑤エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発	自然科学研究機構分子科学研究所
	⑥革新的クリーンエネルギーシステムの実用化	東京大学大学院工学系研究科
産業競争力の強化	⑦次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成	東京大学物性研究所
	⑧近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発	東京大学生産技術研究所
基礎科学の発展	⑨宇宙の基本法則と進化の解明	筑波大学計算科学研究センター

【表1】ポスト京で重点的に取り組む社会的・科学的課題

上記の他に「萌芽的課題」として次の4課題について、今後の調査研究で実現化を検討することになっている。⑩基礎科学のフロンティア・極限への挑戦、⑪複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究、⑫太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明、⑬思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用

分類	サブ課題	位置づけ/狙い
設計プロセスの革新	A 上流設計プラットフォームの開発整備と産業利用実証によるものづくりの革新	新設計基盤の開発 超高速高精度シミュレーションを統合活用し、設計意思決定の抜本的迅速化に貢献
	B リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムの開発	代表的産業分野における実証 我が国の代表的産業での先進的デザインシステムの開発と実証
	C 準直接計算技術を活用したターボ機械設計システムの研究開発	産業のキーコンポーネントによる実証 広範な産業分野をカバーするキーコンポーネントでの評価技術の開発と実証
	D 航空宇宙機の設計・運用革新を実現するコア技術の研究開発	極限環境飛行体による実証 非定常超大規模流体解析の実現による実フライト条件下の機体設計
製造プロセスの革新	E 新材料に対応した高度成型・溶接シミュレータの開発	製造基盤プロセスの精度・信頼性向上 超大規模有限要素解析によるプレス成形・溶接加工プロセスの精度・強度信頼性向上
	F マルチスケール熱可塑性CFRP成型シミュレータの開発	先進的複合材料成型プロセスの最適化 超大規模有限要素解析による熱可塑性CFRP成型プロセス解析モデルの開発とファンブレード開発への応用

【表2】重点課題8のサブ課題

ポスト京で初めて達成可能となる6つのサブ課題が設定されている。とくに費用対効果の大きい上流工程で、製品ライフサイクル全般にわたる主要な課題を解決する。

アプリ開発の重要性がさらに増したということですね。ものづくり分野で産業競争力の強化を目指す重点課題8では、6つのサブ課題を設定して開発に取り組むと発表されました。

6つのうち4つが設計、2つが製造に関するものです<sup>[表2]</sup>。

設計については、上流段階でのコンセプト構築に役立つシミュレーション技術を実現することが目標のひとつで、我々はそれを「コンセプトドリブン設計」とよんでいます。さらに、コンセプトの実現に必要な製造技術も同時に強化していけるよう、設計と製造という2本柱でアプリ開発を進めることにしました。

### ポスト京によるものづくりはどのように変わるのでしょうか？

すでに我々は、京を使うことで非常に高精度な予測ができることをいくつかの製品分野で実証しました。振動や騒音といった、流れに起因する非定常現象の予測もできます。それに加えてポスト京でやろうとしているのは、非常に高精度だけでなく非常に高速な計算です。ひとつの状態を評価するのではなく、実際の設計で必要となる膨大なケース、たとえば1万ケースの評価を現実的な時間でできるようにします。

サブ課題Bの自動車設計を例に取ると、京では空気の流れとボディーの運動の連成

解析を可能にしました。ポスト京ではさらにボディーのねじれ振動等も考慮して乗り心地を評価したり、現在はまだ時間がかかる格子の作成を1時間以内に終えて計算も1時間程度でできるようにします。高速化により、上流設計プロセスでのHPCの利用が現実的になるでしょう。ポスト京によってはじめて可能となる超高速高精度シミュレーションは、ものづくりにパラダイムチェンジをもたらします。

サブ課題Dは飛行機の設計ツール開発がテーマです。飛行機は一定の高度を一定の速度で飛んでいるときは定常的な現象として評価することができるのですが、離着陸時などでは非定常現象になるため、より高度な解析プログラムとポスト京クラスの計算機が必要となります。非定常現象を含むあらゆる飛行状態に対応することで、運用も考慮した設計プロセスを提案します。これはまったく新しい取り組みと言えるでしょう。

それから製造分野の例をあげると、サブ課題Fとして炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の利用技術を強化します。CFRPの用途は、究極的にはクルマのボ

ディーですね。燃費はだいたいクルマの重さで決まるため、軽くなればそれだけ燃費はよくなります。他のサブ課題同様、ジェットエンジンメーカーや素材メーカーといった産業界と連携して開発を進めます。

### ポスト京のポテンシャルが見えてきました。最後に、産業界から見たときのポスト京は当面どんな存在となるのでしょうか？

技術開発というものは、トップエンドが伸びなければ、その下のレンジも伸びないんですね。ポスト京を目指すことで、京クラスのコンピュータを利用する技術も発達します。アプリの陳腐化を避けるためにも、開発の継続性は重要です。

ポスト京の運用が始まるころ、京クラスのコンピュータが産業界でも自由に使えるようになるでしょう。我々はポスト京の時代に初めて実現できるような技術を開発しながら、その成果を京のプロジェクトで実証したアプリにも還元していきます。

産業界で本当に使えるアプリを実用化することが、我々の最終的なゴールだと考えています。



【図1】ポスト京運用開始までのスケジュール

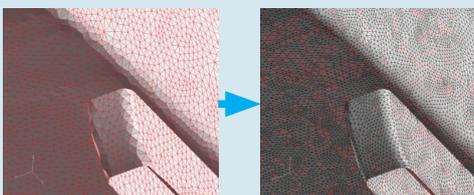
2020年の運用開始に向けて、システムとアプリケーションのCo-design(協調設計)による開発が進められる。文部科学省『フラッグシップ2020プロジェクト(ポスト「京」の開発)』についてより

### ポスト京に向け開発するソフトウェア(サブ課題Bより)

各サブ課題ごとにベースとなるアプリケーションがあり、それをもとにポスト京の能力をフルに利用する新機能と高い性能を持つアプリケーションシステムを開発する。ここではサブ課題B「リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システム」として開発するアプリを示す。

#### FFR-HPC

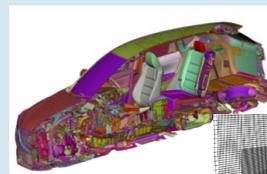
1000億セル規模の大規模解析の実現による非定常空力特性の高精度予測(乗り心地・快適性の予測)



CAD形状マッピング機能による自動格子細分化前後での形状再現性向上の例

#### CUBE

数百億セル規模(対風洞実験値誤差数%)の大規模解析をCADデータから数時間内に実現



階層データ構造を活用した高ストロングスケール性能。設計CADから可視化までをシームレスに実行。



提供：理研AICS、マツダ(株)

# ポスト「京」時代のものづくり …… Part 2

## 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化に向けて



東京大学 大学院工学系研究科  
副研究科長  
吉村 忍 教授

9つある重点課題のうち、ものづくり分野として設定されたのは、前ページの重点課題8と、ここで紹介する重点課題6「革新的クリーンエネルギーの実用化」です。5つのサブ課題からなるプロジェクトの概要について東京大学の吉村忍教授に話を聞きました。

はっきり「実用化」を表明している点が印象的です。

我々の研究開発が対象とするのはすべて実機です。現象論の原理原則を明らかにするというサイエンス的な出口イメージではなく、製品を実用化する際に解決すべき課題をポスト京で完全にシミュレーションすることを狙っています。

従来だったら、作る方が速いからとまず物を作って、実験をやって、経験を積みながら少しずつスケールアップするというやりかたができました。実験ベースの試行錯誤でやれたんですね。ところが、だんだん扱う現象が複雑化し、作るのに膨大な予算がかかるようになって、そういうアプローチが効かなくなってきた。

設計の段階でシステム全体をシミュレーションする必要性がここにあります。ポスト京を使うことで、構想から実用化までのプロセスを大幅に短縮するのがこのプロジェクトの目的です。

課題のひとつとして、火力発電用の石炭ガス化炉（サブ課題A）が挙げられています。

石炭がガス化されているということは、基本的には熱と流体の問題として捉えれば問題が解決できるように思えるわけで、これまでそこを主たるターゲットに研究が進められてきました。ところが、炉の中で石炭が完全に同じ大きさの微粒子になることはなく、石炭の種類によって不純物の混ざり方も異なります。熱的な環境は、すごく揺らぐわけですね。では、高温のガスが何を支えるかといったら、燃焼機の容器です。容器がそれを閉じ込めて、適度に熱を奪いながら内部の環境を保っている。

つまり、構造（容器）と熱流体（ガス化した石炭）の温度境界条件をどう定めるかが精度の鍵で、そこにマルチフィジクス・マルチスケールの精密なシミュレーションを持ち込む必要があります。それによって初めて実機の評価が可能になるでしょう。

計算量が一気に増大するように思えますが、

ポスト京であれば解けるという見通しがあるのでしょうか？

はい。京では、ほぼFFR<sup>[註1]</sup>だけの計算でした。ポスト京では、FFRとADVENTURE（後述）による双方向の連成解析を行います。熱と質量のバランスが完全に保たれる連成系を構築して、きちんとシミュレーションすることで精度を上げることができます。

そして、ポスト京の計算能力を生かして条件サーベイを繰り返し実行することによって、炭種ごとの最適運転パラメータを見つけるための試行錯誤も軽減できます。プラントを長期間運転する際に知りたい、炉全体の構造健全性、安全性、寿命といった情報もシミュレーションで得られるようになるでしょう。

構造と流体といった複数の物理現象を統合するマルチフィジクスと、マクロからミクロまでの規模の隔たりを統合するマルチスケールという概念が、どのサブ課題にも登場しますね。

サブ課題Cの洋上風力発電もいろんな現象が混ざっているマルチフィジクス・マルチスケールの問題です。洋上数十キロメートルに広がるウインドファームで100メートル近い直径の風車が秒速数十メートルの風を受けて回転します。沖合に設置される風車は浮体式なので波によって揺れ、風車のブレードは風を受けて変形し、振動します。ある風車が発生させた乱流が、風下の別の風車に及ぼす影響まで考慮すると、単に風の強いところに風車を並べれば良いという話ではありません。

風車をどう配置すればウインドファーム全体の発電効率が最大になるかを知るため

分類	サブ課題	位置づけ／狙い
火力	A 高圧燃焼・ガス化をともなうエネルギー変換システム	固気液三相LESと炉構造・冷却の大規模連成解析による、CO <sub>2</sub> 分離・回収・貯留技術を導入した次世代火力発電の実用化加速
水素	B 気液二層流および電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化	燃料電池セル・スタック内の大規模気液二層流解析と電極の大規模高性能解析による、燃料電池設計の高度化
自然エネルギー	C 高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析	風車後流の影響を考慮した洋上ウインドファームの性能向上と最適化等
核融合	D 核融合炉の炉心設計	核燃焼プラズマの5次元第一原理計算による、核融合炉の炉心運転条件の最適化
その他	E 膜・界面のナノレベルからの設計	マルチスケールシミュレーションの統合基盤に基づく、クリーンエネルギー用革新的機能性膜の設計

[表1] 重点課題6のサブ課題

ニーズ(国策と実情に合致するエネルギー源)とシーズ(ポスト京の能力発揮が期待できる)の両面を考慮して選ばれた5つのサブ課題からなる。

[註1] マルチフィジックス流体シミュレーションソフトウェア"FrontFlow/red"の略称  
 [註2] 乱流現象(騒音、振動、非定常流体力、乱流熱輸送など)の高精度予測を実現するソフトウェア"FrontFlow/blue"の略称

には、大規模なシミュレーションが必要で  
 ます。ただし、ポスト京を使っても、ウイン  
 ドファーム全体の連成解析を同時に行うの  
 は不可能なので、我々が「オフラインの連  
 成」と呼んでいる手法を取り入れます。た  
 とえば風況マップをあらかじめデータベ  
 ース化しておいて、そのデータを入力とし  
 てポスト京上で流体解析のコードをどんど  
 動かすといった方法です。

マルチフィジクス・マルチスケールを実  
 現する上で、どこを密な連成で解き、どこ  
 をデータベース化してオフラインの連成に  
 するかといった検討は今後重要になってく  
 るでしょう。

ポスト京を適用することでブレークスルー  
 を起こせるポイントを見出す試みとも言え  
 そうです。

サブ課題Bの燃料電池についても実機を  
 想定している点は他と同じですが、まだ全  
 体がガッチとひとつのシステムに組み上  
 がっている話ではなく、実験をやるグル  
 ープとも連携して、ポスト京のシミュレー  
 ションが力を発揮するテーマを抽出すること

ら始めます。

今そうしたテーマのひとつとして考えて  
 いるのが、水の問題ですね。燃料電池とい  
 うのは発生した水をどうコントロールする  
 かで性能が決まってきます。いわゆる気液  
 二層流の評価が実機のパフォーマンスを予  
 想する上で重要です。もうひとつ、実機サ  
 イズの電極モデルを作ることも課題で、水  
 の問題と併せてトータルな知見として、燃  
 料電池設計のプロセスにフィードバックし  
 ようとしています。

吉村さんは構造解析ソフトADVENTURE  
 の開発者として知られています。今回のプ  
 ロジェクトでは、ADVENTUREと他の  
 分野のソフトを組み合わせる手法が多く見  
 られます。

実機をよく分析してみるとわかるのです  
 が、構造解析のコードが1つあったら解け  
 るような問題はもうないですね。流体に  
 ついても、たとえばFFB<sup>[註2]</sup>だけで実機  
 の問題が全部クリアに解決できるというこ  
 ともまずない。ほとんどがマルチフィジク  
 ス、マルチスケールの問題で、しかもそこ

にデータベース的なものとか、経験則的な  
 ものとかをインテグレートして、ようやく  
 実験を置き換えることができるのです。従  
 来のように空間解像度と時間解像度を上  
 げ、計算の効率化を図ることも重要ですが、  
 今述べたようなインテグレーションこそが  
 今後重要になるはずですよ。

また、精密なシミュレーションであって  
 も、1回か2回行うだけでは不十分で、繰  
 り返し計算して、確度の高い予測値であ  
 ったり、確実に動作するパラメータの組み  
 合わせを見つける必要があります。そうし  
 ないものづくりには使えない。もちろん、  
 ポスト京が完成する2020年までは、そう  
 したパラメータサーベイを実際に行うこと  
 は難しいので、それまでに必要な技術を作  
 り、例題的な計算を済ませておくことが今  
 の我々の役目と言えるでしょう。

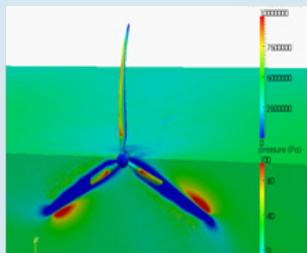
そして、我々が作ったソフトは単なる汎  
 用ソフトとしてではなく、各企業がノウハ  
 ウを注入し、独自のツールとして仕上げる  
 ためのカーネルとして使って欲しいと考  
 えています。そのために必要な企業とのコ  
 ラボレーションにも、力を入れていくつも  
 りです。

### ポスト京に向け開発するソフトウェア(サブ課題Cより)

サブ課題C「高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析」では、下  
 記のように3つのソフトウェアを統合して、洋上風車性能評価統合システム  
 "WindFarm"を構築する。リアルタイムの密な連成とオフラインの連成を組  
 み合わせて、ポスト京の能力に合った実用的なシステムを作り出す。

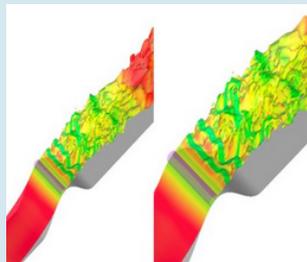
#### FFB-ADVENTURE

1000億規模の乱流解析、  
 洋上風力解析との連成解析  
 による実風車解析、空力構  
 造連成解析(寿命評価)



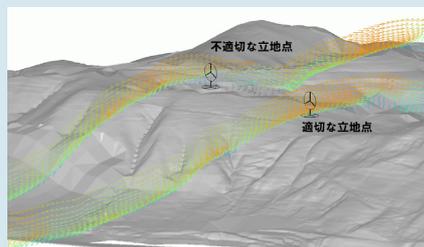
#### LANS 3D

プラズマアクチュエータ等  
 の先進流体制御技術を組み  
 込んだ大規模乱流解析コー  
 ド。高速化ソルバーの組込  
 みにより翼の最適化に対応



#### RIAM-COMPACT (HPC)

洋上流れ解析および洋上風況マップの作成、  
 風車群解析のためのモデル化と最適化、複雑  
 地形(陸上)にも対応



統合



#### WindFarm

各アプリの特色を活  
 かした大規模空力連  
 成システムによるマ  
 ルチスケール解析ソ  
 フトを開発

K.S. Hansen, EERA DeepWind'2014 (2014)

# 次世代並列可視化システム HIVE

独立行政法人理化学研究所  
計算科学研究機構 可視化技術研究チーム  
小野謙二

医薬品や新しい物質の開発、自動車の設計、気象・防災予報、宇宙の成り立ちの秘密。これらは、スーパーコンピュータを使って私たちが挑戦しつづけている研究の一例です。これらのシミュレーションは非常に時間のかかる計算なので、多数のプロセッサから構成されるスーパーコンピュータを使い、並列シミュレーションが行われます。その計算結果は数値データとして表現され、多数のファイルに分割して出力されます。このようなシミュレーション結果の中に潜む現象を観察し、その理解を助けることが「可視化」技術の役割です。ところが、多数のファイルに分割して記録された並列計算の結果を可視化することは簡単なことではありません。

理化学研究所 計算科学研究機構 可視化技術研究チームでは、「京」コンピュータを始めとする多くの並列計算機上で動作する、シミュレーションの観察ツール（顕微鏡や望遠鏡のイメージ）を開発しています。今回の記事では、HIVEと名付けたこの可視化システムについて紹介します。

## 可視化作業のシナリオと課題

「よい可視化システム」を定義することは難しいのですが、性能や機能、ユーザーのやりたいこと、という視点はシステム設計の上で重要となります。

可視化作業は、データの中の現象を観察したり、何かの発見を得るための過程です。その調べ方は観察者の考えが強く反映されるので、可視化方法はユーザーによってさまざまです。また、可視化は機能とともに使いやすさが重視されます。この点がシミュレーションとは大きく異なる特徴です。可視化の使い方を特徴づける軸として、可視化タイミングの選択・対話性・リモート操作などがありますが、これらは相互に関連しています。

いくつかの想定される可視化シナリオ<sup>※1</sup>を見てみましょう。

遠隔地のスパコンを利用し、バッチ処理によりシミュレーションを実行することを

想定します。

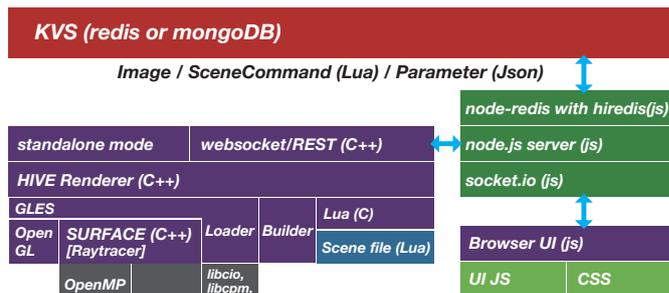
現在は、計算中に書き出したファイルに対して可視化処理を行う「ファイルベース可視化」が主流です。この方法は、低コストなデバイスである磁気記憶装置へのファイル入出力が処理時間の多くを占める点が課題です。この問題点を緩和するためには、並列ファイル入出力技術をうまく使うことが鍵となります。

シミュレーションを実行していると、その途中結果を見たいと思うことは少なくありません。この場合、データをユーザーの手にあるクライアントPCに移動して可視化するローカル可視化と、遠隔地のサーバで可視化処理を行い、その結果（中間データや画像など）をクライアント側へ転送するリモート可視化が考えられます。ローカル可視化では、全てのデータを転送することは移動コストが大きいために適切ではありません。したがって、データを興味の対象領域のみに絞り込んだり、データを間引く、あるいは特徴を残したままデータを縮小する手法などを併用することになります。

一方、リモート可視化は、操作と結果の表示がユーザPC上で動くクライアントプログラムとして実装され、主計算処理はサーバ側のプログラムとして各々独立に動作します。両プログラムはネットワーク経由で協働しながら可視化処理を行うように設計されており、遠隔地での可視化や大規模データ可視化の用途に適します。

リモート可視化では、特にインタラクティブ性（システムの応答性）が重要になります。シミュレーションデータを詳細に観察し、データに潜む現象をあぶり出し、理解していく。そのような発見的な作業を支えているのがインタラクティブ性です。対話性に優れたシステムはユーザーの思考を加速し、ひらめきを与えることができるでしょう。しかし、大規模並列環境におけるインタラクティブ性の確保は大きなチャレンジです。なぜなら、可視化サイクルを構成す

【図1】HIVEのソフトウェア構成



るデータ読み込み、並列レンダリング、データ・画像転送などの一連の処理をすべて高速化しなければならないからです。

このインタラクティブ性の対極にあるのが、あらかじめ決められた手順通りに処理を実行するバッチ可視化です。可視化する対象データやパラメータを記述したスクリプトを用意し、それに従って自動的に可視化を行います。所望の可視化結果を得るためには、対象を効果的に可視化するスクリプトを事前に記述しなければなりません。しかし、どうやってそれらのパラメータを決めていくのか可視化してみるまでわからない。いわゆる「にわとりたまご」的な因果性のジレンマが解決すべき課題として残っています。

また、シミュレーションの実行中にすぐ結果が見たいと思うユーザーは多いでしょう。このためには、シミュレータと連携できるように可視化システムを構築する必要があります。このような可視化はIn-Situ（その場）可視化と呼ばれます。In-Situ可視化は、計算と同時に可視化処理を行うためメモリ上でデータの授受が可能になります。これにより、ファイル操作に起因する速度低下の影響を排除できるので計算性能の劣化が抑えることができ、必要なディスク容量も削減できます。

さらに、計算実行中にシミュレーション結果をモニタリングしながら計算パラメータを変更するSteering技術とも親和性がよく、利便性の高いシミュレーション環境を提供できるでしょう。このIn-Situ可視化は、計算機の演算性能とファイルIO性能の乖離が現在よりも大きくなるエクサフロップスコンピューティングに向けて有力な手法ですが、前述の「にわとりたまご問題」を始めとして解決すべき課題は多く残されています。

※1 小野、大規模数値計算における可視化技術の最先端、可視化情報 Vol.32, No.125, pp.1-6(2012).  
※2 <https://github.com/avr-aics-riken/>  
※3 Nonaka, et al., 2-3-4 Decomposition Method for Large-Scale Parallel Image Composition with Arbitrary Number of Nodes, Proc. of SIMS14, pp.75-80(2014).

【図2】シーンエディタ



### Heterogeneously Integrated Visual analytic Environment 大規模可視化システムHIVEの設計

前述のように可視化にはいくつかの使い方があり、それらを併用することも効果的です。そこで、複数の可視化シナリオをサポートできるソフトウェアを設計しました。

具体的な設計にあたり、多くの計算プラットフォームで動作すること、リモート/ローカル動作、高並列性能、機能拡張性、移植性、メンテナンス性を考慮しています。HIVEは図1のような要素から構成され、C/C++プログラムだけでなく、モダンなwebインタフェイス、Java Script、OpenGL ES、GLSLなどの共

通的なソフトウェアスタックを導入し、モジュール群の有機的連携により多くの機能を実現するシステムとなっています。

HIVEのレンダリングエンジンは、後述の"SURFACE"が担っています。SURFACEを核として、様々な機能性を与える可視化フレームワークがHIVEなのです。

HIVEは、特に大規模並列環境で高い性能を発揮する、利便性の高い可視化システムを目指して開発を進めてきました。そのための重要なしくみとして、多数の分散ファイルを効率的に管理するデータライブラリ<sup>※2</sup>や、並列に生成した部分画像を最終的にひとつの画像に合成する高性能画像重畳ライブラリ<sup>※3</sup>などがあります。

### タブレットからスパコン「京」まで

HIVEの特徴のひとつであるマルチプラッ

トフォーム対応を実現するため、低レベルのインターフェイスはCUIとなっています。SURFACEレンダラを制御するシーンファイルはLuaスクリプトにより記述されます。軽量スクリプトLua自身は多くの環境で動作するので、HIVEも高いポータビリティを持たせることができます。

また図2に示すように、HIVEはCUIだけでなくweb GUIによりシーンファイルを編集できる利便性の高いインターフェイスを提供します。インターフェイスをwebベースにし、モバイル対応のレンダリングAPIを利用することにより、多様な使い方ができる基盤技術を構築し、マルチプラットフォーム、ユビキタス性という特徴をもたせることができました。

### これから

HIVEは、まだ生まれたばかりです。これから、できること(機能)を増やしたり、経験(事例蓄積)を通して、より洗練された使いやすい可視化システムに成長させていくことを考えています。

## SURFACE について

理化学研究所 計算科学研究機構  
可視化技術研究チーム  
藤田将洋

SURFACE (Scalable and Ubiquitous Rendering Framework for Advanced Computing Environments) はレイトレーシング法を核とした大規模データむけのスケーラブルで高品質なレンダラです(形状データなどから画像を作り出すシステム)。現実世界の光の振る舞いをコンピュータで模倣することで、高品質な可視化や絵作りを実現します。

可視化のためのレイトレーシング法は、今からおよそ35年前に提案されました。当時は計算量が多く、コンピュータでの計算に一週間かかることもありましたが、その後、優秀な研究者らにより、複雑な光の反射があるような条件でも効率的に計算ができるようにアルゴリズムの改善が絶えず行われ、また計算機性能の向上も相まって実用的に利用できるフェーズになりました。レイトレーシング法は、現在のペタスケールコンピューティング世代での、大規模データや大規模計算機環境下における最も適したスケラブルな可視化手法として注目されています。

我々はこのレイトレーシング法の可能性とスケラビリティに注目し、SURFACEの開発を「京」が稼働する前から行ってきました。SURFACEはx86などのPC環境

に加え、京でもシームレスに動作するように設計・実装されています。

2013年には「京」を82,944フルノードで動かして分子データの18K解像度のレンダリング(今号の表紙をご覧ください)、2014年には6万ノード(52万コア)を使い10兆個の粒子のレンダリングに成功しています。現在はより多くのユーザーや研究者が使えるように、ユーザーインターフェイスや他アプリケーションとの連携(HIVE、HPC/PF)、さらなる高速化、各種シミュレーションデータフォーマットへの対応、より高品位で多様なレンダリングなどに取り組んでいます。今後のエクサスケール世代における、さらなる大規模可視化のための可視化システムのひとつとしても利用されていきます。

京の計算量を活用し、SURFACEを利用して8K、16K解像度で緻密な可視化をすることで、今までは見えてこなかった視覚的な発見もできるようになります。昨年のスーパーコンピューティングの学会であるSC14の展示では、シミュレーションデータから360度のパノラマCGを生成し、VRで体験できる展示も行いました。

### 可視化を超えて……

日本での最初の電子式コンピュータであるFUJICは、レンズ設計のために発生する膨大な光の経路の追跡(レイトレーシング)の計算を効率化するために作られました。コン

ピュータの進展とレイトレーシング法には実は長い歴史があります。

昨今では、可視化に限らず、皆さんのより身近なところでもレイトレーシング法が使われるようになってきています。たとえば、Disneyの3D CG映画『ベイマックス』では、レイトレーシングによる光輸送シミュレーションによる高品質なレンダリングが行われており、ハイパフォーマンスコンピューティングが可能にしたテクノロジーとアートのひとつということ、SC14で紹介されていました<sup>※4</sup>。

レイトレーシング法の本質は、波・粒子と物体との複雑な交差判定や散乱の計算をいかにして求めるかにあるため、アルゴリズムや実装を高速・高精度に突き詰めることで、可視化にかぎらず、医療、素材、航空、宇宙、自動運転、衝突解析、熱伝導解析、通信などへの幅広い応用も計画されています。

たとえば、自動運転のためにセンサーから得られた情報で複雑な三次元形状をコンピュータで瞬時に作り出し、リアルタイムで衝突シミュレーションをして安全性を検証したり、肌に光を当ててその表面下での散乱をコンピュータでの光散乱シミュレーションと比較することで手術を行わずに病理を見つけ出したり、現実世界では作りづらい構造をもった物質がどのような見た目を持つのか予測したり、太陽が二つあるような惑星では地表から空がどのように見えるのかなどのシミュレーションや予測が可能になります。

※4 <https://www.youtube.com/watch?v=-7Bpo1Quxyw>

# Makerムーブメントとものづくりのコンピューティング

近年しばしば耳にするこの言葉。個人あるいは小集団が新しい手法・技術を用いて自ら求めるものを作り出す様々な活動を総称しているようだ。ここではMakerムーブメントにまつわるトピックから「ものづくりのコンピューティング」に関連するものをいくつか抽出して解説しよう

## Maker Faire

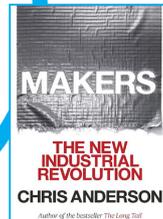
Makerたちの祭典"Maker Faire"は、O'Reilly社の主催で2006年から開催されている。最大の規模となるMaker Faire Bay Areaは10万人以上を集める。2014年6月にはオバマ大統領の主催による、ホワイトハウスで初めてのMaker Faireが開かれた。そのときの演説でオバマ大統領はMakerムーブメントについておおよそ次のように述べている。「アメリカ人が3Dプリンタ、レーザープリンタ、デザインソフトウェアといったツールを使う機会が増えている。それらの使い方は無料で知ることができ、クラウドファンディングのような資金調達の手段もある。製造の民主化が技術によって可能となった。元来、ものづくりは我々のDNAの一部であった。鉄道、発電所、摩天楼、インターネットはこの国の人が夢らし、実現したものだ。そして我々はまだ夢の途中である。市民ひとりひとりがMakerを称え、みずからも実行者となるう」ホワイトハウス公式サイトには"Nation of Making"という常設ページが設けられており、ホワイトハウス内のイベントに限らず、広くMakerたちの活動が報じられている。



Maker Faire White Houseにて、出展者の3Dプリンタに触れるオバマ大統領

## Make: & MAKERS

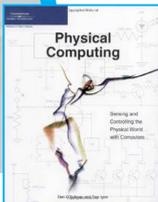
ものづくりカルチャーを表す"Make"、あるいはその実践者を"Makers"と称する表現は、O'Reilly社が2005年に創刊した雑誌"Make"によって提案され、クリス・アンダーソン著"MAKERS"(2009)のヒットで広まった。日本では従来からのメーカーと区別する意味を込めて「メイカー」と表記することがある。現在では、個人ベースのプロトタイピングや自作を楽しむライフスタイルを表す言葉として広く使われている。



# Maker Movement

## Physical Computing

ニューヨーク大学のTom Igoe氏らによって同名の著書(2004)を通じて提唱されたコンピューティングの概念。GUIやCUIしか持たない一般的なコンピュータにセンサとアクチュエータを付加し、現実世界とのインタラクションを実現することを指す。技術的には、IoTやウェアラブルコンピューティングと共通要素が多いが、プロトタイピングやDIYの手法として実践される事例が多い点が少し異なる。



## Open Source Hardware

オープンソースソフトウェアは一般的な概念となり、あらゆる分野のコンピューティングに欠かせない資源となっている。このオープンソースという概念をハードウェアへ拡張したのがオープンソースハードウェアだ。ソフトウェアと違いコピーはできないが、設計を複製する権利が保証されることから、様々なプロジェクトが発生している。Arduinoはその代表例と言えるだろう。



open source hardware

オープンソースハードウェアライセンス準拠製品に貼るためのロゴ

## FabLab

MITのBits and Atomsセンターのアウトリーチ活動として始められた、市民工房を開発・運用する運動。MITの"How to make (Almost) Anything"という人気コースに基づいており、個人を対象に低コストな工作機械とソフトウェアを用いるものづくりの場を提供している。2001年にボストンとインドで始まったFabLab開設の動きは世界中に伝搬し、2015年時点で日本を含む世界各国に400カ所を超えるFabLabが存在する。

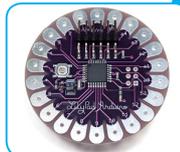


日本最初のFabLabは、2011年開設の"FabLab Kamakura"(鎌倉市)。2015年時点でFabLab Japanに登録されている国内の施設は、つくば市、渋谷区など12カ所以上がある

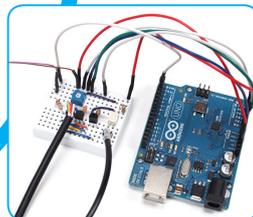
## Arduino アルドウィーノ

イタリアのデザイナーMassimo Banzi氏が中心となって開発されたマイクロコントローラボード(MCUボード)。最初のバージョンは2005年にリリースされ、2013年までにオフィシャル製品だけで70万個が世界中の開発者に渡った。ArduinoはCreative Commonsライセンス(ハードウェア部)とGNU GPL(IDE等ソフトウェア)に基づくオープンソースプロジェクトであり、誰でも複製して販売することができる。そのためクローンを含む普及数は把握できないが、オープンソースMCUボードのデファクトスタンダードとして広く普及しており、初期の3Dプリンタ、ドローン、ウェアラブルデバイス等のなかに見ることでき、Makerムーブメントから生まれた製品の多くがArduinoの恩恵を受けている。リファレンスハードウェアは8bitのシンプルなMCU(Atmel ATmega328)をベースにUSB IFを加えたもので、30ドル以下で販売されている。ソフトウェアはJAVA(Processing)ベースのIDEとCで記述された数キロバイトのファームウェアからなる。近年には32bit版やWiFi搭載型などもリリースされた。

ウェアラブルデバイスのプロトタイピングに使われることが多い"Lilypad Arduino"



現在の標準タイプ"Arduino Uno"。USBインタフェースでPCと接続し、専用の開発環境でプログラミングする



Arduinoユーザーの多くはまずブレッドボードを併用して電子回路のプロトタイピングを行う。技術的難度の低い道具立てによって、初学者でも自由にアイデアを試すことができる

## 芸術衛星 ARTSAT

多摩美術大学が東京大学と共同で進めているARTSATプロジェクトは、2014年2月、世界初の芸術衛星を宇宙へ放った(H-IIAロケット23号機に相乗り)。続いて同年12月には、2号機の"深宇宙彫刻 DESPATCH"の軌道投入に成功。両機共、搭載するミッションコンピュータにはArduino互換機を採用。また、機体を3Dプリンタで制作するなど、Maker文化を反映したミッションが設定された。



ARTSAT Project

2号機は機体そのものが彫刻作品となる。さらに宇宙で生成した詩をCW(モールス信号等)で送信し、地上ではソーシャルネットワークを使った協調ダイバシティ受信を行う

## Phenox

"Phenox"は東京大学工学系研究科航空宇宙工学専攻の若い研究者ふたりが開発した手のひらサイズのクアッドコプタ。知能的、インタラクティブ、プログラマブルを標榜している。一般的な小型クアッドコプタよりも豊富な計算資源を搭載し、画像・音声認識を駆使する高度な飛行を実現している。2014年の3代目プロトタイプはプロセッサとしてデュアルARMコア・FPGA混載のZynq-7000 SoCを搭載し、OSはLinux(Ubuntu)が動作する。空飛ぶサーバだ。このバージョンはKickstarterで賛同者を募り、23,000ドルの資金を得た。2015年には東京大学産学連携本部が主催する"TODAY TO TEXAS"プロジェクトの支援を受けてSXSW2015に参加するなど、世界のドローンコミュニティを視野に入れた活動を続けている。



Phenox Lab

重量65グラム、ペイロード25グラム。飛行可能時間は約5分間

## Autodesk 123D

Autodesk社はクラウドコンピューティング、モバイル、そしてMakerムーブメントに対して積極的に取り組んでいる。たとえば、簡単な操作で3Dモデルの作成編集が可能な個人向け無料アプリ"123Dシリーズ"は、計算負荷の大きい処理をサーバ側で実行する仕組みを取り入れて、モバイル機器での使いやすさを実現した。Makerムーブメントを巡る議論では、3DプリンタやデスクトップCNCといったハードウェアに注目が集まりがちだが、3Dデータを作成編集するソフトウェアツールこそが重要という主張が同社の施策から窺える。2014年後半には3DプリンタのOSとも言えるオープンソースソフトウェア体系"Spark"を発表した。オンラインの集合知も活用して「失敗しない3Dプリンティング」を実現するという。



"123D Catch"はスマートフォンの内蔵カメラで撮った写真から3Dデータを作成するツール。撮った画像はサーバへ送られ、3Dモデルに変換されて戻ってくる。この写真はiPadで模型を「キャッチ」した様子

## Raspberry Pi

30ドル台で購入できる小型PC "Raspberry Pi"は2015年1月の時点で、累計500万台が出荷され、教育用パーソナルコンピュータのデファクトスタンダードとして世界的に認知されつつある。また、ネットワーク機器のプロトタイピングに適した組み込みコンピュータとしても使われることが増えてきた。

最新のRaspberry Pi 2は同価格のままプロセッサが4コアとなり、GUIや画像認識といった計算能力が必要な処理にも対応できる。



Raspberry Piを16台接続して作った実験用PCクラスター。製作費は約10万円。計算能力は約2.6GFLOPS (LINPACK)。Raspberry Pi 2を使用すると同予算で64コアのシステムを構築可能。本機の詳細は <http://www.cenav.org/> に掲載

## Papilio

"Papilio"はFPGA入門者向けのオープンソースハードウェア。ArduinoをFPGAでエミュレートし、Arduinoと同様のソフトウェア環境を使用できる。さらにユーザーはライブラリから「回路」をダウンロードしてFPGAに書き込むことによって、ハードウェアには手を加えずに、映像や音声の処理のような高速度性が要求される機能を付け加えることができる。付加した回路はArduino部から見ると通常の外部回路として扱えるので、初心者も取り付きやすい。ハードワイヤド・コンピュータの威力を手軽に体験する方法のひとつとして注目されつつある。

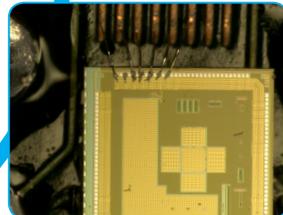


Gadget Factory

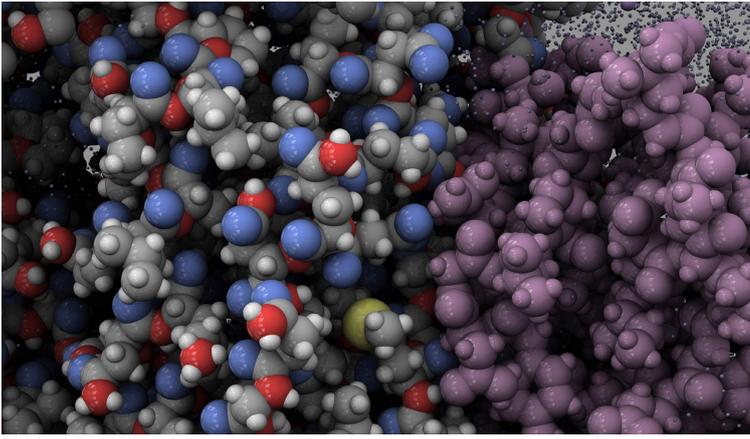
50万ゲートの"Xilinx Spartan 3E" FPGAを搭載する、"Papilio One 500K"。実売価格65ドル前後。秋葉原でも7000円前後で購入可能

## Make LSI

技術の民主化が究極に近づくとき、人々は自由に自分専用のLSIを作るだろうと、金沢大学の秋田純一教授は予想している。その日に備えて、先行例を築くことが目下の取り組みだ。"Make LSI"と名付けられたこのプロジェクトの第1段は「LチカLSI」。LEDをチカチカさせるためだけに設計製造したLSIだ。あざれるほど単純な成果物であっても、そこに至る過程はまだかなり複雑で、とくにCADと半導体 (ASCI) 製造プロセスはアマチュアが気軽に使える状態とはいえない。しかし、フリーCADの普及が進み、産総研が中心となって開発中の「ミニマルファブ」のような超小型半導体工場が実用化されれば、Make LSIは一気に現実味を持つと秋田教授は見ている。その時期は、早ければ5年後には訪れるというのが同教授の読みだ。フォトマスクの代わりにDLPを使うマスクレス露光を導入することで、製造価格も劇的に低減される。1μmプロセス (80386プロセッサと同程度) のLSIを個人の予算内で作れるようになるかもしれない。「それまで作れなかったものが作れるようになると、人は何を作ろうとするだろうか」。この問いかけがイノベーションに繋がると秋田教授は考えている。



Junichi Akita



## 今号の表紙

### 京を用いて可視化した生体膜中の多剤排出トランスポーター

横浜市立大学の生体超分子情報科学研究室でシミュレーションされた生体膜中の多剤排出トランスポーター AcrB<sup>※</sup>を、SURFACE (本誌9ページ参照) を使い、京コンピュータのフルノード (82,944ノード) を用いて可視化したもの。画面を288×288のタイルに分割し、それぞれのタイルを京の1ノードで可視化し、最後にタイルを合成して18K解像度の画像として出力しています。レイトレーシングにより分子間の遮蔽を計算し、奥行き感と分子間の位置関係がわかりやすくなるようにしています。

理化学研究所 計算科学研究機構 可視化技術研究チーム 藤田将洋

※T. Yamane, S. Murakami, M. Ikeguchi: Functional rotation induced by alternating protonation states in the multidrug transporter AcrB: All-atom molecular dynamics simulations. *Biochemistry*, 52, 7648-7658 (2013).

## 編集後記

今号はいつもより4ページ多い、全12ページの構成でお届けしています。これからのものづくりにコンピュータをどう活用すればいいのだろう……産業界の第一線でそうした問題意識を共有している開発者、研究者、企画者、そして経営者の皆さんに向けて編集しています。(F)



## 計算工学ナビ オフィシャルサイト

本誌のPDF版やソフトウェアライブラリ、ニュースなどのコンテンツを提供しているWebサイトは下記のURLからアクセスできます

<http://www.cenav.org/>



## 計算工学ナビ Vol.6

発行日：2015年3月20日

発行：東京大学生産技術研究所

革新的シミュレーション研究センター

〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1

office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp