

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 平成20年度 事業活動報告

〈平成20年4月1日～平成21年3月31日〉

I. 協議会全体事業活動報告

1. 運営委員会/運営小委員会、他

1.1 運営委員会：

- ・委員長：佐々木 元(日本電気)
- ・副委員長：中村道治(日立製作所)、小林敏雄(日本自動車研究所)、柘植綾夫(芝浦工業大学)
中川幸也(IHI)、村野和雄(富士通研究所)、北村一泰(大正製薬)
- ・開催状況：平成20年度 第1回(通算第4回)(08/7/18)、第2回(通算第5回)(09/2/9)

1.2 運営小委員会：

- ・委員長：高田(旭硝子)、副委員長：安東敏彦(味の素)、笠俊司(IHI)、小池秀耀(アドバンソフト)
- ・開催状況：第17回(08/4/22)、第18回(7/10)、第19回(9/25)、第20回(11/26)、
第21回(09/1/30)、第22回(3/25)

協議会業務の実務推進責任を担うため、合計6回/年開催。

また、運営小委員会の下に産協協運営上の課題検討を行うためのWGを適宜設置し、協議会が抱えている重要課題を検討・審議した。

- ・課題検討WG：平成21年度から短期・中期ミッションを明確にし、実施体制における活動資金の確保、組織の法人化案等を検討し、答申案を策定。平成20年度第2回(通算第5回)運営委員会に答申。

1.3 広報委員会：

- ・委員長：伊藤聡(東芝)
技術セミナー、シンポジウム、展示、ホームページ等により、協議会活動の広報を事務局と連携して推進した。個々の活動はそれぞれWG体制で推進し成果を積み上げた。
- ・スーパーコンピューティング技術の最新情報、活用事例などの展開・啓発
- ・本技術に係る国の施策(文科省、経産省、内閣府など)の情報展開
- ・協議会活動成果の会員へのアピール

1.4 事務局：

JEITAに協力を仰ぎ、事務局を下記に設置して運営した。

- ・〒101-0065 東京都千代田区西神田3-2-1 千代田ファーストビル南館7階
社団法人 電子情報技術産業協会内(電話：03-5275-7260/Email：a-sei@jeita.or.jp)

2. 啓発・普及活動

2.1 次世代スーパーコンピュータ開発計画に対する産業界の提案、要望【産業界の要望提案】

(1) 文部科学省「次世代スパコン戦略委員会」における産協協の要望

産業界から「ものづくり戦略拠点」の必要性、要望等を平成21年1月21日の戦略委員会でプレゼンした。

- ・戦略拠点における産業利用枠のあり方や拠点への要望
- ・ものづくり分野の戦略拠点としての企業現場とのコラボレーション形成
- ・産業界で必要とされる人材育成

(2) 次世代スパコン共用における産業利用促進の基本的な考え方の提案(理化学研究所)

次世代スパコンの産業界での利活用に関して、開発主体の理化学研究所との意見交換を行うために

「共用WG」を設置し、産業利用の促進に関する基本的な考え方や、導入すべきアプリケーションやセキュリティ対策など今後の具体的な取り組みの進め方について検討を進め、広く産業利用の促進を図るため、国や大学・研究機関、産業界において取り組むべきことに関する提言をまとめた。

2.2 シンポジウム【情報発信/普及啓発】

第3回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム「産業界におけるスーパーコンピュータ技術」を平成20年10月9日(木)に東京大学生産技術研究所で開催した。

今年度は発足3年目を迎え、協議会の活動状況及び産業界のみならず国のスーパーコンピューティング技術に関する研究活動も強く情報発信することに努めた。

企画の推進は、運営小委員会にシンポジウム実行WGを設置し、企画立案、準備を実施、また、シンポジウムでは、各委員の所属する各社から人員の支援を受けて運営した。概要は下記の通り。

開催日時：平成20年10月9日(木)

シンポジウム：13:00～17:00 参加者 110名(前回310人から大幅減少)

懇親会：17:15～19:00 参加者 60名

開催場所：東京大学 生産技術研究所 コンベンションホール

協力：理化学研究所

協賛：東京大学生産技術研究所、分子科学研究所、国立情報学研究所

プログラム：開会挨拶 佐々木元 委員長(日本電気)

来賓挨拶 文部科学省：倉持隆雄大臣官房審議官

経済産業省：星野岳穂参事官

記念講演Ⅰ「アカデミアのコミュニティー・人材育成の将来像と産業界への期待」

平尾公彦 東京大学 副学長

記念講演Ⅱ「スーパーコンピューティング技術に期待するもの

ー創薬における計算科学の現在と近未来ー」

北村一泰 大正製薬(株) 取締役

パネル討論

「スーパーコンピューティング技術の産業での利活用と産産協への期待」

・モデレーター：伊藤聡 (株)東芝 研究主幹

・パネリスト：井上諭一 文部科学省 室長

岡崎進 名古屋大学 教授

加藤千幸 東京大学 教授

小池秀耀 (株)アドバンスソフト 社長

高田章 (株)旭硝子 特任研究員

閉会挨拶 小林敏雄副委員長(日本自動車研究所)

懇親会 有志

収支：収入；302千円、支出：411千円

収支：▽109千円(不足分:スパコンセミナー収入から充当)

2.3 展示会(CEATEC)の開催【情報発信/普及啓発】

CEATEC JAPAN 2008(最先端IT・エレクトロニクス総合展)の会場内に展示ブースを設け、産産協の活動をPRするとともに、文科省や公的研究機関の協力を仰ぎ、わが国のスーパーコンピューティング技術の研究開発の現状をパネル展示した。

開催日時：平成20年9月30日(火)～4日(土) 10:00～17:00 訪問者：約500名以上

開催場所：千葉幕張メッセ CEATEC JAPAN 2008 展示会場ブース

協力：理化学研究所

後 援：宇宙航空研究開発機構

協 賛：文部科学省、東京大学情報基盤センター、東京工業大学学術国際情報センター
東京大学生産技術研究所、分子科学研究所、国立情報学研究所
日本原子力研究開発機構、海洋研究開発機構

来 場 者：アンケート回答数は昨年の218人に対して倍増の410人、来場者も多く盛会

実施運営：展示の実施運営は、関係機関並びに関係有志からご支援、ご協力によって推進。

2.4 スーパーコンピューティング・セミナー開催【普及・啓発】

(1) 開催概要

産業界におけるスーパーコンピューティング技術の一層の普及・促進を目的として、前年度に引き続き「スーパーコンピューティング・セミナー」を隔月で計5回(参加費有料)開催した。

本セミナーでは、会員企業の事業活動に役立つように、毎回スーパーコンピューティング技術の最新技術の解説(大学、研究機関：「学の先端技術情報」)、産業界でのスパコン利用動向や各企業における実例(会員企業：「産の応用事例情報」)、国の関連施策(省庁：「官の政策情報」)などをテーマ別に講演を実施し、また、終了後には講師と参加者との交流・情報交換を進める懇親会を開催。

平成20年度セミナーの概要は下記のとおり。

◇第9回(平成20年度第1回)：平成20年7月23日(木)13:30~17:00 (参加者：56名)

テーマ：「産におけるシミュレーション活用状況と課題」

◇第10回：平成20年9月18日(木)13:00~17:00 (参加者：51名)

テーマ：「ナノ材料開発分野のスパコン活用」

◇第11回：平成20年11月27日(木)13:00~17:00 (参加者：52名)

テーマ：「バイオ産業界におけるシミュレーション活用」

◇第12回：平成21年1月23日(金)13:00~17:00 (参加者：43名)

テーマ：「もの創りに関するシミュレーション活用」

◇第13回：平成21年3月19日(木)(開催予定)13:00~17:00(参加者：45名)

テーマ：「関西におけるシミュレーション活用状況」

(2) 見えてきた課題

- 1) 参加者の低減：申込社数は加盟社の三分の一以下(約40社/180社)。また、セミナー参加者数が漸減の傾向(50人程度)で集客に苦慮している。
- 2) 運営負担の増加：運営負担が一部の委員に偏り、また、事務局の負担も増えている。
- 3) テーマの選定：計13回(3年間)の開催で、テーマが一巡、今後、新規性が弱まる恐れあり。
- 4) 次年度からは、座学のセミナーだけでなく、テーマ一巡したことで、もっと実技を取り入れた研修会/産業界の人材育成を目指した企画検討中。

2.5 その他(他機関への協賛などによるシンポジウム/セミナーなど)

産業界におけるスーパーコンピューティング技術の普及啓発を行うため、関係機関との連携、協力を進め、会員の情報収集の一助とした。

(◆：共催、協賛、◇：会員による講演、ホームページでのPR他)

◇平成20年6月2日(月)：場所：東京大学武田先端知ビル

「T2K シンポジウム:T2K オープンスパコンによるペタスケール計算への道」

主催：T2K オープンスパコンアライアンス

◇平成20年6月3日(火)~6日(金)：場所：日本国際交流館/日本科学未来館

「次世代スーパーコンピュータプロジェクト

”ナノ分野グランドチャレンジ研究開発”第1回国際会議」

主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究

開発・ナノ統合拠点

- ◇平成20年6月6日(金)：場所：学術総合センター
「NAREGI 成果報告会:NAREGI ミドルウェア Ver. 1.0」
主催：国立情報学研究所
- ◇平成20年6月11日(水)：場所：東京工業大学
「先端研究施設共用イノベーション創出事業[産業戦略利用]
”みんなのスパコン” Tsubame によるペタスケールへの飛翔シンポジウム」
主催：東京工業大学学術国際情報センター
- ◇平成20年9月5日(水)：場所：学術総合センター
「地球シミュレータ産業利用シンポジウム2008」
主催：海洋研究開発機構
- ◆平成20年9月16日(火)、17(水)：場所：MY PLAZA
「次世代スーパーコンピューティングシンポジウム2008」
主催：理化学研究所
- ◇平成20年10月17日(金)：場所：東京大学武田先端知ビル
「共用イノベーションシンポジウム」
主催：東京大学情報基盤センター、北海道大学情報基盤センター、
東北大学サイバーサイエンスセンター、名古屋大学情報連携基盤センター、
京都大学学術情報メディアセンター、大阪大学サイバーメディアセンター、
九州大学情報基盤研究開発センター
- ◆平成20年10月22日(木)：場所：東京大学生産研究所
「第1回イノベーションPJ”ポスト革新PJ”説明会」
主催：イノベーションPJ 産業応用連絡会議(仮称)
- ◆平成20年11月6日(木)：場所：岡崎市・分子科学研究所
「RISM/3D-RISM 講習会(第1回)」
主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究
開発・ナノ統合拠点
- ◆平成20年11月21日(金)：場所：秋葉原コンベンションホール
「第1回連続研究会:陽電子を用いた半導体材料の評価」
主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究
開発・ナノ統合拠点
- ◆平成21年12月10日(水)：場所：岡崎市・分子科学研究所
「第2回連続研究会:元素戦略・ナノクラスターの化学」
主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究
開発・ナノ統合拠点
- ◆平成21年12月12日(金)：場所：岡崎市・分子科学研究所
「第3回連続研究会:新しい概念に基づく熱電材料とその物理」
主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究
開発・ナノ統合拠点
- ◆平成20年12月18日(木)：場所：岡崎市・分子科学研究所
「GAMESS によるFMO 計算講習会(第2回)」
主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究
開発・ナノ統合拠点

- ◇平成20年12月25日(金)：場所：丸の内 MY PLAZA ホール
「次世代生命体統合シミュレーション研究開発プロジェクト・シンポジウム2007」
主催：理化学研究所
- ◆平成21年1月27日(火)：場所：岡崎市 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
「高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト Modylas と
入力支援ツール Ignition<仮称>(第3回)講習会」
主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究
開発・ナノ統合拠点
- ◇平成21年3月4日(水)、5日(木)：場所：自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト第3回公開シンポジウム」
主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究
開発・ナノ統合拠点
- ◆平成21年3月9日(月)：場所：経団連会館
「次世代スパコン活用トップセミナー」
主催：計算科学振興財団
- ◆平成20年3月11日(水)：場所：学士会館
「ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会(第2回)」
主催：文部科学省次世代スーパーコンピュータプロジェクト・ナノ分野グランドチャレンジ研究
開発・ナノ統合拠点

2.6 ホームページ：<http://icscp.jp/>

ホームページへの情報追加、メンテナンスを実施。

- ・協議会活動内容(委員会、各部会他)の情報発信
- ・シンポジウム・セミナーの案内
- ・協議会会員ニーズの把握、意見収集(将来計画)
- ・関連機関の推進活動の情報発信

2.7 その他：

協議会の活動趣旨に沿った活動を行う機関・団体との情報交換、それぞれの業務(例えばセミナー、シンポジウムなど)への相互協力、支援等を行う。

- ・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との連携
- ・分子科学研究所、理化学研究所：グランドチャレンジ・ソフトウェアの開発での連携
- ・理化学研究所次世代スパコン開発実施本部：次世代スパコンの利活用での連携
- ・文部科学省、経済産業省、内閣府：国の施策に関する情報発信
- ・計算科学振興財団、次世代スパコン利用推進協議会：情報交換など
- ・その他、シミュレーション技術に係る公的研究機関・大学：情報交換、学会等での連携

II. 部会活動報告

1. 数値シミュレーションソフト評価普及部会：部会長：笠俊司(IHI)

活動目的：ものづくり分野、ナノシミュレーション分野、ライフサイエンス分野で進められている国家プロジェクトによるシミュレーションソフトウェア開発と連携し、ソフトウェア開発への協力と開発ソフトウェアの評価・実証を進め、ソフトウェアの産業界への普及を図るため、数値シミュレーションソフト評価普及部会を設置する。

活動概要/成果：本部会は、分科会活動を円滑に進めるための情報交換(横通し)機能を担う。平成20

年度は、新たな分科会としてライフサイエンス応用分科会の立ち上げを支援した。

1.1 先端ソフトウェア応用分科会：分科会主査：笠俊司(IHI)

平成19年度まで東大生研を中心に開発が進められた革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクトに協力し、ソフトウェアの試計算・実証計算を通して、プログラムの評価を行うと共に、開発側への要望の取りまとめや産業界への普及活動を行った。

また、平成20年度より開始されたイノベーション基盤ソフトウェアの研究開発プロジェクトの立ち上げに協力し、開発されるソフトウェアの機能・性能などへの要望を取りまとめ、産業界ニーズとして提示した。

プロジェクト開始に当り、産業界も参加することが求められているソフトウェア機能の検証に用いる実証テーマ設定のためのキックオフである産応協-イノベーション基盤PJ連絡会議をプロジェクトと共同で開催した。

分科会の下部組織としてナノ、バイオ、流体・構造の3つのワーキンググループ(WG)を組織し、会員とプロジェクト開発側とのコラボレーションの場として、活発な活動を継続した。

1.2 ナノ統合シミュレーション技術応用分科会：分科会主査：高棹滋(旭化成)

前年度まで行ってきた「ナノ設計実証」の後継となる「産学連携ナノ統合プログラム」において、公募による共同研究の継続について呼びかけ支援を行った。また、開発ソフトウェアの産業界での利活用普及を目的とした「ナノ統合拠点」との共催による開発ソフトウェア講習会の開催、および勉強会や研究会を展開した。

(1) 統合ソフト講習会

第1回「RISM/3D-RISM講習会」

●日時：2008年11月6日(木)10:00～17:00／場所：分子科学研究所

●ソフトウェア名：「RISM/3D-RISM」

第2回「GAMESSによるFMO計算講習会」

●日時：2008年12月18日(木)9:30～18:00／場所：分子科学研究所

●ソフトウェア名：「GAMESSによるFMO」

第3回「高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトModylas と入力支援ツールIgnition(仮称)講習会」

●日時：2009年1月27日(火)10:00～17:00／場所：自然科学研究機構 岡崎

●ソフトウェア名：「Modylas」「Ignition(仮称)」

(2) 連続研究会

第1回「陽電子を用いた半導体材料の評価」

●日時：2008年11月21日(金)13:30～17:00／場所：秋葉原コンベンションホール

第2回「元素戦略・ナノクラスターの化学」

●日時：2008年12月10日(水)9:00～17:30／場所：愛知県岡崎市・分子科学研究所

第3回「新しい概念に基づく熱電材料とその物理」

●日時：2008年12月12日(金)10:30～16:30／場所：東北大学金属材料研究所

第4回「抗がん剤を使わない癌治療法：ハイブリットリポソーム」

●日時：2008年12月27日(土)16:00～28日／場所：グリーンピア南阿蘇

第5回「ウイルスの分子科学」

●日時：2009年1月6日(火)13:00～17:30／場所：東京大学本郷キャンパス

第6回「超分子、分子素子、分子発光・バイオマス(合同開催)」

●日時：2009年1月29日(木)9:00～16:30／場所：分子科学研究所

第7回「DDSナノキャリアー(脂質膜、たんぱく質複合体、高分子ミセルを中心として)」

●日時：2009年1月29日(木)9:00～16:30/場所：東京女子医科大学河田町キャンパス
第8回「分子エレクトロニクス、光エネルギー変換の化学」

●日時：2009年1月30日(金)9:00～16:30/場所：分子科学研究所
第9回「膜、ミセル(ソフト複雑系の分子科学)」

●日時：2009年2月10日(火)13:30～17:30/場所：ホテル法華クラブ京都
第10回「タンパク質機能(イオンチャネル)」

●日時：2009年2月16日(月)13:00～17日/場所：自然科学研究機構
第11回「燃料電池」

●日時：2009年3月9日(月)13:30～17:30/場所：北海道大学・
第12回「エタノール製造(バイオマス(酵素反応))」

●日時：2009年3月13日(金)13:20～14日/場所：湯の山「希望荘」
第13回「TDDFT:光応答計算の基礎、応用と展開」

●日時：2009年3月19日(水)10:30～16:30/場所：キャンパスイノベーションセンター東京
第14回「タンパク質機能(フォールディング)」

●日時：2009年3月30日(月)10:00～16:30/場所：東京医科歯科大学

(3) 説明会

ナノ統合シミュレーションソフトウェア説明会

●日時：2009年3月11日(水)10:00～18:20/場所：学士会館

1.3 ライフサイエンス応用分科会<新規>：分科会主査：安東敏彦(味の素)

京速コンピュータのライフサイエンス領域での産業応用を推進するために、ソフトウェア開発に関連する情報を共有すると共に、ソフトウェア使用や利用の仕組みに対する要望のとりまとめを行う。

理研、分子研、東大生研において開発されているライフサイエンス分野のシミュレーションソフトに対する参議場会からの要望を提言すると共に、参議場会が開発に参画しやすい方法や、開発されたソフトウェアの利用普及の仕組みについて提案する。

このため、本分野に関心のある方々に対して、積極的な参加の案内を進め、1月末に分科会構成を行った。

2. 計算科学技術普及施策部会：部会長：小池秀耀(アドバンスソフト)

前年度まで行ってきたスーパーコンピュータ部会とスーパーコンピューティング施策部会は、名称をスーパーコンピューティング技術分科会とシミュレーションソフトロードマップ分科会に変更後、従来の活動を継続する。両分科会は計算科学技術普及施策部会の下で、活動内容の情報交換、および方向性を議論し、活動の整合性を図った。

また、数値シミュレーションソフト評価普及部会との共同審議により、国プロ提案WG(笠主査)を設置し、「次世代材料設計支援システム」の提案を検討し、関係省庁との調整を進めた。

2.1 スーパーコンピューティング技術(SCT)分科会：分科会主査：村上英樹(新日鐵)

前年度までのスーパーコンピュータ部会の基本ミッションである「次世代スパコン関の活動」に加えて、スーパーコンピューティング技術全般を対象に、会員ニーズを吸い上げるに活動を中心に実施した。新たな活動として、以下を実行した。

①いくつかの代表企業に対してHPCの実態と要望について、個別ヒアリングを開始した。

IHI(重工)、東芝(総合電気)、大正製薬(製薬)、新日鐵(鉄鋼)、住友化学(化学)

②各意見・情報から、ソフトに関する課題はアプリケーションWG、実行に関する課題は産協協体制強化WGに繋ぎ、人材育成プログラム構想へ。

③SCT分科会の活動参加PRビラ製作及び配布。

④2007年アンケートの内「ICSCPに対する意見・要望」について整理し、産協協体制強化WGにて、

運営方法の見直し案を協議。

⑤分科会内にて、個別企業の HPC 利用例の紹介、質疑応答を実施。

2.2 シミュレーションソフトロードマップ分科会：分科会主査：小池秀耀(アドバンスソフト)

欧米におけるスーパーコンピューティング用アプリケーションソフトの状況調査・評価を行い、その結果を踏まえてわが国のソフトウェア開発のあるべき姿やロードマップの検討を行う。その整理された結果を書籍として発行することとした。

「ーコンピュータ・シミュレーションが拓く産業の明日ー」のタイトル名で、現在、原稿が完成し、印刷業者に出稿、製本し、3月19日に発刊した。

以上