

発行：東京都港区虎ノ門  
2-10-1 虎ノ門ツインビルデ  
ィング西棟4階  
富士通虎ノ門オフィス内  
Mail:icscp@nifty.com  
Ver.1  
2016年10月3日(月)No.042

**ICSGP 産応協ニュース** [第42号]  
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)  
Industry Committee for Super-Computing Promotion

## 第9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開催企画 (2016/12/21 開催・概要決定!!)

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)では、スーパーコンピューティング技術の産業界における利活用推進を目的に様々な活動を展開。

この度当協議会では、「産業応用の拡がり～身近になったスーパーコンピューティング技術」をメインテーマに掲げ、下記のとおり第9回シンポジウムを開催。

- ・テーマ：「産業応用の拡がり～身近になったスーパーコンピューティング技術～」
- ・開催日時：2016年12月21日(水)13時から17時30分まで
- ・開催場所：イイノカンファレンスセンター(東京都千代田区内幸町)
- ・参加費：聴講無料 <定員200名>
- ・主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
- ・後援(予定)：文部科学省、経済産業省、一般社団法人日本経済団体連合会
- ・協力(予定)：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
- ・協賛(予定)：一般財団法人高度情報科学技術研究機構、一般社団法人電子情報技術産業協会、一般社団法人日本自動車工業会、一般社団法人HPCIコンソーシアム、公益財団法人計算科学振興財団、公益財団法人都市活力研究所、公益社団法人関西経済連合会、国立研究開発法人科学技術振興機構、国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構、大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所、特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西

**第9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**

**産業応用の拡がり**  
～身近になったスーパーコンピューティング技術～

2016年**12月21日(水)** 13:00より(12:30開場) **聴講無料**

**イイノカンファレンスセンター RoomA**  
(東京都千代田区内幸町)

【申込方法】  
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会ホームページよりお申し込みください。  
⇒申込URL: <http://www.icscp.jp/seventeenth/index.php?id=9-1> (※大きなお名前を必ず入力してください)  
※申し込み終了後に申し込み状況を確認してください。定員200名を超過した場合は、ご希望の分野を優先して申し込みとさせていただきます。

主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)  
後援：文部科学省、経済産業省、一般社団法人日本経済団体連合会  
協賛：一般社団法人電子情報技術産業協会、一般社団法人日本自動車工業会、一般社団法人HPCIコンソーシアム、公益財団法人計算科学振興財団、公益財団法人都市活力研究所、公益社団法人関西経済連合会、国立研究開発法人科学技術振興機構、国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構、大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所、特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西

【お問い合わせ先】 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 ホームページ <http://www.icscp.jp/> 電話 03-6435-6425

ポスター(案)20160929 現在

## [プログラム概要]

13:00-13:05	開会挨拶
13:05-13:20	来賓挨拶 文部科学省 経済産業省
13:20-14:00	基調講演 国立研究開発法人 科学技術振興機構 顧問 中村道治氏
14:00-14:20	平成 28 年度産応協活動状況報告 産応協企画委員長 水落隆司
14:20-14:30	休憩
14:30-15:10	講演 1 イーグル工業株式会社技術本部技術研究部 部長 井上秀行氏
15:10-15:50	講演 2 みずほ情報総研株式会社事業戦略部 プリンシパル 宮田隆司氏
15:50-16:10	休憩
16:10-17:30	パネルディスカッション 「ライフスタイルを変えるコンピューティング技術 (仮)」 (パネラー) ・住友ゴム工業株式会社 研究開発本部 内藤正登氏 ・イーグル工業株式会社 技術本部技術研究部 井上秀行氏 ・みずほ情報総研株式会社事業戦略部 プリンシパル 宮田隆司氏 ・株式会社本田技術研究所四輪 R&D センター シニアエキスパート 内田孝尚氏 ・〇〇〇〇〇〇〇〇 (調整中)
17:30-17:35	閉会挨拶

なお、シンポジウム終了後に同会場で懇親会（会費制：2,000 円）を開催。

## 第 35 回スパコンセミナー開催結果報告<平成 28 年度第 1 回>

### テーマ:分子・材料設計の新たな手法開拓に向けて (インフォマティクスのアプローチを中心に)

本年度は、産応協設立 11 年の年として、次の 10 年に向けたユーザコミュニティ発展を目指した活動を展開し、年 3 回のスパコンセミナー「旬なトピックスを含めた啓蒙活動とニーズ発掘」の企画・開催を推進することといたしました。

本年度第 1 回(通算 35 回)スパコンセミナーは、平成 28 年 9 月 21 日(水)午後 1 時から 5 時まで、機械振興会館地下 3 階研修-1(東京都港区・東京タワー前)で行いました。

今回は、分子・材料設計の新たな手法開拓、特にインフォマティクスのアプローチを重点テーマとして開催しました。



第 35 回スパコンセミナー参加風景  
平成 28 年 9 月 21 日(水)  
午後 1 時から 5 時



テーマ:「分子・材料設計の新たな手法  
開拓に向けて  
～インフォマティクスのアプローチを中心に～

スーパーコンピューティングの応用は、科学研究から工学、社会科学など、対象が広がると同時に、その社会的意義・期待も高まりつつあります。本セミナーでは、関係分野の有識者をお招きし、最新動向、事例、今後の展望等について講演をいただきました。

#### [実施概要]

主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協/ICSCP）

日時：2016年9月21日(水) 13:00～17:00

場所：機械振興会館 地下3階研修-1

(東京都港区・東京タワー前)

参加者数：47名（内、参加登録:33名<32名/当日1名>、講師/WG委員/事務局:14名）

#### 第35回スパコンセミナー実施プログラム結果(20160921 機械振興開会 B3 研修1)

##### <司会進行:実行委員会・スパコンセミナーWG委員(株MCHC)竹内久雄>

- |             |   |          |
|-------------|---|----------|
| 13:00～13:05 | 開会ご挨拶<br>産応協実行委員会委員長(住友化学株)   | 石田 雅也    |
| 13:05～13:50 | 「データ集約型化学研究へのパラダイムシフト<br>～分野融合がもたらす可能性～」<br>東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 | 教授 船津 公人 |
| 13:50～14:35 | 「データベースとインフォマティクスを活用した蓄電池材料の探索」<br>名古屋工業大学 大学院 工学研究科 生命・応用化学専攻        | 教授 中山 将伸 |
| 14:35～14:50 | 休憩  |          |

##### <司会進行:実行委員会・スパコンセミナーWG委員(東レ株)茂本 勇>

- |             |  |          |
|-------------|--|----------|
| 14:50～15:35 | 「先進計算スクリーニングによる新規半導体の開拓」<br>東京工業大学 科学技術創成研究院フロンティア材料研究所                                  | 教授 大場 史康 |
| 15:35～16:15 | 「物質・材料科学における機械学習の先端応用：現状と展望」<br>大学共同利用開発法人 情報・システム研究機構 統計数理研究所<br>モデリング研究系・データ同化研究開発センター | 准教授 吉田 亮 |
| 16:15～16:55 | 「マテリアルズ・インフォマティクスとスパースモデリング」<br>東京大学大学院 新領域創成科学研究科                                       | 教授 岡田 真人 |
| 16:55～17:00 | 閉会の挨拶<br>産応協実行委員会・スパコンセミナーWG 主査(日本電気株)   | 高原 浩志    |

## 講演講師の紹介

	<p>船津研究室は、情報科学的な手法を用いて化学の様々な問題の解決を目指すケモインフォマティクスの研究室です。材料設計・医薬品等の分子設計・有機化合物の合成経路設計・プロセス制御・様々な物性および活性の予測などを対象とした研究を行っています。</p> <p><a href="http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp/">http://funatsu.t.u-tokyo.ac.jp/</a>.</p>
	<p>中山研究室は、無機固体化学・電気化学・計算科学の専門知識に基づいてリチウムイオン電池材料や燃料電池の機能解析と材料探索を中心に研究活動を展開しています。研究活動は、名古屋工業大学のほかに京都大学・触媒電池元素戦略拠点 (ESICB)、物質材料研究機構 (NIMS) ナノ材料科学環境拠点 (GREEN) および情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (Mi2i) でも展開しています。</p> <p><a href="http://nakayama.web.nitech.ac.jp/jp/">http://nakayama.web.nitech.ac.jp/jp/</a></p>
	<p>大場研究室は、膨大な第一原理計算のデータを蓄積し、そこから効率的かつ自動的に有望な物質を選び出すハイスループット・スクリーニングの基盤技術の開発を進めています。高いポテンシャルを有する新物質を的確に選出し、連携している実験グループに提案することで、材料開発を加速することが目標です。このシナリオを実現するため、計算手法の開発に取り組んでいます。</p> <p><a href="http://www.msl.titech.ac.jp/~oba/research.html">http://www.msl.titech.ac.jp/~oba/research.html</a></p>
	<p>吉田研究室は、ベイズ統計学と機械学習を駆動力として、バイオサイエンス分野の諸問題に幅広く取り組んでいます。</p> <p>以下の四つの主な研究課題を紹介。</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>(1) 力学的反発力に基づく並列型マルコフ連鎖モンテカルロ法とゲノム配列のパターン認識</li> <li>(2) カーネル原像法による有機化合物の分子設計</li> <li>(3) 4次元顕微鏡画像に基づく神経細胞のカルシウムイオン濃度の定量化</li> <li>(4) ベイジアン・モデリング技術を使った生体分子ネットワークの構造設計と制御</li> </ol> <p><a href="http://daweb.ism.ac.jp/yoshidalab/index.html">http://daweb.ism.ac.jp/yoshidalab/index.html</a></p>
	<p>岡田研究室は、統計力学や非線形非平衡物理学などの理論物理学の手法で脳科学・神経科学を研究するとともに、情報統計力学・機械学習を用いて物性物理学・地球惑星科学などの自然科学の広い分野を研究しています。</p> <p>脳科学・神経科学では、「スパース符号化」という仮説と密接に関連し、情報科学では圧縮センシングという技術とつながりがあり、高次元の観測データからの知識抽出という切り口から、幅広い自然科学分野のデータ解析において成果をあげつつあります。</p> <p><a href="http://mns.k.u-tokyo.ac.jp/index.php">http://mns.k.u-tokyo.ac.jp/index.php</a></p>

[平成 28 年度活動進捗報告]

**産業基盤ソフトウェア検討WG、2016 年度活動計画概要**

産業基盤ソフト WG(20160708)

1. 活動の背景、目的

産業基盤ソフトウェア検討ワーキンググループ（基盤ソフトWG）は、中長期的に産業界が必要とする HPC（High Performance Computing）分野の基盤ソフトウェアについて、産業界がアカデミアなどと連携して開発推進・維持・発展する仕組みの検討を目的として発足した（2014 年度）。しかし、当初の議論では、主体的に開発推進すべきソフトウェアについて、すぐに顕在化する具体的なテーマを見出すには至らず、現状のシミュレーションの活用状況を把握した上で、さらに潜在レベルを含めた発展的ニーズを見出す必要があることが明らかとなり、2015 年度はより専門的な議論を行うために「機械・建設」、「化学・材料」の 2 分野で分野別研究会を立ち上げ、産業界のニーズを仮説としてまとめた。

<産業界のニーズ仮説のポイント>

- シミュレーションは機械・建設分野では商用ソフトウェアを中心に研究開発から設計・製造現場で実用化され、必要不可欠なものとなっている。
- 化学・材料分野においても、研究開発において有効性が広く認識され、競争力強化に欠かせないツールとして浸透しつつある。
- 両分野に共通して、更なる発展に向けて、協調領域と競争領域のニーズが存在。
- 協調領域では「アカデミア・国家プロジェクト」に対して、既存技術を凌駕する革新的な取り組みへの期待があり、HPC には、10 年あるいはそれ以上の技術の先取りに対するニーズが存在。
- 一方、実用化が進んだ競争領域では、対費用効果、製品開発との同期、機密性などの制約のため、「企業・ベンダー」で対応すべき強いニーズが存在したが、アカデミアへの期待は小さい。

2. 2016 年度活動概要

2016 年度は、前年度のニーズの仮説を踏まえ、以下の活動を行う。

- ① 2015 年度成果をもとにしたニーズ（仮説）の発信（2016 年度上期）
- ② 海外を含めた成功事例の調査（ハード・ソフト・利用体制を含めたアプリ全般へ調査範囲の拡大）
- ③ シーズとニーズのマッチング、個別テーマの探索（燃焼、化学反応など）  
（アプリケーションの開発推進、維持、発展の仕組みの検討についてはロードマップ調査に集約）

2017 年度以降は、個別テーマの具体化を目指す。

<2017 年度>

- 研究開発のプロジェクト化も含めた、個別テーマの具体化の提案（予算、体制）

<2018-2020 年度>

- 個別テーマの実施

**[開催案内] 第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題  
成果報告会 (RIST 主催)**

一般財団法人高度情報科学技術研究機構が主催する「第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会」平成 28 年 10 月 21 日(金)コクヨホールにおいて開催しますのでご案内します。  
<http://www.hpci-office.jp/>

主なプログラムは、「優秀成果賞課題による成果発表」「全課題によるポスター発表」「招待講演 (PRACE, NSCC)

**招待講演 (PRACE)**

**Dr. Sergio Bernardi (Member of the Board of Directors, PRACE)**

**招待講演 (National Supercomputing Centre Singapore)**

**A/Prof. Tan Tin Wee (Director, National Supercomputing Centre Singapore)**

[平成 28 年度活動進捗報告]

## 産業界におけるシミュレーション・ロードマップの検討概要

産応協ロードマップ TF(20160722)

### 2016 年度活動方針

- 産業界でシミュレーションの活用を発展させるためには、利用者としての産業界の努力に加え、国やアカデミアや HW/SW ベンダー等へ期待するところが大きいことが、あらためて確認された。この事実を踏まえ、国・アカデミア・HW/SW ベンダー等に向けての期待を意思表示することで、産業界として望ましく方向付けすることが、本ロードマップ作成の大きな目標である。
- 期待の発信を意識して、産業界のシミュレーション活用のうち将来的な発展が強く求められる「テーマ」を選定し、各テーマの「現状」と「将来像」を明確にする。
- また、期待を適切に発信するため、および、より現実的に将来像を描くため、アカデミア、アプリ、スパコン等の技術動向を調査する。
- これらの調査を踏まえて、ロードマップ第一版を作成する。

### 2016 年度検討項目

- ① ロードマップ検討
  - ◆ テーマ選定し、一部を深堀りして現状と将来像を明示
  - ◆ テーマの選定と深堀り
    - 候補選出（テーマ、および検討チーム）
    - 産応協全体（基盤 WG、企画委員会等）で広報・確認
    - 必要に応じて、企業（産応協外含む）にヒアリング
    - 検討チーム主体で深堀り後、TF でまとめ
  - ◆ テーマのサーベイ（業界・分野をある程度広く検討）
    - 保留。実施可否・方法の検討が必要
- ② 調査：アプリケーション動向
  - ◆ 質問状を作成し、大学・OSS・ベンダーを選定し、ヒアリングを実施
  - ◆ 大学・OSS・ベンダー調査（国内）
    - 調査先選定（深堀りテーマと関連させる）
    - 産応協全体（基盤 WG、企画委員会等）で広報・確認
    - 質問状作成
    - ヒアリング（関連テーマの検討チーム主体）
  - ◆ 海外大学・OSS・ベンダー調査 ⇒ 海外動向調査
- ③ 調査：ハード動向 ⇒ ハードウェア技術動向を調査する
- ④ 調査：海外動向調査 ⇒ 欧州・米国等を訪問調査。

[開催案内]

### 兵庫県立大学 計算科学連携センター 第三回学術会議

兵庫県立大学シミュレーション学研究科は、平成 26 年度に「第 1 回計算科学連携センター学術会議」にはじまり、昨年度に引き続いて、本年度は「兵庫県立大学計算科学連携センター第 3 回学術会議」を下記により開催することとなりましたのでご案内いたします。産応協は、第 1 回から開催に対する後援名義使用を許可し、協力を行ってきております。関心のある方は、是非参加の周知をお願いします。

記

1 イベント名称: 「兵庫県立大学 計算科学連携センター 第三回学術会議」

～自然環境と計算科学～

2.開催日:2016 年 11 月 1 日(木)10:30～19:30

3.開催場所:兵庫県立大学 神戸情報科学キャンパス 大講義室 (7 階)

4.主催:兵庫県立大学産学連携・研究推進機構 計算科学連携センター  
兵庫県立大学大学院 シミュレーション学研究科

<http://www.simulation-studies.org/blog/archives/8500>

[開催案内] **第1回文部科学省フラッグシップ2020プロジェクト**  
**ポスト「京」重点課題⑥シンポジウム**  
 ～世界最先端のスーパーシミュレーションで革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を加速する～

<http://postk6.t.u-tokyo.ac.jp/event/symposium201610.html>

開催趣旨:

エネルギー資源小国である我が国にとって、エネルギー問題はエネルギーセキュリティの観点からも地球温暖化問題対応に向けた国際的責務の観点からも喫緊の重要課題です。本重点課題⑥では、超高効率・低環境負荷を実現する革新的クリーンエネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象の詳細解明と定量予測を、ポスト「京」を駆使した超高精度解析によって実現し、革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速するための研究開発を行います。

本重点課題⑥においては、革新的クリーンエネルギーシステムとして、石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電、磁気閉じ込め核融合炉の4システムを対象として取り上げています。このシンポジウムでは、これまでの進捗状況や今後の計画などについて紹介し、研究内容について議論します。奮ってご参加いただきますようご案内申し上げます。

＜プログラム＞

司会 今村 博 (風力エネルギー研究所 技術部 取締役)	
10:00～10:05	開会挨拶
	吉村忍 (東京大学大学院工学系研究科 副研究科長・教授)
10:05～10:15	来賓挨拶
	宮崎則幸 (北九州市環境エレクトロニクス研究所 パワーエレクトロニクス信頼性研究室 室長・主席研究員)
10:15～10:35	重点課題⑥全体の概要
	吉村 忍 (東京大学大学院工学系研究科)
10:35～11:15	サブ課題A: 高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム 「燃焼・ガス化数値シミュレーションの現状と今後」
	黒瀬良一 (京都大学大学院工学研究科 准教授) 「石炭ガス化炉におけるマルチフィジックスシミュレーションの現状と今後」 山田知典 (東京大学人工物工学研究センター 准教授)
司会 奈良 純 (物質・材料研究機構 主任研究員)	
11:20～12:00	サブ課題D: 核融合炉の炉心設計 「核融合炉心プラズマシミュレーションの現状と今後」
	井戸村泰宏 (日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター 高度計算機技術開発室長)
12:00～12:30	総合討論 1
12:30～13:40	昼休み
司会 渡邊裕章 (九州大学大学院工学研究院 准教授)	
13:40～14:40	サブ課題B: 気液二相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 「固体酸化物形燃料電池電極の大規模シミュレーション」
	鹿園直毅 (東京大学生産技術研究所 教授) 「燃料電池セル内の大規模二相流シミュレーション」 米田雅一 (みずほ情報総研 サイエンスソリューション部 次長) 「膜・電極複合体に関するマルチスケールシミュレーション」 望月祐志 (立教大学理学部 教授)
14:40～15:05	休憩
司会 藤堂 泰 (自然科学研究機構 核融合科学研究所 教授)	
15:05～16:05	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 「ポスト「京」を用いた洋上風車の性能改善 (全体計画)」
	飯田明由 (豊橋技術科学大学大学院工学研究科 教授) 「流体構造連成解析に基づく大型風車のブレード振動解析」 吉村 忍 (東京大学大学院工学系研究科) 「RIAM-COMPACTを用いた洋上風車の性能評価」

内田孝紀（九州大学応用力学研究所 准教授）

司会 山田知典（東京大学人工物工学研究センター）

16：10～16：40 **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**

「大規模 LES 解析プログラム FFB ならびに FFX の開発計画と最新の成果」

加藤千幸（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  
センター長・教授）

16：40～17：10 **総合討論 2**

17：10～17：20 **閉会挨拶**

飯田明由（豊橋技術科学大学）

## 平成 28 年度事業企画立案

### 第 3 回中小企業シミュレーション技術交流会<新潟>の開催決定!!

近年のシミュレーション、CAE 分野の発展は目を見張るものがありますが、計算機プロセッサ単体の速度向上だけではなく、大規模並列計算機やそれに対応するアプリケーションソフトウェアの出現といったパラダイムシフトが、今まさに起こっています。

一方、中小企業のものづくり現場においては、未だシミュレーション技術の本格的活用に至っていません。重要な技術であることは認識していても、技術導入の効果や活用領域が明確でないことに加え、必要なリソース（人的スキルや資金）が不足していることが大きな課題となっています。

こうした現状を踏まえ、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協/ICSCP）は、産業界におけるコンピュータシミュレーション技術の利活用の推進、次のイノベーションの担い手となる人材育成等を目指した課題整理並びに施策・提言を行い、啓発活動を展開しております。

本交流会は、地方の公施設のご支援をいただき、直接、ものづくり現場に携わっている関係者達との技術交流会を行ってきております。今回、新潟県工業技術総合研究所の協力を得て、従来の CAE から大規模なスパコン活用まで、幅広いシミュレーションによるものづくりのあり方を俯瞰して、今後の地域におけるシミュレーション活用について議論する場にしたいと思います。下記により第 3 回中小企業技術交流会<新潟>を開催いたします。

また、今年度は、過去の 2 回（長野、名古屋）開催した結果を踏まえて、わが国の中小企業におけるスーパーコンピューティング技術の利活用等のあり方について、必要事項の要望・提案をまとめ、関係方面への情報発信に努めることとします。

- ・テーマ：「ものづくりとシミュレーション技術の利活用」
- ・開催日時：平成 28 年 11 月 29 日（火）13:00～17:00（開場：12:30）
- ・開催場所：（公財）燕三条磁場産業振興センター リサーチコア 6 階 研修①②
- ・聴講参加費：無料（定員 70 名）
- ・主催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
- ・共催（予定）：新潟県工業技術総合研究所

## 今後の予定

10/7 第 2 回産業基盤ソフト WG 開催

10/14-15 HPC 産業利用オータムスクール 16 開講（千葉県野田市）

### 【産応協事務局】

事務局は「虎ノ門」に設けておりますので、お問い合わせをお待ちしております。

**スーパーコンピューティング技術産業応用協議会**

**事務局 滝口、清**

**電話 03-6435-5425 Email:icscp@nifty.com**