



スーパーコンピューティング技術

産業応用協議会の活動概要

味の素株式会社 安東敏彦

次世代スーパーコンピュータ開発 プロジェクト推進体制

開発推進体制

文部科学省(全体統括)
スパコン整備推進本部

プロジェクト推進委員会
(アプリケーション部会)

理化学研究所(開発主体)
次世代スパコン開発実施本部

大学
研究機関
企業等

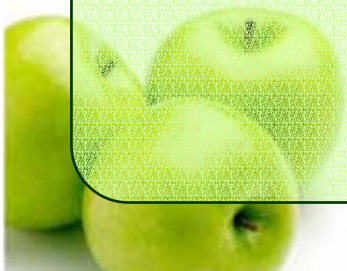
評価体制

外部評価委員会

プロジェクト観察機関
(第三者機関)

アドバイザリーボード
(学識経験者等)

スパコン技術
産業応用協議会



スーパーコンピューティング技術 産業応用協議会の組織と役割

1. 経緯

産業界が、京速計算機の産業応用を推進するため、平成17年12月に設立した。

2. 本協議会の活動概要

産業界ユーザーの窓口として、開発・運用側への意見具申、普及・利用推進、情報共有を図る。

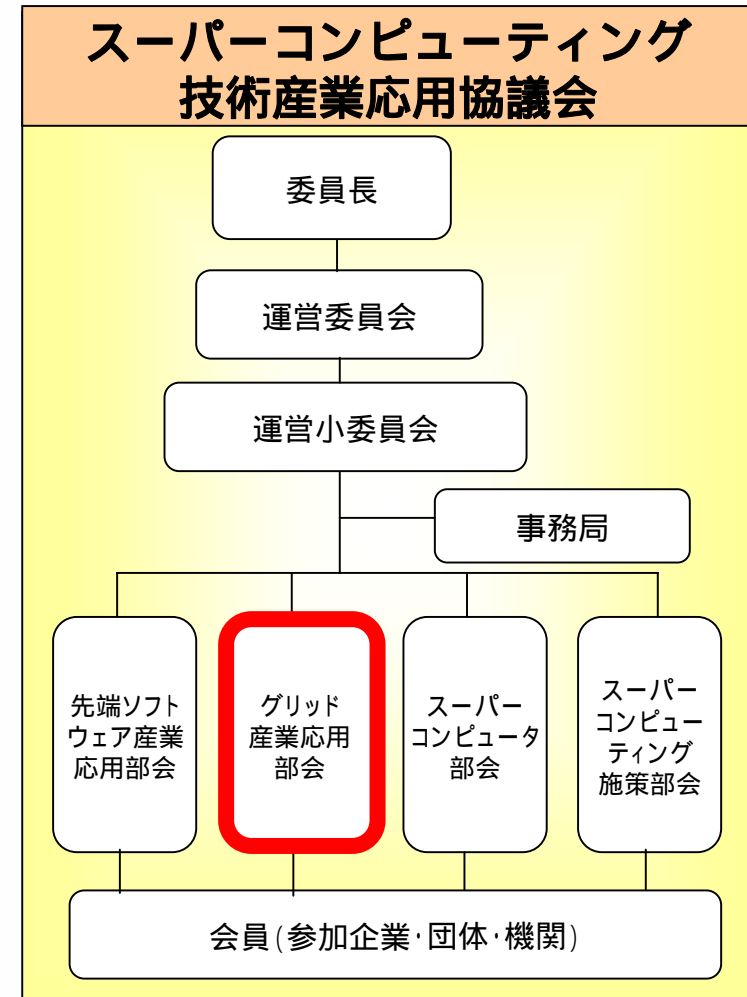
3. 参加機関

・ライフサイエンス分野： 45機関
(化学、医薬品等)

・ものづくり分野： 86機関
(自動車、電機・情報、ソフトウェア等)

・社会基盤の整備分野： 9機関
(建設、エネルギー、鉄道等)

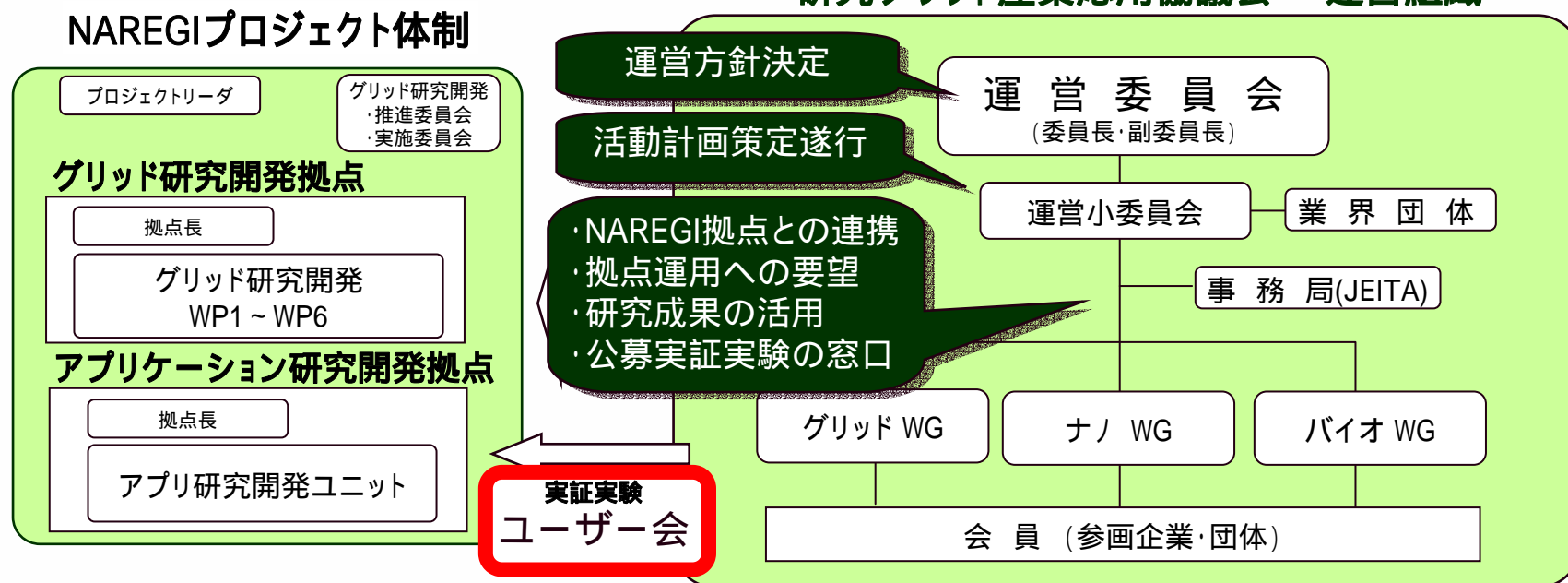
合計140機関



研究グリッド産業応用協議会 (現:グリッド産業応用部会に移行)

NAREGIで開発される技術を、幅広く産業分野において戦略的な技術資産となし、早期に産業に有効活用するため、産業界の窓口としてNAREGIの運営への意見の具申やプロジェクト成果の産業普及促進を行う。

研究グリッド産業応用協議会 運営組織



会員: 40社(2005年1月現在) - 五十音順 -

旭化成(株)、旭硝子(株)、味の素(株)、アドバンスソフト(株)、アプライドバイオシステムズジャパン(株)、(株)アルバック、インテック・ウェブ・アンド・ゲノム・インフォマティクス、(株)イー・アイ・イー研究社、(株)シーズ・ラボ、(株)シーティーアイ、(株)島津製作所、昭和電工(株)、住友化学工業(株)、住友製薬(株)、セイコーエプソン(株)、大正製薬(株)、ダイセル化学工業(株)、(株)デンソー、東亜合成(株)、(株)東芝、(株)日本触媒、日本ゼオン(株)、日本電気(株)、(株)ノバスジーン、(社)バイオ産業情報化コンソーシアム、(株)林原生物化学研究所、日立金属(株)、(株)日立製作所、日立ソフトウェアエンジニアリング(株)、富士写真フイルム(株)、富士通(株)、(株)富士通研究所、古河電気工業(株)、(株)マンダム、三井化学(株)、三井情報開発(株)、三菱化学(株)、(株)三菱化学生命科学研究所、(株)三菱総合研究所、三菱電機(株)

業界団体: 6団体

(社)日本経済団体連合会、(社)電子情報技術産業協会(JEITA)、(財)新機能素子研究開発協会(FED)、(財)バイオインダストリー協会(JBA)、(財)化学技術戦略推進機構(JCII)、日本製薬工業会(JPMA)

平成17年度「ナノ設計実証」公募 研究課題一覧(16社、19件)

No	課題名	実施企業
1	ナノスケールにおける触媒反応の解析と新規触媒の開発	旭化成(株)
2	RISM - SCF法を用いた分子物性および化学反応に対する溶媒効果への適用	三井化学(株)
3	拡張アンサンブル分子動力学シミュレーションプログラムの開発と酵素触媒の活性コンフォメーション探索	三井化学(株)
4	アスパラギン酸プロテアーゼのリガンド結合形式に関する研究	住友製薬(株)
5	核内レセプターのシグナル伝達に関する分子メカニズム解析	住友製薬(株)
6	ナノ磁性粒子集合体の磁化分布解析	日立金属(株)
7	シリコンナノデバイス用高誘電率ゲート絶縁膜材料の劣化過程の研究	(株)富士通研究所
8	時間依存解析に基づく物性量の算出	住友化学(株)
9	光励起・緩和過程における多体効果の量子動力的解析	(株)東芝
10	ナノ領域における希薄混合流体の動的挙動解析	(株)東芝
11	RISM法による溶液中の物性推算手法の研究 - 酸強度の推算 -	旭硝子(株)
12	RISM法による溶媒 - 溶質相互作用を取り入れた物性推算手法の研究	昭和電工(株)
13	RISM法による溶液中の物性推算手法の研究 - 溶解度の推算 -	日本ゼオン(株)
14	RISM法による溶液中の物性推算手法の研究 - 溶媒和のpKaへの効果の推算 -	(株)日本触媒
15	RISM法による溶液中の物性推算手法の研究 - 反応および活性化自由エネルギーの推算 -	ダイセル化学工業(株)
16	RISM法を用いたpKa, log Powの算出	出光興産(株)
17	RISM法を用いたpKa, log Powの算出	JSR(株)
18	両親媒性分子の水溶液構造ならびに熱力学物性の解析	花王(株)
19	ナノスケールによる物性制御へのアプローチと材料設計	(財)電力中央研究所



ユーザー会からの要望事項

- ソフトウェアの活用
 - 市販ソフトウェアの利用
 - 分子研開発ソフトウェアの利用
- 分子研マシンの利用
 - 計算資源の利用範囲
 - グリッド環境導入に関する情報提供
- サポート体制
 - 並列化やチューニングへのサポート
 - 開発における各種支援
 - マニュアル整備



分子研における産業支援体制の整備

支援項目	取り組み	効果
グリッドナノシミュレータの開発	ナノ初期情報生成ツールの開発	作業性、操作性の抜本的改善 (例)タンパク質の初期構造生成: 2~3週間が数時間になる
	アプリケーション間データ変換ツール(GIANT)の開発	・開発ソフト、市販ソフト、フリーウェア等を自由に組み合わせて利用可能になる ・プログラムの使用ごとに数時間かけていたデータ形式の変換作業が不要になる
	入力GUIの開発	高度に訓練された研究者でなくても入力データの作成が可能になる
開発プログラムの提供	各種開発ソフトウェアの提供	研究範囲の拡大、計算効率の向上
計算機資源の提供	SR11000:4ノード HA8000:48ノード	大規模計算が実行可能になる
支援体制の整備	・サポート要員の配置 ・プログラム相談、実行時の相談 ・主要プログラムの実行事例集の作成	疑問点、不明点の早期解決が可能になる
マニュアル、利用の手引きの整備	マニュアルの充実およびホームページへの掲載	マニュアルを常時参照が可能になる
共同研究スペースの整備	計算科学研究センター内の訪問者用公開研究室の設置	関係者が集まったの検討、討論が可能になる

グリッドナノシミュレータ

複雑な入力、多様な実行パターン、多様なソフトの組み合わせを実現

PSE, ワークフローGUI、スケジューラ、……
デプロイ、実行、連成、……
mother screen
実行フロー(コントロールフロー、データフロー)の指定と実行
WP1, WP2, WP3, WP5, WP6

入出力GUI

各プログラムの入力データ
温度、圧力、原子数、ステップ数
basis set、Cl、収束条件、座
標準データ形式で出力

標準データ形式

BMSML, CML

アプリケーション間データ変換ツール (GIANT)

変数定義テンプレート、入出力テンプレート
拡張標準データ形式
BMSML, CML + バイナリ

ナノ初期情報生成ツール

タンパク質、核酸、有機低分子、固体、結
水素の付加、水の付加
結合情報、xyz座標、力場パラメータ、……
拡張標準データ形式で出力

アプリケーションソフト

NAREGI開発ソフト
その他のソフトも組み込み可

標準データ形
GIANT

MD

標準データ形

標準データ形
GIANT

RISM

標準データ形

標準データ形
GIANT

MO

標準データ形
GIANT

固体
電子

標準データ形

標準データ形
GIANT

……

標準データ形
GIANT

……

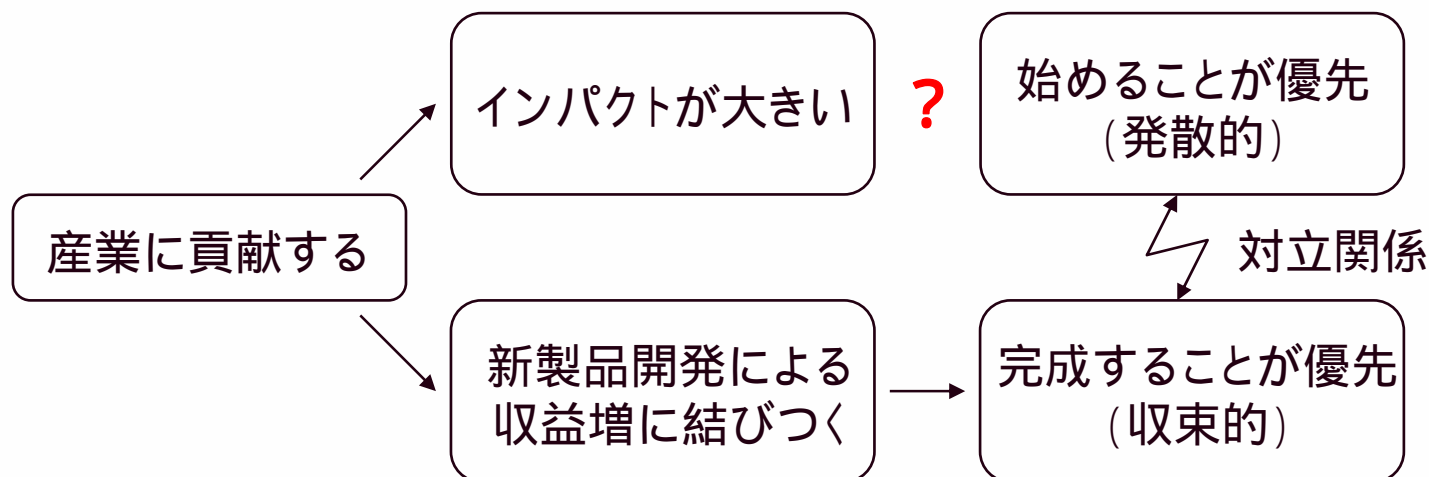
基本ソフトの整備

- 電子状態計算 GAUSSIAN, GAMESS等
- 分子動力学法 IMSオリジナル
 AMBER (準備中)
- RISM IMSオリジナル
- 固体電子論 準備中
- 各受け入れ教官開発ソフト



スパコン協議会の役割

- 産官学間でのコミュニケーション
 - 考え方(評価基準)での対立関係



- ゴールの設定・合意・定期的確認
 - フラグシップテーマの設定
 - BSEの治療法・予防法の開発
 - 高効率太陽電池素材の開発
 - etc.

