

イノベーションの創出

—「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」現場から—

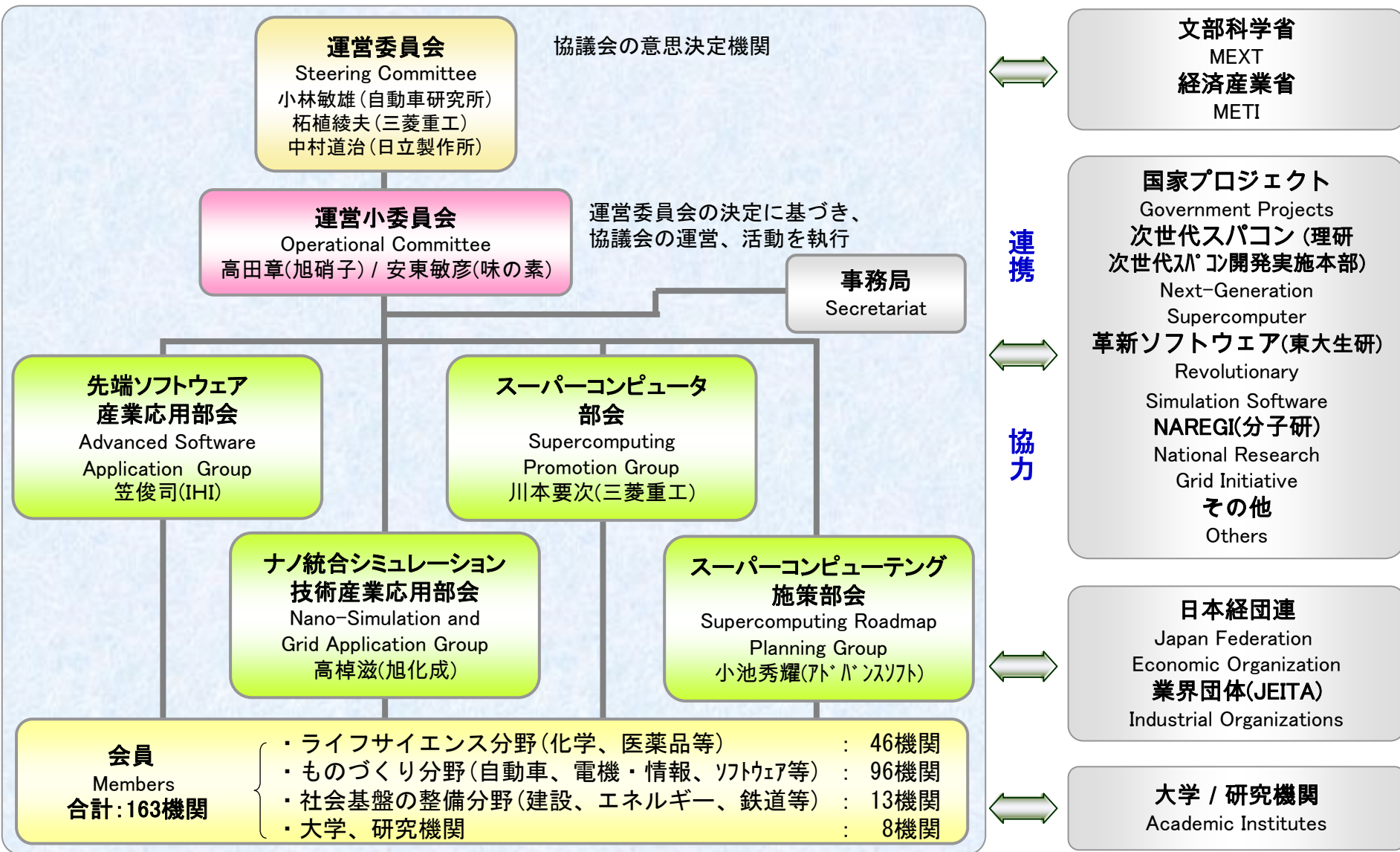
1. 産業界が取り組んできたこと
2. 活動の現状と成果
3. 今後の計画と課題

旭硝子株式会社 中央研究所
高田 章

1. 産業界が取り組んできたこと

◆産業スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

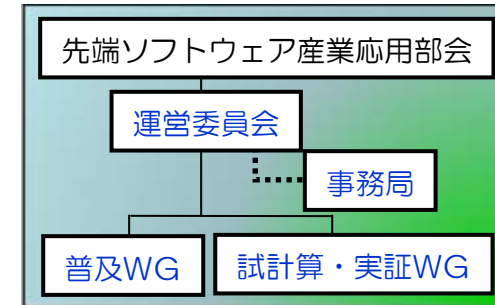
<http://www.icscp.jp>



◆先端ソフト部会：文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発
「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
(<http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/index.html>) の成果ソフトの産業応用推進

◆体制：

- ・運営委員会：部会長 笠俊司(IHI)、副部会長 小西正晃(トヨタ)、WG・分野主査/副主査他で構成
- ・普及WG：寺坂晴夫(東大)
- ・試計算・実証WG：
 - バイオ分野：小沢知永(キッセイ薬品)、宮川博夫(大正製薬)
 - ナノ分野：小林金也(日立)、伊藤聡(東芝)
 - 流体構造分野：高田章(旭硝子)、笠俊司(IHI)
- ・事務局：寺坂晴夫(東大)



◆活動概要：国家PJ「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」で開発されたソフトウェアの試計算・実証、普及

| 分野 | ソフトウェア | ソフトウェア概要 |
|--------|-----------------------|---------------------------|
| バイオ分野 | ProteinDF | タンパク質反応全電子シミュレーション |
| | BioStation(ABINIT-MP) | タンパク質 - 化学物質相互作用解析システム |
| ナノ分野 | PHASE | ナノ・物質・材料マルチスケール機能シミュレーション |
| 流体構造分野 | FrontFlow red/blue | 汎用流体解析(大規模LES) |
| | FrontSTR | 汎用構造解析(大規模FEM) |
| | REVOCAP | 汎用連成カップラ |

活動の現状と成果

◆主な取り組み（H18年度活動実績）

- 普及セミナー : 3回実施(バイオ、構造ソフト) 東大生研、アドバンスソフト共催
- 部会ニュース(月刊) : 技術情報を中心にメール送信、e-ラーニング提供に注力
- 試算・実証WG : 3分野で20回以上定期開催

◆活動成果

試算・実証WGを通じて産学が一体となった取り組み

- *ソフトウェアの公開前に機能・使い勝手を開発者へフィードバック
- *ソフトウェア利用のノウハウを共有化
- *ベンチマーク情報の共有化



もの作り分野において産業界が求める実用的なソフトウェアに進化してきた

今後の計画と課題

◆H19年度の重点活動

| WG | H19年度の重点活動 | |
|--------|--|----------------------------------|
| 普及 | 革新プロジェクトのワークショップと一体となった企画を計画 (初心者向けから初級・中級者向けへ、H19.12頃開催予定) | |
| 試計算・実証 | バイオ分野 | ・ 実試用に基づいたノウハウの共有化 |
| | ナノ分野 | ・ 課題の掘り起こし ・ バイオ・ナノ分野のWG連携・共催 |
| | 流体構造分野 | ・ 流体・構造連成問題のテーマアップ |

※「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト最終年に当たり
・ これまでの活動内容のまとめ
・ 新規プロジェクト立ち上げ支援
に注力

◆課題

現プロジェクトでカバーされていない
製品の評価、プロセスへの応用、イノベーションのためのアイデア創出支援
の分野が残っている

文科省に「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」の
後継プロジェクトの実施を要望する」を提出済み

★成果の産業への普及～アプリケーション分野の拡大

ソフト開発:シーズ指向からニーズ指向への転換
⇒アプリケーション・ターゲットの明確化

開発後のソフトをどう使うかではなく、エンドユーザーが必要としているソフトを開発することが重要

★利用環境、運用についての私見

シミュレーション分野でも**産業界の多様なニーズ**に対応できる仕組みを整備してもよいのではないか

Aユーザー: 次世代コンピュータ、地球シミュレータを利用した大規模計算をしたい

Bユーザー: 大計センター、グリッド環境のようなハード資源を利用できればしたい

Cユーザー: 国プロ、大学で開発されたオリジナルソフトを利用したい

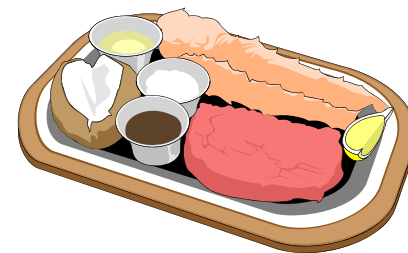
Dユーザー: 高速なネットワークを利用して種々の情報を収集したい

Eユーザー: シミュレーション・ノウハウがないのでハード、ソフト、利用技術をセットにしてスポット的に提供してくれるところはないか

利用者から見て

‘Cafeteria-style Computing’

のような仕組みが実現できないか



Cafeteriaでは

自分の好み・予算にあったメニュー(ハード、ソフト、アドヴァイス)を自由に選んでシミュレーションできる

★人材育成、計算科学・計算工学分野の確立

計算工学分野を例として

1)ダブルメジャーの時代

計算工学＋応用分野

計算工学で学位が取れるように！

2)産学がイコールパートナーとなった人材育成の拠点(COE)作り

学の強み：理論、シミュレーションの方法論

産の強み：特定の方法論にこだわらない課題解決