

# 産業界における スーパーコンピュータ利活用推進について

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 企画委員  
東レ株式会社 先端材料研究所 主任研究員  
(計算科学要素技術連絡会リーダー)  
茂本 勇

## 発表内容

1. スーパーコンピューティング技術産業応用協議会の紹介
2. シミュレーションの産業応用事例
3. 産業界におけるシミュレーションに対するニーズ
4. HPCI推進計画に対する提言

# 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)

## 設立趣旨, 活動内容

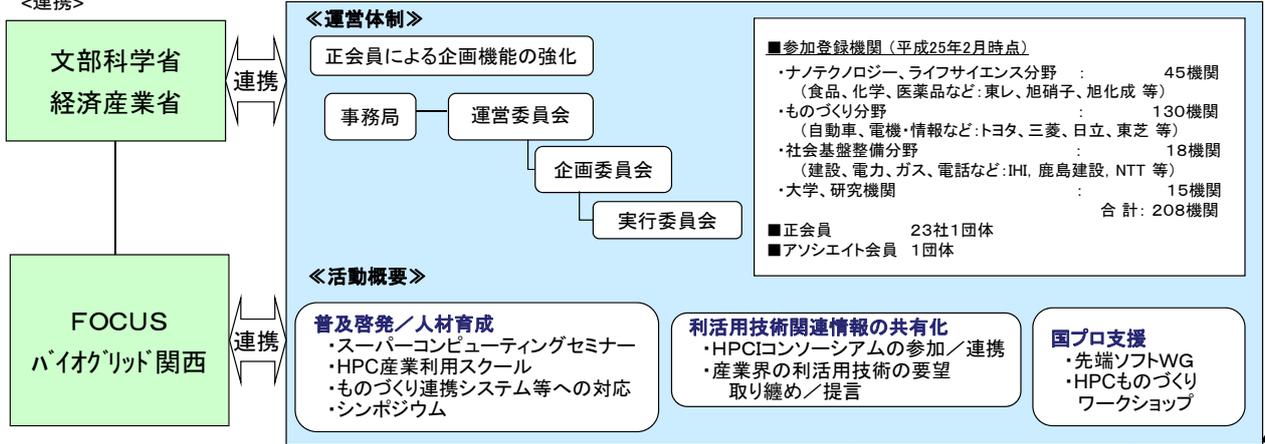
### 〔設立趣旨〕

産業界におけるスーパーコンピューティング技術の利活用推進を目的に平成17年12月に設立。以来シミュレーションソフトウェアの研究開発成果の普及啓発や、人材育成などの活動を推進。協議会の更なる発展と産官学連携でのスーパーコンピューティング技術の普及啓発による産業競争力強化を目指し、**今年度運営体制の見直しを実施。**

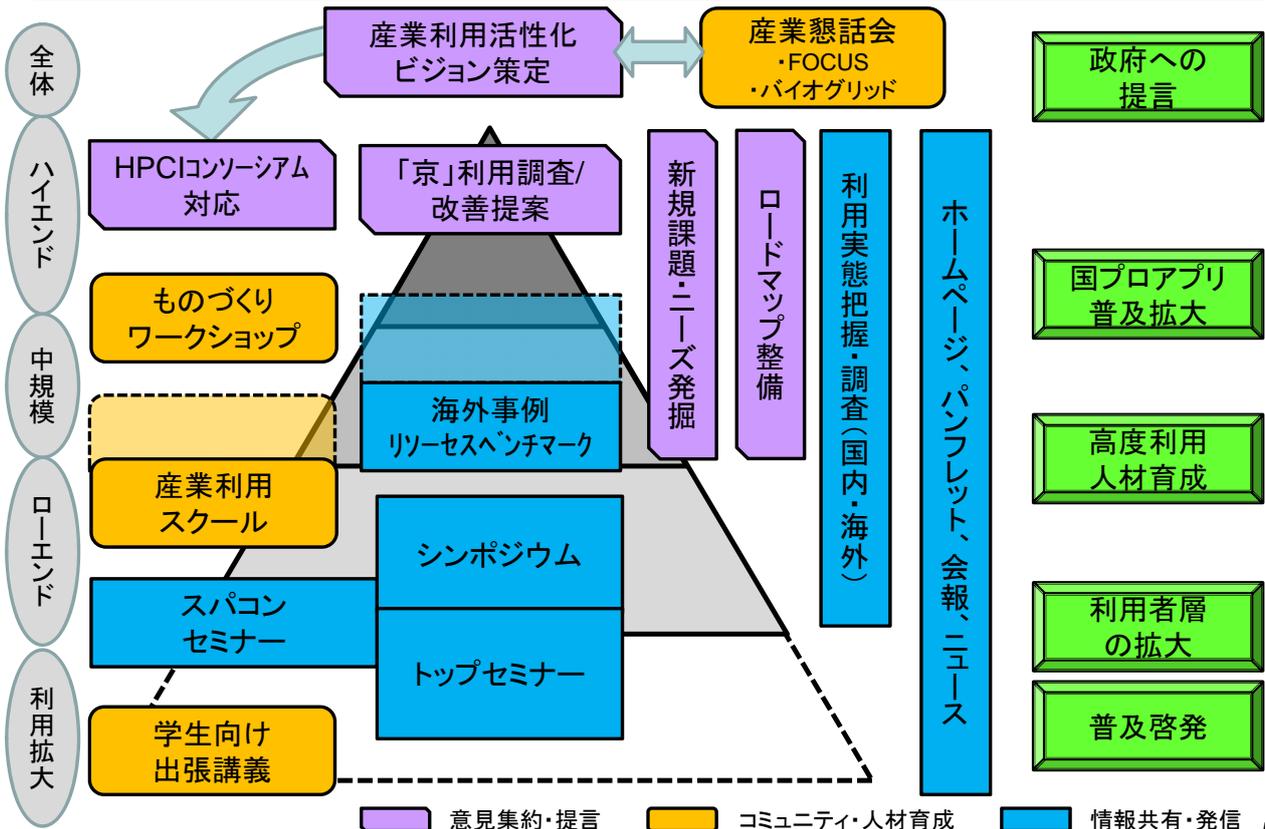
### 〔活動内容〕

運営体制は、意思決定機関で企業会員（正会員）の役員クラスで構成する運営委員会、その下に会の活動の企画提案を進める企画委員会、更にその企画に基づき実際に事業を推進する実行委員会の3委員会を設け、人材育成、情報共有、スーパーコンピューティングの利活用推進に向けての要望、提言の取り纏め等幅広い活動を実施

<連携>



# 産応協2013年度活動計画の全体像



# 東レのグリーンイノベーション事業

## 社会的課題に対するソリューションの提供により、世界経済の持続的発展に貢献

東レグループのおもな製品(例)

社会的課題	ソリューション	現在	中期(～2015)	長期(～2020)
地球環境保護 (CO <sub>2</sub> 抑制など)	省エネルギー	航空機用CFRP ハイブリッドカー用特殊PPフィルム	膜利用省エネプロセス	高断熱フィルム・フォーム
	再生可能エネルギー	非ハロゲン難燃樹脂・フィルム 太陽電池バックシート	塗装レス・表面加飾成形フィルム 風力発電機用CFRP	高性能熱交換換気素子 次世代太陽電池
化石資源・エネルギー枯渇	新エネルギー	燃料電池電極基材	Liイオン電池製造装置 Liイオン電池セパレータ	燃料電池電解質膜
	リサイクル推進	リサイクル材	炭素繊維リサイクル	
水・食糧資源確保	非石化原料由来ポリマー	ポリ乳酸	熱可塑セルロース繊維	膜利用バイオプロセス 非食糧バイオマスポリマー
	水処理	RO膜エレメント・システム 中空系膜モジュール	MBR膜モジュール	高ウイルス除去中空系膜 ハイブリッド海水淡水化・NF膜
少子高齢化・他	QOL向上	血液透析器 血液浄化器 エアフィルター	経口そう痒症改善剤 DNAチップ	頻尿治療薬 C型慢性肝疾患治療薬 炎症性腸疾患治療薬 タンパクチップ 白血球除去カラム ドラッグデリバリーシステム

選択的透過性を備えた高分子膜への社会的・事業的ニーズは大  
シミュレーションによる高分子膜設計技術は、東レの事業拡大に大きく貢献できる

# 産学連携による高分子膜設計技術の構築

Solubility Diffusion Model  
(溶解・拡散理論)

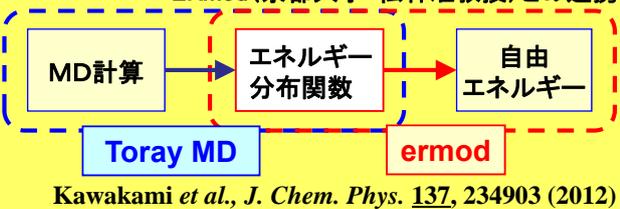
$$K \cdot D = P$$

分子透過性の3要素



### 成果1: 高速・高精度自由エネルギー計算

ERmod(京都大学・松林准教授)との連携



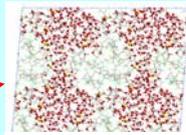
Kawakami et al., J. Chem. Phys. 137, 234903 (2012)

### 成果2: 高性能分子動力学計算ソフト

Modylas, REM(名古屋大学)の機能を自社ソフトに実装

- 多重時間積分法
- レプリカ交換MD法
- 経験的原子価結合法
- 電荷揺らぎMD法

川上他, 高分子論文集 67, 28 (2010)

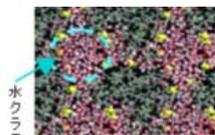


Nafion®ナノ構造, プロトン伝導

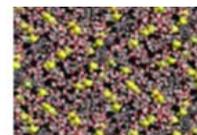
高分子膜設計に展開

燃料電池電解質膜

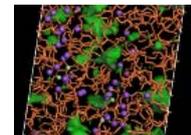
逆浸透膜(海水淡水化)



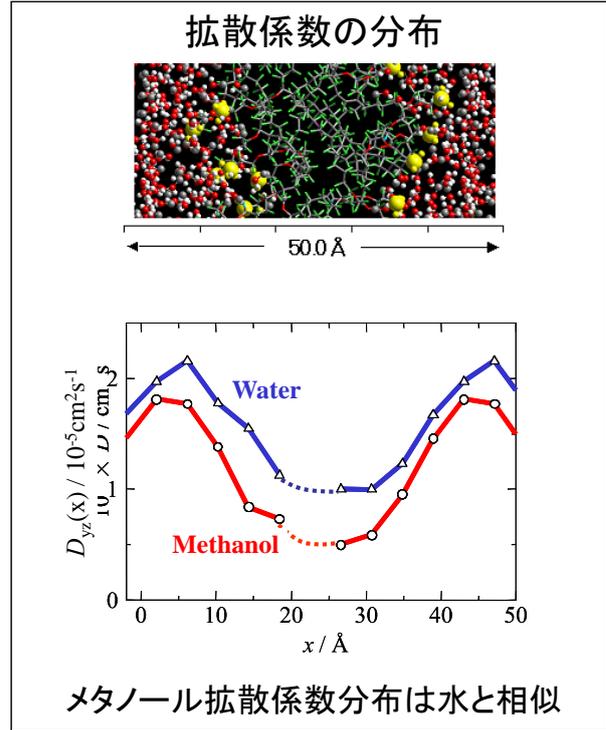
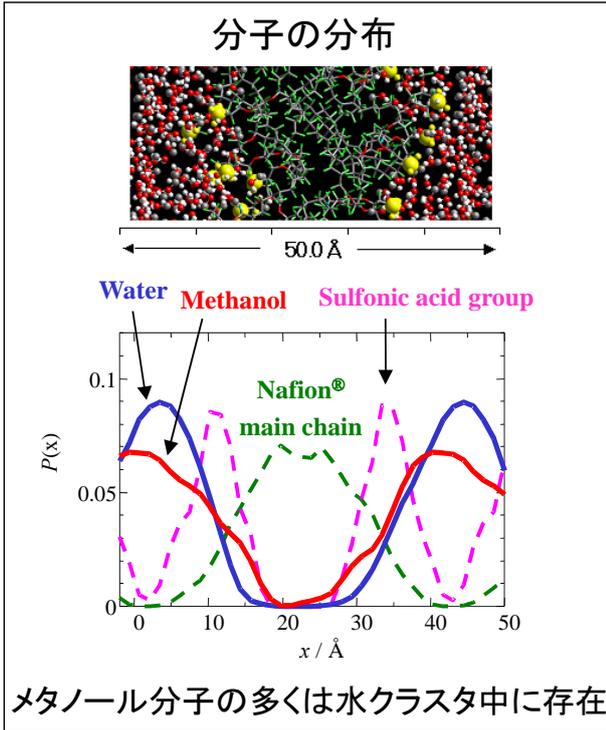
従来膜



新規開発膜



# 電解質膜中の分子および拡散係数の分布



**電解質膜中の透過分子の分布を解明→実験研究者に対する分子設計指針の提供**

# 低メタノール透過性ポリマーの設計指針

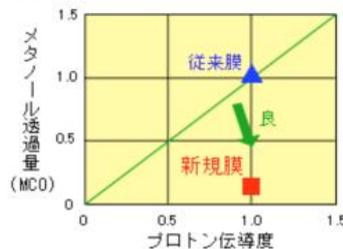
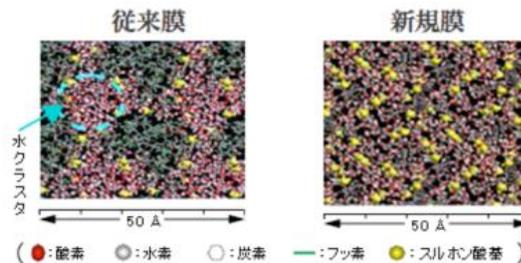
2005年12月16日  
当社プレスリリース

## ダイレクトメタノール形燃料電池 (DMFC)

<技術のポイント>

(1)電解質膜

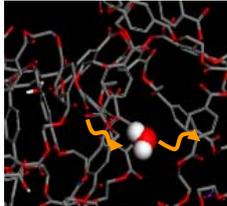
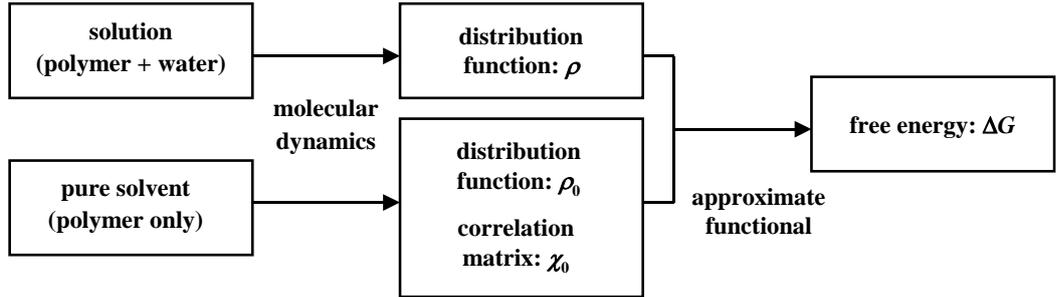
・当社独自の設計コンセプト (クラスタの無い構造) で、  
従来膜比としてプロトン伝導度:1.0、MCO:0.1の新規電解質  
膜を開発



**MD計算が新規ポリマーの  
分子設計に寄与**

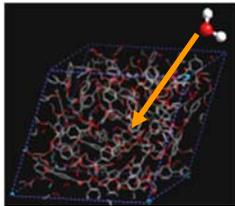
# エネルギー表示法による自由エネルギー計算

自由エネルギーの  
計算スキーム



**溶液(solution)系:**

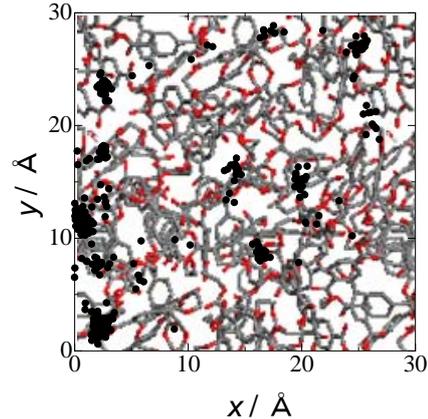
- ① 高分子/低分子混合系についてMD計算
- ② 高分子と低分子の相互作用エネルギーを計算



**溶媒(solvent)系:**

- ① 高分子単独系について MD 計算
- ② 低分子をランダムな位置に挿入して高分子と低分子の相互作用エネルギーを計算

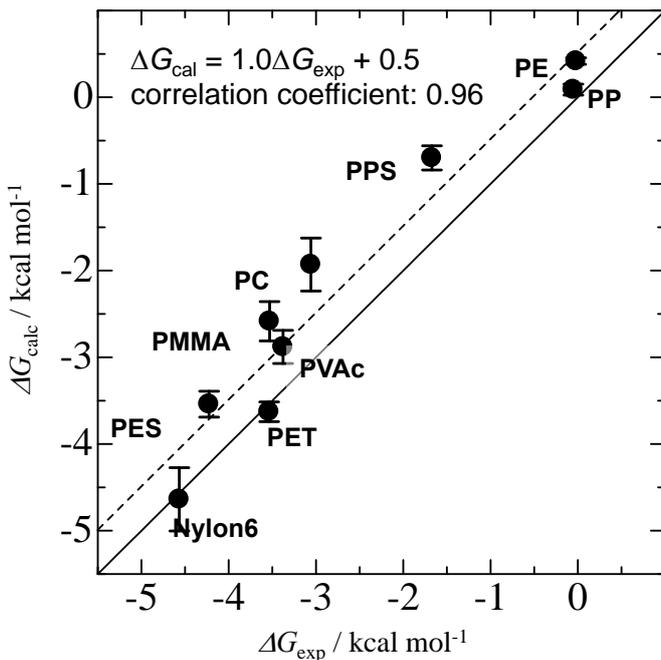
PET中の水分子のトラジェクトリー (4 ns)



**CMSIにおける京都大学との共同研究**

Copyright 2013 Toray Industries, Inc. All Rights Reserved. 11

# 計算値と実験値の比較†



$$K = \exp[-\beta(\Delta G_{\text{polymer}} - \Delta G_{\text{water}})]$$

$$\Delta G_{\text{polymer}} = -\frac{1}{\beta} \ln K + \Delta G_{\text{water}}$$

$$K = \frac{C_{\text{polymer}}}{C_{\text{water}}} \approx \frac{\rho_{\text{polymer}}}{\rho_{\text{water}}} \frac{W}{100}$$

$$W = \frac{M_{\text{wet}} - M_{\text{dry}}}{M_{\text{dry}}} \times 100$$

$\Delta G_{\text{polymer}}$  : 高分子に対する水の溶解自由エネルギー

$\Delta G_{\text{water}}$  : 水に対する水の溶解自由エネルギー\*4

$\rho_{\text{water}}$  : 水の密度

$\rho_{\text{polymer}}$  : 高分子の密度\*5

$W$  : 吸水率\*9

† T. Kawakami, IS, N. Matubayasi, *JCP*, **137**, 234903 (2012).

\*4 *JSME STEAM TABLES*, The Japan Society of Mechanical Engineers (1999).

\*5 <https://polymer.nims.go.jp/>

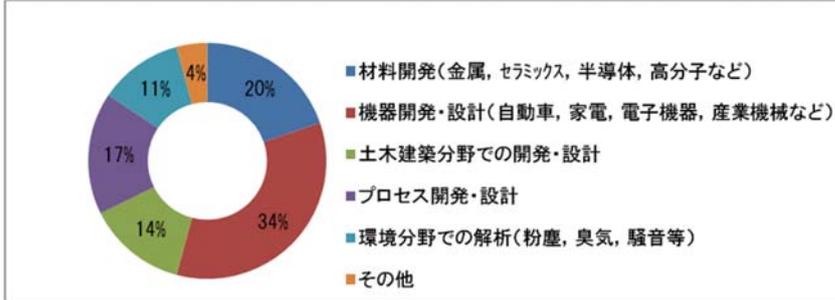
**計算値は実験値を良好に再現(平均誤差=0.5 kcal/mol)**

Copyright 2013 Toray Industries, Inc. All Rights Reserved. 12

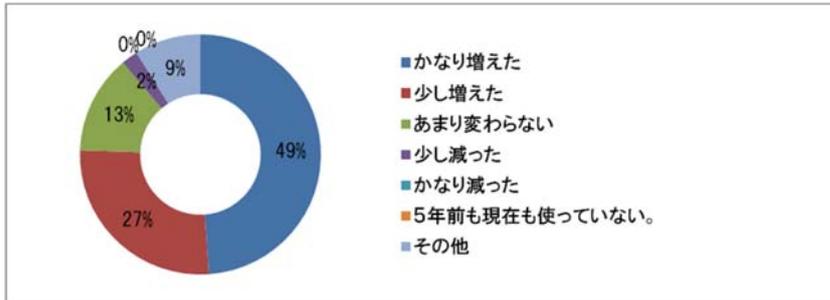
## 産業界におけるシミュレーションに対するニーズ

COCN(産業競争力懇談会) HPC応用研究会によるアンケート結果(抜粋)<sup>†</sup>

□貴社にてシミュレーション技術を利用されている場合、どのような分野で利用されていますか。



□5年前に比べてシミュレーションの活用は増えましたか。

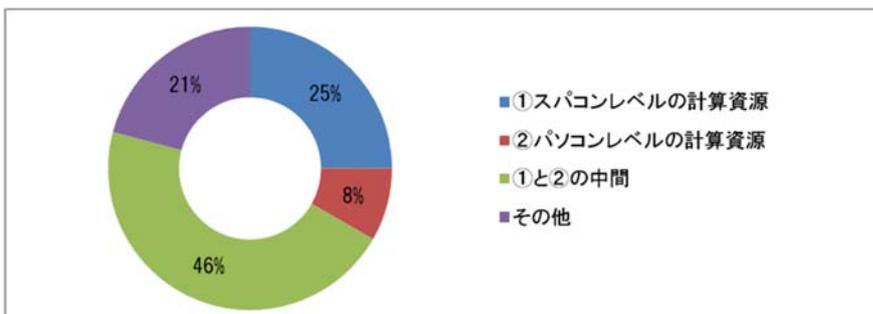
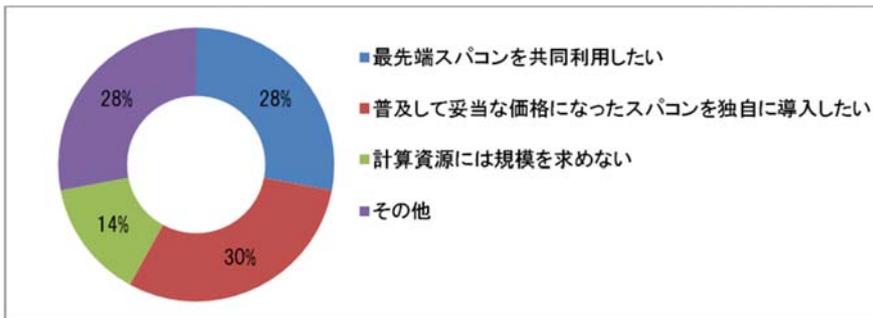


<sup>†</sup> <http://www.cocn.jp/common/pdf/thema48-L.pdf>

**産業界において、シミュレーションは様々な分野で活用が広がっている**

## 産業界における計算リソースに対するニーズ

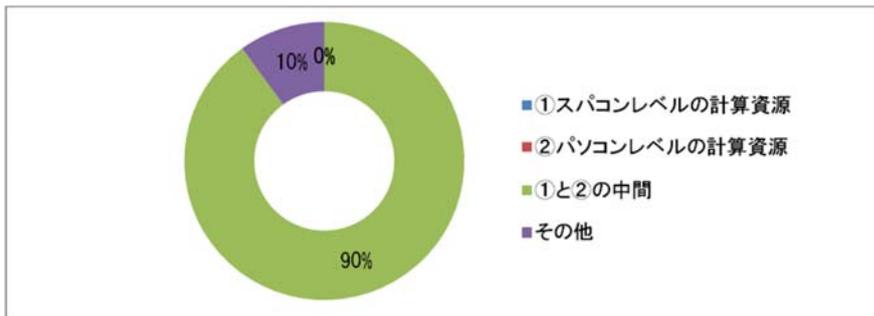
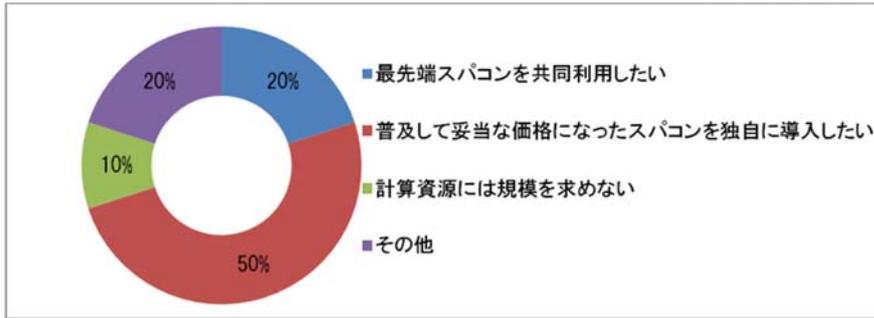
□計算機資源についてどのような資源が必要とお考えですか。



**最先端スパコンニーズがある一方、中間レベルの計算リソースを求める意見が多い  
→スパコン利用にハードルがあると考えている企業がある**

## 中小企業における計算リソースに対するニーズ

□ 計算機資源についてどのような資源が必要とお考えですか。

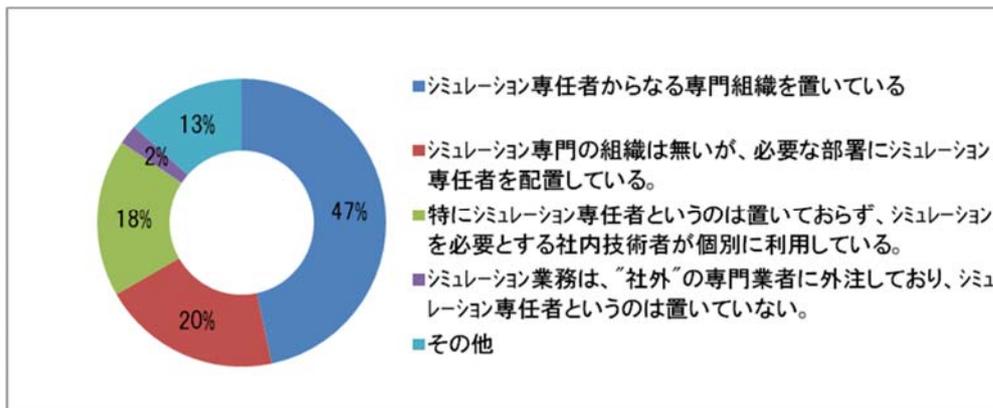


**中小企業では中間レベルを求める意見が大多数→ハードルの存在はさらに顕著に**

## 産業界におけるシミュレーション活用体制

スパコン利用のハードル: 知財, 機密保持, ネットワーク, **活用体制**, ...

□ 貴社において、シミュレーション技術専任者を置いておられますか。



**シミュレーション専任者から成る専門組織を置く企業は約半数**

専門組織  
のない  
企業では

- 使いやすい市販ソフト、手厚いサポートを活用  
プリ・ポストが充実、論文や解説書・セミナーが豊富、活用事例が豊富
- 国プロ・大学ソフトは必ずしも産業界のニーズに合致せず、使いにくい  
活用事例の幅が狭く、適用限界を慎重に見極める必要
- ソフトの自社開発やスパコン向けチューニングは困難

## 産業界における市販ソフトに対するニーズ

## FOCUSスパコンで利用できるソフトウェアの一部(商用ソフト)

分野	ソフトウェア名
流体解析	OpenFOAM (1.7.1、2.0.0、1.6-ext)、 <a href="#">ANSYS Fluent</a> 、 <a href="#">Advance/FrontFlow/red</a> 、 <a href="#">MIZUHO/FrontFlow/blue</a> 、 <a href="#">STREAM V9</a> 、 <a href="#">SCRYU/Tetra V9</a> 、 <a href="#">FINAS/CFD</a> 、 <a href="#">iconCFD</a> 、 <a href="#">CONVERGE</a>
流体・粉体解析	<a href="#">RFLOW</a>
構造解析	<a href="#">ADVENTURECluster</a> 、 <a href="#">MD Nastran(MSC Nastran+Marc+Dytran)</a> 、 <a href="#">LS-DYNA</a> 、 <a href="#">Advance/FrontSTR</a> 、 <a href="#">FINAS/STAR</a>
計算化学	GAMESS、 <a href="#">Gaussian09</a> 、NAMD 2.7、 <a href="#">Advance/OCTA</a> 、 <a href="#">Advance/PHASE</a> 、OpenMX、 <a href="#">Advance/BioStation</a> 、 <a href="#">MIZUHO/BioStation</a> 、ABINIT-MP 4.1、GROMACS 4.5.3、 <a href="#">SCIGRESS ME 2.0</a>
機構解析	<a href="#">MD Adams</a>
プリ・ポスト /可視化	<a href="#">Patran</a> 、 <a href="#">Cubit</a> 、 <a href="#">FieldView</a> 、 <a href="#">FieldView Parallel</a> 、 <a href="#">GLView</a> 、 <a href="#">Pointwise</a> 、 <a href="#">Gridgen</a> 、 <a href="#">EnSight</a> 、ParaView 3.8.1、gnuplot 4.4.2、POV-Ray 3.50c(並列版) 3.6(逐次版)

出典: FOCUS web site (<http://www.j-focus.or.jp/focus/>)

## 使い慣れたソフトが実行できる環境: FOCUSスパコンが支持される大きな理由

Copyright 2013 Toray Industries, Inc. All Rights Reserved. 18

## 中間報告(案)に対する産応協パブコメ

スーパーコンピュータは、今や我が国の産業競争力強化にとって必要不可欠であることに疑いの余地は無い。今回の中間報告案において、エクサスケールに向けて世界TOPレベルのフラッグシップマシンの国内での継続開発を含む**世界最高水準のHPCインフラの在り方と方向性が示された事に対し、産業界として歓迎すると同時に強く賛同の意を表する**ものである。

一方で、産業界における多様な研究開発ニーズを鑑みるに、フラッグシップマシンとともに、様々なアプリに対応した特徴あるリーディングマシンをバランス良く整備することが、スーパーコンピュータの利活用推進の上で重要と考えている。

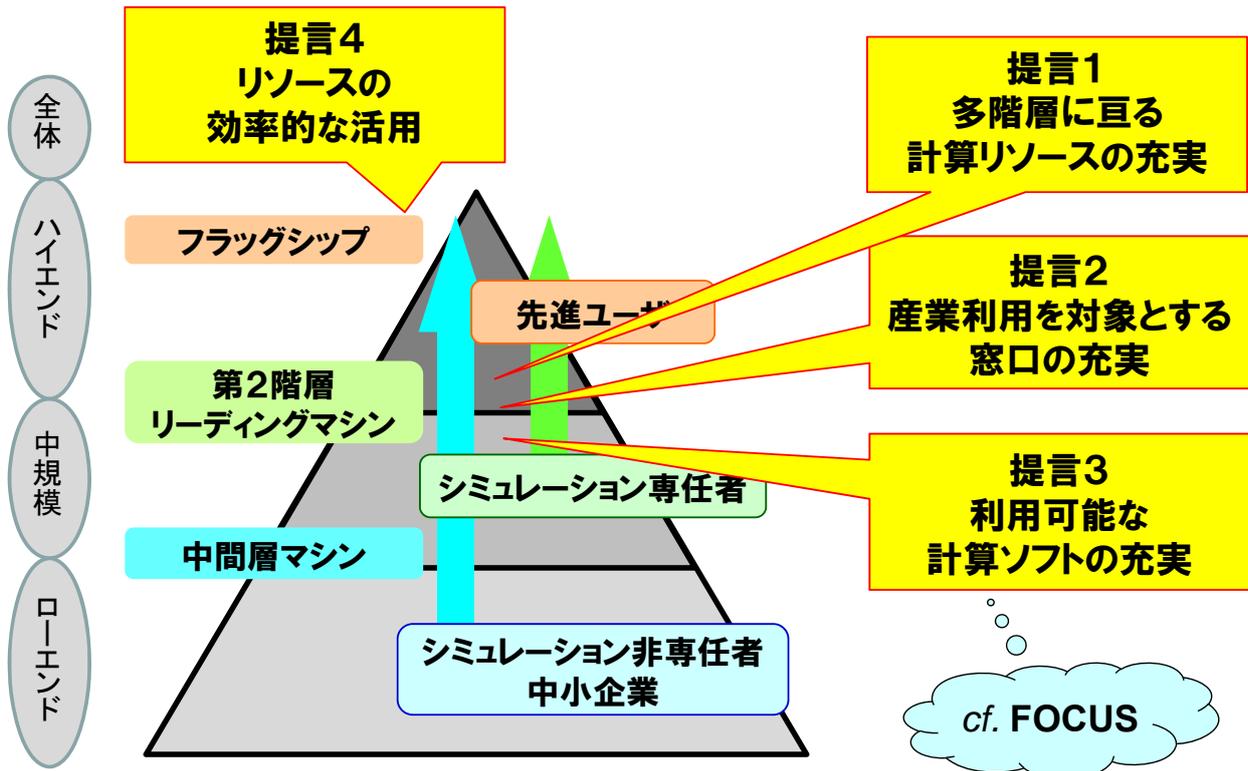
産業界でのスパコン利用は、「京」に代表されるフラッグシップマシンを用いた非常に高度な技術開発はもとより、中堅企業を中心とする極めて裾野の広いスパコン活用による技術の高度化への期待といった、重層的かつ幅広いニーズが存在している。特に、様々なアプリケーションとマシンの適合性を鑑みると、**到底1つのシステムで全てをカバーすることは難しい**。従って、産業界としては、世界トップクラスのマシンが常に我が国のHPCIの全体を牽引しつつも、我が国全体のスパコン資源の強化も重視し、**世界を凌駕するフラッグシップマシンの開発と共に、第二層となる様々な特徴あるアプリに対応したリーディングマシンも充実**されることを強く希望する。

またスーパーコンピュータの利用面において重要となるのは、「フラッグシップマシンシステムを含めた利用面において、**産業界における様々な利用形態に対応可能なきめ細かい運用制度設計**」と「**産業界で利用可能なアプリケーションソフトの整備**」であると考えられる。その面での国の支援を切にお願いするものである。

我々産業界が、今回示されたHPCインフラの性能・機能を楽しみ、より一層の成果をあげる様努力するのは言うまでもない。「スーパーコンピュータ技術産業応用協議会」は産業界を代表する機関として、関連機関と連携をしながら、HPCIの積極的な利活用を通じ、引続き、今後も我が国の産業競争力強化に寄与して行く所存である。

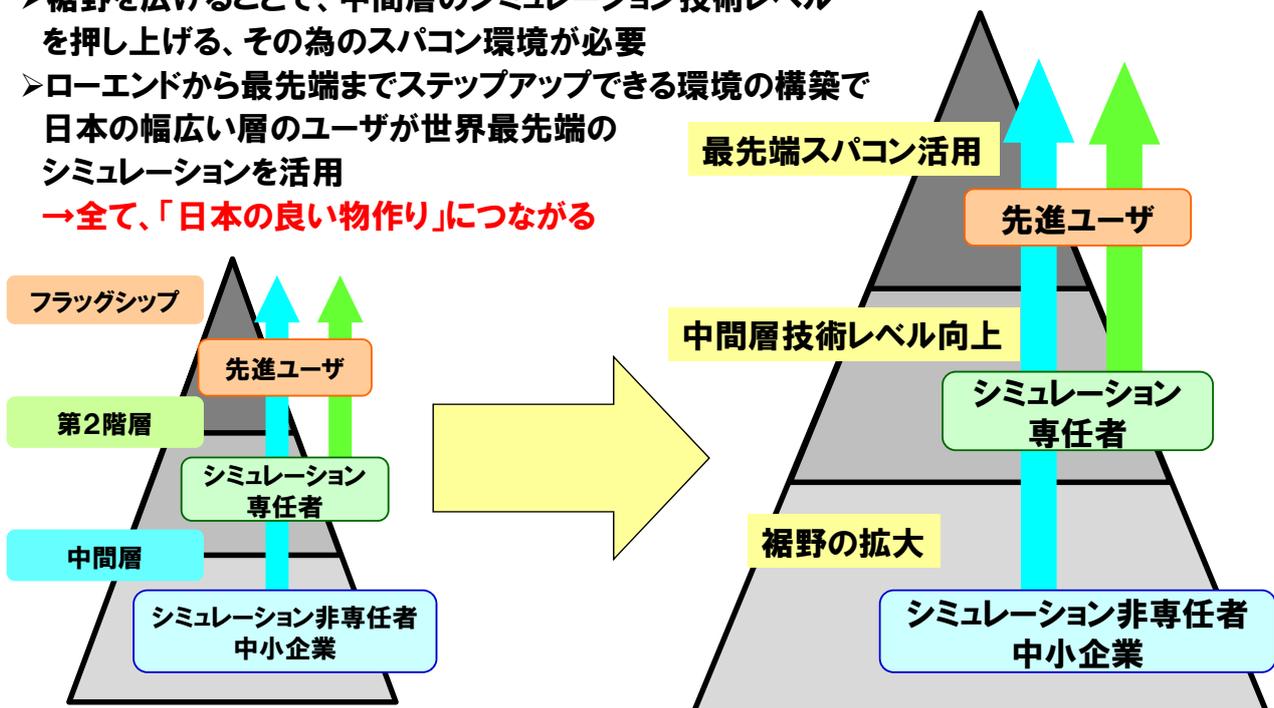
以上

# HPCIの産業利用推進に対する提言の概略



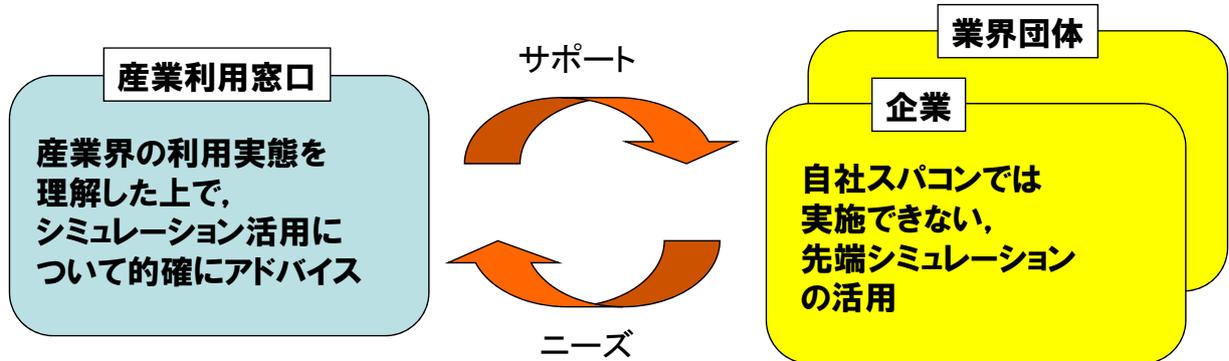
## 提言(1)多階層に亘る計算リソースの充実

- 産業界のシミュレーション活用拡大には、裾野の広がり是不可欠
- 裾野を広げることで、中間層のシミュレーション技術レベルを押し上げる、その為のスパコン環境が必要
- ローエンドから最先端までステップアップできる環境の構築で日本の幅広い層のユーザが世界最先端のシミュレーションを活用  
→ 全て、「日本の良い物作り」につながる



## 提言(2) 産業利用を対象とする窓口の充実

- 産業界を対象とするコーディネータ的組織
- 登録機関を兼ねるとなご良い



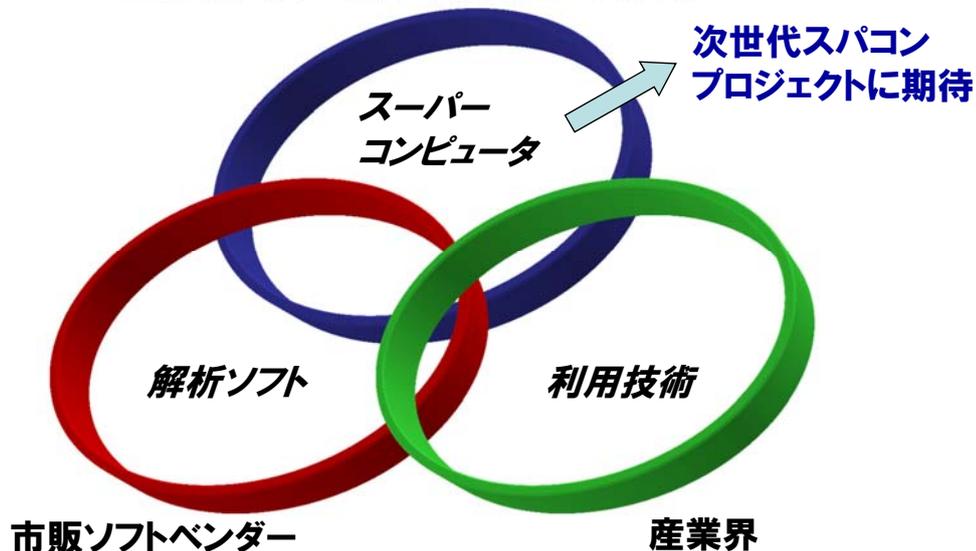
- ◇ 市販ソフト動作環境等  
利用促進の為の枠組み整備
- ◇ 成果を考慮した利用枠設定(拡大)
- ◇ 随時受付など、柔軟な利用登録

- ◇ 画期的な新商品開発
- ◇ 製品開発プロセスの革新
- ◇ 低コスト化, グローバル化促進

## 提言(3-1) 利用可能なソフトの充実

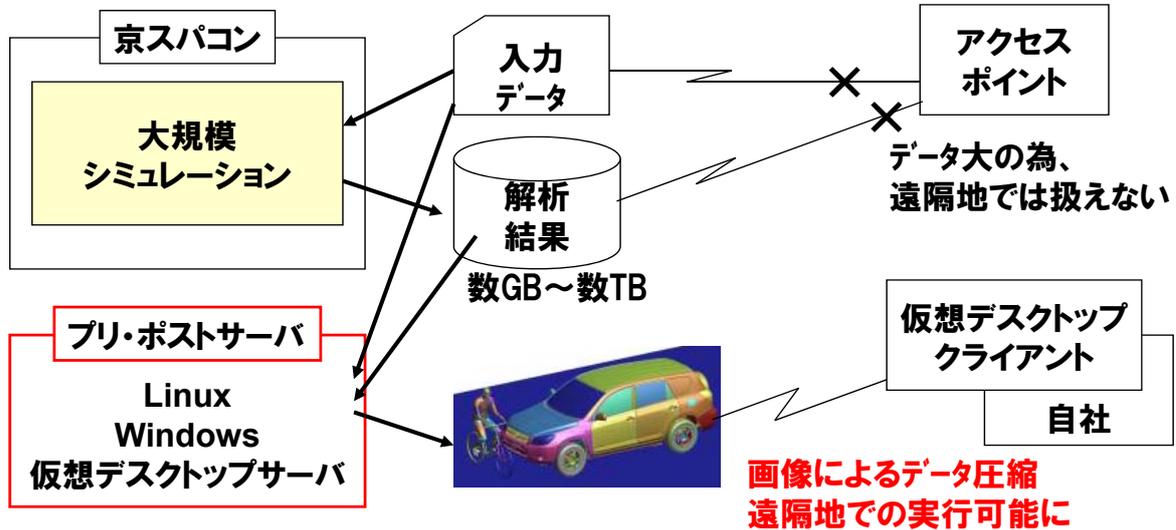
シミュレーション技術は「ハード・ソフト・利用技術」三位一体で進歩

- 推進計画における**ソフトウェア整備の比重拡大(特に市販ソフト)**
- 産官学が連携した共同開発プロジェクトの立ち上げ  
→ RIST・産応協共同で海外事例調査を計画中



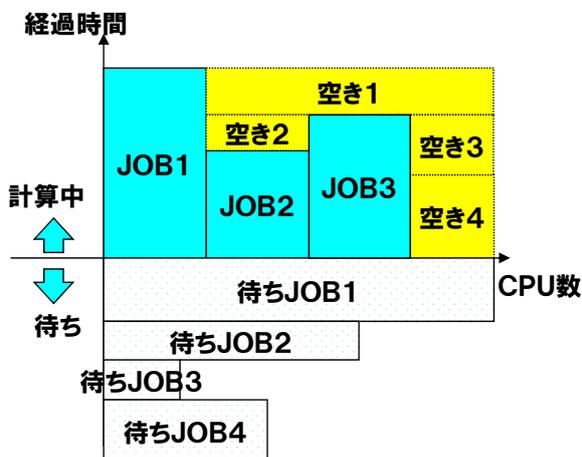
## 提言(3-2) プリ・ポスト実行環境の充実

- 市販プリ・ポストが実行できるWindows環境が必要
- 京スパコンの性能を活用した大規模計算が、遠隔地から実施できるようプリ・ポスト先端技術の開発と活用は重要(自社から使いたい)



## 提言(4) リソースの効率的な活用

- 「京」の占有率: 平均約70%  
→ 30%の空き能力は大変大きな資源、有効に活用したい
- 「京」産業利用の実績をふまえた利用枠の設定をお願いしたい



大企業数社分のスパコン資源に相当する空き資源の利用で新たな成果を生み出せる

- ◇ 情報開示と利用者側が工夫できる利用環境の整備
- ◇ 大規模JOBだけで空きを埋めるのは困難、柔軟な運用を望む
- ◇ 中間レベルの計算リソースも含め、国全体でバランスの取れたHPC環境