

# 次世代スパコンを中核とした ものづくりイノベーションの創出

東京大学生産技術研究所 副所長・教授  
革新的シミュレーション研究センター長 加藤千幸



Center for Research on  
Innovative Simulation Software

# 発表内容

- ものづくり産業の現状と課題
- HPCを利用した次世代のものづくり
- 乗り越えるべき障壁
- 障壁を乗り越えるための具体策
- まとめ

# ものづくり産業の 現状と課題

# ものづくり産業の現状

- 実体経済を支える「ものづくり産業」への回帰・期待が急速に増大
- 我が国の「ものづくり産業」は、「高品質・高機能」製品創出において、国際的なリーダーシップが必要
- 我が国の「ものづくり」の得意技をベースにしながらも、**科学的手段を駆使したイノベーション創出の加速**が課題

# 計算機によるものづくりの現状と展開



- 20世紀にデジタルエンジニアリングの基盤が確立(但し、欧米ツール中心)
- 今後の差別化の決め手は、**マイクロ現象(バイオ・ナノ・流体・熱・構造等)の究明による革新的要素技術の創生から、マクロ構造の最適化に至るまでの膨大な組み合わせの高速シミュレーションの実現**
- 超高速・大規模計算の戦力化

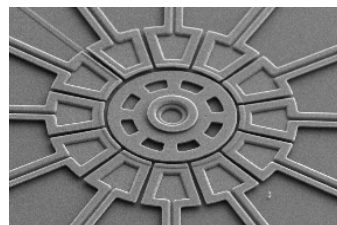
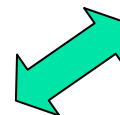
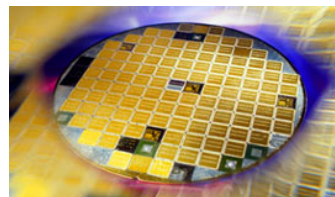
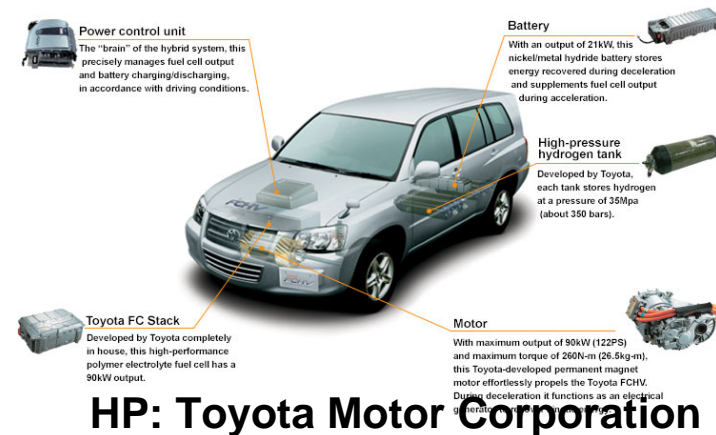
# HPCを利用した 次世代ものづくり

# 5年後の目指すべき姿

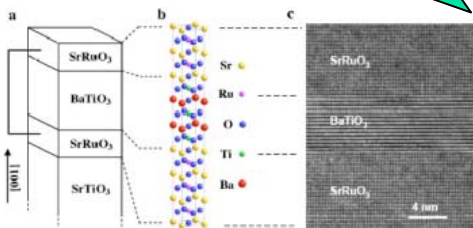
- トップバッター数社が次世代スパコンを利用したイノベーション創出に成功
- 同業他社も追従し、次世代スパコンの利用が加速度的に拡大
- 次々世代スパコンの研究開発が進展

# マイクロ現象の解明と全体最適設計

## ■ 革新的ナノ材料・デバイスの開発と全体最適設計によるイノベーション創出



革新的なデバイス開発  
電子デバイス  
エネルギー変換デバイス  
環境浄化デバイス



超高機能・高信頼性材料の創出



# 次世代自動車の設計開発

ex: 乱流の直接数値解析  
 → 乱流渦の挙動解明と制御  
 → 究極の低C<sub>D</sub>車の実現



### Power control unit

The "brain" of the hybrid system, this precisely manages fuel cell output and battery charging/discharging, in accordance with driving conditions.

### Battery

With an output of 21kW, this nickel/metal hydride battery stores energy recovered during deceleration and supplements fuel cell output during acceleration.



### High-pressure hydrogen tank

Developed by Toyota, each tank stores hydrogen at a pressure of 35Mpa (about 350 bars).



### Toyota FC Stack

Developed by Toyota completely in house, this high-performance polymer electrolyte fuel cell has a 90kW output.

### Motor

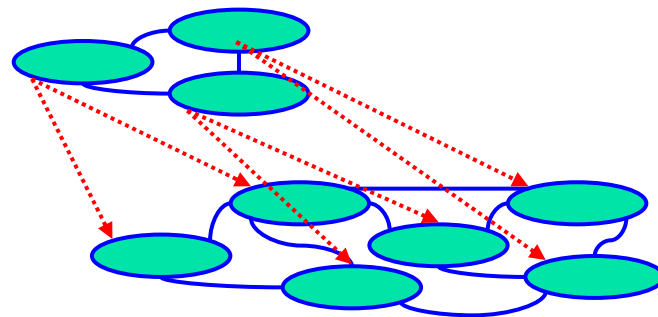
With maximum output of 90kW (122PS) and maximum torque of 260N-m (26.5kg-m), this Toyota-developed permanent magnet motor effortlessly propels the Toyota FCHV. During deceleration it functions as an electrical generator to recover kinetic energy.



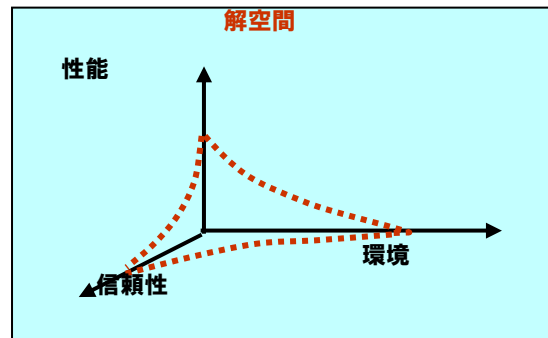
HP: Toyota Motor Corporation



ex: 複合材料のミクロスケール解析  
 → 材料破壊挙動の解明  
 → 超軽量・高信頼性自動車の実現

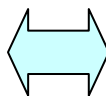


シーズ組み合わせの最適化



多様な設計関数の最適化

マイクロ解析による革新的  
要素性能の向上



高速解析による全体最適化

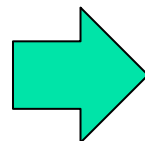
# 高分子EL素材の開発

- デバイス設計・作製技術におけるパラダイムシフト
  - 低分子・無機材料ベース → 高分子化合物ベース
  - 共役系高分子ポリ誘導体など、生体分子に似た鎖状(100 Å 超)構造
- 大画面化・低コスト・量産化が実現
  - 将来、太陽光発電とカップルさせることも可能

## ■ 鍵となるものづくり技術

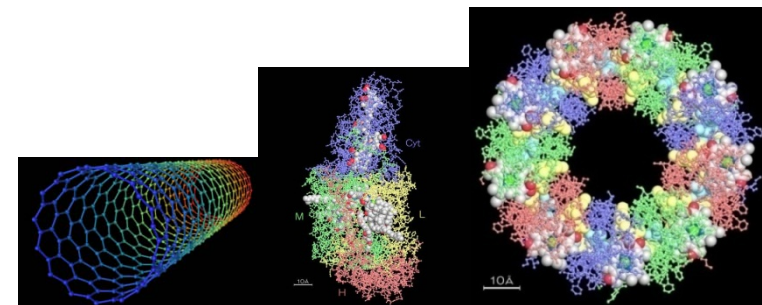
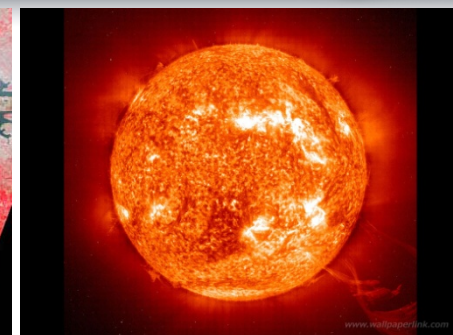
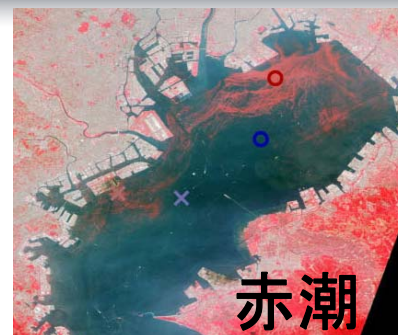
### (量子化学計算と最適設計)

- 素材の発光効率の向上・長寿命化  
(現在は高々数千時間)
- 網羅的な化学修飾と量子計算  
→ 計算の先行により合成の手間を  
大幅カット



# 人工光合成による太陽光利用

- 光起電、水素発生装置設計・利用
  - 化石資源との併用/代替が本格化
- 高機能植物
  - CO2削減、食糧増産、化学燃料
- 鍵となるものづくり技術  
 (量子化学計算と全体最適設計)
  - 密度最大化、資源のロスの少ない取り出し
  - 現植物が利用しきれしていない波長の利用
  - 遺伝子工学によるCO2還元酵素の改造



光発電技術の性能比較 (R. J. Pace, Artificial Photosynthesis, 2005)

|       | 開路電圧   | 最大効率      | 最大効率電流                 | 量子効率    |
|-------|--------|-----------|------------------------|---------|
| シリコン  | ~0.6 V | <25 %     | ~40 mA/cm <sup>2</sup> | ~55 %   |
| 有機光電池 | 1~2 V  | (現時)2~3 % | (現時)≤3                 | 10~30 % |
| PS II | >20 V  | (理論)>40 % | <4                     | ~100 %  |

# 乗り越えるべき障壁

# 乗り越えるべき障壁

## ■ ソフトウェア・ハードウェア環境

- 超並列計算機対応の実用的ソフトウェアの不足  
(革新プロジェクトなどの開発ソフトの実用化は進展)
- PCクラスタから次世代スパコンまでシームレスに利用できる環境の不備
- 設計者が使えるHPC環境の不備

## ■ HPCソフトウェアの利用・開発人材

- 我が国のHPC分野の底上げが必須

## ■ HPCを利用したイノベーションの創出

- イノベーション創出戦略の不足

# 障壁を乗り越えるための具体策



# 計算資源の効率的利活用のスキーム

ものづくり  
のフェーズ

研究開発／製品企画

設計

生産

業務  
の  
要点

- 実現象の詳細究明
- 課題解決策の創出
- 新アイデアの発掘

- 多目的最適化
- ロバスト性評価
- 構造・形状の最適化

- 要素特性評価
- 製品丸ごと評価

- 計算機支援加工
- 計算機支援計測

計算機資源の効率的連携

分散計算機資源

要素最適化  
中規模データ処理

部品・コンポーネントレベル解析

個別生産プロセス  
対応計算処理

マルチフィジックス/スケール  
詳細解析

丸ごと最適化  
大規模データ処理・可視化

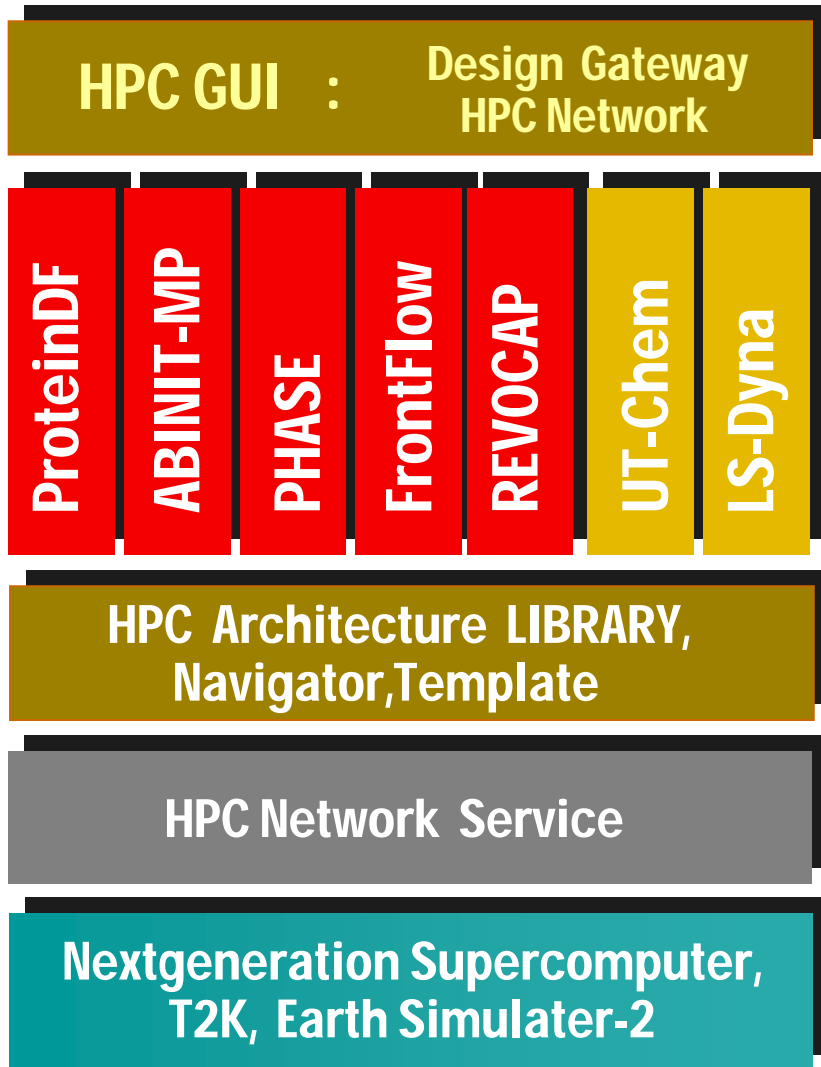
アセンブリ構造  
大規模連成解析

次世代スパコン

ものづくり計算機資源統合利活用基盤

# HPCプラットフォームの開発

## HPCプラットフォームの構成例



## 研究開発-利活用 連携メンバー(例)

### ● 研究開発メンバー

東京大学生産技術研究所  
東京大学大学院工学系研究科  
東京大学人工物工学研究センター  
東京大学情報基盤センター  
北海道大学、東北大学、大阪大学、  
(独)理化学研究所  
(財)高度情報科学技術研究機構、  
(独)物質・材料研究機構、  
国立医薬品食品衛生研究所、  
JAXA、JAMSTEC 他

### ● 産業界メンバー

スーパーコンピューティング技術産業応用  
協議会(代表組織)  
<参加企業>  
自動車、家電、重工業、電機、  
精密機器、鉄道、製薬、IT 他

### ● その他

計算科学振興財団



# HPC標準ソフトウェアの開発・整備



## ■ 実用性・先端性を兼ね備えた我が国独自のHPCソフトウェア群の開発・整備

- PCクラスターから次世代スパコンまでのスケーラビリティと自動データアップグレード
- 標準的な市販ソフトウェアとのデータ互換性を保障
- 次世代スパコン、大学の情報基盤センター、独立行政法人の大型計算機にインストール
- 革新プロジェクト、イノベーションプロジェクトで開発したソフトウェアを中核にして、GCソフト、各研究機関開発のソフトをラインナップ
- 協議会の投票(産業界のニーズ)により決定・国が開発を支援、市販ソフトも候補

# HPC開発・利活用人材の育成

- **利用者教育と開発者教育の系統的推進**
  - 大学・研究機関・産業界との間の積極的な連携
- **HPC利用者教育**
  - HPC標準ソフトウェアを利用した実践的教育
  - 使いこなす能力はもとより、モデリング能力、知見の抽出能力、問題解決能力の育成
  - 情報基盤センター、次世代スパコンを利用
- **実践的シミュレーションソフトウェアの開発教育**
  - チーム制によるシミュレーションソフトウェア開発・HPC教育
  - 計算機科学者と連携したソフトウェア開発教育(神戸のCOEを中核)

# 成功事例の戦略的創出

- 次世代スパコンのリソースの優先割当
  - 5件程度のテーマを公募により採択
- 研究機関との共同研究方式(3年間程度)
  - ソフトウェア開発者も参画
  - マッチングファンド方式
- 研究・開発成果の取り扱い
  - 企業と共同研究者に帰属
  - 成果と成功に至ったプロセスを公表

# まとめ

# ものづくり分野における次世代計算科学 シミュレーションの推進策



■HPC標準ソフトウェアの開発・整備

■HPCソフトウェアの開発・利用人材育成・  
強化

■成功事例の戦略的創出