

# 研究開発課題概要

# 研究開発課題概要



【Ⅰ】	<b>社会基盤・民生機器の抜本的効率化・小型化・静音化を実現する革新技術創出支援システムの研究開発</b>
プロダクト イノベーション	<p>① 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的効率化・低騒音化の研究開発 「京」クラスのスーパーコンピュータを用い、「動的適応型空力設計」概念を実証し、輸送機器・流体機器の効率化と低騒音化に向けた実利用への道を示すことで、計算科学による流体力学設計の限界突破の可能性を示す。</p> <p>② 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発 カーボン系エレクトロニクス、SiCパワーデバイス等の半導体デバイスで要求される非シリコン系材料に対して、高精度・大規模解析を実施し、ナノ構造プロセス・ナノ界面特性を理解し、その最適化指針を構築することを目指す。</p>
【Ⅱ】	<b>未来社会へ向けた価値の創造・製品化プロセスを抜本的に加速する次世代設計システムの研究開発</b>
プロセス イノベーション	<p>③ 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発 ものづくり技術を革新し、付加価値が高く競争力のある工業製品を開発するために、実験に依存している設計プロセスを「京」をはじめとする大規模計算資源を活用し、製品試作数の低減、コスト低減、期間短縮を目指す。</p> <p>④ 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発 ものづくりにおける製品の品質向上および設計開発期間の短縮のため、多数の設計目的を持つ設計問題や性能評価に大きな計算コストがかかる設計問題に適用可能な多目的設計探査手法の開発と実問題での実証。</p>
【Ⅲ】	<b>大規模プラントの信頼性を抜本的に向上させる次世代安全性・健全性評価システムの研究開発</b>
安心・安全 社会の構築	<p>⑤ 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発 プラント全体での俯瞰的な耐震裕度評価、各部ごとの詳細な評価を可能とする(信頼性を抜本的に向上させる次世代安全性・健全性評価システム)。</p>

# 研究開発課題中間報告

# 実施計画と最終目標

課題		前半(H23～H25上)	後半(H25下～H27)	最終目標
イノベーション プロダクト	課題1	1. 大規模流体解析ソフトウェアの整備 2. 流体制御メカニズムの解明 3. 実用問題への適用		・マイクロデバイスによる流体制御を新たな流体機器設計の概念として提案、その有効性を数値シミュレーションによって実証することで流体制御技術として確立し、その実用化に向けた道を示す。
	課題2	1. ソフトウェアの整備・評価 2. ナノ構造プロセス	・ナノ界面特性の探索 3. 重要因子抽出・影響評価	・非シリコン系新規材料の次世代ナノデバイス応用への計算科学的評価とナノ界面構造・形成プロセスの最適化指針を構築する。 ・ナノ材料探索に関する知識基盤を構築し産業界が使える形で提供する。
イノベーション プロセス	課題3	1. アプリの整備・チューニング (FFB、FFR、FFVC、UPACS等) 2. 実機を対象とした対象計算 (車、ターボ機械、船舶、燃焼器)	3. 実用化の検討	・ものづくり分野(自動車、ターボ機械、船舶、燃焼・ガス化装置、高速車両等)を対象にして、乱流の直接シミュレーションに基づいて熱流体設計を抜本的に変革できることを実証する。
	課題4	1. 多目的探査ソフトウェアの整備・評価	2. JAXA/分野4課題での実証 3. 企業が抱える問題での実証	・大規模設計最適化問題のための多目的設計探査手法を開発し、JAXAや分野4他課題、企業が抱える問題に適用してその有効性を実証する。
社会の構築 安心・安全	課題5	1. 詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術の研究開発 2. 開発技術の機能確認・検証用データ作成 3. 具体的事例適用準備	機能確認 機能検証 具体的事例での実証	強固な産学官連携体制の下、大型プラントのものづくりで必要とされる、実験では不可能な詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術(丸ごとシミュレーション技術)を研究開発し、開発した技術の機能確認と動作検証及び具体事例での適用実証を行う。

# プロダクトイノベーション 研究開発課題1 (重点課題)

## 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化の研究開発



### ■ 最終目標

マイクロデバイスによる流体制御を新たな流体機器設計の概念として提案、その有効性を数値シミュレーションによって実証することで流体制御技術として確立し、その実用化に向けた道を示す。

### ■ 研究開発成果

➤ **マイクロデバイスによる流体制御の有効性を数値解析により実証に成功**

新たな流体機器設計概念において、その中心的な役割を果たす「マイクロデバイスによる流体制御」が幅広いスケールで実用に耐える技術であることを京による大規模数値解析を通じて実証した。

➤ **制御機構の解明と実利用に向けたマイクロデバイス設計パラメータに関する知見を獲得**

小スケール(小型もしくは低速)では、幅広い条件下で流体の乱流遷移現象が重要な役割を果たしていること、従ってそれを促すパラメータ設定が有効であることを明らかにした。京を用いることで初めて可能になる大規模シミュレーションのパラメータ・スタディにより、デバイス位置、動作方法などこのスケールにおける流体制御効果の最適設計パラメータに関する多くの情報が得られている。現在、中スケール・大スケール流体機器の制御の検討を進めている。

### ■ 独創性・優位性

- プラズマアクチュエータ等のマイクロデバイスによる剥離制御機構のシミュレーションに不可欠な2つの技術
  - 1) 実形状を対象としたスペクトル的高次精度計算手法
  - 2) LESもしくは直接シミュレーションによる解析

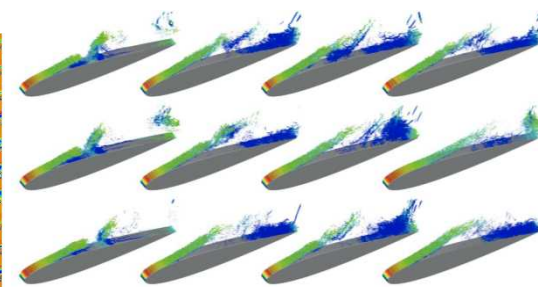
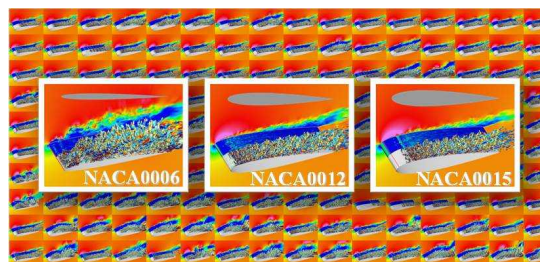
両者の組み合わせで初めて可能となる、局時流動・制御の詳細議論を行う。両者の技術と経験を有するグループは世界中でも大変限られている。(アメリカ空軍研究所などのグループのみ)

### ■ 成果の利活用

➤ **流体機器設計の概念が大きく変革する可能性を示す**

得られた知見や効率的な設定パラメータを国内外における学会発表で公開、本技術の認知度を高める。

研究会を立ち上げることで、剥離制御による性能向上という実用技術としての普及を目指す。



様々なスケールでの流体制御(左:小スケール、右:大スケール)<sub>11</sub>

# プロダクトイノベーション 研究開発課題2

## 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発



### ■ 最終目標

- 非シリコン系新規材料の次世代ナノデバイス応用への計算科学的評価とナノ界面構造・形成プロセスの最適化指針の構築する。
- ナノ材料探索に関する知識基盤を構築し産業界が使える形で提供する。

### ■ 成果

- **実成長温度でのダイナミクス・シミュレーションにより、グラフェン高品質化の解決に資するグラフェン成長過程の解析に成功**
- ・第一原理電子状態計算プログラムPHASEの最適化を実施、京82,944ノードで実効効率20.2%(2.1PFLOPS)を達成。
- ・有望なグラフェン成長法である、金属表面でのCVD成長法、及びSiC基板の熱分解法に関して、絶対零度での解析ではなく従来実施が困難であった実成長温度での第一原理ダイナミクス・シミュレーションを実施し、高温での金属表面の乱雑化によるグラフェン平坦化とエッジ終端化等、グラフェン成長素過程の原子レベルでの解析に成功。
- ・デバイス開発の大きな課題である高品質・大面積なグラフェン作成に向けて前進。

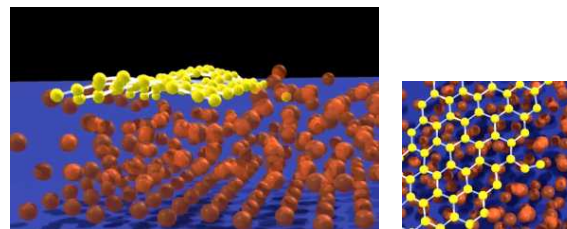
### ■ 優位性

- 京計算機を活用した、**実成長温度での解析**、従来にない**広範な構造探索**、等の大規模解析が可能であり、これにより現象を解明し、**課題解決への指針を構築**することを目指す。

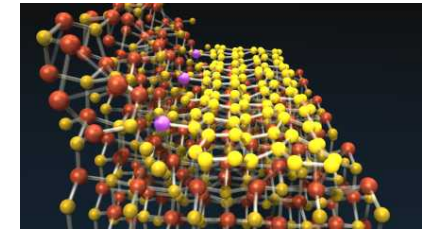
### ■ 成果の利活用

- ものづくり現場との共同研究の実施。  
最先端研究開発支援プログラム「グリーン・ナノエレクトロニクス」のコア技術開発(産業技術総合研究所横山プロジェクト)
- グラフェン・デバイスに関する共同研究を実施中。
- パワーデバイスに関する共同研究を実施中。

金属表面でのグラフェンCVD成長



SiC熱分解法によるグラフェン成長



# プロセスイノベーション 研究開発課題3 (重点課題) 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発



## ■ 最終目標

- ものづくり分野(自動車、ターボ機械、船舶、燃焼・ガス化装置、高速車両等)を対象にして、乱流の直接シミュレーションに基づいて熱流体設計を抜本的に変革できることを実証する。

## ■ 成果

乱流の直接シミュレーションにより、風洞試験や水槽試験の代替え、および機器の性能・品質の向上に資する解析に成功

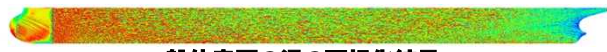
- 自動車 : 自動車実車風洞空力の定量評価を実現
- ターボ機械 : 遠心ファンの音源の定量評価を実現
- 燃焼・ガス化 : 基礎実験装置およびモデル燃焼器内のガス、噴霧、石炭燃焼特性の評価を実現
- 船舶 : 船体まわり流れ直接計算 (300億グリッド) により船体推進抵抗の定量予測(誤差0.9%)に成功

## ■ 優位性

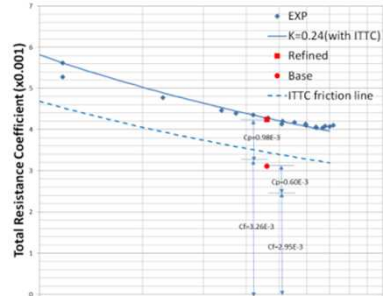
- 大規模並列解析(300億要素)を24時間以内で解析を実現。
- ファン内部の微小な渦(0.5mm程度)の非定常挙動を捉えるため、40億グリッド規模の解析を実施、ファンの騒音源を高精度に予測することに成功。
- 船体推進抵抗技術で300億グリッドを用いた準直接計算を実施し、乱流モデルを用いずに、推進抵抗の定量予測(予測誤差0.9%)が可能であることを実証。(世界初)
- ガス燃焼場、噴霧燃焼場および石炭燃焼場内の温度、NOx濃度およびすす濃度を大規模計算により評価可能な統合ソフトウェアを研究開発。

## ■ 成果の利活用

- 自動車コンソーシアム、ターボ機械コンソーシアム、燃焼・ガス化コンソーシアムを形成し、開発中のシステムに関するディスカッション、試用などを進めている。

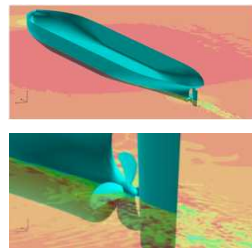


船体表面の渦の可視化結果

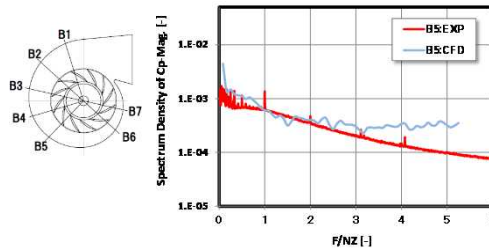


Reynolds Number  
船体推進抵抗の比較

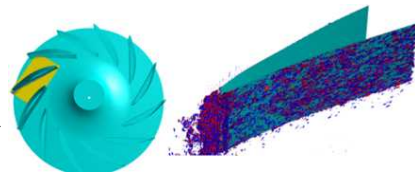
提供: 一般財団法人日本造船技術センター



自航試験計算の準備計算(40億格子)における主流速度分布



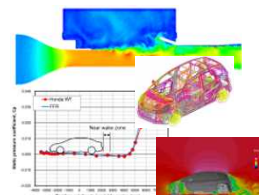
遠心ファンケーシングの圧力変動スペクトルの比較



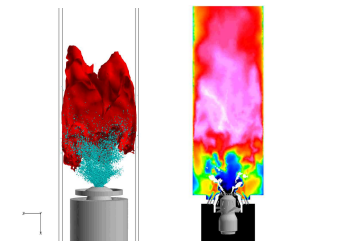
京を用いた100億規模のファン内部流れ計算



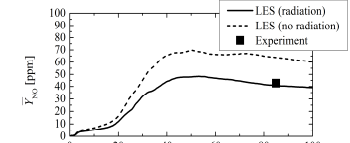
スズキ実車風洞モデル解析(23億規模)



ホンダ新設風洞を模倣したデジタル風洞



粉燃焼火炎の温度分布とNOx放出量の予測

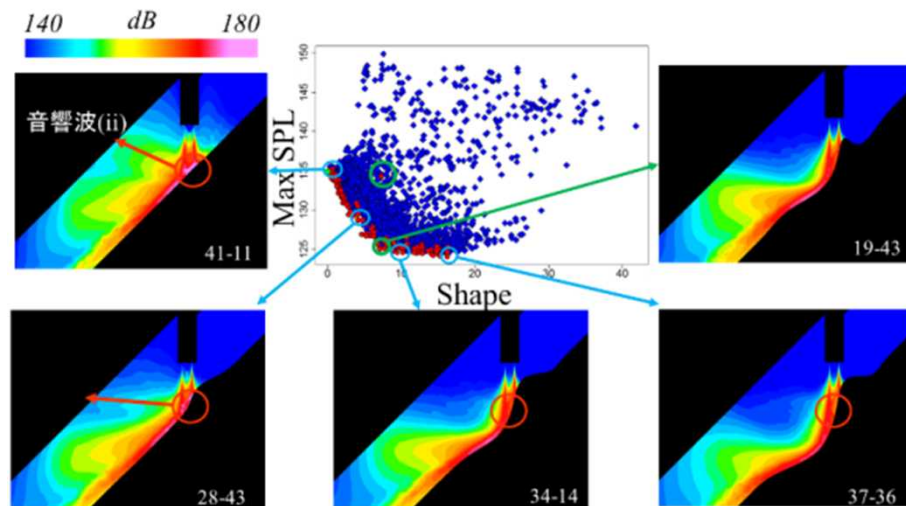


### ■ 最終目標

- 大規模設計最適化問題に適用可能な多目的設計探査手法を開発する。
- JAXAが抱える大規模設計最適化問題に取り組む。

### ■ 成果

- 大規模設計最適化手法に適用可能な多目的設計探査手法を開発した。
- **ロケット射点での空力音響問題の解決に資するロケット射点形状の空力音響多目的設計探査に成功。**
- **深宇宙探査技術実証ミッションDESTINYの6目的軌道設計最適化問題の多目的設計探査に成功。**



ロケット射点の空力音響多目的設計探査. 得られた最適解の分布と代表的な最適解の流れ場の様子.

### ■ 独創性・優位性

- ロケット射点の空力音響設計最適化問題を解いたのは世界初。京コンピュータを用いて多数の高解像度非定常流体シミュレーション(ラージエディシミュレーション)を実施することで初めて実現。
- 多数の設計目的をもつ実設計最適化問題を解き、設計に役立つ知見を得ることができたのは世界初。

### ■ 成果の利活用

- ロケット射点の空力音響設計最適化問題を解いて得られた知見は今後のロケット射点設計に活かされる。
- DESTINYの軌道設計最適化問題を得られた知見は今後のDESTINYミッションの検討に活かされる。
- 3つのデータマイニングソフトウェアを一般に公開。
  - ・ 散布図行列可視化ツール「iSPM」
  - ・ パレート解解析支援ツール「ADVICE」
  - ・ スタイルビューワ「STV」
- マツダ、横浜ゴム等と実用化を視野に入れた共同研究を開始。



### ■ 最終目標

- 強固な産学官連携体制の下、大型プラントのものづくりで必要とされる、実験では不可能な詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術(丸ごとシミュレーション技術)を研究開発し、開発した技術の機能確認と動作検証及び具体事例での適用実証を行う。

### ■ 成果

- **組立構造を意識した有限要素解析により、プラント全体での俯瞰的な耐震裕度評価、各部ごとの詳細な評価に成功**
  - ・プラント全体での俯瞰的な振動計算、各部ごとの詳細な応力／振動計算を「京」上で実施中(1,024ノード)。
  - ・「京」上において世界最速水準となる耐震シミュレータ。(要素技術の研究開発では4,096ノードを用い実行効率42%を達成)
  - ・高温工学試験研究炉の観測データとの比較を通して、建屋の感度解析を実施中。
  - ・市販コードとの計算結果比較で、機能確認を実施中。
  - ・高温工学試験研究炉の耐震裕度評価に向けた準備(地震波200波他)を実施中。
  - ・(株)荏原製作所と千代田化工建設(株)と具体事例を選定
  - ・ポンプシステムの部品挙動解析を実施中。
  - ・ストラクチャ構造物(化学プラント)の俯瞰的な耐震裕度分析を実施中。

### ■ 独創性・優位性

- 部品間の組立状態の挙動解析
- 部品毎のデータ処理による作業の効率化

### ■ 成果の利活用

- 原子力分野の実験施設の耐震性分析などに活用
- ポンプシステムの耐震性分析などに活用
- 化学プラントの耐震性分析に活用