

計算科学技術推進体制構築 中間報告

体制構築施策の特徴的取り組みの全貌

各分野共通
基本施策

- ① 計算機資源の効率的マネジメント
- ② 研究成果の普及

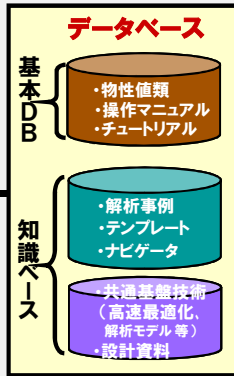
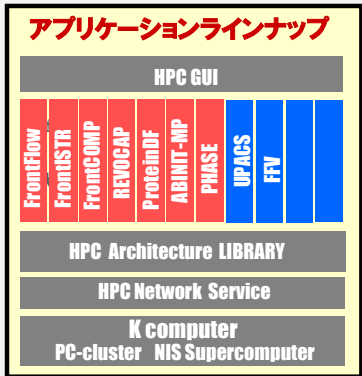
- ③ 人材育成
- ④ 人的ネットワークの形成
- ⑤ 分野を超えた取り組みの推進

分野4 体制構築施策の主眼

“成果を企業で有効に活用する”

[I] 成果を使いやすくするための事業 ②⑤

■ HPC / PF の構築・運用



●最先端の大規模並列シミュレーション技術を研究/設計現場の道具に

- ものづくりに必要な基盤技術・アプリケーションを多数実装
- それを使いこなすためのDB(利用ノウハウ、解析事例等)を構築

[II] 成果を知ってもらうための事業 ④②

■ 成果の発表・意見交換

- 京コンピュータシンポジウム (1回/年)
- 次世代ものづくりシンポジウム (1回/年)
- 分野4 統合ワークショップ (1回/年予定)
- HPCものづくりワークショップ (2回/年予定)
- アウトリーチセミナー (1回/2ヶ月予定)

■ アウトリーチ活動



[III] 成果を活用できる人材育成事業 ③④

■ HPC 産業利用スクール

レベル・目的別コース設置

産業界においてシミュレーション活用によるイノベーション創出の担い手を育成

- HPC技術の習得と応用演習
- 産業界におけるHPCI利活用戦略検討
- HPCにおける業種を超えたネットワークの構築

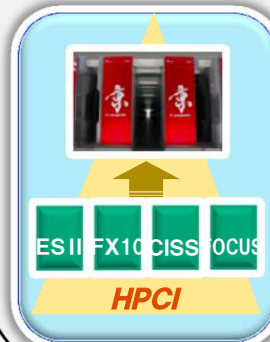
■ 先端ソフト開発者教育 (成果を生むための基盤開発)

東大大学院演習講義

- チーム制によるシミュレーションソフトウェア開発教育
- ソフトウェア工学教育とHPC教育
- ソフトウェア工学の作法とHPCの技術を実践的に両立させる訓練
- 産業界の講師による実践的講義・演習
- 東大情基センターFX10システムの利用

[IV] 成果を実際に使ってもらうための事業 ①③

■ HPCI の効率的利活用



- STEP III
実証研究課題公募事業
- STEP II
HPC産業利用スクール
- STEP I
HPC需要開拓事業

■ HPC 利用者層の拡大

設計実務利用セミナー開催

- 先端アプリ利用解析作業の一連の流れを実演・実習形式で体験
- トライアル利用環境(FOCUSパソコン)の構築によるHPC潜在ユーザーの掘り起しを実施
- HPCアプリの設計現場への早期導入のための支援

実施計画と最終目標

主要な施策	前半(H23~H25上)	後半(H25下~H27)	最終目標
1. 成果を使い易くするための事業 ・研究成果の普及 ・分野を超えた取り組みの推進	1. HPC/PFの構築 2. 解析事例の 3. アプリラインナップ整備	設計システムへの展開 収集・公開	・次世代ものづくりに不可欠の先端的应用ラインナップとその効率的・効果的利用に資するデータベースシステムからなるHPC/PFを構築しHPCIで利用可能な環境を整備することにより、研究成果の広範にわたる産業界への普及を図る。
2. 成果を知ってもらうための事業 ・人的ネットワークの形成 ・研究成果の普及	1. 成果の発表・意見交換(シンポ中心) 2. アウトリーチ活動(専用サイト開設含む)	発表機会の増強 (ワークショップ、アウトリーチセミナー等)	・ものづくりに係る研究者のみならず、広範の産業界の技術者を対象としたシンポジウム/ワークショップ等を開催し、オールジャパンでのHPCIものづくりネットワークを構築する。
3. 成果を活用できる人材育成事業 ・人材育成 ・人的ネットワークの形成	1. HPC産業利用スクール(産応協と連携) 2. 先端ソフトウェア開発者教育	成果物を著書として展開	・習熟レベル別に設ける産業利用スクールを通して先端ソフト活用リーダーを育成し、HPCI活用人材の拡大を図る。 ・大学院の実習講義を通して若手専門家の輩出を図る。
4. 成果を実際に使ってもらおうための事業 ・計算機資源の効率的マネジメント ・人材育成	1. 研究ニーズ、産業ニーズに応じたHPCIの適正配分 2. 需要開拓事業(FOCUSと連携) 3. アプリ利用セミナー、トライアル環境の構築・提供		・多様なニーズに応えるための計算機資源活用の仕組みを構築。 ・産業界のヘビーユーザーのみならず、ボリュームゾーンユーザーの開拓を行い、HPCI活用の裾野拡大を図る。

体制構築施策の主要成果・利活用状況・独創性

■ 成果普及のためのソフトウェアプラットフォーム(HPC/PF)を開発

<特徴>

- ・広範のものづくりに役立つHPC対応基盤アプリケーションを多数搭載(当面10本予定)。
- ・産業界ユーザーが使いこなすためのデータベースを装備(解析事例約140件実装完了)。
- ・分野4アウトリーチサイトを通して一般に公開(10月末よりサイト運用開始)。

<独創性・優位性等>

- ・先端アプリを研究・設計実務に利活用するための支援環境を整備した例はかつてない。



分野4 アウトリーチサイト「計算工学ナビ」

■ 先端アプリ利活用人材の計画的育成と実務利用教育を実施

<特徴>

- ・HPC産業利用スクール:入門、実践、「京」特別コース等の設置により、産業界リーダを計画的に育成(産業界技術者約200名を育成済)。
- ・アプリ実務利用セミナー:トライアル環境を構築(FOCUSスパコン)し、アプリを実際に使うためのセミナーを実施(産業界技術者62名育成済)。

<独創性・優位性等>

- ・計画的な産業界リーダの育成と即戦力的人材育成施策を併設し多様なニーズに対応。

	第1回	第2回	第3回
開催日	H24.7.13(水)	H24.8.22(水)	H24.11.8(水)
会場	大阪国際会議場(大阪市)	東京大学生産技術研究所(東京都目黒区)	計算科学振興財団(神戸市)
参加者数	21名	19名	22名



設計実務セミナー(FFBを対象とした実施例)

參考資料

分野4 次世代ものづくり（課題1）

輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率・低騒音化に関する研究開発 （課題代表者：宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所・藤井孝藏）

研究概要

高効率に流体制御を実現するマイクロデバイスを利用することで、「形状を工夫する空力設計」の概念を越える考え方として「動的適応型空力設計」を提唱する。「京」クラスのスーパーコンピュータを用いて、その概念を実証し、輸送機器・流体機器の更なる高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。具体的には、マイクロデバイスによる流体制御の実証、作動原理の解明（知識基盤の提供）により流体制御技術として確立し、それを基盤として「動的適応型空力設計」への道を示す。また、「ものづくり」分野の特性を踏まえ、産業界での実利用に向けた取り組みを進め、高効率・低騒音流体機器開発への知識基盤とそれに基づく機器設計例を実際に提供する。

研究体制

東京大学 寺本進 准教授（流体制御メカニズムの解明・実用問題への適用） 東京農工大 西田浩之 准教授（プラズマアクチュエータのモデル化）
⇕
宇宙科学研究所/JAXA 課題代表 藤井孝藏 教授ら9名（大規模流体解析ソフトウェアの整備、流体制御メカニズムの解明、実用問題への適用）
⇕
九州大学 宮沢与和 教授ら（実証システムの検討） 北海道大学 椿野大輔 助教（最適制御の検討）

成果内容と科学的又は社会的意義

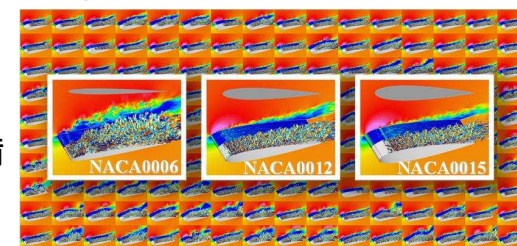
・ マイクロデバイスによる流体制御の有効性を数値解析により実証に成功

ここで提案する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

比較的小スケール（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、従ってそれを促す特性を持つ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、このスケールの流体機器における、デバイス位置、動作方法などデバイスによ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。これらの知見は、本課題が目標とする「マイクロデバイスによる流体制御を前提とした流体機器設計」の実現に大きく寄与する。

本課題の最終目標である「輸送機器・流体機器の更なる高効率化と低騒音化」を達成するため、現在、上記の小スケール領域における知見をもとに、より実用性の高い中・大スケール域での剥離制御のシミュレーションに取り組んでおり、一定の成果が出はじめている。加えて、実用問題への適用例として、風力発電などに用いられる回転翼を対象とした流体制御問題、フィードバック動的制御を可能にする制御則を取り入れた流体制御の準備を進めている。H25冬に立ち上げ予定の企業・大学研究者合同の研究会を通じて、より広い実応用を探るとともに、企業との共同研究や論文発表を通じて、本技術の意義と有効性を広く社会に広めていく。



分野4 次世代ものづくり (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 (課題代表者: 物質・材料研究機構・大野 隆央)

研究概要

- ・半導体デバイスが直面する大きな課題(微細化の限界、消費電力の増大)を解決するため、非シリコン系新規材料(炭素系材料、SiC等)を用いた高機能デバイスの開発が精力的に実施されているが、これら新規材料に対するプロセス・デバイス構造の最適化技術の欠如が大きな問題である。
- ・本研究課題では、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、ナノデバイス特性を原子レベルで理解し、その最適化指針を構築することを目指す。また、新規材料探索に関する解析手法、方法論等の知的基盤を構築し産業界が使える形で提供することを図る。

研究体制

物質・材料研究機構、及び、企業コンソーシアム(高効率電子デバイス材料研究コンソーシアム)で研究実施

参加メンバー: (株)富士通, (株)東芝, (株)日立, NTT (株), (株)サムソン, みずほ情報総研(株), (株)アスムス, 理研, 法政大
ものづくり現場との協力

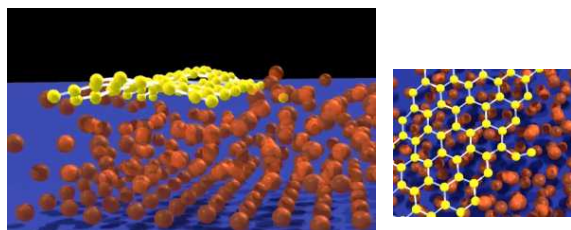
- ・グラフェン・デバイス開発: 最先端研究開発支援プログラム「グリーン・ナノエレクトロニクスのコア技術開発」(産総研横山プロジェクト)
- ・SiCパワーデバイス開発: (株)東芝 研究開発センター

成果内容と科学的又は社会的意義

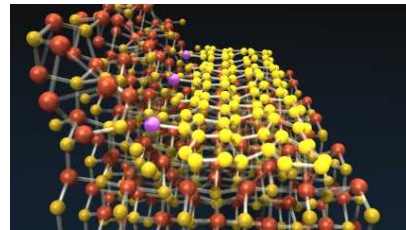
実成長温度でのダイナミクス・シミュレーションにより、グラフェン高品質化の解決に資するグラフェン成長過程の解析に成功

- ・第一原理電子状態計算プログラムPHASEの最適化を実施し、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。
- ・次世代デバイス開発のキーである、グラフェン、SiC等の新規材料のプロセス・デバイス構造の最適化指針構築への道を拓く。

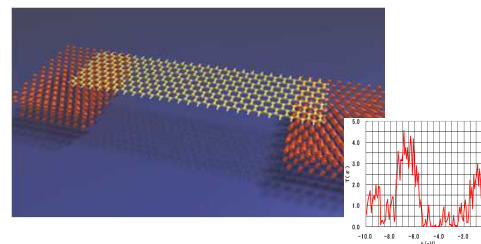
金属表面でのグラフェンCVD成長



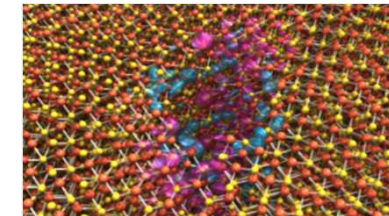
SiC熱分解法によるグラフェン成長



グラフェン・金属接合系の伝導特性



SiC中の欠陥(らせん転位)



分野4 次世代ものづくり（課題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（課題代表者：東京大学・加藤千幸）

研究概要

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は、シミュレーション技術の効果的な活用が必須である。現状ではコストの高い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することにより、製品試作数の低減、コスト低減、期間短縮を目指す。また、これまでの計算技術では評価が困難であった乱流の非定常現象（振動・騒音、損失の発生メカニズム等）も含めた製品性能の評価が可能となるので、製品性能を大幅に向上させるブレークスルーを創出することが期待される。本課題では、ラージエディシミュレーション（LES）をベースとする熱流体解析コードを用いた解析を実施する。

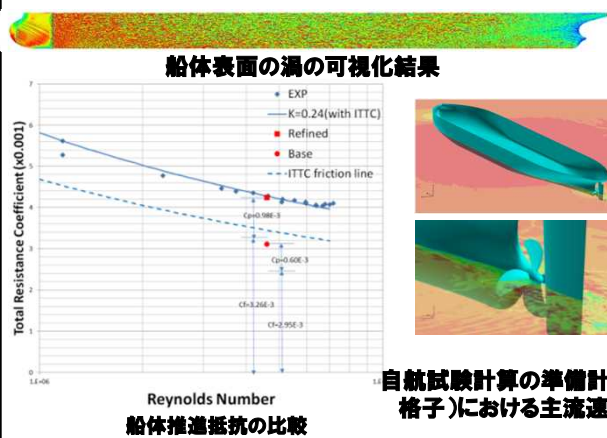
研究体制

- 以下のサブテーマに対し研究開発を実施する。
- 自動車：研究代表 坪倉 誠（北海道大学）：国内の自動車関連メーカ（13社）、研究機関（5機関）でコンソーシアムを構築し研究開発を推進する。
 - ターボ機械：研究代表 加藤千幸（東京大学）：国内のターボメーカ（13社）、研究機関（7機関）でコンソーシアムを構成し研究開発を推進する。
 - 燃焼・ガス化：研究代表 黒瀬良一（京都大学）：国内の重工業メーカ（5社）、研究機関（4機関）でコンソーシアムを構成し研究開発を推進する。
 - 船舶の推進抵抗予測：研究代表 加藤千幸（東京大学）：一般財団法人日本造船技術センターと連携し船舶推進抵抗の予測技術を確立する。

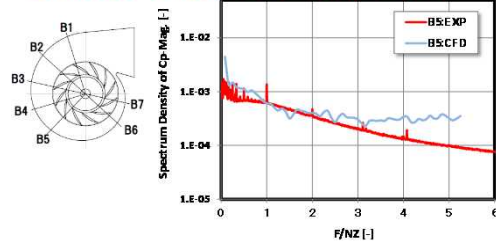
成果内容と科学的又は社会的意義

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

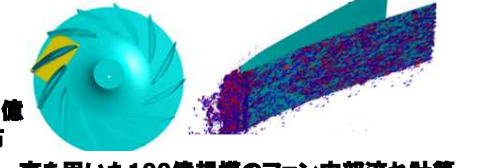
船体まわり流れ直接計算（300億グリッド）により船体推進抵抗の定量予測（誤差0.9%）に成功



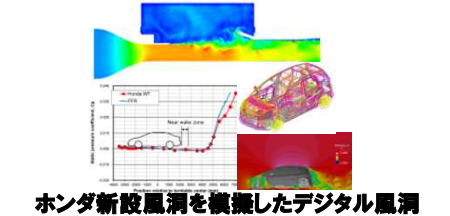
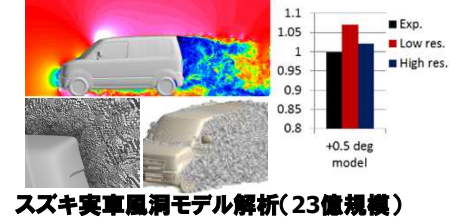
遠心ファンの音源の定量評価を実現



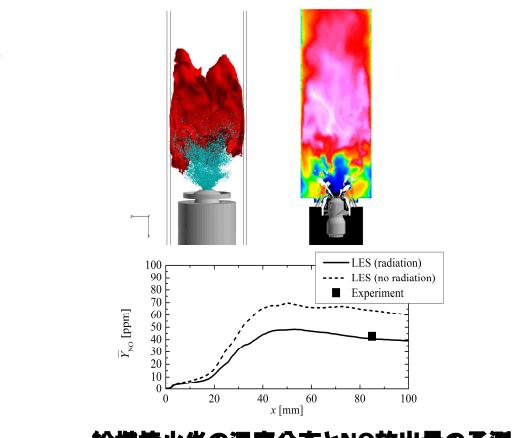
遠心ファンケーシングの圧力変動スペクトルの比較



自動車実車風洞空力の定量評価を実現



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



分野4 次世代ものづくり（課題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

（課題代表者：宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所・大山聖）

研究概要

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、大規模設計問題に適用可能な多目的設計探査技術が産業界で必要とされている。本課題では、多数の設計目的を持つ設計最適化問題や1つの設計候補の性能評価に大きな計算コストがかかる設計最適解問題に適用可能な多目的設計探査手法を開発し、宇宙航空研究開発機構(JAXA)、分野4他課題、および、企業がもつ実設計問題に適用してその有効性を示す。

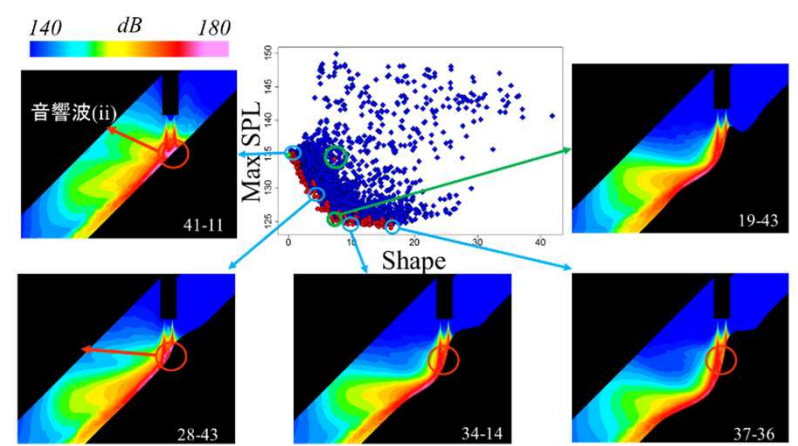
研究体制

JAXA、東北大学、信州大学、名古屋大学、および、複数の企業と共同で研究を進める。JAXAおよび各大学は大規模実問題に適用可能な多目的設計探査技術(多目的設計最適化手法、応答曲面近似法、データマイニング手法)について、分担して研究開発をすすめる。また、JAXAや分野4他課題、企業が持つ大規模実設計問題への適用に関しては、企業と協力しながら、おもにJAXAと東北大学が行う。

成果内容と科学的又は社会的意義

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

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)と多目的進化計算を組み合わせ多目的設計探査を実施することで、ロケット射点形状の空力音響多目的設計探査に世界で初めて成功した。
この計算結果により、ロケット搭載ペイロードの音響環境を改善するためのロケット射点形状の設計指針が得られた。
ここで開発された手法を用いることで、車や列車などの輸送機器、ターボ機械などの空力音響を大幅に削減し、開発期間も短縮することが可能になると考えられる。



得られた最適解の分布と代表的な解の流れ場の様子

分野4次世代ものづくり（課題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 （課題代表者：日本原子力研究開発機構・中島 憲宏）

研究概要

- 【背景】 従来計算技術より一層合理的な裕度設計が必要であり、計算機的能力不足と実用的なアプリ(方法論)が欠如していた
- 【研究内容】 観測された地震波等を用いた耐震シミュレーションによるV&V
従来は不可能であった結合部を有する機械構造物の振動解析
化学プラント主要構造物(ストラクチャ、機器、配管)の集合解析
- 【最終目標】 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)

研究体制

- 【課題代表】 中島 (JAEA)
- 【プロジェクトの総合的推進施策】 中島 (JAEA)
- 【大規模プラントの高精度評価システムにおける構造解析ソフトウェアの研究開発】 中島、西田、宮村、岡田、川上、鶴田 (JAEA)、吉村、藤井 (東大工)、山田 (東大RACE)、岡田 (東京理科)、河合、杉本 (諏訪理科)、塩谷、中林 (東洋大)、荻野 (名大)
- 【プロダクションランの実施と大規模プラントの高精度評価システムの研究開発】 中島、西田、宮村、岡田、川上、鶴田 (JAEA)、吉村 (東大)、宮村 (日大)、木村 (法政大)、手塚 (産総研)、産業分野11社+学術分野3法人

成果内容と科学的又は社会的意義

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

- 【産業上の効果】 丸ごとシミュレーションによる裕度評価技術の改善、振動・地震波応答などの一層合理的な定量的評価
- 【産業界への貢献の進捗】
- ・高温工学試験研究炉 (HTTR: High Temperature engineering Test Reactor)
原子力発電プラント (HTTR) 建屋の感度解析を実施中
 - ・荏原製作所
部品挙動解析 (自重解析、静解析、固有値解析) を実施中
 - ・千代田化工建設
ストラクチャ構造物の俯瞰的な耐震裕度分析を実施中
- 【今後の展望】
- ・高温工学試験研究炉 (HTTR) 施設における部分的 V&V
 - ・組立構造解析プログラム (FIESTA) の京へのポータリング、チューニング
 - ・京上における世界最速の振動解析ソルバーを整備

分野4 次世代ものづくり

計算科学技術推進体制構築(課題代表者:東京大学生産技術研究所・畑田敏夫)

研究概要

【背景】 最先端スパコンの活用による我が国ものづくり産業の国際競争力強化は喫緊の課題であり、産学官一体推進体制構築への期待が大きい。
【取組内容】 代表的な5つの研究課題の成果を如何に産業界全体に普及させるかに力点を置き、1)基盤的アプリケーションのラインナップとその使い方の知識ベースを備えたプラットフォーム(HPC/PF)を整備すること、2)先端アプリケーション利活用人材の育成に対して、階層別教育(HPC産業利用スクール)、アプリ別のセミナー等を開催することを主要施策として推進。大学・研究機関の研究者と産業界技術者の連携を強化。
【最終目標】 次世代ものづくりを牽引する先端アプリケーションの維持・強化・普及体制の構築。

研究体制

【全体取り纏め】 畑田敏夫(東大生研)
【各施策の推進】 ●計算資源の効率的なマネジメント: 吉廣保、皆川廣司(東大生研)他、●研究成果の普及: 小野謙二(AICS)、川鍋友宏(東大生研)、東大生研、東大大学院、立教大、JAXA、JAEA、スパコン産業応用協議会、(公財)計算科学振興財団、●人材育成: 佐藤文俊(東大生研)、村上英樹(新日鐵住金)、東大生研、スパコン産業応用協議会、●人的ネットワーク: 東大生研、AICS、JAXA、JAEA、●分野を超えた取組: 東大生研、AICS、JAXA、JAEA、●プロジェクトの総合的推進: 東大生研(代表機関として)

成果内容と科学的又は社会的意義

- 最先端アプリを研究/設計現場の道具にするための基盤ソフトウェアの基本設計を終了、プロトタイプを構築、動作実証完了
 - ・本研究開発で得られた成果は、大規模シミュレーションを設計で活用するための効率的な実行を補助し、大規模シミュレーションと設計を結びつける上で大きな役割を果たす。DB化済み解析事例件数:約140件(流体、構造、材料等8種類のアプリ)。
 - ・最終目標に対しては60%程度の進捗状況で、当初計画どおりに進行している。アウトリーチ活動については、前倒しで開発を実施している。開発したHPC/PFの仕組みは分野4内で活動している企業コンソーシアム活動へ展開する予定である。
- 先端アプリ利活用人材を計画的に育成(利用者ニーズに対応)

HPC産業利用スクール(スパコン産協と連携)		利用者層拡大施策(FOCUS等と連携)		
H21年度～H24年度	H25年度以降	講習会開催(FFB)	トライアル利用促進	H25以降
◆入門コース ◆実践コース ◆サマースクール ◆「京」特別コース	◆実践コース強化 + ◆特別討議コース	第1回 大阪 第2回 東京 第3回 神戸	・FOCUSスパコンでの トライアル環境構築 ・利用パンフレット作成等	対応アプリの拡大
総参加者 200名		H24 総参加者 62名		

