

産業基盤ソフトウェア検討ワーキンググループ

ー平成 27 年度活動レポートー

産業基盤ソフトウェア検討ワーキンググループは、中長期的に産業界が必要とする HPC (High Performance Computing) 分野の基盤ソフトウェアについて、産業界がアカデミアなどと連携して開発推進し、維持、発展する仕組みの検討を目的として発足した。しかし、当初の議論では、主体的に開発推進すべきソフトウェアについて、すぐに顕在化する具体的なテーマを見出すには至らず、現状のシミュレーションの活用状況を把握した上で、さらに潜在レベルを含めた発展的ニーズを見出す必要があることが明らかとなった。このような状況の中、本年度は専門分野別に「機械・建設」、「化学・材料」の2分野の研究会を立ち上げ、研究会メンバーで詳細な議論を行った。

本レポートは、各研究会での議論とメンバーへのヒアリングをもとに、「機械・建設」および「化学・材料」分野それぞれのシミュレーション全体の活用状況と、それを受けた今後のシミュレーションへの発展的ニーズ、HPC への期待を研究会の仮説としてまとめたものである。

- I. 「機械・建設分野におけるシミュレーションの活用状況と HPC への期待」
- II. 「化学・材料分野におけるシミュレーションの活用状況とアカデミアへの期待」

a.ワーキンググループ・研究会開催一覧

本年度に開催したワーキンググループ・研究会は以下の通り。うち3回はアカデミア側との合同ミーティング形式あるいはシンポジウム形式による開催。

研究会	開催日	開催時間	開催場所
化学①	5月14日	16:00~18:00	トヨタ自動車株式会社 東京本社会議室
機械①	5月21日	13:00~14:00	トヨタ自動車株式会社 東京本社会議室
化学②	6月17日	10:00~12:00	みずほ情報総研株式会社 本社会議室
機械②	6月29日	9:00~12:00	トヨタ自動車株式会社 東京本社会議室
化学③	7月16日	10:00~12:00	みずほ情報総研株式会社 本社会議室
機械③	8月5日	14:30~17:00	トヨタ自動車株式会社 東京本社会議室
機械④	9月3日	14:00~16:00	みずほ情報総研株式会社 本社会議室
化学④	9月9日 ~10日	13:00~18:00 9:00~12:00	クロス・ウェーブ府中（合宿形式）
機械⑤	9月11日	9:00~12:00	トヨタ自動車株式会社 東京本社会議室 (※1：アカデミアとの合同ミーティング)
化学⑤	10月28日	13:00~15:00	みずほ情報総研株式会社 本社会議室
全体①	11月11日	9:30~12:00	トヨタ自動車株式会社 東京本社会議室 (※2：アカデミアとの合同ミーティング)
化学⑥	11月26日	10:00~12:00	みずほ情報総研株式会社 本社会議室
全体②	12月15日	9:00~11:00	株式会社大崎総合研究所 会議室
機械⑥	1月18日	12:30~14:00	ダイキン工業株式会社 東京支社会議室
化学⑦	1月19日	9:30~11:30	みずほ情報総研株式会社 本社会議室
全体③	2月5日	10:00~12:00	トヨタ自動車株式会社 東京本社会議室
化学⑧	2月24日	13:00~18:00	産応協、CMSI、ポスト京重点課題5・6・7合同 産学官連携シンポジウム2016 (ステーションコンファレンス東京)

全体：全体ワーキング グループ 機械：機械・建設分野研究会 化学：化学・材料分野研究会

※1：東京大学生産技術研究所加藤千幸教授、同大学吉村忍教授より、アカデミア側のシミュレーションのシリーズ（ポスト京重点課題プロジェクト）に関する話題をご提供頂いた。

※2：理化学研究所情報基盤センター姫野龍太郎センター長より、創薬分野のシミュレーションのニーズ・シリーズに関する話題をご提供頂いた。

産業基盤ソフトウェア検討ワーキンググループ

機械・建設分野別研究会

I.

「機械・建設分野におけるシミュレーションの活用状況とHPCへの期待」

O. はじめに

産業基盤ソフトウェア検討ワーキンググループは、中長期的に産業界が必要とするHPC (High Performance Computing)¹分野の基盤ソフトウェアについて、産業界がアカデミアなどと連携して開発推進し、維持、発展する仕組みの検討を目的として発足した。しかし、当初の議論では、主体的に開発推進すべきソフトウェアについて、すぐに顕在化する具体的なテーマを見出すには至らず、現状のシミュレーションの活用状況を把握した上で、さらに潜在レベルを含めた発展的ニーズを見出す必要があることが明らかとなった。このような状況の中、本年度は「機械・建設」分野の研究会を立ち上げ、研究会メンバーで詳細な議論を行った。

本レポートは、機械・建設分野別研究会での議論とメンバーへのヒアリングによって、当該分野のシミュレーション全体の活用状況を整理し、今後のシミュレーションへの発展的ニーズ、HPCへの期待を研究会の仮説としてまとめたものである。

目次

1. 全体概要.....	I-2
2. 機械・建設分野におけるシミュレーションの活用状況.....	I-2
3. シミュレーションの更なる活用のための発展的ニーズ.....	I-3
4. ニーズの分析と整理.....	I-4
4.1 アカデミア・国家プロジェクトへの期待.....	I-4
4.2 企業とベンダーで対応すべきニーズ.....	I-5
4.3 ニーズの整理.....	I-5
5. まとめ（シミュレーションの活用状況とHPCへの期待の仮説）.....	I-8
6. 今後の調査項目.....	I-9

¹ 企業内での計算機リソースでは実現が困難な大規模リソースを必要とするソフトウェアおよび利用環境と定義。

1. 全体概要

機械・建設分野では、様々な対象のシミュレーションが商用ソフトウェアを中心に実用化され、既に研究開発や設計の工程で必要不可欠なものとなっている。シミュレーション活用の効果が期待できる領域では、実験だけでは困難な広範囲の設計条件が探索できるようになっており、実験の対費用効果を大きく超える成果を上げている。

こうした活発なシミュレーションの活用状況を受けて、更なる発展的なニーズが存在する。発展的なニーズは大まかに、アカデミア・国家プロジェクトへの期待と企業とベンダーで対応すべきニーズに分類される。そのなかで、方法論からの研究を含めた圧倒的な計算速度向上（10～100倍）や解析困難な複雑現象への対応、新しい最適化設計の手法の開発など、既存技術を凌駕する革新的なテーマについては、研究開発の方法論、コストや期間などのリスクが見積れず、企業やベンダーによる商用ベースでの取り組みは困難であることから、アカデミアや国家プロジェクトへの期待は高い。特に、燃焼・混相流・乱流など解析が難しい現象の実スケール解析、ダイナミックレンジの大きい現象や複数の連成現象の解析（マルチスケール・マルチフィジックス）、製品全体の最適化設計シミュレーションなどは、最先端のHPCを用いて10年あるいはそれ以上を先取りする挑戦的なテーマとして期待が高くなっている。

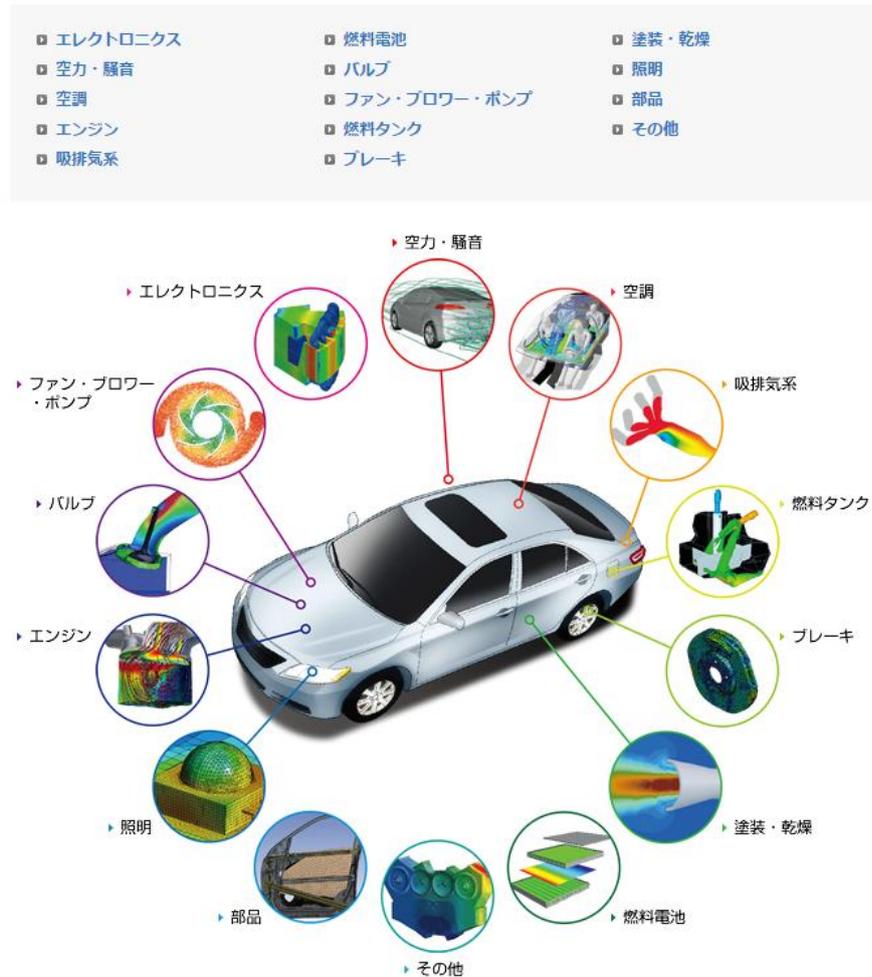
一方、既存のソフトウェアの漸進的な機能向上、製品開発に直結するシミュレーションに強いニーズが存在するが、コストパフォーマンス、製品の開発期間との同期、機密性などの制約があることから、企業とベンダーによる積極的な対応が行われている。また、現状で活用されているシミュレーションの更なる大規模化、大量のパラメータスタディなど、最先端のHPCを用いて10年先の状況を先取することを想定したニーズも存在するが、商用ソフトウェアのスーパーコンピュータ（スパコン）への移植、ライセンス費用の増大など、技術的課題およびコストとビジネスモデルの課題があり、必ずしも強いニーズとはなっていない。

2. 機械・建設分野におけるシミュレーションの活用状況

- 構造、衝突、熱流体、電磁場、音響、振動など様々な対象のシミュレーションが商用ソフトウェアを中心に実用化されており²、研究開発や設計の各工程で必要不可欠なものとなっている（図1）。
- シミュレーションの目的は、実験が難しい現象のメカニズム解明や、実験や試作の代替によるコスト削減である。特に設計では、コストパフォーマンス、製品の開発期間や機密性の制約があることから、実験との組み合わせによって実用的な予測精度を確保しつつ、最先端のスパコンから1桁ないし2桁低い性能のクラスタ計算機やPCを用いて性能解析やパラメータスタディ、最適化を行い、実験回数の削減を達成することで付加価値を生んでいる。
- 既にシミュレーション活用の効果が大きい領域については、実験だけでは困難な広範囲の設計条件を探索できるようになっており、実験の対費用効果を超える成果を上げている。

² 自動車分野をはじめ、機械・建設分野では多くの商用ソフトウェアが海外ベンダー製品を中心に提供されている。

自動車

図1 シミュレーション活用事例（自動車分野）³

3. シミュレーションの更なる活用のための発展的ニーズ

今後、シミュレーション活用による複雑な現象の解明や試作回数の更なる削減（実験は最小限、試作レスに近いレベル）の方向に進むことは間違いなく、今後もシミュレーションの果たす役割は大きい。そのため、シミュレーションを更に活用するためには、現状から更に発展した取り組みへの要求（発展的ニーズ）も高くなっている。

これまでの研究会活動およびメンバーへのヒアリング等で収集した発展的ニーズの具体例を以下に示す。ここでは、主にソフトウェアの機能面向上や対象とする適用範囲拡大へのニーズに加え、ソフトウェア開発の継続的な推進、維持、発展への仕組みに対するニーズも産業界でのシミュレーション活用の促進に欠かせない項目となっている。

- ① 現状のソフトウェアの漸進的な機能向上
 - 現状から2～3倍程度の計算速度向上
 - ユーザーインターフェイスの改良や3D-CADとのシームレスな連携、高品質な自動メッシングなどユーザビリティの向上

³ アンシス・ジャパン株式会社ホームページより引用 (<http://legacy.ansys.jp/applications/industry/auto/>)

- アカデミアで実績を有する新しい手法の応用⁴
 - 既存ソフトウェアの規模拡大（大規模・大量パラメータスタディ等）効果の先取り
- ② 製品開発に直結するシミュレーション
- 総合的なコストパフォーマンス向上
 - 製品開発期間への同期
 - 機密性が高い競争領域のテーマへの適用
 - 現場の経験を用いた合わせ込みによる計算精度の確保
- ③ 既存のシミュレーションを超越する圧倒的な性能向上
- 圧倒的な計算速度の向上（方法論からの研究も含め、10～100倍レベル）
 - 圧倒的な計算精度の向上（モデルオーダーリダクション⁵によるアプローチを含め、実験を代替できるレベル）
- ④ 既存のシミュレーションでは解析が難しい複雑な現象への対応
- 燃焼、混相流、乱流、溶接、切削、複合材、積層材、多孔体など
 - 製品全体の「丸ごと」計算によって初めて理解できる現象
 - 津波、地震、強風、積雪等のダイナミックレンジの大きい現象や複数の連成現象（マルチスケール・マルチフィジックス）
- ⑤ 設計工程を大幅に効率化する手法の確立
- 製品全体の性能達成のための最適化設計シミュレーション。なかでも、データサイエンス、人工知能（AI）等を活用した新しい最適化設計へのアプローチ（数秒のレスポンスによる最適解の取得など）
 - 1Dシミュレーションとの連携などによる概念設計・機能設計（上流設計）（企画CAE、設計のフロンドローディング）
- ⑥ ソフトウェア開発の継続的な推進、維持、発展への仕組みの確立
- 「①」～「⑤」を通じてユーザーの細かなニーズにタイムリーに対応し、ソフトウェアの開発・サポートを継続的に維持、発展させる仕組み

4. ニーズの分析と整理

前章で示したシミュレーションの更なる活用のための発展的ニーズに対して、その性格、位置づけを明確にするために、企業とベンダーで対応すべき領域とアカデミア・国家プロジェクトへ期待する領域に分類し、ニーズの分析と整理を実施した。

4. 1 アカデミア・国家プロジェクトへの期待

前章の「③」～「⑤」については、企業内では関心は高いが、方法論からの研究が必要なりスクの高いテーマ、コストや具体的な効果の評価が難しいテーマ、企業単独での取り組みが難しいテーマであり、アカデミアや国家プロジェクトへの期待が高いものである。これらは主に、

⁴ 例えば、粒子法はメッシュ法において従来困難とされてきた液体飛沫や界面変化など複雑な流動現象に応用されている。

⁵ 3Dモデルの詳細シミュレーション結果から、その物理現象を表現する相関式やパラメータを同定して解析モデルの自由度数を減縮することにより、計算精度を確保しつつ計算負荷を低減するモデリング手法。

企業間の競争領域になる前の段階、すなわち協調領域で実施すべきものである^{6,7}。また、「⑥」についても、「③」～「⑤」の対応を超えるためには、当面、国家プロジェクトによって立ち上げ、産官学連携で取り組むべきテーマである。

そのなかで、圧倒的な計算速度と計算精度の双方が要求されるテーマ、例えば、燃焼・混相流など解析が難しい現象の実スケール解析、ダイナミックレンジの大きい現象や複数の連成現象（マルチスケール・マルチフィジックス）、データサイエンス・AIなどを活用した新しい最適化設計手法と高精度・大量のパラメータスタディを駆使した製品全体の最適化設計シミュレーションなどは、革新的な基盤ソフトウェアと最先端のスパコン利用環境が要求される挑戦的なテーマ（インダストリアルチャレンジ）である。これらは、研究会での議論およびヒアリングにおいて、最先端のHPCを用いて10年後あるいはそれ以上を先取りするテーマとして、産業界からの期待は高い。

4.2 企業とベンダーで対応すべきニーズ

一方、前章の「①」・「②」については、コストパフォーマンス、製品の開発期間への同期や機密性の制約のもとで各社が個別に取り組むことが必要であることから、企業とベンダーで対応すべきニーズであり、主に企業間の競争領域で実施されるものである⁸。

また、機密性が高い競争領域の解析テーマのなかでも、実績が豊富な商用ソフトウェアを活用した大規模・高速シミュレーションや大量パラメータスタディなどのニーズが想定される。これらは、10年後には現在の最先端のスパコン（京やポスト京）のコストが下がることを見込んで企業内で活用できることを想定し、その効果を先取りするものである。しかし、商用ソフトウェアのスパコンへの移植における技術的課題、ライセンス費用の増大などのコストとベンダーのビジネスモデルに関わる課題があるため、研究会での議論およびヒアリングにおいて、現状では必ずしも強いニーズとはなっていない⁹。

4.3 ニーズの整理

以上の分析結果から、主にソフトウェアへの要求に対して企業とベンダーで対応すべき領域とアカデミア・国家プロジェクトへ期待する領域の分類を横軸、PCやクラスタ計算機など企業内で対応可能な領域と最先端のスパコン利用が必要な領域の分類を縦軸として、図2に示すように4つの領域に分けて整理した。

研究会での議論においては、図2のなかで産業界のニーズが最も強い領域は「ゾーンD」であるが、一方、企業単独では困難かつ未知なる領域へのテーマとして「ゾーンB」および「ゾーンA」への期待が大きい。成果の実用化という点では「ゾーンB」のほうが実現への期待が先行するが、革新的かつ最先端のHPCの活用を10年後あるいはそれ以上を先取りする「ゾ

⁶ アカデミアへ期待するニーズは全て協調領域とは限らず、個別の企業・ベンダー・アカデミアの連携による垂直統合プロジェクトなど競争領域となるテーマも存在する。

⁷ 革新的で新しいものづくりの価値を創造する「オープンイノベーション」の取り組みの一つとしても期待されるものである。

⁸ 企業とベンダーで対応すべきニーズは全て競争領域とは限らず、マルチクライアントによる技術開発など協調領域となるテーマも存在する。

⁹ 代替として商用ソフトウェアに近いレベルを有するオープンソースの適用（特に流体解析）が存在するが、現状では試行段階。

ゾーン A」への期待も高い¹⁰。研究会メンバーからの意見に基づいた「ゾーン A」の具体的なテーマの例を表 1 に示す。

最後に、前節で述べた理由のとおり、「ゾーン C」に相当するニーズは必ずしも強くはなっていない。

	企業とベンダーで対応すべき領域	アカデミア・国家プロジェクトへ期待する領域
最先端のスパコン利用が必要な領域 ・10年あるいはそれ以上の効果の先取り	【ゾーンC】 ・商用ソフトウェアの大規模・高速シミュレーションへの適用（製品開発競争下で機密性が高い解析テーマ） ・商用ソフトウェア（オープンソースを含む）を活用するためのHPC利用環境の整備、等	【ゾーンA】 ・複雑な物理現象（燃焼、混相流、乱流など）の実スケール解析 ・ダイナミックレンジの大きい現象、連成現象の解析（マルチスケール・マルチフィジックス） ・製品全体の最適化設計シミュレーション、等
PCやクラスタ計算機で対応可能な領域 ・実用化の拡大、加速	【ゾーンD】 ・商用ソフトウェアの漸進的な機能向上（2～3倍程度の計算速度、ユーザビリティ向上、等） ・アカデミアで実績を有する新しい手法の応用、等	【ゾーンB】 ・方法論からの研究による圧倒的な計算速度向上 ・新分野の現象（溶接、切削、複合・積層・多孔体など）への対応 ・データサイエンス、人工知能を活用した新しい最適化設計、等

モデルオーダーリダクション

図 2 シミュレーション全般ニーズに対する将来的なニーズの位置づけ

¹⁰ 超高層建物の風外力評価シミュレーションの例など、数年後に実現可能性の見通しが出てきたテーマも存在する。

表1 最先端のHPCの活用が期待される機械・建設分野のテーマの例

分野	テーマ	概要
建設	超高層建物の風外力評価 シミュレーション	・超高層建物の風外力評価のための風洞実験代替に向けたシミュレーション。 現状の100倍程度の高速化の可能性があり、数年で設計指針に含めることを目標に企業コンソーシアムとアカデミアとの共同で研究開発が進行中。
	気象的要因を考慮した風況シミュレーション	・風洞実験では実施が困難な、気象的要因（台風、突風など）を考慮した広域街区における風況の把握。
	津波シミュレーション	・発生源から検討対象までを含む、（超）広域の3次元解析。 ・防波堤を乗り越えた津波挙動のメカニズム解明、構造物の津波波力による損傷評価。
重工	ボイラ・ガスタービン燃焼器シミュレーション	・燃焼器の燃焼挙動に関しては多くの研究や技術開発が取り組まれているが、燃焼反応のメカニズムは非常に複雑かつマルチスケール現象であり解明に向けた課題は多い。
	タービン・圧縮機内非定常流動シミュレーション	・ガスタービン・蒸気タービンおよび圧縮機内の非定常挙動の解明に向けた全周動静翼列周りの大規模乱流シミュレーション技術。
自動車	革新的ものづくり設計シミュレーション	・現状の設計における「すり合わせ」を軽減し、一層の開発コスト削減を達成するために、製品全体の性能達成のための最適な設計仕様を決定するシミュレーション技術。
	製造プロセス・材料加工シミュレーション	・溶接時の熱ひずみ、残留応力、亀裂進展の予測、切削シミュレーション ・複合材における層間剥離、最終的に破壊に繋がる微小亀裂の予測、積層材における積層応力および積層ひずみ解析、破壊の予測。

※更なるヒアリング等で具体的テーマの例を洗い出す予定。

5. まとめ（シミュレーションの活用状況とHPCへの期待の仮説）

機械・建設分野では、既に研究開発や設計の工程で様々な分野のシミュレーションが商用ソフトウェアを中心に実用化されている。一方で、シミュレーションの更なる活用のための発展的なニーズが確実に存在し、アカデミア・国家プロジェクトへ期待する領域と、企業とベンダーで対応すべき領域に分けて分析した結果、以下のように整理された（表2）。

表2 シミュレーションの更なる活用のための発展的ニーズ

分類軸	内容
アカデミア・国家プロジェクトへの期待	<ul style="list-style-type: none"> ✓ 研究開発のコスト、期間などが見通せず、企業やベンダーでリスクを取ることが困難な取り組みとして、方法論からの研究を含めた圧倒的な計算速度向上（10～100倍）や解析困難な複雑現象への対応、データサイエンスや人工知能を活用した新しい最適化設計の手法など、既存技術を凌駕する革新的なテーマが対象となる。 ✓ 複雑現象のなかでも燃焼、混相流、乱流など解析が難しい現象の実スケール解析、ダイナミックレンジの大きい現象や複数の連成現象の解析（マルチスケール・マルチフィジックス）、製品全体の最適化設計シミュレーションなどは、革新的かつ最先端のHPCを10年あるいはそれ以上を先取りする挑戦的なテーマとして期待が高い。
企業とベンダーで対応すべきニーズ	<ul style="list-style-type: none"> ✓ コストパフォーマンス、製品の開発期間や機密性の制約のもとで実施される取り組みとして、既存のソフトウェアの漸進的な機能向上、製品開発に直結するシミュレーションが対象となる。 ✓ 商用ソフトウェアを活用した規模拡大の効果を10年先取りするニーズは必ずしも強くない。これは、商用ソフトウェアのスパコンへの移植、商用ソフトウェアのスパコンへの移植における技術的課題、ライセンス費用の増大などのコストとベンダーのビジネスモデルに関わる課題があることが理由である。

6. 今後の調査項目

今後、以下の調査項目に取り組む。

- シミュレーションニーズの仮設の検証
 - ✓ 現在の研究会メンバーを超えた調査対象の拡大
 - ✓ 国内における具体的成果、海外の現状、企業・ベンダー・アカデミアの連携による成功事例、など
- ニーズの具体化とシーズとのマッチング
 - ✓ ターゲットとするニーズの抽出と目標達成基準の設定、それらの実現可能性に向けたシミュレーション手法、計算時間・規模等のソフトウェアへの要求スペックを具体化
 - ✓ 具体化したニーズとアカデミア等のシーズとのマッチング検討
- ソフトウェア開発の推進、維持、発展の仕組みの検討

産業基盤ソフトウェア検討ワーキンググループ
化学・材料分野別研究会

Ⅱ.

「化学・材料分野におけるシミュレーションの活用状況とアカデミアへの期待」

0. はじめに

HPC を我が国産業界のイノベーションに必須のツールとするためには、ポスト「京」をはじめとするスーパーコンピュータシステムの開発・整備に加えて、ハードウェアと両輪をなす「産業界の重要な基盤技術であるシミュレーションソフトウェアの開発・普及」が必要不可欠である。そのため、産業界が抱える HPC およびシミュレーションに対する真のニーズや、そのニーズに対応可能な「産業基盤」となり得るシミュレーションソフトについて検討を進めている。

そのなかで、今年度はワーキンググループ活動及び産応協メンバーへのヒアリングを実施し、シミュレーションの利活用状況を基にした更なる発展的ニーズの仮説構築と、それら発展的ニーズに応えるための期待と要望を取りまとめた。

目次

1. 全体概要.....	Ⅱ-2
2. 化学・材料分野におけるシミュレーションの活用状況.....	Ⅱ-2
3. シミュレーションの更なる活用のための発展的ニーズ.....	Ⅱ-4
4. ニーズの分析と整理.....	Ⅱ-5
4.1. アカデミアへの期待と要望.....	Ⅱ-6
4.2. 人材面への期待と要望.....	Ⅱ-6
4.3. HPC への期待と要望.....	Ⅱ-7
5. まとめ（シミュレーションの活用状況とアカデミアへの期待の仮説）.....	Ⅱ-8
6. 今後の調査項目.....	Ⅱ-9

1. 全体概要

化学・材料分野では、対象とする材料や物性によってはシミュレーションの適用が難しく、実験による試行錯誤に依存する部分がまだまだ大きい。これは、材料特性の発現が多数の原子・電子が複雑に絡み合った現象に起因し、それらを統合的にシミュレーションする事ができないためである。しかし、シミュレーションを用いた材料開発・現象理解の成功事例も報告され始めており、研究開発においては欠かすことのできないツールとして浸透しつつある。

シミュレーションの利活用方法の多くは、材料全系から抽出された特徴的な部位や、現象を分解した素過程の様に単純化された系（“代理指標”）に対してシミュレーションを実施し、材料特性の向上や現象の理解を目指す方法である。そのため、“代理指標”の探索・活用に資する大型計算機・ソフトウェアへのニーズは大きい。一方で、計算規模の拡大に伴い、無機結晶や半導体デバイスの様な規則性の高い対象については、直接的に材料特性をシミュレーション可能な系も出てきているため、系全体を扱える第一原理シミュレータの開発などについても、今後の発展が期待される。さらに、大型実験施設との連携強化による更なるシミュレーションの活用促進を求める声や、個別企業では実現困難なためアカデミアと連携して取り組みたいチャレンジングなニーズも存在する。

これらのニーズに応えるためには、大型計算機と、大型計算機の性能を引き出しニーズの解決に資するソフトウェアが、両輪として発展していく必要がある。さらに、実験とシミュレーションの橋渡しを行い、成果を社会に還元できるような人材も必要である。また、多様なニーズに応え得る大型計算機の整備と、産業界でのユーザビリティ向上に資するサポート体制の構築がなされることで、多くのユーザーに必要とされるHPC基盤になることが期待される。これらの実現のためには、今後も引き続き多面的でバランスを持った支援が必要であると考えられる。

2. 化学・材料分野におけるシミュレーションの活用状況

化学・材料分野におけるシミュレーションは、機械・建設分野の様に最終製品設計の現場では利用されておらず、材料設計における主要な手段は、実験や小スケールの試作による実材料の作成および観測・測定である。これは、機械・建設分野と化学・材料分野のシミュレーションが質的に異なっていることによる部分が多い。機械・建設分野では、特性を直接シミュレーションする事が可能な場合が多いが、化学・材料分野においては、特性を左右する原子・分子レベルの現象や合成プロセスを実験的に観測することが困難な場合も多く、シミュレーションにおいても、対象の構造や現象そのものをそのまま取扱うためには未だ多くのプレイクスルーが必要な状況にある。そのため、仮に「京」をフル活用したとしても、特性値を実験と直接比較可能な精度でシミュレーションするのは極めて困難であり、シミュレーションの活用は原理解明もしくは大まかな方向付けに止まるケースが多い。また、材料設計は膨大な試行錯誤の積み重ねで実施されることが多く、シミュレーションによる方向付けの寄与分を厳密に切り分けることは難しい。したがって、コスト・プロフィットの定量評価が難しく、費用対効果を論ずる段階では無い場合が多い。

しかしながら、化学・材料分野のシミュレーションも研究開発においては欠かすことのできないツールとして浸透してきている。それは、現象解明やメカニズム解析にあたり、シミュレ

ーション利活用、さらにはシミュレーションと先端計測との連携の有効性が広く認識されるようになったためである。また、過去のシミュレーションには“後付けの説明”との批判がについて回ったが、現在ではさらに進んで現象の予測や設計に活用する動きも出てきた。化学・材料分野のシミュレーションの利活用法は、以下に示すように大きく2通りである（図1）。

- 材料特性・現象を直接的にシミュレーションする方法：
ポリマーやコンポジット、界面の様な複雑系ではなく、無機結晶や半導体材料の様に原子座標を完全に決定できると考えられる対象において可能になりつつある方法。
- 材料特性・現象を間接的にシミュレーションする方法：
材料全系から抽出された特徴的な部位や、現象を分解した素過程の様に単純化された系（“代理指標”）に対してシミュレーションを実施し、材料特性の向上や現象の理解を目指す方法。複雑な構造・現象に特性が起因（図2）しているために特性を直接シミュレーションすることが困難な対象に対して使用される。実際の研究開発の現場においては、こちらのアプローチが取られることが多い。また、分野・業界によらず、直接観測できない現象に対して、実験・シミュレーション共に“代理指標”を介して原理解明や性能向上を試みる事が日常的に行われている。

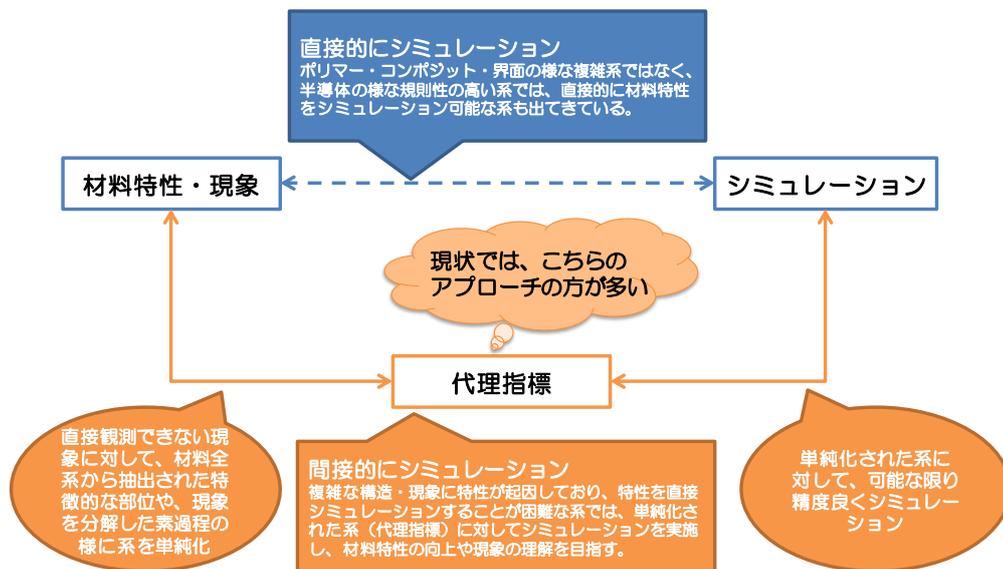


図1 化学・材料分野におけるシミュレーションの利活用法

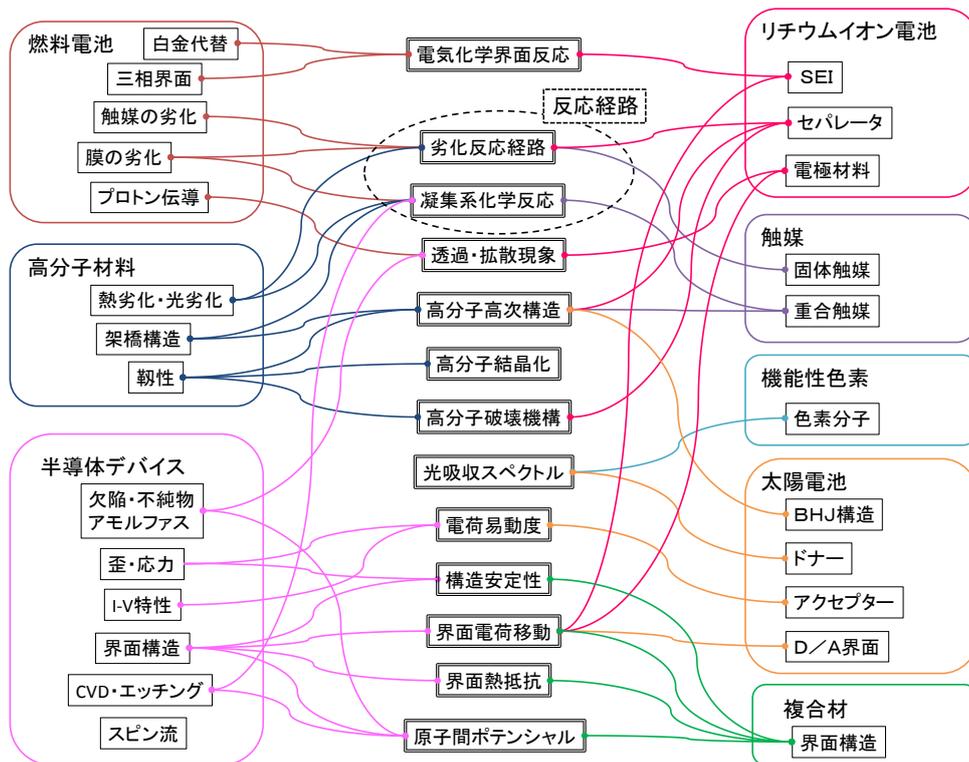


図 2 複雑な構造・現象に起因する材料特性の例

3. シミュレーションの更なる活用のための発展的ニーズ

今後もシミュレーションの活用¹¹による材料特性の向上・理解のために、対象に応じて直接的・間接的な方法が用いられていくが、その多くは間接的な“代理指標”を介した方法になると考えられる。ただし、直接的にデバイス特性をシミュレーションすることや、実験・シミュレーションの連携強化、アカデミアとの連携を通して取り組みたいチャレンジングなニーズ（インダストリアル・チャレンジ）も存在する。

① 新たな“代理指標”の探索・活用

代理指標の探索・活用は既に産業界では日常的に行われており、精度・汎用性の高い新たな代理指標の発見に繋がる大型計算機・ソフトウェアの開発には大きなニーズがある。大型計算機の発展により、より大きな（現実に近づいた）系でのシミュレーションが可能になれば、それまで見えなかった物理が見えるようになり、より精度の高い新たな代理指標の発見に繋がるのが期待される。さらに、Capacity computing によって短時間に代理指標を探索し、効率的に新材料の候補を絞り込むことも可能になることが見込まれる。一方、ソフトウェアの発展（理論・手法の開発・改良やアプリケーションの充実）によっても、代理指標の探索が更に効率的に実施可能になる事や、本質的に新たな代理指標の発見に繋がるのが期待される。代理指標によるアプローチでの成功例には公開されているものもあるが、その多くは各企業の独自のノウハウの集大成であり、

¹¹代表的なソフトウェアとしては OpenMX, NTchem, modylas, GRRM などが産業界から注目されている。

競争力の源泉ともなっているため、公開することはできないものである。しかしながら、代理指標の探索・活用の成果が、各企業におけるシミュレーションへの取り組みを今後も継続・発展させる原動力となることが推察される。また、近年注目を集めている材料科学と情報科学の融合を掲げる Materials Informatics についても代理指標が記述子として役立つケースと、新たな代理指標が見出されるケースがあると考えられ、今後の発展に期待が掛かる。

② デバイス特性の直接シミュレーション

材料特性を直接的にシミュレーション可能な課題に対するニーズには、例えば系全体を第一原理的に計算し、デバイス特性を直接計算するシミュレータの開発がある。ナノサイズのデバイスでは、材料特性だけでなく、原子レベルの構造、界面や欠陥によってデバイス全体の特性が大きく異なってくる。しかし、従来のデバイスシミュレータではそこまでの評価は不可能であり、原子レベルのシミュレーションが必要とされている。MOSFET 丸ごとの第一原理伝導計算も現行の大型計算機において可能になりつつあり、フォノンの効果の導入や分子動力学との連携を進めることで、将来的には太陽電池・熱電素子・圧電素子などの電子デバイスに対しても適用が可能になっていくことが期待される。

③ 大型実験施設とシミュレーションの連携強化

材料を作った際には原理の解明や特性の理解のために必ず測定が行われるが、スペクトルの起源や物性の解釈が出来ないことも多い。このような場面においてもシミュレーションが有効であるが、現象の再現に必要な計算モデルのサイズや、スペクトルの計算精度の点で、未だ十分ではない。より有効に活用するには、大型実験施設と連携した実験・シミュレーション双方からの構造・物性解析の仕組み作りが必要である。さらに、これらの目的に沿ったシミュレーション手法の拡充とプログラムの整備も現状では不十分であるため、理論構築も含めて更なる発展に期待したい。

④ インダストリアル・チャレンジ

各企業が単独で取り組むには難易度が高いが、確かなニーズが存在し、アカデミアに取り組んで欲しいチャレンジングなニーズも存在する。これらのニーズには、例えば、高分子などにおける高次構造形成機構の解明、特性の劣化をもたらす化学的・物理的な構造変化とその経路の解明、光吸収・発光・光化学反応の解析がある。

4. ニーズの分析と整理

前章で示したシミュレーションの更なる活用のための発展的ニーズに応えていくためには、アカデミアとの研究開発はもちろん、国を挙げて人材育成に取り組むと共に、HPC を構築・整備していく必要があると考えられる。以下に、アカデミア・人材・HPC への期待と要望に分類し、ニーズの分析・整理を実施した。

4.1. アカデミアへの期待と要望

産業界におけるニーズには“協調領域”、“中間領域”、“競争領域”の3つの領域に属するものがある。協調領域に属するニーズは、コンソーシアムやポスト「京」重点課題の様に広く協調して取り組むべきニーズである。これらのニーズの多くは長期的でチャレンジングなものであり、各企業で方法論の開発から進めることは難しく、アカデミアとの連携が不可欠となる。成果を公開しつつ、我が国の総力を結集し、圧倒的・革新的な要素技術開発によって国際競争力のある成果を挙げていかなければならない。企業の方針にもよるが、方法論の開発と公知物質での検証までは産業界・アカデミアと協調・連携し国家プロジェクトとして進めることが可能と考えられる。

その先にあるのが中間領域に属するニーズである。これらは、企業毎にアカデミアと共同研究などを通して個別に進めるものである。上述の協調領域（コンソーシアムやポスト「京」重点課題採択テーマ）に産業界が期待していることは、この中間領域におけるニーズに対して、有望な“種”が出てくることである。この領域における成果の公開については、ケースバイケースである。

中間領域から更に先のニーズは、現在の事業に直結するシナリオが書ける短期的なニーズでもあり、各企業が内部で独自に進めていく競争領域のニーズである。競争領域の成果については社外に出す事ができないものであり、出口（製品）に繋がる部分である。そのため、企業にとっては、成果の公開を避けたい競争領域のニーズに、成果公開が前提となるポスト「京」重点課題などの国家プロジェクトで取り組む事は困難である。さらに、競争領域のニーズは変化が早いため、協調領域で設定すべき研究テーマとはスピード感が合わず、協調領域における当初の目標設定が将来の競争領域のニーズには必ずしも直結しない。

したがって、協調領域における研究テーマに求められるのは、長期的視点をもって、応用的成果を創出する基盤となるサイエンスを、広がり・深さともに強化することである。今見えている出口の追求を強調しすぎるあまり、シーズの多様性が失われてしまうのは、産業界が望まない事態である。特に若い研究者には、既定の出口にとらわれることなく、自由な発想で野心的な研究に取り組んでいただきたい。

一方、競争領域においても、アカデミアから素材の供給企業と使用企業までを一貫した“垂直統合化”する事で、ニーズを共有して出口までの到達を加速できるようなテーマも存在することが考えられる。これらに取り組むためには、アカデミアと様々なレイヤーの企業が連携し、理論構築～プログラムの作成～検証～実証計算～実際のものづくりまでを繋げる取り組みが必要であり、その様な試みにも期待したい。

4.2. 人材面への期待と要望

シミュレーションも実験も、対象について深く考察し、計算・測定すべき物理量を決め、必要な方法を選出し、適切にソフト・機器を設定して使いこなすことができる人材でなければ成果を出すことが難しい点では同じであり、誰しものが成果を出せるわけではない。これらを必ずしも1人でこなす必要はないが、多様な人材が有機的に連携する必要がある。「京」、ポスト「京」プロジェクトではコード開発・チューニングに重きが置かれた現状にあり、適切に手法を選択・対象をモデル化し、シミュレーションを使いこなせる様な人材は貴重である。さらに、シ

シミュレーションの更なる活用推進には、実験結果をシミュレーションで解釈する・予測する能力を持った人材による、実験とシミュレーションとの橋渡しも必要である。この実現には、計算対象となる材料・現象についての深い知識や、実験分析に対する知識・理解も求められるため、実験研究者や大型実験施設などとの連携を、若手研究者が主体的に推進する経験を積むことが鍵になると推察される。大学院カリキュラムにおける実験研究室・理論研究室のローテーションや、企業インターンシップの導入も有望と考えられる。これらの様な取り組みによって、大型計算機によるシミュレーションの成果を社会に還元していく事のできる人材が多数輩出されることに期待したい。

4.3. HPC への期待と要望

必要なのはシミュレーションへのニーズ・期待であり、要素技術として未開拓な分野への挑戦である。その上で、必要な計算機スペックを明確にして、HPC の設計をすべきであると考えられる。現状では汎用の大型計算機の開発が先行し、大型計算機を有効活用できるニーズを探している状況に陥っており、あるべき順番とは逆のように見受けられる。さらに、ソフトウェア開発も並列化やチューニングに多くの力が割かれている。ソフトウェア開発については基礎理論・シミュレーション手法・アルゴリズムの開発など、より真理に近い部分へも十分な投資がなされるべきであり、そうなることに期待したい。一方で、代理指標の探索・活用においては大規模なシミュレーションが可能になることで新たな代理指標を得られる可能性や、Capacity computing による短時間での代理指標の探索にも期待がかけられている。これらを踏まえた上で、多様なニーズに答え得る HPC 基盤の整備に期待したい。

また、産業界での確かなニーズを仮に抽出できた場合にも、大型計算機を用意しただけでは産業界のユーザーを定着させることは困難である。日常的に使用しているプログラムが動作しない、またはプログラムを動かすまでに専用のチューニング・コンパイルが必要な状況では、産業界でも一部のユーザー以外には敷居が高い。より広く産業界での利用を促すのであれば、より簡単に使用できるようなサービス体制を組むことも検討すべきである。現状では、ソフトウェア開発者がユーザサポートについても責任を負わなければならないため、開発者の負担とサポートの充実がトレードオフになっており、ユーザーに十分なサポートを提供できていないケースが多い。サポートを充実するためには、開発者とは別枠で体制を整備することが望ましい。

5. まとめ（シミュレーションの活用状況とアカデミアへの期待の仮説）

本検討を通して、化学・材料分野におけるニーズの位置づけとアカデミアへの期待が図 3 の様に整理された。化学・材料分野では、研究開発の段階でシミュレーションの有用性が認識されつつある状況である。更にシミュレーションの利活用を促進するための発展的ニーズが多数存在するため、多様な HPC 基盤の整備・構築と共に、アカデミアとの連携を通して出口（製品）に繋がり得る“種”を今後も広く育てていかなければならない。そのためにも、多面的な支援がバランスを持って推進される必要がある。

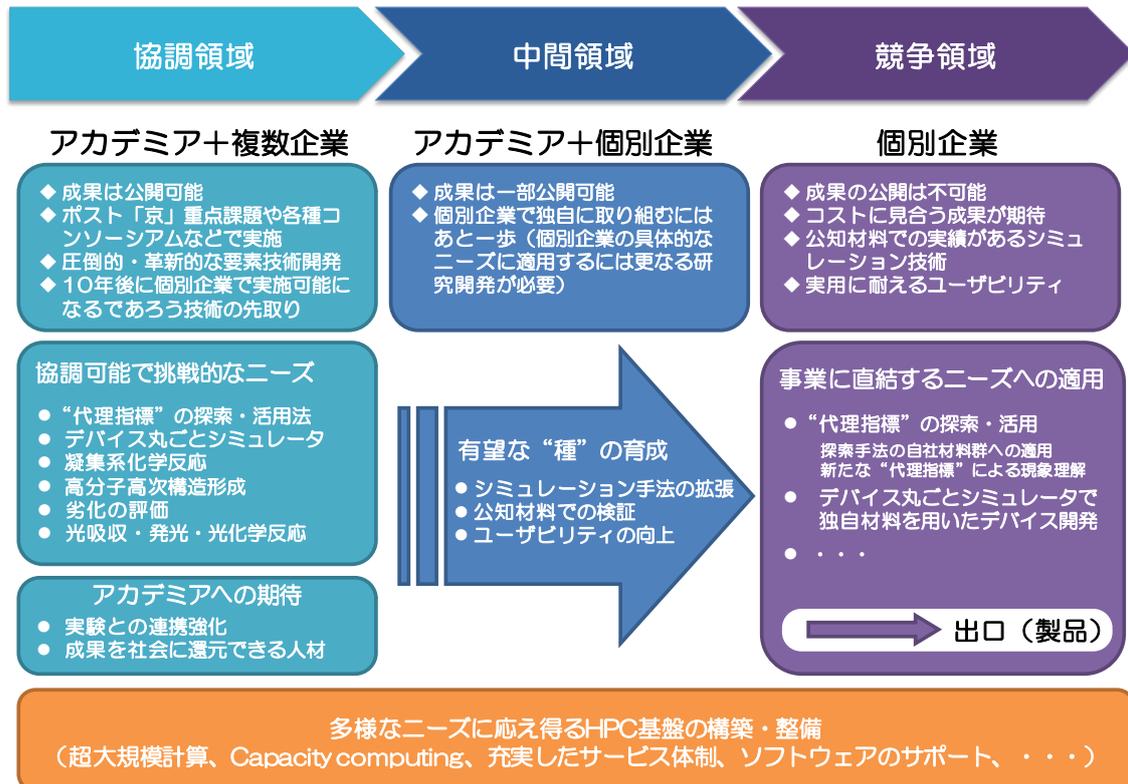


図 3 化学・材料分野におけるニーズの位置づけと HPC への期待

6. 今後の調査項目

今後、以下の調査項目に取り組む。

- シミュレーションニーズの更なる抽出
 - ✓ 現在の研究会メンバーを超えた調査対象の拡大
- 国外の有力ソフトウェアの調査
 - ✓ 国外における有力なソフトウェア（LAMMPS, Quantum-ESPRESSO など）の活用事例、今後の見通しなど
- ニーズの具体化
 - ✓ ターゲットとする事例と目標達成基準の設定、それらの実現可能性に向けたシミュレーション手法、計算時間・規模等のソフトウェアへの要求スペックを具体化
- シーズとニーズとのマッチング
 - ✓ アカデミアとの意見交換、幅広いシーズ調査と整理、ニーズとのマッチング検討