

産業シミュレーションロードマップ^o について

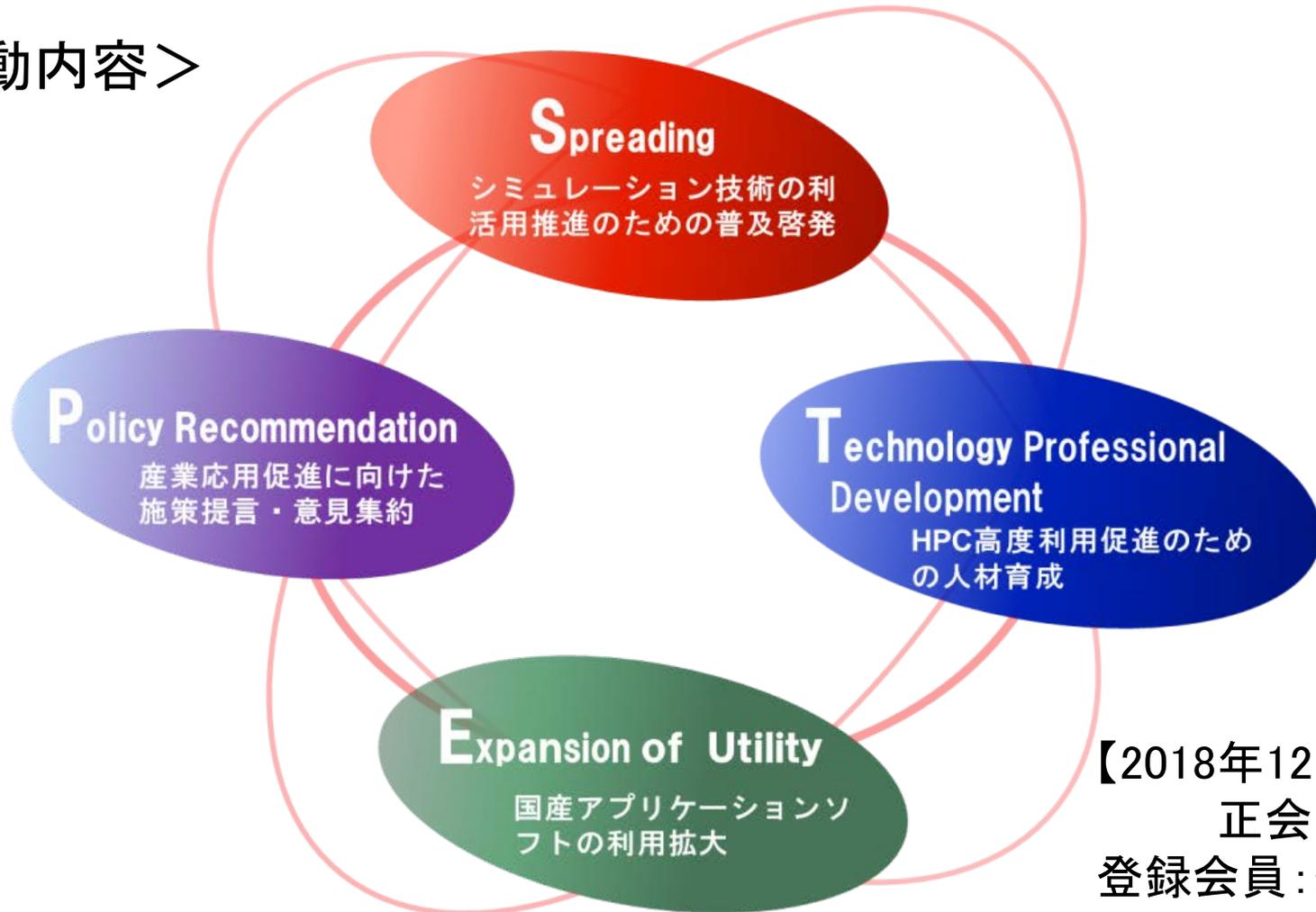
2018年12月

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/ICSCP)

産業シミュレーションロードマップTF

産業界におけるスーパーコンピューティング技術の 利活用促進を目的に2005年に設立

<活動内容>

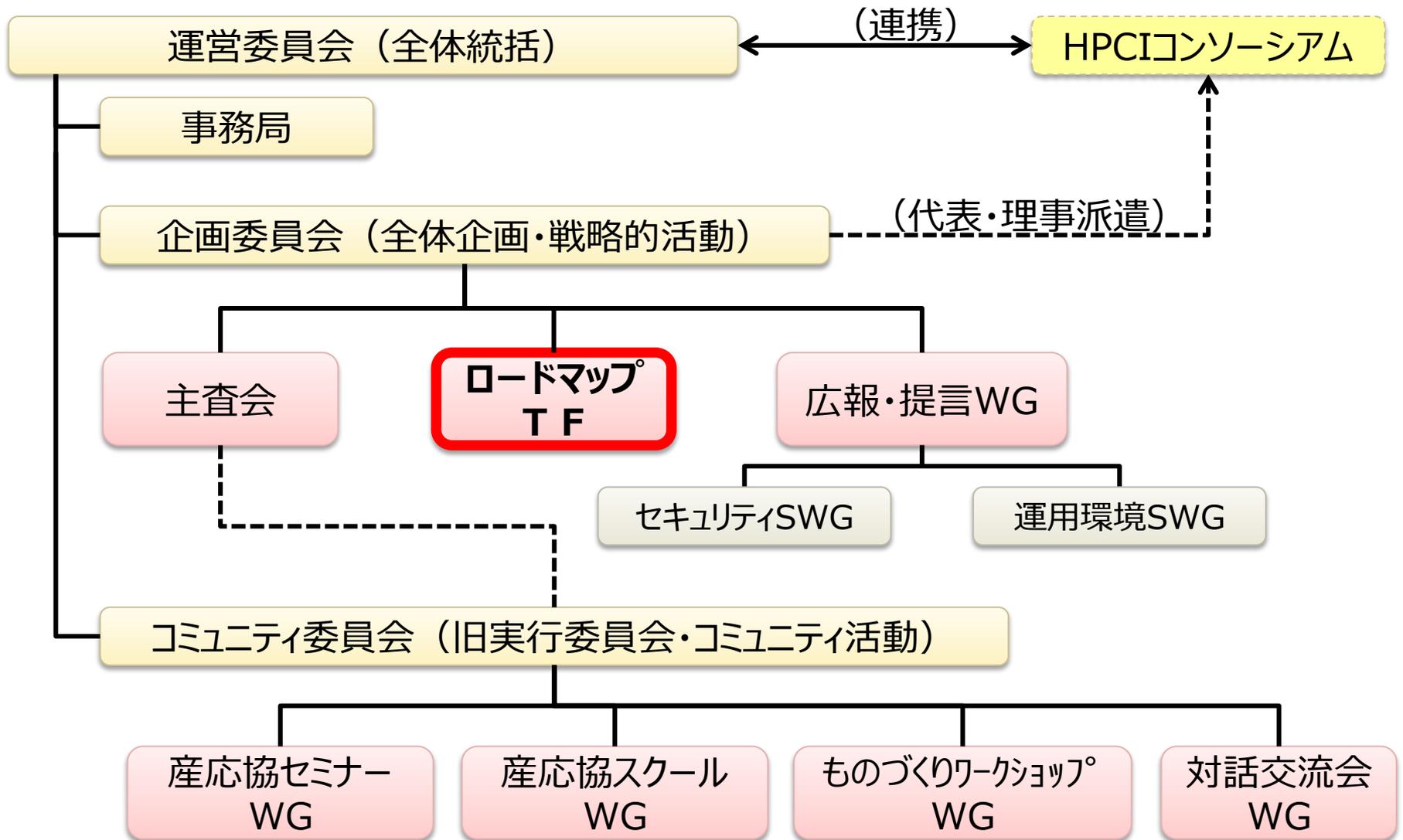


【2018年12月現在】
正会員：21社
登録会員：約600名

正会員企業（現在21社・機関）

| 業種 | 会員企業 | 業種 | 会員企業 |
|----------|--------------------------|-------|------------------------------------|
| 建設 | 鹿島建設 清水建設 | 電気機器 | 東芝 日本電気 日立製作所 富士通 三菱電機 |
| 繊維製品 | 東レ | | |
| 化学 | 三菱ケミカル 信越化学工業 住友化学 | | |
| 石油・石炭製品 | JXTGホールディングス | 輸送用機器 | 川崎重工業 トヨタ自動車 日本自動車工業会 |
| ガラス・土石製品 | AGC | | |
| 鉄鋼 | 新日鐵住金 | | |
| 機械 | IHI | サービス | みずほ情報総研 |
| | ダイキン工業 | その他 | 鉄道総合技術研究所 |

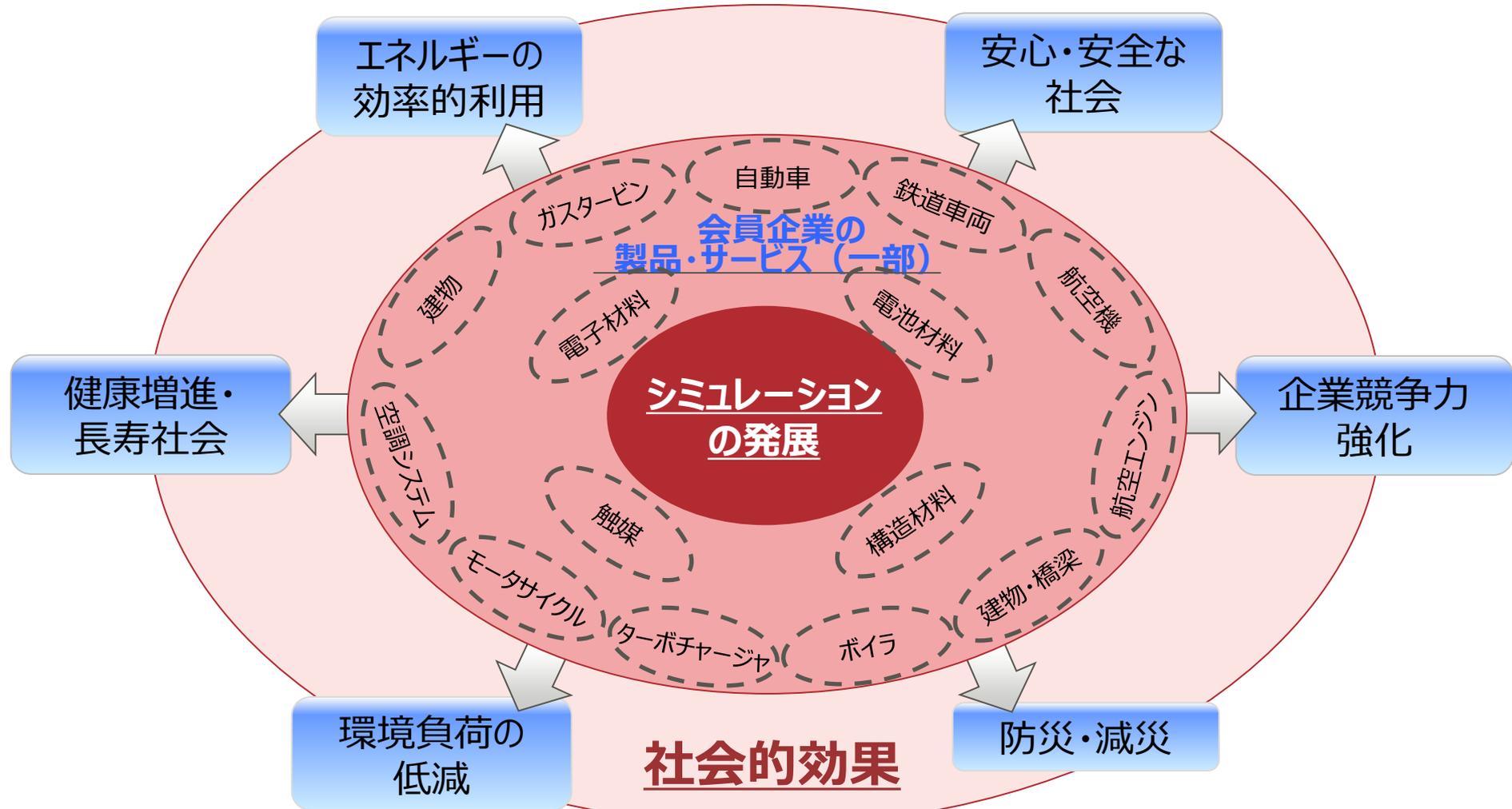
活動目的に賛同いただける企業の入会を募集しています



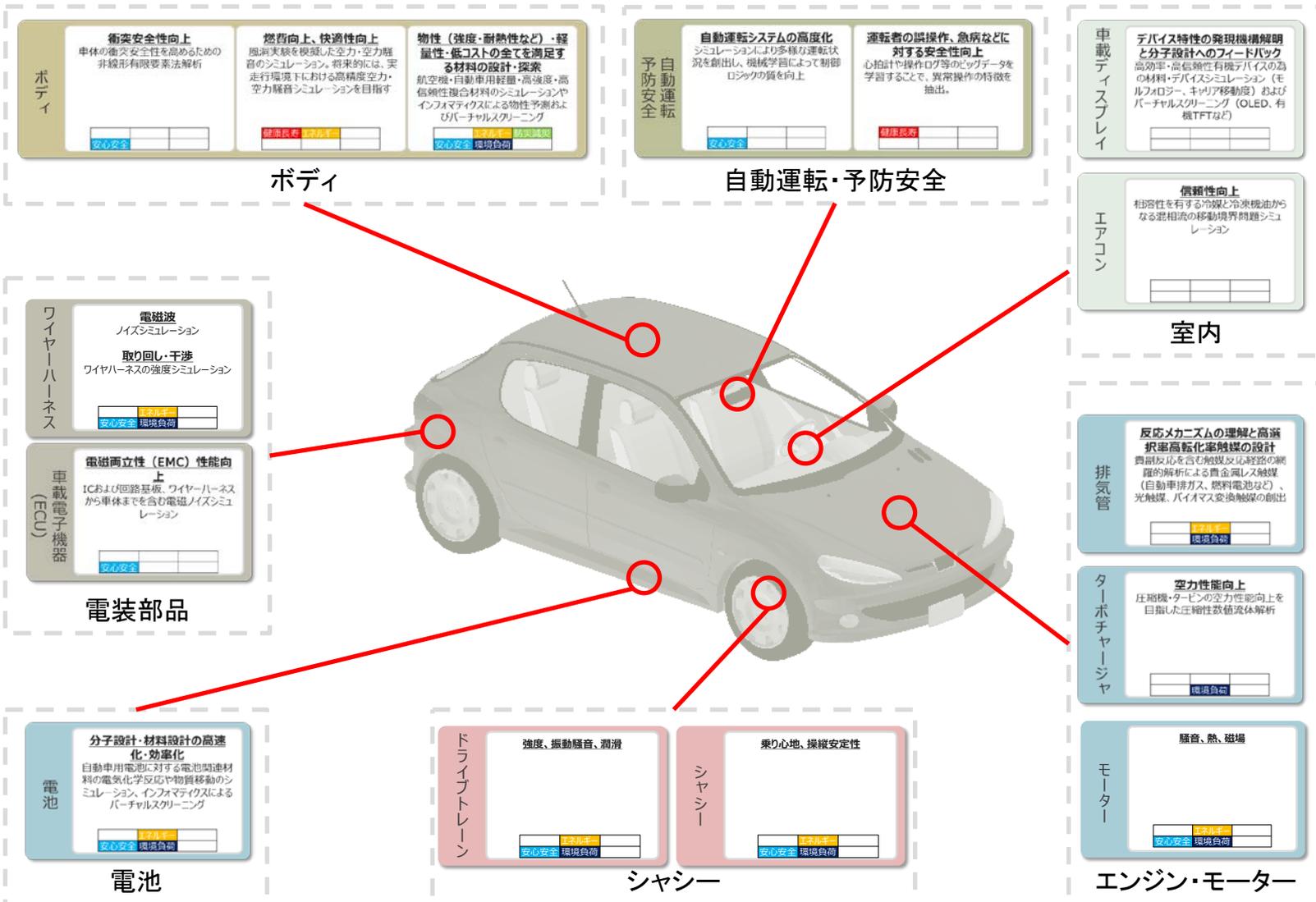
- 広報・提言活動（HPCIの運用改善等に向け、産業界からの提言を発信）
 - ◆ 産応協からの提言「H P C I の産業利活用促進に向けて（I）」〔2017/5/14～〕
 - <2016年度活動まとめ>
 - <2017年度活動まとめ>
 - ◆ 文部科学省研究振興局長への提言手交
 - ポスト「京」の着実な推進を望む（提言）〔2018/3/27〕
 - ポスト「京」の着実な推進および移行期のHPCI産業利用について（提言）〔2018/7/26〕
- 産業シミュレーション・ロードマップ（各種調査を経て、2018/5に初版完成）
 - ◆ HPCシミュレーションに関する海外動向調査報告〔2017/12/11〕
 - ◆ 産業シミュレーション・ロードマップ〔2017/12/19の産応協シンポジウムにて発表〕
- コミュニティ活動（アカデミアとも連携し、産業界の人材育成等に貢献）

| 産応協コミュニティ活動の実績 | 初回 | 開催回数 | 延べ参加者数 |
|------------------|------|------|--------|
| シンポジウム | 2005 | 11 | 1838 |
| スパコンセミナー | 2006 | 41 | 2103 |
| 産業利用スクール | 2009 | 25 | 406 |
| ものづくりワークショップ | 2013 | 10 | 213 |
| 中小企業技術交流会(対話交流会) | 2014 | 4 | 198 |

- シミュレーションは、産業界において幅広い目的で利用されている
- その成果は、各企業の製品・サービスに反映され、社会課題の解決に貢献



シミュレーションの活用と効果【自動車と構成製品】



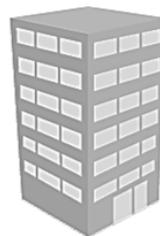
シミュレーションの活用と効果【都市・建物と構成製品】CSCP



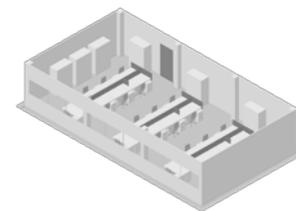
都市・インフラ



街区スケール



建物スケール



部屋スケール

地震

地震動の予測精度の向上
長周期地震動の波動伝播解析

| | | |
|------|--|------|
| 安心安全 | | 防災減災 |
|------|--|------|

火山灰

建物の安全安心
火山噴火を想定した火山灰の被害予測

| | | |
|------|--|------|
| 安心安全 | | 防災減災 |
|------|--|------|

津波

建物の安全安心
大地震発生時における津波の挙動を推定

| | | |
|------|--|------|
| 安心安全 | | 防災減災 |
|------|--|------|

風車

風車の稼働率の向上
風車の建設地点の風況を事前に評価

| | | |
|--|-------|--|
| | エネルギー | |
| | 環境負荷 | |

風

建物の耐風性能の向上
強風被害の減少
強風被害の現象・メカニズムの推定、設計初期の空力性能の確認

| | | |
|------|--|------|
| 安心安全 | | 防災減災 |
|------|--|------|

温熱

快適性の向上
街区スケール（数100m以内）での建物周辺の環境予測

| | | |
|------|-------|--|
| 健康長寿 | エネルギー | |
| | 環境負荷 | |

汚染物質

快適性の向上
工場からの排ガスや臭気の拡散予測

| | | |
|------|--|------|
| 安心安全 | | 環境負荷 |
|------|--|------|

音

快適性の向上
騒音に対する影響予測と評価

| | | |
|------|--|--|
| 安心安全 | | |
|------|--|--|

地震

建物の耐震性能の向上
地震被害の減少
ビル単体（立体シーム）での耐震設計、被害予測

| | | |
|------|--|------|
| 安心安全 | | 防災減災 |
|------|--|------|

地盤

建物の安全安心
地震に伴う地盤の液状化の影響評価

| | | |
|------|--|------|
| 安心安全 | | 防災減災 |
|------|--|------|

コンクリート

建物の安全安心
型枠内へのコンクリートの充填状況を事前予測

| | | |
|------|--|--|
| 安心安全 | | |
|------|--|--|

遮熱用材料

快適性の向上
近赤外線を特異的に反射する材料の予測

| | | |
|--|-------|--|
| | エネルギー | |
| | 環境負荷 | |

音

快適性の向上
コンサートホールなどの音響特性の予測

| | | |
|--|--|--|
| | | |
|--|--|--|

光、照明

快適性の向上
昼光利用や照明による光環境予測

| | | |
|--|-------|--|
| | エネルギー | |
| | 環境負荷 | |

空調

快適性の向上
室内気流の予測と温熱環境の評価

| | | |
|------|-------|--|
| 健康長寿 | エネルギー | |
| | 環境負荷 | |

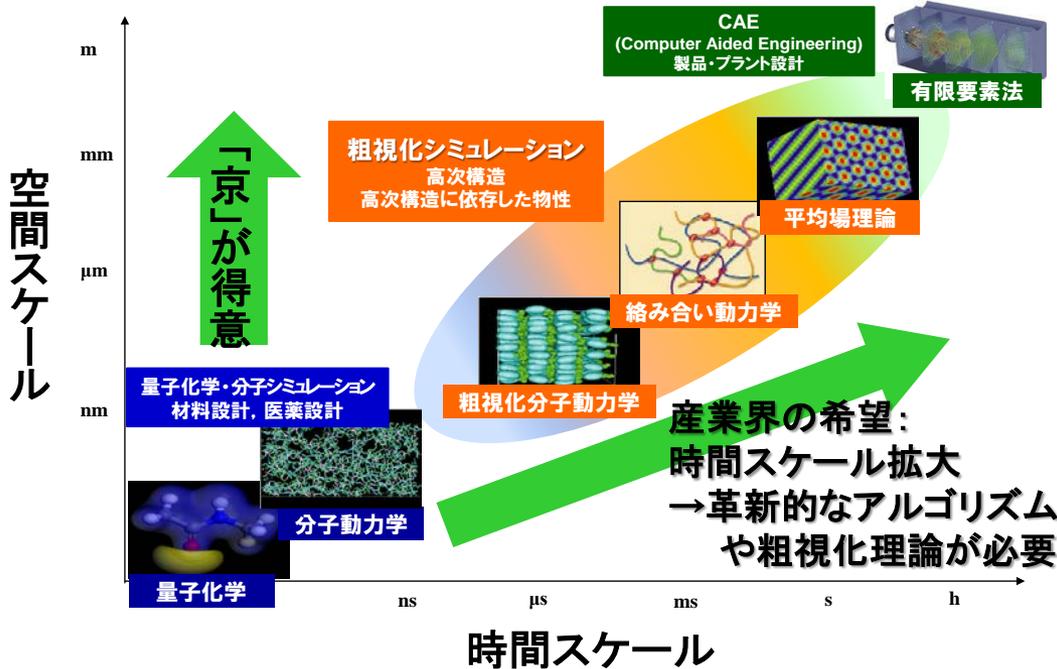
吸音材

快適性の向上
特定周波数のダンピング性能が高い材料・部材の設計

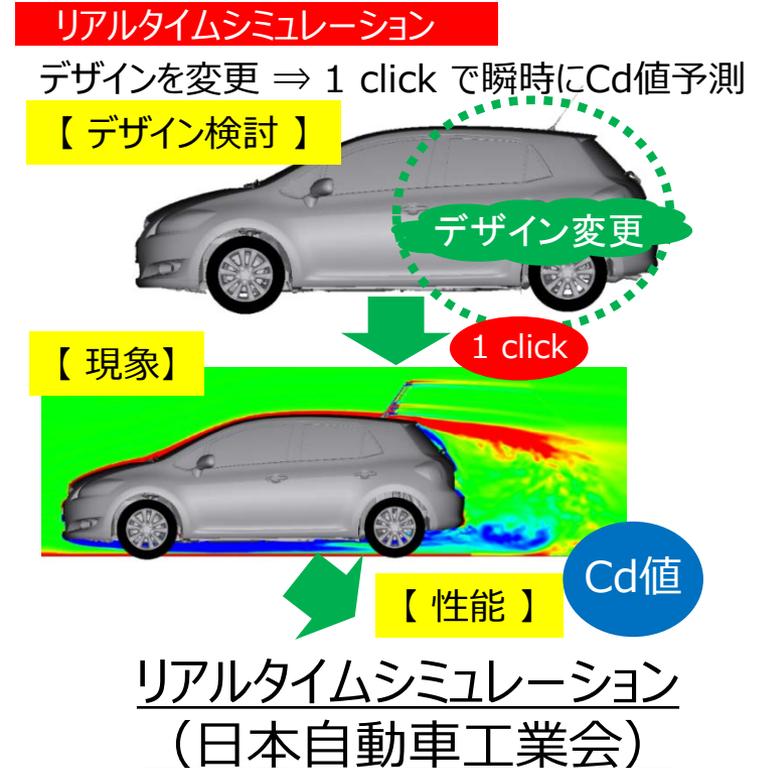
| | | |
|--|--|--|
| | | |
|--|--|--|

ロードマップ作成の背景

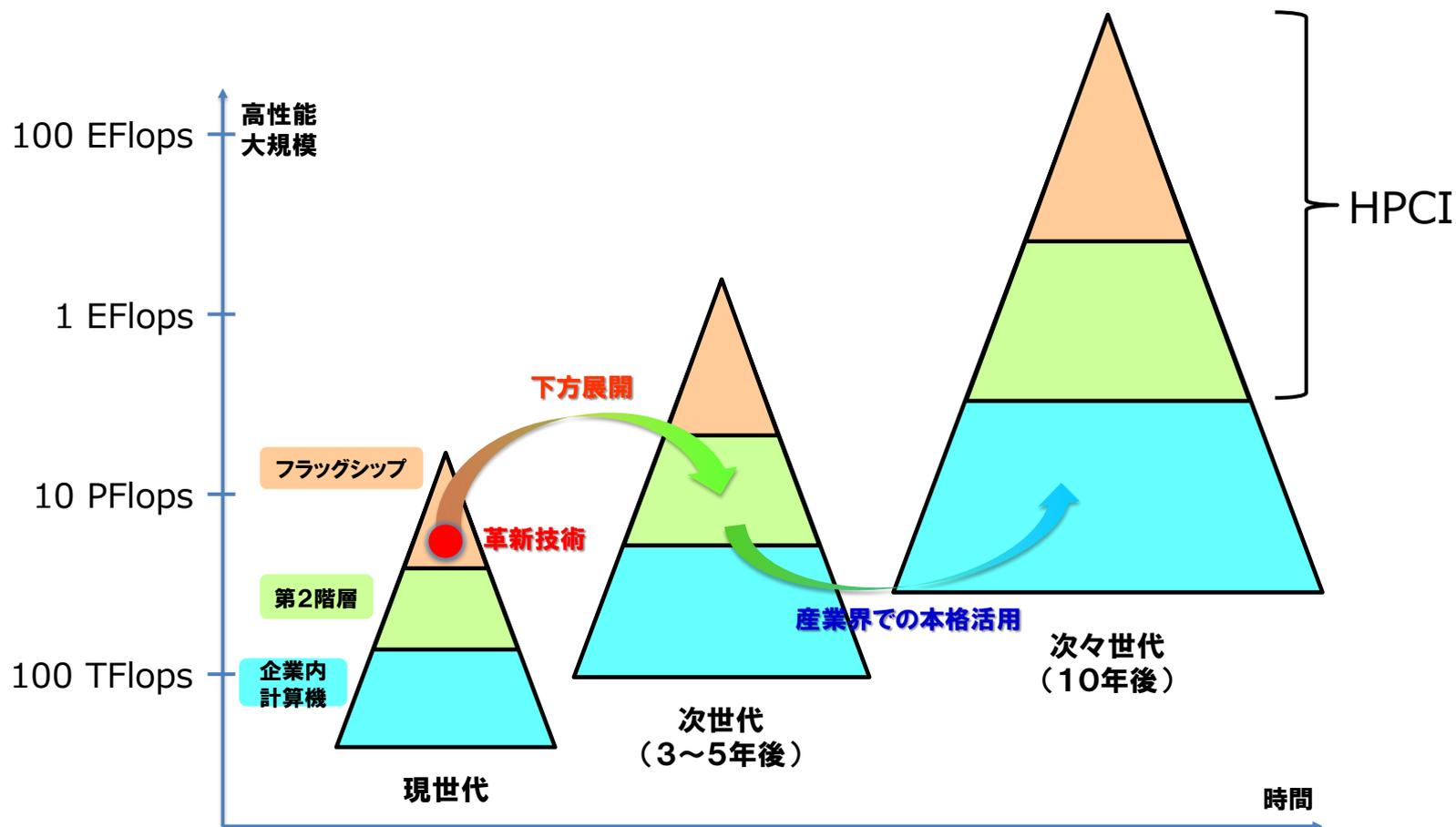
- 先進的な理論研究とこれに基づく計算手法の実現や、開発プロセスの改革につながるソフトウェアの開発を期待する。
 - ◆ 例えば、高分子材料の分野においては、「京」により空間スケールは飛躍的に拡大したが、時間スケールの短さは未だ解決されていない。時間スケールを拡大するような超高速ソフトウェアの開発や粗視化理論への期待が大きい。
 - ◆ また、機械系分野においては、デザインを変更後、瞬時に性能を予測するようなリアルタイムシミュレーションへの期待が大きい。

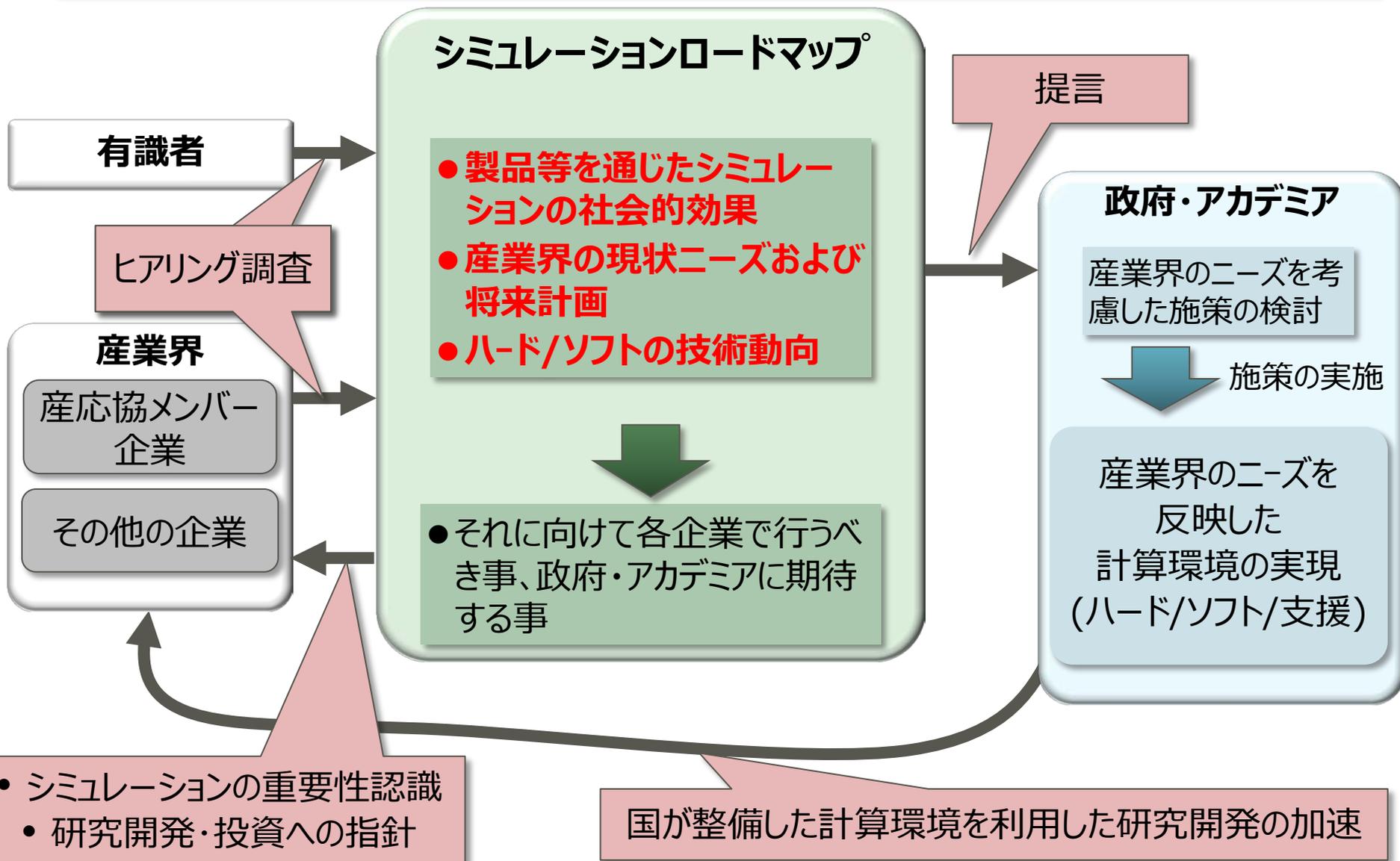


高分子材料の計算手法の位置づけ (東レ)



- 現在のフラッグシップと同等性能のスパコンを産業界が導入する時期には、数年から10年程度のギャップがある
- フラッグシップ／第2階層スパコンの利用による革新技術創出の継続が必要





シミュレーションの利活用状況

建設・機械分野

- 構造、衝突、熱流体など様々な対象のシミュレーションが商用ソフトを中心に実用化されており、研究開発や設計の各工程で必要不可欠
- シミュレーション活用の効果が大きい領域については、実験の対費用効果を超える成果を上げている

材料・化学分野

- 機械・建設分野のように最終製品設計の現場では利用されていないが、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
- シミュレーション利活用方法の多くは、材料全系から抽出された特徴的部位や単純化された系（“代理指標”）に対するシミュレーションを実施し、材料特性の向上や現象理解を目指す方法

- 共通性・重要性が高い、シミュレーションにより課題解決が求められるニーズを分野ごとにピックアップ。必要となる技術、実現に向けた技術的課題と共に、10年程度のスパンでロードマップとしてまとめた
- 実現に向けては、協調領域のソフト技術開発、大規模HPCの利活用が必要
【選定したシミュレーションニーズ】

| | カテゴリ | シミュレーション対象 | 適用製品・効果 |
|---------|---------------------------|-----------------------------------|---------------------|
| 機械・建設分野 | 建設 | 都市・建築のレジリエンス強化 | 極端気象現象を想定した被害推定など |
| | | 温熱環境 | 建物周辺的环境予測など |
| | | 水素爆発(爆燃) | 漏洩水素による爆燃被害の減少など |
| | 輸送機械 | 内燃機関 | 燃焼器の燃費性能評価など |
| | | 空力・空力騒音 | 空気抵抗低減、快適性向上など |
| | 機械 | CFRP成形 | 構造信頼性評価、廃棄コスト削減など |
| | カテゴリ | シミュレーション対象 | 適用製品・効果 |
| 材料・化学分野 | 数値フラスコ (凝集系化学反応) | 触媒反応モデリング | 均一系触媒 |
| | | 表面界面の反応モデリング | 固体触媒、電池関連材料、CVD材料など |
| | 数値フラスコ (光電機能) | 励起状態モデリング | 機能性色素、光学材料など |
| | | 有機デバイス材料モデリング | 有機LED、有機TFTなど |
| | 数値押し出し機 (ポリマー材料の構造と物性) | 共重合ポリマー・ポリマーブレンドの モルフォロジーモデリング | 構造材料用ポリマー、機能性コンパウンド |

■ 頻発する極端気象災害に対する都市・建築のレジリエンス強化

- ・極端気象現象(極大台風、竜巻、猛暑等)を想定した被害推定 **将来 (10年程度)**
- ・新しい対災害設計法の確立

現状

- ・強風災害メカニズム推定 (重点課題④の階層型格子・壁面LESプログラム)
- ・数値解析による風荷重評価手順確立 (国交省建築基準整備促進事業での検証)

- ・数値解析による風荷重評価の実案件への展開

近い将来 (数年程度)

- ・数値解析の高速化による風洞実験と同等の精度・時間での耐風設計の実現
- ・複雑形状の格子自動生成
- ・十数億格子レベルの高速計算

- ・精緻な風圧情報取得による耐風安全性向上
- ・耐風性検証のコスト低減

- ・将来増強する台風を想定した新しい耐風設計法確立
- ・極端気象現象を含む気象モデルとの連成とマルチハザードへの展開
- ・百億格子レベルの大規模・超大サンプル数の計算とAI解析による不確定性の定量化と設計法確立

- ・極端気象災害に対する都市・建築のレジリエンス強化

100倍の計算能力

1,000倍の計算能力

階層型格子・壁面LESで計算効率化

重点課題④等との連携

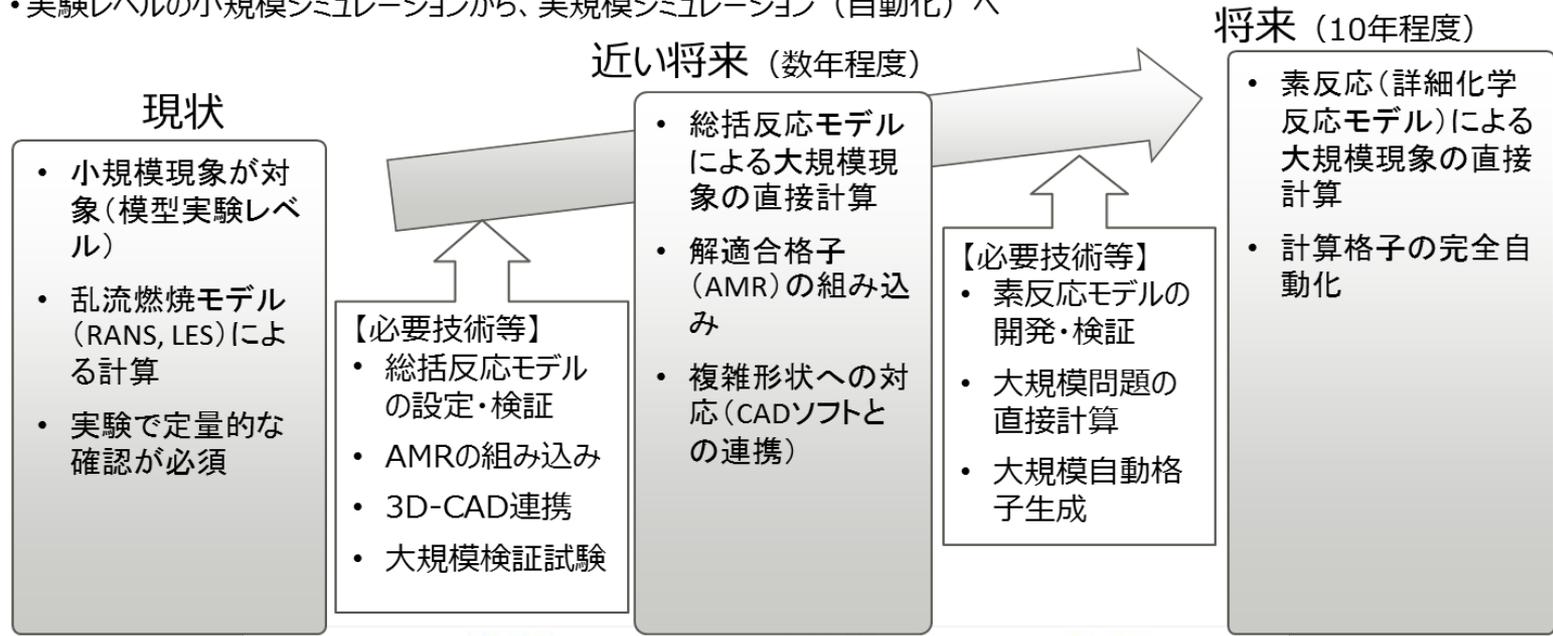
課題設定段階
の早期参画

気象・建設分野の専門家による産学連携プロジェクト

東工大・神戸大・理研・建設会社が組織する「建築CFDコンソーシアム」活動

テーマ詳細（例）：水素爆発（爆燃）に関するシミュレーション

- ・シミュレーション結果を水素関連施設や設備における想定外の漏えい時の対策に反映する
- ・水素漏えいの予測シミュレーションとともに爆燃のシミュレーションを実施することにより各種の対策を想定（防爆、検知、構造）
- ・実験レベルの小規模シミュレーションから、実規模シミュレーション（自動化）へ



テーマ：【建設】建物の温熱環境予測

← 1.テーマ

- リアルタイムでの温熱環境評価
- 人体移動など環境条件の完全な再現下での予測
- 広域スケールおよび気候変動を考慮した予測
- 3DCAD図面をベースに自動的に格子を作成し、短時間でCFD解析を実現

← 2.サマリー

3.解析で実現したい内容

現状

- 街区スケール（数100m以内）での外部環境予測
- 室内スケールでの内部環境予測
- RANSによる解析

↓

近い将来（数年程度）

- 広域スケールおよび気候変動を考慮した予測
- 気流-熱-放射連成解析およびLESによる高精度予測
- 十数億格子レベルの高速計算

↓

- 温熱環境の予測による快適性向上
- 高度な省エネ設計

【必要技術等】
•複雑形状の自動格子生成

【必要技術等】
•小スケールから大スケールまでの計算を高速化
•気象モデルとの連成（LES）

将来（10年程度）

- 人体移動など環境条件の完全な再現下での予測
- リアルタイム評価
- 地形や都市を含む広域の解析
- 百億格子レベルの高速計算

↓

- 高度な空調機器の制御
- 実現象に近い設計法の確立

5.テーマ実現に向け解決すべき課題

4.解析による効果・インパクト

テーマ：【輸送用機器】内燃機関の燃焼性能の高精度予測

- レシプロエンジン（ガソリン・ディーゼル）、ガスタービン（含ジェットエンジン）の燃焼器の燃焼性能評価手法の確立
- 燃焼器開発における燃焼性能予測を定性評価から定量評価へ。実験主体の開発からシミュレーションによる設計への転換
- 燃焼現象を正確に再現して、エミッションの高精度予測、多様な燃料に対応する汎用性を有するシミュレーションの実現へ

現状

- 総括反応モデルを用いた乱流燃焼解析（RANS、LES）
- 乱流火炎の非定常挙動やエミッションの予測精度は不十分
- 機器の開発は実験主体。燃焼シミュレーションは設計に十分利用されていない

- 機器の開発は実験主体
- シミュレーションは設計に十分利用されていない

近い将来（数年程度）

- 簡素化された化学反応モデルを用いたLES解析により、エミッション、着火現象等を定量的に予測
- 実機複雑形状への対応
- 噴霧燃焼（液体燃料）への対応
- 設計利用には、社内計算資源で実行時間1日程度

【必要技術等】

- 簡素化された化学反応モデルの構築
- 実機試験データとの比較検証
- 大規模解析技術の蓄積

- 燃焼実験の一部をシミュレーションで代替
- 開発期間の短縮
- 環境性能の向上

将来（10年程度）

- 詳細化学反応機構を用いた実機燃焼器内の乱流燃焼流れ場の直接解析
- 高効率、低公害燃焼器の設計に必要なエミッション生成、着火・失火、燃焼振動現象の定量予測
- 多様な燃料性状への対応
- 乱流燃焼現象のメカニズム解明

- 想定外の事象に対する安全性の確保
- 実現象に近い設計法の確立

テーマ：【輸送用機器】実走行環境下における空力・空力騒音のダイレクトシミュレーション

- 自動車の走行抵抗を低減して省エネルギー化（実燃費向上）を図るため、実走行環境下における空力特性の高精度予測手法の実用化が望まれる。また、車室内の乗員快適性を向上するため、空力騒音の高精度予測手法の実用化も望まれる。電動化に伴い、パワートレインからの騒音がなくなるため、その他の騒音対策が商品性向上に不可欠になる。

現状

- 風洞試験を模擬した定常流下における空力特性を計算で評価している。空力騒音に関しては、シミュレーション技術の開発段階にある。

- 自動車における実燃費の向上（空力）および乗員快適性向上（空力騒音）。シミュレーション活用による開発期間短縮、製品性能・品質の向上。

近い将来（数年程度）

- 空力特性を定量的に評価できる（空力シミュレーションの精度向上）。空力騒音シミュレーションを実車開発で活用できる。

- シミュレーションの効果・役割が増大（試作実験の削減が可能になる）

【必要技術等】

- ペタスケール計算機による大規模LESや格子ボルツマン法によるCFDシミュレーション
- 流体・構造等の連成解析

【必要技術等】

- エクサスケール計算機による大規模LESまたはダイレクトシミュレーション
- リアルワールドシミュレーション実現のためのビッグデータ活用（例：実走行条件データ同化、AI技術による設計）

将来（10年程度）

- 実走行環境下（風向・風速変動、車両挙動、車両干渉）における高精度空力・空力騒音シミュレーションができる。
- 多目的最適化による設計初期での全体俯瞰設計可能に
- デザイナーとエンジニアが連携したコンセプトデザイン

- シミュレーションの効果・役割がさらに増大（試作実験の大幅削減が可能になる）
- 設計プロセスの革新

テーマ：【機械】CFRPの成形から構造信頼性を評価する構造解析技術

• 航空機や自動車などの省エネルギー化（実燃費向上）を図るため、軽量高強度の複合材料の実用化が進められている。その中で、設計、開発、成形から運用時の信頼性確保、廃棄時のコスト縮減など、ライフサイクル全般に渡るコストや信頼性を評価するシミュレーション技術が求められている。特に長期間の運用が期待される構造では、部材疲労強度特性や衝撃強度特性に直結する成形方法に由来する材料/強度特性の高精度予測技術が設計・開発・製造で不可欠な技術となる。

将来（10年程度）

近い将来（数年程度）

現状

- CFRPの繊維配向を考慮した材料特性を複合則を用いてモデル化することや、材料試験を行って獲得し、構造解析を実施

- 所望の強度特性を有する部材の設計が可能となり、航空機や自動車への軽量部品の適用で、省エネルギー化が進められている

【必要技術等】

- 繊維配向や樹脂によるサンドイッチ状態を忠実に再現するモデルを用いたメタスケール計算機シミュレーション

- 既定のCFRP構造に対して、材料試験を削減し、材料/強度特性を精度よく再現できることで、運用時の高信頼性が担保できる

- 左記の内容において、シミュレーションの効果・役割が増大する（材料試験の削減）

【必要技術等】

- エクサスケール計算機による樹脂と繊維を個別に取り扱うマルチスケール成形/構造シミュレーション

- 異なる成形方法でも、実部品の試作や材料試験を行わずに、材料/強度特性が評価可能となり、求められる設計要求を満足する部材の作り込みが行えるようになる

- シミュレーションの効果・役割がさらに増大し、CFRP適用全般に渡る必須技術として認知される（部品試作の大幅削減が可能になる）

■ 共通性ならびに重要性の高い凝集系化学反応の“数値フラスコ化”

- ◆ 凝集系化学反応の“数値実験化”を実現⇒産業界の基礎研究・研究基盤の強化
- ◆ 均一触媒、表面・界面反応(不均一触媒、機能薄膜、電池材料等)

将来（10年程度）

現状

- 化学的洞察に基いて予め想定した反応経路に沿った遷移状態探索
- 遷移金属の計算精度が不十分
- クラスタや小規模な表面スラブによるモデル化(表面)

- 実験結果の解釈、作業仮説の構築、触媒1次スクリーニング

近い将来（数年程度）

- レアな副反応まで含めた触媒反応経路探索（孤立系）
- より現実に近い表面モデル
- 凝集系の自由エネルギー面探索手法の一般化
- DFT汎関数の高精度化

- 対象拡大、副反応までを考慮した非経験的なスクリーニング

- 遷移金属を含む凝集系・表面における網羅的な化学反応経路探索の日常的活用
- chemical accuracyを有する反応速度定数の算出

- 触媒設計のみならず、熱流体解析と組み合わせることで、非経験的なプロセスシミュレーションを実現(パイロット設計や生産条件最適化などへ波及)

産業界における日常的な活用レベル

重点課題との連携

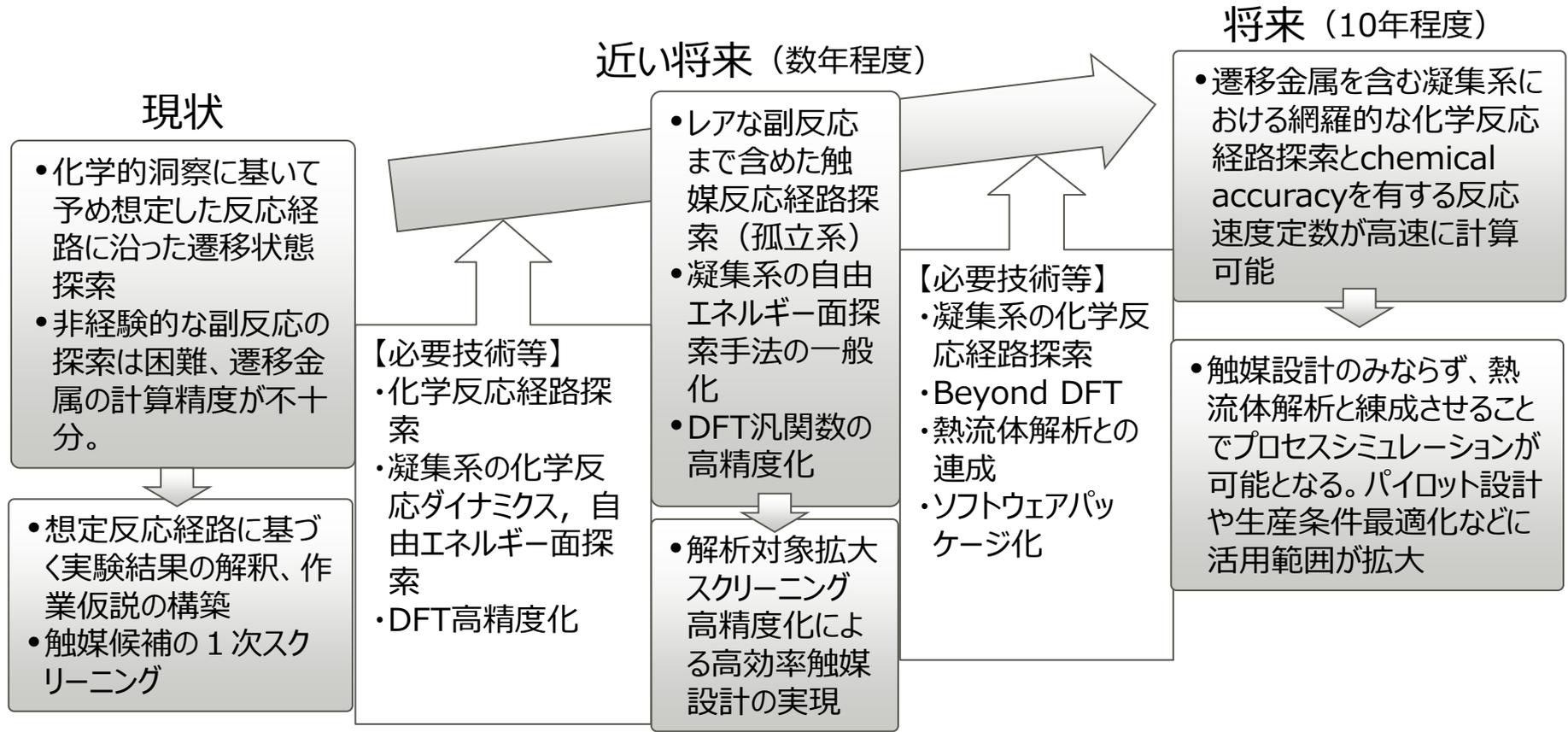
産業界での利活用を容易にする環境を整備
(エコシステムの在り方検討、および具体化等)

課題設定段階の早期参画

次の研究開発プロジェクトとの連携強化

“数値フラスコ” 凝集系化学反応 「ポリマー重合における触媒反応モデリング」

- ポリマー重合における主反応・副反応の反応経路を網羅的に解明。ラボ／パイロット重合実験の置き換え。
- 触媒の性能向上には主反応の活性化と副反応の不活性化の両方が重要であり、特にレアな副反応の抑制が必要。
- ラボスケール実験は反応槽内の温度や物質の分布を均一に保ちやすいが、パイロットでは均一化は不可。パイロットや生産での解析には、マクロな熱・物質収支との連成まで視野に入れる必要あり。



“数値フラスコ” 凝集系化学反応 「表面界面の化学反応モデリング」

- 材料の表面界面で進行する化学反応を網羅的に探索し主反応／副反応を予測
- 反応選択性が重要となるため、主反応のみならず副反応についても網羅的な把握が重要
- 化学的雰囲気考慮しつつ、多成分系での反応挙動をkcal/molオーダーの化学的精度で追跡
- 対象は、電池電極材料の固液界面反応、固体触媒の固気反応、CVD熱分解反応、半導体結晶成長など

現状

- クラスターモデルや小規模サイズの表面スラブモデル等で、仮定した反応経路に沿って計算。
- 非経験的な副反応の探索は困難、遷移金属種の計算精度が不十分

- 作業仮説の構築・検証による実験結果の解釈、分子設計指針の提示

【必要技術等】

- GRRM法の表面反応系への拡張
- 並列化効率の高い電子状態計算プログラム
- 遷移金属系の化学的精度改良
- プリ／ポスト処理環境の整備

近い将来（数年程度）

- 大きなモデルにより、固体の表面や欠陥、ひずみ等の効果をより現実に近い形で考慮
- 主な副反応を含む表面素反応の経路探索が可能

- 解析対象が拡大し、副反応機構などの理解が進展

【必要技術等】

- レイイベントをサンプリングする方法論の改良
- 表面界面を含む凝集系の化学反応ダイナミクス、自由エネルギー面探索
- 熱流体解析との練成
- ソフトウェアパッケージ化

将来（10年程度）

- 多成分表面反応系について、反応雰囲気考慮した上で、実用上考慮すべき反応経路の計算がchemical accuracyで自動的に計算可能

- 複雑な表面化学反応の理解がより一層進み、固体触媒や電池関連材料等の開発を加速

- 熱流体解析と練成したプロセスシミュレーション

“数値フラスコ” 光電機能

「有機光機能材の励起状態モデリング」

- 有機半導体や機能性色素等の分子の励起状態を高精度に予測。究極には実験の代替。
- 特に、現時点では限定的な光学的スペクトル形状、輻射／無輻射過程、発光の量子収率の予測が重要
- 分子の会合体形成や化学的雰囲気（溶液や樹脂）の考慮が必要
- 励起状態での水や酸素が関与する光反応の網羅的経路探索により劣化機構を解明

現状

- 1分子の光吸収や発光波長については、制約はあるが定量的に予測可能。スペクトル形状、強度の定量的予測は困難。また光化学反応の解析は限定的

- 化合物のスクリーニングや現象解明のツールとして活用

【必要技術等】

- TDDFTの汎関数・手法開発・高速化
- 高精度励起状態計算の高速化
- 新手法開発（無輻射失活速度、大きな構造緩和、項間交差を含む反応）
- GRRMとリンク

近い将来（数年程度）

- 励起状態における構造、スペクトル形状、無輻射過程、発光量子収率がある程度定量的に予測可能
- 凝集系における光反応の網羅的探索に理論的な目処

- スクリーニングの確度向上
- 光劣化反応の理解に基づく作業仮説構築

【必要技術等】

- 定量的励起状態計算の大規模化
- 凝集系における励起状態シミュレーション
- ソフトウェアパッケージ化

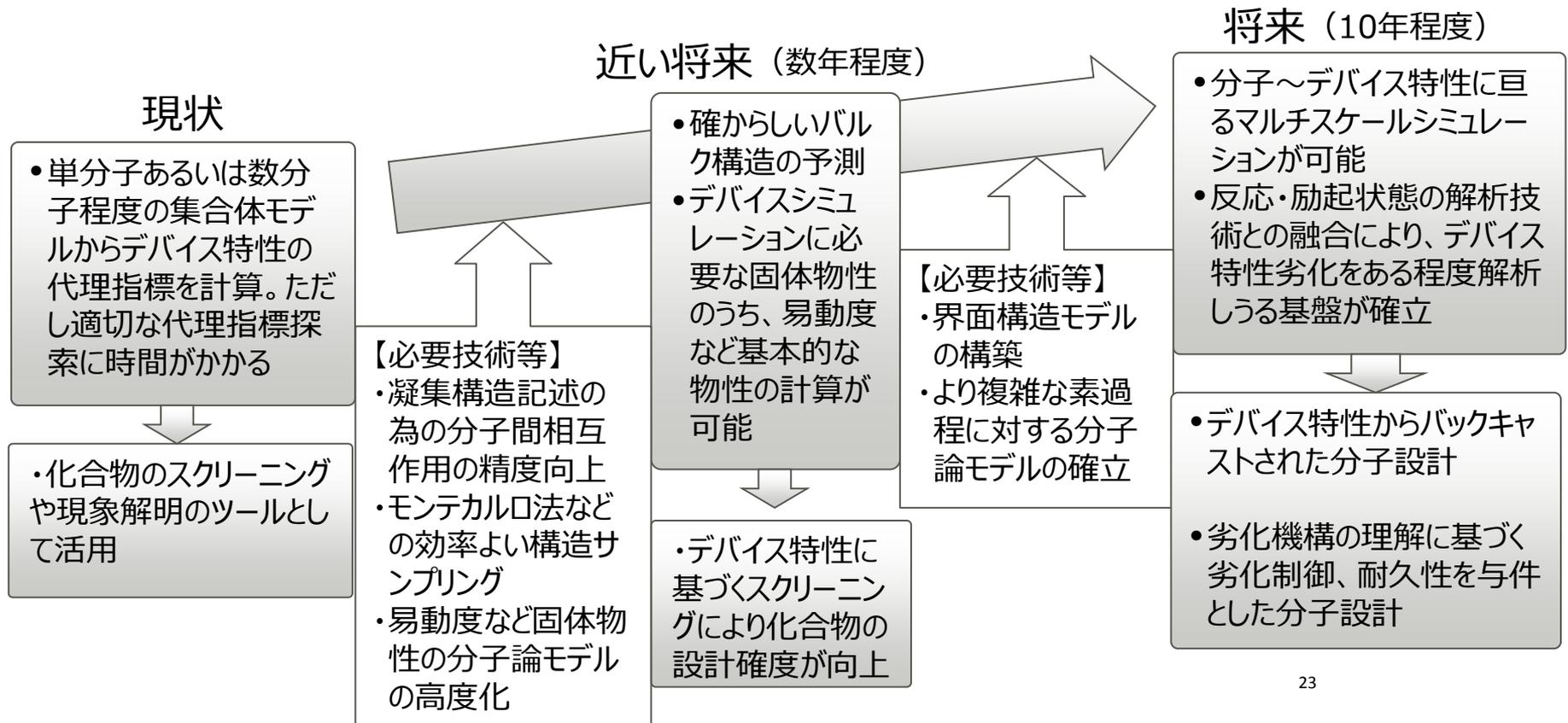
将来（10年程度）

- 会合体構造や化学的雰囲気が考慮された凝集系における光物性・光化学反応性が予測可能

- 光吸収に関わる実験を計算が一部代替、インフォマティクスを活用した机上分子設計の大幅な確度向上
- 光劣化反応の機構理解に基づく光劣化制御、耐久性を与件とした分子設計

“数値フラスコ”光電機能 「有機デバイス材料モデリング」

- 有機デバイス材料について、単分子の分子設計から、凝集系として発現する固体物性の予測、さらにはデバイス特性の予測。
- 分子の特性とデバイス特性を結ぶマルチスケールのシミュレーション技術が必要
- 反応や励起状態の解析技術との融合により、デバイスの特性劣化の解析も可能とする



【材料・化学】共重合ポリマー・ポリマーブレンドのモルフォロジー ICSCP

“数値押し出し機”ポリマー材料の構造と物性

共重合ポリマー・ポリマーブレンドのモルフォロジー

- 多成分ポリマー組成物のモルフォロジーを化学的ないしは機械的に制御することにより、単成分では得られない物性・機能を発現
- 成分の選択, 混合法 (共重合 or ブレンド), プロセス条件 (温度, 剪断速度, 時間) などが制御因子
- 物性の組合せ例: 強度/弾性率, 強度/コスト, 強度/耐薬品性, 強度/吸湿性 など。

現状

- 平均場もしくは粒子法による平衡モルフォロジーの定性的解析 (2Dモデルなど)
- 界面エネルギーの粗い見積もり (相溶化剤設計)
- 試行錯誤による粗視化パラメータ算出
- 粗視化度合いが大きいレオロジーモデル
- 粘性体モデルのCAE

- 非晶性ポリマーやゴムを対象とした定性的理解の獲得や方向性の検討

【必要技術等】

- 計算コードの大規模・高速化
- 粗視化パラメータの定量的算出法 (QM/MD から)
- 自由エネルギー・レオロジーの練成モデル
- モルフォロジーに対する機械学習

近い将来 (数年程度)

- せん断場における非晶性ポリマーのモルフォロジーを (半)定量的に再現。
- 粘弾性モデルのCAE
- 単純な形状のフィラーであれば, 複合材料のフィラー分散状態を再現。

- 実験前のコンセプト検証に活用。

【必要技術等】

- 埋め込み型のマルチスケールモデルによるプロセス因子の取り込み
- 結晶性ポリマーの階層的結晶構造を与える結晶化モデリング
- 異方性フィラー (繊維など) の分散状態
- 物性・機能 ~ モルフォロジー ~ 化学・プロセス因子の機械学習

将来 (10年程度)

- 非晶性ポリマーのモルフォロジーをプロセス因子を加味した上で定量的に再現。
- 結晶性ポリマーのモルフォロジー (球晶・シシカバブ構造など) を (半)定量的に再現。
- 結晶/非晶界面の微細構造解析 (タイ鎖/ループ鎖の分布など)。
- 複雑形状フィラーによる複合材料の分散構造予測。

- 従来にない組合せの高機能/低コスト材料の設計。

■ 「重点課題」アプリの成果創出に向けて

◆ 開発したアプリの継続的な維持・発展

- 第二階層マシン(他アーキ)でのアプリ動作検証
- 産業界の実課題へ適用性による評価
- 産業利用成果のアプリへのフィードバック
- エコシステムの構築にむけた対応

◆ 利活用促進に向けた仕組みづくり

- 利用支援の充実、産学人材交流の場

■ 「ポスト重点課題」における更なる連携強化

◆ 企業ニーズに即した具体的な研究課題の設定

- 複雑な現象の解明、革新的な計算手法… (→産応協ロードマップの活用)

◆ 企業の課題解決に資する他の技術の取り込み

- AI, インフォマティクス…

◆ 実験を通じた検証の強化

■ 成果の社会実装, 分野振興のための学際的コミュニティ活動

- 産業シミュレーションロードマップの実現には、HPCハードウェアの性能向上が必要条件
- ポスト「京」および後継スパコンの整備に大きく期待
- Capacity Computing的な利用にも配慮した、スパコンおよび利用環境の整備が望まれる

表：産業シミュレーションロードマップ実現に必要な計算性能
(計算手法が想定可能等、計算性能を見積ることができるテーマを抜粋)

| カテゴリ | テーマ | 必要計算性能 (現状の計算性能と比べて) | |
|------|----------------|-------------------------|----------------|
| | | 近い将来 (数年程度) | 将来 (10年程度) |
| 建設 | 都市・建築のレジリエンス強化 | 100倍 | 1,000倍 |
| | 温熱環境 | 100倍 | 1,000倍 |
| | 水素爆発 (爆燃) | 100倍～1,000倍 | 1,000倍～10,000倍 |
| 機械 | CFRP成形 | 100倍～1,000倍 | 1,000倍～10,000倍 |

「ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するWG」に対する提言

1. 産業利用をさらに拡大するために
 - ◆ 産業界のニーズに応える利用環境整備と利用者支援の継続・強化が必要
2. 産業利用の観点から共通に取り組むべき課題解決に向けて
 - ◆ 産業界の課題解決に資する先端的ソフトの研究開発・応用研究の拡充が必要
⇒ 共通する課題を明らかにするため、産業シミュレーションロードマップを作成
 - ◆ 研究開発プロジェクトへの、産業界からのより積極的な参画
3. ポスト「京」の計算資源の有効活用のために
 - ◆ 産業利用に配慮した運用制度・資源配分が継続して必要
 - ◆ 早期成果創出に向け、産業界からもアーリーアクセスが必要