

HPC技術ロードマップ(初版)

2023年5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)

HPCロードマップWG

本資料は、2021年7月に公開した「産業シミュレーションロードマップ(第二版)」をベースに、必要技術・必要性能の見直しや追記などを行い、HPCシステム(ハードウェア/ソフトウェア)全体を網羅した技術資料として作成をした「HPC技術ロードマップ」の初版である。

- 産応協について
- シミュレーションの活用と効果
- HPC技術ロードマップについて（作成の背景など）
- シミュレーションの現状と将来
 - 材料・化学分野
 - 建設・機械分野

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>



【2023年4月現在】

正会員:14社

賛助会員:2社・1団体

協力会員:1社

登録会員:917名

正会員

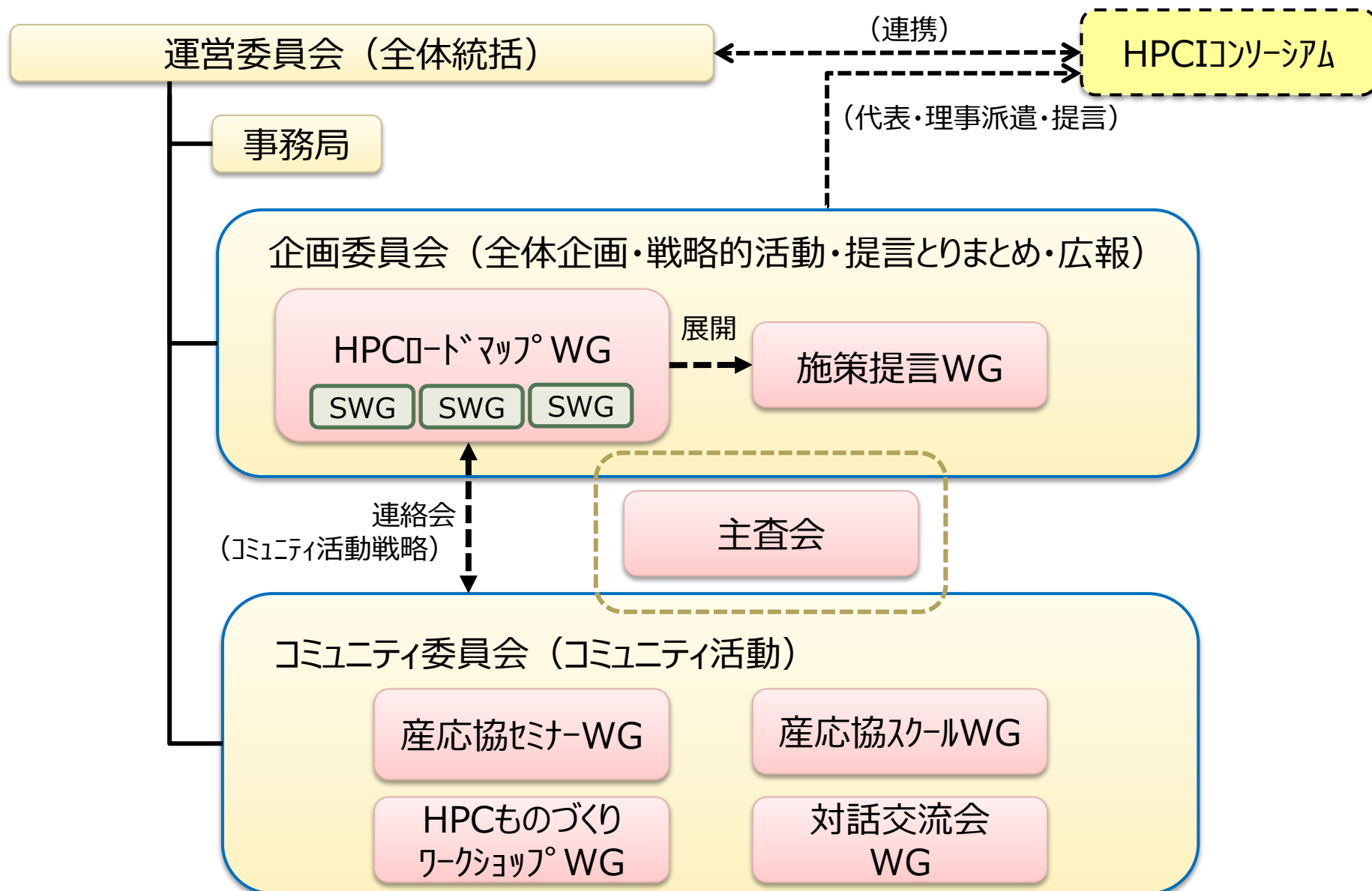
(株)IHI	鹿島建設(株)	川崎重工業(株)	清水建設(株)
ダイキン工業(株)	(株)竹中工務店	(株)東芝	東レ(株)
日本電気(株)	(株)日立製作所	富士通(株)	みずほリサーチ &テクノロジーズ(株)
三菱ケミカル(株)	三菱電機(株)		

準会員(賛助会員)

住友化学(株)	(特定非営利) CAE懇話会	(公財)鉄道総合 技術研究所	
---------	-------------------	-------------------	--

準会員(協力会員)

(株)大和システム エンジニア			
--------------------	--	--	--



■ 広報・提言活動 (HPCIの運用改善、利用環境整備等に向け、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〕
 - ポスト「京」を初めとするHPCIの産業利用と利用支援について (提言) 〔2019/6/12〕
 - 「富岳」を初めとするHPCIの産業利用と利用支援について (提言) 〔2020/7/6〕
 - 「富岳」を初めとするHPCIの産業利用と利用支援について (提言) 〔2021/6/29〕
 - 「富岳」をはじめとするHPCIの産業利用と利用支援について (提言) 〔2022/6/28〕

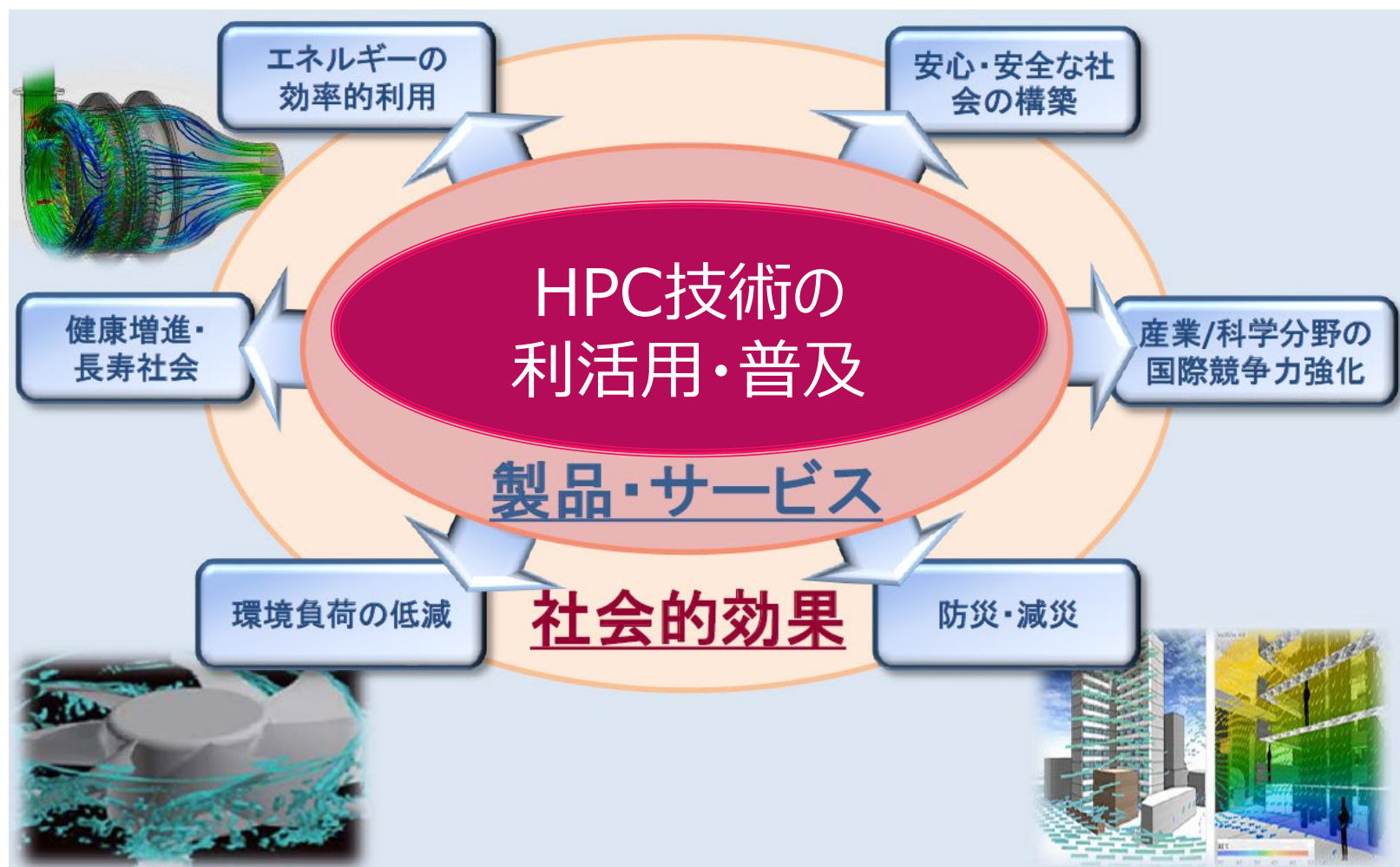
■ 産業シミュレーション・ロードマップ (2018/5に初版完成)

- ◆ 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〔2018/12/19の第11回産応協シンポジウムにて発表〕
- ◆ 産業シミュレーション・ロードマップ第二版〔2021年7月1日公開〕

■ コミュニティ活動 (アカデミアと連携し、産業界の人材育成、HPCの普及・啓発等に貢献)

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年	16	2732
産応協セミナー (旧スパコンセミナー)	2006年	51	2940
産応協スクール (旧産業利用スクール)	2009年	30	469
ものづくりワークショップ	2013年	15	387
中小企業技術交流会 (対話交流会)	2014年	7	467

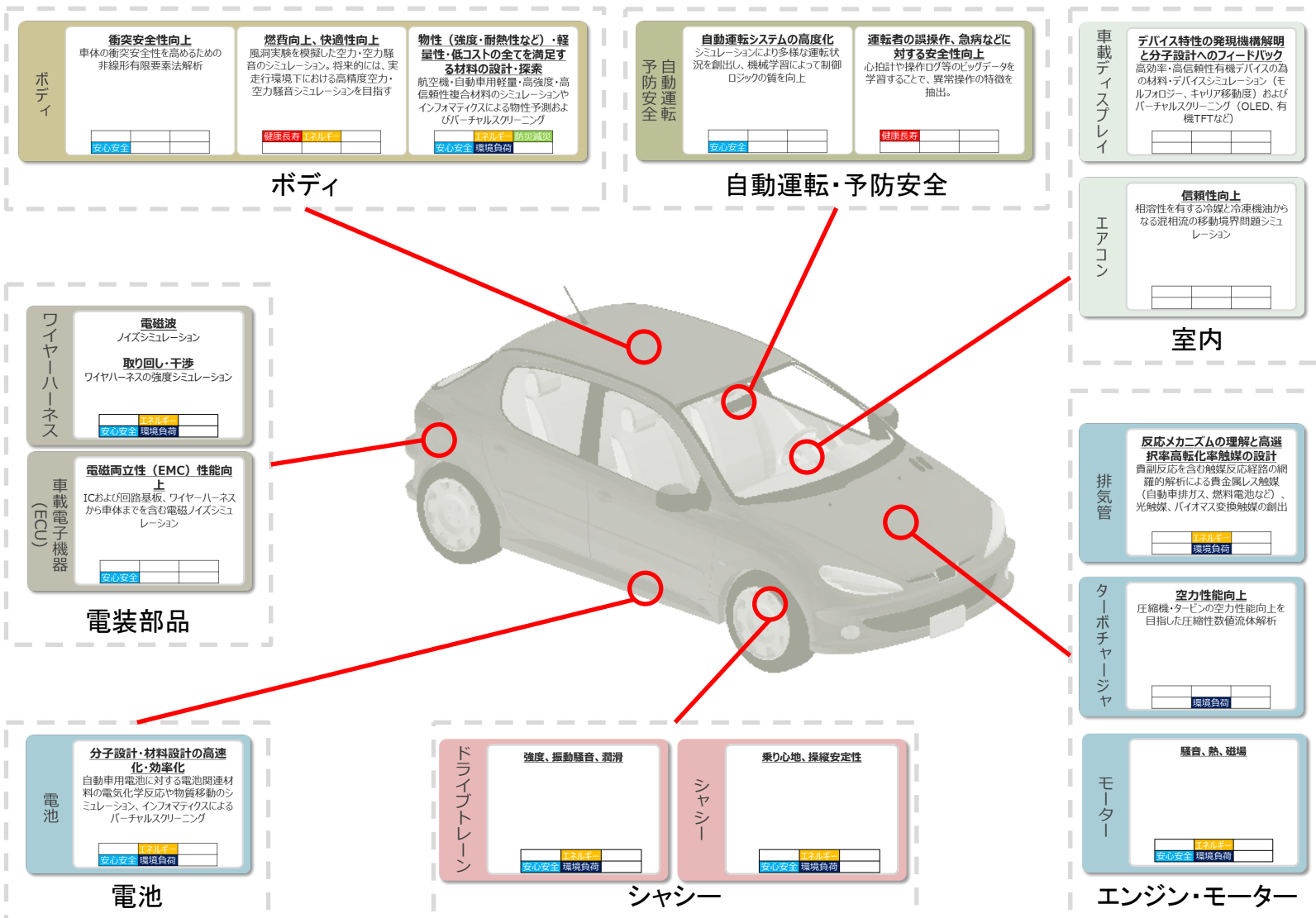
HPC技術*を活用し、地球との共生を図り、サステナブルな社会を目指す



* HPC技術：従来からのシミュレーション技術に加え、データサイエンス、AI等の新技術も含めたものとして定義する

シミュレーションの活用と効果【自動車と構成製品】

ICSCP



シミュレーションの活用と効果【都市・建物と構成製品】 ICSCP



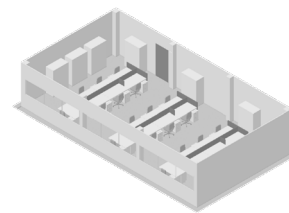
都市・インフラ



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（立体フレーム）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化化の影響評価

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

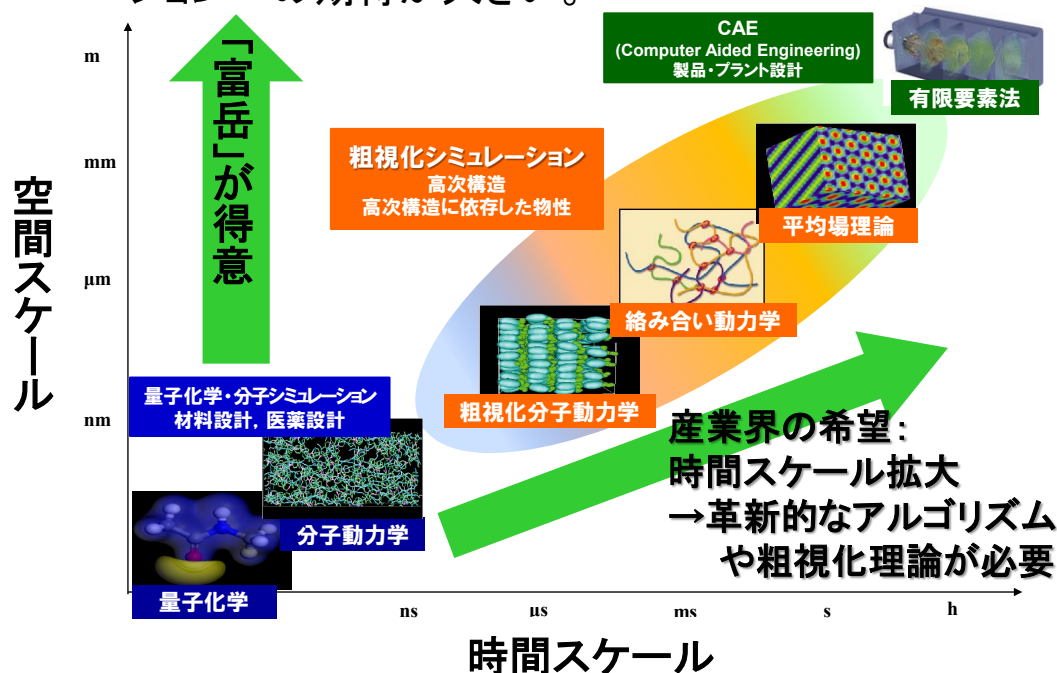
健康長寿	エネルギー	環境負荷
------	-------	------

吸音材

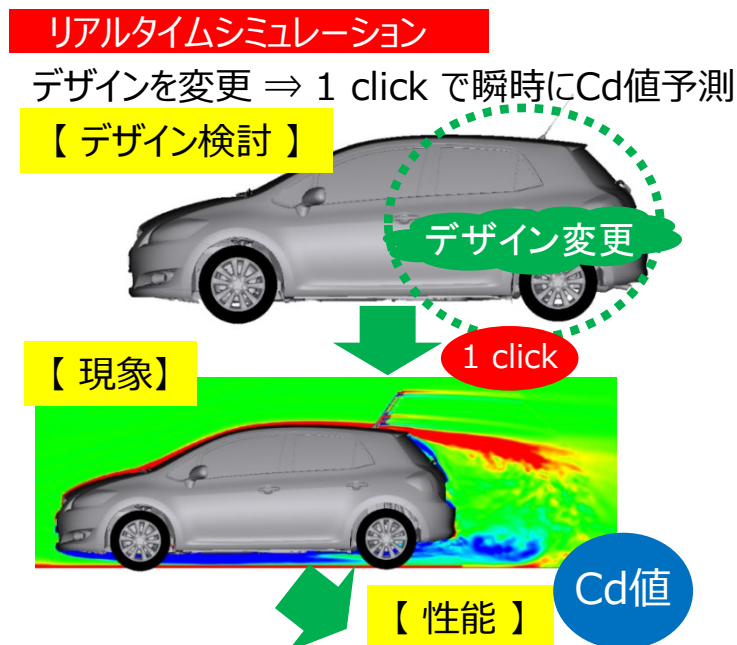
快適性の向上
特定周波数のダンピング性能が高い材料・部材の設計

--	--	--

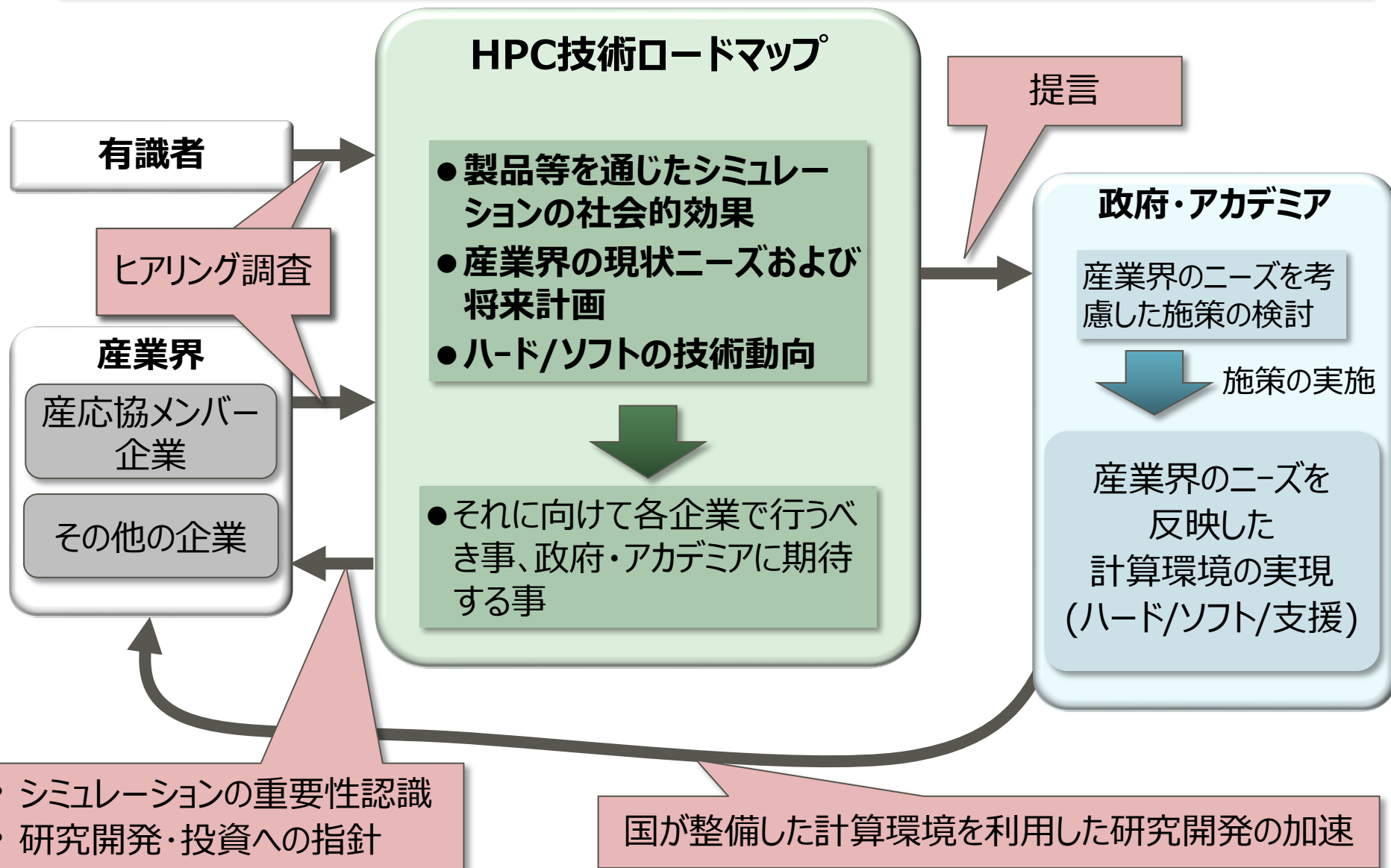
- 2021年に作成した「産業シミュレーションロードマップ」にHPCハードウェア関連情報を追加することでHPCシステム(ハードウェア/ソフトウェア)全体を網羅する。
- 先進的な理論研究とこれに基づく計算手法の実現や、開発プロセスの改革につながるソフトウェアの開発を期待する。
 - ◆ 高分子材料分野においては、空間スケールは「富岳」で拡大したが時間スケールは十分とはいえず、更に拡大するような超高速ソフトウェアの開発や粗視化理論への期待が大きい。
 - ◆ 機械系分野においては、デザインを変更後、瞬時に性能を予測するようなリアルタイムシミュレーションへの期待が大きい。



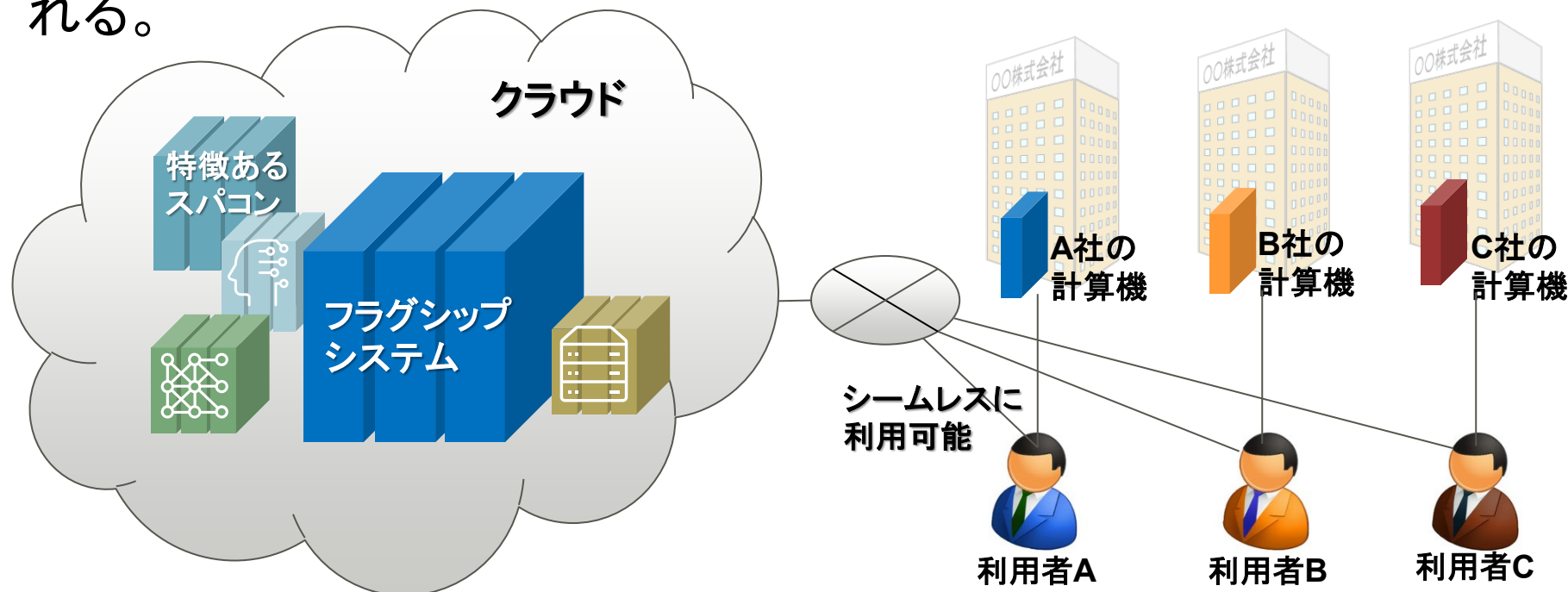
高分子材料の計算手法の位置づけ (東レ)



(日本自動車工業会)



- ポスト「富岳」時代では、フラグシップシステムを含めた様々な特徴を持ったスパコンを各利用者の用途に合わせて組み合わせて利用する形態になる。
- 研究開発やプロダクション・ランなど、用途によって利用する計算機は異なるものになるが、シームレス(*)に利用できることが求められる。



(*) ここでは、計算機の違いを意識せずに同一のユーザーインターフェースで利用できることを指す

シミュレーションの現状と将来

材料・化学分野

- 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:材料化学分野】

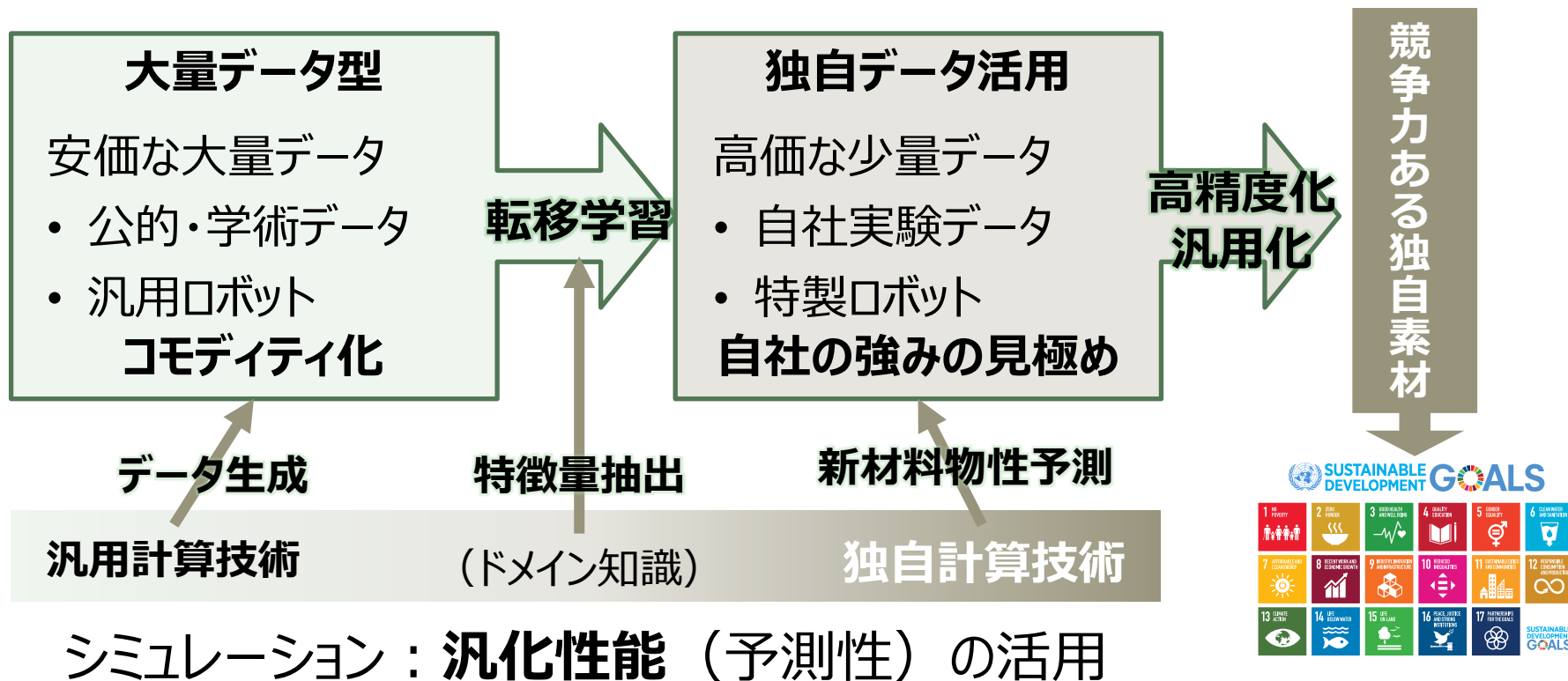
材料・化学分野	カテゴリ	シミュレーション対象	適用製品・効果	進捗等(旧版より)
	数値フラスコ (凝集系化学反応)	触媒反応モデリング	均一系触媒	かなり長期的に取り組むべき課題であり、基本的には継続すべきテーマ。さらに、インフォマティクス技術等の発展にも期待。また、企業活動においてサステナビリティ(CN/CE/LCA)への取り組みも求められてきている点を追記。
		表面界面の反応モデリング	固体触媒、電池関連材料、CVD材料など	
	数値フラスコ (光電機能)	励起状態モデリング	機能性色素、光学材料など	
		有機デバイス材料モデリング	有機LED、有機TFTなど	
	数値押し出し機 (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	

CN (Carbon Neutral),
CE (Circular Economy),
LCA (Life Cycle Assessment)

■ 材料・化学分野ではマテリアルズ・インフォマティクス(MI)が急速に進展

- ◆ AI技術の進歩により、MI（データ駆動型材料設計）が材料設計技術のデファクト化
- ◆ シミュレーションへの期待は、新材料そのものの予測・解析だけでなく、MI物性予測モデルの学習データ源として、定型ジョブ大量実行のニーズが増加
- ◆ さらに、自律型ラボ（ロボット）の進歩と合わせて、従来型ラボ／自律型ラボ／高精度シミュレーション／汎用・大量シミュレーションの組合せによる新しい材料設計技術が進展

データ駆動（狭義のMI）



■ 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

- インフォマティクス技術やCAEと組み合わせ⇒デジタルツイン
- CN/CE/LCAに関わる現象(分解・劣化)のシミュレーション

大量計算～シミュレーションDB構築(機械学習/AIとの融合)、新方法論開発

産業界における
日常的な活用
レベル

重点課題との連携

課題設定段階
の早期参画

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)

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/分解における反応モデリング」

- ポリマー重合/分解における主反応・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。

近い将来（数年程度）

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
- 非経験的な副反応の探索は困難、遷移金属の計算精度が不十分。

- 想定反応経路に基づく実験結果の解釈、作業仮説の構築
- 触媒候補の1次スクリーニング

【必要技術等】

- 化学反応経路探索
- 凝集系の化学反応ダイナミクス, 自由エネルギー面探索
- DFT高精度化

- レアな副反応まで含めた触媒反応経路探索（孤立系）
- 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

- 解析対象拡大スクリーニング高精度化による高効率触媒設計の実現

【必要技術等】

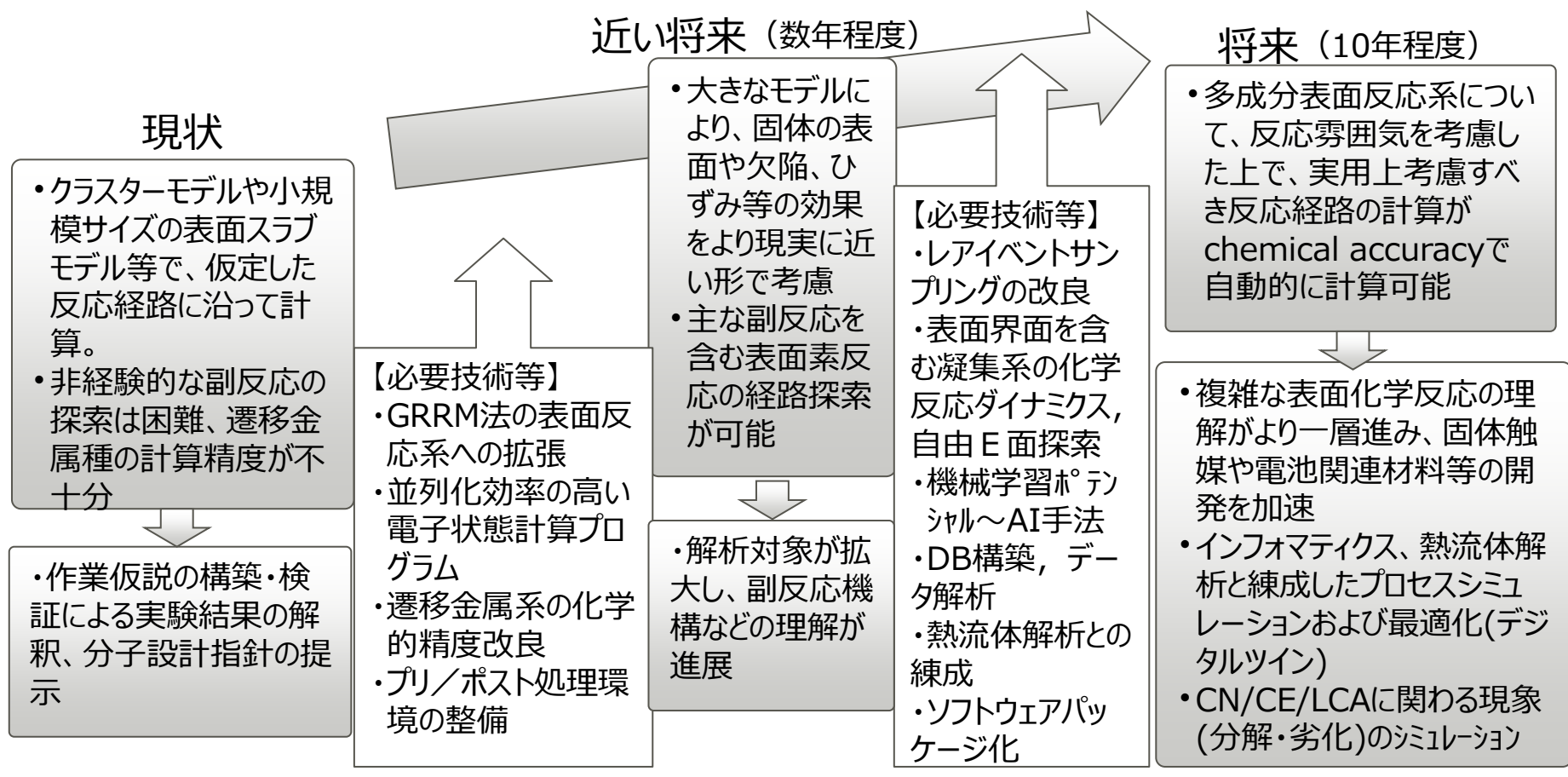
- 凝集系の化学反応経路探索
- Beyond DFT
- 機械学習ポテンシャル～AI手法
- DB構築, データ解析
- 熱流体解析との連成
- ソフトウェアパッケージ化

- 遷移金属を含む凝集系における網羅的な化学反応経路探索とchemical accuracyを有する反応速度定数が高速に計算可能

- インフォマティクス技術や熱流体解析との練成によりプロセスシミュレーションが可能となる。触媒設計のみならず、パイロット設計や生産条件最適化などに活用範囲が拡大(デジタルツイン)
- CN/CE/LCAに関わる現象(分解・劣化)のシミュレーション

“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、劣化反応など



“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

近い将来（数年程度）

将来（10年程度）

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

- 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
- 機械学習ポテンシャル～AI手法
- DB構築・データ解析
- ソフトウェアパッケージ化

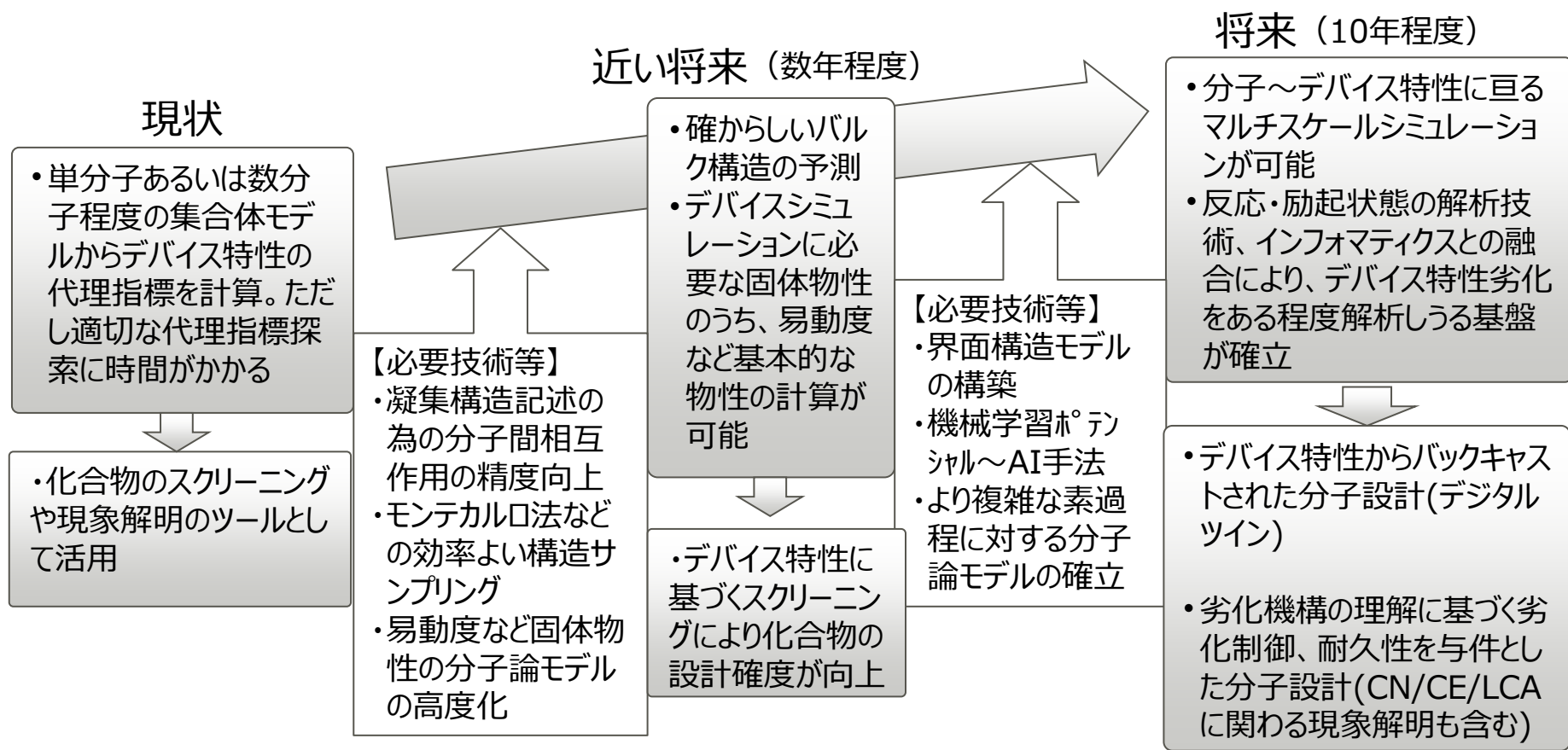
- 会合体構造や化学的雰囲気が考慮された凝集系における光物性・光化学反応性が予測可能

- 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（デジタルツイン）

- 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（CN/CE/LCAに関わる現象解明も含まれる）

“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)

- セン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・プロセス因子の自動取得・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。

- 要求特性からバックキャストした高機能/低コスト材料の設計 (デジタルツイン)。

観点①：数値演算能力だけでは解決できない、本質的な技術課題への取り組み
 （本質的アルゴリズム開発、AI的手法(データ駆動型)、計算モジュール結合の実現 等）

技術課題(例)	応用例
エネルギー面上の停留点探索	安定構造 & 遷移状態探索
レアイベントサンプリング効率化	化学反応メカニズムの理解
エネルギー計算の高速化	長時間ダイナミクス対応, 機械学習ポテンシャル(MLP)
エネルギー計算の高精度化	電子相関や弱い分子間相互作用の高精度化
時間発展演算の抜本的高速化	長時間ダイナミクス対応
スケール間連携	実用材料のマルチスケールな理解
計算データ自動生成 & データ駆動	多目的最適化, MI(転移学習、データ同化…), MLP

観点②：HPC活用についてのコストパフォーマンス向上

$$\text{コストパフォーマンス} = \frac{\text{期待成果（技術課題の克服）}}{\text{UXの改善}} \quad \leftarrow \text{ここを後回しにすると普及しない}$$

実行環境への要望	現状の課題
UX整備	ポータブル/シームレスな環境(例：コンテナ技術、容易なライブラリ環境構築), 柔軟なワークフロー構築(例：pythonスクリプトと計算エンジンの連結)

シミュレーションの現状と将来

建設・機械分野

将来のシミュレーションニーズ(建設・機械分野) (1) ICSCP

【選定したシミュレーションニーズ: 建設・機械分野】

建設・機械分野	カテゴリ	シミュレーション対象	適用製品・効果	進捗等(旧版より)
	建設	極端気象下の都市・建築のレジリエンス強化	極端気象下のマルチハザード(強風・洪水・猛暑)の被害推定、新しい対極端気象災害設計法の構築、スマートシティ実現のための都市OS構築への貢献	重点課題プロジェクト等でアカデミア等と連携して取り組んでおり、進捗状況を踏まえて、旧版で選定したテーマを見直し。
		都市・建物まわりの温熱環境予測	スマートシティの重要な要素である温熱環境をリアルタイム・精緻に解析	
		確率論的地震ハザード評価	日本全国を対象にした確率論的地震ハザード評価	
		気象解析	極端現象の予測、高解像度な短時間予測・長期間予測、大規模アンサンブル短時間予測・長期間予測	
		風荷重	実建物形状を再現したLESを用いた外装材の風荷重評価	
		温熱環境	気候変動を考慮した建築設備の省エネ設計、自然共生社会・低炭素社会の実現、マルチスケール&リアルタイムシミュレーション	

将来のシミュレーションニーズ(建設・機械分野) (2) ICSCP

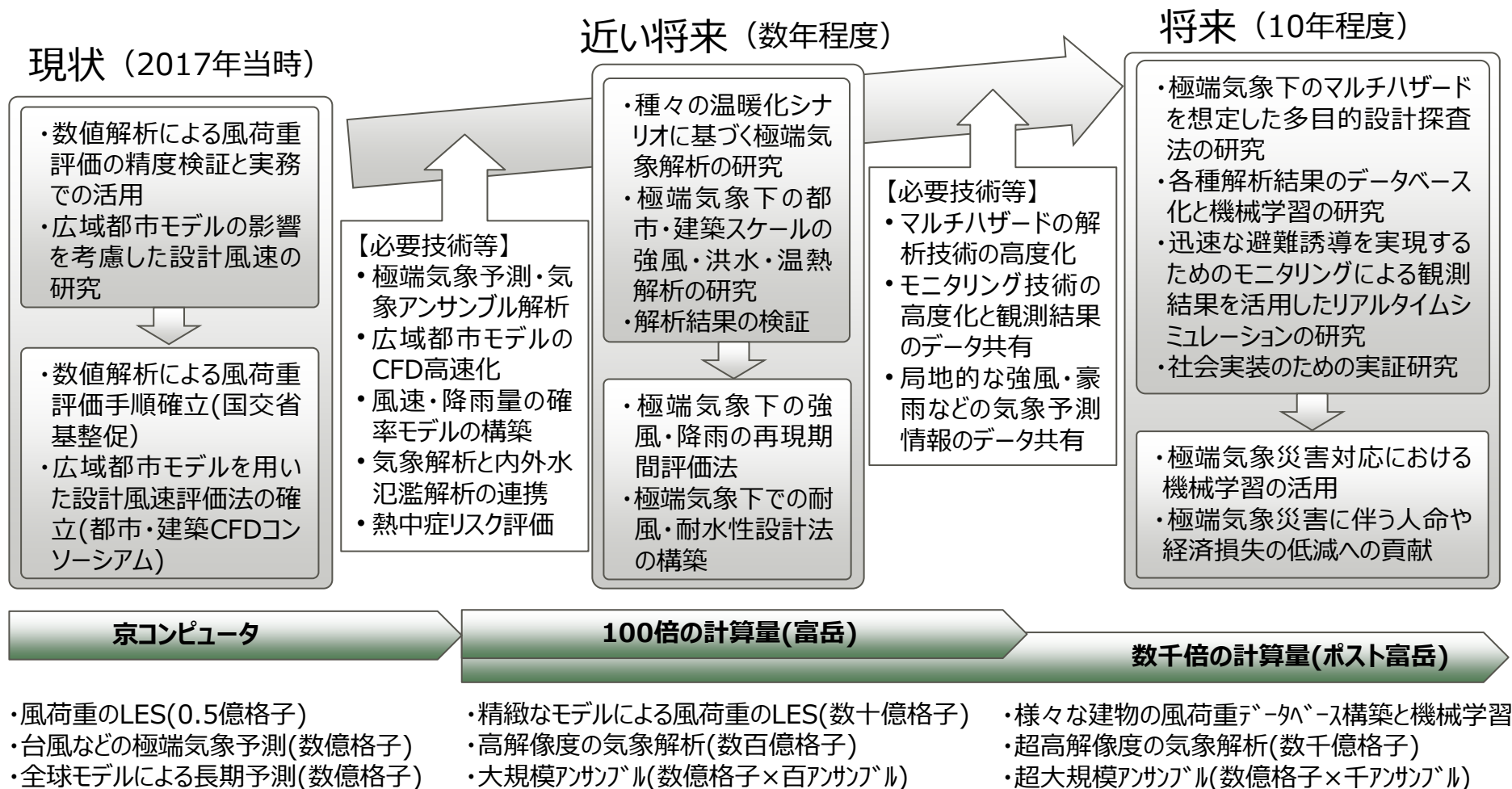
【選定したシミュレーションニーズ: 建設・機械分野】

	カテゴリ	シミュレーション対象	適用製品・効果	進捗等(旧版より)
建設・機械分野	機械	CFRPの成形から構造信頼性を評価する構造解析技術	構造信頼性評価、廃棄コスト削減など	重点課題プロジェクト等でアカデミア等と連携して取り組んでおり、進捗状況を踏まえて、旧版で選定したテーマを見直し。
		冷凍サイクル(混相流)シミュレーション	空調等の冷凍サイクルのシステム全体の設計から保守・運用までを高度化	
		スマートシティー・ビル・ハウスにおける最適AI制御	インフラ、家屋の熱容量やエネルギー効率の予測	
		持続可能な社会を実現するインフラシステム予測技術	インフラシステムを構成する各コンポーネントの性能・挙動の高速予測	
	輸送機械	内燃機関の燃焼性能の高精度予測	燃焼器の燃費性能評価など	
		ガスタービンの全エンジンシミュレーション	ジェットエンジン(航空用ガスタービン)では、信頼性確保、燃費向上など	
		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	空気抵抗低減、快適性向上など	

【建設・機械】極端気象下の都市・建築のレジリエンス強化 ICSCP

■ 極端気象災害に対する都市・建築のレジリエンス強化

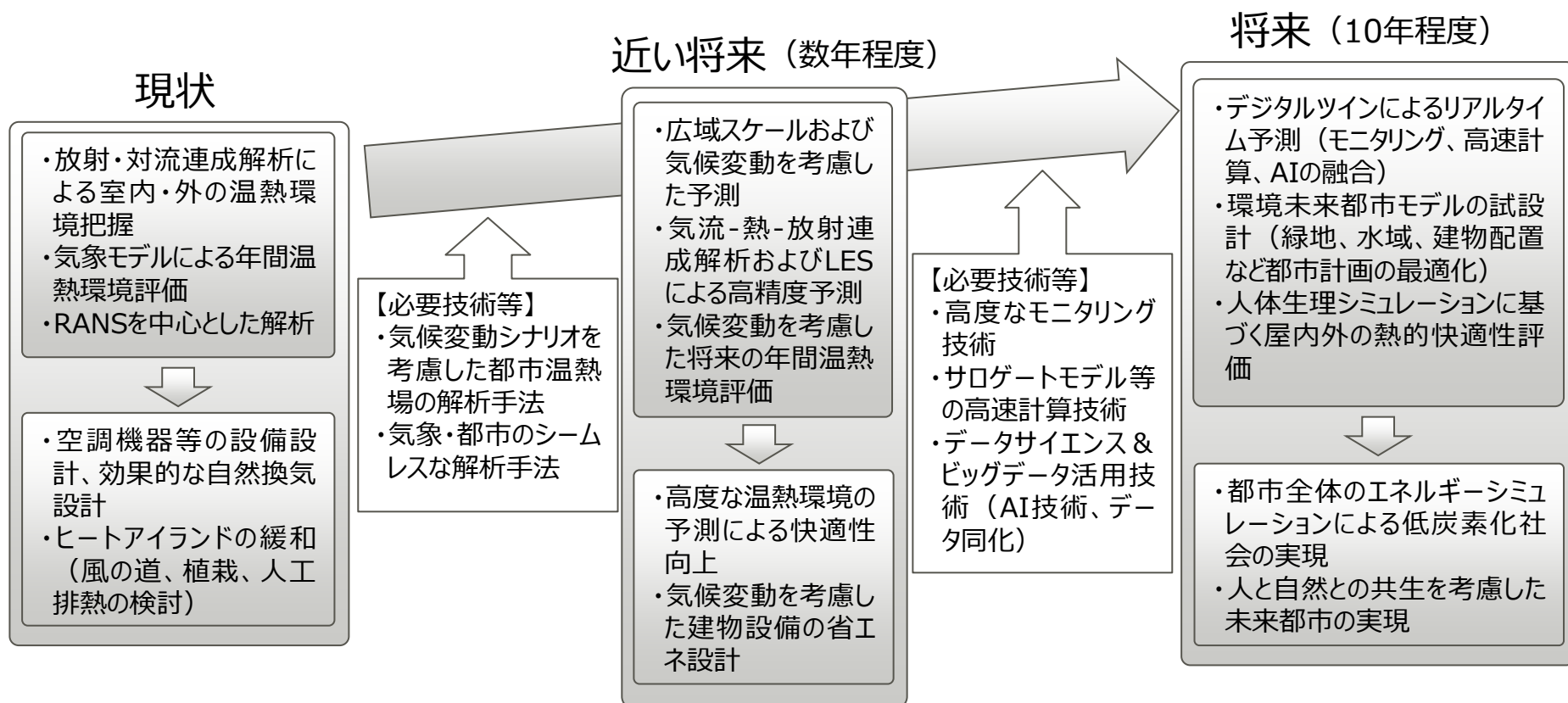
- ・極端気象下のマルチハザード(強風・豪雨・豪雪・洪水・猛暑)を想定した被害推定と精度検証
- ・新しい対極端気象災害設計法の確立とスマートシティ実現のための都市OS構築への貢献



■ 都市・建物まわりの温熱環境予測

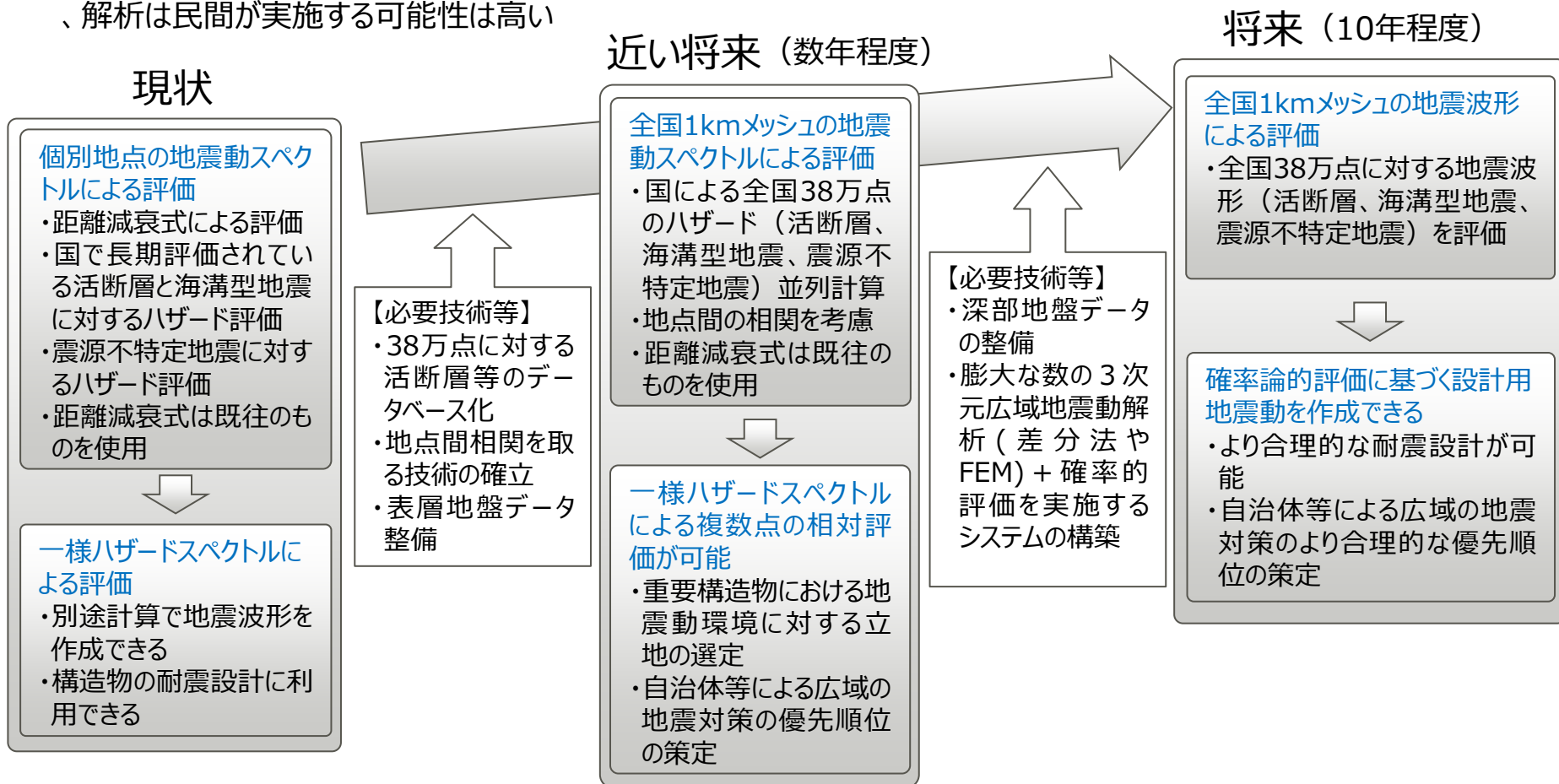
スマートシティの重要な要素である温熱環境をリアルタイム・精緻に解析

- ・リアルタイムでの温熱環境評価
- ・広域スケールおよび気候変動を考慮した予測・評価
- ・自然共生社会、低炭素社会への貢献



■ 確率論的地震ハザード評価

- ・日本全国を対象にした確率論的地震ハザード評価を行う。
- ・現状は地震動の最大値だけで評価されているが、将来的には地震波形による評価を目指す
- ・将来的な地震ハザード評価に必要な深部地盤DBや地震動解析結果DBの整備は国や国研が実施する可能性があるが、解析は民間が実施する可能性は高い



■ 将来ニーズの実現のため、「富岳」を最大限活用していく

現状

メソスケール～総観スケール（台風、爆弾低気圧など）の極端現象の予測（数億格子）

- ・数km解像度の気象モデルによる台風、爆弾低気圧などの5日程度先の挙動の予測が可能。メソスケール～総観スケールの極端現象に対する防災に活用。

全球モデルによる長期間予測（数億格子）

- ・数十km解像度の全球モデルによる再解析データセット、将来予測データセットの作成が可能。気候変動影響評価に活用。

近い将来（数年程度）

高解像度な短時間予測・長期間予測（数百億格子）

- ・メソの大雨・強風を高解像度（数百m）で予測。地域スケールの大雨・強風対策、避難行動に活用。
- ・高解像度（数km）な長期間予測によるメソの再現精度が高い再解析データセットの作成が可能。

大規模アンサンブル短時間予測・長期間予測（数億格子×百アンサンブル）

- ・数時間先のメソの極端現象を確率論的に予測。大雨・強風対策、避難行動に活用。
- ・各種の温暖化シナリオ・気候モデルに基づく将来予測データセットの作成が可能。

将来（10年程度）

超高解像度な短時間予測・長期間予測（数千億格子）

- ・マイクロ～メソの局地的な大雨・強風を超高解像度（数十m）で予測。ピンポイントの大雨・強風対策、避難行動に活用。
- ・超高解像度（数百m）な長期予測によるマイクロ～メソの再現精度が高い再解析データセットの作成が可能。構造物の設計外力（大雨・強風）評価に活用。

超大規模アンサンブル短時間予測・長期間予測（数億格子×千アンサンブル）

- ・24時間先のメソの極端現象を確率論的に予測。早期かつ合理的な大雨・強風対策、避難行動に活用。
- ・各種の温暖化シナリオ・気候モデルに基づく多ケース・多モデルの将来予測データセットの作成が可能。不確実性を考慮した合理的な気候変動影響評価に活用。

100倍の計算能力

1,000倍の計算能力

京コンピューター

「富岳」

ポスト「富岳」

図：ニーズ実現に必要な計算量の見通し（気象解析）

- 将来ニーズの実現のため、「富岳」を最大限活用していく

現状

LESを用いた外装材の風荷重評価(京コンピュータ実績)

- ・5500万格子点の計算を京コンピュータ(72ノード, 576コア)で270時間／風向の計算を36風向分実施する必要がある。
⇒ $576 \times 270 \times 36 = 560$ 万コア時間

近い将来（数年程度）

実建物形状を再現したLESを用いた外装材の風荷重評価(予測)

- ・風荷重が問題となる実部材の再現には、18億格子点、時刻み1/3、36風向分の計算を実施。
計算規模は現状の100倍。

100倍の計算能力

将来（10年程度）

実建物形状を再現したLESを用いた外装材の風荷重評価の機械学習(予測)

- ・機械学習させるためのLESデータを用意するために、左記と同様の計算規模で、20種類の建物のバリエーションを計算する。
現状の2,000倍の計算規模。

1,000倍の計算能力

京コンピュータ

「富岳」

ポスト「富岳」

図：ニーズ実現に必要な計算量の見通し(風荷重)

- 将来ニーズの実現のため、富岳クラスの高性能並列計算機および高速な大規模ストレージを最大限活用していく

現状

任意な気象場を対象とした都市スケールの広域計算と建物スケールの融合解析

- ・RANSを中心とした解
- ・ヒートアイランドの緩和（風の道の確保、植栽効果）

近い将来（数年程度）

気候変動を考慮した建築設備の省エネ設計

- ・高度な省エネ設計のためのパラスタ計算（室内外連成解析×数百ケース）
- ・気候変動を考慮した気象モデルによる年間温熱環境評価（数億格子×境界条件×365日間）

将来（10年程度）

自然共生社会・低炭素社会の実現

- ・未来都市の試設計（複数の都市モデル×都市全体のエネルギーシミュレーション）

マルチスケール&リアルタイムシミュレーション

- ・リアルタイム予測（AI/機械学習, 観測データの同化）

数十倍の計算量

数百倍の計算量

京コンピューター

富岳クラス+高速大規模ストレージ

図：ニーズ実現に必要な計算量の見通し（温熱環境）

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、廃棄時のコスト削減など、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。

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
- 積層構造を評価することが普通となっている

- 所望の強度特性を有する部材の設計が可能となっており、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】

- 繊維配向や乱れ、繊維の含有量を忠実に再現するモデルを用いたパタスケール計算機シミュレーション

近い将来（数年程度）

- 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

- 材料/強度特性や成形欠陥の評価において、シミュレーションの効果・役割が増大する（材料試験・要素試験の削減）

【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

将来（10年程度）

- 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）

100～1,000倍の計算能力
多層1要素を1層1要素でモデル化、肉厚もの

1,000～10,000倍の計算能力
複数部品、システム全体解析

テーマ：冷凍サイクル（混相流）シミュレーション

- 空調（温水暖房の熱源ヒートポンプ化を含む）等の冷凍サイクルのシステム全体のシミュレーション技術の確立
- コンプレッサの動力学、冷媒による熱輸送、ファンによる放熱、冷媒-水熱交換器の最適設計等の各種シミュレーション技術の高度化、統合によりシステム全体を再現可能なシミュレーションモデル（デジタルツイン）により、設計から保守・運用までを高度化する

現状

- 経験則に基づく定式化と実験による合わせ込み
- 機器の開発は実験主体
- 実際の現象解明も実験計測だけでは難しい

- 設計は実験確認により後戻りあり
- シミュレーションが再現性がなく、活用しきれていない

近い将来（数年程度）

- 混相流の相変化による熱輸送モデルのシミュレーション技術確立
- ファン設計による熱交換シミュレーション技術確立
- コンプレッサの動力学モデルのシミュレーション技術構築

- 【必要技術等】
- 混相流の相変化を含めた現象再現可能な基礎解析技術
 - 実現象とシミュレーションの比較可能な計測技術

- 現象理解による要素設計の効率化
- 設計の後戻りの削減
- 効率向上

将来（10年程度）

- 系全体のモデル化によるシステムのシミュレーションによる設計
- リアルタイムシミュレーションによるシステム制御への活用

- 実現象再現によるシステム全体設計の効率向上
- センシングデータを活用した保守運用の効率化
- ...

テーマ：スマートシティ・ビル・ハウスにおける最適AI制御

- ・スパコンとIoTセンサをリアルタイムに接続し実データに基づくサイバーフィジカルモデルとAI制御：

- ・人の流れ、将来動態予測の推定
- ・気流、蓄熱、日射量の変動予測
- ・インフラ、家屋の熱容量やエネルギー効率の予測
- ・空気質の保証

将来（10年程度）

- ・スパコン内に街・ビル全体のデータ駆動型の大規模サイバーフィジカルモデルを構築し、IoTセンサデータと同時接続による現場再現と高精度な予測。
- ・個別の現場機器を制御するクラウドとスパコンが密結合し、スパコンの予測に基づく、クラウド側の個別最適制御を実現

近い将来（数年程度）

- ・中規模な領域のデータに基づいたサイバーフィジカルモデルシミュレーションとシミュレーションに基づいた最適制御
- ・新しい働き方に即したエネルギーマネジメント：設備可動マネジメントによるエネルギー効率化・最適化

【必要技術等】

- ・街・ビル中の全てIoTセンサとクラウドをスパコンに接続、リアルタイム解析
- ・強化学習による街・ビル全体サイバーフィジカルモデルの生成
- ・スパコン内のエージェントによる予測制御

- ・利用者数、複数の部屋、複数ビルビルフロアのエネルギー効率を考えた快適制御、エネルギーマネジメント

現状

- ・単体のIoTセンサ情報に基づく個別機器の機械学習と、それによる室内の快適空調制御（非スパコン）
- ・スパコンを用いた流体解析による機器形状（ファン形状など）の最適化

【必要技術等】

- ・複数IoTセンサ情報とシミュレーションに基づく部屋・ビル建屋状態予測AIの構築

- ・小規模の部屋、ビルのフロア毎の快適制御、省エネ制御

テーマ：持続可能な社会を実現するインフラシステム予測技術

- 社会生活を支えるインフラシステムを構成する各コンポーネントの性能・挙動の高速予測
- 環境問題まで含めたインフラシステム全体の性能・挙動の予測
- シミュレーションツールの利用拡大

現状

- シミュレーションを用いたインフラを構成する機器(ポンプ、タービンなど)や環境(風力発電の局地的な気候予測)の個別の性能予測
- システム全体の性能予測は1Dなどの簡易解析
- アカデミアのツールの利用は限定的

- 解析時間がかかっている
- 全体予測は精度が不十分
- 設計者へのCAEの普及が不十分

【必要技術等】

- AIを活用した予測技術
- 富岳を利用した大規模解析
- 使い勝手のよい解析ツールのエコシステム化

近い将来（数年程度）

- AI活用した機械学習による性能予測
- 大規模シミュレーションを用いたシステム全体予測
- GUIが整備されたシミュレーションツール

- 予測時間の高速化
- 全体予測の高精度化
- 開発分野へのHPC利用拡大

【必要技術等】

- AIを用いた高速予測
- 環境・社会活動全体のモデル化
- 富岳クラスの大規模計算機のエコシステム化

将来（10年程度）

- 超ビッグデータを用いた機械学習に基づく性能予測
- AIとシミュレーションとが連携した大規模システム予測
- 富岳クラスが利用できるユーザフレンドリなシミュレーションツール

- 社会の挙動の予測
- 設計部門へのHPCの利用拡大

テーマ：【輸送用機器】内燃機関の燃焼性能の高精度予測

- ・内燃機関を用いる輸送用機器、エネルギー機器の燃費向上、環境性能改善のためには、燃焼性能の高精度予測が必要
- ・燃焼器開発における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ベース開発への転換を図る
- ・燃焼現象を精度よく再現して、エミッションの定量予測、多様な燃料に対応する汎用性を有する解析技術の実現を目指す
- ・対象はレシプロエンジン（ガソリン、ディーゼル、GE）、ガスタービン（航空用、産業用）の燃焼器を想定

現状

- ・総括反応モデルを用いた乱流燃焼解析（RANS、LES）で実機複雑形状に対応した評価を実施
- ・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

【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

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
- ・噴霧燃焼（液体燃料）、水素・アンモニア燃焼への対応
- ・設計利用には、社内計算資源で実行時間 1 日程度

- ・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

【必要技術等】

- ・詳細反応機構の数値モデルの開発と精度検証
- ・高効率な数値解析法
- ・データベース構築・データ解析

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
- ・AI/機械学習との融合による燃焼反応計算の高速化

- ・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
- ・カーボンフリーエンジン設計の実現

テーマ：【輸送機械】ガスタービンの全エンジンシミュレータ

- ジェットエンジン(航空用ガスタービン)では、信頼性確保、燃費向上のためには、負荷変化時のエンジン挙動の把握が重要
- 発電用ガスタービンでは、太陽光発電などの再生可能エネルギーの普及により急速な負荷変動対応が必要
- これらに対応するには負荷変動時に異なる物理現象を考慮して全体挙動を解明する全エンジンシミュレータ構築が必要

現状

- エンジンの各要素をモデル化した1次元モデルにより全エンジンのシミュレーションを実施
- 詳細な物理現象を考慮できない
- モデル化の際に実験結果に基づく相関式が必要

- 状態変化時のエンジン挙動把握が可能
- 開発初期段階での活用が可能

【必要技術等】

- 1次元モデルと3次元モデルを連成するソフトウェア開発
- 計算機/ソフトウェアの解析速度の向上 …

近い将来（数年程度）

- 1次元モデリングと3次元モデリングを組み合わせたエンジンシミュレータの構築
- 強度解析のみ3Dモデリングを行い、流体、伝熱は1次元モデリングを用いるエンジンシミュレータ

- 部分的だが詳細形状の影響評価が可能
- 非定常シミュレーションの精度向上

【必要技術等】

- 大型エンジンにも適用可能な大規模解析技術
- 計算機/ソフトウェアの解析速度の向上
- データベース構築・データ解析

将来（10年程度）

- エンジン全体の3次元モデリングによるマルチコンポーネント統合シミュレーション
- 流体解析、熱伝導解析、強度解析を連成して行うマルチフィジックスシミュレータの実現
- AI/機械学習との連携による設計・最適運転条件決定システム構築（デジタルツイン）

- 非定常現象を考慮した高度なガスタービン開発
- トラブル発生時の原因究明への活用、および、その対策立案の高精度化
- 全エンジンコンポーネント統合最適設計

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。

【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

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】

- 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

引き続き産応協は、スーパーコンピューティング技術の普及と利活用促進等に取り組んでいきます。