14:40~16:40(120分)

●分科会B「次世代ものづくり」 パネルディスカッション

# ペタフロップス時代の ものづくりとシミュレーション

~期待と課題~

### パネルディスカッションの目的

■ペタフロップス時代における、ものづくり分野のハイエンドシミュレーション(HPC)に対する具体的な期待を共有するとともに、期待を現実のものにするための課題を明確にし、その解決策を探る。

# パネリストならびにモデレータ

#### ■ パネリスト

#### (基幹産業分野)

- ▶【産】笠俊司(株式会社IHI ものづくり改革推進本部 主幹)
- ▶【学】吉村忍(東京大学大学院工学系研究科教授)

#### (ナノデバイス、新材料分野)

- ▶【産】小林金也(株式会社日立製作所日立研究所主管研究員)
- ▶【産】金田千穂子(株式会社富士通研究所ナノエレクトロニクス研究センター主管研究員)
- ▶【学】大野隆央(物質・材料研究機構 計算科学センター長)

#### ■ モデレータ

▶ 加藤千幸(東京大学生産技術研究所教授)

### パネルディスカッションの進め方

- パネリストのプレゼンプレゼンテーション(各5分、計40分)
  - ➤ 各パネリストからHPCへの期待と課題を発表
- パネリストの主張点を整理・確認(10分)
- HPCに対する期待に関する議論(20分)
- ■期待を実現するための課題に関する議論(40分)
  - ▶ 利用するハードウエアに関する課題
  - > ソフトウェア開発および人材育成に関する課題

### 各パネラーの主張点のまとめ

#### ■ IHI 笠氏

- ➤ 3Dモデルを中核としたものづくりプロセスへの移行は完了
- ▶ ループ型設計からセットベース型設計(設計解全体像の事前把握)へ
- > CAEの利用分野は機構、構造、制御、伝熱、流体、電磁場、成形など
- > HPCへの期待:解析精度の飛躍的向上と多点同時探索の実現
- ▶ 課題:一気通貫解析・マルチフィジックス解析実現

#### ■ 東京大学 吉村教授

- ものづくり分野で次世代スパコンにより始めて解が得られる問題を提示すべき
- ▶ 次世代スパコンはバーチャル実証試験に威力発揮!
  - ✓ 原子力発電プラントの耐震安全性評価
  - ✓ 従来設計(多質点系モデル)の限界を打破
- 要素情報は実験・小規模スパコンによるモデル化: それを次世代スパコンにインテグレート
- > このようなアプローチは他にも展開可能

### 各パネラーの主張点のまとめ(続き)

### ■日立製作所 小林氏

- ▶ ナノデバイスでは界面・薄膜・粒界が製品の主要特性を決定
- ▶ 界面現象の予測にはメゾスケールの解析が不可欠
- > メゾスケールの解析ができれば設計手法が変革
  - ✓ ハードディスクドライブのマルチスケール解析
  - ✓ 有機EL:実験中心の試行錯誤からシミュレーションによる分子設計(高速・高精度分子軌道法)

#### ➤ 期待されるHPCの貢献

- ✓ マルチスケールシミュレーションによる材料探索・創造→実験評価
- ✓ High-k材料など

#### > 課題

- ✓ 解析精度、品質、検証、計測データ、材料ノウハウとの連携、
- ✓ 結果の知識処理、プロセスシミュレーションとの組み合わせ
- ✓ 材料の寿命、信頼性には計測が必要、ロバスト性の確保

### 各パネラーの主張点のまとめ(続き)

#### ■ 富士通研究所 金田氏

- 微細化により原子スケールシミュレーションが必須に
  - ✓ そこら中界面だらけ、結晶の性質からの推定不可
  - ✓ 量子効果の顕在化(トンネル効果、電子の波動性)
  - ✓ 少数の欠陥が信頼性に大きな影響
- ▶ 期待されるHPCの貢献・次世代スパコンに対する期待
  - ✓ モデル化のための現象の理解(従来)→材料探索へ(将来)
  - ✓ 大規模・高精度シミュレーションの「先導」
  - ✓ 大規模・高精度シミュレーションによるモデルの高度化
  - ✓ 産業応用に向けた基盤的部分でインパクトのある成果を期待

#### > 課題

- ✓ 産業界では時間が重要(開発との同期が必要)
- ✓ シミュレーション(投資)効果の定量的評価が必要
- ✓ 製品開発には分野毎のシミュレーションの統合が必要
- ✓ 開発者、実験技術者へのシミュレーションの浸透
- > 産学の連携のあり方
  - ✓ 学には共通基盤技術と人材育成を期待
  - ✓ ものづくりでは分野毎のカスタマイズが必須であり、ここは産業(事業)としての展開が必須

### 各パネラーの主張点のまとめ(続き)

### ■物質・材料研究機構 大野氏

- ▶ ナノデバイス、太陽電池等開発では、ナノレベルの物質の機能解明が必須
- ▶ ナノデバイス開発におけるシミュレーションの貢献のためには大規模化が必須
  - ✓空間スケール、組成の複雑化、時間スケール
- ➤ 国プロ(PHASEの開発)により上記を実践中
- トものづくりの現場でソフトウェアを使うためには
  - ✓ ロバスト性、ユーザーインターフェース、信頼性(情報発信、情報の 共有、ソフトウエアの維持・管理システム)
  - ✓ユーザの問題解決への支援が必要

### HPCの貢献・次世代スパコンへの期待

- 前提条件(ものづくり分野に特有な条件)
  - ▶ 大規模計算1回でものづくりができるわけではない!
  - ▶ シミュレーションの使用が必須である局面(代替手段が無い)と シミュレーション以外にも代替案がある場合がある
  - 後者においてシミュレーションを活用するためには、シミュレーションに対する 投資回収効果を定量化が必須
- 実験・ノウハウによる設計の変革

  - > 改革、変革の意識が必要
- 試作の代替・大規模プラントの評価
  - ▶ 原子カプラントの耐震安全評価、
  - > 自動車の衝突評価、など
- 従来法による設計限界の打破
  - > 新たな設計空間の探索
  - > 新たな方式の創出
- 新材料創出・ナノデバイス創出
  - ▶ 分子スケール解析、メゾスケール解析

### 1. 利用するハードウエアに関する課題

- 前提条件(ものづくり分野に特有な条件)
  - ▶ 大規模計算1回でものづくりができるわけではない!
  - > 手許の計算機による最適化も必須
- 次世代スパコンなど100TFLOPS~10PFLOPS級の計算機が使える環境の整備
  - ▶ 手許の計算機とスパコンとのシームレスな接続が必須(ソフトウエア、データ処理など)
  - ▶ 将来(数年後)の自前ハードウエアによる開発の先導
- 将来的に構築すべきハードウエア環境は?
  - ▶ものづくり分野のHPCハードウエアの全体像の共有が必要

## 2. ソフトウェア開発に関する課題

#### ■ 前提条件

- ▶ 次世代スパコンなど100万コア級の並列度を持つアプリケーションソフトウェアの開発は容易ではない。
- ▶ 産業界でソフトウエアを実用化するためには、カスタマイズ、CAEシステムへの取り込みが必要
- ▶ ソフトウェアの研究開発における産・学のミッション連携のあり方は?
- 戦略・革新・イノベーション基盤ソフトプロジェクトなど、最初から産学が連携してソフトウェアの開発と実証することは一つの解
- 基盤ソフトウェアがあれば、統合ソフトの開発やカスタマイズは産でも可能
- ただし、それだけでは産業界の多様な二一ズに答えることは不可能
- 基盤的アルゴリズムとソフトウエアの基本形開発の部分は学のミッション
  - ▶ 学会の中でアルゴリズムやソフトウェアのスクリーニング
  - プロダクティブなソフトウェアの開発を学のレベルに求めるべきではない
  - 学のソフトウェアシーズ(資産)を産業界に生かすための仕組みが必要
  - ▶ 産でも大規模・超並列ソフトウエアを開発できる人材の育成が必須