

『第2回スーパーコンピューティング・セミナー』参加報告

【日 時】'07年1月25日

【会 場】トスラブ赤坂

【主 催】スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

【講 演】

1. 次世代スパコンの産業利用に向けて

文部科学省 研究振興局 情報課 室長 星野 利彦

【要 旨】

・次世代スパコンプロジェクト

目的：世界最先端・最高性能の次世代スパコンの開発・整備及び利用技術の開発普及
総事業費：1,154億円（平成18年度～平成24年度）

プロジェクトの概要

10^{ペタ}PFlops級（京速）^{けい}スパコンの開発・整備

次世代スパコンを最大限活用するためのソフトウェアの開発・普及

スーパーコンピューティング研究教育拠点の形成

産官学の密接な連携の下、一体的に推進する

・スパコン資源を効率的に利活用する最先端ネットワークの構築

・日本の競争力維持のため、国が直接的に投資して世界トップのスパコンを開発
大学・研究機関、企業のサーバ等に導入

2. デジタルエンジニアリングにおける CAE への期待

石川島播磨重工業(株) 基盤技術研究所 解析技術部 部長 笠 俊司

【要 旨】

・3D-CAD、CAEの活用&ものづくりのデジタルエンジニアリング化 試作代替

・従来：「設計」プロセスでCAEを適用

今後：「設計」＝「概念設計（FOA）」＋「詳細設計（高精度・大規模CAE）」

・企業内CAE専門家は、境界条件の設定、モデル化に専念

（CAEコードの高度化はベンダー等に任せる）

・次世代スパコンへの期待（**バーチャルエンジン技術により、リグ試験をまるごと代替**）

全体（Whole system）解析、過渡作動条件

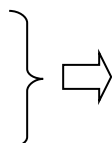
マルチスケール（マクロ～ミクロ～ナノ）・マルチフィジックス（連成）

・バーチャルエンジンコンセプトによる効果

シミュレーションによる最適化

物理現象の理解

バーチャルテスト



・開発期間短縮（-33%）

・開発コスト削減（-50%）

・開発リスク^(*)低減（-100%）

(*)重大設計変更件数

3. バーチャルエンジン 製品企画から運用までの情報技術適用について考える

(独)宇宙航空研究開発機構 研究領域統括 福田 正大

【要 旨】

- ・ '70年代後半から CFD に着手。'85以降は重工各社と協力して 3D 粘性流解析をリード
- ・ 解析例
超音速機周りの流れ場解析、 VTOL エンジン用遷音速斜流圧縮機の流れ解析、ヘリコプタ(ブレード)周りの流れ解析、 超音速燃焼、 ジェットエンジン(ファン+燃焼器+タービン)の CFD シミュレーション
- ・ まとめ：
エンジンの製品企画から運用までの IT 適用が競争力の源泉
<協業の仕組みが重要>
国機関：先行的技術の研究開発
ソフトウェアベンダ：先行技術の実用化(コード化)
エンジンメーカー：先行技術を実践活用

4. マルチフィジックスに基づくバーチャルジェットエンジンの開発

(独)物質・材料研究機構 超耐熱材料センター 研究員 北嶋 具教

【要 旨】

- ・ バーチャルジェットエンジン(コンピュータ上で仮想的に運転)とは；
材料シミュレーション(ナノ~マイクロ・スケール)と流れ・熱移動・構造シミュレーションの融合
- ・ 次世代コンピュータの必要性
Phase-field 法による組織形成計算では実用組成の合金組織を計算可能
実エンジンの飛行条件をモニタリングし、バーチャルエンジンに適用
新部材適用検討、損傷予測
- ・ バーチャルエンジン・シミュレーションシステムの開発体制
流れ・熱移動・構造シミュレーション(JAXA、IHI、東芝)
材料シミュレーション(NIMS、大学、東芝)
統合化(アドバンスソフト、IHI)
実証(NIMS、KHI、JAL、ANA)

5. 革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発

東大)生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター長 教授 加藤 千幸

【要 旨】

- ・ 『革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発』プロジェクト
<目的>
実用的な最先端計算科学シミュレーションソフトの開発・普及 など

< 概要 >

文科省次世代 IT 基盤構築のための研究開発プログラム

事業期間：'05 年～'07 年、事業規模：約 36 億円、研究員 120 名

< 研究開発体制 >

中核拠点：東大)生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター

参加機関：東大)人工物工学研究センター、NIMS、国立医薬品食品衛生研究所、

ほか(民間 160 社超)

・成果(解析事例)紹介

たん白質 医薬品候補物質相互作用解析(結合性評価) エーザイとの共同研究

創薬の高精度スクリーニングに活用

ナノ・シミュレーションによる新材料設計とナノ機能予測

第一原理計算により半導体のエネルギー準位を予測(世界初)

LE-7A ロケットエンジン用インデューサポンプのキャビテーション流れ解析

その他 17 件の先進的解析事例が紹介された

6. 事例紹介:第一原理計算による SiC 熱酸化過程のシミュレーション

電力中央研究所 材料科学研究所 研究員 大沼 敏治

< 計算 : SiO₂/SiC(0001)界面の界面準位分布の第一原理計算 >

【計算目的】SiC/SiO₂界面の構造が界面準位に及ぼす影響を明らかにする

【計算結果のまとめ】

- ・Si ダングリングボンドにより界面準位は SiO₂/4H-SiC 界面と SiO₂/6H-SiC 界面共に価電子帯端より 1.7eV 上に現れた
- ・Si ダングリングボンド、C ダングリングボンド共に水素原子終端することにより界面準位は消失した
- ・C クラスタモデルでは界面準位は伝導帯端のみならず価電子帯端にも現れた

< 計算 : SiO₂/4H-SiC(0001)界面における熱酸化過程の第一原理分子動力学シミュレーション(地球シミュレータ使用) >

【計算結果のまとめ】

- ・O₂分子は SiO₂中の Si 原子や界面 Si 原子と結合、乖離する
- ・余剰となった O 原子により SiC 界面の Si 原子は酸化され SiO₂層中へと移動する
- ・酸化途上において界面トラップ形成の原因の候補である炭素クラスタが形成される
- ・O₂分子が炭素クラスタと反応することにより CO 分子、C₂O 分子が生成された
- ・地球シミュレータを使うにあたって、チューニング(並列計算の効率化)等に約 1 年を費やした。

以 上

神鋼リサーチ株式会社 江口 隆