

HPCI計画推進委員会 ポスト「京」の利活用促進・成果創出加速に関するWG発表資料

ポスト「京」の利活用促進に向けた 産業界からの提言

2018年12月18日

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)

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
 - 産業界が利用するソフトウェア環境の拡充（エコシステム構築を含む）等
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
 - 「重点課題」アプリの産業実課題への適用性による評価
 - 「ポスト重点課題」への課題設定段階での早期参画 等
 - ◆ ポスト「京」および後継スパコンの整備に大きく期待
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
 - 実証利用・個別利用の枠組み、産業利用課題の選定基準は継続
 - 新規利用拡大・普遍的課題への挑戦等のため、さらに新しいカテゴリーの導入を期待
 - ◆ 早期の成果創出に向け、利用上の課題洗出しのため、産業界からもアーリーアクセスが必要

1. 産業利用拡大に向けた利用環境整備・利用者支援SCP

■ 会員企業の「京」を含むHPCI利活用における主な課題

◆ 産応協提言「HPCIの産業利活用促進に向けて (I)」*¹より

- ① 産業界が利用するソフトウェアの環境整備
(主に商用ソフト、OSS)
- ② HPCI情報セキュリティの現状理解と評価
(リスクとメリットが判断できる情報の提供)
- ③ ポスト「京」時代に向けた周辺環境の拡充
(大規模データハンドリング)

登録機関およびHPCI構成機関
に整備・支援の拡充を期待

→ ②、③についてはHPCI構成
機関との情報交換会(RIST主
催)を実施(2018年)し議論中

◆ 産応協調査報告「HPCシミュレーションに関する海外動向調査書」*²より

- OSS開発プロジェクトにおける、利用支援等まで視野に入れたエコシステム構築

(*1: 付録1および付録2、*2: 付録3)

■ ポスト「京」時代においても、産業界のニーズに応える利用環境を整備し、利用者を支援するためのさらなる体制強化・取り組みを期待

2. 先端的ソフトウェアへの期待 (材料・化学分野の例) CSCP

■ 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

「ポスト重点課題」との連携強化

2. 先端的ソフトウェアへの期待（建設・機械分野の例）CSCP

■ 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
 - ・新しい対災害設計法の確立
- 将来（10年程度）

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

2. 産業界の問題解決に資する先端的ソフトウェアの実現CP

■ 「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検討・具体化
- ◆ 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 (課題設定段階の早期参画)
 - 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

■ 一般利用枠（産業利用課題）の選定と資源配分

- ◆ 実証利用・個別利用の枠組みの継続
- ◆ 産業界からの応募が選定される施策の継続
 - 産業利用課題の、一般課題と異なる選定基準の継続
 - 産業利用課題のトライアル・ユースの継続。新規の利用をさらに促すために、若手人材育成課題と類似した「新規産業利用課題」の設定等の施策の検討
 - 業界等の共通課題に取り組むためのコンソーシアム型の公募は有効。さらに、例えば産業界における戦略的かつ普遍的なテーマに挑戦する「戦略的産業利用枠」等の新しいカテゴリーの設定により、よりいっそうの産業競争力強化を期待
 - 「産業利用枠」のあり方については採択実績を踏まえ再検証

■ ポスト「京」へのアーリーアクセス

- ◆ 「京」利用初期に、利用上の課題(不慣れ、準備不足等を含む)が多発したことを踏まえて、ポスト「京」の成果早期創出に向け、アーリーアクセスによる早い段階での課題洗い出しが必要
- ◆ 具体的な検証項目等について、会員企業の意見をとりまとめ中