

21世紀のものづくりとシミュレーション

東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター
センター長・教授 加藤 千幸



1 はじめに

自然界で起こる現象を支配する方程式は解析的に解ける場合は限られているが、解析的には解けない場合でも計算機を使って近似解を求めることは可能である。差分法や有限要素法などにより支配方程式の近似解を求め、自然現象を仮想的に再現する手法である計算科学シミュレーション（以下、単にシミュレーションと記す）は、ものづくり分野を始め多くの理学・工学分野において、理論・実験に次ぐ第3の方法論として期待が集まっており、また21世紀には大きな進展が期待されている。この理由は、数値解析手法の進歩もさることながら、計算機の性能が3年で約10倍、10年で約1000倍という割合で急激に向上しているからである。

現在、(独)理化学研究所が主体となり、兵庫県神戸市のポートアイランドで、「次世代スーパーコンピュータ」の開発が進められている。このコンピュータは、世界最速のCPUを10万個程度搭載し、ピーク性能は、10 PFLOPS (Peta Floating Points Operations per Second, 1 PFLOPSは、1秒間に 10^{15} 回の浮動小数点演算を実行する演算能力)程度になるものと予想され、開発目標の1つに、稼働開始時点で世界最速のスーパーコンピュータとなることを掲げている¹⁾。「スーパーコンピューティング」は日本の基幹科学技術の1つと位置づけられており、前記のスパコン開発プロジェクトは、2002年に稼働を開始し、数年の間、世界最速を誇っていた、(独)海洋研究開発機構の地球シミュレータ(ピーク性能は40 TFLOPS (Tera Floating Points Operations per Second), 1 TFLOPSは1秒間に 10^{12} 回の浮動小数点演算を実行する演算能力)の開発以来の大型国家プロジェクトである。

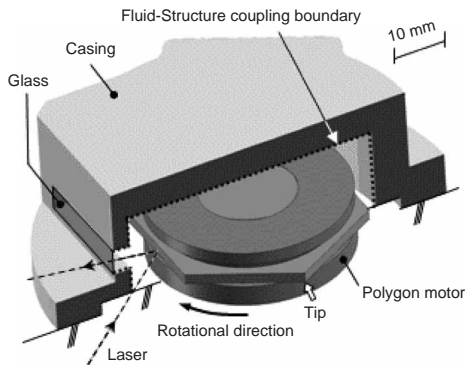
このように、ハイエンド計算機のピーク性能は数年後には間違いなくベタ・フロップスの時代を迎え、さらにそれから数年たつと、ミドルレンジの計算機、つまり研究者や技術者が日常業務の中で使用する計算機もベタ・フロップスの性能を有するようになることが期待される。このような状況を踏まえ、本稿は今後のものづくり分野におけるシミュレーションに対する期待と課題に関して

筆者の私見を纏(まと)めたものである。

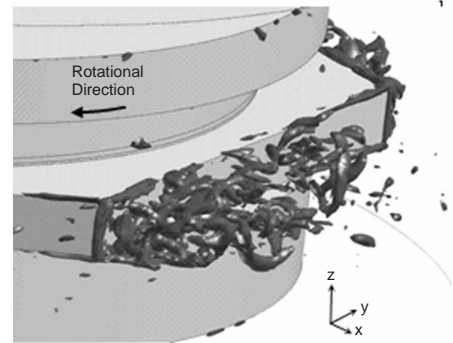
2 これからのシミュレーションに関する期待

ものづくり分野において、これからのシミュレーションに期待される貢献として主要なものは、以下の3つである。まず、研究開発や設計の初期の段階において、基本的な方式や原理を考案したり、あるいは材料を探索したり新たな材料を開発したりする場合にシミュレーションを活用し、従来は達成できなかった高性能を実現したり、革新的な材料を開発したりすることが考えられる。次に、所定の機能を実現するための方式や材料などが決定された後、性能や信頼性、重さ、大きさ、コストなど多数の評価関数を考慮して、種々のパラメータを決定する詳細設計のプロセスにおいてシミュレーションを活用し、設計プロセスに要する時間を短縮したり、最適な設計パラメータの選択を可能にしたりすることが挙げられる。最後に、詳細設計が完了すると実際に製品を試作し、期待どおりの性能を発揮するか、あるいは振動や騒音などの問題が無いかなどを確認するために試作を行うことが多いが、この試作の代替としてシミュレーションを利用し、試作に要する期間やコストを削減することが期待される。さらに、基本設計、詳細設計、試作評価のすべての設計・開発プロセスに統合的なデータベースに基づいたシミュレーションを活用することにより、これらの各設計プロセスをオーバーラップさせながら同時並行的に進行させることが可能になれば、全体の設計・開発期間とコストの大幅な削減が期待される。

たとえば、第1図は非定常の流れ解析を利用した、ポリゴンモータから発生する流体・振動音の解析モデルである²⁾。ポリゴンモータは、レーザープリンタや複写機の主要部品であり、回転する多面体ミラーがレーザー光を反射し、感光体に潜像を形成する。ファンやポンプの動翼通過音と同様に、ポリゴンモータも回転基本周波数 nz (n : 毎秒回転数, z : ミラー面数)とその高調波成分のピーク騒音が卓越するために、音圧レベルは低くても耳障りな音質であり、低減が望まれている。ここでは、ポ



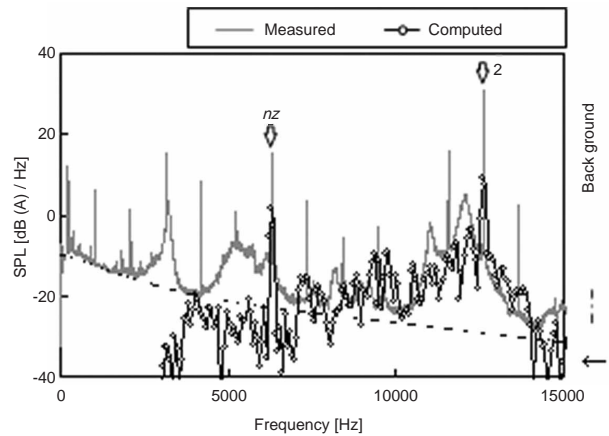
第1図 ポリゴンモータの流体振動音解析モデル²⁾



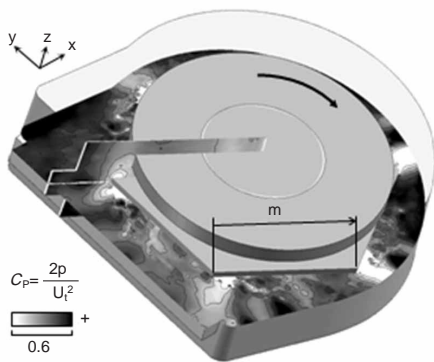
第3図 ミラーまわりの瞬時の渦の構造

リゴンモータから騒音が発生する詳細なメカニズムを解明することと騒音低減を図ることを目的として非定常流れ計算を実施した。計算に用いた計算格子は600万点程度であり、32 CPUのPCクラスターを用いて計算を実施した。

計算された瞬時の圧力分布とミラーまわりの渦の構造をそれぞれ第2図、第3図に示す。ミラーの角部からはく離れた流れが乱流に遷移し、ケーシング内圧力変動の原因となっていることがわかる。流れ計算により求めたケーシング内面における圧力変動を荷重変動に変換し、陽的有限要素法を用いてケーシング内を弾性波として伝播する音を解析した³⁾。さらに、本研究では市販の音響解析ソフトウェアSYSNOISE[®](注1)を用いて、ケーシングから放射される音を計算した。上方1 mの地点における騒音の周波数スペクトルを実験値と比較した結果を、第4図に示す。予測された騒音スペクトルは実験値と定量的に一致している。また、この計算により、ピーク音が卓越するのは、流体加振の周波数とケーシング上面の膜振動の周波数が近いことが原因であることが明らかとなり、ケ



第4図 上方における騒音スペクトルの比較



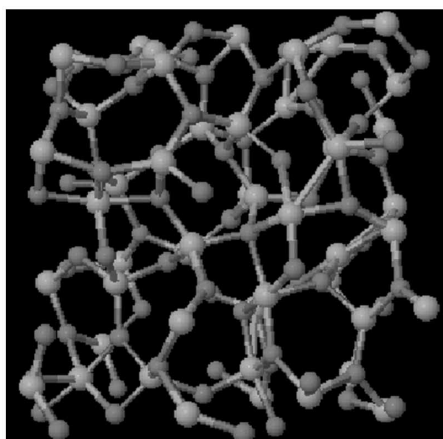
第2図 ミラーまわりの瞬時の圧力分布

ーシング形状を改良することにより、ピーク性騒音を3 dB程度低減することができた。

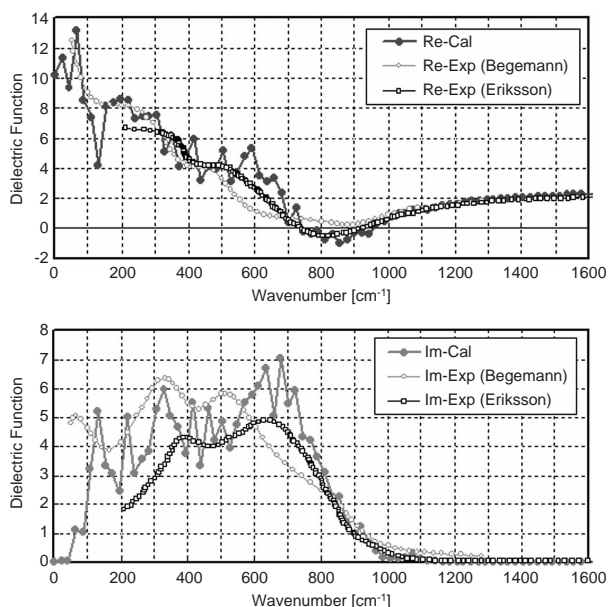
シミュレーションに対する期待は流体設計や構造設計だけでなく、たとえば材料の探査や新規材料の開発に関しても大きな期待が集まっている。特に、ナノ物質・ナノ構造は今後の工学にさまざまな革新をもたらす可能性を秘めており、重要な研究分野であるが、物質のスケールが小さくなると連続体としての材料特性の評価だけでは不十分であり、電子状態まで考慮して材料の特性や機能を評価する必要がある。しかし、ナノスケールの物質の特性を実験的に正確に評価することは極めて困難である。このため、材料の電子状態に基づき機能や特性を評価することができる、量子力学（第一原理計算）に立脚したナノシミュレーションには新材料の探査・開発ツールとして大きな期待が寄せられている。

大規模な第一原理計算を利用して、次世代半導体用ゲート絶縁膜の候補材料の誘電率を解析した結果を第5図、および第6図に示す^{4), 5)}。現在実用されている最新の半導体のゲート長は40 nm程度であるが、20 nm程度のゲート長を有した半導体が研究開発されている。デバイス構造

(注1) 米国 LMS International 社の登録商標



第5図 アモルファス Al_2O_3 の誘電率計算モデル^{4),5)}



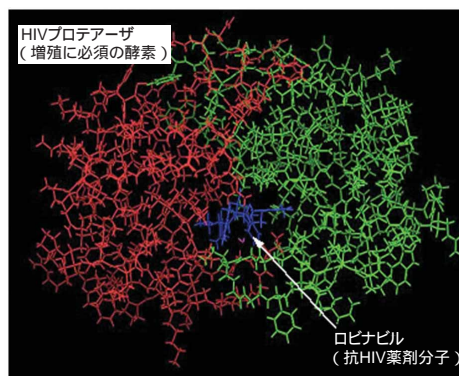
第6図 第一原理計算で予測された誘電率と実測値との比較
(上:実部,下:虚部)

が小さくなると、トンネル効果によるリーク電流が無視できなくなり、消費電力や発熱量が増大してしまう。そこで、高誘電率をもったゲート絶縁膜 (High-kゲート膜) の開発が重要な課題となっている。本シミュレーションは、High-kゲート膜の候補材料の1つであるアモルファス構造のアルミナ (Al_2O_3) の誘電率を第一原理計算により予測し、実測値と比較したものであるが、このような計算により誘電率が定量的に予測できることが明らかとなった。第一原理計算は、次世代材料の探索に実際に利用され始めている。

生命科学分野、特に薬の開発に関しても、今後のシミュレーションの貢献に対して大きな期待が集まっている。たとえば、タンパク質の量子化学計算は創薬設計に本質

的な変革をもたらす可能性を秘めている。タンパク質は数十から数千のアミノ酸残基から構成された巨大分子であり、その機能の解析には古典力学的な手法や重要な部分のみを量子力学的に解析し、残りの部分は古典力学により解析する手法 (QM/MM法^(注2)) がこれまでは主として用いられていた。しかしながら、巨大分子であるタンパク質をモノマーやダイマーとよばれるアミノ酸残基1つあるいは2つからなるフラグメントに分割し、すべてのフラグメントの組み合わせに対して軌道計算をすることにより、タンパク質分子全体の軌道を一度に扱うことなく、数千kcal/molという高精度でエネルギー計算が可能なFMO法 (Fragment Molecular Orbital Method) とよばれる手法が近年開発された。これにより、数百残基からなるタンパク質と薬の候補となる低分子化合物の結合性を数分というオーダーで予測できるようになっている。

第7図は、FMO法によりHIVウイルスと抗HIV製剤分子との相互作用を解析したものである^{6),7)}。この解析は原子総数3225、基底総数17423の量子化学計算であるが、64 CPUから構成されるPCクラスターを用いれば14時間程度で計算できる。また、現在のスーパーコンピュータを用いれば数分で計算できることが確認されており、今後計算機のさらなる高速化と計算手法の改良などにより、このような量子化学計算は薬の候補化合物のスクリーニング・最適化ツールとして活用されることが期待されている。



第7図 HIVウイルスと医薬品候補化合物の量子化学計算^{6),7)}

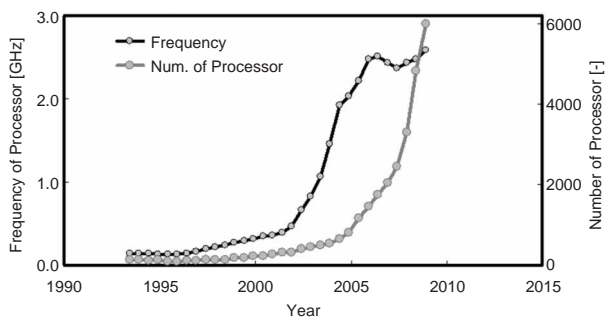
(注2) QM/MM法: Quantum Mechanics / Molecular Mechanics Method

3 今後のシミュレーションの課題

前節では、21世紀においてはものづくりのさまざまな分野で計算科学シミュレーションの大きな貢献が期待されていることを、具体例とともに示した。しかし、今後シミュレーションをさらに発展させ、このような期待に応えていくために解決しなければならない課題も山積している。最後に、本節ではそれらの課題のうち、筆者が特に重要だと考える点を述べる。

3.1 計算機アーキテクチャに適合したソフトウェア開発

これからの計算機の性能を引き出すためには、アプリケーション・ソフトウェアには極めて高い並列性を有することが要求される。この理由は、第8図に示すように、計算機の動作周波数の向上は2005年あたりでほぼ頭打ちになっており、現在の計算機の性能向上はもっぱらプロセッサ数の増加によりもたらされているためである。前述のように次世代スーパーコンピュータのCPU数は10万程度になるものと予想されており、このような計算機の性能をフルに発揮するためには、アプリケーション・ソフトウェアには非並列部の割合が 10^{-5} 以下といった、極めて高い並列性が要求される。



第8図 計算機の基本周波数の向上とプロセッサ数の増加
(出典：<http://www.top500.org/>)

さらに、次々世代の計算機のCPUは数百以上のコアを有するいわゆるメニーコア化が進展するものと予想されており、このような計算機の性能を引き出すためには、CPU間の並列計算の実現に加えて、CPU内の多数のコアを同時に稼働させることが必須となり、再帰性の無い長大なループ計算が計算の大部分を占めなければならない。

上記のようなCPU内外の並列計算の実現と併せて、アプリケーション・ソフトウェアがこれからの計算機の性能を引き出すためには、いわゆるメモリー・ウォールの障壁を乗り越える必要がある。つまり、演算コアの性能

を引き出す上での最大の（本質的な）課題は、メモリーバスの能力の限界から、計算に必要なデータがメモリーから演算コアに供給できないことである。たとえば、1980年代のベクトル計算機のメモリーバスはCPUが1回演算する間に8バイトのデータをCPUに供給する能力を有していたが、現在最速のベクトル計算機でもこの能力が2.5バイトに低下しており、またスカラー計算機においてはこの数値は0.2バイトから0.5バイト程度しかない。今後、ハードウェア的にいかにしてデータ供給能力を維持・向上させるかという課題と併せて、アプリケーション・ソフトウェア側でもデータ転送量ができるだけ小さい計算アルゴリズムの開発が重要となる。

3.2 解析システムから設計システムへ

単に計算プログラムだけがあっても、製品設計に生かすことはできない。高度な計算科学シミュレーションをものづくり設計に生かすためには、設計データを用いて迅速に計算を実行することを可能にする前処理プロセスや、計算結果を効率的に設計にフィードバックするための後処理プロセス、さらに設計の最適化を支援する機能などを有した、次世代のCAE (Computer Aided Engineering) システムを構築する必要がある。たとえば、流体解析を例にとれば、数年後には数百億点の計算格子を用いた直接計算が実用的なレベルで可能になることが予想されるが、ユーザーが大規模な計算格子を意識しなくとも解析が実行できるようなシステムがないと設計では使い物にはならない。このようなシステムは従来のプリ・ポスト処理の延長では実現することは不可能であり、ユーザーが接するプリの情報にCAD (Computer Aided Design) データ、あるいは比較的小規模な計算格子であり、またポストの情報は高度に集約された流れ場の情報とすべきであり、この間のすべての処理は超並列計算により実現することが重要である。つまり、流れ解析システムのパラダイムシフトが必要となる。また、材料定数などのデータベースを完備したり、大規模解析の実行例などが再利用できるようにしたりすることにより、設計システムとしてのユーザーの使い勝手を向上させることがきわめて重要となる。

前記のように、数値解析の中核プログラムの開発には今後大きな困難を伴うことが予想され、このための共通基盤的なソフトウェアの研究開発は大学など研究機関の重要なミッションである。このような基盤的なシミュレーション・ソフトウェアをベースとしてこれからの設計システムを構築していくことが望ましいが、このためには産学官の強力な連携体制の構築が必須となる。

3.3 物理モデルの高度化，新規アルゴリズムの開発

今後の計算機の発達を考えると，さまざまな分野で大規模，高精度な解析が可能となることが期待されるわけであるが，計算機能力の向上に任せておけば物理モデルの高度化が不要となるわけではない。たとえば，筆者の専門である流れの解析分野では乱流自体に関してはほぼ予測の目処（めど）がたっており，モデルをこれ以上高度化しなければならないニーズはない。しかしながら，キャビテーション流れや燃焼流れのように，乱流の渦スケールよりもはるかに小さな空間スケール，時間スケールをもったマルチスケール現象に関しては，いくら計算機が速くなっても分子スケールの運動を直接解析することは不可能であり，これらの現象のより定量的な予測のためにはモデルのさらなる高度化が必要である。また，流体・構造・音響現象などのマルチフィジックス現象に関しては，それぞれの現象の解析手法は確立されているが，連成現象の高精度で効率的な数値解析手法の研究開発が必要である。さらに，これからの計算機アーキテクチャに合致したシミュレーションの方法論やそれを具現化する計算アルゴリズムの研究開発も欠かしてはならない。一般に，シミュレーションの方法論や計算アルゴリズムが提唱されてから，種々の基本的問題において方法論やアルゴリズムが検証され，さらに実用的な問題に関してその有効性が実証されるまでには相当な年月が掛かる。したがって，次々世代の計算機アーキテクチャを念頭に，このような研究開発にも早期に取り掛かる必要がある。

3.4 人材育成と利用技術の高度化

最後の課題は人材の育成と利用技術の高度化である。一般に，シミュレーションが高度になればなるほど，シミュレーションは設計の現場からは離れていく傾向がある。高度なシミュレーションを使いこなして，製品設計に生かすためには，物理現象の本質を理解し，先端的シミュレーションの活用方法に習熟した人材の育成が必須となる。筆者らは早くからこの重要性を認識し，産学連携体制の下，HPC（High Performance Computing）産業利用スクールを開講している。参考までに，最近実施した実践コースの様子を第9図に示すが，このコースでは先端的な大規模解析のモデル作成，解析の実行，解析の後処理など一連のプロセスを設計者自身が実施できるように企画したものである。本スクールは大変好評の内に終了し，このような人材育成事業の重要性を再認識した次第である。



第9図 HPC産業利用スクールの様子（東京大学生産技術研究所，同情報基盤センター，スーパーコンピューティング技術産業応用協議会，海洋研究開発機構の合同開催）

4 おわりに

計算機のピーク性能は10年で1000倍という速度で向上しており，数年後には間違いなく計算機の性能は10ペタ・フロップス（1秒間に1京回の演算をする能力）の時代に突入する。このような中，ものづくりに関するさまざまな分野において，計算科学シミュレーションの貢献に大きな期待が集まっている。しかしながら，シミュレーションの利活用技術をさらに発展させ，このような期待を現実のものとし，産業競争力の強化に資するためには解決すべき課題も山積している。そのような課題の解決のためには，シミュレーションを高度に利用したこれからのものづくりのあり方に関して産学官が将来ビジョンを共有し，その実現のための課題に関して共通の認識をもつことが重要となる。本稿が，そのような議論が開始される1つの契機となれば幸いである。

本稿に示した計算事例は，文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「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」で開発された汎用LES（Large Eddy Simulation）解析プログラムFrontFlow/blue（FFB），第一原理計算プログラムPHASEシステム，および，FMO法による量子化学計算プログラムABINIT-MPを使用して計算したものである。また，大規模解析を実施するために，（独）海洋研究開発機構の共同研究プロジェクトならびに東京大学と（独）海洋研究開発機構との共同研究において，地球シミュレータの計算機資源を使用させて頂いた。それぞれここに記して感謝の意を表す。

参考文献

- 1) 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム2009, 東京 (2009-10).
- 2) 秋山修 他: ポリゴンモーターから発生する流体騒音の数値解析 日本機械学会論文集B編 73, No.725, pp.67-75 (2007).
- 3) Y. Jiang, et al. : Quantitative evaluations of flow-induced structural vibration and noise in turbo-machinery by full-scale weak-coupled simulation. Journal of Fluid and Structures 23, pp.531-544 (2007).
- 4) 濱田智之 他: 第一原理計算による誘電応答解析ソフトウェアの開発 極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性 (第9回研究会) 75, 応用物理学会 (2004).
- 5) H. Momida, et al. : Theoretical study on dielectric response of amorphous alumina. Physical Review B. 73, 054108 (2006).
- 6) Y. Mochizuki, et al. : Large scale calculations with fragment molecular orbital scheme. Chemical Physics Letters 396, pp.473-479 (2004).
- 7) Y. Mochizuki, et al. : Configuration interaction singles method with multilayer fragment molecular orbital scheme. Chemical Physics Letters 406, pp.283-288 (2005).

《プロフィール》

加藤 千幸 (かとう ちさち)

1982	東京大学 工学部機械工学科卒業
1984	同大学院 工学系研究科機械工学専攻 修士課程修了
1984-1998	(株)日立製作所入社 機械研究所に配属, 乱流の数値解析に関する研究に従事
1988-1989	米国スタンフォード大学 留学 Master of Science取得
1995	東京大学から博士(工学)の学位授与
1999-2003	同大学 生産技術研究所 助教授
2003-現在	同大学 生産技術研究所 教授
2003-2006	文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」研究代表者
2003-2008	同大学 生産技術研究所 計算科学技術連携研究センター センター長
2005-2008	文部科学省 次世代IT基盤構築のための研究開発「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」研究代表者
2008-2009	同大学 生産技術研究所 副所長
2008-現在	革新的シミュレーション研究センター センター長
2008-現在	文部科学省 次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション創出の基盤となるシミュレーションソフトウェアの研究開発」研究代表者
2009-現在	独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 設立準備室 研究主幹兼務

日本学術会議特任連携会員, 日本機械学会フェロー, ターボ機械協会理事, 日本ガスタービン学会理事, 日本流体力学会評議委員

専門技術分野:

マイクロエネルギー変換機器の研究, 非定常乱流と空力騒音の予測と制御, 非定常乱流の数値予測とその工学的応用, 他

主な著書:

熱設計技術 / 解析ハンドブック (ミマツコーポレーション, 2008)

ターボ機械 - 入門編 - (新改訂版) 第二章ターボ機械の構成要素と内部流れ (日本工業出版, 2005)

主な編書:

機械工学便覧 基礎編 1欄 機械工学総論 (丸善(株), 2005)