

Simulation

Medical Treatment, Health

Society 5.0

Big Data

AL

Environment, Energy

Disaster Prevention



① 13:00~17:30

神商ホール(神戸商工会議所) 会 場

神戸商工会議所会館内 3F

企業の経営者層・技術部門幹部、 対象 企業の研究者・技術者等

100名 定員

HPからお申し込みください

【主催】 公益財団法人計算科学振興財団 (FOCUS)、神戸商工会議所 【共催】 兵庫県、神戸市

【後援】文部科学省、経済産業省、

国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター、

一般財団法人高度情報科学技術研究機構、一般社団法人HPCIコンソーシアム、 一般社団法人日本経済団体連合会、日本商工会議所、

公益社団法人関西経済連合会、東京大学生産技術研究所、

公益財団法人 ひょうご科学技術協会、

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、 特定非営利活動法人CAE懇話会、

特定非営利活動法人バイオグリッドセンター関西、

一般社団法人オープンCAE学会

「スーパーシミュレーションの挑戦 間の時空感覚を超越する~」 氏 吉村

プログラム

第1部

開会挨拶・来賓挨拶

基調講演

「スーパーシミュレーションの挑戦

~人間の時空感覚を超越する~」

東京大学大学院 工学系研究科 システム創成学専攻

教授 吉村忍氏

特別講演

「新たな価値を創出するシミュレーション技術

~環境とくらしで貢献~」

パナソニックホールディングス株式会社 プロダクト解析センター

部長 太田智浩氏

第2部 (FOCUS 事例集から)

事例講演1

「量子化学計算による IR スペクトルの予測

~新材料の開発を目指して~」

バンドー化学株式会社 伝動技術研究所 材料開発グループ

森本 莉恵 氏

事例講演2

「ナノシミュレーションによるアルミニウム合金 腐食データベースの構築

~腐食特性解明への富岳活用の取り組み~」

株式会社コベルコ科研 技術本部 計算科学センター 狩野 恒一 氏

講演者との名刺交換とフリ─ディスカッション



計算科学振興財団 (FOCUS) は、スーパーコンピュータ (スパコン) の産業利用促進を図るため、産学官の連携協力により設立されました。

FOCUS の活動拠点がある神戸ポートアイランドには、世界トップクラスの性能を有する「富岳」をはじめとする 5 台のスパコンと計算科学の関係機関が集積する全国に例をみない「シミュレーション・クラスター」が形成されています。

FOCUS は、その関係機関と連携して、産業界におけるスパコンの利用拡大とシミュレーション技術の高度化支援などを推進しています。

FOCUS が運営する産業利用向け「FOCUS スパコン」は、2011 年の利用サービス開始 以来、11 年連続で利用法人数が増加し、累計で 400 法人を超えるなどスパコン利用の拡大 と、「富岳」や大学・研究機関が有するスパコンへのステップアップ利用に貢献しています。

昨今の Society5.0 やカーボンニュートラルの実現など新しい時代の要請に合わせて、スパコンの活用範囲は拡がっています。企業においては、我国が有する世界トップレベルの計算機基盤やビッグデータ・AI 技術、計算科学の手法を最大限に活用して、生産性の向上、競争力の強化、CO₂削減及び省エネ推進など、企業の改革や発展、更には SDG's 達成への貢献につないでいくことが極めて重要です。

本セミナーでは、経営者・技術部門の管理者層から実践技術者の皆様方に、スパコンと計算科学の重要性を実感していただけるよう、新しい技術活用で生み出されるイノベーションの動向や具体的な先進事例をご紹介します。今回は足下のコロナ収束傾向の状況及び対面での情報交換の有益性を鑑みまして、会場オンサイトのみの開催と致します。このセミナーを契機に、企業の皆様方が、より一層スパコン利用の実践にチャレンジしていただけることを祈念いたします。

最後に、今回の開催にご協力ご支援いただきました関係各位に改めて感謝申し上げます。

公益財団法人 計算科学振興財団 理事長 秋山 喜久

基調講演

スーパーシミュレーションの挑戦

~人間の時空感覚を超越する~

吉村忍

東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻・教授



講演概要

2050年のカーボンニュートラル(CN)社会実現に向けては、脱炭素化エネルギー源の研究開発や、運輸、生産などの様々な人間活動における脱炭素化の取り組みの加速が必須であり、新たなイノベーションも要求される。本講演では、CN 社会における主力電源の一つとして大きな期待を集める大規模洋上風力発電の研究・開発・運用・低コスト化において、富岳の果たす役割について事例を交えてわかりやすく説明する。具体的には、本講演者らが富岳での活用を念頭に研究開発を進めてきたソフトウェア群(ADVENTURE、FFB、REVOCAP_Coupler/ADVENTURE_Coupler)を連携活用する、マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション(スーパーシミュレーション)について、基本アルゴリズム、ソフトウェア構造を解説した後に、NREL5MW 風車の乱流解析、動的応答解析、疲労損傷解析を示す。



特別講演

新たな価値を創出するシミュレーション技術 ~環境とくらしで貢献~

太田 智浩

パナソニック ホールディングス株式会社 プロダクト解析センター 部長



講演概要

温暖化対策のパリ協定や SDGs(持続可能な開発目標)など環境問題は重点課題である。また国が目指すべき未来社会としてサイバーとフィジカル空間を高度に融合させ、人中心の社会である Soiety 5.0 を提唱している。これら背景のもと、当社では「地球環境問題の解決」と「より快適・健康・安全なくらし」の2つの領域において研究開発を重点的に取り組んでおり、シミュレーションはコア技術の1つとなっている。

本講演では材料・デバイス、空間、およびヒトをベースとしたシミュレーションの活用事例を紹介し、今後の課題について述べる。



事例講演1

量子化学計算による IR スペクトルの予測

~新材料の開発を目指して~

森本 莉恵

バンドー化学株式会社 伝動技術研究所 材料開発グループ



講演概要

近年、弊社製品に対する環境安定性、長寿命化のニーズが高まっており、主要な取扱い材料であるゴム材料の特性として、耐寒性、耐熱性、耐オゾン性の向上などが求められています。そのニーズに応えるゴム種としてエチレン・プロピレン・ジェンゴム(EPDM)がありますが、一方で他材料との接着性に劣るという問題点がありました。その問題点を克服するために改質処理を検討しており、改質率や構造の確認に実測による赤外分光法(IR)を用いていますが、標準物質と比較する方法では構造解析の範囲に限界がありました。そのため、量子化学計算を用いて、化学構造からIRスペクトルを予測し、構造解析を実施しました。

本講演では、量子化学計算の内容、異なる化学構造に基づいた IR スペクトルの予測結果、実測値との比較による構造推定結果、これらの結果から、改質処理後の構造推定が可能となり、改良の指針が得られたことなどについて紹介します。



事例講演2

ナノシミュレーションによる アルミニウム合金腐食データベースの構築

~腐食特性解明への富岳活用の取り組み~



株式会社コベルコ科研 技術本部 計算科学センター



講演概要

インフラの劣化に伴う構造物補修は社会的課題となっており、金属材料の腐食は構造物劣化の主要因の一つとなっています。しかし腐食現象は様々な要因に起因しており、実験的なアプローチでは系統的な分析が難しいという現状があります。一方で近年の計算機科学および機械学習手法の発展に伴い、計算科学による材料探索のDX化が急速に進められているという背景が存在します。

本課題は「富岳」産業課題の取り組みであり、アルミニウム合金を対象として計算科学と機械 学習手法を組み合わせて腐食特性データベースを構築することを目的としております。腐食現 象は金属表面で起きるナノスケールの化学反応です。この特性のデータベース構築のためには ナノスケールの系統的な計算が求められます。このことから大型計算機の利活用は重要な要素 です。

講演ではその他事例も交えながら、本課題を通じたマテリアルズインフォマティクスのコンセプト、腐食現象における計算科学の適用事例をご紹介いたします。

