

わが国を支えるシミュレーション技術と産学連携

Inovative Simulation Technology Based on Industry-academia Collaboration

中 村 道 治*

Michiharu NAKAMURA

1. 緒 言

日本が諸外国に対して産業競争力を強化していくためには製品開発力及び物作り技術の充実、強化が必要である。その中で、シミュレーション技術は計算機能力の向上、グリッド等の分散計算環境の高度化に伴い、製造業活性化及び知的財産の創生にとって有力な武器になりつつある。

ここでは、産業界のシミュレーション適用事例、米国の取り組み、スーパーコンピューティングの問題点、及び重点分野におけるシミュレーションの動向について言及し、最後に今後のシミュレーション技術のあり方と産学連携について述べる。なお、本論説は平成 14 年 12 月 12 日に開催された、文科省 IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」シンポジウムにて講演した内容をまとめたものである。

2. 産業界のシミュレーション

産業界においては古くからシミュレーション技術を活用してきた。図 1 に産業界でのシミュレーション適用分野例を示す。流体力学、量子力学、熱力学、電子工学等々の理論および実験結果を活用して、シミュレーション技術を構築し、それを色々な分野に応用している。その中でいくつ

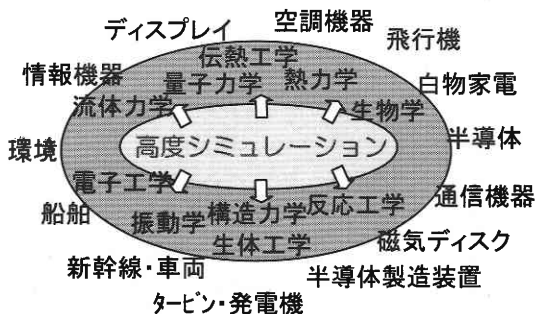


図 1 産業界でのシミュレーション適用分野

かのシミュレーションを適用した事例を紹介する。

半導体では銅配線の線幅が狭くなると、配線抵抗を減らそうとする。銅はシリコン上に簡単に接着しないため、その間に入れる膜や添加すべき材料を検討する必要がある。図 2 は、材料実験に頼らないで計算によって銅とシリコンの間に入れる膜の設計を行った例である¹⁾。100 万以上の計算格子を用いた大規模流体解析により、毎時 200 キロ以上のスピードで走行する新幹線のパンタグラフの騒音の解析を行った例も報告されている^{2,3)}。図 3 は磁気ディスク装置で問題となるフラッタ現象を LES (Large Eddy Simulation) で解析した例である。媒体と磁気ヘッド間での圧力変動がある程度予測できるレベルにきている⁴⁾。

他に、プラズマディスプレイの開発で日本が先頭を切れた理由の 1 つは、放電発光特性のシミュレーション技術を駆使した点にある。また、半導体エッチング装置内で発生するプラズマプロセスを予測するために、分子反応、電磁場、流体が相互作用して場を統合した解析が行われており、膜生成設計にシミュレーションが有効に活用されている^{5,6)}。さらに、自動車に搭載している多数のマイコンが発するノイズの低減にもノイズ電流分布を予測できるシミュレーションが使われている⁷⁾。

以上に示したのは私の近辺で行われてきた例である。それ以外の分野においても非常に大規模な計算が、現場や設

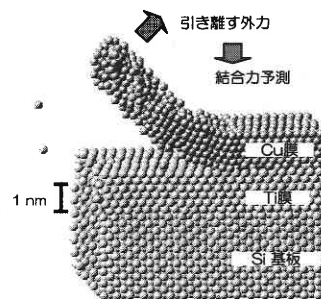
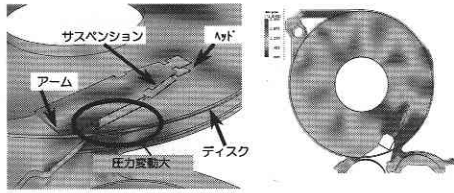


図 2 半導体デバイス配線用銅薄膜の界面強さ予測シミュレーション

* (社) 日本経済団体連合会産業技術委員会



100万規模の計算格子

図3 磁気ディスク圧力変動解析

計レベルで盛んに行われるようになってきた。

3. シミュレーションにおける方法論の変革

このような状況の中、日本のハイエンド・コンピューティングや高度シミュレーションをもう一度見直してみると、産業界で新たに取り組むべき課題が見えてくる。1つは、シミュレーションの方法論がここに来て変わりつつある事。もう1つは、ナノやバイオの新しい分野の取り組みが求められている事である。これから10~20年、日本が科学技術立国あるいは製造立国として製造産業を活性化していくためのスーパーコンピューティングの役割は大きく、実験が難しい分野における解明できる分野の拡大及び開発期間やコストを大幅に削減する事を可能とするものと期待される。

近年、高度シミュレーションの方法論自体も変わりつつある。図4に示すように従来は単一の現象、平衡現象、あるいは同一スケールの現象を取り扱ってきた。それがマルチスケール、マルチフィジックスという新しい時代の幕開けを迎えている。例えば、これまでマクロな視点に立った数値モデルとして、固体力学、流体力学、あるいは熱力学等を使った解析とミクロな視点に立った離散モデルとしての分子動力学や粒子法等々が時間と空間で連結されることで、細かな動きをきちんと見ながら全体の動きも見るといった事が今求められているという意味で、マルチスケールのシミュレーション技術が開発されようとしている。

他方、スーパーコンピュータ自身の、あるいはスーパーコンピューティング技術自身の進歩・発展がまだ止まらない。アーキテクチャがどんどん変わって進歩し、それが階層化している。特に、最近はよりコスト・エフェクティブに大規模計算が出来るクラスタ型計算機やグリッド環境が実現されようとしている。

このように考えると、製造業を活性化するスーパーコンピューティングというのは3つの切り口から議論し進めていく必要がある。(1) アプリケーションと情報科学の融合：アプリケーションを使う人は、必ずしも最先端の情報分野のエキスパートではない。バイオインフォマテックに見られるようにアプリケーション側といわゆる情報科学を

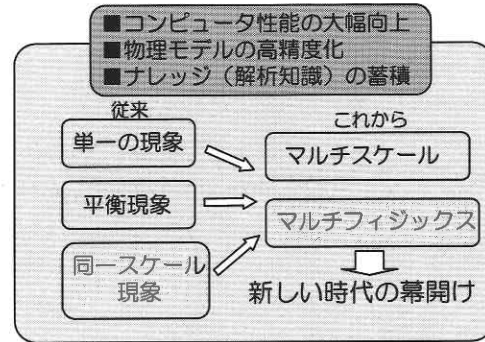


図4 シミュレーション方法論の変革

やっている人たちとの連携が今非常に求められている。(2) スーパーコンピューティングによる価値創造：いまだに分からない現象の解明や、世界に先駆けた新しい発明・発見に繋がるような事を出していく、高いレベルの価値を生み出していく必要がある。(3) アカデミーとインダストリーのシームレスな連携：従来不足していた大学や国の研究所で開発されや優秀な解析技術等を産業界で積極的に実用化していく動きが必要。

4. 米国の取り組み

次にアメリカの取り組みを紹介する。図5にはトップ500スーパーコンピュータ・サイトの2002年11月現在のデータを示す。これは年2回、世界で最も早いコンピュータリストが公表するもので、図中には10位までの最新情報を挙げており、1位が日本の地球シミュレータである。実効性能が35.86テラフロップスで、ピーク性能は40.96テラフロップスである。それ以降はロスアラモスやローレンスリバモア等々の、アスキーあるいはそれに関連したようなプロジェクト等が並んでいる。この時点では地球シミュレータがトップであり、10傑の中に日本のコンピュータ・サイトが常に1~2つある状況が続いている。図中に示した5位と8位はいわゆるPCクラスタであり、この10傑の中に登場してきたというのも最近の動向である。

図6にはスーパーコンピュータの性能向上の動向を示す。1年で約2倍の性能向上を果たしている。半導体だけではムーアの法則から考えてもこのような性能向上は期待出来ない。やはりアーキテクチャや方式、あるいはソフトウェアの進展と半導体の進歩が掛け合わさってこのような進歩が維持されている。

最近の米国の大きなイニシアティブとしてはネットワーク・アンド・ITR&D・イニシアティブがある。これは必ずしも1つのプロジェクトというよりは、アメリカ全体の連邦政府が進める全体のイニシアティブの総称と捉えた方が良い。その詳細を見ると、最初にハイエンド・コンピューティング・コンピューティションというテーマがあり、IT関

http://www.top500.org 2002年11月現在

#	所有機関	計算機名称	実効性能	ピーク性能	ノード数	メーカ
1	地球シミュレータセンタ	地球シミュレータ	35.86	40.96	5,120	NEC
2	ロスアラモス国立研究所	ASCI-Q	7.73	10.24	4,096	HP
3	ロスアラモス国立研究所	ASCI-Q	7.73	10.24	4,096	HP
4	ローレンスリバモア国立研究所	ASCI White	7.26	12.28	8,192	IBM
5	ローレンスリバモア国立研究所	Linux Cluster Xeon	5.69	11.05	2,304	Linux NX
6	ドイツパースパココンピュータセンタ	Alpha Server	4.46	6.03	3,106	HP
7	CEA(France)	Alpha Server	3.98	5.12	2,560	HP
8	システム予測研究所(NOAA)	Aspen system	3.34	6.76	1,536	HPTI
9	HPCx(UK)	pSeries Turbo	3.24	6.66	1,280	IBM
10	国立気象研究センタ(NGAR)	pSeries Turbo	3.16	6.32	1,216	IBM

性能の単位:TFlops

図5 TOP500 スーパーコンピュータサイト

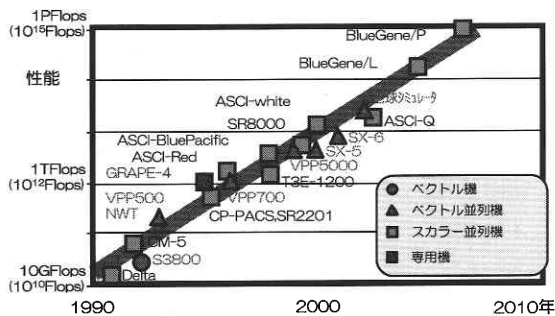


図6 スーパーコンピュータの発展

連の科学技術の基盤研究予算の約半分にこのハイエンド・コンピューティングが位置づけられている。この事実はシミュレーションの重要性を示す証拠と言える。これが産業競争力を支えているという事が大切な事である。例えばバイオ分野の場合では、NIH (National Institutes of Health) が強力に進めているサンディエゴのスーパーセンタは、世界的によく知られている。ナノテクノロジーの場合も、各大学が協力して各種の推進テーマを進めている。

このような米国の強力な取り組みに対する危機意識が、日本経団連でシミュレーション技術を重点化戦略部会で取り上げたきっかけになった。

5. 我が国のスーパーコンピューティングの問題点

次に、日本のスーパーコンピューティング発展・普及のための課題について分析する。基礎研究、大学における高度コンピューティング、戦略ソフトウェアに関する研究は高いレベルにある。それに対して、実際に産業界で用いられているソフトウェアはそのほとんどが外国製である。この原因を考えると、外国製、例えばアメリカ製である場合、アメリカが使ってまずその良さを確認した後で日本がやっと使い始めているため日本は必ず遅れて使っている事が予想される。これはまさに最近世の中で言っている「ザ・ヴァレー・オブ・デス」という「死の谷」の最も分かり易い例である。基礎研究では大学に立派な仕事があるが、産業界がそれを生かしていない原因としては、実証ソフトウェア

の開発が日本ではほとんど手がついていないことが考えられる。現在、東大の連携センターで進められている戦略的基盤ソフトウェアの開発プロジェクトでは、単に新しいアルゴリズムやソフトウェアを開発するだけでなく、それを実際に実用化する部分を推進する。その仕掛けの1つとしてベンチャー・カンパニーも立ち上げて行くという取り組みが行われている。その結果、「ザ・ヴァレー・オブ・デス」を克服する1つの良いモデルになると考えられている。

6. 重点分野におけるシミュレーション技術の動向

ここでは、新しい分野であるナノとバイオのシミュレーション動向について述べる。日本経団連ではこの2~3年、ナノとバイオの取り組み全般について議論しており、その中でシミュレーション技術を実際のアクションプランにして行く動きを進めている。

例えば、創薬のプロセスで10~15年の開発期間がかかるその各ステップに高度シミュレーション技術を最大限に導入する事によって、その開発期間の短縮を図る。これは現在、世界的なテーマになっており、計算科学や創薬シミュレーションを強化していく事が必要である。また、単に創薬だけではなく、これからコンピュータの性能が向上すると、分子レベルから細胞レベル及び生体レベルにそのシミュレーションがどんどん適用出来るようになり、医療全体をも変えるような大きなパラダイムシフトも期待できる。図7には、タンパク質の構造や機能を電子状態を考慮してマルチスケールで解析した例である^{8,9)}。最近では細胞生体シミュレーションというようなレベルでの試みも既に活発に始まっており、日本がもっとコンピュータの能力を上げて、世界をリードして行くべきである。

ナノの分野でも、半導体でのチャンネルの幅が現在90ナノ~100ナノメートルの半導体を開発している。未来プロジェクトでは、60ナノ、その次は40, 30, あるいは27ナノという半導体になる。それに相当して厚さ方向は実にナノオーダーの制御をやっており、この部分でのシミュレーション活用が期待できる。また、図8には、分子動力学を用いて断線のモデルである粒界の原子挙動をシミュレーションした例を示す¹⁰⁾。アルミ配線の断線が起こる原因には種々のモデルがあり、結晶粒界の安定性や不安定性という現象が1つ1つのモデルになっていく。これらの地味な分野も非常に大切であり、このような結晶粒界の考え方は、半導体の材料だけではなく、特に構造材料にとっては永遠の課題である。最近話題になっている応力腐食割れ等も社会的にも非常に重要な分野である。

以上述べてきた内容を纏めると、シミュレーションによる効果としては、市場の拡大の加速やその中で日本がメインプレーヤーになっていく事、あるいは社会的損失を回避する事等が挙げられる。例えば、バイオ・医療・創薬分野の

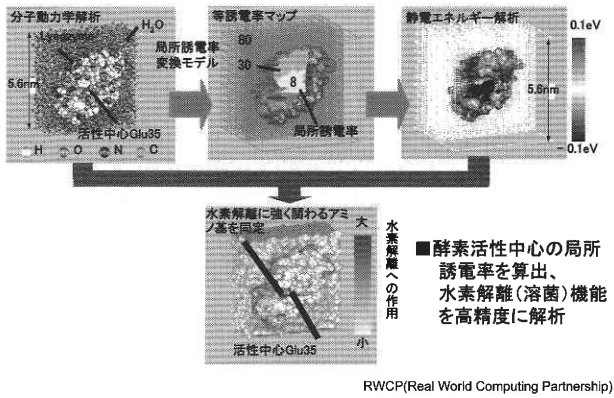


図7 タンパク質構造・機能シミュレーション

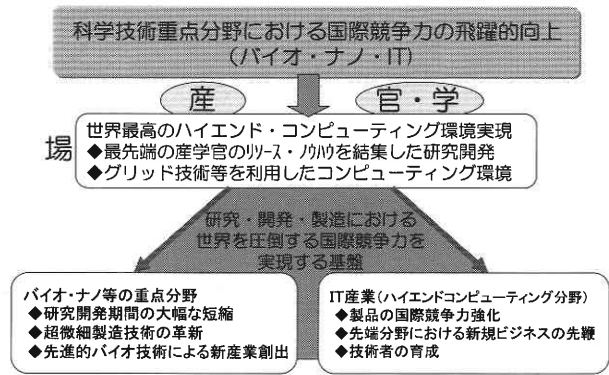


図9 産官学連携による強化

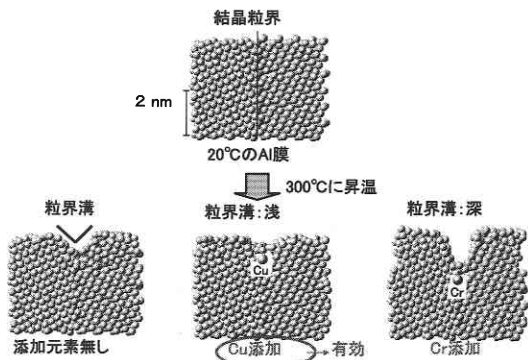


図8 原子シミュレーションによる断線挙動予測

シミュレーションによって、医療費の節減等々の貢献ができると思われる。

7. 今後のシミュレーション技術のあり方と産学連携

最後にまとめとして、シミュレーション分野での産学連携についての提言を述べる。図9にその骨子を示す。21世紀の国家戦略として我々自身が新たな市場をつくり出して経済を活性化して行く際に、シミュレーションで突破口を開いて新たな発明・発見をすることが大いに期待できる。そのためには戦略的基盤ソフトウェアの開発及びアプリケーション側と情報科学の両方が連携して進める必要がある。さらに、スーパーコンピュータによって新しい価値を生み出す姿勢が非常に重要である。このような場が我が国に複数存在することが望ましく、これは必ずしも物理的な場である必要はなく、参加者が情報をシェアし時折顔を合わせて議論出来るような場が非常に有効である。このような観点で今回の戦略的基盤ソフトウェア開発のプロジェクトは、非常に先駆的なリーダーシップを取る事が可能な場所であると期待できる。

最後に、戦略的基盤ソフトウェアのプロジェクトを含めて産業界、官学が皆で議論出来る、そして最先端の技術が使える、教育もやる場が必要であり、是非作りたいと願っ

ている。そして、産官学連携が本当の意味で建設的に回り出すように努力して行きたい。

(2003年4月8日受理)

参 考 文 献

- 1) Tomio Iwasaki and Hideo Miura, Journal of Materials Research, "Molecular dynamics analysis of adhesion strength of interfaces between thin films", Vol. 16, No. 6, pp. 1789-1794, (2001)
- 2) M. Kaiho, M. Ikegawa and C. Kato, "Application of a 3-D FEM/FDM Overlapping Scheme to Heat and Mass Transfer and Moving-Boundary Problems", Computational Fluid Dynamics Journal, Vol. 7, pp. 131-141, (1996)
- 3) 阿部, 他, 2001年日本機械学会年次大会講演論文集, (2001)
- 4) H. Shimizu *et al.*, Numerical simulation of positioning error caused by air-flow-induced vibration of head gimbals assembly in hard desk drive, APMRC 2002, printing
- 5) Kinya Kobayashi, Kazutami Tago, Noryuki Kurita, Physical Review A, "Efficient direct self-consistent-field method in density functional theory", 53, 3, p1903, (1996)
- 6) Kazumi Tago, Hideyuki Kazumi, Kinya Kobayashi, Journal of Alloys and Compounds, "A plasma keyics model: analysis of wall loss reactions in dry etching of silicon dioxide", 279, p60, (1998)
- 7) H. Fukumoto, *et al.*, "Inductance Calculation of Multiple Arbitrary Shaped Plane Using Finite Element Method", IEEE 4th EPEP Proceedings, pp. 223-225, (1995)
- 8) Shirun Ho, Sigeo Ihara, Minoru Saito, Katsuhiro Watanabe, Shoichi Kubo, Richard D. Schlichting, "Correlative Analysis between pKa and Structure Variation in HEWL bycoupling., Molevular Dyanimics Simulation and Continumm Electrostatic Simulation", Protein Science, Vol. 10 Suppl. 1, pp. 150 April 2000
- 9) Shirun Ho, Satoshi Itoh, Sigeo Ihara, and Richard Schlichting, "Agent middleware for heterogeneous scientific simulations", Proceedings of the 1998 ACM/IEEE SC 98 conference, <http://www.supercomp.org/sc98/TechPapers/sc98>, (1998)
- 10) Tomio Iwasaki, Naoya Sasaki, Akio Yasukawa and Norimasa Chiba, "Molecular dynamics study of impurity effects on grain boundary grooving", Japan Society of Mechanical Engineers International Journal, Series A, Vol. 40, pp. 15-22, (1997)