

【産業競争力懇談会2012年度 研究会 最終報告】

【シミュレーション応用によるものづくり連携
システム及び新材料設計手法】

2013年3月13日

産業競争力懇談会 **COCN**

【エクゼクティブサマリ】

1. 本研究会の基本的な考え方

現在、計算科学シミュレーション技術(以下シミュレーション、解析、CAE技術)は産業界のものづくりの実際の現場に普及しており、その技術は大規模化、高度化しつつある。しかし、大規模・高度シミュレーション技術を駆使できる企業はまだ少なく、また、産業分野や企業規模によって大きな差が存在している。さらに、シミュレーション環境の構築や解析技術ノウハウ蓄積にも課題が多く、シミュレーションの信頼性や結果解釈等、実際のものづくりとの連携が十分にできているとは言えない。

特に、シミュレーションや解析情報データと思考(設計)をうまく繋げたものづくりへの活用、すなわち、シミュレーションをうまく活用するための「知識、知恵の方法論(解析妥当性や目利き、創造性)」がまだ確立されていない。これを解決するためには、人材育成が重要だが、それと共に新たな視点として、「理解のための解析技術」から「活用するための解析知識(解析品質の理解)」への進展が必要である。

本研究会では、昨年、企業規模や業界の違いによる意見の多様さにも配慮しながら、望まれている施策、必要とされている人材の姿を定量的に示すため、企業アンケートや、必要に応じヒアリング等を行い、分析した内容を報告書(フェーズ1)にまとめた。

本年度は、フェーズ2として、①昨年度の HPC 応用研究会活動を継続したものづくり連携システムの可能性探索を共通課題として、また、材料分野シミュレーションでは、材料特性データ不足や実現象スケール差、予測精度、製造との格差等、その活用に課題が多いことが予想されたことから、②産官学連携における材料シミュレーションと材料技術者の連携に基づく革新材料創生・産業化の仕組み構築を特化課題として取り上げ、この二点に関する分科会を設置・検討し、提言にまとめる。

2. 検討の視点と範囲

二つの分科会において、以下検討する。

(HPC 応用分科会 [昨年度の HPC 応用研究会の継続]) :

- ・昨年度課題抽出に加えて、更なる調査・分析による『ものづくり連携システム』の仕組み具体化
- ・『ものづくり連携システム』をうまく運用するための、多様なシミュレーション情報と技術者をうまくつなぐための高度連携技術(可視化等)の提案

(シミュレーション応用材料設計分科会 [新規]) :

- ・多数の大学/研究所/メーカーに散らばっている材料シミュレーション技術者と材料技術、製造者との情報交換、議論による、対象テーマを幾つか想定した現状課題抽出と分析
- ・新しい高機能材料の設計シミュレーション手法、開発・実用化モデル、ものづくりとの連携、および産官学連携の検討

3. 産業競争力強化のための提言および施策の検討：産業界における「ものづくり連携システム」のあり方 【HPC 応用分科会】

3.1 「ものづくり連携システム」を推進するための課題の詳細分析

昨年度報告書では「ものづくり連携システム」の重要な拠点の例として公設試の位置づけが重要であることを指摘した。そこで、その状況を分析するため、比較的 CAE 活動を活発に推進している二つの公設試を訪問して、詳細にヒアリングを実施した。また、今後、連携システムでも想定される産業界におけるソフトウェア活用の課題の俯瞰を行い、詳細な課題抽出を行った。

3.1.1 公設試ヒアリング

(1) 新潟県工業技術総合研究所

- ・ CAE 専門研究員は 3 名で、域内企業への技術相談や現場技術立会による課題抽出から、シミュレーション解析、結果の解釈、検証実験（機械加工、計測なども自らやる）、ソリューション提案まで、さらには企業人材育成まで幅広く行う。特に技術支援センター職員は、常時域内企業を回り、課題や技術ニーズに対する情報収集と技術相談を行う。

- ・ 組織上の工夫として、CAE 研究室（バーチャル組織）を運営。

上記 CAE 専門研究員により運営され、CAE に関する情報から、解析モデルの検討、材料物性データの取得、検証実験、さらに解析技術者育成まで、CAE 利用に関するあらゆる相談に対応し、CAE 技術による課題解決と技術普及を行うバーチャルの中核組織。

- ・ 人材育成システム：長岡ものづくりアカデミー

上記 CAE 専門研究員らによる 2006 年度調査事業による成果を元に、財団法人にいがた産業創造機構(NICO)、長岡工業高等専門学校と共同で、長岡モノづくりアカデミー(3D-CAD/CAE コース*)を創設し(2008 年)、現在 CAE 研究室から講師派遣を通じて、企業の CAE 技術者の人材育成を行っている。

(2) 長野県工業技術総合センター

- ・ CAE を担当している研究員は 4~5 名であるが専任ではなく、他の業務も担当している。また、簡単な解析であれば、更に数名が対応できる。
- ・ 新潟県工業技術総合研究所と同様、域内企業への技術相談や現場技術立会による課題抽出から、シミュレーション解析、結果解釈、検証実験（機械加工、計測なども自らやる）、さらには企業人材育成まで幅広く行う。
- ・ 過去に繊維織物業界への支援に活用していたコンピュータ技術を背景に、情報技術に特化した支援体制を構築した経緯があり、現在、CAE 技術の活用が活発に行われている。また研究開発成果は、公開可能なものについては充実した報告書が掲載され、シミュレーション技術の事例紹介として機能している。
- ・ 上信越公設研ネット(群馬、長野、新潟、産総研)という枠組みの中で、CAE を活用した

研究事例や地域企業への技術支援内容についてお互いに紹介しながら連携を深めている。

- ・人材育成への取組み：長野県製品設計技術研究会などでの講習会等の実施。

(3) 公設試ヒアリングから見えてくる普及、活性化の視点

工夫点：

- ・公設試という立場から地域企業に密着した職員による対応、その地域の産業特性・特徴を生かした CAE 適用の検討
- ・CAE に関する情報から、解析モデル検討、材料物性データ取得、検証実験、さらに、解析技術者育成まで、CAE 利用に関するあらゆる相談に対応し、CAE 技術とものづくりノウハウによる課題解決と技術普及といった上流から下流までを通して扱おうとする組織づくり
- ・3D CAD に付属しているような CAE の普及に伴って、最適な解が簡単に得られるものと考えている企業も多い。そのような企業に対しては、過大な期待を修正し、「できることとできないこと」「材料物性値や境界条件の違いによる解析結果の差異」などを説明しながら理解を得るようにし、上手に CAE を活用してもらえるように努めている
- ・支援企業と共に考え、スピード感ある製品化支援を重視

課題：（公設試以外の関係部署ヒアリングも反映）

- ・研究資金の不足、ソフト保守費の問題
- ・人材の不足（地方の中小企業では、専門部隊（専任者）を配置することは困難であり、現場の技術者が兼務しているのが現状）
- ・公設試間の連携が不十分、メリットが見えない
- ・下請け企業が多く、提案型解決へのシフトを目指すが、解析検証が難しい
- ・CAE に係る相談は緊急を要するトラブル対応の案件が多く、そのため公設研による対応も迅速な対応が必要となっている。
- ・CAE を活用した課題解決や技術開発に至る過程は、企業秘密の部分が多く、外部公表が制限されるなど、成果の可視化が難しい。
- ・県における公設試の組織としての活動の限界、公設試間の連携の難しさ
- ・公設試以外の高専、大学等も含め連携の必要性
- ・中小企業間に大きな差があり、レベル合わせは困難、現実課題としてはコストダウンが目標、新しい価値の製品貢献は少ない
- ・世界を視野にいれたニッチで最先端の事業に対し CAE を活用して支援する仕組み

3.1.2 ソフトウェア活用の現状課題の抽出

上記、公設試の事例にも見られるように、連携システムにおいての情報共有やソフトウェア活用という新たな視点が今後大事になると思われる。現状のソフトウェアの分類と課題を分析した。現在、一般的に使用されているソフトウェアには幾つかの形態があるが、こ

ここではフリー/オープンソースソフト、企業内オリジナルソフト、商用ソフトの三つのカテゴリーに分類して、それらの現状と課題を整理した。(詳細は本文および参考資料表1を参照)

3.2 シミュレーションを核とするものづくり連携システムのあるべき姿

- (1) 公設試も含めた関係機関の連携、情報共有がスムーズに行く仕組み構築
- (2) (1) により、シミュレーションやCAEを活用することで以下の内容が実現できること。
 - ・ 地方企業競争力向上のための成長循環ビジネスモデルの構築
 - ・ 県としてのメリット向上
- (3) 投資マインドの向上、成果PRの施策
- (4) 連携システムのあるべき姿(詳細は本文参照)
 - ・ シミュレーション技術インキュベーション組織の必要性
 - ・ HPC ビジネスの活性化
 - ・ HPC 技術活用の横展開
 - ・ クラウド技術による連携プラットフォーム構築

3.3 次世代クラウドシステムによるものづくり連携プラットフォームのあり方

(詳細は本文参照)

ここでは、連携システムのあるべき姿と現状を比較し、まずはあるべき姿につなぐための暫定的(中間的)な案として抽出課題を改善し、活性化するための施策として、クラウド的な「ものづくり連携システム」の具体的な内容を検討した。

3.3.1 課題解決のモデル化技術(ビジュアルアナリティクス、解析品質V&V他)

(1) ビジュアルアナリティクス

課題解決のプロセスの中で仮説検証といったユーザの思考を支援するビジュアルアナリティクス(VA、視覚的分析)技術を活用して、さまざまな分野におけるシミュレーションから出力される変数間の因果関係を明らかにすることが挙げられる。

- 1) 多変数データ向け融合可視化技術
- 2) 座標・変数空間結合可視化技術
- 3) ビジュアルアナリティクス環境を使った適用検証

(2) 高精度な解析

- 1) 複雑現象に忠実な解析モデリング
- 2) システム全体の挙動がわかる技術、解析と計測融合による解析品質V&V構築

3.3.2 知識継承を実現する人材育成・活用システム(シニア活用、他)(詳細は本文参照)

- ・ シニア活用: シミュレーションノウハウの技術伝承者としての役割
- ・ 産学連携インターシップによるシミュレーション人材育成:
 - 従来よりもCAEによるものづくりに根ざした教育、経験の醸成

3.3.3 クラウドシステムにおけるプラットフォーム

先進的なクラウドシステムを活用した、ものづくりのための連携プラットフォームは、特に中小規模の企業におけるシミュレーション導入・活用、ひいては産業競争力の向上にとって重要なツールとなる可能性を有している。

一方で、ものづくり現場での効果的活用を図る上では、いくつかの課題も存在する。

- (1) セキュリティ&ロバストネスと、ユーザビリティのトレードオフ
- (2) 商用パッケージソフトウェアのライセンス・スキームのクラウド対応
- (3) 本格的解析に伴う大規模データの転送、処理の効率化
- (4) 利用方法に関するコンサルティング拡充

3.3.4 アプリソフトウェア開発の持続的発展のための戦略骨子

(1) 正のスパイラル

ソフトウェアの開発や持続的な維持、発展に欠かせないのは、開発者、コーディネータ（ソフトベンダー他）、利用者が満足し、使うための意識を高く持ち続けることができるかどうかにかかっている。いわゆる正のスパイラルができるかどうかにかかっている。

(2) クラウドシステムにおける多様なソフトウェアのライセンスのあり方

ソフトを動かすハード環境については並列化、クラウド化が急速に進みつつある。このような中で従来利用されてきたソフトの開発や発展に歪が生じている。特に商用ソフトでのライセンス問題は顕著である。現在はCPU毎に課金するシステムが主流であるため、現在の並列化システムやクラウドに対応した課金体系になっていない。ライセンスのあり方の見直しが強く求められる。

(3) 計測とシミュレーションとの接続技術

近年、コンピュータの発達とともに、構造データや特性なども含め実験データを共通的にデータベース化する動きが急である。

共通的にデータベース化については過去、1996年にIPAで行われた「知見情報データベース」があるが、それを運用する（開発者とユーザを取り持つ）機関がなく、その後の進展はない。米国では最近材料分野において、Material Project

(<http://materialsproject.org/>)として、実験データ、計算機シミュレーション、データベース化を合わせ持ち、必要に合わせ情報をフリーで得られるシステムが動き出していることを踏まえた対応が必要である。

(4) ソフトウェアの価値成長デザイン(維持、オープンブラッシュアップ)

フリー／オープンソースソフト、企業内オリジナルソフト、商用ソフトは互いに補完する関係にあり、それぞれの特徴を生かした協調と競争により共に発展させることが重要である。まず広範囲のリソースを活用できるオープンソースについては、公的研究成果のオープン化、基盤ソフト(インフラ)としての公的な開発・評価体制の整備、カスタマイズを含む企業利用に適したライセンス形態の開発が必要である。また、市場競争の中で発展する商用ソフトについては、ニーズの積極的なフィードバックによるベンダーの育

成や、共通ツールと割切った利用技術の高度化が必要である。これらの発展の上で、企業内では独自のノウハウ（実験・製造プロセス等）と強く結びついたシミュレーション技術を戦略的に開発することにより、オープンソース、商用ソフトを超えた競争力を確保することが重要である。

(5) 大学発のソフトウェアを維持・管理するための受け皿(組織)

プログラム自体の開発は大学では研究機関で世界に誇ることができるレベルのものが数多く開発されてきている。しかしながらそれを維持・管理する受け皿に関してはほとんど対策が取られていない。そこに大きな正のスパイラルに入らない原因があるものと思われる。そこで、開発者と利用者をつなげる第三の機関として、配布分配者（コーディネータ）の存在が重要となる。このような機関を充実することが大きな変革につながる可能性がある。

3.3.5 地域企業における新しい価値を産むためのビジネスモデル

我が国のものづくりを担う各業種・各企業が活用し、その生産性を高め、個々の産業競争力を強化するには各地域における公設試がそれぞれの地域の大学等の知的資源と一体となって地域企業の課題解決に取り組んでいく必要がある。その意味では各地域の公設試の果たすべき役割は大きい。一方で公設試は行政区分上それぞれの自治体に所属し、地域性を生かすことは重要な視点であるが、情報の仕掛、リソース制限等、課題も多い。

このような制度的な課題に対して、最近では前節で述べたようなクラウド技術によって情報流通を活発化することによって情報共有を推進することが可能である。企業と公設試や大学等の間を取り持つ広域地域連携組織が必要。ここにはコーディネータ・アドミニストレータが配し、産学の情報流通の「踊り場」となることも期待される。

以上、上述してきた3.2、3.3章をまとめた結論として、新たに改良した「ものづくり連携システムイメージ」を以下に示す。

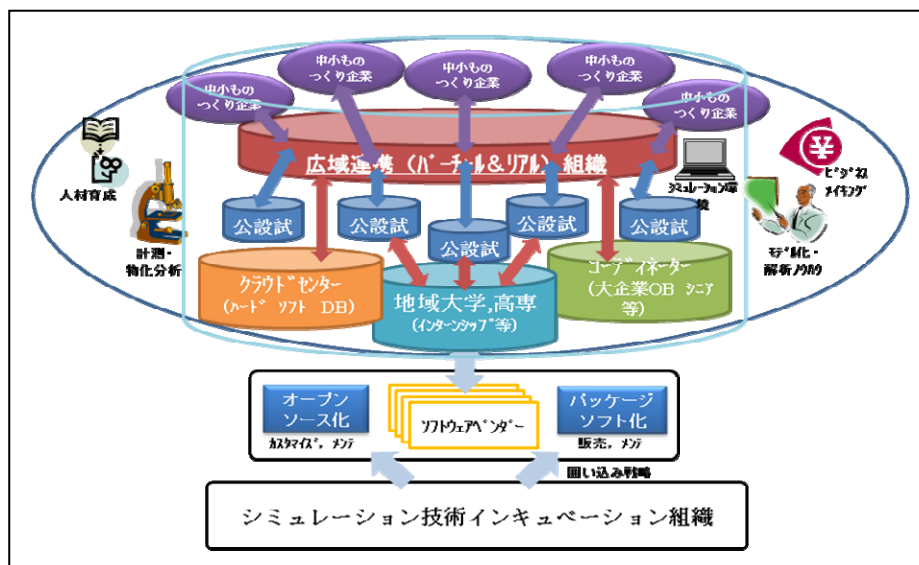


図 ものづくり連携システム (イメージ)

3.5 ものづくり連携システムの具体的骨子

中小企業を中心とした我が国の産業界ニーズがよく集約される公設試へのヒアリング等によるVOC分析に基づき、シミュレーション技術の活用視点で検討し、顕在化してきた課題を今回、明確化した。すなわち、公設試には企業側ニーズが集まるが、対応するには情報共有、人員、ソフトウェア、予算、等の面でさまざま課題がある。これを解決するには産官学や国としての体制の工夫と新たな方針による連携づくりが行われなければならない。これまでの議論を踏まえ、まずはこれを克服する枠組みをまとめると以下ようになる。

(1) 次世代クラウドシステム上に構築されるものづくり連携プラットフォームの実現。

公設試や高専、大学をハブとしてシミュレーション技術を普及し、活用していくには情報集約的な広域連携組織を置くことが望ましいが、これをクラウド技術によって実現する。そのためには高速安価な通信網の整備、ソフトライセンスの考え方の転換、用途に合ったセキュリティ技術の開発、可視化等の活用技術開発、また、利用者とソフトウェア開発者を繋ぐ主体的組織が必要である。さらに公的な研究施設プラットフォームとの連動が望まれる。

(2) ものづくりにおけるシミュレーション技術の知識を継承する仕組みと人材の育成・活用システムの整備。

シミュレーション技術がブラックボックス化することを防ぎ、真に意味ある解析を行うために、より踏み込んだインターンシップ制度の整備とシニア人材の活用が強く望まれる。また、解析結果そのものを蓄積し、再利用することを可能とする制度による知識継承システムが必要である。

(3) 課題解決モデル化技術と解析結果の検証システムの研究開発の推進。

従来、シミュレーション技術の研究開発はハードウェア、ソフトウェア、およびネットワーク・システム技術に限定されてきた。しかし、産業界の抱える課題を解決するには、シミュレーション技術を適用できる形にモデル化する技術とその結果の検証システムが必要である。ビジュアルアナリティクスに代表される新しいモデル化技術、解析結果の検証や解釈等の解析品質技術の研究開発プロジェクトを興すべきである。

(4) 地域性を生かしたバリューイノベーションを実現するものづくり連携システム構築。

クラウド技術によって地域の中小企業や地方大学のハブとなっている各地の公設試を連携させ、活用情報を流通させ、また各地の公的な研究施設をリモート活用することによって、地域性を生かしたビジネスの創出を目指す。そのためには、公設試の活動範囲拡大、公設試間連携促進、目利き人材（コーディネータ）正しく配することも重要である。

(5) シミュレーション技術インキュベーション組織を設置し、産官学で運用・活用する。

ここにおいて大学等が生み出した日本発のシミュレーション技術シーズを大企業等が中心となって実用レベルまで高めていくことによって、HPCビジネス市場の活性化を推進すると同時に、分野ごとのシミュレーション技術コミュニティを育成していく。

4. 産業競争力強化のための提言および施策検討： 産業界におけるシミュレーション 応用新材料設計手法のあり方 【シミュレーション応用材料設計分科会】

産業界におけるシミュレーション応用の新材料設計手法のあり方を提言するため、現状の課題の分析と材料シミュレーションにおける新材料設計の方向性の調査を実施し、設計手法の将来ビジョンについて検討した。

4.1 検討方針

二つの視点で以下を検討する。

- ①現状の材料シミュレーションによる材料設計の課題抽出と分析
(実際のものづくり現場の課題)
- ②コンピュータシミュレーションによる新材料の設計のあり方の検討、提案

4.2 現状の材料シミュレーションによる材料設計の課題抽出と分析

4.2.1 課題検討上のポイント

(1) 技術的な課題

- ・実際の製造・加工プロセスに適用できる材料組成、材料特性の開発
- ・耐久性・信頼性・劣化などの材料の長期信頼性の予測
- ・材料設計固有の課題、特徴、他分野との違い、開発期間、人材、教育、等々
- ・実用的な計算精度と有効な活用方法→ユーザから見た「駄目」と「OK」の境目は何か
- ・スパコンベース解析の課題
- ・素材の複合時、部材の組み合わせ時のように、材料システム化の段階で初めて顕在化する問題の予測（素材・部材・製品の各段階における擦り合わせ技術等）

(2) 政策的な課題

- ・日本と海外メーカーとの材料設計の考え方の相違は何か（強み、弱み）
- ・現状の公的技術ロードマップの課題・問題点の検討
- ・投資コストに見合うだけの効果、成果が出るシミュレーションとは何か
- ・国プロ開発等のアカデミア開発ソフト技術の維持、メンテナンスの仕組み
- ・アカデミア開発の材料シミュレーションの産業界への技術移転を行うための体制
- ・大学・公的研究機関との連携（ソフト開発、教育・人材育成、計算資源提供等）

4.2.2 アンケート調査

アンケート、ヒアリング(自社、他社)の実施。

(1) アンケートへの反映内容

- ・現状の材料設計・製造の課題、新機能材料の設計のあり方、材料シミュレーションの課題と期待、材料データベースの課題
- ・材料メーカー、材料システムメーカーを対象にアンケートを実施

(2) アンケート具体的内容／項目の概略を以下に示す。

- ・現状の材料設計・製造の課題、製造と設計のギャップ
- ・日本と海外メーカーとの材料設計の考え方の相違
- ・材料シミュレーションへの一番の期待は何か
- ・材料開発におけるどのフェーズでシミュレーションを利用する(したい)か
- ・大学・公的研究機関との連携状況、連携への期待

4.2.3 アンケート結果の分析

(1) アンケート概要の集計結果

回答企業 10 社、回答者数 67 人、設問数 30 問.

(2) アンケート結果の分析と傾向 (詳細は本文及び参考資料 p51 以降参照)

回答率の高かった設問の中から、主要な意見を抽出し、以下に列挙する.

■材料設計：

- ・使用目的：開発ニーズに対する材料機能要件の明確化、詳細な現象説明
- ・必要技術：理論的設計指針、材料シミュレーションスキーム
- ・設計課題：材料特性や組成の評価解析、寿命・劣化特性の予測

■材料シミュレーション：

- ・シミュレーションの使用フェーズ：

1) 材料組成・組織設計時、2) 機能要件の設定時、3) 性能発現メカニズムの解析時

- ・材料スペックの決定要因：顧客やシステム全体からのニーズ
- ・必要技術：原子・分子レベルの解析、複数のスケールシミュレーションの連成解析
- ・要求機能：解析精度、現実に近い忠実なモデル

■材料データベース：

- ・性能課題：データの豊富さ・精度、データベース間の連携

■材料の設計開発：

- ・材料設計における海外メーカーと日本のメーカーの差異：
 - 1) 材料データ量、2) システム思考の設計法、3) 計測技術
- ・開発課題：材料シミュレーション、材料データベース、材料合成の連携による三位一体の設計開発スキーム

4.2.4 事例分析

ここでは材料を開発する側での成功事例分析と、今後課題となる使う側からの課題や方向性について、文献調査に基づく分析を実施した.

(1) 成功事例の分析

幾つかの先端事例を調査. 具体的事例としては、以下を調査した.

- ・LSI 層間絶縁膜(低誘電率材料)、光学フィルムの例、タイヤの新材料技術開発、電気特性シミュレーション、水処理膜、CFRP、構造用金属材料 (詳細は本文参照)

事例から見る成功の要因の分析：

- 1) 実験、計測だけでは理解が難しい複雑現象の解明と理解
- 2) 実験と計測の連携による仮説(シミュレーション)と検証プロセスの協働
- 3) 複雑現象を説明できる理論モデルの構築、重要因子の導出と、実験への反映
- 4) シミュレーションによる現象特性の定量化
- 5) 材料開発におけるシミュレーションの目的と役割(守備範囲)の明確化
- 6) 開発方向性の事前予測、材料スクリーニングに的を絞ったシミュレーション

(2) 課題トピックス

・共通の課題：

- 1) 製品や部材の丸ごと全てを対象としたシミュレーションは不可能。計算モデルの大きさに制限がある中で、材料の使用目的に応じた適切なモデル化が必要
- 2) 耐久性(劣化)予測やメカニズム解明に対するニーズは大きいですが、長大な時空間スケールのシミュレーションを行う必要があるため、現在の技術では困難
- 3) マルチスケール・マルチフィジックス材料シミュレーション技術の実用化
- 4) システムニーズに対応できる材料シミュレーション技術の開発

4.2.5 特定分野の課題抽出(詳細は本文参照)

(1) 構造材料系：

- ・顧客から求められる価値提案の高度化・複雑化への対応
- ・材料組織構造の特徴量設定とその定量的測定手法の確立
- ・材料組織構造予測モデルの高度化と検証(実験)

(2) 高分子材料：

- ・最初に検討すべきは、顧客にとっての価値をどのような手段で実現するか。
- ・材料(素材の構成)・分子・製造プロセス設計のどの段階をどの手法で計算するか
- ・原子・分子スケールのシミュレーションを有効活用するには、ノウハウが必要

- (3) 共通課題：既存の材料設計シミュレーションの限界を超えるためには、組織・手法の連携が重要(高度計算機環境等)

4.2.6 システムから見た材料設計の課題抽出

家電の例として以下の視点をまとめた(詳細は本文参照)。

- (1) システム設計現場における材料シミュレーション技術導入の課題
- (2) 部品組み合わせシミュレーションの課題
- (3) システム設計の立場から材料設計に望むもの

4.3 コンピュータシミュレーションによる新材料の設計のあり方の検討、提案

4.3.1 あるべき姿イメージ(案)

- ① システムから見た材料への機能要件設計(理論や現象理解による逆問題的手法)

- ②あらゆるパラメータを考慮した計算機シミュレーションによる材料設計（試作レス）
- ③材料設計→物性、分子設計→製造プロセス設計、をトータルにシミュレーション

4.3.2 着目すべき項目の検討

- ・「新材料」の定義、シミュレーション対象の設定、新材料設計における幾つかの手法の活用策、逆問題手法順問題の繰り返し、第一原理等の評価解析＋ノウハウ、データベース組み合わせ、スパコンを活用
- ・検証技術としての材料設計 V&V プロセス基準の構築
- ・国プロデータベースの有効活用のあり方 (Big データ含む)

4.3.3 「新材料」設計手法の事例分析（文献調査による）

文献調査により、現状の材料設計研究の事例を分析した（詳細は本文参照）。

- ・米国 Alex Zunger の取組み (逆問題手法) の例
- ・有機太陽電池用のドナー有機半導体高分子の理論設計の例
- ・米国 (MIT) Gerbrand Ceder (“絨毯爆撃”設計) の例
- ・高分子材料設計におけるマルチスケール・シミュレーション
- ・マテリアルインフォマテックス、他

(1) 事例の分析

- 1) 「新材料」設計として、理想とされる「逆問題」的なアプローチは実用的には課題が多く、順問題の繰り返しがまだ主流である。
- 2) 分子シミュレーション技術は材料設計に盛んに活用されてきている。
- 3) 材料特性は多数のパラメータが影響しあうため、材料シミュレーションと遺伝的アルゴリズム等の探索的手法が連携して良く用いられる。
- 4) マルチスケールな材料モデルのシミュレーション技術が必要不可欠ではあるが、まだ技術的には実用的には至っていない。

4.3.4 今後必要と思われる「新材料」の設計手法・システムの骨子

アンケート、課題抽出、文献調査より、あるべき材料設計システムイメージを検討。理想的なあるべき姿を実現するには課題が多い。まずは、従来からのシミュレーションの高精度化、大規模化とデータサイエンス等の新しい分野との連携が、あるべき姿実現に向けたアプローチの一つとして考えられる。

その例として、「新材料設計のための計算科学と情報科学連携」の研究や技術開発の推進が必要であり、技術の構成要素とその連携イメージ図を以下に記載する。

必要な構成要素：図中に描く番号と項目が対応する

(1) システムの視点からみた材料機能要件の設計

材料に新たに求められる新機能を、材料が組み込まれるシステムやサブシステムから

のニーズに対応して仕様を探索する、いわゆる逆問題的設計の考え方の導入

(2) 情報科学と材料計算科学の連携（マテリアルインフォマテックス）

材料シミュレーションから算出される材料情報、材料データベース等の保有する膨大な材料情報に情報科学手法を適用することで、目標の材料構造や物性を効率的に探索できる新しいハイスループット材料設計手法の導入

(3) 新機能材料のアイデア創出のための材料物性・構造データの構築

新機能を創生する原理、原則を作り出すための“気づき”を与える、材料・物性情報構築.

(4) 解析精度の向上（近似精度の向上、現実に近い忠実なモデルの構築）

- ・ 大規模計算機の利用：高度な近似理論の適用による精度向上、計算モデル大規模化
- ・ マルチスケール材料モデル：現実外力等境界条件を取り込む連携シミュレーション
- ・ 大規模モデル（原子分子スケール）やマルチスケール材料モデルのモデリング・可視化

(5) 機能要件から製造プロセスまでの一貫したトータルシミュレーション

機能要件→材料設計→分子・素材設計→製造プロセス設計、という一連の流れに対応した情報とシミュレーションの連携、プロセス全体統合解析できるシミュレーション

(6) 解析品質ルールの構築

材料シミュレーションと計測データを常に比較、検証する仕組みの構築

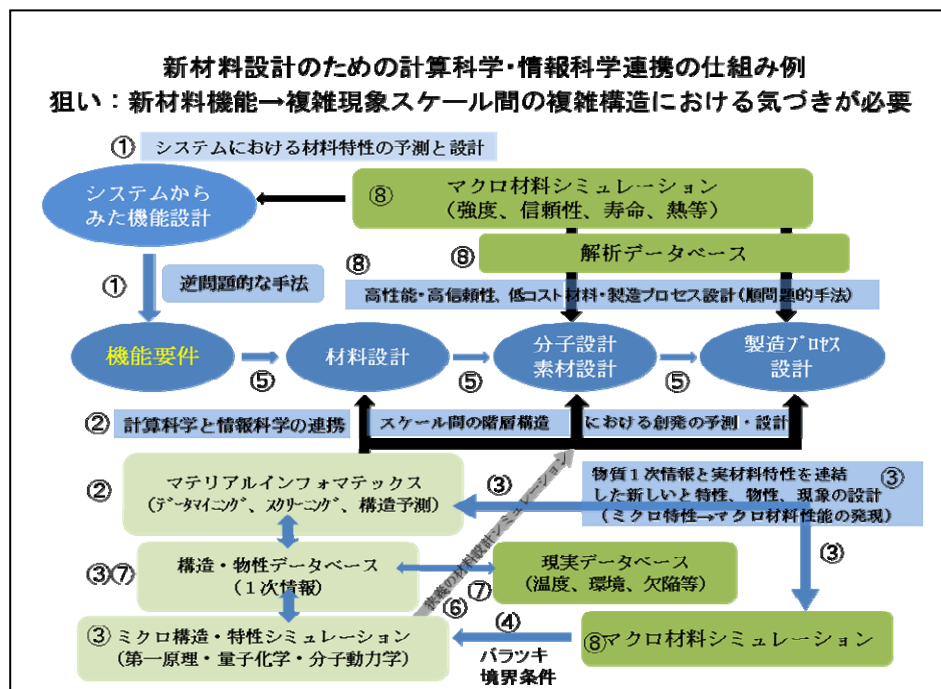
(7) 材料実験データベース、計測データベース

常に新しい材料情報が蓄積され、活用時に変換容易、公開可能なプラットフォーム

(8) グローバルな材料開発に勝つためのマクロ材料シミュレーション

低コスト、ばらつき、軽量化等最適信頼性設計を実現するマクロシミュレーション

(9) 上記 1) ~8) を連携させるための省庁連携による、情報共有の仕組み、体制づくり



5. 本研究会からの提言

5.1 産業界における「ものづくり連携システム」のあり方 【HPC 応用分科会】担当

中小企業を中心とした我が国の産業界ニーズがよく集約される公設試へのヒアリング等によるVOC分析に基づき、シミュレーション技術の活用視点で検討し、顕在化してきた課題を明確化した。すなわち、公設試には企業側ニーズが集まるが、対応するには情報共有、人員、ソフトウェア、予算、等の面でさまざま課題がある。これを解決するには産官学や国としての体制の工夫と新たな方針による連携づくりが行われなければならない。これまでの議論を踏まえ、まずはこれを克服する枠組みをここでは提言する。

(1) 次世代クラウドシステム上に構築されるものづくり連携プラットフォームの実現。

公設試や高専、大学をハブとしてシミュレーション技術を普及し、活用していくには情報集約的な広域連携組織を置くことが望ましいが、これをクラウド技術によって実現する。そのためには高速安価な通信網の整備、ソフトライセンスの考え方の転換、用途に合ったセキュリティ技術の開発、可視化等の活用技術開発、また、利用者とソフトウェア開発者を繋ぐ主体的組織が必要である。さらに公的な研究施設プラットフォームとの連動が望まれる。

(2) ものづくりにおけるシミュレーション技術の知識を継承する仕組みと人材の育成・活用システムの整備。

シミュレーション技術がブラックボックス化することを防ぎ、真に意味ある解析を行うために、より踏み込んだインターンシップ制度の整備とシニア人材の活用が強く望まれる。また、解析結果そのものを蓄積し、再利用することを可能とする制度による知識継承システムが必要である。

(3) 課題解決モデル化技術と解析結果の検証システムの研究開発の推進。

従来、シミュレーション技術の研究開発はハードウェア、ソフトウェア、およびネットワーク・システム技術に限定されてきた。しかし、産業界の抱える課題を解決するには、シミュレーション技術を適用できる形にモデル化する技術とその結果の検証システムが必要である。ビジュアルアナリティクスに代表される新しいモデル化技術、解析結果の検証や解釈等の解析品質技術の研究開発プロジェクトを興すべきである。

(4) 地域性を生かしたバリューイノベーションを実現するものづくり連携システム構築。

クラウド技術によって地域の中小企業や地方大学のハブとなっている各地の公設試を連携させ、活用情報を流通させ、また各地の公的な研究施設をリモート活用することによって、地域性を生かしたビジネスの創出を目指す。そのためには、公設試の活動範囲拡大、公設試間連携促進、目利き人材（コーディネータ）正しく配することも重要である。

(5) シミュレーション技術インキュベーション組織を設置し、産官学で運用・活用する。

ここにおいて大学等が生み出した日本発のシミュレーション技術シーズを大企業等が中心となって実用レベルまで高めていくことによって、HPCビジネス市場の活性化を推進すると同時に、分野ごとのシミュレーション技術コミュニティを育成していく。

5.2 産業界におけるシミュレーション応用新材料設計手法のあり方

【シミュレーション応用材料設計分科会】担当

産業界における材料シミュレーションの現状を把握し、将来のあるべき姿を検討するために、企業アンケートやヒアリング、材料分野における先端シミュレーション技術の調査、分析等を行い、材料シミュレーション技術活用の課題を明確にした。

その結果、あるべき姿の実現に向けた第一歩として、材料シミュレーション技術の高度化によるシミュレーションの高精度化と大規模化、および材料計算科学と情報科学の融合によるハイスループット材料設計システムの開発に取り組む必要があると考えられる。その一例として「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」構想を提言した。

提言の主なポイントは以下のとおりである。

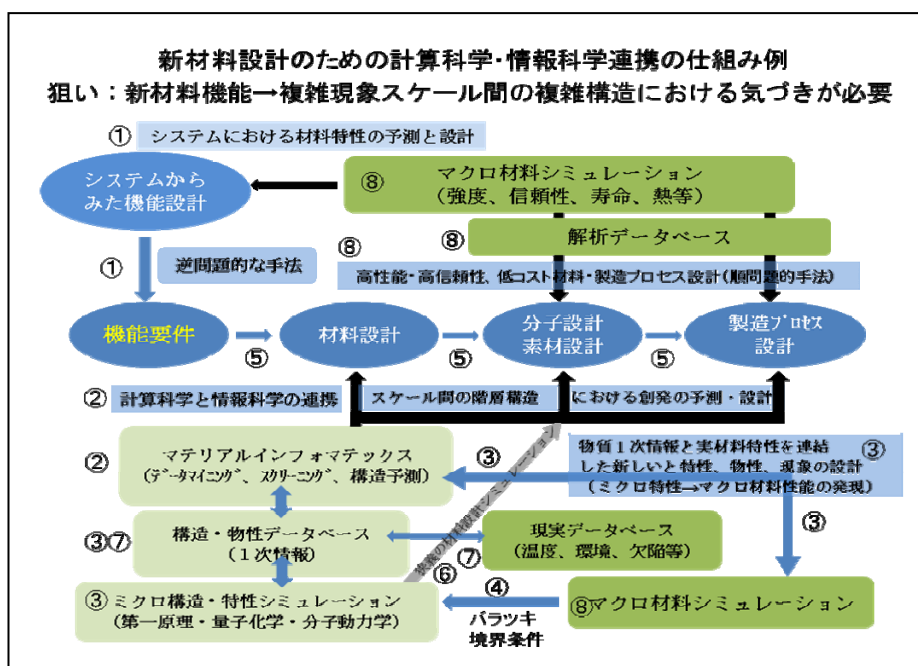
- (1) 材料に新たに求められる新機能を、材料が組み込まれるシステムやサブシステムからのニーズに対応して仕様を探索する、システム視点からみた材料機能要件設計の考え方
- (2) 情報科学と材料計算科学の連携（マテリアルインフォマテックス）

材料シミュレーションから算出される材料情報、材料データベース等の保有する膨大な材料情報に情報科学手法を適用することで、目標の材料構造や物性を効率的に探索できる新しいハイスループット材料設計手法の導入

- (3) 新機能材料のアイデア創出のための材料物性・構造データの構築

新機能を創生する原理、原則を作り出すための気づきを与える、材料・物性情報構築。

- (4) 解析精度の向上（近似精度の向上、現実に近い忠実なモデルの構築）
- (5) 機能要件から製造プロセスまでの一貫したトータルシミュレーション
- (6) グローバルな材料開発に勝つためのマクロ材料シミュレーション
- (7) 材料シミュレーションにおける解析品質基準の構築と標準化
- (8) 上記項目を連携させるための省庁連携による、情報共有の仕組み、体制づくり



以上

【目 次】

1. 本プロジェクトの基本的な考え方
2. 検討の視点と範囲
3. 産業競争力強化のための提言および施策の検討：【HPC 応用分科会】
「産業界における「ものづくり連携システム」のあり方」
 - 3.1 「ものづくり連携システム」を推進するための課題の詳細分析
 - 3.2 シミュレーションを核とするものづくり連携システムのあるべき姿
 - 3.3 次世代クラウドシステムによるものづくり連携プラットフォームのあり方
 - 3.4 ものづくり連携システムの具体的骨子
4. 産業競争力強化のための提言および施策の検討：【シミュレーション応用材料設計分科会】
「産業界におけるシミュレーション応用新材料設計手法のあり方」
 - 4.1 検討方針
 - 4.2 現状の材料シミュレーションによる材料設計の課題抽出と分析
 - 4.3 コンピュータシミュレーションによる新材料の設計のあり方の検討、提案
5. 本研究会からの提言
 - 5.1 産業界における「ものづくり連携システム」のあり方 【HPC 応用分科会】担当
 - 5.2 産業界におけるシミュレーション応用新材料設計手法のあり方
【シミュレーション応用材料設計分科会】担当

【はじめに】

世界経済のグローバル化が進み、海外企業も含めた企業間の競争が急激に高まっている中で、今後とも産業競争力を維持していくためには、技術イノベーションによるものづくり生産性向上を図ることが不可欠である。このグローバル化の動きの中で、ものづくりの変革も少しずつ起こりつつあるが、その中で、従来の試行錯誤的なもの作りから、高精度なシミュレーション技術による効率的かつ高信頼に新しい材料や製品システムの開発が期待されている。さらに、最近世界一になった「京」コンピュータ開発や、各種スーパーコンピューティングの進化により、計算科学シミュレーション技術の大規模化、高度化も進展しつつある。

しかしながら、その半面、産業界で分野に違いはあるが、大規模、高度解析活用ができる企業は現実にはまだ少なく、解析環境やノウハウ蓄積には課題が多く、実際のものづくりにおいて、必ずしも計算科学が産業界に十分普及しているとは言えず、また、普及はしている場合でも、実際のものづくりとの連携が十分とは言えない状況と思われる。

すなわち、シミュレーションをうまく活用する知識・知恵の方法論(解析妥当性や目利き、創造性)、施策がまだ確立されていない。これを解決するためには、人材育成と共に新たな視点として、理解のための解析技術から、活用するための解析知識への進展が必要である。

このような中で、産業競争力懇談会では、幅広い産業界(特に小規模企業)を視野に、計算科学が広く産業界のものづくり現場に普及していくための施策として、広い意味での解析品質向上の手段、人材育成の仕組み、解析モデリング&シミュレーションの解析情報データベースの有効活用やデータベースとのインタラクションの方法論、産業界がアクセス、試行できる解析情報共有のありかた等の検討を行い、具体的なものづくり連携のあり方を模索して提言に繋げる活動を行っている。本報告が、産官学の垣根を越えた、より活発な議論の一助となることを願うものである。

産業競争力懇談会
会長(代表幹事)
榊原 定征

【研究会メンバ(順不同)】

□リーダー：佐々木直哉(ICSCP/産応協、日立)

事務局：三好一義(ICSCP/産応協、日立)

笠井憲一(ICSCP/産応協、日立)

□構成メンバ

(HPC 応用分科会)：

・ COCN 会員 (8 名)

半沢宏之(第一三共)

澤田正康(ニコンシステム)

澤田有弘(産総研)

浅井美博(産総研)

関口智嗣(産総研)

井上靖朗(産総研)

中村佳正(京都大学)

小山田耕二(京都大学)

・ COCN 非会員

伊藤 聡(理研)

・ オブザーバ

山本 模(JST)

・ ICSCP/産応協メンバ：運営小委員会メンバ 有志

石田邦夫(東芝)

小西正晃(トヨタ)

高原浩志(日本電気)

景山正人(新日鐵住金)

滝本正人(みずほ情報総研)

善甫康成(法政大学)

(シミュレーション応用材料設計分科会)

・ COCN 会員 (15 名)

茂本 勇(東レ)

上原 淳(JX ホールディングス)

中村 勉(J X 日鉱日石エネルギー)

浅井美博(産総研)

井上靖朗(産総研)

中村佳正(京都大学)

相賀史彦(東芝)

信時英治(三菱電機)

白石 泰(シャープ)

松崎洋市(新日鐵住金)

澤田英明(新日鐵住金)

今野晋也(日立製作所)

・ オブザーバ

島津博基(JST GRDS)

【本 文】

1. 本研究会の基本的な考え方

現在、計算科学シミュレーション技術(以下シミュレーション、解析、CAE技術)は産業界のものづくりの実際の現場に普及しており、その技術は大規模化、高度化しつつある。しかし、大規模・高度シミュレーション技術を駆使できる企業はまだ少なく、また、産業分野や企業規模によって大きな差が存在している。さらに、シミュレーション環境の構築や解析技術ノウハウ蓄積にも課題が多く、シミュレーションの信頼性や結果解釈等、実際のものづくりとの連携が十分にできているとは言えない。

特に、シミュレーションや解析情報データと思考(設計)をうまく繋げたものづくりへの活用、すなわち、シミュレーションをうまく活用するための「知識、知恵の方法論(解析妥当性や目利き、創造性)」がまだ確立されていない。これを解決するためには、人材育成が重要だが、それと共に新たな視点として、「理解のための解析技術」から「活用するための解析知識(解析品質の理解)」への進展が必要である。

本研究会では、昨年、企業規模や業界の違いによる意見の多様さにも配慮しながら、望まれている施策、必要とされている人材の姿を定量的に示すため、企業アンケートや、必要に応じヒアリング等を行い、分析した内容を報告書(フェーズ1)にまとめた。

本年度は、フェーズ2として、①昨年度のHPC応用研究会活動を継続したものづくり連携システムの可能性探索を共通課題として、また、材料分野シミュレーションでは、材料特性データ不足や実現象スケール差、予測精度、製造との格差等、その活用に課題が多いことが予想されたことから、②産官学連携における材料シミュレーションと材料技術者の連携に基づく革新材料創生、産業化の仕組み構築を特化課題として取り上げ、この二点に関する分科会を設置・検討し、提言につなげることにした。

2. 検討の視点と範囲

本年度は二つの分科会において以下を検討する。

【HPC 応用分科会 [昨年度のHPC 応用研究会の継続]】：

- ・昨年度の課題抽出に加えて、更なる調査・分析による『ものづくり連携システム』の仕組みの具体化
- ・『ものづくり連携システム』をうまく運用するための、多様なシミュレーション情報と技術者をうまくつなぐための高度連携技術(可視化等)の提案

【シミュレーション応用材料設計分科会 [新規]】：

- ・多数の大学/研究所/メーカーに散らばっている材料シミュレーション技術者と材料技術、製造者との情報交換、議論による対象テーマを幾つか想定した現状課題抽出と分析
- ・新しい高機能材料の設計シミュレーション手法、開発・実用化モデル、ものづくりとの連携、および産官学連携の検討

3. 産業競争力強化のための提言および施策の検討：産業界における「ものづくり連携システム」のあり方 【HPC 応用分科会】

3.1 「ものづくり連携システム」を推進するための課題の詳細分析

昨年度報告書では「ものづくり連携システム」の重要な拠点の例として公設試の位置づけが重要であることを指摘した。そこで、その状況を分析するため、比較的 CAE 活動を活発に推進している二つの公設試を訪問して、詳細にヒアリングを実施した。また、今後、連携システムでも想定される産業界におけるソフトウェア活用の課題の俯瞰を行い、詳細な課題抽出を行った。

3.1.1 公設試ヒアリング

(1) 新潟県工業技術総合研究所

組織と特徴：

- ・職員数 84 名(研究職員 73 名)
- ・一つの研究開発センタと五つの技術支援センタ(下越、県央、中越、素材応用、上越)からなる
- ・事業：
 - ①技術支援：技術相談、依頼試験、機器開放
 - ②課題解決：ミニ共同研究(企業等課題解決型受託研究)、実用研究、小規模研究
 - ③研究開発：共同研究、受託研究(競争型・政策型)
 - ④情報提供発信 研究成果発表会、研究所一般公開、技術調査・研究会
- ・相談数は 1.3 万件/年(リピーター含む。個々の相談事例は、タグを付け分類・記録・共有されている)

CAE 技術普及の取組み：

□CAE 要員

- ・CAE 専門研究員は 3 名で、研究開発センタ(2 名)と技術支援センタ(1 名)に分散している。但し、この 3 名による OJT により、簡単な解析を行える職員も何名か居る。
- ・CAE 専門研究員といっても、域内企業への技術相談や現場技術立会による課題抽出から、シミュレーション解析、結果の解釈、検証実験(機械加工、計測なども自らやる)、ソリューション提案まで、さらには企業人材育成まで幅広く行う。特に技術支援センタ職員は、常時域内企業を回り、課題や技術ニーズに対する情報収集と技術相談を行うのを欠かさない。これらの活動により、現場の課題やニーズに密着して、解析のみならず、実験解析をも駆使して課題解決に迅速に当たり、さらには現場適用、商品化といった領域まで細やかな対応が可能となっている。
- ・また、研究開発センタと技術支援センタとで要員ローテーションを行っており、基盤的研究開発と現場ニーズ対応開発のバランスをうまく取るようにしているとのこと。但し、異動により担当者が担当地区が変わっても継続的な CAE 技術対応を行えるように後述の

『CAE 研究室』なるバーチャル組織を運営している。

□CAE 環境

- ・保有ソフト(企業開放)ある程度あり

ANSYS Mechanical、ANSYS LS-DYNA、MARC、PAM-STAMP2G、SolidWorks Simulation、JMAG(電磁場解析)

□組織上の工夫：CAE 研究室(バーチャル組織)

<<http://www.iri.pref.niigata.jp/ad_balloon/cae_vr_lab2/index.htm>>

- ・上記 CAE 専門研究員により運営され、CAE に関する情報から、解析モデルの検討、材料物性データの取得、検証実験、さらに解析技術者育成まで、CAE 利用に関するあらゆる相談に対応し、CAE 技術による課題解決と技術普及を行うバーチャルの中核組織(但し、ハードな組織ではなく、ボランティアによるコミュニティ的な組織)。
- ・業務内容としては、支援対象企業のニーズやシミュレーション利用レベルに応じて、お話し解析からモデル化相談や解析結果の検証、物性地取得のための依頼試験、さらには製品開発での共同研究にいたるまで幅広く支援業務を行っている。
- ・本研究室の総研内における研究開発アクティビティは高く、平成 23 年度は大型研究プロジェクト 6 件(総研全体で 12 件)、ミニ共同研究 11 件(総研全体で 51 件)と総研全体に比してかなりの割合を受託している

<< http://www.iri.pref.niigata.jp/ad_balloon/cae_vr_lab2/history.htm>>.

- ・研究開発成果は、公開可能なものについては充実した報告書が総研の年報に掲載され、シミュレーション技術の事例紹介として機能している。

<< <http://www.iri.pref.niigata.jp/houkoku.html#houkoku>>>

- ・このバーチャル組織『CAE 研究室』により、そのソフト/ハードな側面をうまく使い分けて、柔軟な人材運用(人事ローテーションがあっても継続的に支援)を行ったり、CAE 技術の存在感を高めたり(成果をまとめてボリューム感を示す)している。

□CAE 業務運用上の工夫：

- ・支援対象企業と共に考え、スピード感ある製品化支援を重視するための工夫が行われている。例えば、企業側の CAE への過大なる期待を修正し、CAE では何ができて、何ができないか、対策案を出すのは人間(CAE が最適解を出すのではない)、CAE には物性値やメッシュ、境界条件が必要、精度と時間のトレードオフ関係、といったことの理解を得ることから始め、支援企業とひざを突き合わせた検討を行うことで課題解決を図っている。この際、課題解決のスピードが重要で、まずは、精度 60%でもよいから数日程度で解析を行い、課題解決に向けての方向性を迅速に示すように心掛けている。
- ・また、上記のようにして、トラブル対応、コスト・品質改善、新商品開発といった成果のスループットを上げ、かつ適正に PR することにより、総研内における CAE 技術のポジション向上に努め、予算の獲得につなげている。

□人材育成システム：長岡モノづくりアカデミー <<<http://www.n-phoenix.jp/>>>

- ・上記 CAE 専門研究員らによる 2006 年度調査事業による成果を元に、財団法人にいがた産

業創造機構(NICO<<<http://www.nico.or.jp/>>>)、長岡工業高等専門学校と共同で「長岡モノづくりアカデミー」を2008年に創設し、企業のCAE技術者の人材育成を行っている。CAE研究室から講師派遣が行われるため、本コースの受講者は、コース終了後も講師であるCAE研究専門研究員と密接な連携を持つことができるため、その後の技術相談などではより迅速に、かつ適切なアドバイスが受けられる。

- ・カリキュラムは、材料力学や有限要素法など工学の基礎を学ぶ『設計基礎コース』から、応用/実践的な『開発設計コース』、『3D-CAD/CAEコース』、さらにより高度な設計全般とリーダー育成を行う『設計実践コース』と技術レベルを段階的に上げた育成を行えるように構成されている。何れも単なるソフト操作教育だけでなく、基礎となる工学や結果解釈、設計のノウハウ、さらにはリーダーに必要なビジネススキルまでも含むものである。

(2) 長野県工業技術総合センター

組織と特徴：

- ・職員数 約100名(研究者)
- ・四つの部門(材料、食品、精密・電子、環境・情報)からなる
- ・事業：
 - ①技術支援：技術相談、依頼試験、施設利用、
 - ②研究開発：共同研究、受託研究(競争型・政策型)
 - ③人材育成：研究成果発表会、研究所一般公開、技術調査・研究会
 - ④情報提供：
- ・CAE相談数 数100件/年

CAE技術普及の取組み：

□CAE要員

- ・CAEを担当している研究員は4~5名であるが専任ではなく、他の業務も担当している。また、簡単な解析であれば、更に数名が対応できる。
- ・新潟県工業技術総合研究所と同様、域内企業への技術相談や現場技術立会による課題抽出から、シミュレーション解析、結果の解釈、検証実験(機械加工、計測なども自らやる)、さらには企業人材育成まで幅広く行う。

□CAE環境

- ・保有ソフト(企業開放)ある程度あり:(センタパンフレット『材料技術部門 設備一覧』)、MoldFlow、3D-TIMON(樹脂流動解析)、ANSYS Multi physics(構造・伝熱解析)、LS-DYNA(構造解析)、J-STAMP(衝突解析)、ANSYS FLUENT(流体解析)、Maxell3D(電磁場解析)、SolidWorks(CAD)、DEFORM-3D(鍛造解析)、などかなり充実

□組織上の工夫：

- ・過去に繊維織物業界への支援に活用していたコンピュータ技術を背景に情報技術に特化した支援体制を構築した経緯があり、その体制を元にCAE技術への活用が活発に行われ

ている。

- ・ 研究開発成果は、公開可能なものについては充実した報告書が作成され、シミュレーション技術の事例紹介として機能している。

＜＜ <http://www.gitc.pref.nagano.lg.jp/reports.html>＞＞

□CAE 業務運用上の工夫：

- ・ 地域の特性を活かした『攻めの組織(研究開発型)』への転換を志向しており、その一環でシミュレーション技術の利活用も推進しつつある。

例①：地元の間伐材の有効利用を狙った「木製ガードレール」の設計に CAE を活用し、地域産業活性化を図った。

＜＜<http://www.pref.nagano.lg.jp/doboku/iji/kaihatu.htm>＞＞

例②：地域の特徴産業である超精密加工部品産業のグローバル化をサポートすべく、高精度・高速プレス打ち抜き技術による IC チップ小型化といった開発において、研究所保有のシミュレーション解析技術と加工実験解析技術の両輪で、開発速度アップを図った。また、「非接触 3 次元測定装置」といった計測機器も導入/活用し、実機(試作サンプル)との形状照合など解析結果の妥当性評価を実施、その効率化を図っている。

- ・ 上信越公設研ネット(群馬、長野、新潟、産総研)という枠組みの中で、CAE を活用した研究事例や地域企業への技術支援の内容についてお互いに紹介しながら連携を深めている。

□人材育成への取組み：長野県製品設計技術研究会などでの講習会等の実施

＜ <http://www.gitc.pref.nagano.lg.jp/zairyo/sekkei-ken/> ＞

- ・ CAE 担当研究員による地域企業への OJT による普及活動の外に、かつては『長野県製品設計研究会(会員企業：約 30 社)』という枠組みで、大学や先端企業による講演会を年に数回実施したり、構造解析や磁場解析といった個別技術に特化した分科会活動を大学や高専と連携して展開していた。現在は、『長野県製品設計技術研究会』で講習会やセミナーを実施している。

3) 公設試ヒアリングから見えてくる普及、活性化の視点

工夫点：

- ・ 公設試という立場から地域企業に密着した職員による対応、その地域の産業特性・特徴を生かした CAE 適用の検討
- ・ CAE に関する情報から、解析モデル検討、材料物性データ取得、検証実験、さらに、解析技術者育成まで、CAE 利用に関するあらゆる相談に対応し、CAE 技術とものづくりノウハウによる課題解決と技術普及といった上流から下流までを通して扱いうる組織づくり
- ・ 3D CAD に付属しているような CAE の普及に伴って、最適な解が簡単に得られるものと考えている企業も多い。そのような企業に対しては、過大な期待を修正し、「できることと

できないこと」「材料物性値や境界条件の違いによる解析結果の差異」などを説明しながら理解を得るようにし、上手に CAE を活用してもらえるように努めている

- ・ 支援企業と共に考え、スピード感ある製品化支援を重視

課題：（公設試以外の関係部署ヒアリングも反映）

- ・ 研究資金の不足、ソフト保守費の問題
- ・ 人材の不足（地方の中小企業では、専門部隊（専任者）を配置することは困難であり、現場の技術者が兼務しているのが現状）
- ・ 公設試間の連携が不十分、メリットが見えない
- ・ 下請け企業が多く、提案型解決へのシフトを目指すが、解析検証が難しい
- ・ CAE に係る相談は緊急を要するトラブル対応の案件が多く、そのため公設研による対応も迅速な対応が必要となっている。
- ・ CAE を活用した課題解決や技術開発に至る過程は、企業秘密の部分が多く、外部公表が制限されるなど、成果の可視化が難しい。
- ・ 県における公設試の組織としての活動の限界、公設試間の連携の難しさ
- ・ 公設試以外の高専、大学等も含め連携の必要性
- ・ 中小企業間に大きな差があり、レベル合わせは困難、現実課題はコストダウンが目標、新しい価値の製品貢献は少ない
- ・ 世界を視野にいったニッチで最先端の事業を CAE を活用して支援する仕組み

3.1.2 ソフトウェア活用の現状課題の抽出

上記、公設試の事例にも見られるように、連携システムにおいての情報共有やソフトウェア活用という新たな視点が今後大事になると思われる。本節では現状のソフトウェアの分類と課題を分析した。

現在、一般的に使用されているソフトウェアには幾つかの形態があるが、ここではフリー/オープンソースソフト、企業内オリジナルソフト、商用ソフトの三つのカテゴリーに分類して、それらの現状と課題を整理した。（詳細については参考資料、p.45 表1）

- (1) フリー/オープンソースソフト（以後単にオープンソースと称す）としては、OS 分野において Linux が有名であるが、ものづくりに必要なシミュレーションの分野でも近年 OpenFOAM（流体解析）、SALOME-Meca（構造解析）、ABINIT（第一原理分子シミュレーション）、NAMD（分子動力学シミュレーション）、MyPresto（創薬シミュレーション）など、商用ソフトウェアに匹敵する機能を持つソフトが現れている。オープンソースの多くは大学や公的研究機関での研究成果が元になっており、ソースコードを無償で入手でき、自由に改変・再配布ができるライセンス形態で公開されている。優れたオープンソースはユーザと開発者のコミュニティによる自立的な発展のサイクルに入っており、操作性、信頼性においては商用ソフトには及ばないものの、必要な費用は導入に至る人件費以外ほとんど不要である。

また、改変の自由度が高いことから、企業内ソフトと同様に独自のノウハウと直結させたシミュレーションの機能を実現できる可能性を持っている。また多くの人材が自由に関与できることから、広い範囲の知見の集約や人材育成の機能も有している。一方、利用においては、企業のノウハウの流出を避けるライセンス形態の整備や一定範囲での信頼性の確保（解析限界の把握）は課題である。

- (2) 企業内オリジナルソフトは、機密性が高いために成功事例が公開されることは少なく、その実態を知ることは難しい。一方、国内においては独自開発よりもコストパフォーマンスが高い海外の商用ソフトの導入が急速に進んでいる。このため、独自に開発したオリジナルソフトを競争力にまで高めているが企業が無いとは言えないが、一般的には大企業と言えども独自開発のための人材と体制を確保することは難しくなっている。
- (3) 商用ソフトは使用権販売という明確なビジネスモデルによって収益を確保して継続的な投資を行うことで発展させることが出来る。これらは汎用的な機能を集約して基盤化するとともに、個別の機能をカスタマイズによって実現する機能も持っており、企業内オリジナルソフトを代替しつつある。今後も利用者が機密性の高い企業内の独自の解析ノウハウを保護しつつ、適切な情報を開発者にフィードバックすることにより、企業に必要な機能が充実すると思われる。しかし一方で汎用基盤上に作られたカスタマイズでは大きな差別化要因にはならず、他社の追従は容易である。また、現状では有力ソフトウェアのほとんどが海外製品であり、フィードバックや最新技術の導入が遅れる恐れもある。このため、企業内の独自のノウハウ、競争力との直結する競争領域（自社でしか出来ない実験、製造プロセスとの結合等）においてはオリジナルソフトを維持しつつ、一般領域において商用ソフトを利用するような戦略的な取組みが必要である。そのため、ソフトウェアを開発できる人材を企業内に確保すると同時に、汎用部分を開発できる国内ソフトベンダーやオープンソースの活用も重要である。

3.2 シミュレーションを核とするものづくり連携システムのあるべき姿

本節では公設試も含めた関係機関の連携、情報共有がスムーズに行いうる連携システムのあるべき姿を述べる。ここでは、大企業から中小企業までがその中でシミュレーション技術を活用した競争力強化が期待される。

連携イメージとしては、以下の施策が必要と思われる。

- (1) 公設試も含めた関係機関の連携、情報共有がスムーズに行く仕組み構築。
- (2) (1) により、シミュレーションやCAEを活用することで以下の内容が実現できること。
 - ・ 地方企業競争力向上のための成長循環ビジネスモデルの構築
 - ・ 県としてのメリット向上
- (3) 投資マインドの向上、成果PRの施策

上記を実現するための、あるべき姿として検討した内容を次に示す。

3.2.1 シミュレーション技術インキュベーション組織の必要性

産業界がシミュレーション技術を活用し、その産業上の課題を迅速に解決していくにはためにはCAEを核としたものづくり連携システムの構築が必要である。ものづくり連携システムにおいては産官学のさまざまなプレイヤーが異なるフェーズとフィールドで参加し、その課題解決に生かすことが出来なければならない。ここでいうフィールドとは、HPC技術が活用される場とその担い手である。昨年の報告書で述べているように、フェーズとしては ①HPC技術創出フェーズ、②HPCビジネス創出フェーズ、③HPC技術活用フェーズが考えられ、フィールドとしては④学術フィールド（大学・国研等）、⑤産業界フィールド（大企業、中小企業）、⑥公的フィールド（公設試、独法・公益法人等）がある。①HPC技術創出フェーズでは、ハイエンドスパコンの開発や新しいアルゴリズムに基づくソフトウェアの研究開発、シミュレーションによる課題解決のための手法開発等が国の事業として、中長期的なビジョンの下に実施されるべきであり、④学術フィールドである大学・国研を中心として⑤産業界フィールドの内、とくに大企業等が参画する有期限のプロジェクトとして実施すべきである。プロジェクト相互の関係は長期的ビジョンの下に十分に検討されるべきであり、とくにハードウェアは数年の内に陳腐化するのに対して、ソフトウェアは実用化までに10年単位の期間がかかり、さらに長期にわたって使い込まれていくことを考慮したプロジェクトとしなければならない。このため、技術創出フェーズにおいても、プロトタイプから実用システムにインキュベートする仕組みは必要であるが、この部分が“死の谷”になっていた。

これを克服するために、研究開発に参画した大企業等の中心先進ユーザが先行事例の創出を行い、ものづくりシミュレーション技術として実証していく場として、シミュレーション技術インキュベーション組織が必要と思われる。この運営母体は⑥公的フィールドの機関を中心とし、予算は官民からの投資によって行うことが必要である。産業界の代表的あるいは具体的課題をもとに開発したHPC技術を検証し、解析事例として集約し、必要に応じて研究開発の場にフェードバックさせていく。

海外においてはこのような組織がすでに構築されていることに留意すべきである (<http://www.cerfacs.fr/index.php>)

3.2.2 HPC ビジネスの活性化

ものづくりHPC技術のビジネス化は基本的に産業界・市場に任せるべきであり、この部分は②HPCビジネス創出フェーズに相当する。しかし、我が国ではHPCビジネスがほとんど立ち上がっていない現状を踏まえ、とくにベンチャーがHPCビジネスを起業する際の優遇措置はなされるべきである。すなわち税制上の優遇措置に加えて、国費等によって研究開発されたHPC技術は原則としてベンチャーが自由に活用できることを推進すべきである。このフェーズにおいては産業界のとのニーズのマッチングが促進され、利用価値の高いものは自律的に成長していくことが期待される。

3.2.3 HPC 技術活用の横展開

HPC技術の実問題への適用は大企業のみならず我が国のものづくりの根幹をなす中小企業ゾーンへの展開が図られなければならない。しかし、昨年度実施した企業へのアンケート結果からも判明しているとおり、中小企業には新しい技術の導入に時間をかける余裕はなく、また、新たな設備導入を行う投資も困難な状況にある。このような状況下では技術相談・指導を行う各自治体の公設試の果たすべき役割が非常に大きくなっている。とくに地域性に配慮した対応や迅速な対応が可能であることは中小企業にとっては重要である。この③HPC技術活用フェーズにあっては、公設試等の公的機関がハブとなってCAE/HPC技術の普及促進を行うべきであるが、一方で、各自治体の公設試も厳しい人員・予算の範囲内で対応せざるを得ない状況である。このため、公設試が個々にHPC技術の活用推進を行うだけでなく、各自治体の公設試が連携してCAE/HPC技術の活用・普及を我が国の産業界のボリュームゾーンに対して推進していくべきである。

3.2.4 クラウド技術による連携プラットフォーム構築

ものづくり連携シミュレーションシステムを実現する場・技術としてはクラウド技術によるプラットフォーム構築が望ましい。ここでは、計算機能は当然必要であるが、情報集約・検索機能、モデル化機能等も必要である。このような次世代クラウドプラットフォームは基本的には産業界が自ら構築すべきものではあるが、我が国のものづくりのインフラであることから、次世代クラウド技術を用いたものづくり連携プラットフォームが構築されるべき高速通信網は国が整備・普及させることが必要である

以上、ものづくり連携システムにおいて各フェーズにおける、各フィールドの役割のあるべき姿を以下の表にまとめる。

	学術フィールド		産業界フィールド		公的フィールド	
	大学・国研等	大企業	中小企業	公設試	独法・公益法人	
HPC技術活用フェーズ	① HPC技術活用人材の育成 ② 国産HPC技術(国プロ成果物)による研究・教育現場での利活用	① 先行的成功事例の創出 ② 新産業創出	① 公設試等の支援を活用し、自社課題の迅速な解決 ② 国プロ成果物のビジネス化	① 中小企業支援によるCAE技術の普及促進 ② 活用現場での利用ニーズの集約とフィードバック ③ CAE人材の育成 ● CAE/HPC技術の普及促進のハブ機能	① 公設試等と連携した産業界への普及促進活動の推進 ② HPC技術活用人材の育成	
HPCビジネス創出フェーズ	国プロ成果物の事業展開協力	国プロ成果物の事業展開の推進	国プロ成果物の事業展開の推進	企業指導・相談における国プロ成果物の活用	国プロ成果物の普及促進事業の推進	
HPC技術創出フェーズ	① ハイエンドスパコンの研究開発(ハード) ② 革新的ソフトウェアの研究開発(ソフト) ③ 課題解決・モデル化手法の開発(利用技術) ● 有期限プロジェクトとして研究開発を実施 ● プロジェクトを連続的・戦略的に行い、科学技術力を継承・深耕	① 国プロ参画によるHPC技術の創出 ② 先進的ユーザーとしてHPC技術の実用性実証・ブラッシュアップ ③ 創出技術のインキュベーション	① 国プロ参画によるHPC技術の創出	① 利用ニーズの国プロへの範囲	① 創出技術のインキュベーション ② 課題解決・モデル化手法をDB化し知識の集約と活用の推進	

3.3 次世代クラウドシステムによるものづくり連携プラットフォームのあり方

ここでは、連携システムのあるべき姿と現状を比較し、まずはあるべき姿につなぐための暫定的（中間的）な案として抽出課題を改善し、活性化するための施策として、クラウド的な「ものづくり連携システム」の具体的な内容を検討した。

3.3.1 課題解決のモデル化技術（ビジュアルアナリティクス、解析品質 V&V 他）

(1) ビジュアルアナリティクス

課題解決モデル化技術のひとつとしては、課題解決のプロセスの中で仮説検証といったユーザの思考を支援するビジュアルアナリティクス(VA、視覚的分析)技術を活用して、さまざまな分野における HPC から出力される変数間の因果関係を明らかにすることが挙げられる。ここで、ビジュアルアナリティクスとは、シミュレーション結果で出力される大量の変数から関連の可能性が高いものを選択し、それらの間の因果関係を検証する科学と定義される。

産業界の課題解決において重要な仮説検証プロセスにおいて役立つビジュアルアナリティクス環境（図 1 参照）を構築し、その有効性を検証することが重要であり、以下の項目の研究開発が必要である。

1) 多変数データ向け融合可視化技術

全体像を把握するための俯瞰ビューは、シミュレーションの定義される座標空間中で、多変数データがどのように分布しているのかを対話的に理解できる必要がある。特に、膨大なデータに対して、思考の連続性を阻害することのない描画速度が要求される。

2) 座標・変数空間結合可視化技術

注目すべき場所と変数が特定できたら、それら多変数データがどのように関連するかを明らかにするために変数空間での多次元データ向け情報可視化技術が要求される。

3) ビジュアルアナリティクス環境を使った適用検証

上記 1) 2) で開発するビジュアルアナリティクス環境を活用して、当該分野で設定された課題解決に取り組む必要がある。

ここでは、仮説検証といったユーザの思考そのものを支援するという側面で可視化技術を見直し、ビジュアルアナリティクス環境を構築することを提案する。ビジュアルアナリティクス環境が定着すると、大規模災害発生後でいつも議論される想定外問題に対して積極的に向き合うことが可能になると推測される。「想定」という言葉は、ある人工物を設計するとき、そのシミュレーションモデルに境界条件をどのように設定するかという場面で用いられる。境界条件を設定するとは、設計しようとする対象物が、どのような環境に置かれているかを想定し、その場合に受けるはずの外的要因を定義することであるが、これは経験知が重要な役割を果たす。

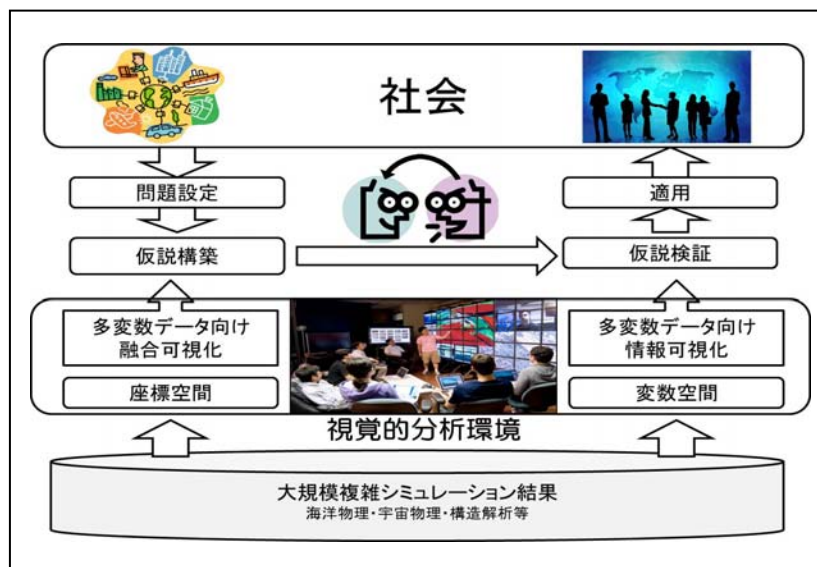


図 1 ビジュアルアナリティクス活用

(2) 高精度な解析（デバイス・材料開発の例）

デバイス・材料開発に関わる計算シミュレーション技術においては、①課題解決モデル化技術、②高精度・高速ソルバー、③シミュレーション結果の解析を組み合わせることが必要であるが、デバイスが微細化、高機能化するに従い、モデル化技術と高精度・高速ソルバーの重要性が増している。ここでは産学の知見を集約して、方法論的にも第一原理計算のみならず必要な手法を融合するマルチフィジクス・マルチスケールシミュレーション技術の開発を急ぐ必要がある。一方で、流体解析・構造解析では普通に行われている解析結果の品質保証をデバイス・材料開発でも行うことが重要である。実用材料にはばらつきがあることからばらつきを考慮した解析手法の開発や、制御しきれない境界条件に対するデータ同化技術の適用等、より高度な解析品質の保証と検証技術（advanced V&V 技術）を開発する必要がある。

3.3.2 知識継承を実現する人材育成・活用システム（シニア活用、若手人材育成）

(1) シニア活用

シニア活用はIT分野に限らず、これからの人口減少による労働力不足、年金需給の開始の延長といった構造的な問題に加え、最近ではシニアの海外流出による高度技術流出という問題もあり、国内での活用を活性化することが急務である。しかし、日本では定年制が一般であるために、シニアの活用に関しての実績が少なく、どのような分野であれできるだけ早急に活用基盤を構築せねばならない。シミュレーション分野での活用には、一般的なシニア活用の条件に加えて

- ・シミュレーションを主な業務にしてきたシニアという人材自体がこれまでいなかった
- ・業務内容が比較的身体的な負荷が少ない

といった特性があり、これから活用基盤を構築するには有利な状況だと考えられる。

また、シニアに期待できる役割としては、

- ・後進の指導
- ・ソフトウェアの維持管理

・ソフトウェアのクリエイター

などが考えられる。後進の指導は会社組織にしばられない（技術を中心にした）メンターな役割が考えられる。教科書では伝えられない細かな技能がありその伝承が期待できる。多くのソフトウェア開発に携わり、いろいろな状況に対応してきた経験は、ソフトウェアの維持管理の担い手として有望である。日本でも海外に負けないシミュレーションソフトを生み出していかなければならないが、第一には大学を中心とする若手に期待するとしても、シニアにもその一翼を担うことはできると考えられる。多くの実務経験があればこそ、自己満足ではない使い手を考慮してソフトウェアの創出が可能である。

以上から、本研究会で議論しているインキュベーションセンターの運営にシニアの活用を加えることが考えられる。はじめに述べたことを考慮すると、単なる活用から一歩進んで、ひとつのモデルケースとなるような体制をつくることが望ましい。それは単にポストを作るだけでなく、シニアが十分に力を発揮できる環境をつくらねばならない。シニアは能力や体力の個人差が大きいとされる。また、シニア活用には持っている能力を提供してもらうという意味合いが強いが、積極的に教育をして新たな知識を加えてより経験を活かす機会も必要である。ものを作ってきた人にCAEを学んでもらえば、CAE技術者には見えないものづくりのノウハウを伝える指導者として期待できる。

もちろん、上に述べたような環境を用意するにはコストが発生するが、シニアを余剰労働力ととらえるのではなく、付加価値の高い労働力と考えるということは、活用に対してある程度の資源を投入することである。単なる“シニアを活用する”から“活躍できるシニアを育てる”にしていくことが、ものづくり日本の復権には必要である。

(2) 産学連携インターシップによるシミュレーション人材育成

ここでは今後のインターシップの在り方をふまえて、インターシップを利用したシミュレーション技術の継承について検討した内容を述べる。

産業界および社会全体でグローバルイノベーションを牽引する人材を育てるため、産業界の大学・大学院教育へのニーズを示すとともに、中・長期的な学びの場を用意して企業が学生を受け入れ、現場についての理解を深めさせ、成果を生み出すプロセスに携わらせるのがインターシップの本来の目的である。ものづくり力をもつ中小企業や地域の企業における知識の継承、シニア技術者のもつ経験的な知識・スキルの継承が大きな課題となっているが、シミュレーション技術をもつ学生をインターシップ生として受入れることで、シニアが会得しているものづくり技術を広く活用可能な形に定量化することができよう。

従来のインターシップは、就職活動をひかえた修士課程1年次の夏期休暇中の短期（2～3週間）インターンが中心であった。このため就業体験はできても、知識・スキルの継承を通じた人材育成につなげることに困難があった。一方、中・長期（3ヶ月～1年間）のインターンとしては、例えば、「グローバルCOEプログラム」や「博士課程教育リーディングプログラム」等の支援によるインターシッププログラムや独自の博士課程

学生インターンシッププログラムを実施する大学もあるが、対象が特定の大学・研究科の博士課程学生に限られる、中小企業や地域の企業との接続が困難、プログラムのテーマにシミュレーション技術の継承が含まれるとは限らないといった課題があった。

そこで、二つの可能性を提言する。ひとつは、シミュレーション技術の継承につながるような研究室単位の共同研究を増やすため、学部卒業研究の研究指導補助を産業界に求めることである。多くの大学の工学系学部、理学系学部では、4年次の夏期に実施される大学院入学試験に合格して同じ大学の大学院に進学する学部生の割合が依然として高く、また、優秀な学生は4年次前期までに卒業に必要な授業科目の単位は全て取り終えて、4年次後期は卒業研究に専念している。そこで、優秀な学部学生が所属する学科と企業が連携して卒業研究に関する研究指導補助をインターンシッププログラムとして実施することが考えられる。10月から2月の5ヶ月のうちの3ヶ月程度をインターン期間、残りを卒論執筆と発表に充てることができる上、卒論発表後の春期休暇中、場合によっては修士課程入学後も同じ企業で休暇期間を利用したインターンシップを継続できることが大きなメリットである。

もう一つのアイデアは、修士課程1年次生を対象とした単位化されたインターンシップ科目を学内で開講する方法である。情報系企業を中心に必ずしも企業の現場でなければインターンにならないといった制約がない場合は、大学側が用意するスペースで実験・演習科目としてインターンシップ科目を実施する。産業界からは科目担当の非常勤講師を派遣することになる。文部科学省「先導的ITスペシャリスト育成推進プログラム」のように経済団体連合会からの講師派遣も検討の対象となる。

3.3.3 クラウドシステムにおけるプラットフォーム

先進的なクラウドシステムを活用した、ものづくりのための連携プラットフォームは、特に中小規模の企業におけるシミュレーション導入・活用、ひいては産業競争力の向上にとって重要なツールとなる可能性を有している。

一方で、ものづくり現場での効果的活用を図る上では、いくつかの課題も存在する。

(1) セキュリティ&ロバストネスと、ユーザビリティのトレードオフ

利用者にとって業務の一部を外部のリソースに提供するにあたって、業務内容に関するセキュリティやストレージ上のデータに関する不測のトラブルなどに対するリスクヘッジがされると同時に、アクセシビリティや操作性の確保も重要である。

(2) 商用パッケージソフトウェアのライセンス・スキームのクラウド対応

一部の商用ソフトベンダにおいては、クラウド環境にも対応したライセンススキームの提供がなされつつあるが、サービス提供者、利用者双方にとって、利用規模・内容に応じてフレキシブルなライセンススキーム、課金の仕組みが必要である。

(3) 本格的解析に伴う大規模データの転送、処理の効率化

とくに医薬品開発においてはバイオインフォマティクスの活用が早期開発のカギであり、各種データのクラウドシステムとの融合化が必要である。また、いろいろな分野

において、膨大なデータからの有効な情報を得るために、3.3.1項で述べたようなVAなどの可視化技術の必要である。

(4) 利用方法に関するコンサルティング拡充

解析モデル作成からシミュレーションソフトウェアの実行、処理結果の可視化、解釈、また利用者作成のアプリケーションソフトウェアの場合、一定範囲での並列化計算支援など。また、そもそも外部リソース（クラウドなど）を利用すべきか、企業内で利用可能なリソースを活用すべきか、投資の必要性や投資先自体を含めたビジネス・コンサルティング提供の仕組みが希求される。

特に中小規模の企業をターゲットとしたクラウド環境においては、ITリソースやツールの整備に限らず、より総合的なコンサルティング環境が重要である。

以上挙げた課題等によりこれまでのクラウドビジネスは苦戦しているが、これを克服するためには、リソース提供側（計算機センター、クラウドセンター）などが、アカデミック重視ではなく、産業利用を主要ミッションのひとつに位置付けている必要がある。また国の政策においても、人材育成、ノウハウ・事例の蓄積を含め、中小規模の企業にとって活用されやすい仕組みの整備や、予算投入が望まれる。

3.3.4 アプリソフトウェア開発の持続的発展のための戦略骨子

(1) 正のスパイラル

ソフトウェアの開発や持続的な維持、発展に欠かせないのは、開発者、コーディネータ（ソフトベンダー他）、利用者が満足し、使うための意識を高く持ち続けることができるかどうかにかかっている。いわゆる正のスパイラルができるかどうかにかかっている。開発者にとって、利用者が多ければ嬉しいはずであり、さらにフィードバックがかかることにより、ソフトウェアが使いやすく改良される。コーディネータ（含ソフトベンダー）は両者を繋ぐ役割を果たすはずである。また、開発されたソフトウェアをさらに使いやすく作り直す機会も増え、利用の環境が整い、更に発展していくはずである。現在、国内でのソフトウェアの開発の持続的発展が図れない要因の1つは、正のスパイラルがかかっていないということである。以下、現在の利用環境を中心に正のスパイラルを掛けることのできるための現状把握と対策について述べる。

(2) クラウドシステムにおける多様なソフトウェアのライセンスのあり方

上述のようにソフトを動かすハード環境についても並列化、クラウド化が急速に進みつつある。このような中で従来利用されてきたソフトの開発や発展に歪が生じている。特に商用ソフトでのライセンス問題は顕著である。現在はCPU毎に課金するシステムが主流であるため、現在の並列化システムやクラウドに対応した課金体系になっていない。このような新しい利用形態に即したライセンスのあり方をユーザの要望を踏まえて早急に構築すべきである。

材料探索の分野やバイオ分野では、既存のソフト（主に商用ソフト）のユーザとして

の計算機利用を行う機会が非常に多い。創薬、農薬など多くの化合物を探索するために、比較的小規模の計算を多数使う場合が多い。ユーザ側から見ると現在の並列化システムやクラウドに対応しやすく、効果が上がりやすい領域ではあるが、上述のライセンスの問題が大規模な利用を阻んでいることを指摘したい。

(3) 計測とシミュレーションとの接続技術

材料探索の分野や創薬、農薬などのバイオ分野では、従来、母核となる化合物やその周辺の化合物について合成し構造を分析特定した物質そのものをライブラリとして蓄えてきたが、近年、コンピュータの発達とともに、構造データや特性なども含め実験データを共通的にデータベース化する動きが急である。特に産業界ではデータ書式など独自であり、外部に出ることはない。一方、大学や研究機関では、研究室

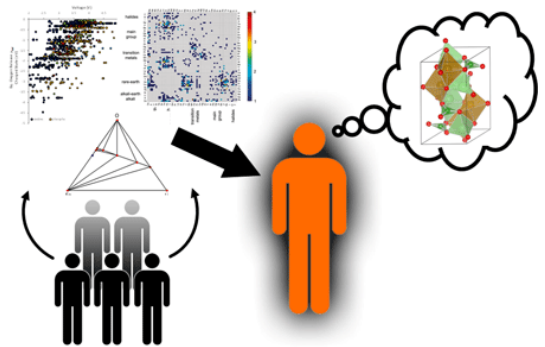


図 <http://materialsproject.org/> より引用

間の壁もあるだろうが、データとして互いに利用出来る環境・風土がある。ただデータ書式の統一化が図られていないのが現状である。データ連携に関する最新の技術を産業界のシミュレーション現場で早急に取り入れて、活用していくことが重要である。

解析知見のデータベース化については過去、1996年にIPAで行われた「知見情報データベース」があるが、それを運用する（開発者とユーザを取り持つ）機関がなく、その後の進展はない。米国では最近、Material Projectとして、実験データ、計算機シミュレーション、データベース化を合わせ持ち、必要に合わせ情報をフリーで得られるシステムが動き出している。これが機能すれば、必要なときに必要な情報を得られ、産業競争力強化において効果が高い。利用の体制の新しい展開、今後の参考になる動きである。

(4) ソフトウェアの価値成長デザイン(維持、オープンブラッシュアップ)

フリー／オープンソースソフト、企業内オリジナルソフト、商用ソフトは互いに補間する関係にあり、それぞれの特徴を生かした協調と競争により共に発展する環境を構築することが必要である。このための方策として、オープンソースについては

- ・ 公的研究開発成果のオープン化
- ・ 基盤ソフト(インフラ)としての公的な開発・評価体制の整備
- ・ 企業利用(カスタマイズを含む)に適したライセンス形態の開発

が考えられ、また、商用ソフトについては

- ・ 共通基盤領域での利用(ツールとしての割切り)
- ・ ベンダーの育成(企業における利用情報のフィードバック、企業とベンダーとの継続的な発展/共同開発、他)
- ・ 利用技術の高度化によるノウハウの蓄積、差別化

が必要である。さらにこれらを活用しつつ、企業の競争力を実現するために、

- ・企業内の独自のノウハウ、競争力との強結合(自社でしか出来ない実験、製造プロセスとの結合等)
- ・ブランド、技術戦略への組み込み。(独自のシミュレーション技術、成果のアピール)
- ・機密保持のノウハウの確保した上での外部連携

によりオリジナルソフトを戦略的に開発することが重要である。

(5) 大学発のソフトウェアを維持・管理するための受け皿(組織)

わが国においても大学等によるプログラム開発自体は世界に誇ることができるレベルのものが数多くなされてきている。しかしながらそれを維持・管理する受け皿に関してはほとんど対策が取られていない。そこに大きな正のスパイラルに入らない原因があるものと思われる。基盤的ソフトウェアに関して、これまで国プロでの投資は主に大学、研究機関を中心とするものである。しかしながら上述のように、開発者と利用者を結びつける第三の機関として、配布分配者(コーディネータ)の存在が重要となる。このような機関を充実することがシミュレーション技術の活用における大きな変革につながる可能性がある。国プロ成果物を実用に耐えうるレベルまでインキュベートし、その普及を図りソフトウェア資産・活用技術を維持・メンテできる体制を持つ機関を考える必要がある。大学発だけのソフトでは使い難いので、その周辺ソフトをこの団体が入れ込んで使い易いものに仕上げ提供するような仕組みが必要である。

この開発者と利用者を取り持つ中間的な組織が主体となることにより、シミュレーションに使うための実条件に見合った境界条件が入手や、解析方法などを集めておけば、実際の境界条件を利用者から聞き出して整理し、データベース化しておく仕組みの構築も可能になる。従来は、HPCの利用による丸ごと解析が中心に考えられていたが、これは境界条件などの不具合を無くすための手法の一つととらえることができる。これらの結果も含め、再利用可能な形で保存しておくことを考えることが可能となる。

3.3.5 地域企業における新しい価値を産むための仕組み

国プロや大企業を中心としたシミュレーション技術の創出を担うシミュレーション技術インキュベーション組織の技術を我が国のものづくりを担う各業種・各企業が活用し、その生産性を高め、個々の産業競争力を強化するには各地域における公設試がそれぞれの地域の大学等の知的資源と一体となって地域企業の課題解決に取り組んでいく必要がある。しかしながら、公設試は行政区分上それぞれの自治体に所属し、また、地域性に依存するところもある。地域性を生かすことは先の公設試のヒアリングでも明らかなように、重要な視点であるが、活動の制約、情報の仕掛、リソースの制限等、課題も多い。

このような制度的な課題に対して、最近では前節で述べたようなクラウド技術によって情報流通を活発化することによって情報共有を推進することが可能である。企業と公設試や大学等の間を取り持つ広域地域連携組織が必要と思われる。このような広域地域

連携組織には権限を委譲されたコーディネータ・アドミニストレータを配し、産学の情報流通の「踊り場」となることも期待される。

従来、このような組織には多大なインフラと運営資金が必要であり、かつこの組織そのものが大きなビジネスにはならなかったことから進んではいないが、昨今のICT技術と前章までに述べた、公的高速通信網の利用、シニア人材の活用等制度面での改善を行うことによって、上記広域地域連携組織が実施主体となりうる。この組織の運営には公的資金（公的研究機関）や民間資本を投じる必要があるが、現在、存在する各種業界団体のメタ組織として位置づけることも提言したい。すなわち、業界ごとないしは地域ごとに存在する各種団体の横断的組織として、シミュレーション技術・CAE技術を基礎とし、ものづくりの知見を集約・流通させるものである。

現在、大学等の公的機関が所有するさまざまな研究施設をプラットフォーム化して、広く産業界での活用に供する仕組みが政策として進行している。これは大規模な装置群やそれを使いこなすノウハウを持たない企業に対して高いレベルの解析・計測技術を提供するものである。我が国の公的機関のインフラを活用する仕組みとも本組織が連携して、我が国のものづくりポテンシャルを生かすことを早急に実現する必要があり、それによって地域性を生かしたビジネス創出が期待できる。

以上、上述してきた3.2、3.3章をまとめた結論として、新たに改良した「ものづくり連携システムイメージ（図2）」を以下に示す。

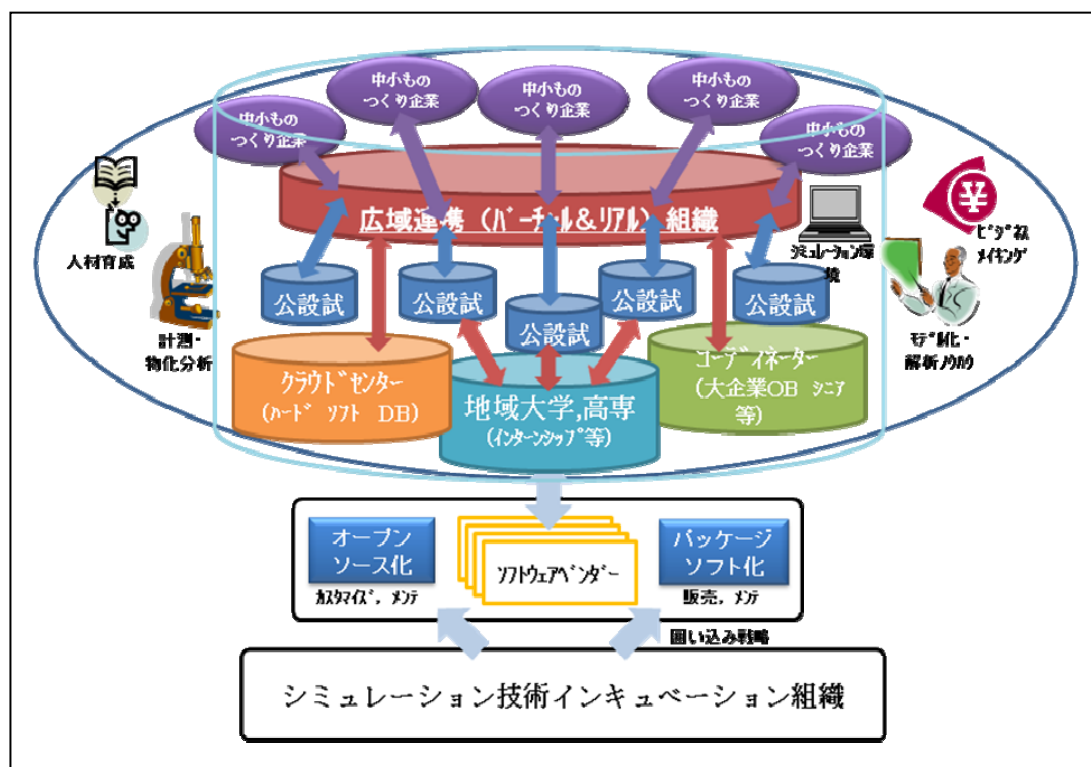


図2 ものづくり連携システム（イメージ）

3.5 ものづくり連携システムの具体的骨子

中小企業を中心とした我が国の産業界ニーズがよく集約される公設試へのヒアリング等によるVOC分析に基づき、シミュレーション技術の活用視点で検討し、顕在化してきた課題を今回、明確化した。すなわち、公設試には企業側ニーズが集まるが、対応するには情報共有、人員、ソフトウェア、予算、等の面でさまざま課題がある。これを解決するには産官学や国としての体制の工夫と新たな方針による連携づくりが行われなければならない。これまでの議論を踏まえ、まずはこれを克服する枠組みをまとめると以下ようになる。

(1) 次世代クラウドシステム上に構築されるものづくり連携プラットフォームの実現。

公設試や高専、大学をハブとしてシミュレーション技術を普及し、活用していくには情報集約的な広域連携組織を置くことが望ましいが、これをクラウド技術によって実現する。そのためには高速安価な通信網の整備、ソフトライセンスの考え方の転換、用途に合ったセキュリティ技術の開発、可視化等の活用技術開発、また、利用者とソフトウェア開発者を繋ぐ主体的組織が必要である。さらに公的な研究施設プラットフォームとの連動が望まれる。

(2) ものづくりにおけるシミュレーション技術の知識を継承する仕組みと人材の育成・活用システムの整備。

シミュレーション技術がブラックボックス化することを防ぎ、真に意味ある解析を行うために、より踏み込んだインターンシップ制度の整備とシニア人材の活用が強く望まれる。また、解析結果そのものを蓄積し、再利用することを可能とする制度による知識継承システムが必要である。

(3) 課題解決モデル化技術と解析結果の検証システムの研究開発の推進。

従来、シミュレーション技術の研究開発はハードウェア、ソフトウェア、およびネットワーク・システム技術に限定されてきた。しかし、産業界の抱える課題を解決するには、シミュレーション技術を適用できる形にモデル化する技術とその結果の検証システムが必要である。ビジュアルアナリティクスに代表される新しいモデル化技術、解析結果の検証や解釈等の解析品質技術の研究開発プロジェクトを興すべきである。

(4) 地域性を生かしたバリューイノベーションを実現するものづくり連携システム構築。

クラウド技術によって地域の中小企業や地方大学のハブとなっている各地の公設試を連携させ、活用情報を流通させ、また各地の公的な研究施設をリモート活用することによって、地域性を生かしたビジネスの創出を目指す。そのためには、公設試の活動範囲拡大、公設試間連携促進、目利き人材（コーディネータ）正しく配することも重要である。

(5) シミュレーション技術インキュベーション組織を設置し、産官学で運用・活用する。

ここにおいて大学等が生み出した日本発のシミュレーション技術シーズを大企業等が中心となって実用レベルまで高めていくことによって、HPCビジネス市場の活性化を推進すると同時に、分野ごとのシミュレーション技術コミュニティを育成していく。

4. 産業競争力強化のための提言および施策検討： 産業界におけるシミュレーション 応用新材料設計手法のあり方 【シミュレーション応用材料設計分科会】

産業界におけるシミュレーション応用の新材料設計手法のあり方を提言するため、
現状の課題の分析と材料シミュレーションにおける新材料設計の方向性の調査を実施し、
設計手法の将来ビジョンについて検討した。

4.1 検討方針

二つの視点で以下を検討する。

- ①現状の材料シミュレーションによる材料設計の課題抽出と分析
(実際のものづくり現場の課題)
- ②コンピュータシミュレーションによる新材料の設計のあり方の検討、提案

4.2 現状の材料シミュレーションによる材料設計の課題抽出と分析

4.2.1 課題検討上のポイント

(1) 技術的な課題

- ・実際の製造・加工プロセスに適用できる材料組成、材料特性の開発(良い材料組成を発見したが製造できないでは駄目など)
- ・耐久性・信頼性・劣化などの材料の長期信頼性の予測
- ・材料設計固有の課題、特徴、他分野との違い、開発期間、人材、教育、等々
- ・実用的な計算精度と有効な活用方法→ユーザから見た「駄目」と「OK」の境目は何か
- ・スパコンベース解析の課題
- ・素材の複合時、部材の組み合わせ時のように、材料システム化の段階で初めて顕在化する問題の予測(素材・部材・製品の各段階における擦り合わせ技術等)

(2) 政策的な課題

- ・日本と海外メーカーとの材料設計の考え方の相違は何か(強み、弱み)
- ・現状の公的技術ロードマップの課題・問題点の検討
- ・投資コストに見合うだけの効果、成果が出るシミュレーションとは何か
- ・国プロ開発等のアカデミア開発ソフト技術の維持、メンテナンスの仕組み
- ・アカデミア開発の材料シミュレーションの技術の産業界への移転体制
(教育、サポート、ライセンス)
- ・大学・公的研究機関との連携(ソフト開発、教育・人材育成、計算資源提供等)

4.2.2 アンケート調査

アンケート、ヒアリング(自社、他社)の実施。

(1) アンケートへの反映内容

- ・現状の材料設計・製造の課題
- ・新機能材料の設計のあり方

- ・材料シミュレーションの課題と期待
- ・材料データベースの課題
- ・材料メーカー、材料システムメーカーを対象にアンケートを実施

(2) アンケート具体的内容／項目の概略を以下に示す。

- ・現状の材料設計・製造の課題
- ・製造と設計のギャップ
- ・日本と海外メーカーとの材料設計の考え方の相違
- ・材料シミュレーションへの一番の期待は何か
- ・技術的実現を牽引する機関(大学、公的研究機関、民間企業、コンソーシアム等)
- ・材料開発におけるどのフェーズでシミュレーションを利用する(したい)か
(基礎研究、製品開発段階、既存製品・プロセス改良 など)
- ・大学・公的研究機関との連携状況、連携への期待

4.2.3 アンケート結果の分析

(1) アンケート概要の集計結果

回答企業 10 社、回答者数 67 人、設問数 30 問。

(2) アンケート結果の分析と傾向 (詳細は参考資料 p. 47 以降参照)

回答率の高かった設問の中から、主要な意見を抽出し、以下に列挙する。

■材料設計：

- ・使用目的：開発ニーズに対する材料機能要件の明確化、詳細な現象説明
- ・必要技術：理論的設計指針、材料シミュレーションスキーム
- ・設計課題：材料特性や組成の評価解析、寿命・劣化特性の予測

■材料シミュレーション：

- ・シミュレーションの使用フェーズ：

1) 材料組成・組織設計時、2) 機能要件の設定時、3) 性能発現メカニズムの解析時

- ・材料スペックの決定要因：顧客やシステム全体からのニーズ
- ・必要技術：原子・分子レベルの解析、複数のスケールシミュレーションの連成解析
- ・要求機能：解析精度、現実に近い忠実なモデル

■材料データベース：

- ・性能課題：データの豊富さ・精度、データベース間の連携

■材料の設計開発：

- ・材料設計における海外メーカーと日本のメーカーの差異：

1) 材料データ量、2) システム思考の設計法、3) 計測技術

- ・開発課題：材料シミュレーション、材料データベース、材料合成の連携による三位一体の設計開発スキーム

4.2.4 事例分析

ここでは材料を開発する側での成功事例分析と、今後課題となる使う側からの課題や方向性について、文献調査に基づく分析を実施した。

(1) 成功事例の分析

幾つかの先端事例を調査。具体的事例としては、以下を調査した。

具体的事例分析：

- ① LSI 層間絶縁膜(低誘電率材料) <<応用数理 vol.11、No.1、46-49 (2001)>>

ポリシロキサン系材料を対象に、ゾルゲル合成実験 Gr と連携して特徴的な実験結果に対するメカニズム解明を行った。シミュレーション Gr が分子構造モデルを考案して、誘電率を支配する分子構造因子を解明、低誘電率材料の開発指針を導いた。その指針に沿って実験 Gr が様々な材料系を検討する中で、特定の分子構造において想定外の効果が現れ、想定内効果との相乗効果により目標値を達成した。ここでの想定外効果も、開発方針を突き詰めた結果得られたものである。

計算による貢献は、現象解明に基づく基本方針の策定に重点を置き、具体的材料の考案は実験 Gr に任せた。自身の経験から、合成を知らない計算屋が提案しても無駄(合成不可能または極めて困難)が多く、開発の足を引っ張りかねないことを痛感。特に材料シミュレーションの分野では、直接的なアウトプット(具体的材料の提案)が成功に繋がることは極めて稀であり、むしろ実験との連携によりプロジェクト全体の成果を得ることでの貢献があることを(成果として見えにくい)十分に認識すべき。

②光学フィルム

<<藤本隆宏・桑嶋健一著「日本型プロセス産業」第11章 新日本石油「日石LGフィルム」>>

- ・シミュレーションを製品開発に活用して光学フィルム開発した。
- ・研究開始時に設定したコンセプト(仮説)の妥当性をシミュレーションで確認し、後に実験でその仮説を実証した。この成果を元に研究テーマの専任体制が出来た。
- ・研究テーマの方針変更時の仮説設定にシミュレーションを活用
- ・用途(顧客)別の製品設計へシミュレーションを活用し、製品差別化戦略に貢献した。

③高性能・高品質タイヤの新材料技術開発

<<http://www.spring8.or.jp/ja/news_publications/press_release/2011/111212>>

<<http://www.riken.jp/r-world/info/release/news/2013/jan/fea_01.html>>

コンピュータ上で分子設計を行い反応や結合およびそれに伴うナノ粒子の階層構造を予測することで開発のスピードアップすることが可能となり、これまでにない低燃費用新ポリマー“両末端マルチ変性ポリマー”の開発に成功した。

④高性能スパコンによる大規模な電気特性シミュレーション

<<<http://jp.fujitsu.com/journal/strength/technologies/201110.html>>>

スパコンの効率的な利用により、新しいナノデバイス設計に必要な原子1,000個レベルの電気特性シミュレーションに成功した。

⑤水処理膜 <<<http://www.toray.co.jp/news/water/nr110221.html>>>

高分子学会賞(技術) : <http://www.toray.co.jp/news/water/nr110527.html>>>

最先端の解析技術(陽電子消滅寿命測定法)と分子シミュレーション技術との連携によって、水処理膜における孔径を中心とした細孔構造を解析し、周囲の環境が変化した際の細孔構造の変化を予測、環境変化においても細孔構造が変化しにくい分子設計による架橋ポリアミドの一次構造安定化を実現した。

⑥CFRP <<<http://www.toray.co.jp/news/rd/nr110105.html>>>

長さ数mmの炭素繊維を1本1本ランダムに配置することにより、等方的特性を有する新しい概念の複合材料を開発。従来の短繊維複合材料の課題であった、理論強度からの乖離と異方性を大幅に改善し、航空機用CFRPに代表されるプリプレグに匹敵する強度発現率を達成。

同時に、不連続繊維複合材料の強度シミュレーション技術を開発し、構造部材の強度保証を大きく改善。強度の発現率を定量化することができ、今回開発した短繊維複合材料では、理想強度の90%を等方的に発現させることに成功。

⑦構造用金属材料

構造用金属材料の合金設計には、Thermocalcなどの計算状態図が活用され、材料シミュレーションが優れた材料の開発に貢献している。国際状態図委員会では、計算状態図を用いて、優れた実用材料を開発した企業を毎年1社表彰しており、2012年の受賞では、Ni基合金の析出強化相であるNi₃Alの安定性の温度依存性に及ぼす添加元素の影響を計算状態図により解析した。この結果、使用温度で強度向上に寄与するNi₃Alを大量に析出させながらも、熱間鍛造温度では、熱間加工性を悪化させるNi₃Alを完全に消失させることができる合金成分を机上で見出し、高温強度と熱間鍛造性を両立した鍛造材料の開発に成功した。

事例から見る成功の要因の分析：

- 1) 実験、計測だけでは理解が難しい複雑現象の解明と理解
- 2) 実験と計測の連携による仮説(シミュレーション)と検証(実験、施策)
プロセスの協働
- 3) 複雑現象を説明できる理論モデルの構築、重要因子の導出と、実験へのフィードバック

- 4) シミュレーションによる現象特性の定量化
- 5) 材料開発におけるシミュレーションの目的と役割（守備範囲）の明確化
- 6) 開発方向性の事前予測、材料スクリーニングに的を絞ったシミュレーションの有効活用

(2) 課題トピックス

現象分野毎に特徴的な事例を採り上げ、個別課題、共通課題を抽出。

・分野固有の課題

高分子材料：

高分子材料では高分子鎖がからみあい構造等の複雑な凝集構造を形成するため、全原子モデルを用いた動的構造シミュレーションに長大な計算時間を要する。高分子鎖のからみあい構造がキー物性となる場合では、分子構造の特徴が失われるものの、計算時間を激減できる粗視化モデルを用いることで、シミュレーションが実現されている。一方、からみあい構造が無視でき、分子構造がキー物性となる場合では、高分子のオリゴマーモデルによる計算も可能であろう。しかし、両構造とも無視できない場合は全原子モデル以外に有効な方法がないため、実用的なシミュレーションは極めて困難である。

鉄鋼製品での腐食：

鉄鋼製品では使用環境における耐久性を検討する上で、腐食の問題がある。耐食性評価の暴露試験には長大な時間を要するため、それに代わる評価法として腐食現象シミュレーション手法の構築を鉄鋼協会フォーラム「腐食起点・界面のミクロ・ナノ解析と数理モデル化による腐食促進試験法の設計」にて模索中。腐食現象には多様なスケールの現象（電磁気、拡散、化学反応）が関わるため、現象全体の数値モデル化は必然的にマルチスケールとなる。しかし、現状ではラプラス方程式と物質移動式を基礎とする連続体シミュレーションが主流であり、電極反応やナノサイズ物質移動をどう取り込むかが大きな課題となっている。この分野では、第一原理計算はまだまだ現実から遠いと指摘されている。

・共通の課題：

- 1) 製品や部材の丸ごと全てを対象としたシミュレーションは不可能。計算モデルの大きさに制限がある中で、どの部分を切り取り、どの物性を計算するか等、材料の使用目的に応じた適切なモデル化が必要。
- 2) 耐久性(劣化)予測やメカニズム解明に対するニーズは大きい。長大な時空間スケールのシミュレーションを行う必要があるため、現在の技術では困難。ブルームーン・アンサンブル等の手法はあるが、劣化に関わる反応経路が全て明らかになっていなければ適用できない。副反応の予測には、反応経路を効率よく自動的に探索するアルゴリズムが必要。

3) マルチスケール・マルチフィジックス材料シミュレーション技術の実用化

(原子、分子、メゾ組織、マクロ組織、工業部材まで空間的、時間的スケールでのマルチフィジックス材料シミュレーション技術)

4) システムニーズに対応できる材料シミュレーション技術の開発

家電等のエンドユーザ商品では、通常数十点から数百点の部品から構成されており、個々の部品の材料特性よりも組み合わせた場合の、機能・性能、不具合等を把握する必要がある。しかしながら、これらのシステムシミュレーション技術が未確立なため、経験と勘に大きく頼らざるを得ない状況である。

材料設計のシミュレーションモデルでは、巨大になりすぎて実用的でないこと、他部品と組み合わせた場合の挙動が定義できない等の問題があり、新たな定義が必要である。この定義は材料設計の要求仕様にも結びついており、材料設計の段階で材料システム（素材の部材化、部材の製品化）レベルの要求仕様についても解析可能な材料シミュレーション技術の開発が必要である。

4.2.5 特定分野の課題抽出

(1) **構造材料系**：参考資料 p. 57『課題抽出マップ（構造材料系）』参照のこと

・顧客から求められる価値提案の高度化・複雑化への対応

近年、素材物性の特性値向上だけでなく、顧客の最終製品機能向上や製造コスト削減といったソリューション提案の比重が高まりつつあり、対応するシミュレーション技術も一部は顧客環境に相当するものまでも含み、多様化、複雑化している。顧客との最適設計連携や自社の人材育成なども含んだ効率的なシミュレーション環境を如何に整備すべきかが課題。

・材料組織構造の特徴量設定とその定量的測定手法の確立

構造材料の一部では、その特性値が材料の組織構造に大きく影響され、このためフェイズフィールド法に代表されるような組織構造シミュレーション技術や、それに必要な物性値を算出する第一原理計算等の研究が精力的に進められている。しかしながら、一方で、その組織構造情報と材料特性値との相関に関しては、まだ不明な部分が多く、さらに組織構造情報そのものの測定技術においても、最近ようやく3次元の解析が出来るようになった段階で、3次元組織の形態学的特徴量の抽出も緒に就いたばかりである。今後の測定手法の高度化、簡易化が望まれる。

・材料組織構造予測モデルの高度化と検証（実験）

上記、フェイズフィールド法など、近年、組織構造シミュレーション技術の進展は著しいが、未だ現実の製造プロセスにおける物理現象を十分にモデル化できていない部分も多く、定量的設計というよりも、むしろメカニズム解明での利用が主体。今後、効率的な先端的物理モデルの組み込みと検証体制が必要。また、検証結果や物性値等に関しては、可能であればDB化して、共有できるものは共有することが必要である。

(2) 高分子材料：参考資料 p. 58『課題抽出マップ（高分子系）』参照のこと

・最初に検討すべきは、顧客にとっての価値をどのような手段で実現するか

必要な機械的機能を得るための材料物性を見出す技術が、材料メーカーにとって重要になりつつある。また、目標物性を満足するために、新たな分子構造から材料設計するか、あるいは加工方法や添加剤等の手段によって既存材料のポテンシャルを引き出す方向か。

・材料（素材の構成）・分子・製造プロセス設計のどの段階をどの手法で計算するか

シミュレーションの目的によって必要な手法が異なる。また、構造・流体系は完成度が高く使いこなしのノウハウ蓄積が進んでいるのに対して、原子・分子スケール（第一原理計算や分子シミュレーション）は理論・ソフトの開発は進んでいるものの、活用は発展途上。マルチスケール手法に至っては、理論自体の開発が求められる。

・原子・分子スケールのシミュレーションを有効活用するには、ノウハウが必要

モデルサイズや計算時間に対する制約が大きいため、現実的な計算時間で役に立つ結果を得るには、計算コストと精度をバランスよく満足する計算モデル・近似理論・計算条件を適切に選択・設定するためのノウハウが必要。

(3) 共通課題：既存の材料設計シミュレーションの限界を超えるためには、組織・手法の連携が重要（高度計算機環境等）

材料設計分野のシミュレーションは、計算機負荷が極めて大きく、公的スパコンの利用も必要とされる可能性が高い。ソフトの先端的物理モデルや物性 DB 等の充実と併せ、公的スパコンの利用体制の充実に向け、いっそうの産学官の連携が必要。

さらに、計算科学と情報科学との連携、最先端理論・ソフト・スパコン活用における産官学連携も必要。特に公的スパコンの性能を引き出すのは、個々の企業による対応では限界があり、官学からのソフト提供や技術指導などのサポートが不可欠。

4.2.6 システムから見た材料設計の課題抽出

今後、システム視点（使う側）から見た材料設計の方向性（材料メーカーへの要求）を議論することが必要と思われる。以下の視点で課題点を整理した。

- ・システム視点のシミュレーション
- ・「材料」という定義は分野によって多様であり、そこを明確にして考える
- ・システムモデルと連携した境界条件での材料シミュレーションの必要性
- ・製造プロセスを考慮した材料設計手法の構築
- ・材料スペック外のシステムにける現象の予測と解明

ここでは家電の例を記載する。

(1) システム設計現場における材料シミュレーション技術導入の課題（家電メーカーの場合）

- ・設計業務は、既存部品の選定と組み合わせ技術（加工も含む）が主体で、従来にない新規部品（新材料）を採用する機会は少ない。

- ・既存部品の組み合わせであれば、技術者の経験と過去の設計資産、部品の技術情報等で対応できる場合が多い。
- ・新規部品採用時には、部品自体の特性よりも他部品との組み合わせ検証が重要になる。
- ・それをシミュレーションで確認するには、新規部品だけでなく既存部品のシミュレーションモデルも必要になり、実施には実際の試作確認よりも大変になる場合が多い。

(2) 部品組み合わせシミュレーションの課題

- ・シミュレーションモデルの定義が困難
不具合排除のためのモデル化は、想定外の項目まで洗い出さなければならないため、定義は困難。
- ・新規部品と既存部品の両方のモデルが必要

(3) システム設計の立場から材料設計に望むもの

- ・機能定義、使用条件の定義
部品単体だけでなく、周辺部品との組み合わせを想定した定義。
- ・動作環境変動時の特性定義
標準条件での特性だけでなく、動作環境変化時の特性変化を定義。
- ・既存部品との差異定義
望目特性だけでなく、仕様定義される全項目について 既存部品との差異を明確化。置き換えた時に発生する不具合を予想、回避できる。

4.3 コンピュータシミュレーションによる新材料の設計のあり方の検討、提案

4.3.1 あるべき姿イメージ（案）

- ①システムから見た材料への機能要件設計（理論や現象理解による逆問題的手法）
- ②あらゆるパラメータを考慮した計算機シミュレーションによる材料設計（試作レス）
- ③材料設計→物性、分子設計→製造プロセス設計、をトータルにシミュレーション

4.3.2 着目すべき項目の検討

- ・「新材料」の定義、シミュレーション対象の設定
- ・新材料設計における幾つかの手法の活用策
- ・逆問題手法（目的→材料特性→材料組成→製造プロセス）、順問題の繰り返し
- ・第一原理等の評価解析（シンプルモデルで計算）+ノウハウ、データベース組み合わせ
- ・スパコンを活用した材料シミュレーション
- ・データベース（経験）と材料シミュレーションのうまい組み合わせのあり方
- ・ユーザから見た簡易ツール（例えば、EXCEL ベース）としての計算システムのあり方
- ・検証技術としての材料設計 V&V プロセス基準の構築
- ・国プロデータベースの有効活用のあり方 (Big データ含む)

4.3.3 「新材料」設計手法の事例分析（文献調査による）

文献調査により、現状の材料設計研究の事例を分析した。

①米国 Alex Zunger の逆問題設計

<<<http://www.centerforinversedesign.org/approach.html>>>

このレポートからは、数学的な意味での”逆問題”を解く事は難しく、順問題の繰り返しになる。特に材料系のミクロ視点シミュレーションにおいては、多体系の電子状態解析は困難が予想される。

②有機太陽電池用のドナー有機半導体高分子の理論設計

<< J. Phys. Chem. C 2011, 115, 16200-16210. “Computational Design and Selection of Optimal Organic Photovoltaic Materials”

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp202765c>>>

アクセプタ分子を1つに固定し、132種類のモノマーから形成できるドナー高分子から、高効率なものを遺伝的アルゴリズムにより探索。

(分析、課題)

- (1) 高分子の組織構造に関する解析、キャリア輸送に関する解析が付加されると、より現実のデバイス設計に近づくと思われる。
- (2) 高分子の初期構造生成ツールとして Open Babel が用いられ、分子軌道計算には Gaussian09 が用いられ、出力結果整理のツールに cclib が用いられているとのこと。使いやすい入出力ユーザインターフェースが実用上重要となる。

③米国(MIT) Gerbrand Ceder の“絨毯爆撃”設計

<<http://computing.ornl.gov/workshops/scidac2010/presentations/a_jain.pdf
「The Materials Genome Project: Materials Design with High-Throughput Ab Initio Computing」>>

リチウムイオン電池用カソード材料を設計するために、約2万種の候補材料に対して、ハイスループットDFT計算を行い、機能(電位と容量)と安全性(電位と酸素の化学ポテンシャル)の2点でスクリーニング。これから得られた3種類の有望な新材料について合成を実施。課題は計算で得られたミクロ特性と実際の工業的マクロ特性の相関明確化。なお、材料革新のキーは計算の自動化、適切なデータ操作、そして普及とのこと。

④高分子材料設計におけるマルチスケール・シミュレーション

<<http://octa.jp/index_jp.html、

https://www.jstage.jst.go.jp/article/cicsj/24/5/24_5_173/_pdf>>

高分子シミュレーションの分野では、1990年代末から2000年代初頭にかけて「シームレス・ズーミング」概念の下に開発されたOCTAシステムが、高分子の様々な空間・時間スケールに応じた計算エンジンを提供している。これにより特定のスケールに対

応する計算は実行できるようになった。

⑤マテリアルズインフォマテックス

マテリアルズインフォマテックス（材料インフォマテックス）と呼ばれている分野がある。我が国が有する世界最高レベルの材料に関する構造や特性など様々なデータベースを活用し、それを適切に整理することで、材料設計・探索に利用するもの。計算機の性能向上と効率的な計算手法の出現、そして計算精度の向上に伴い、第一原理計算を多数実行し、系統的に物質情報を獲得し、データベース化する。

<<<http://cms.mtl.kyoto-u.ac.jp/informatics.html>>>

(1)事例の分析

- 1) 「新材料」設計として、理想とされる「逆問題」的なアプローチは実用的には課題が多く、順問題の繰り返しがまだ主流である。
- 2) 分子シミュレーション技術は材料設計に盛んに活用されてきている。
- 3) 材料特性は多数のパラメータが影響しあうため、材料シミュレーションと遺伝的アルゴリズム等の探索的手法が連携して良く用いられる。
- 4) マルチスケール・マルチフィジクスの材料モデルのシミュレーション技術が必要不可欠ではあるが、まだ技術的には実用的には至っていない。

4.3.4 今後必要と思われる「新材料」の設計手法・システムの骨子

アンケート、課題抽出、文献調査より、あるべき材料設計システムイメージを検討。理想的なあるべき姿を実現するには課題が多い。まずは、従来からのシミュレーションの高精度化、大規模化とデータサイエンス等の新しい分野との連携が、あるべき姿の実現に向けたアプローチの一つとして考えられる。

その例として、「新材料設計のための計算科学と情報科学連携」の研究や技術開発の推進が必要であり、技術の構成要素とその連携イメージ図を以下に記載する（図中に描く番号と項目が対応する）。

必要な構成要素：

(1) システムの視点からみた材料機能要件の設計

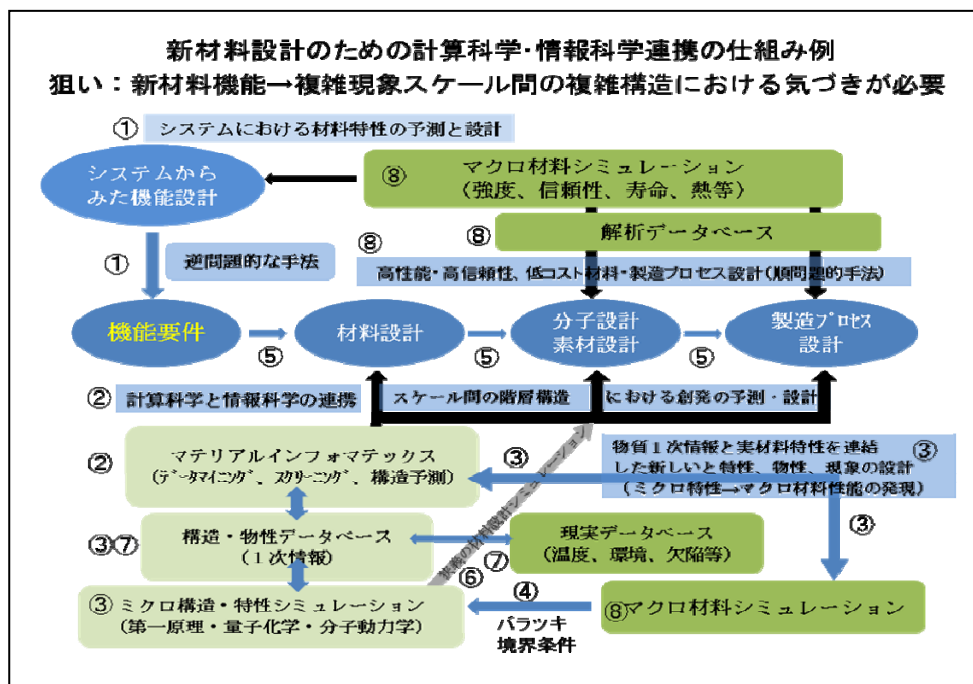
材料に新たに求められる新機能を、材料が組み込まれるシステムやサブシステムからのニーズに対応して仕様（効果が高い）を探索する、いわゆる逆問題的設計の考え方の導入

(2) 情報科学と材料計算科学の融合（マテリアルインフォマテックス）

材料シミュレーションから算出される材料情報、材料データベース等の保有する膨大な材料情報に情報科学手法を適用することで、目標の材料構造や物性を効率的に探索できる新しいハイスループット材料設計手法の導入

(3) 新機能材料のアイデア創出のための材料物性・構造データの構築

- 新機能を創生する原理を作り出すための気づきを与える、材料・物性情報構築。
 - ・1次情報（ミクروسケールの物性、構造、原子の組み合わせ等）の現象原理データ
 - ・材料スケール間の階層相互作用における新規な特性や現象発現モデル
 - ・マクロ構造とミクロ構造の相関、計測データ等。
- (4) 解析精度の向上（近似精度の向上、現実に近い忠実なモデルの構築）
- ・大規模計算機の利用：高度な近似理論の適用による精度向上、計算モデル大規模化、ただし、現状では産業界において超並列計算機の利用技術・ノウハウが十分に蓄積されていないため、官学が有するソフトや技術を、産業における課題に適用するための産官学連携が必要
 - ・マルチスケール材料モデル：ミクロなシミュレーションに及ぼす実在の外力や環境等の境界条件（動的）を与えるためのミクローマクロ材料連携シミュレーション
 - ・原子分子スケールの大規模モデルや、マルチスケール・マルチフィジクス材料モデルを構築するための、モデリング・可視化環境の整備
- (5) 機能要件から製造プロセスまでの一貫したトータルシミュレーション
機能要件→材料設計→分子・素材設計→製造プロセス設計、という一連の流れに対応した情報とシミュレーション連携、プロセス全体統合解析シミュレーション
- (6) 解析品質ルールの構築
材料シミュレーションと計測データを常に比較、検証する仕組みの構築
- (7) 材料実験データベース、計測データベース
常に新しい材料情報が蓄積され、活用時に変換容易、公開可能なプラットフォーム
- (8) グローバルな材料開発に勝つためのマクロ材料シミュレーション
低コスト、ばらつき、軽量化等最適信頼性設計を実現するマクロシミュレーション
- (9) 上記項目を連携させるための省庁連携による、情報共有の仕組み、体制づくり



5. 本研究会からの提言

5.1 産業界における「ものづくり連携システム」のあり方 【HPC 応用分科会】担当

中小企業を中心とした我が国の産業界ニーズがよく集約される公設試へのヒアリング等によるVOC分析に基づき、シミュレーション技術の活用視点で検討し、顕在化してきた課題を明確化した。すなわち、公設試には企業側ニーズが集まるが、対応するには情報共有、人員、ソフトウェア、予算、等の面でさまざまな課題がある。これを解決するには産官学や国としての体制の工夫と新たな方針による連携づくりが行われなければならない。これまでの議論を踏まえ、まずはこれを克服する枠組みをここでは提言する(連携メージは p34 図2 参照)。

(1) 次世代クラウドシステム上に構築されるものづくり連携プラットフォームの実現。

公設試や高専、大学をハブとしてシミュレーション技術を普及し、活用していくには情報集約的な広域連携組織を置くことが望ましいが、これをクラウド技術によって実現する。そのためには高速安価な通信網の整備、ソフトライセンスの考え方の転換、用途に合ったセキュリティ技術の開発、可視化等の活用技術開発、また、利用者とソフトウェア開発者を繋ぐ主体的組織が必要である。さらに公的な研究施設プラットフォームとの連動が望まれる。

(2) ものづくりにおけるシミュレーション技術の知識を継承する仕組みと人材の育成・活用システムの整備。

シミュレーション技術がブラックボックス化することを防ぎ、真に意味ある解析を行うために、より踏み込んだインターンシップ制度の整備とシニア人材の活用が強く望まれる。また、解析結果そのものを蓄積し、再利用することを可能とする制度による知識継承システムが必要である。

(3) 課題解決モデル化技術と解析結果の検証システムの研究開発の推進。

従来、シミュレーション技術の研究開発はハードウェア、ソフトウェア、およびネットワーク・システム技術に限定されてきた。しかし、産業界の抱える課題を解決するには、シミュレーション技術を適用できる形にモデル化する技術とその結果の検証システムが必要である。ビジュアルアナリティクスに代表される新しいモデル化技術、解析結果の検証や解釈等の解析品質技術の研究開発プロジェクトを興すべきである。

(4) 地域性を生かしたバリューイノベーションを実現するものづくり連携システム構築。

クラウド技術によって地域の中小企業や地方大学のハブとなっている各地の公設試を連携させ、活用情報を流通させ、また各地の公的な研究施設をリモート活用することによって、地域性を生かしたビジネスの創出を目指す。そのためには、公設試の活動範囲拡大、公設試間連携促進、目利き人材(コーディネータ)正しく配することも重要である。

(5) シミュレーション技術インキュベーション組織を設置し、産官学で運用・活用する。

ここにおいて大学等が生み出した日本発のシミュレーション技術シーズを大企業等が中心となって実用レベルまで高めていくことによって、HPCビジネス市場の活性化を推進すると同時に、分野ごとのシミュレーション技術コミュニティを育成していく。

5.2 産業界におけるシミュレーション応用新材料設計手法のあり方

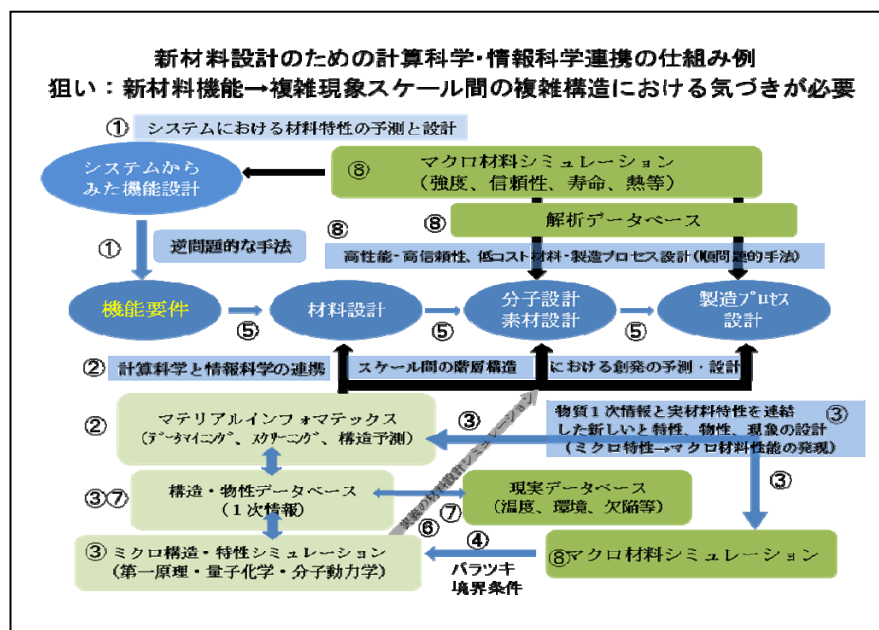
【シミュレーション応用材料設計分科会】担当

産業界における材料シミュレーションの現状を把握し、将来のあるべき姿を検討するために、企業アンケートやヒアリング、材料分野における先端シミュレーション技術の調査、分析等を行い、材料シミュレーション技術活用の課題を明確にした。

その結果、あるべき姿の実現に向けた第一歩として、材料シミュレーション技術の高度化によるシミュレーションの高精度化と大規模化、および材料計算科学と情報科学の融合によるハイスループット材料設計システムの開発に取り組む必要があると考えられる。その一例として「新材料設計のための計算科学と情報科学連携システム」構想を提言した。

提言の主なポイントは以下のとおりである。

- (1) 材料に新たに求められる新機能を、材料が組み込まれるシステムやサブシステムからのニーズに対応して仕様を探索する、システム視点からみた材料機能要件設計の考え方
- (2) 情報科学と材料計算科学の連携（マテリアルインフォマテックス）
材料シミュレーションから算出される材料情報、材料データベース等の保有する膨大な材料情報に情報科学手法を適用することで、目標の材料構造や物性を効率的に探索できる新しいハイスループット材料設計手法の導入
- (3) 新機能材料のアイデア創出のための材料物性・構造データの構築
新機能を創生する原理、原則を作り出すための気づきを与える、材料・物性情報データ
- (4) 解析精度の向上（大規模解析、マルチスケールモデル、現実に近い忠実なモデルの構築）
- (5) 機能要件から製造プロセスまでの一貫したトータルシミュレーション
- (6) グローバルな材料開発に勝つためのマクロ材料シミュレーション
- (7) 材料シミュレーションにおける解析品質基準の構築と標準化
- (8) 上記研究項目を連携させるための省庁連携による、情報共有の仕組み、体制づくり



以上

参考資料

参考資料、表 1: ソフトウェアの特徴とビジネスモデルの概要

	フリー／オープンソース	企業内オリジナルソフト	商用ソフト
開発元	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">大学・研究機関</div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">ものづくり企業</div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">ソフトウェアベンダー</div>
利用形態	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">フリー／オープンソースソフトウェア</div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">ものづくり企業内ソフトウェア</div>	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 0 auto;">商用ソフト</div>
代表的なソフトウェア	OpenFOAM、 SALOME-Meca、 Abitnit、 NAMD	非公開	Fluent、 Star-CD、 LS-Dyna、 ABAQUS、 Gaussian、 VASP、 AMBER
特徴の比較	<ul style="list-style-type: none"> • 汎用性：○ • 操作性：△ • 信頼性：△ • 自由度：○ • 継続性：○ • 価格対性能：◎ • ノウハウの集約性：○ • 差別化の可能性：△ 	<ul style="list-style-type: none"> • 汎用性：△ • 操作性：△ • 信頼性：○ • 自由度：◎ • 継続性：△ • 価格対性能：△ • ノウハウの集約性：◎ • 差別化の可能性：◎ 	<ul style="list-style-type: none"> • 汎用性：◎ • 操作性：○ • 信頼性：○ • 自由度：△ • 継続性：◎ • 価格対性能：○ • ノウハウの集約性：△ • 差別化の可能性：△
発展の現状	<ul style="list-style-type: none"> • ユーザと開発者のコミュニティによる自立的な発展 • 商用ソフトに匹敵する性能の有望ソフトが普及し始めている。 • 多くの人材が自由に関与できることから、広い範囲の知見の集約や人材育成の機能もある。 	<ul style="list-style-type: none"> • 1980年代に活発であった大手企業内での開発は 2000 年前後から商用ソフトの導入に押され、大幅に減少。 • 収益に直結する成功事例が公にされることは少ない。(技術アピールとして公開される場合はあるが、詳細は不明) 	<ul style="list-style-type: none"> • 有力ソフト(海外製品中心)の利用拡大、寡占化の進展 • 大手企業での実用化、日常化、実用ノウハウの蓄積
収益性	<ul style="list-style-type: none"> • 収益性に関する明確な事例はない。 	<ul style="list-style-type: none"> • 収益性の評価が困難。 • 現状の収益性は低い。 	<ul style="list-style-type: none"> • 高い収益性を持つ成功事例あり。
ビジネスモデル	<ul style="list-style-type: none"> • 導入支援サービス(操作方法の説明、トレーニング等) • 解析／コンサルサービス 	<ul style="list-style-type: none"> • 企業内利用 • 解析／コンサルサービス • 開発請負(ソフトウェアハウス) 	<ul style="list-style-type: none"> • 使用権許諾(商品販売) • 保守(定期バージョンアップ) • 導入支援サービス(操作方法の説

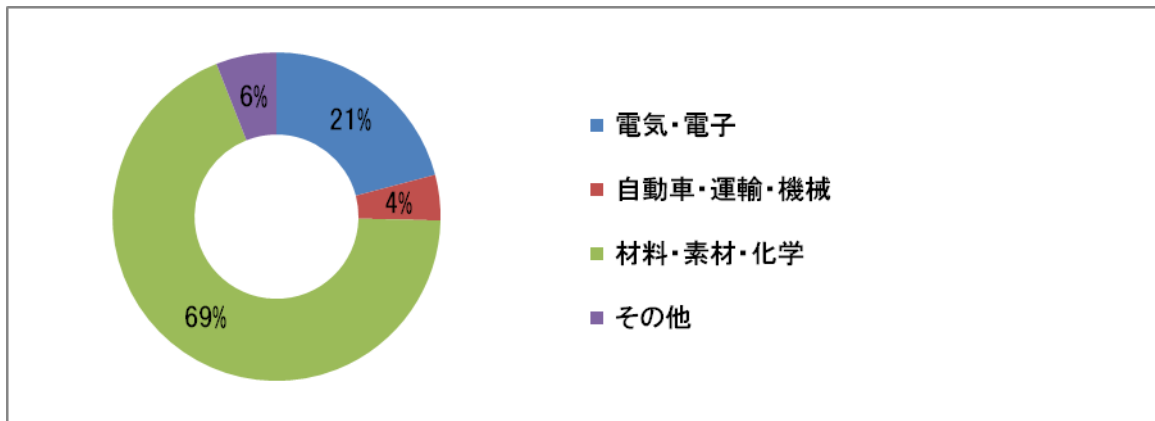
	<ul style="list-style-type: none"> • カスタマイズ 		<ul style="list-style-type: none"> 明、トレーニング等) • 解析／コンサルサービス • (カスタマイズ)
利用における課題	<ul style="list-style-type: none"> • 信頼性の確保 • 権利の確保、ノウハウの確保 (企業利用のためのライセンス形態の整備) 	<ul style="list-style-type: none"> • 成功事例の確保(収益性の確保) • 高度利用のための人材の確保 • オープンソース、商用ソフトとの差別化 • 企業競争力における戦略的位置づけ 	<ul style="list-style-type: none"> • ブラックボックス化への対応、解析品質の確保 • ノウハウ流出防止、技術の差別化 • 海外ベンダーによる寡占、国内ベンダーの不足による情報格差 • 利用の裾野拡大(研究部門から設計現場、大企業から中小企業へ) • 低価格化
方策(案)	<ul style="list-style-type: none"> • 公的研究開発成果のオープン化 • 公的評価(体制の整備) • 基盤ソフト(インフラ)として、公的整備 • 企業利用に適したライセンス形態による開発 	<ul style="list-style-type: none"> • 企業内の独自のノウハウ、競争力との強結合(自社でしか出来ない実験、製造プロセスとの結合等) • ノウハウの確保した上での外部連携 • ブランド、技術戦略への組み込み、シミュレーション成果のアピール(シミュレーションによる安全性、信頼性確保など) 	<ul style="list-style-type: none"> • 共通基盤部分での利用、ツールとしての割り切り • ベンダーの育成(企業における利用情報のフィードバック、企業とベンダーとの継続的な発展／共同開発、他) • 利用技術の高度化によるノウハウの蓄積、差別化

【参考資料(アンケート概要)】

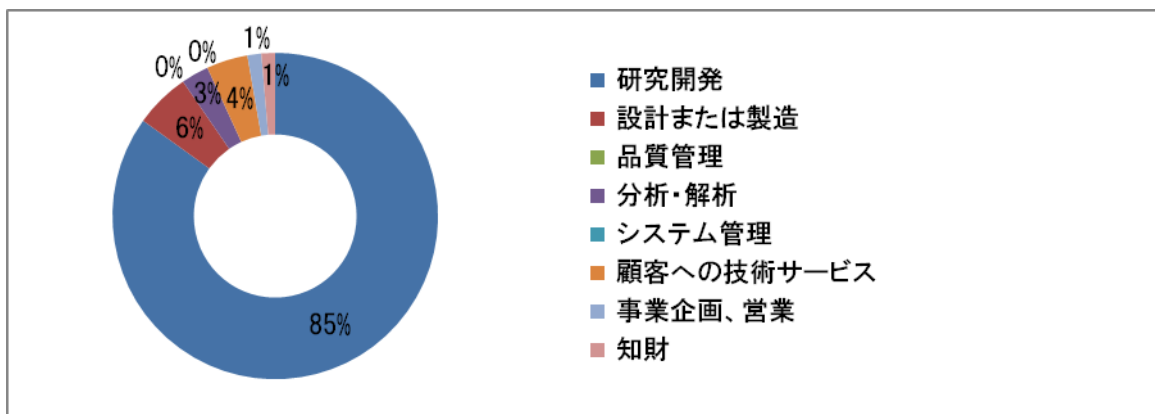
アンケート内容の詳細(主なものを掲載)

□回答者のカテゴリ：

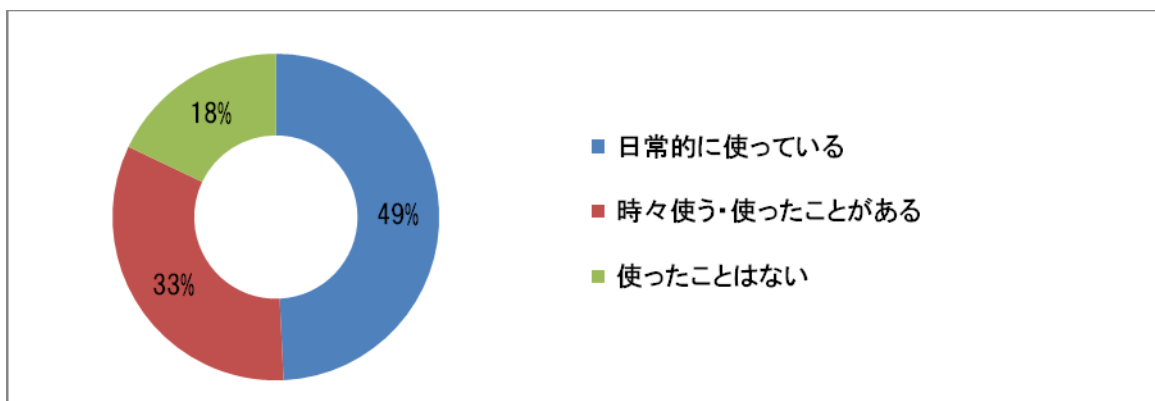
(1) 右記の業態で最も近いものをお選びください。



(2) 御回答者の所属されている部署の主たる業務は何ですか。(複数回答可)

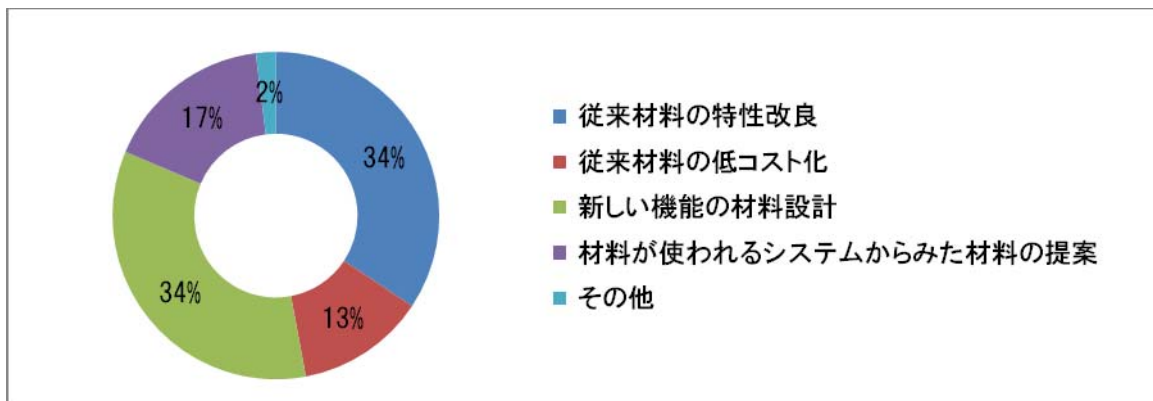


(3) 材料設計シミュレーションをお使いですか。

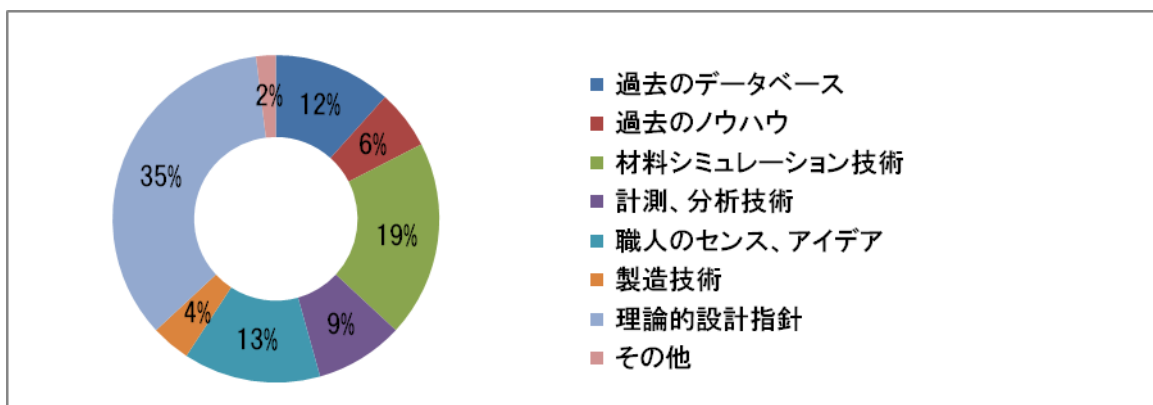


アンケート分析

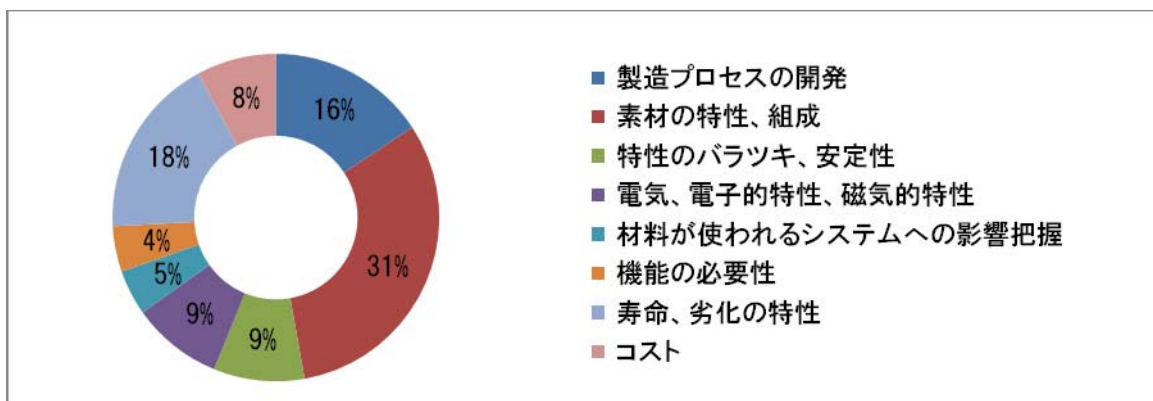
(1) 今後の材料設計の方向性は何ですか。



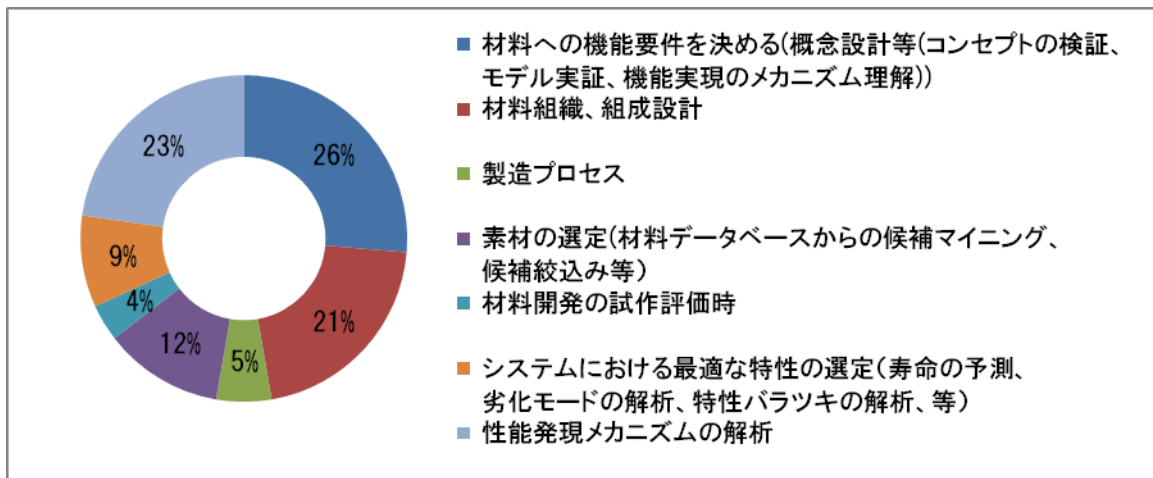
(2) 新しい機能の材料を設計するためには何が一番必要ですか。



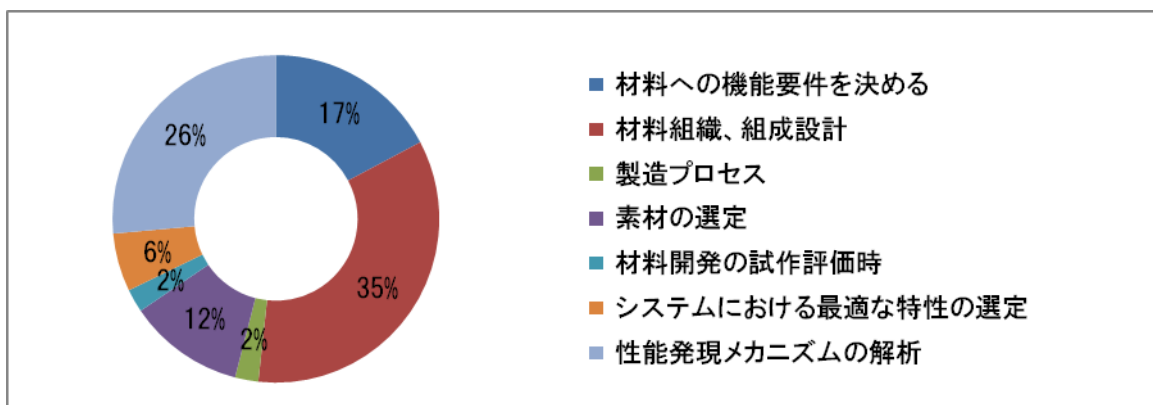
(3) 新しい機能の材料を設計する上での、一番の課題は何ですか。



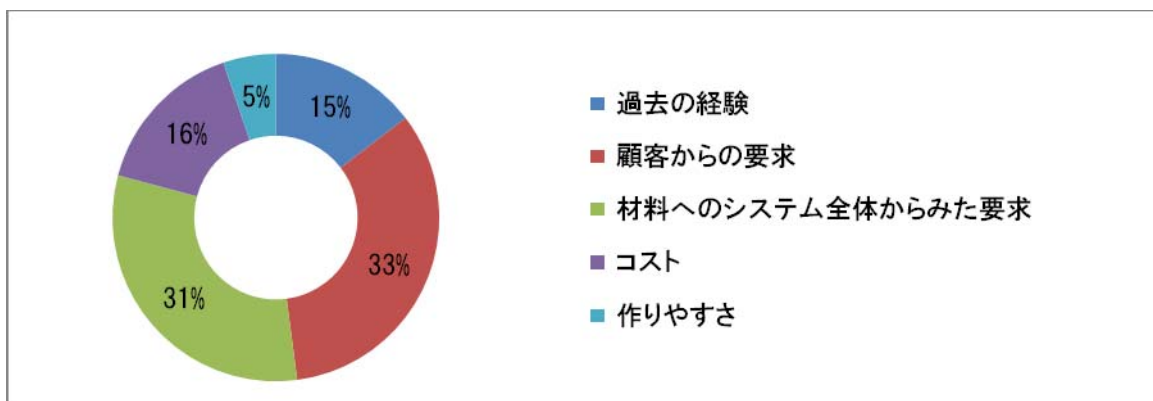
(4-1) 材料設計において、どの段階で材料シミュレーションを活用していますか。



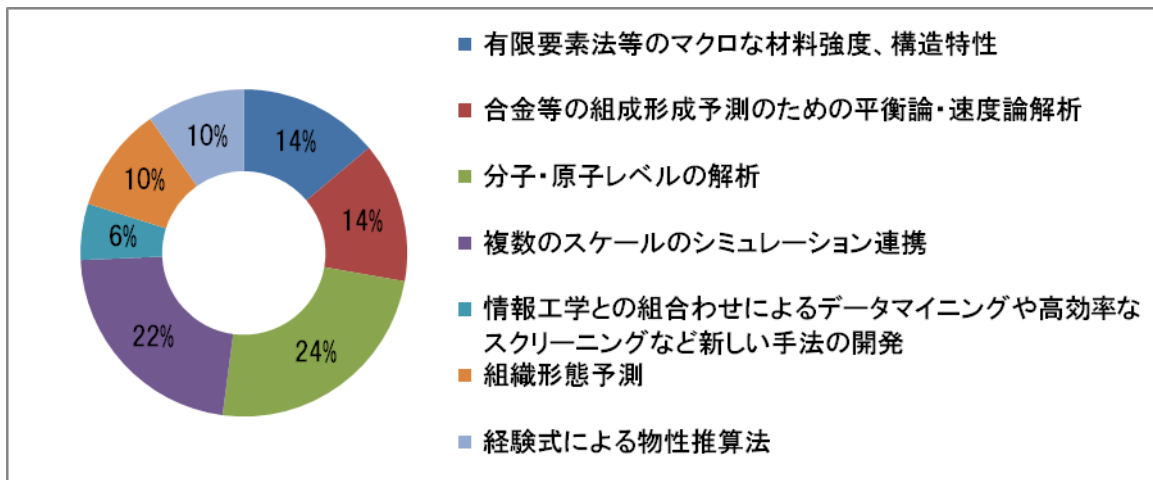
(4-2) 材料設計において、どの段階で材料シミュレーションが一番必要ですか。



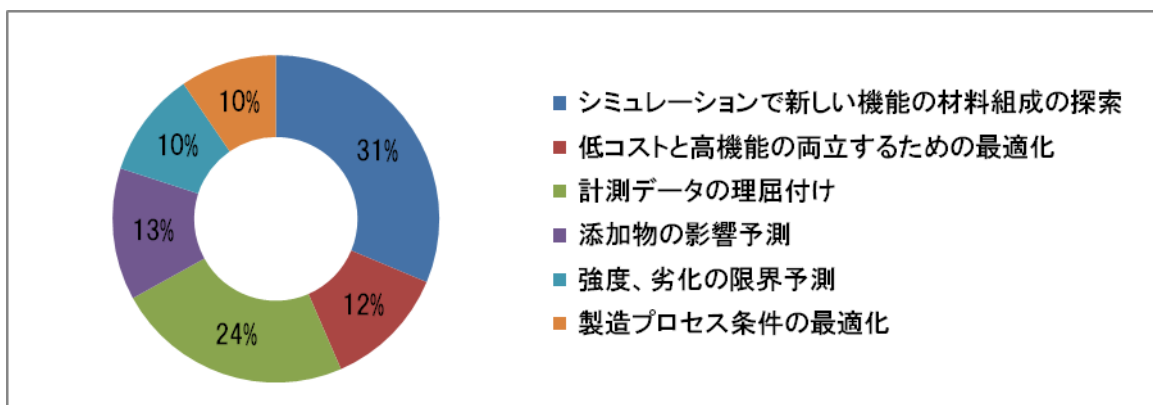
(5) 材料の機能要件を決めるための手法は何ですか。



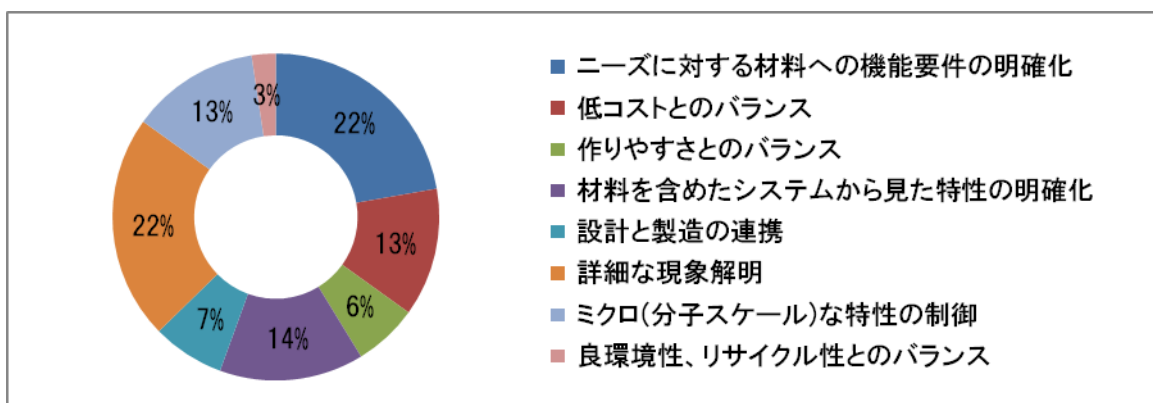
(6) 材料設計において必要なシミュレーション技術は何ですか。



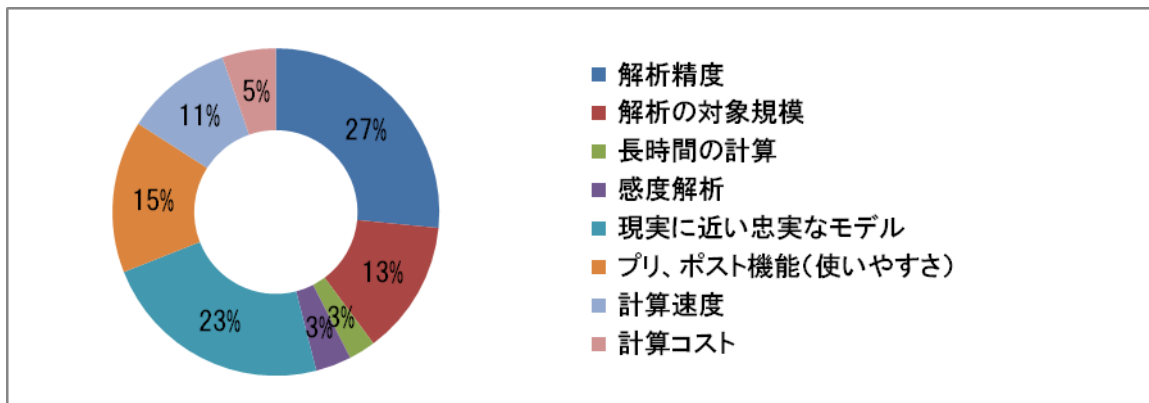
(7) 材料シミュレーションを有効活用するための方法は何ですか。



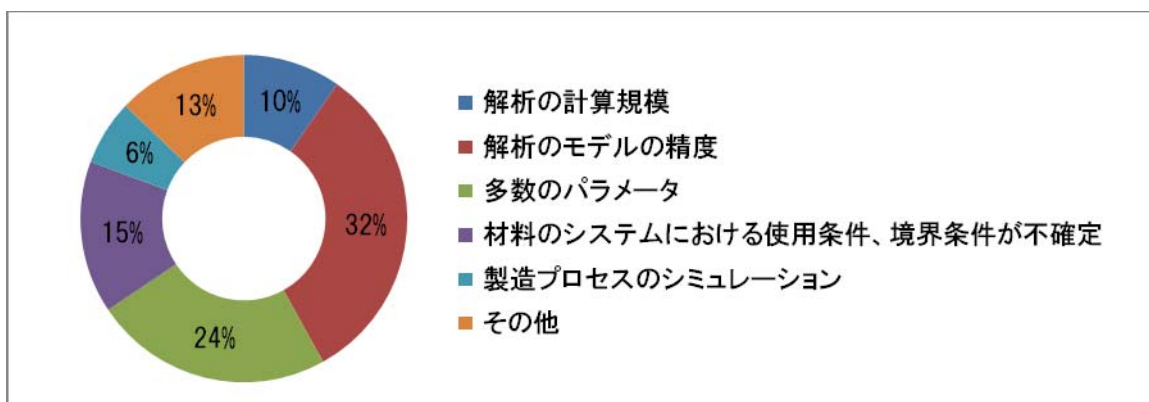
(8) 新しい機能の材料を設計するために何が必要ですか。



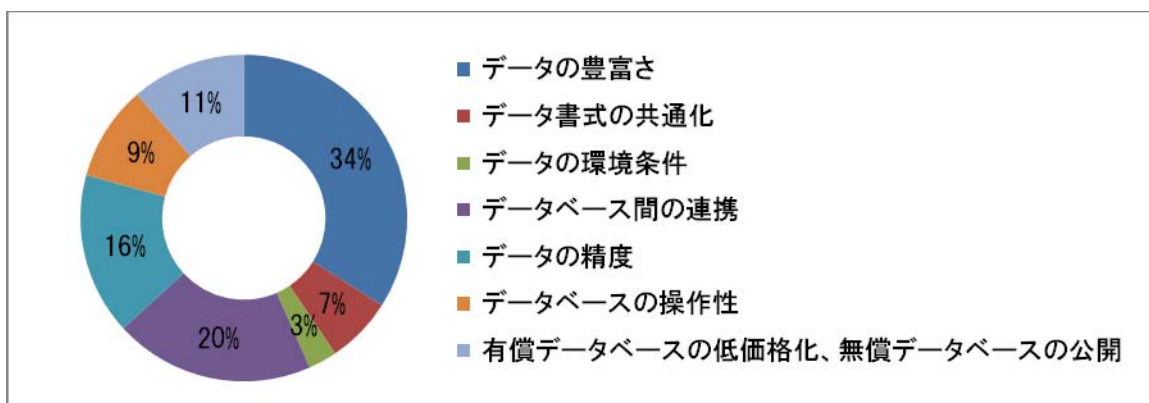
(9) 材料シミュレーションで一番必要な機能は何ですか。



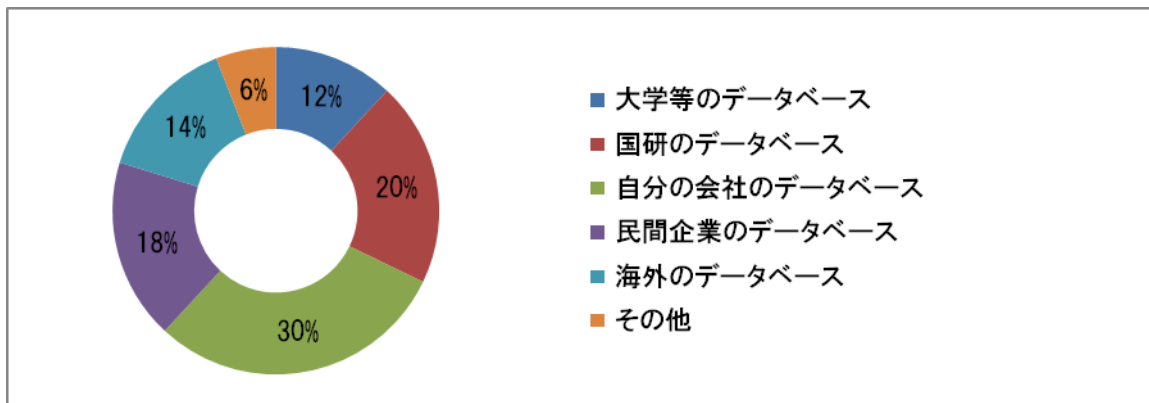
(10) シミュレーションで材料を設計するシステムを想定した場合、機能要件を入力すると、材料が自動的に設計される、いわゆる、逆問題設計が理想と思われるが、それを実現するためには何が不足して課題ですか。



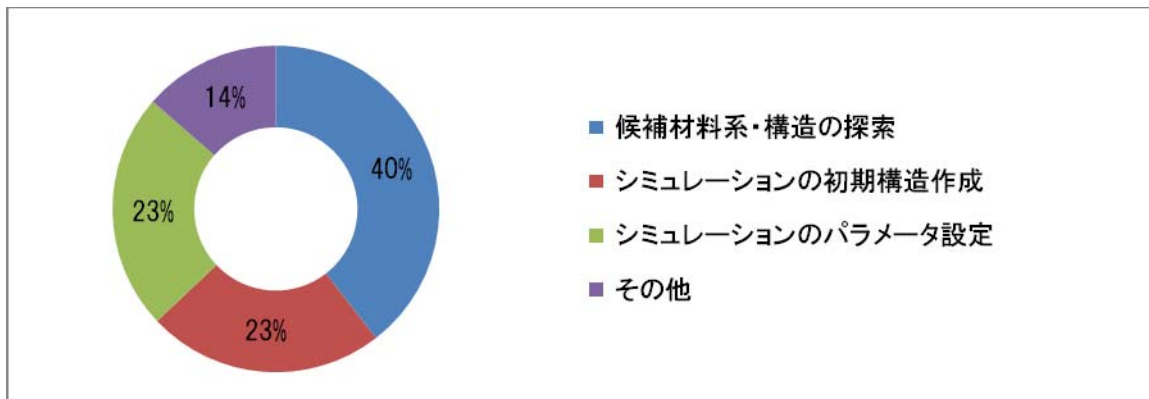
(11-1) 材料シミュレーションでは材料データベースは大事であるが、現状データベースの課題、今後のデータベースへの要求は何ですか。



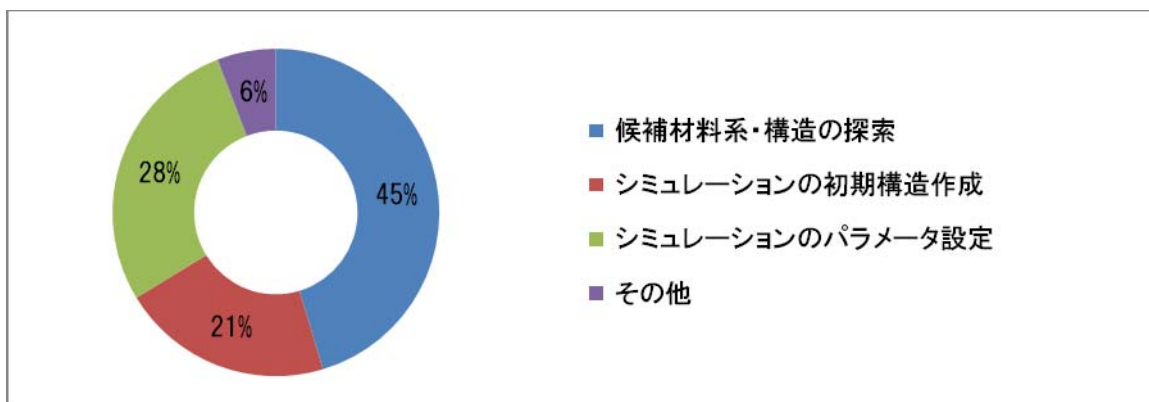
(11-2) 現在活用している材料データベースは何ですか。



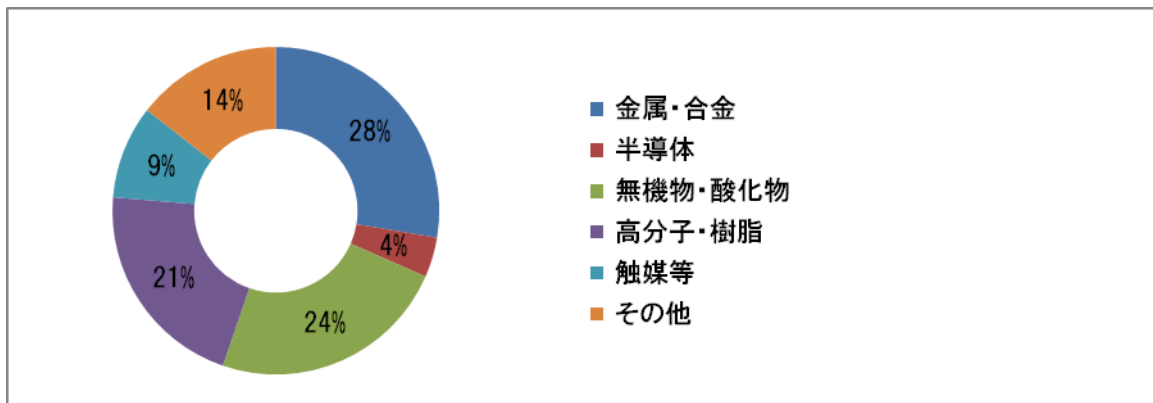
(11-2b) 現在材料データベースをどのように活用されていますか。



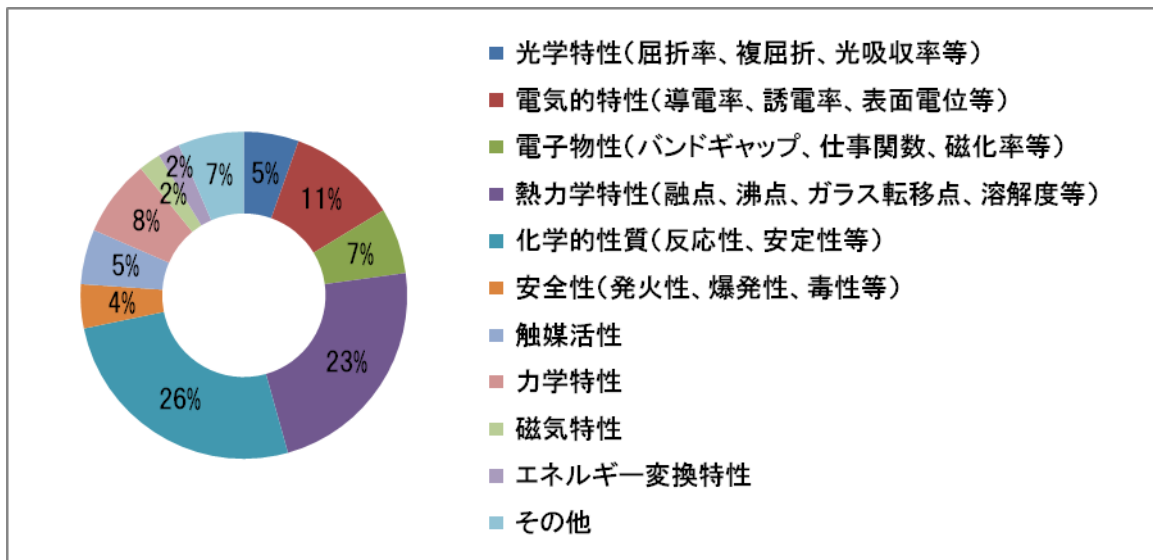
(11-2c) 今後材料データベースをどのように活用したいですか。



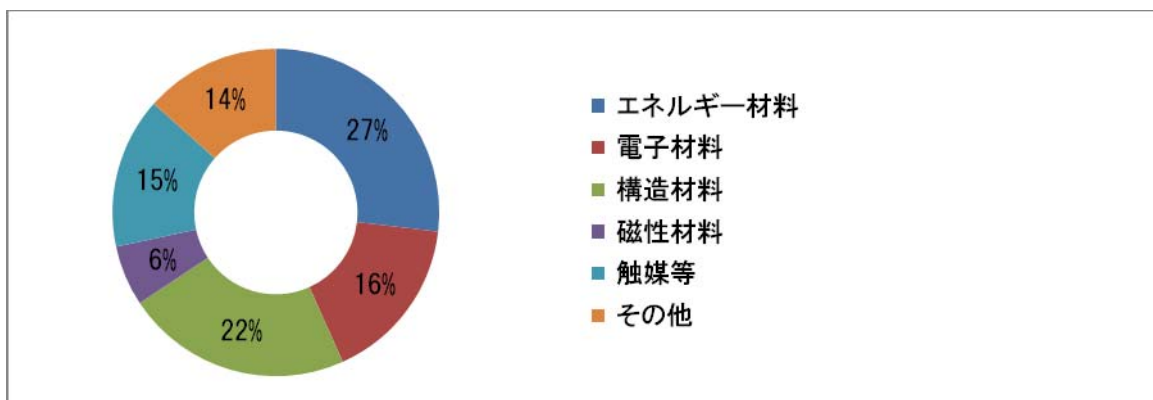
(11-3) 現在の材料データベースに不足している素材は何ですか。



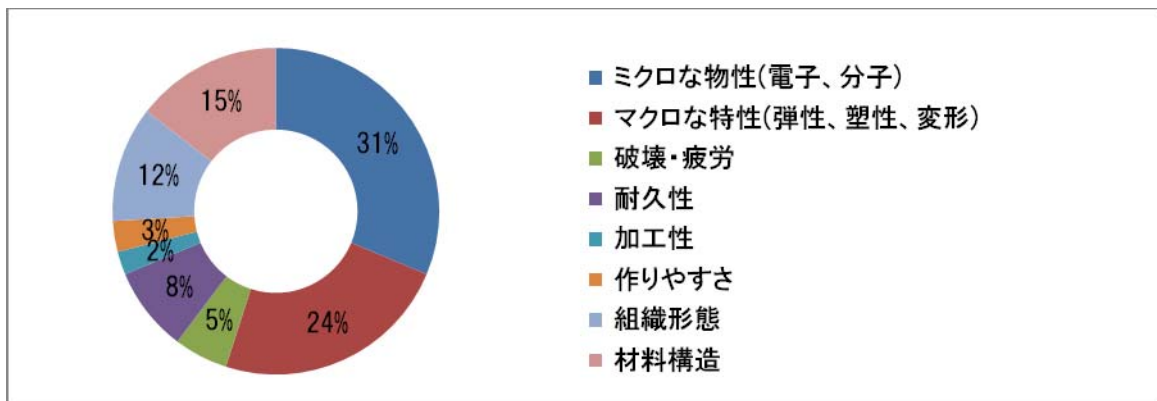
(11-4) 現在の材料データベースに不足している物性・特性は何ですか。



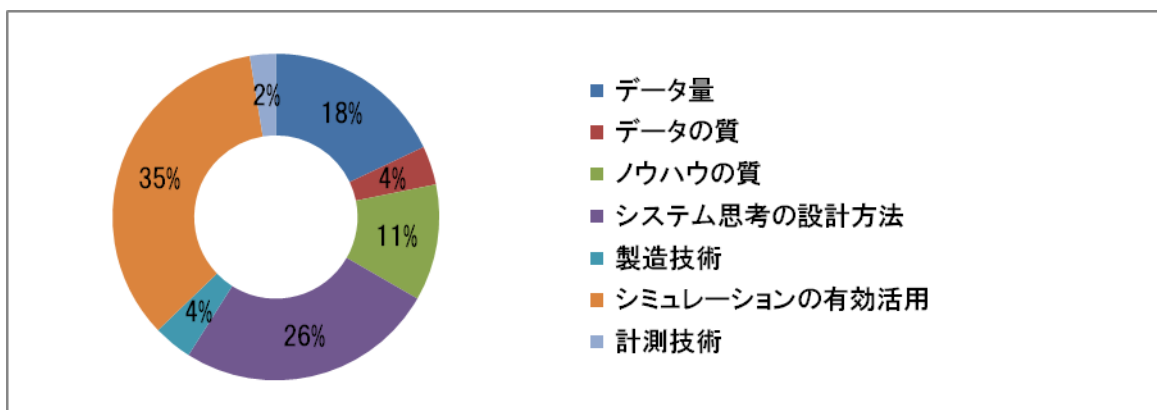
(11-5) 現在の材料データベースに不足している適用分野は何ですか。



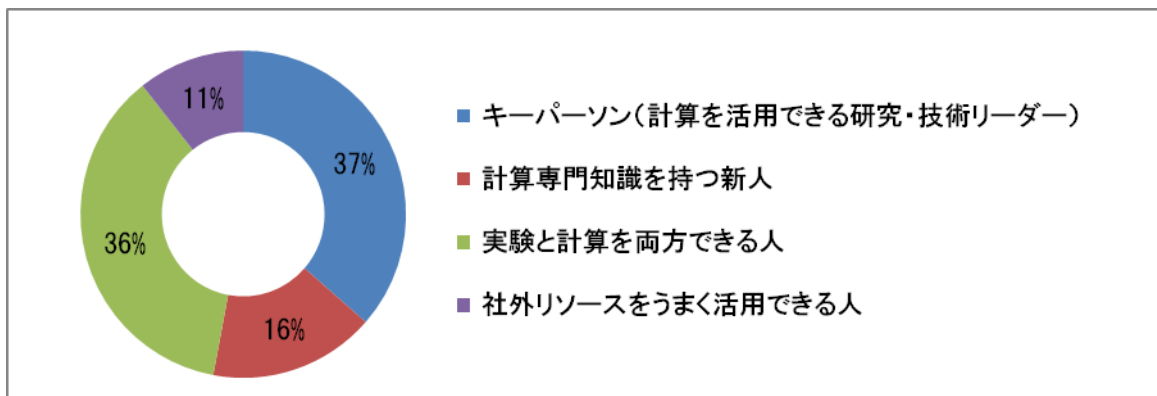
(12) シミュレーションを材料設計に活用するには、どのような特性が出力される必要がありますか。



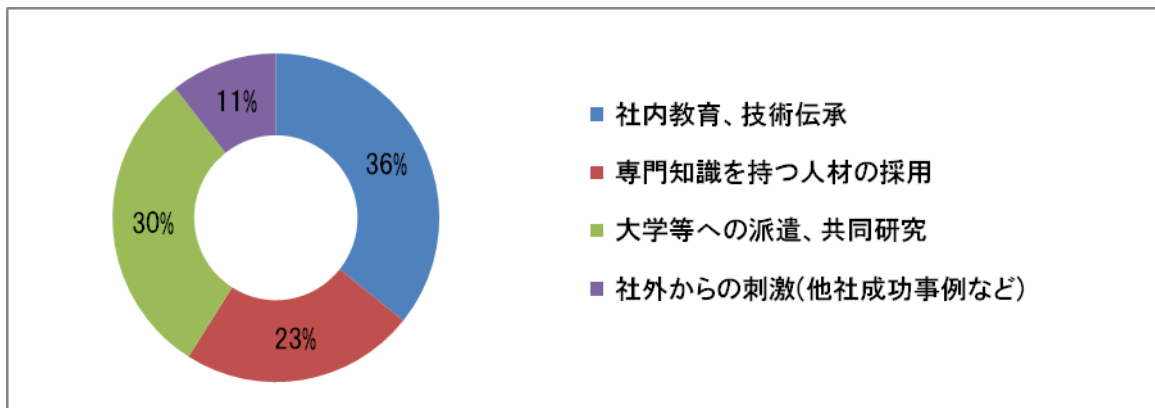
(13) 材料設計における海外メーカーと日本のメーカーの違いは何ですか。



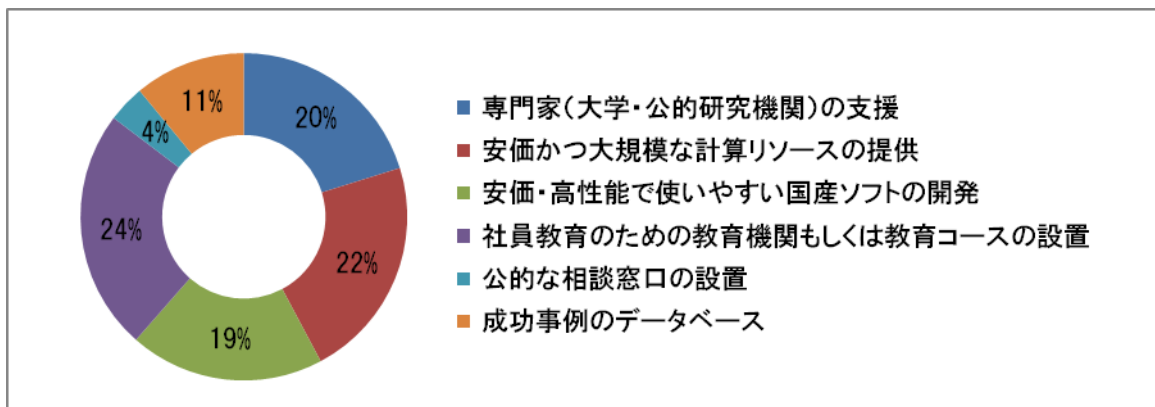
(14) どういう人材が必要ですか。



(15) 人材育成の有効な方法は何ですか。

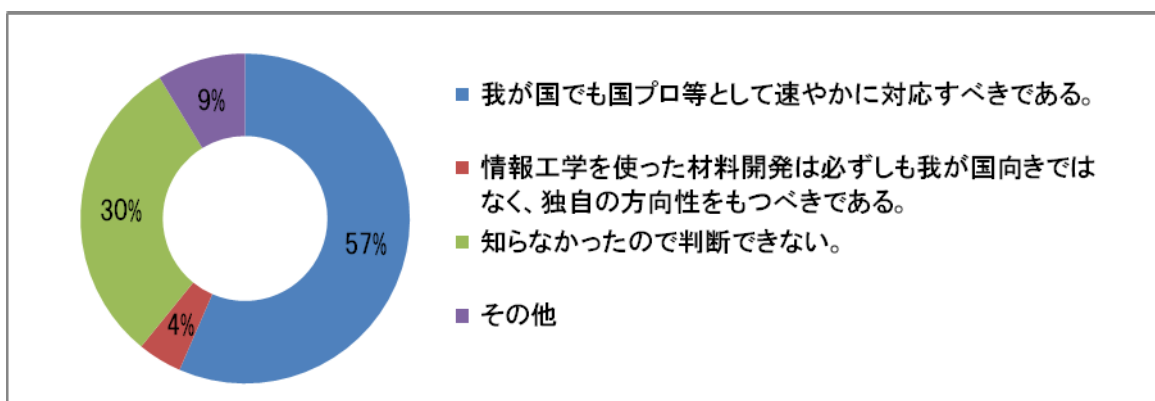


(16) 材料設計におけるシミュレーション活用のため、どのような制度・支援が必要ですか。

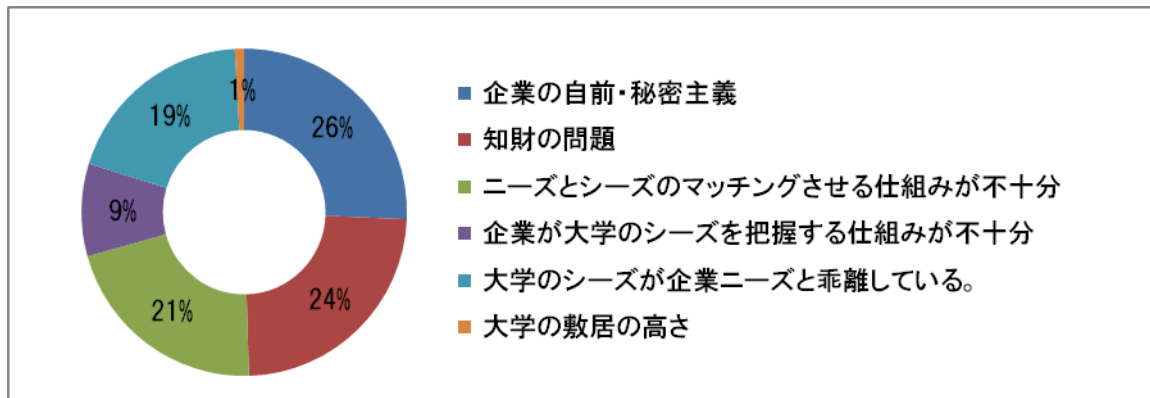


(17) アメリカでは政府の支援により材料シミュレーション、材料データベースと材料創製の三位一体となった材料開発研究が精力的に進められている。我が国はどう対応すべきか。

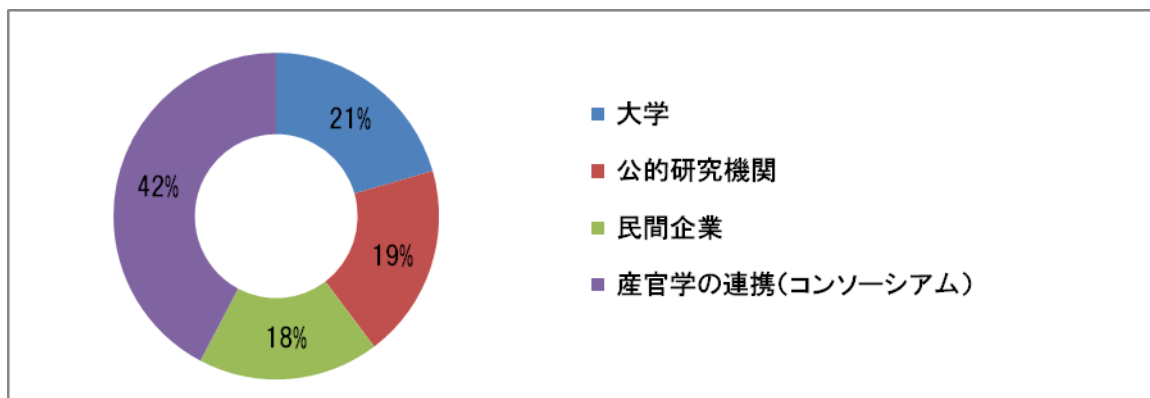
http://www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials_genome_initiative-final.pdf



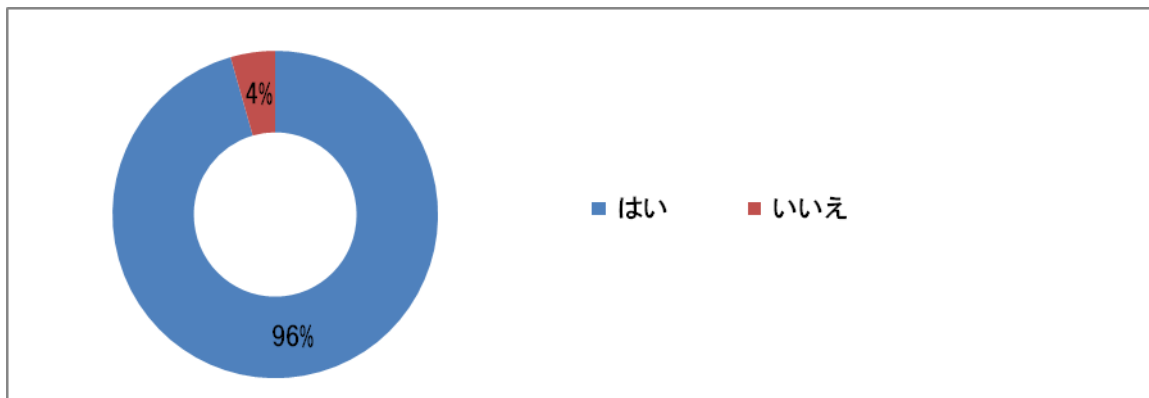
(18) 日本において、材料分野の円滑な産学連携を進める上での課題、阻害要因はありますか。



(19) 材料シミュレーションの技術開発はどこが牽引すべきですか。



(20) 材料設計において、その材料を適用するシステムや適用方法などとの整合性に関して、材料設計シミュレーションから何らかの情報が得られることを期待しますか。



【参考文献 (課題抽出マップ)】

課題抽出マップ (構造材料系)

ものづくり現場における、新材料設計手法確立に向けての課題抽出マップ(構造材料系)		COON研究会(新材料設計)資料		2013/02/07	
	顧客製品 (車、家電等)	自社製品 (鋼材)			原料 (炭石等)
ものづくりプロセス概要	物の流れ	顧客メーカーでの設計	システムからみた設計 (顧客価値の創出→機能要件)	材料設計	製造プロセス設計
	設計工程	顧客設計指標	【機械・化学的特性】 強度、延性、靱性、水素脆性、耐熱性、疲労強度、耐腐食性 【その他】 ユーザーソリューション	【組織構造】 単相、複相、固溶元素、析出物	【プロセス因子】 熱処理温度、時間、冷却速度、時効処理、加工量
シミュレーション技術における課題	ものづくり現場において、新材料設計手法確立に向けての課題 (材料が組み込まれた製品全体機能やその製造プロセスをも含む「システム」として見た場合)	顧客メーカーとサプライヤー (材料メーカー等)との設計連携 (一貫最適化)の仕組みをどのように図る (すり合わせ型? モジュール型?)	顧客からのニーズを上記特性に落とし込む手法は、経験的に進んでおり、現状、不都合はそれほど感じていない (既存顧客、既存市場の垂直統合型だからか?) 新規顧客、市場に入り込む場合にも、自動車等での培ったソリューション提案手法を、他市場や他分野に展開するのが主である。	現状、材料組織構造情報に関する設計判断は、経験的(組織写真)で、材料組織構造情報からの有用な特徴量抽出技術が必要 (計量形態学) そもそも何が、「有用な特徴量」かを設定し、それを計測する技術の開発が必要あり (3D結晶構造解析技術等) フェーズフィールド法など組織形成シミュレーション技術を如何に材料設計に活かすか、その方法論を模索中。	近年、進展著しい、左記の組織形成シミュレーション技術において、必要とされる物性値等を第一原理計算にてえようとすると試みはあるも、十分に定量的な解析には至らず、CAE解析等定量的解析が主。
	現状技術	【発見】『気付き』『差別化』といった要素を効果的に盛り込むGUIの開発環境のようなものも必要か? * 下手をすれば、物づくり能力の優劣よりも、設備投資能力の大小が勝負の分け目になってしまう。(各企業の戦略次第)	有限要素法、最適化ソフト フェーズフィールド法、析出シミュレーション	第一原理計算	
	課題、要望	顧客とサプライヤーとのシミュレーション技術の効率的な連携 顧客とサプライヤーとのシミュレーション技術の効率的な連携 顧客とサプライヤーとのシミュレーション技術の効率的な連携	現状、これまで現象論的であった、組成やプロセス因子と組織構造との関係のモデルの精緻化を進めている段階。 組織構造と材料機能との普遍的な関連を明らかにするには、より洗練された数学的枠組みが必要か? (情報、数学などとの連携が必要) 設計最適化を得る際、より効率的な最適化探索アルゴリズムが必要か。 (大量のシミュレーション解析を行い、その結果群に対してインフォーマティブな探索手段を取るような場合) 実用材料に関しては、また十分な解析事例、検証事例が少なく、V&V体制の整備 (高度計測機器の整備、計測結果のDB化)やリファレンスとなる計算結果が必要 (DB化)		
計算機環境における課題	現状環境	多様な顧客メーカーとのシステムでありながら、柔軟な計算環境を如何に構築するか。	近年、自身でシミュレーションプログラムを開発できる人材が少なくなっているように思える。		社外リソース (超並列) 社内リソース
	課題、要望	商用ソフトウェアを用いる場合には、高並列の遅れや、ライセンス費用の高騰が課題 (クラウドシステムのような利用形態がもたらさないか?) 順方向繰り返し型を前提とするなら、超高速環境が必要か?			
その他課題	現状	大学にて、シミュレーション技術に関する学際的な取り組みを行う、シミュレーション学科なるものが、必要か。 (機械、物理、化学、情報工学、ソフトウェア工学、人間工学、経営工学等々)			
	課題、要望				

課題抽出マップ (高分子系)

材料設計における課題抽出(高分子系)		2018/1/27 OGN研究室(材料設計)		
物の流れ	顧客ニーズ(車、家電等)	自社製品(糸、布帛、フィルム、糊、墨、中間体等)	原料(モノマー、触媒等)	
設計工程	顧客メーカーでの設計 【顧客設計情報】 ・安全性 ・快適性 ・操作性 ・汎用性 ・環境適合性	システムからみた設計 (顧客価値の創出・機能要件) 【構造・化学・電気的性質】 ・強度 ・引っぱり、曲げ、引き裂き等 ・弾性、粘性、粘度 ・色調、透明性 ・伝導度(純潔度) ・分離性能 ・耐久性(経時変化) ・耐薬品性 ・耐熱性 ・耐水性 【顧客から見た新材料の価値】 ・従来材料との特長差 ・取り扱いの容易さ ・使用環境による特性変化 ・柔軟性、真気等 ・製品コスト ・環境適合性 (車利用容易、グリーンプラ等)	製造プロセス設計 【製法・合成】 ・連続処理/バッチ処理 ・反応温度・時間 ・触媒 ・副反応・最良反応抑制 ・流路・物質移動 ・分離回収、精製 【分子設計】 ・原料コスト ・形態(粉末、液体、気体) ・融点、沸点、ガラス転移点 ・溶解性 ・蒸気圧 ・粘度 ・熱安定性(毒性、可燃性、腐食性) ・色調 ・誘電率、屈折率 ・・・等々	分子設計
設計工程より 設計される材料 の組み合わせ (触媒、原料等)		【形状】 ・糸、フィルム、樹脂 ・変形系(異形断面、中空糸等) ・中間体(粉末、溶液、ペースト等) ・中間加工材(フィルム等) 【成分】 ・ポリマー単体 ・添加剤(可塑剤、安定剤等) ・コンパウンド、フィラー強化 ・表面改質、コーティング		
ものづくり現場 における課題		顧客価値を設計行程のどの段階で実現するか、必ずしも分子構造を追求する必要はなく、コーティング、フィラー、添加剤等で十分なケースが多い。 既存車であれば、顧客のニーズに合わせた評価系は社内ではあり、コスト、品質、納期、顧客満足度は必ずしも最適化されていない。 新車種では、社内の評価系が未確立、競合との評価系でなければ、最終製品の設計には使えない。	材料設計 ・安全、安定、低コストな製造プロセスの設計。 ・出荷時の形状は、顧客要求もしくは顧客とのすり合わせによる。 ・発色の範囲が既存設備のスペックに制限されがち。	
現状技術	顧客メーカーと設計技術の共有、CAD/CAE連携することによりコンピュータ内で協業する仕組みづくりが必要。	CAD、CAD内包CAE	分子シミュレーション ・重量化学計算 ・分子シミュレーション	
シミュレーション技術 における課題		必要な機械的機能を得るための材料物性を見出す技術が、材料メーカーにとって重要になりつつある。機械的物性と化学的物性を両方とも考慮した設計技術が求められる。 劣化のシミュレーションは困難、DB整備が望まれる。 設計空間の微細化(メソ構造へ)	・樹脂化シミュレーション(OCTA等) ・重量化学計算 ・分子シミュレーション ・シミュレーションによる主な貢献は、メカニズム説明、真の意味で分子設計と言えるような事例はごく稀。 目的により必要な計算精度は異なる。メカニズム説明には精度をシミュレーションには速度を重視する。 メカニズム説明には、材料に依じたパラメータの整備(DB化)や、パラメータを自動生成する仕組みが必要。 モデルサイズや計算時間に対する制約が大きい。計算コストと精度をバランスよく満足する計算モデルの近似化、計算条件を適切に選択・設定するためのノウハウDBが必要(ただし、企業からのノウハウ開示は難しい)。	
現状課題	顧客メーカーとの協業をいかに行うか。	・社内リソース ・需給の高拡大、ムラ解消のため、社外リソース活用が必要。	・社内リソース ・社外リソース(超並列計算)への期待もあり	・社内リソース ・社外リソース(超並列)
計算機連携 における課題			・前方向繰り返し型を前提とするなら、超高速環境を柔軟なバッチ処理環境が必要。 ・リアルタイムな計算結果、実測結果のDBと継続的アップデート(メンテナンス) ・計算機アーキテクチャを気にせず使える環境が望ましい。親家の超並列環境ではないと性能が引き出せない。 ・社外リソース利用時、セキュリティをいかに確保するか	
現状	シミュレーションを担当する人材のあるべき姿。基礎理論の理解、課題の理解、計算モデルへの落とし込み、実験研究者・技術者への説明、全ての能力が求められるのは困難。 技術的困難に直面した際の対応。社内には複数の専門家がいないが、シミュレーション初心者もいる。手は良くない。 超並列環境に対応するソフトは大学発のものも多く、GUIが楽々で使いやすい。手は良くない。 社外リソース利用時の課題(商用ソフトの活用拡大、セキュリティ確保、データ伝送高速化)			
その他課題	人材育成(社外人材教育を想定した継続・教育プログラム、ポスドクから企業へのキャリアパス)。 相談窓口(大学、国研、FOCUS、JAC等の勉強会)。二一とシズとのマッチング。 大学、国研と商用ソフトベンダーとの連携。			

産業競争力懇談会（COCN）

東京都千代田区丸の内一丁目 6 番 6 号 〒100-8280

日本生命丸の内ビル（株式会社日立製作所内）

Tel : 03-4564-2382 Fax : 03-4564-2159

E-mail : cocn.office.aj@hitachi.com

URL : <http://www.cocn.jp/>

事務局長 中塚隆雄