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

Center for Research on Innovative Simulation Software

ご挨拶

センター長・教授　加藤千幸

革新的シミュレーション研究センター（Center for Research on Innovative Simulation Software、略称CISS）は、2008年1月に東京大学生産技術研究所附属研究施設として設置され、2013年4月の改組を経て、1) 世界をリードする先端的シミュレーションソフトウェアの研究開発、2) 研究開発成果の社会への普及、3) シミュレーションソフトウェアを開発・利活用できる人材育成のための研究・教育基盤の強化を目的に活動を行ってきました。

これまで、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」（2008年10月から2013年3月）をはじめに、文部科学省「HPCI戦略プログラム」分野4 次世代ものづくりプロジェクト（2011年度から2015年度）など、CISSが発足した2008年から、多くの国のプロジェクトを推進してきました。これらのプロジェクトにおいて、HPC（High Performance Computing）環境で効率的に稼働する基盤的なシミュレーションソフトウェアを研究開発してきました。また、「HPCI戦略プログラム」では強力な産学官連携体制を構築し、風洞試験や水槽試験などにとって代わり得る精度を有するシミュレーションを実現したり、自動車の実走行状態を模擬できるシミュレーションを実現したりし、「京」を用いてこれらのシミュレーションソフトウェアの実証研究を進めてきました。このように「京」を用いて先端的な成果を上げることができました。

CISSは上記の活動を引き続き、さらに、発展させるべく、2018年4月から3期目の活動に入っています。具体的には、文部科学省『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発』プロジェクトの一つである「重点課題⑧近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」の代表機関として、2014年度から2019年度までの間、先端的シミュレーションソフトウェアの研究開発を推進してきました。この成果により、「京」と比較して、25倍以上高速に稼働するアプリケーションを開発し、さらに、これらの計算機の全系を用いた場合、50倍以上の高速計算が可能になる見通しが得られています。2020年度からは、3年間の予定で、文部科学省『「富岳」成果創出加速プログラム』の代表実施機関として、重点課題⑧で研究開発したアプリケーションを用いて、「富岳」を利用した大規模な実証研究を推進しています。これと並行して、データ同化手法や設計最適化手法などのデータ科学的なアプローチとHPCを利用したシミュレーションとを融合した研究分野において大きな成果の創出が期待されていることを踏まえて、データ科学的手法も駆使した、革新的なシミュレーション方法論の研究開発を行っています。CISSでは、我が国の産業競争力の強化に貢献すべく、これらに向けた取り組みも強力に牽引していく所存です。

引き続き、CISSの活動に対し、皆様方のご理解とご支援を頂ければ誠に幸いです。

令和２年6月

※富岳共用前評価環境における評価結果は、スーパーコンピュータ「富岳」の共用開始時の性能・電力等の結果を保証するものではない。

概 要

革新的シミュレーション研究センターでは、「将来のものづくりを変革できるシミュレーションソフトウェアの研究開発」「シミュレーションソフトウェアの実証と実用化」「高度なシミュレーションを開発・利用する人材の育成」を目的として、我が国の産業競争力の強化に資するとともに、ものづくり環境の変化に応じた、新たなHPC利用技術開発とその実証を推進します。

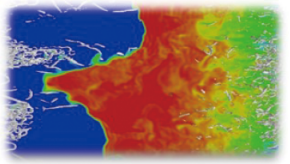
第3期革新的シミュレーション研究センターの研究分野

大規模データ解析を融合した、新たな設計・評価技術の研究開発を可能にする体制を構築しています

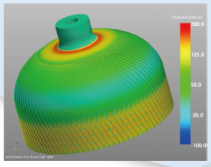
ものづくり

- 乱流数理工学　半場藤弘教授
- 信頼性工学　吉川暢宏教授
- 輸送動力変換機器工学　加藤千幸教授
- 最適設計工学　長谷川洋介准教授

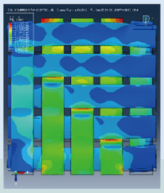
船舶・車等の設計(加藤)
提供:(一財)日本造船技術センター



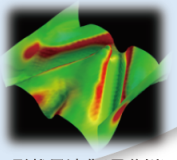
乱流モデル・制御(半場、加藤、長谷川)



CFRP容器最適設計(吉川)



メゾスケール強度解析(吉川)

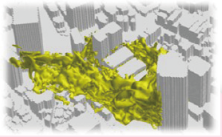


形状最適化(長谷川)

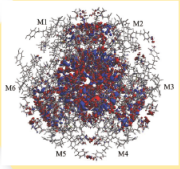
大規模データ解析

- 大規模データ解析工学　小野謙二客員教授

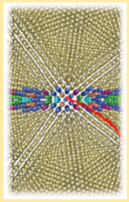
上流設計プラットフォームの整備(小野)



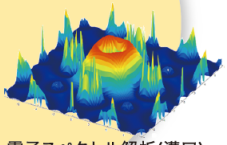
都市環境予測(大岡)



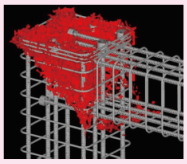
タンパク質設計(佐藤)



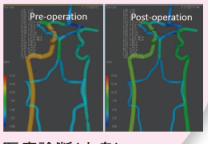
物性評価(梅野)



電子スペクトル解析(溝口)



人工物モニタリング(長井)



医療診断(大島)

ナノスケール分子デバイス・材料設計

- 生体材料工学　佐藤文俊教授
- 材料科学・材料創造　溝口照康教授
- 材料応用工学　梅野宜崇教授

医療工学・都市安全

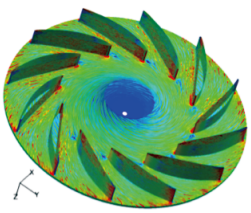
- 医療工学　大島まり教授
- 都市エネルギー工学　大岡龍三教授
- 社会インフラ工学　長井宏平准教授

研究メンバーと研究内容

加藤 千幸　センター長・教授　Chisachi Kato

専門分野　熱流体システム制御工学

ターボ機械や自動車、船舶などの流体関連製品の流れ解析手法や流れから発生する騒音の数値シミュレーション手法の構築、ならびに、その応用を目指した研究開発を進めている。特に、数百億要素規模の大規模な乱流計算を実現するための諸課題を明らかにし、それを解決するための数値解析手法を構築し、シミュレーションソフトウェアを研究開発した。また、開発したソフトウェアを用いて、様々な工業製品の高性能化、信頼性向上、騒音低減などを目的とした産学官共同研究を進めている。一方、環境・エネルギー分野の研究として、風の比較的弱いところでも出力が得られ、また、騒音が小さいことを特長とする新しい風車の研究開発や、風車の騒音モデルの高度化、キャビテーションモデルの高度化、ならびに、超小型ガスタービンの要素技術の開発などを進めている。

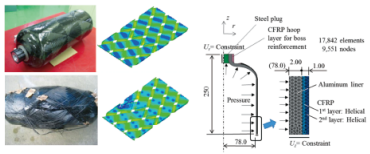


遠心送風機内部の渦度分布

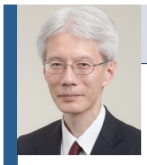
吉川 暢宏　副センター長・教授　Nobuhiro Yoshikawa

専門分野　マルチスケール固体力学

HPCIを活用した炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の強度評価と設計の高度化に取り組んでいる。試行錯誤的にしか設計諸元を決定できなかった現状を打開するため、炭素繊維／樹脂を区分するミクロスケールシミュレーションに基づく強度評価法を開発している。燃料電池自動車の基幹部品となっているCFRP製高圧水素容器の開発においては、炭素繊維束を最小単位として行われるフィラメントワインディングの経路や樹脂の強度特性、さらには製造誤差が強度発現機構に与える影響を直接的に評価できることを実証している。成形性が高く今後さらに普及することが期待される熱可塑性樹脂を用いたCFRPの成形シミュレーションソフトウエアを開発し、ジェットエンジンファンブレードの開発に供している。



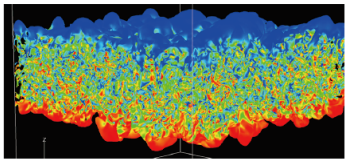
ズーミング解析による燃料電池自動車用高圧水素容器の破裂強度予測



半場 藤弘　教授　Fujihiro Hamba　協力メンバー

専門分野　流体物理学

流体シミュレーションソフトウェアの基盤技術としての乱流モデリングと計算法の開発を行っている。計算機の発達によって大規模で複雑な流体現象のシミュレーションが可能となってきたが、その基礎となる物理モデルや計算法の改良も不可欠である。流体の基礎方程式に基づく理論解析と基本的な流れ場の大規模数値シミュレーションにより、乱流の統計的な性質や物理的な機構を解明し、その知見を反映させて乱流モデルを改良することによって、より大規模で高速な流れに適用できる流体計算法の開発を目指している。また複雑な物理現象を伴う流体運動の一例として、液体金属やプラズマ気体などの電導性流体の乱流の研究を行っている。

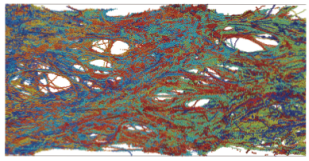


回転系の乱流拡散の運動エネルギーの分布。赤色は右巻らせん運動、青色は左巻らせん運動を表す

梅野 宜崇　教授　Yoshitaka Umeno

専門分野　ナノ構造強度物性学

当研究室では、分子動力学法や密度汎関数法第一原理計算といった原子・電子モデルシミュレーションを用いて、ナノ構造材料の強度および物性の発現機構を明らかにするための研究を行っている。また、ナノ～ミクロスケール現象の理解に基づいたマルチスケール力学解析にも取り組んでいる。最近の研究課題は、固体の理想強度および構造不安定モード解析、パワー半導体デバイスの変形・破壊解析、低次元ナノ構造体の変形およびマルチフィジックス解析、固体酸化物形燃料電池電極材の反応分子動力学解析、ポリマー変形・破壊のマルチスケール解析、耐環境セラミックスコーティングの最適構造設計等である。

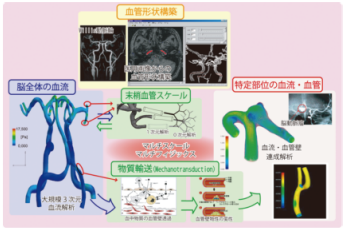


ポリカーボネート変形の粗視化原子モデル解析

大島 まり　教授　Marie Oshima　協力メンバー

専門分野　バイオ・マイクロ流体工学

心筋梗塞や脳梗塞などの循環器系疾患は動脈硬化症など血管病変が原因となって発症する。血管病変においては、血流の力学的刺激が重要な関わりを示している。そこで、当研究室では動脈硬化症や脳動脈瘤などの血管病変に着目し、様々な空間スケールを持つ血管の階層構造を考慮し、かつ血流が血管壁に与える力学的な影響だけでなく細胞の機能変化などの生理学的な影響もモデル化したマルチスケール・フィジックス数値シミュレーションの実現を目指している。これらの疾患が発症・進行するメカニズムの解明とともに、臨床応用を視野に入れ、医療画像や計測データを用いた患者個別に対応できるような診断・治療のためのシミュレーションシステムの開発を行っている。

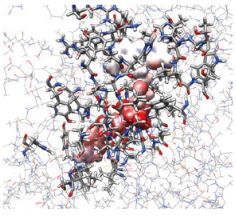


循環器系統合シミュレーションシステムの概要

佐藤 文俊　教授　Fumitoshi Sato

専門分野　計算生体分子科学、量子分子生物学

タンパク質は、わずかなエネルギーで効率良く働く精密な分子であり、機能の発現と大規模で複雑な構造を持っていることとは不可分である。タンパク質の機能を本質的に解明し予測するためには、タンパク質分子構造を丸ごと取り扱い、量子化学を用いて反応機構を解析する方法が正攻法である。当研究室では、密度汎関数法に基づくタンパク質全電子計算プログラムProteinDF/QCLOによるシミュレーションシステムの研究開発を行っており、スパコンに適した第3世代法アルゴリズムの開発に成功した。オリジナルプログラム以外にも様々なシミュレーション法を組み合わせ、新規酵素やナノ材料の設計といった産業・社会への応用・貢献を目指している。

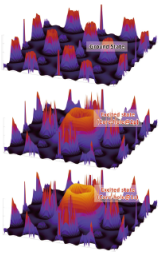


グルコースオキシダーゼのフラビンアデニンジヌクレオチド表面の静電ポテンシャル

溝口 照康　教授　Teruyasu Mizoguchi　協力メンバー

専門分野　ナノ物質設計工学

材料機能が発現するメカニズムを明らかにするためには、物質の原子・電子構造を定量化する必要がある。本研究室では透過型電子顕微鏡（TEM）、走査TEM（STEM）、電子線エネルギー吸収端近傍微細構造（ELNES）、X線吸収端近傍微細構造（XANES）、第一原理計算法および独自開発したELNES/XANES理論計算法を複合利用した研究を行っている。具体的には人工超格子やイオン液体などの先進材料、Liイオン電池材料や太陽電池材料などのエネルギー材料を研究対象とし、原子・電子構造をナノ計測と理論計算により定量的に明らかにすることで「構造」と「機能」の相関性を明らかにし、「物質設計」を実現することを目指している。

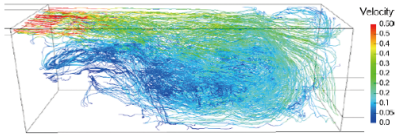


内殻電子励起スペクトル（ELNES/XANES）の第一原理計算をするうえで不可欠な内殻空孔状態の電子構造。上からそれぞれ基底状態、Mg2p内殻空孔状態、Mg1s内殻空孔状態の波動関数。物質は酸化マグネシウム（MgO）。

大岡 龍三　教授　Ryozo Ooka　協力メンバー

専門分野　都市エネルギー工学

大岡研究室では、都市の環境とエネルギーに関する研究を行っている。特にCFDを利用した建物内外の気流解析、都市の大気環境解析、風環境解析、ヒートアイランド予測を行い、都市における乱流現象の基礎的な検討を行うとともに、よりよい都市環境実現のための環境影響評価や設計に役立てている。最近では、気候変動を加味した建築設計のための将来気象データの整備を行っている。それとは別に都市のエネルギー問題改善のため、メタヒューリスティックや機械学習などを利用した都市エネルギーシステムの最適運用手法の開発や、建築の消費エネルギーを正味で0にするゼロ・エネルギー・ビルの開発も行っている。このように大岡研究室は未来に向けての都市のあり方を提案している。



格子ボルツマン法による建物内外の気流解析

小野 謙二　客員教授　Kenji Ono

専門分野　大規模計算機工学

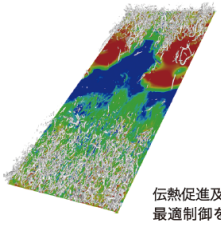
大規模な計算機資源を利用して多数のシミュレーションを行い、それらの複数の計算結果から有用な設計情報をえるキャパシティコンピューティングのアプローチは、ロバスト設計、最適化、不確かさの定量化などを通して、工業製品の設計パラダイムを大きく変える。このためには、大規模なデータを対象として、短時間シミュレーション技術、ワークフロー技術、ポスト処理技術、データサイエンス技術の統合が必要となる。本研究室では計算科学と計算機科学の融合アプローチにより、先進的なシミュレーションシステムを構築し、産業分野への実応用と多方面への展開を図ることを目指している。

Webベースのワークフローシステム WHEEL

長谷川 洋介　准教授　Yosuke Hasegawa

専門分野　界面輸送工学

地球環境予測、エネルギー有効利用を目的として、乱流及びそれに付随する熱・物質輸送現象の予測、制御に関する研究を行っている。具体的には、乱流中のスカラー源の特定を目的として、限られた計測情報を数値シミュレーションに取り込むことにより、流れ場やそれに付随する温度場、濃度場の３次元構造の推定を進めている。また、最適制御理論を応用することにより、研究者の物理的洞察に頼ることなく、エネルギー機器内部の熱流動現象を決定論的に最適化するためのツールを構築している。特に最近では、血管網や熱交換器等の複雑な３次元構造を有する流路内部の熱流動現象の数値シミュレーション、さらには、構造最適化アルゴリズムの開発を進めている。

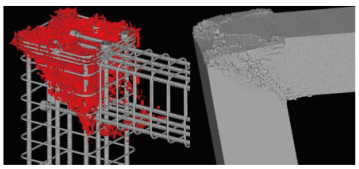


伝熱促進及び抵抗低減のための最適制御を施された壁面上を流れる乱流場

長井 宏平　准教授　Kohei Nagai　協力メンバー

専門分野　成熟社会インフラ学

鉄筋コンクリートの破壊シミュレーションを、離散解析（Rigid Body Spring Model）を用い、コンクリートのひび割れ発生と進展を直接的に表現する微細スケールにて実施している。ここでは鉄筋の節形状までモデル化し、複雑な配筋を一本ずつ全て再現し、例えば柱梁接合部の破壊のような複雑な応力とひび割れ状態を直接的に表現する。さらに、損傷した鉄筋コンクリートの構造性能を評価するために、鉄筋腐食の伴う鉄筋膨張とコンクリートへのひび割れ導入や、腐食原因となる塩化物イオンや水分などの物質移動を表現するトラスネットワークも導入している。社会基盤インフラの老朽化問題への適用を進めている。



柱梁接合部の破壊シミュレーション

先端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の推進

国のプロジェクトを推進、または、プロジェクトに参画し、最先端の実用的なシミュレーションソフトウェアの研究開発を牽引しています。

現在センターが推進している国のプロジェクト

文部科学省『「富岳」成果創出加速プログラム』 (2020〜2022)
「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発

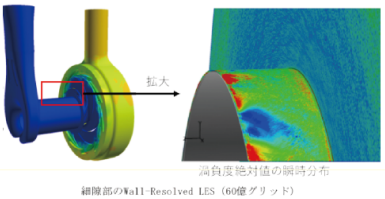
課題責任者　**加藤千幸**　東京大学生産技術研究所　教授

エネルギー産業の心臓部となる「ターボ機械」と輸送産業の中核となる「自動車」を対象に、「富岳」あるいは「富岳」の時代におけるHPCの高い計算性能を十二分に引き出すことができるアプリケーション・ソフトウェアを駆使することによって、ものづくりの在り方を抜本的に変革できることを証明することを目的とした研究を実施します。

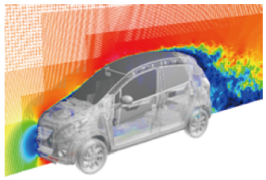
実証研究テーマ

1. 数値曳航水槽の実現と省エネデバイスによる推進効率の向上（FrontFlow/blue）
2. 細隙部を含めた多段遠心ポンプの内部流れのWall-Resolved LES（FrontFlow/blue）
3. 圧縮機サージの直接解析（ターボ機械用DES圧縮性流れ解析ソフトウェア）
4. リアルワールド自動車空力性能の予測（CUBE）
5. リアルワールド自動車空力音予測（CUBE, FFX）　※括弧内は利用するアプリケーション・ソフトウェア

小規模計算による実証解析結果



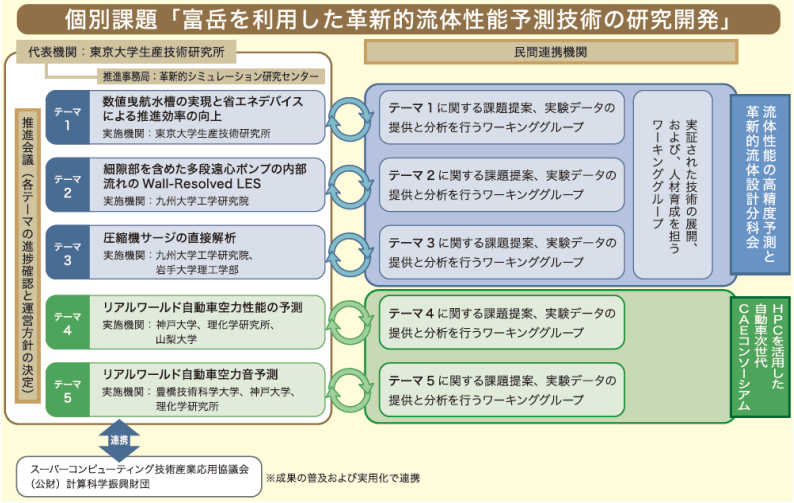
細隙部（側室トライナー部）の Wall-Resolved LES 解析結果



形状データ提供：スズキ㈱

プリ処理・コアカーネル高速化により
解析ターンアラウンドタイム (TAT) 24 時間以内を実現

実施体制

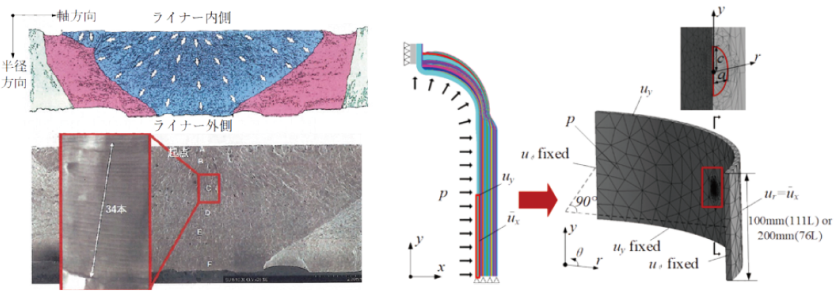


本研究開発は、神戸大学、九州大学、岩手大学、豊橋技術科学大学、山梨大学、理化学研究所と密接に連携して実施しています。

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (2019〜2021)
超高圧水素インフラ本格普及技術研究開発事業／水素ステーションのコスト低減等に関連する技術開発／複合圧力容器の評価手法確立・技術基準整備に関する技術開発

分担者　**吉川暢宏**　東京大学生産技術研究所　教授

本事業は水素ステーションに設置される超高圧複合圧力容器蓄圧器のコスト削減に向けた寿命評価方法の簡素化及び寿命延長設計に資する技術開発を目的としています。具体的には蓄圧器を構成する材料の試験片試験からボトムアップ的に容器の圧力サイクル疲労強度解析方法を確立して、設計疲労曲線を用いた疲労設計や累積損傷則の適用を可能とし、現状では必須となっている実容器を用いた疲労試験費用、試験時間の削減を図ると共に、蓄圧器使用寿命の延長を図ります。



ズーミング解析による超高圧複合圧力容器蓄圧器の疲労き裂進展寿命予測

本研究開発は、一般財団法人石油エネルギー技術センター（JPEC）、高圧ガス保安協会（KHK）と連携して実施しています。

センターが推進してきた国のプロジェクトとその成果例

文部科学省『「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」重点課題』

重点課題⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

代表機関
(2014〜2019)

製品コンセプトを初期段階で定量評価し、最適化する革新的設計手法、コストを最小化する革新的製造プロセス、およびそれらの核となる最先端スパコンの能力を最大限に引き出せるキラーアプリケーションを研究開発し、付加価値の高いものづくりの実現を目指して、文部科学省『ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発』重点課題⑧「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」を推進してきました。

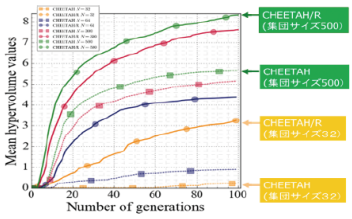
本重点課題では、代表的な産業分野（自動車、ターボ機械、航空機等）を対象に、ニーズに沿った価値創造と費用対効果の大きいものづくりを実現するため、【設計プロセスの革新】と【製造プロセスの革新】のカテゴリーに分類して、アプリケーションの開発に取り組んできました。

本研究課題は、九州大学、神戸大学、東北大学、山梨大学、東京理科大学、宇宙航空研究開発機構（JAXA）、理化学研究所と密接に連携し、研究開発を実施してきました。

得られた成果例

サブ課題A 設計を革新する多目的設計探査・高速計算技術の研究開発

多目的設計最適化アプリCHEETAH/Rを開発し、必要な計算時間の大幅な短縮を実現しました。



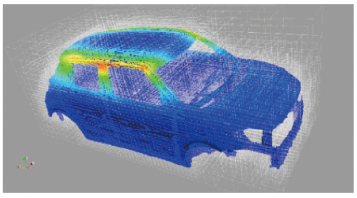
発電用風車設計最適化問題を用いた性能評価

【実施機関】
JAXA、九州大学、東北大学、東京理科大学、理化学研究所

【開発したアルゴリズム等】
CHEETAH/R、低B/F直接-反復ハイブリッド反復法、時間並列化アルゴリズム、ワークフローWHEEL

サブ課題B リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムの研究開発

実車フルモデルの複雑な形状を用いた空力解析が、従来の10倍程度の加速を実現しました。

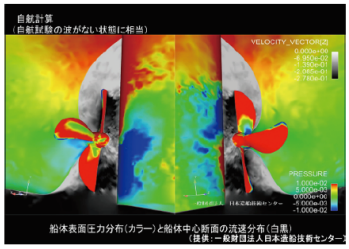

自動車の薄板構造と流体の統一連成解析

【実施機関】
神戸大学、山梨大学、理化学研究所

【開発したアプリケーション】
CUBE
形状データ提供:スズキ(株)

サブ課題C 準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発

FrontFlow/blueについて、「富岳」で100倍高速化を達成できる見込みを得ました。



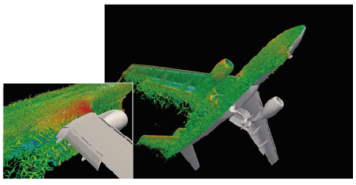
自航試験のベンチマーク計算 (KVLCC2船型)　提供: (一財)日本造船技術センター

【実施機関】
東京大学、九州大学

【開発したアプリケーション】
FrontFlow/blue,FFX (LBMコード)

サブ課題D 航空機の設計・運用革新を実現するコア技術の研究開発

実機複雑形状に対して、階層型等間隔直行格子生成を達成し、試計算を行いました。

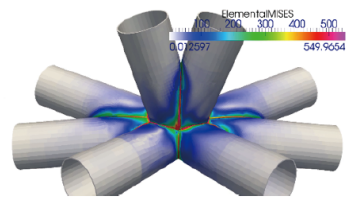

JAXA High-Lift Model (レイヤー格子・LES壁モデルなし)・流体:31億点(全体:45億点)

【実施機関】
JAXA、東北大学、東京理科大学

【開発したアプリケーション】
FFVHC-ACE

サブ課題E 新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータの研究開発

溶接工程を模擬するシミュレータの要素技術開発し、構造全体の変形や、母材に発生する応力状態を評価しました。



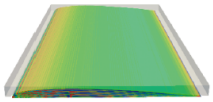
大規模望遠鏡の架台部におけるアーク溶接シミュレーションの解析結果(表示は相当応力)

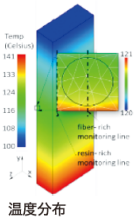
【実施機関】
東京大学(大学院新領域創成科学研究科)

【開発したアプリケーション】
FrontISTR

サブ課題F マルチスケール熱可塑CFRP成形シミュレータの研究開発

ジェットエンジン部品の熱可塑プレス成形シミュレーションを実施しました。


応力分布



温度分布

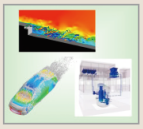
【実施機関】
東京大学

【開発したアプリケーション】
FrontComp

これまでセンターが推進してきた国のプロジェクト

HPCI戦略プログラム　分野4 次世代ものづくり

代表機関
(2009〜2015)



●概　　要　革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラを駆使することにより、“次世代ものづくり”分野の飛躍的発展に寄与する。

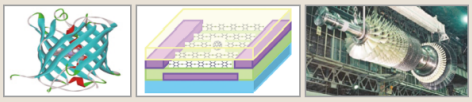
●戦略機関　東京大学生産技術研究所、(国研)日本原子力研究開発機構(JAEA)、(国研)宇宙航空研究開発機構(JAXA)

イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発

中核拠点
(2008〜2012)

●概　　要　バイオ、ナノを含む広義のものづくり分野を対象とし、我が国の産業イノベーションに資する世界最先端・実用的ソフトウェアの研究開発・普及促進・人材育成

●参加機関　東京大学生産技術研究所、同大学院工学系研究科、同大学院新領域創成科学研究科、(独)物質・材料研究機構、国立医薬品食品衛生研究所、立教大学、ソフトウェアベンダー、他

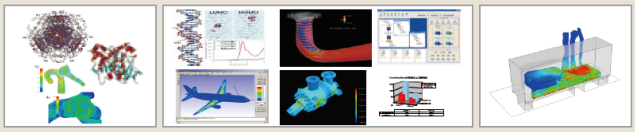


革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発

中核拠点
(2005〜2007)

●概　　要　21世紀の科学技術の飛躍的進展のカギとなる、世界をリードする実用的ソフトウェアの研究開発・普及・人材育成

●参加機関　東京大学生産技術研究所、同大学院工学系研究科、同人工物工学研究センター、(独)物質・材料研究機構、国立医薬品食品衛生研究所、北海道大学、東北大学、慶応義塾大学、九州大学、電気通信大学、立教大学、(財)高度情報科学技術研究機構、アドバンスソフト(株)、他

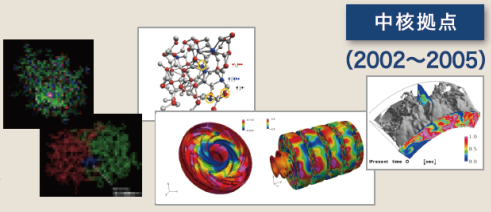


戦略的基盤ソフトウェアの開発

中核拠点
(2002〜2005)

●概　　要　世界最高水準の実用的な計算科学シミュレーション・ソフトウエアの開発・普及

●参加機関　東京大学生産技術研究所、同大学院工学系研究科、同人工物工学研究センター、(独)物質・材料研究機構、国立医薬品食品衛生研究所、慶応義塾大学、九州大学、電気通信大学、立教大学、(財)高度情報科学技術研究機構、アドバンスソフト(株)、他



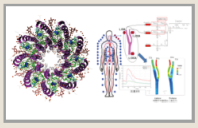
グランドチャレンジアプリケーションの開発

参 加
(2006〜2010)

次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発

●概　　要　超高速計算機を利用した、分子スケール・臓器全身スケール解析システムの開発

●連携機関　(独)理化学研究所、大阪大学、京都大学、横浜市大、慶応義塾大学、東北大、東京大学、他



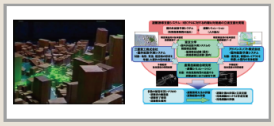
安全・安心科学技術プロジェクト

参 加
(2007〜2009)

有害危険物質の拡散被害予測と減災対策研究

●概　　要　有害危険物質の屋内・屋外拡散予測・および避難誘導支援システムの開発

●連携機関　三菱重工㈱、アドバンスソフト㈱、(独)産業技術総合研究所



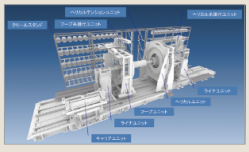
国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構

水素利用技術研究開発事業 / 燃料電池自動車及び水素ステーション用低コスト機器・システム等に関する研究開発 / 多給糸フィラメントワインディングによる複合容器の設計高度化に関する研究開発

参 加
(2015〜2017)

●概　　要　燃料電池自動車(FCV)及び水素ステーション用低コスト機器・部品等の研究開発、および、一連の機器及びシステムのコスト低減、FCVの普及展開及び国際競争力確保に資するための研究開発

●連携機関　村田機械(株)、帝人(株)



多給糸フィラメントワインディング装置

プロジェクトで開発のアプリケーション

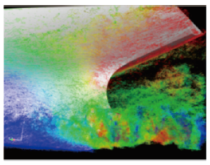
熱流体分野

熱流体・音響解析システム

責任者・連絡先
加藤千幸 東京大学生産技術研究所 教授
ciss-cfd@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

FrontFlow/blue
FrontFlow/blue-ACOUSTICS

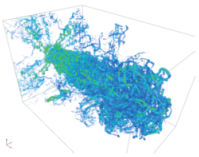
乱流現象(騒音、振動、非定常流体力、乱流熱輸送等)の高精度予測が可能です。PCクラスタから京まで、多様なマシンで高速に動作し、1000億要素規模の大規模流体解析および1億要素規模の大規模音響解析およびこれらの連成解析をサポートします。空力騒音解析、ターボ機械内部流れ解析、船舶の推進抵抗予測等、多数の工学的問題に適用できます。


船体まわりの乱流境界層の直接計算
提供：一般財団法人日本造船技術センター

階層直交格子を用いた実用複雑系流体解析プログラム

FrontFlow/violet
Cartesian(FFV-C)
Hierarchical Cartesian (FFV-HC)

高性能大規模並列にチューニングした非圧縮熱流体解析ツールで、人工物から自然物に至るまで様々な複雑形状まわりの流れを解析し、直交等間隔格子(FFV-C)と階層的直交格子(FFV-HC)の2種類のデータ構造に対応しています。実設計問題における課題を短期間で解析するため、形状データ(STL形式)から自動格子生成を行い、短時間で計算できる点が特徴です。豊富な制御パラメータや境界条件、データサンプリング機能、性能モニタリング機能などを提供します。


二重反転ジェットの複雑な流れの様子を渦管により可視化

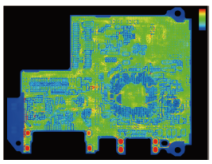
材料構造分野

非線形構造解析システム

責任者・連絡先
奥田洋司 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 教授
office@frontistr.com
「frontISTR研究会」https://www.frontistr.com/

FrontISTR

PCから京などの超並列スパコンまで対応可能なオープンソースの構造解析システムです。商用コードに匹敵する実用的な非線形構造解析機能(プリ・ポストを含む)と、大規模・並列・プログラマビリティに関する革新性、の両面を備えています。「京」の65,536コアを用いて75億自由度問題を13.7時間で解くことができます。


プリント配線基板熱反り解析（75 億自由度、最小メッシュ 7.5μm、「京」65,536 コア使用、ミーゼス応力分布）

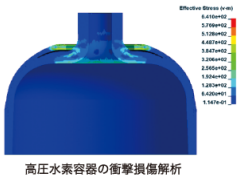
複合材料強度信頼性評価シミュレーター

責任者・連絡先
吉川暢宏 東京大学生産技術研究所 教授
yoshi@telu.iis.u-tokyo.ac.jp

[フィラメントワインディング(FW)CFRP容器]
FrontCOMP_FW, FrontCOMP_FW_multi
FrontCOMP_FW_shell, FrontCOMP_tank
FrontCOMP_tank_multi,
FrontCOMP_wind_multi

[CFRP部材成形]
FrontCOMP_cure, FrontCOMP_TP

繊維と樹脂を区別したメゾスケールモデルに基づく炭素繊維強化プラスチック部材の高度な信頼性解析を実現します。燃料電池自動車普及のための基幹部品である高圧水素容器の合理的最適設計を支援するため、繊維束サイズやワインディング経路、樹脂の非線形材料特性、硬化スケジュールなどの違いが、容器強度に与える影響を正確に評価します。

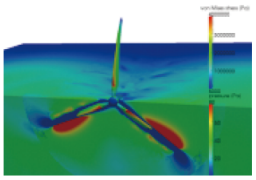

高圧水素容器の衝撃損傷解析

連成解析

大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーター REVOCAPシステム

REVOCAP_Coupler
REVOCAP_PrePost
REVOCAP_Refiner

FrontISTRおよびFrontFlow/blue等と連携し、各種並列計算機環境で大規模連成解析を実現します。具体的には、風車の翼が風を受けて振動する流体ー構造連成現象の解析等の事例があります。その他、磁場ー構造連成解析、流体ー構造ー音響連成解析など、様々な連成解析に対応しています。


流体ー構造連成解析結果(流体圧力コンター、翼の変形(×100)、ミーゼス応力コンター(翼表面))

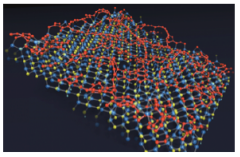
ナノ・バイオ分野

第一原理電子状態計算ソフトウェア

責任者・連絡先
大野隆央 国研)物質・材料研究機構 MANA 特別研究員
phase_system@nims.go.jp
「PHASEポータルサイト」https://azuma.nims.go.jp/

PHASE/0
PHASE-Viewer
ASCOT

PHASE/0は密度汎関数理論に基づいた擬ポテンシャル法による平面波基底の第一原理電子状態解析ソフトウェアです。基本的な電子構造解析に加え、ダイナミクス解析、化学反応解析、スペクトル解析等の高度な機能を提供します。ノートPC、PCクラスタからスパコンまで、幅広い計算機プラットフォームに対応可能です。ASCOTはナノ接合系における量子伝導解析の機能を提供します。

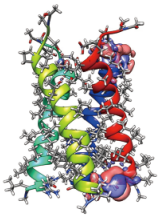

SiC上でのグラフェン成長の大規模第一原理シミュレーション

第3世代密度汎関数法によるタンパク質全電子カノニカル分子軌道計算

責任者・連絡先
佐藤文俊 東京大学生産技術研究所 教授
satofumi@iis.u-tokyo.ac.jp
「ProteinDFサイト」http://proteindf.github.io/

ProteinDF
QCLO

量子化学計算標準のガウス型基底関数を用いる密度汎関数法によるタンパク質全電子カノニカル分子軌道計算ソフトウェアです。PCクラスタからスパコンまで、幅広い計算機プラットフォームをカバーし、生体分子の電子構造モデリングにおいて、現時点で到達した最新機能を提供します。

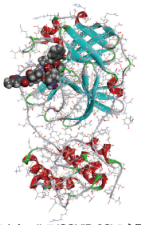

インフルエンザ A ウィルス M2 タンパク質の密度汎関数法分子動力学計算。プロトンの移動過程が調べられる。

バイオ分子相互作用シミュレーター

責任者・連絡先
望月祐志 立教大学理学部 教授
abinitmp-office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

ABINIT-MP
BioStation Viewer

高度に並列化されたフラグメント分子軌道(FMO)法に基づいて、タンパク質と化学物質との相互作用を解析し、理論創薬における効率的な化合物探索・分子設計に貢献します。また、機能性ポリマーやナノバイオ界面系などの応用化学の分野でも広く利用が可能です。


新型コロナウィルス(COVID-19)の主要プロテアーゼ(Mpro)と阻害剤N3の複合構造。ABINIT-MPプログラムを使ったFMO計算による詳細な相互作用解析によって重要残基の特定を行った。

最先端のシミュレーションソフトウェアによるさまざまな解析事例は、**計算工学ナビ http://www.cenav.org/** をご覧ください。

● FrontFlow/blue、BioStation、ProteinDF、ABINIT-MP、REVOCAP、PHASE、ASCOTは国立大学法人東京大学の日本における登録商標です。

シミュレーションソフトウェアの普及・人材育成

将来の計算機環境を見据えて、それに適合するアルゴリズム・ソフトウェアの開発を継続的に実施するとともに、これまでに国家施策として開発してきた、広い意味でのものづくり関係の先端的・実用的アプリケーションの普及・教育活動を行っています。社会からの期待に応えるべく、HPCI戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」において構築した普及の仕組みを有効に活用して、最新の情報を順次発信し、HPCものづくり利用者を支援します。

Webサイト「計算工学ナビ」

ウェブサイト「計算工学ナビ」(http://www.cenav.org)において、さまざまなアウトリーチ活動を紹介しています。

ニュースレター

最新の研究開発成果や、ソフトウェアの民間活用事例などをわかりやすく伝えるニュースレターを発行しています。ニュースレターは、本ウェブサイト上でもご覧いただけます。

「京」、FX10、PCクラスタ等で動作するソフトウェア

本ウェブサイトの「ソフトウェアライブラリ」にて、熱流体／構造／ナノテクノロジー／ライフサイエンスの各分野の解析シミュレータとその周辺ソフトウェアのダウンロードが可能です。

HPCアプリ利活用の促進のための解析事例データベース

上述した各アプリケーションによる解析事例集を公開しています。各分野の標準的な解析例題やベンチマーク問題、「京」を用いた超並列解析事例までを網羅しており、アプリケーションの機能や性能などの特長を紹介しています。また、一部の解析事例には再現実行可能なデータセットを添付し、ユーザーによる解析追体験を可能にしています。

Q&Aや不具合情報などの情報共有

ユーザー関心度の高い情報はFAQを整備します。不具合情報の共有はアプリ毎に用意します。(GitHub等)

計算工学ナビホームページ

ソフトウェアライブラリ

解析事例データベースコンテンツ例

HPCものづくり利用者支援

計算科学振興財団(FOCUS)やスーパーコンピューティング技術産業応用協議会(ICSCP)などと連携して、広範のものづくりに適用可能なアプリケーションの利用者層拡大を目的としたユーザ支援を行っています。

HPC利用者への支援

熱流体分野、材料構造分野、ナノ量子分野のアプリケーションにおいて、前処理から計算実行、後処理まで、企業での利用環境を想定した利用法を習得する体験セミナーなどを支援しています。

- ・FrontFlow/blue実務設計セミナー
- ・HPC/PFハンズオンセミナー
- ・HPC産業利用スクール　など

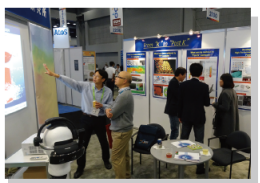
産業界との連携

ソフトウェアの実用化を目指して、産業界の実例問題を対象にしたベンチマークを実施しています。

セミナーの様子

国際会議への出展

アウトリーチ活動の一つとして、SCおよび国際フロンティア産業メッセの国際会議に出展を行っています。


アメリカで開催のSCの様子

国際フロンティア産業メッセの様子

知識データベースの整備

国のプロジェクトで開発したアプリケーションを使いこなすためのノウハウ・事例を蓄積するデータベースを開発し、インターネット上 (http://www.cenav.org/)で公開しています。

解析事例データベースコンテンツ例

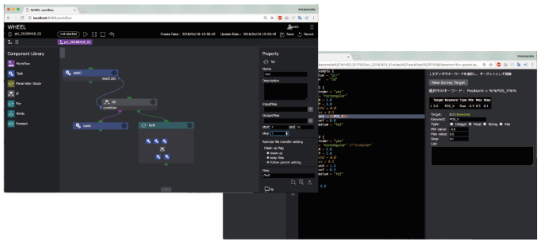
分 野	アプリ名	事例件数
ものづくり（構造・流体・音響）	FrontFlow/blue	29
	FrontFlow/violet	16
	FrontCOMP	10
	FrontISTR	31
	ADVENTURE	4
	OpenFOAM	16
ナノスケール分子デバイス・材料設計	PHASE	65
	ABINIT-MP	16
	ProtainDF	20
	合計	207

解析事例データベース収録件数一覧

解析実行環境の整備

最先端の大規模並列アプリケーションを、研究/設計現場の道具として利用可能にするプラットフォームを開発・整備しています。

解析実行環境のシステム構成図



ユーザ・インターフェース画面例 (Webブラウザ上で動作)

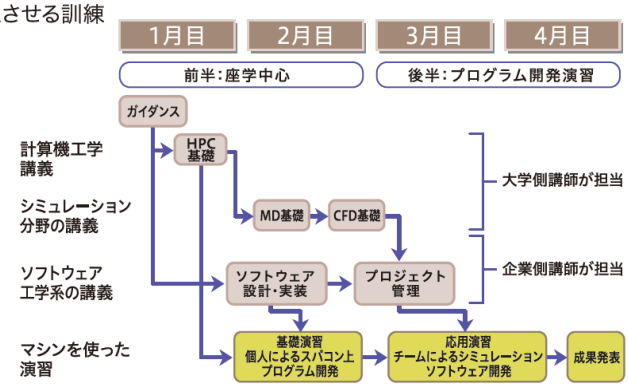
最新シミュレーションソフトウェア開発教育 –実践的シミュレーションソフトウェア開発演習–

シミュレーションソフトウェア開発者教育を、平成21年度より東京大学工学系大学院で実施し、シミュレーションソフトウェア工学の教育に寄与しています。

- チーム制・チケット駆動開発によるソフトウェア 開発
- ソフトウェア工学とHPC (主に前者に比重)、これらを実践的に両立させる訓練
- 企業の講師を加えた実践的な講義・演習
- 流体力学と分子動力学のハイブリッド並列シミュレーションプログラムを作成
- 最新スパコンでの開発・実行

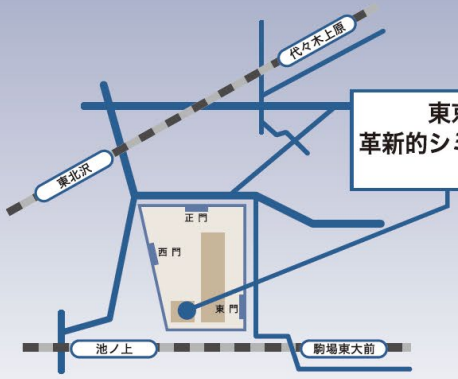
ISBN-13:
978-4130624541

ISBN-13:
978-4130624558



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

〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1
TEL 03-5452-6661
FAX 03-5452-6662
E-mail office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp
URL http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/



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
An-604

小田急線／東京メトロ千代田線
東北沢駅より徒歩7分
代々木上原駅より徒歩12分

井の頭線
駒場東大前駅(西口)より徒歩10分
池ノ上駅より徒歩10分

June 2021