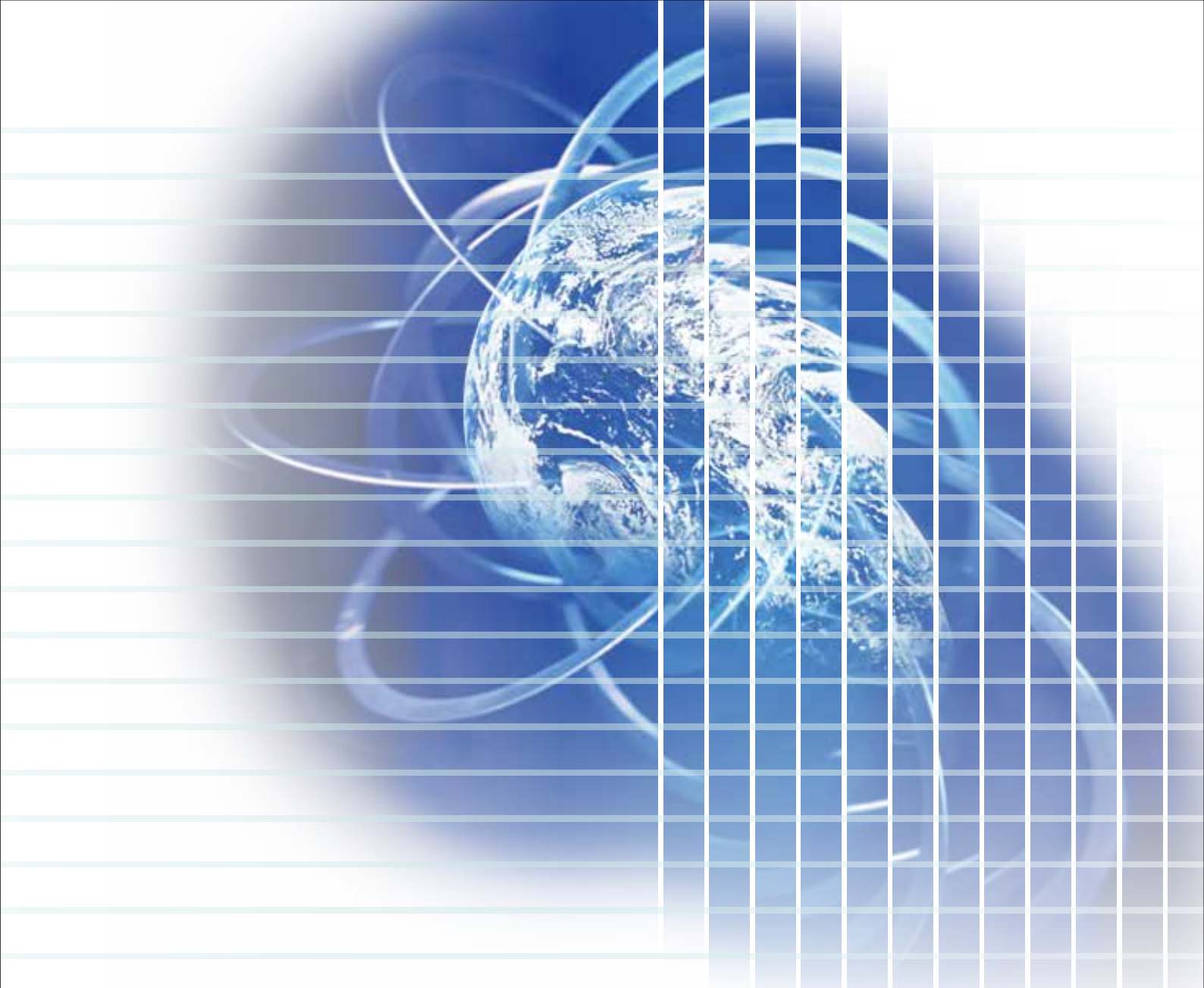




東京大学生産技術研究所

革新的シミュレーション研究センター

Center for Research on **I**nnovative **S**imulation **S**oftware



2023年4月から、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、4期目の活動をスタートさせました。

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月と2018年4月の2回の改組を経て、1)世界をリードする先端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。

第4期では、第3期までの活動を発展させ、工学における課題解決と価値創成への貢献の観点から、今後のシミュレーション技術の果たすべき役割は「材料開発に始まり設計と製造を経て実用に供され最終的に廃棄に至るまで、人工物がたどる一連の段階を一気通貫で事前にシミュレーションし、それぞれの段階で起こりえる課題を事前に予測し解決手段まで提示すること」にあると考え、そのようなシミュレーション技術の開発と活用をセンターが実現すべきビジョンとして定義し、活動を行うこととしています。

具体的には、力学のコアコンピテンスの再構築と飛躍的な強化および先端シミュレーションソフトウェアの研究開発のための基盤技術の開発に関する活動を行うとともに、開発したソフトウェアと獲得したデータのオープンサイエンス化と社会普及、および、HPC（High Performance Computing）・データ科学融合のシミュレーションソフト技術の開発とそれを利活用できる人材育成のための教育基盤の強化に取り組めます。

先端シミュレーションソフトウェアの研究開発の一つの活動として、CISSでは、発足した2008年からこれまで、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、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、多くの国のプロジェクトを推進し、HPC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、実用化してきました。

上記で開発したシミュレーション技術を利用して、2018年度からは、首相のカーボンニュートラル宣言で一気に加速した水素社会構築事業の一翼を担う国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）のプロジェクトを継続的に実施しています。現在は、2024年度までの予定で、「燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業／水素利用等高度化先端技術開発／機械学習を用いた高圧水素複合容器の最適設計技術に関する理論検討及び実証」を実施し、大規模有限要素解析と機械学習を融合させた最適設計のためのIT基盤の構築に係る研究開発を実施しています。

また、2023年4月から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」「AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築」を、代表実施機関（課題責任者加藤千幸教授）として推進しています。このプロジェクトは、AIの活用によってHPCの産業応用を飛躍的に拡大できることを実証し、研究開発により得られたソフトウェアの広汎なものづくり分野への展開に貢献するものです。「HPCI戦略プログラム」で構築した強力な産学官連携体制の下で進めてきた、「京」や「富岳」を用いた開発シミュレーションソフトウェアの実証研究を継続して進めてまいります。そして、これまでと同様に、我が国の産業競争力の強化に貢献すべく、先端シミュレーション技術の研究開発の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5年6月

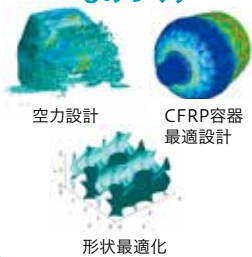
概要

革新的シミュレーション研究センターでは、第3期までに開発された先端シミュレーションソフトウェアの研究開発のため基盤技術を活用し、力学のコアコンピテンスの再構築と飛躍的な強化を図り、持続可能な社会構築の要請に応えることを目的として、材料開発から廃棄に至るまでを一気通貫でシミュレーションするための最新技術の研究開発を行っています。当センターが開発してきた先進力学シミュレーションモデルを汎用ソフトウェアとして公開し、実証課題の解決に展開すると同時に高度シミュレーションを担う人材のリカレント教育を実施するためのデジタルエンジニアリング基盤の整備と実証的検証を行い、研究資産の凡化と公開により、ものづくり分野でのデジタルトランスフォーメーションの促進に貢献します。

先進学術の推進

力学のコアコンピテンスの再構築と飛躍的な強化および先端シミュレーションソフトウェアの研究開発のための基盤技術の開発

ものづくり

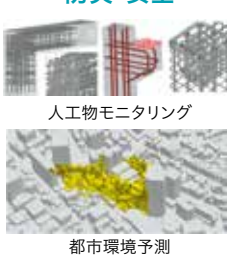


実験、シミュレーション、AIを融合した方法論の実践

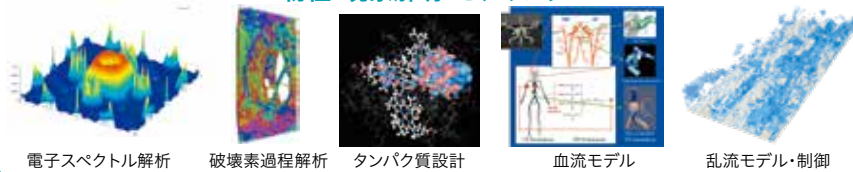


新たな統一的な理論・力学体系の構築

防災・安全



物性・現象説明・モデリング



熱・流体物理

教授	半場藤弘	流体物理学
教授	加藤千幸	熱流体システム制御工学
教授	大島まり	数値流体力学
教授	長谷川洋介	界面輸送工学
教授	大岡龍三	都市エネルギー工学
客員教授	小野謙二	大規模計算機工学
准教授	菊本英紀	複雑系環境制御工学

物質・材料機能

教授	吉川暢宏	マルチスケール固体力学
教授	梅野宜崇	ナノ・マイクロ機械物理学
教授	溝口照康	ナノ物質設計工学
教授	井上純哉	鉄鋼冶金インフォマティクス
准教授	栃木栄太	ナノスケール材料強度学
助教	久保淳	ナノ・マイクロ機械物理学

確率・量子論的計算科学

教授	佐藤文俊	計算生体分子科学
准教授	古川亮	複雑流体物理学
准教授	長井宏平	成熟社会インフラ学

研究成果の社会還元と人材育成および課題抽出

開発した先端シミュレーションソフトウェアと獲得したデータのオープンサイエンス化と社会普及およびHPC・データ科学融合の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と教育基盤の強化および社会的課題の抽出

課題解決と価値創造に貢献するシミュレーション技術

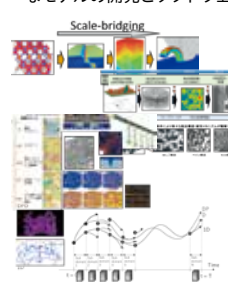
- 素材開発から保守までを統合した仮想空間で一気通貫で検討し課題の解決策を提示
- 製造・検査・保守段階で得られた膨大な計測データを材料開発や設計にフィードバックする信頼性向上のDXを支援するためのシミュレーション技術の高精度化

企画 ▶ 材料開発 ▶ 設計 ▶ 製造 ▶ 検査 ▶ 保守 ▶ リユース ▶ 廃棄

デジタルトランスフォーメーション カーボンニュートラル 防災・減災 エネルギーマネジメント

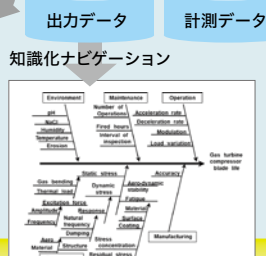
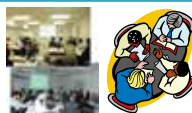
先進学術の推進

- 多様な専門性を有するメンバーのシナジー効果を発揮したディシプリンとスケールをまたぐ新たなモデルの開発とソフトウェア化



人材育成および課題抽出

- プラットフォームを活用したハンズオンセミナーやサイドバイサイドトレーニングによるリカレント教育
- コンソーシアムによる社会的課題の抽出



研究成果の社会還元

- プラットフォームを活用した実証的課題解決の実践
- ① 燃料電池モビリティ用CFRP製高圧水素タンクの開発
- ② 環境負荷低減型建設材料の開発
- ③ 太陽熱を利用した炭酸ガス燃料化システムの開発
- 成果の見える化により新たな共創課題設定を促進しステークホルダーへの求心力強化

ものづくりライフサイクルマネジメントプラットフォーム

第4期主要事業

第4期の主要事業として、先進力学モデルの凡化を促進するデジタルエンジニアリングプラットフォームを活用した水素サプライチェーン構築を基軸とする、グリーンイノベーションを加速するDX基盤の整備とリカレント教育および実証研究への展開基盤の整備を実施しています。

水素サプライチェーン構築を基軸としたグリーンイノベーションへの貢献

水素を媒体とするエネルギーサプライチェーンを強化し、エネルギーインフラ機器およびモビリティの信頼性と経済性を両立させ、社会受容性も向上させたうえでグリーンイノベーションの具現化に貢献するため、先進力学シミュレーションソフトウェアを活用したDX基盤を構築



高度力学シミュレーションリカレント教育

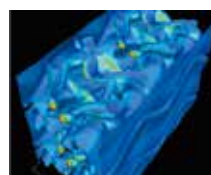
工学の広い分野で必要なシミュレーション技術に関する横断的セミナーを実施

- 材料強度・破壊分野
(ハード・ソフトマターの力学)
- 土木・建築分野 (構造物の寿命予測)
- マテリアル分野 (材料物性)
- 熱流体分野 (流れ解析・可視化)



HPC・データ科学的設計手法の普及

文部科学省プロジェクト「富岳」成果加速プログラムにおいて開発した、大規模汎用LBM解析ソフトウェアの産業応用を加速するために、大規模解析と解析結果の分析を柱とする実践コースを実施



(提供: 豊橋科学技術大学 飯田明由教授)



ハンズオンセミナーによる利用技術の習得とセンター保有の計算機による自社課題の解決と実証

メンバーと研究開発内容

吉川 暢宏

センター長・教授

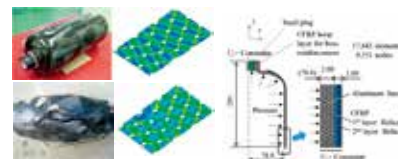
Nobuhiro Yoshikawa

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ます。試行錯誤的に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ます。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ます。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ェアを開発し、宇宙航空機器の開発に供しています。



ズーム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

梅野 宜崇

副センター長・教授

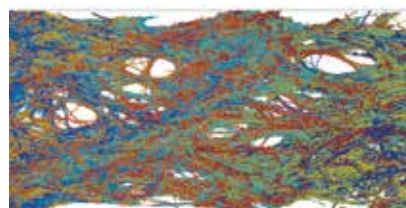
Yoshitaka Umeno

専門分野 ナノ・マイクロ機械物理学



当研究室では、材料強度や諸物性の本質を真に理解することを目指し、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・マイクロ域における材料挙動を明らかにするための研究を行っています。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ます。最近の研究課

題は、固体結晶材料の理想強度・変形・破壊および構造不安定モード解析、低次元ナノ構造体の座屈変形およびマルチフィジックス解析、境界潤滑の粗視化分子動力学解析、化学機械研磨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、機械学習を援用したナノ・マイクロ疲労のマルチスケールモデル構築、等です。



ポリカーボネート変形の粗視化原子モデル解析

半場 藤弘

教授

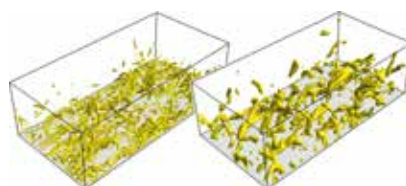
Fujihiro Hamba

専門分野 流体物理学



最近の計算機の発達によって大規模で複雑な流体现象のシミュレーションが可能となってきましたが、その基礎となる乱流の物理モデルと計算法の改良は依然として重要な課題です。我々は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を行い、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ます。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ます。



チャネル乱流の壁面近くの渦構造。左は小スケールの渦、右は中スケールの渦を示す。

加藤 千幸

教授

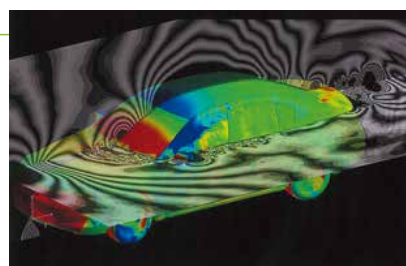
Chisachi Kato

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まわりの乱流や乱流から発生する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ます。特に、数百億格子から数千億格子規模の大規模な乱流・音響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、アプリケーションソフト

ウェアを開発しています。また、アプリケーションソフトウェアがスーパーコンピュータ「富岳」や最新鋭のGGPUなどにおいて高速に稼働するためのアルゴリズムも研究開発しています。開発したアプリケーション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ます。



格子ボルツマン法に基づくアプリケーションFFXによる自動車の空力音響解析結果 (画像提供: 本田技術研究所)

大島 まり

教授

Marie Oshima

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します。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ます。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ます。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ます。

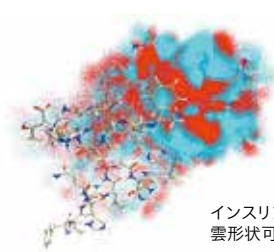


循環器系統合シミュレーションシステムの概要



タンパク質は、わずかなエネルギーで効率良く動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は不可分です。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った量子化学計算が正攻法です。当研究室で

は、ハイブリッド密度汎関数法に基づくタンパク質正準分子軌道計算プログラムProteinDF/QCLObotの研究開発を行っており、第3世代法アルゴリズムの開発に成功しました。量子コンピューティングも視野に入れ、産業応用・社会貢献を目指しています。

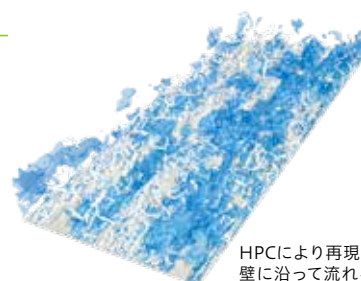


インスリンの分子軌道の雲形状可視化



当研究室では、流れ、およびそれに伴う熱・物質輸送の予測、制御のための基礎研究を進めるとともに、エネルギー、バイオ医療、環境予測、生産技術への応用研究を展開しています。エネルギー分野では、乱流輸送現象の最適制御、乱流伝熱面の形状/トポロジー最適化とその実証実験を進めています。バイオ医療分野では、発生段階の毛細血管網形成メカニ

ムの解明やガン治療を目的としたナノメディシンの開発を行なっています。環境分野では、限られた計測データをシミュレーションに同化することにより、流れ場やそれに付随するスカラー場の推定を進めています。さらに、インクジェットプリンティング技術の最適化を通じて、様々な機能性デバイスの製造プロセスの革新を目指した研究開発を展開しています。

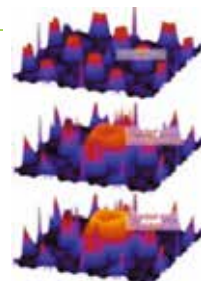


HPCにより再現された壁に沿って流れる乱流の瞬時場の可視化



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ります。当研究室では第一原理計算や分子動力学計算を主としたシミュレーションに加え、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)などのナノ計測、さらに機械学習をはじめとしたデータ駆動型手法を駆使して、材料機能が発現するメカニズムの解析を進めています。具体的に半導体、触媒、エネルギー材料、セラミックスなどの先進材料を研究対象とし、「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ます。

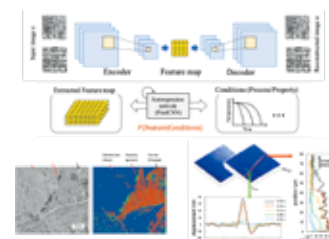


内殻電子励起スペクトル(ELNES/XANES)の第一原理計算をするうえで不可欠な内殻空孔状態の電子構造。上からそれぞれ基底状態、Mg2p内殻空孔状態、Mg1s内殻空孔状態の波動関数。物質は酸化マグネシウム(MgO)。



構造材料の特性は、結晶構造や分子構造だけでなく、結晶粒の大きさや形状、粒界の性質、転位等の欠陥の密度や分布など、様々なスケールの組織因子によって左右されます。そのため、構造材料を理解し、その特性予測するには、材料組織の幾何学的特徴を捉える手法や、支配的となる物理現象の抽出が必要と

なっています。当研究室では、独自開発した材料組織の定量測定手法で得られたデータと、計算材料科学/データ駆動科学を融合することで、構造材料の特性を支配する因子を抽出し、新たな構造材料の設計指針を得ることを目指しています。

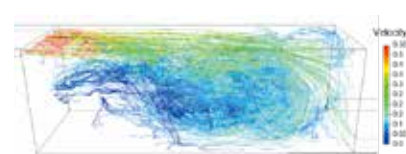


PSP連関を抽出する深層学習モデル/鉄鋼材料の自動識別例/結晶組織形成過程のその場計測例



当研究室では、都市の環境とエネルギーに関する研究を行っています。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ます。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ます。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適用手法の開発や、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ます。このように当研究室は未来に向けての都市のあり方を提案しています。



格子ボルツマン法による建物内外の気流解析



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ます。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ります。当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ます。



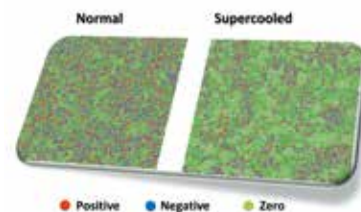
Webベースのワークフローシステム WHEEL

古川 亮 准教授 Akira Furukawa 専門分野 複雑流体物理学



ガラス転移現象は、これまでに様々な理論モデルの提案があり、多くの研究者の取り組みがあったにも関わらず、そのメカニズムは不明なままです。当研究室では、ガラス転移とそれに付随して発現する様々な異常物性の解明を目指して、分子動力学シミュレーションを援用し、独自の考え方に基いて研究に取り組んでいます。

また、アクティブマター、粉体懸濁液におけるレオロジー特性や非平衡下での構造形成の理解も課題としています。特に、構成要素間の流体力学的相互作用は主要な役割を明らかにすることを目的とし、粒子-流体ハイブリッドシミュレーションを用いた研究を行っています。



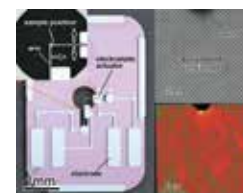
構造緩和時間での粒子交換イベントの空間パターン（ノーマル(左)および過冷却(右)状態）

栃木 栄太 准教授 Eita Tochigi 専門分野 ナノスケール材料強度学



結晶性材料の変形や破壊現象は転位、双晶、亀裂と言った格子欠陥の挙動と密接に関連することが知られています。透過型電子顕微鏡(TEM)は格子欠陥を直接観察する解析ツールとして広く活用されています。さらに、結晶の変形・破壊現象に伴う格子欠陥挙動の解析にはTEM内にて試料に荷重負荷を行いなが

ら観察を行う、いわゆるその場TEM機械試験法が有効です。当研究室では、TEMを用いた結晶中に形成される格子欠陥の構造解析研究を進めるとともに、MEMS技術を活用した新規TEM用駆動デバイスおよび制御システムの開発とそれを活用したその場観察研究を実施しています。



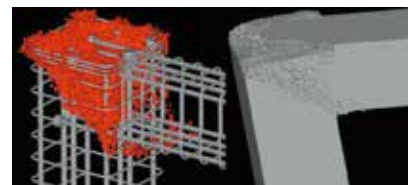
荷重負荷MEMSデバイスを用いた原子分解能TEMその場機械試験による局所ひずみ解析

長井 宏平 准教授 Kohei Nagai 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ます。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

態を直接的に表現します。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、鉄筋腐食に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ます。社会基盤インフラの老朽化問題への適用を進めています。



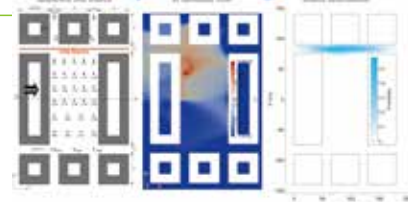
柱梁接合部の破壊シミュレーション

菊本 英紀 准教授 Hideki Kikumoto 専門分野 複雑系環境制御工学



建築・都市空間における環境情報の高度化や解析効率化を目的とした研究を行っています。主に空気の流れおよびその質に関して、シミュレーションやセンシング、またそれらを融合した解析技術を開発しています。例えば、数値流体力学・気象モデルおよび観測に基づくデータを統計モデルや機械学習技術を用いて統

合し、都市空間内の気流を高速かつ高解像度で推定する手法や未知の空気質汚染源などの環境因子を逆解析する手法、センサー配置を最適化する手法などを研究しています。これらを通じて、建築・都市環境の詳細な把握および効果的な制御を実現することを目指しています。



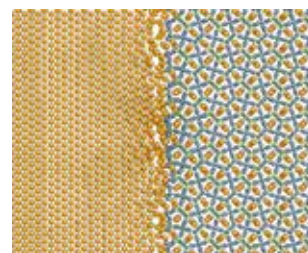
乱流・統計解析を応用した市街地空間における汚染物質発生源同定

久保 淳 助教 Atsushi Kubo 専門分野 ナノ・マイクロ計算材料力学



構造材料における変形や破壊の根源的なメカニズムを解明することを目的として、全原子分子動力学法や粗視化分子動力学法による原子・分子シミュレーションを行っています。金属、半導体、セラミックス、高分子材料などの様々な材料を対象として、主に強度や破壊靱性などの機械的特性に関連した研究を進め

ています。その他に複合材料の熱伝導や金属表面の潤滑・トライボロジー問題などの複合的なテーマも研究の対象としています。また、分子動力学シミュレーションに必要な原子モデル・粗視化粒子モデルの開発や、機械学習を利用した物性評価手法の開発にも取り組んでいます。



ネオジム磁石界面の原子構造解析

各研究室のWebページ

吉川暢宏研究室	http://www.young.iis.u-tokyo.ac.jp/
梅野宜崇研究室	http://www.cmsm.iis.u-tokyo.ac.jp/
半場藤弘研究室	http://www.iis.u-tokyo.ac.jp/~hamba/
加藤千幸研究室	http://ckatolab.iis.u-tokyo.ac.jp/
大島まり研究室	http://www.oshimalab.iis.u-tokyo.ac.jp/japanese/
佐藤文俊研究室	http://www.satolab.iis.u-tokyo.ac.jp/
長谷川洋介研究室	http://www.ysklab.iis.u-tokyo.ac.jp/index.html

溝口照康研究室	http://www.edge.iis.u-tokyo.ac.jp/
井上純哉研究室	http://metall.iis.u-tokyo.ac.jp
大岡・菊本研究室	http://venus.iis.u-tokyo.ac.jp/
古川亮研究室	https://sites.google.com/g.ecc.u-tokyo.ac.jp/complexfluid/
栃木栄太研究室	https://sites.google.com/g.ecc.u-tokyo.ac.jp/nanoscale-strength
長井宏平研究室	http://www.nagai.iis.u-tokyo.ac.jp/

大型研究プロジェクト

当センターはこれまでに国のプロジェクトを推進するなど、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とその実用化を牽引しています。

文部科学省プロジェクト

代表機関

「富岳」成果創出加速プログラム

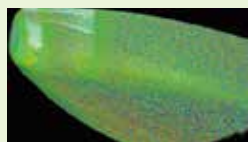
AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築 (2023～2025年度)

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)

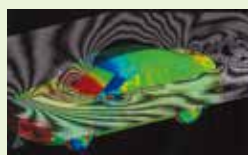
概要 AIの活用によってHPCの産業応用を飛躍的に拡大できることを実証し、大規模な産学連携コンソーシアム等を組織し、研究成果を幅広いものづくり分野に展開します。さらに、次世代の計算基盤となる解析アルゴリズムを開発します。

参加機関

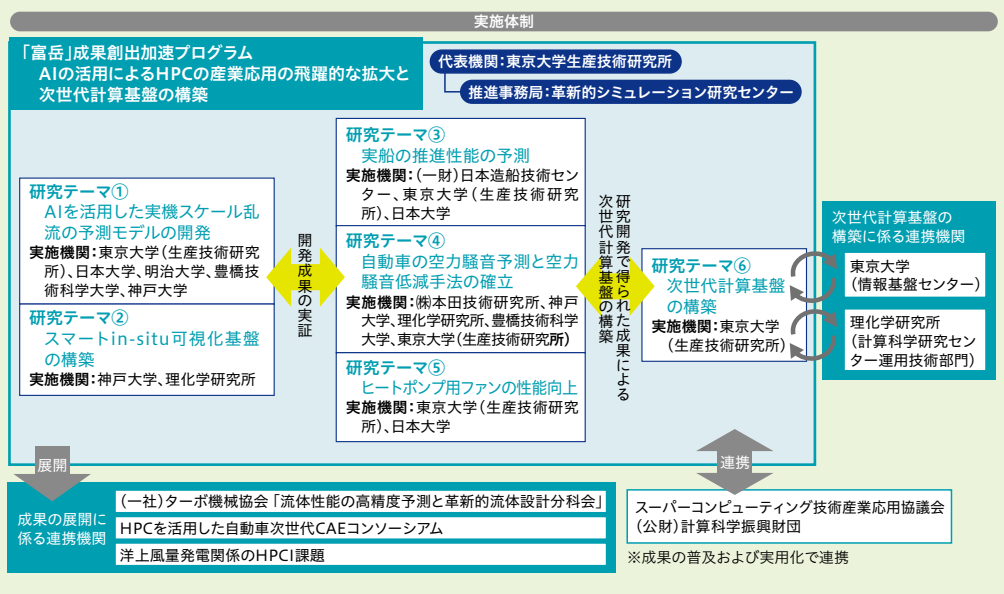
東京大学、神戸大学、
豊橋技術科学大学、
日本大学、明治大学、理化学研究所、
一般財団法人日本造船技術センター、
株式会社本田技術研究所



水槽試験結果との比較
(提供: (一財)日本造船技術センター)



格子ボルツマン法アプリケーションFFX
による自動車の外部音場の予測結果



● これまでのプロジェクト

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

代表機関

概要 エネルギー産業の心臓部となる「ターボ機械」、および、輸送産業の中核となる「自動車」を対象に、「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した。

参加機関 東京大学生産技術研究所、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



プロペラ渦の様子



車両まわりの空力音場(FFX)

ポスト「京」重点課題⑧ 「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの研究開発」(2014～2019)

代表機関

概要 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題の一つである、産業競争力強化に資するアプリケーションを研究開発しました。

参加機関 東京大学生産技術研究所、東京大学大学院新領域創成科学研究科、東北大学、東京理科大学、神戸大学、山梨大学、九州大学、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所



HPCI戦略プログラム 分野4次世代ものづくり(2009～2015)

代表機関

参加機関 東京大学生産技術研究所、日本原子力研究開発機構、宇宙航空研究開発機構



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(2008～2012)

代表機関

参加機関 東京大学生産技術研究所、東京大学大学院工学系研究科、東京大学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プロジェクト(2005～2007)

代表機関

参加機関 東京大学生産技術研究所、東京大学大学院工学系研究科、東京大学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(2002～2005)

代表機関

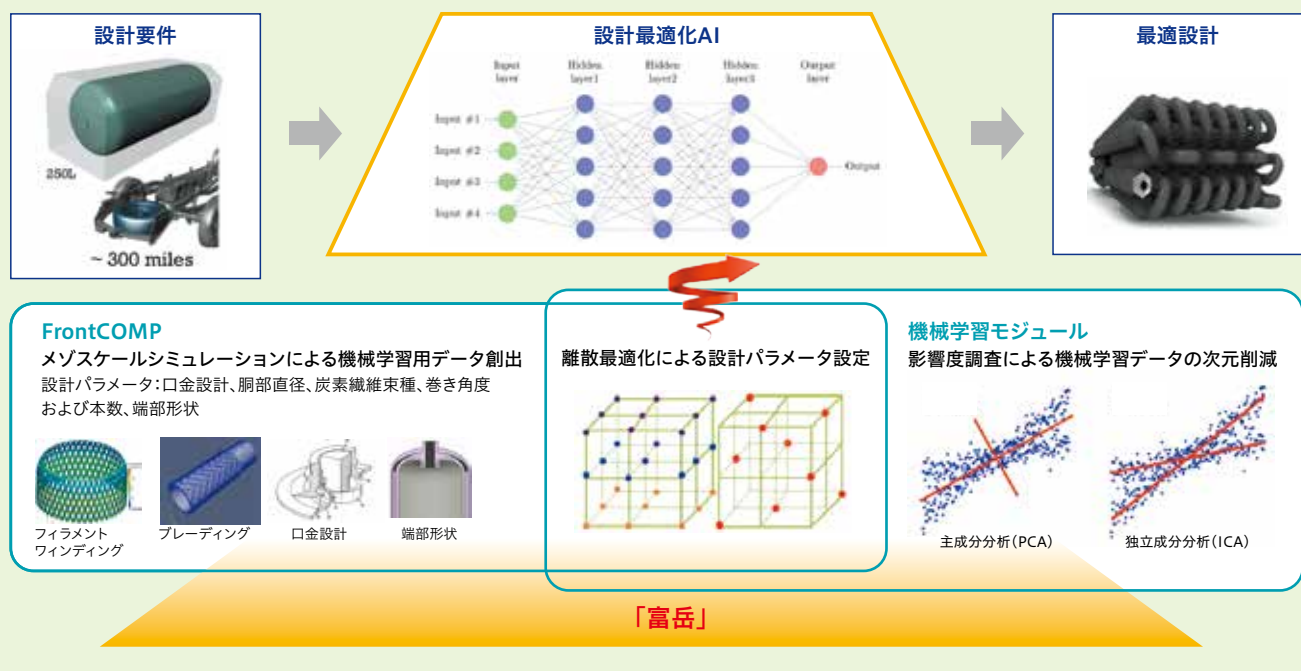
参加機関 東京大学生産技術研究所、東京大学大学院工学系研究科、東京大学人工物工学研究センター、(独)物質・材料研究機構、国立医薬品食品衛生研究所、慶応義塾大学、九州大学、電気通信大学、立教大学、(財)高度情報科学技術研究機構、アドバンスソフト(株)、他

燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業／水素利用等高度化先端技術開発

機械学習を用いた高圧水素複合容器の最適設計技術に関する理論検討及び実証 (2021～2024年度)

概要 カーボンニュートラルを牽引する最重要機器である燃料電池自動車用炭素繊維強化プラスチック(Carbon Fiber Reinforced Plastic, CFRP)製高圧水素容器の設計高度化を目指し、「富岳」に代表されるスーパーコンピュータを最大限活用し、大規模有限要素解析と機械学習を融合させた最適設計のためのIT基盤を構築し、高圧水素タンクの低コスト化(2050年目標1/5)に貢献します。

参加機関 東京大学生産技術研究所、株式会社SUPWAT



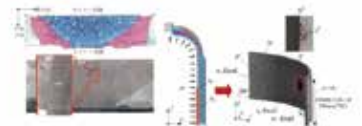
● これまでのプロジェクト

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(2018～2022)

分担機関

概要 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実施しました。

参加機関 東京大学生産技術研究所、(一財)石油エネルギー技術センター、
高圧ガス保安協会



ズーム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

超高圧水素インフラ本格普及技術研究開発事業／国際展開、国際標準化等に関する研究開発／
燃料電池自動車の国際基準調和・国際標準化に関する研究開発に係る再委託業務(2018～2022)

代表機関

概要 GTR13 Phase 2 IWG会議(2019年11月開催)に提案された水素適合性試験方法が、オーステナイト系ステンレス鋼以外の材料に適用された場合に生じる問題点について、水素脆化メカニズムおよび材質面の影響から検討しました。さらに、提案された水素適合性を評価するにあたって注意すべき点についてRationale案に記載すると共に、材料専門家会議において提案、議論しました。

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／
多給系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(2015～2017)

分担機関

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を実施しました。

参加機関 東京大学生産技術研究所、村田機械(株)、帝人(株)

多給系フィラメントワインディング装置



アウトリーチ活動

当センターは、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、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、ウェブサイト上でもご覧いただけます。

■ 「富岳」、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、ソフトウェア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。



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

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—

平成21(2009)年度より東京大学工学系大学院でシミュレーションソフトウェア開発者教育を実施し、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。

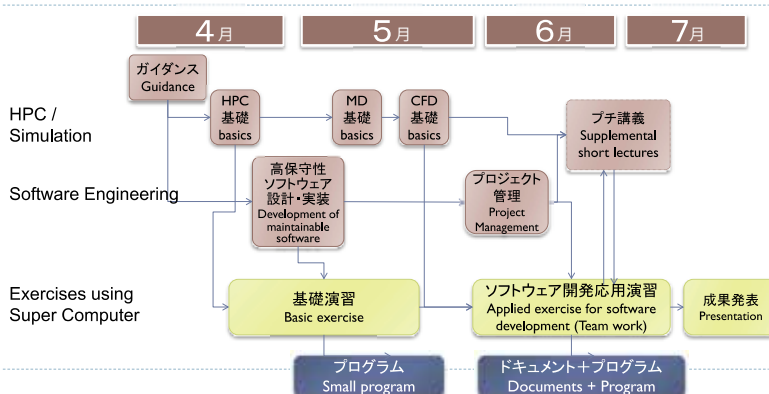
- チーム制・チケット駆動開発によるソフトウェア開発
- ソフトウェア工学とHPC（主に前者に比重）、これらを実践的に両立させる訓練
- 企業の講師を加えた実践的な講義・演習
- 流体力学と分子動力学のハイブリッド並列シミュレーションプログラムを作成
- 最新スパコンでの開発・実行

ISBN-13:
978-4130624541



ISBN-13:
978-4130624558

Outline of class schedule



国際会議への出展

アウトリーチ活動の一つとして、SC (The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis) 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。



SCの様子



国際フロンティア産業メッセの様子

公開アプリケーション

当センターは、国のプロジェクトを推進し、様々な先端的なアプリケーションソフトウェアを開発してきました。

熱流体分野

熱流体・音響解析システム FrontFlow/blue FrontFlow/blue-ACOUSTICS

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

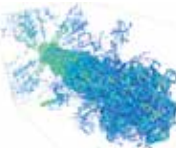


乱流現象や空力音の高精度予測が可能なアプリケーションソフトウェアです。PCクラスからスーパーコンピュータ「富岳」まで、多様なマシンで高速に動作し、最大7,000億要素規模の大規模乱流解析および200億要素規模の大規模音響解析およびこれらの連成解析をサポートします。自動車の空力・音響解析、ターボ機械内部流れ解析、船舶の推進抵抗予測等、多数の工学的問題に適用できます。

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)

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



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。

空力音響直接解析システム FrontFlow/X

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



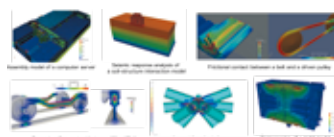
競技用自転車の空力解析結果
(提供:豊橋技術科学大学 飯田明由教授)

複雑な実機形状まわりの乱流や乱流から発生する音を短時間に高精度に予測することが可能なアプリケーションソフトウェアです。PCクラスからスーパーコンピュータ「富岳」まで、多様な計算機上で高速に動作し、最大7,000億格子規模の実証計算と2兆格子規模のベンチマーク計算の実績を有します。ユーザは実機製品のCADデータを用意し、解析領域と代表速度・音速などのパラメータを設定するだけで、計算格子が自動的に生成され、短時間内に計算結果が出力されます。自動車の空力・音響解析、船舶の推進抵抗予測、複雑な電子機器まわりの流れの予測など、さまざまな工学問題に適用できます。

材料構造分野

非線形構造解析システム FrontISTR

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.org
(一社) FrontISTR Commons
https://frontistr.com/



FrontISTRを利用したさまざまな大規模数値解析事例

FrontISTRはPCからクラスタマシンや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広範囲な非線形解析機能をサポートし、大規模なアプリケーション、並列処理、プログラマビリティに対応した革新的な機能を備えています。FrontISTRの継続的な改良、維持、利用促進を目的としてFrontISTR Commonsが2018年4月に設立されました。設立以来、ソフトウェアの機能拡張やユーザサポートの拡充、商用版やフリー版の様々なプリボストソフトとの連携など、積極的な活動を展開しています。

複合材料強度信頼性評価シミュレーター

[フィラメントワインディング(FW)CFRP容器] [CFRP部材成形]

FrontCOMP_FW
FrontCOMP_FW_multi
FrontCOMP_FW_shell
FrontCOMP_tank
FrontCOMP_tank_multi
FrontCOMP_wind_multi

FrontCOMP_cure
FrontCOMP_TP

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



高圧水素容器の衝撃損傷解析

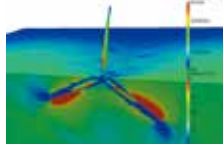
繊維と樹脂を区別したメソスケールモデルに基づく炭素繊維強化プラスチック部材の高度な信頼性解析を実現します。燃料電池自動車普及のための基幹部品である高圧水素容器の合理的最適設計を支援するため、繊維束サイズやワインディング経路、樹脂の非線形材料特性、硬化スケジュールなどの違いが、容器強度に与える影響を正確に評価します。

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

流体-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))

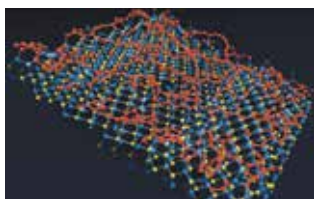


FrontISTRおよびFrontFlow/blue等と連携し、各種並列計算環境で大規模連成解析を実現します。具体的には、風車の翼が風を受けて振動する流体-構造連成現象の解析等の事例があります。その他、磁場-構造連成解析、流体-構造-音響連成解析など、様々な連成解析に対応しています。

ナノ・バイオ分野

第一原理電子状態計算ソフトウェア PHASE/0 PHASE-Viewer ASCOT

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計算ソフトウェアです。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クラスからスーパーコンピュータまで、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の正準分子軌道計算

ProteinDF
QCLObot

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/



量子化学計算標準のハイブリッド密度汎関数法によるタンパク質の正準分子軌道計算ソフトウェアです。PCクラスからスーパーコンピュータまで、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。

SARS-CoV-2ウイルススパイクタンパク質とACE2の静電ポテンシャル分布

バイオ分子相互作用シミュレーター

ABINIT-MP
BioStation Viewer

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

新型コロナウイルス(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。



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。

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。



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

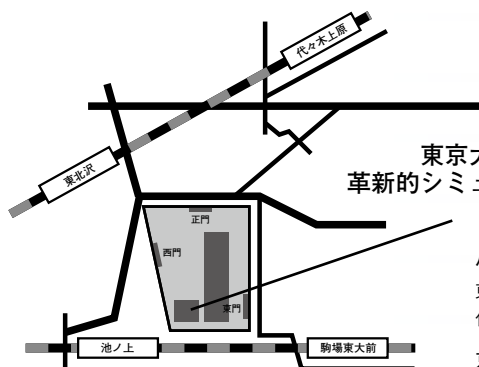
〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1

TEL 03-5452-6661

FAX 03-5452-6662

E-MAIL office@ciiss.iis.u-tokyo.ac.jp

URL <http://www.ciiss.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

京王井の頭線

駒場東大前駅(西口)より徒歩10分

池ノ上駅より徒歩10分