

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



センター長・教授 吉川 暢宏

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、2018年4月と2023年4月の3回の改組を経て、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います。

2023年4月に活動をスタートさせた第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、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シミュレーションし、それぞれの段階で起こりえる課題の解決手段まで提示すること」にあると考え、センターのビジョンとして掲げることとしました。

先端的シミュレーションソフトウェアに関する研究開発の出口として、2008年からこれまで、文部科学省のプロジェクトや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。現在では、2024年度までの予定で、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「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、代表実施機関として推進しています。強力な産学官連携体制の下で実施しているこれらのプロジェクトが、我が国の産業競争力の強化に貢献するものと信じております。さらには、これらの研究活動で得られたHPC（High Performance Computing）・データ科学融合の方法論や獲得したデータのオープンサイエンス化と社会普及、それらを利活用できる人材育成のための教育基盤の強化に積極的に取り組んでいく所存です。

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。

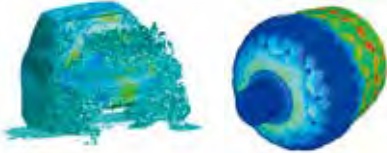
令和6年6月

概要

当センターでは、これまでに開発してきた、先進的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。

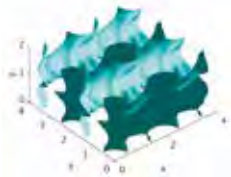
先進学術の推進

ものづくり



空力設計

CFRP容器最適設計



形状最適化

実験、シミュレーション、AIを融合した方法論の実践

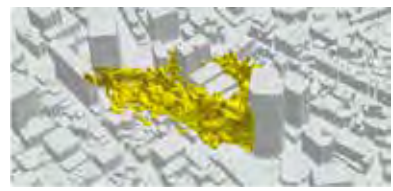


新たな統一的な理論・力学体系の構築

防災・安全

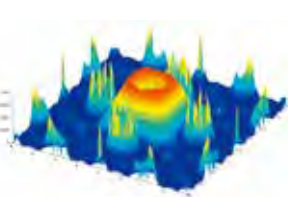


人工物モニタリング



都市環境予測

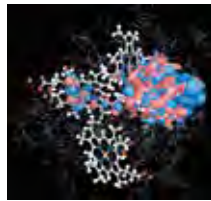
物性・現象解明・モデリング



電子スペクトル解析



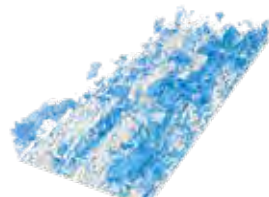
破壊素過程解析



タンパク質設計



血流モデル



乱流モデル・制御

熱・流体物理



教授 半場藤弘※
流体物理学



教授 大島まり※
バイオ・マイクロ
流体工学



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



准教授 菊本英紀※
複雑系環境制御工学

確率・量子論的 計算科学



教授 佐藤文俊
計算生体分子科学

物質・材料機能



センター長
教授 吉川暢宏
マルチスケール
固体力学



副センター長
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 柘木栄太※
ナノスケール
材料強度学



准教授 古川亮※
複雑流体物理学

※協力教員

センター主要事業

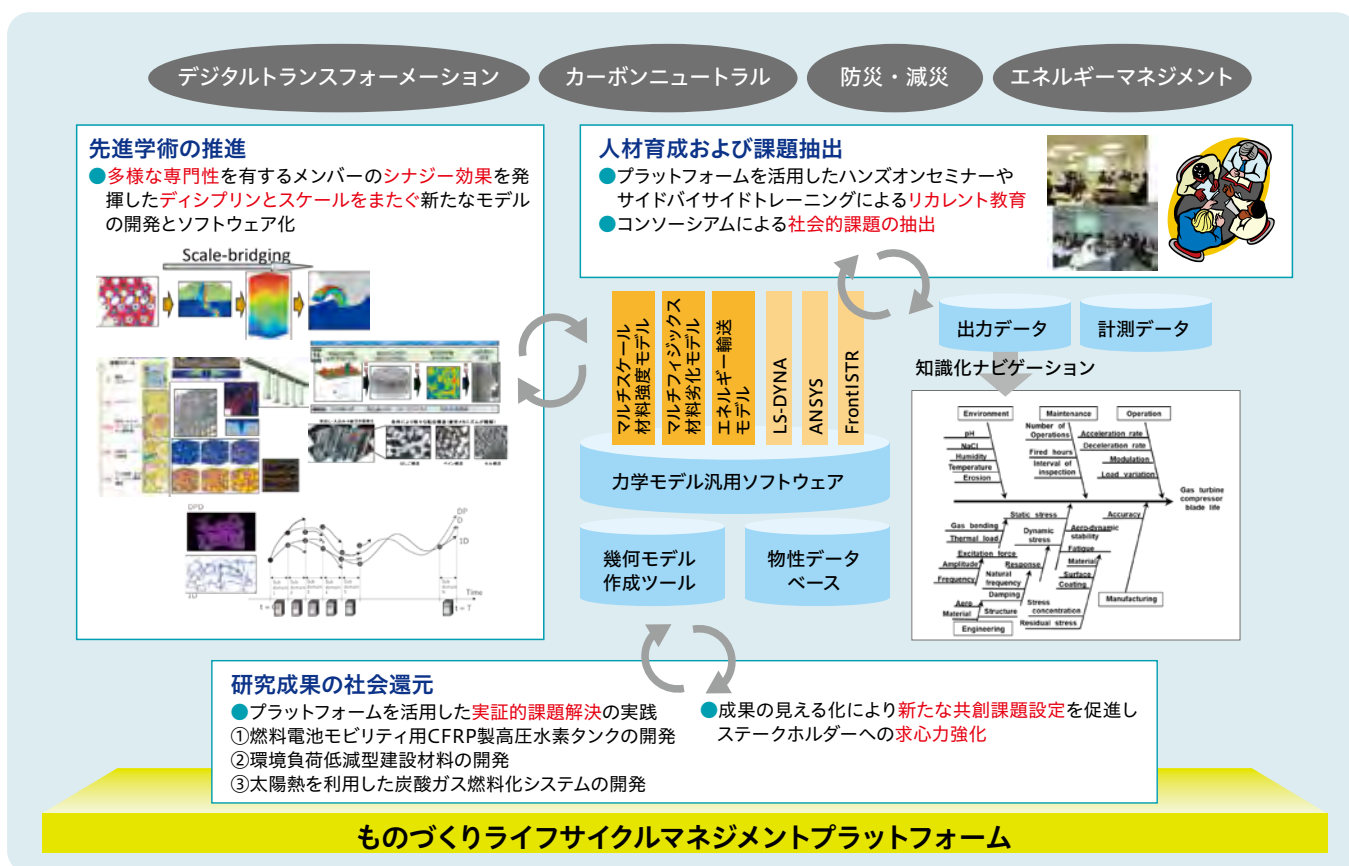
当センターが開発してきた先進力学シミュレーションモデルを汎用ソフトウェアとして公開し、実証課題の解決に展開すると同時に高度シミュレーションを担う人材のリカレント教育を実施するためのデジタルエンジニアリング基盤の整備と実証的検証を行い、研究資産の凡化と公開により、ものづくり分野でのデジタルトランスフォーメーションの促進に貢献します。

研究成果の社会還元のためのプラットフォーム開発

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(デジタルトランスフォーメーション)を支援するためのシミュレーション技術の高精度化

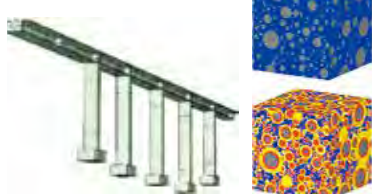
企画 ▶ 材料開発 ▶ 設計 ▶ 製造 ▶ 検査 ▶ 保守 ▶ リユース ▶ 廃棄



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)など



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などにおいて開発した、大規模シミュレーション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



ワークショップ: 力学の未来の様子



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

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。

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—

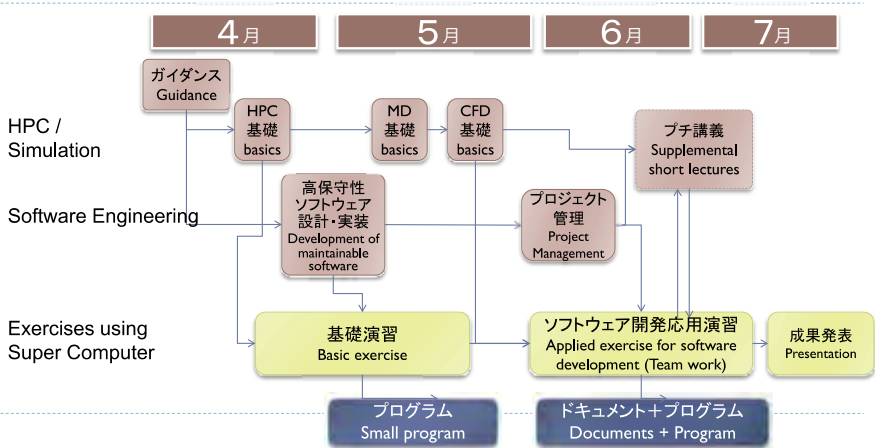
平成21(2009)年度より東京大学工学系大学院でシミュレーションソフトウェア開発者教育を実施し、シミュレーションソフトウェア工学の教育に寄与しています。

- 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



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行っています。

■ 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

■ Q&Aや不具合情報などの情報共有



計算工学ナビホームページ



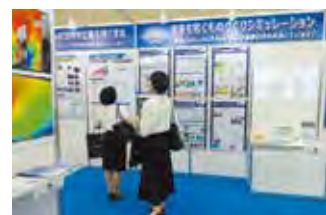
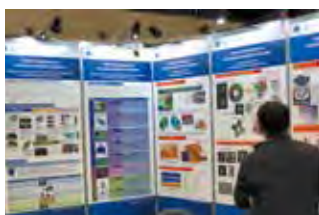
ソフトウェアライブラリ

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といった国際会議に出展しています。



SCの様子



国際フロンティア産業メッセの様子



メンバーと研究開発内容

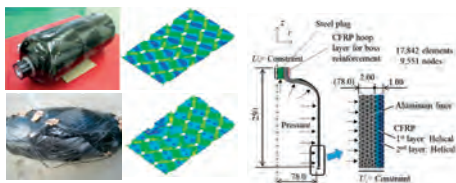
吉川 暢宏

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/樹脂を区分するマイ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。



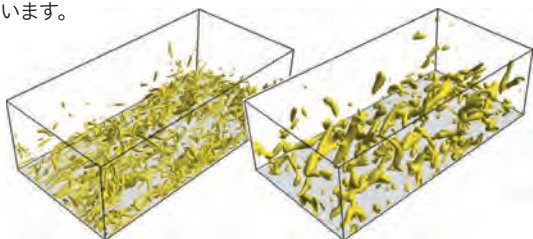
ズーム解析による燃料電池自動車用高圧水素容器の破綻強度予測

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。



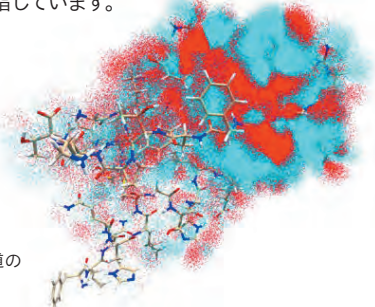
チャンネル乱流の壁面近くの渦構造。左は小スケールの渦、右は中スケールの渦。

佐藤 文俊

教授 Fumitoshi Sato

専門分野 計算生体分子科学

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。



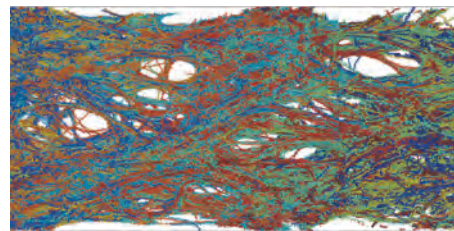
インスリンの分子軌道の雲形状可視化

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〜マイ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。



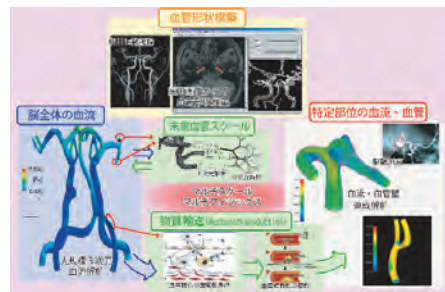
ポリカーボネート変形の粗視化原子モデル解析

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の発症原因である動脈硬化症などの血管病変は、血流の力学的刺激に影響を受けています。当研究室では、これらの病変に焦点を当て、血管の階層構造をマルチスケールで考慮しています。さらに、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影響もモデル化したマルチスケール・フィジクス数値シミュレーションを開発しています。これらの疾患のメカニズムを理解し、臨床応用に役立てるために、医療画像や計測データを活用し、患者個別に対応できる診断・治療のためのシミュレーションシステムを開発しています。



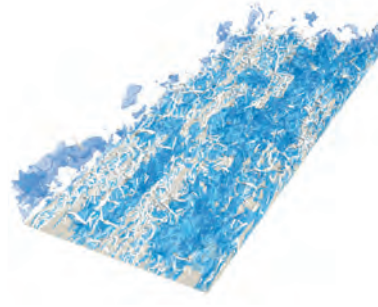
循環器系統合シミュレーションシステムの概要

長谷川 洋介

教授 Yosuke Hasegawa

専門分野 界面輸送工学

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ズ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

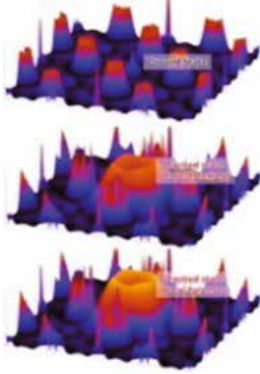
溝口 照康

教授 Teruyasu Mizoguchi

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)。

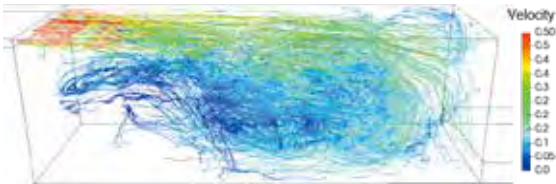


大岡 龍三

教授 Ryoza Ooka

専門分野 都市エネルギー工学

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

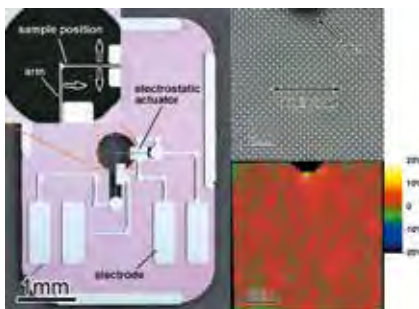
栃木 栄太

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、亀裂とい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

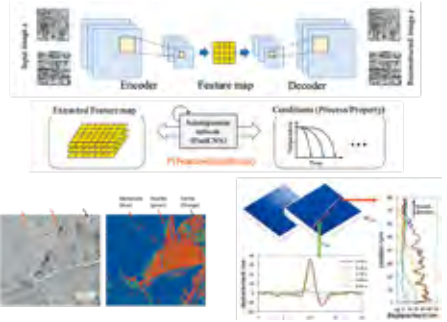


井上 純哉

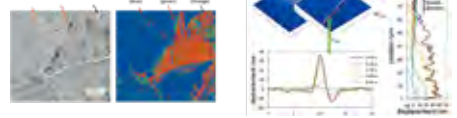
教授 Junya Inoue

専門分野 鉄鋼冶金インフォマティクス

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、その特性を予測するには、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

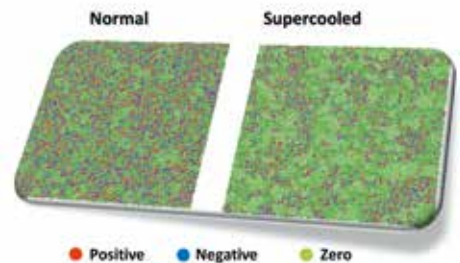


古川 亮

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、独自の考えに基づ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。



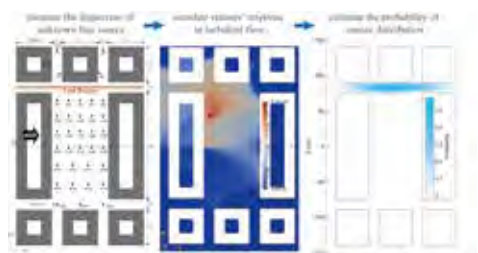
構造緩和時間での粒子交換イベントの空間パターン(ノーマル(左)および過冷却(右)状態)

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

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)

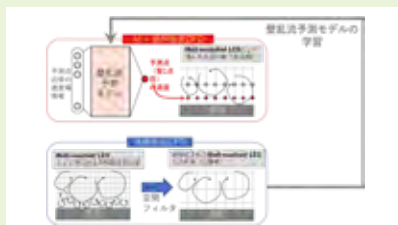
研究開発課題責任者 長谷川洋介 (東京大学生産技術研究所 教授)

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。

実施機関 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

研究テーマ1

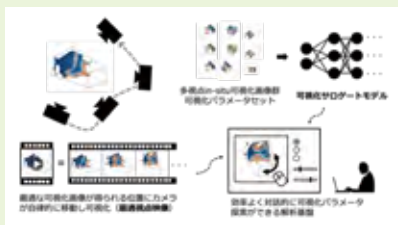
AIを活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発



開発する壁乱流予測モデルの概念図

研究テーマ2

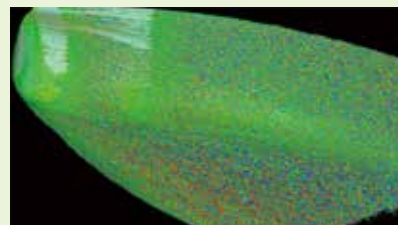
スマートin-situ可視化基盤の構築



スマートin-situ可視化

研究テーマ3

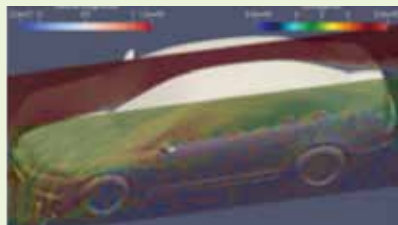
実船の推進性能の予測



船体抵抗の予測結果

研究テーマ4

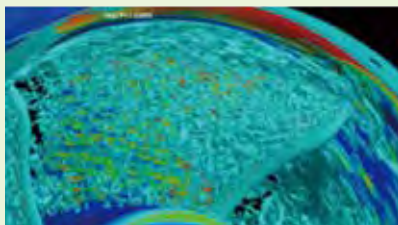
自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立



車両まわりの音場

研究テーマ5

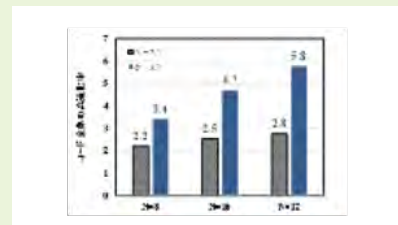
ヒートポンプ用ファンの性能向上



ファン周りの流れ

研究テーマ6

次世代計算基盤の構築



高F/B比アルゴリズムの効果の検証例

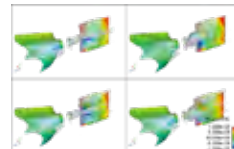
● これまでのプロジェクト

「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開発を実施しました。

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

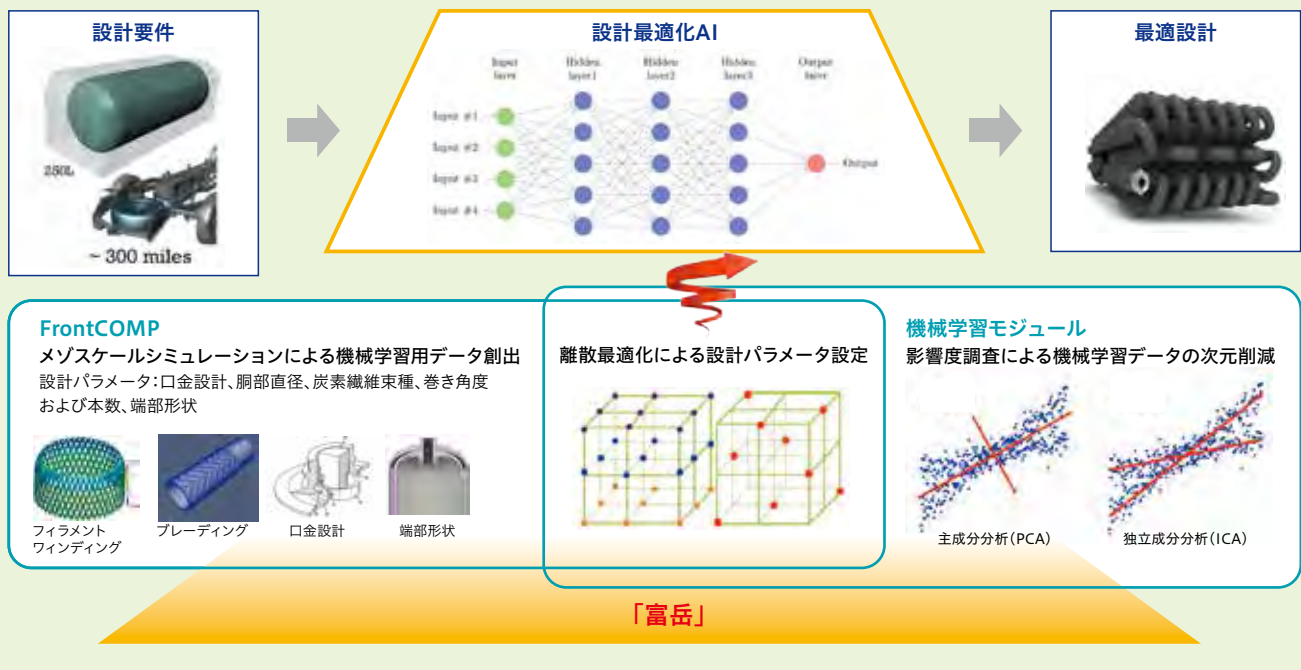


燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業／水素利用等高度化先端技術開発

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

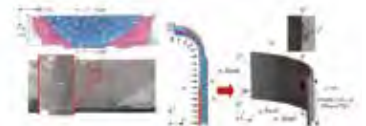


● これまでのプロジェクト

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)

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)

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(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)



多給糸フィラメントワインディング装置

公開アプリケーション

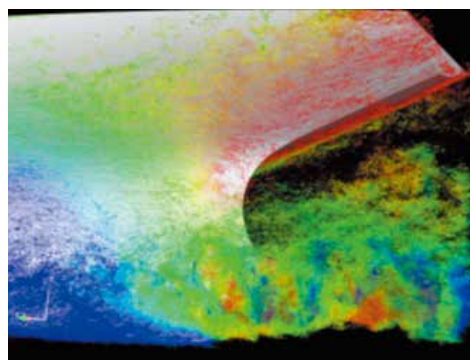
当センターは、国のプロジェクトを推進し、様々な先端的なアプリケーションソフトウェアを開発してきました。

熱流体・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 名誉教授
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クラスタ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、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)

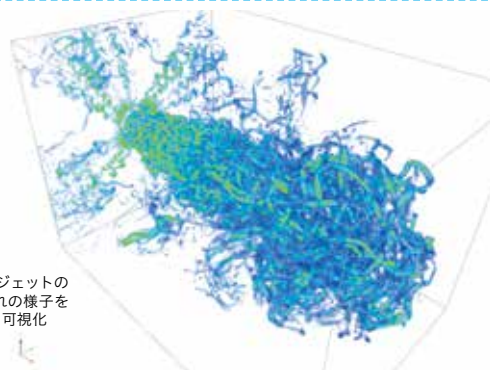


熱流体分野

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時間で解析するため、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。

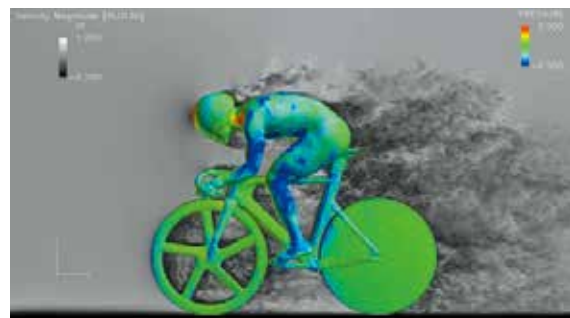
二重反転ジェットの流れの複雑な様子を渦管により可視化



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 名誉教授
ciss-cfd@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

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クラスタ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。

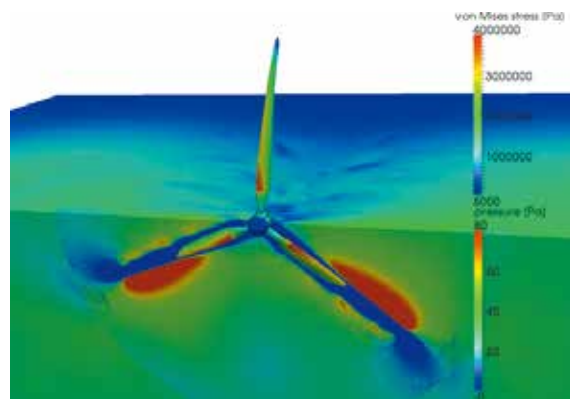


競技用自転車の空力解析結果(提供:豊橋技術科学大学 飯田明由教授)

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-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。



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))

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、<http://www.cenav.org/>をご覧ください。

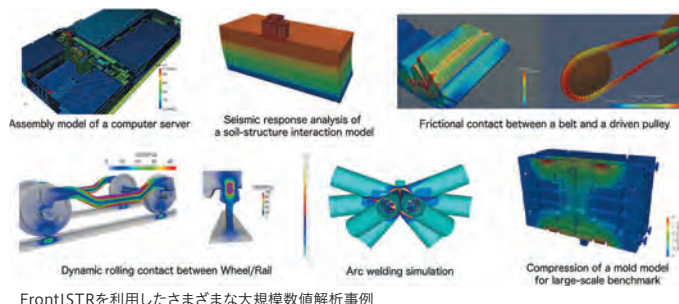


・FrontFlow/blue、BioStation、ProteinDF、ABINIT-MP、REVOCAP、PHASE、ASCOTIは国立大学法人東京大学の日本における登録商標です。

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ラットフォームとの連携など、積極的な活動を展開しています。



FrontISTRを利用したさまざまな大規模数値解析事例

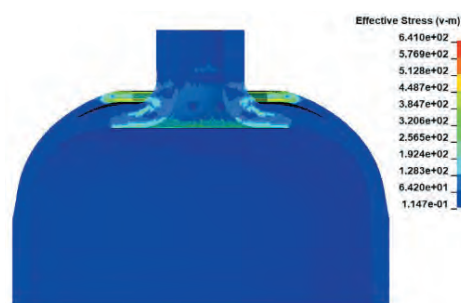
複合材料強度信頼性評価シミュレーター [フィラメントワインディング (FW) CFRP容器]

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

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

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。

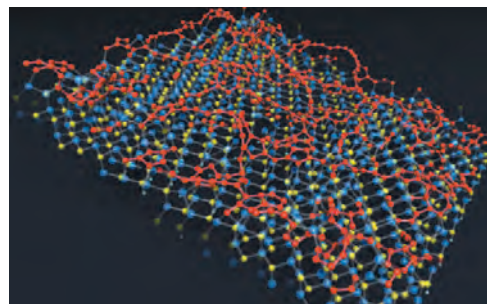


高圧水素容器の衝撃損傷解析

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。

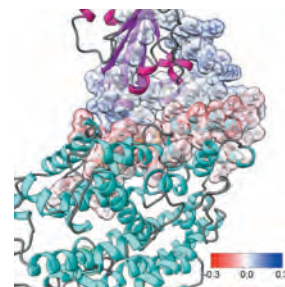


SiC上でのグラフェン成長の大規模第一原理シミュレーション

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クラスタ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。

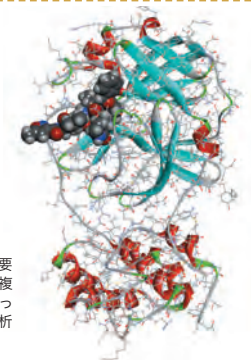


SARS-CoV-2ウイルススパイクタンパク質とACE2の静電ポテンシャル分布

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
 Abinitmp-office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

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いました。



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

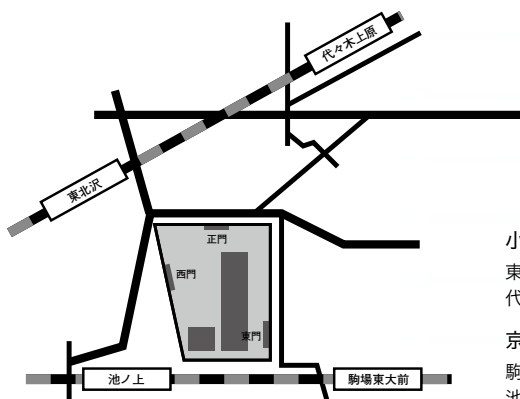
〒153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1

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/>



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