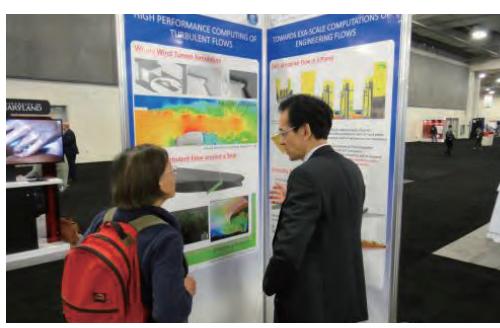
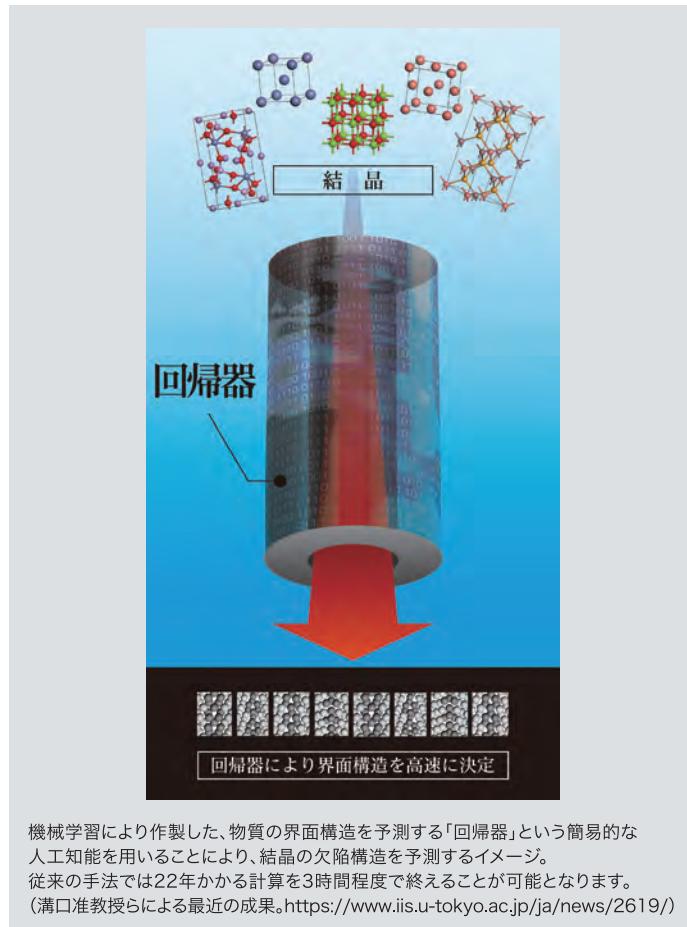


# ポスト「京」が運用される時代に向けた アプリケーションの開発を着実に推進

平成27年2月より、文部科学省は「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」を推進しています。いわゆる、ポスト重点課題とよばれるアプリケーション開発プロジェクトですが、本センターはその中の「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」(以下、「重点課題⑧」)の中核機関として、ものづくり分野のアプリケーションの開発を推進しています。2年間の準備研究期間を経て、今年度より本格研究を始め、2021年度から2022年度に運用が開始される予定のポスト「京」で利用されるアプリケーションの開発を進めています。代表的な産業分野を対象に、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に、設計プロセスのみならず製造プロセスの革新も目標にして、自動車、ターボ機械や航空機の設計の高度化に資するアプリケーション開発と熱可塑性CFRP(Carbon-Fiber Reinforced Plastic)の成形シミュレータの開発などを進めており、これまでのところ開発は順調に進んでいます。これまでの成果は、本年3月17日に開催する第2回目のシンポジウムでご報告いたしますので、是非ご参加いただければ幸いです。

本ニュースレターは、昨年11月13~18日に米国ソルトレイクシティで開催されたスパコンに関する世界最大の国際会議SC16における重点課題⑧の展示発表を中心に編集していますが、その会議に合わせて発表された、スパコンの性能ラン

キングTop500において、国内では初めてスーパーコンピュータ「京」の性能を凌駕する性能のシステムが出現しました。このシステムでは最新のメニコアCPUが用いられています。今後のスーパーコンピュータは、コア数の増大、演算加速器の実装、同時に計算するデータ数の増大などにより性能向上が期待されています。このような状況を踏まえ、重点課題⑧におけるポスト「京」に向けた取り組みはもちろんですが、このような多様化するCPUにも対応できるように研究を進め、得られた成果を広く産業界に普及できるように努めていく所存です。引き続き、関係各位のご理解とご協力をお願いする次第です。



SC16風景

機械学習により作成した、物質の界面構造を予測する「回帰器」という簡単的な人工知能を用いることにより、結晶の欠陥構造を予測するイメージ。  
従来の手法では22年かかる計算を3時間程度で終えることが可能となります。  
(溝口准教授による最近の成果。<https://www.iis.u-tokyo.ac.jp/ja/news/2619/>)

# SC16 Report

11月13～18日の6日間、アメリカ合衆国ユタ州ソルトレイクシティにおいて、国際会議SC16が開催されました。SC(The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis)は、世界で最も権威のあるスーパーコンピュータ関連の会議です。今回も300以上の展示ブースにより最先端の技術と研究成果の紹介がありましたが、その中で我々も現在代表機関として実施しているプロジェクト「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について



紹介をしてきました。また、この会議に合わせて発表されたTop500では、国内で「京」を凌駕するスーパーコンピュータが出現し、ランキングに変動がおきました。そして、Gordon Bell Prizeでは中華人民共和国の研究機関が初受賞しましたが、この研究は半年前にTop500の第1位になったスーパーコンピュータを用いたものでした。このように、新しい風を感じることができた会議となりました。

## CISS ブース

SCでは、Technical Program、Exhibits等が設けられていますが、当センターでは今回Exhibitsにおいて展示発表をしました。ここでは、現在当センターで実施しているプロジェクトの文部科学省「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』における、自動車の設計、ターボ機械の設計、航空機の設計に関する取り組みを紹介しました。この紹介では、ポスター展示、ビデオ放映の他、zSpaceという3次元可視化システムを用い、得られた成果の可視化の実演も行いました。可視化実演の詳細はこの後記載します。

また、重点課題⑧における研究開発は重点課題⑥『革新的クリーンエネルギー・システムの実用化』と連携を取りながら進めていますが、その連携についても紹介できる展示としました。

多くの方に立ち寄っていただき、興味を持っていただきました。



## Topics

### Top500 および HPCG ランキング

Linpackによる連立一次方程式の処理速度上位500位までのスーパーコンピュータがSC16の開催に合わせて発表されましたが、その中で、最先端共同HPC基盤施設(東京大学情報基盤センターと筑波大学計算科学研究センターにより設置された組織)に設置されたOakforest-PACS(13,554.6 TFlops)が今回国内第1位(世界では第6位)にランクされました。「京」(10,510.0 TFlops、世界では第7位)を凌駕する計算機の出現により、「京」の運用開始以降初めて国内の計算資源構造が八ヶ岳型となりました。なお、無錫国立スーパーコンピューティングセンターに設置されている神威太湖之光(中国、93,014.6 TFlops)が、この6月に引き続きランキング

第1位を獲得しています。

一方、2014年から発表されている、産業利用などに供されるアプリケーションの多くに用いられている共役勾配法の処理速度による国際的なランキングであるHPCG(High Performance Conjugate Gradient)では、「京」(0.6027 PFlops)が今回第1位を獲得しました(Oakforest-PACS(0.3855 PFlops)は第3位)。

また、Graph500(グラフ解析の性能を競うランキング。今回は「京」が第1位。)やGreen500(エネルギー消費効率を競うランキング。今回はDGX SATURNV(米国)が第1位。)の表彰も行われました。

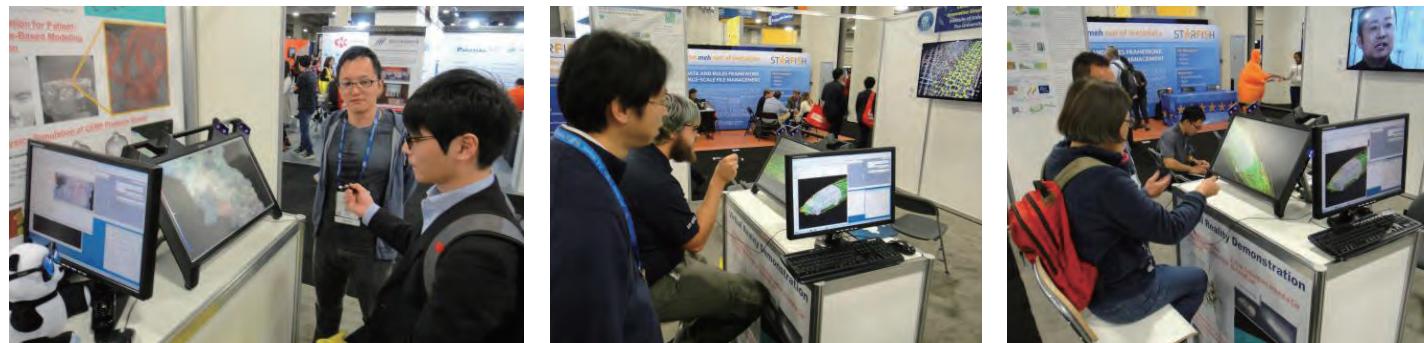
## ヘッドトラッキング機能付き立体視ディスプレイによる シミュレーション結果の可視化デモンストレーション

ブースでは、仮想現実感(Virtual Reality, VR)を使用した可視化のデモンストレーション展示を行いました。デモに使用したzSpaceは偏光メガネをかけて見ることで立体視可能なディスプレイに、偏光メガネに付いたマーカーをトラッキングする機能と加速度センサが組み込まれたスタイラスを組み合わせたシステムです。メガネのマーカーをトラッキングすることで、3次元モデルを見ている時に頭の動きに連動してモデルの表示を変えることが可能となるため、3次元モデルを回り込んで見ることや、頭をディスプレイに近づけることで3次元モデルの中に突入するような表示が可能となります。また、スタイラスを使って3次元モデルを掴み、スタイラスを動かすことで3次元モデルを裏返したりしながら様々な方向から観察することができます。

展示では、FrontFlow/blue(FFB)やFrontFlow/violetで計算した自動車周りと車内のエアコンからの風の流体シミュ

レーション、FrontCOMPで計算したCFRP製高圧水素容器の強度評価、脳動脈瘤血流シミュレーション、ProteinDFで計算したタンパク質の静電ポテンシャルなどを展示し、多くの方々に体験していただきました。FFBによるシミュレーションのデモでは、車体の下側やタイヤの部分に入り込む流れを見たい時に、スタイラスで車を掴んで裏返したりすることで簡単に思うような位置を見ることができることが好評でした。ProteinDFによるシミュレーションのデモでは、タンパク質の立体構造がよりはっきりと見え、普通のディスプレイで見ていた際にはわかりづらかったくぼみ部分が、思った以上に深いくぼみであることなどがわかると好評でした。

VRを体験した方に自分が見たシミュレーションのことに興味を示してもらえ、体験後にポスターで研究の説明を行うといったこともあり、体験した方々からは好評を得ることができました。(吉廣)



## Gordon Bell Prize

今年のGordon Bell Prizeは、中国科学院、中国科学院大学のChao Yang氏に率いられた、11名のメンバー(Wei Xue(清华大学、国家超級計算無錫中心)、Haohuan Fu(清华大学、国家超級計算無錫中心)、Hongtao You(National Research Center of Parallel Computer Engineering and Technology)、Xinliang Wang(清华大学)、Yulong Ao(中国科学院、中国科学院大学)、Fangfang Liu(中国科学院、中国科学院大学)、Lin Gan(清华大学、国家超級計算無錫中心)、Ping Xu(清华大学)、Lanning Wang(北京師範大学)、Guangwen Yang(清华大学、国家超級計算無錫中心)、Weimin Zheng(清华大学))からなるグループに授

与されました。中華人民共和国の研究機関としては初受賞となりました。これは、「10M-Core Scalable



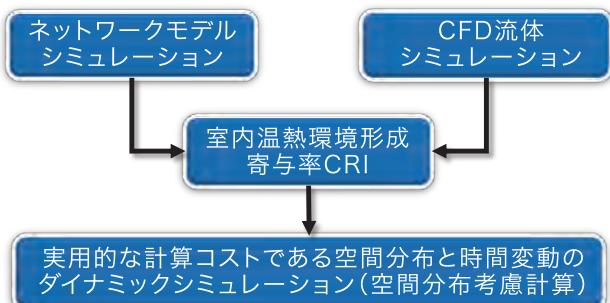
Fully-Implicit Solver for Nonhydrostatic Atmospheric Dynamics」という受賞タイトルですが、彼らにより開発された超スケーラブルな完全陰解法を用いた大気のダイナミクスの解析をされたもので、10,000,000コア超までスケールした、2 PFlops超の性能を実現した計算となっています。なお、この計算は、この6月からTop500ランキングで第1位を獲得している神威太湖之光において実施されたものです。



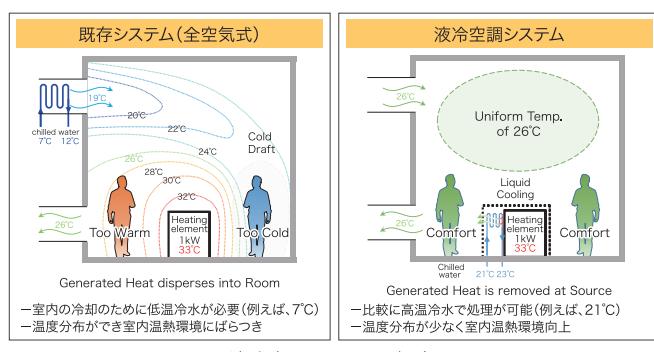
加藤 信介 教授

## ネットワークモデルに空間分布性状を組み込む ダイナミックエネルギー・ミュレーション

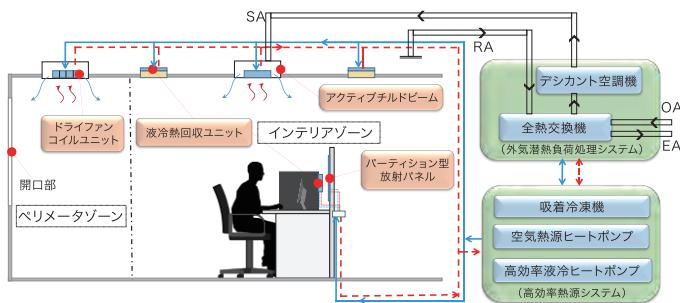
空調される建物のエネルギー消費シミュレーションは、室内温熱環境の空間分布と時間変動の両方を考慮した検討が必要です。室内一様仮定のネットワークシミュレーションは、年間8760時間のエネルギーシミュレーションを実用的に計算できるが、室内の温熱環境の空間分布が考慮されません。CFDは空間分布を考慮できるが、年間を通じてのシミュレーションは計算コストが高く、実用化されません。CFDにより算出される室内の熱輸送性状をモデル化した室内温熱環境形成寄与率CRIをネットワークモデルに組込み、これを実現します。



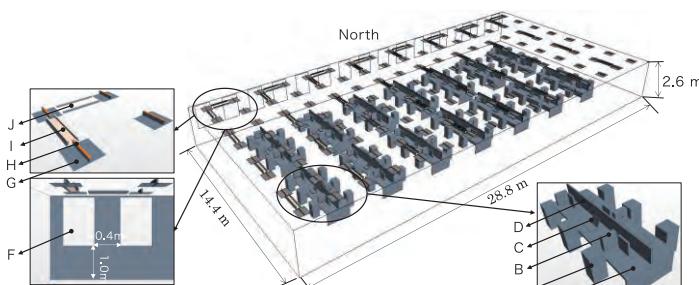
# 液冷空調システムで室内的温度分布を考慮して 期間的温熱環境を解明



## 液冷空調システムの概念



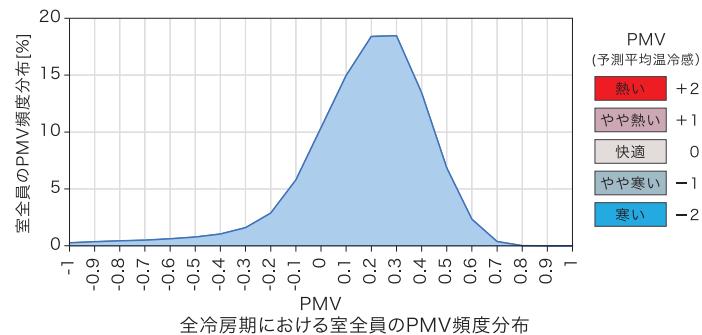
## 液冷空調システムの構成



|         |                                  |                               |                          |          |
|---------|----------------------------------|-------------------------------|--------------------------|----------|
| A:人体84人 | B:Desktop PC42台<br>(波冷熱收回ユニット付き) | C:Laptop 42台<br>(波冷熱收回ユニット付き) | D:放射バティション42枚            | E:デスク14台 |
| F:窓16枚  | G:照明器具128台<br>(波冷熱收回ユニット付き)      | H:リータン口128枚                   | I:アクティブヒルド<br>J:ドライFCU8台 |          |

#### 液冷空調システムを装備したオフェイスモデル

顕潜熱分離空調の一つである液冷空調システムは、執務空間の快適性の維持向上を図りながら、一層の省エネルギーを目指します。このシステムは室内での空調負荷となる熱発生をその発熱源直近で冷却水に回収し、室内空気への熱の拡散を最小限にとどめ、居住域全体に渡って均質な温熱環境を提供することを目指します。この空調システムを導入したモデルオフィスを対象に、在室者全員のそれぞれ個人個人の年間の温熱環境の累積頻度を評価しつつ(時間的に変動する室内空間の温熱環境の詳細な空間分布を考慮しつつ)、空調されるオフィスの年間のエネルギー消費を評価しました。その結果、液冷空調システムでは室内に放出される内部発熱が小さいことにより、在室者毎の温熱快適性指標であるPMVのはらつきが小さく、快適時間の累積頻度が大きくなりました。



$|PMV| \leq 0.5$

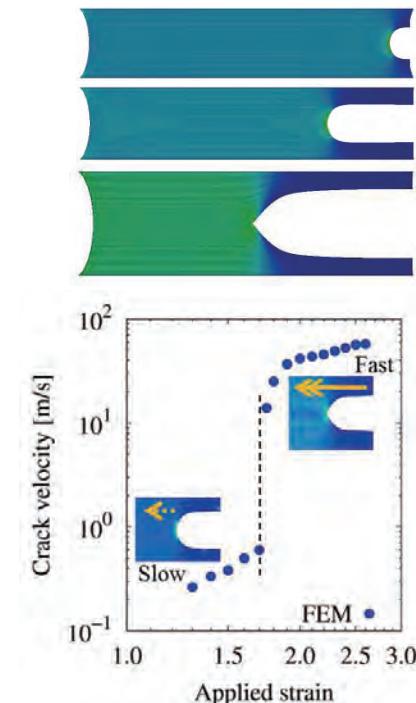
#### 全冷房期における室全員の温熱快適性の時間的な満足率



梅野 宜崇 准教授

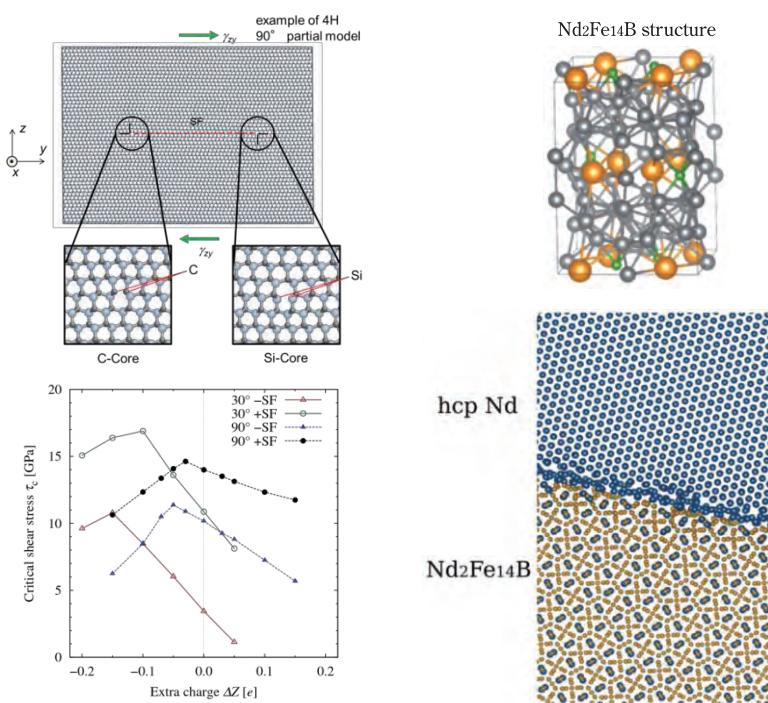
## ゴムき裂進展のモード転移現象の予測が可能に！

自動車用タイヤは燃費や走行性能に直結する重要なパートであり、その性能向上が常に求められています。特に、薄肉化しても寿命を損なわないようなゴム材料の開発が進められており、数値シミュレーションによる設計支援が強く求められています。ゴムのき裂進展問題では、あるひずみエネルギーを境にき裂進展速度が不連続に変化する「モード転移」という現象が起こることが知られていますが、これを数値シミュレーションで再現することはこれまで不可能でした。我々のグループでは、ゴム材料の粘弾性挙動と破壊基準を最適化することにより、有限要素法シミュレーションでこのモード転移現象を再現することに世界で初めて成功\*しました。このシミュレーションモデルにより、なぜこのモード転移が発生するのかを材料の機械的特性の観点から明快に説明することができるため、ゴムの高寿命化、すなわちモード転移点をより高ひずみ側にするための指導原理の構築に活用することができます。（\*特許出願済）



ゴムき裂進展のFEM解析によるモード転移現象の再現

## 拡張型原子モデルを用いた デバイス信頼性評価のシミュレーション技術



余剰電荷環境中のSiCの部分転位易動度の  
原子シミュレーション

ネオジム(Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B)結晶と  
界面構造の原子シミュレーション

半導体デバイス、エネルギーデバイス、磁気デバイスなど、様々なデバイス材料の高性能化・構造緻密化が求められており、原子モデルシミュレーションを用いて設計支援をすることが期待されています。そのためには、ある限られた特性だけでなく幅広い材料物性を精度よく表現する高度な原子モデルが必須となります。我々は、デバイス材料の原子シミュレーションに対して求められる原子間ポテンシャルの特性を適切に分類し、それに応じたポテンシャル関数構築法を提示しました。この技術によって、これまで実現が難しかった、パワー半導体デバイス(SiC)の破壊と転位移動問題、固体酸化物形燃料電池(SOFC)電極材の相変態と拡散問題、ネオジム磁石結晶・界面構造と磁性問題などに対して、信頼性の高い原子シミュレーションを行うことが可能になりました。

## 活動報告

### 国際フロンティア産業メッセ 2016

9月8日(木)～9日(金) 神戸国際展示場で開催。出展社数481社、全来場者数29,875名と、過去最大であった昨年度をさらに上回り、大変盛会となりました。センターのブースでは、センターの紹介ビデオやものづくり関連動画を映し、パネル展示では神戸拠点の活動紹介とポスト「京」概要などを展示しました。ものづくりの研究成果をまとめた動画は、多くの来場者に見ていただけ、スパコンへの興味の深さがうかがえました。



### AICS一般公開

11月5日(土) 計算科学研究機構(神戸市・ポートアイランド)6F講堂で開催。センターが出展した「科学の広場」では、「空気の流れを見てみよう!!」と題して、飛行機の翼の形と傾きを変えて揚力の大きさを調べるシミュレーションを使った翼設計のコンピュータシミュレーションの実体験や、紙風船を用いた浮遊実験を通して、空気の流れを体験していただきました。また、研究成果をまとめたポスター、電子パネル、動画を展示しました。



### HPC産業利用オータムスクール 16

10月14日(金)～15日(土)に千葉県野田市クリアビューホテルで開催。「粒子法」をテーマとして企画された今回のオータムスクール16は、10名の参加者と講演や実習、交流会を通じ、有識者との直接対話はもちろん、多種多様な業界の受講者たちが持つ悩みや課題の共有、その課題解決に向けた討論や情報交換を行いました。基調講演には長年にわたり粒子法の開発に取り組んでこられた横浜国立大学名誉教授・(株)SPH研究所代表取締役会長の酒井謙様より、SPH粒子法の基礎理論、固体・流体・粉体解析への展開について講演して頂きました。



## イベント案内

### 第2回ポスト「京」重点課題⑧シンポジウム

平成29年3月17日(金) 10:00～17:30

場所：東京大学生産技術研究所コンベンションホール

今回のシンポジウムは、文部科学省のプロジェクト・重点課題⑧の研究開発計画や最新の成果を紹介し、ポスト「京」を駆使することで開ける可能性を議論することにより、課題の成果をよりニーズに合った期待度の高いものにすることを狙いとしています。多数の皆様のご参加をお待ちしています。

計算工学科ナビ 今すぐチェック!

▶ Knowledge Base



解析事例データベース  
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を収録  
<http://www.cenav.org/>

## 編集後記

ポスト「京」重点課題の事業が順調に進行しています。革新センターでは、現在、イベント案内で紹介している来年3月のシンポジウムにむけて準備を進めているところです。全6サブ課題の成果報告やパネルディスカッションなど充実した企画にしたいと思います。皆様のご参加をお待ちしています。どうぞよろしくお願い申し上げます。

## 資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661  
FAX : 03-5452-6662  
E-mail : [office@ciis.iis.u-tokyo.ac.jp](mailto:office@ciis.iis.u-tokyo.ac.jp)  
URL : <http://www.ciis.iis.u-tokyo.ac.jp/>

## 編集発行

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