

令和時代のものづくりに貢献する シミュレーション技術の研究開発を推進

30年余り続いた平成の時代が終わり、令和の時代の幕が開きました。

国内のスーパーコンピュータに目を向けると、平成の時代前半では、特定分野の専用計算機として、数値風洞NWT (170 GFLOPS^{※1}、航空機の空力計算)、CP-PACS (614 GFLOPS^{※1}、素粒子物理学、宇宙物理学などの基礎科学計算) や地球シミュレータ (35.86 TFLOPS^{※1}、気象計算^{※2}) が設備整備され、それぞれの分野で利用されました。その後、国のプロジェクトとして、広範な計算科学分野で利用される、「京」 (10.51 PFLOPS^{※1}) が開発され、共用に供されました。「京」は、大学情報基盤センター等に整備されたスーパーコンピュータ、ストレージ、ネットワーク (SINET) とともに、HPCIの中核設備として多くの研究者に利用されています。このように、平成の時代にはスーパーコンピュータの実効性能が飛躍的に高くなるとともに、研究者にとって容易に利用できるインフラが構築・整備され、その利用環境が劇的に変化しました。

このような状況の中、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、平成の時代の半ばである平成14年1月に設置された計算科学技術連携研究センターの成果を継承する形で、平成20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ました。当センターは設置以来現在に至るまで、多くの国のプロジェクトを中核機関として推進し、変化するスーパーコンピュータの利用環境に対応した、先端のシミュレーション技術の開発を行うとともに、利用技術を含む、その成果の社会への展開に努めてまいりました。

令和の時代に入って間もない令和元年8月16日には、「京」の共用が停止されることとなっており、一方、令和3年には、次のフラッグシップ計算機であるポスト「京」の運用が開始される見込みであり、次の時代のスーパーコンピューティングをさらに強力に牽引して行くことが期待されています。ものづくり分野においては、シミュレーションだけではなく、データ科学やAIとシミュレーションとを融合して活用することが必要不可欠な時代になります。

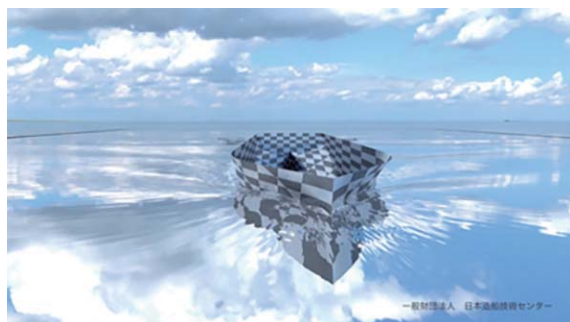
ポスト「京」重点課題⑧プロジェクトも残すところ1年となり、今後の成果創出フェーズの具体的な展開方法を検討しながら、ポスト「京」を利用した早期の成果創出に向けた研究開発を進めています。新時代のCISSの活動に対し、引き続き、皆さま方のご理解とご支援を賜りたく、よろしくお願い申し上げます。

令和時代最初の発行となる本ニュースでは、平成時代の最後に開催した第4回ポスト「京」重点課題⑧シンポジウムの報告を中心に紹介しています。また、イベント案内で紹介している、本年9月に開催を予定している重点課題⑧・重点課題⑥ 第3回HPCものづくり統合ワークショップでは、今後のHPCとデータ科学・AIとの関連を題材に、この先の新しいシミュレーション技術の展開についての議論を行いたいと考えています。少し先になりますが、ぜひ多くの皆様のご参加をお待ちしております。

センター長・教授 加藤千幸

※1 LINPACK ベンチマークの実行性能。

※2 一部、気象計算以外の分野の研究にも利用。



(提供：(一財)日本造船技術センター)



(飯田・宮澤他、2018年数値流体力学シンポジウム)

「京」により得られた代表的なシミュレーション結果。船の抵抗試験のベンチマーク計算結果 (左) と自動車の空力・音響解析結果 (右)。

第4回ポスト「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・製造プロセスの開発」シンポジウム

平成31年3月13日(水)に、本所コンベンションホールにおいて、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」の第4回シンポジウムを、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の主催、東京大学生産技術研究所の共催にて、開催しました。

ポスト「京」向けに開発を進めているアプリケーション・ソフトウェアを実用性の高いものにすることを狙いとした本シンポジウムでは、実施機関側から、ポスト「京」重点課題⑧の最新の成果と最終成果の達成見込みに関して報告し、また、各サブ課題のカウンターパートナーとなる産業界から、開発しているアプリケーション・ソフトウェアを用いてすでに開始している実証研究の状況やアプリケーション・ソフトウェアに対する期待が紹介されました。また、招待講演として、「数値シミュレーション技術が切り拓く航空機空力設計プロセスの革新」と題して、三菱重工業株式会社総合研究所中尾雅弘副所長に講演をしていただきました(中段参照)。会場の参加者も含めて、ポスト「京」を用いて何を行うかについて活発な議論が行われました。

本シンポジウムには、民間企業101社からの参加者を含め、269名に参加いただき、また、シンポジウムに引き続き開催された懇談会にも78名に参加いただき、盛会裡に終了しました。



会場の様子



岸所長挨拶



質疑に答える加藤センター長

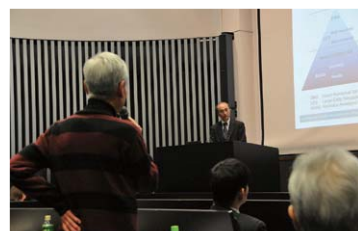
招待講演

三菱重工業株式会社 総合研究所 中尾雅弘副所長の講演では、航空機の開発プロセスの概要、シミュレーション技術の発展による風洞試験時間の短縮や航空機を対象とした数値流体力学解析の現状を紹介いただき、飛行試験での潜在リスクの削減などのために求められる、低速離着陸時の最大揚力係数の高精度予測と高速巡航時の衝撃波による空力振動(Buffet)の発生境界の高精度予測をするうえで、大規模・高精度非定常乱流解析が必要不可欠であることを紹介いただきました。そのうえで、ポスト「京」を利用した、高レイノルズ数の領域におけるBuffet現象などの非定常空力解析の実現や実機レイノルズ数における全機空力解析の実現に向けて、開発されている航空機設計プロセスへの期待をお話いただきました。

会場から高い関心を集め、多くの質疑にお答えいただきました。



三菱重工業 中尾副所長



質疑応答の様子

このシンポジウムで紹介されたポスト「京」重点課題⑧の成果や産業界からの期待は、計算工学NAVIニュースレター Vol.16にまとめていますので、あわせて参照ください。



計算工学NAVIニュースレターは以下よりダウンロードできます。

<http://www.cenav.org/nldl/>



I. 次世代最適化・高速化技術開発戦略

II. 次世代CFDソルバー開発戦略 part 1

サブ課題A

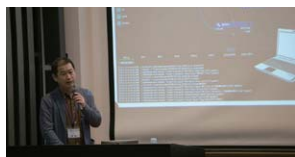
「設計を革新する多目的設計探索・高速計算技術の研究開発」

サブ課題責任者の宇宙航空研究開発機構(JAXA) 大山聖准教授より、現在開発中のターンアラウンドタイムを短縮し、制約条件が厳しい設計最適化問題で優れた解を得ることができる多目的設計探索アルゴリズムについて紹介いただき、そして、九州大学 小野謙二教授より、シミュレーションの基盤技術である、計算時間を短縮する高速化技術と多数の計算を効率的に実行し、生産性を向上するワークフロー技術について紹介いただきました。

続いて、株式会社荏原製作所 後藤彰技監より、多目的設計探索技術の実問題への展開として、サブ課題Cおよび(一社)ターボ機械協会と連携して実施している、「ファンの最適設計」の取組み状況を紹介いただき、このような新しい取組みに関する産業界としての期待と展望を紹介いただきました。



JAXA 大山准教授の講演の様子



九大 小野教授の講演の様子

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」

サブ課題責任者の神戸大学 坪倉誠教授より、次世代自動車の開発リードタイムの大幅削減と実運転環境での条件変化を考慮できる新たなシミュレーションと、これを基盤技術とした、空力や構造解析を統合した自動車統合設計システムの開発状況について紹介いただきました。続いて、株式会社本田技術研究所 寺村実主任研究員より、これまで行ってきたCFD予測精度向上のための技術課題解決に向けた取組みと、本プロジェクトで開発している自動車統合設計システムへの期待について紹介いただきました。



神戸大 坪倉教授の講演の様子

III. 次世代CFDソルバー開発戦略 part 2

サブ課題D

「航空機的设计・運用革新を実現するコア技術の研究開発」

サブ課題責任者のJAXA 高木亮治准教授より、開発中の実機詳細形状に対応した高速解析および、実飛行条件(高レイノルズ数流れ)における高精度乱流解析を実現する革新的空力解析プログラムの概要を紹介いただきました。特に、階層型等間隔直交構造格子と埋め込み境界による計算格子の自動生成技術および実機高レイノルズ数乱流解析実現のキーとなる壁面モデルLESの開発状況と、それらを用いた解析例について紹介いただきました。



JAXA 高木准教授の講演の様子

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」

サブ課題責任者の東京大学 加藤千幸教授より、本プロジェクトのターゲットアプリケーションであるFrontFlow/blue(FFB)の高速化や機能拡張、および、計算格子の完全自動生成と流体騒音の直接計算が可能な、格子ボルツマン法に基づく新規アプリケーション(FFX)の研究開発の状況等について紹介いただきました。続いて、(一財)日本造船技術センター 西川達雄課長より、曳航水槽の完全代替を目的とした高精度CFDの開発概要、および、最新の模型試験との比較検証結果等を紹介いただき、最後にポスト「京」へ向けた課題について紹介いただきました。



東大生研 加藤教授の講演の様子

IV. 次世代材料・構造ソルバー開発戦略

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」



東京大学 奥田教授の講演の様子

サブ課題責任者の東京大学 奥田洋司教授より、溶接工程における溶接順序探索および逆ひずみ量推定の高精度化・高速化を目的に開発している高度成形・溶接シミュレータに必要な要素技術の開発状況と、現時点でのターゲット問題への取組み状況について紹介いただきました。続いて、株式会社IHI 高倉大典主任研究員より、大規模溶接シミュレーション技術の現状および課題を、ジフクライミングクレーンのマストの溶接に関する解析事例を交えて紹介いただきました。

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」

サブ課題責任者の東京大学 吉川教授より熱可塑CFRP(Carbon Fiber Reinforced Plastic)の成形シミュレータ開発の現状の報告とともに、実部品の成形シミュレーションに関する展望を紹介いただきました。続いて、株式会社IHI 穂坂 俊彦主査からは複雑な3次元形状であるジェットエンジンの複合材ファン動翼の製造上の重要課題と、ポスト「京」を用いたシミュレーション技術の高度化を活用した開発期間の短縮と低コストを目指す本プロジェクトへの期待を紹介いただきました。



東大生研 吉川教授の講演の様子

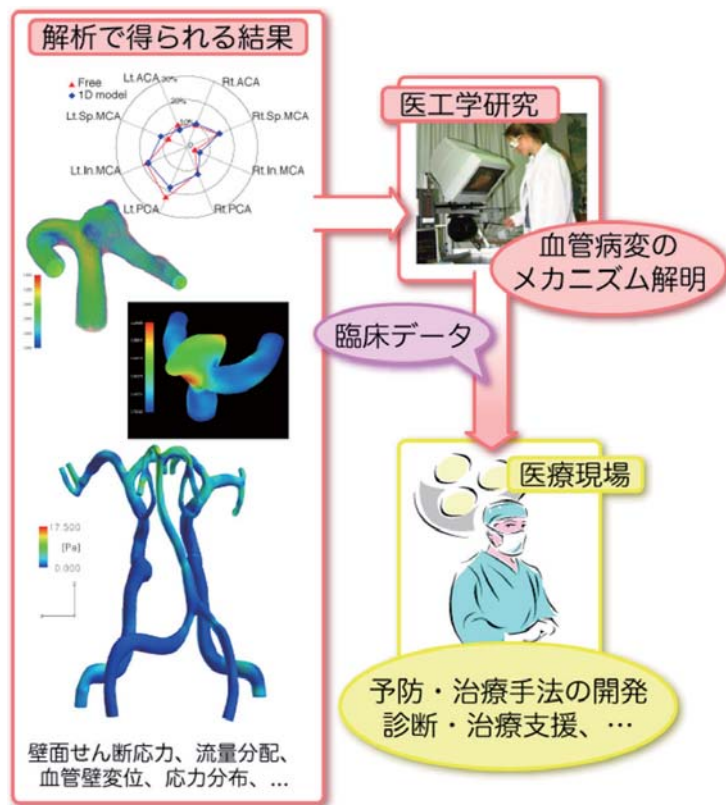


大島 まり 教授

シミュレーションによる予測医療

循環器系疾患では、血流の流体力学的要因が重要な役割を果たしています。特に、我が国は超高齢化社会を迎え、今後、循環器疾患の患者数は増加すると考えられます。そこで、本研究では、代表的な循環器系疾患である脳動脈瘤・動脈硬化症に着目し、これら疾患の発症および進行のメカニズムを流体力学的な観点から解明するとともに、患者個人に応じた治療方法を提案することのできる予測システムの開発を行っています。システムの概要としては、右図に示されているように、医用画像とシミュレーションを組み合わせることにより、臨床現場で必要とされている血行動態を示す情報を提供します。

循環器系の血流シミュレーションでは、実際の生体内の各個人の解剖学および生理学的な状況を反映した血流を再現することが重要な課題です。そのため、CT (Computed Tomography) やMRI (Magnetic Resonance Imaging) 等の医用画像から必要な情報を抽出し、これらのデータを用いて効率的かつ効果的にシミュレーションを行っていくことが求められています。前者については、シミュレーションのための医用画像処理技術の研究であり、患者個別の医用画像から3次元血管形状を自動かつ高精度にモデリングする手法を開発しています。後者は、血流シミュレーションであり、末梢血管網など循環系全体の影響を考慮したマルチスケール血流シミュレーション手法の開発、血流と血管壁の変形を同時に解く流体構造連成解析、など多角的な視点から循環器系疾患のメカニズム解明に取り組んでいます。

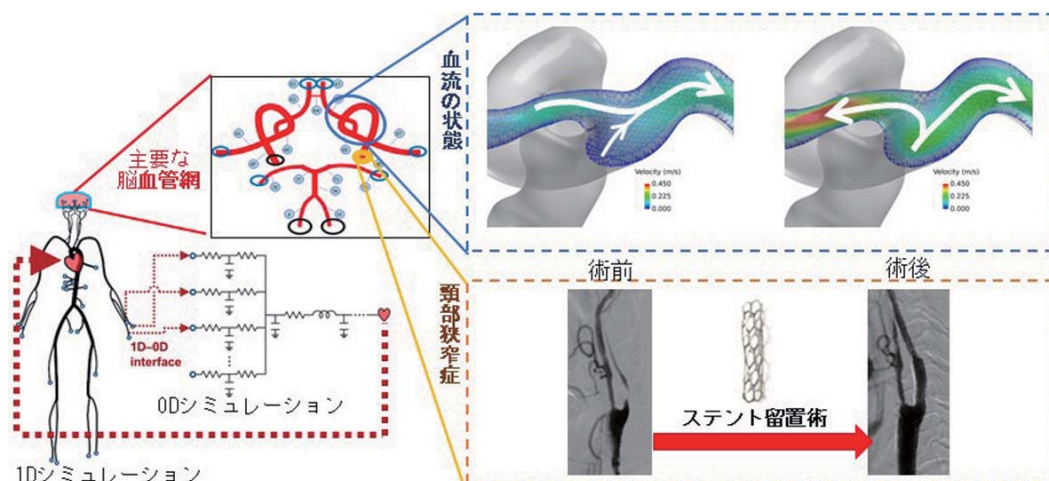


予測医療のためのシミュレーションシステム概要

術後の血行動態の予測に向けて

重度狭窄症を持つ場合には、低侵襲であるステント留置術による血管内治療が施される場合が、近年増加しています。手術によって変化する脳内全体の循環は、脳だけでなく、全体の血流調整によって変化するため、全身循環を考慮して血流解析を行う必要があります。一方、全長9万キロ、直径が25mmから5μmの間を変化する全身血管網を流れる血流をどのように効果的に数値解析するかは、大きな課題です。そこで、低次元モデルによる1D-0Dシミュレーションと3Dシミュレーションを組み合わせたマルチスケール血流解析手法を開発しています。

具体的な症例として、左側内頸動脈の狭窄症のためにステント留置手術した70才男性のシミュレーション例を下図に示します。シミュレーションにより、手術前と手術後では血流の流れる方法やそれに伴う壁面剪断応力が変化していることがわかります。このように、全身循環を考慮することにより、手術の脳内循環に与える影響を把握することが可能となります。現在、個別の患者にとって最適な手術方法を提案するためのシミュレーション手法の開発を行っています。



マルチスケールシミュレーションの概要



佐藤 文俊 教授

タンパク質のデザイン

オン・チップによるタンパク質工学技術が登場し、近い将来タンパク質の改変が一段と高速かつ大規模に行われるようになりそうです。参考となるタンパク質なしで新しい機能を持つタンパク質を発現することはまだまだハードルが高いでしょうが、タンパク質の性能をチューニングするといった改変には大いに期待が持てます。とはいえ、やみくもに変異を導入するのではたちまち試験数が発散してしまいますので、デザインにはエビデンスに基づく効果的な情報を利用して変異候補をある程度絞り込むことが重要となります。これまでタンパク質のデザインには、遺伝子系統樹や一次構造の保存情報、ホモロジーモデリングや分子動力学法による立体構造情報などが利用されてきました(上図)。しかし、これだけではまだ十分な絞り込みには至らぬことが大半です。

当研究室では、オリジナルプログラムProteinDF/QCLOを研究開発し、タンパク質の(正準)分子軌道を計算してきました。反応機構に影響を及ぼしうる分子軌道群の分布を観察することによって、どのアミノ酸残基が反応に関与しているのかが直截的にわかります。これまでの既存の情報に加え、この新しい量子効果情報も活用したタンパク質の改変研究を提唱しています。

量子効果情報を利用したデザインには演繹法と帰納法があります(下図)。演繹法は上述のように、参考となるタンパク質で支配方程式を解き、反応機構にすでに関与しているアミノ酸残基をピックアップする方法です。もちろん、これらが変異の候補となります。何に変えるべきかのシミュレーションもできますが、候補となり次第全てのアミノ酸に変異させて実験してしまう方が効率的でしょう。この方法であれば、実験・シミュレーションを組み合わせた最適化ループがすぐに実用化できます。一方帰納法は、参考となるタンパク質では反応機構に関与していないものの、変異を導入すれば新たに反応機構に影響をあたえる箇所を予測する方法です。これには多数のシミュレーションが必要で、得られたデータによる機械学習やデータ同化などで達成できるこれからの研究です。

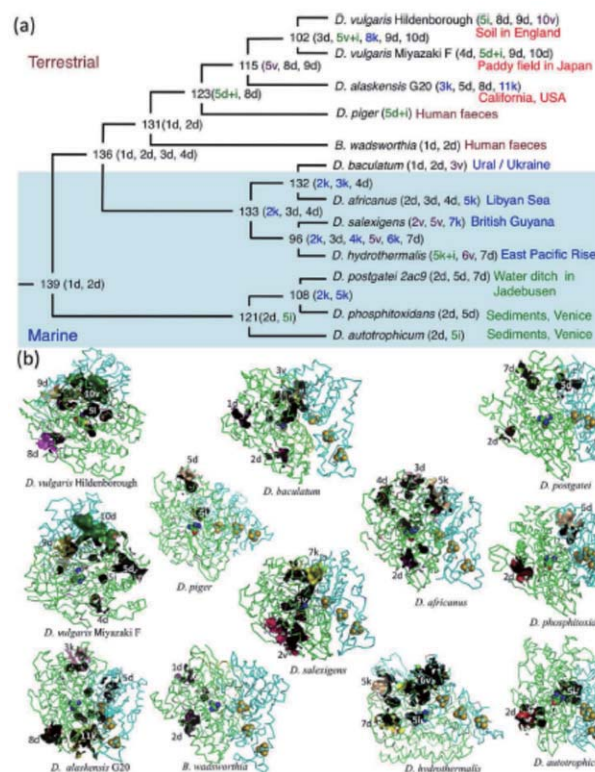
量子効果には2つの大きな特徴があります。1つは、分子軌道は分子の化学的性質を表すものですから、多少構造が動いていても同じ化学的性質を持つ状態内ならばその構成要素は、エネルギーとは異なり、大きくは変化しません。組成比率が変わるだけです。そのためどのアミノ酸残基が関与するかの情報は信頼性が高いのです。2つ目は、量子効果は距離には依存しないことです。反応中心から離れたアミノ酸残基からでも大きな影響を与えることが可能です。反応中心周りは進化の過程で多くの淘汰を生き抜いてきたので大変よくできています。実は、この辺りを変えてしまうと性能が落ちる場合がほとんどなのです。量子効果により反応中心の構造を壊さずに性能を変える長距離砲のようなデザインが可能です。

ご興味のある方、コラボしませんか。

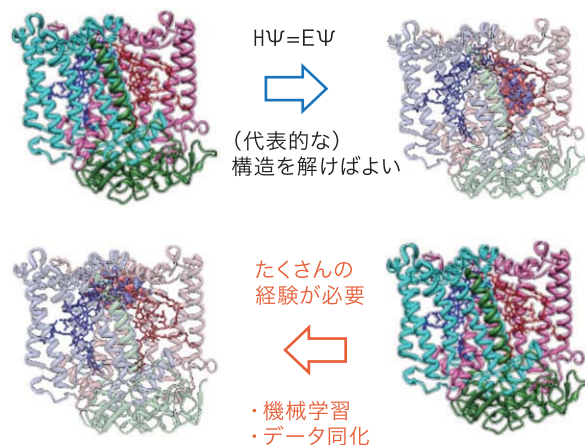
タンパク質分子軌道の本来の姿

上記のように、分子軌道は分子の電子状態や反応機構を解析するうえで極めて重要な関数です。分子軌道は等値面で描かれるのが普通です。小さな分子であればその方法でよく形状を観察・認識することができるのですが、タンパク質のような大きな分子では分子軌道が非局在化するため、全体の形状を正確に把握することが難しくなります。等値面表示は分子軌道の分布の1つの断面面を表示しているにすぎないからです。

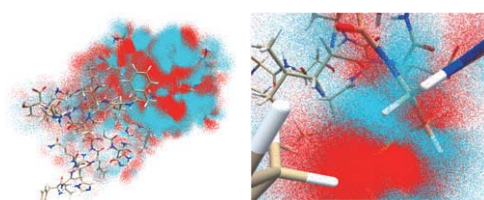
当研究室では、棄却法を用いて分子軌道の値に応じた密度の点描を行うことでタンパク質分子軌道本来の姿を描くことに成功しました(右図)。本方法は複雑な分子軌道の分析に適していると考えております。



ヒドロゲナーゼのガスキャビティ形状予測



演繹的設計(上)と帰納的設計(下)



インスリンの分子軌道の本来の姿；全体像(左)と内側からの探索図(右)

第11回PHASE/0利用講習会:基礎編(PHASE-Viewer利用)

PHASE/0



昨年5月に続き、平成31年2月1日(金)に、電子状態計算(バンド計算)に初めて取り組む方を対象に、第一原理電子状態ソフトウェアPHASE/0の、機能紹介の講義とPCを用いた計算実習を組み合わせた利用講習会を、東京大学生産技術研究所セミナー室で開催しました。16名の方に参加いただき、電子状態計算を体験いただきました。今回も、参加者の皆様から高い評価をいただきました。



PHASE/0は、「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」プロジェクトの成果物の一つであるPHASEを基礎として、PHASEシステム研究会を中核とする体制下で開発改良されている、密度汎関数理論に基づく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プログラムです。全エネルギー、電荷密度分布、電子の状態密度、バンド構造、安定な原子構造等の計算ができます。

※第12回講習会は5月24日(金)
本所セミナー室にて開催されました。

イベント案内

●●● その他関連団体イベント ●●●

国際フロンティア産業メッセ2019

開催日：2019年9月5日(木)～6日(金)
会場：神戸国際展示場(神戸ポートアイランド)

●●● ワークショップ ●●●

重点課題⑧・重点課題⑥
第3回HPCものづくり統合ワークショップ

開催日：2019年9月19日(木)
会場：東京大学生産技術研究所

東大駒場リサーチキャンパス公開2019

キャンパス公開情報

開催日：2019年5月31日(金)～6月1日(土)
会場：東京大学駒場IIキャンパス内 生産技術研究所C棟2階C棟ラウンジ

CISSの研究紹介、CISSが推進しているプロジェクトの概要や研究成果を動画上映・ポスター・タッチパネル展示の他、MR(Mixed Reality)・VR(Virtual Reality)体験を通して、紹介しています。

【 CISS所属教員の研究室の展示会場 】

○加藤千幸教授(熱流体システム制御工学)	: Be-B01/Bw-B01	○溝口照康教授(ナノ物質設計工学)	: Fe-311
○吉川暢宏教授(マルチスケール固体力学)	: Be-B03	○大岡龍三教授(都市エネルギー工学)	: Ce-B08
○半場藤弘教授(流体物理学)	: Bw-505	○梅野宜崇准教授(ナノ構造強度物性学)	: Cw-302
○大島まり教授(数値流体力学)	: De-505	○長谷川洋介准教授(界面輸送工学)	: De-202
○佐藤文俊教授(計算生体分子科学)	: De-501	○長井宏平准教授(成熟社会インフラ学)	: Ee-B05

教員名(専門分野)：室番号



計 算 工 学 ナ ビ

Knowledge Base 解析事例データベース

今すぐチェック!

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

本ニュースでは、平成時代最後の開催となりました第4回ポスト「京」重点課題⑧シンポジウムの様子を紹介しました。多くの方にご参加いただき、大変盛況でした。ありがとうございました。令和時代も、ワークショップ等の、得られた成果公開のための、様々な普及活動を行ってまいりますので、引き続きどうぞよろしくお願い致します。

資料請求お問い合わせ先

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/>

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