

スパコン「富岳」用アプリケーション開発プロジェクト完遂 「富岳」を用いた成果創出のためのプロジェクトを開始

2015年2月より開始された文部科学省のポスト「京」重点課題プロジェクトは、2020年3月に終了しました。革新的シミュレーション研究センター（以下、革新センター）は、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」の研究開発を推進してきました。関係の皆様のご協力もあり、大きな成果を上げることができました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

ポスト「京」重点課題⑧では、自動車、ターボ機械、航空機をはじめ、溶接やCFRP（Carbon Fiber Reinforced Plastics）の成形を対象として、設計・製造プロセスにおいて変革させることを目指して、「富岳」の有する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・ソフトウェアの開発を行ってきました。このプロジェクトで得られた最終成果は、2020年3月に開催を予定していた第5回ポスト「京」重点課題⑧シンポジウムなどでご報告する予定でしたが、新型コロナウィルスの感染拡大のため、シンポジウムは中止せざるを得ませんでした。そのため、関係の皆様に直接ご報告することはできなかったのですが、本ニュース（下図および2～3ページ）、および、計算工学NAVI Vol.18^{※1}で成果の一部を紹介いたしますので、これらを参照いただけすると幸いです。

2020年4月からは文部科学省『「富岳」成果創出加速プログラム』の領域③「産業競争力の強化」の一つの課題である「「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」を推進しています。プロジェクト期間は3年間であるため、短期決戦型のプロジェクトです。このプロジェクトの概要も本ニュースレターの最後に紹介しておりますので、ご参考いただければ幸いです。このプロジェクトでは、「数値曳航水槽の実現」、「多段遠心ポンプの内部流れと性能の直接シミュレーション」、「圧縮機サージの直接解析」、「実走行状態における自動車空力性能の予測」、および、「自動車の空力・構造・音響連成解析」

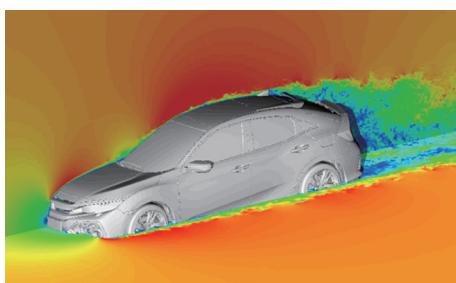
の合計5つのテーマを設定し、「富岳」を利用した実証研究を展開しています。最初の三つのテーマは、エネルギー産業の心臓部となる「ターボ機械」に関するテーマであり、残りの二つのテーマは輸送産業の中核となる「自動車」に関するものです。「富岳」は昨年12月から理化学研究所計算科学研究センターに搬入が開始され、本プロジェクトでは、既に、「富岳」の共用前評価環境Ⅲを利用して、最大、72ラック、27,648計算ノード(1,327,104コア)を用いた並列計算を実施しており、「京」と比較して、ノード性能で25倍以上、全系の性能で50倍以上の高速な計算が実現できることを確認しております。^{※2}「富岳」は2021年4月から全系を用いた共用が開始される見込みですが、前記のように、ポスト「京」重点課題⑧プロジェクトで得られた成果の実証研究を加速しております。ターボ機械と自動車の製品開発において、重要な現象でありながら従来は経験的に扱われていた複雑な流体現象の解明に貢献していくと考えています。

このプロジェクトは、革新センターと、協力機関である神戸大学、九州大学、岩手大学、豊橋技術科学大学、山梨大学、理化学研究所が中心となって推進されますが、（一社）ターボ機械協会「流体性能の高精度予測と革新的流体設計分科会」やHPCを活用した自動車次世代CAEコンソーシアムに参画されている産業界の方々とも密接に連携をして実証研究を実施することとなっています。その実証研究の中では、製品開発時の問題を例題として、開発されたシミュレーション技術を適用していきます。この結果として、3年間のプロジェクト終了時に、開発したシミュレーション技術が各企業の製品開発の場で実用性の高いものとなっていることを願っています。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。

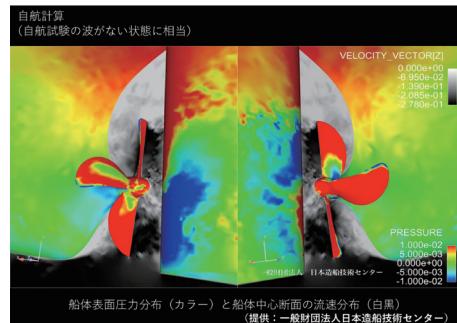
センター長・教授 加藤千幸

※1 <http://www.cenav.org/nldl/>

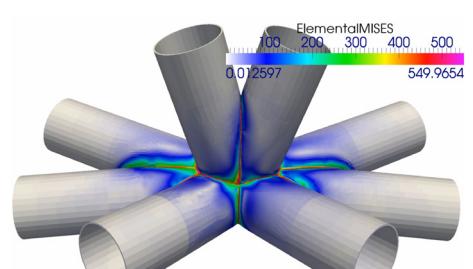
※2 富岳共用前評価環境における評価結果は、「富岳」の共用開始時の性能・電力等の結果を保証するものではない。



自動車周り流れの渦構造



自航試験のベンチマーク計算 (KVLCC2船型)
提供：一般財団法人日本造船技術センター



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)

「近未来型ものづくりを先導する革新的

近未来型ものづくりの核心をなす手段である、最先端スパコンの能力を最大限に引き出せるアプリケーションソフトウェア群ならびにそれらを統合して設計・製造支援を行うための超高速シミュレーションシステムの開発と産業における戦力化を目的として、センターが推進してきたこのプロジェクトも、本年3月に終了しました。平成25年12月に採択されてから5年間の研究開発で多くの成果が得られましたが、^{※3} ここではその一部を紹介します。

※3 成果例は計算工学 NAVI vol.18 もご参照ください。 <http://www.cenav.org/nld/>

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

多目的設計最適化問題のトレードオフを可視化する多目的設計探査技術と高速計算技術を開発しました。この結果、多目的設計探査技術については、これまでに開発された技術を統合し、実問題で従来のアルゴリズムと比較して1/3～1/30程度のターンアラウンドタイムで優れた解集合の探査が可能であることを示しました。

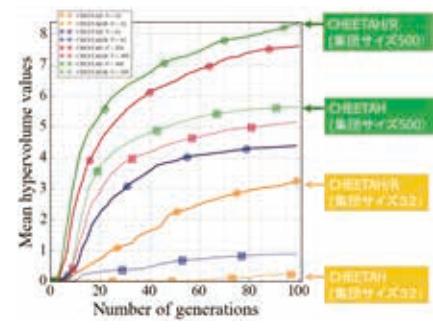
得られた技術については、多目的設計最適化技術は、ターボ機械の最適設計問題に貢献するとともに、ソフトウェアベンダと連携して、産業界に展開することを考えています。また、高速化技術として開発した低B/Fアルゴリズムは、ポスト「京」重点課題⑥サブ課題Cで開発したRIAM-COMPACT HPCを用いて性能確認を実施することを考えています。

【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

【実施機関】

宇宙航空研究開発機構、九州大学、東北大学、東京理科大学、理化学研究所



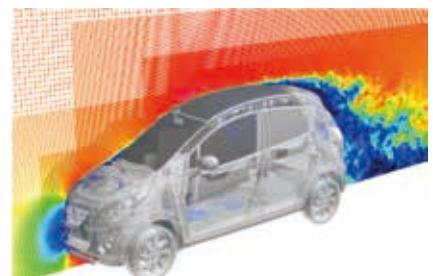
発電用風車設計最適化問題を用いた性能評価

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

設計上流側でデザイナと技術者が協調して実施するコンセプトデザインを支援すると共に、時々刻々と変化する運転条件を考慮したシミュレーションを実現するために実施しました。この結果、実車空力解析に対してプリ処理・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24時間以内を実現しました。

得られた技術については、文部科学省のプロジェクトの「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（代表：東京大学 加藤千幸センター長・教授）の中などで、HPCを活用した自動車次世代CAEコンソーシアム（<https://www.riken.jp/collab/consortium/cnach/>）と連携して、運動連成解析の実現と狭帯域音の予測技術の確立に向けた開発を実施することを考えています。



自動車 CAD に対する領域分割による解析ターンアラウンドタイム (TAT) 加速

【開発したアプリケーション】

CUBE

【実施機関】

神戸大学、山梨大学、理化学研究所

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

性能・信頼性を大幅に向ふことができるターボ機械設計システムを実現するために実施しました。この結果、高速化技術を統合した流れソルバーの開発と性能評価について、「富岳」で流体解析コードFrontFlow/blue(FFB)の100倍高速化(ノード性能比)が達成できる見込みを得ました。

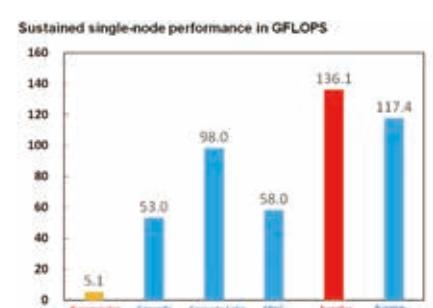
得られた技術については、文部科学省のプロジェクトの「富岳」成果創出加速プログラム「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発（代表：東京大学 加藤千幸センター長・教授）の中で、(一社)ターボ機械協会「流体性能の高精度予測と革新的流体設計分科会」と連携して、多段遠心ポンプの内部流れ等の完全な予測可能であること等を実証し、ターボ機械の設計の高度化に貢献します。

【開発したアプリケーション】

FFB、FFX (LBM コード)

【実施機関】

東京大学、九州大学



FFB のノード当たりの実行性能^{※4}



重点課題⑧

設計・製造プロセスの開発」プロジェクト

<コ・デザイン成果>

ターゲットアプリケーションであるFrontFlow/blue(FFB)に対して、理化学研究所・富士通と連携して、高速化技術の開発を実施しました。その結果、共用前評価環境Ⅱの利用により、スパコン「富岳」のノード実行性能が95.5GFLOPS^{※4}となるとの評価が得られ、当初目標としていた「富岳」で100倍高速化(ノード性能比)が達成できる見込みを得ました。また、ここで得られた知見は、このプロジェクトの主要なアプリケーションである、CUBE、FFVHC-ACE、FrontISTRに展開され、それぞれ「富岳」により高い実効性能が得られる目途が得られています。※4 富岳共用前評価環境における評価結果は、「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。

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

航空機の設計・開発および運用・運航プロセスに革新をもたらすコア技術として、新たな設計評価技術、飛行安全性向上技術等を実現するために実施しました。この結果、新たな壁面モデルの開発により、高速バフェットや低速失速の再現に成功し、さらに、設計上重要となるレイノルズ数効果についても、過去の文献等と比較して、定性的に一致した傾向が予測できることを確認しました。

得られた技術については、文部科学省のプロジェクトの「富岳」成果創出加速プログラム「航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究」(代表:東北大学河合宗司教授)の中で、空力課題、主翼の空力構造連成課題に対して、実機フライト試験の代替となり得ることを先導的に実証します。

【開発したアプリケーション】

FFVHC-ACE

【実施機関】

宇宙航空研究開発機構、東北大学、東京理科大学



単独翼の遷音速バフェットの計算結果



単独翼の後縁失速の計算結果

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

成形機・車両全体規模での数 μm 精度の予測を可能とする技術を実現するために実施しました。この結果、開発した要素技術を、2つの実証例題への適用し、施工条件・溶接工程に沿った現象の再現が可能であること、その結果として得られる変形、溶接金属部における応力・塑性ひずみ分布、永久変形量などが評価可能であることを確認しました。

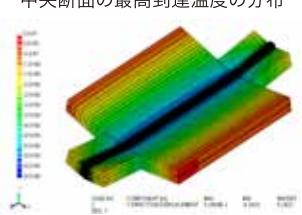
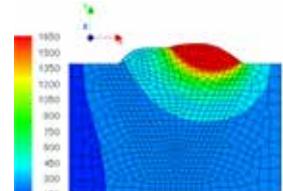
得られた技術については、様々な研究開発の取り組みの中でFrontISTRの開発を継続することを考えており、その成果も含めて、平成30年4月2日にユーザ支援体制として設立した一般社団法人 FrontISTR Commons (<https://www.frontistr.org/>) の中で展開することを考えています。

【開発したアプリケーション】

FrontISTR

【実施機関】

東京大学（大学院新領域創成科学研究科）

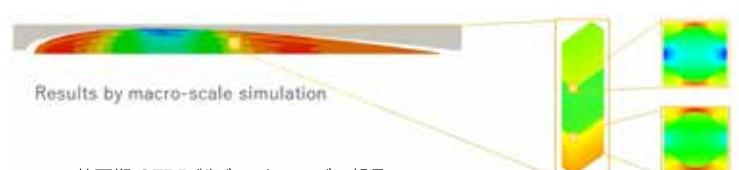


サブ課題 F

マルチスケール熱可塑CFRP成形シミュレータの研究開発

強度評価に裏打ちされた最適設計を可能とするためのマルチスケール熱可塑CFRPシミュレーションを研究開発するために実施しました。この結果、ミクロスケールズーミングシミュレーション手法を構築しました。以上の研究開発により、実部品のマルチスケール熱可塑CFRP成形シミュレーションが実施可能となりました。

得られた技術については、ポスト「京」重点課題⑧以前のプロジェクトで開発したシミュレータと共に、燃料電池自動車の高圧水素容器の低価格化のための課題に応用していくことを考えています。また、一方向強化炭素繊維テープを局所過熱しつつ自動積層するAutomated Tape Laying (ATL) 法の普及促進に貢献することを考えています。



【開発したアプリケーション】

FrontComp

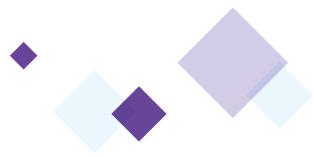
【実施機関】

東京大学

熱可塑CFRP製ジェットエンジン部品の
プレス形成ズーミング解析



梅野 宜崇 准教授

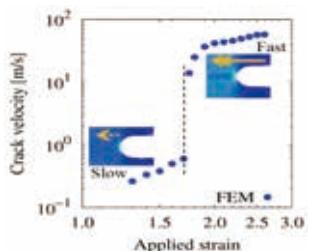


◆ ポリマー破壊挙動のマルチスケール解析

ポリマーは軽さや成形性の高さに加え、分子構造によって様々な特性を持たせることができることから、構造材料としての工業製品への応用が急速に広まっていますが、ポリマーが示す特有の破壊挙動のメカニズムはまだ十分に解明されていません。我々は粗視化粒子モデルや有限要素法を駆使したマルチスケール解明により、ポリマーに見られる特異なき裂進展の機序の解明、機械的特性と分子構造の関連性の解明に取り組んでいます。

ゴムで観察されるき裂進展速度のジャンプ現象(あるひずみエネルギーでき裂速度が2桁ほど急激に増大する)の原因は長年謎とされてきましたが、我々は有限要素法解析で本現象の再現に初めて成功し、その原因がき裂先端応力の非単調增加にあり、それが局所的なガラス転移によってもたらされるものであることを突止めました。これによって本現象は粘弾性体に一般に発現しうるものであり、ゴムだけでなく樹脂でも起こりうることを指摘、これまでの実験結果を説明することができました。

また我々は、構造用ポリマー材料についての粗視化分子動力学を多くの条件に対して実施することにより、任意のひずみ速度・温度・荷重様式に対する降伏応力を与える理論式を構築することができました。さらに、分子構造が応力-ひずみ関係に及ぼす影響を分析することで、分子量と脆性-延性遷移に明瞭な関係があることを明らかにしました。この取り組みは、構造材ポリマー設計のための実験を代替するデジタルエンジニアリングの確立を大きく加速するものと考えています。



ゴムき裂速度ジャンプの有限要素法解析

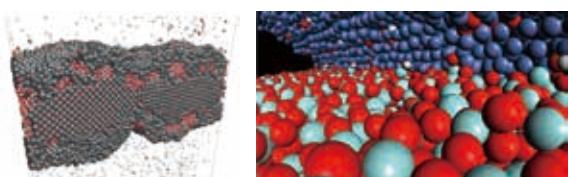


ポリカーボネート引張破壊の粗視化分子動力学解析

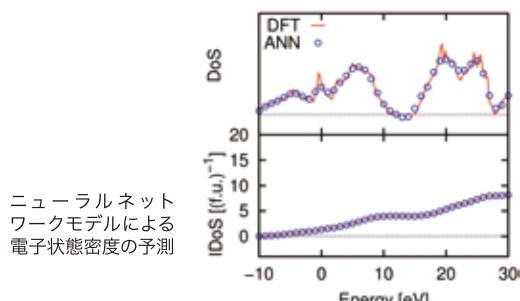
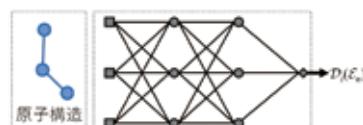
◆ データサイエンスを活用した原子モデリングが拓くナノ・マルチフィジックス

データサイエンスで生み出された新技術を様々な分野に応用する試みが急速に拡大しています。我々は、深層学習を活用した新しい原子モデリング手法の開発に取り組んでおり、これまで計算コストの極めて高い量子力学計算でしかできなかったナノスケールシミュレーションを原子モデル解析で高速に行う方法を提案しています。

ひずみによる原子配置の変化が電子状態を変化させることを利用するひずみエンジニアリングは古くから知られていますが、ナノチューブのように大変形を示す構造体では急峻な物性変化が起こり得るため、画期的なデバイス創製の可能性があります。我々は、原子構造と電子状態密度のマッピングにニューラルネットワークモデルを適用し、Schrödinger方程式を解くことなく電子構造を高速に予測する方法を開発しました。これは、ナノスケールのマルチフィジックスを解明するための強力なツールとなり、例えばナノチューブの座屈変形を利用した新しいナノデバイスの設計への応用が期待されます。



固体酸化物形燃料電池の反応分子動力学解析



ニューラルネットワークモデルによる電子状態密度の予測

また、化学反応における原子の挙動をシミュレートする反応分子動力学法は、電池電極反応メカニズムを明らかにする方法として期待されていますが、原子間相互作用を記述する反応力場の構築が問題でした。我々は反応力場を効率的かつ簡単に構築するための機械学習アルゴリズムの高度化に取り組んでいます。これまで、固体酸化物形燃料電池材料のナノ構造形成プロセスや発電プロセスのシミュレーションに成功しています。さらに、使いやすいユーザーインターフェースを備えたフィッティングツールの開発も進めています。



長谷川 洋介 准教授



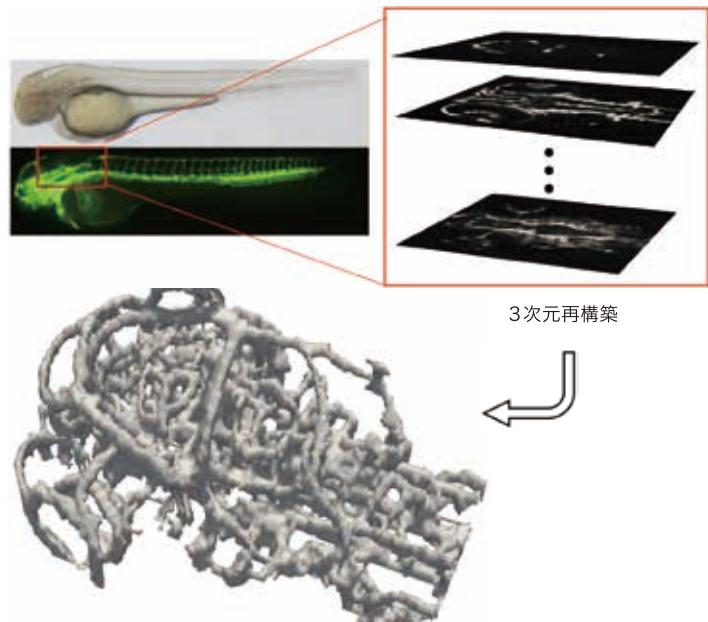
我々のグループでは、最適化数理と大規模流体シミュレーションを用いて、流体现象に関わる様々な最適化問題に取り組んでいます。2018年4月からはブラウン大学に滞在し在外研究を実施し、2020年3月に帰国しました。以下では、現地で行なった共同研究の一部をご紹介します。

◆ ゼブラフィッシュ脳内血流シミュレーション



ゼブラフィッシュは体が透明で、生きたまま体内の血管網と内部の流れが可視化できるため、発生生物学や医学における生体モデルとして大きく注目されています。

我々のグループでは、ゼブラフィッシュの脳内の共焦点画像から毛細血管構造を3次元的に再構築を行う手法を開発しました。更に、1)各血球のダイナミクスを忠実に再現した散逸粒子動力学(Dissipative Particle Dynamics)、2)血球の効果はモデル化した3次元の流体シミュレーション、そして3)血管断面内の流れの分布を考慮しない1次元モデルという3つの異なるアプローチを適用し、血管網の流れの予測を行いました。1)から3)に向かうに従って、計算精度は落ちますが、計算負荷は飛躍的に低減されます。このように異なる信頼性を持つ計算を上手く組み合わせることにより、精度を保証しつつ、効率良く計算を行うための手法を構築しています。



顕微鏡画像から再構築された脳内血管構造

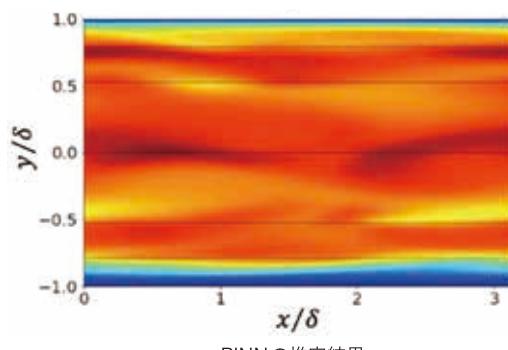
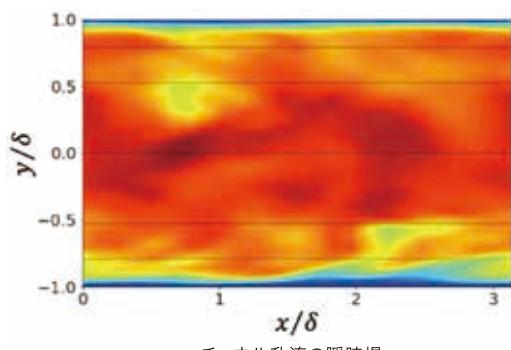
◆ 物理法則を考慮した深層学習による熱流動場推定



近年、計算機能力の向上、計測装置の高解像度化に伴って、膨大なデータが蓄積されつつあります。このようなビッグデータに機械学習を応用することにより普遍的な知識の抽出が期待されています。

その一方で、従来の機械学習では、単なる「データ」と見なすために、物理法則を様的に考慮することができません。

本研究では、物理法則を陽的に組み込んだ深層学習(PINN: Physics-informed neural network)を開発し、熱流動場推定に応用しています。これにより、観測データが豊富なところでは機械学習の高い関数近似特性を利用しつつ、観測データが不足する領域では物理法則に基づいた予測が可能となります。本研究では、同手法を乱流場の推定やスカラー源推定の問題に適用し、高い推定性能を確認しました。





「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

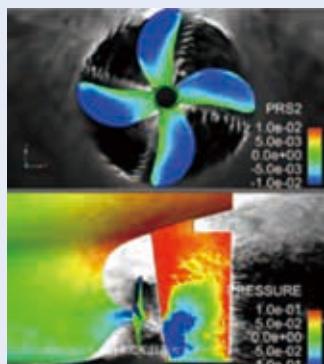
課題責任者 加藤千幸 東京大学生産技術研究所 センター長・教授



革新的シミュレーション研究センターでは、2020年から3年間、神戸大学、九州大学、岩手大学、豊橋技術科学大学、山梨大学、理化学研究所と協力して、文部科学省の「富岳」成果創出加速プログラムの一つの課題を実施しています。このプロジェクトは、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」を対象とした、下に示す5つの本実証研究テーマに対して、ポスト「京」重点課題⑧で開発した、「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と証明することを目的とした研究を実施するものです。

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

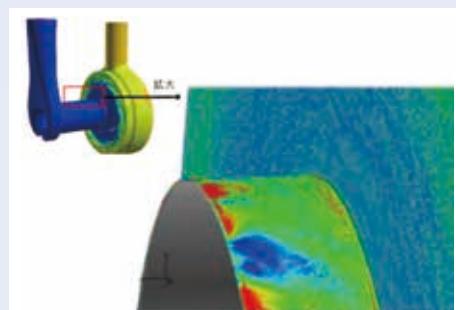
高効率な省エネデバイスの開発に貢献します。



自航試験の解析結果
(提供:一般財団法人日本造船技術センター)

テーマ②：細隙部を含めた多段遠心ポンプの内部流れのWall-Resolved LES

ポンプ設計の高度化に貢献します。



細隙部(側室トライナー部)の解析結果

テーマ③：圧縮機サージの直接解析

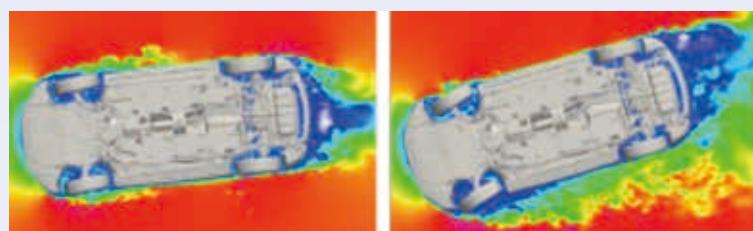
圧縮機サージの予測技術を確立します。



旋回失速発生時の流速分布

テーマ④：リアルワールド自動車空力性能の予測

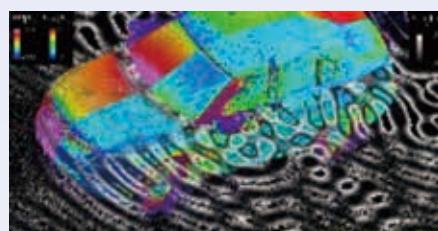
実走行状態の自動車の空力性能の評価を実現します。



コーナリング時のリアルワールド空力・運動連成シミュレーション

テーマ⑤：リアルワールド自動車空力音予測

実走行時の空力音予測を行います。

ドアミラー周りの広帯域騒音解析結果(音場)
(飯田、宮澤他、2018年数値流体力学シンポジウム)

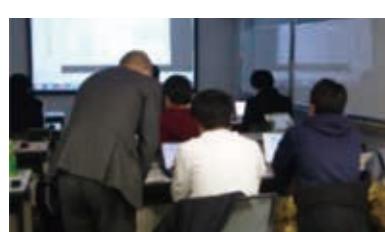
活動報告



PHASE/0



昨年5月の第12回に続き、令和2年2月21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第13回利用講習会を、東京大学生産技術研究所セミナー室で開催しました。13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の詳細は、以下をご参照ください。
<https://azuma.nims.go.jp/>

今すぐチェック!

計算
互
学
ナ
ビ

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

平成26年から5年間、革新センターが推進してきたポスト「京」重点課題⑧プロジェクトが3月で終了しました。今年度からは、「富岳」成果創出プログラムの一つの課題を推進してまいります。センターでは、今後も、この新プロジェクトの成果を報告するシンポジウムや研究開発されたソフトウェアの利用講習会等を企画してまいります。引き続き、よろしくお願ひいたします。

資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661
FAX : 03-5452-6662
E-mail : office@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