

第3期革新的シミュレーション研究センター 5年目を終えるにあたって

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、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」の研究成果を引き継ぐ形で平成20年1月に設置された、東京大学生産技術研究所附属の教育研究施設です。革新センターの設置目的は、①世界をリードする先端の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、および、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教育基盤の強化です。この設置目的を達成するために、計算科学技術連携研究センターの活動期間も含めて、革新センターは20年以上の間、中心的な活動として、文部科学省の先端の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を代表機関として推進してきました。現在も、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムの「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発(令和2年度から令和4年度、以下、「富岳」流体予測革新プロジェクト)を推進しています。

革新センターの研究開発成果はこれまでも機会を設けて皆様にご報告してきましたが、先端のシミュレーションソフトウェアに係る成果は本ニュースレターのVol. 33から4号にわたって紹介していますのでご参照ください。また、今年度は第6回HPCものづくり統合ワークショップを令和4年9月27日に開催するとともに、アウトリーチ活動として、国際フロンティア産業メッセ2022(令和4年9月1日～2日開催)やSC22(令和4年11月13日～18日開催)にも出展いたしました。本号でもこれらを紹介しましたのでご参照ください。

「富岳」流体予測革新プロジェクトは本年度で終了しますが、すでにさまざまな成果が得られています。令和5年

3月1日(水)に第3回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウムを開催し、最終成果をご報告いたします。また、シンポジウムではこれまでの20年あまりの活動の成果を総括し、将来のものづくりシミュレーションについて展望します。関係各位にはぜひご参加いただきたいと考えております。また、現在文部科学省では、「富岳」の次のフラッグシップシステムに関する調査研究が実施されています。革新センターでもそのような議論を見据えながら、ポスト「富岳」時代の、新たなものづくりの方法論の研究開発に貢献していきたいと考えています。

革新センターは、3回目の改組を行い、令和5年4月から新たな体制でさらに強化した研究教育活動を実施していきます。その具体的な内容に関しては本ニュースレターの次号でご紹介いたしますが、引き続き、革新センターの研究教育活動にご指導・ご鞭撻を賜れば誠に幸いです。

センター長・教授 加藤千幸



センターメンバー集合写真(生研An棟4階テラスにて、2023年1月5日撮影)
前列(右から)：梅野宜崇教授、加藤千幸センター長・教授、吉川暢宏副センター長・教授
後列(右から)：長谷川洋介准教授、大島まり教授、佐藤文俊教授、溝口照康教授、石原晶子学術専門職員(事務局)

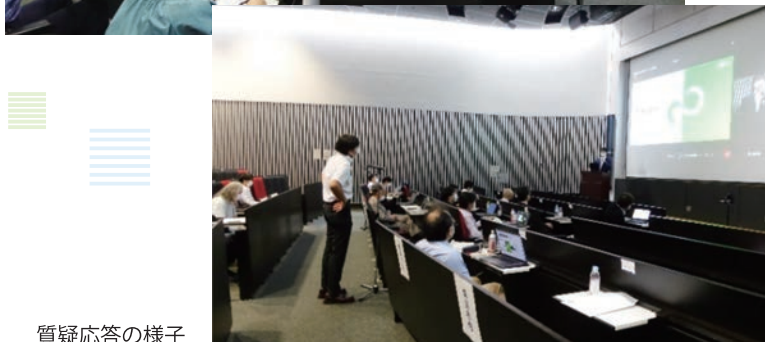
「富岳」成果創出加速プログラム 第6回HPCものづくり統合ワークショップ

令和4年9月27日(火)に、『「富岳」成果創出加速プログラム』第6回HPCものづくり統合ワークショップを、昨年度に引き続き、本センターの主催、東京大学大学院工学系研究科『「富岳」成果創出加速プログラム』『スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用』プロジェクトと東北大学大学院工学研究科『「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』プロジェクト、(国研)理化学研究所計算科学研究センター『「富岳」成果創出加速プログラム』『「富岳」が拓く Society 5.0時代のスマートデザイン』プロジェクトの共催にて開催しました。東京大学生産技術研究所コンベンションホールとWebex Eventsによるハイブリッド

形式によって開催された本ワークショップは、民間企業76社からの参加者を含めた150名(含む、現地参加24名)に参加いただき、活発な意見交換が交わされる場となり、盛会裡に終了しました。

このワークショップは、今後のものづくり分野におけるHPCの利活用の在り方を展望することを目的として開催したもので、「富岳」の時代のHPCの産業応用を展望する『「富岳」の時代のHPCの利用成果』セッションと、前半のセッションで紹介された「富岳」で得られた成果を踏まえて、その実用化について議論するとともに、ポスト「富岳」の時代のHPCの利用について展望する『「富岳」の時代の成果の実用化とポスト「富岳」の時代に向けて』セッションで構成されました。

前半の『「富岳」の時代のHPCの利用成果』セッションでは、「富岳」成果創出加速プログラムで得られた成果を中心に、三菱重工業株式会社の弓取孝明氏より航空機解析に関する、三菱重工業株式会社の柚木啓太氏より水素焚ガスタービンへの取組に関する話題を提供いただきました。ものづくり分野における「富岳」を利用した研究事例を紹介いただき、「富岳」の時代のHPCの産業応用を概観することができました。



質疑応答の様子

後半の『「富岳」の時代の成果の実用化とポスト「富岳」の時代に向けて』セッションでは、「富岳」で得られる実証研究成果に対する期待と実用化に対する課題と、ポスト「富岳」時代のハードウェアの展望、ポスト「富岳」時代のハードウェア開発への期待・要望、そして、ポスト「富岳」時代のアプリケーション開発の展望と要望について、パネルディスカッション形式で議論いただきました。このパネルディスカッションには、前半のセッションに登壇いただいた先生方に、ポスト「富岳」のハードウェアに関する調査研究を実施されている(国研)理化学研究所計算科学研究センターの近藤正章チームリーダーと、将来のアプリケーションについての検討を行ってきた(国研)宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所の高木亮治准教授らを加えた先生方に登壇いただきました。



パネルディスカッションの様子

※革新センターが現在推進している『「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』プロジェクトについては、以下をご参照ください。

<https://www.fugaku-pj.iis.u-tokyo.ac.jp/>

国際フロンティア産業メッセ2022への出展

令和4年9月1日(木)～2日(金)に、神戸国際展示場で開催された国際フロンティア産業メッセ2022に出展しました。これは、スーパーコンピュータ「富岳」をはじめとしたHPCで利用される技術の産業展開を目的として、関連機関である(公財)計算科学振興財団、(国研)理化学研究所 計算科学研究センター、(一財)高度情報科学技術研究機構の4団体が連携して出展したものです。

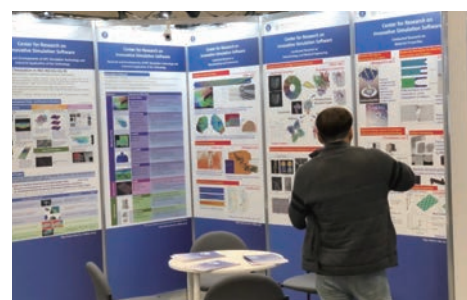
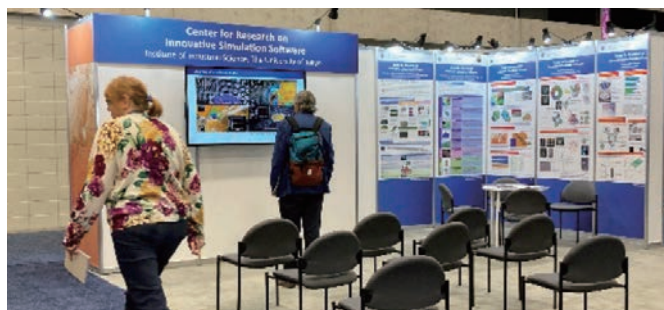
当センターからは、ポスター展示や動画放映によって、現在推進している『「富岳」成果創出加速プログラム』『「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発』プロジェクトの実施内容、アプリケーションの開発状況や、最新の成果等を紹介するとともに、これまでに進められている産業界との連携例を紹介しました。

内閣官房小型無人機等対策推進室と兵庫県が主催した第1回ドローンサミットと同時開催された、今年度の国際フロンティア産業メッセ2022には、適切な新型コロナウイルス感染症対策を行ったうえで開催された昨年度までの2年間よりも多い、427社・団体、496小間の展示があり、2日間で約12,900人の方の来場がありました。当センターの展示を多くの方に見ていただきました。



国際会議 SC22(米国ダラス)への出展

令和4年11月13日(日)～18日(金)に、スーパーコンピュータ関連の、世界で最も権威のある国際会議である、SC22(The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis)が、アメリカ合衆国テキサス州ダラスにおいて開催されるとともに、ヴァーチャル配信されました。今回のExhibitsでは、昨年度の約倍の、355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。



その中で、革新センターでは、ExhibitsにおいてExhibitorとして出展し、センターの活動の紹介をはじめ、現在代表機関として実施している『「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』プロジェクトの実施内容や最新の成果等を、ポスター展示や動画放映によって紹介しました。

Topics スーパーコンピュータランキング・Gordon Bell Prize

例年SC開催に合わせて発表される、LINPACKの連立一次方程式の処理速度によるスーパーコンピュータランキングTop500では、Oak Ridge National Laboratoryに設置のFrontier(米国、1.102 EFLOPS)が2022年6月に続いて、2期連続1位を獲得しました。(国研)理化学研究所に設置のスーパーコンピュータ「富岳」(日本、0.442 EFLOPS)は、ランキングTop500では2位でしたが、共役勾配法の処理速度による国際的なランキングHPCG(16.00 PFLOPS)と、グラフ解析の性能のランキングGraph500(102,955 GTEPS)では6期連続1位、AIの計算などで活用されている単精度や半精度演算器などの能力も加味したランキングHPL-AI(2.000 EFLOPS)では3位(1位はFrontier(米国、6.861 EFLOPS)が獲得)を獲得しています。

今年のGordon Bell Prizeは、Université Paris-SaclayのLuca Fedeli氏ら、フランス、日本、アメリカの研究機関に所属する16名のグループの「CPushing the Frontier in the Design of Laser-Based Electron Accelerators With Groundbreaking Mesh-Refined Particle-In-Cell Simulations on Exascale-Class Supercomputers」と題した研究が受賞しました。これは、Top500で上位にランクされるFrontier、「富岳」、SummitとPerlmutter上で最適化されたParticle-in-Cell法に関する研究です。また、Gordon Bell Special Prize for HPC-Based COVID-19 Researchは、Argonne National LaboratoryのMaxim Zvyagin氏ら34名のグループの「GenSLMs: Genome-scale language models reveal SARS-CoV-2 evolutionary dynamics」が受賞しました。



半場 藤弘 教授

計算機の発達により乱流の大規模計算が可能となりましたが、得られたデータから乱流現象を深く理解したり、さらに大規模な実用計算を行うには、乱流の解析・予測手法の改良が必要です。

乱流解析手法の改良 波数スペクトル空間からスケール空間へ

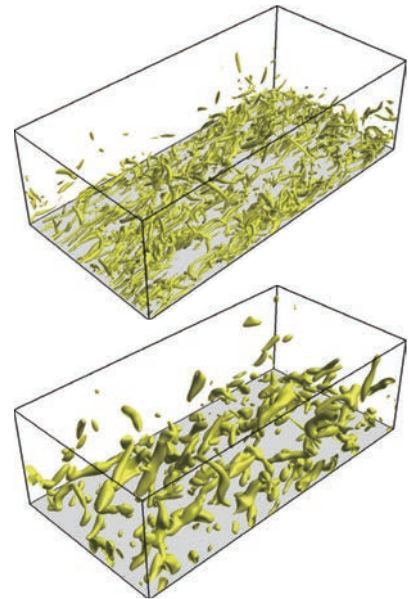
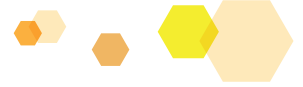
乱流は大小さまざまな渦の集まりからできており、特に固体壁の近くでは小さな渦が多く見られます。乱流現象を理解するには、さまざまなサイズの渦のエネルギーのやりとりを調べることが重要になります。速度の空間分布にフーリエ変換を施してエネルギースペクトルを求めると、スペクトルの低波数成分が大きな渦に、高波数成分が小さな渦に対応し、乱流中には低波数から高波数へのエネルギーの流れが存在することが知られています。ただしエネルギースペクトルを扱えるのは乱流が統計的に一樣な場合に限られ、現実の乱流は物体や境界の影響で非一樣なので、厳密にはスペクトルを扱えません。

本研究では、フーリエ変換を用いて波数空間で解析するかわりに、空間フィルターを用いて物理空間のまま解析することに取り組んでいます。フィルターの幅を変えることで渦の大きさすなわちスケールを区別し、スケールの空間でのエネルギー密度を新たに定式化しました。平行平板間の乱流に適用し、非一樣乱流でスケール空間でのエネルギー分解ができることを示し、スケール間のエネルギー輸送を解析し考察しました。

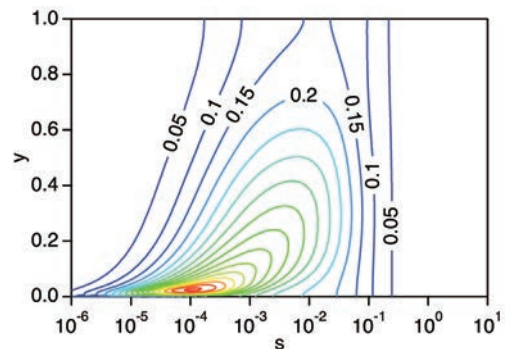
乱流予測手法の改良 局所モデルから非局所モデルへ

大気の流れや航空機まわりの流れなど大規模な乱流を予測するには、平均操作によって小さな渦をならして、大きな渦の平均速度場だけを計算します。その際に粗視化された小さな渦が平均場に与える影響を、乱流モデルを用いて取り入れる必要があります。乱流モデルとして従来から局所的なモデルが用いられてきました。通常の渦拡散モデルでは、ある点における乱流熱フラックスは、同じ点の温度勾配に比例するので、空間について局所的で、しかし大気対流混合層のように熱対流の渦が層全体に広がるような場合は、局所近似が成り立たないことが予想されます。

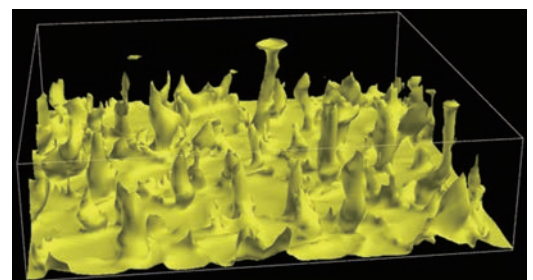
本研究では、従来の局所的な渦粘性・渦拡散モデルを、非局所的なモデルに拡張することをめざしています。たとえば乱流熱フラックスが離れた点の温度勾配にも依存するモデルです。応答関数を新たに導入し、空間・時間について非局所的な渦粘性率・渦拡散率を理論的に導出しました。それを一様等方な乱流や平行平板間の乱流に適用し、非局所渦拡散率の分布を求めてモデル化を行ないました。非局所モデルを通じて、物理機構に基づいた乱流予測のさらなる改良に取り組んでいます。



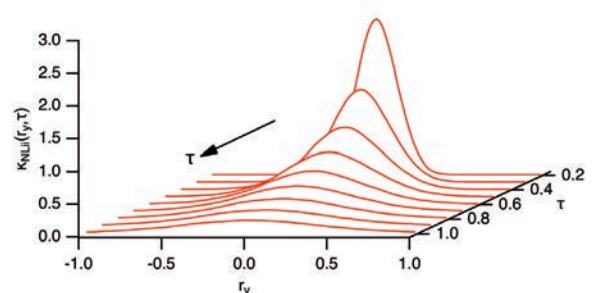
平行平板間乱流の壁面近くの渦の集まり
(上)最小渦、(下)中規模の渦



スケール空間の乱流エネルギー密度の分布



熱対流乱流の上昇ブルーム



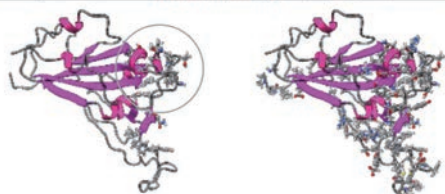
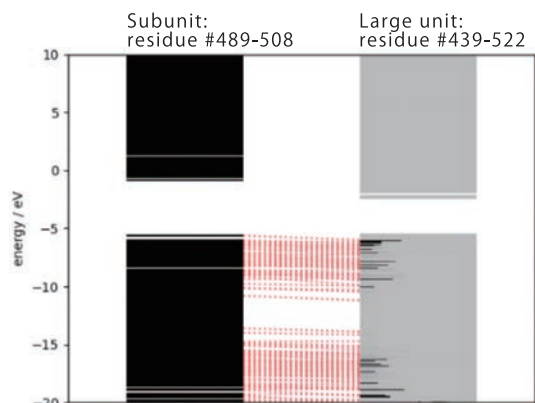
非局所渦拡散率の空間分布の時間変化



佐藤 文俊 教授



タンパク質の分子軌道計算

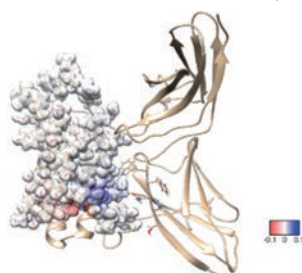


SARS-CoV-2 Spike RBDの分子軌道の解析例

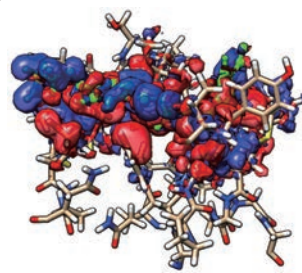
当研究室では、オリジナルプログラム ProteinDF/QCLObotを研究開発し (<https://proteindf.github.io/>)、タンパク質の(正準)分子軌道の研究を推進しています。

左図はSARS-CoV-2 Spikeタンパク質の受容体結合ドメイン(RBD)の分子軌道の解析例です。黒および灰色の横線はそれぞれサブユニットと大ユニットの分子軌道のエネルギー準位を、赤色の点線は重なりが大きい分子軌道間を、その重みを灰色の横線中の黒色線の長さで示しています。黒色線の長さはサブユニットの分子軌道の寄与を、赤点線からは混成軌道を特定することができます。このタンパク質は他のサブユニットと混成軌道を形成して、分子軌道が非局在化していました。下左図はインターフェロン $\alpha 2$ とその電荷数変化を伴わない変異体(Lys23Arg)との間の静電ポテンシャル分布の差を、下右図はPETを分解する酵素PETaseが基質と結合することで生じる電子密度の変化を描いたものです。いずれも物理量変化の影響は広く及びました。

このようにタンパク質の分子軌道計算によって、反応機構に影響を及ぼしうる分子軌道群などが観察でき、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。



インターフェロン $\alpha 2$ とLys23Arg変異体の静電ポテンシャル分布の差(右リボンは受容体)



PETaseの基質複合体形成による電子密度の変化

量子コンピュータで量子化学シミュレーション

量子コンピュータは量子力学の原理・法則を利用して計算を実行するコンピュータです。最近IBMから汎用性の高いゲート型商用量子コンピュータが登場し、つとに有名となりました。量子コンピュータが現在のコンピュータに対していずれ強みを発揮する分野として、「暗号」、「最適化」、「機械学習」、「シミュレーション」などが挙げられています。東京大学は、量子コンピューティングを実現する科学技術を日本国内において独自のかたちで集結させ、戦略的に重要な研究開発活動を強化し、産官学協力のもとに我が国全体のレベルアップと実現の加速化を図り、広く産業に貢献することを目的に「量子イノベーションイニシアティブ(QII)協議会」を創設しました。

当研究室ではQII協議会に参画し、株式会社日立製作所とともに量子コンピュータで量子化学シミュレーションを実行する方法について基礎研究を開始しました。



ゲート型商用量子コンピュータ IBM Quantum System One^{*)}

*) 出展: (左図) <https://www.ibm.com/blogs/think/jp-ja/ibm-quantum-system-one-receive-award/>
(右図) <https://cs-cz.facebook.com/IBMJapan/photos/pcb.4114027625319649/4114027465319665/?type=3&theater>

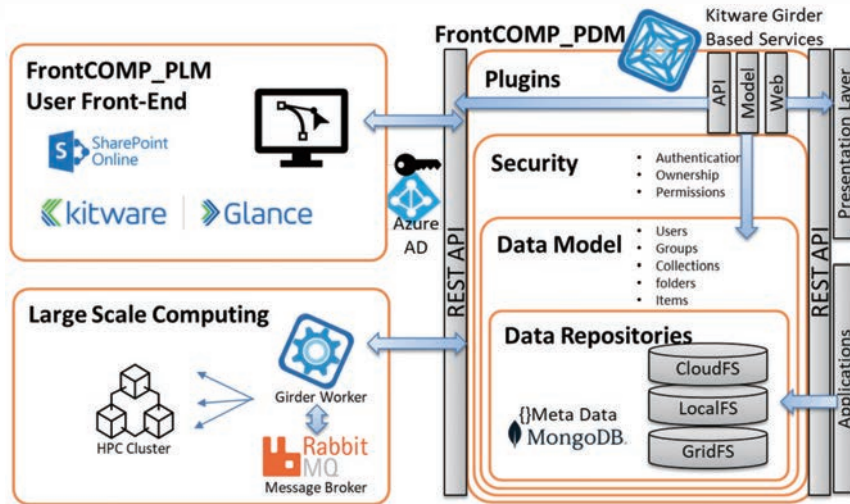
FrontCOMPシリーズをプラットフォーム上で展開

開発者 吉川 暢宏 教授

燃料電池自動車用の高圧水素タンクやロケット用の液化低温燃料タンクの開発を念頭に、炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の成形プロセスシミュレーションと強度評価シミュレーションをサポートするソフトウェアFrontCOMPシリーズを開発してきました。

- Digital Data Processor for FW Pressure Vessel
 - ・FrontCOMP_tank Axisymmetric model by continuum model
 - ・FrontCOMP_FW Single-FW meso-model
 - ・FrontCOMP_FW_multi Multi-FW meso-model
 - ・FrontCOMP_FW_shell Multi-FW meso-model by shell elements
 - ・FrontCOMP_wind_multi CAM data for Multi-FW
- Forming Simulation of CFRP
 - ・FrontCOMP_cure Thermoset CFRP
 - ・FrontCOMP_TP Thermoplastic CFRP

CFRPタンクの設計から製造と検査を経て廃棄に至るまで、一貫通貫でのソフトウェア活用を推進するため、それぞれのソフトウェアで生成されたデジタルデータを同一のプラットフォーム上で連携させることを可能にしました。機械学習による最適設計の探索とも連携させ、高性能容器を効率よく設計できる環境を整えました。



イベント案内

文部科学省「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』プロジェクト 第3回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム

開催日：令和5年3月1日(水) 10:00 - 17:00

会場：東京大学生産技術研究所コンベンションホールおよびオンライン



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/

今すぐチェック!

編集後記

令和2年度から開始した「富岳」流体予測革新プロジェクトは、この年度末に終了します。これまでの3年間の研究で得られた成果は、3月1日に開催のシンポジウムで報告させていただきます。今回もハイブリッド形式での開催を予定していますので、多くの方にぜひ会場に足をお運びいただき、今後のものづくりシミュレーションについてご議論いただきたいと思います。どうぞよろしくお願いたします。

資料請求お問い合わせ先

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