

## 将来のシミュレーション技術を議論

### — 機械学習やHPCをテーマにワークショップやセミナーを開催 —

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、令和5年4月からの第4期目において、先進学術の推進、研究成果の社会還元と人材育成および課題抽出を3つの柱に据えた活動を進めています。

その活動の一つとして、AIと融合したシミュレーション技術のシーズとニーズを探索することを目的とした「ワークショップ：力学の未来」を開催しました(下左図参照)。これは、各回材料強度、マテリアル、流体力学等に分野を絞ってシリーズ化したもので、それぞれの分野での、機械学習をキーワードにした取り組みを、その技術を利活用する可能性のある技術者を対象に紹介いただく形で開催しています。材料強度、マテリアル、流体力学の分野の回では、予想を上回って参加いただいた多くの方によって、活発に議論いただき、その取り組みに対して高い関心があることがわかる機会になりました。今後も、そのほかの分野を対象として開催することを予定しておりますので、ぜひ多くの皆様に参加いただければと思います。

大規模シミュレーションと機械学習技術の基礎を習得した人的資源の拡充のための活動として、セミナー「水素社会の実現に不可欠な高圧水素タンク開発にイノベーションをもたらす機械学習技術」と実践的ものづくりシミュレーショントレーニングコース「機械学習を利用した高圧水素容器の最適設計」を開催しました。これらは、令和3年4月から推進している(国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)プロジェクト

「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」で得た成果の紹介と普及を一つの目的として開催したもので、多くの方に参加いただきました。

これらに加え、HPC(High Performance Computing)技術に関して議論するイベントとして、「HPCものづくり統合ワークショップ」を開催しました(下右図参照)。このイベントでは、「富岳」時代をはじめポスト「富岳」時代のスーパーコンピュータにおけるものづくりシミュレーション技術について議論いただきました。今回で第7回を数えるこのワークショップにも多くの方に参加いただき、ありがとうございました。関連して、文部科学省プロジェクト「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」の第1回HPC産業応用拡大プロジェクトシンポジウムを、令和6年3月21日に開催することとしています。このシンポジウムでは、最新の成果を報告し、その成果を利用したものづくり技術について議論することを考えていますので、多くの方に参加いただきたく思います。

以上のように、プロジェクトで得た成果の発信をはじめ、様々な活動を行ってまいりました。当日の様子は本文に紹介しておりますので、そちらを参照いただくと幸いです。そこで議論した内容を踏まえて、先進学術の推進を実施していくことを考えております。引き続き、CISSの活動に対し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。

センター長・教授 吉川暢宏



ワークショップ：力学の未来の様子

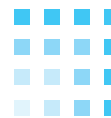


第7回HPCものづくり統合ワークショップの様子

## II ワークショップ：力学の未来

流体力学、土木・建築工学、材料強度、マテリアル等の各分野で取り組まれている力学問題のモデリングおよびシミュレーションを俯瞰し、機械学習をキーワードにこれからの力学シミュレーションの在り方を議論するワークショップ：力学の未来をシリーズ形式で開催しました。このワークショップは、令和5年3月30日に開催したシンポジウム：力学の未来での議論を発展させるために企画したもので、力学モデルの高度化や力学問題の解法に関する方法論に関して新たな展開に資することを目的としています。

令和5年10月4日(水)に開催の第1回ワークショップでは、材料強度分野に焦点を当て、産業技術短期大学森英喜准教授に「材料力学特性解析にむけた機械学習ポテンシャルの開発と適用」と題して、そして、東京大学生産技術研究所梅野宜崇副センター長・教授に「ナノ・マイクロ疲労問題に対するマルチスケールモデリングの取組み」と題して講演いただきました。食堂コマニを利用して、Webex Webinarsによるハイブリッド形式によって開催されたこのワークショップは、民間企業56社からの参加者を含めた73名(含む、現地参加14名)に参加いただき、和やかな雰囲気の中で、シミュレーションと機械学習が共存した計算手法の在り方に関して活発に意見交換される場となり、盛会裡に終了しました。



令和5年11月8日(水)に開催の第2回ワークショップでは、マテリアル分野に関して、特に「生成AI」と「知財」に焦点を当て、東京工業大学物質理工学院畠山敬助教に「材料研究を加速するための生成AI・大規模言語モデルの活用検討」と題して、そして、東京大学生産技術研究所菅野智子教授に「AI関連発明の現状」と題して講演いただきました。生産技術研究所中セミナー室1 (An401・402)、および、Webex Webinarsによるハイブリッド形式によって開催されたこのワークショップは、民間企業71社からの参加者を含めた98名(含む、現地参加15名)に参加いただき、生成AIを活用した研究事例やAI関連発明の事例が紹介され、それらを踏まえた意見交換が活発にされ、盛会裡に終了しました。



令和5年12月21日(木)に開催の第3回ワークショップでは、流体力学分野に焦点を当て、東京大学生産技術研究所長谷川洋介教授に「流体力学はどこに向かうのか」と題して、そして、東京理科大学理学部第一部犬伏正信准教授に「データ駆動型乱流研究のこれから ～力学・安定性の観点から～」と題して講演いただきました。そして、これらを踏まえて、将来の機械学習の利用に関して議論しました。生産技術研究所中セミナー室1 (An401・402)、および、Webex Webinarsによるハイブリッド形式によって開催されたこのワークショップは、民間企業100社からの参加者を含めた148名(含む、現地参加15名)の多くの方に参加いただき、盛会裡に終了しました。



### イベント案内

#### 第4回ワークショップ：力学の未来(量子化学分野：量子コンピューティング)

開催日：令和6年3月5日(火) 15:00 - 17:00

会場：東京大学生産技術研究所中セミナー室1 (An401・402) およびWebex Webinars



## 第7回HPCものづくり統合ワークショップ

第7回HPCものづくり統合ワークショップを令和5年12月5日(火)に東京大学生産技術研究所大会議室とWebex Webinarsによるハイブリッド形式によって開催しました。本ワークショップは昨年度に引き続き、革新的シミュレーション研究センターが主催し、ものづくり分野との関連が深い、「富岳」成果創出加速プログラムの3つの課題に共催していただく形で開催しましたが、民間企業71社からの参加者を含めた132名(現地参加26名)の方々にご参加いただき、活発な議論が行われ、盛会裡に終了しました。

このワークショップは、以下に記載する3つのセッションにより構成しました。最初の2つのセッションでは、「富岳」を利用してこれまでに得られた最新の成果をご紹介いただき、現状のHPCの利用状況に関する情報を共有しました。さらに、最後のセッションでは最新のハードウェアの動向やポスト「富岳」に向けた検討状況などをご紹介いただくとともに、ソフトウェアの研究開発状況を紹介いただき、ポスト「富岳」時代を見据えた、ものづくりシミュレーション技術について展望しました。以下、それぞれのセッションについて具体的に紹介します。



『富岳』成果創出加速プログラム課題の最新状況セッションでは、ものづくり分野との関連が深い「富岳」成果創出加速プログラムの課題などの最新の状況を、それぞれの課題責任者である東京大学大学院工学系研究科吉村忍教授、理化学研究所計算科学研究センター坪倉誠チームリーダー、東北大学大学院工学研究科河合宗司教授、ならびに東京大学生産技術研究所加藤千幸教授よりご報告いただき、シミュレーション技術の研究開発状況に関する情報を共有しました。

次に、「富岳」等の利用成果セッションでは、「富岳」の一般課題(産業利用課題を含む)などによって得られた成果を、住友ゴム工業(株) 研究開発本部 研究第一部長角田昌也氏、みずほリサーチ&テクノロジーズ(株) 課長山出吉伸氏、九州大学大学院渡邊裕章教授と阪神高速道路(株) 杉山裕樹氏にご報告いただき、現状のHPCの利用状況について議論しました。



最後の「ポスト『富岳』時代を見据えたHPC技術とその産業応用への期待」セッションでは、NVIDIA Corporation, Principal Engineer, Ian Karin氏およびエヌビディア合同会社永田聡美氏、理化学研究所計算科学研究センター佐野健太郎チームリーダー、理化学研究所計算科学研究センター技師中村宜文氏から、最新のハードウェアの動向やポスト「富岳」に関する検討状況、基盤ソフトウェアの検討状況などを紹介していただきました。また、東京大学情報基盤センター下川辺隆史准教授と明治大学理工学部亀谷幸憲専任講師には現在取り組まれているアプリケーションソフトウェアの研究開発状況をご紹介いただき、ポスト「富岳」時代のスーパーコンピュータを利用したものづくりシミュレーション技術について展望しました。

※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「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」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/2023/>

### イベント案内

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」  
**第1回HPC産業応用拡大プロジェクトシンポジウム**

開催日：令和6年3月21日(木) 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Webex Webinars



加藤 千幸 教授



加藤千幸研究室では風洞実験や数値計算を利用して、流れから発生する音の研究を実施しています。本稿ではその一例を紹介します。

ファンなどの空気機械に乱れが流入すると大きな音が発生することが知られていましたが、その原理的なメカニズムは不明でした。この現象を解明するために、低騒音風洞試験装置の上流に乱れを発生する特殊な装置を設置し、流体機械の基本的な要素である翼から発生する音や翼のまわりの流れを詳細に計測しました(写真1)。その結果、乱れが流入すると翼の前縁近傍の圧力の変動が大きくなり、大きな音が発生することがわかりましたが<sup>1)</sup>(図1)、その原理的なメカニズムは風洞実験だけでは解明できませんでした。そこで、翼の上流に乱れを発生させるための円柱を設置した数値計算を実施しました(図2左)。実験では実現できないような条件を設定することができるという数値計算のメリットを活かして、翼のまわりに境界層が発達しない条件の計算も実施しました。その結果、流入した乱れ(渦)が翼前縁近傍の負圧面の主流の加速によって引き延ばされ、大きな音が発生することがわかりました<sup>2)</sup>(図2右)。

この例以外にも、本研究室では数値計算を利用して、さまざまな現象の解明や製品の性能向上を目指した研究を実施しています。

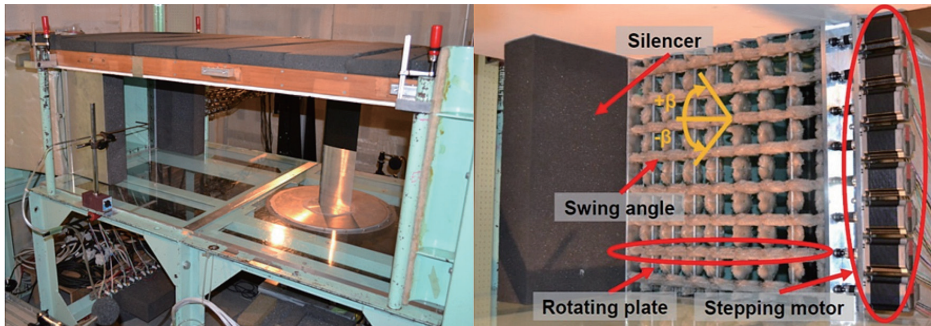


写真1 乱れ発生装置を設置した、翼まわりの流れから発生する音の風洞実験

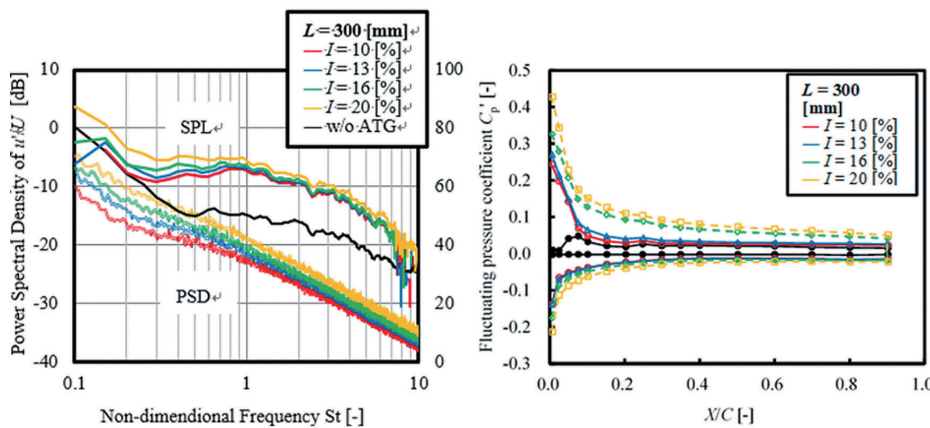


図1 発生する音(左)と翼の表面の圧力変動(右)の計測結果

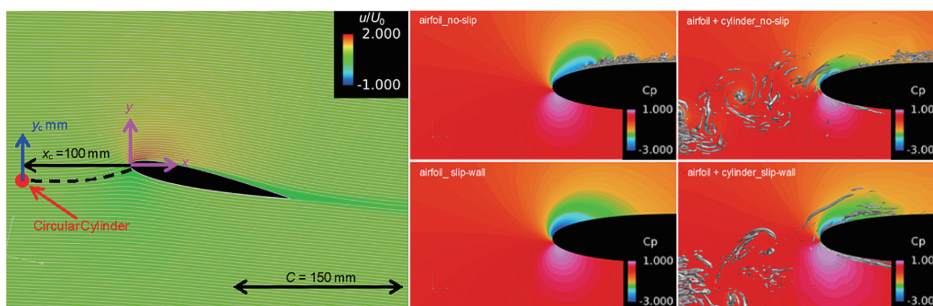
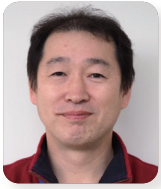


図2 翼の上流に円柱を設置した流れと音の数値シミュレーション

- 1) 乱れを含む流れの中に置かれた翼から発生する空力音に関する研究(第1報:翼が一様な乱れの影響を受ける場合)、小林 典彰、鈴木 康方、加藤 千幸、日本機械学会論文集、86巻881号(2020年)
- 2) 乱れを含む流れの中に置かれた翼から発生する空力音に関する研究(第2報:翼が円柱後流の影響を受ける場合)、小林 典彰、鈴木 康方、加藤 千幸、日本機械学会論文集、86巻885号(2020年)





小野 謙二 客員教授



## スケーラブルなテンソルトレイン分解の研究

様々な社会的課題を解決するアプローチとしてデジタルツインの方法論が提案され、それに伴いIoT機器による生成データの増加、大規模シミュレーションの活用、データ分析など、巨大な多次元配列データを処理する必要性が高まっています。計算機を構成するCPU、メモリ、ネットワークなどのうち外部記憶装置であるハードディスクは大容量ですが、データアクセス速度が最も遅い上、その構造上並列化が難しい点で大規模データを処理する上でボトルネックになります。そこで、データ入出力のボトルネックを緩和するためデータ圧縮の技法が利用されます。しかし、データを復元するプロセスでは、復元時に圧縮前のデータを保持しておくのと同程度のメモリ空間を消費するため、省メモリなプログラミングが要求されるなどの課題が生じます。

このような背景をもとに、データを圧縮したまま演算できるテンソルトレイン分解 (Tensor-Train Decomposition, TTD) [1] が提案されました。TTDは、図1のように任意のd階テンソル(d次元配列)データをd個の3階コアテンソル(A[\*][\*][\*]の配列データ)の形に分解します。テンソルをd個のコアテンソルの形で保持している状態をTT-formatと呼びます。この過程では図2のように多次元配列を一旦2次元配列の形に変形し(reshape)、得られた行列を特異値分解(SVD)により圧縮します。このとき、指定の閾値を満たすように特異値の大きなものからいくつかを選び、少ない特異値モードだけを使いデータを表現することによってデータ圧縮を行います。この処理を多段で繰り返す処理(TT-SVD)により、TT-formatを得ます。このアルゴリズムは効率的な固有値計算法が利用できますが、それらは逐次処理であるため並列計算機のメリットを活かせません。

そこで、我々の研究グループでは並列化が可能なParallel TTD(PTTD)を提案しました。PTTDによりnプロセスで計算する場合、図3のように、まず元のデータをn分割します。各プロセスは独立にTT-SVDを実行した後、後段の処理のために計算したデータを隣接するノード間で集約し、2回目のTT-SVD処理を行います。このとき、データの送受信処理が発生しますが、処理回数が進む毎に転送データ量は減少していきますので、並列化に与える影響は小さくなります。TT-SVDの計算時間はデータ転送時間に比べて多いため、並列化効率を高く保つことができ、大並列向きのアルゴリズムとなります。図4には128×16×16×16×16×128(約10億要素)の特性の異なるデータをPTTDで圧縮した場合のスケーラビリティを示しています。いずれも、8,192コアまで優れたスケーラビリティを示しています。

[1] S. Xie, A. Miura and K. Ono, "Error-bounded Scalable Parallel Tensor Train Decomposition," 2023 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW), St. Petersburg, FL, USA, 2023, pp. 345-353, doi: 10.1109/IPDPSW59300.2023.00064.

$$A(2,1,2,3,1) = G_1(2) \times G_2(1) \times G_3(2) \times G_4(3) \times G_5(1)$$

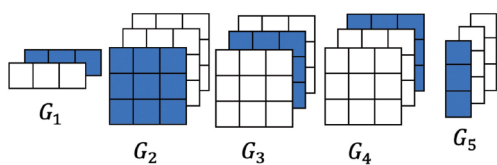


図1 5階のテンソル  $A \in \mathbb{R}^{2 \times 3 \times 3 \times 3 \times 3}$  の任意の要素はTTコアの対応するスライス(行列)の積により表現できる。この図では  $A(2,1,2,3,1)$  を例示している。

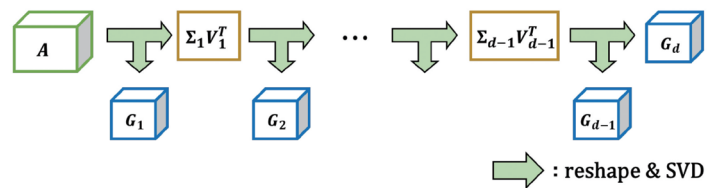


図2 TT-SVDの処理。左特異ベクトル  $U_i$  の上位モードが圧縮されTTコア ( $G_i$ ) を形成し、特異値と右特異ベクトルの積  $\Sigma_i V_i^T$  が次段の圧縮対象となる。これを多段で処理する。

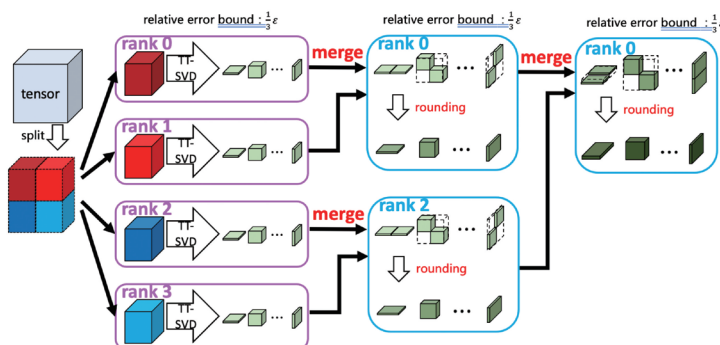


図3 領域分割型のParallel Tensor-Train Decomposition

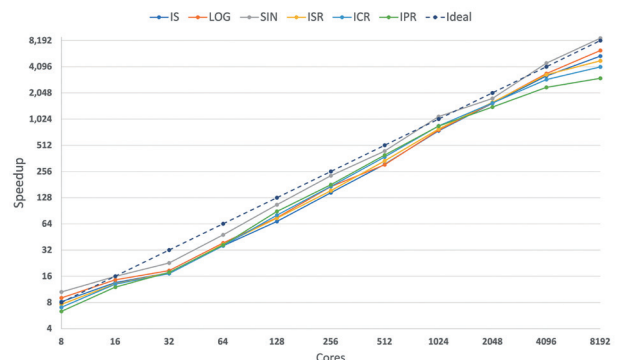


図4 強スケーラブル時の性能

## セミナー「水素社会の実現に不可欠な 高圧水素タンク開発にイノベーションを もたらす機械学習技術」

令和5年7月21日(金)に、水素社会の実現に不可欠な高圧水素容器開発と、開発にイノベーションをもたらす機械学習技術に焦点を当てたセミナーを開催しました。本セミナーでは、吉川暢宏センター長・教授、および、横山卓矢(株)SUPWAT代表取締役CEOより、水素社会実現に向けた現状などについて紹介いただき、それを踏まえて、機械設計にイノベーションをもたらす機械学習技術への期待について議論しました。75名の方に参加いただき、盛会裏に終了しました。



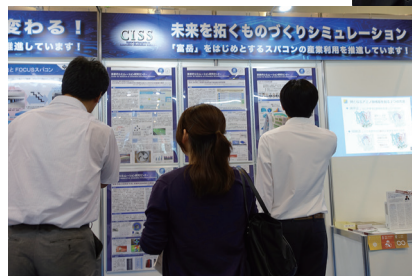
## 実践的ものづくりシミュレーション トレーニングコース「機械学習を利用した 高圧水素容器の最適設計」

令和5年10月3日(火)と4日(水)に、カーボンニュートラル実現の基幹機器であり、現在開発が進められている燃料電池自動車用高圧水素容器の、機械学習技術を用いた最適設計に関して、研究開発の最先端を体験するトレーニングコースを実施しました。1日目に機械学習を用いた最適設計の基礎理論等を学ぶ機械学習基礎講座を行い、2日目にCFRP製高圧水素容器に関する最適設計の実習を行いました。8名の方に参加いただき、機械学習を用いた最適設計計算を体験いただきました。



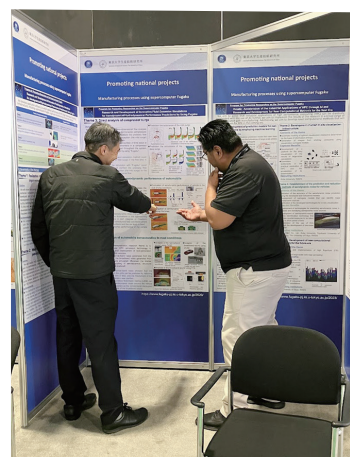
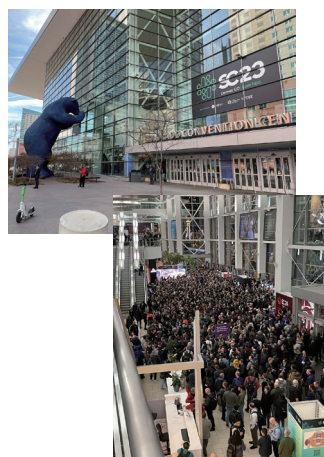
## 国際フロンティア産業メッセ2023


令和5年9月7日(木)～8日(金)に開催された国際フロンティア産業メッセ2023に出展しました。革新的シミュレーション研究センターからは、ポスター展示や動画放映によって、これまでの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、産業界との連携例を紹介しました。国際フロンティア産業メッセ2023には、441社・団体、528小間の展示があり、合計約13,600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いただきました。



## 国際会議SC23

令和5年11月13日(月)～16日(木)に開催された、スパコン関連の、世界で最も権威のある国際会議であるSC23のExhibitsにおいてExhibitorとして出展しました。今年度のExhibitsでは、438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、革新的シミュレーション研究センターの活動の紹介をはじめ、現在実施しているプロジェクトの概要や最新の成果等を、ポスター展示や動画放映によって紹介しました。





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

計 算 工 学 ナ ン ン

Knowledge Base 解析事例データベース

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

今すぐチェック!

### 編集後記

CISSでは、今年度の活動として、文部科学省プロジェクトに関連したワークショップに加え、今後の力学シミュレーションの在り方を議論するワークショップ:力学の未来を開催しました。このワークショップは、今後も、分野をかえて開催することを企画しています。ぜひ多くの方に参加いただき、これからの力学シミュレーションについて議論いただきたいと思いますので、引き続きどうぞよろしく願いたします。

### 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