

将来のスーパーコンピュータに対応した シミュレーション技術の開発を目指して

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)が推進している文部科学省「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」は、プロジェクト開始から1年が経過しました。研究開発は順調に進んでおり、既に様々な成果が創出されています。令和6年3月21日には、その最新の成果を報告することを目的に、第1回HPC産業応用拡大プロジェクトシンポジウムを開催しました。詳細は本文を参照いただけます。多くの方に参加いただき、最新成果と今後の展開に関する講演、そして「AIを利用したものづくりと今後の展開」と題したパネルディスカッションでの議論をおこして、将来のものづくりシミュレーションについて展望することができました。

第1回HPC産業応用拡大プロジェクトシンポジウムでも議論いただきましたが、現在、最先端のスーパーコンピュータにはGPU等の演算加速機構を取り入れられることが主流となっており、それへの対応が必須になっています。また、スーパーコンピュータの年あたりの性能向上速度が鈍化していることを踏まえると、将来のシミュレーションには、AIを活用するなどして効率化を図る技術を導入することの必要性も高まっている状況にあると認識しています。

文部科学省では、次世代計算基盤としての、「富岳」の次のフラッグシップシステム(ポスト「富岳」)を、遅くとも2030年頃に運用を開始することを目指し、倍精度浮動小数点演算等の

実効性能として5～10倍以上の計算能力、および、AIの学習等に必要となる低精度での性能では運用開始時点で世界最高水準の計算能力を実現するフラッグシップシステムの開発・整備に向けた検討が進められています。その内容を注視しながら、第1回HPC産業応用拡大シンポジウムで議論いただいた内容を踏まえて、シミュレーション技術の開発をすすめていく必要があると考えています。

このような流れの中で、CISSとしても、今後のシミュレーションの在り方について検討すべく、令和5年度より「ワークショップ：力学の未来」を開催しています。令和5年12月に開催した第3回まではAIと融合したシミュレーション技術に焦点をあてましたが、令和6年3月5日に開催した第4回では量子コンピューティングを題材として、量子化学分野の2名の講演者を迎えて開催しました。当日の様子は本文に報告させていただきましたが、多くの方に参加いただき、量子コンピューティングにも多くの関心が集まっていることを感じることができました。

今後の発展に期待が高まっている量子コンピュータは、現在実用化に向けて検討が進められ、上述のポスト「富岳」よりも先の時代に実用に供されることになるものと考えていますが、CISSでも、量子コンピュータを含む、様々な環境で実施可能なシミュレーション技術を対象として、基礎的研究から実証研究までを、広範な分野に対して進めてまいりたいと考えています。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



第1回HPC産業応用拡大プロジェクトシンポジウムの様子
(左: 加藤千幸教授の講演、右: パネルディスカッション)



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)の総合討論の様子

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

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムの一つの課題である、「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」(以下、本プロジェクト)では、令和6年3月21日に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によるハイブリッド形式にて、第1回HPC産業応用拡大プロジェクトシンポジウム(主催：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、共催：東京大学生産技術研究所)を開催しました。

本プロジェクトでは、「富岳」の実証研究の成果をより幅広い産業分野に展開するための、HPCシミュレーションに必要な計算資源の大幅な削減と革新的なシミュレーション技術を開発することを目的としています。これを実現するために、産業界におけるHPCの実用化を加速するための「基盤研究」、基盤研究の産業上の効果を検証するための、カーボンニュートラル時代のものづくりを代表した「実証研究」、および、実証された基盤研究の成果を幅広い産業分野に展開するための「次世代計算基盤の構築」に係る6つの研究テーマを設定して、研究開発を推進しています。



質疑応答の様子



長谷川洋介教授と坪倉誠教授／チームリーダーの講演の様子

今回のシンポジウムでは、本プロジェクトの最新の成果を報告し、それを踏まえて、HPCとAIを活用したものづくりシミュレーションや、次世代の計算基盤技術の、今後のものづくりへの貢献について議論しました。また、これらの講演を踏まえて、シンポジウムの最後に、産業界の方を登壇者に迎えた、「AIを利用したものづくりと今後の展開」と題したパネルディスカッションを行いました。

当日は民間企業99社からの参加者を含め、251名(含、現地参加46名)の方々に参加いただき、盛会裡に終了することができました。

本プロジェクトのHP→ <http://www.fugaku-pj.iis.u-tokyo.ac.jp/2023/>

パネルディスカッション

シンポジウムの最後に、産業界の方々を含む、本プロジェクトの実施者による、「AIを利用したものづくりと今後の展開」と題したパネルディスカッションを開催しました。

パネリストには、東京大学生産技術研究所の加藤千幸教授、神戸大学大学院システム情報学研究科の坂本尚久准教授、一般財団法人日本造船技術センター 課長の西川達雄氏、豊橋技術科学大学大学院工学研究科の飯田明由教授、株式会社本田技術研究所先進技術研究所 アシスタントチーフエンジニアの宮澤真史氏を迎え、東京大学生産技術研究所の長谷川洋介教授がモデレータを務めて、本プロジェクト等の成果を活用する、AIを利用したものづくりとその今後を展望するための意見交換を行いました。

HPCを利用した実証研究成果の実用化に対する課題やAIを利用したものづくりシミュレーション技術の研究開発の現状などを話題として、会場も交えての意見交換が行われました。今後の計算資源や必要となる計算コストを踏まえた、AIを利用した実証研究成果の実用化、大規模・大量データの利活用法とそのための課題等についてご意見が寄せられ、今後の、HPCとAIを利用したものづくりシミュレーションを展望することができました。パネルディスカッションで明確になった課題を踏まえて、本プロジェクトの研究開発やその成果の普及活動を実施していきたいと考えています。



パネルディスカッションの様子

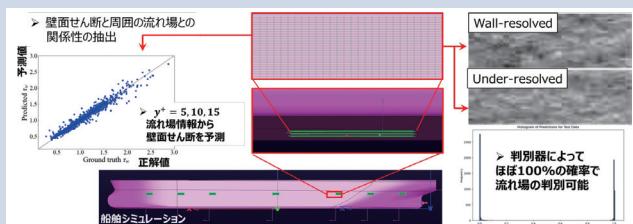
■ 基盤技術の研究開発セッション ■

このセッションでは、産業界におけるHPCの実用化を加速するための2つの研究テーマに関して、各研究テーマの進捗状況やこれまでに得られた成果、その成果に対する産業界の期待などを紹介いただきました。

研究テーマ①:

AIを活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発

本研究テーマでは、計算コストを飛躍的に軽減できる壁面挙動予測モデルの開発や、設計空間を短時間に探索できる高精度なサロゲートモデルを構築する研究を実施しています。シンポジウムでは、三菱重工業(株)総合研究所 主席研究員の飯田耕一郎氏に得られる成果に対する期待を、東京大学生産技術研究所の長谷川洋介教授に最新の成果を紹介いただきました。

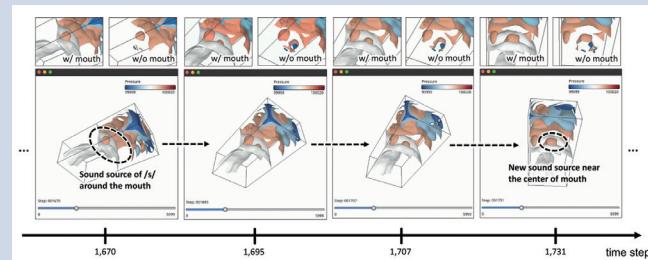


壁乱流予測モデルの開発

研究テーマ②:

スマート in-situ 可視化基盤の構築

本研究テーマでは、スマート in-situ 可視化基盤の構築に関する研究開発を実施しています。シンポジウムでは、神戸大学大学院システム情報学研究科の坂本尚久准教授に最新の成果を、富士通(株)先端技術開発本部先端ソフト実証部部長の田部井亮氏に得られる成果に対する期待を紹介いただきました。



音源位置と推測される口元付近の圧力変動の様子を自動撮影

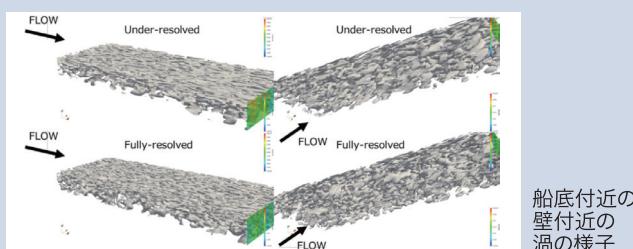
■ 基盤技術を活用した実証研究セッション ■

このセッションでは、基盤研究の産業上の効果を検証するための3つの研究テーマと、実証された基盤研究の成果を幅広い産業分野に展開するための研究テーマに関して、これまでに得られた成果およびその成果に対する期待を紹介いただきました。

研究テーマ③:

実船の推進性能の予測

本研究テーマでは、研究テーマ①で開発する壁面挙動予測モデルを活用して、模型試験スケールの流場と模型船の推進性能を予測するための研究開発を実施しています。シンポジウムでは、(一財)日本造船技術センター技術開発部 課長の西川達雄氏に最新の成果を、(株)MTI シミュレーションチーム ユニット長のバダロッティ ティモテオ氏に得られる成果に対する期待を紹介いただきました。

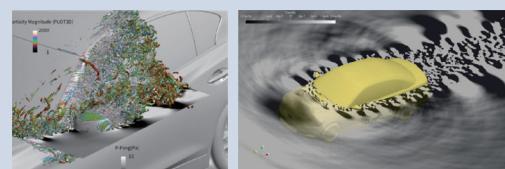


船底付近の壁付近の渦の様子

研究テーマ④:

自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立

本研究テーマでは、研究テーマ①および研究テーマ②で開発する研究成果を活用して、車両まわりの主要な空力音源を高精度に特定する技術を研究開発しています。シンポジウムでは、まず、豊橋技術科学大学大学院工学研究科の飯田明由教授と神戸大学大学院システム情報学研究科／(国研)理化学研究所計算科学研究センターの坪倉誠教授／チームリーダーに最新の成果を、日産自動車(株)カスタマーパフォーマンス＆第二車両実験部 主担の川俣英之氏に、開発される複雑現象統合シミュレーションフレームワークCUBEを用いた技術に対する期待を紹介いただきました。

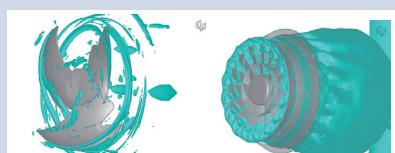


CUBEを用いて得られた、変動風再現下における、音源近傍の流れ構造(左図)、および、格子ボルツマン法(FFX)を用いた、実車を対象とした計算例(右図)

研究テーマ⑤:

ヒートポンプ用ファンの性能向上

本研究テーマでは、研究テーマ①で開発するサロゲートモデルを活用して、従来性能を大幅に上回るプロペラファンを設計するための研究開発を実施しています。シンポジウムでは、富士電機(株)技術開発本部デジタルイノベーション研究所 主席の金子公寿氏に連携機関である(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」における活動を紹介いただき、続けて、日本大学理工学部の鈴木康方教授に最新の成果を紹介いただきました。

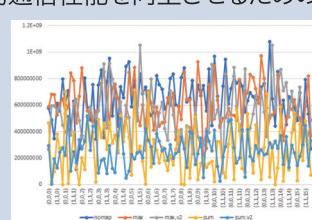


室外機プロペラファン(左)と改良ファン(右)の内部流れの流動予測

研究テーマ⑥:

次世代計算基盤の構築

本研究テーマでは、HPCアプリケーションを、GPGPUに移植し、HPCシミュレーションを幅広い産業分野に展開するための研究開発、「富岳」の実効通信性能を向上させるための基盤研究等を実施しています。シンポジウムでは、東京大学生産技術研究所の加藤千幸教授と(国研)理化学研究所計算科学研究センター運用技術部門技術黒田明義氏に得られた最新の成果を紹介いただきました。



FrontFlow/blueの「富岳」上のランクマップの最適化



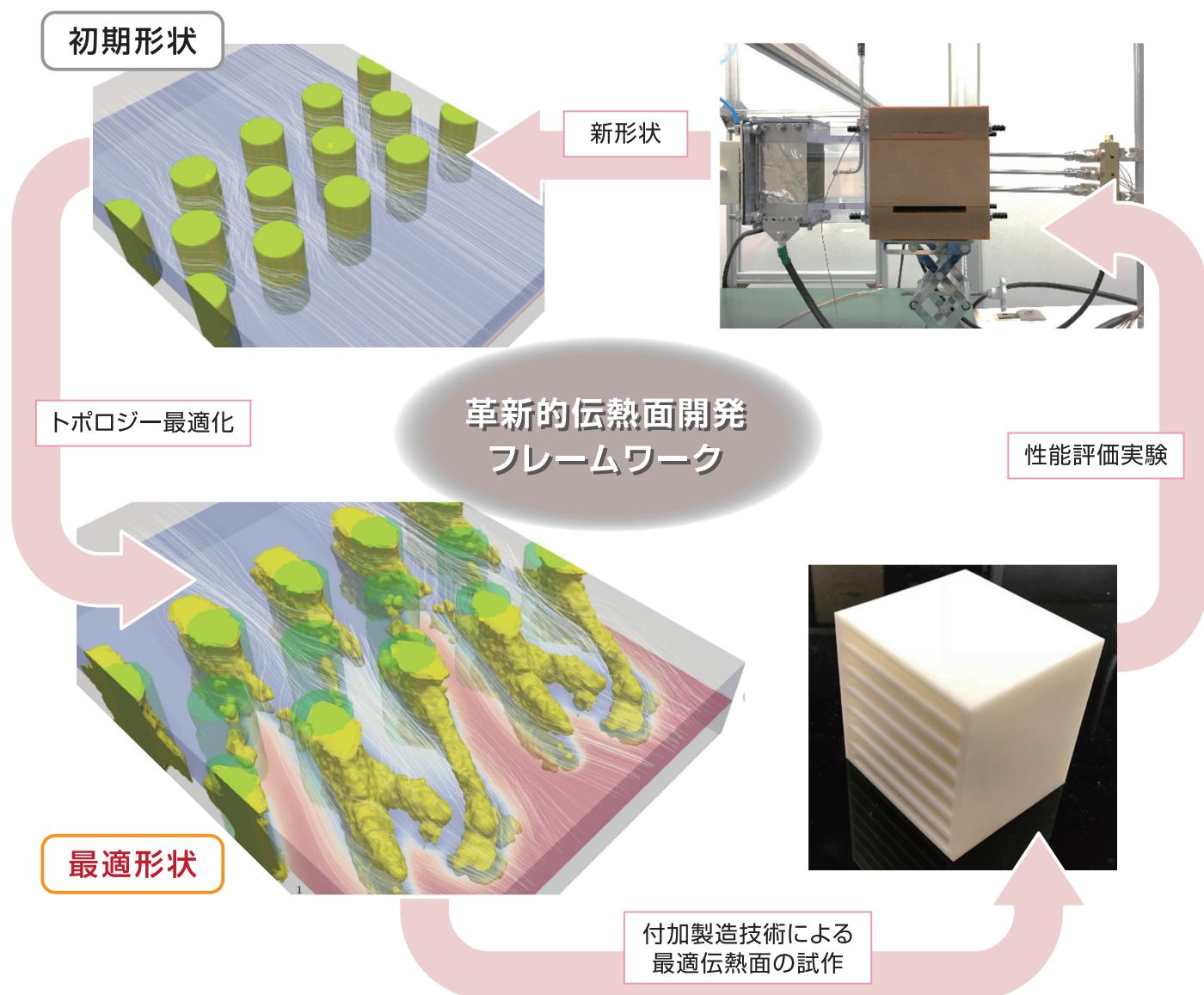
長谷川 洋介 教授

当研究室では、2024年4月現在、7名の特任研究員、12名の博士学生や短期来訪者を含めて、40名程度のメンバーが所属し、シミュレーション技術、計測技術に加えて、機械学習を始めとする最適化技術を組み合わせることによって、熱流体工学における様々な最適化問題に取り組んでいます。研究対象は、エネルギー、バイオ医療、環境予測、製造プロセス等、多岐に渡りますが、その中で以下ではエネルギーに関する研究テーマを紹介します。

伝熱面のトポロジー最適化に関する研究

カーボンニュートラル社会の実現のためには、熱の有効利用に関する基盤技術の一層の発展が必要とされています。多くの工学機器では、熱は流体運動に伴い輸送されるため、熱輸送制御のための伝熱面の形状／トポロジー最適化が注目されています。

当研究室では、最適化数理や機械学習を用いて伝熱面の形状最適化アルゴリズムを構築し、熱伝導、対流熱伝達、ふく射伝熱を考慮した最適伝熱面の提案、付加製造技術による最適伝熱面の試作、その性能実証までを一気通貫で行うフレームワークを構築し、産業界との密な連携を通じて、現実の工学機器への応用を展開しています。





大岡 龍三 教授

空調設備管理の知能化の推進にあたり、従来の方程式を解く数値流体解析(CFD)より大幅に計算時間を短縮できる室内気流環境予測手法が必要です。近年、人工ニューラルネットワーク(ANN)は、少量のCFDデータを学習して、大量の空調条件などに変更したケースを高速に計算できるため、業界に注目されています。しかし、ANNは物理現象を理解せずにデータを模倣するのみであり、予測結果と物理現象との乖離が懸念されています。

物理情報ニューラルネットワークによる室内気流非定常予測

従来のANNの損失関数に方程式の残差を加える、物理情報ニューラルネットワーク(PINN)はANNに物理知識を組り込む手法の一つと考えられます(図1)。そこで、本研究はPINNを応用し、室内非定常流れ場に関する問題を検討しました。図2に示す空間を対象として、まずCFDを用いて、気流が空間の左上から吹き出した瞬間から気流が安定するまでの速度場の非定常解析を行いました。続いて、非定常無次元時間 $t/t_0 = 122$ までのCFDデータを教師データとして、ANNとPINNを訓練しました。訓練されたANNとPINNによる、予測した全時間帯の結果を比較しました。図3に示すように、ANNとPINNは両者とも予測時間点が教師時間点から離れながら精度が低下していきますが、PINNの誤差は全体的にANNより小さくなります。また、図4に速度マグニチュードコンター、図5に気流が安定した後の速度ベクトルを示しています。気流が安定した時に、PINNは渦の構造を保ちます。しかし、ANNの結果は、空間上部の気流と下部の逆流が乖離している様子が見えます。この事例から、室内気流予測では、PINNはANNより気流の物理合理性が高いと考えられます。本研究は関東学院大学 魏誠浩助教(当時東京大学大学院)の博士論文の一部であることを記します。

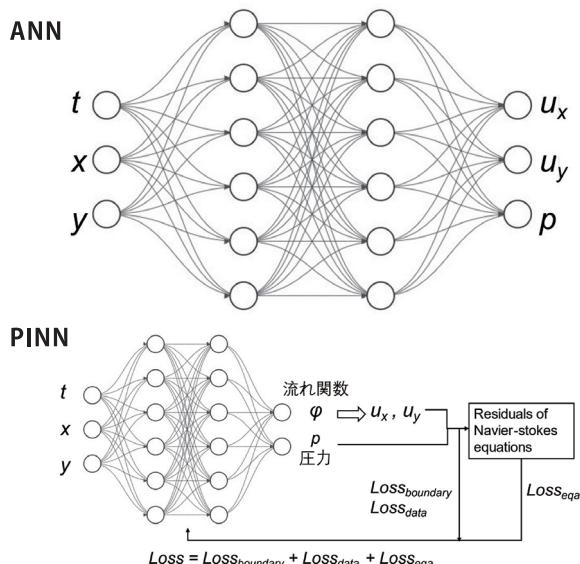


図1 ANNとPINNの構造

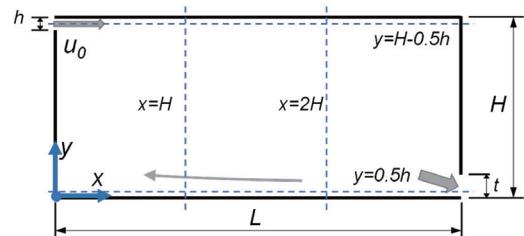


図2 対象空間

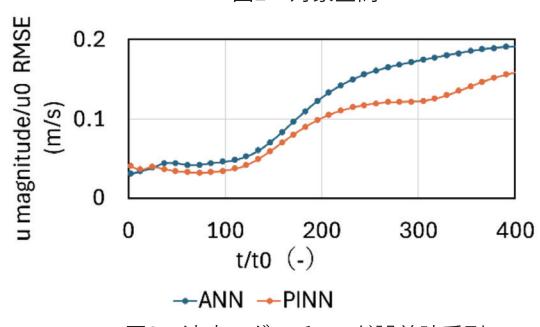


図3 速度マグニチュード誤差時系列

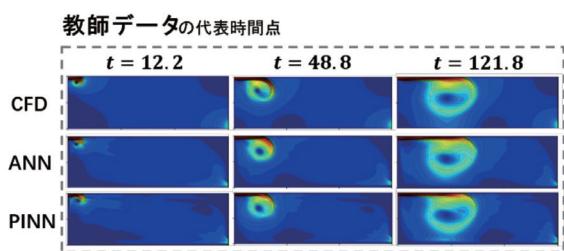


図4 教師時間点とテスト時間点におけるANNとPINNの結果の比較(速度マグニチュード)

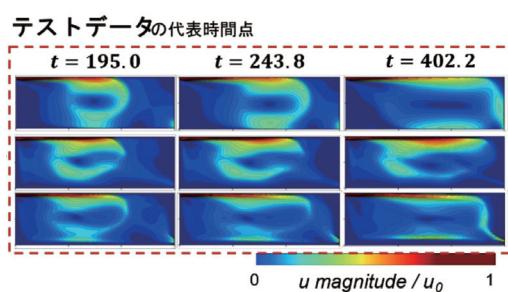
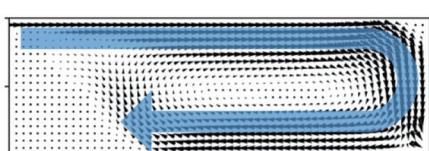
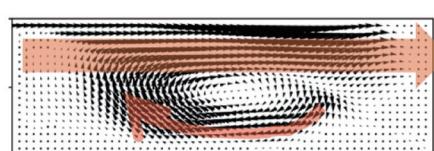


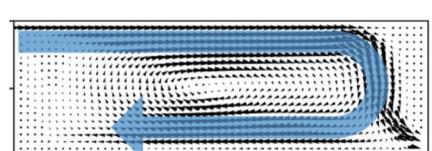
図5 安定した時間点においてANNとPINNの速度ベクトル精度比較



(a) CFD



(b) ANN



(c) PINN

ワークショップ：力学の未来

CISSでは、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、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ています。

第4回は、第1～3回の材料強度分野、マテリアル分野、そして流体力学分野に続いて、令和6年3月5日に、量子化学分野、特に「量子コンピューティング」に焦点を当て開催しました。慶應義塾大学理工学研究科の杉崎研司特任准教授に「量子位相推定：量子世界の自然法則を活用した量子化学計算法」と題して、そして、東京大学大学院工学系研究科の高橋英男氏に「化学反応シミュレータの研究開発と将来展望」と題して講演いただきました。量子位相推定アルゴリズムの最近の進展等の、量子コンピュータによる量子化学計算の現状が紹介され、それを踏まえて、量子化学分野における量子コンピューティングの将来を展望することができました。

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によるハイブリッド形式にて開催した本ワークショップには、民間企業47社からの参加者を含めた98名(含む、現地参加20名)に参加いただき、盛会裡に終了しました。



講演の様子



総合討論の様子

イベント案内

駒場IIリサーチキャンパス公開:東京大学生産技術研究所

開催日：令和6年6月7日(金)・8日(土) 10:00-17:00

会 場：駒場IIリサーチキャンパス(一部オンライン)

【革新的シミュレーションセンター(CIIS)】 : C棟2階笠岡ラウンジ
「先進的シミュレーション技術の研究開発と社会実装」

[CIIS所属教員の研究室]

熱・流体物理

- 半場藤弘教授(流体物理学)
「乱流の物理とモデリング」
- 大島まり教授(バイオ・マイクロ流体工学)
「医療画像×血流シミュレーション×AI」
- 長谷川洋介教授(界面輸送工学)
「熱流体现象の予測と制御」
- 大岡龍三教授(都市エネルギー工学)
「未来の環境とエネルギーシステムのデザイン」
- 菊本英紀准教授(複雑系環境制御工学)
「環境センシングとデザイン」

物質・材料機能

- 吉川暢宏教授(マルチスケール固体力学)
「ハイパフォーマンスコンピューティングによるCFRPタンク開発の高度化」
- 梅野宜崇教授(ナノ・マイクロ機械物理学)
「ナノ・マイクロ域の機械物理の理解に基づいたマルチスケールモデルの構築」
- 溝口照康教授(ナノ物質設計工学)
「顕微鏡と計算機と人工知能による物質理解」
- 井上純哉教授(鉄鋼冶金インフォマティクス)
「鉄鋼冶金とデータ駆動科学の融合」
- 栃木栄太准教授(ナノスケール材料強度学)
「ミクロレベルでの変形/破壊現象の直接観察」

確率・量子論的計算科学

- 佐藤文俊教授(計算生体分子科学)
「生体分子やナノ分子の革命的なシミュレーション」
- 古川亮准教授(複雑流体物理学)
「複雑流体の非線形・非平衡現象」

● 教員名(専門分野)
「研究内容」

今すぐチェック!



計 算 五 学 ナ ピ

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

Knowledge Base

解析事例データベース

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

編集後記

令和6年3月末で加藤千幸教授と小野謙二客員教授が東京大学の職を退かれ、令和6年度よりCISSは12名の体制で活動することとなりました。昨年度は、CISSの活動の一つとして、データ科学的手法や量子コンピュータの活用といった、ものづくりシミュレーションをとりまく環境に対応するための意見交換の機会を設けましたが、今後もこの活動を継続していくことを計画しています。引き続きどうぞ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