

「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」プロジェクトも残すところ1年 プロジェクトの目的の完遂に向けて

スーパーコンピュータ「富岳」の実証研究の成果をより幅広い産業分野に展開し、HPC (High Performance Computing) 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」(以下、HPC産業応用拡大プロジェクト)は、開始から2年が経過しました。

HPC産業応用拡大プロジェクトでは、6つの研究テーマに分けて研究開発を進めていますが、そのうち壁面挙動予測モデルの開発や高精度なサロゲートモデルの構築を行う研究テーマでは、これまでに開発した壁面挙動予測モデルを平板乱流へ適用し、壁面摩擦の予測性能を維持しつつ、計算コストを大幅に低減できること、そして、構築したサロゲートモデルにより、高精度CFD (Computational Fluid Dynamics) を実行せずに未知の設計変数における高精度に性能予測が可能であることを確認しました。スマートin-situ可視化基盤の構築に係る研究テーマでは、渦輪形成シミュレーションや自動車空力特性シミュレーションを対象として、開発した可視化サロゲートモデルの検証を行いました。そして、次世代計算基盤の構築に係る研究テーマでは、ランクマップの最適化効果の検証を実施するとともに、中核アプリケーションをGPUに移植し、ベンチマーク計算と最適化を実施しました。

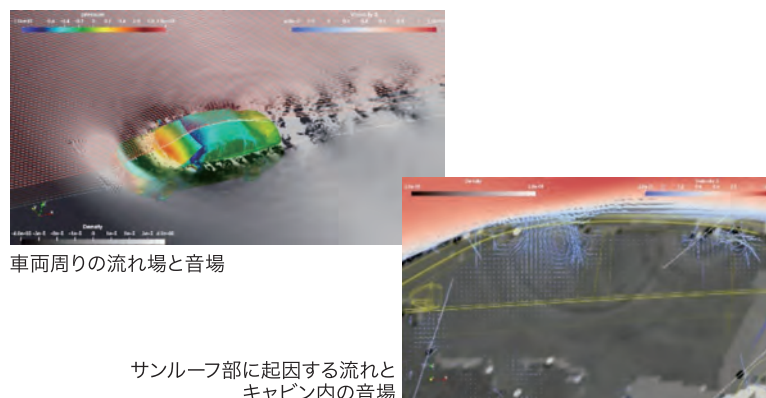
実船の推進性能予測に係る研究テーマでは、開発している壁乱流予測モデルを用いて、模型船の推進抵抗予測と精度検証を実施しました。自動車の空力騒音予測に係る研究テーマでは、CUBEを用いてバスバサ音を予測することに成功し、これまで

未解明であったその発生機構を明らかにしました。また、FFXを用いて実車のウィンドスロップの計算を実施し(下図左参照)、実測とほぼ一致する共鳴周波数が得られることを確認しました。ヒートポンプ用ファンに係る研究テーマでは、構築したサロゲートモデルを用いて翼端隙間などの形状最適化を実施するとともに、サロゲートモデルの精度をさらに向上させる知見を得るために、現行ファンの流れ場の計算(下図右参照)を実施しました。

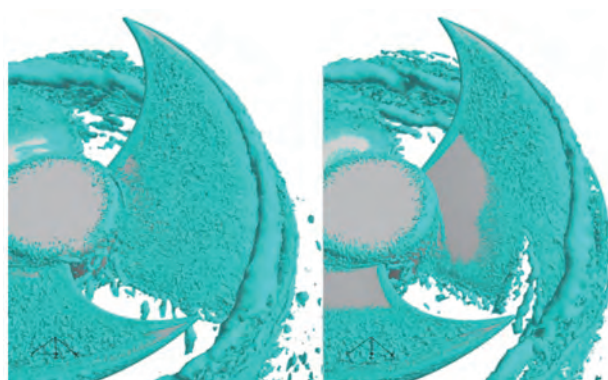
これらの成果については、令和7年3月13日に開催の第2回HPC産業応用拡大プロジェクトシンポジウムにおいて報告させていただきました(詳細は本文を参照ください)。このプロジェクトも残すところ1年足らずで、目標達成に向けて着々と成果を創出しています。引き続き、関連する産業界の方々とも連携して、目標の達成に向けて研究開発を行ってまいりますので、よろしくお願いいたします。

上記のシンポジウムの招待講演で紹介いただきましたが、「富岳」の後継機のポスト「富岳」の開発プロジェクトが開始されました。今後はその開発内容を見据えながら、シミュレーション技術の開発を進めていく必要があると考えています。また、CISSの事業として開催したワークショップ:力学の再構築(詳細は本文を参照ください)等では、機械学習や量子コンピューティング技術の力学シミュレーションへの応用についても議論してきましたが、今後は、これらの技術と力学シミュレーションをいかに融合していくかが重要になると考えております。シンポジウムやワークショップでいただいたご意見を参考に、今後ものづくりシミュレーション技術の研究開発を進めてまいりますので、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 長谷川洋介



FFXを用いた、ウィンドスロップ解析



HPC産業応用拡大プロジェクトで得られた成果例



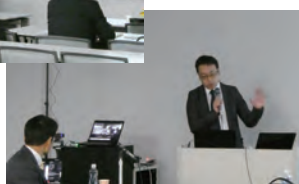
Ⅱ ワークショップ：力学の再構築

革新的シミュレーション研究センターでは、2023年度に引き続いて、力学等の既往の学術体系を変革する新たなシミュレーションの方法論について議論するワークショップシリーズ、ワークショップ：力学の再構築を開催しています。このワークショップシリーズでは、流体力学、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ことを目的としたものです。

2024年度第1回のワークショップは、材料インフォマティクス分野に焦点を当て、令和6年12月11日に開催しましたが、その後、材料強度分野に焦点を当てた2024年度第2回と流体力学分野に焦点を当てた2024年度第3回を、それぞれ、令和7年1月16日と3月5日に開催しました。



2024年度第2回ワークショップでは、革新的シミュレーション研究センターの古川亮准教授に「ソフトマターの多階層シミュレーション：背景、手法、そして応用例」と題して、コロイド粒子・流体ハイブリッドシミュレーションの紹介や、SPm (Smoothed Profile method) の応用例として、微生物の異常レオロジーについて紹介いただきました。そして、革新的シミュレーション研究センターの栃木栄太准教授に「結晶性材料における力学応答の原子レベル観察とシミュレーションへの期待」と題して、MEMS (Micro Electro Mechanical Systems) デバイスを用いたその場TEM (Transmission Electron Microscope) 機械システムが変形や破壊現象の素過程の解析に有効であること、そして、力学的現象に関わる原子レベルシミュレーションへの期待を紹介いただきました。そして、紹介いただいた内容をもとにディスカッションを行い、材料強度分野においては、機械学習を用いることによるモデリングの工夫等、シミュレーション技術の開発が必要であることを再認識する場となりました。



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で開催した、この2024年度第2回ワークショップには、民間企業25社からの参加者を含めた53名(含む、現地参加11名)に参加いただき、盛会裡に終了しました。

2024年度第3回ワークショップでは、慶應義塾大学理工学部の深淵康二教授に「量子アニーラを用いた移流拡散方程式求解の試み」と題して、量子アニーリングの適用事例として、有限差分法とChebyshevスペクトル法による流体計算の成果を紹介いただきました。そして、九州大学大学院工学研究院の久谷雄一准教授に「Q-CAFE (quantum-computer aided fluid engineering) への誘い」と題して、量子アニーリングによる流体計算、空力形状最適化とPIV画像の超解像、および、量子インスパイアードによるテンソルネットワークを用いた流体計算に関する研究事例を紹介いただきました。紹介いただいた内容により、量子コンピューティングの流体力学分野への適用状況を認識する場となりました。



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で開催した、この2024年度第3回ワークショップには、民間企業86社からの参加者を含めた121名(含む、現地参加13名)に参加いただき、盛会裡に終了しました。

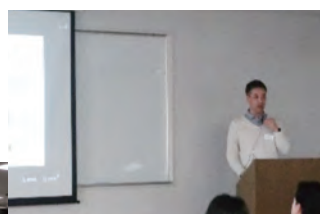
令和6年度に開催した全3回のワークショップ：力学の再構築によって、機械学習技術や量子コンピューティングの現状や参加者の皆様の高い期待を再認識できたとともに、今後の発展の可能性について議論する貴重な機会となりました。

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2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7年3月13日に東京大学生産技術研究所 大会議室(An301・302)、および、Webex Webinarsによるハイブリッド形式にて、第2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)を開催しました。



長谷川洋介教授による講演の様子



坂本尚久准教授による講演の様子



加藤千幸上席研究員による講演の様子



鈴木康方教授による講演の様子

西川達雄氏による講演の様子

その後、招待講演として、理化学研究所計算科学研究センター チームリーダーの近藤正章氏より、「『富岳NEXT』プロジェクトの始動：次世代計算基盤の構築に向けて」と題して、次世代の高性能計算基盤に係る、これまでの調査研究結果、および、スーパーコンピュータ「富岳」の後継機の開発主体として選定され、令和7年1月に開始した、次世代システムの開発・整備を目的とした「富岳NEXT」プロジェクトについて講演いただきました。そして、これらの講演を踏まえて、シンポジウムの最後に、近藤正章氏と講演いただいた産業界の方を登壇者に迎えた、「ポスト『富岳』時代のものづくりシミュレーション」と題したパネルディスカッション(下記参照)を行いました。

当日は民間企業93社からの参加者を含め、215名(含、現地参加39名)の方々にご参加いただき、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しました。

本プロジェクトでは、産業界におけるHPCの実用化を加速するための「基盤的な研究」、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、研究開発を行っています。今回のシンポジウムにおける、これらの研究テーマのセッションでは、本プロジェクトの実施者に得られた最新の成果等について、そして、関連する産業界の方に本プロジェクトで得られる成果に対する期待等について講演いただきました。



招待講演における質疑応答の様子

パネルディスカッション

シンポジウムの最後に、「ポスト『富岳』時代のものづくりシミュレーション」と題したパネルディスカッションを行いました。

パネリストには、本シンポジウムで講演いただいた、理化学研究所計算科学研究センター チームリーダーの近藤正章氏、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 企画委員長(株式会社竹中工務店技術研究所)の鈴木琢也氏、鹿島建設株式会社技術研究所都市防災グループ 主任研究員の中島慶悟氏、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、株式会社日立製作所研究開発グループグリーンインフライノベーションセンタ熱流体ソリューション研究部 主任研究員の塚本和寛氏を迎え、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ました。



パネルディスカッションの様子

各研究テーマのセッションや招待講演での講演を踏まえて、スーパーコンピュータ「富岳」をはじめとするHPCの活用の問題点について、AIを活用したものづくりシミュレーション技術について、大規模・大量データの活用に係る課題について、そして、今後のHPCに対する期待について共有し、ポスト「富岳」時代に向けたものづくりシミュレーションについて意見交換を行いました。この意見交換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。



梅野 宜崇 教授



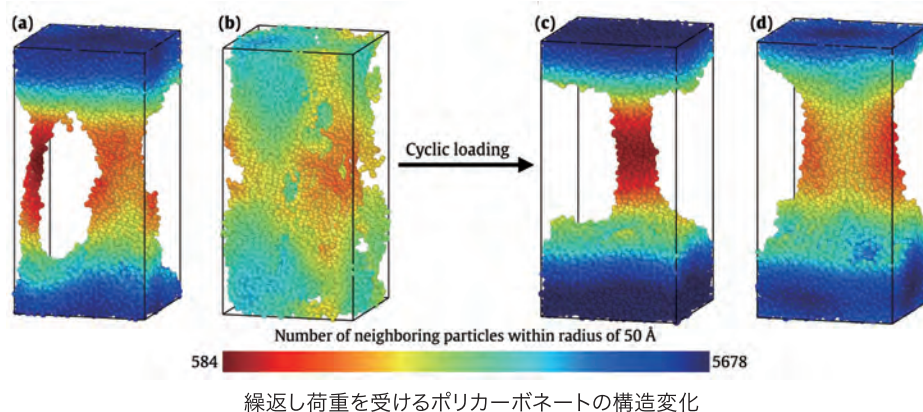
ポリマー引張および疲労強度の粗視化分子動力学解析

エンジニアリングプラスチック(エンブラ)は航空機や自動車など多くの工業製品に構造材料として使用されるようになってきており、ポリマー(高分子)材料の機械的特性をナノレベルから明らかにすることが求められています。

本グループではこれまで、粗視化分子動力学法を用いたシミュレーションにより、ポリカーボネートの分子構造と強度の関係について系統的な検討を行うことで、荷重モード・温度・ひずみ

速度・分子量など様々な因子が変形・破壊挙動に及ぼす影響を調べてきました。最近では、分子量の異なるポリマーからなるモデル、すなわち分子量の多分散性(PDI)を有するモデルの引張強度解析を実施して、PDIは最大応力に影響し、それは分子鎖の広がりを示す回転半径(R_g)が大きいモデルにおいて特に顕著であること、降伏後のひずみ硬化挙動に対してはPDIの影響は小さく、 R_g による影響が支配的であることなどを示しました。

さらに、ポリマーの疲労挙動についても着目しており、引張/圧縮繰返し負荷のシミュレーションによって分子構造変化と強度低下について検討しています。繰返し変形による分子鎖間の絡み合い度(Z_e)や R_g の低下および強度低下がみられることが、分子構造変化の可視化および応力ひずみ関係のヒステリシスループの双方から確認できています。その結果、 $Z_e \cdot R_g$ の初期値が高いモデルの場合に、特に繰返し負荷に伴う分子構造の変化が激しく、強度低下が顕著であることを明らかにしました。また、繰返し荷重に対する強度低下を抑えるためには Z_e よりも R_g を保持するような分子構造の方が有効であることも分かりました。このようなナノ力学的知見の蓄積により、材料設計のための指導原理獲得を目指しています。

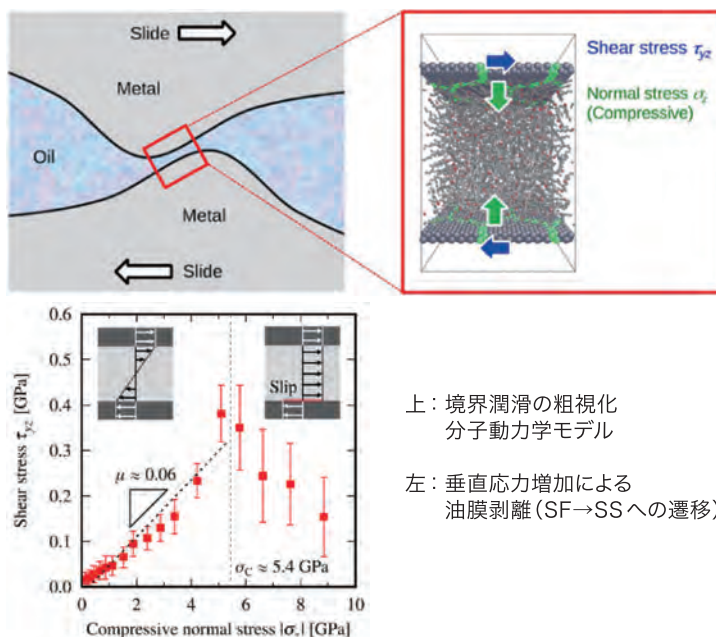


境界潤滑メカニズム解明のためのマルチスケールモデリング

摺動部での摩擦によるエネルギー損失は工業製品において避けられないものの、その低減は製品設計における永遠の課題とも言えるでしょう。特に、固体接触と流体潤滑が混在する境界潤滑状態のメカニズムは複雑であり、その解明が強く望まれています。

我々は、反応分子動力学法と粗視化分子動力学法を用いたマルチスケールモデルを提案し、境界潤滑状態における潤滑油分子の挙動を明らかにする取り組みを行っています。すなわち、潤滑油分子が金属表面の結晶粒界に吸着する際のエネルギーを、反応力場を用いた全原子分子動力学法により求め、それに基づいた粗視化分子動力学モデルを構築する枠組みを提案しています。

これによって、金属表面上への油膜形成過程と、垂直・せん断応力作用による油膜剥離過程、すなわち Shear Flow (SF) / Stick Slip (SS) 状態間の遷移について調べることができ、この遷移には一定の時間を要すること、SFとSS状態が共存する応力範囲が存在することが示されるなど、これまでになく知見が得られています。また、金属表面の粗さが油膜剥離に及ぼす影響についても検討し、表面粗さが大きくなると油膜剥離の臨界応力が上昇する(すなわちナノレベルの粗さを有する表面の方が油膜剥離が起こりにくくなり、摩擦係数の低減が期待される)ことが示されました。





溝口 照康 教授



人工知能技術を活用したマテリアル研究が、現在、世界的に加速しています。著者の研究グループでは、シミュレーション、機械学習、および、原子レベルの計測を組み合わせ、次のような研究を展開しています。

データ駆動型層間化合物探索

層状物質の層間にイオンや分子(インターカラント)が挿入された層間化合物は、インターカラントの種類と層との組み合わせによりイオン伝導性や電気伝導性が発現し、リチウムイオン電池をはじめとした応用に広く利用されています。しかしながら、その組み合わせは極めて多様であり、新たな物性発現の可能性を秘めている一方で、どのような組み合わせが安定に存在し得るのかという「安定性」の指標は、十分に解明されていませんでした。本研究グループでは、層間化合物に関する網羅的な第一原理計算を実施し、約9,000種類に及び構造、エネルギー、バンド構造のデータベースを構築しました。さらに、この大規模データを活用することで、層間化合物の安定性を記述するための新たな理論を確立しました。この理論は、構築したデータベースに含まれない未知の層間化合物の安定性についても高精度に予測可能であることが示されています。図1は我々が導いた理論式とエネルギーの回帰結果を示しています。比較的単純な数式によって多くの層間化合物の安定性が記述できていることが分かります。

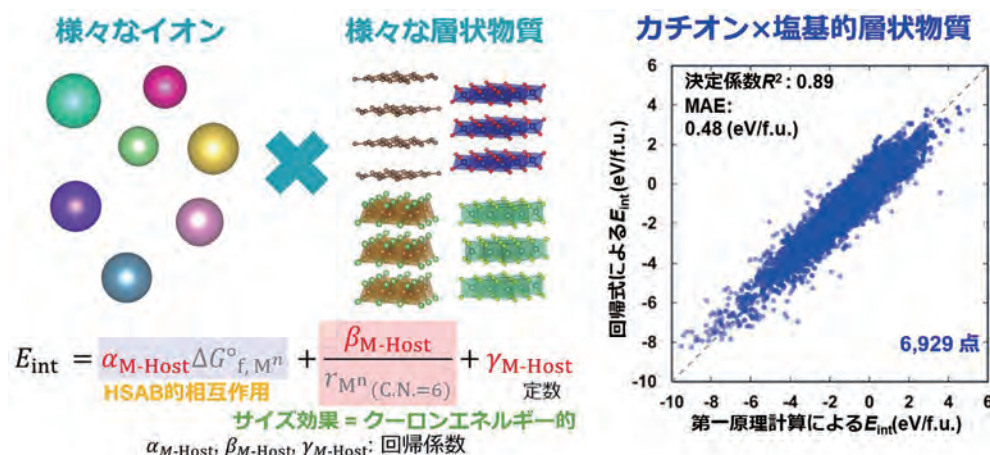


図1: (左) 層間化合物の安定性に関する回帰式と (右) 回帰結果

データ駆動型化学結合解析手法の確立

物質の物性はその原子構造や電子構造によって支配されています。とくに電子構造に着目すると、構成原子が有する原子軌道同士が結合的・反結合的な相互作用を通じて分子軌道やバンド構造を形成しており、これらの相互作用の理解は、電子構造の本質的な把握に不可欠です。しかしながら、近年の固体物理分野では、平面波を基底関数とする第一原理計算コードが主流となっており、これらの手法では原子軌道の重なりに基づいた結合・反結合の定量的な評価が困難です。そこで本研究グループでは、従来、分子軌道計算の分野で用いられてきた共有結合ダイアグラム(OPダイアグラム: Overlap Population diagram)を固体にも適用可能とする独自の解析コードを開発しました。さらに、約13万種類の分子における約200万の化学結合についてOPダイアグラムを作成し、それらを大規模なデータベースとして構築しました。このデータベースを活用し、Graph Neural Network(GNN)を用いたOPダイアグラムの予測モデルを構築した結果、分子構造から対応するOPダイアグラムを高精度で予測可能であることを実証しました。図2には、本研究で用いたGNNモデルの概略図を示しています。

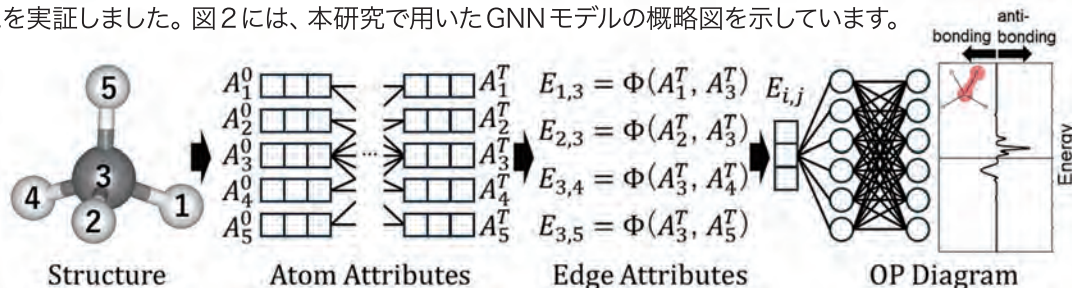


図2: Graph neural networkをもちいた共有結合ダイアグラム(OP diagram)の予測

Quantum Computing講習会-IBM Qiskitを用いたハンズオン

令和6年2月14日に、生産技術研究所D棟5階 De501 佐藤文俊研究室において、革新的シミュレーション研究センター主催で、生産技術研究所所属の研究者ならびに大学院生を対象とした、量子力学の知識や語彙を極力使わずに量子コンピュータの威力を体感するための量子コンピューティングトレーニングコース「Quantum Computing講習会-IBM Qiskitを用いたハンズオン」を、佐藤文俊研究室の高橋英男氏を講師に迎え、実施しました。



佐藤文俊研究室では、量子超越性が見込める量子コンピューティングアルゴリズムとして、量子・古典ハイブリッドとは異なるフル量子コンピューティングアルゴリズムの研究開発を実施しています。具体的には、実行に必要な量子回路を四則演算から整備することで、フル量子コンピュータでの実行を実現した、第一量子化法に基づくグリッドベースの化学反応シミュレーションの研究開発を行っています。

量子コンピュータのシミュレータIBM Qiskitを利用したこのトレーニングコースでは、一組の入力データに対して加減乗除の演算回路を呼び出して結果を確認する回路や、一回の演算操作で複数の組の入力データに対して演算を一括で行い、結果を確認する回路を作成し、量子コンピュータならではの重ね合わせと量子もつれを活用した、量子化学シミュレーションの中に考え方が登場するいくつかの数値演算を体験いただきました。現地参加いただいた3名の方には、量子化学シミュレーションの要素となる演算が量子コンピュータではどのように実現されるのかを実感いただきました。



イベント案内

東大駒場リサーチキャンパス公開2025 ここで、未来に挑む

日時：令和7年5月30日(金)・31日(土) 10:00-17:00
会場：駒場リサーチキャンパス

【革新的シミュレーション研究センター(CISS)の展示】：C棟2階(Ce2) 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」
※イベント：14:00-15:00 講演会(ハイブリッド開催)

CISS所属教員の研究室の展示

●○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)
「予測医療に向けてー医用画像×血流シミュレーション×AIー」
- ・長谷川洋介教授(界面輸送工学)
「熱流体工学における逆問題への挑戦」
- ・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」

・教員名(専門分野)
「展示内容」

※展示内容等は変更になる場合があります。

●○物質・材料機能●○

- ・吉川暢宏教授(マルチスケール固体力学)
「水素サプライチェーンを支えるCFRPタンク開発」
- ・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とマルチスケール解析」
- ・溝口照康教授(ナノ物質設計工学)
「人工知能で物質を設計する」
- ・井上純哉教授(鉄鋼冶金インフォマティクス)
- ・栃木栄太准教授(ナノスケール材料強度学)
「結晶の微細構造と力学的性質」

●○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)
「複雑流体の物理：ガラス、コロイド、粉体、バクテリアまで」



計 算 工 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/>

今すぐチェック!

編集後記

今年度の東大駒場リサーチキャンパス公開2025は、令和7年5月30日・31日に開催されます。CISSでは、所属する研究室の研究開発の内容をはじめ、文部科学省や国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)のプロジェクで得られた成果を、ポスター等の展示により紹介します。また、会場では、CISSの教員による、研究内容を紹介する講演会も行うこととしています。ぜひ多くの方に来場いただけると幸いです。

資料請求お問い合わせ先

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