



東北大学流体科学研究所
未来流体情報創造センター

AFI-
NITYII

AFI Next-generation Integrated supercomputer
for promoting fluid science and Technology



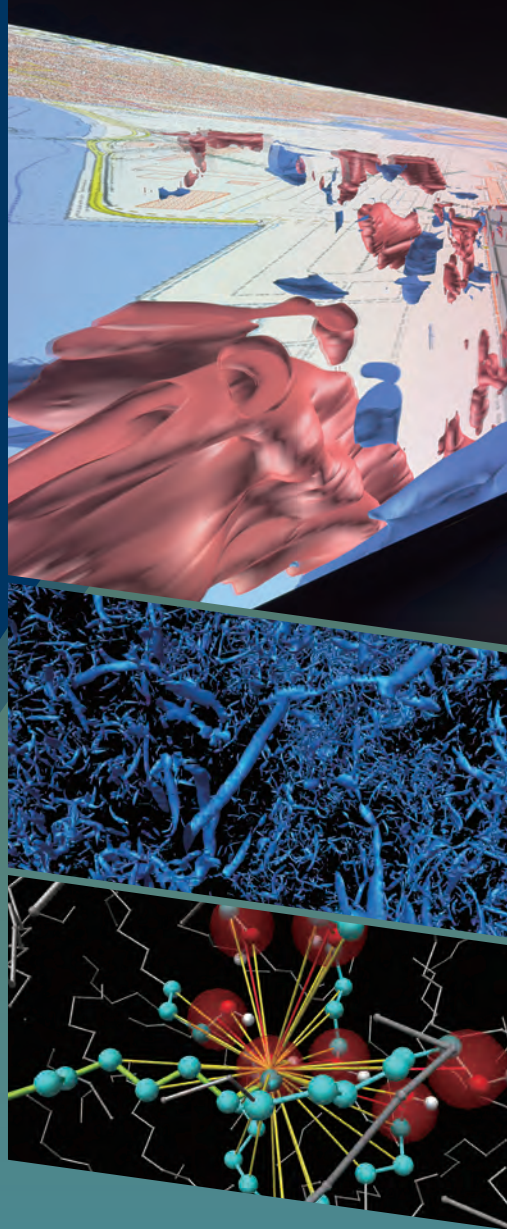
東北大学流体科学研究所 未来流体情報創造センター

本センターは、流体科学分野におけるスーパーコンピューティング、計算機シミュレーションと実験の計測融合研究、流体情報の高度可視化等のための次世代融合研究システムを運用するとともに、国際会議の開催やデータベースによる研究成果の発信を行っています。学術的、社会的に高い研究目標を達成するために、次世代融合研究システムの利用はプロジェクト研究を主体とし、採択審査や評価を行っています。これらを通じて、流体科学研究所の使命、すなわち流体科学の基礎研究とそれを基盤とした先端学術領域との融合ならびに重点科学技術分野への応用による世界最高水準の研究の推進に貢献しています。

HISTORY

沿革

- 1990年 12月 Cray Y-MP8 / 8128 導入
- 1994年 10月 Cray C916 / 161024 導入
- 1999年 9月 未来流体情報創造センター設置
- 1999年 11月 SGI Origin 2000, NEC SX-5 / 16A 導入
- 2005年 11月 SGI Altix 3700, NEC SX-8 導入
- 2011年 5月 SGI Altix UV1000, NEC SX-9 導入
- 2014年 5月 SGI UV2000 増設
- 2018年 8月 Fujitsu Server PRIMERGY によるシステム導入
- 2024年 8月 HPE CRAY XD2000 を中心とするシステム導入



GREETING

ご挨拶

次世代融合研究システムが切り開く 統合流動科学

東北大学流体科学研究所 所長 丸田 薫



地球環境と調和した人類社会の持続的発展の基礎である流動科学技術の継続的発展を先導するため、本センターでは「次世代融合研究システム (AFI-NITY II)」として2024年8月にHPE CRAY XD2000により構成される分散メモリ型並列計算システムを中心とするシステムを新たに導入し、マクロならびにミクロな視点から、物質の流れのみならず、熱、エネルギー、電磁波、情報の流れをも対象とした高度流体情報に関する研究を推進しています。

実験装置に直結し実験と計算を一体化する次世代融合研究手法や大規模数値計算を駆使し複雑な流れ場を解析、得られた膨大な流体情報を高度可視化あるいはデータマイニングをすることにより、未知の複雑な流動現象を解明するとともに、人類社会の持続的発展に繋がるさまざまな流動現象の制御法や設計法を開発してまいります。

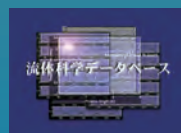
本センターは、高度流体情報の国際研究拠点として、2001年から毎年、高度流体情報に関する国際シンポジウムを開催するとともに、国内外の大学や企業との共同研究プロジェクトも積極的に推進しています。本研究所が掲げる「統合流動科学」の格段の発展を通じ、研究・開発の成果を国際展開する目標に向け、研究者・技術者の育成にも貢献してまいります。本センターの活動に対し、今後も変わらぬご支援を賜りますよう、よろしくお願い申し上げます。

INFORMATION

情報発信

流体科学データベース

スーパーコンピュータによる大規模数値計算など流体科学に関する研究成果を「流体科学データベース」としてホームページ上で公開しています。流れに関する研究成果を「流体情報」として共有し活用することを目指しています。



<http://afidb.ifs.tohoku.ac.jp>



高度流体情報に関する国際シンポジウム (AFI)

毎年、高度流体情報に関する国際シンポジウムを開催し、流れに関する研究成果を世界に発信しております。

国内外の研究者との情報の共有、連携、活用を図るとともに、「高度流体情報学」のさらなる発展を目指しています。

このほか、利用成果報告書の出版や、東北大学の公開行事および関連する国際会議での展示等への積極的な参加など、研究成果の発信に努めております。

次世代融合研究システム

AFI-NITY II

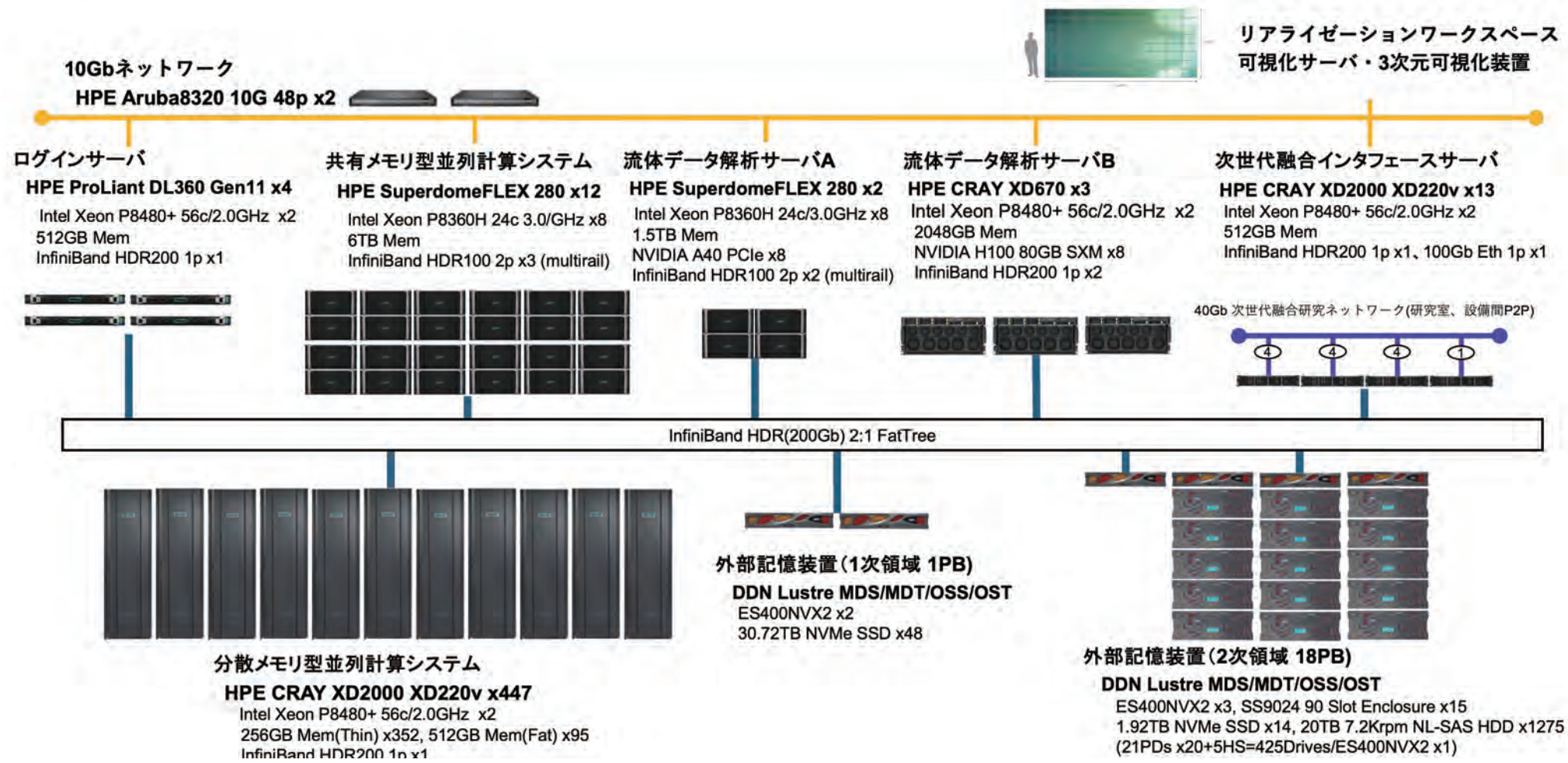
AFI Next-generation Integrated supercomputer
for promoting fluid science and Technology



「AFI-NITY II」で拓く研究の新時代

2024年8月に稼働を開始した現在の「次世代融合研究システム（AFI-NITY II）」は、スーパーコンピューティングを行う計算サーバ群、計算結果の画像解析のための3次元可視化サーバ、実験装置を接続して計算シミュレーションと実験解析をリンクする計測融合研究のための次世代融合インタフェースサーバを中核として、PBクラスの容量をもつストレージシステム（磁気ディスク装置）を有し、3次元可視化出力装置を備えたリアライゼーションワークスペース（RWS）や周辺機器を備えています。

計算サーバ群は、HPEによる分散メモリ型並列計算システムと共有メモリ型並列計算システムを主力として構成されており、システム総理論演算性能合計4.4PFLOPS・最大共有メモリ6TB・主記憶容量合計223TBの計算機能を提供します。サーバ群と利用者をつなぐネットワークは40Gbit Ethernetをバックボーンとして整備され、研究所内において高速なデータ交換や画像処理を含むクライアント作業を可能にしています。



ハードウェア

次世代融合研究システムのスーパーコンピューティングを担う分散メモリ型並列計算機システム、共有メモリ型並列計算機システム、流体データ解析サーバBの性能は表のとおりです。

	理論演算性能[PFLOPS]	主記憶容量合計[TB]
分散メモリ型並列計算機システム	3.2	135.5
共有メモリ型並列計算機システム	0.2	221.2
流体データ解析サーバB	0.8	6.0

ソフトウェア

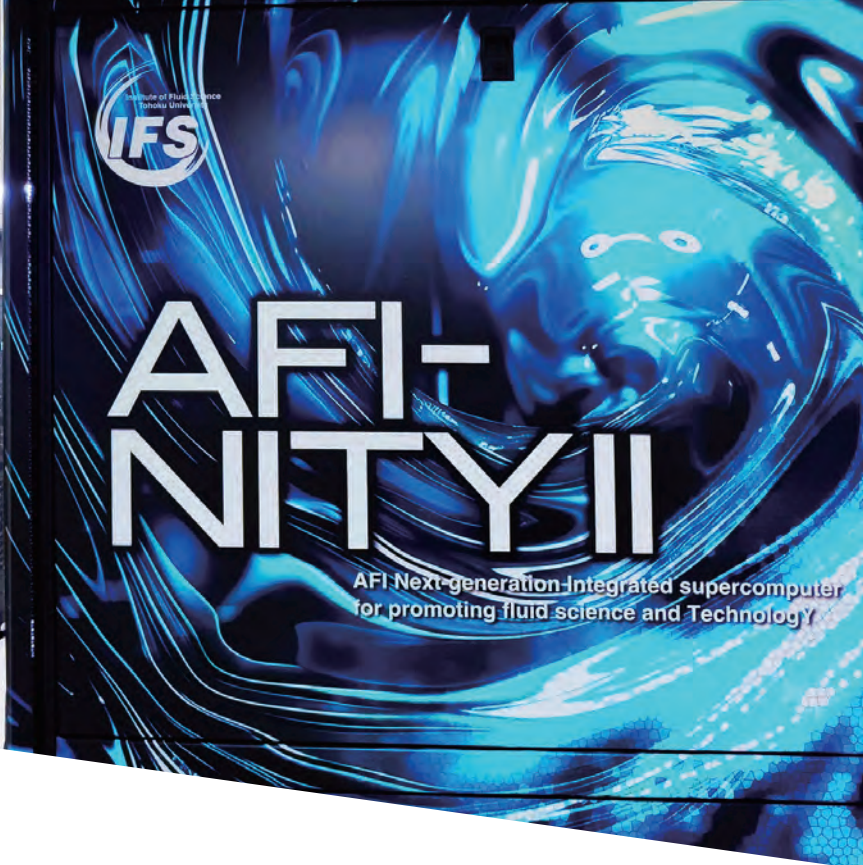
次世代融合研究システムによる研究を支援するためにソフトウェアを各種そろえています。主なものは以下のとおりです。

●流体解析 ANSYS, FaSTAR, CONVERGE	●科学技術計算結果の可視化 [流体解析結果の可視化] FIELDVIEW, Tecplot, AVS/Express [構造解析結果の可視化] Abaqus/CAE [分子・量子系解析結果の可視化] Materials Studio Visualizer, GaussView
●構造解析 Abaqus, LS-DYNA, ANSYS	●モデリング [流体解析モデルの作成] ANSYS, CATIA [構造解析モデルの作成] Abaqus/CAE, CATIA [分子・量子系解析モデルの作成] Materials Studio Visualizer, GaussView [STL編集ソフトウェア] Materialise Magics
●分子・量子系解析 Materials Studio, Gaussian, Amber, Amsterdam Modeling Suite, Cantera	●メッシング [流体解析モデルのメッシュ処理] ANSYS, Pointwise, ICEM CFD [構造解析モデルのメッシュ処理] Abaqus/CAE
●その他の解析ソフトウェア Comwave, COMSOL Multiphysics, JMAG	
●構造最適化 modeFRONTIER	
●コンパイラ Intel oneAPI (C/C++, Fortran), GCC, NVIDIA HPC SDK	
●ライブラリ Intel MPI, IMSL Fortran, OpenMPI, OpenMP	

サポート

本センターでは、センター長の下、研究開発室が中心となって、次世代融合研究システムの運用とユーザーサポートを行っています。

●運営委員会 センターの基本運営方針の策定および実施	●採択審査委員会 センターの研究プロジェクトの採択・審査・評価
●研究開発室 次世代融合研究システム および研究所ネットワークの管理運用、 ユーザーサポート、センターの事務 および企画広報業務	●サポートWG ユーザーサポート

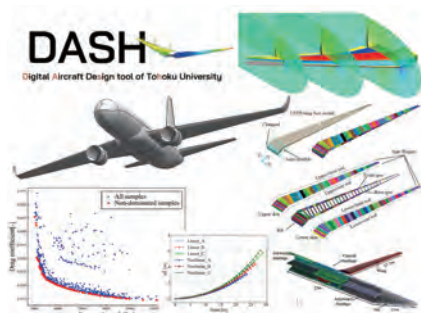


流体構造連成解析と 最適化に基づく航空機設計

遷音速旅客機の設計では、空気力と構造変形が相互に作用する釣り合い状態を連成解析によって捉える必要があり、また空気抵抗や構造重量の最小化といった複数の目的関数を考慮した多目的最適化も重要な技術となります。本研究では、炭素繊維強化プラスチック製航空機のための機体設計ツール (Digital Aircraft deSign tool of ToHoku University: DASH [1]) を開発し、マルチスケール解析による材料特性予測、様々な飛行条件における主翼変形の空弾解析、構造サイジングに基づく主翼部材寸法の最適化、ペイズ最適化等による翼形状の多目的最適化を可能としました。特に、炭素繊維種の違いによる主翼性能の変化を定量化することに成功し、次世代繊維であるトレカ® T1100Gを用いることによる構造重量・主翼変形の低減効果を初めて明らかにしました[2]。現在、機体全体 (完成機) を対象とした設計ツールの開発を進めると共に、より高度かつ高忠実な解析技術を適用するための連成解析手法に関する基礎研究も進めています。

[1] https://www.ifs.tohoku.ac.jp/mulphd/software/DASH/docs/_build/html/index.html

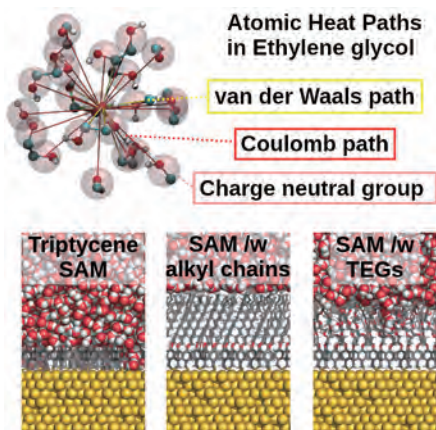
[2] Aerospace Science and Technology, Vol. 124, 2022, 107565
<https://doi.org/10.1016/j.ast.2022.107565>



分子動力学シミュレーションによる 熱輸送の分子メカニズムの解明と制御

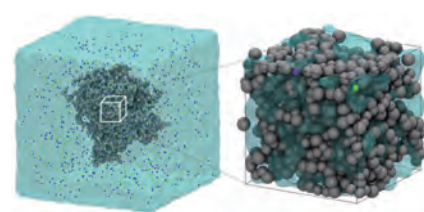
半導体などの電気部品の更なる性能向上には、より高度な熱マネジメントが急務となっています。それに伴い、所望の特性を持つ熱媒体や断熱材を分子レベルで設計する技術が求められています。そのような「分子設計」を実現するためには、マクロな熱伝導の分子スケールメカニズムを知ることが必要ですが、固体結晶や気体と比べて、液体、ソフトマターやそれらの界面に関しては分子配列・運動が不規則なため、研究が困難となっています。

本研究では、分子動力学シミュレーションを用いて、マクロ熱伝導を一つ一つの原子・分子間の相互作用 (熱伝搬パス、上副図) によるミクロなエネルギー伝搬の集積として把握する解析法を確立し、それによって、固液界面における自己組織化単分子膜 (下副図) の分子の構造・官能基の特徴と熱輸送の関係を明らかにしてきました。



人工タンパク質を用いた 液-液相分離の理論設計と制御

タンパク質やRNAが自己集合することで液-液相分離し、細胞内に液滴やゲル状の構造体を形成することが知られています。細胞内の混み合ったカオス状態の中で液滴を形成し、特定の分子を濃縮させつつ他の分子を排除して秩序を作り出すことで、転写、翻訳、シグナル伝達など、様々な生命現象を調節していると考えられています。動的でかつ可逆的な液滴内部を実験的に原子解像度で構造観測することは困難であり、構成分子の種類・組合せの探索には試行錯誤的な実験が必要なのが現状です。そこで本研究では、分子シミュレーションを用いて相分離する人工タンパク質を理論的に設計し、液滴形成メカニズムの解明と流動性の制御に取り組んでいます。実験グループと連携し、実験的にも合成・評価を行い、細胞内相分離のボトムアップ的な理解を進めると同時に、特定の分子を液滴に閉じ込めることで細胞内の狙ったタンパク質の機能を制御する手法の開発を目指しています。



AFI- NITY II

AFI Next-generation Integrated supercomputer
for promoting fluid science and Technology



東北大学流体科学研究所

未来流体情報創造センター

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2-1-1
TEL:022-217-5302 FAX:022-217-5311
MAIL:afi-contact@ifs.tohoku.ac.jp

