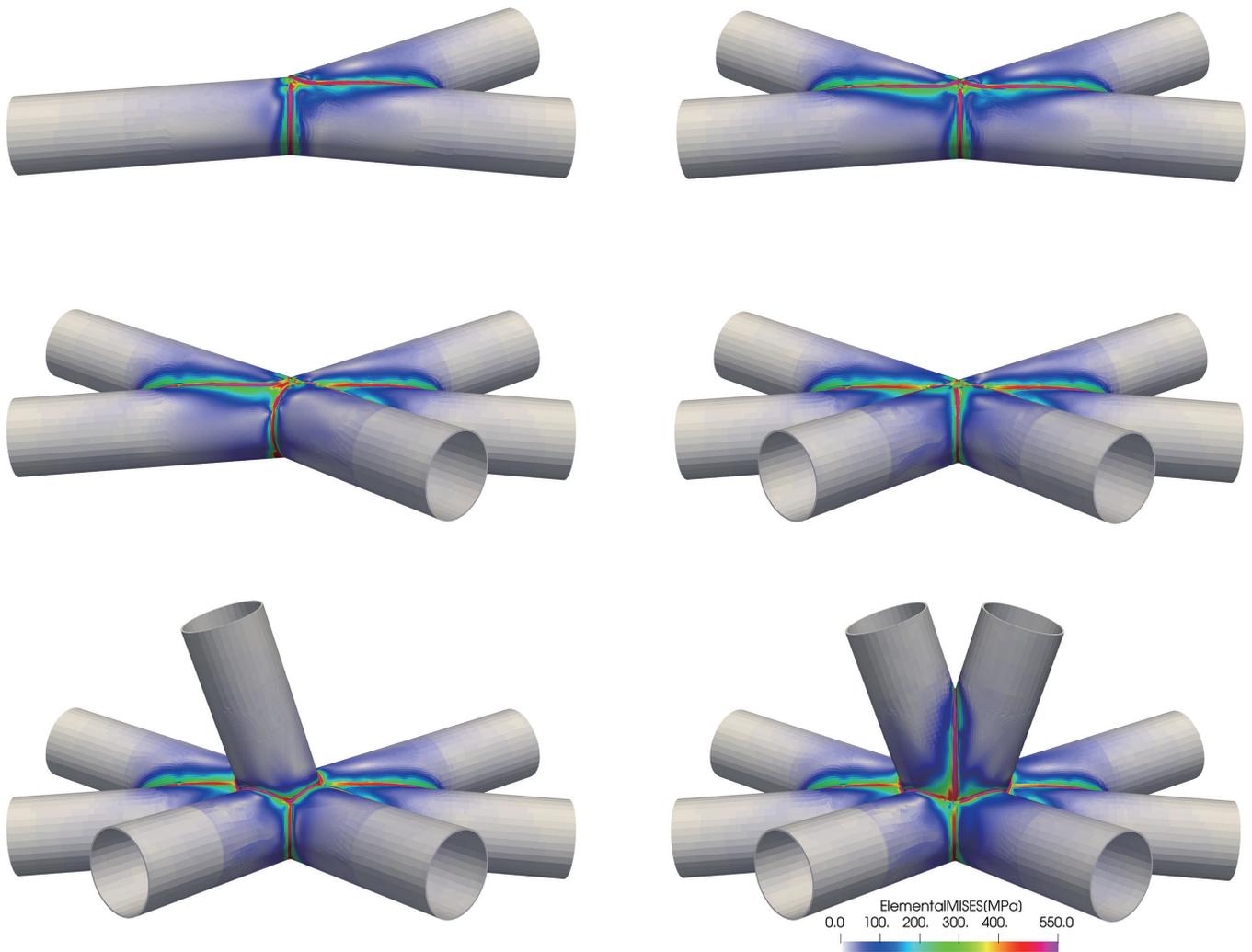


計 算 互 学 ナ ビ

計算工学ナビ・ニュースレター2020年春号



ポスト「京」重点課題⑧

産業競争力強化に向けた高性能・高機能アプリケーションを開発 重点課題⑧課題責任者 加藤千幸

《特集》 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発

重点課題⑥ 各サブ課題 研究開発成果の概要 サブ課題責任者

重点課題⑧ 各サブ課題 研究開発成果の概要 サブ課題責任者

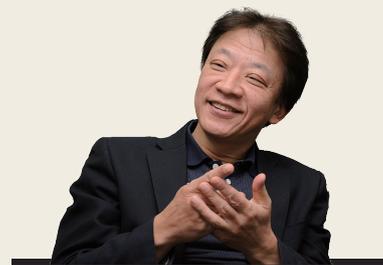
ポスト「京」重点課題⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

文部科学省 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発

産業競争力強化に向けた高性能・高機能アプリケーションを開発

文部科学省「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」プロジェクトでは、9の課題に対して、「富岳」において高性能を発揮すべきアプリケーションの開発と最適化が進められてきました。本ニュースレターでは、その9の課題のうち、工学系の2つの課題、すなわち、重点課題⑥「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」と重点課題⑧「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」の最終成果を紹介します。

それに先だって、重点課題⑧の課題責任者である加藤千幸教授に5年間に及ぶプロジェクトを振り返り、研究開発の成果についてお話しいただきました。



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
加藤 千幸 センター長・教授

デザインにより高性能アプリケーションを開発

重点課題⑧「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」プロジェクトでは、企画段階から製品の性能や信頼性を定量的に評価でき、また、設計を最適化できる革新的設計手法、コストを最小化しつつ信頼性を向上させることが可能な革新的製造プロセスの実現を目指して、その鍵を握るアプリケーションの研究開発を進めてきました。この目的を実現するために、6つのサブ課題を設定し、アプリケーション開発を推進してきました。6つのサブ課題では、共通基盤となる上流設計プラットフォームの開発（サブ課題A）、その実証のための代表的産業分野（自動車・ターボ機械・航空機など）における製品設計システムの開発（サブ課題B、C、D）、さらに、今後の製造プロセスの核となる製造基盤技術の開発（サブ課題E、F）に取り組んできました。

これらの研究開発には、2つの大きな目的がありました。1つはスパコン「京」の後継機となる「富岳」において高性能を実現すること、もう1つは実際にものづくりの現場で応用したときに高い効果を発揮することです。単に計算が速いだけでは意味がありませんし、逆に、効果があっても解析に要する時間が長大化したのでは実用的には使えません。そのため、この両方を可能にする高度なアプリケーションを開発する必要がありました。

アプリケーション開発において、鍵となったのはコデザインによる開発です。つまり、「富岳」を始めとして次世代のCPUにおけるアプリケーション性能を高めるため、ハードウェアとアプリケーションの開発者が協働して研究開発を推進しました。このコデザインによってCPUアーキテクチャ、コア数、動作周波数などのハードウェアのパラメータがまず最適化されました（フェーズ1）。次いで、最適化されたパラメータに基づき詳細設計されたハードウェアにおいて、アプリケーションの高速化を図ってきました。重点課題⑧では、ターボ機械設計・評価システムの流体解析アプリケー

ション「FFB (FrontFlow/Blue)」をターゲットアプリケーションに選定し、これを中核として、自動車統合設計システムである非圧縮性・圧縮性流体解析プログラム「CUBE」、航空機の次世代空力解析ソルバーである圧縮性流体解析プログラム「FFVHC-ACE」、溶接シミュレータの非線形構造解析プログラムや熱可塑性CFRP製造プロセスシミュレータのコアソルバーとしても利用された「FrontISTR」といった、4本の主要アプリケーション開発を進めました。その結果、「FFB」では、「京」と比較して、40倍以上の高速化を達成できる見込みが得られており、その他のアプリケーションでも、「京」に対して20倍から50倍といった高い性能が得られる見通しが得られています。また、アプリケーション開発では、重点課題⑥「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」と連携し、「アプリケーション連携開発会議」を年に2回開催し、チューニング手法などさまざまな分野で詳細な情報共有を行うなど、開発の効率化を図りました。

「富岳」に向けた準備計算を完遂

アプリケーション性能とともに目的として掲げてきた産業上の利用効果については、当然ながら「富岳」がまだ稼働していないので、本当の意味での実証研究は実施していません。しかし、「京」や「京」以外のHPCI資源を活用して、規模を縮小した問題で産業上の利用効果を検証しました。たとえば、サブ課題Aの多目的最適設計探索技術については、サブ課題Bと連携し、自動車の空力最適化を実施しました。また、サブ課題Cと連携し、小型ファンの性能・騒音の最適化も進めてきました。サブ課題Bでは、メーカーから提供されたホワイトボディを用いた剛性解析についての精度検証などを実施し、サブ課題Cでは、開発アプリケーションによりシミュレーションによる曳航水槽試験の代替が可能であることを実証しました。サブ課題Dでは、実機複雑形状の航空機に対して、離着陸時の最大揚力や遷音速バフェットなど、従来の数値解析技

術では評価できなかった予測を実現できることを証明しました。この成果により、実機を用いた飛行試験のリスクを低減し、開発期間の短縮および開発コストの削減につながる成果が「富岳」で得られることが期待されています。サブ課題Eでは、溶接法の高度化や新材料利用の促進に貢献する溶接順序探索の高精度化、逆ひずみ量推定の高高速化などを目的として、高度成形・溶接シミュレータを開発し、大規模望遠鏡の架台部とジブクライミングクレーンマストのアーク溶接工程について検証計算を進めています。最後に、サブ課題Fでは、熱可塑性CFRP（炭素繊維強化プラスチック）成形シミュレーションが可能なマイクロスケール熱可塑性成形シミュレータを開発し、その効果の検証としてジェットエンジンファン部材の成形シミュレーションに適用し、内部に発生する複雑な応力分布と残留ひずみ発生メカニズムを明らかにしました。

6つのサブ課題の全てにおいて、アプリケーションの高度化・高速化は比較的スムーズに進み、各サブ課題が当初掲げていた目標を達成し、成功裏にプロジェクトを終えることができたと考えています。本プロジェクトに対しては、当初から産業界からの期待も大きく、産業界から大きな協力が得られたこともプロジェクトが成功した大きな要因の一つです。

2020年度から試験的に稼働し、2021年度以降に本格運用を開始する「富岳」を活用して進められるプロジェクト「『富岳』成果創出加速プログラム」が、2020年度から開始されます。上記6つのサブ課題の一部が、そのプロジェクトを推進する課題として選定されましたが、それに選ばれなかった課題も含めて、このプロジェクトの研究開発成果をさらに発展させて、付加価値の高いものづくりの実現、日本の国際的な産業競争力強化に大きく貢献することが期待されています。産業界との共同研究などさまざまな可能性を模索しながら、さらなる展開の道を切り開いていく努力を続けていきたいと考えています。



サブ課題A 高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム

東京大学大学院
工学系研究科
教授

吉村 忍

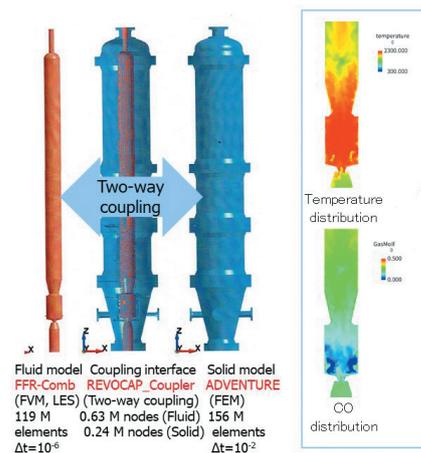
文部科学省ポスト「京」重点課題⑥「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」プロジェクトのサブ課題Aでは、2020～2030年代の実用化を目指して研究開発が進められているCO₂回収・貯留を伴う石炭火力発電システムの実現のカギを握る高圧燃焼・ガス化炉をターゲットとし、従来の計算機環境では実現が不可能であった炉全系高精度シミュレーション技術を研究開発しました。このシミュレーションの実現により、高圧燃焼・ガス化プロセスの詳細定量評価が可能となり、適切な炉パラメータ探索の試行錯誤プロセスを大幅に削減し、国際競争力のある実用炉に必須となる高効率化・低環境負荷・高レジリエンス性能の実現を加速し、その実用化時期の早期化に貢献します。

ラボスケール石炭ガス化炉（電中研炉）を対象とした解析では、FVMに基づく並列LES燃焼解析コードFFR-Combがガス化炉の燃焼部やスラグ流の固気液三相燃焼解析を担い、FEMに基づく並列熱伝導解析コードADVENTURE_

Thermalが炉容器内の熱伝導解析を担います。炉容器内表面には燃焼部より高熱負荷が加えられますが、同時に炉容器内に埋め込まれた冷却管を流れる冷却水によって強制冷却されるため、ADVENTURE_Thermalには、冷却管内の1次元の移流拡散解析を担当する解析モジュールが追加実装されています。さらに、燃焼部の外表面、すなわち炉容器の内表面が連成界面となり、この部分で熱の授受が行われます。燃焼部外表面から炉容器内表面への熱流束Qの送受信と、炉容器内表面の壁面温度TwのFFR-Combへの送受信を通して、FFR-CombとADVENTURE_Thermalの双方向連成を実現。並列計算実行中の、熱流束や炉容器壁面温度の物理量のオンライン送受信は、並列カプラーREVOCAP_Couplerによって実現します。さらに、一連の双方向連成解析が終了後は、得られた炉容器内の温度分布の時刻歴解析結果を、オフラインでFEMに基づく並列非線形構造解析コードADVENTURE_Solidに入力して解析することにより、炉容器の非線形熱応力挙動を評価することができます。

図に、解析の一例として、燃焼部の温度分布やCO分布、炉容器部の温度分布、スラグ流発生時のスナップショットを示します。本解析シ

ステムを用いることにより、従来燃焼解析単独で行われることの多かった解析について、燃焼部を内包する炉容器における熱伝導解析と冷却管を通した強制冷却解析を双方向に連成して解くことができ、より高精度の解析が可能になります。



▲ ラボスケール石炭ガス化炉のマルチフィジクスシミュレーションの事例



サブ課題B 気液二相流および電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化

東京大学
生産技術研究所
教授

鹿園 直毅

燃料電池は、究極的な高効率かつクリーンなエネルギー変換装置であり、次世代自動車の動力源や定置用発電システム等としての本格的な普及が期待されています。また、コモディティ化してしまった多くの技術に代わって、次世代の我が国の産業競争力を担う技術の一つとしても期待が大きいです。現在のところ、我が国の燃料電池に関する技術は世界的にも優位な立場にあるものの、各国の追い上げは非常に激しく、今後ともその競争力を保つことができるかどうかの重要な時期を迎えています。

燃料電池は、マクロスケールのセル・スタックから、微細かつ複雑なメゾスケールの電極多孔体、Pt触媒・担体・電解質のナノスケールの三相界面というように、広範囲な長さスケールにわたって輸送現象と電気化学反応が重畳した非常に複雑な系です。さらに、発電性能に関わる電極内の反応・物質輸送の不均一性、液水滞留によるガス供給の不均一性、および耐久性に関わる電極構造の経時変化等、時空間的な変

化や非一様性が大きいことも設計が困難であることの大きな要因です。これらの現象は大電流や高温といった非常に過酷な条件でより顕在化するため、その実験計測は一般に困難であり、かつ出来たとしても膨大なコストを要することから、数値シミュレーション技術への期待が非常に大きくなっています。

サブ課題Bでは、マクロスケールの気液二相流解析（PEFC-2PHASE）、メゾスケールの電極内の反応・輸送解析（PEFC-ECR）、および膜電極接合体（MEA）におけるミクロスケールの構造・物質輸送解析（ABINIT-MP、CAMUS、PHASE/0）等のアプリケーションソフトを開発し、個々のスケールにおける解析精度と適用性を大幅に向上することができました。さらに、各スケールにおける解析結果を連携させることで、単一のソフトでは扱うことのできない複雑な現象を予測可能なマルチスケール解析ワークフローを構築できました。具体的には、ナノ構造・機能解析によって算出した電解質膜・電極三相界面のプロトン伝導度およびガス拡散係数を電極要素特性解析に適用することで、MEAの発電性能解析を実施しました。ナノレベルの計算は経験パラメータ無しで第一原理的に行われるため、

広範囲の素材材料を統一的な精度で扱うことが可能で、汎用性が非常に高いものとなっています。三相界面および触媒層の構造・輸送パラメータについては、実験による経験式を用いることなく、シミュレーションによる内部現象理解に基づいたモデルとして扱うことが可能になりました。さらに、電極要素特性解析により算出した分極特性（活性化過電圧、電解質膜およびアイオノマーの抵抗過電圧、触媒層構造に起因した拡散過電圧）、および大規模気液二相流解析によって算出した流路内の圧損増倍、液水滞留量等の二相流動パラメータを全体性能シミュレータに適用することで、部材レベルからセル・スタックの発電性能、特に自動車用PEFCに要求される高電流密度域の限界性能を予測することが可能となりました。このようなマルチスケールのアプローチによって、材料特性から電池デバイス設計やシステム設計にボトムアップで橋渡しするのみならず、電極作成プロセスやシステムの制約をもとに、あるべき材料特性をトップダウン的に示すことが可能です。このようなマイクロ・メゾ・マクロのスケールを連携する試みは世界を見ても例が無く、本プロジェクトの大きな成果だと自負しています。



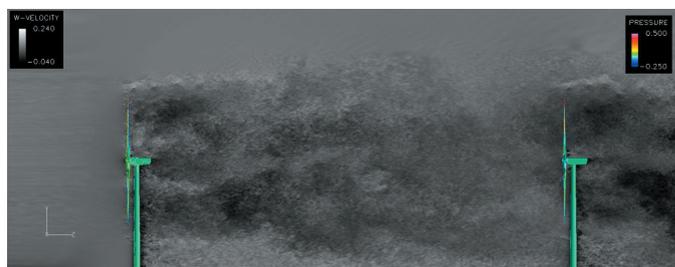
サブ課題 C 高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析

豊橋技術科学大学
教授
飯田 明由

自然エネルギー利用計画の一環として、我が国では、2030年に400万kwの洋上ウィンドファーム開発が計画されています。洋上ウィンドファームにおける実機大規模風車を対象とした解析では、ブレード周りの数ミクロンの渦から、風車後流の数m～数10mの渦、大気境界層内の数百m～1kmの巨大な乱れを同時に解像する必要があり、高精度のマルチスケール解析が発電性能や疲労寿命を高精度に予測する上で本質的に重要となります。このような取組みは、計算科学的にも非常に難度が高く、世界的に前例がありません。しかし、今後ますます高まる風力発電需要を考えた時に、限定されたスペースの中で洋上ウィンドファームを立地し、所定の発電性能（発電電力及び耐用年数20年）を達成していくためには、サイトの風況（年間の風速分布や風向分布）を十分に考慮しつつ、大型風車の相互干渉、すなわち上流側配置の風車の後流（Wake）による下流側配置の風車の発電性能低下を高精度に予測し、さらに、後流に晒される後方配置の風

車の流体構造連成振動に基づく疲労強度評価を高精度化していくことが必須となります。サブ課題6Cでは、前述の風車周りの大規模マルチスケール解析（FrontFlow/Blue東京大学生産技術研究所、豊橋技術科学大学）、洋上ウィンドファーム全体を対象とした多風向（16～24方位）性能評価・最適化解析（RIAM-COMPACT-HPC九州大学）、大規模風車の流体構造連成振動解析によるブレードの寿命評価（東京大学）に取り組んでいます。洋上ウィンドファームに関しては、Science 366, 443 (2019)に“Grand challenges in the science of wind energy（風力エネルギーの科学における大きな挑戦）”と題するレビュー論文が掲載され、大型化する洋上風車の開発における今後の挑戦的な課題として、(i) 風力発電所の運転の重要なゾーンにおける大気の流れの物理学に対する理解の向上、(ii) 風力タービンの材料とシステムのダイナミクス、(iii) 大規模な送電網システム内で相乗的に運転される

数百の発電機で構成される風力発電設備の最適化と制御)の3つが掲げられており、本サブ課題では、主に(i)(ii)に関する解析技術の開発がまさに世界に先駆けて行われています。図は2台の風車の大規模流体解析結果であり、風車後流の相互干渉による下流側風車の性能低下の定量評価が可能になりました。また、ブレードに作用する変動流体力をもとに、複合材料に作用する複雑な応力分布を解析し、ブレードの疲労寿命予測が可能となりました。大規模数値解析技術を活用し、洋上ウィンドファームのような試作機を作ることが困難なシステムの性能や寿命を事前に予測することが可能となり、ウィンドファームの開発・設置への貢献が期待されます。



▲2台の風車の大規模流体解析結果



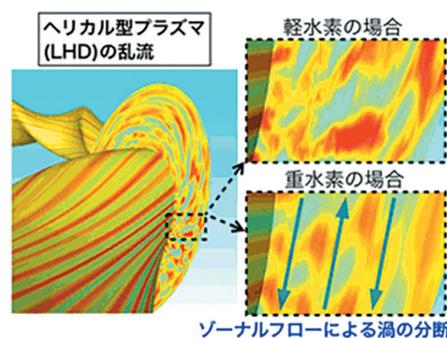
サブ課題 D 核融合炉の炉心設計

日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター
高度計算機技術開発室長
井戸村 泰宏

本サブ課題では、次世代核融合実験炉ITERにおける炉心プラズマ性能の評価・予測、および、より高性能な炉心運転シナリオの探索に向けて、富岳向けのエクサスケール核融合プラズマシミュレーションを開発しました。核融合プラズマシミュレーションは5次元位相空間（空間3次元×速度2次元：速度1次元は高周波のサイクロトロン運動を平均化して消去）における粒子分布関数の乱流問題となりますが、ITERの核燃焼プラズマは既存実験装置に比べてさらに桁程度大きい時空間スケールを持つため、エクサスケール計算が必須です。本サブ課題では3つのターゲットコード、大域的乱流輸送解析コードGT5D、局所的乱流輸送解析コードGKV、高エネルギー粒子閉じ込め解析コードMEGAをベースとして、1. エクサスケール計算技術の開発、2. 核燃焼プラズマ解析のための計算モデル開発、3. 開発コードを用いた実証研究、という3つの研究テーマに取り組んできました。エクサスケール計算技術に関しては、富岳のプロトタ

イプと考えられるプラズマシミュレータ（FX100）、Oakforest-PACS（KNL）等の最先端メニーコア型計算機において、メニーコア最適化技術や省通信アルゴリズム等の計算技術を開発し、各システム全系規模の強スケーリングを達成しました。核燃焼プラズマ計算モデルに関しては、マルチ時間スケール現象の長時間計算手法や燃料粒子の重水素と三重水素に加えて核融合反応により生成するヘリウムや炉内機器から放出される不純物を含む多種イオン系プラズマモデルを確立しました。実証研究に関しては、多種イオン系プラズマの乱流輸送や高エネルギー粒子駆動磁気流体力学（MHD）現象の解析に関して多くの成果が得られました。GT5Dではトカマク装置に対する実証研究を進め、水素プラズマと重水素プラズマの閉じ込め特性の違いをもたらす乱流輸送の水素同位体効果を解明しました。水素同位体効果は三重水素を含むITERの閉じ込め特性を評価する上で重要な課題です。GKVでは核融合科学研究所の大型ヘリカル装置（LHD: Large Helical Device）に対する実証研究を進め、2018年に開始された重水素プラズマ実験に先駆けてその閉じ込め性能を予測するという快挙を成し遂げました（図）。MEGAでは核反応生成α粒子の閉じ込めを左右する高エネルギー粒子駆動

MHD現象についての実証研究を進め、msecオーダーのMHD不安定性が数10～100msecのインターバルで間欠的に励起されるマルチ時間スケール現象を捉えることに成功しました。これらの成果は50篇を超える査読付き論文として公表され、開発ソフトウェアの一部はオープンソースとして公開されました。また、若手研究者を中心に多くの学会賞も受賞し、次世代の核融合シミュレーションをリードする人材の育成にも貢献しました。



▲LHDの重水素プラズマ閉じ込め性能予測
[<http://www.nifs.ac.jp/press/170410.html>]



サブ課題 A 設計を革新する多目的設計探査・高速計算技術の研究開発

宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所
准教授
大山 聖

サブ課題Aは、製品のライフサイクルにわたるコスト低減や高品質化に貢献できる意思決定の質的・時間的ブレークスルーを実現する新設計基盤を整備し、産業競争力強化の実証を目的としています。具体的な達成目標として以下の3つを定義しています。

- (a)大規模計算環境において高効率な多目的設計最適化アルゴリズムを開発し、実設計問題に適用して、その有効性を実証する。
- (b)高速計算技術を多くの分野で利用可能なフレームワークとして整備し公開する。
- (c)多目的設計探査処理をワークフローWHEELにより自動化し、サブ課題間連携に適用する。

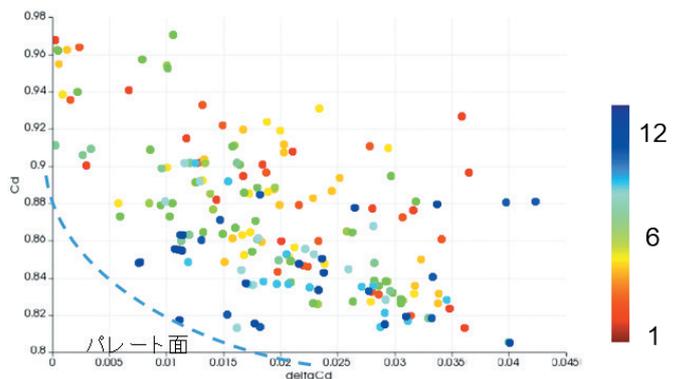
多目的設計最適化アルゴリズムの開発は、戦略プログラムで開発された多目的設計最適化アプリCheetahをベースとし、M2M分解などの新技術を開発・実装することにより制約条件が厳しい実問題においても短時間で優れたパレート最適解がえられる改良を加えたCheetah/Rを開発しました。マツダベンチマーク問題などの複

数の実問題ベンチマーク問題において、開発したCheetah/Rが優れた性能を示すことを確認しています。また、富岳での大規模計算を見据えた予備計算として、重点課題8サブ課題B・マツダ株式会社と連携して車両の空力設計最適化を実施しました。これにより、比較的少ない設計評価回数でも特徴的な関係を抽出することができることを確認しました(図)。

高速計算技術は、時間領域並列化法、低B/Fアルゴリズムの開発を行いました。時間領域並列化法は、材料設計などの応用が見込める放物型方程式で200倍以上の短時間化を果たし、低B/Fアルゴリズムは、88コアのメニーコア環境において80倍以上の優れたスレッド並列性能を達成する画期的な疎行列反復アルゴリズムを開発しました。

設計ワークフローに関しては、ウェブブラウザで動作するワークフロー構築・実行ツールWHEELを開発し、

ABINIT-MP(重点課題6アプリ)+WHEELによる、京microキューを用いた6000ジョブ自動実行を実現し、キャパシティ・コンピューティング事例におけるWHEELの有用性を確認しています。また、サブ課題Cと連携し、FFBによるボックスファン最適設計ワークフローを構築し、性能と騒音の2目的最適化を、Cheetahを用いて実行するワークフローを構築しました。ここでは、複数の計算資源にわたる複雑かつ長時間の解析ワークフローを試行中です。



▲正対風時抵抗値の最小化と横風時抵抗最小化のトレードオフ



サブ課題 B リアルタイム・リアルワールド 自動車統合設計システムの研究開発

神戸大学大学院
システム情報学研究所
教授
坪倉 誠

サブ課題Bでは、デザイナーと技術者が協調してコンセプトデザインを実現できるような超高速で高精度なリアルタイム空力性能評価システム、さらに空力のみならず音波、熱、構造変形といった複数の物理現象が連成しあう実走行環境下での性能評価、多目的最適化による設計上流側での全体俯瞰設計を実現するリアルワールド統合設計システムの開発を進めてきました。リアルタイム解析においては、シミュレーションデータ構造として階層直交格子と埋め込み境界法に基づく格子作成法を採用することで、開発CADデータからデータ修正を行うことなくダイレクトに計算メッシュを作成することに成功し、非構造格子を用いた空力解析と比較してプリ処理を含めて数十分の一に解析時間を短縮することに成功しました。この解析フレームワークを用いて、サブ課題A及びマツダ(株)と連携して、数百ケースに及ぶ車両空力の多目的形状最適化を実現しました。また「富岳」に向けて、SIMD化の促進を中心とするプログラムチューニング

を行い、対「京」性能向上比として25.6倍の高速化を達成しました。さらに多目的最適化で得られた車体形状と空力性能の関係を教師データとしてニューラルネットで学習させることを試みました。この結果、8つの設計変数に対して100個程度の教師データを用いることで、5%程度の誤差で空気抵抗をほぼ瞬時に予測することが可能となりました。現在は、パレート曲面近傍の解に対して共通な流れ構造を抽出すべく、固有直交分解を行い、機械学習処理により重要なモードを抽出することを試んでいます。

リアルワールド解析では、実開発CADデータに対してコーナリング時の車体運動、前輪舵角変化、タイヤ回転を考慮した実走行時の非定常空力解析を実現しました。また、ドライバー反応を含む車体運動モデルを組み込むことで車体運動と空力との双方向連成解析を可能とし、突風や急なハンドル操作時の車体の運動挙動を高精度に予測することを可能としまし

た。また、基礎方程式として非圧縮性流体と圧縮性流体を統一的に扱える方程式を採用し、ボンネット周りの微小隙間から発生する狭帯域音の直接解析を実現しました。さらに流体運動と構造変形を統一的に扱える連続体方程式を採用することで、流体と構造が強連成するような問題への適用も可能にしています。現在は、スズキ(株)から提供されたホワイトボディを対象として、オイラー型構造解析に基づく剛性解析を進めその有用性を検討しています。10分程度でメッシュ作成が可能(一般的な有限要素法ではひと月程度)であり、特にプリ処理に対して既存手法に対する利点があります。



▲ボンネット周辺から発生する狭帯域音の直接解析 協力：スズキ(株)

各サブ課題 研究開発成果の概要



サブ課題 C

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
センター長・教授
加藤 千幸

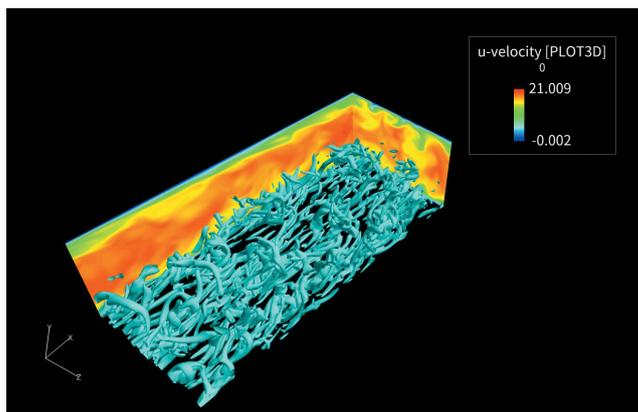
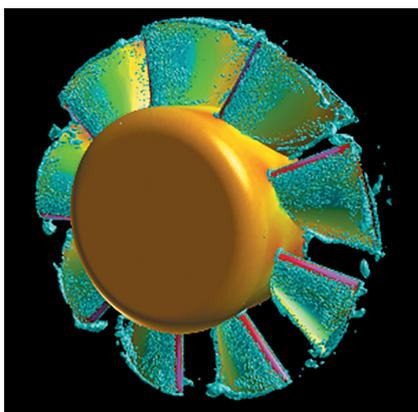
数十億から数百億の格子を用いた大規模計算により、ループ試験や水槽試験に匹敵する予測精度を実現できることは証明済みですが、このような計算を実用化するためには、必要な計算リソースの大幅な削減と計算格子の作成時間の短縮が課題でした。そこで、重点課題8Cでは、FFBの大幅な高速化に取り組むとともに、計算格子の完全自動作成が可能な、格子ボルツマン法ベースの新たな流体解析システムFFXを開発しました。

FFBの高速化に関しては、データのロード効率を徹底的に見直すことにより、ほぼ全てのホットカーネル（主要な計算部分）に対して、「京」を用いて、実効最大値46 GB/secの8割以上にあたる、メモリ転送速度40GB/secを達成し、2倍の高速化を実

準直接計算技術を活用したターボ機械 設計・評価システムの研究開発

現しました。この成果を「富岳」に適用し、「京」に対して約20倍のノード性能を達成しました。一方、FFXの開発に関しては、計算格子の自動作成機能を具備する解析システムを開発し、一様等方性乱流、チャンネル乱流などのベンチマークテストにより、FFBと同等の予測精度を有することを確認しました。また、「京」のほぼ全系を用いて約2.2兆グリッドの大規模格子の自動生成と並列計算が可能であることを示しました。同じ計算格子であれば、FFXはFFBと比較して1/10

以下のメモリ使用量で10倍以上高速な計算が可能です。FFXシステムは任意の複雑形状に対して、計算格子を完全に自動で作成することができるため、自動車の空力・音響計算などの複雑形状まわりの流れの予測に適用しています。ボックスファンの性能と騒音の予測結果（FFB）、および、チャンネル乱流の予測結果（FFX）を下図に示します。誌面の制約により、実験等との比較は示していませんが、これらの予測結果は実験値やDNS（乱流の直接計算）結果とほぼ一致しています。



▲ボックスファンの性能・騒音予測結果（左：FFB）とチャンネル乱流の予測結果（右：FFX）



サブ課題 D

宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所
准教授
高木 亮治

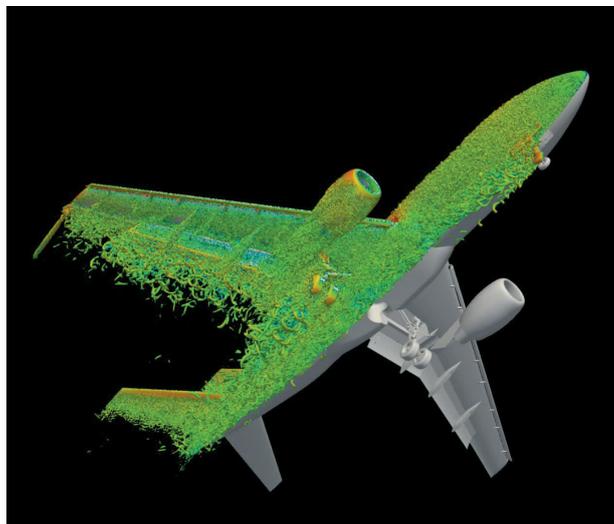
航空機の設計・運用革新を実現するコア技術の研究開発

これまで解析で評価できなかった航空機空力設計課題（航空機離着陸時の最大揚力の予測、遷音速バフェットの予測）を、設計に使えるレベル（精度、解析時間）で解析可能とするために、実飛行条件での実機詳細形状全機周りの空力解析を高速・高精度で実現可能な圧縮性乱流解析プログラムFFVHC-ACEの開発を行ってきました。FFVHC-ACEでは階層型等間隔直交構造格子法と目的別壁モデルを採用しており、解析目的に応じて適切な壁モデル（形状壁面モデル、壁面モデルLES）を選択することが可能です。形状壁面モデルに関しては、航空機実機詳細形状のような複雑形状に対しても高速かつ自動で計算格子生成を実現するIB（Immersed Boundary）法を用いたものと、比較的単純な形状向けに高精度解析を実現するレイヤー格子法が用意されています。実飛行条件である高レイノルズ数流れの高精度乱流解析は本来であれば「富岳」を持ってしても現実的ではありませんが、壁面モデルLESを適用することで、高精度乱流解析に

必要となる計算格子点数を劇的に削減することが可能となり、「富岳」で実飛行条件の高精度乱流解析が可能となります。

FFVHC-ACEは階層型等間隔直交構造格子法と形状壁面モデル（IB法）により、実機詳細形状周りの解析が可能となりました。図に実機詳細形状の解析例を示します。ここでは離着陸形態を表現するため、機体、主翼、尾翼（水平、垂直）、エンジンナセルは勿論のこと、高揚力装置（フラップ、スラット、取付装置）、ランディングギアなども考慮した全機形状の解析を行っています。FFVHC-ACEでは、機体形状データとしてSTLファイルを与えると、解析に必要な計算格子を自動作成し解析を実施。本解析では計算格子の作成時間は数十分であり、従来と比較して劇的に短縮され、計算全体でのターンアラウンドの短縮に大きく貢献しています。

壁面モデルLESは、実機飛行条件の高レイノルズ数流れの高精度乱流解析を実現するためのキー技術です。壁面モデルLESを用いることで、現実的な計算規模でこれまで不可能であった高レイノルズ数での遷音速バフェットの予測や後縁失速の予測に成功しています。



▲実機詳細形状まわりのテスト計算



サブ課題 E 新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータの研究開発

東京大学大学院
新領域創成科学研究科
教授
奥田 洋司

サブ課題Eでは、自動車をはじめさまざまな工業製品の製造現場において根幹となる基礎工程である、溶接工程をターゲットとして取り組んできました。溶接工程は、局所的な加熱・冷却によるひずみや溶接金属の収縮などによって、予測が難しい変形や残留応力による割れなどを引き起こすこともあり、熟練工の知恵や経験に頼る部分も大きい工程です。CAEの活用が期待されていますが、計算規模・計算時間の観点から十分な活用がされていないのが現状です。そこで大規模非線形構造解析ソフトウェアFrontISTRをベースに「高度成形・溶接シミュレータ」の研究開発を進めてきました。

最終年度では、産業分野からのニーズに基づき、2つの実証例題（大型望遠鏡架台部、クレーンマスト）への適用を進めてきました。いずれも数メートル～数十メートル級の機械・構造物である一方、溶接金属の収縮などを高精度に予測するためには、溶接部付近で数 μm ～数mmの細かなメッシュサイズが必要で、全体をモデ

ル化すると数十～数百億要素になると試算されます。このように超大規模な解析モデルが想定される一方で、各部品・各部位だけでも数十バスの溶接工程が含まれ、全工程に渡る解析ステップ数は、数十万～数百万ステップに渡ると試算されます。また、その各ステップで、熱弾塑性はもちろん、母材の固定などがある場合にはアセンブリ/接触状態を考慮するため、材料非線形・境界非線形の両方の考慮が必要です。

こうした複雑かつ大規模な解析を、安定かつ高速に進めるため、2つの課題に取り組まれました。一つ目は、「アセンブリ/接触問題の大規模解析が可能な並列反復法の構築」です。アセンブリ/接触を考慮すると、得られる係数行列が非正定値行列となることから、従来、直接解法が採用されてきましたが、一千万自由度を超えたあたりから十分なスケーラビリティが得られにくくなります。そこで、陽的自由度消去法というテクニックを用い、係数行列を正定値化したうえで反復解法の適用を行いました。二つ目は、実証例題に適用することで顕在化してきた既存アルゴリズムの不安定性に対する取り組みです。多重ループからなる非線形問題ですが、Newton-Raphson反復の閾値に応じて、多重ル

ープの最内にある反復解法の収束閾値を自動調節することで時短化を図りました。また、反復解法が収束しないとき、オンメモリでパラメータを調整しリカバリするカットバック機能を導入し、万が一発散しても、収束が得られていた時点から計算が再開・継続できるようにしました。

さらに、実際の溶接工程に沿った入熱などの条件設定が不可欠ですが、実証例題のように複雑な形状をもつ機械・構造物においては、こうした入力条件の設定が非常に煩雑な作業となります。本プロジェクトでは、複雑な溶接工程を統一的に扱うためのプリポストソフトウェアの開発も並行して行っており、そうした複雑な入熱設定がGUIベースにおこなえるよう機能拡張を行いました。

得られた研究・開発成果は、研究協力をいただいた産業界の方にフィードバック・共有し、溶接工程における溶接順序探索及び逆ひずみ量推定の高精度化・高精度化に資するツールとして役立てられるよう、引き続き取り組みつづけていきたいと思います。

(成果画像は表紙を参照)



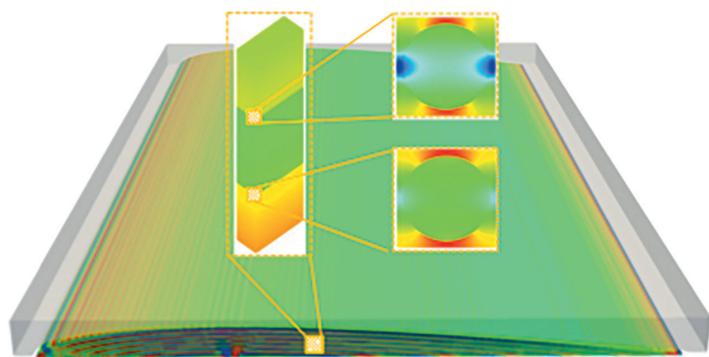
サブ課題 F マルチスケール熱可塑 CFRP 成形シミュレータの研究開発

東京大学生産技術研究所
教授
吉川 暢宏

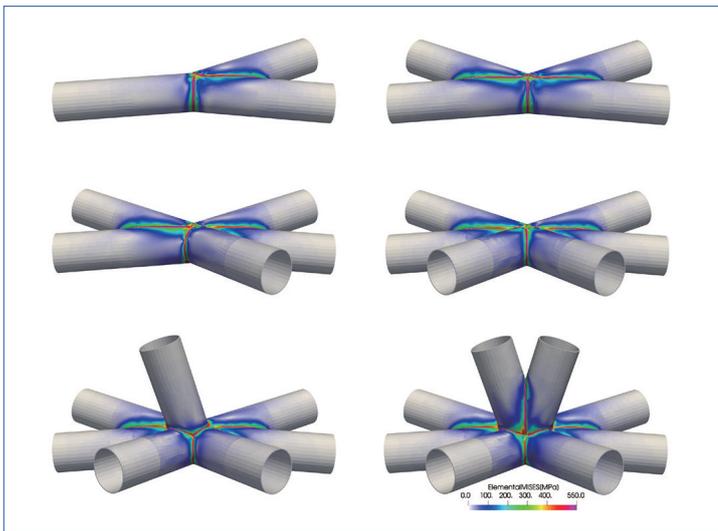
成形性と比剛性・強度の両立に期待して熱可塑CFRPを機械材料として活用する試みがなされていますが実用化例は多くはありません。強度に関する信頼性を確保する有効な手段がないことが主因であり、熱可塑樹脂自体の強度不足に加えて昇温成形により生じる強度のばらつきが大きいこと、最小強度を保証する保守的な設計を行わざるを得ないのが現状です。強度のばらつきは温度変化に伴い材料内部に生じる複雑な応力再配分機構に因ります。その機構を解明し製造と設計に有益な知見を提供することを目的に熱可塑CFRP成形シミュレータを開発しました。ジェットエンジン部品の開発を支援するため、一方向に炭素繊維を配し熱可塑樹脂と複合化したプリプレグシートを積層し加熱および加圧する成形プロセスを忠実にたどることを可能にしました。プリプレグシートは直交異方性材料としてモデル化し、材料パラメータを炭素繊維と樹脂からなるユニットセルに関する非線形解析から均質化法に基づき決定。均質化されたモデル

によるシミュレーション結果から全体の強度を支配する部分を抽出しズーム解析を行うことまで可能にしました。プリプレグシートは薄さ100ミクロン程度であり、シート1枚ごとの正確なモデル化をジェットエンジン部品全体について行うことは「京」の計算資源をもってしても不可能です。現状、実物をスケールダウンした試験片の成形シミュレーションによるバリデーションまで終了しています。均質化モデルにより成形後のマクロ変形を再現することは可能でしたが、積層界面の力学場がマイクロモデルによ

るものと乖離する問題が顕在化し、均質化モデルの妥当性を検討中です。試みに行ったジェットエンジン実部品を模擬したモデルのシミュレーションからは、プレス成形型とCFRP部品の接触面において複雑な力学場が発生し、加圧時および加圧後冷却過程を通じて、時間的にも空間的にも劇的に変動することがわかりました。その変化を定性的に理解することは難しく、「富岳」により実部品クラスの大規模シミュレーションが実施可能となっても、得られたデータの解釈を支援するソフトウェアが必要であると思われる。



▲熱可塑 CFRP 製ジェットエンジン部品のプレス形成ズーム解析



今号の表紙

ポスト「京」重点課題⑧ サブ課題E

FrontISTRをベースに開発した高度成形・溶接シミュレータにより、ターゲット問題の一つである大型望遠鏡架台部のアーク溶接工程をシミュレーションしました。図は、熱応力解析結果を可視化したものです（表示は相当応力[MPa]）。メッシュの詳細化と熱弾塑性の考慮による精度の向上が期待されています。

東京大学大学院新領域創成科学研究科 奥田・橋本研究室 特任研究員 林 雅江

編集後記

今号は、「ポスト『京』」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発（重点課題）を特集しました。プロジェクトは、調査研究・準備研究フェーズを経て2016年度から本格的な研究開発フェーズに入り、いよいよ今年度をもって完了となりました。特集記事では、重点課題⑥および重点課題⑧の各サブ課題責任者らに5年間に及ぶ研究開発の成果の概要をご執筆いただきました。また、重点課題⑧課題責任者の加藤千幸教授には、重点課題⑧の5年間を振り返り、得られた成果について語っていただきました。



計算工学ナビ オフィシャルサイト

本誌のPDF版やソフトウェアライブラリ、ニュースなどのコンテンツを提供しているWebサイトは下記のURLからアクセスできます

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



計算工学ナビ Vol.18

発行日：2020年3月4日

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

office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp