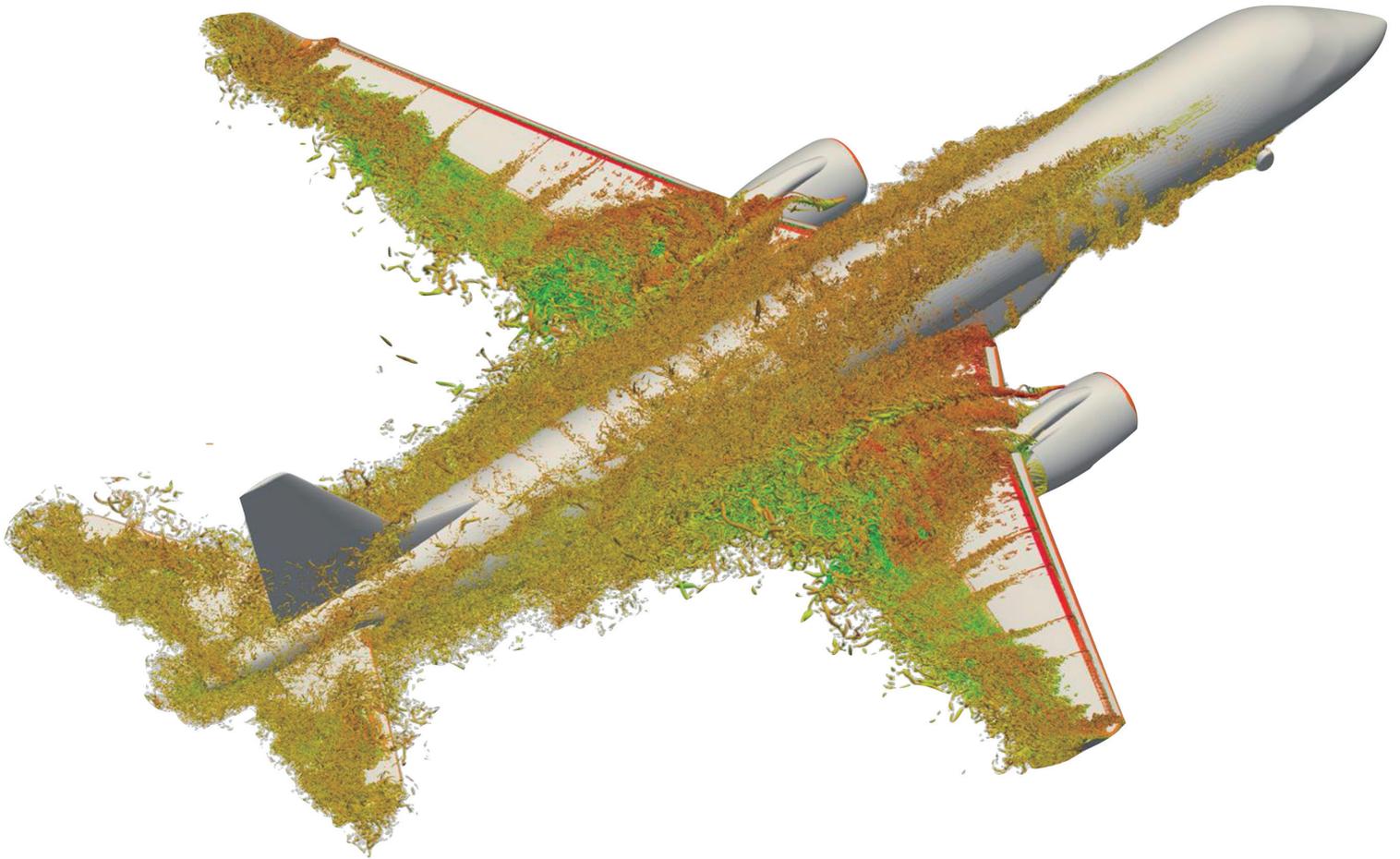


計 算 工 学 ナ ビ

計算工学ナビ・ニュースレター2022年秋号



■計算工学ナビ・特別インタビュー

「富岳」成果創出加速プログラム 航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究

安定・高忠実なKEEPスキームで実現する航空機開発の新たなイノベーション 東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻 河合 宗司

■特集「富岳」成果創出加速プログラム 開発アプリケーション

汎用並列有限要素法解析システムADVENTURE 東京大学大学院工学系研究科 吉村 忍

複雑現象統一的解法フレームワークCUBE 神戸大学大学院システム情報学研究科/理化学研究所計算科学研究センター 坪倉 誠

格子ボルツマン法に基づく大規模LES解析ソルバーFFX 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 山出 吉伸・加藤 千幸

圧縮性流体LES 基盤ソルバーFFVHC-ACE 東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻 河合 宗司

■計算工学ナビ・レポート

RISTのOpenFOAMへの取り組み 一般財団法人高度情報科学技術研究機構神戸センター産業利用推進部 浅見 暁

「富岳」成果創出加速プログラム

航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究 安定・高忠実なKEEPスキームで実現する 航空機開発の新たなイノベーション



東北大学大学院工学研究科
航空宇宙工学専攻
河合 宗司 教授

文部科学省が実施する「『富岳』成果創出加速プログラム」は、「富岳」を用いて成果を早期に創出することを目的としたプログラムです。そのなかの「領域3 産業競争力の強化」に含まれる課題の1つである「航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究」（「富岳」航空機プロジェクト）では、高度な計算能力を有する「富岳」と物理現象を高忠実に再現する壁面モデルおよび計算スキーム（KEEPスキーム）を用いて、世界初となる航空機全機周り・実フライト高レイノルズ数条件での高忠実な圧縮性Large-eddy simulation（LES）解析による航空機空力現象の予測評価に取り組んでいます。これにより、現状の航空機開発における実機フライト試験への依存度を激減させる次世代の設計開発技術の実現をめざしています。今回は、課題代表者である東北大学大学院工学研究科の河合宗司教授に、プロジェクトの取り組みや研究成果などについてお話をいただきました。

数値シミュレーションが 航空機開発を変える!?

はじめに、航空機開発における数値シミュレーションの重要性についてお話しください。

河合 航空機開発に欠かすことができないのが空力性能の予測・評価です。かつて航空機の空力設計に革新をもたらしたのが、時間平均流れ場を対象とする圧縮性CFD（数値流体力学）技術（RANS [Reynolds-Averaged Navier-Stokes] 解析など）の発展とスーパーコンピュータの進歩でした。数値シミュレーションの登場によって、従来の風洞試験への依存度は軽減し、今日ではCFD技術は航空機開発にとって不可欠な技術となっています。航空機空力設計における重要なパラメータにレイノルズ数があります。レイノルズ数は、慣性力と粘性力の比で定義される無次元数で、分母が粘性力、分子が慣性力を表し、粘性力が支配的な場合にはレイノルズ数は低く、どろどろとした安定した流れ（層流）となります。一方、慣性力が支配的となる場合にはレイノルズ数は高く、さらさらとした不安定な流れ（乱流）になります。航空機周りの流れではレイノルズ数が非常に高いのが特徴です。航空機は比較的速い速度で移動し、サイズも大きいので、レイノルズ数が高くなるのです。通常みなさんが乗る旅客機のレイノルズ数は、だいたい 10^7 オーダーを超えるくらいです。巡航時で 5×10^7 くらいのオーダー、離着陸のときは速度が下がるので、 2×10^7 オーダーくらいになります。一方、風洞実験ではこのレイノルズ数がどうなるかというと、たとえばJAXAが保有する航空機用としては日本で最大級の風洞設備などを使ってもレイノルズ数は 10^6 オーダーくらいになってしまいます。風洞に航空機をそのまま入れて測定することはできません。小型の模型を使いますから、サイズが小さくなり、レイノルズ数が低くなるわけです。レイノルズ数が1桁違うと現象は大きく変わってしまいます。そのため、現状の航空機開発では、もちろん風洞試験も行いますが、最終的には実際に航空機を造って飛ばして、どうなるかを確認する必要があります。もちろん航空機開発の

歴史のなかで培われた知見や経験も重要ですが、現状と大きく形状を変えようというときには、予測が非常に難しくなります。では、数値シミュレーションはどうでしょうか。もちろん難しいところはいろいろありますが、レイノルズ数は計算のインプットになりますので、数値シミュレーションで実フライト高レイノルズ数の解析ができれば、航空機開発の進め方は大きく変わるはずですよ。

航空機実機フライト試験を代替する “第二のイノベーション”を

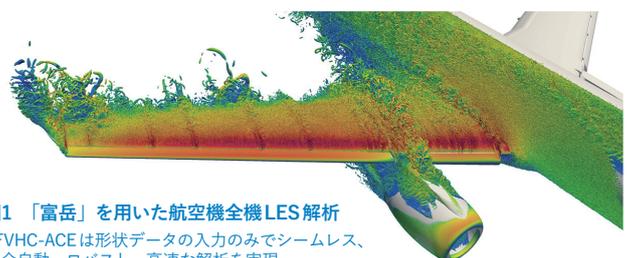
河合先生が取り組んでおられる「『富岳』航空機プロジェクト」の目的は？

河合 最初に、圧縮性CFD技術の発展が航空機設計に革新をもたらしたとお話ししましたが、これを航空機開発の“第一のイノベーション”とすると、数値シミュレーションによる実フライト高レイノルズ数条件での航空機周りの流れをフライトエンベロープ全域で予測することができれば、実機フライト試験を代替する“第二のイノベーション”になり得ると考えています。フライト試験をシミュレーションで置き換えることができれば、コストや時間、開発リスクを減らすことができますし、新たなチャレンジ、たとえばこれまでなかった創造的な航空機設計が可能になります。航空機メーカーの苦労も大きく軽減されます。私たちの研究プロジェクトは、次世代の数値シミュレーションによって、航空機開発におけるゲームチェンジャーをめざしています。さらに、研究の目的はもう1つあります。航空機は高速で飛行するため空気も圧縮されますので、航空機のシミュレーションでは、圧縮性流体の方程式を解くこととなります。しかし、航空機のような複雑形状に対して、細かい乱流現象をきちんと解像しながら高忠実にシミュレーションできるソフトウェアは、現状では、

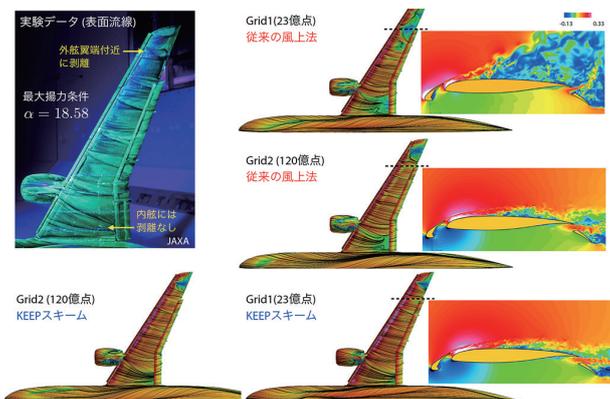
日本はもちろん世界を見てもほとんどありません。商用ソフトウェアはありますが、高忠実なシミュレーションができるかという疑問が残ります。そこで私たちは、学術研究から産業利用まで幅広く使える安定で高忠実なシミュレーションが可能なソフトウェアを開発し、多くの人々の役に立つ高忠実な圧縮性流体解析の基盤アプリとして確立したいと考えてきました。

そうした目的を達成するために、安定・高忠実な計算スキームの開発に取り組まれたわけですね。

河合 はじめに、圧縮性流体解析のボトルネックについてお話ししましょう。乱流を解析するためのLarge-eddy simulation（LES）を実現するには、乱流を正確に解像する計算スキームがとても重要です。正確な計算スキームとは何かというと、離散化エラーが少ない、理想的には離散化エラーがゼロの計算手法です。ところが、圧縮性流体解析では、どうしても計算が不安定になってしまいます。これが圧縮性流体解析のボトルネックなのです。私の知る限り、すべてといっても過言ではないほど圧縮性流体解析ソルバーでは計算の安定化のためだけに、数値拡散といわれる拡散エラーを入れているのが実情です。本来、数値拡散はLESのためには入れたくない。でも、安定化のために入れざるを得ないのです。今まで、誰もこのボトルネックを突破できませんでした。たとえば、学術で使われているトップクラスの研究コードであっても数値拡散を付与していますし、さらに複雑形状解析に用いられる工学応用・商用コードでは、さらに大きな数値拡散エラーを入れることで計算を安定化させています。

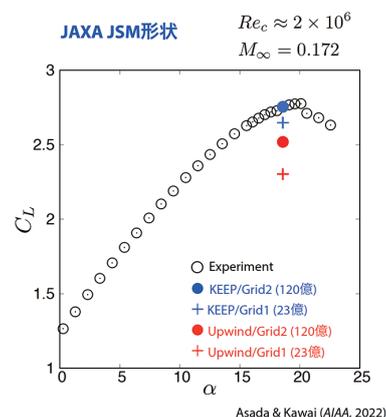


▲図1 「富岳」を用いた航空機全機LES解析
FFVHC-ACEは形状データの入力のみでシームレス、完全自動、ロバスト、高速な解析を実現



◀図2 KEEPスキームのインパクト
KEEPスキームと従来の計算手法（風上法）計算結果と実験データ（左上）の比較。揚力が最大値をとる付近では、どこに剥離が生じているか、KEEPスキームでは、より少ない格子点で実験データと遜色ない結果が得られた

▶図3 航空機全機形状の最大揚力予測
青色はKEEPスキーム、赤色は従来の計算手法。KEEPスキームによる解析結果は実験データとほぼ一致することが示された（縦軸は揚力係数、横軸は迎角）



これからお話しする私たちの計算スキーム「KEEPスキーム」のスタートラインは、「数値拡散エラーを入れなくても安定した計算ができる理想的な計算方法を構築したい」ということでした。そのために何をしたかというと、まず私たちは、数値計算が不安定になるのは物理現象を正しく再現していないからではないかと考えました。そして、今までの計算手法では満たしていなかった物理法則を、さらに高忠実に満たす計算手法を構築し、数値拡散エラーを入れなくても安定に計算できる手法の開発を進めてきました。

もう少し詳しく説明すると、圧縮性流体現象は質量の保存則と運動量の保存則、エネルギーの保存則を満たしながら解くのが一般的です。既存の手法もこれらを満たしています。しかし、それでは不安定になってしまうのです。私たちのアイデアのポイントは、これらの3つの方程式から二次的、副次的に出てくる保存量も満たすような工夫です。二次的な物理量とは運動エネルギーやエントロピーです。これまでの計算手法では、これら二次的な運動エネルギー方程式やエントロピー保存則を満たすようにきちんと計算できていなかったために、計算が不安定となり、それを抑えるために数値拡散エラーを入れていたと考えています。そこで、私たちは発想を転換し、計算手法を工夫して、運動エネルギー方程式やエントロピー保存則を満たすようにきちんと計算できる手法を開発し、提案してきました。それが「KEEPスキーム (Kinetic Energy & Entropy Preserving scheme)」です。簡単に説明すると、質量・運動量・エネルギーの支配方程式を解きつつ、二次的な物理量である運動エネルギーの方程式やエントロピー保存則についても離散的に満たしながら計算できる計算手法になっています。それにより数値拡散エラーを入れなくても、実現象を高いレベルで再現し、かつ安定に計算が可能になったというわけです。

民間旅客機「SpaceJet」の実機フライト解析も実施

河合先生が「『富岳』航空機プロジェクト」に向けて取り組んでこられたのが、圧縮性流体LES基盤ソルバーFFVHC-ACEの開発ですね。

河合 ええ。私たちは、実フライト高レイノルズ数条件での航空機全機複雑形状周りの圧縮性流体LES解析を実現するためにFFVHC-ACEを

開発しています。このソフトウェアの3つの特徴は、① 複雑形状に対して完全自動格子生成を可能とする階層型等間隔直交格子法、② 高レイノルズ数解析を可能とする壁面モデルLES、③ 物理現象を高忠実に再現することで安定性と非拡散性を満足する数値計算スキーム (KEEPスキーム) です。ここでは3つ目のKEEPスキームを中心に説明させていただきました (FFVHC-ACEについてはP6記事を参照)。

続いて、「富岳」を用いた航空機全機LES解析についてお話しします。FFVHC-ACEでは、完全自動で格子が生成され、そのまま直にシミュレーションに移っていくという完全自動のソルバーになっています。航空機の形状データを入力すれば、あとは勝手に計算されるのです。完全自動だけでなく、これまでなかなかできなかった計算ができるようになっています。たとえば、主翼の前縁の一部が前方に移動して主翼との間に隙間をつくるスラットという装置があります。これは翼下面側の気流の一部を上面に流すことで剥離を遅らせ、より高い迎角（翼が流れに対してどれだけ傾いているかを表す角度）まで失速せずに揚力を増大させることができます。スラットは主翼から離して宙に浮かせることができないので、主翼とつなぐ支持装置があって、これが航空機の空力に結構効いていることが知られていますが、そうした細かい形状も自動格子生成で再現しながら、全機周りの解析ができています (図1)。特に巡航時の解析と異なり、離着陸時はこうした複雑な形状がつくり出す乱流現象が非常に重要になるため、これまでの乱流を直接解かない計算手法ではうまく予測できなかった領域です。さて、図2・3では、複雑形状解析で広く一般的に用いられている既存の計算手法（風上法）と私たちのKEEPスキームによる解析結果を比べることで、KEEPスキームの結果に与えるインパクトを示しています。離着陸時のような揚力が最大値をとる付近では、機体周りの流れがどのようになっているのか、実験とシミュレーション結果を比較しています。実験データでは、主翼の内舷側には境界層の剥離がなく、外舷側に剥離が見えている様子が示されています。一方、シミュレーションの結果を見ていただくと、KEEPスキームでは23億点の格子で内舷側には付着している流れ場が予測されており、外舷側の剥離の様子も実験データと似ています。これに対して従来の計算手法（風上法）では、格子点数が120億点だとややいい結果が出ていますが、同じ23億

点では内舷側も外舷側も大きく剥離し、実験データとかなり違ってきます。つまり、5倍強の格子点を使った従来法と比べてもKEEPスキームは遜色ないというか、より優れた結果が出ているわけです。言い換えれば、従来の計算手法では「富岳」を使っても、正確な航空機全機LES解析を行うことが難しいのに対して、KEEPスキームなら「富岳」で十分な計算ができることが実証されたわけです。

民間旅客機「SpaceJet」の実機フライト解析も行われたそうですね。

河合 はい。三菱重工グループの方々にFFVHC-ACEを使って「富岳」上で計算していただきました。私を知る限り、産業界による初の民間旅客機のLES解析です。その結果は公開されており (表紙画像を参照)、形状データの入力のみで完全自動かつロバストなLES解析が実現できること、さらに高精度に離着陸時の空力予測も可能であることが実証されました。

今後はどのように研究開発に取り組んでいかれるのですか。

河合 3年間の『富岳』成果創出加速プログラム』では、離着陸性能を決める揚力係数 C_L の最大値およびその前後の予測を重要なターゲットとして行ってきました。その目標はほぼ達成しつつあります。しかし、航空機設計はこれだけでいいわけではありません。たとえば高速側のフライトエンベロープ境界付近では、衝撃波が非定常に振動するバフット現象というものがあります。こうした現象の予測も今後はやっていきたいと考えています。また、翼に発生するフラッターとよばれる振動についても、設計で重要になるので、流体と構造を連成させる解析にも展開していきたいです。もう1つターゲットにしたいのは、離着陸時の騒音問題です。すでに高忠実な計算ができていていると思っているので、航空機の騒音解析にも使えないかと考えています。さらに、学術研究から産業利用・実用までの使用に耐え得る高忠実な圧縮性流体LES解析の成果は、さまざまな分野に適用できると考えています。たとえば高速鉄道やロケットなどです。こうしたアプリケーションの広がりがより大きくなっていけばいいと考えています。



東京大学大学院
工学系研究科
吉村 忍 教授

汎用並列有限要素法解析システム ADVENTURE

著者らは、2020年4月にスタートした文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムにおいて、Society5.0を支える電力システムの主要クリーンエネルギー源として期待されるCCS (Carbon dioxide Capture and Storage) 技術の適用に適した次世代火力発電システムの主要構成機器である石炭ガス化炉と超臨界圧CO₂ガスタービン、および洋上ウィンドファームのそれぞれの高精度かつ高速なデジタルツインを構築し、実機エネルギーシステムの開発、設計、運用の最適化に活用できるようにして、それらの実用化を大幅に加速することを目的とした研究開発プロジェクト(略称: クリーンエネルギー「富岳」プロジェクト)を進めています。

このプロジェクトでは、著者らが25年に渡って研究開発を進めている汎用並列有限要素法(FEM)解析システムADVENTUREのうち、並列固体力学解析コードADVENTURE_Solid2と並列熱伝導解析コードADVENTURE_Thermalの「富岳」向けチューニングと実活用を進めています。

機械・構造物の変形・破壊現象の数値解析技術として、現在最も広く用いられており、ものづくりの基盤となっているのはFEMです。実用的FEMでは、実機の複雑形状の問題を扱えることが必須であるため、3次元解析の場合であれば、大小さまざまな4面体や6面体、あるいはそれらが混在した非構造格子(メッシュ)を扱うこととなります。また、時定数のごく短い衝撃現象の解析を除いて、ほとんどの問題において連立一次方程式を陰的に解くことも必須となります。

最近では、HPCの進展・普及によって産業界においても解析対象の大規模化へのニーズが急速に高まってきています。その場合、FEM構造解析の必須アイテムであったマトリクスソルバーの陰的解法として直接法ソルバーを活用することが不可能となり、反復法ソルバーの活用が望まれます。しかしながら、機械・構造物の

場合、解析対象の規模が大規模になると、流体解析などとは異なり、構造内に空間を有するため、たいへん複雑な形状で、かつ相対的に薄肉の構造物となります。このため、解くべきマトリクス方程式の条件数が悪化し、ほとんどの反復法ソルバーでは収束解を得ることができず、実用に適しません。このような背景に照らすと、ADVENTURE_Solid2が採用しているHDDM-BDD型マトリクスソルバー(図1)は画期的です。

すなわち、極めて複雑な形状を有し超大規模(10⁸~10⁹自由度オーダー)な実用構造(薄肉構造)解析を、「富岳」のような数万ノード、数十万コアのHPC環境で高速かつ確実に解く(反復計算が収束する)ことができる、世界唯一の汎用FEM固体力学解析コードとなっています。実用的成果の例として、東京電力福島第一原子力発電所1号機(建屋-格納容器-炉容器-各種支持構造を含む超精密モデル)の2011年東北地方太平洋沖地震本震時の地震応答解析(ニューマークβ法)を、「京」や「富岳」上で4面体一次要素の2億自由度モデルや、4面体二次要素の15億自由度モデルで解析を行いました。

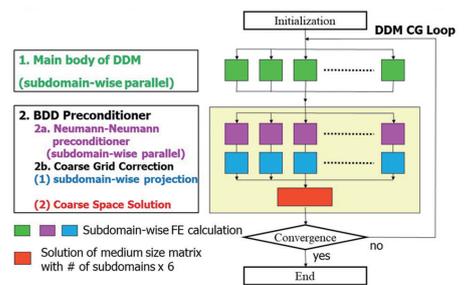
ADVENTURE_Solid2のマトリクスソルバーの基本的な処理フローを図1に模式的に示します。複雑かつ超大規模な解析対象を、PartとSubdomainの2階層で分割する階層型領域分割法(HDDM)を採用することによって、数万ノード、数十万コアのHPC環境で効率的に処理するとともに、balancing領域分割法(BDD)に基づく前処理手法を採用することによって、条件数の大きな悪構造の方程式系であっても、ロバストに収束解を得ることができます。結果的には、HDDM-BDD法は、極めて多数の小(数千自由度)~中規模(数万自由度)の部分領域のFEM求解を行う「ローカルFEMソルバー」と、部分領域の剛体自由度に関する中規模(数十万自由度)方程式の求解を行う「コースグリッド修正」から構成されます。部分領域ローカルFEMソルバーはプロセッサ(あるいはマルチコアやシングルコア)単位で実行され、さまざまな並列直接法ソルバーが活用できます。一方、BDD前処理のためのコースソルバー部分についても、さまざまな並列直接法ソルバーが実装さ

れます。両アプローチにより、巨大な非構造格子を用いて、任意の複雑形状を扱うことができ、従来解かれたことがないような極めて複雑な形状の実機構造物の陰解析を実現できます。

現在、「富岳」上で、石炭ガス化炉の燃焼流動・伝熱・冷却・繰返し熱弾塑性の連成シミュレーションと、5MWや15MWの巨大洋上風車の流体構造連成振動と累積疲労損傷シミュレーションを実施しています。前者では、並列LES燃焼流解析ソルバーFFR-Comb(有限体積法)とADVENTURE_Thermalを汎用並列連成カップラーREVOCAP_Couplerを介して双方向連成シミュレーションを行い、そこで得られた炉容器構造体の温度履歴を入力としてADVENTURE_Solid2による繰返し熱弾塑性(クリープ)解析を行っています。後者では、並列LES乱流解析コードFFBとADVENTURE_Solid2をREVOCAP_Couplerを介した一方向流体構造連成シミュレーションを行い、ADVENTURE_Solid2から得られた動的振動応答解析結果から、後処理ツールADVENTURE_Fatigueを用いて累積疲労損傷解析を行っています。以上の解析のために、ADVENTURE_Solid2については、次の解析機能が追加実装されました。

- ・繰返し熱弾塑性クリープ解析機能
- ・積層構造材料の直交異方性解析機能

さらに、後処理ツールとして、累積疲労損傷を評価するADVENTURE_Fatigueも新たに開発されました。現在、ADVENTURE_Solid2、ADVENTURE_Thermal、ADVENTURE_Fatigue、REVOCAP_Couplerはいずれも、「富岳」上で稼働しています。



▲図1 ADVENTURE_Solid2のHDDM-BDDソルバーの処理の流れ



神戸大学大学院
システム情報学研究所/
理化学研究所
計算科学研究センター
坪倉 誠 教授/チームリーダー

複雑現象統一の解法フレームワークCUBE

複雑現象統一の解法フレームワークCUBEは、2012年より理化学研究所計算科学研究センターで開発を進めています。流体や個体といった連続体として扱える物体の流動や変形、さらにそれらと連成した熱の輸送や音の発生、化学反応を含むような複雑現象に対しては、複数のシミュ

レーション技術を連成させることで対応することが一般的ですが、このような場合、シミュレーション間でデータの補間や異なる時空間スケールを扱う必要があるため、並列計算における単体・並列性能の向上が難しく、この結果、シミュレーションの解像度を高めることが難しいという問題が生じます。CUBEでは、統一的な偏微分方程式とトップダウン的なデータ構造を採用することでこの問題を解決し、超並列環境を有効に活用して問題解決のブレークスルーをもたらすことを目的としています。統一的データ構造としては階層直交格子を採用し、立方体領域

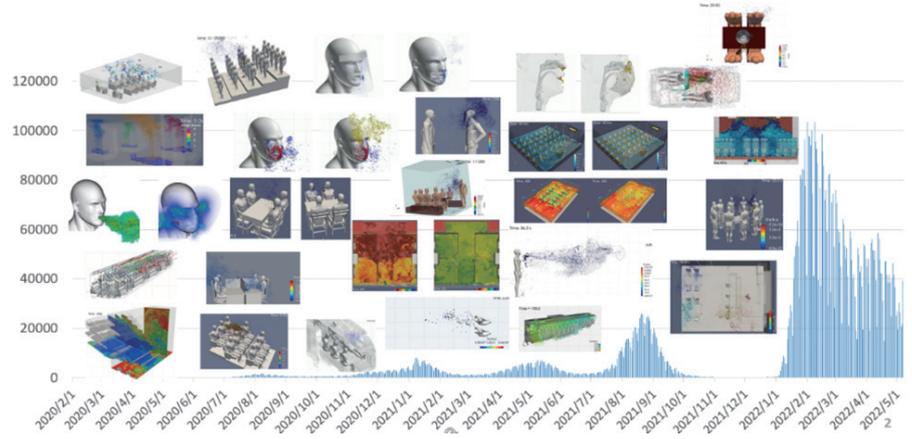
に対する八分木法による領域分割(Cube)と、全てのCube領域に対して同数の計算格子(Cell)を配分するビルディングキューブ法(Nakahashi, 2003)を採用しています。こういったデータ構造を採用することで、次世代の計算機アーキテクチャに対しても容易なチューニングが可能となり、「富岳」において現在、6.4%程度の単体性能を達成し、9%程度の性能向上の目的がたっています。また、並列性能に対しては、実際の自動車車体形状を対象としたウィークスケーリングにおいて、最大680億セル規模、51,200ノードに対して74%程度の性能を達成しており、最



▲図1 車体の隙間から発生するフィードバック音の直接解析

大数千億セル程度までの超大規模計算を視野に入れた開発を進めています。

CUBEの主目的の1つは、スパコン「京」や「富岳」などのフラッグシップスパコンの産業利用を促進することにあり、自動車や燃焼システムを対象とした理研産学コンソーシアムや、都市・建築CFDを対象としたコンソーシアムと連携することで、実産業界での利用を想定したフレームワークの設計とその有用性の検証、さらには社会実装までをめざした研究開発を進めています。これらの活動からの要請の1つとして、超並列計算におけるシミュレーションの速度のみならず、計算モデルの作成の高速化が挙げられます。実際、シミュレーションの空間解像度が高くなると、形状データ (CAD) の表面修正と格子作成にかかる時間が指数的に増大し、実設計開発環境での利用の大きな障害となります。この問題に対して、直交格子を対象とした埋め込み境界条件を改良することで、部材間の隙間や重合を含むCADデータからの直接格子作成を可能とし、たとえば自動車会社で実際に用いられている数千の部材を集めたCADデータからのメッ



▲図2 新型コロナ感染リスク評価と対策のデジタルトランスフォーメーション (実施解析の一例と日本の新規陽性者数の推移)

シュ作成を、数十億セル規模であれば1時間以内に達成することができます。これは一般的な非構造格子をもちいた場合の格子作成の数百倍に相当します。これにより、自動車の形状を詳細に再現し、統一解法を用いることで、車輪の回転や操舵による舵角変化を含む車体の運動・空力連成シミュレーションや、車体表面の微小な隙間から発生するフィードバック音の予測など、実運転条件を想定したりアルワールドシミュレーションに大きな進展をもたらしました (図1)。

一方、超並列計算環境の活用という意味では、今まで再現が難しかった複雑現象を扱えるという観点からの進展に加えて、膨大な数の計算を高速に実施し、ビッグデータを生み出すというデータ科学との融合によるシミュレーシ

ョン活用の高度化という観点でもCUBEは大きな進展をもたらしました。2020年に発生した新型コロナウイルスパンデミックでは、CUBEと「富岳」計算資源を活用することで、2年程度の期間の間に、2,000万ノード時間程度を用いて、70を超える交通機関や公共施設等の感染シーンに対して、1,500を超える評価を行い、感染リスク評価と対策提案のデジタルトランスフォーメーションを実現しました (図2)。現在は、自動車に関するリアルワールドシミュレーションと、自動車、都市・建築、室内環境設計を対象としたデータ科学融合シミュレーションに関して、2つの成果創出加速プログラム、新型コロナ感染リスク評価と対策提案に関して、JST/CRESTのプロジェクトを推進しています。

格子ボルツマン法に基づく大規模 LES 解析ソルバー FFX



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
山出 吉伸 協力研究員



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 教授

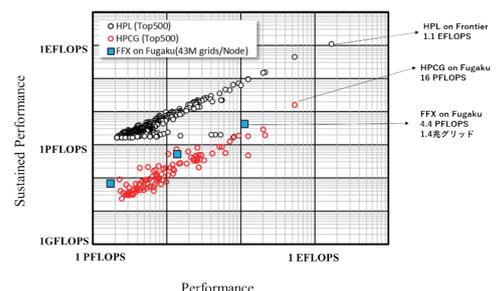
工業製品のまわりの流れは多くの場合乱流であり、製品 (物体) の近傍には無数の微小な渦が存在します。たとえば、時速80kmで走行する車のまわりには直径約0.5mmの渦が存在し、秒速1mで曳航される模型船のまわりには直径約0.8mmの渦が存在します。この小さな渦の運動によって運動量や熱が輸送されるので、物体表面近くの渦の運動を直接計算 (以下、準直接計算) することによって、車や船舶の抵抗やファンのまわりの流れから発生する音などの工業製品の流体性能を実験に匹敵する精度で予測することが可能になります。製品近傍の渦の直径はサブミリオーダーである一方、製品のサイズはメートルオーダーであるため、乱流の準直接計算は必然的に大規模になります。車や模型船の準直接計算に必要な格子数は非構造格子で数百億~数千億、等間隔直交格子で1兆程度となります。本研究課題では、工業製品の流体性能を準直接計算によって実験の代替えとなり得る精度で予測するために、有限要素法に基づくソ

フトウェアであるFrontFlow/blue (以下、FFB) および格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method、以下 LBM) に基づくソフトウェアであるFrontFlow/X (以下、FFX) を開発してきました。ここではFFXの開発進捗および最新の成果について報告します。

準直接計算の実用化の鍵の1つは計算速度です。2022年6月に発表されたTop500ランキングの計算機の性能を図1に示します。横軸は計算機のピーク性能、縦軸は2つのベンチマークテストの結果を示し、黒丸 (○) はHigh Performance Linpack (以下、HPL)、赤丸 (○) はHigh Performance Conjugate Gradient (以下、HPCG) です。スパコン「富岳」はHPLでは2位に退きましたが、実用計算に近いHPCGでは依然、世界一の性能を誇っています。この図には、スパコン「富岳」のノードあたり4,300万グリッドをのせた、FFXのweak-scaleベンチマークテストの結果を併記しています。FFXの結果の場合、使用したノード数から計算されるピーク性

能を横軸に示しています。FFXの性能はTop500のHPCGにおける性能よりも高く、スパコン「富岳」の32,768ノードを用いた計算 (グリッド数約1.4兆) の計算で4.4PFLOPSの実効性能を達成しています。LBMは陽解法であり時間刻目が小さく、時間ステップ数が多くなりますが、時間ステップ数を100万ステップと仮定すれば22時間程度で実行できます。実際の計算では通信負荷がこのベンチマークテストよりも高くなり、並列化効率が悪化することがわかっていますので、その改良に取り組んでいます。

FFXは計算の開始時にSTLなどの表面形状データを計算格子間のインターセクト情報の集合に変換し、壁面境界条件を課します。このた



▲図1 Top500におけるHPL、HPCGの性能およびFFXの富岳におけるWeak Scaleベンチマークテスト結果

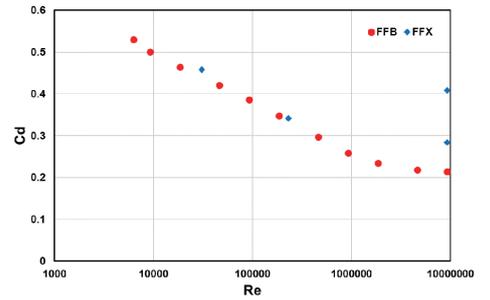
め、ユーザは形状データファイル名を指定するだけで計算することができ、メッシュデータを作成する必要がありません。1兆格子規模の複雑形状計算でも30秒程度でインターセクト情報を作成できることを確認しています。一様等方性乱流、チャンネル乱流、角柱まわりの流れなどの基礎的な流れ場の計算では、FFXはFFBと同精度な予測精度が得られることを確認しています。車のまわり流れのテスト計算結果(流速分布)を図2に示します。格子解像度は2mm、格子数は約1,300億です。また、レイノルズ数と抵抗係数との関係を図3に示します。この図にはFFBによる結果も併記しています。FFXによる計算は実車のレイノルズ数では格子解像度が不足し、リアウィンドウからはく離が実際よりも早

るため、抵抗係数は過大となりますが、この解像度の格子で解像できるレイノルズ数であればFFBによる結果と定量的に一致していることがわかります。この計算は一様な格子解像度で実施したのですが、階層的な解像度の計算格子を用いれば1兆程度格子で50 μ mの解像度(壁面近傍)の計算を実現でき、実際のレイノルズ数



▲図2 FFXによる車両まわり流れ計算における主流方向速度の瞬時分布

の条件でも高精度な計算が可能であると考えています。このような計算結果は別途、ご紹介したいと思います。



▲図3 車両の抵抗係数のレイノルズ数依存性



圧縮性流体 LES 基盤ソルバー FVHC-ACE

東北大学大学院工学研究科
航空宇宙工学専攻
河合 宗司 教授

「富岳」成果創出加速プログラム「航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究」では、これまで困難であった実フライト高レイノルズ数条件における航空機全機複雑形状周りの高忠実な圧縮性流体LES解析を実現させ、本LES解析技術が航空機空力設計における第二のイノベーション(*)となり得ることを先導的に実証していくことをめざしています。その中核となるのが、現在研究開発を進めている圧縮性流体LES基盤ソルバーFVHC-ACEです。本稿では、FVHC-ACEの3つのキー技術やFVHC-ACEを用いた最新の航空機全機LES解析について、紹介します。

FFVHC-ACEの3つのキー技術

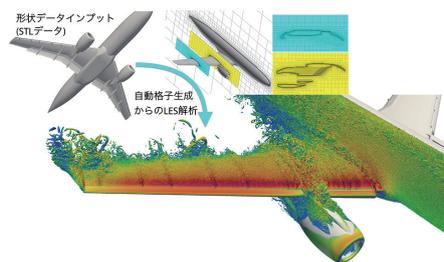
航空機全機複雑形状周りの高忠実な圧縮性流体LES解析を実現させるFFVHC-ACEの3つのキー技術は、(1)複雑形状に対して完全自動格子生成を可能とする階層型等間隔直交格子法、(2)高レイノルズ数流れのLES解析を可能とする壁面モデルLES、(3)高忠実な圧縮性流体のLES解析を実現する数値計算スキーム(KEEPスキーム)です。特にわれわれオリジナルの学術成果(2)(3)を基盤とした3つのキー技術がすべて揃うことで、これまで困難であった航空機全機LES解析を初めて実現しています。

航空機離着陸時には、高揚力装置スラット・フラップやその支持装置、さらには脚などの複雑形状が展開されます。このような複雑形状に対して従来の物体適合格子を作成することは、実際の計算時間よりもしばしば大幅に時間がかかります。さらにはLES解析が必要となる大規模格子であれば、作成そのものが困難となることもあります。FFVHC-ACEでは、階層型等間隔直交格子法を用いることで、形状データ(STL

データ)の入力のみで完全自動格子生成からの航空機全機LES解析をシームレスに実現しています(図1)。本機能は、格子生成を含め高速かつ容易に、誰でも高品質な複雑形状LES解析を実現するうえで、欠かすことのできない技術となっています。

さらに航空機のLES解析を困難にしている要因に、高レイノルズ数の壁乱流現象を扱う必要性があります。航空機の空力はレイノルズ数依存性が強いことが知られており、実際のフライト条件である $Re_c \sim 10^7$ にもおよぶ高レイノルズ数条件での空力予測が欠かせません。この高レイノルズ数流れのLES解析を可能としているのが、われわれオリジナルの学術成果である壁面近傍(おおよそ境界層厚みの5~10%以下の領域)の内層乱流をモデル化する壁面モデルLESです。壁面モデルLESでは、LES本来の予測精度を保ったまま、格子点数の大幅な削減および大きな時間刻み幅を取ることが可能となり、通常のLESと比べ約10,000倍の飛躍的な高速化を実現しています。この壁面モデルLESがなければ、向こう数十年のスパコンの進歩を考えても、 $Re_c \sim 10^7$ レベルの航空機全機LES解析は困難であり、FFVHC-ACEのキー技術の1つです。

以上に加え、LES解析では乱流現象を正確に解像する数値計算スキームが重要な役割を果たします。FFVHC-ACEでは、高忠実な圧縮性流体LES解析を実現するKEEP(Kinetic-Energy and Entropy Preserving)スキームを独自に開発し、実装しています。KEEPスキームでは、



▲図1 FVHC-ACEによる完全自動格子生成からの航空機全機LES解析

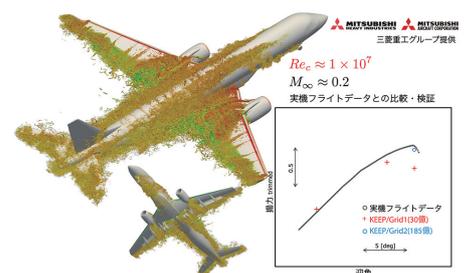
圧縮性流体現象でキーとなる2次的な物理量(運動エネルギー・エントロピー)についてもその物理法則を満たすように計算法を工夫することで、数値拡散(散逸エラー)を導入せずに、今までにないロバストで高忠実な圧縮性流体LES解析が可能となっています(詳細は本誌のP2-3、KEEPスキームに関するインタビュー記事をご覧ください)。

FFVHC-ACEを用いた産業界による航空機全機LES解析

図2は、FFVHC-ACEを用いた三菱重工グループによる民間旅客機の実機フライトを対象としたLES解析結果です。形状データの入力のみで完全自動かつロバストなLES解析が実現できること、かつ高精度に離着陸時の空力予測が可能であることを示しています。これは私が知る限り、産業界による初の民間旅客機のLES解析です。学術研究から産業利用・実用までの使用に耐える高忠実な圧縮性流体LES解析が実現可能なアプリケーションは、日本国内はもとより世界的に見てもほぼ存在しないといっても過言ではない状況です。そのようななか、高忠実な圧縮性流体LES解析の基盤アプリの構築・公開も私たちの1つの大きな目的であり、FFVHC-ACEがその一端を担えればと考えています。

<注釈>

(*) 計算工学ナビ・ニュースレターVol.20(2021年3月発行)「最新の圧縮性LES研究と「富岳」で航空機開発に第二のイノベーションを」を参照。



▲図2 FVHC-ACEを用いた三菱重工グループによる民間旅客機LES解析

RISTのOpenFOAMへの取り組み



一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)
神戸センター産業利用推進部

浅見 暁 次長



● RISTのアプリケーション・ソフトウェア利用環境整備の取り組み

高度情報科学技術研究機構 (RIST) は登録施設利用促進機関、及び「HPCIの運営」代表機関の業務の一環として、スーパーコンピュータ「富岳」を中心とするHPCIシステムの利用者支援を行っています。この一環として、HPCIユーザの利便性の大幅な向上、成果の早期創出、ユーザのすそ拡大等の効果を狙い、アプリケーション・ソフトウェア (以下、「アプリソフト」) の利用環境整備(ブリンストール、利用に有用な情報の提供など)を2017年度から実施しています。その整備対象として、利用者が多いまたは利用の見込まれるアプリソフト (Open Source Software; 以下、OSS*) (カテゴリ1)、国で開発された重要なアプリソフトや新しい分野として利用が見込まれるアプリソフト (以下、「国プロアプリ」) (カテゴリ2) の2種類に分類したアプリソフトから、RIST内に設けた外部有識者からなるアドバイザーWGからのアドバイス、ポスト「京」重点課題プロジェクトや「富岳」成果創出加速プログラム等のコミュニティへのヒアリング、さらには国内外の動向調査などの結果を元に整備計画を立案し、整備を実施してきました。現在、カテゴリ1として5本のOSS (OpenFOAM、LAMMPS、GROMACS、Quantum ESPRESSO、FDS) を「富岳」に、カテゴリ2として15本の国プロアプリをHPCI計算機システムに整備する活動に取り組んでいます。また、整備したアプリソフトについては、開発グループやHPCIの各基盤センターと連携を取りながら各計算機システムを利用した講習会 (ハンズオン) を実施しています。

私の所属する産業利用推進部で主に担当しているOpenFOAMは、利用報告書に記載されたアプリソフトの利用ランキングにおいて2番目(2022/3/30までの産業課題において)に多く利用されているため、本稿では「富岳」におけるRISTのOpenFOAMへの取り組みについてご紹介します。

● OpenFOAMの整備状況

OpenFOAM (Open source Field Operation And Manipulation) はC++で記述された数値流体ソルバー群で、多種多様な流体解析に対応するソルバーが実装されています。また利用者の目的に合致した標準ソルバーがない場合には、ソルバーをカスタマイズ (つくり込むこと) することが可能です。OpenFOAMは、現在、The OpenFOAM Foundation[1]と、ESIグループのOpenCFD社[2]から公開されている2種類のバージョンがあります。「富岳」におけるOpenFOAMは、Spack[3]と呼ばれるパッケージ管理ツールによるブリンストール環境とインストール方法を記載した構築手順書の2つを提供しています。いずれの場合も、「富岳」向けの最適化オプションをつけてソースコードをコンパイルしたものを利用できるようになっています。Spackではビルド済みのバイナリファイルを提供しており、spack loadコマンドを実行することにより容易に環境設定が行われます[4]。既存のOpenFOAMの標準ソルバーを利用する場合は、このSpackによる方法が便利です。またソルバーをカスタマイズして利用する場合に対応するために、利用者自身でインストールを行うことができるように構築手順書を情報共有CMS(「富岳」利用者のHPCIアカウントによるログインが必要)で提供しています。

2022年6月現在、RISTが「富岳」に整備しているOpenFOAMのバージョンは表1の通りです。

	Foundation版	OpenCFD版
Spack提供版	8	v2012, v2106
構築手順書	8, 9	v1912, v2006, v2012, v2106, v2112

▲表1 RISTが「富岳」に整備しているOpenFOAMのバージョン

● OpenFOAMの支援

RISTは、HPCI利用者からの一元的な問い合わせの窓口として「ヘルプデスク」を設け、利用者からさまざまな相談や支援の依頼を受け付けています。OpenFOAMの支援から、性能改善事例を

2つほど紹介します。図1は、タイムステップループに入るまでの初期処理時間が高並列実行時に大幅に増加するという現象を改善した「京」での事例です[5]。MPI_Send/MPI_Recv通信を用いた集団通信のパターンに着目し、MPI_Gather/MPI_Scatter関数やMPI_Alltoall関数に置き換える修正を実施、約6,500秒かかっていた初期処理の時間を26秒まで短縮することができました。この修正は、タイムステップループ部分でも有効で、実行時間は447秒から65秒へ改善できました。

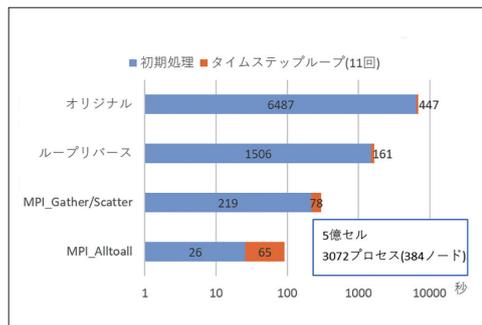
次にCAEワークショップで発表した「富岳」でのベンチマークテスト実行時の事例[6]を紹介いたします。高並列実行時に初期処理時間が増加してしまうという現象が発生し調査を行ったところ、v1712から追加されたファイルハンドラー処理の部分が影響 (各processorNディレクトリに対し、全プロセス数回のアクセスが発生) していることが分かりました。これをMPIプロセスが担当するディレクトリにのみアクセスするようにバッチ修正することによって、それまで約18,000秒の時間がかかっていた部分を78秒に短縮することができました (図2の512ノード時)。この事例以外にも、「富岳」でのOpenFOAMの利用に関する問い合わせ件数は8件ありました。

上記の2つの事例については、日本ESI、OpenCFD社へ情報提供を行い、それぞれOpenFOAM+、OpenFOAM-v2012で採用され、オリジナルコードが修正されました。その他のベンチマークについては、HPCIポータル[7]もご覧ください。

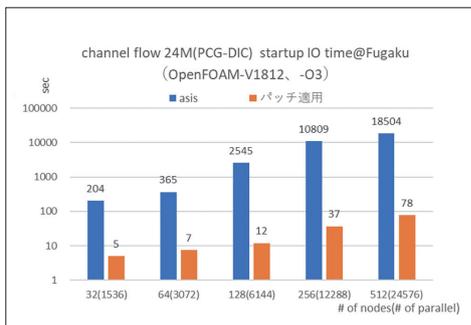
● 今後のアプリ整備計画

今年度、「富岳」においては5本のOSSのバージョンアップを予定しており、また、合計15本の国プロアプリについては、「富岳」をはじめHPCIにおいてバージョンアップを計画中です。さらに、整備したアプリケーションを効率よくまた簡便に実行するためにワークフローツールの整備も検討しています。アプリの普及活動として、R-CCS (理化学研究所) や大学の基盤センターと協力して講習会を実施していますが、新たな展開として講習会参加者・参加予定者の利便性の向上を目的に動画などのアーカイブ化・公開を行う予定です。

今後もRISTでは、「富岳」を含むHPCIの利用者からの要望に応えることができるようアプリソフト利用環境整備を進めていく所存です。



▲図1 初期処理とタイムステップループの時間の推移



▲図2 初期処理時間の改善結果

【参考文献】

- [1] <https://openfoam.org/>
- [2] <https://www.openfoam.com/>
- [3] <https://spack.io/>
- [4] https://www.hpci-office.jp/pages/openfoam_r-ccs_riken-2
- [5] 浅見 暁, 井上 義昭, 青柳 哲雄 (高度情報科学技術研究機構): 「京」, HPCIにおける大規模並列化に向けたOpenFOAM高度化支援 RIST NEWS No.61 pp.3-13 2016.7.22 https://www.rist.or.jp/mews/61/ristnews_61.html
- [6] 浅見 暁 (高度情報科学技術研究機構): 第4回CAEワークショップ 富岳/FX1000に向けたOSS移植に関する富士通-RISTの共創 https://www.hpci-office.jp/invoke2/documents2/ws_cae_210312_azami.pdf
- [7] https://www.hpci-office.jp/documents/appli_software/Fugaku_OpenFOAM_performance.pdf



今号の表紙

FFVHC-ACEによる民間旅客機のLES解析

「富岳」成果創出加速プログラム「航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究」では、これまで困難であった実フライト高レイノルズ数条件における航空機全機複雑形状周りの高忠実な圧縮性流体LES解析を実現させるため、圧縮性流体LES基盤ソルバーFFVHC-ACEの研究開発を進めています。表紙の画像は、三菱重工グループによるFFVHC-ACEを用いた民間旅客機「SpaceJet」の実機フライト試験を対象としたLES解析結果です。形状データの入力のみで完全自動かつロバストなLES解析が実現しており、この成果により、高精度な離着陸時の空力予測が可能であることが示されました。

東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻 教授 **河合 宗司**
画像提供/三菱重工グループ

編集後記

『富岳』成果創出加速プログラムは、現在4領域22課題で推進されており、そのうち4課題は、産業競争力の強化に資するものづくり分野の課題です。今号の特集では、それらの課題のうち、「航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究」で挙げられている優れた成果の一つの安定・高忠実なKEEPスキームについて、課題代表者に語っていただきました。また、ものづくり分野の4課題で開発されている4つのアプリケーションの開発状況について紹介しました。2020年から開始された『富岳』成果創出加速プログラムも3年目を迎え、今回紹介した4課題のうち3課題は、今年度が最終年度になっています。得られた最終成果により、産業界の具体的課題解決へ貢献することが期待されています。



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.23

発行日：2022年9月1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