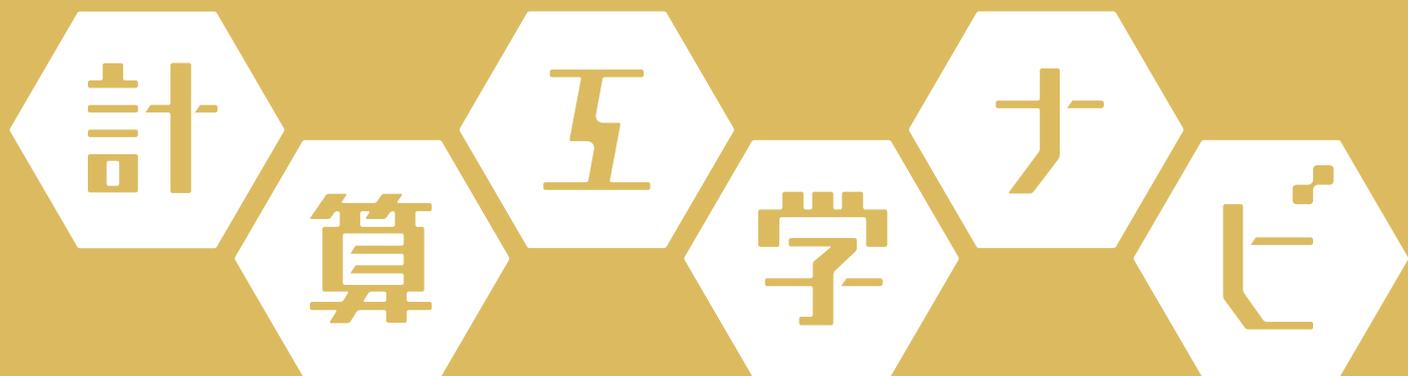
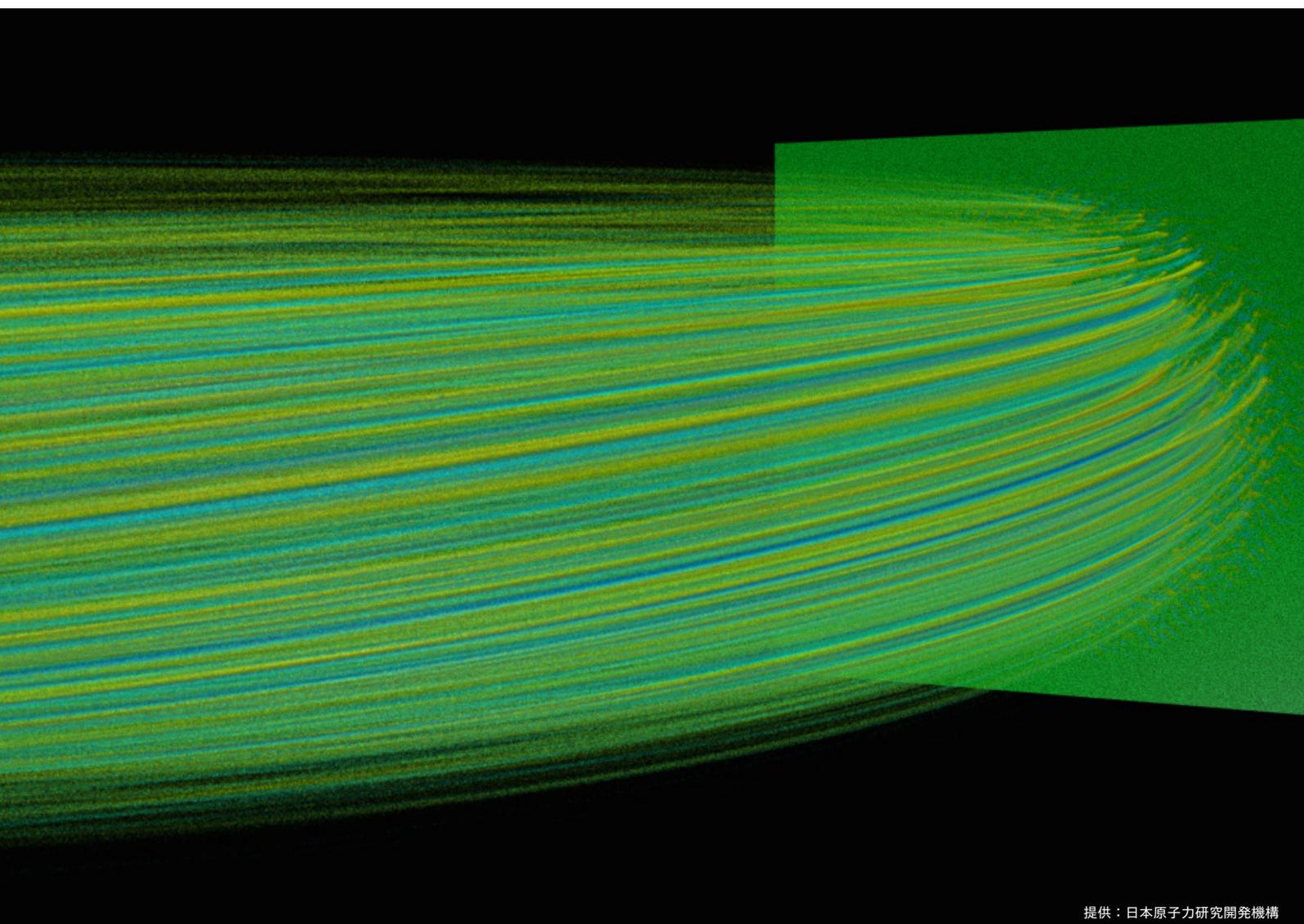


ものづくりにHPCを活用するためのツールとケーススタディー



QUARTERLY NEWSLETTER / SUMMER 2015



提供：日本原子力研究開発機構

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 鹿園直毅

熱流体解析システム

FrontFlow/violet-HC

オープンソース遠隔可視化ソフトウェア

PBVR

VOL. **7**

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



ポスト京に向けた研究開発が平成26年度にスタートしました。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』(本誌Vol.6参照)のサブ課題のひとつとして設定されたのが、『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』というテーマで、燃料電池システムの実用化に大きく影響する技術開発が進められています。このプロジェクトで固体酸化物形燃料電池(SOFC)に関連する領域を担当する東京大学生産技術研究所の鹿園直毅教授に話を聞きました。



東京大学生産技術研究所
エネルギー工学連携研究センター
鹿園直毅 教授

はじめに鹿園さんのバックグラウンドを教えてください。

私のもともとの専門は「熱」です。メーカーで蒸気サイクルや冷凍サイクルのコンポーネントを作る仕事をしていました。2002年に大学へ移ってから、燃料電池のなかでも熱の問題が重要なSOFCの研究、なかでも一番困っている電極の研究にシフトしてきたという経緯があります。

このプロジェクトではSOFCとPEFC(固体高分子燃料電池)の両方を扱いますが、私は主にSOFCを担当し、PEFCはみずほ情報総研と京都大学を中心とするチームが担当します。SOFCとPEFCの両方に共通の課題は電極で、イオン、電子、物質の輸送、そして電気化学を連成させて電極の反応全体をシミュレーションすることが目標のひとつです。

この記事では主にSOFCの側から見た課題について伺いたいと思います(PEFC関連の開発概要については次ページのカコミ参照)。SOFCの電極に特有の難しさとは

どんなものでしょうか？

SOFCは700度から800度という高温で動作します。燃料極はセラミックスとニッケルの混合物なのですが、ニッケルは融点が高くないので長い時間のなかでどうしても動いてしまい、最悪の場合、凝集し、粒成長してネットワークが切れてしまいます。そうすると、電子が流れなくなって、電極が機能しなくなります。

発電設備として使われるSOFCの運転期間は最低でも10年間。長期間の安定性という視点が大事です。しかし、初期の構造を変えるたびに10年かけて実験するわけにはいかない。これが加速実験をしたいという企業のニーズが強い理由です。

現在のモデルでも温度を上げれば加速はするのですが、温度依存性が異なる現象があるため、通常温度による実験と一致しません。真の加速実験を行うためには、要因ごとに正しくモデル化したシミュレーション技術を作り、それを検証する必要があります。10年を短期間で予測するシミュレーションができれば、より高性能な

SOFCの開発に大きく貢献できると考えています。

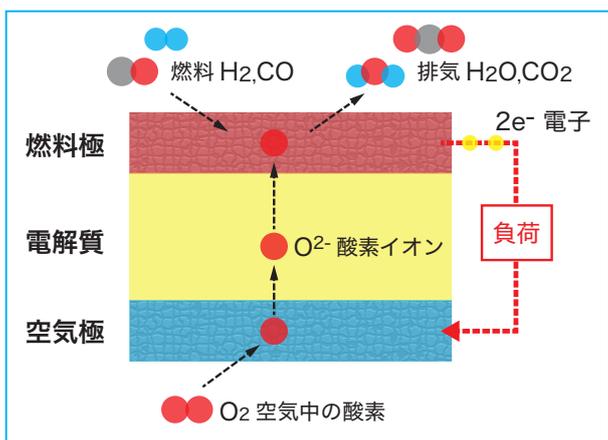
これまではそのようなシミュレーションを実現することは難しかったのですか？

従来、我々が使うことができたコンピュータでは10μm強の領域に対し100nm程度のメッシュが限界でした。これでは解像度不足で精度が出ず、満足できる水準まで到達できなかったのです。ポスト京を使うことで、20μmの領域に対して10nmの解像度を実現したいと考えています。

それができて初めて、高い精度でモデルに関する議論を行えるようになります。

もう少し電極について教えてください。どんな電極が良い電極なのでしょう？

燃料極はニッケルとイットリア安定化ジルコニア(YSZ)からなる多孔体で、ここをイオンはくねくね曲がりながら流れていきます。まっすぐ流れている状態を基準にすると、7倍から8倍くらい遠回りして



【図1】 固体酸化物形燃料電池 (SOFC) の発電原理

電極は燃料極、電解質、空気極の3層で構成され、それぞれに組成の異なるセラミック系材料が使われる。

SOFC: Solid Oxide Fuel Cell
PEFC: Polymer Electrolyte Fuel Cell
YSZ: Yttria-stabilized Zirconia
FIB: Focused Ion Beam
SEM: Scanning Electron Microscope
TPB: Triple Phase Boundary

PEFC関連のアプリ開発の概要

大規模気液二相解析コード

・OpenFOAM, FrontFlow/blue等のオープンソースをベースに表面張力・壁面濡れ性の影響を含む流路界面の水滴挙動、マニホールドの二相流動を再現
 ・数億グリッド(数百枚セル積層スタック、セル1枚あたり1億グリッド規模)の気液二相解析の達成

大規模PEFC電極解析コード

・実寸電極サイズへの拡大(界面格子サイズ20nm以下、電極厚さ20 μ m)
 ・電極形成プロセスシミュレーション、発電性能予測

PEFC全体シミュレータ(工学モデルの高度化)

高精度二相流動モデル、高精度発電モデル、流動モデル、伝熱モデル

コスト低減に向けたスタック設計指針

いる。これを屈曲度ファクターと言います。遠回りするほど損失は大きくなりますから、本当はまっすぐスーッと流れてほしい。つまり、屈曲度ファクターが低いほどいい電極と言えます。

このプロジェクトの課題のひとつは、電極構造を最適化する技術の開発で、適切な評価関数を与えてシミュレーションを行うことによって、たとえば屈曲度ファクターの低い構造を見つけることができると考えています。

ただし、シミュレーションによっていい形がわかって、それが非現実的な構造ではあまり意味がありません。実際に作れないといけません。実はここがSOFCの難しいところなのです。

SOFCの電極は瀬戸物のお茶碗と同じように、セラミックスの粉をこねて焼いて作ります。そうしないと安くできない。そのかわり結果は「出来なり」です。良い構造の電極を作るためには、焼結のプロセスを予測する技術が必要で、これは劣化の予

測にも効いてきます。

長期間運転を前提とする電極の劣化予測、製造時の焼結予測、そして構造の最適化という3つの課題を解決するコードの開発が始まったところですね。

まだ名前を付けていないのですが、我々が「大規模SOFC電極解析コード」と呼んでいるものをベースに、今後はポスト京に対応するための並列化を進めていきます。

世界的にみて、SOFCの技術開発に大規模計算を適用する我々のようなアプローチをとっている人はほとんどいません。我々もまだ分からないことだらけです。電極の内部にはいろんな不純物があって、高温でありとあらゆることが起こります。反応によって元素が動き、その動きによって別の反応が起こる。その組み合わせはものすごい数ですが、ひとつひとつ潰していって本質に迫りたい。これが我々のアプローチです。

この技術を産業界が利用できるのはいつ頃でしょうか？

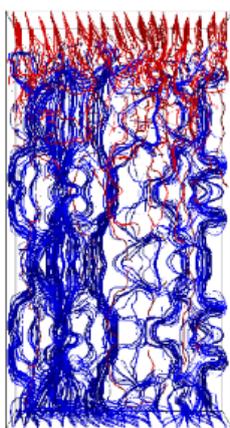
設計の現場でポスト京クラスの計算機が使えるようになるのは10年後でしょうか。それまでには間に合わせたい。

SOFCの技術競争は10年どころか、20年後、30年後まで続くと思います。さらにその先の炭化水素燃料が枯渇したあとは水素社会となってPEFCが活躍するでしょう。その頃になると、SOFCは廃棄物やバイオマス等の炭化水素燃料の発電と可逆発熱器としての利用が中心になるでしょう。

世界的な化石燃料の利用が減少するまで、少なくともこの50年くらいの間、日本のメーカーは競争力を維持してほしいと願っています。そのためにはポスト京のような計算機を使ったシミュレーションがすごく効いてくるでしょう。もし我々がやらなくても、誰かがやるはずで、早くやらなければ意味がない。そういう競争のなかにいると思っています。



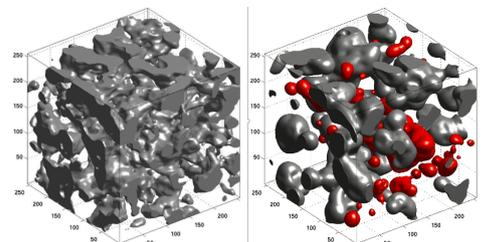
Ni-YSZ燃料極内酸化イオン電気化学ポテンシャル分布



Ni-YSZ燃料極内イオン電流および電子電流分布(赤=イオン電流、青=電子電流)

【図2】実電極構造を用いた3次元分極シミュレーション

FIB-SEMは集束イオンビーム(FIB)により試料を高精度に研磨し、走査電子顕微鏡(SEM)により断面画像を連続的に撮像する技法。これを用いて電極の3次元構造を明らかにし、その構造データに酸化イオン・電子・ガス種の拡散と、三相界面(TPB)での電気化学反応を連成した3次元格子ボルツマン法数値シミュレーションを適用する技術を開発した。ポスト京に向けて、より大規模なシミュレーションを可能にし、モデルの精緻化につなげる。



【図3】耐久性9万時間を前提としたSOFC電極構造の劣化予測

左図の灰色の塊はニッケルが連結している初期の状態を示している。時間が経過するにつれ、ニッケルが凝集・粒成長して連結が切れた状態(右図の赤い部分)が発生する。この変化過程を高速かつより大規模にシミュレーションすることで、10年間という長い運転期間における電極劣化を短期間で予測可能にするのが、本プロジェクトの課題のひとつとなっている。

オープンソース遠隔可視化ソフトウェア **PBVR**



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 (任期付) 研究員
博士(工学)
河村拓馬

数値シミュレーションの規模が大きくなるにつれ、可視化システムに対する要求も厳しくなっています。とくに京コンピュータのような大規模並列環境に適したクライアント・サーバ型の可視化システムの開発は重要なテーマと言えるでしょう。この課題に取り組んでいる日本原子力研究開発機構の河村拓馬さんに、可視化ソフトウェア"PBVR"について解説をお願いしました。

従来の遠隔可視化システムは、可視化処理速度やメモリ使用量、データ転送量がボトルネックとなって、可視化作業に膨大な時間が必要とされていました。

遠隔可視化ソフトウェアPBVR (Particle-Based Volume Rendering) はクライアント・サーバシステムを採用し、大規模な結果データをサイズの小さい可視化用粒子データに変換して転送することで、これらの問題を解決し、ボリュームレンダリングによるインタラクティブな可視化を実現しています。

PBVRはスーパーコンピュータ「京」をはじめとする様々な超並列計算機に対応し、クロスプラットフォーム環境で利用できます。また高度な伝達関数設計機能を実装しており、ボリュームレンダリングだけでなく、等値面、断面、そして多変量データ解析にも対応しています。

図1にPBVRの使用例を示します。

GT5D (Gyrokinetic Toroidal 5 Dimensional Eulerian code) によるプラズ

マ乱流シミュレーションの結果データに対して、右上の伝達関数エディタにより磁場ポテンシャル・静電ポテンシャル・密度揺動の三変量に関する描画を制御し、左上のスクリーンに可視化結果を表示しています。

PBVRは以下のWebページからダウンロードが可能になっています。

<http://ccse.jaea.go.jp/ja/download/software.html>

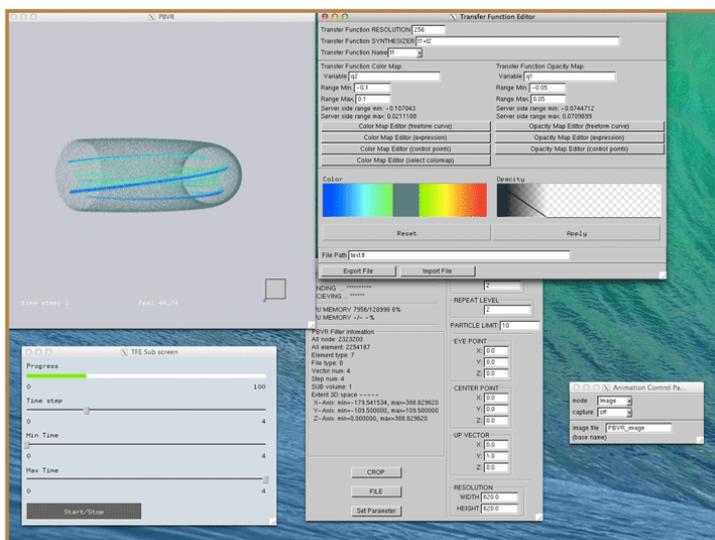
従来のクライアント・サーバ型可視化システムの問題点

京に代表されるペタスケールスーパーコンピュータの登場によってシミュレーション規模が増大し、得られる結果データ(ボリュームデータ)も飛躍的に大規模化しています。そのため、昔ながらの「ユーザPCにボリュームデータを転送して、商用ソフトを利用してポスト処理」という方法は、データ転送量の増大やユーザPCのメモリ・ストレージ容量の不足という問題により、非現実的なものとなりました。

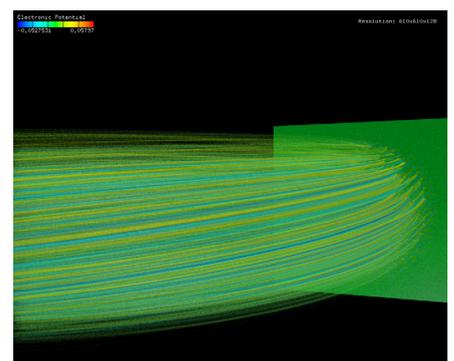
そこで、豊富な計算資源を持つサーバ上で可視化処理を行い、クライアントに可視化要素を転送するクライアント・サーバ型可視化が重要視されるようになりました。

しかし、既存の商用ソフトによるクライアント・サーバ型可視化では、ボリュームデータの大規模化に比例して可視化データとして使用されるポリゴンの数が爆発し、データ転送の増加、および、描画処理速度の低下という問題が発生します。特に、高度な奥行き表現手法であるアルファブレンディングを用いる場合には、可視化データの探索や並べ替え処理に起因するノード間コミュニケーションが多発します。そのため描画処理速度のストロングスケーリングが達成できず、大規模並列環境を利用してインタラクティブな可視化は困難という問題がありました。

これらの課題を解決するため、京都大学小山田研究室で開発されたParticle-Based Rendering (PBR) の技術を利用し、大規模並列分散環境に適したクライア

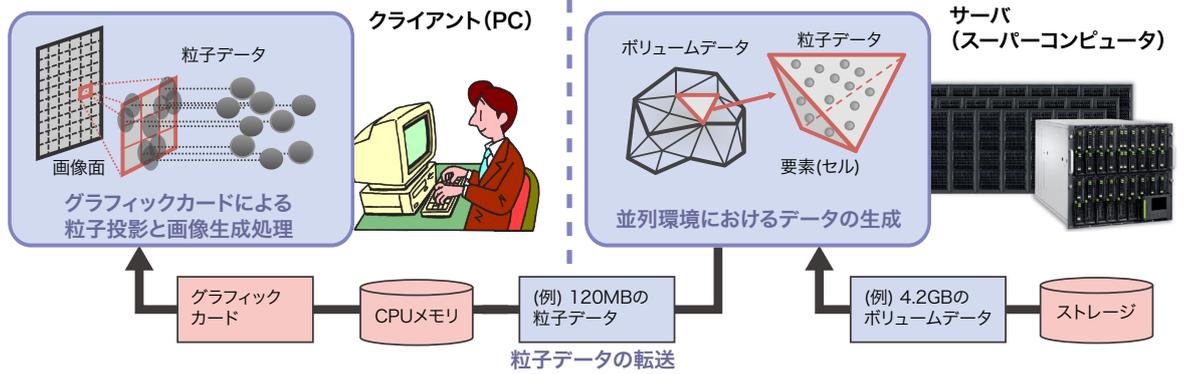


【図1】遠隔可視化システムPBVRのGUI
PBVRはGNU Lesser General Public License (LGPL) で公開されている。クライアントプログラムはLinux、Mac、Windowsの各OSで動作する。



【図3】GT5Dデータの静電ポテンシャルの可視化結果

【図2】PBVRの処理の概要



ント・サーバ型可視化システムを開発しました。それが遠隔可視化システムPBVRなのです。

効率的な並列処理を実現する遠隔可視化システムPBVR

PBVRの重要な特徴として、ポリゴンベースの可視化手法と異なり、可視化用の粒子データのサイズが画像解像度で決定されるため、元の大規模データのサイズと比べて十分に小さくなるということが挙げられます。

図2にPBVRの処理概要を示します。サーバは大規模データを読み込み、伝達関数を参照してボリュームデータに対して粒子生成を行います。PBVRではサーフェスも粒子で表現するため、大規模データに対しても大量のポリゴンを生成することはありません。

粒子データのサイズは通常10～100MBのオーダーであり、ソケット通信によりクライアントPCに転送されます。クライアントPC上で粒子データはメインメモリに格納され、レンダリング時にグラフィックスコントローラ（GPU）に格納されます。粒子データは時系列順に逐次転

送され、インタラクティブな可視化が可能となります。また、PBVRは前処理としてフィルタリングによるボリュームデータの分割を行い、並列読み込みとマスター・スレーブ型の動的負荷分散により効率的な並列処理を実現します。

京コンピュータに対応しストロングスケーリングを達成

粒子データの処理に京（約1000コア）を利用し、GT5Dから得られた大規模データ（約3億格子、100タイムステップ）の可視化を行いました【図3】。

その結果、従来の可視化システムではノード間通信がボトルネックとなって困難だったストロングスケーリングを達成するという成果が得られています【図4】。

商用可視化ソフトとの比較

表1に商用可視化ソフトEnSightのクライアント・サーバモードによるボリュームレンダリングとの比較結果を示します。

実験にはGT5Dデータを使用し、実験環境として帯域幅～3.4MB/sのイーサネットで接続されたサーバ（Xeon

X5570・48コア）、クライアント（Xeon E5 + Quadro K5000）を用いました。

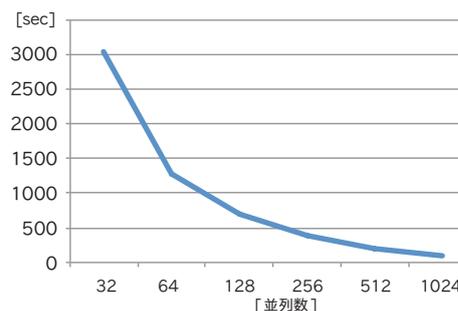
画像が表示されるまでの時間（合計）について、PBVRはEnSightの約30倍高速で、60frame/secという、いわゆるインタラクティブフレームレートを達成しています。またクライアント使用メモリについてもPBVRが小さく、効率的な可視化システムだということがわかります。

より高画質な可視化へ

遠隔可視化システムPBVRは、可視化インターフェースや大規模可視化手法の両観点から現在も開発を続けています。可視化インターフェースとしては、キーフレームアニメーションやクロッピングのような従来の基本機能の追加とバージョンアップを行っています。さらに昨今ますます複雑化してゆくシミュレーション結果から知見を得るためのチャレンジングな機能開発として、多次元データの可視化機能やマルチスケール可視化手法の開発を進めています。エクサスケールを見据えた更なる要素技術の開発として、超高並列環境下での最適化はもちろんのこと、より高画質な可視化を可能にする技術を開発する予定です。

	PBVR	EnSight
フィルタ処理 [sec/step]	0.7	-
画像生成処理 [sec/step]	51.4	3873
データ転送 [sec/step]	75.7	
合計 [sec/step]	127.8	
描画速度 [frame/sec]	60.0	2.7
クライアントメモリ使用量 [MB]	257	900

【表1】全体性能の比較



【図4】京によるGT5Dデータの可視化処理時間

※EnSightは米国Computational Engineering International, Inc.の商標です

熱流体解析システム FrontFlow/violet-HC (Hierarchical Cartesian)



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特任研究員
大西順也

FrontFlow/violet Hierarchical Cartesian (FFV-HC) は FrontFlow/violet (FFV)^[1] の派生バージョンのひとつであり、その名の通り、階層型の直交格子に最適化された熱流体解析システムです。一様等間隔格子の利点を継承しつつ、格子配置に柔軟性を持たせることを目的として、開発が進められています。

ちなみに、FFV-HCの開発が始まったのは2012年9月で、「京」の共用開始と同時期です。いわば双子のような関係です。

一様等間隔格子の利点・課題

直交格子の特徴は、データ構造、および、計算アルゴリズムが単純であることです。このことは、多方面で様々な利点をもたらします。

- ▶ 計算プログラムの生産性、保守性、可搬性が良好
- ▶ 計算プログラムの単体性能、並列性能が良好
- ▶ 物理現象のモデリングが容易
- ▶ プリ・ポスト処理が簡便。ソルバーと一体的な実行が可能。

特に最後の項目は、工学的な応用におい

て重要な性質です。なぜなら、工業製品の設計に流体解析を利用する際、現状ではこれらの処理がボトルネックになることが多いからです。FFVでは、計算格子作成機能をソルバー初期化過程の一部として取り込むことで、大規模な格子を迅速、かつ、自動的に作成することを可能としています。また、将来的には、可視化機能をソルバー内部に取り込むことも検討しています。

図1には、一様等間隔格子を用いた計算例として、自動車車体周りの空力解析の結果を示します。この例では解析領域全体(24.5m×12.2m×6.14m)に4mmの格子を配置しました。特筆すべき点は、車体の外部だけではなく、内部(エンジンルーム、車室など)にも格子が配置されているところです。なぜなら、従来の格子作成手法では、エンジンルームのような複雑な形状を扱うことは不可能ではないにしても、非常に難しいからです。

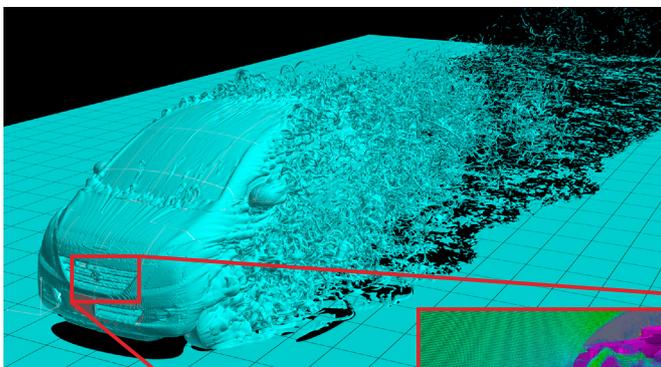
一方で、この解析で用いた計算セルの総数は、約290億個に達します。非構造格子を用いた解析では、同程度の格子規模で、格子間隔を1mm以下にまで小さくできていることを考えると、直交格子がいかに非効率的であるかが分かります。つまり、直交格子には、格子配置の柔軟性が低く、必要な計算セルが膨大になりがちであるとい

う課題があります。この課題を解決することを目的として、FFV-HCの開発が始まりました。

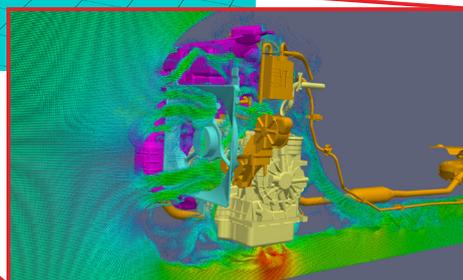
階層型直交格子の導入

FFV-HCでは、階層型直交格子の導入において、block-based adaptive mesh refinement (AMR)^[2] を利用しています。図2に示した通り、block-based AMRでは解析領域全体を八分木構造で分割し、各リーフノードにブロックと呼ばれる直交格子を割り当てます。このとき、ブロック内の直交格子には一様等間隔のものが用いられます。また、それぞれの直交格子の大きさは物理的には異なるものの、論理的には同じになるようにします(計算セル数を同じにするという意味です)。

これらの性質は、現代のスパコン事情にとって、非常に都合の良いものと言えます。例えば、一様等間隔格子を用いることはメモリ使用量の削減につながりますし、メモリアクセスが連続になることから、キャッシュの有効活用という点でも有利です。また、各ブロックの計算セル数が同じであるという点は、プロセスに割り当てるブロック数を揃えるだけで計算負荷の均衡を実現できることから、分散メモリ環境において



【図1】290億セルによる計算例
協力：スズキ株式会社



【図2】block-based AMR

項目	時間 [秒]
1. ポリゴンの読み込み	85.14
2. 八分木作成・通信	85.61
3. ポリゴン通信	14.03
4. 格子-ポリゴン交差判定	14.04
5. 計算セル分類	14.16

【表1】格子作成所要時間の内訳

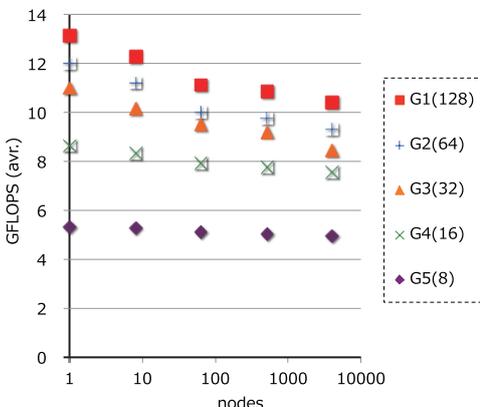
高い並列性能を実現するために重要となります。

図3はFFV-HCの計算速度性能を評価した結果です。横軸は計算プロセス数で、何台の計算機を並列動作させたかを示しています。縦軸はFFV-HCの計算速度で、1秒当りに処理した演算数のプロセス間平均値を示しています。なお、各プロットは、ブロックに割り当てる計算セル数による違いを示しています(G5からG1の順に多くなります)。また、このテストはいわゆるウィークスケーリングを調査したものです。したがって、計算速度が計算プロセス数に依らず、高い水準で一定になるのが理想的な結果です。

FFV-HCの性能はブロックに割り当てる計算セル数によって大きく異なりますが、概して言えば、ブロック当りの計算セル数が多いほど性能が良いと言えます。特に、ブロック当りの計算セル数が最大の場合(G1)は、単体性能がピーク性能比(京では128GFLOPS)で約10.2%、並列化効率が32,768ノード使用時で約72.8%となり、非常に良い性能を示すことができます。逆に、ブロック当りの計算セル数が少なくなると、性能は急激に低下することも見て取れます。この原因は、ブロック間のデータ同期にかかるコストの増加です。

階層型直交格子の導入効果

図4は、先に示したのと同様の自動車空



【図3】FFV-HCの単体・並列性能

力解析に、階層型格子を適用した結果です。このとき、最小格子間隔が一樣直交格子と同じ(4mm)になるように階層型格子を作成したところ、総計算セル数は約4.0億になりました。つまり、階層型格子を導入することで、計算セルを約72分の1にまで削減することができたのです。また、最小格子間隔を半分(2mm)にしたところ、総計算セル数は約32億となり、それでもまだ9分の1程度に抑えられることも分かりました。

表1には、約32億セルの格子を作成するのに要した時間をまとめました。ポリゴン(車体形状を表すSTLファイル。ファイルサイズは約3.3GB、ポリゴン数は約1240万)の読み込みと八分木の作成・通信がホットスポットになっていることが分かります。しかしながら、いずれの処理時間もただか数分のオーダーであること、また、格子作成全体を通して10分以内に処理が完了することも見て取れます。したがって、従来の手作業による格子作成に比べれば、格段に速くなっていると言えます。

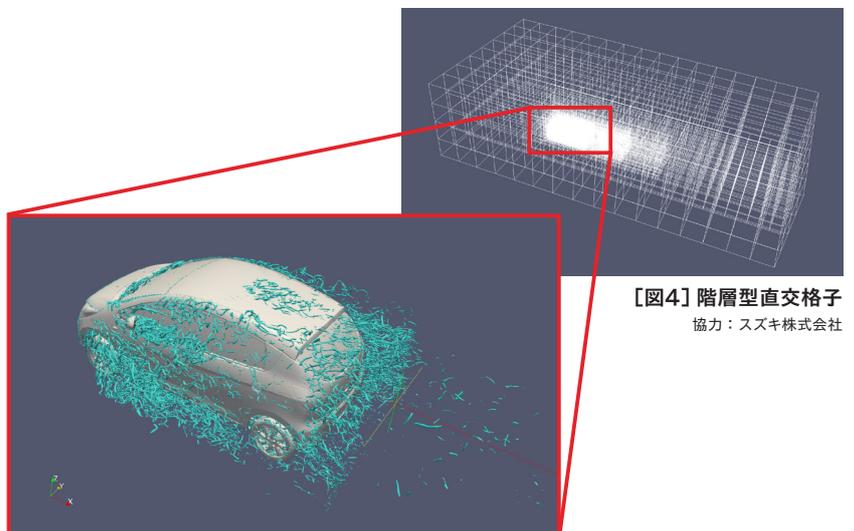
今後の展望

FFV-HCは、オープンソース・ソフトウェアとして公開されており、いつでも試用が可能な状態となっています^[3]。しかしながら、FFV-HCは開発が始まってから日が浅いため、もうひとつの派生バージョン

であるFFV-Cのように、様々な機能が実装されていたり、豊富な応用事例が蓄積されていたりするわけではありません。加えて、マニュアル等の整備についても、不十分な点が残っています。また、自動車の例で示した通り、階層型格子の導入で計算セル数の削減には成功しましたが、それですぐに実用に結びつくわけではありません。より実用的な流体解析を実施するためには、例えば以下のような、様々な要素技術の開発が必要と考えています。

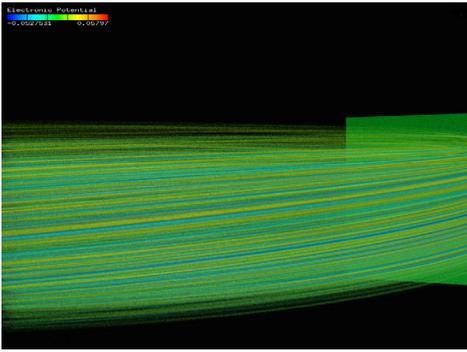
- ▶ 直交格子上で物体形状を正確に表現するための形状近似機能
- ▶ 流体-構造連成や気液二相流解析のための移動境界捕獲機能
- ▶ 回転体を考慮するための Multiple Reference Frame 機能
- ▶ 物体表面の解像度を向上させるためのレイヤー格子機能

現在は、主に最初の項目に関して研究・開発を進めています。そして、HPCI戦略プログラム分野4・課題3の活動の一環として実施している車体空力とエンジン冷却のトレードオフ解析を通して、FFV-HCの実用性を実証することに取り組んでいます。次のステップでは、気液二相流解析への適用を進める予定です。



【図4】階層型直交格子
協力：スズキ株式会社

[1] 小野, 三次元非定常熱流体解析プログラム FrontFlow/violet, 計算工学ナビ Vol.5.
[2] 国内では直交格子積み上げ法(Building-Cube Method, BCM)と呼ばれることが多いです
[3] FFV-HC ソースコード配布サイト, <https://github.com/avr-aics-riken/FFV-HC>



今号の表紙

GT5Dデータの静電ポテンシャルの可視化

「京」で実行した核融合プラズマ乱流シミュレーションから得られた静電ポテンシャルの値を遠隔可視化システムPBVRで可視化したもの。従来手法ではデータ転送と可視化作業に長時間必要ですが、PBVRによりインタラクティブに京のストレージ上のデータを可視化できます。図では従来のスカラー場のボリュームレンダリングに加え、PBVRの多変量データ解析機能によって座標値とスカラー場で不透明度と色を与えて抽出した断面を合成表示しています。

日本原子力研究開発機構 河村拓馬

編集後記

この号の表紙のテーマであるプラズマ乱流シミュレーションについては、本紙 vol.2にも記事があります。京で99.9999%の強スケーリング性能を実現した開発者たちへのインタビューです。現在も下記サイトで公開中ですので、併せてご覧ください。(F)



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.7

発行日：2015年6月25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@ciiss.iis.u-tokyo.ac.jp