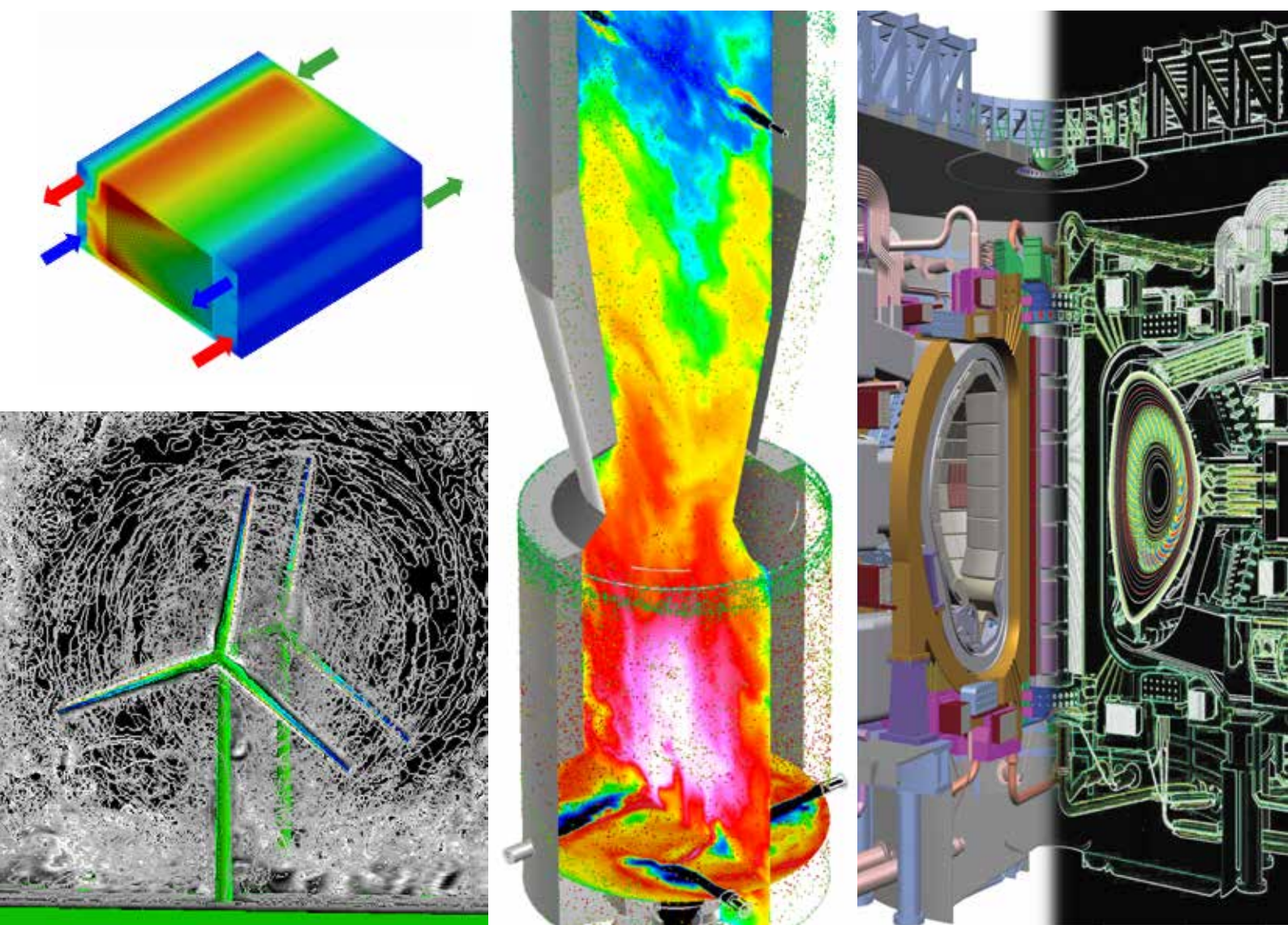


ものづくりにHPCを活用するためのツールとケーススタディー

計 算 工 学 ナ ビ

計算工学ナビ・ニュースレター2016年秋号



ものづくり分野で
HPCが市民権を得るために

東京大学 加藤千幸

産業界とのタイアップを通じて
クリーンエネルギーの実用化をサポート

東京大学 吉村 忍

VOL. **11**

ものづくり分野で HPC が市民権を得るために

文部科学省では一昨年度から「京」の次のスパコン、ポスト「京」の開発を開始しており、2021年頃から本格的に運用を開始することが計画されています。ポスト京は実際のアプリケーションで、最大で京の100倍の計算速度を実現することを目標としています。ハードウェア、つまり、計算機本体やコンパイラなどのシステムソフトウェアの開発と並行して、ポスト京上で高速に動くアプリケーションソフトウェア（以下、単にアプリケーション）の研究開発も今年度から本格的に実施されています。そのうちの一つに、「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」というプロジェクトがあります。長いので、通常、ポスト京重点課題とよばれています。このプロジェクトでは全部で9つの重点課題が選定されていますが、本号はそのうちの一つである、重点課題⑥の特集です。重点課題⑥のタイトルは「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」であり、東京大学の吉村忍先生を責任者として実施され

ています。

このニュースレターがカバーする主な領域はものづくり分野ですが、それに関連した重点課題は4つあり（右ページを参照）、これらの課題では最先端のスパコンの利用を前提として、アプリケーションの研究開発が行われています。ところで、CAD（Computer-Aided Design）やCAE（Computer-Aided Engineering）はものづくり分野で当たり前の用語として使われており、最近では、ビッグデータやIoT（Internet of Things）という言葉が盛んに使われています。それに対して、スーパーコンピューティング（Supercomputing）やハイ・パフォーマンス・コンピューティング（High-Performance Computing、HPC）はその手の学会では当たり前の用語になっていますが、実際のものづくりの現場ではまだ市民権を得ているとは言えず、ビッグデータやIoTに俄かに先を越された感があります。ものづくり分野に関連する重点課題には、ポスト京で複雑な現象を解明したり、予測したりすることにより産業上のブ

レークスルーを実現することが求められていますが、スーパーコンピューティングやHPCといった言葉をものづくり分野でデビューさせるミッションも担っています。そのための鍵が計算時間の短縮や必要となる計算機の小型化です。

少し専門的な話になりますが、京のCPUの性能は1秒間に1,280億回の掛け算や足し算をすることができます。もちろん、割り算や引き算もできます。今年の6月にインテルが発表した多数の演算コアを搭載した新しいメニーコアCPUは京のCPUの30倍近くの性能を有したものです。仮に、アプリケーションの



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』責任者
東京大学生産技術研究所
加藤千幸

計算速度がCPUの性能に単純に比例するとしますと、2020年頃には京の時代の50倍から100倍規模が大きな計算を実施したり、あるいは、50分の1から100分の1の数のCPUで同等な計算を実施したりすることができます。これが実現できればスーパーコンピューティングやHPCといった言葉がものづくり分野の一般用語としての地位を確立することが可能になります。ところがそうは問屋が卸してくれません。

CPUの性能は年々着実に向上しているのですが、それを使いこなすには高度なチューニングが必要になっています。たとえば、インテルの新しいメニーコアCPUは最大72個のコアが搭載されますが、演算器はシムド（SIMD、Single Instruction Multiple Data）演算器といって8つのデータに対して一遍に同じ計算を実施します。このとき、レジスタというところにデータが準備されていないと計算が実施されず、CPUの性能を発揮することができません。このような計算機ではレジスタに素早くデータを揃えておくことが鍵を握りますが、口で言うほど簡単なことではありません。重点課題⑥と重点課題⑧はタイプが似ているアプリケーションが多いため、アプリケーションの開発を連携して実施していますが、この関係をさらに強化し、ものづくり分野でHPCやスーパーコンピューティングが日常的に使われるようになるように尽力したいと考えています。具体的なアプリケーションの開発やチューニングの状況についてはまた別の機会に紹介したいと思います。

プロジェクトのタイムライン

RIKEN AICS フラッグシップ2020プロジェクトページより
<http://www.aics.riken.jp/fs2020p/>

2014年度

基本設計開始（協調設計:Co-design）
システムとアプリケーションを協調的に開発する方針に基づいて基本設計を開始

2015年度

詳細設計開始
詳細設計と試作のフェーズ。並行してアプリケーションの開発を進める

2018年度

製造開始
量産を開始する。性能向上に向け、アプリケーションなどの調整を引き続き行う

2020年頃

ポスト「京」の運用開始
社会やサイエンスの課題解決に向け、本格的に運用を開始する

フラッグシップ 2020 プロジェクト ポスト「京」で重点的に取り組む9つの課題

文部科学省が推進するフラッグシップ2020プロジェクトは、新たなスーパーコンピュータ(ポスト「京」)とアプリケーションを開発し、社会が抱える複雑な課題の解決とサイエンスの探求に役立てることを目標としています。9つの重点的に取り組む課題が設定されており、日本の様々な大学・研究機関が活動しています。

健康長寿社会の 実現

重点課題 **1** 生体分子システムの機能制御による
革新的創薬基盤の構築

重点課題 **2** 個別化・予防医療を支援する
統合計算生命科学

防災・環境問題

重点課題 **3** 地震・津波による複合災害の
統合的予測システムの構築

重点課題 **4** 観測ビッグデータを活用した
気象と地球環境の予測の高度化

エネルギー問題

重点課題 **5** エネルギーの高効率な創出、
変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

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

重点課題⑥のサブ課題

- A** 高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー
変換システム
- 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
- 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
- D** 核融合炉の炉心設計

産業競争力の 強化

重点課題 **7** 次世代の産業を支える
新機能デバイス・高性能材料の創成

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

重点課題⑧のサブ課題

- A** 設計を革新する多目的設計探索・
高速計算技術の研究開発
- 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
- C** 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
- D** 航空機の設計・運用革新を実現す
るコア技術の研究開発
- 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
- 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

基礎科学の発展

重点課題 **9** 宇宙の基本法則と進化の解明

産業界とのタイアップを通じて クリーンエネルギーの実用化をサポート

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題は9つの分野からなり、その6番目のテーマが「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」です(以下、重点課題6と表記)。この課題の責任者である東京大学の吉村忍教授に、プロジェクトの現状と目標について聞きました。ポスト京で初めて可能となる世界最先端のシミュレーション技術を産業界に提供し、クリーンエネルギーシステムの最適化をサポートする計画です。



東京大学 大学院工学系研究科
副研究科長
吉村 忍 教授

なぜ革新的なクリーンエネルギーシステムの開発に最先端のシミュレーション技術とポスト京の能力が必要なのでしょう？

我々が研究開発の対象としているのは、革新的なシステムではあるけれども、原理原則から分からないというものではありません。石炭ガス化炉、燃料電池、洋上風車、核融合炉といった、原理原則はもうある程度わかっていて、実用化の段階にあるものがターゲット。つまり、実機が対象です。それらの開発は小規模なものから始められ、試行錯誤を繰り返しながら、長い時間をかけてここまで来ています。実験的なアプローチで開発が続けられてきたと言っているでしょう。

我々はこれまでのそうした努力を否定するつもりはまったくありません。その上で開発者の皆さんに対して、次のように訴えかけたいのです。

この先、本当の実用化の段階を迎えて、世界のあちこちに石炭ガス化炉があるとか洋上風力発電ファームが建っているという状況に達するまでには、超えなければならないギャップがあるはず。このギャップを今までと同じような実験的なアプローチだけで超えられますか？ あるいはそれをコストエフェクティブに実現できますか？ もしそのギャップを乗り越えるのが難しいとしたら、我々とタイアップしてポスト京レベルのシミュレーション技術を使うことで、一緒に乗り越えませんか？ ……この最後の問いかけが説得力を持つよう、サブ課題ごとに準備を進めているのが現在の状況です。

どのようなタイアップの形があり得るのか、各サブ課題の状況とともに伺っていきます。ひとつめのサブ課題Aは、石炭を微粉炭にしてから高压燃焼させてガスにする炉、いわゆる石炭ガス化炉が対象ですね。

実際に稼働する設備を作るためには、ガス化炉や燃焼器全体の高精度なシミュレーションが不可欠です。全体ということはどういうことかということ、従来のように炉の内部の燃焼流だけを見るのではなく、炉壁や外部の冷却パイプも含めた熱的なバランスをきちんと予測するということです。炉内の温度が高くなりすぎると容器が壊れ、逆に低くなりすぎると溶けて底に溜まったスラグが固化して目詰まりを起こしますから、発熱と冷却をうまくバランスさせる運転点を見つけることが重要です。

そのためには、炉内の燃焼場と炉壁の界面における温度条件あるいは熱流束の条件を併せて解くことが必須で、今回我々は、燃焼場を解くFFR_comb^[1]とADVENTURE Thermal^[2]という固体中の熱伝導を扱うコードを、REVOCAP coupler^[3]を介して双方向連成させることで、この問題を解こうとしています。

また、底に溜まるスラグは液化していますので、固体である微粒子と気体である燃焼ガスに加えて、液体であるスラグも同時に捉える必要があります。従来の固気二相から固気液三相のシミュレーションに変わるわけです。液体の部分の時間オーダーと燃焼場の時間オーダーは随分スケールが違っているので、これをうまくハンドリングするのは燃焼系の計算としてはとてもチャレンジングな課題です。

こうした大規模で複雑な計算はすべてポスト京レベルのスパコンによって初めて可能となるもので、世界的に見ても最先端の事例と言えるでしょう。

このシミュレーション手法が石炭ガス化炉の実用化にどう貢献するのでしょうか？

重要なのは、我々の手法は対象のスケールアップに対応できる点です。

現在対象としている電力中央研究所(電中研)の炉は直径が30cmくらい、高さが5mくらいですが、商用発電用の炉はもっとずっと大きく、内部は完全な乱流場です。小規模な炉で予想した結果を線形外挿しても、予測はできません。原理原則に基づいたシミュレーションモデルを作って、体系が大きくなって非線形性がより強く出てきたときにも高い計算能力を使ってそのモデルのまま解くということができれば、対象のスケールに関わらず正確に予測できます。

我々がいま進めているのは、電中研炉を対象にしたV&V^[4]です。実験データと比較しながら、我々の手法を実証しています。これを今後2年間くらいで終えて、技術の有効性を証明し、その次はもっと大型の石炭ガス化炉を開発している企業グループや国のプロジェクトと連携してしていきたいと考えています。

サブ課題B『燃料電池』については、前回の取材時点[計算工学ナビ Vol.6]に比べて取り組み内容が豊富になった印象です。

当初の方針は固体高分子形燃料電池(PEFC)と固体酸化物形燃料電池(SOFC)

- [1] FrontFlow/red を京都大学、電力中央研究所、数値フローデザインが改良した large-eddy simulation (LES) コード
- [2] 固体中の定常・非定常熱伝導解析ソフトウェア <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/download/Thermal.html>
- [3] マルチ力学解析エンジン <http://www.cenav.org/library/>
- [4] Verification and Validation ここではおもに計算結果の信頼性を検証する作業のこと
- [5] フラグメント分子軌道 (ab initio FMO) フラグメント http://www.cenav.org/abinit_mp_open/
- [6] 第一原理電子状態計算プログラム <https://azuma.nims.go.jp/cms1>
- [7] FrontFlow/blue 非圧縮流体の非定常流動を高精度に予測可能な汎用流体解析コード <http://www.cenav.org/library/>
- [8] 静弾性・静弾塑性・動弾性・動弾塑性・大変形応力解析ソフトウェア <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/download/Solid.html>
- [9] National Renewable Energy Laboratory <http://www.nrel.gov/>
- [10] 2025年の完成を目指し開発中の国際熱核融合実験炉 <https://www.iter.org/>

の電極特性をメゾスコピックなモデルを用いて計算するというものでした。現在はそれに加えて、もっとミクロな段階での発電プロセスも対象としています。具体的には、PEFC膜電極接合体 (MEA) のナノ構造・機能分析をABINIT-MP^[5]とPhase0^[6]を使って行います。これによって、電極の特性をマルチスケールで解明し、大規模な燃料電池スタックの定量的な解析が可能となるでしょう。

他のサブ課題と同様に、ターゲットはあくまでも実機です。当面は小規模なスタックを対象にV&Vを重ね、実績を積んだ上で、既に自動車用や定置用の燃料電池製品を製造しているメーカーに対して、プロセスの最適化に繋がる新しい知見を提供したいと考えています。

サブ課題C『洋上風力発電』でも流体と構造の連成解析がポイントですね。

洋上ウインドファームに採用される風車の翼は片側だけで60~70mという巨大なものです。このくらい大きくなると、風を受けて回った時に、翼の先端は3mから4mたわみます。しかも、翼は異方性材料でできているため、その振動モードはかなり複雑です。さらに、風車の揺れとタワーの揺れは双方向で影響しあいます。流体場のなかに構造が置かれたことによって流体が乱れ、それに起因する振動成分などによって異常振動が起きることもあるので、翼の特性をちゃんとモデル化しつつ、流体と構造の相互作用をきちんと計算する必要があります。

風車の揺れ方は発電性能に影響し、強度

にも影響します。当然、事業者は正確な予測を求めるでしょう。この要求に対して、流体場はFFB^[7]、構造側はADVENTURE solid^[8]、双方向連成についてはREVOCAP couplerと、3つのソフトウェアを組み合わせで解決する準備をしているところです。

V&Vを行うには、翼構造の詳細なデータと実測値が必要となりますが、そうした情報は風車メーカーと組まないと分かりません。現在はアメリカの国立再生可能エネルギー研究所 (NREL^[9]) が公開している5メガワット級モデル風車を対象にモデルを検証しています。これを2年間くらい続けて、きちっとした計算ができることを確認した後に、風車メーカーとのタイアップを実現したいと考えています。風車の業界は国際的な競争が激しくなっていますが、我々の技術が貢献できる余地は大きいはずです。

最後のサブ課題Dは『核融合炉の炉心設計』がテーマです。

炉心プラズマの乱流現象や磁気流体現象の5次元第一原理計算はポスト京によって初めて可能となる極めてチャレンジングな課題です。これを世界に先駆けて実現したい。

ターゲットはITER^[10]です。核融合の発生条件を満たす運転ができるかどうかを実証するために、シミュレーションの面でサポートしていくのが我々の役割です。各国でプラズマのシミュレーション研究を行っているグループとも協調したり競争したりしながら、開発を進めていきます。



【図1】重点課題6のホームページ

下記のURLで、重点課題6のプロジェクト概要やニュースを読むことができます。

<http://postk6.t.u-tokyo.ac.jp/>

モデルの妥当性を実機ベースで検証し、ポスト京にも対応できるスケラビリティを実現したのちに、産業界や各国の研究グループとタイアップしていくというストーリーは全サブ課題に共通していますね。ひとつ気になったのは、重点課題6が直接対象としていない分野の開発者・研究者も、その成果を活用することはできるのでしょうか？

それは可能です。なぜなら、我々のソフトウェアはオープンソースあるいは商用コードとして入手可能であり、汎用性を第一に考慮して開発されているからです。特定の問題しか解けないようなコードの作り方はしていません。我々も汎用のコードをインテグレートして個々の課題に適用しているのです。ソフトウェアとシミュレーションの手法は他の分野にも展開していけるでしょう。

もちろん、ポスト京クラスの計算資源を誰もが使えるようになるのは、まだ先の話ですね。だからといって、オールオアナッシングと捉えるのではなく、現行の計算機を使っても、精度を少し落とすとか、計算時間を長くかけるといったことをすれば、エンジニアリング的に有用な答えは得られます。

今後しばらくは、我々が先行してポスト京レベルのシミュレーション技術を開発していきますが、すぐに成果は研究者のコミュニティにフィードバックされ、コミュニティを通じて産業界に浸透していくことでしょう。

文部科学省フラッグシップ2020プロジェクト・重点課題6を構成する4つのサブ課題について概要をまとめました。各サブ課題は、革新的なクリーンエネルギーシステムの開発に寄与するという社会的・産業的な意義と、ポスト京で世界最先端のシミュレーションを実現するという計算科学的な意義の双方を満たすよう設定されています。どれも実現すれば世界初となるような「スーパーシミュレーション」と言えるでしょう。

出典：ポスト「京」重点課題6ホームページ (<http://postk6.t.u-tokyo.ac.jp/>)

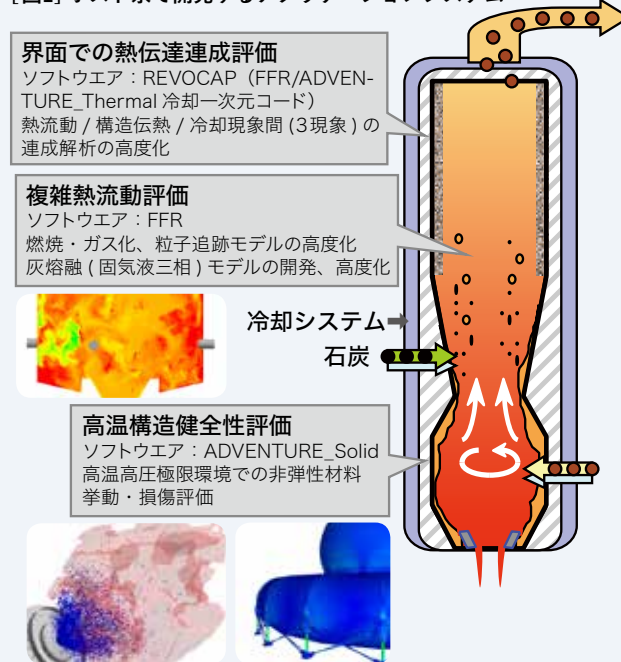
サブ課題A 高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム

火力発電エネルギーを作り出すシステムの主要部である燃焼器およびガス化炉の内部では、液体燃料や固体燃料の気流への分散・蒸発（揮発）、燃料と酸化剤の乱流混合、発熱反応、輻射、壁面伝熱など、様々な素過程が同時かつ相互に影響を及ぼし合いながら起こっています。このような非常に複雑で強い非線形性を有するシステムでは、実験室での小規模実験から、実規模に近い実証試験、さらに実機（商業炉）へとスケールアップするプロセスにおいて、しばしば前段階で適正化した設計パラメータや稼働条件ではうまく動作しないということが起こり、このことが開発コストの増大と実用化を遅らせる大きな要因の1つとなっています。今後、大規模数値シミュレーションにより、燃焼器やガス化炉の内部現象の解明や高精度予測が可能となり、新しいシステムの開発コストの低減や実用化への期間短縮が実現すると期待できます。

【計算科学としての革新性】

- ・実機実圧（～数十気圧）に対する燃焼・ガス化反応モデルの高精度化・高速化
- ・気相、液相、分散粒子相、三相の同時解析モデルの実装
- ・灰の壁面付着、溶解メカニズムの解明とモデリング
- ・実機の燃焼系計算と炉容器の熱伝導計算及び非線形損傷解析の双方向連成シミュレーション

【図1】ポスト京で開発するアプリケーションシステム



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

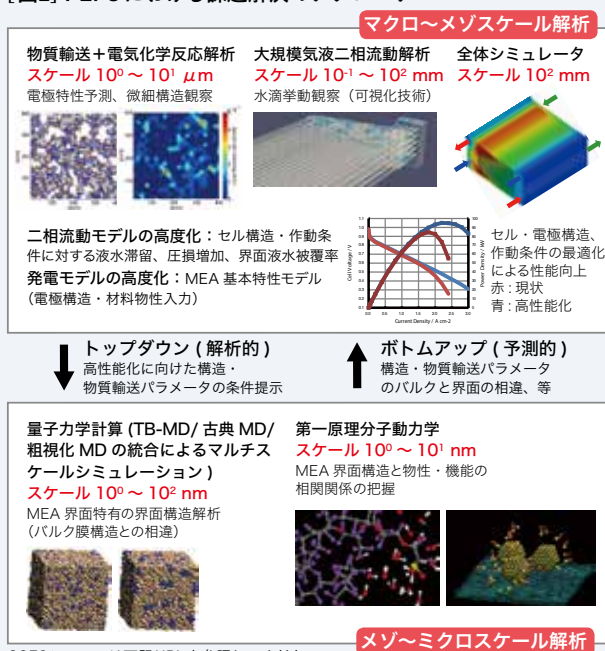
燃料電池は、微細なスケールでの現象とマクロなスケールの現象とが連成する大変複雑なシステムであり、その設計を高度化することは容易ではありません。例えば、PEFCでは、酸素供給と水の排出が適切に行われないとセルの一部が有効に機能せず性能低下が発生します。これを解決するためには、気液二相流を適切に制御しなければなりません。微細な気液界面とマクロな流動様式を同時に予測しなければ精度の高い設計はできません。また、電極反応は触媒・アイオノマー・担体が空間的に複雑に配置された膜電極接合体(MEA)内で生じますが、その構造やその中での輸送現象は原子レベルから解像しなければ明らかにすることはできません。

一方、SOFCにおいても、電極内の輸送現象と微細に分散する三相界面の空間的な情報を同時に取り扱うことが、電極の高性能化と高信頼性化へは必須となっています。これらは、大規模数値シミュレーションによって初めて実現できるものであり、燃料電池スタックや電極の設計技術の高度化に大きく貢献できると期待されます。

【計算科学としての革新性】

- ・サブミリの液滴からマニホールド内のマクロな気液二相流動の一体解析
- ・気相、液相、分散粒子相、三相の同時解析モデルの実装
- ・10nm程度の解像度を有する電極有効反応場の全域シミュレーション

【図2】PEFCにおける課題解決のアプローチ



SOFCについては下記URLを参照してください
http://postk6.t.u-tokyo.ac.jp/research/sub_b.html

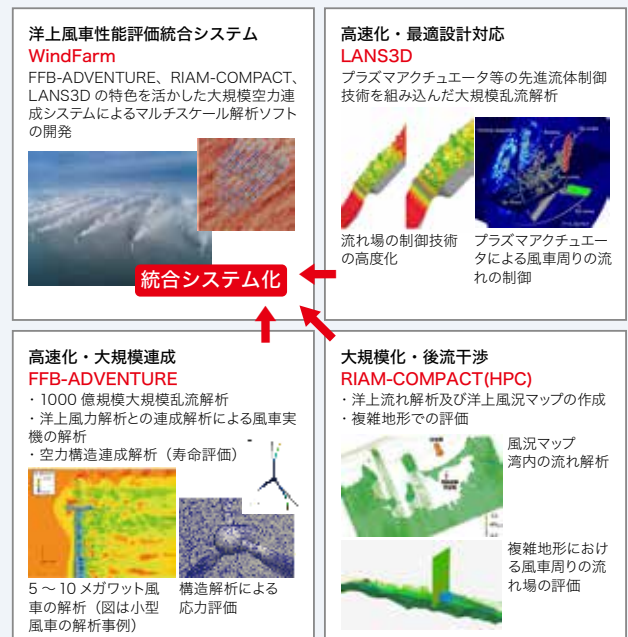
サブ課題 C 高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析

洋上風車に使用される風車は直径が100m以上あります。これらの大型の風車が海洋上に数kmの範囲に設置されます。このような大規模な流れを実験室で模擬することは非常に難しく、その一方で実際に作って見て、性能が出なかったら作り直すというわけにはいきません。また、気象の影響を受けるため、性能を正確に評価するには様々な条件における解析を行う必要があります。このような複雑な条件下にある洋上ウィンドファームの性能評価、寿命評価を行うには、計算科学による支援が必須となります。

【計算科学としての革新性】

コンピュータを用いて流れ場や振動を計算する場合、全体を小さな要素に分けて（離散化）、各時刻における物理量を求めていきます。このとき、要素の大きさや時間刻みは物理現象ごとに異なります。洋上風車は翼面の小さな渦（直径1mm以下、特性時間:ミリ秒）からブレードの後方にできる渦（直径数10cm、特性時間:秒）、風車全体の渦（直径数10m、特性時間:分）、気象条件に依存する流れ（直径数100mから数km、特性時間:分から数日）など、取り扱う渦の大きさや時間スケールが多岐にわたります。このようなマルチスケールの現象を計算科学として取り扱うための工夫が必要となります。また、振動と流れ場を同時に解析するための連成解析技術をマルチスケールで実施するための技術が必要となります。

【図3】ポスト京で開発するアプリケーションシステム



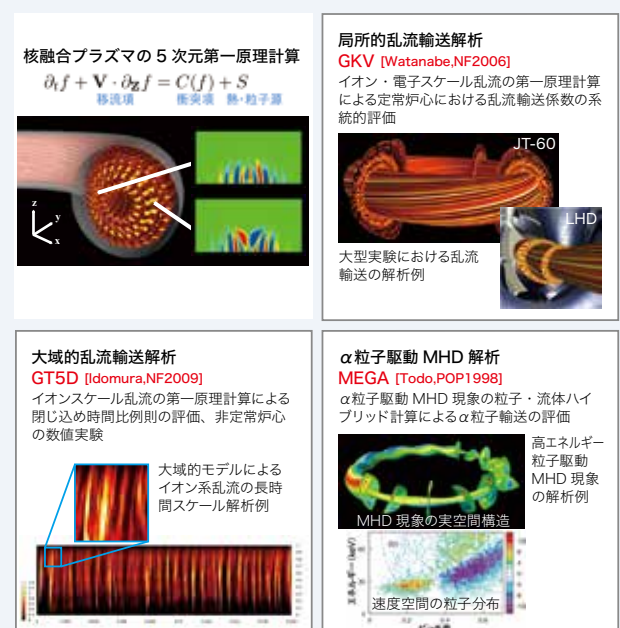
サブ課題 D 核融合炉の炉心設計

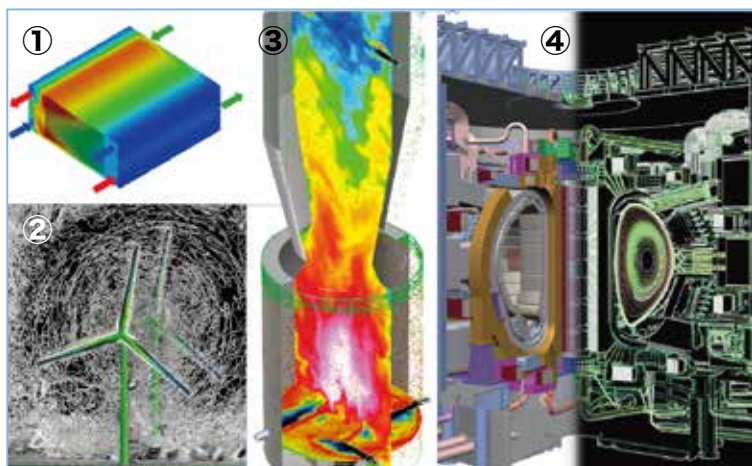
核融合炉心プラズマ解析の標準的アプローチとなっている5次元第一原理モデルに基づく国際競争力の高い国産核燃焼プラズマ解析コードを開発し、ポスト「京」においてITER炉心運転条件の最適化を目指します。開発コードを国内の実験研究者に普及し、ITER実験提案等に活用することによって、ITER計画における我が国の優位性を高め、ITER計画への投資効果を最大化することが可能になると期待されます。

【計算科学としての革新性】

ITER炉心プラズマの5次元第一原理計算を実現するには、ポスト「京」の性能をフル活用するメニーコア最適化等の計算機技術、先進的な省通信アルゴリズムや時間積分スキーム等の応用数学、マルチスケール現象を効率的に記述する物理モデルといった計算機科学からプラズマ物理に及ぶ最先端の知見を複合した研究開発が必要不可欠です。本課題では幅広い分野の専門家の協業体制を構築して研究開発を推進します。

【図4】ポスト京で開発するアプリケーションシステム





今号の表紙

フラッグシップ2020プロジェクト・重点課題6のサブ課題

①固体高分子形燃料電池のマクロ～メゾスケール解析 ②風車の設置・疲労寿命解析システム ③石炭ガス化炉の燃焼シミュレーション ④国際熱核融合実験炉（ITER）

編集後記

本誌はフラッグシップ2020プロジェクトで設定されている9つの重点課題のうち、ものづくりに関連する2つの分野（6と8）を紹介しています。プロジェクトの全貌については、理化学研究所計算科学研究機構が提供している下記のページに詳しくまとめられています。（F）

<http://www.aics.riken.jp/fs2020p/>



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.11

発行日：2016年9月30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