

計

算

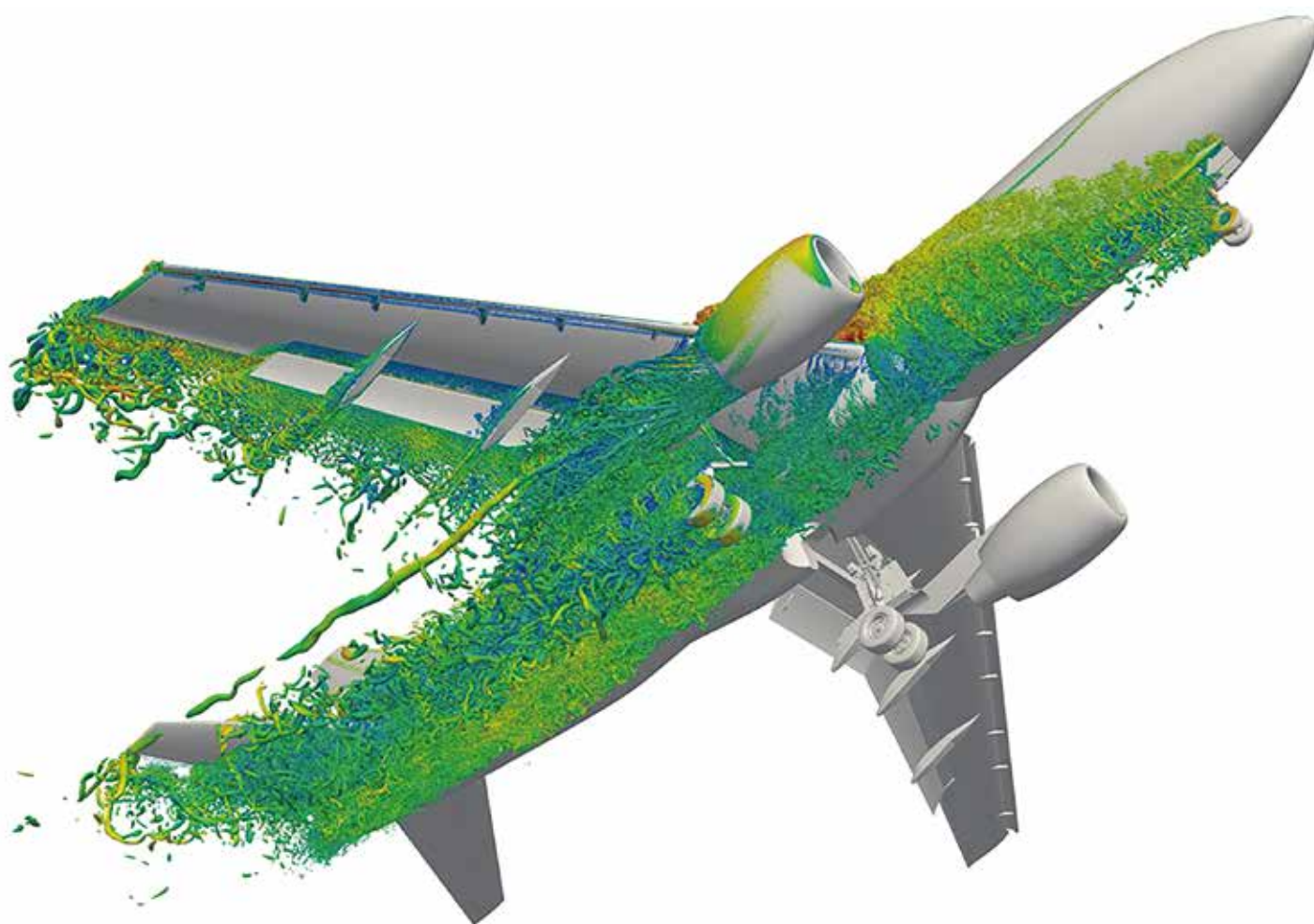
工

学

ナ

ビ

計算工学ナビ・ニュースレター2023年秋号



■特別インタビュー 「富岳」成果創出加速プログラム

航空機デジタルフライトが拓く機体開発DXに向けた実証研究

高度な計算科学とデータ駆動科学の融合による航空機デジタルフライトで機体開発DXを促進

東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻 河合 宗司

AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築

カーボンニュートラル時代のものづくりに貢献するためHPCの産業応用を加速するとともに幅広い分野に展開

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

■レポート

「富岳」成果創出加速プログラムの成果

「スーパーシミュレーションとAIを連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用」

東京大学大学院工学系研究科 吉村 忍

量子インスパイアード技術「デジタルアニーラ」の紹介 富士通株式会社 戦略アライアンス本部 岩井 大介

航空機デジタルフライトが拓く機体開発 DX に向けた実証研究 高度な計算科学とデータ駆動科学の融合による 航空機デジタルフライトで機体開発 DX を促進

スーパーコンピュータ「富岳」の特性を十分に活用して、科学的・社会的課題解決に直結する成果の早期創出を支援するため、2020年度から文部科学省が実施している事業が「『富岳』成果創出加速プログラム」です。2023年度は、これまでにない新規成果の創出が期待される研究課題として4つの科学的・社会的課題の領域から17課題が採択され、「航空機デジタルフライトが拓く機体開発DX (Digital Transformation) に向けた実証研究」もその1つに選ばれています。今回は、研究開発課題責任者である東北大学大学院工学研究科の河合宗司教授に、2020年度から2022年度の「『富岳』成果創出加速プログラム」における取り組みを振り返っていただくとともに、新たに始まったプロジェクトについてお話をいただきました。



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

航空機開発に革新をもたらす 数値シミュレーションを実現

はじめに、「『富岳』成果創出加速プログラム」で進めてこられた「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）」を振り返って、達成された成果などについてお話しください。

河合 2020～2022年度に実施した「富岳」航空機プロジェクトでの一番の目標は、これまで誰も成し遂げていなかった、実飛行レイノルズ数における圧縮性流体LES (Large Eddy Simulation) 解析を航空機全機複雑形状で実現させることでした。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、航空機設計における重要なパラメータです。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）になり、逆に慣性力が支配的な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。比較的速い速度で移動しサイズも大きい航空機の周りでは、レイノルズ数は非常に高くなり、通常の旅客機のレイノルズ数は 10^7 オーダーとなります。しかし、風洞実験では、国内最大級の施設を使用してもレイノルズ数は 10^6 オーダーくらいで1桁以上のギャップが存在するため、航空機の空力性能は最終的には実機フライト試験などでしか評価できないという課題がありました。数値シミュレーションで実飛行レイノルズ数の解析ができれば、航空機空力設計に革新をもたらすことができます。

そこで私たちは、高レイノルズ数での航空機全機LES解析の実現をめざしました。研究開発のターゲットとしたのは、これまで予測評価が困難であった航空機開発における最大の空力課題ともいえる離着陸性能や失速などの安全性に関わる最大揚力を正確に予測評価することでした。結果から申し上げれば、LES解析は予想以上の高い成果を達成し、現在では実験データとほぼ一致するまでになっています（図1）。

これを実現するためにまず取り組んだのが、高レイノルズ数流れのLESを可能とする壁面近傍内層乱流をモデル化する壁面モデルLESの研究でした。さらに、大きな成果を挙げたのが、画期的な計算手法KEEPスキーム (Kinetic Energy & Entropy Preserving scheme) です。圧縮性流体现象は質量・運動量・エネルギー保存

の3つの支配方程式を解くのが一般的ですが、それではどうしても計算が不安定になることが避けられない状況でした。そこで従来はその数値不安定を抑えるために数値拡散エラーを導入しなければならませんでした。そこで私たちは発想を転換し、支配方程式の離散化を工夫することで、3つの支配方程式から二次的・副次的に導出され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正しく解ける計算手法を構築しました。その結果、数値拡散エラーを導入する必要もなく、安定で高忠実な圧縮性流体の解析が可能になりました。もう1つの成果が、複雑形状に対する完全自動格子生成を可能にした等間隔階層型直交格子法です。簡単にいうと、航空機の形状さえ用意してもらえば、複雑な機体に合わせてユーザーが格子をつくる必要なく、ソルバーが自動で格子を生成し、すぐに計算できるというものです。

こうしたキーとなる主要技術の開発によって、私たちは世界的にも類を見ない完全自動、安定・高忠実な次世代の圧縮性流体基盤アプリFFVHC-ACEの構築に成功しました。3年間でここまで達成することができて、本当に良かったです。正直なところ、これほどプランどおりに進み、十分に満足いく成果が得られたのはすごいことだと思っています。

一方で、社会実装への展開としては、三菱重工グループがこれまで開発を行ってきた民間旅客機「スペースジェット」を対象とした、FFVHC-ACEを用いた「富岳」による計算が挙げられます。三菱重工グループの研究者が、形状データの入力のみで、完全自動かつロバストに「スペースジェット」の実機フライト解析に成功しました（図2）。また高精度に離着陸時の最大揚力予測な

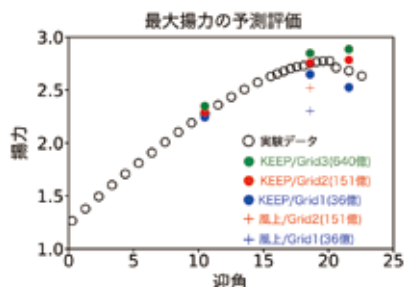
どが可能であることも実証されました。これは私が見る限り、産業界による世界初の民間旅客機のLES解析です。これにより、高忠実な圧縮性流体のLES解析が、実機フライト試験の代替となることが先導的に実証され、さらに航空機開発における最大の空力課題である最大揚力の予測評価の解決にも一定の見通しがついたといえます。

航空機デジタルフライトが新たな機体開発 DX促進技術となることを実証したい

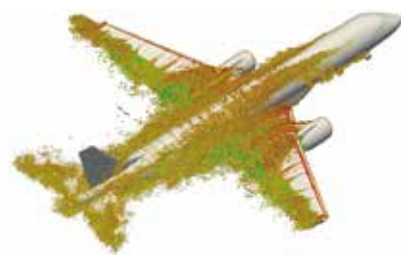
今年度からスタートした「『富岳』成果創出加速プログラム」ではどのようなことに取り組まれているのですか。

河合 前回のプロジェクトでは、航空機全機解析を達成することをめざしてやってきて、3年間でやっとなできるようになりました。しかし、まだやるべきことはたくさんあって、今回の「航空機デジタルフライトが拓く機体開発DXに向けた実証研究」では、学術研究から応用・実用までの使用に耐える次世代の高忠実な圧縮性流体解析基盤アプリケーションFFVHC-ACEの機能をさらに拡充し、高度な計算科学とデータ駆動科学の融合に基づく航空機デジタルフライトが機体開発DX促進技術になることを実証したいという、かなり高い目標を掲げています。さらに、国内航空機開発メーカーとの連携のもとで、航空機設計プロセスへの展開も進めていきたい考えです。

そのための主な解析的な目標は3つあります（図3）。これまで開発してきた高忠実・圧縮性流体解析基盤アプリFFVHC-ACEは、航空機が速度を落とす離着陸時の低速流れをターゲットにしてきました。これからは、巡航時などの高



▲図1 航空機全機形状の最大揚力予測結果の比較
KEEPスキーム（緑・赤・青丸）、従来の計算手法（+）の比較。KEEPスキームは実験データとほぼ一致することが示された。



▲図2 FFVHC-ACEによる民間旅客機「スペースジェット」の実機フライト試験を対象としたLES解析結果。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。

速流れでも使えるように展開するというのが1つ目の目標です。低速から高速まで、超音速流れにも適応できるようにしたいのです。たとえば、音速に近い速度で飛行するとき、衝撃波によって境界層が剥離し、それにともない衝撃波が翼面上を非定常に振動することで機体に振動をひきおこす高速パフェットという現象がありますが、その境界がどこにあるかも予測評価できるようにすることをめざしています。

2つ目は、離着陸空力音響の予測評価です。KEEPスキームのおかげもあって、圧縮性流体を高忠実に解けるようになりました。つまり音響も直接解けるということで、きちんとした音響解析ができるように展開していきたいと考えています。というのも、ここ数十年で航空機のエンジン音はかなり静かになってきており、航空機の低騒音化が進んでいます。エンジンが静かになったおかげで、フレームノイズといわれる機体そのものから出る空力音が注目されるようになり、こちらの空力音も下げる工夫が必要になってきているからです。

3つ目は、主翼空力弾性の予測評価です。いま私たちにできるのは、変形しない航空機周りの計算です。しかし、実際には航空機が飛ぶと主翼がぐっと曲がるなど変形します。こうした移動変形物体の解析は非常に難しいのですが、ぜひ実現させたいと考えています。すでにボディフィットで格子を作成して移動変形させるといった計算方法はできているのですが、これからやろうとしているのは、自動格子生成を引き継いで、直交格子のなかで物体が自由に動いたり変形したりしても計算できるアルゴリズムの構築です。私たちとしては、いままで実現してきた物体形状を用意するだけで安定・高忠実な解析を可能とする開発アプリFFVHC-ACEの利点はそのまま損なわずに展開できる、ユーザーフレンドリーなものにしたいと考えています。ただ、使う側にとって使いやすいものをつくるということは、その分研

究者側がたいへんになるということで、容易なことではありません。この移動変形物体の計算手法の確立や空力弾性の予測評価ができるようになれば、将来的にはヘリコプターやドローンなどの回転機器の解析にも開発アプリFFVHC-ACEが展開可能になります。

大規模複雑流体データのデータ駆動科学を推進

これから河合先生が取り組んでいかれるもう1つの課題が、データ駆動科学との融合とうかがっていますが。

河合 機械学習をはじめ、レゾルベント解析、固有直交分解（POD: Proper Orthogonal Decomposition）や動的モード分解（DMD: Dynamic Mode Decomposition）といった時空間データ解析技術などを活用することによって、超大規模非線形複雑流体データから現象の因果関係を抽出したり、役に立つ情報を引き出すようにしていこうというわけです。

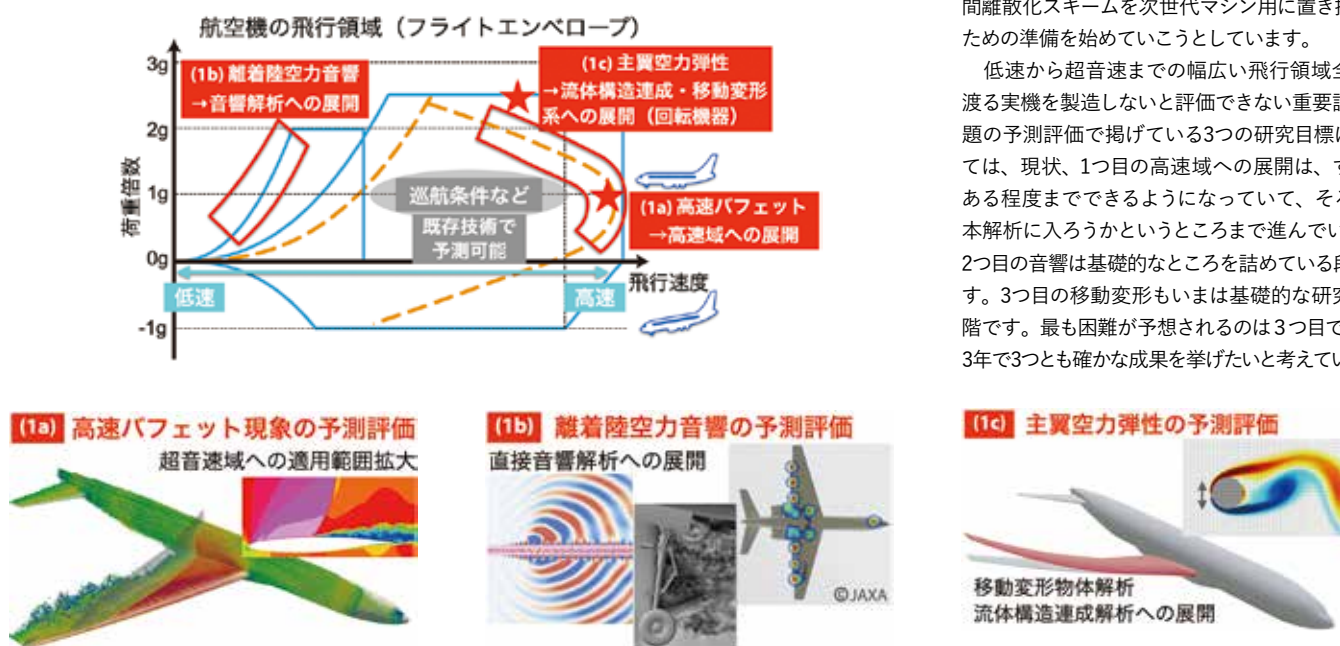
実は、データ駆動科学を用いた解析については以前から取り組んできました。高忠実な計算ができるようになると、流れが複雑なだけに理解が難しくなったり、データ量も非常に大きくなるのでどう処理してよいのかわからなくなるなど、とても苦労していたからです。流体現象は非線形なので、何が原因で何が結果なのかの理解が非常に困難なことも大きな要因です。原因が結果になったり、結果が原因になったりするとそれが流体現象の理解を難解にしている、そのような超大規模非線形複雑流体データに内在する因果関係、インプットとアウトプットの関係やキーとなる流体現象を、数学的手法を活用して解析する手法の構築も今回のプロジェクトではめざしています。言い換えれば、詳細な計算で出てきた複雑な流れ場データのなかから重要で意

味のあるものを抽出する解析手法を構築したいということです。ただ、数百億点という大規模な非定常データを扱うデータ駆動科学はかなりたいへんです。私たちは、大規模な非定常複雑流体データをそのまま使って正確なデータ解析をやっていきたいのですが、この規模のデータを扱う先行する研究が見あたらないこともあり、データ駆動科学を用いた超大規模非線形複雑流体データ解析は非常におもしろい展開が期待できそうだと思っています。さらに、そこから役に立つ知見をどのように抽出するのが、さらに重要なテーマになってきます。

これまでの研究開発によって、高忠実なシミュレーションが形状データ入力のみで自動的にできるようになったわけですから、次は「このあたりが大事ですよ」、「ここを見てほしいんです」、「ここに大事な現象が起きていますよ」ということが自動的に抽出できるようにしたいですね。たとえば、研究者ならば、1か月や2か月かけてデータをじっくり見て、大事な現象を見つけ出すこともできますが、産業界の人たちに実際に使ってもらえるものにするためには、自動的に大事な現象が抽出できるようにする必要がありますと考えています。3年間でそこまで到達できるようにしたいです。具体的には、たとえば失速にいたる現象が起きたとき、原因を見つけ出すためにはどのあたりの流れ場が重要なのか、それがある程度自動的に見えるようになることが理想です。流れ場の知見が得られれば、設計をどのように変えればよいかということまで踏み込むことができますから。

もう1つの課題が、ポスト「富岳」を見据えた次世代アプリケーションへの展開です。低B/F環境下でも性能を出せる新しい計算アルゴリズムを確立し、次世代のマシンに乗せられるようにKEEPスキームをもっていきたいと考えています。具体的には基底関数ベースの計算アルゴリズムにKEEPスキームを展開することを考えています。空間離散化スキームを次世代マシン用に置き換えるための準備を始めていこうとしています。

低速から超音速までの幅広い飛行領域全域に渡る実機を製造しないと評価できない重要設計課題の予測評価で掲げている3つの研究目標については、現状、1つ目の高速域への展開は、すでにある程度までできるようになっていて、そろそろ本解析に入ろうかというところまで進んでいます。2つ目の音響は基礎的なところを詰めている段階です。3つ目の移動変形もいまは基礎的な研究の段階です。最も困難が予想されるのは3つ目ですが、3年で3つも確かな成果を挙げたいと考えています。



▲図3 航空機デジタルフライトが拓く機体開発DXに向けた実証研究

(1a) 高速パフェット境界の予測評価、(1b) 離着陸空力音響の予測評価、(1c) 主翼空力弾性・フラッタの予測評価という3つの研究項目のイメージ。

AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築 カーボンニュートラル時代のものづくりに貢献するため HPCの産業応用を加速するとともに 幅広い分野に展開

スーパーコンピュータ「富岳」は、世界最高水準の総合的な性能を有し、日本がめざす未来社会の姿 Society 5.0の実現に資する大規模計算基盤です。文部科学省は、アカデミア、産業界などとの連携体制により、「富岳」を用いた新たな科学的・社会的成果の創出や成果の社会実装を強力に推進することを目的に、2020年度から「富岳」成果創出加速プログラムを実施し、2023年度には新たに17課題を採択しました。「AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築」もその1つに選ばれています。今回は、研究開発課題責任者である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の加藤千幸教授に、新たに始まったプロジェクトについてお話をいただきました。



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 教授

研究開発成果の実用化には 計算に必要な資源量の削減が必要

2020～2022年度に実施した「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発（『富岳』流体予測革新プロジェクト）の成果を受けて、今年度から新たに「AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築」が始まりました。研究開発のねらいなどについてお話しください。

加藤 『富岳』流体予測革新プロジェクトでは、Large Eddy Simulation(LES)に基づく流体解析システムFFB(FrontFlow/blue)、格子ボルトマン法(LBM)ベースの流体解析システムFFX(FrontFlow/X)、複雑現象統一シミュレーションフレームワークCUBE、九州大学が開発したターボ機械用DES(Detached Eddy Simulation)圧縮性流れ解析ソフトウェアという4つの主要なアプリケーション・ソフトウェアを活用して、輸送機器やエネルギー機器などを主な対象に、HPC(High Performance Computing)を駆使したシミュレーション技術の実証研究を推進してきました。実機スケールの乱流において微細な渦まで直接計算することにより、船の曳航水槽試験や自動車の風洞試験、ターボ機械の性能試験などをシミュレーションで完全に代替できる見通しを示すことができました。また、自然風や前走車を作る変動の影響を受ける自動車の空力・運動連成解析の実現といった自動運転の実用化の加速に資する成果の達成や、ターボ機械の設計にとって重要でありながら従来は経験的に扱われてきたターボ機械特有の不安定現象である圧縮機サージの直接解析を世界で初めて実現して発生メカニズムを解明するなど、多くの成果が得られました。

こうした成果を踏まえて、今年度からは、AIやデータ科学を積極的に活用し、強力な産学連携体制のもとでHPCの適用範囲を飛躍的に拡大する研究開発を実施し、その効果を実証するとともに、研究成果の社会実装、つまり実用化を加速していきたいと考えています。そのために私たちがめざすのは、わかりやすいという「シミュレーションでできることはわかったので、これからはもっと簡単にやっていきましょう」という

ことです。たとえば船の計算では、これまで100億～700億要素を用いた実証研究を実施し、水槽試験が代替できることがわかりました。自動車も1,700億格子を用いた計算によって、音も含めた空力解析ができ、実走行状態における空力特性や音の予測が可能になりました。ターボ機械に関しても約10億格子を用いた長時間の計算を行い、サージングという現象の解明・予測ができるようになりました。そこでこの先は、計算に必要な資源量を大幅に削減して、HPCを駆使したシミュレーション技術の実用化を加速していきたいのです。なぜ資源量の削減が重要なのかというと、これからは計算機の性能が1年半～2年で2倍、4～5年で10倍というように向上し続けるなら、数年後には成果の実用化は問題なく進んでいくでしょう。ところが、近年の計算機性能のトレンドを見ていくと、今後は計算性能の大幅な向上を期待するのは難しいというのが多くの専門家の予測です。計算資源量の増加や低コスト化が望めないなかで、これまでの研究開発成果の実用化を進めていくには、計算量を大幅に減らし、より簡単に計算できるようにしていかなければなりません。

今年度からの研究開発により、HPCシミュレーションに必要な計算資源の大幅な削減と革新的なシミュレーション技術の開発ができれば、スーパーコンピュータ「富岳」の実証研究の成果をより幅広い産業分野に展開できます。また、AIやデータ科学の活用により大規模計算結果の対話的な可視化、特徴量の自動抽出、およびアプリケーションの抜本的な高速化ができれば、産業界におけるHPCシミュレーションの実用化を大幅に加速できるはずです。今回の研究開発で得られる成果は、日本の持続的成長を支える産業の発展に貢献するものになると考えています。

AIの活用によるHPCの産業応用の 飛躍的な拡大を推進する6つの研究テーマ

HPCの産業応用の飛躍的な拡大を実現させるために、どのような研究開発が実施されるのですか。

加藤 この課題では、AIを活用することによってHPCの産業応用を飛躍的に拡大し、産業界

におけるHPCの実用化を加速するための「基盤的な研究」、基盤研究の産業上の効果を検証するための「実証研究」、そして実証された基盤研究の成果を幅広い産業分野に展開するための「次世代計算基盤の構築」の3つの分野に6つの研究テーマを設定して実施します。

「基盤研究」の1つ目は、HPCの計算コストを飛躍的に削減するための「AIを活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発」(研究テーマ1)です。ここでは深層機械学習を応用して、壁面近傍の乱流生成を再現する壁面挙動予測モデルの開発と、多数の計算結果を集約することにより広範囲な設計空間を短時間に探索できる高精度なサロゲートモデル(数値シミュレーションに代わり機械学習を活用して現象を予測する手法)の構築を推進します。どういうことかということ、たとえば、これまでの計算規模の100分の1の計算(10億要素規模の計算)によって、水槽試験を代替しようとする、当然格子点が入らず、壁面の挙動は正しく予測できません。そこで細かいスケールの流れは解いていなくても、いわゆる教師データを用いて学習することで、少ない計算量でも壁面の挙動を予測できるようにしようというわけです。われわれの手元には、これまでに蓄積してきた膨大なデータがあるわけで、これを使わない手はないですからね。2つ目は、ユーザーが計算環境やデータの規模を意識することなく、可視化の視点やパラメータを探索し、調整することを可能にする「スマート in-situ (インサイチュ) 可視化基盤の構築」(研究テーマ2)です。これによって、CUBEにおいて大規模計算結果を手軽に可視化するプラットフォームを開発し、実用化のボトルネックを解消して、普及の加速をめざします。

「実証研究」としては、カーボンニュートラル時代に求められるものづくりの在り方を象徴する研究テーマとして、「実船の推進性能の予測」(研究テーマ3)、「自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立」(研究テーマ4)、および「ヒートポンプ用ファンの性能向上」(研究テーマ5)の3つの研究テーマを設定し、「基盤研究」で得られた成果の産業上の効果を実証します。具体的には、研究テーマ3では、研究テーマ1で

開発する壁面挙動予測モデルをFFBおよびFFXに実装して、模型試験スケールの流場と模型船の推進性能を予測するとともに、実船スケールの流場と実船の推進性能を予測し、試験結果などと比較することによって、予測精度を検証します。研究テーマ4では、研究テーマ1で開発する壁面挙動予測モデルをCUBE、FFB、FFXに実装し、自動車の開発現場で実施可能な格子規模のLESによって空力騒音を精度よく予測する技術を構築し、研究成果の実用化を加速するとともに、研究テーマ1および研究テーマ2で開発する研究成果を活用して、HPCシミュレーションが創出する膨大なデータを基に、車体表面の圧力変動、車両まわりの空力音源、発生する音との相関解析を行うことによって、空力騒音を高精度に予測し、主要な空力音源を高精度に特定できる技術を開発します。研究テーマ5では、研究テーマ1で開発する研究成果を活用して、従来は検討されていなかった広範な設計パラメータを探索することにより、従来性能を大幅に上回るプロペラファンを設計します。そして、研究テーマ2の成果も活用し、翼先端付近の流れの重要な構造を同定することにより、マウスリングの形状なども含めたプロペラファンの性能や騒音を高精度に予測可能なサロゲートモデルに進化させ、これによりサロゲートモデルの産業上の利用効果を証明するとともに、画期的なプロペラファンの開発が促進され、冷凍空調産業に大きなインパクトをもたらしたり、高効率なヒートポンプの開発によって熱需要の電化の促進などに貢献したりすることが期待されます。

研究テーマの「次世代計算基盤の構築」については、まず、主要なHPCアプリケーションをGPGPUに移植してHPCシミュレーションを幅広い産業分野に展開しようとしています。今日の計算機のトレンドを考えると、何らかの加速技術が使われていくことは間違いないので、われわれもGPGPUへのポーティングと最適化

を進めています。さらに、アプリケーションの実効性能がメモリー性能律速にならない解析アルゴリズムを研究開発すること、「富岳」の実効通信性能を向上させるための基盤研究を実施していくこと、こういったことに取り組んでいくとしています。

カーボンニュートラル時代のものづくりに直結する実証研究を推進

基盤研究の産業上の効果を検証するうえでは、カーボンニュートラル時代のものづくりを強く意識しておられると聞いています。

加藤 実証研究では、カーボンニュートラルに直接貢献するテーマを選んでいきます。今回の課題は、基盤研究と実証研究の2段階の構造になっていて、研究開発成果をどこに適用していくかというテーマ選択は非常に重要です。そのための指針として、われわれが重要視したのが、カーボンニュートラルに直結するテーマ選択でした。たとえば、日本の貿易に占める海上貨物（海運）の割合（重量ベース）は、輸出入合わせて99.5%（2021年 財務省貿易統計）を占め、航空貨物を大きく引き離しています。そうした海運を担う船舶において推進性能の向上による二酸化炭素の排出量削減が進めば、非常に大きな効果が得られます。ただ、現状では実船で省エネデバイスがどのように効いているのかよくわかりません。それは実船の流れ場や性能が把握できていないためで、それにより省エネデバイスの効果的な設計にも支障が出ます。そこで実船の性能推定精度を高める予測が重要になります。研究テーマ3では計算資源量を低減した予測の実用化とともに、カーボンニュートラルに貢献する性能予測精度の向上による省エネデバイスの改良も視野に入れて取り組んでいます。研究テーマ4の対象は自動車です。今後の自動車のEV化に伴い、パワートレインの騒

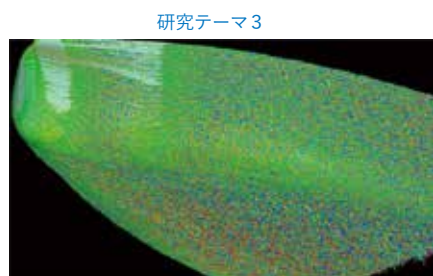
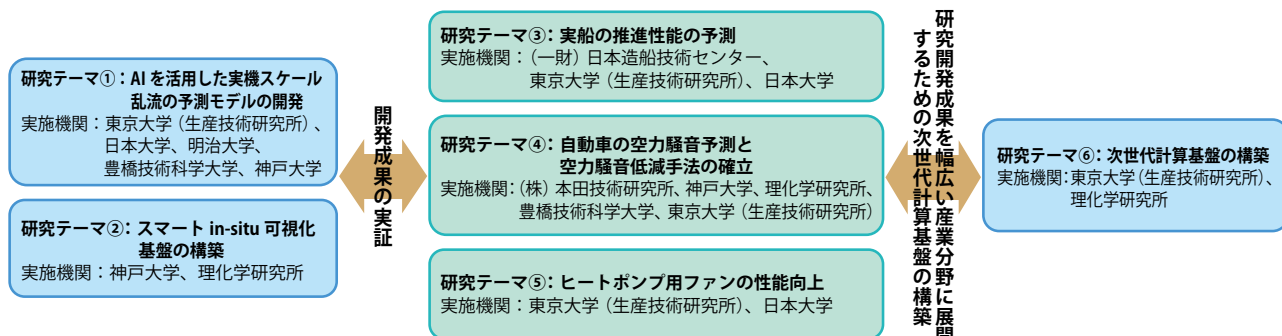
音が低下することで空力騒音がより大きな問題になるなど、カーボンニュートラル時代の自動車開発には新たな課題があり、空力騒音低減のための予測技術の向上などが求められています。研究テーマ5ではヒートポンプ用のファンを扱います。熱交換器にとってファンの性能向上は重要ですが、その形状は試行錯誤によって決められているのが実情です。そうした設計環境を抜本的に改良して性能向上を図ることをめざしています。

最初の1年で研究開発を軌道に乗せたい

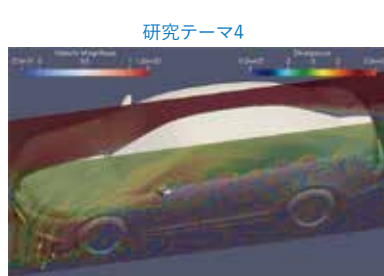
最後に課題の進捗についてお話しください。

加藤 研究テーマ1、2で開発したアルゴリズムを、研究テーマ3、4、5に適用してこれを実証するという構造になっていますが、研究テーマ1、2は基礎研究的な要素が強いので、これを構築して3年で一気に実証レベルまでもっていくのは、正直なところ、なかなかたいへんなことだと思っています。「実証研究」においては、先の『富岳』流体予測革新プロジェクト』同様に、産学連携で推進していきます。研究テーマ3では（一財）日本造船技術センターをはじめ造船メーカーが、研究テーマ4では自動車関連の「HPCを活用した自動車次世代CAEコンソーシアム」が、研究テーマ5ではターボ機械関連の（一社）ターボ機械協会「流体性能の高精度予測と革新的流体設計分科会」が、研究機関と一体になって実施する計画です。

今回の課題の難しさは、「こうやればできる」という筋道がまだはっきりと見えていないことにあります。その意味では、最初の1年が非常に重要と考えています。この1年のうちに研究開発を軌道に乗せることができれば、あとはやるだけです。早いうちに軌道に乗せることが大事なミッションになると思っています。



船首近傍の境界層のシミュレーション結果
提供／（一財）日本造船技術センター



車両まわりの音場のシミュレーション



プロペラファンの例

▲図1 「AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築」の研究内容と実施体制

「富岳」成果創出加速プログラムの成果 「スーパーシミュレーションと AI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用」

東京大学大学院
工学系研究科
吉村 忍 教授



エネルギー資源小国であるわが国にとって、エネルギー問題はエネルギーセキュリティの観点からも地球温暖化問題対応に向けた国際的責務の観点からも喫緊の重要課題でした。2020年に世界的にカーボンニュートラルへの取り組みが一気に加速し、わが国においても同年12月にグリーン成長戦略が発表されました。

われわれは文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」において、主要クリーンエネルギー源として期待される次世代火力発電システムと洋上ウィンドファームについて、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、実用化を大幅に加速することを目的として研究開発を進めました。以下に、主な成果を述べます。

実機システムをターゲットとする各種力学系アプリケーションの開発

第1に、スーパーコンピュータ「富岳」上で効率的に稼働し、実機システムをターゲットとする各種力学系アプリケーションを開発しました。(1-1)大規模燃焼LES乱流解析コードFFR-Combについては、Flamelet燃焼モデルに加えて、Flamelet/ANNモデルを組み込み、噴霧燃焼や微粉炭燃焼の混相燃焼やスラグ流解析を組み込んだLES乱流解析が行えるようになりました。(1-2)大規模LES乱流解析コードFrontFlow/blue (FFB)については、5 MWを超える発電用大型風車複数台並べた環境で、High-fidelityモデルにより風車ローターの回転を再現したLES解析を実現し、高精度の出力評価を行えるとともに、風車直下のnear-fieldから5D~12D(Dはローター直径)離れたfar-fieldの3次元後流分布の計算に成功しました。その解析結果を回帰分析して、ダブルガウシアン型の高精度後流分布モデルを構築しました。(1-

3a)大規模並列FEM解析コードADVENTUREについては、実機の繰返し熱弾塑性・クリープ解析機能、直交異方性解析機能、引張クラックと分散鉄筋を含むコンクリート解析機能を実装した構造解析コードADVENTURE_Solid3を開発しました。(1-3b)実機の冷却管解析機能を組み込んだ伝熱解析コードADVENTURE_Thermalを開発しました。(1-3c)風車ブレード内に生じる工学モデルに基づく累積疲労損傷解析のポスト処理ツールADVENTURE_Fatigueを開発しました。(1-4)並列連成解析カプラーREVOCAP_Couplerについては、FFR-CombとADVENTURE_Thermalを統合したオンライン双方向連成解析、ADVENTURE_ThermalとADVENTURE_Solid3を連携活用したオフライン熱弾塑性解析、FFBとADVENTURE_Solid3を連携活用したオフライン片方向連成解析に成功しました。(1-5)Actuator Line Model (ALM)を組み込み多数の大型風車が並んだウィンドファーム全体を解析できるLES乱流解析コードRC HPC版を開発しました。

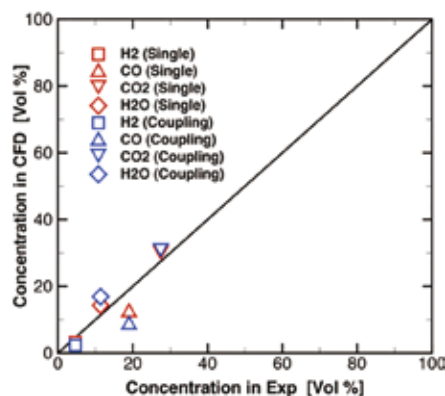
実機クリーンエネルギーシステムの解析結果と試験結果の比較

第2に、上記(1-1)~(1-5)のアプリケーション群を連携活用し、3種類の実機クリーンエネルギーシステムの解析を行い、試験結果等と比較し、それぞれにV&V (Verification & Validation 検証と妥当性の確認)を達成しました。(2-1a, b)石炭ガス化炉については、「Lab-scale石炭ガス化炉」の双方向連成解析結果と試験結果が良好に一致し、V&Vを完了しました(図1)。「Bench-scale石炭ガス化炉」の双方向連成解析に向けて、燃焼流体部、炉容器の伝熱・冷却部、炉容器構造部のそれぞれの単体解析を実施しました。(2-2)「超臨界圧CO₂ガスタービン」については、低圧条件(8 MPa, 17 MPa)での解析結果と試験結

果が良好に一致しV&Vを完了しました。(2-3a)5 MW風車2台を離間間隔3Dでタンデム配置したケースについて、FFBとRC-HPC版を用いて解析し、主流方向流速の時間平均値を相互に比較し、傾向が一致することを確認しました。(2-3b)FFBの解析結果から、RC-HPC版に実装されている工学風車モデルALMのパラメータチューニングを実施し、RC-HPC版の高精度化を実現し、Alpha Ventusの観測結果と比較し良好に一致し、V&Vを完了しました。(2-3c)FFBによる5 MW風車3台のタンデム解析(離間間隔6.5D)を実施し、後流相互干渉を定量的に把握しました。(2-3d)FFBのLES解析から得られる5 MW風車翼に付加される流体力分布を、REVOCAP_Couplerを通してADVENTURE_Solid3へ入力し、翼の動的変形応答を計算し、ADVENTURE_Fatigueによって翼に生じる累積疲労損傷を評価しました(図2)。

HPCとAIの連携活用

第3に、次に示すHPC (High Performance Computing) とAIの連携活用を実現しました。(3-1)FFR-Combの燃焼乱流解析に関して、Flamelet法とAIを連携活用し、高精度かつ効率的な非線形燃焼モデルFlamelet/ANNを構築し実装しました。(3-2)FFB⇒REVOCAP_Coupler⇒ADVENTURE_Solid3による流体構造連成解析から得られる非定常構造応答解析の結果をAIで学習しサロゲートモデルを構築し、NREL5MW風車ブレードの非定常応答を1%以内の精度で高速に再現することに成功しました。



▲図1 Lab-scale石炭ガス化炉の出口ガス組成の解析結果と試験結果の比較



▲図2 NREL5MW風車ブレードの累積疲労損傷解析事例 (TSR=5、入力乱れ10%のケース、最大年間累積疲労損傷=0.858)

量子インスパイアード技術「デジタルアニーラ」の紹介

富士通株式会社
戦略アライアンス本部

岩井 大介 エグゼクティブディレクター



量子コンピューティング技術

昨今、量子コンピューティング技術が、多くの誌面を賑わしているのは、ご存知の通りです。ただ、量子コンピューティング技術のなかには、大別して量子ゲート方式とイジングマシン方式が存在し、ここで紹介する「デジタルアニーラ」は、イジングマシン方式の中の量子インスパイアードにカテゴライズされます。多くの誌面を賑わしているのは量子ゲート方式で、これは将来のコンピューティング技術の有力候補であることは間違いありませんが、その実用化には、まだしばらくの期間がかかると考えられています。「デジタルアニーラ」を含む量子インスパイアードは今使えて、発展し続ける技術として日本がリードし、社会実装が進み始めています(図1左)。量子インスパイアードは、組合せ最適化問題に特化したコンピューティング技術であり、一見用途が限られるように思いますが、さまざまな業種分野に組合せ最適化問題は内包されており、それらの課題解決に役立っています。

「デジタルアニーラ」技術

「デジタルアニーラ」は、現在の汎用コンピュータでは解くことが難しい組合せ最適化問題を高速に解くために富士通株式会社が開発した技術です。その特徴は、組合せ最適化問題をイジングモデルに落とし込み、電子スピンの状態(-1, +1)をバイナリ変数(0,1)に変換したエネルギー関数に対し、MCMC(Markov-Chain Monte Carlo)法で高速に評価系のエネルギーが最小となる基底状態を探索するアーキテクチャにあります。

イジングマシン方式には「デジタルアニーラ」のような量子インスパイアードと、量子アニーリングがあり、両技術が実用化されています。量子アニーリングのメリットは、物理的にスピン間(ビット間)の相互作用に基づいて計算がなされるため、時間をかければ厳密解が保証されるという点にあります。材料計算など厳密解が必要とされるケースでは、実力を発揮します。一方、量子アニーリングにデメリットがあるとすると、極低温動作であるために、大規模化が難しい点、1つのスピンと結合できるスピンの数が物理的に限られており、複雑な最適化問題をそのまま計算に落とし込みにくい点にあります。量子インスパイアードのメリット・デメリットはその逆であり、厳密解は保証されませんが、室温動作のデジタル回路であるために、大規模化が容易であり、かつ、スピンを表現するビットもビット数分だけ結合させることが可能(全結合)であり、複雑な最適化実問題をそのまま表現することができます。

「デジタルアニーラ」は、大規模・複雑な最適化実問題を高速に解くためにさまざまな工夫が

なされています。ここでは2つ紹介します(図1右)。1つ目は、計算中の局所解トラップ抑制技術です。エネルギー関数の基底状態、つまり最適解を探索していくアニーリング計算途中で、局所解に陥ることは往々に起こります。量子アニーリングの場合は、トンネル効果を使って、局所解から最適解へと移っていきませんが、「デジタルアニーラ」はデジタル回路であり、そのようなことはできません。局所解に陥ったことを検知し、エネルギー的にオフセット値を与えることで、局所解からの脱出を促し、高速に最適解に導く確率を高める仕組みを取り入れています。もう1つは、超並列処理です。アニーリング計算手法は従来のシミュレーティッド・アニーリングでも取り入れられていますが、1つのビットを反転させ、そのエネルギー値を前解と比較して解を更新するという逐次処理を繰り返すため、計算時間がかかります。「デジタルアニーラ」の場合は、N個ビットがあるとすると、そのすべてを並列に反転させ計算し比較しますので、高速な最適解探索が可能になります。

「デジタルアニーラ」の応用例

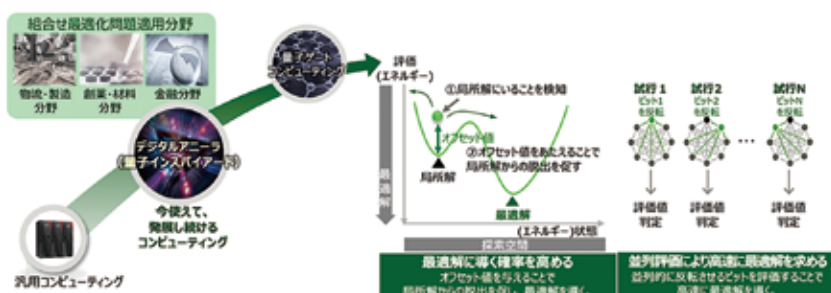
ここでは、材料開発から製品開発までの広い意味でのCAE(Computer Aided Engineering)に活用される「デジタルアニーラ」の応用例を2つ示します。

図2左は中分子環状ペプチドの安定構造探索を示したものです。中分子環状ペプチドは医薬として活用されます。医薬候補を絞り込む段階で、そ

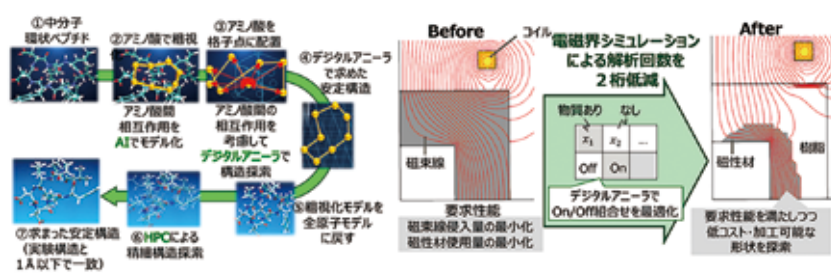
の形状を知ること是非常重要的です。低分子の場合は、従来の分子動力学計算によって、形状を計算できますが、分子数の多い中分子になると、計算量が膨大で、収束しない場合が多いのが現状です。単純に分子動力学計算を行うのではなく、ペプチドの構成要素であるアミノ酸残基で括り、残基間の相互作用をAIでモデル化、残基をこの場合は面心立方格子の格子点に配置し、モデル化した相互作用ポテンシャルを用いて、格子点に残基が存在するしないを1,0で表現して「デジタルアニーラ」でエネルギーの低い状態を求めます。その後、求めた解を初期値として精細な分子動力学計算を行うことで中分子のような分子数の多い系でも安定構造を求めることができます。この技術は、ペプチドにおけるアミノ酸残基のように、粗視化できる他の材料系にも適用可能です。

図2右は磁気シールドの構造最適化を示したものです。磁気シールドの形状は、磁束線侵入量の最小化と磁性材料使用量の最小化という要件を満たすように決定されます。通常は電磁界シミュレーションを繰り返し行うことで形状を決定していきますが、計算量が多いことが課題です。ある場所に磁性材料が存在するかしないかを1,0で表現し、2要件を満たす解を「デジタルアニーラ」で高速に解く、トポロジー最適化を行うことで電磁界シミュレーションの回数を2桁低減できることを示しました。この技術も磁気のみではなく、トポロジー最適化を必要とするさまざまな事例に適用可能です。

以上のように、さまざまな業種分野で「デジタルアニーラ」の活用が始まっています。事例を見ていただければ分かりますが、その多くは、「デジタルアニーラ」のみではなく、AI、HPC(High Performance Computing)なども活用したハイブリッドコンピューティング技術によって実現されています。今後も「デジタルアニーラ」は、ハイブリッドコンピューティングの重要要素技術として進化し続け、CAEにおいても活用が進むことが期待されます。

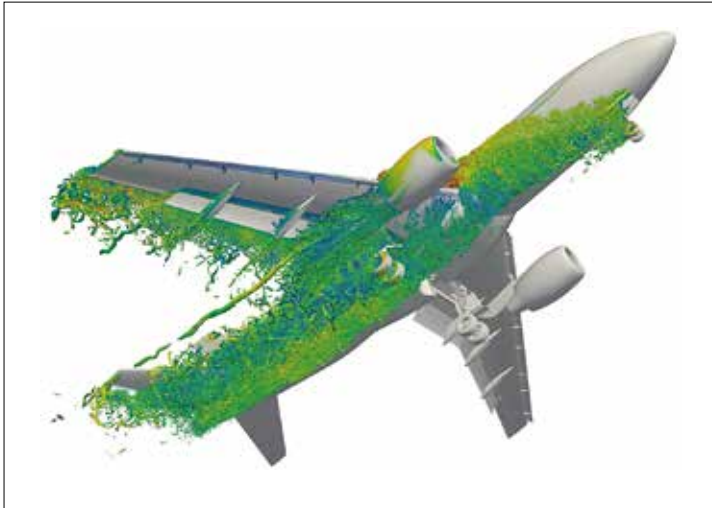


▲図1 「デジタルアニーラ」の位置付け(左)と高速求解性能を実現する二つの独自技術(右)



▲図2 「デジタルアニーラ」の応用例

左：DA(デジタルアニーラ) × HPC × AIによる中分子環状ペプチドの安定構造計算
右：DA × HPCによる磁気シールド設計



今号の表紙

FFVHC-ACEによる航空機離着陸時複雑形状周りのLES解析

2020～2022年度の「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、圧縮性流体LES基盤ソルバーFFVHC-ACEを確立し、いま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解析を実現しました。表紙の画像は、FFVHC-ACEを用いた民間旅客機の離着陸時を模擬したLES解析結果です。640億点規模の格子を20分弱で完全自動生成する「階層型直交格子法」をはじめ、「壁面モデル」や「KEEPスキーム」などの独自の学術成果により、ランディングギアやフラップ・スラット、支持装置、ナセルなどを含めた航空機離着陸時の複雑形状でも、形状データの入力のみでユーザーを問わない完全自動かつ安定・高忠実なLES解析を実現しました。2023年度からは、前回の成果をさらに発展させる「富岳」成果創出加速プログラム「航空機デジタルフライトが拓く機体開発DXに向けた実証研究」が始まっています。

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**

編集後記

スーパーコンピュータ「富岳」を用いた新たな最先端の科学的・社会的成果創出や成果の社会実装を目的に実施されている、文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」では、今年の春に新たに17課題が採択されました。新規の採択課題では、世界最高水準の総合的な性能を有する「富岳」を活用して、AI・データ科学との融合・連携による成果の創出や次世代を見据えたアプリケーションに繋がる取り組みなど、これまでにない新規成果の創出が見込まれる研究課題に挑戦しています。今号では、これらの課題のうち、「産業競争力の強化」領域の「航空機デジタルフライトが拓く機体開発 DXに向けた実証研究」、「AIの活用による HPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築」という2課題の研究開発課題責任者へのインタビュー記事を掲載しました。



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.25

発行日：2023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