

計 算 工 学 ナ ビ

Quarterly News Letter Fall 2013



創刊に寄せて

ものづくりとシミュレーション 加藤千幸

シミュレーションの現場から

住友ゴム工業 / ダンロップスポーツ

ソフトウェアライブラリ

FrontCOMP

ものづくりを革新する HPCシミュレーションの可能性を伝えたい



加藤千幸 教授

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センター長であり、国家プロジェクト『次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム分野4・次世代ものづくり』を統括する加藤千幸教授による創刊のごあいさつ。

ここで言うシミュレーションとは何なのか。今後の議論の前提なので、まずこの点を簡単に整理しましょう。

広義のシミュレーションを「ある事象の結果がどうなるかを予測すること」とします。避難訓練のときは、火事が起きたらどうなるかを予想して行動しますね。これもシミュレーションのひとつ。こうした予測をコンピュータの力で行うことを計算科学シミュレーションと言います。当然、コンピュータの能力によって可能なシミュレーションは違ってきます。スーパーコンピュータのように高速な計算機を使う領域をハイパフォーマンス・コンピューティング (HPC) と呼び、『計算工学ナビ』で扱うのは、おもにこのHPCによるシミュレーションです。

計算科学シミュレーションは「現象を記述する方程式の近似解を計算機で求めること」と言い換えることができます。たとえば、落下中のリンゴの1秒後の位置はニュートンの運動方程式を解くことで予測可能です。もちろん、実際の複雑な問題に対して紙と鉛筆でこうした計算をしてはなかなか答えがでないで、コンピュータの出番となります。コンピュータの能力が向上するにつれ、予測可能な現象は飛躍的に増えました。気象予測や災害シミュレーションの結果は目にする機

会が多いでしょう。そうした適用範囲のひとつに「ものづくり」があり、シミュレーションの効果が大きい分野のひとつです。

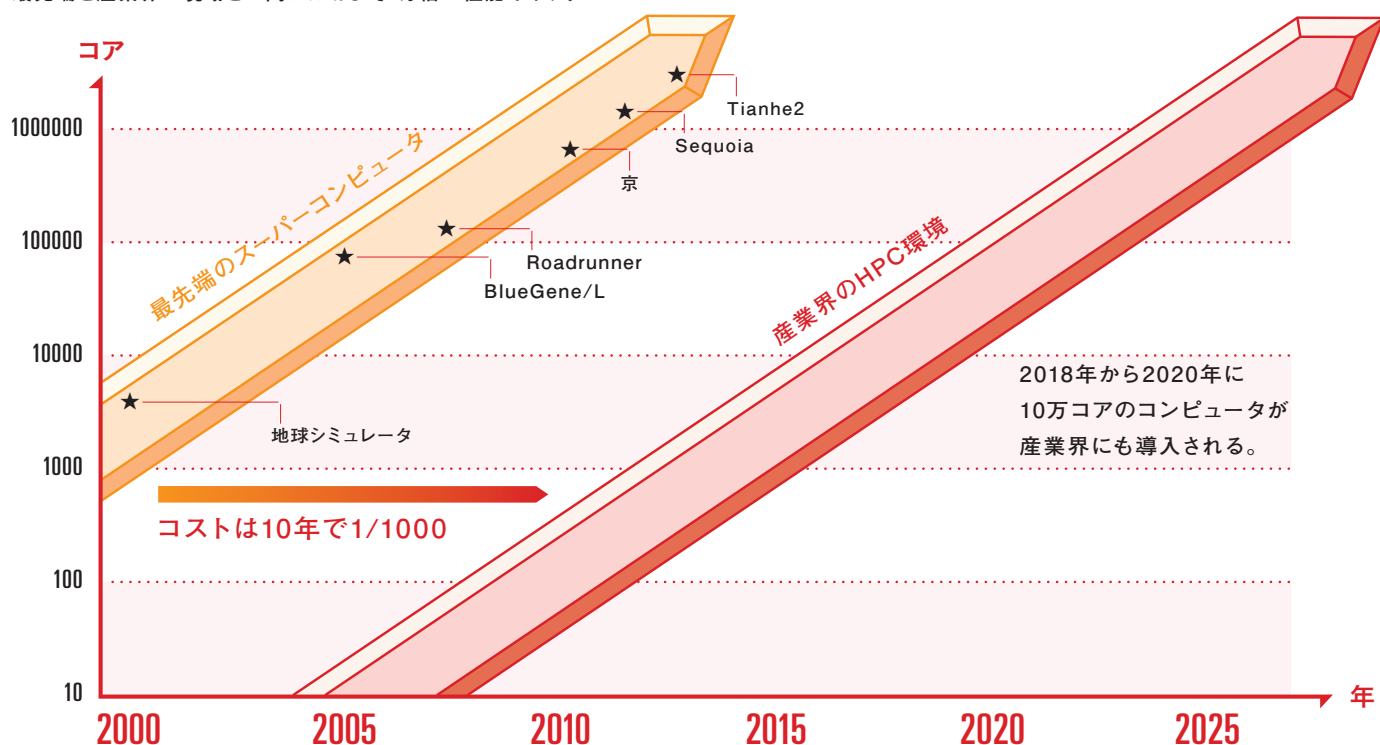
すでに産業界の現場では、ものづくりのためのシミュレーションが広く行われています。しかし、現在の最高性能のコンピュータを使ってできるシミュレーションと現場のそれとの間にはギャップがあるのではないのでしょうか。つまり、潜在的なコンピュータの能力がまだ生かされていない。現場のシミュレーションで使われるコンピュータは64コアくらいのものが一般的。一方、『京』は64万コアです。1万倍の開きがある。大きなギャップです。ただし、このギャップは良いギャップとなり得ます。我々の取り組みはこのギャップを他者に先んじて埋め、産業競争力を生み出すことが目的です。

より速く、より良いものを

2018年から2020年頃には10万コアクラスのコンピュータが産業界の現場に導入され始めるでしょう。現在と同程度のコストで、およそ1,000倍の計算能力を使えるようになります。で

■ 増大するコンピュータの能力

最先端と産業界の現場の間にはおよそ1万倍の性能ギャップ



は、この計算能力をものづくりに活用することで、どんなことが可能になるのでしょうか。

まず、実験をシミュレーションで置き換えることができるようになります。たとえば自動車の空力試験を風洞ではなくコンピュータ上で行うことが可能となり、モノを作って動かす必要がなくなる。もちろん、最終製品は作るのですが、設計、実験、評価のサイクルから試作が不要になることで開発のプロセスが圧倒的に速くなるのです。【図1】▶

また、高度なシミュレーションを通じて、より良い設計が可能となります。自動車の乗り心地を改善するとしましょう。そのためには、自動車が急に曲がったときにどのような力を受け、どのような運動をするかといったメカニズムをより深く理解することが前提です。シミュレーションは現象の深い理解に役立ちます。ただし、格段に違う製品を作るためには、格段に深い理解が必要で、そのためには格段に高速なコンピュータによって格段に詳細な予測をする必要があります。

ここまでは1,000倍の能力をひとつの高度なシミュレーションに使う話でしたが、この能力を現在と同レベルのシミュレーションを同時に1,000個動かすためにも使えます。多数のシミュレーションを並列に実行することで、最適なパラメータを計算機のなかで探すのです。設計とは最適なパラメータの決定であるとするなら、これは設計手法の革新に繋がると我々は考えています。【図2】▶▶

産業競争力の源泉

ものづくりにおけるシミュレーションの効果をまとめると次の

3つです。

- 1 ▶ 実験の代替
ものを作らなくていいから開発期間が短くなる
- 2 ▶ 現象の理解
より深く理解することで性能や信頼性を向上させる
- 3 ▶ 最適設計
最適なパラメータをシミュレーションで探し出す

これらは産業競争力の源泉であり、とくにものづくりを主要産業に位置づけている我が国にとって、この分野で先行することは競争力維持のため不可欠と言っていいでしょう。とは言え、実務への導入は一朝一夕にはできません。2018年に到来するであろう10万コア時代を見据えて、今から実証研究や人材育成に取り組む必要があります。刻々と変動するビジネス環境のなかであって、その負担は小さいものではないかもしれません。

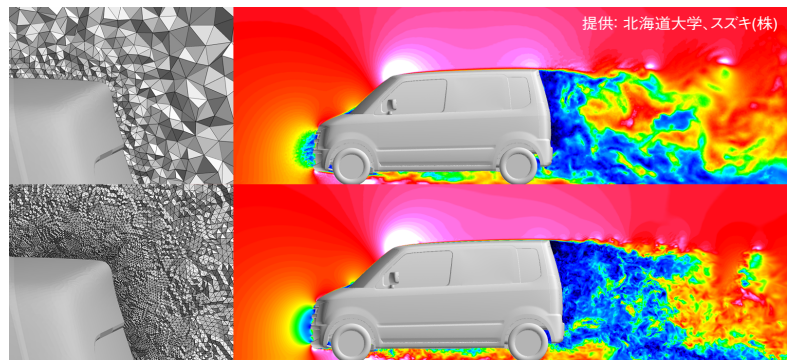
我々は産業界におけるそうした活動を支援しています。開発したシミュレーションソフトウェアはすべて公開し、トライアルに供しています。また、ワークショップやシンポジウムを通じて利用技術の共有を図っています。この『計算工学ナビ』もそうした情報共有の一環としてスタートしました。今後継続的に、研究者からの成果報告、産業界からの事例紹介、各ソフトウェアの解説記事などをお伝えしていく予定です。最新の情報については次のURLを参照してください。

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

皆さんからのご質問やご要望も歓迎します。上記ウェブサイトを通じてお寄せください。

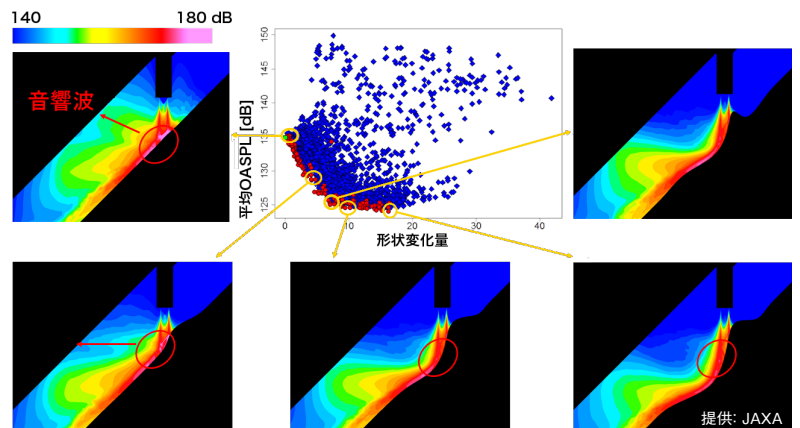
【図1】▶ 自動車用次世代空力設計システム

北海道大学を中心に、自動車会社10社、サプライヤー3社、大学4校で結成されたコンソーシアムによる研究成果。従来レベルの3,500万要素（格子解像度2~10mm）と世界最大規模の23億要素（0.5~2.5mm）のモデルを生成し、空力計算の結果を比較したところ、3,500万要素では風洞実験に対して10%程度の誤差を示したのに対し、京を用いた23億要素のシミュレーションは2~3%の誤差で空力抵抗を予測できることを実証した。この精度があれば車体形状の微妙な変化も捉えることができ、自動車設計のプロセスに大きな変化をもたらす可能性がある。



【図2】▶▶ 探査ロケット射点形状の空力音響設計

ロケットの打ち上げ時にエンジンから出る音響波は震動となってペイロードに大きな影響を与える。この音響波を最小限に抑える射点の設計はJAXAの研究課題のひとつ。設計の最適化に多目的進化計算を取り入れ、50個体×50世代のシミュレーションを京を用いて行ったところ（6,500ノードで2週間以上の計算時間）、形状設計に関する有益な知見が得られた。この方法により空力音響設計探査に成功したのは世界で初めて。



新しいシミュレーションへの挑戦が 開発の指針を生み出す

住友ゴム工業
ダンロップスポーツ

産業界の現場におけるシミュレーション活用をレポートするシリーズ第1回は流体解析を現象理解に生かし、より魅力的な製品の開発につなげている住友ゴムの取り組みを、ゴルフボールの例を中心に紹介します。

ゴルフボール（公認球）には大きさや重さ、初速度、トータル飛距離などの制約があり、飛ぶボールを開発するのは難しい。だが「ディンプルにはまだ設計の余地がある」と語るのは住友ゴム工業株式会社研究開発本部の角田昌也氏だ。

ディンプルとはゴルフボールの表面にあるくぼみのこと。ディンプルのパターンや形状、深さは、ボールの飛距離を大きく変化させる。たとえば、深さを0.005mm変化させるだけで飛び方が変わる。

同社は1996年頃、ゴルフボールの空力研究を始めた。2001年からはゴルフ製品開発用のシミュレーション技術を「デジタルインパクト」と名付けて展開してきた。2009年にはアリゾナ州立大学やメリーランド大学と共同研究で、飛行中のボールが周りの空気からどのように抗力を受け、ディンプルをどんな形にすれば抗力（空気抵抗）が少なくなるのかを探った。当時はゴルフボールの周囲の空間を10億セルに分割し、計算は計算科学振興財団（FOCUS）でオリジナルのソフトウェアを使って行ったが、十分な規模の計算が困難なため計算を断念したという経緯がある。

そして今ふたたび、北海道大学大学院工学研究院の坪倉誠准教授らと共同で、FrontFlow/Red*を使ったボールのシミュレーションに挑んでいる。ダンロップスポーツから実験データを提供し、計算は北海道大学で行っている。

ヘッドスピード45m/s前後のトップアマチュアが打ったゴルフ

ボールは、毎分2800～3000回転でバックสปินしながら、およそ63～65m/sで飛び出す。

空中を飛ぶボールは空気による抗力、そして揚力を受ける。抗力はボール前方で圧縮される空気と後方の空気圧差によって生まれる。つまり空気の流れがボールの後ろまで回りこみ、空気圧差が少なくなるほどボールはより良く飛ぶ。

もしゴルフボールがツルツルの球（滑面球）だったら、あまり飛ばない。滑面球の場合、ボール表面の空気の流れが剥離する分離点はボールの前方に位置し、抗力が大きくなるからだ。ディンプルはボール表面に乱流境界層を作ることで速度勾配を大きくし、その結果、剥離点が後ろにずれて、ボールの抗力が減少するのだと考えられている。

レイノルズ数が一定の値になったときに抗力係数が急に小さくなる現象を「ドラッグクライシス」という。ディンプルはここに関わっている。ディンプルがあることで低速でも抗力が小さい状態になるので、ボールはよく飛ぶ。ここまでは同社による以前の研究で、シミュレーションでの再現には成功していた。

だが「乱流の剥離の現象を正確にシミュレーションでとらえるのはすごく難しい」と角田氏は語る。少しパラメーターを変えただけでも全く異なった結果になるからだ。

今は時々刻々変化する表面を高精度に解析できる「ALE（Arbitrary Lagrangian-Eulerian）法」を使うことで、よりうまく解くことができるようになった。だが、回転させた条件で



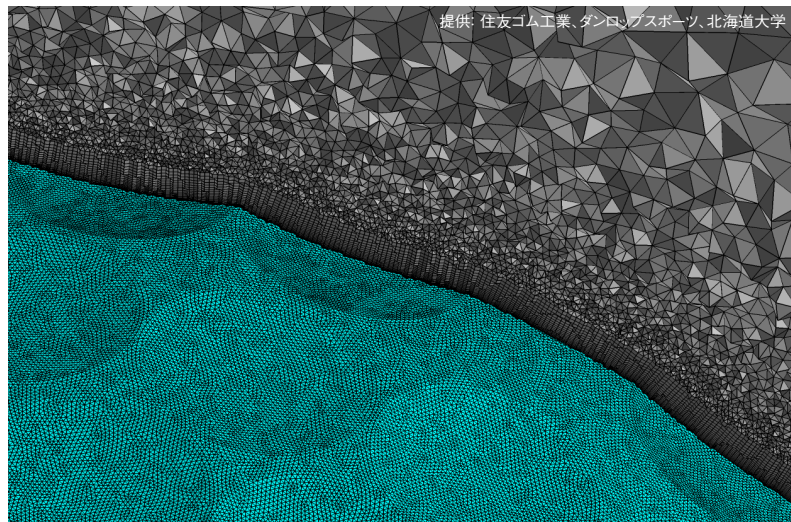
提供: 住友ゴム

シミュレーションを通じて、現象の本質を見抜きたいのです



研究開発本部研究第1部課長
角田昌也氏

住友ゴム工業株式会社はダンロップ、ファルケン、グッドイヤーのブランドで親しまれているタイヤ事業を中核に、スポーツ用品、ヘルスケア用品などの分野で事業を展開している。<http://www.srigroup.co.jp/>

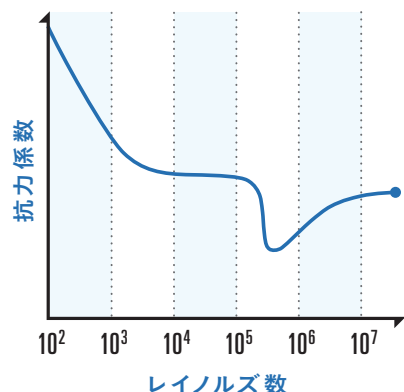


ゴルフボールの解析モデル

青い領域がボール表面で、周囲が空気。格子数は1億1500万。ボール直上には境界層をとらえるための細かい格子が表現されている。

ドラッグクライシス

ゴルフボールの場合、レイノルズ数が30万程度の領域でこの現象が見られることが多い



の計算はまだ難しいという。

「回転条件では、静止状態よりも流れが複雑になり、時々刻々と状態が変化していくので、計算結果の解釈が難しく、まだまだ分からないことだらけなんです」

今後はさらに格子密度を上げ、モデルを改善して現象の本質に迫っていく。

角田氏は「シミュレーションで試作回数を減らそうというのは、実験コストよりも計算コストの方が高い状況では、贅沢な使い方」だと語る。空中で飛んでいるボールから流れが剥離する様子を詳細に観察することは難しい。だがシミュレーションならば色々な物理量を観察でき、実験ではできないこともできる。

「ディンプルの設計はまさに試行錯誤や経験です。なかなかロジカルにはできてない。今は実験をたくさんやって統計的に調べていますが、計算機は『どうしてそうなるのか』という本質、理屈を調べるのに、すごく便利な道具なんです」。

そこには特に大学との共同研究に期待しているという。「企業の技術者だけで見ても見えないものが、大学の先生たちとやることによって見えてくる。私はそこに期待しています」

いまの角田氏のもうひとつの業務はタイヤの製造プロセスシミュレーションだ。タイヤの製造工程では、ゴムが流動状態となっている工程が多く、ゴルフボールで培った流体シミュレーション技術の横展開を図っている。

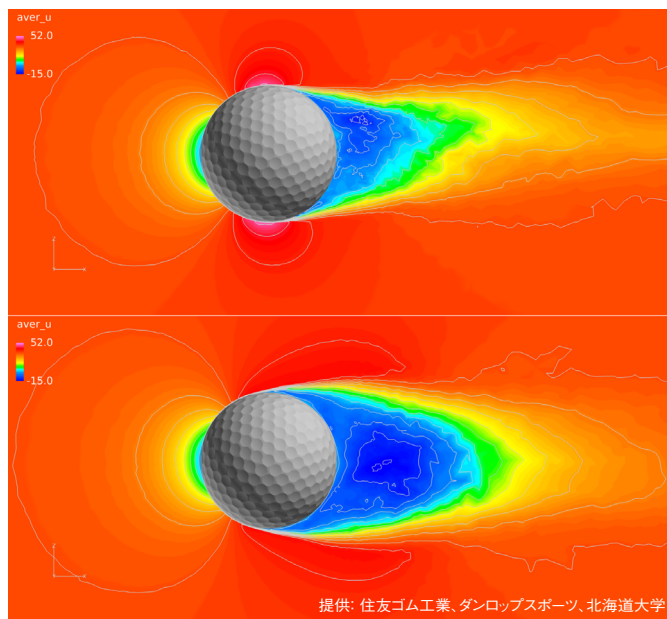
同社はタイヤ材料を分子レベルで解析して材料を開発している。だが、良い材料を開発するだけでは実験室レベルだ。それが量産できるかどうかとなると、まだ難しいことが多いのだという。

タイヤの製造は、ゴムのポリマーにカーボンやシリカ、架橋剤などと加えて練り混ぜる「ミキシング」という工程から始まる。練る回数や材料を入れるタイミングにもノウハウがある。だが下流の工程でシート状にならないなどトラブルが少ない。だから、タイヤ材料を混ぜる一番最初の工程、見えない工程の細部を、流体シミュレーションで「見える化」しようというわけだ。

現象の本質を見ることで、今は経験の蓄積で作られている冷

却温度、圧力をかけるタイミング、混ぜるための羽根の回転速度などに、「指針」を作りたいと角田氏は語る。

「シミュレーションで『理屈作り』をやっていくことで、できるだけ性能の良いタイヤを出していきたいですね」



提供 住友ゴム工業、ダンロップスポーツ、北海道大学

空気の流れ分布

上より高速の場合で、下より低速の場合。速度を上げると抵抗が小さくなる現象がうまく表現されている。ボールの後ろのほうになるに従って境界層厚みが薄くなって、空気が剥離する。まだ実験データよりもシミュレーション結果の境界層厚みが厚くなっている。今後、特にボール表面に対して垂直方向の境界層の格子密度をさらに細かくして、解析を進める予定だ。

★用語解説

FrontFlow / Red

乱流変動などの非定常現象の高精度予測が可能な Large Eddy Simulation (LES) に基づいた乱流燃焼解析ソフトウェア。京にも対応する高性能なチューニングが実施されている。

複合材料強度信頼性評価シミュレータ

FrontCOMP

FrontCOMP_mold

賦型プロセスシミュレータ

複雑な繊維束構造と樹脂システムをメソスケールモデル化

FrontCOMP_cure

硬化プロセスシミュレータ

樹脂硬化プロセスで発生する初期欠陥の評価

FrontCOMP_damage

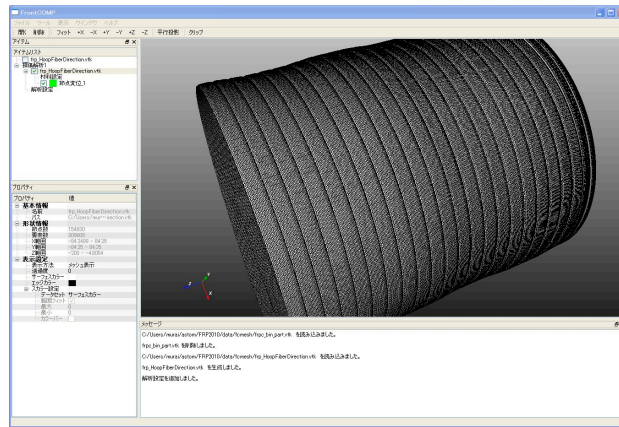
損傷発展シミュレータ

損傷シミュレーションによる強度信頼性評価

FrontCOMP_GUI

複合材料統合化シミュレーションプラットフォーム

各シミュレータとデータベースを統合的に運用するためのグラフィカルユーザーインターフェイス



製造ナレッジ
データベース

材料
データベース

損傷モデル
データベース

2025年に200万台——これは主要な自動車メーカー及びエネルギー企業が加盟する政策提言組織『燃料電池実用化推進協議会』が掲げる燃料電池自動車（FCV）の普及目標。この目標を実現するため、政府も支援して2015年には水素燃料を供給する水素ステーションが全国100カ所に設置される予定だ。FCVのコンセプトモデル『FCV-R』を発表したトヨタのように、自動車メーカー各社の開発も本格化している。

FCVと水素ステーションの双方に不可欠なのが、高圧の水素を蓄える容器。車両用は700気圧、ステーション用は1000気圧という高い圧力に耐えられるタンクが大量に必要となる。しかし、今のところ高圧水素容器の設計手法は確立されていない。外殻となる炭素繊維強化プラスチック（CFRP）の層を含む容器全体の正確な強度評価の方法が存在しないことが、合理的設計を難しくしている。

この課題に、シミュレーションソフトウェアの開発という方法で取り組んでいるのが東京大学生産技術研究所の吉川暢宏教授である。

「ニーズオリエンテッドな研究と言えます。現場の設計者が持つ疑問に答えるためには、従来のマルチスケールシミュレーションでは不十分なんです。より細かいスケールに踏み込んで、近似解ではなく正解を得る必要がありました。そのために開発したのが、メソスケールを扱う複合材料強度信頼性評価シミュレータ“FrontCOMP”です」。

メソスケールで正解に導く

高圧水素容器の強度は、金属製のライナーにCFRPを何重にも巻き付けることで確保される。この巻き方には無数のバリエーションがあり、容器メーカーは蓄積したノウハウを頼りに、経験的に設計を行っているのが現状だ。

「700気圧の容器なら、その2.5倍くらいの圧力まで破裂しないことが条件。その強度を満たす最適な巻き方、最小の巻き数を決める合理的なやり方は、今のところない状態です。設計者は、どこから壊れるのか、どうしてそうなるのかを正確に知りたいはず」。

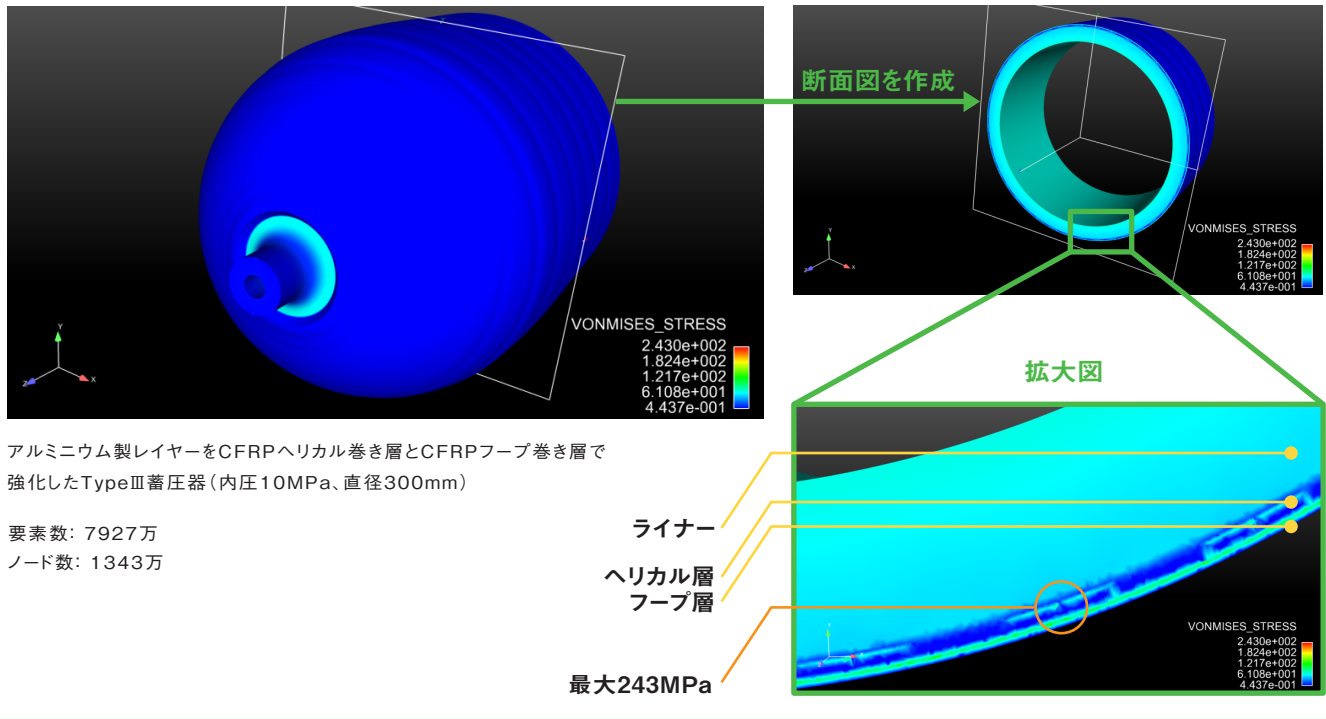
ある巻き方の強度を設計段階で評価する仕組みがあれば、最適な設計に近づくことができる。そのためにはメソスケールでの計算が必要だった。

FrontCOMPにおけるメソスケールとは、直径5～6ミクロンの炭素繊維を扱うミクロスケールと容器全体をおおまかに扱うマクロスケールの間にある領域を指す。炭素繊維を1万本以上



東京大学生産技術研究所
吉川暢宏教授

■ ミーゼス応力が最大となる箇所を見つける例



アルミニウム製レイヤーをCFRPヘリカル巻き層とCFRPフープ巻き層で強化したTypeⅢ蓄圧器(内圧10MPa、直径300mm)

要素数: 7927万
ノード数: 1343万

ライナー
ヘリカル層
フープ層
最大243MPa

束ねたテープとしてモデル化することで、ミクروسケールよりも小さい計算量とマクروسケールよりも高い精度を両立させている。

「通常のマルチスケール解析では、メゾスケールの情報を近似的に求めてマクروسケールに渡します。エンジニアリング的にそういうやり方が有効なこともあるのですが、そこから一歩進んで正解をきちんと計算しよう、というのがFrontCOMPの考え方です」。

当然、この考え方に従えば計算量は増大する。製品に近い規模の解析には、T2K (140TFlops) やFX10 (1.1PFlops) クラスのスーパーコンピュータが必要となり、要素数7900万のモデルを対象にした最近の解析事例では、T2K (512コア使用) で3.5時間を要した。

より大規模に、より広い分野に

要素数1億弱のメゾスケール解析によって、高圧水素容器の設計者は有益な情報を得ることができる。このことはすでに実証済みだ。しかし、現場の要求はもっと厳しいのではないかと吉川教授は考えている。

「メーカーの設計者から見ると、この規模でもまだ足りないかもしれません。今考えているのは、CFRPのレイヤーを1層ずつではなく、何十層まとめて計算する方法です。100億要素くらいのシミュレーションを、なんとか今後5年くらいで実現したい。もちろんハードウェアの制約はあります。京でも難しい。もうひとつ上のスケールのハードウェアが必要です。そしてFrontCOMPにも、さらなる改良が必要です」

燃料電池自動車を推進する産業界のニーズに呼応するた

め、CFRPを使った高圧容器の解析を開発の主要テーマとしてきたFrontCOMPだが、すでに新たな分野への適用も進められている。そのひとつが航空機用ジェットエンジンのファンブレードに対する強度評価だ。

「ジェットエンジンの場合、問題はもっと複雑で、最終的にはバードストライクの試験をクリアする必要があります。CFRP化した最前列のブレードが壊れても、エンジン全体に致命的な損傷を与えてはいけません。ブレードの製造に使うCFRPはごく薄いシートで、それをいろんな方向に多数貼り合わせるのですが、どういう重ね方が一番いいのかを、設計段階の正確なシミュレーションによって知りたいというニーズがあります」。

樹脂の硬化プロセスのシミュレーションに対応しているFrontCOMPは、成形時の意図しない変形を予測するために、洗面台やキッチンの水回りといった身近なプラスチック製品の設計にも使われ始めている。適用可能な分野は、まだほかにもたくさんありそうだ。

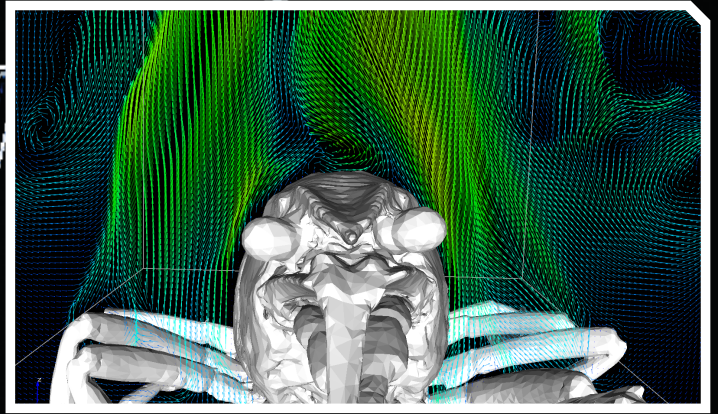
CISSライセンス*で公開されているFrontCOMPは、ダウンロードして試用することができる。

ダウンロードページ: <http://www.cenav.org/library/>

★用語解説

CISSライセンス

非営利目的の使用は自由です。営利目的の利用については商用ライセンスの申請が必要です(許諾に3ヶ月程度の時間がかかります)。問い合わせ先: 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 software@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp



■ 今号の表紙

生体幾何情報を元にした熱流体解析

自然物である生体は、人工物である工業製品とは異なり設計図を持ちません。このため、生体の熱流体解析を行う場合には、形状情報を取得し、計算格子を作成するというプロセスが重要になります。この計算では、ザリガニを樹脂などで固めて数十マイクロメートル単位で薄くスライスした断面を画像化し、得られる一連のピクセルイメージから三次元的なボリュームデータを作成しました。ボリュームデータに対して、セグメンテーションや等値面処理などのプロセスを経て、ザリガニの表面形状が得られます。この計算では、ザリガニに初期温度を与えて自然対流をシミュレーションし、茹でて皿の上においたザリガニから立ち上る蒸気のイメージを模擬しています。

(理化学研究所計算科学研究機構 小野謙二)

■ 編集後記

創刊号はいかがでしたか？ 3件の取材を通じて最も印象に残ったのは「現象の理解」という言葉です。この言葉からは人間の能力に対する信頼が伝わってきます。コンピュータが現象を再現して細部を見せてくれれば、我々はそれを理解し、より良いものづくりに生かすことができるというオプティミズムを心強く思いました。本誌のタイトルにある計算工学という4字から、無機的で人間味の薄い世界を思い浮かべた方もいるかもしれませんが、それは違います。根底にあるのは人間性に対する信頼と楽観。このふたつは創造に不可欠の要素ですね。信頼と楽観に根ざした創造の世界をナビゲートする計算工学ナビをよろしく願います。(F)



計算工学ナビ オフィシャルサイト

本誌のダウンロードや、ソフトウェアライブラリ、その他の読み物を提供しているオフィシャルWebサイト

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

計算工学ナビ Vol.1
発行日: 2013年10月31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