

「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」プロジェクトも残すところ1年 プロジェクト完遂に向けて、実証計算を加速

我が国のフラッグシップシステムがスーパーコンピュータ「京」からスーパーコンピュータ「富岳」に置き換わり、2年がたちました。その間、スパコン「富岳」は、スパコンの性能を表す国際的なランキングであるTOP500、HPCG、HPL-AI、およびGraph500において4期連続でトップを獲得しています。また、昨年3月からは共用に供されるようになり、さまざまな分野の研究開発に貢献しています。特に、「富岳」を用いた新型コロナウイルスの飛沫の拡散・エアロゾル拡散に関するシミュレーションが、2021年ゴードン・ベル賞COVID-19研究特別賞を受賞するなど、すでに多くの成果を挙げています。

革新的シミュレーション研究センター（以下、革新センター）が推進している、成果創出加速プログラムの1課題である「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」プロジェクトもこの2年の間に目標達成に向けて着々と成果を創出しています。

数値曳航水槽の実現と省エネデバイスによる推進効率の向上を目的としたテーマでは、省エネデバイスのメカニズム解明のための解析を実施して、プロペラの後方に設置したデバイスが、プロペラ後方の流場のみならず、プロペラ上方から前方の流場にまで影響を及ぼしていることがわかりました。ポンプ設計の高度化を目的としたテーマでは、細隙部を含めた遠心ポンプの内部流れの解析を実施しています。今年度は最大400億要素規模の解析を実施し、シミュレーションによって試験の代替が可能であることを実証する予定です。圧縮機サージの予測技術を確立することを目標としたテーマでは、遷音速遠心圧縮機サージの直接解析を実施し、流量および圧力が長周期に変動する現象が再現されました。これはシミュレーションによってマイルドサージ現象を再現した成果であり、世界で初めてサージの直接計算に成功したものです。

自動車を対象とした、空力性能予測や空力・構造・音響連成解析に関する2つのテーマでも多くの成果を得ています。空力性能予測に係るテーマでは、実走行時の車の空力性能を予測するためのモジュールを整備し、大気乱流変動下で、ドライバのステアリングモデルも組み込んだ、実走行状態の自動車の空力

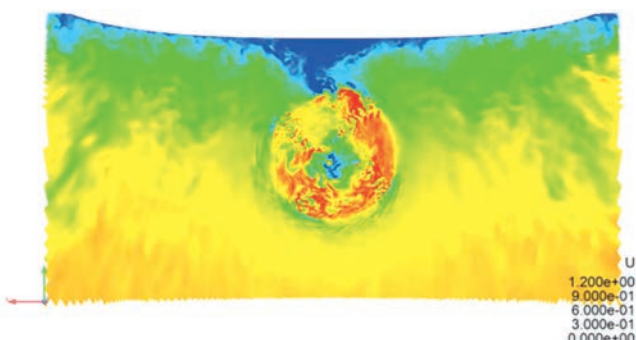
性能の計算が可能となっています。実走行時の車内音の予測を目的としたテーマでは、フロントグリルから発生するピーク性騒音の予測技術を開発するとともに、LBM (Lattice Boltzmann 法) に基づく車外の空力音の予測から振動解析を経て、車内音を予測するための一貫したシミュレーションシステムを開発しています。この解析システムの開発過程において、ドアミラーやホイールハウスに強い音源があることがわかってきました。

このプロジェクトも残すところ1年足らずです。将来的に必要な技術も見据えながらこのプロジェクトを完遂し、スパコンの産業利用技術の発展に貢献したいと考えています。プロジェクトにご参加いただいている研究機関の方々や一般社団法人ターボ機械協会「流体性能の高精度予測と革新的流体設計分科会」や「HPCを活用した自動車次世代CAEコンソーシアム」に参画されている業界の方々をはじめ、多くの業界の方との連携は必要不可欠であると考えていますので、よろしくお願いたします。

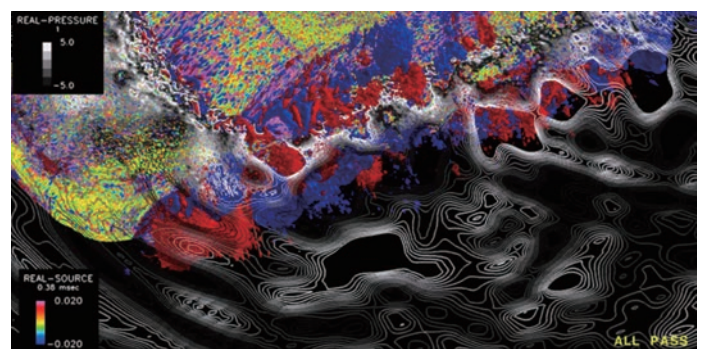
令和4年3月に開催したシンポジウムにおいて、実際に研究開発されている方々より、上述した研究成果の詳細をご紹介いただきました。シンポジウムの様子は本文中にも紹介させていただきましたが、304名の方にご参加いただき、盛会裏に開催されました。特に、今回は生産技術研究所のコンベンションホールをオンサイト会場としたハイブリッド形式にて開催することができました。10名の方に来場いただきましたが、対面で議論することの大切さを改めて感じました。また、オンラインでも多くの方々にご参加いただき、このプロジェクトの成果に対する期待の大きさを実感することができました。参加いただいた方には改めて御礼申し上げます。

今後のイベントも、状況が許す限りハイブリッド形式での開催を考えております。革新センターのミッションであるシミュレーション技術の社会実装に向けて議論させていただきたいと考えています。引き続き革新センターの研究活動に、ご理解とご協力をお願い申し上げます。

センター長・教授 加藤千幸



船のプロペラ下流の流速分布 (FFBによる計算結果)
(提供:一般財団法人日本造船技術センター)



車両全体まわりの音場 (FFBおよびFFB-AIによる計算結果)

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム 「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」 第2回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムの一つの課題である、「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」(以下、本プロジェクト)では、3月9日に東京大学生産技術研究所 コンベンションホール、および、Webex Eventsによるハイブリッド形式にて、第2回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム(主催：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、共催：東京大学生産技術研究所)を開催しました。

本プロジェクトは、エネルギー産業の心臓部である「ターボ機械」、および、輸送産業の中核を形成する「自動車」を対象として、「富岳」の高い性能を引き出せるアプリケーションを駆使して、自動車の風洞試験や流体機械の性能試験を完全にシミュレーションで代替できることを証明するとともに、製品の性能や信頼性を支配する複雑な流体现象のメカニズムを解明するために、大規模な実証計算を実施しています。このことによって、「富岳」の時代においては、ものづくりの在り方をシミュレーションによって抜本的に変革できることを示すことを目指しています。

第2回目となる今回のシンポジウムでは、これまでに得られた成果を報告するとともに、産業界の利用者からその得られた成果への期待を述べていただき、「富岳」の時代のものづくりシミュレーションについて議論しました。

当日は民間企業119社からの参加者を含め、304名(含、現地参加10名)の方々にご参加いただき、盛会裏に終了することができました。

本プロジェクトのHP → <http://www.fugaku-pj.iis.u-tokyo.ac.jp/>



岡部 徹生産技術研究所長による開会の挨拶



オンサイト会場の様子

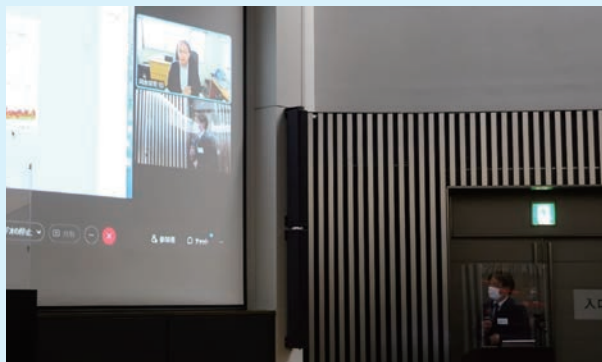
招 待 講 演

流体科学計算の最新状況を俯瞰するための招待講演として、東北大学大学院工学研究科の河合宗司教授と京都大学大学院工学研究科の黒瀬良一教授に講演いただきました。

河合教授には、「安定・高忠実な圧縮性流体ソルバーと航空機全機LES解析」と題して、航空機数値解析に関して講演いただきました。「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」プロジェクトで開発を進めている高レイノルズ数・圧縮性流体ソルバー FVHC-ACEと「富岳」を用いた航空機全機形状LES(Large Eddy Simulation)解析の最新の研究成果についても紹介いただきました。また、河合教授を中心に開発された高レイノルズ数解析を可能とする壁面モデルLESや「安定性」と「非散逸性」を同時に満足するKEEP(Kinetic energy & entropy preserving)スキームを紹介いただきました。

黒瀬教授には、「カーボンニュートラル社会の実現に向けた燃焼数値シミュレーションの役割」と題して、燃焼数値解析に関して講演いただきました。カーボンニュートラル社会の実現に貢献する、黒瀬教授を中心に実施されている燃焼数値シミュレーションに関する研究を紹介いただき、「富岳」を利用した今後の燃焼数値シミュレーションについて展望いただきました。

これらの講演もふまえて、「富岳」の時代のものづくりシミュレーションについて幅広い観点から議論しました。



河合教授の講演における質疑応答の様子



黒瀬教授の講演の様子

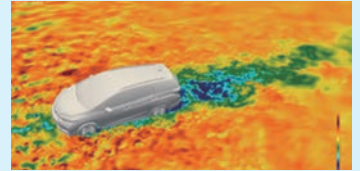
自動車統合設計システムの研究開発

このセッションでは、自動車の空力性能の予測と空力音の予測の2つのテーマに関して、各テーマの進捗状況やこれまでに得られた成果、成果に対する産業界の期待などを紹介いただきました。

(実証研究テーマ④) リアルワールド自動車空力性能の予測

まず、神戸大学/理化学研究所計算科学研究センターの坪倉誠教授/チームリーダーより、複雑形状の車両モデルに対して、サスペンションやステアリング機構も考慮したリアルワールド自動車空力・車両運動連成解析のフレームワークの構築状況を説明いただき、構築したシステムを利用して得られた最新成果について紹介いただきました。

続いて、日産自動車株式会社技術参与の大島宗彦氏より、EV時代の空力エンジニアが解決すべき課題を紹介いただき、変動風が車両の空気抵抗に与える影響や横風変動が自動運転制御に与える影響などを説明いただき、これらの課題に対する「富岳」への期待についてお話しいたしました。

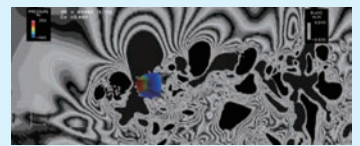


大気乱流を模擬した変動風下における、レーンチェンジ時の自動車周りの流れ渦構造

(実証研究テーマ⑤) リアルワールド自動車空力音予測

株式会社本田技術研究所アシスタントチーフエンジニアの宮澤真史氏より、自動車の広帯域空力騒音予測に関する取り組みに関して、シミュレーションモデルの詳細化とメッシュ作成に要する時間の短縮やポストプロセスの負荷低減などの課題があることを説明いただきました。

続いて、豊橋技術科学大学の飯田明由教授より、設計開発への適用を目指して開発している、格子ボルツマン法に基づいた流体解析ソフトウェア (FFX) を用いた自動車空力音の予測に関して、開発しているシステムの概要や解析事例を紹介いただくとともに、従来の分離解法を用いた解析との関係についても紹介いただきました。



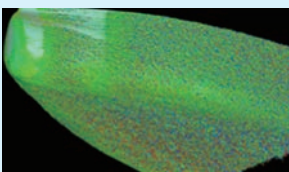
FFXを用いたドアミラー周りの音場解析結果

ターボ機械設計・評価システムの研究開発

このセッションの冒頭では、東京大学の加藤千幸センター長・教授より、ターボ機械の研究開発に係る、これまでに得られている具体的な成果を概観いただき、また、本課題の主要なアプリケーションの一つである FrontFlow/blue (FFB) を例にとり、「富岳」の性能を引き出すために実施した内容を紹介いただきました。

それに引き続き、以下のように、ターボ機械に関して設けられた3つのテーマのこれまでに得られた成果およびその成果に対する期待を紹介いただきました。

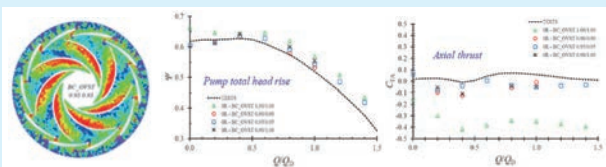
(実証研究テーマ①) 数値曳航水槽の実現と省エネデバイスによる推進効率の向上



船首近傍の境界層の計算例 (提供: 一般財団法人 日本造船技術センター)

一般財団法人日本造船技術センター課長の西川達雄氏、ジャパンマリンユナイテッド株式会社流体研究グループ長の増田聖始氏、および、株式会社三井造船船島研究所部長の木村校優氏より、水槽試験の代替のためのLES (Large Eddy Simulation) を利用した解析の技術の開発について紹介いただき、そして、「富岳」を使った解析結果や、取得された数値曳航水槽の実現のための検証データとの比較について紹介いただきました。

(実証研究テーマ②) 細隙部を含めた多段遠心ポンプの内部流れのWall-Resolved LES



主要水力部内の流れ (左図)、および、ポンプの揚程係数 (中図) と羽根車に作用する軸方向スラスト力係数 (右図)

株式会社荏原製作所技術開発部長の渡邊啓悦氏より、格子を1回リファインした場合までのポンプ内部流れのLES解析の計算結果を紹介いただき、遠心ポンプの水力性能や軸スラストの予測結果と実験結果との比較や、設計流量ならびに20%流量における内部流れの詳細について解説いただきました。

(実証研究テーマ③) 圧縮機サージの直接解析



流量と全圧比のリサージ変動 (左図) と配管も含めた圧力変動分布 (右図)

株式会社IHI主任研究員の佐藤渉氏、および、九州大学の古川雅人教授より、圧縮機サージ現象を概説いただき、その発生予測の重要性和困難性を示していただいた上で、「富岳」へのターボ機械用DES (Detached Eddy Simulation) 圧縮性流れ解析ソフトウェアのコードチューニング状況とマイルドサージに関する解析結果について紹介いただきました。



梅野 宜崇 教授

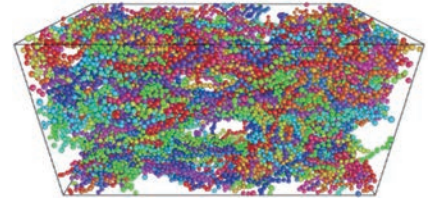


粗視化分子動力学解析によるポリマー強度と分子構造の相関説明

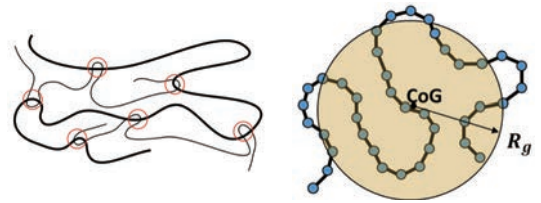
ポリマーの構造材料としての重要度は増す一方ですが、ポリマーの特徴の一つとして、分子種や分子構造によって特性が大きく変わることが挙げられます。そこで、ポリマーの機械的特性と分子構造との相関をシミュレーションによって明らかにすることで、新たな構造用高分子の材料設計指針を与えることが期待されています。

本グループでは、粗視化分子動力学法によりポリカーボネートの引張りシミュレーションを系統的に行い、荷重モード・温度・ひずみ速度・分子量など様々な因子が変形・破壊挙動に及ぼす影響を調べています。それにより、ポリカーボネートの降伏応力と温度・ひずみ速度の関係を表すマスターカーブの取得などに成功しています。

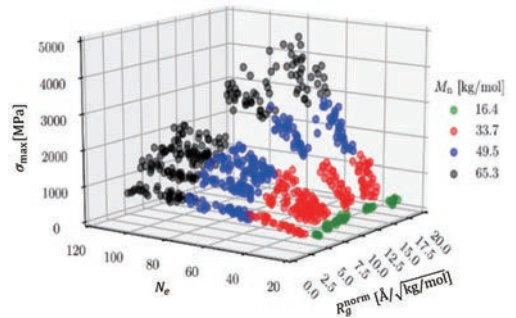
さらに、ポリマー分子の絡み合い度と脆性-延性遷移に強い相関があることが示されました。そこで、分子あたりの分子間絡み合い点数・分子量に加え、一分子鎖の空間的な広がりを示す指標としてよく用いられる回転半径に着目し、応力ひずみ関係への影響を検討しました。その結果、応力ひずみ関係の最大応力値が分子量、分子鎖あたりの絡み合い点数、分子の回転半径の関数として表せることが明らかになりました。



ポリマー引張の粗視化粒子モデル解析



分子の絡み合い点数と旋回半径

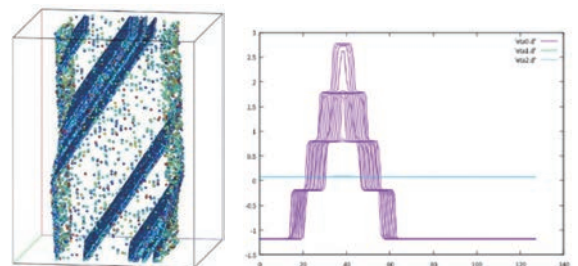


ポリカーボネート引張り最大応力と分子構造パラメータの関係

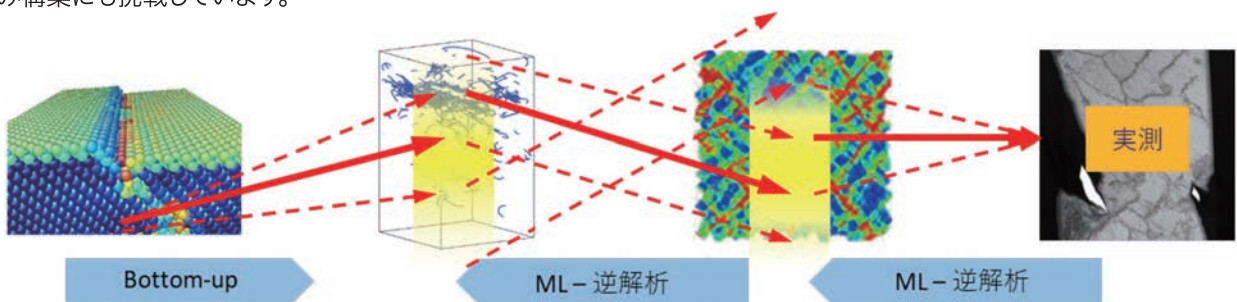
ナノ・マイクロ疲労のマルチスケール解析

金属材料が繰返し荷重を受け、材料内部にき裂が発生・成長することによって破壊に至る金属疲労は、工業製品の破損要因の多くを占める重要な破壊形態です。疲労は極めて複雑な現象であり、長い研究の歴史にも関わらず、その発生メカニズムは完全に説明されたとは言えません。特に最近、疲労き裂発生源と考えられてきたPSB(固執すべり帯)と呼ばれる転位組織のサイズよりも小さな試験片でも、疲労が発生することが実験によって観測されたことから、ナノ～マイクロ領域での疲労き裂発生メカニズムの解明が急務となっています。

本グループでは、分子動力学法・フェーズフィールド法・反応拡散方程式を組み合わせたマルチスケール解析により、原子レベルの欠陥から発生する結晶すべり、転位同士の相互作用、転位の集団的挙動による転位組織形成のシミュレーションを行うことで、ナノ～マイクロスケールに亘る疲労発生メカニズムの解明に取り組んでいます。また、ニューラルネットワークモデルを活用することで異なる階層のモデリングをシームレスに接続し、ナノ領域からミクロン領域まで矛盾なく繋がる新たなマルチスケール解析の枠組み構築にも挑戦しています。



金属における結晶すべり挙動の原子モデル解析とフェーズフィールド解析



機械学習を活用した統合マルチスケール解析フレームワーク



溝口 照康 教授



材料中の格子欠陥(界面、表面等)は材料特性に決定的な役割を果たしています。筆者の研究グループでは、シミュレーションとナノ計測、機械学習を活用し、以下のような研究を行っています。

機械学習を利用した高速かつ高精度な表面・界面機能予測

筆者の研究グループでは機械学習とシミュレーションを組み合わせて表面や界面の機能を予測する手法を開発しています。

界面や表面はその幾何学的自由度から構造を決定するためには、膨大な量の候補構造についてシミュレーションを実行する必要があります。我々は界面や表面の構造を決定することなく、バルクや孤立系から得られる情報のみを記述子とすることで、界面や表面の機能を予測する手法を開発することに成功しました。図1は、表面機能予測の模式図と結果を示しています。シミュレーションで得られる孤立系の状態密度(DOS)を記述子として利用することで、結合エネルギー、結合距離、共有結合電荷やフェルミエネルギーを高精度に予測できていることが分かります。

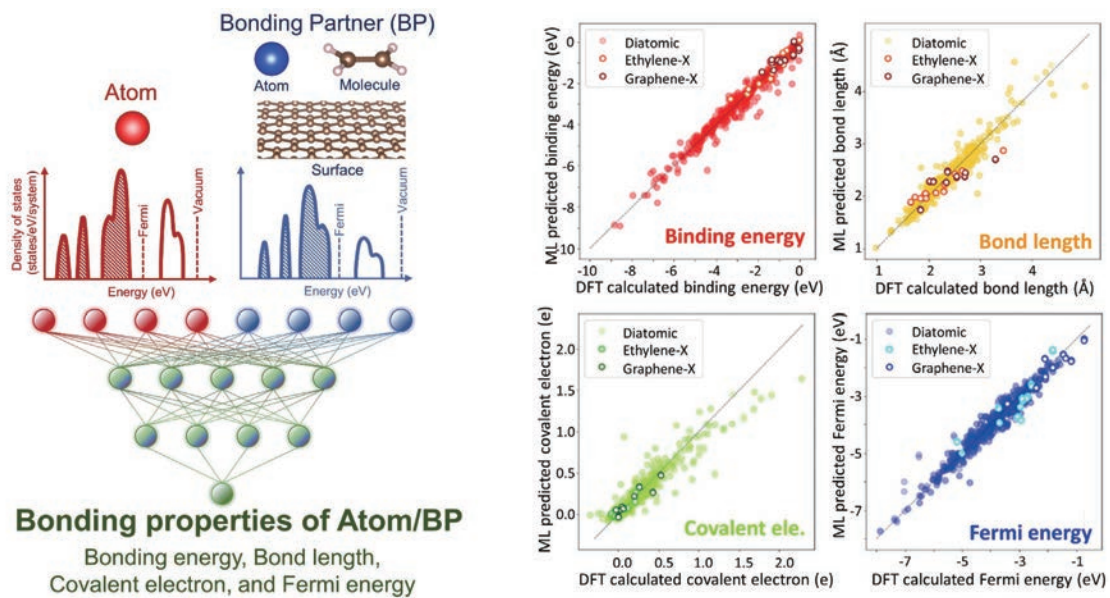


図1: (左)機械学習による表面機能予測の模式図と(右)予測結果

局所熱膨張係数の直接計測

一般的に界面では結晶内部と異なる熱膨張が生じます。熱膨張は電子デバイスの故障やインフラ設備の劣化にもつながるためその理解が重要でした。一方で、界面などの局所的な熱膨張を直接測定する手法はありませんでした。我々は透過型電子顕微鏡で測定されるプラズモンピークに注目しました。

電子顕微鏡内で昇温してプラズモンピークを計測することで、界面の局所的な熱膨張を計測することに成功しました。図2は界面における熱膨張を模式的に示しています。ある界面は結晶内部の約3倍の熱膨張を示し、以前から予想されていた界面における熱膨張におおよそ一致しましたが、別の界面の熱膨張は、結晶内部のわずか1.4倍程度に抑えられていることが明らかになりました。このような熱膨張の界面構造依存性は、本手法による個々の界面の局所的な熱膨張の測定によって初めて明らかになることができました。

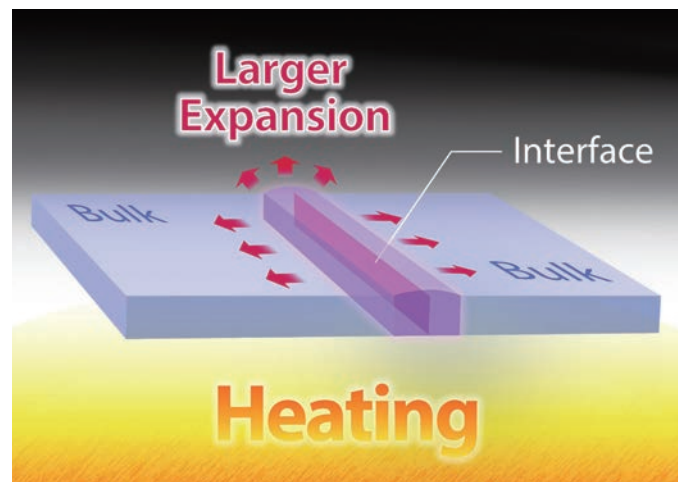


図2: 界面における大きな熱膨張挙動の模式図

大規模LES解析ソルバー FrontFlow/blue (FFB) とFrontFlow/x (FFX)

開発者 加藤 千幸 センター長・教授

本号では、文部科学省のプロジェクト「富岳」成果創出加速プログラムにおいて研究開発が進められている2つの大規模LES (Large Eddy Simulation) 解析ソルバー、FrontFlow/blue (FFB) とFrontFlow/x (FFX) をご紹介します。いずれのソフトウェアもHPC (High Performance Computing) の産業応用を促進することを目的として開発されているものです。

FFBは連続体流体の基礎方程式である、連続の式、ナビエ・ストークス方程式、および内部エネルギーの式を有限要素法によって離散化して解きます。スーパーコンピュータ「富岳」に向けた最適化が進められた結果、FFBは「富岳」のほぼ全系を用いて22.6 PFLOPSという、アプリケーションソフトウェアとしては世界最速の計算速度を実現しています(図1)。このことによって、最大1,000億要素規模の応用計算が可能

となっており、ファン、ポンプ、船、自動車など多くの応用計算の実績を有しています。

一方、FFXはLattice Boltzmann法(LBM)に基づくLES解析ソルバーであり、階層的な直交格子法(Building Cube Method、BCM)を用いることによって、自動車のエンジンルームやタイヤハウス内の流れなど、複雑形状まわりの流れを計算するための格子を完全に自動で生成できることが最大の特長です。同一の格子数(要素数)であれば、FFXはFFBと比較して50倍程度高速な計算が可能です。FFXを用いることによって、最大2兆格子規模の応用計算が可能ですが、1,700億格子を用いて自動車まわりの流れと流れから発生する音を直接計算した結果を図2に示します。

今後、これらのアプリケーションソフトウェアの実用化を加速していく予定です。

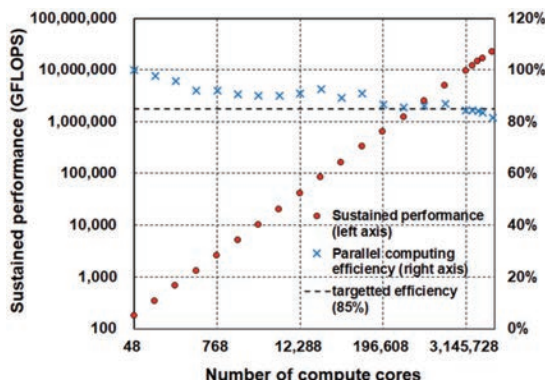


図1: FFBの計算速度 (Kato, et al., ACM Gordon Bell Prize finalist paper, 2020)



図2: FFXの応用計算例 (提供: 豊橋技術科学大学 飯田明由教授)

イベント案内

駒場IIリサーチキャンパス公開

開催日: 令和4年6月10日(金)・11日(土) 10:00 - 17:00

会場: 東京大学生産技術研究所

(一部オンライン配信を含むハイブリッド開催)

国際フロンティア産業メッセ2022

開催日: 令和4年9月1日(木)・2日(金) 10:00 - 17:00

会場: 神戸国際展示場(神戸市・ポートアイランド)

今すぐチェック!

計 算 工 学 ナ ビ



Knowledge Base

解析事例データベース

最先端のシミュレーション
ソフトウェアによる、
さまざまな解析事例を収録

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

編集後記

この2年の間、いろいろなイベントをオンライン開催してきましたが、3月に開催の「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウムでは、ハイブリッド形式ではありませんが、ようやくオンサイトでも開催することができました。今年度のイベントは、可能な限りハイブリッド形式での開催をしたいと思います。ぜひ多くの皆様にオンサイトでご参加いただければと考えています。引き続きどうぞよろしくお願いいたします。

資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661

FAX : 03-5452-6662

E-mail : office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

URL : <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>

編集発行

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