

令和元年度 文部科学省  
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

令和元年度  
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」  
成果報告書

令和2年5月29日  
国立大学法人東京大学  
吉村 忍

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、国立大学法人東京大学が実施した令和元年度「ポスト「京」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」」の成果を取りまとめたものです。

## 目次

1. 委託業務の題目 .....	1
2. 実施機関（代表機関） .....	1
3. 委託業務の目的 .....	1
4. 令和元年度（報告年度）の実施内容 .....	2
4-1. 実施計画 .....	2
4-1-1. (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 .....	2
4-1-2. (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 .....	2
4-1-3. (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 .....	3
4-1-4. (サブ課題 D) 核融合炉の炉心設計 .....	4
4-1-5. プロジェクトの全体推進 .....	5
4-2. 実施内容（成果） .....	6
4-2-1. (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 .....	6
4-2-2. (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 .....	53
4-2-3. (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 .....	75
4-2-4. (サブ課題 D) 核融合炉の炉心設計 .....	147
4-2-5. プロジェクトの全体推進 .....	187
4-3. 活動（研究会等） .....	198
4-4. 実施体制 .....	200

別添1 学会等発表実績

別添2 実施計画

## 1. 委託業務の題目

「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」

## 2. 実施機関（代表機関）

代 表 機 関	機関名		国立大学法人東京大学			
	所在地		〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1			
	課題 責任者	ふりがな	よしむら しのぶ	生年	西暦 1959年3月18日 (61歳)	
		氏名	吉村 忍	月日	※2020年4月1日現在	
		所属部署名	大学院工学系研究科		役職	副学長・教授
	連絡先	連絡先		Tel.03-5841-6960 Fax.03-5841-0651		
		E-mail		yoshi@sys.t.u-tokyo.ac.jp		
	事務 連絡 担当者	ふりがな	ばん みなこ			
		氏名	坂 美奈子			
		所属部署名	工学系・情報理工学系等事務部	役職	係長	
連絡先	連絡先		Tel.03-5841-0308 Fax.03-5841-6058			
	E-mail		jutaku@t-adm.t.u-tokyo.ac.jp			

## 3. 委託業務の目的

エネルギー資源小国である我が国にとって、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ある。エネルギー基本計画の中では、電源構成について、あらゆる面（安定供給、コスト、環境負荷、安全性）で優れるエネルギー源はないとの前提のもとにエネルギー源ごとの特性を踏まえ、現実的かつバランスの取れた需給構造を構築する方針が打ち出されている。このような我が国を取り巻く状況を踏まえ、本重点課題では、超高効率・低環境負荷を実現する革新的クリーンエネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象の詳細解明と定量予測を、ポスト「京」を駆使した超高精度解析（第一原理的解析を中核とするマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーション）によって実現し、革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速するアプリケーション群の研究開発を行う。

このため、中核機関の国立大学法人東京大学は、分担機関の国立大学法人豊橋技術科学大学、国立大学法人京都大学、国立大学法人九州大学大学院工学研究院、国立大学法人九州大学応用力学研究所、国立大学法人名古屋大学、学校法人立教学院立教大学、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構、国立研究開発法人物質・材料研究機構、大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所、みずほ情報総研株式会社、株式会社風力エネルギー研究所と共同で業務を実施する。

国立大学法人東京大学は、上記の目的を達成するため、以下の4つのサブ課題（A、B、C、D）に関する研究開発とそのとりまとめを行うとともに、プロジェクトの全体推進を担当する。

## 4. 令和元年度（報告年度）の実施内容

### 4-1. 実施計画

最終年度となる平成 31 年度（令和元年度）は、平成 30 年度の業務実績、および中間評価を受けて平成 29 年度に改定された実施計画に基づいて当該年度の研究開発を実施し、その結果をとりまとめる。以下に各サブ課題の業務内容について記す。

#### 4-1-1.（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

本サブ課題では、2020～2030 年代の実用化を目指して研究開発が進められている CCS を伴う石炭火力発電システムの実現のカギを握る高圧燃焼・ガス化炉をターゲットとし、従来の計算機環境では実現が不可能であった炉全系高精度シミュレーション技術を研究開発する。また、ベンチスケール石炭ガス化炉の実証計算に向けた準備を行い、設計解析環境の構築を行う。

平成 31 年度（令和元年度）は、下記の各項目の内容の研究開発を実施し、これまでの成果をとりまとめる。

##### a) サブ課題 A の総合的推進

下記項目 b)、c)、d)で各機関が実施する内容をとりまとめ、設計解析環境の構築を行う。

##### b) 高圧燃焼器のシミュレーション技術<再委託機関：国立大学法人京都大学>

b)-1 パイロットスケール超臨界圧燃焼器を対象に燃焼—構造連成計算を実施し、V&V を実施する。

##### c) ガス化炉のシミュレーション技術

c)-1 ラボスケール石炭ガス化炉を対象とした計算（灰熔融の考慮あり）を実施し、V&V を実施する。<再委託機関：国立大学法人九州大学大学院工学研究院、国立大学法人京都大学大学院工学研究科>

c)-2 ベンチスケール石炭ガス化炉を対象とした試計算を実施し、実証計算に向けた準備を行う。  
<再委託機関：国立大学法人九州大学大学院工学研究院>

##### d) 高温構造健全性評価シミュレーション技術<国立大学法人東京大学大学院工学系研究科>

d)-1 ラボスケール石炭ガス化炉の構造健全性および炉構造内伝熱・反応・冷却システム全体のマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを実施し、V&V を実施する。

d)-2 ベンチスケール石炭ガス化炉を対象とした解析モデル構築と試計算を実施し、実証計算に向けた準備を行う。

#### 4-1-2.（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

本サブ課題では、次世代の主要なエネルギー変換機器として期待されている燃料電池を対象に、従来の計算機環境では実現が不可能であった大規模二相流動、電極構造および過電圧等のマルチスケール連携による要素特性シミュレーション技術を研究開発し、それぞれに検証する。

平成 31 年度（令和元年度）は、下記の各項目の内容の研究開発を実施し、これまでの成果をとりまとめる。

##### a) サブ課題 B の総合的推進

下記項目 b)、c)、d)、e)で各機関が実施した内容をとりまとめ、個々のシミュレーション技術間の連携方法、およびシミュレーションが燃料電池の性能に及ぼす影響についてとりまとめ、セル性能のV&Vを実施する。

b) 大規模二相流解析による実機 PEFC スタックの設計プロセスの構築<再委託機関：みずほ情報総研株式会社>

b)-1 並列気液二相流コードをショートスタック解析へ適用し、V&Vを実施する。

b)-2 セルレベルの二相流 DB を構築し、発電性能予測へ適用する。

c) SOFC 電極要素特性解析<国立大学法人東京大学生産技術研究所>

c)-1 直交格子系焼結シミュレーションコードを適用する。

c)-2 SOFC 電極過電圧特性の予測のための多相系コードを適用する。

c)-3 随伴解析を用いた電極構造最適化コードを適用する。

d) PEFC 電極要素特性解析<再委託機関：国立大学法人九州大学大学院工学研究院>

d)-1 触媒層 3次元電極構造を用いた反応輸送解析と電圧損失予測を行い、V&Vを実施する。

e) PEFC 膜電極接合体(MEA)のナノ構造・機能解析

e)-1 PEFC 膜電極接合体のナノ構造要素間の詳細解析を行い、検証する。<再委託機関：学校法人立教学院立教大学>

e)-2 MEA 触媒三相界面のナノ構造と機能の解析を行い、検証する。<再委託機関：国立研究開発法人物質・材料研究機構>

#### 4-1-3. (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

本サブ課題では、洋上ウィンドファームの発電性能予測、信頼性評価、風車単体性能の改善に注力したマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術の開発研究を実施する。

平成 31 年度 (令和元年度) は、下記の各項目の研究開発を実施し、これまでの成果をとりまとめる。

a) サブ課題 C の総合的推進<再委託機関：国立大学法人豊橋技術科学大学>

下記項目 b)、c)、d)、e)で各機関が実施する内容をとりまとめ、設計ツールを構築する。

b) 後流の影響を考慮した大型洋上風車高精度評価技術の開発<国立大学法人東京大学生産技術研究所>

b)-1 FFB を用いてタンデム配置された洋上風車周りの大規模流体解析を行い、風車間の流れの相互作用 (特に後流の影響) を定量的に評価可能とする。平成 30 年度に得られた知見を元にブレード周りの 10~20mm オーダーの渦を解像しながら、後流の発生プロセスを評価し、さらに数 100m ~1km オーダーの後流の伝搬を解析するためにシステムの高速度を進める。

b)-2 翼スケールの実験と解析を行い FFB に実装する壁モデルの性能検証を行い、FFB に実装し、風車解析に適用する。

c) 流体構造連成振動解析による風車ブレードの信頼性評価の高精度化<国立大学法人東京大学大学院工学系研究科>

c)-1 複合材料構造特性を考慮した風車ブレードの流体構造連成振動解析技術を構築する。

c)-2 風車ブレードの振動応答解析を元に、風車ブレードの累積疲労損傷評価法を構築する。(使用ソフト：FFB、ADVENTURE、REVOCAP)

- d) 洋上ウィンドファーム全体の高精度流れ解析<再委託機関：国立大学法人九州大学応用力学研究所>
  - d)-1 大規模並列かつ多風向[16ないし24方位]計算を可能にする RIAM-COMPACT HPC 版の構築を行うとともに、欧州のウィンドファームの Alpha Ventus を対象とした解析を行い、予測精度の検証を行う。
  - d)-2 豊橋技科大・東大生研で実施する b)-1 の FFB による実機風車 2 台の大規模風車解析結果を活用し、RIAM-COMPACT HPC 版の予測精度を検証する。
- e) シミュレーションシステムの検証および実用化のための調査およびデータ提供<再委託機関：株式会社風力エネルギー研究所>
  - e)-1 本サブ課題において開発するマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムの有効性検証のために、欧米のウィンドファーム情報の調査とデータ提供、および国内で想定される洋上ウィンドファームの仮想的なデータ提供を解析担当機関に行う。
  - e)-2 洋上ウィンドファームの発電量評価精度向上への寄与度を考慮し、風車相互干渉、気象解析との連携、流体構造連成振動・損傷、海面変動による風車揺動の影響を検討する。

#### 4-1-4. (サブ課題 D) 核融合炉の炉心設計

本サブ課題では、長期代替クリーンエネルギー源として期待される核融合炉の実用化に向けて次世代核融合実験炉 ITER を対象とし、従来の計算機環境では難しかった核燃焼プラズマの 5 次元第一原理計算を実現し、炉心運転条件の最適化設計に貢献する。

平成 31 年度 (令和元年度) は、以下の各項目の研究開発を実施し、これまでの成果をとりまとめる。

##### a) サブ課題 D の総合的推進<再委託機関：国立研究開発法人日本原子力研究開発機構>

本サブ課題を効率的かつ効果的に推進するため、サブ課題 D 開発推進会議を適宜開催し、参画各機関の連携・調整を実施し、下記項目 b)、c)、d)、e) で各機関が実施する内容をとりまとめる。

##### b) 核燃焼プラズマ解析に向けた計算モデル拡張

###### b)-1 大域的乱流輸送解析の計算モデル拡張<再委託機関：国立研究開発法人日本原子力研究開発機構>

大域的乱流輸送解析コード GT5D を用いてトカマク装置における多種イオン系乱流輸送に関する実証研究を実施し、開発コードの有効性を検証する。

###### b)-2 局所的乱流輸送解析の計算モデル拡張<再委託機関：国立大学法人名古屋大学>

局所乱流輸送解析コード GKV を用いて LHD 装置における多種イオン系乱流輸送に関する実証研究を実施し、開発コードの有効性を検証する。

###### b)-3 高エネルギー粒子閉じ込め解析の計算モデル拡張<再委託機関：大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所>

高エネルギー粒子閉じ込め解析コード MEGA を用いて LHD 装置における高エネルギー粒子駆動 MHD 現象に関する実証研究を実施し、開発コードの有効性を検証する。

##### c) エクサスケール計算に向けたコデザイン

###### c)-1 ポスト「京」向け粒子法の開発<再委託機関：大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所>

ポスト「京」シミュレータを用いて粒子法コードの計算カーネルの性能評価を実施する。

c)-2 ポスト「京」向け格子法の開発<再委託機関：国立研究開発法人日本原子力研究開発機構>

ポスト「京」シミュレータを用いて格子法コードの計算カーネルの性能評価を実施する。また、省通信クリロソルバ等のエクサスケール計算基盤技術を整備し、オープンソースとして公開する。

d) 実証研究と ITER 物理課題検討<再委託機関：大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所>

開発コードを用いた JT-60、LHD 実験に関する実証研究、および、ITER 物理課題検討に関わる解析を実施する。

e) 開発コードの普及および人材育成<再委託機関：国立大学法人名古屋大学>

平成 29 年度に公開した局所乱流輸送解析コード GKV の機能拡充、および、利用拡大・普及に向けた取り組みを実施する。

#### 4-1-5. プロジェクトの全体推進

4つの出口（石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電、核融合炉炉心設計）を有する本重点課題プロジェクトを効率的かつ効果的に推進するため、重点課題責任者の指揮監督のもとに東京大学大学院工学系研究科内に設置した課題推進事務局を中核として推進業務を行う。具体的にはプロジェクト全体の管理・調整業務（会計・総務・連絡・調整等）、大型計算機資源の確保・同資源のサブ課題間の調整業務、全サブ課題に共通的な課題の推進支援業務である。さらに、当該重点課題内全体推進会議、アプリケーション連携開発会議（重点課題⑧との連携）等を適宜開催し、参画各機関の連携・調整にあたる。特に、プロジェクト全体の進捗状況を確認しつつ計画の合理化を検討し、適宜諮問委員会を開催するなど、プロジェクトの効果的・効率的推進に資する施策を実施する。また、プロジェクトで得られた成果については、可能な限り積極的に公開して今後の展開に資するとともに、革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速するアプリケーション群の研究開発を推進する。

平成 31 年度（令和元年度）は、プロジェクト全体ならびに各サブ課題で掲げた目標に対する達成度確認のための諮問委員会を開催し、共通基盤技術としてマルチフィジクス連成と V&V およびマルチスケール連携と V&V、大規模行列計算・データ可視化に関する連携を推進するとともにコードデザインを推進し、これまでの成果をとりまとめる。

また、平成 31 年度（令和元年度）も継続して課題推進事務局に事務局長、同補佐、技術支援員を雇用する。事務局長には、プロジェクト全体の管理・調整業務、大型計算機資源の確保・同資源のサブ課題間の調整業務、全サブ課題に共通的な課題の推進支援業務の全体管理運営を担わせる。同補佐には、プロジェクト全体の会計、重点課題代表者とサブ課題間の連絡・調整等を担わせ、技術支援員には、全体推進の中で発生する上記共通的課題の推進支援業務を担わせる。

## 4-2. 実施内容（成果）

最終年度となる平成 31 年度（令和元年度）は、平成 30 年度の業務実績、および中間評価を受けて平成 29 年度に改定された実施計画に基づいて当該年度の研究開発を実施し、その結果をとりまとめた。以下に各サブ課題の業務内容について記す。

### 4-2-1.（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

<再委託機関：国立大学法人京都大学、国立大学法人九州大学>

#### （1）研究成果の概要

本サブ課題では、2020～2030 年代の実用化を目指して研究開発が進められている Carbon dioxide Capture and Storage (CCS) を伴う石炭火力発電システム実現のカギを握る高圧燃焼・ガス化炉を主なターゲットとする。従来の計算機環境では実現が不可能であった炉全系高精度シミュレーション技術を研究開発し、高圧燃焼・ガス化プロセスの詳細定量評価を実現することにより、適切な炉パラメータ探索の試行錯誤プロセスを大幅に削減し、国際競争力のある実用炉に必須となる高効率化・低環境負荷・高レジリエンス性能の実現を加速し、その実用化時期の早期化に貢献する。

平成 31 年度（令和元年度）は、下記の各項目の内容ならびに成果目標等に関して研究開発を推進した。

#### （2）サブ課題 A の総合的推進

平成 31（令和元年度）年度は、高圧燃焼器のシミュレーション技術、ガス化炉のシミュレーション技術、高温構造健全性評価シミュレーション技術、およびマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションの実施に係る課題を推進し、以下に詳述する各項目で各機関が実施する内容を取りまとめ、設計解析環境の構築を行った。なお、「京」が令和元年 8 月で停止したため、他の第二階層計算機資源や今後利用可能となる「富岳」環境に向けた設計解析環境を構築した。

#### （3）高圧燃焼器のシミュレーション技術

昨年度は、パイロットスケールの東芝エネルギーシステムズ株式会社製 50MWth 級超臨界 CO<sub>2</sub> タービン用燃焼器を対象に、燃焼器金属壁の熱連成（熱流体—構造連成）を考慮した超臨界燃焼場の LES を実施し、理論値との比較によって、本 LES 法が超臨界燃焼場の予測に有効な手段になることを示した。そこで、令和元年度は、東芝エネルギーシステムズがごく最近、異なる燃焼条件下で詳細な実測を行ったことを受け、同条件下における LES を実施し、V&V を行った。

##### （3-1）解析対象および計算方法

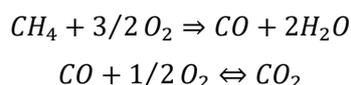
Figure 4.2.1-1 に、対象とした東芝エネルギーシステムズ製 50MWth 級検証試験用超臨界 CO<sub>2</sub> タービンおよび燃焼器の概要[1]を示す。東芝エネルギーシステムズでは、CO<sub>2</sub> 放出低減への取り組みの一つとして Allam cycle[2]を用いた超臨界 CO<sub>2</sub> サイクル発電システム向けのガスタービンの開発を進めている。このシステムは CO<sub>2</sub> 雰囲気中で燃料の天然ガスと酸素で燃焼させて、発生した高温高压の CO<sub>2</sub> と H<sub>2</sub>O（水蒸気）の混合ガスでガスタービンを回す発電システムである[3]。タービンを出た混合

ガスは、再生熱交換器を通過後、冷却器で冷却されて H<sub>2</sub>O（水）を分離し、残りの CO<sub>2</sub> の大部分を循環させて再び燃焼器に供給する。また、燃料に含まれる C（炭素）から発生した CO<sub>2</sub> は、余計なエネルギーをかけることなく高濃度でそのまま抽出可能なため、高い発電効率を損なうことなく、CO<sub>2</sub> を回収できる発電システムである[3]。本ガスタービン燃焼器は、酸化剤 / 燃料(CH<sub>4</sub>)/再循環 CO<sub>2</sub> により燃焼が行われ、運転条件はタービン入り口圧力約 30MPa の超高压条件を想定しているが[4]、今回対象とした燃焼試験は計測が容易な 8.5MPa で行っている。

本研究では、この超臨界燃焼器を対象に NuFD/FrontFlow/Red (FFR-Comb) [5~9]を用いた熱流体一構造連成の LES を実施する。

Figure 4.2.1-2 に、計算領域と解析格子の概要を示す。節点数およびセル数はそれぞれ、0.61 億点および 1.84 億点である。一方、構造には 4 層のセルを配置する。燃料と酸化剤は燃焼器上流部の燃料噴射ノズルから燃焼器内に供給され火炎を形成する。燃焼器壁は冷却用 CO<sub>2</sub> によって冷却されている。

本 LES では、乱流モデルとして標準 Smagorinsky モデルを用いた。圧縮性流体スキームを用い、実気体モデルとして Soave-Redlich-Kwong (SRK)モデル[10]を適用した。乱流燃焼モデルとしては Dynamically Thickened Flame モデル[11,12]を用い、反応機構としては Westbrook のメタン 2 段反応モデル[13]：



を採用した。本 LES は、京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータ ACCMS を用いて、3,000 並列で実施し、1,000 ステップ当たり約 2 時間要した。総計算時間としては約 300 時間（約 12.5 日）であった。



Figure 4.2.1-1. Supercritical CO<sub>2</sub> turbine and combustor [1]

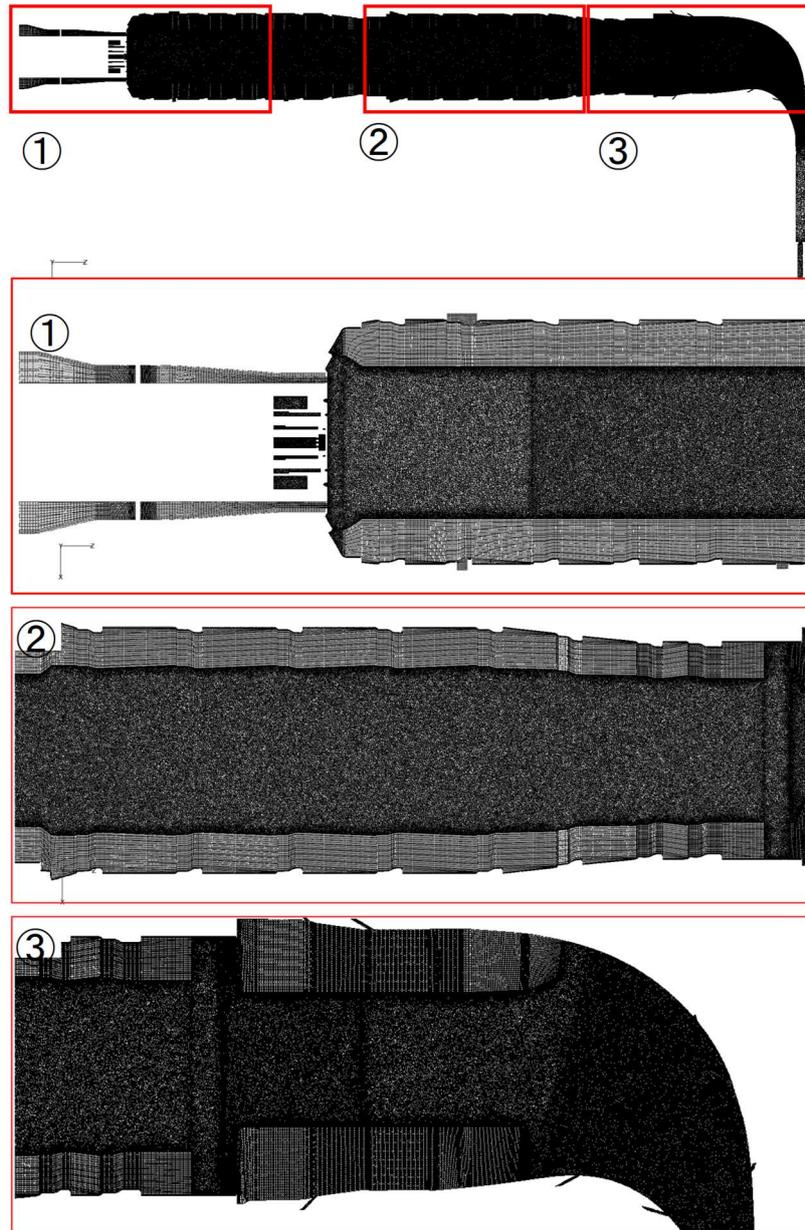


Figure 4.2.1-2. Computational domain and grids

### (3-2) 結果および考察

Figure 4.2.1-3 に、燃焼器内の乱流燃焼流れ場の温度、および化学種質量分率( $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,)の瞬時分布を示す。燃料噴射ノズル出口中心部分の燃焼領域では燃料過濃条件で燃焼し、 $\text{O}_2$  濃度も小さい。その後、燃料過濃部分の外周側に噴射された酸化剤と混合反応することで  $\text{CH}_4$  は速やかに消費されることがわかる。また、高温の燃焼ガスは、燃焼器側壁面から流入する  $\text{CO}_2$  の希釈で主流ガス温度の低下、および燃焼器壁面から与えられる冷却用  $\text{CO}_2$  により壁面近傍の温度が低く保たれることが分かった。

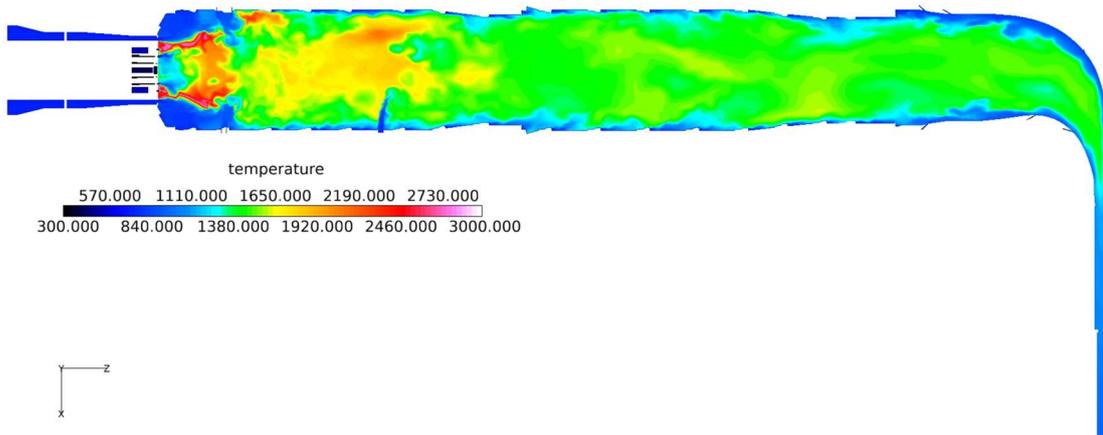
Figure 4.2.1-4 に、燃焼器壁面(固体壁)の燃焼ガス側表面温度の瞬間分布を示す。燃焼器内面にはセラミックコーティングが施されており、このコーティング表面温度となる。燃焼器壁面には軸方向に冷却用  $\text{CO}_2$  噴出部が複数設けられており、その噴出部のすぐ後流部壁面は冷却  $\text{CO}_2$  により壁面温度が低く保たれているが、噴出部よりある一定の距離が離れると、冷却  $\text{CO}_2$  の効果が小さくなり、壁面

温度が比較的高くなることがわかる。燃焼器下流に行くにつれて、主流燃焼ガスの温度が下がることで壁面温度も下がる傾向がみられる。

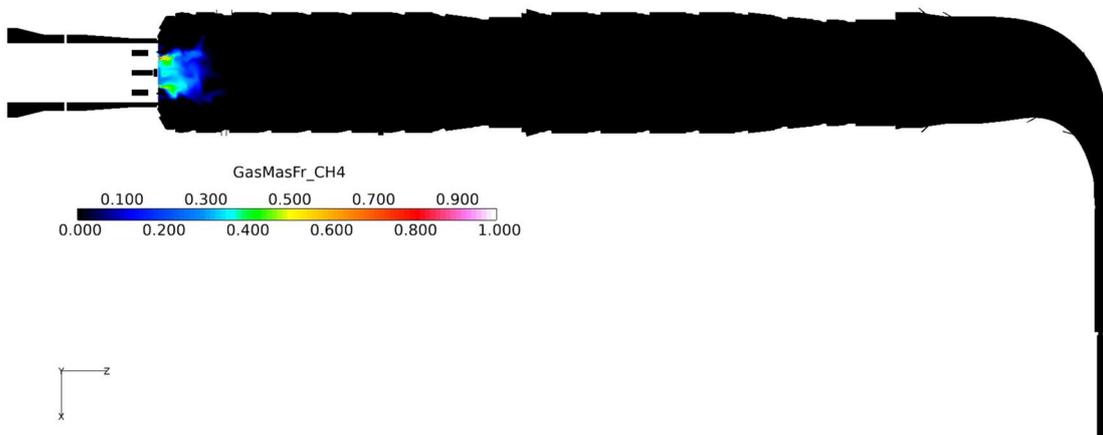
Figure 4.2.1-5 に、入り口温度で除し無次元化した燃焼器出口温度の実測値との比較を示す。LES で予測された温度は実測値と良く一致することがわかる。この結果から、本 LES 法は、実機燃焼器内の超臨界燃焼場の定量的な予測にも有効であると言える。

### (3-3) まとめ

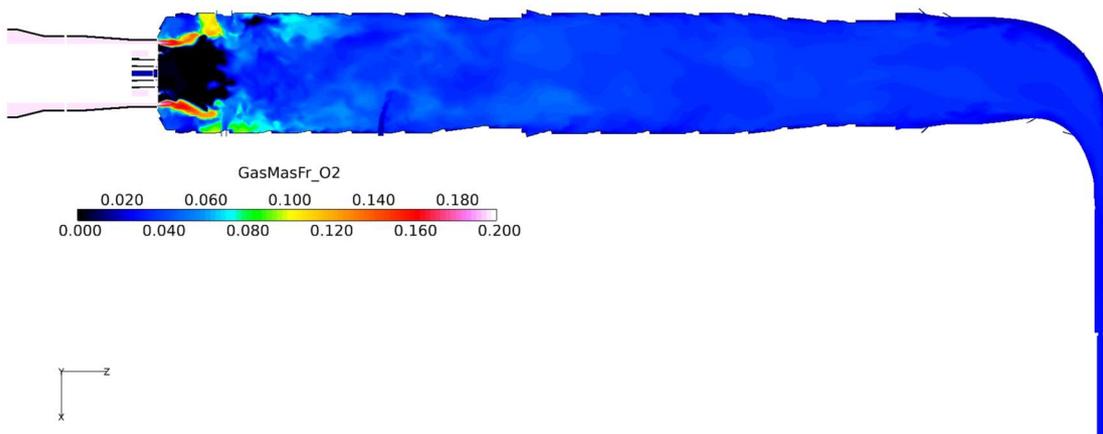
本研究では、東芝エネルギーシステムズ製 50MWth 級超臨界 CO<sub>2</sub> タービン検証機用燃焼器を対象に、燃焼器壁の熱連成（熱流体—構造連成）を考慮した超臨界燃焼場の LES を実施し、その計測値との比較を行うことにより、本 LES 法が超臨界燃焼場の予測に極めて有効な手段であることを示した。今後、「富岳」を利用して、本 LES 法を 500MWth スケール（検証機の約 10 倍の出力）の燃焼器に適用し、その設計および最適操作条件の選定に役立てていく予定である。



(a) Temperature [K]



(b) CH<sub>4</sub> mass fraction



(c) O<sub>2</sub> mass fraction

Figure 4.2.1-3. Instantaneous combustion fields

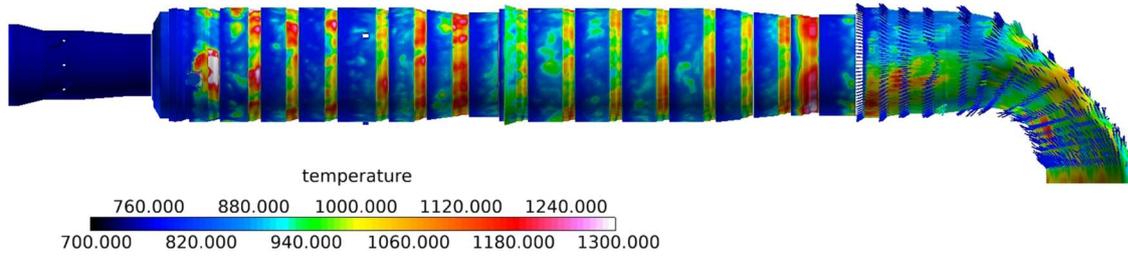


Figure 4.2.1-4. Instantaneous inner metal wall temperature distribution [K]

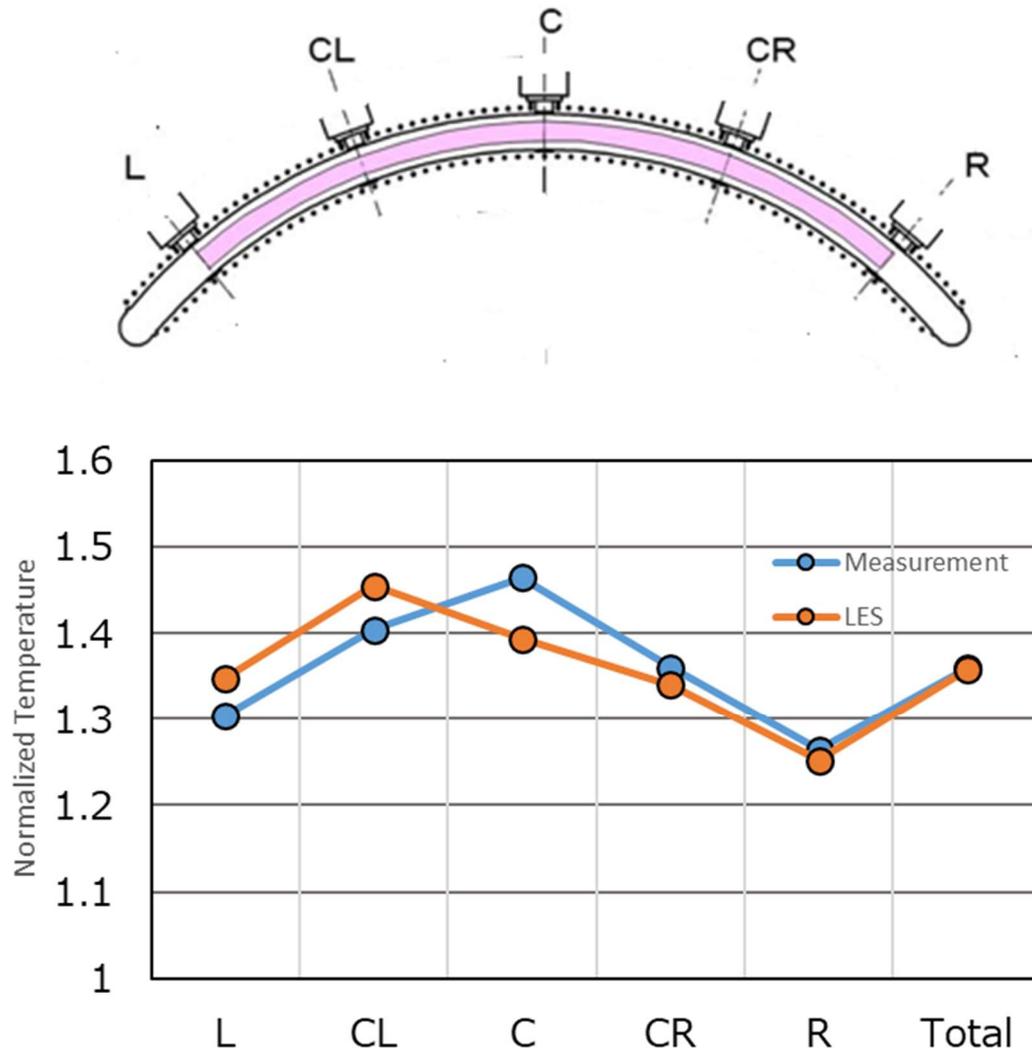


Figure 4.2.1-5. Comparison of Normalized time-averaged temperature at the exit of combustor [-]

文献

- [1] Sasaki, T., Itoh, M., Maeda, H., Tominaga, J., Saito, D., Niizeki, Y., “Development of Turbine and Combustor for a Semi-closed Re-cuperated Brayton Cycle of Supercritical Carbon Dioxide”, In Proc. of the ASME 2017 Power Conference Joint With ICOPE-17, POWER-ICOPE2017-3419, 2017.

- [2] Allam, R., Fetvedy, J., Forrest, B., Jones, C., Nomoto, H., Itoh, M., “A novel, high-efficiency, oxy-fuel power plant with low-cost electricity production and 100% capture of carbon dioxide”, POWER-GEN International 2013.
- [3] 岩井保憲, 伊東正雄, “超臨界 CO<sub>2</sub> サイクル発電用ガスタービン燃焼器”, 東芝レビュー, 70 (5), 2015.
- [4] Iwai, Y., Itoh, M., Morisawa, Y., Suzuki, S., Cusano, D., Harris, M., “Development approach to the combustor of gas turbine for oxy-fuel, supercritical CO<sub>2</sub> Cycle”, In Proc. of the ASME Turbo Expo 2015, Palais des Congres, Montreal, Canada, GT2015-43160, 2015.
- [5] Moriai, H., Kurose, R., Watanabe, H., Yano, Y., Akamatsu, F., Komori, S., “Large-eddy simulation of turbulent spray combustion in a subscale aircraft jet engine combustor - Predictions of NO and soot concentrations -”, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 135, 091503, 2013.
- [6] Tachibana, S., Saito, K., Yamamoto, T., Makida, M., Kitano, T., Kurose, R., “Experimental and numerical investigation of thermo-acoustic instability in a liquid-fuel aero-engine combustor at elevated pressure: validity of large-eddy simulation of spray combustion”, Combustion and Flame, 162, 2621-2637, 2015.
- [7] Kishimoto, A., Moriai, H., Takenaka, K., Nishiie, T., Adachi, M., Ogawara, A., Kurose, R., “Application of a non-adiabatic flamelet/progress-variable approach to Large Eddy Simulation of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> combustion under a pressurized condition”, Journal of Heat Transfer, 139, 124501, 2017.
- [8] Kobayashi, Y., Iwai, Y., Itoh, M., Nishiie, T., Kurose, R., “Large-eddy simulation of fluid-structure interaction for Supercritical CO<sub>2</sub> combustor”, The Asian Congress on Gas Turbines 2018 (ACGT2018), Aiina Center, Morioka, Iwate, Japan, 2018.
- [9] Jain, P., Iwai, Y., Kobayashi, Y., Itoh, M., Nishiie, T., Kurose, R., “Large-eddy simulation of a supercritical CO<sub>2</sub> combustion field in a realistic combustor”, The 1st R-CCS International Symposium, Kobe International Conference Center, Kobe, Japan, 2019.
- [10] Soave, G., “Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State,” Chemical Engineering Science., 27, 1197–1203, 1972.
- [11] Charlette, F., Meneveau, C., Veynante, D., “A power-law flame wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion. Part I. Non-dynamic formulation and initial tests,” Combustion and Flame, 131, 159-180, 2002.
- [12] Strakey, P.A., Eggenspieler, G., “Development and validation of a thickened flame modelling approach for large eddy simulation of premixed combustion,” Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 132, 071501, 2010.
- [13] Westbrook, C.K., Dryer, F.L., “Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames”, Combustion Science and Technology, 27, 31-43, 1981.

#### (4) ガス化炉のシミュレーション技術

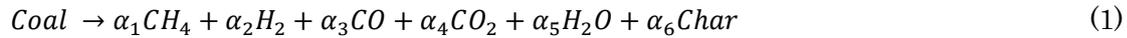
石炭ガス化炉の設計に資するシミュレーション技術には、ガス化炉内の固気二相反応流れと熔融スラグ流れを同時に解析する機能が必要とされる。本年度は、ラボスケール石炭ガス化炉を対象とした計算を実施し、V&Vを実施した。また、ベンチスケール石炭ガス化炉を対象とした試計算を実施した。

#### (4-1) ラボスケール石炭ガス化炉の数値解析

ラボスケール石炭ガス化炉を対象として、まずはガス化反応解析について、実験値との比較による V&V を実施した。その上で、スラグ流れ解析を実施した。

##### (4-1-1) 解析方法

Eulerian-Lagrangian 法による固気二相反応流の Large-eddy simulation[1,2]と Eulerian-Eulerian (VOF) 法による熔融スラグ流れの数値解析をカップリングさせた固気液三相流解析をラボスケール石炭ガス化炉を対象として実施した。本計算は固気液三相それぞれにおいて同一の化学種が定義され、反応に伴う相間の熱物質輸送を考慮することが可能である。気相の支配方程式は、連続の式、運動量保存式、エネルギー保存式、および化学種保存式を解いた。SGS 応力モデルには Dynamic Smagorinsky モデル[3]を用いた。固相については、個々の粒子のいわゆる BBO 方程式をパーセル近似により解き、流体と粒子の干渉効果については、PSI-CELL 法[4]により考慮した。ガス化炉内の化学反応としては、石炭の熱分解による揮発分放出、石炭チャーの固気（ガス化）反応、および気相反応を考慮した。揮発分放出過程を Eq. (1)により表し、揮発分組成については、Umemoto らの実験データ[5]を用いた。揮発分放出速度については、Eq. (2)に示す単一次反応モデルにより考慮し、その反応速度パラメータは FLASHCHAIN モデル[6]により見積もった。



$$\frac{dV_i}{dt} = A_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT_p}\right) (V_i^* - V_i) \quad (2)$$

ここで、 $\alpha_i$ は総和が1となる各揮発分の係数である。 $V_i$ は揮発した各揮発分量、 $A_i$ および $E_i$ は頻度因子と活性化エネルギー、 $V_i^*$ は粒子が保有する総揮発分量である。

チャーガス化反応については、Eqs. (3)~(5)に示す  $O_2$  ガス化、 $CO_2$  ガス化、および  $H_2O$  ガス化の3つの反応経路を考慮した。チャーガス化反応モデルには、 $CO_2$  ガス化および  $H_2O$  ガス化については Eq. (6)に示す Langmuir-Hinshelwood モデルに基づく活性点部分共有モデル[5]を用いた。 $O_2$  ガス化については nth-order モデル[7]を用いた。それぞれの反応経路の反応速度パラメータは文献[8]の値を用いた。



$$\frac{dx}{dt} = \eta(1-x)\sqrt{1-\Psi \ln(1-x)} \left( \frac{k_{11} P_{CO_2}}{1+k_{12} P_{CO_2}+k_{13} P_{CO}+a/ck_{22} P_{H_2O}+a/ck_{23} P_{H_2}} + \frac{k_{21} P_{H_2O}}{1+bck_{12} P_{CO_2}+bck_{13} P_{CO}+k_{22} P_{H_2O}+k_{23} P_{H_2}} \right) \quad (6)$$

ここで、 $x$ は粒子内炭素分の反応率、 $\eta$ は粒子内細孔に対する有効拡散係数、 $\Psi$ は細孔の形態係数、 $P_i$ は各化学種分圧、 $a$ 、 $b$ および $c$ はそれぞれ活性点部分共有効果を表すモデルパラメータである。

気相反応については、Eqs. (7)~(11)の総括反応を考慮した。気相反応速度の算出にはアレニウス式の直接クロージャモデルである SSFRRM[9] (Eq. (12)) を用いた。



$$\bar{\omega}_i = \overline{\omega(\bar{\rho}, \tilde{Y}_i, \tilde{T})} + K_1 \left( \overline{\omega(\bar{\rho}, \tilde{Y}_i, \tilde{T})} - \overline{\omega(\bar{\rho}, \tilde{Y}_k, \tilde{T})} \right) \quad (12)$$

ここで、 $\bar{\omega}_i$ は各反応物の消費速度である。

輻射モデルには Discrete Ordinate 法[10]を用いた。

Eulerian-Eulerian (VOF) 法による溶融スラグ流れの数値解析では、質量保存式、エネルギー保存式、および化学種保存式に加えて、ボイド率輸送式を解いた。各方程式には、粒子の壁面や液面への付着に伴う熱物質輸送を取り扱うための生成項が存在する。

$$\text{ボイド率輸送式:} \quad \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + C = \dot{\phi}, \quad \dot{\phi} = \frac{\sum m_p}{V_{cv} \sum \Delta t_{sub}} \quad (13)$$

$$\text{化学種保存式:} \quad \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + C = \dot{Y}, \quad \dot{Y} = \frac{\sum m_p Y_{p,i}}{V_{cv} \sum \Delta t_{sub}} \quad (14)$$

$$\text{エンタルピー保存式:} \quad \frac{\partial \rho H}{\partial t} + C = \dot{H}, \quad \dot{H} = \frac{\sum m_p c_p T_p}{V_{cv} \sum \Delta t_{sub}} \quad (15)$$

$$\text{質量保存式:} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = \dot{\rho}, \quad \dot{\rho} = \frac{\sum m_p}{V_{cv} \sum \Delta t_{sub}} \quad (16)$$

ここで、 $C$ は対流項、 $\phi$ はボイド率、 $Y$ は化学種質量分率、 $H$ はエンタルピー、 $m_p$ は粒子質量、 $V_{cv}$ は検査体積、 $\Delta t_{sub}$ は粒子サブサイクル時間刻みである。

VOF 法の特徴として、セル内のボイド率がゼロより大きな値をもつ場合、気相と液相は同一の流速をもつため、気液界面（例えば、ボイド率=0.5 等値面）よりも液相側内部において $1 - \phi$ で定義される気相がより質量流量の大きな液相の動きに追従し、気液界面から気相側の流速分布に影響を及ぼす。石炭ガス化炉の場合、コンバスタ底部からスラグホールを通過して炉底へ流下するスラグ流にガス流れが極端に追従する現象が発生する。そこで本研究ではこれを避けるため、ボイド率が一定値を超えるまで液相の移流を制限することで、気相流れと液相流れの分離を行った。チャー粒子がガス化炉内壁面もしくはスラグ流表面に衝突した際、チャー中の可燃成分が 99%以上気相へ相変化しているもののみ付着することとし、可燃成分の消失を防止した。

#### (4-1-2) 解析条件

Figure 4.2.1-6 に、対象とするラボスケール石炭ガス化炉の計算領域ならびに計算格子（バーナ部拡大）を示す。格子数はモデルチューニングを行うため簡易格子である約 100 万要素のものを用いた。ガス化炉の試験条件（解析条件）は、石炭供給量 100 kg/h、酸素比 0.54 の条件に対して、ガス化剤組成を  $O_2/CO_2/N_2=25\%/25\%/50\%$  に設定した。熔融スラグの密度は  $2,700\text{ kg/m}^3$ 、粘度については T-shift モデル[11]を、表面張力については CSF モデル[12]を用いて考慮した。NS 方程式の対流項の離散化には 2 次中心差分に 5 % の 1 次風上成分をブレンドしたのものを用いた。時間進行にはオイラー陰解法を用い、時間刻みは  $5 \times 10^{-6}\text{ s}$  とした。

なお、V&V においては、Eqs. (3) - (5)における固気相間熱物質移動時の質量保存性の改善、Eq. (11)における素反応データベースに基づく圧力・化学種濃度相関式[8]の精度向上、および輻射強度輸送式の解法改善を図った上で、結果の評価を実施した。さらに、壁面の熱的境界条件 (Eq. (17)) について、熱伝達係数  $a\text{ W/(m}^2\text{K)}$  の感度解析を実施した。

$$\dot{q} = a(T_g - T_0) \quad (17)$$

ここで、 $\dot{q}$  はガス化炉内壁面を通じて炉外へ移動する熱流束、 $T_g$  と  $T_0$  はそれぞれ壁面境界から 1 点目の格子におけるガス温度と周囲温度 (=308 K) である。本研究では、 $a$  を 1, 10, 50, および 100 と変化させ、ガス化炉中心軸上ガス温度分布とガス化炉出口ガス組成への影響を調査した。

#### (4-1-3) 解析結果

Figure 4.2.1-7 に、中心軸上の時間平均ガス温度分布について、実験値とコードチューニング前後の解析結果との比較を示す。なお、図中の実験値のプロットにはエラーバーにより計測時の最大・最小値も載せた。図より、ガス化炉中心軸上温度分布の解析結果は、ガス化炉下部のコンバス温度から上部のリダクタ出口に至る全領域において良い一致をみており、本コードチューニングによりその解析精度が劇的に改善されていることがわかる。Figure 4.2.1-8 に、ガス化炉出口におけるガス組成について、実験値とコードチューニング前後の解析結果との比較を示す。なお、図中の実験値のプロットにはエラーバーにより計測時の最大・最小値も載せた。図より、ガス化炉出口ガス組成に対する本コードチューニングの結果は、CO 濃度よりも  $CO_2$  濃度の方が高いこと等、定性的な傾向が一致していることに加え、ガス温度分布と同様に、実験値に対して定量的にも極めて良好な一致を示していることがわかる。次の Eq. (18) で定義されるガス化性能指標の一つである炉内炭素転換率の解析結果は 68.8 % であり、実験値の 70.6 % に対して相対誤差 2.5 % 程度の精度で予測可能であることを確認した。

$$\text{炉内炭素転換率 [\%]} = \frac{\text{ガスに転換された炭素質量}}{\text{投入石炭中炭素質量} + \text{投入チャー中炭素質量}} \times 100 \quad (18)$$

Figure 4.2.1-9, 10 に、チューニング前後のコードによる (a) ガス温度、(b)  $H_2$ 、(c) CO、(d)  $CO_2$ 、および (e)  $H_2O$  の瞬間分布の解析結果をそれぞれ示す。ガス化炉内のガス温度分布や各化学種の濃度分布の特徴にそれほど大きな差異は見られず、それらの絶対値のみがコードチューニングによって変化して

いることから、コードチューニング前のコードであってもガス化炉の定性的な挙動をある程度は再現することは可能であったことが確認された。

Figure 4.2.1-11 に、 $a$  を変化させた際のガス化炉中心軸上温度分布への影響を示す。図より、 $a$  が大きい値になるに従って壁面熱流束が大きくなり、ガス化炉内温度が低下していく様子がわかる。 $a$  が 2 桁大きくなるとリダクタ内のガス温度に対して約 200 K 程度の変化が現れている。実験値に近い分布を示すのは、 $a$  を 10 または 50 とした場合であった。これは、実験により計測された熱流束の値にほぼ一致している。Figure 4.2.1-12 に、 $a$  を変化させた際のガス化炉出口ガス組成への影響を示す。ただし、図中の解析結果は、各化学種の測定値によって正規化されている。図より、実験値に近い値を示すのは、 $a$  を 1 または 10 とした場合であり、2~6%程度の相対誤差であった。以上の結果より、ガス化炉解析の熱的境界条件には、 $10 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$  を与えるのが妥当であるとの結論を得た。

Figure 4.2.1-13 に、ある時刻から時系列 4 点の石炭粒子と熔融スラグ流れの様子を示す。また比較のため、適正な熔融スラグの排出状況を撮影した実験時の写真を併せて示す。コンバスタ内を旋回流により滞留する石炭粒子は、反応の進行とともに灰分のみを含む粒子へと変化し、やがて遠心力によりコンバスタ内壁面へ衝突する。解析ではこの時、Lagrangian 粒子は VOF へと変換され、液相の熔融スラグ層が形成される。図より、コンバスタ内壁面に形成された熔融スラグ層は重力によりコンバスタ底部のスラグホールに向かって流下していく様子を観察することができる。コンバスタホールには、安定的な熔融スラグ流出を促すため、2 つの溝が切つてあるが、この溝の位置に対応する形で二筋の自由落下する熔融スラグ流も観察できる。こうした挙動は、実験により観察される熔融スラグ排出状況と定性的に一致する。



(a) Computational domain.



(b) Computational grid.

Figure 4.2.1-6. Computational domain and grid.

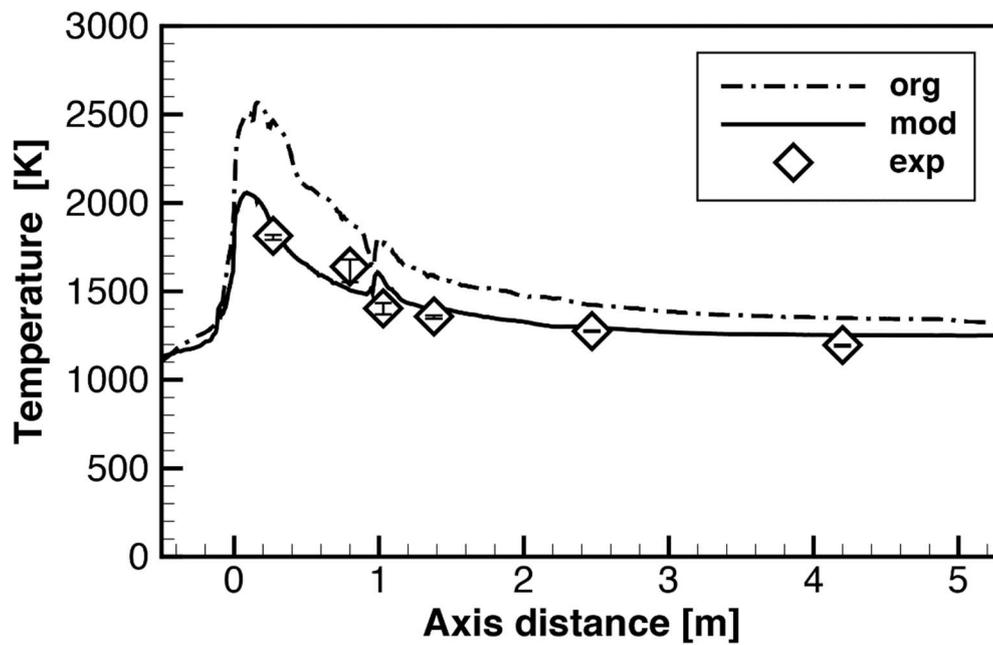


Figure 4.2.1-7. Time-averaged gas temperature distribution on a center axis. (org: original, mod: modified).

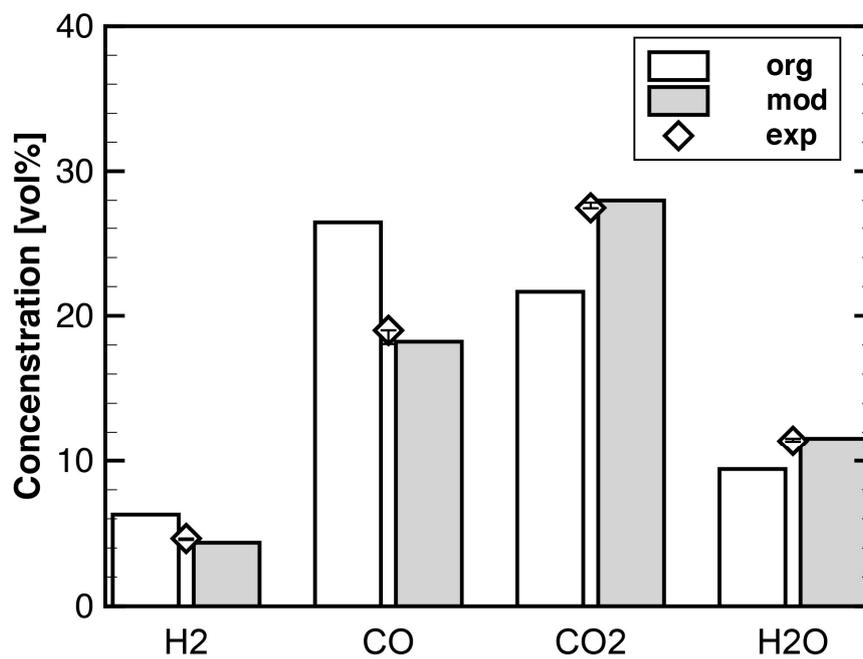
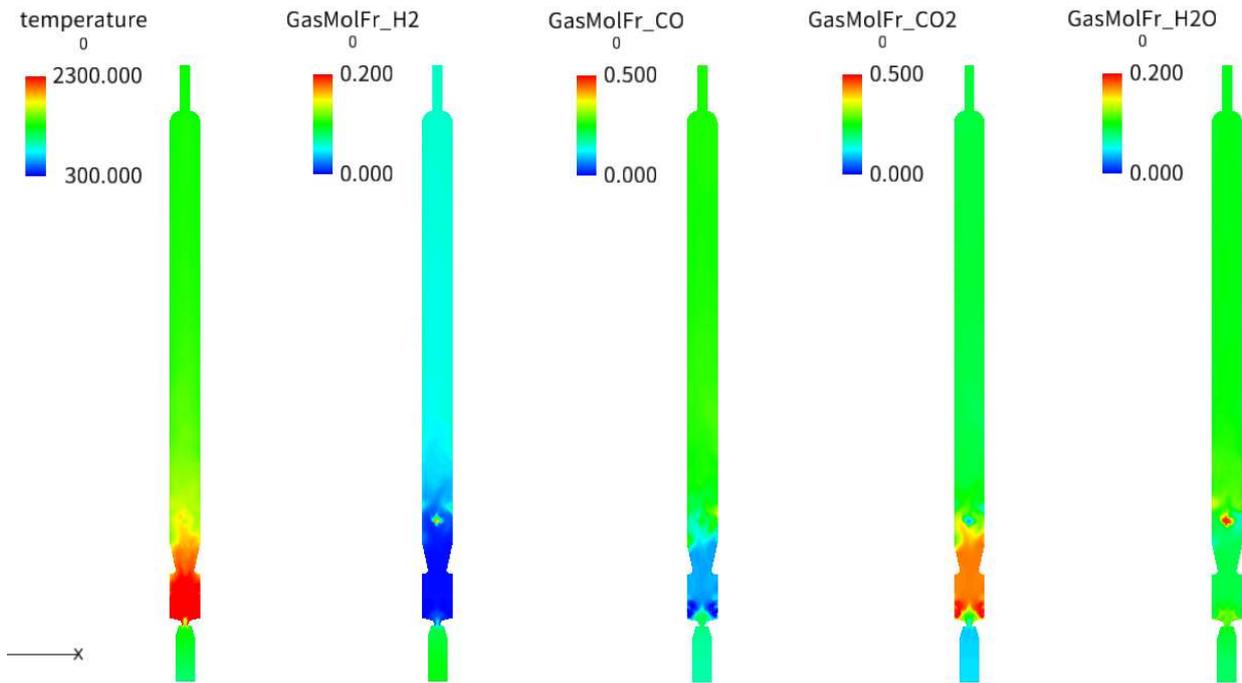


Figure 4.2.1-8. Time-averaged gas composition at an exit of gasifier.



(a) Temperature

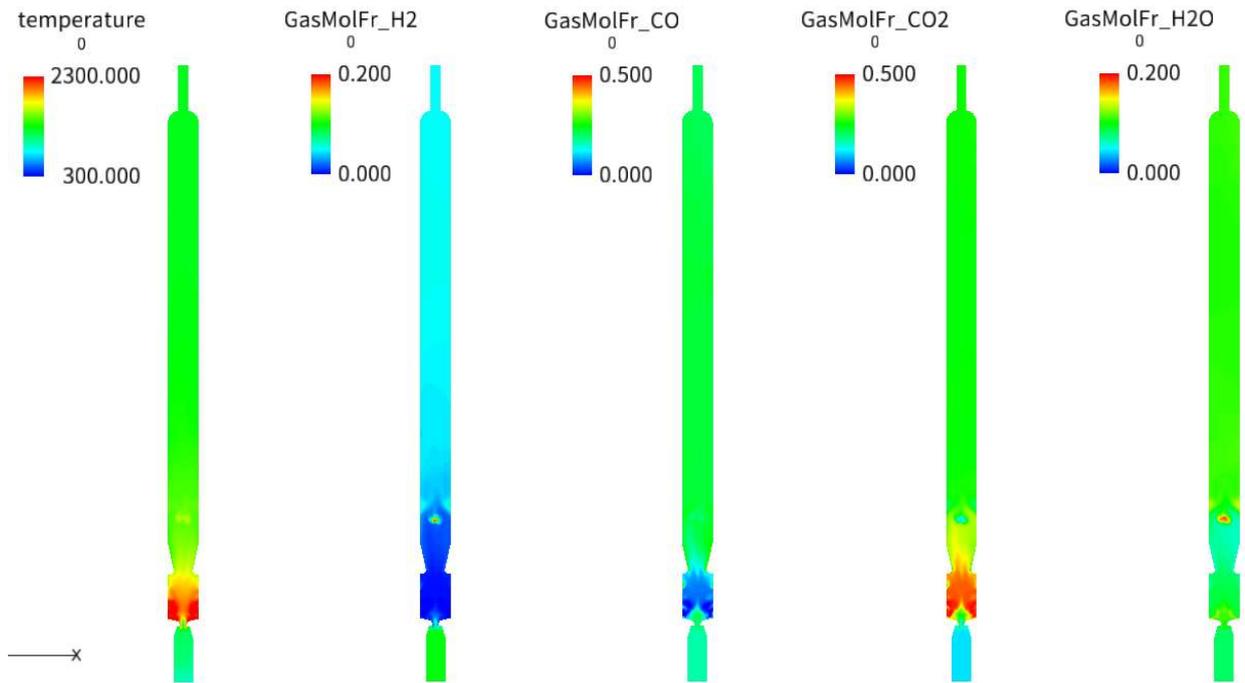
(b) H2

(c) CO

(d) CO2

(e) H2O

Figure 4.2.1-9. Instantaneous distributions of (a) temperature, (b) H2, (c) CO, (d) CO2 and (e) H2O by the original code.



(a) Temperature (b) H2 (c) CO (d) CO2 (e) H2O

Figure 4.2.1-10. Instantaneous distributions of (a) temperature, (b) H2, (c) CO, (d) CO2 and (e) H2O by the modified code.

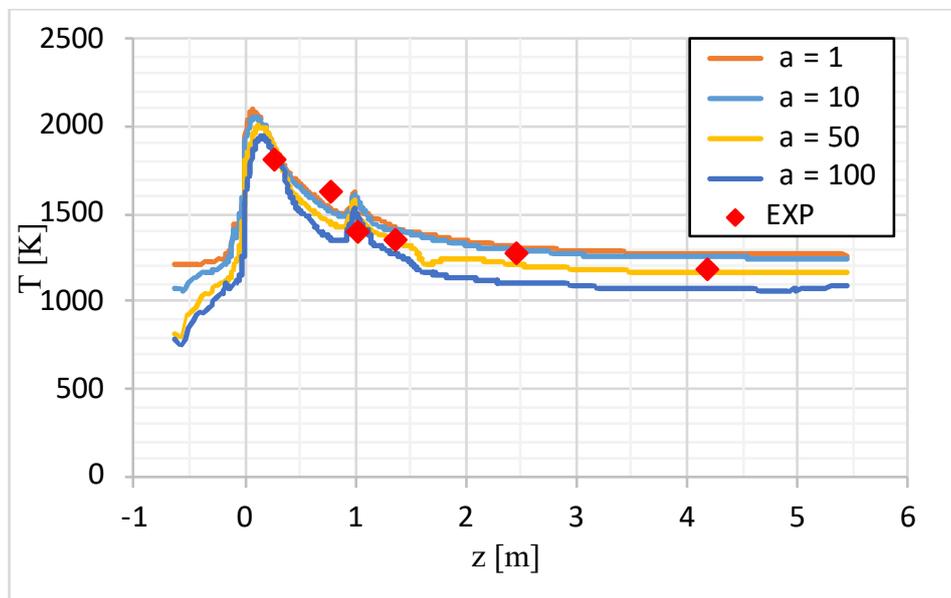


Figure 4.2.1-11. Sensitivity analysis of thermal boundary condition on gas temperature distribution.

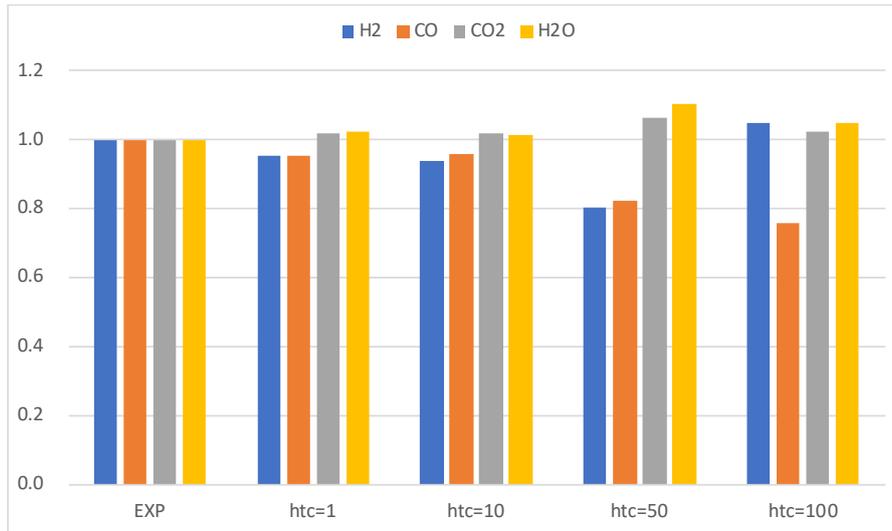


Figure 4.2.1-12. Sensitivity analysis of thermal boundary condition on product gas composition.

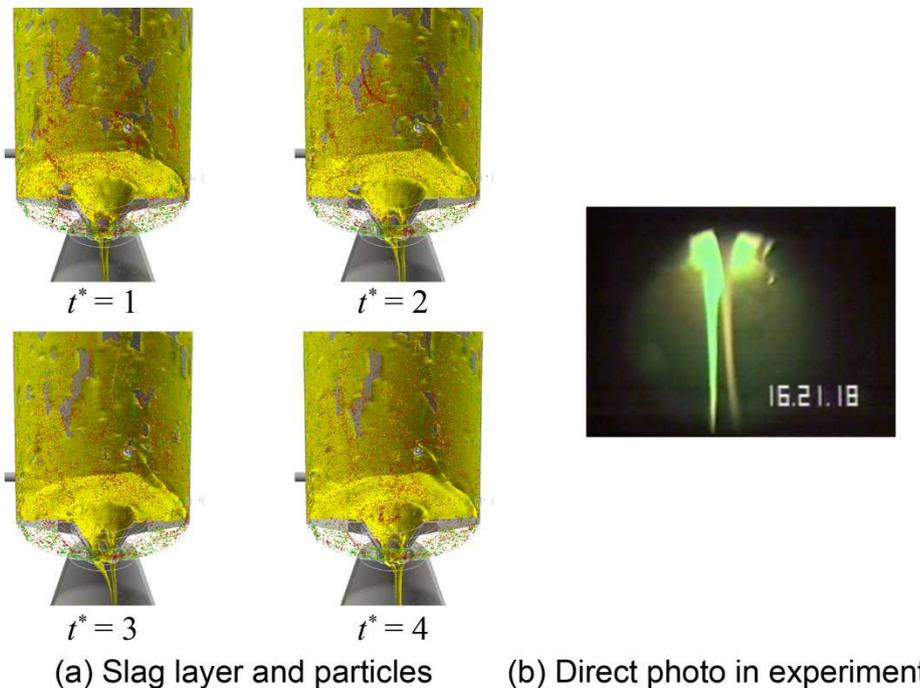


Figure 4.2.1-13. Molten slag layer and flow formed on an inner walls and particles within Combustor.

#### (4-2) ベンチスケール石炭ガス化炉の数値解析

ベンチスケール石炭ガス化炉を対象として、ガス化反応解析について試計算を実施した。ラボスケールガス化炉の解析格子解像度に対して相対的に粗い格子であるため参考値となるが、実験値との比較も行なった。解析方法・解析条件は H30 年度と同様であるが、本年度はさらに連成解析を行いつつ収束に至るまで計算を行い、実験値との比較を実施した。

#### (4-2-1) 解析方法

前述の固気液三相反応流の数値解析のうち、Eulerian-Lagrangian 法による固気二相反応流の Large-eddy simulation を、ベンチスケール石炭ガス化炉を対象として実施した。解析方法は全く同一であるため、前節を参照されたい。

#### (4-2-2) 解析条件

対象とするベンチスケール石炭ガス化炉の計算格子の格子数は約 1 億要素である。ガス化炉の試験条件（解析条件）は、初期圧力約 1.0 MPa、石炭供給量 50t/d、および酸素比約 0.4 である。炭種は、前節のラボスケール石炭ガス化炉の数値解析と同一種である。NS 方程式の対流項の離散化には 2 次中心差分に 5% の 1 次風上成分をブレンドしたものを用いた。時間進行にはオイラー陰解法を用い、時間刻みは  $5 \times 10^{-6}$  s とした。なお、本解析は、前節のチューニング前のコードを用いて計算を行なった。

#### (4-2-3) 解析結果

Figure 4.2.1-14 に、ガス化炉の中心軸上ガス温度分布を示す。ただし、各軸は代表長さ、および代表温度によりそれぞれ無次元化されている。コンバスタにのみ酸素が供給されているため、コンバスタ内のガス温度は高い値を示している。ガスはコンバスタからリダクタへと流入すると急激に温度が低下する。これはコンバスタで供給された酸素が完全に消費され、吸熱反応であるチャーガス化反応が支配的となったためである。リダクタバーナ近傍でガス温度は最小値を示すが、これはリダクタバーナからは低温の  $\text{CO}_2$  が供給されているためである。この低温の  $\text{CO}_2$  はコンバスタから上昇してくる高温ガスと混合し、ガス温度はすぐに回復する。その後、リダクタ内のガス温度はガス化炉出口に向かって徐々に低下していくが、温度低下はわずかであり、吸熱反応によるものというよりは壁面からの熱損失が主因だと推察される。

Figure 4.2.1-15 に、ガス化炉内の温度について、実験値との比較を示す。ただし、無次元化軸方向位置が 2.43 および 8.98 の 2 点について、トラバース式熱電対の挿入位置（中心軸上ではない）の値であり、実験値により正規化した。図より、各点の相対誤差は約 12.5% および約 6% であった。Figure 4.2.1-16 に、ガス化炉出口ガス組成の実験値との比較を示す。なお、各化学種はそれぞれの実験値により正規化した。図より、CO 濃度、および  $\text{CO}_2$  濃度はほぼ実験値と一致したものの、 $\text{H}_2$  濃度、および  $\text{H}_2\text{O}$  濃度については、最大 80% 程度の相対誤差を生じている。これは  $\text{CH}_4$  の生成反応を考慮していないことの影響があると考えられる。

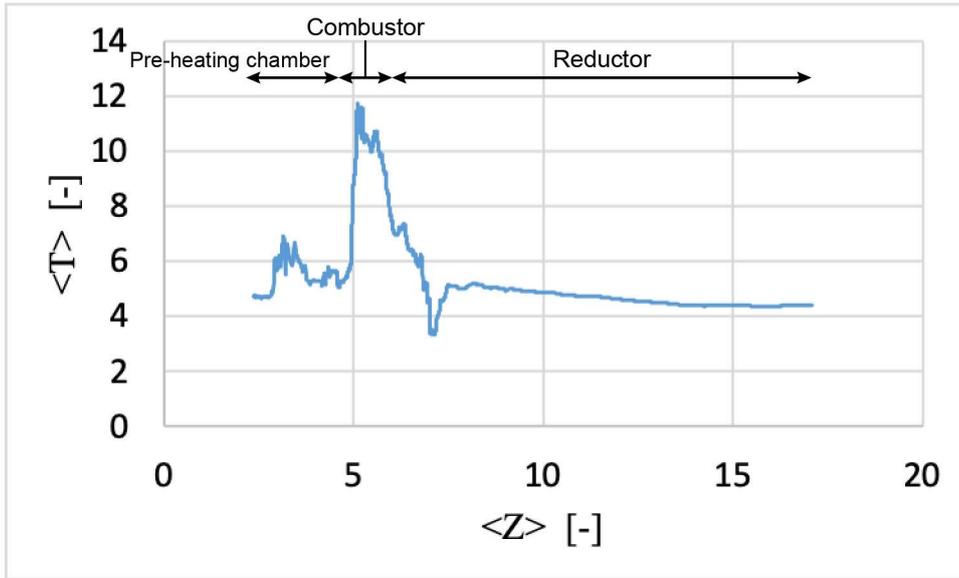


Figure 4.2.1-14. Instantaneous distribution of gas temperature on center axis.

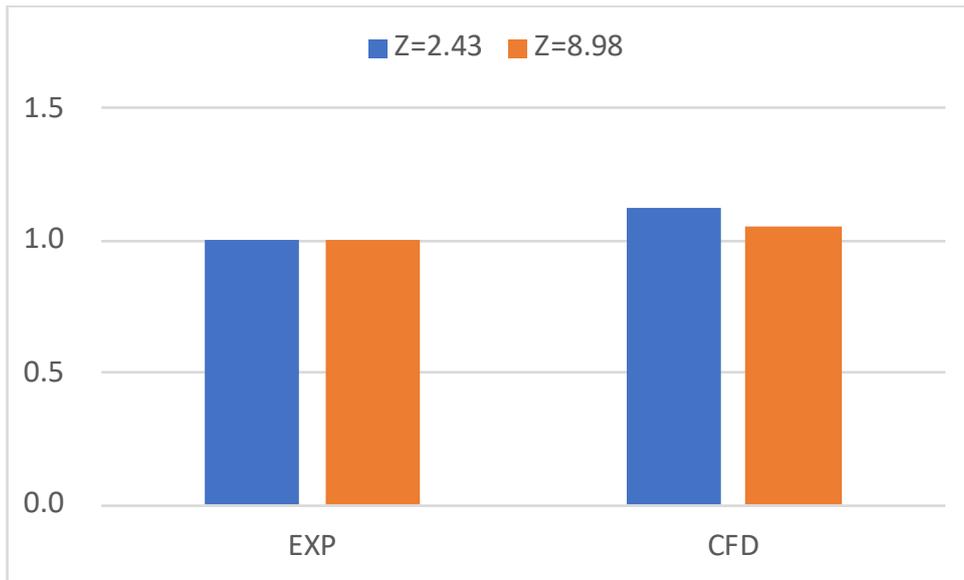


Figure 4.2.1-15. Comparison of gas temperature with experiment at two axial points.

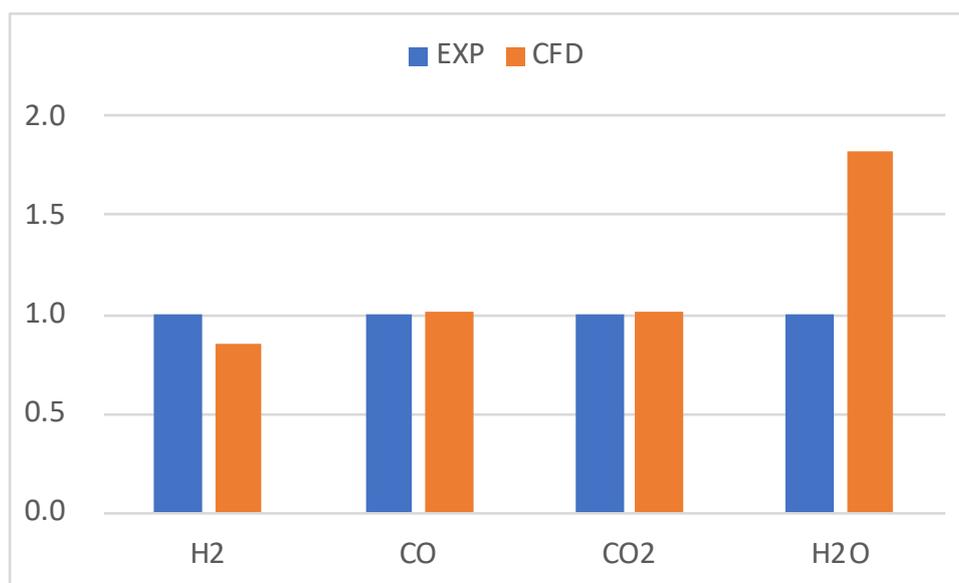


Figure 4.2.1-16. Comparison of product gas composition with experiment.

#### (4-3) まとめ

本研究では、石炭ガス化炉の設計に資するシミュレーション技術には、ガス化炉内の固気二相反応流れと熔融スラグ流れを同時に解析する機能が必要とされる。本年度は、ラボスケール石炭ガス化炉を対象とした計算を実施し、V&Vを実施した。また、ベンチスケール石炭ガス化炉を対象とした試計算を実施した。これらの成果により、ベンチスケール石炭ガス化炉を対象とした固気液三相流ガス化反応数値解析を実施可能な準備が整ったものと考えている。

#### 文献

- [1] H. Watanabe, K. Tanno, Y. Baba, R. Kurose, S. Komori, Large-eddy simulation of coal combustion in a pulverized coal combustion furnace with a complex burner, *Turbulence*, , 6, pp.1027-1030, 2009.
- [2] M. Muto, H. Watanabe, R. Kurose, S. Komori, S. Balusamy, S. Hochgreb, Large-eddy simulation of pulverized coal jet flame -Effect of oxygen concentration on NOx formation, *Fuel*, 142, pp.152-163, 2015.
- [3] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, S. Lee, A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport, *Phys. Fluids A*, 3, pp.2746-2757, 1991.
- [4] C.T. Crowe, M.P. Sharma, D.E. Stock, The Particle-Source-In Cell (PSI-CELL) model for gas-droplet flows, *J. Fluids Eng.*, 99, pp.325-332, 1977.
- [5] S. Umemoto, S. Kajitani, S. Hara, Modeling of coal char gasification in coexistence of CO2 and H2O considering sharing of active sites, *Fuel*, 103, pp.14-21, 2013.
- [6] Niksa, S., A.R. Kerstein, FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics, 1. Formulation, *Energy Fuels*, 5, pp.647-665, 1991.
- [7] H. Watanabe, M. Otaka, Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier, *Fuel*, 85, pp.1935-1943, 2006.

- [8] H. Watanabe, K. Tanno, H. Umetsu, S. Umemoto, Modeling and simulation of coal gasification on an entrained flow coal gasifier with a recycled CO<sub>2</sub> injection, *Fuel*, 142, pp.250-259, 2015.
- [9] P.E. DesJardin, S.H. Frankel, Large-eddy simulation of a nonpremixed reaction jet: application and assessment of subgrid-scale combustion models, *Phys. Fluids*, 10, pp.2298-2314, 1998.
- [10] W.A. Fiveland, Three-dimensional radiative heat-transfer solutions by the discrete-ordinates method, *J. Thermophys.*, 2, pp.309-316, 1988.
- [11] G.J. Browning, G.W. Bryant, H.J. Hurst, J.A. Lucas, T.F. Wall, An empirical method for the prediction of coal ash slag viscosity, *Energy Fuels*, 17, pp.731-737, 2003.
- [12] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, C. Zemach, A continuum method for modeling surface-tension, *J. Compu. Phys.*, 100, pp.335-354, 1992.

#### (5) 高温構造健全性および炉全系シミュレーション技術

##### (5-1) 構造健全性および炉構造内伝熱・反応・冷却システム全体のマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション

ラボスケール石炭ガス化炉の構造健全性および炉構造内伝熱・反応・冷却システム全体のマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを実施し、V&Vを実施した。高温構造健全性シミュレーション技術については、これまで開発してきた高温構造非線形構成則（Ohno-Wang 非線形移動硬化則と Norton-Bailey クリープ則）、及び非線形熱応力評価機能に加え、物性値の温度依存性の取り扱い機能を実装し、一連の技術開発を完了した。炉構造内伝熱・反応・冷却システム全体のマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションについてはプロジェクトの全体推進と協力し、ラボスケール石炭ガス化炉を対象として、FFR-Comb と ADVENTURE\_Thermal コードを REVOCAP\_Coupler (Socket 版) で双方向に接続した連成解析を「京」上で実行し、非定常解析が正常に実行できることを確認するとともに、V&Vとして、得られた解析結果を電中研提供の計測値と比較し、結果のオーダーと傾向がほぼ合うことを確認した。

##### (5-1-1) ラボスケール石炭ガス化炉の構造健全性評価シミュレーション

電力中央研究所において実際に稼働している石炭ガス化実験炉を本サブ課題における解析ターゲットとしている。ここでは、流体領域の熱流動解析（燃焼解析）と周辺の炉構造部の固体中熱伝導解析を双方向連成問題として解析し、その結果として得られた炉構造中の温度の時刻履歴を入力データとして、炉構造部の構造健全性評価を行う。また、炉のスケールアップに伴い、熱的な極限環境下での構造健全性評価となるため、金属材料のひずみ硬化と、熱回復によって生じる一定ひずみ速度あるいは一定応力でのクリープ現象等を考慮可能な大規模シミュレーションコードの実装に取り組んできた。

上述した非線形材料挙動を考慮した構造健全性評価のためのシミュレーションを実施するには、適切な繰り返し弾塑性・クリープ構成則の導入が必要となる。このため、ロケットエンジンへの適応事例[1]に基づき、重点課題⑥のターゲットアプリケーションとしてコデザインを進めている汎用大規模有限要素法構造解析ソルバ ADVENTURE\_Solid に対して、昨年度まで Norton 則および Ohno-Wang (OW) 則[2-5]の混合則の追加実装を行ってきた。本年度は各種物性値の温度依存性を同コードに反映する実装作業を行った。

(5-1-1-1) 物性値温度依存性導入の定式化

本節では Table4.2.1-1 に示す記号を使用する。

Table4.2.1-1. Nomenclature

記号	意味
	$\Delta$ は増分形を表し、ない場合には全量形とする。
$f^{ext}$	外力ベクトル
$f_c^{ext}$	節点集中荷重ベクトル
$f_s^{ext}$	面分布荷重ベクトル
$f_T$	熱荷重ベクトル
$B$	ひずみ-変位マトリクス
$D_e$	弾性マトリクス(温度を介して時間変化する)
$\sigma$	応力ベクトル
$\epsilon_i$	試行ひずみベクトル
$\epsilon_i^p$	塑性ひずみベクトル
$\epsilon^T$	熱ひずみベクトル
$\alpha$	線膨張係数ベクトル(温度を介して時間変化する) (等方的として $\alpha[1 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0]^T$ とする。)
$T$	積分点温度
$R$	残差力ベクトル
$K$	剛性マトリクス
$u$	変位ベクトル

本開発では中点則を用いて応力増分や熱荷重増分を評価する実装を行った。各物理量を計算する際のサンプリング温度は Table4.2.1-2 のようにして算出した。基本的な方針として応力積分のアルゴリズム中で弾性マトリクスや線膨張係数のような積分の中で必要とされるヤング率 $E$ 、ポアソン比 $\nu$ 、線膨張係数 $\alpha$ のような量は中点でサンプリングして、それ以外の量は終点でサンプリングするような実装とした。

Table 4.2.1-2. Sampling Temperature for Material Properties

サンプリング温度	物理量
$T\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right)$	ヤング率 $E$
	ポアソン比 $\nu$
	線膨張係数 $\alpha$
$T(t + \Delta t)$	降伏応力 $\sigma_y$
	加工硬化 $h$
	OW 移動硬化パラメータ $(\zeta, r)$
	クリープパラメータ $(A, n, m)$

各温度において対応する降伏応力を算出する際にはバイリニアモデルを基本として  $T(t + \Delta t)$  を含む  $T_1 \leq T(t + \Delta t) < T_2$  を定めて  $T_1$  および  $T_2$  について降伏応力を計算した後、温度について補間するような実装を行った。Figure 4.2.1-17 に概要を示す。

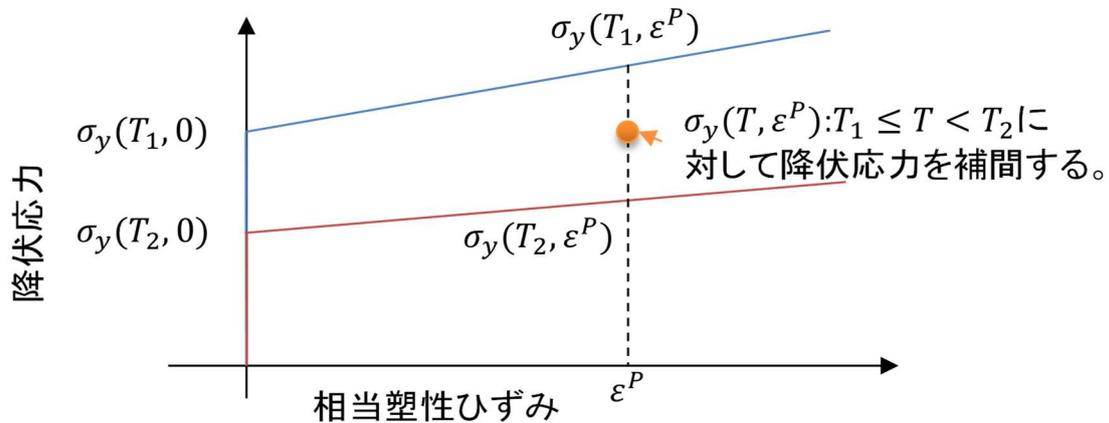


Figure 4.2.1-17. Interpolation of Yield Stress on Specific Temperature

温度依存性を考慮した釣り合い方程式は以下のようなになる。

初回目の Newton Raphson (NR) 反復 :

$$\text{外力増分: } {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{f}^{ext} = {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{f}_C^{ext} + {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{f}_S^{ext} + {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{f}_B^{ext}$$

$$\text{熱ひずみ荷重の増分: } {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{f}_T = \int_V \mathbf{B}^T \mathbf{D}_e \left( t + \frac{\Delta t}{2} \right) \alpha \left( t + \frac{\Delta t}{2} \right) ({}^{t+\Delta t}T - {}^tT) dV$$

$$\text{右辺ベクトル: } \mathbf{R} = {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{f}^{ext} + {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{f}_T$$

初回 NR 反復のみ熱ひずみ荷重増分を右辺ベクトルに導入する。

以降の NR 反復 :

$$\text{外力全量 : } \quad {}^{t+\Delta t} \mathbf{f}^{ext} = \sum_{p=0}^{t+\Delta t} {}^p \mathbf{f}^{ext}$$

$$\text{応力積分 : } \quad {}^{t+\Delta t} \boldsymbol{\sigma}_i = {}^t \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{D}_e \left( \mathbf{t} + \frac{\Delta t}{2} \right) \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i^e = {}^t \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{D}_e \left( \mathbf{t} + \frac{\Delta t}{2} \right) (\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_i^p - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^T)$$

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}^T = \boldsymbol{\alpha} \left( \mathbf{t} + \frac{\Delta t}{2} \right) ({}^{t+\Delta t} T - {}^t T)$$

$$\text{内力 : } \quad {}^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{int} = \int_V {}^{t+\Delta t} \mathbf{B}_i^T {}^{t+\Delta t} \boldsymbol{\sigma}_i dV$$

$$\begin{aligned} \text{右辺ベクトル (残差力) : } \quad \mathbf{R} &= {}^{t+\Delta t} \mathbf{f}^{ext} - {}^{t+\Delta t} \mathbf{f}_i^{int} \\ {}^{t+\Delta t} \mathbf{f}^{ext} &= {}^t \mathbf{f}^{ext} + {}^{t+\Delta t} \Delta \mathbf{f}^{ext} \end{aligned}$$

#### (5-1-1-2) コード実装

温度依存性を考慮した場合の熱荷重増分を導入した場合の計算フローについて Figure 4.2.1-18 に示す。実装における既存コードからの主な変更点は以下のとおりである。

#### データ構造の変更

ADVENTURE Solid の非線形物性値の温度依存性を導入するために物性値データの構造体及び各積分点の OW クリープモデルデータの構造体を拡張した。

#### 熱荷重増分計算の変更

熱荷重増分の計算時に  $\mathbf{D}_e$  および  $\boldsymbol{\alpha}$  の温度依存性を考慮するため積分点ごとに fe\_Constants 構造体を別々に計算できるように剛性行列計算ルーチンを拡張した。

#### 応力計算処理の変更

OW モデルにおける応力計算の処理について弾塑性モデル及びクリープに温度依存性を導入した。

#### $\mathbf{D}_{ep}$ マトリクス計算処理の変更

応力積分計算同様にヤング率・ポアソン比・線膨張係数については中点則を用いた評価を行い、加工硬化・移動硬化・クリープパラメータに関しては次ステップでの温度でサンプリングするように実装を行った。

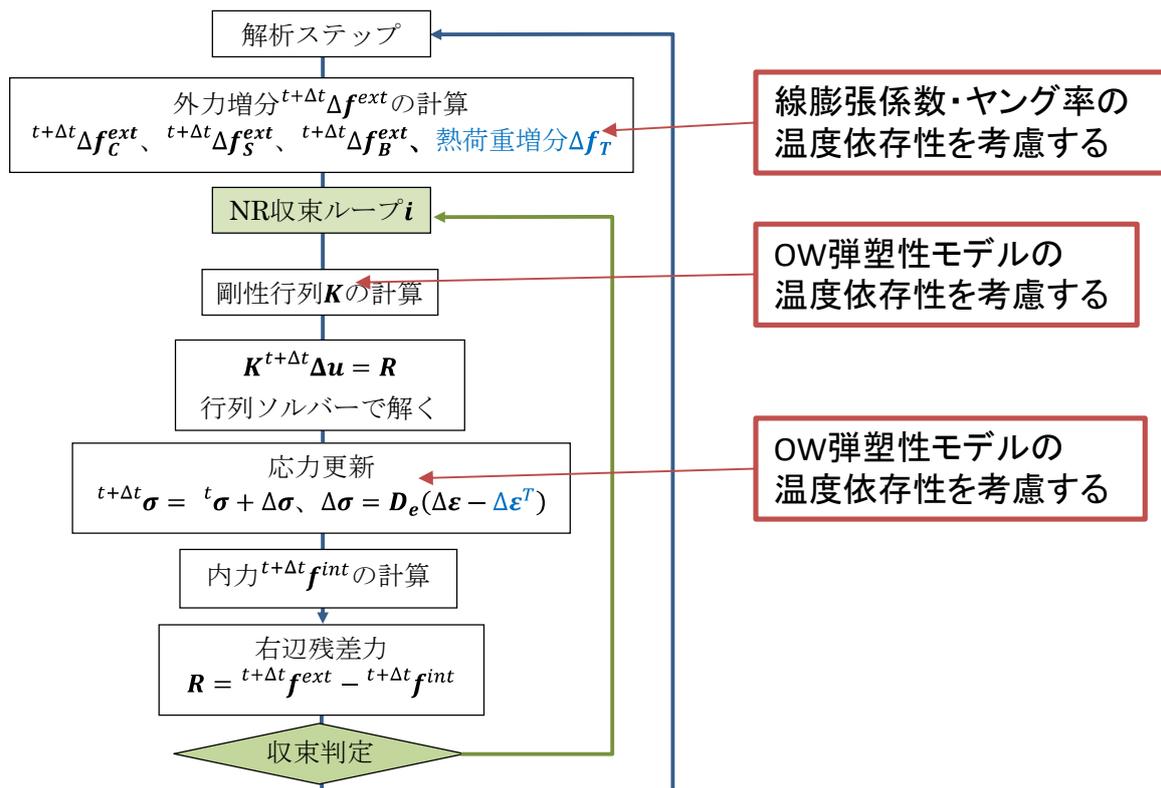


Figure 4.2.1-18. Computation Flow of Newton Raphson Iterations with Temperature Dependency

(5-1-1-3) 物性値温度依存性検証解析

スラストモデルを用いて伝熱解析からの熱応力解析への連成解析を行い物性値の温度依存性機能の検証を行った。降伏応力の温度依存性の導入あり・無しについてステップ-応力関係の比較を行った。

【モデル】

Figure 4.2.1-19 にスラストモデルの各部寸法を示す。ここからメッシュ作成を行い、伝熱解析及び熱応力解析を行った。伝熱解析の境界条件を Figure 4.2.1-20、熱応力解析の境界条件を Figure 4.2.1-21 に示す。伝熱解析については燃焼部に相当する部分で固定温度境界を 10 ステップに分けて 800°C までかけ、外側の冷却面に対しては熱伝達境界条件を課した。熱応力解析についてはフランジ部を固定するような条件で解析を行った。

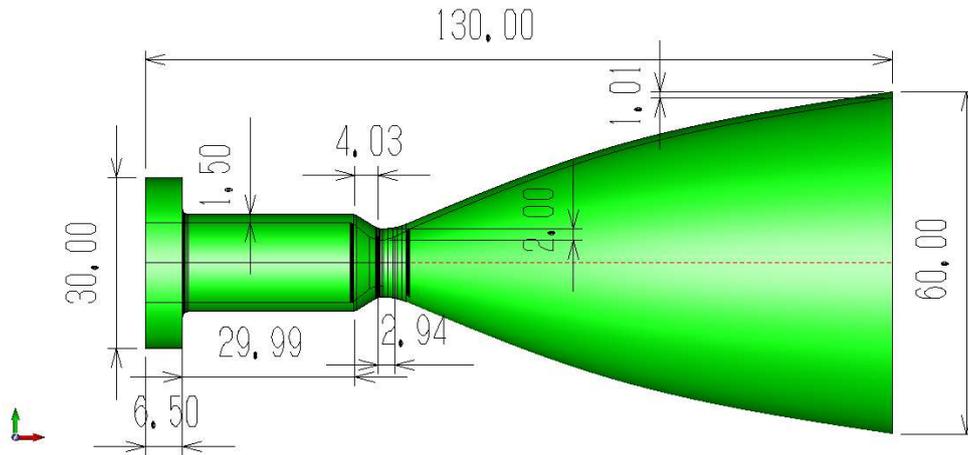


Figure 4.2.1-19. Schematic View of Thruster Model

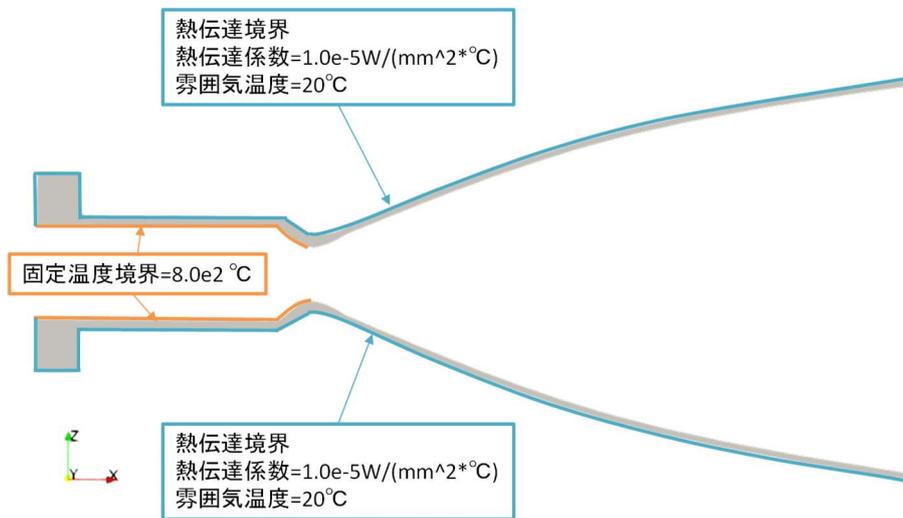


Figure 4.2.1-20. Boundary Conditions for Thermal Conductivity Analysis on Thruster Model

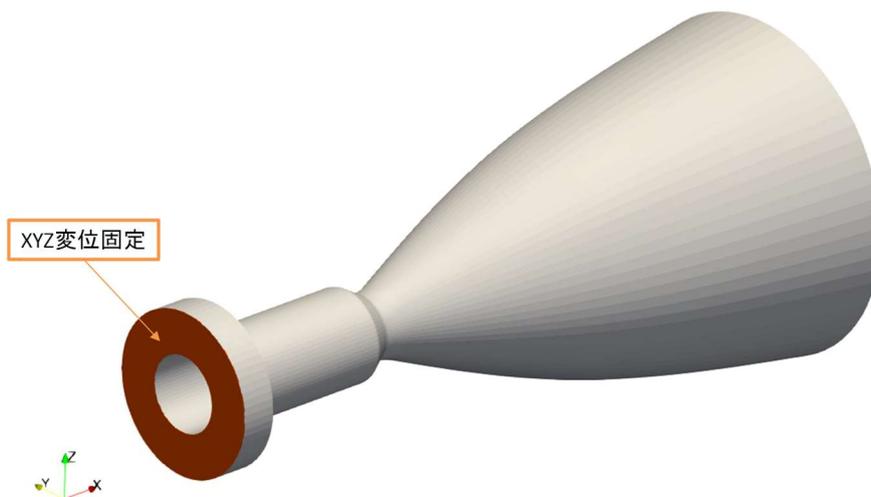


Figure 4.2.1-21. Boundary Condition for Thermal Stress Analysis on Thruster Model

伝熱解析の物性値を Table 4.2.1-3 に示す。温度依存性なしケースの弾塑性パラメータを Table 4.2.1-4、移動硬化パラメータを Table 4.2.1-5、クリープパラメータを Table 4.2.1-6 に示す。温度ステップ条件と熱応力の収束条件を Table 4.2.1-7 に示す。

Table 4.2.1-3. Material Properties of Thruster Model for Thermal Conductivity Analysis

熱伝導率[W/(mm*K)]	6.100E-03
比熱[J/(g*K)]	5.450E-01
密度[g/(mm <sup>3</sup> )]	4.430E-03

Table 4.2.1-4. Material Properties of Thruster Model for Elasto-Plastic Analysis

ヤング率[MPa]	1.100E+05
ポアソン比	3.200E-01
降伏応力[MPa]	8.800E+02
加工硬化係数[MPa]	2.000E+02
線膨張係数[1/°C]	9.900E-06

Table 4.2.1-5. Material Properties of Thruster Model for OW Model

	1	2	3	4
ζ	1.540E+03	5.530E+02	1.000E+02	2.600E+01
r	5.844E+01	1.121E+02	3.210E+01	3.808E+02

Table 4.2.1-6. Material Properties of Thruster Model for Norton Model

A	2.221E-15
n	3.270E+00
m	-7.338E-01

Table 4.1.2-7. Analysis Conditions of Thruster Model for Coupled OW and Norton Models

温度ステップあたりの境界温度条件増分[°C/step]	8.000E+01
温度ステップ数	10
合計インクリメント数	240
1 インクリメントの Δt [s]	2.500E-01
Newton-Raphson 反復収束判定基準	1.500E-06
前処理方法	BDD 法 (デフォルト設定)

降伏応力の温度依存性を考慮する場合の弾塑性パラメータについて Table 4.2.1-8 に示す。

Table 4.2.1-8 Material Properties of Thruster Model for Temperature Dependency Problem

	温度	
	20°C	800°C
ヤング率[MPa]	1.100E+05	1.100E+05
ポアソン比	3.200E-01	3.200E-01
降伏応力[MPa]	8.800E+02	6.600E+02
加工硬化係数[MPa]	2.000E+02	2.000E+02
線膨張係数[1/°C]	9.900E-06	9.900E-06

【解析結果：伝熱解析】

伝熱結果の最終ステップにおける温度分布は Figure 4.2.1-22 のようになった。燃焼器部分での温度上昇が確認できる。

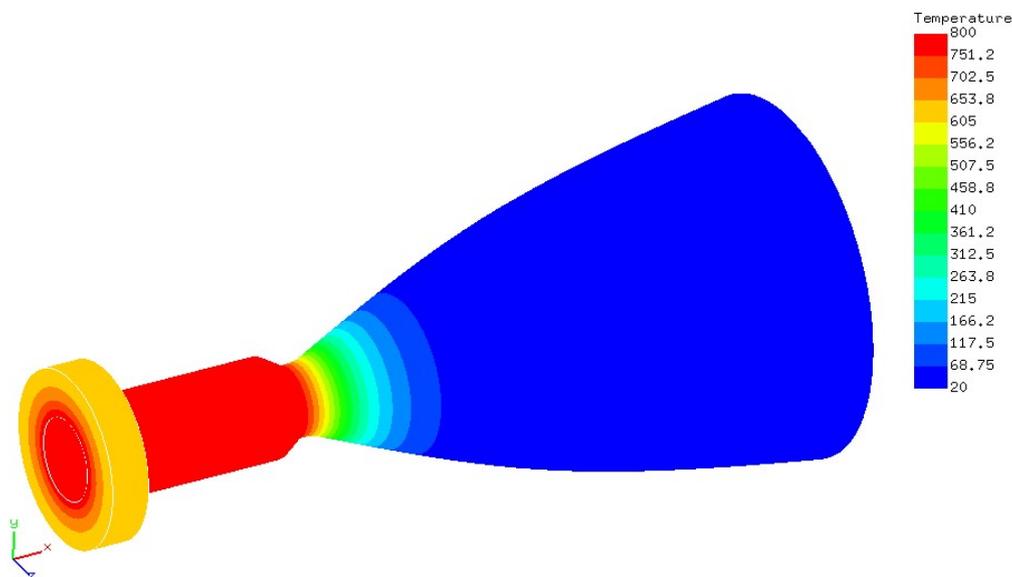


Figure 4.2.1-22. スラスタモデル 伝熱解析 温度分布 t= 60s 240 インクリメント

【解析結果：熱応力解析】

伝熱解析の結果を引き継ぎ、240 インクリメントの熱応力解析を行い NR 反復が収束することを確認できた。最終インクリメントの変位分布を Figure 4.2.1-23、相当応力分布を Figure 4.2.1-24 に示す。

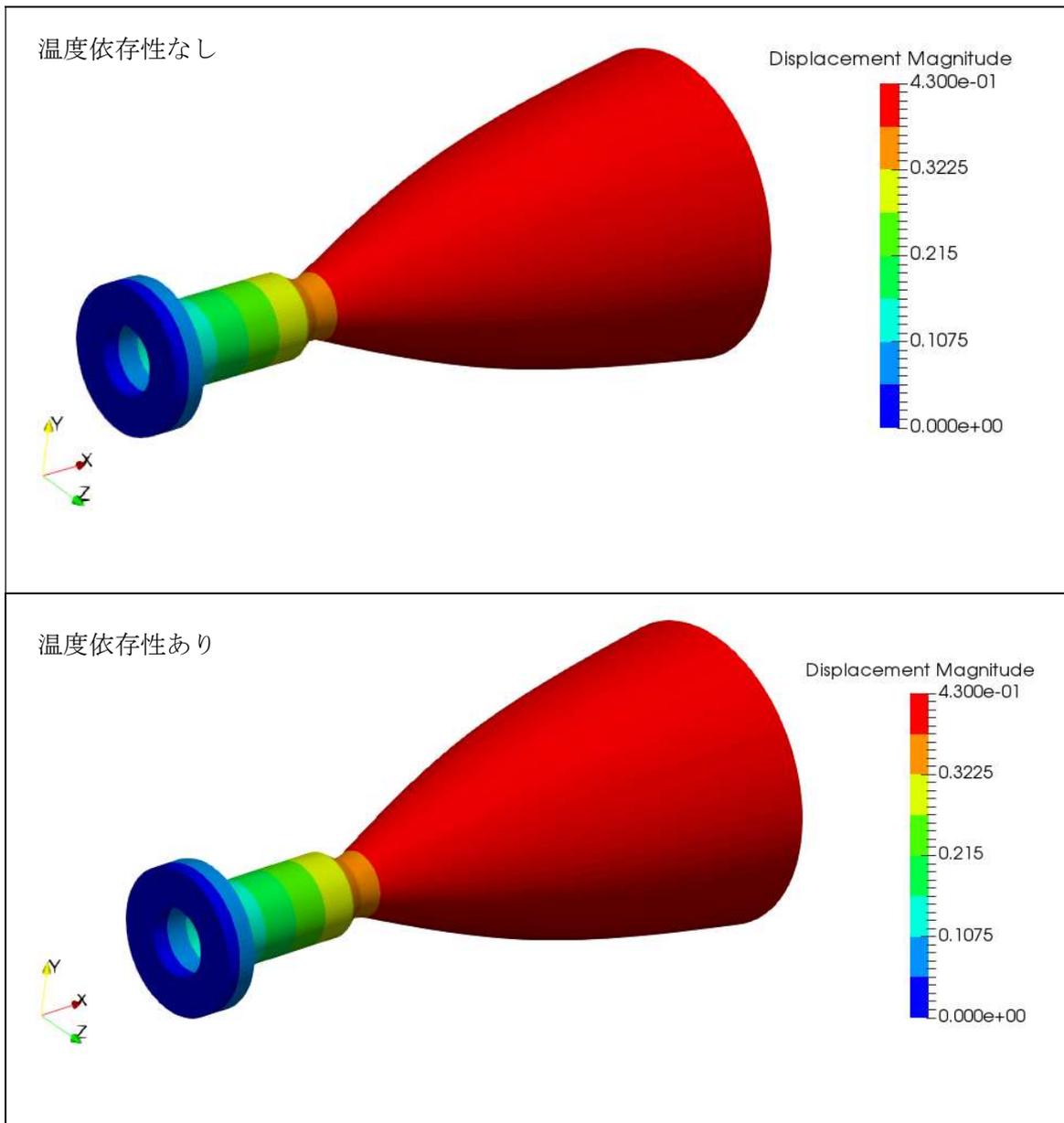


Figure 4.2.1-23. Displacement Distribution of Thruster Model

現在の温度依存性の設定では線膨張係数は温度に係らず一定であるため、Figure 4.2.1-23 の変位分布はほぼ同様のものになっていると考えられる。一方降伏応力に関しては温度により変化するため Figure 4.2.1-24 の相当応力は高温部において温度依存性ありのケースで温度依存性なしのケースに比べて低い結果が得られることが確認できた。

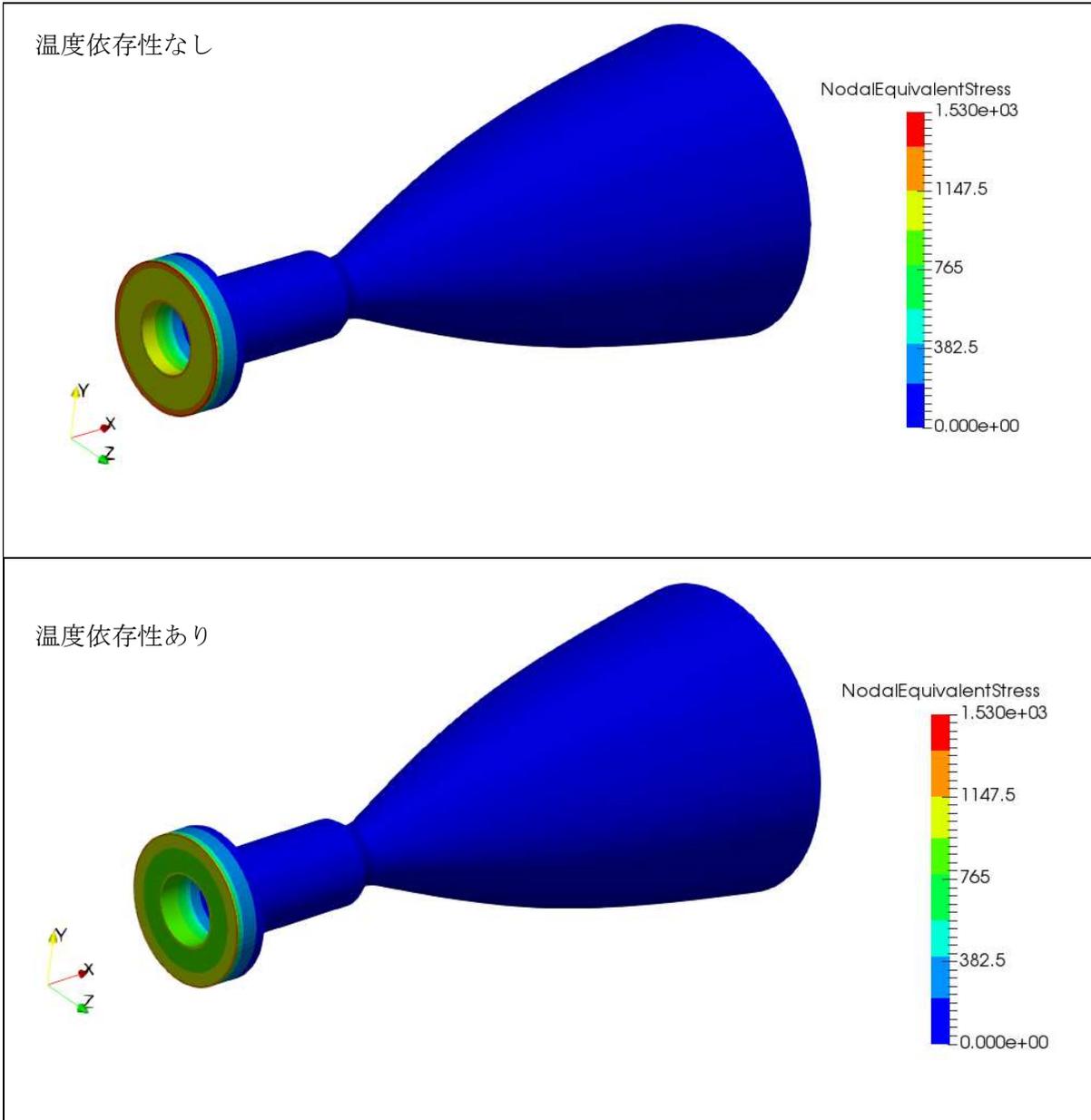


Figure 4.2.1-24. Equivalent Stress Distribution of Thruster Model

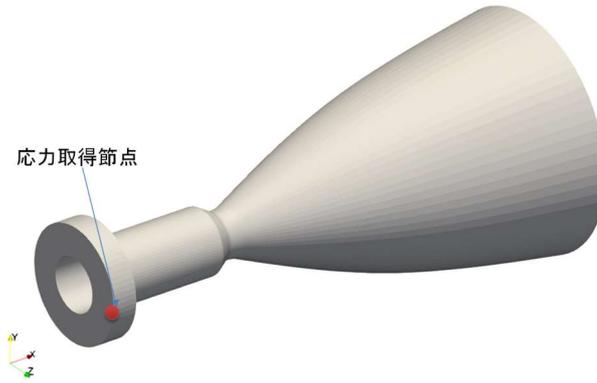


Figure 4.2.1-25. Location of Monitoring Point for Stress Evaluation

Figure 4.2.1-25 の節点について相当応力とインクリメントの関係を取得した図を Figure 4.2.1-26 に示す。

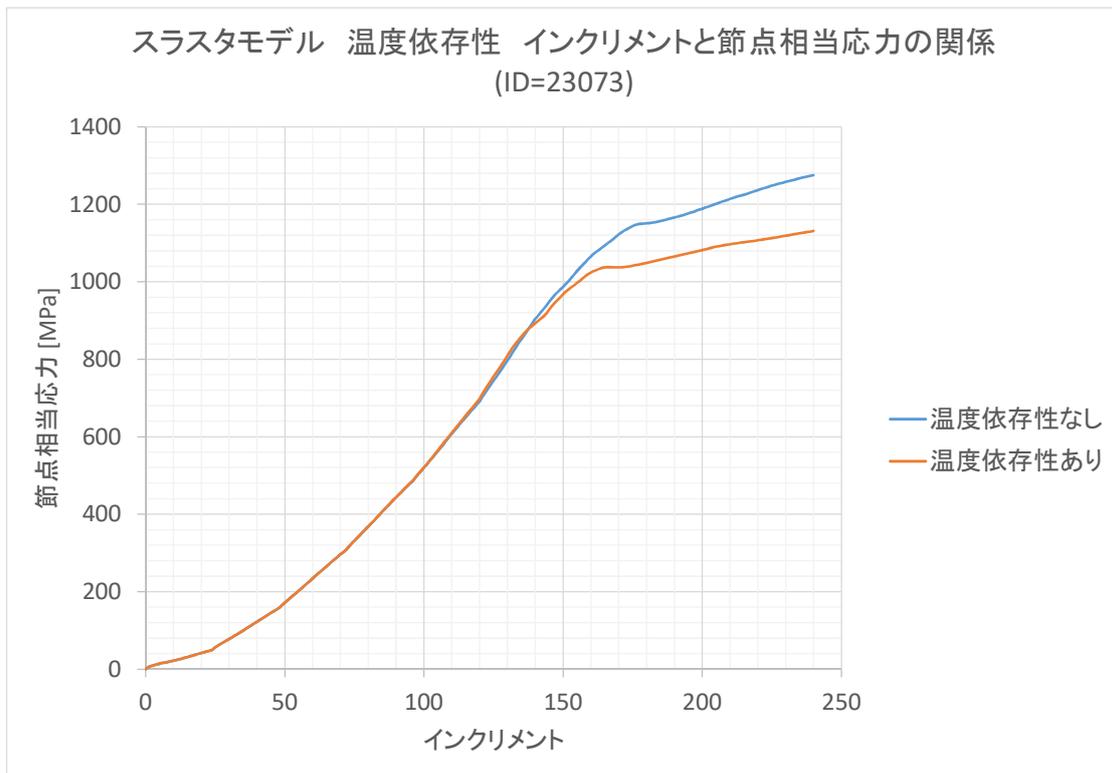


Figure 4.2.1-26. Time Evolution of Nodal Equivalent Stress on Monitoring Point

Figure 4.2.1-26 より、インクリメントが進み温度が上昇するにつれて温度依存性なしのケースに比べて温度依存性ありのケースで相当応力が低くなる現象を確認できた。これより、物性値の温度依存性の実装が適切であることを確認できた。

(5-1-1-4) 石炭ガス化実験炉の熱応力解析

石炭ガス化実験炉を対象として熱応力解析を行った。解析モデルは、要素数約 1.6 億、節点数約 2551 万の四面体 1 次要素メッシュにより分割されている。入力となる温度分布は、燃焼流解析ソルバ NuFD/FrontFlow Red (FFR) による燃焼室内の燃焼流解析と、伝熱解析ソルバ ADVENTURE\_Thermal (ADV) による炉容器内部の伝熱解析を連成して解いた結果得られたものである。実物の炉容器本体は高温高圧条件に使用可能な高張力鋼に耐熱レンガ等を組み合わせた複合的な構造であるが、今回のモデルでは簡単のため単一材料からなる線形弾性体とみなし、高炉等で用いられる高張力鋼 HT80 の物性を参考に、Table 4.2.1-9 に示した値を与えた。

解析結果の可視化には LinuxPC を使用した。PC に計算結果ファイルを転送した後、並列 In-situ 可視化ツール LexADV\_WOVis を使用して 10,000×20,000 ピクセルの高精細画像ファイルを生成した。生成した可視化画像を Figure 4.2.1-27 および Figure 4.2.1-28 に示す。Figure 4.2.1-27 は節点相当応力を色コンタとして示したもので、y=0 の面で切断して炉容器内部と燃焼室表面の応力分布を同時に示したものである。Figure 4.2.1-28 はコンバスタ付近を切り出して拡大したものである。なお、図中でき裂のように見えるのは領域分割による部分間境界である。得られた応力分布は妥当なものであり、以上の熱応力解析と可視化をもって、一連の連成解析による構造健全性評価が実施可能であることを確認した。

Table 4.2.1-9. Material Properties of Coal Gasifier Model

Young's Modulus	$2.03 \times 10^{-5} [N/mm^2]$
Poisson's ratio	0.3 [-]
Coefficient of Thermal Expansion	$1.17 \times 10^{-5} [1/K]$

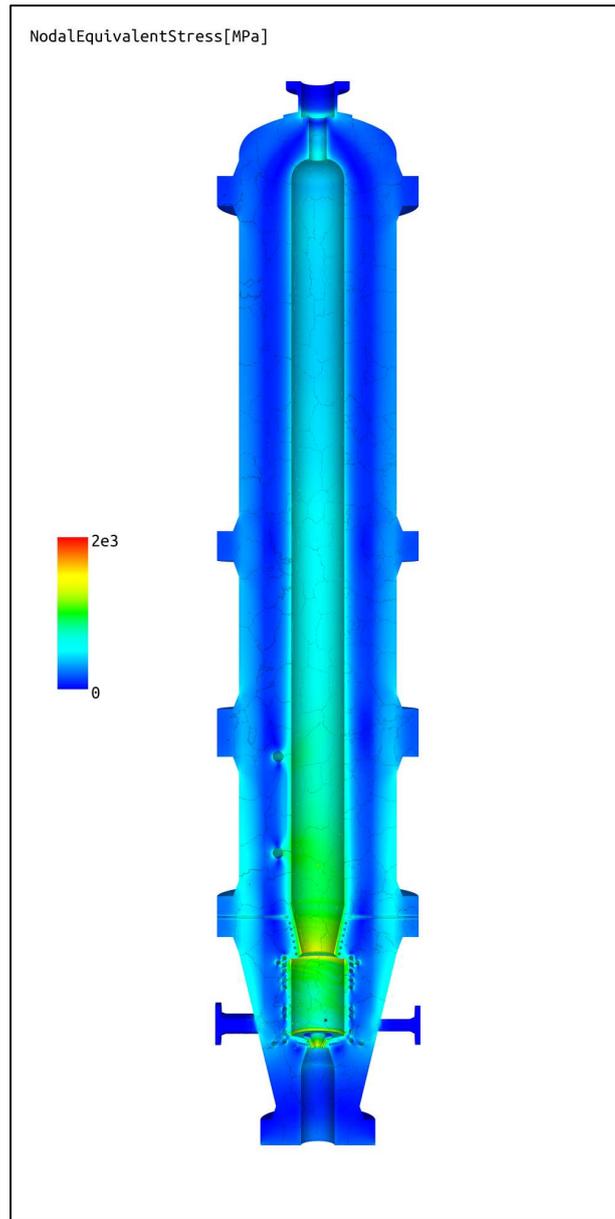


Figure 4.2.1-27. Thermal Stress Distribution of Coal Gasifier Model

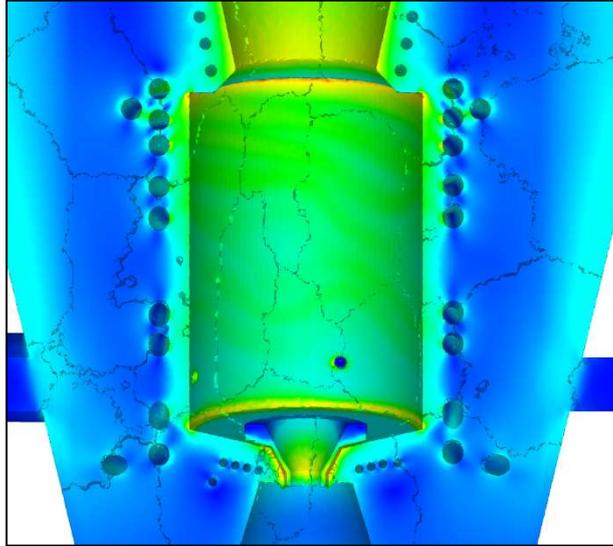


Figure 4.2.1-28. Closer View of Thermal Stress Distribution near Combustor

#### 文献

- [1] 西元 美希、山西 伸宏、吉村 忍、笠原 直人、秋葉 博, “極限マルチフィジクス環境における液体ロケットエンジンの破損メカニズムの解明” 日本機械学会論文, 78 巻 795 号, (2012) , 1534-1546
- [2] M. Kobayashi, M. Mukai, H. Takahashi, N. Ohno, T. Kawakami and T. Ishikawa, “Implicit integration and consistent tangent modulus of a time-dependent non-unified constitutive model”, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.58, No.10(2003), pp.1523-1543.
- [3] 小林峰雄, 大野信忠, “ひずみ硬化／動的回復の一般形に基づく繰返し塑性構成式の陰的積分およびコンシステント接線剛性 (第 1 報 定式化) ”, 日本機械学会論文, 66 巻 647 号, (2000) , 1274-1280
- [4] 小林峰雄, 大野信忠, “ひずみ硬化／動的回復の一般形に基づく繰返し塑性構成式の陰的積分およびコンシステント接線剛性 (第 2 報 数値的検証) ”, 日本機械学会論文, 66 巻 647 号, (2000) , 1281-1289
- [5] N. Ohno and J.-D. Wang, “Kinematic Hardening Rules with Critical State of Dynamic Recovery, Part I: Formulation and Basic Features for Ratchetting Behavior”, International Journal of Plasticity, Vol. 9(1993), pp.375-390.

#### (5-1-2) ラボスケール石炭ガス化炉の統合シミュレーション

電力中央研究所において実際に稼働している石炭ガス化実験炉を本サブ課題における解析ターゲットとしている。ここでは、流体領域の熱流動解析（燃焼解析）と周辺の炉構造部の固体中熱伝導解析を双方向連成問題として解析し、その結果として得られた炉構造中の温度の時刻履歴を入力データとして、炉構造部の非線形構造解析を行う。本年度は平成 30 年度までに開発した構造健全性および炉構造内伝熱・反応・冷却システムの各機能を統合し、プロジェクトの全体推進と協力しマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを構築した。また、石炭ガス化実験炉モデルを対象に「京」においてオンライン双方向連成解析を実施し、非定常解析が正常に実行できることを確認するとともに、V&V として、得られた解析結果を電中研提供の計測値と比較し、結果のオーダーと傾向がほぼ合

うことを確認した。

(5-1-2-1) 非定常解析

本サブ課題では並列熱伝導解析コード **ADVENTURE\_Thermal** と並列燃焼解析コード **FFR-Comb** に対し並列カプラ **REVOCAP\_Coupler (Socket 版)** を用いて双方向連成解析を実現する。ここで用いる **FFR-Comb** は、4-2-1の項の「(4) ガス化炉のシミュレーション技術」で述べたチューニング前のコードを用いている。解析対象である石炭ガス化実験炉モデルの燃焼部の格子要素は六面体要素、四面体要素、三角柱要素、四角錐要素から構成されており、総要素数は約1億である。モデルの概要及び連成境界面の名称を **Figure4.2.1-29** 及び **Figure4.2.1-30** に、各境界面の条件を **Table4.2.1-10** に示す。また、構造解析モデル中に4種類の冷却管が配置されており、それらの仕様を **Table4.2.1-11** に示す。構造解析モデルは複数の部品で構成され、その内側に流体解析モデルが入り、連成境界面を介して熱の伝達が行われる。構造物の外側は一定温度の大気と接している他、内部には冷却管が配置されており、それぞれが熱伝達する。

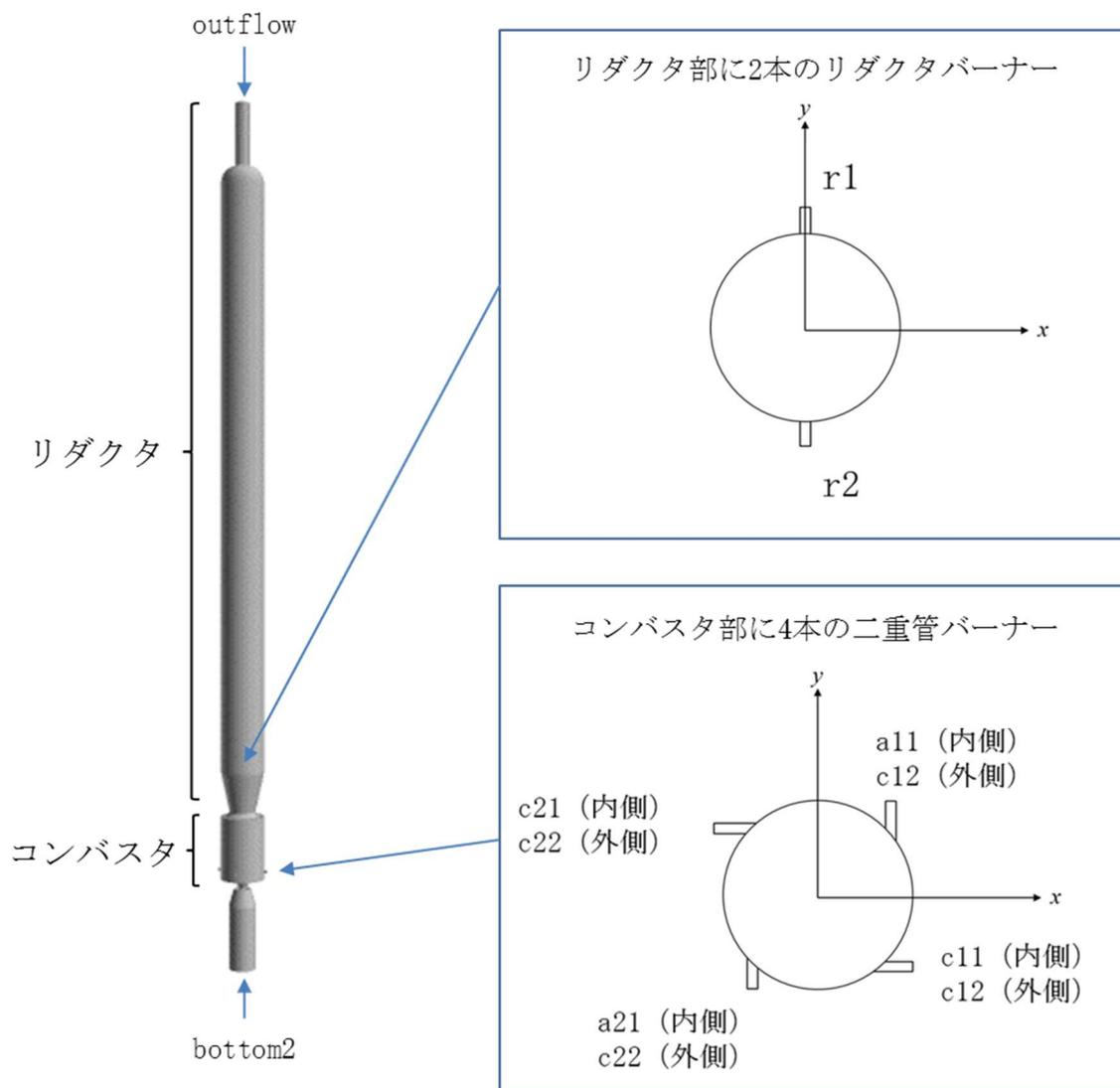


Figure4.2.1-29. Coal gasification reactor model outline, and its inflow / outflow boundary

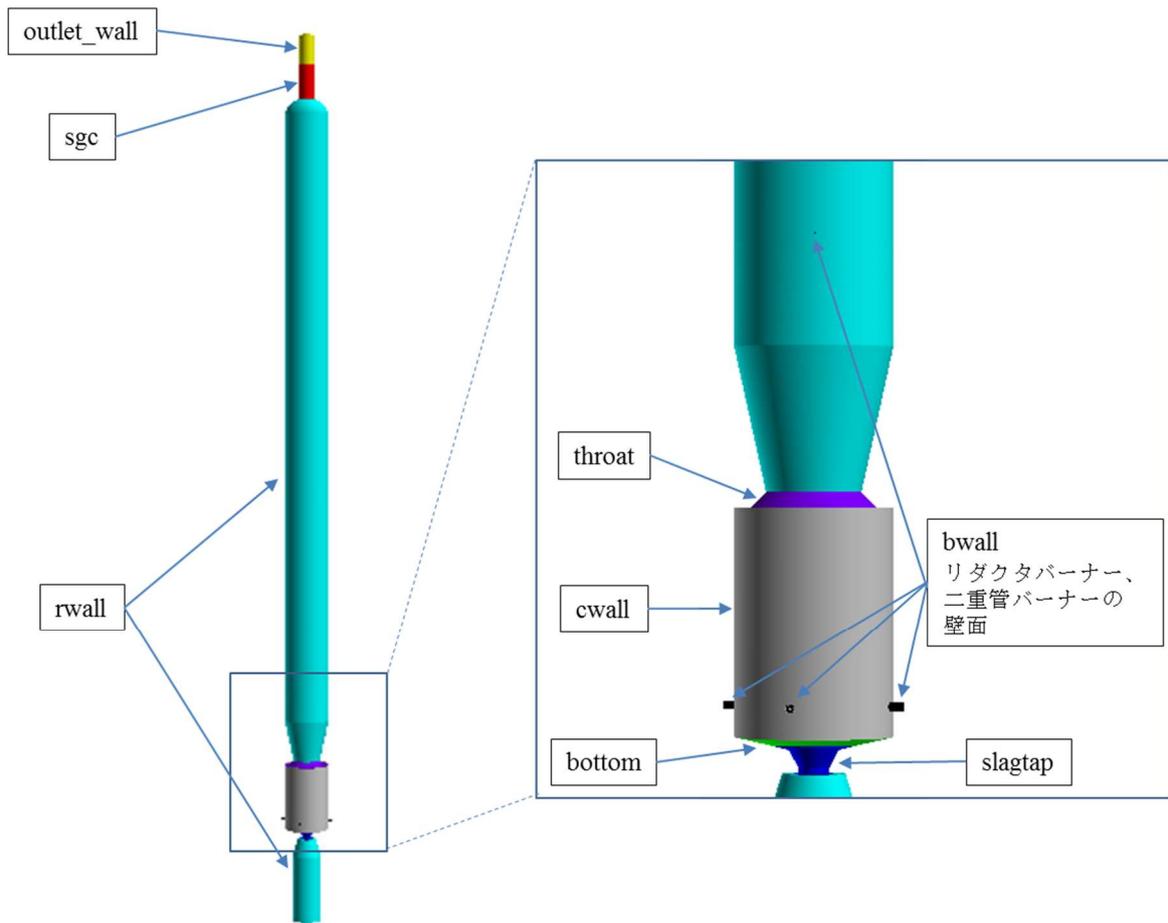


Figure4.2.1-30. Wall boundary of coal gasification reactor model

Table4.2.1-10. Boundary conditions of model

流入境界			
名称	流入流速(m/s)	流入化学種	温度(K)
c11	18.83101	O2(10.54%)+N2(34.9%)+CO2(54.54%)+ H2O(0.02%)+微粉炭( $d=28.61\mu\text{m}$ )	299.15
c12	9.471399	O2(45.58%)+N2(54.38%)+H2O(0.04%)	413.14
c21	18.83101	O2(10.54%)+N2(34.9%)+CO2(54.54%)+ H2O(0.02%)+微粉炭( $d=28.61\mu\text{m}$ )	299.15
c22	9.471399	O2(45.58%)+N2(54.38%)+H2O(0.04%)	413.14
a11	12.07626248	CO2+微粉炭( $d=17.04\mu\text{m}$ )	292.15
a12	9.471399	O2(45.58%)+N2(54.38%)+H2O(0.04%)	413.14
a21	12.07626248	CO2+微粉炭( $d=17.04\mu\text{m}$ )	295.15
a22	9.471399	O2(45.58%)+N2(54.38%)+H2O(0.04%)	413.14
r1	14.80662572	CO2+微粉炭( $d=28.61\mu\text{m}$ )	299.15
r2	14.80662572	CO2+微粉炭( $d=28.61\mu\text{m}$ )	299.15
bottom2	0	0	300.0
流出境界			
名称	出口压力(Pa)	出口温度(K)	
outflow	$2.0 \times 10^6$	306.05	
壁面境界			
名称	速度条件	温度条件	
bwall	free slip	Transfer 条件、 $T_w=308\text{K}$ 、 $h_{tc}=10.0$	
bottom	Log 則	Transfer 条件、 $T_w=308\text{K}$ 、 $h_{tc}=10.0$	
cwall	Log 則	Transfer 条件、 $T_w=308\text{K}$ 、 $h_{tc}=10.0$	
throat	Log 則	Transfer 条件、 $T_w=308\text{K}$ 、 $h_{tc}=10.0$	
rwall	Log 則	Transfer 条件、 $T_w=308\text{K}$ 、 $h_{tc}=10.0$	
sgc	Log 則	Transfer 条件、 $T_w=308\text{K}$ 、 $h_{tc}=10.0$	
slagtap	Log 則	Transfer 条件、 $T_w=308\text{K}$ 、 $h_{tc}=10.0$	

Table4.2.1-11. Cooling pipe specification

番号	部品名称	配管径 (mm)	流路長 (mm)	流量	冷媒
①	リダクタ下段テストパネル	φ48.6	2979.218	1,100 l/h	水
②	スロート部冷却コイル	φ15.3	3909.041	3,000 l/h	水
③	コンバスタ冷却コイル(A 系統)	φ27.2 (20A)	4708.164	3,000 l/h	水
	(B 系統)		4739.958		
	(C 系統)		4682.979		
	(D 系統)		4711.397		
④	スラグタップ冷却コイル	φ11	3831.471	2MPa 45kg/h	蒸気

さらに、上述の双方向連成燃焼解析によって得られた 250000~260000step における中心軸上温度分布及び化学種分布を Figure4.2.1-31~35 に、出口での化学種組成を Table4.2.1-12 に示す。250000~260000step における温度・化学種の時間変動はごく僅かであることが確認され、初期状態から十分な時間が経過し定常状態に到達するまでの解析が正常に実行されたことが示された。

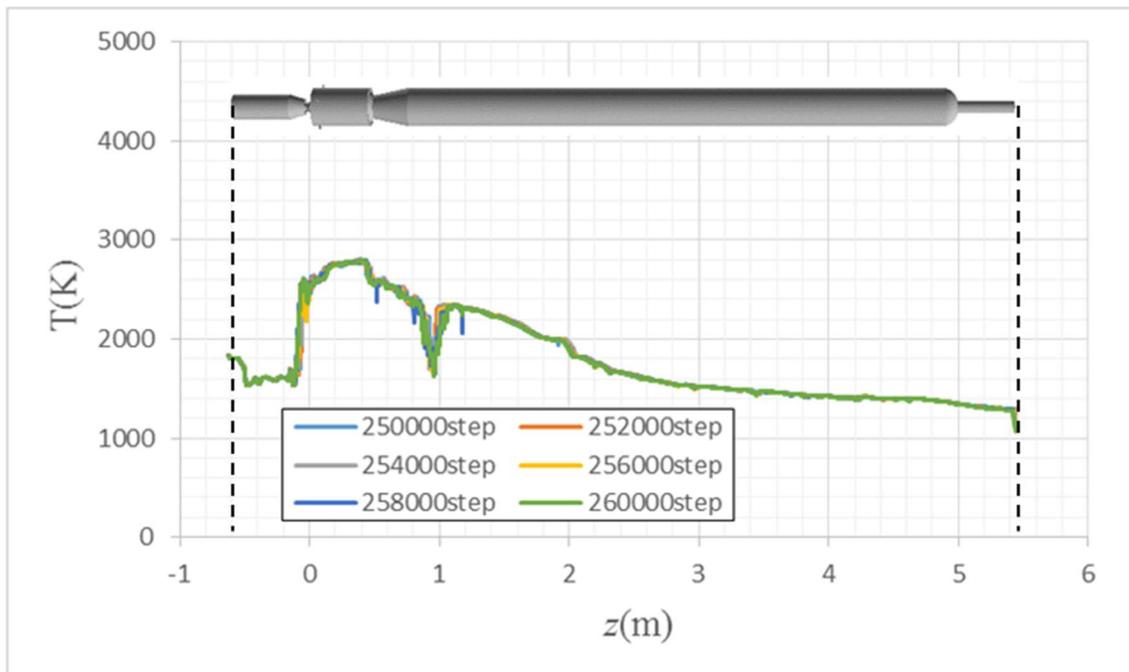


Figure4.2.1-31. Temperature distribution on the central axis in 250000-260000 step

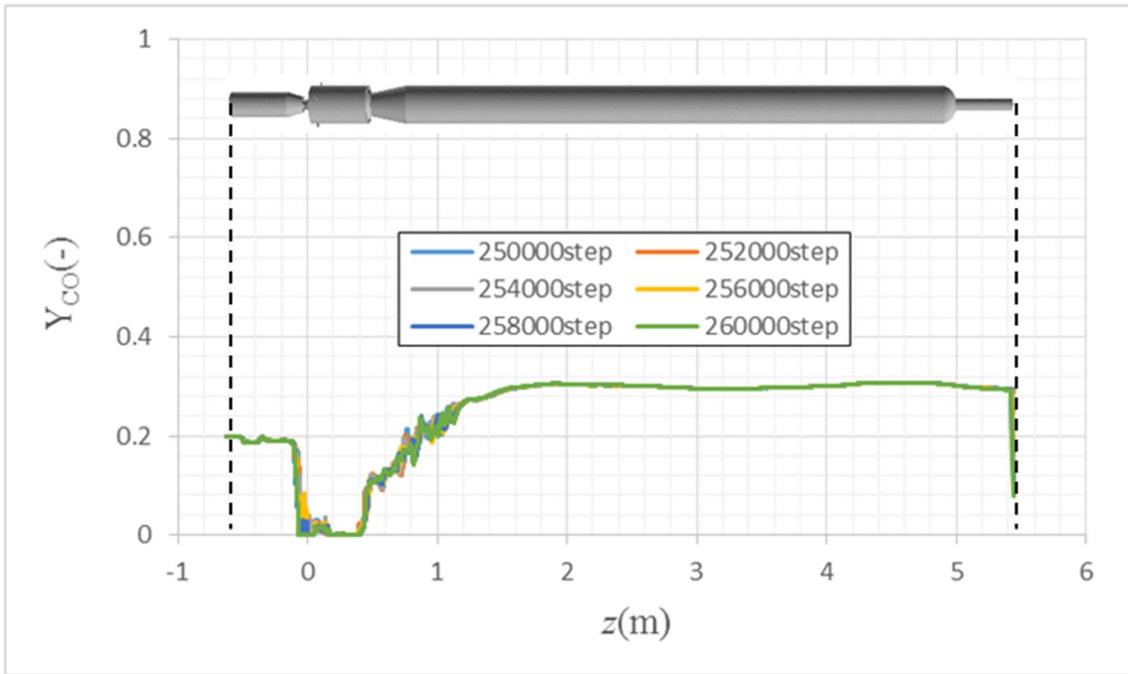


Figure4.2.1-32. CO distribution on the central axis in 250000-260000 step

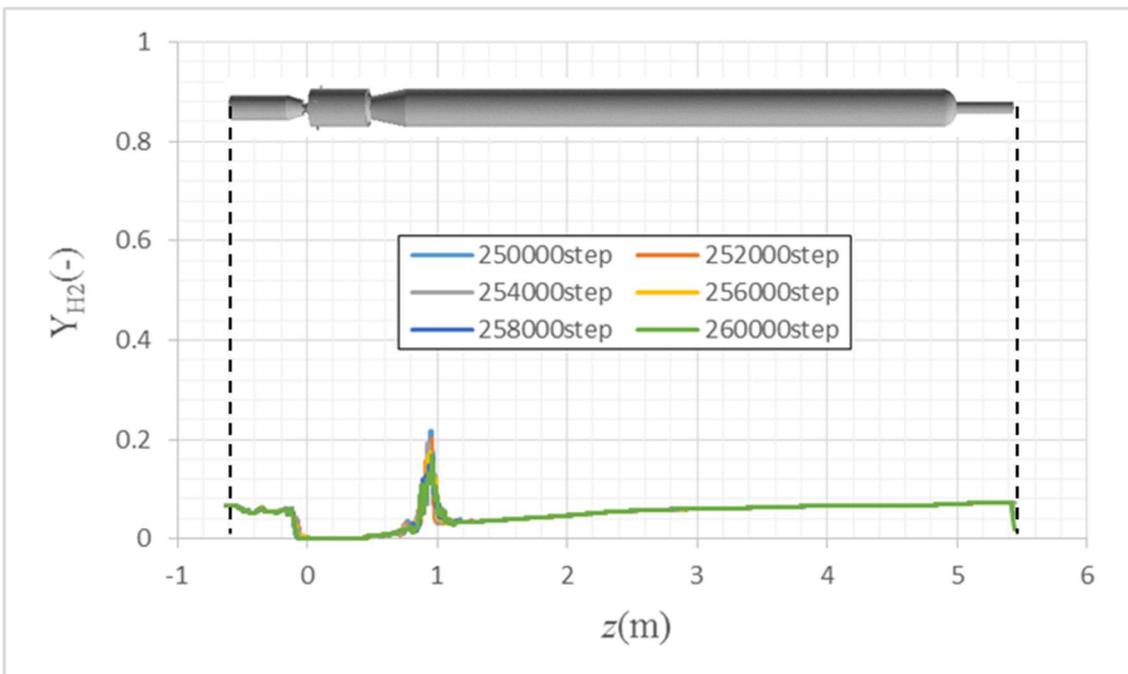


Figure4.2.1-33. H2 distribution on the central axis in 250000-260000 step

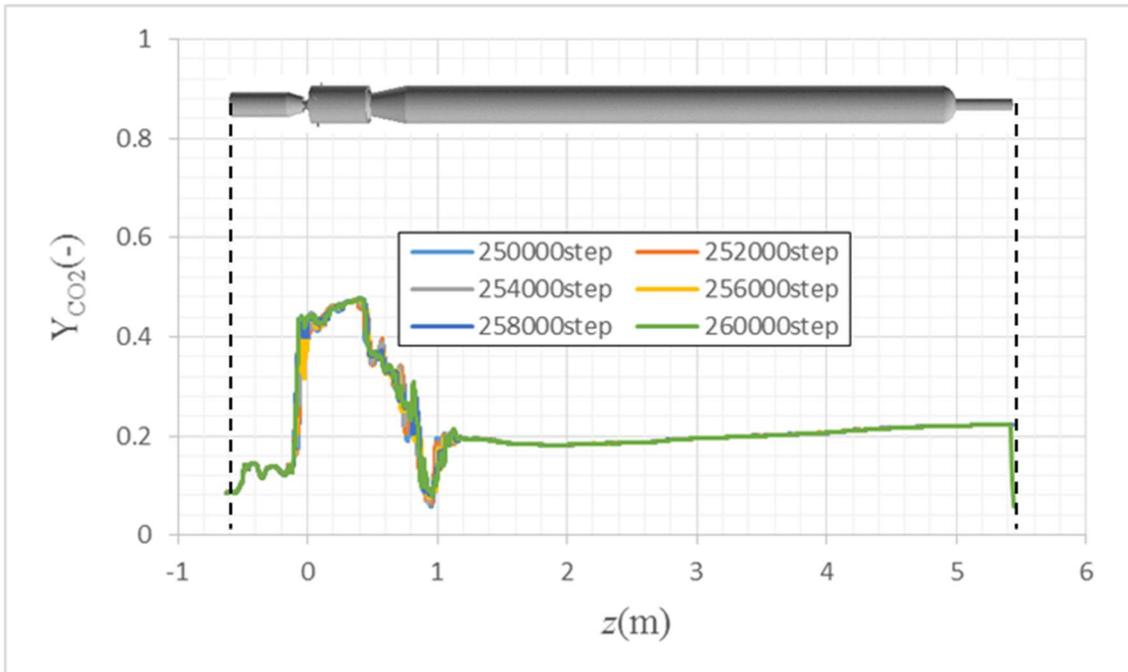


Figure4.2.1-34. CO<sub>2</sub> distribution on the central axis in 250000-260000 step

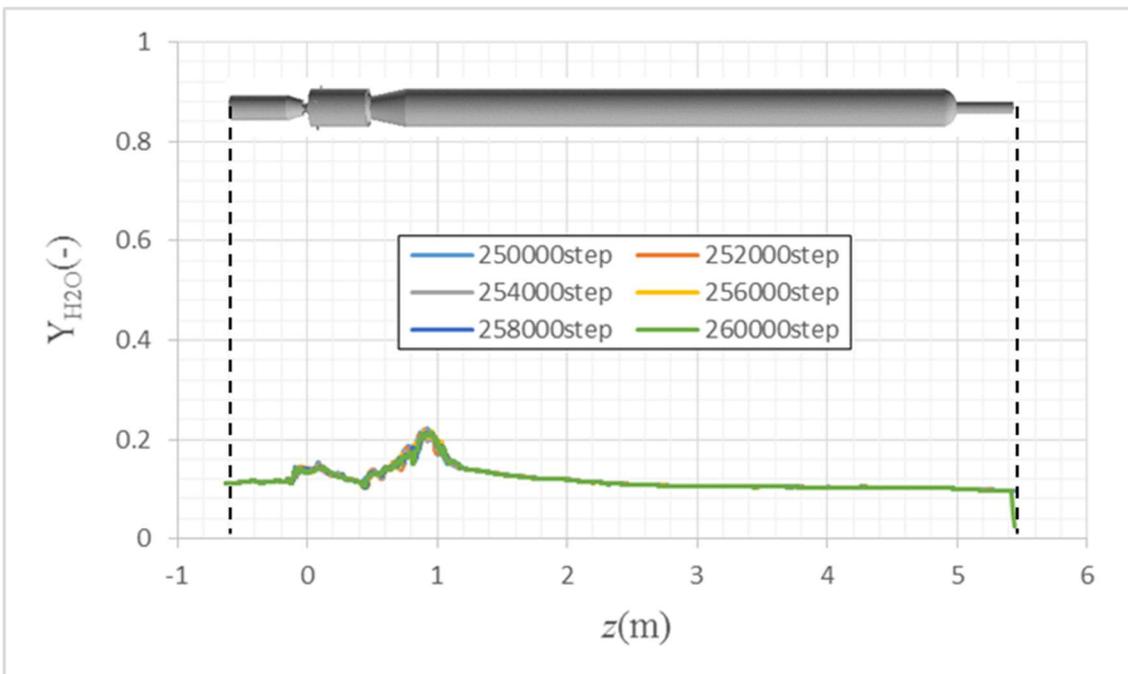


Figure4.2.1-35. H<sub>2</sub>O distribution on the central axis in 250000-260000 step

Table4.2.1-12. Gas composition at the outlet in 250000-2600000 steps (vol%)

	250000step	252000step	254000step	256000step	258000step	260000step
H2	7.30558	7.30945	7.31329	7.31709	7.3209	7.32457
CO	29.4422	29.4382	29.434	29.4298	29.4254	29.4208
CO2	22.3096	22.3116	22.3134	22.3152	22.3166	22.3171
H2O	9.65752	9.65367	9.64984	9.64603	9.64221	9.63851
CH4	6.74E-23	6.09E-23	5.29E-23	4.72E-23	4.53E-23	4.32E-23
N2	31.2841	31.2862	31.2885	31.2909	31.294	31.2981

## (5-1-2-2) 実験結果との比較検証

電中研提供の実験結果を Table4.2.1-13 に、実験結果と双方向連成解析結果、および参考解析となる流体単独の解析結果との比較を Figure4.2.1-37、38 及び Table4.2.1-14、15 に示す。中心軸上温度分布は FFR 単体解析の方が実験値と近い値となる一方で、出口ガス組成は連成解析の方が実験値と近い値となった。また、両ケースとも温度及び CO、H<sub>2</sub> が実験値より過大となる傾向が見られた。なお、ここで用いた FFR-Comb は、4-2-1 の項の「(4) ガス化炉のシミュレーション技術」で述べたチューニング前のコードであり、チューニング後のコードを用いることにより、解の改善が期待される。

Table4.2.1-13. Results of the CRIEPI reactor experiment

		H22NM2R3T2
ガス温度		
コンバスタ温度	K	1814.5
コンバスタ出口温度	K	1640.62
リダクタ熱電対 1	K	1404.15
リダクタ熱電対 2	K	1357.96
リダクタ熱電対 3	K	1275.43
リダクタ熱電対 4	K	1197.56
出口ガス組成		
H2	vol%	4.650
CO	vol%	19.003
CO2	vol%	27.483
H2O	vol%	11.388
CH4	vol%	0.633
N2	vol%	36.323
燃料反応率		
炉内炭素転換率	%	70.62
コンバスタ炭素転換率	%	79.39
リダクタ炭素転換率	%	63.35
生成ガス高位発熱量 wet	kcal/Nm3	779.32
冷ガス効率	%	47.83

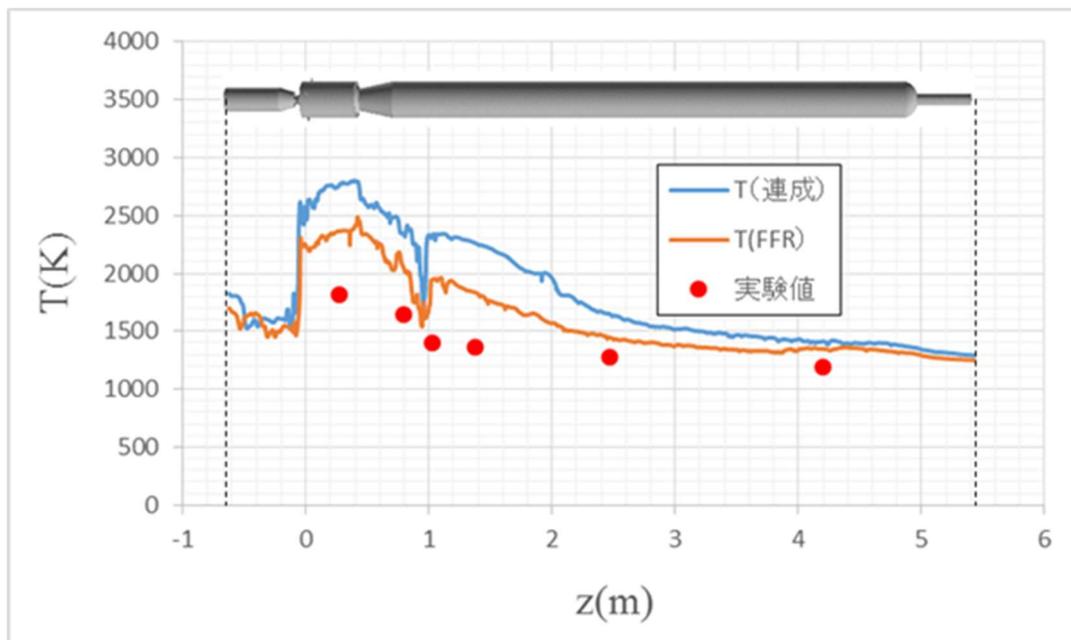


Figure4.2.1-37. Temperature distribution on the central axis in 250000 step

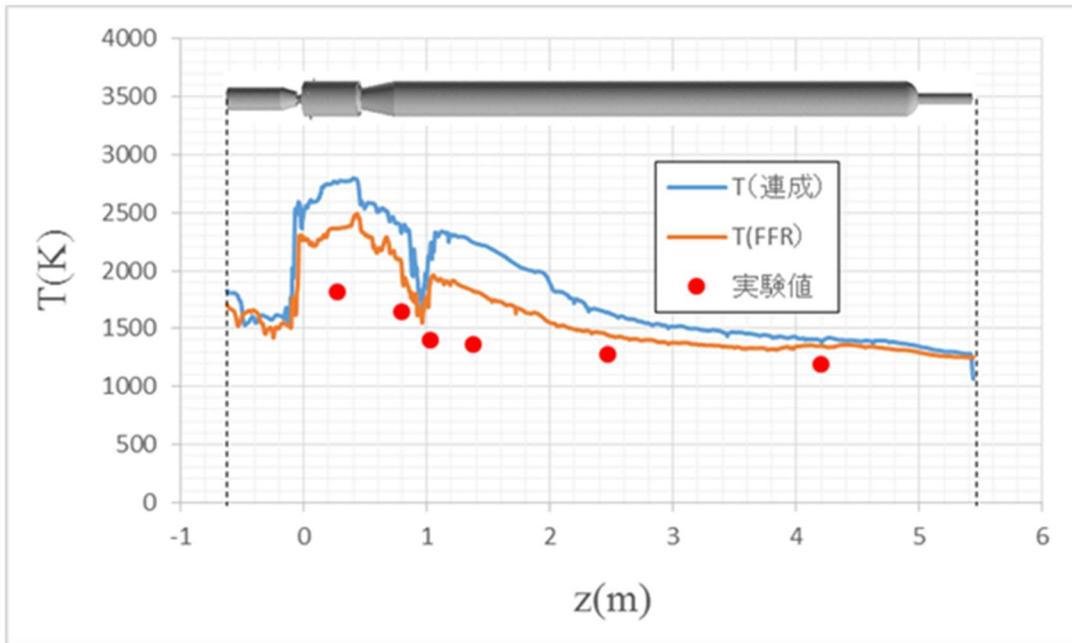


Figure4.2.1-38. Temperature distribution on the central axis in 260000 step

Table4.2.1-14. Comparison of experimental and analytical results: Gas composition at the outlet in 250000 steps (vol%)

	実験結果	解析結果(連成)	解析結果(FFR 単体)
H2	4.65	7.30558	8.66554
CO	19.003	29.4422	36.2898
CO2	27.483	22.3096	27.1354
H2O	11.388	9.65752	10.3764
CH4	0.633	6.74E-23	6.62E-23
N2	36.323	31.2841	17.5323

Table4.2.1-15. Comparison of experimental and analytical results: Gas composition at the outlet in 260000 steps (vol%)

	実験結果	解析結果(連成)	解析結果(FFR 単体)
H2	4.65	7.32457	8.65281
CO	19.003	29.4208	36.3807
CO2	27.483	22.3171	27.2075
H2O	11.388	9.63851	10.3751
CH4	0.633	4.32E-23	6.98E-23
N2	36.323	31.2981	17.3834

(5-2) ベンチスケール石炭ガス化炉を対象とした解析モデル構築と試計算

ベンチスケール石炭ガス化炉を対象とした解析モデル構築と試計算を実施し、実証計算に向けた準備を行った。ベンチスケール石炭ガス化炉を対象とした解析モデル構築においては、燃焼部分の解析モデルを用いて FFR-Comb による燃焼試計算を行い、正常に解析できることを確認した。また、冷却管を含む炉容器部の解析モデルについては、ベンチスケール石炭ガス化炉の開発担当者とも繰り返し打合わせを行い、次ステップの双方向連成解析に向けて、燃焼部モデルとの連成界面部分のメッシュ接続が可能となるように、解析モデルを構築した。

(5-2-1) ベンチスケール石炭ガス化炉の解析モデル構築

(5-2-1-1) メッシュ構築の概要

ベンチスケール石炭ガス化炉の CAD モデルに対してメッシュモデルの作成を行った。本メッシュモデルでは、石炭ガス化炉の構造物全体をモデル化対象としているが、冷却システムについては一部の近似的なモデル化を実施した。モデル化範囲については Table4.2.1-16 に示す。冷却システムのモデル化について、スラグホール部は形状変更を行わず冷却管形状のままメッシュモデルを作成し、それ以外 (Table4.2.1-16 における△) の部品は冷却システムを冷却管形状から構造簡略化された境界条件モデルに変更した。

Table4.2.1-16. Target of modeling

	部品名称	冷却管	冷却管のモデル化
1	リダクタ出口	あり	△ (構造簡略化)
2	リダクタ上部	あり	× (モデル化なし)
3	リダクタ中部	あり	× (モデル化なし)
4	リダクタ下部	あり	× (モデル化なし)
5	コンバスタ	あり	△ (構造簡略化)
6	ディフューザ	あり	△ (構造簡略化)
7	スラグホール	あり	○
8	軽油燃焼室	あり	× (モデル化なし)

○：メッシュモデルとして作成

△：構造簡略化を行いモデル化

×：モデル化は行わない

(5-2-1-2) メッシュのモデル化手法

メッシュモデルの作成手順としては、CAD モデルより表面パッチを生成し、生成された表面パッチを使用してメッシュモデルを生成した。メッシュをモデル化するにあたり、部品は境界条件の設定および可視化を考慮し、4 分割 (90° 周期) とした。メッシュ生成においては、冷却管構造をそのままモデル化するスラグホール部周辺における冷却管同士の間隔やモデル規模を考慮し、局所的な粗密制御を行った。生成されたメッシュモデルの規模を Table4.2.1-17 に示す。類似形状 (ラボスケール石炭

ガス化炉)におけるモデル規模と比較し、構造・熱伝導共に3倍程度の自由度となっている。

Table4.2.1-17. Mesh scale and degrees of freedom

項目	石炭ガス化炉	電中研炉
部品数	124	32
節点間隔	5mm	
要素数	406,317,033	155,999,061
節点数	67,112,837	25,510,852
自由度数(熱伝導解析)	67,112,837	25,510,852
自由度数(構造解析)	201,338,511	76,532,556

(5-2-1-3) 冷却管を含む炉容器部の構築

冷却システムのモデル化において、構造簡略化を行うことができないスラグホール部は、冷却管形状を変更せずにメッシュモデルを作成したが、構造簡略化が可能なディフューザやコンバスタ、リダクタ出口に設けられた冷却管では Figure4.2.1-39 に示す構造簡略化を行った。

従来の冷却システム(冷却管モデル)では、冷却管(コイル形状)に冷媒の温度や熱流束を設定していたが、冷却管の構造をコイル形状から円筒形状へ変更することでモデルの規模や境界条件の設定を簡素化した。構造簡素化モデル(以後、境界条件モデル)では、冷却管が設けられている耐火材に冷却管相当のモデルを挿入している。この冷却管相当のモデルは、境界条件が設定できるように冷却管の中心を分割面として厚み方向に2層分割されており、分割面に境界条件として熱流束や温度を設定することができる。ディフューザやコンバスタ部のような複数系統の冷却管がある場合には、複数の系統が設定できるように分割を行い、系統が異なる部分に対しては、影響を及ぼさないようなモデル化を行った。

例として、Figure4.2.1-40 及び Figure4.2.1-41 にコンバスタ部の冷却管と境界条件モデルを示す。コンバスタでは4系統の冷却管(①~④)が設けられている。

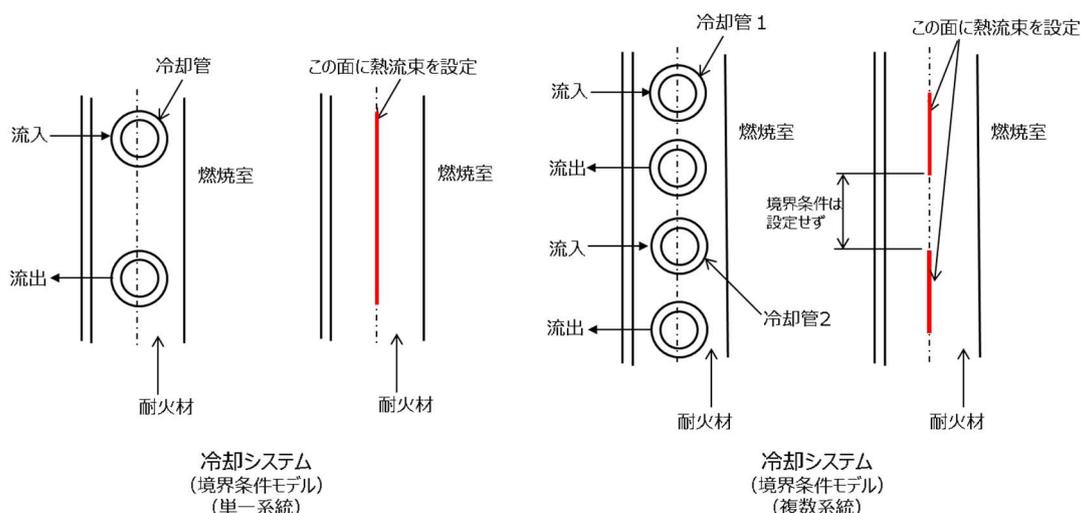


Figure4.2.1-39. Boundary condition (simplified cooling tube shape model)

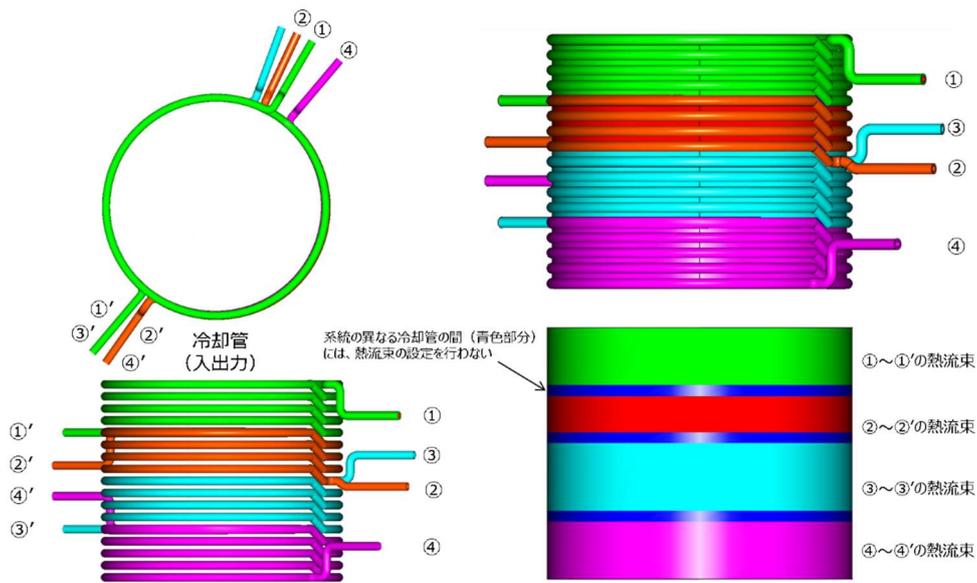


Figure4.2.1-40. Combustor section: Cooling tube model

※ 図中の①～①' は、冷媒の流入出方向ではなく系統を示す。

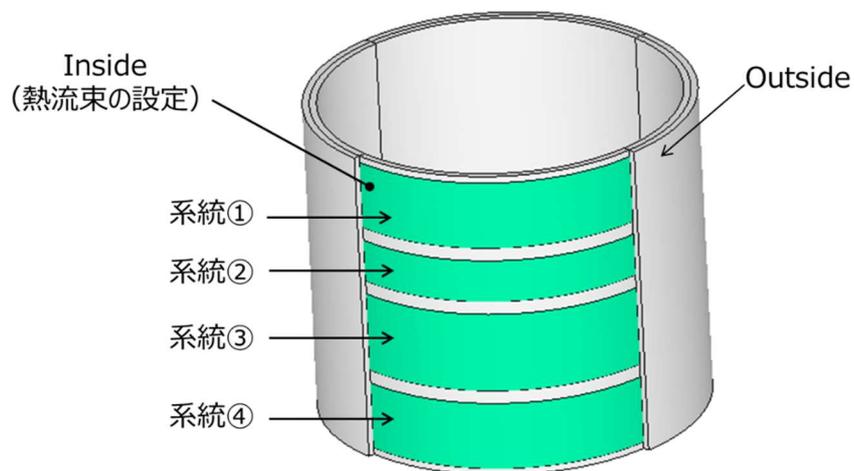


Figure4.2.1-41. Combustor section: boundary model

(5-2-2) ベンチスケール石炭ガス化炉の試算

(5-2-2-1) 解析条件

境界条件として、炉内温度と冷却システム及び材料物性の設定を行った。材料物性値を Table4.2.1-18 に示す。また燃焼室及び冷却システムに対する温度境界条件を Table4.2.1-19 及び Figure4.2.1-42 に示す。ただし、スラグホール部冷却管と燃焼室は均一の温度設定とした。

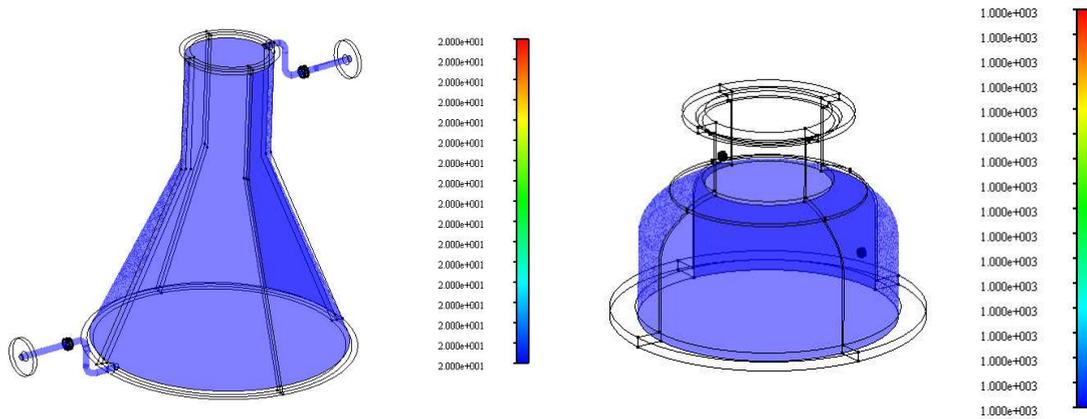
Table4.2.1-18. Material property value

物性値	鋼材	TOCAST-13L	HE0152C
密度 (t/mm <sup>3</sup> )	7.86×10 <sup>-9</sup>	1.375×10 <sup>-9</sup>	2.65×10 <sup>-9</sup>
比熱 (J/kg/K)	4.76×10 <sup>8</sup>	1.6736×10 <sup>9</sup>	8.368×10 <sup>8</sup>
熱伝導率 (mW/K/mm)	58.5	4.42×10 <sup>-1</sup>	1.5

※TOCAST-13L 及び HE0152C は、ダミー値を使用（実際の物性値とは異なる）

Table4.2.1-19. Temperature configuration

設定箇所	系統	設定温度 (°C)
リダクタ出口冷却管	/	20.0
燃焼室	/	1,000
ディフューザ	①	30.0
	②	35.0
	③	40.0
コンバスタ	①	45.0
	②	50.0
	③	55.0
	④	66.0
スラグホール冷却管	①	20.0
	②	
	③	

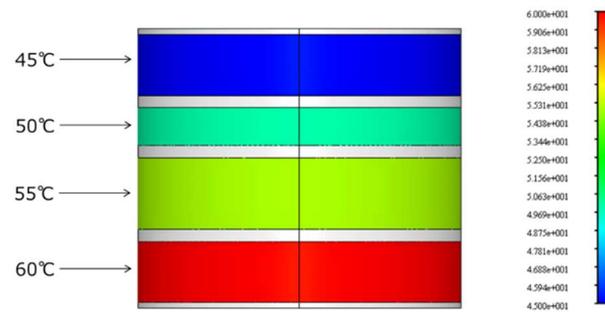


リダクタ出口冷却管

リダクタ出口



ディフューザ部



コンバスタ部

Figure4.2.1-42. Temperature configuration of each section

(5-2-2-2) 試解析の実施

メッシュ及び冷却システムの簡略化が正しく機能するかを確認するため、モデルの一部を用いて定常熱伝導解析を実施した。ベンチスケール石炭ガス化炉モデルに対する試解析は、ディフューザ、コンバスタ、スラグホールに関連する耐火材・冷却システムを対象とし、商用版の ADVENTURECluster を用いた。スラグホール周辺部は、冷却管や耐火材等の形状が複雑であり、冷却システムにおいても複数の冷温度設定を行ったが、解析は問題なく完了し設定された温度設定が反映されていることを確認した (Figure4.2.1-43、44)。ディフューザ及びコンバスタ部では、設定した温度が確認され、冷却システムとして機能することが確認できた (Figure4.2.1-43、44)。ただし、この解析はメッシュ及び冷却システムの評価目的として実施したものであり、材料物性や温度設定は実機と異なる。

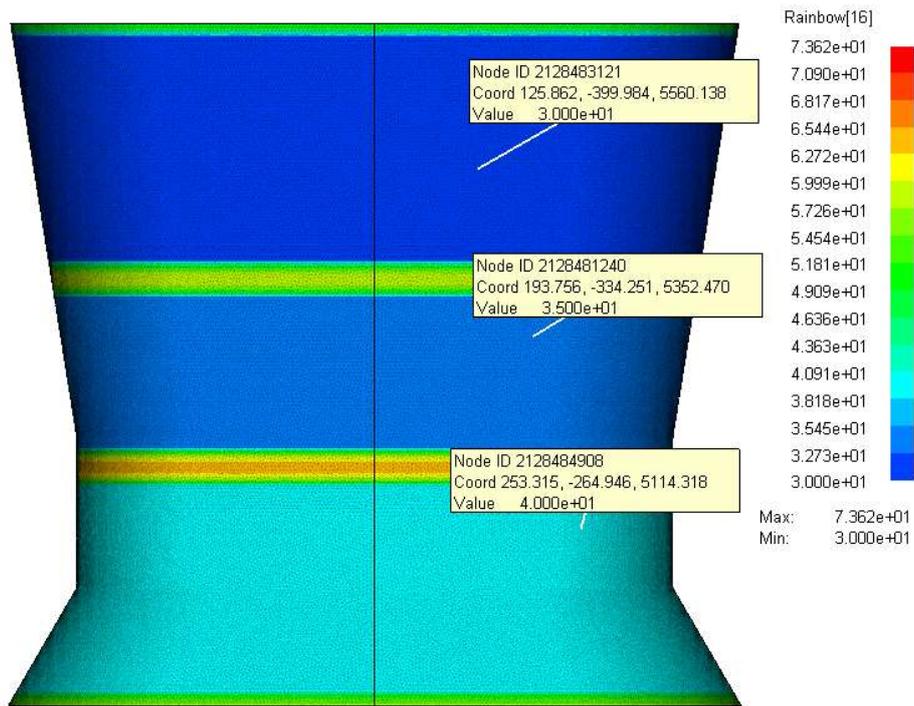


Figure4.2.1-43. Temperature distribution (diffuser: cooling system)

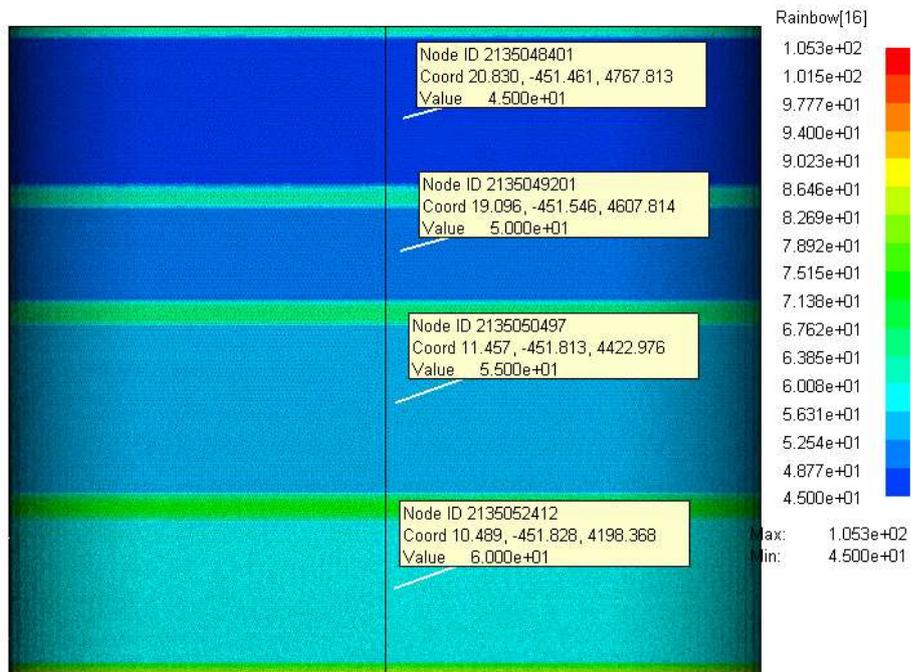


Figure4.2.1-44. Temperature distribution (combustor: cooling system)

#### 4-2-2. (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

<再委託機関：みずほ情報総研株式会社、国立大学法人京都大学、学校法人立教学院立教大学、国立研究開発法人物質・材料研究機構>

##### (1) 研究成果の概要

本サブ課題では、将来のクリーンで高効率なエネルギー変換装置として期待されている固体高分子形燃料電池および固体酸化物形燃料電池を対象として、大規模な気液二相流解析を行うことで革新的設計プロセスを構築するとともに、電極の構造形成から経時変化、材料ナノ構造の詳細解析に関するシミュレーション技術を開発することを目的としている。

平成 31 年度（令和元年度）は、PEFC 内の大規模二相流解析、SOFC 電極要素特性解析、PEFC 電極要素特性解析、PEFC 膜電極接合体（MEA）のナノ構造・機能解析の各サブ項目について、後述するように大規模並列計算コードの高度化を実施し、各現象の再現を行った。また、他の国家プロジェクトや産業界との連携、および実用化に向けた研究開発動向に関する検討を行った。

##### (2) サブ課題 B の総合的推進

各サブ項目において各機関が実施した内容について情報共有を図ることで、燃料電池設計プロセスの高度化に資する気液二相流、電極、MEA の超大規模解析を実現する上での課題を抽出し、その解決に向けた方策の検討を行った。個々のシミュレーション間を共同で定義した入出力パラメータで直列的にカップリングさせ、燃料電池の材料から、電極、セル、スタックまでの一連の部品や製品の性能を評価した。

##### (3) 大規模二相流解析による実機 PEFC スタックの設計プロセスの構築

大規模二相流解析による実機 PEFC スタックの設計プロセスの構築に向けた検討として、以下の項目を実施した。

まず、並列気液二相流コードのショートスタック解析への適用では、昨年度までに開発した大規模気液二相流解析コード（コード名：PEFC-TPF）を用いて、Figure 4.2.2-1 に示すとおり、業界標準 MEA（Membrane Electrode Assembly：膜電極接合体）を用いた 20 セルショートスタックの気液二相流解析（出力電流密度  $3.0 \text{ A/cm}^2$  一定条件、およびアイドリング時への負荷変動条件）を実施した。なお、発電による生成水量分布は、全体性能シミュレーション計算によるスタックの電流密度・水蒸気活量（飽和水蒸気分圧を基準とした水蒸気分圧の規格化量）の分布から算出した。具体的には、水蒸気活量が 1.0 以上の領域で凝縮水が発生し、電流密度に比例して増加するフラックスとして付与した。その結果、Figure 4.2.2-2 に示すように、ショートスタックのエンドセル（両端セル）においては放熱の影響で生成水量が増加し、セルへの空気流入量が平均流量に対し 5%程度低下した。また、アイドリングへの負荷変動時（ $3.0 \text{ A/cm}^2$  から  $0.1 \text{ A/cm}^2$  相当の空気流量に 0.1 秒で切り替え）では、エア流量の減少によって流路内の液水滞留量が増加し、セル間のエア流量分布の不均一性が一定発電時と比べて増加し、燃料電池の性能が低下する要因の一つとなることが分かった。さらに、非公開データであるが、自動車用実機ショートスタックの気液二相流解析によるセル間流量分配と全体性能シミュレーションの連携により、セル間電圧の実測データを計算誤差 10%以内の精度で再現した。以上の成果により、大

規模気液二相流解析コード PEFC-TPF を用いることで自動車用燃料電池の排水性向上のための設計条件の検討が可能となった。

続いて、セルレベルの二相流 DB の構築と発電性能予測への適用では、全体性能シミュレーションに必要となる気液二相流パラメータを大規模二相流解析から導出し、評価セルによる性能検証を実施した。まず、業界標準の評価セルである JARI セルを対象として、流路内の圧損増倍、気液速度比を単位区間毎で統計処理することでみずほ情報総研が自社開発した全体性能シミュレーションの Coarse Grid モデルと連結できる流路二相流マクロパラメータ（気相と液相の相対浸透率）に加え、流路と GDL（Gas Diffusion Layer：ガス拡散層）の界面における液水による被覆率の DB を構築した。Figure 4.2.2-3(a)に、JARI セル流路（カーボンセパレータ：静的接触角  $95^\circ$ ）のエアストイキ比（St）（反応に理論上必要な空気流量に対する比率）の違いによる流路内液水分布の結果、(b)にエアストイキ比および流路の接触角違いによる相対浸透率と被覆率の結果を示す。ここで、図中の  $\alpha$  は流路単位体積当たりの液水の体積率を表す。エアストイキ比が高い条件では小さい液滴が分散して移動するが、エアストイキ比が低下する（流路内の空気流量が低下する）と液滴どうしが合体してプラグを形成し、部分的に流路を閉塞する現象が発生することがわかる。また、JARI セル流路（カーボンセパレータ：静的接触角  $95^\circ$ ）では液水が体積率で約 15%まで滞留して界面の被覆率も増加する一方、流路壁面が親水性の場合は液水が溜まりにくく界面の被覆率も小さい。これは、親水化によって液水が GDL 界面から吸い上げられる効果によるものと考えられる。

加えて、市販品とほぼ同じ基材構造・気孔率・静的接触角の GDL を対象として、液水による有効ガス拡散係数の低下率を計算した。Figure 4.2.2-4 から分かるように、液相体積率  $S < 0.2$  の領域では屈曲度  $\tau = 2.4$ 、 $S > 0.3$  の領域では  $\tau = 3.5$  の相関となった。これは、液水量の増加に伴って径が大きい空孔から閉塞し、ガスの拡散経路が長くなるためである。この結果と流路二相流パラメータを全体性能シミュレーションへ組み込み、JARI セルの性能解析を実施した。その結果、Figure 4.2.2-5 に示すように、エアストイキ比の低下に伴う圧力損失、限界電流密度および分割電極による電流密度分布を計算誤差 10%以下の精度で再現した。

さらに、PEFC 電極要素特性解析を用いた過電圧分離の計算結果から、触媒層の電極メゾスケール構造に起因するプロトン輸送抵抗（アイオノマー+電解質膜）および酸素輸送抵抗（空孔+アイオノマーへの溶解+アイオノマー中の拡散）および反応活性パラメータを算出し、全体性能シミュレーションの過電圧モデルに組み込み連成解析の手法を構築した。Figure 4.2.2-6 に、酸素分率 21%、相対加湿 100%、温度  $80^\circ\text{C}$ におけるカソード電極要素特性解析の結果を用いたときの JARI セルの性能解析結果を示す。空気流量（エアストイキ比）の低下に対する限界電流の発生を定性的に再現できており、均一場を想定したエアストイキ比 10 の運転条件では電極要素特性とほぼ一致する結果となる。高電流密度領域で限界電流が発生するのは液水の影響と考えられる。以上の成果により、電極要素特性解析と気液二相流解析を連結した PEFC 全体性能のシミュレーションが可能となった。

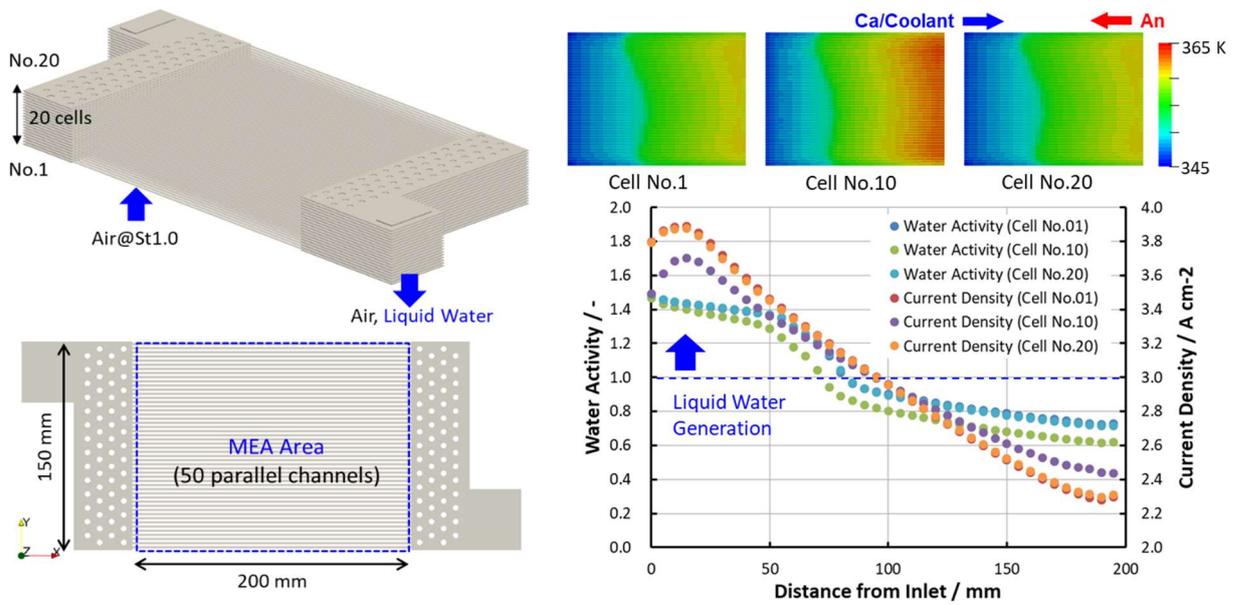


Figure 4.2.2-1. Structure and internal distributions of a short stack (20 cells).

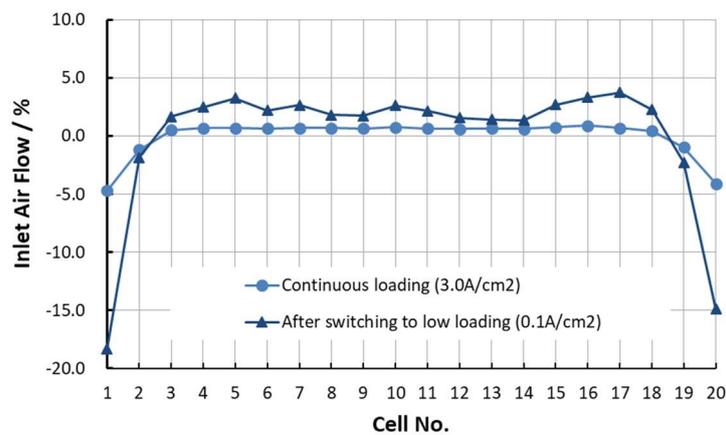
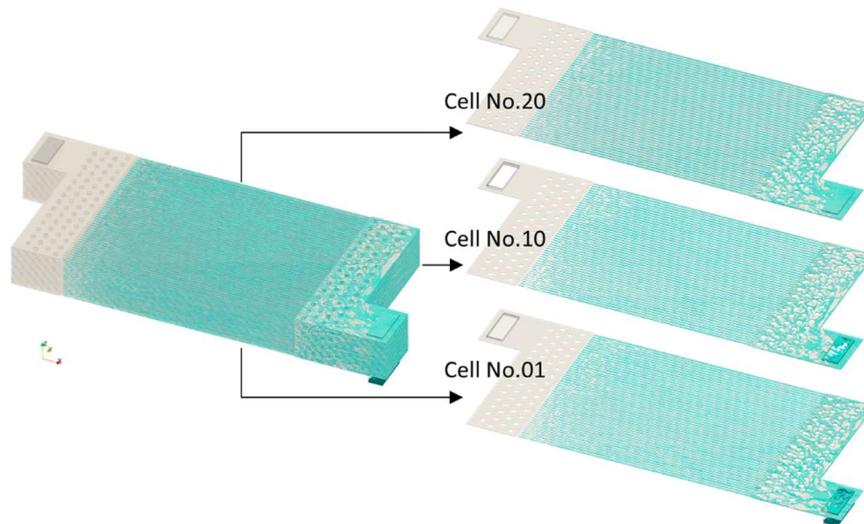
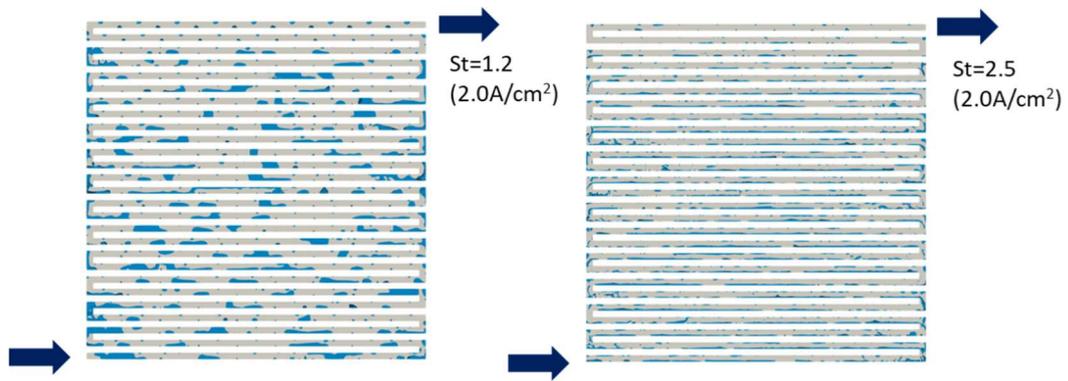
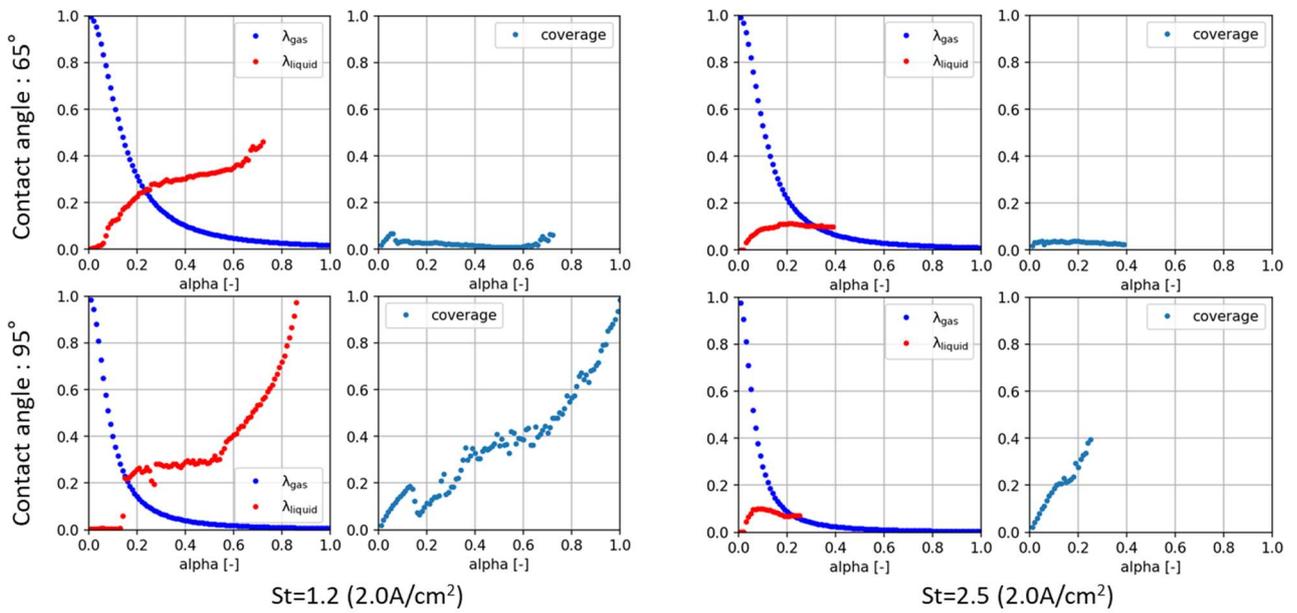


Figure 4.2.2-2. Two-phase flow simulation and distribution of flow rate into each cell of a short stack.



(a) Liquid water distributions in JARI cell for different air flow rates.



(b) Relative permeability in flow channel and coverage on the channel/GDL surface.

Figure 4.2.2-3. Macroscopic two-phase flow parameters for different air flow rates and wettabilities of channel wall.

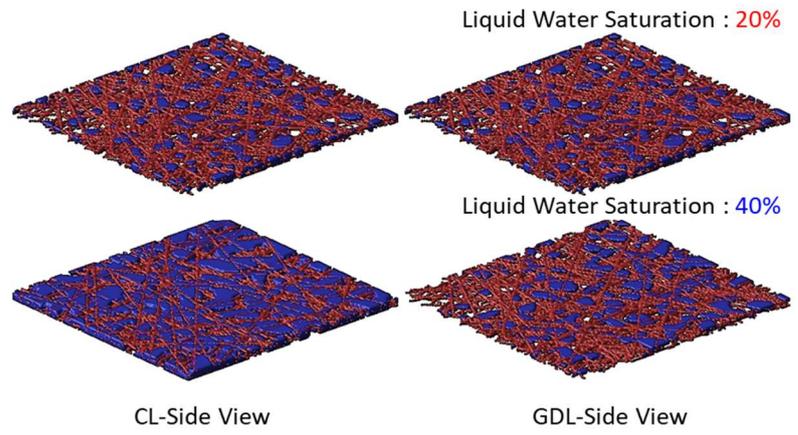
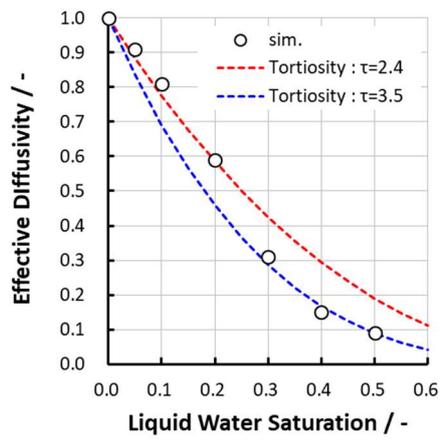
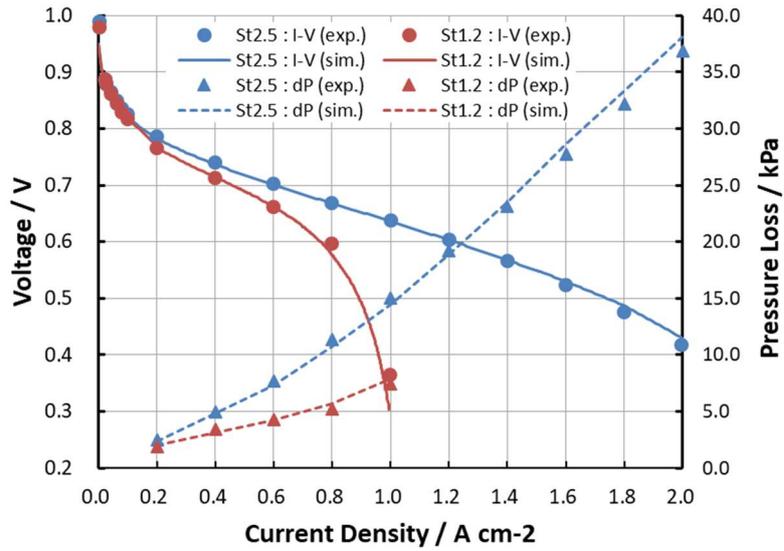
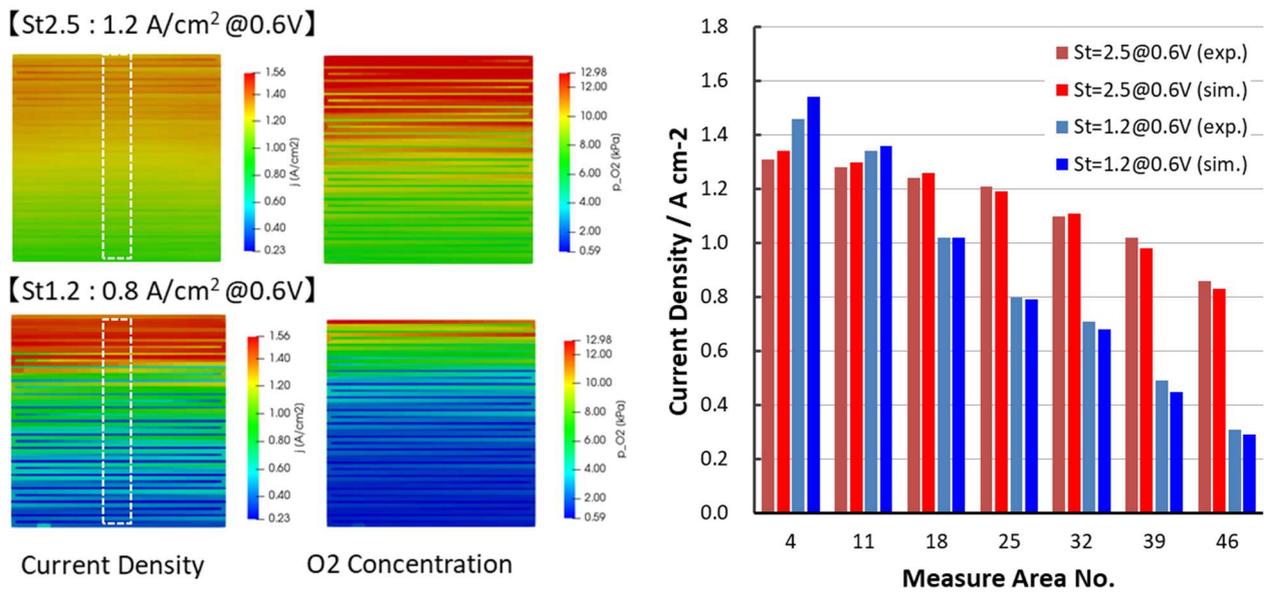


Figure 4.2.2-4. Effective gas diffusivity of gas diffusion layer.



(a) I-V performance and pressure loss



(b) Distributions of current density using the current scan device.

Figure 4.2.2-5. Validation of PEFC model coupled with the macroscopic two-phase flow parameters with experimental data of JARI cell.

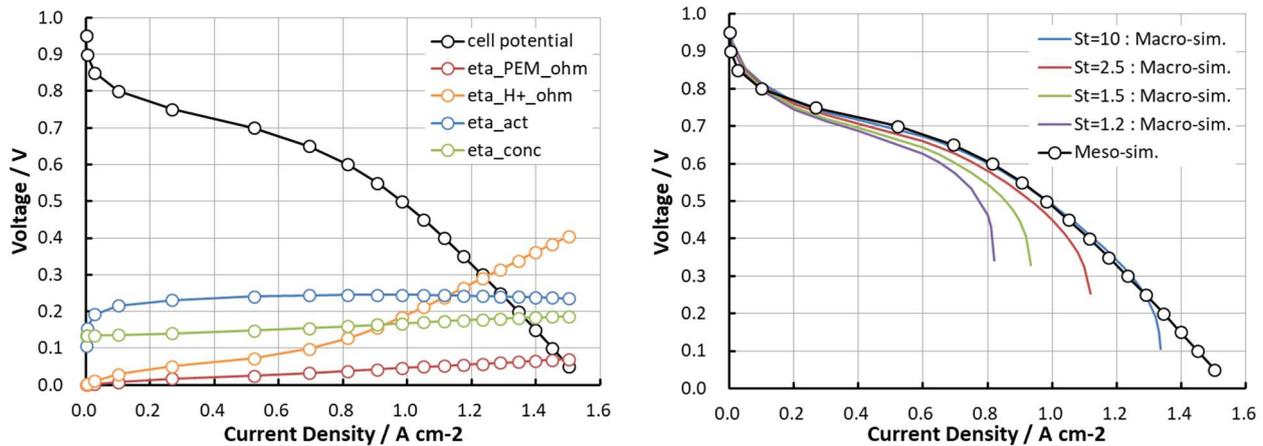


Figure 4.2.2-6. PEFC performance simulation by macro-meso scale coupling.

(Left: Various overvoltages by mesoscopic simulation, Right: JARI cell performance by macroscopic simulation)

#### (4) SOFC 電極要素特性解析

SOFC 燃料極における Ni 焼結による微細構造変化の予測を目的としたフェーズフィールド法に基づくシミュレーションプログラム（コード名：SOFC-PFM）の開発では、「富岳」上での実行性能の予測、ならびに、実行速度向上のためのチューニングを実施した。実行性能の予測には、理化学研究所が提供する「富岳」性能予測ツールと「富岳」理研シミュレータを用いた。また、チューニングにおいては、空間 3 重ループを融合、コンパイラの自動分割機能等の効果について調査した。その結果、Table 4.2.2-1 に示すように「京」1 ノードと「富岳」1CMG との比較において、約 6.8 倍(=20.8452/3.0316)の高速化が実現されることがわかった。また、厚み方向長さ約 23.6  $\mu\text{m}$  の実電極構造に対して、格子サイズ約 11.5 nm、総格子点数約 37 億点規模の格子を用いることで、アノード電極における Ni 相の焼結過程のシミュレーションを実施し、問題なく動作することを確認した。

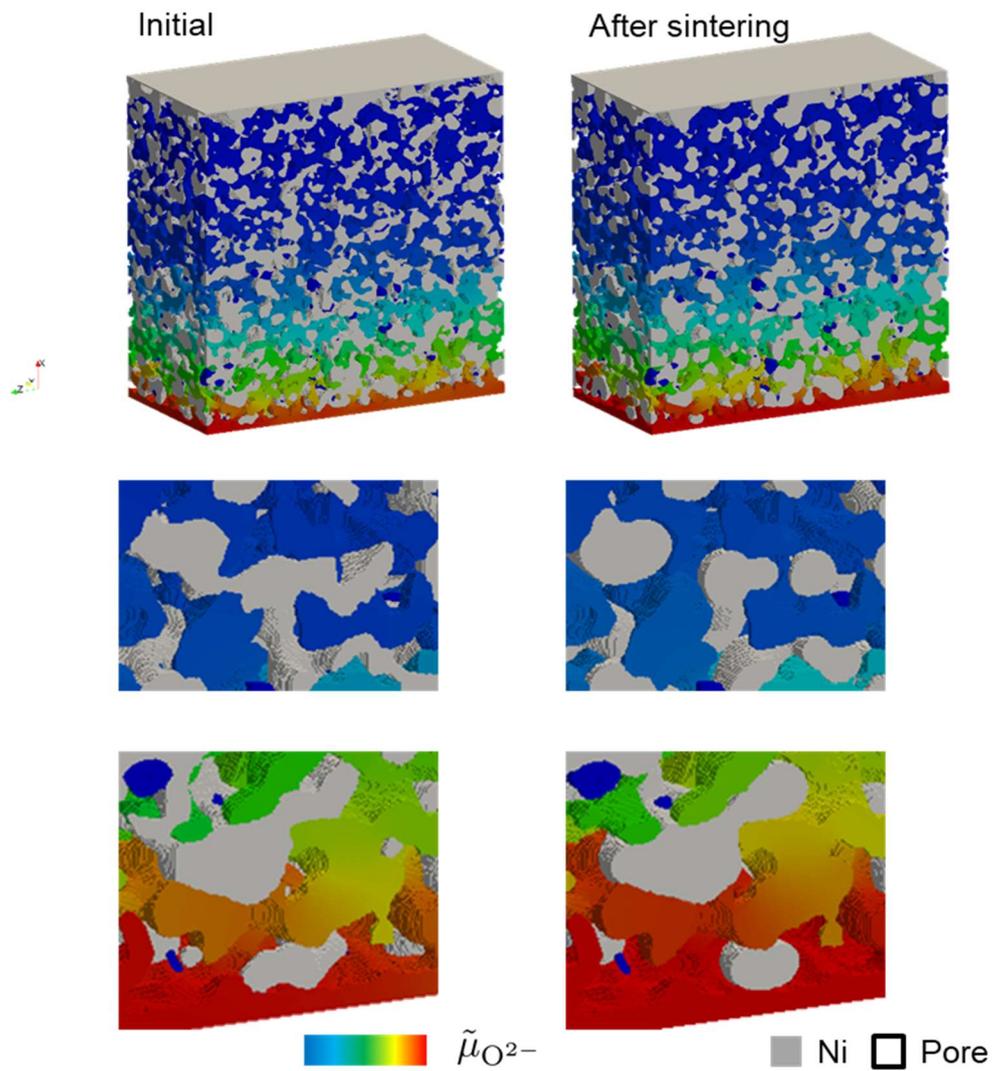
電極過電圧特性の予測を目的とした多孔体内ガス拡散-電気化学反応連成プログラム（コード名：SOFC-ECR）の開発では、上記の Ni 焼結シミュレーションで得られた大規模構造を対象として、過電圧解析を実施した。Figure 4.2.2-7 には、焼結前後における(a)電極構造、(b)断面平均イオン電流分布の比較を示す。電極構造の比較においては、焼結後の方が、Ni 相が全体的に丸みをおびていることがわかる。また、Ni 相が分断される箇所があることもわかる。イオン電流分布の比較においては、焼結後イオン電流が大きくなっていることから、電気化学反応が抑制されたことがわかる。これは、Ni 相の構造変化により、三相界面 (Triple Phase Boundary, 以下 TPB) 密度の減少、イオン伝導経路の分断等が生じ、その結果、反応活性が低下したためと考えられる。焼結前後の TPB 密度を比較したところ、約 88.5% (=2.09/2.36) まで低下していることがわかった。

電極構造の最適化を目的とした随伴解析プログラム（コード名：SOFC-OPT）の開発では、電解質—カソード間の界面形状を対象とした最適化コードを開発し、その妥当性を検証した。最適化における目的関数にはカソードにおける総反応電流を設定し、二相界面反応と三相界面反応の両者を考慮した。設計変数は電解質—カソード界面構造を表すレベルセット関数の空間的分布とした。開発したコードを、電解質—カソード間界面に付加した柱状構造の最適化に適用した。Figure 4.2.2-8(a)に結果の

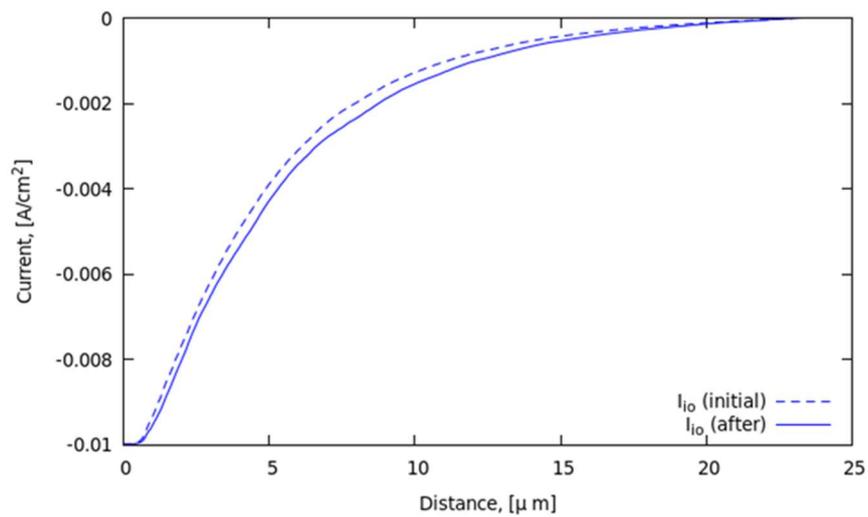
一例を示す。最適化が進むに従い、まず柱状構造が電解質から遠方方向に伸びることがわかる。また、柱状構造は、根元（電解質に接する部分）では電解質表面を覆うように成長し、皺のような構造を形成する一方で、先端ではいくつかの枝に分岐し、空間全体に広がるように成長することがわかる。また、Figure 4.2.2-8(b)に示す通り、目的関数である総反応電流の履歴より、最適化が正しく行われていることが確認できる。

Table 4.2.2-1. Elapse time in the major subroutines used in SOFC-PFM, measured on the K computer (real machine) and two software frameworks provided by RIKEN.

サブルーチン名	経過時間 [sec] (括弧内の数値は「京」の結果に対する相対値)		
	「京」	「富岳」 性能予測ツール	「富岳」 理研シミュレータ
pfm_add_squared	3.7590 (1)	1.0400 (0.27)	0.5700 (0.15)
pfm_calc_mu_c	0.4047 (1)	0.1015 (0.25)	0.1132 (0.27)
pfm_calc_mu_eta	9.2603 (1)	1.5904 (0.17)	1.3920 (0.15)
pfm_update_phi_ch	0.2484 (1)	0.0688 (0.27)	0.0604 (0.24)
pfm_update_phi_ac	6.7452 (1)	0.9680 (0.14)	0.8960 (0.13)
Total	20.8452 (1)	3.7687 (0.18)	3.0316 (0.14)



(a) Microstructure



(b) Current density

Figure 4.2.2-7. Comparison between before and after sintering of a Ni/YSZ/pore anode: (a) the microstructures and (b) the distributions of current density.

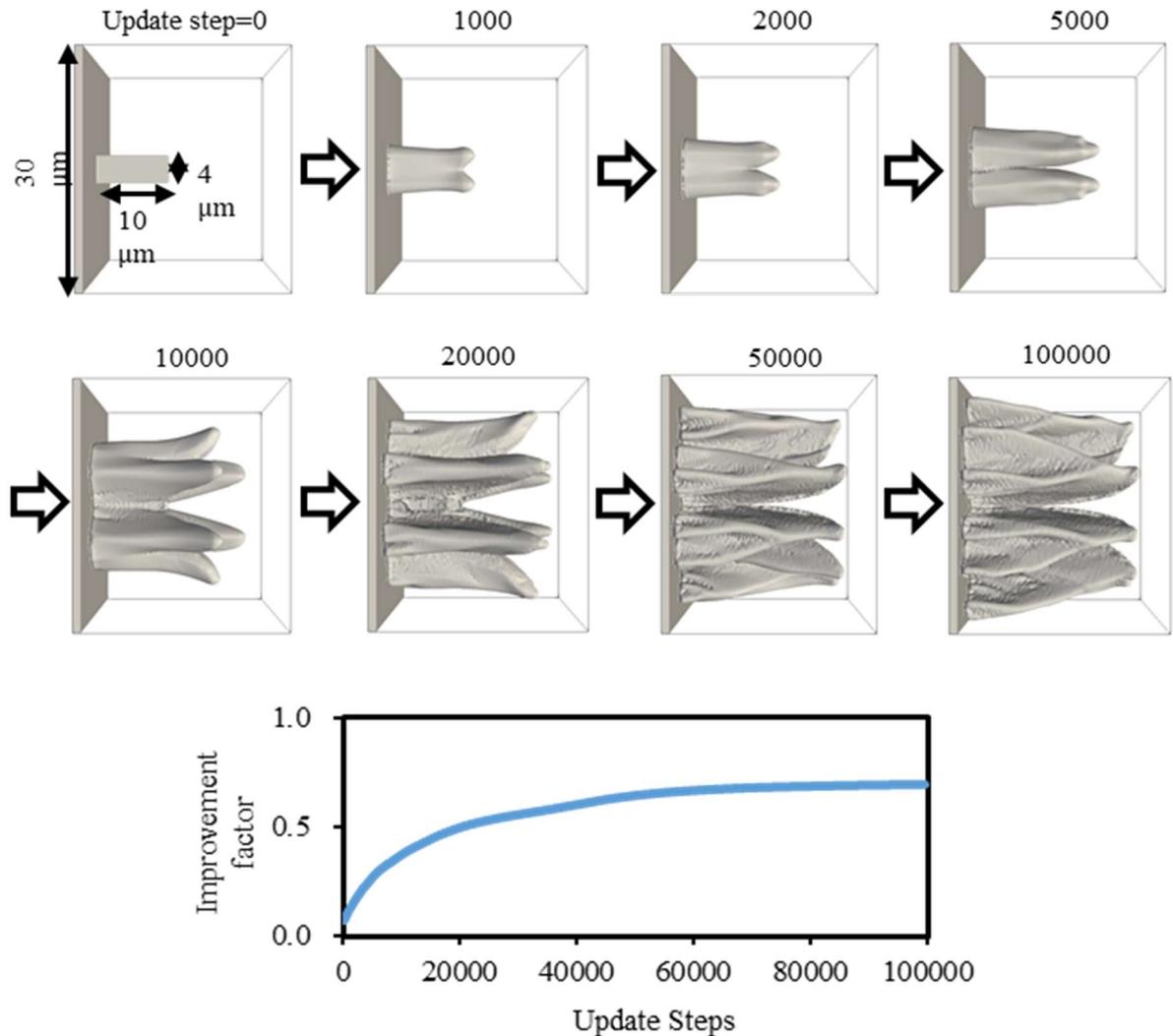


Figure 4.2.2-8. Iteration history of (a) electrolyte-cathode interface shape and (b) improvement factor (the relative change in the total current in the entire domain).

#### (5) PEFC 電極要素特性解析

PEFC 触媒層内の反応輸送解析による最適構造設計に関して、過電圧予測コードを完成させ、そしてマクロスケール計算へ展開させた。特に、実際の触媒層構造の形成過程を考慮し、これまで開発のカーボン担体の凝集構造モデルにさらにアイオノマーの付着形態の影響を加味した上で、発電特性の影響を検証した。Figure 4.2.2-9 に示すように、実験から取得される構造特性を再現できる模擬数値構造を作製可能となり、その結果、カーボン担体表面に被覆するアイオノマー量とアイオノマー厚さ、被覆率の相関式を得ることが可能となった。また、種々の構造を対象に計算を実施し、最適構造の検討を行った。Figure 4.2.2-10 の(a)、(b)に凝集粒子径違いの計算対象を示す。(c)に発電特性曲線を示す。この図より高電流高電位を達成できる凝集粒子径は凡そ 500 nm であることがわかる。また(d)に触媒層内の反応分布を示すが、図より二次細孔部分の拡散と凝集粒子内部への拡散の両面より、500nm の凝集系の場合に反応分布が均一になることがわかった。すなわち凝集径に最適値が存在することがわかり、本計算技術により定量的な最適設計が可能となった。

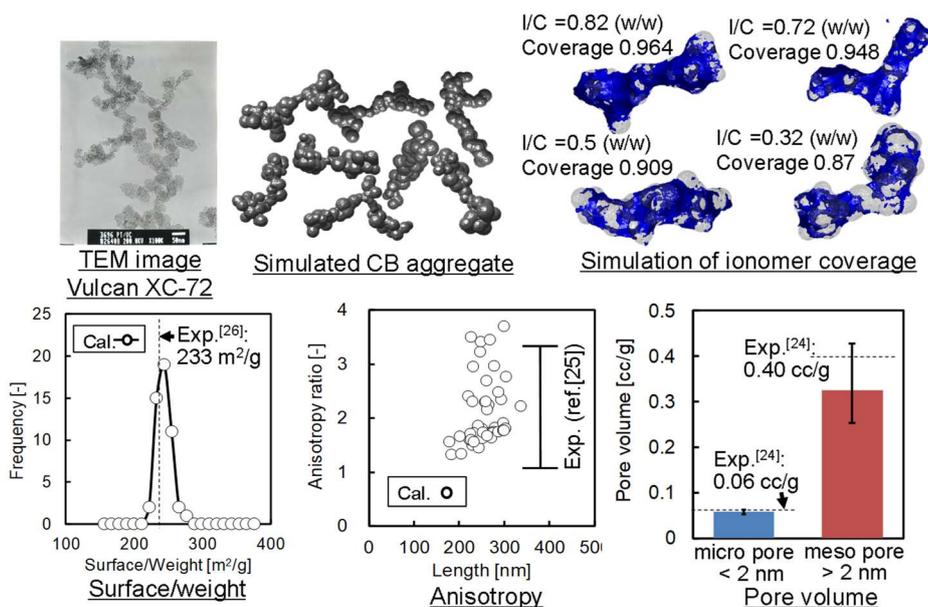


Figure 4.2.2-9. Simulated carbon black and evaluation of validity of this structure.

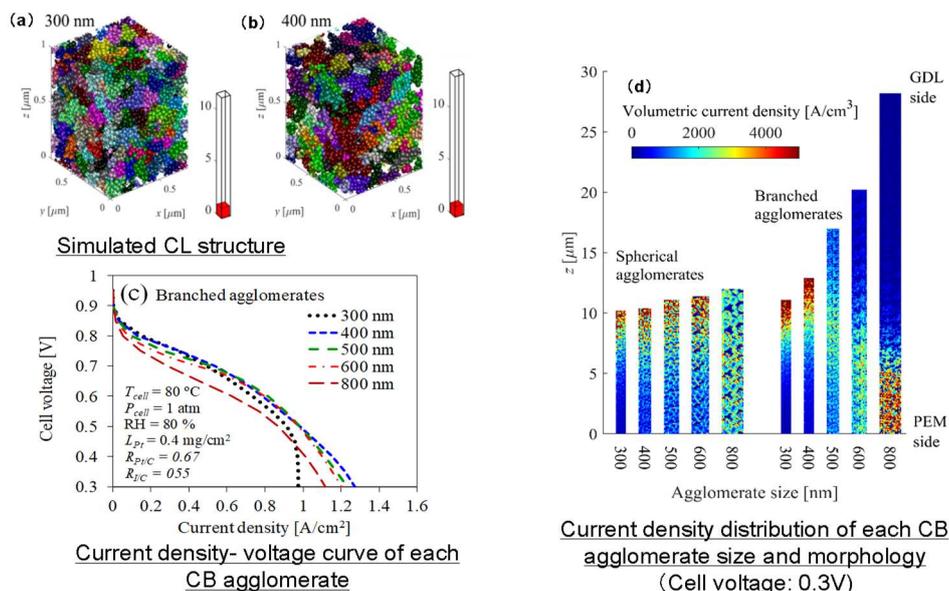


Figure 4.2.2-10. Simulated carbon black and evaluation of validity of this structure.

さらに、本計算のV&V（実験との比較検証）として、触媒層構造の実測測定との比較、および出力特性との比較を行った。計算結果は実験値と良好に一致し、本計算の妥当性を確認した。また、PEFC膜電極接合体（MEA）のナノ構造解析から得られるアイオノマーのプロトン伝導性とPt表面の吸着水の影響を反映させて本メゾスケール解析に実装することで、Pt近傍のナノスケールの材料特性を反映させた発電特性評価が可能となった。以上の計算を総合して、Figure 4.2.2-11に示すように実際の触媒層を対象にした計算が可能となった。また、出力特性を左右する支配要因を過電圧内訳の計算により明確にし、この情報を触媒層の特性値としてマクロ計算（セルスケール計算）に展開可能となっ

た。

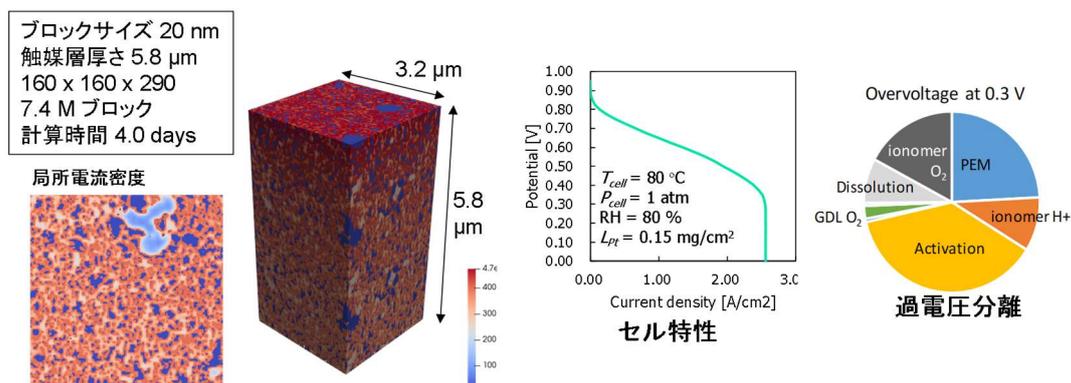


Figure 4.2.2-11. Reconstruction and segmentation of 3D catalyst layer structure obtained by FIB-SEM and simulation result of current density – voltage curve and the breakdown of overvoltage.

## (6) PEFC 膜電極接合体 (MEA) のナノ構造・機能解析

### (6-1) PEFC 膜電極接合体のナノ構造要素間の詳細解析と検証

FMO 計算に基づく有効相互作用 ( $\chi$ ) パラメータ[1,2]を用いる散逸粒子動力学 (DPD) のナノ-メゾのマルチスケールシミュレーション (MSS) 手法 FMO-DPD を確立し、実証的応用では課題の電解質膜[3]に加え、技術の水平展開として脂質膜[4,5]とベシクル[6]、さらにタンパク質[7]に対して成功裏に適用してきた。また、有効パラメータ算定のシステム[2]を FCEWS[8]として公開すると共に、J-OCTA[9]にもバンドルされて広く使われつつある。また、独自開発した高効率 DPD 計算プログラム CAMUS も github でソース公開[11]となっている。このように、FMO-DPD を基軸として MSS の分野振興に一定の貢献をすることが出来たと考えている。

RSC Adv.のオープンアクセス論文[3]で扱ったように、電解質膜の素材としてはナフィオンの方が芳香族系の SPEEK よりも優れていることが知られている。こうした中、山梨大のグループが SPEEK を凌駕する SPP-QP なる新規の芳香族系素材[12]を開発した。そこで、FMO-DPD による比較・解析を試みた。論文[3]の計算時よりも FCEWS の改良が進み、また DPD シミュレーションの設定条件の「ノウハウ」(剛直性の導入など)の蓄積が進んだことから、ナフィオンと SPEEK も再計算した。Figure 4.2.2-12 に SPP-QP の分子構造と、粗視化のためのセグメント分割を示すが、これら 3 種の他に水粒子 (W) も加えて計算する必要がある。 $\chi$  パラメータ算定のための FMO 計算では、基底関数をこれまでの 6-31G(d)から柔軟性がベターな cc-pVDZ とした (ただし、基底関数の向上に伴う計算コスト増は 2.5 倍)。Figure 4.2.2-13 は、FCEWS を使って FMO エネルギーから SPP-QP 用に算出された 6 種の  $\chi$  パラメータのリストである。この他に、ナフィオンと SPEEK に関するパラメータも再算定し、Figure 4.2.2-14 にあるように各系に対してセグメント接続を設定し、J-OCTA の COGNAC モジュールを使って DPD シミュレーションを実行した。そして、得られた水のクラスター構造に対してパーコレーション解析による連結度評価を行い、Figure 4.2.2-15 に示す結果を得た。これにより、電解質膜素材として SPEEK よりも優れ、ナフィオン 4 に近いことが確認された (本成果は 2019 年 11 月の電池討論会で発表)。現在、より詳細な解析を進めているところである。

全体推進のパートでも記載したタンパク質の FMO-DPD シミュレーションは、論文[7]として Appl.

Phys. Express にオープンアクセスで出版した。内容は 2018 年度の成果報告書でも記載した、アミノ酸残基 10 個の小型タンパク質シニョリンの畳み込みに加え、140 個の残基から成る  $\alpha$ -シヌクレイン（神経毒性を有り）の特徴的な U 字型構造の再現（Figure 4.2.2-16 を参照）にも成功した画期的なものである。 $\chi$  パラメータの算定は FCEWS、DPD には水素結合などのタンパク質特有の局所相互作用を柔軟に設定出来る CAMUS を使っているが、FMO-DPD 法を生体分子への水平展開を通じての汎用性の高さを示したとも言える。また、パラメータは FMO 導出ではないが、重点課題①の奥野恭史教授のグループとの共同研究で、CAMUS を使ったアミロイド B（認知症の原因物質とされる）の凝集過程のシミュレーションを系統的に行い、凝集の機構に関する重要な知見を得、ACS Chem. Neuroscience に論文として報告[13]したことを記しておく（重点課題⑥-①間連携の事例）。

脂質系への FMO-DPD の応用では、星薬科大学の福澤薫准教授とのコラボレーションで DOPC にコレステロールを混合した複合系を計算した。Figure 4.2.2-17 に膜の例を示すが、直感的な「均質混合状態」とは異なり、コレステロールが DOPC の膜中でクラスターを形成することが明らかになった。星薬科大学では X 線の小角散乱の実験も行っており、シミュレーション結果と実験結果との符合も得られた。2019 年度には、DPD のメゾ構造をリバースマッピングしてナノ構造へ戻すワークフローも DSRMS としてシステム化され、この複合脂質にも適用してみたが、コレステロールの凝集を裏付ける局所的な相互作用が確認出来た。

脂質膜に対する微小タンパク質の影響評価も FMO-DPD のフレームワークで行った。Figure 4.2.2-18 は、膜貫通性が知られているアルギニン 8 量体 (R8) の 2 分子を POPC 膜に対して乱数的に配置した例で、この後で DPD シミュレーションを行い、2 分子の協同効果によって膜に孔が形成される軌跡も得られた。脂質の粒子数を増やした計算を現在試みている。

最後にプログラム関係についてまとめる。FCEWS は配座サンプリングの巧妙化と効率化などの改良を行った。この更新版 FCEWS のリリースは 2020 年春の予定であり、これまでと同様に J-OCTA にバンドルされる。リバースマッピングの DSRM はシステムとしてまとまっており、マニュアルと例題を整備すると共に、論文化の準備も進めている。DSRMS のリリースは 2020 年の前半を目指している。DPD プログラム CAMUS は、OpenMP/MPI の混成並列化が進められており、種々のベンチマークテストを行った。Figure 4.2.2-19 は、水粒子の系で 4 スレッドで下層並列をした条件で MPI プロセス数を増やし、1 ステップの時間を計測した結果である。水粒子の数が 1 千万となると、8 プロセスでも有効な加速が得られていることが分かる。今後、大規模な複合脂質やタンパク質への応用計算で CAMUS が威力を発揮するものと期待している。

## 文献

- [1] "Fragment Molecular Orbital-based Parameterization Procedure for Mesoscopic Structure Prediction of Polymeric Materials", K. Okuwaki, Y. Mochizuki, H. Doi, T. Ozawa, J. Phys. Chem. B, 122 (2018) 338-347.
- [2] "フラグメント分子軌道(FMO)法を用いた散逸粒子動力学シミュレーションのための有効相互作用パラメータ算出の自動化フレームワーク", 奥脇弘次, 土居英男, 望月祐志, J. Comp. Chem. Jpn., 17 (2018) 102-109. (2018 年度日本コンピュータ化学会論文賞受賞)

- [3] "Theoretical Analyses on Water Cluster Structures in Polymer Electrolyte Membrane by Using Dissipative Particle Dynamics Simulations with Fragment Molecular Orbital Based Effective Parameters", K. Okuwaki, Y. Mochizuki, H. Doi, S. Kawada, T. Ozawa, K. Yasuoka, RSC Adv., 8 (2018) 34582-34595.
- [4] "Dissipative particle dynamics (DPD) simulations with fragment molecular orbital (FMO) based effective parameters for 1-Palmitoyl-2-oleoyl phosphatidyl choline (POPC) membrane", H. Doi, K. Okuwaki, Y. Mochizuki, T. Ozawa, K. Yasuoka, Chem. Phys. Lett., 684 (2017) 427-432.
- [5] "散逸粒子動力学におけるシリカー脂質膜界面付近の水の取扱い", 土居英男, 奥脇弘次, 望月祐志, 小沢拓, J. Comp. Chem. Jpn., 16 (2017) 28-31.
- [6] "X線小角散乱と散逸粒子動力学法を用いた脂質膜およびベシクル形成メカニズムの解明", 新庄永治, 奥脇弘次, 土居英男, 望月祐志, 古石誉之, 福澤薫, 米持悦生, J. Comp. Chem. Jpn., 17, (2018) 172-179.
- [7] "Folding simulation of small proteins by dissipative particle dynamics (DPD) with non-empirical interaction parameters based on fragment molecular orbital calculations", K. Okuwaki, H. Doi, K. Fukuzawa, and Y. Mochizuki, Appl. Phys. Express, 13 (2020) 017002.
- [8] <[http://www.cenav.org/fcews\\_ver1\\_rev2/](http://www.cenav.org/fcews_ver1_rev2/)>.
- [9] <<https://www.jsol-cae.com/product/material/jocta/technical/>>.
- [10] "A portable code for dissipative particle dynamics (DPD) simulations with additional specific interactions", H. Doi, K. Okuwaki, T. Naitou, S. Saitou, and Y. Mochizuki, ChemBio-Informatics J. 18 (2018) 70-85.
- [11] <<https://github.com/hdoi/camus>>.
- [12] "Design of flexible polyphenylene proton-conducting membrane for next-generation fuel cells", J. Miyake, R. Taki, T. Mochizuki, R. Shimizu, R. Akiyama, M. Uchida, K. Miyatake, Sci. Adv., 3 (2017) eaao0476.
- [13] "Stabilization Mechanism of Non-fibrillar Amyloid- $\beta$  Oligomer Involved with Hydrophobic Core Obtained by Dissipative Particle Dynamics", R. Kawai, S. Chiba, K. Okuwaki, R. Kanada, H. Doi, M. Ono, Y. Mochizuki, and Y. Okuno, ACS Chem. Neuroscience, 11 (2020) 385-394.

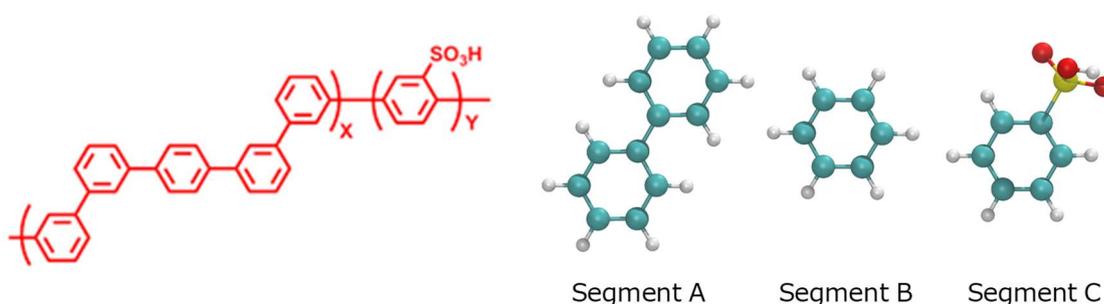


Figure 4.2.2-12. Molecular structure of SPP-QP and segmentation for FMO-DPD simulation.



Figure 4.2.2-13. Evaluated  $\chi$  parameters for SPP-QP.

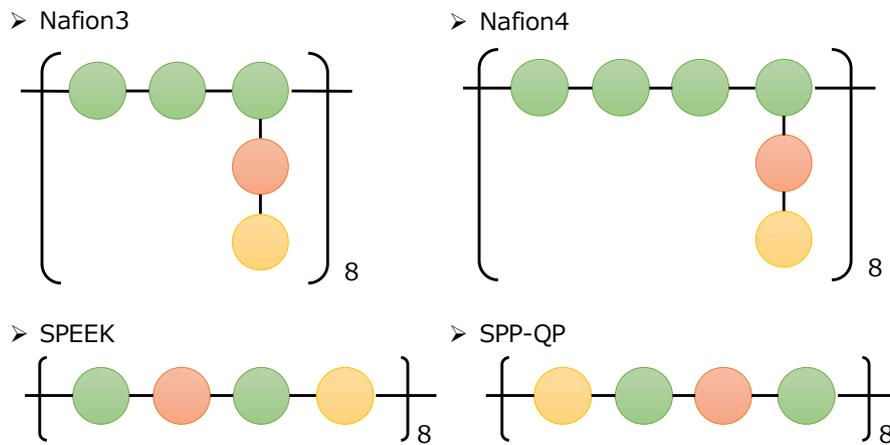


Figure 4.2.2-14. DPD segment setting for membrane materials.

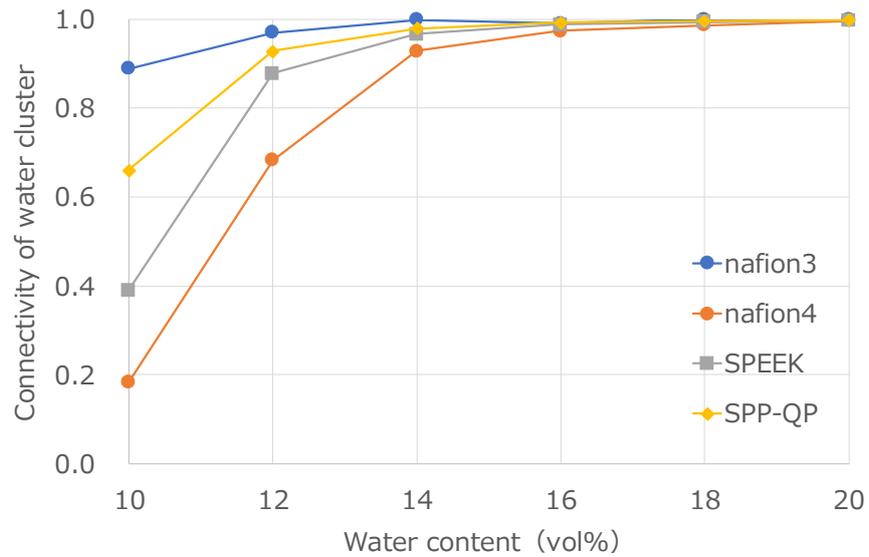


Figure 4.2.2-15. Connectivity results of water clusters.

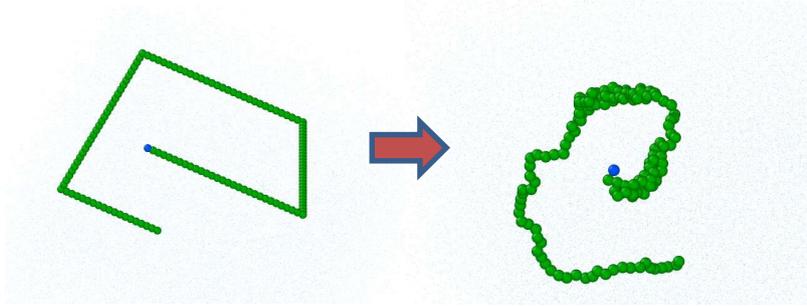


Figure 4.2.2-16. Folding of  $\alpha$ -synuclein (Blue ball indicates N-terminal residue).

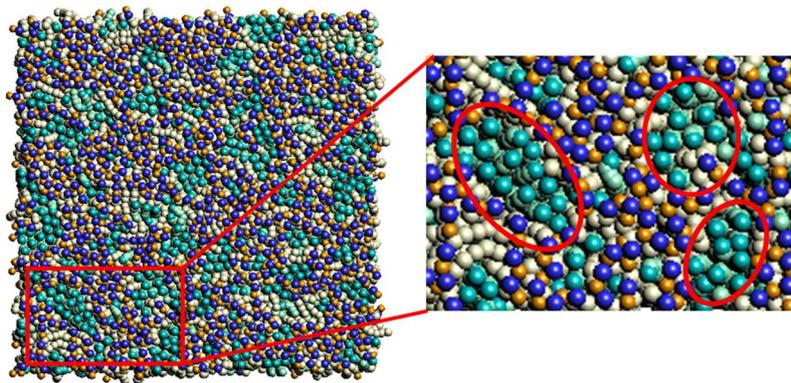


Figure 4.2.2-17. DPD-simulated membrane structure of DOPC and cholesterol binary system (green balls correspond to cholesterol).

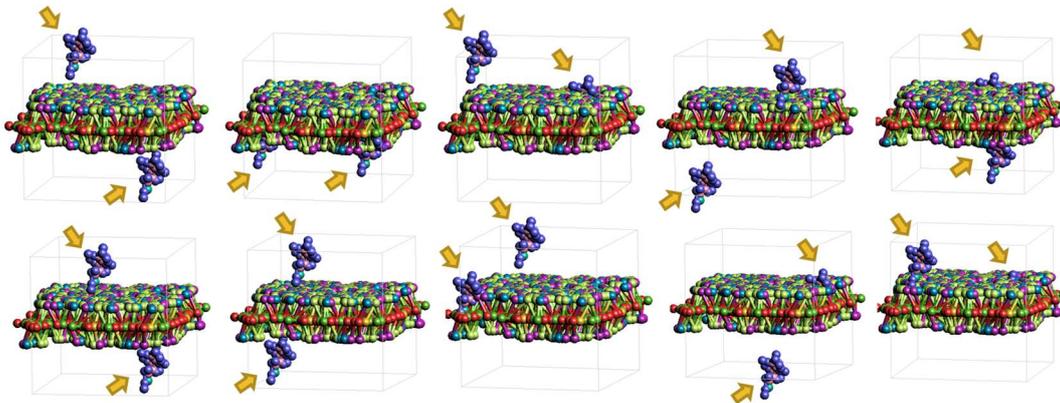


Figure 4.2.2-18. Trials of initial setting to place two R8 moieties onto POPC membranes.

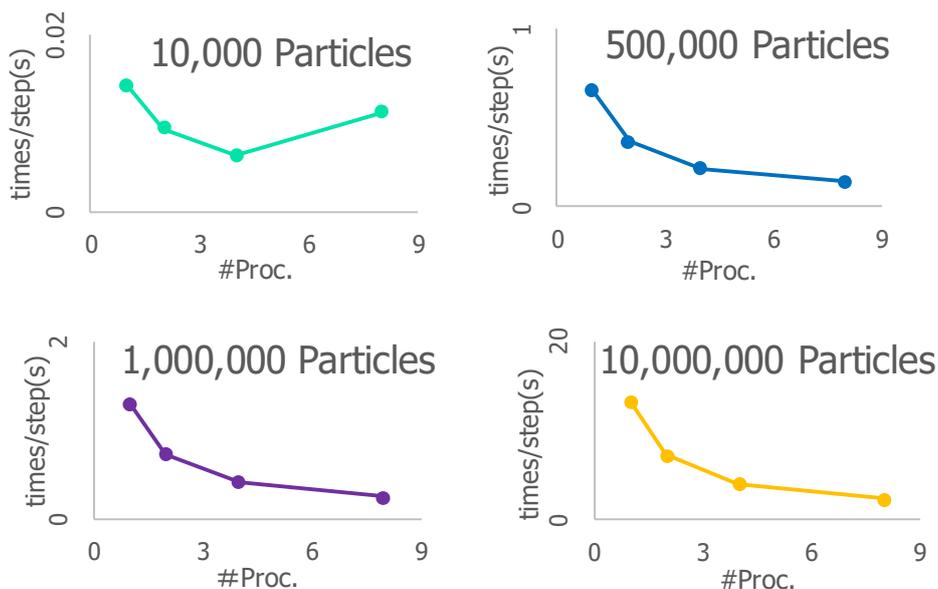


Figure 4.2.2-19. Acceleration against MPI process increment (2,4,8) under 4 threads parallelization for water particle systems (on twin Xeon Gold 6248 CPUs).

#### (6-2) MEA 触媒三相界面のナノ構造と機能の解析と検証

PEFC 膜電極接合体 (MEA) のナノ構造・機能解析に向けて、昨年度に提案した算出法により得られたナフィオン系電解質アイオノマー、Pt 触媒、水分子の間のソフト型有効相互作用ポテンシャルを用いて、MEA ナノ構造に対する粗視化シミュレーションによる解析を実施した。水和ナフィオン中のプロトン伝導については、水分子の形成する会合体が伝導の経路になると言われているが、水チャンネルの構造が実験的に明確に観測されているわけではなく、特に触媒近傍の構造については知見が少ない。そこで、実験系に即した物質構成を持つ MEA ナノ構造モデルを作成し、その触媒界面近傍の水和ナフィオンの構造を検討した。具体的には、触媒/電解質の二相界面 (Pt 触媒/水和ナフィオン電解質)、及び炭素担体電極を含めた三相界面 (炭素担体電極/Pt 触媒/水和ナフィオン電解質) の散逸粒子動力学 (DPD) シミュレーションによる解析を実施した。

昨年度に構築した粗視化モデルを使用して、Figure 4.2.2-20 (左) の様なナフィオン ( $n=2$ ) の水和系を検討した。即ち、ナフィオンの原子団 A-C をそれぞれ 1 個の DPD 粒子へと粗視化し、結合している粒子同士をバネで束縛して bead-spring モデルとした (Figure 4.2.2-20 (右))。水分子は 4 個をまとめて 1 個の DPD 粒子 (W と記す) へと粗視化し、白金は原子~8 個に対応する DPD 粒子 (PT と記す) で表した。DPD 粒子 A-C および W の相互作用には[1]のソフトポテンシャルを、これらの粒子と PT 間の相互作用には[2]のものを使用した。後者の相互作用ポテンシャルは昨年度に我々がオリジナルに提案したものである。

二相界面の計算系は 640 個のナフィオン分子 ( $m=5$  を 1 分子とした) と 2400、4,800、7200 個の W 粒子および PT 粒子で構成した。これらの計算系のナフィオンの含水率は  $\lambda=3, 6, 9$  で ( $\lambda$  は水分子とスルホ基の個数比)、実作動の燃料電池における値に対応している。PT 粒子は、単純格子キューブ状 ( $6^3$  粒子) およびスラブ状 (8 層,  $28^2$ - $30^2$  粒子/層) に配置した。これらの PT クラスタは、

それぞれ、実燃料電池の触媒微粒子とモデル実験に使われる白金スラブの形状をモデル化したものである。比較検討のために PT 粒子の無いバルク系の計算も行った。

各系に対して 100,000 ステップの計算を行った。異なる初期構造からそれぞれに対し 10 のパターンを計算した。いずれの系でも水和ナフィオンは親水部（粒子 C と W）と疎水部（A と B）に相分離した。Figure 4.2.2-21 に各系の最終ステップの構造を示す（代表として  $\lambda=6$  のものの一つを示した）。親水部も疎水部も見た目には比較的に微細に入り組んだ形状（2 nm 程度のスペーシング）である。エネルギーと構造の変化をモニターした結果、比較的早い段階で（~10,000 ステップ）定常な状態に到達することが分かったため、シミュレーションの後半のデータを統計解析に使用した。

Figure 4.2.2-22 と Figure 4.2.2-23 に、それぞれ PT キューブ系と PT スラブ系の成分粒子分布を示す。どちらの系でも、成分粒子が PT からの距離の関数として振動的な分布をする。即ち、キューブ系では殻状、スラブ系では層状の構造が形成されていることを意味する。含水率の大きい系では分布の大小がより明瞭になる傾向がある。また、スラブ系の層状構造ではキューブ系の殻状構造に比べて成分分布の濃淡が強いという特徴がある。分布のピークは PT 側から順に W,CB,A,BC,W,...であり、このように振動的に分布するのは白金上に W 粒子が優先的に分布することと、および疎水部/親水部に相分離することに起因している。W 粒子が優先的に PT 上に分布するのは、ポリマー粒子 A-C がエントロピー的な理由で PT クラスタ表面を被覆しにくいからである。このように両 MEA ナノ構造ともに Pt 表面付近に親水・疎水の層状構造が形成されることが明らかになった。

冒頭で述べたように水和ナフィオンの水チャンネルがプロトン輸送経路であれば、その構造はプロトン伝導や燃料電池発電効率に大きく影響するはずである。水チャンネルの連結性の側面を解析するため、上記の構造を出発にした DPD 計算を追加で行い（100,000 ステップ、この計算ではポリマー粒子 A-C は固定した）、トラジェクトリから W 粒子の平均二乗変位 (MSD) を評価した (Table 4.2.2-2)。表のデータから、いずれの含水率でも PT キューブ系の MSD はバルク系のものと比較的に近いことがわかる。これらの系では MSD の  $x^2, y^2, z^2$  の各成分が時間に比例して順調に増加したが、これは水チャンネルのネットワークが 3 次元的に切れ目なく遠方まで連結していることを意味する。Figure 4.2.2-22 で見たように、PT キューブ系では成分粒子が殻状に整列しているが、この整列は余り完全なものではなく、水チャンネルの連結にはあまり影響がないことが示されていることに注意されたい。一方、PT スラブ系の MSD は、バルク系の数値に比較して基板に平行な  $x^2$  と  $y^2$  の成分が大きく、基板に垂直な  $z^2$  の成分が極端に小さいのが特徴である。PT スラブ系では、 $x^2$  と  $y^2$  の成分は時間に応じた増加を示すものの、 $z^2$  の成分は ~50 の値で飽和する。このことは PT スラブ系の xy 面内の成分整列が強いため、水チャンネルの連結が xy 面内では緊密化され、z 方向では他の成分 A-C によって遮断されることによるものである (PT 粒子による遮断ではない。MSD 解析のための PT スラブ系の DPD 計算では PT 粒子を取り除いている)。これは、PT キューブ系の成分整列とは対照的である。Table 4.2.2-2 のデータから、含水率によって W 粒子の MSD が大きく変わることもわかる。つまり、調べたような範囲で含水率が小さくなると、ネットワークの連絡が急速に損なわれることを示唆している。

実燃料電池においては、白金表面のうち水で被覆される部分だけが触媒として機能し得る。この観点から、DPD 計算で得た各構造に対して、PT クラスタ表面直上の各粒子成分の割合を解析した (Table 4.2.2-3)。表に示したように、 $\lambda=3-9$  のどの含水率においても W 粒子の割合が最も高く、水和ナフィオン全体での粒子分率 (Table 4.2.2-3 のイタリックの数値) を大きく上回った。キューブ系でもスラ

ブ系でも表面粒子割合はあまり変わらない。ここでは、W 粒子の割合が大きいとはいえ表面を全被覆するわけではなく、被覆率が含水率に依存することに注目されたい。つまり、含水率の小さい系では白金表面が触媒として有効に使われていない可能性があり、この要因を通じて発電効率がナフィオン含水率に依存しているかもしれないということである。Table 4.2.2-3 の Pt 表面の吸着水に関する解析結果は、メゾスケール解析グループに提供した。

三相界面に関しては、Figure 4.2.2-24 に示すような、炭素担体電極も含めたモデル構造を用いて DPD 解析を実施した。炭素表面上に PT キューブを置き全体を水和ナフィオンで覆った構造、すなわち、炭素担体/Pt 微粒子/水和ナフィオン電解質の三相界面に対するモデル構造である。DPD 計算では、炭素担体が疎水的であることに鑑みて、担体粒子と A-C,W との相互作用パラメータは 30 (A と B) と 35 (C と W) に設定した。解析の結果、水の拡散性など、二相界面 PT キューブ系と有意な相違は見られなかった。これは、炭素担体が疎水的であるためと考えられ、三相界面における Pt 触媒付近でのナフィオンと水分子の吸着構造やネットワーク構造特性は二相界面 PT キューブ系と類似していると思われる。

以上、触媒/電解質系の DPD シミュレーションを行い、水和ナフィオンの相分離構造が PT クラスターの有無や形状を強く反映することを明らかにした。

#### 文献

- [1] S. Yamamoto and S. Hyodo, *Polymer Journal*, 35, 519 (2003).  
 [2] N. Tajima, J. Nara, T. Yamasaki, T. Ozawa, H. Nitta, K. Ohata, and T. Ohno, *J. Electrochem. Soc.*, 166, B3156 (2019).

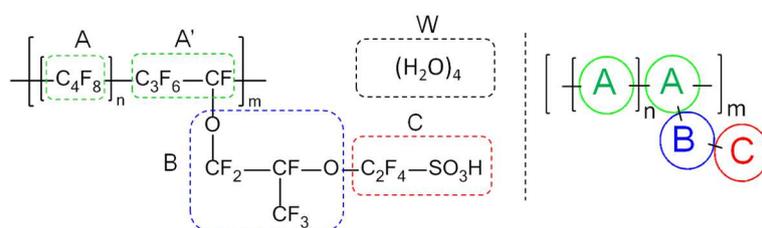


Figure 4.2.2-20. Coarse-graining of a hydrated nafion system to DPD particles A-C and W (left), and a bead spring model of the coarse-grained nafion (right). Nafion molecules with  $n = 2$  are simulated in this study.

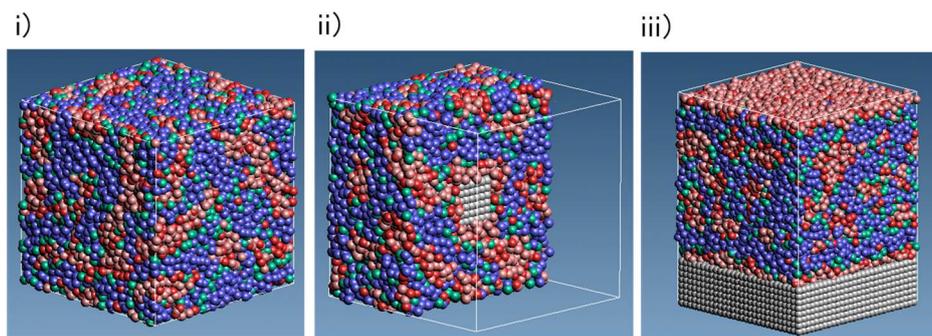


Figure 4.2.2-21. Snapshots of DPD simulations (at 100,000 step) for bulk hydrated nafion of  $\lambda = 6$  (i), and corresponding interfacial systems with a PT cube (ii) and a PT slab (iii). Coloring of DPD particles: A(blue), B(green), C(red), W(orange), and PT(gray).

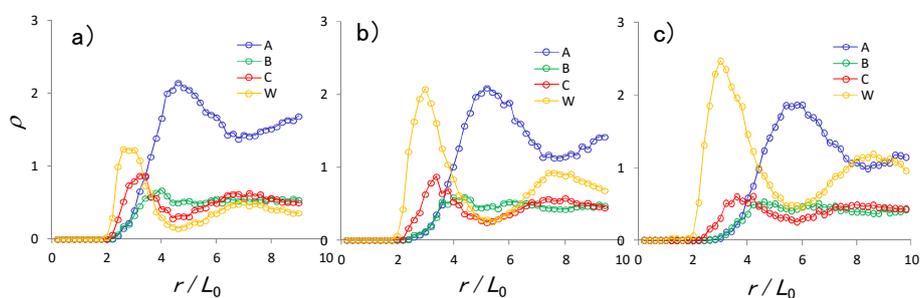


Figure 4.2.2-22. Distribution of nafion components for the interfacial systems with a PT cube ( $\lambda = 3, 6, \text{ and } 9$  in (a)-(c), respectively).  $r$ : distance from the center of the PT cube ( $L_0 = 0.71 \text{ nm}$ );  $\rho$ : number density of each component in a spherical shell at  $r$ . Averages were taken over every 10,000 steps after 50,000 step.

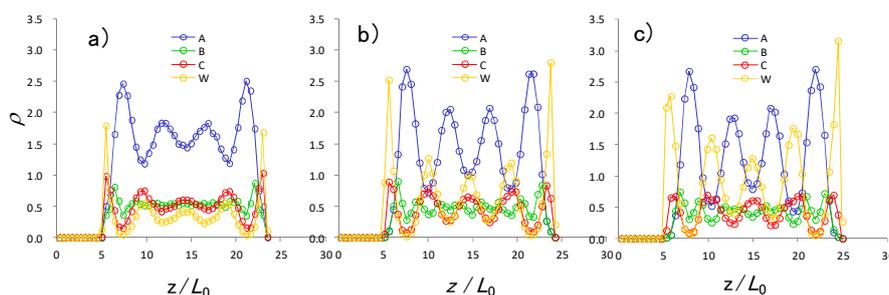


Figure 4.2.2-23 Distribution of nafion components for the interfacial systems with a PT slab ( $\lambda = 3, 6, \text{ and } 9$  in (a)-(c), respectively).  $z$ : distance from the bottom layer of the PT slab ( $L_0 = 0.71 \text{ nm}$ );  $\rho$ : number density of each component in a layer at  $z$ . Averages were taken over every 10,000 steps after 50,000 step.

Table 4.2.2-2. Particle diffusion in the water component network of the model structures of hydrated nafiona

	$\langle r^2 \rangle^b$	$\langle x^2 \rangle^b$	$\langle y^2 \rangle^b$	$\langle z^2 \rangle^b$
$\lambda = 3$				
bulk	482 (27)	158 (18)	165 (21)	158 (24)
PT cube	465 (44)	155 (24)	157 (30)	154 (25)
PT slab	1027 (71)	489 (46)	485 (53)	52 (19)
$\lambda = 6$				
bulk	1464 (102)	488 (62)	493 (70)	483 (38)
PT cube	1408 (91)	456 (57)	472 (29)	480 (53)
PT slab	2078 (69)	1019 (48)	1016 (61)	43 (12)
$\lambda = 9$				
bulk	2381 (72)	773 (122)	852 (129)	755 (67)
PT cube	2337 (83)	791 (84)	814 (96)	732 (40)
PT slab	2760 (89)	1334 (59)	1366 (66)	60 (32)

<sup>a</sup> MSD of W particles in 100,000 steps of simulation (in  $L_0^2$  unit), averaged over ten different structures (standard deviations in parentheses). <sup>b</sup>  $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$ , where  $\langle r^2 \rangle$  is the total MSD, and  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle y^2 \rangle$ , and  $\langle z^2 \rangle$  are the x-z components.

Table 4.2.2-3. Ratios of particles A-C and W among surface particles a.

	$\langle r^2 \rangle^b$	$\langle x^2 \rangle^b$	$\langle y^2 \rangle^b$	$\langle z^2 \rangle^b$
$\lambda = 3$				
bulk	482 (27)	158 (18)	165 (21)	158 (24)
PT cube	465 (44)	155 (24)	157 (30)	154 (25)
PT slab	1027 (71)	489 (46)	485 (53)	52 (19)
$\lambda = 6$				
bulk	1464 (102)	488 (62)	493 (70)	483 (38)
PT cube	1408 (91)	456 (57)	472 (29)	480 (53)
PT slab	2078 (69)	1019 (48)	1016 (61)	43 (12)
$\lambda = 9$				
bulk	2381 (72)	773 (122)	852 (129)	755 (67)
PT cube	2337 (83)	791 (84)	814 (96)	732 (40)
PT slab	2760 (89)	1334 (59)	1366 (66)	60 (32)

<sup>a</sup> Average over every 10,000 steps after 50,000 step (standard deviations in parentheses). Surface particles are defined as particles A-C and W within a distance of soft potential cutoff ( $L_0 = 0.71 \text{ nm}$ ) from some PT particles. *Italic* figures are the particle ratios in the whole hydrated nafion.

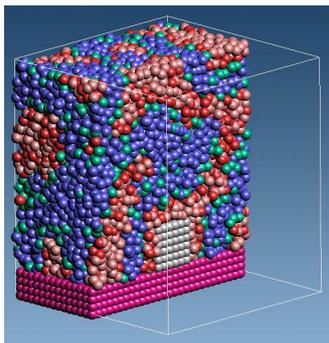


Figure 4.2.2-24. Snapshot of DPD simulations (at 100,000 step) for an interfacial system with a PT cube on a carbon support. Coloring of DPD particles: A(blue), B(green), C(red), W(orange), PT(gray), and carbon particles (purple).

#### 4-2-3. (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

<再委託機関：国立大学法人豊橋技術科学大学、国立大学法人九州大学応用力学研究所、株式会社風力エネルギー研究所>

##### (1) 研究成果の概要

本サブ課題では、洋上ウィンドファームの発電性能予測、信頼性評価、風車単体性能の改善に注力したマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術の開発研究を実施する。

平成 31 年度（令和元年度）は、大規模解析による洋上風車後流の相互干渉の影響評価、ウィンドファームの性能評価技術の開発、流体・構造連成振動解析による風車の寿命評価解析技術を開発し、洋上ウィンドファームの基本性能、ウィンドファームの最適配置、風車の構造振動・寿命解析評価を行った。各項目の成果の詳細について以下にまとめる。

##### (2) サブ課題 C の総合的推進

下記項目（3）（4）（5）（6）の開発および調査検討内容を取りまとめ、RIAM-COMPACT・FFB・ADVENTURE 等を連携させたシステムを用いて、洋上風車の性能を評価する設計ツールを構築した。この結果、FFB を用いた大規模流体解析により、従来は評価が難しかった風車下流における風車性能の定量的な評価、大気乱流の影響評価が可能となった。また、RIAM-COMPACT を用いたウィンドファーム解析により風車配置・風向の違いによるウィンドファームの性能評価が可能となった。加えて、FFB-ADVENTURE を用いた連成解析により、風車に作用する応力、寿命を評価することが可能となった。

##### (3) 後流の影響を考慮した洋上風車高精度評価技術の開発

###### (3-1) 後流の影響を考慮した大型洋上風車高精度評価技術の開発

FFB を用いてタンデム配置された洋上風車周りの大規模流体解析を行い、風車間の流れの相互作用（特に後流の影響）の定量的な評価により、直径の 3 倍程度下流に風車を設置した場合、風車性能が半分以下になることを明らかにした。ブレード周りの 10~20mm オーダーの渦を解像しながら、後流の発生プロセスを評価し、さらに数 100m~1km オーダーの後流の伝搬を解析するためにシステムの高高速化を行った。

日本の自然エネルギー利用計画の一環として、2030 年には 400 万 kw のウィンドファームの開発が計画されている。ウィンドファームの性能を向上させるためには、風車自体の性能向上に加え、風車周りの流れの相互干渉による発電量の低減、翼の疲労破壊、年間発電量の予測に基づく最適配置方法の検討が必要である。洋上風車に使用される風車は直径が 100m 以上となるため、単体での性能評価試験でさえ難しいが、ウィンドファームのように複数台を運転する場合は、風車後流の相互干渉の影響を考慮する必要がある。また、大気乱流の影響も考慮する必要がある、沿岸部に設置された場合は、地形の影響も考慮する必要がある。

ウィンドファームの解析で非常に難しい点は、風車の翼周りの境界層内の渦、風車の後流の渦、風車全体の流れ場に作られる渦、大気乱流場の渦など対象とする流れ場の渦スケール、時間スケールが大きく異なる点である。このため、洋上風車の解析では、風車自体はアクチュエータモデル等でモデル

化するなどして、スケールの違いを省略した解析や RANS モデルを用いた解析が行われることが多い。LES 解析が行われている場合もあるが、解像度を考慮すると十分な精度で行われているとは言えない状況である。実務的な観点からはアクチュエータモデルなどを用いた出力予測モデルが必要となるが、これらのモデル解析の精度を向上させるためには、より詳細で正確な後流の解析データ、翼との干渉データに基づくモデル化が必要である。

本研究では、タンデム配置された洋上ウィンドファーム用風車の相互干渉流れを LES 解析によって計算する際の問題点について検討し、後流モデルを構築するための基礎データの取得を試みた。まず単体風車に関する性能評価を行い、解析規模や格子解像度について検討し、次にタンデム配置された風車の解析を実施し、上流風車の後流の干渉が下流側の風車性能にどのような影響を及ぼすかについて調べた。

### (3-1-1) 解析手法

洋上風車に用いられている大型風車の流れ解析を行う場合、先に述べたように流れ場の時間スケールが大きく異なる。たとえば、直径 100 m、コード長 2-4 m 程度の風車 (5MW) の場合、翼面上の渦スケールは  $10^3 \sim 4$  m オーダーであり、その時間スケールは  $10^{-3}$  秒オーダーである、また、風車ブレードの後方にできる渦は、空間スケールが  $10^{-1}$  m 程度、時間スケールは  $10^{-2} \sim 1$  秒程度である。風車全体の流れ場の空間スケールは 10 m 程度、時間スケールは 10 秒のオーダーとなる。また、気象レベルになれば、時間スケールは数分から数時間、場合によっては数日から数十日となる。空間スケールも数百 m 以上となる。本研究では、気象レベルの変化までは考えないが、そのような場合でも、空間および時間に対するスケール比は  $10^{5-6}$  程度となり、スケールの異なる流れ場解析が必要となる。本研究では、ブレード周りの流れ場と風車後流の流れをバランスよく解く方法について検討する。

解析には文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「革新的ソフトウェアの研究開発」によって開発された、乱流解析プログラム FFB (Front Flow/blue) を使用した。FFB は、3 次元非定常非圧縮性流 NS 方程式と連続の式を有限要素法により離散化した乱流解析アプリケーションである。計算スキームは時間、空間ともに 2 次精度である。風車等の回転体の解析には、オーバーセット法を用いる。オーバーセット法における解析誤差を小さくするため、低マッハ数近似を適用している。乱流モデルにはダイナミック・スマゴリンスキーモデルを用いた。

FFB はスーパーコンピュータ「京」で十分な性能が得られるようにチューニングされており、数億から数十億要素の大規模解析が可能である。

解析対象は設計スペックや実験データが広く公開されている NREL 5MW の風車とした。Table 4.2.3-1 に NREL 5MW の風車の仕様を示す。ロータ直径は 126 m、定格周速比は 7 である。Figure 4.2.3-1 に風車の外観図を示す。

Table 4.2.3-1. Specifications of NREL 5MW wind turbine.

Description	Value
Rating	5 MW
Rotor Orientation	Upwind
Blade Configuration	3 Blades
Rotor, Hun Diameter	126 m, 3 m
Cut-In, Rated, Cut-Out Wind Speed	3 m/s, 11.4 m/s, 25m/s
Cut-In, Rated Rotor Speed	6.9 rpm, 12.1 rpm
Tip Speed	80 m/s

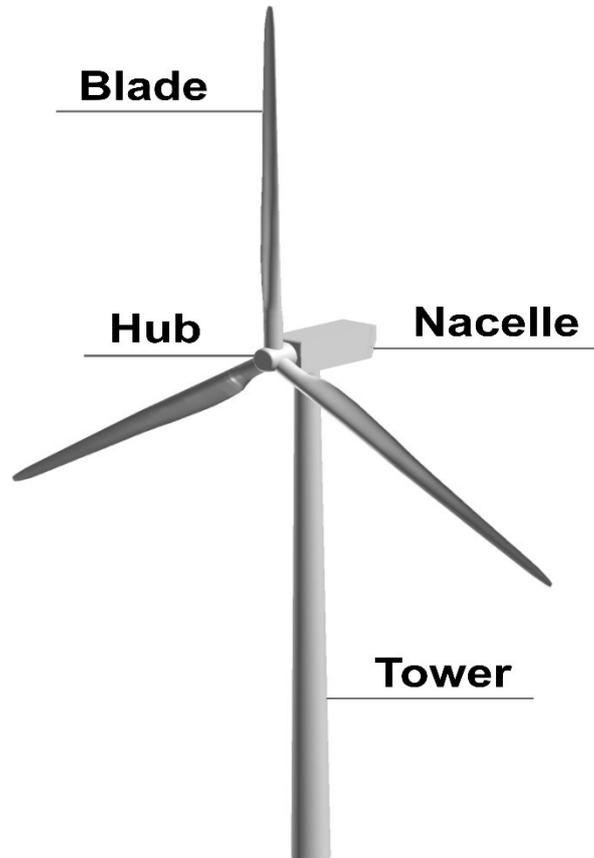
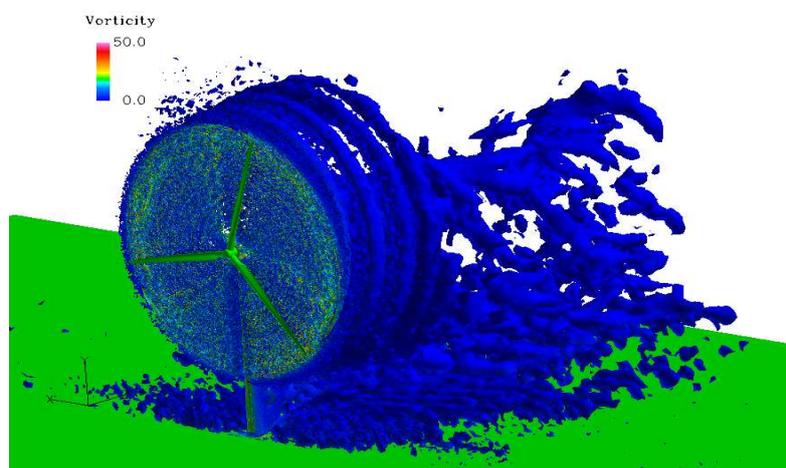


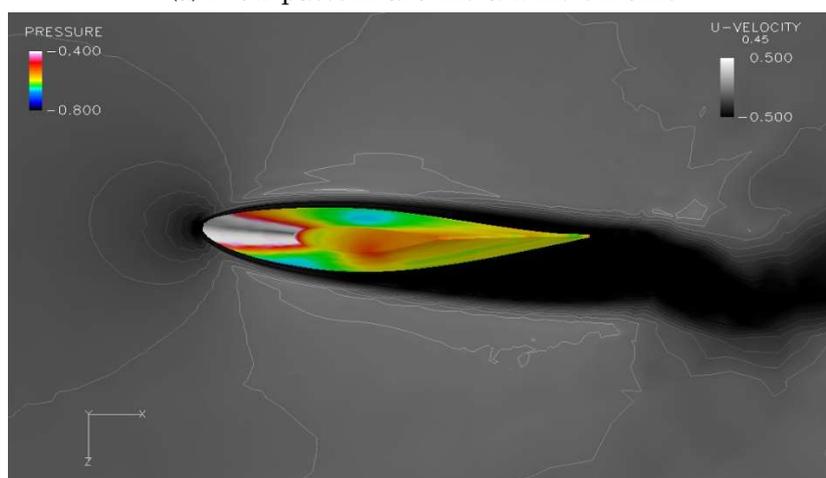
Figure4.2.3-1 Schematics of NREL 5MW wind turbine.

格子解像度の影響を調べるため、いくつかの格子解像度で解析を行った。まず予備計算として翼面上にプリズムメッシュを配置したテトラメッシュによる粗い格子の解析を行った。要素数は約6千5百万である。このメッシュを用いて風車単体の解析を行った結果の一例を Figure4.2.3-2 に示す。風車翼端部から翼単渦が下流に放出される様子が観察され、全体的には風車周りの解析が行えているように見えるが、翼面の流れは前縁付近で大きくはく離し、流れが翼面で転向しないため、翼による仕事が得られず、出力は過小評価される。これは、翼面の格子解像度が低く、風車ブレード周り的高レイノルズ数流れ ( $10^7$ ) を解くのに十分でないためと考えられる。ここで翼表面に Slip 境界条件を課して、流れが剥離せずに翼に沿って転向する条件で解析を行ったところ、後述するように風車の出力係数は翼素理論によって得られる値とよく一致することが確認された。このことから、風車の性能を評価するためには、風車ブレード前縁で流れを転向させることが可能な格子解像度が必要であること

がわかる。また、このことは風車翼面の境界層内の渦を解くのに十分な解像度がなくても風車性能を求めることが可能であることを示している。したがって、RANS 解析等で風車性能が実験値と一致しているからと言って、風車の周りの流れが正しく求められているわけではないことがわかる。極端に言えば、翼面の流れをポテンシャル流れで近似しても風車性能はそれなりに求めることができることに注意しなければならない。



(a) Flow pattern around a wind turbine



(b) Flow pattern around a turbine blade

Figure4.2.3-2. Example of large-scale wind turbine analysis with insufficient resolution grids (65M elements)

本研究では、格子解像度を変えた予備計算をいくつか実施し、最終的に Table 4.2.3-2 に示す中規模格子（風車単体：1億5千万要素）、詳細格子（風車単体：2億7千万要素）を用いて風車の性能評価を行った。当初は風車の複雑形状を再現するためにテトラメッシュ（境界層格子にはプリズム）も試したが、十分な解析精度が得られなかったことから、ヘキサメッシュを用いた。Table 4.2.3-2 に解析格子の代表的な寸法を示す。風車ブレード上の格子解像度は、乱流境界層厚さをコード長の 4%、乱流境界層内の積分長スケールは境界層厚さの 10% と仮定して求めた。また、前縁での流れの転向及び境界層遷移が再現できることを条件として格子解像度を設定した。中規模格子および詳細格子の乱流境界層における格子解像度は流れ方向、壁面垂直方向、スパン方向に壁座標でそれぞれ、(2000, 600,

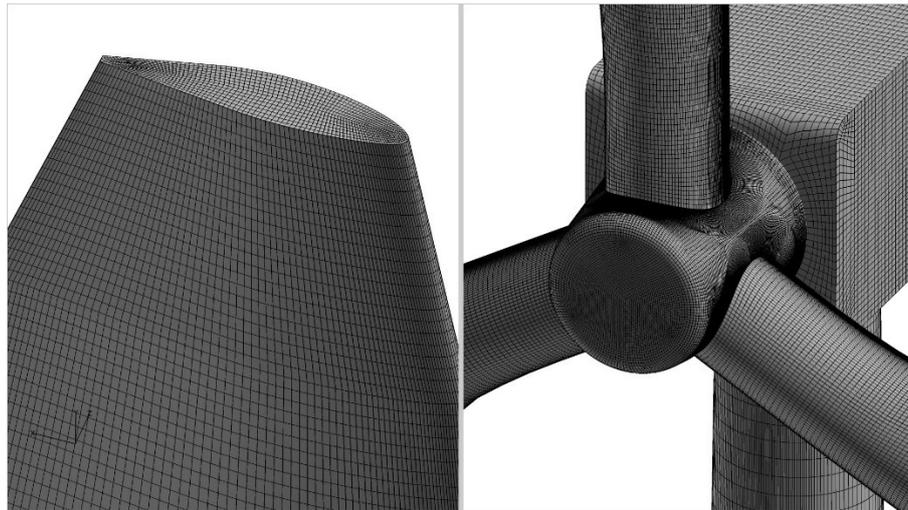
4000) および (1000, 200, 2000) である。中規模格子は後縁近傍の積分長スケールを解像する程度、詳細格子はブレードの各スパン長におけるコード長 50% 位置の積分長スケールを解像することが可能な程度の解像度である。この条件から求めた風車ブレード表面の第一格子の実寸法は、中規模格子で 3.5 mm、詳細格子で 1 mm である。境界層高さ方向のメッシュをより小さくすることも可能であるが、格子のアスペクト比を極端に大きくすると乱流場を正しく解析できなくなることから、格子のアスペクト比を最大 10 程度とし、翼面上のメッシュ幅が 10 mm 以下となるようにした。第一格子が  $y^+ = 200$  となるため、この格子ではブレード境界層を完全に解像することはできない。しかし、後述するように前縁付近の翼の転向を再現するには十分であり、解析規模のバランスを考慮し、この解析格子を使用して解析を行った。

ブレード境界層外縁の格子サイズは、3 cm 程度であり、ブレードからのはく離渦や翼端渦を解像するのに十分な解像度を有する。また、風車下流の格子サイズは 1 m とした。洋上風車の解析や風車の風況解析では、10m から数 m 程度の格子を用いて解析する機会が多いが、大気乱流といえどもそのような大きな格子では、流れ場を解像することは難しく、低解像度の LES 解析となってしまう。解像度の低い LES は RANS 解析よりも精度が悪くなることもあるため、本研究では、風車下流の格子サイズを 1m とし、風車後流を十分な解像度で解析することを試みた。一般に流体解析では、物体から十分離れた位置では格子解像度を下げて、乱流場を人工的に減衰させ、出口境界に導くことが多いが、本解析では、後流自体が検討対象となるため、下流領域の格子を出口境界まで 1m とした。Figure 4.2.3-3 に解析格子の概略を示す。

2 台の風車を並べたタンデム解析は、単体解析のデータをもとに、単体解析の細かい格子と同じ解像度で 2 台の風車解析を行った。風車間の距離は一般的な洋上風車では直径の 6 倍から 10 倍程度とすることが多いが、前述のように風車間の格子解像度を十分細かくする必要がある。直径 120 m の風車の場合、風車間隔を直径の 10 倍とすると 1200 m にも及ぶため、解析リソース的に非常に厳しくなる。大型風車の場合、主流速度に対して、ブレード先端速度は 7 倍から 8 倍程度となるため、風車が一回転する間に主流が進む距離はわずかであり、風車間の距離が大きくなると解析時間が大きくなる。そこで今回の解析では風車間距離を直径の 3 倍とした。洋上風車の場合、風車の横方向間隔は直径の 3 倍程度であり、風向きによっては実際にありうる状況であることから、風車間距離を直径の 3 倍とした。要素数は約 6 億 5 千万である。風車の干渉を調べるため、解析ステップ数は 100 万程度とした。

Table 4.2.3-2. Computational mesh for LES Simulation

Description	Middle Grid			Fine Grid		
	Blade	Wake	Outer	Blade	Wake	Outer
Minimum mesh size [m]	0.0035	0.05	1	0.001	0.03	1
Element type	Hex	Hex	Hex	Hex	Hex	Hex
Number of nodes [ $\times 10^6$ ]	59	76	7	192	80	7
Number of elements [ $\times 10^6$ ]	60	77	7	194	81	7



(a) Middle grid



(b) Fine grid

Figure4.2.3-3. Surface grid around the blade tip and the hub.

### (3-1-2) 解析結果

Figure4.2.3-4 に単体風車の出力係数の解析結果を示す。実線は翼素理論を用いた性能予測結果である[1]。前述したように粗い格子（テトラメッシュ：6千5百万要素）を用いた解析では、翼周りの高レイノルズ数流れの効果である前縁での流れの転向をとらえることができないため、出力係数が過小評価されている。ただし、壁面境界条件を Slip 条件にした仮想的な解析では、粗い格子であっても出力係数は翼素理論の結果とほぼ一致する。このことは前述したように風車性能を評価する場合、前縁での流れの転向が重要であり、その部分が解析できれば性能評価が十分に行えることを示している。

ヘキサメッシュによる中規模格子（1億5千万要素）を用いた場合でも流れ場を十分とらえることはできないため、出力係数は過小評価となっている。詳細格子（要素数2億7千万）の解析結果は翼素理論の結果とよく一致することがわかる。詳細格子を用いた場合の、第一格子の高さは  $y^+ = 200$  に相当する。この解像度は乱流境界層内の渦を解像するには不十分であるが、翼の性能を評価することは可能であり、風車解析を LES で行う場合、最低限この解像度が必要であることがわかった。

Figure4.2.3-5 にブレード周りの圧力分布を示す。図の横軸は翼のコード方向距離  $x$  を翼弦長  $C$  で無次元化した値である。同じ  $x/c$  で値が 2 つあるのは、翼の下面と上面の両方を一つの図に示しているからであり、一般に翼の性能はこの圧力係数線図で評価される。中規模格子の場合、レイノルズ数の低い風洞実験結果と似た圧力分布となっていることがわかる[2]。一方、詳細格子を用いた場合は、前縁で流れが加速し、翼面に沿って流れていることがわかる。洋上風車のブレードレイノルズ数は  $10^7$  オーダーであり、この流れを解像するには、十分に細かいメッシュが必要なことがわかる。前縁の圧力分布のわずかな差により出力係数の結果が大きく異なることから、前縁付近の流れの重要性がわかる。

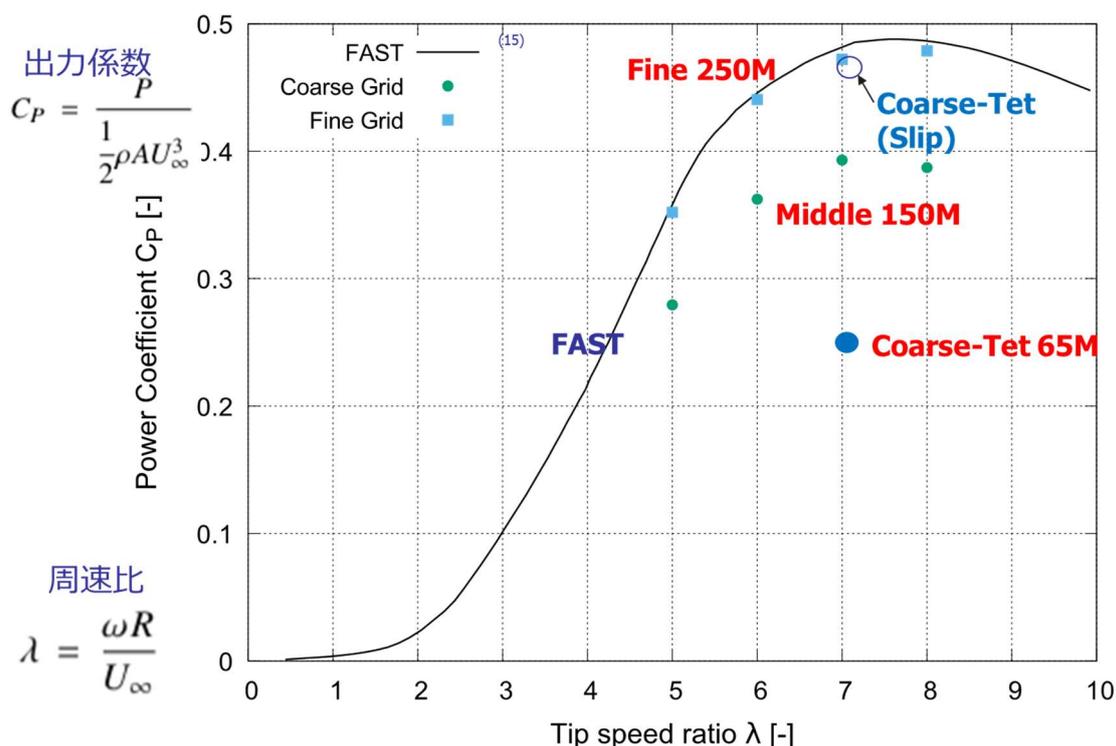


Figure4.2.3-4. Comparison of power coefficients of WT

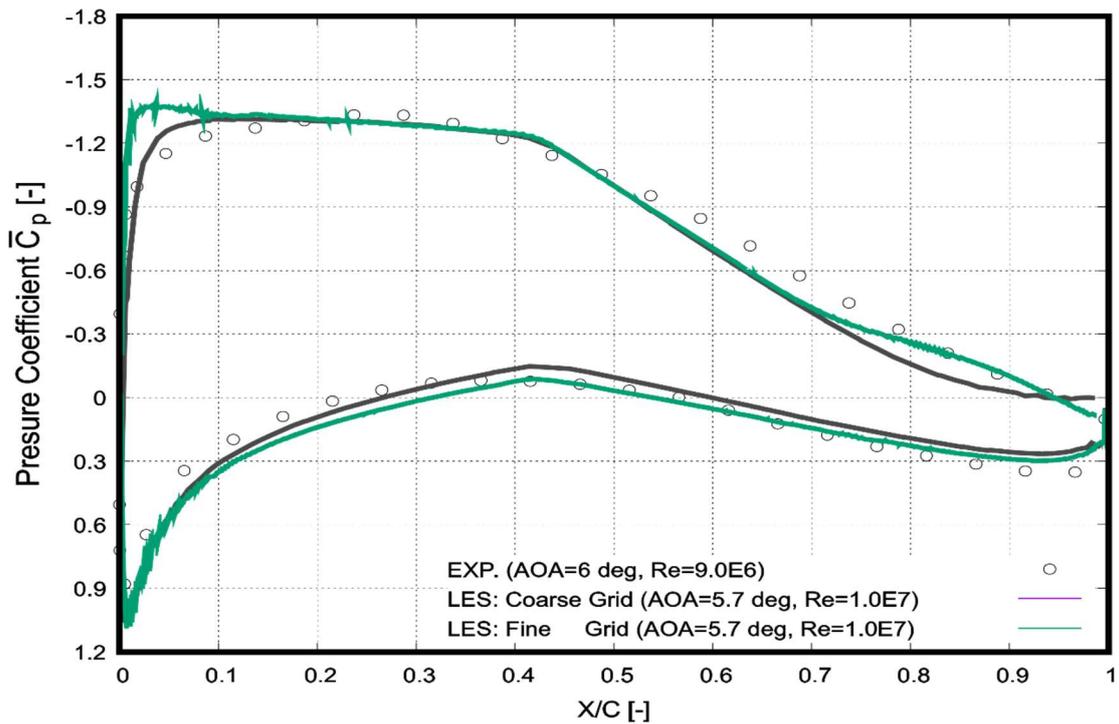
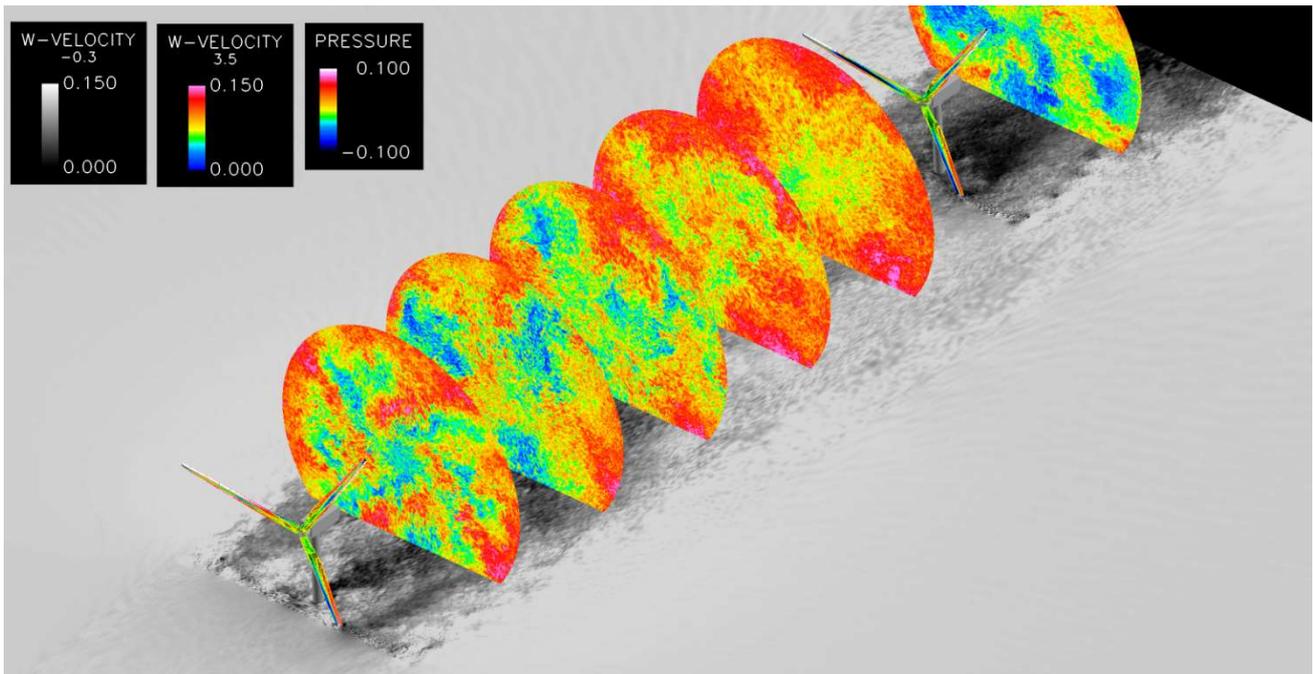
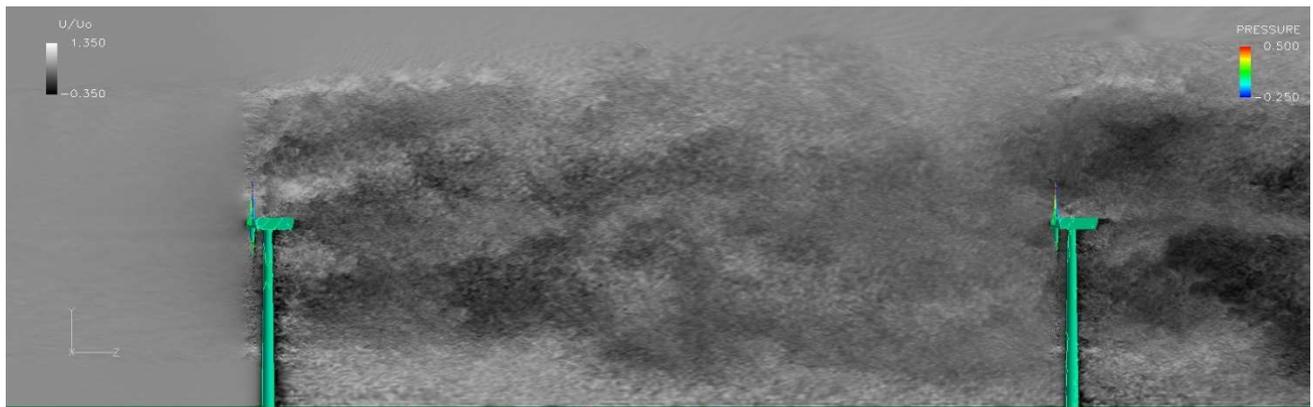


Figure4.2.3-5. Comparison time-average static pressure at 90% spanwise position

Figure4.2.3-6 にタンデム配置の場合の風車周りの流れ場を示す。前述したように風車後流の解像度を落とさずに解析を行っているため、後流中の微細な渦構造が（不自然に減衰せずに）とらえられていることがわかる。2台の風車間距離は 378m であるが、この領域を 1500 分割し、格子サイズ 0.25 m で計算を行った。ブレードから放出される渦のスケールは数 10mm であり、この渦が後流領域で減衰しないように格子の成長率を調整した。翼下流の渦の成長率については別途行った風洞実験の結果をもとに推定した。



(a) Bird point of view



(b) Side view

Figure4.2.3-6. Flow field around a tandem arrangement wind turbines

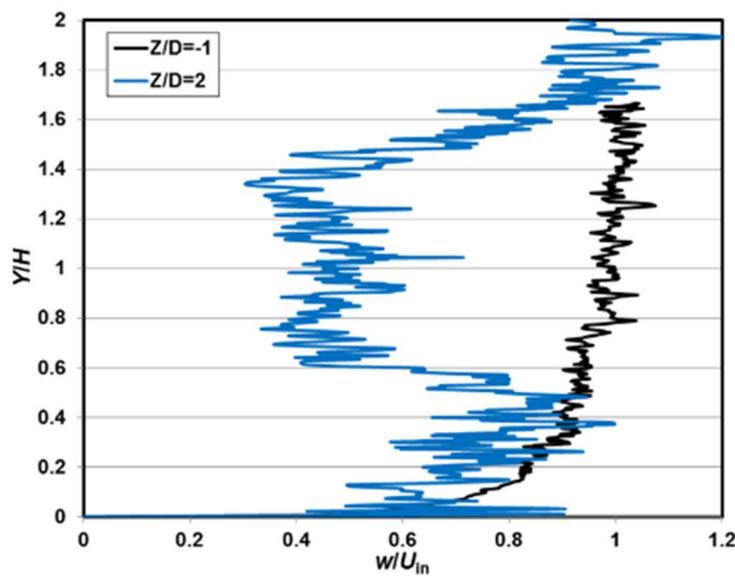
Figure4.2.3-7 に上流側風車と下流側の風車周りの鉛直方向速度分布を示す。ここで図の縦軸は風車タワー中心高さ  $H$  で風車の界面からの位置  $y$  を無次元化した値であり、 $y/H=1$  が風車のタワー中心を意味する。横軸は主流速度  $w$  を風車に流入する気流速度  $U_{in}$  で無次元化した値である。 $Z$  は上流側風車の設置位置を原点とした流れ方向の距離であり、風車直径  $D$  で無次元化した。

$Z/D=-1$  は上流風車から直径分だけ上流の位置を示し、 $Z/D=2$  は上流風車から下流に風車直径の 2 倍離れた位置を意味する。

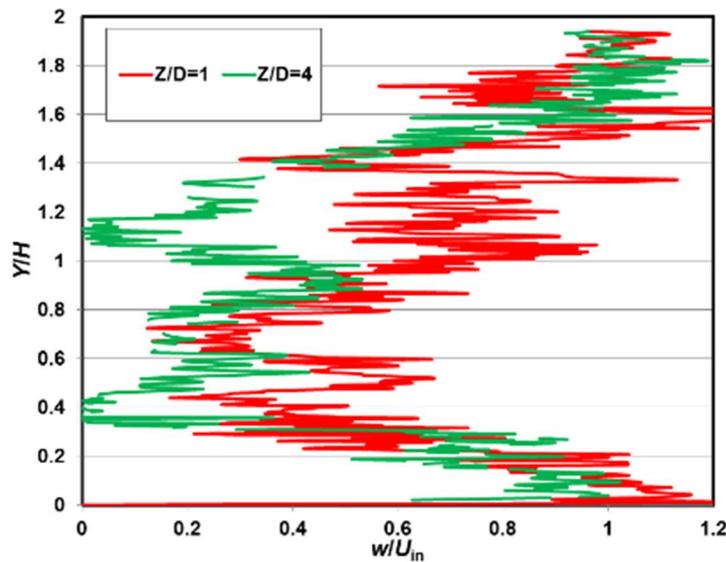
- $Z/D=-1$  上流側風車の上流 1D の位置を示し、上流側風車への流入風を示す。
- $Z/D=2$  下流側風車の上流 1D の位置を示し、下流側風車への流入風を示す。
- $Z/D=1$  上流側風車の下流 1D の位置を示し、上流側風車の後流を示す。
- $Z/D=4$  下流側風車の下流 1D の位置を示し、下流側風車の後流を示す。

上流側の風車では、流入速度分布は大気境界層を模擬した速度分布であり、風車中心が境界層厚さになるように設定した。風車を通過すると速度が大きく減速していることがわかる。上流風車下流で減速した流れは、風車ハブ高さ付近では下流に行くに従い、次第に速度を回復するが、ハブ高さより下の部分では回復が遅く、減速したまま下流の風車に流入する。このため、下流側風車では、風車の上流と下流の速度差が小さく、十分な流体仕事を得られていないことがわかる。

Figure4.2.3-8 は上流側風車と下流側風車の翼面圧力分である。上流と下流側風車の圧力分布は詳細格子と粗い格子の場合とよく似ており、前縁部分で転向が十分でなくなり、風車の性能が得られなくなることがわかる。Figure4.2.3-9 は翼面圧力分布と速度場を示す。流れ場の図からは大きな差異がみられないが、風車性能としては大きく低下することから、流れ場のコンタ図だけでは不十分であり、Figure4.2.3-8 に示したような定量的な評価が重要となる。



(a) Forward



(b) backward

Figure4.2.3-7. Velocity profiles of wind turbine

Figure4.2.3-10 に上流側風車と下流側風車の出力特性の時間変化を示す。風車単体解析において、一様流を流入させた場合は、翼素理論とほぼ一致する出力係数が得られるが、(1)大気乱流の影響により上流風車の性能は、一様流が流入する場合と比べて 8%低下する。下流側風車の出力低下はさらに 50%低下する。このため、一様流が流入する理想的な場合と比較して、下流側風車の性能は 55%低下する。ベッツ理論と比較すると 65%の低下となり、後流の影響が大きいことがわかる。この解析では風車間隔が近いという問題があるため、将来的には風車間距離をより広くして評価を行う必要がある。

洋上風車では、下流側風車の性能が定格の 20%程度となることもあり、風車間の干渉が出力に及ぼす影響が大きいことがわかる。

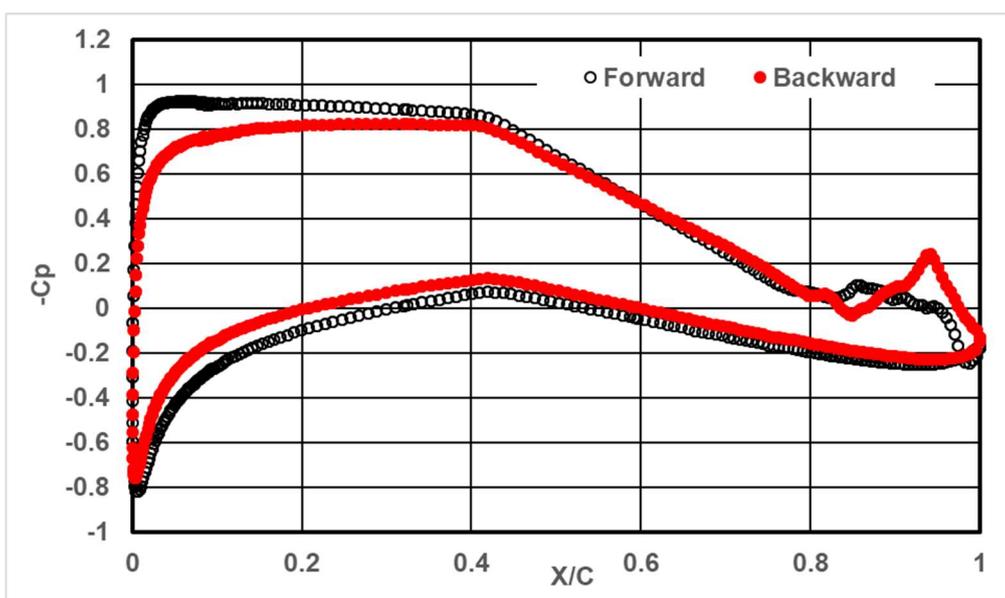


Figure4.2.3-8. Comparison time-average static pressure of tandem-arrangement wind turbines at 90% spanwise position

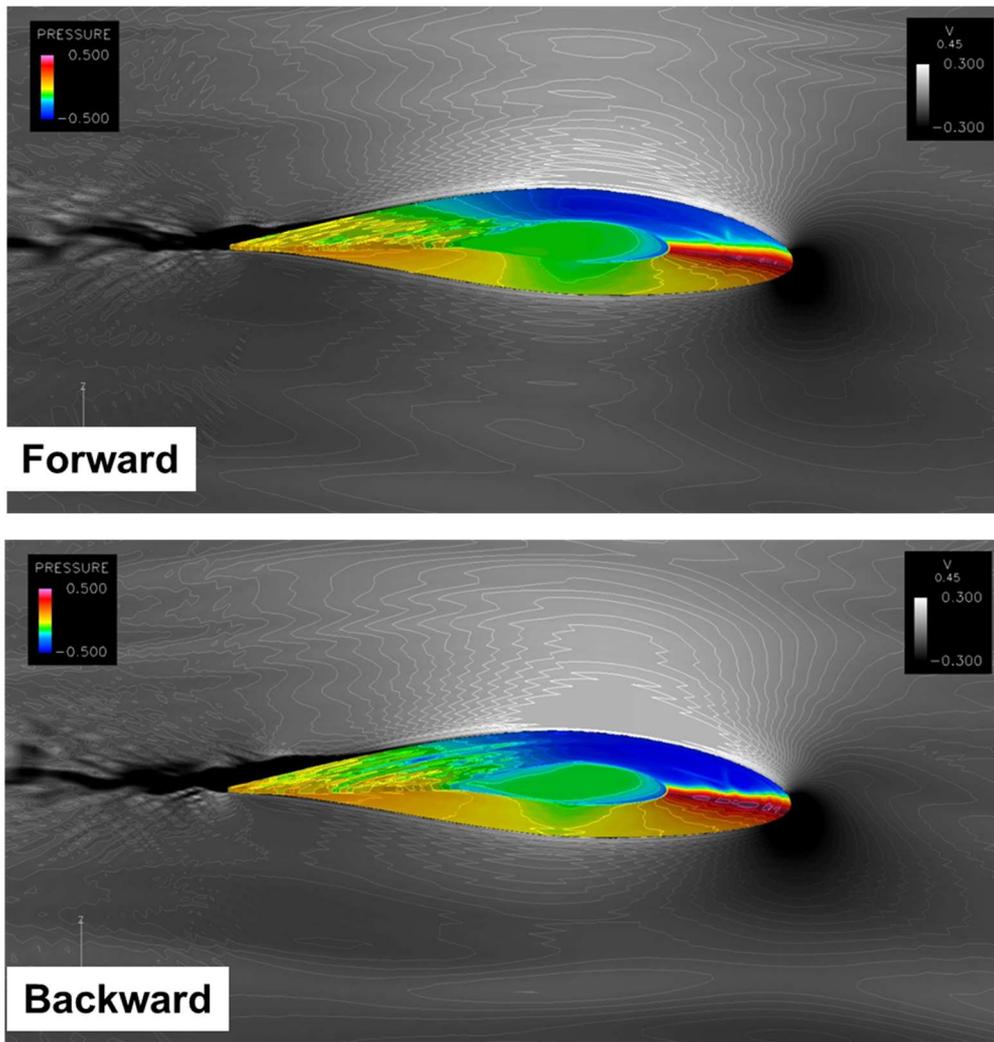


Figure4.2.3-9. Flow and pressure distribution around blade of tandem-arrangement wind turbines

(3-1-3) まとめ

洋上風車に使われる直径 120m の大型風車周りの流れ場を解析するための格子解像度、乱流解析手法について検討した。また、タンデム配置された風車の性能評価を行い、後流の干渉による性能低下を定量的に評価した。直径の 3 倍程度下流に風車を配置した場合、下流側の風車の出力係数は単体の場合に比べ半分程度に低下することがわかった。

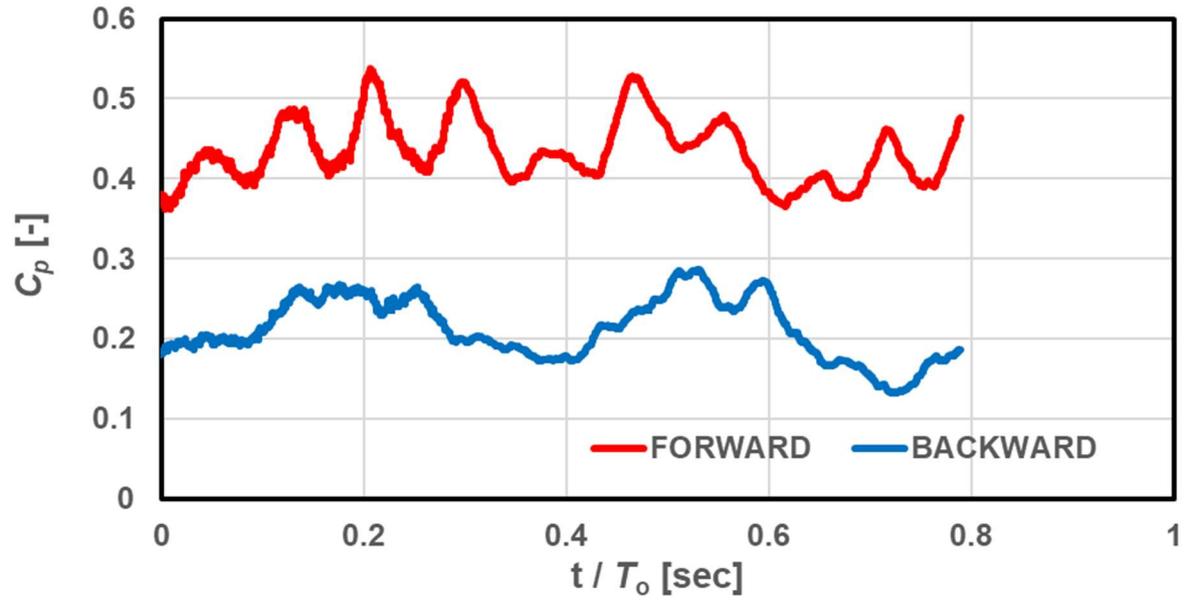


Figure 4.2.3-10. Time history of power coefficient of tandem-arrangement wind turbines

文献

- [1] J.Jonkman and M.Buhl Jr., FAST user's guide, Rep. NREL/TP-500-38230, National Renewable Energy Laboratory, Colorado, 2005.
- [2] Llorente, E, Gorostodo, A, Jacobs, M, Timmer, WA, Munduate, X, Pires, Wind tunnel tests of wind turbine airfoils at high Reynolds numbers, Journal of Physics: Conference Series, vol. 524, no. 1, pp. 1-10, 2014.

(3-2) 壁モデルの FFB への実装

翼スケールの実験と解析を行い FFB に実装する壁モデルの性能検証を行い、FFB に実装し、風車解析に適用した。また、風洞実験結果から下流方向への渦のスケール変化を推定し、解析メッシュの規模の推定を行った。

FFB に DES (Detached Eddy Simulation) を実装し、DES の適用条件を変えた解析と LES 解析の比較を行った。レイノルズ数  $10^6$  の場合は、DES を用いて格子解像度を落とした解析結果と LES 結果が一致することを確認することができたが、風車解析における  $10^7$  のレイノルズ数の場合、格子アスペクト比の問題から  $y^+ > 200$  以上の格子を用いて DES を実施することが難しかったことから、風車解析では、 $y^+ = 200$  の解像度で計算を行うこととした。DES 自体は格子数を減らし、計算負荷を軽減するには有効な手法であるが、風車の場合、アスペクト比が非常に大きいことから、格子解像度を境界層方向だけ小さくすることが難しい。風車翼の単体計算を行う場合は、スパン位置のある一部を取り出すことができるため、アスペクト比の問題を軽減できることから、単体計算において DES を用いて、解析を行い、翼前縁での転向効果をみるのに十分な格子であり、境界層の発達の様子を確認するのに適している。風車全体解析では DES の結果などから適切な格子サイズを推定し、境界層内の渦は十分に解像できなくとも前縁の転向が解析できる解像を求め、風車解析に適用することとした。

風車下流の渦スケールの変化については、風洞実験と LES 解析を行い、渦の成長率を推定した。Figure 4.2.3-11 に解析条件および解析領域を示す。

Figure 4.2.3-12 は数値解析により得られた速度勾配テンソルの第 2 不変量の等値面である。渦が下流に広がっていく様子をとらえられている。この渦の広がりをもとに格子サイズを推定する。

風洞実験及び数値解析により渦の空間スケールを相関法により求めた結果を Table 4.2.3-3 に示す。実験及び LES 解析結果より、X 方向 (主流方向) のスケールの変化は翼弦長の 5~9 %、Y 方向 (翼弦に垂直方向) のスケールは翼弦長の 2~5 %、Z 方向 (スパン方向) のスケールは翼弦長の 2.5%~3.5 %程度であることがわかった。風車解析を行う場合、翼周りの流れが後流領域に発達するまでに、上記の成長率で渦スケールが大きくなる (ただし、強度は小さくなる) と仮定し、解析メッシュの増加率を調整する必要がある。

Table 4.2.3-3. Growth rate of the turbulent eddies in the wake of an airfoil

基準位置	Measured			LES	
	X方向移動	Y方向移動	Z方向移動	X方向移動	Y方向移動
6C-負圧面側RMSピーク	-	-	-	0.098	0.041
6C-最大速度欠損	0.065	0.030	0.027	0.069	0.047
6C-圧力面側RMSピーク	0.049	0.016	0.024	0.082	0.027
11C-負圧面側RMSピーク	0.080	0.028	0.035	-	-
11C-最大速度欠損	0.069	0.029	0.033	-	-
11C-圧力面側RMSピーク	0.091	0.052	0.038	-	-

Airfoil	NACA0012
Reynolds number (Chord line/Flow velocity)	$4.0 \times 10^5$ [-] ( $C=0.15$ [m]/ $U_\infty=40$ [m/s])
Minimum grid size around the airfoil ( $\Delta x$ , $\Delta y$ , $\Delta z$ ) ( $\Delta x^+$ , $\Delta y^+$ , $\Delta z^+$ )	(0.0025, 0.000025, 0.0006) (40, 4, 10)
Grid size of wake ( $\Delta x$ , $\Delta y$ , $\Delta z$ )	(0.0066, 0.0066, 0.0006)
Number of elements	207 million
Angle of attack (Inflow angle)	9 [deg.]
Time increase	$1.00 \times 10^{-4}$ [-]

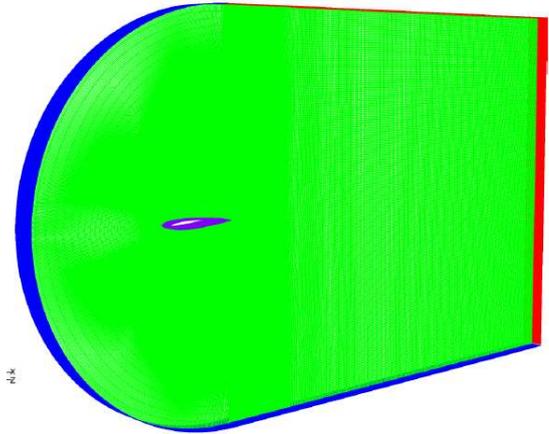


Figure4.2.3-11. Numerical conditions of simulation for estimation of the growth rate of turbulent eddies

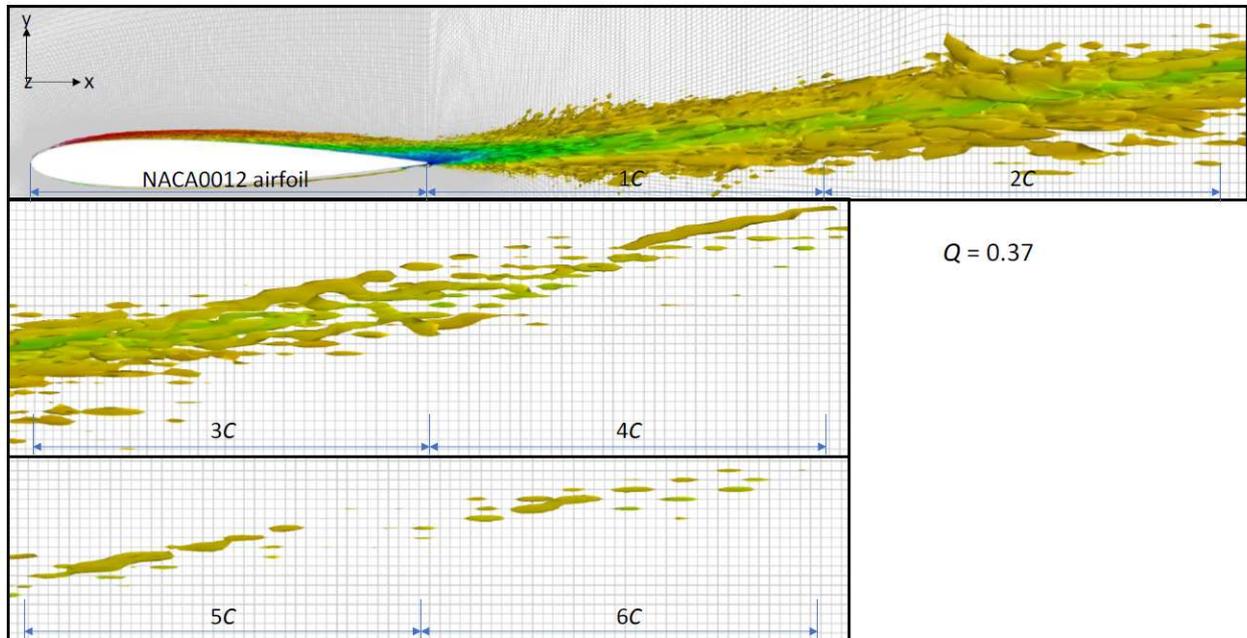


Figure4.2.3-12. Iso-surface of the second invariant of the velocity gradient tensors in the wake of an airfoil

風車後流の乱れと翼の干渉を数値解析で正しく評価することができることを確認するため、渦の成長率と渦のサイズを考慮した解析を実施した。翼の上流に格子乱流を設置し、風洞実験に近い条件で

翼周りの解析を行った。Figure4.2.3-13 に解析領域を示す。解析領域の上流に乱流格子を設置し、NACA0012 周りの流れ解析を実施した。乱流格子は開口率 60%の角棒を用いたものとした。解析領域は、翼弦長  $C$ を代表寸法として翼の前縁から  $1/2$  翼弦長の位置を原点とし、上流  $5C, 10C$ の位置に格子乱流を設置した。この位置は、乱流格子下流の流れが（格子の影響が小さくなり）一様等方性となるための助走距離を格子間隔  $M$ の 30 倍程度となることから、 $30M$ に相当する  $5C$ とした。

Figure4.2.3-14 に翼周りのメッシュ（C型メッシュ）と乱流格子の接続を示す。格子のトポロジーが異なる場合、単にメッシュが細かいだけでなく、接続がスムーズでないと流れ場に非物理的な振動が発生する可能性がある。メッシュ解像度、接続方法に十分注意して格子を生成した。

Figure4.2.3-15 に格子乱流中の翼周りの流れ場の乱流強度を示す。格子で生成された乱れが緩やかに減衰し、翼に流入していることがわかる。Figure4.2.3-16 に下流方向への減衰率を示す。

一様等方性乱流の乱れの減衰は Saffman により [1]、乱流格子からの距離の  $-6/5$  乗に比例して減衰することが知られている。解析結果は、 $-6/5$  乗に近い減衰特性を示していることから、メッシュのゆがみ、非一様性などの影響をほとんど受けておらず、数値粘性による影響もないことがわかった。

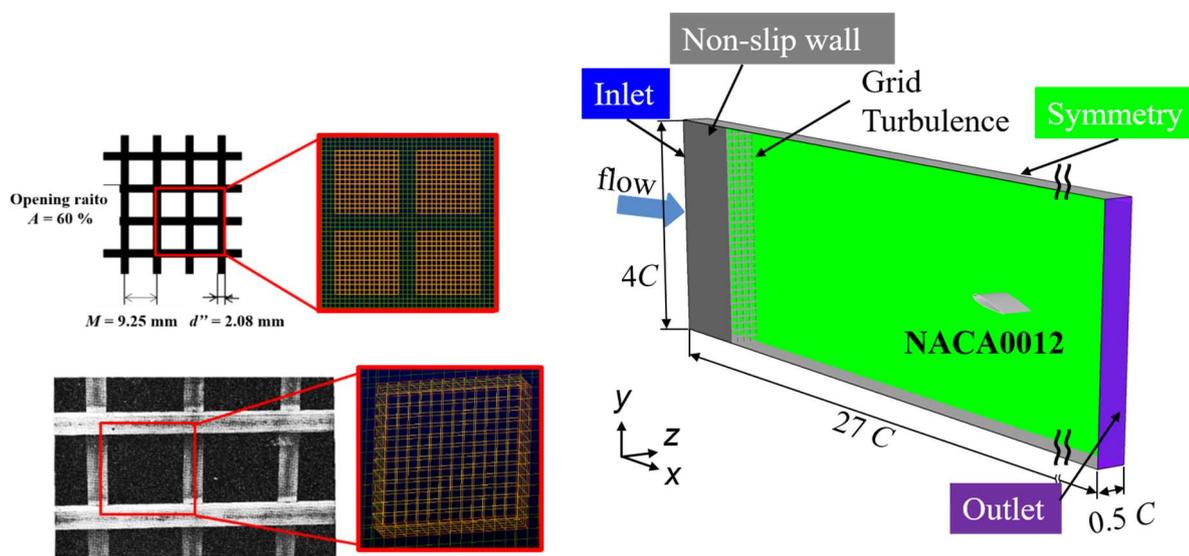


Figure4.2.3-13. Numerical domain for evaluation of airfoil performance in grid turbulence

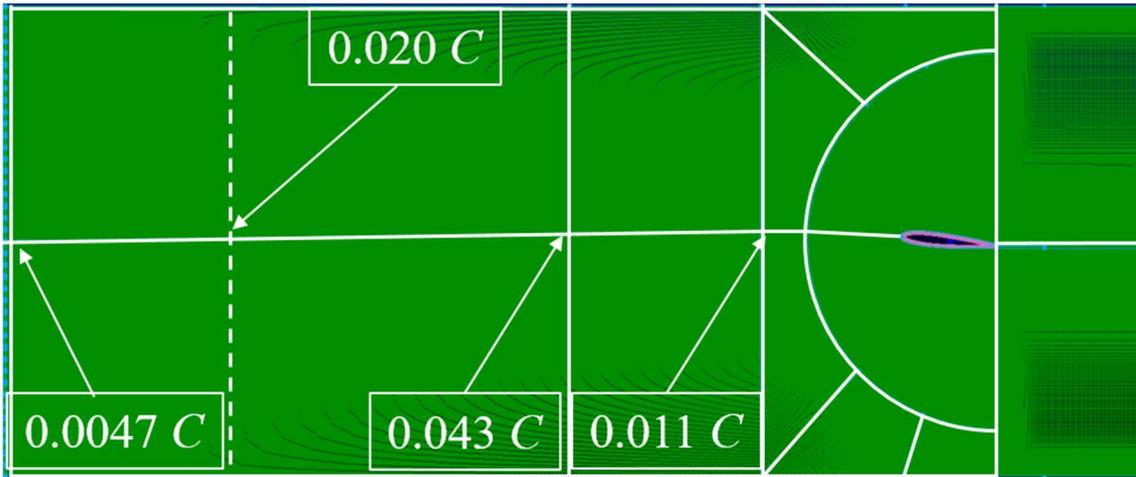


Figure4.2.3-14. Mesh topology for flow simulation airfoil in the grid turbulence

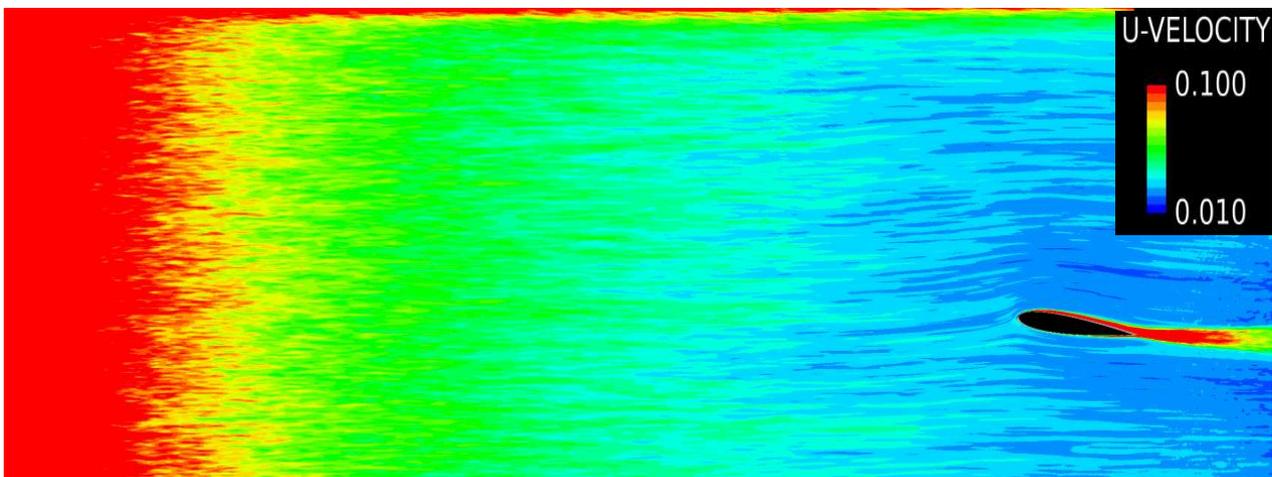


Figure4.2.3-15. Distribution turbulence intensity behind a turbulence grid

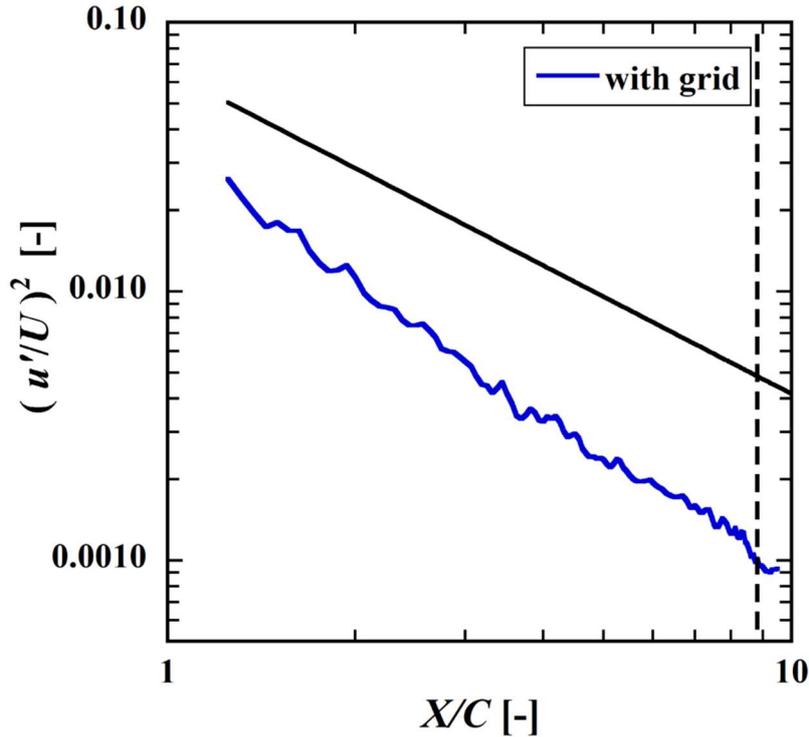


Figure4.2.3-16. Decay tendency of turbulence intensity in mainstream direction

非等方テンソル  $b_{ij}$  は、Rotta より式(1)で定義された乱流の非等方度を表すテンソルである[2]。この非等方テンソルはレイノルズ応力テンソル( $\overline{u_i u_j}$ )を表しており、等方性乱流からのずれを表す量となる。Figure4.2.3-17 に非等方テンソルの下流方向への変化を示す。格子乱流で乱れが生成された直後は、格子による影響を受けるため、非等方テンソルがゼロではないが、下流に行くにしたがって、等方化し、翼の直前では、ほぼ非等方度はゼロとなっている。

乱流場が等方化する傾向は、式(2)に示す非等方性テンソルの第2不変量、式(3)に示す第3不変量を用いて表すことができる。Figure4.2.3-18 に第2不変量と第3不変量の関係を示す。ここで第2不変量の大きさは非等方度の度合いを表し、第3不変量は、非等方度により乱流場の渦スケールがどのような形状をしているかを示す。第2不変量が小さいほど等方的であること示しており、第3不変量が正の場合、渦形状は主流方向に伸びた葉巻型になる。一方、第3不変量が負の場合、パンケーキのように板状の形状となる。翼の近傍では第2、第3不変量ともゼロに近く流れ場は等方であることがわかる。また、第3不変量が正の場合であるため、格子乱流から生成された乱れは翼方向に向かって伸びた葉巻型であることがわかる。初期かく乱は下流に行くにしたがって等方化するが、等方化の過程はKwing-So と JOHN[3]が示した第2不変量と第3不変量により表される Return to Isotropy の示す領域内にあることがわかる。この結果より、生成した乱れが自然に等方化していることが確認され、非物理的なふるまいがみられないことを示唆している。

$$b_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j}}{q^2} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \quad q = \sqrt{\left(\frac{u'_1}{U}\right)^2 + \left(\frac{u'_2}{U}\right)^2 + \left(\frac{u'_3}{U}\right)^2} \quad (1)$$

$$II = -b_{ij}b_{ji} \quad (2)$$

$$III = \frac{b_{ij}b_{jk}b_{ki}}{3} \quad (3)$$

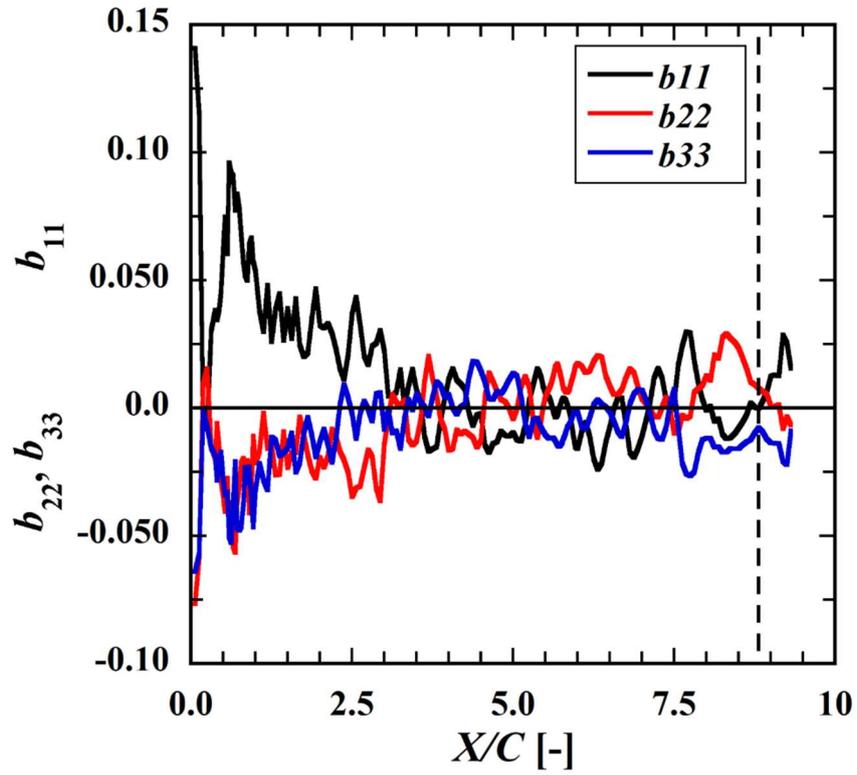


Figure4.2.3-17. Streamwise profiles of diagonal components of anisotropy tensor

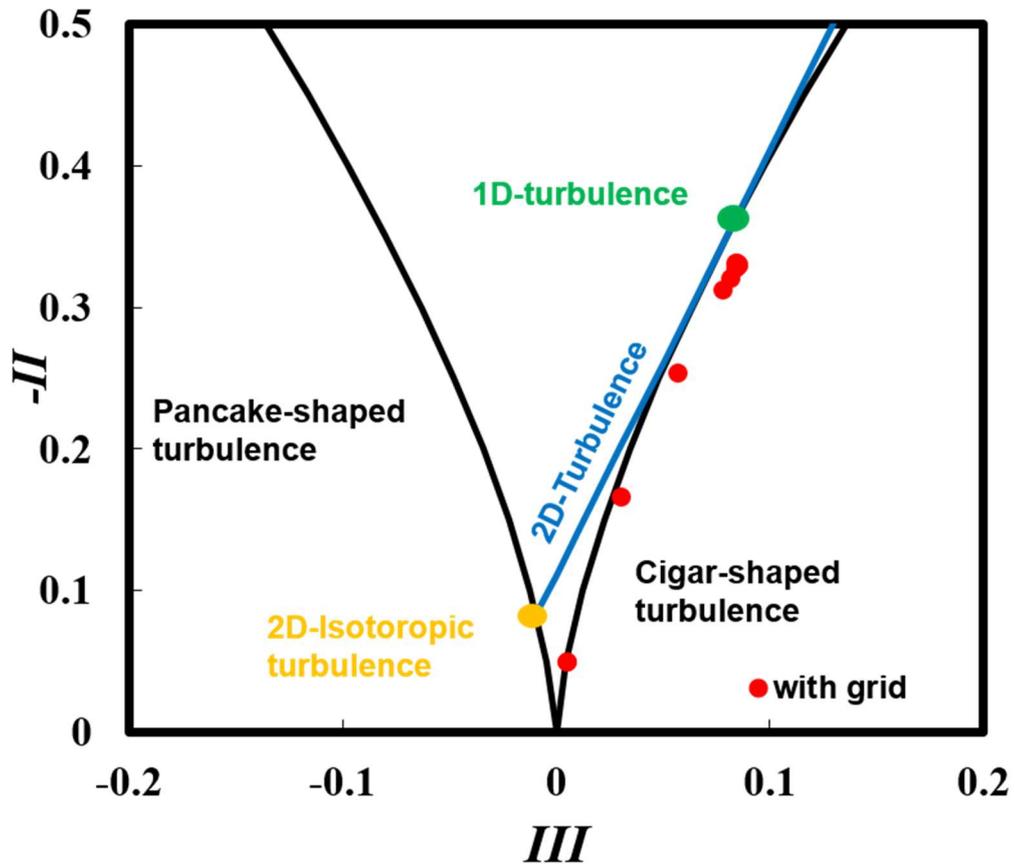


Figure4.2.3-18. The turbulence triangle and possible states of turbulence in invariant coordinates,  $-II$  vs.  $III$

Figure4.2.3-19 に翼周りの流れ場を示す。格子乱流場では、翼に乱れが流入していることがわかる。また、Figure4.2.3-20 に主流乱れの速度スペクトルを示す。速度変動スペクトルには、周波数の $5/3$ 乗に比例している慣性小領域がみられることから、格子乱流に自然な乱流を誘起できていることがわかる。これらの結果から、解析領域内に、一様かつ高レイノルズ数乱流場が形成されていることがわかる。

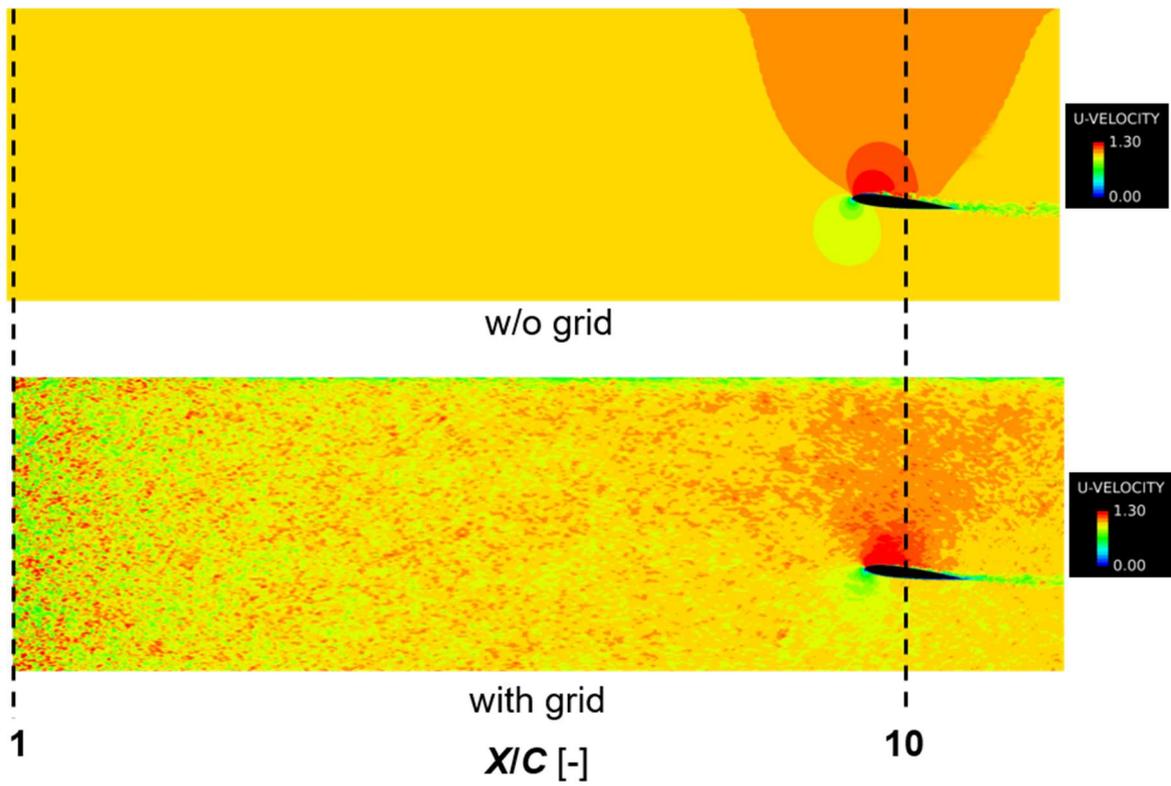


Figure4.2.3-19. Flow prepattern around an airfoil without and with turbulence grid

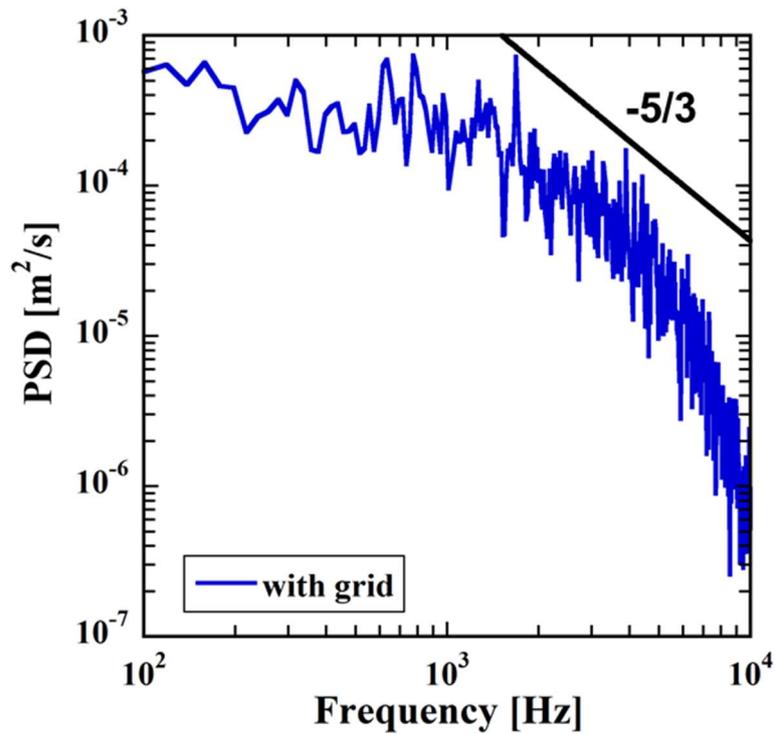
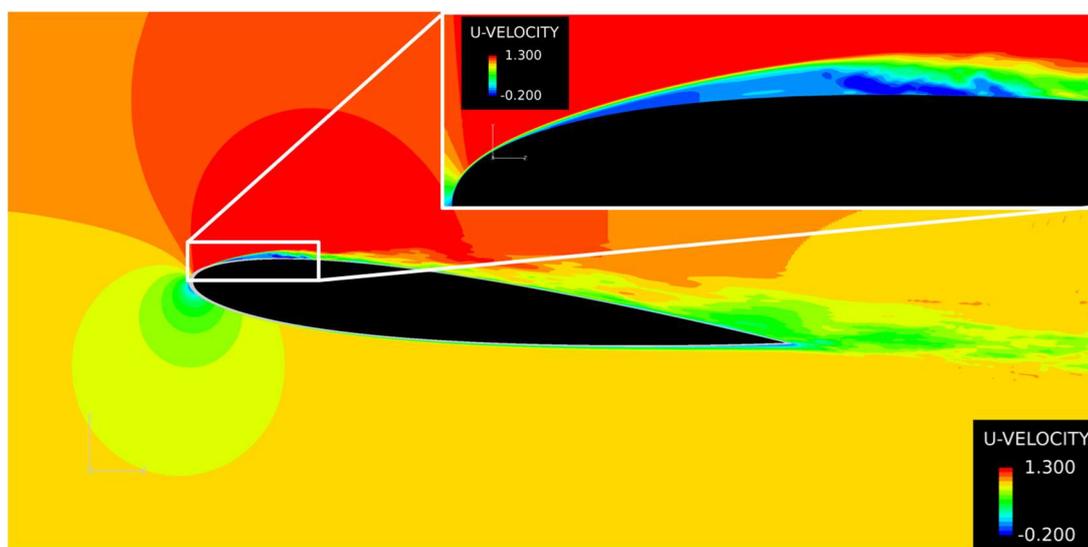


Figure4.2.3-20. Power spectrum of grid turbulence

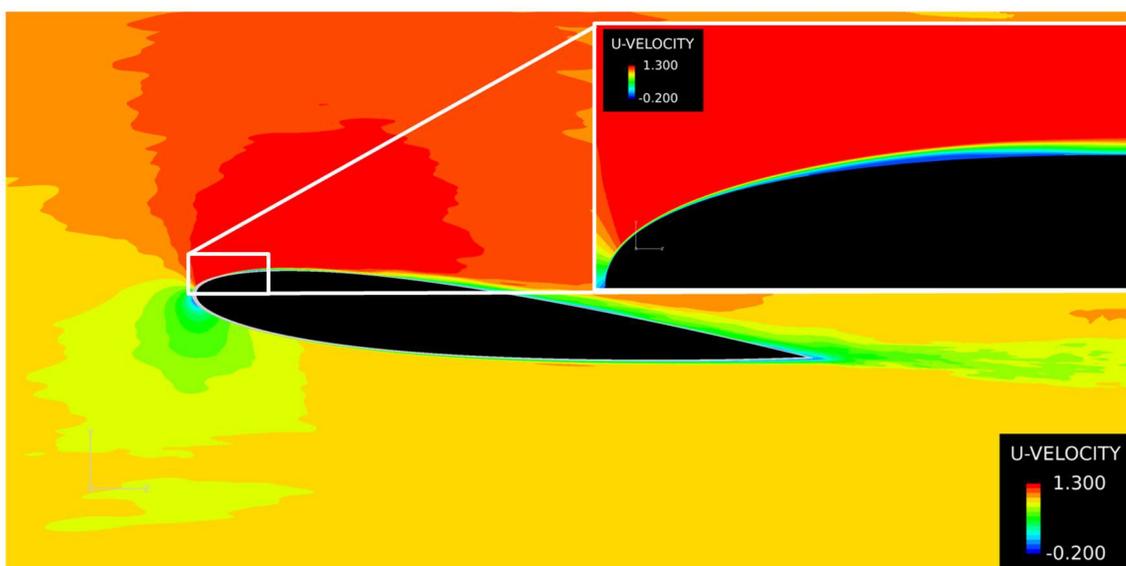
Figure4.2.3-21 に翼近傍周りの流れ場を示す。主流に乱れがない場合、前縁付近で流れが剥離し、剥

離泡が形成される。Figure4.2.3-22 に翼面静圧を示す。負圧面の圧力が前縁から少し下流に行った位置において一定となっていることわかる。この部分ははく離泡ができた領域に相当する[4]。

主流に乱れがある場合、負圧面のスペクトルは連続的であり、流れが翼面に沿っていることを示している。剥離泡が存在する場合、翼前縁の流れが翼に沿って流れないため、流体力が低下する。剥離泡が生成されている場合、翼による流れの転向が小さくなる。この結果、主流乱れがある場合、翼の揚力が 1.7%増加し、抗力が減少することが確認された。抗力の低下は、はく離泡が小さくなることによって後流の幅が小さくなるためである。格子乱流が揚力、抗力に及ぼす影響は、風洞実験とも良く一致していることが確認された。これらのことより乱れが流入する場合の翼周りの流れを正しく評価できていることがわかる。これらの知見を風車の全体解析に適用することにより後流の影響を正しく評価することが可能となった。



(a) w/o grid



(b) with grid

Figure4.2.3-21. Flow pattern around an airfoil without and with grid turbulence

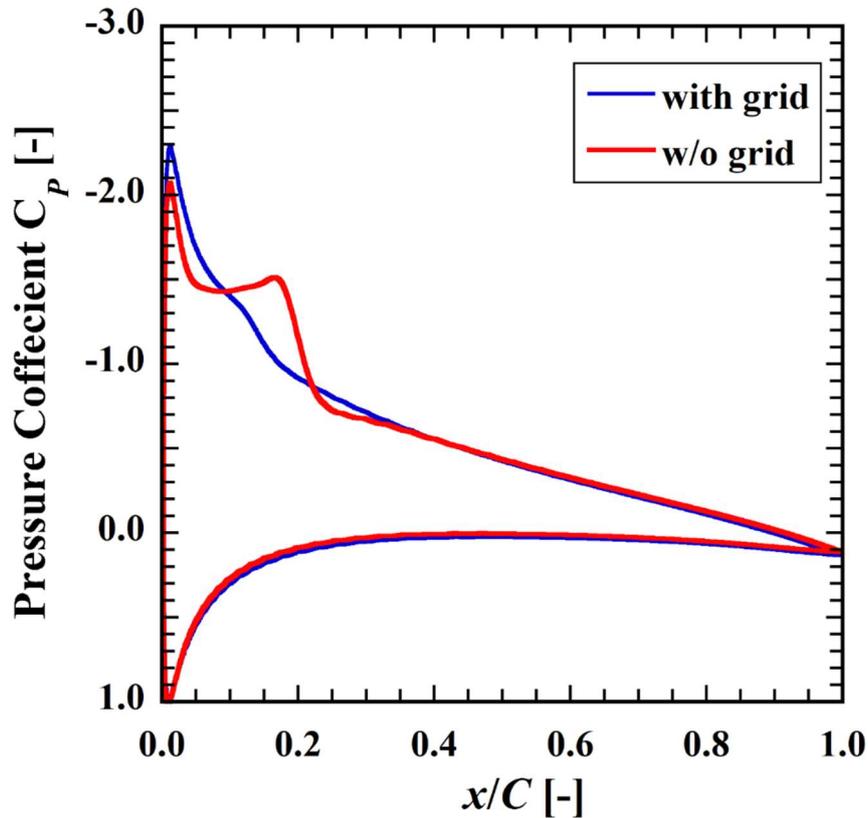


Figure 4.2.3-22. Distribution of surface pressure coefficient of airfoil

文献

- [1] Saffman, P. G. “Note on decay of homogeneous turbulence”, Physics of Fluids, Vol. 10, pp. 1349–1352, (1967)
- [2] Rotta J. C., “Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz”, Zeitschrift für Physik, Vol. 129, pp. 547–572, (1951)
- [3] Kwing-So Choi and J. L. Lumley, “The return to isotropy of homogeneous turbulence”, J. Fluid Mech., Vol. 436, pp. 59–84, (2001)
- [4] 李家賢一, “翼型上に生ずる層流剥離泡”, 日本流体力学学会誌, Vol. 22, No. 1, pp. 15-22, (2003)

(4) 流体構造連成振動解析による風車ブレードの信頼性評価の高精度化

(4-1) 複合材料構造特性を考慮した風車ブレードの流体構造連成振動解析技術

複合材料構造特性を考慮した風車ブレードの流体構造連成振動解析技術を構築した。プロジェクトの全体推進と協力し、NREL5MW 発電用風車の複合材料構造風車ブレードを対象とした片方向流体構造連成解析に関しても、「京」上での FFB 解析と PC クラスタ上での ADVENTURE\_Solid 及び ADVENTURE\_Fatigue による解析を REVOCAP\_Coupler を介してオフラインで連成させる解析を実行し、LES 流体解析から振動応答解析、疲労損傷解析までを滞りなく実行できることを確認するとともに、その解析技術を構築した。

#### (4-1-1) 流体解析結果から風車ブレードへの流体力の入力データ構築

並列 LES 解析コード FFB を用いた洋上大型風車周りの非定常流体解析の結果から、昨年度構築した REVOCAP\_Coupler を用いて風車ブレードに作用する流体力を抽出し、ブレードの構造信頼性解析を行うためには、ADVENTURE\_Solid で使用できる形式に変換する必要がある。また、今回は非定常流体解析の結果は風車ブレード一回転分のみを用いたが、複数回回転時の構造信頼性解析を行うため、一回転分の表面力データを複製し、前後に緩和区間を設けることで複数回回転を模擬したデータを作成した。以下の4ケースの流体解析結果に対して入力データを構築した。

- (a) 一様流流入：周速比 5 (以下の説明では” TSR5” )
- (b) 一様流流入：周速比 6 (以下の説明では” TSR6” )
- (c) 一様流流入：周速比 7 (以下の説明では” TSR7” )
- (d) 一様流流入：周速比 8 (以下の説明では” TSR8” )

流体解析の結果を見ると流れ場は準定常状態であり、ブレード 1 回転の開始時点と終了時点の表面力分布は詳細に見ると一致していない。そのため、単純に 1 回転の終了直後に開始時点の表面力分布をループさせてしまうと、1 回転目終了時点の表面力分布と 2 回転目開始時点の表面力分布の間に不連続変化が生じ、この差が実現象には存在しない異常な衝撃力として構造信頼性解析に悪影響を及ぼす。また、回転開始時点で表面力が発生しているため、構造解析の立場から見ると解析開始直後にやはり衝撃力が与えられることになる。実現象ではこのような衝撃力は発生していないため、これも解析に悪影響を及ぼす (Figure4.2.3-23)。

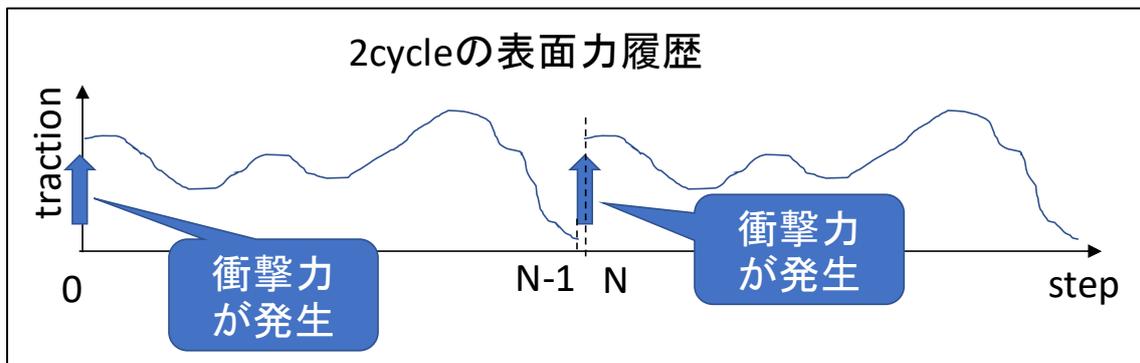


Figure4.2.3-23. Conceptual diagram of impact force generation at the surface force history replication

これらの問題点を改善するため、1 回転目開始の前と、 $n$  回転目 $\sim n+1$  回転目( $n>0$ )の間にそれぞれ表面力分布が滑らかにつながるような緩和区間を設け、緩和区間中の流体力分布を区間前後の流体力の値から生成する処理を適用した。以後、1 回転目開始の前に設ける緩和区間を「初期緩和区間」、 $n$  回転目 $\sim n+1$  回転目の間の緩和区間を「中間緩和区間」と呼ぶ。

#### (4-1-2) 補間アルゴリズム

簡便のため緩和区間前後の履歴から3次曲線で接続するようにした。緩和区間内のNステップを追加する際の概念図を Figure4.2.3-24 に示す。初期緩和区間については $v_{N-2} = v_{N-1} = 0$  と見做した。

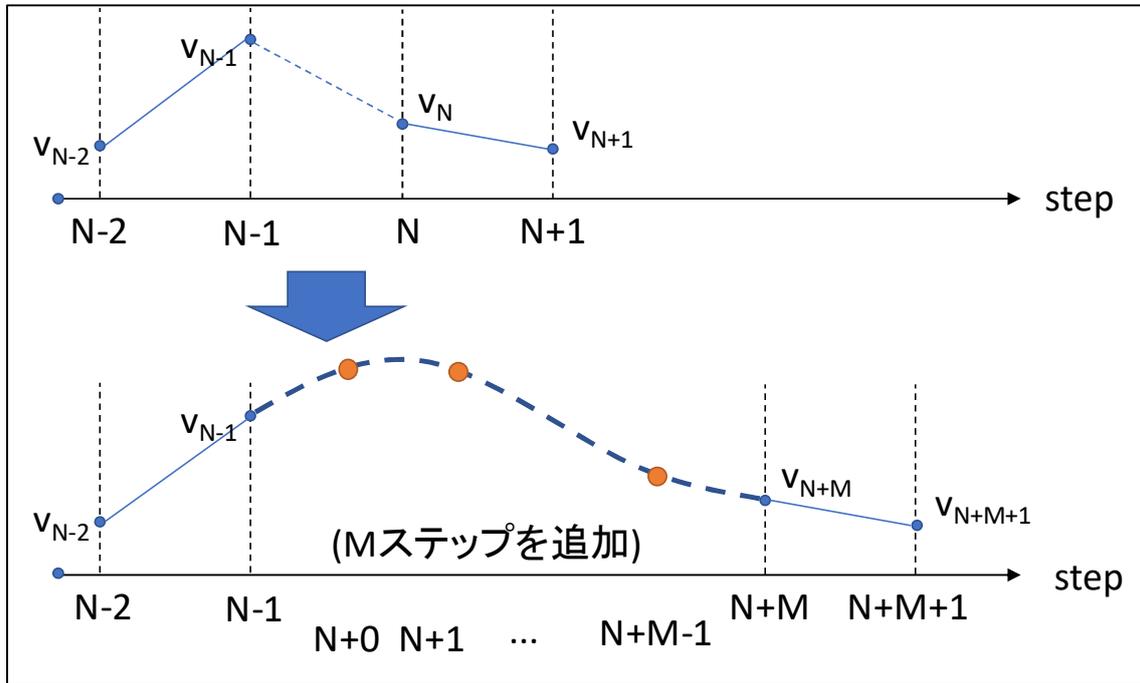


Figure4.2.3-24. Conceptual diagram of the interpolation curve in the relaxation interval

緩和区間内は

$$v_s = f(s) = As^3 + Bs^2 + Cs + D \quad (2-1)$$

で補間した。ただし、sは緩和区間内に新たに生成する追加ステップ番号である。式(2-1)をsで微分すると、

$$f'(s) = 3As^2 + 2Bs + C \quad (2-2)$$

が得られる。

補間区間前後の値との1次及び2次連続性を満たすには、以下の式を満たす必要がある。

$$v_{-1} - v_{-2} = v_0 - v_{-1} \quad (2-3a)$$

$$v_{N+1} - v_N = v_N - v_{N-1} \quad (2-3b)$$

$$f'(0) = C \quad (2-3c)$$

$$f'(N-1) = 3A(N-1)^2 + 2B(N-1) + C \quad (2-3d)$$

式(2-1)~(2-3)から、式(2-1)の係数A~Dは以下の式を解くことで得られる。

$$D = 2v_{-1} - v_{-2} \quad (2-4a)$$

$$v_{N-1} = A(N-1)^3 + B(N-1)^2 + C(N-1) + D = 2v_N - v_{N+1} \quad (2-4b)$$

$$C = v_{-1} - v_{-2} \quad (2-4c)$$

$$3A(N-1)^2 + 2B(N-1) + C = v_{N+1} - v_N \quad (2-4d)$$

式(2-4a)～(2-4d)を連立一次方程式の形に書き直すと、

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ (N-1)^3 & (N-1)^2 & (N-1) & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3(N-1)^2 & 2(N-1) & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2v_{-1} - v_{-2} \\ 2v_N - v_{N+1} \\ v_{-1} - v_{-2} \\ v_{N+1} - v_N \end{pmatrix} \quad (2-5)$$

となる。

式(2-5)の係数行列は  $N \neq 1$  のとき逆行列を持つため、

$$\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{(N-1)^3} & -\frac{2}{(N-1)^3} & \frac{1}{(N-1)^2} & \frac{1}{(N-1)^2} \\ -\frac{3}{(N-1)^2} & \frac{3}{(N-1)^2} & -\frac{2}{N-1} & -\frac{1}{N-1} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 2v_{-1} - v_{-2} \\ 2v_N - v_{N+1} \\ v_{-1} - v_{-2} \\ v_{N+1} - v_N \end{pmatrix} \quad (2-6)$$

を計算することで係数 A～D が求められる。なお、連成境界節点ごとに異なる表面力履歴を持つため、この計算は全ての連成境界節点で行った。

#### (4-1-3) 風車ブレードの構造信頼性解析結果の可視化

オフライン連成解析のための流体力変換ツールには、ADVENTURE\_Solid の計算結果を ParaView で可視化するための VTK ファイルに変換するツール adv2vtk が含まれるため、これを利用して構造信頼性解析の結果を可視化した。以下に、ADVENTURE\_Solid の計算結果による TSR7 ケースの変形可視化結果を示す。ADVENTURE\_Solid の計算結果は、各ケースとも約 0.8Hz の z 方向の振動による変形が支配的であった。そこで、0.8Hz 周期の振動を 8 等分した時刻 (=約 0.179 秒) ごとの変形を可視化した。時刻ごとの静止面を作成し、そこから動画を作成した (Figure4.2.3-25a-e)。

また、本サブ課題で開発した構造信頼性評価のための疲労解析モジュール ADVENTURE\_Fatigue によって得られた 20 年連続稼働させた場合の疲労評価の可視化結果も併せて示す。これは疲労度を 0～1 で表したもので、1 になると破壊されたことを示す (Figure4.2.3-26)。

いずれも可視化ツールとして ParaView を用いた。

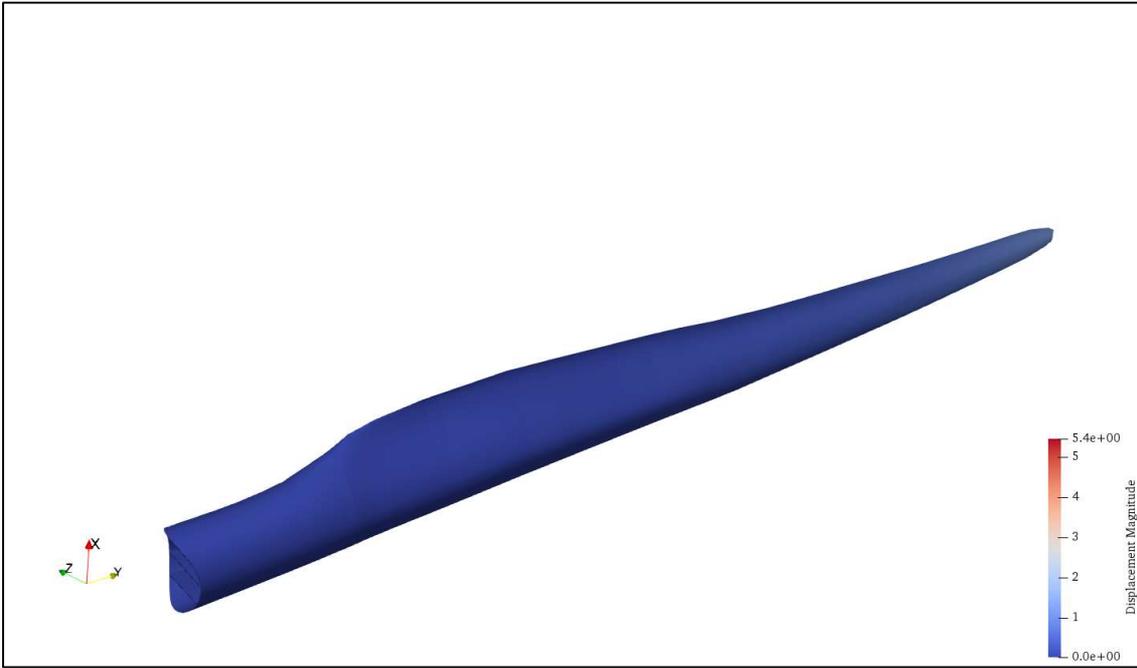


Figure4.2.3-25a. Analysis results of TSR7 (deformation,  $t=0.179\text{s}$ )

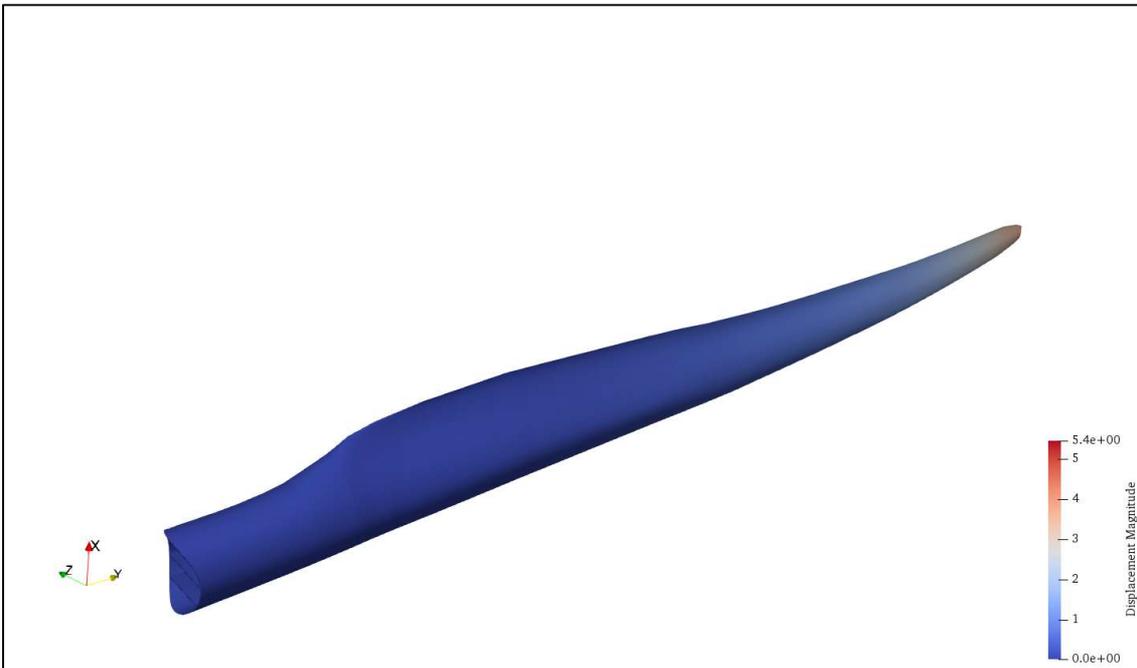


Figure4.2.3-25b. Analysis results of TSR7 (deformation,  $t=0.357\text{s}$ )

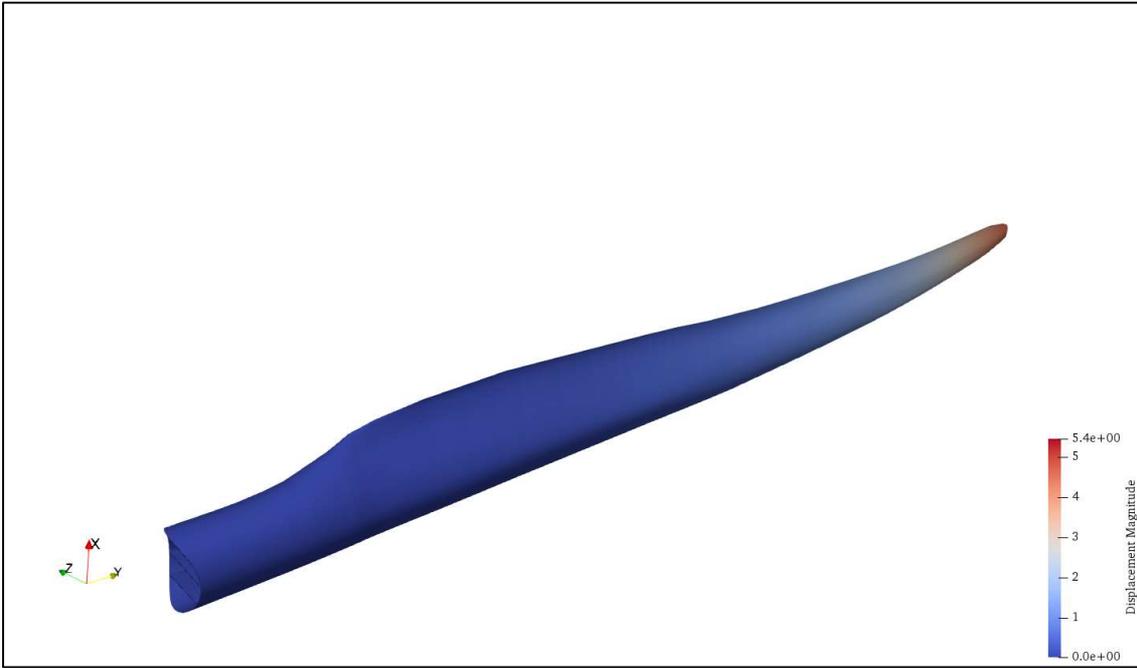


Figure4.2.3-25c. Analysis results of TSR7 (deformation, t=0.536s)

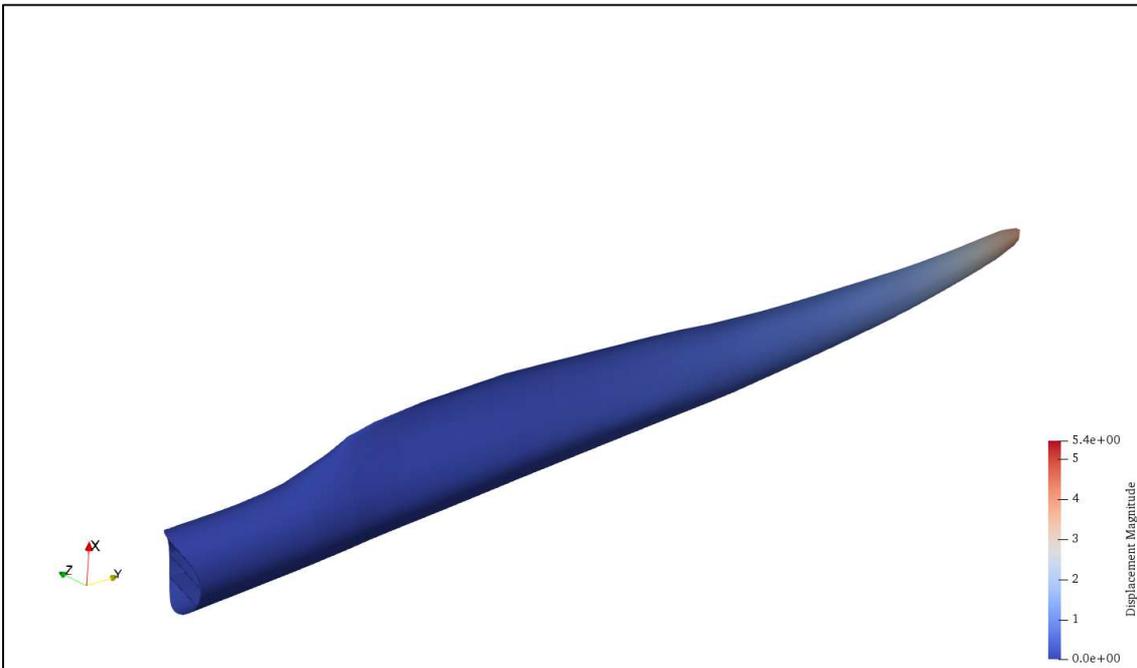


Figure4.2.3-25d. Analysis results of TSR7 (deformation, t=0.714s)

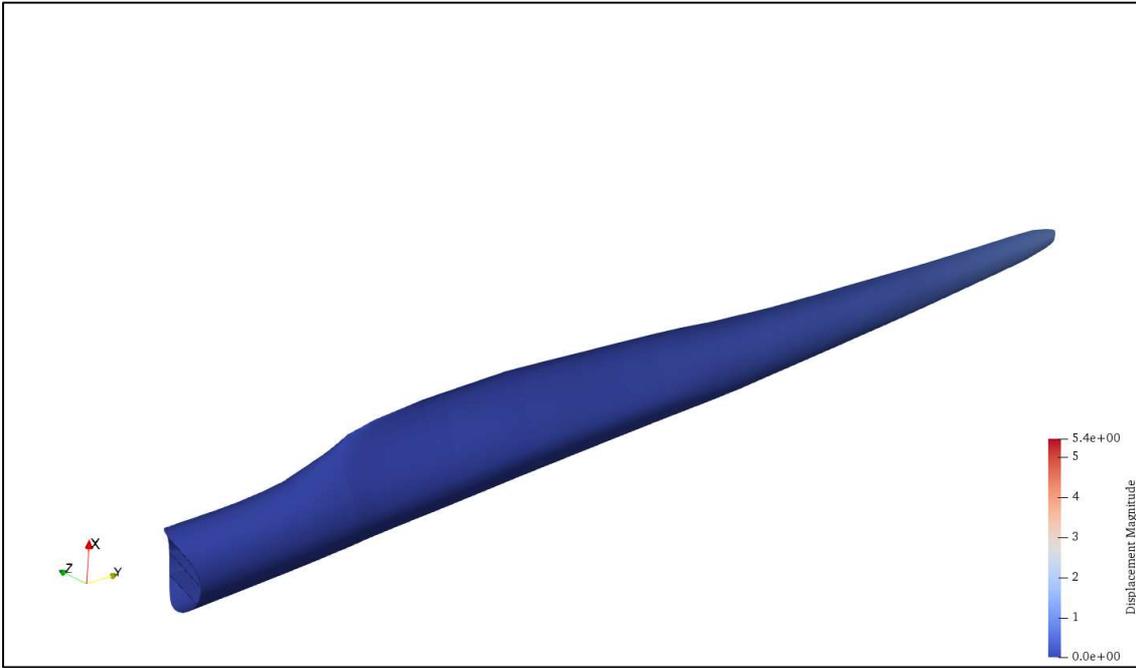


Figure4.2.3-25e. Analysis results of TSR7 (deformation, t=0.893s)

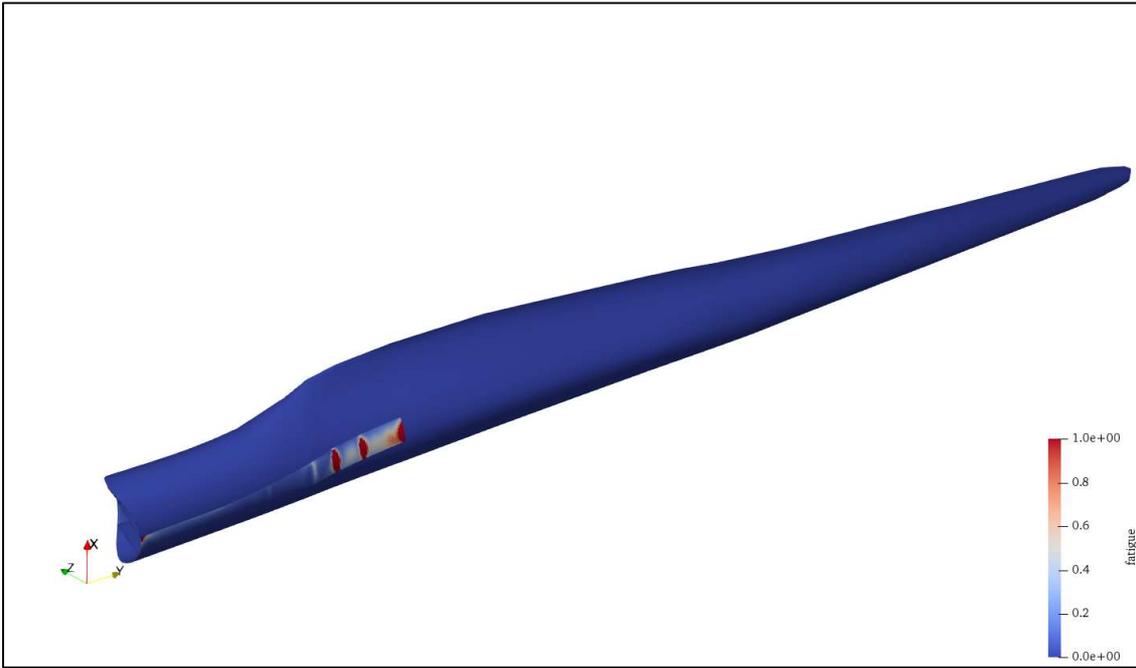


Figure4.2.3-26. Analysis results of TSR7 (fatigue)

(4-2) 風車ブレードの振動応答解析を元にした風車ブレードの累積疲労損傷評価法

風車ブレードの振動応答解析を元に、風車ブレードの累積疲労損傷評価法を構築した。ADVENTURE\_Solid から得られる NREL5MW 発電用風車ブレードの振動応答解析結果を入力データとして、風車ブレードの累積疲労損傷評価を工学的手法に基づき行える ADVENTURE\_Fatigue コードを構築した。これにより NREL5MW 発電用風車を対象として、LES 解析から振動応答解析、疲労損傷解析までを滞りなく実行できることを確認するとともに、その解析フローを確立した。

(4-2-1) 重力と遠心力を ADVENTURE\_Solid へ実装

本サブ課題では NREL 5MW ブレードの構造解析と信頼性解析を目的とし、一方向流体・構造・疲労計算システムの開発を行った。流体シミュレーションは FrontFlow/Blue を用いて行い、流体力履歴を REVOCAP\_Coupler を介してブレード表面に適用し、ADVENTURE\_Solid を用いた構造解析を行った。また、構造解析に先立ち、詳細な幾何学情報を持つ正確な有限要素ブレードモデルを構築した。構造解析で算出した応力履歴データは、ADVENTURE\_Fatigue を用いた疲労寿命推定に利用した。

流体解析： FrontFlow/Blue (FFB)

構造解析： ADVENTURE\_Solid (ADVENTURE\_Solid)

疲労解析： ADVENTURE\_Fatigue (ADVENTURE\_Fatigue)

Figure4.2.3-27 に示すように、軸 z を中心に回転するブレードの場合、方向を固定した状態で風力と重力を考慮する必要がある。数値解析において翼根には拘束条件が付与されており、その結果、風力に加えて時間の経過とともに方向が変化する重力や遠心力も考慮する必要がある。

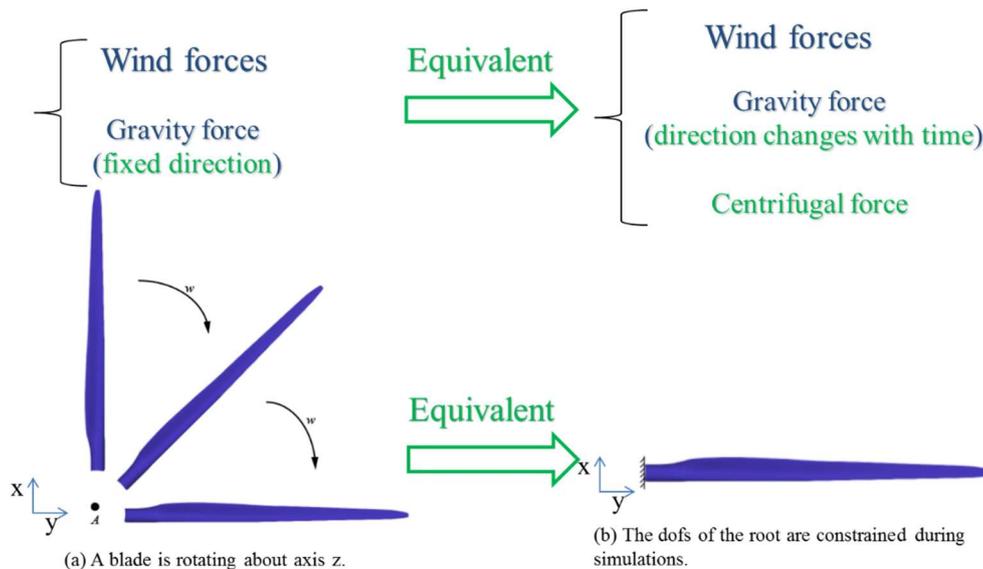


Figure4.2.3-27. Numerical treatment for the rotating blade during dynamic simulations

空間に固定された座標系を考え、遠心加速度を導出する。回転軸に垂直な平面を考え、その平面上の点（積分点）が反時計回りに等加速度運動（角加速度がゼロのときは等角速度運動）をしていると仮定する。点の半径方向座標を  $r$ 、初期角速度を  $\omega_0$ 、角加速度を  $\dot{\omega}$  とする。時刻  $t$  の角速度  $\omega$  は  $\omega = \omega_0 + \dot{\omega}t$  である。回転変位  $\Delta\theta$  は

$$\Delta\theta = \int_0^t \omega dt = \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2$$

である。変位  $\mathbf{u}$  は 2 次元直交座標系で

$$\mathbf{u} = \left( r \cos \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right), r \sin \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right) \right)$$

と表すことができる。この式から、速度  $\dot{\mathbf{u}}$  と加速度（向心加速度） $\ddot{\mathbf{u}}$  はそれぞれ

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}} &= \left( -r(\omega_0 + \dot{\omega}t) \sin \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right), r(\omega_0 + \dot{\omega}t) \cos \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right) \right) \\ \ddot{\mathbf{u}} &= \left( -r\dot{\omega} \sin \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right) - r(\omega_0 + \dot{\omega}t)^2 \cos \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right), r\dot{\omega} \cos \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right) \right. \\ &\quad \left. - r(\omega_0 + \dot{\omega}t)^2 \sin \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right) \right) \end{aligned}$$

と導ける。遠心加速度  $\mathbf{a}$  は

$$\begin{aligned} \mathbf{a} = -\ddot{\mathbf{u}} &= \left( r\dot{\omega} \sin \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right) + r(\omega_0 + \dot{\omega}t)^2 \cos \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right), -r\dot{\omega} \cos \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + r(\omega_0 + \dot{\omega}t)^2 \sin \left( \omega_0 t + \frac{1}{2} \dot{\omega} t^2 \right) \right) \end{aligned}$$

である。この式を実装する。なお、角加速度  $\dot{\omega}$  がゼロであるときは

$$\mathbf{a} = (r\omega_0^2 \cos \omega_0 t, r\omega_0^2 \sin \omega_0 t)$$

となる。

密度を  $\rho$  とすると、遠心加速度による物体力は  $\rho \mathbf{a}$  である。離散化された仮想仕事式の物体力の項は

$$\int_{\Omega} N^T \rho \mathbf{a} d\Omega$$

となる。ただし  $\Omega$  は解析領域、 $N$  は形状関数である。実装では物体の回転と共に回転する座標系を考え、遠心加速度を物体力の項として与えた。

#### (4-2-2) NREL 5MW 規格ブレードの動解析

開発したシステムを用いて NREL 5MW ブレードの構造変形及び疲労損傷に及ぼす重力及び遠心力の影響を検討するため、7 ケースの数値計算を実施した。7 ケースの流体力データは FFB を用いて計

算し、1回転の流体データを考慮する。一様流流入：周速比7(入口速度は11.4m/s)とした。構造解析はADVENTURE\_Solidを用いて実施した。CASE 1では重力と遠心力を考慮せず、CASE 2では重力のみ、CASE 3では遠心力のみ、CASE 4では重力と遠心力の両方を考慮している。CASE 5-7では流体力は考慮していない。

Figure4.2.3-28(a)、(b)、(c)は、それぞれ x、y、z 方向に沿った流体力履歴 (TSR=7、一様流入流、1回転)を示している。また、フーリエ変換によりブレード先端の流体力履歴に対応するスペクトル曲線を得た結果を Figure4.2.3- 29(a)、(b)、(c)に示す。これらの曲線から、流体力の主な負荷周波数は6.0Hz以下であることがわかる。

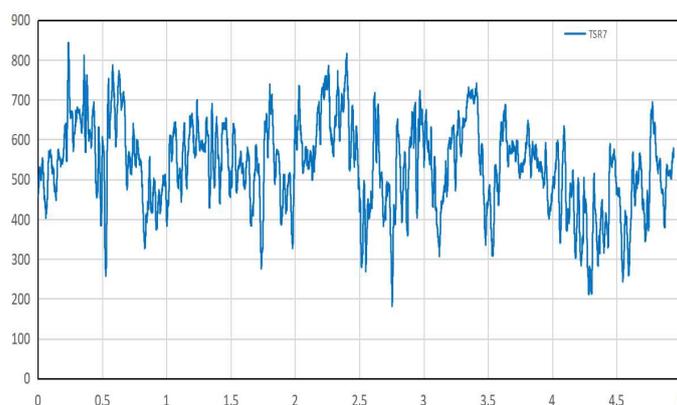


Figure4.2.3- 28 (a). Traction history along x direction (Unit: Pa)

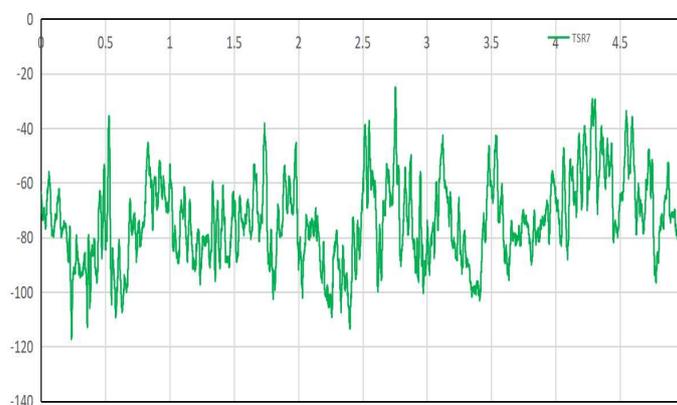


Figure4.2.3- 28(b). Traction history along y direction (Unit: Pa)



Figure4.2.3- 28(c). Traction history along z direction (Unit: Pa)

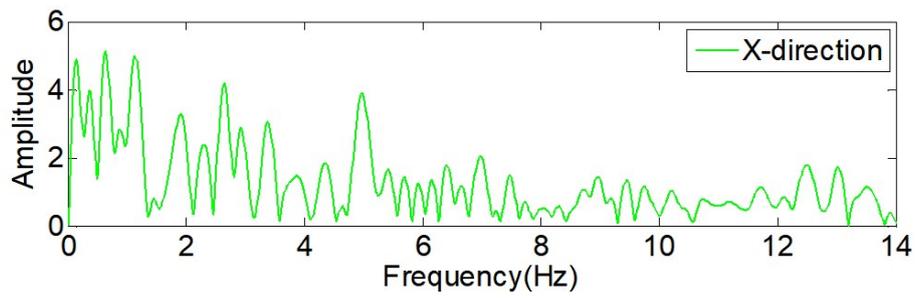


Figure4.2.3- 29(a). spectrum curve along x direction

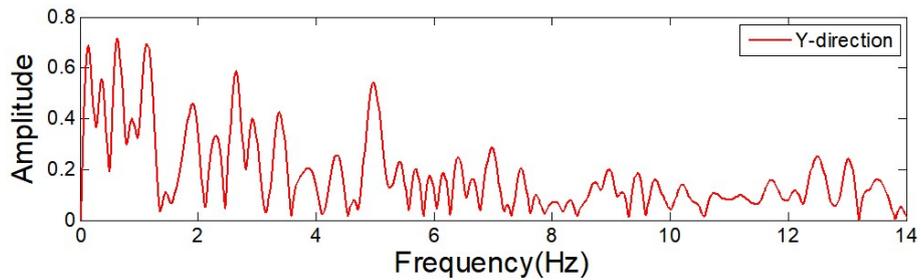


Figure4.2.3- 29(b). spectrum curve along y direction

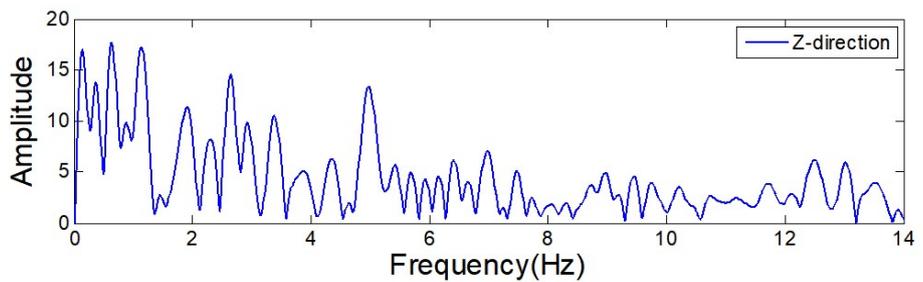


Figure4.2.3- 29(c). spectrum curve along z direction

CASE 1-4 については、ブレード先端の  $x,y,z$  方向の変位履歴をそれぞれ Figure4.2.3-30(a)、(b)、(c) で比較した。これらの図から、全体的には  $x$  方向の変位（曲げ変形）に重力の影響があるものの、遠心力の影響はほとんどないことがわかる。同様に CASE 5-7 のブレード先端の  $x,y,z$  方向の変位履歴をそれぞれ Figure4.2.3-31(a)、(b)、(c) で比較した。これらの図からも同様の結論が得られた。

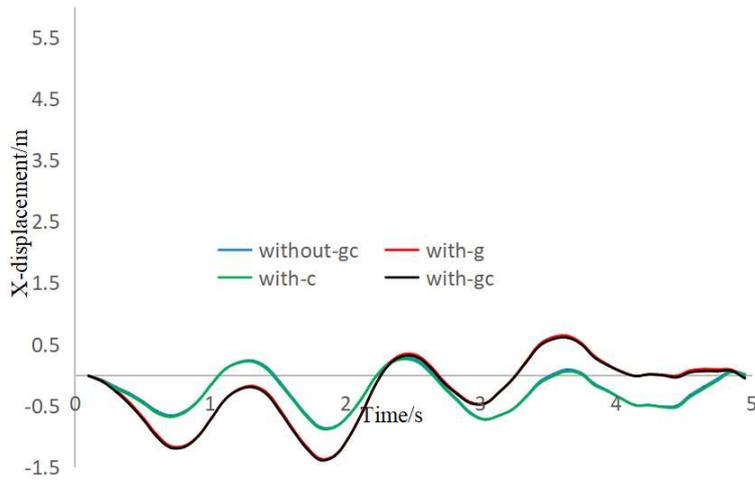


Figure4.2.3- 30(a). Comparison of displacement history at blade tip (CASEs 1-4, x direction)

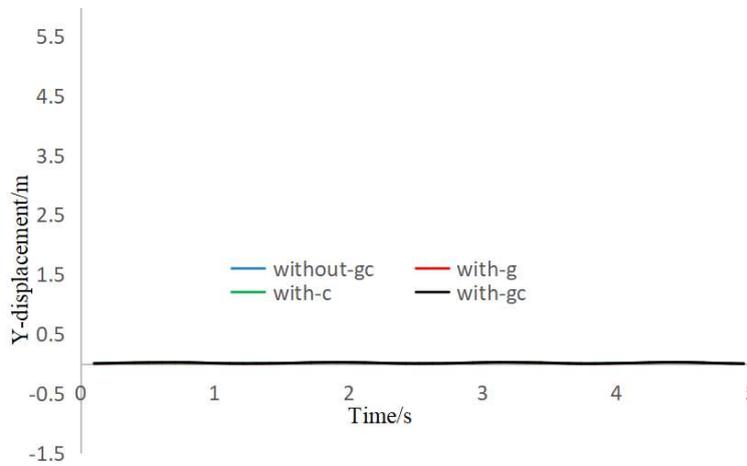


Figure4.2.3- 30(b). Comparison of displacement history at blade tip (CASEs 1-4, y direction)

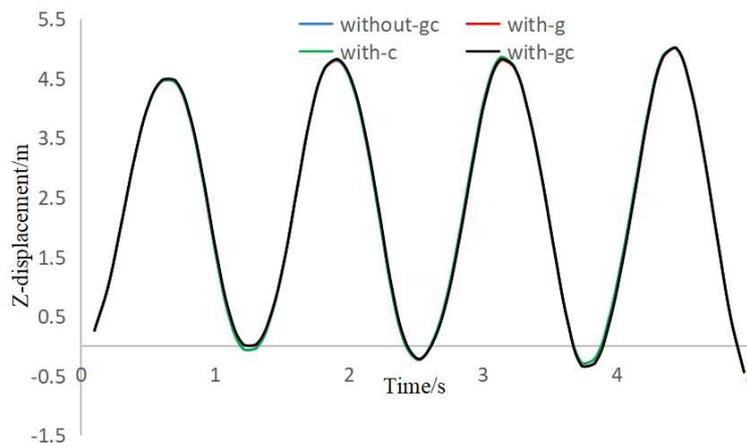


Figure4.2.3- 30(c). Comparison of displacement history at blade tip (CASEs 1-4, z direction)

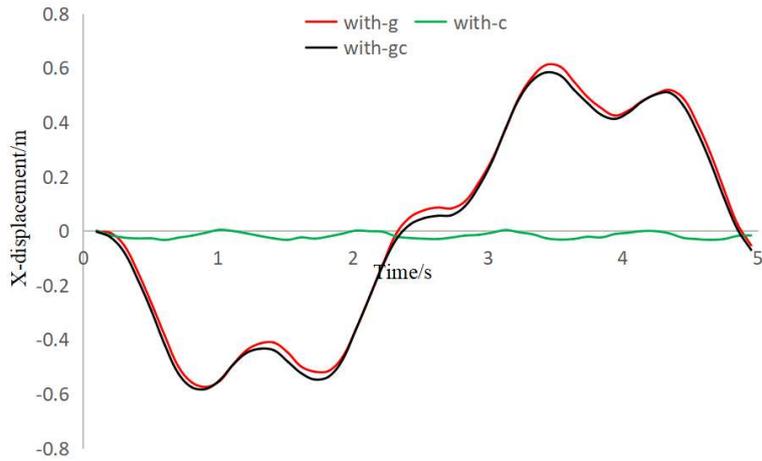


Figure4.2.3- 31(a). Comparison of displacement history at blade tip (CASEs 5-7, x direction)

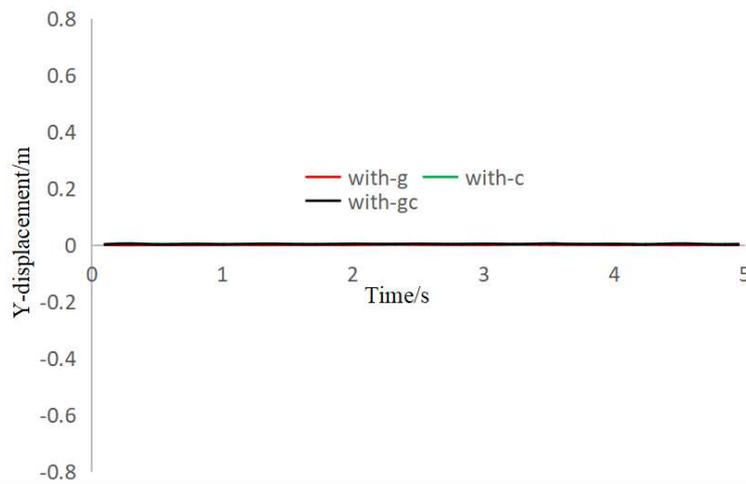


Figure4.2.3- 31(b). Comparison of displacement history at blade tip (CASEs 5-7, y direction)

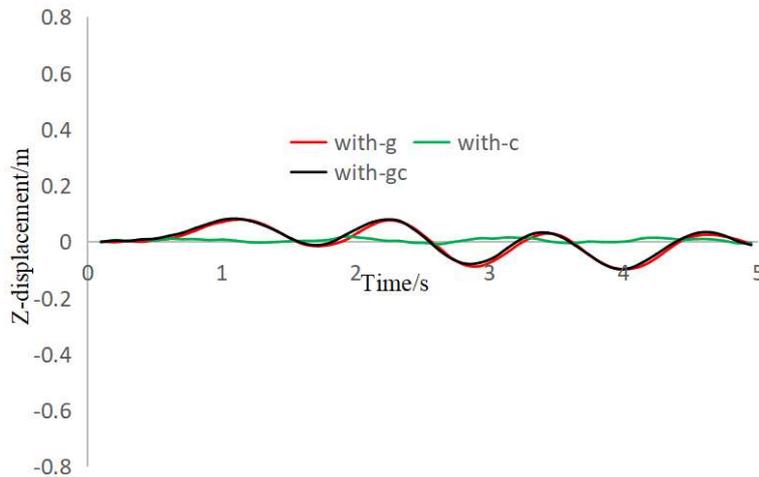


Figure4.2.3- 31(c). Comparison of displacement history at blade tip (CASEs 5-7, z direction)

(4-2-3) NREL 5MW 規格ブレードの疲労解析

動解析と同様に、開発したシステムを用いて NREL 5MW ブレードについて 7 ケースの疲労解析を実施した。7 ケースの流体力データは FFB を用いて計算し、1 回転の流体データを考慮する。一様流

流入 : 周速比 7 (入口速度は 11.4m/s) とした。疲労解析は ADVENTURE\_Fatigue を用い、Figure4.2.3-32 に示す通り 20 年間のブレード全体の疲労損傷分布を求めた。CASE 1 では重力と遠心力を考慮せず、CASE 2 では重力のみ、CASE 3 では遠心力のみ、CASE 4 では重力と遠心力の両方を考慮している。CASE 5-7 では流体力は考慮していない。

Figure4.2.3-33(a)、(b)、(c)、(d)に、CASE 1-4 の疲労損傷分布を示した。これらの図において、EID は要素 ID、max は最大疲労値を示している。重力と遠心力の両方が疲労値に影響を与えていること、重力の影響は要素 ID が 133666 の領域では曲げ効果により疲労値が大きくなること、遠心力の影響は要素 ID が 74031 の領域では疲労値を大きくすることが示された。

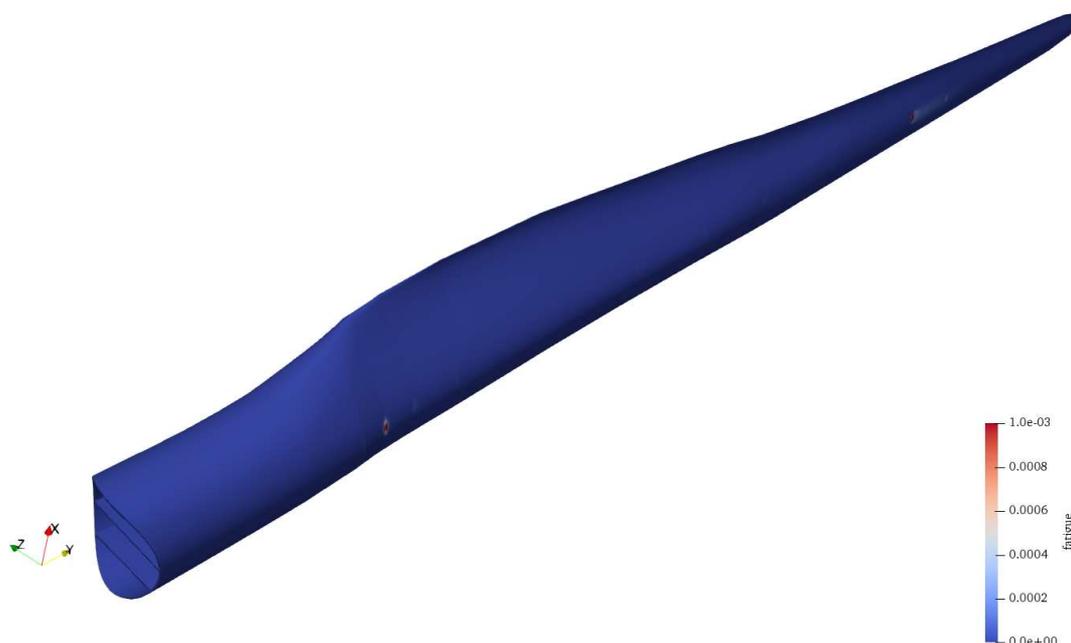


Figure4.2.3-32. Fatigue damage distribution of the blade working for 20 years

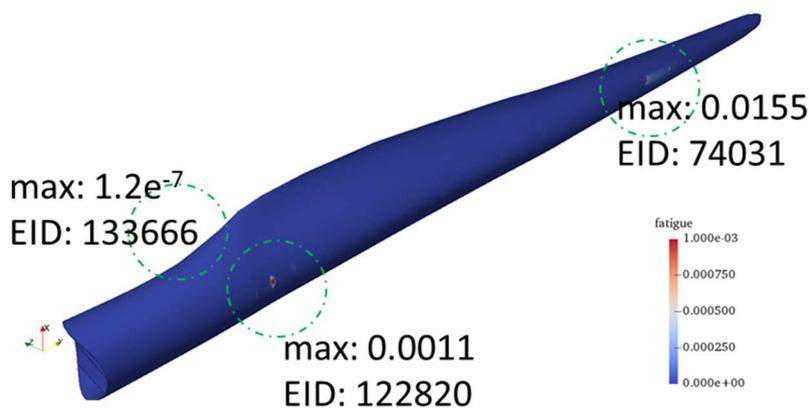


Figure4.2.3- 33(a). without gravity force and without centrifugal force

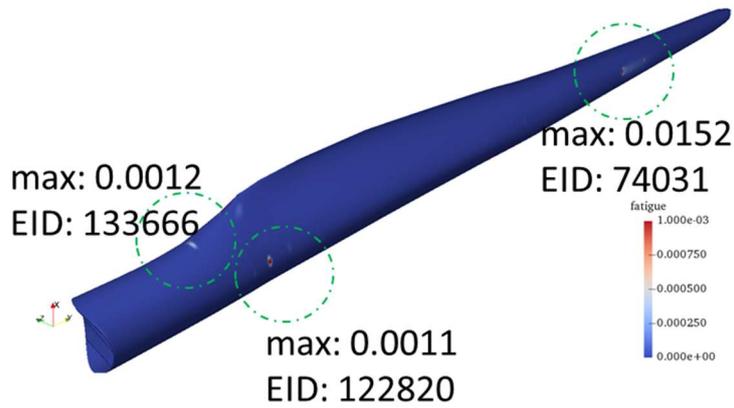


Figure4.2.3- 33(b). with gravity force

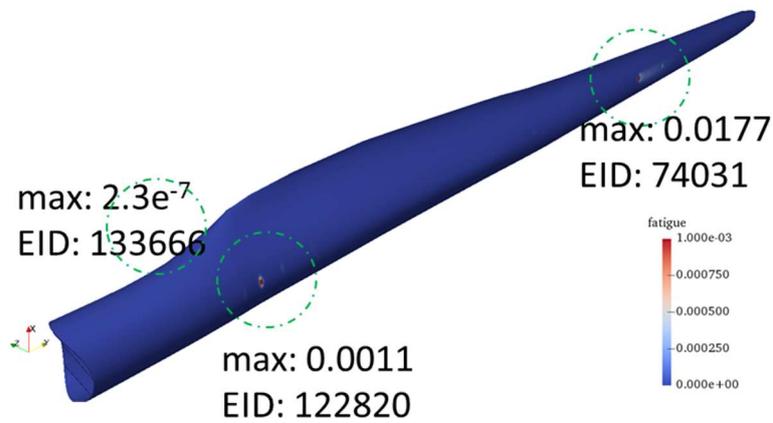


Figure4.2.3- 33(c). with centrifugal force

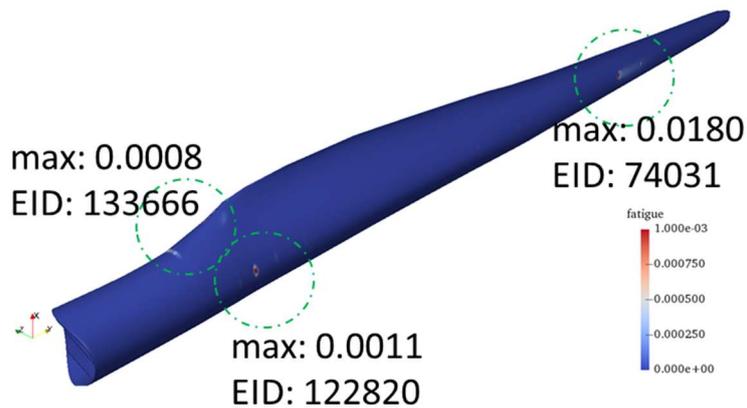


Figure4.2.3- 33(d). with gravity force and with centrifugal force

- (5) 洋上ウィンドファーム全体の高精度流れ解析
- (5-1) RIAM-COMPACT HPC 版の開発
- (5-1-1) 開発方針

風車の設置場所を選定するための風況予測シミュレーションは、事業の成功を左右する判断材料となるため、主に下記の観点で高精度な予測結果が要求される。

1. 複数の風向での評価（16-32 方位）
2. 10 分間の実時間平均値
3. 様々な風況での評価（乱流強度や変動風など）

次世代の風況予測では、従来のシミュレーションのように数点の評価ケースから判断を下すのではなく、これらの点を考慮したシミュレーションを行い、多数の結果から総合的な評価を行う必要がある。そのためには、利用する計算機の性能を引き出せるシミュレータを構築し、多数の計算を短時間で実施することが求められる。利用する計算機は、想定するユーザ層を考慮して、「富岳」を始めとして Intel のクラスター、ベクトル機など多様な計算機を検討しなければならない。そのため、異なるアーキテクチャでも高速な計算が可能な計算方法が望ましい。

基礎方程式として、非圧縮の Navier-Stokes 方程式を用いるため、圧力の Poisson 方程式の求解が最も時間のかかる部分となる。したがって、大規模疎行列を係数行列にもつ反復解法の高速化が最重要課題の一つとなる。

#### (5-1-2) 多風向同時計算の検討

プロジェクト開始時には、「富岳」のアーキテクチャの方向として、低 B/F のメニーコアであることが想定されたため、低 B/F アーキテクチャで高速な実行が可能な反復法の開発が主な目的の一つであった。ループ内の演算密度を増加するアイデアとして、疎行列ベクトル積 ( $Ax=b$ ) を行列行列積の形式 ( $AX=B$ ) に変換することを検討した。つまり、同一の係数行列に対して異なる右辺ベクトルを用意し、対応する複数の解ベクトル  $X$  を同時に求める方法である。異なる右辺ベクトルの具体的な例は、異なる風向の計算が考えられる。この方法は、利用する係数行列をメモリからキャッシュに一度ロードすれば、その値を複数の解ベクトルの求解に流用できるため、要求 B/F を減少させることができ、低 B/F アーキテクチャでの高速化が期待できる。

まず、異なる風向の計算を同時に実行する場合、流れの状況によって計算時間が異なる可能性がある。つまり、流れの変動の度合いにより圧力場を求める場合の反復回数に違いが生じる。速度場の影響は連立一次方程式の右辺項に含まれるが、速度場に変化があると右辺項の値が変化するため、それに応じて収束性が変化することがわかっている。風車の場合、風向や配置により風車間の相互干渉の程度が変わるため、前述のような状況を引き起こす可能性がある。これを確認するために、簡単な実験を行った。

実験は、2次元の2角柱を流入風向に対して直列に配置し、角柱間の距離を変化させたシミュレーションを行った。シミュレータには、非圧縮性流体シミュレータである FFV-C を利用した。FFV-C は直交系格子を用いた LES シミュレータであり、開発する RIAM-COMPACT と類似の特性を示す。Figure4.2.3-34 に各中間の中心距離  $x$  を  $x=1.2\sim 4.5$  まで変化させた場合の流れの様子を計算し、各ケースの圧力反復回数の履歴を示す。横軸はステップ数であり、縦軸は反復回数を示す。配置により、

流れの状況が変わるため、圧力の反復回数の履歴が異なることが確認できる。

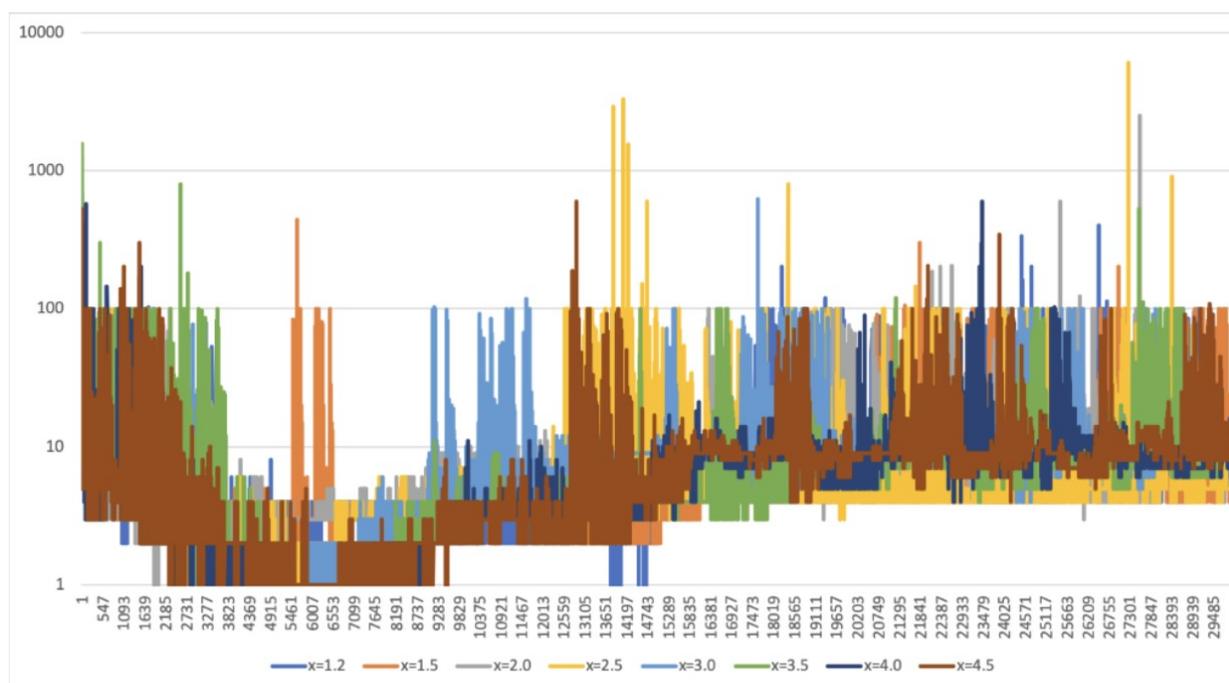


Figure4.2.3-34. History of fluid simulation pressure iterations for different configurations

Figure4.2.3-35 には、最も反復回数の少ない  $x=1.5$  のケースを基準に 30000 ステップまでの反復回数の総数を比較した。これより、今回の単純なケースでも、35%程度の反復回数の差が生じることがわかる。

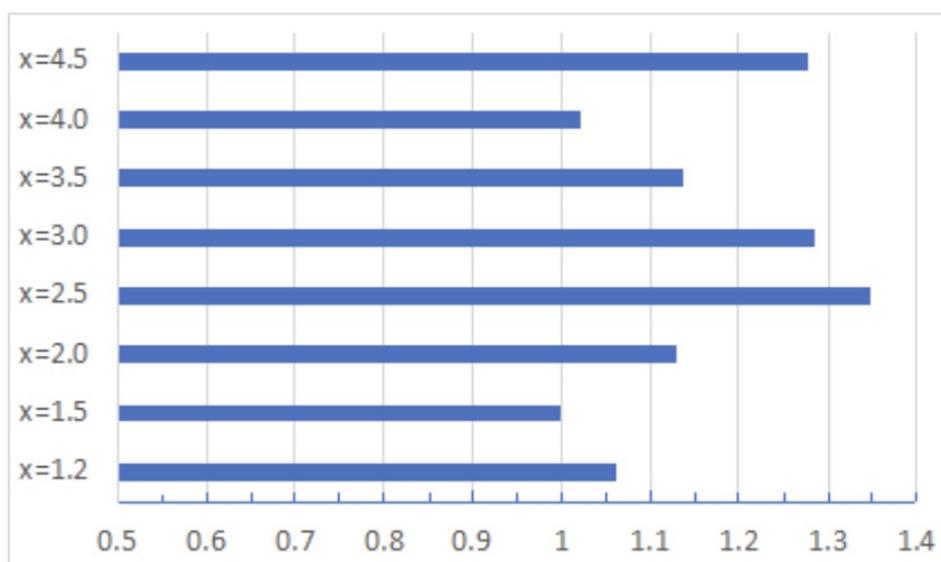


Figure4.2.3-35. Comparison of number of pressure repetitions

したがって、行列積行列積の形式で要求 B/F を低減し、高速化を図ることは可能であるが、この方針を複数の風向として実装する方法は全体として効率化することが保証できないという結果となった。そこで、別の方法として、オーソドックスに 1 ケースの計算時間を短縮することを考える。1 ケースの計算を短時間化できれば、多風向の計算を同時に解かずとも同等の効果を得ることができる。そこで、次節で説明するように、反復解法的高速化により計算時間を短縮する。

#### (5-1-3-1) 低 B/F 疎行列反復解法

反復解法部分の要求 B/F を低減するために、高 B/F となる疎行列反復法に部分的に直接法を組み合わせた方法を提案した。提案方法は、L1 キャッシュの利用効率が非常に高く、メニーコアアーキテクチャにおけるスレッドスケラビリティが非常に高い特性を持つ。また、提案手法は、メニーコア、マルチコアアーキテクチャだけでなく、ベクトル計算機においても非常に高い性能を達成できることが確認できた。なお、この開発は、重点課題⑧で実施したものであるが、参考までにその概要を記す。

圧力の Poisson 方程式を離散化すると、疎行列を係数行列にもつ連立一次方程式が得られる。式 (1) では物理量  $\phi$ 、格子幅  $h$ 、 $\phi$  を Poisson 方程式のソース項としている。

$$\begin{aligned} & \phi_{k,i-1,j} + \phi_{k,i+1,j} + \phi_{k,i,j-1} \\ & + \phi_{k,i,j+1} + \phi_{k-1,i,j} + \phi_{k+1,i,j} - 6\phi_{k,i,j} = h^2 \Psi_{k,i,j}, \end{aligned} \quad (1)$$

式(1)に対して、古典的な SOR 反復法を適用すると、

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{6}\hat{\phi}_{k-1,i,j}^m + \hat{\phi}_{k,i,j}^m - \frac{1}{6}\hat{\phi}_{k+1,i,j}^m \\ & = \frac{1}{6} \left( \phi_{k,i-1,j}^{m-1} + \phi_{k,i+1,j}^{m-1} + \phi_{k,i,j-1}^{m-1} + \phi_{k,i,j+1}^{m-1} - h^2 \Psi_{k,i,j} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

ここでハット記号(^)は  $k$  方向に関する三重対角行列を直接法で解いた後のテンポラリの解ベクトルである。その後、式(3)の SOR の反復過程を適用する。この方法は Line SOR (SLOR) 法と呼ばれる。

$$\begin{aligned} \Delta\phi_{k,i,j}^m &= \hat{\phi}_{k,i,j}^m - \phi_{k,i,j}^{m-1} \\ \phi_{k,i,j}^m &= \phi_{k,i,j}^{m-1} + \omega \Delta\phi_{k,i,j}^m, \end{aligned} \quad (3)$$

式(2)の三重対角行列は、最も効率的な LU 分解 (トーマスアルゴリズム) を用いて解くことが多い。ただし、LU 分解は逐次アルゴリズムであるため、並列化も SIMD 化もできない。また、効率的な省

演算解法で高い B/F アルゴリズムであるため、高い演算性能が得られない。そこで、LU 分解を並列化するため、Parallel Cyclic Reduction (PCR)を採用する。

(5-1-3-2) PCR の概要

LU 分解は前進消去と後退代入の 2 パスのアルゴリズムである。各パスで、依存関係があるために並列化ができない。PCR 法はその依存関係がなくなるように、式変形を行う。1 回の式変形操作を縮約という。1 回縮約すると、最初の N 元の連立一次方程式は、2 つの N/2 元の連立一次方程式となる。さらに再度縮約操作を行うと、4 つの N/4 元連立一次方程式が得られる。これを繰り返すと、最終的に N 個の単一方程式が得られ、直ちに解が得られる。

連立一次方程式  $Au=d$  を考える。

$$\begin{pmatrix} b_0 & c_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_1 & b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N-1} & b_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{N-1} \end{pmatrix}$$

(4)

この行列の i 行を考えると、

$$a_i u_{i-1} + u_i + c_i u_{i+1} = d_i, \quad i = 0, 1, \dots, N-1,$$

(5)

式(5)は点 i について、 $i \pm 1$  の点が依存関係をもつ。 $i \pm 1$  行の式に行列の基本操作を施し、 $i \pm 1$  点との依存関係を断ち切るようにすると、

$$a'_i u_{i-2} + u_i + c'_i u_{i+2} = d'_i, \quad i = 0, 1, \dots, N-1,$$

(6)

が得られる。式(6)は両隣の点と直接関係がないことがわかる。この処理を縮約処理とよぶ。なお、この縮約操作により、係数の値が変化していくことに注意する。再度、縮約処理を施すと次式を得る。

$$a''_i u_{i-4} + u_i + c''_i u_{i+4} = d''_i, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

(7)

縮約処理は全ての点との依存関係がなくなるまで繰り返す。処理の流れを Figure4.2.3-36 に示す。

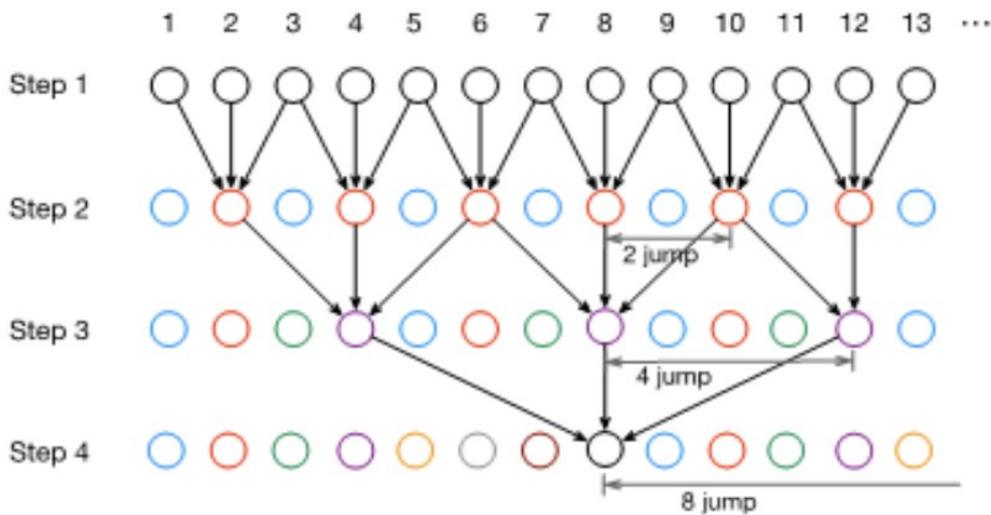


Figure 4.2.3-36. Reduction process of PCR algorithm. The colors indicate different sets of equations

解法の詳細については、[1]を参考にされたい。開発した SLOR-PCR 法は、SLOR 反復法の直接法部分に PCR 法を取り入れ、スレッド並列および SIMD 処理の効率を高める方法である。

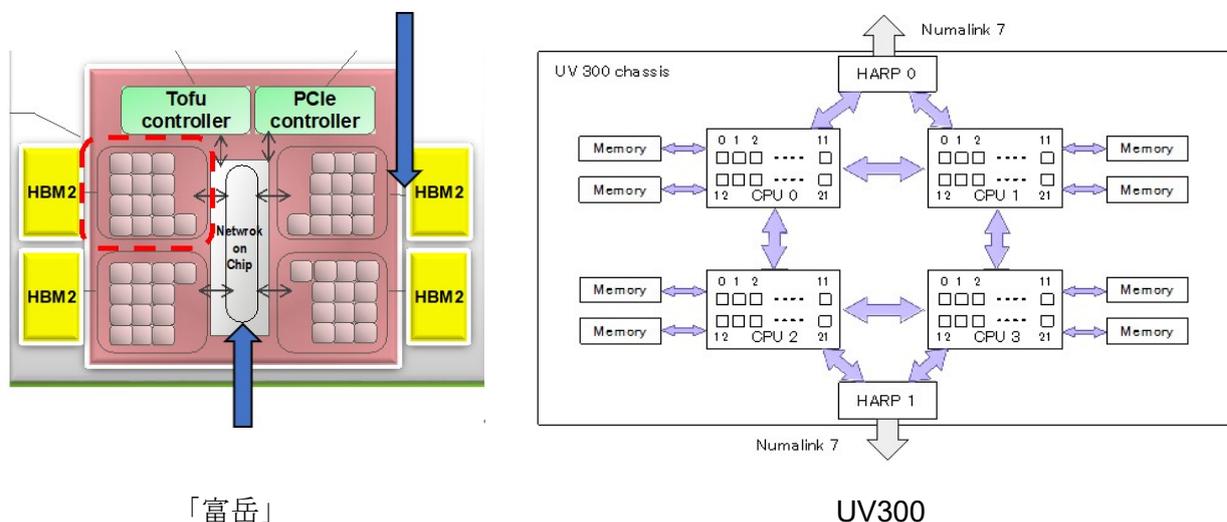
(5-1-3-3) 評価機

SLOR-PCR 法を評価するため、RIAM-COMPACT のソースコードから抜き出したカーネル部分に SLOR-PCR 法を適用し、性能評価を実施した。評価計算機として、マルチコア Intel Skylake-SP、メニーコア SGI UV300、ベクトル NEC SX-Aurora の 3 機種を選定した。主要諸元を Table 4.2.3-4 に示す。

Table 4.2.3-4. Specifications of the evaluation machine

	Intel Xeon Skylake-SP	SGI UV300 Broadwell-EP	SX-Aurora A100-1
Architecture	Gold 6140	E7-8880 v4	Type 10C
Socket (CPUs)	2	4 × 4 Chassis	1
Cores per CPU	18	22	8
Frequency (GHz)	2.3	2.2	1.4 <sup>1</sup>
Peak <sup>2</sup> (GFLOPS)	5,298 <sup>3</sup>	24,780	4,300
MMU size (GB)	384	12,000	24
MMU BW (GB/s)	255.9	1,360	750
L1 cache <sup>4</sup> (KB)	32	32	–
L2 cache <sup>4</sup> (KB)	1,024	256	–
L3 cache (MB)	24.75	55	16 <sup>6</sup>
L3 BW (GB/s)	147 <sup>5</sup>	–	332 <sup>6</sup>
OS	RHEL 7.4	RHEL 7.3	CentOS 7.4
C++ compiler	Intel 18.0	Intel 18.0	nc++ 2.3.0
Fortran compiler	Intel 18.0	Intel 18.0	nfort 2.3.0

特に、UV300は「富岳」のアーキテクチャと類似した構成となっている（Figure 4.2.3-37 参照）。つまり、メニーコア、cc-NUMA アーキテクチャ、リングバス構造などである。UV300での特性を考察することにより、「富岳」での動作の傾向を推測することができるだろう。



<http://pr.fujitsu.com/jp/news/2018/08/22-1.html>

Figure4.2.3-37. Comparison of Fugaku and UV300 architectures

(5-1-3-4) 評価結果

まず、Figure4.2.3-38 に Skylake-SP における SLOR-PCR 法の演算性能を Jacobi 反復法、Red-Black SOR 法と比較して示す。SLOR-PCR 法は 36 コアまでスケール可能なスレッド性能を示している。一方で、古典的な反復解法では演算性能は低い。両者の差は約 6 倍程度あることがわかる。

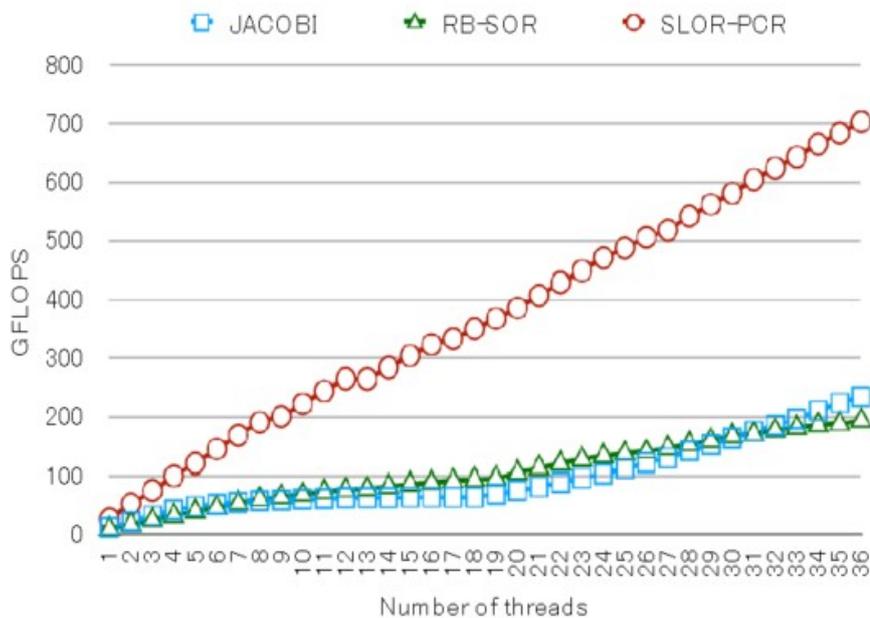


Figure4.2.3-38. Comparison of iteration performance in Skylake-SP

次に、演算性能の違いの原因を探るため、キャッシュの利用率を調べた。Figure4.2.3-39 に L1 キャッシュと L2 キャッシュのヒット率を示す。SLOR-PCR の L1 ヒット率は 98%程度であるのに対し、Red-Black SOR 法は 76%程度である。一方、L2 ヒット率については SLOR-PCR 法は 7%程度でほぼ一定であり、L1 キャッシュが効率的に効いていることがわかる。Red-Black SOR 法は L2 のヒット率は 25~60%とばらつきがあり、L1 のヒット率が低いため、L2 まで見ていることがわかる。このキャッシュの挙動により、SLOR-PCR 法は優れた L1 上データの再利用性があることがわかる。

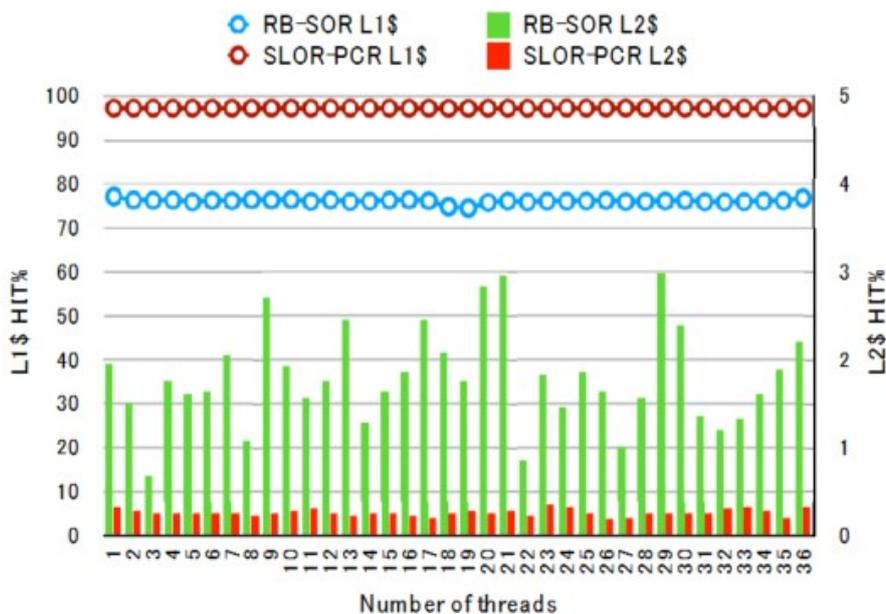


Figure4.2.3-39. Skylake-SP cache hit rate

Figure4.2.3-40 に示すように、アーキテクチャの異なる SX-Aurora についても、同様の挙動を示すことがわかった。

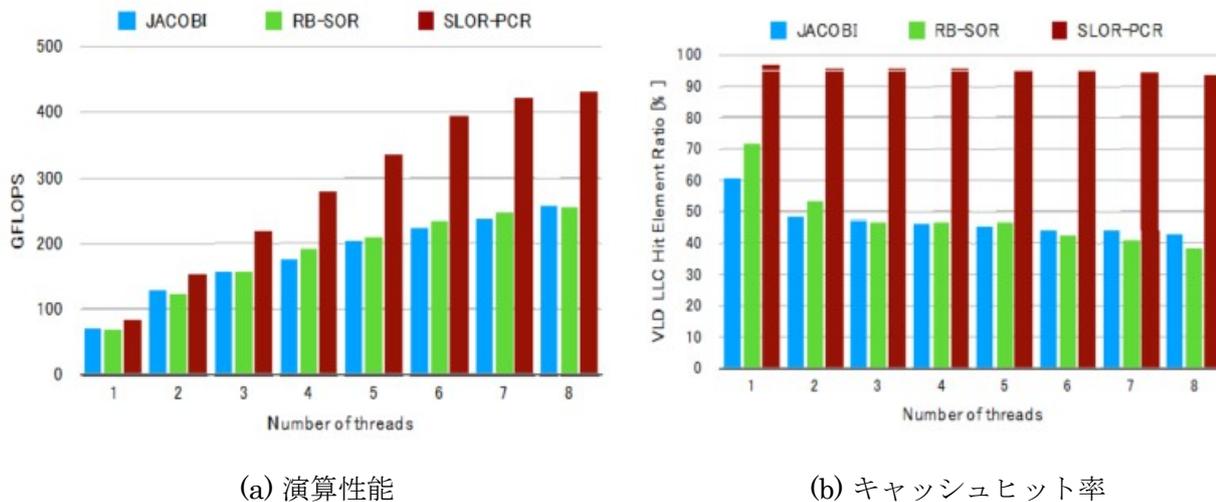


Figure4.2.3-40. Arithmetic performance and cache behavior in SX-Aurora

Figure4.2.3-41 には UV300 の演算性能を示す。UV300 は 4 つのユニットが NumaLink7 で接続されており、各ユニットは 88 コアをもつ。全 352 コアで SLOR-PCR 法は他の 2 つの反復解法に比べて高い演算性能を達成している。特に、1 ユニット内では 88 コア時に 80 倍以上のスピードアップを達成しており、メニーコアの性能を十分に引き出せていることが確認できる。

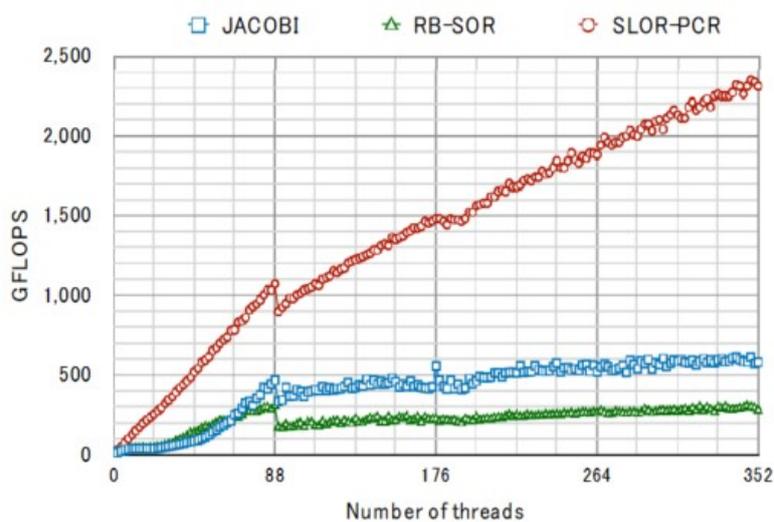


Figure4.2.3-41. Comparison of calculation performance of UV300

(5-1-3-5) 計算時間の比較

これまでは、計算速度に対する評価を行ってきたが、Figure4.2.3-42 に実際の計算時間を評価した結果を示す。Figure4.2.3-42 は右側が解きにくい問題であり、左側が解きやすい問題を示す。Jacobi 法や Red-Black SOR 法は問題が解きにくくなると急速に反復回数が増加し計算時間が増えるが、SLOR-PCR 法の反復回数は増加しにくい。これは、直接法における求解の効果であると考えられる。

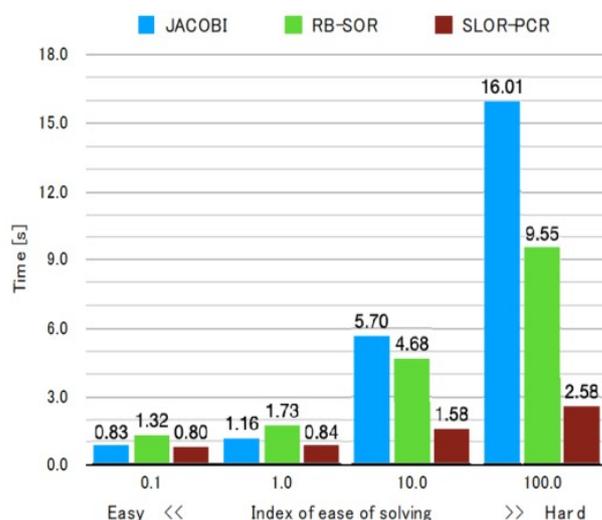


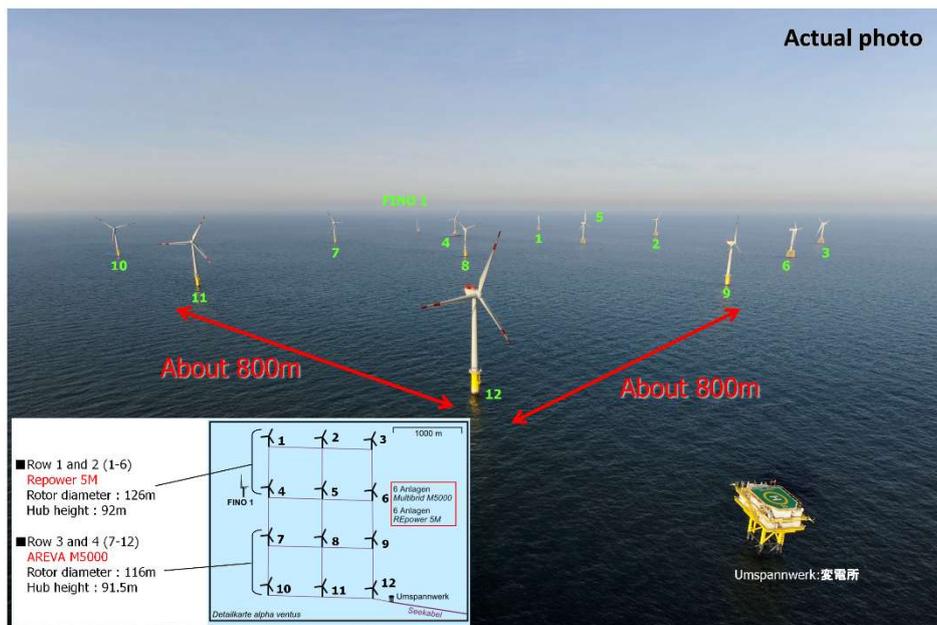
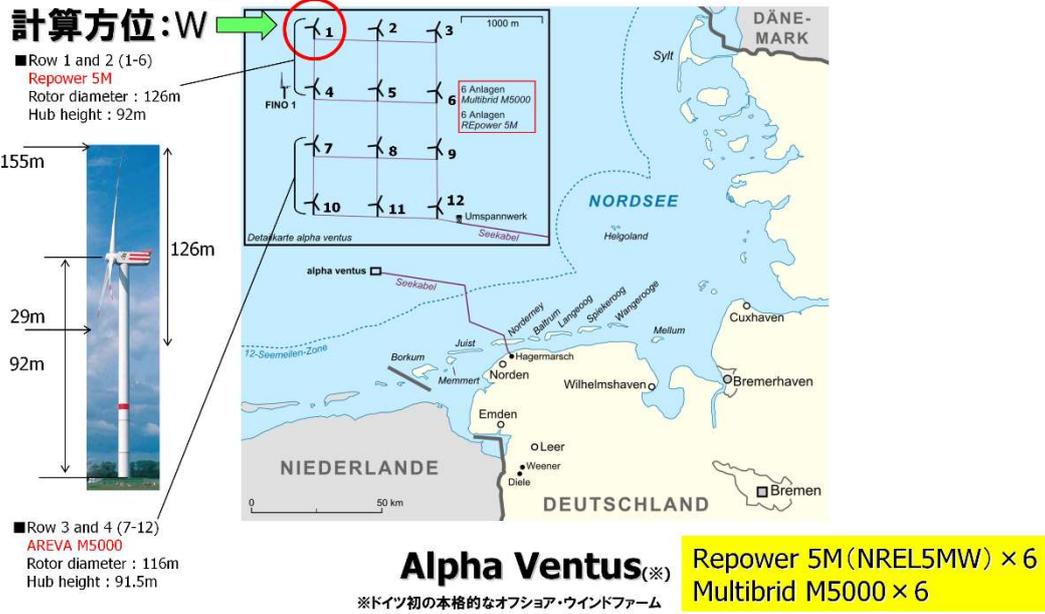
Figure4.2.3-42. Time comparison of convergence characteristics for different right-side terms

#### (5-2) RIAM-COMPACT HPC 版による Alpha Ventus 洋上ウィンドファーム解析

次に、今回開発した数値風況予測シミュレータ RIAM-COMPACT HPC 版を用いたベンチマークテストに関する研究成果を報告する。

本研究にてターゲットにしたサイトは Figure4.2.3-43 に示す Alpha Ventus 洋上ウィンドファームである。ここは、ドイツ初の本格的なオフショア・ウィンドファームであり、5MW クラスの風車が合計 12 基設置されている。

## Target single wind turbine



<http://www.adwenoffshore.com/portfolio-item/alpha-ventus/>

Figure4.2.3-43. Alpha Ventus Offshore Wind Farm

Figure4.2.3-44 には、本研究で対象とした風車の諸元を示している。これらの数値は空力弾性シミュレーションコード FAST にて得られた結果である。Figure4.2.3-45 には、本プログラムの検証に用いた工学モデル（石原モデル）の結果を示す。

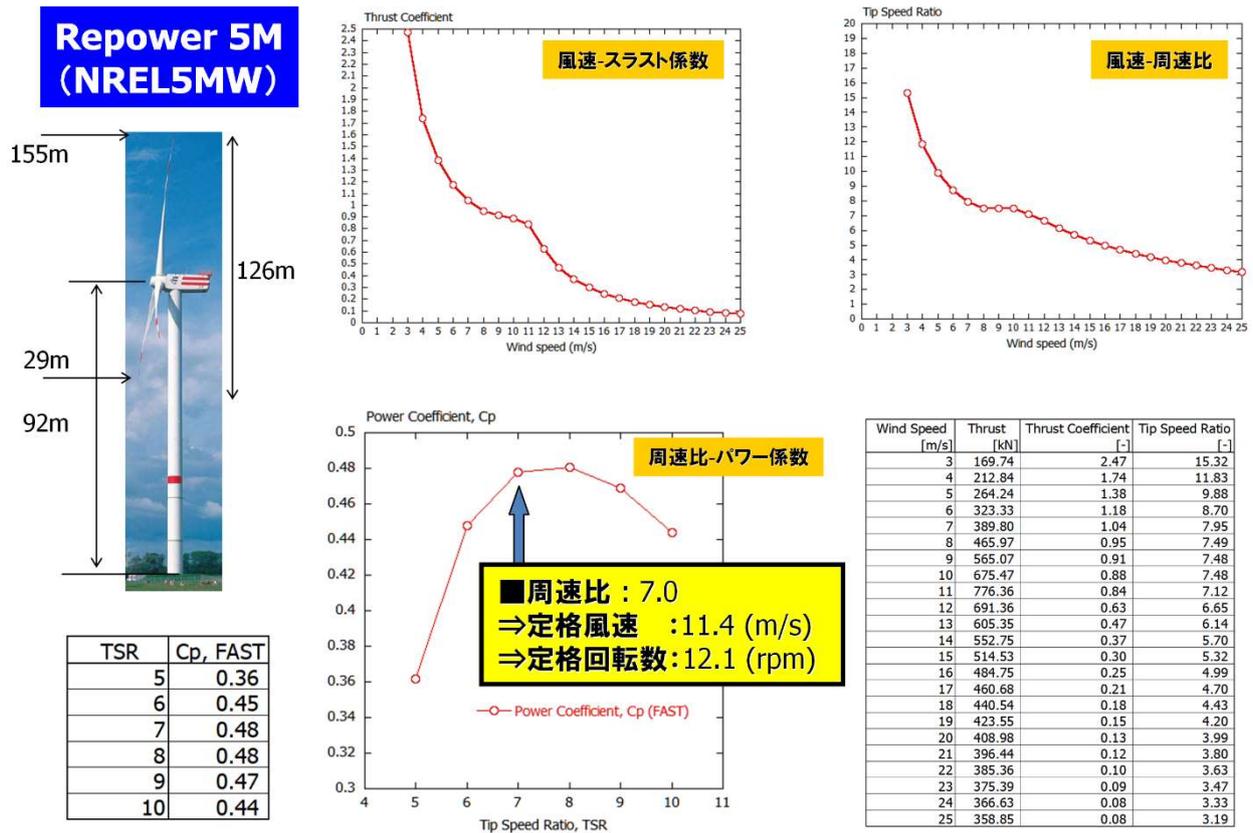


Figure4.2.3-44. NREL 5MW wind turbine specifications

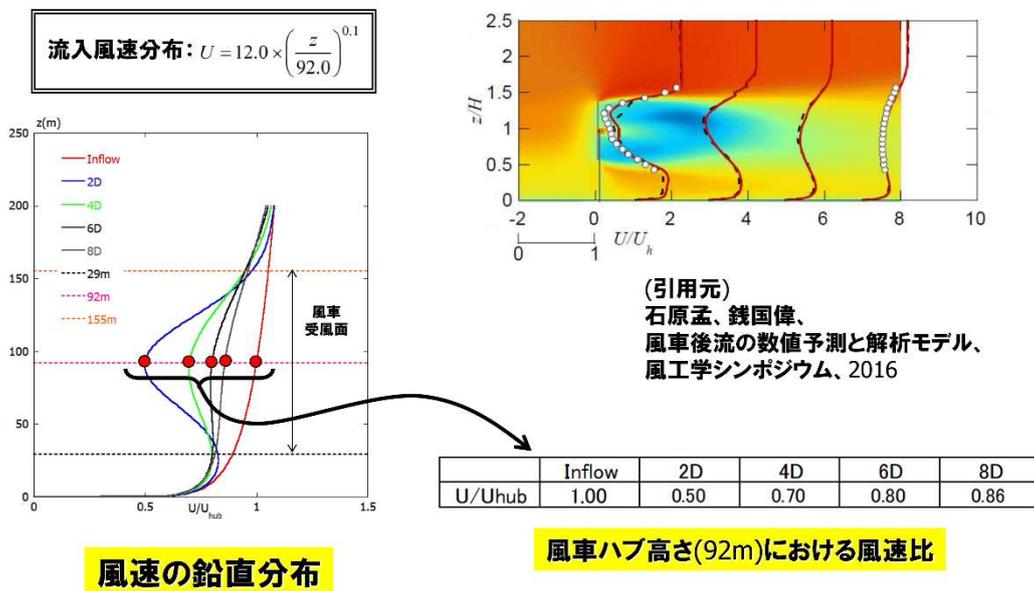


Figure4.2.3-45. Overview of engineering wake model (Ishihara model)

最初に、風車単機の計算を行い、予測精度の検証を実施した。その結果を Figure4.2.3-46 に示す。Near wake 領域および Far wake 領域ともに概ね良好な一致を得ることに成功した。

## Actuator Line Model

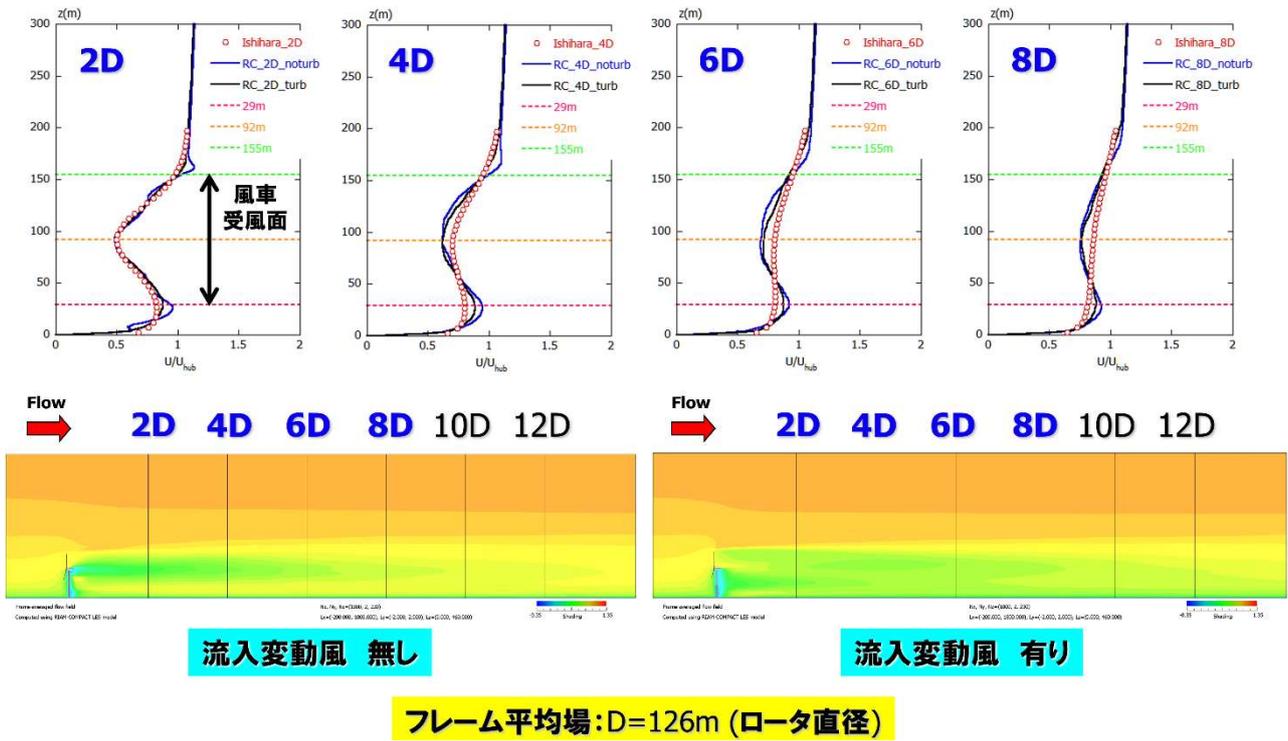


Figure 4.2.3-46. Results of benchmark calculation, comparison with engineering model (Ishihara model)

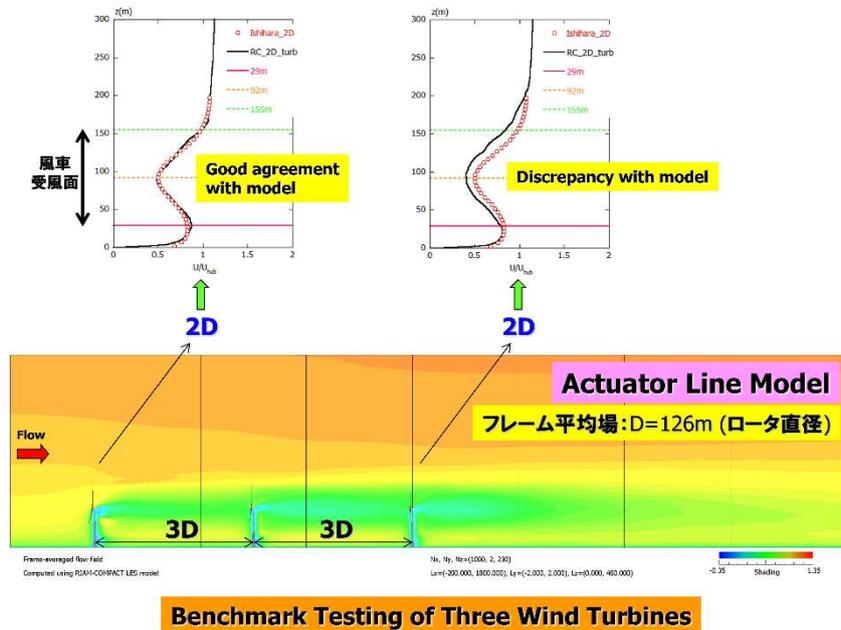


Figure 4.2.3-47. Results of benchmark calculation (for three wind turbines) and comparison with engineering model (Ishihara model)

次に、風車を3基設定した場合の検討を行った。得られた結果を Figure4.2.3-47 に示す。特に、下流3台目の風車の下流域に注目する。風車の相互干渉の影響を強く受け、工学モデルと有意な差異が生じていることが明確に観察される。この結果は、既存の工学モデルは複数台の風車ウェイクの相互干渉の再現には問題あることが分かる。

実スケールの Alpha Ventus 洋上ウインドファームを対象とした計算を実施する前に、最終的な計算コードの確認を、以下に示すミニ Alpha Ventus 洋上ウインドファームを作成して行った (Figure4.2.3-48 を参照)。今回のミニ Alpha Ventus 洋上ウインドファームでは、風車のスケールおよび台数は、実際の Alpha Ventus 洋上ウインドファームと同じである。異なるのは風車の離隔距離である。ミニ Alpha Ventus 洋上ウインドファームでは風車の離隔距離を、風車直径  $D$  の3倍と設定した。計算格子は主流方向、スパン方向、鉛直方向にすべて同一とし、2m に設定した。全格子点数は8,800万点である。風車ブレードの回転にはアクチュエータラインモデルを採用している。風車の周速比は7.0である。流入風の傾きは  $N=10$  とした。

Figure4.2.3-49 および Figure4.2.3-50 には、ミニ Alpha Ventus 洋上ウインドファームを対象とした計算結果例を示す。特に Figure4.2.3-50 では、計算プログラムの有効性および妥当性を検証するために、任意の風車配置によるテストを実施した。両者のケースともに計算は安定に実行された。流れ場の可視化結果を吟味すると、複数の風車下流に形成されている風車ウェイクが相互に干渉している様子が確認される。形成された流れ場は、強非線形な流動現象であり、我々が採用した乱流モデル LES によるアプローチの有効性が示された。

### Benchmark Testing of Mini Alpha Ventus (12 Wind Turbines)

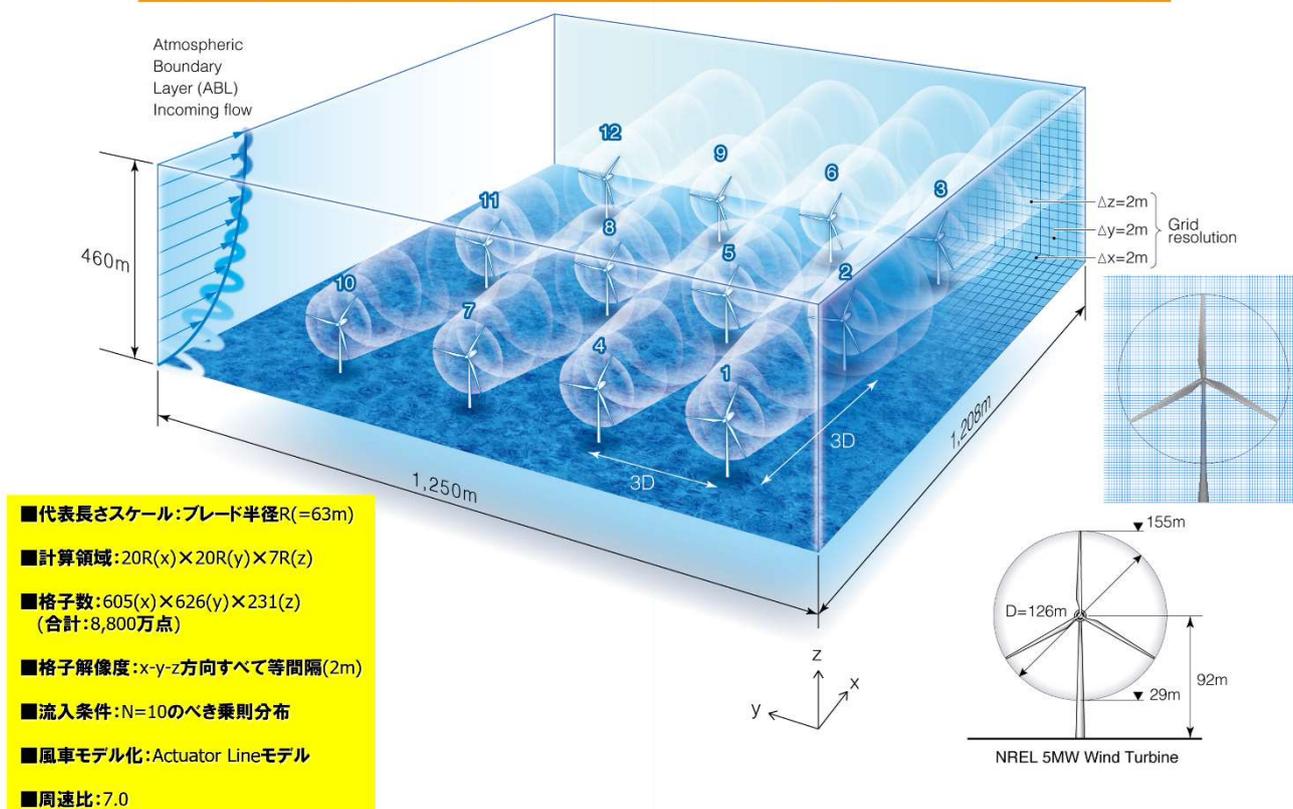


Figure4.2.3-48. Mini Alpha Ventus Offshore Wind Farm

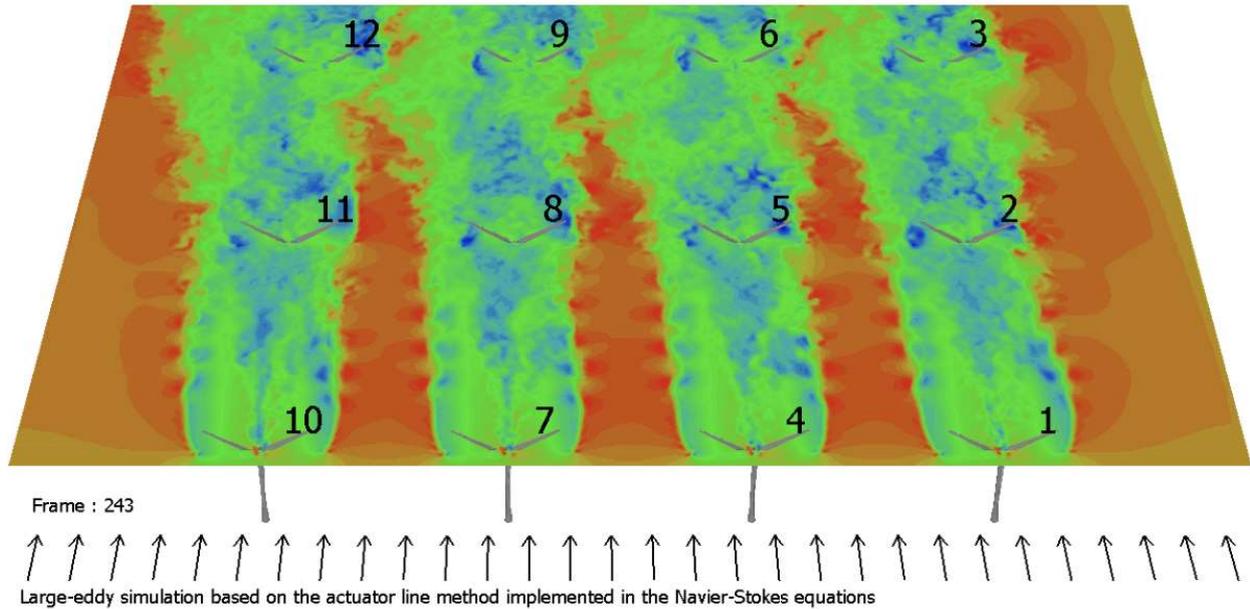


Figure4.2.3-49. Example of calculation results for a mini Alpha Ventus offshore wind farm No.1

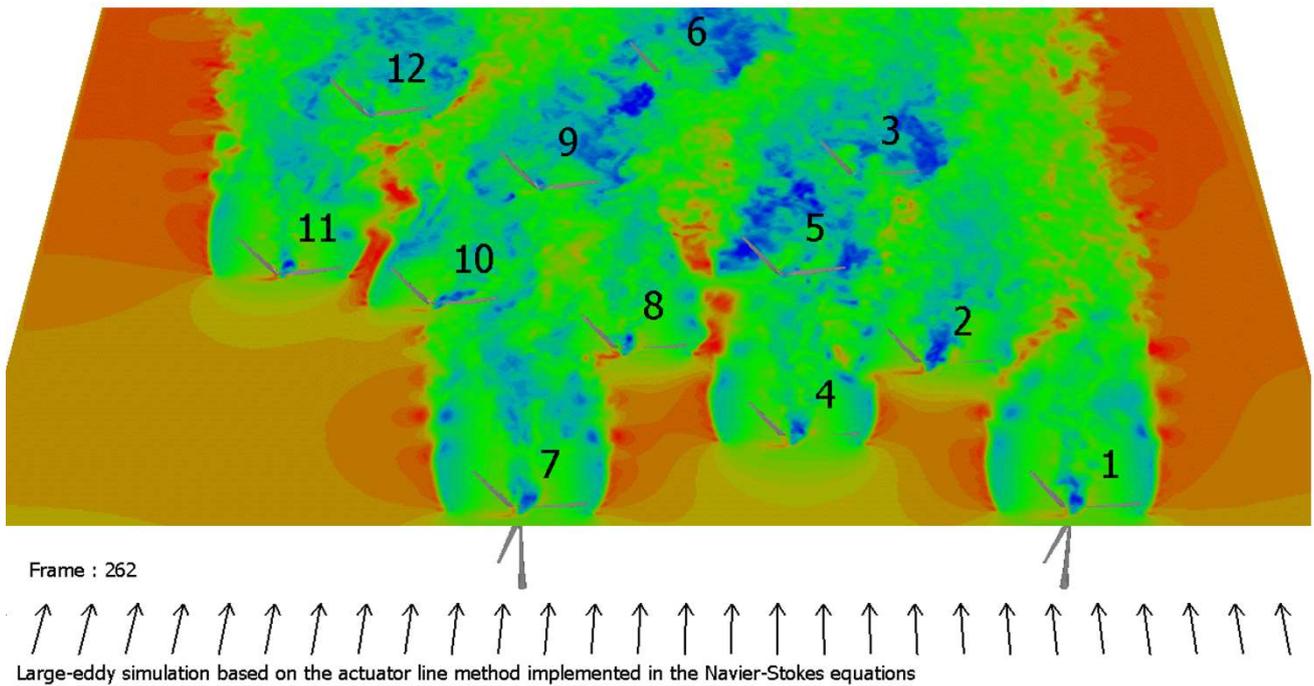
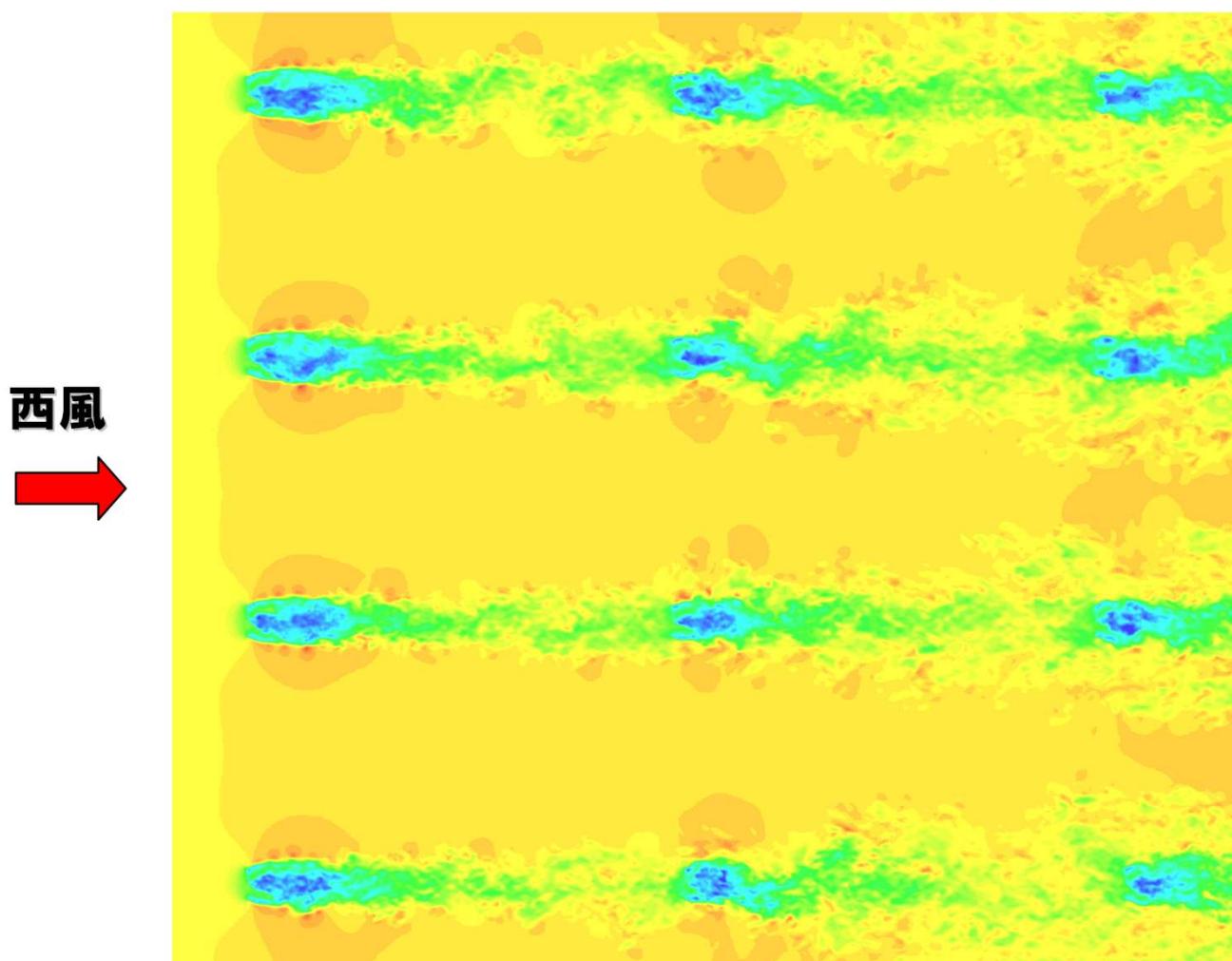


Figure4.2.3-50. Example of calculation results for a mini Alpha Ventus offshore wind farm No.2

最後に、実スケールの Alpha Ventus 洋上ウィンドファーム（風向は西風）を対象にした計算結果を示す。空間解像度は各方向ともに 5m である。総格子点数は  $821(x) \cdot 721(y) \cdot 231(z)$  である。約一億四千万点である。Figure4.2.3-51 には、風車ハブ高さ 92m における風速分布（瞬間場）を示す。各風車から風車ウェイクが形成され、下流側ではそれらが複雑に相互干渉している様子が明確に観察される。特に下流 3 列目の風車群（No.3、6、9、12）は上流側に位置する 2 台の風車ウェイクの影響を受

けている。Figure4.2.3-52 には、風車ハブ高さにおける風速情報とそのグラフを示す。各風車位置にて特徴的な傾向が再現されている。



**瞬間場**  
**(風車ハブ高さ92mにおける主流方向速度分布)**

Figure4.2.3-51. Example of calculation results for Alpha Ventus offshore wind farm

WTG No.	スカラー水平風速
1	1.00
2	0.87
3	0.80
4	1.00
5	0.87
6	0.81
7	1.01
8	0.88
9	0.84
10	1.02
11	0.90
12	0.88

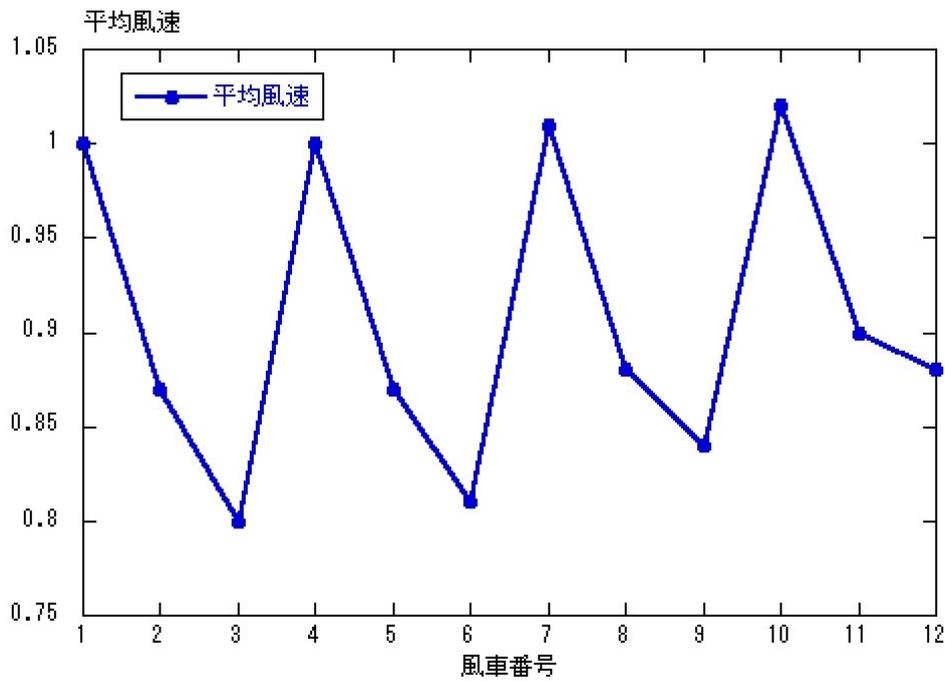
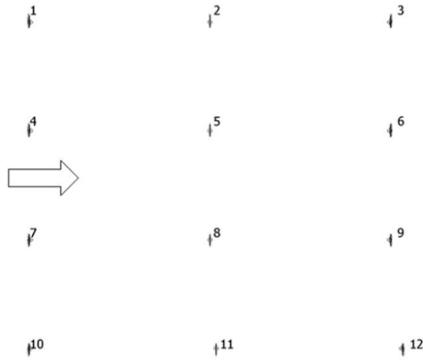


Figure4.2.3-52. Alpha Ventus Calculation results for offshore wind farm, wind speed information of wind turbine hub height

(5-3) まとめ

以上に述べたように、直接法と反復解法のハイブリッドである SLOR-PCR 法は L1 データの再利用性が高く、メニーコアやベクトルアーキテクチャに対して高性能を達成できる反復解法であり、その性能は古典的な反復法に比べて 6 倍程度であり、富岳の単体理論性能の約 30%を引き出せることがわかった。

さらに、直交不等間隔格子を採用した場合に生じるメトリクス計算部分を考慮すると、さらにループ内の演算密度を高めることができ、コードの要求 B/F を下げることができる。

このことから、RIAM-COMPACT HPC 版に本手法を適用することにより、「富岳」のみならず、多様な計算機での利用を念頭においた整備開発が可能であることが確認できた。

また同時に、実スケール Alpha Ventus 洋上ウィンドファームの解析については、他の風向などの計算を行い、総合的に RIAM-COMPACT HPC 版の性能を検証していく予定である。

## 文献

- [1] Ono, K., Kato, T., Ohshima, S., and Nanri, T. : Scalable Direct-Iterative Hybrid Solver for Sparse Matrices on Multi-Core and Vector Architectures, Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, pp. 11–21, ACM HPCAsia2020, Fukuoka, Japan, 2020.

### (6) シミュレーションシステムの検証および実用化のための調査およびデータ提供

#### (6-1) 検証用データの調査及びデータ提供

本サブ課題において開発するマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムの有効性検証のために、欧米のウィンドファーム情報の調査とデータ提供、および国内で想定される洋上ウィンドファームの仮想的なデータ提供を解析担当機関に行った。

#### (6-1-1) 発電量予測及び疲労荷重解析に必要な風のパラメータ

ウィンドファームの発電量予測及び疲労荷重評価に必要な主な風のパラメータを Table 4.2.3-5 に示す。各風パラメータは、10 分間平均値を元に年間統計量を算出し、ウィンドファームの運転期間 (20 年間<sup>1</sup>) における平均値として求める。また、各風パラメータは方位別に算出をする。実際のプロジェクトでは、現地で風観測を行い、流体シミュレーションによって各風車位置の風況を予測 (観測位置から外挿) して、各風パラメータを算出する。

Table 4.2.3-5. Wind condition parameter for energy yield assessment and fatigue load analysis

目的	必要な風パラメータ
発電量予測	<ul style="list-style-type: none"> <li>風速出現頻度分布</li> <li>ウィンドシアアのべき指数<sup>2</sup> (等価ロータ速度で発電量を算出する場合)</li> </ul>
疲労荷重評価	<ul style="list-style-type: none"> <li>風速出現頻度分布</li> <li>有効乱流強度 (周囲乱流強度及びウエイクによる乱流強度から算出)</li> <li>ウィンドシアアのべき指数</li> </ul>

<sup>1</sup> 近年計画されている欧州の洋上ウィンドファームでは、25 年または 30 年で計画がされているものが多い。

<sup>2</sup> 次式で表される高さ方向の風速分布。

$$V(z) = V(z_r) \times \left( \frac{z}{z_r} \right)^\alpha$$

ここで、 $V(z)$  は高さ  $z$  における風速、 $z_r$  は基準高さ、 $\alpha$  はウィンドシアアのべき指数である。

発電量予測は、一般に、風速出現頻度分布と風車のパワーカーブ（発電出力曲線）から Gross 発電量を算出し、風速出現頻度分布と風車のスラストカーブ（軸推力係数）から求めたウェイクロス<sup>3</sup>を差し引いて、Net 発電量（ウェイクロスを考慮した発電量）<sup>4</sup>を求める。洋上においては、十分沖合では、陸からの地形影響は小さくなり、風速の水平分布はほぼ一様とみなせる。一方、大気安定度に起因するウィンドシア（風速の高さ方向の分布）及びその変動は、風車の大型化に伴って、発電量に対する影響度が大きい。また、風車ウェイクによる発電ロス、海水面の粗度が小さいことにより、速度回復に必要な距離が大きくなるため、その影響が大きい。更に、日本は欧州と異なり、洋上沿岸域において、沿岸の陸地の地形が複雑なところが多く、鉛直方向だけでなく、水平方向の風速が非一様となり、陸から沖合にかけての大気境界層の発達予測が、課題となっている。

疲労荷重解析は、設定した風のパラメータ（風条件）を元に、IEC61400-1:2019（風車設計要件）で規定される乱流モデルを用いて乱流風を作成して、空力弾性モデルの動的シミュレーションの入力に用い、定められた設計荷重ケースの計算を行う。疲労荷重解析に用いる有効乱流強度の算定式が IEC 規格で定められており、式(1)に示す。有効乱流強度は、式(1)に示されるように、大気境界層内の乱流強度（周囲乱流強度）と風車ウェイクによる乱流強度を加えて、風車の部材に応じて求められる。洋上沿岸域では、陸からの地形影響が大きく、大気境界層における乱流強度の分布を高精度に予測することに加え、風車ウェイクによる乱流強度も高精度に予測する必要があり、風車選定、疲労荷重解析及び寿命評価において、有効乱流強度の算定は重要である。

$$I_{\text{eff}} = \frac{\hat{\sigma}_{\text{eff}}}{V_{\text{hub}}} = \frac{1}{V_{\text{hub}}} \left[ (1 - N p_w) \hat{\sigma}_c^m + p_w \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_T^m(d_i) \right]^{\frac{1}{m}} ; p_w = 0,06 \quad (1)$$

ここで、

$m$	評価対象の材料の Wöhler (S-N 曲線) 指数
$D$	風車直径
$\hat{\sigma}_c = \hat{\sigma} + 1,28\hat{\sigma}_\sigma$	代表周囲乱流標準偏差 (90%分位値)
$\hat{\sigma}$	周囲乱流標準偏差
$\hat{\sigma}_\sigma$	周囲乱流標準偏差の標準偏差
$\hat{\sigma}_T = \sqrt{\frac{V_{\text{hub}}^2}{\left(1,5 + \frac{0,8d_i}{\sqrt{C_T}}\right)^2} + \hat{\sigma}_c^2}$	ウェイク中心におけるハブ高の代表乱流標準偏差の最大値
$C_T$	ハブ高風速に対応する風車スラスト係数に基づく特性値
$d_i$	風車直径で正規化した近隣風車番号 $i$ との距離;

<sup>3</sup> 上流側の風車の影響で下流側風車の発電量が低減すること。

<sup>4</sup> 実際は、ウェイクロスの他に、送電ロス、ブレードの汚れ・劣化による性能低下、カットアウトヒステリシス、発電所内消費、出力制限等による発電ロスがあるが、本サブ課題ではモデルの検証が目的のため、これらのロスは含めない。

$c$	定数 (1 m/s)
$I_{\text{eff}}$	有効乱流強度
$N$	近隣風車の基数

### ① Alpha Ventus 洋上ウィンドファーム

前述の通り、本サブ課題においては、ドイツ最初の洋上ウィンドファーム Alpha Ventus の実測データを用いて検証を実施した。Alpha Ventus は 2 機種の 5MW 風車が合計で 12 基 (60MW) のウィンドファームで、2009 年 8 月 (全体としての正式な運転は 2010 年 4 月) から運転開始をしている。

以下に、Alpha Ventus の概要及び検証用データの詳細を示す。検証データは DEWI (ドイツ) の研究グループの成果を参照する<sup>5</sup>。Figure4.2.3-53 及び Table4.2.3-6 は、風車配置及び観測地点を示す。図中の FINO1 は風況観測塔を示す。風速は、高度 41.5, 51.5, 61.5, 71.5, 81.5, 91.5m LAT (最低天文潮位) で計測されている。また、FINO1 のプラットフォーム及び変電所でライダー (Leosphere 社 Windcube V1 及び Windcube V2) による観測も実施されている。検証に用いるデータ期間を Table4.2.3-7 に示す。

FINO1 での風速・風向データは、マスト構造物の影響を受けており、さらに Alpha Ventus の影響も受けているため、"一様流マスト補正スキーム" (UAM-scheme)<sup>6,7</sup>に基づいて補正が行われた。それに加えて、風向データは FINO1 プラットフォームに設置された LIDAR を用いて補正が行われている。また、東からの風については、変電所の LIDAR、AV3 及び AV12 のナセル風速風向計のデータを用いて、ウィンドファームによる擾乱の影響を排除している。更に、一部のデータ欠測については CFD によって補完を実施している。Figure4.2.3-54 の風配図は、これらの補正・補完後のデータで、これが検証用データとなる。91.5m LAT で年平均風速が 9.9m/s、主風向 (風の出現頻度が最も多い風向) は西南西である。

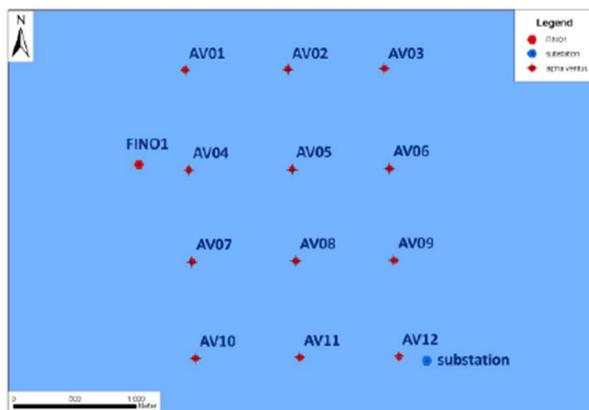


Figure4.2.3-53. Wind turbine and met mast layout

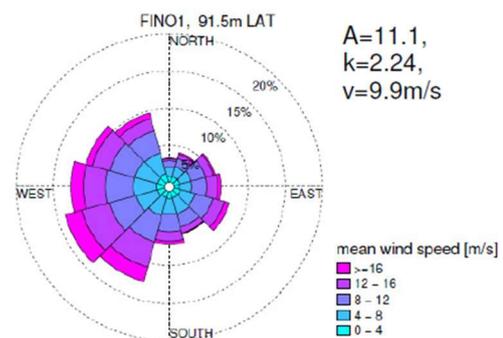


Figure4.2.3-54. Wind rose at FINO1

<sup>5</sup> A. Westerhellweg, et al., Wake Measurements at alpha ventus - Dependency on Stability and Turbulence Intensity, Journal of Physics Conference Series 555 (2014) 012106.

<sup>6</sup> T. Neumann: FINO1 and the mast shadow effect, 52nd IEA Topical Expert meeting: Wind and Wave Measurements at Offshore Locations, Berlin, Germany, February 2007.

<sup>7</sup> A. Westerhellweg, V. Riedel, T. Neumann: Comparison of Lidar- and UAM-based offshore mast effect corrections, EWEA 2011, Brussels.

Table 4.2.3-6. Wind turbine and met mast locations

	緯度	経度
AV01	N 54. 021671	E 6. 593500
AV02	N 54. 021671	E 6. 605916
AV03	N 54. 021671	E 6. 618332
AV04	N 54. 014340	E 6. 593843
AV05	N 54. 014340	E 6. 606345
AV06	N 54. 014340	E 6. 618848
AV07	N 54. 007503	E 6. 594162
AV08	N 54. 007503	E 6. 606745
AV09	N 54. 007503	E 6. 619328
AV10	N 54. 000332	E 6. 594498
AV11	N 54. 000332	E 6. 607165
AV12	N 54. 000332	E 6. 619833
FINO1	N 54. 598111	E 6. 587638

Table 4.2.3-7. Period of used measurement data set for the assessment

ウィンドファーム運転実績データ期間	2011年1月1日～2012年6月30日（1年6ヶ月間）
FINO1 観測データ期間	2010年7月1日～2012年6月30日（2年間）

次に、FINO1におけるウィンドシアのベキ指数、乱流強度を解析した結果を示す。Table 4.2.3-8は、大気安定度をウィンドシアのベキ指数に基づき、3つに分類した場合の頻度分布を示す。FINO1（2010年7月1日～2012年6月30日）では、不安定（ $\alpha < 0.07$ ）の頻度が53%、中立（ $0.07 < \alpha < 0.15$ ）が20%、安定（ $\alpha > 0.15$ ）が27%となっている。Figure 4.2.3-55及びFigure 4.2.3-56は、西風（ $255^\circ \sim 280^\circ$ ）におけるウィンドシアのベキ指数の頻度分布及び乱流強度の分布を示す。Figure 4.2.3-55から、ウィンドシアのベキ指数はビン平均値としては0.1程度であるが、ビン平均値付近の頻度は低く、ほぼ0と、0.2強の頻度が高くなっている。Figure 4.2.3-56から、乱流強度は風速10m/sで0.05程度となっており、風速が高くなるにつれ、高くなる傾向を示している。これは、高風速域において風により海面の粗度が高くなっていることを意味している。Figure 4.2.3-57は、ウィンドシアのベキ指数と乱流強度の相関関係を示す。シアが高い場合（安定時）、乱流強度が低く（0.03程度）、シアが低い場合（不安定時）、乱流強度は高い（0.05）。

また、参考のため、CENER（スペイン）の研究グループによるFINO1の大気安定度の解析結果<sup>8</sup>も示す。Figure 4.2.3-58は、80.0m LATに設置された超音波風速計を用いた9分類（xu:非常に不安定, vu:とても不安定, u:不安定, wu:やや不安定, n:中立, ws:やや安定, s:安定, vs:とても安定, xs:非常に安定）した大気安定度の風速階級別頻度分布を示している。Figure 4.2.3-59は、大気安定度に対するウィンドシアのベキ指数及び乱流強度の相関（ $225^\circ \pm 90^\circ$ ）であるが、DEWIの研究グループと同様の傾向を示している。

<sup>8</sup> J.Sanz Rodrigo, et.al., Atmospheric stability assessment for the characterization of offshore wind conditions, Journal of Physics: Conference Series 625(2015) 012044

Table 4.2.3-8. Stability classification in respect to wind shear for FINO1 during 7/2010 - 6/2012

	ウィンドシア べき指数	頻度 [%]
不安定	$\alpha < 0.07$	53
中立	$0.07 < \alpha < 0.15$	20
安定	$\alpha > 0.15$	27

wind shear exponent alpha, dir sector 255°-280°, period 2010-07-01 - 2012-06-30

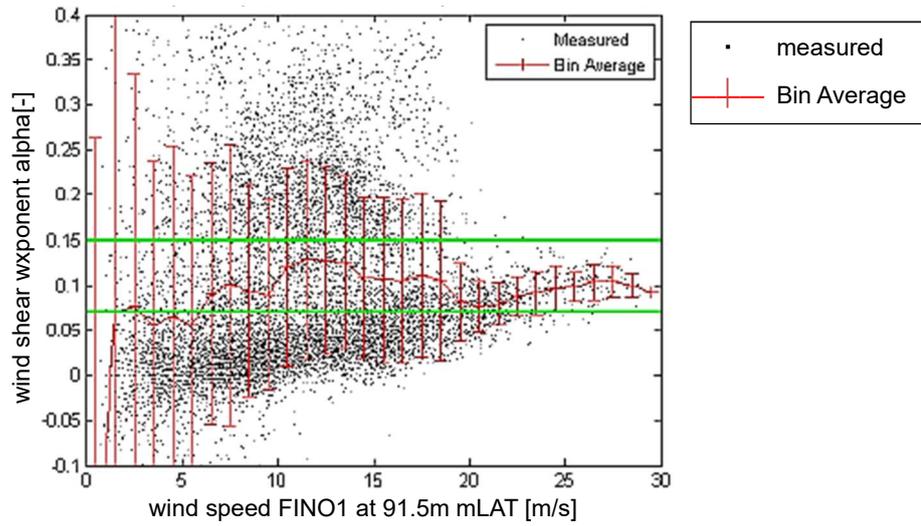


Figure4.2.3-55. Wind shear exponent at FINO1

turbulence intensity dir sector 255°-280°, period 2010-07-01 - 2012-06-30

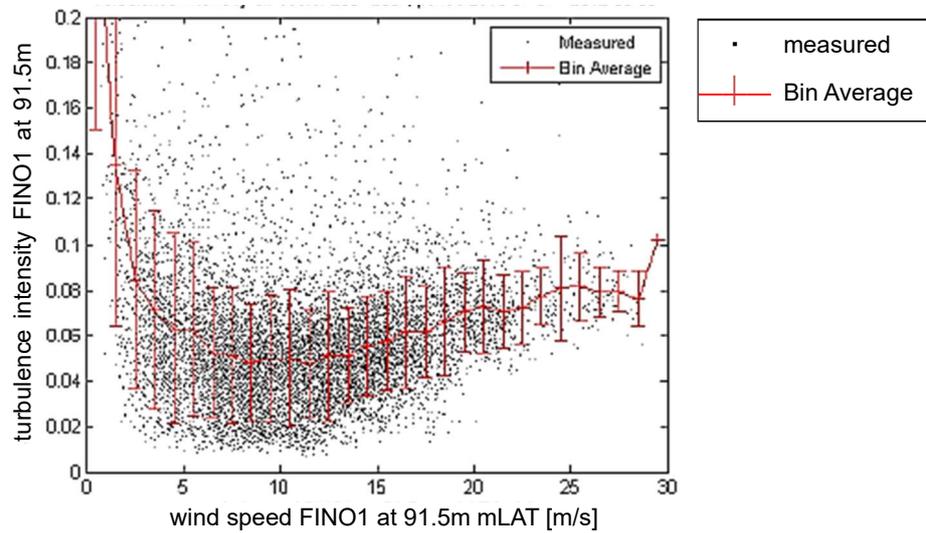


Figure4.2.3-56. Turbulence intensity at FINO1

wind shear exponent alpha, y=[7;11m/s], dir = [255°-280°], period 2010-07-01 - 2012-06-30

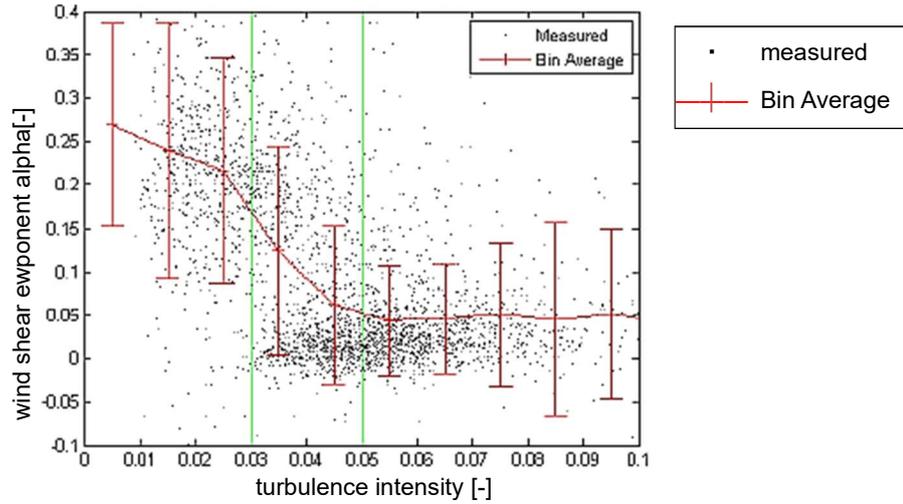


Figure4.2.3-57. Wind shear exponent versus turbulence intensity at FINO1, 91.5m LAT for the wind speed bin [7 to 11m/s] and the wind direction sector 255°-280°

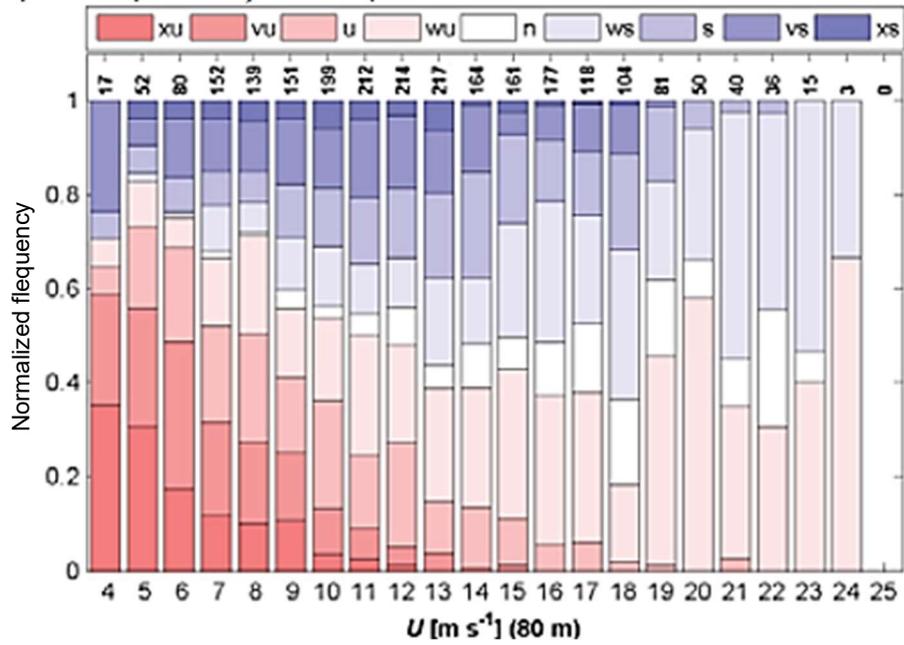


Figure4.2.3-58. Distribution of stability with wind speed

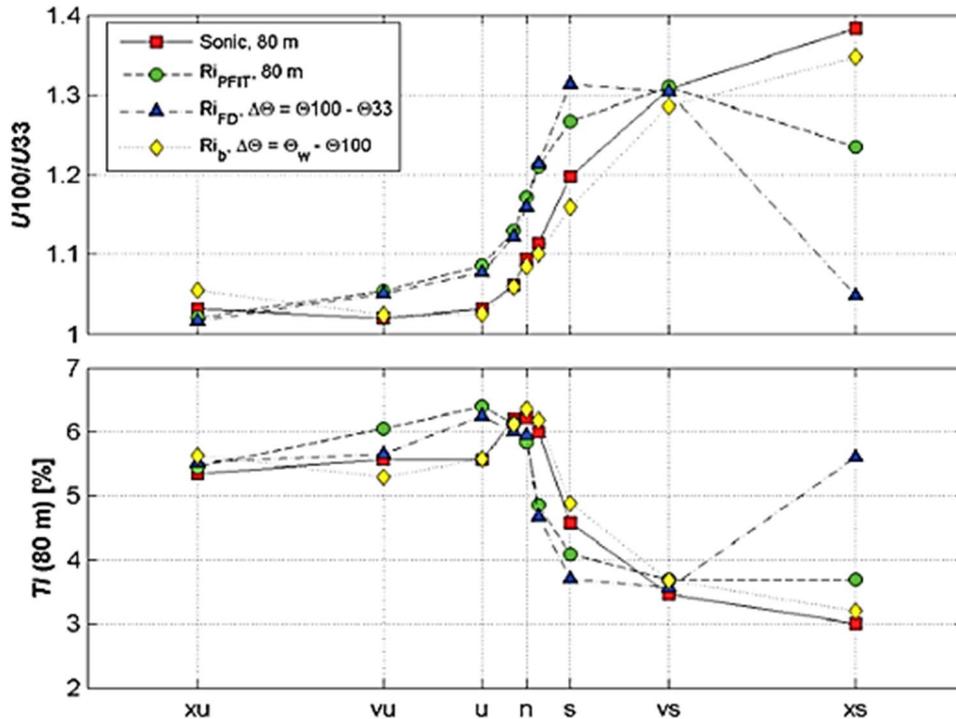


Figure4.2.3-59. Class-averaged wind conditions at the open-sea sector of Fino-1 ( $225^\circ \pm 90^\circ$ ) as a function of the stability parameter based on different stability assessment methods

Figure4.2.3-60 は、AV4 のウェイクによる AV5 の発電量ロスの結果（風速 7m/s~11m/s）を示す。風向が  $270^\circ$  の時、発電量ロスは 49% となった。

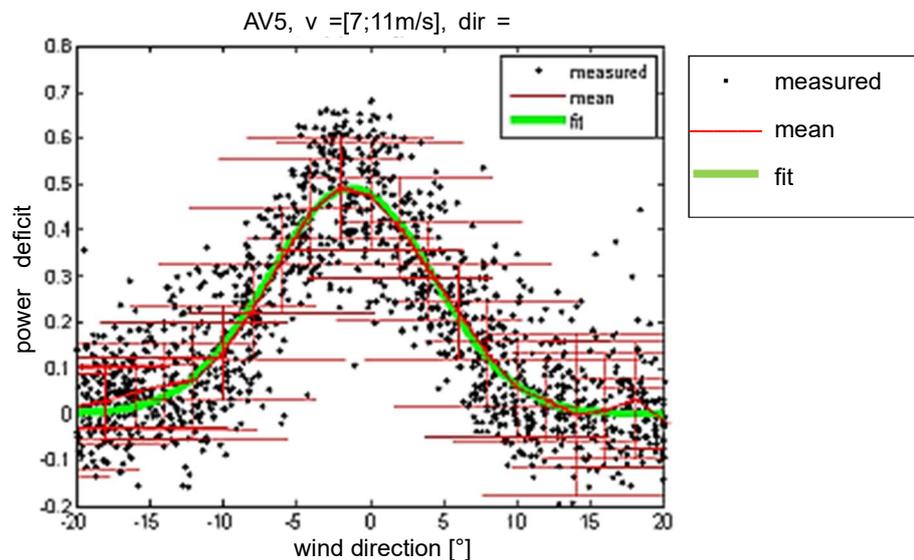


Figure4.2.3-60. Power deficit of the AV5 in the wake of AV4 in 6.7D distance for  $v = [7,11\text{ms}]$

ウィンドファーム全体解析（発電量予測）の検証は、上記の AV4 のウェイクによる AV5 の発電量ロスとし、その評価をするための風の条件（流体シミュレーションの流入条件）を、Table4.2.3-9 にま

とめる。

Table 4.2.3-9. Proposed calculation conditions for validation

	検証条件
風向	270° ±20°
風速	7-11 m/s
ウィンドプロファイルのべき指数	0.1
乱流強度	4%

## ② OWA Wake Challenge

発電量事業者を中心とする洋上風力の低コスト化を目指した研究開発プログラムである欧州のOWA（Offshore Wind Accelerator）において、Wake Challenge というウェイクモデルのベンチマークプロジェクトが 2019 年に開始した。英国及びデンマークの合計 5 つのウィンドファームのデータがウェイクモデルの検証用に提供される。Table4.2.3-10 及び Figure4.2.3-61 にベンチマークで対象とするウィンドファームを示す。本ベンチマークには研究機関やコンサルなど 10 チーム以上が参画をし、ステップ 1：ブラインドテスト、ステップ 2：詳細データの提供に基づくベンチマーク、ステップ 3：実績データに基づくモデルのキャリブレーション、の順でプロジェクトを進めている。IEA Wind Task31（流れモデル及びウィンドファームモデルのベンチマーク）からも、このプロジェクトに参加をしている。

Table 4.2.3-10. Benchmark wind farm in OWA Wake Challenge program

ウィンドファーム	データ提供元（発電事業者）
Anholt	ørsted
Dudgeon	Equinor
Rodsand2	EON
Westmost Rough	ørsted
Ormonde	Vattenfall



Figure4.2.3-61. Location of benchmark wind farm in OWA Wake Challenge program

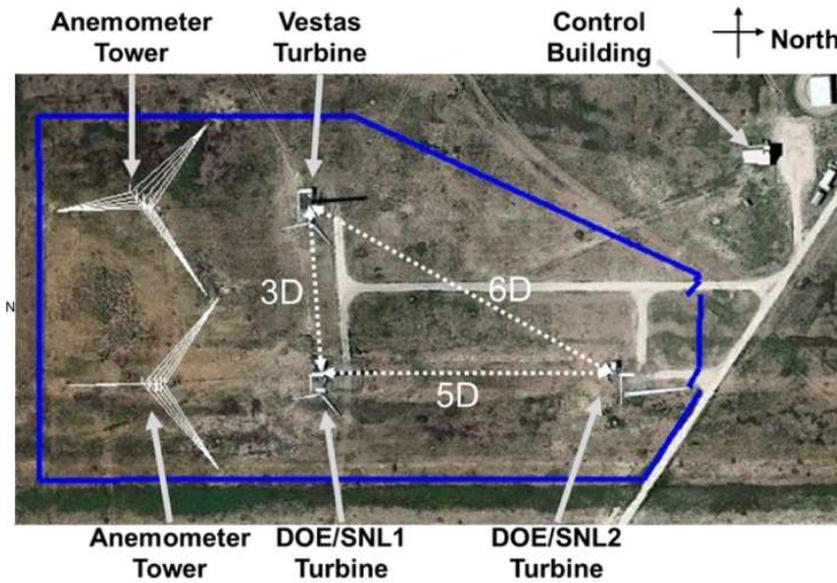
### ③ A2e SWiFT

米国における国プロとして、NREL（米国国立再生可能エネルギー研究所）及び SNL（サンディア国立研究所）が実施しているスケール風車 V27 による実証プロジェクト SWiFT がある。米国においては、ウィンドファーム全体としての最適化を目指した風車制御設計の研究開発を重点的に進めている。

SWiFT 試験サイト (Figure 4.2.3-62) には、3 機の試験風車 (V27、ロータ径：27m) と、流入風を計測する 2 つの風況観測塔が設置されている。2017 年に実施された計測キャンペーンでは、V27 に DTU の Spinner ライダーを搭載し、風車ウェイクの操舵 (steering) を実測し、詳細な運転実績データ (風車トルク、ロータスピード、曲げモーメント等) 及び風況観測データ (流入風、ウェイク分布) を収集した。その結果は米国エネルギー省 (DOE) のデータアーカイブ&ポータル (DAP)<sup>9</sup>で公開されており、モデル開発者がシミュレーションコードを検証できるようになっている。Figure 4.2.3-63 に SWiFT 試験サイトの DTU Spinner ライダーによって計測されたウェイク (左図。シミュレーション結果との比較用にポスト処理済) と SOWFA によるシミュレーション結果 (右図) の比較を示す。SOWFA とは、NREL が開発した WRF 及び OpenFOAM からなるウィンドファームシミュレーションコードである。

---

<sup>9</sup> Brian Naughton, Scott Schreck, and Alan Wright. Wake: Wake steering experiment. October 2018. <https://a2e.energy.gov/projects/wake>.



(a) Layout of test turbines and met masts



(b) DTU spinner LiDAR

Figure4.2.3-62. SWiFT test field

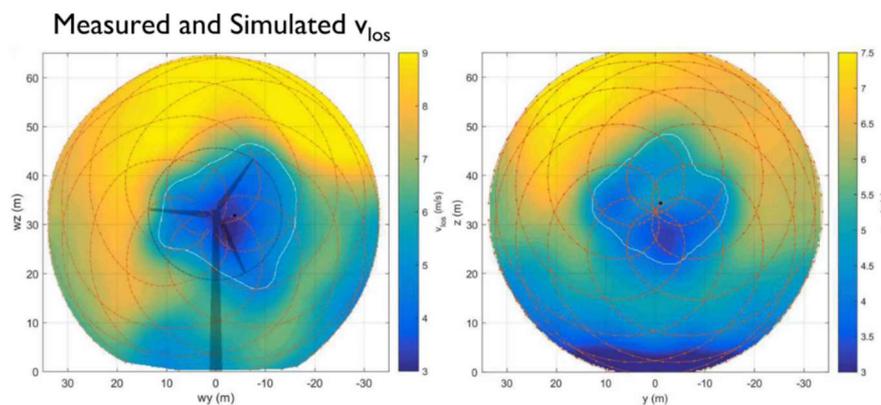


Figure4.2.3-63. Validation of SOWFA wake simulation using SWiFT experiment data sets

④ 国内で想定される洋上ウィンドファームの仮想的なデータ提供

国内の風力業界団体である日本風力発電協会（JWPA）は、Table 4.2.3-11 及び Figure4.2.3-64 に示す通り、一般海域における着床式洋上風力発電のポテンシャル容量は、全国合計で約 91GW 見込まれるとした<sup>10</sup>（年平均風速 7.0m/s 以上、水深 10～40m、約 20m<sup>2</sup>以上のまとまったエリアを確保できる海域を想定）。

Table 4.2.3-11. Offshore wind potential in Japan (JWPA, 2018)

5.0MW級（ローター径126m）風車を前提としたポテンシャル

	全体容量	風速別(m/s)容量 MW				
	MW	7.0-7.5	7.5-8.0	8.0-8.5	8.5-9.0	9.0-
全国	91,906	37,623	32,729	16,301	4,598	655
北海道	34,492	9,688	13,391	8,648	2,337	428
東北	15,999	6,595	6,211	2,192	876	126
東京	12,680	5,650	5,322	1,480	126	101
中部	11,243	3,112	3,395	3,477	1,260	0
北陸	0	0	0	0	0	0
関西	1,449	1,247	195	6	0	0
中国	510	435	76	0	0	0
四国	2,482	2,173	258	50	0	0
九州	13,051	8,724	3,880	447	0	0

前提：風車離隔を10D×5Dとし必要面積を算出（D=ローター径）

<sup>10</sup> JWPA 洋上風力発電の導入推進に向けて～再生可能エネルギー大量導入の早期実現～（2018）

■ 着床式 ポテンシャルマップ

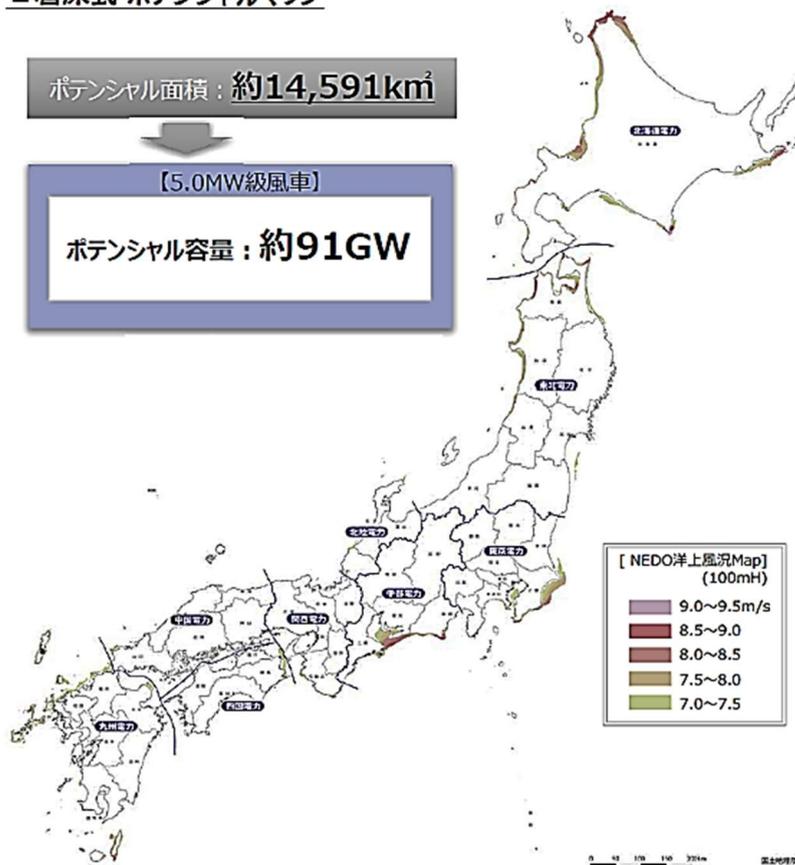


Figure4.2.3-64. Offshore wind potential map in Japan (JWPA, 2018)

Figure4.2.3-65 に日本の洋上風力発電の導入状況及び計画を示す<sup>11</sup>。

2019年7月には、既に一定の準備段階に進んでいる区域として11区域（青森県、秋田県、新潟県、千葉県、長崎県）、このうち4区域（秋田県、千葉県、長崎県）が協議会の組織等の準備を直ちに開始する有望な区域として示された。これらが今後国内における一般海域における先行したウィンドファームとなっていくと考えられる。

また、国が主導する有識者会議の中で、欧州主要国における洋上ウィンドファームの1区域当たりの平均設備容量を参考に、約35万kW（例：10MW風車×35機）を標準的な洋上ウィンドファームの設備容量と想定している。

<sup>11</sup> METI/MLIT, 総合資源エネルギー調査会省エネルギー・新エネルギー分科会再生可能エネルギー大量導入・次世代電力ネットワーク小委員会洋上風力促進ワーキンググループ 交通政策審議会港湾分科会環境部会洋上風力促進小委員会 合同会議 中間整理（2019年4月）

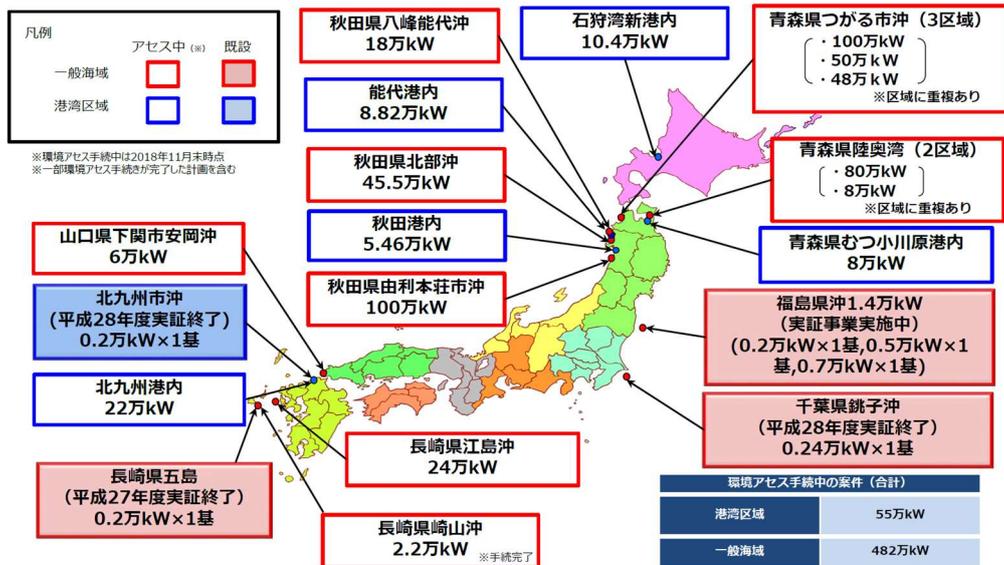


Figure4.2.3-65. Installed and planned offshore wind farm in Japan (METI/MLIT, 2018)

Figure4.2.3-66 に欧州におけるウィンドファームのレイアウト事例を示す。Horns RevI の風車離間距離は  $7D \times 7D$ 、RodsandII 及び Nysted は、 $3D \sim 10D$ 、Barrow は  $5.5D \times 8.5D$  となっている (D: 風車ロータ直径)。国内においては、着床式ウィンドファームが対象とする水深となる離岸距離が欧州と比べて短い海域が多いため、ウィンドファームの列数は小さくなる可能性が高いと推測される。

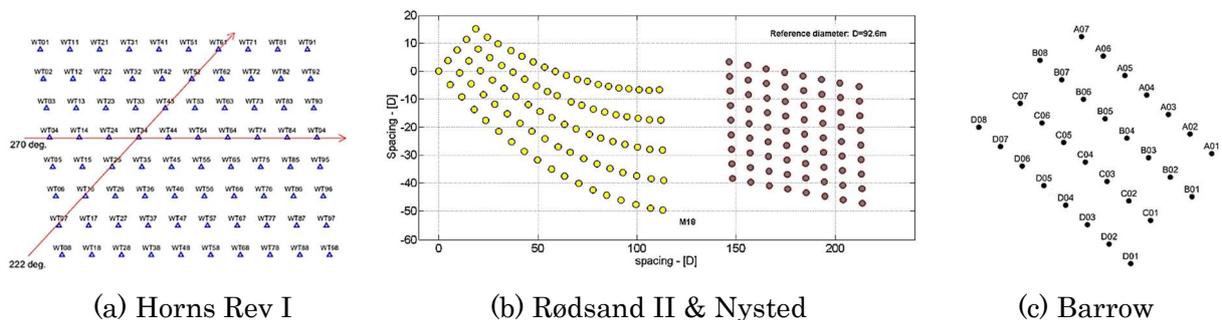


Figure4.2.3-66. Offshore wind farm layout example in EU

⑤ サブ課題 C における各アプリケーションの検証方法 (V&V) のまとめ

本サブ課題の各アプリケーションにおける検証方法を Table4.2.3-12 に示す。マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムには、フルスケール風車における検証データが必要であり、詳細な風車モデル、当該風車が設置されたウィンドファーム及びその運転実績データ、現地での風況観測塔による観測データが利用可能な Alpha Ventus が選ばれた。Alpha Ventus は、IEA Wind Task30 において荷重解析のモデル検証のためのデータも提供しており、今後、疲労損傷評価をする上で利用できる可能性がある。

Table 4.2.3-12. Summary of V&V framework in sub issue 6-C

実施項目	ウィンドファーム全体解析	後流干渉詳細解析			実用化調査・検討
目的	ウィンドファーム発電量予測	大気境界層のモデル化 風車（タンデム）の大規模解析によるウエイク中の性能評価	風車（単体）の大規模解析によるウエイクの高精度計算	大型風車ブレード（複合材）の疲労損傷評価	・海外のウエイクモデル、大規模解析の最新動向の提供 ・V&V のデータ提供
アプリケーション	RIAM-COMPACT	FFB	FFB	ADVENTURE	
体制	九大	豊橋技科大	東大生研・みずほ	東大工	WEIT
検証・実証方法 (V&V)	・FFB の結果と比較 (3D の離間距離でタンデム計算) ・Alpha Ventus の発電量を文献値と比較 (12 基、特定風向)	・RC の結果と比較 (3D の離間距離でタンデム計算)	・風洞試験 (日大)	・固有値解析の結果を文献値と比較済	

(6-2) 洋上ウィンドファームの発電量評価精度向上への寄与度検討

洋上ウィンドファームの発電量評価精度向上への寄与度を考慮し、風車相互干渉、気象解析との連携、流体構造連成振動・損傷、海面変動による風車揺動の影響を検討した。

① 風力エネルギーのグランドチャレンジ

近年、洋上風力産業が成長し進化していく中で、より高性能でコスト競争力のある風車の開発が進められている。NREL は 2020 年 2 月に IEA Wind Task37 15MW プログラムの成果として、15MW 参照風車 (RWT) を発表した<sup>12</sup>。15MW RWT は、風車システム全体がオープンアクセスとなっており、研究者、エンジニア、設計者がシミュレーションやプロトタイプ設計に用いることができ、容易に性能変更、コスト評価が可能となっている。

風車の大型化が進む中、風車スケール、ウィンドファームスケールに対して、気象スケールの物理現象の影響がますます重要になってきている。Figure4.2.3-67 は、米国の研究者が中心になってサイエンス誌に発表した風力研究のグランドチャレンジ<sup>13</sup>が対象とするスケールを表す図である。

<sup>12</sup> NREL, New Reference Turbine Gives Offshore Wind an Upward Draft, <https://www.nrel.gov/news/program/2020/reference-turbine-gives-offshore-wind-updraft.html>

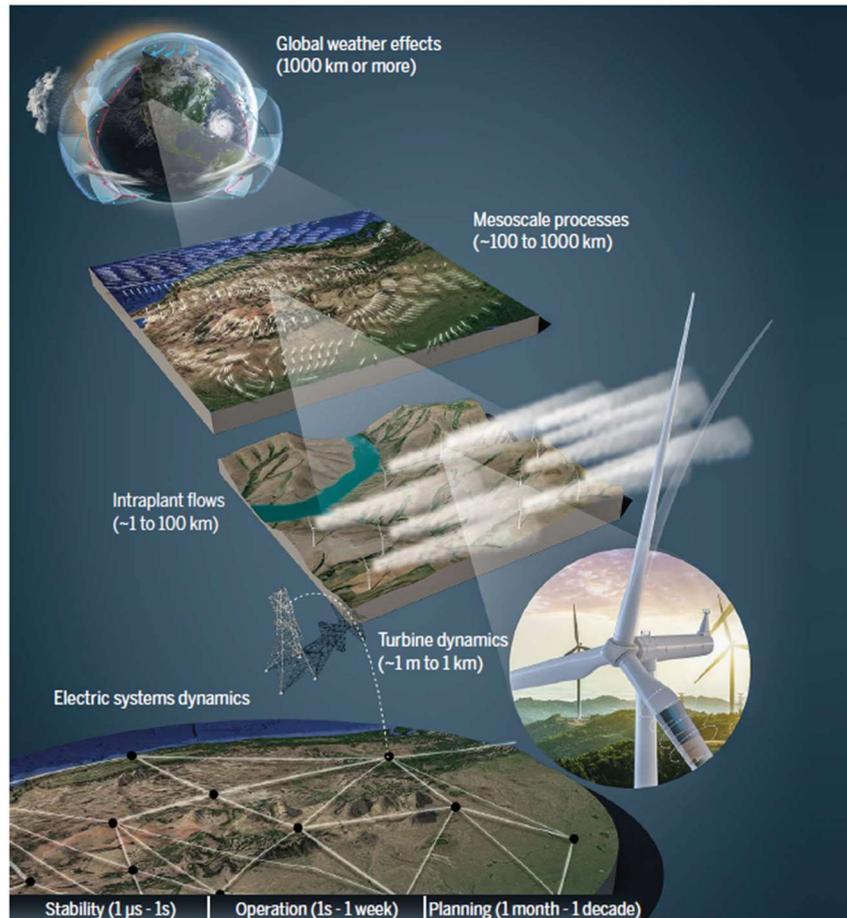


Figure 4.2.3-67. The cascade of scales underlying wind energy scientific grand challenges<sup>13</sup>

この論文では、風力エネルギー研究におけるグランドチャレンジとして3つのテーマを挙げた。

- (i) 高高度風車における大気の流れの物理的理解の向上
- (ii) 個々の風車部品材料とシステムダイナミクス
- (iii) 大規模な電力系統の中で相互影響する数百台の発電機からなる風力発電所の最適制御

これら3つのグランドチャレンジは相互依存しているため、各分野での進歩が、他の2つの分野と同時進行で求められ、統合的・横断的な研究の拡大が必要とされる。地球レベルでの気象システムから風力タービン翼の境界層までの長さのスケールと気象の季節変動の時間スケールを理解し、発電と需要のサブ秒単位の動的制御とバランスを管理する必要がある。

また、統合的な研究を成功させるためには、多分野（実験・計算）にまたがる膨大な情報をいかに効率的に取り扱うかが重要になる。計算科学とデータ科学に関連する分野の研究は、スケールや分野を超えてモデルやデータ統合に関する研究支援をすることになると考えられる。

このような風力エネルギー科学のグランドチャレンジを解決することで、将来、風力発電所が電力システムのニーズに対して、低コストで供給することが可能になると考えられる。

<sup>13</sup> P.Veers, et.al., Grand challenges in the science of wind energy, Science 366, eaau2027 (2019)

② 重要度ランクテーブル (PIRT) 手法

米国の A2e (Atmosphere To Electron) プロジェクトや EU の NEWA (New European Wind Atlas) プロジェクトでは、研究開発の戦略策定をする上で、PIRT (Phenomena Identification and Ranking Table) 手法が活用されており、IEA Wind Task31 の中でも、A2e や NEWA の取り組みを参照して、V&V 戦略を検討している。Table 4.2.3-13 は、A2e プロジェクトにおける PIRT 手法の例<sup>14</sup>を、Table 4.2.3-14 は、NEWA プロジェクトにおけるギャップ分析のガイドライン<sup>15</sup>を示す。PIRT では、各技術要素をブレイクダウンし、それぞれの重要度、モデルの妥当性 (Adequacy) のレベル付けをステークホルダー間のコンセンサスに基づいて行う。この事例では、高・中・低の3つのランクに分類をしている。また、モデルの妥当性のレベル付けにおいては、現象をモデル化する上でのギャップ分析を、物理的ギャップ、数値コード的ギャップ、検証データギャップの観点で行っている。

Table 4.2.3-13. A2e PIRT, Wind Turbine Scale

Phenomenon	Importance at Application Level	Model Adequacy		
		Physics	Code	Val
<b>Turbine scale flow phenomena</b>				
Blade Aero / Wake Generation				
Blade load distribution effects and rotor thrust	H	M	L	L
Tip and root vortex development, and evolution and merging	H	M	L	L
Vortex sheet and rollup (in addition to tip/root vortex)	M	M	M	L
Blade generated turbulence characteristics (energetic scales)	H	L	L	L
Root flow acceleration effect ('hub jet')	Unknown	M	L	L
Boundary layer state on turbine performance (roughness, soiling, bugs, erosion)	H	L	L	L
Boundary layer state (Re)	L	M	L	L
BL details near TE and LE	H	M	L	L
Rotational augmentation	H	L	L	L
Dynamic stall	H	L	L	L
Unsteady inflow effect (turb. intensity, spectra, coherence; veer, shear)	H	L	L	L
Blade flow control	M	L	L	L
Tower/rotor/nacelle wake interactions	H	M	L	L
Icing	L	L	L	L

<sup>14</sup> D.Maniaci, Overview of V&V framework, IEA Wind Task31 Annual Meeting, (2016)

<sup>15</sup> NEWA, Report on the hierarchy of benchmarks Deliverable D3.4,(2016)

Table 4.2.3-14. NEWA Guidelines to determining the importance ranking level

レベル	物理的	数値コード的	検証データ
高 (H)	全動作範囲にわたって、現象を表すことができる成熟したモデル	コードの検証を実施し、関連するベンチマークで文書化され、意図したモデルが実装されている	アプリケーションに関連する包括的な検証によるエビデンスがある
中 (M)	一般的に関連する現象を捉えている中忠実度モデル	意図したモデルは実装されているが、検証が完了していないか、関連するベンチマークがない	部分的な検証で、十分な動作範囲をカバーしていない
低 (L)	現象の再現性が不十分な低次モデル	意図したモデルが未実装で、検証が不完全で、使用を妨げる可能性のあるバグや問題がある	検証が不十分な場合、またはアプリケーションに関連していない場合

③ EU ETIP Wind ロードマップ (浮体式洋上風力)

EU の Horizon2020 研究プロジェクトの一つである ETIP (European Technology & Innovation Platform on Wind Energy) において作成された、ロードマップ (浮体式洋上風力) <sup>16</sup>で示された技術開発項目を Figure4.2.3-68 に示す。このロードマップの中で、短期的に必要とされる技術開発項目として、設計ツールの検証、中期的に必要な技術開発項目として、統合設計を挙げている。ウェイク及び乱流に関しては、優先順位は中程度、開発時期は長期的に必要な技術開発項目と位置付けられている。

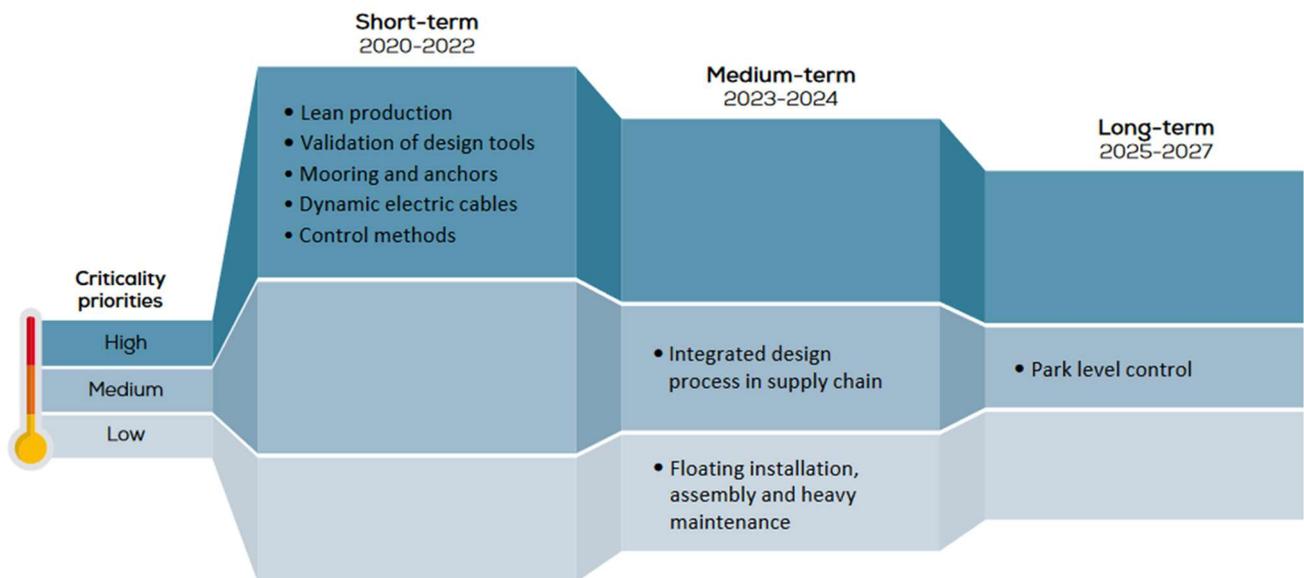


Figure4.2.3-68. EU ETIP Wind Floating offshore wind roadmap

④ 米国洋上風力技術開発コンソーシアムロードマップ

<sup>16</sup> ETIP Wind Roadmap Floating offshore wind, (2019)

2020年3月末時点において、米国で運転中の洋上風力プロジェクトは、ロードアイランド州 Block Island 洋上風力発電所 (6MW×5 基) の1件であるものの、既に、許認可申請等が済んでいる案件が、25.8GW に達しており、今後、洋上風力発電の開発が急速に進められると考えられる。

そのような中、英国の Carbon Trust、米国エネルギー省 (DOE) 及びニューヨーク州エネルギー研究開発局が中心となる洋上風力技術開発コンソーシアムが組成され、今後の技術開発ロードマップを策定<sup>17</sup>した (Table 4.2.3-15)。そこでは、研究開発の柱を3つ置き、ウェイク及び乱流については、着床式、浮体式のどちらにおいても重要なテーマとして掲げられている。

- (i) 風力発電システムの技術開発 (着床式・浮体式)
- (ii) 風資源及びサイト条件の理解
- (iii) 施工、O&M、サプライチェーン

Table 4.2.3-15. US National offshore wind research and development consortium roadmap

技術開発項目	Pillar 1			Pillar 2	Pillar 3
	着床	浮体	着床及び浮体 共通	風資源及びサ イト条件	施工、O&M、 サプライ チェーン
超大型風車の開発	○				
性能試験					○
暴風対応発電システム			○		
氷対応			○		
浮体の最適化		○			
基礎構造の低コスト化	○				
係留システム		○			
系統・電力システム			○		○
エネルギー貯蔵			○		
ロジスティクス					○
維持管理及び修理					○
気象条件				○	
系統的な海象条件計測				○	
海象モデルサイトの開発				○	
地盤条件データベースの開発				○	
ウェイク及び乱流	○	○			
環境及び社会的影響					○
規制、許認可、レーダー干渉					○

<sup>17</sup> National Offshore Wind Research & Development Consortium, Research and Development Roadmap Version 2.0, (2019)

以上、欧米の最新の研究開発動向を調査し、本プロジェクトで取り組んでいる研究項目が実際に進んでいる洋上ウィンドファーム開発においてどのような位置付けとなるのかを確認した。風車及びウィンドファームスケールの大型化を背景としてより統合的な研究が必要となり、とりわけ計算科学とデータ科学分野からはスケールや分野を超えてモデルやデータ統合に関する研究支援が必要となること、また複数のロードマップにおいてウェイク及び乱流の研究が重要なものと認識されていることが明らかになった。

#### 4-2-4. (サブ課題 D) 核融合炉の炉心設計

<再委託機関：国立研究開発法人日本原子力研究開発機構、国立大学法人名古屋大学、大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所>

##### (1) 研究成果の概要

本サブ課題では、長期代替クリーンエネルギー源として期待される核融合炉の実用化に向けて次世代核融合実験炉 ITER を対象とし、従来の計算機環境では難しかった核燃焼プラズマの 5 次元第一原理計算を実現し、炉心運転条件の最適化設計に貢献する。

平成 31 年度（令和元年度）は、核燃焼プラズマ解析に向けた計算モデル拡張に関しては、乱流輸送解析コード GT5D、GKV、および高エネルギー粒子閉じ込め解析コード MEGA における多種イオン系モデルへの拡張、マルチスケール計算モデルの開発、開発モデルの理論的妥当性検証を完了し、核燃焼プラズマ解析コードを完成させた。エクサスケール計算技術開発に関しては、粒子法、格子法を対象とするメニーコア最適化手法、省通信アルゴリズム等のエクサスケール計算技術の開発、およびポスト「京」プロトタイプ機（Oakforest-PACS、FX100、「富岳」試作機）における技術実証を完了し、エクサスケールシミュレーションを完成させた。実証研究と ITER 物理課題検討に関してはトカマク装置、LHD における多種イオン系乱流輸送（水素同位体効果、不純物輸送）の実証研究を完了し、実験的計測誤差やデータベースの分散に対する開発コードの予測性能を明確化するとともに、JT-60U、LHD における高エネルギー粒子駆動 MHD 現象の解析を完了し、長時間スケールの間欠的 MHD 現象を再現することに成功した。これらの成果の一部は ITPA において発表され、ITER 物理課題の検討にも貢献した。開発コードの普及および人材育成に関しては、GKV をオープンソースとして公開し、コード普及に向けた講習会を実施するとともに、省通信型行列計算ライブラリ、In-Situ 可視化システム等のエクサスケール計算基盤技術をオープンソースとして公開した。以上の取り組みによりサブ課題 D の成果目標を達成した。

##### (2) サブ課題 D の総合的推進

本サブ課題の総合的推進に資する取り組みとして、各機関の責任者による意思決定を目的とする幹事会、プロジェクトメンバー全体の研究開発進捗報告を目的とする開発推進会議の運営を行うとともに、連携体制の構築と研究協力の推進に向けた以下の取り組みを実施した。

###### (2-1) 連携体制の構築

LHD および JT-60 における実証研究に向けて、核融合科学研究所（NIFS）の「大型ヘリカル装置（LHD）実験共同研究」、および量子科学技術研究開発機構（QST）の「トカマク炉心プラズマ共同研究」を継続し、連携体制を構築した。また、エクサスケール計算技術開発および実証研究の完了に向けて、JAEA および理研の計算機科学の専門家 2 名、および NIFS の LHD 実験解析の専門家 1 名を新たにプロジェクトメンバーに追加した。

###### (2-2) 国際協力の推進

米国において核融合シミュレーションに関する SciDAC（Scientific Discovery through Advanced

Computing) および ECP (Exascale Computing Project) を推進しているプリンストン大学プラズマ物理研究所 (PPPL)、オークリッジ国立研究所 (ORNL) の研究グループと国際協力を推進した。日米科学技術協力 (核融合分野) の下で進められている核融合理論共同研究、JIFT (Joint Institute for Fusion Theory) の枠組みに加えて、エクサスケール計算機開発に関する DOE-MEXT MOU におけるアプリケーション連携テーマを立ち上げ、プラズマ物理と計算機科学の両面からの連携体制を構築した。DOE-MEXT 連携に関しては、6th DOE-MEXT workshop (2019 年 5 月 28 日~29 日、シカゴ) において「富岳」と Summit におけるエクサスケール計算技術開発に関する連携の成果を報告した[1]。関連する共同研究としては周辺プラズマ乱流解析コードの開発を実施した[2]。また、2019 年 10 月 28 日~29 日の 2 日間、理化学研究所計算科学研究センター (R-CCS、神戸) において”Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration”を開催し、日本側 14 名、米国側 11 名の参加者が日米のエクサスケール核融合シミュレーション開発に関する情報交換を行った。

一方、欧州との協力に関しては、フランス原子力・代替エネルギー庁 (CEA) との国際協力を推進した。エクサスケール核融合シミュレーション開発を目的として CEA と共同で雇用したポスドクを中心として大域的乱流輸送解析コードを用いた解析[3,4]を実施するとともに、エクサスケール計算技術の共同開発を実施した[5]。

## 文献

- [1] C.S. Chang, Y. Idomura, T. Moritaka, Y. Todo, T.-H. Watanabe, J. Wells, S. Klasky, and J. Choi, “Status of US-Japan collaboration on exascale fusion simulations between the ECP and the Post-K project”, 6th DOE-MEXT Workshop, 28-29 May, Chicago, USA (2009).
- [2] T. Moritaka, “Development of XGC particle code for LHD”, Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, 28-29 October, Kobe, Japan (2019).
- [3] Y. Asahi, V. Grandgirard, Y. Sarazin, P. Donnel, X. Garbet, G. Dif-Pradalier, G. Latu, and Y. Idomura, “Synergy of turbulent and neoclassical transport through poloidal convective cells”, Plasma Physics and Controlled Fusion 61, 065015 (2019).
- [4] K. Obrejan, Y. Idomura, and M. Honda, “Influence of the normalised gyroradius on neoclassical transport in global gyrokinetic simulations using the code GT5D”, 18th European Fusion Theory Conference, 7-10 October, Ghent, Belgium (2019).
- [5] Y. Asahi, G. Latu, V. Grandgirard, J. Bigot, “Performance portable implementation of a kinetic plasma simulation mini-app”, Proceedings of 6th Workshop on Accelerator Programming Using Directives (WACCPD), Denver, CO, USA (2019).

### (3) 核燃焼プラズマ解析に向けた計算モデル拡張

#### (3-1) 大域的乱流輸送解析の計算モデル拡張

##### (3-1-1) コードの概要と開発状況

大域的乱流輸送解析コード GT5D [1]はトーラス形状磁場 (Figure4.2.4-1) で閉じ込められた核融合

プラズマを解析対象とする乱流輸送解析コードであり、5次元ジャイロ運動論方程式（磁化プラズマにおける高周波のサイクロトロン運動を平均化して6次元ボルツマン方程式を5次元に簡約化したもの）と乱流場のポアソン方程式から構成される磁化プラズマの第一原理モデルを炉心プラズマ全体について計算し、乱流場の非線形発展とそれによって引き起こされるプラズマ輸送現象を解析する。GT5Dにおける物理モデルの大きな特徴は、炉心プラズマ全体を計算領域として、なおかつ、微視的なプラズマ乱流（相関長:~1mm、相関時間:~0.01ms）と巨視的なプラズマ分布（勾配特性長:~1m、エネルギー閉じ込め時間:100ms~1s）の時空間スケールの分離を仮定せずにマルチスケール現象を単一の第一原理モデルで統一的に記述する full-f モデルの計算を行うことである。以下に5次元位相空間  $(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp})$  における多種イオン系モデルのジャイロ運動論方程式系を示す。

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \dot{\mathbf{R}} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{R}} + \dot{v}_{\parallel} \frac{\partial f_s}{\partial v_{\parallel}} = \sum_{s'} C(f_s, f_{s'}) + S_s, \quad (1)$$

$$\dot{\mathbf{R}} = v_{\parallel} \mathbf{b} + \frac{c}{\mathbf{b} \cdot \mathbf{B}^*} \mathbf{b} \times \nabla \langle \phi \rangle + \frac{m_s c}{q_s \mathbf{b} \cdot \mathbf{B}^*} \mathbf{b} \times \left( v_{\parallel}^2 \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} + \frac{1}{2} v_{\perp}^2 \nabla \ln B \right), \quad (2)$$

$$\dot{v}_{\parallel} = -\frac{\mathbf{B}^*}{m_s \mathbf{b} \cdot \mathbf{B}^*} \cdot \left( q_s \nabla \langle \phi \rangle + \frac{1}{2} m_s v_{\perp}^2 \nabla \ln B \right), \quad (3)$$

$$-\nabla_{\perp} \cdot \left[ \sum_s P_s \right] \nabla_{\perp} \phi = 4\pi \sum_s q_s \int f_s d^3 v. \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{R}$  は粒子位置、 $v_{\parallel}$  と  $v_{\perp}$  は磁力線に並行、垂直方向の粒子速度、 $s$  は粒子種のラベル、 $q_s$  は電荷、 $m_s$  は質量、 $f_s$  は粒子分布関数、 $\phi$  は静電ポテンシャル、 $\langle \phi \rangle$  は軌道平均した静電ポテンシャル、 $C$  は異種粒子衝突演算子、 $S_s$  はソース・シンク項、 $\mathbf{B}$  は磁場、 $B=|\mathbf{B}|$  は磁場強度、 $\mathbf{b}=\mathbf{B}/B$ 、 $\mathbf{B}^*=\mathbf{B}+(m_s c/q_s)v_{\parallel}\nabla\times\mathbf{b}$ 、 $P_s$  は分極効果の係数を示す。

計算手法[2]としては、5次元位相空間の移流方程式として与えられるジャイロ運動論方程式(1)に4次精度無散逸保存型差分を適用する。ポアソン方程式(4)にはトロイダル方向 ( $\varphi$  方向) にフーリエモード展開、トーラス断面上で2次元有限要素法を適用する。速度空間の移流拡散方程式として与えられる粒子衝突項には6次精度中心差分を適用する。時間積分には移流項と粒子衝突項の間にオペレータ分割法を適用し、前者に2次精度半陰的ルンゲ・クッタ法を採用して磁力線方向の高速な熱運動を陰的に取り扱うとともに、後者をクランク・ニコルソン法によって計算する。ここで、後者の速度空間の2次元移流・拡散項が与える非対称行列の連立一次方程式はノード内で計算可能な規模となるため容易に計算できるが、前者の4次元移流項が与える非対称行列の連立一次方程式は並列処理を必要とする大規模問題となるため、移流項の差分・陰解法ソルバが主要な計算コストを占める。この差分・陰解法ソルバには、これまで、非対称行列向けのクリロフ部分空間法である一般化共役残差法を用いてきたが、メニーコア環境でボトルネックとなる集団通信の問題を解決するために、省通信クリロフ部分空間法も導入された[3]。並列化にはMPIとOpenMPを用いたハイブリッド並列処理を採用しており、5次元位相空間に対する3次元、もしくは、4次元の領域分割モデルを階層的なネットワークで構築することによって通信コストを最小化し、OpenMPによって実装した通信隠蔽処理によって、

「京」全系規模となる約 60 万コアまで強スケーリングを実現した[4,5]。これに加えて、省通信クリロフ部分空間法の導入によってメニーコア環境でボトルネックとなるクリロフ部分空間法の直交化処理に伴う縮約通信のコストを削減し、Oakforest-PACS 全系規模となる約 55 万コアまで強スケーリングを実現した。

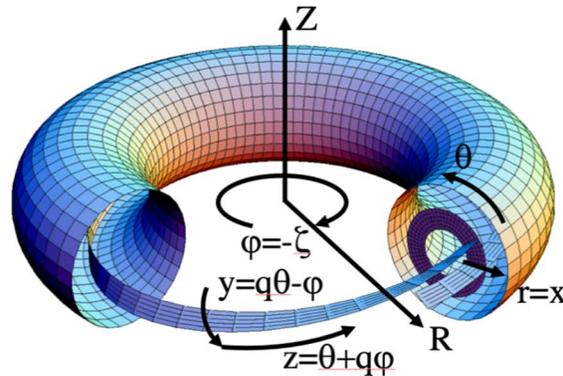


Figure 4.2.4-1. Cylindrical coordinates  $(R, \zeta, Z)$ , Flux coordinates  $(r, \theta, \varphi)$ , and Field-following coordinates  $(x, y, z)$  used in fusion plasma simulations. Here,  $z$  shows the direction of magnetic field line and the safety factor  $q$  shows its winding pitch.

これまで、GT5D は重水素プラズマ実験におけるイオン系乱流が引き起こす熱輸送および温度分布形成の解析を目的として開発されてきた。本サブ課題では重水素、三重水素、ヘリウム等を含む多種イオン系の核燃焼プラズマにおけるイオン系乱流と電子系乱流が引き起こす燃料粒子輸送、不純物粒子輸送、運動量輸送、イオン熱輸送、電子熱輸送、およびそれによる炉心プラズマ分布形成の解析を実現する。この目標達成に向けて、運動論的電子モデル、多種イオン系モデル、3次元磁場配位モデルといった物理モデル拡張、および格子法のエクサスケール計算技術開発に取り組んできた。平成 27 年度には運動論的電子モデル、異種粒子衝突モデルといった基本的な物理モデルを開発した[5]。平成 28 年度にはコードを多種イオン系モデルに拡張するとともに、運動論的電子モデルを用いた実証研究を実施した[6]。平成 29 年度はコードを 3次元磁場配位モデルへ拡張して、LHD 配位における検証計算を実施するとともに[7]、トカマク配位における 3次元擾動磁場の衝突性輸送現象に対する影響評価を実施した[8]。また、CEA との国際協力に基づくコード間ベンチマークも順調に進展し、開発コードによる非線形乱流計算の精度検証を完了した[9]。平成 30 年度はプロジェクト前半で開発した要素物理モデルを統合して多種イオン系の大域的乱流輸送解析コードを整備し、実証研究で目標としている不純物輸送解析に関して衝突性輸送解析の精度検証[10]を実施するとともに、乱流輸送と衝突性輸送の相互作用に関する実証研究[11]を実施した。平成 31 年度(令和元年度)は開発コードを用いて ITER で重要課題となっているタングステン不純物の輸送、および乱流輸送の水素同位体効果を解析した。この結果、タングステン衝突性輸送のプラズマサイズ依存性を明らかにした[12]。また、水素同位体効果については長年の謎となっていたイオン温度勾配駆動(ITG)モードが駆動するイオン系乱流における水素同位体効果を世界で初めて再現することに成功した[13]。これらの成果により、平成 31 年度(令和元年度)の実施計画を達成するとともに、サブ課題 D の成果目標を十分に達成できた。

(3-1-2) 平成 31 年度 (令和元年度) の研究成果

(3-1-2-1) 不純物の衝突性輸送解析の精度検証[12]

ITER の核燃焼プラズマでは燃料粒子の重水素と三重水素の核融合反応によって 3.5MeV のヘリウム (アルファ粒子) と 14MeV の中性子が発生する。中性子はブランケットと呼ばれる炉内機器で吸収されてそのエネルギーが発電に用いられるのに対し、アルファ粒子のエネルギーは炉心プラズマを自己加熱して高温状態を維持するために使われて、最終的に熱化したヘリウム (ヘリウム灰) が生成される。したがって、核燃焼プラズマは、主に、重水素、三重水素、ヘリウム、3 種類のイオンを含む多種イオン系となる。これに加えて、ダイバータ、ブランケット、炉壁等の炉内機器のプラズマ対向材から放出されるベリリウムやタングステン、および境界層プラズマ制御のために外部から注入されるアルゴン等の不純物も存在することから、炉心プラズマの運転シナリオを最適化する上で、多種イオン系プラズマにおける様々な原子番号  $Z$ 、原子量  $A$  の不純物に対する高精度な輸送特性評価が重要な課題となっている。特に、タングステン ( $Z=74$ 、 $A=184$ ) のような高  $Z$  不純物の炉心への蓄積は、燃料の希釈による燃料純度の低下、あるいは、エネルギーの放射損失による炉心温度低下につながり、炉心出力への影響が大きいことから、タングステン不純物の挙動を理解することは ITER の最重要課題となっている。しかしながら、タングステンのような高  $Z$  不純物は燃料粒子の重水素や三重水素に比べて質量が大きく熱速度が一桁程度異なることから、高  $Z$  不純物を含む多種イオン系のシミュレーションは速度空間のマルチスケール問題となる。このようなマルチスケール問題では、速度空間の解像度、およびクーロン衝突による速度空間の拡散過程の時間ステップ幅が厳しくなることから、平成 28 年度に異種粒子衝突演算子の陰解法ソルバを開発した。この異種粒子衝突演算子の計算精度を検証するために、平成 30 年度に多種イオン系の衝突性輸送解析における衝突性輸送理論[14]との比較を実施した[10]。今年度はこの解析を発展させ、急峻な温度勾配のパラメータ領域におけるタングステン輸送の熱遮蔽効果を解析した。

衝突性輸送理論において、原子番号  $Z_s$  の不純物の粒子束  $\Gamma_{Cs}$  の近似解は拡散係数  $D_s$  と熱遮蔽係数  $H_s$  を用いて以下のように表される。

$$\Gamma_{Cs} \sim n_s D_s \left[ \frac{1}{L_{ns}} - Z_s \frac{1}{L_{nD}} - Z_s H_s \frac{1}{L_{tD}} \right] \quad (5)$$

ここで、 $L_{ns} = -n_s / \nabla n_s$ 、 $L_{ts} = -T_s / \nabla T_s$  は粒子種  $s$  の密度勾配パラメータ、温度勾配パラメータを示す。また、熱遮蔽係数は粒子衝突周波数が十分に大きい極限で  $H_s = 1/2$  という解析解を持つ。上式から、トレーサー不純物の輸送は自身の密度勾配による拡散項 (第 1 項) と主プラズマの密度勾配による内向き輸送 (第 2 項)、および主プラズマの温度勾配による外向き輸送 (第 3 項) の競合で決まり、特に、タングステンのような高  $Z$  不純物の場合には第 2 項と第 3 項が与える非拡散的輸送が支配的となることがわかる。平成 30 年度に実施した解析では、これらの傾向を捉えることに成功し、1) 低  $Z$  不純物のヘリウムでは、第 1 項の依存性が強く出ることに対し、高  $Z$  不純物のタングステンでは不純物密度勾配に対する依存性が弱いこと、2) 熱遮蔽効果によって  $R/L_{tD} = 0$  (一様温度) の場合と比べて  $R/L_{tD} = 1$  (緩やかな温度勾配パラメータ) の場合には内向き輸送が大きく低減することを示し、どのケースにおいても GT5D と衝突性輸送理論の解析結果が定量的に一致することを確認した。今年度はこの解析

を進展させ、ITER の運転シナリオ設計において重要な  $R/L_{\text{D}} \gg 1$  となる急峻な温度勾配パラメータ領域における熱遮蔽効果を解析した。

この解析では、昨年度と同様に DIII-D 装置（米）の実験データを基準として設定された小型装置パラメータ（Cyclone Base Case）を採用し、3種類のトレーサー不純物、ヘリウム（ $Z=2$ 、 $A=4$ ）、炭素（ $Z=6$ 、 $A=12$ ）、タングステン（典型的なプラズマ温度に対するコロナモデルによる電離状態の評価から  $Z=40$ 、 $A=184$  としている）を含む重水素プラズマの解析を実施した。ここで、不純物イオンの電荷密度は電子密度の  $10^{-4}$  倍のいわゆるトレーサーレベルに設定し、影響が小さいトレーサー不純物間の異種粒子衝突演算子は無視した。Figure 4.2.4-2(a)-(c)に示す規格化装置サイズ  $a/\rho=150$ （ $a$ : プラズマ半径、 $\rho$ : イオン軌道半径）で実施した温度勾配スキャンの結果から、温度勾配が急峻になるほど GT5D と衝突性輸送理論の解析結果は乖離し、GT5D はタングステンの熱遮蔽効果を衝突性輸送理論より低く見積もることが示された。ここで、衝突性輸送理論ではタングステンの熱遮蔽係数は  $H_w=0.46$  となるのに対して、GT5D の温度勾配スキャンから得られる係数は  $H_w=0.32$  となり熱遮蔽効果が約 3 割低い結果となった。この原因として、衝突性輸送理論では温度勾配の特性長  $L_{\text{ts}}$  に比べて粒子軌道幅が十分に小さいという局所近似を仮定しているが、温度勾配が急峻になるとこの近似が破れている可能性がわかってきた。この点を検証するために ITER 規模の規格化装置サイズ  $a/\rho=600$  で同様の温度勾配スキャンを実施した。Figure 4.2.4-2(d)-(f)に示す結果において、GT5D と衝突性輸送理論の粒子束は良い一致を示しており、GT5D の熱遮蔽係数は  $H_w=0.43$  と評価された。以上の結果から、ITER 規模の装置サイズでは局所近似が妥当であり、GT5D と衝突性輸送理論の解析結果が一致することが確認できた。また、現在の実験解析で用いられている標準的な衝突性輸送理論は、 $a/\rho < 300$  程度の既存装置に対してタングステンの熱遮蔽効果を過大評価している可能性が明らかになった。

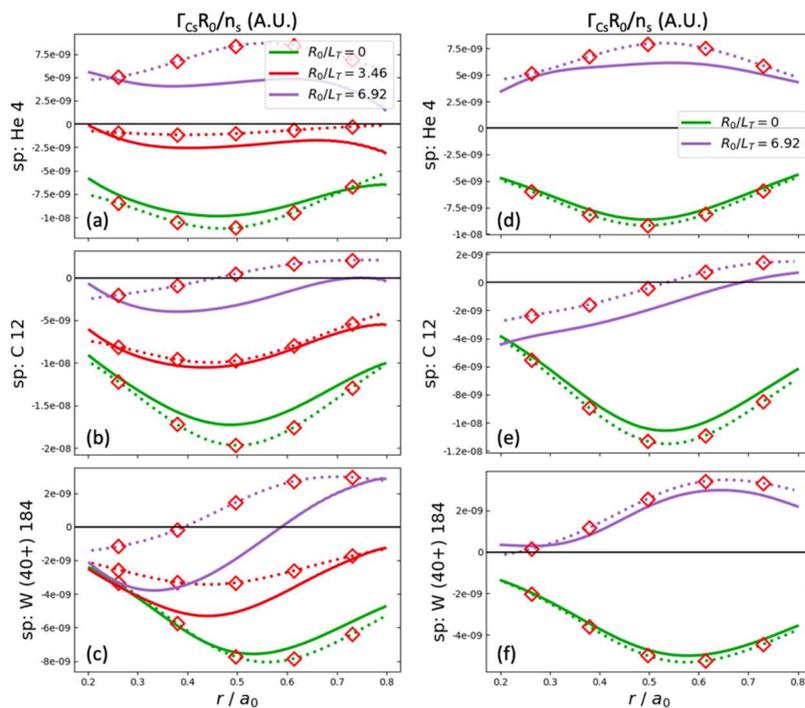


Figure 4.2.4-2. Radial profiles of collisional transport fluxes of a Deuterium plasma with three tracer impurities ((a),(d) Helium, (b),(e) Carbon, (c),(f) Tungsten) in a Cyclone base case parameter

with  $R/L_{nD}=R/L_{ns}=2.2$  and  $q_s n_s / en_e = 10^{-4}$ , where  $q_s$  and  $n_s$  are the charge and density of species  $s$ .  $R/L_{ts}(=R/L_{tD}=R/L_{te})$  scans are shown for (a)-(c)  $a/\rho=150$  and (d)-(f)  $a/\rho=600$ . Solid lines show GT5D results, and dashed lines with diamonds show estimations by the collisional transport theory [14].

### (3-1-2-2) 水素同位体効果の解析[13]

多種イオン系プラズマの乱流輸送に関するもう一つの重要課題は水素プラズマと比べて重水素プラズマで乱流輸送が抑制される水素同位体効果である。水素に比べて原子量  $A$  が 2 倍の重水素の方が軌道半径  $\rho \propto A^{1/2}$  が約 1.4 倍大きくなり、乱流の相関長もそれに比例するため、古典的な局所乱流理論によって得られる閉じ込め時間のスケーリング  $\tau_{GB} \propto A^{-0.5}$  (ジャイロボームスケーリング) では重水素プラズマの方が乱流輸送が大きくなると予想される。しかしながら実験はそれと逆の傾向  $\tau_{EXP} \propto A^{0.2}$  を示す[15]。近年の理論的研究から、捕捉電子モード (TEM) が駆動する電子系乱流に関しては、水素と重水素で異なるイオンと電子の粒子衝突効果によって TEM の安定性が変化する効果やそれに関連して乱流を抑制する帯状流の非線形応答が変化する効果等の水素同位体依存性が議論されてきたが、イオン温度勾配駆動 (ITG) モードが駆動するイオン系乱流の水素同位体効果を再現した例はほとんどなく、その物理機構は長年の未解決課題となっていた。さらに、ASDEX-U 装置 (独) における最近の水素同位体実験[16]では、プラズマ加熱方式の違いによって水素同位体効果に違いが出るという実験結果が示され、より一層複雑な問題が提示された。この実験では、電子サイクロトロン共鳴加熱 (ECRH) による電子加熱では水素同位体効果が顕著に現れ、重水素プラズマの閉じ込めが改善するのに対し、中性粒子ビーム入射 (NBI) によるイオン加熱では水素同位体効果が弱まり、水素プラズマと重水素プラズマでほぼ同じ閉じ込め時間となることが示された。このような ITG 乱流の水素同位体効果とその加熱方式に対する依存性を検証するために、GT5D を用いて水素プラズマと重水素プラズマの ITG 乱流数値実験を実施した。

GT5D による先行研究では規格化装置サイズ  $a/\rho$  の変化による大域的な背景シア流や雪崩現象による非局所的輸送の違いが ITG 乱流の輸送特性に大きく影響し、規格化装置サイズに比例して乱流輸送が大きくなる傾向が示されている[17]。水素プラズマと重水素プラズマでは軌道半径  $\rho \propto A^{1/2}$  が約 1.4 倍異なり、規格化装置サイズ  $a/\rho$  も水素プラズマで約 1.4 倍大きくなる。最初に、この大域的な装置サイズ効果に着目して  $a/\rho$  と  $A$  を独立に変化させた①( $a/\rho, A$ )=(150,2)、②( $a/\rho, A$ )=(210,1)、③( $a/\rho, A$ )=(225,2)という 3 ケースの ITG 乱流数値実験をイオン加熱条件で実施した。この結果、重水素プラズマでプラズマ半径  $a$  を変化させた場合①→③、および  $a$  を固定して粒子種を水素から重水素に変化させた場合①→②において同様の閉じ込めスケーリング  $\tau_B \propto A^0$  (ボームスケーリング) が得られることを示した。これにより、従来は独立な問題として捉えられてきた水素同位体効果と装置サイズ効果が同じ物理効果によって支配されており、大域的乱流解析では閉じ込めスケーリングのベースラインが局所的乱流理論のジャイロボームスケーリングからボームスケーリングに変わることを明らかにした。この結果は NBI によるイオン加熱実験で見られた水素プラズマと重水素プラズマでほぼ同じ閉じ込め時間が観測された実験結果とも整合する。

次に、電子加熱を印加した ITG 乱流数値実験を実施し、重水素プラズマで閉じ込めが改善する水素同位体効果  $\tau_{GT5D} \propto A^{0.15}$  を再現することに成功した。 $\tau_{EXP} \propto A^{0.2}$  および  $\tau_{GT5D} \propto A^{0.15}$  から得られる水素プラズマと重水素プラズマの閉じ込め時間の比はそれぞれ 1.15、1.11 となるが、この結果は  $\tau_{EXP}$  の評

価に用いられた実験データベースの誤差 (RMSE~15.8%) の範囲内で一致している。この数値実験に関して系統的な加熱パワースキャンを実施した結果、水素プラズマと重水素プラズマの電子加熱パワー比が  $P_H/P_D \sim 1.4$  となる条件でほぼ同じイオン温度分布、電子温度分布が形成されることを示した (Figure 4.2.4-3(a),(b))。上記 ASUDEX-U 実験では電子加熱パワー比が  $P_H/P_D \sim 1.3$  となるプラズマでほぼ同じ温度分布が形成されることが報告されており、GT5D は実験結果とよく一致している。Figure 4.2.4-3(c)に示すイオン熱拡散係数と電子熱拡散係数から、電子加熱条件であるにも関わらず、電子からイオンへの衝突性エネルギー移行によって ITG 乱流が駆動されてイオン系が主要な熱輸送チャンネルとなっていることがわかる。また、水素プラズマと重水素プラズマの乱流輸送の比がイオン加熱数値実験で見られたボームスケージングが与える約 1.4 倍を大きく上回っていることがわかる。このプラズマでは ITG 乱流が支配的であるが、電子からイオンへの衝突性エネルギー移行が水素プラズマと重水素プラズマで異なることにより、イオン系への実質的な加熱パワーが水素プラズマで増大し、ITG 乱流がより強く駆動されることでバースト的な非局所的輸送が増大していることがわかった (Figure 4.2.4-3(d))。

本研究では ITG 乱流の水素同位体効果を加熱方式の依存性まで含めて再現し、その物理機構を解明することに世界で初めて成功した。この成果をまとめた論文[13]は Physics of Plasmas 誌の featured article に選出された。

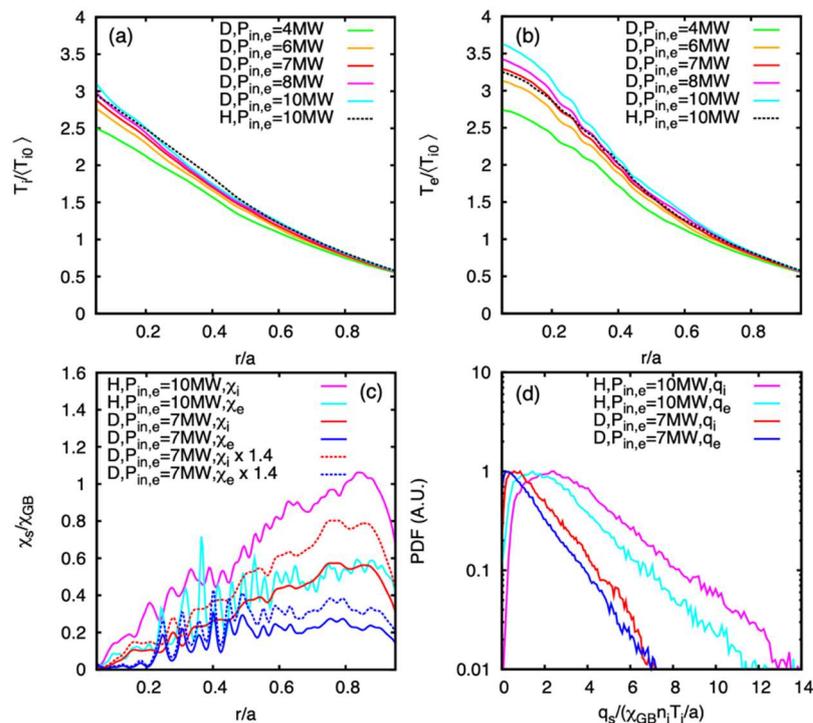


Figure 4.2.4-3. Hydrogen isotope effects in electron heating isotope scan numerical experiments with ASDEX-U like parameters. (a) and (b) show ion and electron temperature profiles in Hydrogen (H,  $P_H=10MW$ ) and Deuterium (D,  $P_D=4,6,7,8,10MW$ ) plasmas, which give the similar profiles by applying electron heating with  $P_H=10MW$  and  $P_D=7MW$ , respectively. (c) shows the thermal diffusivity normalized by the gyro-Bohm diffusivity  $\chi_{GB}$ . (d) shows the PDFs of flux-surface averaged heat fluxes at  $r/a=0.5$ .

## 文献

- [1] Y. Idomura, H. Urano, N. Aiba, and S. Tokuda, “Study of ion turbulent transport and profile formations using global gyrokinetic full-f Vlasov simulation”, *Nucl. Fusion* 49, 065029 (2009).
- [2] Y. Idomura, M. Ida, T. Kano, N. Aiba, and S. Tokuda, “Conservative global gyrokinetic toroidal full-f five dimensional Vlasov simulation”, *Comput. Phys. Commun.*, 179, 391-403 (2008).
- [3] Y. Idomura, T. Ina, A. Mayumi, S. Yamada, K. Matsumoto, Y. Asahi, and T. Imamura, “Application of a communication-avoiding generalized minimal residual method to a gyrokinetic five dimensional Eulerian code on many core platforms”, *Proceedings of 8th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems, Denver, CO USA, November 2017 (Scala'17)*
- [4] Y. Idomura, M. Nakata, S. Yamada, M. Machida, T. Imamura, T.-H. Watanabe, M. Nunami, H. Inoue, S. Tsutsumi, I. Miyoshi, and N. Shida, “Communication overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer”, *Int. J. HPC Appl.* 28, 73-86 (2014).
- [5] Y. Idomura, “A new hybrid kinetic electron model for full-f gyrokinetic simulations”, *J. Comput. Phys.* 313, 511-531 (2016).
- [6] Y. Idomura, “Toroidal angular momentum balance during rotation changes induced by electron heating modulation in tokamak plasmas”, *Phys. Plasmas* 24, 080701 (2017).
- [7] S. Matsuoka, Y. Idomura, and S. Satake, “Neoclassical transport benchmark of global full-f gyrokinetic simulation in stellarator configurations”, *Phys. Plasmas* 25, 022510 (2018)
- [8] S. Matsuoka, Y. Idomura, and S. Satake, “Global kinetic simulations of neoclassical toroidal viscosity in low-collisional perturbed tokamak plasmas”, *Phys. Plasmas* 24, 102522 (2017).
- [9] Y. Asahi, V. Grandgirard, Y. Idomura, X. Garbet, G. Latu, Y. Sarazin, G. Dif-Pradalier, P. Donnel, C. Ehrlacher, “Benchmarking of flux-driven full-F gyrokinetic simulations”, *Phys. Plasmas* 24, 102515 (2017).
- [10] K. Obrejan, Y. Idomura, and M. Honda, “Numerical study of neoclassical impurity transport using the code GT5D”, *24<sup>th</sup> Joint US-EU Transport Task Force Meeting, 18-21 March, Austin, USA (2019).*
- [11] Y. Idomura, “Enhancement of neoclassical impurity transport by a geodesic compression effect in full-f gyrokinetic simulations”, *20<sup>th</sup> ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting, 9-11 April, Daejeon, Korea (2018).*
- [12] K. Obrejan, Y. Idomura, and M. Honda, “Influence of the normalised gyroradius on neoclassical transport in global gyrokinetic simulations using the code GT5D”, *18<sup>th</sup> European Fusion Theory Conference, 7-10 October, Ghent, Belgium (2019).*
- [13] Yasuhiro Idomura, “Isotope and Plasma Size Scaling in Ion Temperature Gradient Driven Turbulence”, *Phys. Plasmas* 26, 120703 (2019, featured article).
- [14] S. P. Hirshman and D. J. Sigmar, “Neoclassical transport of impurities in tokamak plasmas”,

Nucl. Fusion 21, 1079 (1981).

- [15] ITER Physics Basis, “Chapter 2: Plasma confinement and transport”, Nucl. Fusion 39, 2175 (1999).
- [16] P. A. Schneider et al., “Explaining the isotope effect on heat transport in L-mode with the collisional electron-ion energy exchange”, Nucl. Fusion 57, 066003 (2017).
- [17] Y. Idomura and M. Nakara, “Plasma size and power scaling of ion temperature gradient driven turbulence”, Phys. Plasmas 21, 020706 (2014).

### (3-2) 局所乱流輸送解析の計算モデル拡張

#### (3-2-1) コードの概要と開発状況

トーラス型核融合プラズマの閉じ込め領域で発生する微視的乱流による輸送現象について、電子スケールまで含めて高解像度で解析するため、または全体の計算負荷を低減し実験解析への適用を効率的に進めるためには、局所モデルによる解析が適している。このため局所的乱流輸送解析コード GKV では、磁力線に沿った磁気座標を用いて細長いチューブ状の計算領域を設定し、位相空間上の分布関数の発展方程式を解く。従来の GKV における具体的な計算手法は、以下のようにまとめられる。5次元位相空間上で定義された分布関数についてのジャイロ運動論的方程式を、陽的時間積分法であるルンゲ・クッタ・ギル法を用いて数値的に求める。磁力線を横切る方向の乱流揺動はスペクトル法を用いて高精度に扱うとともに、残りの3次元については差分法を適用する。並列計算手法の最適化により、「京」全系規模での高並列計算を実現し、ITER や JT-60 に代表されるトカマク型装置のイオン乱流輸送解析はもとより、トロイダル方向 ( $\varphi$  方向) に非一様な磁場分布を持つ LHD に代表されるヘリカル型装置の乱流解析や、イオン軌道半径から電子軌道半径におよぶマルチスケール乱流輸送問題などの先端的な乱流輸送研究が展開され、多くの学術的成果を上げてきた。

今後の ITER 実験における核燃焼プラズマへの適用を目指し、本課題では、多種イオン系へのモデル拡張とそのための計算手法の開発を進めた。これまでに予備的研究として、異種粒子衝突演算子の実装、および多種イオン系に対する新たな時間積分法の開発を平成 27 年度に進め、平成 28 年度には、多種イオン系に対する時間積分法の拡張、多種イオン系の乱流輸送モデルの拡張、JT-60U 実験および LHD 実験に対する実証研究を進めた。平成 29 年度には、衝突項を陰解法化した新たな時間積分法の開発を進めるとともに、プラズマ回転効果の導入を行った。合わせてこれまでに構築した多種イオン系モデルを活用し、LHD に対する実証研究、高性能トカマクでの電磁乱流の研究を実施した。平成 30 年度は、背景プラズマ回転シア効果の検証、ならびに高並列度を志向した並列計算手法の改良を行い、GKV の計算モデル拡張を進めた。最終年度となる平成 31 年度（令和元年度）には、多種イオン系の興味深い実験結果を示す LHD 不純物ホール・プラズマに関する実証研究、背景シア流による乱流輸送抑制効果の検証、高圧力領域での実証研究に向けた電磁乱流解析、高圧力プラズマにおける磁気シア効果の解析を実施した。

さらに GKV コードの最適化について述べる。GKV コードは「京」において MPI 通信時間の削減・隠蔽を目的とした最適化を行うことでフルノード強スケーリングを達成した。一方、「富岳」では、ノードあたり演算性能が 20 倍以上飛躍しつつも、メモリバンド幅も大きく向上したことでメモリに対する Byte/FLOPS 値は 0.38 と「京」の 0.5 に匹敵する。しかし、インターコネクティブバンド幅は高々 2

倍程度の向上にとどまるため、インターコネクトに対する Byte/FLOPS は 0.015 と「京」の 0.156 より 1 桁小さい。このことは、MPI 通信が律速となり得る GKV コードにおいてシビアな条件であり、アプリケーションにおける演算密度の向上がエクサスケール計算での性能発揮のカギとなる。この問題に対処するため、平成 30 年度までの開発により、多粒子種衝突項の陰解法化を実装することで、演算密度の向上と求解時間の短縮を実現した。また、既の実装してあった並列 FFT に対する通信と演算のオーバーラップも、より省メモリ・省通信となるように改良を行った[1]。これらの改良は GKV の性能向上だけでなく、計算コストバランスやホットスポットの変化ももたらした。そこで、RIKEN-CCS FX100 上で取得した GKV の詳細 PA データを基に、ポスト「京」性能推定ツールを用いて、「富岳」での実行時間と内訳を予測した。その結果、MPI 通信を含む GKV コード全体の予測ピーク演算性能比は 5.85%と見積もられ、「富岳」においても十分に高い計算性能を実現する見通しを得た。さらに内訳をみると、新たに実装した衝突項陰解法部分が全体の演算の 4 割を占め、その部分に限ればピーク演算性能比 12.86%を達成し、本研究課題で実施したコード開発の有効性が示された[1]。

上述の成果により、平成 31 年度（令和元年度）の実施計画を達成するとともに、サブ課題 D の成果目標を十分に達成できた。

### (3-2-2) 平成 31 年度（令和元年度）の研究成果

#### (3-2-2-1) LHD 不純物ホール・プラズマでの粒子輸送に関する研究

複数イオン種プラズマの乱流輸送を扱えるように拡張した GKV コード、および複数種プラズマの衝突性輸送（新古典輸送）を扱える DKES/PENTA コードと FORTEC-3D コードを用いて、不純物ホール構造をもつ LHD プラズマの粒子輸送について、運動論に基づく第一原理計算による解析を進めた。不純物ホールとは、中性粒子ビーム入射（NBI）で加熱された高イオン温度放電において、不純物炭素イオンの密度がプラズマ中心部で極端に小さくなる現象であり、LHD でのみ観測されている特異な密度構造である。不純物ホールの形成は、不純物イオンの輸送機構と不可分であり、核融合プラズマの実現に向けて重要な研究課題である。一方、この密度分布を維持している輸送機構を明らかにするには、微視的揺動による乱流輸送と衝突効果による新古典輸送について詳細な解析を行う必要がある。特に、炉心領域に粒子源はないため、準定常的に維持されている不純物ホール構造では、乱流輸送と新古典輸送が釣り合っていることが予想される。

乱流輸送は、プラズマの密度・温度の勾配分布に敏感に応答する性質（プラズマ分布の硬直性）が存在するため、その特性を詳細に調べる必要がある。平成 29 年度に実施した当該プラズマの乱流輸送における温度勾配依存性、および、平成 30 年度に実施した密度勾配依存性の解析において、熱輸送については粒子種間でプラズマ勾配依存性に大きな差異は確認されなかった。一方、粒子輸送については粒子種ごとに大きく異なる依存性を有することが分かっている。これは、電子とイオンの粒子輸送束が電氣的に釣り合う両極性条件に支配されながら、粒子束が決定されるためである。その結果、炭素不純物イオンの乱流粒子輸送は、プラズマ内部領域へと輸送される内向きの性質を有することがわかっている。平成 31 年度（令和元年度）は、この特性について異なる径方向位置についても解析を実施した。Figure 4.2.4-4 に示すように、不純物ホールが存在している別の径方向位置 ( $\rho=0.52$ ) においても、これまでの解析位置 ( $\rho=0.61$ ) と同様に、各粒子種の粒子束が両極性条件で決定される中、乱流による不純物炭素イオンの輸送フラックスは内向きであることが確認された。この解析結果のロバ

ースト性を確認するために、これまで考慮されていなかったプラズマ中に形成される径方向 ( $r$  方向) の電場 (径電場) の影響を調べた。この結果、径電場の効果は、Figure 4.2.4-5 に示すように、本プラズマで計測された電場シアよりも十分に大きい場合を仮定しても、不安定性の発展に与える影響は小さく、ほぼ同じ線形成長を示すことが確認された。よって、対象とした LHD プラズマにおいては、弱い径電場に起因するポロイダル回転シアの乱流輸送への影響は、ほぼ排除できる可能性が高いことが示された。

一方、新古典輸送については、平成 30 年度に実施した DEKS/PENTA コードによる解析により、NBI 加熱による外部トルク効果が十分な場合は、これまで予測されていた負の両極性電場だけでなく正の電場も形成し得ること、さらに、後者の正電場の場合には、不純物炭素イオンの粒子束が外向きになることが示されていた。平成 31 年度 (令和元年度) は、上述の乱流輸送解析と同様に、異なる径方向位置での解析を実施した。Figure 4.2.4-4 で示すように、正電場が形成される場合では、不純物炭素イオンの粒子束が外向きを維持し、かつ、電子や水素イオンについても、新古典粒子束が乱流粒子束と異符号で同程度の大きさになることが示され、新古典と乱流の双方の輸送束がバランスし得ることが確かめられた。さらに、FORTEC-3D コードによる大域的な新古典輸送計算の結果、径方向内側領域から外側領域にかけて、負電場から正電場に変化していくことが確かめられ、不純物イオンの外向き粒子束が確かに生じることが確認された[2]。実際に、加熱ビームの入射トルクに応じて、正電場の形成と不純物密度のホローな分布形成を示す実験データが LHD でも見つかった[3]。一連の運動論に基づく解析により、不純物ホール形成においては、正の径電場形成を伴いながら、新古典輸送と乱流輸送がともに構造の維持に重要な役割を果たしている可能性が高いことが示された。

上記の研究成果は、ISHW 会議[2, 3]での発表、ならびに、ICCP11 会議[4]における招待講演で報告され、Physics of Plasma 誌[5]にて成果がまとめられた。

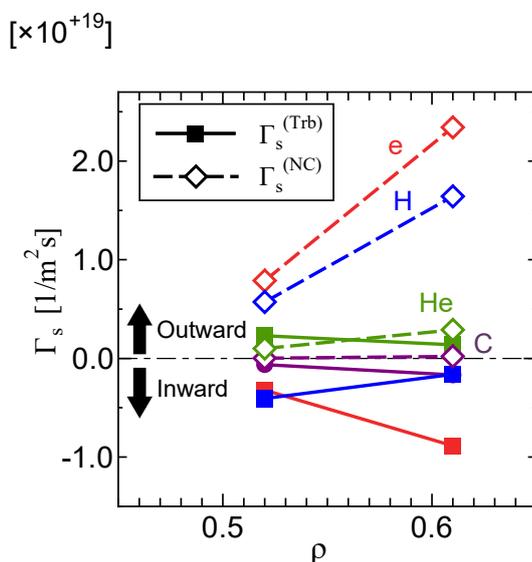


Figure 4.2.4-4. The turbulent particle fluxes  $\Gamma_s^{(Trb)}$  and the neoclassical particle fluxes  $\Gamma_s^{(NC)}$  for each species at  $\rho = 0.52$  and  $\rho = 0.61$ . The neoclassical fluxes are evaluated in the case of the electron-root.

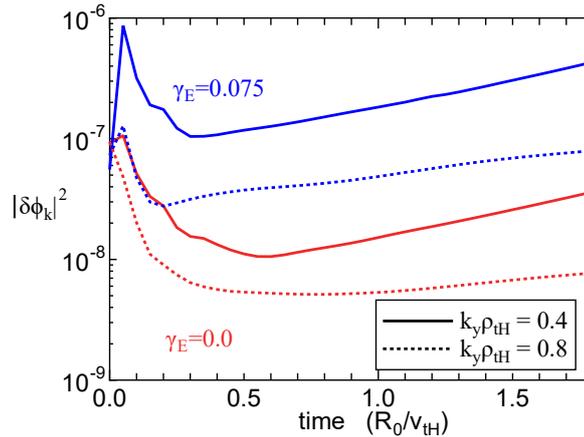


Figure 4.2.4-5. Time evolutions of the potential fluctuations in the LHD impurity hole plasma with  $\gamma_E = 0.0 v_{ti}/R$  and  $\gamma_E = 0.075 v_{ti}/R$  which is sufficiently larger than the neoclassical expectation.

### (3-2-2-2) 乱流輸送シミュレーションにおける背景シア流効果

磁場閉じ込めプラズマ中では、外部からの運動量ソースや自発的なトルク生成等によって巨視的な差動回転流がしばしば形成される。閉じ込め磁場中のトロイダル方向 ( $\varphi$  方向) の運動量バランスやプラズマ半径方向の粒子輸送バランスに起因して径方向の電場が生じ、ポロイダル方向 ( $\theta$  方向) の回転 ( $E \times B$  回転) が作られる。この背景流がもつシアは、微視的不安定性に対し顕著な安定化効果を与えるため、数値シミュレーションにおいて正確に取り扱うことが、輸送レベルの高精度計算や乱流抑制機構の解明にとって重要となる。本課題では GKV に背景シア流効果を実装する拡張を進め、揺動の線形成長や乱流熱輸送レベルに対する効果の検証を行った。

一様なシアをもつ時間的に一定な背景流が存在する場合、揺動成分はシアを持つ流れに沿って定常的な変形を受ける。前年度までのシミュレーションモデルの拡張により、波数空間上において高波数領域に揺動スペクトルを移流させる計算手法が GKV へと実装された。ここで波数空間座標系は、背景シア流効果が作用しない状態に固定された Euler 的な取り扱いとなっており、他のジャイロ運動論コードでも同様の手法が採用されている。主要な微視的不安性である捕捉電子モード (TEM) やイオン温度勾配 (ITG) モードの線形計算に対するベンチマークテストにより、GKV における実装の健全性を確認している。本年度は、非線形計算によって得られる乱流熱輸送レベルに対する背景シア流効果を詳しく検証するため、シア率 ( $\gamma_E$ ) に関するスキャンを実施した。物理パラメータにはトカマクプラズマに対する乱流輸送計算の標準的なパラメータセットである Cyclone-Base-Case を採用し、電子運動に関して断熱応答近似を課した ITG 乱流を解析対象に設定した。背景シア流が存在しない場合にはプラズマ小半径 ( $x$ ) 方向に伸びた揺動が線形不安定性によって成長するが、背景シア流が存在する場合には揺動の空間構造に対してシア率に応じた傾きを生じながら乱流状態へと発達していく (Figure 4.2.4-6)。さらに、揺動の空間構造への影響を通じて、乱流熱輸送レベルもシア率の増加に伴って低減することが確認され、乱流熱輸送レベルがシア率について非線形の依存性を示すという先行研究結果 [e.g., Barnes et al., PRL2011] とも定性的に一致する結果が得られた。また、LHD プラズマへの適用例を Figure 4.2.4-7 に示す。ExB 回転シアの導入により、LHD プラズマにおいても、ドリフト波不安定性の成長率が抑制される様子が確認できた。

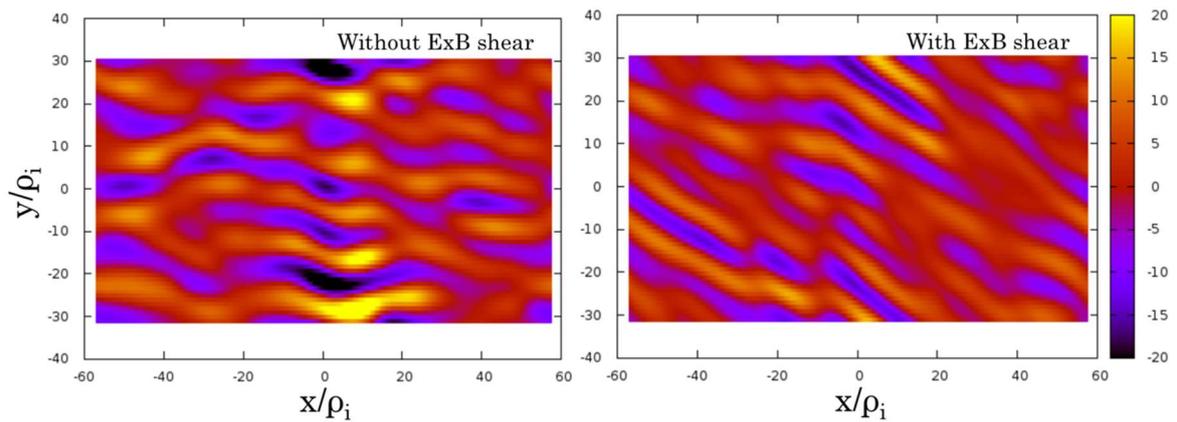


Figure 4.2.4-6. Spatial structure of electrostatic potential fluctuations in linearly evolving phase of the ITG instability: the case without(left) and with the ExB shear effect.

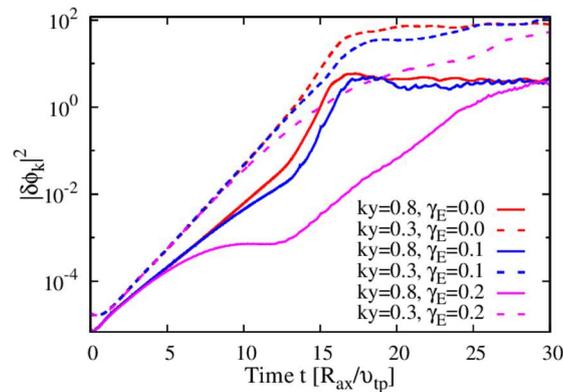


Figure 4.2.4-7. Time evolution of the potential energy in the ITG instability with different values of the ExB shearing rate, where the LHD configuration with the NBI injected plasma are utilized.

### (3-2-2-3) 高圧力領域での実証研究に向けた電磁乱流解析

核融合炉の経済性という観点からは、ベータ値が高いプラズマ、すなわち高圧カプラズマ配位の実現が望まれる。次世代の JT-60SA や ITER、原型炉といった装置で想定される高圧カプラズマへの適用を見据え、平成 30 度は、これまでの研究で静電近似および断熱的電子モデルを用いた条件の下で解析を行った。具体的には、ITER-like 配位と高形状度配位と呼ばれる 2 つの JT-60SA 想定磁場平衡について、実磁場配位効果を取り入れた GKV による電磁的微視的不安定性の解析を行い、有限圧力効果の影響を調査した。

平成 31 年度（令和元年度）は、上記で用いた平衡構築・磁気座標構成・電磁乱流解析を半自動的に行う連携スクリプトを開発し、多数の実験的平衡に対して電磁乱流解析を瞬時に適用できるようになった。実証研究への応用として、実験で観測される高閉じ込めモードプラズマ周辺部のペDESTAL と呼ばれる急峻圧力勾配・エッジ局在電流構造における線形安定性解析を行った。ペDESTAL 構造の安定性はこれまで電磁流体力学（MHD）による解析が中心に行われ、実験結果をよく説明する解析例も多数報告されている。一方、従来の MHD だけでは説明しきれない放電もあり、拡張 MHD や微視的

不安定性の可能性が示唆されている。そこで、従来の MHD 解析と整合するようにペダスタル規格化圧力勾配  $\alpha$  およびエッジ局在電流  $j$  を変化させ、ジャイロ運動論コード GKV を用いて多数の平衡に対する電磁的微視的不安定性解析を実施した。本課題で開発した連携スクリプトの利用により、こうした解析の効率的な実施が可能となった。結果を Figure 4.2.4-8 に示す。MHD 安定性解析では高  $\alpha$  低  $j$  の一部の領域でバルーニングモード不安定性 (BM) が存在するが、微視的不安定性解析では全域で不安定性が存在する。特に、高  $\alpha$  低  $j$  に対応する不安定性は運動論的バルーニングモード (KBM) と呼ばれる。本解析では、KBM は MHD-BM よりも広範なパラメータ領域で不安定化することが確認された。また、解析に用いた基準パラメータ (星印) は MHD-BM の閾値からは離れており、むしろ KBM の不安定化閾値に近い。このため、KBM が圧力勾配のこれ以上の急峻化を抑える役割を果たしている可能性が示唆された。[6]

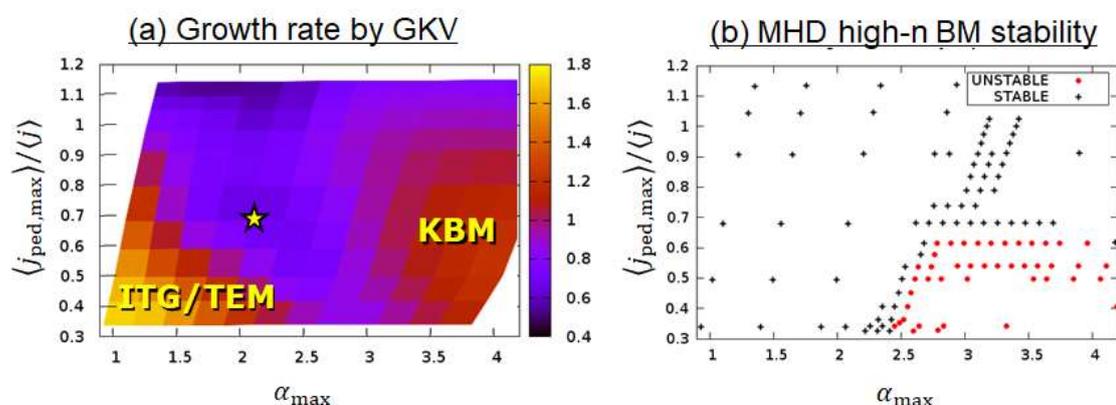


Figure 4.2.4-8. (a) Linear growth rate of electromagnetic micro-instabilities obtained by GKV (for a fixed-wavenumber mode) and (b) stability map of MHD high-toroidal-mode-number ballooning mode at the pedestal region. Nominal parameter is pointed at the star.

### (3-2-2-4) 高圧力プラズマでのイオン温度勾配不安定性と乱流輸送への磁気シア効果

磁場閉じ込めプラズマにおいて規格化されたプラズマ圧力は  $\beta$  値と呼ばれ、核融合反応率およびトカマクプラズマの定常運転に必要な自発電流の生成割合に直接関連した重要なパラメータである。この  $\beta$  値を増大させるためには、プラズマの異常輸送の  $\beta$  値依存性を理解することが必須である。本研究では、 $\beta$  値の上昇とともにプラズマ閉じ込め磁場の構造が変化することに注目し、この効果をジャイロ運動論的シミュレーションコード GKV に組み込んで数値シミュレーションを行い、乱流輸送の  $\beta$  値依存性を調べた。その結果、磁場構造が変化することによって、 $\beta$  値上昇とともに乱流輸送が必ずしも減少しないことを新たに示した[7]。この結果は、従来信じられていた  $\beta$  値上昇とともに乱流輸送が減少することと大きく異なる。以上の結果は、DIII-D Cyclone base case と呼ばれる典型的なプラズマに対するものであったが、平成 31 年度 (令和元年度) は、いくつかのトカマク型磁場閉じ込め装置のプラズマについて、乱流を駆動するドリフト波不安定性の  $\beta$  値依存性を調べた。その結果、 $\beta$  値上昇とともに乱流を駆動する不安定性の成長率が減少することは、磁気シアが小さい場合に起こることを示した[8]。この結果は、低磁気シアにおけるプラズマ閉じ込め改善を示唆する。

以下に計算結果を示す。計算対象は、JET 装置の放電番号 66404 の小半径  $\rho=0.33$  および 75225 の

$\rho=0.33$  と  $\rho=0.64$ 、AUG の放電番号 29224 の小半径  $\rho=0.5$  である。Figure 4.2.4-9. (Left) は、有限 $\beta$ 効果、およびそれに伴う磁場構造の変化がドリフト波不安定性（イオン温度勾配不安定生）の線形成長率に及ぼす影響を示す。従来から知られているように、磁場構造の変化がない場合（MFF）にはイオンの $\beta$ 値 ( $\beta_i$ ) の増加とともに線形成長率が減少する。一方、磁場構造の変化（MFC）にともない安定化の影響が弱められる場合、磁場構造の変化がない場合（MFF）に比べて不安定性の成長率が高止まりするので、縦軸の値（両者の線形成長率の比  $\gamma_{MFF}/\gamma_{MFC}$ ）が小さくなる。つまり、JET の放電番号 66404 の小半径  $\rho=0.33$  および 75225 の  $\rho=0.64$ 、AUG の放電番号 29224 の小半径  $\rho=0.5$  は磁場構造変化の効果が大きく、ドリフト波不安定性の安定化効果が弱い。これらの場合は磁気シア  $s$  が 1 程度に大きいことに注意する。一方、磁気シア  $s$  が 1 より十分小さい JET 放電番号 75225 の  $\rho=0.33$  では、成長率の比は  $\beta_i$  が増加しても変わらず 1 に近い。これは、磁場構造変化の効果が弱いことを示す。したがって、磁気シアが小さい場合、 $\beta$  値増大に伴うドリフト波不安定性の安定化が期待できる。つまり、低磁気シアでは、有限圧力効果による ITG 乱流の抑制が期待できる（MFF と MFC の差が小さく、有限圧力効果による輸送低減が起こると期待できる）。一方、磁気シアが 1 程度に大きい場合、 $\beta$  値の増大に伴うドリフト波不安定性の安定化は期待できない。

磁気シアが小さい場合、有限の $\beta$ 値により磁場構造が変化する効果が小さくなる理由は以下のように考えられる。Figure 4.2.4-9. (Right) で示されるように、磁気シア  $s$  が 1 程度に大きい場合（JET の放電番号 66404 の小半径  $\rho=0.33$  および 75225 の  $\rho=0.64$ 、AUG の放電番号 29224 の小半径  $\rho=0.5$ ）は、不安定性のモード構造が磁力線方向に  $\pi$  程度にまで広がる。一方、磁気シア  $s$  が 1 より十分小さい場合（JET の放電番号 75225 の  $\rho=0.33$ ）は、不安定性のモード構造が磁力線方向に  $\pi$  を超えて広がっている。つまり、磁気シア  $s$  が小さい場合、不安定性のモード構造が磁力線方向により大きく広がる。有限の $\beta$ 値により磁場構造が変化する効果は Pfirsch-Schluter 電流に起因するが、この電流は  $\cos(z)$  に比例することから、モード構造が磁力線方向座標  $z$  について  $\pi$  以上広がると、その効果がプラスとマイナスで相殺し弱くなる。したがって、磁気シアが小さいと不安定性のモード構造が磁力線方向に広がり、有限 $\beta$ 値による磁場構造変化の不安定性への影響は小さくなることが理解できる。

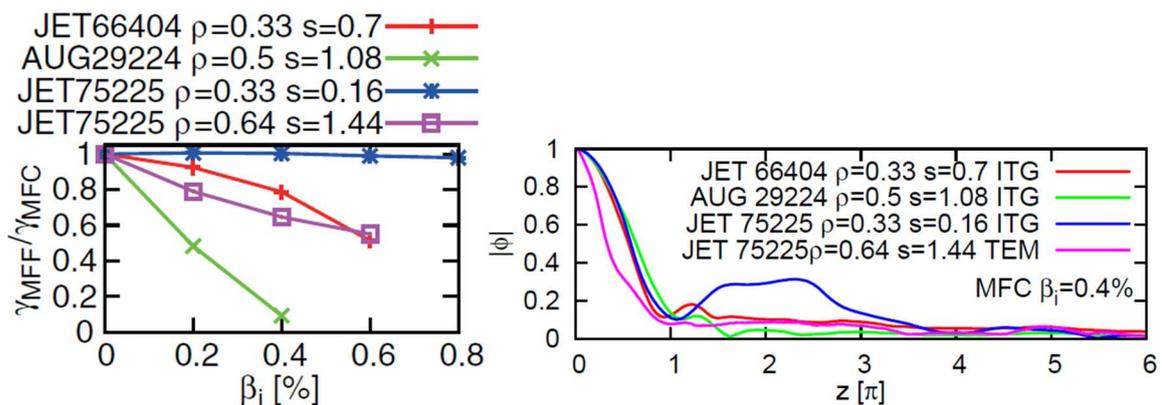


Figure 4.2.4-9. (Left) Dependence of normalized linear growth rates of the drift wave (the ion temperature gradient) instability ( $\gamma_{MFF}/\gamma_{MFC}$ ) on the ion beta value  $\beta_i$  through the magnetic field change due to finite plasma pressure. (Right) Profiles of the electrostatic potential perturbation along the field line.

## 文献

- [1] S. Maeyama, "Current status of GKV code", Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, 28-29 October, Kobe, Japan (2019).
- [2] K. Fujita, S. Satake, R. Kanno, M. Nunami, M. Nakata, J. M. García-Regaña, J. L. Velasco, and I. Calvo, "Global Effects on the Variation of Ion Density and Electrostatic Potential on the Flux Surface", 22nd International Stellarator and Heliotron Workshop (ISHW2019), Madison, USA, (September 2019).
- [3] M. Nunami, M. Nakata, S. Satake, K. Fujita, H. Yamaguchi, S. Matsuoka, M. Sato, S. Toda, and H. Sugama, "Particle Balance in Turbulent and Neoclassical Transport of Helical Plasmas", 22nd International Stellarator and Heliotron Workshop (ISHW2019), 23-27 September, Madison, USA, (2019).
- [4] M. Nunami, "Gyrokinetic turbulence simulation studies on stellarator plasmas", 11th International Conference on Computational Physics (ICCP11), 24-28 June, Hangzhou, China (2019).
- [5] M. Nunami, M. Nakata, S. Toda, and H. Sugama, "Gyrokinetic simulations for turbulent transport of multi-ion-species plasmas in helical systems", Physics of Plasmas 27, 052501 (2020).
- [6] 前山伸也, 「プロジェクト HBGKR の成果報告」, 第 9 回 IFERC-CSC 研究会 (2020).
- [7] A. Ishizawa, D. Urano, Y. Nakamura, S. Maeyama, and T.-H. Watanabe, "Persistence of Ion Temperature Gradient Turbulent Transport at Finite Normalized Pressure", Phys. Rev. Lett. 123, 025003 (2019).
- [8] 中谷滉平, 石澤明宏, 中村祐司, 前山伸也, 渡邊智彦, 「シャフラノフシフトに影響された微視的不安定性の  $s$ - $\alpha$  依存性」, 日本物理学会第 75 回年次大会 (2020).

### (3-3) 高エネルギー粒子閉じ込め解析の計算モデル拡張

#### (3-3-1) コードの概要と開発状況

MEGA[1]は、トーラス形状磁場閉じ込めプラズマにおいて  $\alpha$  粒子等の高エネルギー粒子が駆動する MHD 現象とそれによる高エネルギー粒子輸送の解析を目的とした、高エネルギー粒子と MHD 流体のハイブリッドシミュレーションコードである。高エネルギー粒子に関する 5 次元ジャイロ運動論方程式は粒子法で計算されるのに対して、バルクプラズマの挙動を近似する MHD 方程式は格子法で計算される。時間積分法は 4 次精度ルンゲ・クッタ法であり、MHD 方程式の空間微分には 4 次精度中心差分が適用されている。MEGA は MPI と OpenMP によって並列化されており、「京」において 13 万コアまでの強スケーリングを実現している。

トーラス形状磁場閉じ込めプラズマにおける高エネルギー粒子分布は、高エネルギー粒子の生成、粒子衝突、損失といった古典的な物理過程と MHD 揺動がもたらす輸送によって形成される。古典的物理過程の時間スケールは粒子衝突による高エネルギーイオン減速時間 ( $\sim 100\text{ms}$ ) 程度であるのに対して、ハイブリッド計算の時間ステップ幅は MHD 方程式による制約が厳しく 1ns 程度に制限されるので、減速時間スケールのハイブリッド計算は難しい。この問題を解決するために、MHD 揺動を含ま

ない古典的物理過程のみの計算（以下では「古典的計算」と呼ぶ）では時間ステップ幅を 10 倍以上にとることができることに着目し、MHD 揺動を含むハイブリッド計算と古典的計算を交互に繰り返すマルチフェーズ計算法を開発し、高エネルギーイオン減速時間程度の長時間の計算を可能とした[2]。また、MHD 揺動を平均化して安定化効果をもたらす高エネルギーイオンの軌道半径効果を取り入れるとともに、MHD 方程式に熱イオンの反磁性ドリフトと平衡プラズマ回転を導入して拡張することにより、計算の信頼性が向上している。これらの効果を取り入れた米国の DIII-D トカマク実験データに関する実証研究では、実験において観測された不安定性による高エネルギーイオン分布の顕著な平坦化と不安定性に起因する電子温度揺動の周波数、空間分布、振幅がマルチフェーズ計算によってよく再現できており、シミュレーションの妥当性が確認された[3]。

平成 27 年度には、高エネルギー粒子駆動不安定性を安定化する熱イオンの運動論的效果を取り入れるための物理モデル拡張を検討し、平成 28 年度はこの検討に基づいて MEGA を拡張した。平成 29 年度には拡張した MEGA を用いた高エネルギー粒子駆動不安定性のシミュレーションを実行し、熱イオン温度が高い場合には熱イオンのランダウ減衰による安定化効果が強いことを実証した[4]。平成 30 年度には、熱イオンを運動論的に取り扱うシミュレーションを大型ヘリカル装置 (LHD) における MHD 不安定性に適用し、熱イオン軌道による安定化効果を実証した[5]。また、LHD における高エネルギー粒子駆動不安定性に高エネルギー粒子と熱イオンの双方を運動論的に取り扱うシミュレーションを適用し、高エネルギー粒子駆動不安定性による熱イオンの加熱を実証した[6]。平成 31 年度（令和元年度）には LHD 装置における MHD 現象に関する実証研究をさらに進展させて、現実のプラズマに近づけた低電気抵抗の条件下では MHD 不安定性の成長率がプラズマの磁気レイノルズ数に反比例して減少することを見出し、実験において観測されている LHD プラズマの安定性を実証した。さらに、高エネルギー粒子駆動 MHD 不安定性によって損失する高エネルギーイオンの速度空間領域に関する実験結果を再現することに成功し、高エネルギー粒子駆動不安定性による熱イオン加熱のさまざまな物理条件への依存性を解明した。以上の成果により、平成 31 年度（令和元年度）の実施計画を達成するとともに、サブ課題の成果目標を十分に達成できた。

### (3-3-2) 平成 31 年度（令和元年度）の研究成果

#### (3-3-2-1) LHD における MHD 不安定性に対する熱イオンの運動論的效果

LHD 実験では体積平均ベータ値が約 5% の高ベータプラズマが実現されている[7,8]。ここでベータ値とは磁気圧力に対するプラズマ圧力の比である。このような高ベータ LHD プラズマに対して MHD 理論は圧力勾配駆動型不安定性を予測するが、実験で観測されている高ベータプラズマは安定であり、その安定性保持メカニズムは未解明のままである[9-12]。このことは MHD モデルの限界、すなわち、運動論的效果の重要性を示唆していると考えられる。そこで本研究では、熱イオンの運動論的效果を取り入れて拡張した MEGA コードを圧力勾配駆動型 MHD 不安定性の解析に適用し、熱イオンの運動論的效果について調べた[5,13]。

平成 30 年度においては、トロイダルモード数  $n=10$  の圧力勾配駆動型 MHD 不安定性に対して拡張版 MEGA コードを用いて運動論的 MHD 解析を行った[5]。熱イオン軌道を正しく取り扱った運動論的 MHD 解析では、不安定性の線形成長率が MHD モデルより得られる線形成長率の約 60% 程度に減少することがわかった。この抑制メカニズムを調べたところ、ヘリカルリップルに捕捉されたイオン

の歳差ドリフト運動に起因することがわかった。この解析では、計算時間の短縮のため、小さい磁気レイノルズ数 ( $S=10^5$ ) を仮定して行った。磁気レイノルズ数はプラズマの電気抵抗に反比例する無次元量である。ここで調査した不安定モードは抵抗性モードであるため、実験での低電気抵抗に対応した磁気レイノルズ数 ( $S>10^6$ ) のもとでは、不安定性の線形成長率は歳差ドリフト周波数よりも小さくなり、不安定性に対する捕捉イオンの応答がさらに弱まり、不安定性の成長率が強く抑制されることが予想された。

そこで平成 31 年度 (令和元年度) には磁気レイノルズ数の幅広い範囲について熱イオンの運動論的効果を考慮したシミュレーションを実行し、多くのトロイダルモード数の不安定性を調査した[13]。トロイダルモード数  $n=2,8,12$  の成長率を Figure 4.2.4-10 に示す。これらのシミュレーションで現れる不安定モードは抵抗性バルーニングモード (図中の B) と抵抗性交換型モード (図中の I) である。低磁気レイノルズ数では抵抗性バルーニングモードが最も不安定であるのに対して、高磁気レイノルズ数では抵抗性交換型モードが最も不安定である。また、低磁気レイノルズ数では不安定性の成長率が  $S^{-1/3}$  の依存性を示すのに対して、高磁気レイノルズ数では成長率が  $S^{-1}$  に依存して減少し強く安定化していることがわかる。これらの結果は、実験で観測されている LHD プラズマの安定性と整合するとともに、観測される不安定性は抵抗性交換型モードであるという計測結果[14]とも整合している。

このように拡張版 MEGA コードを用いた解析は、長年の未解決課題であった LHD プラズマの優れた MHD 安定性を再現し、その物理機構を解明することに成功した。

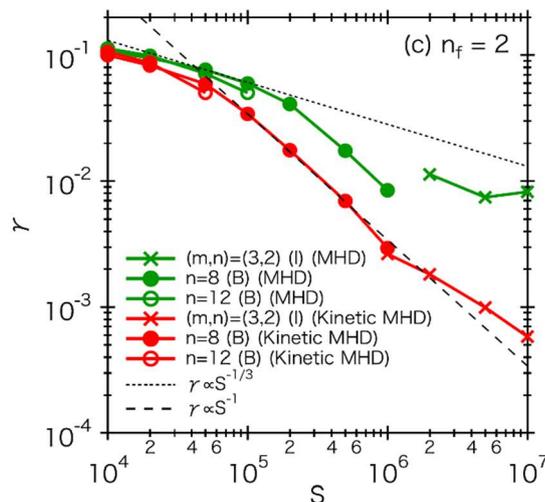


Figure 4.2.4-10. Linear growth rates of the instabilities obtained from MHD model (green curves) and kinetic MHD model (red curves) for  $n=2$  toroidal mode number family ( $n=2, 8$  and  $12$ ). 'B' and 'I' denote the ballooning mode and the interchange mode, respectively [13].

### (3-3-2-2) 高エネルギーイオン駆動 MHD 不安定性による高エネルギーイオン損失に関する実証研究

プラズマを高温に維持するために必要な高エネルギーイオンの閉じ込めは重要な研究課題である。高エネルギーイオンの閉じ込めは、衝突による輸送だけではなくアルフベン固有モード(AE)と呼ばれる高エネルギーイオン由来の MHD 不安定性に強く依存している。この MHD 不安定性を考慮して高

エネルギーイオンの閉じ込めを再現し、予測することは、将来の核融合炉の設計において非常に重要である。

LHD での高エネルギーイオン閉じ込め研究は主に接線中性粒子ビーム入射 (NBI) および垂直 NBI を用いて行われており、接線 NBI を用いた実験においてアルフベン固有モードが突発的に成長する現象である AE バーストとそれに伴う高エネルギーイオンの損失が観測されている[15,16]。LHD での AE バーストおよび高エネルギーイオンの損失を MEGA コードで再現するために、平成 30 年度までに AE バーストに関する実証研究を開始し、高エネルギーイオンの損失の増加が、不安定性の強度の 2 乗に比例することを再現した[17]。

平成 31 年度 (令和元年度) には、実験における高エネルギーイオン損失検出器 (FILD) をモデル化した「数値 FILD」を新たに開発し、MEGA コードに導入した。MEGA コードでは高エネルギーイオンの回旋中心の軌道を追跡しているが、数値 FILD では検出器近傍に到達した高エネルギーイオンを回旋円周上の 64 個の粒子に分割し、分割した粒子の軌道を回旋運動も含めて追跡している。実験での FILD の設置位置に到達した粒子を損失粒子と判定し、その分布を解析することにより FILD による計測を模擬している。損失高エネルギーイオンの速度空間分について、「数値 FILD」と実験での FILD 計測結果を Figure 4.2.4-11 に比較する。AE バースト発生前の時間帯[Figure 4.2.4-11(a)]では、入射エネルギー付近の高エネルギーイオンが測定されている。AE バーストが発生中の時間帯[Figure 4.2.4-11(b)]においては、エネルギー 100-150 keV およびピッチ角 35-50 度の高エネルギーイオンの損失が増加している。この増加した損失領域は、Figure 4.2.4-11(c)に示されている実験で計測された損失領域とほぼ一致している。シミュレーションが実験結果をよく再現しており、これにより MEGA コードを用いたシミュレーションの妥当性を実証できた[18,19]。一方で、Figure 4.2.4-11(c)に見られる損失粒子分布の 2 つのピークをシミュレーションでは解像できておらず、この違いの原因を解明してシミュレーションを改良することが今後の課題である。

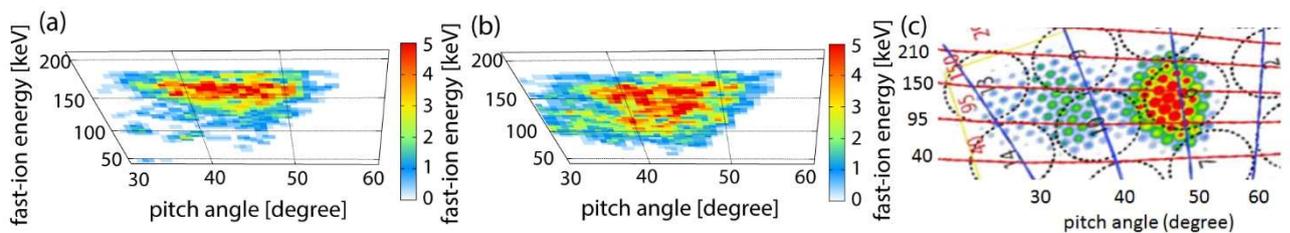


Figure 4.2.4-11. Comparison of pitch-angle and energy distribution of lost fast ions among (a) MEGA simulation before AE burst, (b) MEGA simulation during AE burst, and (c) FILD measurements during AE burst. Color represents the number of the detected fast ions [arb.unit]. The lost fast-ion measurements with FILD shown in Fig. (c) were published in Ref. [16].

### (3-3-2-3) 高エネルギー粒子駆動測地的音響モードチャネリングの系統的研究

高エネルギー粒子駆動測地的音響モード (EGAM) はトカマク型装置やヘリカル型装置の環状プラズマにおいて高エネルギーイオンが引き起こす不安定性の一種である[20]。EGAM はトロイダル方向に対称な空間構造を持つので粒子の半径方向輸送に寄与しない。EGAM との相互作用によってエネルギーを与える粒子種とエネルギーを受け取る粒子種が存在するとき、粒子の半径方向分布を乱すこと

なく EGAM を媒介とする粒子種間のエネルギー転送が可能となる。高エネルギー粒子が EGAM を不安定化する際に、EGAM から熱イオンにエネルギーが受け渡されれば、EGAM を媒介として高エネルギー粒子から熱イオンへのエネルギー転送が可能となる。この機構は GAM チャネリングと呼ばれ、核融合反応によって生じる高エネルギーアルファ粒子がプラズマ加熱の役割を担う核燃焼プラズマでの実現が期待されている。現在の核燃焼プラズマの想定では、アルファ粒子は粒子間衝突によって熱イオンと電子を加熱するが、特に高エネルギーのアルファ粒子の衝突は電子との衝突が支配的であり、核融合反応の燃料である熱イオンの加熱効率は低い。GAM チャネリングは高エネルギーアルファ粒子による熱イオンの効率的な加熱を可能とするため、核融合エネルギーの実現に向けて大きな貢献が期待される物理機構である。

平成 30 年度には、高エネルギー粒子と熱イオンの双方を運動論的に取り扱うシミュレーションを適用し、LHD 実験に基づいた 3 次元実形状平衡とプラズマ分布を用いて、LHD における EGAM のシミュレーションを実行し、GAM チャネリングが可能であることを世界で初めて実証した[6]。平成 31 年度（令和元年度）にはさまざまな物理条件（高エネルギーイオン圧力、高エネルギーイオン最大エネルギー、高エネルギーイオンピッチ角分布）に対する GAM チャネリングの依存性を系統的に調査し、以下を明らかにした[21]。

周波数変調を伴わない EGAM の時間発展では、EGAM の線形成長段階において発生する GAM チャネリングは、EGAM の成長の飽和とともに停止する。EGAM 成長の飽和の原因は非線形段階の EGAM が共鳴高エネルギーイオンを捕捉し、高エネルギーイオンから EGAM へのエネルギー供給が停止することであるから、EGAM 成長の飽和とともに GAM チャネリングが停止するのである。一方で、周波数変調を伴う場合には、EGAM の飽和後も高エネルギーイオンからのエネルギー供給が停止しないため、GAM チャネリングは継続して発生する。

GAM チャネリングが継続して発生している場合には、エネルギー転送効率（＝熱イオンのエネルギー増加と高エネルギーイオンのエネルギー減少の比）が一定である。

Figure 4.2.4-12 に示すように、EGAM の周波数が低い方が熱イオンとの相互作用が強く、高いエネルギー転送効率を得られる。

熱イオン温度が高い場合には EGAM と共鳴可能な粒子数が多くなるために、エネルギー転送効率が高い。

これらの結果を実験に適用すると、高い中性粒子ビーム（NBI）入射パワー、低い NBI エネルギー、高い熱イオン温度などが GAM チャネリングに有利な条件であると言える。

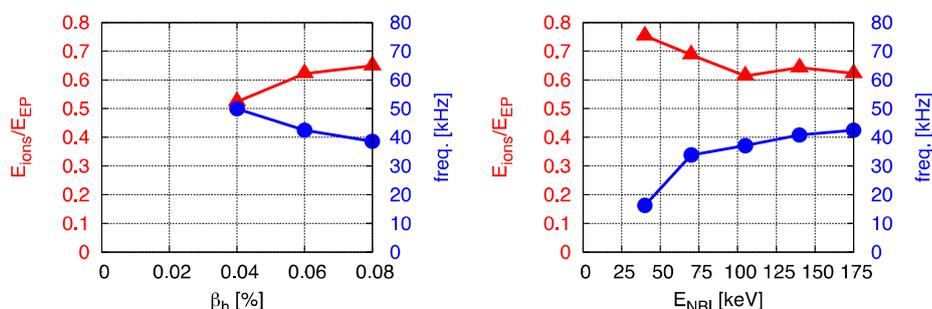


Figure 4.2.4-12. The energy transfer efficiency (triangles) and EGAM frequency (circles) versus the energetic particle pressure (left panel) and beam energy (right panel) [21].

#### (3-3-2-4) アルフベン固有モードバーストを引き起こす高エネルギーイオン臨界分布

マルチフェーズ計算法は粒子衝突時間スケールの長時間計算を可能とする計算法である。マルチフェーズ計算法を用いたこれまでの実証研究は、米国のトカマク型装置 DIII-D と LHD を主な対象としてきた[2,3,17,19,22]。日本の JT-60U トカマクに関しても平成 29 年度に実証研究を行い、マルチフェーズ法とマルチフェーズ法を用いない連続ハイブリッド計算の結果を比較することにより、マルチフェーズ法の有効性を実証した[23]。平成 30 年度は、JT-60U 実験において観測された大振幅のアルフベン固有モード (AE) が繰り返し突発的に発生する現象 (Abrupt Large-amplitude Event, ALE) にマルチフェーズ計算法を適用した[24]。このシミュレーションでは中性粒子ビーム入射 (NBI) による高エネルギーイオン生成を考慮している。シミュレーション結果において 40-60ms 間隔で ALE が発生し、ALE に伴って高エネルギーイオンが大きく損失した。これらの結果は実験結果をよく再現しており、マルチフェーズ計算法の有効性を実証している。

このようなアルフベン固有モードが繰り返し突発的に発生する現象である AE バーストの物理機構を解明するために、大規模なマルチフェーズシミュレーションを実施し、複数 AE の共鳴の重なりによる高エネルギーイオン輸送束と高エネルギーイオン分布関数の時間発展を詳細に解析した[25]。この研究では TFTR 実験[26]に基づく物理条件を採用した。実験と同様の NBI パワー 10MW, 減速時間 100ms の場合には、複数 AE のバースト的な成長と減衰が 2.8ms の時間間隔で繰り返し発生し、アルフベン速度で規格化した MHD 速度揺動の最大振幅は  $3 \times 10^{-3}$  であった。これらは実験結果とよく一致している。

AE バーストの発生直前には、複数の AE が不安定化して小振幅に成長している。これらの小振幅 AE は高エネルギーイオン分布関数を局所的に平坦化し、位相空間において階段状の分布を形成する。さらにビーム入射を行うと AE の振幅増大によって共鳴の重なりが局所的に発生し、それによるさらなる AE の振幅増大が連鎖的かつ大域的な共鳴の重なりを引き起こす。階段状の分布は、大域的な共鳴の重なりによって複数の AE が突発的に成長する AE バーストをもたらす臨界分布である。AE バーストの発生前後の高エネルギーイオン分布関数の時間発展を Figure 4.2.4-13 に示す。AE バーストは大域的な高エネルギーイオン輸送と高エネルギーイオン分布の飽和をもたらす。AE バーストが発生する場合において、NBI パワーや減速時間を増加しても高エネルギーイオン圧力分布が変化しない「分布復元性 (profile resiliency)」を以前の研究において見出した[27]。バースト直前の高エネルギーイオン分布関数を NBI パワーが異なる場合について比較したところ、高エネルギーイオン分布関数は NBI パワーが異なってもほぼ同じであり、高エネルギーイオン分布関数にも復元性があることを発見した。

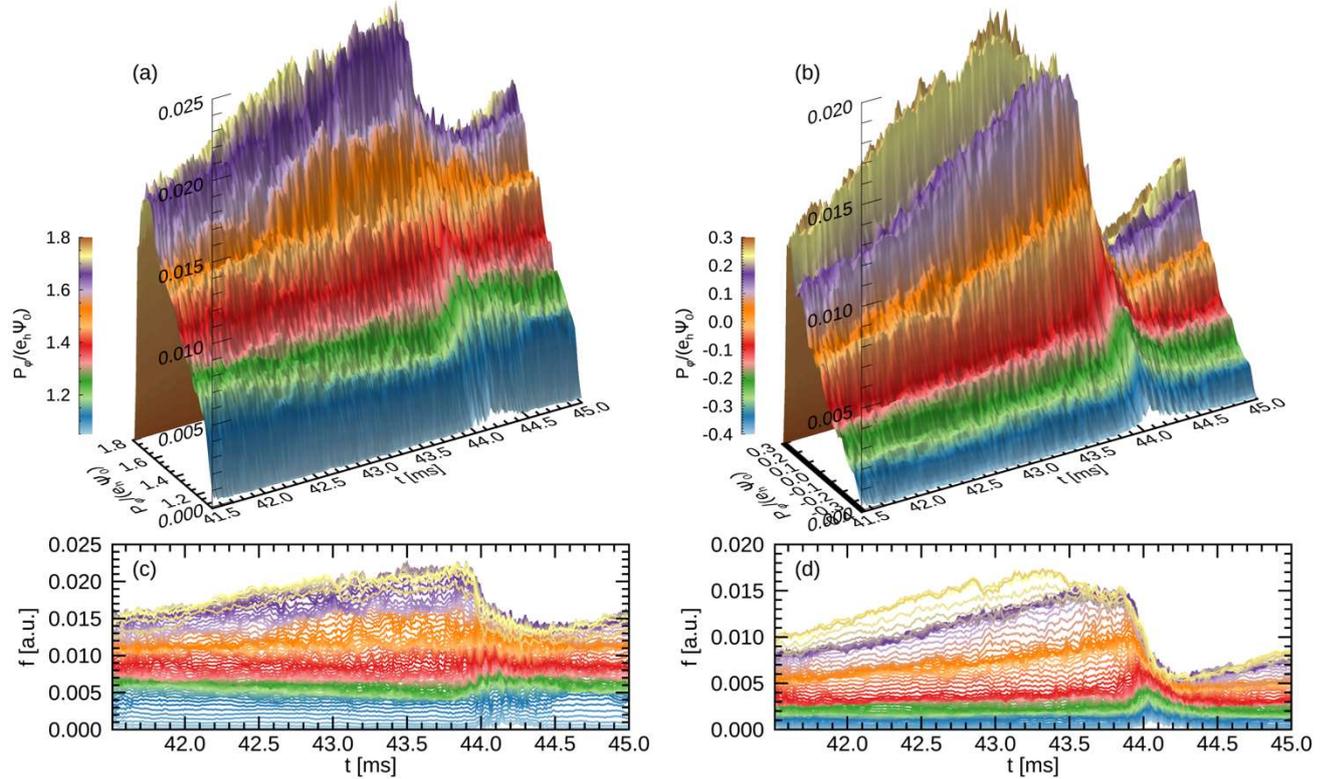


Figure 4.2.4-13. Time evolution of fast ion distribution function  $f(P_\phi)$  with a constant energy and a constant magnetic moment for (a) co-going and (b) counter-going particles to the plasma current. Color represents  $P_\phi$ . The time evolution of the distribution functions is plotted with a constant interval in  $P_\phi$  for (c) co-going and (d) counter-going particles [25].

文献

- [1] Y. Todo and T. Sato, “Linear and nonlinear particle-magnetohydrodynamic simulations of the toroidal Alfvén eigenmode”, *Phys. Plasmas* **5**, 1321 (1998).
- [2] Y. Todo et al., “Multi-phase simulation of fast ion profile flattening due to Alfvén eigenmodes in a DIII-D experiment”, *Nuclear Fusion* **54**, 104012 (2014).
- [3] Y. Todo et al., “Multi-phase simulation of fast ion profile flattening due to Alfvén eigenmodes in a DIII-D experiment”, *Nuclear Fusion* **55**, 073020 (2015).
- [4] Y. Todo, H. Wang, and M. Sato, “A new magnetohydrodynamic hybrid simulation model with thermal and energetic ions”, Joint Meeting of 26th International Toki Conference and 11th Asia Plasma and Fusion Association Conference, 5-8 Dec., Toki, Japan (2017).
- [5] M. Sato and Y. Todo, “Effect of precession drift motion of trapped thermal ions on ballooning modes in helical plasmas”, *Nuclear Fusion* **59**, 094003 (2019).
- [6] H. Wang et al., “Simulation of energetic particle driven geodesic acoustic modes and the energy channeling in the Large Helical Device plasmas”, *Nuclear Fusion* **59**, 096041 (2019).
- [7] Komori et al., “Development of net-current free heliotron plasmas in the Large Helical Device”,

- Nuclear Fusion 49, 104015 (2009).
- [8] H. Yamada et al., “Overview of results from the Large Helical Device”, Nuclear Fusion 51, 094021 (2011).
- [9] N. Nakajima et al., “Growth Rates and Structures of MHD Modes in Stellarator/Heliotron”, J. Plasma Fusion Res. Ser. 6 45 (2004).
- [10] K.Y. Watanabe et al., “Effects of global MHD instability on operational high beta-regime in LHD”, Nuclear Fusion 45, 1247 (2005).
- [11] H. Miura and N. Nakajima, “Influences of ballooning modes with moderate wave number on MHD equilibrium in LHD”, Nuclear Fusion 50, 054006 (2010).
- [12] M. Sato et al., “Characteristics of MHD instabilities for high beta plasmas in inward shifted LHD configurations”, Nuclear Fusion 57, 126023 (2017).
- [13] M. Sato and Y. Todo, “Ion Kinetic Effects on linear pressure driven MHD instabilities in helical plasmas”, to appear in Journal of Plasma Physics (2020).
- [14] S. Sakakibara et al., “MHD study of the reactor-relevant high-beta regime in the Large Helical Device”, Plasma Phys. Control. Fusion 50, 124014 (2008).
- [15] M. Osakabe et al., “Experimental observations of enhanced radial transport of energetic particles with alfvén eigenmode on the lhd”, Nucl. Fusion 46, S911 (2006).
- [16] K. Ogawa et al., “Magnetic configuration effects on TAE-induced losses and a comparison with the orbit-following model in the large helical device”, Nucl. Fusion 52, 094013 (2012).
- [17] R. Seki et al., “Comprehensive magnetohydrodynamic hybrid simulations of Alfvén eigenmode bursts and fast-ion losses in the large helical device”, Nucl. Fusion 59, 096018 (2019).
- [18] R. Seki et al., “Hybrid Simulations of Alfvén eigenmode induced fast-ion losses and its validation with the scintillator-based fast-ion loss detector in the Large Helical Device”, 22<sup>nd</sup> International Stellarator and Heliotron Workshop, 23-27, Sep., Madison, USA (2019).
- [19] R. Seki et al., “Hybrid simulation of fast-ion losses due to the Alfvén eigenmode bursts in the Large Helical Device and the comparison with the Fast-Ion-Loss Detector measurements”, submitted to Journal of Plasma Physics.
- [20] G. Fu, “Energetic-Particle-Induced Geodesic Acoustic Mode”, Physical Review Letters 101, 185002 (2008).
- [21] H. Wang et al., “The systematic investigation of energetic-particle-driven geodesic acoustic mode channeling using MEGA code”, to appear in Nuclear Fusion 60 (2020).
- [22] Y. Todo et al., “Comprehensive magnetohydrodynamic hybrid simulations of fast ion driven instabilities in a Large Helical Device experiment”, Phys. Plasmas 24, 081203 (2017).
- [23] A. Bierwage and Y. Todo, Comput. “Benchmark of multi-phase method for the computation of fast ion distributions in a tokamak plasma in the presence of low-amplitude resonant MHD activity”, Phys. Comm. 220, 279 (2017).
- [24] A. Bierwage et al., “Simulations tackle abrupt massive migrations of energetic beam ions in a tokamak plasma”, Nature Communications 9, 3282 (2018).

- [25] Y. Todo, “Critical energetic particle distribution in phase space for the Alfvén eigenmode burst with global resonance overlap”, *Nuclear Fusion* 59, 096048 (2019).
- [26] K.L. Wong et al., “Excitation of toroidal Alfvén eigenmodes in TFTR”, *Phys. Rev. Lett.* 66, 1874 (1991).
- [27] Y. Todo, “Multi-phase hybrid simulation of energetic particle driven magnetohydrodynamic instabilities in tokamak plasmas”, *New Journal of Physics* 18, 115005 (2016).

#### (4) エクサスケール計算に向けたコデザイン

##### (4-1) ポスト「京」向け粒子法の開発

##### (4-1-1) 計算技術の概要

本開発では、ポスト「京」を想定した次世代環境におけるプラズマ粒子コードの基盤技術開発を目指し、米国のプリンストン・プラズマ物理研究所 (PPPL) およびオークリッジ国立研究所 (ORNL) との国際協力の下、米国エクサスケールプロジェクト (ECP) の主要プラズマ粒子コードである XGC1 コードを対象とした最適化技術開発による性能向上、およびヘリカル (ステラレータ) 型プラズマに対する実シミュレーションへの適用 (XGC-S コード) を進めると同時に、そこで得られた最適化技術の国産コードである FORTEC-3D コードへの展開を進めてきた。さらに、大型ヘリカル装置 (LHD) 等のプラズマ実験を想定した配位における輸送シミュレーションを実施することで、開発コードの有効性の確認と「富岳」におけるさらなる性能向上を目指した。

XGC-S コードは周辺プラズマ乱流を主な解析対象として、粒子法に基づく分布関数の時間発展と非構造格子による電磁場の空間離散化を用いる点が、オイラー法による分布関数の発展を計算する GKV や GT5D といった炉心乱流コードとは大きく異なる。また、構造格子を用いる粒子コード MEGA とも異なる。これまでに XGC-1 により実施された ORNL の TITAN における数十万コア環境での大規模計算では、カーネル部分の 9 割以上の演算が GPU 上で実行され、対ピーク性能比は 8.61% を記録している。昨年度までに FX100 を利用した大幅な最適化が施されてきたが、平成 31 年度 (令和元年度) はポスト「京」シミュレータおよび「富岳」試作機における性能評価を実施した[1]。一方、FORTEC-3D コードは、国内で開発されたドリフト運動論に基づくプラズマ粒子コードである。これまでの XGC1 を対象とする研究開発で得られた最適化技術は FORTEC-3D にも適用され、昨年度までの開発において主要カーネルの最適化が行われた。平成 31 年度 (令和元年度) は、より現実的なプラズマである、多粒子種プラズマでの新古典輸送解析を実現するため、これまでに最適化された FORTEC-3D を多粒子種プラズマに拡張し、新たな並列処理手法を構築することで高効率な並列処理を実現した[3]。以上の成果により、平成 31 年度 (令和元年度) の実施計画を達成するとともに、サブ課題 D の成果目標を十分に達成した。

##### (4-1-2) 平成 31 年度 (令和元年度) の研究成果

##### (4-1-2-1) ジャイロ運動論粒子コード XGC-S の「富岳」における性能評価[1]

XGC-S (X-point Gyrokinetic Code – Stellarator) は、ジャイロ運動論方程式系に基づき荷電粒子のジャイロ中心軌道を計算粒子を用いて追跡する Particle-in-Cell コードである。これまでに主として核融合科学研究所の Plasma Simulator (FX100) を対象に最適化を進めてきた本コードを、理化学研

研究所のポスト「京」シミュレータおよび「富岳」試作機に移植し、単体性能および並列性能を評価した。

まず、運動方程式に基づき計算粒子の軌道追跡を行う部分を抽出したカーネルを対象に単体性能を評価した。本カーネルはシミュレーション全体に要する経過時間のうちの80-90%以上を占めている。前年度までに典型的なCPUマシンに対する最適化を行い、主要ループを多重化するとともに最内ループをSIMD演算とソフトウェアパイプライン化に対応させた。最内ループの長さは可変であり、レジスタやキャッシュメモリのサイズといったハードウェアの特性に応じて調整することができる。Figure 4.2.4-14は、FX100と性能推定ツール・ポスト「京」シミュレータにおいて最内ループ長とCPUあたりの実効演算性能を比較したものである。FX100（紫線）ではループ長が数千のときに性能が最大になっており、これはSIMD/ソフトウェアパイプライン化によるループ長に応じた性能向上と、作業配列の増加によるループ長に応じた性能低下の両方が作用した結果であると考えられる。性能推定ツール（緑線）では、FX100での性能からループラインモデルに基づいて「富岳」での性能を予測しており、FX100で得られた傾向とよく一致している。ピーク性能比では、FX100では最大28%、性能推定ツールでは最大20%程度となっているが、CPU性能の向上により後者の方が高い実効性能となっている。ポスト「京」シミュレータ（白抜き赤丸）で得られた性能は性能推定ツールよりも低くなり（ピーク性能比10%程度）、CPUあたりの性能ではFX100と同程度になっている。

次に、同カーネルの単体性能評価を「富岳」試作機で行った。Figure 4.2.4-15(A)（赤線）は試作機で得られた性能を最内ループ長に対して示している。ループ長が数十程度のときに急速に性能が向上しているが、それ以上のループ長では性能が飽和していることがわかる。飽和した時の性能は、ポスト「京」シミュレータのものとはほぼ一致している。FX100との傾向の違いについては、SIMD幅の増加によりループ数が小さい時の性能向上が顕著になるがソフトウェアパイプライン等のそれ以上の最適化があまり効果的でないこと、作業配列の増加によるメモリあるいはキャッシュアクセスのレイテンシはそれほど大きくないことが原因であると考えられる。Figure 4.2.4-15(B)は、実行時間の内訳を浮動小数点演算やメモリアクセス待ちなどに分けて表示したものである（左：試作機、右：FX100）。メモリ・キャッシュアクセス待ちの割合は試作機で減少している一方、演算待ちが大幅に増加していることがわかる。コンパイラが出力するメッセージでは、レジスタ不足によるソフトウェアパイプラインの抑止が示唆されており、このことが演算待ちの増加やループ長に対する性能飽和の主因であると考えられる。また、ループラインモデルに含まれないレジスタ不足が性能のボトルネックになっているため、性能推定ツールとの乖離が生じていると思われる。

これまでの最適化により、「富岳」試作機（最内ループ長6,000）の場合でSIMD演算率は91%、キャッシュミス率は3.5%（L1D）と1.3%（L2）となるなど、SIMD化やメモリ/キャッシュ性能についてはFX100と同様に良好な性能が確認でき、カーネル全体の実効性能はピーク性能比で9.5%程度である。ソフトウェアパイプライン化を促進するためには、ループ分割など「富岳」特有の最適化が必要になる。既存のループに分割点を追加する形での分割は行なったが、作業配列とのデータのやり取りが増えるため、大きな性能の改善には至っていない。さらなる単体性能の向上には、より大域的なループ構造の組み換えが必要である。

同カーネルを対象に、「富岳」試作機でスレッド・プロセス並列性能を検証した。Figure 4.2.4-16(A)は1CMG内の最大12コアを使ったスレッド並列性能を示す（強スケールリング）。従来と同様に、多重

化したループの外側を使って並列化している。FX100 と同様の手法でほぼ理想的なスケーリングが実現しており、12 コアでの並列化効率は 99.7%である。Figure 4.2.4-16(B)は、4~2,048 プロセスにおける弱スケーリングでの並列性能を示している。16-2,048 プロセスで算出した並列化率は 99.99995%、並列化効率は 99.878%である。本結果をそのまま外挿した場合、150,000 プロセス規模での大規模並列化でも 95%以上の並列化効率が見込まれ、「富岳」全系規模でも効率な計算が可能であると期待される。

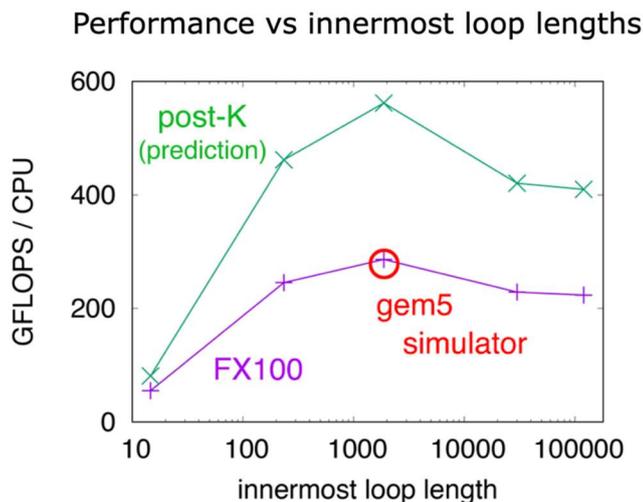


Figure 4.2.4-14. The sustained GFLOPS of the particle push kernel are plotted against the inner most loop length. Green, purple, and red curves show the estimations from the performance prediction tool on FX100, the performance counter on FX100, and the Post-K simulator, respectively.

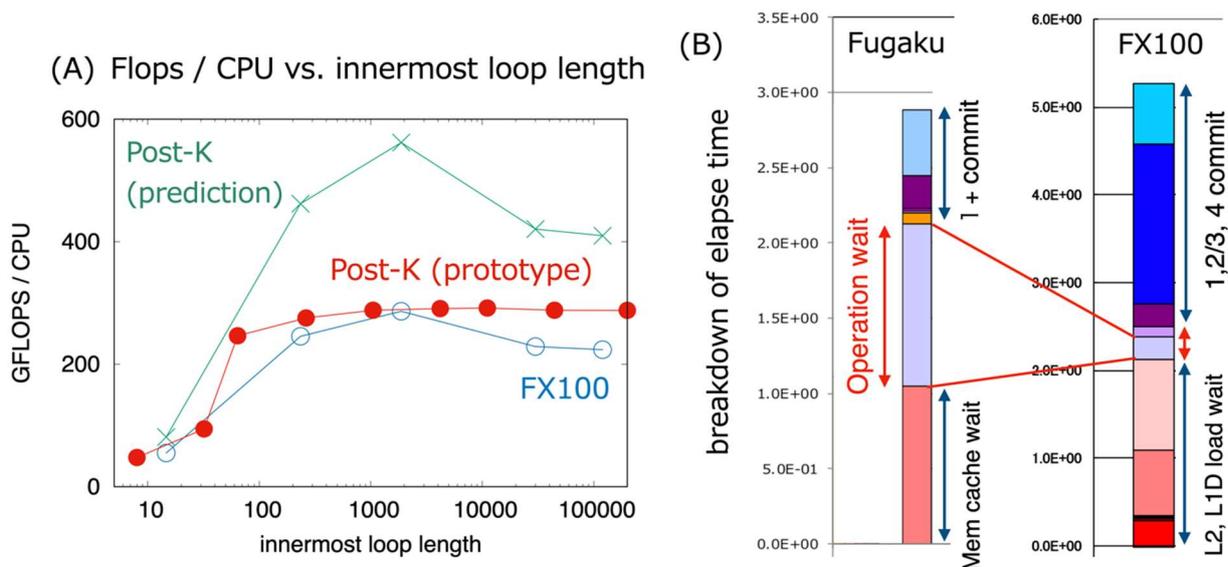


Figure 4.2.4-15. (A) shows the sustained GFLOPS of the particle push kernel versus the inner most loop length in the same definition as Figure 4.2.4-14. The performance data on Fugaku (Post-K)

prototype machine (red) is added. (B) shows the profile data on Fugaku prototype (left) and FX100 (right). The cost distribution includes “instruction commit”, “instruction wait”, “memory/cache wait”, etc...

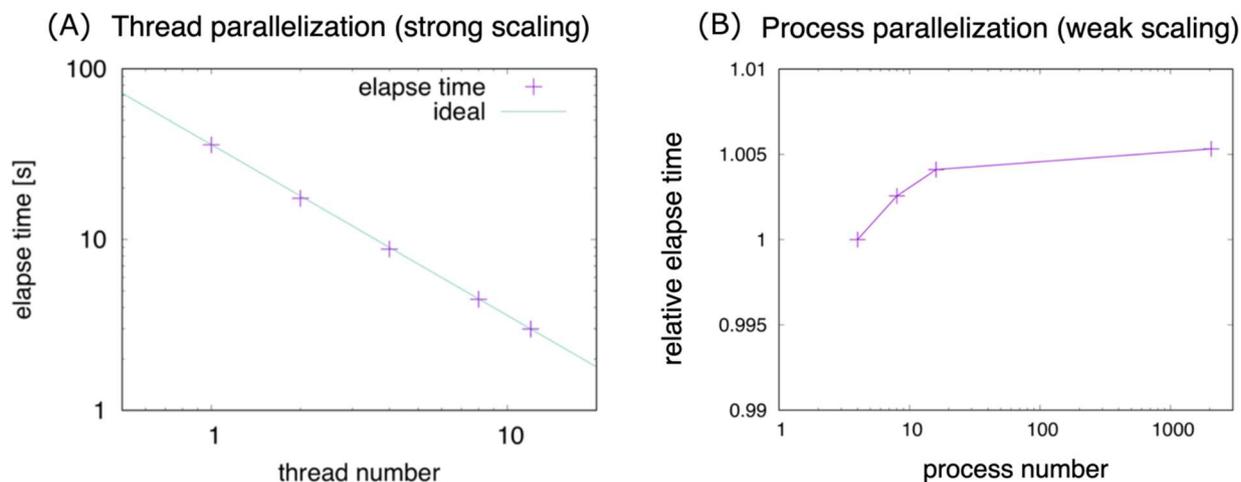


Figure 4.2.4-16. (A) shows the thread scalability (strong scaling) on 1 CMG of Fugaku prototype. The elapsed time for 1~12 threads is plotted. (B) shows the MPI process scalability (strong scaling) on Fugaku prototype. The elapsed time for 4~2,048 MPI processes is normalized by that for 4 MPI processes.

#### (4-1-2-2) 新古典粒子コード FORTEC-3D の多粒子種プラズマへの拡張

FORTEC-3D[2]は、トーラス磁場中の平均自由行程の長い荷電粒子の案内中心運動とクーロン衝突によって引き起こされる「新古典輸送」と呼ばれる粒子や熱の輸送現象をドリフト運動論方程式に基づいて解く粒子コードとして核融合科学研究所で開発された。特に、LHDのようなヘリカル配位や、トカマクにおける誤差磁場の影響を含めた現実的な3次元磁場配位中の大域的新古典輸送シミュレーションを可能とする高い汎用性が特筆すべき点である。

昨年度、Plasma Simulator (FX100) におけるSIMD化とパイプライン化の両方を有効にするためのDOループ構造の最適化を行い、高い実効性能（ピーク比30%程度）を実現した。最終年度である平成31年度（令和元年度）は、将来の核融合炉の運転予測のために欠かせない、燃料の重水素・三重水素と電子、さらに核融合反応で生成されたヘリウムや容器壁から出てくるタングステンや鉄などの各種不純物イオンを含めた現実的な多粒子種プラズマでの新古典輸送解析を実現するため、これまでに最適化されたFORTEC-3Dコードを多粒子種プラズマに拡張した。

多粒子種プラズマのシミュレーションにおいて問題となるのは当然ながら計算コストの増大である。これまでの単一粒子種のコードで全体の8割以上を占めていた、荷電粒子のドリフト運動を解くルーチン（これは平成30年度に上述の最適化を行った）は粒子種ごとに独立に行えるため、単純に粒子種倍のMPIプロセスを用いることで高い並列化効率が得られる。一方、多粒子種計算で最もコストが増大する懸念があるのが粒子種間のクーロン衝突を模擬するモンテカルロ計算部分である。N種の粒子

種がある場合、計算すべき衝突は自己衝突を含めて  $N+1C_2 = \frac{(N+1)!}{2!(N-1)!}$  通りになる。衝突計算に必要な

乱数の総数もこれに応じて増大するため、疑似乱数発生 の 並列化が必須である。また、FORTEC-3D で採用している線形化クーロン衝突項は、乱数によって a-b 粒子種間の衝突を模擬する“テスト粒子衝突項”と、それによって生じるモーメントとエネルギーの変化を相殺し、保存則を満たすための“フィールド粒子衝突項”に分かれる。この保存則を満たす計算のために、a-と b 粒子種の衝突計算を同時に進める必要があるが、これと c-d 粒子種間の衝突計算は独立に行うことができる。上の 2 点を踏まえ、多粒子種版 FORTEC-3D のクーロン衝突計算部分の並列計算効率を上げるために、次のような実装を行った[3]。

疑似乱数については、理化学研究所の大規模並列数値計算技術研究チームが開発した、Mersenne-Twister 法乱数をもとにした並列化疑似乱数生成ルーチン”KMATH\_RANDOM”[4] を採用した。これは、特に「京」向けに SIMD 最適化も施されたものであり、FX100 においても高速に品質の良い疑似乱数を生成することができる。MPI ランク毎に 1 つの疑似乱数列（これは  $2^{19937} - 1$  の非常に長大な周期長を持つ）の遠く離れた位置（ $2^{100}$  飛ばしなど）を乱数の始点として開始する Jump Method を利用した並列化であり、単体の Mersenne Twister 乱数と同等の生成速度で並列生成が可能である。FORTEC-3D では、さらに乱数発生ルーチン 1 回呼び出し当たりの乱数の発生個数を固定して値を貯めこみ、使い切ったら再度生成する形で KMATH\_RANDOM の最適化を図った。この最適化は、一回当たり 64,000 個の乱数発生付近で最も高効率となり、特に 10,000 個以下の少ない乱数をオリジナルの KMATH\_RANDOM をそのまま call して使う場合に比べて、乱数の平均生成時間を約 3/4 に短縮できた。FX100 における生成速度は 100 万個の乱数当たり約 0.003 秒と高速である。この結果、複数粒子種計算においても乱数発生にかかる時間はシミュレーション全体からは無視できる程度に抑えられた。

次にクーロン衝突項の並列化の実装と最適化であるが、多粒子種計算は MPI プロセスを粒子種毎のコミュニケータに分けて実行する形をとった (Figure 4.2.4-17 に模式図)。粒子種 a と b の衝突計算においては、テスト粒子衝突で生じたモーメントと運動量の変化を a-b 間で通信する必要があるが、まず各粒子種の変化量を、Figure 4.2.4-17 の level2 のコミュニケータを使って粒子種毎のコミュニケータの rank0 に集約する。次に、粒子種ごとの rank0 同士の通信 (Figure 4.2.4-17 の level3) を用い、a-b 間で変化量の情報を共有する。最後に、各粒子種の rank0 は level2 通信を使って同じ粒子種の MPI ランク全体に、a-b 間で通信した内容を broadcast して共有し、フィールド粒子衝突計算を行う、という流れで進む。MPI 通信以外のすべての計算は MPI ランク毎に完全に独立・並列に実行できる。

また、4 種以上の粒子種が存在する場合は、a-b 間衝突の計算と通信をしている間に、c-d、e-f、…の粒子種を担当している MPI ランク間でも並行して行うようにした。このようにして、衝突計算にかかる実時間は N 粒子種あっても  $N^2$  ではなくほぼ N に比例するようになった。

FX100 における 3 粒子種計算での MPI 並列化の weak-scaling を計測した結果を Figure 4.2.4-18 に示す。Weak-scaling は 1 粒子種の計算の場合より若干悪化しており、MPI 並列数に対し  $a \log_2(x) + c$  の依存性があることがわかる。この原因として、1)多粒子種計算にすると衝突周波数の高い粒子種の組み合わせがどうしても入り、単一粒子種計算に比べて、ドリフト軌道の計算ルーチンに対する衝突計算ルーチンの頻度が相対的に上がること、2)衝突計算に必要な MPI 通信が、1 粒子種内での ALLREDUCE 型のもの (Figure 4.2.4-17 の level2 の通信) が主であり、MPI 数を増やした時に発生

する REDUCTION 通信の回数が、トーナメント式に行われると MPI 数  $x$  に対して  $\log_2(x)$  でスケールするため、と考えられる。上に挙げた 2 つの最適化をする前の並列化効率は調べていないが、衝突計算にかかる時間を  $N^2$  から  $N$  に比例するようなアルゴリズムを採用しているため、粒子種が増えるほど今回の並列化の実装法の効果は大きく表れるものと期待できる。

新古典輸送計算コードの多粒子種化の完成によって、核融合炉の実現に向けて必要な炉心プラズマの閉じ込め性能予測、不純物イオン分布の予測とその回避のための運転シナリオ構築など、様々な問題に FORTEC-3D が適用できるようになった。このコード開発の成果はポスト京時代においても引き続き生かされ、核融合研究の様々なシミュレーションに利用していく予定である。

• **3-level MPI communications**

1. All MPI processes (MPI\_COMM\_WORLD)
2. Intra-group communication
3. Inter-group communication

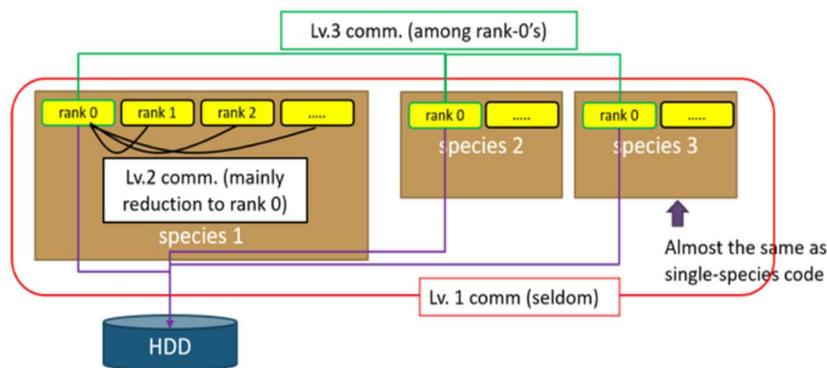


Figure 4.2.4-17. The structure of parallelization and MPI communicators in the multi-species version of FORTEC-3D.

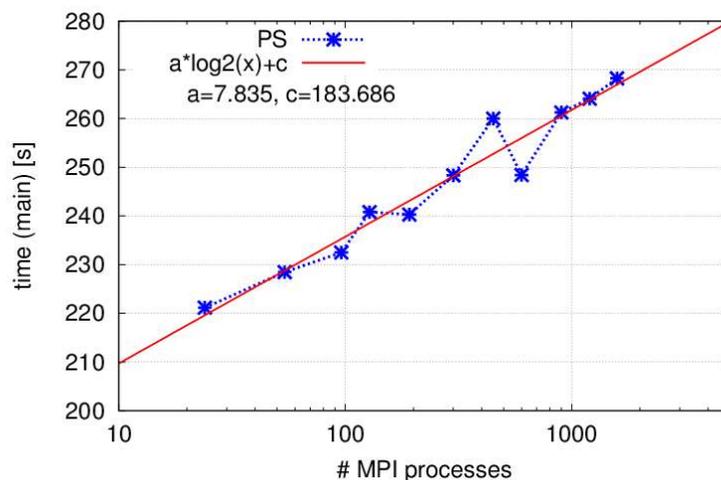


Figure 4.2.4-18. The weak scaling of FORTEC-3D on Plasma Simulator (FX100). Blue shows the elapsed time and Red is a fitting with a function  $a \log_2(x) + c$ . A three species plasma is computed with 400k particles per MPI process, and 1/3 of total MPI processes are assigned for each species.

## 文献

- [1] T. Moritaka, “Development of XGC particle code for LHD”, Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, 28-29 October, Kobe, Japan (2019).
- [2] S. Satake , Y. Idomura, H. Sugama , T.-H. Watanabe, “Benchmark test of drift-kinetic and gyrokinetic codes through neoclassical transport simulations”, Computer Physics Communications vol. 181 (2010) 1069-1076.
- [3] 佐竹 真介, 松岡 清吉, 菅野 龍太郎, 洲鎌 英雄, 沼波 政倫, “ $\delta f$ -PIC コードによる多イオン種新古典輸送シミュレーションに向けたクーロン衝突項の開発”, 日本物理学会第 70 回年次大会, 23pCM-11 (2015).
- [4] <https://www.r-ccs.riken.jp/labs/lpnctrtr/projects/kmath-random/>

### (4-2) ポスト「京」向け格子法の開発

#### (4-2-1) 計算技術の概要と開発状況

本サブ課題のターゲットコードである GT5D、GKV、MEGA には格子法が用いられている。これらのコードにおける格子法の高性能化に向けて、メニーコア最適化技術、および、省通信アルゴリズムの研究開発を実施する。メニーコア最適化に関しては、平成 27 年度に CEA と共同で差分法に基づく GT5D[1]とセミラグランジアン法に基づく GYSELA[2]の逐次計算カーネルを対象とするメニーコア最適化技術の開発を実施した。この研究開発では、上記 2 つの計算カーネルを GPU (K20X)、XeonPhi (KNC)、FX100 という 3 つの異なるアーキテクチャに対して最適化し、特に、計算手法によって異なるメモリアクセスパターンとアーキテクチャに依存して大きく異なるメモリ階層構造の適合性を評価した[3]。この結果、メニーコア環境でもピーク性能比と同程度の性能向上を達成し、電力性能比を大幅に改善する見通しを得た。平成 28 年度は省通信アルゴリズムの構築に着手し、クリロフ部分空間解法の最も基本的なアルゴリズムである共役勾配 (CG) 法の省通信アルゴリズム[4]の検討を行い、省通信 CG (CACG) 法ソルバを開発した[5]。平成 29 年度はこの成果を発展させ、チェビシエフ基底省通信 CG (CBCG) 法ソルバを開発して省通信アルゴリズムのロバースト性を向上するとともに[6]、GT5D の差分・陰解法ソルバで取り扱う非対称行列向けにも省通信一般化最小残差 (CA-GMRES) 法ソルバを開発し、最先端メニーコア環境における GT5D のスケーラビリティを向上した[7]。また、シミュレーションデータの可視解析手法に関する予備的研究にも着手し、粒子ベースボリュームレンダリング (PBVR) に基づく In-Situ 可視化システムを最先端メニーコア環境において構築した[8]。平成 30 年度は CA-GMRES 法を適用した GT5D によって Oakforest-PACS 全系規模 (8,192 ノード) の強スケーリングを達成した[9]。また、In-Situ 可視化システムの SIMD 最適化を実施した[10]。平成 31 年度 (令和元年度) は「富岳」を用いた上記ソルバの性能評価を実施するとともに、「富岳」でサポートされた FP16SIMD 演算を活用した混合精度前処理付き省通信一般化最小残差 (CA-PGMRES) 法を構築し、GT5D の処理性能をさらに向上した[11]。また、これまでに開発した省通信型クリロフ部分空間法ソルバと In-Situ 可視化システムをオープンソースコードとして公開した[12]。これらの成果により、平成 31 年度 (令和元年度) の実施計画を達成するとともに、サブ課題 D の成果目標を十分に達成できた。

(4-2-2) 平成 31 年度 (令和元年度) の研究成果

(4-2-2-1) 混合精度前処理付き省通信一般化最小残差 (CA-PGMRES) 法の開発[11]

GT5D では (3-1-1) に示したジャイロ運動論方程式系において、式(1)左辺の 4 次元移流項のうちクーラン条件が最も厳しい線形移流項 (式(2)第 1 項、第 3 項、式(3)第 2 項) を陰的に取り扱う。従来のコードでは 4 次元移流項の差分・陰解法における非対称行列の連立一次方程式を一般化共役残差 (GCR) 法で取り扱ってきたが、最先端のメニーコア環境において通信コストのボトルネックが顕在化してきた。この問題を解決するために、CA-GMRES 法ソルバを開発した。

これまでに Plasma Simulator、および、Oakforest-PACS において、それぞれ 1,280 ノードまで強スケーリングを確認し[7]、さらに昨年度には Oakforest-PACS 大規模 HPC チャレンジ[9]において全系規模の 8,192 ノードまでの強スケーリングを達成した。

今年度は CA-GMRES 法ソルバを「富岳」に移植し、性能評価を実施した。その結果、CA-GMRES 法における新たな通信ボトルネックが顕在化した。クリロフ部分空間法には基底ベクトル直交化処理に必要な縮約通信と差分計算に伴う袖通信が存在する。省通信クリロフ部分空間法では前者の回数を大幅に削減しているが、後者についてはいくつかの異なる手法が提案されている。文献[4]では Matrix Powers Kernel (MPK) と呼ばれる手法が提案されている。MPK では  $s$  回の  $\text{SpMV}$  に必要な袖領域データをまとめて転送し、袖通信を行わずに  $s$  回の  $\text{SpMV}$  を実行する。ただし、この処理には 1)袖通信の回数は削減されるが転送データ総量は増大する、2)ステンスルが伸びる ( $R, \zeta, Z, v_{ii}$ ) 方向以外に  $R-Z$  方向等の斜め方向の袖通信が必要となる、3) $s$  回分の袖領域データに対しても冗長な差分計算が必要になる、4)前処理付きアルゴリズムの場合には前処理後のデータに対する追加の袖通信が必要になる、という課題が存在する。これら問題を解決するために、文献[5]では縮約通信のみ省通信化し、袖通信は MPK を用いずに通信隠蔽を適用するハイブリッド省通信法を提案した。文献[13]では CA-GMRES 法ソルバにおける MPK とハイブリッド省通信法の性能比較を行い、後者の優位性を確認した。

ハイブリッド省通信法の通信隠蔽処理では差分計算を中心領域と表面領域に分割し、OpenMP によって実装した通信スレッドで袖通信を行いながら同時に残りのスレッドで袖領域データを参照しない中心領域の差分計算を行い、最後に表面領域の差分計算を行う[14]。この手法を適用する上で前提となる条件は袖通信のコストが同時処理される中心領域の差分計算のコストに比べて同程度以下となることである。この条件は「京」をはじめとするペタスケール計算機では十分に満たされていたが、近年の計算機における演算性能向上により、Oakforest-PACS で両者のコストが同程度になり、さらに最先端の「富岳」ではコスト比が逆転する状況が発生している。ここで、「京」と「富岳」の性能比は演算が約 24 倍となるのに対し、通信 (ノードインジェクションバンド幅) は約 2 倍に留まっており、通信性能と演算性能のギャップは一桁拡大している。この問題を根本的に解決するために、「富岳」でサポートされた FP16SIMD 演算を活用した混合精度前処理を新たに開発し、反復回数 ( $\text{SpMV}$ 、袖通信の回数) を大幅に削減した。

GT5D で最初に採用した GCR 法の選定にあたり、GCR 法、GMRES 法、BiCGstab 法等の主要アルゴリズム、および、それらに対称逐次過緩和 (SSOR) 前処理、不完全 LU 分解 (ILU) 前処理を適用した前処理付きアルゴリズムの比較を行った。この結果、反復回数の観点からは SSOR 前処理が有効であることがわかっていたが、計算コストやメモリ使用量の観点から当時のテラスケール計算機向

けに GCR 法を選定した。この経験に基づいて CA-GMRES 法に SSOR 前処理を適用したが、従来の FP64 (倍精度) 処理では反復回数は削減できたものの、全体コストが増大することがわかった。この問題を解決するために FP16SIMD 演算を活用した混合精度前処理を開発した。FP16 (半精度) 演算は GPU 上の機械学習プログラムで多用されており、近年の GPU 向け HPC アプリケーションでは FP16 演算を活用した演算加速事例も報告されている。しかしながら、FP16SIMD 演算は従来の CPU ではサポートされておらず、CPU 向け HPC アプリケーションで FP16 演算を活用する試みはほとんどなかった。FP16 演算では仮数部の桁数が 4 桁に制限されるため、限られた計算精度でアルゴリズムを注意深く設計する必要がある。本研究では GT5D で対象としている線形移流項の演算子は磁場の非一様性によって決まる滑らかな関数であることに着目し、問題を適切に規格化することで FP16 演算による SSOR 前処理を機能させるアルゴリズムを構築した。Figure 4.2.4-19 に示す CA-PGMRES 法アルゴリズムでは緑で示す部分で演算子  $A$  の各行の成分の最大値を対角成分とする規格化行列  $D$  によって連立一次方程式  $Ax=b$  を規格化している。また、SSOR 前処理の設計では MPI 並列処理に関しては通信を含まない Block-Jacobi 法を採用するとともに、多数スレッドの並列処理向けに細分化 red-black SSOR 前処理を構築した。さらに、SIMD 幅 512bit の FP16SIMD 演算における 32 変数のベクトル処理向けに 4 次元データの最内の  $v_{II}$  方向の SSOR 処理を含まない 3 次元近似前処理を考案した。線形移流項の移流速度はトーラス磁場中の非摂動粒子軌道によって与えられるが、磁場の非一様性による  $v_{II}$  方向の運動、すなわち、加速は実空間の運動に比べて変化が少ない。3 次元近似前処理はこの物理的特徴を活用して設計している。

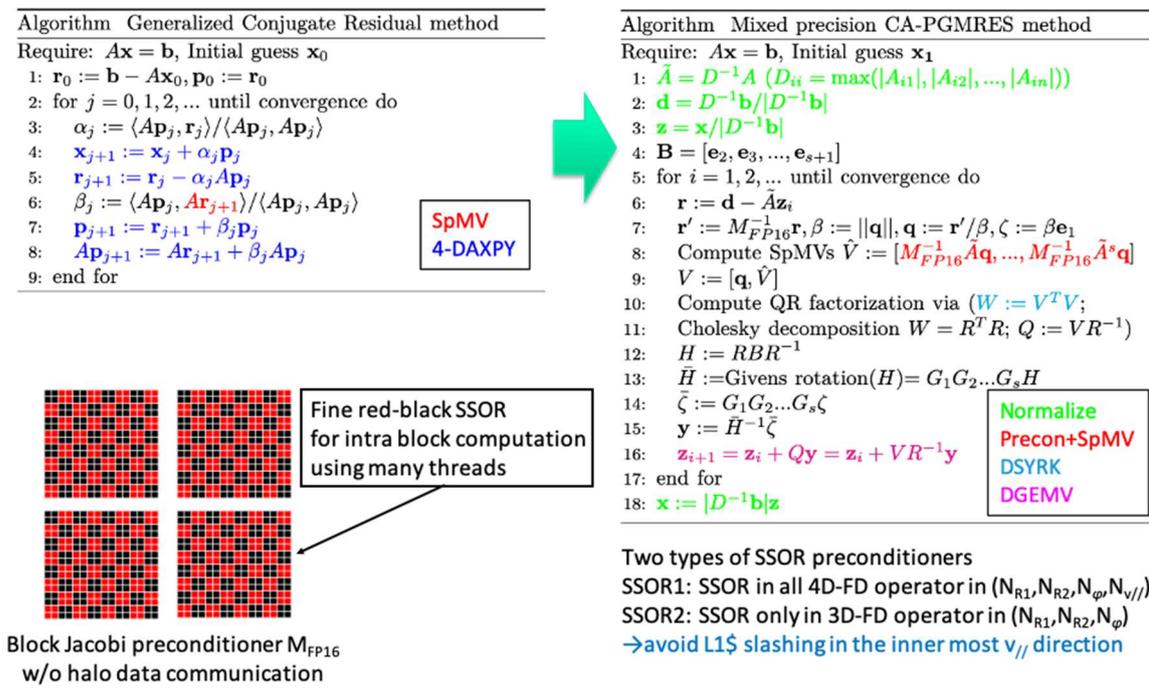


Figure 4.2.4-19. Communication-Avoiding Generalized Minimum RESidual method with FP16 SSOR preconditioner. The Block-Jacobi preconditioner with fine red-black SSOR is designed for thread parallelization. In SSOR, SSOR1 compute stencils in all 4D directions, while SSOR2 uses 3D approximation, which avoids L1 cache slashing in the inner most  $v_{II}$  direction.

上記ソルバを「富岳」でテストした結果を Figure 4.2.4-20 に示す。GCR 法ソルバに比べて CA-GMRES 法ソルバは 1.7 倍の性能向上を示す。これに SSOR 前処理を適用すると反復回数は一桁減少するが FP64 処理では前処理無し CA-GMRES 法ソルバに比べて 4 割程度の性能劣化を示す。しかしながら、SSOR 前処理に FP16 処理を適用するとメモリアクセスが約 1/3 に減少し、演算密度が大幅に向上する。ここで、規格化を適用しない場合には FP16 処理は収束せず破綻するが、上記の規格化手法を適用することでほぼ同じ収束特性が維持され、約 2.24 倍の性能向上が得られる。4 次元前処理と 3 次元近似前処理は同じ収束特性を示し、L1 キャッシュ効率の改善によって約 1.41 倍の性能向上が得られる。以上の結果から、上記の混合精度 SSOR 前処理設計の妥当性が確認できた。GCR 法ソルバと CA-PGMRES ソルバの最終的な性能差は約 5.38 倍に達し、「富岳」で利用可能となった FP16SIMD 演算を活用した新たなアルゴリズムの有効性が示された。

	GCR	CA-GMRES(20)	CA-PGMRES (SSOR1,FP64)	CA-PGMRES (SSOR1,FP16)	CA-PGMRES (SSOR2,FP16)
Number of iterations	602	660	64	68	68
All_reduce/iteration	1	1/s	1/s	1/s	1/s
Computation [flop/grid]	47.0	56.2	328.5	40.5+288.0	40.5+208.0
Load/store [byte/grid]	128.0	43.6	366.0	126.0	126.0
Memory [Gbyte/node]	6.3	23.2	13.6	12.0	11.4
Roofline time [s]	6.66	3.06	2.35	0.86	0.82
Elapse time [s]	12.9	7.58	13.52	3.38	2.40

Figure 4.2.4-20. Numerical properties of the GCR , CA-GMRES (s=20), and CA-PGMRES (s=4, SSOR1/SSOR2) solvers. An implicit solver with  $(N_R, N_z, N_z, N_{v//})=(160,160,32,96)$  is computed using a single node on Fugaku.

Figure 4.2.4-21 に Haswell (JAEA-ICEX)、FX100 (Plasma Simulator)、KNL (Oakforest-PACS)、A64FX (「富岳」)、V100 (Summit) における各ソルバの性能比較を示す。ここで、Haswell の 1 ソケットのメモリバンド幅は「京」とほぼ同じ性能である。GCR 法ソルバの Haswell の 1 ソケットあたりの処理速度を基準として各プロセッサ、ソルバの性能を見ると、GCR 法ソルバでは「富岳」は Haswell の約 12 倍、KNL の約 2 倍、V100 の約 1.2 倍の性能を示す。CA-GMRES 法ソルバでは「富岳」の性能向上はさらに約 20 倍まで拡大し、CA-PGMRES 法ソルバでは約 63 倍という飛躍的な性能向上を示す。CA-PGMRES 法ソルバの「富岳」と V100 の性能比は約 2 倍に拡大しているが、これは FP16 SSOR 前処理の処理効率によるものである。Figure 4.2.4-19 に示す細分化 red-black SSOR 前処理では細分化ブロックのサイズを  $(N'_R, N'_z, N_z, N_{v//})=(2,2,32,96)$  と設定し、このうち  $(N'_R, N'_z, N_z)=(2,2,32)$  についての 3 次元 SSOR 処理はデータ依存関係があるため並列化できず、処理の並列度が 1/128 に低下する。この SSOR 前処理の並列度は CMG あたり 12 コアの「富岳」では十分であるが、GPU あたり 5,120 コアの V100 では並列度が不足し、処理効率 (Occupancy、メモリバンド幅) が低下することがわかった。

Figure 4.2.4-22 に「富岳」における ITER 規模のシミュレーションの強スケールリングを示す。ここで、重水素イオンと実質量比  $m_i/m_e=3,672$  の電子を含む 2 成分プラズマに対し、装置サイズ  $a/\rho=700$ 、格子数  $(N_R, N_{\zeta}, N_Z, N_{v//}, N_{v\perp})=(720, 720, 64, 64, 24)$ 、時間ステップ幅  $\Delta t=5\Omega_i^{-1}$  とし、1,440、2,880、5,760 ノード (5,760、11,520、23,040CMG、1MPI プロセス/CMG) における 1 時間ステップあたりの処理時間を計測した。ここで、 $\Omega_i$  はイオンサイクロトロン周波数を示す。コスト分布は線形移流項の陰解法ソルバ (Krylov)、非線形移流項 (Nonlinear)、ポアソン方程式 (Field)、粒子衝突項 (Collision)、およびその他 (Other) のコストを示す。数千ノード規模の並列処理では従来の GCR 法ソルバを用いても良好な強スケールリングが得られるが、新しい CA-PGMRES 法ソルバを用いた場合には強スケールリングを維持しつつ 3 倍程度の高速化が実現している。GT5D ではこれまで規格化装置サイズ  $a/\rho=150\sim 240$  で質量比を  $m_i/m_e=100$  程度に下げて計算コストを削減した数値実験を「京」数千ノードで実行してきたが、今回得られた「富岳」数千ノードの処理性能はほぼ同じノード数でこれまでの数値実験を約 4 倍 (体積は約 64 倍) の ITER 規模  $a/\rho=600\sim 1,000$  かつ実質量比の電子に拡張できることを示している。以上の成果により平成 31 年度 (令和元年度) の実施計画を達成するとともに、サブ課題 D の開発目標を達成した。

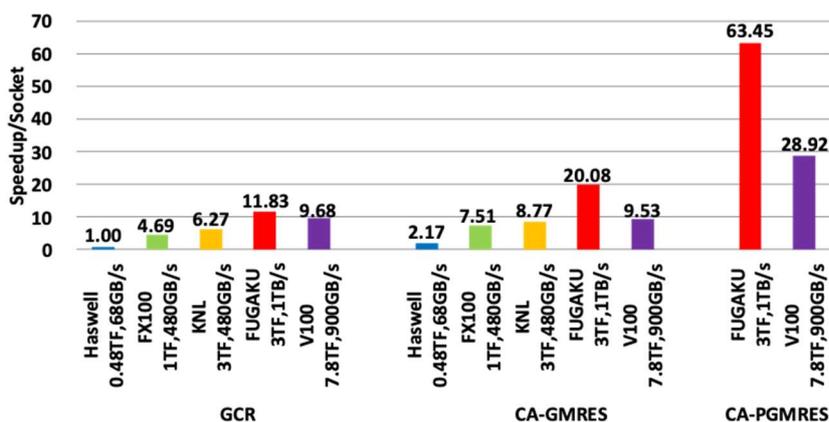


Figure 4.2.4-21. Cross-platform comparisons of the GCR, CA-GMRES, and CA-PGMRES solvers. The performance per socket is normalized by the performance for a single socket of Haswell, which has a similar memory bandwidth as a single node of K. An implicit solver with  $(N_R, N_{\zeta}, N_Z, N_{v//})=(160, 160, 32, 96)$  is computed on Haswell (4sockets), FX100 (4CMGs), KNL (2sockets), Fugaku (4CMGs) and Summit (4GPUs).

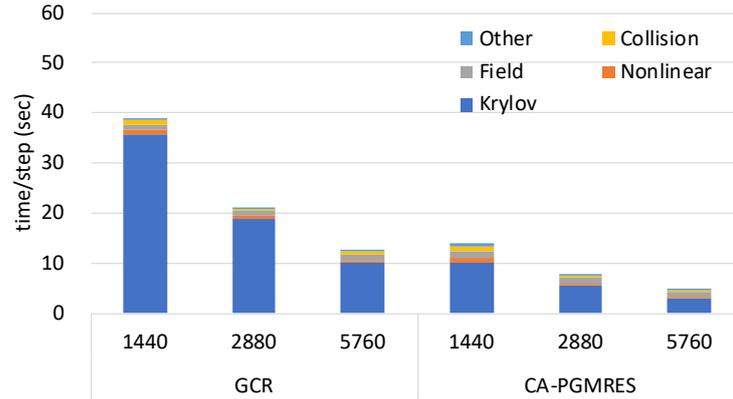


Figure 4.2.4-22. Strong scaling of GT5D with the GCR and CA-PGMRES solvers using 1,440, 2,880, and 5,760 CPUs on Fugaku. The elapsed time per time step is shown for the ITER-size parameter case (a two component plasma with deuterium ions and kinetic electrons with  $m_i/m_e=3,672$ , the normalized plasma size  $a/\rho=700$ , the number of grids  $(N_R, N_\zeta, N_Z, N_{v\parallel}, N_{v\perp})=(720, 720, 64, 64, 24)$ , the time step width  $\Delta t=5\Omega_i^{-1}$ ).

#### 文献

- [1] Y. Idomura, H. Urano, N. Aiba, and S. Tokuda, “Study of ion turbulent transport and profile formations using global gyrokinetic full-f Vlasov simulation”, *Nucl. Fusion* 49, 065029 (2009).
- [2] V. Grandgirard et al., “A 5D gyrokinetic full-f global semi-Lagrangian code for flux-driven ion turbulence simulations”, *Comput. Phys. Commun.* 207, 35 (2016).
- [3] Y. Asahi, G. Latu, T. Ina, Y. Idomura, V. Grandgirard, and X. Garbet, “Optimization of fusion kernels on accelerators with indirect or strided memory access patterns”, *IEEE Trans. Para. Dist. Sys.* 14, 1 (2016).
- [4] M. Hoemmen, “Communication-Avoiding Krylov Subspace Methods”, Ph.D. dissertation, EECS Dept., U.C. Berkeley, 2010.
- [5] A. Mayumi, Y. Idomura, T. Ina, S. Yamada, and T. Imamura, “Left-Preconditioned Communication-Avoiding Conjugate Gradient Methods for Multiphase CFD Simulations on the K Computer”, In: *Proceedings of the 7th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems. ScalA '16*, Piscataway, NJ, USA, IEEE Press (2016) 17–24.
- [6] Y. Idomura, T. Ina, A. Mayumi, S. Yamada, T. Imamura, “Application of a preconditioned Chebyshev basis communication-avoiding conjugate gradient method to a multiphase thermal-hydraulic CFD code”, *Lecture Notes in Computer Science* 20776, 257 (2018).
- [7] Y. Idomura, T. Ina, A. Mayumi, S. Yamada, K. Matsumoto, Y. Asahi, and T. Imamura, “Application of a communication-avoiding generalized minimal residual method to a gyrokinetic five dimensional Eulerian code on many core platforms”, *Proceedings of 8th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems*, Denver, CO USA, November 2017 (ScalA'17)
- [8] T. Kawamura, T. Noda, Y. Idomura, “Performance Evaluation of Runtime Data Exploration

Framework based on In-Situ Particle Based Volume Rendering”, Supercomputing Frontiers and Innovations 4, 43-54 (2017).

- [9] 井戸村泰宏、他、平成 30 年度 Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム大規模 HPC チャレンジ「大規模原子力流体コードの性能評価」(2018).
- [10] T. Kawamura, Y. Idomura, “Improvement of Interactive Remote In-Situ Visualization using SIMD-aware Function Parser and Asynchronous Data I/O”, accepted for publication in Journal of Visualization.
- [11] Y. Idomura, T. Ina, Y. Ali, T. Imamura, “Optimization of Fusion Plasma Turbulence Code GT5D on FUGAKU and SUMMIT”, 2nd R-CCS international symposium, 17-18 February, Kobe, Japan (2020).
- [12] <https://ccse.jaea.go.jp/software/>
- [13] Kazuya Matsumoto, Yasuhiro Idomura, Takuya Ina, Akie Mayumi, Susumu Yamada, “Implementation and performance evaluation of a communication-avoiding GMRES method for stencil-based code on GPU cluster”, Journal of Supercomputing 75, 8115-8146 (2019).
- [14] Y. Idomura, M. Nakata, S. Yamada, M. Machida, T. Imamura, T.-H. Watanabe, M. Nunami, H. Inoue, S. Tsutsumi, I. Miyoshi, and N. Shida, “Communication overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer”, International Journal of High Performance Computing Applications 28, 73-86 (2014).

#### (5) 実証研究と ITER 物理課題検討

##### (5-1) JT-60、LHD 実験に関する実証研究

##### (5-1-1) トカマク装置に関する実証研究

トカマク型装置を対象とした GKV コードを用いた実証研究は、JT-60U 実験[1]や米国の DIII-D 実験[2]を中心に行われ、JT-60U 実験を対象とする粒子輸送の解析[3]、機械学習によるモデル化[4]が進められてきた。平成 31 年度（令和元年度）はこの機械学習モデルを用いた輸送モデルの構築と密度分布評価に関する実証研究[5]、および機械学習手法の高度化[6]を実施した。一方、高いプラズマ圧力をもつ炉心条件において発生する電磁乱流を対象として、マルチスケール乱流の飽和機構解明[7]、JT-60SA 装置の実形状磁場を用いた電磁乱流の解析[8]、有限圧力による磁場形状変形効果の検証[9]が進められてきた。平成 31 年度（令和元年度）は、さらに JET や ASDEX-U 装置における磁場形状効果の解明、ならびに、MHD モードを含めた高圧力領域における不安定性のパラメータ依存性の組織的探索手法の整備がなされた。

高エネルギー粒子閉じ込め解析に関しては、(3-3)に示したように MEGA のマルチフェーズ計算法を TFTR 実験で観測されたアルフベン固有モードが繰り返し突発的に成長する現象(AEバースト)に適用して、実験結果の再現に成功するとともに、その物理機構を解明し、AEバーストを引き起こす高エネルギーイオンの臨界分布が存在することを見出した [10]。

以上の取り組みにより平成 31 年度（令和元年度）の実施計画を達成した。

##### (5-1-2) LHD に関する実証研究

LHD プラズマを対象とした乱流輸送解析は、水素プラズマにおける熱輸送の実証研究[11]、温度勾配の計測誤差の影響に関する誤差推定手法の確立がなされてきた[12]。さらに、多種イオン系の乱流輸送解析に関連する実証研究として水素同位体効果の実証研究に着手し、重水素プラズマにおける捕捉電子モード乱流の抑制効果の解明[13]、LHD 実験データを用いた重水素プラズマの閉じ込め改善[14]を確認した。加えて、不純物輸送に関連する実証研究として、ヘリウムと炭素を不純物として含む水素プラズマの粒子輸送解析により、各粒子種の粒子輸送特性の温度勾配依存性を解析し[15]、不純物の準定常密度分布の維持に必要な乱流輸送と衝突性輸送の釣り合い条件の検討を進めた[16]。平成 31 年度（令和元年度）においては、LHD の不純物ホール実験を対象に、電場による回転効果も含め、乱流による不純物輸送の検証を行い、衝突を介した新古典輸送の重要性を確認した[17, 18, 19]。

高エネルギー粒子閉じ込め解析に関しても、(3-3) に示したように MEGA を用いた実証研究が進展しており、熱イオンの運動論的效果による MHD 不安定性の安定化に関する実証研究[20]、アルフベン固有モードによって損失する高エネルギーイオンの速度空間領域に関する実証研究[21]、高エネルギー粒子駆動測地線音響モードと呼ばれる MHD モードを媒介とする高エネルギーイオンから熱イオンへのエネルギー転送に関する実証研究[22]を実施した。

以上の取り組みにより平成 31 年度（令和元年度）の実施計画を達成した。

#### (5-2) ITER 物理課題検討に関わる解析

国際トカマク物理活動 (ITPA) 「輸送と閉じ込め」に関する課題グループ会合に参加し、JT-60U 実験データに水素同位体効果の解析に関する成果発表を行うとともに、ITER 物理課題検討に関する情報を収集した[23]。

国際トカマク物理活動 (ITPA) 「高エネルギー粒子物理」に関する課題グループ会合に参加し、MHD モードを媒介とする高エネルギーイオンから熱イオンへのエネルギー転送に関する成果発表を行うとともに、ITER 物理検討課題に関する情報を収集した[24]。

以上の取り組みにより平成 31 年度（令和元年度）の実施計画を達成した。

#### 文献

- [1] M. Nakata, M. Honda, M. Yoshida, H. Urano, M. Nunami, S. Maeyama, T. -H. Watanabe, and H. Sugama, “Validation studies of gyrokinetic ITG and TEM turbulence simulations in a JT-60U tokamak using multiple flux matching”, Nucl. Fusion 56, 086010 (2016).
- [2] M. Yoshida, G. R. McKee, M. Murakami, B. A. Grierson, M. Nakata, et al., “Magnetic shear effects on plasma transport and turbulence at high electron to ion temperature ratio in DIII-D and JT-60U plasmas”, Nucl. Fusion 57, 056027 (2017).
- [3] E. Narita, M. Honda, M. Yoshida, N. Hayashi, H. Urano, and S. Ide, “Effects of toroidal rotation on electron heat transport via changes in inertial force and impurity density”, Plasma Phys. Control. Fusion 59, 044012 (2017).
- [4] E. Narita, M. Honda, M. Nakata, M. Yoshida, H. Takenaga, and N. Hayashi, “Gyrokinetic modelling of the quasilinear particle flux for plasmas with neutral-beam fuelling”, Plasma Phys. Control. Fusion 60, 025027 (2018).

- [5] E. Narita, M. Honda, M. Nakata, M. Yoshida, H. Takenaga and N. Hayashi, “Neural-network-based semi-empirical turbulent particle transport modelling founded on gyrokinetic analyses of JT-60U plasmas”, *Nucl. Fusion* 59, 106018 (2019).
- [6] M. Honda and E. Narita, “Machine-learning assisted steady-state profile predictions using global optimization techniques”, *Phys. Plasmas* 26, 102307 (2019).
- [7] S. Maeyama, T.-H. Watanabe, and A. Ishizawa, “Suppression of Ion-Scale Microtearing Modes by Electron-Scale Turbulence via Cross-Scale Nonlinear Interactions in Tokamak Plasmas”, *Phys. Rev. Lett.* 119, 195002 (2017).
- [8] 西岡賢二, 前山伸也, 相羽信行, 本多充, 仲田資季, 渡邊智彦, “JT-60SA に向けた電磁的微視的不安定性の局所パラメータ依存性解析”, 第 74 回日本物理学会年次大会 (2019).
- [9] A. Ishizawa, D. Urano, Y. Nakamura, S. Maeyama, and T.-H. Watanabe, “Persistence of Ion Temperature Gradient Turbulent Transport at Finite Normalized Pressure”, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 025003 (2019).
- [10] Y. Todo, “Critical energetic particle distribution in phase space for the Alfvén eigenmode burst with global resonance overlap”, *Nuclear Fusion* 59, 096048 (2019).
- [11] A. Ishizawa et al., “Multi-machine analysis of turbulent transport in helical systems via gyrokinetic simulation”, *Nucl. Fusion* 57, 066010 (2017).
- [12] M. Nunami, M. Nakata, S. Toda, A. Ishizawa, R. Kanno, and H. Sugama, “Simulation studies on temperature profile stiffness in ITG turbulent transport of helical plasmas for flux-matching technique”, *Physics of Plasmas* 25, 082504 (2018).
- [13] M. Nakata, M. Nunami, H. Sugama, and T.-H. Watanabe, “Isotope Effects on Trapped-Electron-Mode Driven Turbulence and Zonal Flows in Helical and Tokamak Plasmas”, *Phys. Rev. Lett.* 118, 165002 (2017).
- [14] M. Nakata, K. Nagaoka, K. Tanaka, H. Takahashi, M. Nunami, S. Satake, M. Yokoyama, F. Warmer and the LHD Experiment Group, “Gyrokinetic microinstability analysis of high-Ti and high-Te isotope plasmas in Large Helical Device”, *Plasma Physics and Controlled Fusion* 61, 014016 (2019).
- [15] M. Nunami, M. Sato, M. Nakata, S. Toda, H. Sugama, M. Yokoyama and H. Yamaguchi, “Impacts of External Momentum Torque on Impurity Particle Transport in LHD”, *Plasma and Fusion Research* 12, 1203039 (2017).
- [16] M. Nunami, M. Nakata, M. Sato, S. Toda, H. Sugama, H. Yamaguchi, and M. Yokoyama, “KINETIC SIMULATION STUDIES ON MULTI-ION-SPECIES PLASMA TRANSPORT IN HELICAL SYSTEMS”, *Proc. 27th IAEA-FEC (Ahmedabad, India, 22–27 October 2018)* [TH/P6-8].
- [17] M. Nunami, “Gyrokinetic turbulence simulation studies on stellarator plasmas”, 11th International Conference on Computational Physics (ICCP11), Hangzhou, China (June 2019).
- [18] K. Fujita, S. Satake, R. Kanno, M. Nunami, M. Nakata, J. M. García-Regaña, J. L. Velasco, and I. Calvo, “Global Effects on the Variation of Ion Density and Electrostatic Potential on the Flux

Surface”, 22nd International Stellarator and Heliotron Workshop (ISHW2019), Madison, USA, (September 2019).

- [19] M. Nunami, M. Nakata, S. Satake, K. Fujita, H. Yamaguchi, S. Matsuoka, M. Sato, S. Toda, and H. Sugama, “Particle Balance in Turbulent and Neoclassical Transport of Helical Plasmas”, 22nd International Stellarator and Heliotron Workshop (ISHW2019), Madison, USA, (September 2019).
- [20] M. Sato and Y. Todo, “Ion Kinetic Effects on linear pressure driven MHD instabilities in helical plasmas”, to appear in Journal of Plasma Physics (2020).
- [21] R. Seki et al., “Hybrid simulation of fast-ion losses due to the Alfvén eigenmode bursts in the Large Helical Device and the comparison with the Fast-Ion-Loss Detector measurements”, submitted to Journal of Plasma Physics.
- [22] H. Wang et al., “The systematic investigation of energetic-particle-driven geodesic acoustic mode channeling using MEGA code”, to appear in Nuclear Fusion 60 (2020).
- [23] E. Narita et al., “Gyrokinetic analysis of isotope effects on particle transport in JT-60U”, 23rd ITPA Topical Group Meeting on Transport and Confinement, 14-17 October, Hefei, China (2019).
- [24] H. Wang, “Nonlinear simulation of energetic particle driven geodesic acoustic mode channeling in LHD plasmas”, 22nd ITPA Topical Group on Energetic Particles Meeting, 9-11 April, Rovaniemi, Finland (2019).

#### (6) 開発コードの普及および人材育成

ジャイロ運動論にもとづく乱流輸送シミュレーションは、磁場閉じ込め核融合プラズマの異常輸送（乱流輸送）研究において、理論的観点からのみならず、実験解析においても今や必須のツールである。特に局所モデルを用いたシミュレーションコード GKV は、実験との比較においてより機動的に適用され、乱流を駆動する不安定モードの同定、揺動特性の比較、輸送フラックスの見積もりまで幅広く応用されている。本課題で開発を進めている GKV コードの普及のため、これまで 3 回の講習会を開催してきた。平成 31 年度（令和元年度）は 12 月 13 日に核融合科学研究所において第 4 回 GKV 講習会を行った。講習会では、コードに関する概略の説明だけでなく、参加者が各自のパソコンを持参し、実習を取り入れた講習を行った。また、本課題で継続的に開発してきた GKV コードについては、最新版を web 上に公開した[1]。以上の取り組みにより平成 31 年度（令和元年度）の実施計画を達成した。

文献

- [1] <http://www.p.phys.nagoya-u.ac.jp/gkv/>

#### 4-2-5. プロジェクトの全体推進

<再委託機関：学校法人立教学院立教大学、国立研究開発法人物質・材料研究機構>

##### (1) 研究成果の要旨

平成 31 年度（令和元年度）は、プロジェクト全体ならびに各サブ課題で掲げる目標の妥当性確認のための諮問委員会の開催や、共通基盤技術としてマルチフィジクス連成と V&V およびマルチスケール連携と V&V、大規模行列計算・データ可視化に関する連携を推進するとともにコデザインを推進し、これまでの成果をとりまとめた。またアウトリーチ活動を通じて本プロジェクトの成果の広報やアプリケーションの普及に努めた。

##### (2) プロジェクト全体の管理・効率化

平成 31 年度（令和元年度）も引き続き実施機関内に課題推進事務局を設置し、4 つのサブ課題における共通的業務の推進支援を担わせた。諮問委員会を開催し（令和元年 5 月 23 日、令和元年 12 月 25 日）、研究開発項目のブラッシュアップと進捗管理の徹底をはかるとともに、プロジェクトで得られた成果の積極的な公開のためホームページの更新につとめた。また第 4 回となるシンポジウムを令和元年 11 月に開催し、アプリケーションの講習会・ワークショップを開催するなど、アウトリーチ活動を推進した。なお、これまでのアプリケーション普及活動等の実績を Table4.2.5-1 にまとめた。

Table4.2.5-1 Outreach activities

No.	タイトル	開催日	場所	参加者
1	重点課題⑥⑧ 第 1 回 HPC ものづくり統合ワークショップ	2017/9/12	東京大学生産技術研究所	80
2	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 第 2 回シンポジウム	2017/10/25	東京大学弥生講堂	143
3	Plasma Conference 2017、シンポジウム「ポスト「京」に向けたプラズマシミュレーションの新展開」	2017/11/21	姫路商工会議所	50
4	第 2 回 GKV 講習会	2017/12/15	核融合科学研究所	20
5	第 1 回東京ハンズオン ABINIT-MP 講習会	2018/2/23	RIST 東京事務所	10
6	ADVENTURE プロジェクト 20 周年記念シンポジウム	2018/3/20	東京大学大学院工学系研究科	90
7	IEA Wind Task31 シンポジウム	2018/4/17	東京大学生産技術研究所	70
8	4th US-Japan Joint Institute for Fusion	2018/7/30-	プリンストン大学	30

	Theory Workshop on "Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing"	31		
9	重点課題⑥⑧ 第2回 HPC ものづくり統合ワークショップ	2018/9/26	東京大学生産技術研究所	80
10	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 第3回シンポジウム	2018/10/23	東京大学弥生講堂	134
11	第3回 GKV 講習会	2019/1/17	核融合科学研究所	10
12	第2回東京ハンズオン ABINIT-MP 講習会	2019/3/27	RIST 東京事務所	10
13	第1回 FMO-DPD/FCEWS セミナー	2019/3/27	RIST 東京事務所	10
14	重点課題⑥⑧ 第3回 HPC ものづくり統合ワークショップ	2019/9/19	東京大学生産技術研究所	80
15	Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration	2019/10-28-29	KOBE, Japan	25
16	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 第4回シンポジウム	2019/11/5	東京大学弥生講堂	160
17	PHASE/0 講習会	2019/11/25	東京工業大学	20
18	ABINIT-MP 講習会	2019/12/6	名古屋大学	10
19	第4回 GKV 講習会	2019/12/13	名古屋大学	10
20	ABINIT-MP 講習会	2020/1/28	東京工業大学	10

### (3) マルチフィジックスシミュレーション基盤の構築

マルチフィジックス連成と V&V では、サブ課題 A と協力し、ラボスケール石炭ガス化炉を対象として、FFR-Comb と ADVENTURE\_Thermal コードを REVOCAP\_Coupler (Socket 版) で双方向に接続した連成解析を「京」上で実行し、非定常解析を正常に実行できることを確認するとともに、得られた解析結果を電中研提供の計測データと比較し、結果のオーダーと傾向がほぼ合うことを確認した。また、REVOCAP\_Coupler の Socket 版と MPI 版を用いた双方向連成解析における通信性能等についても比較を行い、両者でほぼ同程度の性能が出ることを確認した。詳細については、本報告書 4-2-1. (5-1-2)「ラボスケール石炭ガス化炉の統合シミュレーション」の項を参照されたい。

一方、サブ課題 C と協力し、NREL5MW 発電用風車を対象とした片方向流体構造連成解析に関しても、「京」上での FFB 解析と PC クラスタ上での ADVENTURE\_Solid 及び ADVENTURE\_Fatigue による解析を REVOCAP\_Coupler を介してオフラインで連成させる解析を実行し、LES 解析から振

動応答解析、疲労損傷解析までを滞りなく実行できることを確認するとともに、その解析フローを確立した。詳細については、本報告書 4-2-3. (4-1)「複合材料構造特性を考慮した風車ブレードの流体構造連成振動解析技術」を参照されたい。

#### (4) マルチスケールシミュレーション基盤の構築

マルチスケール連携での成果として、フラグメント分子軌道 (FMO) プログラム ABINIT-MP[1]の関係からまとめることにする。ポスト「京」のプロジェクトの中で、ABINIT-MP の幾つかのローカル版の統合を意図して Open シリーズとして展開し、これまで Ver. 1 として Rev. 5 (2016 年 12 月)、Rev. 10 (2018 年 2 月)、Rev. 15 (2019 年 3 月) としてリリースし、個別のバイナリ提供を行うと共に、(一財) RIST の協力を得て「京」をはじめ全国の HPCI センターにライブラリプログラムとして整備してきた[2]。そして、プロジェクト最後の更新版が Rev. 20 (2020 年 3 月) であり、これまでと同様に「計算工学ナビ」のサイト[3]で Figure 4.2.5-1 のように告知した。Rev. 20 の機能面の追加・強化では、(I) Rev. 15 の中で仮実装した sp2 射影によるフラグメント分割の機能[4]に関する入力指定を改良したこと、(II) ポワソン・ボルツマン(PB)型の溶媒和モデル[5,6]でのエネルギー分割解析 (PIEDA) をサポートしたこと、(III) 注目領域での部分構造の最適化において周囲の静電ポテンシャルの凍結近似による高速化[7]を図ったこと、(IV) 多層 FMO[8]の扱いによって注目領域のみに 3 次までの摂動エネルギー計算[9]を可能としたこと、(V) 小原アルゴリズム[10]による積分生成モジュールの拡張で f 関数まで対応したこと、が挙げられる。(II)は水和の影響を比較的簡便に見積もるのに有用であるし、(IV)は理論創薬での高速・高精度のスクリーニングに貢献するもので、Rev. 20 では使い勝手の向上を重視した機能追加になっている。なお、(II)は国立医薬品食品衛生研究所の沖山佳生氏が長年独自に開発してきたモジュール、(III)は星薬科大学の福澤薫准教授の指揮で AMED/BINDS プロジェクトの中で開発されたモジュールを融通いただいたものである。

ABINIT-MP の普及を意図したハンズオンセミナーは、(一財) RIST との共催で名大 (2019 年 12 月 6 日) と東工大 (2020 年 1 月 29 日) で開催 (Figure 4.2.5-2 を参照) した。どちらも参加者から好評を得ると共に、開催後にバイナリの個別の利用希望を数件頂いた。

ABINIT-MP の大規模な応用計算では、ドイツのグループとの国際共同研究の仕事が Phys. Chem. Chem. Phys. 誌に 2019 年の Hot Article に選定の上で掲載[11]され、さらに当該号の裏表紙 (Figure 4.2.5-3) を飾ることも出来た。また、表面科学の関係ではカルサイト表面への人造ペプチドの吸着機構の詳細解析を Jpn. J. Appl. Phys. 誌で論文[12]にした。

ABINIT-MP の今後のリリースは、Rev. 25 を 2020 年の秋に Ver. 1 系の最終版として、励起状態系の多層 FMO 計算などの機能を加えて行う予定である。その後は Ver. 2 系に移行し、SMASH (元分子科学研究所の石村和也氏による[13]) の 1,2 電子積分の生成モジュールを積む S 系、恒等分解 (RI) 近似に特徴のある PAICS (鹿児島大学の石川岳志教授による[14]) の摂動計算モジュールをインターフェースした P 系に分かれることになる。SMASH、PAICS のいずれのモジュール移植もポスト「京」のプロジェクトの中でここまで進められてきたが、特に前者は重点課題⑤の成果物のシェアであり、重点課題⑥-⑤間連携の事例となっていることを明記したい。いずれにせよ、2022 年の「富岳」の本格稼働を念頭に ABINIT-MP の研究開発と普及の活動を継続させたいと考えている。

次に、サブ課題 B で進めてきた、FMO 計算に基づく有効相互作用パラメータを用いる散逸粒子動力

学 (DPD) のナノ・メゾのマルチスケールシミュレーション (MSS) について記す。独自の DPD プログラム CAMUS[15]を使い、タンパク質の畳み込みを行った成果を *Appl. Phys. Express* 誌でオープンアクセスの論文[16]としたが、ダウンロード数は公開 2 ヶ月で 500 を超え、高い注目を集めていると言える。この論文の主内容は、応用物理学会 2018 年秋期学術講演会で奥脇弘次氏 (立教大学の助教) が講演奨励賞を獲得したものであるが、パーキンソン病に関わる 140 残基の  $\alpha$ -シヌクレインの構造形成もその後成功し、FMO-DPD 法の汎用性の高さが示された。MSS の特記事項として、重点課題①のリーダーである京都大学の奥野恭史教授のグループとの共同研究で、認知症の原因物質とされるアミロイド  $\beta$  の凝集に関わる CAMUS による大規模な DPD 計算 (ここでは経験パラメータを使用) を *ACS Chem. NeuroScience* で論文[17]としたことを重点課題⑥-①間連携の実績として挙げておきたい。プログラム・システムについては、有効パラメータ算定の FCEWS の精度向上、それにメゾ・ナノのリバースマッピングの DSRMS の整備を進めたが、後者については複合脂質の解析でも常用可能なレベルに達しており、2020 年度上期のリリースを目指している。

機械学習関係でも進展があった。一つ目は、FMO 計算によるタンパク質内のアミノ酸残基間の相互作用エネルギーの予測を化学的精度で達成したことである。この研究は 2017 年度にマイクロソフトの Azure 環境を使ってニューラルネットワーク (NN) 回帰で試みていたが、荷電残基間は上手くいくものの非荷電系は精度が出ないままであった。2019 年度、記述子を拡充し、回帰手法をサポートベクター (SV)、ランダムフォレスト (RF) を加えて再挑戦したところ、RF では学習の終了後に荷電、非荷電に依らずに数 kcal/mol 以下の誤差で残基間相互作用エネルギーを予測出来ることが確認された。Figure 4.2.5-4 は、20 残基の Trp-Cage の FMO 実計算値と予測値の比較プロットで、ほぼ理想的な対角線に乗っていることが見て取れる。この内容を応用物理学会の 2020 年春期学術講演会に登壇申し込みしたところ、高い評価を受けて注目講演に選定されたが、学会は新型コロナウイルスの影響で残念ながら中止となった (ただし、要旨発行を持って成立済)。

機械学習の二つ目は、2 次元に簡約された NACA 翼の数値流体力学 (CFD) シミュレーション結果の可視化流速図に関する深層学習についてである。これまで、人が目視でラベルを付け、それを学習・判定に用いていたが、恣意性・任意性は否めなかった。そこで、データ科学手法の一種である位相的データ解析 (TDA) のパーシステントホモロジー[18] (ツールは HomeCluod[19]を利用) を援用して特徴量を抽出し、k 平均法によって分類を行うワークフローを確立した。Figure 4.2.5-5 は、逆解析によって認識された渦構造を投影した図の例である。TDA を使うことで目視のラベル付けに比して渦の剥離の遷移状態の同定の確度が上がり、結果として判定精度が向上するのを確認しており、CFD の専門学会 (第 33 回数値流体力学シンポジウム) で発表を行った。

機械学習系では、日本コンピュータ化学会の論文誌 *J. Comp. Chem. Jpn.* に 2 報[20,21]、計算工学会誌に総説[22] (依頼) を出版した。また、計算工学会の「機械学習の工学問題適用に関する研究会」の委員にもなった。「富岳」の時代には、シミュレーションと機械学習の連携が進むとされるが、ポスト「京」のプロジェクトの間に、そのための助走は行えたのではないかと考えている。

## 保護中: ABINIT-MP Openシリーズ (Ver.1 Rev.20)

※2019年3月版(Ver.1 Rev.15)に関するページはこちらです

### はじめに

ABINIT-MPは、フラグメント分子軌道 (FMO) 計算を高速に行えるソフトウェアです[1]。専用GUIのBioStation Viewerとの連携により、入力データの作成～計算結果の解析が容易に行えます。4体フラグメント展開 (FMO4) による2次摂動計算も可能です。また、部分構造最適化や分子動力学の機能もあります。FMOエネルギー計算では、小規模のサーバから超並列スパコンまで対応しています (Flat MPIとOpenMP/MPI混成)。

[1]"Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems", S. Tanaka, Y. Mochizuki, Y. Komeiji, Y. Okiyama, K. Fukuzawa, Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 10310-10344.

### 特徴

ABINIT-MPは使い易いFMOプログラムで、4体フラグメント展開までが可能です。研究室単位のLinux/Intel系サーバに標準搭載されているMPI環境で動作しますし、特別な設定も必要ありません。また、煩雑で注意深さを要するフラグメント分割を伴う入力データの作成は随伴GUIのBioStation Viewer (Windowsで動作) を使うなどすれば容易に作成出来ます。また、フラグメント間相互作用エネルギー (IFIE) などの計算結果は膨大となりプリントからの理解はしばしば困難ですが、Viewerを使うと可視的・直観的に対象系の相互作用の様態を把握出来ます。

Figure 4.2.5-1. Announcement of ABINIT-MP Open Ver. 1 Rev. 20 at the web site of "Keisan-Kogaku Navi".



Figure 4.2.5-2. Snapshots of ABINIT-MP Hands-on seminar (Left: at Nagoya University 2019/12/6 & Right: at Tokyo Institute of Technology 2020/1/29).



Figure 4.2.5-3. Inside cover figure by our paper (Hot Paper 2019) published as Phys. Chem. Chem. Phys. 21 (2019) 21213-21222.

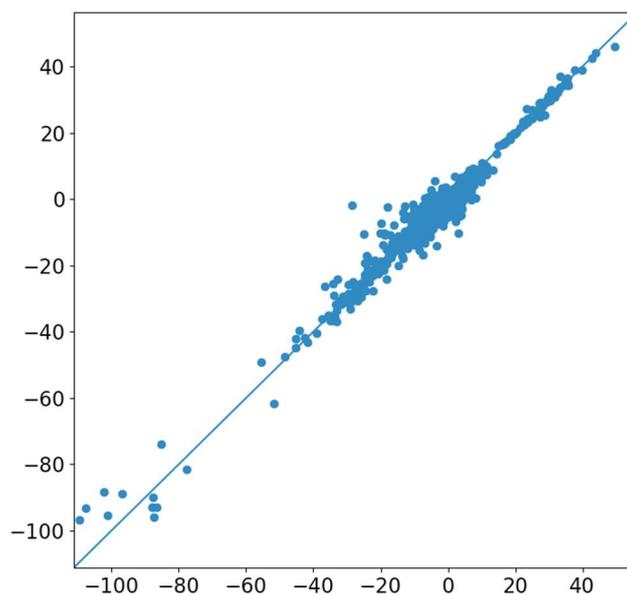


Figure 4.2.5-4. Plot of FMO-computed and RF-predicted interaction energies of Trp-Cage protein (Horizontal axis: FMO-calculated & Vertical axis: RF-predicted).

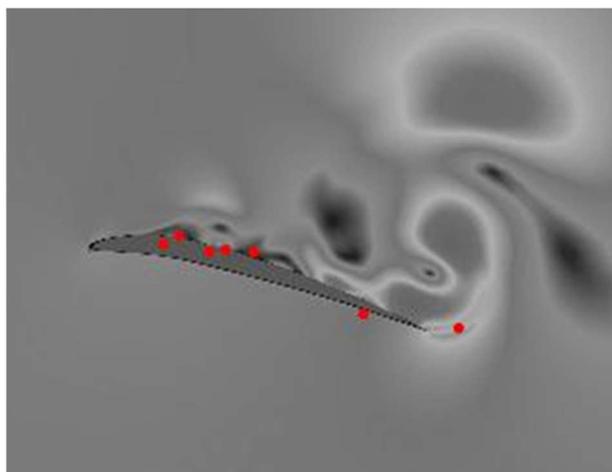


Figure 4.2.5-5. Persistent homology-based reverse analysis onto visualized CFD result of 2-dimensional wing model (NACA 6306).

#### 文献

- [1] "Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems", S. Tanaka, Y. Mochizuki, Y. Komeiji, Y. Okiyama, K. Fukuzawa, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16 (2014) 10310-10344.
- [2] "ABINIT-MP Open シリーズの最新の開発状況について", 望月祐志, 秋永宜伸, 坂倉耕太, 渡邊啓正, 加藤幸一郎, 渡辺尚貴, 奥脇弘次, 中野達也, 福澤薫, *J. Comp. Chem. Jpn.*, 18 (2019) 129-131.
- [3] <[http://www.cenav.org/abinit-mp-open\\_ver-1-rev-20/](http://www.cenav.org/abinit-mp-open_ver-1-rev-20/)>. (2020/3/30 公開予定)
- [4] "Fragmentation at sp<sup>2</sup> carbon atoms in fragment molecular orbital (FMO) method", Y. Akinaga, K. Kato, T. Nakano, Y. Akinaga, K. Kato, T. Nakano, K. Fukuzawa, Y. Mochizuki, *J. Comp. Chem.*, in press.
- [5] "Fragment Molecular Orbital Calculations with Implicit Solvent Based on the Poisson-Boltzmann Equation: Implementation and DNA Study", Y. Okiyama, T. Nakano, C. Watanabe, K. Fukuzawa, Y. Mochizuki, and S. Tanaka, *J. Phys. Chem. B* 122 (2018) 4457-4471.
- [6] "Fragment Molecular Orbital Calculations with Implicit Solvent Based on the Poisson-Boltzmann Equation: II. Protein and Its Ligand-Binding System Studies", Y. Okiyama, C. Watanabe, K. Fukuzawa, Y. Mochizuki, T. Nakano, and S. Tanaka, *J. Phys. Chem. B*, 123 (2019) 957-973.
- [7] "Geometry Optimization of the Active Site of a Large System with the Fragment Molecular Orbital Method", D. G. Fedorov, Y. Alexeev, K. Kitaura, *J. Phys. Chem. Lett.* 2 (2011) 282-288.
- [8] "Multilayer Formulation of the Fragment Molecular Orbital Method (FMO)", D. G. Fedorov, T. Ishida, K. Kitaura, *J. Phys. Chem. A*, 109 (2005) 2638-2646.
- [9] "Large-scale FMO-MP3 calculations on the surface proteins of influenza virus, hemagglutinin (HA) and neuraminidase (NA) ", Y. Mochizuki, K. Yamashita, K. Fukuzawa, K. Takematsu, H. Watanabe, N. Taguchi, Y. Okiyama, M. Tsuboi, T. Nakano, S. Tanaka, *Chem. Phys. Lett.*, 493 (2010) 346-352.
- [10] "Efficient recursive computation of molecular integrals over Cartesian Gaussian functions", S.

Obara, A. Saika, J. Chem. Phys. 84 (1986) 3963-3974.

- [11] "Cm<sup>3+</sup>/ Eu<sup>3+</sup> Induced Structural, Mechanistic and Functional Implications for Calmodulin", B. Drobot, M. Schmidt, Y. Mochizuki, T. Abe, K. Okuwaki, F. Brulfert, S. Falke, S. A. Samsonov, Y. Komeiji, C. Betzel, T. Stumpf, J. Raff, and S. Tsushima, Phys. Chem. Chem. Phys., 21 (2019) 21213-21222.
- [12] "Interaction between calcite and adsorptive peptide analyzed by fragment molecular orbital method", K. Kato, K. Fukuzawa, and Y. Mochizuki, Jpn. J. Appl. Phys., 58 (2019) 120906.
- [13] <<http://smash-qc.sourceforge.net/>>.
- [14] <<http://www.paics.net/>>.
- [15] "A portable code for dissipative particle dynamics (DPD) simulations with additional specific interactions", H. Doi, K. Okuwaki, T. Naitou, S. Saitou, and Y. Mochizuki\*, ChemBio-Informatics J. 18 (2018) 70-85.
- [16] "Folding simulation of small proteins by dissipative particle dynamics (DPD) with non-empirical interaction parameters based on fragment molecular orbital calculations", K. Okuwaki, H. Doi, K. Fukuzawa, and Y. Mochizuki, Appl. Phys. Express, 13 (2020) 017002.
- [17] "Stabilization Mechanism of Non-fibrillar Amyloid- $\beta$  Oligomer Involved with Hydrophobic Core Obtained by Dissipative Particle Dynamics", R. Kawai, S. Chiba, K. Okuwaki, R. Kanada, H. Doi, M. Ono, Y. Mochizuki, and Y. Okuno, ACS Chem. Neuroscience, 11 (2020) 385-394.
- [18] <[https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka\\_lab/introduction\\_j.pdf](https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab/introduction_j.pdf)>.
- [19] <[https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka\\_lab/homcloud/](https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab/homcloud/)>.
- [20] "機械学習によるテキスト処理ツールの開発と応用", 亘理結香, 奥脇弘次, 望月祐志, J. Comp. Chem. Jpn., 18 (2019) 123-125.
- [21] "転移学習と生成ネットワークの試行事例", 伊藤雅仁, 篠嶋友也, 望月祐志, 秋永宜伸, 小杉範仁, J. Comp. Chem. Jpn., 18 (2019) 132-135.
- [22] "深層学習とシミュレーションの連携事例", 伊藤雅仁, 遠藤克浩, 望月祐志, 泰岡顕治, 計算工学会誌, 24 (2019) 3983-3987.

#### (5) 大規模行列計算・データ可視化に関する連携

大規模行列計算に関するサブ課題 B、D 連携については、昨年度に引き続き、サブ課題 B における解析(固体酸化物形燃料電池の電解質-電極界面構造の最適化)で用いられる係数行列を対象として、サブ課題 D がこれまでに開発してきた行列ソルバ(マルチグリッド法、もしくは、不完全コレスキー分解を前処理とした共役勾配法)を適用し、その収束特性を調査した。

Figure 4.2.5-6 に問題設定の概要を示す。なお、問題設定は昨年度のものと同じである。サブ課題 B では、イオン輸送の促進を目的として、電解質-電極界面構造の最適化を試みている。このとき、イオン輸送は反応拡散方程式で表現される。反応拡散方程式の数値解析には、直交格子上の有限体積法が用いられる。そのため、3次元解析においては、7重対角行列で表現された係数行列をもつ行列問題を解くことになる。なお、行列の固有値の最大値と最小値の比、すなわち、条件数は、電解質と電極の拡散係数の比に比例することが知られている。したがって、拡散係数比が大きくなると、行列の収

束特性が悪化することが懸念される。

Figure4.2.5-7 は、上記の問題に対して、不完全コレスキー分解 (CG で表記) を前処理とした共役勾配法を適用したときの収束特性である。横軸はソルバの反復回数、縦軸は各反復時における残差を示す。(a)は拡散係数比  $k_1/k_0$ , (b)は一辺あたりの格子数  $N$  の影響について調査した結果を示している。Figure4.2.5-7(a)からは、拡散係数比によらず、残差がほぼ単調に収束することがわかる。このことは、不完全コレスキー分解による前処理が、条件数の改善に非常に有効であることを示している。一方、Figure4.2.5-7(b)からは、 $N=32, 64, 128$  の3 ケースいずれにおいても、残差がほぼ単調に収束することがわかる。ただし、残差を同じ程度まで減少させるのに必要な反復回数は  $N$  に応じて大きくなることも確認できる。一般的に、この問題に対してはマルチグリッド法が有効であり、マルチグリッド法を導入することで必要な反復回数を一定に保つことができると考えられている。

そこで、同じくサブ課題 D の開発したソルバ (マルチグリッド法を前処理とした共役勾配法) とみずほ情報総研の開発したソルバ (マルチグリッド法を前処理とした BiCGSTAB 法) を用いて、マルチグリッド法の効果を検証した。この結果、みずほ情報総研の開発したソルバによって最も良い収束特性が確認できた。この結果の一例を Figure4.2.5-8 に示す。一辺あたりの格子数を 32 から 512 の間で変化させても、収束に必要な反復回数がほとんど変化しないことが確認できる。なお、マルチグリッド法においては、各レベルにおけるスムージング演算の演算内容・適用回数、異なるレベル間でデータを授受する際の縮約・補間演算など様々なパラメータがあり、また、それらのパラメータの最適値は個々の問題設定に依存し、事前に推定することが難しい。実際、今回試したパラメータの範囲においては、期待通りに収束しないこともあった。今後は、最適パラメータを容易に推定する方法を確立することが求められる。

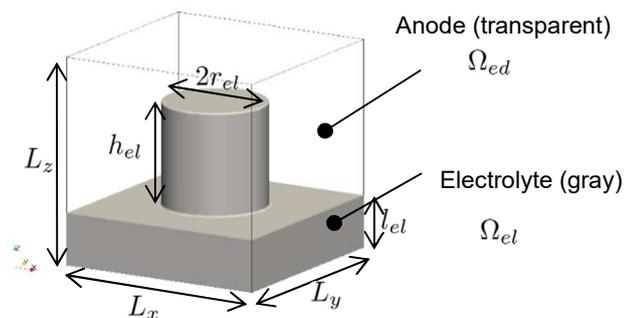
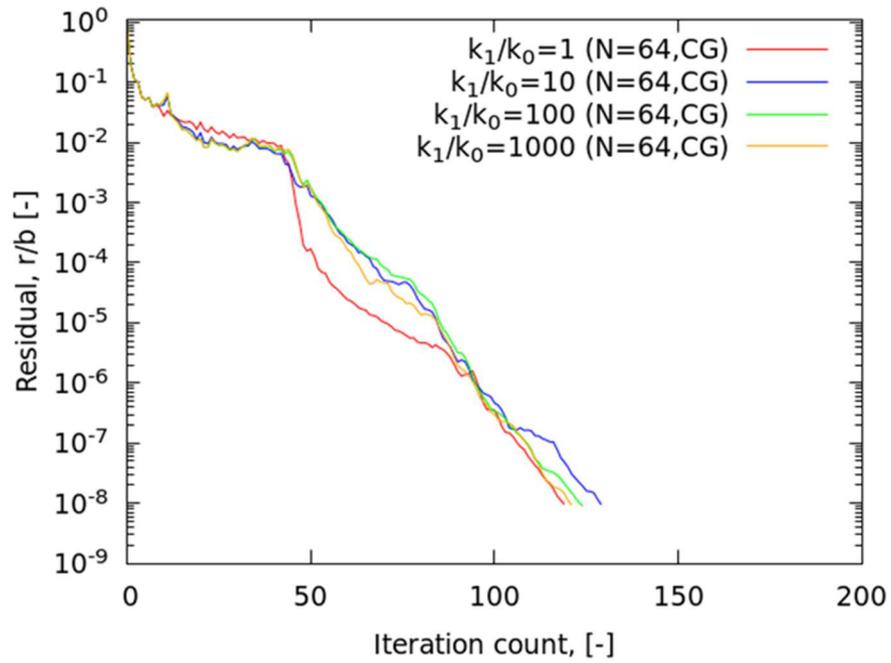
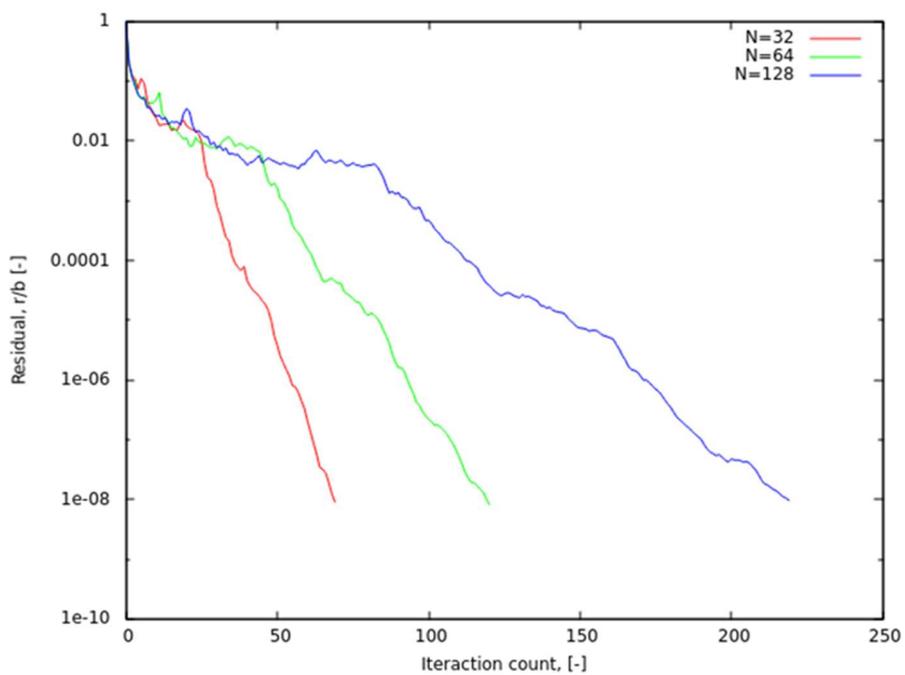


Figure4.2.5-6. Computational domain used for the comparison study of the matrix solvers. The transport of oxide ion from the electrolyte (shown in gray) to the anode (transparent) is considered.



(a)



(b)

Figure 4.2.5-7. Comparisons of the convergence properties of the preconditioned CG solver (incomplete LU decomposition preconditioner) developed in Sub. D group. (a) and (b) show the dependency on the condition number (the ratio of diffusion coefficients) and the problem size, respectively. The history of residual in L2 norm is plotted against the number of iterations.

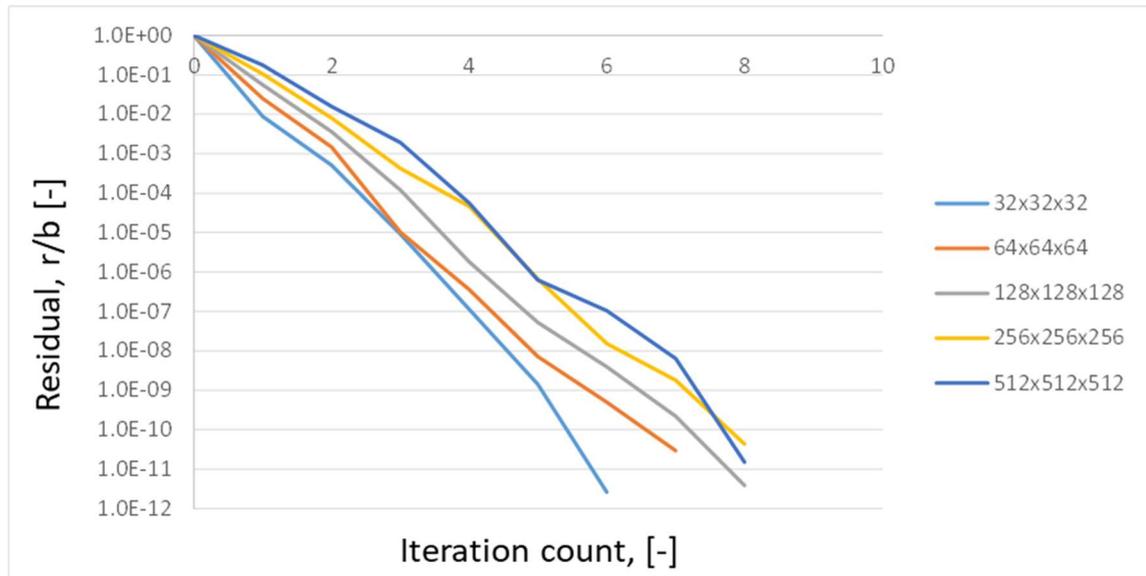


Figure4.2.5-8. Convergence properties of the matrix solver developed in Mizuho Information & Research Institute, Inc. (Multi-grid preconditioned BiCGSTAB method). The history of residual in L2 norm is plotted against the number of iterations.

(6) コデザインの推進

重点課題⑥では ADVENTURE をターゲットアプリケーションとしてこれまで NDA の下でコデザインに係る活動を行ってきた。これらの成果は NDA 締結者のみに対して公開している「次世代超高速電子計算機システムに関するコデザイン報告書」等において報告してきた。これまでの活動の結果として、「富岳」向け高速化の推進により、「富岳」上では対「京」性能比で 35 倍以上の高速化が得られる見込みを得た。

### 4-3. 活動（研究会等）

#### （1）諮問委員会

年 月 日	行 事
R1.5.23	第9回諮問委員会
R1.12.25	第10回諮問委員会

#### （2）重点課題⑥⑧連携事務局会議（幹事会）

年 月 日	行 事
R1.8.5	第17回連携事務局会議（幹事会）
R1.10.8	第18回連携事務局会議（幹事会）
R2.1.10	第19回連携事務局会議（幹事会）

#### （3）重点課題⑥⑧アプリケーション連携開発会議

年 月 日	行 事
R1.6.11	2019年度 第1回アプリケーション連携開発会議
R1.12.4	2019年度 第2回アプリケーション連携開発会議

#### （4）個別サブ課題会議

サブ課題	年 月 日	行 事
①（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	R1.5.20	サブ課題 A 全体会議
	R1.6.6	ADVENTURE 会合
	R1.7.17	石炭ガス化炉解析に関する打合せ
	R1.9.24	カプラに関する打合せ
②（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	R1.5.15	サブ課題 B 研究打合せ
	R1.12.18	サブ課題 B 研究打合せ
③（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	R1.9.4	洋上風車解析の打合せ
	R2.1.9	洋上風車解析の打合せ
	R2.1.31	洋上風車解析の打合せ
	R2.3.19	洋上風車解析の打合せ
④（サブ課題 D）核融合炉の炉心設計	R1.5.20	第1回サブ課題 D 幹事会
	R1.7.17	第1回サブ課題 D 開発推進会議
	R1.9.18	第2回サブ課題 D 幹事会
	R1.12.16	第2回サブ課題 D 開発推進会議
	R2.3.2	第3回サブ課題 D 開発推進会議

## (5) アウトリーチ活動

年 月 日	行 事
R1.9.19	重点課題⑥⑧ 第3回 HPC ものづくり統合ワークショップ
R1.10.18	第8回 材料系 WS
R1.10.28-29	Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration (Kobe, Japan)
R1.11.1	第6回 RIST 成果報告会
R1.11.5	第4回 重点課題⑥ シンポジウム
R1.11.9	2019年度 R-CCS 一般公開
R1.11.17-22	SC19
R1.11.25	PHASE/0 講習会 (東京工業大学 大岡山キャンパス)
R1.12.6	ABINIT-MP 講習会 (名古屋大学)
R1.12.13	第4回 GKV 講習会
R2.1.28	ABINIT-MP 講習会 (東京工業大学 大岡山キャンパス)
R2.2.17	第9回 材料系 WS
R2.3.4	HPCI フォーラム「スーパーコンピュータ「京」時代の成果から「富岳」への期待」; 同時開催「見える化シンポジウム」(開催中止、ウェブ展示)

#### 4-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
① (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	国立大学法人東京大学大学院工学系研究科  国立大学法人京都大学  国立大学法人九州大学大学院工学研究院	教授 吉村忍  教授 黒瀬良一  准教授 渡邊裕章
② (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	国立大学法人東京大学生産技術研究所  みずほ情報総研株式会社  福岡県福岡市西区元岡744番地 国立大学法人九州大学大学院工学研究院  学校法人立教学院立教大学理学部化学科  国立研究開発法人物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点	教授 鹿園直毅  サイエンスソリューション部・次長 米田雅一  准教授 井上元  教授 望月祐志  主任研究員 奈良純

<p>③ (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</p>	<p>国立大学法人豊橋技術科学大学</p> <p>国立大学法人九州大学応用力学研究所</p> <p>国立大学法人東京大学大学院工学系研究科</p> <p>国立大学法人東京大学生産技術研究所</p> <p>株式会社風力エネルギー研究所</p>	<p>教授 飯田明由</p> <p>准教授 内田孝紀</p> <p>教授 吉村忍</p> <p>准教授 長谷川 洋介</p> <p>技術部・取締役 今村博 取締役 鈴木章弘 (2019/8～)</p>
<p>④ (サブ課題 D) 核融合炉の炉心設計</p>	<p>国立研究開発法人日本原子力研究開発機構システム計算科学センター</p> <p>国立大学法人名古屋大学 大学院理学研究科</p> <p>大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所 ヘリカル研究部</p>	<p>室長 井戸村泰宏</p> <p>教授 渡邊智彦</p> <p>教授 藤堂泰</p>
<p>⑤プロジェクトの全体推進</p>	<p>国立大学法人東京大学大学院工学系研究科</p> <p>学校法人立教学院立教大学理学部化学科</p> <p>国立研究開発法人物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点</p>	<p>教授 吉村忍</p> <p>教授 望月祐志</p> <p>主任研究員 奈良純</p>

## 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

サブ課題代表者: 吉村 忍

## 1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際 の別	査読(有りの 場合○を 記入)
1	Large-Eddy Simulation of Turbulent Autoigniting Hydrogen Lifted Jet Flame with a Multi-regime Flamelet Approach	Y. Hu, R. Kurose	International Journal of Hydrogen Energy, Vol.44, pp.6313-6324	2019年3月	国際	○
2	Numerical Investigation on the Detailed Structure of a Coaxial Coal Jet Flame Using LES with Elementary Reactions	S. Ahn, H. Watanabe, T. Kitagawa	Energy and Fuels, Vol.33, pp.4621-4631	2019年4月	国際	○
3	Effect of Devolatilization Model on Flame Structure of Pulverized Coal Combustion in a Jet-burner System	S. Ahn, H. Watanabe, T. Kitagawa	Journal of Mechanical Science and Technology, Vol.33, pp.1973-1979	2019年4月	国際	○
4	Experimental and Numerical Analysis of Turbulent Pulverized Coal Flame in a Coaxial Burner	S. Ahn, K. Tainaka, H. Watanabe, T. Kitagawa	Energy, Vol.33, pp.727-735	2019年7月	国際	○
5	Statistics of progress variable and mixture fraction gradients in an open turbulent jet spray flame	C.T. d'Auzay, U. Ahmed, A. L. Pillai, N. Chakraborty, R. Kurose	Fuel, 247, 198-208 (2019), 4, 103201 (24 pages) (2019)	2019年7月	国際	○
6	Statistical behavior of turbulent kinetic energy transport in boundary layer flashback of hydrogen-rich premixed combustion	U. Ahmed, A. L. Pillai, N. Chakraborty, R. Kurose	Physical Review Fluids	2019年10月	国際	○
7	石炭ガス化炉内現象の数値シミュレーション	渡邊裕章	日本ガスタービン学会誌	2019年11月	国内	
8	Large eddy simulation of pulverized coal combustion in multi-burner system -effect of in-furnace blending method on NOx emission	M. Muto, H. Watanabe, R. Kurose	Advanced Powder Technology, 30, 3153-3162 (2019)	2019年12月	国際	○
9	Numerical and experimental investigations on turbulent combustion fields generated by large-scale submerged combustion vaporizer burners with water spray equipment	T. Honzawa, R. Kai, M. Seino, T. Nishiie, Y. Suzuki, A. Okada, K. Wazaki, R. Kurose	Journal of Natural Gas Science and Engineering	2020年4月	国際	○
10	Large eddy simulation of a partially pre-vaporized ethanol reacting spray using the multiphase DTF/flamelet model	Y. Hu, R. Kai, R. Kurose, E. Gutheil, H. Olguin	International Journal of Multiphase Flow	2020年4月	国際	○

## 2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Parallel Simulation of Thermal Conduction in Coal Gasification Vessel Considering Cooling Pipes (口頭)	Naoto MITSUME, Tomonori YAMADA, Shinobu YOSHIMURA	International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences (ICCES 2019), Tokyo, JAPAN	2019年3月	国際	
2	[Keynote presentation] A Coupled Heat Transfer Simulation of Coal-Gasifier (口頭)	Tomonori YAMADA, Naoto MITSUME, Shinobu YOSHIMURA	20th International Conference on Fluid Flow Problems (FEF-2019), Chicago, USA	2019年4月	国際	○
3	Numerical investigation of methane/air premixed flame near the wall with conjugate heat transfer: Effect of temperature swing heat insulation (口頭)	R. Kai, R. Masuda, T. Ikedo, R. Kurose	17th International Conference on Numerical Combustion, Hotel Quellenhof, Aachen, Germany	2019年5月	国際	
4	Numerical investigation of impinging spray flame-wall heat transfer in compression-ignition engine (口頭)	A. L. Pillai, T. Murata, T. Ikedo, R. Masuda, R. Kurose	18th International Conference on Numerical Combustion, Hotel Quellenhof, Aachen, Germany	2019年5月	国際	
5	LES/flamelet simulation of turbulent partially premixed hydrogen-nitrogen lifted jet flame (ポスター)	Y. Hu, T. Murakami, J. Li, R. Kurose	5th International Conference on Polygeneration (ICP 2019), Kyushu University, Fukuoka, Japan	2019年5月	国際	
6	Numerical investigation of gasification characteristics on an oxy-fuel gasifier (口頭)	Seongyool Ahn, Hiroaki Watanabe, Toshiaki Kitagawa	The 5th International Conference on Polygeneration, Fukuoka, Japan	2019年5月	国内	
7	Some challenges in numerical simulation of spray combustion (口頭)	R. Kurose	Seventh International Workshop on the Turbulent Combustion of Sprays (TCS-7), Tenerife, Spain	2019年6月	国際	
8	Large-eddy simulation of combustion instabilities of spray combustion: The effect of equivalence ratio in lean combustion (口頭)	J. Nagao, A. Pillai, R. Kurose	Asia-Pacific Conference on Combustion (ASPACC2019), Fukuoka International Congress Center, Fukuoka, Japan	2019年7月	国際	
9	Numerical study on the effect of coal combustion on a pilot-scale turbulent coal combustion furnace (口頭)	Seongyool Ahn, Hiroaki Watanabe, Toshiaki Kitagawa	The 12th Asia-Pacific Conference on Combustion, Fukuoka, Japan	2019年7月	国内	
10	Validity of LES/flamelet approach for transcritical O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> combustion (口頭)	R. Kai, A. Kishimoto, K. Takenaka, R. Kurose	Asia-Pacific Conference on Combustion (ASPACC2019), Fukuoka International Congress Center, Fukuoka, Japan	2019年7月	国際	
11	Numerical investigation of Nox formation with a derived global reaction mechanism on a turbulent pulverized coal combustion furnace (口頭)	Seongyool Ahn, Kouki Maeda, Hiroaki Watanabe, Toshiaki Kitagawa	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019, San Francisco, USA	2019年7月	国際	
12	LES modeling and simulation of coal gasification on an O <sub>2</sub> -CO <sub>2</sub> gasifier in the oxy-fuel IGCC system (口頭)	Hiroaki Watanabe, Ryoichi Kurose, Kenji Tanno	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019, San Francisco, USA	2019年7月	国際	
13	ヒドラジン/NTO 燃焼の数値シミュレーションに対するFlamelet 法の検討 (口頭)	小西健斗, 甲斐玲央, 黒瀬良一	日本流体力学会 年会2019、電気通信大学	2019年9月	国内	
14	Direct Numerical Simulation on Atomization-Evaporation Process of Liquid Jet in an Oscillating Crossflow (口頭)	温健, 黒瀬良一	第47回 日本ガスタービン学会定期講演会、函館アリーナ	2019年9月	国内	
15	燃焼振動が燃料液滴の運動特性に及ぼす影響 (口頭)	長尾順, A. Pillai, 黒瀬良一	第47回 日本ガスタービン学会定期講演会、函館アリーナ	2019年9月	国内	
16	Development Status of Numerical Simulations for Rocket Engine Design Activities - Towards Precise Prediction of Combustion Instabilities - (口頭)	M. Adachi, A. Ogawara, D. Watanabe, H. Moriai, R. Kurose, T. Nishiie	70th International Astronautical Congress, Washington D.C., USA	2019年10月	国際	
17	石炭ガス化炉内のガス化反応・スラグ流シミュレーション、口頭	渡邊裕章, 梶谷史朗, 黒瀬良一	第56回石炭科学会議、名古屋市、愛知県	2019年10月	国内	
18	Numerical investigation of droplet wetting behavior on groove-decorated surface (口頭)	Z. Yuan, M. Matsumoto, R. Kurose	72nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Washington State Convention Center, Seattle, Washington, USA	2019年11月	国際	

19	Validation of non-adiabatic FGM approach for numerical simulation of flame propagation near the wall(口頭)	R. Kai, K. Takenaka, R. Kurose	International Gas Turbine Congress 2019 (IGTC2019), Toranomon Hills Forum, Tokyo, Japan	2019年11月	国際	
20	噴霧浮き上がり火炎のLarge Eddy Simulation	村上太一, Yong Hu, 黒瀬良一	第57回燃焼シンポジウム、札幌コンベンションセンター	2019年11月	国内	
21	非断熱FPV法と壁面液膜モデルを用いた高圧条件下での噴霧火炎壁面間熱伝達の直接数値計算	村田拓也, A. L. Pillai, 黒瀬良一	第57回燃焼シンポジウム、札幌コンベンションセンター	2019年11月	国内	
22	燃焼解析のFlamelet法に対するDeep Learning手法の適用	小西健斗, 寺内峻亮, 黒瀬良一	第33回数値流体力学シンポジウム、北海道大学	2019年11月	国内	
23	乱流と干渉するデトネーションの直接数値計算	乱流と干渉するデトネーションの直接数値計算	第33回数値流体力学シンポジウム、北海道大学	2019年11月	国内	
24	Effect of an obstacle on combustion instability in a spray back-step combustor(口頭)	J. Nagao, A. L. Pillai, R. Kurose	The second conference of the PRTEC series (PRTEC2019), Maui Island, Hawaii, USA	2019年12月	国際	
25	A Coupled Heat Transfer Modeling of Coal-Gasifier with Embedded Cooling Pipes (口頭)	Tomonori YAMADA, Naoto MITSUME, Shinobu YOSHIMURA	The Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM2019), Taipei, Taiwan	2019年12月	国際	

## サブ課題B: 気液二相流及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

サブ課題代表者: 鹿園直毅

## 1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際 の別	査読(有りの 場合○を 記入)
1	Multi-axis Decomposition of Density Functional Program for Strong Scaling up to 82, 944 Nodes on the K Computer: Compactly Folded 3D-FFT Communicators in the 6D Torus Network	Takahiro Yamasaki, Akiyoshi Kuroda, Toshihiro Kato, Jun Nara, Junichiro Koga, Tsuyoshi Uda, Kazuo Minami, Takahisa Ohno	Comp. Phys. Comm. 244, 264 (2019)	2019年4月	国際	○
2	Interface of Hydrated Perfluorosulfonic Acid Electrolyte and Platinum Catalyst: Construction of a Dissipative Particle Dynamics Simulation Model	Nobuo Tajima, Jun Nara, Takahiro Yamasaki, Taku Ozawa, Hiroya Nitta, Kosuke Ohata, and Takahisa Ohno	J. Electrochem. Soc. 166, B3156-B3162 (2019)	2019年4月	国際	○
3	Cm3+/Eu3+ Induced Structural, Mechanistic and Functional Implications for Calmodulin (2019 Hot Paper Award)	B. Drobot, M. Schmidt, Y. Mochizuki, T. Abe, K. Okuwaki, F. Brulfert, S. Falke, S. A. Samsonov, Y. Komeiji, C. Betzel, T. Stumpf, J. Raff, and S. Tsushima	Phys. Chem. Chem. Phys., 21 (2019) pp.21213-21222	2019年8月	国際	○
4	ABINIT-MP Openシリーズの最新の開発状況について	望月祐志、秋永宜伸、坂倉耕太、渡邊啓正、加藤幸一郎、渡辺尚貴、奥脇弘次、中野達也、福澤薫	J. Comp. Chem. Jpn., 18 (2019) pp.129-131	2019年10月	国内	○
5	転移学習と生成ネットワークの試行事例	伊藤雅仁、篠嶋友也、望月祐志、秋永宜伸、小杉範仁	J. Comp. Chem. Jpn., 18 (2019) pp.132-135	2019年10月	国内	○
6	深層学習とシミュレーションの連携事例(依頼記事)	伊藤雅仁、遠藤克浩、望月祐志、泰岡顕治	計算工学会誌、24(4) (2019) pp.3983-3987	2019年10月	国内	○
7	Topology optimization of electrolyte-anode interfaces of solid oxide fuel cells using the adjoint method	Junya Onishi, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa, Naoki Shikazono	J. Electrochem., Soc., 166 (13), F876-F888 (2019).	2019年10月	国際	○
8	Simulation of carbon black aggregate and evaluation of ionomer structure on carbon in catalyst layer of polymer electrolyte fuel cell	Gen Inoue, Tomohiro Ohnishi, Magnus So, Kayoung Park, Masumi Ono, Yoshifumi Tsuge	Journal of Power Sources, 439, 227060 10.1016/j.jpowsour.2019.227060	2019年11月	国際	○
9	Interaction between calcite and adsorptive peptide analyzed by fragment molecular orbital method	K. Kato, K. Fukuzawa, and Y. Mochizuki	Jpn. J. Appl. Phys., 58 (2019) 120906-1-4	2019年11月	国際	○
10	The effect of solvent and ionomer on agglomeration in fuel cell catalyst inks: Simulation by the Discrete Element Method	Magnus So, Tomohiro Ohnishi, Kayoung Park, Masumi Ono, Yoshifumi Tsuge, Gen Inoue	International Journal of Hydrogen Energy 44(54), 28984-28995 10.1016/j.ijhydene.2019.09.012	2019年11月	国際	○
11	Folding simulation of small proteins by dissipative particle dynamics (DPD) with non-empirical interaction parameters based on fragment molecular orbital calculations	K. Okuwaki, H. Doi, K. Fukuzawa, and Y. Mochizuki	Appl. Phys. Express, 13 (2020) 017002-1-4	2019年12月	国際	○
12	A discrete particle packing model for the formation of a catalyst layer in polymer electrolyte fuel cells	Magnus So, Kayoung Park, Tomohiro Ohnishi, Masumi Ono, Yoshifumi Tsuge, Gen Inoue	International Journal of Hydrogen Energy, 44(60), 32170-32183 10.1016/j.ijhydene.2019.10.005	2019年12月	国際	○
13	Stabilization Mechanism of Non-fibrillar Amyloid-β Oligomer Involved with Hydrophobic Core Obtained by Dissipative Particle Dynamics	R. Kawai, S. Chiba, K. Okuwaki, R. Kanada, H. Doi, M. Ono, Y. Mochizuki, and Y. Okuno	ACS Chemical Neuroscience, 11 (2020) pp.385-394	2020年1月	国際	○
14	A Particle Based Ionomer Attachment Model for a Fuel Cell Catalyst Layer	Magnus So, Kayoung Park, Yoshifumi Tsuge and Gen Inoue	Journal of The Electrochemical Society 10.1149/1945-7111/ab68d4, 167, 013544, 2020.01.	2020年1月	国際	○
15	FMO-MD simulations of (NH <sub>3</sub> ) <sub>32</sub> cluster: effect of electron correlation	M. Ninomiya, H. Doi, Y. Matsumoto, Y. Mochizuki, and Y. Komeiji	Bull. Chem. Soc. Jpn., 2020, Vol.93, No.4, 553-560	2020年2月	国際	○
16	Optimization of Electrode-Electrolyte Interface Structure for Solid Oxide Fuel Cell Cathode	An He, Junya Onishi, Naoki Shikazono	J. Power Sources, 449, 227565 (2020).	2020年2月	国際	○
17	Fragmentation at sp <sup>2</sup> carbon in fragment molecular orbital (FMO) method	Y. Akinaga, K. Kato, T. Nakano, K. Fukuzawa, and Y. Mochizuki	J. Comp. Chem., Vol.41 (2020) 1416-1420.	2020年3月	国際	○

18	Interface of Hydrated Perfluorosulfonic Acid Electrolyte with a Platinum Catalyst: Structural Analyses with Dissipative Particle Dynamics Simulations	Nobuo Tajima, Jun Nara, Taku Ozawa, Hiroya Nitta, Kosuke Ohata, and Takahisa Ohno	J. Electrochem. Soc. 167, 064513 (2020)	2020年4月	国際	○
19	カルサイト・ハイドロキシアパタイト結晶表面とペプチドのFMO相互作用解析	畑田峻、加藤幸一郎、奥脇弘次、福澤薫、望月祐志	J. Comp. Chem. Jpn. in Press (2020)	in press	国内	○
20	Design of a Self-degradable Ionizable Lipid-like Material for Delivering Messenger RNA based on "Hydrolysis accelerated by the intra-Particle Enrichment of Reactant (HyPER)"	H. Tanaka, T. Takahashi, M. Konishi, N. Takata, M. Gomi, D. Shirane, Y. Yamasaki, Y. Sakurai, K. Ueda, K. Higashi, K. Moribe, E. Shinsho, R. Nishida, K. Fukuzawa, E. Yonemochi, K. Okuwaki, Y. Mochizuki, Y. Nakai, K. Tange, H. Yoshioka, S. Tamagawa, and H. Akita	Adv. Func. Mater. in Press (2020)	in press	国際	○
21	Fragment molecular orbital based interaction analyses on COVID-19 main protease - inhibitor N3 complex (PDB ID:6LU7)	R. Hatada, K. Okuwaki, Y. Mochizuki, K. Fukuzawa, Y. Komeiji, Y. Okiyama, and S. Tanaka	ChemRxiv & J. Chem. Inform. Model., 2020, 60, 7, 3593-3602	2020年6月	国際	○

## 2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Large-Scale Simulation of Two-Phase Flow for Polymer Electrolyte Fuel Cells、口頭	高山 糧	The 20th International Conference on Fluid Flow Problems (FEF-2019)、米国・シカゴ市	2019年4月	国際	
2	可視化シミュレーション結果の深層学習による解析事例(依頼講演)	望月祐志	機械学習の工学問題適用に関する研究会、東京	2019年5月	国内	○
3	FMO計算におけるSP2炭素原子でのフラグメント分割(口頭)	秋永宜伸、中野達也、福澤薫、加藤幸一郎、望月祐志	2019理論化学討論会、札幌	2019年5月	国内	
4	FMO-DPD手法の開発と先導的応用(口頭)	奥脇弘次、望月祐志、土居英男、小沢拓	第24回計算工学講演会、大宮	2019年5月	国内	
5	2次元翼モデルの可視化CFD結果に関する転移学習を用いた解析(口頭)	伊藤雅仁、齊藤天菜、伊藤隆登、奥脇弘次、望月祐志、秋永宜伸、小杉範仁	第24回計算工学講演会、大宮	2019年6月	国内	
6	ペプチド対応のフラグメント分割ツールの開発(ポスター)	吉田杏平、加藤幸一郎、奥脇弘次、阿部鷹也、望月祐志、福澤薫	日本コンピュータ化学会2019年春季年会、東京	2019年6月	国内	
7	Scratchを経由する機械学習教材の開発の試み(ポスター)	満野仁美、奥脇弘次、伊藤雅仁、望月祐志	日本コンピュータ化学会2019年春季年会、東京	2019年6月	国内	
8	転移学習と生成ネットワークの試行事例(ポスター)	伊藤雅仁、篠嶋友也、奥脇弘次、望月祐志、秋永宜伸、小杉範仁	日本コンピュータ化学会2019年春季年会、東京	2019年6月	国内	
9	散逸動力学シミュレーションによるアミロイドβオリゴマーの自己組織化の検討(口頭)	河合良子、千葉峻太郎、金田亮、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、奥野恭史	日本コンピュータ化学会2019年春季年会、東京	2019年6月	国内	
10	ABINIT-MP Openシリーズの最新の開発状況について(口頭)	望月祐志、秋永宜伸、坂倉耕太、渡邊啓正、加藤幸一郎、渡辺尚貴、奥脇弘次、中野達也、福澤薫	日本コンピュータ化学会2019年春季年会、東京	2019年6月	国内	
11	FMO-DPDシミュレーションのための有効相互作用パラメータ算出の自動化フレームワーク(招待講演)	奥脇弘次、土居英男、望月祐志	日本コンピュータ化学会2019年春季年会、東京	2019年6月	国内	○
12	FMO-DPDシミュレーションの応用展開(口頭)	奥脇弘次、土屋裕大朗、新庄永治、土居英男、望月祐志、福澤薫、泰岡顕治	日本コンピュータ化学会2019年春季年会、東京	2019年6月	国内	
13	FMO計算を用いた天然ゴム中タンパク質とイソブレン鎖ω末端モデルとの相互作用解析(口頭)	阿部鷹也、奥脇弘次、福澤薫、望月祐志、佐藤弘一	日本コンピュータ化学会2019年春季年会、東京	2019年6月	国内	
14	固体酸化物形燃料電池の電解質/燃料極におけるメソスケール構造のトポロジー最適化(口頭)	大西順也、鹿園直毅	第24回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文集、東京、2019年6月20-21日、C134 (2019).	2019年6月	国内	
15	Theoretical study on surface structures of S/Ni(110)(口頭)	Jun Nara, Keisuke Sagisaka, and Daisuke Fujita	21st International Vacuum Conference, Malmo, Sweden	2019年7月	国際	
16	ナノメゾの非経験的マルチスケールシミュレーションによる電解質膜の解析 & 2次元翼の可視化CFD結果の深層学習による解析(招待講演)	望月祐志	自動車技術会、東京	2019年7月	国内	○
17	燃料電池内二相流シミュレーションと巨視的モデル化(口頭)	田中 翔一	混相流学会若手研究者夏季セミナー、福岡市	2019年8月	国内	○
18	Topology Optimization of Electrolyte-Anode Interfaces in Solid Oxide Fuel Cells(口頭)	Onishi, J. and Shikazono, N.	The 16th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC-XVI), ECS Transactions, 91 (1), pp.2127-2135 (2019)., Kyoto, Japan	2019年9月	国際	
19	Numerical Optimization of the Solid Oxide Fuel Cell Electrode-Electrolyte Interface Structure with Adjoint Method(口頭)	He, A., Onishi, J. and Shikazono, N.	The 16th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC-XVI), ECS Transactions, 91 (1), pp.2045-2054 (2019)., Kyoto, Japan	2019年9月	国際	
20	FMO-DPDの連携による脂質二重膜とコレステロール、ペプチドモデルのシミュレーション(口頭)	奥脇弘次、新庄永治、西田瑠花、土屋祐太郎、土居英男、望月祐志、福澤薫、米持悦生	応用物理学会秋期年会2019、札幌	2019年9月	国内	
21	固体表面とペプチドの相互作用に関するFMO-機械学習の連携解析の試み(口頭)	畑田峻、加藤幸一郎、福澤薫、奥脇弘次、望月祐志	応用物理学会秋期年会2019、札幌	2019年9月	国内	

22	固体とタンパクの出会いを計算する(招待講演)	加藤幸一郎、畑田峻、奥脇弘次、福澤薫、望月祐志	応用物理学会秋期年会2019、札幌	2019年9月	国内	○
23	リチウムイオン電池・燃料電池の数値解析とモデリング(化学工学的アプローチ)(口頭)	井上元	電気化学会関東支部 第55回学際領域セミナー 電気化学デバイスの実用化に向けた学際的アプローチ、東京	2019年9月	国内	○
24	金属有機構造体(MOF)へのゲスト分子ドーピングに関する理論的研究(口頭)	森田 巧、高 相圭、山崎 隆浩、奈良純、田中 喜典、大野 隆央、木下 健太郎	第80回応用物理学会 秋季学術講演会、札幌	2019年9月	国内	
25	FMOとDPDの連携によるマルチスケールシミュレーション(FMO-DPD)法の開発と応用(依頼講演)	望月祐志、奥脇弘次、土居英男、伊藤雅仁、小沢拓、福澤薫	第68回高分子討論会、福井	2019年9月	国内	○
26	PFSA/Pt 界面系の構造に関する散逸粒子動力学シミュレーション(ポスター)	田島 暢夫、奈良 純、小沢 拓、新田 浩也、大昌 広介、大野 隆央	第68回高分子討論会、福井	2019年9月	国内	
27	Macroscopic Modeling of Liquid Water in Channel and GDL Based on Detailed Two-Phase CFD(口頭)	田中 翔一	236th ECS Meeting、米国・アトランタ市	2019年10月	国際	
28	Integrated simulation approach to understand the relationship between fabrication process and cell performance in polymer electrolyte fuel cells(口頭)	Gen Inoue、Tomohiro Ohnishi、Masumi Ono、Kayoung Park、Magnus So、Yoshifumi Tsuge	The 5th International Symposium on IMPRESS、Kanazawa、Japan	2019年10月	国際	○
29	Simulation of a fuel cell catalyst layer using discrete element method(口頭)	Magnus So、Tomohiro Ohnishi、Kayoung Park、Masumi Ono、Yoshifumi Tsuge、Gen Inoue	The 5th International Symposium on IMPRESS、Kanazawa、Japan	2019年10月	国際	
30	Optimization of Solid Oxide Fuel Cell Cathode Microstructure with Adjoint Method(口頭)	An He、Junya Onishi、Naoki Shikazono	The Fifth International Symposium on Innovative Materials and Processes in Energy Systems (IMPRES2019)、C113、Kanazawa、Japan	2019年10月	国際	
31	Development status of ABINIT-MP program in 2019(Oral&Poster)	Y. Mochizuki、K. Sakakura、H. Watanabe、K. Kato、Y. Akinaga、K. Fukuzawa、K. Okuwaki、T. Nakano	CBI conference 2019、Tokyo	2019年10月	国内	
32	Interaction Analyses between Calcite/Apatite and Peptides by Fragment Molecular Orbital Method (Oral&Poster)	R. Hatada、K. Kato、K. Okuwaki、K. Fukuzawa、Y. Mochizuki	CBI conference 2019、Tokyo	2019年10月	国内	
33	High-speed geometry optimization for protein active site with the fragment molecular orbital method (Poster)	K. Okuwaki、N. Watanabe、T. Nakano、Y. Okiyama、Y. Mochizuki、C. Watanabe、T. Homma、K. Fukuzawa	CBI conference 2019、Tokyo	2019年10月	国内	
34	レスベラトロールと受容体のFMO相互作用解析-その1(ポスター)	秋澤和輝、阿部鷹也、奥脇弘次、福澤薫、望月祐志	日本コンピュータ化学会2019年秋季年会、広島	2019年10月	国内	
35	Numerical Modeling of Solid Oxide Fuel Cell Electrodes(口頭)	Shikazono、N.、Yan、Z. He、A.、Jiao、Z. and Hara、S.	30th Interational Symposium on Transport Phenomena、Halong、Vietnam	2019年11月	国際	○
36	FMO-DPD 法による脂質二重膜形成におけるコレステロールの影響の検討(ポスター)	西田瑠花、奥脇弘次、新庄永治、望月祐志、古石誉之、福澤薫、米持悦生	J-OCTAユーザー会議、東京	2019年11月	国内	
37	第一原理電子状態計算手法による材料研究	奈良純	JSOL CAEフォーラム in Tokyo 2019、品川	2019年11月	国内	○
38	SiC酸化プロセスの第一原理分子動力学解析(口頭)	大野隆央	応用物理学会 シリコン材料・デバイス研究会(SDM)、東京	2019年11月	国内	○
39	Migration Energies of 5-7 Edge Dislocations in GaN(口頭)	Jesse Chiam Anderson、Masato Oda、Jun Nara、and Tsuyoshi Miyazaki	The 9th Asia-Pacific Workshop on Widegao Semiconductors、Okinawa、Japan	2019年11月	国際	
40	高分子電解質膜材料設計に向けた非経験的パラメータに基づく粗視化シミュレーション解析(口頭)	加藤幸一郎、奥脇弘次、土居英男、米田雅一、望月祐志	第60回電池討論会、京都	2019年11月	国内	
41	2次元翼モデルの可視化CFD結果の自動ラベル付け(口頭)	伊藤雅仁、奥脇弘次、望月祐志、小杉範仁	第33回数値流体力学シンポジウム、札幌	2019年11月	国内	
42	FMOとDPDを連携したマルチスケールシミュレーション手法(FMO-DPD)の開発と先導的応用(ポスター)	奥脇弘次、土居英男、望月祐志、小沢拓、泰岡顕治、福澤薫	第33回分子シミュレーション討論会、名古屋	2019年12月	国内	

43	構造揺らぎを考慮したリガンド-タンパク質のFMO相互作用解析(ポスター)	藤田駿明、畑田峻、奥脇弘次、福澤薫、望月祐志、田中成典、古明地勇人	第47回構造活性相関シンポジウム、熊本	2019年12月	国内	
44	タイヤゴム素材に関する計算化学的研究の事例紹介#2(口頭)	阿部鷹也、奥脇弘次、土居英男、望月祐志、福澤薫、佐藤弘一	高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会、東京	2019年12月	国内	
45	Multiscale and Multiphysics Simulations of Polymer Electrolyte Fuel Cell Towards Exascale Computing (Invited Oral)	S. Yoshimura, N. Shikazono, M. Yoneda, G. Inoue, Y. Mochizuki, T. Ohno, and J. Ohnishi	APCOM 2019, Taiwan	2019年12月	国外	
46	Multiphysics Simulations of Polymer Electrolyte Fuel Cell Towards Exascale Computing(口頭)	Yoshimura, S., Shikazono, N., Yoneda, M., Inoue, G., Mochizuki, Y., Ohno, T. and Ohnishi, J.	Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM), Taipei Taiwan	2019年12月	国際	
47	可視化CFD結果の自動ラベル付(口頭)	伊藤雅仁、奥脇弘次、望月祐志	機械学習の工学問題適用に関する研究会、東京	2020年1月	国内	
48	2次元翼モデルの可視化CFD結果に関する深層学習と位相的データ解析(口頭)	伊藤雅仁、奥脇弘次、望月祐志、小杉範仁	2019(令和元)年度 宇宙科学情報解析シンポジウム、相模原	2020年2月	国内	
49	重点課題(6)における材料・分子系のシミュレーション事例、ならびにデータ科学との連携事例(依頼講演)	望月祐志	第9回材料系ワークショップ、東京	2020年2月	国内	○
50	タンパク質のアミノ酸残基間の相互作用エネルギーに関する機械学習(口頭発表・注目講演選定)	畑田峻、八幡研一郎、奥脇弘次、田中成典、古明地勇人、福澤薫、望月祐志	応用物理学会春期年会2020、東京	2020年3月	国内	
51	FMO-DPDの連携による脂質二重膜、タンパク質の構造解析システムの整備と応用(口頭)	奥脇弘次、新庄永治、西田瑠花、土屋祐太郎、土居英男、望月祐志、福澤薫、米持悦生	応用物理学会春期年会2020、東京	2020年3月	国内	
52	小角X線散乱と分子シミュレーションを融合したDOPC/Cholesterol二重膜の物性解析(口頭)	新庄永治、奥脇弘次、望月祐志、古石誉之、福澤薫、米持悦生	日本薬学会、京都	2020年3月	国内	

## 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

サブ課題代表者: 飯田 明由

## 1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際 の別	査読(有りの 場合○を 記入)
1	A Nodal-based Extrinsic Cohesive/Contact Model for Interfacial Debonding Analyses in Composite Structures	Shunhua CHEN, Naoto MITSUME, Wei GAO, Tomonori YAMADA, Mengyan ZANG, Shinobu YOSHIMURA	Computers and Structures, 215, pp.80-97	2019年4月	国際	○
2	Parallel Analysis System for Free-Surface Flow Using MPS Method with Explicitly Represented Polygon Wall Boundary Model	Naoto MITSUME, Tomonori YAMADA, Shinobu YOSHIMURA	Computational Particle Mechanics, 7, pp.279-290	2019年7月	国際	○
3	Analysis of jet oscillations with acoustic radiation in the recorder by direct aeroacoustic simulations	K. Onogi, H. Yokoyama, A. Iida	The Journal of the Acoustical Society of America, 146(2) 1427-1437	2019年8月	国際	○
4	ケーシングスリットがファン騒音に及ぼす影響についての圧縮性流れ解析による分析	藁和克武, 横山博史, 板垣来翼, 飯田明由	ターボ機械, 47(4) 219-226	2019年10月	国内	
5	Development of Two Intrinsic Cohesive Zone Models for Progressive Interfacial Cracking of Laminated Composites with Matching and Non-matching Cohesive Elements	Shunhua CHEN, Naoto MITSUME, Tinh Quoc BUI, Wei GAO, Tomonori YAMADA, Mengyan ZANG, Shinobu YOSHIMURA	Composite Structures, 229, 111406	2019年12月	国際	○

## 2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Flow-induced Vibration and Fatigue Damage of NREL5MW Blade of Offshore Wind Farm Using K-Computer (口頭)	Shinobu YOSHIMURA, Tomonori YAMADA, Shunhua CHEN, Naoto MITSUME, Akiyoshi IIDA, Chisachi KATO, Yoshinobu YAMADE, Shori ORIMO, Yasunori YUSA	20th International Conference on Fluid Flow Problems (FEF-2019), Chicago, USA	2019年4月	国際	
2	Structural and Fatigue Modeling of a 5MW Wind Turbine Blade Under Different Wind Loads (口頭)	Shunhua CHEN, Shinobu YOSHIMURA, Kaworu YODO, Naoto MITSUME, Yasunori YUSA, Tomonori YAMADA, Chisachi KATO, Shori ORIMO, Yoshinobu YAMADE, Akiyoshi IIDA	15th U.S. National Congress on Computational Mechanics (USNCCM15), Austin, Texas, USA	2019年7月	国際	
3	Fatigue Life Estimation of a 5MW Wind Turbine Blade under Wind Loads (口頭)	陳順華、吉村忍、淀薫、三目直登、遊佐泰紀、山田知典	第32回計算力学講演会(CMD2019)講演論文集, Web, 東洋大学川越キャンパス(埼玉)	2019年9月	国内	
4	タンデム配置された風車の空力特性(口頭)	煎谷晴輝、山出吉伸、飯田明由、加藤千幸	日本機械学会第97期流体工学部門講演会、豊橋市、愛知県	2019年11月	国内	
5	洋上風力タービン周辺の流れと音場の数値解析(口頭)	飯田明由、吉永司、加藤千幸	第33回数値流体力学シンポジウムプログラム(流体力学学会)、北海道大学	2019年11月	国内	
6	Development of a Computational System for Structural and Fatigue Analysis of a 5MW Wind Turbine Blade Under Different Wind Loads (口頭)	Shunhua CHEN, Shinobu YOSHIMURA, Kaworu YODO, Naoto MITSUME, Yasunori YUSA, Tomonori YAMADA, Chisachi KATO, Shori ORIMO, Yoshinobu YAMADE, Akiyoshi IIDA	The Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM2019), Taipei, Taiwan	2019年12月	国際	

## サブ課題D:核融合炉の炉心設計

サブ課題代表者:井戸村泰宏

## 1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際 の別	査読(有りの 場合○を 記入)
1	Implementation and performance evaluation of a communication-avoiding GMRES method for stencil-based code on GPU cluster	Kazuya Matsumoto, Yasuhiro Idomura, Takuya Ina, Akie Mayumi, Susumu Yamada	Journal of Supercomputing, <a href="https://doi.org/10.1007/s11227-019-02983-7">https://doi.org/10.1007/s11227-019-02983-7</a> (2019)	2019年9月	国際	○
2	核融合プラズマのエクサスケールシミュレーション	井戸村泰宏、渡邊智彦、藤堂泰	シミュレーション, Vol.38, pp9 (2019)	2019年7月	国内	
3	Machine-learning assisted steady-state profile predictions using global optimization techniques	M. Honda and E. Narita	Physics of Plasmas, Vol. 26, pp. 102307 (2019)	2019年10月	国際	○
4	Isotope and plasma size scaling in ion temperature gradient driven turbulence	Y. Idomura	Physics of Plasmas, Vol. 26, pp.120703 (2019)	2019年12月	国際	○
5	GPU Acceleration of Communication Avoiding Chebyshev Basis Conjugate Gradient Solver for Multiphase CFD Simulations	Y. Ali, N. Onodera, Y. Idomura, T. Ina, T. Imamura	Proceedings of 10th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA'19), Denver, CO USA, DOI: 10.1109/ScalA49573.2019.00006 (2019)	2020年1月	国際	○
6	Performance portable implementation of a kinetic plasma simulation mini-app	Y. Asahi, G. Latu, V. Grandgirard, J. Bigot	Proceedings of 6th Workshop on Accelerator Programming Using Directives (WACCPD), Denver, CO, USA (2019)	2019年11月	国際	○

## 2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Status of US-Japan collaboration on exascale fusion simulations between the ECP and the Post-K project、口頭	C.S. Chang, Y. Idomura, T. Moritaka, Y. Todo, T.-H. Watanabe, and J. Wells, S. Klasky, J. Choi	6th DOE-MEXT Workshop, Chicago, USA	2019年5月	国際	
2	Evaluation of entropy transfer rate in interactions of the zonal flows and turbulence、口頭	T.-H. Watanabe	APTWG mini workshop, Wuhan, China	2019年6月	国際	
3	Effects of kinetic ions on the electron temperature gradient turbulence、口頭	T.-H. Watanabe	14th Japan-Korea Workshop on Theory and Simulation of Magnetic Fusion Plasmas, Fukuoka, Japan	2019年6月	国内	
4	Gyrokinetic simulation of fusion plasma、口頭	Y. Idomura	9th East-Asia School and Workshop on Laboratory, Space, and Astrophysical Plasmas, Nagoya, Japan	2019年7月	国際	○
5	Dependency of turbulent transport on various local parameters in high temperature tokamak plasmas by using the analysis of electromagnetic micro-instability、ポスター	K. Nishioka	9th East-Asia School and Workshop on Laboratory, Space, and Astrophysical Plasmas, Nagoya, Japan	2019年7月	国内	
6	電磁的微視的不安定性のローカルパラメータ依存性並びにそれを 用いた加熱応答特性解析、ポスター	西岡賢二	第25回NEXT研究会、京都大学	2019年8月	国内	
7	Effects of kinetic ions on electron temperature gradient turbulent transport、口頭	T.-H. Watanabe, S. Kusaka, and S. Maeyama	25th Numerical Experiment of Tokamak (NEXT) Meeting, Kyoto, Japan	2019年8月	国内	
8	核融合プラズマのジャイロ運動論シミュレーション、口頭	井戸村泰宏	STEMシミュレーション研究会2019、広島大学東千田キャンパス	2019年9月	国内	○
9	Performance portability of large scale Krylov solvers with OpenACC and CUDA、口頭	Yasuhiro Idomura, Yussuf Ali, Naoyuki Onodera, Yuta Hasegawa	OpenACC Annual Meeting 2019, R-CCS, Japan	2019年9月	国際	○
10	Influence of the normalised ion gyroradius on collisional transport of impurities in GT5D simulations、口頭	K. Obrejan, Y. Idomura, M. Honda	プラズマシミュレータシンポジウム2019、核融合科学研究所	2019年9月	国内	
11	ITG 乱流における水素同位体効果の full-f ジャイロ運動論シミュレーション、ポスター	Y. Idomura	プラズマシミュレータシンポジウム2019、核融合科学研究所	2019年9月	国内	
12	射影演算法によるプラズマ乱流マルチスケール相互作用の抽出、口頭	前山伸也	プラズマシミュレータシンポジウム2019、核融合科学研究所	2019年9月	国内	
13	電子温度勾配乱流の飽和状態とイオンの運動論的効果、ポスター	渡邊智彦	プラズマシミュレータシンポジウム2019、核融合科学研究所	2019年9月	国内	
14	Moment extract method and its application to a semi-Lagrangian scheme for drift kinetic equations、口頭	T.-H. Watanabe	International Conference on Numerical Simulation of Plasmas 2019, Santa Fe, USA	2019年9月	国際	○
15	森-Zwanzigの射影演算法を利用した小スケールから大スケールへの寄与の抽出とモデル化、口頭	前山伸也, 渡邊智彦	日本物理学会2019年秋季大会、岐阜大学	2019年9月	国内	
16	電磁的微視的不安定性解析により得られる高温トカマクプラズマにおける輸送の多次元マップ、口頭	西岡賢二, 前山伸也, 相羽信行, 本多充, 仲田資季, 渡邊智彦	日本物理学会2019年秋季大会、岐阜大学	2019年9月	国内	
17	Magnetic Reconnection during Fast Ion Driven Alfvénic Activity、口頭	A. Bierwage, K. Shinohara, Y. Todo, N. Aiba and M. Yagi	16th IAEA Technical Meeting on Energetic Particles in Magnetic Confinement Systems - Theory of Plasma Instabilities (EPPi), Shizuoka, Japan	2019年9月	国際	
18	Influence of the normalised gyroradius on neoclassical transport in global gyrokinetic simulations using the code GT5D、ポスター	K. Obrejan, Y. Idomura, M. Honda	18th European Fusion Theory Conference, Ghent, Belgium	2019年10月	国際	
19	Status of GT5D、口頭	Y. Idomura	Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, Kobe, Japan	2019年10月	国際	

20	GPU optimization of matrix solvers、口頭	Y. Ali, N. Onodera, Y. Idomura, T. Ina, T. Imamura	Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, Kobe, Japan	2019年10月	国際	
21	Computational nuclear engineering at JAEA and Post-K project、口頭	Y. Idomura	1st CEA-JAEA collaboration workshop on computational nuclear engineering, Kashiwa, Japan	2019年10月	国際	
22	Current status of GKV code、口頭	S. Maeyama	Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, Kobe, Japan	2019年10月	国内	
23	イオン温度勾配駆動乱流における水素同位体効果の解析、口頭	井戸村泰宏	第36回プラズマ・核融合学会年会、中部大学	2019年11月	国内	
24	大域的ジャイロ運動論的シミュレーションにおける衝突輸送に対する規格化ジャイロ半径の影響、口頭	K. Obrejan, Y. Idomura, M. Honda	第36回プラズマ・核融合学会年会、中部大学	2019年11月	国内	
25	電子・イオンスケール乱流相互作用の抽出とモデル化、ポスター	前山伸也, 渡邊智彦	第36回プラズマ・核融合学会年会、中部大学	2019年11月	国内	
26	トロイダル電子温度勾配乱流への運動論的イオンの効果、ポスター	渡邊智彦, 前山伸也	第36回プラズマ・核融合学会年会、中部大学	2019年12月	国内	
27	Methodology for extracting and modeling electron-scale effects in multi-scale plasma turbulence、ポスター	S. Maeyama, T.-H. Watanabe	3rd Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPs-DPP2019), Hefei, China	2019年11月	国際	
28	Communication-avoiding sparse matrix solvers for extreme scale nuclear CFD simulations、口頭	Y. Idomura	Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM2019), Taipei, Taiwan	2019年12月	国際	
29	プロジェクトHBGKRの成果報告、口頭	前山伸也	第9回IFERC-CSC研究会	2020年1月	国内	
30	プロジェクトLGKSASCの成果報告、口頭	渡邊智彦, 前山伸也	第9回IFERC-CSC研究会	2020年1月	国内	
31	プロジェクトMTSISOの成果報告、口頭	西岡賢二, 前山伸也	第9回IFERC-CSC研究会	2020年1月	国内	
32	Interactive In-situ Steering and Visualization of GPU-accelerated simulations using Particle-based Volume Rendering、ポスター	T. Kawamura, N. Onodera, Y. Idomura	International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2020), Fukuoka, Japan	2020年1月	国際	
33	Effects of kinetic ions on electron temperature gradient turbulent transport、口頭	T.-H. Watanabe	Max Planck Princeton Center Workshop 2020	2020年1月	国際	
34	Optimization of Fusion Plasma Turbulence Code GT5D on FUGAKU and SUMMIT、ポスター	Y. Idomura, Y. Ali, T. Ina, T. Imamura	2nd R-CCS international symposium, Kobe, Japan	2020年2月	国際	
35	タンゲステン不純物の大域的古典輸送解析、口頭	井戸村泰宏, K. Obrejan, 本多充	日本物理学会第75回年次大会、名古屋大学	2020年3月	国内	

## 全体推進

サブ課題代表者:吉村 忍

## 1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際の別	査読(有りの場合○を記入)
1	Star Walls—Aesthetic Pentagon-shaped Stereo Tiling Using Pen-ta-graphene Carbon	K. Hagita, Y. Kawazoe, M. Ogino	AIP Advances, Vol.9, 035001 (6 pages)	2019年3月	国際	○
2	分離反復型連成解法の開発と燃焼シミュレーションへの適用	吉村 忍、山田知典	特集 マルチフィジクスシミュレーションの進展, 日本ガスタービン学会誌, Vol.47, No.6, pp.418-423	2019年11月	国内	
3	Feasibility Study of Full-scale Elastic-plastic Seismic Response Analysis of a Nuclear Power Plant	T. Miyamura, S. Yoshimura, T. Yamada	Bulletin of the JSME, Mechanical Engineering Letters, (Vol. 6 (2019), No. 6 pp. 19-00281-19-00281).	2019年12月	国際	○

## 2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際の別	招待講演(○を記入)
1	Multiscale and Multiphysics Simulations of Polymer Electrolyte Fuel Cell Towards Exascale Computing (口頭)	Shinobu YOSHIMURA, Naoki SHIKAZONO, Masakazu YONEDA, Gen INOUE, Yuji MOCHIZUKI, Takahisa OHNO, Junya ONISHI	The Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM2019), Taipei, Taiwan	2019年12月	国際	

ポスト「京」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」  
実施計画

令和2年5月29日  
国立大学法人東京大学  
吉村忍

## 更新記録

平成 28 年 2 月 29 日版：サブ課題 E のサブ課題 B への統合に伴う更新

平成 29 年 5 月 29 日版：サブ課題 C の体制変更に伴う更新

平成 29 年 12 月 22 日版：中間評価に伴う更新

平成 30 年 5 月 31 日版：平成 29 年 12 月 22 日版を平成 29 年度成果報告書別添として提出

令和元年 5 月 31 日版：平成 29 年 12 月 22 日版を平成 30 年度成果報告書別添として提出

令和 2 年 5 月 29 日版：平成 29 年 12 月 22 日版を平成 31 年度（令和 1 年度）成果報告書別添として提出

## 目次

1. 実施概要 .....	1
(1) 目的・意義 .....	1
(2) 研究開発内容 .....	2
(3) 目標・期待される成果 .....	3
(4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ .....	4
(5) 年次計画 .....	5
(6) 実施体制 .....	10
(7) 必要計算資源 .....	13
2. 研究開発内容詳細 .....	16
<b>2-1. 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> .....	16
(1) 目的・意義 .....	16
(2) 実施内容 .....	16
(3) 目標・期待される成果 .....	17
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....	19
(5) 実施体制 .....	19
(6) 必要計算資源 .....	20
<b>2-2. 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</b> .....	20
(1) 目的・意義 .....	20
(2) 実施内容 .....	21
(3) 目標・期待される成果 .....	24
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....	25
(5) 実施体制 .....	25
(6) 必要計算資源 .....	26
<b>2-3. 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</b> .....	27
(1) 目的・意義 .....	27
(2) 実施内容 .....	27
(3) 目標・期待される成果 .....	30
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....	31
(5) 実施体制 .....	31
(6) 必要計算資源 .....	32
(7) 平成28年度までの成果と、平成29年度からの体制変更について .....	32
<b>2-4. サブ課題 D. 核融合炉の炉心設計</b> .....	33
(1) 目的・意義 .....	33
(2) 実施内容 .....	34

(3) 目標・期待される成果 .....	37
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと .....	39
(5) 実施体制 .....	39
(6) 必要計算資源 .....	40
2-5. 全体推進 .....	41
(1) コデザインについて .....	41
(2) マルチフィジクス連成と V&V .....	41
(3) マルチスケール連携と V&V .....	42
(4) 大規模行列計算、データ可視化に関する連携 .....	42
(5) アプリケーションの普及活動と V&V .....	42
(6) 必要計算資源 .....	44
(7) 人材育成 .....	44
(8) アウトプット成果 .....	45
3. 採択時の留意事項への対応状況 .....	46
4. 中間評価における指摘事項への対応状況 .....	49

## 1. 実施概要

革新的クリーンエネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象を詳細に解明し、定量的に予測することができる、ポスト「京」を最大限に活用したマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術を研究開発し、これを活用して、超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。同システムの実用化は我が国が抱える最重要課題の一つであり、すでに国策として数々の関連事業やハードウェア開発主体のプロジェクトが実施されている他、民間においても低炭素社会実現等へ向けた様々な努力が行われている。エネルギー資源小国である我が国においては、特定のエネルギー源に特化した需給計画は立てにくく、多様なエネルギー源のそれぞれの特徴を十分に勘案した上でその可能性をできるだけ大きく引き出す努力が必要である。また、従来はその手段として実験や実証試験と称する実規模に近いハード開発が先行するケースが多かった。しかし、革新的クリーンエネルギーシステムのように、中核となる物理現象が多岐にわたることと大変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頻繁に起こり得る。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であった。

一方、詳細かつ定量的に実現象を把握するもう一つの方法としてシミュレーションへの期待も大きかったが、計算機性能の限界により短期間で、実機レベルの大規模かつ詳細な解析を行うことは不可能だった。これに対して、本課題では、ポスト「京」のエクサスケール級の計算機性能を駆使し、革新的クリーンエネルギーシステムの実機レベルの複雑物理現象の大規模超精密解析を短時間で繰り返し行うことを実現し、実機条件における設計パラメータや稼働条件などの最適解を効率的に探索し、新技術開発実現の抜本的スピードアップに資する。

なお、後述するように、本重点課題においては、革新的クリーンエネルギーシステムとして、石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電、磁気閉じ込め核融合炉、の4システムを対象として取り上げる。これらはプロジェクト出口であるエネルギー源としては、それぞれに独立したものであるが、その中核をなす物理現象（構造、流体、熱、電磁気、材料劣化等）や克服すべき計算科学的課題（ベクトル・マトリックス演算、マルチフィジクス性、マルチスケール性、パラメトリック計算、最適解探索、コデザイン、実機レベルのV&Vなど）に、多くの共通点があり、既存の国家プロジェクト等の中ではそうした本質的課題に対する計算科学的取り組みがほとんどなされていないか、あるいは不十分であった。このため、出口（エネルギー源）の多様性、個別性に十分に配慮しながらも、アプリケーション研究開発レベルにおいて、サブ課題間の連携を十分にとることにより、各サブ課題を単独で遂行することに比べて、大きな相乗効果を生むように本重点課題全体の推進を図る。また、同様の観点から、重点課題⑧とは共通する主要アプリケーションも多いことから、アプリケーション研究開発レベルにおいて、重点課題⑥、⑧でも十分な連携体制をとることとした。

### (1) 目的・意義

エネルギー資源小国である我が国にとって、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ある。エネルギー基本計画の中で、電源構成については、あらゆる面（安定供給、コスト、環境負荷、安全性）で優れるエネル

ギー源はないとの前提のもとに、エネルギー源ごとの特性を踏まえ、現実的かつバランスの取れた需給構造を構築する方針が打ち出されている。このような我が国を取り巻く状況を踏まえ、本重点課題では、超高効率・低環境負荷を実現する革新的クリーンエネルギーシステムの中核をなす複雑な物理現象の詳細解明と定量予測を、ポスト「京」を駆使した超高精度解析（第一原理的解析を中核とするマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション）によって実現し、革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を大幅に加速する。

なお、革新的クリーンエネルギーシステムに関しては、すでに国策として数々の関連事業やハードウェア開発主体のプロジェクトが実施されている他、民間においても低炭素社会実現等へ向けた様々な努力が行われている。従来は新しいエネルギーシステムを実現化する方法として実験や実証試験と称する実規模に近いハード開発が先行するケースが多かった。しかし、革新的クリーンエネルギーシステムのように、中核となる物理現象が多岐にわたることと大変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頻繁に起こり得る。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であった。

そこで、本課題では、ポスト「京」のエクサスケール級の計算機性能を駆使し、革新的クリーンエネルギーシステムの実機レベルの複雑物理現象の大規模超精密解析を短時間で繰り返し行うことを実現し、実機条件における設計パラメータや稼働条件などの最適解を効率的に探索できるようにして、新技術開発実現の抜本的スピードアップに資する。

## （２）研究開発内容

本研究開発では、革新的クリーンエネルギーシステムを対象とするが、具体的なエネルギーシステムとしては、喫緊の課題はもとより中長期的な視点も加味して、我が国の国策と実情に合致したエネルギー源であること（ニーズ）とポスト「京」を最大限に活用する最先端計算科学シミュレーションにより課題を克服し多大の効果が期待できること（シーズ）の両面を考慮することに主眼をおき、エネルギーシステムを選定し、その実現を最も効率的に行えるようなサブ課題実施体制を構築した。また、適用するアプリケーションソフトウェアについては、スパコン「京」等において実績のあるソフトウェアシーズの中から、ポスト「京」時代の主要アプリケーション（革新的クリーンエネルギーシステムの実用化に必須）として選定し、重点的に研究開発し、戦力化する。

以下に本重点課題を構成するサブ課題の分類・具体名とその目的を記す。

【火力】⑥-A：高圧燃焼・ガス化を伴うエネルギー変換システム

（実機石炭ガス化炉・超臨界圧CO<sub>2</sub>タービンを対象とする、世界初の炉構造・反応〔燃焼〕・冷却のマルチスケール・マルチフィジクスを考慮した炉全系高精度シミュレーションシステムを開発。）

【水素】⑥-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

（固体高分子形燃料電池PEFCスタックの高出力密度化・低コスト化（出力密度4kW/L以上、Pt使用量0.1g/kW以下）に貢献するセル・電極設計のためのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術を開発。固体酸化物形燃料電池SOFC電極の高耐久性実現（15年以上に相当するSOFC

耐久性評価)に貢献できる電極3次元シミュレーション技術を開発。)

【自然】⑥-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

(洋上ウィンドファームの後流や大気境界層の影響を考慮した発電性能予測および流体構造連成振動解析に基づく風車の信頼性評価を高精度に行えるマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムの開発。)

【核融合】⑥-D: 核融合炉の炉心設計

(大型実験プロジェクトと連携した実証研究によって多種イオン系モデルを確立。エクサスケール計算の要素技術を統合し、世界最先端の計算精度と計算性能をもつ国産核燃焼プラズマ解析コードを開発。)

【太陽光 その他】⑥-E: 膜・界面のナノレベルからの設計 (H26、H27 年度で終了。H28-31 年度はサブ課題 B と全体推進に再編)

(マルチスケールシミュレーションの統合基盤に基づくクリーンエネルギー用革新的機能性膜の設計)

なお、本重点課題で取り上げた、上記の4システムはプロジェクト出口であるエネルギー源としては、それぞれに独立したものであるが、その中核をなす物理現象(構造、流体、熱、電磁気、材料劣化等)や克服すべき計算科学的課題(ベクトル・マトリックス演算、マルチフィジクス性、マルチスケール性、パラメトリック計算、最適解探索、コデザイン、実機レベルのV&Vなど)に、多くの共通点があり、既存の国家プロジェクト等の中ではそうした本質的課題に対する計算科学的取り組みがほとんどなされていないか、あるいは不十分であった。このため、出口(エネルギー源)の多様性、個別性に十分に配慮しながらも、アプリケーション研究開発レベルにおいて、サブ課題間の連携を十分にとることにより、各サブ課題を単独で遂行することに比べて、大きな相乗効果を生むように重点課題全体の推進を図る。具体的には、「全体推進」という横串のサブ課題間の連携の体制を構築し、4サブ課題と「全体推進」が連動して、重点課題⑥全体の研究開発を進めることとする。また、同様の観点から、重点課題⑧とは共通する主要アプリケーションも多いことから、アプリケーション研究開発レベルにおいて、重点課題⑧とも十分な連携体制をとることとした。

なお、開発を効果的に推進する観点から、目標を設定し、産業界のニーズにも応じた研究開発を推進することとする。目標としては基本機能の開発、設計支援環境の構築、構築したシステムの例証を行う。サブ課題ごとの詳細および「全体推進」の内容については「2. 研究開発内容詳細」で述べる。

### (3) 目標・期待される成果

超高効率・低環境負荷な革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を、ポスト「京」を最大限活用する最先端計算科学シミュレーション技術を駆使することによって抜本的に加速する。

【アウトプット成果】

(平成29年度終了時):

革新的クリーンエネルギーシステム対応主要アプリケーション群の基本機能の整備を完了する。

(本格実施フェーズ終了時):

各サブ課題で開発した革新的クリーンエネルギーシステム対応主要アプリの「京」レベル計算機による機能の予備確認。開発した主要アプリのポスト「京」による機能確認と実スケール問題での効果の

実証に向けた準備。

(ポスト「京」運用開始5年後) :

開発した主要アプリのポスト「京」による機能確認と実スケール問題での効果の実証。ポスト「京」を用いた実証計算により、革新的クリーンエネルギーシステムの早期実現に取り組む。

【アウトカム成果】

(ポスト「京」運用開始5年後) :

サブ課題で対象とする各エネルギーシステムに関し、解析効果の認知・実機への利活用。

(ポスト「京」運用10年後) :

各サブ課題の技術的目標達成が主要アプリにより促進され、革新的クリーンエネルギーシステム全体の实用化時期の早期化に貢献。

#### (4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ

本重点課題の中で研究開発されるアプリケーション群は、マイクロ領域（第一原理計算、量子化学計算）からマクロ領域（熱、流体、構造、連成）に至る、我が国を代表し世界的にも競争力の高いマルチスケール・マルチフィジクス解析の汎用性のあるソフトウェアであり、ポスト「京」の性能を最大限に活用できるように適切化されたものとして提供される。しかも、石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電などの本重点課題で対象とする革新的クリーンエネルギーシステムの課題を解決できるのみならず、極めて広い範囲の人工物等のマイクロ現象、マクロ現象、マルチスケール・マルチフィジクス現象の高精度解析にも適用できる。このため、計算科学としての学術面への貢献はもとより、幅広い産業課題解決への多大な貢献も期待できる。

(5) 年次計画

課題全体	中間目標 (平成29年度)	主要アプリケーションの基本機能の開発、コードの高度化 (ポスト「京」対応)
	最終目標 (平成31年度)	マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション機能の検証、ポスト「京」による例証の実施に向けた準備

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ			
	平成26年度	平成27年度	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
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 (東京大学・吉村忍)	<p>(目標)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・推進体制の構築、本格実施の準備</li> </ul> <p>(実施内容)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・協力企業の選定</li> <li>・対象機器の選定</li> <li>・連携プロジェクトの検討</li> </ul>	<p>(目標)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・推進体制の構築、本格実施の準備</li> </ul> <p>(実施内容)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・守秘義務契約の締結</li> <li>・コード開発仕様策定</li> <li>・モデルの調査</li> </ul>	<p>(目標)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・流体構造連成の実装、およびラボスケールの火炉・燃焼器を対象にした試計算の実施</li> </ul> <p>(実施内容)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・石炭灰の壁面付着および熔融モデルの導入・試計算の実施</li> <li>・超臨界物性モデルの導入・試計算の実施</li> <li>・炉構造・反応・冷却のマルチフィジクスを考慮した流体構造連成の実装</li> </ul>	<p>(目標)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ラボスケールの火炉・燃焼器を対象にした試計算の実施</li> </ul> <p>(実施内容)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・石炭ガス化炉・超臨界圧CO<sub>2</sub>タービンを対象に、炉構造・反応・冷却のマルチフィジクスを考慮した試計算の実施 (灰溶解の考慮無し)</li> </ul>	<p>(目標)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ラボスケールの火炉・燃焼器を対象にした試計算の実施とV&amp;Vの実施</li> </ul> <p>(実施内容)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・石炭ガス化炉・超臨界圧CO<sub>2</sub>タービンを対象に、炉構造・反応・冷却のマルチフィジクスを考慮した試計算の実施 (灰溶解の考慮有り) とV&amp;Vの実施</li> </ul>	<p>(目標)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・実機の火炉・燃焼器を対象にした実証計算の実施に向けた準備</li> </ul> <p>(実施内容)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・石炭ガス化炉・超臨界圧CO<sub>2</sub>タービンを対象に、炉構造・反応・冷却のマルチフィジクスを考慮した実証計算の実施に向けた準備</li> <li>・設計環境の構築</li> </ul>

<p>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（東京大学・鹿園直毅）</p>	<p>（目標） ・二相流解析技術、電極構造解析技術の大規模化に向けた課題設定</p> <p>（実施内容） ・二相流解析技術、電極構造解析技術の大規模化に向けた調査</p>	<p>（目標） ・二相流解析技術、電極構造解析技術の大規模化に向けた課題設定</p> <p>（実施内容） ・二相流解析技術、電極構造解析技術の大規模化に向けた調査 ・課題設定に対する産業界のヒアリング</p>	<p>（目標） ・大規模二相流解析技術の構築 ・電極構造解析技術の構築</p> <p>（実施内容） ・並列CFDコードへの気液二相流計算機能の実装、動作検証 ・要素試験等による二相流解析モデル検証 ・電極構造解析コード開発 ・粗視化用有効パラメータの決定法の汎用化（触媒を含む）、各種電解質膜の系統的な比較</p>	<p>（目標） ・セルレベルの二相流DB構築に向けた解析データ蓄積 ・電極構造解析技術の構築</p> <p>（実施内容） ・並列気液二相流の大規模計算技術の開発 ・セルレベルの二相流動様式の定量化 ・電極構造解析コード開発 ・非経験的な有効パラメータに基づく膜電極接合体のモデリングの試み（解析から設計への道筋）</p>	<p>（目標） ・セルレベル二相流DB構築と大規模二相流解析のスタックへの適用 ・電極構造解析技術の高度化</p> <p>（実施内容） ・並列気液二相流コードによる数十～百億メッシュ規模のスタック計算の検討 ・二相流DB構築とスタック内二相流動の試計算 ・電極構造解析コードの適用 ・反応性種を含めた膜電極接合体の統合的シミュレーションの実施（解析から設計の流れを確立）</p>	<p>（目標） ・大規模二相流解析技術の評価 ・電極構造解析技術の高度化 ・マルチスケール連携によるセル性能解析技術の構築</p> <p>（実施内容） ・自動車運転モードに対応したスタック排水性解析の実施 ・電極構造解析コードの適用 ・膜電極接合体の合理的な設計とポスト京利用を想定したV&amp;V総合評価 ・膜電極複合体～触媒層～流路モデリング連携によるセル性能のV&amp;V</p>
----------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

<p>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 (豊橋技術科学大学・飯田明由)</p>	<p>(目標) ・推進体制の構築(協力企業との連携強化等)</p> <p>(実施内容) ・ポスト京における計算資源の詳細見積もりと実施計画の詳細化</p>	<p>(目標) ・推進体制の構築(課題の明確化等と実施計画の詳細化)</p> <p>(実施内容) ・洋上風車後流解析技術の調査および検討</p>	<p>(目標) ・洋上風車の性能・安全性の基礎解析</p> <p>(実施内容) テスト計算の実施。解析手法の高速化、問題点の把握。</p>	<p>(目標) ・洋上ウィンドファームのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術の要素技術の開発</p> <p>(実施内容) 要素技術の解析結果の検証、プログラムの高速化、高精度化の検討。</p>	<p>(目標) ・洋上ウィンドファームのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術の要素技術の連携とそれを活用したウィンドファームの発電性能、風車の信頼性評価</p> <p>(実施内容) 要素技術を連携し、統合シミュレーション技術を用いたウィンドファームの発電性能と風車の信頼性評価</p>	<p>(目標) ・洋上ウィンドファームのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術を活用した設計ツールの実用化</p> <p>(実施内容) 統合シミュレーション技術を活用して設計ツールを構築し、ツールの精度検証、実用化に対応した課題の解決。</p>
<p>サブ課題D 核融合炉の炉心設計(日本原子力研究開発機構・井戸村泰宏)</p>	<p>(目標) ・実施体制を構築し、研究計画の概要を策定</p> <p>(実施内容) ・関連プロジェクトと連携した実施体制を構築。想定されるリソースに対して開</p>	<p>(目標) ・開発コードの予備検証を行い、研究計画を完成</p> <p>(実施内容) ・開発コードの計算モデル、計算性能の予備検証を反映した目標の具体化を図り、</p>	<p>(目標) ・開発コードの計算モデル拡張を完了</p> <p>(実施内容) ・開発コードを多粒子種に拡張し、多種イオン系における乱流輸送とMHD現象の特</p>	<p>(目標) ・開発コードのエクサ計算技術を開発</p> <p>(実施内容) ・開発コードにおいて、メニーコア計算手法、陰解法ソルバ、高性能粒子法等のエク</p>	<p>(目標) ・実証研究により計算モデルの妥当性を評価</p> <p>(実施内容) ・JT-60、LHDと連携した実証研究によって開発コードの計算精度を検証し、さら</p>	<p>(目標) ・開発コードの計算性能、計算精度を実証</p> <p>(実施内容) ・目標精度の達成に向けて実証研究を継続するとともに、計算技術の有効性を実</p>

	発項目を精査し、研究計画を策定	研究計画を完成	性を理論的に解析	サ計算技術を開発	に、計算モデルを向上	証
サブ課題E 膜・界面のナノレベルからの設計 (立教大学・望月祐志)	(目標) 計画の詳細立案、推進体制の構築  (実施内容) マルチスケール・シミュレーション(MSS)向け統合プラットフォームの仕様検討	(目標) 成果目標のFSと計画の詳細決定  (実施内容) 有効パラメタの定義と算定法の妥当性の検証、MSS統合プラットフォームの仕様決定 検討をもとに平成28年度以降はサブ課題Bへ統合				
全体推進	(目標) ・プロジェクトの効率的推進  (実施内容) ・推進体制の構築	(目標) ・プロジェクトの効率的推進  (実施内容) ・主要アプリケーション開発における共通項目の整理 ・共通基盤の要素抽出	(目標) ・プロジェクトの効率的推進  (実施内容) ・サブ課題間共通主要アプリケーションの整備 ・マルチフィジクスシミュレーション基盤の構築(REVOCAP_Couplerの整備) ・マルチスケールシミュレーション連携システムのプロトタイプ	(目標) ・プロジェクトの効率的推進  (実施内容) ・サブ課題間共通主要アプリケーションの高度化 ・マルチフィジクスシミュレーション基盤の実証(FFB/FFR-REVOCAP連携の実証) ・マルチスケールシミュレーション	(目標) ・プロジェクトの効率的推進  (実施内容) ・サブ課題間共通主要アプリケーションの機能追加 ・マルチフィジクスシミュレーション基盤の効率化(FFB/FFR-REVOCAP連携の効率化) ・マルチスケールシミュレーション	(目標) ・プロジェクトの効率的推進  (実施内容) ・サブ課題間共通主要アプリケーションの実証計算補助 ・マルチフィジクスシミュレーション基盤の実証(FFB/FFR-REVOCAP連携の実証計算実施) ・ポスト京の試作機を活用した

			ピング、並行ジョブ (capacity computing) 環境の構築	オン連携システムの本実装と普及策の検討、ナノ系計算の高度化	オン連携システムの利活用と普及促進、ナノ系計算の高度化の継続	マルチスケールシミュレーションの有効性の実証
--	--	--	--------------------------------------	-------------------------------	--------------------------------	------------------------

## (6) 実施体制

本重点課題の全体推進体制を下図に示す。まず、課題全体の運営方針決定機関として「重点課題運営会議」を設け、重点課題責任者、サブ課題責任者、推進管理者等を構成メンバーとする。その下部組織として、各サブ課題推進主要メンバーから構成される「サブ課題連絡会議」を設け、前記運営会議での方針の共有並びにサブ課題間の連携促進等を議論する。また、「アプリケーション開発会議」を設け、本重点課題で開発する主要アプリケーションの効率的・効果的開発について議論する。さらに、重点課題全体の進捗状況の評価や助言を得るため「諮問委員会」を上部組織として設置し、産業界代表や有識者に参加頂く。一方、各サブ課題の研究開発の推進は、分類別の推進会議等の開催によって、遅滞のない成果創出を図る。以上の本重点課題全体の事務作業をサポートする組織として、東京大学大学院工学系研究科内に課題推進事務局を設置する。本重点課題では、特に、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会やFOCUSとの連携を重視するとともに、アプリ開発にあたってはハード開発とのコデザインのため理化学研究所と密接な連携を図る。

なお、本重点課題で取り上げた、石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電、磁気閉込核融合炉の炉心設計の4システムはプロジェクト出口であるエネルギー源としては、それぞれに独立したものであるが、その中核をなす物理現象（構造、流体、熱、電磁気、材料劣化等）や克服すべきシミュレーション課題（ベクトル・マトリックス演算、マルチフィジクス性、マルチスケール性、パラメトリック計算、最適解探索、コデザイン、実機レベルのV&Vなど）に、多くの共通点がある。このため、出口（エネルギー源）の多様性、個別性に十分に配慮しながらも、アプリケーション研究開発レベルにおいて、サブ課題間の連携を十分にとることにより、各サブ課題を単独で遂行することに比べて、大きな相乗効果を生むように重点課題全体の推進を図る。具体的には、「全体推進」という横串のサブ課題間の連携の体制を構築し、4サブ課題と「全体推進」が連動して、重点課題⑥全体の研究開発を進めることとする。また、同様の観点から、本重点課題⑥と重点課題⑧では、共通して活用するアプリケーションも多い（たとえば、FFB、FFR、ADVENTURE、REVOCAPなど）ので、両者で連携をとり、情報交換を密に行い、効率的なアプリケーション開発を実施する。

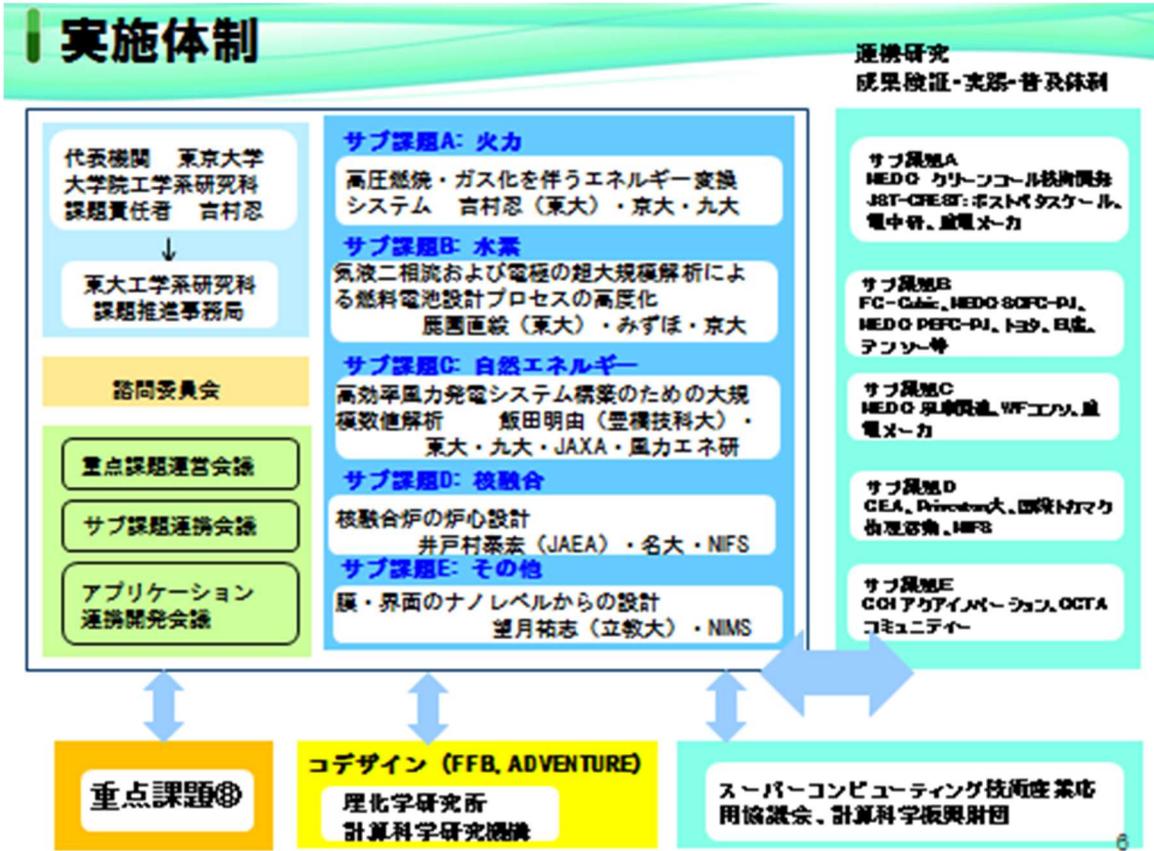


図 平成26、27年度の実施体制

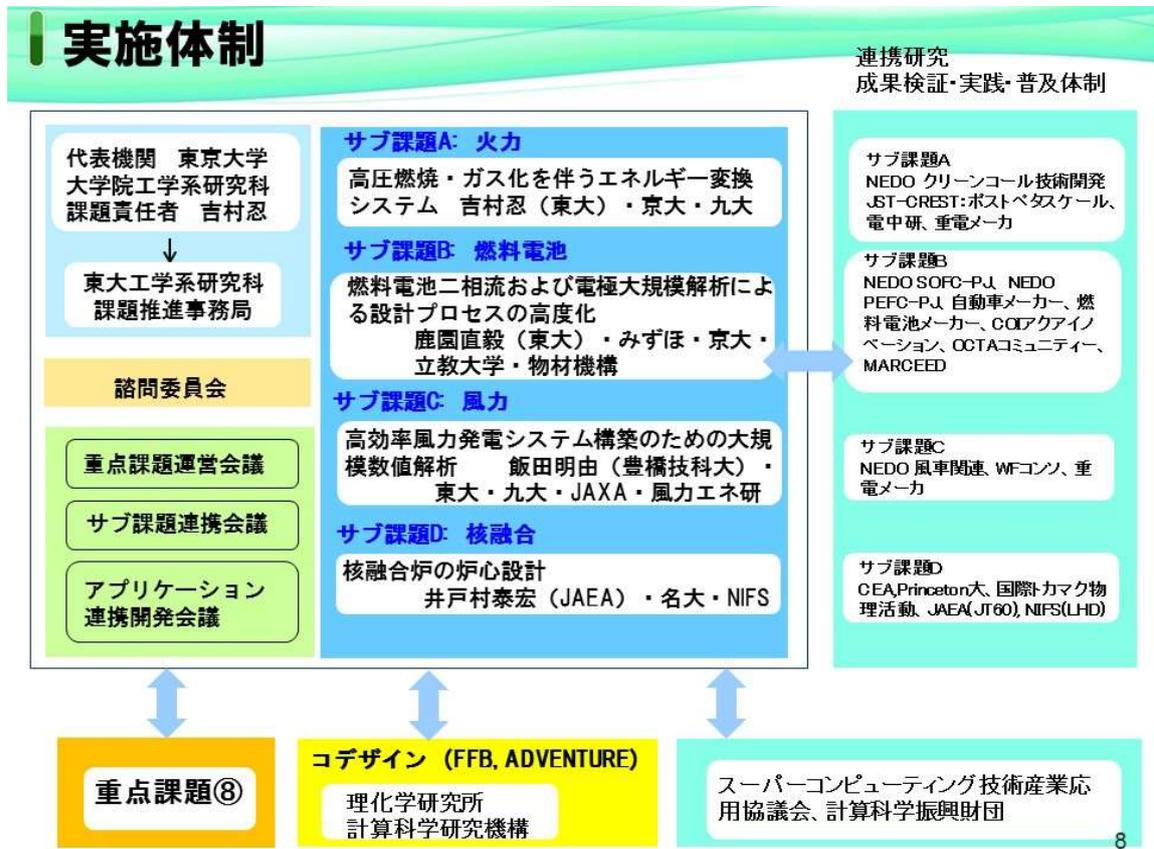


図 平成28年度の実施体制

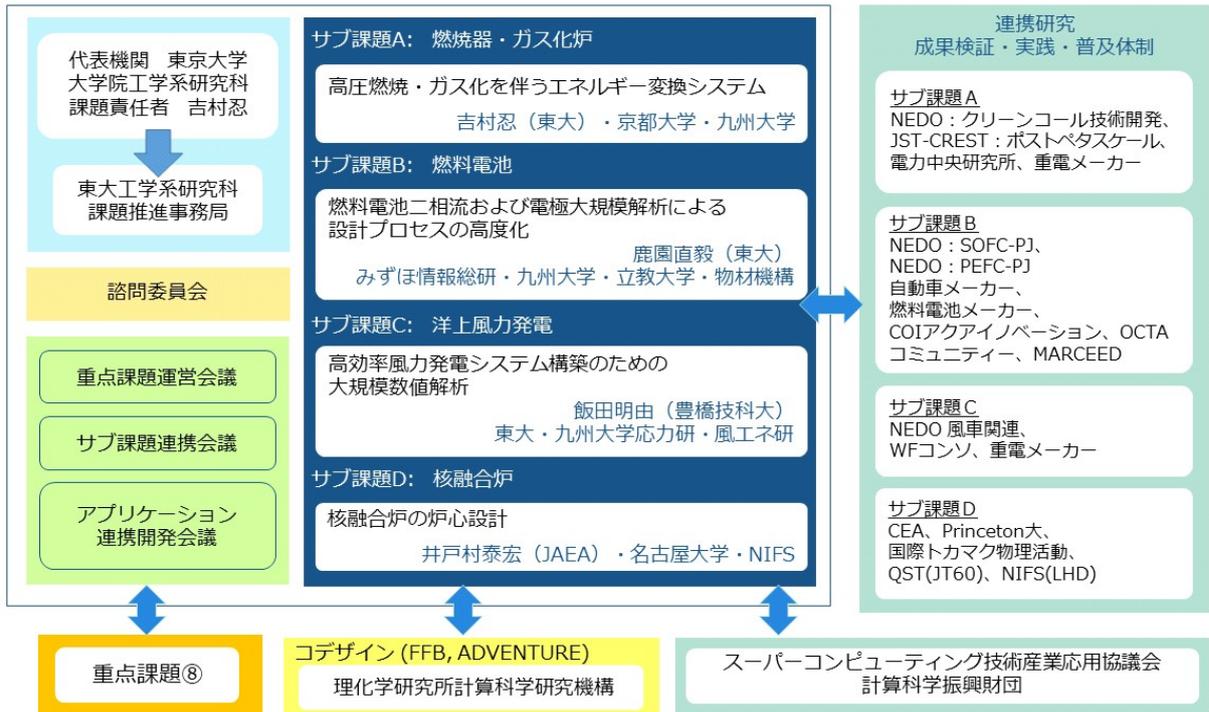


図 平成29～31年度の実施体制

## 重点課題⑥内アプリケーション連携開発体制

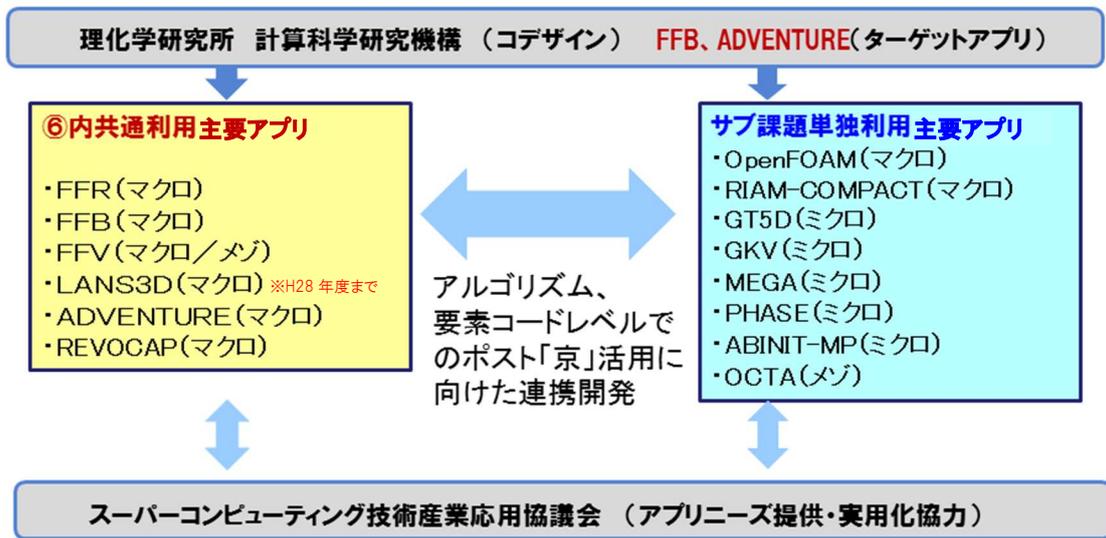


図 重点課題⑥内アプリケーション連携開発体制

# アプリケーション連携開発体制



図 重点課題⑥、⑧アプリケーション連携開発体制

## (7) 必要計算資源

### サブ課題 A :

これまでの「京」での計算資源実績、および、今後の解析規模の拡大（個々のシミュレーション規模で 100 倍）を総計し、以下の計算資源が必要となる。

アプリケーション開発実施時に必要な「京」の計算資源量：550 万ノード時間／年

- (A) 燃焼・ガス化・粒子追跡・灰溶融シミュレーション技術の高度化 300 万ノード時間／年
- (B) 高温高压極限環境における構造健全性および炉構造・反応・冷却のマルチフィジクス評価 250 万ノード時間／年

### サブ課題 B :

これまでの「京」や他の計算資源実績を基礎として、今後の解析規模の拡大（計算格子点数で 100～1000 倍程度）を考慮すると、以下の計算資源が必要となる。

アプリケーション開発実施時に必要な「京」の計算資源量：975 万ノード時間／年

- (A) セルレベル二相流解 80 万ノード時間／年
- (B) スタック全体二相流解析 240 万ノード時間／年
- (C) 焼結予測 1032 ノード×200 時間×5 ケース = 103.2 万ノード時間／年
- (D) 過電圧評価 1032 ノード×200 時間×5 ケース = 103.2 万ノード時間／年

- (E) 構造最適化 1032 ノード×200 時間×3 ケース = 61.92 万ノード時間/年
- (F) その他：チューニング、デバッグ等 50 万ノード時間/年
- (G) MEA 構造解析：157 万ノード時間/年
- (H) MEA 機能解析：180 万ノード時間/年

サブ課題 C：

これまでの京における実績および解析規模の拡大から以下の計算資源を必要とする。

アプリケーション開発実施時に必要な「京」の計算資源量：750 万ノード時間/年

平成 28 年度まで

- (A) 風車単体解析：250 万ノード時間/年
- (B) ウィンドファーム解析：300 万ノード時間/年
- (C) 先端流体制御解析：200 万ノード時間/年

平成 29 年度以降

- (A) 風車単体解析：450 万ノード時間/年
- (B) ウィンドファーム解析：300 万ノード時間/年

サブ課題 D：

アプリケーション開発実施時に必要な「京」の計算資源量：550 万ノード時間/年

計算資源は主に LHD や JT-60 における実証研究に利用する。「京」における既存装置の計算コストは GKV が JT-60 で約 1 万ノード時間/ショット、LHD で約 50 万ノード時間/ショット、GT5D が JT-60 で約 100 万ノード時間/ショット (LHD は未実施)、MEGA が JT-60 で約 10 万ノード時間/ショット、LHD で約 100 万ノード時間/ショットとなっていることから、各コードで年間平均 2~3 ショット程度の解析を実行するために「京」の資源を約 550 万ノード時間/年を必要とする。これに加えて、FX100、MIC、GPU 等の最先端のメニーコアプロセッサにおけるコード開発を実施するために「京」以外の資源を約 40 万ノード時間/年を必要とする。

全体推進：

全体推進では「京」の利用は行わず、「京」以外の計算資源を用いて主要アプリケーション群の整備、マルチフィジクス/マルチスケールシミュレーション基盤の整備を中核として実施する。また、各サブ課題において必要となる「京」以外の計算資源の調整を行う。

「京」の計算資源量

(単位：ノード時間/年)

	H27 年度	H28 年度	H29 年度	H30 年度	H31 年度
目標	180 万	1993 万	2825 万	2825 万	2825 万

「京」以外の計算資源量

(単位：ノード時間/年)

	H27 年度	H28 年度	H29 年度	H30 年度	H31 年度

目標	0	320 万	320 万	320 万	320 万
----	---	-------	-------	-------	-------

## 2. 研究開発内容詳細

### 2-1. 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

#### (1) 目的・意義

東日本大震災後に我が国のエネルギーベストミックスの一角を占める原子力発電が機能不全に陥り、電力供給に占める火力発電の割合は約 90%にまで上昇している (LNG43%、石炭 28%、原油 19%)。このうち、石炭火力発電は世界の総発電量の約 40%を占め (2010 年時)、今後も新興国の旺盛な電力需要を受け、益々の増加が見込まれている。このため、我が国のエネルギーセキュリティ、世界的な地球温暖化対策、国が主導するインフラシステム輸出戦略のどの観点から見ても、高効率・低環境負荷・高レジリエンス技術をより一層高度化し石炭火力発電システムを革新することが必要不可欠である。特にゼロエミッションサイクル (CO<sub>2</sub> 排出総量ゼロ) を実現する CO<sub>2</sub> 分離・回収・貯留 (CCS [Carbon Capture Storage]) 技術を導入した石炭ガス化炉と超臨界圧 CO<sub>2</sub> タービンは次世代の本命の石炭火力発電に必須の革新技術であり、国家プロジェクトとして推進されている。しかし、この技術においては高圧燃焼・ガス化という大変複雑な物理・化学現象を伴う上に、最近の火力発電システムを商業炉として実用に供するためには、より一層の効率向上と環境負荷低減のためにコンバインドサイクル等の複雑なシステム化も要求される。このため、設計・開発時に試行錯誤プロセスが増大し、中小規模の試験炉から大型実用炉にスケールアップする際に、試験・開発期間が増大し、それに伴い開発コストが肥大化し、結果的に実用炉の経済性の低下を引き起こす。これは国家プロジェクトの大きなリスク要因になるとともに、もし技術的に実現できたとしても社会的な実装段階において経済性の観点から大きな阻害要因となる。

本サブ課題では、2020~2030 年代の実用化を目指して研究開発が進められている CCS を伴う石炭火力発電システム実現のカギを握る高圧燃焼・ガス化炉を主なターゲットとする。従来の計算機環境では実現が不可能であった炉全系高精度シミュレーション技術を研究開発し、高圧燃焼・ガス化プロセスの詳細定量評価を実現することにより、適切な炉パラメータ探索の試行錯誤プロセスを大幅に削減し、国際競争力のある実用炉に必須となる高効率化・低環境負荷・高レジリエンス性能の実現を加速し、その実用化時期の早期化に貢献する。

#### (2) 実施内容

ポスト「京」によって初めて達成される第一原理的高精度シミュレーション (固気液三相の LES [Large Eddy Simulation]) により、実験では計測が不可能な燃焼・ガス化・粒子追跡・灰溶融等の非定常マルチスケール・マルチフィジクス挙動の定量把握を行う。主な実施項目を以下に具体的に記す。

(a) 超臨界圧 CO<sub>2</sub> タービンおよび石炭ガス化炉を対象とする、燃焼・ガス化・粒子追跡・灰溶融の第一原理的燃焼流シミュレーション技術の高度化 (物理化学モデルの高度化と時空間分解能の高精度化) (京大、九大)

(b) 上記 2 炉型を対象とする構造健全性および炉構造内伝熱・反応 (燃焼・ガス化・灰溶融等)・冷却システム全体の非定常非線形マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションの実現 (東大)

本サブ課題における実用化プロセス、チャレンジングな点、V&V プロセスは次の通りである。

・実用化へのプロセス

すでに実証炉から商用炉に転用された茨城県勿来の空気吹き の 25 万 kW の IGCC (Integrated coal Gasification Combined Cycle) 事例を参照しつつ、さらに経済性の高い 50 万～100 万 kW 級の石炭ガス化プラントの高効率化、および酸素吹きまたは酸素—CO<sub>2</sub>吹きによる IGCC+CCS 実用化を念頭に NEDO プロジェクト (現在、電中研—九大で実施中)、民間企業 (三菱日立パワーシステムズ) との連携体制を構築する (電中研とは平成 27 年度に秘密保持契約を締結し、電中研炉の解析に関する共同研究を実施中。三菱日立パワーシステムズとはポスト「京」のターゲット問題である三菱重工実験炉の解析準備に向けて平成 29 年度中に秘密保持契約の締結を予定)。さらに、熔融スラグの詳細シミュレーション等、燃焼・構造・伝熱・冷却の統合シミュレーション環境を整備し、酸素吹きの CCS への適用は 2020 年代、また、酸素—CO<sub>2</sub>吹きは 2030 年代の実用化に貢献する。

・チャレンジングな点

大規模燃焼解析については、現在、米国 Center for Exascale Simulation of Combustion in Turbulence (ExaCT)等のコード開発があるが、燃焼シミュレーション部分のみに特化している。それに対して、本サブ課題では、実機の石炭ガス化炉を対象として、(1) 気相、液相、分散粒子相、三相の同時解析モデルの実装、(2) 灰の壁面付着、熔融メカニズムの解明とモデリング、(3) 実機の燃焼系計算と炉容器の熱伝導計算および非線形損傷解析の双方向連成シミュレーションを行うこととしており、これらは、いずれも世界的にも例のないサイエンス的にもチャレンジングな研究開発課題である。

・V&V プロセス

固気液三相の燃焼解析を担当する FFR-Comb と固体中の熱伝導解析と非線形損傷解析を担当する ADVENTURE\_Thermal および ADVENTURE\_Solid については、それぞれに、解析機能の高度化を行い、個別現象のベンチマーク問題などの解析を通して、平成 28～29 年度中に個別のコードの精度および性能検証を行う。一方、現実の石炭ガス化炉を対象としたマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションの V&V は次のプロセスで行う。プロジェクト期間中 (平成 31 年度まで) に確実に利用できる実験データとしては、電中研の石炭ガス化実験炉がある。これについては平成 27 年度に電中研と本サブ課題実施機関の間で秘密保持契約を締結し、解析対象のデータの受け渡しなどを実施済である。平成 28 年度から平成 29 年度にかけて、FFR-Comb と ADVENTURE\_Thermal および並列連成カップラー REVOCAP\_Coupler、ADVENTURE\_Solid の相互接続を行い、また、電中研炉の解析モデルの構築を行い、その解析を実施し、同実験炉の試験結果と FFR-Comb と ADVENTURE\_Thermal、および FFR-Comb と ADVENTURE\_Thermal 双方向連成シミュレーションの比較を行う。そして平成 30 年度前半に V&V を完了する。また、この解析を進めることと並行して、三菱重工・電中研との調整により、三菱重工実験炉 (長崎研究所) の解析を行うべく交渉を進め、電中研実験炉の解析に次いで、これらの解析の準備を行う。平成 29 年度中に締結すべく三菱日立パワーシステムズと秘密保持契約の交渉を進めており、解析対象のデータ受け渡し、解析モデル作成、予備解析などの実施時期は平成 30～31 年度を想定する。

### (3) 目標・期待される成果

ポスト「京」を最大限に活用したシミュレーションの定量的目標として、石炭ガス化においては灰

の溶融・付着モデルを導入し、炉構造内伝熱解析と熱流体解析を双方向に連成することにより、ガス化炉出口温度の予測精度 10%未満、化学種組成・灰分量の予測精度 20%未満を目指す。また、超臨界圧燃焼においては実在気体モデルおよびそれに適した乱流燃焼モデル法を導入し、炉構造内伝熱解析と熱流体解析を連成することにより、超臨界圧（5MPa 程度以上）燃焼器出口温度の予測精度 10%未満、燃焼器内壁面熱フラックスの予測精度 20%未満を目指す。

#### 【アウトプット成果】

平成 29 年度終了時：

ラボスケールの石炭ガス化炉・超臨界圧 CO<sub>2</sub> タービンを対象とする、炉構造・反応・冷却のマルチフィジクスを考慮した試計算を実施する（灰溶融の考慮無し）。

本格実施フェーズ終了時：

ラボスケールの石炭ガス化炉・超臨界圧 CO<sub>2</sub> タービンを対象に、世界初の炉構造・反応・冷却のマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションをし（灰溶融の考慮有り）、V&V を実証する。また、このソフトウェアを用いた設計環境を構築する。さらに、三菱重工実験炉の解析準備を完了する。

本サブ課題では、中間評価時点で論文数 8 本（査読有 5 本）、学会発表数 30 件（招待講演 2 件）であった。中間評価以降から本格実施フェーズ終了時までの間の達成目標としては、論文 10 本（半数は国際ジャーナル論文）、学会発表数 25 件（半数は国際会議）、解説等論文 1 件を目指す。

ポスト「京」運用開始 5 年後：

開発した主要アプリのポスト「京」による機能確認と三菱重工実験炉をはじめとする実機での効果の実証。その後、本プロジェクトで開発したソフトウェアを様々な条件下で実施し、現場における火炉および燃焼器の設計および適切な操作条件の選定に役立てる。

#### 【アウトカム成果】

ポスト「京」運用開始 5 年後：

実機燃焼過程の高精度シミュレーションに基づきバーナ形状、燃焼器形状、空気比等の操作条件選定、高温高压の非定常非線形極限環境での構造健全性評価や冷却設備の適切な配置の効率的探索を実現する。

ポスト「京」運用開始 10 年後：

開発した技術を利用して、CO<sub>2</sub> 削減により大きく貢献する（マイナスエミッション）バイオマスガス化炉の実用化にも資する。これらの成果物により、従来の経験的手法による試行錯誤的発電プラント設計から脱却し、シミュレーション主導設計（Simulation-based Design）を実現する。さらに、実用化過程でのパイロット炉等のバーチャル化により、実用化時期のより一層の早期化および経済性の向上に貢献する。

#### 【本サブ課題のもたらす波及効果と経済的効果】

実用化された石炭ガス化炉については、様々な産地で生産される石炭に対応する必要があるが、成

分の異なる石炭を効率的に燃焼するためには、炭種に応じた炉の操作条件を適切化することが必須である。本シミュレーション技術を活用することにより、そうした操作条件の適切化を効率的に行うことが可能となり、2030年頃に予定される CCS を伴う石炭ガス化複合発電のより一層の普及に貢献することが期待できる。

また、本プロジェクトの貢献により、少なく見積もっても、年あたり 400 万 kW 級 1 基、5 年間で 5 基の建設を上積みできる。400 万 kW 級 1 基あたり 1400 億円のプラント売り上げがあり、既存石炭火力発電に比べて年あたり 190 万トンの CO<sub>2</sub> 削減効果と、5.4 億円の燃料費節約効果が得られる。5 年では、7000 億円のプラント売り上げと 2850 トンの CO<sub>2</sub> 削減効果、81 億円の燃料費削減がある。

#### (4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

本サブ課題ではポスト「京」によって初めて可能となる高圧燃焼・ガス化プロセスの第一原理的予測を行う。このため、文科省 HPCI 戦略プログラムにおいて開発を行ってきた汎用並列熱流体解析コード FFR-Comb において燃焼・ガス化モデルの高度化を行う。さらに、反応（燃焼・ガス化・灰溶融）過程のより一層の高精度シミュレーションのため高温流体と構造間の熱伝達条件を正確に記述する炉構造・反応・冷却の非定常非線形マルチフィジクス評価を我が国屈指の汎用並列有限要素法解析コード ADVENTURE\_Solid および ADVENTURE\_Thermal と、さらに、超並列環境で実行可能な世界唯一の汎用並列連成解析プラットフォーム REVOCAP\_Coupler を本サブ課題の対象現象に適合するように高度化し実現する。なお、REVOCAP\_Coupler の機能拡張と開発自体は全体推進において実施する。これまで、「京」を利用した HPCI 戦略プログラムでは計算能力の制限から、FFR-Comb では亜臨界状態でのガスタービン燃焼器、ベンチスケールのガス化炉（実験炉）の解析、ADVENTURE では 100 億自由度規模の比較的シンプルな大変形弾塑性振動解析、REVOCAP\_Coupler では有限要素法解析コード同士の比較的小規模な問題を対象とする 2 現象の連成解析に留まってきた。これらの先進的 HPC コード群をポスト「京」向けに高度化し、かつ、本サブ課題で対象とする実機の非定常非線形複雑連成現象に対応させることにより、初めて超臨界圧 CO<sub>2</sub> タービンと石炭ガス化の CCS 導入実現の加速が可能となる。

#### (5) 実施体制

東京大学・京都大学・九州大学を中核として、民間協力機関<sup>注1)</sup>、国プロ等<sup>注2)</sup>と連携し、ポスト「京」の計算能力を最大限活用し、CCS を導入した次世代の本命の石炭火力発電における高効率・低環境負荷・高レジリエンス技術をより一層高度化する。

大規模シミュレーション技術・ソフトウェア資産に関しては「京」での卓越した研究実績（戦略分野 4）があり、民間との共同研究もすでに着手している。今後、本サブ課題の実用化に向けて、特に開発するコードの実機レベルの V&V プロセスを中心に、NEDO プロジェクト等と積極的に連携を進めていく。

注 1) 重工系企業数社と協議中。

注 2) NEDO「ゼロエミッション石炭火力技術開発プロジェクト」「CCS 対応高効率システム開発」「CO<sub>2</sub>回収型クローズド IGCC 技術開発」（実施期間：平成 27～31 年度）、代表者：牧野尚夫（一般財団法人電力中央研究所 エネルギー技術研究所 首席研究員）（協議中）。

## (6) 必要計算資源

これまでの「京」での計算資源実績、および、今後の解析規模の拡大（個々のシミュレーション規模で100倍）を総計し、以下の計算資源が必要となる。

アプリケーション開発実施時に必要な「京」の計算資源量：550万ノード時間／年

- (A) 燃焼・ガス化・粒子追跡・灰溶融シミュレーション技術の高度化 300万ノード時間／年
- (B) 高温高压極限環境における構造健全性および炉構造・反応・冷却のマルチフィジクス評価 250万ノード時間／年

## 2-2. 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

### (1) 目的・意義

燃料電池は、究極的な高効率かつクリーンなエネルギー変換装置であり、将来の化石燃料消費量およびCO<sub>2</sub>排出量の削減に向け、次世代自動車用の動力源、定置用発電システムとしての本格普及が期待されている。自動車用の固体高分子形燃料電池（PEFC）はすでに実用化が図られているものの、今後の本格普及のためにはより一層のコスト低減と耐久性向上が課題である。具体的な課題としては、中長期的には脱Pt触媒や高温作動電解質膜などの革新的材料のブレークスルーが要求される一方、直近では、PEFCの高出力密度化によるコスト低減として、電極の物質輸送抵抗の低減、Pt使用量低減やフッ素系（Nafion）・炭化水素系電解質のプロトン伝導性向上といった既存材料の改善、および低温起動・負荷変動時の液水滞留の抑制による発電の均一化・安定化が重要な課題である。また、固体酸化物形燃料電池（SOFC）は、炭化水素燃料を利用する際に最も高効率を実現でき、将来の主要なエネルギー変換装置として期待されている。しかし、高温での固体材料の拡散や反応による電極多孔体構造自体の経時変化が性能低下の原因となっており、定置用発電システムに必要な耐久性向上が直近の課題となっている。

燃料電池はマクロスケールのセル・スタックから微細かつ複雑なメソスケールの電極多孔体、Pt触媒・担体・電解質のナノスケールの三相界面までの広範囲な領域にわたるイオン・電子・反応物質の輸送と電気化学反応が重畳した非常に複雑な現象である。原子レベルのナノスケールから数10～100nmオーダーのメソスケールである三相界面、そして10μm厚の触媒層までの非常に大きなスケール比を有する複雑微細構造内およびセパレータ流路内での様々な運転条件、たとえば発電性能に関わる電極内の反応・物質輸送の不均一性、液水滞留によるガス供給の不均一性、および耐久性に関わる電極構造の経時変化等の計測は困難であり、そのための実験には膨大なコストを要する。このような燃料電池のマルチスケール現象を数値予測する試みはポスト「京」によって初めて実現できるものであり、サイエンス的にも大きな価値がある。

また、各メーカーともコストや信頼性だけでなく、製造プロセスといった多くの実績からほぼ製造方法や材料を絞込みつつあり、それらを前提として製品競争力を向上させることが当面最大の課題となっている。つまり産業界のニーズとして、現在主流となっている材料や製法をベースとし、上述したマルチスケールの複雑現象を明らかにし、設計技術を高度化することが強く求められている。すなわち、燃料電池の製品競争力向上に資するという観点からは、最終的な製品構成としてのスタックや電極の設計に役立つ数値シミュレーション技術開発が必要不可欠である。

以上から、本サブ課題ではポスト「京」を用いた大規模数値シミュレーション技術によって、燃料電池のマクロ～メゾスケールおよびメゾ～ナノスケールにおける全体現象の理解に基づいた三相界面構造、電極構造とセル構造、作動条件の適切化等の設計指針を提示することにより、自動車用燃料電池および定置用燃料電池システムが直面する課題解決に直接的に貢献することを目的とする。

## (2) 実施内容

本サブ課題では、燃料電池セル・スタック内の大規模な気液二相流解析、電極全体の反応機構解析および電極内三相界面の機構解析を実現するとともに、それらの成果を燃料電池全体性能シミュレータへ反映することにより、PEFCの高性能化とセル・スタック小型化に資する構造・作動条件の適切化等の設計指針を提示することを目指す。また、SOFCについては耐久性向上に資する電極構造変化と電極全体の反応機構解析にフォーカスする。

PEFCに関しては、膜電極接合体 (MEA) におけるミクロスケールの構造・物質輸送解析、メゾスケールの電極内の反応・輸送解析、およびマクロスケールの気液二相流解析を用いて、個々の部材における現象を解明するとともに構造設計指針を提示する。それに加えて、MEA およびセル・スタックの発電性能を評価するために、各スケールにおける解析結果を連携させたマルチスケール解析ワークフローを構築する。具体的には、ナノ構造・機能解析によって算出した電解質膜・電極三相界面のプロトン伝導度およびガス拡散係数を電極要素特性解析に適用することで、MEAの発電性能解析を実施する。ナノレベルの計算は、経験パラメータ無しで第一原理的に行われるため、広範囲の素材材料を統一的な精度で扱うことが可能で汎用性が高く、メゾ・マクロ系を通じた設計ツールとしての基盤を支える。触媒活性等の電気化学反応パラメータについては計測の必要があるものの、三相界面および触媒層の構造・輸送パラメータについては、実験による経験式を用いることなく計算結果による内部現象理解に基づいたモデル式として扱うことが可能になる。さらに、電極要素特性解析により算出した分極特性 (活性化過電圧、電解質膜およびアイオノマーの抵抗過電圧、触媒層構造に起因した拡散過電圧)、および大規模気液二相流解析によって算出した流路内の圧損増倍、液水滞留量等の二相流動パラメータを全体性能シミュレータに適用することで、部材レベルからセル・スタックの発電性能、特に自動車用 PEFC に要求される高電流密度域の限界性能を予測することが可能となる。ナノスケールシミュレーションから得られる物性値のメゾスケール電極シミュレーションへの反映、電極要素解析結果やセル・スタックの二相流動解析結果の燃料電池全体性能シミュレータへのリンクといったマイクロ・メゾ・マクロのスケールを連携する試みは、世界を見ても例がなく、ポスト「京」で初めて実現される。材料特性から電池デバイス設計やシステム設計にボトムアップで橋渡しするのみならず、電極作成プロセスやシステムの制約のもとにあるべき材料特性をトップダウン的に示すことが可能になる。

なお、サブ課題 B の直交格子系のメゾスケール電極シミュレーションの高速化に関しては、全体推進とサブ課題 D も連携協力する。

### (a) 大規模二相流解析による実機 PEFC スタックの設計プロセスの構築 (みずほ情報総研、東大)

PEFC 流路における気液二相流解析の実績を有するオープンソース CFD コード (OpenFOAM) を流路/GDL 界面からセルレベルの詳細解析に適用し、要素実験によるモデル検証を行い、流路構造・作動条件 (流量、圧力、温度) に対する排水速度や局所的な液水滞留量および圧損増加などのセルレベルの

局所的な二相流動の定量化とデータベース（DB）構築を行う。また、大規模並列化に向けた行列ソルバの収束性向上への検討を実施するとともに実機セル・スタック設計において求められる精度を実現するメッシュ規模を明らかにすることで、燃料電池自動車の実セル・スタック設計に資する大規模気液二相流解析コードとそのための計算格子生成とデータ入力システムを開発する。

PEFC 内の表面張力と流路壁面濡れ性の影響を考慮した 0.1mm～数 cm スケールの液水挙動の解明と二相流動の工学的評価、気液二相流動の数十～百億グリッド規模の大規模シミュレーションは、いずれも世界的に例のない挑戦的な研究開発課題である。

大規模二相流解析の V&V については以下の方針で実施する。

- ・基礎二相流現象（前進・後退接触角、メニスカス、等）の検証を行う。
- ・可視化セル要素試験（流路・カーボン多孔質界面）のデータを用い、燃料電池特有の二相流動（濡れ性、表面張力効果、水滴成長径）解析機能の検証を行う。
- ・NEDO 評価セル等を用いた高電流密度域の限界性能、圧力損失の検証、ショートスタック（20 枚積層）におけるセル間の流量・電圧分布等の検証を行う。

平成 29 年度は、気液二相流の大規模並列計算技術とそのための計算格子生成とデータ入力システムを開発し、評価セルの流路構造に対して圧損増倍、液水滞留量等の相関量を算出し、全体シミュレーションに適用して発電特性を検証し、モデルの課題を整理する。平成 30 年度は、並列気液二相流コードを用いて単セルから 20 枚ショートスタックの解析に資する試算を行い、実機相当セルの流路構造に対する二相流の相関量を算出し、それを用いた全体シミュレーションによるショートスタックの解析と同構造・同規模の詳細な気液二相流解析の結果を比較する。平成 31 年度は、自動車運転モードに対応したスタック排水性解析を実施する。また、標準材料を用いた NEDO 評価セルの発電性能を 10mV 程度の精度で予測する技術の確立を目指すとともに、自動車用 PEFC の設計に要求されるショートスタックレベルでセル間の流量・電圧分布等の解析を行う。

#### (b) SOFC 電極要素特性解析（東大）

東京大学ですでに開発を進めている計算モデルを基盤とし、理化学研究所で開発を進めてきた階層直交格子による大規模シミュレーション技術を導入することで、実電極における多孔体構造を考慮した実験 9 万時間（10 年間）に相当する長時間焼結予測技術、過電圧予測技術を開発する。また、より高性能、高信頼性な電極構造を明らかにするために、随伴解析に基づく複雑形状の最適化アルゴリズムを搭載する。

SOFC 電極シミュレータの V&V については、東京大学にて Ni-YSZ や LSCF 等の標準的な SOFC 材料を用いたボタンセルを作製し、電流電圧特性評価、交流インピーダンス測定、FIB-SEM を用いた電極 3 次元構造再構築を実施し、シミュレータの検証を行う。

平成 29 年度は、大規模並列計算に適用可能なフェーズフィールド法による 3 次元電極構造解析コードを開発する。平成 30 年度は、電極構造変化から過電圧までを予測する統合解析手法を完成させる。平成 31 年度は、100 億格子規模の電極構造解析を実施する。

#### (c) PEFC 電極要素特性解析（九大）

京都大学で開発を進めてきた PEFC 電極の形成プロセスおよび過電圧予測シミュレーション技術を

大規模化し、触媒層の各種構造パラメータ（担体粒径、凝集形状、電解質被覆構造、触媒担持量、分散）をもとに出力性能と反応分布の観点からデータベース構築を行う。さらに適切な構造パラメータ探索のためのアルゴリズムを開発し実装する。また、その触媒層特性を反応速度定数と物質輸送特性パラメータ（拡散係数、プロトン伝導度）に整理する。特に項目(d)のナノスケールシミュレーション（立教大・物材機構）にて行われるアイオノマーの輸送機構解析（プロトン伝導・ガス拡散）の知見より、各種アイオノマー材料の特性を本メソスケール解析に反映させて発電特性評価を行う。従来の研究では、アイオノマーのナノスケール解析が困難であるため、そのプロトン伝導性やガス拡散性の特性評価には実験的に取得された経験式が用いられていた。したがって各種アイオノマー材料の発電特性に及ぼす影響がこれまでは不明瞭であったが、本研究項目のように各スケールの知見を融合（マルチスケール連携）することで、新規材料利用時の発電特性予測にも応用できる。

SOFC、PEFCともに電極有効反応領域である数 $10\mu\text{m}$ スケールを数百億グリッド規模で解析する電極の数百億グリッド規模の大規模シミュレーションは、世界的に例のない非常に挑戦的な課題であり、サイエンス的にも大きな価値がある。

PEFC 電極要素特性解析のV&Vについては以下の方針で実施する。

- ・Pt 担持量の異なる各種 Pt/カーボン担体のモルフォロジーや微細孔のデータ収集および担体形成解析の結果と比較し検証を行う。
- ・多孔質触媒層構造の形成解析（アイオノマー被覆考慮）と FIB-SEM による実材構造とを比較し検証を行う。
- ・触媒層反応輸送解析と実触媒層活性の電気化学測定との比較を行い触媒層レベルでの性能を検証する。

平成 29 年度は、触媒層の構造パラメータと電極特性を関連付ける反応速度パラメータおよび輸送特性パラメータをモデル化する。平成 30 年度は、2-5nm の空間分解能を有する FIB-SEM で取得した触媒層三次元電極構造を対象に反応輸送解析を行い、内部の反応抵抗や物質輸送抵抗に起因する電圧損失（過電圧）を 10mV 程度の精度で予測する。

#### (d) PEFC 膜電極接合体 (MEA) のナノ構造・機能解析（立教大・物材機構）

立教大で研究開発を進めてきた全重点課題中で唯一のフラグメント分子軌道 (FMO) 法プログラム ABINIT-MP を用いて、高分子の粗視化シミュレーション (OCTA で実行可能な散逸粒子動力学 (DPD) など) の有効相互作用 ( $\chi$ ) パラメータを非経験的かつ定量的に算定する手法を確立し、Nafion や PEEK などの電解質膜の合理的設計に適用する。また、ABINIT-MP と物材機構で開発を進めてきた密度汎関数 (DFT) プログラム PHASE/0 を連携活用し、PEFC の三相界面構造・機能解析のための実用的 MSS (Multi-Scale Simulation) 基盤を構築する。これにより、Pt クラスターとカーボン担体を含む三相界面の構造モデリングを実施した上で、PEFC 性能を大きく左右するアイオノマーの輸送機構解析（プロトン伝導・ガス拡散特性評価）を行い、メゾ～マクロシミュレーションで用いられる含水量に対する物質輸送係数との関係について界面構造とバルク膜構造における水チャンネル構造等の相違点を明らかにする。

実験的な計測・評価が困難である電極内三相界面に関して、非経験的な有効パラメータのみに基づく Pt 触媒・担体・電解質を含めた三相界面の構造モデリングと機能解析、さらに合理的な設計への展開は、世界的にも例のないチャレンジングな研究開発課題であり、サイエンス的にも大きな価値があ

る。

平成 29 年度は、フラグメント分子軌道 (FMO) 法プログラム ABINIT-MP を用いて、高分子粗視化シミュレーションの有効相互作用 ( $\chi$ ) パラメータを非経験的かつ定量的に算定する手法を確立して相互作用パラメータ算出ワークフローシステムとしてまとめ、さらに膜電極接合体における水クラスター構造を再現するプロトコルを構築する。また、得られたメゾレベルの数値指標を項目(c)の九大グループのマクロ系のシミュレーションに転用することも試みる。平成 30 年度は、密度汎関数 (DFT) プログラム PHASE/0 を連携活用し、PEFC の三相界面構造と機能を解析するための統合的シミュレーションを実施する。平成 31 年度は、膜電極接合体の合理的な設計とポスト京利用を想定した V&V 総合評価を行う。

### (3) 目標・期待される成果

#### 【アウトプット成果】

(平成 29 年度終了時) :

PEFC では、セル流路内の 0.1~1 mm オーダーの水滴からスタック内の数 10cm オーダーの複雑な二相流動の予測が実現できる。大規模二相流コードと流動様式の DB については当該分野における計算例は存在せず、実験計測では困難であった実機 PEFC 内二相流動の解析により、発電均一化・安定化に向けたセル形状設計、作動条件設計のための主要アプリとして活用できる。電極解析では実材料スケール (10  $\mu$ m 前後) における反応不均一性と物質輸送の連成効果を再現するシミュレーション技術が実現される。また、実験計測が困難とされる MEA 内のナノ界面構造モデリングと輸送特性との相関把握、ナノレベルの非経験的計算に基づいた高分子メゾ構造の高精度予測による電解質の合理的評価が可能となる。

SOFC では、10 年間の信頼性を短時間に評価できる技術、具体的には、電極過電圧および構造変化の評価に必要となる解像度である格子サイズ 10 nm 以下、計算領域として電極反応が実質的に進行する領域サイズである 20  $\mu$ m 以上、実験に換算して 9 万時間 (10 年) に相当する 3 次元シミュレーション技術が実現される。

(本格実施フェーズ終了時) :

PEFC スタックの高出力密度化・低コスト化 (出力密度 4kW/L 以上、Pt 使用量 0.1g/kW 以下) に貢献するセル・電極設計シミュレーション技術を開発。SOFC 電極の高耐久性実現 (15 年以上に相当する SOFC 耐久性評価) に貢献できる電極 3 次元シミュレーション技術を開発。

燃料電池メーカーの数が限られていることから、当プロジェクトで作成するアプリケーションはユーザーのニーズに直結したカスタマイズが必要であるが、NEDO プロジェクト等を通じて、燃料電池メーカーとの情報交換を活発に行っており、プロジェクト終了時にはメーカーへ展開する準備は整っている。さらに、サブ課題 B と全体推進で連携して開発を進めている散逸粒子動力学法 (DPD) 計算に必要な  $\chi$  パラメータを FMO 計算から算定する相互作用パラメータ算出ワークフローのシステム FCEWS (Fragment molecular orbital-based Chi-parameter Evaluation Workflow System) を、「計算工学ナビ」のサイトから提供する予定である。

本サブ課題では、中間評価時点で論文数 4 本 (査読有 3 本)、学会発表数 30 件 (招待講演 3 件) であった。中間評価以降から本格実施フェーズ終了時までの間の達成目標としては、論文 10 本 (半

数は国際ジャーナル論文)、学会発表数 28 件 (半数は国際会議)、解説等論文 1 件を目指す。

(ポスト「京」運用開始 5 年後) :

PEFC については、実機 PEFC スタックの高出力密度化・コスト低減 (出力密度 4kW/L 以上、Pt 使用量 0.1g/kW 以下) に向けたセル・電極設計に貢献できるシミュレーション技術が実現される。SOFC については、15 年以上に相当する耐久性評価が可能な 3 次元シミュレーション技術が実現される。

#### 【アウトカム成果】

(ポスト「京」運用開始 5 年後) :

本成果が産業界において実際の燃料電池電極およびセル・スタックの評価に適用されるようになり、高性能化によるコスト低減・耐久性向上のための設計ツールとして認知されるようになる。

(ポスト「京」運用開始 10 年後) :

本成果が当該分野の設計ツールとして産業界において活用されるようになる。

#### (4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

燃料電池の流路内二相流計算については、0.1~1 mm オーダーの水滴を捕捉できる解像度 (10  $\mu$ m ~ 数 10  $\mu$ m) で数千万規模のメッシュを用いた実績があるが、実機セルからスタックを対象とするには計算規模が不足している。自動車用の実機セルからスタックの定量的な挙動を評価するためには 20 枚程度のセルを積層したショートスタックまでを対象とすることが必要であり、同等の解像度では数十~百億メッシュ規模が想定される。本プロジェクトでは、実際のセル・スタック設計で求められる精度を実現するために必要なメッシュ規模についても実験等による検証を通じて明らかにする。さらには流路・マニホールドの構造条件、供給ガス流量・出力密度の運転条件等、検討すべき条件が広範であることから、セルレベルからスタック全体の挙動を評価する二相流動解析による設計条件のパラメトリック評価はポスト「京」で初めて可能となる。また、SOFC 電極構造変化を予測するフェーズフィールド計算においては、 $256^3$  個のメッシュを用いて GPU による約 2 万時間実験相当の計算が可能となっているが、解像度と計算領域ともに不足している。界面格子サイズ 10 nm 以下、電極厚み 20  $\mu$ m の計算領域、実験 9 万時間 (10 年間) に相当する大規模な 3 次元電極シミュレーションは、ポスト「京」で初めて可能となる。PEFC の電極構造と過電圧を予測する計算においても SOFC と同レベルの解像度と計算領域が要求される。

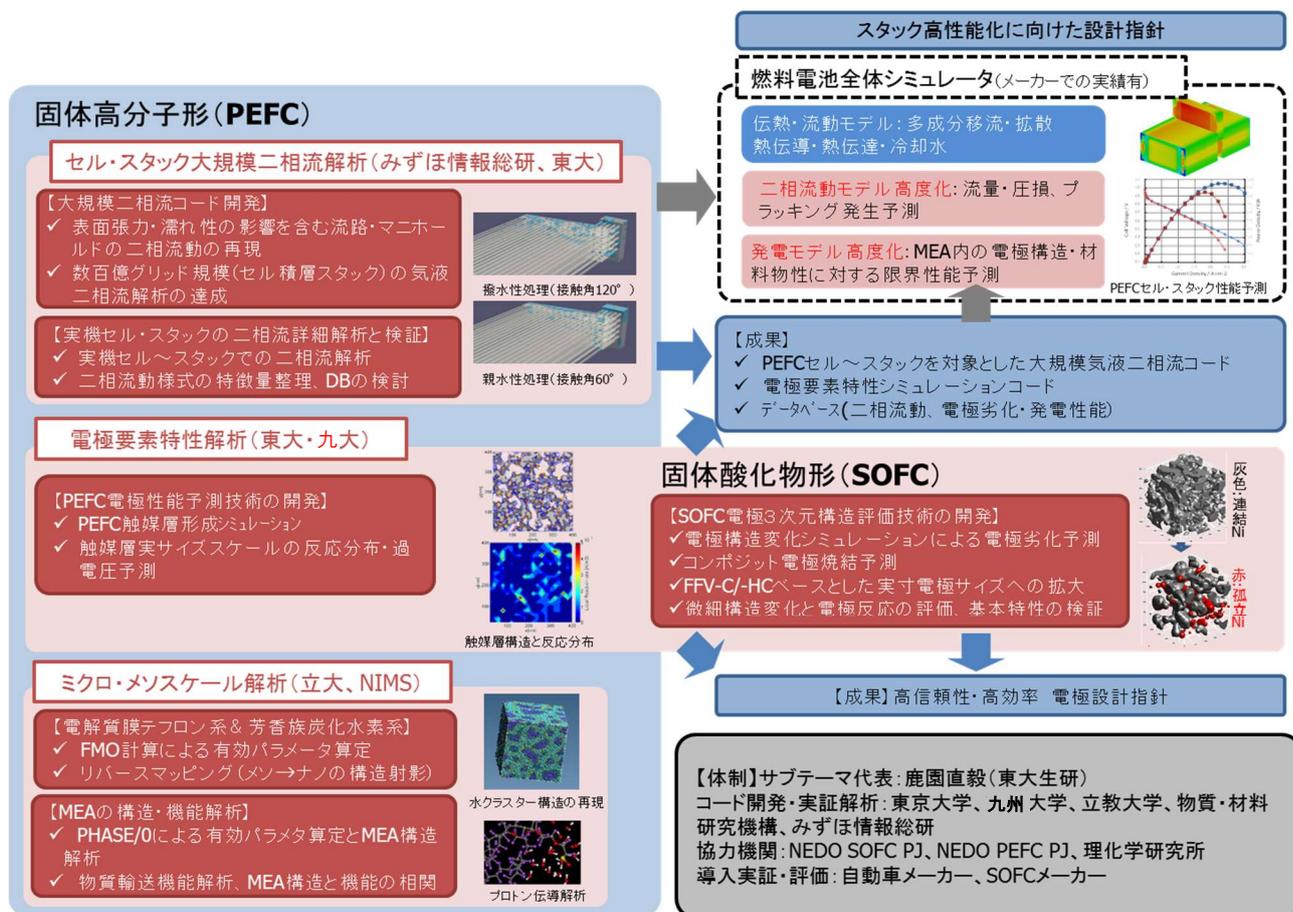
さらに、PEFC 電極内は Pt 触媒と担体および電解質 (アイオノマー) の複雑な三相界面構造を有し、ナノスケールの現象解明が電極の性能および耐久性向上の鍵となっている。しかし、その界面構造における物質輸送特性、機械的強度や化学的安定性などへの指針を検討するためには、ポスト「京」が可能とする同時並行的なジョブ実行 (capacity computing) を踏まえたナノレベルでの電子状態解析やパラメータスタディを含め、実在系の界面構造モデリングを含めた超大規模解析が必要となる。

#### (5) 実施体制

東京大学、理化学研究所、みずほ情報総研、九州大学、立教大学、物質・材料研究機構が分担機関となり、セル・スタック大規模二相流解析、電極要素特性解析および三相界面構造の機能解析を実施する。協力機関として、自動車メーカー (予定)、SOFC メーカー (予定) が参画し、設計プロセス高度

化による燃料電池の性能および信頼性向上を図る。産業界単独では、ポスト「京」の性能を十分に引き出す並列ソフトウェア開発は困難であり、国費の支援によるソフトウェア開発を行った上でメーカーでの適用を図る必要がある。メーカーからのニーズに基づいて共通の課題を抽出した上で、本サブ課題の分担機関が標準ソフト開発を行う体制とするが、ソフトウェアの開発段階において各メーカーの課題に対応したシミュレーションを実施し、開発プロセスにフィードバックさせる。

また、東京大学 (SOFC)、九州大学 (PEFC) が参画している NEDO 技術開発プロジェクト (固体酸化物形燃料電池等実用化推進技術開発、固体高分子形燃料電池利用高度化技術開発事業) においては、電極評価のための計測・解析手法の開発を目的としているが、計算機環境の制約から、電極の一部を切り出した比較的小規模な評価となっている。本サブ課題では、NEDO プロジェクトの成果となる電極解析手法を大規模並列化することで、実電極規模まで計算領域を拡大することができるようになる。



## (6) 必要計算資源

これまでの「京」や他の計算資源実績を基礎として、今後の解析規模の拡大 (計算格子点数で 100~1000 倍程度) を考慮すると、以下の計算資源が必要となる。

アプリケーション開発実施時に必要な「京」の計算資源量: 975 万ノード時間/年

- (A) セルレベル二相流解 80 万ノード時間/年
- (B) スタック全体二相流解析 240 万ノード時間/年
- (C) 焼結予測 1032 ノード×200 時間×5 ケース = 103.2 万ノード時間/年
- (D) 過電圧評価 1032 ノード×200 時間×5 ケース = 103.2 万ノード時間/年

- (E) 構造最適化 1032 ノード×200 時間×3 ケース = 61.92 万ノード時間／年
- (F) その他：チューニング、デバッグ等 50 万ノード時間／年
- (G) MEA 構造解析：157 万ノード時間／年
- (H) MEA 機能解析：180 万ノード時間／年

## 2-3. 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

### (1) 目的・意義

持続的なクリーンエネルギー供給システムを実現するためには、再生可能エネルギーがキーテクノロジーの一つである。再生可能エネルギーの中でも風力発電は欧米および中国で導入が進んでおり、近年欧州では立地制約の克服のため洋上へ展開され、3～5MW クラスの大型風車 50～150 機からなる大型洋上ウィンドファームが建設されている。我が国でも風力発電の導入は着実に進んでおり、日本風力発電協会によると国内では 2020 年までに 50 万 kW、2030 年には 760 万 kW の洋上ウィンドファーム建設が可能との試算がある。大規模な洋上ウィンドファームでは、立地の制約上（輸送・施工、港湾区域、航路、漁協権など）、風車を格子状に配置する 경우가多く、上流側風車の後流（ウェイク）の影響のため下流側風車において数 10%もの発電量低下や乱流増加のための疲労荷重の増加が問題となっている。欧州の洋上ウィンドファームでは、ファーム内の増速機を全て交換した例もある。プロジェクトの事業性を評価するためには、ウィンドファームの設計開発において風車同士の流れの干渉に伴う発電性能低下、および疲労評価を高い精度で予測する必要がある。風車後流予測モデルは欧米で開発が行われているが、簡易な工学モデルが使われており、解析の不確かさはウィンドファームによっては年間発電量の予測誤差が 5%～30%程度もあり、プロジェクトの採算性・健全性を担保するためには精度の高い予測モデルの開発が求められている。さらに加えて、我が国では、立地制約や環境条件（台風による強風および複雑地形の影響を受けた高乱流の陸風等）が欧州よりも厳しく、上述した欧米で洋上ウィンドファームの設計に用いられている評価手法をそのまま適用することは適切ではなく、我が国に適した、風車後流や大気境界層の変動風が洋上ウィンドファームの発電性能およびブレードやロータの信頼性に及ぼす影響を高精度に評価・設計する手法の構築が喫緊の課題である。

本サブ課題では、我が国において 2020 年代に複数建設される洋上ウィンドファームの高効率化を実現するためのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムの研究開発を行う。開発メンバーは、乱流解析（FFB、LANS-3D）、複雑地形乱流解析（RIAM-COMPACT）、大規模構造解析（ADVENTURE）、並列流体構造連成解析（REVOCAP）、および風車性能の評価・環境アセスに関する十分な実績・実務経験、企業開発経験を持っており、これまでの解析経験をもとにポスト「京」の計算資源を活用した大規模解析システムを開発することにより、風力分野のデファクトスタンダードとなる発電性能や構造信頼性の評価に活用できるソフトウェアを開発する。本システムにより、大型風車および洋上ウィンドファームの開発・設計を支援し、日本の風力発電産業の国際競争力強化に貢献する。

### (2) 実施内容

洋上ウィンドファームの発電性能予測、構造信頼性評価、風車単体性能の改善に注力したマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション技術の開発研究を実施する。

#### (a) 風車模型スケール解析（豊橋技術科学大学）

大気乱流、風車後流を考慮した風車周りの流れ解析、および発電性能評価を行い、ウィンドファーム

の発電量や疲労荷重低減など風車性能向上を実現するシステムを提案するための基礎検討を行う。具体的には、風車模型スケールの解析と実験を行い、模型スケールでの妥当性検討を行う。

(b) 大規模洋上風車解析技術、特に後流影響の高精度評価技術の開発（東大生産技術研究所）

2台の大型風車を数100m～1kmの間隔を空けてタンデムに配置し、上流側配置の風車の後流が、下流側配置の風車の発電性能に与える影響を高精度に評価するため、FFBを用いた大規模流体解析（ブレード周りの10～20mmオーダーの渦を解像しながら後流の発生プロセスを評価し、さらに数100m～1kmオーダーの後流の伝搬を解析する）技術の開発と高速化を行う。また、翼スケールの実験と解析を行いFFBに実装する壁モデルの性能検証を行う。（使用ソフト：FFB）

なお、大規模洋上風車の風車ブレードレイノルズ数は $10^7$ オーダーであり、境界層厚さはコード長（5m程度）の2%程度であり、最小渦スケールは10ミクロンのオーダーである。現在の計算リソース（「京」コンピュータ）では、1機当たりの格子点数を100億規模としても翼面付近の格子アスペクト比が大きくなりすぎるため、微細渦構造を正確に求めることは難しい。高レイノルズ数翼の境界層に関する課題は、重点課題⑧の航空機解析でも同様の課題であり、重点課題⑧で提案される壁モデルをFFBに適用（重点課題⑥⑧間の連携）し、風車の後流解析の高精度化を行うとともに、壁モデルによるリソースの低減効果を確認する。

また、プロジェクト前半において諮問委員会で指摘された、浮体式洋上風車の場合に海面変動による風車の揺動の与える影響については、空力弾性連成を考慮した動的機構解析ツールFASTを用いて風車および浮体の連成解析を行い検討した結果、タワーや浮体の揺動はほとんど浮体式洋上風車の発電性能に影響がないことが示された。このため、後流の影響を評価するための大規模CFD解析および流体構造連成振動解析においては、基本的に揺動の影響を直接的には考慮しないこととした。ただし、風車揺動の影響を含めたマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーション解析技術に関する検討は引き続き行うこととする。

(c) 流体構造連成振動解析による風車ブレードの信頼性評価の高精度化（東大工学系研究科）

上流側配置および下流側配置の大型風車に対するブレードの複合材料構造特性を考慮した流体構造連成振動解析技術を開発し、風車ブレードの振動応答、応力発生を解析し、ブレードおよびロータの構造信頼性評価を高精度化する。（使用ソフト：FFB、ADVENTURE、REVOCAP）

(d) 洋上ウィンドファーム全体の高精度流れ解析（九州大学）

ウィンドファームに配置される多風向に対する多数の風車の後流および大気境界層の影響を考慮した大規模風況解析（大規模並列かつ多風向[16ないし24方位]）システムの構築を行う。また、本解析と豊橋技科大・東大生研で実施する風車周りの流れ解析（FFBによる実機風車2台を長距離離してタンデムに配置した大規模風車解析）を連携する。なお、本ウィンドファーム全体解析においては、個々の風車モデルに簡易的なモデルを用い、多数の風車の後流の相互干渉および地域特有の風況を考慮して年間発電量を予測することになるが、加えて、項目(b)で行う後流影響評価のための大規模流体解析の結果を活用し、ここで用いる簡易風車モデルの精度向上に関する検討を行う。（使用ソフト：RIAM-COMPACT HPC版）

(e) 先進流体制御技術およびロバスト性を考慮した空力・空力音響解析技術の構築（JAXA）（平成28年度で完了）

大規模数値解析技術を開発、利用することで、風車ブレードに取り付けたマイクロデバイスを利用し

た高効率な動的流体制御による翼性能改善技術を開発する。（使用ソフト：LANS3D）

(f) シミュレーションシステムの検証および実用化のための調査およびデータ提供（風力エネルギー研究所）

本サブ課題において開発するシミュレーションシステムの有効性検証のために、欧米のウィンドファーム情報の調査とデータ提供、および国内で想定される洋上ウィンドファームの仮想的なデータ提供を解析担当機関に行う。

(g) 洋上ウィンドファームの発電量評価精度向上への寄与度を考慮し、風車相互干渉、気象解析との連携、流体構造連成振動・損傷、海面変動による風車揺動の影響を検討する（全機関）

本サブ課題を推進するにあたり、チャレンジングな点、V&Vプロセス、実用化プロセスは次の通りである。

#### ・チャレンジングな点

風車が多数設置される洋上ウィンドファームは、立地の制約のため、風車が格子状に配置される場合が多い。格子状に配置された場合、卓越風向においても風上に設置された風車の後流の影響を受ける風下の風車の発電性能は低下する。このため、ウィンドファームの風車群の発電性能評価では、風車間の相互干渉を正確に計算する必要がある。CFDにより複数の風車を含んだ解析を実施するためには、ウィンドファーム全体を囲む広大な空間（横数km×縦10km×高さ0.5km）に対して、風車ブレード周りの境界層を解像するためには平均25cm（ブレード周りでは数mm）の詳細な計算格子を配置し計算する必要がある。大型風車一基であれば横0.5km×縦2km×高さ0.5kmの空間の計算に必要な計算格子は300億グリッドである。風車一基の計算（300億グリッド規模）であれば「京」を用いれば計算可能であったが、風車の相互干渉を精密に評価するためには、複数の風車をブレード直径Dの約2.5～10倍の距離を空けて配置し、上流側配置の風車からの後流の発生と後流の長距離（2.5D～10D）伝搬と、下流側風車への影響評価を計算する必要があったため、大規模メッシュによる数千万時間ステップの長時間積分が必要であり、これまでの計算機では実現が不可能であった。

ポスト「京」を活用してこれら全てのスケールの効果を取り込んだ大規模かつ超精密な計算を実現することは、数値流体力学分野において学術的観点からも飛躍的な進歩をもたらす。

#### ・V&Vプロセス

本サブ課題で対象とする大型風車について、実スケール風車のロータ・ナセル・タワー全体に対する精密な流体力学的評価と疲労特性評価を行った事例は極めて限られている。そこで、本サブ課題では、風力の研究分野で広く研究が行われており、詳細な形状データ、材料データなどが入手可能な、米国NREL（National Renewable Energy Laboratory）の5MW風車を複数機並べたものを対象として、シミュレーションを行い、風車後流の影響評価と、ブレードの疲労特性評価手法の第一段階の適用性検証を実施する。それと並行して、国内の大型洋上風車メーカーとの連携体制の構築を目指し、風車メーカーのニーズにマッチした風車の解析・設計ツールの構築を目指す。

#### ・実用化プロセス

FFB や ADVENTURE などのアプリケーション単体はすでに実用化や産業界への適用が進められているが、本サブ課題で研究開発される洋上ウィンドファームの発電性能予測シミュレーションシステムについても、産業界との連携協力体制のもとに適用性検証を実施しながら、実機風車の解析・設計ツールとして普及を図っていく。具体的に RIAM-Compact は、すでに国内風力発電業界の標準風況解析コードとして認知、活用されている。それを並列大規模化、多風向同時解析を実現するウィンドファーム用並列風況解析コード RIAM-Compact HPC 版は、特定のアプリケーションに特化しているもの、産業界ユーザーと密接に連携しながら研究開発を進めており、ユーザーニーズに応じてカスタマイズすることも可能である。

### (3) 目標・期待される成果

#### 【アウトプット成果】

- ・平成 29 年度終了時
  - ・大型風車の相互干渉解析手法の確立 (FFB)
  - ・流体・構造連成振動解析 (片連成) による風車ブレードの振動応答、応力解析技術の開発 (FFB-ADVENTURE、REVOCAP)
  - ・洋上ウィンドファーム全体のシミュレーションの大規模並列化と多風向同時解析技術の開発 (RIAM-COMPACT HPC 版)
  - ・高度流体制御技術による風車性能の改善手法の提案 (LANS3D) (平成 28 年度で完了)

#### ・本格実施フェーズ終了時

洋上ウィンドファームの後流と大気境界層の影響を考慮した発電性能予測および流体構造連成振動解析 (双方向) によるブレードの信頼性評価を行う、マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションシステムを開発する。日本近海の海洋風況を考慮した風車性能の予測ツールの開発を行う。また、高度流体制御技術を用いて、風車の空力性能を改善する手法を提案する (平成 28 年度で完了)。

本サブ課題では、中間評価時点で論文数 3 本 (査読有 1 本)、学会発表数 31 件であった。中間評価以降から本格実施フェーズ終了時までの間の達成目標としては、論文 15 本 (半数は国際ジャーナル論文)、学会発表数 45 件 (半数は国際会議)、解説等論文 1 件を目指す。

#### 【アウトカム成果】

(ポスト「京」運用開始 5 年後) :

- ・ウィンドファームの発電量予測 (誤差 10%以下)
- ・ウィンドファームにおけるロータ応力解析 (流体・構造連成解析)
- ・高効率流体制御手法の開発 (性能改善効果 10%以下)
- ・ウィンドファーム用風車の発電コスト低減案を産業界に向けて提案する。

(ポスト「京」運用開始 10 年後) :

大規模洋上ウィンドファームの年間発電量の予測システムの実用化を行う。また、ウィンドファームにおける風車の寿命予測を可能とする。

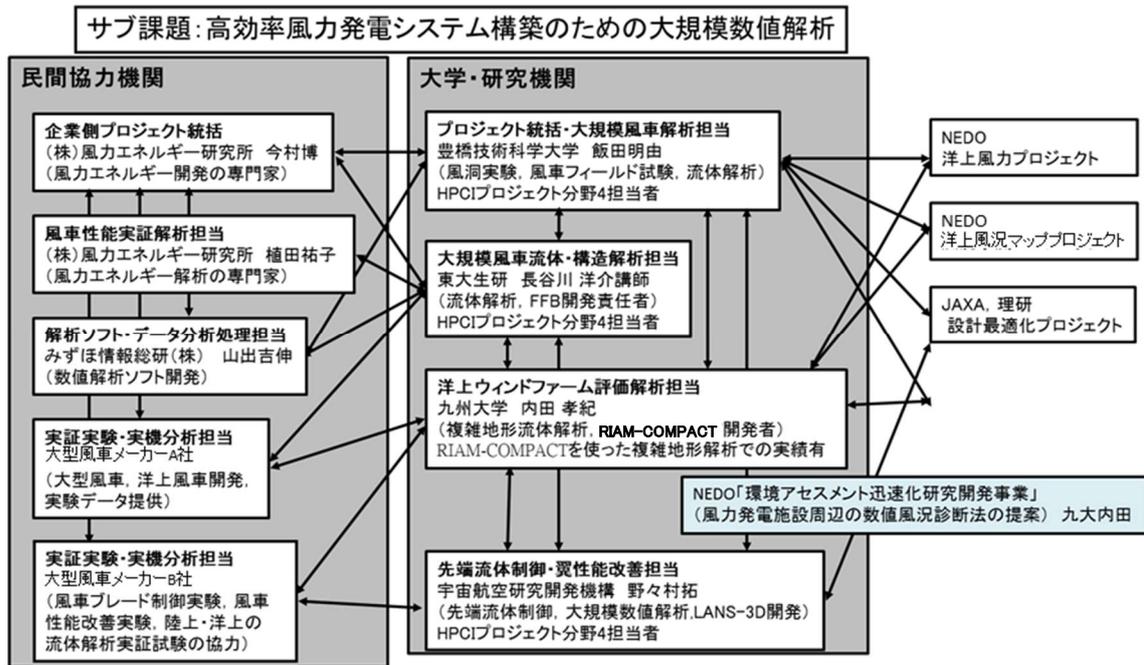
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

「京」でできていること:ロータ、ナセル、タワーを含む大型風車単体の大規模な非定常解析が可能となり、さらに流体構造連成振動解析(片連成)による小型風車(等方均質材料モデル)の構造解析も可能となっている。また、地形の影響を考慮した非定常解析が可能となった。しかし、実機の洋上ウィンドファームのような大型風車群の後流や大気境界層を考慮した流れ解析やそれを基礎とするウィンドファームの適切な配置設計に活用できる解析は実現できていない。

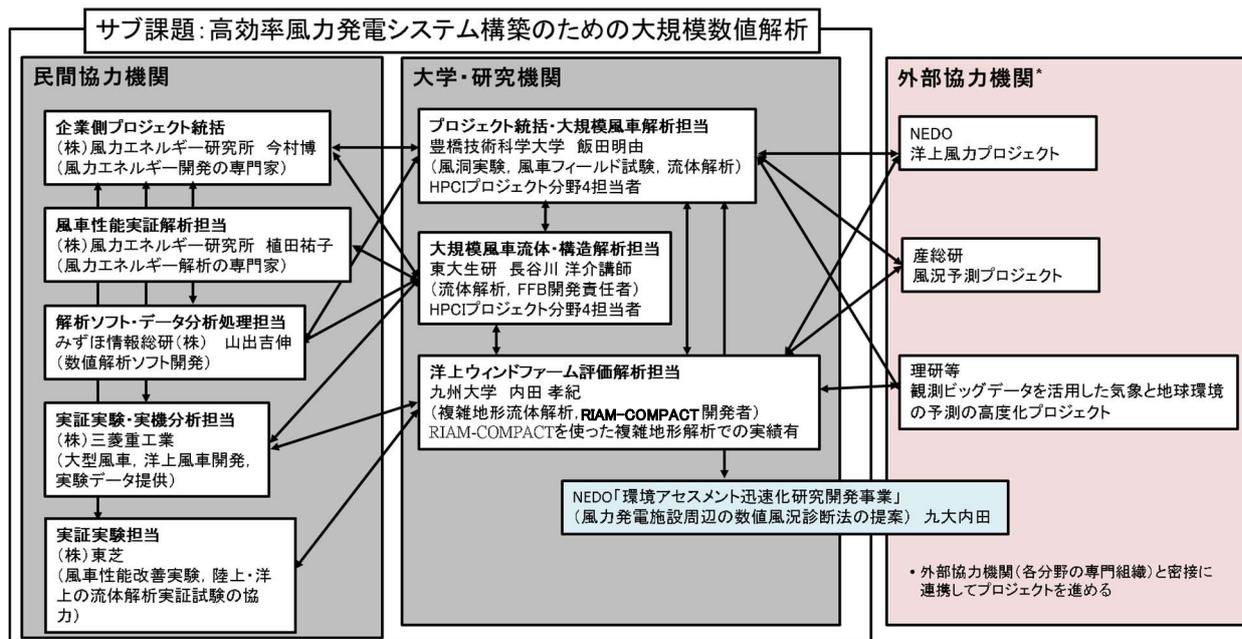
ポスト「京」でなければできないこと:大気境界層、地形、ブレード周りに及ぶマルチスケールを考慮した大規模洋上ウィンドファームにおける風車間の流れの相互干渉の解析は現状では確立されておらず、ポスト「京」での解析で初めて実現できる。この技術により実環境下における風車の解析を行い、発電量の向上、ブレードの寿命改善、低コスト化が可能となり、風力発電プロジェクトごとに発電コストをミニマムにする設計手法を実現することにより、我が国における風力発電の導入促進および風力発電産業の競争力向上に貢献する。

(5) 実施体制

大学・研究機関を中核として、民間協力機関、外部協力機関と連携し、ウィンドファームの実用化においてポスト「京」の技術を活用する体制を構築する。大規模数値解析に関しては戦略分野4での研究実績があり、また、本サブ課題に関連したテーマとして、たとえば、分担者の一人である九州大学内田はNEDO「環境アセスメント迅速化研究開発事業」に課題名「風力発電施設周辺の数値風況診断法の提案」を提案するなど、本サブ課題の実用化に向けて他の機関とも積極的に連携を進めていく予定である。このように、各分担機関には十分な設備、人員、実績がある。各機関の成果・進捗等は代表機関が一元管理することにより、プロジェクトが円滑に推進できるようにする。



平成28年度までの実施体制



平成29～31年度の実施体制

### (6) 必要計算資源

これまでの京における実績および解析規模の拡大から以下の計算資源を必要とする。

アプリケーション開発実施時に必要な「京」の計算資源量：750万ノード時間/年

平成28年度まで

- (A) 風車単体解析：250万ノード時間/年
- (B) ウィンドファーム解析：300万ノード時間/年
- (C) 先端流体制御解析：200万ノード時間/年

平成29年度以降

- (A) 風車単体解析：450万ノード時間/年
- (B) ウィンドファーム解析：300万ノード時間/年

### (7) 平成28年度までの成果と、平成29年度からの体制変更について

サブ課題Cのテーマの一つである「高度流体制御技術を用いた風車性能の改善」については分担機関である宇宙航空研究開発機構が研究を推進した。具体的には、(1)流体制御用ソフトの開発、(2)ポスト京へ向けたチューニング、(3)流体制御技術の開発を行い、平成28年度末までに以下のような成果が得られた。

動的失速の流れ場での効率向上の可能性および静的な風車翼素まわり流れをボルテックスジェネレータ型に置いたプラズマアクチュエータで良く制御できることを明らかにした。これらの結果により流体制御により風車単体性能の向上の可能性を示すことができた。また実際の大型風車のブレードで利用されている断面形状の動的失速のシミュレーションおよび静止翼まわりの流れのシミュレーションを行い、これらの解析の信頼性を明らかにしつつ流体制御の効果を確かめた。詳細は、平成28年度までの成果報

告書を参照されたい。

これらの課題を推進することにより、回転する風車翼の制御技術、解析技術を確立することができた。すでに企業により実際の風車にプラズマアクチュエータを取り付けた実証実験(1年間)も行われており、本解析技術は実用レベルとなっている。また、この技術は航空機などの他の分野にも応用が可能である。

「高度流体制御技術を用いた風車性能の改善」に関しては、諮問委員会からいくつか提起された課題、事業者側からの新たな課題、提案を受け、限られた資源の中で成果を効率的に上げるため、実施内容を精査した結果、風車の単体性能の向上は、洋上風車の実用化において重要な技術課題ではあるものの、HPCIを用いた風車性能評価システムを確立すれば、個別の案件として実施することも可能であり、計画全体に及ぼす影響は小さく、風車相互干渉、気象解析との連携、流体構造連成振動・損傷、海面変動による風車揺動の発電量評価精度への影響という、より優先度の高い課題にリソースを集中し研究を実施することとし、当技術改善については平成 29 年度以降の研究課題からはずし、実施体制を変更することとした。

## 2-4. サブ課題 D. 核融合炉の炉心設計

### (1) 目的・意義

核融合炉は①燃料(重水素、リチウム)が無尽蔵かつ世界中で利用可能、②低環境負荷(低炭素、低レベル放射性廃棄物)、③原理的に爆発事故やメルトダウンが発生しない、といった特徴から、環境・エネルギー問題を根本的に解決しうる長期代替クリーンエネルギー源と期待されている。その科学的・工学的実証を目指して 2025 年から運転が開始される ITER は「エネルギー基本計画」における戦略的技術課題に位置づけられている。本サブ課題の目的は核融合炉の炉心設計の中核をなす核燃焼プラズマ解析コードを開発し、炉心運転条件を探索する上で必要となるプラズマ解析技術を確立することである。この解析技術を活用し、現在設定されている ITER の標準運転条件の妥当性を検証するとともに、さらに炉心運転条件を向上することによって ITER の目標達成をプロアクティブに支援することが可能となる。しかしながら、ITER は既存実験と比べて炉心体積やエネルギー閉じ込め時間(炉心からエネルギーが散逸する特性時間)といった時空間スケールが一桁大きく、さらに、重水素、三重水素、ヘリウムを含む多種イオン系、核反応生成アルファ粒子による炉心プラズマの自己加熱といった核燃焼プラズマ固有の新たな物理効果を含むため、ITER 炉心プラズマにおける乱流現象や磁気流体(MHD)現象の 5 次元第一原理計算(ボルツマン方程式)はポスト「京」によって初めて実現可能となるサイエンス的に極めてチャレンジングな課題である。このような核燃焼プラズマ解析を実現するには、多数の演算コアから構成される将来のエクサスケールアーキテクチャに適した計算手法を確立すること、および、多種イオン系のプラズマ乱流輸送や高エネルギー粒子輸送といった核燃焼プラズマ解析において鍵となる物理現象を高精度に再現できる計算モデルを確立すること、すなわち、開発コードの V&V がクリティカルな問題である。本サブ課題でベースとするプラズマコードはノード並列化に関してはすでに「京」全系の強スケーリングを達成して SC13 の受賞を獲得した実績があるが、本サブ課題では、さらにメニーコアプロセッサにおける最適化技術を開発することによって 1000 万コア級のハイブリッド並列処理技術を実現する。V&V に関しては、JT-60 や LHD といった国内大型実験プロジェクトと緊密に連携した実証研究によって計算モデルの信頼性を検証するとともに高精度化を図る。これにより、世界に先駆けて ITER の核燃焼プラズマ解析に必要な計算手法と計算モデルの確立を目

指す。

なお、本サブ課題では人材育成と開発コードの普及について次のように考えている。国内大型実験プロジェクトと連携した実証研究を通じて開発コードの利用実績を蓄積しながら国内ユーザーを育成し、開発コードの普及を図る。これと同時に、ITER 機構の支援の下で活動している国際トカマク物理活動 (ITPA:International Tokamak Physics Activity) における ITER の物理課題検討に貢献することによって開発コードの国際競争力を向上させる。ITER 実験を主導するには国際競争力の高い核燃焼プラズマ解析コードに裏付けられた実験提案が必要不可欠であることから、本サブ課題には ITER への投資効果を最大化し、我が国の核融合エネルギー開発を加速する上でも大変重要な意義がある。また、将来の原型炉や商用炉の炉心設計においても ITER で実績のある国際競争力の高い核燃焼プラズマコードが必須となるため、本サブ課題で推進する実証研究や ITPA への貢献といった取り組みはコード実用化への重要なプロセスとなる。

## (2) 実施内容

磁場閉じ込め型の核融合炉では約 1 億度の燃料プラズマをトーラス状の磁場で閉じ込めて核融合反応を持続させる。燃料プラズマ中の重水素と三重水素の核融合反応によって発生する 3.5MeV のヘリウム (アルファ粒子) は磁場に閉じ込められて燃料プラズマを自己加熱し、最終的に低エネルギーのヘリウム灰として炉心から排気される。このシステムの性能は核融合出力  $P_F$  と運転に必要なエネルギー  $P_H$  の比  $Q=P_F/P_H$  で定義され、ITER は  $Q=10$  を目標としている。この目標性能を達成する上で以下の炉心運転条件が重要となる。

- ・ 燃料純度を低下させるヘリウム灰や不純物の蓄積を回避し、高い炉心出力  $P_F$  を維持すること。
- ・ 炉心からのエネルギーの散逸を低減して、運転エネルギー  $P_H$  を最小化すること。
- ・ 炉心を自己加熱するアルファ粒子を効率的に閉じ込めて、運転エネルギー  $P_H$  を最小化すること。

たとえば、ITER 標準運転条件では 4.3% のヘリウムの蓄積が想定されているが、この比率を 50% 低減できれば炉心出力は約 20% 向上する。また、炉心からのエネルギーの散逸やアルファ粒子の損失を抑制できれば、より小さい運転エネルギー  $P_H$  で核融合反応に必要な高温状態を維持することが可能となる。したがって、閉じ込め磁場構造、プラズマ加熱、燃料供給等の工学的パラメータを制御して炉心運転条件を向上することは、核融合炉の発電コストに直結する重要課題である。

炉心運転条件はプラズマの乱流現象や磁気流体現象の非線形過程によって支配されているため理論的な評価が難しく、従来の炉心設計では実験データベースに基づく経験則が用いられてきた。しかしながら、既存装置では核燃焼のない単一イオン種の水素プラズマ、もしくは、重水素プラズマによる模擬実験が行われてきたのに対し、ITER では重水素、三重水素、ヘリウム等を含む多種イオン系の核燃焼プラズマ実験が実現し、炉心体積やエネルギー閉じ込め時間といった時空間スケールも既存実験より一桁大きいものとなる。このギャップを埋めて、ITER の炉心運転条件をより確かなものにするためには、5 次元第一原理モデルに基づく炉心設計手法を確立し、従来の経験則による炉心設計をポスト「京」における第一原理計算で再検証する必要がある。

本サブ課題では既存プラズマコードをベースとして物理モデル拡張、計算技術開発、実証研究を推進し、ポスト「京」において ITER の解析を可能とする核燃焼プラズマ解析コードを開発する。この目標達成に向けて、以下の目標に取り組む。

本サブ課題では以下の3つのプラズマコードをベースとして核燃焼プラズマ解析コードを開発する。

- ・ 大域的乱流輸送解析コード：GT5D（実施機関：JAEA）
- ・ 局所的乱流輸送解析コード：GKV（実施機関：名大）
- ・ 高エネルギー粒子閉じ込め解析コード：MEGA（実施機関：NIFS）

核融合プラズマの標準的な第一原理モデルは5次元位相空間（空間3次元×速度2次元）におけるプラズマ粒子分布の非線形発展を記述する移流・拡散方程式（ボルツマン方程式）で与えられる。GT5DとGKVはどちらもこの5次元第一原理モデルを格子法（CFD法）で計算し、プラズマ乱流によるプラズマ粒子やエネルギーの輸送を解析する。GT5Dが炉心プラズマ全体を計算領域とする大域的モデルによる数値実験を行うのに対し、GKVは一本の磁力線に沿った局所領域をモデル化した局所的モデルによって乱流輸送を解析するため、比較的計算コストが小さい。GT5DとGKVはこれまで既存装置における単一イオン種の模擬実験を対象として開発されてきたが、本サブ課題では、これらを燃料となる重水素と三重水素、核融合反応で発生するヘリウム、および、構造材から放出される様々な不純物を含む多種イオン系（最大10種）に拡張する。これによって電荷中性条件の拘束下で無撞着に決定される燃料とヘリウム灰、不純物の複雑な乱流輸送、および、衝突性輸送を第一原理計算で評価するとともに、多種イオン系のプラズマ乱流によるエネルギー輸送特性も評価できるようになる。

一方、MEGAは炉心プラズマに対しては大域的モデルのMHD方程式を格子法で計算し、アルファ粒子等の高エネルギー粒子に対する5次元第一原理モデルを粒子法で計算することにより高エネルギー粒子が駆動するMHD現象、および、それによる高エネルギー粒子の輸送を解析する。MEGAはこれまで既存装置における単一加熱粒子ビーム入射実験において励起されるMHD現象を対象として開発されてきたが、本サブ課題ではこれを加熱粒子ビーム（重水素）に加えて核反応で発生するアルファ粒子が混在するITERの運転条件に拡張する。さらに、これまでMHD方程式で計算してきた炉心プラズマの挙動を多種イオン系の5次元第一原理モデルで取り扱うことにより、多種イオンの相互作用を厳密に考慮しつつ、多様な位相空間分布をもつ高エネルギー粒子が励起するMHD現象の解析を可能とする。

以上の研究開発においては、乱流輸送解析の高度化とエクサスケール計算技術の開発が大きな割合を占めるため、それぞれの主担当となっている名大とJAEAにおいてポスドク各1名の採用を予定している。また、ポスドク以外にも本サブ課題における最先端のコード開発や実証研究に学生等の若手研究者を積極的に参画させることによって、計算機科学から数学、物理、実験まで見渡せる次世代のコード開発者の育成を目指す。

以下に本サブ課題におけるV&Vプロセス、実用化プロセス、アプリ開発における目標性能を具体的に説明する。

#### ・ V&V プロセス

JT-60、LHD等の国内大型実験プロジェクトと連携して開発コードの実証研究を実施する。これに向けて各プロジェクトの実験研究者と議論を行い、平成27年度よりNIFSの「大型ヘリカル装置（LHD）実験共同研究」、および、JAEAの「トカマク炉心プラズマ共同研究」を実施し、緊密な連携体制を構築した。具体的な実証研究の内容は以下の通り。

乱流輸送解析に関しては、計算コストが比較的小さく、機動性の高いGKVを用いてJT-60、および、

LHD の実験データを系統的に解析する。解析にあたっては、従来から比較を進めている水素プラズマ、あるいは、重水素プラズマにおける熱輸送係数に加えて、ヘリウム等、ITER で想定される不純物を入射した模擬実験における各イオン種の粒子輸送係数や熱輸送係数を実験データと比較することによって、開発コードの妥当性を検証する。さらに、これらの実験解析結果に基づき、乱流輸送係数の簡易的な評価を可能とする乱流輸送モデルを構築する。

一方、計算コストが大きい GT5D に関しては、GKV で系統的に調べた実験データのうちの代表的なケースを対象として数値実験を行うことにより、輸送係数だけでなく大域的なプラズマの温度分布や密度分布の構造を実験データと比較する。また、計測誤差の影響を受けやすいプラズマの密度分布や温度分布、および、そこから評価される輸送係数だけでなく、よりロバストな評価が可能なエネルギー閉じ込め時間の粒子種や装置サイズに対する経験則を評価することによって開発コードの妥当性を検証する。

高エネルギー粒子閉じ込め解析に関しては、これまで主に JT-60 の加熱粒子ビーム入射実験で進めてきた実証研究を LHD の実験データにも拡張する。2次元トーラス形状磁場の JT-60 に比べて3次元トーラス形状磁場の LHD の実形状磁場を用いる場合には MHD モードのスペクトル構造が複雑化するため、高い計算精度が求められる。このため、3次元トーラス形状磁場に特有の粒子軌道に着目して、LHD 実験における MHD 現象の実証研究を推進する。これに加えて、LHD では磁場に対して接線方向と垂直方向の粒子ビームを組み合わせる重水素の加熱粒子ビーム入射実験が平成 28 年度より計画されていることから、多様な位相空間分布をもつ高エネルギー粒子が混在する状況で励起される MHD 現象に対する実証研究も推進する。

#### ・実用化プロセス

本サブ課題で開発している3つのプラズマ解析コード GT5D、GKV、MEGA はいずれも国内外の実験装置を対象とする実証研究の実績を蓄積し、主要国際会議で招待講演を獲得する等、世界的な解析コードとして核融合分野で認知されてきた。これらのコードをさらに核融合分野における標準的コードとして発展させることを狙って、以下の取り組みを推進する。国内大型実験プロジェクトと連携した実証研究では、各コードの開発者が実験研究者と共同で計算誤差や計測誤差を評価しつつ開発コードの V&V を進めることにより、実験研究者へのコード普及を促進する。これにより、開発コードを新たな実験提案に活用し、LHD や JT-60 における高性能プラズマ開発に貢献することが可能となる。これ以外にも、開発コードを実験データ解析や炉設計において広く活用することを目指して、コードのオープンソース化、解析事例の公開、あるいは、実験研究者や炉設計技術者を対象としたセミナーといったコード普及のための取り組みを名大が主担当となって推進する。このような国内の取り組みと並行して、ITPA における ITER 物理課題検討やコード間ベンチマークといった国際的な取り組みを積極的に推進することによって開発コードの国際競争力を向上する。本サブ課題ではコード開発と実証研究によって核融合炉の炉心運転条件を探索する上で必要なプラズマ解析技術を確立し、さらに、開発コードの普及、国際的競争力向上のための取り組みを推進することによって、ITER の標準運転条件の妥当性検証や新たな実験提案に活用できる核燃焼プラズマ解析コードの実用化を図る。

#### ・アプリ開発の目標性能

これまで解析対象としてきた既存装置と比べて、ITER は炉心体積やエネルギー閉じ込め時間といった時空間スケールが一桁大きくなるため、計算コストの大幅な増大が見込まれる。これに加えて、核燃焼プラズマ解析では粒子種の数に比例して計算コストが増大するため、ITER 炉心プラズマの 5 次元第一原理計算にはポスト「京」が必須となる。

乱流輸送解析コード GT5D、GKV については、多次元領域分割モデルや通信隠蔽技術といった先進的な超並列処理技術の開発によって、すでに「京」全系での強スケーリングを対ピーク性能比約 10%で達成している。本サブ課題では、さらにメニーコアプロセッサに対する最適化技術を開発することによって 1000 万コア級の強スケーリングを実現するハイブリッド並列処理技術を実現する。これに加え、時間ステップを制約している高速な電子運動の陰解法ソルバを、省通信クリロフ部分空間解法等の先進的な計算スキームを用いて開発し、計算コストの削減と処理効率の向上を図る。

高エネルギー粒子閉じ込め解析コード MEGA についてはこれまでに「京」1 万ノード規模の強スケーリングを達成しているが、主要なコストを占める粒子法部分の対ピーク性能比が 5%程度に留まっている。この問題を解決するために、「京」で対ピーク性能比約 20%を達成しているプラズマ粒子コード PARMER (神戸大、NIFS 等) や米国のプラズマ粒子コード XGC1 (プリンストン大学) 等、国内外の主要粒子コードと連携した最適化技術開発による性能向上の可能性を検討する。時間スケールの問題に関しては、MEGA は陽解法を用いているが、準定常的に発展する乱流現象と異なり間欠的な励起と安定化を繰り返す MHD 現象の特徴を利用して、MHD 現象が励起されるフェーズのみに高コストな Particle-In-Cell 法を適用するマルチフェーズ法を開発する。

上記のコード開発に加えて、プロジェクト後半ではエクサスケール計算データの可視化解析技術の開発も実施する。また本サブ課題で開発する行列ソルバやデータ可視化解析技術は他分野、特に構造格子系の計算を実施するサブ課題 B のメゾスケールの電極計算においても利用可能な共通基盤技術となりうる。全体推進との連携の下で、これらを行列計算ライブラリや可視化解析ツールとして整備し、オープンソースとして公開することによって、サブ課題間、さらには、重点課題間で共通基盤技術の展開を図る。

### (3) 目標・期待される成果

#### 【アウトプット成果】

平成 29 年度終了時：

- ・既存装置における単一イオン種の水素プラズマ、もしくは、重水素プラズマによる模擬実験を解析対象として開発されてきた乱流輸送解析コード GT5D、GKV、および、高エネルギー粒子閉じ込め解析コード MEGA を核燃焼プラズマ解析で必要となる多種イオン系 (最大 10 種類) に拡張し、開発した計算モデルの理論的妥当性を検証する。
- ・メニーコアプロセッサ向け最適化技術、電子運動の陰解法ソルバ、粒子・流体マルチフェーズ法といったエクサスケール計算に向けた要素技術の開発を完了し、その有効性を検証する。

本格実施フェーズ終了時：

- ・プロジェクト前半で開発した多種イオン系の乱流輸送解析、および、高エネルギー粒子閉じ込め解析のための計算モデルを統合し、さらに JT-60、LHD 等の国内大型実験プロジェクトと連携した実証研究によって開発コードの V&V を実施することにより、ITER の核燃焼プラズマ解析に必要となる計算モ

デルを確立する。評価精度としては、実験的計測誤差やデータベースが含むデータ分散と同程度の評価誤差を目標とする。具体的な実証研究の目標としては、乱流輸送解析では、大域的電場の効果を含めて多種イオン系の輸送解析精度を向上する。平成 30 年度は改良モデルの精度検証を実施し、平成 31 年度は LHD における実証研究を実施する。高エネルギー粒子閉じ込め解析に関しては、長時間スケールの間欠的 MHD 現象の再現を目指す。平成 30 年度はトカマク装置、平成 31 年度は LHD における実証研究を実施する。

- ・同時に、上記シミュレーションコードに関して、エクサスケール計算に向けた要素技術を統合し、ポスト「京」(プロトタイプ機)全系規模までの強スケールリング実現に向けた研究開発を行うとともに、エクサスケール計算データの可視化解析技術を開発する。以上の取り組みにより、世界最先端の計算精度と計算性能をもつ国産核燃焼プラズマ解析コードを完成させ、ポスト「京」を活用した ITER 計画への貢献を可能とする。

- ・本サブ課題では、中間評価時点で論文数 15 本(査読有 15 本)、学会発表数 116 件(招待講演 12 件)、プレスリリース 1 件の成果を創出し、6 件の学会賞を獲得するなど、国内外から高い評価を得ている。中間評価以降から本格実施フェーズ終了時までの間の達成目標としては、これとほぼ同数の論文 15 本、学会発表数 120 件を目指す。

ポスト「京」運用開始 5 年後：

- ・ポスト「京」を用いた ITER の核燃焼プラズマ解析において実験条件あたり 10~100 ケースの系統的なパラメータスキャンを行い、標準運転条件の定常炉心 (~10ms) における乱流輸送特性、および、アルファ粒子閉じ込め特性それぞれについて、設計の妥当性を検証するとともに、さらなる高性能炉心開発に向けた理論的指針を示す。具体的には、まず、アルファ粒子による自己加熱によって決まる炉心プラズマの位相空間構造を明らかにし、その上で、摂動磁場、加熱粒子ビーム入射、電磁場による加熱といったアクチュエータによる直接的制御、あるいは、アクチュエータによる乱流現象や MHD 現象の変化を介した間接的制御による位相空間構造の制御性を明らかにすることを目指す。このような熱平衡から離れた速度空間構造の非線形な制御を必要とする工学系は核融合分野特有のものであり、サイエンス的な価値が高い。ITER の制御手法開発に必要なシミュレーションは、現在、「京」で実施している既存装置を対象とするシミュレーションの 10-1000 倍の計算規模となるため、ポスト「京」で初めてできる画期的な利活用である。

#### 【アウトカム成果】

(ポスト「京」運用開始 5 年後)：

- ・ポスト「京」を用いた ITER の核燃焼プラズマ解析によって定常炉心運転条件の向上に向けた理論的指針を示す。これにより、ITER 実験を主導する標準的なコードとしての国際的地位を確立する。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。

(ポスト「京」運用開始 10 年後)：

- ・ITER の核燃焼プラズマ実験における定常炉心の乱流輸送特性、および、アルファ粒子閉じ込め特性に対する実証研究が様々な実験条件で進展し、核燃焼プラズマ解析コードの信頼性がさらに向上する。

ITER の次の段階で計画されている原型炉（商用炉）では ITER より一桁大きい核融合出力を想定していることから、炉心パラメータのギャップを埋めて、より確度の高い炉心設計を行うには第一原理計算に基づく信頼性の高い核燃焼プラズマ解析コードが必要不可欠となっている。また、炉心設計の様々な技術的要求に対応してコードを改良するには、物理モデルから数値計算手法のレベルまで内容が把握できる国産炉心設計コード、および、それを支える人材の存在が極めて重要となる。このため、本サブ課題で開発する核燃焼プラズマ解析コードは、我が国の核融合炉開発における主要アプリとなり、長期的に産業界に大きな波及効果をもたらす。

#### （４）「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと

（「京」でできていること）

乱流輸送解析に関しては、JT-60、LHD 等の既存装置における単一イオン種の水素プラズマ、もしくは、重水素プラズマの模擬実験の解析を「京」や Helios (1.5PF) を用いて行い、熱輸送特性の定量的比較が進展した。また、「京」をフル活用した超大規模計算（500 万ノード時間/ショット）によって単一イオン種の乱流輸送解析を ITER 規模の装置サイズ、および、イオン-電子系のマルチスケール乱流に拡張し、ITER で重要なプラズマ乱流輸送の装置サイズスケーリングや電子熱輸送の物理機構を提示した。

高エネルギー粒子閉じ込め解析に関しては、JT-60 等の既存装置における単一加熱粒子ビーム入射実験の解析を Helios (1.5PF) 上で行い、実験で観測された MHD 現象の磁場揺動データの定量的比較が進展した。

（ポスト「京」でなければならないこと）

乱流輸送解析に関しては、開発する核燃焼プラズマ解析コードは ITER 規模の装置サイズで最大 10 種の多種イオン系を取り扱うとともに、乱流輸送データベースの構築のために一つの実験条件（磁場配位）に対して 100 ケース程度のパラメータスキャンが必要となる。このため、現在、「京」1 万ノード規模（約 1PF）で実行しているプロダクションランの 10-1000 倍規模の計算が必要となる。

高エネルギー粒子閉じ込め解析に関しては、開発する核燃焼プラズマ解析コードでは既存装置より一桁大きい炉心体積の ITER 規模の装置サイズで最大 3 種の高エネルギー粒子を取り扱う。このため、現在、Helios 千ノード規模（約 0.35PF）で実行しているプロダクションランの 30-1000 倍規模の計算が必要となる。

したがって、開発する核燃焼プラズマ解析コードについて、ポスト「京」を用いることで初めて ITER の解析が実現する。ポスト「京」を活用することによって ITER 実験における我が国の優位性を高めるとともに、ITER の次の段階で計画されている原型炉設計において、より確度の高い炉心設計を行うことが可能となり、核融合炉の早期実用化に貢献できる。

#### （５）実施体制

本サブ課題では各分担機関で 3 つのプラズマコード、GT5D（主担当 JAEA）、GKV（主担当名大）、MEGA（主担当 NIFS）の開発を推進するが、これにあたり、エクサスケール計算技術開発（主担当 JAEA）、乱流輸送解析（主担当名大）、高エネルギー粒子閉じ込め解析（主担当 NIFS）を担当する 3 つのチー

ムを設定し、マトリックス状の実施体制によって、コード間、および、課題間の連携・協調を図る。

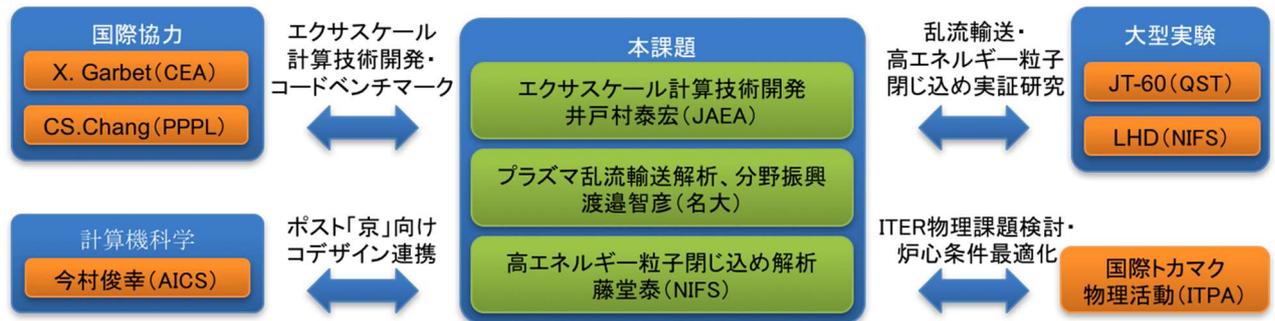
コード普及や人材育成といった分野振興（主担当名大）としては、コードのオープンソース化や解析事例の公開を推進するとともに、実験研究者や炉設計技術者を対象としたセミナーを実施する。また、本サブ課題における最先端のコード開発や実証研究にポストドクや学生等の若手研究者を積極的に参画させることによって、計算機科学から数学、物理、実験まで見渡せる人材の育成を目指す。

実証研究については、JT-60、LHD 等の国内大型実験プロジェクトと連携して開発コードの信頼性向上を図るとともに、開発コードを各プロジェクトの高性能プラズマ開発に活用する。連携体制を具体化すべく各プロジェクトの実験研究者と議論を行い、平成 27 年度より NIFS の「大型ヘリカル装置（LHD）実験共同研究」、および、JAEA の「トカマク炉心プラズマ共同研究」を実施し、緊密な連携体制を構築した。また、平成 28 年度からは実証研究の推進を目的として実験研究者が本サブ課題に参画することも予定している。

ITER の物理課題検討を進めている国際トカマク物理活動（ITPA）への参画に関しては、乱流輸送解析、および、高エネルギー粒子閉じ込め解析のタスクグループの日本委員と議論を行い、平成 27 年度より本サブ課題メンバーが専門家会合に参画している。

エクサスケール計算技術開発に関しては、欧米の主要なエクサスケール核融合シミュレーションプロジェクトを推進しているプリンストン大学プラズマ物理研究所（PPPL, C. S. Chang/ Managing Principal Research Physicist, PI of SciDAC-3 EPSI）、フランス原子力庁（CEA, X. Garbet/Research Director）との連携体制を構築し、最先端のプラズマシミュレーション技術に関する情報交換を行うことによりエクサスケール計算技術開発を加速する。この目的のために、名大が中心となって日米科学技術協力事業核融合分野に基づく日米協力体制を構築し、平成 27 年度よりエクサスケール核融合シミュレーション開発に関する日米協力ワークショップを開始した。日欧協力に関しては、CEA-JAEA 連携協定に基づいて CEA で開発中のプラズマ乱流解析コード GYSELA を JAEA に導入し、FX100、MIC、GPU といったメニーコアプロセッサにおける処理性能のコード間ベンチマークを開始した。

また、ポスト「京」に特化したエクサスケール計算技術開発に関しては、理研 AICS が主催するコデザイン SUBWG に参画して情報収集を行うとともに、ポスト「京」に向けた大規模数値計算手法の開発を理研 AICS（今村俊幸/大規模並列数値計算技術研究チームリーダー）と連携して実施している。



※QST: 量子科学技術研究開発機構（旧 JAEA）

## （6）必要計算資源

アプリケーション開発実施時に必要な「京」の計算資源量：550 万ノード時間／年

計算資源は主に LHD や JT-60 における実証研究に利用する。「京」における既存装置の計算コストは GKV

が JT-60 で約 1 万ノード時間/ショット、LHD で約 50 万ノード時間/ショット、GT5D が JT-60 で約 100 万ノード時間/ショット (LHD は未実施)、MEGA が JT-60 で約 10 万ノード時間/ショット、LHD で約 100 万ノード時間/ショットとなっていることから、各コードで年間平均 2~3 ショット程度の解析を実行するために「京」の資源を約 550 万ノード時間/年を必要とする。これに加えて、FX100、MIC、GPU 等の最先端のメニーコアプロセッサにおけるコード開発を実施するために「京」以外の資源を約 40 万ノード時間/年を必要とする。

## 2-5. 全体推進

4 つの出口 (石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電、核融合炉炉心設計) を有する本重点課題を効率的かつ効果的に推進するため、重点課題責任者の管理のもとに、全体推進として次のタスクを推進する。

タスク 1 : プロジェクト管理 (会計・総務・連絡・調整等) 事務

タスク 2 : 大型計算機資源の確保・同資源のサブ課題間の調整

タスク 3 : アプリケーション研究開発における共通の課題の推進

このタスクには、次のような内容が含まれる。プロジェクト出口であるエネルギー源としては、それぞれに独立したものであるが、その中核をなす物理現象 (構造、流体、熱、電磁気、材料劣化等) や克服すべきシミュレーション課題 (ベクトル・マトリックス演算、マルチフィジクス性、マルチスケール性、パラメトリック計算、最適解探索、コデザイン、実機レベルの V&V など) に、多くの共通点がある。このため、出口 (エネルギー源) の多様性、個別性に十分に配慮しながらも、アプリケーション研究開発レベルにおいて、十分にサブ課題間の連携をとることにより、各サブ課題を単独で遂行することに比して、大きな相乗効果を生むように重点課題全体の全体推進を図る。また、この観点から、重点課題⑧とは共通する主要アプリも多いことから、アプリケーション研究開発においては重点課題⑥、⑧間でも十分な連携体制をとることとした。

### (1) コデザインについて

平成 26 年度から平成 27 年度においては、ADVENTURE が重点課題⑥におけるターゲットアプリとして、また、FFB が重点課題⑧におけるターゲットアプリとしてコデザインが推進されたが、平成 28 年度以降は、コデザイン文書の公開に合わせて、そのノウハウを活用しながら、REVOCAP\_Coupler、FFR-Comb 等の他のアプリケーションに順次コデザインを展開していく。なお、コデザインの進捗状況は、重点課題全体のコデザインに関する委員会において、確認される

### (2) マルチフィジクス連成と V&V

複数のマクロシミュレーションを連成させるプラットフォームのベースとして、東京大学において開発が進められてきた REVOCAP\_Coupler を活用し研究開発を行い、特にサブ課題 A においては FFR-Comb - REVOCAP\_Coupler - ADVENTURE\_Thermal、Solid 連携、サブ課題 C においては FFB - REVOCAP\_Coupler - ADVENTURE\_Solid 連成を実現し、それぞれのサブ課題のターゲット課題のシミュレーションを行う。具体的に REVOCAP\_Coupler の機能向上やチューニングは全体推進で行い、基本的な問題に対する動作確認・性能推定、実応用と V&V は、2-1、2-3 節で述べたようにサブ課題 A において石炭ガス化炉を解き、サブ課題 C において大型風車の解析を行うことにより実施する。なお、マルチフィジクス連成は、サブ課

題 B や D においても共通の課題であるので、REVOCAP\_Coupler の直接的活用のみならず、REVOCAP\_Coupler の研究開発・利用を通して習得されたマルチフィジクス連成のノウハウやアルゴリズム（分離反復連成や、異なる離散化モデル（FEM、FVM 等）間でのデータ通信時の各種物理量の保存等）の要素的活用も推進し、サブ課題 B や D の推進に資する。さらに、複数のシミュレータのマルチフィジクス連成における V&V においても、その共通事項を整理し、重点課題⑥全体で共有する。また、この成果は、重点課題⑧とも共有する。この成果は、今後のエクサスケールコンピューティング時代の知識基盤として公表する。

### （3）マルチスケール連携と V&V

マイクロあるいはメゾやマクロのシミュレーションを連携するマルチスケール連携については、汎用化ツールを構築することはなかなか難しいものの、異なるスケールをブリッジングしていく際のノウハウや留意点をまとめ共有化することは大変有効である。本重点課題においては、サブ課題 B において、ABINIT-MP と OCTA の連携（相互作用パラメータ算出ワークフロー）、PHASE/0 と古典的 MD の連携（ポテンシャル算出ワークフロー）、ナノスケールシミュレーションから得られる物性値のメゾスケール電極シミュレーションへの反映、電極要素解析結果やセル・スタックの二相流動解析結果の燃料電池全体性能シミュレータへのリンク等の研究開発が行われ、サブ課題 C においては、風車ブレード周りの乱流解析、風車後流の影響を考慮したウィンドファームの乱流解析、大気境界層における乱流解析のマルチスケール連携に関する研究開発が行われる。そこで、これらの連携方法や V&V に関するノウハウや留意点をまとめ重点課題⑥⑧において共有できるようにする。この成果は、今後のエクサスケールコンピューティング時代の知識基盤として公表する。

### （4）大規模行列計算、データ可視化に関する連携

サブ課題 D で開発を進めている計算技術のうち、構造格子を対象とした行列ソルバやデータ可視化解析技術は他分野、特に構造格子系の計算を実施するサブ課題 B のメゾスケールの電極計算においても利用可能な共通基盤技術となりうる。全体推進との連携の下で、これらを行列計算ライブラリや可視化解析ツールとして整備し、オープンソースとして公開することによって、サブ課題間、さらには、重点課題間で共通基盤技術の展開を図る。

### （5）アプリケーションの普及活動と V&V

本重点課題で研究開発するアプリケーションの多くは、汎用コードとなっており、各サブ課題で扱う重点課題の解決に資するのみならず、様々な産業応用分野を有する。また、現存する産業応用分野の問題の解析を通して、開発アプリケーションの V&V を実行することも可能となる。アプリケーションの普及活動や産業界との双方向連携（ニーズの吸い上げと、シーズの提供）については、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会や FOCUS との定期的な会合を通じて推進するとともに、各アプリケーションが有するユーザーグループや産学官連携コンソーシアムなどを通じて推進する。全重点課題の中で唯一のフラグメント分子軌道 (FMO) 法プログラム ABINIT-MP については、その単体機能の一部拡充と V&V、普及推進を本「全体推進」の中で展開する。また以下のように重点課題⑥⑧間の連携を推進する。すなわち、省メモリ化と行列積演算 (DGEMM) 指向の徹底とともに、重点課題⑧で開発されている WHEEL（自動ジョブ投入・回収システム）を活用して、有効パラメータ算定や材料開発にとっては有益性の高い

capacity computing への親和性を高める。また、重点課題⑤の中で開発されているプログラム/モジュール（量子計算では SMASH（分子研の石村 Gr.）の中の一部計算モジュールの移植、また全原子古典 MD による検証では MODYLAS（名大の岡崎 Gr.）の利用を検討）の活用も適宜行いつつ機能拡充を図る。また、平成 28 年春に設立予定の産官学コンソーシアムを通じ、OCTA コミュニティやスーパーコンピューティング技術産業応用協議会との連携も図りつつ ABINIT-MP の産業応用を促進し、同時に V&V も推進する。

第一原理分子動力学プログラム PHASE/0 については、その単体機能の一部拡充と V&V、普及推進を本「全体推進」の中で展開する。演算量削減、徹底した演算並列化により第一原理分子動力学解析を大規模・長時間化するとともに、有効パラメータの適切化手法を高度化しメソスケール解析手法との連携を強化する。ものづくり現場と連携して、膜電極接合体に加えて省エネルギーデバイス等を想定した実材料のナノ構造・機能解析を実施し開発手法の実用性を実証しつつ、実績のある利用講習会、ワークショップ、ポータルサイト等の活動を通して PHASE/0 や ABINIT-MP の普及をさらに推進する。

この他サブ課題ごとに研究開発が進むアプリケーションの普及活動については、より具体的には次のように考えている。

サブ課題 A で研究開発が進む、有限体積法ベースの燃焼 LES 解析コード FFR-Comb、有限要素法ベースの汎用解析システム ADVENTURE（構造解析コード ADVENTURE\_Solid、熱伝導解析コード ADVENTURE\_Thermal）、全体推進で研究開発が進む並列連成カップラー-REVOCAP\_Coupler、サブ課題 B で研究開発が進む、フラグメント分子軌道法ベースの ABINIT-MP、第一原理分子動力学ベースの PHASE/0、サブ課題 C で研究開発が進む有限要素法ベースの LES 乱流解析コード FFB、構造解析コード ADVENTURE\_Solid（前出）、並列連成カップラー-REVOCAP\_Coupler（前出）は、いずれも汎用性を考慮したコードである。これらのアプリケーション群は、重点課題⑥プロジェクトの開始前（日本学術振興会未来開拓プロジェクト、文科省戦略的シミュレーションプロジェクト、同革新的シミュレーションプロジェクト、HPCI 戦略分野プロジェクト時代等）からすでにユーザー群をコンソーシアム形式でとりまとめたり、ソフトベンダーも巻き込んだ産学協体制のもとに研究開発や運用が行われている。このため重点課題⑥プロジェクトの成果は、個別サブ課題の解決に資するのみならず、これらの既設の産学連携体制を通じて産業界に普及していくことも予定されている。

汎用有限要素法解析システムである ADVENTURE については、本重点課題における開発のベースとして用いるオープンソース版と、商用版がある。オープンソース版、商用版ともにすでに広範な産業界での利用実績があるが、本重点課題の研究開発を通して新たに実装される非線形損傷解析機能（サブ課題 A）や複合材料解析機能（サブ課題 C）、ポスト「京」に向けた高速解析機能（コデザイン）、FFR-Comb や FFB との双方向マルチフィジクス連成解析機能（サブ課題 A、C）は、いずれも産業界にとっても大変魅力的な新機能である。その普及に関しては、ADVENTURE の定期セミナーおよびオープンソース版や商用版のユーザーネットワークを通じて、普及を図っていく予定である。なお、本研究開発においては、ADVENTURE 商用版の開発・販売を行っているソフトベンダーを、開発委託機関の一つとして取り込んでいるので、オープンソース版での成果を商用版へ展開する準備を事実上進めていることになる。

また、サブ課題 D で開発されている 3 種類のプラズマ解析コード GT5D、GKV、MEGA はいずれも世界的な解析コードとしてプラズマ物理、核融合分野で認知されているものである。これらは、現時点では産業界の一般ユーザーに活用されることは想定されていないものの、プラズマ物理、核融合分野において標準的コードとして活用されることを狙って、実機実験結果との比較を通じた V&V、解析事例公開、ユ

ユーザー向けセミナー、オープンソース化、実験研究者への提供等様々な活動を展開している。加えて、ITPA（国際トカマク物理活動）における ITER 物理課題検討やコード間ベンチマークといった国際的な取り組みを積極的に推進することによって開発コードの国際競争力の向上を図っている。

この他、サブ課題 B で研究開発が進められている PEFC や SOFC のメゾスケール電極解析コードや、サブ課題 C で開発が進められているウィンドファーム用並列風況解析コード RIAM-Compact HPC 版は、特定のアプリケーションに特化しているもの、それぞれの分野での産業界ユーザーと密接に連携しながら研究開発を進めており、ユーザーニーズに応じてカスタマイズすることも可能である。特に、RIAM-Compact は、すでに国内風力発電業界の標準風況解析コードとして認知され、活用されている。

また、サブ課題 B で研究開発が進められている燃料電池スタックの大規模気液二相流解析では、OpenFOAM ベースで研究開発を進めてきている。これは、小規模モデルながら産業界において OpenFOAM が燃料電池スタックの気液二相流解析への適用が進められてきたからであり、サブ課題 B において、解析精度と解析規模拡大に向けたソルバの研究開発と燃料電池特有の aspekto の大きい部材構造（面方向のサイズに対して厚み方向が 1/100 以下）に対して、専用の計算格子生成技術を開発するなど、格子生成等の前処理のユーザー負担を軽減することも進めており、その成果は即産業応用が可能である。さらに、サブ課題 B で開発が進められているアプリケーションについては、燃料電池メーカーの数が限られていることから、当プロジェクトで作成するアプリケーションはユーザーのニーズに直結したカスタマイズが必要であるが、NEDO プロジェクト等を通じて、燃料電池メーカーとの情報交換を活発に行っており、プロジェクト終了時にはメーカーへ展開する準備は整っている。また、サブ課題 B と全体推進で連携して開発を進めている散逸粒子動力学法（DPD）計算に必要となる $\chi$ パラメータを FMO 計算から算定するシステム FCEWS（Fragment molecular orbital-based Chi-parameter Evaluation Workflow System）を、「計算工学ナビ」のサイトから提供する予定である。

以上のように、本プロジェクトでは多種多様なコードの研究開発が進行しており、それぞれの特徴に配慮しながら、普及や産業応用を展開している。

## （6）必要計算資源

コード開発・検証は外部の計算機資源を用いて行うため、「京」の利用はない。また、個々のサブ課題における検証・実証計算はそれぞれのサブ課題の計算資源により行うこととする。

## （7）人材育成

本重点課題⑥においては、様々な観点から計算科学分野の人材育成にも取り組む。その取り組み内容は、大きく次の3種類に分けられる。

人材育成タイプ1：ポスドクなどの若手研究者・技術者を直接雇用し、プロジェクトへの直接的参画を通してポスト京アプリの研究開発および V&V の中核を担う人材を育成するケース。

人材育成タイプ2：分担研究者の所属する大学および研究所の研究室において学ぶ修士課程や博士課程の学生が、本研究プロジェクトの R&D の一部に係ることによって、近い将来、大学などや企業などにおいて計算科学分野の第1線を担うことになる研究者・技

術者の人材育成を行うケース。

人材育成タイプ3：開発アプリをサブ課題のターゲット分野の研究者、技術者が活用できるように講習会などを行うケース。

以下に、上記タイプ1～3の人材育成について具体的取り組みを記す。

人材育成タイプ1：サブ課題Aでは、5名のポスドクを雇用し、2名は高圧高温燃焼モデルの構築に従事させ、1名は固気液三相流モデルの構築に従事させ、1名は熱構造連成解析技術開発に従事させる。サブ課題Bでは、ポスドク1名を雇用し、燃料電池電極構造解析技術開発に従事させる。サブ課題Cでは、3名程度のポスドクおよび企業技術者に、企業ニーズを踏まえ、NRELの5MW風車をベースとした研究開発に従事させる。サブ課題Dでは、2名のポスドクをそれぞれ原子力研究機構、名大、核融合科学研で雇用し、原子力研究機構と名大においてはそれぞれで開発するアプリの物理モデル開発と実証研究に従事させる。

人材育成タイプ2：本研究に参画する研究者の研究室（東大、京大、名大、九大、豊橋技科大、立教大、原子力研究機構、物材機構、核融合科学研）に所属（指導委託を含む）する修士課程、博士課程の学生が、本重点課題⑥に一部係る研究分野において修士論文、博士論文の研究を実施する。

人材育成タイプ3：サブ課題Aでは、開発する主要アプリADVENTURE、FFR等はすでにフリーコードとともに商用コードも存在し、それぞれにユーザーグループを抱えているので、それらのネットワークをフル活用し、大学および企業ユーザーに対するセミナー／講習会を実施し、新規開発機能の産業資料の一層の促進を図る。サブ課題Bでは、企業研究者を東京大学の共同研究員、立教大学の研修員としてそれぞれ招き、開発アプリを利用できるように教育する。また、ABINIT-MPプログラム単体やOCTAとの連携などに関するハンズオン・セミナー／講習会などを行う。サブ課題Cでは、2年間を目途に洋上ウインドファームの適切化に関するアプリ技術開発に注力し、その間に研究会やセミナーにより企業ニーズを把握しつつ、3年目以降は企業の若手技術者にはOJTによりスキルを高めてもらい、最終的には企業の若手技術者が自らアプリ開発が可能なスキルを身につける。サブ課題Dでは、名大を中心として、コード普及に向けたオープンソース化、セミナー等の分野振興の取り組みを推進する。これに加えて、実証研究に実験研究者にも業務協力者として参画してもらおう。この過程においてコード開発者と、本サブ課題に関連する実験プロジェクトにおける実験研究者が共同でV&Vを行うことによって、実験研究者にもコードの専門知識を習得してもらおう。なお、どの分野でも共通することであるが、本重点課題⑥で開発するような最先端のコードにおいて計算結果の妥当性をユーザーが判断して使いこなすには、背景にある理論や計算手法の理解が不可欠となっているため、実証研究の取り組みを通して本事業と連携する実験プロジェクト側に高いレベルのユーザーを育成することが本格的なコードの活用、普及において重要だと考えている。

## （8）アウトプット成果

（本格実施フェーズ終了時）

全体推進では、中間評価時点で学会発表数3件であった。中間評価以降から本格実施フェーズ終了時までの間の達成目標としては、論文3本、学会発表数6件、解説等論文2件を目指す。

### 3. 採択時の留意事項への対応状況

対応済みの項目については特に個別記述の必要がないとのことであったが、対応状況を明確にするため以下に個々の指摘事項に対する対応を明記する。

#### 全体指摘事項：

(1) 課題全体として達成すべき成果を明確にするとともに、その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標および最終目標）を明確にすること。その際、目標設定においては、発電コストを意識し、シミュレーションによるコスト削減の効果についても明確にすること。

本重点課題では各サブ課題が対象とするエネルギー源ごとの特性を踏まえ、現実的かつバランスの取れたコスト削減、開発期間短縮の検討を行っている。平成 26 年度はサブ課題ごとの検討を実施し、平成 27 年度に重点課題全体としての検討結果を示し、その結果の一部を本実施計画改訂版の中にも記載した。

(2) 相乗効果が期待される他プロジェクト等と効果的に連携して取り組むとともに、役割分担を明確にすること。

まず、重点課題⑥内のサブ課題間の連携、特にアプリケーション研究開発の効果的、効率的推進の観点から連携体制、連携内容について明記した。

サブ課題 B（旧 B）とサブ課題 E（旧 E）の燃料電池課題については、新規にサブ課題 B として統合し、より強化を図った。特に、旧サブ課題 E が狙うマイクロ～メゾのシミュレーションを、明示的に燃料電池課題に組み込むことにより、マイクロ～メゾ～マクロのマルチスケールシミュレーションの手法の研究開発を明確にした。その上で、本重点課題⑥の新サブ課題 B では、既存材料を高度化することにより、燃料電池の高性能化を狙うという目標を明確化し、重点課題⑤および⑦の燃料電池関連研究の、革新的材料探索を目指す研究との差別化を明確化した。とはいえ、両者は決して排他的なものではない。本重点課題で研究開発するマイクロのアプリケーションは、ABINIT-MP と PHASE/0 であるが、重点課題⑤⑦で開発されるマイクロのアプリケーションを、本重点課題⑥でも連携利用することも計画している。

(3) シミュレーションで得られた成果を具現化することのできる実験研究者や産業界との連携体制を明確にすること。

革新的クリーンエネルギーシステムに関しては、すでに国策として数々の関連事業やハードウェア開発主体のプロジェクトが実施されている他、民間においても低炭素社会実現等へ向けた様々な産業的な努力が行われている。従来の進め方は、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・商用化へとスケールアップするのが基本であったが、本重点課題で取り上げた、石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電、核融合炉炉心設計においては、中核となる現象が多岐にわたりかつ大変複雑であることから、実証試験の実施のみで起こり得る現象を全て定量的に把握したり、適切な設計パラメータや稼働条件を見つけ出すことは困難となり、開発の効率化はなかなか困難であった。そこで、本重点課題においては、革新的クリーンエネルギーシステムの中核となる複雑な物理現象を、第一原理的解析を中核とするマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーションで詳細かつ定量的

に予測・評価できるようにすることにより、スケールアップに伴う予測性を大幅に高めると同時に、適切な設計パラメータや稼働条件の探索を実現することにより、革新的クリーンエネルギーシステムの実現化を大幅に効率化し加速することを可能とするものである。

一方、一般にシミュレーションにとって定量的な予測性を担保するためには、十分な V&V (Verification & Validation) を実施することが必須である。この観点から、現実に実験室規模の実験や実証試験等を遂行している国プロや民間企業とは、密に連携し、それらの実験条件のシミュレーションと実験結果やシミュレーション結果の比較を行うことが必要である。

以上のように、本重点課題で対象とするエネルギーシステムにおいて、大規模な国プロや実証試験と、本重点課題で研究開発する先進シミュレーションは相補的な関係にあり、これは本重点課題実施者のみならず、国プロ実施者や民間企業の担当者らも十分に認識している。ただし、このレベルになると、多くの機密事項が関連してくるので、サブ課題ごとに、適切に秘密保持契約などを結びながら、研究開発を進めていくこととしている。具体的な対応については、本実施計画書改訂版内に記載した。

(4) 開発したアプリケーションを産業界に広く展開していくために、ユーザーの利用環境や利用イメージを意識するとともに、市販アプリケーションとの差別化を明確にして開発に取り組む具体的な方針を明確にすること。その際、ADVENTURE の開発をオープンソース版ではなく商用版に基づいて実施することを検討した上で、産業界への展開を効率的に行うことのできる方針とすること。

ポスト「京」における自由な活用、一般への展開・普及ということを考えると、予定通り、オープンソース版で ADVENTURE の研究開発を行うことは合理的と考えている。一方、本研究開発においては、ADVENTURE 商用版の開発・販売を行っているソフトベンダーを、開発委託機関の一つとして取り込んでいるので、オープンソース版での成果を商用版へ展開する準備を事実上進めていることになる。また、本重点課題の全体責任者であり、ADVENTURE プロジェクトリーダーでもある吉村忍教授は、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会メンバーと、ポスト「京」開発アプリケーションの産業界への普及、および産業界のニーズの汲み取りに関する情報交換会を定期的実施しており、産業界への展開を効率的に進める準備を整えている。

(5) 各サブ課題の独立性が高いが、サブ課題間の連携や、同様なアプリケーションの共通基盤化を図る具体的な取り組みを明確にすること。

革新的クリーンエネルギーシステムとして、本重点課題では、石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電、核融合炉炉心設計、の4システムを対象として取り上げる。これらは、プロジェクト出口であるエネルギー源としてはそれぞれに独立したものであるが、その中核をなす物理現象(構造、流体、熱、電磁気、材料劣化等)や克服すべきシミュレーション課題(ベクトル・マトリックス演算のポスト「京」対応、マルチフィジクス連携、マルチスケール連携、多数のパラメトリック計算、最適解探索、コデザイン、実機レベルの試験結果を活用した V&V など)に、多くの共通点がある。このため、出口(エネルギー源)の多様性、個別性に十分に配慮しながらも、アプリケーション研究開発レベルにおいて、サブ課題間で十分な連携を図ることにより、各サブ課題を単独で遂行することに比して、大きな相乗効果を生むように重点課題全体の全体推進を図る。また、同様の観点から、重点課題⑧とも共通する主要アプリも多いことから、アプリケーション研究開発においては重点課題⑥⑧でも十分な

連携体制をとる。

なお、これまでの実施計画書においては、重点課題⑥⑧の連携を明示していたが、重点課題⑥内でのアプリケーション研究開発のサブ課題連携を明示していなかったため、本実施計画改訂版において、その点も明記した。

(8) 人件費の占める割合が大きいが、本プロジェクトで雇用する研究者（ポスドク等）の人員計画を明確にするとともに、将来のステップアップまで見据えた登用、人材育成の取り組みの計画を明確にすること。

サブ課題ごとに縛られず、重点課題全体としてポスドク等の雇用にあたっては、計算機科学から数学、物理、実験まで見渡せる重点課題全体での研究テーマを意識し、将来的に各研究機関のエクサスケールシミュレーションをリードできる人材の育成を目指す。本実施計画改訂版において、その点を明記した。

サブ課題ごとの指摘事項：

(6) 本提案のサブ課題 B については、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）において取り組まれる電池関連の研究開発ともコミュニケーションを図り、相乗効果を図ることのできる体制を明確にすること。

サブ課題 B（旧 B）とサブ課題 E（旧 E）の燃料電池課題については、新規にサブ課題 B として統合し、より強化を図った。特に、旧サブ課題 E が狙うマイクロ～メゾのシミュレーションを、明示的に燃料電池課題に組み込むことにより、マイクロ～メゾ～マクロのマルチスケールシミュレーションの手法の研究開発を明確にした。その上で、本重点課題⑥の新サブ課題 B では、既存材料を高度化することにより、燃料電池の高性能化を狙うという目標を明確化し、重点課題⑤および⑦の燃料電池関連研究の、革新的材料探索を目指す研究との差別化を明確化した。とはいえ、両者は決して排他的なものではない。本重点課題で研究開発するマイクロのアプリケーションは、ABINIT-MP と PHASE/0 であるが、重点課題⑤⑦で開発されるマイクロのアプリケーションを、本重点課題⑥でも連携利用することも計画している。

(7) 本提案のサブ課題 E について、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）と方法論に共通性があることから、重点課題間の効果的な連携や産業界との協力体制の一本化を検討した上で、体制を具体化すること。

サブ課題 B（旧 B）とサブ課題 E（旧 E）の燃料電池課題については、新規にサブ課題 B として統合し、より強化を図った。特に、旧サブ課題 E が狙うマイクロ～メゾのシミュレーションを、明示的に燃料電池課題に組み込むことにより、マイクロ～メゾ～マクロのマルチスケールシミュレーションの手法の研究開発を明確にした。その上で、本重点課題⑥の新サブ課題 B では、既存材料を高度化することにより、燃料電池の高性能化を狙うという目標を明確化し、重点課題⑤および⑦の燃料電池関連研究の、革新的材料探索を目指す研究との差別化を明確化した。とはいえ、両者は決して排他的なものではない。本重点課題で研究開発するマイクロのアプリケーションは、ABINIT-MP と PHASE/0 であるが、

重点課題⑤、⑦で開発されるマイクロのアプリケーションを、本重点課題⑥でも連携利用することも計画している。

#### 4. 中間評価における指摘事項への対応状況

1. 課題全体として達成すべき成果を明確にするとともに、その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）を明確にすること。その際、各サブ課題の進捗状況に基づいて、より優位性の高いクリーンエネルギーシステムの開発を選択的・戦略的に推進することを検討すること。

平成 29 年 5 月 29 日提出の実施計画の「1. 実施概要」に述べているように、本重点課題で取り上げている 4 システム（石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電、磁気閉じ込め核融合炉）はエネルギー源としてはそれぞれに独立したものであり、これまでは完全に独立した国プロジェクト等として推進が図られてきている。しかしながら、計算科学的な観点からこれらの 4 プロジェクトを俯瞰すると、その中核をなす物理現象（構造、流体、熱、電磁気、材料劣化等）や克服すべき計算科学的課題（ベクトル・マトリックス演算、マルチフィジクス性、マルチスケール性、パラメトリック計算、最適解探索、コデザイン、実機レベルの V&V(Verification & Validation)など）に、多くの共通点がある。したがって、計算科学的には独立して研究開発を進めるよりも、同一プロジェクトの傘下のもとで、連携して研究開発を進めることが効率的と判断し本プロジェクトを遂行している。ただし、連携した研究開発を具体的かつ効果的に進めるために、各エネルギーシステムを対象とする 4 サブ課題に加えて、全体に横串を通す全体推進、を設定し、遂行してきている。また、同様の観点から、重点課題⑧とは共通する主要アプリケーションも多いことから、アプリケーション研究開発レベルにおいて、重点課題⑥、⑧で協力して年に数回アプリケーション連携開発会議を実施するなど、十分な連携体制をとってきている。

ご指摘の点は、各エネルギーシステムを扱うサブ課題ごとの「達成すべき成果の明確化」、「その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）の明確化」、に留まらず、課題全体として、「達成すべき成果の明確化」、「その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）の明確化」を行うべき、と理解したので、具体的に以下のように対応していく。

一方、「各サブ課題の進捗状況に基づいて、より優先順位の高いクリーンエネルギーシステムの開発を選択的・戦略的に推進することを検討すること」、とのご指摘もあった。この点について、改めて本重点課題の「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」の観点からの研究開発戦略を述べる。本重点課題⑥で取り上げている 4 つのエネルギーシステムは、実用化までの時間スケジュールも、クリーンエネルギー源としての国家的・社会的な役割も異なっており、それぞれの優劣を単純に論じることは適切でないと考えている。これらの 4 つのエネルギーシステムに共通しているのは、エネルギー小国の日本にとっていずれも実現が望まれる重要なクリーンエネルギー源であり、計算科学プロジェクトとは独立して、大きな予算を投じて国家プロジェクト等として推進が図られているということである。また同時に、いずれもその中核の現象にマルチフィジクス、マルチスケール性が本質となる大変複雑な物理現象が介在しているにもかかわらず、既存の国家プロジェクト等の中では、実験研究主導で進められ、そうした本質的な課題に対する計算科学的取り組みがほとんどなされていないか、あるいは不十分である、という点も共通性がある。したがって、本重点課題⑥の中で、4 エネルギーシステムの計算科学的

課題を同時に扱うことは国費の戦略的活用という観点からも大変重要かつ意義があることと考えている。

確かに、平成 29 年夏に行われた中間評価の段階では、サブ課題ごとの進捗状況に差があることは実施者側としても十分に認識しているところである。しかし、それは、各サブ課題の計算科学プロジェクトとしての特性に差があるために、中間段階で現れている差にすぎないと考えている。したがって、4 エネルギーシステムのいずれかを選択するというアプローチではなく、サブ課題ごとの目標設定を精査し、その実現に向けた定量的・定性的目標を修正し、同時に全体推進機能をこれまで以上に強化し、課題全体としての目標設定を精査し、それに向けて強力に推進していくことで、十分に対応できると考えている。

以上が、本指摘に対する課題全体としての対応方針である。それを踏まえ、各サブ課題の対応と全体推進としての対応のポイントを以下に記す。ただし、年間目標等についてはここには記さず、本実施計画書の改訂版に具体的に反映している。

#### 【サブ課題 A】

サブ課題 A では、達成すべき成果を次のように設定する。

- ・実機実圧（亜臨界から超臨界圧まで）における燃焼・ガス化・粒子追跡・灰溶融（固気液三相）の第一原理的シミュレーション技術を実現する。（FrontFlow/red-Comb[FFR-Comb]の機能強化）
- ・実機実圧（亜臨界から超臨界圧まで）における燃焼等反応一炉構造内伝熱一冷却システム全体の非定常非線形マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを実現する。（FFR-Comb と ADVENTURE\_Thermal との双方向連成解析の実現、ADVENTURE\_Solid の非弾性解析機能強化、ADVENTURE\_Thermal から ADVENTURE\_Solid への片連成解析の実現）
- ・電力中央研究所石炭ガス化実験炉等と上記シミュレーションとの比較による統合シミュレーションレベルの V&V の実施。
- ・ポスト「京」を活用し実機のシミュレーションを実現するための準備作業（モデル作成、「京」等による予備解析等）

#### 【サブ課題 B】

サブ課題 B では、達成すべき成果を次のように設定する。

- ・固体高分子形燃料電池（PEFC）流路/GDL 界面からセルレベルの詳細気液二相流解析シミュレーション技術を開発し、それを用いて解析を実施し、要素実験によるモデル検証を行い、局所的な二相流動の定量化とデータベース（DB）を構築する。さらに、実規模スタック内の数十～百億グリッド規模の気液二相流解析へ展開し、自動車の様々な運転モードにおけるスタック内の排水性解析の評価・検証を実施する。

なお、計画当初は、OpenFOAM で二相流解析の検証を行い、その後、100 億メッシュ規模の大規模計算（単相流）を確立している FFB に二相流モデルを移植する計画であった。しかし、自動車業界を中心として産業界でも気液二相流を含めた CFD に OpenFOAM を利用する環境が整備され、実績も蓄積されつつあることから、OpenFOAM で燃料電池セル・スタックの大規模気液二相流解析が完結することのユーザメリットが高まっている。また、OpenFOAM も単相流では「京」で 100 億メッシュ規模の計算が可能となっており、現時点までの実施結果を活かし、限られた開発リソースで最大の成果を達成するという立場に立つ

と、OpenFOAM をそのまま用いる方が「産業界で活用する」という主目的に合致すると考えられる。そこで、産業界において燃料電池セル・スタック設計に求められる 20 セルスタックのメッシュ規模に関して実験検証を含めて明らかにすることを目的として、既存の OpenFOAM コードには実装されていない行列ソルバ、気液界面捕獲スキームの導入、並列効率のチューニングと検証を集中的に実施して開発を加速していく。

- ・固体酸化物形燃料電池 (SOFC) の焼結による電極形態変化および過電圧の経時変化の予測を目的として、階層直交格子に基づいた大規模シミュレータを開発する。また、高性能・高信頼性を持つ電極構造の解明を目的として、随伴解析に基づく構造最適化機能を開発する。

- ・PEFC 触媒層の各種構造パラメータ (担体粒径、凝集形状、電解質被覆構造、触媒担持量、分散) と出力性能の相関を定量化する過電圧シミュレーションを実施する。

- ・フラグメント分子軌道 (FMO) 法プログラム ABINIT-MP を用いて、高分子粗視化シミュレーションの有効相互作用 ( $\chi$ ) パラメータを非経験的かつ定量的に算定する手法を確立し、PEFC 電解質膜設計に適用する。また、密度汎関数 (DFT) プログラム PHASE/0 を連携活用し、PEFC の三相界面構造と機能を解析するための実用的 MSS (Multi-Scale Simulation) 基盤を構築する。

#### 【サブ課題 C】

サブ課題 C では、これまでの研究開発の中から、洋上ウィンドファーム発電量予測の高精度化を実現するために必要となる全ての要素技術をリストアップし、その中から、ポスト「京」を活用した大規模高精度シミュレーションが必須となるマルチスケール大規模流れ解析 (大気境界層の影響や後流 [ウェイク] による下流側に設置される風車の発電性能低下の定量評価精度の向上) と、風車疲労荷重解析の高精度化を実現するための流体・構造双方向連成振動解析のシステム構築に着目し研究開発を進める。さらに、この着実な実現のため、コアとなる技術要素を精査し、①ウィンドファーム全体の流れ解析、②流体構造連成振動解析、③ブレードの複合材料構造のモデル化と解析、④風車模型スケール流れ解析、⑤翼スケール流れ解析、とスケールごとに分けて、それぞれのレベルで研究開発と検証を進め、最終的に連携活用を図る。最終的な洋上ウィンドファーム発電量予測においては、ポスト「京」を活用し、大規模並列化および多風向 (16 ないし 24 方位) 同時計算により高精度・高速計算を実現可能とすることを目標とする。また、流体・構造双方向連成振動解析においては、風車後流影響時の応力変動の定量的な評価を行う。本サブ課題では、洋上ウィンドファームのマルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを活用した感度解析を通して定性的妥当性確認を行う。

#### 【サブ課題 D】

サブ課題 D では開発した物理モデルと計算技術の実証に関して以下の目標を設定する。

- ・プロジェクト前半で開発した多種イオン系の乱流輸送解析、および、高エネルギー粒子閉じ込め解析のための要素技術を統合し、さらに JT-60、LHD 等の国内大型実験プロジェクトと連携した実証研究によって開発コードの V&V を実施することにより、ITER の核燃焼プラズマ解析に必要な計算モデルを確立する。評価精度としては、実験的計測誤差やデータベースが含むデータ分散と同程度の評価誤差を目標とする。具体的な実証研究の目標としては、乱流輸送解析では、大域的電場の効果を含めて多種イオン系の輸送解析精度を向上する。平成 30 年度は改良モデルの精度検証を実施し、平成 31 年度は LHD における

実証研究を実施する。高エネルギー粒子閉じ込め解析に関しては、長時間スケールの間欠的 MHD 現象の再現を目指す。平成 30 年度はトカマク装置、平成 31 年度は LHD における実証研究を実施する。

・同時に、上記シミュレーションコードに関して、エクサスケール計算に向けた要素技術を統合し、ポスト「京」(プロトタイプ機) 全系規模までの強スケーリング実現に向けた研究開発を行うとともに、エクサスケール計算データの可視化解析技術を開発する。

以上の取り組みにより、世界最先端の計算精度と計算性能をもつ国産核燃焼プラズマ解析コードを完成させ、ポスト「京」を活用した ITER 計画への貢献を可能とする。

### 【全体推進】

各サブ課題の具体的な遂行を通して進む、ポスト「京」向けのマルチフィジクス連成、マルチスケール連携について、共通事項を整理し、今後のエクサスケールコンピューティング時代の知識基盤として公表する。また、実機の試験結果とマルチフィジクス・マルチスケールシミュレーションの結果の比較検討を行う V&V プロセスに関しても手順を整理し、併せて今後の知識基盤として公表する。

---

2. 情報科学技術分野における研究開発の論文数、学会発表数は、事業の成果を議論する上で1つの指標となりうるため、分野の特性を考慮の上、論文数、学会発表数の達成目標値を設定すること。

---

本重点課題では、プロジェクト前半は、サブ課題ごとの個別テーマの推進と同時に、サブ課題ごとの複数テーマやアプリケーションコードのマルチフィジクス&マルチスケール統合方法の検討等に大きな労力を割いてきたことは否めず、結果的にサブ課題によっては論文数や学会発表数などが不十分だったことは否めない。また、本重点課題には、エンジニアリング的要素の強い技術課題から、サイエンス的要素の強い学術課題まで幅広く含んでいることや、成果創出までを比較的短期間で行える課題(新規モデルやアルゴリズムの提案、基本的なモデル解析を通じた効果検証等)から、成果創出までに時間のかかる課題(マルチフィジクス連成やマルチスケール連携、実機の解析モデル作成と解析、解析結果と試験結果との比較検討、V&V等)までを含んでいることも、中間評価の段階では、論文数や学会発表数が不十分な分野があった原因と考えている。プロジェクト前半の研究開発成果を基盤として、プロジェクト後半は研究開発の加速が進むと考えているが、改めて、サブ課題ごとの特性を踏まえた上で、論文数、学会発表数の達成目標値を以下のように設定する。

### 【サブ課題 A】

目標値(中間評価以降からプロジェクト終了時まで)

論文数: 10本、学会発表数: 25件、解説等: 1本

(それぞれ半数は国際ジャーナルや国際会議)

### 【サブ課題 B】

目標数(中間評価以降からプロジェクト終了時まで)

論文数：10本、学会発表数：28件、解説等：1本  
(それぞれ半数は国際ジャーナルや国際会議)

#### 【サブ課題C】

目標数（中間評価以降からプロジェクト終了時まで）  
論文数：15本、学会発表数：45件、解説等：1本  
(それぞれ半数は国際ジャーナルや国際会議)

#### 【サブ課題D】

目標数（中間評価以降からプロジェクト終了時まで）  
論文数：15本、学会発表数：120件  
(論文数の2/3、学会発表数の1/3はそれぞれ国際ジャーナルや国際会議)

#### 【全体推進】

目標数（中間評価以降からプロジェクト終了時まで）  
論文数：3本、学会発表数：6件、解説等：2本

---

3. 予備計算などを通じて、サイエンス的な目標を明確にすること。その目標に対して、ポスト「京」でいつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのかを明確にすること。その時点でポスト「京」で初めてできる画期的な利活用について具体的に説明すること。

---

本重点課題は、ポスト「京」プロジェクトの全9重点課題の中では、工学的課題解決を目指すテーマを多分に含む重点課題と考えている。指摘事項の「サイエンス的な目標の明確化」の意味するところを「学術的な目標の明確化」と捉え、以下に今後の対応のポイントを記す。

#### 【サブ課題A】

・実機実圧（亜臨界から超臨界圧まで）における燃焼・ガス化・粒子追跡・灰溶融（固気液三相）の第一原理的シミュレーション技術を実現する。世界的に見ても過去にこのような現象のシミュレーションは行われていない。また、三菱重工実験炉以上の実機の計算はポスト「京」を用いてはじめて可能になる。

・実機実圧（亜臨界から超臨界圧まで）における燃焼等反応一炉構造内伝熱一冷却システム全体の非定常非線形マルチスケール・マルチフィジクス統合シミュレーションを実現する。

世界的に見ても過去にこのような現象のシミュレーションは行われていない。このような連成シミュレーションは、各種の次世代エンジンや熱機関の研究開発など、極めて広い応用範囲を持っており、その観点からも大変大きな学術的価値がある。また、三菱重工実験炉以上の実機の計算はポスト「京」を用いてはじめて可能になる。

・石炭ガス化炉では、空気吹き、 $O_2$ 吹き、 $O_2+CO_2$ 吹きなど様々な手法が研究開発されており、また、世

界中で算出される様々な炭種を用いた運用が必要となる。そのため、極めて多様な実験研究が行われている。一方、本シミュレーションは、これらの多様な吹送方式、炭種に対して普遍的な解析基盤を提供するものであり、極めて画期的である。このような研究開発は高度な実験実証技術と、ポスト「京」のような世界最先端の計算科学基盤を有する日本においてしか実現することができない。それが国・産業界を問わず石炭ガス化炉プロジェクトの関係者からも大きな期待を集めている要因である。

#### 【サブ課題 B】

サブ課題 B では、原子レベルのナノスケールから数 10~100nm オーダーのメゾスケールまでのマルチスケール解析ワークフローの構築が学術的にも実用的にも大きな特徴となっている。電解質についての解析ワークフローはすでにほぼ実現しており、プロジェクト終了時まで三相界面のモデリングも完成させる予定である。この解析ワークフローの中で、モデリングした三相界面構造に基づく材料特性解析（プロトン伝導等）は、ポスト「京」を用いてはじめて可能となる。また、同様にメゾスケールからナノスケール構造を再構築したリバースマップ構造を、原子レベルで詳細にフラグメント分子軌道法（FMO）計算によって解析するのにも、ポスト「京」の利用が必須となる。このような燃料電池のマルチスケール計算は、世界的にも行われておらず、学術的にも大きな価値がある。

2030 年頃の燃料電池車普及促進期に市場投入される次世代燃料電池車の出力性能向上には、実触媒層規模で実在材料における輸送抵抗要因を明確にする必要がある。たとえば 10 $\mu\text{m}$  厚の触媒層は、約 0.02  $\mu\text{m}$  程度の一次粒子から構成されており、本目標を達成するためには、スケール比 500 倍の複雑微細構造内を高精度にかつ様々な運転条件を解析する必要がある。複雑な触媒担体モルフォロジーが引き起こす、ガス・電子・イオン輸送抵抗と電気化学反応界面の形成機構を定量的に明らかにすることは、ポスト「京」によって初めて実現できるものであり、学術的にも大きな価値がある。

#### 【サブ課題 C】

洋上ウィンドファームにおける実機大規模風車を対象としたマルチスケール大規模流れ解析の取り組みは、計算科学的にも非常に難度が高く、世界的に前例がない。しかし、今後ますます増大する風力発電需要を考えた時に、限定されたスペースの中で洋上ウィンドファームを立地し、所定の発電性能を実現していくためには、大型風車の相互干渉、すなわち上流側風車の後流による下流側配置の風車の発電性能低下を高精度に予測し、さらに、後流に晒される後方配置の風車の流体構造連成振動に基づく疲労強度評価を高精度化していくことが必須となる。サブ課題 C において研究開発を行う、洋上ウィンドファームを対象とした多風向（16 方位あるいは 24 方位）マルチスケール大規模流れ解析（後流の発電性能に及ぼす影響）と、後流を受ける大規模風車の流体構造連成振動解析は、ポスト「京」によって初めて実現が可能となるものであり、数値流体力学的にも計算力学的にも世界的に例を見ない大きな学術的価値のあるものである。この解析システムを活用することにより、洋上ウィンドファームのサイト決定、サイト内の大型風車の設置基数や配置、発電性能予測など、を高精度化することができ、洋上ウィンドファームの設置を推進することができる。

#### 【サブ課題 D】

サブ課題 D ではポスト「京」運用開始 5 年後の目標として以下を設定する。

ポスト「京」を用いた ITER の核燃焼プラズマ解析において実験条件あたり 10~100 ケースの系統的なパラメータスキャンを行い、標準運転条件の定常炉心 (~10ms) における乱流輸送特性、および、アルファ粒子閉じ込め特性それぞれについて、設計の妥当性を検証するとともに、さらなる高性能炉心開発に向けた理論的指針を示す。

具体的には、ポスト「京」を活用して、まず、アルファ粒子による自己加熱によって決まる炉心プラズマの位相空間構造を明らかにし、その上で、摂動磁場、加熱粒子ビーム入射、電磁場による加熱といったアクチュエータによる直接的制御、あるいは、アクチュエータによる乱流現象や MHD 現象の変化を介した間接的制御による位相空間構造の制御性を明らかにすることを目指す。このような熱平衡から離れた速度空間構造の非線形な制御を必要とする工学系は核融合分野特有のものであり、サイエンス的な価値が高い。ITER の制御手法開発に必要なシミュレーションは、現在、「京」で実施している既存装置を対象とするシミュレーションの 10-1000 倍の計算規模となるため、ポスト「京」で初めてできる画期的な活用である。

---

4. 成果の利活用について、開発したアプリケーションを産業界に広く展開していくために、ユーザーの利用環境や利用イメージを意識するとともに、市販アプリケーションとの差別化を明確にして開発に取り組む具体的な方針を明確にすること。

---

平成 29 年 5 月 29 日提出の実実施計画の「1. 実施概要」の「(4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ」、において述べたように、本研究課題の中で研究開発されるアプリケーション群は、マイクロ領域（第一原理計算、量子化学計算）からマクロ領域（熱、流体、構造、連成）に至る、我が国を代表し世界的にも競争力の高いマルチスケール・マルチフィジクス解析の汎用性のあるソフトウェアであり、これらはポスト「京」の性能を最大限に活用できるように適切化されたものとして提供される。しかも、石炭ガス化、燃料電池、洋上風力発電などの本重点課題で対象とする革新的クリーンエネルギーシステムの課題を解決できるのみならず、極めて広い範囲の人工物等のマイクロ現象、マクロ現象、マルチスケール・マルチフィジクス現象の高精度解析にも適用できる。

具体的には、サブ課題 A で研究開発が進む、有限体積法ベースの燃焼 LES 解析コード FFR-Comb、有限要素法ベースの汎用解析システム ADVENTURE（構造解析コード ADVENTURE\_Solid（重点課題⑥から提案されたコデザインのターゲットアプリ）、熱伝導解析コード ADVENTURE\_Thermal）、並列連成カプラー REVOCAP\_Coupler、サブ課題 B で研究開発が進む、フラグメント分子軌道法ベースの ABINIT-MP、第一原理分子動力学ベースの PHASE/0、サブ課題 C で研究開発が進む有限要素法ベースの LES 乱流解析コード FFB（重点課題⑧から提案されたコデザインのターゲットアプリ）、構造解析コード ADVENTURE\_Solid（前出）、並列連成カプラー REVOCAP\_Coupler（前出）は、いずれも汎用性を考慮したコードである。これらのアプリケーション群は、重点課題⑥プロジェクトの開始前（日本学術振興会未来開拓プロジェクト、文科省戦略的シミュレーションプロジェクト、同革新的シミュレーションプロジェクト、HPCI 戦略分野プロジェクト等時代）からすでにユーザー群をコンソーシアム形式でとりまとめたり、ソフトベンダーも巻き込んだ産学協力体制のもとに研究開発や運用が行われている。このため重点課題⑥プロジェクトの成果は、個別サブ課題の解決に資するのみならず、これらの既設の産学連携体制を通じて産業界に普及してい

くことも予定されている。なお、ADVENTURE システムはオープンソース版に加えて、日本学術会議未来開拓プロジェクト終了時の 2002 年からすでにその商用版 ADVENTUREcluster が株式会社アライドエンジニアリングから販売されており、現在すでに自動車会社や電機・重工関係などの産業界に幅広く普及されている。ADVENTUREcluster は非線形有限要素法解析コード ABQUS と同様の非線形解析機能を有しつつ、超並列計算機環境で稼働し解析規模も計算速度も一桁から二桁大きな性能を有するソフトとして認知されている。

また、サブ課題 D で開発されている 3 種類のプラズマ解析コード GT5D、GKV、MEGA はいずれも世界的な解析コードとしてプラズマ物理、核融合分野で認知されているものである。これらは、現時点では産業界の一般ユーザーに活用されることは想定されていないものの、プラズマ物理、核融合分野において標準的コードとして活用されることを狙って、実機実験結果との比較を通じた V&V、解析事例公開、ユーザー向けセミナー、オープンソース化、実験研究者への提供等様々な活動を展開している。加えて、ITPA（国際トカマク物理活動）における ITER 物理課題検討やコード間ベンチマークといった国際的な取り組みを積極的に推進することによって開発コードの国際競争力の向上を図っている。

この他、サブ課題 B で研究開発が進められている PEFC や SOFC のメゾスケール電極解析コードや、サブ課題 C で開発が進められているウィンドファーム用並列風況解析コード RIAM-Compact HPC 版は、特定のアプリケーションに特化しているもの、それぞれの分野での産業界ユーザーと密接に連携しながら研究開発を進めており、ユーザーニーズに応じてカスタマイズすることも可能である。特に、RIAM-Compact は、すでに国内風力発電業界の標準風況解析コードとして認知、活用されている。

また、サブ課題 B で研究開発が進められている燃料電池スタックの気液二相流解析では、OpenFOAM ベースで研究開発を進めてきている。これは、小規模モデルながら産業界において OpenFOAM が燃料電池スタックの気液二相流解析への適用が進められてきたからであり、サブ課題 B において、解析精度と解析規模拡大に向けたソルバの研究開発と燃料電池特有の aspek トの大きい部材構造（面方向のサイズに対して厚み方向が 1/100 以下）に対して、専用の計算格子生成技術を開発するなど、格子生成等の前処理のユーザー負担を軽減することも進めており、その成果は即産業応用が可能である。

さらに、サブ課題 B と全体推進で連携して開発を進めている散逸粒子動力学法 (DPD) 計算に必要な  $\chi$  パラメータを FMO 計算から算定するシステム FCEWS (Fragment molecular orbital-based Chi-parameter Evaluation Workflow System) を、「計算工学ナビ」のサイトから提供する予定である。

以上のように、本プロジェクトでは多種多様なコードの研究開発が進行しており、それぞれの特徴を配慮しながら、普及や産業応用を展開しているので、今後はその点を整理しながら、目標と成果を明確にしていきたい。

---

5. 各サブ課題の独立性が高いが、サブ課題間の連携や、同様なアプリケーションの共通基盤化を図る具体的な取り組みを明確にすること。

---

このご指摘の点については、1 の指摘事項の対応の部分でも一部回答させていただいているが、ここに改めて具体的な強化の取り組みを記す。

(1) マルチフィジクス連成に関するサブ課題 A、C、全体推進の連携について

並列連成カプラー REVOCAP\_Coupler については、サブ課題 A では有限体積法ベースの燃焼 LES 解析コード FFR-Comb と有限要素法ベースの熱伝導解析コード ADVENTURE\_Thermal との双方向連成解析を実現し、同時にサブ課題 C では有限要素法ベースの LES 乱流解析コード FFB と有限要素法ベースの ADVENTURE\_Solid との双方向連成解析を実現すべく研究開発を行っている。その成果は、非構造格子に対応するポスト「京」における並列マルチフィジクス連成解析の重要なプラットフォームとなっていくことが期待される。

(2) マルチスケール連携に関する重点課題⑥サブ課題 B と全体推進、重点課題⑧のサブ課題 A との連携について

FMO 計算から  $\chi$  パラメータを算定するワークフローをシステムとしてまとめた FCEWS (Fragment molecular orbital-based Chi-parameter Evaluation Workflow System) を基盤ソフトとして公開予定である。また、重点課題⑧サブ課題 A で開発中の WHEEL (旧名 HPC/PF) を用いて、 $\chi$  パラメータ算定に必要な膨大な数の FMO 計算を ABINIT-MP のジョブとして自動実行するシステム連携も進めている。これは平成 29 年度下期から「京」の micro job 枠を使って実行予定である。

PHASE/0 に関しても、相互作用算出のアルゴリズムを確立した後、重点課題⑧サブ課題 A と連携して、WHEEL を利用したパラメトリック計算の自動実行の枠組み構築を計画している。

(3) 大規模行列計算、データ可視化等に関するサブ課題 A、サブ課題 B、全体推進の連携について

サブ課題 D で開発を進めている計算技術のうち、構造格子を対象とした行列ソルバやデータ可視化解析技術は他分野、特に構造格子系の計算を実施するサブ課題 B のメゾスケールの電極計算においても利用可能な共通基盤技術となりうる。全体推進との連携の下で、これらを行列計算ライブラリや可視化解析ツールとして整備し、オープンソースとして公開することによって、サブ課題間、さらには、重点課題間で共通基盤技術の展開を図る。

(4) マルチフィジクス連成、マルチスケール連携手順の知識基盤の整理と公開、実機試験結果とマルチフィジクス・マルチスケールシミュレーションの解析結果の V&V 手順の整理と公開について

(1)、(2) の取り組みに加えて、各サブ課題の具体的な遂行を通して進む、ポスト「京」向けのマルチフィジクス連成、マルチスケール連携について、共通事項を整理し、今後のエクサスケールコンピューティング時代の知識基盤として公表する。また、実機の試験結果とマルチフィジクス・マルチスケールシミュレーションの結果の比較検討を行う V&V プロセスに関しても手順を整理し、併せて今後の知識基盤として公表する。

## (別紙1) 実施機関一覧

	実施機関	備考
全体推進	東京大学	代表機関(吉村忍)
	立教大学	分担機関
	物質・材料研究機構	分担機関
	自然科学研究機構分子科学研究所	協力機関
	星薬科大学	協力機関
	鳥取大学	協力機関
	長崎大学	協力機関
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	東京大学	代表機関(吉村忍)
	京都大学	分担機関
	九州大学	分担機関
	東洋大学	協力機関
	諏訪東京理科大学	協力機関
	日本大学	協力機関
	宮崎大学	協力機関
	名古屋大学	協力機関
	電力中央研究所	協力機関
	神戸大学	協力機関
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	東京大学	代表機関(鹿園直毅)
	みずほ情報総研	分担機関
	京都大学	分担機関
	立教大学	分担機関
	物質・材料研究機構	分担機関
	九州大学	協力機関
	神戸大学	協力機関
	産業技術総合研究所	協力機関
	理化学研究所計算科学研究機構	協力機関
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	豊橋技術科学大学	分担機関(飯田明由)
	東京大学	代表機関
	九州大学応用力学研究所	分担機関
	宇宙航空研究開発機構	分担機関(H28まで)
	風力エネルギー研究所	分担機関
	東芝	協力機関
	HPCシステムズ	協力機関
サブ課題D 核融合炉の炉心設計	日本原子力研究開発機構	分担機関(井戸村泰宏)
	名古屋大学	分担機関
	自然科学研究機構核融合科学研究所	分担機関
	理化学研究所計算科学研究機構	協力機関
	プリンストン大学プラズマ物理研究所	協力機関
	フランス原子力庁	協力機関
	量子科学技術研究開発機構	協力機関