jh140038-NA21

滝沢寛之（東北大学大学院情報科学研究科）

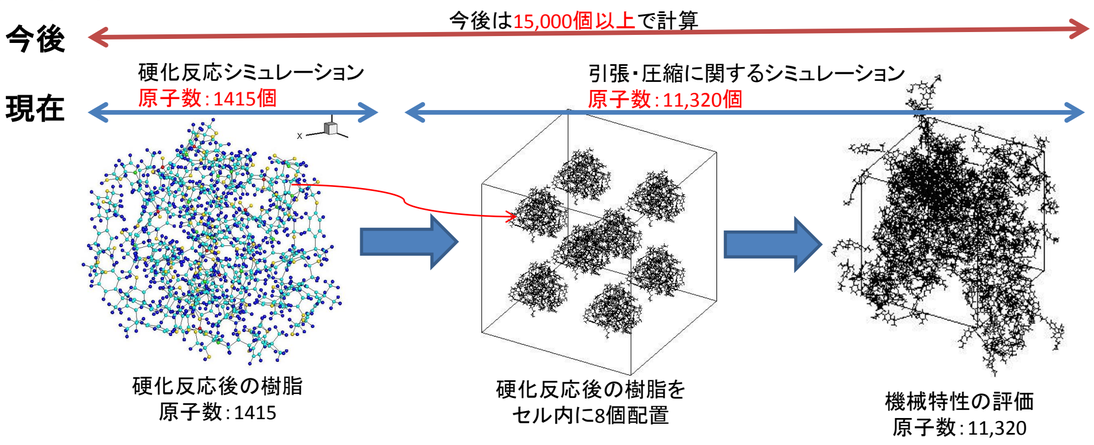
機械工学分野におけるシミュレーション科学の新展開

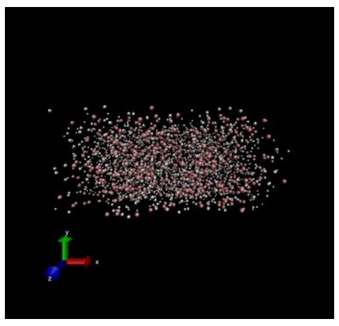
研究目的 機械工学分野では様々な数値シミュレーション技術が研究されているにもかかわらず、そのソフトウェア開発技術やスーパーコンピューター利用技術が共有されているとは言い難い。また、スーパーコンピューターの利用技術は近年ますます高度化しており、機械工学分野の研究者がスーパーコンピューターの演算能力を引き出すために要する労力は年々増大している。本研究の目的は、現在上記の理由からスーパーコンピューターの本格的な利用に至っていない**機械工学分野の先進的・萌芽的な数値シミュレーションを対象とし、スーパーコンピューターを有効利用した場合の性能向上とさらなる高度化・高性能化に必要な課題を明確にする**ことである。

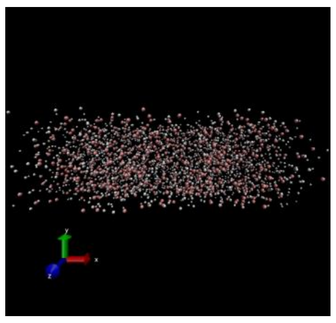
研究計画 平成25年度に得られた指針に基づいて、引き続き平成26年度には共同研究者らのプログラムの高速化を支援し、これまでは研究室レベルのパソコンの計算能力や容量の制約により実行困難であった規模のシミュレーションを実現することを目指す。また、平成26年度には東北大学サイバーサイエンスセンターのSX-9システムが新システムに更新される予定であることから、新システムが利用可能となり次第、上記プログラムの新システム向けに最適化も行う予定である。既存のシステムよりも大幅に高性能な新システムを活用することにより、より高度で高速なシミュレーションが可能となり、機械工学分野での優れた成果を期待できる。さらに、計算機工学の観点からも、新しいシステム向けの実践的かつ実用的な高速化手法を実アプリケーションに基づいて探ることが可能であり、その後の新システム活用のための有用な知見が得られることを大いに期待できる。

複合材料の破壊に関するマルチスケールシミュレーション

炭素繊維強化プラスチック(CFRP)は軽量かつ高強度という優れた機械特性を有することから航空宇宙機器に使用されている。特に航空宇宙分野に適用されるCFRPにおいてはマトリクス樹脂にエポキシ樹脂が用いられている。CFRPの機械特性にはマトリクス樹脂の機械特性が影響するため、最近では分子シミュレーションを用いたマトリクス樹脂の開発が注目されている。本研究では、分子シミュレーションを用いて硬化反応シミュレーションおよび引張シミュレーションを行うことにより、エポキシ樹脂の機械特性を調査する。分子シミュレーションは、大規模系（分子数が多い）であるほど高精度であるが、その反面一般的なパソコンでは計算時間がかかることが課題である。そこで、本研究ではスーパーコンピューターSX-9を用いて、大規模系で分子シミュレーションを行いエポキシ樹脂の機械特性を調査している。現在、オープンソースコードのLAMMPSに加えてオリジナルのエポキシ樹脂分子シミュレーションプログラムを開発中であり、主剤、硬化剤およびそれらの配合比が硬化特性に与える影響を分子シミュレーションにより調査している。




引張シミュレーション前


引張シミュレーション後

バイパス遷移過程の解明のための数値流体シミュレーション

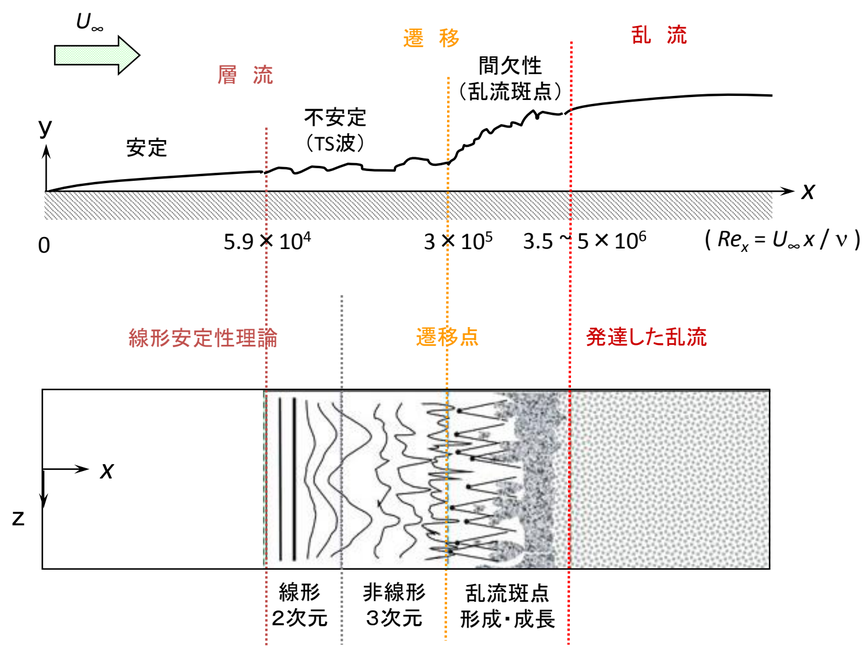
本研究の目的は、境界層遷移及び乱流素過程の動力学明らかにすることにある。乱流が示す強い混合・拡散能力や高い熱伝達性能といった特徴的な性質は、乱流中に存在する大小様々な渦の不規則で乱雑な運動によって、単位時間当たりの運動量や熱の輸送量が極めて高い状態に保たれているお蔭である。すなわち、乱流遷移を含む乱流現象を解明するためには、渦の動力学に対する深い理解が求められる。

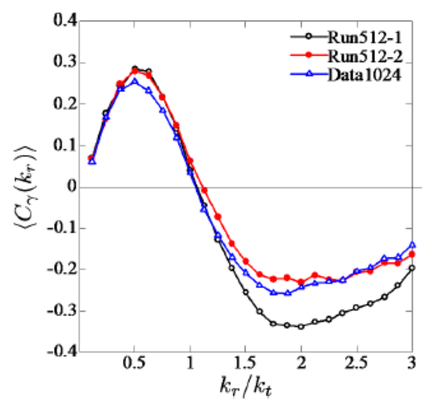
境界層遷移

バイパス遷移が起こる際に現れるストリーク構造とこれらが発達して形成される局所的な乱流領域（乱流斑点）の関係に着目し、人為的に発生させた低速のストリークに対して壁面から噴流を吹くことで流れ場がどのように変化するのかについて調べ、乱流斑点が生成しやすい“外部刺激”の条件について探っている。

乱流素過程

スーパーコンピューターを利用して大規模乱流の直接数値計算（DNS）データの解析を進めた。乱流の統計理論は、低波数のエネルギー保有領域と高波数のエネルギー散逸領域の影響が無視できる慣性小領域についてのみ成立する。このような乱流の普遍的な統計量を議論するためには少なくとも1,0243個以上の格子解像度が必要となり、パソコンレベルではもはや扱いきれないため、スーパーコンピューターの有効活用が求められている。





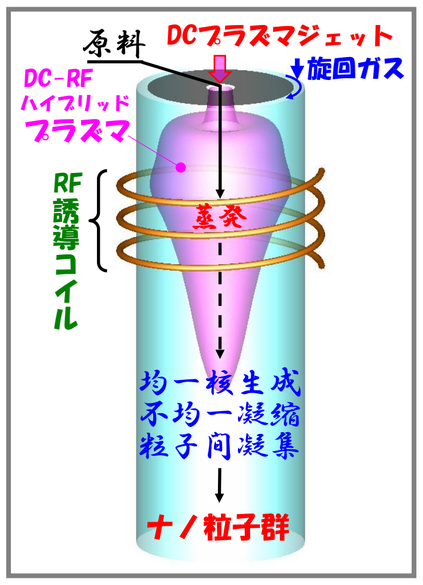
渦のスケールと伸長速度

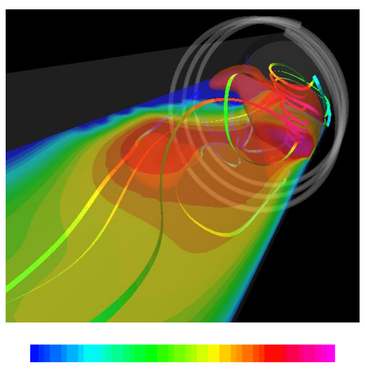
プラズマによるナノ粒子創製プロセス

右図に示すように、プラズマ流を用いたナノ粒子創製プロセスは、原料を瞬時に蒸発させることから始まる。原料の蒸気は移流によりプラズマ末端部へと運ばれ、そこで温度降下に伴う飽和蒸気圧の急激な減少により、過飽和状態に陥る。この状態は不安定であるため原料は気体の状態を保てず、分子は衝突しあい核を形成し（均一核生成）、その核に蒸気が凝縮する（不均一凝縮）ことで、ナノメートルスケールの粒子が成長する。これがナノ粒子生成の基本的な機構であるが、加えてナノ粒子同士の衝突・合体（粒子間凝集）も粒子成長過程に寄与する。プラズマ流は、以上のプロセスを一つのステップで実現できるため、効率的なナノ粒子量産システムとみなすことができる。

しかし、プラズマ流は強い発光を伴う高温の電磁熱流体であり、また原料の蒸発過程やナノ粒子の形成過程はわずか数ミリ秒の間に完了してしまうため、実測による定量評価は困難を極める。さらにプラズマプロセスにおけるナノ粒子群形成過程の詳細なメカニズムは依然として解明されていないため、求められる粒径や組成を持つナノ粒子を創製するためにはエンジニアの経験に頼らざるを得ず、加えて莫大な時間とコストを要することも問題となっている。

現在、プラズマトーチ内の３次元流動現象が明らかになりつつある。本研究によって得られた熱流動場の代表的な瞬間像を右に示す。今後は、非定常３次元的に流動するプラズマ場におけるナノ粒子群の集団成長および輸送現象の反応非平衡性も組み込んだ、より高度な数理モデルおよび計算コードを開発していく予定であり、さらなる高性能なスーパーコンピューターが必要である。

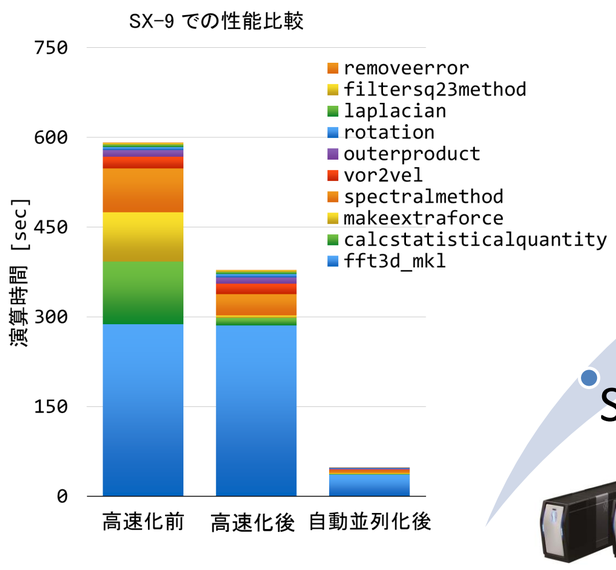




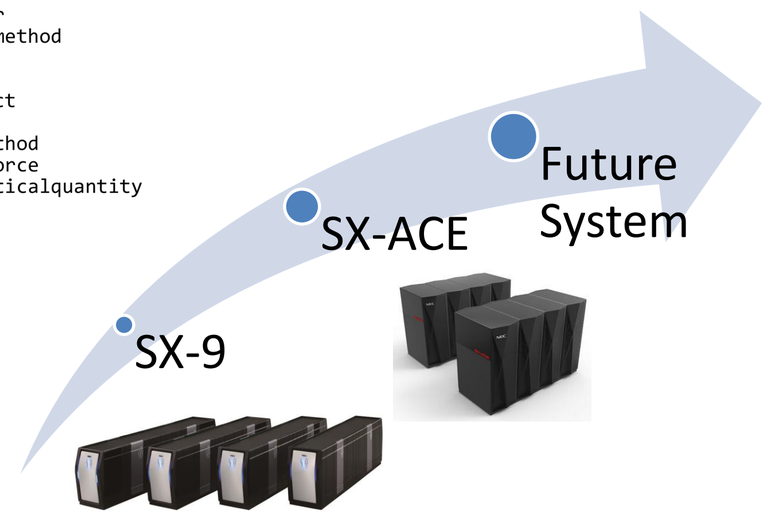
下流側から見た熱流動場

機械工学分野の萌芽的シミュレーションの高速化支援

スーパーコンピューター利用技術の高度化により、機械工学分野におけるシミュレーション科学のさらなる発展には、構成拠点に所属する計算機科学分野の研究グループ、研究者の協力が必要不可欠である。本研究では、先進的あるいは萌芽的な手法に基づく数値シミュレーションを対象としており、本研究を遂行することによってスーパーコンピューターの本格利用につながることを大いに期待できる。



乱流シミュレーションの高速化支援



新世代システムへの移植支援