

13-NA30

## 機械工学分野におけるシミュレーション科学の新展開

滝沢 寛之（東北大学大学院情報科学研究科）

概要 本研究では、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。本研究で対象とする数値シミュレーションは、それ自身が有意義な成果を期待できる重要な数値シミュレーションである。しかし、先進的・萌芽的研究段階であるためにスーパーコンピューターの本格利用には現在至っていない。このため本研究を遂行することにより、機械工学分野におけるスーパーコンピューターの利用促進とその結果として数値シミュレーションの高度化・高性能化が期待でき、機械工学の研究者および計算機科学の研究者の双方にとって有意義な共同研究である。これまでの検討の結果、一部のシミュレーションコードに関して、計算コストの高いルーチンの特定や、スーパーコンピューターへの移植に向けた課題の明確化を行うことができた。今後も共同研究を継続し、すでに高速化支援に取り組んでいるシミュレーションコードの高速化を図るとともに、現在は人的リソースの問題から後回しになっているコードの高速化支援を行う。

### 1. 研究の目的と意義

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。

機械工学分野の数値シミュレーションの高速化支援のためには、実用的なシミュレーション規模での性能評価が必要不可欠であり、そのための大規模計算資源が必要不可欠である。特に萌芽的研究の段階では、並列化を考慮せずにプログラム開発されてきたコードが多いため、SX-9 のように比較的大きな計算ノードで実行できるシステムが有用であると期待される。

本研究で対象とする 4 種類の数値シミュレーション

は、それぞれ以下の理由から学術的・社会的意義の大きい研究開発に必要なものである。

#### ● 発電機器の安全・安心設計に資する熱流動シミュレーション

安全性の高い発電機器を設計することは、電力の安定供給のために必要不可欠である。スーパーコンピューターを利用することにより安全かつ高効率な発電機器が開発できる。

#### ● 熱硬化性樹脂の機械特性評価のための分子シミュレーション

分子シミュレーションを用いて樹脂の機械特性を評価することは、樹脂の分子構造および損傷・破壊メカニズムに関する知見を得ることが出来、それらが機械的特性に及ぼす影響を予測することができる。また、マルチスケールで巨視構造の設計を行う場合には、分子スケールから議論を行うことで、材料設計へのフィードバックを行うことも可能になる。

#### ● 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

境界層は層流状態から乱流状態に遷移するが、

乱流状態になることで摩擦抵抗がひと桁増大するため、その遷移過程を解明し遷移を遅らせる方法を見つけることができればエネルギー資源の大幅な節減となる。

### ● プラズマによるナノ粒子創製プロセスシミュレーション

プラズマによるナノ粒子創製プロセス全体を包括する数値解析システムを構築できれば、ナノ粒子形成機構やプラズマ流の複雑熱流動場との干渉現象を解明できるのみならず、コンピュータ上で仮想的な実験を低コストで繰り返すことができるようになるため、工学的な意義は極めて大きい。

## 2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

### (1) 共同研究を実施した拠点名および役割分担

研究代表者の滝沢と東北大学サイバーサイエンスセンターは、スーパーコンピュータ利用技術やアプリケーション高速化支援に取り組んでおり、特にベクトル型スーパーコンピュータ向けの高速化支援ではこれまでに多くの実績を残している。このため、本研究においても、対象とするシミュレーションの高速化支援を主に担当する。

共同研究者の山本、佐野、古澤、三宅は、「発電機器の安全・安心設計に資する熱流動シミュレーション」の研究開発を担当する。発電機器における破壊や損傷に至る熱流動を把握するためには複雑な非定常熱流動を数値計算で解明する以外に有効な手段がなく、スーパーコンピュータの高い演算性能が必要である

共同研究者の岡部と青柳は、「熱硬化性樹脂の機械特性評価のための分子シミュレーション」を担当する。分子シミュレーションにより力学特性を求めるためには、ある程度大きい系でシミュレーションを行う必要がある。この場合、系の規模が大きくなるほど計算の高速化が強く望まれる。ゆえに、大規模系の分子シミュレーションにおいてスーパーコンピュータによる数値シミュレーションが必要となる。

共同研究者の福西と伊澤は、「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」を担当する。遷移過程の解明のためには、境界層の開始点近傍において入り込んだ微小な変動が下流に向かって流下する過程で境界層に与える影響について詳細に調べる必要がある。この変動は微小なため、実験で捉えることは難しく、計算機シミュレーションが必須となる。

共同研究者の茂田は、「プラズマによるナノ粒子創製プロセスシミュレーション」を担当する。プラズマによるナノ粒子創製プロセス全体を包括する数値解析システムの構築は、時間・空間ともにマルチスケールに渡る複雑な物理現象の再現の試みに等しく、莫大な計算容量と計算時間を必要とする。

### (2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

### (3) 当公募型共同研究ならではの事項など

スーパーコンピュータ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の本格利用につながることを大いに期待できる。また、研究代表者および共同研究者が所属する東北大学工学部機械系と同大学サイバーサイエンスセンターとは物理的に近く、頻繁に議論することができることから、密な連携を期待できる。

本研究を遂行することにより、機械工学分野におけるスーパーコンピュータの利用促進とその結果として数値シミュレーションの高度化・高性能化が期待でき、機械工学の研究者および計算機科学の研究者の双方にとって有意義な共同研究と考えている。東北大学サイバーサイエンスセンターでは、長期にわたって継続的に利用者のアプリケーションの高速化支援を行ってきた実績がある。

本研究においてもこれまで蓄積してきたノウハウを十分に活用して萌芽的研究を支援し、機械工学分野での成果につながることを期待できる。

### 3. 研究成果の詳細

本研究で対象とする数値シミュレーションは、それ自身が有意義な成果を期待できる重要な数値シミュレーションである。本研究で行う高速化支援と平行して、それぞれの分野でも成果を残している。以下、本研究で対象とする 4 つの研究分野のそれぞれにおける研究成果を報告する。

#### ● 発電機器の安全・安心設計に資する熱流動シミュレーション

まずは数値タービンの並列処理効率を検証するため、蒸気タービン最終三段静動翼列の非定常湿り蒸気流れについて全周計算仮定して計算した場合の計算加速率を算出した。図 1 に計算に用いた計算格子を示す。翼列流路ブロック数は 551 ブロックである。

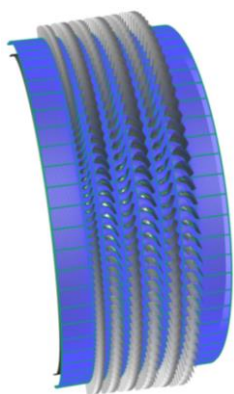


図 1 全周計算に用いた計算格子

東北大学サイバーサイエンスセンターSX-9 上で MPI に基づく並列計算を実施した。ただし、計算反復回数は 10000 回で最終解は求めている。その結果、1 CPU の場合には、計算時間が 386429 秒であった者に対して、SX-9 の最大 CPU 数である 64CPU の場合には、8627 秒となり、その比である速度向上率は、44.8 倍となった。

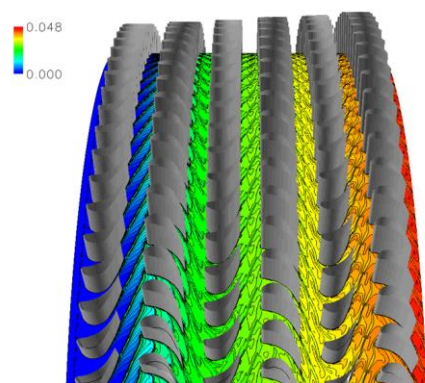
次に、周方向の流動が周期的であると仮定して、翼列流路 13 ブロックに簡略化した計算格子に対して非定常解が求まるまで計算した。具体的には、

三菱重工が設計した蒸気タービン低圧三段の静動翼列を通る非定常三次元湿り蒸気流れに対して、入口全圧 0.3296MPa、入口全温 384.3K の入口境界条件の場合について数値解析した。これは 25K の過冷却状態に当たる条件であり、入口では乾燥した蒸気が流入しているため、タービン三段流路の適当な位置で非平衡凝縮が起こる。図 2(a)、2(b) にそれぞれ、計算により得られた全流路ミッドスパンならびに三段動翼列流路断面における瞬間湿り度分布を示す。まず、図 2(a)より一段目静翼列下流域で凝縮が開始していることがわかる。凝縮により生成された液滴は下流に行くに従って成長し、三段目動翼下流域では最大 4.8%の湿り度が得られた。また、湿り度は各翼列の後流の影響を受けながら増加していることも示されている。図 2(b)には、三段目動翼断面においては湿り度が極端に偏在化している様子が示されている。湿り度は断面中央域が全体的に高く、エンドウォールに行くにしたがって減少しているが、エンドウォール付近ではかなり非定常性が強い分布になっている。これは、前段に位置する、一段目静翼列、一段目動翼列、二段目静翼列、二段目動翼列、そして三段目静翼列から発生したコーナー渦や翼後流のすべてが干渉しながら三段目動翼列まで流れ込んでくるため、これらが湿り度の分布に影響した結果であると考えられる。実は、湿り度 4.8%は翼端近傍で得られており、湿り度がコーナー渦や後流によりかなり偏在化していることを示唆している結果である。蒸気の湿りは蒸気タービンの効率やタービン翼の壊食に直接影響を与える因子である。その絶対値の評価ならびに最大値の位置を把握することは、高効率化ならびに高信頼化を目指す次世代蒸気タービン設計に有益な知見を与えることができる。

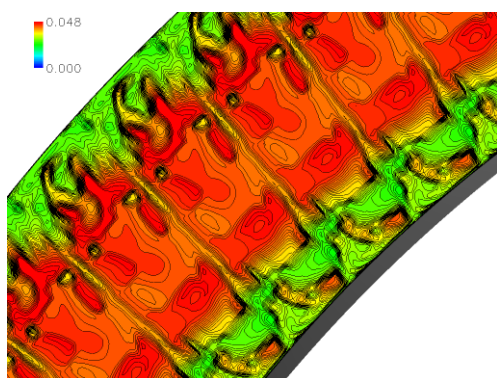
#### ● 熱硬化性樹脂の機械特性評価のための分子シミュレーション

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



(a) ミッドスパン



(b) 三段目動翼流路断面

図 2 瞬間湿度分布

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した。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った。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。

オープンソースコード LAMMPS を使い、スーパーコンピューターSX-9 を使用しエポキシ樹脂の引張シミュレーションを行った。その結果、計算時間が大幅に短縮され、大規模系の構造で短時間に多くのサンプルを得ることが出来た。大規模

系により詳細に分子構造を議論できるだけでなく、計算時間の短縮化により多くの計算結果（サンプル）を取り機械特性の傾向を比較・考察することが可能となった。図 3 および図 4 に引張シミュレーション結果を示す。このような大規模系および計算時間の短縮化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（機械特性の傾向調査など）には不可欠であり、今後の樹脂開発に果たす役割は大きいと考えられる。

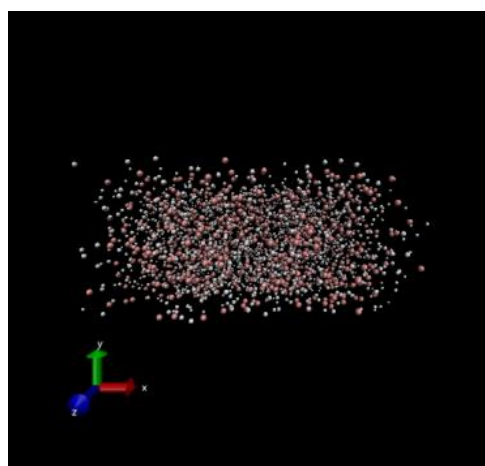


図 3 引張シミュレーション前

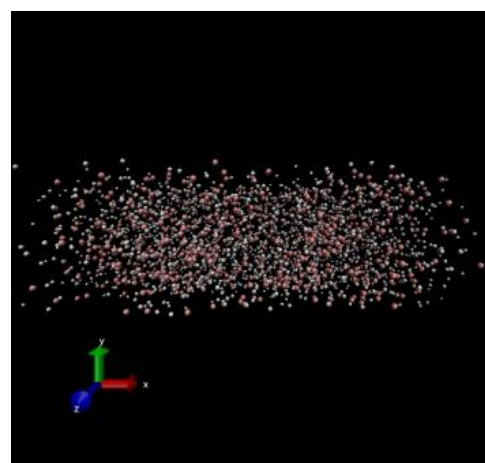


図 4 引張シミュレーション後

#### ● 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。

本年度は以下の内容で研究を進めた。まず前者の境界層遷移については、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た。

また、後者の乱流の研究については、スーパーコンピュータ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。乱流計算とその解析にはスーパーコンピュータの利用が欠かせない状況にある。本研究では、渦度ベクトルに直交する面内にフーリエバンドパスフィルタを適用することで乱流場を渦運動のスケールに応じて複数の流れ場に分離する方法を新たに提案し、それぞれの流れ場の中から渦構造の抽出を行って、これらの渦構造の伸張と流れ場のスケールとの関係について評価した。その結果の一例を図 5 に示す。横軸は解析対象とする渦とその他のスケールの渦を抽出するのに使用したバンドパスフィルタの中心波数の比であり、縦軸は渦の引き伸ばされやすさを表す伸長速度係数である。図 5 から、 $k_r/k_t = 0.5$  のとき係数の値が最大となり、 $k_r/k_t > 1$  では負の値を取ることがわかる。このことは、慣性小領域にある渦は、乱流レイノルズ数に関わらず、自身の 2 倍程度大きいスケールの渦が作る速度場によって引き伸ばされる傾向があることに加えて、自身より小さい渦は引き伸ばしには寄与しないことを

意味している。

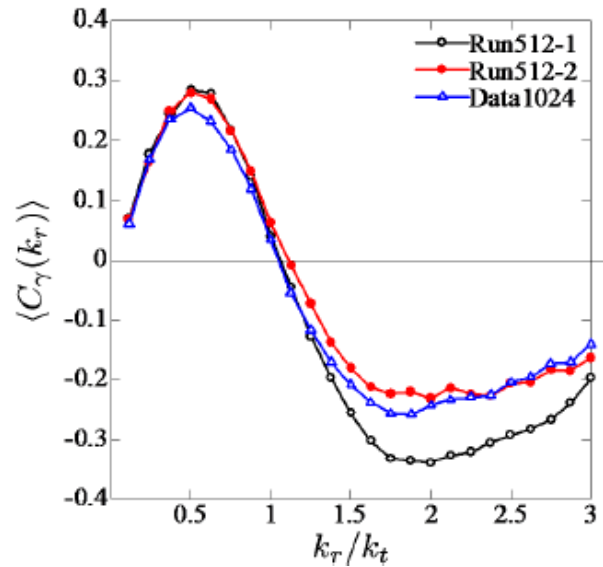


図 5 渦のスケールと伸長速度

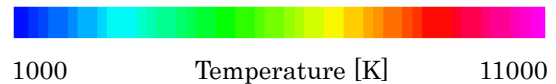
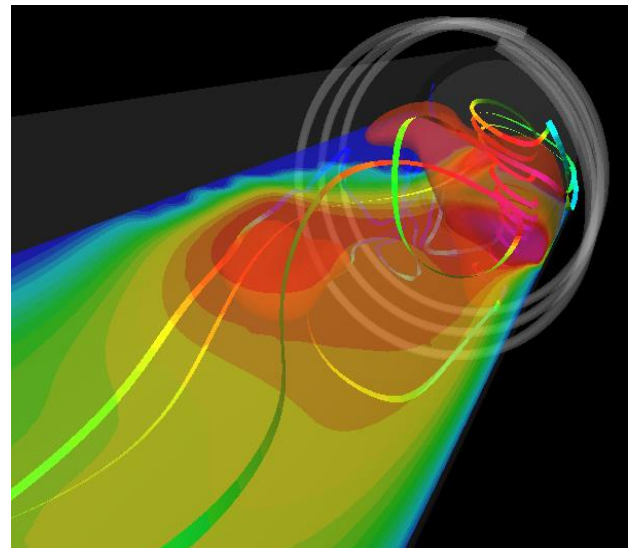


図 6 下流側から見た熱流動場

(中央断面における温度分布、9000 K の等温面、流線)

● プラズマによるナノ粒子創製プロセスシミュレーション

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。図 6 に本計算によって得られた熱流動場の代表的な瞬間像を示す。温度分布や流線から、プラズマトーチ内は 3 次元的で複雑な熱流動場となっており、しばしば仮定される軸対

称 2 次元の場とは程遠いものとなっていた。高温のプラズマ領域には、らせん状の流線が示す再循環流が見られることが多い。これは導電率の高いプラズマ領域に Lorentz 力が発生し、流体運動を駆動するためである。またその再循環流はトーチ上部から注入される低温のガス流にも影響を与えるため、結果としてトーチ内の熱流動場に片寄りが生じ、直進性の高いプラズマジェットも蛇行する。さらに高温領域と低温領域の界面が波打っている。これは異なる密度の流体が互いに異なる速度で運動していて、界面において Kelvin-Helmholtz 不安定性が発現するためである。

#### 4. これまでの進捗状況と今後の展望

本研究では、機械工学分野の先進的、萌芽的な数値シミュレーションプログラムをスーパーコンピュータの環境に移植し、それらのシミュレーションを高性能化、大規模化することで、機械工学分野での新しい研究成果の創出を支援することを目指している。以下では、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを使って数値シミュレーションを高速化するための作業の進捗状況と、今後の課題について報告する。

##### ● 発電機器の安全・安心設計に資する熱流動シミュレーション

これまでの研究で、タービン全周多段を仮定した場合の並列処理効率を算出することができた。翼列流路 551 ブロックに対して、SX-9 の 64CPU を割り当てて MPI 並列処理した結果、44.8 倍の速度向上率を得ることができた。これは、1 CPU では約 100 時間かかっていた計算が 2.3 時間で完了する性能である。ただし、反復計算は 10000 回のみであり、実際にはこれの 20 倍程度の反復回数が必要とされることから、現状の SX-9 を使用しても 50 時間弱の計算時間が必要になる。本来 64 倍に近づくべき速度向上率が 44.8 倍という結果になった原因としては、まずはまだ完全に並列化されていない計算ルーチンが存在することと、流路ブロック間の通信ならびに待機時間が計算全体の約

15%を占めている点などがあげられる。したがって、今後はこれらについてさらなる改良を加えて、並列処理効率の向上を目指す。一方で、計算対象として、より実際のタービンを模擬するため、蒸気タービン最終多段長翼列を通る非定常湿り蒸気流れの数値解析を実施する。

##### ● 熱硬化性樹脂の機械特性評価のための分子シミュレーション

オープンソースコードの LAMMPS に加えてオリジナルの数値シミュレーションプログラムを開発中であり、その性能分析とサイバーサイエンスセンターの環境への移植方法を検討している。本シミュレーションコードではサイバーサイエンスセンターでは提供されていないライブラリ関数が多用されていることから、現在、その代替手段を検討している。

##### ● 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

境界層遷移のシミュレーションの結果、主流の 30%の強さで噴流を吹くと境界層中で渦構造が発達する様子が観察されたが、乱流斑点の生成にまでは至らなかった。今後は、スーパーコンピュータを活用して計算領域及び格子解像度を十分に確保することを予定しており、本研究の枠組みの中でその大規模化の支援を行っていく予定である。また、乱流シミュレーションに関しても、現在さらに詳細な検討を進めている。

##### ● プラズマによるナノ粒子創製プロセスシミュレーション

プラズマの非定常 3 次元流動現象をさらに高精度にシミュレートするためのモデルと計算コードを現在構築中である。またナノ粒子群の集団的成長過程の数理モデルと計算アルゴリズムについては開発済みであるが、化学反応を伴う成長過程をシミュレートするためのモデルについては現在開発中である。本共同研究では、それらのモデルと計算コードを構築した後に、スーパーコンピュー

ターによる高速化の支援を行う予定である。

## 5. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

### (2) 国際会議プロシーディングス

1. Satoshi Miyake, Satoru Yamamoto, Yasuhiro Sasao, Kazuhiro Momma, Toshihiro Miyawaki and Hiroharu Ooyama, Unsteady Flow Effect on Nonequilibrium Condensation in 3-D Low Pressure Steam Turbine Stages, Proc. ASME Turbo Expo 2013, San Antonio, GT2013-94832, (2013), CD-ROM(全文査読).
2. Yasuhiro Sasao, Satoshi Miyake, Kenji Okazaki, Satoru Yamamoto and Hiroharu Ooyama, Eulerian-Lagrangian Numerical Simulation of Wet Steam Flow through Multi-stage Steam Turbine, Proc. ASME Turbo Expo 2013, San Antonio, GT2013-95945, (2013), CD-ROM(全文査読).
3. Tadashi Tanuma, Yasuhiro Sasao, Satoru Yamamoto, Yoshiaki Niizeki, Naoki Shibukawa, Hiroshi Saeki, Aerodynamic Interaction Effects from Upstream and Downstream on the Down-flow Type Exhaust Diffuser Performance in A Low Pressure Steam Turbine, Proc. ASME Turbo Expo 2013, San Antonio, GT2013-95901, (2013), CD-ROM(全文査読).
4. Xinrong Su, Satoru Yamamoto and Xin Yuan, On the Accurate Prediction of Tip Vortex: Effect of Numerical Schemes, Proc. ASME Turbo Expo 2013, San Antonio, GT2013-94660, (2013), CD-ROM(全文査読).
5. Satoshi Miyake, Itsuro Koda, Satoru Yamamoto, Yasuhiro Sasao, Kazuhiro Momma, Toshihiro Miyawaki and Hiroharu Ooyama, Unsteady Wake and Vortex Interactions in 3-D Steam Turbine Low Pressure Final Three Stages, ASME Turbo Expo 2014, GT2014-25491, (2014), (全文査読中).
6. Masaya Shigeta, 3D fluid dynamic modelling of

RF plasmas, (招待講演), Proceedings of the 31st International Conference on Phenomena in Ionized Gases, Granada, Spain, (July 14-19, 2013), USB Memory, 2 pages.

7. Masaya Shigeta, Numerical Simulation of Multiple Thermal Plasma Plumes from a Jet Array, The 12th International Symposium on Fluid Control, Measurement and Visualization, Nara, Japan, (November 18-23, 2013), USB Memory, 10 pages.

### (3) 国際会議発表

### (4) 国内会議発表

1. 山本悟、日本機械学会 2013 年度年次大会、ワークショップ「CFD の産業活用における方向性」、マルチフィジックス CFD の産業応用、2013 年度年次大会 DVD 論文集、(2013-9) (招待講演) .
2. 笹尾泰洋、三宅哲、山本悟、蒸気タービン内部における液滴挙動のシミュレーション、日本機械学会 2013 年度年次大会 DVD 論文集、(2013-9).
3. 三宅哲、笹尾泰洋、山本悟、蒸気タービン三段翼列を通る非平衡凝縮流れの三次元非定常解析、日本機械学会 2013 年度年次大会 DVD 論文集、(2013-9).
4. 岩崎俊樹、三宅哲、笹尾泰洋、山本悟、スタッキング翼からなるタービン多段静動翼列の非定常三次元流動解析、第 91 期日本機械学会流体工学部門講演会 DVD 論文集、(2013-11).
5. 三宅哲、笹尾泰洋、山本悟、非平衡凝縮を伴う蒸気タービン三段静動翼列の三次元非定常流動解析、第 27 回数値流体力学シンポジウム、(2013-11), CD-ROM.
6. 吉川穰、茂田正哉、伊澤精一郎、福西祐、「ストリーク構造と噴流の干渉による境界層の不安定化の促進」、第 91 期流体工学部門講演会講演論文集、(2013-11).
7. 廣田真人、茂田正哉、伊澤精一郎、福西祐、「乱

流の階層的渦構造の抽出とその運動に関する  
研究」, 第 27 回数値流体力学シンポジウム講  
演論文集, (2013-12).

(5) その他 (特許、プレス発表、著書等)

1. 山本 悟, ガスタービン工学、日本ガスタービ  
ン学会、(2013-8), 83-91(著書、分担執筆).