

「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」
平成 17 年度採択研究代表者

尾形 修司

名古屋工業大学大学院工学研究科・教授

ナノ・メゾ・マイクロの複雑固液界面の大規模数値解析

1. 研究実施の概要

我々のチームでは、MEMS、燃料電池、排気ガス触媒コンバーター等の材料に見られる動的変形する流体固体界面での物理化学過程への適用を旨とし、階層的手法による固体および流体計算コードの高適用範囲化、それらを結合して同時並列的に計算する手法の開発、大規模計算環境でシミュレーションを実行するための基礎研究を、ナノからのスケールアップと、マイクロからメゾへのスケールダウンの両方向から行う。

ナノスケール用コードの開発に関し H19 年度は、nudged elastic band 法と組み合わせたハイブリッド量子古典コードの適用例として諸材料(Si およびアルミナ)内部での原子拡散バリアエネルギーの外部応力依存性を考え、量子領域のアダプティブな動的再選択法の改良等を行った。今後はより大規模な系を対象としてコードの適用化研究を行う。また、溶液中での化学反応を想定して溶媒分子の特徴を最小限取り入れた古典剛体分子モデルを考え、その集団に関する、計算精度が確保でき時間安定性が高い動力学計算法を提案した。

マイクロ・メゾスケール用コードの開発に関し H19 年度は、格子ボルツマン法を多孔質媒質中の二相流体に適用可能とする為に、熱分布と界面変化の表現、非連続体領域に対応した散乱関数の導入等を階層的取扱により進めた。新しい界面再構築法を鼻腔内流れにも適用した。また、線状高分子等が巨視的な乱流場に存在する際の流体コードを作成し、その流体輸送特性への影響を調べた。他方、固体の粗視化粒子コードの開発を進め、擬2次元および3次元系への適用、再帰的粗視化、ナノスケール領域とのハイブリッド化等を行った。さらに、列柱を2次元ポアズイユ流中においたハイブリッド流体固体シミュレーションを行い、列柱振動による流れ誘起現象を見いだした。今後は、MEMSなど実際の問題に適用する。

計算グリッド上での大規模ハイブリッドシミュレーション実現に関し H19 年度は、Ninf-G によりグリッド化した、nudged elastic band 法と融合したハイブリッド量子古典コードをアルミナ中での原子拡散過程に適用し、計算ノードの障害検知・復旧機能およびスケジューリングモジュールの利用

研究を日米間の複数のスーパーコンピューターを用いて行った。今後は、上記マイクロ・メゾスケール用コードを用いた研究も進める。

2. 研究実施内容

(文中にある参照番号は4.(1)に対応する)

1. ナノスケール用コードの開発

1.1 同時並列型ハイブリッドコードとそのグリッド適用化

ハイブリッド量子古典シミュレーション法の実用性を高めるために、対象系を半導体のみならず金属にも拡大し、さらに結晶状態のみならずアモルファル/液体状態も考えて、量子領域の自動選択アルゴリズムの開発を進めた。量子計算には実空間差分型の密度汎関数法を用いている。また、昨年度から継続し、高バリアエネルギー過程のために Nudged Elastic Band (NEB)法と組み合わせたハイブリッド量子古典コードを開発し、その適用例として Si およびアルミナ結晶内部での原子拡散バリアエネルギーの外部応力依存性を考えた。例えば、Si デバイス等の内部では、酸化層との界面で Si 結晶は数パーセント程度の歪みを受けている。実際に Si 結晶を広範囲(-2 から 9%)に歪ませ、NEB 化ハイブリッド量子古典コードを用いて計算すると、歪み方向と率に依存して酸素原子の拡散バリアエネルギーが大きく(-0.5eV から+0.5eV の範囲)変化することが分かった[5]。

上記 NEB 化ハイブリッド量子古典コードを、GridRPC と MPI を組み合わせたプログラミング手法を用いてグリッド化するとともに、グリッド上での計算機割り当ての煩雑さをアプリケーションから隠ぺいするためのスケジューリングモジュールを開発した。グリッド化されたハイブリッドシミュレーションコードとスケジューリングモジュールを連携させ、 γ アルミナ中での水素原子の移動過程のシミュレーションを対象とし、日米大規模グリッド上での実証実験を行った(図1参照)。実験においては、日米 4 サイト(5 台のクラスタ計算機群)総数 1129 プロセッサを利用し、約 60 時間にわたってシミュレーションを継続した。障害検知および復旧機能を備えた実装およびスケジューリングモジュールの利用により、必要な計算資源を適切に利用しながら大規模グリッド上での長時間実行に成功した。

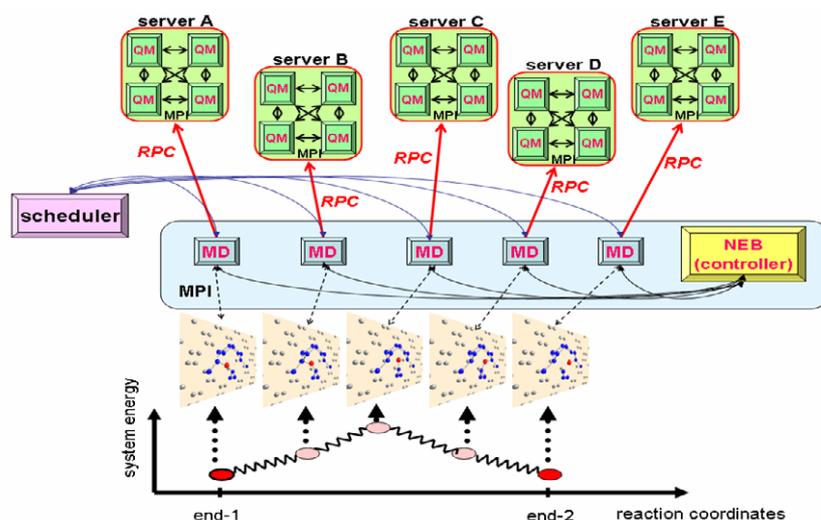


図1 グリッド化されたNEB化ハイブリッド量子古典シミュレーションコードの概念図

1.2 階層手法による化学反応の近似表現

溶液中での化学反応をモデル化する際、大量の溶媒分子には出来るだけ計算負荷の低い表現を用いることが望ましい。溶媒分子の特徴を最小限取り入れたモデルとして剛体分子モデルを考え、角運動量成分の時間発展をベルレ法によって解く動力学計算法「角運動量ベルレアルゴリズム(AMV)」の開発を、昨年度から継続して進めた。AMVにおける時間ステップごとの保存量の規格化法等を改良し計算精度と時間発展計算における安定性を向上させた。

2. マイクロ・メゾスケール用コードの開発

2.1 格子ボルツマン法の適用範囲拡大

相変化を伴う二相流を、その熱分布と界面変化を取り入れて解析する格子ボルツマンコードを開発した。例として、重力下にある加熱平板上で発生する気泡の成長を調べ、気泡が平板から離れ始める際に平板との接触部分がくびれること等、実験結果を再現することを確認した。非連続体側に対応できる格子ボルツマンコードの開発[1,2,6]を行い、実際に角柱を挿入したマイクロチャネル流れの解析を行い分子動力学法の結果と比較した。また、複雑境界面での流体-固体連成問題解析の基礎として開発した、デジタル画像データとして与えられた固体面の離散的データから滑らかな界面形状に境界面を変換する手法を、生体内流れに適用した。また、格子ボルツマン法の高い並列性を視野に入れて、この手法による高解像度の非圧縮一様乱流の直接数値シミュレーションの可能性を探り、短波数領域を除いて満足のいく結果を得た。

2.2 固体の粗視化、流体と固体のハイブリッド化

弾性固体の新しい粗視化手法である粗視化粒子コードの開発を進め、様々な物質の擬2次元および3次元系への適用化、再帰的粗視化、ナノスケール領域とのハイブリッド化、並列計算化等を行い、コードの実用性を高めた(図2参照)。

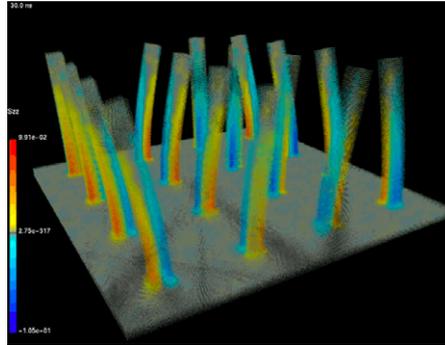


図2. 並列化された粗視化粒子コードで計算した振動柱群(カーボンナノチューブ群を模擬).

さらに、列柱を2次元ポアズイユ流中においたハイブリッド流体固体シミュレーション(流体計算には格子ボルツマン法、固体には粗視化粒子法を適用)を行い、列柱振動による流れ誘起現象を見いだした。弾性棒と流れの相互作用問題においての鍵は、境界条件の粗視化法にある。メソスケール粒子の運動の各計算時刻で格子ボルツマン法(流体部分)に用いる分布関数を求め、流体運動の時間スケールにわたって時間平均するという粗視化法を開発した。棒の下面がレイリー波で励起されたとき、レイリー波の進行方向とは逆向きの平均的な流れが誘起されること等、興味深い現象見いだした。

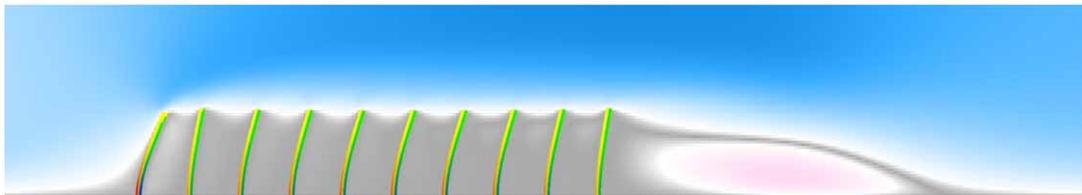


図3. ポアズイユ流れ中におかれた粗視化粒子で構成された弾性列柱の変形(応力分布)と渦度場。レイノルズ数は18.7.

故意あるいは自然に流体に含まれている線状高分子の特性長は、乱流場における最小渦(コルモゴロフスケール)よりも小さいか同程度である。まず、コルモゴロフスケール以下での場の解析性を検証し、空間解像度と統計量との関連を調べた[3,4]。次に、固体粒子および線状高分子を簡単なモデルで表現し、巨視的な乱流場におかれたときの相互作用を解析する基本的コードを作成した。数値計算の結果、十分強い引き伸ばしの場合にはさらにモデルの改良が必要と判明した。

3. 研究実施体制

(1)「尾形」グループ

① 研究分担グループ長:尾形 修司(名古屋工業大学大学院工学研究科、教授)

② 研究項目

- ・ ナノ・メゾスケール用ハイブリッドコード開発
- ・ マイクロ・メゾスケール用ハイブリッドコードの開発

(2)「兵頭」グループ

① 研究分担グループ長:兵頭 志明(豊田中央研究所材料分野計算物理研究室、室長)

② 研究項目

- ・ 階層的的手法による格子ボルツマン法の複雑微細境界問題への適用範囲拡大
- ・ 階層的的手法による化学反応の近似表現

(3)「須賀」グループ

① 研究分担グループ長:須賀 一彦(大阪府立大学大学院工学研究科、教授)

② 研究項目

- ・ メゾからの複雑境界熱流体問題への適用

(4)「田中」グループ

① 研究分担グループ長:田中 良夫(産業技術総合研究所グリッド研究センター、主幹研究員)

② 研究項目

- ・ シミュレーションコードのグリッド化

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

[1] Xiao-dong Niu, Toshihisa Munekata, Shiaki Hyodo, and Kazuhiko Suga: An Investigation of gas-diffusion-layer properties in PEM fuel cell by a multiphase multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model, J. Power Sources, Vol. 172, 542-552, (2007).

[2] Xiao-dong Niu, Shiaki Hyodo, Toshihisa Munekata, and Kazuhiko Suga: Kinetic lattice Boltzmann method for micro gas flows: Issues on boundary condition, relaxation time, and regularization, Phys. Rev. E, Vol. 76, 036711 (2007).

[3] Takeshi Watanabe and Toshiyuki. Gotoh: Intermittency and accuracy of direct

numerical simulation for turbulence and passive scalar turbulence, *J. Fluid Mech.*, Vol. 590, 117 (2007).

- [4] Takeshi Watanabe and Toshiyuki. Gotoh: Scalar flux spectrum in passive scalar convected by homogeneous turbulence under a uniform mean scalar gradient, *Phys. Fluids*, Vol. 19, 121701 (2007).
- [5] Takahisa Kouno and Shuji Ogata: Activation energy for oxygen diffusion in strained silicon: a hybrid quantum-classical simulation study with the nudged elastic band method, *J. Phys. Soc. Jpn*, Vol. 77, No.5 (2008), in press.
- [6] Xiao-dong Niu, Shiaki Hyodo, Toshihisa Munekata, and Kazuhiko Suga: Lattice Boltzmann Simulation of gas flow over micro-scale airfoils, *Computers and Mathematics with Applications* (2008), in press.