U.D.C. [532/533+537.8+539.37/.38].001.573:681.322-181.2-185.4

特集 CAD/CAM/CAE

スーパーコンピュータHITAC S-820のための 数値シミュレーション先端技術

Advanced Numerical Simulation Technique Using Supercomputer Hitachi S-820

スーパーコンピュータの飛躍的な発達は、数値シミュレーションの量的な拡 大だけでなく、解析内容の質的な向上も可能にしつつある。このような背景か ら、流体、電磁場、材料の各分野で、実測データや経験則をほとんど使用する ことなく、基礎方程式をもとに物理現象を解析できる、従来にない新しい数値 シミュレーション技術を開発した。スーパーコンピュータを用いたこのような 数値シミュレーションの新たな展開は、自然科学での新しい物理現象の発見・ 予測や、産業界での革新的な新製品の開発などの有力な手段を提供するものと して期待される。

三木一克*	Kazuyoshi Miki
原田 巌*	Iwao Harada
悔垣菊男**	Kikuo Umegaki
小瀬洋一**	Yôichi Ose
熊洞宏樹***	Hiroki Kumahora

言 1 緒

表 | 数値シミュレーション技術の概要 スーパーコンピュータ スーパーコンピュータの発達に伴って、理論的解析や測定

が困難な物理現象を数値シミュレーションによって解明ある いは予測する計算物理研究が,理論物理,実験物理と並んで 重要な役割を担うようになってきた。また、電子機器、重電 機器,原子力機器などの製品開発でも,製品の高性能化,コ スト低減, 信頼性向上を達成する手段として, 物理現象を高 精度に解析する数値シミュレーション技術が強く要求されて いる。

このため、スーパーコンピュータHITAC S-820(以下、S-820と略す。)を用いて、実測データや経験則をほとんど使用す ることなく, 基礎方程式をもとに, 物理現象を高精度に解析 する数値シミュレーション技術を開発した。本稿では、表1 に示す流体, 電磁場, 材料の各分野での代表的な数値シミュ レーション技術の概要とその適用例を紹介する。

2 乱流解析

熱交換器などの熱流体機器をはじめ、電子・家電・重電機 器などでは、伝熱・流動特性を向上するために、機器の形状

れている。この方法は、粘性流体の基礎方程式であるナビエ・ 分割する必要がある。このため、10⁵~10⁶の格子点が必要とな ストークス式を時間平均操作して得られる渦の運動エネルギ り、膨大な計算時間を要するという問題があった。そこで、 ーkとその散逸率eに関する輸送方程式を解く方法である。時 計算時間の大部分を占める圧力に関するポアソン方程式の計 間平均に基づいているため、計算時間が短く、種々の流れに 算にマルチグリッド法²⁾を導入した。この方法では、図1に示

HITAC S-820専用に独自に開発した数値シミュレーション技術の代表例を 示す。

分 野	解 析 技 術	適 用 例
	直接シミュレーション	配管系内の非定常乱流解析
流体	大渦シミュレーション	熱交換器の伝熱管群内の 熱伝達解析
電磁場	荷電粒子軌道解析	質量分析計の後段加速検出器 のイオン軌道解析
材 料	分子軌道解析	酸化物高温超電導体の 電子構造解析

応用され実績があるが、非定常なはく離や二次流れなどの解 析が困難であり,また解析体系の形状ごとに複数の実験定数 の値を設定する必要がある。

このため,実験定数や経験則を用いずに非定常な乱流挙動 を解析できる技術を開発した。

27

(1) 直接シミュレーション

直接シミュレーションは,一切の乱流モデルを導入せず, や使用条件によって複雑に変化する乱流現象の把握が不可欠 ナビエ・ストークス式を差分法で直接解く方法であるい。この となっている。 方法では、乱流中の大小さまざまな渦の生成と消滅を計算す 乱流解析の実用的方法として、k-ε乱流モデルが広く利用さ るために、乱流渦の最小スケール程度の大きさに解析領域を

* 日立製作所 エネルギー研究所 工学博士 ** 日立製作所 エネルギー研究所 *** 日立製作所 エネルギー研究所 理学博士

238 日立評論 VOL. 72 No. 3 (1990-3)



(a) 格子レベル k (b) 格子レベル k+1 (c) 格子レベル k+2図 | マルチグリッド法の概念 粗密の異なる複数の格子レベルを 用いて,反復計算の収束性を向上した。









図2 マルチグリッド法を用いたポアソン方程式の計算結果 マルチグリッド法による計算時間は、格子数の1.2~1.3乗に比例し、 105格子数以上では従来法の一以下となる。

すように、間隔の異なる複数の計算格子を用意し、各格子に 対応する周波数成分の誤差を反復計算の過程で低減すること により, 収束を加速する。 圧力方程式の計算結果を図2に示 す。従来法(SOR(Successive Over-Relaxation)法, Gauss-Seidel法)による計算時間は計算格子点数の2乗に比例するの に対し、マルチグリッド法では1.2~1.3乗に比例するため、 目標の計算体系(105~106計算格子点数)では計算時間を 100に短縮できることがわかった。

前後に曲管と直管を持つディフューザ内の流れの三次元解 析結果を図3に示す。曲管部の後流側で,旋回流,壁面近傍 の二次流れ、はく離渦が発生し、ディフューザ以降の流路で はく離渦列が上下非対称で非定常に流れていくようすがわか る。このような乱流挙動は、可視化実験でも部分的に確認さ

 $\mathbf{28}$

(b) 流路内の軸方向流れ

図3 配管系内の非定常乱流の解析結果 曲管の後流側で,旋回 流,二次流れが発生している。解析には,115,000の計算格子を使用した (a)。曲管部で発生したはく離渦は、渦列となって非定常にディフューザ 側に流れていく(b)。

れているが、時間平均した従来の乱流モデルでは模擬するこ とは難しい。

(2) 大渦シミュレーション

大渦シミュレーションは、計算格子で分割した微小空間内 でナビエ・ストークス式を空間平均し、計算格子幅より大き な渦を直接計算するとともに、格子幅より小さい渦には統計 乱流理論によって導かれた乱流モデルを適用する方法である3)。 このような空間平均操作により,上述した直接シミュレーシ ョンに比べて、より少ない計算格子点数で非定常な乱流解析 が可能である。

しかし、この方法は、計算格子幅より小さい渦の計算に用 いる乱流モデルの制約のため、境界層(壁面近傍の流れ)には

スーパーコンピュータHITAC S-820のための数値シミュレーション先端技術 239



図4 熱交換器の伝熱管群での燃焼ガスの等温線分布 管群中を通り抜ける燃焼ガスの流れと伝熱管の 熱伝導を同時に解析した。上流側の伝熱管や側壁の影響を詳細に把握することが可能となった。

適用できず,熱伝達率や圧力損失係数を求めるためには,壁 面近傍での経験則(速度対数則)を用いる必要がある。このた め,経験則が適用できる比較的単純な流路形状に使用が限定 されていた。そこで,境界層に直接シミュレーションを適用 し,主流部だけに大渦シミュレーションを適用する方法を開 発した⁴⁾。これにより,実際の複雑な流路形状にも適用可能と なった。

熱交換器の伝熱管群への適用結果を図4に示す。このよう な解析により,乱流に伴う伝熱管表面での局所的な熱伝達の 予測が可能となった。なお本解析では,約7万7,000個の計算 格子点を使用したが,S-820/60で17分で計算できた。

3 荷電粒子軌道解析

電子ビームやイオンビームを用いた各種の電子機器や電磁 機器では,機器の高性能化に伴って電極が多段化し,電極形 状が複雑になる傾向にある。収束した一様なビームを得るた めに電極系を最適化するには,三次元電磁場内の荷電粒子(電 子,イオンなど)の高精度な軌道解析技術が不可欠である。

このため、電極形状を正確に取り扱えるBoundary-Fit法を 用いた荷電粒子軌道解析技術を開発した⁵⁾。Boundary-Fit法 は、図5に示すように、写像空間での立方体格子から成る直 方体の体系を、実空間での実際の形状に座標変換する方法で ある⁶⁾。境界形状に沿った曲線状の計算格子を自動的に生成で きるため、電極の曲面形状を高精度に取り扱える。しかし、 多段化した電極系は、複数の基本立体から構成された複合立

体形状をしているため、この形状に上記の方法を適用するの は非常に難しい。また、格子を生成したとしても、格子の粗 密やひずみが大きくなり、解析精度を低下させる。

新たに開発した部分構造反復法では、複雑な形状を複数の 部分構造に分割し、形状の簡単な部分構造ごとに、上記の Boundary-Fit法を適用する。これにより、複合立体構造の取 り扱いが可能となった。また、着目している部分構造だけを 主記憶に、他はS-820の拡張記憶にメモリすることにより、計 算格子点総数が10⁵~10⁶個に及ぶ大規模体系の取り扱いが可能 になった。

後段加速検出器への適用結果を図6に示す。後段加速検出 器は,正および負の低エネルギー荷電粒子を加速することに より,感度を向上した検出器である。同図に示した検出器は, 遮へい壁とマルチプライアの存在によって非軸対称形状とな っている。ここでは、一次負イオンビームを当てることによ ってターゲットから出射される二次正イオンが、マルチプラ イアに取り込まれるまでを解析した。解析により、二次イオ ンの収率を100%とするには、マルチプライアの第一ダイノー ド中心を、シールド先端に一致させる必要があることがわか った。本解析では、計算格子点総数が6.7×10⁵個に及んだが、

29

240 日立評論 VOL. 72 No. 3 (1990-3)









曲線状の計算格子 図5 荷電粒子の三次元軌道解析技術の概要 を自動的に生成できるBoundary-Fit法に,新たに部分構造反復法を加え, 複雑な大規模体系の解析を可能にした。

30

質量分析計な 図6 後段加速検出器の二次イオン軌道解析結果 どで使用される後段加速検出器の電極配置および形状を, イオン軌道解 析をもとに最適化した。

スーパーコンピュータHITAC S-820のための数値シミュレーション先端技術 241

4 多原子系の電子構造解析

新素材の研究・開発では、電子レベルでの材料の基礎物性 を理解することが不可欠となっている。特に、測定の困難な 物理現象に対しては、実験値を使用せずに電子論的に現象を 解析する必要があり、電子数が100個以上の大規模な多原子系 を解析できる実用的な材料シミュレーション技術が強く望ま れている。

このため、分子軌道法を用いて、実験値や経験則を使用せ ずに多原子系の電子構造を解析する技術を開発した。分子軌 道法では、図7に示すように、分子内の電子は特定のエネル ギーと軌道(分子軌道)を持っていると仮定し,分子軌道を各 原子での電子の軌道(原子軌道)の線形結合で表し、その係数 を変分法によって決定する7)。ここでは、実用的な大規模体系 に適用するため, 分子軌道法のうち, 電子間交換相互作用と 電子相関相互作用を電子密度関数の一乗に比例する局所関数 で表わすXα法を採用した。また、計算誤差の最大の要因であ る電子間のクーロンポテンシャルの積分誤差を低減するため, 新たにハイブリッド積分法を開発した⁸⁾。この方法では、積分 に90%以上寄与する原子に束縛された電子密度に対して解析 積分を適用し,残りの原子間に存在する電子密度に対して数 値積分を適用した。これにより、図8に示すようにイオン化 ポテンシャルは、0.1 eVの誤差範囲で実験値と一致した。 酸化物高温超電導体YBa₂Cu₃O₇の結晶構造での銅-酸素ク ラスターへの適用結果を図9に示す⁹⁾。銅と酸素にかかわる主



K.Siegbahn,et al.: "ESCA applied to free molecules",North Holland,(1969)ⁱ⁾ D.E.Powers,et al.: J.Chem.Phys.78(1983)2866ⁱⁱ⁾

図8 イオン化ポテンシャルの比較 電子間のクーロンポテンシャルの積分誤差を低減することにより、イオン化ポテンシャルの予測精度 を向上した。



要な相互作用を考慮するには、2ピラミッド構造の取り扱い が最低限必要であり、今回これを初めて実現した。銅および 酸素原子の配置については、実験値から得た座標を使用し、 水素原子は境界条件として設定した。取り扱った電子の総数 は115個である。計算時間はS-820/60で約20時間を要した。

解析の結果,ホール軌道(電子を占有しない軌道)の主成分 は酸素の2p軌道から成り,銅と酸素間で格子状に結合するσ 結合軌道であるという実験事実と一致した。また,ホール軌 道はa,b平面だけに分布することから,超電導状態での電流 がa,b平面上を流れるという実験結果とも一致した〔図9(c)〕。 一方,σ結合軌道よりはイオン化ポテンシャルが大きく,ホ ールとしては不安定ではあるが,図9(d)に示すπ結合軌道も存 在する可能性があることがわかった。超電導機構に関しては, 銅原子と酸素原子のπ形結合による相互作用のほかに,酸素原 子と酸素原子のπ形結合による相互作用の寄与も考えられる。

5 結 言

スーパーコンピュータの飛躍的な発達は,数値シミュレー ションの量的な拡大だけでなく,解析内容の質的な向上も可 能にしつつある。本稿では,流体,電磁場,材料の各分野で, 従来にない新しい数値シミュレーション技術の概要と適用例 を示した。スーパーコンピュータを用いたこのような数値実

~~~~~	
分子軌道	分子軌道
$\psi_1 = C_{11} x_1 + C_{12} x_2$ 動道エネルギー <i>F</i> 1	$\psi_2 = C_{21} x_1 + C_{22} x_2$ 動道エネルギー F2
$H\psi_1 = E_1 \psi_1$	$H\psi_2 = E_2 \psi_2$

図7 分子軌道法の概要 分子内の電子の軌道を,個々の原子での 電子の軌道の線形結合の形で表す。 験は,従来の理論,実験のカテゴリーを越えた新しい研究・ 開発手段を提供する。今後,自然科学での新しい物理現象の 発見・予測や,産業界での革新的な新製品の開発などに,真 価を発揮していくものと期待される。

31

242 日立評論 VOL. 72 No. 3 (1990-3)





(b) 2ピラミッド構造の解析体系





(a) YBa2Cu3O7の結晶構造







側面図

(c) σホール軌道の等高線図

(d) *π*ホール軌道の等高線図

図 9 酸化物高温超電導体の電子構造解析結果

銅と酸素で構成される逆ピラミッド構造が2個連なった体系を対象とした。電子数は115個である。

## 参考文献

32

- 1) T. Kawamura, et al. Computation of High Reynolds Number Flow around a Circular Cylinder with Surface Roughness, AIAA Paper, 84-0340(1984)
- 2)A. Brandt : Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems, Math. Comput., 31, 333(1970)

Turbulence Measurements (July, 1988)

- 小瀬,外:Boundary-Fit 曲線座標交換法による三次元ビーム 5) 軌道解析, 電気学会静止器·高電圧合同研究会資料, SA-89-28, HV-89-29(平1-7)
- J. F. Thompson, et al. Boundary-Fitted Coordinate 6) Systems for Numerical Solution of Partial Differential
- J. W. Deardorff : A Numerical Study of Three-Dimen-3) sional Channel Flow at Large Reynolds Numbers, J. Fluid Mech. 41, 427(1970)
- I. Harada : Large Eddy Simulation of Turbulent Channel 4) Flow Using Boundary Layer Splitting Model, Proceedings of the Third Int. Symp. on Refined Flow Modelling and
- Equations, J. of Comput. Phys., 47, 1(1982) 藤永:分子軌道法,岩波(昭55-9) 7) 小林,外:DV-Xa法における電子間クーロンポテンシャル計 8) 算法の改良,日本物理学会予稿集,4P-ZG-14(平1-10) 熊洞,外:DV-Xα法による銅-酸素クラスターの電子構造解 9) 析, 日本物理学会予稿集, 3P-ZB-4(平1-10)