

戦略プログラムも残すところ1年あまり 成果目標の達成と実用化へ加速

ご存じのように、革新的シミュレーション研究センター（CISS）では「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくりの代表機関として、(独)日本原子力研究開発機構、(独)宇宙航空研究開発機構と協力して、5つの研究開発課題を推進するとともに、そこで得られた成果を広く産業界に普及させるためのさまざまな仕組みづくりやその実践をしてきました。

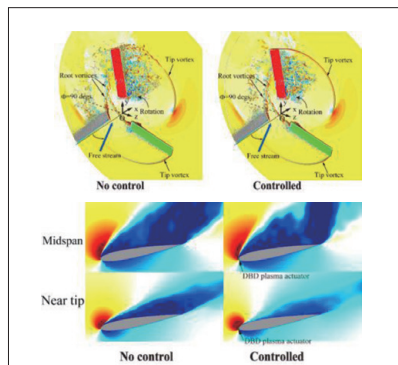
本ニュースレターの巻頭頁にはこれまで得られている成果の一部を掲載させていただきました。マイクロデバイスによる流れの制御メカニズムを解明し、大型風車の性能向上にその成果を適用するためのシミュレーションが進み、それに基づいたフィールド試験が実施されたり(左下図)、次世代半導体デバイス材料として期待されているグラフェンの成長プロセスの大規模第一原理分子動力学法シミュレーションに世界で初めて成功し、重要な影響因子などがわかってきたりしました(中下図)。また、これまで不可能であった実機の実圧における燃焼のシミュレーションなども可能となりつつあり(右下図)、重工・電機メーカーによる実用化が期待されています。「HPCI戦略プログラム」はあと1年あまりで終了しますので、当センターとしてはお約束した成果

目標を確実に達成するとともに、その後の実用化に対しても、産業界と連携してその加速に貢献していきたいと考えております。

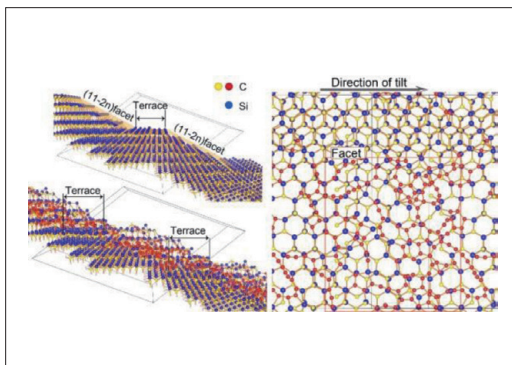
「京」は2012年9月28日に本格運用が開始されてから2年あまりが経過し、「京」を利用したさまざまな成果が出始めています。また、ポスト「京」に向けたアプリケーション・ソフトウェアの開発プロジェクトの調査研究が開始されようとしています。「京」の100倍程度の計算能力を持つポスト「京」は今から5年後の2020年に本格運用を開始する予定でハードウェアの検討・開発も進められていますが、さらに、その後のわが国のスパコン開発をどうするのかという議論も開始されています。このように、わが国のスパコンの開発・利活用のプロジェクトは「京」、ポスト「京」、ポストポスト「京」と三代にわたる実践・準備・検討が行われています。

当センターでも次世代、次々世代のスパコンで実用化されることが期待されるさまざまなシミュレーションの基礎研究も実施しており、本号から2号にわたり、センターに所属する各教員の研究成果をご紹介しますことにしました。

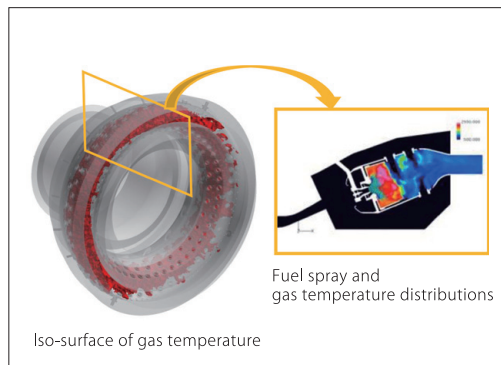
センター長・教授 加藤 千幸



小型風車モデルまわりの3次元流れ場と任意ブレード断面位相平均速度場の比較(提供: JAXA)



初期構造(左図上)と、3層分のSi脱離後の再緩和構造(左図下)と見下ろした拡大図(右図)(提供: NIMS)



「京」による航空機ジェットエンジン用アニュラ型燃焼器内噴霧燃焼のLES(1.2億要素)(提供: 京都大学・JAXA)

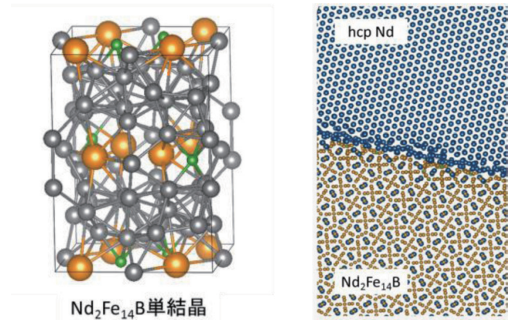
原子モデル解析と第一原理計算によるナノ構造材料の強度および物性予測

梅野 宜崇 准教授

ネオジム磁石結晶構造・界面構造の原子モデリングに成功！

分子動力学法や密度汎関数法第一原理計算といった原子・電子モデルシミュレーションは、ナノスケールの微小材料の変形・強度問題や諸物性について信頼性の高い解析を行うことができ、様々な現象のメカニズムを明らかにすることができます。当研究室では、このようなシミュレーションを用いて、ナノ構造材料の強度および物性の発現機構を明らかにするための研究を行っています。結晶理想強度や構造不安定モード解析といった材料強度の本質に迫る試みから、ナノ構造体の変形を利用した新原理デバイスの理論予測、ネオジム磁石界面特性の解析、ペロブスカイト強誘電材のドメインスイッチング解析、

固体酸化物形燃料電池材料の特性解析といった、デバイス材料の特性評価や機能予測のためのシミュレーションまで、幅広く研究しています。



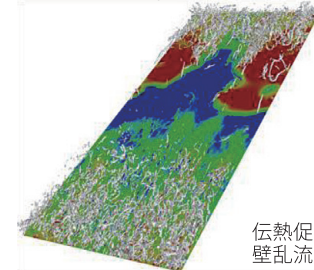
熱流動現象の最適制御、エネルギー機器の3次元構造最適化

長谷川 洋介 講師

流動抵抗を減らしつつ混合促進を実現！

エネルギー機器の高性能化、省エネルギー化に向けて、界面における輸送現象の予測や自在な制御が鍵となります。例えば、固体と流体の界面で生じる摩擦抵抗は、航空機や船舶等の高速輸送機器のエネルギー損失の要因となります。また、圧力損失を抑えつつ伝熱を促進することは熱交換器の性能向上、コンパクト化に大きく貢献します。一般に、流体、及びそれに伴う熱・物質輸送や化学反応は、強非線形性、多自由度を有しており、研究者の直感や物理的な洞察のみでは、熱流体システムの最適化は容易ではありません。当研究室では、上述の界面輸送現象

の機構解明、モデリングを行うと共に、制御理論を熱流体システムに応用することによって、熱流動現象の最適制御、エネルギー機器の3次元構造最適化を進めています。



伝熱促進、及び抵抗低減を目指した壁乱流の最適制御

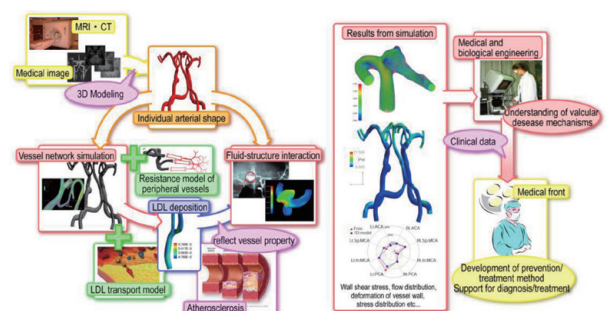
循環器系統合シミュレーションシステムの開発

大島 まり 教授

患者個別に対応できるような診断・治療のためのシミュレーションシステムを実現！

心筋梗塞や脳梗塞などの循環器系疾患は動脈硬化症など血管病変が原因となって発症します。血管病変においては、血流の力学的刺激が重要な関わりを示しています。そこで、当研究室では動脈硬化症や脳動脈瘤などの血管病変に着目し、様々な空間スケールを持つ血管の階層構造を考慮し、かつ血流が血管壁に与える力学的な影響だけでなく血管壁や生理学的な影響もモデル化したマルチスケール・フィジックス数値シミュレーションの実現を目指しています。これらの疾患が発症・進行するメカニズムの解明とともに、臨床応用を視野に入れ、医療画像や計測データを用いた患者個

別に対応できるような診断・治療のためのシミュレーションシステムの開発を行っています。



循環器系統合シミュレーションシステムの概要

シミュレーションとナノ計測による、構造と機能との相関性(構造機能相関)を解明

溝口 照康 准教授

原子分解能計測とシミュレーションにより太陽電池材料の粒界構造を決定！

当研究室ではシミュレーションとナノ計測により、物質の原子配列と電子構造を精密に理解し、構造と機能との相関性(構造機能相関)を解明することを目的とした研究を行っています。2014年度においては、以下のような研究を行いました。

(1) 化合物太陽電池材料の粒界設計

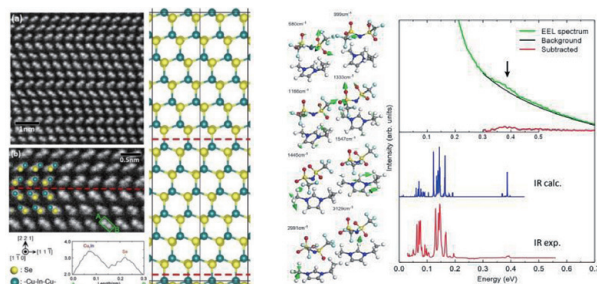
CuInSe₂ (CIS) は化合物系薄膜太陽電池の光吸収層として期待されています。本研究では原子分解能計測によりCIS粒界の原子構造を定量的に決定することに成功し、さらに第一原理ハイブリッド汎関数計算により粒界がバンドギャップ物性に与える影響を明らかにしました。

左図：CIS粒界の原子分解能像と計算構造

右図：イオン液体の振動スペクトルと対応する分子振動モード

(2) イオン液体の振動挙動解析

イオン液体は反応媒体や電池電解質として期待されています。本研究ではイオン液体の分子振動スペクトルを、透過電子顕微鏡を用いて計測することに成功しました。さらに第一原理摂動理論に基づくスペクトル計算によりその起源を明らかにしました。



原子力発電所事故時の放出量および再飛散量推定手法高度化に関する研究

加藤 信介 教授

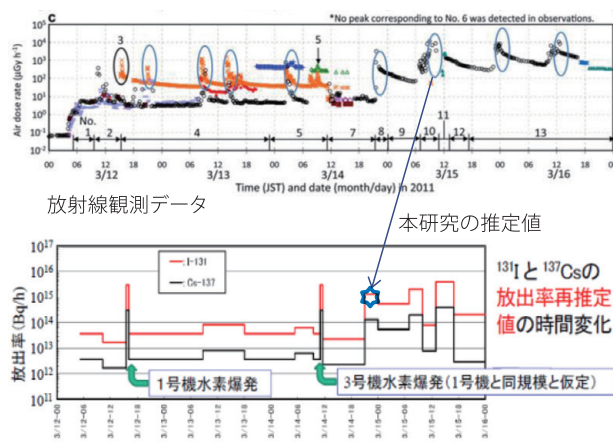
短時間で放散源強度を推定する手法を開発中！

当研究室で取り組んでいる課題の一つに、文部科学省の原子力基礎戦略研究イニシアティブの助成を得て進めている「原子力発電所事故時の放出量および再飛散量推定手法高度化に関する研究」があります。これは以前から取り組んでいる危険物質などの拡散現象の観測値から放散源の位置や放散強度を同定する研究の一環です。放散源位置が既知の場合は時間的に変動する放散強度を推定することになります。具体的な推定は気象モデ

ル(W-SPEEDI、WRFほか)に基づく拡散計算結果と広域観測データ(濃度、空間線量率、沈着量)を相互比較して、放出量を推定します。本研究では、緊急時に短時間で推定する手法として、風洞実験による拡散データを活用して、狭域観測データ(発電所周辺の空間線量率)が得られれば、短時間で放散源強度を推定する手法も開発しています。



事故原発(1～3号機)と観測点



原子力研究開発機構の推定値

- ・ 拡散の推定は風洞実験に基づく正規拡散モデル
- ・ 空間線量率計算式：上記濃度分布の空間積分式 (GAMPULコード)
- ・ 気象条件：現地気象観測データ (風向、風速、大気安定度)
- ・ 観測データ：発電所周界の固定観測データ (空間線量率)
- ・ 放出量推定時刻：2011年3月15日午前 (2号機から最大漏えい発生)

原発事故の放出量推定

SC14 報告



スパコン分野の最大の学会であるSC14が、2014年11月16日(日)~21日(金)の6日間、米国ルイジアナ州ニューオリンズ(モリアル会議センター)で開催されました。SC14では、世界中から製造業から金融・医療サービス、学術・政府関係者に至る様々な分野の第一線で活躍する技術者・開発者・研究者が一同に介し、その集まる参加者は10,000人を超えます。

国際フロンティア産業メッセ2014 報告

日時：9月4日(木)・5日(金)

場所：神戸国際展示場(427団体出展)

「JAXA」実験装置が大変好評でした!

今年は、パネル、動画の展示に加え、JAXAによる「プラズマアクチュエーター簡易実験装置」を設置し、剥離制御の可視化実験を実演することにより、輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発について紹介しました。



AICS一般公開「科学の広場」2014 報告

日時：10月25日(土)

場所：理化学研究所計算科学研究機構

【科学の広場】において、「10分でわかる空気の流れ〜物体浮遊実験〜」と銘うち、下からの風によって浮遊するボールで空気流れの可視化を体験できる展示コーナーを作りました。



第1回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会

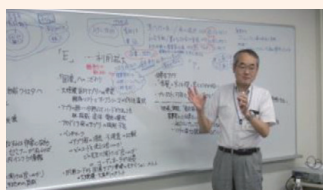
日時：10月31日(金)

場所：コクヨホール

ポスターセッションに参加し、分野4次世代ものづくりの研究紹介をしました。



第3回HPC産業利用オータムスクール2014開催報告 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会



2014年9月19日(金)、20日(土)の両日、HPC産業利用オータムスクールが多摩永山情報教育センター(東京・多摩市)において開催されました。今回は、産業界利活用の将来に

向けたビジョン策定を行うため、スーパーコンピューティング技術産業応用協議会の設立当時の思いを振り返るとともに、「京」の活用事例の課題並びにスパコン「京」とフラッグシップ2020プロジェクト等、現状と今後の最新動向の情報共有を図り、産業界において次のイノベーションの担い手となる人材を育成するため、HPC(High Performance Computing)技術や、その企業活用戦略立案の企画力を習得する機会として、企業の将来をどのように形作るのかといった内容について討論を行い、今後のあるべき姿を整理しました。

イベント案内

分野4次世代ものづくり第2回ワークショップ

日時：2015年3月11日(水)

場所：東京大学生産技術研究所An棟

3部門に分かれ、最新成果事例紹介

- 流体・伝熱・燃焼部門
- 材料・構造・信頼性部門
- 先端アプリ・共通基盤・PF部門



今すぐチェック!

Knowledge Base



解析事例データベース

最先端のシミュレーションソフトウェアによる、さまざまな解析事例を収録

<http://www.cenav.org/>

編集後記

今回のCISS NEWSは、センター所属の先生方の研究を紹介しました。ニュースで研究室の紹介をするのは、2010年1月号以来ですが、今後の記事の企画としては、プロジェクトの成果報告、革新センタートピックスの紹介を掲載していく予定です。今後とも宜しくお願いいたします。

資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661

FAX : 03-5452-6662

E-mail : office@ciiss.iis.u-tokyo.ac.jp

URL : <http://www.ciiss.iis.u-tokyo.ac.jp/>

編集発行

東京大学生産技術研究所

革新的シミュレーション研究センター

〒153-8505

東京都目黒区駒場4-6-1