

[報 告]

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第5回シンポジウム 報告

江川 隆輔

スーパーコンピューティング研究部

平成25年7月11日、12日の両日、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第5回シンポジウムが、東京品川The Grand Hallにおいて開催されました。

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究は、東北大学、北海道大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ8つの共同利用の施設を構成拠点とする「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」が、超大規模数値計算系応用分野、超大規模データ処理系応用分野、超大容量ネットワーク技術分野、およびこれらの技術分野を統合した大規模情報システム関連研究分野、更には分野間に亘る複合分野の研究者らと取り組む学際的な共同利用・共同研究です。この取り組みにより我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展が大いに期待されております。平成22年度は37件、平成23年度には39件、平成24年度には44件の課題が学際大規模情報基盤共同利用・共同研究として採択されており、そのうち当センターとの共同研究課題は、平成22年度4件、平成23年度は6件、平成24年度は6件ありました。

本シンポジウムでは、昨年度採択された35件に及ぶ研究課題の成果発表、および今年度採択された44件の研究課題のポスター発表を通して積極的な議論が交わされたばかりでなく、拠点および拠点を構成する各センターにおけるそれぞれの共同研究への取り組みを確認することができました。本報告では、今年度の東北大学との共同研究として採択された課題のうち以下に示す課題のポスターを転載致します。来年度も引き続き、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の研究公募を行う予定であります。ご興味のあるかたは奮ってご応募ください。また、応募に際して不明な点などあります場合は、お気軽に当センターまでお問い合わせください。

【平成25年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点における当センターとの共同研究課題】

- ・球座標系2.5次元差分法による地球・火星・月の全球地震波伝播モデリング

研究代表者 豊国源知（東北大学）

- ・核融合炉先進ブランケットデザイン条件における高精度MHD熱伝達データベースの構築と乱流モデリング

研究代表者 山本義暢（山梨大学）

- ・大規模シミュレーションによるメタマテリアルを用いたプラズモンポラリトン技術の開発とその応用に関する研究

研究代表者 有馬卓司 (東京農工大学)

- ・機能性界面の大規模第一原理計算手法の開発と応用

研究代表者 森川良忠 (大阪大学)

- ・機械工学分野におけるシミュレーション科学の新展開

研究代表者 滝沢寛之 (東北大学)

- ・次世代ペタスケールCFDのアルゴリズム研究

研究代表者 佐々木大輔 (金沢工業大学)

球座標系2.5次元差分法による地球・火星・月の全球地震波伝播モーデリング

1. 研究の目的

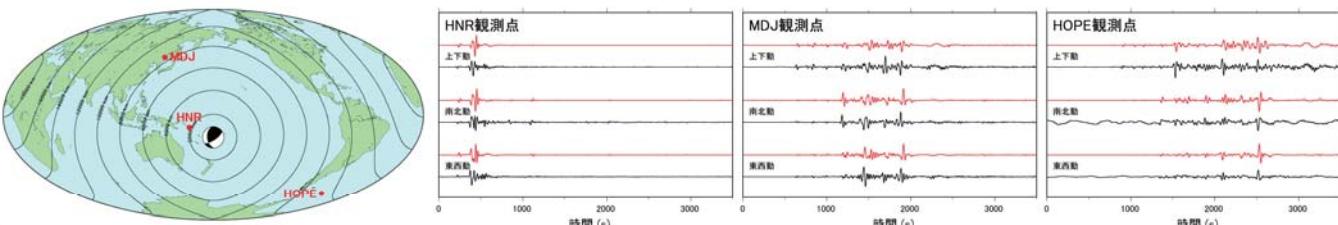
本課題では、既存の地球・火星・月の内部構造モデルと震源に関する情報を用いて、これらの天体の内部を伝播する地震波を、高周波数まで精度よく決定することを第一の目的とする。また3天体におけるシミュレーション結果を比較検討することで、それぞれの天体の地震波伝播の特徴を抽出することを第二の目的とする。

火星や月では1960～70年代に地震計による観測が行われたが、データの質や観測点分布の偏りのために地震波伝播には不明な点が多い。現在はこれらの天体で再度地震探査を行う計画が各国で進められている。本課題では現在までに得られている天体内部構造や震源の知識を活用し、現実的な全球波動場のシミュレーションで各天体の地震波動場の特徴を予測する。これにより、従来の観測の欠点を補完し、将来の地球外地震探査へ向けた機器開発、観測計画への指針を与えられると期待される。

2. モデリング手法「球座標系2.5次元差分法」

本課題で利用する計算手法は、研究代表者らがこれまで開発を行ってきた、全球地震波伝播を精度と効率よく計算する手法「球座標系2.5次元差分法」である。2.5次元計算とは、媒質の2次元構造断面上で3次元の波動場を計算する方法であり、球座標系を用いたグローバルな地震波伝播計算の場合、通常の3次元計算の1万～10万分の1の計算資源で現実的な波動場を計算できる。図1は、2009年11月9日にフィジーで発生した地震(Mw7.3、震源の深さ604 km)について、3つの観測点で記録された観測波形と、2.5次元計算による理論波形を比較した結果であり、両者がよく一致していることから本手法の計算精度が確認できる。

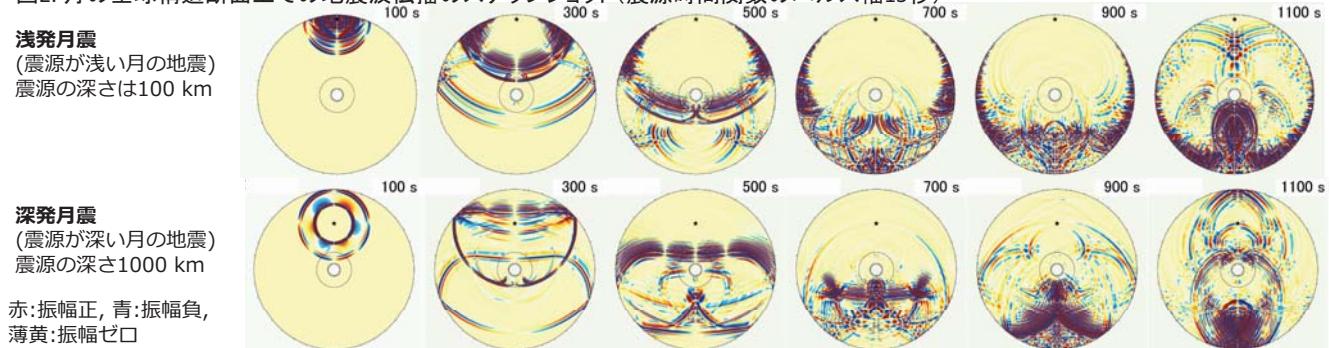
図1. 球座標系2.5次元差分法による3観測点での理論波形(赤線)と観測波形(黒線)の比較。観測点分布は左図に示した。



3. これまでの研究成果：月の地震波伝播シミュレーション

図2は研究代表者らがこれまで東北大学サイバーサイエンスセンターのSX-9を利用して行った、周期15秒での月の地震波伝播シミュレーションの結果である。月の断面を伝わる地震波の様子を、地震発生後100秒から200秒おきに描いたものであり、色の濃い部分が地震の振幅が大きい場所を表す。震源の深さを変えて2通りのシミュレーションを試み、震源が浅い場合には月面での振動が非常に長く続くという、これまでの観測から得られた月の地震の特徴の再現に成功した。

図2. 月の全球構造断面上での地震波伝播のスナップショット(震源時間関数のパルス幅15秒)



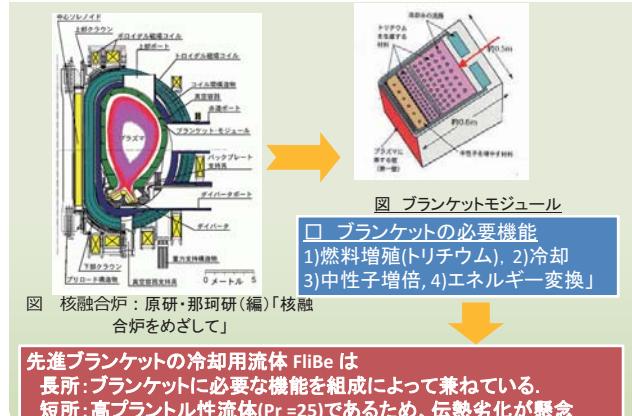
4. これから的研究計画

現実的な地震波シミュレーションのためには、周期2秒程度の短周期まで計算を行う必要がある。周期2秒の場合、月の計算では上で示した計算例の約60倍のメモリーと、400倍の計算時間が必要となる。本課題ではプログラムのチューニングとMPI化を進め、SX-9の4ノード64CPU(ジョブクラスp64)を利用した計算で、月では周期2秒、火星では周期4秒、地球では周期8秒までの現実的な地震波伝播計算を行う予定である。

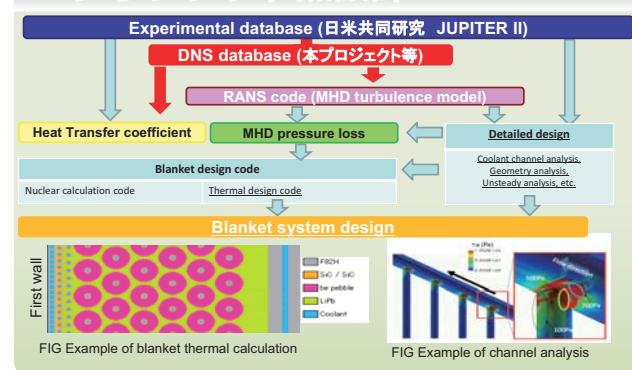
核融合炉先進ブランケットデザイン条件における 高精度MHD乱流熱伝達データベースの構築と乱流モデリング



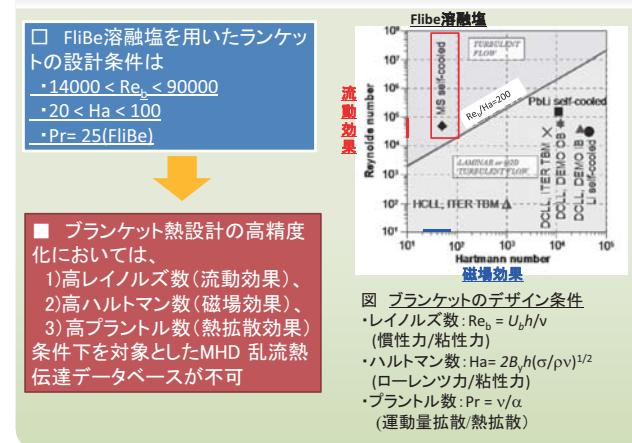
1. 核融合炉・ブランケット



2. ブランケット熱設計



3. ブランケットデザイン条件



4.DNSデータベースの構築とMHD乱流モデリング

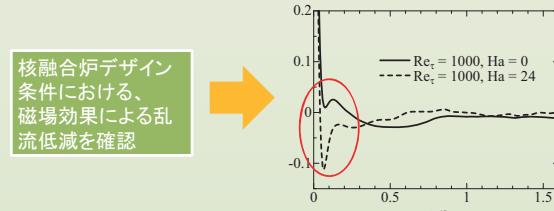
■ 現在までに、速度場を対象としたDNSデータベースの構築に成功



図 主流変動速度のコントラスト
 $-4(\text{black}) < u^+ < 4(\text{white})$, DNSデータベース: $Re_b = 40000$, $Ha = 0, 48, 68$

- 高レイノルズ数条件特有の大規模構造を確認
- 磁場下では、大規模構造の縮退を確認
- 磁場下では、2点間相関に負の相関が出現

→磁場効果のスケーリングと乱流モデル開発における重要な知見



■ MHD乱流モデリング

図 スパン方向への2点間相関

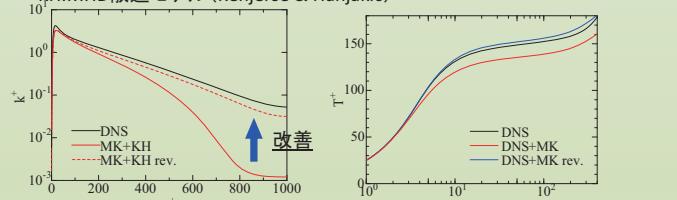
口磁場下のスケーリングパラメータ:

磁場の影響によって、乱流スケールが縮退することから内層乱流構造の強度とスケールをレイノルズ応力の勾配に基づいたレイノルズ数(実効レイノルズ数)をスケーリングパラメータに用いたMHD乱流モデルを開発

■ベースとしたMHD乱流モデル

MK: 低レイノルズ型k-eモデル(Myong & Kasagi)

KH: MHD散逸モデル(Kenjere & Hanjalic)



■ DNSデータベースを用いたMHD乱流モデリングを改良し、予測精度の大幅な向上を達成(DNSデータベースとの誤差は5%以内)

大規模シミュレーションによるメタマテリアルを用いたプラズモンポラリトン技術の開発とその応用に関する研究



1. 背景・目的

メタマテリアルとプラズモンポラリトン

メタマテリアル

電磁界に対する新媒質であり、これまで自然界では見つかっていない特性を示す。周期構造で作製される。

新しい電気特性とは…

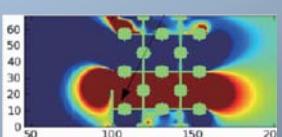
- ・負の透磁率
- ・磁壁
- ・負の誘電率
- など
- ・負の屈折率



写真：代表的なメタマテリアル

プラズモンポラリトン

波長よりも小さな電界が局在する。波長より小さい電界を応用することにより高分解能センサー等への応用を期待。これは負の誘電率を持つ媒質の表面に発生する。



プラズモン解析イメージ

本研究の目的

マイクロ波領域においてプラズモンポラリトンの実用化

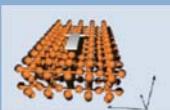
2. 研究内容

構造の開発から基礎技術および応用技術までの一貫した研究を行う

大型計算機



構造の開発



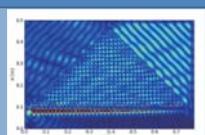
プラズモンポラリトン生成に必要なメタマテリアルの開発を行う。メタマテリアルは周期構造で構成される。

プラズモン生成法の確立



プラズモンを発生させるには、励起方法に工夫が必要であり効率的な歴方法はまだ解明されていない。

応用法の開発



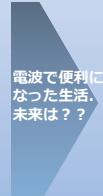
シミュレーションを通してマイクロ波領域におけるプラズモンポラリトン現象の応用技術の開発を行う。

これらすべてを大型計算機で効率的に行う

3. 予想される成果

・電波技術の進歩

モールス信号・ラジオ・TV放送（アナログ・デジタル）・レーダ・医療応用・WIFI（無線LAN）・携帯電話・ETC・携帯電話



未来は開発技術の更なる応用で
もっともっと便利になる。

本研究で開発する技術の応用でさらに便利な社会を目指す。

森川良忠、稻垣耕司、小野倫也、木崎栄年（阪大院工）、濱田幾太郎（物材機構）
小林広明、江川隆輔、小松一彦（東北大サイバー）、柳澤将（琉球大理）

機能性界面の大規模第一原理計算手法の開発と応用



本研究では、酸化物触媒表面や界面、水/半導体界面、有機デバイス界面等、半導体デバイスや燃料電池、二次電池、触媒等の応用上重要なまでの界面における原子構造や電子構造、および、反応過程を出来る限り現実に近いモデルを用いて精度の高い第一原理シミュレーションを行い、その特性を支配する要因を明らかにすることを目指す。それによって、現象の背後にある原理を解明するのみならず、それらの知見を生かして、より有用な界面を計算機シミュレーションによりデザインする指針を与えることを目指す。

First-Principles analysis of CARE process of GaN - Initial stage of etching process -

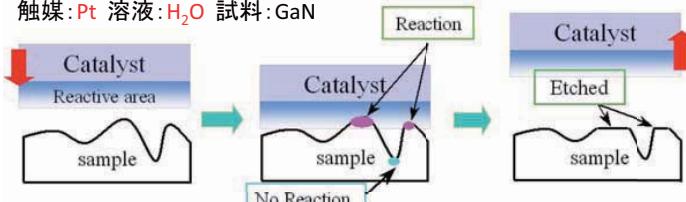
Mari Oue, Kouji Inagaki, Kazuto Yamauchi and Yoshitada Morikawa

Department of Precision Science and Technology, Graduate School of Engineering, Osaka University

Introduction / Catalyst referred etching(CARE)

水中でGaNにPt等を接触させると平坦化加工ができる
結晶性の良いステップ-テラス構造を得られる

触媒: Pt 溶液: H₂O 試料: GaN

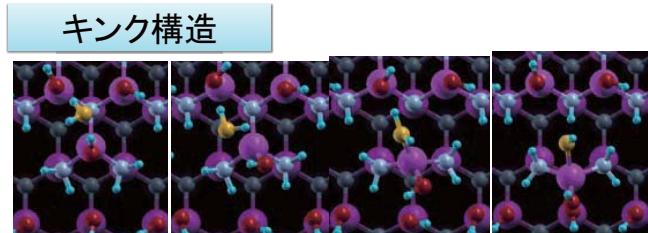
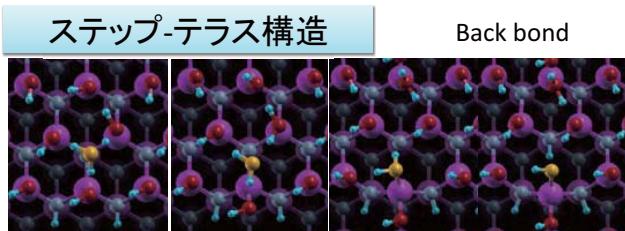


Ref. J. Murata et al, J.Cryst.Growth. 310(2008)1637.
J. Murata et al, Jpn.J.Appl.Phys.48(2009)121001.

問題点
加工速度が遅い



結果



Calculation method and model

STATE (Simulation Tool for Atom TEchnology)

○ 密度汎関数法(DFT)

○ GGA-PBE汎関数

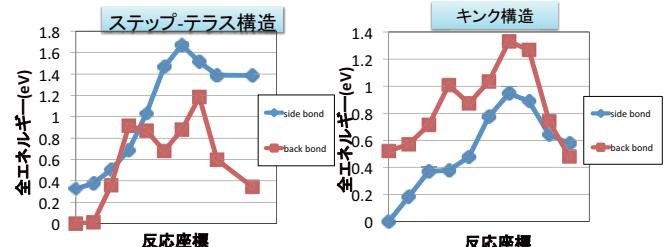
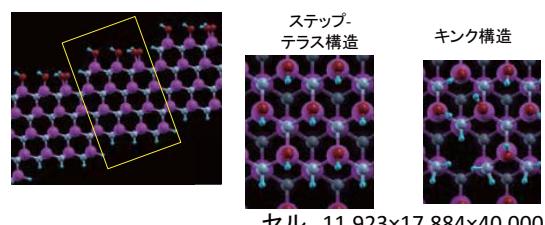
○ ウルトラソフト擬ポテンシャル

○ 平面波展開法

○ Climbing image NEB

(Nudged elastic band) 法

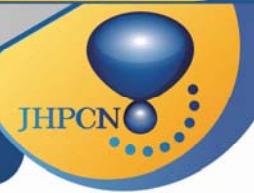
Ref. Henkelman et al,
J. Chem. Phys. 113, 9901 (2000)



Conclusion

- ステップ-テラス構造、キンク構造共にback bondへの解離吸着の反応障壁が低く、終状態は安定化した
 - キンク構造の方がステップ-テラス構造よりも反応障壁は低かった
- 今後の予定
- プロトントリレーを介したH₂O分子の解離吸着について調べる
 - Pt 存在下での反応について調べる

次世代ペタスケールCFDのアルゴリズム研究



研究背景及び目的

- ◆ 大規模並列計算機の性能をフルに活用できる次世代CFDの実用化を目指す。
- ◆ 航空機をはじめとする流体機械の高性能化と環境適合化が実現できる革新的な設計を可能にする。

90年代～現在

超並列計算機時代

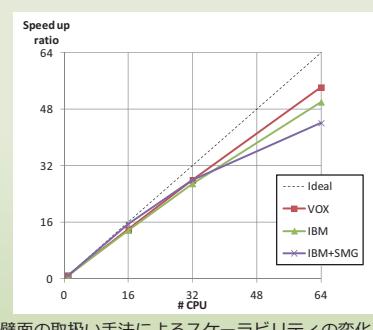
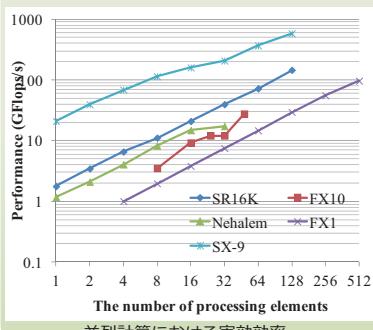


今年度の研究及び研究体制

- 数値流体力学の研究グループ（金沢工大、東北大、東海大、JAXA）及び計算機科学の研究グループ（東北大・サイバー、名大・情報基盤）による共同研究・開発体制
- ◆ ペタスケール向けの超並列化技術開発
 - ◆ ペタフロップス級高解像度流体計算のアルゴリズム開発
 - ◆ 多分野連成や大規模流体解析などの応用工学問題への適用

大規模並列計算に向けた技術開発

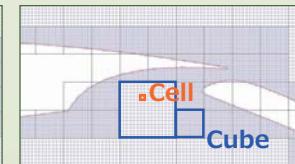
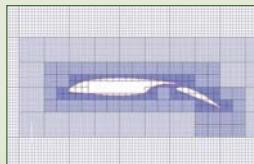
- ◆ 通信遅延の隠蔽手法の導入による並列性能の向上
- ◆ 壁面境界条件を考慮した負荷分散の均一化



計算手法

Building-Cube法 (ブロック型直交格子法)

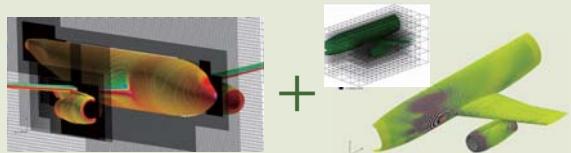
- ◆ 等間隔直交格子法に基づく手法
- ◆ 多数の小領域Cubeによる領域分割
- ◆ 全てのCubeで等価な計算負荷
- ◆ 高速ロバストな格子生成
- ◆ 高解像度解法を容易に構築可能
- ◆ 簡易なデータ構造とアルゴリズム



計算領域はCubeに分割され、各Cube内に同数のCellが生成される
F1の格子 (8億点格子)
(最小格子幅は実車サイズで約3mm)

大規模並列解析による革新設計

- ◆ 流体解析と音響解析のカップリングによる空力騒音解析の実現 (流体音響連成解析)

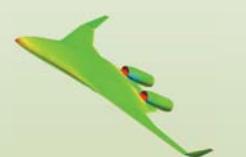


航空機全機モデルの流体解析 ファン（エンジン）騒音の音響伝播解析

従来と形状の異なる低騒音航空機の設計



Over-The-Wing-mounted 形態



Hybrid Wing Body形態