

研究課題名: 超多自由度複雑流動現象解明のための効率的な並列計算コード開発

研究代表者: 岡本 直也(名古屋大学大学院工学研究科附属計算科学連携教育研究センター)

内燃機関における乱流燃焼や、結晶成長などにみられる複雑流動現象において、流れの役割の定性的および定量的理解が必要となってきた。また、それらの複雑流動現象解明のためには、近年発展が著しいスーパーコンピュータを駆使した大規模な直接数値計算が非常に有効である。本研究では、流れ、計算科学を専門とする研究者の学際的な共同研究により、特に多くの化学種をもつ流れの高効率な大規模直接数値計算コードの開発およびデータ解析を行った。平成 29 年度は特に、(1)ガソリンの主成分である n ヘプタンの乱流燃焼、ならびに(2) 有機金属気相成長法(MOVPE)による窒化ガリウム(GaN)結晶成長の 2 次元数値計算を行った。得られた成果は以下の通りである。

(1) n ヘプタンの簡略化学反応メカニズムを用いた乱流燃焼の直接数値計算(DNS)において、解像度が数値計算結果に与える影響を明らかにした。着火遅れ時間が解像度によって変化し高解像度化により着火遅れ時間が収束することがわかった。また、ヘプタンや反応を促進させる OH の質量分率の場の可視化により、低解像度では化学種の小スケールの構造を解像できず、高解像度の計算と局所的に異なる反応が起きることがわかった。次に、非等間隔メッシュを用いて、燃焼室壁を導入した系で n ヘプタン自己着火過程の DNS による数値実験を実施した。流れが壁から内部に向かうところでは壁近傍に低温未燃領域、内部に細い反応遅延領域が形成され、反応遅延領域から低温未燃領域に向かって本着火が急激に進行すること等がわかった。

(2) 熱力学解析と流体力学を融合したマルチフィジックス・シミュレーション手法により、GaN MOVPE 成長で使われる装置を簡略化した系（上下 2 つの平行な平板間を過ぎる多成分弱圧縮流れ）の数値計算を実施した。結晶成長表面である GaN 基板を下平板中央付近に 2 インチの大きさで想定し、表面温度を 1300 K とした。流入口を 3 つに分け、それぞれ異なった割合で各化学種を 1000 K で流入させた。化学種は Ga, NH₃, H₂, N₂, CH₄ であり、化学種の質量分率に対する移流拡散方程式を用いて計算を行った。基板上における各化学種の分圧、温度等を用いて GaN の成長反応の表面構造を考慮した熱力学解析を行い、面方位に依存した Ga ガスの平衡分圧を計算し、GaN の結晶成長の駆動力を求めた。流体力学と熱力学のカップリングは、結晶成長表面における化学反応の質量保存則を満たすような質量分率の境界条件により行った。数値計算の結果、結晶成長表面で Ga が取り込まれるため、流れ方向に進むほど Ga の分圧が低下し、結晶成長の駆動力も低下することがわかった。今後は 3 次元にコードを拡張し、壁面からの熱輻射の効果もとりにれた並列コードを開発する予定である。