

目次

[巻頭言]	
・Vol.10 No.2号の発刊にあたって	1
岩下武史	
[スーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠) 研究報告]	
・ポルフィリンコアを有する色素を用いた色素増感太陽電池の開発	2
梅山有和	
・固体NMRならびに第一原理計算による有機EL素子の分子構造・凝集構造の解析	4
鈴木不律、梶 弘典	
・電子ストレステンソルによる化学結合の理論的研究	7
市川和秀	
・気象庁高解像度データ同化システム(JNoVA)における台風状況下の海面交換係数の最適化	10
伊藤耕介、川畑拓矢、本田有機、加藤輝之、石川洋一、淡路敏之	
・鉄酵素と鉄触媒の反応メカニズムに関する計算量子化学研究	12
平尾 一	
・脱プロトンしたレチナールシッフ塩基のオブシシフト	14
長谷川淳也、藤本和宏、浅井康太	
・トリアリールアミン系新規有機デバイス材料の電荷輸送解析	16
川口久文、鈴木不律、西村秀隆、若宮淳志、村田靖次郎、梶 弘典	
・塗膜表面形状による摩擦抵抗低減効果	18
高木洋平	
・視覚性短期記憶課題中におけるヒト頭頂間溝のトポグラフィック領域のfMRI応答	20
金津将庸、山本洋紀、澤本伸克、福山秀直、齋木 潤	
・蔵本-シバンスキー方程式におけるアトラクタ・マージング・クライシスの不安定周期軌道解析	22
齊木吉隆、小林 幹	
・歳差球体内の乱流リングとダイナモ	24
木田重雄、清水雅樹	
[プログラム高度化支援事業研究報告]	
・動弾性有限積分法(EFIT)を用いたイメージベース波動解析の効率化	26
中畑和之	
・H-matrices (階層型行列)法を用いた準動的な地震発生サイクルシミュレーションの省メモリ化・高速化	30
平原和朗、大谷真紀子、高橋康人、堀 高峰、兵藤 守	
・噴霧燃焼の超並列大規模数値シミュレーションの実現に向けて	36
黒瀬良一、岩下武史、張 会来、小森 悟	
・原子・分子過程を取り入れたプラズマの複雑性と構造形成	40
岸本泰明	
・ジャイロ運動論に基づいた位相空間 5次元プラソフ方程式による乱流輸送のシミュレーション研究	44
今寺賢志	
・3次元2相流格子ボルツマン法による貯留岩の空隙ネットワーク及びフラクチャーにおける二相流動シミュレーション ..	48
村田澄彦	
[スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠) 研究報告]	
・計算化学による有機反応経路の追跡	52
山邊信一	
・マルチフェイズ解法による shallow basin 内の流動不安定性の計算	56
永井克明	
[サービスの記録・報告]	
・スーパーコンピュータシステムの稼働状況とサービスの利用状況	60
・センター利用による研究成果(平成22年度)	63
[資料]	
・大型計算機システム利用負担金 別表	66
・サービス利用のための資料一覧	68
[編集後記]	
・編集後記、奥付	69

全国共同利用版

広報

「センター共同研究報告」
(平成22年度)

【若手研究者奨励枠】梅山有和◎鈴木不律、梶 弘典◎市川和秀◎伊藤耕介、川畑拓矢、本田有機、加藤輝之、石川洋一、淡路敏之◎平尾 一◎長谷川淳也、藤本和宏、浅井康太◎川口久文、鈴木不律、西村秀隆、若宮淳志、村田靖次郎、梶 弘典◎高木洋平◎金津将庸、山本洋紀、澤本伸克、福山秀直、齋木 潤◎齊木吉隆、小林 幹◎木田重雄、清水雅樹【プログラム高度化支援事業】中畑和之◎平原和朗、大谷真紀子、高橋康人、堀 高峰、兵藤守◎黒瀬良一、岩下武史、張 会来、小森 悟◎岸本泰明◎今寺賢志◎村田澄彦【大規模計算支援枠】山邊信一◎永井克明

Vol.10 No.2 号の発刊にあたって

京都大学学術情報メディアセンター

岩下 武史

本号では、毎年冬号で恒例となっております、学術情報メディアセンターの共同研究に関する報告を掲載いたします。若手研究者の支援事業につきましては2006年より実施し、本年度で6年目となります。一方、大規模計算の支援事業、プログラム高度化の支援事業につきましては、共に2008年からの実施で、本年度で4年目となります。これらの事業の開始年度である2008年は、現行のスーパーコンピュータ HX600(thin)、及び SPARC Enterprise M9000(fat)が導入された年であり、筑波大学、東京大学、京都大学の共同調達による T2K オープンスーパーコンピュータ仕様の計算機がこれらの三大学で運用に供された年でもあります。ここで、すでにお気づきの方も居られるかもしれませんが、京都大学学術情報メディアセンターでは、4年毎にスーパーコンピュータをリプレースしますので、来年度からは新しい計算機が運用開始となります。既に、センターニュースでも告知しておりますとおり、新システムは3つのサブシステムより構成されます。いずれのシステムも現行の thin クラスタで使用されている x86 系のプロセッサに基づいたシステムとなりますが、システム全体の演算能力は7倍以上に増強され、ノード数も拡大いたします。近2年の間は、申し込み数に比べて十分なノード数を提供することができず、一部の申請者の方にはグループコースのノード数の削減をお願いして参りましたが、そのような事態を当面避けることが可能となると考えております。一方、並列数の拡大はユーザの皆様にとって、プログラミングの負担が増大するという側面もあります。そこで、今号での報告に見られるプログラム高度化支援事業や、これに類するユーザとセンターの連携が今後、益々重要になってくると考えられます。例えば、本号で報告されている岸本氏(京大エネルギー科学研究科)のプラズマシミュレーションでは、センター教員が考案した負荷分散アルゴリズムである OhHelp の導入に際する既存プログラムの整備が行われ、次年度以降には OhHelp の導入による分散メモリ環境での並列性能の改善が見込まれています。このように、アプリケーションプログラムの高度化は段階的に進むものであり、継続的な連携、支援が重要となると考えています。新システムにおける共同研究事業の方向性はまだ未確定となっておりますが、本広報においても継続的にセンターで実施されている最先端の計算科学・数値シミュレーションについて発信をしたいと考えております。

次号では、新システムの紹介、その使い方、ベンチマークによる性能評価等をご紹介する予定です。新システムの安定稼働、ユーザの皆様のシームレスな移行のため、より速報性のある Web による情報提供を先行して行う予定です。広報の発行は1~2ヶ月程度、遅らせる予定としております。今後も、本センターの広報をご活用いただき、皆様の研究・教育活動に益するところがありますように取り組んで参ります。今後ともどうぞよろしくお願いいたします。

ポルフィリンコアを有する色素を用いた色素増感太陽電池の開発

梅山有和

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻

1 緒言

化石燃料の枯渇への懸念と環境問題への関心の向上に伴い、シリコン太陽電池の実用化が本格化している。しかしながら、シリコン太陽電池は高純度シリコンの製造費用が高いという根本的な問題点を抱えている。一方、シリコン太陽電池に変わる太陽電池として色素増感太陽電池が注目されている。色素増感太陽電池は安価に製造でき、カラフルで、しかもフレキシブルという特徴を有する。現在までにルテニウム錯体と多孔性酸化チタンを用いた系において 11% を越える高いエネルギー変換効率 (η) が報告されている。しかし、ルテニウムは高価で、資源制約もある。そのため、ルテニウム錯体に変わる安価で高性能な色素の開発が求められている。そこで我々は、安価な金属を利用できるポルフィリン錯体に注目し、新規ポルフィリン系色素の開発を行ってきた^{1,2}。本研究では、メソ位に電子供与性のジアルキルアミノ基と電子受容性のカルボキシフェニルエチニル基を導入することで電荷移動(CT)性を高めた ZnPH および ZnPF を考案した (Figure 1)³。特に ZnPF ではフッ素の導入により CT 性が高まり、セル性能に影響を及ぼすことが期待される。

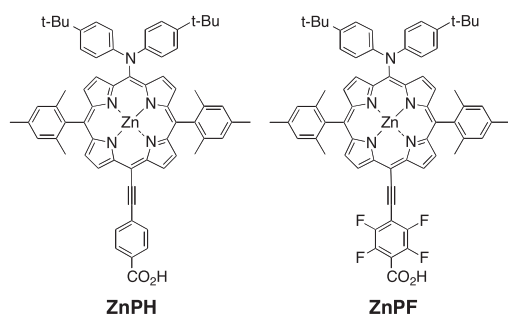


Figure 1. Structures of ZnPH and ZnPF.

2 結果と考察

2.1 新規ポルフィリン色素の諸物性と色素増感太陽電池への応用

ZnPF および ZnPH のジクロロメタン溶液中の吸収スペクトルを Figure 2 に示す。ZnPF の吸収スペクトルは ZnPH と比較して、Q 帯は 9 nm 長波長シフトした。また、DPV 測定により求めた ZnPF の第一酸化電位 ($E_{\text{ox}} = 1.20$ V vs. NHE) は ZnPH ($E_{\text{ox}} = 1.15$ V vs. NHE) と比較して 0.05 V 正側にシフトし、ZnPF は若干酸化されにくくなっていることがわかる。

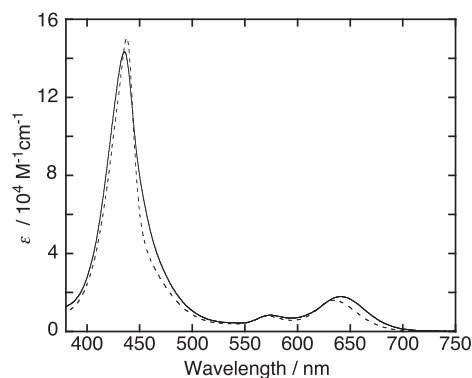


Figure 2. UV-vis absorption spectra of ZnPF (solid line) and ZnPH (dashed line) in CH₂Cl₂.

太陽電池作製条件の最適化を試みたところ、共吸着剤としてケノデオキシコール酸 (CDCA) 2 等量を添加したときに、ZnPF に関しては MeOH 溶液中 30 分浸漬 (25 °C)、ZnPH では 2 時間浸漬で最高特性が得られた。その電流-電圧特性は、ZnPF で $J_{\text{sc}} = 10.1$ mA cm⁻², $V_{\text{oc}} = 0.65$ V, $ff = 0.70$, $h = 4.6\%$ 、ZnPH で $J_{\text{sc}} = 17.1$ mA cm⁻², $V_{\text{oc}} = 0.67$ V, $ff = 0.59$, $\eta = 6.8\%$) であった。最適条件下での作用スペクトルを Figure 3 に示す。全波長

にわたり ZnPF は ZnPH よりも IPCE 値が低下しており、電流-電圧特性における J_{sc} の差と一致している。

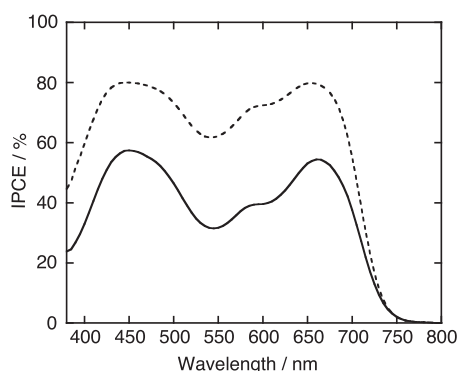


Figure 3. Action spectra of ZnPF cell (solid line) and ZnPH cell (dashed line).

2.2 理論計算

ポルフィリンの再安定化構造およびそのフロンティア軌道の電子構造について知見を得るために、密度汎関数法 (DFT) による理論計算 (B3LYP) を行った。基底関数系に 3-21G(d) を選択し、Gaussian03 プログラムを用いた。分子軌道の可視化には Molstudio3.0 プログラムを用いた。Figure 4 に ZnPH および ZnPF の最高被占軌道

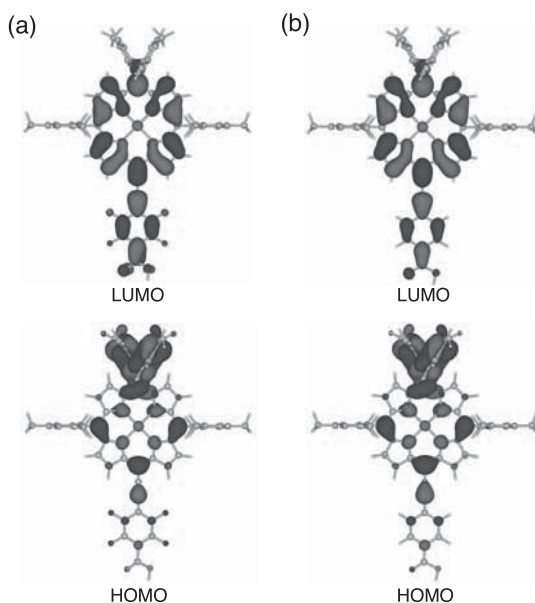


Figure 4. Some sets of molecular orbital diagrams for (a) *cis*-ZnP, (b) *trans*-ZnP, (c) *mono*-ZnP, and (d) ZnP-ref obtained by DFT calculations with B3LYP/3-21G(d).

(HOMO) と最低空軌道 (LUMO) における電子密度分布を示す。一般に、アンカー部位の LUMO の電子密度が大きいほど、励起状態の色素と酸化チタンの 3d 軌道との間の電子カップリングが大きくなることが知られている。ZnPF では ZnPH に比べて、アンカー部位の LUMO の電子密度が高くなっているため、電子注入には有利に働く。

一方、第一酸化電位と励起エネルギー E_{00} から励起状態の酸化電位を計算すると、ZnPF ($E_{ox}^* = -0.65$ V vs. NHE) と ZnPH ($E_{ox}^* = -0.73$ V vs. NHE) となった。酸化チタンの電導帯電位 (-0.5 V vs. NHE) を考慮すると、色素から酸化チタンの電導帯への電子注入の自由エネルギー変化が -0.2 V 程度である。ZnPF の J_{sc} 値が低下したことは、アンカー部位の LUMO の電子密度による影響ではなく、色素から酸化チタンの電導帯への電子注入の自由エネルギー変化の差が十分に大きくないことが主原因であると考えられる。

3 参考文献

- [1] H. Imahori, T. Umeyama and S. Ito, "Large π Aromatic Molecules as Potential Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells", *Acc. Chem. Res.*, **42**, 1809-1818 (2009).
- [2] H. Imahori, Y. Matsubara, H. Iijima, T. Umeyama, Y. Matano, S. Ito, M. Niemi, N. V. Tkachenko and H. Lemmetyinen, "Effects of *meso*-Diarylamino Group of Porphyrins as Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells on Optical, Electrochemical, and Photovoltaic Properties", *J. Phys. Chem. C*, **114**, 10656-10665 (2010).
- [3] S. Mathew, H. Iijima, Y. Toude, T. Umeyama, Y. Matano, S. Ito, N. V. Tkachenko, H. Lemmetyinen, and H. Imahori, "Optical, Electrochemical, and Photovoltaic Effects of an Electron-Withdrawing Tetrafluorophenylene Bridge in a Push-Pull Porphyrin Sensitizer Used for Dye-Sensitized Solar Cells", *J. Phys. Chem. C*, DOI: 10.1021/jp2030208 (2011).

固体 NMR ならびに第一原理計算による 有機 EL 素子の分子構造・凝集構造の解析

鈴木 不律、梶 弘典

京都大学化学研究所

1 緒言

有機材料の巨視的特性(発光特性、電荷輸送特性など)を分子構造、凝集状態といった分子レベルの構造から解明することは、優れた有機デバイスの開発のみならず、基礎科学においても重要である。しかし、有機 EL 材料に対し、その構造解明は、これまでほとんど行われてこなかった。これは、結晶化を可能な限り抑制することが求められる有機 EL 材料においては、非晶状態はもちろんのこと、そのモデルとなる結晶状態であっても乱れを有している場合が多く、X 線回折法による構造解析が困難なためである。例えば、発光かつ電子輸送材料である tris(8-hydroxyquinoline) aluminum(III) (Fig. 1) には α 、 β 、 γ 、 δ 、 ϵ 型の 5 つの結晶形が存在することが明らかにされているが、その結晶構造に関しては別々のグループから異なる構造が提案されており、確定していない[1-6]。このような状況の下、本研究では、2 種の構造が提案されている δ -Alq₃ 結晶に焦点を絞り、周期境界条件下での化学シフト計算が可能な GIPAW 法[7]を用いて NMR 等方化学シフト値を求め、 δ -Alq₃ の CP/MAS ¹³C NMR スペクトルから得られた実測値[5]との比較検討により、構造精密化を試みた。

2 実験

Cölle ら[2]によって報告された δ -Alq₃ 結晶構造については水素の座標が記載されていない。そのため、まず、水素原子を付加した上で、セルパラメータおよび Al、C、O、N 各原子の座標を文献

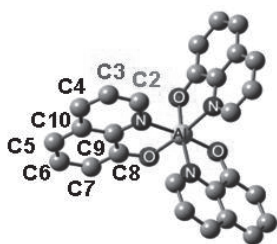


Fig. 1. The structure of Alq₃. Here, we only show *facial*-Alq₃.

で報告されている値に固定し、周期境界条件の下で H 原子の座標のみに対して構造最適化を行った。また、セルパラメータを固定した条件下で結晶中の全原子に対する構造最適化計算も行った。一方、Rajeswaran ら[3]により報告された δ -Alq₃ 結晶構造については水素の座標が記載されているが、この構造に対しても、セルパラメータおよび Al、C、O、N 各原子の座標を各々の文献で報告されている値に固定し、周期境界条件の下で H 原子の座標のみに対して構造最適化を行った。これらの構造最適化には、平面波基底を用いた DFT、および、交換相関ポテンシャルには一般化密度近似 (GGA) を用いた。GGA 汎関数としては Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 交換相関汎関数を用いた。平面波エネルギーカットオフは 27.9 Ry (380 eV)とした。

上述の構造に対して、GIPAW 法に基づいた NMR 化学シフト計算を行った。交換相関ポテンシャルに GGA を用い、GGA 汎関数としては PBE 交換相関汎関数を用いた。平面波エネルギーカットオフは 80 Ry (1088 eV)とした。なお、構造最適化計算には CASTEP、GIPAW 法に基づく化学シフト計算には Quantum-Espresso を用いた。粉末 X 線回折プロファイル計算には Mercury を用いた。

3 結果・考察

Fig. 2(a), (b)に、Cölle ら、および、Rajeswaran らによってそれぞれ報告された δ -Alq₃ の結晶構造 (いずれにおいても分子は *facial* 体からなる) を基に計算した粉末 X 線プロファイルを示す。両構造から計算される粉末 X 線プロファイルはほぼ一致しており、X 線回折測定によってこれら両構造の区別や比較検討を行うことは困難である。

Fig. 3(a), (b)には、 γ -および δ -Alq₃ の実測 CP/MAS ¹³C NMR スペクトル[5]を示す (いずれも結晶中の分子は *facial* 体からなる)。Fig. 3(a)と異なり、Fig. 3(b)では各炭素種に対する共鳴線に分裂が見られ

る。例えば、C2 共鳴線は 3 本に明瞭に分裂しているが、このような共鳴線の分裂は、一分子の facial 体の Alq_3 では見られない特徴であり、分子間相互作用の影響が示唆される[5]。

Rajeswaran らによって報告された $\delta\text{-Alq}_3$ の結晶構造を基づき NMR 等方化学シフト値を計算したところ、構造最適化を全く行わない場合には、計算値と実測値が全く一致しなかった。Fig. 4(a)には、Cölle らのモデル (H 原子最適化後) に対して計算した NMR 等方化学シフト値を示す。Fig. 4(a)の全体的な化学シフトの広がり、Fig. 3(b)の化学シフトの広がりと同程度であり、実測をよく再現している。一方、Fig. 4(b)には、Rajeswaran らのモデル (H 原子最適化後) に対する等方化学シフト値を示す。この構造に対しては全体的な化学シフトの広がり、実測値に比べて大きく広がっており、実測スペクトルとのずれが大きい。各炭素のシグナルの分裂も実測に比べかなり大きくなっていることがわかる。以上の結果は、X 線回折測定のみでは困難であった両者の区別が、本手法により可能となることを明示している。ただし、Fig. 4(a)も、実測と非常に良く一致しているというわけではない。例えば、実測スペクトルにおける C2 共鳴線の 3 本の等間隔な分裂は、Fig. 4(a)においては 2 本にしか分裂していない (各共鳴線の帰属は Fig. 1 参照)。そこで、より実測に近い Cölle らの提案した構造を基に、周期境界条件下での全原子の構造最適化計算を行い、さらなる構造の精密化を試みた。全原子を最適化した構造に対する等方化学シフトの計算結果を Fig. 4(c)に示す。Fig. 4(a)、(b)と比較して、全体的な共鳴線の広がりや各共鳴線の位置が実測値を良く再現していることがわかる。特に、H 原子のみを最適化した構造では得られなかった、ほぼ等間隔に分裂した 3 本の C2 共鳴線や、C3 の 1 本の共鳴線が実測と良く一致している。Fig. 5 には、これらの化学シフトの計算値を縦軸に、実測値を横軸にとった比較図を示す。これらの図からも、Cölle ら、および、Rajeswaran らの構造(H 原子最適化後)に比べ、Cölle らの構造を全原子最適化した構造に基づく計算値が、実測値とより良い一致を示していることが明確である。

Fig. 6 には、全原子の最適化前後の結晶構造の変化を示す。最適化前後での炭素原子の変位は最大で 0.15 \AA であった。この構造最適化を行った結

晶構造から求めた X 線回折プロファイルを Fig. 2(c)に示す。Fig. 2(c)も Fig. 2(a)、(b)とほぼ一致しており、構造最適化による X 線回折プロファイルの明確な変化は認められない。この結果から、少なくとも今回の $\delta\text{-Alq}_3$ 結晶に対しては、X 線回折法に比べ、固体 NMR の方が構造を精密に決定できる、すなわち、構造精密化に有用であることが明らかとなった。

有機材料における電荷輸送は、分子間での電荷

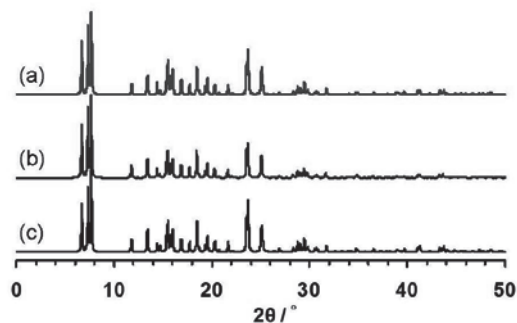


Fig. 2. Calculated X-ray profiles for crystal structures of $\delta\text{-Alq}_3$; (a) Cölle's structure after the optimization of proton coordinates, (b) Rajeswaran's structure after the optimization of proton coordinates, (c) Cölle's structure after the optimization of all the atomic coordinates.

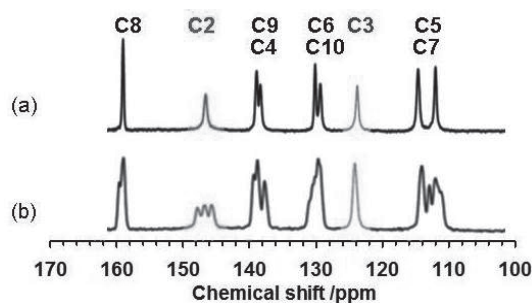


Fig. 3. Experimental CP/MAS ^{13}C NMR spectra of (a) $\gamma\text{-Alq}_3$ and (b) $\delta\text{-Alq}_3$ [5]. See Fig. 1 for the assignments of resonance lines.

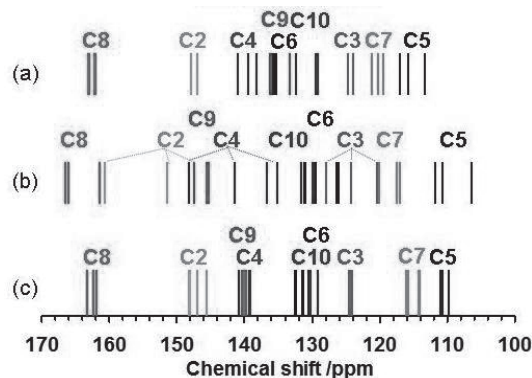


Fig. 4. NMR isotropic chemical shifts calculated from the crystal structures of $\delta\text{-Alq}_3$; (a) Cölle's structure after the optimization of proton coordinates, (b) Rajeswaran's structure after the optimization of proton coordinates, (c) Cölle's structure after the optimization of all the atomic coordinates.

のホッピング伝導によって起こる。そのため、分子間の波動関数の重なり（電荷移動積分）が電荷輸送特性を決める重要な因子の一つとなる。我々はすでに、分子間距離が 0.1 - 0.2 Å 変化するだけでも電荷移動積分が大きく変わることを明らかにしている[8,9]。そのため、有機材料の電荷輸送特性を分子レベルで明らかにするという我々の目的に対しては、X線回折法で得られる精度では十分でなく、本研究での精度が必須となる。

現在、本手法の非晶系への展開を試みており、有機 EL における構造-物性相関の解明に取り組んでいる。これにより、有機 EL というデバイスの中で有機材料はどのような構造をとっているのか、また、電荷輸送においてデバイス中で実際にどのようなことが起こっているのかを、分子・電子のレベルから明らかにしたいと考えている。

4 謝辞

本研究は、京都大学スーパーコンピュータ共同研究制度（若手奨励枠）による。また、総合科学技術会議により制度設計された最先端研究開発支援プログラムにより、日本学術振興会を通して助成された。計算時間の一部は、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムより提供された。ここに感謝の意を記す。

- [1] Brinkmann, M.; Gadret, G.; Muccini, M.; Taliani, C.; Masciocchi, N.; Sironi, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 5147.
- [2] Cölle, M.; Dinnebier, R. E.; Brutting, W. *Chem. Commun.* **2002**, *23*, 2908.
- [3] Rajeswaran, M.; Blanton, T. N.; Klubek, K. P. *Zeitschrift Fur Kristallogr: NCS.* **2003**, *218*, 439.
- [4] Muccini, M.; Loi, M. A.; Kenevey, K.; Zamboni, R.; Masciocchi, N.; Sironi, A. *Adv. Mater.* **2004**, *16*, 861.
- [5] Kaji, H.; Kusaka, Y.; Onoyama, G.; Horii, F. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 4292.
- [6] Rajeswaran, M.; Blanton, T. N. *J. Chem. Crystallogr.* **2005**, *35*, 71.
- [7] Pickard, C. J.; Mauri, F. *Phys. Rev. B.* **2001**, *63*, 245101.
- [8] Yamada, T.; Sato, T.; Tanaka, K.; Kaji, H. *Org. Electron.* **2010**, *11*, 255.
- [9] Yamada, T.; Suzuki, F.; Sato, T.; Tanaka, K.; Kaji, H. *Org. Electron.* **2011**, *12*, 169.

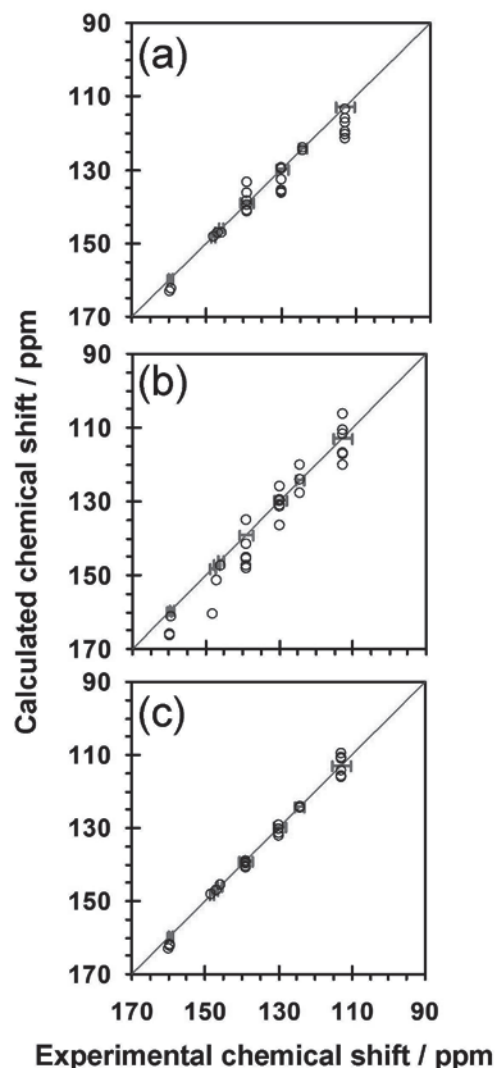


Fig. 5. Comparison of experimental and calculated isotropic chemical shifts of δ -Alq₃ crystals. For the chemical shift calculations, the structures proposed by Cölle et al. and by Rajeswaran et al., after the optimization of proton coordinates, are used in (a) and (b), respectively. In (c), all the atomic coordinates are optimized for the Cölle's structure. Error bars indicate the line widths of respective experimental resonance lines.

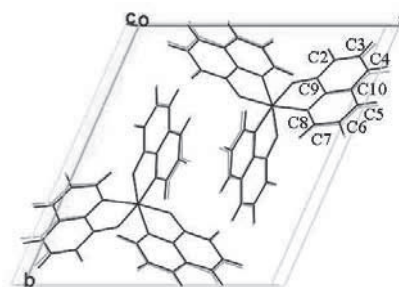


Fig. 6. Crystal structures of δ -Alq₃. Grey lines show the structure proposed by Cölle et al. (after the optimization of proton coordinates). Black lines show the structure after the optimization of all the atomic coordinates for the Cölle's structure.

電子ストレステンソルによる化学結合の理論的研究

市川和秀*

*工学研究科マイクロエンジニアリング専攻

1 はじめに

ストレスとは応力あるいは圧力を意味し、ストレステンソルは物質の内部に働く力を表すために広く用いられる量である。連続体についてある領域を考えた時、その領域に働く力は、領域全体にかかる外力と領域の表面を通してはたらくストレステンソルの発散（テンション）との和になる。特に定常状態を考えれば、外力とテンションがつりあうという平衡方程式が成り立つ。このような構造力学や材料力学で広く現れる平衡方程式は原子分子についてもそれらの波動関数（自然軌道）を用いて書き下すことができる。原子分子系の場合、外力に対応するのは原子核や他の電子からの（古典的な）クーロン力であり、それを打ち消して定常状態を作っているのが電子のストレステンソル（の発散）となる

電子ストレステンソルという概念は古典的なクーロン力に拮抗して原子や分子を成り立たせる量子的な効果を表すものとしてシュレディンガーによる量子力学の創設以来彼自身も含め考えられてきたものであるが、化学結合との関連が調べられるようになったのは比較的最近のことである。[1]

化学結合を電子ストレステンソルで解析するためにわれわれはテンションとエネルギー密度という電子ストレステンソルから導かれる量も用いる。特に、テンション（ストレステンソルの発散）がゼロベクトルとなる点（「ラグランジュ点」と呼ぶ）におけるエネルギー密度（ストレステンソルのトレース）の値で結合次数を定義して、結合の強さの指標とすることが提案されてきた。[2, 3]

本稿ではこの電子ストレステンソルを用いた化学結合の解析を逆サンドイッチ型および open-lantern 型 2 核遷移金属錯体 [4] と、水素化パラジウムクラスター [5] に適用した結果を報告する。

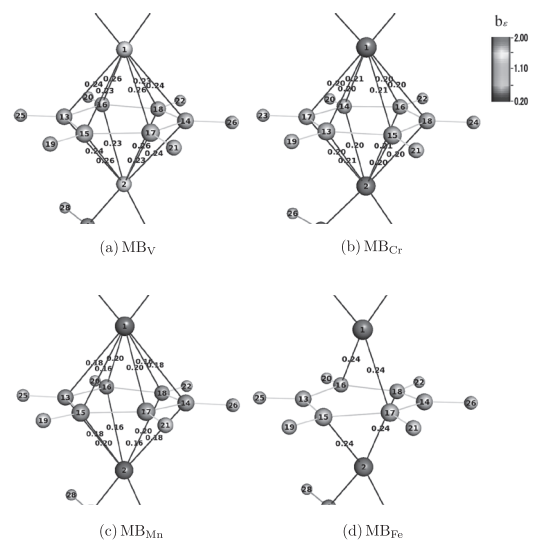


図 1: ベンゼン環と金属原子間の結合強度の指標 (a) MB_V , (b) MB_{Cr} , (c) MB_{Mn} and (d) MB_{Fe} [4].

2 逆サンドイッチ型および open-lantern 型 2 核遷移金属錯体の電子ストレステンソルによる解析

逆サンドイッチ型 2 核遷移金属錯体 (MB_V , MB_{Cr} , MB_{Mn} , MB_{Fe} の 4 種類) について、電子ストレステンソルに基づいた解析を行った (図 1)。特にエネルギー密度を用いた結合次数はベンゼン環と遷移金属 (V, Cr, Mn) の間の結合の強さを、従来の分子軌道法による評価と相対的に同じ順序 ($V > Cr > Mn$) を与えることがわかった。

Open-lantern 型 2 核遷移金属錯体については、Cr-Cr 結合を持つ錯体と Mo-Mo 結合を持つ錯体の比較を行った。われわれの結合次数の計算結果によれば前者の方が大きいですが、分子軌道法の計算では後者の

方が大きくなることが示唆される。これはわれわれの結合次数はラグランジュ点という一点のみのエネルギー密度で評価していたため、遷移金属間結合のような広がった d 軌道が関与する結合を評価するには適さないことが原因と考えられた。このことから、「ラグランジュ面」という 2 次元的に広がった領域でエネルギー密度を積分して結合の大きさを評価することを提案し結合次数を定義したところ、分子軌道法と同じ相対強さを与えることがわかった。

3 水素化パラジウムクラスターの電子ストレステンソルによる解析

水素が飽和した小さなパラジウムクラスター (Pd_n , $n = 2 \sim 9$) を電子ストレステンソルで解析した。特に、電子ストレステンソルに基づいた結合次数を用いて解析した。結合長と結合次数の散布図 (図 2) を見るにより異なった種類の結合を分類することができることがわかった。例えば、同じ Pd-H 間結合でも距離が短いもの (強い結合) と長いもの (弱い結合) では結合長-結合次数の図上で異なる曲線 (おおまかにいって傾きの異なる直線) 上に乗ることがわかった。また、それらは Pd-Pd 間結合とも異なる系列 (曲線) に属する。

電子ストレステンソルの最大固有値と固有ベクトルを調べたところ、Pd-Pd 間や、弱い Pd-H 間では、固有ベクトルは原子間をつなぐようなパターンを示

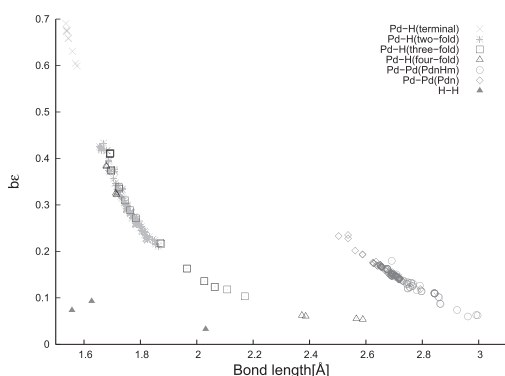


図 2: Pd クラスタと水素化 Pd クラスタにおける結合長とエネルギー密度による結合次数との相関。[5]

すが最大固有値は負であることがわかった。これを「擬スピンドル構造」と名付けた (これまでそのような固有ベクトルのパターンで最大固有値が正の部分は「スピンドル構造」と呼んでいた)。この水素化パラジウムクラスターには H-H 間結合も存在するが、スピンドル構造を示すものと擬スピンドル構造を示すものがあることがわかった (水素分子そのものはスピンドル構造を示す)。

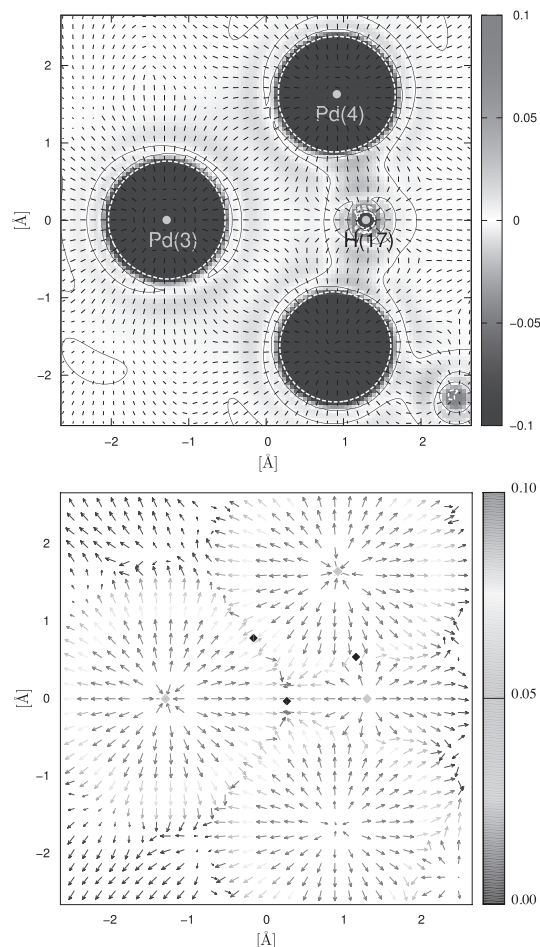


図 3: Pd_9H_{22} のある断面における、ストレステンソル最大固有値と固有ベクトル (上パネル) とテンション (下パネル)。[5]

4 まとめと展望

電子ストレステンソルによって化学結合を解析することが遷移金属を含む分子についても有用な結果を与えることがわかった。またそれとともに新たな

興味深い課題も見つかった。今後、ラグランジュ面の探索並びにその上での積分を効率良く計算する方法の開発や、擬スピンドル構造の化学的理解を進めることが課題となり、その研究によって電子ストレステンソルを通した化学結合の理解が進展すると期待できる。

参考文献

- [1] A. Tachibana, *J. Chem. Phys.* **115**, 3497 (2001); *Int. J. Quantum Chem.* **100**, 981 (2004); *J. Mol. Model.* **11**, 301 (2005); *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, **943**, 138 (2010).
- [2] P. Szarek and A. Tachibana, *J. Mol. Model.* **13**, 651 (2007).
- [3] P. Szarek, Y. Sueda, and A. Tachibana, *J. Chem. Phys.* **129**, 094102 (2008).
- [4] K. Ichikawa, A. Wagatsuma, Y. I. Kurokawa, S. Sakaki and A. Tachibana, *Theor. Chem. Acc.* (published online) DOI 10.1007/s00214-011-0966-0
- [5] K. Ichikawa, A. Wagatsuma, P. Szarek, C. Zhou, H. Cheng and A. Tachibana, *Theor. Chem. Acc.* (to be published) DOI 10.1007/s00214-011-1044-3

気象庁高解像度データ同化システム(JNoVA)における 台風状況下の海面交換係数の最適化

伊藤耕介¹ 川畑拓矢² 本田有機³ 加藤輝之³ 石川洋一¹ 淡路敏之¹

1: 京都大学理学研究科 2: 気象研究所 3: 気象庁数値予報課

1 はじめに

近年、台風進路の予測精度は著しく改善されてきたが、台風強度の予測精度はほとんど改善されていない。この問題に対処するためには、強度に影響のある物理現象を適切に表現できる数値モデルを用いることとともに、変数の不確定性を適切に考慮し、観測値の情報を数値モデルの空間に内挿する「データ同化」の高度化が重要となる。

気象庁のJNoVAと呼ばれるデータ同化システムは、アジョイント法と呼ばれる優れた手法を採用し、台風強度の再現も可能となる高解像度化が進んでいる(Honda et al., 2005; 本田・澤田 2010)。しかし、海面での運動量・熱・物質の交換に関わる海面交換係数と呼ばれる係数は、データ同化による最適化の対象となっていない。特に、海面で気象側が受ける摩擦の強さを決める摩擦係数と、海面からの水蒸気供給量を決める水蒸気交換係数は台風のエネルギーバランスを考える上で重要であり、かつ、直接観測が困難なため、その不確定性を考慮に入れて適切な修正を施すことが重要と考えられる。

アジョイント法は、数値計算に用いられる方程式を拘束条件として、観測可能な物理量をうまく説明するように変数を制御する最適化法である。これを応用すれば、海面から離れた観測値の情報を用いて、海面交換係数を制御変数として加えることも可能である(図1)。Ito et al. (2010)は、単純化された数値モデルを用いて、海面交換係数をアジョイント法の制御変数として加えることで、台風の再現性能が向上しうることを示した。本研究は、より精巧なシステムであるJNoVAにこの手法を導入し、現実の台風の再現性能に対するインパクトを調べるものである。

2 実験設定

本研究では、2010年台風14号の最盛期を対象とした。まず、気象庁高解像度解析値(MA)2010年10月28日0時(世界標準時)の値を初期値として、3時まで数値積分を行う。その後、3時の値を初期値として、現業の数値天気予報システムと同様のデータ同化サイクル実験(NoCoef)、及び、海面交換係数の修正を施すデータ同化サイクル実験(Coef)をそれぞれ29日0時までに行い、両者を比

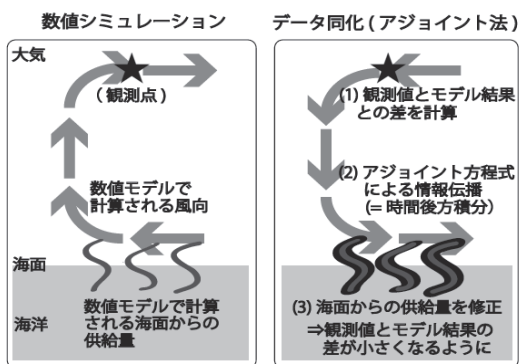


図1 アジョイント方程式による海面交換係数の最適化の概念図。簡単のため、定常な移流のみを考えている。

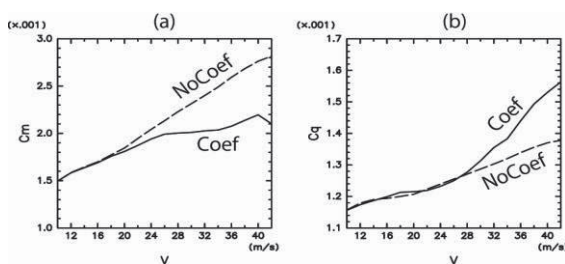


図2 海面交換係数の風速依存性 (a) 摩擦係数 (b) 水蒸気交換係数。破線が“NoCoef”、実線が“Coef”の値を表す。

表1 NoCoef と Coef における Jobs の値及び変化率(RC)

cycle	J_{obs}		
	NoCoef	Coef	RC
1	781.4	785.7	+0.6%
2	1083.5	1067.1	-1.5%
3	3457.0	2683.2	-22.4%
4	4984.1	4657.8	-6.5%
5	2290.5	1925.8	-15.9%
6	1546.1	1348.8	-12.8%
7	1860.5	1784.3	-4.1%

較する。JNoVA では同化の 1 サイクルを 3 時間としており、本研究でもそれを踏襲したため、全部で 7 サイクルについての比較となる。

3 比較データ同化実験の結果

図 2 に、全 7 サイクルの結果から得られた摩擦係数と水蒸気交換係数の風速依存性を示す。この結果は、"Coef"では、強風速域で摩擦係数が小さくなるように修正され、水蒸気交換係数は大きくなるように修正されていたことを示している。近年の観測的研究・室内実験における研究によれば、強風速域で摩擦係数は一定の値で飽和、もしくは、減衰する可能性の高いことが指摘されている (Powell et al., 2003)。本研究で得られた摩擦係数の風速依存性は、この結果とも整合的である。

表 1 には、領域全体で、観測値と数値モデル結果との二乗誤差の総和を、観測値の誤差共分散で重みづけして定量化した値 Jobs を示す。この表から、"Coef"では、最大で 22.4%も値が低くなっており、観測値と数値モデルの結果がより整合的になっていることが分かる。

各サイクルの最終時刻における台風の地表面最大風速の値を、気象庁のベストトラックデータ (衛星画像などから推測される台風の情報を収めたデータセット) と比較したのが表 2 である。同じ観測データを同化しているにもかかわらず、"Coef"の結果は"NoCoef"よりも、ベストトラックデータに近くなっている。偏差の二乗平均平方根(RMS)を比較すると、"NoCoef"では 7.5 m/s あったものが、"Coef"では 3.6 m/s となっている。また、中心位置の RMS についても、NoCoef 実験とベストトラックの間で 19.4 km あったが、Coef 実験とベストトラックの間では 14.0 km と低下傾向が

表2 各サイクルの最終時刻における台風の地表面最大風速 (単位は m/s)。“NoCoef”と“Coef”の各実験によって得られた値、及び、気象庁のベストトラックデータの値。

cycle	Vmax		
	NoCoef	Coef	JMA
1	45.7	48.6	48.9
2	44.5	45.4	48.9
3	41.6	48.7	48.9
4	36.3	41.8	46.3
5	35.6	39.9	43.7
6	32.2	38.3	43.7
7	37.7	37.7	41.2

みられた (図表は省略)。これらの結果は、海面交換係数の最適化をはかることで、より現実に近い台風が数値モデルで再現されることを示している。

4 まとめ

気象庁の高解像度データ同化システムを用い、新たに海面交換係数の最適化を施すデータ同化実験を行った。その結果、観測値とモデル結果のミスフィットは、既存の手法に比べ最大で 22.4%低下し、数値モデルによって再現される台風の強度や位置も、ベストトラックデータへと近づいた。本研究で得られた摩擦係数・潜熱交換係数の風速依存性の修正値を、新たに将来予測に利用することによって予測性能の向上も期待できるため、引き続き研究を進めていきたい。

参考文献

- Honda, Y., M. Nishijima, K. Koizumi, Y. Ohta, K. Tamiya, T. Kawabata, and T. Tsuyuki, 2005: A pre-operational variational data assimilation system for a non-hydrostatic model at the japan meteorological agency: formulation and preliminary results. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 131(613), 3465–3475.
- Ito, K., Y. Ishikawa and T. Awaji, 2010: Specifying air-sea exchange coefficients in the high-wind regime of a mature tropical cyclone by an adjoint data assimilation method, *SOLA*, 6, 13-16, doi:10.2151/sola.2010-004.
- Powell, M., P. Vickery, and T. Reinhold, 2003: Reduced drag coefficient for high wind speeds in tropical cyclones. *Nature*, **422**, 279–283.
- 本田有機・澤田謙, 2010: 非静力学メソ4次元変分法, 数値予報課報告・別冊第56号

鉄酵素と鉄触媒の反応メカニズムに関する計算量子化学研究

平尾 一

京都大学福井謙一記念研究センター

現所属: Nanyang Technological University

1 はじめに

鉄酵素シトクロム P450 の化学反応では Fe(IV)=O 型の間体が反応活性種として働くものと考えられている。しかしながらこの Fe(IV)=O 中間体は短寿命で実験でのキャラクタライゼーションが難しく、反応性や生成機構について不明な点が多い。本研究は、こうした特徴を有する Fe(IV)=O 型中間体の性質を計算量子化学的に理解することを目的としたものである。

2 シトクロム P450 のタンパク環境

シトクロム P450 の強力な触媒機能はポルフィリンカチオンラジカルが配位した Fe(IV)=O 中間体、いわゆる Compound I (Cpd I) によるものと考えられている。P450 Cpd I は基質内に存在するいくつかの C-H 結合のうち、特定のものだけを選択的に水酸化する能力を有しているが、これは活性中心を取り囲むタンパク環境が基質の配向をうまく制御しているためである。例えばバクテリア由来の P450cam の場合、基質である樟脳 (camphor) の 5-exo 位の C-H 結合だけが選択的に水酸化される (図 1)。またタンパク環境は基質反応の遷移状態を安定化し、触媒過程で本質的役割を担うことも多い。このようなタンパク環境効果を詳細に理解することは重要な課題であると考え、我々は P450 Cpd I に関して、ONIOM(DFT:MM)法に基づくタンパク環境のエネルギー分割解析を実行し、その起源を明らかにするとともに各アミノ酸残基の寄与を評価した (図 2)。

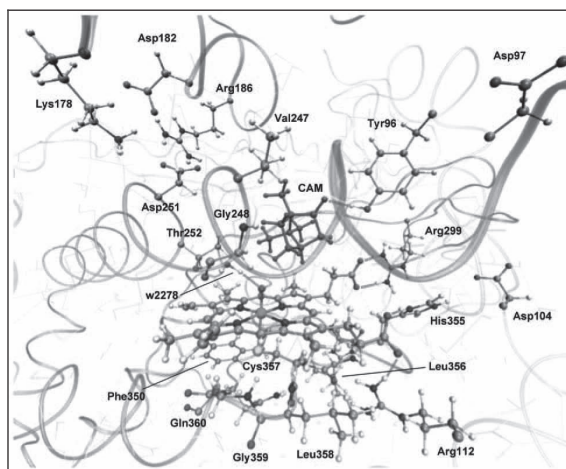
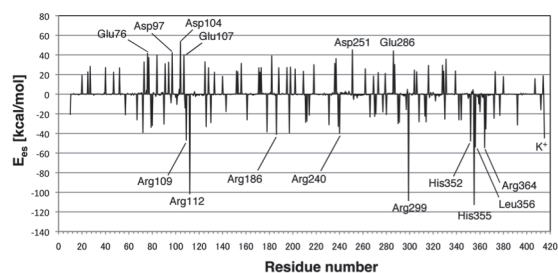


図 1 P450cam Cpd I の活性中心の様子。

(a) Electrostatic energy



(b) vdW energy

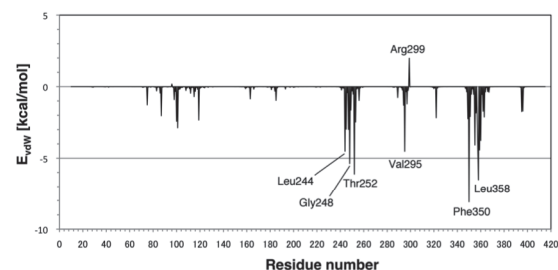


図 2 各アミノ酸残基の寄与: (a) 静電効果; (b) van der Waals 効果。

3 非ヘム型合成オキソ鉄(IV)錯体の生成機構

Que らは非ヘム型リガンド TMC が配位した Fe(II)錯体と過酸化水素からオキソ鉄(IV)錯体が得られることを示した (図 3a)。また反応に塩基 2,6-lutidine を加えると反応が速まることも明らかにした。この塩基はヘムペロキシダーゼにおけるヒスチジン残基と同様、酸塩基触媒として過酸化水素のヘテロリティック O-O 解裂を促進している可能性がある (図 3b)。我々は、この合成錯体系でのオキソ鉄(IV)生成機構と塩基の役割を計算化学的に解明することを試みた。

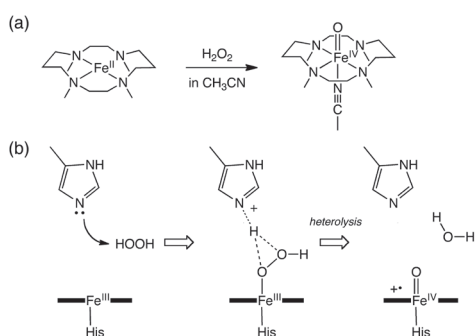


図 3. (a) オキソ鉄(IV)生成反応 ; (b) ヘムペロキシダーゼにおけるヒスチジンの役割。

計算の結果、二種類の反応経路 A と B があることがわかった。Path A はヘムペロキシダーゼ型の反応経路で、Path B は過酸化水素のホモリティック O-O 結合解裂を伴う経路である (図 4)。

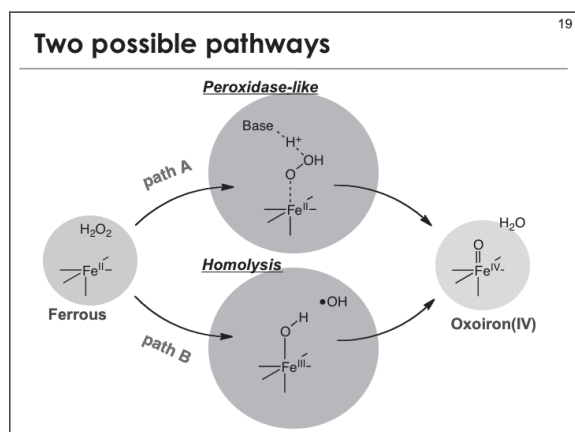


図 4. 二種類の反応経路。

系に 2,6-lutidine 塩基を加えない場合には、Path B が有利であることがわかった。しかしながら塩基を加えた場合には、有利な反応経路が Path

A へと切り替わることが判明した (図 5)。また電子状態の解析から、2,6-lutidine の存在下では proton-coupled electron transfer が O-O 解裂を後押ししていることがわかった (図 6)。

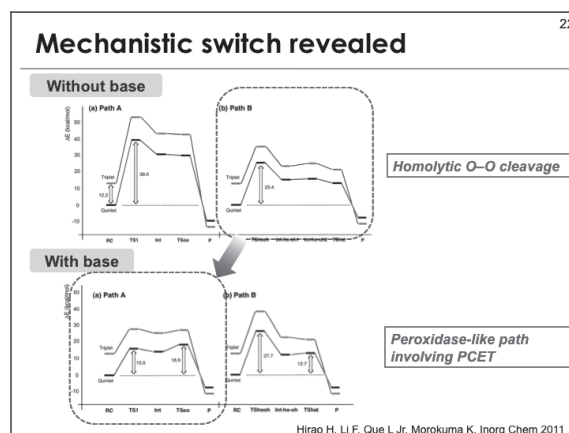


図 5. 反応エネルギープロファイル。

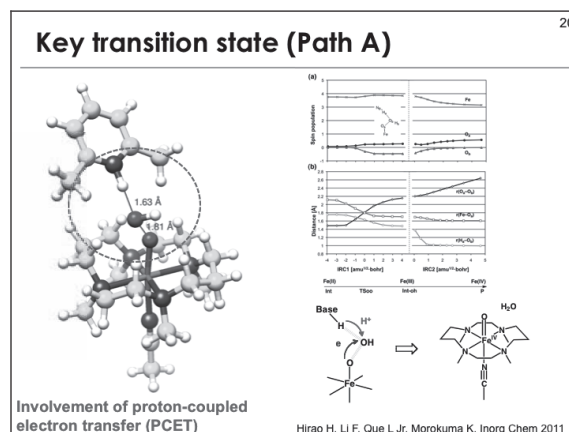


図 6. Path A の遷移状態構造とスピンポピュレーションの変化。

参考文献

- [1] Hirao, H.; Morokuma, K. 第4回分子科学討論会, 大阪大学, Sep. 16, 2010.
- [2] Hirao, H.; Morokuma, K. *Yakugaku Zasshi - J. Pharm. Soc. Jpn.* (薬学雑誌) 2011, 131, 1151-1161.
- [3] Hirao, H. *Chem. Lett.* in press.
- [4] Hirao, H.; Que, L., Jr.; Morokuma, K. *ICTAC-13: 13th International Conference on Computational Catalysis*, Matsushima, Miyagi, Japan, June 25, 2010.
- [5] Hirao, H.; Li, F.; Que, L., Jr.; Morokuma, K. *Inorg. Chem.* 2011, 50, 6637-6648.

脱プロトンしたレチナールシッフ塩基のオプシシフト

長谷川 淳也¹, 藤本 和宏², 浅井 康太¹

¹京都大学工学研究科合成・生物化学専攻, ²神戸大学大学院システム情報学研究科

1 イントロダクション

網膜中の視物質中において光吸収を担うプロトン化レチナールシッフ塩基(PSB)は、与えられた蛋白質環境に応答して光吸収エネルギーを変化させる特徴がある。これまで我々は、量子・分子力学のハイブリッドモデルである QMMM 法を用いて研究を行い、(i)図 1b に示すように、PSB の励起状態には分子内電荷移動性(ICT)があること、(ii)蛋白質の電荷アミノ酸 (PSB に対するカウンターイオン)や電荷双極子を持つアミノ酸により、PSB の結合サイトには、大きく偏りのある静電ポテンシャルが生じていることを示し、(i)と(ii)の協同効果により、PSB の光吸収エネルギーが変化することを明らかにした[1]。

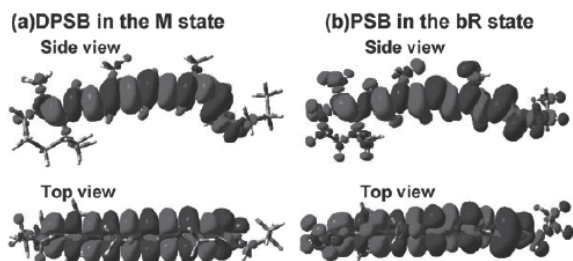


図 1. 電子遷移に伴う差電子密度。赤・青の領域はそれぞれ、電子密度の増大・減少を示す。(a)DPSB および (b)PSB。(b)の方が右側の N 原子付近に電子の増大箇所が見られる。

他方で、脱プロトン化したレチナールシッフ塩基(DPSB)もオプシシフトを示す。メタノール溶液中では 3.4 eV である吸収エネルギーが、バクテリオロドプシン(bR)のM中間体においては 3.0 eV にまで低下し、約 0.4 eV もの低エネルギーシフトを示す。この結果が意外であるのは、脱プロトン化により、PSB におけるオプシシフトの主要な必要条件が失われるにもかかわらず、スペクトルシフトが起きる点にある。図 1a に示すように、

DPSB では脱プロトン化により ICT 性が小さくなり、同時に bR 蛋白質中のカウンターイオンであるアスパラギン酸がプロトン化されるため、静電ポテンシャルの偏りが解消される。

このように例外的なオプシシフトの起源を明らかにするために、メタノール溶液や bR 蛋白質の電子的効果を考慮した励起エネルギーの計算を行った。特に、周辺環境の電子的効果を評価するために、図 2 のようなメタノール溶液と bR 蛋白質の QM1/QM2/MM モデルを用いた[2]。DPSB からなる QM1 領域は SAC-CI 計算を行い、励起状態計算に含める溶媒分子や蛋白質分子などは QM2 領域として、CIS 計算を行った。その外側の領域は MM 計算により考慮した。励起エネルギーの変化が十分小さくなるまで QM2 領域を拡大した計算を行い、CIS の精度の範囲内でメタノール溶媒と bR 蛋白質の効果を公平に評価した[2]。

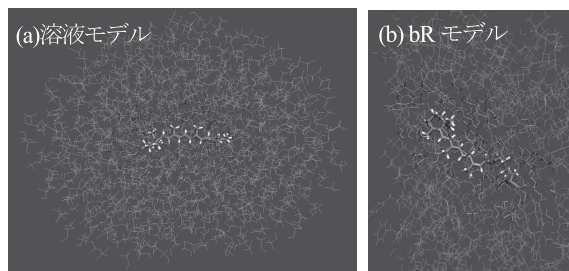


図 2. (a)メタノール溶液中、(b)bR 蛋白質中における DPSB の計算モデル。灰色：MM 原子、茶色：CIS 計算における QM2 領域、Colored-by-elements：QM1 領域

2 溶媒と蛋白質の電子的効果が励起エネルギー及ぼす効果

まず最初に、計算される励起エネルギーにおいて、QM2 領域のサイズに対する依存性について述べる。DPSB から距離 R_{QM2} の範囲にかかるアミノ酸を QM2 領域に含めた。CIS 法を用いて励起エネルギーを計算したところ、 $R_{QM2} = 3 \text{ \AA}$ にお

いて、メタノール溶液と bR 蛋白質の双方で最も顕著な赤方シフトが見られた。 $R_{QM2} = 5 \text{ \AA}$ を超えて QM2 領域を拡大した際に、励起エネルギーに及ぼす寄与は 0.05 eV 未満であった。従って、電子状態の寄与は半径 5 Å 程度の領域を考慮すると十分正確な計算ができることが分かった[2]。

次に、メタノール溶液の電子的効果は高々 0.1 eV 程度であったのに対し、bR 蛋白質では約 0.25 eV もの赤方シフトを与えることが明らかになった[2]。同様の計算を蛍光蛋白質 GFP, mKO, DsRed について行った結果はメタノール溶液と同等であった[3]。従って、bR 蛋白質の特殊な性質が示唆される。DPSB を取り巻く構造を調べると DPSB が π 電子系を持つ Tyr176, Trp82, Trp173 に囲まれていることが分かる (図 3)。現在、これらアミノ酸と DPSB の相互作用をより具体的に解析を行っている。

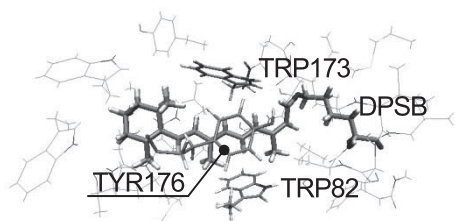


図 3 bR 蛋白質の DPSB 近傍において、 π 電子系を持つアミノ酸。

3 DPSB におけるオプシシフトのメカニズム

次に、メタノール中と比較して、bR 蛋白質中の励起エネルギーが約 0.4 eV 小さい原因について、徐々に DPSB を取り巻く環境や DPSB の分子構造を変化させることで解析した。本研究で算出した DPSB のオプシシフトは 0.42–0.48 eV であり、実験結果の 0.42 eV[4] を良く再現できた。

図 4 に解析の結果を示す。赤色で示した構造変化の寄与は 0.31–0.32 eV、紺色で示した環境効果の寄与は 0.11–0.16 eV であり、構造変化がオプシシフトにおいて主要な寄与をすることが明らかになった。

DPSB はメタノール中では all-trans 型が最も安定である。これに対し、bR M 中間体では光異性化の結果、6-s-trans/13-cis 構造をとる。All-trans から 13-cis に変化する際に、励起エネルギーは約 0.09 eV 低下する。更に 6-s-cis から

6-s-trans に変化すると、0.22–0.23 eV 程度低下する。

他方で、気相中の all-trans DPSB をメタノール環境に入れると励起エネルギーは 0.10 eV 程度低下し、6-s-trans/13-cis DPSB を bR 蛋白質環境に入れると 0.21–0.26 eV 低下する。従って、DPSB の環境効果の寄与は 0.11–0.16 eV の低エネルギーシフトと見積もることが出来る。

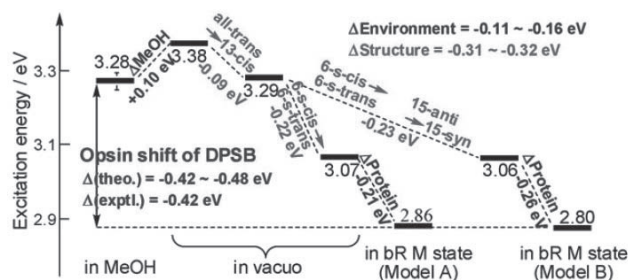


図 4. DPSB の励起エネルギーのオプシシフトの起源についての分割解析。赤字は構造変化による変化を、青字は周辺環境の静電的效果による変化を示す。

最後に、構造変化に伴う励起エネルギーの変化を正確に記述する際には、電子相関効果が重要であることを述べる。DPSB の励起状態を CIS、TD-B3LYP, TD-rCAM-B3LYP などで計算すると、構造変化の寄与は 0.11–0.18 eV と過小評価された。CIS(D), SAC-CI と電子相関効果を考慮すると構造変化の寄与は 0.23–0.28 eV, 0.31–0.32 eV と増加する。

4 謝辞

本共同研究制度を毎年活用させて頂きました事、この場を借りて感謝致します。

5 参考文献

- [1] K. Fujimoto, JH, and H. Nakatsuji, Bull. Chem. Soc. Jpn. 82, 1140-1148 (2009); K. Fujimoto, JH, and H. Nakatsuji, Chem. Phys. Letters, 462, 318 (2008).
- [2] K. Fujimoto, K. Asai, and JH, Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 13107 (2010).
- [3] JH, T. Ise, K. Fujimoto, A. Kikuchi, E. Fukumura, A. Miyawaki, and Y. Shiro, J. Phys. Chem. B, 114, 2971 (2010).
- [4] Y. Gat and M. Sheves, Photochem. Photobiol., 59, 371 (1994).

トリアリールアミン系新規有機デバイス材料の電荷輸送解析*

川口久文、鈴木不律、西村秀隆、若宮淳志、村田靖次郎、梶 弘典

京都大学化学研究所

1. 序論

有機エレクトロルミネッセンス (EL) をはじめとする有機デバイスにおいて、低消費電力化、長寿命化は重要な課題である。これらの課題の解決には、より効率的な電荷の輸送が必要である。本研究では、我々が新たに合成した電荷輸送材料である、ねじれ曲面を有する酸素架橋型トリフェニルアミン二量体 (OQP2、Fig. 1) に対して、Marcus 理論[1]により有機分子を頭わに考えた電荷輸送シミュレーション[2,3]を行い、有機分子の凝集状態と電荷移動度の相関解明を試みた。今回は、OQP2 の結晶に対する検討を行った。結晶構造には、単結晶 X 線構造解析に基づいた構造 (XRD)、その構造に対して水素原子のみを最適化した構造 (H-OPT)、全原子を最適化した構造 (ALL-OPT) の 3 つを用いた。

2. 計算

量子化学計算により、OQP2 の中性、カチオン、アニオン状態について構造最適化を行い、得られた構造を用いて reorganization energy を計算した。また、拡張ヒュッケル法により、隣接 2 分子間の charge transfer integral を計算した。これらの計算値から、Marcus 理論に基づき 298 K における 正孔、電子に対する電荷移動速度定数 k_{CT} を計算した。量子化学計算には Gaussian03 プログラムを用いた。次に、OQP2 結晶薄膜に電界が印加された場合の電荷移動のモンテカルロシミュレーション[4]を行い、結晶格子を周期境界条件により拡張した系に対して移動度を計算した。また、電荷が対極に到達するまでのペアの使用回数を計算した。

* 本研究はスーパーコンピュータ共同研究制度 (若手研究者奨励枠) の採択課題：「非晶状態における電荷輸送解析」に基づく。

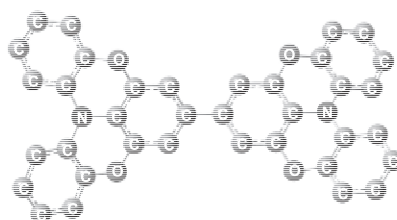


Figure 1. OQP2 の分子構造。

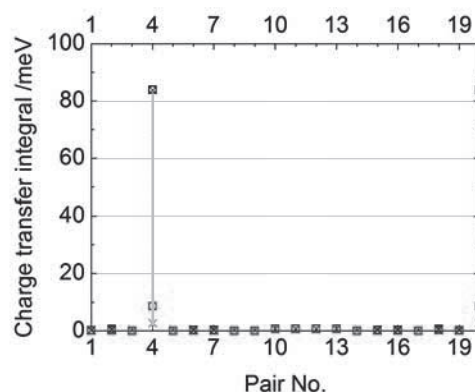


Figure 2. 拡張 Hückel 法により求めた OQP2 結晶中の隣接 2 分子間の charge transfer integral の値。○ : XRD、□ : H-OPT、× : ALL-OPT に対する計算値 (黒色 : 正孔輸送、赤色 : 電子輸送)。



Figure 3. 拡張 Hückel 法により求めた OQP2 の HOMO および LUMO。

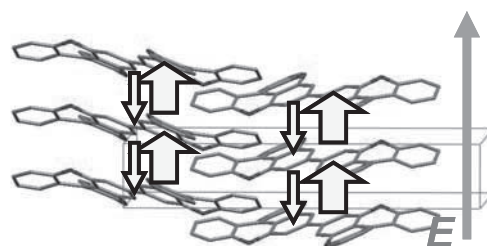


Figure 4. OQP2 結晶中における電荷輸送に有利な隣接 2 分子のペア。

3. 結果と考察

OQP2 の正孔輸送、電子輸送に対する reorganization energy は、それぞれ 0.10 eV、0.40 eV と計算された。Fig. 2 には、OQP2 結晶中の隣接 2 分子間における charge transfer integral の計算結果を示す。電子輸送に比べ、正孔輸送に対する値が大きく、正孔輸送に優れていることが示された。この要因としては、Fig. 3 に示すように、OQP2 の LUMO が中央の biphenylene 基付近に主に局在しているのに対し、HOMO は分子全体に非局在化しており、隣接分子間の HOMO の overlap が大きくなりやすいためと考えられる。特に、Fig. 4 に示す上下方向の 2 分子ペア (Fig. 2 におけるペア 4, 20) に対する transfer integral の値が大きい。これらのペアは隣接する 2 分子が積層する配置となっていることから、他のペアに比べて分子間距離が分子全体に渡って非常に接近しており、HOMO および LUMO の overlap に特に有利な距離・配向となっていることがわかる。

次に、これらの値を用いて Marcus 理論に基づき k_{CT} を計算した。さらに、得られた k_{CT} を用いて、OQP2 結晶の b 軸方向 (Fig. 4 の矢印の方向) に電界を印加した場合の移動度を計算した。その結果を Fig. 5 に示す。正孔輸送に対する移動度は $10 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 程度、電子輸送に対しては $10^3 - 10^4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 程度となり、正孔輸送が 4-5 桁大きい結果となった。なお、a 軸および c 軸方向に電界を印加した場合は正孔輸送・電子輸送いずれに対しても移動度は非常に小さく、移動度の算出が不可能であった。以上の結果から、OQP2 がすぐれた正孔輸送材料であること、また、b 軸方向のみへ高い移動度を有する、移動特性に異方性を有する材料であることが示された。

Fig. 6, 7 には、b 軸方向に電界を印加した場合の正孔輸送時のペア使用回数を示す。印加した電界に対して逆方向への移動は、負の回数として表示した。電界強度は、それぞれ $300, 1000 \text{ V}^{1/2}\text{cm}^{-1/2}$ である。ここでは、全原子を最適化した構造に対して行った結果のみを示すが、いずれの構造においても、ペア 4, 20 番の繰り返しによって電荷が輸送されてる。また、電界強度を大きくすることにより、電荷が正方向に優先的にホッピングしており、効率的に電荷移動していることがわかる。

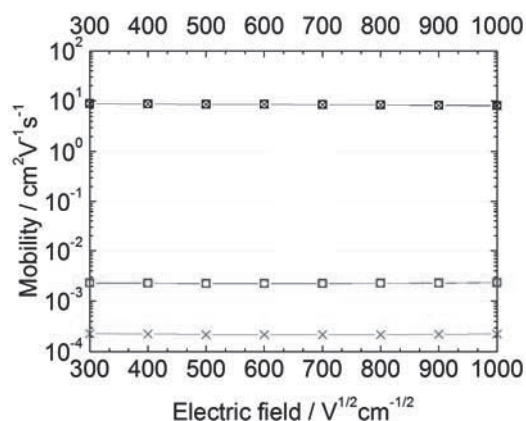


Figure 5. OQP2 結晶中における電荷移動度。○: XRD、□: H-OPT、×: ALL-OPT に対する計算値 (黒色: 正孔輸送、赤色: 電子輸送)。

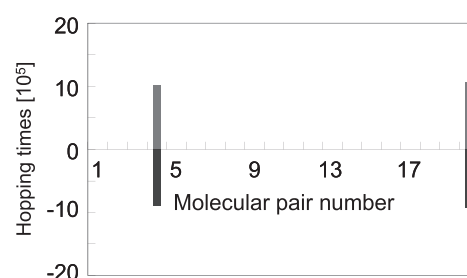


Figure 6. 全原子を最適化した構造に対するペアの使用回数 ($F^{1/2} = 300 \text{ V}^{1/2}\text{cm}^{-1/2}$)。

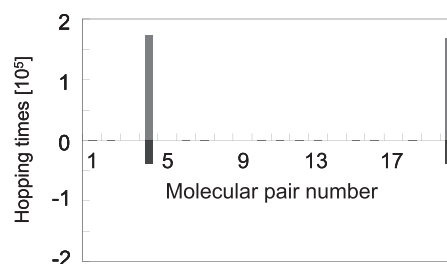


Figure 7. 全原子を最適化した構造に対するペアの使用回数 ($F^{1/2} = 1000 \text{ V}^{1/2}\text{cm}^{-1/2}$)。

謝辞

本研究は、京都大学スーパーコンピュータ共同研究制度 (若手奨励枠) による。また、総合科学技術会議により制度設計された最先端研究開発支援プログラムにより、日本学術振興会を通して助成された。ここに感謝の意を記す。

- [1] R. A. Marcus and N. Sutin, *Biochim. Biophys. Acta.*, **811**, 265 (1985).
- [2] T. Yamada, T. Sato, K. Tanaka, and H. Kaji, *Org. Electron.* **11**, 255 (2010).
- [3] T. Yamada, F. Suzuki, A. Goto, T. Sato, K. Tanaka, and H. Kaji, *Org. Electron.* **12**, 169 (2011).
- [4] H. Bässler, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **175**, 15 (1993).

塗膜表面形状による摩擦抵抗低減効果

高木 洋平

大阪大学大学院基礎工学研究科

1 緒言

タンカーやコンテナ船などの大型船舶が航行するときに発生する推進抵抗は、海水面付近での造波抵抗と船底での粘性摩擦抵抗に大別することができる。このうち、粘性摩擦抵抗は推進抵抗の約6割を占めており、様々な抵抗削減技術が提案されている。摩擦抵抗を減少させるためには壁面の凹凸すなわち粗度を小さくした塗膜面を作ることが重要である。また、海水中でハイドロゲルとなるような柔軟な塗膜面を形成する水和型塗料も注目を浴びている。本研究ではこのような付加的な動力を必要としない機能的船底塗膜に注目し、抵抗低減効果の発現メカニズム及び壁面の形状影響について数値シミュレーションを用いた基礎的な検討を行った。

2 すべり速度を有する平行平板間乱流での抵抗低減効果

水和型塗料が水中でヒドロゲルを形成するとき、塗膜面上ではヒドロゲル水和層が形成され、通常の剛体表面を通り過ぎる流れとは異なりすべり速度が発生されることが予想される。そこで本研究では図1に示すような平行平板間乱流の直接数値計算(DNS)を行い、すべり速度の発生による抵抗低減効果を検証した。基礎方程式は非圧縮性流体

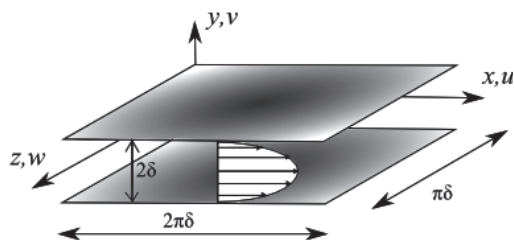


図1 平行平板間乱流の計算領域

の Navier-Stokes 方程式と連続の式であり、四次精度中心差分法を用いて空間離散化を行い、部分段階法によって時間前進を行った。計算領域の大きさはチャンネル半幅を δ として流れ方向に $2\pi\delta$ 、スパン方向に $\pi\delta$ とし、壁面摩擦速度に基づくレイノルズ数 Re_τ は 180 とした。

まずはじめに塗膜面を考慮しない通常の DNS を行い、次式で定義される摩擦係数を求めた。

$$C_f = T_w / (\rho U_m^2 / 2) = 1 / ((U_m / u_\tau)^2 / 2)$$

ここで、 T_w は壁面せん断応力、 ρ は密度、 U_m は平均流速、 u_τ は壁面摩擦速度である。塗膜がない状態、すなわち壁面境界条件をすべりなしとしたとき、 $C_f = 8.245 \times 10^{-3}$ であった。

次に、ハイドロゲル塗膜を単純化したモデルとして、壁面せん断応力がある値を超えるとすべり速度が発生すると仮定し、数値計算を行った。壁面せん断応力のしきい値を求めるために、すべりなし条件での結果に対して壁面せん断応力(流れ方向成分)の空間分布を求めた例を図2に示す。壁座標で規格化した T_w^+ は 100 から 1000 の値をとるため、 $T_w^+ > 500$ では流れ方向とは逆向きに、 $T_w^+ < 200$ では流れ方向と同じ向きにすべり速度が発生するとした。摩擦係数を求めると $C_f = 8.029 \times 10^{-3}$ となり、抵抗低減率は約 2.6% となったが、今回用いた

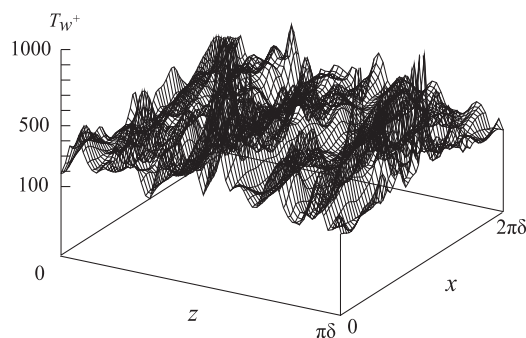


図2 壁面せん断応力の流れ方向成分

制御手法では時間平均の長さに C_f が大きく影響されるため、更なる検討が必要である。

3 円柱表面形状が抵抗係数に及ぼす影響

船底に塗料を塗った状態であっても表面状態は滑らかではなく凹凸が存在し、その粗度影響を考慮することは非常に重要である。本解析では実験的・数値的に検討が多くなされている円柱周り流れを行い、円柱表面に溝や起伏を持たせたときの抵抗値に対する影響を調べた。

基礎方程式は平行平板間乱流の DNS と同様に Navier-Stokes 方程式と連続の式であるが、高レイノルズ数での解析を行うために Large-eddy Simulation (LES) を用いた。円柱直径 D と一様流速の大きさ U を基にしたレイノルズ数は 3.9×10^3 及び 3.2×10^4 とした。

表面形状は通常の円柱モデル(Circular model)の他に、図 3 に示すような周方向 45° ごとに深さ $0.05D$ の溝を設けたモデル(Grooved model)、溝とは逆に高さ $0.05D$ の突起を設けたモデル(Toothed model)を解析対象とした。

数値計算データより求められた抗力係数 C_D を表 1 に示す。まず $Re = 3.9 \times 10^3$ の低レイノルズ数の結果に注目すると、円柱表面に凹凸を設けると後流での圧力変化が大きくなり、抵抗値が増加する結果となった。一方、 $Re = 3.6 \times 10^4$ の高レイノルズ数の場合には、抵抗係数はどのモデルでも同程

表 1 抵抗係数に及ぼす表面形状の影響

Surface shape	Drag coefficient (C_D)	
	$Re = 3.9 \times 10^3$	$Re = 3.6 \times 10^4$
Circular	1.135	1.141
Grooved	1.237	1.274
Toothed	1.423	1.179

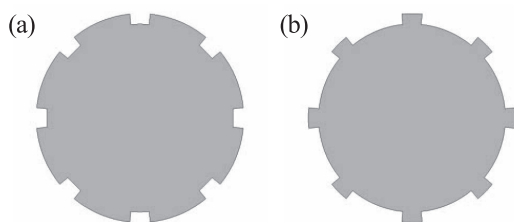


図 3 表面に凹凸を持つ円柱モデル

度($C_D = 1.1 \sim 1.2$)の値となった。各モデルの抵抗係数のレイノルズ数依存性に注目してみると、circular model と grooved model ではレイノルズ数が一桁上昇してもほぼ同じ値を取るのに対し、toothed model では減少していることがわかる。

この toothed model での抵抗減少を詳しく考察するために、はく離領域での速度分布を図 4 に示している。物体の半分を通過した位置より流れがはく離するが、 $Re = 3.9 \times 10^3$ の場合では通常の時計回りのはく離渦が形成されるのに対し、 $Re = 3.6 \times 10^4$ の場合では突起の根元部分に反時計まわりの小さな渦が出来ていることがわかる。この渦の形成によって抵抗を減少させるような表面圧力の変化が起こったと考えられる。

4 まとめ

本研究ではハイドロゲル塗膜でのすべり速度発生を模擬した平板間乱流の計算と表面に凹凸を有する円柱周り流れの計算を行った。今後は塗膜面の流体応答性や粗度影響を組み込んだ数値モデルを開発し、実船舶への応用を展開する予定である。

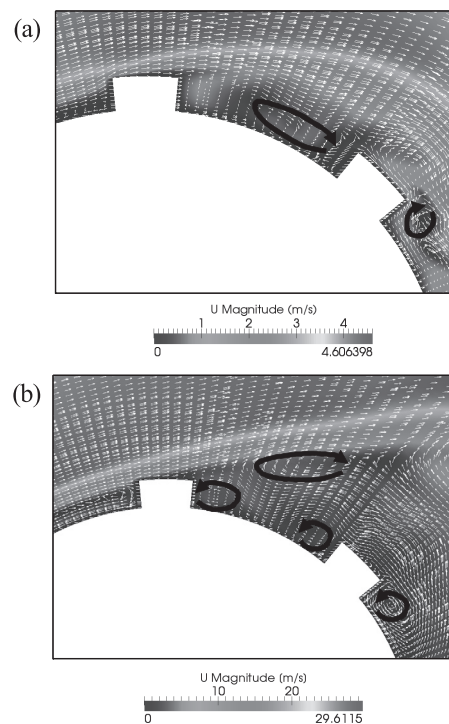


図 4 Toothed model でのはく離領域内速度分布 (コンターは速度の大きさを表す) : (a) $Re = 3.9 \times 10^3$, (b) $Re = 3.6 \times 10^4$ 。

視覚性短期記憶課題中におけるヒト頭頂間溝のトポグラフィック領域の fMRI 応答

金津将庸¹ 山本洋紀¹ 澤本伸克² 福山秀直² 齋木潤¹

¹京都大学大学院人間・環境学研究科 ²京都大学大学院医学研究科高次脳機能総合研究センター

1 はじめに

テーブルの上にペンやコーヒーカップといった物体がいくつか置いてある光景を見つめることを想像してみよう。物体の個数が少なければ、目を閉じてしばらくしたのちでも、どこに何があったかを思い出すことはたやすくできる。しかし物体の数が増えれば徐々に困難になっていくであろう。このような課題を行う際に働いているのが視覚性短期記憶（Visual Short-Term Memory, VSTM）であり、ヒトの認知機能において極めて重要な役割を担っている。ヒトを被験者とした脳機能イメージング実験により、VSTM 課題中に頭頂間溝付近の領域が賦活されることが報告されている[1-2]。しかし、頭頂間溝はトポグラフィー（視野位置の大脳皮質上における連続的な表現）を持つ複数の下位領域に分かれることがわかっており[3]、VSTM 機構を担う領域はさらに限局される可能性がある。この問いに答えるため、本研究においては fMRI を用いて頭頂間溝のトポグラフィック領域を被験者ごとに同定し、次にそれらの領域の視覚性短期記憶課題中の応答を評価した。

2 方法

2.1 頭頂間溝のトポグラフィック領域の同定

8名の被験者に対し、位相符号化法を用いてトポグラフィック領域の同定を行った[3-4]。被験者はMRI スキャナ内で60秒の周期で視野上を移動する多色格子模様刺激を観察し、同時に刺激に空間的注意を向ける課題を行った。視野角位置方向

のマッピングには時計回り・反時計回りの扇形刺激、視野偏心度方向のマッピングには拡大・縮小するリング刺激を用いた。刺激と同じ周期で有意な fMRI 応答 ($p < 0.01$) を示したボクセルを抽出し、解剖画像から再構築された大脳皮質表面モデル上に表示した。皮質表面上において刺激の視野上の位置との対応関係が連続的に再現されていた領域をトポグラフィック領域として同定した。

2.2 視覚性短期記憶実験

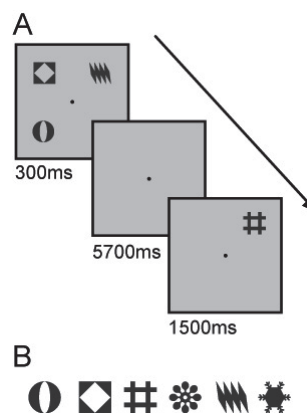


図1: 視覚性短期記憶課題 A. 課題の流れ。B. 課題に用いた6種類の形刺激。

被験者ごとに同定したトポグラフィック領域の VSTM 課題中の脳活動を調べた。被験者は300msの間呈示された1個から4個の形刺激（サンプル刺激）を記憶し、5700msの保持期間の後、呈示されたテスト刺激が記憶した刺激と同一であるかどうかをボタン押しで回答した（図1）。各トポグラフィック領域の fMRI 応答を抽出し、deconvolution 法を用いてセットサイズ（物体の

個数) 条件ごとの時系列応答を求めた。次に各領域内のボクセルに対し GLM 解析を行い、高記憶負荷条件 (セットサイズ 3 および 4) の際に有意な応答を示したボクセルの数を求め、その領域内に占める比率を評価した。

3 結果

3.1 トポグラフィック領域の時系列応答

すべての被験者に対し、頭頂間溝内において 5 つの領域 (IPS0, IPS1, IPS2, IPS3, IPS4) を同定した。IPS0 は横後頭溝と頭頂間溝の交点に見出され、IPS1 から先の領域は後頭側から前頭側にかけて位置し、半視野表象が順次繰り返されていた。

これらの領域は VSTM 課題中に持続的な応答を示した (図 2)。応答の強さは高負荷条件 (セットサイズ 3 および 4) において大きかった。

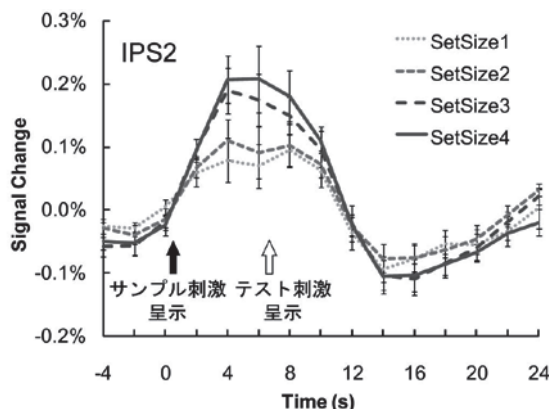


図 2: VSTM 課題中の IPS2 の時系列応答。縦軸が応答の強さ、横軸は時間を表す。

3.2 トポグラフィック領域内部における VSTM 課題中の応答

各トポグラフィック領域において、高負荷条件 (セットサイズ 3 および 4) において有意な応答 ($p < 0.01$) を示したボクセルの個数が領域内全体のボクセルの個数に占める比率は IPS2 において最も大きかった (図 3) (ANOVA, $F_{(4,28)} = 10.94$, $p < 0.001$; post-hoc multiple comparison test, IPS2 vs IPS0, $p < 0.001$; IPS2 vs IPS1, $p < 0.01$; IPS2 vs IPS3, $p < 0.05$; ; IPS2 vs IPS4, $p < 0.001$)。左右半球間で有意な差は見られなかった。

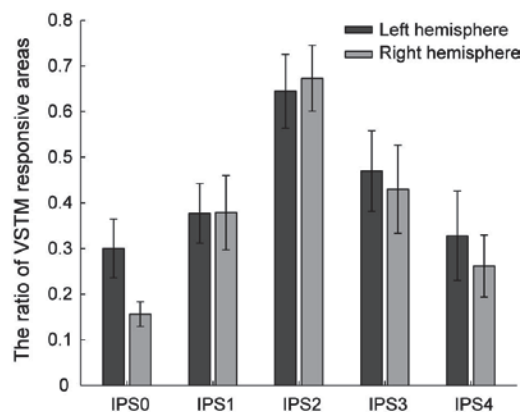


図 3: 頭頂間溝の各領域内で VSTM 課題中に有意な応答を示した領域の占める割合。

4 まとめ

本研究では、頭頂間溝の各トポグラフィック領域の VSTM 課題中における応答特性を調べることを目的とした。このためまずトポグラフィー同定実験を行い、頭頂間溝に 5 つの領域を同定した。これらの領域において、VSTM 課題中に応答を示したボクセルの比率が最も高いのは IPS2 であった。この結果は、視覚性短期記憶の処理機構において重要な役割を果たしているのは頭頂間溝の中間部であることを示唆する。

5 参考文献

- [1] J.J. Todd, and R. Marois, Capacity limit of visual short-term memory in human posterior parietal cortex, *Nature*, **428**, pp.751-754, 2004.
- [2] Y. Xu, and M.M. Chun, Dissociable neural mechanisms supporting visual short-term memory for objects, *Nature*, **440**, 7080, pp.91-95, 2006.
- [3] J.D. Swisher, M.A. Halko, L.B. Merabet, S.A. McMains, and D.C. Somers, Visual topography of human intraparietal sulcus, *Journal of Neuroscience*, **27**, pp.5326-5337, 2007.
- [4] H. Yamamoto, H. Ban, M. Fukunaga, C. Tanaka, M. Umeda, and Y. Ejima, Large- and Small-Scale Functional Organization of Visual Field Representation in the Human Visual Cortex, *Visual Cortex: New Research*, pp. 195-226, Nova Science, 2008.

蔵本-シバシンスキー方程式におけるアトラクタ・マーキング・クライシスの不安定周期軌道解析

齊木 吉隆*

北海道大学大学院 理学研究院 数学部門

小林 幹

東京大学生産技術研究所・FIRST 合原最先端数理モデルプロジェクト

蔵本-シバシンスキー方程式で生じるアトラクタ・マーキング・クライシスの転移点前後のパラメタにおいてカオスアトラクタと不安定周期軌道の多様体構造の解析を行った。その結果、カオスアトラクタと不安定周期軌道の多様体構造は、転移点前後で特徴的な変化を起こさないことが明らかとなった。しかしながら、適切に分類された不安定周期軌道の集団を考えると、それらの集団間において多様体構造に特徴的な違いが認められた。

1 アトラクタ・マーキング・クライシス

本研究では空間 1 次元の実変数の偏微分方程式である蔵本-シバシンスキー (KS) 方程式：

$$u_t + 2uu_x + u_{xx} + \nu u_{xxx} = 0.$$

を 2π 周期境界条件 $u(x, t) = u(x + 2\pi, t)$ 下で考察する。ここでは、フーリエ級数展開 $u(x, t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_k(t)e^{ikx}$ を使ったスペクトル法を採用し、扱う系を奇関数のみで張られる部分空間に限定する [1] ことにより、

$$\dot{a}_k(t) = (k^2 - \nu k^4)a_k(t) + k \sum_m a_m(t)a_{k-m}(t),$$

を考察することとする。ただし、 $a_0 = 0, 1 \leq (k, m) \leq N$ (N は打ち切り波数) であり、以下では $N = 16$ とする。

KS 方程式は、 ν を変えると $\nu = \nu_{AMC} \sim 0.02990$ でアトラクタ・マーキング・クライシス (AMC) を起こす。AMC とは、パラメタ変化に伴って複数のカオスアトラクタが相空間上でぶつかり一つのカオスアトラクタが形成されるカオス-カオス転移のことである。図 1 は AMC 転移点 ($\nu = \nu_{AMC}$) 付近でポアンカレ断面 ($a_1 = 0, \dot{a}_1 > 0$) を用いた分岐図を表しており、 $\nu > \nu_{AMC}$ においては、AMC でぶつかる前に対称的に存在する二つのカオスアトラクターの一方のみを描写している。

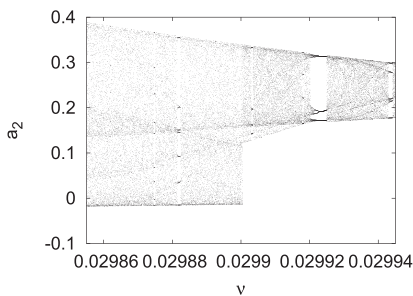


図 1: AMC 転移点 ($\nu = \nu_{AMC}$) 付近の分岐図。ポアンカレ断面は $a_1 = 0, \dot{a}_1 > 0$ を用いた。

2 カオスアトラクタの多様体構造

AMC 転移点前後のパラメタにおけるカオスアトラクタの多様体を数値的に構成し、その前後で多様体構造に定性

*E-mail:saiki@math.sci.hokudai.ac.jp

的な違いが見られるかどうかを調べる。特にここでは、多様体の構造を特徴づける量として、安定多様体と不安定多様体がなす角度 [2]：

$$\angle(E^s, E^u) = \cos^{-1} \left(\max_{\substack{|\mathbf{u}^s|=|\mathbf{u}^u|=1 \\ \mathbf{u}^s \in E^s, \mathbf{u}^u \in E^u}} (|\mathbf{u}^s, \mathbf{u}^u|) \right) \times \frac{180}{\pi},$$

を用いる。ただし、 E^s, E^u はそれぞれ伸びる方向、縮む方向に対応したリアプノフベクトル \mathbf{v}_j で張られる部分空間である。ここで、リアプノフベクトル \mathbf{v}_j は以下で定義される：

$$\lim_{n \rightarrow \pm\infty} \frac{1}{n} \log |D\mathbf{f}^n(\mathbf{x})\mathbf{v}_j| = \lambda_j.$$

ただし、 $D\mathbf{f}^n(\mathbf{x})$ は考えている系のヤコビアン、 λ_j は j 番目のリアプノフ指数を表している。リアプノフベクトルの計算は、Ginelli らによって開発された数値アルゴリズムを用いる [3, 4]。我々は軌道上の各点でこの角度 (以下多様体角度と呼ぶ) を計算することで、その軌道の多様体の特徴づける。図 2 は AMC 転移点前後におけるカオスアトラクタの多様体角度の密度分布を示している。図 2 から、カオスアトラクタの多様体角度に関する密度分布は AMC 転移点の前後でほとんど変わらないことがわかる。AMC 転移点ではカオスアトラクタの形に大きな変化が起きている (図 1) ことと対照的である。なお、AMC 転移点前後の両パラメタ ($\nu = 0.02987$ (AMC 後), 0.02991 (AMC 前)) において密度分布は 0 度付近に値を持っており、カオスアトラクタは双曲性を失っていると考えられる。

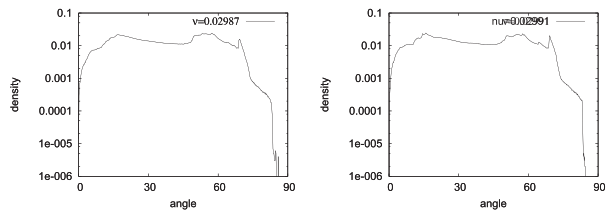


図 2: カオスアトラクタの多様体角度に関する密度分布。 $\nu = 0.02987$ (AMC 後)(左), $\nu = 0.02991$ (AMC 前)(右)。

3 不安定周期軌道の多様体構造

AMC 転移点付近において不安定周期軌道 (UPO) は以下の 3 種類に分類される [5]：(1) mUPO： $\nu > \nu_{AMC}$ に

においてカオストラクタに埋め込まれておらず、その安定多様体が2つの対称なカオストラクタを分けるバインバウンダリの役割をするUPO, (2) aUPO: カオストラクタに埋め込まれていて AMC 転移点前後で存在するUPO, (3) gUPO: AMC 転移点後 ($\nu < \nu_{AMC}$) にのみ存在するUPO.

ここでは、アトラクタの骨格をなしている(2)と(3)の2種類の不安定周期軌道に着目して、それらの多様体構造を調べる. 特にここでは、不安定周期軌道上の多様体角度の最小値(最小多様体角度と呼ぶ):

$$\min_{0 \leq t < T} \angle(E^s, E^u)_t.$$

に着目する. ただし, T は不安定周期軌道の周期である.

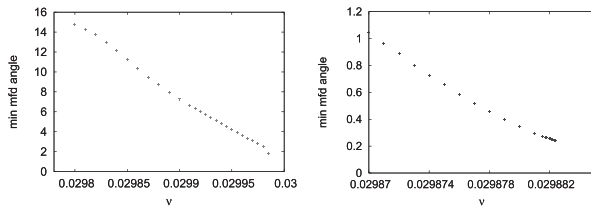


図 3: ある不安定周期軌道 (aUPO(左), gUPO(右)) の最小多様体角度の ν 依存性.

図 3 は, ある aUPO と gUPO に対する最小多様体角度の ν 依存性である. これは, カオスの多様体構造と同様に, UPO の多様体構造は AMC によって大きな変化を受けないことを示している. また, 不安定周期軌道の種類によらず, 不安定周期軌道の多様体角度はパラメタ ν を大きくしていくにつれて単調に減少し, サドル-ノード分岐等でその不安定周期軌道が消滅する点で最小値をとることが明らかになった. この結果は, AMC から離れたパラメタ領域において得られた結果と一致する [6]. 以上の結果は, AMC という大規模な構造変化を伴う転移の有無に関わらず, 幅広いパラメタ空間で成り立つ性質である.

次に, AMC 転移点前後のパラメタ値に対して, 不安定周期軌道 (aUPO, gUPO) をそれぞれ数値的に多数求め, それらの最小多様体角度が, 軌道の周期に対してどのように分布しているかを調べる. 図 4 は, AMC 転移点前後の2つの異なるパラメタにおいて存在する多数の不安定周期軌道に対して, 横軸に周期軌道の周期, 縦軸に最小多様体角度をプロットしたものである. 図 4(左上, 左下)を見ると, aUPO に関しては ν が小さいと最小多様体角度は全般的に大きくなる. 一方, 図 4(左上, 右上) は, AMC 転移点後には aUPO より gUPO の方が相対的に小さい最小多様体角度を持つ傾向にあることを示している. gUPO は AMC 後にサドルノード分岐ならびにそれに派生する分岐を経て出現する UPO である. パラメタ ν を AMC 転移

点に下から (AMC 転移点後のパラメタから) 近づけていくと, gUPO に対応するサドル-ノード分岐が集積している [5]. また, 図 3 からわかるように, 不安定周期軌道の最小多様体角度はサドル-ノード分岐点等で消滅する点で最小値をとり, 離れるに連れて大きな値をとる. つまり, AMC 転移点直後のパラメタ $\nu = 0.02987$ は各 gUPO に対応するサドル-ノード分岐点に近いので, $\nu = 0.02987$ における gUPO の最小多様体角度は小さな値を持つ傾向にあると考えることができる.

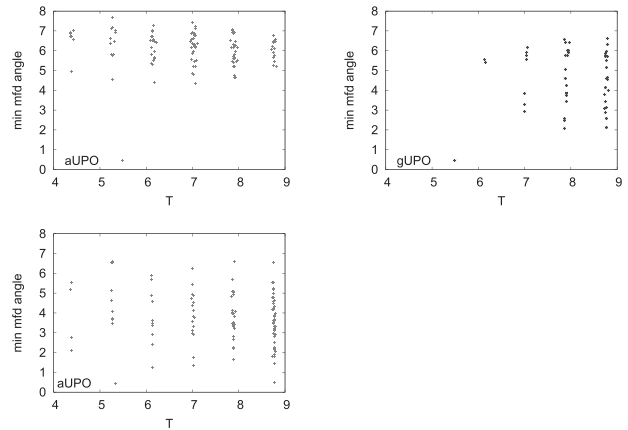


図 4: AMC 転移点前後 ($\nu=0.02987$ (上), 0.02991 (下)) における多数の不安定周期軌道 (周期 T) (aUPO(左), gUPO(右)) の最小多様体角度.

参考文献

- [1] F. Christiansen, P. Cvitanović, and V. Putkaradze, *Nonlinearity* **10**, 55 (1997).
- [2] P. V. Kuptsov and S. P. Kuznetsov, *Phys. Rev. E* **80**, 016205 (2009).
- [3] F. Ginelli, P. Poggi, A. Turchi, H. Chate, R. Livi and P. Politi, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 130601 (2007).
- [4] Y. Saiki and M. U. Kobayashi, *J. SIAM Lett.* **2** 107 (2010).
- [5] Y. Saiki, M. Yamada, C.-L. Chian, R. A. Miranda and E. L. Rempel, *Reconstruction of chaotic saddles and classification of unstable periodic orbits*, submitted.
- [6] M. U. Kobayashi and Y. Saiki, *Manifold Structures of Unstable Periodic Orbits and the Appearance of Periodic Windows in Chaotic Systems*, submitted.

歳差球体内の乱流リングとダイナモ

木田 重雄* 清水雅樹†

*同志社大学 理工学部

†大阪大学大学院 基礎工学研究科 機能創成専攻

1 はじめに

地磁気の起源や構造および、その極性のカオス的
反転は長きにわたり興味深い研究対象であり続けて
きた。地球外核における熱対流により導電性流体の
流れが駆動され、ダイナモ効果によって地磁気が生
じているとされることが一般的である。一方、自転
軸の歳差運動によって駆動される流れが地磁気を形
成するという研究がある (Markus 1968)。

本研究では後者の歳差運動ダイナモに注目し、歳
差運動を行う球体内部という単純化された問題設定
において、数値計算によりエネルギー収支や磁場の
生成メカニズムおよび磁場構造などを調べる。

2 支配方程式

歳差運動を行う球体内の非圧縮導電性流体を考え
る。球体の中心を通る自転軸はそれに垂直方向の軸
(歳差軸) のまわりに回転し (歳差運動)、両軸まわり
の角速度 (自転角速度 $\Omega_s \hat{z}$ と歳差角速度 $\Omega_p \hat{x}$) はと
もに一定であるとする。 $\Omega_p \hat{x}$ で回転する系 (歳差系)
での非圧縮 MHD 方程式は無次元量で、

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{b} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} &= \mathbf{u} \times (\nabla \times \mathbf{u}) - 2\Gamma \hat{x} \times \mathbf{u} \\ & - \nabla P + (\nabla \times \mathbf{b}) \times \mathbf{b} + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u} \\ \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} &= \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{b}) + \frac{1}{Re_m} \Delta \mathbf{b} \end{aligned}$$

となる。ここで、 P は遠心力などを含む一般圧
力であり、無次元パラメータはそれぞれ、 $\Gamma =$
 Ω_p / Ω_s , $Re = a^2 \Omega_s / \nu$, $Re_m = a^2 \Omega_s \mu \sigma$ で定義され
る。また a, ν, μ, σ はそれぞれ、球半径、動粘性係数、
透磁率、電気伝導率である。境界条件について、流
れは球体壁面で粘着するとし、透磁率は球体内外で
等しく外部磁場 (\mathbf{b}^{out}) は無限遠方で 0 となるポテン

シャル場であると仮定して、

$$\mathbf{u} = \hat{z} \times \mathbf{r} \quad \mathbf{b} = \mathbf{b}^{\text{out}} \quad (r = 1).$$

となる。本研究ではこれらの方程式をスペクトル法
を用いて解く。(Kida & Nakayama 2008)

3 臨界 Re_m 数とエネルギー収支

$Re = 1000, \Gamma = 0.1$ の歳差運動で得られた純流
体 ($\mathbf{b} = 0$) での定常乱流場 (Goto *et al.* 2007) に、
小さな振幅の磁場を加えたものを初期条件とし、磁
場が増幅されるか減衰するかを調べたものを図 1 に
示す。これより、 $Re \geq 8000$ で磁場は増幅され維
持されることが分かる。以下では磁場が維持される
 $Re_m = 10000$ の場合で、統計的に定常な場を調べた
結果を述べる。

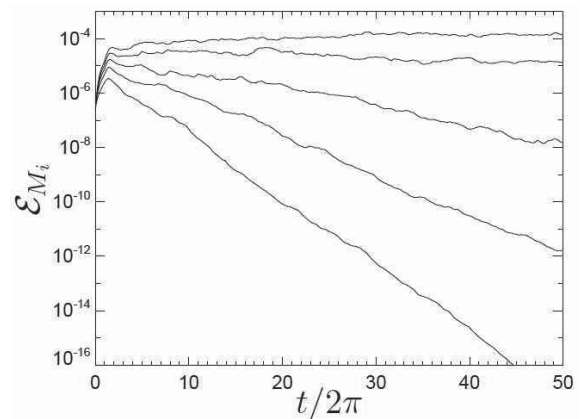


図 1 : 球体内の磁気エネルギーの時間発展。下
から $Re_m = 2000, 4000, 6000, 8000, 10000$. $Re =$
 $10000, \Gamma = 0.1$.

図 2 に単位時間あたりのローレンツ力による仕事、
壁面摩擦力による仕事、粘性散逸を示す。壁摩擦力
により得られたエネルギーのほとんどは粘性により
散逸するが、その 2–3% 程度がローレンツ力によ
って磁気エネルギーに変換されている。

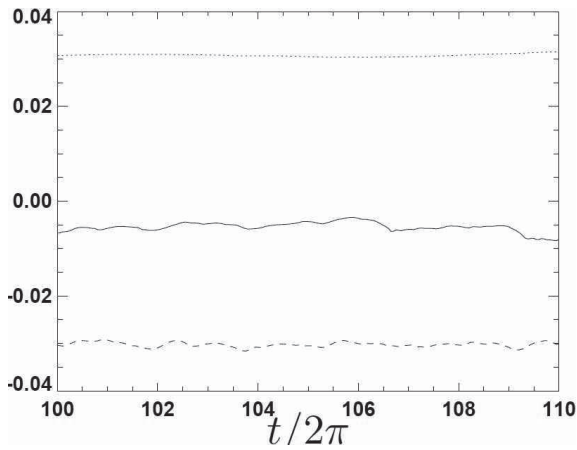


図2：エネルギー収支. 実線, 点線, 破線はそれぞれ単位時間あたりのローレンツ力による仕事, 壁面摩擦力による仕事, 粘性散逸を表す.

4 乱流リング

磁場がどこで強められているかを見るため, 図3に渦度場と磁場の大きさの分布を示す. 自転軸と歳差軸はそれぞれ実線と点線で示されている. 渦度場と磁場のどちらにおいても, 活発な領域は球体壁面近傍でリング状に沿って分布しており, このリングは歳差系で固定されていて, その法線方向はおよそ(0.3,0.3,0.8)の方向を向いている. また, このリングに沿って高速な流れが帯状に存在している.

外部磁場においても, 強い磁場の領域はこのリングに沿って表れている. (図中の球表面のグレースケールで黒色の部分.)

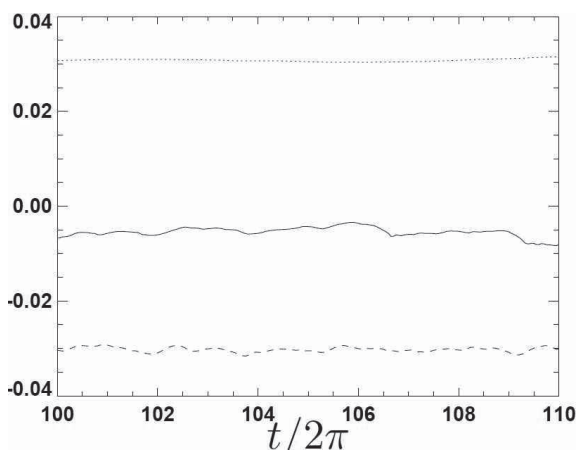


図2：エネルギー収支. 実線, 点線, 破線はそれぞれ単位時間あたりのローレンツ力による仕事, 壁面摩擦力による仕事, 粘性散逸を表す.

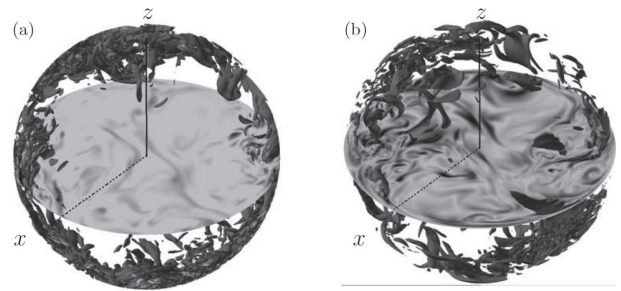


図3：乱流リング. (a) 渦度の等値面 ($|\nabla \times \mathbf{u}| = 5$) と (b) 磁場の等値面 ($|\mathbf{b}| = 0.05$) を示す. グレースケールは赤道面での (a) 渦度, (b) 磁場の分布を表す.

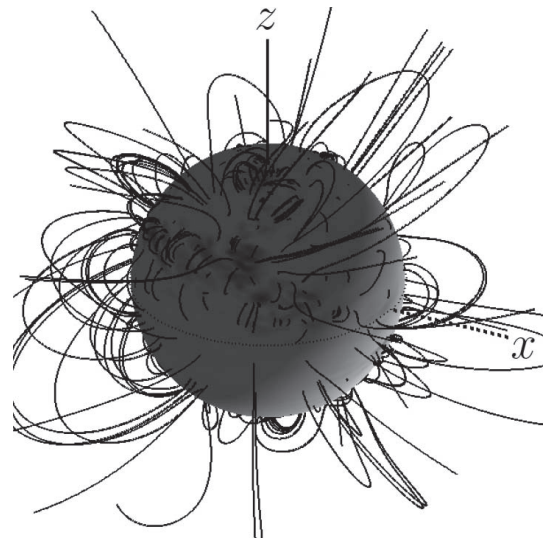


図4：外部磁場. 球体表面のグレースケールは磁場の強さ, 実線は磁力線を表す. 球体表面の点線は赤道 ($z = 0$). $t = 100/2\pi$.

5 まとめ

歳差運動によって駆動される電磁流体ダイナモを実現した. 上記で述べたパラメータ $Re = 10000, \Gamma = 0.1, Re_m = 10000$ では, 乱れ磁場は球壁面付近を這うリング状の高速流に沿って強められている. 様々なパラメータで, 磁場の生成メカニズムやその構造を調べるのが今後の課題である.

[参考文献]

- [1] Malkus, W. V. R., *Science.*, **160**, pp.259 (1968)
- [2] Kida, S. & Nakayama, K., *J. Phys. Soc. Japan*, **77**, 054401 (2008)
- [3] Goto, S., Ishii, N., Kida, S., and Nishioka, M., *Phys. Fluids*, **19**, 061705 (2007)

E-mail: shimizu@me.es.osaka-u.ac.jp

動弾性有限積分法 (EFIT) を用いた イメージベース波動解析の効率化

中畑 和之 *

*愛媛大学大学院理工学研究科

1 はじめに

発電プラントや土木橋梁等の経年劣化した構造部材を非破壊的に検査するために、超音波探傷が行われている。インフラの構造部材のほとんどが専用設計で同じ形状が少ないだけでなく、3次元的に複雑な形状を有する物が多い。また、コンクリート等の材料は強い非均質性を呈するため、これらの部材を伝搬する超音波は、従来の波線理論等で解析的に推定できないほど複雑な伝搬挙動を示す。そこで、著者らは設計時に用いた CAD 図、完成品の CT 写真や表面凹凸データ等を基に数値モデルを作成し (イメージベースモデリング [1])、非均質異方性材料中の超音波の3次元伝搬解析を簡単な準備で行うシミュレータ [2] の開発を進めてきた。数値解析法は動弾性有限積分法 [3](Elastodynamic Finite Integration Technique: EFIT) を採用する。EFIT は時間領域の波動伝搬解析法であり、FDTD 法のように応力と粒子速度を交互に更新する。本シミュレータの特徴は、数値モデルのボクセルと EFIT のセルのサイズ・位置を一致させることで、複雑な外部・内部形状を、少ない作業量でモデル化でき、しかも EFIT は陽解法であるため並列計算の効率が良いであろうという期待があった。

しかし、複雑形状が扱えるという利点の裏側で、コード内部では異種材料や吸収境界 (PML) をセル毎に場合分けして計算を進めるため、非常に入り組んだネスト構造となっており、計算速度の低下を招いていた。これまで、高速化を意図して、計算領域を1次元方向に分割してプロセス並列を行う計算方法と分割された領域内で共有メモリを用いてスレッド並列を行う方法を既に導入していたが、期待したほど台数効果が得られていなかった。また、時間領域の解析法では途中で計算結果を定期的に出力すること

が多く、特に3次元大規模モデルを並列に計算する時に高速に出力する技術の導入が望まれていた。ここでは、以上のような効率の低下の原因を洗い出し、本シミュレータの高速化・効率化を試みたので、その成果について報告する。

2 動弾性有限積分法 (EFIT)

3次元動弾性問題における EFIT の離散化については、著者等の論文 [2] に詳細が述べられている。ここでは、EFIT における物理量の配置、解の更新、並列処理の導入を中心に述べる。

2.1 基礎式

対象物の変位ベクトルを u_i 、応力テンソルを τ_{ij} 、物体力ベクトルを f_i と表すとき*、固体中を伝搬する波動は次式の運動方程式と構成関係式を満足する。

$$\rho(\mathbf{x})\ddot{u}_i(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \tau_{ij}(\mathbf{x}, t)}{\partial x_j} + f_i(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

$$s_{ijkl}(\mathbf{x})\tau_{kl}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(\mathbf{x}, t)}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} \right) \quad (2)$$

ここで、 $\{\}$ は時間微分作用素 ($= \partial/\partial t$) である。上式で、 ρ は密度、 s_{ijkl} は弾性コンプライアンスで4階のテンソルである。なお、 s_{ijkl} の逆は弾性ステイフネス c_{ijkl} である。いま、粒子速度を $v_i (= \partial u_i / \partial t)$ とし、式 (1) と (2) の積分形式を考えると次式を得る。

$$\int_V \rho \dot{v}_i dV = \int_S \tau_{ij} n_j dS + \int_V f_i dV \quad (3)$$

$$\int_V s_{ijkl} \dot{\tau}_{kl} dV = \int_S \frac{1}{2} (v_i n_j + v_j n_i) dS \quad (4)$$

上式ではガウスの発散定理を用いており、 n_i は積分領域 V の外向き法線である。式 (4) は弾性ステイフ

*ここでは Index 標記 ($i=1,2,3$) を使用し、総和規約を適用する。

ネスとその対称性を用いて次のようにも書ける.

$$\int_V \dot{\tau}_{kl} dV = \int_S c_{kl ij} v_i n_j dS \quad (5)$$

2.2 離散化

積分領域 V として1辺の長さが Δx の立方体セルを考える. 一般的に, FITでは V の形状として任意のものを選ぶことができるが, ここではイメージベースモデリングに適用するために立方体とする. この立方体を積分セルとして, 式(3)と(5)を離散化する. 体積積分においてセル内で物理量が一定, 面積積分では各面内で物理量が一定とすると, 図1に示すような節点の配置が自然に決まる. 材料定数は τ_{ii} の積分セルで定義されるため, v_i について離散化するとき, 密度 ρ は隣り合うセルの平均値 $\bar{\rho}$ とする [2]. 従って, v_i の計算では材料定数の平均値を採用することで, 異種界面の結合条件は暗に満たされる.

2.3 解の陽的更新

時間 t に対して, v_i と τ_{ij} を中心差分で近似する.

$$\{v_i\}^z = \{v_i\}^{z-1} + \Delta t \{\dot{v}_i\}^{z-\frac{1}{2}} \quad (6)$$

$$\{\tau_{ij}\}^{z+\frac{1}{2}} = \{\tau_{ij}\}^{z-\frac{1}{2}} + \Delta t \{\dot{\tau}_{ij}\}^z \quad (7)$$

ここで, z は整数, Δt は時間ステップ幅である. 式(6)を使って整数次の時間ステップ z の v_i が求まる. 次に, 式(7)で半整数次の時間ステップ $z + \frac{1}{2}$ における τ_{ij} が求まることになり, この過程を交互に実行することで陽的に解が求まる.

3D EFIT の計算フローを図2に示す. イメージベースモデリングで作成した数値モデルを N 個の領域に分割し, 分割した1つの領域に対して1プロセスを

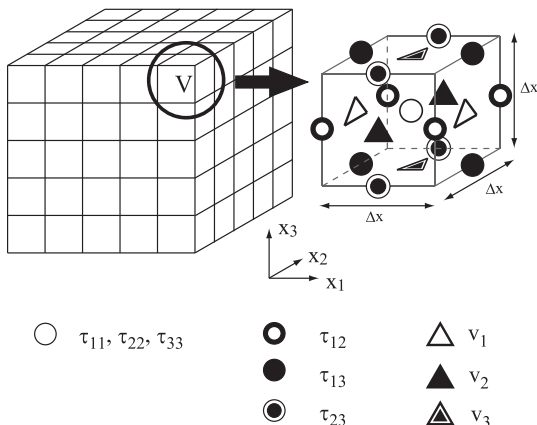


図1: 3次元EFITのグリッド配置. 速度 $v_i (i = 1, 2, 3)$ と応力 $\tau_{ij} (i, j = 1, 2, 3)$ は異なった位置に配置される.

割り当てて, 計算を行う (プロセス並列). 袖領域の情報は MPI ライブラリによって通信しながら計算を進める. また, 領域内ではスレッド並列によってループ構文を高速実行させている. ある時間ステップおきに, 決められた座標の変位 (又は応力値) を出力する. クーラン条件を満足しながら, 解を更新する.

3 高速化・高効率化のための改良

高度化前のコードでは, 非均質材料を扱う際に各セル毎に材料を識別するために複雑なネス構造になっていたが, ここでは Lookup table を用いて効率よくデータを参照することにした. この部分の詳細は本報告では割愛し, 以下では, 3次元 MPI の導入と MPI-IO (MPI ライブラリによる並列入出力) の導入の効果について述べる.

3.1 3次元 MPI の導入

高度化前のコードでは, 図3(a)に示すように, 計算領域を1次元方向に分割し, その袖領域の情報を MPI 通信で共有しながら計算を行っていた. また, 領域内は OpenMP によるスレッド並列を採用していた. 京都大学学術情報メディアセンターの Thin クラスタを使用した場合, コア数を増やしていくと台数効果が非常に悪くなったため, ここでは計算領域を3次元方向に分割し, スレッド並列を併用しないプロセス並列のみの計算方法 (フラット MPI) を採用した. MPI/OpenMP ハイブリッド並列 (4 プロセス \times 16 スレッド), フラット MPI (64 プロセス) で計算した場合の実行時間の比較を図4に示す. 図4は, 200^3 ボクセルからなる均質・等方性の数値モデルを用い, 1000 ステップの更新に要した時間をプロットしたものである. ここでは, コンパイラによる性能も検証するため, Intel (オプション -O3), Fujitsu (オプション -Kfast), PGI (オプション -fastsse) の3つを用いて比較した. コードは Fortran95 で書かれ, すべて倍精度で計算している. この結果から, 各コンパイラともに計算時間に大きな差は無いことが分かる. また, いずれのコンパイラを用いた場合も, フラット MPI による計算が最も短い時間で終了することがわかる.

次に, フラット MPI を導入した場合の台数効果 (スケラビリティ) について検証を行う. 図5に, プロセス数を増加させた場合のスピードアップ S (1 コアと, フラット MPI によるマルチコアを用いた場合の

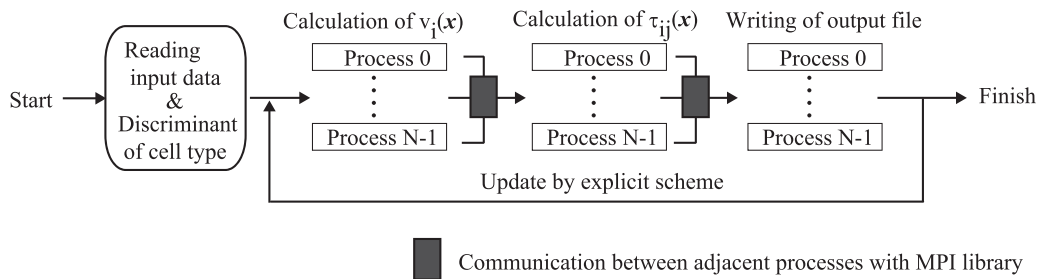


図 2: 3D EFIT の計算フローと計算領域の袖領域を共有するための MPI 通信。

計算時間の比)をプロットした[†]。ボクセル数 500^3 , 1200^3 , 2000^3 の 3 種類の数値モデルに対して, プロセス数を変化させた場合の S を比較した。フラット MPI を用いれば 1000 プロセスを利用しても台数効果はリニアに向上しており, 非常に良い効率が得られることが分かった。

3.2 MPI-IO の導入

高度化前は, マスタプロセスにデータを集めて, ある時間ステップおきに 3 次元領域の物理量を出力していた (Master-IO)。しかし, Master-IO は, マスタプロセスの出力バッファが大きくなること, 出力前に各プロセスのデータをマスタプロセスに通信して集約する必要があり, 出力に時間を要していた。そ

こで, MPI-IO を導入し, 出力の並列処理を行った。MPI-IO は, コード実行時に生成された全プロセスから, プログラム内で設定されたバイト数でプロセス順に出力するものである。従って, マスタプロセスにデータを集約する必要が無く, 高速に出力処理を

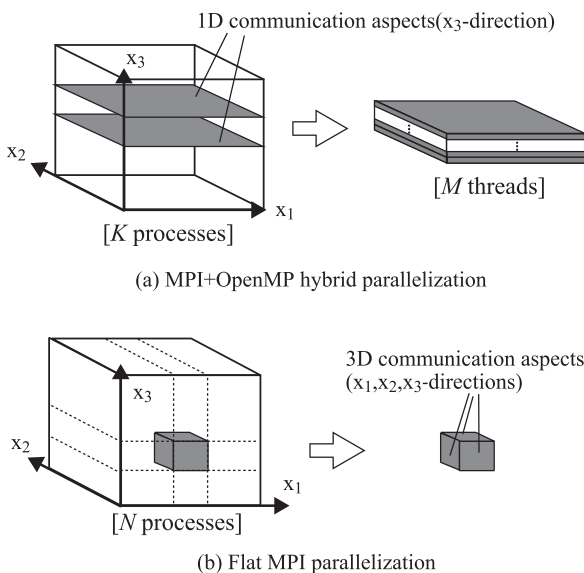


図 3: (a) 1 次元プロセス並列とスレッド並列のハイブリッド方法, (b) 3 次元プロセス並列 (フラット MPI)。

[†]これは, H23 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点プロジェクトにおいて Thin クラスタ 64 ノード (1024 コア) を利用できる機会を利用して計算したものである。

A: (Single CPU), B: (64 processes), C: (4processes x 16threads)

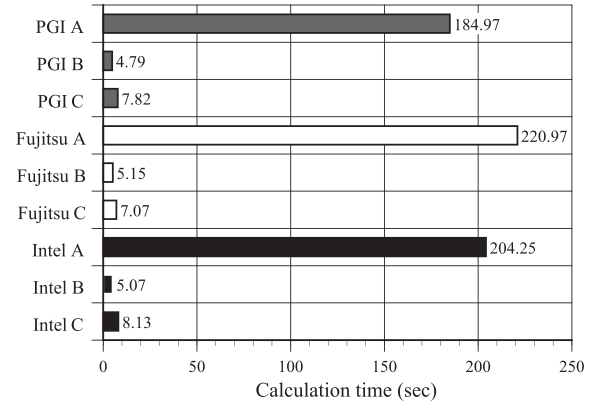


図 4: 計算に要した時間の比較 ([A] シングル CPU, [B] フラット MPI, [C] MPI/OpenMP ハイブリッド)。

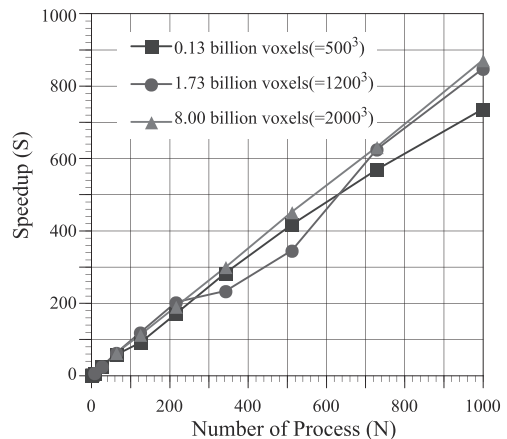


図 5: プロセス数を増やした場合のスピードアップ。

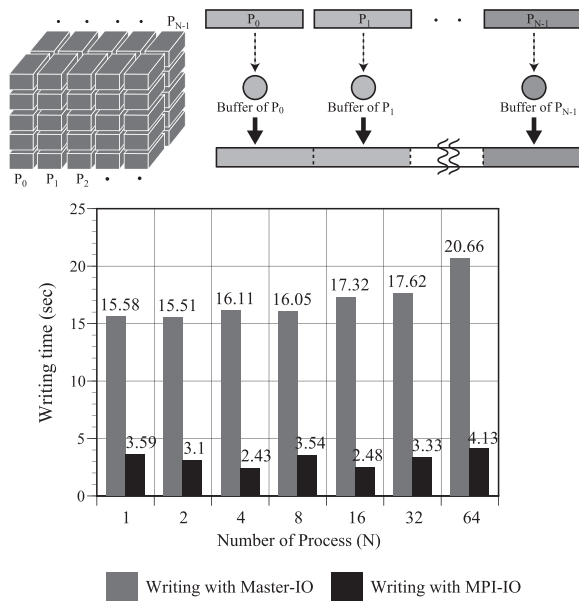


図 6: MPI-IO の概念図と出力時間の比較.

行うことができる. 図 6 に Master-IO と MPI-IO の出力時間の比較を示す[‡]. ここでは, 使用したプロセス数毎に, 100^3 ボクセルを出力するのに要した時間をプロットした. プロセス数が増えても MPI-IO を用いれば一定の時間で出力が可能であることがわかる.

4 数値解析例

コンクリート内部の骨材や空隙の形状, およびそれらの分布形態も厳密にモデル化したいため, ここでは被検体の CT 写真を元に数値モデルを作成した. コンクリート供試体 (高さ 100mm, 断面 60mm×60mm) の断面 CT 写真を 400 枚撮影し, これを画像処理・補間してボクセル集合体を作成する. 数値モデルは, セメントペースト ($c_P=3950\text{m/s}$, $c_S=2250\text{m/s}$, $\rho=2050\text{kg/m}^3$), 骨材 ($c_P=4400\text{m/s}$, $c_S=2600\text{m/s}$, $\rho=2600\text{kg/m}^3$), 空隙の 3 相から構成される. セメントと骨材は等方性材料とした. 骨材の体積率は 32.8%, 微小空隙のそれは 0.3% である. 数値モデル上面の $\phi=20\text{mm}$ の領域に垂直探触子を模擬して直応力を与えることで, 中心周波数 200kHz の超音波を発振する. $\Delta x=0.10\text{mm}$ (ボクセルの総数は約 3.5 億個), $\Delta t=10\text{ns}$ とし, 伝搬時間は $36\mu\text{s}$ (3600 ステップ) まで計算した. コンクリー

[‡]Master-IO は, バイナリデータをレコード番号を指定して逐次的に出力していたため, 1 プロセスで比較した場合でも時間を要していた.

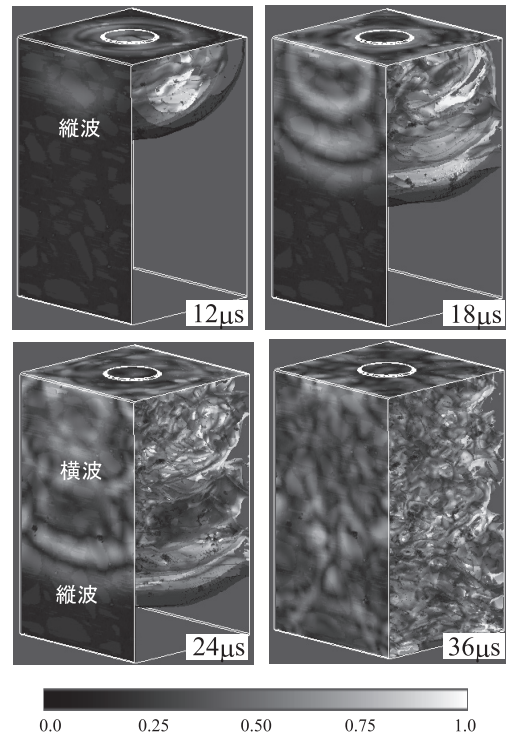


図 7: コンクリート中の超音波伝搬の可視化

トの外側はすべて完全反射境界条件とした. このときのコンクリート中の超音波伝搬解析の結果を図 7 に示す. 図では, 変位の絶対値 $|u| = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + u_3^2}$ をレンダリングした. 高度化したコードでは, フラット MPI (Thin クラスタ: 64 プロセス並列) を用いて計算時間は 1 時間弱であった. 高度化前に比べて, 高度化後は全体で 3 倍弱の計算速度向上が得られた.

謝辞: 本研究の実施の機会を与えて頂いた「スーパーコンピュータシステム共同研究企画委員会」の皆様, 並びに終始ご指導を頂いた学術情報メディアセンター市川眞一先生に深甚なる感謝を申し上げます.

参考文献

- [1] K. Terada, T. Miura and N. Kikuchi, “Digital image-based modeling applied to the homogenization analysis of composite materials,” *Computational Mechanics*, **20**(4), 331-346, (1997).
- [2] 中畑和之, 徳永淳一, 廣瀬壮一, “イメージベース波動伝搬シミュレーションと超音波探傷法のモデル化への応用,” *非破壊検査*, **59**(5), 231-238 (2010).
- [3] P. Fellinger, R. Marklein, K.J. Langenberg and S. Klaholz, “Numerical modeling of elastic wave propagation and scattering with EFIT –elastodynamic finite integration technique,” *Wave Motion*, **21**, pp.47-66 (1995).

H-matrices（階層型行列）法を用いた準動的地震発生サイクルシミュレーションの省メモリ化・高速化

平原和朗¹・大谷真紀子¹・高橋康人²・堀高峰³・兵藤守³

¹京都大学大学院理学研究科・²同志社大学大学院工学研究科・³海洋研究開発機構地球内部ダイナミクス領域

2011年3月11日に発生したマグニチュード（M）9.0の東北地方太平洋沖地震の発生機構解明や、今後30年以内に発生すると危惧されている、次期南海トラフ巨大地震の発生予測に向けて、スーパーコンピュータ上に日本列島を構築してプレートを沈み込ませ、地震を発生させる、地震発生サイクルシミュレーションが行われようとしている。こういったシミュレーションは、大規模・マルチスケールとなり、シミュレーションコードの省メモリ化・高速化が必須である。その高速化・省メモリ化に向けて、1昨年・昨年度からプログラム高度化支援事業に採択されている。昨年度は Hierarchical-Matrices（H-matrices 階層型行列）法の精度およびそのパフォーマンスの検証を試みたので、概要を報告する。

1 はじめに

2011年3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震はマグニチュード（M）9.0の超巨大地震で、強震動特に巨大な津波を生じ、未曾有の東日本大震災をもたらした。また、西南日本では、今世紀前半中に、M8クラスの地震が発生し、西南日本に大きな被害をもたらした。被害総額は国家予算規模に上ると想定されているが（中央防災会議,2003）、東北地方太平洋沖超巨大地震の発生を受けて、南海トラフ巨大地震の想定について見直しが始まっている。

こういった中で、被害軽減に向けて、理学・工学・社会科学・人文科学といった広い分野で、様々な対策が立てられようとしている。なぜマグニチュード9.0東北地方太平洋沖地震が発生したのか、また次期南海地震がいつ、どういった破壊様式で起きるかが、最大の関心事であるが、非常に難しい問題である。これに答えるため、地震発生サイクルシミュレーションが行われている。大規模マルチスケールになるため、シミュレーションの省メモリ化・高速化が必須である。

シミュレーションに繰り返し現れる演算に、す

べり応答関数行列とすべり欠損（速度）ベクトル積演算があり、この部分の省メモリ化・高速化を検討している。シミュレーションではプレート境界を N 個のセル（小断層）に分割して運動方程と摩擦則をカップルさせて各セルでのすべりの時間発展を追跡する。この場合、直接計算を行うと、行列・ベクトル積に要するメモリ・計算量は $O(N^2)$ となる。

これまで地震発生サイクルシミュレーションでは、問題の空間対称性を利用したFFTを用いての高速化が試みられている（例えば、Kato,2008）。しかしながら、東北地方や南海トラフのような沈み込み帯では、深さ方向にもトラフ軸方向にも対称性を考えられないので、その適用には限界がある。また、我々は、高速多重極法（Fast Multipole Method: FMM）の適用も検討してきた。FMMは、ラプラス場・ヘルムホルツ場などにおける N 体間減衰の相互作用の高速数値計算アルゴリズムである。ラプラス場の場合で $O(N)$ 、ヘルムホルツ場の場合で $O(N \log N)$ の計算時間と使用メモリで計算を実行できるとされている。均質全無限弾性体を仮定して、高速化を図ってきた（平原・他,2009）。具体的には、Liu and Nishimura(2006)

のチュートリアルコードを参考に分岐構造のコーディングを行った。また、3次元静的弾性問題における多重極展開係数については、Yoshida et al.(2001)を参照して、開発を行ってきた。しかしながら、沈み込み帯のシミュレーションには、地表を含む半無限弾性体での計算が必須である。ところが、現在までその多重極展開に適した形で得られていない。そのため、近似する必要があるが、特に傾斜断層上での縦ずれ断層運動において高速多重極法適用の困難さが、大谷・他(2010)で指摘されている。

このため、採択されたプログラム高度化支援事業では、Hierarchical-Matrices (H-matrices 階層型行列) 法を用いた準動的地震発生サイクルシミュレーションの省メモリ化・高速化に取り組んでいる。現状について、Ohtani et al.(2011)に従って報告する。

2 地震発生サイクルシミュレーション

まず、Hori et al.(2004)およびHori(2006)に従い、シミュレーション手法を紹介する。

半無限均質弾性体を仮定し、その中にプレート境界を設定する。プレート境界を N 個の小さなセル (小断層) に区切ると、各セル i での準静的運動方程式は次のように書ける。

$$\tau_i(t) = -\sum_j K_{ij} (\delta_j(t) - V_{pl,j} t) - \frac{G}{2\beta} V_i(t) \quad (1)$$

ここで、 τ_i , V_i , δ_j , $V_{pl,j}$, K_{ij} , G , β は、それぞれ、セル i でのせん断応力、すべり速度、セル j でのすべり、プレート収束速度、セル j での単位すべりによるセル i での応力変化 (すべり応答関数)、剛性率、S波速度である。これと、速度と状態に依存する摩擦則のうち、composite law (Kato and Tullis, 2006)

$$\tau_i(t) = \sigma_i \left[\mu_s + \Theta_i(t) - a_i \ln \left\{ V_s / V_i(t) + V_s / V_{st} \right\} \right] \quad (2)$$

$$\frac{d\Theta_i(t)}{dt} = \frac{b_i V_{pl,i}}{L_i} \exp \left[-\frac{\Theta_i(t)}{b_i} \right] \exp \left[-\frac{V_i(t)}{V_c} \right] - \frac{V_i(t)}{L_i} \left[\Theta_i(t) - b_i \ln \left\{ \frac{V_{pl,i}}{V_i(t)} + \frac{V_{pl,i}}{V_{st}} \right\} \right] \quad (3)$$

を連立させて各プレート境界セルにおけるすべりの発展をシミュレートする。実際には、式(1)と(2)

を時間で微分し連立させ、速度の時間微分を得て、これを式(4)と連立させて、時間刻み幅可変の5次Runge-Kutta法により積分している。

ここでの変数の詳細はHori(2006)に譲るが、式(2)のように摩擦がすべり速度 V_i と状態変数 Θ_i

(その時間発展は式(3)に従う) との関数となっており、 σ_i は法線応力で、式(2)の右辺第2項は摩擦係数となっている。速度と状態に依存する摩擦構成則と言われる所以である。また、ここで、

a_i, b_i, L_i は、各セル i に与える摩擦特性をコントロールするパラメータで、前者2つのパラメータの差が正(負)だと速度強化(速度弱化)を示し、すべり速度が増すと摩擦が増える(減少する)。

実験データから、これらのパラメータは温度(すなわち深さ)依存を示すパラメータであることが分かっている。通常、沈み込み帯での温度構造を考慮して、プレート境界の地震発生域の深さに負の値を、浅部と深部の安定すべり領域に正の値を与えるといったように、主として深さ方向に摩擦パラメータの分布を与え、シミュレーションを行っている。

プレート境界を小さなセルに分割すると書いたが、この分割の影響が地震サイクル計算結果に影響を及ぼさないようにするには、分割サイズ h が、

$$h = h^* = cGL / \sigma(b - a) \quad (4)$$

となる必要がある(Rice, 1993) (ここで、 c は分割するセルの形に依存する定数)。通常用いられているパラメータ範囲では、セルサイズは1km以下となる。

式(2)と(3)から分かるように、問題の非線形性による繰り返し計算の必要性に加えて、分割セルサイズの要請から来る、セル数の多さにより、地震発生サイクルシミュレーションは、多大な計算時間とメモリを要する、大規模計算となる。

3 H-matrices (階層型行列) 法の適用

前セクションで述べたように、実際的な大規模マルチスケールシミュレーション問題に取り組むには、コードの省メモリ化・高速化が必須である。

式(2)に見られる、すべり応答関数とすべりの行列・ベクトル積

$$\sum_j K_{ij}(\delta_j(t) - V_{pl,j}t) \quad (5)$$

の部分（またはその時間微分したもの）の省メモリ化・高速化を考える。分割したセルの数を N とすると、これには、 $O(N^2)$ のメモリおよび演算回数を要する。この行列・ベクトル積の演算に **H-matrices** 法を用いて、省メモリ化・高速化を図る。

H-matrices とは、密行列を階層的な行列に分解し、各小行列を低ランク行列で近似したもので、密行列を有効に圧縮した元の行列に比べて疎な近似行列表現である (Börm et al., 2009)。この構造に基づき、行列ベクトル積などの行列演算を小さなメモリ量で高速に行うことができる。なお、**H-matrices** 作成および演算に必要なライブラリー (**HLib**) は、マックスプランク研究所から公開されている (<http://www.hlib.org/hlib.html>)。

地震サイクルシミュレーションコード **RSGDX** (Hori,2006)は、 $N \times N$ すべり応答関数行列の計算を行う部分とこの行列を入力して各セルにおけるすべり発展を計算する部分に分かれている。まず、**HLib** を用いて、すべり応答関数行列を **H-matrices** 表現により圧縮して出力するように改良した。この部分は、並列化されていない。従って、**T2K** オープンスーパーコンピュータシステムでは、1 ノードの共有メモリで使用できるのは 28GB なので、現状では圧縮効率にもよるがおよそ $N=1,900,000$ セルくらいまでの計算が上限となる。これに対し、すべり発展を計算する部分は並列化を行っている。以下では **64PE** を用いて計算を行っている (Ohtani et al., 2011)。

半無限均質弾性媒質中に傾斜角 10° の平面プレート境界 (600km x 240km) を設定し、 $N=32,000$ 個の 3 角形セルに分割した際のすべり応答関数行列を例に、**H-matrices** 作成の手順を述べると以下ようになる：

1) セル番号の並び替え：できるだけ距離の近いセル同士が連なるように、セル番号を並び替える。

2) η -admissibility 条件

$$(\min\{\text{diam}(Q_r), \text{diam}(Q_s)\} \leq \eta \text{dis}(Q_r, Q_s))$$

による小行列への分割： $n \times n$ 小行列 M の n 個の

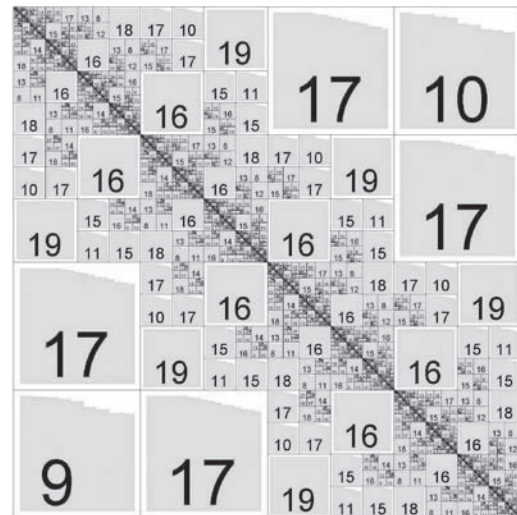


図 1 $N \times N$ ($N=32,000$)すべり応答関数の **H-matrices** 表示。各小行列内の数字はランクを表す。

レシーバおよび n 個のソースセルに対応する領域 (Q_r および Q_s) の大きさを $\text{diam}(Q_r)$, $\text{diam}(Q_s)$ 、領域間の距離を $\text{dis}(Q_r, Q_s)$ とすると、この条件を満たしていなければ、 Q_r と Q_s 領域は近いとして更に小行列へ分割し、最小セル数 n_{\min} になるまで分割を続ける。

3) 低ランク行列での近似：各 $n \times n$ 小行列をランク $k (< n)$ の $n \times k$ 行列 A, B で $M = AB^T$ のように近似する。この際、相対近似精度 ϵ_{ACA} を満たすようにランク k を決める (ACA 法)。

4) 再圧縮：更に各小行列の特異値 (σ_i) を計算し、 $\sigma_i < \epsilon \sigma_1$ に対する小さな特異値を除きランクをさらに下げる。

$n_{\min}=16$, $\eta=2$, $\epsilon=10^{-4}$, $\epsilon_{ACA}=0.9\epsilon$ として、得られた **H-matrix** を図 1 に示す。分割された小行列内の数字はその小行列を近似したランクを示す。対角項あたりに位置する小行列は密行列、非対角項に位置する小行列のサイズは大きいが疎行列で近似しているのが分かる。その結果、メモリサイズは、オリジナルの 10.37GB から 0.22 GB に減少している。

上述したように、主として、 n_{\min} , η は **H-matrices** の構造を、 ϵ_{ACA} , ϵ は計算精度を決定するが、本報告では、 $n_{\min}=16$, $\eta=2$, $\epsilon_{ACA}=0.9\epsilon$ に固定して、まず ϵ の影響を $N=32,000$ の場合に調べた (Ohtani et al., 2011)。

摩擦モデルとしては上述の半無限均質弾性体

中に設置した傾斜角 10° のプレート境界面上に 2 つのアスペリティを置き、プレートを駆動させ、地震サイクルシミュレーションを実行し、アスペリティの中心におけるすべり速度をオリジナルプログラムによるものと比較して精度の検討を行った。その結果、 $\varepsilon=10^{-4}$ 以下に設定する必要があることが分かった。

次に、摩擦モデルを固定し、セルサイズを小さくして、セル分割数 N を増やし、メモリサイズと計算時間の N 依存性を調べた。H-matrices法を用いないオリジナルコードで、ある期間の地震サイクルの計算に要する時間は、すべり応答関数行列とすべり遅れベクトル積の計算から期待される $O(N^2)$ ではなく $O(N^3)$ となった。これは、地震サイクルのシミュレーションにおいて、微分方程式の積分には時間可変のルンゲクッタを用いているが、セルサイズが小さくなると系がスティッフになるので、時間幅が小さくなり多くの時間ステップ数が必要となるためである。実際、時間ステップ数は N に比例し、行列・ベクトル積と併せて、 $O(N^3)$ となる。この時間ステップ数の変化はH-matrices法を用いた場合でも同じであるので、

10,000 回のすべり応答関数行列とすべり遅れベクトル積計算時間の N 依存性を調べた。

$\varepsilon=10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}$ に対して、 N を増やした時のメモリ容量および計算時間を、H-matricesを用いないオリジナルに比較して、図 2 に示す (Ohtani et al., 2011)。オリジナルコードでの計算では、これまで述べたように、必要なメモリ容量および計算時間ともに $O(N^2)$ で増加していく。これに対し、H-matrices法を適用したコードでは、メモリ容量は、ほぼ $O(N)$ の依存性を示す。ところが、計算時間については、 $N=128,000$ くらいまでは、 $O(N)$ で増加するが、それ以上多くなると、急に計算時間が増加する傾向を示す。

ここでは図に示していないが、図 1 のような H-matrices 表示を書いてみると、 $\varepsilon=10^{-4}$ の場合、 $N=128,000$ では、最外側の小行列のランクが 20 であるが、 $N=288,000$ では 98 となり急激に増加している。この急激なランクの増加が実際に何に起因しているかは現在のところ明らかでないが、この N あたりでの計算時間の急激な増加は、この最外側の小行列のランクの増加にあると思われる。

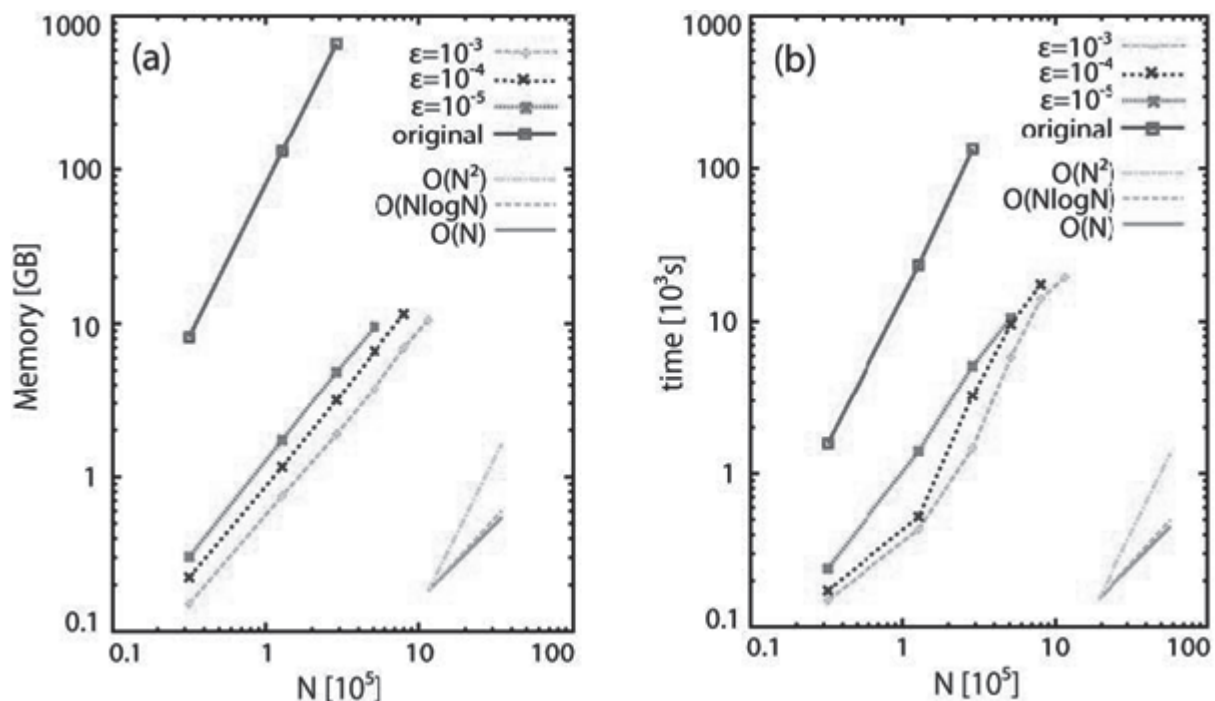


図 2 H-matrices法を用いないoriginalと $\varepsilon=10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}$ に対するメモリ量と計算時間に対するセル数 N 依存性比較のため、 $O(N), O(N \log N), O(N)$ 依存性を書き入れている。

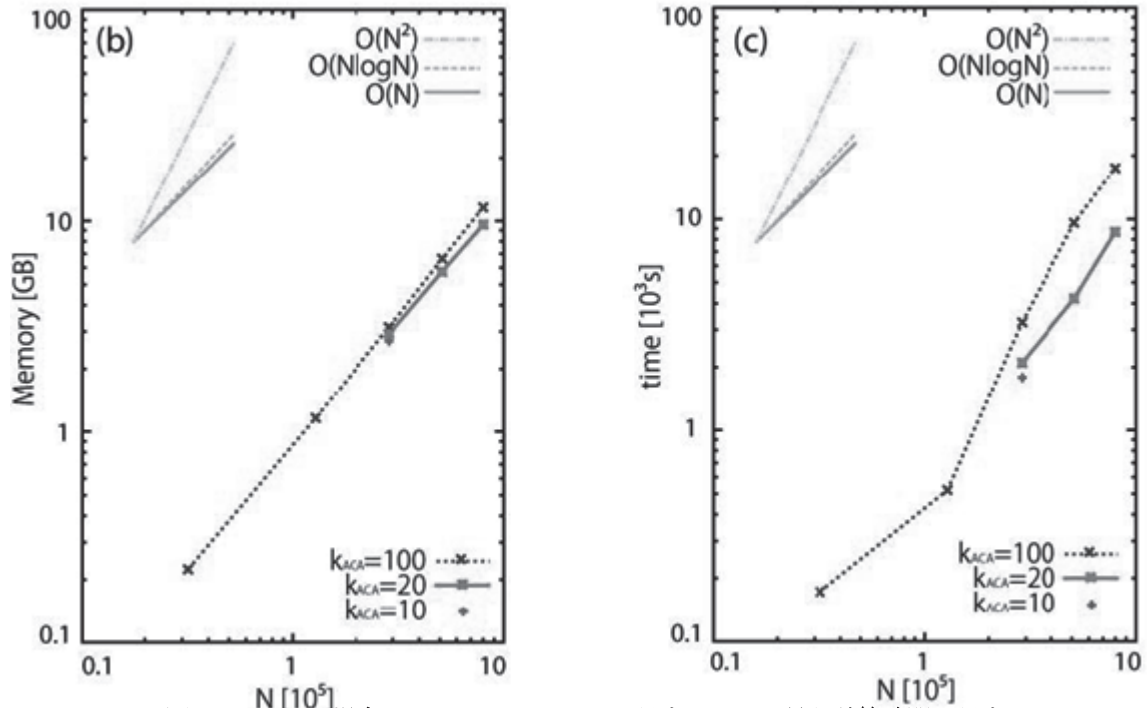


図3 $\epsilon=10^{-4}$ の場合で、 $k_{ACA}=100,20,10$ に対するメモリ量と計算時間に対するセル数 N 依存性比較のため、 $O(N), O(N \log N), O(N)$ 依存性を書き入れある。

実は、これまで述べてこなかったが、**H-matrices** を構築する際にもう一つパラメータ k_{ACA} を用いている。**admissible** 小行列のランクの決定は、主として ϵ_{ACA} によるが、それに加えて **admissible** 小行列の取り得る最大のランク k_{ACA} を指定している。これまでは $k_{ACA}=100$ を用いてきた。**admissible** 小行列の各要素に対応するソースセルと観測セルの距離は大きいと、その絶対値は小さい。**admissible** 小行列の近似精度を相対誤差で見積もっているため、応力評価と言う点ではランクを落としてもそれ程大きな誤差を生じないと期待される。

そこで $N=288,000$ 、 $\epsilon=10^{-4}$ の場合、 $k_{ACA}=10,20,40,60,80$ と変化させて、すべり速度の時間履歴を $k_{ACA}=100$ の場合（この場合はランクは ϵ_{ACA} で決まっている）と比較してどこまで落とせるか検討した。ここでは図に示していないが、その結果、 $k_{ACA}=20$ 以上であれば十分な精度を持っていることが分かった (Ohtani et al., 2011)。図3には、 k_{ACA} を変化させた時のメモリおよび計算時間を記しているが、十分な計算精度を持つ $k_{ACA}=20$ では、計算時間を $O(N) \sim O(N \log N)$ に抑えているのが分かる。

このように **admissible** 小行列のランクを抑えることで計算精度を保ちながら、計算時間を $O(N) \sim O(N \log N)$ に抑えることが可能であることが分かった。

謝辞：センターの中島・高橋両氏にはコードのチューニングおよび密行列の疎行列化手法についてお教えいただいた。また、富士通にはコードの高度化についてお教えいただいた。謝意を表します。

4 参考文献

- Börm, S., L. Grasedyck and W. Hackbusch, Hierarchical Matrices, Lecture Note, Max-Planck-Institut für Mathematik, 2006 中央防災会議、2003.
- Hori, T., *J. Earth Simulator*, 5, 8-19. 2006.
- Hori, T., et al., *Earth Planet. Sci. Lett.*, 228, 215-226, 2004.
- 平原和朗・光井能麻・堀高峰、日本地震学会 2009 年秋季大会、京都。
- Kato, N. and T.E. Tullis, *Geophys. Res. Lett.*, 26, 643-696, 2001.
- Kato, N., *J. Geophys. Res.*, 113, B06302,

- doi:10.1029/2007JB005515, 2008.
- Liu, Y.J. and N. Nishimura, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 30, 371-381, 2006.
- 大谷真紀子・平原和朗、日本地球惑星科学連合
2010年大会、幕張、2010.
- Ohtani, M., K. Hirahara, Y. Takahashi, T. Hori,
M. Hyodo, H. Nakashima, and T. Iwashita,
Procedia Computer Science, 4 1456-1465,
2011.
- Rice, J.R., *J. Geophys. Res.*, 98, 9885-9907,
1993.
- Yoshida, K., N. Nishimura and S. Kobayashi,
*International Journal for Numerical Methods
in Engineering*, 50, 525-547, 2001.

噴霧燃焼の超並列大規模数値シミュレーションの実現に向けて

黒瀬良一, 岩下武史¹, 張 会来², 小森 悟

京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻

¹ 京都大学学術情報メディアセンター

² 株式会社数値フローデザイン

1 はじめに

数 μm ~数百 μm 程度の油滴に微粒化された液体燃料が気相乱流中で蒸発, 燃焼反応する噴霧燃焼は, ガスタービンエンジンなどのエネルギー変換装置やロケットエンジンなどの推進装置をはじめ, 多くの工業装置で利用されている. 従って, このような工業装置の開発, 最適設計, および運転条件の選定を効率的に進めるうえで, 噴霧燃焼のメカニズムを明らかにし, その挙動の正確な予測を行うことは極めて重要である[1,2].

近年, 計算機性能の飛躍的な向上により, 高精度の流れの数値シミュレーション法である, ラージ・エディ・シミュレーション (LES) の噴霧燃焼場への適用が現実的になり, その精度の検証および詳細な燃焼特性の評価が行われるようになってきた [3-7]. しかし, 既往研究のほとんどは, 詳細化学反応や輻射の効果を簡略化もしくは無視しており, 精度の高い LES が実施されているとは言い難い. また, 噴霧燃焼の LES は計算機負荷が高く, 1 ケースあたり数日もしくは数週間もの計算時間を要するケースが多いため, 1 ケースあたり 1 日以内で結果がほしいという強い要望をもつ実用分野においては, 未だ有効に利用される状況には至っていない.

このような課題を解決する方法としては, 超並列大規模数値シミュレーションの採用が挙げられる. しかし, 噴霧燃焼の LES では, 連続相である気流と分散相である液滴運動の相互効果を正確に取り扱うオイラー・ラグランジアンカップリング法が不可欠であるため, この計算において並列化

効率が大幅に低下することが考えられる. また, 流れの圧力解法である, ポアソン方程式についても, 超並列条件下では並列化効率が急激に低下することが危惧されている.

そこで, 本研究では, 超並列大規模数値シミュレーションへの第一段階として, 既存の噴霧燃焼 LES コードのプロファイリングを実施することを目的とする. また, 超並列大規模計算に効果的なポアソン方程式の解法についても考察する. なお, 本研究では, 次世代スパコン (神戸の「京」) での利用も予定されている熱流体解析ソフト Front Flow/ red (FFR)を対象とする.

2 噴霧燃焼の数値シミュレーション

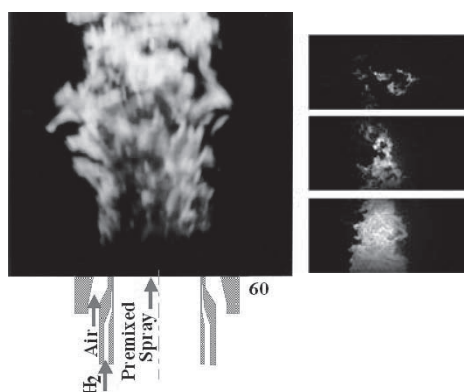
2.1 支配方程式

計算には, FrontFlow/red (FFR)を京都大学, (財)電力中央研究所および (株)数値フローデザインにより改良したコードを用いる.

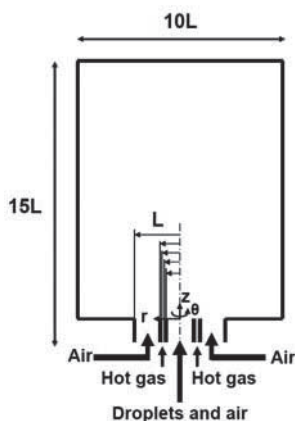
気相の支配方程式は, 質量, 運動量, エンタルピ, 混合分率, および反応進行変数の保存式であり, これらに LES 用のフィルタ操作を施す. 乱流燃焼モデルとしては, 輻射を含む油滴-気相間の熱移動を考慮可能な拡張 flamelet/progress-variable 法を用いる[8]. 油滴の挙動はラグランジェ的に解くことにより求め, 油滴の蒸発モデルには, 非平衡 Langmuir-Knudsen モデル[9,10]を用いる. 燃料は Jet-A (航空燃料用ケロシン) とし, 約 200 化学種, 1200 反応を考慮する. 本数値シミュレーション手法の詳細は別報[1,2,8,11]を参照されたい.

2.2 対象系

図1に計算対象とした噴霧噴流火炎の可視化写真、および計算領域を示す。この噴霧噴流火炎は、実際の噴霧火炎中での現象を実験室レベルで理想化して抽出するために考案された乱流噴流の予混合噴霧火炎であり、微粒化から着火までの距離を長くとることにより工業用バーナなどで見られる噴射ノズル近傍での微粒化過程の影響や保炎器後流に形成される循環流や大規模渦が極力排除されている [1]。バーナは三重管構造を有しており、中心管から微粒化された油滴と空気、二重管からパイロットバーナのための着火剤、三重管から空気を注入される。中心管から注入される液体燃料の質量流量は $0.045 \text{ kg-fuel/kg-air}$ (当量比は約 0.75)、噴流の断面平均速度 U_0 を 5.5 m/s 、空気温度は 300 K である。従って、バーナ半径および噴流の断面平均速度を基準としたレイノルズ数 Re は約 14,100 となる。



(a) 実験により観察される火炎と油滴分布



(b) 計算領域

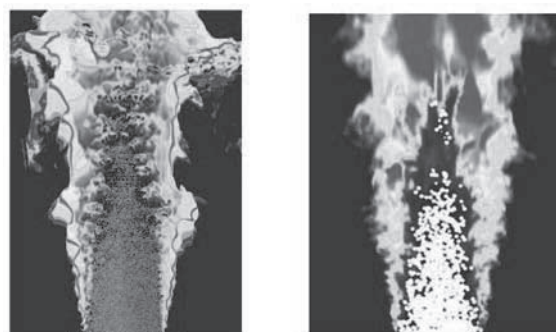
図1 計算対象とした噴霧噴流火炎

3 プロファイリングについて

本数値シミュレーションの実施条件を以下にまとめると。

セル数： 5500 万
 粒子数： 100 万
 並列数： 1024
 Step 数： 38700
 計算時間： 155 時間
 メモリ： 1.7TB

図2に燃料液滴と火炎温度の断面分布を 300 万セル、10 万液滴に対して実施した既往結果と比較して示す。バーナから供給された油滴が分散、蒸発し、乱流燃焼へと至る過程が模擬されている。また、300 万セルの計算に比べて、今回の 5500 万セルの方が、乱流変動およびそれに伴う火炎の揺らぎを詳細に示していることも確認できる。



5500 万セル 300 万セル
 図2 噴霧噴流火炎のガス温度と油滴分布

5500 万セルの本計算のプロファイリングを行った結果、解析全体の実効効率は 0.37%、全経過時間に対する通信待ち時間の割合は 17.4% であり、全計算時間の内、「MPI 通信に関わるシステムモジュール」に約 60%、「粒子追跡ソルバ」に約 20%、「圧力ソルバ」に約 10%、「速度ソルバ」に約 4% かかっていることがわかった。ここで、全計算時間の内、「MPI 通信に関わるシステムモジュール」に約 60% もかかっている理由については、現在ではまだ原因ははっきりしていないが、

```

「do icom=1,ncomp
  PYS(:,icom,2)=PYS(:,icom,1)
enddo 」
や
「DYDTP(:,:)=0.d0 」

```

のように「(:)」を使用しているところで時間がかかっていることがわかった。この原因については現在調査中であるが、DO ループに置き換えることにより、わずかに改善されることが確認できた。

4 ポアソン方程式の解法について

上述したように、現状では「圧力ソルバ (ポアソンソルバ)」の負荷は 10%と高くないが、最終的な目標である数万並列の計算ではその負荷が急激に上昇することが予想される。これは、既存の FFR に実装されているポアソンソルバで利用されている BiCG-STAB 法や ICCG 法は問題の規模が増大するにつれて収束性が悪化することが知られているためである。そこで、課題プログラムにおいて将来的にさらに大規模モデルを扱うことを想定し、線形ソルバ部分の機能追加を行った。即ち、BiCG-STAB 法や ICCG 法による求解と異なり、理想的な状況では問題サイズに依存しない反復回数を実現するマルチグリッド法による求解を可能とした。具体的な実装手段として、分散並列環境で国際的に広く使われている Hypre パッケージ内の BoomerAMG を当該プログラムと連携するためのインターフェース設計を行い、Fortran による実装を行った。

図 3 に、約 300 万自由度のテストモデルを用いた場合の BiCG-STAB 法と BoomerAMG の求解時間の比較について示す。この図に見られるように、1 プロセスの逐次実行では、AMG ソルバの優位性が大きい。これは、BiCG-STAB 法では反復回数が約 400 程度となっているのに対して、AMG ソルバのサイクル数は 24 であり、マルチグリッド型解法の収束性の優位性によるものである。しかし、8 プロセス使用時には両ソルバの性能は同程度となる。これは、分散 AMG ソルバでは、コースニングやスムージングの並列処理が難しく、

逐次型の AMG ソルバと比べて収束性が劣化することによる。一方、前処理なしの BiCG-STAB 法は原理的には収束性の劣化を伴うことなく並列化が可能である。しかし、ポアソン方程式に対する反復解法の適用事例によると、非マルチレベル型の解法では、問題の自由度の $1/3 \sim 1/2$ 乗に比例して収束性が劣化することが報告されている。本研究における AMG ソルバの有用性については、今後より大規模な問題での検証が必要と認識しているが、上記を考えると、マルチレベル型の解法は必要であり、その分散メモリ環境での並列化が課題と考えられる。

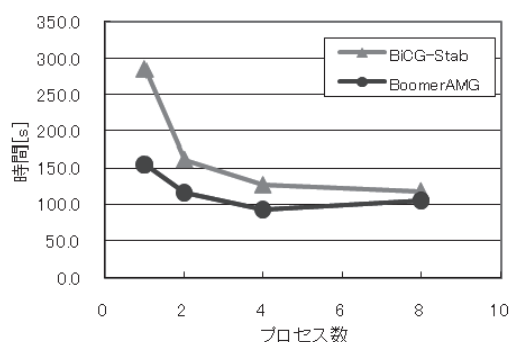


図3 BiCG-STAB 法と BoomerAMG の求解時間の比較

5 おわりに

本研究では、超並列大規模数値シミュレーションへの第一段階として、既存の噴霧燃焼 LES コードのプロファイリングを実施するとともに、ポアソン方程式の解法についても考察を行った。得られた主な知見および今後の課題は以下の通りである。

- (1) プロファイリングでは、MPI 通信の負荷が最も高い値を示す。今後、この原因を解明する必要がある。
- (2) オイラー・ラグランジアンカップリング法の計算には約 20%が費やされる。今後、効率化について検討を行う必要がある。
- (3) 圧力解法 (ポアソン方程式の解法) には約 10%が費やされる。AMG ソルバの有用性については、より大きな規模の問題で確認を行っていく必要がある。

(4) 次世代スパコン「京」では、10億セル、1万並列以上の計算が期待される。今後は、さらなる超並列大規模計算への拡張および改良を進めていく必要がある。

なお、本研究の一部は、文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業『「HPCI 戦略プログラム」研究 分野4 次世代ものづくり』の一環で実施されたものである。本研究の詳細については以下のホームページを参照されたい。

<http://www.fluid.me.kyoto-u.ac.jp/members/kurose/hpci.html>

参考文献

- [1] 黒瀬良一, 赤松史光: 「噴霧燃焼の実験と数値シミュレーション」, 日本燃焼学会誌, vol. 50, pp. 206-214 (2008).
- [2] 黒瀬良一: 「乱流混相燃焼」, 日本燃焼学会誌, vol. 52, pp. 302-310 (2010).
- [3] Kurose, R., Desjardins, O., Nakamura, M., Akamatsu, F., and Pitsch, H.: Numerical simulations of spray flames, *CTR Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford University*, pp. 269-280 (2004).
- [4] Moin, P., and Apte, S.V.: Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors, *AIAA Journal*, vol. 44, pp. 698-708 (2006).
- [5] Boileau, M., Pascaud, S., Riber, E., Cuenot, B., Gicquel, L. Y. M., Poinso, T.J., and Cazalens, M.: Investigation of two-fluid methods for large eddy simulation of spray combustion in gas turbines, *Flow Turbulence and Combustion*, vol. 80, pp. 291-321 (2008).
- [6] Patel, N., and Menon, S.: Simulation of spray-turbulence-flame interactions in a lean direct injection combustor, *Combustion and Flame*, vol. 153, pp. 228-257 (2008).
- [7] Ihme, M., and Pitsch, H.: Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation, *Physics of Fluids*, vol. 20, 055110 (2008).
- [8] Fujita, A.: *Numerical simulations of spray combustion and droplet evaporation*, PhD thesis, Kyoto University, 2011.
- [9] Miller, R. S., Harstad, K., and Bellan, J.: *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 24, pp. 1025-1055 (1998).
- [10] Miller, R. S., and Bellan, J.: *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 384, pp. 293-338 (1999).
- [11] 森合秀樹: 「航空機用ガスタービンエンジン燃焼器内部における噴霧燃焼場の実験と数値シミュレーション」, 京都大学博士論文, 2011.

原子・分子過程を取り入れたプラズマの複雑性と構造形成

岸本 泰明

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻

レーザー方式による核融合プラズマや自然界や実験室のプラズマでは、様々な状態にある物質が、複雑な原子・分子過程や衝突緩和過程を通して非平衡・非定常な状態を作り出され、多彩な時空間構造やダイナミクスを創出する。我々は、このような複雑過程が関与した複雑なプラズマ現象を解明することを目的に、原子・分子過程や荷電粒子間の衝突・緩和過程などの基礎過程を自己無撞着に取り入れた電磁粒子コード (EPIC3D) を開発している。放電・雷過程やレーザーに照射された固体や気体の電離過程などは典型例であり、T2K (京都大学メディアセンター) を使用した大規模シミュレーションにより、これらの過程を解明した。本コードは、プラズマ粒子数が時間的に変化するとともに、空間的に不均一性の高い非定常状態が生成されるため、不可分散が極めて高いシミュレーションとなる。そのため、コードの並列化においては、京都大学学術情報メディアセンターで開発された領域分割型動的負荷分散アルゴリズム (OhHelp) の導入を進めている。

1 研究背景

レーザー方式による核融合プラズマや自然界のプラズマ、実験室・産業応用のプラズマに広く目を転じると、凝集相、気相、クラスターなど様々な状態にある物質が、多彩な原子・分子過程や衝突緩和過程を通して、非平衡・非定常なプラズマ状態を作り出し、多彩な構造を創出する。そのような原子・分子過程が作り出す複雑なプラズマ現象を解析するコードとして、原子・分子過程や粒子間の衝突・緩和過程や輻射過程などの基礎過程を自己無撞着に取り入れた拡張型3次元電磁粒子コード (EPIC3D : 3-Dimensional Extended Particle based Integrated Code) を開発してきた [1,2]。

EPIC3D では、荷電粒子間の衝突・緩和過程モデルとして、衝突前後の運動量、およびエネルギーを相対論的に厳密に保存する pairing 法を、モンテカルロ法と併用して用いている[2]。これにより、電子の平均自由行程に対して温度勾配のスケール長が同程度となり、Fick の法則 (拡散近似) が成立しない状況下での非局所熱伝導過程が正しく再現することができる。また原子過程に関しては、電磁場によるトンネル電離過程と電子衝突による電離過程が実装されている。電子衝突による

電離過程に関しては、衝突緩和過程に pairing 法を使用していることを利用して、衝突緩和で用いた電子・原子 (イオン) の pairing を用いている。ただし、3 体再結合過程については、3 対の pairing が必要なことや、衝突前の2つの電子のエネルギーをパラメータとする断面積の入手が容易でないことから、今後、適切なモデル化が必要である。また、トンネル電離および単一・多光子吸収電離による光電離過程も実装されており、再結合過程・内部励起については今後導入予定である。Table 1 に、導入されている原子過程 (予定を含む) を示す。

本研究では、同様に「超大規模数値計算系応用分野」の枠組みで、EPIC3D の高精度化を行うとともに、並列最適化を行った。さらにそのコードを用い

物理過程	要因	素過程	
電離過程	光電離過程	トンネル電離	単一・多光子吸収電離
	電子衝突	外殻電離	内殻電離
再結合過程	電子衝突	放射性再結合	2電子衝突再結合
		3体衝突再結合	電子付着負イオン生成
内部励起過程	電子衝突		
分子過程	電子衝突	分子解離	イオン対生成

Table 1: Atomic process installed and/or planned atomic and molecular process.

ることで、電離過程を伴った高強度レーザーとクラスターとの相互作用シミュレーション、および放電・雷過程の突発的なダイナミクスと構造形成のシミュレーションを行った。これらの現象は、中性媒質がプラズマ状態へ移行する際の一般的な状態として位置づけられる。このような原子過程とそれに伴うプラズマ生成過程の素過程を明らかにすることで、それらの特性を生かした応用研究（放電・雷過程における突発性の制御、高強度粒子・X線源開発など）を推進する。

尚、EPIC3Dでは、通常のプラズマ粒子コードと異なり、プラズマを構成する荷電粒子数は、電離・再結合過程を通して時々刻々変化することから数値雑音レベルが高くなり、十分な空間メッシュ数と粒子数が必要となる。また、それらの粒子の生成・消滅に伴って、計算負荷も領域内で一般的に局在するとともに時間変化することから、負荷分散などを考慮した並列化が将来的に必要なことになる。そのため、コードの並列化においては、京都大学学術情報メディアセンターで開発された領域分割型動的負荷分散アルゴリズム (OhHelp) の導入を進めている。

2-1 高強度レーザーとクラスターの相互作用シミュレーションの実現

原子クラスターは少数多体系として興味深い研究対象であり、特に高Z物質からなるクラスターとレーザーとの相互作用では、表面の存在に起因した分極モードなど、様々な新奇な物性が出現する。このようなクラスターに高強度レーザーを照射することにより、高エネルギーの多価イオンの生成や粒子加速、クラスターからの高次高調波や高輝度X線、また高強度・短パルスの中性子源や核変換など、様々な応用研究が考えられている [3-5]。

本研究においては、EPIC3D を用いて高強度レーザーと炭素クラスターの相互作用とそれに伴う

高エネルギーイオンの生成の大規模シミュレーションを行い、クラスターの初期半径に対する加速エネルギーの依存性を調べ、特定なクラスターサイズにおいて加速効率が格段に増大する現象を見出すことに成功した。

Fig. 1 の上段は、電子密度およびイオン密度の各時刻における空間分布を示している。100[fsec]では、クラスターからの電子の放出に伴ってイオン膨張が起り、その後、クラスターは小さくなり、500-700[fsec]ではクラスター核が消失して均一なプラズマが生成される。一方、Fig. 6 の下段は、クラスター半径が $a=200$ [nm], 500 [nm] の場合の各時刻における電磁場強度の空間分布を示している。 $a=200$ [nm] の場合には、クラスターは早い時刻で消失している一方、 500 [nm] の場合には、クラスターによって電磁波が散乱され、レーザーが進入しない遮断密度を上回る密度領域が増大している様子がわかる。

Fig. 2 は、異なったクラスター半径に対する最大の加速エネルギーを示している。 62.5 - 125 [nm] では、

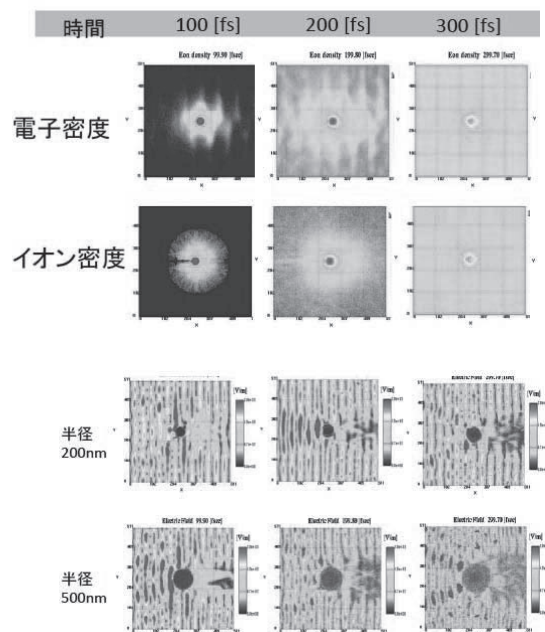


Fig. 1: Density profiles of ion and electron in the cluster with $a=200$ [nm] (upper) and the profiles of magnetic field intensity in the clusters with $a=200$ nm $a=500$ nm (lower).

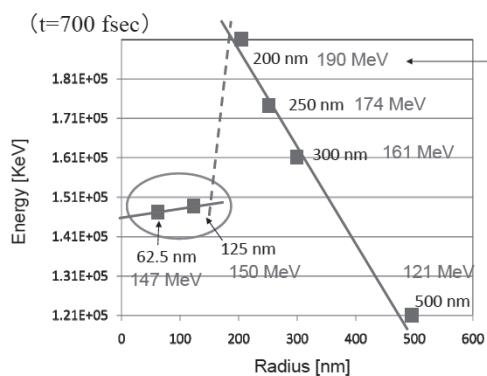


Fig. 2 : Maximum energy for the accelerated ion in the cluster with different cluster radius.

イオンエネルギーの最大値は 150[MeV]であるが、125[nm]-200[nm]において急峻（不連続的）に増大し、200[nm]では 190[MeV]まで加速される。この値は、核子あたり 18[MeV]となり、最近の実験結果と大きくは矛盾しない値である。また、クラスター半径がさらに増大するとイオンエネルギーの最大値は減少することがわかる。これらの結果から、最大のイオン加速を得るためには、エネルギーの最大値が存在することが明らかになった。

2-2 放電・雷シミュレーションの実現

また本研究においては、EPIC3D を用いて、放電・雷過程[5-9]とそれが関与する応用研究を中心に、原子・分子過程や衝突・緩和、輻射過程が本質的役割を果たすプラズマの生成過程における相変化や臨界現象の関わる物理機構の解明と理論・シミュレーションモデルの構築・体系化を行った。特に、プラズマへの相変化の過程を ①初期状態の形成（初期値の科学） ②トリガーと臨界ダイナミクス（引金・連鎖の科学）、③トリガー後の構造形成のダイナミクス（構造発展の科学）の三過程に分類し、各過程での物理過程とその関連性を明らかにすることにより「突発性の科学」を中心とした学理の構築を行った。

Fig. 3 は、ネオン(Ne)の高圧ガス(密度：

$4.6 \times 10^{20} [\text{cm}^{-3}]$)に静電界($1.1 \times 10^7 [\text{V/cm}]$)を印加したとき、初期に配置した Ne^{+2} の微小な電離スポットから放電が進行する様子を示した EPIC3D のシミュレーション結果である。初期に配置した電離スポットから、高電界によって線状の放電経路が生成され、それが左右に発展している様子が分かる。プラズマは、中央に形成された放電路から左右に急速に広がっていく様子が分かる。

なお、並列化は y 方向に 1 次元 MPI を使用して行っている。

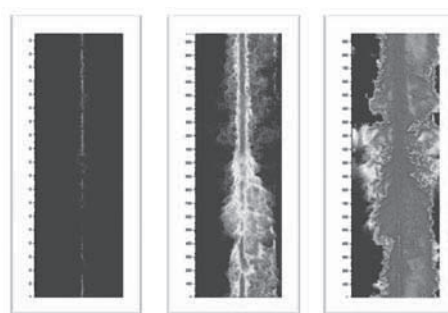


Fig. 3 : Density profile of Ne ion discharged by strong external electric field at $t=15[\text{psec}]$, $20[\text{psec}]$, $25[\text{psec}]$.

3 まとめと今後の課題

本研究では、プラズマの粒子モデルをベースに、原子過程や衝突緩和過程を取り入れた粒子コード(EPIC3D)の開発を行い、これにより、高強度レーザーとクラスターやなどの物質との相互作用、および、圧縮気体中の放電・雷過程のシミュレーションを行った。いずれも初期状態は大部分中性であり、レーザー場や空間電界、あるいは電子衝突などに起因する原子過程を通してプラズマが生成される。その過程において、ミクロな原子過程や衝突緩和過程と、分極場やプラズマ波などに代表される集団運動を伴ったマクロなプラズマ過程が相乗的に相互作用することにより、新しい時空間構造を持った現象が創出される。これまでプラズマ物理学における原子・分子過程は、プラズマ・壁相互作用やプロセスプラズマ分野で精緻な研究として発展してきた。一方、放電・雷過程は、長い研究の歴史にも関わらず、必ずしも原理的な

解明には至っていない。放電・雷過程がこれまでのプラズマ研究と大きく異なる点は、「原子・分子過程と云ったマイクロな過程が、(摂動的ではない)マクロな全体構造や構造変化そのものを決定している点」である。構造の起源とも密接に関連したこの「古くて新しい問題」に今シミュレーションコードが重要な役割を果たしていると言える。

現在 EPIC3D への領域分割型動的負荷分散アルゴリズム “Ohhelp” の導入を行うためのコード整備を進めてきた。このため、EPIC3D の 3 次元領域分割化を行うとともに、電磁場計算や粒子衝突計算、運動方程式や電流密度計算を Ohhelp 仕様に変更する作業を進めてきた。これらの成果をベースに、今後本格的な Ohhelp の導入は行う予定である。

参考文献

- [1] [岸本泰明 (編集) : 「プラズマの非局所輸送現象と様々な構造形成」プラズマ・核融合学会誌 **78** (No.9) 857-912 (2002)、小特集 「異なった時空間スケールが関与する多階層シミュレーション研究—現状からの展望—」プラズマ・核融合学会誌 **79** (No.5) 460-463(2003)、及び「乱流と層流が混在した多階層・複合系プラズマ研究の展開」, 478-488 (2003)
- [2] 岸本泰明, “物質の電離ダイナミクスと構造形成のシミュレーション”, プラズマ・核融合学会雑誌 **84**, 484 (2008).
- [3] Y. Kishimoto: Femtosecond (edited by M. Uesaka, Imperial College Press/World Scientific (2005)): 2.4.5. Neutron (135-142).
- [4] T. Nakamura, Y. Fukuda and Y. Kishimoto, “Ionization dynamics of cluster targets irradiated by x-ray free-electron-laser light”, Phys. Rev. A **80**, 053202 (2009).
- [5] Y. Fukuda, Y. Kishimoto, T. Masaki and N. K. Yamakawa, “Structures and dynamics of cluster plasmas created by ultra-short intense laser fields”, Phys. Rev. A **73**, 031201(R)/1-4 (2006).
- [6] T. Masaki and Y. Kishimoto, Journal of Plasma and Fusion Research **81** (10), 643-644 (2005).
- [7] Y. Kishimoto and T. Masaki, J. Plasma Physics **72** (part 6), 971-974 (2006).
- [8] V.P. Pasko, et al., Nature **416**, 15 (2002)

ジャイロ運動論に基づいた位相空間 5 次元ブラソフ方程式による

乱流輸送のシミュレーション研究

今寺 賢志

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻

磁場閉じ込め核融合プラズマでは、密度や温度勾配が自由エネルギーとなって引き起こされる不安定性の非線形発展の結果、系が乱流状態に移行し、複雑な輸送現象が現出する。このようなプラズマが関与した様々な物理現象を解明することを目的に、我々は速度分布関数を位相空間で直接的に解く Vlasov コードの開発を行った。本稿では、その並列化効率の改善成果、数値スキームの高精度化、およびそのシミュレーション結果について報告する。

1 研究背景

中性粒子ビーム加熱等によってプラズマ中にイオン温度分布の急峻な勾配が形成されると、それが自由エネルギー源となって微視的な揺らぎが発生し、乱流に発展する。そのような乱流がプラズマ中に異常輸送をもたらす、自己組織的に背景温度分布の緩和を引き起こすと考えられている。さらにこれらのプラズマは、「多階層」という言葉でしばしば形容されるように、幅広い時間・空間スケールの素過程を内包し、かつ、それらは互いに連結している。

このような磁場閉じ込め核融合プラズマを再現する方法の一つとして、実空間 3 次元 (x, y, z) 、速度空間 2 次元 (v_{\parallel}, μ) のジャイロ運動論的 Vlasov シミュレーション [1] がしばしば用いられる。このシミュレーションの特徴としては、ジャイロ運動に伴う旋回位相の次元が 1 つ減っていることで、速度空間が 2 次元に低減されていること、さらに旋回位相の共役変数である磁気モーメント μ に関する微分演算子を含まないため、磁気モーメント μ は定数パラメータとしてのみ含まれていることが挙げられる。一方で、ジャイロ運動よりも十分ゆっくりした運動論的効果や、有限ジャイロ半径による場の平均化効果などの物理的に重要な要素が包含されており、プラズマ乱流、特にドリフト波に起因する乱流輸送現象を解析する上で都合の良い構成となっている。

しかしながら、その計算精度は用いる数値計算手法に依存し、位相空間 5 次元の運動を追跡するため大規模な計算容量や計算時間はなお必要であり、高い並列化効率を有するコードの開発は研究の必要条件となる。

我々は、2 次元 $x-y$ 領域分割法とそれに特化した Poisson solver 用の高速フーリエ変換を実装した位相空間 5 次元ジャイロ運動論的 Vlasov コード (以下 GK5 コード) を開発し、乱流輸送の解析を行ってきた [2-4]。しかしながら、分布関数の袖部通信処理が大規模計算においてボトルネックとなり、大規模計算での良いスケールアップが望めない。

そこで本研究では、京都大学学術情報メディアセンター、並びに富士通株式会社の協力の基、これまで開発してきた GK5 コードの高度化改善を行った。具体的には、3 次元領域分割法とそれに特化した高速フーリエ変換を実装し、 10^4 のプロセス数に対しても十分なスケールアップの確保が可能なコードの改良を行った。また、現在用いている保存型 IDO (Interpolated Differential Operator) を改良した「多重拘束マルチモーメント法」を新たに開発し、Vlasov コードへの実装を試みた [5]。さらにそのコードを用いて、グローバル乱流輸送シミュレーションを行い、ミクロスケールの乱流とマクロスケールの温度分布緩和過程、さらには、帯状流に代表されるメゾスケールの揺らぎの相互作用を解析した [2, 3]。本稿では、これらの 3 点について報告を行う。

2 3次元領域分割による並列化効率の改善

GK5 コードでは、実空間3次元 (x, y, z) ジャイロ運動論的 Poisson 方程式を高速フーリエ変換によって解いているため、少なくとも実空間3次元 (x, y, z) のうち、1次元は領域分割されていない必要がある。そこで今回は、3次元 $x-y-v_{\parallel}$ 領域分割を導入し、同時にそれに関連したメモリアクセス効率の改善を行った。本研究課題において、改善した主な内容は以下の通りである。

- (A) 大規模計算における袖部通信処理の絶対量を減らすことを目的として、3次元 $x-y-v_{\parallel}$ 領域分割法を導入する。
- (B) 大規模計算において1CPUに割り当てられる各次元の典型的なメッシュ数を考慮して、メモリ配列宣言順序、並びにループ順序の入れ替えを行う。
- (C) 分布関数の時間発展を行った直後に、袖部のバッファリング処理とアンバッファリング処理を行うことで、キャッシュ上にあるデータを有効利用する。また、このときに最内側の次元である平面単位による処理を行うことで、演算ループの処理効率を上げる。
- (D) 3次元 $x-y-v_{\parallel}$ 領域分割を導入した際の、袖部のバッファリング処理とアンバッファリング処理におけるメモリアクセス効率の改善を目的として、 $x-y$ 方向データの袖部通信処理と v_{\parallel} 方向データの袖部通信処理を連続させ、途中のアンバッファリング処理を止める。

Fig. 1 は、64 プロセスから 1024 プロセスを用いて行った大規模計算における(a)処理全体の並列化効率、(b)(Vlasov 計算パート)+(袖部通信処理パート)の並列化効率を、64 プロセスの時を 1 と示している。ただし、測定モデルとしては、 $(N_x, N_y, N_z, N_{v_{\parallel}}, N_{v_{\perp}}) = (256, 256, 8, 256, 8)$ を用いており、およそ1GBのメモリ量に相当する。1024 プロセスを用いた場合では、従来のコードと比較して改良後は、(a)において約 1.75 倍、(b)において約 1.98 倍改善され、3次元 $x-y-v_{\parallel}$ 領域分割の導入の有効性が示された。

また、L3 キャッシュミス率も処理全体において

約 24.8%削減されていることがわかり、キャッシュがより有効利用されていることが示された。

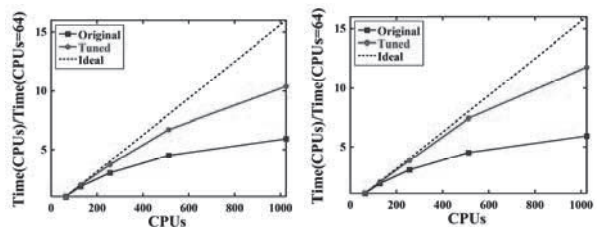


Fig. 1: Scalability of the original and tuned 5D gyrokinetic Vlasov code. (a) Scalability of total calculation and (b) that of Vlasov + boundary setting parts are shown. Ideal line is also shown as a reference.

3 多重拘束マルチモーメント概念による Vlasov コードの再構築

Vlasov シミュレーションの数値計算手法として、これまでの歴史では、有限差分法や有限体積法を基礎とした解法が広く用いられてきた。それらは、空間微分や数値流束を評価する上で、物理的意味とは独立に、離散化したグリッド値をいかに「滑らか」に結ぶかを第一義の拘束条件としている。しかしながら、保存型 IDO 法で得た着想を基に、支配方程式に基づいて物理的に意味のある拘束条件の下で離散化を行う「多重拘束マルチモーメント概念」を新しく提案し、そのスキームの実装を行った [5]。この概念では、複数の物理モーメント値を参照することで精度を確保し (Table 1)、さらにそれらを支配方程式のモーメントに沿って独立に時間積分することで、物理的に意味のある多重の拘束条件を課している。

	従来の差分概念	保存型 IDO 法の概念	多重拘束マルチモーメント概念
独立変数	グリッド値のみ	グリッド値とグリッド間積分値	グリッド値とグリッド間モーメント値
精度の向上	参照する区間を拡げる	参照する区間を拡げる	参照するモーメントの次元を上げる
急峻な構造の捕捉	3次精度の場合 	2次精度の場合 	4次精度の場合

Table 1: Comparison between the concepts of the conventional FDM, IDO-CF and Multi-Moment scheme.

Fig. 2はFourier解析によって求められた1次風上、3次風上、保存型IDO法、マルチモーメント法の1タイムステップあたりの(a)振幅の減衰率、及び(b)位相誤差を表している。マルチモーメント法は、高波数まで非常に精度よく解けることがわかる。

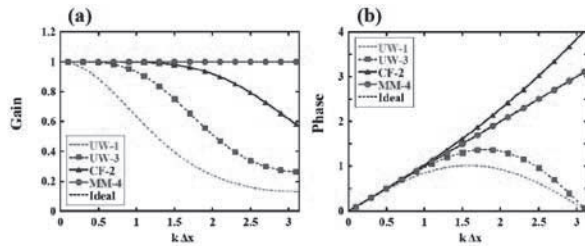


Fig. 2: (a) Gain and (b) phase errors of different schemes for 1D linear transport equation. The red curve corresponds to the Multi-Moment scheme, other ones to the 1st-order upwind (orange), 3rd-order upwind (green), IDO-CF (blue), and the ideal phase (black), respectively.

Fig. 3は、2次元鍵型分布の剛体回転を100周行った結果を、3次風上差分法、保存型IDO法と比較して示している。3次風上差分法の16分の1、保存型IDO法の4分の1のメッシュ数しか用いていないにもかかわらず、100周後も初期の構造が高精度で捉えられていることがわかる。この結果は、本スキームが微細構造の保持に極めて優れており、数値散逸によるエントロピーを低減し、エントロピーを指標関数とした後述の解析がより正確に行えることを示唆している。

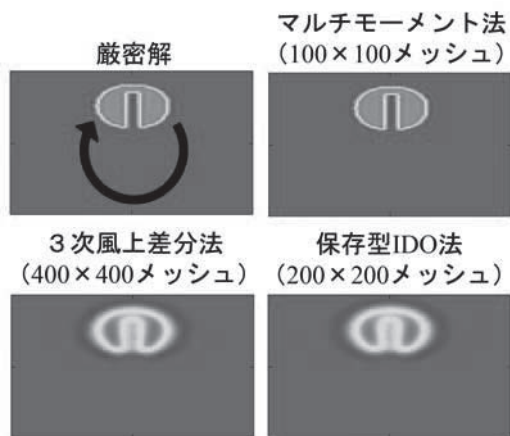


Fig. 3: Contour view of the solid-body in the Zalesak problem after one hundred anticlockwise rotations simulated by using 3rd-order upwind, IDO-CF and Multi-Moment schemes. Here, 400x400, 200x200, 100x100 mesh numbers and constant velocity are assumed, respectively.

4 温度分布緩和を伴う乱流プラズマの大規模 Vlasov シミュレーションとエントロピーダイナミクスの解明

次に、上述のコードを用いて、核融合プラズマ中の微視的乱流、帯状流、及び温度分布緩和の関係を解析した [2, 3]。中性粒子ビーム加熱等によってプラズマ中にイオン温度分布の急峻な勾配が形成されると、それが自由エネルギー源となってイオン温度勾配モードと呼ばれる微視的な揺らぎが発生し、乱流に発展する。そのような乱流がプラズマ中に異常輸送をもたらし、自己組織的に背景温度分布の緩和を引き起こすと考えられている。一方、乱流が発生すると、乱流自身の非線形相互作用によって帯状流が自発的に生成され、それによって乱流が抑制されることが一般的に知られており、それが結果的に温度分布の緩和にも影響を及ぼすことが予測される。

そこで本研究では、この三者を関係付ける指標関数として、熱統計力学で用いられているボルツマンエントロピーを導入し、グローバルな系における新しいエントロピーバランス方程式を導いた。この方程式は、従来のエントロピーバランス方程式で記述されていた微細構造に起因した揺動エントロピーと、温度分布の緩和に伴うエントロピー生成だけでなく、帯状流生成に伴うエントロピー生成、及び揺動エントロピーの半径方向への伝搬によって構成されており、背景温度分布の緩和を伴う非局所乱流輸送を記述するモデルとして適している。

本研究ではさらに、前述の GK5 コードを用いて、このエントロピーバランスの解析を行った。Fig. 4は、揺動エントロピー生成(EP2)、熱流束(HF2)、帯状流生成(DF2)、揺動エントロピー流出(EC2)の空間分布を表している。不安定性が強いケースでは、まず線形時に温度分布の緩和を駆動源として揺動エントロピーが励起され(a)、それが avalanche 的な温度緩和の伝搬を伴って、非常に早い時間スケールで半径方向に進行していくことが示された (b, c)。一方で、エントロピーバランスの観点からは帯状流の寄与は十分に小さく、これは avalanche 的な輸送に対して帯状流がほとんど影響を与えないことを示唆している。一方、不安定性が弱いケ

ースでは、帯状流による寄与は比較的大きく、帯状流によって熱流束が分断され(d, e)、温度分布の大域的な緩和が局所的なものに遷移することが示された。この結果は、帯状流のシアと帯状圧力が同波数、同位相であることに対応しており、新たな物理関係を示唆している。

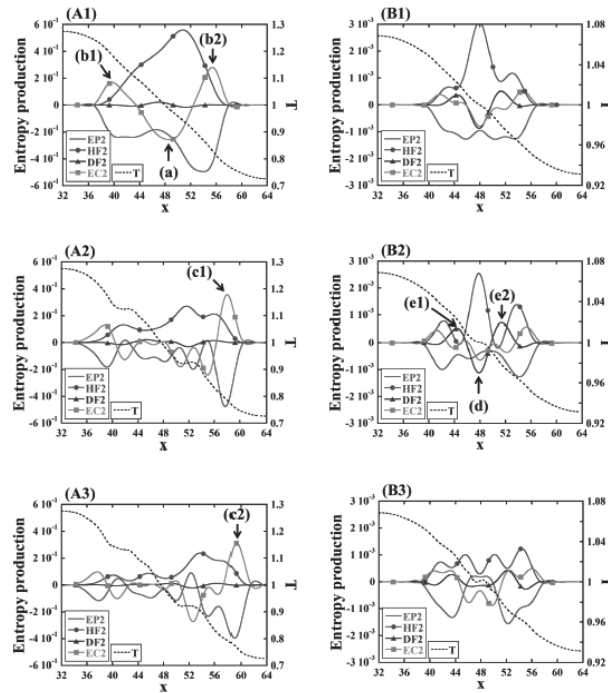


Fig. 4: Spatial profile of each term in the entropy balance equation. LHS figure shows that in the strong ITG instability case at different times (A1) 9.0×10^3 , (A2) 1.0×10^4 , (A3) 1.05×10^4 , whereas RHS one shows that in the weak instability case at different times (B1) 4.4×10^4 , (B2) 4.5×10^4 , (B3) 4.6×10^4 . Note that the temperature scale is different.

5 総括と今後の課題

本研究ではまず、京都大学学術情報メディアセンター、並びに富士通株式会社の協力の基、これまで開発してきた GK5 コードの高度化改善を行った。具体的には、3次元 $x-y-v_{\parallel}$ 領域分割法とそれに特化した高速フーリエ変換を実装し、 10^4 のプロセス数に対しても十分なスケージングの確保が可能なコードの改良を行った。その結果、処理全体の並列化効率が 1024CPU のケースで約 1.75 倍改善され、3次元 $x-y-v_{\parallel}$ 領域分割の導入の成果が確認された。また L3 キャッシュミス率も、処理全体において約 24.8%削減され、キャッシュの有効利用によるメモリアクセスの改善成

果も確認された。今後は、京都大学学術情報メディアセンターが開発した並列処理指向型のマルチグリッド法による Poisson solver を GK5 コードに実装することで、100 テラフロップス級の大規模計算における並列化効率の改善を試みる。

次に、支配方程式に基づいて物理的に意味のある拘束条件の下で離散化を行う「多重拘束マルチモーメント概念」を新しく提案し、そのスキームの実装を行った。その結果、マルチモーメント法を用いることで、数値散逸、並びに数値分散が十分低減されていることが分かった。この特性は位相空間 2次元 Vlasov シミュレーションでも確認され、波と粒子の相互作用に伴う位相空間の渦構造を、長時間にわたり捕捉可能であることを示した [5]。今後は、位相空間 4次元、及び 5次元のコードに多重拘束マルチモーメント法を導入することで、乱流シミュレーション、特にエントロピーを指標関数とした乱流シミュレーションにおける精度の向上を図る。

さらに、本コードを用いて温度分布の緩和に対する帯状流の影響を、エントロピーを指標関数として解析し [2, 3]、不安定性の強さによって帯状流の寄与が異なることを示した。今後は、衝突項や加熱項といった効果を含んだ開放系乱流シミュレーションへの拡張を試みる。

Reference

- [1] X. Garbet, Y. Idomura, L. Villard and T.-H. Watanabe, Nucl. Fusion **50**, 043002 (2010).
- [2] K. Imadera, Y. Kishimoto and J. Q. Li, J. Plasma Fusion Res. **5**, 019 (2010).
- [3] K. Imadera, Y. Kishimoto, J. Q. Li and T. Utsumi, J. Plasma Fusion Res. **5**, S2050 (2010).
- [4] J. Q. Li, K. Imadera, Z. X. Wang, P. Hilscher and Y. Kishimoto, accepted for the proceedings of SNA + MC-2010 (2010).
- [5] T. Kawano, K. Imadera, J. Q. Li and Y. Kishimoto, accepted for the proceedings of the International Toki Conference (ITC-20).

3次元2相流格子ボルツマン法による貯留岩の空隙ネットワーク及び フラクチャーにおける二相流動シミュレーション

村田澄彦

京都大学大学院・工学研究科・社会基盤工学専攻

炭酸ガス排出量の削減方法として研究が進められている地中貯留や既存油田からの原油回収率を増加させる原油増進回収法に対して、貯留岩の空隙ネットワーク及びフラクチャーにおける炭酸ガスや原油の残留挙動を明らかにし、炭酸ガスの貯留可能量及び原油の可採埋蔵量を評価するための基礎的な知見を得るため、格子ボルツマン法を用いた二相流動シミュレーションを実施している。今回、京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータ共同研究制度（プログラム高度化支援枠）の支援を得て、キャッシュミスの低減によるプログラムの高速化とIOの改善による大規模空隙ネットワークモデルへの対応を図った。ここでは、そのプログラムの高度化について報告を行うとともに、高度化されたプログラムを用いた計算例を紹介する。

1 はじめに

炭酸ガスの地中貯留（CO₂ Capture and Storage: CCS）は、最も有効な炭酸ガス排出量削減方法として注目されており、様々な研究が進められている。特に、我が国では火力発電所など大規模炭酸ガス排出源の近くに広く分布する層位トラップ構造の帯水層に炭酸ガスを圧入し、残留ガスとして貯留することが考えられている¹⁾。一方、近年の油価の高止まりを受けて、油田からの原油回収率を増加させる原油増進回収法（Enhanced Oil Recovery: EOR）の適用が積極的に進められるようになってきている。この場合、原油と同程度に粘性を高めたポリマー水溶液や界面活性剤水溶液、高温水蒸気、炭酸ガスなどが貯留層に圧入される。CCSやEORにおいては、貯留層の空隙ネットワークや主たる流体流動経路となるフラクチャーにおける炭酸ガス及び原油の残留挙動を調べることは、炭酸ガスの貯留可能量と漏洩に対する安全性の評価、原油の可採埋蔵量の評価に対して基礎的な知見を提供するという点で重要である。

そこで、本研究では、ベレア砂岩のマイクロフォーカスX線CTスキャナ画像から再構築した同砂岩

の空隙ネットワークモデルとフラクチャー表面形状のフラクタルモデルから構築した単一フラクチャーモデルに対して、格子ボルツマン法（以下、LBM）を用いて水-CO₂系、水-油系の3次元2相流動シミュレーションを実施し、CO₂及び原油の残留挙動とそれに影響する空隙ネットワーク及びフラクチャーの特性について調査している。

これらのシミュレーションでは、貯留岩の空隙ネットワークとフラクチャーそれぞれの幾何学特性を漏れなく含んでいる十分に大きい領域に対して、細部の流動も正しく計算できるように十分小さい寸法のLBM格子を用いることが必要である。本研究では、空隙ネットワークモデルに対して、空隙半径をその空隙断面積と面積が等しい円の半径としたとき、用いたベレア砂岩の空隙半径の平均値が6.8μm、最大空隙半径が約60μmであることから、ベレア砂岩の1.0mm×1.0mm×1.0mmの領域をとり、寸法が2.5μm×2.5μm×2.5μmのLBM格子を用いた。一方、フラクチャーモデルに対して、フラクチャー表面高さの標準偏差が約0.9mm、向かい合う2つのフラクチャー面の凹凸の相関距離が約1.1mm、フラクチャーの平均開口幅が約0.7mm、その標準偏差が0.3mm

であることから、単一フラクチャーを含む 24mm×24mm×5.6mm の領域をとり、寸法が 50μm×50μm×50μm の LBM 格子を用いた。LBM 格子数は、それぞれ 400×400×400 格子、480×480×112 格子となっている。将来、岩石コアスケールの計算を行うことや、より細かい LBM 格子数を用いて空隙内の現象をさらに詳しく見ることを考える場合、非常に大規模な計算が必要となる。

このような大規模計算に対応するため、平成 21 年度よりスーパーコンピュータ共同研究制度（プログラム高度化支援）の支援を得て 3 次元 2 相流格子ボルツマン法プログラム（以下、LBM3D2P）の演算の効率化と MPI による大規模並列化への対応を進めてきた。そして、平成 22 年度は、配列の統合による L3 キャッシュミスの低減と MPI-IO の導入による IO 時間の短縮と大規模計算への対応を図った。また、MPI の領域分割にミネソタ大学で開発された METIS を利用することで各プロセスが受け持つ計算の負荷バランスを均等化させ、全体としての演算効率の向上を図った。

本稿では、LBM3D2P について簡単に説明した後、高度化による計算速度の向上結果とフラクチャー内の原油の残留挙動についての計算結果を紹介する。

2 LBM3D2P

LBM3D2P では Gunstensen ら(1991)²⁾ による色付き粒子を用いた二相流格子ボルツマン法を適用し、それに用いる平衡分布関数には Grunau ら(1993)³⁾ が提案した静止粒子パラメータを導入するものを用いた。また、LBM 格子には図 1 に示す 3 次元 15 速度 (3D15Q) 格子モデルを用いた。この方法では、時刻 t 、位置ベクトル \mathbf{x} の格子点における赤粒子と青粒子の分布関数をそれぞれ $f_i^r(\mathbf{x}, t)$ 、 $f_i^b(\mathbf{x}, t)$ として、二相流格子ボルツマン方程式を次式で表す。

$$f_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t + 1) = f_i^k(\mathbf{x}, t) + \Omega_i^k(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

ここに、 k は赤色粒子 r と青色粒子 b のいずれかを示し、 i は静止状態を含めて 15 の仮想粒子の運動方向を示す。また、 $\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)$ は衝突による粒子分布の変化を表す衝突項であり、 \mathbf{c}_i は粒子の運動方向 i に対する格子速度ベクトルである。時刻 t 、位置ベクトル \mathbf{x} の格子点における粒子全体の分布関数 $f_i(\mathbf{x}, t)$ は

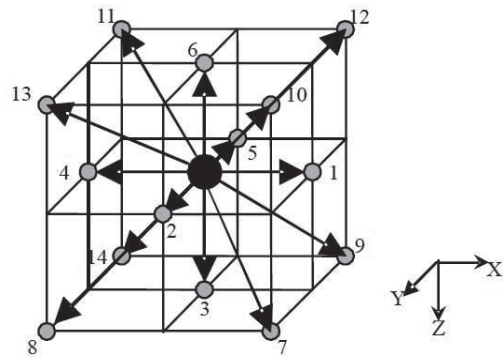


図 1 LBM3D2P で用いた LBM 格子 (3D15Q)

赤色粒子と青色粒子の分布関数の和で表され、

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^r(\mathbf{x}, t) + f_i^b(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

となる。

また、重力などの体積力を無視する場合、式(1)の衝突項 $\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)$ は次式で表わされる。

$$\Omega_i^k(\mathbf{x}, t) = \left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^A + \left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^B \quad (3)$$

ここに、右辺第 1 項の $\left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^A$ は局所平衡状態への緩和過程を表現し、流体の粘性の効果を表わす項である。また、右辺第 2 項 $\left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^B$ は二相界面に作用する界面張力の効果を表わす項である。なお、重力を考慮する場合は、第 3 項目として体積力を表わす項を追加すればよい。なお、本研究の計算領域では流体の流動挙動に及ぼす重力の影響は少ないものと考え、重力を無視して計算を行っている。

緩和過程項には次式で表わされる格子 BGK モデル²⁻⁴⁾を適用した。

$$\left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^A = -\frac{1}{\tau_k} \left(f_i^k(\mathbf{x}, t) - f_i^{k(eq)}(\mathbf{x}, t)\right) \quad (4)$$

ここに、 τ は単一緩和時間係数であり、 $f_i^{k(eq)}(\mathbf{x}, t)$ は局所平衡分布関数である。また、界面張力項には Gunstensen ら(1991)²⁾によるモデルを適用して

$$\left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^B = A \left| \mathbf{F} \right| \left(\frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{F})^2}{|\mathbf{c}_i|^2 |\mathbf{F}|^2} - G \right) \quad (5)$$

とした。ここに、 A は界面張力の大きさを制御するパラメータであり、 G は格子モデルに依存し質量保存則から導かれる係数で、3D15Q 格子モデルでは

$G=1/3$ となる。また、 \mathbf{F} は局所カラー勾配と呼ばれ、

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \mathbf{c}_i (\rho_r(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) - \rho_b(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t)) \quad (6)$$

と定義される。ここに、 ρ_r 及び ρ_b はそれぞれ局所的な赤色流体と青色流体の密度であり、次のように定義される。

$$\rho_r(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i^r(\mathbf{x}, t) \quad (7)$$

$$\rho_b(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i^b(\mathbf{x}, t) \quad (8)$$

これらの赤粒子、青粒子は1タイムステップ毎に静止状態も含めて15方向の隣接格子点に移動し、各方向から移動してきた粒子と衝突することで式(1)にしたがって新たな分布状態となる。これらの分布関数から格子点毎に各流体の密度、流速、圧力が決定されるので、1タイムステップ毎に次々と新たな分布関数を計算することで流れ場の二相流動を解くことができる。

3 LBM3D2Pの高度化

LBM3D2Pは平成21年度にMPI並列への対応を図ったが、CPUのL3キャッシュミスの発生とマスターIO方式によるIOが計算速度低下の主因となっていることが判明した。そこで、同時にアクセスされることが多いにも関わらず別々の配列に格納されたデータを一つの配列に融合し、連続したメモリアドレスに格納されるように工夫することでキャッシュミスの発生を低減した。次に、IOをマスターIO方式からMPI-IO方式に変更することで、マスタープロセスの負担を大幅に軽減し、並列規模が大きく

なってもIOに要する時間が増加しないように改良を行った。その結果、表1に示すとおり、演算以外にプロセス間通信及びIOを含めたトータルの計算速度が約1.4倍から2.3倍に向上した。また、IOに要する時間も並列数が増加するにしたがって短くなり、MPI-IOの効果が確認できた。なお、この結果は改良を行う前後のプログラムを用いてLBM格子数が $400 \times 400 \times 400$ のベレア砂岩の空隙ネットワークモデルに対し、水飽和の状態から200タイムステップ分 CO_2 を圧入する計算を行って得たものである。

また、LBM3D2Pの実質的な計算は空隙部のみあるいはフラクチャー部のみに対して行われる。このため、モデルを均等分割する方法(均等分割法)でMPIの領域分割を行った場合、空隙分布に依存してプロセス間の計算負荷が大きく異なり、計算効率が悪くなる。また、均等分割法ではプロセス数が多くなるにしたがって空隙を多く含むプロセスと含まないプロセスとの差が顕著になり、プロセス間の負荷バランスがさらに悪くなる。そこで、この問題を解消するため、ミネソタ大学で開発されたマルチレベルグラフ回帰分割法による領域分割ソフトMETISを用いて空隙部のみを領域分割する方法(METIS適用法)を採用した。METIS適用法では、METISによる前処理が必要となるが、プロセス間の負荷バランスを均等化され計算速度の向上が期待できる。

METIS適用法の効果を確認するため、上記と同じ200タイムステップの計算を行い、均等分割法との計算時間及び並列計算のスケーラビリティの比較を行った。その結果、METIS適用法では、演算時間において1.3倍から2.0倍の性能向上が認められた。MPI通信及びIOを含めた全体の計算時間においても1.5倍から2.4倍の性能向上となった。また、METIS

表1 LBMプログラムの最適化前後における計算時間の比較

プロセス数	1	4	8	16	32	64	128	256
(チューニング前)								
演算時間 (秒)	15666.59	4457.41	3730.44	1303.38	695.36	398.43	247.69	170.85
通信時間 (秒)	0.01	3.13	11.12	7.75	17.13	12.77	22.99	16.53
IO時間 (秒)	90.39	72.72	69.56	131.14	70.12	116.07	142.45	120.67
(A)計算時間 (秒)	15756.99	4533.26	3811.12	1442.27	782.61	527.27	413.13	308.05
(チューニング後)								
演算時間 (秒)	9814.25	3018.63	1561.21	814.83	473.76	308.20	176.83	120.79
通信時間 (秒)	0.01	5.64	7.61	15.88	12.09	12.70	5.71	4.82
IO時間 (秒)	210.87	101.00	81.28	55.40	67.66	50.71	30.65	21.10
(B)計算時間 (秒)	10025.13	3125.27	1650.10	886.11	553.51	371.61	213.19	146.71
(A)/(B)	1.57	1.45	2.31	1.63	1.41	1.42	1.94	2.10

適用法の並列計算のスケーラビリティは IO を含めた全体の計算時間で見ると並列数が 128 並列より増えると少し低下傾向を示すものの均等分割法に比べて大きく、演算と通信時間の和でみるとスケーラビリティは 256 並列まで直線的に伸び、METIS 適用法の効果が大きいことが確認できた。

4 フラクチャーにおける原油の残留挙動

第 1 章に記した単一フラクチャーモデルに対して、原油飽和状態からポリマーを用いて粘性を変化させた水を圧入したときの原油の残留挙動の違いを LBM シミュレーションにより調べた。フラクチャー壁面の濡れ性を oil-wet (接触角 150°) とし、(水の粘性係数) / (原油の粘性係数) が 0.3 と 3.0 の場合の圧入水の分布をフラクチャーの開口幅分布図に重ね合わせたものをそれぞれ図 2, 図 3 に示す。なお、黒色領域が圧入水を示している。また、開口幅は色の濃い領域の方が広いことを示している。

図 2 から、粘性比が小さい場合、フラクチャーの開口幅が広い部分に優先的に水が浸入し、水の浸入が遅い開口幅が狭い部分の背後に水が回り込むことで油が残留することがわかる。また、図 3 から、粘性比が大きくなると開口幅に対する水の浸入速度の差が小さくなり、その結果、開口幅が狭い部分の背後での油の残留が減少することがわかる。なお、フラクチャー壁面の濡れ性を water-wet (接触角 30°) とした場合も、同様の傾向が得られた。

5 おわりに

LBM3D2P プログラムにおいて配列の融合による L3 キャッシュミスの低減と MPI-IO による IO の効率化を図ることで計算速度の向上を図ることができた。さらに、MPI の領域分割に METIS を用いることで計算速度の向上と並列計算の良好なスケーラビリティが得られることがわかった。また、高度化した LBM3D2P による計算例として、単一フラクチャー内の原油の残留挙動の計算結果を紹介した。今後、様々な空隙ネットワークモデル及びフラクチャーモデルに対して LBM3D2P を用いたシミュレーションを行い、それぞれのモデルにおける流体の残留挙動を明らかにすることで炭酸ガスの貯留可能量及び原油の可採埋蔵量の評価に資することとしたい。

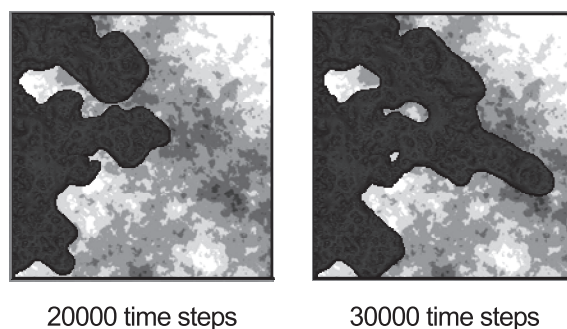


図 2 水の浸入状況 (粘性比 0.3, oil-wet)

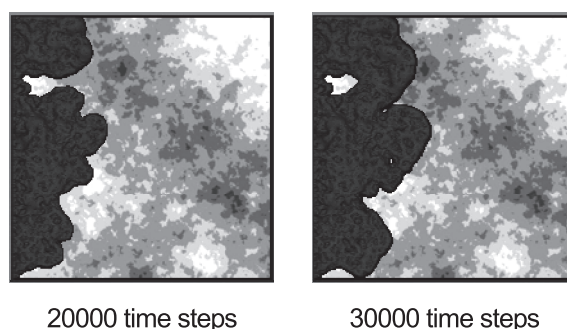


図 3 水の浸入状況 (粘性比 3.0, oil-wet)

謝辞

本研究は、京都大学学術情報メディアセンターの平成 21 年度、22 年度スーパーコンピュータ共同研究制度の支援を受けて実施した。また、ベレア砂岩試料及び関連データは石油資源開発 (株) よりご提供頂いた。記して謝意を表する。

参考文献

- 1) 経済産業省 : CCS2020 我が国における二酸化炭素の分離回収・地中貯留技術研究開発の動向, http://www.rite.or.jp/Japanese/lab0/choryu/ccs/ws/4_nishio.pdf, (2007)
- 2) Gunstensen, A. K. et al. ; Lattice Boltzmann Model of Immiscible Fluid, Phys. Rev. A, 43, 4320-4327, (1991).
- 3) D. Grunau, S. Chen and K. Eggert: A lattice Boltzmann model for multiphase fluid flows, Phys. Fluids A, 5, 2557-2562, (1993)
- 4) S. Chen and G. D. Doolen : Lattice Boltzmann method for fluid flows, Annu. Rev. Fluid Mech., 30, 329-364, (1998)

計算化学による有機反応経路の追跡

山邊 信一

奈良教育大学 教育学部

有機反応の多分子系でのポテンシャル面を計算化学により追跡した。GAUSSIAN03 及び GAUSSIAN09 を用いて、反応の遷移状態構造を求め、次に固有反応座標の計算により、反応経路を決定した。この手法により、古典的あるいはよく知られた反応でありながら、その機構が不明瞭なままであった炭酸生成・電離、エステルの加水分解や Rimer-Tiemann 反応を調べた。これらの反応の素過程を求めた結果、従来依りの定説としての見方とは異なる新しい反応機構を明らかにすることができた。

1 序

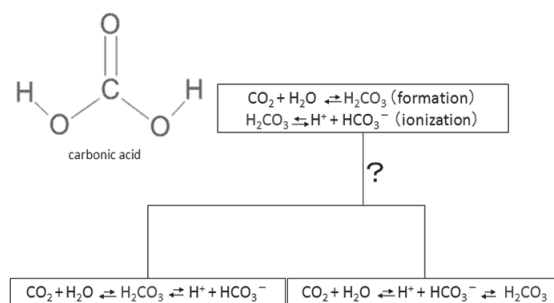
近年、計算化学の方法の発達と、コンピュータの高速化により、simulation の精度と規模が飛躍的に向上した。各種の実測値と計算値の良一致が見られ、現在、計算化学は化学の重要な研究手段となりつつある。しかし、依然として、有機反応での多分子系の複雑なポテンシャル面の追跡には困難な面がある。それは、反応の遷移状態(TS)構造の決定のむつかしさに帰因している。平成 22 年度後期、大規模計算支援枠を承認いただいた機会に、拡大したモデル系でかつ高精度の方法により、2. 炭酸の生成・電離、3. Reimer-Tiemann 反応、4. エステルの加水分解等の経路を求める事ができた。そして、これらの反応の機構について、系統的かつ具体的な描像を示す事ができた。

2 炭酸生成・電離

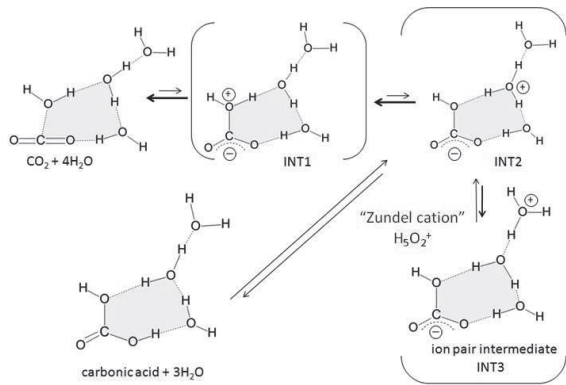
炭酸(H₂CO₃)は二酸化炭素が水に溶けることで生じ、水溶液中で 2 段階の電離を起こす弱酸である。これらの現象はよく知られている。しかし、CO₂ + H₂O と炭酸と電離の 3 つの関係は意外にも詳細には分かっていない。

本研究では、炭酸という分子に注目し、二酸化炭素の水和の反応を計算化学で調べた。

Scheme 1 に挙げた 2 通りの関係のどちらかを判定するため、CO₂ + nH₂O → H₂CO₃ + (n-1)H₂O (水分子数, n=1~4, 6, 8, 13, 20, 30) の反応経路を追跡した。n=1~4 では協奏的な経路, n=8 では 2 つのイオン対中間体を含む段階的反応が求められた。n=20, 30 でようやく類似した経路が求まり、3 つの中間体 INT1, INT2, INT3 が介在することがわかった。Figure 1 に INT3 のイオン対中間体を示す。3 つの中間体を含めて、Scheme 2 のような炭酸生成・電離の反応機構を見出した。この結果、Scheme 1 の右側が適切な表現であることがわかった。



Scheme 1 炭酸生成と電離の関係を表す 2 通りの経路



Scheme 2 炭酸の生成反応と電離を表す最小モデル

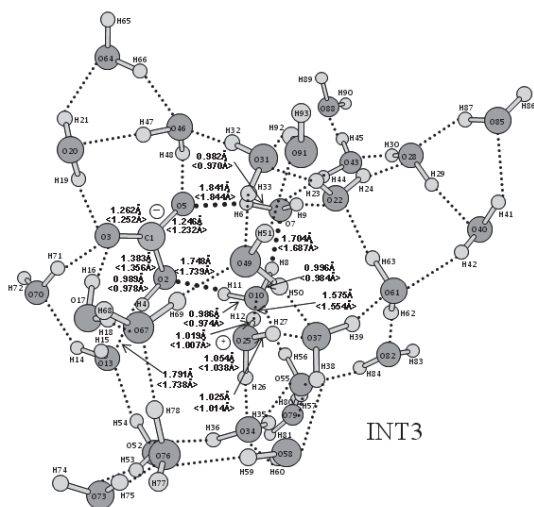
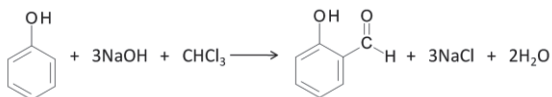


Figure 1 CO₂ + 30H₂O のモデルで求められたイオン対中間体

3 Reimer-Tiemann 反応

Scheme 3 は、1876 年に K.Reimer と F.Tiemann により報告された有名な反応を示す。



Scheme 3 Reimer-Tiemann の反応式

この反応では、Figure 2 のように、クロロホルム HCCL₃ より生じたジクロロカルベン CCL₂ がフェノキドイオン H₅C₆O⁻に求電子付加を起こすと考えられている。

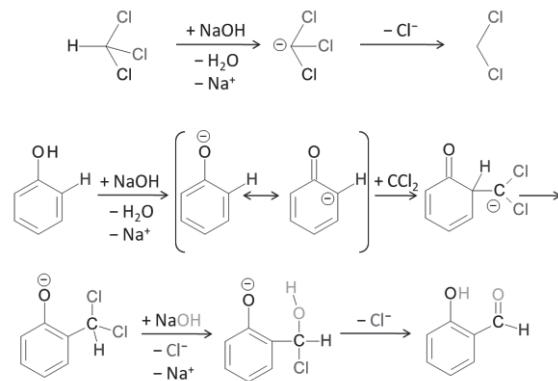


Figure 2 カルベンが関与した経路の従来からの定説

ところが、CCL₂ は不安定中間体であり、水分子 7 個を付加したモデルでは構造最適化の結果、分解してしまっ。モデルを検討し直した結果、Figure 3 での金属陽イオンは関与したカルベノイドで存在できる事が判明した。

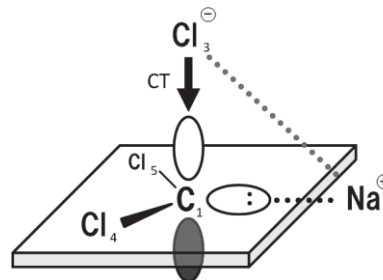


Figure 3 カルベノイド、軌道相互作用の図

このカルベノイドを含められる H₅C₆ONa.H₂O + [NaOH(H₂O)]₂ + HCCL₃ の反応系で経路を追跡した。この結果、16 個の素過程を求める事ができた。

Figure 4 に、律速段階の遷移状態構造を示す。

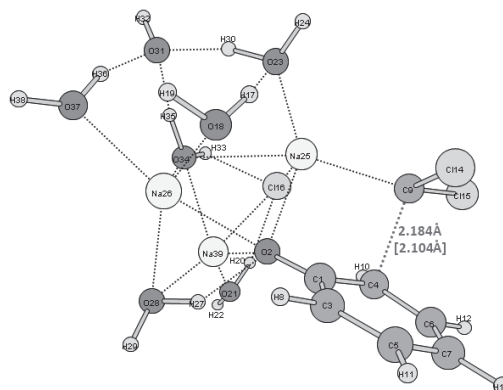


Figure 4 TS2 の CCL₂ 付加構造

また、Figure 5 には 構造変化に対応するエネルギー変化を示す。

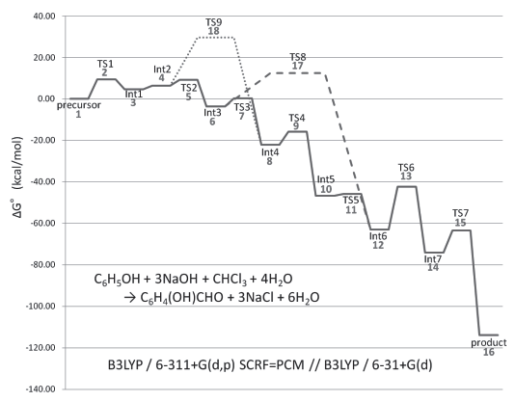
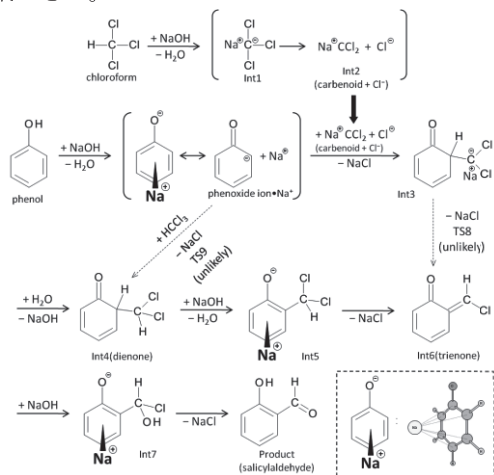


Figure 5 エネルギー変化図

進行とともに、大きなエネルギー安定化が生じる極めて自発的な反応である事がわかった。

以上の計算結果を踏まえて、Reimer-Tiemann反応について、Scheme 4 の新しい反応機構が提案できた。

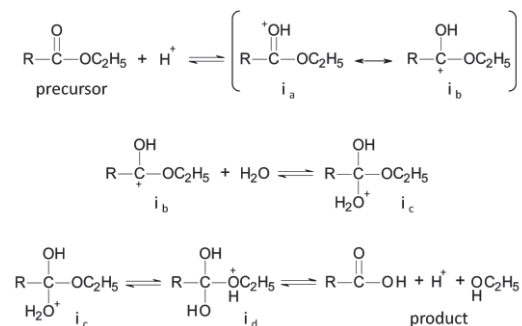


Scheme 4 研究のまとめの図

4 酸触媒下のエステルの加水分解反応

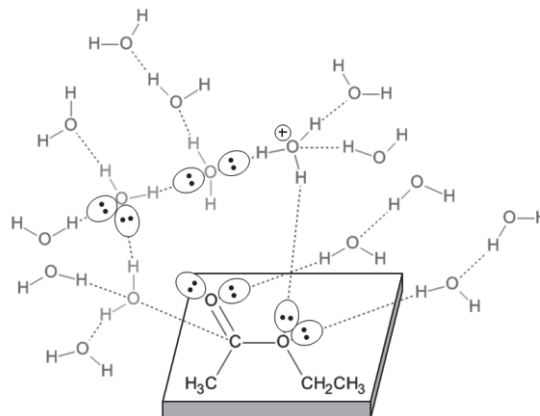
この反応は、高校化学 I の教科書にも載っている有名なものである。

反応機構として、Scheme 5 の AAc2 機構がよく知られているし定着している。



Scheme 5 AAc2 機構

本当に、Scheme 5 での *i*_a, *i*_b のような炭素陽イオン中間体介在するのかどうか、Scheme 6 の反応モデルで吟味した。



Scheme 6 反応モデル

Figure 6 に参考として、以前に求められた中性での反応に伴う構造変化を示す。

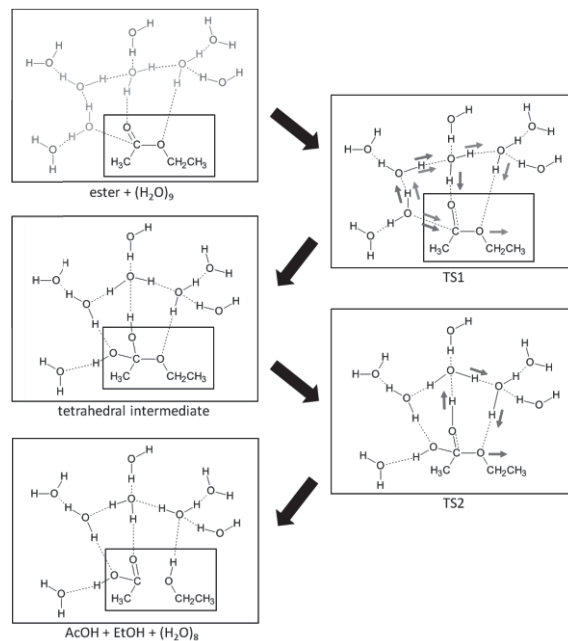


Figure 6 反応に伴う構造変化

2段階の反応であり、中間体 Int1(Me), Int2(Me) が求められた。これらの中間体が酸触媒下でも介在するのか否かが興味ある。

Figure 7 は、エネルギー変化を示す。

ここでは、中性条件エステル・(H₂O)₁₆ の反応、及び協奏的経路のエネルギー変化も併せて図示されている。Precursor → TS1 → Int1 → Int2 → TS2 → Product の反応パターンは、他の反応体 (たとえば安息香酸エチル) でも求められた。

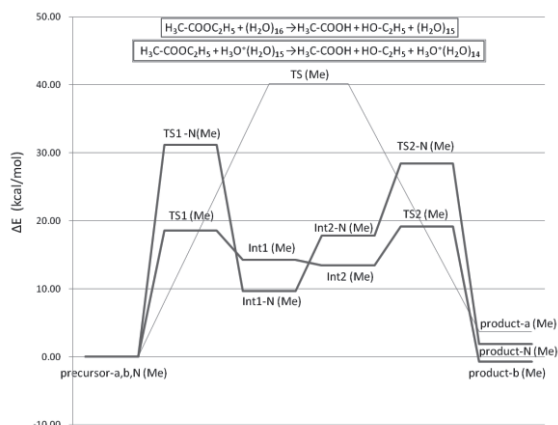
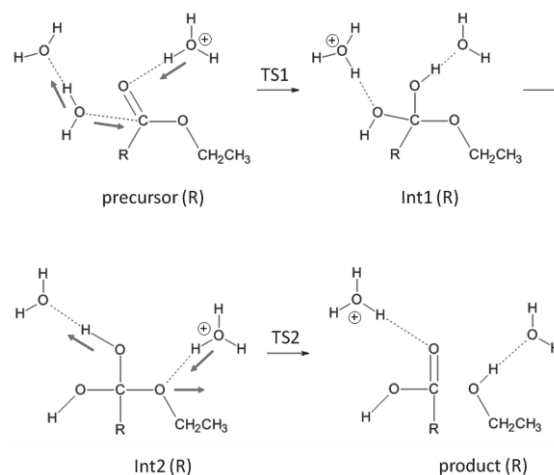


Figure 7 エネルギー変化



Scheme 7 反応機構のまとめ図

Figure 8 には、酢酸エチルエステル $\text{H}_3\text{C-COO-C}_2\text{H}_5$ の TS1 と TS2 の構造を示す。

これらの計算結果を基に、反応機構として、Scheme 7 が提案できる。

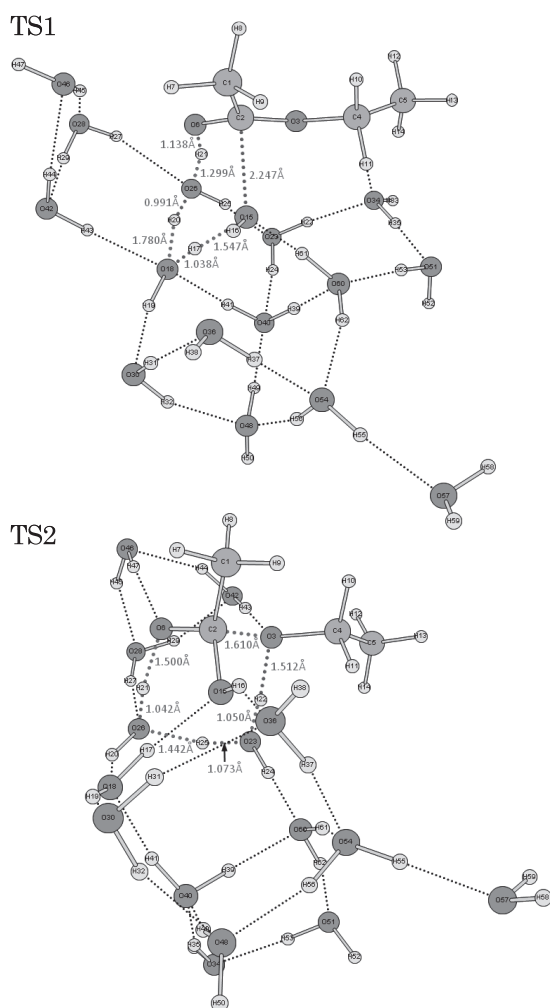


Figure 8 酢酸エチルエステルの構造

5 研究成果

1. "A computational study on the relationship between formation and electrolytic dissociation of carbonic acid." Shinichi Yamabe and Nao Kawagishi Theoretical Chemistry Accounts, in press, Ms. No. TCAC-D-10-00269R2

(炭酸の生成・電離)

2. "A significant role of alkaline cations on the Reimer-Tiemann reaction." Shinichi Yamabe and Takeshi Fukuda, Organic & Biomolecular Chemistry (英国化学会), Org. Biomol. Chem., 2011, 9 (14), 5109 – 5114

<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2011/OB/C10B05405H>

(Reimer-Tiemann 反応)

3. "Role of hydrogen bonds in acid catalyzed hydrolyses of esters" Shinichi Yamabe, Takeshi Fukuda and Misao Ishii, Theoretical Chemistry Accounts, under revision, Ms. No. TCAC-D-11-00114

(エステルの酸触媒下の加水分解)

マルチフェイズ解法による shallow basin 内の流動不安定性の計算

永井 克明

京都大学大学院・社会基盤工学専攻・修士課程

湖沼やラグーン、浅いダムなど、水平方向の長さスケールが鉛直方向スケールより十分大きい水域では、水平断面内に発達した渦が、主流の流向を不安定にする現象が観察されている。

本研究では、水平面内の循環流の発達と主流の不安定現象、さらにこの流況に伴う微細粒子の輸送と底面への堆積過程を数値的に再現するため、独自に開発されたマルチフェイズ解法を、OpenMP および MPI を利用して並列化した。平成 22 年度の大規模計算支援枠 (Fat SMP クラスタ、128 コア) を利用して、これまで困難であった長時間にわたる流れと物質輸送の計算を行った。

1 はじめに

湖沼やラグーン、浅いダム (shallow reservoirs) など、水平方向の長さスケールが水深方向スケールより十分大きい水域では、水平断面内に発達した鉛直軸をもつ渦 (水平循環流) が、主流の流向を不安定にする現象が観察されている。浅い水槽 (shallow basin) を用いた流動実験では、ある特定の条件で主流方向が不安定となり、水槽形状が対称的であるにもかかわらず、水槽内に著しい非対称流動が生ずることが確認されている^{1),2)}。また、この不安定流に伴う土砂などの物質輸送も、浅いダム内での濁質貯留機能に関連する重要な検討課題となっている。

本研究では、既往の実験で観察された水平循環流の発達と主流の不安定現象、さらに微細粒子の輸送と底面への堆積過程を数値的に再現するため、固気液三相を同時に扱えるマルチフェイズ解法³⁾を、OpenMP および MPI を利用して並列化した。平成 22 年度の大規模計算支援枠 (Fat SMP クラスタ、128 コア) を利用して、長時間にわたる shallow basin 内の流れと、それに伴う微細粒子輸送のシミュレーションを行った。

2 数値解析手法

2.1 基礎方程式

利用した基礎方程式は、空間フィルタリングが施された多相場の質量保存則と運動方程式である。多相場を構成する各相には、非圧縮条件が適用できると仮定する。流体計算セルより小さいスケールの乱

流現象を表現するために、サブグリッドスケールモデルを用いる。質量保存則は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (1)$$

ここで、 ρ と u_j は、それぞれ各相の体積平均密度と、3次元直交座標系の x_j 方向の質量平均速度成分である。なお、式 (1) および以下の基礎式中の変数には、いずれも空間フィルタリングが施されているとする。非圧縮条件は次式となる。

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2)$$

さらに、運動方程式は次式のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) &= f_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} (-\tau_{ij} + 2\nu D_{ij}) \end{aligned} \quad (3)$$

ここに、 p は各相の体積平均圧力であり、 f_i と ν は、それぞれ体積力 (重力加速度) と動粘性係数である。 D_{ij} は歪み速度テンソルであり、 τ_{ij} は、標準スマゴリンスキーモデル⁴⁾を利用して計算される。

2.2 離散化と計算手法の概要

基礎方程式はコロケート格子上で、有限体積法により離散化される。解法は、SMAC 系のアルゴリズムと同様である。運動方程式の予測段階の計算では、陰的解法 (C-ISMAC 法⁵⁾) を利用し、移流項は 5 次精度の TVD スキーム⁶⁾により計算される。また、

圧力計算では、水と空気のように、密度が大きく異なる場を統一的に扱え、しかも非圧縮条件を精度良く満足する解を求められる C-HSMAC 法⁷⁾を用いる。この解法は、既往の SOLA 法⁸⁾より高速であることが確認されている。C-HSMAC 法における行列計算には、BiCGSTAB 法を利用している。

3 数値解析手法の適用性

3.1 対称容器内に発生する水平循環流の計算

本節では、自由水面を摩擦が作用しない (free-slip) 固体壁として扱い、OpenMP のみを用いて並列化した場合の計算結果を示す。この計算手法では、流体計算セル数 20 万、16 並列とした場合に、実現象 1,000 秒に対する計算時間は約 50 時間である。

図-1 に、3次元計算対象領域の水平断面形状を示す。水平断面形状は流下方向に対して左右対称である。 $L = 3$ (m) かつ $B = 4$ (m) の条件 (case- 3×4) と、 $L = 6$ (m) かつ $B = 2$ (m) となる条件 (case- 6×2) の2条件の計算を行った。水深はいずれも 0.2 m、流入断面平均流速は 0.14 m/s である。

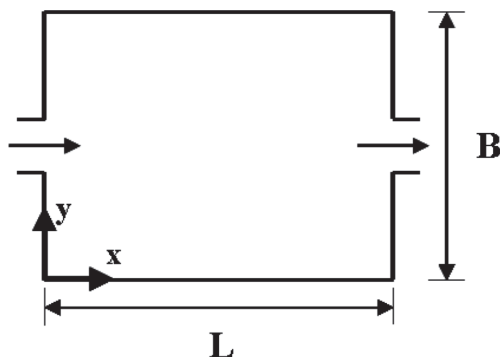


図-1 計算対象領域の平面図

図-2 に、case- 3×4 を対象とする計算で得られた各時刻の水平断面 (水面に相当する最上面) 内のフローパターンと渦度分布を示す。流体計算セルより大きいスケールの乱れのため、流況は変動しているが、図-3 に示すように、平均的には流下方向に対して左右対称なフローパターンが計算されている。

一方、図-4 に示すように、case- 6×2 では、流入する主流が時間の経過とともに、左側壁面に付着する流れとなり、平均的には図-5 のような非対称なフローパターンが形成された。

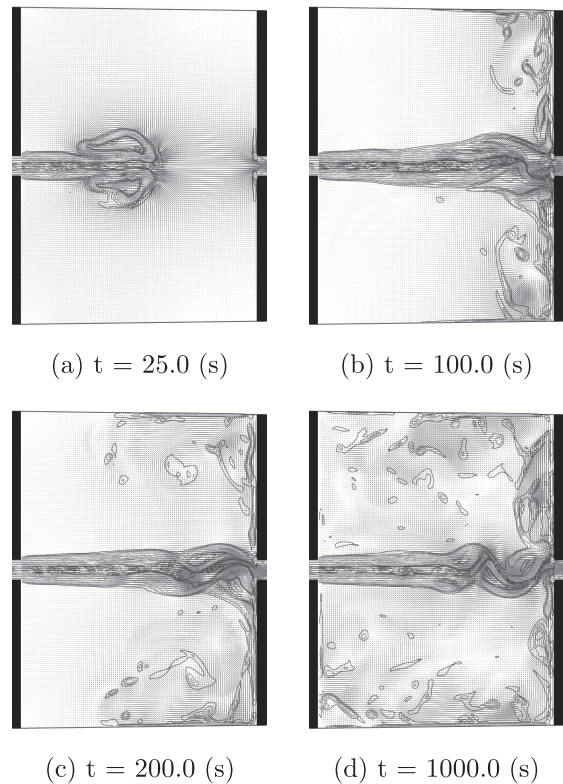


図-2 計算で得られた水平断面内のフローパターンと渦度分布 (case- 3×4 、最上面)

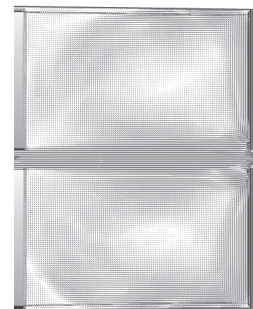
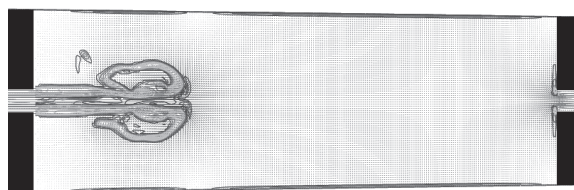
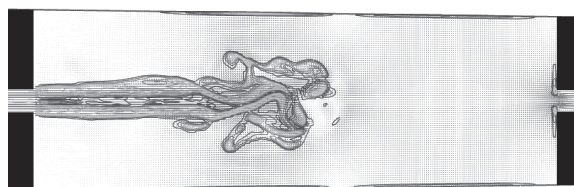


図-3 時間平均されたフローパターン (case- 3×4 、800 ~ 1,000 秒間の平均、最上面)

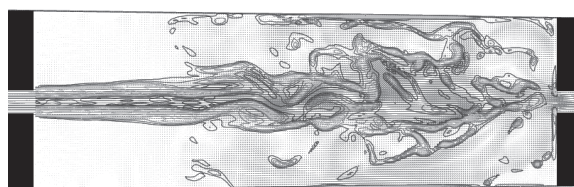
以上のように、shallow basin の水平形状が変わり、 L/B が増加すると、ある時点で主流が側壁面に沿う水平循環流が形成され、非対称なフローパターンが形成されることが計算で再現された。以上の結果は、実験結果¹⁾と一致している。



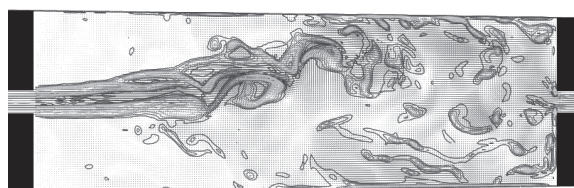
(a) $t = 25.0$ (s)



(b) $t = 50.0$ (s)



(d) $t = 150.0$ (s)



(f) $t = 1000.0$ (s)

図-4 水平断面内のフローパターンと渦度分布の計算結果 (case-6 × 2、最上面)

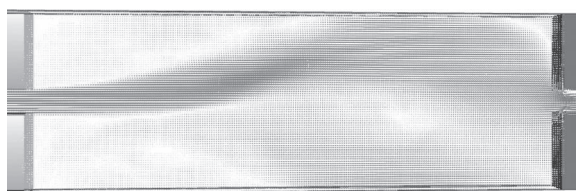


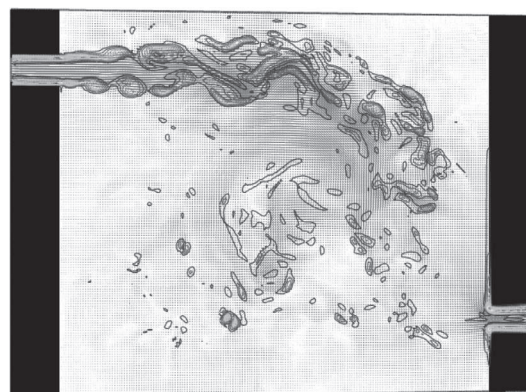
図-5 時間平均されたフローパターン (case-6 × 2、800 ~ 1,000 秒間の平均、最上面)

3.2 微細粒子輸送と底面への堆積過程の計算

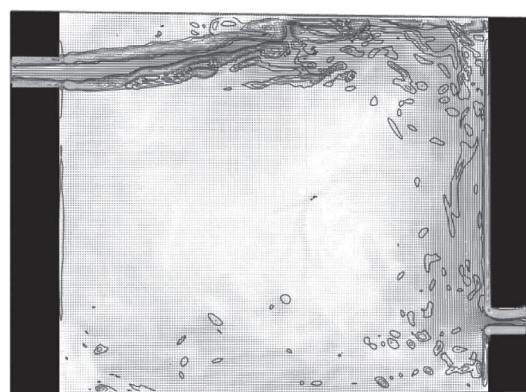
本節では、3.1 節とは異なり、気相と液相の両者を計算対象として、自由水面変動を考慮する計算手法を用いる。計算プログラムは、3次元領域分割法

に基づき、フラット MPI により並列化されている。本節の計算では、流体計算セル数は約 140 万としている。Fat SMP クラスターの 110 コアを使用した場合、実時間 1,000 秒に対する計算時間は約 42 時間であった。

EPFL-LCH (スイス連邦工科大学・水理構造物研究所) で実施された平面水槽 (水平スケール 4.5 m × 4.0 m、水深 0.2 m) 内の自由水面流と微細粒子の輸送・堆積実験の結果を計算対象とした。流入・流出位置が非対称に配置された条件を対象として、静水状態の初期条件から、実験と同様の流入境界条件を与えて非定常計算を進めた。その結果、図-6 に示すように、計算開始後 80 秒ではほぼ直進していた主流が、880 秒では左側壁に付着し、計算領域内に 1 つの水平循環流が形成された。これは、実験で計測されたものと同様のフローパターンである。



(a) $t = 80.0$ (s)



(b) $t = 880.0$ (s)

図-6 水平断面内のフローパターンと渦度分布の計算結果 (水表面近傍)

上記の流動計算に加えて、shallow basin 内に流入する微細粒子の計算を行った。2.1 節で示した基礎方程式に加えて、沈降速度を考慮した粒子濃度の移流拡散方程式を使用し、これを有限体積法により離散化して計算を行った。移流項の計算には、5 次精度 TVD スキーム⁶⁾を用いている。底面から離脱する粒子濃度は、多相場の運動方程式の圧力項と粘性項の体積積分から底面せん断力を算出し、pickup rate⁹⁾を用いて求められる。図-7 に示すように、実験結果と同様に、水平循環流に沿う堆積形状が計算されたが、粒子の堆積による流況の変化までは再現に至らず、今後さらに長時間にわたる計算およびモデルの検討を行う必要があることがわかった。

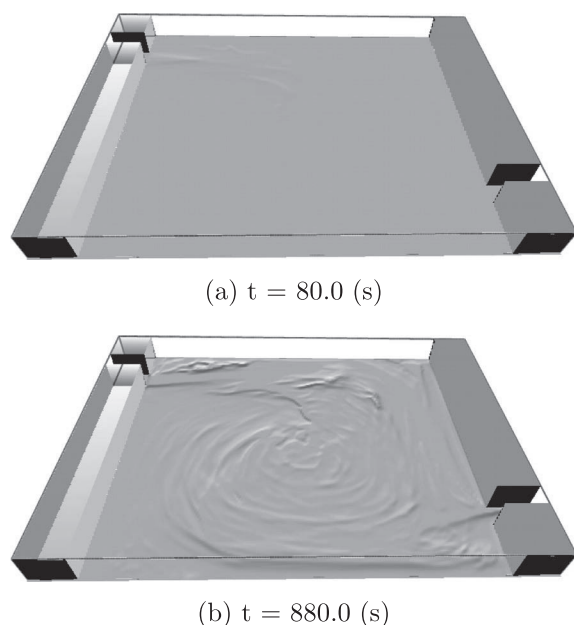


図-7 微細粒子輸送と底面への堆積過程の計算結果

4 おわりに

本研究では、マルチフェイズ解法を OpenMP および MPI を用いて並列化し、水平方向の長さスケールが卓越する shallow basin 内の流れと、微細粒子の輸送および底面への堆積過程の計算を行った。このような問題を対象とする計算では、通常長時間にわたる演算が必要となるが、並列化と大規模計算により計算時間が短縮され、離散化法やモデルの検討が効率的に行えることが確認された。今回の共同研究制度により、今後解法の高度化を進めて行く上で、非常に有用な成果が得られたと考えられる。

5 謝辞

本計算は、京都大学学術情報メディアセンターの平成 22 年度スーパーコンピュータ共同研究制度 (大規模計算支援枠) を利用して実施されたものであり、多大なご支援を賜りましたことに感謝申し上げます。

参考文献

- 1) S. A. Kantoush. Symmetric or asymmetric flow patterns in shallow rectangular basins with sediment transport. *Proc. 32nd IAHR biennial congress*, 2007.
- 2) B. J. Dewals, S. A. Kantoush, S. Erpicum, M. Piroton, and A. J. Schleiss. Experimental and numerical analysis of flow instabilities in rectangular shallow basins. *Environ Fluid Mech.*, Vol. 8, pp. 31–54, 2008.
- 3) S. Ushijima. Multiphase-model approach to predict arbitrarily-shaped objects moving in free surface flows. *Proc of APCOM'07 - EPMESC XI*, pp. MS41-3-1, 2007.
- 4) J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, Vol. 91, No. 3, pp. 343–368, 1963.
- 5) S. Ushijima and I. Nezu. Higher-order implicit (C-ISMAL) method for incompressible flows with collocated grid system. *JSCE Journal*, No. 719/II-61, pp. 21–30, 2002.
- 6) S. Yamamoto and H. Daiguji. Higher-order-accurate upwind schemes for solving the compressible Euler and Navier-Stokes equations. *Computers Fluids*, Vol. 22, No. 2/3, pp. 259–270, 1993.
- 7) S. Ushijima and Y. Okuyama. Comparison of C-HSMAC and SOLA methods for pressure computation of incompressible fluids. *JSCE Journal*, No. 747/II-65, pp. 197–202, 2003.
- 8) C. W. Hirt and J. L. Cook. Calculating three-dimensional flows around structures and over rough terrain. *J. Comput. Phys.*, Vol. 10, pp. 324–340, 1972.
- 9) H. Nakagawa and T. Tsujimoto. Sand bed instability due to bed load motion. *Proc. ASCE, Journal of Hydraulics Division*, Vol. 106, HY 12, pp. 2029–2051, 1980.

Thin SMP クラスタ運転状況 (2011/4 ~ 2011/9)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

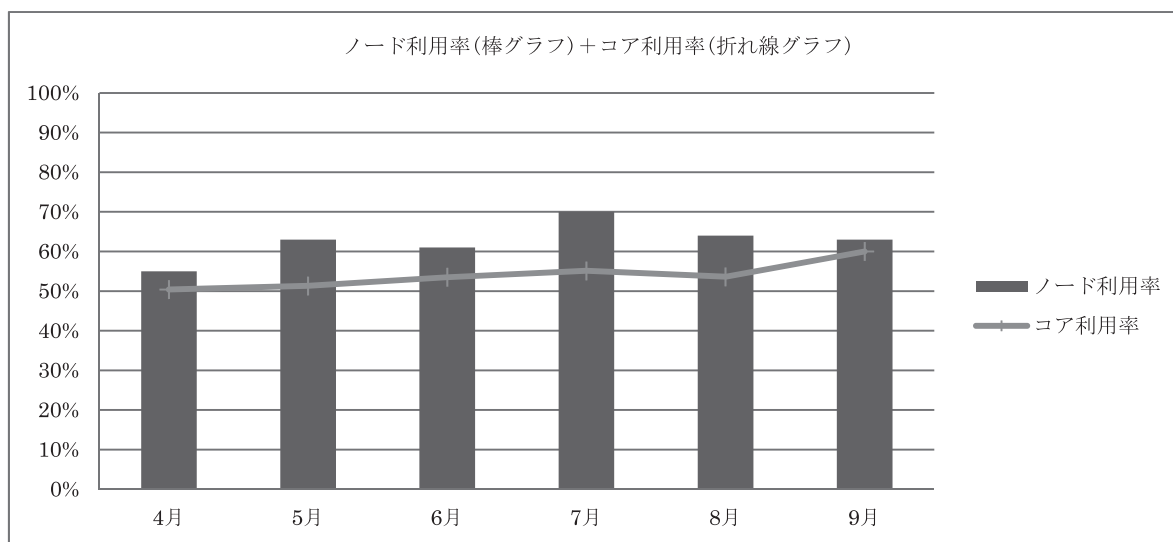
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2011/04/01 0:00	2011/04/04 9:00	81.0
2011/07/05 9:00	2011/07/05 20:00	11.0

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2011/04/18 4:15	2011/04/18 11:00	6.8
2011/04/29 5:30	2011/04/29 8:50	3.3
2011/05/04 5:40	2011/05/04 11:20	5.7
2011/05/10 10:00	2011/05/10 11:00	1.0
2011/05/15 16:00	2011/05/16 20:10	28.2
2011/05/18 5:10	2011/05/18 9:10	4.0
2011/05/20 20:55	2011/05/21 0:30	3.6

2) サービス状況

	サービス時間 [h]	バッチ						TSS			
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率	セッション数	セッション時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数
4月	629	20,184	129,054	1,957,500	1,796,499	377.8	55%	12,878	7,534	94,125	25.7
5月	702	32,885	148,944	2,172,954	2,064,699	384.4	63%	13,946	6,202	83,145	25.7
6月	720	69,284	292,718	2,378,339	2,163,441	390.0	61%	15,917	4,607	85,134	26.0
7月	744	36,800	510,816	2,492,460	2,329,124	385.6	70%	14,399	5,563	103,715	25.8
8月	733	129,675	306,563	2,463,010	2,260,180	390.0	64%	11,793	8,266	112,217	26.0
9月	720	121,089	168,548	2,694,464	2,584,177	390.0	63%	12,437	2,395	135,358	26.0
計	4,247	409,917	1,556,642	14,158,727	13,198,120	386.3	63%	81,370	34,565	613,694	25.9



※ 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)

※ 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)

※ ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

※ TSS = ログインノード+専用クラスタについてのデータ

Fat SMP クラスタ運転状況 (2011/4 ~ 2011/9)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

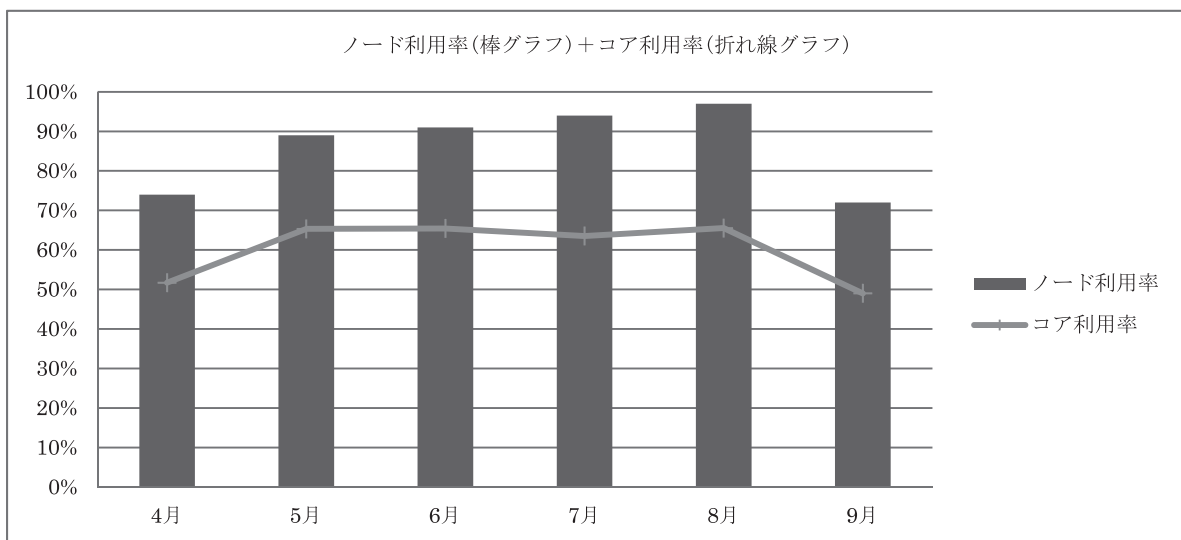
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2011/04/01 0:00	2011/04/04 9:00	81.0
2011/07/05 9:00	2011/07/05 20:00	11.0

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2011/04/18 4:15	2011/04/18 11:00	6.8
2011/04/29 5:30	2011/04/29 8:50	3.3
2011/05/04 5:40	2011/05/04 11:20	5.7
2011/05/10 10:00	2011/05/10 11:00	1.0
2011/05/15 16:00	2011/05/16 20:10	28.2
2011/05/18 5:10	2011/05/18 9:10	4.0
2011/05/20 17:00	2011/05/20 20:55	3.9
2011/05/20 20:55	2011/05/21 0:30	3.6
2011/09/22 17:15	2011/09/22 22:15	5.0

2) サービス状況

	サービス時間[h]	バッチ						TSS			
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率	セッション数	セッション時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数
4月	629	2,534	21,009	270,614	242,453	6.8	71%	2,111	514	4,276	1.0
5月	698	1,923	26,350	373,108	318,627	6.9	88%	2,277	395	1,545	1.0
6月	720	731	19,870	391,771	340,095	7.0	90%	2,063	605	839	1.0
7月	744	721	27,557	386,682	281,874	7.0	93%	2,242	672	3,909	1.0
8月	733	818	27,769	405,746	298,119	7.0	99%	2,848	209	1,482	1.0
9月	715	1,128	15,085	290,890	228,996	7.0	74%	2,039	430	5,562	1.0
計	4,239	7,855	137,639	2,118,812	1,710,164	7.0	86%	13,580	2,825	17,613	1.0



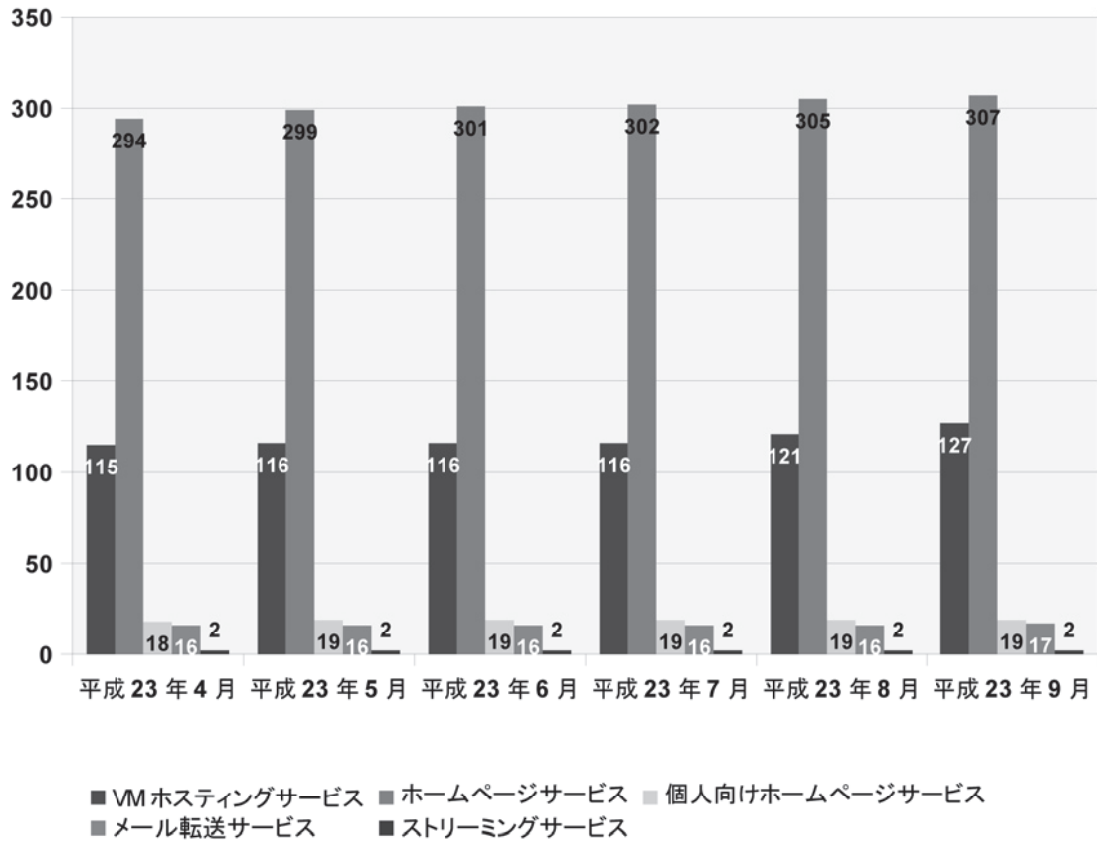
※ 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)

※ 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)

※ ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

汎用コンピュータシステムのサービス状況

1 ホスティング・ホームページサービス利用状況



(平成 23 年 4 月から平成 23 年 9 月)

大型計算機システム利用承認件数について

平成 23 年 9 月末現在、大型計算機システムの利用件数は、2,266 件となっています。

センター利用による研究成果

—平成 22 年度計算機利用結果報告書から—

- 【1000 情報学】
1. Kenji Rikitake: SFMT Pseudo Random Number Generator for Erlang: Erlang'11: Proceedings of the 2011 ACM SIGPLAN Erlang Workshop, pp.78 - 83, 2011
 2. Rikitake, K.: Cryptography on multicore systems: an Erlang case: Proceedings of IPSJ Computer Security Symposium 2010 (CSS2010), Session 2A2, pp.2 - 2, 2010
 3. Rikitake, K.: Implementing SFMT PRNG on Erlang: Proceedings of Tokyo Erlang Workshop #5, erlang-users.jp, pp.3- 3, 2010
- 【1400 健康・スポーツ科学】
4. 及川 研, 栗山英樹, 佐藤精一: 野球の無死 1 塁で用いられる送りバント作戦の効果について: コーチング学 研究, Vol.24, No.2, pp.119-128, 2011
- 【3900 心理学】
5. 山本哲也, 山本洋紀, 眞野博彰, 梅田雅宏, 田中忠蔵, 河野憲二: 追跡眼球運動関連機能におけるヒトMT/MST野の相違: 信学技報, Vol.110, No.149, pp.13-18, 2010
 6. 山本洋紀: 脳画像正規化の限界に関する情報理論的解析: 信学技報, Vol.110, No.149, pp.19-24, 2010
 7. Yamamoto H., Fukunaga M., Takahashi S., Mano H., Tanaka C., Umeda M., and Ejima Y.: Inconsistency and Uncertainty of the Human Visual Area Loci following Surface-based Registration: Probability and Entropy Maps: Human Brain Mapping, pp. in press, 2011
- 【4400 地球惑星科学】
8. Kosuke Ito, Yoichi Ishikawa, Yoshiaki Miyamoto and Toshiyuki Awaji: Short-time-scale processes in a mature hurricane as a response to sea surface fluctuations: Journal of the Atmospheric Sciences, Vol.68, No.10, pp.2250-2272, 2011
 9. Toshiko Terakawa and Mitsuhiro Matsu'ura: 3-D tectonic stress fields in and around Japan inverted from CMT data of seismic events: Tectonics, pp.doi:10.1029/2009TC002626 - doi:10.1029/2009TC002626, 2010
 10. Yosuke Shikakura, Yukitoshi Fukahata, Noa Mitsui, and Kazuro Hirahara: 3-D cell model simulation of the inland earthquake generation pattern in Southwest Japan during the Nankai earthquake cycles in a layered viscoelastic medium: American Geophysical Union, Fall Meeting 2010, abstract #, No.T33B, pp. 2258-2258, 2010
 11. 鹿倉洋介, 深畑幸俊, 光井能麻, 平原和朗: 成層粘弾性を仮定した南海トラフ地震サイクル中での西南日本内陸地震発生様式のセルモデルシミュレーション: 日本地震学会2010年秋季大会, No. P3-44, pp. 262-262, 2010
 12. Yamazaki, H. and T. Satomura: Nonhydrostatic Atmospheric Modeling Using a Combined Cartesian Grid: Mon. Wea. Rev., Vol.138, pp. 3932-3945, 2010
 13. Sugino, M. and T. Satomura: Long-lived Typhoons over Indochina: J. Res. Eng. Tech., Vol.7, pp. 97-104, 2010
 14. Ogohara, K. and T. Satomura: Changes in mass flow caused by CO2 condensation in the Martian atmosphere: Adv. Geosci., Vol.19, pp.195-205, 2010
 15. H. Ishida, T. Y. Nakjima, T. Yokota, N. Kikuchi, H. Watanabe: DEVELOPMENT AND VALIDATION OF CLOUD SCREENING ALGORITHM FOR GOSAT/CAI: International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Science: Vol.XXXVIII, No.8, pp.411-414, 2010
 16. 石田春磨, 中島 孝, 菊地信行, 横田達也, 渡辺宏: MODISとの比較によるGOSAT-CAI雲スク

- リーニング結果の検証: 気象学会2010年度秋季大会講演要旨, 2010
17. 中村武史, 竹中博士, 岡元太郎, 金田義行: 流体-固体境界周辺における3次元地震波動場の差分解法に関する数値実験: 地震2, Vol. 63, pp.187-194, 2011
【4600 基礎化学】
18. K. Fujimoto, K. Asai, and J. Hasegawa: Theoretical Study of the Opsin Shift of Deprotonated Retinal Schiff Base in the M state of Bacteriorhodopsin: Phys. Chem. Chem. Phys., Vol.12, pp.13107-13116, 2010
【4700 複合化学】
19. Kenji Kiyohara, Takushi Sugino, and Kinji Asaka: Phase transition in porous electrodes: The Journal of Chemical Physics, Vol.134, No.15, pp.154710-154716, 2011
【5000 機械工学】
20. Yoshinobu Yamamoto and Tomoaki Kunugi: Discussion on heat transfer correlation in turbulent channel flow imposed wall-normal magnetic field: Fusion Engineering and Design, Vol.86, No.doi:10.1016/j.fusengdes.2011.06., pp.1-5, 2011
21. 山本 義暢, 功刀 資彰, 辻 義之: 高プラントル数乱流熱伝達の直接数値計算における適切な空間解像度に関する考察: 日本伝熱学会論文集 (TSE), Vol.19, No.3, pp.59-70, 2011
22. 山本義暢, 功刀資彰: 高レイノルズ数MHD乱流場における高プラントル数熱伝達: 第47回日本伝熱シンポジウム講演論文集, Vol.3, pp.529-530, 2010
23. Y. Yamamoto and T. Kunugi: Direct Numerical Simulation of MHD Turbulent Flows with High-Pr Heat Transfer: Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2010 (SNA + MC2010), No.Paper No.10351, pp.1-6, 2010
24. Y. Yamamoto, T. Kunugi and F. Li: High-Pr Heat Transfer in Viscoelastic Drag-Reducing Turbulent Channel Flow: T. Yao (ed.), Zero-Carbon Energy Kyoto 2009, pp.58-64, 2009
【5200 土木工学】
25. 岩堂哲也, 森脇 亮, Siegfried RAASCH, Marcus Oliver LETZEL: 建物アスペクト比の変化に伴う都市キャノピー流れの変化に関する数値実験: 土木学会水工学論文集, Vol.55, pp.S331-S336, 2011
【5600 総合工学】
26. Koji Eriguchi, Yoshinori Nakakubo, Asahiko Matsuda, Masayuki Kamei, Yoshinori Takao, and Kouichi Ono: Threshold Voltage Instability Induced by Plasma Process Damage in Advanced Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistors: Jpn. J. Appl. Phys., Vol.49, pp.08JC02-1-08JC02-5, 2010
27. Takumi Saegusa, Koji Eriguchi, Kouichi Ono, and Hiroaki Ohta: Molecular Dynamics Evaluation of Thermal Transport in Naked and Oxide-Coated Silicon Nanowires: Jpn. J. Appl. Phys., Vol.49, pp.095204-1-095204-4, 2010
【6500 農業工学】
28. Hiroyuki ONOYAMA, Chanseok RYU, Masahiko SUGURI, Michihisa IIDA: Estimation of Rice Taste Property Using Hyperspectral Remote Sensing: 5th International Symposium on ISMAB, Apr. 5-7, 2010
29. 柳 讚錫, 村主勝彦, 梅田幹雄: 地上部ハイパースペクトルカメラによる生育中のチャの収量と品質推定: 日本リモートセンシング学会, Nov. 9-10, 2010
30. Yusuke SOHARA, Chanseok RYU, Masahiko SUGURI, Si-bum Park, Shigenobu Kishino: Estimation of Catechins Concentration of Green Tea Using Hyperspectral Remote Sensing: IFAC International Conference Agricontrol 2010, Dec. 6-8, 2010
31. Hiroyuki ONOYAMA, Chanseok RYU, Masahiko SUGURI, Michihisa IIDA: Estimation of Nitrogen Contents in Rice Plant at the Panicle Initiation Stage Using Ground-Based Hyperspectral Remote

Sensing: IFAC International Conference
Agricontrol 2010, Dec. 6-8, 2010

大型計算機システム利用負担金

(2009年10月1日より)

別表1 スーパーコンピュータシステム

コース	タイプ	セット	利用負担額	提供サービス					
				システム	バッチ	システム資源	経過時間 (時間)	ディスク (GB)	利用者 番号
エントリー	—	基本	12,600 円/年	Thin SMP	共有	最大1ノード相当(並列数16、メモリ32GB)	1	60	—
パーソナル	タイプ1	基本	100,000 円/年	Thin SMP	共有	最大2ノード相当(並列数32、メモリ64GB)	168	600	—
	タイプ2	基本	100,000 円/年	Fat SMP	共有	最大2ソケット相当(並列数8、メモリ64GB)	168	600	—
グループ	タイプ1	最小	250,000 円/年	Thin SMP	優先	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	336	2,000	6
		追加単位	250,000 円/年				—	2,000	6
	タイプ1B	最小	300,000 円/年	Thin SMP	準優先	4ノード((16コア、メモリ32GB) × 4)	336	2,400	12
		追加単位	150,000 円/年				—	1,200	6
	タイプ1C	最小	750,000 円/年	Thin SMP	占有	4ノード((16コア、メモリ32GB) × 4)	336	4,000	12
		追加単位	375,000 円/年				—	2,000	6
	タイプ2	最小	400,000 円/年	Fat SMP	優先	4ソケット(16コア、メモリ128GB)	336	4,000	12
		追加単位	200,000 円/年				—	2,000	6
	タイプ2B	最小	240,000 円/年	Fat SMP	準優先	4ソケット(16コア、メモリ128GB)	336	2,400	12
		追加単位	120,000 円/年				—	1,200	6
大規模ジョブ	タイプ1	最小	24,000 円/週(7日)	Thin SMP	優先	4ノード((16コア、メモリ32GB) × 4)	—	—	—
		追加単位	6,000 円/週(7日)				—	—	—
	タイプ2	最小	20,000 円/週(7日)	Fat SMP	優先	4ソケット(16コア、メモリ128GB)	—	—	—
		追加単位	5,000 円/週(7日)				—	—	—
専用クラスター	—	最小	750,000 円/年	Thin SMP	—	4ノード((16コア、メモリ32GB) × 4)	—	4,000	12
	—	追加単位	375,000 円/年				—	2,000	6
ライセンスサービス			20,000 円/年	可視化ソフト(AVS,ENVI/IDL)およびプリポストウェアの1ライセンスにつき					

備考

- 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
 - 大判プリンタサービス
 - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ライセンスサービスの申請には、大型計算機システムの利用者であることが必要である。
- 「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。
「準優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。
「優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。
「占有」：稼働状況によらず記載値(以上)の計算資源が確保されることを保証する。
- ディスク容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。
- グループコース及び専用クラスターコースのシステム資源は、下記の負担額を支払うことにより増量することができる。
なお増量は各月1日に実施し、増量した資源は当該年度末までの期間にわたって利用されるものとする。

コース	タイプ	追加負担金額(増量単位あたり)	システム資源増量単位	ディスク増量(GB)
グループ	タイプ1	25,000 円/月	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	2,000
	タイプ1B	15,000 円/月	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	1,200
	タイプ1C	37,500 円/月	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	2,000
	タイプ2	20,000 円/月	2ソケット(8コア、メモリ64GB)	2,000
	タイプ2B	12,000 円/月	2ソケット(8コア、メモリ64GB)	1,200
専用クラスター	—	37,500 円/月	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	2,000

7. グループコース及び専用クラスターコースを通年でなく利用する場合には、下記の負担額を支払うものとする。
ただし、利用期間は当該年度内に限るものとする。

利用期間		3ヶ月		6ヶ月		9ヶ月	
グループコース	タイプ1	最小	100,000 円	150,000 円	225,000 円		
		追加単位	100,000 円	150,000 円	225,000 円		
	タイプ1B	最小	120,000 円	180,000 円	270,000 円		
		追加単位	60,000 円	90,000 円	135,000 円		
	タイプ1C	最小	300,000 円	450,000 円	675,000 円		
		追加単位	150,000 円	225,000 円	337,500 円		
	タイプ2	最小	160,000 円	240,000 円	360,000 円		
		追加単位	80,000 円	120,000 円	180,000 円		
	タイプ2B	最小	96,000 円	144,000 円	216,000 円		
		追加単位	48,000 円	72,000 円	108,000 円		
専用クラスターコース	—	最小	300,000 円	450,000 円	675,000 円		
	—	追加単位	150,000 円	225,000 円	337,500 円		

8. グループコース及び専用クラスターコースの利用者番号は利用者あたり年額5,000円を負担することで追加できる。

9. 機関・部局定額制度

他機関又は学内における部局(『国立大学法人京都大学の組織に関する規程』第3章第2節から第11節で定める組織をいう。)の組織が、その組織単位でグループコースサービス(年間)の利用を申請する場合、料金表(年間)に掲載額の1.5倍を利用負担金とする。なお、利用負担金額が150万円未満の場合は100人、150万円を超える場合は、150万円毎に100人までの利用者を認める。

別表2(汎用コンピュータシステム)

区分	利用負担額	単位
VMホスティングサービス	126,000円/年	1仮想マシンにつき
ホームページサービス	31,500円/年	1ドメイン名につき
個人向けホームページサービス	12,600円/年	1アカウントにつき
メール転送サービス	12,600円/年	1ドメイン名につき

備考

1. 利用負担額は、総額表示である。
2. 上記表の汎用コンピュータシステムのサービスを利用するためには、大型計算機システムの利用者であることが必要である。
3. ホームページサービス及びVMホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことによりオプションサービスを利用することができる。

オプションサービス種別	利用負担額	単位
データベース(Oracle)	63,000円/年	1アカウントにつき
ストリーミング(Helix Server)	31,500円/年	1アカウントにつき

4. VMホスティングサービスのシステム資源は、下記の負担額を支払うことにより増量することができる。

種別	利用負担額	単位
ディスク	10,500円/年	100GBにつき
システム資源	100,800円/年	1台につき

システム資源1台とは、CPU:2コア、メモリ:2GB である。

5. VMwareを用いたVMホスティングサービスは、下記の負担額を支払うことにより利用・増量することができる。ただし、システム資源が非常に限られているためサービスを提供できる場合が限定される。

種別	利用負担額	単位
標準機能サポート	25,200円/年	1仮想マシンにつき
ディスク	10,500円/年	100GBにつき
システム資源	201,600円/年	1台につき

システム資源1台とは、CPU:1コア、メモリ:2GB である。

6. 利用負担額は、当該年度(4月から翌年3月まで)の利用に対して年額として算定するが、年度途中から利用を開始する場合には月数に応じて減額する。

別表3 スーパーコンピュータシステム(民間機関利用)

システム	システム資源	経過時間(時間)	ディスク(GB)	利用者番号	利用負担額
Thin SMP	4ノード((16コア、メモリ32GB)×4)	336	2,400	12	1,200,000 円/年
	6ノード((16コア、メモリ32GB)×6)	336	3,600	18	1,800,000 円/年
	8ノード((16コア、メモリ32GB)×8)	336	4,800	24	2,400,000 円/年

備考

1. 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。
2. ディスク容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。
3. 通年でなく利用する場合には、下記の負担額を支払うものとする。
ただし、利用期間は当該年度内に限るものとする。

システム資源	利用期間		
	3ヶ月	6ヶ月	9ヶ月
4ノード	300,000 円	600,000 円	900,000 円
6ノード	450,000 円	900,000 円	1,350,000 円
8ノード	600,000 円	1,200,000 円	1,800,000 円

— サービス利用のための資料一覧 —

1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

- Thin SMP クラスタ : thin.kudpc.kyoto-u.ac.jp
 - Exceed onDemand 接続 : thinX11.kudpc.kyoto-u.ac.jp
 - Fat SMP クラスタ : fat.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- ※ ホストへの接続は SSH(Secure Shell)のみ、telnet, ftp は不可

2. 問い合わせ先 & リンク集

- 情報環境機構のホームページ
<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/>
- 学術情報メディアセンターのホームページ
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
- スーパーコンピュータシステムに関する問い合わせ先
 - 利用申請などに関する問い合わせ先
【共同利用支援グループ・共同利用担当（北館窓口）】
E-mail : zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7424 / Fax : 075-753-7449
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/>
 - システムの利用など技術的な問い合わせ
【研究支援グループ】
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7426
URL: <http://web.kudpc.kyoto-u.ac.jp/>
- ホームページ・ホスティングサービスに関する問い合わせ先
【情報環境支援グループ】
E-mail : whs-qa@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7494
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/whs/>
- コンテンツ作成支援サービスに関する問い合わせ先
【コンテンツ作成室】
E-mail : cpt@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-9012
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/content/>

編 集 後 記

ネコの話 私はネコが大好きだ。ペットショップで高額な値段で取引される血統書付きの子ネコたちはとても可愛いのだが何とも言えぬ虚しさを感じてしまう。買い手のつかない子ネコが成長とともに値段が下げられていくのが何だか…子ネコの値段をどうやって決めるのか知りませんが売手と買手で希望価格の折り合いをつけて適切な値段を決めるのかな？子ネコの売買に興味は無いです。そろそろ来年の日めくり&週めくりネコカレンダーの準備を始めないといけません。玄関と居間と寝室の3部屋にそれぞれ違うカレンダーを置き週ごと日ごとにネコを楽しみませす。ネコと暮らせるマイホームはまだまだ先になりそうです。

H. A

今年、何回か山に登る機会がありました。一つは3000m越えの有名な山。歩いてしか見られない風景や達成感はなんともいえません。でも下山時にバテてしまい予定通り帰れないかもと情けない気持ちに…経験があり準備も万端な同行者と現代の山道具の助けでなんとか無事下山しましたが日頃の運動不足を反省しました。もう一つは600m程の近郊の山。学生や同僚と秋の京都を満喫しました。しかし途中で道迷い。スマホも山道までは案内してくれません。一人に準備を任せきりだったことを反省。幸い事無きを得ましたがどんな山でも日頃と事前の準備があつてこそ。まずは定期的な運動の時間確保から、かな。

エセ登山者

京都大学学術情報メディアセンター全国共同利用版広報 Vol. 10, No. 2

2011年 12月 26日発行

編集者 京都大学学術情報メディアセンター
 広報教育委員会・全国共同利用版広報編集委員会
 発行者 〒606-8501 京都市左京区吉田本町
 京都大学学術情報メディアセンター
 Academic Center for Computing and Media Studies
 Kyoto University
 Tel. 075-753-7400
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
 印刷所 〒616-8102 京都市右京区太秦森ヶ東町 21-10
 株式会社エヌジーピー

広報編集部会

岩下 武史 (部会長)

平石 拓 (副部会長)

赤坂 浩一

秋田 祐哉

小西 満

斎藤 紀恵

高見 好男

元木 環

表紙デザイン：谷 卓司

(ティアンドティ・デザインラボ)

