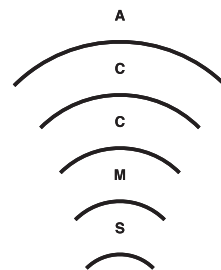


京都大学学術情報メディアセンター

Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University

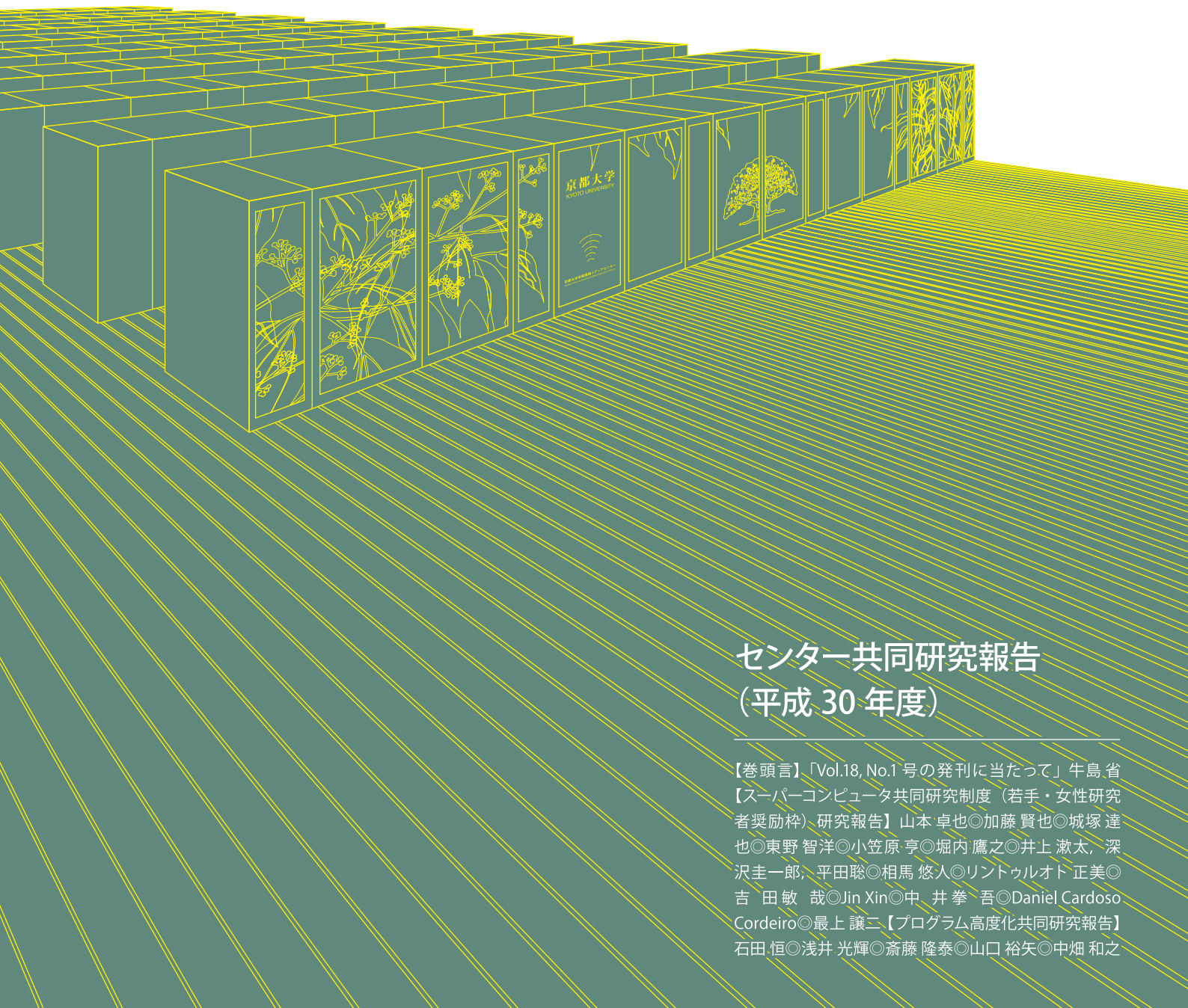


広報

全国共同利用版

Vol.18, No.1 2019

ISSN 1347-3581



センター共同研究報告 (平成30年度)

【巻頭言】「Vol.18, No.1号の発刊に当たって」牛島省
【スーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性研究者奨励枠）研究報告】山本卓也◎加藤賢也◎城塚達也◎東野智洋◎小笠原亨◎堀内鷹之◎井上漱太、深沢圭一郎、平田聡◎相馬悠人◎リントゥルオト正美◎吉田敏哉◎Jin Xin◎中井拳吾◎Daniel Cardoso Cordeiro◎最上譲二【プログラム高度化共同研究報告】石田恒◎浅井光輝◎斎藤隆泰◎山口裕矢◎中畑和之

Vol.18, No.1 号の発刊に当たって

京都大学学術情報メディアセンター 牛島 省

本号では、京都大学学術情報メディアセンターにおいて実施された平成 30 年度の共同研究報告について特集いたします。平成 30 年度は、「若手・女性研究者奨励枠」では 14 件、「プログラム高度化共同研究」では 5 件の共同研究が実施されました。

学術情報メディアセンターでは、スーパーコンピュータ共同研究制度として、「若手・女性研究者奨励枠」、「大規模計算支援枠」、「プログラム高度化共同研究」という 3 種類の研究支援事業を実施しています。課題募集は年度開始前後に行われます。また、年度途中で追加募集が実施される場合があります。応募された課題の採否は、スーパーコンピュータ共同研究企画委員会にて審査されます。本共同研究制度への応募方法や申込み時期等の詳細につきましては、<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/support/kyodo/>をご参照下さい。

上記の共同研究制度のうち、「若手・女性研究者奨励枠」の応募資格は、(1) 40 歳未満の若手研究者 (学生を含む、性別は問わない)、あるいは、(2) 女性研究者 (年齢は問わない)、とされています。この「若手・女性研究者奨励枠」では、スーパーコンピュータを利用することで学術的にインパクトがある成果を創出できる課題に対して、計算機利用負担金の全額または一部を本センターが負担しています。さらに、「若手・女性研究者奨励枠」は、JHPCN (学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点) の活動の一環と位置づけられており、優れた課題は、JHPCN の萌芽型共同研究へ推薦されます。推薦された課題は、JHPCN シンポジウムにてポスター発表を行うことが可能となるなどの特典がありますので、是非この共同研究制度をご活用ください。本号に掲載された 14 件の「若手・女性研究者奨励枠」の研究成果報告では、複雑流体および流体構造連成問題、ウマの群れの個体間の力学モデル計算、コンクリートの破壊力学、量子化学、各種の分子動力学計算、結晶生成などに関する多様な研究が行われ、全国 7 大学の若手・女性研究者の研究をサポートいたしました。なお、JHPCN の萌芽型共同研究には 10 件の課題が採択されました。

また、「プログラム高度化共同研究」では、京都大学のスーパーコンピュータをグループコースまたは専用クラスターコースでご利用の研究者 (JHPCN および HPCI にて京都大学のスーパーコンピュータを利用する研究者も含む) を対象に、プログラムの制御構造・データ構造の改良による性能チューニングや並列化手法の改良、問題分割・負荷分散方式などの改良による大規模計算プログラムの高度化・高性能化などを支援しています。平成 30 年度は、(1) 分子シミュレーションによるヌクレオソーム構造変化の網羅的探索、(2) 巨大津波遡上時の木造家屋の瓦礫生成過程シミュレーション、(3) 異方性弾性波動問題に対する演算子積分時間領域境界要素法の高性能化、(4) 飽和土の大規模変形・流動計算を目的とした固液混合 MPM の開発、(5) 強い音響異方性を有する CFRP に対する開口合成法の高速度実行、という 5 件のプログラム高度化支援を行いました。これらの共同研究では、各種環境変数の感度分析、逐次計算コードのスレッド並列化と行列計算ライブラリの活用、ハイブリッド並列演算におけるパラメータサーベイ、MPI 並列コードのハイブリッド並列化、メモリアクセスの効率化などが実施され、10 倍以上の高速化が実現した課題もあります。このように、多分野にわたる解法の高度化・高性能化が行われており、計算効率を向上させる際の参考になると思います。

今後も皆様の研究、教育にご活用いただけるようにセンター教職員も尽力していきますので、ご利用・ご支援のほど、よろしくごお願い申し上げます。

機械攪拌操作時気泡巻き込みに対する数値解析

山本 卓也

東北大学大学院環境科学研究科先端環境創成学専攻

1 緒言

液体材料を混合する操作は多くの工業プロセスで用いられ、金属生産プロセス、化学プロセス、食品プロセス等によく見られる。この混合プロセスでは回転する翼を利用した機械的攪拌操作がよく利用される。

本研究では金属生産プロセスでの機械攪拌操作に注目するが、鉄鋼プロセスでは KR (Kanbara Reactor) 法と呼ばれる脱硫プロセス、アルミニウム生産プロセスでは脱アルカリ金属等のために利用されるフラックス処理、脱水素処理、均一な合金生成のための攪拌[1]等に利用される。KR 法では溶銑表面に散布した CaO 粒子を巻き込み、硫黄をスラグ中へと分離する。また、アルミニウム生産プロセスではアルミニウムは空気中の水蒸気と反応して不純物となる皮膜を熔融金属表面に形成するため、これを巻き込まずに攪拌する必要がある。上述のプロセスでは、機械攪拌中での液面振動メカニズムが重要となる。

本研究では、機械攪拌操作中での気液界面巻き込み現象のメカニズムを解明するため、VOF 法を利用して中心、偏心攪拌時の液面変動メカニズムを解明した。

2 数値解析手法

内径 192 mm、深さ 400 mm の円筒容器内に水を 320 mm まで満たし、6 枚パドル翼を液深 40 mm まで浸漬させた。翼端直径は 60 mm であるとし、今回利用したパドル翼は熔融金属系への適用を目指し、翼厚が 6 mm とした。翼は 300 rpm、400 rpm で回転させた。翼を円筒容器軸中心位置と 60 mm 偏心した位置に配置した。

数値シミュレーションでは、Navier-Stoke 式、連続式を解き、気液界面追跡手法としては代数的 Volume of Fluid (VOF)法を利用した。本解析条件では攪拌 Reynolds 数は 18,000、24,000 であったため、乱流モデルとして LES を利用した。計算格子は翼付近、気液界面付近で細分化し、総格子点数はおおよそ 4,000,000 点であった。詳細な数値シミュレーション手法に関しては、著者らの既報に記載されている[2]。今回のシミュレーションは全てオープンソースである OpenFOAM を利用した。

3 結果と考察

本研究では数値シミュレーション結果を検証するため、高速度ビデオカメラによる撮影と気泡巻き込み条件の測定を行った。中心、偏心のそれぞれで気泡巻き込み回転数はそれぞれ 390 rpm、460 rpm であった。数値シミュレーションでは、中心位置の 400rpm のみで気泡を巻き込んだ。これは定性的に一致している。さらに、高速度ビデオカメラにより得られた界面振動位置と数値シミュレーションによって得られた界面振動位置は良好に一致した。このため、数値シミュレーションは良好に実験を表していると言える。

回転数 300 rpm、400 rpm の場合の中心、偏心位置における時間平均化した界面高さ分布を Fig. 1 に示す。中心攪拌の方が大きく液面が変形し、軸中心でより大きく凹んだ形状となる。一方で偏心攪拌の場合、液面の平均位置は中心攪拌と比べると平坦な分布となる。特に、側壁と攪拌軸の間で液面が盛り上がり、より平坦な液面高さ分布へと変化する。このように平均液面高さが変化した理由を考察するため、偏心攪拌の場合の Fig. 1 の

点線上の断面平均速度ベクトルを Fig. 2 に示す。攪拌翼から吐出された強い流れは側壁と衝突し、上昇流へと変換される。この側壁付近の上昇流が気液界面を持ち上げる。このため、Fig. 1 に示した攪拌軸と側壁間の液面盛り上がりへと繋がり、気液界面変動幅が小さくなる。

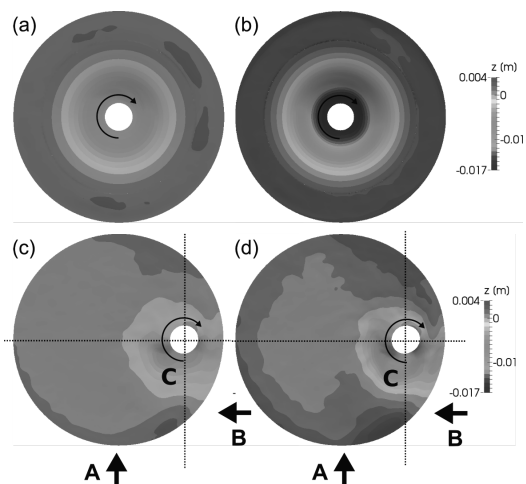


Fig. 1 Time-averaged height of free surface with different impeller location and rotation speed: (a) on-axis 300 rpm, (b) on-axis 400 rpm, (c) eccentric 300 rpm, and (d) eccentric 400 rpm.

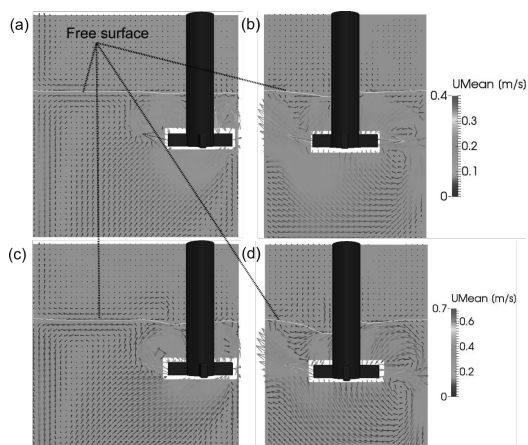


Fig. 2 Time-averaged cross-sectional velocity vectors generated by eccentric stirring (a), (c) viewed from point A in Fig. 1, (b), (d) viewed from point B in Fig. 1. The rotation speeds are (a), (b) 300 rpm and (c), (d) 400 rpm.

中心、偏心攪拌時の動的な界面挙動を Figs. 3, 4 に示す。中心攪拌の場合には大きく変動し回転する部分が二箇所存在するものの、偏心攪拌の場合には、そのような大きな変動は存在せず、小さいランダムな変動が発生する。これは、中心攪拌ではマクロ不安定性の効果が大きくなり、偏心攪拌ではマクロ不安定性が発生しにくくなるからであ

る。

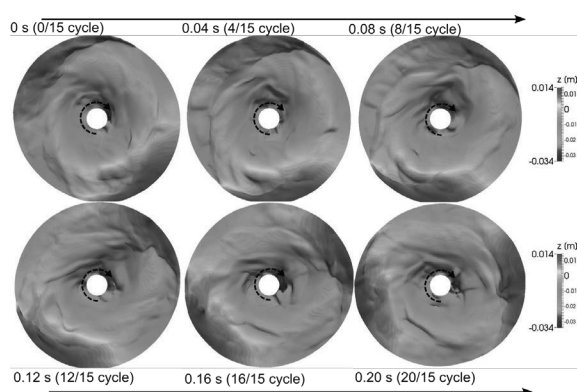


Fig. 3 Snapshots of free-surface height in the case of on-axis stirring with 400 rpm rotation.

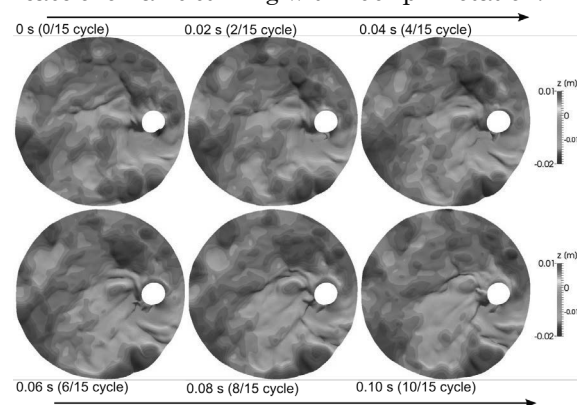


Fig. 4 Snapshots of free-surface height in the case of eccentric stirring with 400 rpm rotation.

4 結言

本研究では機械攪拌時の液面からの気泡巻き込みメカニズムを解明するため、中心攪拌、偏心攪拌時の液面変動挙動を解明した。攪拌方法によって液面の平均位置が異なり、動的な変動挙動も全く異なることがわかり、それぞれのメカニズムを解明することができた。

引用文献

- [1] V. S. Warke *et al.*, J. Mater. Process. Technol. **168** (2005) 119-126.
- [2] T. Yamamoto *et al.*, Chem. Eng. J. **367** (2019) 25-36.

謝辞

本研究制度(若手・女性研究者奨励枠)を活用させて頂いたことを、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

大規模溶解炉における溶融アルミニウム機械攪拌時の流動解明

加藤 賢也

東北大学大学院環境科学研究科先端環境創成学専攻

1 緒言

国内アルミニウム産業における最初の生産プロセスは、輸入したアルミニウム地金を溶解炉で溶かし、その後不要元素を除去し、合金成分を調整するための溶湯処理プロセスである。この溶湯処理プロセスでは、機械攪拌を行いながら溶融アルミニウム中へとハロゲン化物を含む溶融塩、もしくは、塩素ガスが導入され、不純物を浮上分離させる[1]。この溶湯処理は大規模、不透明かつ高温であるため、その実験による観測が困難である。

溶融処理の一つにフラックス処理という不純物除去処理がある。ここでは、フラックスと呼ばれる粉末状の固体粒子を溶融アルミニウム中へと散布し、不純物と固体粒子が反応し、浮上させる。この反応効率を向上させることが現場技術では求められているが、上記の問題より実験的な観測が困難である。

本研究では、水を用いたモデル実験と数値シミュレーションを活用し、効率の良いフラックス処理条件を調査した。

2 実験手法、数値解析手法

実機をスケールダウンした水モデル実験装置を作成し、NaOH と HCl の反応を利用した物質移動実験を用いた。Figure 1 に実験装置の概略図を示す。図中に示すような水槽に HCl 水溶液(3.5 molL⁻¹)を満たし、攪拌翼を槽の端に配置し、一定速度で回転させた。ここで利用した翼形状は、アルミニウム産業で利用されているものである[2]。その上に、NaOH 水溶液(2.0 molL⁻¹)に 72 時間浸した後に乾燥させたパーライト粒子(三井金属、比重 0.21)を 170 g 散布した。このパーライト粒子表

面に付着した Na⁺イオンと HCl 水溶液中の H⁺イオンの交換反応が生じ、水溶液の pH が変動する。pH の変動を Fig. 1 中に示された 4 箇所(A-D 点)で測定し、pH の変化から物質移動係数を導出した[3]。各測定点での物質移動係数の平均値を槽の物質移動係数と定義して時計方向 (CW)、半時計方向 (CCW)回転の結果を比較した。

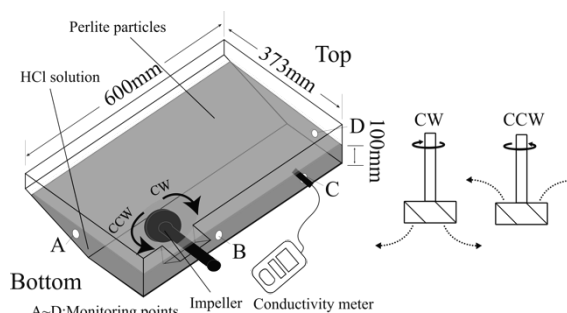


Fig. 1 Schematic representation of water model experiment [4].

槽内の流動を可視化するために、同時に数値解析を行った。槽内の流動のみに着目し、Navier-Stokes 式、連続式を解いた。ここで、攪拌 Reynolds 数は 30000 (500 rpm), 60000 (1000 rpm)であったため、乱流モデルとして Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS), k- ω SST モデルを利用した。攪拌翼の回転を表現するために、Multi Reference Frame (MRF)法を利用し、翼付近のみ回転領域であるとした。数値解析手法の詳細は既報[2]と同様である。総計算格子点数は約 125 万点であり、計算は全てオープンソースである OpenFOAM を利用して行われた。

3 結果と考察

水モデル実験によって得られた物質移動係数を Fig. 2 に示す。回転数が増大するにつれ物質移動係数は増大し、回転方向が CCW の方が CW より

大きい。このようになった原因を調査するために、数値解析結果より考察する。

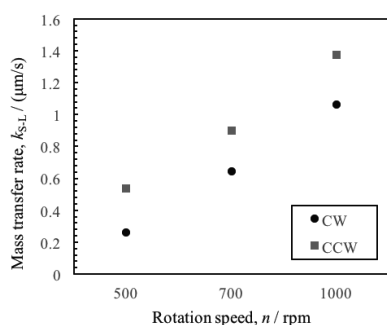


Fig. 2 Mass transfer coefficient with different rotation direction and rotation speed of impeller [4].

パーライト粒子は比重が小さいため、流れの影響がなければ自由表面上に浮遊する。これが本実験中では槽内部へと巻き込まれた。このような状況下で物質移動は、1. 乱流変動による巻き込み、2. 巻き込まれた粒子表面での物質移動が関与すると考えられる。ここでは、最初に関わる現象である自由表面上での現象に注目する。数値解析により得られた自由表面における乱流エネルギー分布と速度分布を Figs. 3,4 に示す。CW では乱流エネルギーが小さく、CCW では大きくなる。また、回転数の増大に伴って自由表面上の乱流エネルギーが増大する。速度分布の場合には、回転数の増大に伴って速度が増大するものの、速度の絶対値としては回転方向に対しては大きく変化しない。このため、乱流エネルギーが要因で物質移動係数の回転方向依存性が引き起こされたと考えられる。このため、CCW においては自由表面上で大きい乱流速度変動によって粒子巻き込みが促進され、槽内部では粒子表面における濃度境界層が薄くなり、物質移動が増大することで、槽全体の物質移動係数が増大したと考えられる。これらの議論の詳細に関して既報の論文[4]を参照して頂きたい。

4 結言

本研究ではアルミニウムの溶湯処理の一つである機械攪拌操作を伴うフラックス処理を模擬したモデル実験と数値シミュレーションを行った。実験結果によると、攪拌翼の回転方向によって物質移動係数が大きく変化した。これは回転方向の違いによって気液界面での乱流変動が大きく変化した、

モデル粒子の巻き込みが大きく変化したからである。

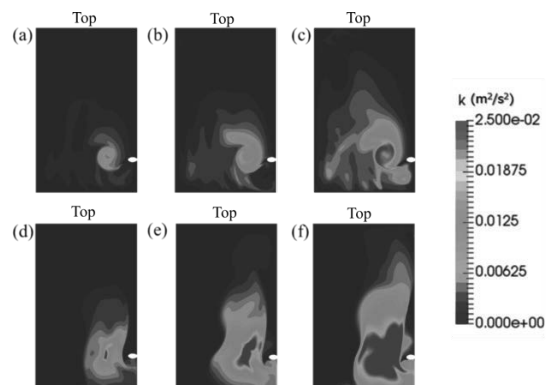


Fig. 3 Distribution of turbulent kinetic energy on the free surface: (a)-(c) CW, (d)-(f) CCW, (a),(d) 500 rpm, (b), (e) 700 rpm, (c), (f) 1000 rpm [4].

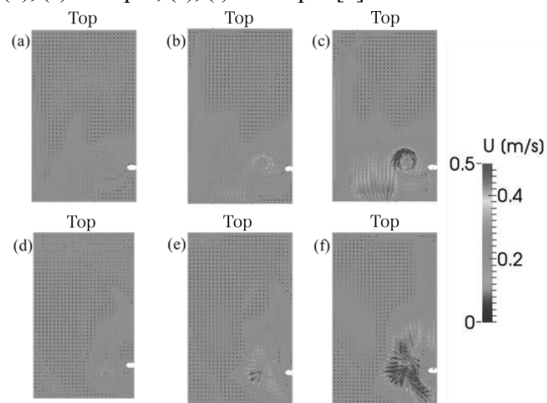


Fig. 4 Velocity distribution on the free surface: (a)-(c) CW, (d)-(f) CCW, (a),(d) 500 rpm, (b), (e) 700 rpm, (c), (f) 1000 rpm [4].

引用文献

- [1] M. E. Schlesinger, Aluminum Recycling, second edition (CRC press, Florida 2014).
- [2] T. Yamamoto, K. Kato, S. V. Komarov, Y. Ueno, M. Hayashi, Y. Ishiwata, J. Mater. Process. Technol. 259 (2018) 409-415.
- [3] R. Shiba, M. A. Uddin, Y. Kato, S. Kitamura, ISIJ Int. 54 (2014) 2754-2760.
- [4] K. Kato, T. Yamamoto, S. V. Komarov, R. Taniguchi, Y. Ishiwata, Mater. Trans. 60 (2019) 2008-2015.

謝辞

本研究制度(若手・女性研究者奨励枠)を活用させて頂いたことを、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

界面分光の分子動力学シミュレーション

城塚 達也

茨城大学工学部物質科学工学科

1 はじめに

固体と液体の界面に代表される埋もれた界面は学術的・工業的に極めて重要であるが、その分子レベルでの反応メカニズムには未だに多くの謎が存在する。そこで、近年発展が著しい和周波発生 (SFG) 分光法を申請者がこれまで開発してきた手法により解析し、界面現象を明らかにする。特に、本研究ではシリカ・水界面と酸化チタン・水界面における構造やダイナミクスを調べる。古典・第一原理分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて界面分光の1つである SFG 分光法を解析する。

2 手法

まず SFG スペクトルの計算では申請者が開発した手法を用いた。[1-3] 固体・液体界面を生成する必要がある場合には、第一原理 (DFT) 計算を用いて水との界面を生成し表面構造を実験と比較する。実験では表面にどれだけの分子が吸着しているか不明な部分が多いため、ここではまず静的な界面構造を議論する。酸化チタン・水界面における電荷分離状態を電子状態計算により再現し、最終的に光触媒や超親水性の分子メカニズムを議論する。

その後、得られた構造で高精度の量子化学計算を行い分子動力学 (MD) シミュレーションでの分子力場を構築する。これらの計算では cp2k や Gaussian などの汎用計算プログラムを用いる。得られた力場を使い SFG スペクトル、水の拡散係数や再配向時間などのダイナミクスを古典 MD シミュレーションにより計算し、実験と比較する

ことにより分子メカニズムを解析する。界面構造とダイナミクスとの相関やイオン効果などは実験でも観測されているため、本研究によりそれらの分子レベルでの描像を明らかにする。一般に古典 MD シミュレーションでは非分極の分子モデルが多用されるが分光スペクトルの再現は難しいため、この計算では高精度な分極モデルを用いることにより実験観測量の議論が可能となる。

このような界面系では系の大きさを十分大きくとらないと実験結果と比較し検討することはできないため、全原子数は約数千原子になる。また、水分子には分極モデルを採用し、シミュレーション時間は数十 ns になる。計算には高並列化された in-house コードを用いた。

3 結果

初めに、パルミチン酸単分子膜と水溶液界面の解析を行った。[1] この研究は和周波発生 (SFG) 分光法における電気二重層の重要性をアメリカの実験家と理論家との共同研究で初めて明らかにすることができた。実験は理論的に計算が困難な表面ポテンシャルを測定し、理論は実験では解明が難しい電気二重層の重要性と界面構造を明らかにすることができた。そのため、実験と理論が相補的な役割を果たすことができた。このように、界面での水溶液の構造・ダイナミクスを解明することによって、化学反応に与える影響や界面での性質に関する知見を得ることができた。

また、SFG 分光法における電気二重層の重要性を一般的な電解質水溶液に拡張し、実験ではこれまで明らかにならなかった電気二重層効果のイオン濃度依存性を始めて明らかにすることができ

た。[2, 3] 本研究の成果は今後 SFG 分光を他の固体と液体界面に応用する際に基礎的なデータ・知見を提供することができた。

これらに加えて、金属表面の化学反応に関する実験との共同研究も実施した。本研究では主に VASP や cp2k などのパッケージプログラムを使用し、実験的には明らかでなかった CVD (chemical vapor deposition) における律速段階の解析やその分子メカニズムを解明した。[4, 5]

(Figure 1 top) 最後に、上記と同様の手法を用いることにより酸化チタン・水界面における電荷分離状態の電子状態計算の基盤を構築することができた。(Figure 1 bottom)

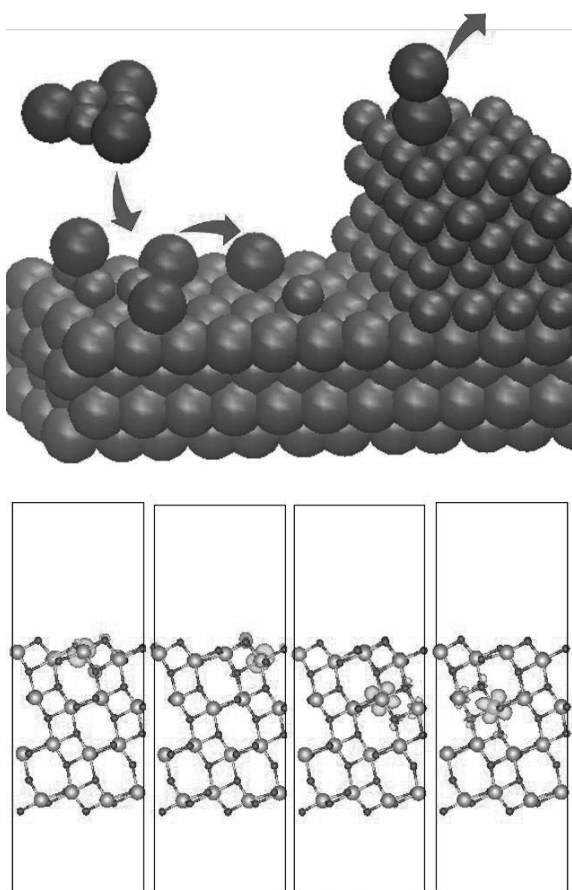


Figure 1. (Top) Schematic of CVD processes considered in Ref. [4]: Adsorption of precursors, migration of adsorbates and desorption of by-product. (Bottom) Polaron (excess electron) simulated in this study at the anatase (101) surface.

4 おわりに

荷電した界面における SFG スペクトルを計算する手法を開発し、パルミチン酸単分子膜と水溶液界面やシリカ・水界面などに応用した。この研究により得られた知見は脂質膜、シリカのような無機化合物、金属酸化物、燃料電池の固体高分子膜など幅広い系にとって有益であり、実験の SFG の測定はすでになされているのでこの研究のアプローチが直接適用できる。本研究の解析は荷電した界面では本質的であり、電気二重層など界面の本質に迫る事ができ、分子科学・表面科学としても非常に意義深い。また、銅の CVD 法による堆積のシミュレーションを行い実験的に観測された律速段階を明らかにすることができた。今後は、酸化チタン・水界面での水分子の役割や異なる界面における反応性の違いなどを解析する予定である。

謝辞

本研究では、京都大学学術情報メディアセンターの共同研究制度（若手奨励枠）を活用させていただきました。

参考文献

- [1] S. K. Reddy, R. Thiriaux, B. A. W. Rudd, L. Lin, T. Adel, T. Joutsuka, F. M. Geiger, H. C. Allen, A. Morita, and F. Paesani, *Chem*, 4 (7), 1629–1644, 2018.
- [2] T. Joutsuka, T. Hirano, M. Sprik, and A. Morita, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20 (5), 3040–3053, 2018.
- [3] T. Joutsuka and A. Morita, *J. Phys. Chem. C*, 122 (21), 11407–11413, 2018.
- [4] T. Joutsuka and S. Yamauchi (原稿準備中).
- [5] T. Nishikawa, K. Horiuchi, T. Joutsuka and S. Yamauchi (投稿中).

高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と電子物性の相関解明

東野 智洋

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻

1 緒言

ポルフィリンは400~450 nmにSoret帯と呼ばれる強い吸収と550~600 nmにQ帯と呼ばれる中程度の吸収をもち、増感色素として有望である。しかし、単純な構造のポルフィリン色素では長波長の太陽光を効率よく利用することができないため、光捕集能を改善させる分子設計が必要である。近年ではプッシュプル構造を導入することによって、10%を超える変換効率が実現されてきている。最近、ベンゾチアジアゾールを用いたプッシュプル型の色素 **XW17** を増感色素として用いた系で9.5%という高い変換効率が達成されている^[1]。また、有機薄膜太陽電池において、ベンゾチアジアゾールよりも電子求引性の高いナフトビスチアジアゾールを用いることで光捕集能が改善し、変換効率も向上することが報告されている^[2]。しかし、色素増感太陽電池の増感色素にナフトビスチ

アジアゾール基を用いた例は無かった。そこで本研究では、光捕集能のさらなる向上を狙い、**XW17**の構造にナフトビスチアジアゾール基を導入した色素 **ZnPNTz** を設計・合成した (Figure 1)^[3]。

2 結果と考察

2.1 新規ポルフィリン色素の物性と太陽電池性能評価

色素増感太陽電池セル作製条件の最適化を行った結果、光電変換効率は **XW17** を用いたセルで8.14%となったのに対し、**ZnPNTz** を用いたセルでは3.63%となった。光電変換効率は **XW17** よりも低くなったが、**XW17** を用いたセルで光電流発生が見られたのが800 nm程度までであったのに対し、**ZnPNTz** を用いたセルでは860 nm付近まで光電流発生が見られた (Figure 2)。これは、ナフトビスチアジアゾール基の高い電子求引性によってプッシュプル特性が強められたことで **ZnPNTz** の吸収ピークが長波長化していたため

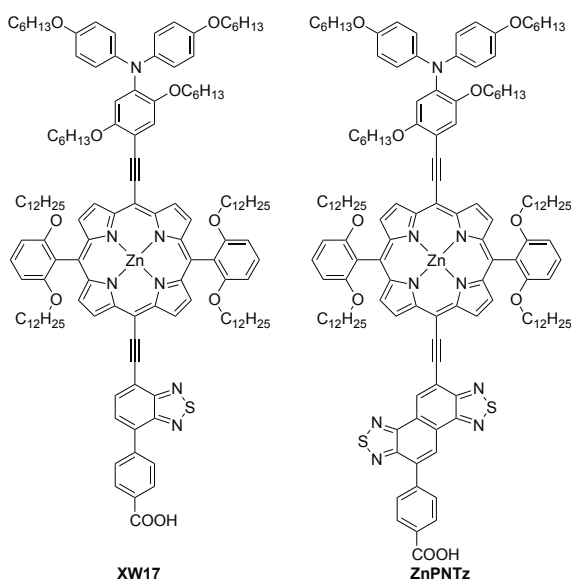


Figure 1. Molecular structures of porphyrin dyes.

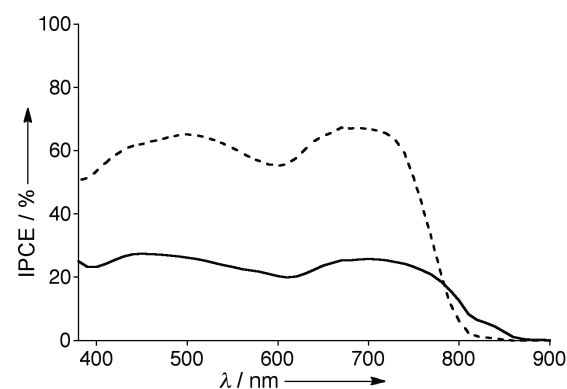


Figure 2. Photocurrent action spectra of the DSSCs based on **ZnPNTz** (solid line) and **XW17** (dashed line) under the best conditions.

あると考えられる。したがって、ナフトビスチアジアゾール基を活用することによって、近赤外光を効率よく利用可能できる色素を開発可能であると言える。

2.2 理論計算

ポルフィリン色素の最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、Gaussian09 プログラムを用いて密度汎関数法 (DFT) による理論計算を行った (B3LYP/6-31G(d))。Figure 3 にポルフィリン色素 **ZnPNTz** および **XW17** の基底状態での構造および最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO) における軌道分布を示す。トリアリールアミン、ナフトビスチアジアゾール基はどちらもポルフィリンと同一平面を取っており、共役系が効果的に広がっていることがわかった。また、**ZnPNTz** の LUMO が大きく安定化することによって HOMO-LUMO ギャップが小さくなっており、吸収ピークの長波長化が見られたことと一致した。一方で、カルボキシ基の LUMO での軌道分布は、**XW17**

よりも **ZnPNTz** で小さくなっていて、カルボキシ基の LUMO の軌道分布が小さく、励起状態の色素からの電子注入の効率が低くなってしまったと考えられる。このように、本計算結果は実験結果の理論的解釈の一助となった点で意義がある。

3 参考文献

- [1] Tang, Y.; Wang, Y.; Li, X.; Ågren, H.; Zhu, W.-H.; Xie, Y. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2015**, *7*, 27976–27985.
- [2] (a) Vohra, V.; Kawashima, K.; Kakara, T.; Koganezawa, T.; Osaka, I.; Takimiya, K.; Murata, H. *Nature Photonics* **2015**, *9*, 403–408. (b) Kawashima, K.; Fukuhara, T.; Suda, Y.; Suzuki, Y.; Koganezawa, T.; Yoshida, H.; Ohkita, H.; Osaka, I.; Takimiya, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 10265–10275.
- [3] Higashino, T.; Kurumisawa, Y.; Nimura, S.; Iiyama, H.; Imahori, H. *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, 2537–2547.

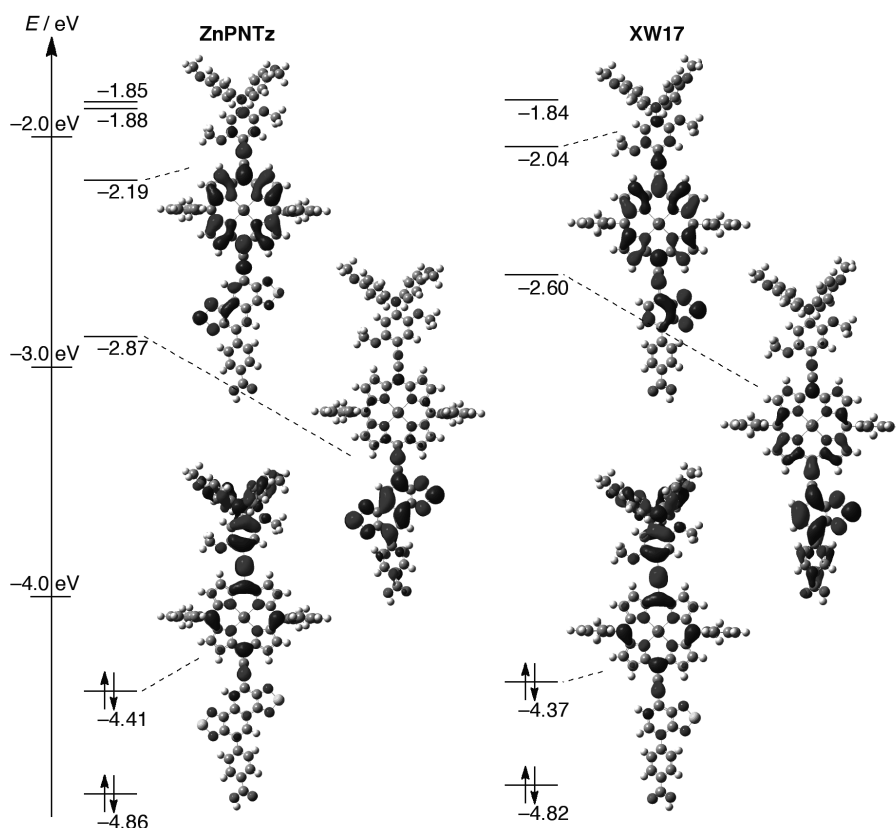


Figure 3. Selected Kohn–Sham orbitals for (a) **ZnPNTz** and (b) **XW17**, obtained by DFT calculations with the B3LYP/6-31G(d) level. To simplify the calculations, alkoxy groups were replaced with methoxy groups.

無重力下での高プラントル数流体における温度差マランゴニ効果に起因する

液柱内対流場の二次不安定性

小笠原 亨

東京理科大学大学院理工学研究科機械工学専攻

1 緒言

自由界面を有する気液界面において、温度分布が存在する場合、表面張力の温度依存性により表面張力が不均一となり、対流が生じる。この対流はマランゴニ対流と呼ばれ、微小重力環境下やマイクロスケール下で顕在化する。これは自然対流の駆動力の一つとして着目されている。例えば、単結晶材料生成方法の一つである floating-zone (以下, FZ) 法は、純度の高い単結晶材料を生成することができる。一方で、材料生産の高効率化のために、微小重力下で利用するとマランゴニ対流の不安定性によって生じる振動流が材料生成に悪影響を及ぼすことが知られている¹⁾。したがって、マランゴニ対流の不安定性に関する理解や制御の観点で研究が行われている。

図1は half-zone (以下, HZ) モデルと呼ばれる、FZ 法の半分を模擬した、最も典型的なモデルである。上下壁面間に液柱を形成し、上部を加熱、下部を冷却することで液柱自由表面上に温度勾配を付与し、上から下へマランゴニ対流を発生させる。この HZ モデルにおけるマランゴニ対流の不安定性にプラントル数 (以下, $Pr = \nu/\kappa, \nu$: 動粘性係数, κ : 熱拡散率) が影響を与えることが一般的に知られている²⁾⁻⁴⁾。まず、上下壁間の温度差が小さい時、液柱内対流場は二次元定常流になる。低 Pr 流体の場合、温度差を大きくすると、対流場は3次元振動流になり (一次不安定性)、その後3次元振動流に遷移する (二次不安定性)²⁾⁻¹¹⁾。高 Pr 流体においては、二次元定常流から3次元振動流に一気に遷移する (一次不安定性)^{2), 7), 10)}。この対流後の高次不安定性およびカオス化過程においても研究されている¹²⁾⁻¹⁵⁾。茂木 (2017)¹⁶⁾ はフ

ロケ理論によって $Pr = 4$ の二次不安定性における臨界レイノルズ数 $Re_c^{(2)}$ を明らかにした。しかし、非線形解析では対流等は明らかにされていない。本研究では二次不安定性に関して、直接数値計算および固有直交分解 (以下, POD)¹⁷⁾ を用いて解析を行った。

私が所属している研究室は、国際宇宙ステーション日本実験棟「きぼう」によって行われていた、MEIS (Marangoni Experiment in Space) や Dynamic Surf. と称される流体物理実験に参画していた。そして、今後、JEREMI (Japanese European Research Experiment on Marangoni Instabilities) と称される、流体実験を行う予定である。JEREMI では、気体側に強制対流を付与し、自由界面での熱伝達制御を行う予定である。

本研究では、マランゴニ対流の不安定化メカニズムの解明による理学的貢献、及び産業分野への波及効果を目指し、研究を実施している。

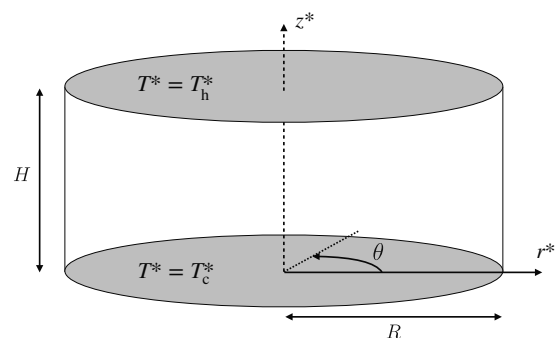


Fig. 1 Schematics of half-zone geometry

2 計算方法

液柱の高さを H 、半径を R とし、アスペクト比 $\Gamma = H/R$ と定義する (図1)。液柱は動的・静的な変形を考慮せず、常にストレートな形状を保持

しているものとする. 計算系全体は無重力環境下を想定している. 上下壁間の温度差は $\Delta T = T_h - T_c$ と定義し, 表面張力 $\sigma(T)$ は温度に依存し, 線型的な変化をするものと仮定する.

$$\sigma(T) = \sigma(T_c) + \sigma_T(T - T_c) \quad (1)$$

ここで, $\sigma_T = \partial\sigma/\partial T$. 流体は非圧縮性ニュートン流体であることを仮定し, Pr が 4 であるものとする. 無次元化された流体の運動と熱輸送を記述する支配方程式は, Navier-Stokes 方程式, 連続の式, エネルギー方程式とする. 表面張力を除く物性の温度依存性は無視する.

$$\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t} + (\mathbf{u}^* \cdot \nabla) \mathbf{u}^* = -\nabla p^* + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^* \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^* = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t} + (\mathbf{u}^* \cdot \nabla) T^* = \frac{1}{Ma} \nabla^2 T^* \quad (4)$$

ここで, \mathbf{u}^* を無次元速度ベクトル, p^* を無次元圧力, $T^* = (T - T_c)/\Delta T$ を無次元温度とする. 円柱座標系 (r, θ, z) を用いている. これより以下においては $*$ を省略する. 無次元数 Re は対流の強さを測るパラメーターであり, 以下のように定義する.

$$Re = \frac{|\sigma_T| \Delta TH}{\rho \nu^2} \quad (5)$$

ここで, ρ は密度, ν は動粘度, Ma をマランゴニ数とすると, $Ma = Re Pr$ という関係がある.

境界条件は上下壁上では, 速度はノンスリップ, 温度は高温壁・低温壁で T_h および T_c でそれぞれ一定としている. 液柱自由表面上での熱の授受はないものとし, 断熱の境界条件を与え, 速度に関しては, 表面張力とせん断応力の釣り合いから, マランゴニ効果による流体の駆動を行っている.

計算により得られたデータから時間平均に対する温度変動分 \hat{T} を算出し, 一般的に知られている POD¹⁶⁾ を用いて解析を行う. POD からは固有値 λ , 固有ベクトル a , 固有関数 ϕ , が得られる. 周期関数を POD した際, 同じ固有関数が 2 つずつ得られることが一般的に知られているため, 各固有関数の成分の固有値を足し合わせてエネルギー E_k を以下のように定義する.

$$E_k = \lambda_{2k} + \lambda_{2k-1} \quad (6)$$

ここで k は正の整数であり, k が小さいほど E_k は

大きくなるように定義している. また, 各成分の温度変動 \hat{T}_k を以下のように定義する.

$$\hat{T}_k = a_{2k} \phi_{2k} + a_{2k-1} \phi_{2k-1} \quad (7)$$

3 結果

周方向波数 (以下, m) が $m = 3$ で周期的な回転振動流であった対流場は $Re = 3250$ において準周期回転流へと遷移した. 図 2 (a) - (c) は FFT によって得られた回転周期を元に準周期回転流を回転座標系に変換し, 温度変動の等温面を可視化した様子を時系列に示している. 等温面の形および大きさが時間によって変形していることが確認できる. したがって, これを二次不安定性後の対流場として, 以下に結果を記述する.

二次不安定性前の温度場を POD によって分解した結果, エネルギーの大きい順に成分は $m = 3, 6, 9$ を示した. これは元の対流場の m および高調波成分である. 図 2 (d) - (f) は二次不安定性後の温度場を POD によって分解した各成分の温度変動の等温面の瞬時場を可視化した様子である. 一番エネルギー量の大きい成分 ($k = 1$) は二次不安定性前同様 $m = 3$ であることが確認できる. しかし, 次にエネルギーの大きい成分は $m = 2, 4$ の形を示している. したがって, これらの成分が生じることで二次不安定性が発生したことがわかる. また, この対流場からは高調波成分も得られているが, エネルギー値が新しく生じた成分のエネルギーよりも小さいことが確認されている.

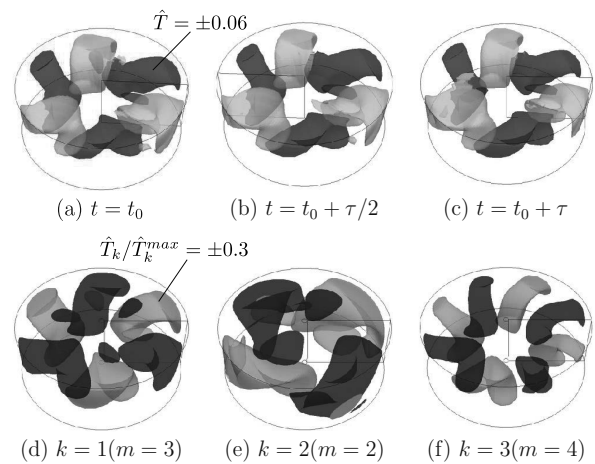


Fig. 2 (a)-(c) 3D visualization of thermal-fields in rotating frame of reference against fundamental frequency of hydrothermal wave after secondary instability (d)-(f) Large energy components obtained by POD

図3は二次不安定性後の温度場を POD によって得られたエネルギーの大きい7つの成分の各 m に対するパワースペクトルを示している. この三次元グラフからも二次不安定性前には確認されていない $m = 3$ および高調波以外の m のピークが存在していることが明確である.

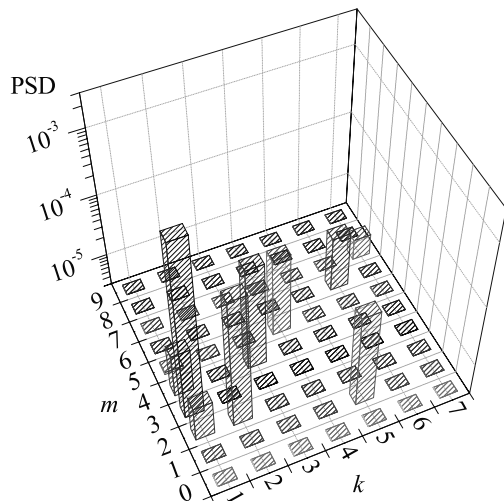


Fig. 3 Full spectral decompositions of surface temperature deviation at $z = \Gamma/2$ for each component after secondary instability

図4に二次不安定性後に生じた $m = 2$ および4のエネルギー値 E_k を Re の変化とともに示す. Re が大きくなるにしたがって, それぞれのエネルギーは大きくなることを確認できる. $Re < 3200$ では $m = 2, 4$ の成分の存在を確認することができなかった. このエネルギー値の分布から, 二次不安定性における臨界レイノルズ数 ($Re_c^{(2)}$) を求める. 臨界値近傍の3点の値を線型近似し, $E_k = 0$ との交点を $Re_c^{(2)}$ と定義した.

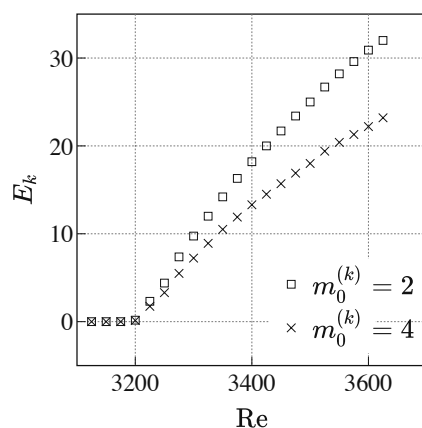


Fig. 4 Energy of Fig.2 (e) and (f) as a growth of Re

4 結言

$Pr = 4$ の流体で, 無重力下でのストレートな液柱 ($\Gamma = 0.7$) を想定して, 二次不安定性の遷移過程を調査するため直接数値計算を行った. 二次不安定性後の対流場は準周期回転流になることを確認した. この対流場を POD によって解析し, 二次不安定性前には確認されなかった $m = 3$ および高調波以外の成分が得られた. この成分のエネルギー値の Re 数に対する発達過程から臨界レイノルズ数 $Re_c^{(2)}$ を求めた.

5 参考文献

- 1) A. Cröll et al.: J. Cryst. Growth, **191** (1998) 365.
- 2) M. Wanschura et al.: Phys. Fluids, **7** (1995) 912.
- 3) I. I. Ryzhkov: Phys. Fluids, **23** (2011) 082103.
- 4) K. Fujimura: J. Phys. Soc. Jan., **82** (2013) 074401.
- 5) R. Rupp et al.: J. Crystal Growth, **97** (1989) 34.
- 6) M. Levenstam and G. Amberg: J. Fluid Mech., **297** (1995) 357.
- 7) J. Leypoldt et al.: J. Fluid Mech., **414** (2000) 285.
- 8) M. Levenstam et al.: Phys. Fluids, **13** (2001) 807.
- 9) N. Imaihi et al.: J. Crystal Growth, **230** (2001) 164.
- 10) C. Nienhüser and H. C. Kuhlmann: J. Fluid Mech., **458** (2002) 35.
- 11) K. Motegi et al.: Phys. Fluids, **29** (2017) 074104.
- 12) R. Velten et al.: Phys. Fluids A, **3** (1991) 267.
- 13) V. M. Shevtosova et al.: Phys. Review E, **68** (2003) 066311.
- 14) I. Ueno et al.: Phys. Fluids, **15** (2003) 408.
- 15) T. Matsugase et al.: Int. J. Heat Mass Trans., **89** (2015) 903.
- 16) K. Motegi et al.: Annual Meeting of the Japan Society of Fluid Mechanics 2017 (2017b).
- 17) K. Li et al.: J. Crystal Growth, **307** (2007) 155.

Adjoint sensitivity 解析を用いた パワーデバイス用半導体製造装置の最適設計のための数値解析

堀内 鷹之

大阪大学大学院 基礎工学研究科 物質創成専攻 化学工学領域

1 緒言

シリコンカーバイド(SiC)は高い熱伝導率や広いバンドギャップを持つことから、次世代パワーデバイス用半導体として期待されている[1,2]。過飽和を駆動力とした Top-Seeded Solution Growth(TSSG)法によるSiC結晶成長は従来用いられている昇華法に比べて極めて高品質な結晶を作製できる一方で、低炭素溶解度のために成長速度が極めて遅い。炭素源のるつぼ(crucible)を高温にし、種結晶(seed)は低温とすることで過飽和度を高くできると考えられるが、このような場合は、融液相に大きな温度差が存在する。種結晶付近で自由表面上の温度差に起因するMarangoni対流が支配的となるため、種結晶面内成長速度が不均一化し結晶の高品質性が失われる恐れがある[3]。そこで、成長速度を低減させることなくMarangoni対流の影響のみを低減する制御法が必要である。るつぼ温度分布条件を変えて制御する手法が考えられるが、パラメトリックスタディでは任意の温度分布に対して検討するには非現実的である。そこで本研究では、ノンパラメトリック感度解析[4]を用いた逆解析を用いて、るつぼ温度分布の最適条件を数値的に導出した。

2 解析手法

解析領域は既報[3]と同一でありるつぼ内容融液の概略図をFig. 1に示す。図中のtarget領域における種結晶へと向かうMarangoni対流を抑制することを目標とし、次の目的関数 F の最小値問題を考える。

$$F = \frac{\int_{\Gamma_{\text{tar}}} (-u_r) d\Gamma}{\int_{\Gamma_{\text{tar}}} d\Gamma} = \frac{\int_{\Gamma_{\text{tar}}} (-u_r) d\Gamma}{A_{\text{tar}}} \quad (1)$$

ここで、式(1)中の積分はtarget領域における面積分を意味し、 u_r は半径方向速度成分である。るつぼ温度微小変化 δT_{cru} に対する目的関数の応答(これを局所感度と呼ぶ)、即ち、るつぼ壁の各座標点上の $\delta F/\delta T_{\text{cru}}$ を計算するために、随伴変数法を用いて随伴方程式を導出した。以下に解くべき式、及び局所感度を示す。これらの導出の詳細は参考文献[5]を参照されたい。

支配方程式:

$$\begin{aligned} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{\mathbf{F}_E}{\rho} - \mathbf{g} \beta (T - T_0) \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ (\mathbf{u} \cdot \nabla) T &= \alpha \nabla^2 T + \frac{Q}{\rho C_p} \\ (\mathbf{u} \cdot \nabla) C &= D \nabla^2 C \end{aligned} \quad (2)$$

随伴方程式:

$$\begin{aligned} -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}^* - (\nabla \mathbf{u}^*) \cdot \mathbf{u} &= -\nabla p^* + \nu \nabla^2 \mathbf{u}^* + T \nabla T^* \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^* &= 0 \\ -(\mathbf{u} \cdot \nabla) T^* &= \alpha \nabla^2 T^* - \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{g} \beta \end{aligned} \quad (3)$$

局所感度:

$$\frac{\delta F}{\delta T_{\text{cru}}(\mathbf{r})} = \alpha \mathbf{n} \cdot \nabla T^*(\mathbf{r}) \quad (4)$$

感度分布に基づき最急降下法[6]によって、るつぼ温度 T_{cru} を最適値まで更新した。これらの解析にはオープンソースの有限体積法ソルバーであるOpenFOAM[7]をカスタマイズして用いた。

3 結果と考察

Figure 2に最適化前後の融液内速度場及び温度場分布を示す。最適化後には、種結晶に向かうMarangoni対流による下降流が抑制され、上昇流

が見られるようになった。Figure 3に最適化前後の結晶成長速度分布を示す。最適化後は結晶成長速度を大きく損なうことなく、中心から4 mmまでの広範囲にわたって均一な結晶成長速度分布が見られた。

4 結言

TSSG法によるSiC結晶成長の数値解析に随伴方を用いた逆解析を導入し、結晶成長速度を低下させることなくMarangoni対流を抑制することが可能なるつば温度分布をノンパラメトリックに求めることができ、最適化後の結晶成長速度分布は広範囲にわたって均一化できた。

謝辞

本研究の一部は、JSPS 科研費 基盤研究 A(18H03839)の助成を受けた。

引用文献

- [1] R. Wei *et al.*, *J. Appl. Phys.* 113 (2013) 053503.
- [2] F. Roccaforte *et al.*, *Microelectron. Eng.* 187–188 (2018) 66–77.
- [3] T. Yamamoto *et al.*, *J. Cryst. Growth* 470 (2017) 75–88.
- [4] K. Momose *et al.*, *Heat Tran. Asian Res.* 32 (2003) 1–12.
- [5] T. Horiuchi *et al.*, *J. Cryst. Growth* 517 (2019) 59–63.
- [6] D.G. Luenberger, *Optimization by Vector Space Methods*, John Wiley & Sons., 1969.
- [7] OpenFOAM, (see URL: <https://www.openfoam.com/>)

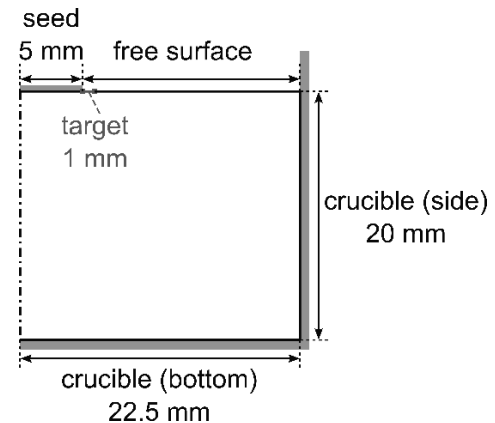


Fig. 1 Computational domain of SiC melt.

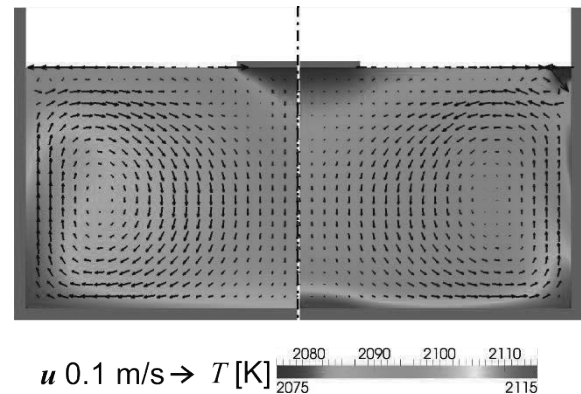


Fig. 2 Flow velocity vectors and temperature distribution of (left) the initial state and (right) the optimized state.

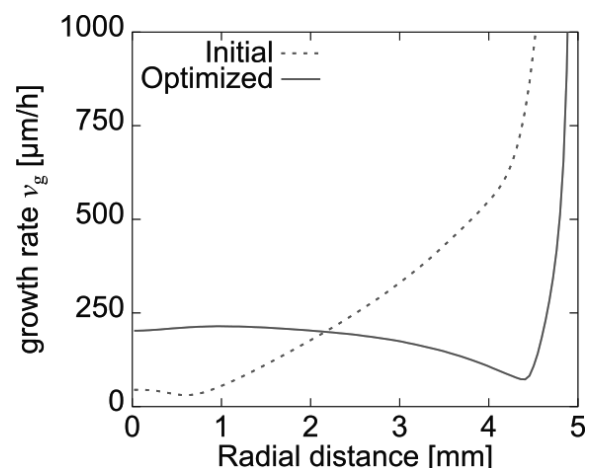


Fig. 3 The growth rate profile for the initial and optimized state.

ウマの個体間に作用する力の解明に向けた数値シミュレーション

井上漱太¹、深沢圭一郎²、平田聡¹

1: 京都大学野生動物研究センター

2: 京都大学学術情報メディアセンター

1 はじめに

動物の群れは多様性に富んでいる。近年、計測技術の急激な発展とともに、群れを構成する個体の行動ルールに関する研究が高まりを見せている。個体間の単純なインタラクションが群れ全体の維持・協調にどのように寄与しているのだろうか。Couzin らは Attraction、Alignment、Repulsion という3種類の力の相互作用により動物の群れにおけるさまざまな振る舞いが説明できると提唱した[1]。これにより、巨大な群れにおいても、近傍の個体との局所的なインタラクションが、群れの全体が維持する機構であることが理論的に提示された。また、魚類の群れにおいて、個体の加速度を定量的に計測することにより、この理論の有効性がすでに検証されている[2]。

この分野の根底にある一つの大きな疑問は、全ての群れに共通する個体間インタラクションルールの存在である。現状では、比較的多くの研究が魚類や鳥類を対象にしており、陸上性の哺乳類の群れにおける研究は少ない[3]。特に体サイズの大きな哺乳類の群れにおいて、個体の動きや群れ内での相対位置を定量的に捉えた研究は非常に少ない。そこで、本研究ではポルトガルのアルガ山に生息する野生のウマの群れを対象に、個体間距離を調節している力の推定を目指した。

ウマは極めて社会性の高い動物と一般的に考えられている。野生環境下において、ウマの個体群はハレム群とバッチェラー群に分かれる。ウマは有蹄類としては珍しく恒常的な群れ構成を維持する。群れのまとまりが安定して観察できることから個体間に働く力を推定するには、非常に適した動物だと言

える。本研究では Attraction と Repulsion の相互作用を、距離を変数にもつ関数によってモデル化し、シミュレーションをおこない、野外観察によって得られたデータの再現を狙った。

2 野外観察

野外観察におけるデータ収集は2016年6月および2017年5-7月にポルトガルのアルガ山でおこなわれた。合計3群を終日追跡し、ドローン(Phantom 3, Mavic Pro)により画像データを収集した。それぞれの群れの個体数は7-8頭だった。画像は30分ごとに高度25-80m程度で撮影され、一枚の画像が群れの構成個体全てを含むように高度を調節した。ウマの群れは採食、移動、休息という3種類の状態に大別することができ、本研究では採食場面のみを解析した。それぞれの群れに関して、合計60枚程度の画像を解析に使用した。個体の首の付け根と尾の基部の midpoint に相当する点を個体の座標として、個体間距離の計測に使用した。

3 ウマの個体間に働く力の数値シミュレーション

力の数値シミュレーションのために、一個体の周囲に重力のように”場”を導入し、距離が遠いと Attraction として、距離が近いと Repulsion として働く力を以下のように定めた。

$$F = -\frac{a(r-r_a)}{(r-r_a)^2 + d} - b$$

この関数において r は個体間の距離をあらわし、 r_a は Attraction と Repulsion の境界値である。本研究では、各群れの個体数と同数の点を 2 次元平面上にランダムに配置した状態から、 F を個体間に作用させ、一定ステップ後に点間の距離を測定した。これを観察で得られた画像の枚数分繰り返した。そして、測定された個体間距離を確率分布とみなし、野外観察により得られた分布とピーク位置および残差平方和を比較し、 a 、 b 、 c 、 d 、 r_a の最適パラメータセットを探索した。

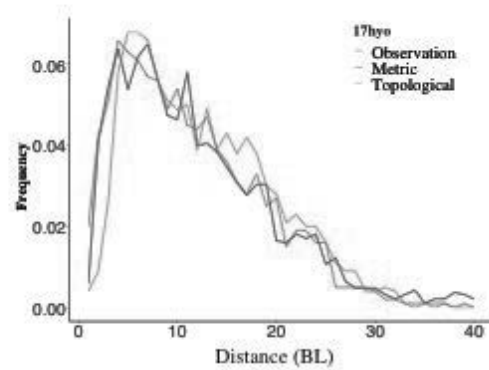


Figure 1. 個体間距離の確率分布。

4 相互作用モデル

ある個体の力の作用範囲を定めるモデルはいくつかあるが、本研究ではメトリック距離およびトポロジカル距離を使用した。メトリック距離においては、個体は周囲 R_m 内に存在する他個体全てとインタラクションを持つ。トポロジカル距離においては、距離の近い順に N_t 個体とインタラクションを持つ。

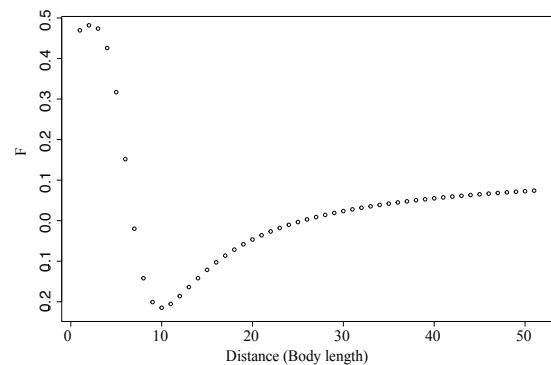


Figure 2. トポロジカル距離を用いたシミュレーションにおける最適パラメータセットから再現された F の挙動。

5 結果

シミュレーションによる個体間距離の再現は 3 群中 2 群で成功した (Figure 1)。メトリック距離とトポロジカル距離の最適パラメータはそれぞれ、 $R_m = 9$ 、 $N_t = 3$ であった。二つのモデルの比較において、メトリック距離の方が一貫して小さな残差平方和を示したが、劇的な違いは生じなかった。

最適パラメータセットにおける F の挙動は魚群における加速度の振る舞いに近い性質を示した (Figure 2)。具体的には、ごく近い距離のみで、大きな Repulsion の力を示し、7 Body length 付近で Attraction の力に切り替わった。そして、Attraction の力は大きくはないものの、遠くまで作用した。

6 考察

本研究ではトポロジカル距離、メトリック距離、両モデルにおいて一個体は近傍のみとインタラクションした。インタラクションの作用範囲を広げると結果を全く再現できず、ウマの群れにおいても群れの中での局所的なインタラクションが群れを維持する機構であることが示唆された。

6 参考文献

- [1] ID. Couzin, et al. "Collective memory and spatial sorting in animal groups." *Journal of theoretical biology* 218.1 (2002): 1-11.
- [2] JE. Herbert-Read et al. "Inferring the rules of interaction of shoaling fish." *PNAS* 108.46 (2011): 18726-18731.
- [3] S. Inoue, et al. "Spatial positioning of individuals in a group of feral horses: a case study using drone technology." *Mammal Research* 64.2 (2019): 249-259.

界面の摩擦接触を考慮した損傷モデルによる 鉄筋コンクリートの3次元破壊シミュレーション

相馬 悠人 *

*茨城大学大学院理工学研究科社会インフラシステム科学専攻

1 はじめに

社会基盤構造物の安全性評価の高度化を図るため、数値シミュレーションにより、鉄筋コンクリートの破壊挙動を定量的に把握することへの重要性が増している。鉄筋コンクリートの破壊挙動を精度よく再現するためには、鉄筋とコンクリートの力学挙動のモデル化に加えて、鉄筋とコンクリート間の付着挙動のモデル化が解析精度を左右する重要な課題となる。鉄筋とコンクリート間の付着は、主に材料界面の粘着力、材料間がずれる際の摩擦力、鉄筋の節による支圧抵抗力により成り立っている。しかしながら、これらの要因の影響は、鉄筋の表面形状や、コンクリートの応力状態、鉄筋周りに生じるひび割れなどの様々な条件によって変化するため、付着挙動を予測することは困難な問題であり、これまでに付着挙動を詳細かつ、有効に評価できる方法は確立されていない。

そこで本研究では、付着の影響要因を直接反映させた鉄筋コンクリートの破壊シミュレーション手法を構築する。そして、付着性能の異なる丸鋼と異形鉄筋の引抜き試験を模擬した破壊シミュレーションを実施することで、付着挙動の再現性を検証する。

2 破壊シミュレーション手法

付着の要因となる界面での破壊や摩擦力を考慮するため、筆者らが開発した界面の摩擦接触を考慮した損傷モデル [1] を適用する。界面に直交する局所座標系を考えることで、界面の力学挙動を定式化する。界面に対して垂直方向のひずみ ε'_1 を用い、破壊面の開口を判定する。開口する場合には次式の構成

式を使用する。

$$\sigma' = (1 - D)C\varepsilon' \\ \text{when } \varepsilon'_1 > 0 \quad (\text{in opening}) \quad (1)$$

ここで、 σ' と ε' はフォークト表記による局所座標系の応力ベクトルとひずみベクトル、 C は弾性係数マトリックス、 D は 0 ~ 1 の値を取る損傷変数であり、材料が健全な状態では 0、完全に破壊した状態では 1 となる。

界面に対して垂直方向のひずみ ε'_1 を用い、破壊面の接触を判定する。接触する場合には、界面に対して垂直方向の初期剛性を保持させることで接触挙動を表現する。界面に対して垂直方向の応力 σ'_1 は次式で表される。

$$\sigma'_1 = C_{11}\varepsilon'_1 + (1 - D)C_{12}\varepsilon'_2 + (1 - D)C_{13}\varepsilon'_3 \\ \text{when } \varepsilon'_1 \leq 0 \quad (\text{in contact}) \quad (2)$$

接触状態における界面の固着やすべりを考慮するため、クーロンの摩擦則を導入する。式 (2) により得られた界面に対して垂直方向の応力 σ'_1 を用いることにより、摩擦応力 τ_f は次式で表される。

$$\tau_f = \mu\sigma_n = \mu|\sigma'_1| \quad (3)$$

ここで、 μ は摩擦係数、 σ_n は垂直応力である。

界面の固着や摩擦接触を伴う破壊挙動を再現するため、局所座標系のせん断応力 τ'_{12} は次式で表される。

$$\tau'_{12} = C_{44}\gamma'_{12} \\ \text{when } \tau_f \geq |\tau'_{12}| \quad (\text{not sliding}) \quad (4) \\ \tau'_{12} = (1 - D)C_{44}\gamma'_{12} + \text{sgn}(\gamma'_{12})D\tau_f \\ \text{when } \tau_f < |\tau'_{12}| \quad (\text{sliding}) \quad (5)$$

ここで、 sgn は符号関数である。

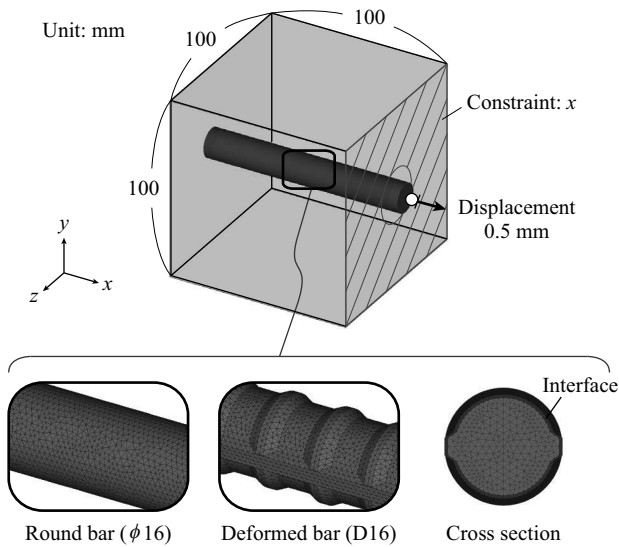


図 1: 引抜き試験の供試体を模擬した有限要素モデル

表 1: 材料パラメータ

	E	ν	k	G_f	ε_0	μ
Steel	200 GPa	0.3	—	—	—	—
Concrete	30 GPa	0.2	20	0.1 N/mm	0.0001	—
Interface	200 MPa	0.2	20	0.1 N/mm	0.004	0.5

3 付着挙動の再現性

3.1 解析条件

付着挙動の再現性を検証するため、付着性能の異なる丸鋼と異形鉄筋の引抜き試験を解析した。有限要素モデルを図 1 に示す。対称性を考慮し、1/4 モデルを四面体要素により作成した。鉄筋の表面形状を詳細にモデル化し、表面に厚さ 0.5 mm の界面相を設けた。丸鋼モデルと異形鉄筋モデルの要素数は約 60 万である。材料パラメータを表 1 に示す。鉄筋の表面形状のみを変え、2 ケースの解析を実施した。

3.2 解析結果

図 2, 3 に荷重 - 変位関係と内部の損傷分布を示す。節による支圧抵抗力の差により、丸鋼と異形鉄筋では最大荷重に差が生じた。また、丸鋼では界面のみ

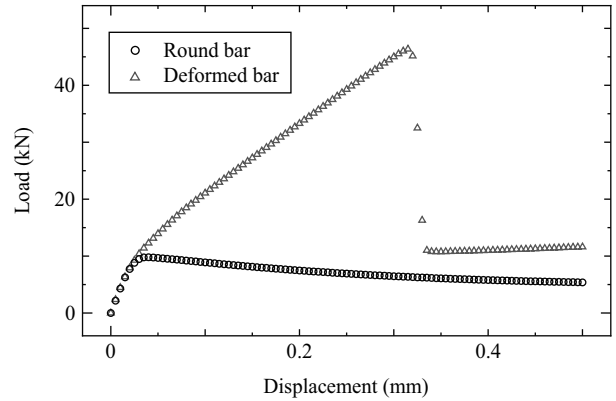


図 2: 丸鋼および異形鉄筋モデルにおける荷重 - 変位関係

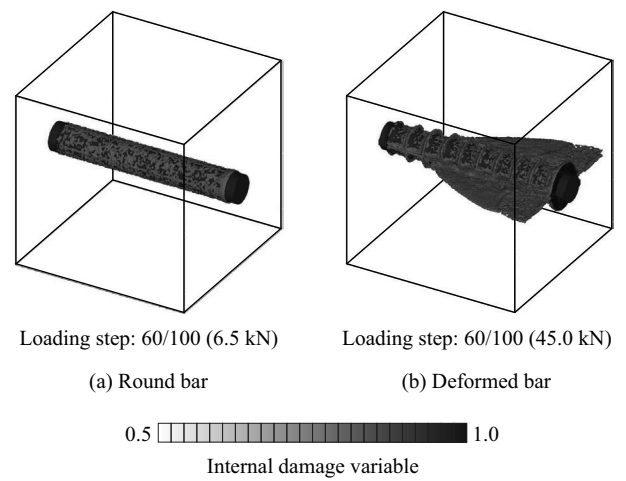


図 3: 丸鋼および異形鉄筋モデルにおける内部の損傷分布

が破壊しているのに対し、異形鉄筋では内部ひび割れや、鉄筋の軸に沿った縦ひび割れを再現できた。

4 おわりに

本研究では、丸鋼と異形鉄筋の引抜き試験を模擬した解析を行うことで、提案手法が鉄筋の表面形状のモデル化を変えるだけで、それぞれの付着挙動の傾向を詳細に再現できることを示した。

参考文献

[1] 相馬 悠人, 車谷 麻緒: 摩擦接触を考慮した損傷モデルによる準脆性材料の破壊シミュレーション, 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol.74, pp.I.233-I.241, 2018.

N結合型糖鎖修飾によるタンパク質の機能制御の関連性

リントウルオト正美

京都府立大学大学院生命環境科学研究科応用生命科学専攻

N結合型糖鎖修飾と機能制御の関連性について分子動力学法(MD)法を用いて研究を進めた。KLK8(ニューロプシン)の基質特異性に大きな影響を与えるLoop 99はKLKファミリーに共通しN結合型糖鎖修飾部位を含む。ヒトKLK8(PDB ID:1npm)に2種の糖鎖を結合したモデルと結合なしのモデルを比較した結果、糖鎖修飾がない場合に比べ糖鎖修飾したモデルでは結合部位周辺のループの揺らぎに変化が表れ、特にLoop 99の揺らぎが変化した。糖鎖修飾なしでは自由エネルギー曲面上に3つの極小点が存在しているが、Loop 99が主に大きく動いていることがわかった。また、Loop 99の動きに伴い基質結合部位のポケットの体積が減少し、触媒残基間の距離が大きく変化することがわかった。一方、糖鎖修飾することにより、基質ポケットはさらに広がる動きを見せた。糖鎖修飾によって結合部位の構造が影響を受けることがわかった。

1 諸言

細胞外のタンパク質や膜たんぱく質の多くが糖鎖修飾を受けている。タンパク質の主な糖鎖修飾はSerやThr側鎖の酸素原子に糖が結合するO結合型糖鎖、Asn側鎖のアミド窒素原子に糖が結合するN結合型糖鎖が存在する。これらの糖鎖修飾はタンパク質の構造変化、機能改善、安定性や溶解性の向上、品質管理、分子認識や情報伝達の指標として様々な機能を有している。糖鎖修飾はドラッグデリバリーシステムへの応用、腫瘍マーカーの開発、新規医薬品開発などで注目されており、研究が多くなされてきたが、計算化学を用いた例は少ない。

多様な組織、血漿中で発現し様々な疾病との関連性が示唆されているkallikrein (KLK)ファミリーは異なる基質特異性を有するセリンプロテアーゼでこれまでに15のタンパク質が報告されている。KLKファミリーの反応サイトに共通して存在するLoop 99は酵素によってその長さは異なるが糖鎖結合部位を有しセリンプロテアーゼの基質特異性に関係していると考えられている¹⁾。しかし、糖鎖はそのフレキシビリティから固体結晶構造は得られておらず、機能との関連性は完全

に解き明かされてはいない。

KLKファミリーに属するKLK8(neuropsin)は中枢神経系で発現しており、このタンパク質の機能障害により、記憶障害や精神疾患との関連性が示唆されてきた。本研究に先立ってKLK8とその基質であるneuregulin-1の複合体のモデルとしてKLK8-ペプチドモデル(糖鎖はなし)を用い、分子動力学計算を行った。その結果、KLK8の基質特異性は基質のアミノ酸配列に左右され、基質がLoop 99と効率的に相互作用を行うことが重要であることがわかった²⁾。N結合型糖鎖は基本型の糖鎖であっても非常に大きい。Loop 99への糖鎖修飾は直接結合しているLoop 99の揺らぎはもちろんのことタンパク質全体の揺らぎに影響を与えることが予想される。

本研究ではKLK8のLoop 99における糖修飾の反応サイトとその周辺の構造に与える影響に着目し、分子動力学(MD)計算を用いて研究を行った。

2 方法

ヒトKLK8(PDB ID:1npm)のLoop 99内Asn95にアセチルグルコサミン(GlcNAc)、マンノース(Man)、ガラクトース(Gal)から成る糖鎖

((GlcNac)₂Man(ManGlcNacGal)₂) を結合したモデルを基本形として BAN モデル、その末端をシアル酸で延長した糖鎖 ((GlcNac)₂Man(ManGlcNacGalSia)₂) BAS モデル、糖鎖なしの WT モデルを用いた。これらのモデル周辺 20 Å に水を、生理条件になるように Na⁺ と Cl⁻ を配置した。

MD 計算には Gromacs³⁾ を使い、アミノ酸残基には amber ff14SB 力場⁴⁾、糖鎖には GLYCAM06-j⁴⁾、水分子には TIP3P⁵⁾ を用いた。最急下法によるエネルギー最小化に続いてモデルに位置拘束を課した状態で 300 K まで昇温した。次に 1 ns かけて徐々に拘束を解除しながら、NPT 計算をおこなった。2 ns の平衡化後、100 ns の production run を行った。

3 結果

3つのモデルともに 15 ns 前後で RMSD はほぼ一定値に到達していた。そこで 20~100 ns の trajectory を用いて C α 原子の RMSF の比較を行った。それぞれのモデルにおける b-factor を Fig.1 に示す。WT モデルでは Loop 99 に揺らぎがみられるが、BAN モデルではその揺らぎが抑えられていた。一方で BAS モデルでは Loop 99 を含む活性中心周辺のループの揺らぎが大きくなった。

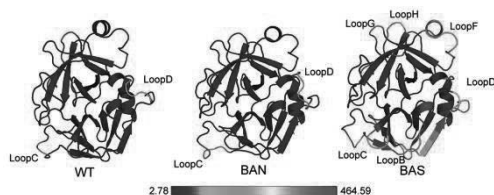


Fig. 1 B-factor coloring of WT and two glycosylated models.

次に主成分分析を行い自由エネルギーマップを作成したところ、WT では3つの極小点が存在していた。これらの構造は Loop 99 が主に動いていたことがわかった。この Loop 99 の揺らぎに伴い触媒残基間の距離が大きく変化することがわかった。結晶構造解析結果では2つの触媒残基間の距離はプロトンの移動を伴う反応を開始するには非常に大きい(約 4 Å)が、極小点の一つでは水素結合形成距離(1.9~2.3 Å)まで短くなっていた。Loop 99 の動きが活性部位の構造を変えることで活性を制御している可能性が示唆される。同様に BAN

や BAS では主成分分析の結果、それぞれ 2 つのエネルギー極小点が存在し、Loop 99 の動きによる違いであった。WT とは異なり、糖鎖が結合しているモデルでは触媒残基間が水素結合距離にまで短くなることはなかった。糖鎖の結合により BAN、BAS では基質ポケットが大きくなり、WT では最大 2605 Å³ 出会ったのに対し BAN、BAS では 5335 Å³、4144 Å³ であった。

4 まとめ

WT において触媒三残基間の距離が水素結合距離まで近づくのは 80 ns 以降の短い間であり、エネルギー曲面上で 2 状態間に平衡関係があるといきれない。また、糖鎖結合モデルの結果からは N 結合型糖鎖修飾は機能に影響を与えうるということはわかったが、触媒三残基は反応を開始できる位置関係にはない。現状では複雑なエネルギー曲面上の比較的似通った局所的な構造のサンプリングしかできないことから、さらにサンプリング空間を広げた計算を行うことを目的として、拡張アンサンブル法の一つであるレプリカ交換法を用いた計算 (REMD) を次に行うこととした。300 K から 450 K までの間の 70 個のレプリカを用意し、REMD を実行中である。さらに計算と解析を続けることによってこれらの糖鎖の基質ポケットや反応活性点の構造変化と反応制御の関連性について調べたい。

5 参考文献

- 1) Skala, Wolfgang et al. *J. Biol. Chem.* 289, 34267, (2014)
- 2) リントウルオト正美他、日本コンピュータ化学会 2017 秋季年会精選論文特集号 16 巻(5号)、160-162
- 3) S. Pronk, et al., *Bioinformatics*, 29, 845, (2013).
- 4) J. A. Maier, et al., *J. Chem. Theory Comput.*, 11, 3696, (2015).
- 5) K. N. Kirschner, et al., *J. Comput. Chem.*, 29, 622, (2008).
- 6) W. L. Jorgensen, et al., *J. Chem. Phys.*, 79, 926, (1983).

都市構造物の幾何的特徴がもたらす大気乱流の空間スケールへの影響

吉田 敏哉 *

*京都大学大学院理学研究科地球惑星科学科専攻

1 はじめに

都市化の進行に伴い、都市の高温化（ヒートアイランド現象）や人工排出物の増大による大気汚染といった都市特有の環境問題がより深刻化している。これらの現象の予測には精緻な気象モデルの使用が不可欠である。しかし、都市構造物上の気象予測には、複雑な形状および配置をした構造物による大気への影響を適切に表現することが求められる。特に乱流による運動量輸送過程について、都市の効果を考慮してパラメタライズすることが重要である。乱流運動量輸送のパラメタライゼーションには主に乱流の空間スケールが使用されるが、複雑な都市構造物の影響を受けた乱流の空間スケールに関する詳細な評価は十分行われていない。既往研究により、实在都市構造物の重要な特徴である建物高さのばらつきが平均風速やレイノルズ応力といった代表的な統計量に大きく影響することが示されてきた。

そこで本研究では、建物高さのばらつきが及ぼす乱流の空間スケールへの影響を明らかにすることを目的とする。そのため、乱流を陽に計算可能な Large-eddy simulation を用いて、都市構造物上の大気乱流の数値シミュレーションを実行し、乱流の空間スケールの解析を行った。

2 計算設定

計算領域は主流方向 4 km・スパン方向 2.4 km で、水平解像度は 2 m とした。計算領域内には Fig. 1 で示されたような粗度ブロックが繰り返し並べられている。各ブロックは水平方向に 10 格子で解像されている。建物高さのばらつきの影響を調べるため、建物

高さの標準偏差と平均高さ H_{ave} の比 V_h が $V_h = 0.0$ (V00), $V_h = 0.5$ (V05), $V_h = 1.0$ (V10) となるようなブロック列を用いた。ブロックの密度を示す建ぺい率 λ_p は 0.25 としている。本研究では流入境界に別計算領域で作成した乱流境界層流をタイムステップ毎に与えている。

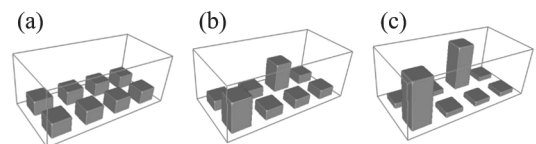


Fig 1: block layouts in the unit area of (a) V00, (b) V05, and (c) V10.

3 結果

乱流組織構造を抽出するため、上昇運動に対応する ejection と下降運動に対応する sweep を判別条件とした条件付き平均を行い、ejection および sweep 周りの乱流構造の空間スケールを算出した。ejection および sweep は運動量輸送の大部分を担っており、運動輸送を行う乱流構造の空間スケールの算出に適した条件といえる。Fig. 2 に主流方向の長さスケール L_x とスパン方向の長さスケール L_y を示す。粗度ブロック高さ上空の $H_{ave} - 5H_{ave}$ の高度では、sweep を中心とした乱流組織構造の空間スケールの方が ejection を中心とした長さスケールより長く、この結果は V_h に依存していない。一方、粗度ブロック高さ以下では、V00 で得られた ejection および sweep 周りの L_x は、V05 や V10 の L_x よりも大きく、乱流構造が主流方向に引き伸ばされていることが分かった。

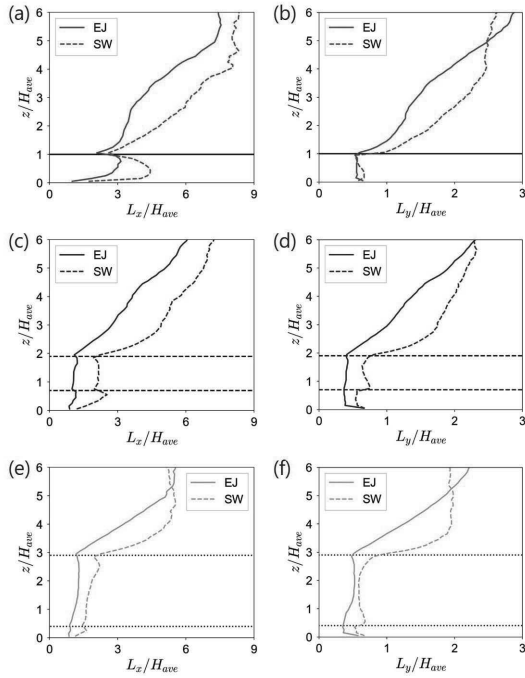


Fig 2: Vertical profiles of L_x and L_y in (a, b) V00, (c, d) V05, and (e, f) V10. EJ and SW denote ejection and sweep, respectively. The black-solid, -dashed and -dotted lines indicate the height of blocks in V00, V05, and V10, respectively.

続いて、主流方向の長さスケール L_x と横方向の長さスケール L_y のアスペクト比について調べた (Fig. 3)。その結果、粗度ブロック高さ上空における ejection と sweep 周りの乱流空間スケールのアスペクト比は、 V_h によらずほぼ一定であった。このことは、粗度ブロック上空の乱流組織構造は地表面によらず相似的特徴を有することを示唆している。一方、粗度ブロック高さ以下の高度では、sweep を中心とした構造は ejection を中心とした構造に比べて、主流方向に伸びた特徴をもっていることが分かる。すなわち、sweep 周りの組織構造の空間形状は粗度ブロックによって変形しやすいことを示している。これは、sweep 中心の構造は下降運動を伴うため粗度ブロック高度以下に存在する時間が長く、構造物に衝突する回数が増えることが原因であると考えられる。

4 まとめ

本研究では建物高さばらつきがおよぼす乱流組織構造の空間スケールへの及ぼす影響を調べるため、

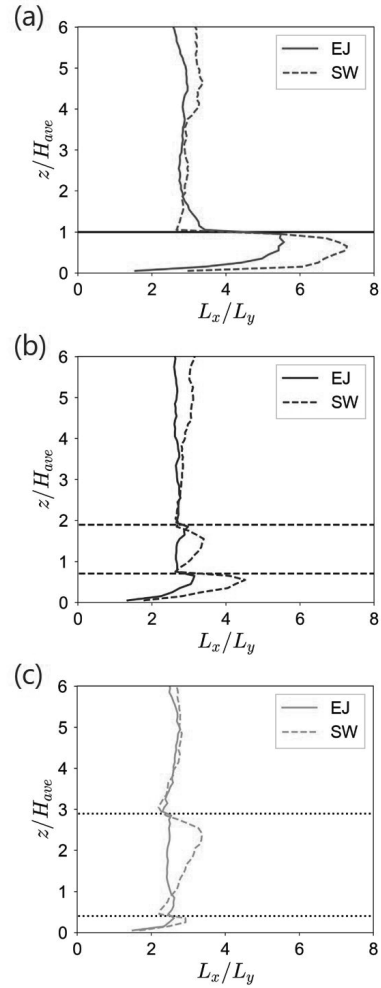


Fig 3: Vertical profiles of L_x/L_y in (a) V00, (b) V05, and (c) V10. EJ and SW denote ejection and sweep, respectively. The black-solid, -dashed and -dotted lines indicate the height of blocks in V00, V05, and V10, respectively.

高さのばらつきが異なる構造物群を使用した Large-eddy simulation を実行した。そのために、ejection と sweep に対応した乱流組織構造を条件付き平均により抽出した。その結果、粗度ブロック高度上空では、乱流構造の空間スケールは高さのばらつきによらず相似的特徴を示した。一方、粗度ブロック高度以下の高度では、粗度ブロックの影響を受け主流方向に引き伸ばされた特徴を示した。

Numerical simulation of InGaSb crystal growth under micro-gravity onboard the International Space Station

Research on the effects of heating rate for dissolution process

Jin Xin

Osaka University

1 Introduction

InGaSb is promising semiconductor that can be utilized for many thermal-photo-voltaic devices. Micro-gravity environment onboard the International Space Station can suppress all the adverse effects and offers us a better understanding of the transport phenomenon and crystal growth mechanism.

However, the opportunities for space experiments are very rare and require a lot of significant preparation and money. Therefore, it is necessary to examine and determine the most favorable conditions through numerical simulations in advance to shed light on future space experiments.

Previous simulations have been carried out to optimize the experimental conditions; however, they predicted a much longer dissolution length for the feed crystals. The undissolved feed crystals after the experiments is necessary for the post processing and analysis, so the over dissolution problem of feed crystals should be discussed and prevented for future research. Therefore, a series of numerical simulations with different heating rates are performed.

2 Numerical methods

Figure 1 shows the schematics of the growth ampoule, its applied temperature and the 2D

axisymmetric grid systems. The GaSb(feed)/InSb/GaSb(seed) sandwich sample was stacked into a quartz ampoule and sealed with boron Nitride and Carbon sheets. A new phase diagram of GaSb-InSb is utilized in current volume averaging continuum model in OpenFOAM. The simulation is performed under zero gravity to save computational cost and further details for numerical methods and procedures can be found in our previous work (Yamamoto et al., 2016).

In addition, for different heating rates were adopted for current research: Case A, 3.6K/h; Case B, 7.2 K/h; Case C, 18.0 K/h; Case D, 36.0 K/h.

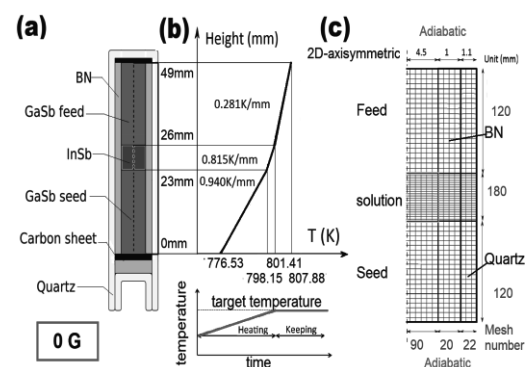


Figure 1 Schematics of (a) the growth ampoule, (b) its applied temperature and (c) the grid system for current numerical simulation.

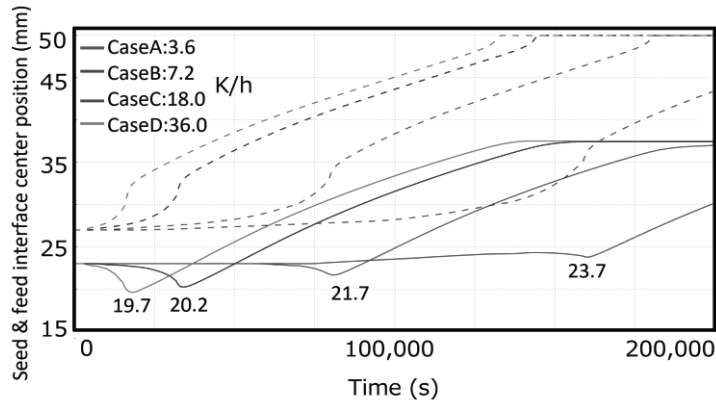


Figure 2. Time evolution of the center position of crystal/melt interfaces. Dashed lines represent feed/melt interfaces and solid lines represents seed (or grown-crystal)/melt interface in the dissolution process in 200,000 seconds.

3 Results and discussion

Figure 2 shows the computed time evolution of the crystal/melt interfaces during the dissolution process at four different heating rates. The dashed lines represent the positions of the feed/melt interface during feed dissolution process, while the solid lines represent the positions of seed/melt interface during the seed dissolution process and the grown-crystal/melt interface during the crystal growth process. It must be mentioned that the crystal growth process begins earlier at the higher heating rate, as seen from Case A to Case D in Figure 1. In addition, at the larger heating rate we predict more seed dissolution and less feed dissolution before the beginning of the crystal growth process. We also note that the seed crystal did not dissolve in Case A, being different from the cases of B, C and D. This is because in Case A the heating rate was so small that, before even the seed started dissolving, the solutes species from the feed crystal diffused through the melt and reached the seed interface, and accumulated there (which prevents seed dissolution) until the crystal growth began. However, in Cases B, C and D, the local seed interface already dissolved before the solutes from the feed reached the seed interface. Cases B, C and D had larger seed dissolution lengths (1.3mm, 2.8mm and 3.3mm, respectively) than that of Case A.

In the crystal growth process, in all four cases, we observed the same growth and dissolution rates as shown in Figure 1 after the heating process stopped. At the 200,000th second of the simulation, in all Cases of B, C and D we observe a complete dissolution of the feed crystal, and the growth process already stopped due to the higher heating rates. The dissolution duration was much longer in Case A than that in Cases B, C and D, due to the smaller heating rate used in Case A. The crystal growth was still progressing at the 200,000th second. Therefore, we recommend the use of a heating rate of 3.6 K/h or smaller in the ISS experiments (Inatomi et al., 2015).

4 Conclusion

In summary, current research shows that the heating rate is an important factor in affecting the dissolution length of the feed and seed crystals. Results also suggest that a heating value of 3.6K/ or smaller would be appropriate for the future space experiments.

5 Reference

- [1] T. Yamamoto et al., Num. Heat Transfer, Part B: Fundam. **70**(5), 441 (2016)
- [2] Y. Inatomi et al., NPJ Microgravity. **1**(1). 15011 (2015)

3 次元流体変数の予測

中井 拳吾

東京大学大学院 数理科学研究科

本稿は齊木 吉隆氏 (一橋大学経営管理研究科) との共同研究に基づくものである。

1 はじめに

機械学習は様々な分野で注目されている。近年、機械学習の一種であるリザーバーコンピューティング [1, 2] が時系列データやリャプノフ指数などの予測において有効であることが報告されている [2, 4]。リザーバーコンピューティングにおける学習は入力データから得られたリザーバーベクトルと出力するベクトルを線形にフィッティングさせることに重点が置かれている。この学習はニューラルネットワーク構造を学習しないためフィッティングにかかる計算コストを減らしている。そこで我々はリザーバーコンピューティングの手法を用いて構成したモデルにより流体変数の挙動を予測した。

2 リザーバーコンピューティング

$d\phi/dt = \mathbf{f}(\phi)$ で表される力学系の変数, $\mathbf{u} = \mathbf{h}_1(\phi) \in \mathbb{R}^M$ と $\mathbf{s} = \mathbf{h}_2(\phi) \in \mathbb{R}^P$ について考える。ただし, ある時刻まで (学習時間と呼ぶ) の入力変数 \mathbf{u} , 出力変数 \mathbf{s} の時系列は既知とする。出力変数 \mathbf{s} の時系列を予測する時刻 (予想時間と呼ぶ) において, 入力変数 \mathbf{u} の時系列データは未知とする。学習時間において \mathbf{u} を要素分解することで得た高次元ベクトル \mathbf{r} の時系列データに対して出力が \mathbf{s} を近似できるように \mathbf{r} と \mathbf{s} の線形関係を決定する。この決定がリザーバーコンピューティングにおける学習に相当する。(詳細は [3] を参照。)

このように物理的な知見を用いずに時系列データの学習のみからモデルを構築する。また, ニューラルネットワークの構造自体を学習する機械学習よ

りも圧倒的に計算量が少なく済むため, 代わりにニューラルネットワークの次元を大きくできる。そのためたとえダイナミクスが複雑なふるまいを示すとしても, それが決定論的である場合にはこの種の方法が有効である。

3 流体

周期境界条件の下で 3 次元非圧縮 Navier-Stokes 方程式の直接数値計算によって得られた時系列データをリザーバーコンピューティングで用いる。

流体のマクロ変数としてエネルギー関数を考察する。波数 $k \in \mathbb{N}$ におけるエネルギー $E_0(k, t)$ を次で定義する:

$$E_0(k, t) := \frac{1}{2} \int_{D_k} \sum_{\zeta=1}^3 |\mathcal{F}_{[v_\zeta]}(\kappa, t)|^2 d\kappa,$$

ただし, $D_k := \{\kappa \in \mathbb{Z}^3 | k - 0.5 \leq |\kappa| < k + 0.5\}$ とする。 $\mathcal{F}_{[v_\zeta]}(\kappa, t)$ は速度 v のフーリエ変換を表す。微細な振動を除くために短時間の時間平均をとった $E(k, t) = \sum_{l=99}^0 E_0(k, t - l\Delta t^*)/100$ を考察する。これによりエネルギー関数の本質的な挙動を見ることが出来る。これ以降時間平均を取った E をエネルギー関数と呼ぶことにする。

4 結果

以下のように時系列データ $\mathbf{u}(t), \mathbf{s}(t)$ を設定し, リザーバーコンピューティングにより学習を行う。

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(t) = (\tilde{E}(1, t), \tilde{E}(2, t), \dots, \tilde{E}(9, t))^T,$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{u}(t + \Delta t) = (\tilde{E}(1, t + \Delta t), \dots, \tilde{E}(9, t + \Delta t))^T,$$

ただし, パラメータは [3] の表 I (b) を用いる。また, \tilde{E} はエネルギー関数 E を正規化したものである。

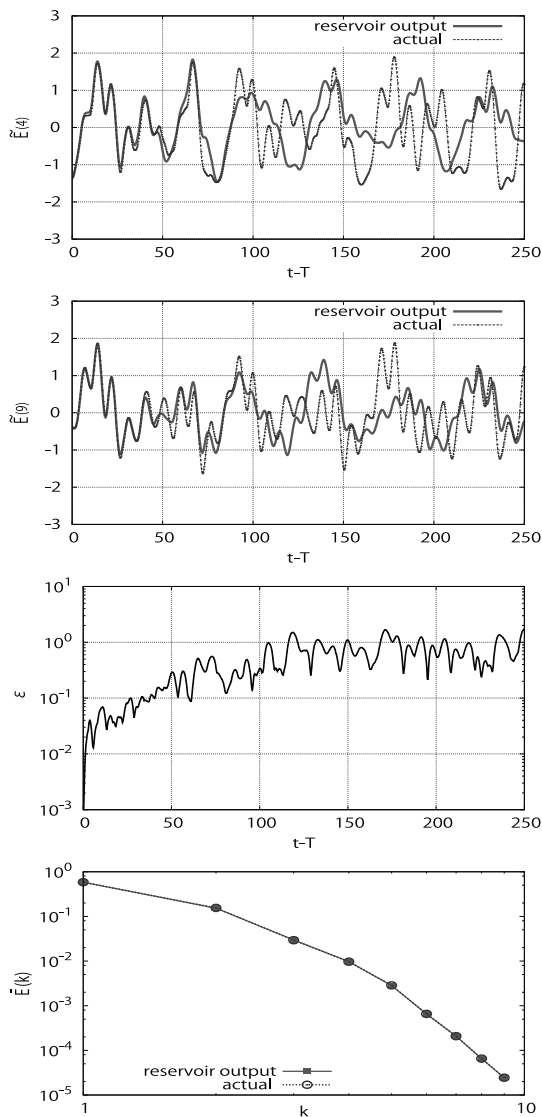


図1 Inference of time-series of macroscopic variables of a fluid flow.

$\hat{E}(1, \cdot)$ から $\hat{E}(9, \cdot)$ の9次元の学習によってエネルギー関数の予測に成功した。図1(上2つ)に $\hat{E}(4, t)$ と $\hat{E}(9, t)$ の時系列データを書き出した。モデルから得られた時系列データを赤色の実線, 比較のため Navier–Stokes 方程式の直接数値計算によって得られた時系列データを青色の点線で書いている。流体のカオス性に由来する初期値鋭敏性により長時間時系列の予測が失敗することが予測される。実際, 図1(下から2番目)に書き出したエネルギー関数のエラー $\epsilon(t) = \sum_{k=1}^{N_0} |\hat{E}(k, t) - \tilde{E}(k, t)| / N_0$ ($N_0 = 9$) の成長は $t - T \lesssim 100$ において指数関数的な増加が確認できた。一方で, エネルギー関数

$E(k, t)$ 各波数 k の時間平均によって得られるエネルギースペクトル $\bar{E}(k) = \langle E(k, t) \rangle$ について, 時刻 $1000 < t - T < 2000$ の予測した時系列データから再構成することに成功した 図1(最下)。このことから速度のデータなどの微視的な時系列データを使わずに構成したりザーバーによる力学系は統計量もうまく再現できていることがわかる。

以上のことから, 構成したりザーバーの力学系はエネルギー関数の挙動を表現するカオス力学系として見るができることが示唆されている。

5 まとめ

流体のマクロ変数として各波数のエネルギー保有量を表すエネルギー関数の時間発展モデルを機械学習により構成した。構成したモデルは, エネルギー関数の時系列データの予測ができることが確認できた。また, モデルから得られた時系列データの統計量としてエネルギースペクトルの一致も確認した。これらのことから構成したりザーバーモデルがエネルギー関数の挙動をうまく再現できることが確認できた。

6 謝辞

中井は JSPS 科研費 19J12482 の助成を受けている。また, 本研究でおこなった計算の一部は京都大学のスーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性奨励枠)に基づく。ここに感謝の意を表す。

参考文献

- [1] H. Jaeger, and H. Haas, *Science*, 304, (2004), pp. 78-80.
- [2] Z. Lu, J. Pathak, B. Hunt, M. Girvan, R. Brockett, and E. Ott, *Chaos*, 27, (2017), pp. 041102.
- [3] K. Nakai, and Y. Saiki, *Phys. Rev. E*, 98, (2018), pp. 023111.
- [4] J. Pathak, Z. Lu, B. Hunt, M. Girvan, and E. Ott, *Chaos*, 27, (2017), pp. 121102.

Numerical simulation of deepwater oil blowout

Turbulent jets and droplet size distribution

Daniel Cardoso Cordeiro

大阪大学大学院 基礎工学研究科

1 Introduction

In 2010, the largest offshore blowout in history happened in the Gulf of Mexico, USA. The sub-sea injection of chemical dispersants was used to treat deepwater oil spills. However, with only few studies prior to its application, the overall effectiveness of this method is still being questioned as appropriate measures of the oil droplets were not performed in situ. The present study investigates the droplet size distribution (DSD) and the turbulence features of the blowout oil treated with chemical dispersants in the area near the oil release through computational simulations. A hybrid volume-of fluid/Euler-Euler model with a large eddy simulation (LES) turbulent model was used to investigate the turbulent breakup of the oil jet into the water and the effects of surface tension, inlet diameter and velocity.

2 Numerical Method

The governing equations solved are the continuity (Eq. 1) and Navier-Stokes (Eq. 2) equations.

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \mathbf{u}_k \cdot \nabla \alpha_k = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k)}{\partial t} + (\rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k \cdot \nabla) \mathbf{u}_k = -\alpha_k \nabla p + \nabla \cdot (\mu \alpha_k \mathbf{u}_k) + \rho_k \alpha_k \mathbf{g} + \mathbf{F}_{D,k} + \mathbf{F}_{S,k} + \mathbf{F}_{vm,k} \quad (2)$$

where \mathbf{u} is the velocity, α is the volume fraction, t is time, ρ is the density, p is the pressure, \mathbf{g} is the gravity acceleration, $\mathbf{F}_{S,k}$ is the surface

tension force, $\mathbf{F}_{D,k}$ is the drag force calculated by the Schiller-Naumann model, $\mathbf{F}_{vm,k}$ is the virtual mass force and the subscript k indicates the fluid phase. An LES Smagorinsky turbulence model was also used.

The domain was modeled based on the experimental data [1], i. e., an 1.0 m height cuboid tank with a 0.3 m x 0.3 m width. Oil flows through a round inlet at the center of the tank initially filled with water. The DSD was calculated a posteriori by isolating the droplets in the isosurface $\alpha = 0.5$, computing their volume and calculating their equivalent diameter considering them as a sphere.

Six cases were calculated following the experimental Weber number ($We = 11 \sim 1.8 \times 10^6$) and Reynolds number ($Re = 269 \sim 1076$) given by: $Re = U_j D / \nu_j$ and $We = \rho_j U_j^2 D / \sigma$, where U_j is the jet velocity, D is the inlet diameter, ν_j is the dispersed phase kinematic viscosity, ρ_j is the dispersed phase density and σ is the surface tension.

3 Results and Discussions

The volume mean diameter d_{50} calculated by the empirical models [2] and the present LES results is shown in Fig. 1. The black dotted line represents d_{50} from the experimental data. Prediction by the present LES model agrees fairly well with the experimental results for all cases, on the other hand, the empirical methods cannot estimate d_{50} and the differences are of several orders of magnitude.

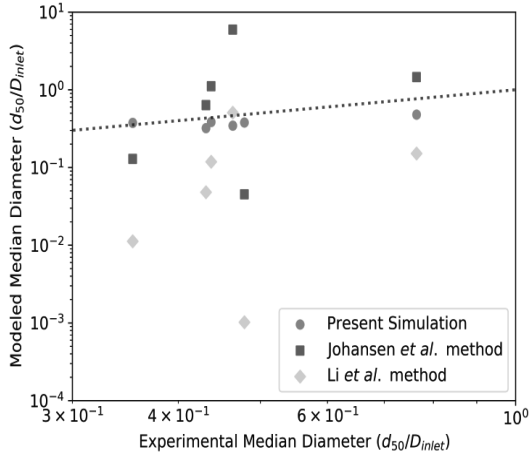


Figure 1: Comparison of the accuracy of methods for estimation of the volume mean diameter d_{50} .

Fig. 2a shows a positive isosurface of the second invariant of velocity gradient Q which identifies an association of Kelvin-Helmholtz instabilities (initial ‘rings’) and hairpin vortices that ‘peel off’ the jet core into droplets (shown in the white isosurface $\alpha = 0.5$). This process is known as primary atomization. In Fig. 2b, the initial orderly hairpins start to become increasingly chaotic, enhancing the secondary breakup of droplets.

The behavior of the average local droplet Weber number, i.e., the one calculated using the droplet diameter and droplet velocity, was also studied. The curves collapse into a similar trend when scaled by the local maximum

average Weber number, which we found to be a function of the Brownell-Katz number (BK) or of the We , Re and Froude number $Fr = U_j^2/(gD)$ as shown in Eq. 3:

$$\left(\overline{We}\right)_{max} \cong 2\sqrt{BK} = 2\frac{We}{\sqrt{ReFr}} \quad (3)$$

4 Conclusion

The application of a hybrid volume-of-fluid/Euler-Euler model with a large eddy simulation turbulent model was effective in modeling the laboratory scale oil blowout in a water tank. With a relative mean error of 0.19 for the oil droplet median diameter prediction, the model surpassed the state-of-the-art empirical models.

However, further investigation is necessary to explain the behavior of the droplet Weber number in order to better understand the phenomenon.

References

- [1] Kujawinski et al., *Environ Sci Technol*, **45**, 1298–1306, 2011.
- [2] Socolofsky et al., *Proc. of 38th AMOP*, 2015.
- [3] Miyata et al., *JIME*, **51**, 109–116, 2016.

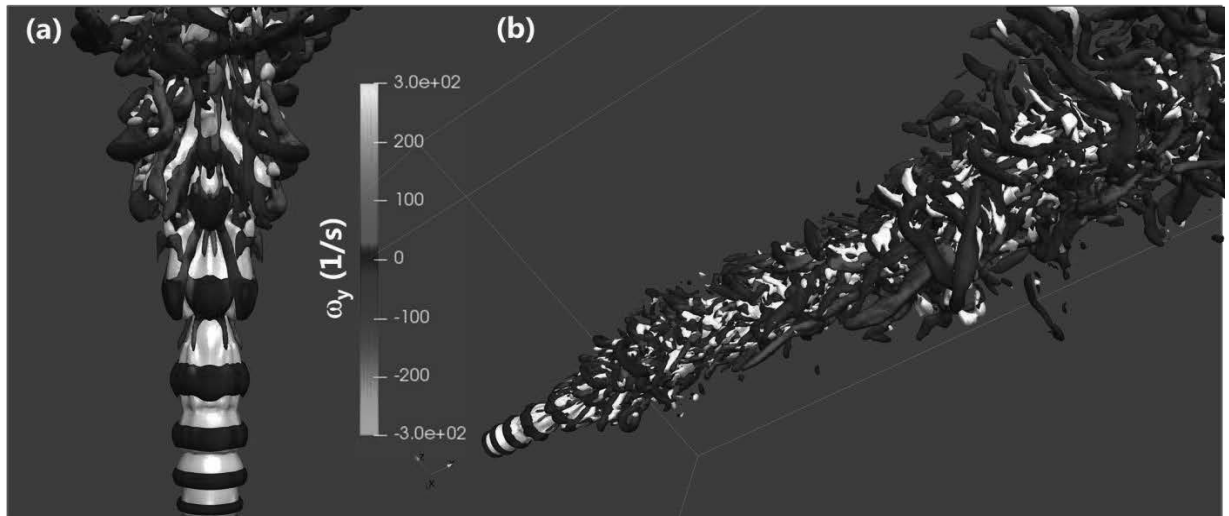


Figure 2: A positive isosurface Q (colored by the vertical vorticity) and $\alpha = 0.5$ (white) for $Re = 1076$ and $We = 179$. (a) Details of the Kelvin-Helmholtz instabilities near the inlet and the hairpin vortices. (b) Increasing disorder of the turbulent vortices.

分子動力学計算による膜貫通型ペプチドと リン脂質二重膜の相互作用ダイナミクス

最上 譲二

東北大学大学院工学研究科

本研究では、ペプチドとリン脂質二重膜との相互作用を調べるためにマイクロ秒スケールの分子動力学(MD)シミュレーション及び自由エネルギー計算を行った。

ペプチドはアミノ酸の配列を変えるだけで簡単に分子の特性を制御でき、 α ヘリックスを形成させれば疎水性ドメインがリン脂質二重膜に貫通する事で、膜貫通タンパク質のように強固な細胞膜アンカーを実現できる。この細胞膜アンカー型ペプチドを利用する事で、細胞毒性の低い細胞標識ツールへの応用が期待されている。しかし、 α ヘリックス型ペプチドは横向きに膜表面に吸着する状態なども存在しており、ペプチドが膜に貫通する挙動を明らかにする事が効率的な細胞膜アンカーには重要である。そこで、 α ヘリックス型ペプチドとリン脂質二重膜との相互作用についてMD計算を通して検討した。

1 緒言

より安定に膜と相互作用して脱離しにくいモデル分子として、多くの膜貫通タンパク質の膜ドメインに共通している α ヘリックスをモチーフにした膜貫通型ペプチド(6K、WALPxなど)が研究されている[1](図1)。ところが、膜貫通ペプチドは α ヘリックスの両末端に親水性残基が存在し、安定な膜貫通型をとるようにデザインされているため、ジャイアントリポソーム(LUV: Large Unilamellar Vesicle)に膜貫通型ペプチドを作用しても自発的に膜貫通型に移行しない問題が指摘されている[2]。

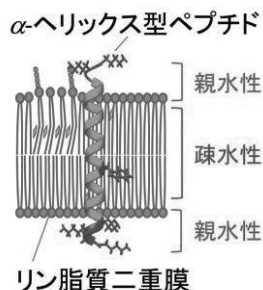


図1. リン脂質二重膜へ貫通した α -ヘリックス型ペプチド

そこで、 α ヘリックス型ペプチドとリン脂質二重膜の安定性を熱力学的に定量評価するために、分子動力学(MD)シミュレーションならびに自由エネルギー計算を行った。

2 計算方法

計算対象とする分子は、 α ヘリックス型ペプチドとして比較的良好に研究されている6Kペプチド(KKAAALAAAAALAAWAALAAAKKKK-NH₂)を用いた[1]。リン脂質二重膜のモデルとしてはPOPC膜を用いて、POPC膜の外部、内部にペプチド分子がそれぞれ準安定的に存在する間の全原子のトラジェクトリをサンプリングした。長時間のMD計算であるがレアイベントを見るのではなく、一定時間内において平衡状態にあると統計的に判断された状態の自由エネルギー計算から、熱力学的安定性を評価した。自由エネルギー計算は、高速かつ高精度なエネルギー表示法(ER法)に基づいた手法を用いた。ER法はMatubayasiらによって開発された、相互作用エネルギーの分布関数を汎関数溶液理論に適用した計算手法であ

り多体の溶媒効果を正確に評価する場合に適している[3]。

MD シミュレーションは以下に示す典型的な条件下で行った。6K ペプチド1分子に対してPOPCは173分子、水は6047分子を直方体ユニットセルに周期境界条件で配置した。NPT アンサンブルで20°C、1気圧の条件下で10 ns(サンプリングインターバル: 200 fs)の計算をNAMDパッケージを用いて行った。水分子モデルはTIP3Pを用い、6K ペプチドおよびPOPC分子はCharmm22および36力場を使用した。静電相互作用はPME法を適用し、実空間カットオフを12Åに設定した。

3 結果と考察

6K ペプチドの溶媒和自由エネルギー計算の結果を図2に示す。水中では-704.4 kcal/mol、POPCリン脂質膜中では-845.3 kcal/molと得られた。これより、6K ペプチドのリン脂質膜中への挿入にともなう自由エネルギー変化は $DG = -140.9$ kcal/molと見積もられた。この値は同じ α ヘリックス構造をとる23残基からなるペプチドWALP23とPOPC膜との相互作用を調べた粗視化シミュレーションによる自由エネルギー計算の値-35 kcal/molよりも安定性が高く見積もられた[4]。この原因として、6K ペプチドの水中における構造を初期構造の α ヘリックスのまま計算している事が考えられる。実際に6K ペプチドを合成して得られた水中における6Kと膜中を模倣したSDS中の6KのCDスペクトルを測定したところ、SDS中において α ヘリックスを示すピークが2倍程度強調されることが分かった(図3)。すなわち、水中における6K ペプチドは α ヘリックス構造を維持しているものの、CDスペクトルとして50%程度緩んだ構造になっている事を示している。

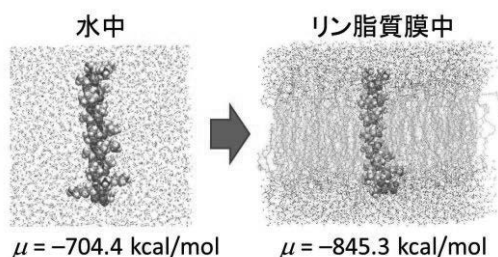


図2. 6K ペプチドの膜への挿入

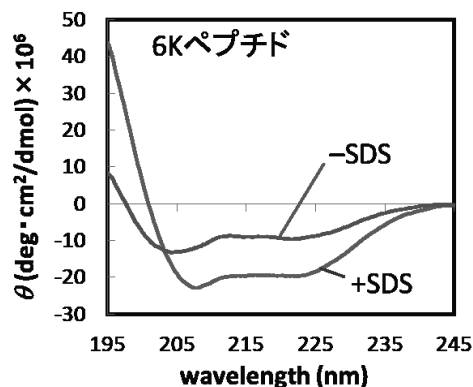


図3. 6K ペプチドのCDスペクトル

4 結言

以上の結果から、次におこなうべき以下の課題を得た。

- (1) 水中における6K ペプチドの構造を考慮したMDシミュレーション
 - (2) 6K ペプチドの膜中の位置依存性
 - (3) 6K ペプチドの配列を置換し膜透過性をコントロールしたペプチドのMD計算
- (3)については、既にアルギニン置換6Kペプチドを合成して、HeLa細胞に暴露した試験により膜透過性が変化する実験結果を得ている(データ省略)。また、ペプチドとリン脂質二重膜の結合熱の測定よりエンタルピー的寄与も明らかにした(データ省略)。このように、膜透過性のコントロールと熱力学的評価を、実験と計算の両面からアプローチすることで、効率的な膜貫通ペプチドのデザインができると期待される。

5 引用文献

- [1] Y.-C. Tang, C. M. Deber, *Biopolymers* **76**, 110–118 (2004).
- [2] A. Christopher, B. Burkhard, *Thermodynamics, Kinetics of Dynamic Systems*, IntechOpen, DOI:10.5772/1433 (2011).
- [3] N. Matubayasi, M. Nakahara, *J. Chem. Phys.* **113**, 6070 (2000).
- [4] W. F. Drew Bennett et al., *J. Chem. Phys.* **143**, 243127 (2015).

分子シミュレーションによるヌクレオソーム構造変化の網羅的探索

生体高分子の並列分子動力学シミュレーションプログラム SCUBA のチューニング

石田 恒

量子科学技術研究開発機構 量子生命科学領域

本共同研究制度課題では、量子科学技術研究開発機構にて開発した生体高分子の並列分子動力学シミュレーションプログラム SCUBA を用いたヌクレオソーム構造変化の網羅的探索を迅速に実行するためのプログラム高度化を実施した。特に、ループ変形、MPI 環境変数、IO 環境変数の最適化を実施することで計算精度を向上することができた。今後、チューニングされた SCUBA を用い、ゲノム DNA を収納するヌクレオソーム集合体（染色体）の構造を特徴づけるヌクレオソーム構造変化を特徴づけるヌクレオソーム内相互作用を特定し、染色体上の遺伝子発現メカニズムを原子レベルで理解する。

1 生体高分子の並列分子動力学シミュレーションプログラム SCUBA

タンパク質や核酸などの生体分子は、その立体構造を変化させることで機能を発揮している。生体分子の立体構造変化を調べるためには、生体分子の個々の原子の相互作用を計算しながら立体構造変化を時々刻々追跡する「分子動力学シミュレーション」は非常に有用な方法である。従来の分子動力学シミュレーションでは計算アルゴリズムや計算機性能の制限により、シミュレーションの対象は単体のタンパク質や核酸であった。しかし、生体内ではタンパク質や核酸が単体で働くことはむしろ少数であり、複数のタンパク質、核酸が互いに様々な配向をとりながら集合体(生体超分子)を形成して機能を発揮する。

SCUBA (Simulation Codes of hUge Biomolecule Assemble) は生体分子（主に核酸、蛋白質）の機能発現メカニズム解析研究を目的として量子科学研究開発機構により開発された、分子動力学シミュレーションシステムである。用いる運動方程式は、古典力学のニュートン運動方程式である。SCUBAは空間分割法による並列化により、扱える原子数は100万原子以上であり、高い並列化効率（並列化効率99.9%）を有する。

SCUBAは長距離相互作用を高速かつ高精度に計

算するPPPM(Particle-Particle Particle-Mesh)計算法、系のエネルギー、温度、圧力を一定に保つ様々な時間積分アルゴリズム、レプリカ交換、自由エネルギー計算、エネルギー最小化、基準振動解析、原子結合長を固定することにより時間ステップの増大を可能とするSHAKE, RATTLEアルゴリズム、系の原子分布異方性により引き起こされる並列化効率の悪化を防ぐための動的ロードバランスなど、最新のアルゴリズムを搭載している。

2 SCUBA のプログラム高度化

初めに、プロファイル計測と性能向上に向けた調査・検討を実施した。用いた系は小規模系（small、122,862 原子、メモリ使用量：12GB 程度、ディスク使用量：50MB 程度）及び大規模系（large、2,107,110 原子、50GB 程度、ディスク使用量：500MB 程度）である。実行並列数は小規模系：1n16p1t(small), 1n16p2t(small), 1n16p4t(small), 1n32p1t(small), 1n32p2t(small), 大規模系：2n64p1t(large), 2n32p2t(large), 4n64p1t(large), 4n32p2t(large)とした。（並列数(XnYpZt)の表記の意味は、X：使用ノード数、Y：ノードあたりプロセス数、Z：プロセスあたりスレッド数、X*Y*Z：総コア数）

調査の結果、1. ファンデルワールス力 ellj15

の演算がコストの大半を占める 2. プロセス数 2 倍による性能向上は 1.9 倍、3. スレッド数 2 倍による性能向上は 1.5~1.7 倍程度、4. 自動ベクトル化による性能向上は 1.3~1.7 倍程度、5. コードジェネレータによりベクトル長やアンロールの制御が可能、6. 大規模系では通信(主に 1 対 1 通信)比率が増加し、プロセス間のインバランス発生、7. Intel コンパイラでは IO 時間大、バッファリングを行うための環境変数の指定で性能向上の可能性があることがわかった。

以上の結果を検討、6 種類(1. ベクトル長(Intel 及び Cray コンパイラ)、2. ループ変形+コンパイルオプション (Intel 及び Cray コンパイラ)、3. OpenMP スケジューリング (Intel 及び Cray コンパイラ)、4. Hugepage (Intel コンパイラ)、5. MPI 環境変数 (Intel コンパイラ)、6. IO 環境変数 (Intel コンパイラ))の最適化を実施し、性能を評価した。

2.1 ベクトル長

ベクトル長においては、VECLEN=16 がほぼ全てのケースで最速であった。ただし、Cray では 4n64p1t(large)で VECCLEN=32 で 16 に対して 5%性能向上する場合があった。

2.2 ループ変形

ループ変形 ((1)最内ループブロッキング(ブロックサイズ:VECCLEN) (2)外側ループフルアンロール (3)最内ループ内 select 文削除 (4)最内ループ融合 1(VECCLEN の do ループ) (5)最内ループ内 if 文削除 (6)最内ループ融合 2(if 文削除に伴う VECCLEN の do ループ) (7)最内ループ内除算変更 (Newton-Raphson 法による除算無効) とコンパイルオプションの組合せにおいては、2n64p1t(large)では、Intel で tune106(ループ変形(1)(2)(7),-qopenmp コンパイルオプション追加)が最速となり、オリジナル版に対して 1.05 倍性能向上した。Cray では tune402(ループ変形(1)(2)(3)(4),-O3 コンパイル オプション)が最速となり、オリジナル版に対して 1.39 倍性能向上した。全体として最速値は Intel が Cray に対して 1.07 倍高速であった。1n16p1t(small)では、Intel で tune006(ループ変形(1)(2)(7))が最速となり、オリ

ジナル版に対して 1.02 倍性能向上した。Cray では tune402 が最速となり、オリジナル版に対して 1.49 倍性能向上した。全体として最速値は Intel が Cray に対して、1.21 倍高速であった。

2.3 OpenMP スケジューリング

OpenMP スケジューリングでは、guided で 1~2%性能向上するが、コンパイラや入力データによらずスレッド並列未適用の方が最速であった。

2.4 hugepage

hugepage では、入力データによらず hugepage の使用による性能向上は殆ど無かった。

2.5 MPI 環境変数

MPI 環境変数では、Eager 通信主体の環境変数指定により、2n64p1t(large)でのみ 1.31 倍性能向上した。

2.6 IO 環境変数

IO 環境変数では、1n16t(small)、1n32p1t(small)、2n64t(large)、4n64p1t(large)でそれぞれ 1.11 倍、1.19 倍、1.15 倍、1.32 倍性能向上した。(主要な IO は rank0 のみによるリスタートファイルの read/write で総 IO 量は数 10MB(small)~数 100MB(large)である。Intel は Cray に比べて read/write システムコールの IO 長が小さく、呼出回数が read は 7 倍以上、write は 100 倍以上多い。そのため、Intel においては、ファイル IO のバッファリングを有効にする環境変数 (FORT_BUFFERED、FORT_BLOCKSIZE)を指定することで性能向上したと考えられる。)

3 まとめ

以上の結果を参考にして、本課題の計算規模におけるループ変形、MPI 環境変数、IO 環境変数の最適化を実施する。そして、分子シミュレーションによるスクレオソーム構造変化の網羅的探索を推進する。

巨大津波遡上時の木造家屋の瓦礫生成過程シミュレーション

浅井 光輝*

*九州大学大学院 工学研究院 社会基盤部門

1 はじめに

2011年東北地方太平洋沖地震で生じた大規模な津波により、沿岸域の木造家屋の多くは瓦礫となった。津波と瓦礫が混在して遡上することで、人的・経済的損失が拡大した。瓦礫の総量は約2200万トンにも及び、災害復旧時にはその膨大な瓦礫の処理に時間を有し、復旧・復興が遅れが生じた。今後、南海トラフなど、同規模の地震・津波被害が生じる危険性が高いことが指摘されている。そのため、津波遡上を事前に把握し災害に備えるだけでなく、同時に発生する瓦礫の総量と拡散状況を事前評価し、災害後の復旧活動に備える必要がある。本研究の目的は、特に木造家屋の倒壊を反映した津波遡上解析技術を開発し、遡上解析のさらなる高精度化を実施すると共に、津波遡上後の都市全体に発生する瓦礫総量と拡散・分布状況の事前評価が可能なツールへの発展を目指すことである。

以上の目的から、まずは地震・津波に対する都市全域の木造家屋倒壊解析から開発を進めており、現在以下の2点の課題に取り組んでいる。

- (1) 都市全域のモデル化及び地震応答解析
- (2) 流体構造連成解析手法の開発

本研究グループでは、粒子法の一つであるSPH法を用いた高知市の津波遡上解析をすでに実施しており、粒子数10億以上の規模の流体解析が可能であることはすでに確認している[1]。一方で、都市全域規模の地震応答解析を実施するにあたって、構造解析手法の計算速度の高速化が必須となった。

2 構造解析手法

本研究では構造解析手法として有限要素法であ

るASI-Gauss法[2]を採用した。1部材を2つの線形チモシェンコはり要素だけで分割し、数値積分点を順応的にシフトすることで部材の弾塑性挙動を低い計算コストで高精度に表現する手法であり、またUpdated Lagrangian記述を用いた定式化により崩壊に至るまでの大変形挙動を解析可能な有限変形弾塑性解析方法である。2001年9月11日に起こったニューヨーク世界貿易センタービル(WTC)の崩壊再現解析[3]や実大3次元震動破壊実験装置(E-Defense)を用いた実大モデル振動実験との比較[4]により、本解析コードは性能検証済みである。塑性化の判定は要素両端の断面力を降伏関数に代入することにより行う。本研究では以下の降伏関数を用いた。

$$f_y = \left(\frac{M_x}{M_{x0}}\right)^2 + \left(\frac{M_y}{M_{y0}}\right)^2 + \left(\frac{N}{N_0}\right)^2 + \left(\frac{M_z}{M_{z0}}\right)^2 = 1 \quad (1)$$

ここで、 M_x 、 M_y 、 N 、 M_z はそれぞれx、y軸回りの曲げモーメント、軸力、ねじりモーメントである。右下添え字の“0”は全断面塑性値であることを示す。部材の破断は要素の断面力を解放することで表現しており、それにより崩壊現象の解析を可能としている。

3 プログラム高度化

3.1 オリジナルコードの問題点

ASI-Gauss法の従来の使用方法は、1つの構造物のみを対象として構造解析を行うものであった。そのため、モデルの規模は大きくても節点数・要素数ともに数万オーダーに抑えられており、計算コストが顕著な問題とはならなかった。しかし本研究で対象とする都市全域規模のモデルは、要素数が4000万、節点数が3000万程度と大規模である。オリジナルコードは、並列計算に対応しておらず、また要

素数が数千万オーダーのモデル解析を想定していないため、計算効率の低いアルゴリズムが存在していた。都市全域の大規模地震応答解析をするにあたって、ASI-Gauss 法の並列化およびアルゴリズムの改良が必要となった。

3.2 改良点

ASI-Gauss 法を高速化するため、ソースコードのスレッド並列化（以下、OpenMP と記述）を段階的に行った。まずは計算コストが高く非効率な場所を計測し、連立一次方程式ソルバーと接触探索アルゴリズムの両者から改良を行った。ソルバーについては剛性行列の格納法として CRS 法（Compressed Row Storage）を採用し、スレッド並列効率の高い共役勾配法ライブラリーを移植した。また接触探索には、特に粒子系の解析における近傍粒子探索法で用いられているバックグラウンドセルを使ったセル検索方法を応用することで、接触探索すべき要素を限定することで大幅な高速化を実現した。

3.3 性能評価

性能評価に使用したモデルは、図 1 に示す要素数：43,934、節点数：30,370 のモデルである。このモデルを用いて、1000 ステップの計算に要する時間を測定した。並列化コードの解析環境は、京都大学スーパーコンピュータ System A、1 ノード、64 スレッドである。その結果、従来のコードでは 33 時間 32 分要した計算が、ソルバーの改良後の計算時間は、13 時間 37 分になり、約 2.5 倍の高速化を達成した。特にソルバーのサブルーチン単体に注目すると、35 倍高速化（並列化効率：57%）している。この結果から、ソルバーは大幅に高速化したものの、他の計算効率が低いサブルーチンが、解析時間の多くを占めていることが 2.5 倍の高速化に留まっている要因であることが判明した。

次に実施した高速化は接触探索アルゴリズムの改良である。従来のコードでは、一要素が、その他すべての要素に対し、接触探索のための計算を行っていた。無駄な計算を削減するために、解析領域をセル単位で分割し、接触探索の候補を自身のセルと近傍のセルのみに限定することで接触探索の高速化を実現した。

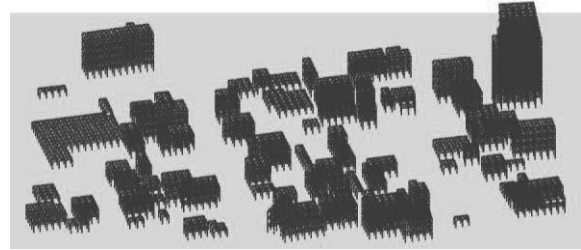


図 1 モデル小（要素数：4.4 万，節点数：3.0 万）



図 2 モデル大
（要素数：217 万，節点数：155 万）

その結果、図 1 と同様のモデル・解析条件において、接触探索アルゴリズム改良後のコードでは、解析時間が 13 時間 37 分から 2 時間 11 分になり、さらに 6 倍近く高速化することができた。（ソルバーと併せると約 15 倍の高速化を実現。）

以上の高速化は、非線形解析までに留まっており、ASI-Gauss 法一番の特徴である崩壊後の解析まで実施すると、急激に解析速度の低下を招く。図 1 と同様のモデルでは、全体剛性行列構築に 7 秒要したのに対し、図 2 に示す要素数：217 万、節点数 155 万オーダーのモデルでは約 5 時間要することが分かった。接触計算では、ギャップ要素を追加し、その要素を介して接触要素間の力を伝えている。そして全体剛性行列を再び構築している。そのため、現状のコードでは接触判定・接触解除判定されるたびに、ギャップ要素が増減し、約 5 時間かけて全体剛性行列を一から作り直している。以上、崩壊後の全体剛性行列のアセンブリに時間を要していることに起因することが判明した。現在は、崩壊後の解析の高速化に取り組んでいる。

4 都市全域の地震応答解析

構造解析手法である ASI-Gauss 法には、改善の余地が依然としてあるものの、都市全域の地震応答解析が実現可能な高速化を達成することができた。

4.1 都市全域のモデル化

都市全域のモデル化には、地理情報システム (GIS) を用いた[5]。GIS より得られる建物の立体位置情報と数値標高データから、都市全域の建物モデルを構築した (図 3)。また同データから、津波遡上解析に必要な地表面モデルの作成も可能である。

本研究で対象とする都市は、高知県高知市とした。前述の通り、本研究グループでは、高知市の津波遡上解析も併行して実施している (図 4)。ASI-Gauss 法を用いた都市全域のモデル化及び地震応答解析を達成後は、津波遡上解析と連成することで、地震・津波に対する都市全域の木造家屋倒壊解析へと発展させる予定である。

4.2 都市全域モデルの領域分割

高知市モデルの概要は次の通りである。領域：7 km×10 km、建物数：82,916、要素数：43,411,162、節点数：30,295,639、データサイズ：9.5 GB。単一のパソコンでも解析できないことはないが、数日の間に解析を終了させるためには、複数の計算機を同時に使うことが望ましい。そこで、複数の計算機に計算負荷が一致するように領域分割を行った。その例として、高知市全域モデルを 20 区画に分割した例を示す (図 5)。

このモデルの平均要素数は 2,170,558 (絶対偏差：0.3%)、平均節点数は 1,514,782 (絶対偏差：1.1%) であった。領域分割の結果、各領域の平均解析時間は 28 時間 28 分 (System A：20 ノード、68 スレッド、1000 ステップ) に抑えることができ、都市全域の地震動解析が数日の内に完了できるようになった。

図 6 は 20 区画のうち、1 区画を可視化した図であり、カラーコンターはモデルの水平変位を表している。高い建物ほど大きく揺れていることがわかる。図 7 は図 6 をさらに拡大した図である。建物一つ一つの形状が再現されており、はり要素にてモデル化されていることが確認できる。

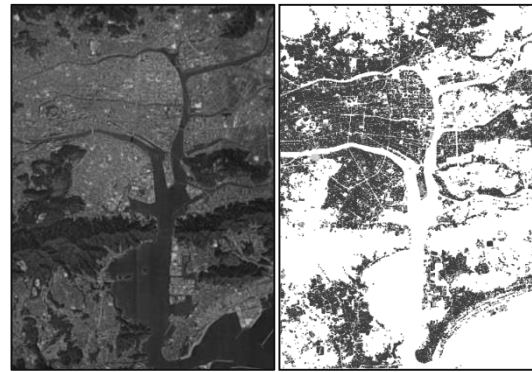


図 3 高知市の都市モデル

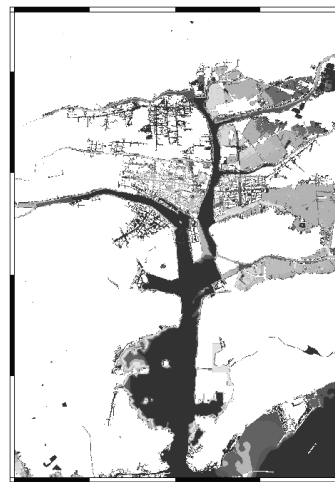


図 4 高知市の津波遡上解析



図 5 高知市モデルの領域分割



図 6 1 区画の地震応答解析結果

都市全域モデルにおいては、建物ごとに建築年代を考慮した耐力は設定されておらず、また地震・津波で崩壊の危険性の低い堅牢な建物も同じはり要素モデル化しているなど、まだ改良の余地があり、引き続きモデルを洗練させていく。

5 まとめ

今回の共同研究により、ソースコードの OpenMP 化、共益勾配法ライブラリー導入等、特にソルバーを中心に計算速度が高速化した。これにより、都市全域の大規模地震応答解析が実現可能となり、本研究を大きく前進するものとなった。今後、継続的に計算効率の低いアルゴリズムを改良することで、更なる計算高速化を図るとともに、都市全域モデルの修正、流体構造連成解析手法を開発し、巨大津波遡上時の木造家屋の瓦礫生成過程シミュレーションを実施する方針である。

謝辞

本研究は、筑波大学・磯部大吾郎教授、田中聖三助教との共同研究として実施させていただきました。コードチューニングをしていただいたクレイ・ジャパン・インクの方々、またサポートしていただきました京都大学情報メディアセンター関係者各位に感謝申し上げます。また JSPS 科研費 17H02061 の助成を受けて実施しました。ここに感謝の意を表します。

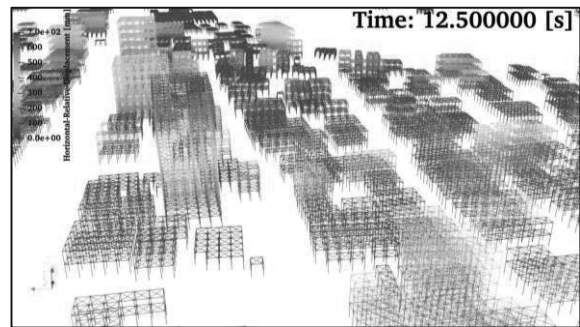


図7 1区画の地震応答解析結果(拡大)

参考文献

- [1] 江口史門, 浅井光輝, 大谷英之, 一色正晴: 建物群を含む地表面詳細モデルを用いた粒子法による三次元津波遡上解析, 土木学会論文集 A1 (構造・地震工学), Vol. 72, No. 4 (地震工学論文集第 35 卷), pp. I_367-I_377, 2016.
- [2] D. Isobe: *Progressive Collapse Analysis of Structures: Numerical Codes and Applications*, Elsevier, eBook ISBN: 9780128130421, Paperback ISBN: 9780128129753, 2017.
- [3] 磯部大吾郎, チョウミョウリン: ASI-Gauss 法による世界貿易センタービルの飛行機衝突解析, 日本建築学会構造系論文集, 第 600 号, pp.83-88, 2006.
- [4] 韓元相, 磯部大吾郎: ASI-Gauss 法を用いた地震応答解析コードの性能検証, 計算工学講演会論文集 CD-ROM, 第 16 巻, 2011.
- [5] 大谷英之, 陳健, 堀宗朗: 地震応答解析モデルの堅牢な自動構築のための床形状判読手法の開発, 土木学会論文集 A1 (構造・地震工学), Vol. 70, No. 4 (地震工学論文集第 35 卷), pp. I_1124-I_1131, 2014.

異方性弾性波動問題に対する 演算子積分時間領域境界要素法の高性能化

斎藤 隆泰**

*群馬大学 大学院理工学府 環境創生部門

1 緒言

本報告では、異方性弾性波動問題における演算子積分時間領域境界要素法 (CQBEM: Convolution Quadrature time-domain Boundary Element Method) の高性能化について述べる。近年、炭素繊維強化プラスチック (CFRP: Carbon Fiber Reinforced Plastic) やオーステナイト系材料等の (音響) 異方性材料が自動車や航空・宇宙、土木分野等、工学の様々な分野で注目を集めている。これら異方性材料は、高強度等を理由に実用化が進んでいる。異方性材料の維持管理には、通常の金属材料等と同様に、超音波非破壊検査 (UT: Ultrasonic non-destructive Testing) の適用が試みられている。しかしながら、音響異方性が原因で、超音波は複雑に伝搬することから、探傷精度の低下が懸念されている。そのため、音響異方性を考慮した、弾性波動 (超音波は固体中で弾性波動の性質を示す) 散乱解析手法を開発することは、UT の精度向上に大きな寄与をもたらすと考えられる。このような理由から、異方性材料中の弾性波動解析 [1] も近年、いくつか行なわれている。しかしながら、波動解析に適した境界要素法 (BEM: Boundary Element Method) を用いた異方性弾性体中の大規模弾性波動解析は、ほとんど行なわれていない。

そこで、本報告では、CQBEM を用いて、異方性弾性体中のき裂群に対する弾性波動散乱解析を行なった例を紹介する。CQBEM は、従来の時間領域境界要素法よりも数値安定 [2] であることで知られており、近年、工学の様々な時間領域問題に適用されている。異方性弾性波動問題における CQBEM の詳細説明は文献 [3] に譲り、以下では解くべき問題の解析モデルについて簡単に説明した後、数値解析例を示

す。なお、解析では、京都大学のスーパーコンピュータで OpenMP, MPI を用いて計算を効率的に行なっている。最後に、今後の展望等についても述べることとする。

2 解析モデル

解析例として、図 1 に示すような、無限異方性弾性体 V 中のき裂群による純面外波の多重散乱問題を考える。き裂はもちろん、ランダムに配置されていても構わない。長さ $2a$ のき裂群に対して鉛直上向きに入射波を送信すると、入射波とき裂群の相互作用により、散乱波が発生する。この時、面外変位 $u_3(\mathbf{x}, t)$ に対して、以下の時間領域境界積分方程式が成り立つ。

$$u_3(\mathbf{x}, t) = u_3^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) - \int_S T_{33}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * [u_3(\mathbf{y}, t)] dS_{\mathbf{y}} \quad (1)$$

ただし、 t は時間、 $u_3^{\text{in}}(\mathbf{x}, t)$ は入射波、 $T_{33}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ は二次元純面外異方性弾性波動問題に対する二重層核、 $[u_3(\mathbf{y}, t)]$ はき裂開口変位を表す。本研究では、式 (1) の畳み込み積分 $*$ を Lubich の演算子積分法 (CQM: Convolution Quadrature Method)[4] で評価する。なお、CQM を用いることにより式 (1) の時間領域積分核 $T_{33}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t)$ を直接評価する必要はなくなり、ラプラスパラメータ s を用いた $T_{33}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$ を評価することとなる。そのため、従来の時間領域境界要素法が苦手とした粘弾性波動問題等も CQBEM で解析することが可能となる [2]。

さて、式 (1) を時間と空間に関して適切に離散化すれば、最終的に各時間ステップにおいて $\mathbf{T}[\mathbf{u}] = \mathbf{u}^{\text{in}}$ の形式の代数方程式に帰着される。その代数方程式

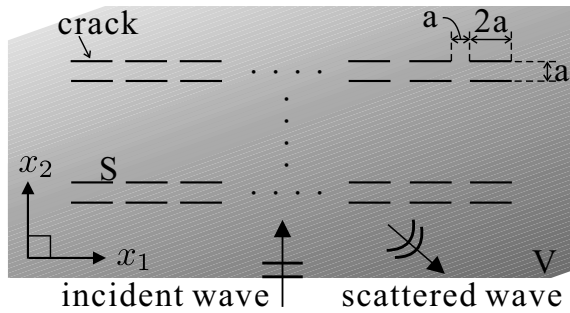


図 1: 解くべき問題.

を解くことで、各時間ステップにおけるき裂開口変位を求めることが可能となる。ただし、 \mathbf{T} は、式 (1) の境界積分により求まる係数行列、 $[\mathbf{u}]$ はある時刻におけるき裂開口変位、 \mathbf{u}^{in} は入射波から成るベクトルである。

一般的に、CQBEM も含め時間領域境界要素法では、境界要素数を M とすれば、 \mathbf{T} は $M \times M$ 程度の係数行列となる。そのため M が大きい場合は、計算時間・記憶容量が膨大となる。境界要素法のアルゴリズムを改良して高速化を目指す場合は、高速多重極法 (FMM:Fast Multipole Method)[5] 等の方法を適用することが盛んに行なわれてきたが、一般の異方性弾性波動問題の場合、基本解の多重極展開を行なうことが難しい [2]。そこで本研究では、冒頭で述べたように、まず京都大学のスーパーコンピュータを用いて Open MP と MPI のハイブリッド並列化を施すことで、大規模計算を効率的に実施する方策を取った。

3 数値解析例

以下、数値解析例を示す。

3.1 解析条件

数値解析例として、無限異方性弾性体 V を一方向炭素繊維強化プラスチック (以下、一方向 CFRP、水平方向を炭素繊維方向) と仮定した。図 1 中のき裂群は、128 (水平方向 × 鉛直方向き裂数 = 8×16) 個の水平き裂群とし、水平方向 × 鉛直方向 = $23.0a \times 7.0a$ の長方形領域に規則正しく配置した。各き裂は 20 個の境界要素に分割しており、全境界要素数は 2560 (き裂総数

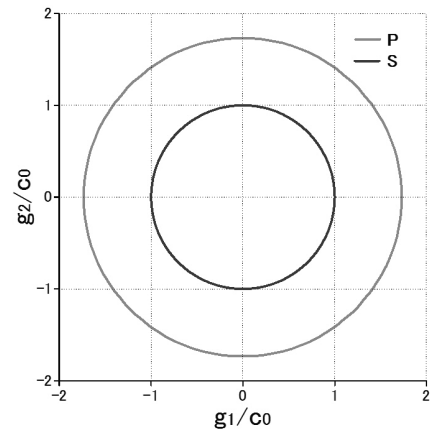


図 2: 等方性材料に対する群速度曲線の例.

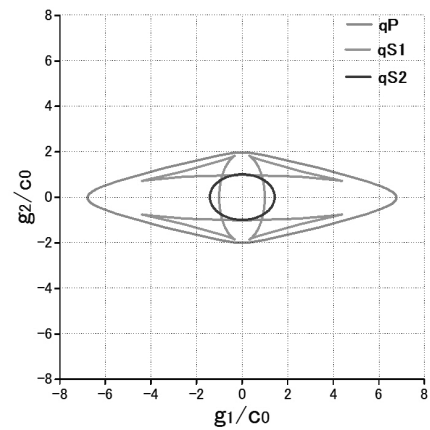


図 3: 一方向 CFRP に対する群速度曲線の例.

×1 つのき裂あたりの境界要素数 = 128×20) とした。また、時間増分 $c_T \Delta t/a$ は、 $c_T \Delta t/a = 0.01$ 、総時間ステップ数は 256 とした。ただし、 c_T は純面外波の入射波の波速である。このときの全未知数は 655360 (全境界要素数 × 総時間ステップ数 = 2560×256) であり、異方性弾性波動問題における基本解が閉じた形式で与えられないことも含めて、かなりの大規模波動問題となる。一方、入射波 $u_3^{\text{in}}(\mathbf{x}, t)$ は x_2 軸を正の方向に伝搬する平面波とし、次のように与えた。

$$u_3^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) = \frac{u_0}{2} (1 - \cos 2\pi\alpha) \quad (2)$$

$$\alpha = \begin{cases} \frac{c_T}{\lambda} \left(t - \frac{x+a}{c_T} \right) & \text{for } (0 \leq \alpha \leq 1) \\ 0 & \text{for otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

ここで、 u_0 は入射波の変位振幅、 λ は入射波の波長を表す。ただし、ちょうど $c_{Tt}/a = 0.0$ で入射波が最下方のき裂に当たるように時間を調整している。また、本報告では、OpenMP, MPI のハイブリッド並列が正しく行なわれている効果を確認するため、解析対象を異方性弾性波動問題で最も簡単な純面外波動問題としている。そのため、一方向 CFRP の解析に必要な弾性定数は、 $C_{44} = 1.0$ 、 $C_{55} = 2.02$ のみであり、それぞれ C_{44} で無次元化した。

3.2 解析結果の妥当性を示すための群速度曲線

一般的に、異方性弾性波動問題では、解析に先立ち、群速度曲線を描いて波動伝搬方向に対する波速（ここでは群速度の意味）を求めておくことが解析結果の妥当性を示す意味で重要である。参考のため、解析に用いた等方性材料と、一方向 CFRP に対する群速度曲線を、それぞれ図 2、図 3 に示しておく。本研究で扱う異方性弾性波動は図 3 における qS2 波（純面外波、青線で表記、図 2 の等方性材料の場合は SH 波と呼ばれる）であること、群速度ベクトルの値はそれぞれの $c_0 = \sqrt{C_{44}/\rho}$ で無次元化されていることに注意されたい。図 2 より、等方性材料中では、P 波と S 波の異なる二種類の波動が存在することがわかる。ただし S 波は二次元問題の場合、SV 波と面外波動である SH 波に分類できるものの、それらの波動速度自体は同じである。しかしながら、図 3 の一方向 CFRP の場合、異なる波動速度を持つ三種類の波動が存在することがわかる。特に擬縦波である qP 波は水平方向に早く伝搬することがわかる。また、擬横波の一つである qS1 波は 45 度方向等で波面がクロスしながら伝搬することがわかる。本報告で解析対象とした qS2 波の群速度曲線は、横長の楕円形状を示しているため、水平方向にやや速い速度で伝搬することがわかる。すなわち、図 3 より、音響異方性の性質を把握でき、解析結果で示す散乱波は、図 2 や図 3 で示した群速度曲線に従って伝搬していなければ正しい結果とは言えない。

3.3 数値解析結果

図 4、図 5 に、それぞれ等方性材料、一方向 CFRP に対する数値解析結果を示す。これら図中の (a),(b),(c)

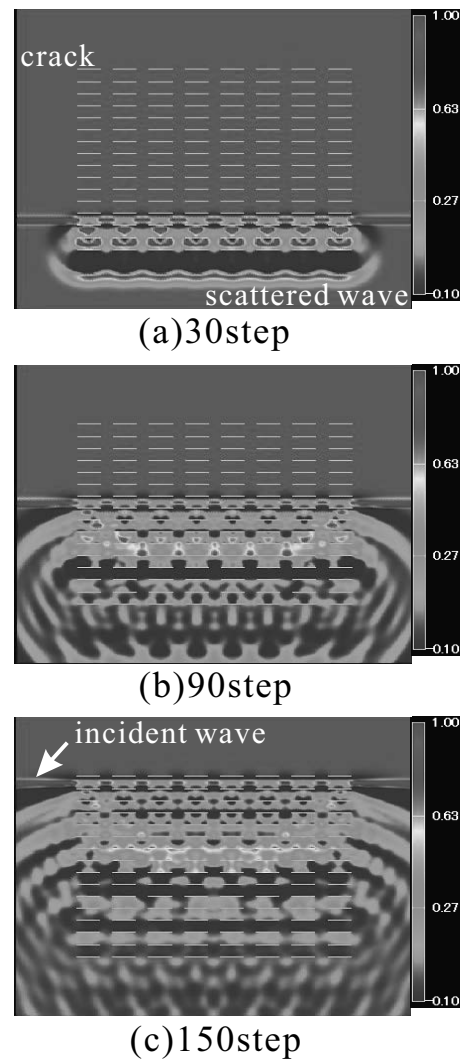


図 4: 等方性材料中のき裂群による弾性波動散乱解析結果 (a)30 (b)90 (c)150 時間ステップにおけるき裂群周辺の面外波動場。

の結果は、それぞれ 30, 90, 150 時間ステップにおける、き裂群周辺の純面外波の絶対値を可視化した結果を示している。また、図中の水平の白線は実際のき裂を示していることに注意されたい。図 4(a) より、最下方のき裂による散乱波の発生を確認することができる。その後、図 4(b),(c) より、各き裂間での多重散乱波も確認できる。図 4(a) 等において発生した散乱波を注意深く見ると、散乱波の波面は同心円の形状を保って伝搬していることがわかる。すなわち、図 4 の結果は、図 2 の等方性材料に対する群速度曲線にしたがって、等方に伝搬していると言える。

一方、図 5 の一方向 CFRP に対する結果に注目す

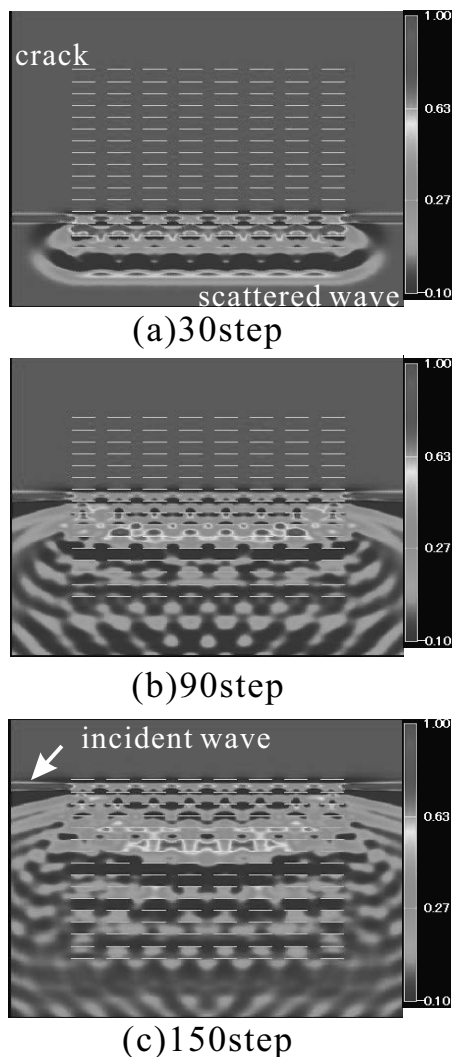


図 5: 一方向 CFRP 中のき裂群による異方性弾性波動散乱解析結果 (a)30 (b)90 (c)150 時間ステップにおけるき裂群周辺の純面外波動場。

ると、図 4 同様に、図 5(a) より、き裂群から散乱波が発生し、図 5(b), (c) で多重散乱波の発生を確認することができる。しかしながら、発生した散乱波を注意深く見ると、等方性材料の結果に比べて、散乱波は水平方向に早く伝搬している様子を確認できる。すなわち、一方向 CFRP の場合の散乱波は、図 3 の qS_2 波における群速度曲線にしたがって、楕円状の波面を保って伝搬している様子を確認できることから、解析結果は妥当であると判断出来る。

なお、解析には京都大学の Cray XC40 を用いた。並列化は 8 ノードに MPI プロセスを 1 つずつ割当て、1 ノード 68 コアの OpenMP 並列計算を施した。この場合の解析に要した時間は、全き裂開口変位を求

めるために要した時間は 4 時間 34 分、求めた開口変位を用いて解析領域内部の異方性弾性波動場を求めるために要した時間は 71 時間程度 (内点総数 32768 点) である。内点の計算は、並列化前は 3 週間程度を要する (見込み) であったことを考えれば、計算時間を大幅に削減することができたと言える。

4 おわりに

本高度化事業では、純面外波動を対象とした異方性弾性波動問題に対する演算子積分時間領域境界要素法の高性能化を行なった。異方性弾性波動問題の境界要素法では、基本解が複雑なため、多くの計算時間が必要である。今後は、さらに FMM を適用する等の方策を取り、高性能化を図る予定である。また、二次元純面内異方性弾性波動問題への拡張も行う予定である。

謝辞

本研究は、京都大学における平成 30 年度プログラム高度化支援事業で実施されたものです。また、平成 30 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究 (課題番号: jh180049, 異方性・非均質材料中を伝搬する弾性波動解析手法の開発と非破壊検査への応用, 拠点研究機関: 京都大学) の支援により行なわれました。

参考文献

- [1] 斎藤 隆泰, 「音響異方性材料中の超音波伝搬シミュレーション」, 非破壊検査, vol.68, No.2, pp.78-83, (2018).
- [2] 斎藤 隆泰, 「波動解析と時間領域境界要素法」, 計算工学, vol.24, No.3, pp.13-16, (2019).
- [3] A. Furukawa, T. Saitoh and S. Hirose, Convolution quadrature time-domain boundary element method for 2-D and 3-D elastodynamic analyses in general anisotropic elastic solids, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, vol.39, pp.64-74, (2014).
- [4] C. Lubich, Convolution quadrature and discretized operational calculus I, *Numer. Math.*, vol.52, pp.129-145, (1988).
- [5] V. Rokhlin, Rapid solution of integral equations of classical potential theory, *J. Comput. Phys.*, vol.60, pp.187-207, (1985).

飽和土の大規模変形・流動計算を目的とした 固液混合MPMの開発

山口 裕矢*

*東北大学災害科学国際研究所（〒980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉468-1）

1 はじめに

近年多々見られる大規模土砂災害の被害抑制のためには、複雑な土の挙動を表現し得る数値シミュレーション手法が求められる。本研究では、多孔質体理論による固液混合体の支配方程式を基礎式とした既往の固液混合MPM[1, 2]を発展させ、降雨などの影響による大規模な地盤災害現象をより安定的・効率的に表現する手法を提案する。具体的には、従来の手法が液相に対して弱圧縮性を仮定していたことに対し、非圧縮性を仮定したfractional-step法[3]による水圧の陰的計算方法を導入することで、安定性と効率性の改善を図る。また、B-spline基底関数を採用することで、MPMの長所のひとつである領域分割並列化による大規模計算に対応すると同時に、速度勾配が連続となるため、計算の精度と安定性を向上が期待される。洗堀・運搬・堆積といった3次元に複雑な土水混合体の挙動を含む模型実験に対して提案手法を適用し、その表現性能を確認する。

2 解析手法

2.1 支配方程式

本研究では多孔質体理論に基づき、飽和土を土骨格と間隙水とに分離し、固相と液相からなる2相の連続体の重ね合わせとして考える。以下では、添え字 s, w は固相と液相に関する変数を表す。固体と液体の粒子密度を ρ_s, ρ_w とすると、各々の多孔質体中の部分密度 $\bar{\rho}_s, \bar{\rho}_w$ は間隙率 θ を用いて次式により表される。

$$\bar{\rho}_s = (1 - \theta)\rho_s \quad (1)$$

$$\bar{\rho}_w = \theta\rho_w \quad (2)$$

上式を用いて、固相、液相の質量保存則は、それぞれ次式によって表される。

$$\rho_s \frac{D(1 - \theta)}{Dt} + (1 - \theta) \frac{D\rho_s}{Dt} + (1 - \theta)\rho_s \nabla \cdot \mathbf{v}_s = 0 \quad (3)$$

$$\rho_w \frac{D\theta}{Dt} + \theta \frac{D\rho_w}{Dt} + \theta\rho_w \nabla \cdot \mathbf{v}_w = 0 \quad (4)$$

ここに、 $\mathbf{v}_s, \mathbf{v}_w$ は固相・液相の速度を表す。土は土骨格の体積変化に対して土粒子の体積変化が微小であることから、土粒子の非圧縮性 $D\rho_s/Dt = 0$ を仮定する。また、水についても非圧縮性 $D\rho_w/Dt = 0$ を同様に与える。そして、間隙率 θ の連続性の仮定により、式(3), (4)より固液混合体に関する次の連続式を得る。

$$\nabla \cdot [(1 - \theta)\mathbf{v}_s + \theta\mathbf{v}_w] = 0 \quad (5)$$

次に、固相と液相の多孔質体中の部分応力 $\bar{\sigma}_s, \bar{\sigma}_w$ は、各々次式で与えられる。

$$\bar{\sigma}_s = \sigma' - (1 - \theta)p_w \mathbf{I} \quad (6)$$

$$\bar{\sigma}_w = -\theta p_w \mathbf{I} \quad (7)$$

ここに、 σ' は土骨格の示す有効応力、 p_w は液体の圧力、 \mathbf{I} は2階の単位テンソルである。水の粘性については、巨視的運動量交換や間隙水圧と比較して影響が小さいため、一般的に固液混合モデルでは透水係数に考慮されているものとみなす。

また、固相・液相間の運動量交換 $\hat{\mathbf{p}}$ はDarcy-Forchheimer則により与える。

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}_E - p_w \nabla \theta \quad (8)$$

$$\hat{p}_E = \frac{\theta^2 \mu}{k} (\mathbf{v}_w - \mathbf{v}_s) + \frac{1.75}{\sqrt{150}} \frac{\rho_w \theta^2}{\sqrt{k}} \frac{|\mathbf{v}_w - \mathbf{v}_s|}{\theta^{3/2}} (\mathbf{v}_w - \mathbf{v}_s) \quad (9)$$

$$k = \frac{D_{50}^2 \theta^3}{150(1-\theta)^2} \quad (10)$$

ここに、 g は重力加速度、 D_{50} は平均粒径に関するパラメータである。

これらの応力と運動量交換を用いて、固相と液相の運動方程式は各々以下で与えられる。

$$\bar{\rho}_s \mathbf{a}_s = \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}_s + \bar{\rho}_s \mathbf{b}_s + \hat{\mathbf{p}} \quad (11)$$

$$\bar{\rho}_w \mathbf{a}_w = \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}_w + \bar{\rho}_w \mathbf{b}_w - \hat{\mathbf{p}} \quad (12)$$

ここに、 \mathbf{a} は加速度、 \mathbf{b} は物体力である。

2.1.1 材料構成則

固相の変形勾配テンソル \mathbf{F} は以下のように乗算分解できると仮定する。

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (13)$$

ここに、 \mathbf{F}^e は弾性変形勾配、 \mathbf{F}^p は塑性変形勾配である。

固相の弾性応答を表現するために、本研究では Hencky 超弾性モデルを採用する。塑性変形の表現には、次に示す Drucker - Prager の降伏基準を採用する。

$$\Phi(\boldsymbol{\sigma}', c) = \sqrt{J_2(s(\boldsymbol{\sigma}'))} + \eta p - \xi c \quad (14)$$

ここに、 s は偏差応力、 p は固相の静水圧応力、 c は粘着力、 η, ξ は内部摩擦角 ϕ より定まる材料パラメータである。Drucker - Prager モデルについては、過剰なダイレイタンスを抑制するため、一般的に非関連流れ測が用いられる。また、流動化に伴う膨張変形による土骨格の崩壊を表現するために、完全塑性を仮定し、次に示す損傷モデルを導入する。

$$K = \begin{cases} K & \text{if } \frac{\xi}{\eta} c - p > 0, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (15)$$

ここに、 K は体積弾性率である。

2.2 固液混合 MPM

2.2.1 時間方向の離散化

以下の定式化においては各変数に付した添え字 $n, n+1$ は時刻 t_n, t_{n+1} における値を意味する。速度

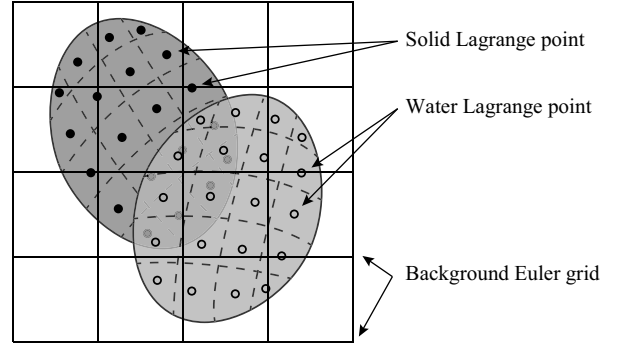


図 1: 固液混合 MPM による離散化の模式図

\mathbf{v} に関する前進差分を適用することにより、式 (11)、(12) は次式で表される。

$$(1-\theta^n) \rho_s \frac{\mathbf{v}_s^{n+1} - \mathbf{v}_s^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n - (1-\theta^n) \nabla p_w^{n+1} + (1-\theta^n) \rho_s \mathbf{b}_s + \hat{\mathbf{p}}_E^n \quad (16)$$

$$\theta^n \rho_w \frac{\mathbf{v}_w^{n+1} - \mathbf{v}_w^n}{\Delta t} = -\theta^n \nabla p_w^{n+1} + \theta^n \rho_w \mathbf{b}_w - \hat{\mathbf{p}}_E^n \quad (17)$$

ここで、固液各相に関して以下に示す中間速度 $\mathbf{v}_s^*, \mathbf{v}_w^*$ を導入する。

$$(1-\theta^n) \rho_s \mathbf{v}_s^* = (1-\theta^n) \rho_s \mathbf{v}_s^n + \Delta t \left[\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^n + (1-\theta^n) \rho_s \mathbf{b}_s + \hat{\mathbf{p}}_E^n \right] \quad (18)$$

$$(1-\theta^n) \rho_s \mathbf{v}_s^{n+1} = (1-\theta^n) \rho_s \mathbf{v}_s^* - (1-\theta^n) \Delta t \nabla p_w^{n+1} \quad (19)$$

$$\theta^n \rho_w \mathbf{v}_w^* = \theta^n \rho_w \mathbf{v}_w^n + \Delta t \left[\theta^n \rho_w \mathbf{b}_w - \hat{\mathbf{p}}_E^n \right] \quad (20)$$

$$\theta^n \rho_w \mathbf{v}_w^{n+1} = \theta^n \rho_w \mathbf{v}_w^* - \theta^n \Delta t \nabla p_w^{n+1} \quad (21)$$

式 (19)、(21) を連続式 (5) に代入することで、次の圧力ポアソン方程式が導かれる。

$$\nabla \cdot \left[(1-\theta^n) \mathbf{v}_s^* + \theta^n \mathbf{v}_w^* + \left(\frac{1-\theta^n}{\rho_s} + \frac{\theta^n}{\rho_w} \right) \Delta t \nabla p_w^{n+1} \right] \quad (22)$$

2.2.2 空間方向の離散化

固液混合 MPM の手法はいくつか提案されているが、本研究では図-1 に示すように、固相と液相を異なるラグランジュ粒子で表現し、計算格子は同一とする手法を用いる。これにより、全物質領域は粒子群で表現され、全質量は各粒子に集約されることか

ら、 α 相の粒子質量 $m_{\alpha p}$ は以下で与えられ、変形の過程で一定である。

$$m_{\alpha p} = \int_{\Omega_{\alpha p}^0} \bar{\rho}_{\alpha} dv \quad (\alpha = s, w) \quad (23)$$

ここに、 Ω_p^0 は粒子の初期体積領域である。また、速度や圧力、間隙率などの粒子値は格子点値を用いて次式により補間される。

$$\Phi(\mathbf{x}_{\alpha p}) = \sum_{I=1}^{n_n} N_I(\mathbf{x}_{\alpha p}) \Phi_I \quad (\alpha = s, w) \quad (24)$$

ここに、 n_n は全節点数、 $N_I(\mathbf{x}_{\alpha p})$ は格子点 I の α 相粒子 p の位置における形状関数、 Φ は諸々の物理量を表す。形状関数は有限要素法などに使用されるものと同様の形式である。

2.2.3 B-spline 基底関数

本研究では MPM 特有の数値振動を抑制するために B-spline 基底関数を適用する。B-spline 基底関数はパラメータ空間の座標の並びであるノットベクトルによって定義され、一次元では $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n+p}, \xi_{n+p+1}\}$ と書かれる。ここに、 ξ_i は i 番目のノットを示し、 n は基底関数の数、 p は多項式の次数を表す。B-spline 基底関数は次のように再帰的に定義される。

$$N_{i,0}(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{if } \xi_i \leq \xi < \xi_{i+1} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (25)$$

$$N_{i,p}(\xi) = \frac{\xi - \xi_i}{\xi_{i+p} - \xi_i} N_{i,p-1}(\xi) + \frac{\xi_{i+p+1} - \xi}{\xi_{i+p+1} - \xi_{i+1}} N_{i+1,p-1}(\xi) \quad (26)$$

本研究では最初と最後のノットが $p+1$ 回現れるオープンノットベクトルを用いることで、パラメータ空間の端部において関数値と一致させることにより、一般的な MPM と同様に格子点においてディリクレ境界条件を与える。

3 実験の再現解析

提案手法の表現性能を確認するために、模型実験の再現解析を実施した。模型実験は図 2 に示すように、水路に設置された砂山に対し、造波装置により発生させた孤立波を衝突させるものであり、砂山の洗掘・運搬・堆積を含む。砂山は川砂を充填した

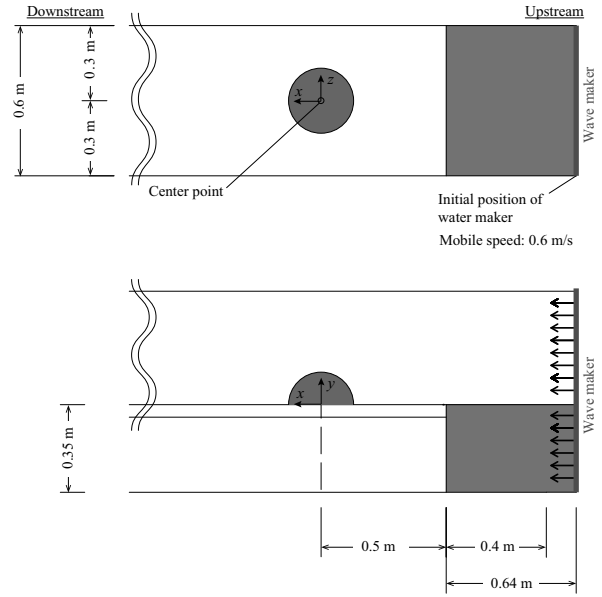


図 2: 砂山への孤立波衝突実験の装置模式図

モールドを垂直に引き上げることで作成しており、数値計算モデルの砂山は実際の砂山の形状をレーザー距離計によって測定したデータを基にモデル形状を決定する。また、予め 10 秒間の自重荷荷を行うことによって初期条件を与える。孤立波については造波装置を剛体粒子によって表現し、実験と同様の移動速度・距離によって初期条件を作成する。水路の底面はノンスリップ境界、下流側は流出境界、その他の面はスリップ境界とし、解析の各種パラメータは表 1 に示す通りである。

解析結果と実験結果との比較を図 3 に示す。図より、砂山の一部が流水によって削り取られ、最終的に下流側に尾を引くように分布していることが分かる。流動中の挙動に着目すると、波の衝突直後は砂が下流側に大きく広がるように分布するが、徐々に流線型に変化していることが分かり、実験と同様の特徴的な挙動が捉えられていることが見て取れる。これより、提案する手法は従来の解析手法では表現が困難であった土水混合体の複雑な大変形・流動挙動の表現性能を有すると考えられる。

4 おわりに

本研究では土水混合体の複雑かつ大規模な挙動を表現することを目的とし、2 層粒子を用いた固液混

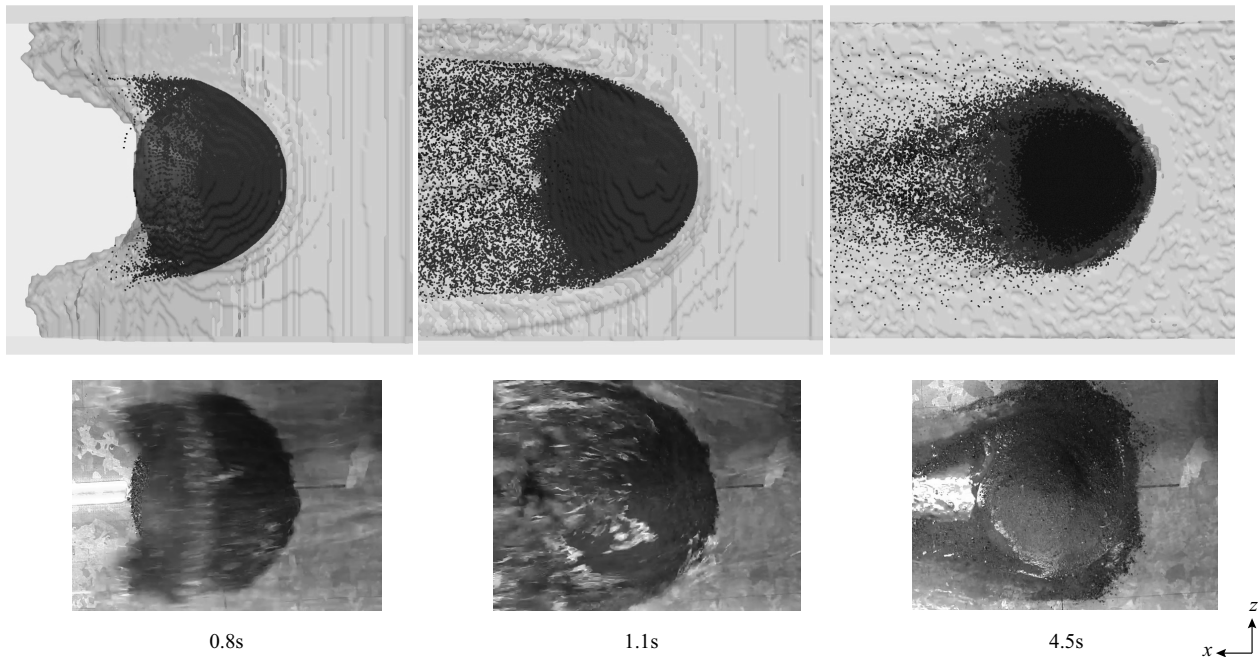


図3: 解析結果（上段）と実験写真（下段）の比較

表 1: 再現解析に用いた解析パラメータ

Parameter	Value
Particle number / Grid	$4 \times 4 \times 4$
Density ρ_s [kg/m^3]	2700
Young's modulus E [MPa]	20
Poisson ratio ν	0.3
Cohesion c [kPa]	0.05
Internal friction angle ϕ	40°
Initial porosity θ_0	0.3
Particles' diameter D_{50} [m]	1.0×10^{-3}
Particle number / Grid	$4 \times 4 \times 4$
Density ρ_w [kg/m^3]	1000
Dynamic viscosity μ [$\text{Pa} \cdot \text{s}$]	1.0×10^{-3}
Gravity force [m/s^2]	-9.8
Grid size [m]	$0.01 \times 0.01 \times 0.01$
Time increment Δt [s]	1.0×10^{-4}

合 MPM を発展させた手法を提案し、実験の再現解析を行った。検証の結果、安定状態にあった砂山が流水の影響によって流動した後に堆積する様子が表現され、実験結果との整合性が確認された。今後は土・砂の材料構成則について更に検討を行い、実際の土砂災害への適用性を検討して行く計画である。

参考文献

- [1] Abe, K., Soga, K., and Bandara, S. : Material point method for coupled hydromechanical problems. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 140(3), 04013033, 2013.
- [2] Bandara, S., and Soga, K. : Coupling of soil deformation and pore fluid flow using material point method. Computers and geotechnics, 63, 199-214, 2015.
- [3] Kularathna, S., and Soga, K. : Implicit formulation of material point method for analysis of incompressible materials. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 313, 673-686, 2017.

強い音響異方性を有する CFRP に対する開口合成法の高速実行

中畑和之*

*愛媛大学大学院理工学研究科

1 はじめに

炭素繊維強化樹脂 (Carbon fiber reinforced plastic: CFRP) は、金属よりも軽く、剛性、耐疲労性、耐食性に優れている。また、現場で比較的自在に成形加工できるため、多分野で利用が加速している。成形や加工は様々な方法が提案されているが、結局は炭素繊維と樹脂の複合材料となるため、スケール毎に異なる欠陥や不良箇所が発生することが問題となる。例えば、プリプレグを用いる場合、繊維シート間に剥離が発生する。繊維うねりも CFRP の圧縮強度を大幅に低下させる。運用後は、衝撃等による内部割れを評価することが要求される。従って、欠陥の大きさや位置に合わせて、超音波法、渦流探傷法、X線透過試験法等の非破壊検査法が適用されている。深さ方向のきずの情報を定量的に推定する方法としては、超音波法が有効である。ここで、レーザー光を対象材料に照射し、照射点の物質が熱膨張を起こすことで超音波を発生する方法がある。発生した超音波は光音響波と呼ばれ、レーザー誘起応力波あるいはフォトメカニカル波とは区別される [1]。光音響波は非常に広帯域な波動が材料表面あるいは内部で発生するため、表層に近い内部でも映像化が可能である。

これまで、著者らは、光音響イメージングのための顕微鏡 (Photoacoustic Microscopy : PAM) を開発してきた。この PAM は、レーザー光の照射点と超音波プローブを共焦点化 [2] したものであり、照射点を走査しながら、各点で光音響波を受信する。この光音響波の拡がりや歪みを考慮しながら受信波を合成し、CFRP の内部を 3 次元的に映像化するために、開口合成法のコードを開発してきた。ここでは、モノスタティックに映像化を行う開口合成法をベースとしており、我々の手法の特徴は、CFRP の音響異方性に起因する音速の方向依存性と波動の拡がり (開口) を

考慮しながら波形を合成することである。この合成処理には数値計算を用いるが、画素毎に音速と開口の補正を行うため、メモリアクセスと分岐を多用する多重ループ構造になる。従って、走査ピッチが細かく、映像化範囲が広領域になるほど、大規模な計算となり、その高速実行が求められる。ここでは、開口合成法のコードのチューニングを共同研究として実施し、京都大学スーパーコンピュータ Camphor2(システム A, Cray XC40) でその性能検証を行ったので、その成果を報告する。

2 光音響波の計測と映像化手法

レーザー光を物質に照射すると、物質の光学特性に従って散乱あるいは吸収される。吸収されたエネルギーで光熱的作用や光化学的作用が生じる。非常に短いパルス幅で光を物質に照射すると短時間に熱膨張が生じ、これによって応力が生じる。この原理を利用して、超音波領域の光音響波を発生させる。以下では、光音響波を効率よく収集するための顕微鏡システムと、その波形を合成して内部を映像化する開口合成法の概要を述べる。

2.1 光音響顕微鏡 (PAM)

著者が CFRP 検査用に開発した顕微鏡は、医療用の Acoustic-resolution PAM(AR-PAM[2]) の共焦点原理を参考にしており、そのシステムの概要を図 1(a) に示す。レーザー光源から、532nm と 1064nm の 2 種類の波長のレーザー光を切り替えて出射する。繰り返し周波数は 100Hz であり、パルス幅 4.0ns の短パルスレーザーを励起している。レーザー光は、ファイバを通じて顕微鏡ユニットに送られて、アキシコンレンズによってリングパターンを形成する。リン

グ状の光は、反射プリズムを用いて CFRP 表面に集光される。発生した光音響波は、図 1(b) に示すように、プリズムの中心に設置した集束型水浸超音波プローブによって検出される。水平方向にラスタ走査 (x - y 平面) して、顕微鏡ユニットを平行移動させることによって、各点で光音響波を受信する。プローブで得られた信号は外部アンプで増幅された後、レシーバで受信される。さらに光音響信号は DAQ で量子化されて、PC メモリに保存されていく。

2.2 開口合成法 (SAFT)

ここでは SAFT による CFRP 内部の 3 次元映像化を行う。図 2 に示すように、レーザー光の照射点の座標を \mathbf{o}^i とする。 i 点でレーザー光を照射後、同位置で受信した光音響波形を $V(\mathbf{o}^i, t)$ とする。CFRP における光音響波は水との接触面 (CFRP 表面) で卓越して発生することが確認されている。表面で光音響波が発生した時刻を $t = 0$ とすると、時刻 $t = T$ の波動は、レーザー照射点である CFRP 表面で発生した光音響波が、内部の散乱体から戻ってくるまでの時間とみなすことができる。CFRP は強い異方性を

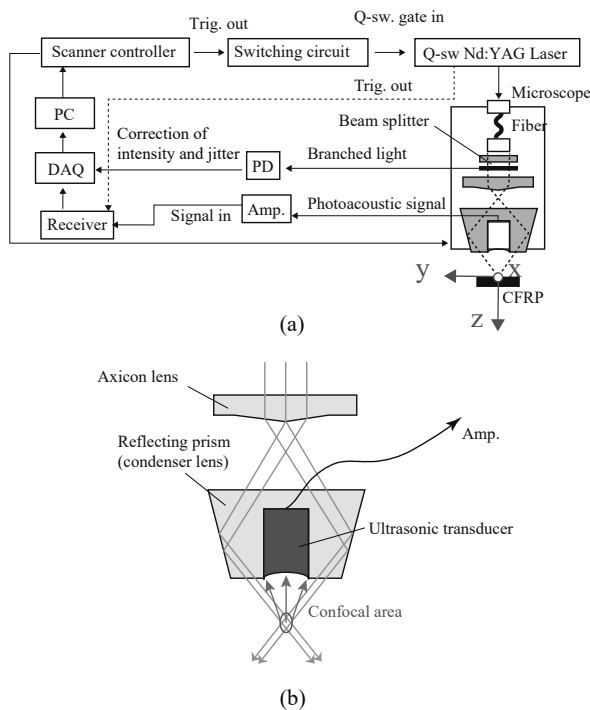


図 1: (a) 光音響波計測システムの概要図, (b) 顕微鏡ユニット。

呈するので、光音響波の速度分布を \mathbf{g} とすると、照射点 \mathbf{o}^i と散乱源 \mathbf{r} までの距離 $r (= |\mathbf{r} - \mathbf{o}^i|)$ は、次式となる。

$$r = \frac{|\mathbf{g}(\mathbf{r})|T}{2} \quad (1)$$

式 (1) に従って、時刻 $t = T$ の振幅値 $V(\mathbf{o}^i, T)$ は位置 \mathbf{r} で発生した波動だとみなし、この振幅値を位置 \mathbf{r} に $h_i(\mathbf{o}^i, \mathbf{r})$ としてマッピングする。レーザーの照射点 i を移動しながら、各位置で振幅値 h_i を重ね合わせる。

$$H(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N h_i(\mathbf{o}^i, \mathbf{r}) w \left(\sqrt{(r_x - o_x^i)^2 + (r_y - o_y^i)^2} \right) \quad (2)$$

ここで、光音響波の到達する範囲 (開口) を仮定し、それによる振幅強度の補正 w を考慮する。この w は、

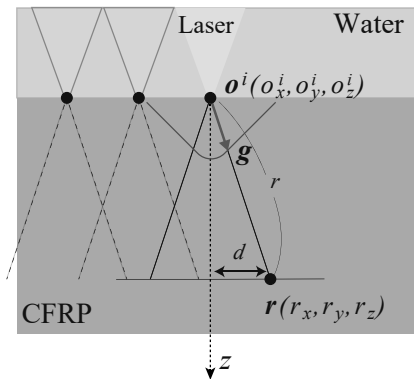


図 2: 開口合成法における対象画素 \mathbf{r} と照射点 \mathbf{o}^i 。

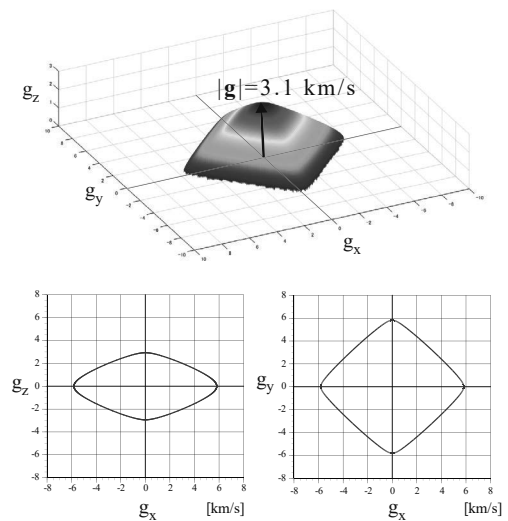


図 3: 綾織 CFRP の群速度分布。

ガウス分布を採用している。

$$w(d) = \exp \left[-\frac{d^2}{(d_0/2)^2} \right] \quad (3)$$

図3に、後に示す綾織 CFRP 供試体の群速度分布を示しておく。x-y 平面では、ひし形に近い速度分布を示す。

3 プログラムコードの高度化

3.1 オリジナルコードのフローと問題点

開口合成法を実行するためのフローを図4に示す。解析条件やデータなどを入力後、多重ループの計算が始まる。レーザー照射点から映像化対象の画素 r までの往復伝搬時間 $t = T$ を見積もる。このとき、群速度 g のテーブルから位置(方向)に依存した速度を呼び出し、さらに開口補正 w を計算する。この時間 T に対応する振幅値 h_i を受信波から抽出する。これは各レーザー照射点 i における作業であるが、この作業を x-y 面の照射点数分 ($i = 1 \sim N_x \times N_y$) 行い、

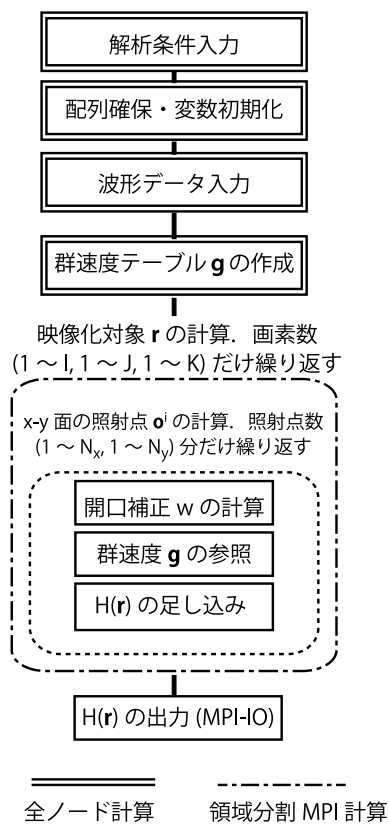


図4: 開口合成法のフローチャート

振幅値 H をスタックする。以上の計算を全ての画素で等しく行う。従って、実質的には、図4中の破線で示された枠のループ計算がメインとなり、 (x, y, z) 方向の画素の数 ($1 \sim I, 1 \sim J, 1 \sim K$) だけこのループを繰り返すことになる。各画素での振幅値 H の計算は独立であるので、ここでは対象領域を分割し、MPI 並列で計算を行っている。本コードは多重ループの計算となるが、その過程において群速度テーブルを逐一参照すること、開口の範囲か否かを判断し、否の場合ループを抜ける必要があり、メモリアクセスと分岐を多用する計算である。また、振幅値 H の総和計算は OpenMP によるリダクション処理を採用しているが、初期コードでは、多くのコアを使用するほど計算効率が低下することが問題であった。

3.2 改良点

分析の結果、本コードの計算時間のほとんどを占めるのは、この振幅値 H の総和計算であり、構造としては画素数に相当する外側3重ループと、照射点に関連する内側2重ループの計5重ループからなる。さらに、最内側の処理に複数の IF 文が含まれている。この IF 文の判定次第では、そのステップを即時中断し、次のステップに移行 (cycle 処理) するようになっている。当初は、シーケンシャルな1次元ループに変換して、一次元配列にした振幅値配列 H を用いて計算していたが、1次元に変換する必要性は低く、3次元配列へ変更し、3重ループで計算できるように変更した。初期コードでは内側の照射点の2重ループに対して OpenMP 指示行が挿入されていたが、変更後のコードでは最外側のループに対して OpenMP 指示行を挿入するように変更した。さらに、開口の範囲内か否かを IF 文で判定していたが、開口の範囲外か否かに変更を行った。

3.3 性能比較

京都大学スーパーコンピュータ Camphor2 (システム A, Cray XC40) の1ノードを用いて、改良コードの性能検証を行った。コンパイラは Cray Fortran Compiler 8.6.5, MPI ライブラリは Cray MPI 7.7.0 を用いた。システム A の実行については、全て cache モードを使用した。当初のプログラムで、プロセスあたり2スレッドとなるように Hybrid 実行をした結

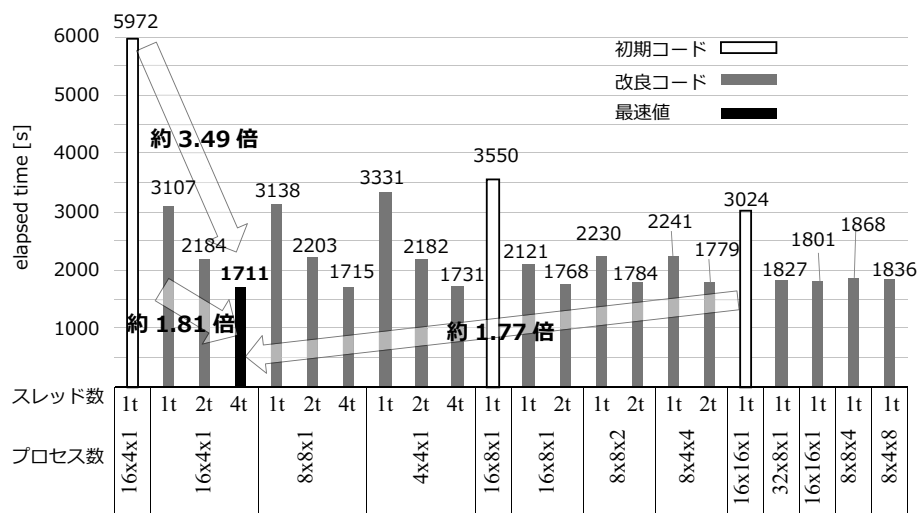


図 5: スレッド・プロセス数を変えた場合の System A での実行時間の比較

果、全て Flat-MPI 実行よりも性能が低下する結果となっていた。すなわち Hybrid 化が不完全であった。また、当初のプログラムにおいて、1 ノード内で 64 並列、128 並列、256 並列を測定した結果、64 並列の性能を基準として、256 並列で約 2 倍の性能を示していた。256 並列実行の場合、Intel KNL のハードウェアスレッド (HT) を使った場合、L1 キャッシュを 4 プロセスが、L2 キャッシュを 8 プロセスが共有している事を考えると、性能としては悪くない結果である。

最適化後の性能評価について、図 5 に結果をまとめる。白色の棒グラフは当初のコード、グレーの棒グラフが改良版の性能結果である。1 ノード内で、プロセス数やスレッド数を変えて実行した結果、その内の最速値は 64 プロセス × 4 スレッドの場合であり、黒で示している。当初コードにおける最速値であった 256 プロセス並列 (Flat MPI, 16x16x1) の結果と比較すると、改良版の最速値 (64 プロセス × 4 スレッド, 16x4x1) は約 1.77 倍の性能向上となっている。64 並列 (16x4x1) の結果について注目してみると、初期コードでは Hybrid 実行は性能が低下する結果となっていたが、改良版では 4 スレッドまでスケラビリティが見られており、約 1.81 倍の性能向上となっている。また、同じ Flat-MPI 同士でも約 1.92 倍の性能向上を示した。64 プロセスの場合、改良版の最速値は当初の約 3.49 倍の性能向上となった。

2 ノード以上を使った場合の性能評価については、本コードは時間発展をしないので、基本的にファイ

ル出力時以外に通信を行うことが無い。現時点で I/O の時間は非常に小さい事から、並列数を増やす事による MPI-IO の時間増加はそれほど問題にはならないと思われる。

4 CFRP 内部の映像化例

ここでは、CFRP の供試体について、超音響波を用いた映像化例を示す。供試体は図 6 に示すように、綾織の 8 層構造であり、厚さは 2.12mm である。前節 2 で示した超音響顕微鏡を用いて、改良コードによる SAFT の映像化を行った。内部の 3 次元映像化結果を図 7 に示す。可視化範囲は、 x 方向 20mm、 y 方向 10mm の範囲であり、顕微鏡のスキャンピッチは 0.02mm とした。ここで SAFT では、画素サイズは 0.025mm、ビームパラメータ $d_0=0.2\text{mm}$ として計算を行った。図 7 は鳥瞰図、同図 (b) は表面、同図 (c) は $x-z$ 断面を表している。図 7 の白色の濃度は、式 (2) の H の大きさを表している。この結果から、表面の様子は勿論、層間構造までもが鮮明に再構成されているのがわかる。

5 まとめ

今回の共同研究によって、特に hybrid 並列の性能向上が顕著であった。これによって、スケラビリティが大幅に改善され、当初のコードよりも 3.5 倍

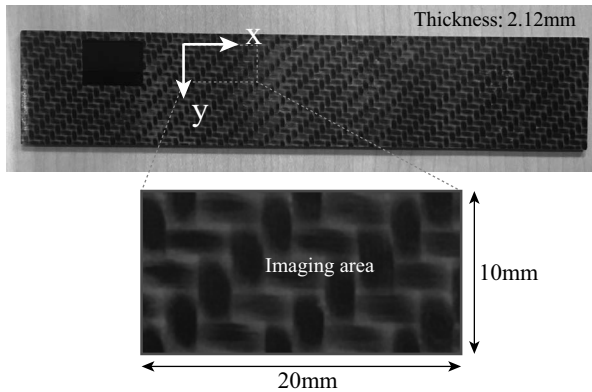


図 6: 綾織 CFRP の写真と映像化対象領域.

近い高速化が実現できた。今後更なる改良を試みる
とするならば、一番のホットスポットとなっている
振幅値 H の足し込み計算処理について検討する必要
がある。現時点では、この処理がベクトル化が出来
ていない事が性能向上の阻害要因の一つと考えられ
る。構造的に大幅な書き換えが必要となるが、継続
して検討を行いたい。

謝辞： 有益なご助言を頂いた「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、並びにコー
ドチューニングについて直接ご指導頂いたクレイ・
ジャパン・インクの鈴木 幸朗氏に感謝申し上げます。

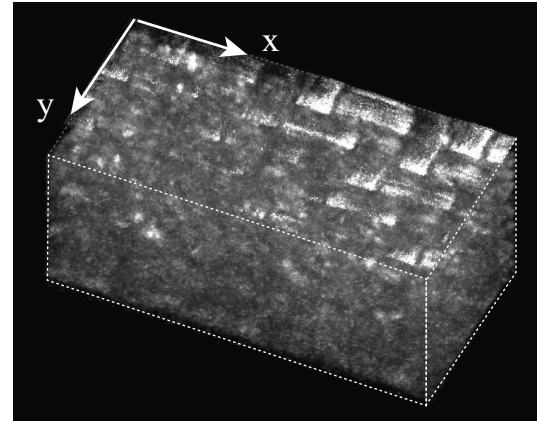
本研究に関連する成果:

(1) Kazuyuki Nakahata, Kazuki Karakawa, Keiji Ogi,
Koichi Mizukami, Satoshi Wada, Takeshi Namita, Tsuyoshi
Shiina, Three-dimensional SAFT imaging for anisotropic
materials using photoacoustic microscopy, *Ultrasonics*,
Vol.98, pp.82-87, 2019.

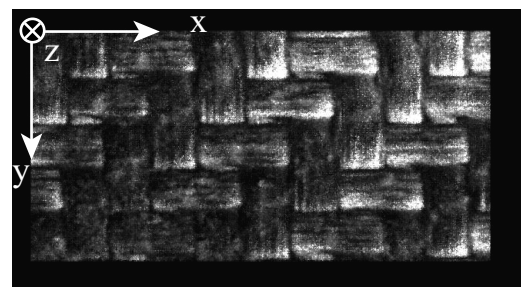
DOI:10.1016/j.ultras.2019.05.006.

(2) 中畑和之, 黄木景二, 水上孝一, 大平克己, 丸山真
幸, 和田智之, 浪田 健, 椎名 毅, 光音響法による炭素
繊維補強樹脂の表面直下剥離の 3 次元イメージング,
電気学会論文誌 C, Vol.139, No.2, pp.142-148, 2019.

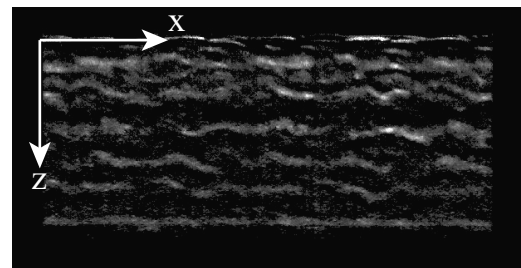
DOI:10.1541/ieejieiss.139.142



(a)



(b)



(c)

図 7: 綾織 CFRP の内部映像化. (a) 鳥瞰図, (b) 表面,
(c) $x - z$ 断面.

参考文献

- [1] 佐藤俊一, 小原實, 光と超音波・圧力波の複合的作用を利用した医療技術の進展, *光学*, Vol.38, No.6, pp.288-297, 2009.
- [2] H. F. Zhang, K. Maslov, G. Stoica, L. V. Wang, Functional photoacoustic microscopy for high-resolution and noninvasive in vivo imaging, *Nature Biotechnology*, Vol.24 (7), pp.848-851, 2006.

システム A 運転状況 (2018 年 10 月 ~ 2019 年 3 月)

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

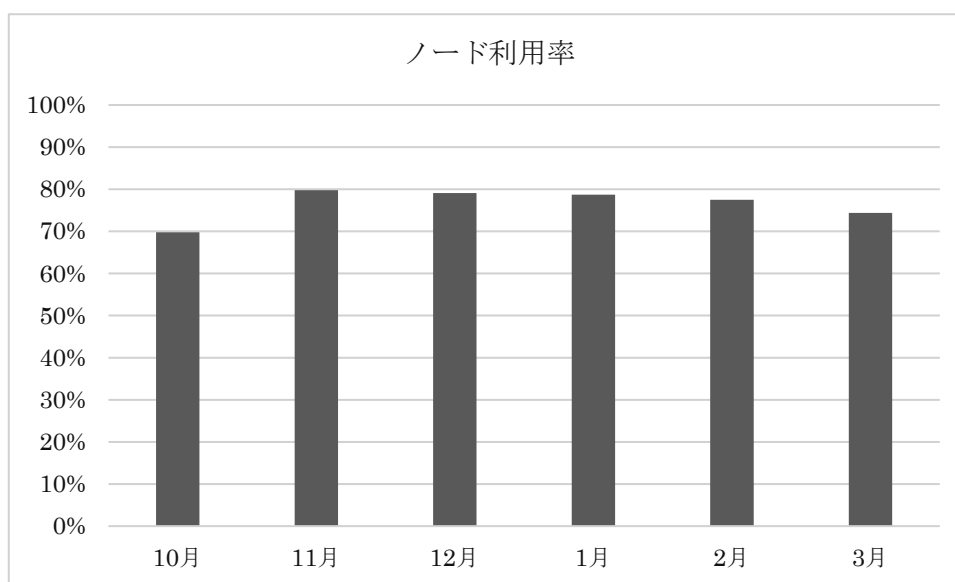
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2018/10/08 9:00	2018/10/12 16:55	103.92
2018/12/06 9:00	2018/12/07 11:30	26.50
2019/03/27 9:00	2019/03/31 24:00	111.00

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]
2018/11/20 15:40	2018/11/20 18:50	3.17

2) サービス状況

	サービス時間 [h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼働ノード数	ノード利用率
10月	640.08	20,785	130,153	53,174,864	35,588,686	1574.2	69.8 %
11月	716.83	24,320	201,414	67,614,272	48,505,617	1799.3	79.8 %
12月	717.50	34,942	252,345	65,035,363	45,751,924	1794.8	79.1 %
1月	744.00	31,000	251,814	71,854,980	53,598,300	1796.1	78.7 %
2月	672.00	17,049	182,801	64,135,474	47,964,320	1799.0	77.5 %
3月	633.00	17,619	153,333	60,698,374	47,870,627	1736.6	74.4 %
計	4,123.41	145,715	1,171,860	382,513,327	279,279,474	1750.0	76.6 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼働ノード数 = 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 = 稼働ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

システム B 運転状況 (2018 年 10 月 ~ 2019 年 3 月)

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

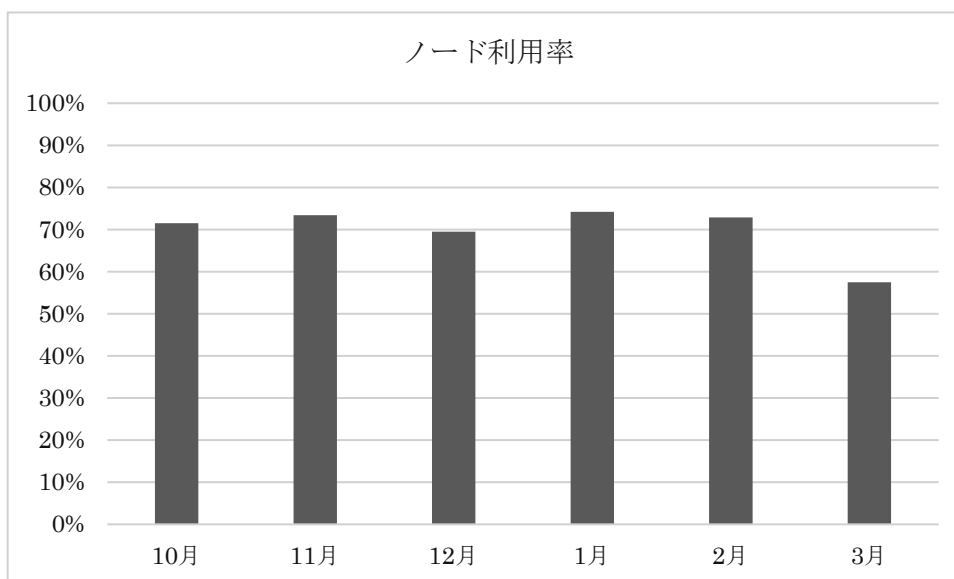
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2018/10/08 9:00	2018/10/10 13:00	52.00
2018/12/06 9:00	2018/12/07 10:07	25.12
2019/03/27 9:00	2019/03/31 24:00	111.00

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]
2018/11/20 15:40	2018/11/20 18:50	3.17
2019/01/30 23:20	2019/01/31 10:49	11.48

2) サービス状況

	サービス時間 [h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼働ノード数	ノード利用率
10月	692.00	99,188	657,152	13,536,136	11,067,731	830.8	71.5 %
11月	716.83	198,589	765,685	15,102,805	11,910,870	832.6	73.4 %
12月	718.88	190,644	791,775	13,954,791	11,056,737	821.7	69.5 %
1月	732.52	171,032	893,723	15,522,607	11,919,752	839.2	74.2 %
2月	672.00	115,571	753,756	14,083,765	11,086,523	839.3	72.9 %
3月	633.00	52,080	624,961	12,167,455	9,999,868	788.3	57.5 %
計	4,165.23	827,104	4,487,052	84,367,559	67,041,481	825.3	69.8 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼働ノード数 = 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 = 稼働ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

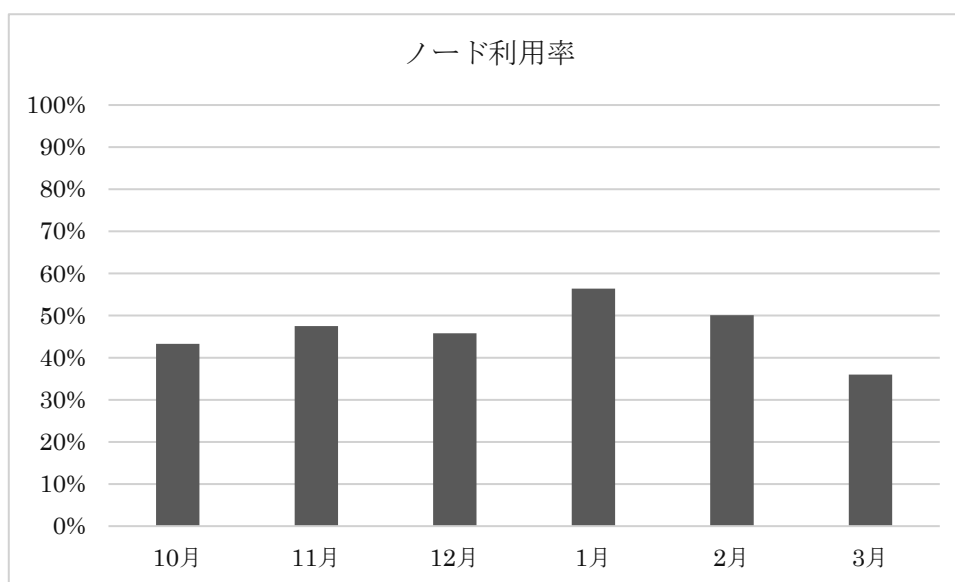
システム C 運転状況 (2018 年 10 月 ~ 2019 年 3 月)

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			システムダウン障害発生状況		
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]	障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2018/10/08 9:00	2018/10/10 13:00	52.00	2018/11/20 15:40	2018/11/20 18:50	3.17
2018/12/06 9:00	2018/12/07 10:07	25.12			
2019/03/27 9:00	2019/03/31 24:00	111.00			

2) サービス状況

	サービス時間 [h]	バッチ					ノード利用率
		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	
10月	692.00	3,856	29,887	242,712	236,811	15.8	43.3 %
11月	716.83	2,629	21,859	281,109	245,698	16.0	47.5 %
12月	718.88	3,811	24,153	290,756	258,624	15.6	45.8 %
1月	744.00	88,968	100,266	347,785	292,843	15.9	56.4 %
2月	672.00	46,371	64,565	318,751	262,690	16.0	50.1 %
3月	633.00	27,530	61,587	257,685	202,681	15.1	36.0 %
計	4,176.71	173,165	302,317	1,738,798	1,499,347	15.7	46.5 %



- 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

別表1 スーパーコンピュータシステム

			利用負担額	提供サービス								
コース	タイプ	セット		システム	バッチ	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数			
エントリ	-	基本	12,600 円/年	B	共有	最大1ノード相当((36コア、128GBメモリ)×1)	1	0.2	-			
パーソナル	タイプA	基本	100,000 円/年	A	共有	最大4ノード相当((68コア、16+96GBメモリ)×4)	168	3.0	-			
	タイプB	基本	100,000 円/年	B	共有	最大4ノード相当((36コア、128GBメモリ)×4)		3.0				
	タイプC	基本	100,000 円/年	C	共有	最大1ノード相当((72コア、3072GBメモリ)×1)		3.0				
グループ	タイプA1	最小	200,000 円/年	A	優先	4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)	336	24.0	8			
		追加単位	100,000 円/年			2ノード((68コア、16+96GBメモリ)×2)		12.0	4			
	タイプA2	最小	240,000 円/年		標準優先	8ノード((68コア、16+96GBメモリ)×8)		28.8	16			
		追加単位	60,000 円/年			2ノード((68コア、16+96GBメモリ)×2)		7.2	4			
	タイプA3	最小	600,000 円/年		占有	8ノード((68コア、16+96GBメモリ)×8)		48.0	16			
		追加単位	300,000 円/年			4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)		24.0	8			
	タイプB1	最小	210,000 円/年	B	優先	4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)		168	24.0	8		
		追加単位	105,000 円/年			2ノード((36コア、128GBメモリ)×2)			12.0	4		
	タイプB2	最小	252,000 円/年		標準優先	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)			28.8	16		
		追加単位	63,000 円/年			2ノード((36コア、128GBメモリ)×2)			7.2	4		
	タイプB3	最小	630,000 円/年		占有	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)			48.0	16		
		追加単位	315,000 円/年			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)			24.0	8		
	タイプC1	最小	130,000 円/年	C	優先	1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)			168	24.0	8	
		追加単位	130,000 円/年			1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)				24.0	8	
	タイプC2	最小	156,000 円/年		標準優先	2ノード((72コア、3072GBメモリ)×2)				28.8	16	
追加単位		78,000 円/年	1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)			14.4	8					
大規模ジョブ	タイプA	最小	20,000 円/週(7日)		A	占有	8ノード((68コア、16+96GBメモリ)×8)			168	-	-
		追加単位	10,000 円/週(7日)				4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)					
	タイプB	最小	21,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)						
		追加単位	10,500 円/週(7日)			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)						
	タイプC	最小	13,000 円/週(7日)	C	占有	2ノード((72コア、3072GBメモリ)×2)						
		追加単位	6,500 円/週(7日)			1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)						
専用クラスター	-	最小	630,000 円/年	B	-	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)	-	48.0		16		
		追加単位	315,000 円/年			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)	-	24.0		8		
ストレージ容量追加			10,000 円/年	ストレージ容量10TBの追加につき								
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。パーソナルコース、グループコース又は専用クラスターコースを、年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
- 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、ストレージ容量追加、ライセンスサービスの申請には、スーパーコンピュータ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。
「標準優先」：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の計算資源が確保されることを保証する。
- ストレージ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。
- 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を利用申請する場合の利用負担額は、別表1に規定する1.5倍の額とする。なお、利用負担額が年額150万円未満の場合は100人、年額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。ストレージは、1.5倍の容量とする。
- スパコン連携サービス
学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータシステムと密な連携により、学内における部局の組織が計算サーバ等を設置する場合、下記の負担額を支払うものとする。

冷却方式	利用負担額	利用負担額算定単位
水冷	9,800 円/月	水冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき
空冷	11,500 円/月	空冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき

別表2 汎用コンピュータシステム

区 分	利用負担額	単 位
仮想サーバホスティングサービス	36,000円/年	1仮想サーバにつき

備考

1. 利用負担額は、総額表示である。
2. 上記表の仮想サーバホスティングサービスを利用するには、スーパーコンピュータシステムの利用者であること。
3. 1仮想サーバに割当ててるシステム資源は、CPU:2コア、メモリ:4GB、ディスク:100GBである。
4. 仮想サーバ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CPU、メモリ、ディスクを増量することができる。

区 分	利用負担額	単 位
CPU増量	3,000円/年	2コアにつき(最大8コアまで)
メモリ増量	3,000円/年	4GBにつき(最大64GBまで)
ディスク増量	6,000円/年	100GBにつき(最大1,000GBまで)

5. 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

システム	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数	利用負担額
A	8ノード(68コア、16+96GBメモリ)×8)	336	28.8	16	960,000 円/年
	12ノード(68コア、16+96GBメモリ)×12)	336	43.2	24	1,440,000 円/年
	16ノード(68コア、16+96GBメモリ)×16)	336	57.6	32	1,920,000 円/年
B	8ノード(36コア、128GBメモリ)×8)	336	28.8	16	1,008,000 円/年
	12ノード(36コア、128GBメモリ)×12)	336	43.2	24	1,512,000 円/年
	16ノード(36コア、128GBメモリ)×16)	336	57.6	32	2,016,000 円/年
C	2ノード(72コア、3072GBメモリ)×2)	336	28.8	16	624,000 円/年
	3ノード(72コア、3072GBメモリ)×3)	336	43.2	24	936,000 円/年
	4ノード(72コア、3072GBメモリ)×4)	336	57.6	32	1,248,000 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。パーソナルコース、グループコース又は専用クラスターコース
年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除し
利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
2. ストレージ容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。

全国共同利用版広報・Vol.17(2018)総目次

[巻頭言]

Vol. 17, No. 1 号の発刊にあたって	1-1
Vol. 17, No. 2 号の発刊にあたって	2-1

[スーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性研究者奨励枠）研究報告]

高精度視覚質感記憶の心理学的基盤と神経機構の解明.....	1-2
阿蘇山の複雑地形における高精度メッシュを用いた領域大気モデルの感度解析及び性能評価.....	1-4
破壊力学に基づく損傷モデルによる鉄筋コンクリートの3次元破壊シミュレーション	1-6
高効率・高耐久性色素増感太陽電池の実現に向けた新規ポルフィリン色素の開発と電子構造の解明 ..	1-8
気液混相攪拌操作に対する数値解析	1-10
iPS 細胞懸濁培養の最適化を目的とした攪拌槽内粒子挙動解析.....	1-12
パワーデバイス用半導体製造装置設計、最適化に関する数値解析	1-14
カスケード選択型分子動力学シミュレーションの開発とタンパク質構造変化予測への適用.....	1-16
粒子との接触を伴う液体挙動の直接数値解析.....	1-18
無重力下での高プラントル数流体における	
温度差マランゴニ効果に起因する液柱内対流場の二次不安定性.....	1-21
視聴覚モダリティ間デコーディングによる感覚間協応のメカニズムの解明.....	1-24
随伴解析を用いた物体表面形状最適化による抵抗低減.....	1-26
アンブレラサンプリングを利用した自由エネルギー反応経路探索法の開発.....	1-28
タンパク質フォールディング駆動力の確率的解析	1-30
津波による底泥巻き上げ量の予測と海洋環境変化に関する数値解析	1-32
分子動力学シミュレーションを用いた小分子・高分子混合溶液の相溶性の計算手法の確立.....	1-34
攪拌時における混合評価に対する数値シミュレーション.....	1-36
1 次元量子スピン鎖の非平衡定常状態における温度勾配の数値的研究	1-38
非一様な都市構造物上における大気乱流の組織構造に関する数値解析.....	1-40
半無限領域のスペクトル法による竜巻を模した渦の数値実験に向けた研究開発	1-42
高周波分数冪ラプラシアン Navier-Stokes 方程式のエネルギースペクトルの考察	1-45

[プログラム高度化共同研究報告]

動的/静的水～土骨格連成有限変形解析コードの高度化	
～任意形状に対する領域分割法の適用の検討～	1-47
高分子分離膜の大規模シミュレーション	1-49
非均質異方性材料評価のための陽的ボクセル有限要素解析の高度化	1-52
超小型マイクロ波放電式中和器の電子引き出しを対象とした3次元プラズマ粒子計算	1-56

[講習会参加報告]

Cray XC40 プログラミング講習会-Scaling DL Training Workloads with the Cray PE Plugin.....	2-2
---	-----

[バーストバッファによる高速ファイルI/O]

バーストバッファの利用について～ DataWarp 編～	2-6
------------------------------------	-----

[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.....	1-60, 2-9
センター利用による研究成果（平成 29 年度）	2-12

[資料]

大型計算機システム利用負担金 別表.....	1-64,2-16
全国共同利用版広報・Vol.16(2017)総目次.....	1-67
サービス利用のための資料一覧.....	1-69,2-19

[奥付]

奥付	1-70,2-20
----------	-----------

— 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

- システム A : camphor.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム B・C : laurel.kudpc.kyoto-u.ac.jp
 - システム B (SAS 利用時) : sas.kudpc.kyoto-u.ac.jp

※ ホストへの接続は SSH(Secure SHell) 鍵認証のみ、パスワード認証は不可

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
【情報環境支援センター】
E-mail : zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7424
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先
【スーパーコンピューティング掛】
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7426
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/contact.html>

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. 18, No. 1

2019年 10月 31日 発行

編集者 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編集部会
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. 075-753-7414
<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

深沢 圭一郎 (部会長)
平石 拓 (副部会長)
水谷 幸弘
熊谷 真由美
尾形 幸亮

表紙デザイン：中山 豊
(中山商店)

目次

【巻頭言】

- ・ Vol.18, No.1 号の発刊に当たって 牛島 省 1

【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性研究者奨励枠)研究報告】

- ・ 機械攪拌操作時気泡巻き込みに対する数値解析 山本 卓也 2
- ・ 大規模溶解炉における溶融アルミニウム機械攪拌時の流動解明 加藤 賢也 4
- ・ 界面分光の分子動力学シミュレーション 城塚 達也 6
- ・ 高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と電子物性の相関解明 東野 智洋 8
- ・ 無重力下での高プラントル数流体における温度差マランゴニ効果に起因する液柱内対流場の二次不安定性
..... 小笠原 亨 10
- ・ Adjoint sensitivity 解析を用いたパワーデバイス用半導体製造装置の最適設計のための数値解析 堀内 鷹之 13
- ・ ウマの個体間に作用する力の解明に向けた数値シミュレーション 井上 漱太, 深沢 圭一郎, 平田 聡 15
- ・ 界面の摩擦接触を考慮した損傷モデルによる鉄筋コンクリートの3次元破壊シミュレーション 相馬 悠人 17
- ・ N結合型糖鎖修飾によるタンパク質の機能制御の関連性 リントウルオト 正美 19
- ・ 都市構造物の幾何的特徴がもたらす大気乱流の空間スケールへの影響 吉田 敏哉 21
- ・ Numerical simulation of InGaSb crystal growth under micro-gravity onboard the International Space Station
..... Jin Xin 23
- ・ 3次元流体変数の予測 中井 拳吾 25
- ・ Numerical simulation of deepwater oil blowout—Turbulent jets and droplet size distribution
..... Daniel Cardoso Cordeiro 27
- ・ 分子動力学計算による膜貫通型ペプチドとリン脂質二重膜の相互作用ダイナミクス 最上 譲二 29

【プログラム高度化共同研究報告】

- ・ 分子シミュレーションによるヌクレオソーム構造変化の網羅的探索 石田 恒 31
- ・ 巨大津波遡上時の木造家屋の瓦礫生成過程シミュレーション 浅井 光輝 33
- ・ 異方性弾性波動問題に対する演算子積分時間領域境界要素法の高性能化 斎藤 隆泰 37
- ・ 飽和土の大規模変形・流動計算を目的とした固液混合MPMの開発 山口 裕矢 41
- ・ 強い音響異方性を有するCFRPに対する開口合成法の高速度実行 中畑 和之 45

【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 50

【資料】

- ・ 大型計算機システム利用負担金 別表 54
- ・ 全国共同利用版広報・Vol.17 (2018)総目次 57
- ・ サービス利用のための資料一覧 59

【奥付】

- ・ 奥付 60