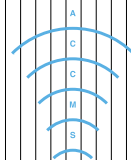


全国共同利用版

# 広報

## センター共同研究報告(平成27年度)

【巻頭言】「Vol.15, No.2 号の発刊に当たって」深沢 圭一郎【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠)】山本 卓也◎岡本 幸也◎梅山 有和◎西谷 公秀◎斉木 吉隆◎本木 慎吾◎高木 洋平◎中村 翔一◎茂木 孝介◎中野 直人◎鬼頭(西岡) 宏任◎松嶋 俊樹◎西山 健太【プログラム高度化支援事業】車谷 麻緒◎高瀬 慎介◎森 知也◎横嶋 哲◎今寺 賢志【スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠)】藤井 雅文◎横嶋 哲【会議参加報告】平石 拓



# 目次

## 【巻頭言】

- ・ Vol.15, No.2 号の発刊に当たって ..... 深沢 圭一郎 ..... 1

## 【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠)研究報告】

- ・ 液膜内振動マランゴニ対流のメカニズム解明 ..... 山本 卓也 ..... 3
- ・ 乱流相分離制御による自己組織化構造の能動的選択 ..... 岡本 幸也 ..... 6
- ・ 有機系太陽電池への応用を指向した光機能性有機分子の構造と電子構造の相関解明 ..... 梅山 有和 ..... 9
- ・ バイオフィルム成長に関する三次元モデルの構築 ..... 西谷 公秀 ..... 11
- ・ 間欠性ダイナミクスの不安定周期軌道解析 ..... 斉木 吉隆 ..... 14
- ・ 運動量輸送と熱輸送の非相似性の最大化 ..... 本木 慎吾 ..... 16
- ・ 高分子特性を考慮した界面活性剤添加溶液の抵抗低減効果 ..... 高木 洋平 ..... 18
- ・ 周囲気体を考慮したHZ液柱内温度差マランゴニ対流場の数値解析 ..... 中村 翔一 ..... 21
- ・ 高プラントル数を用いたHZ液柱内温度差マランゴニ対流の数値解析  
ーカオス・乱流化過程の解明に向けてー ..... 茂木 孝介 ..... 23
- ・ パターン学習を用いた経験的セル・オートマトン構成法とそれによる偏微分方程式モデルの模倣 ..... 中野 直人 ..... 25
- ・ 共有結合性有機骨格構造体(COF)の電荷移動シミュレーション ..... 鬼頭(西岡) 宏任 ..... 29
- ・ 理想化モデルを用いた、竜巻を模した渦の力学に関する研究 ..... 松嶋 俊樹 ..... 31
- ・ オフロード路面における車輪の走行性能解析  
ー惑星ローバ用車輪におけるラグ周辺部分のミクロな砂の挙動解析ー ..... 西山 健太 ..... 34

## 【プログラム高度化共同研究報告】

- ・ 非線形有限要素法による鉄筋コンクリートの大規模破壊シミュレーション ..... 車谷 麻緒 ..... 36
- ・ 津波流体力による建造物の破壊過程を考慮した構造流体連成解析 ..... 高瀬 慎介 ..... 41
- ・ 産業集積の空間的同期と都市規模・空間パターンに関する研究 ..... 森 知也 ..... 45
- ・ 「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」に関するプログラム高度化 ..... 横嶋 哲 ..... 48
- ・ 乱流輸送コードGKNETへの運動論的電子の実装 ..... 今寺 賢志 ..... 52

## 【スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠)研究報告】

- ・ 地震前兆における山岳地表面を伝搬する電磁プラズマ波の特性解明 ..... 藤井 雅文 ..... 56
- ・ 「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」に関する大規模計算 ..... 横嶋 哲 ..... 60

## 【会議参加報告】

- ・ SC16参加報告 ..... 平石 拓 ..... 64

## 【サービスの記録・報告】

- ・ スーパーコンピュータシステムの稼働状況とサービスの利用状況 ..... 65
- ・ センター利用による研究成果(平成27年度) ..... 71

## 【資料】

- ・ 大型計算機システム利用負担金 別表 ..... 74
- ・ サービス利用のための資料一覧 ..... 77

## 【編集後記】

- ・ 編集後記、奥付 ..... 78

## 巻頭言

Vol. 15, No.2 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  
深沢 圭一郎

本号では、学術情報メディアセンターの平成 27 年度共同研究報告について特集いたします。平成 27 年度では若手研究者の支援事業に関して 13 件、プログラム高度化支援事業について 5 件、大規模計算の支援事業について 2 件の共同研究が実施され、それぞれの報告が掲載されています。数値計算に関する様々な報告が掲載されていますので、計算機を利用される研究者や学生の方の良い参考になればと思います。

採択件数の最も多い若手研究者の支援事業は、学生を含む 40 歳未満の若手研究者を対象とした利用者向けの奨励研究制度で、優れた研究提案で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と期待される課題に対して計算機利用負担金の全部または一部を本センターが補助しています。平成 27 年度 2 次募集から若手に加えて、女性枠（年齢は問わない）も追加され、若手・女性研究者奨励研究と変更になりました。今回報告のあった 13 件には化学物性や流体計算、数理モデル、運動モデル、物理など多様な研究分野が含まれています。また、採択された研究者の所属は北海道大学、一橋大学、東京理科大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学と京都大学だけでは無く全国の若手研究者との共同研究となっているのも特徴です。これまでスーパーコンピュータを利用されてこなかった分野の研究もあり、挑戦的な研究の支援の一つになってきたと感じています。

次に、プログラム高度化支援事業では、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コースでご利用の研究グループを対象に、ユーザから提供いただいたプログラムに実際に手を加えて、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による高度化・高性能化、問題分割・負荷分散方式などの改良による高度化・高性能化といった大規模計算プログラムの高度化・高性能化を支援しています。平成 27 年度では、流体計算、コンクリート・地面の構造解析、経済問題といった研究分野のアプリケーション高度化を支援させていただきました。プログラムによって、高度化の内容は異なりますが、主に高並列計算が可能になるようにスレッド並列、MPI 並列の実装、ノード間通信の効率化などが行われ、同様の計算を行う研究者にとっても良い情報となると思います。

そして、大規模計算の支援事業ですが、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コースでご利用の研究グループを対象に最大で 128 ノード×2 週間の大規模ジョブコース利用支援を行っています。今回は、地震の前兆現象の可能性のある電磁プラズマ波の大規模解析とプログラム高度化にも採択された流体計算の大規模実行への支援報告となっています。近年のスーパーコンピュータは大規模計算を行えないとその性能の恩恵を受けることができないため、このような大規模計算の情報を知っておくことは、今後大規模

化を狙う研究者にも役立つと思います。

また、本号では昨年に **Salt Lake City** で開催された世界最大のスーパーコンピュータの会議である **SC16** への参加報告があります。本センターでは例年この会議にブースを出しており、情報の収集、広報活動も行っています。SC17 でもブースを出す予定ですので、ご興味のある方は本センターへお知らせください。

最後に、今回報告にありますような共同研究、計算機支援を主として、これからも皆様の研究、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、今後ともご利用、ご支援のほど、よろしく願いいたします。

# 液膜内振動マランゴニ対流のメカニズム解明

山本 卓也

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

宇宙飛行士の Donald Pettit 博士によって国際宇宙ステーション内で行われた円形液膜におけるマランゴニ対流に関する実験が行われた。この一部の実験において振動するマランゴニ対流が発生したが、その発生メカニズムや発生条件等は詳細には分かっておらず、その振動流の発生条件とメカニズムを解明することとした。数値シミュレーションによってそのメカニズム解明を試み、その振動流に対する液膜変形度の影響が非常に大きいことが判った。さらに、その流動メカニズムに対しても考察を行った。

## 1 緒言

マランゴニ対流は表面張力勾配によって発生する流れであり、バルク半導体結晶生成プロセスや製膜プロセスにおいてよく見られ、最終製品の品質に影響する[1]。このように、数多くの応用面でも見られるが、一般には浮力対流と共存するためマランゴニ対流の影響だけを実験的に調査するのは非常に難しい。このため、数多くの宇宙環境を利用した研究が行われてきた[2,3]。

宇宙環境を利用したマランゴニ対流実験の一つに宇宙飛行士の Donald Pettit 博士の実験[4,5]がある。これらの実験では円形リング内に液膜を製作し、この液膜に加熱した半田ごてを近づけることで、液膜内にマランゴニ対流を発生させる。このような簡易な実験であったものの複数の特異な流れや振動流れが発生している。この特異な流れに対しては、数多くの研究が行われてきている[6-10]。一方で液膜内振動流に対しての研究[11,12]は少なく、Pettit 宇宙飛行士の実験によって確認されたような振動流の発生条件や発生メカニズムについては全く判っていない。

そこで、今回の研究では Pettit 宇宙飛行士の実験で見られた振動流の発生条件、発生メカニズムを解明することを最終的な目的とし、液膜内マランゴニ対流に対する液膜形状と液膜に加える熱量の影響を調査した。

## 2 数値解析手法

数値シミュレーションに用いた解析領域の概略図を Fig. 1 に示す。計算領域は円形の液膜であり、流体領域のみを数値的に解いた。液膜は水であるとし、Prandtl 数は 6.96 で詳細な物性値は既報[7]の通りである。

支配方程式は Navier-Stokes 式、連続式、energy 式である。気液界面形状は動的に変形しないと仮定し、振動流に対する静的な界面形状の影響を調査した。境界条件として、気液界面に沿って Marangoni 対流条件、断熱条件を課した。また、半田ごての加熱を側壁での温度境界条件としてモデル化した条件[7]を用い、非定常伝熱条件を課した。この計算についてはオープンソースである OpenFOAM[13]を活用し、これらの条件をすべて導入して計算した。離散化手法として時間進行に 2 次精度 backward 法、energy 式の非線形項には NVD スキームである gamma スキーム[14]を用い、その他空間スキームには 2 次精度線形補間法を用いた、速度圧力連成には PISO 法[15]を用いた。計算格子の解像度については既報[16]で報告の通りである。

## 3 結果と考察

自由表面に沿った温度分布の時間変化を Fig. 2

に示す。加熱部から液膜中心に流れが発生することで、中央へ向かって高温部分が広がっていることが容易に分かる。さらに、液面形状の変形が大きい(a)場合、大きく左右に振動する流れが発生し、変形が小さい(b)場合には振動流は発生していないように見える。このことから、液面形状が大きく変形している場合に、宇宙実験で見られたような振動流が発生すると考えられる。

さらに、加熱部付近の温度分布を詳しくみると、特に高温となっている加熱壁付近の等温線が波状に曲がっている。これは、Hydrothermal wave によってこのように、温度分布が空間的に振動したものであると考えられる。このように、液膜内では局所的に時空間的に振動する Hydrothermal wave と左右に大きく振動する流れの2種類の振動流が混在していることが判った。

加える熱量を変化させた場合の計算も同時に行った。この場合の計算結果についても、加熱壁付近で Hydrothermal Wave が発生し、液面形状が大きく変形している場合にのみ左右に大きく振動する流れが見られた。本解析結果では、加える熱量が振動流に対して大きな影響を与えるということにはなかった。このことから、左右に大きく振動する流れは液面形状が支配的な因子であることがわかる。

液面形状を変化させた場合には、流動の強さが大きく変化する[7]。これは、液面形状が大きく変形した場合に、流路が細くなり、質量保存則を満たすために流体の速度が上昇する。流体の速度が上昇した場合にはマランゴニ対流によるブリューム先端において温度勾配がより急峻となり、さらにマランゴニ駆動力が大きくなり、速度が上昇する。このため、液面形状を変化させることで液膜内に発生する液膜中心に向かう流れが速くなり、液膜中心付近での自由境界層が薄くなったために、このような左右に大きく振動する流れが発生したのではないかと推測できる。

さらに詳細な結果やメカニズムに対する議論については、すでに誌面上[16]で報告済みであり、そちらをご覧頂きたい。

## 4 結言

液膜内振動マランゴニ対流の発生条件、発生メ

カニズムの解明のための数値シミュレーションを行った。液膜が大きく凹んでいる場合には左右に大きく振動する振動流が発生し、液膜形状に関わらずに液膜端に沿って Hydrothermal Wave が発生することが判った。Pettit 博士が行った宇宙空間での液膜の実験では、液膜が大きく凹んでいたために、大きく左右に振動する振動流が発生したものと推察できる。

## 引用文献

- [1] A. Hirata, *FDMP*, **3**, 203-230 (2007).
- [2] M. Lappa, *Fluids, Materials and Microgravity: Numerical Techniques and Insights into Physics*, 1<sup>st</sup> edition (Elsevier Science, Oxford, U. K., 2005).
- [3] H. Kawamura *et al.*, *Int. J. Heat Transfer*, **134**, 031005 (2012).
- [4] D. Pettit, Saturday Morning Science Videos, 2003 see <http://mix.msfc.nasa.gov/IMAGES/QTVR/06012111.mov>.
- [5] D. Pettit, Thin Film Physics, 2011 see <http://physicscentral.com/explore/sots/episode3.cfm>.
- [6] I. Ueno *et al.*, *Proc. of the second Conference on Microfluidics*, Toulouse, 10-203 (2010).
- [7] T. Yamamoto *et al.*, *Phys. Fluids*, **25**, 082108 (2013).
- [8] T. Yamamoto *et al.*, *Trans. JSASS Aerospace Tech. Japan*, **12**, Pe\_19-Pe\_27 (2014).
- [9] H. C. Kuhlmann, *Microgravity Sci. Tech.*, **26**, 397-400 (2014).
- [10] L. Fei *et al.*, *Microgravity Sci. Tech.*, (in Press) DOI: 10.1007/s12217-016-9523-8.
- [11] I. Ueno and T. Watanabe, *I. J. Trans. Phenomena*, **12**, 301-306 (2011).
- [12] D. Limsukhawat *et al.*, *Prog. Comput. Fluid Dyn.*, **13**, 132-140 (2013).
- [13] OpenFOAM, (see <http://www.openfoam.com/>)
- [14] H. Jasak, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **31**, 431-449 (1999).
- [15] R. I. Issa, *J. Comput. Phys.*, **62**, 40-65 (1985).
- [16] T. Yamamoto *et al.*, *Phys. Fluids*, **28**, 032106 (2016).

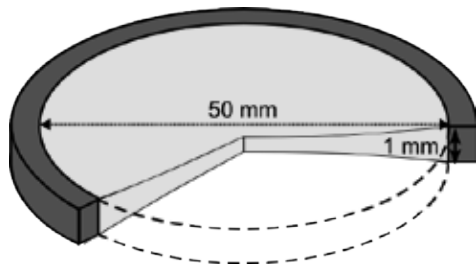


Fig. 1 Schematics of a circular liquid film used in this calculation.

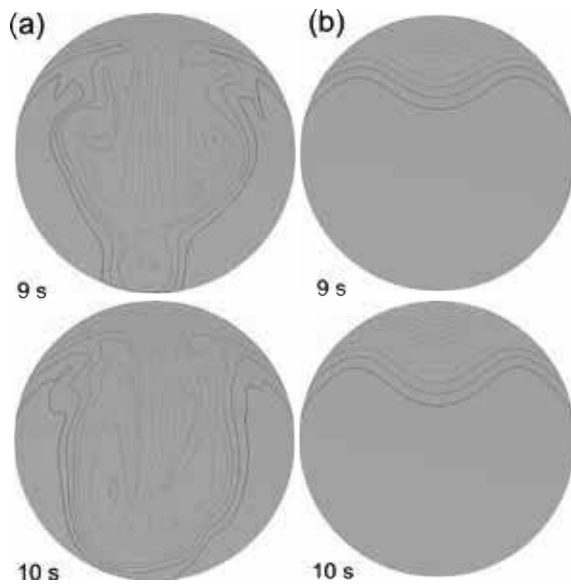


Fig. 2 Time development of temperature contours along a free surface: volume ratio is (a) 0.55 and (b) 0.95, RED color indicates high temperature and BLUE color indicates low temperature.

## 謝辞

本共同研究制度(若手研究者奨励枠)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。

# 乱流相分離制御による自己組織化構造の能動的選択

岡本幸也

大阪大学大学院基礎工学研究科

本研究では、流体制御の観点から、多孔質材料の製造プロセスに用いられている相分離現象を制御することで材料の性質を変化させるプロセスの開発を目指し、相分離を伴う乱流場の3次元数値解析を行った。結果から、乱流場の影響によって自己組織化構造の空隙率は88%から95%へと増加し、特に、乱流中の大スケールの渦層から小スケールの渦管への遷移に伴って自己組織化構造が分裂することが示唆された。

## 1 緒言

高温で完全に混じり合っている多相流体は、急冷などによって熱力学的に不安定な状態となると各成分の相へと分離する。この相分離現象はスピノーダル分解と呼ばれ、特に、相分離の際にネットワーク状の自己組織化構造が形成されることが知られており、一方の成分領域を酸化等の処理で取り除くことで、多孔質材料の製造プロセスに用いられている。多孔質材料は大きな表面積や高い機械強度などの機能を材料に発現させ、多孔質ガラスやイオン交換膜、触媒担体等に用いられている。相分離を利用した多孔質材料作製過程においてその性質を制御できれば、高い反応性や効率的な物質移動が期待できる。実際の材料を作製するプロセスの流動状態は混合性能をあげるために乱流であることが多く、乱流場が相分離に与える影響を調べる必要がある。いままでに相分離による自己組織化構造の形成が乱流場の存在によって抑制されることが実験的・数値的に知られているが[1, 2]、乱流中の特定の渦構造が相分離にどのように寄与するかはわかっていない。そこで本研究では、乱流渦の自己組織化構造形成過程へ及ぼす効果について調べるため三次元数値計算を用いた検討を行った。

## 2 解析手法

計算対象とした系は組成A、Bからなる非圧縮性の二成分混合流体であり、初期状態として完全に混合された状態(成分比率が50%-50%)を想定した。二成分の界面をなだらかに表現するため、両成分の密度 $\rho_A$ 、 $\rho_B$ から以下のオーダーパラメータを定義する。

$$\psi = \frac{\rho_A - \rho_B}{\rho_0}$$

ここで、 $\rho_0$ は混合状態での平均密度である。このオーダーパラメータを用いて相分離挙動を表現する時間発展方程式は以下のCahn-Hilliard式、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \psi}{\partial x_j} = \Gamma \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j} \mu$$

となる。ここで、 $t$ は時刻、 $x_j$ は座標、 $u_i$ は速度、 $\Gamma$ はモビリティパラメータ、 $\mu$ は化学ポテンシャルである。化学ポテンシャルは二重井戸型となる、Landau-Ginzburg型の自由エネルギーから求めた。



流体場の支配方程式は、以下の連続式と Navier-Stokes 式、

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0,$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \psi \frac{\partial \mu}{\partial x_i} + f_i$$

である。ここで、 $p$  は圧力、 $Re$  はレイノルズ数、 $f_i$  は外力項である。Navier-Stokes 式中の右辺第 3 項は相分離寄与項であり、化学ポテンシャルの勾配を駆動力として流体が受ける力を表現することで相分離と流体場をカップリングしている。本研究では、微小スケールの渦運動を解像する必要があるため、空間微分の計算には、少ない格子点数であっても比較的解像度の高い手法であるスペクトル法を用いた。時間積分には、線形項に 2 次精度の Crank-Nicolson 法を、非線形項に 3 次精度の Runge-Kutta 法を用いた。

本研究では、均一に攪拌された乱流中で局所的に想定されるような一様等方乱流を対象とした。計算領域は一辺が  $2\pi$  の立方体を  $128^3$  の格子点で分割し、境界条件は各方向に周期境界条件を設定した。乱流場は、低波数領域に外力を加えることで、一様で等方的な乱流状態を維持し、定常状態でのテイラーマイクロスケールに基づくレイノルズ数は 120 となった。オーダーパラメータの初期条件は、相分離の開始に必要なホワイトノイズを加え、Cahn-Hilliard 式に含まれるパラメータは、Berti らによって行われた 2 次元計算とオーダーが等しくなるような値を用いた[2]。解析は、外力を加えた相分離を伴う乱流場以外に、初期速度が無く、外力も加えない、相分離のみの場合についても行った。

### 3 結果と考察

乱流の効果が多孔質構造に及ぼす影響を調べるため、無次元時間  $t = 3$  における相分離領域の等値面 ( $\psi = 0.6$ ) を Fig. 1 に示す。流れ場がない場合、相分離による多孔質構造の形成が確認されており、空隙率 ( $\psi$  がピーク値以下である領域の占める割合) は 88% となった。一方で、乱流状態の流れ場がある場合、多孔質構造骨格が減少し、空隙率は 95% へと増加した。この構造変化は乱流中の渦による折りたたみや引き延ばしを通して混合が促進されたためであると考えられる。我々の既往の研究[3]において、乱流中で観察される大スケールから小スケールへのエネルギーカスケードが、相分離の発生によって、比較的大スケール ( $k < 10^4$ ) から著しく減少、すなわち、相分離によってエネルギーカスケードが阻害されることが分かっている。乱流中の渦構造には比較的スケールが大きいシート状の渦層と最小スケールに相当する渦管の存在が知られており[4]、特定スケールの渦構造が自己組織化構造形成に及ぼす影響の理解は、自己組織化構造の能動的制御プロセスの確立に大きく寄与すると思われる。そこで本研究では自己組織化構造の変化に及ぼす各スケールの乱流渦の寄与を調べるため、Fig. 2(a) に、 $t = 3$  での  $x$ - $y$  断面における  $\psi$  (グレースケール)、比較的大スケールの渦である渦層(青色の等値線)、小スケールの渦である渦管(赤色の等値線)の分布を示す。また、Fig. 2(b)、Fig. 2(c) にはそれぞれ渦層が支配的な領域、渦管が支配的な領域の拡大図を示す。Figure 2 から、渦層が支配的な領域では、渦層に沿うような形で、自己組織化構造が形成されていることが分かる。渦層は、乱流中で流れがぶつかり大きな歪みが生じている領域を表しており、この歪みによって、自己組織化構造が引き延ばされたと考えられる。また、渦管が支配的な領域の周りでは、比較的小さな自己組織化構造が分布していることが分かる。これは、渦層から渦管へと遷移する際に、渦層によって引き延ばされていた自己組織化構造が、渦管の回転運動によって分裂させられ、その際に渦がエネルギーを失うことでエネルギーカスケードが阻害されることが考えられる。

## 4 結言

本研究では一様等方乱流中の二成分流体の相分離現象を対象とした3次元数値解析を行い、乱流場、特に乱流中の渦構造と自己組織化構造の形成の関連性について調べた。本研究では乱流の影響によって、自己組織化構造の空隙率が増加し、多孔質材料の性質を変化させられることがわかった。また、渦構造と自己組織化構造の観察から、大スケール渦である渦層によって自己組織化構造が引き延ばされ、渦層から遷移した渦管の回転運動によって分裂させられると考えられ、乱流強度の変化や、剪断を加えるなどの人為的な操作によって、乱流中の渦構造を変化させることで、自己組織化構造を能動的に変化させられることが期待出来る。

## 参考文献

1. Pine, D. J., Eswar, N., Maer, J. V. and Goldburg, W. I., "Turbulent suppression of spinodal decomposition," *Phys. Rev. A*, 29 (1984), pp. 308 - 313.
2. Berti, S., Boffetta, G., Cencini, M. and Vulpiani, A., "Turbulence and coarsening in active and passive binary mixtures," *Phys. Rev. Lett.*, 95 (2005), 224501.
3. Okamoto, S., Takagi, Y. and Okano, Y., "Interaction between phase separation and turbulence in binary mixture," 2015 Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2015), ASCHT15-Wed06-005, November 22-25 (2015).
4. Horiuti, K. and Takagi, Y., "Identification method for vortex sheet structures in turbulent flows," *Phys. Fluids*, 17 (2005), 121703.

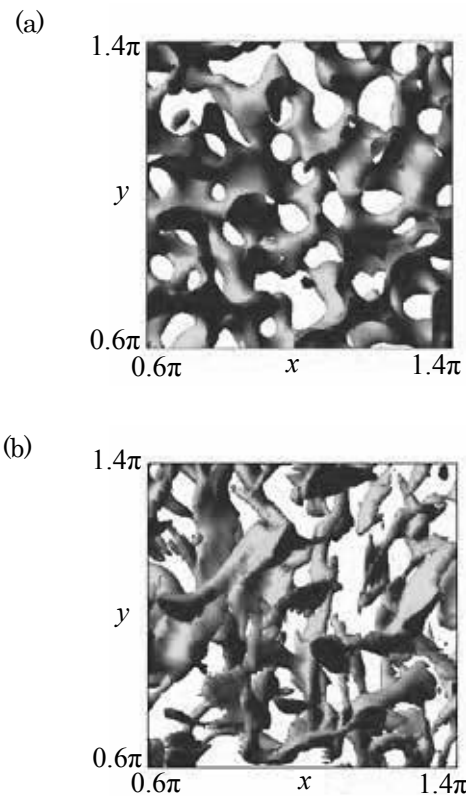


Fig. 1 The self-organized structure at  $t = 3$  (isosurface of  $\psi = 0.6$ ): (a) without flow, (b) with turbulent flow.

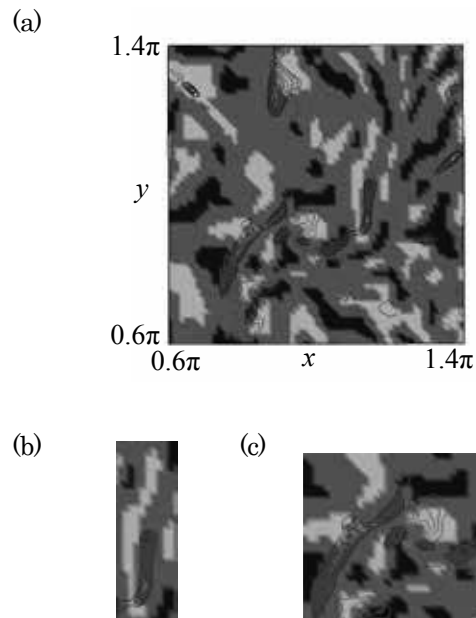


Fig. 2 The distribution of vortex sheets (blue line), vortex tubes (red line) and  $\psi$  (gray scale) at  $t = 3$ : (b) vortex sheets are dominant, (c) vortex tubes are dominant.

# 有機系太陽電池への応用を指向した光機能性有機分子の構造と 電子構造の相関説明

梅山有和

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻

## 1 緒言

色素増感太陽電池における増感色素の多くはカルボン酸部位で酸化チタン表面に吸着しているが、その吸着力が十分でなく、酸化チタンから脱着しやすいことが素子の耐久性を下げの一因となっている<sup>1,3</sup>。本研究では、ポルフィリンの *meso* 位の 2 カ所に 2,6-ビス(オクチルオキシ)フェニル基を、残りの 2 カ所にそれぞれジアルキルアミノ基とトロポロニルエチニル基を導入した新規ポルフィリン YD2-*o*-C8T を設計した (Figure 1)。トロポロンはチタン原子に対してカルボン酸よりも強く配位することが知られており、酸化チタン表面への吸着基として用いることで耐久性の向上が期待される。そして、吸着基がカルボン酸のポルフィリン YD2-*o*-C8 を参照化合物として、電池性能及び耐久性の比較を行った<sup>4</sup>。

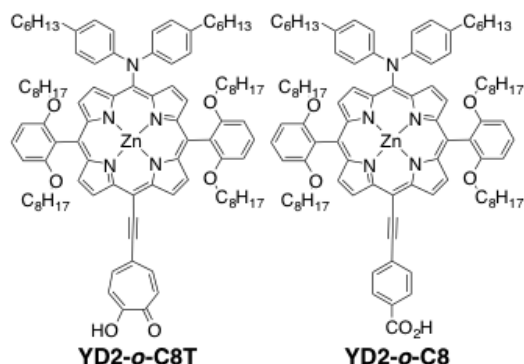


Figure 1. Molecular structures of porphyrins.

## 2 結果と考察

### 2.1 新規ポルフィリン色素の光吸収特性

### と色素増感太陽電池への応用

YD2-*o*-C8T および YD2-*o*-C8 の THF 溶液中の吸収スペクトルを Figure 2 に示す。YD2-*o*-C8T の吸収スペクトルは Soret 帯、Q 帯ともに YD2-*o*-C8 よりもブロード化、長波長シフトしており、光捕集能が改善されていることがわかった。

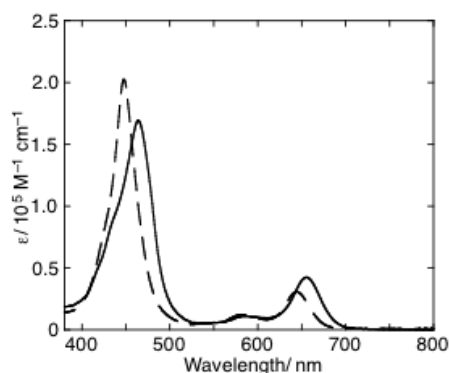


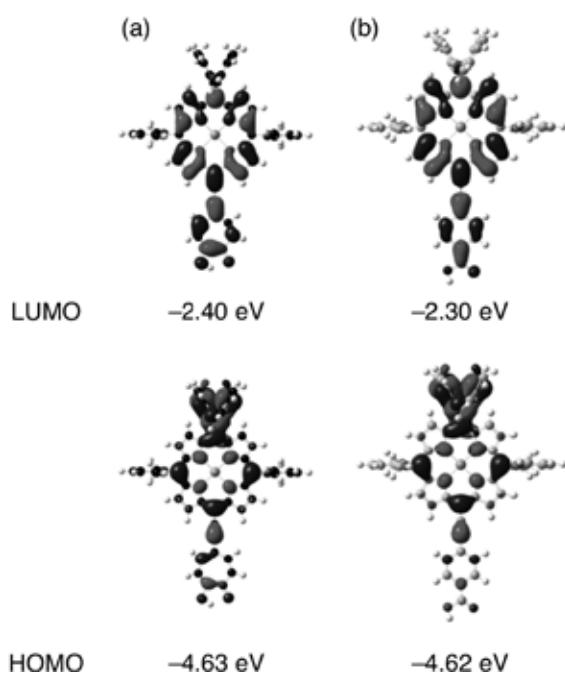
Figure 2. UV-vis absorption spectra of YD2-*o*-C8T (solid line) and YD2-*o*-C8 (dashed line) in THF.

浸漬時間、共吸着剤 CDCA の添加量、セル組み立て後の暗所経時効果により最適化を行ったところ、YD2-*o*-C8T において  $J_{SC} = 15.56 \text{ mA cm}^{-2}$ ,  $V_{OC} = 0.73 \text{ V}$ ,  $ff = 0.68$ ,  $\eta = 7.7\%$ 、YD2-*o*-C8 において  $J_{SC} = 17.32 \text{ mA cm}^{-2}$ ,  $V_{OC} = 0.78 \text{ V}$ ,  $ff = 0.65$ ,  $\eta = 8.8\%$  という結果が得られた。光捕集能の改善により、YD2-*o*-C8T では 700 nm 以降の波長においても光電流発生が確認されたが、より短波長の領域で低い IPCE 値 (外部量子収率) となっているために YD2-*o*-C8 よりも小さい  $J_{SC}$  値になったといえる。しかしながら、連続白色光照射による素子の耐久性を調べたところ、500 時間後に YD2-*o*-C8 では 33% 低下したのに対し、YD2-*o*-C8T では 13% しか

低下しなかった。トロポロンを吸着基として用いることで色素の脱着が大幅に抑制でき、耐久性が向上したと考えられる。

## 2.2 理論計算

ポルフィリン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、密度汎関数法 (DFT) による理論計算 (B3LYP) を行った。基底関数系に 6-31G(d) を選択し、Gaussian 09 プログラムを用いた。Figure 3 に YD2-*o*-C8T および YD2-*o*-C8 の最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO) における電子密度分布を示す。YD2-*o*-C8T および YD2-*o*-C8 の HOMO-LUMO ギャップを比較すると YD2-*o*-C8T (2.23 eV) < YD2-*o*-C8 (2.32 eV) となった。HOMO のエネルギーレベルはどちらもほぼ同じであったが、YD2-*o*-C8T ではトロポロンの強い電子求引性によって LUMO が低くなったために、YD2-*o*-C8



**Figure 3.** Selected molecular orbital diagrams for (a) YD2-*o*-C8T and (b) YD2-*o*-C8 obtained by DFT calculations with B3LYP/6-31G(d). To simplify the calculations, alkyl chains on the diarylamino groups were replaced with methyl ones, whereas octyloxy groups on the phenyl groups were replaced with methoxy ones.

よりも狭い HOMO-LUMO ギャップになったと考えられる。また、吸着部位の LUMO の電子密度は色素の励起状態と酸化チタンの 3d 軌道の電子カップリングに影響を与える。YD2-*o*-C8T では、吸着部位の LUMO の電子密度が高いことから酸化チタンへの良好な吸着と電子注入が期待できる。一方、YD2-*o*-C8T の HOMO の電子密度は吸着部位から遠いジアルキルアミノ基に主に広がっており、電荷再結合の抑制も期待される。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] H. Imahori, T. Umeyama and S. Ito, "Large  $\pi$ -Aromatic Molecules as Potential Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells", *Acc. Chem. Res.*, **42**, 1809-1818 (2009).
- [2] H. Imahori, T. Umeyama, K. Kurotobi and Y. Takano, "Self-Assembling Porphyrins and Phthalocyanines for Photoinduced Charge Separation and Charge Transport", *Chem. Commun.*, **48**, 4032-4045 (2012).
- [3] T. Higashino, H. Imahori, "Porphyrins as Excellent Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: Recent Developments and Insights", *Dalton Trans.*, **44**, 448-463 (2015).
- [4] T. Higashino, Y. Fujimori, K. Sugiura, Y. Tsuji, S. Ito, and H. Imahori, "Tropolone as High-Performance Robust Anchoring Group for Dye-Sensitized Solar Cell", *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 9052-9056 (2015).

# バイオフィーム成長に関する三次元モデルの構築

西谷 公秀

大阪大学大学院基礎工学研究科

## 1 緒言

バイオフィームとは、壁面上に付着した微生物が流路内の流体運動による栄養基質物質の供給によって成長する膜状の集合体の総称であり、その成長過程を明らかにして制御することが工学的に重要な課題となっている。例えば医療現場において使用されるカテーテル内では毒性のあるバイオフィームの増殖を妨げるために微生物を死滅させる薬剤を添加することが必要であるが、そのような添加剤の使用量を最小限にとどめるために移動現象論的アプローチによるバイオフィームの成長制御が有効となってくる。Sanchez ら[1]は、マイクロデバイスを用いたバイオフィームの成長実験を行い、実際の成長挙動の観察に成功している。しかしながら、成長挙動に関する定量的な評価は実験データのばらつきから困難となっている。一方、高木ら[2]は、供給物質輸送と流体の運動量輸送を同時に解く二次元数値シミュレーションを実施し、実験と同様なバイオフィームの成長を数値的に表現しているが、成長核となるバイオフィームの初期条件の依存性については二次元モデルであるために限定的な解析のみがなされていた。そこで本研究では、実際のバイオフィームの初期配

置によって成長段階や周囲流動場がどのように調査するために、従来の二次元数値モデルを三次元モデルに拡張した数値解析を行った。

## 2 数値解析手法

解析対象は Fig. 1 に示す三次元矩形チャンネルである。支配方程式は基質を含む溶液には対しては以下に示す連続の式及び Navier-Stokes 方程式を用いた。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial(\phi_s \mathbf{u})}{\partial t} + \rho \nabla(\phi_s \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \eta \nabla^2(\phi_s \mathbf{u}) + \mathbf{F} \quad (2)$$

ここで、 $\rho$ は溶液の密度、 $\mathbf{u}$ は溶液の流速、 $t$ は時間、 $p$ は圧力、 $\eta$ は溶液の粘度、 $\mathbf{F}$ は溶液とバイオフィーム間の摩擦力、 $\phi_s$ は溶液の体積分率である。一方、バイオフィームの運動を解くためには、成長と代謝を考慮した以下の Cahn-Hilliard 方程式を用いた。

$$\frac{\partial \phi_n}{\partial t} = \nabla \left[ \lambda \phi_n \frac{\delta f}{\delta \phi_n} \right] + Y \left\{ \left( \frac{\mu}{Y} + m \right) \phi_n \frac{c}{K_c + c} - m \phi_n \right\} \quad (3)$$

ここで、 $\phi_n$ はバイオフィームの体積分率、 $\lambda$ はモビリティパラメータ、 $f$ は自由エネルギー、 $Y$ は収率、 $\mu$ は最大比増殖速度、 $m$ は保持定数、 $K_c$ は半飽和定数である。これらの支配方程式は有限体積法を用いた空間離散化を行い、ルンゲクッタ法を用いて時間積分を行った。計算格子は直交不等間隔格子を用いて作成し、総格子点数は約 780,000 点である。解析条件としては、流入平均速度とチャンネル幅で定義されるバルクレイノルズ数を 0.1 とし、溶液のシュミット数を 435 とした。初期状態ではバイオフィームを底面に付着させ、基質を含んだ溶液を流入させてバイオフィームを

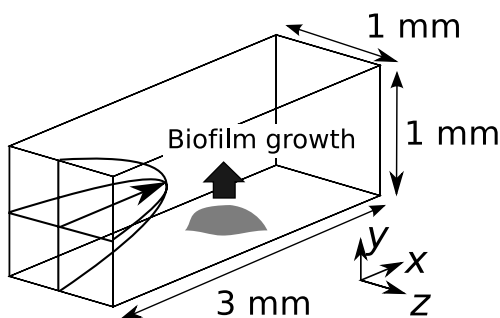


Fig. 1 Analysis model of biofilm growth in a rectangular channel.

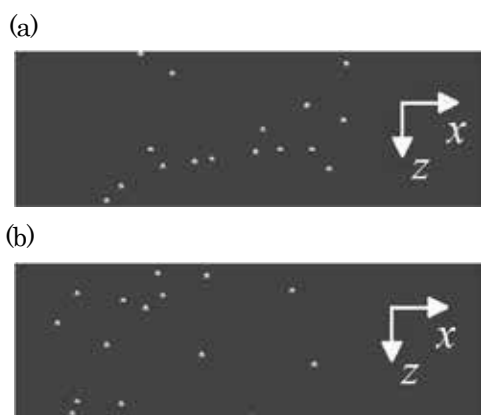


Fig. 2 Initial biofilm distributions on the bottom wall: (a) RUN1, (b) RUN2.

成長させた。初期条件として  $\phi_n = 0.5$  のバイオフィルムを 16 個、底面にランダムに配置し、Fig. 2 に示す 2 種類の配置(RUN1、RUN2)について数値解析を行った。

### 3 結果と考察

バイオフィルムは時間経過に伴い成長し、指数関数的に増加した。二ケースそれぞれのバイオフィルムの総量の差は、 $t = 140$  で 2%弱である。これは高木ら[2]が行った二次元数値解析における差より小さい。今回の解析では  $Sc$  数が大きいいため拡散の影響が小さく、栄養基質の輸送に関しては対流が支配的である。そのため、三次元数値解析の差が二次元数値解析の差より小さくなった理由を速度場の観点から議論する。バイオフィルム周囲の流線を Fig. 3 に示すと、流体がバイオフィルムの上方だけでなく横を回りこむように通過していることがわかる。一方、二次元数値解析ではバイオフィルムの立体的な障害により上方を通過する流れのみが発生し、下流の底面付近では基質が不足するが、三次元数値解析では下流のバイオフィルムに基質が十分に供給されることになる。これを詳しく観察するために底面近くの基質濃度分布を Fig. 4 に示す。基質濃度はバイオフィルムの上方と横方向で同程度である。よって基質濃度が上方と同様にバイオフィルムの横を通過して供給される。ゆえにどの初期配置でも基質が二次元数値解析より行き渡りやすく、成長の差が小さくなる結果となった。

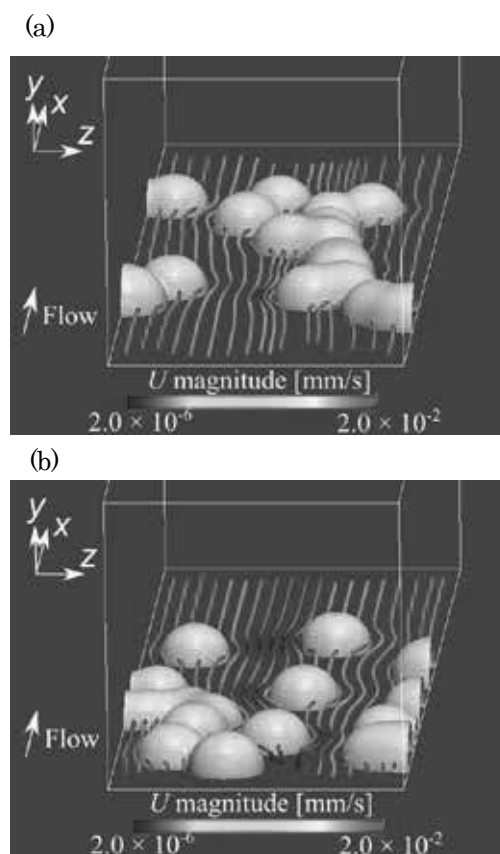


Fig. 3 The patterns of stream lines around biofilm and the grown biofilm (gray contour): (a) RUN1, (b) RUN2.

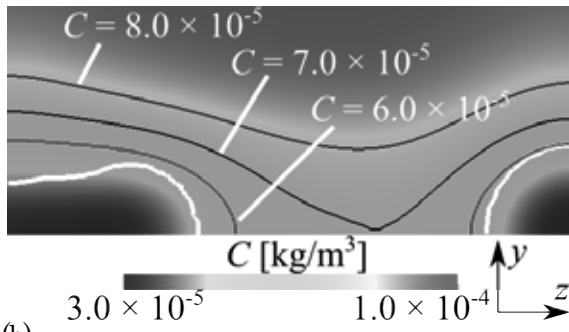
### 4 結言

より実際のバイオフィルム成長過程に近い数値モデルを構築するために、二次元モデルを三次元モデルに拡張し、バイオフィルムの配置依存性を検討した。その結果、数値解析を三次元に拡張したことで、溶液がバイオフィルムの横を回りこむ挙動を表現できた。よって三次元におけるバイオフィルム成長過程では下流に基質が十分に供給され、バイオフィルム初期配置が成長に与える影響は二次元モデルに比べ小さくなることが示された。

### 参考文献

- [1] Z. Sanchez, A. Tani, N. Suzuki, R. Kariyama, H. Kumon and K. Kimbara, "Assessment of change in biofilm architecture by nutrient concentration using a multichannel microdevice flow system", J. Biosci. Bioeng.,

(a)



(b)

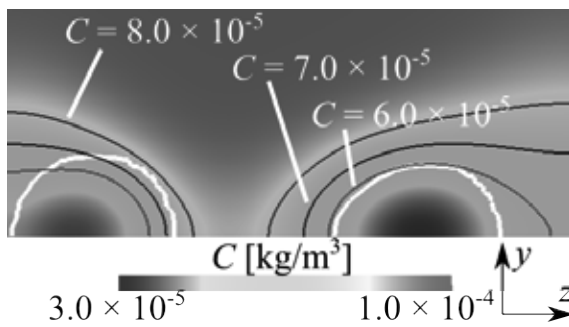


Fig. 4 The concentration distributions of substrate around biofilm on the cross section of the plane of  $x = 0.1$  mm: (a) RUN1, (b) RUN2.

- [2] 高木洋平、大畑貴嗣、岡野泰則、Z. Sanchez、金原和秀、”流路内におけるバイオフィルムの成長シミュレーション”、第 63 回理論応用力学講演会、OS05-01-03 (2014).

# 間欠性ダイナミクスの不安定周期軌道解析

齊木 吉隆 (一橋大学大学院商学研究科)  
yoshi.saiki@r.hit-u.ac.jp

不安定次元の異なる周期軌道が共存する構造は高次元力学系では非常にありふれていると考えられる。本研究ではその種の構造をもつ低次元力学系を構築し、その事実を不安定周期軌道の計算によって実際に確認した上で、構造の背後に存する準周期軌道に着目した解析をおこなった。

以下で定義されるトーラス上3次元写像 (mod  $2\pi$ )

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= 3x_n + r(\sin x_n + \sin y_n + \sin z_n), \\ y_{n+1} &= y_n - r \sin y_n + r(1 - \cos x_n), \\ z_{n+1} &= z_n - r \sin z_n + r(1 - \sin x_n) + r(1 - \sin y_n). \end{aligned} \quad (1)$$

を取り扱う ( $r = 0.1$ ). この力学系は典型的にはカオスのなふるまいを示す (図 1). 実際 3つのリアプノフ指数は,  $\lambda_1 = 1.09833, \lambda_2 = -0.00634, \lambda_3 = -0.01383$  である. た

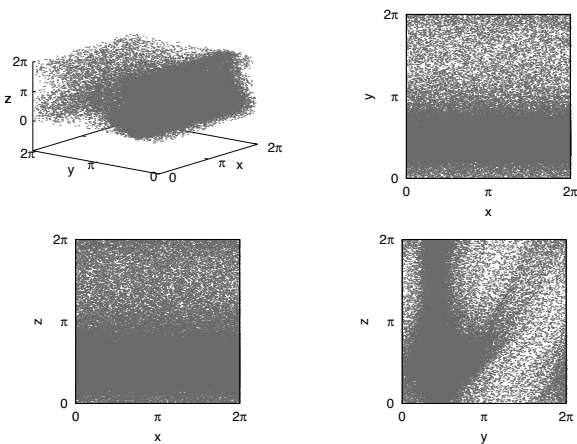


図 1: カオス軌道の射影図 ( $xyz, xy, xz, yz$ ).

だ, 通常の低次元力学系と異なる点は不安定次元の異なる構造が共存している点である. この力学系に埋め込まれた周期軌道を検出してそれらのリアプノフ指数を調べたところ, 1,2,3の不安定次元をもつ周期軌道が共存していることが確認された (図 2). 異なる不安定次元をもつ構造の共存の背後にあるメカニズムを探ることにする. mod を無視して考えるとこの写像で  $x$  方向については 1 回の反復で概ね 3 倍されることに着目し,  $x$  軸に横断的な不変面を同定

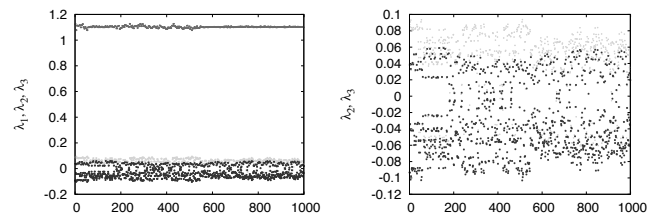


図 2: 各周期軌道 (周期 2-7) の第 1,2,3 リアプノフ指数 (左). 第 2,3 リアプノフ指数 (右). 第 1 リアプノフ指数は常に正であるが, 第 2, 第 3 は正, 負のものが共存している.

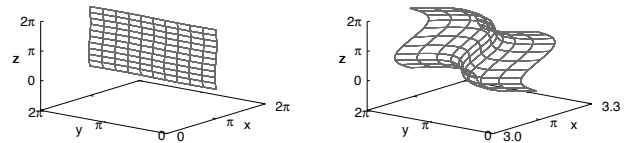


図 3: 力学系の不変面 (左) とその拡大図 (右).

した (図 3). 各  $(y, z)$  に対して,  $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_n}{3} \rightarrow \pi$  ( $n \rightarrow \infty$ ) なる  $x_n$  の収束先を求めればよい. ここで, 実際の計算では  $\infty$  の代わりに 50 を用いた. この不変面上での軌道の射影図は図 4 のようになり, そのリアプノフ指数は正が 1 個で 0 が 2 個となっている (図 5). したがって不変面上の軌道が 2 次元の準周期軌道であることが示唆される. 実際, 図 6 によって互いに近くに存在する不変面上の初期点は, 300, 600, 900, 1200 回反復を経ても互いに近くに存在し続けることが確認され, 不変面上には不安定成分はないことがわかる.

準周期軌道の回転数を調べるために重み付きバーコフ平均  $WB_N[1]$

$$WB_p^N(f)(x) := \sum_{n=0}^{N-1} \hat{w}_{n,N} f(x_n) \quad (2)$$



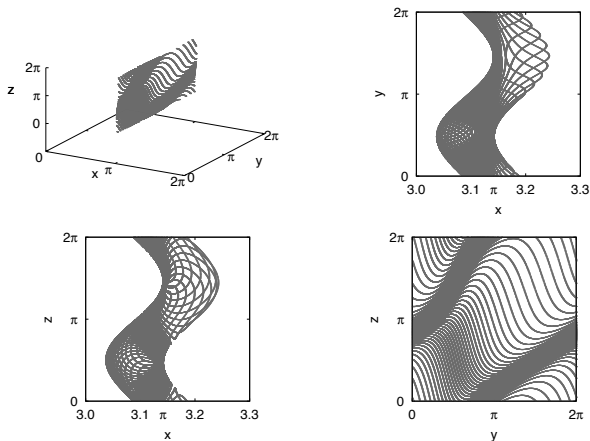


図 4:  $x$  軸に横断的な不変面上での軌道の射影図 ( $xyz, xy, xz, yz$ ). 不変面上の軌道は不変面から横断方向に不安定であるため, 不変面上の点から反復させる毎に数値誤差に相当する分だけ不変面から離れてしまう. そこで, 写像毎に逐一不変面に引き戻して軌道を求めた.

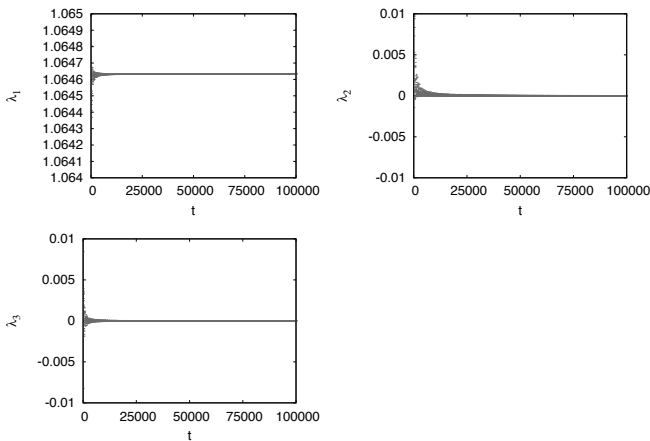


図 5: 不変面上での軌道のリアプノフ指数 ( $\lambda_1 = 1.0646, \lambda_2 = 0.0000, \lambda_3 = 0.0000$ ).

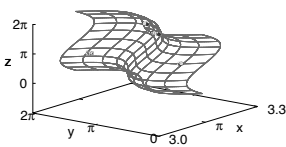


図 6: 不変面上に互いに近くにとった 13 の初期点集合を 300, 600, 900, 1200 回反復させた集合. リアプノフ指数 (図 5) と合わせると不変面上のふるまいは準周期的であることが示唆される.

を用いる. ここで

$$\hat{w}_{n,N} = \frac{w_p(n/N)}{\sum_{j=0}^{N-1} w(j/N)} \quad (3)$$

であり,

$$w_p(t) := \begin{cases} \exp\left(\frac{-1}{t^p(1-t)^p}\right), & \text{for } t \in (0, 1) \\ 0, & \text{for } t \notin (0, 1). \end{cases} \quad (4)$$

である (以下の計算では  $p = 1$  とした). 不変面上の準周期軌道の  $y$  成分から求めた回転数  $\rho_y$  は,

$$\rho_y = 0.1731838339716555313719 \quad (5)$$

$z$  成分から求めた回転数  $\rho_z$  は,

$$\rho_z = 0.1600374953195806712604 \quad (6)$$

となった. この準周期軌道の存在が異なる不安定次元をもつ周期軌道の稠密性ならびに間欠性ダイナミクスの起源になっていると予想される.

## 参考文献

- [1] S. Das, C. B. Dock, Y. Saiki, M. Salgado-Flores, E. Sander, J. Wu and J. A. Yorke. Measuring quasiperiodicity, *Europhysics Letters* 114, 40005, 2016.

# 運動量輸送と熱輸送の非相似性の最大化

本木 慎吾

大阪大学大学院基礎工学研究科機能創成専攻

## 1 緒言

エネルギーの有効活用の観点から、熱交換器の性能向上が様々な工学機器において求められている。熱交換器の性能を向上させるためには、作動流体の流動抵抗を低減、あるいは増加させないままに、伝熱を促進させる必要がある。しかし、この実現は一般に困難な課題であるとされる。例えば、乱流は層流に比べて顕著に高い熱輸送能力を有するが、一方で、運動量の輸送の促進もまた引き起こし、結果として、摩擦損失の増大を招いてしまう。このジレンマは運動量輸送と熱輸送間の相似性として古くから経験的によく知られている。本研究の目的は、この相似性を崩し、非相似性を促進させる（具体的には、壁面温度が一定に固定された平行平板間流れにおいて、壁面摩擦損失を小さく保ちながら高い壁面熱流束を得る）速度場を見つけることである。そのような最適な速度場を求めることが出来れば、伝熱促進を目的とした流体制御の指針として役立つと期待される。

## 2 計算手法

上下に一定の温度差を付加した3次元平行平板間クエット流を対象に、スカラー（温度）の総散逸率（壁面熱流束に相当する）とエネルギーの総散逸率との差を目的汎関数とする。探索の対象とする速度場は定常であるものとし、制約条件として、非圧縮流体における連続の式と温度についての移流拡散方程式を用いた。変分法を用い、境界条件を考慮することで、汎関数の第一変分が零となる停留条件（非線形のオイラー・ラグランジュ方程式）を導出し、これを数値的に解くことにより目的汎関数を最大にする最適な速度場を得た。

具体的な計算手順としては、まず乱流の瞬間場など、連続の式を満足する速度場を初期推定として与え、汎関数の勾配を用いて上昇方向に速度場を更新することで極大点に十分に近付け、その後、GMRES法を取り入れたニュートン法を用いて収束させた。速度や温度等の各変数は流れ方向及びスパン方向にフーリエ級数、壁垂直方向にチェビシェフ多項式の線形結合で表される壁面境界条件を満足する基底で展開し、ガラーキン法を用いて各方程式を離散化した。各方向のエリアス誤差は除去した。方程式系の残差は計算機の丸目誤差  $O(10^{-15})$  程度である。数値計算コードはFortran90で作成し、Intelコンパイラを用いてコンパイルを行った。計算コードはMPIとOpenMPを組み合わせて並列化した。統計処理や可視化等のポスト処理にはIDL及びParaviewを用いた。

## 3 結果と考察

図1は各レイノルズ数（平板の速度差の半分と流路高さの半分に基づく）において得られた最適状態のスカラー散逸とエネルギー散逸を示している。実線は層流状態を示しており、スカラー散逸及びエネルギー散逸は等しい値をとる。一方で乱流状態においては、両者は完全には一致しないものの、前述した相似性のために、ほぼ等しい値を示していることが分かる。対して、本研究で得られた最適状態は乱流状態よりも顕著に高いスカラー散逸が低エネルギー散逸において達成されていることがわかる。図2は低レイノルズ数におけるスカラー散逸を示しており、流れ方向に一樣な制約を課した2次元の速度場において得られた最適状態もプロットしている。極めて低いレイノルズ

数では層流解が最適状態として得られ、レイノルズ数が増加すると流れ方向に一樣な2次元解が現れる。図3は2次元解の温度及び速度ベクトルの分布を示している。この解は、等温度差を有する平行平板間における、2次元で非圧縮かつ定常な速度場において、エネルギー散逸一定の条件下で壁垂直方向の熱流束を最大にする最適状態[1]に類似しており、大スケールの循環ロールによって構成される。一方で本研究では、さらにレイノルズ数を増加させることによって3次元構造を有する解が最適状態として得られた。高レイノルズ数において、2次元解は鞍点となる。図4は分岐直後における流れの構造を示している。渦構造の可視化には速度勾配テンソルの第2不変量 $Q > 0$ を用いており、その等値面はスパン方向渦度の変動成分 $\omega'_z = \omega_z - \langle \omega_z \rangle_{xz}$ を用いて色付けられている。抽出された管状渦構造は流れ方向を向いており、それらの大部分が正の $\omega'_z$ を示していることがわかる。従って、この縦渦は平均流の渦度と反対符号のスパン方向渦度をもつようにスパン方向に傾いているといえる(アンチサイクロン渦)。また、白黒の等値面は局所のスカラー散逸及びエネルギー散逸が2次元解から顕著に増加した領域を各々示している。黒の等値面は渦管の直下のみに観察されるが、対して白の等値面は渦管に沿ってその周囲に分布していることがわかる。これは、アンチサイクロン渦に巻き付けられる温度の等温線の間隔が、背景に存在するせん断流によってより狭められることに起因していると考えられる。

本研究によって得られた最適状態は極めて高い伝熱特性を有するが、伝熱促進制御の観点から考えると、その速度場そのものを流体制御によって実際に達成することは困難であるだろう。しかしながら、汎関数の最適化問題を解くことによって得られた知見の1つであるアンチサイクロン渦による伝熱促進のメカニズムを応用することによって、新たな伝熱促進技術の開発に繋がることを期待できる。

#### 4 参考文献

[1] Hassanzadeh, P., Chini, G. P. and Doering, C. R. "Wall to wall optimal transport", *J. Fluid Mech.*, 751, 627–662, 2014.

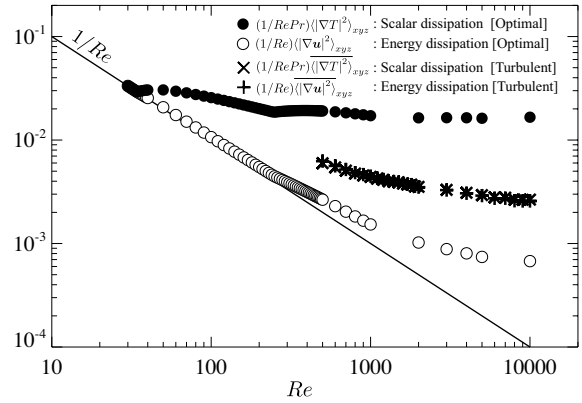


Fig1. Scalar and energy dissipation for optimal and turbulent states.

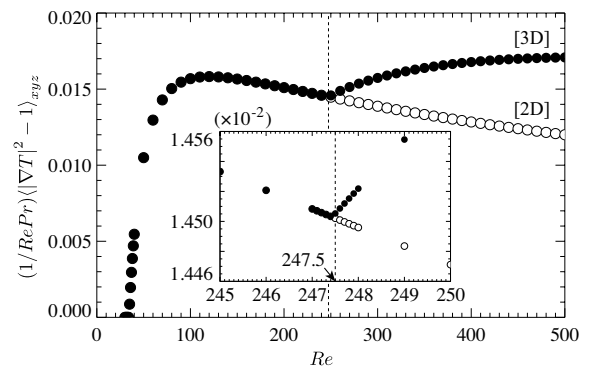


Fig2. Scalar dissipation for  $Re = 0 - 500$ .

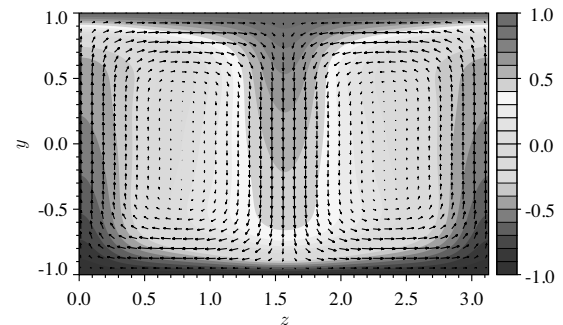


Fig 3. Temperature and velocity field of the optimal state at  $Re = 200$ .

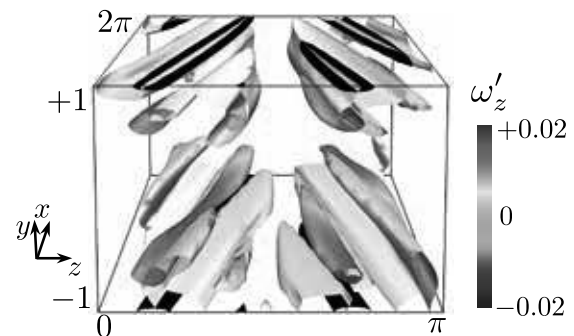


Fig4. Vortex tubes and regions in which increase in scalar (white) and energy (black) dissipation is observed.

# 高分子特性を考慮した界面活性剤添加溶液の抵抗低減効果

高木 洋平

大阪大学大学院基礎工学研究科

## 1 緒言

流体と固体壁面の間には粘性摩擦抵抗が生じ、この抵抗によって大きなエネルギー損失及び圧力損失が引き起こされる。通常の流れでは速度が速い乱流状態であるが、この乱流摩擦抵抗を低減させる方法の一つに、流体中に希薄な高分子溶液を添加することによって摩擦抵抗が大きく減少するトムズ効果がある。トムズ効果は微量な添加剤を加えることによって比較的容易に抵抗低減効果を得られることから、石油パイプライン輸送や熱交換器などさまざまな分野での応用が期待されている。

トムズ効果による抵抗低減の開始は主に高分子濃度に依存すると考えられているが、詳細な機構は十分に説明がなされていない。提案されている抵抗低減メカニズムは高分子の壁近傍での集積による速度境界層厚みの増加と、流体エネルギーの高分子弾性エネルギーへの変換による効果の二種類に分けられる。

トムズ効果の発現には高分子のレオロジー特性が深く関わっていると考えられている。抵抗低減がどのような時に発現するかを予測するためには、高分子の緩和時間と乱流中の渦運動の時間スケールを関係づけることが必要であるとされている[1]が、実験的にそれらの特性量を時空間的に調べることは難しく、十分な検討はなされていない。本研究では最も単純なカノニカル乱流の一つである一様等方乱流を対象として、一軸方向に回転を加えた回転乱流の直接数値計算(Direct Numerical Simulation, DNS)を実施し、生成された乱流場に高分子を投入して追跡することにより、高分子の弾性エネルギーと乱流渦構造との相関を調べた。

## 2 数値解析手法

本研究では、まずはじめに非圧縮性一様等方乱流のDNSを行った。支配方程式は以下に示す連続の式とNavier-Stokes方程式である。

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \varepsilon_{ijk} \frac{1}{Ro} u_j \Omega_k \quad (2)$$

ここで、 $u_i$ は速度、 $t$ は時間、 $p$ は圧力、 $\Omega_i$ は角速度であり、各変数は無次元化されている。レイノルズ数 $Re$ は3000のみとし、回転の強さを示すロスビー数 $Ro$ に関しては、 $1/Ro = 0 \sim 0.5$ として回転強度の依存性を検討し、回転は $z$ 軸方向のみに与えた。解析領域は等方的な一様乱流を対象としているため、一辺が $2\pi$ の立方体領域とした。計算格子は $256^3$ とし、支配方程式は有限差分法を用いて離散化してRunge-Kutta法及びCrank-Nicholson法によって時間積分した。

次に、生成された乱流場に対して高分子を追加入して乱流場中での高分子の運動を追跡した。厳密な高分子添加溶液の乱流解析では高分子応力の発展方程式をNavier-Stokes方程式とカップリングさせるが、本研究では乱流場から高分子への影響みのを考慮するone-wayカップリングとした。高分子鎖のモデルには、Finitely Extensible Nonlinear Elastic model (FENE)[2]を用いた。このFENEモデルを用いたとき、高分子の弾性エネルギー $E_f$ は以下のように計算される。

$$E_l = -\frac{nkTb(N)}{2} \sum_{m=1}^{N-1} \left\langle \ln \left( 1 - \frac{[r^{(m)}]^2}{b(N)} \right) \right\rangle \quad (3)$$

ここで、 $n$ は高分子の数密度、 $k$ は Boltzman 定数、 $T$ は絶対温度、 $N$ はビーズ数(今回の解析では  $N=2$ )、 $m$ はビーズの端からの番号、 $b(N)$ 及び  $r^{(m)}$ はそれぞれ平衡状態での長さで無次元化されたバネの最大伸長長さとビーズ間距離である。高分子の最大末端間距離の二乗を  $b=3000$  とし、高分子の最大緩和時間 $\lambda$ と Kolmogorov の時間スケール $\tau_\nu (=0.77)$ で定義される Weissenberg 数( $We = \lambda/\tau_\nu$ )を10から90の値で変化させた計算を行った。

### 3 結果と考察

Figure 1 に、高分子の弾性エネルギーと  $We$  数の相関を示す。 $We$  数が増加すると高分子の弾性エネルギーも比例して増加することがわかるが、乱流場に回転が加わると、同じ  $We$  数において高分子の弾性エネルギーへの変換がさらに増加していることがわかる。回転の効果は Navier-Stokes 式において外力として与えられ、すなわち大きなスケールの構造に働くエネルギー注入が行われるが、乱流中ではエネルギーカスケードによって注入されたエネルギーが微細な乱流渦のスケールまで伝達され、その結果、スケールの小さい高分子においても流体から高分子へのエネルギー伝達が回転の効果によって促進されていると考えられる。

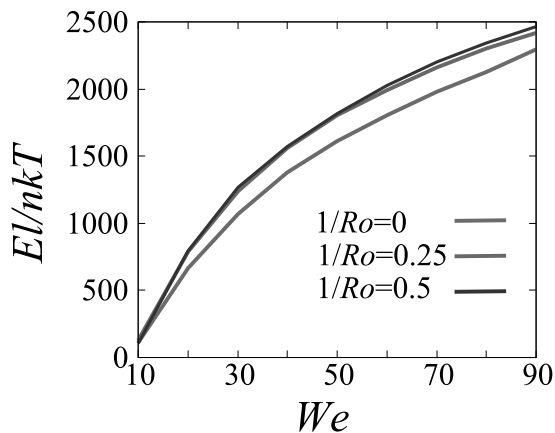


Fig. 1 The rotation strength dependency of Weissenberg number on elastic energy.

乱流中の渦構造を抽出するために、次式で与えられる速度勾配テンソルの第二不変量  $Q$  を算出した。

$$Q = \frac{1}{2} (S_{ij}S_{ji} + \Omega_{ij}\Omega_{ji}), \quad (4)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right),$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

この第二不変量  $Q$  を用いて乱流中の渦構造を可視化した結果を Fig. 2 に示す。本研究での DNS データでは  $Re$  数が低いため取りうる  $Q$  の値が大きくないが、Fig. 2(a)に示す回転無しの場合の結果に注目すると、ゼロに近い  $Q=1$  の等値面では層状の構造が抽出され、大きい  $Q=1.5$  の等値面では管状の構造が抽出されており、渦層に沿って渦管が形成されていること[3]がわかる。一方、回転を加えた Fig. 2(b)の結果では、渦構造が全体的

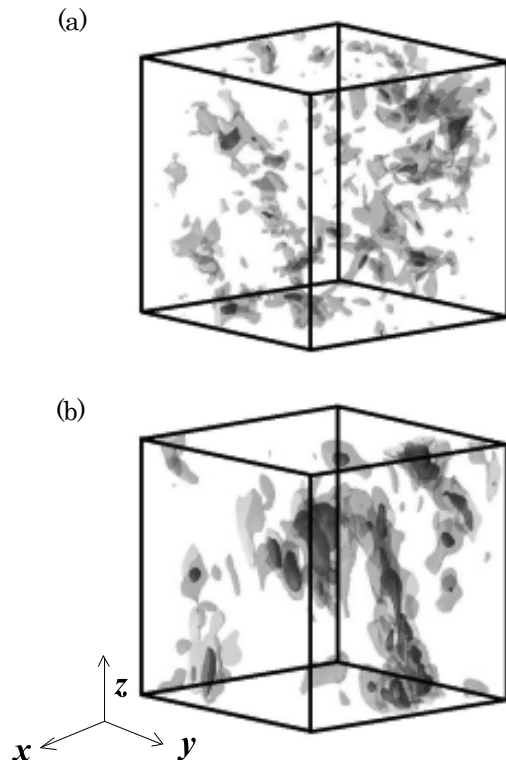


Fig. 2 The isosurfaces of  $Q$  at  $t=40$  (outer surface with  $Q=1$  and inner ones with  $Q=1.5$ ): (a)  $1/Ro=0$  (without rotation), (b)  $1/Ro=0.5$ .

に粗大化、すなわち初期の大きい構造が微細化されていないことがわかり、Fig. 1 での結果と併せて考えると、高分子は乱流中の大きい構造である渦層の周辺に集まり、エネルギーカスケードの過程において乱流運動のエネルギーが高分子の弾性エネルギーにも変換されていると考えられる。

## 4 結言

本研究では、高分子添加溶液中において抵抗低減効果につながる高分子の挙動を調べるために、回転を加えた一様等方乱流の直接数値計算を行い、生成された乱流場に高分子を追加した際の高分子挙動と高分子-流体間のエネルギー伝達について解析を行った。回転を加えることによって乱流中の渦構造の微細化が抑制されるが、大きいスケールの渦構造である層状の渦層上に高分子鎖が集積し、乱流のエネルギーの一部が高分子の弾性エネルギーへと変換されることが明らかになった。今回対象とした流れ場は一様等方乱流であったが、円管内流れや回転二重円筒内流れ (Taylor-Couette 流れ) においても同様な解析を行い、高分子の配向・集積と抵抗低減効果の関係を調べる予定である。

## 参考文献

- [1] P. K. Prasinski, B. J. Boersma, F. T. M. Nieuwstadt, M. A. Hulsen, B. H. A. A. Van Den Brule and J. C. R. Hunt, “Turbulent channel flow near maximum drag reduction: simulations, experiments and mechanisms”, *J. Fluid Mech.*, 490, pp. 251-291 (2003).
- [2] R. B. Bird, C. F. Curtiss, R. C. Armstrong and O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids*, 2nd Edition, Volume 2, Wiley (1989).
- [3] K. Horiuti and Y. Takagi, “Identification method for vortex sheet structures in turbulent flows”, *Phys. Fluids*, 17, 121703 (2005).

# 周囲気体を考慮した HZ 液柱内温度差マランゴニ対流場の数値解析

中村 翔一

東京理科大学大学院理工学研究科機械工学専攻

## 1 緒言

自由表面上に温度差を与えると、それに起因した表面張力差を駆動力とする対流が発生する。この流れは、マランゴニ対流と呼ばれており、特に微小重力下やマイクロスケールにおいて支配的になることが知られている。

Smith と Davis [1]は、薄液膜において自由表面に対して水平方向の温度勾配が発生している場合、マランゴニ対流により hydrothermal wave(以下 HTW)が生じる流れの不安定性を線形安定性解析を用いて発見した。現在、図 1 のような Half-Zone 液柱(以下 HZ 液柱)はマランゴニ対流の不安定性を研究するための代表的な系となっている。HZ 液柱においてマランゴニ対流の強さを示す無次元数としてマランゴニ数(以下  $Ma$ )がよく用いられている。Kamotani ら[2]は HZ 液柱において高プラントル数流体( $Pr=24\sim 49$ )を用いて実験的に自由表面での熱輸送を示すパラメータであるビオ数(以下  $Bi$ )が臨界値に与える影響を示した。2014 年から実施されている日米共同宇宙実験では、Kamotani ら[2]の実験を元に  $Bi$  に着目している。さらに、2018 年から実施予定の日欧共同宇宙においても、 $Bi$  と可視化用トレーサ粒子が一本の線内に集合する現象である粒子集合現象に焦点を当てた研究が行われる予定である。しかし、実験装置の制約上得られない情報も多く、数値解析によるアプローチが必要である。また、液柱だけでなく周囲気体も着目しているため、計算コストが非常に高くなりスーパーコンピュータの利用が不可欠である。本研究では、実験に近い条件で従来よりも広範囲な領域での数値解析を実施し、周囲気体が HZ 液柱内流れの不安定性に与える影響を調べることを目的としている。

## 2 数値解析手法

数値解析で用いた計算対象を図 1 に示す。これは、液柱( $Pr=4$ )の周りにシールドを取り付けその中にアルゴンガス( $Pr=0.67$ )を充満させている。支配方程式は円筒座標系非圧縮非定常の 3 次元ナビエーストックス方程式、エネルギー方程式、連続の式であり不等分割スタッガード格子を用いて解いた。また、有限差分法を用い 2 次精度中心差分により離散化した。連続の式、ナビエーストックス方程式のカップリングにはフラクショナルステップ法、ポアソン方程式の解法として Chebyshev SOR 法を用い、打ち切り誤差は  $10^{-6}$  とした。時間進行方法は、液柱には 2 次精度の Adamus-Bashforth 法、周囲気体は、軸方向の粘性項に 2 次精度の Crank-Nicolson 法その他の項は Euler 法を用いた。粒子の計算方法は Hoffmann と Kuhlmann [3]の手法を用いている。この計算コードは、Open MP と MPI を用いたハイブリッド並列化を行った。

## 3 結果と考察

今までの先行研究では、 $Bi$  を考慮し液柱内流れの不安定性を調べる際計算コストが増加するため、周囲気体を無視し簡略化した境界条件を定義し、周囲気体の数値解析はほとんど行われなかった。

まず、二次元定常流から三次元振動流へ遷移する臨界マランゴニ数  $Ma_{cr}$  と低温壁温度  $T_c$  の関係を示す。臨界マランゴニ数  $Ma_{cr}$  の算出方法は Imaishi ら [4]の方法を用いた。局所的なビオ数を軸方向に平均したビオ数  $Bi_{ave}$  は  $Ma_{cr}$  上での値である。今回の数値シミュレーション結果(図 2)

$Ma_{cr}$  と  $T_c$  の関係を見ると  $T_c$  が高くなるにつれて  $Ma_{cr}$  が小さくなり振動流へ遷移しやすくなっている。これは地上実験でも見られている傾向であり[2], 表面での熱損失により表面流速が加速されるためである。次に, アスペクト比  $\Gamma$  (液柱高さ/半径) の影響を見ると  $\Gamma$  が大きくなるにつれ  $T_c$  依存性が高くなる傾向が見られた。これは, 低温壁温度  $T_c$  との臨界高温壁温度  $T_{her}$  の関係 (図3) により説明できる。これを見ると, アスペクト比が大きくなるにつれ,  $T_{her}$  が小さくなっていることがわかる。そのため,  $\Gamma$  が小さくなるにつれ液柱近くの気体温度が上昇し, 液柱表面での  $Bi$  が低下する。つまり,  $T_c$  を同じよう変化させていても  $\Gamma$  により  $Bi$  が異なるためこのような傾向となっていると考えられる。さらに, 動粘度温度依存性の影響を見た。これは, 数値シミュレーションで調査できないパラメータであり, 図1, 2の中塗りの点が動粘度温度依存性なし, 中抜きりの点が動粘度温度依存性ありの結果である。これにより動粘度温度依存性を考慮したことにより  $Ma_{cr}$  と  $T_{her}$  が小さくなることを示した。

#### 4 結言

より実験に近い条件である周囲気体を考慮した HZ 液柱を用いた数値シミュレーションを行い, 地上実験と同じような傾向を得ることができた。さらに,  $\Gamma$  による影響を調べ今後の実験結果に繋げることができた。しかし, この周囲気体を考慮した計算の場合計算負荷が増加するため, 今後はさらに並列化の効率を上げる必要がある。

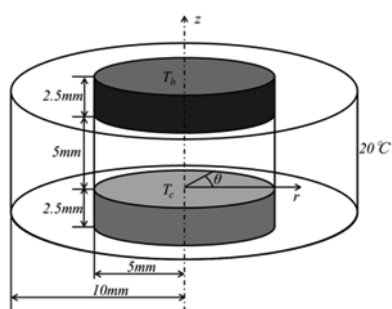


図1 計算対象

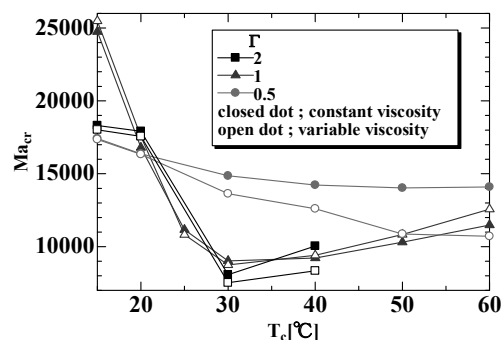


図2. 低温壁温度と臨界値の関係  
横軸: 低温壁温度  
縦軸: 臨界マランゴニ数 (対流場の遷移点)

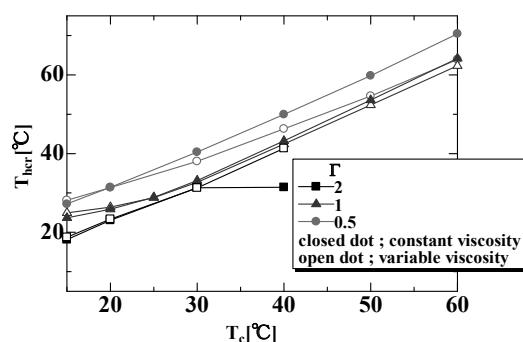


図3. 低温壁温度と臨界高温壁温度の関係  
横軸: 低温壁温度  
縦軸: 臨界高温壁温度 (対流場の遷移点)

#### 参考文献

- [1] M. K. Smith and S. H. Davis, J Fluid Mech, **132**, 119-144 (1983)
- [2] Y. Kamotani et al, Int. J. Heat Transfer, **46**, 3211-3220 (2003).
- [3] E. Hofmann, H. Kuhlmann, Phys. Fluids, **23**, 072106 (2011)
- [4] N. Imaishi et al, Crystal Growth **230**, 164-171 (2001)

最後に, 本研究制度 (若手奨励枠) を活用させて頂きましたことにお大変感謝致します。



# 高プラントル数を用いた HZ 液柱内温度差マランゴニ対流の数値解析

カオス・乱流化過程の解明に向けて

茂木 孝介

東京理科大学理工学研究科機械工学専攻

## 1. 緒言

自由界面を有する系において、気液界面に温度差や濃度差をつけることに起因して、表面張力差を駆動力とする対流が発生する。この対流はマランゴニ対流と呼ばれ、微小重力環境下におけるマイクロスケール流体の駆動力の一つとして注目されている。一方で、floating-zone 法のような高品質な材料生成過程において、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<sup>1</sup>。故に、マランゴニ対流の不安定性に関する理解、制御の点で研究が行なわれてきた。

私の所属する研究室は、国際宇宙ステーション日本実験棟「きぼう」にて行なわれている、流体物理実験に共同研究グループとして参画している。今回、宇宙実験のテーマの一つである、「マランゴニ対流におけるカオス・乱流とその遷移過程」の解明に向けて、直接数値シミュレーションを行なった。

本研究では、計算対象として floating-zone 法の代表的なモデルである half-zone モデル (HZ モデル, 図 1) を計算対象とした。上下ロッド間に液柱を形成させ、上部壁を加熱、下部壁を冷却することで液柱自由表面上に温度勾配を付与し、マランゴニ対流を発生させるモデル系である。宇宙実験の結果との比較を行なうために、高いプラントル数(Prandtl 数,  $Pr = \nu/\kappa$ ,  $\nu$ : 流体の動粘度,  $\kappa$ : 流体の熱拡散率)で、かつ、地上実験と比べて長い液柱を対象とした。また、周囲気体への熱損失を考慮し、対流場が定常な流れから非定常な流れへと遷移する臨界値を調査した。また、遷移後の十分発達した対流場の構造を調査した。

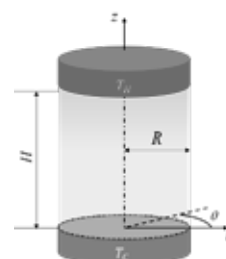


Fig. 1 The schematic image of a liquid bridge.

## 2. 計算条件

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。今回の計算では、 $\Gamma = 2.0$  とし、液柱は表面の変形を考慮せず、常にストレートな形状を保持しているものとする。また、計算系全体は無重力状態であることを想定した。

流体は非圧縮性ニュートン流体であるとし、 $Pr = 16$  とした。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なる。

また、液柱自由表面上での熱の授受を自由界面での熱の授受を示す無次元数、ビオ数(Bi)で表した。マランゴニ対流の強さを示す無次元数、マランゴニ数(Ma)をとし、ビオ数とマランゴニ数をパラメトリックに変化させて計算を行なった。

## 3. 結果

図 2 に Bi を変化させたときの臨界マランゴニ数(Mac)と各対流場の遷移過程を示す。Mac は各 Bi 数における臨界マランゴニ数を示す。SW は standing waves である。TW1(a), 1(b)は traveling waves である。臨界値の傾向は先行研究で実施された、 $Pr = 16$ ,  $\Gamma = 1.8$  の線形安定性解析の結果と類似した傾向を示している<sup>2</sup>。Bi が 1 以上の領域において、対流場は SW へと安定的に遷移し、維持されていることが確認さ

れた。また、臨界値からやや離れた  $Ma$  においては、臨界値直上の  $SW$  とは傾向の異なる別種の  $SW$  が確認された。図 3 は臨界直後に見られた液柱自由表面上の温度変動分布の 1 周期分の時間変化を観察したものである。臨界マランゴニ数に近いほうに着目する(図 3(a))。上部ロッド側から cold spot が現れ、下部ロッドに向かい、それと入れ替わる形で、今度は hot spot が現れる。hot spot も cold spot 同様に上部から下部へと流れていき、再び cold spot が現れるという周期的な流れとなっている。

次に臨界マランゴニ数から離れたマランゴニ数の対流場に着目する(図 3(b))。図 3(a)と大きく異なるのは cold spot の形状である。cold spot の出現と同時に一對の斜交した cold line が現れ、cold spot が現れたところで交差した状態を維持したまま下部ロッドに向かっていく様子が確認できる。これは Matsugase et al.によって報告された、‘X’状構造に非常に似通った構造である<sup>3</sup>。本計算結果は実験で確認された‘X’状構造を、初めて数値シミュレーションによって再現することができた。

この温度変動分布の構造を明らかにするために、周方向波数:  $m \geq 2$  による空間フーリエ分解を施した(図 4)。これを見てみると、オリジナルのデータでもっていた、cold line の斜交している構造を維持していることがよくわかる。これより、この‘X’状構造は基本波によって構築されたものではなく、より高い周方向モード数によって構築されていることがわかった。これは対流場の高調波成分の影響が増大したことによるものであることを示唆する結果である。

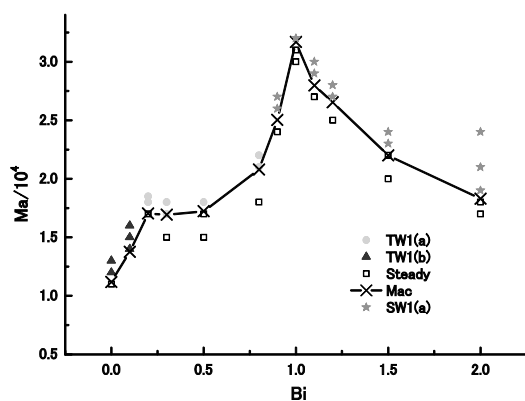


Fig. 2 Critical stability curves as a function  $Bi$

for  $Pr = 16, \Gamma = 2.0$ .

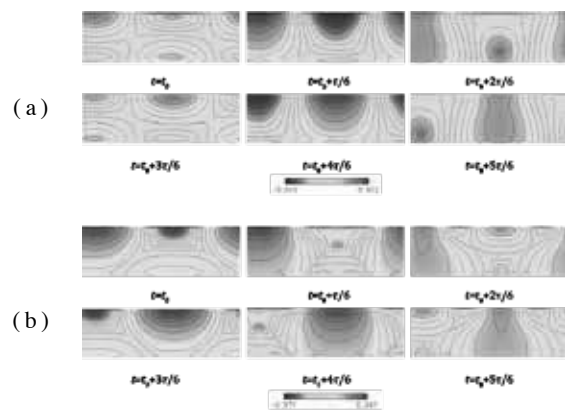


Fig. 3 The snapshot of temperature deviation distribution on the free surface,

(a)  $Ma = 19000, Bi = 2.0$  (b)  $Ma = 36000, Bi = 2.0$ .

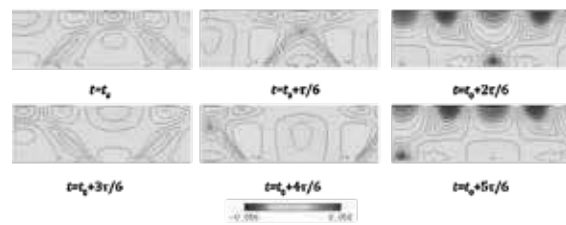


Fig. 4 Space Fourier decomposition for  $m \geq 2$  ( $Ma = 36000, Bi = 2.0$ ).

## 4. 結言

$Pr = 16$  の流体で、無重力状態を想定したストレートな長液柱を対象とし、周囲気体との熱損失を変化させた際の数値シミュレーションを行なった。ビオ数が 1 以上において、対流場が振動流へと遷移すると、対流場の形態は  $SW$  へと遷移し、維持されることを明らかにした。 $SW$  の対流場を強くしていくと、‘X’状構造を持った対流場を数値解析で初めて再現することができた。また、‘X’状構造は対流場の高調波成分の影響が増大したことによるものであることを示唆した。

今後の予定は、周囲気体から熱を受け取った際の対流場の遷移過程を調査し、今後の宇宙実験への一つの知見として貢献していく予定である。

## 5. 参考文献

- 1) A. Cröll et al., *J. Cryst. Growth*, vol. 191, pp. 365–376, 1998.
- 2) B. Xun et al., *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 54, no. 9–10, pp. 1698–1705, 2011.
- 3) T. Matsugase et al., *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 89, pp. 903–912, 2015.

# パターン学習を用いた経験的セル・オートマトン構成法と それによる偏微分方程式モデルの模倣

中野直人\*

\*国立研究開発法人科学技術振興機構さきがけ，北海道大学大学院理学研究院

本稿は川原田茜講師（京都教育大学数学科）と宮路智行特任講師（明治大学研究・知財戦略機構）との共同研究に基づく。

## 1 はじめに

複雑な挙動を見せる現象に対する予測モデルの構築は自然科学のみならず様々な分野における強い関心事である。いわゆる非線形性が強い、もしくは自由度の大きな力学系ではその予測は一般に難しく、数理科学の重要な問題として長く研究されてきた。また、計測技術の向上によって大量のデータが取得できるようになり、そのデータから対象とする現象の法則を経験的にモデル化する試みがなされてきている。この手法では、所与のデータセットに対象とする現象が表現するあらゆる振る舞いが含まれているとみなし、機械学習的なアプローチでモデル方程式を構成する。これには大規模なデータ処理とモデルパラメータ決定を必要とするが、大規模計算機の利用など、昨今の計算機能力の向上が経験的モデリングの実行を可能としている。

しかし、複雑な現象であればあるほど予測モデルを立てるのは難しく、その表現のためにそのようなモデルにはしばしば多くのパラメータが含まれる。それらのパラメータを実際のデータにフィットさせることは困難を伴う。そのため、現象の遷移の「骨子」を表すようなセル・オートマトン (CA) によるモデリングは、ノンパラメトリック解析の一つとして、方法論の確立が必要とされている。経験的に構成された局所規則を調べることによって対象となる現象のメカニズムの解明につなげるのである。

CA モデルとは、空間を有限サイズのセルで区切り、次の時間ステップでの状態を、現時点における隣

接セルの状態から決定するというモデルである。例えば、空間 1 次元の  $M$  状態 3 近傍 CA では、

$$(a, b, c) \mapsto d \quad (a, b, c, d = 0, 1, \dots, M - 1)$$

という局所規則という写像を用いる。これは、現時点での状態が  $b$  であり、かつ左隣と右隣の状態がそれぞれ  $a$  と  $c$  となる場合、次の時点での状態を  $d$  で与える。このように、CA は局所規則によって各セルの状態を更新する非常にシンプルな数理モデルではあるが、game of life や von Neumann の自己複製機械などの複雑なパターンを表現するものもあり、豊富なパターン生成を為し得るという意味では現象の模倣に用いるに足るポテンシャルを有している。

所与のデータから経験的に CA をモデルする手法は、最初に Kawaharada and Iima [1] によって提案された。彼らはその手法を生物対流のパターン画像に対して適用し [2]、実験データと定性的に一致するようなシミュレーション結果を出力する CA モデルを構築している。また、その方法論をある種の偏微分方程式 (PDE) モデルに適用し、その数値解のデータセットを用いて、その解の振る舞いと似たパターンを表す簡易 CA モデルを構成しようと試みた [3]。しかし、PDE の数値解を用いる場合は、得られる局所規則はわずかな時間ステップの間に定常状態に陥るパターンを与えることが多く（すなわち CA のパターンが時間とともに変化せず固定される）、現象の模倣には程遠いのが現状であった。彼らは確率的 CA を導入することでその問題点を突破したが、しかし決定論的 CA モデリングに関しては依然としてパターンの固定に対する解決策が与えられていなかった。

それに対して、我々は時空間スケールを CA のパターン伝播に合わせることでその問題を解決した [5]。

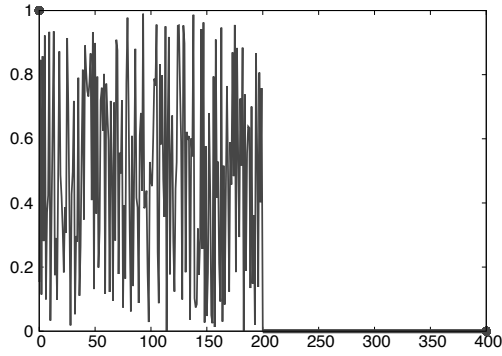


図 1: データセット  $U^{(j)}$  を構成するための Burgers 方程式の初期値の例.

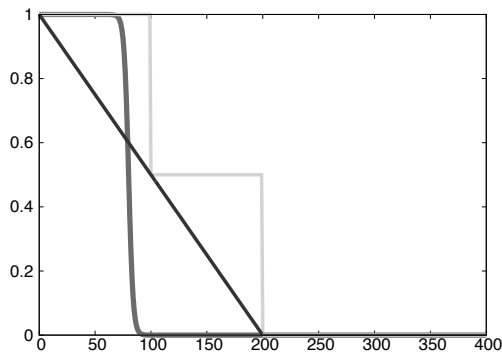


図 2: CA シミュレーションのための初期波形: 赤線は (5), 緑線は (6), 青線は (7) で与えられる.

ここでは Burgers 方程式の数値解を対象として, その数値解から改良された統計的 CA 構成法を用いて CA モデルを構成している. その得られた CA モデルは元の Burgers 方程式の持つ粘性衝撃波面の伝播などの諸性質を良く再現できている. さらにこの経験的 CA モデル構成法は数値解析的なアプローチも持ち, 対象とする PDE との関連性も見出されており [4,6], 今後の発展が非常に期待される研究である. 本稿では [5] での研究について概略を説明する.

## 2 データ

ここで用いるデータは Burgers 方程式

$$\begin{cases} u_t + (u^2/2)_x = \nu u_{xx} & (0 < t < T, 0 < x < L), \\ u(t, 0) = 1, u(t, L) = 0 & (0 < t < T), \\ u(0, x) = u_0(x) & (0 < x < L) \end{cases} \quad (1)$$

の数値解データである. ここでは,  $L = 400, T = 600,$   $Re = 10$  としている.  $u_0 \geq 0$  を満たす初期条件を

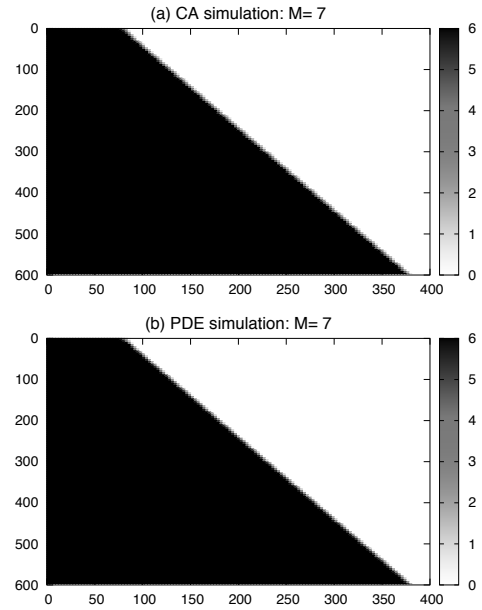


図 3: (a) 本手法によって得られた統計的 CA によるシミュレーション. CA の初期値は (5) を状態数  $M = 7$  で (3) によって離散化した. (b) 同じ初期値に対する Burgers 方程式の数値解を状態数  $M = 7$  で (3) によって離散化したプロット. (a) と (b) 両方とも横軸と縦軸はそれぞれ空間方向と時間方向を表す.

与えると,  $x$  の正の方向に波が伝播し, さらにその波面が衝撃波面を形成することが良く知られている. 波面の伝播速度はその面の両側の  $u$  の値によって定まり, 速い波面が遅い波面を吸収する様子が観察される.

統計的 CA 構成法のため, 様々な初期値に対して Burgers 方程式の数値解を構成する必要がある. ここでは適当な離散スキームの下,  $j$  番目の初期値に対する数値解  $u_{i,n}^{(j)} = u^{(j)}(i\Delta t, n\Delta x), i = 0, 1, \dots, I,$   $n = 1, 2, \dots, N$  を以下のように構成する. 上記の波面伝播の性質から, 初期値  $u_{0,n}$  の値を,  $n = 0$  のとき  $1, n = 1, 2, \dots, N/2 - 1$  のとき  $[0, 1]$  上の一様乱数,  $n = N/2, N/2 + 1, \dots, N$  のとき  $0$  を与え (図 1), 数値解を生成する. ここでは  $J = 100$  セット作成し, 以下のようなデータセットを得る.

$$U^{(j)} := \{u_{i,n}^{(j)} \mid i = 0, 1, \dots, I-1, \\ n = 1, 2, \dots, N-1\},$$

$$U := \bigcup_{j=1}^J U^{(j)}. \quad (2)$$

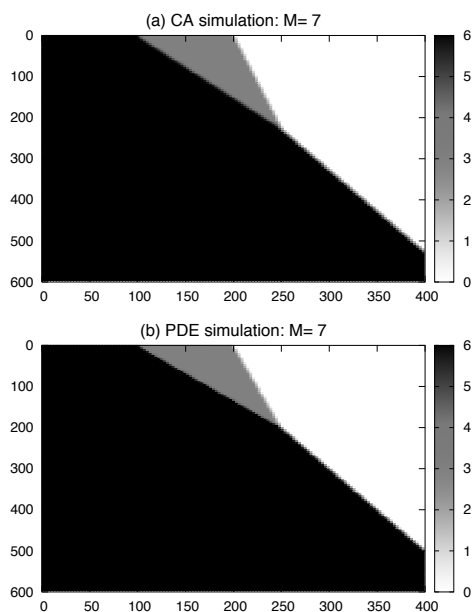


図 4: (a) 本手法によって得られた統計的 CA によるシミュレーション. (b) Burgers 方程式の数値解. 用いた初期値は (6) である. 離散化と軸はいずれも図 3 と同様である.

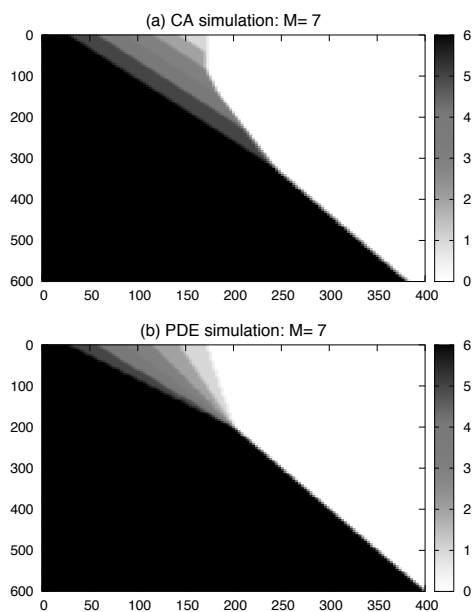


図 5: (a) 本手法によって得られた統計的 CA によるシミュレーション. (b) Burgers 方程式の数値解. 用いた初期値は (7) である. 離散化と軸はいずれも図 3 と同様である.

### 3 手法

統計的 CA 構成法を以下のようにしてデータセット (2) に適用する. この手法は, 所与のデータセットについて状態変化の最大頻度を与えるパターンを局所ルールとして採用する方法である.

CA の状態数を  $M \in \mathbb{N}$ ,  $M \geq 2$  とするとき,

$$U_{a,b,c} = \left\{ \left( [u_{i,n-1}^{(j)}], [u_{i,n}^{(j)}], [u_{i,n+1}^{(j)}] \right) = (a, b, c) \mid u_{i,n}^{(j)} \in U \right\}$$

とおく. ただし,  $a, b, c = 0, 1, \dots, M-1$  である. ここで,  $[x]$  は  $x$  の状態数であり,

$$[x] = \text{floor}(xM) \quad (3)$$

で与えられる. この  $U_{a,b,c}$  は, 隣接 3 セルの状態数が  $(a, b, c)$  と並んでいる三つ組みのデータ全体からなる集合である. さらに, その三つ組みのデータの次の時間ステップでの行き先を

$$U_{a,b,c}(d) = \left\{ u_{i+1,n}^{(j)} \mid [u_{i+1,n}^{(j)}] = d, \left( u_{i,n-1}^{(j)}, u_{i,n}^{(j)}, u_{i,n+1}^{(j)} \right) \in U_{a,b,c} \right\}$$

と定める. すると, 隣接 3 セルが  $(a, b, c)$  となるような三つ組みのデータの次時間ステップでの状態の最頻値は

$$d = \arg \max_{d'} \# \tilde{U}_{a,b,c}(d') \quad (4)$$

によって与えられる. ここで,  $\#$  は集合の要素数を示す. この計算をあらゆる  $(a, b, c)$  に対して適用することで,  $M$  状態 CA の全ての局所規則を決定することができる.

尚, この手法ではあらゆる数値解の変動パターンを記録するために非常に多くのデータを用いている. また, 状態数  $M$  における決定するべき局所規則の数が  $M^3$  となるため,  $M$  が増大すると計算負荷が高い. しかし, 局所規則の計算アルゴリズムは並列化計算と相性が良く, スーパーコンピュータの利用意義の高い研究となっている.

さらに, 上記の手法によって構成した統計的 CA の局所規則 (4) を用いてシミュレーションをおこない, 得られた CA モデルの再現性を確認する. ここでは 3 つのケースに対して確認する.

1 つ目は, シミュレーションの初期値をシフトされたシグモイド関数を用いる:

$$u_0(x) = \frac{\tanh((80-x)/4) + 1}{2} \quad (0 \leq x \leq L). \quad (5)$$

この初期波面の傾きは空間スケールに対して相対的にきつくなっている (図 2 赤線)。

2つ目は、階段函数

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 & (0 \leq x \leq L/4), \\ 1/2 & (L/4 < x \leq L/2), \\ 0 & (L/2 < x \leq L), \end{cases} \quad (6)$$

である (図 2 緑線)。これは不連続点を持つため衝撃波面が初期から存在するケースであるが、方程式に粘性があるために数値シミュレーションは破綻せず進むことができる。

3つ目は、区分的に直線の函数である (図 2 青線)。

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 - 2x/L & (0 \leq x \leq L/2), \\ 0 & (L/2 < x \leq L). \end{cases} \quad (7)$$

(5) と比べると傾きは緩くなっている。

また、統計的 CA 構成法によって構成された CA モデルの再現性の比較のため、ここでは上の (5), (6), (7) と同じ初期値に対して Burgers 方程式の数値解も計算する。

## 4 結果

ここでは  $M = 7$  のときの結果について述べる。 $J = 100$  セットのデータを用いると、全ての状態の三つ組み  $(a, b, c)$ ,  $a, b, c \in \{0, 1, \dots, M-1\}$  に対して、局所規則 (4) が決定可能であった。

図 3 に本手法で得られた統計的 CA モデルによるシミュレーションと Burgers 方程式の数値解をプロットした (5)。どちらの図も比較のために (3) の方法で離散化している (図 4, 5 でも同様である)。図が示すように、両方とも波面 (白と黒の境界面) の伝播速度は定量的な一致をみせている。また、統計的 CA の結果は、状態数 6 の領域が散逸によって消えたり、波面が停止したりすることはない。これは既存の手法では達成できなかったことである。

初期値 (6) の場合の結果を図 4 に表す。いずれも伝播の速い波面 (状態数 6 と 3 の境界面) が遅い波面 (3 と 0 の境界面) に到達することが見て取れる。さらに、2つの波面が合体した後は、波面の速度が早まっていることも一致している。これによって、統計的 CA シミュレーションでは3つの異なる波面の伝播速度を表現できるモデルとなっていることがわかる。そしていずれの速度も元の Burgers 方程式の伝播速度とほとんど一致しており、統計的に構成し

た CA モデルは良く Burgers 方程式の持つ性質を再現できていると言える。

初期値を (7) とした場合は、Burgers 方程式の数値解は値の傾斜が徐々に切り立ち、粘性衝撃波面を構成しようとする (図 5b)。統計的 CA シミュレーションの場合は、時間ステップが経っても状態数 0 と 1 (白と黄) の境界面と 1 と 2 (黄と橙) の境界面が動かないが、状態数 3, 4 と 5 の境界面はそれぞれ異なる速度で左方向へ動き、やがて1つの波面へと合体する。波面の固定が起きているために CA モデルは Burgers 方程式の解の挙動を完全に模倣できているとは言えないが、しかし依然としていくつもの波面の伝播速度を表現できることによって、Burgers 方程式の解の漸近状態と良く似た挙動を最終的には取ることがわかり、良い一致を与えていると言える。■

## 参考文献

- [1] A. Kawaharada and M. Iima. Constructing cellular automaton models from observation data. In 2013 First International Symposium on Computing and Networking, pp 559–562 (2013).
- [2] A. Kawaharada and M. Iima. An application of data-based construction method of cellular automata to physical phenomena. The special issue of Journal of Cellular Automata, to appear.
- [3] A. Kawaharada, E. Shoji, H. Nishimori, A. Awazu, S. Izumi and M. Iima. Cellular automata automatically constructed from a bioconvection pattern. Recent Advances in Natural Computing, Mathematics for Industry, **14** pp. 15–25 (2015).
- [4] A. Kawaharada, T. Miyaji, and N. Nakano. An analyzable method for constructing a cellular automaton from a continuous system. In 2015 Third International Symposium on Computing and Networking, pp 418–423 (2015).
- [5] A. Kawaharada, T. Miyaji, and N. Nakano. Proper choice of spatio-temporal scale and dataset subsampling for empirical CA construction. In 2015 Third International Symposium on Computing and Networking, pp 424–429 (2015).
- [6] A. Kawaharada, T. Miyaji, and N. Nakano. Analysis of a method for constructing a cellular automaton from a continuous system. Int. J. Networking and Computing **6**(2), pp 230–242 (2016).

# 共有結合性有機骨格構造体(COF)の電荷移動シミュレーション

鬼頭(西岡)宏任

名古屋大学大学院理学研究科 (現：筑波大学計算科学研究センター)

## 1 INTRODUCTION

共有結合性有機骨格構造体(COF)と呼ばれる多孔性高分子は、その構造特性(自己集合、熱安定性、軽量)と機能特性(ガス吸着貯蔵、不均一性触媒、光伝導)から大きく注目されている[1]。ポルフィリンやフタロシアニンなどの芳香族分子が連結して作られた2次元シート形状のCOFは、シート間の $\pi$ - $\pi$ 相互作用によってグラファイトのように積層する。半導体性特性を示すCOFでは、その骨格に使われた芳香族分子の $\pi$ 軌道を使って、二次元面に垂直なカラム方向に効率よく電荷が移動していると考えられているが、その詳しい実態とメカニズムは良く分かっていない。

本稿では、古典分子動力学(MD)シミュレーション、量子化学計算、キャリア移動シミュレーションを組み合わせたマルチスケールシミュレーションを用いて、COF中の電荷輸送の理論解析を行った研究成果[2]について簡単に紹介する。

## 2 移動積分の揺らぎ

本研究[2]では、p型半導体特性を示すことが実験的に確認されているTP-COF[3]を対象とした。図1(a)に示すように、TP-COFはトリフェニレンとピレンが連結したCOFで、イオン化ポテンシャルエネルギーの低いピレンユニットの方を通過して、ホールキャリアがカラム方向に移動していると考えられる。このホール移動のシミュレーションを実行するためには、カラム方向に隣接したピレンユニット間のホール移動積分値をパラメータとして見積もる必要がある。その際、シート間は $\pi$ - $\pi$ 相互作用によってスタックしているため、移動積分は構造の熱揺らぎの影響を大きく受けると

考えられる。そこでまず、TP-COFの $3 \times 3 \times 4$  スーパーセルに対し、周期境界条件と室温のNVTアンサンブルを課した古典MDシミュレーションを実行した。次に、MDシミュレーションのスナップショットに対して量子化学計算を実行し、ピレンユニット間のホール移動積分を求めた。

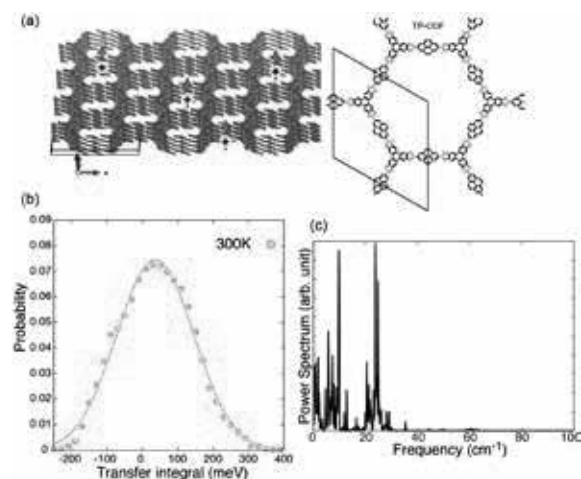


図 1(a)TP-COF (b)移動積分計算結果の分布 (c)移動積分データのパワースペクトル

移動積分の計算には、フラグメント分子軌道(FMO)法から電荷移動パラメータを計算する手法を用いた[4]。今回は、各フラグメントの電子状態計算を密度汎関数(DFT)法からDFTの精度を再現する半経験的手法である密度汎関数強束縛(DFTB)法に置き換えたFMO法[5]を用いることで、更なる計算コストの削減が実現されている。

図1(b)には、60フェムト秒毎に約492ピコ秒間、移動積分を計算した結果の分布をプロットしている。移動積分の平均値と揺らぎの標準偏差の結果は、38meVと102meVであり、構造の熱揺らぎによって移動積分が大きく揺らいでいることが分かる。またガウス関数(図1(b)の実線)でよく

フィットすることができるため、移動積分の揺らぎは正規分布に従っていると仮定できる。

図 1(c)には、移動積分時系列データに対してパワースペクトルを求めた結果である。スペクトルの強度から、 $65\text{cm}^{-1}$ 以下の遅いモードのみが移動積分の揺らぎに寄与していることが分かる。また、 $25\text{ cm}^{-1}$  辺りに顕著なピークが現れる。もう一つの顕著なピーク( $5\text{ cm}^{-1}$  辺り)は非常に遅いモードであることと、移動積分が正規分布に従うことから、移動積分の揺らぎの性質は  $25\text{ cm}^{-1}$ の振動数をもつ調和振動子を使って再現できる。

### 3 電荷移動シミュレーション

TP-COF におけるホールキャリア電荷移動シミュレーションは、上で述べた移動積分の揺らぎの効果を取り入れる必要がある。そこで以下の一次元強束縛ハミルトニアン[6]を用いて、ピレンを通過してカラム方向にホールキャリアが移動していくことをモデル化する。

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_j \alpha x_{j,1} |j\rangle \langle j| \\
 & + \sum_j [-\tau + \beta(x_{j+1,2} - x_{j,2})] (|j\rangle \langle j+1| + |j+1\rangle \langle j|) \\
 & + \sum_j \left( \frac{1}{2} m_1 v_{j,1}^2 + \frac{1}{2} m_1 (\omega_1 x_{j,1})^2 \right) \\
 & + \sum_j \left( \frac{1}{2} m_2 v_{j,2}^2 + \frac{1}{2} m_2 (\omega_2 x_{j,2})^2 \right)
 \end{aligned}$$

ここで、サイト  $j$  がカラム方向のある一つのピレンを表す。右辺第二項では、 $\omega_2=25\text{ cm}^{-1}$ の固有振動数を持つ調和振動子  $x_{j,2}$ (第 4 項)とキャリアが線形に相互作用することで、図 1(b)(c)に示した移動積分の揺らぎが引き起こされると仮定している。(その他のパラメータについては、文献[2][6]で説明されている)。

キャリア移動度は、キャリアの拡散係数  $D$  からアインシュタインの関係式  $\mu = eD/(k_B T)$  を用いて見積もることができる。そこで、一次元系の中心サイトにホールの波動関数が局在していると初期条件を設定し、波動関数がどのように拡散するかをシミュレーションする。その際、キャリア波動関数の時間発展は時間依存シュレディンガー方程式を、調和振動子の運動の時間発展は古典ニュートン方程式を解く、量子古典混合シミュレーション

シミュレーション[6]を実行する。図 2 にはキャリアの平均二乗変位の時間依存性をプロットしている。この結果は直線で良くフィットすることができ、その傾きが拡散係数となる。このシミュレーションから、 $1.93\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  という非常に高いキャリア移動度が TP-COF に対して見積もられた。TP-COF に対するキャリア移動度の実験値は報告されていないが、我々の計算値は、別の p 型半導体 COF の実験値( $>1.3\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{s}^{-1}$ )[1]と良く一致している。今後、今回の手法を、より良い半導体特性を示す COF の理論設計へ応用することを目指していく。

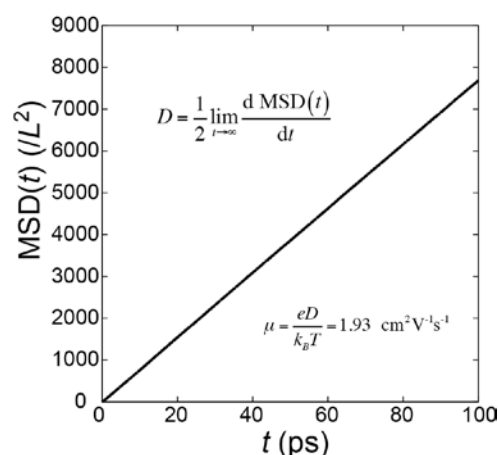


図 2 キャリアの拡散シミュレーションから得られた平均二乗変位の時間発展

### 4 ACKNOWLEDGEMENTS

本研究では、京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータ共同研究制度(若手奨励枠)を活用させて頂きました。

[1] X. Feng, et al., *Chem. Soc. Rev.* **41**, 6010 (2012)

[2] H. Kitoh-Nishioka, K. Welke, Y. Nishimoto, D. G. Fedorov, and S. Irlle (in preparation)

[3] S. Wan, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **47**, 8826 (2008).

[4] H. Kitoh-Nishioka, K. Ando, *Chem. Phys. Lett.* **621**, 96 (2015); 鬼頭(西岡) 宏任, 安藤耕司, 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.14 No.2 pp. 8-9. (2016)

[5] Y. Nishimoto, et al. *J. Chem. Theory Comput.* **10**, 4801 (2014); Y. Nishimoto, et al. *J. Chem. Phys. Lett.* **6**, 5034 (2015).

[6] A. Troisi, *Adv. Mater.* **19**, 2000 (2007)



# 理想化モデルを用いた、竜巻を模した渦の力学に関する研究

松嶋 俊樹 \*

\*京都大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻

## 1 はじめに

発達した竜巻は、渦の中心に下降流をもつような、2セル構造を持つことが知られている。そのような構造は、不安定性によって、渦の鉛直軸方向に対して左手回りの螺旋構造をもったモードや、鉛直方向にほぼ一様なモードが発達し [1], 竜巻の親渦の中に複数の子渦が含まれる多重渦構造との関連が示唆されている。そのような現象の力学を理解することを目指し、著者らは、竜巻を模した渦の数値計算のための、平らな平面の上の半無限領域において、下端で粘着境界条件を課すことが可能なスペクトル法モデルの開発を行ってきた [2, 3]。本課題では、そのような数値モデルの検証実験として行った渦輪の壁衝突の数値実験の結果を解析した。本報告では、はじめに開発した数値モデルについて簡単に説明し、次に行った解析について説明する。

## 2 数値モデルの概要

### 2.1 支配方程式

三次元非圧縮ナビエ・ストークス方程式は、ベクトル不変形で、

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} - \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} = -\nabla P - \nu \nabla \times \boldsymbol{\omega}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{u}$  は速度場、 $\boldsymbol{\omega}$  は三次元渦度場で、 $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u}$ 、 $P$  は順圧圧力関数、 $t$  は時刻、 $\nu$  は動粘性係数である。以上の方程式を、円柱座標系の領域  $r \in [0, \infty)$ 、 $\theta \in [0, 2\pi]$ 、 $z \in [0, \infty)$  において  $z = 0$  での粘着条件を課して解く。また、基底関数によって展開された速度場

を、 $C^\infty$  級条件、エネルギー有界条件を満たすようにする。非圧縮性 (2) により、速度場はトロイダルポテンシャル  $\psi$  とポロイダルポテンシャル  $\chi$  によって以下のように表される。

$$\mathbf{u} = \nabla \times (\psi \mathbf{e}_z) + \nabla \times \nabla \times (\chi \mathbf{e}_z), \quad (3)$$

半無限領域スペクトル法による数値モデルは、 $\psi, \chi, \phi = \nabla^2 \chi$  についての方程式を基礎として構築する。

### 2.2 離散化

問題領域は半無限であるため、空間離散化には無限領域のスペクトル法を用いる。まず、水平方向に対して、円柱座標系  $(r, \theta)$  における無限平面を、以下のように射影する。

$$r = 2R \sqrt{\frac{1+\mu}{1-\mu}}, \quad r \in [0, \infty), \mu \in [-1, 1]. \quad (4)$$

式 (4) を介して、変数  $\phi$  は以下のように球面調和関数展開する。

$$\phi = \sum_{m=-M}^M \sum_{n=|m|}^N \tilde{b}_n^m(z, t) P_n^m(\mu) e^{im\theta}. \quad (5)$$

係数  $\tilde{b}_n^m(z, t)$  に対して、さらに以下のような展開を考える。各  $m (m=0$  については省略) についての五重対角対称行列  $Q_{ij}^m$  を、その  $(i, j)$  成分が

$$Q_{ij}^m = \sqrt{i(i+1)j(j+1)} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (1-\mu)^2 P_i^m(\mu) P_j^m(\mu) d\mu, \\ (m \neq 0; i, j = |m|, |m|+1, 2, \dots, N), \quad (6)$$

となるように導入する。行列  $Q_{ij}^m$  の正規直交固有ベクトルと対応する固有値をそれぞれ  $\mathbf{v}_n^m$ 、 $\lambda_n^m$  ( $n = 1, 2, \dots, N-1$ ) と書き、固有ベクトルの成分を  $\mathbf{v}_n^m =$

$(v_{in}^m)$  ( $i = 1, 2, \dots, N-1$ ) と表す. これによって, 係数  $\tilde{b}_n^m(z, t)$  を以下のように固有ベクトルで展開する.

$$\tilde{\phi}_p^m(z, t) = \sum_{n=|m|}^N \sqrt{n(n+1)} \tilde{b}_n^m v_{np}^m$$

$$(p = 1, \dots, N - |m| + 1). \quad (7)$$

以上の展開を用いると, 下端の粘着境界条件の代わりに, 以下の  $\phi$  の積分制約条件が得られる.

$$\int_0^\infty \tilde{\phi}_p^m(z, t) \exp\left(-\sqrt{\frac{\lambda_p^m}{4R^2}} z\right) dz = 0 \quad (8)$$

鉛直方向の離散化には, 水平方向と類似の以下の射影

$$z = H \frac{1+x}{1-x}, \quad z \in [0, \infty), x \in [-1, 1]. \quad (9)$$

を行った後, チェビシエフ多項式を用いる. 詳細は省略するが, 論文 [3] では, 鉛直方向の展開を与えている. また, 粘性項に陰的解法を用いて時間積分する際の精度を改良するための反復手法を導入し, 時間離散化した偏微分方程式が高精度に解くことができることを示している.

## 3 結果

### 3.1 数値実験

数値モデルのパフォーマンスを評価するため, 三次元的に屈曲した渦輪の水平な壁との衝突の数値実験を行う. 必要な計算資源量を削減するため, 球面調和関数展開において, 方位角波数の 5 の倍数のモードだけを考慮するセクターモデルを用いる. 水平方向に用いた写像における球の半径を  $R = 0.55$ , ルジャンドル多項式およびルジャンドル陪関数展開の切断次数を  $N = 745$ , 分点数を  $J = 750$ , 方位角方向の分点数を  $2J/5 = 300$  としている. 鉛直方向に用いた写像のパラメータを  $H = 1.2$ , 切断波数を  $L = 633$ , 分点数を  $K = 640$ , 時間積分の時間ステップを  $\Delta t = 0.0125$ , 動粘性係数を  $\nu = 1.45 \times 10^{-5}$  とする. 粘性項と非線形項の時間離散化にはそれぞれ BDF2 と BX2\* を用いた. また, 境界条件は不透過条件と粘着境界 (すなわち積分制約条件) を課した. 数値コードは MPI を用いて並列化した. このとき, 各プロセスでのデータの分割において, 波数空間では各方位角波数のデー

タに対してブロックサイクリック分割を採用し, 実空間では各動径方向の分点のインデックス  $j$  のデータに対してブロック分割を採用した.

### 3.2 解析と可視化

渦の時間発展を追跡するため, 粒子を用いた解析を行う. 時刻  $t = 1$  間隔で出力された三次元速度場と渦度場のデータ (ただし, 領域  $r \leq 2, z \leq 2$  に限定) を用いて, 初期に空間的にランダムに配置した 20000 個の粒子を移流させる. さらに, 移流させた各粒子から出発し, 渦度ベクトルの方向へと辿ることによって, 渦線を構成する. 渦線をこのように構成すると, 非粘性の場合, 流体力学に関するヘルムホルツの第二法則より, 各渦線が時刻に依存せず常に同じ流体粒子群から構成される. 今の場合は粘性流体を考えているため, 渦線を構成する粒子は入れ替わるが, 少なくとも渦線の一点で束縛される. したがって, 時間局所的には, 渦線をトレーサーと見て, 渦の追跡を行うことができる. 粒子の移流計算と渦線の構成には, ParaView (<http://www.paraview.org/>) をシステム D の CRAY XC30 向けにクロスコンパイルして用いた.

初期の渦線と  $y = \tan(18^\circ)x$  面の方位角渦度を図 1 に示した. 初期の渦輪はほぼ軸対称な分布であるが, 方位角波数 5 の倍数において, 有限振幅の擾乱を入れている. 図は省略するが, 時間が経つと, 渦輪は自己誘導速度で壁に衝突し, 二次渦輪が生成される. その後, 二次渦輪は初期に与えた主渦輪の周りを回りこんだ後,  $\theta = 18^\circ + 72^\circ \times i$  ( $i = 0, 1, \dots, 4$ ) のまわりで主渦輪の下に潜り込み,  $\theta = 36^\circ + 72^\circ \times i$  ( $i = 0, 1, \dots, 4$ ) では中心軸へ移流されて主渦輪から離れる. 結果として, 図 2 のように花びら状の構造を作りつつ, 流れは複雑になっていく.

## 4 まとめ

開発した半無限領域のスペクトル法モデルを用いた数値実験として渦輪の壁衝突の数値実験を行い, その解析を行った. これらの詳細について記述した論文 [3] については現在印刷中である. 今後は, 開発した半無限領域のスペクトル法モデルを用いて, 竜巻を模した渦の三次元の数値実験を行う予定である.

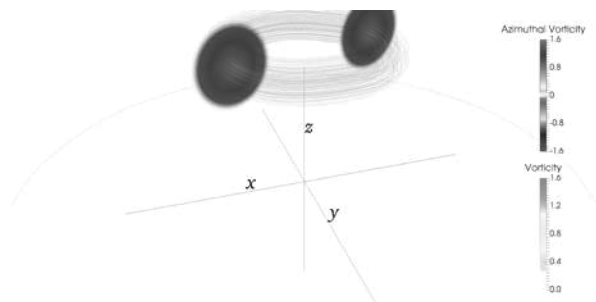


図 1: 時刻  $t = 0$  における渦度の大きさを色で示した三次元渦線と,  $y = \tan(18^\circ)x$  面の方位角渦度. 図の中の黒点は,  $(r, \theta, z) = (2, 2\pi i/1500, 0)$  ( $i = 0, 1, \dots, 1499$ ) を示している.

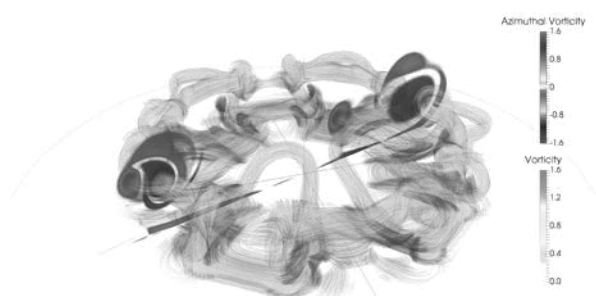


図 2: 時刻  $t = 200$  であることを除き図 1 と同じ.

謝辞 本課題は, 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・女性研究者奨励枠) と, 特別研究員奨励費 (No. 15J01380) の助成を受けたものです.

## 参考文献

- [1] 松嶋 俊樹・石岡 圭一, 2014: サリバン渦の安定性について, 日本流体力学会誌ながれ **33**, 47-60.
- [2] 松嶋 俊樹・石岡 圭一, 2016: 半無限領域のスペクトル法による渦輪の壁衝突の高解像度計算, 日本流体力学会誌ながれ **35**, 89-92.
- [3] Matsushima, T. and Ishioka, K., 2016: A highly accurate spectral method for the Navier-Stokes equations in a semi-infinite domain with flexible boundary conditions, *Fluid Dynamics Research*, in press

# オフロード路面における車輪の走行性能解析

## 惑星ローバ用車輪におけるラグ周辺部分のミクロな砂の挙動解析

西山健太\*

\*京都大学農学研究科地域環境科学専攻

### 1 緒言

車輪と土の相互作用問題は、様々な要因が介在する複雑な研究課題であり、これまでは実験的あるいは半経験的手法により解析されてきた。近年は数値解析手法による車輪の走行予測が試みられている。高精度な走行予測は、エネルギー効率の高い車輪の開発や、車両による車輪の駆動力制御手法の確立のために必要と考えられる。

本研究の目的はオフロード路面における車輪の走行を高精度にシミュレーションすることである。特にラグを有する惑星ローバ用の金属製弾性車輪のけん引性能について、ラグ間やラグ近傍の応力状態を把握してミクロな観点から検討することを目指す。これはラグの数・幅・長さ等のラグ形状を決定する際に、車輪全体に発生するマクロな走行性能の観点から議論する既往の研究では不十分なことによる。

### 2 解析手法

車輪を有限要素法 (FEM)、土を離散要素法 (DEM) により 2 次元でモデル化し、陽解法による数値積分を用いて解析を行う。車輪にけん引負荷とトルクを加えることで車輪の走行が制御され、1 回の走行中は一定の滑り率に維持される。また、走行性能は定常状態で走行している区間の平均を取り、滑り率に対する推進力、けん引力、走行抵抗、沈下量で評価される [1]。なお、ローバ用の車輪の多くは円筒形状であり 3 次元的なラグパターンを持たず、2 次元解析でも十分有用な結果が得られると考えている。

### 3 解析条件

ドイツ航空宇宙センター (DLR) で実施された、珪砂を充填した土槽での火星ローバ用車輪の走行試験 [2] を参考に解析条件およびパラメータを決定した。供試車輪は、B3 車輪と呼ばれる弾性車輪と、B6 車輪と呼ばれる剛性車輪の 2 種類とした。車輪は直径 300 mm、ラグは 12 個のタブルグローサが等間隔に配置されラグ高さ 8 mm、厚さ 1.2 mm、2 つのラグの間隔は 10 mm である。また、DEM の円要素の直径は 3, 2.5, 2 mm (混合個数比 1:2:3)、要素数 47453 個、時間刻み  $1.25 \times 10^{-6}$  s とし解析を実施した。なお、DEM 要素直径はパソコンによる解析 [1] で用いた直径の半分とした。

### 4 解析結果と考察

#### 4.1 走行後の状態

図 1 に走行後の車輪と土の変形挙動の結果例を示す。ラグの間に入り込む粒子数が従来より増加し、より詳細な変形状況が表現できている。また、パソコンによる解析では見られなかったが、轍に車輪のラグによる周期的な跡が明確に残されていることが確認できる。そのため、轍の形成については、ラグ形状との関連で要素径を細かくする必要性がうかがえる。

#### 4.2 走行性能の結果

マクロな車輪全体に働く走行性能の実験結果を図 2、解析結果を図 3 に示す。B3 (弾性) 車輪の方がけん引力が高いなど、両者間で類似した傾向が見受けられ、妥当な解析が実施できたと考えられる。

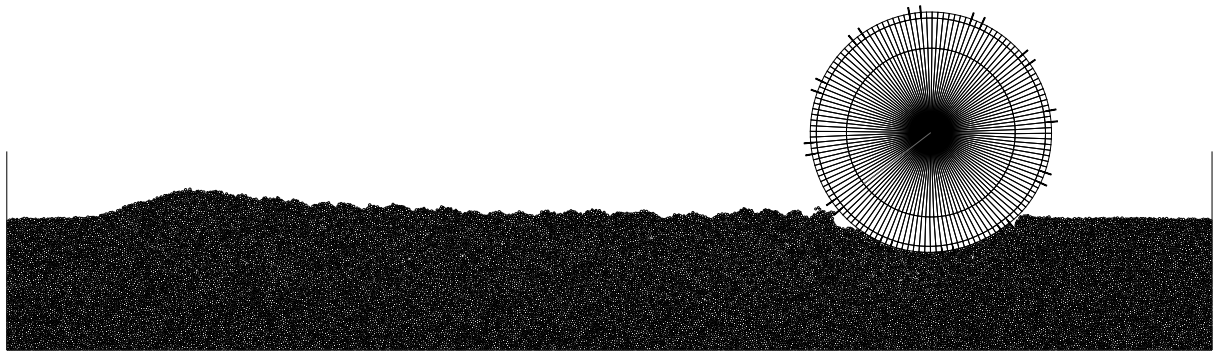


図 1: 走行後の車輪と土の変形挙動 ( B6 車輪, 滑り率 60 % )

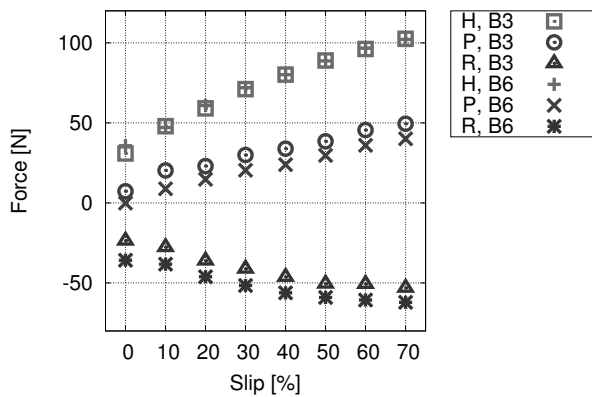


図 2: 実験結果 ( 推進力  $H$ , けん引力  $P$ , 走行抵抗  $R$  ) [2]

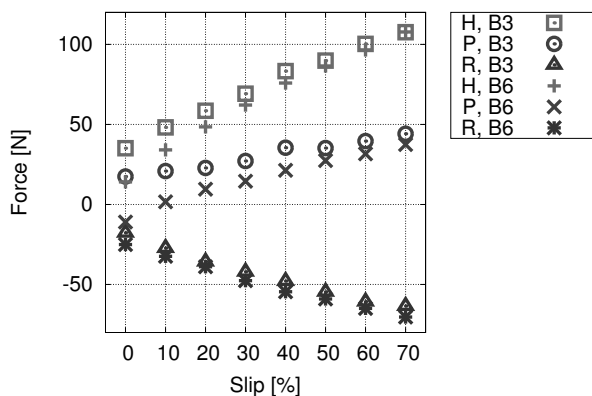


図 3: 解析結果 ( 推進力  $H$ , けん引力  $P$ , 走行抵抗  $R$  )

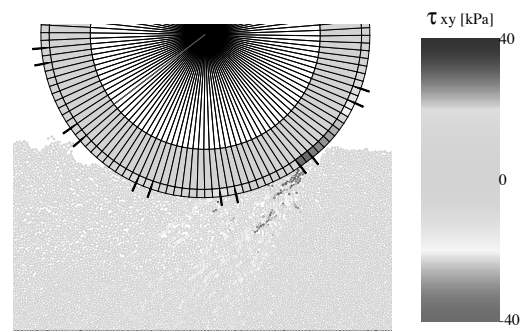


図 4: せん断応力  $\tau_{xy}$  の例 ( B6 車輪, 滑り率 60 % )

### 4.3 応力状態

図 4 に応力解析の例を示す。ラグを起点に車輪後方へと土中に局所的な応力鎖が発生していることが明らかである。

### 参考文献

- [1] K. Nishiyama, H. Nakashima, T. Yoshida, T. Ono, H. Shimizu, J. Miyasaka, K. Ohdoi. 2D FE-DEM analysis of tractive performance of an elastic wheel for planetary rovers. *Journal of Terramechanics* 64 (2016) 23-35.
- [2] M. Scharringhausen, D. Beermann, O. Kromer, L. Richter. Single wheel tests for planetary applications at DLE Bremen. 11th European Regional Conference of the International Society for Terrain-Vehicle Systems – Bremen, October 5-8 2009.

### 謝辞

本研究は、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) によるものである。記して関係各位に厚く御礼申し上げる。

# 非線形有限要素法による鉄筋コンクリートの 大規模破壊シミュレーション

車谷 麻緒\*

\*茨城大学 工学部 都市システム工学科

## 1 はじめに

土木構造物の設計や維持管理の高度化において、鉄筋コンクリートの力学性状の評価は重要である。鉄筋コンクリートは材料挙動のまったく異なるコンクリートと鉄筋で構成されており、補強材である鉄筋の配置（配筋）によって異なる破壊モードを示す。鉄筋コンクリートの力学性状を評価するには、材料のモデル化やパラメータを変えずに、配筋の違いのみを考慮して、様々な破壊モードを再現できる数値解析手法が必要になる。

配筋の違いのみを考慮して、鉄筋コンクリートの様々な破壊モードを再現するには、鉄筋コンクリートの平均的な挙動を考えるのではなく、コンクリートのひび割れ進展挙動と鉄筋の塑性変形を別々にモデル化する必要がある。さらに、配筋などの内部構造のみを考慮して、鉄筋コンクリートの破壊挙動を再現するには、メッシュサイズの小さい有限要素モデルが必要になるため、メッシュサイズに依存しないモデル化の適用と解析プログラムの高度化および数値解析の高速化が必須となる。近年の計算機ハードウェアの急速な発達により、大規模な数値シミュレーションを行える環境は整いつつある。しかし、そのハードウェア環境を利用して、鉄筋コンクリートの破壊シミュレーションを高精度に行える解析手法が確立されているとは言い難い。

そこで本研究では、コンクリートのひび割れ進展挙動のモデル化にコンクリートの破壊力学に基づく修正 von-Mises 損傷モデル [1] を適用し、鉄筋の塑性変形のモデル化に von-Mises 塑性モデルを適用することにより、鉄筋コンクリートの破壊挙動を 3 次元で詳細に再現できる数値解析手法を構築する [2]。さ

らに、領域分割と MPI 並列化を行うことにより、大規模シミュレーションに応用可能な方法に拡張する。提案手法の有効性と妥当性を検証するため、せん断補強筋 10 本を有する RC はりの 4 点曲げ試験に本手法を適用し、メッシュサイズによる影響と実験結果の再現性について検討する。

## 2 数値解析手法

本研究では、鉄筋コンクリートの 3 次元破壊挙動を詳細にシミュレートするために、コンクリートと鉄筋の材料挙動を別々にモデル化する。以下に、コンクリートと鉄筋の材料モデルを簡単に示す。

### 2.1 コンクリートの材料モデル

コンクリートのひび割れ進展挙動のモデル化には、コンクリートの破壊力学に基づく修正 von-Mises 損傷モデル [1] を適用する。このモデルは、コンクリートの破壊進行過程における結合力と開口変位の関係を連続体損傷モデルに応用したもので、コンクリートの破壊力学の特徴である破壊エネルギーの定義も満足するモデルである。これを通常の有限要素法に導入することにより、コンクリートのひび割れ進展挙動を再現する。

多次元での損傷を評価するに際して、ひずみテンソルの不変量を用いた等価ひずみを用いる。具体的には、次式で与えられる修正 von-Mises 基準に基づく等価ひずみ [3] を採用する。

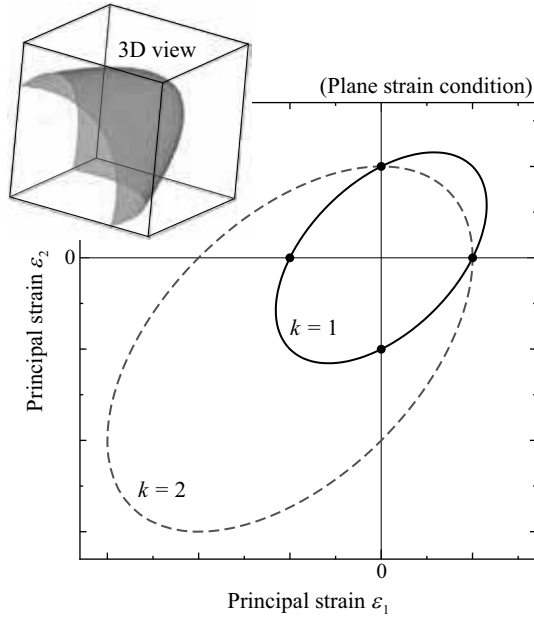


図 1: 2次元および3次元での主ひずみ空間における等価ひずみの等値面

$$\varepsilon_e = \frac{k-1}{2k(1-2\nu)} I_1' + \frac{1}{2k} \sqrt{\left(\frac{k-1}{1-2\nu} I_1'\right)^2 + \frac{12k}{(1+\nu)^2} J_2'} \quad (1)$$

上式において、 $\nu$ はポアソン比、 $k$ は圧縮に強く引張に弱い特性を付与できる圧縮引張強度比である。 $I_1'$ はひずみテンソルの第1不変量、 $J_2'$ は偏差ひずみテンソルの第2不変量である。

3次元および2次元の主ひずみ空間に $\varepsilon_e$ の等値面をプロットした例を図1に示す。圧縮引張強度比 $k$ を用いて引張破壊と圧縮破壊を考慮したことにより、圧縮に強く引張に弱いというコンクリートの力学特性を表現できることが分かる。

損傷は回復しないこととし、変形履歴における等価ひずみの最大値を $\kappa \geq 0$ で表すことにより、等方性の損傷モデルは次式で与えられる。

$$\boldsymbol{\sigma} = (1 - D(\kappa)) \boldsymbol{c} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2)$$

$D(\kappa)$ は損傷の度合いを $0 \leq D \leq 1$ で表す損傷変数であり、次式で表される。

$$D(\kappa) = 1 - \frac{\kappa_0}{\kappa} \exp\left(-\frac{E\kappa_0 h_e}{G_f} (\kappa - \kappa_0)\right) \quad (3)$$

ここで、 $\kappa_0$ は損傷開始時の等価ひずみである。

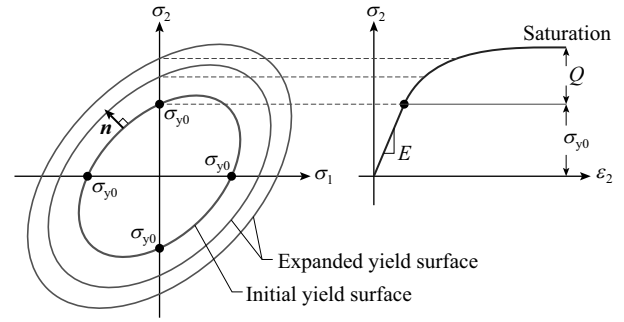


図 2: 非線形等方硬化則に基づく von-Mises 塑性モデル

## 2.2 鉄筋の材料モデル

本研究では、鉄筋の構成モデルに、図2に示すような、非線形等方硬化則に基づく von-Mises 塑性モデルを適用する。

次に示すように、全ひずみは弾性ひずみと塑性ひずみに加算分解され、応力はそのうちの弾性成分のみが寄与するものとする。

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p \quad (4)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{c} : \boldsymbol{\varepsilon}^e = \boldsymbol{c} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p) \quad (5)$$

ここで、 $\boldsymbol{\varepsilon}$ は微小ひずみテンソル、 $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ は弾性ひずみテンソル、 $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ は塑性ひずみテンソル、 $\boldsymbol{\sigma}$ はコーシー応力テンソル、 $\boldsymbol{c}$ は弾性係数テンソルである。

図2に示すような、指数関数で与えられる非線形等方硬化則を採用することにより、降伏関数 $f \leq 0$ は次式で与えられる。

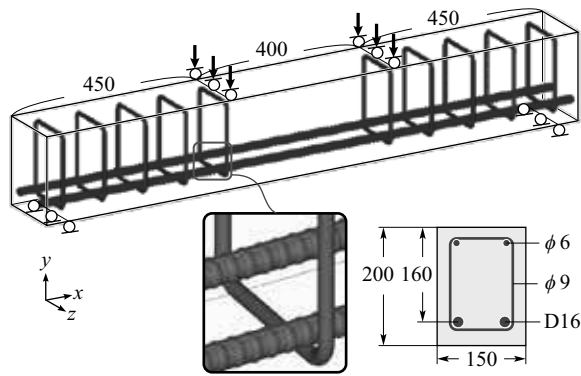
$$f = \sigma_v - \sigma_{y0} - Q(1 - e^{-bp}) \quad (6)$$

ここで、 $\sigma_v$ は von-Mises の相当応力、 $\sigma_{y0}$ は初期降伏応力、 $p$ は相当塑性ひずみ、 $Q$ と $b$ は塑性硬化を表すためのパラメータである。塑性流動則は関連流れ則に従うものとし、次式で与えられる。

$$d\boldsymbol{\varepsilon}^p = dp \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = dp \boldsymbol{n} \quad (7)$$

## 3 数値解析例

本解析手法においては、損傷モデルを用いて、コンクリートのひび割れ進展挙動をモデル化している。既往の損傷モデルを用いた破壊シミュレーションで



Material parameter of steel

$E$	$\nu$	$\sigma_{y0}$	$Q$	$b$
200 GPa	0.3	380 MPa	150 MPa	15

Material parameter of concrete

$E$	$\nu$	$\kappa_0$	$G_f$	$k$
29 GPa	0.2	0.0001	0.1 N/mm	20

図3: せん断補強筋10本を有するRCはりの解析条件と材料パラメータ

は、解析結果がメッシュの寸法や分割に依存することが知られており、これを回避するために特別なモデル化を行うことが多い。筆者らの既往の研究 [1, 2] では、鉄筋の塑性変形が生じない問題を対象に、鉄筋コンクリートのひび割れ進展挙動がメッシュサイズに依存しないことを確認している。以下では、コンクリートのひび割れ進展と鉄筋の塑性変形が生じるRCはりの破壊シミュレーションを対象に、メッシュサイズの影響と実験結果の再現性について検討する。

### 3.1 解析対象と条件

解析対象は、図3に示すような、せん断補強筋（スターラップ）を10本有する曲げ破壊先行型のRCはりの4点曲げ試験である。主鉄筋はD16の異形鉄筋とし、数値解析では異形鉄筋の幾何形状を忠実に有限要素メッシュに反映させることとする。問題の対称性を考慮し、1/4モデルを解析対象とする。1/4モデルの要素数を約50万、100万、200万要素とし、有限要素には1次の四面体要素を用いる。解析条件は、強制変位12mmを500ステップで載荷する変位制御試験とする。

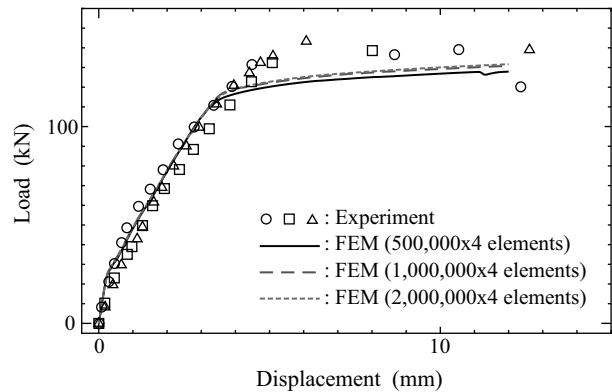


図4: メッシュサイズの異なる有限要素モデルに対する荷重-変位関係の比較

本研究では、異形鉄筋の節が表現できる程度の小さなメッシュサイズを設定し、異形鉄筋の幾何形状を詳細にモデル化している。そのため、コンクリートと鉄筋の境界面については、特殊な界面要素や付着モデルを用いずに、境界面に位置する有限要素の応力集中によって、境界面から損傷が発生し、付着力が徐々に消失する過程を直接的に再現する。

さらに、図3と同条件のRCはり試験体を作成し、4点曲げ試験を行い、解析結果と実験結果とを比較する。

### 3.2 解析結果と考察

解析結果として、荷重-変位関係を比較したものを図4に示す。メッシュサイズの異なる3ケースの結果はほぼ一致しており、メッシュサイズの相違が荷重-変位関係に与える影響は非常に小さいといえる。解析結果は実験結果ともほぼ一致しており、本手法による破壊シミュレーションの妥当性が見て取れる。

次に、ひび割れの発生と進展の相違について検討する。モデル表面での等価ひずみの分布を比較したものを図5に示す。提案手法による3次元破壊シミュレーションは、ひずみの局所化によりひび割れを再現する方法であるので、ひずみの分布がひび割れの分布に対応する。結果を見て分かるように、メッシュサイズが違っていても、ひび割れの本数や経路はほとんど変化していないことが分かる。図6は実験結果におけるひび割れの分布を表している。図5と図



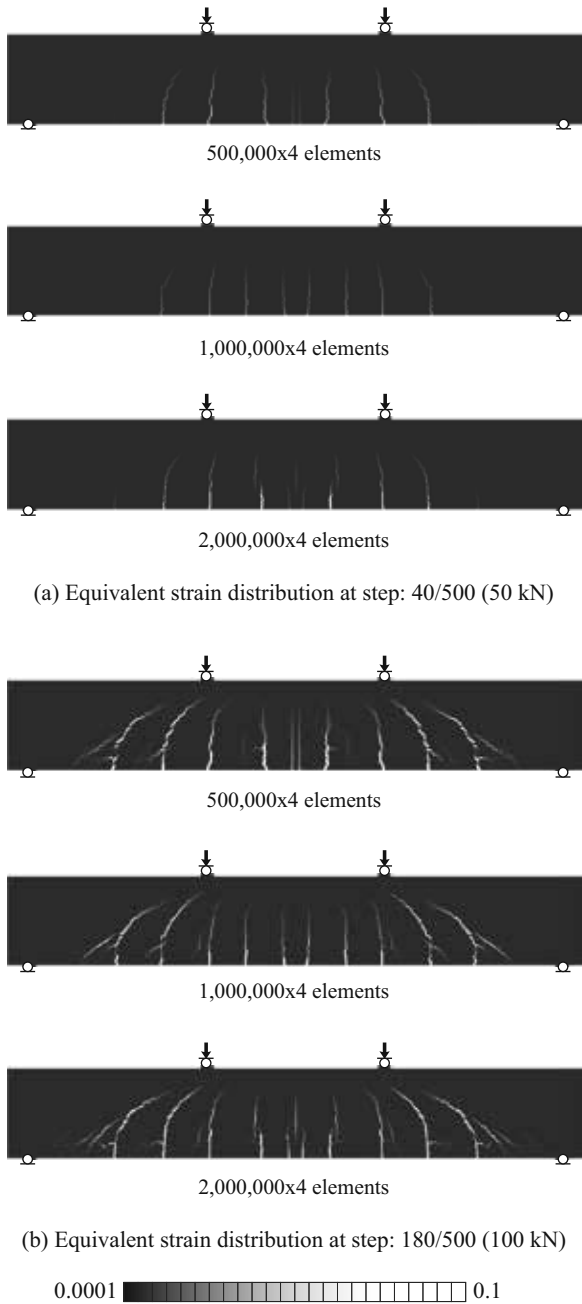


図5: メッシュサイズの異なる有限要素モデルに対するひび割れ分布の比較

6を比較すると、数値解析から得られたひび割れ分布は実験とほぼ同様の分布であることが分かる。

図7は、モデル内部における損傷（ひび割れ）の分布を3次元で可視化した結果である。本研究では、異形鉄筋の幾何形状を忠実に考慮してメッシュ分割を行っているため、提案手法による破壊シミュレ

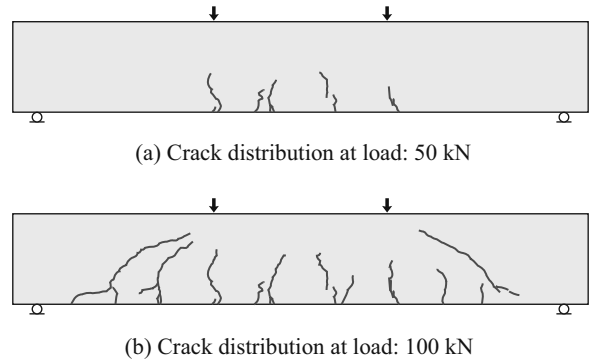


図6: 実験結果におけるひび割れの分布

シオンは、RCはりの表面から生じる損傷（ひび割れ）に加えて、RCはり内部の鉄筋の表面から発生・進展する損傷（ひび割れ）までを詳細に再現できる方法であることが分かる。

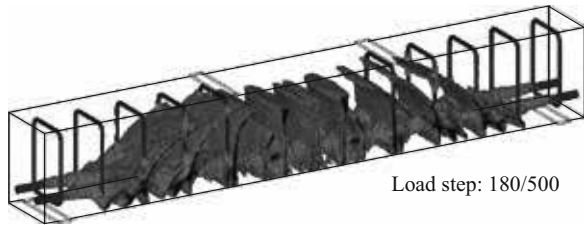
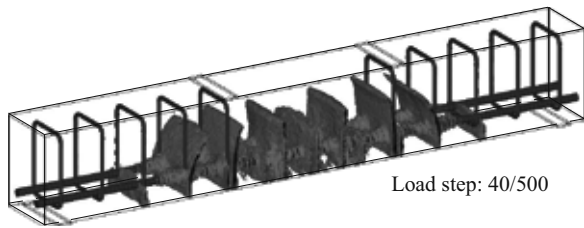
図8は、数値シミュレーションに要した計算時間を示している。3ケースともに、領域分割を行い、128コアによるMPI並列を適用している。計算時間はほぼ線形的に増加しており、さらに多くのコアを使用することにより、計算時間を短縮することができる。

## 4 おわりに

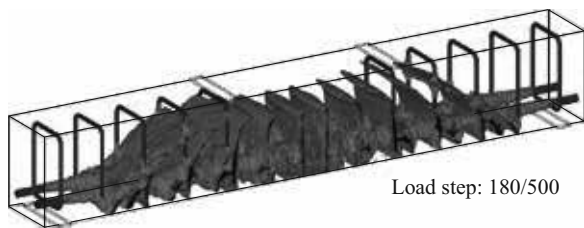
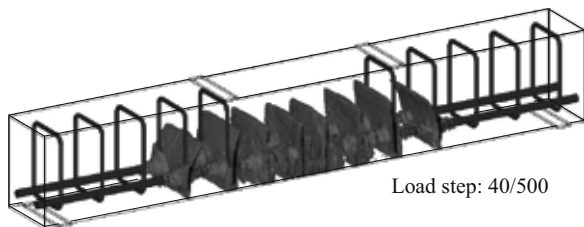
本研究では、コンクリートのひび割れ進展挙動をモデル化に修正 von-Mises 損傷モデルを適用し、鉄筋の塑性変形に von-Mises 塑性モデルを適用することにより、鉄筋コンクリートの3次元破壊シミュレーション手法を構築した。さらに、領域分割とMPI並列化を行うことにより、大規模破壊シミュレーションにも応用可能な方法に拡張した。

コンクリートひび割れ進展と鉄筋の塑性変形が顕著に表れるRCはりの破壊シミュレーションに本手法を適用したところ、メッシュサイズに依存することなく、実験結果と同様の結果が得られることを示した。今後は、結果をまとめて、学術誌に投稿し、研究成果を発信していく予定である [4]。

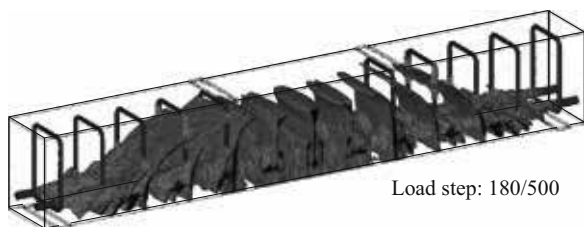
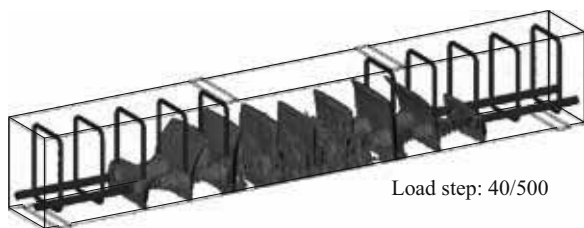
謝辞： 本研究を進めるにあたり、京都大学学術情報メディアセンターならびにクレイ・ジャパン・インクの方々には、プログラムの高度化・並列化に多大なご協力をいただきました。ここに記して、感謝の意を表します。



(a) 500,000x4 elements



(b) 1,000,000x4 elements



(c) 2,000,000x4 elements

図 7: 有限要素モデルの内部における 3 次元損傷分布

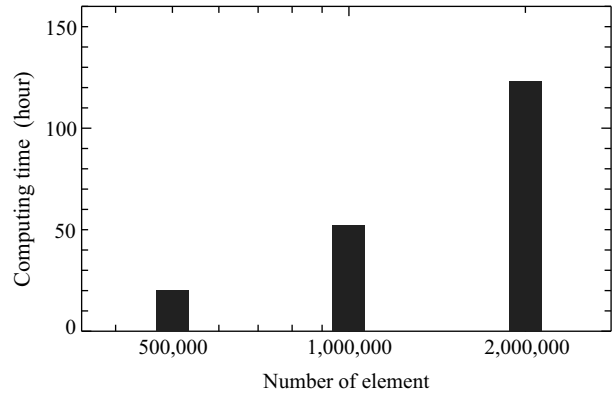


図 8: メッシュサイズの異なる有限要素モデルに対する計算時間の比較

## 参考文献

- [1] 車谷麻緒, 寺田 賢二郎, 加藤準治, 京谷孝史, 檜山和男, 「コンクリートの破壊力学に基づく等方性損傷モデルの定式化とその性能評価」, 日本計算工学会論文集, pp.20130015, (2013).
- [2] 車谷麻緒, 根本優輝, 相馬悠人, 寺田 賢二郎, 「コンクリートの破壊力学を考慮した鉄筋コンクリートの 3 次元破壊シミュレーションとその性能評価」, 日本計算工学会論文集, Vol.2016, pp.20160004, (2016).
- [3] J.H.P. de Vree, W.A.M Brekelmans, M.A.J. van Gils, 「Comparison of nonlocal approaches in continuum damage mechanics」, *Computers and Structures*, **55**, pp.581–588 (1995).
- [4] M. Kurumatani, Y. Soma, S. Abe, 「Fracture simulation of reinforced concrete using an isotropic damage model based on fracture mechanics」, *12th World Congress on Computational Mechanics*, (2016).

# 津波流体力による構造物の破壊過程を考慮した 構造流体連成解析

高瀬 慎介\*

\*東北大学大学院 工学研究科

## 1 はじめに

災害大国である我が国では、数多くの自然災害が発生し、大きな社会問題になっている。これらの自然災害による被災規模を適切に把握し、被災状況を軽減する方策を事前に提案する手法として、数値シミュレーションによる被害予測が行われつつある。

そこで本研究では、これらの自然災害の中でも津波漂流物および流体力による構造物の破壊に着目する。すなわち、津波流体力および漂流物の衝突による構造物の変形・破壊過程とその過程がさらに2次的な構造物被害を引き起こす災害の解析手法の開発を行う。解析手法として、流体力の計算には安定化有限被覆法、構造物の衝突計算には個別要素法を用い、相互の連成解析手法を構築する。現在、安定化有限被覆法による計算は、MPIにより並列計算が行われているが、衝突計算部分の個別要素法は、並列計算がされておらず、その部分が大規模化へのボトルネックになっている。非並列部分のMPIによる並列化が可能になれば、実際の条件に近い津波被害予測解析が可能となり、工学的にも有効な被害予測手法になる。

## 2 流体の数値解析手法

### 2.1 有限被覆法

有限被覆法 [1] (FCM) は、近似関数が数学領域  $\Omega^M$  と支配方程式が満たされるべき物理領域  $\Omega^P$  を独立して定義する。そして、FCM では有限要素法 (FEM) における形状関数の代わりに、解析対象となる物理領域とは独立な PU 条件 (Partition of Unity) を満たす近似関数 (以下、PU 重み関数) を数学被覆に導入

し、この数学被覆と物理領域の交わりを物理被覆として定義する。物理被覆には、物理変数を近似するための被覆関数と呼ばれる未知パラメータを含む関数を導入する。被覆関数には、PU 重み関数との積により構成される基底関数が一次独立性を満たす限り任意の関数形を利用できるが、本研究では、定数項のみを未知パラメータとして用いることにする。

本研究では、FCM の物理要素の基本形状としては1次の四面体要素を用いることにする。そして、被覆関数は定数項のみとするので、本研究における FCM の物理要素は、必然的に FEM における1次の四面体有限要素と等価なものとなる。ただし、FCM では流体の数学領域内に構造物が存在してもよく、流体の物理要素の境界は数学要素と独立に動くことができる。この特徴を利用して、構造物の境界位置を正確に考慮したうえで流れと構造物の剛体運動の相互作用を評価可能な数値解析手法を構築する。なお、流体と構造物の境界位置は、構造物表面をゼロとする距離関数である Levelset 関数作成し、流体領域の定義を行っている。

### 2.2 流体に関する定式化

本研究で用いる支配方程式は、非圧縮粘性流体における Navier-Stokes の運動方程式と連続式で以下のように表される。

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \mathbf{f} \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, p) = \mathbf{0} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

ここで、 $\rho$  は密度、 $\mathbf{u}$  は流速ベクトル、 $p$  は圧力、 $\mathbf{f}$  は物体力ベクトル、 $\boldsymbol{\sigma}$  は応力テンソルである。また、

Newton 流体を仮定し、構成則には次式を用いる。

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \quad (3)$$

ここで、 $\mathbf{I}$  は 2 階の単位テンソル、 $\mu$  は粘性係数であり、 $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$  は次式で定義される変形速度テンソルである。

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T) \quad (4)$$

### 2.3 安定化有限被覆法

3 次元流れ場の支配方程式 (1) に対して有限被覆法を用いた SUPG/PSPG 法 [2],[3] を適用すると、次式のような安定化有限被覆法による離散化方程式が得られる。

$$\begin{aligned} & \rho \int_{\Omega^p} \mathbf{w}^h \cdot \rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}^h}{\partial t} + \mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{u}^h - \mathbf{f} \right) d\Omega \\ & + \int_{\Omega^p} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{w}^h) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^h, p^h) d\Omega + \int_{\Omega^p} q^h \nabla \cdot \mathbf{u}^h d\Omega \\ & + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega_e^p} \left\{ \tau_{\text{supg}} \mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{w}^h + \tau_{\text{pspg}} \frac{1}{\rho} \nabla q \right\} \\ & \cdot \left\{ \rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}^h}{\partial t} + \mathbf{u}^h \cdot \nabla \mathbf{u}^h - \mathbf{f} \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}^h, p^h) \right\} d\Omega \\ & + \sum_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega_e^p} \tau_{\text{cont}} \nabla \cdot \mathbf{w}^h \rho \nabla \cdot \mathbf{u}^h d\Omega \\ & + \int_{\Gamma_g} \bar{p}(\mathbf{u}^h - \bar{\mathbf{u}}^h) \cdot \mathbf{w}^h = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 $\Omega^p$  は Navier-Stokes 方程式の物理領域、 $\mathbf{u}^h$ 、 $p^h$  は、それぞれ速度と圧力の有限要素近似式、 $\mathbf{w}^h$ 、 $q^h$  は、それぞれ運動方程式と連続式に対する重み関数の近似式、 $\bar{p}$  はペナルティ一定数、 $\bar{\mathbf{u}}^h$  はペナルティ一境界面での速度である。安定化項である第 4,5 項は要素ごとに定義される不連続量であるため、要素ごとの領域  $\Omega_e^p$  での積分の総和となる。ここで、 $e$  は要素番号、 $n_{el}$  は要素数である。また、第 4 項は移流の卓越に対して安定化を施す SUPG 項、および圧力振動を回避するための PSPG 項であり、第 5 項は自由表面の数値不安定性を回避するための衝撃捕捉 (Shock-Capturing) 項 [4]、ペナルティ項は構造壁面上での Dirichet 型境界条件を考慮するために付加したものである。また、 $\tau_{\text{supg}}$ 、 $\tau_{\text{pspg}}$ 、 $\tau_{\text{cont}}$  は、すべて安定化パラメータである。

### 2.4 Phase-field 法を用いた界面捕捉

本研究では、砕波等の複雑な自由表面形状を表現する必要があるため、固定メッシュを用いた Euler 的手法の 1 つである Phase-field 法を採用することにする。Phase-field 法では、次式に示す保存形式に修正された Allen-Cahn 型移流方程式 [5] を解くことで自由表面位置を決定する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \frac{\epsilon}{\delta} \nabla \cdot (\delta \nabla \phi) - F_a, \quad (6)$$

$$F_a = \phi(1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$$

ここで、 $\epsilon$  は移動度、 $\delta$  は界面領域の代表幅である。また、 $\phi$  は Phase-field 変数を表し、気体であれば 0.0、液体であれば 1.0、自由表面上であれば 0.5 とするものとする。そして、各要素における流体の密度  $\rho$  と粘性係数  $\mu$  は、液体 (水) と気体 (空気) の密度  $\rho_l$ 、 $\rho_g$  と粘性係数  $\mu_l$ 、 $\mu_g$ 、Phase-field 関数  $\phi$  を用いて次式のように求められる。

$$\rho = \rho_l \phi + \rho_g (1 - \phi) \quad (7)$$

$$\mu = \mu_l \phi + \mu_g (1 - \phi) \quad (8)$$

式 (6) に対して、SUPG 法に基づく安定化有限要素法を適用し、解析を行っている。詳しい定式化については、文献 [6] を参照されたい。

## 3 構造の数値解析手法

### 3.1 個別要素法を用いた剛体要素

球要素を用いる個別要素法 [7] では、球要素を剛結することで複雑な剛体モデルを表現することが可能である。このとき、剛体を構成する球要素がそれぞれ個別に接触判定を行っており、球要素ごとに計算された接触点と接触力の情報を剛体の重心に作用する力に換算することで剛体の運動を表現している。すなわち、剛体要素  $g$  の重心に関する次式の運動方程式を解く。

$$\frac{d(m_g \mathbf{v}_g)}{dt} = \mathbf{F}_g \quad (9)$$

$$\frac{d(\mathbf{I}_g \boldsymbol{\omega}_g)}{dt} = \mathbf{M}_g \quad (10)$$

ここで、 $m_g$  は剛体の質量、 $\mathbf{v}_g$  は剛体の速度ベクトル、 $\mathbf{I}_g$  は慣性モーメントテンソル、 $\boldsymbol{\omega}_g$  は剛体の角速度ベクトルである。重心に作用する力  $\mathbf{F}_g$  及びモーメ

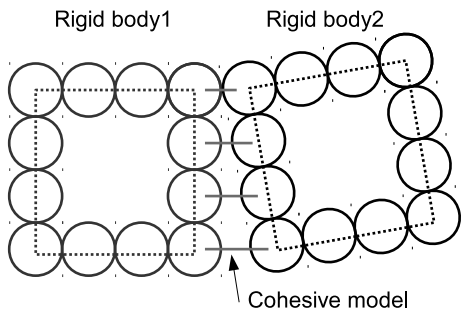


図 1: Cohesive model による DEM 剛体モデルの連結

ント  $\mathbf{M}_g$  は剛体を構成する球要素  $i$  に対して接触しているすべての要素に関する接触力の総和として以下のように書き下せる。

$$\mathbf{F}_g = \sum_i (\mathbf{F}_n + \mathbf{F}_s) \quad (11)$$

$$\mathbf{M}_g = \sum_i (\mathbf{N} \times \mathbf{F}_s) \quad (12)$$

このとき、 $\mathbf{x}_i$  を球要素  $i$  の重心座標、 $\mathbf{x}_g$  を剛体の重心座標として  $\mathbf{N} = (\mathbf{x}_i + r_i \mathbf{n}) - \mathbf{x}_g$  である。なお、 $r_i$  は球要素  $i$  の半径、 $\mathbf{n}$  は球要素  $i$  の重心から接触している球要素の重心へと向かう法線方向の単位ベクトルである。また、本研究では、球要素は剛体モデルの表面にのみ配置し、計算負荷を軽減している。剛体の姿勢管理には、クォータニオン（四元数）を導入している。

式 (9) から、時間ステップ  $n$  と時間ステップ  $n+1$  における剛体の速度ベクトルを  $\mathbf{v}_g^n$ 、 $\mathbf{v}_g^{n+1}$  とすると、

$$\mathbf{v}_g^{n+1} = \mathbf{v}_g^n + (\mathbf{F}_g/m_g)\Delta t \quad (13)$$

となる。ここで、 $\Delta t$  は微小時間増分量である。また、式 (10) から、時間ステップ  $n$  と時間ステップ  $n+1$  における剛体の角速度ベクトルを  $\omega_g^n$ 、 $\omega_g^{n+1}$  とすると、

$$\omega_g^{n+1} = \omega_g^n + (\mathbf{I}_g^{-1}\mathbf{M}_g - \mathbf{I}_g^{-1}\omega_g^n \times \mathbf{I}_g\omega_g^n)\Delta t \quad (14)$$

となる。また、剛体重心の位置座標  $\mathbf{x}_g$  の更新は、剛体の速度ベクトルを用いて次式により更新する。

$$\mathbf{x}_g^{n+1} = \mathbf{x}_g^n + \mathbf{v}_g^n\Delta t \quad (15)$$

### 3.2 Cohesive model による破壊の表現

本研究では、図-1 に示すように、剛体モデルの表面を潜在的な不連続面として、この面を Cohesive model

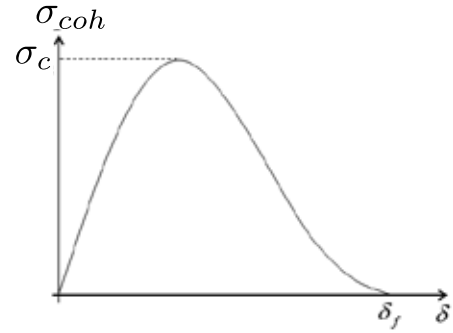


図 2: Cohesive model のイメージ

を用いて連結することで破壊挙動を表現する。本研究で用いた Cohesive model は、多項式を用いたものであり、次式で表現される。

$$\sigma_{coh} = \begin{cases} \frac{27}{4}\sigma_c\left(\frac{\delta}{\delta_f}\right)\left[1 - 2\left(\frac{\delta}{\delta_f}\right) + \left(\frac{\delta}{\delta_f}\right)^2\right], & \delta \leq \delta_f, \\ 0, & \delta > \delta_f, \end{cases} \quad (16)$$

ここで、 $\sigma_{coh}$  は結合力、 $\sigma_c$  は結合力の上限値、 $\delta$  は開口量、 $\delta_f$  は完全な破壊に至る開口量を意味する。このモデルのイメージ図を図-2 に示す。なお、本研究では、負荷時による破壊に着目しているおり、簡便のため、除荷時も式 (16) を用いるモデル化を行っている。

## 4 数値解析例

数値解析例として、建物に津波が襲来した場合の構造流体連成解析結果を示す。DEM の並列計算には、DEM の解析で用いている探索用のバックセルを図-3 に示すように領域分割をし、MPI による並列計算を行っている。解析結果として、建物が津波により崩壊する様子を図-4 に示す。この図に示すように、津波波力により、壁面が壊されていく様子が見てとれる。次に、並列化効率を図-5 に示す。いままでボトルネックになっていた DEM の計算部分が高速化され、変更前に比べて、約 3.2 倍の高速になっていることがわかる。

## 5 おわりに

本研究では、構造物の破壊過程も考慮可能な構造流体連成解析手法を構築し、その並列化性能向上の

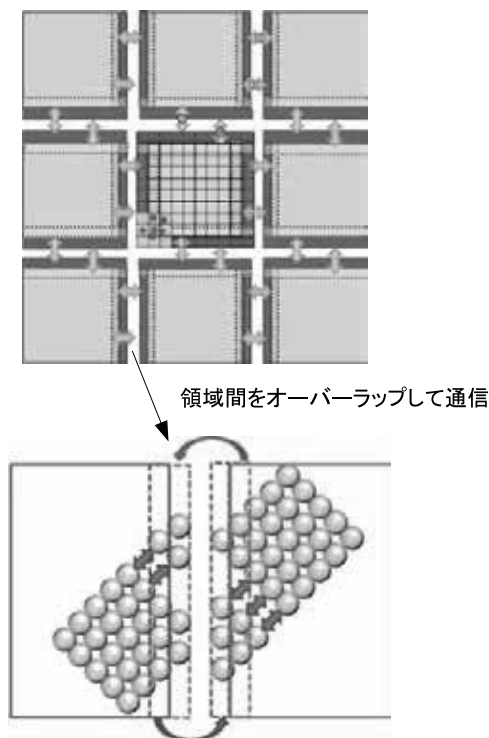
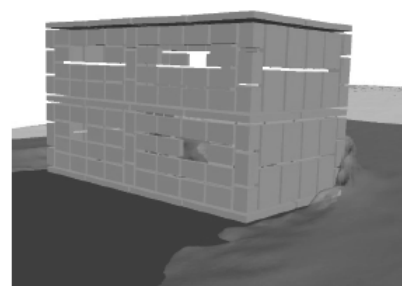


図 3: バックセルを用いた領域分割法

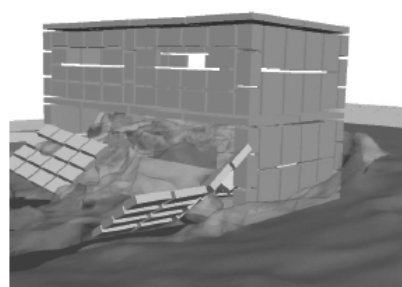
ため、DEM を用いた剛体要素の並列化について検討を行った。DEM の並列化により高速計算が可能となり、より実現象に近い解析が可能となった。しかし、今回の解析では、バックセル領域を分割後、領域分割の変更は行わないため、剛体要素が動くことにより、各ノードでの計算負荷のばらつきが多くなり、計算効率の低下が見られているので、今後は、動的負荷分散を考慮した DEM の並列計算が課題となる。

## 参考文献

- [1] Terada, K., Asai, M. and Yamagishi, M.: Finite Cover method for linear and nonlinear analyses of heterogeneous solids, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.58, Issue 9, pp.1321-1346, 2003.
- [2] Brooks, A.N., Hughes, T.J.R.: streamline-upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32, pp.199-259, 1982.
- [3] Tezduyar, T.E.: Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations : *Advanced in Applied Mechanics*, 28, pp.1-44, 1991.



(a)



(b)

図 4: 解析結果

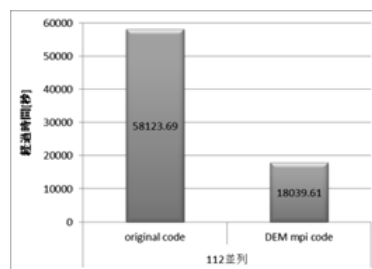


図 5: 並列化効率

- [4] Aliabadi, S., and Tezduyar, T.E.: Stabilized-finite-element/interface-capturing technique for parallel computation of unsteady flows with interfaces, *Compute Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190, pp.243-261, 2000.
- [5] N. Tanaka, J. Matsumoto and S. Matsumoto: Phase-field model-based simulation of motions of a two-phase fluid on solid surface, *Journal of Computational Science and Technology*, Vol.7 No.2, pp.322-337, 2013.
- [6] 高瀬慎介, 森口周二, 寺田賢二郎, 小山直輝, 金子賢治, 車谷麻緒, 加藤準治, 京谷孝史: 構造物の破壊を考慮した有限被覆法に基づく構造流体連成解析, *土木学会論文集 A2(応用力学)*, Vol.71, No.2 (応用力学論文集 Vol.18), I.203-I.212, 2015.
- [7] Cundall, P. A. : A Computer model for simulating progressive, Large Scale movement in blocky rock system, *Proceedings of ISRM Symposium*, pp.11-18, 1971.

# 産業集積の空間的同期と都市規模・空間パターンに関する研究

森知也

京都大学経済研究所

## 1 緒言

「集積」は今日の経済立地の代表的形態であり、先進国及び途上国における先進地域では、人口の80%以上が都市に集中する。この事実は、国内に限らず、国際地域における経済地理を理解する上で、経済集積原理の解明が鍵であることを意味している。経済集積の特徴的な性質は、その規模の多様性である。例えば、2010年の日本では、人口の90%以上が住む200余りの都市の人口は、平均が55万人であるのに対し、3500万人の東京から2万人の倶知安まで幅広い。

都市規模の多様性は、都市の空間パターンとともに、明確な秩序によって特徴づけられることが知られている。具体的には、都市群は、大都市の周囲に小都市群が集積する「空間結束性」を示し、それが再帰的に生起することによる空間的フラクタル構造を持ち、更に、フラクタルにおける階層間で、都市規模分布が共通の冪乗則を示すことが、日米独のデータを用いて示されている [1]。

図1,2は、アメリカとドイツで同定された地域経済圏における都市規模分布を、それぞれ示している。図2には、ドイツの都市規模分布に加えてシカゴ経済圏の都市規模分布も示してあり、それは、ドイツ全域を含むケルン経済圏の都市規模分布とほぼ一致していることが分かる。この事実は、地域経済圏における都市規模分布の共通冪乗則が、国を超えて成立している可能性を示唆している。

本研究では、規模の経済の程度が異なる多数の産業を含む仮想経済において、多様な規模の経済集積が形成され、上述の、都市規模・空間分布における、フラクタル構造と共通冪乗則が発現することが、安定均衡の一般的な性質であることを、モンテカルロ・シミュレーションによって示すことを目的としている。現実経済と同程度の都市数、及び、都市規模の多様性を実現するためには、産業数×都市数に相当する数十万次元の高次非線形最適化問題を解く必要があり、本共同研究では、そのための解析プログラムの高度化・並列化を行った。既に、昨年度の高度化共同研究において、1次元円環立地空間の下で産業毎の計算を並列化し、システムDを用いて7-8倍程度の高速化を実現してい

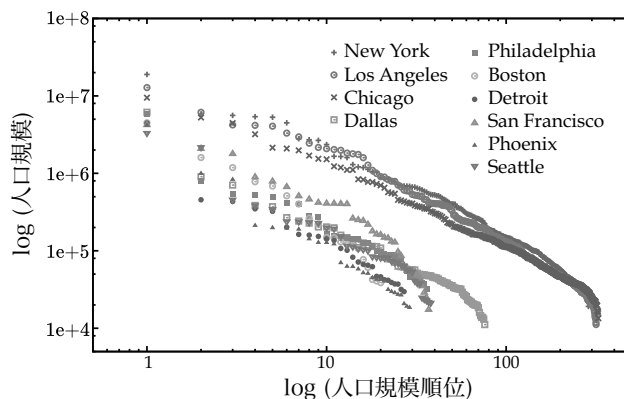


図1. アメリカの地域経済圏における都市規模分布 (2007年)

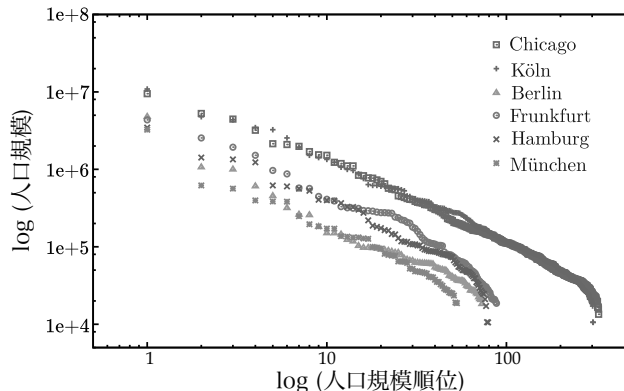


図2. ドイツの地域経済圏における都市規模分布 (2008年)

る。本年度は、これに加えて、都市毎の計算について並列化を行い、更なる高速化を試みるとともに、立地空間を2次元周期境界空間に拡張した。

## 2 モデルと数値解析における課題

分析には、多産業・多地域に拡張した Pflüger [2] モデルを用いた。異なる産業は異なる種類の消費財を生産し、各種消費財はさらに多数の差別化された財パラエティで構成される。各産業の集積は、財の多様性を

嗜好する消費者、生産における規模の経済、及び、輸送費用の存在から生ずるフィードバック効果によって形成され、集積の規模と空間的周期は、フィードバック効果の大きさにより異なる。産業の集積はその生産財の消費者/労働者の集積を伴って都市を形成する。大都市は、共通の消費者を介して、複数の産業が共集積することにより形成される。

仮想経済では、立地空間上に一定間隔で配置した地点群からなる立地空間を仮定し、所与人口の労働者 (= 消費者) を各産業・地点にランダムに配置した初期状態から、労働者の産業間・地点間分布を所与とした“短期均衡”の達成と、労働者の効用水準改善を目的とした移住を繰り返し、最終的に各労働者が移住の動機を持たない“長期均衡”に到達する。各短期均衡の導出は、産業数 × 地点数の未知数に対して、産業毎に (地点数 × 地点数) の行列演算を繰り返す do-loop を複数含む。今回のプログラム高度化は、これら do-loop の OpenMP と MPI を用いたハイブリッド並列化・周期境界型立地空間から生ずる対称性を活かした演算の効率化を中心に行われた。

### 3 結果

#### 3.1 計算性能

図 4 は、1 次元立地空間の下で、産業単位での並列化を含むプログラム高度化による計算効率の改善を示している。OpenMP を用いたごく単純な並列化を含むオリジナル・プログラムは、システム D を用いて、各シミュレーションを 1 プロセス・28 スレッドの下で実行した。図は、ノード/コア数と実行時間の関係を示している。いずれも、(地点数, 産業数) = (512, 256) の下で、5 万回の短期均衡計算の所要時間で評価している。オリジナル・プログラムに対して、高度化プログラムでは、7 ~ 20 倍の速度改善があった。一方で、並列化による高速化は概ね産業毎の並列化によって実現されており、都市毎での並列化による計算速度の改善は殆ど得られなかった。

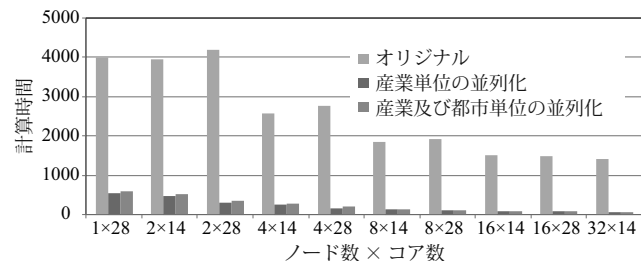


図3. 1次元立地空間の下での高度化・並列化による計算速度の改善 (短期均衡 5万回)

2次元立地空間の下では、オリジナル・プログラムに対して3~6倍の速度改善があった。1次元立地空間

間の場合と同様に、並列化による高速化は、基本的には産業単位の並列化のみが有効であった。

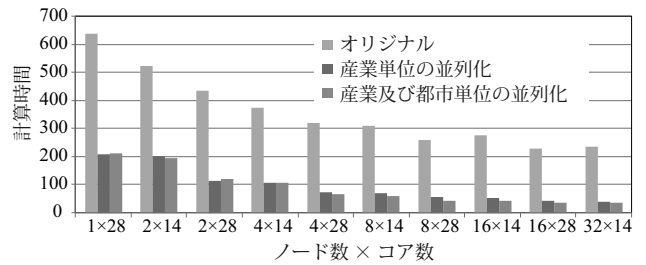


図4. 2次元立地空間の下での高度化・並列化による計算速度の改善 (短期均衡 5万回)

#### 3.2 シミュレーション結果

実際の経済分析への応用では、アメリカの貿易データから推計された約 14000 品目に関する価格マークアップ率を用いて、産業構造を特定している。具体的には、この分布から、所与数の品目をランダムに抽出し、抽出した個々の品目の価格マークアップ率を個々の産業の生産品目の価格マークアップ率とみなす。価格マークアップ率は規模の経済の指標と解釈でき、この分布の形状が、均衡における都市規模分布の形状を規定する。

現状、2次元立地空間の下での均衡計算は十分に高速化されていたため、本年度は1次元立地空間の下でのブートストラップ標本の蓄積に特化した。具体的には、仮想経済においてアメリカと同程度の都市の数・規模の多様性を実現できる (産業数, 地点数) = (256, 1024) の場合を基本ケースとした。

図 5 は、安定均衡における典型的な人口の空間分布を示している。輸送費水準によって、人口集積の程度は異なるが、人口の空間分布がこのようなフラクタル構造を持つ性質は共通している。この例は、財の輸送費用が比較的低い場合で、図が示すように、単一の都市に圧倒的な人口集中が起こる一極型構造が実現することが知られている。なお、輸送費が高い場合には、ほぼ同様規模の「最大都市」が複数が存在する「多極型」となる。

現時点で、一極型の場合について安定均衡のブートストラップ標本を 823 生成し終えている (各パラメータ設定下で 1000 標本の生成を行う)。計算にはシステム D を用いており、4 プロセス・28 スレッドで計算した。図 6 は、均衡導出に要した 1 標本当りの計算時間の分布の分布を示しており、平均は 9.36 時間であった。なお、新システム A を用いた場合、2 プロセス × 68 スレッドの下で平均 28.97 時間と、システム D に比べて平均で 3 倍の計算時間を要している。

図 7 は、上述の米独の実証分析と同様の方法で同定した、仮想経済における各地域経済圏の都市規模分布



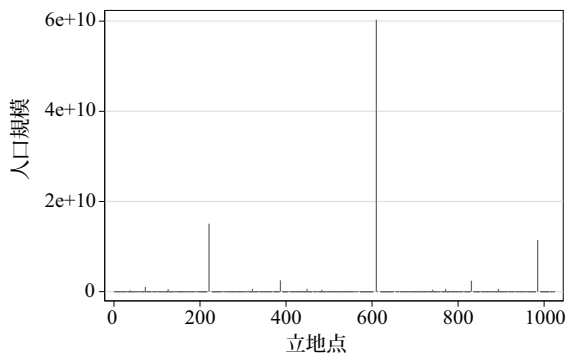


図5. 仮想経済における都市の位置と人口規模

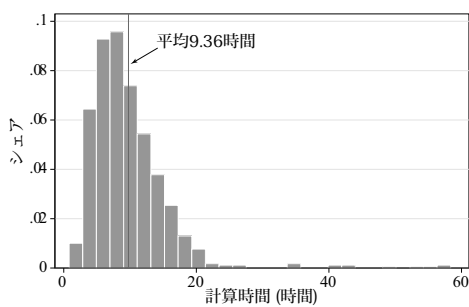


図6. 計算時間

を示している。図から明らかなように、都市規模分布は地域経済圏間で共通の冪乗則に従っている。但し、地域経済圏間の共通冪乗則の成立については、今後、各輸送費水準の下で生成した個々のブートストラップ標本について、[1]による実証研究と同様の方法で統計的に検証し、安定均衡の一般的性質として、厳密に結論付ける予定である。

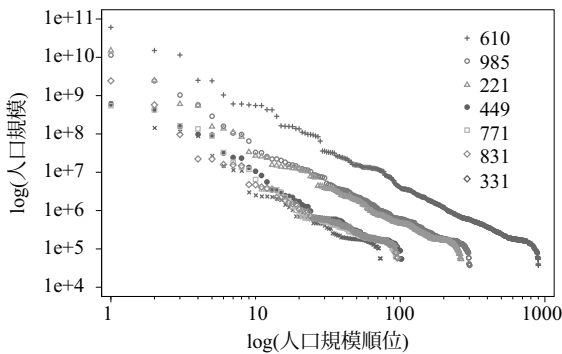


図7. 仮想経済の地域経済圏における都市規模分布

#### 4 結語

本共同研究では、現実の空間経済において観察される、都市規模分布の空間的フラクタル構造と共通べき乗則の創発を再現する数値解析プログラムの高度化・並列化を行った。特に、計算の並列化と効率化によって、1次元立地空間下では大規模なモンテカルロシミュレーションが可能になった。今後は、2次元立地空間における計算性能の改善を模索するとともに、1次元立地空間の下で異なる輸送費水準下でシミュレーションを進め、現実に観察される都市規模・空間分布の秩序形成を理論的に再現し、そのメカニズムの解明を試みる。

#### References

- [1] Tomoya Mori, Tony E. Smith, and Wen-Tai Hsu. Cities and space: Common power laws and fractal structures. Unpublished manuscript, Institute of Economic Research, Kyoto University, 2016.
- [2] Michael Pflüger. A simple, analytically solvable, chamberlinian agglomeration model. *Regional Science and Urban Economics*, 34(5):565–573, September 2004.

# 「メッシュ状透過性平行平板間乱流の 直接数値シミュレーション」に関するプログラム高度化

横嶋 哲\*

\*静岡大学 学術院工学領域 数理システム工学系列

## 1 はじめに

「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」は、京都大学 学術情報メディアセンターのプログラム高度化支援事業（2015年度）に採択され、続いてスーパーコンピュータ共同研究制度（大規模計算支援枠（2015年度・後期））としても採択された。後者（大規模計算）は前者（プログラム高度化）の作業環境としても利用された。本報では前者の概要を報告する。後者の概要は文献 [1] を参照されたい。

## 2 高度化前のプログラムの概要

プログラム高度化対象は、非圧縮なニュートン流体の3次元非定常解析（直接数値シミュレーション）コードであり、特徴としては

- 有限差分法による離散化
- 3方向周期境界条件の適用
- 埋め込み境界法（IB法）[2, 3]の導入
- 高速フーリエ変換を利用した、線形連立方程式の効率解法の導入

が挙げられる。

### 2.1 支配方程式

熱的に様な密度  $\rho_f$ 、粘性係数  $\mu_f$  の流体の支配方程式は以下のように表現できる：

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{1}{\rho_f} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f}_{IB}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2)$$

ここで  $\mathbf{u}$  は流速ベクトルを、 $\boldsymbol{\tau}$  は流体の応力テンソル

$$\boldsymbol{\tau} = -p' \mathbf{I} + \mu_f (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (3)$$

を、 $p'$  は流体圧力を示す。また、 $\mathbf{f}_{IB}$  は固体境界表面上で粘着・不透過条件を課すためにIB法で導入される単位質量当たりの体積力（仮想外力）を表す。 $\mathbf{f}_{IB}$  の決定方法は2.2節で示す。なお、式(3)を式(4)に代入して整理すれば、次式を得る：

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nu_f \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}_{IB}. \quad (4)$$

ここで  $p \equiv p' / \rho_f$ 、 $\nu_f = \mu_f / \rho_f$  は流体の動粘性係数を表す。

IB法では式(4)および(2)を流体領域だけでなく固体を含む計算領域全体で解く。固体境界が流れに及ぼす影響をIB法で扱う利点は、流体解析用の計算格子点を固体境界形状とは独立に設定できる点にある。

### 2.2 埋め込み境界法による境界条件の適用

流体の運動量保存則(4)を時間離散化して以下のように表す：

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \mathbf{rhs}^{n+1/2} + \mathbf{f}_{IB}^{n+1/2}. \quad (5)$$

ここで  $\mathbf{rhs}^{n+1/2}$  は式(4)の移流項および応力項を時刻  $t^n$  と  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  の間で評価したものを表す。 $\mathbf{u}$  の定義位置のどこかで  $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(d)}$  の拘束条件を課す場合には、外力  $\mathbf{f}_{IB}$  を

$$\mathbf{f}_{IB}^{n+1/2} = \frac{\mathbf{u}^{(d)} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} - \mathbf{rhs}^{n+1/2} \quad (6)$$

と与えればよい。ただし拘束条件を課す位置は必ずしも式 (4) の評価位置とは一致しない。

一般に IB 法では固体境界上に点（以下、IB 点と呼称）を配置し、IB 点の集合で固体表面形状を表現する。Uhlmann[2] の IB 法では、速度境界条件を課するための外力をこの IB 点上で評価する：

$$\mathbf{F}_{\text{IB}}^{n+1/2} = \frac{\mathbf{U}^{(d)} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} - \mathbf{RHS}^{n+1/2}. \quad (7)$$

以下では IB 点上で評価される物理量を大文字で示すこととする。\$\mathbf{U}^{(d)}\$ は境界条件で、境界が静止していれば \$\mathbf{U}^{(d)} = \mathbf{0}\$ となる。式 (7) は \$\tilde{\mathbf{U}} = \mathbf{U}^n + \mathbf{RHS}^{n+1/2}\Delta t\$ の表現を用いれば

$$\mathbf{F}_{\text{IB}}^{n+1/2} = \frac{\mathbf{U}^{(d)} - \tilde{\mathbf{U}}}{\Delta t} \quad (8)$$

と書ける。この中間流速 \$\tilde{\mathbf{U}}\$ は流速 \$\mathbf{u}\$ の定義位置では

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \mathbf{rhs}^{n+1/2} \quad (9)$$

のように求められる。

以上より、IB 点上での中間流速 \$\tilde{\mathbf{U}}\$ を \$\tilde{\mathbf{u}}\$ から、および流速定義位置での外力 \$\mathbf{f}\_{\text{IB}}^{n+1/2}\$ を \$\mathbf{F}\_{\text{IB}}^{n+1/2}\$ からそれぞれ評価できれば、式 (9) および (8) を用いることで \$\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(d)}\$ の拘束条件を任意の位置で課することができる。Uhlmann の IB 法ではラグランジュな IB 点 (\$\mathbf{X}\_j^{(i)}\$) とオイラーな流速定義点 (\$\mathbf{x}\_l\$) での情報交換を離散デルタ関数を用いて以下のように行う：

$$\mathbf{U}(\mathbf{X}_j^{(i)}) = \sum_m \mathbf{u}(\mathbf{x}_m) \delta_h(\mathbf{x}_m - \mathbf{X}_j^{(i)}) \Delta V_E^3, \quad (10)$$

$$\mathbf{f}_{\text{IB}}(\mathbf{x}_l) = \sum_p \sum_q \mathbf{F}_{\text{IB}}(\mathbf{X}_q^{(p)}) \delta_h(\mathbf{x}_l - \mathbf{X}_q^{(p)}) \Delta V_q^{(p)}. \quad (11)$$

ここで \$\Delta E\$ は流体解析用のオイラー系のデカルト格子間隔を、\$\Delta V\_q^{(p)}\$ は固体 \$p\$ の \$j\$ 番目の IB 点が受け持つ流体領域の体積を表す。Kempe and Fröhlich[3] は、Uhlmann が提案した上述の \$\mathbf{f}\_{\text{IB}}\$ の決定法（フォーシング・スキーム）がフォーシング誤差を伴うことを指摘し、その誤差の低減法を提案した。本研究でも Kempe and Fröhlich の修正フォーシング・スキームを採用するが、その詳細については支配方程式の時間離散化と併せて 2.3 節で述べる。

離散デルタ関数 \$\delta\_h(\mathbf{x} - \mathbf{X})\$ は

$$\delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}) = \psi(r_1)\psi(r_2)\psi(r_3)/\Delta E^3 \quad (12)$$

のように \$r\_i = (x\_i - X\_i)/\Delta E\$ に関する 1 次元関数の掛け合わせで表される。関数 \$\psi\$ にはいくつかの選択肢があるが、ここでは幅 \$3\Delta E\$ の次式 [4]

$$\psi(|r|) = \begin{cases} \frac{1}{6}(5 - 3|r| - \sqrt{-3(1 - |r|)^2 + 1}), & \frac{1}{2} \leq |r| \leq \frac{3}{2} \\ \frac{1}{3}(1 + \sqrt{-3|r|^2 + 1}), & |r| \leq \frac{1}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (13)$$

を採用した。すなわち IB 点 (\$\mathbf{X}\_j^{(i)}\$) と流速定義点 (\$\mathbf{x}\_l\$) で情報のやり取りが生じるのは、互いの距離が全ての方向に \$1.5\Delta E\$ 未満のときに限られる。式 (10) および (11) は、これを用いてオイラー系とラグランジュ系で情報転移を行っても流体に働く力やトルクの総量が変わらないという特長を有する [5]。

## 2.3 支配方程式の離散化

支配方程式の離散化の概略は以下のものである：式 (4), (2) の時間積分については、粘性項を 2 次精度クランク・ニコルソン法で陰的に、移流項を 3 次精度ルンゲ・クッタ法 (RK3) [6] で陽的に扱った。未知量である流速ベクトルと圧力はスタガードに空間配置し、完全保存型の 2 次精度差分法 [7] によって空間離散化を行った。そのようにして得られた離散方程式に部分段階法を適用して解いた。以下では上述の方法で支配方程式を時間方向にのみ離散化し、プログラム内で実際に扱われている離散式を導出する。

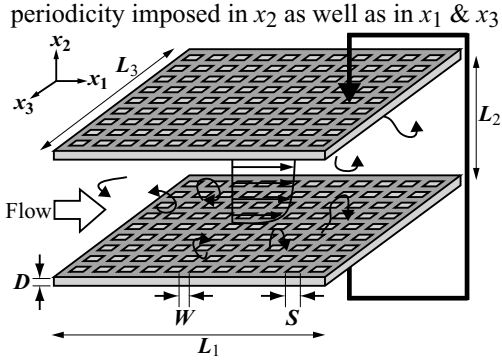
式 (4), (2) を時間方向に離散化すると次式を得る：

$$\frac{\mathbf{u}^k - \mathbf{u}^{k-1}}{\Delta t} = -\frac{2\beta_k}{\rho_f} \nabla p^k + \beta_k \nu_f \nabla^2 (\mathbf{u}^k + \mathbf{u}^{k-1}) + \mathbf{f}_{\text{IB}}^k - \gamma_k \mathbf{N}^{k-1} - \eta_k \mathbf{N}^{k-2}, \quad (14)$$

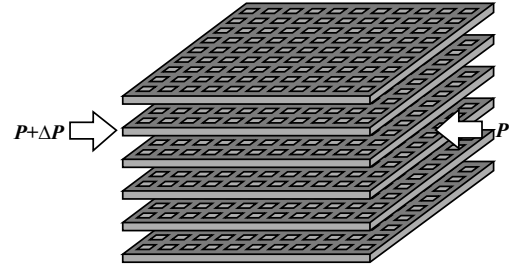
$$\nabla \cdot \mathbf{u}^k = 0. \quad (15)$$

ここで \$\mathbf{N}\$ は移流項 \$(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}\$ を表す。上付きの添え字は RK3 のサブステップ (\$k = 1, 2, 3\$) を表し、\$\mathbf{u}^0\$ は古い時刻の、\$\mathbf{u}^3\$ は新しい時刻の流速をそれぞれ表す。他の物理量も同様である。\$\beta, \gamma, \eta\$ は RK3 の係数で、\$\beta\_1 = 4/15, \gamma\_1 = 8/15, \eta\_1 = 0, \beta\_2 = 1/15, \gamma\_2 = 5/12, \eta\_2 = -17/60, \beta\_3 = 1/6, \gamma\_3 = 3/4, \eta\_3 = -5/12\$ のように与えられる。

式 (14) および (15) に部分段階法を適用し、式 (10), (8), (11) を組み込めば、流体挙動に関する支配方程式



(a) flow to be studied.



(b) another view of the system.

図 1: 検討対象流れの概要.

式は以下のように扱われる:

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^{k-1}}{\Delta t} = -\frac{2\beta_k}{\rho_f} \nabla p^{k-1} + 2\beta_k \nu_f \nabla^2 \mathbf{u}^{k-1} - \gamma_k \mathbf{N}^{k-1} - \eta_k \mathbf{N}^{k-2}, \quad (16)$$

$$\tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_j^{(i)}) = \sum_m \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_m) \delta_h(\mathbf{x}_m - \mathbf{X}_j^{(i)}) \Delta E^3, \quad (17)$$

$$\mathbf{F}_{\text{IB}}^k(\mathbf{X}_j^{(i)}) = \frac{\mathbf{U}^{(d)}(\mathbf{X}_j^{(i)}) - \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{X}_j^{(i)})}{\Delta t}, \quad (18)$$

$$\mathbf{f}_{\text{IB}}^k(\mathbf{x}_l) = \sum_p \sum_q \mathbf{F}_{\text{IB}}^k(\mathbf{X}_q^{(p)}) \delta_h(\mathbf{x}_l - \mathbf{X}_q^{(p)}) \Delta V_q^{(p)}, \quad (19)$$

$$\frac{\mathbf{u}^* - \tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} = \beta_k \nu_f \nabla^2 (\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{k-1}) + \mathbf{f}_{\text{IB}}^k, \quad (20)$$

$$\nabla^2 \phi^k = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{2\beta_k \Delta t}, \quad (21)$$

$$\frac{\mathbf{u}^k - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{2\beta_k}{\rho_f} \nabla \phi^k, \quad (22)$$

$$p^k = p^{k-1} + \phi^k - \beta_k \Delta t \nu_f \nabla^2 \phi^k. \quad (23)$$

以上は強制外力  $\mathbf{f}_{\text{IB}}^k$  を Uhlmann[2] に倣って決定した場合であるが, Kempe and Fröhlich[3] は Uhlmannの方法では IB 点上で  $\mathbf{U}^{(d)}$  と  $\mathbf{U}^*$  にズレが生じることを指摘し, 修正フォーシング・スキームを提案した. Kempe and Fröhlich の方法では, 式 (20) で求めた  $\mathbf{u}^*$  を式 (17) を用いて IB 点に移し, 次にそこで得られる  $\mathbf{F}'_{\text{IB}} = (\mathbf{U}^{(d)} - \mathbf{U}^*)/\Delta t$  を式 (19) によって  $\mathbf{u}$  の定義位置に戻し, 最後に  $\mathbf{u}^* \leftarrow \mathbf{u}^* + \Delta t \cdot \mathbf{f}'_{\text{IB}}$  によって  $\mathbf{u}^*$  の値を修正し, 併せて  $\mathbf{f}_{\text{IB}}^k \leftarrow \mathbf{f}_{\text{IB}}^k + \mathbf{f}'_{\text{IB}}$  とする. 彼らはこの操作を数回程度反復することでフォーシング誤差が低減されることを示しており, 本研究では 3 回反復後に式 (21) 以後のプロセスに進んだ.

式 (20) のヘルムホルツ方程式および式 (21) のポア

ソン方程式については, それぞれ上述の差分法に基づいて得られた離散方程式を波数空間上で解き, 得られた数値解を物理空間に戻した. 上記の操作に必要な 3 次元正/逆フーリエ変換には FFTW を利用した. このため, 空間離散化は全ての方向に幅  $\Delta_E$  の等間隔デカルト格子に基づく.

### 3 検討対象流れ: メッシュ状透過性平行平板間乱流

2 節でその概要が示されたコードがターゲットとする流れの概略を図 1 に示す. 図 1(a) が本研究で実際に対象とした系を表す. 境界接線方向に加えて, 境界法線 ( $x_2$ ) 方向にも距離  $L_2$  の周期性が課されており, 2 枚のメッシュ状平板は同一境界を表すことに留意されたい. すなわち, 図 1(a) は, 図 1(b) のように無数のメッシュ状境界が等間隔に並んだ系の幾何学的最小ユニットにあたる.

次節で概要を示すプログラム高度化作業のための具体的な検討対象として, 平板間距離  $L_2$  の半分  $\delta$  を基準として, 主流方向に  $L_1 = 3.84\delta$ , 横断方向に  $L_3 = 1.92\delta$  の領域を確保し, メッシュ厚  $D$  を  $\delta/150$ , メッシュ間空隙  $S$  をゼロとした. このときメッシュ状透過性平行平板間乱流は通常の不透過な平行平板間乱流に帰着する. 主流  $x_1$  方向に摩擦レイノルズ数  $Re_\tau \equiv U_\tau \delta / \nu_f = 150$  となる一定の圧力差を課することで流れを駆動した. この直方体領域を全ての方向に  $\Delta = 1.0(\nu_f / U_\tau)$ , すなわち壁座標で 1 の等間隔格子で離散化した. すなわち,  $x_1, x_2, x_3$  の各方向の計算格子点数はそれぞれ 576, 300, 288 となる.

表 1: 高度化による計算速度向上. 例えば “p32t2” はプロセス数が 32, プロセス当たりのスレッド数が 2 を示す. P3DFFT での 2 次元領域分割は, p64t1 の場合に主流  $x_1$  方向と横断  $x_3$  方向に  $8 \times 8$  分割, p32t2 の場合に  $8 \times 4$  分割とした. FFTW では横断方向の 1 次元分割である.

並列度	オリジナルコード		FFTW (1次元領域分割)		P3DFFT (2次元領域分割)	
			p64t1_4node	p32t2_4node	p64t1_4node	p32t2_4node
経過時間	911870 sec		28999.55 sec	22116.95 sec	21685.39 sec	18683.11 sec
速度向上比	1.0		31.4	41.2	42.0	48.8

## 4 プログラム高度化の概要と性能評価

プログラム高度化として, 2 節でその概要が示されたコードに対して, MPI によるプロセス並列と OpenMP によるスレッド並列を組み合わせたハイブリッド並列化を施した. 高度化前のコードでは, 式 (20) のヘルムホルツ方程式および式 (21) のポアソン方程式の数値解法に伴う 3 次元高速フーリエ変換に 60% 近い処理時間を要することが確認されており, この点への対処が最も重要である. 他方で固体境界形状を表現する点集合 (IB 点) の座標  $\mathbf{X}_j^{(i)}$  および, そこでの流速  $\mathbf{U}$  や外力  $\mathbf{F}_{IB}$  については, 全てのランクで同じ値を保持することとした.

上述の高速フーリエ変換の高速化として, MPI 並列に領域分割を導入する場合, 現在利用している FFT ライブラリである FFTW では, 1 次元分割のみ可能である. これでは, 当該 1 次元方向の計算格子数よりも MPI で使用するプロセス数が大きいような大規模並列化が行えないことになる. よって本高度化では, 2 次元分割が可能な FFT ライブラリを調査した. Fortran 対応, r2c/c2r 対応, MPI と OpenMP のハイブリッド並列対応といった基準を全て満たすものの中から, 開発歴, 使用実績, ライセンス形態やメンテナンス状況を考慮して, 今回は P3DFFT を新たに導入することとした. 得られたハイブリッドコードの性能評価を京都大学のスーパーコンピュータシステム B の 4 ノード (64 コア) 上で行った. 主要な結果を表 1 に示す. FFTW では最も計算格子点数が多い主流  $x_1$  方向について 1 次元領域分割を, P3DFFT では  $x_1$  と横断  $x_3$  方向についての 2 次元領域分割が施された.

P3DFFT の導入の効果は, 当初に問題が懸念されたような, 分割数が 1 次元領域分割方向のメッシュ

数 (本検証では 576) を超えるような大規模並列環境下だけではなく, 高々 4 ノードの本検証においても明瞭に認められる. この結果, オリジナルコードと比較して約 49 倍の高速化が確認できた.

謝辞: プログラム高度化の実施にあたって, クレイ・ジャパン・インクの鈴木 幸朗 様, および高橋由樹 様から多大な協力を得ました. 記して謝意を表します.

## 参考文献

- [1] 横嶋 哲: 「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」に関する大規模計算, 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.14 No.2, 2015 (印刷中).
- [2] Uhlmann, M.: An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows, *J. Comput. Phys.*, Vol.209, pp.448–476, 2005.
- [3] Kempe, T. and Fröhlich, J.: An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows, *J. Comput. Phys.*, Vol.231, pp.3663–3684, 2012.
- [4] Roma, A.M., Peskin, C.S. and Berger, M.J.: An adaptive version of the immersed boundary method, *J. Comput. Phys.*, Vol.153, pp.509–534, 1999.
- [5] Peskin, C.: The immersed boundary method, *Acta Numerica*, Vol.11, pp.1–39, 2002.
- [6] Spalart, P.R., Moser, R.M. and Rogers, M.M.: Spectral methods for the Navier-Stokes equations with one infinite and two periodic directions, *J. Comput. Phys.*, Vol.96, pp.297–324, 1991.
- [7] Morinishi, Y., Lund, T.S., Vasilyev, O.V. and Moin, P.: Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow, *J. Comput. Phys.*, Vol.143, pp.90–124, 1998.

# 乱流輸送コード GKNET への運動論的電子の実装

今寺 賢志

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻

磁場閉じ込め核融合プラズマでは、電子ダイナミクスが深く関与した捕捉電子モード(TEM)が乱流輸送過程に重要な役割を果たす一方で、電子を運動論的に解く必要があることから、そのシミュレーションを実施するためには、大規模計算に向けて高並列化されたコードの開発は不可欠である。そこで本研究では、我々が開発した大域的乱流輸送コード GKNET に対してハイブリッド並列の実装等を行った。本稿では、それらの実装方法と得られた高速化率、およびそのコードを用いて行った TEM シミュレーションの結果について報告する。

## 1 研究背景/目的

乱流を抑制することで輸送係数を低下させ、断熱層/粒子遮蔽層として作用する「内部輸送障壁」の形成は、磁場閉じ込め核融合プラズマを高性能化する上で重要な鍵を握っているが、第一原理に基づいた乱流輸送シミュレーションでは再現されていなかった。これは、大規模な計算機資源を必要とする大域的乱流輸送コードの開発・実行が容易でないこと、さらには径電場に代表される背景分布と乱流の相互作用が物理的に解明されていないことに起因している。

そこで我々は、新たに大域的乱流輸送コード「GKNET (GyroKinetic Numerical Experimental Tokamak)」を開発した[1,2]。本コードでは、外部からの熱ソース/シンク、ならびに衝突効果が適切に導入されており、熱ソースによる温度分布の急峻化によって駆動される乱流(熱源駆動型乱流)に加え、新古典輸送過程を経て形成される径電場も適切に評価することが可能である。

このコードを用いて、熱源駆動型乱流輸送シミュレーションを行った結果、力学的平衡によってもたらされる径電場は、イオン温度勾配(ITG)モードと呼ばれるイオン系乱流のポロイダル対称性を回復させる方向に作用し、不安定化に寄与することが明らかとなった。さらにその径電場を変調させるために運動量ソースを導入した結果、図1に示すように、順方向のトロイダル回転による強制

的な内部輸送障壁の形成に成功した[3,4,5]。この結果を踏まえ我々は、「乱流構造のポロイダル対称性を破ることが乱流の安定化に寄与し、結果として輸送障壁の形成をもたらす」との着想に至った。

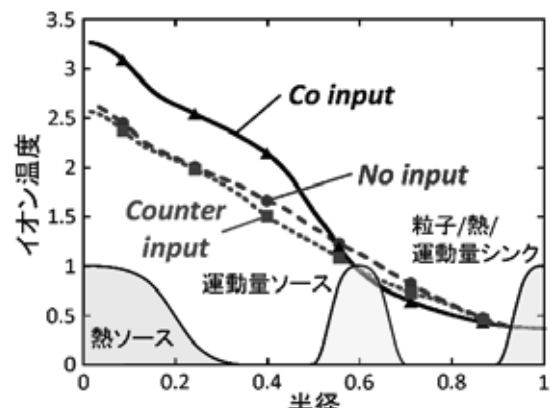


図1: 運動量源を導入した場合のイオン温度分布

そのために重要となってくる物理的要素が、電子ダイナミクスを第一原理に沿って解いた場合に得られる運動論的電子効果である。図2は、断熱電子を仮定した従来のシミュレーションで明らかとなった ITG 乱流の安定化/不安定化メカニズムを模式的に示したものである。ITG 乱流では、径電場が不安定化に寄与していたため、外部から十分に大きな運動量ソースの導入を必要としていた。一方、捕捉電子モード(TEM)と呼ばれる電子ダイナミクスが深く関与したモードが励起された場合、乱流構造が反転するために、径電場はむしろ安定化に作用し、さらに、ITG 乱流と比較して

より強く励起されると考えられている自発回転 [6] を最適化することでその安定化効果が更に増幅されることで、自発的な内部輸送障壁が形成されることが期待できる(図 3)。

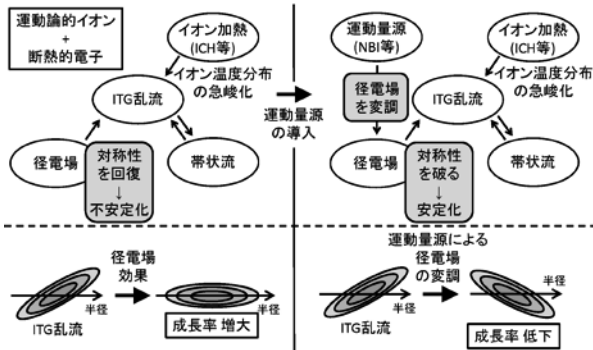


図 2: 先行研究で明らかとなった乱流構造の対称性による ITG 乱流の安定化/不安定化メカニズム

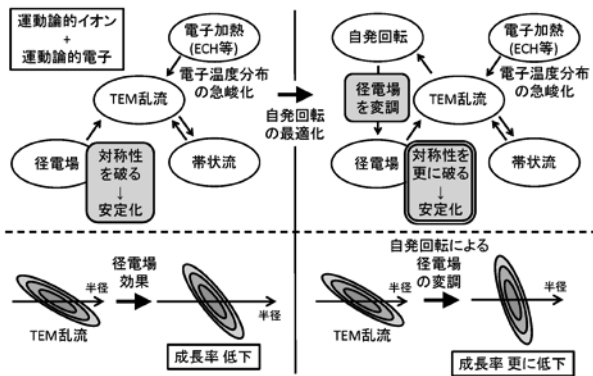


図 3: 本研究で解明を目指す乱流構造の対称性による TEM 乱流の安定化/不安定化メカニズム

しかしながら一方で、電子を運動論的に解いた場合、質量比(イオンの質量/電子の質量)の平方根に比例して CFL 条件が厳しくなるため、計算量は莫大なものとなり、TEM 不安定性を扱える大域的ジャイロ運動論コードは世界的にもまだ極めて希少である。

そこで本研究では、 $10^5$  コアを超える大規模計算において良並列スケールリングを確保するために、従来の MPI 並列をハイブリッド並列(MPI 並列+OpenMP 並列)に拡張することで、現実的な計算時間で電子を運動論に沿って時間積分できる大域的ジャイロ運動論コードを開発し、ITG/TEM 不安定性と温度分布形成の因果関係を明らかにすることを目的とした。

## 2 ハイブリッド並列の導入

本研究課題では、申請時のオリジナルコードに対して主に以下の 3 点に関する作業を行った。

### (1) ハイブリッド並列の実装

全ての DO ループにおいて、ハイブリッド並列を実装した。主な利点としては裾値データの通信量の削減と、プロセス・スレッドの性能の良い分割数の組合せを選択できる自由度の増加が挙げられ、特に  $10^5$  コア程度の大規模計算において有効であると考えられる。

### (2) スカラーチューニング

ループ順序や配列順序の入れ替えによってキャッシュチューニングを行った。

### (3) プロセス並列に伴う領域分割法の変更

オリジナルコードでは 5 次元(x, y, z, v,  $\mu$ ) 領域分割を用いており、特に  $\mu$  方向については優先的に分割を行っていたが、その制約を解除して自由に領域分割できるようにコードを変更した。

図 4 は、(A) オリジナルコード、(B) (1)+(2)を行ったコード、(C) (1)+(2)+(3)を行ったコードの各パートの計算時間を示している。"Vlasov"は 5 次元の双曲線型偏微分方程式である Vlasov 方程式のソルバー部を指しており、"Field"は楕円型偏微分方程式である準中性条件のソルバー部(速度空間の積分に伴う MPI\_ALLREDUCE を含む)を指している。まず(A)と(B)を比較すると、Field 部で計算時間が大幅に削減されていることがわかる。これは、準中性条件を解く際の 3 重ループの順序と配列順序が対応しておらず、その結果ストライドアクセスが発生していたことが原因と考えられる。また Vlasov 部でも若干の計算時間の削減が得られており、特に 128 コアの場合に顕著であったことから、5 次元裾値データの通信時間が短くなったことに起因しているものと思われる。一方で、 $\mu$  方向の積分のために使用している MPI\_ALLREDUCE にかかる通信時間は(B)のケースの方が増加しており、128 コアではその比率が 26%に達していることから、大規模計算において非常に強いボトルネックになることが推測される。

そこで、 $\mu$  方向の領域分割を避けるために(3)の改善を更に行った。具体的には  $\mu$  方向の領域分割

(A) Original

Part	8 [core] (16, 1)	16 [core] (32, 1)	32 [core] (32, 1)	64 [core] (64, 1)	128 [core] (128, 1)
Total	3214 [s]	1801 [s]	886 [s]	477 [s]	226 [s]
Vlasov	1494 [s]	888 [s]	449 [s]	238 [s]	130 [s]
Field (Allreduce)	1638 [s] (261 [s])	842 [s] (164 [s])	391 [s] (80 [s])	210 [s] (64 [s])	73.7 [s] (37 [s])

(B) Tuned (Hybrid並列+スカラーチューニング)

Part	8 [core] (8, 1)	16 [core] (8, 2)	32 [core] (8, 4)	64 [core] (8,8)	128 [core] (16,8)
Total	2130 [s]	1206 [s]	643 [s]	349 [s]	213 [s]
Vlasov	1392 [s]	732 [s]	366 [s]	177 [s]	99 [s]
Field (Allreduce)	569 [s] (104 [s])	366 [s] (94 [s])	217 [s] (85 [s])	138 [s] (71 [s])	91 [s] (57 [s])

(C) Tuned (Hybrid並列+スカラーチューニング+領域分割法の変更)

Part	8 [core] (8, 1)	16 [core] (8, 2)	32 [core] (8, 4)	64 [core] (8,8)	128 [core] (16,8)
Total	1473 [s]	905 [s]	422 [s]	239 [s]	143 [s]
Vlasov	939 [s]	591 [s]	278 [s]	157 [s]	97 [s]
Field (Allreduce)	534 [s] (12 [s])	314 [s] (5 [s])	144 [s] (3 [s])	82 [s] (3 [s])	46 [s] (2 [s])

図 4: (A)オリジナルコード、(B)Hybrid 並列の実装とスカラーチューニングを行ったコード、(C)Hybrid 並列の実装とスカラーチューニング、領域分割法の変更を行ったコードの Vlasov 部、Field 部にかかる計算時間とその和

の割り当てを最も効率改善に優れていたz方向に回した。その結果、MPI\_ALLREDUCE にかかる時間は大幅に削減され、さらに Vlasov 部についてもキャッシュミスが削減されたことから計算時間が短くなっていることがわかる。

実際の計算時間を(A)と(C)を比較した場合、16 コアのケースで2.18倍、128 コアのケースで1.58倍の高速化に成功し、当初予定していた通りの成果が得ることができたと言える。

### 3 ITG/TEM シミュレーション

2 節で説明したハイブリッド並列されたコードを用いて、線形 ITG/TEM シミュレーションを行った。図 5 (A)はイオン温度が急峻な場合 ( $R_0/L_{Ti} = 6.66, R_0/L_{Te} = 2.22$ ,  $R_0$ :装置の大半径、 $L_{Ti}$ :イオン温度勾配の特性長、 $L_{Te}$ :電子温度勾配の特性長)に得られたモード構造であり ITG モード

に対応しており、(B)は電子温度勾配が急峻な場合 ( $R_0/L_{Ti} = 2.22, R_0/L_{Te} = 6.66$ )で TEM モードに対応している。実周波数が正(ITG)から負(TEM)に変化することで、モードの回転角(プロット角)が反転することが確認され、当初想定していた現象と合致していることがわかった。また、その回転角の反転が自発回転と呼ばれる乱流に起因したプラズマ回転も反転させることが確認され、その制御によって内部輸送障壁の自発形成が促進されることが期待できる。

### 4 総括と今後の課題

本稿では、大域的乱流輸送コードに対してハイブリッド並列とスカラーチューニング、領域分割法の変更を行うことで、16 コアのケースで2.18倍、128 コアのケースで1.58倍の高速化に成功した。また、そのコードを用いて、線形 ITG/TEM



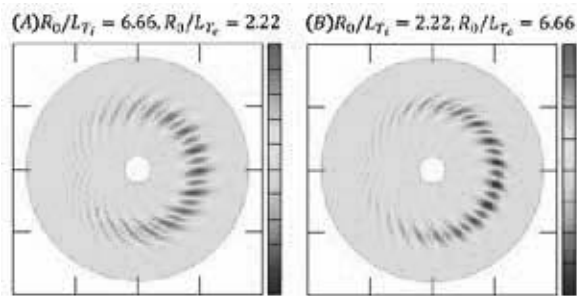


図 5: (A)イオン温度勾配が急峻な場合と(B)電子温度勾配が急峻な場合におけるバルーニング構造

シミュレーションを行った結果、ITG/TEM モードの再現に成功し、モードの回転角が反転することが確認された。この結果から、TEM 乱流に対しては径電場の安定化メカニズムが増幅される可能性が示唆され、内部輸送障壁の自発的な形成の再現が期待される。

今後の課題としては、熱源駆動型 ITG/TEM シミュレーションを行い、上述の点について検証することが挙げられ、そのために(1)半陰解法の実装による CFL 条件の緩和、(2)ハイブリッド電子モデル[6]による CFL 条件の緩和も併せて行う予定である。

#### Reference

- [1] Kenji Imadera, Yasuaki Kishimoto, Kevin Obrejan, Takuya Kobiki and Jiquan Li, “Global profile relaxation and coupled with  $E \times B$  staircase in toroidal flux-driven ITG turbulence”, *Proceedings of 25th Fusion Energy Conference* (2014).
- [2] Kevin Obrejan, Kenji Imadera, Jiquan Li and Yasuaki Kishimoto, “Development of a global toroidal gyrokinetic Vlasov code with new real space field solver”, *Plasma and Fusion Research*, **10**, 3403042 (2015).
- [3] Kenji Imadera, Yasuaki Kishimoto, Kevin Obrejan, Takuya Kobiki and Jiquan Li, “Non-local profile relaxation and barrier formation in toroidal flux-driven turbulence”, *The 7th IAEA Technical Meeting on “Theory of Plasma Instabilities”*, Italy (2015).
- [4] Kenji Imadera, Jiquan Li and Yasuaki Kishimoto, “Flux-driven gyrokinetic simulation on multiple

scale transport with internal transport barrier formation in magnetic confinement fusion plasmas”, *18th International Congress on Plasma Physics*, Taiwan (2016).

- [5] Kenji Imadera, Jiquan Li and Yasuaki Kishimoto, “ITB formation in flux-driven gyrokinetic ITG turbulence”, *Proceedings of 26th Fusion Energy Conference* (2016).
- [6] Yasuhiro Idomura, “A new hybrid kinetic electron model for full- $f$  gyrokinetic simulations”, *Journal of Computational Physics*, **313**, 511 (2016).

# 地震前兆における山岳地表面を伝搬する 電磁プラズマ波の特性解明

藤井 雅文 \*

\*富山大学 大学院理工学研究部 工学領域

## 1 はじめに

近年、地震の前兆現象として電磁波の異常な長距離伝搬現象が観測されている。この現象は地殻活動に伴って地表に出現する電荷が原因で誘起されることが推察され、さらに電荷の発生メカニズムが半導体における電子や正孔の生成と同様な機構であることが解明されつつある。このように、従来の地震学における測地的な地震予測とは異なり、地震の前兆として生じる電磁気的な現象を捕えようとする研究が進展している。本研究ではこのような電磁気現象のうち、地表面電荷と電磁波、特にラジオ放送波との相互作用を大規模な数値解析により解明することを試みた。

同様な物理現象に金属表面の自由電子による光散乱がある。金属に光が照射されると表面の電子は光の電場から受けるクーロン力によって振動しようとする。このとき、自由電子密度が十分大きいと高い振動数の外部電場の動きに追従することができ、このような状況では光は金属内部深くまでは浸透できず反射される。しかし、自由電子密度が小さいと電子は外部電場の動きに追従できず、その物質はもはや金属ではなく誘電体と同様になり光は物質の中に侵入する。すなわち、表面電荷密度の大小により物質は外部からの光あるいは電磁波に対して金属のようにふるまうか誘電体のようにふるまうかが決まることとなる。

同じことが地表面に出現する電荷に対して示すことができる。すなわち、地震の前兆として地表面に電荷が多く存在していれば近傍の電磁波と結合して強く散乱したり回折させる。その反対に地表面に多くの電荷が存在していなければ地表面に到達し

た電磁波はそれほど大きな作用をおよぼさないで、一部は地中に浸透し、一部は反射する比較的穏やかなふるまいをする。

このような電磁波と地表面電荷の相互作用を大規模数値解析によって、特に山岳地帯における実際の複雑な地形を考慮することにより精密に解析する。このような解析によって得られる知見に基づき電磁波の観測を実施すれば、観測結果の変化によって応力変化などの地殻活動を捕えることが可能になると考えられ、このような電磁波の異常現象を明らかにすることが本研究の目的である。これに関連する論文はすでに米国地球物理学連合の学術誌に掲載され [1]、同学会ホームページにおいて注目の論文として取り上げられた [2]。本稿はこれらの一部を抜粋し加筆したものである。

## 2 理論背景

地球上の岩石はプレートと呼ばれる数 10 km の厚さの岩盤を構成しており、これがマンツルの流動によってゆっくりと移動する際に特定の箇所には大きな応力が作用する。地中深くの火成岩は高温で熔融した状態で水分子を取り込み、上方に移動し冷えて固まる。この際に水素や酸素原子が岩石中の特定の部位に入り込み、ペルオキシ結合を形成することが示されている。このような水素や酸素を取り込んだ火成岩に応力が作用すると特定のペルオキシ結合が破断され、それに伴ってちょうど半導体の電子と正孔のような電荷が発生する。特に火成岩に応力が作用すると P 型半導体に類似した状態となり正孔が生成され岩石中を移動して地表に出現する。また、深部の高温の岩石は熱によって励起された伝導電子を

生じ、これらが地中の主に活断層等に沿って伝搬し地表面に到達する。地表面の異なる場所に到達した正孔と電子は再結合するまでは地表を移動しその部分が静電気を帯びたような状態になる。このような地中の岩石における電子と正孔の生成が理論と実験によって示されている [4]。

地表に出現した電荷が自然界において興味深い現象を引き起こすことについて様々な推察と実際に観察された現象が報告されている。それらの詳細は他の文献にゆずり、ここではその1つであるラジオ放送波との相互作用を検証する。ラジオ放送波はAMラジオの長波帯からFMラジオの超短波(VHF)帯が良く知られている。長波帯の電波は周波数が約30kHzから300kHzであり、上空に存在する電離層によって反射されやすく地表面との間で反射を繰り返して遠方まで伝搬する性質がある。一方、超短波帯は周波数が約30MHzから300MHzであり比較的周波数が高く、上空の電離層を透過してしまい通常100km程度より遠方へは届きにくい性質がある。

地震前兆時に地表に電荷が出現するとそれらの電荷は付近を伝搬する電波の電場から力を受け振動する。これは、例えて言えば湖面の上に風が吹くとき水面が波立つのと同じような現象として理解できる。地表面の電荷が波立つ現象は、表面電荷のプラズマ振動である。光学領域では金属表面に光を照射したときに自由電子が振動する表面プラズモンとしてよく知られている。電波の領域でも物質表面に電荷が存在するところに電波が伝搬すると同様の表面プラズマ波が励振される。

実際、地震や地殻活動による表面電荷がこのような地表面のプラズマ波、あるいは地表面プラズモンを生じさせるような表面電荷密度に達することは可能である。このことは上述の理論および実験から推察されており、超短波帯の電波との相互作用を観測すればこれによって地殻に作用する応力の変化を検出することが可能となる。すなわち、遠方のFMラジオ放送波を常時観測しておき、地殻への応力変動があれば受信されるラジオ放送波の強度が変化することにより検知できる。このような現象を実際の地形を考慮して解析し、正確に電波の伝搬特性を理解することが重要となっている。超短波の波長は数mであるが、地形の変化や電波の伝搬距離は数100kmにおよぶ。したがって、少なくとも地形の起伏

と電波の散乱を解析するためには1km四方程度の地形をモデル化する必要がある。このため数値解析は大規模問題となり大型計算機を使用することが必要となる。

## 3 数値解析

### 3.1 手法

今回の数値解析には有限差分時間領域法(FDTD法)を用いた。本手法は電磁波のマクスウェル方程式を差分近似して逐次時間を追って計算するものであり、解析領域を分割することにより効果的な並列計算が可能であり、したがって大規模数値解析に適している。また、プラズマ振動は周波数に依存する性質を持ち、この周波数特性を微分方程式の形で正確に有限差分法に取り込むことが可能となっている。筆者は本手法をナノメートルサイズの金属粒子に生じる局在表面プラズモンの解析に適用しその妥当性は確認済みである [3]。

解析対象には図1(a)-(c)に示すように富山県と長野県にまたがる北アルプス山岳地帯のうち立山連峰の剣岳を選んだ。同峰は標高2999mであり約2500m以上は森林限界を超え樹木はなく、花崗岩が切り立ち露出している構造である。この外観を図1(d)に示す。このため山体のモデル化には典型的な岩石の電気定数として一様に比誘電率6、導電率 $10^{-3}$  [S/m]を適用した。解析は図1(c)に示す直線AB(5km)に沿った2次元解析と正方形C(600m×600m)の範囲における3次元解析を行った。このために必要な計算機資源は超並列計算機GB8000による3次元解析について最大64ノード、1024プロセス、記憶容量3.8TB、計算時間は1解析当たり約6時間であった。

デジタル標高モデルは国土地理院による5m水平分解能標高地図をもとに双3次スプライン補間法を用いFDTD解析に必要な空間分解能0.2mの解析モデル(図2)を生成した。このモデルの山頂に向けて周波数70MHzの電波を西から東(z軸の正方向)へ伝搬させている。

### 3.2 結果および考察

今回の解析の主な結果である山頂付近の電波と地表面プラズマ波との相互作用を、図3には西から観察した様子、図4には上方から見下ろした様子を示している。図3 (a) および図4 (a) には山体の誘電率分布を黒/黄色のコントラストによって示す。地表面に電荷が存在しない場合、すなわち図3 (b)、図4 (b) では電波は山頂で弱く回折していることが分かる。電波は山頂の岩石中に侵入してから外部へ出ていく様子が分かる。これに対して図3 (c)、図4 (c) に示す地表に電荷が存在する場合、すなわち地殻の応力が変動していると考えられる状況では、電波は山頂の表面プラズマ波と強く相互作用し、山頂に引き付けられるように反対側まで地表面に沿って伝搬し、さらに地表の凹凸によって散乱される様子が判明した。このような状況では通常電波が到達しない地域に向けて電波が再放射され、高感度の受信機で受信できることが推測できる。

以上のように、電波と地表面電荷の相互作用を大規模な数値解析によって解明することが可能となった。このような結果に基づき様々な地点から出射されるラジオ放送波の受信強度を常時観測することにより、これまで不明であった地殻活動と電波伝搬の関係を推察することが可能になり、ひいては地震につながる地殻の応力変動を検出できる可能性が高まることを期待している。

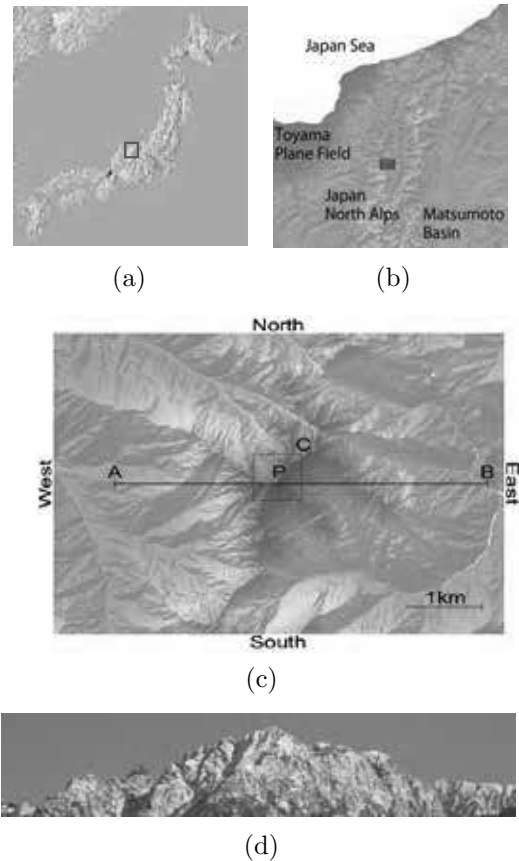


図1: 解析領域の位置と地形。(a) 日本地図中、赤の長方形は日本の北アルプス山岳地帯。(b) 図(a)中の赤い領域の拡大図。本解析で考慮した北アルプスの領域。赤い四角形は解析領域の位置。(c) 図(b)の赤い領域(東西に6 km、南北に4 km)の劔岳のデジタル標高モデル。頂上をPで示す。(d) 西側からの劔岳頂上の眺望。図の領域は水平方向幅約3 km、垂直方向は標高約2 2 0 0 mから3 0 0 0 mの高度差約8 0 0 m。視点は劔岳の真西よりやや北方向に寄る。図(a)-(c)は国土地理院地図、図(d)は著者による撮影。

### 参考文献

- [1] M. Fujii, "A new mode of radio wave diffraction via the terrestrial surface plasmon on mountain range" *Radio Science*, v.51, pp.1396-1412, doi:10.1002/2016RS006068, Sep. 2016.
- [2] L. Crane, "Earthquakes could funnel radio waves to dark zones in mountains", *American Geophysical Union Eos*, 97, doi:10.1029/2016EO059987, Sep. 2016.
- [3] M. Fujii, "Fundamental correction of Mie's scattering theory for the analysis of plasmonic resonance of a metal nanosphere" *Phys. Rev. A*, vol.89, no.3, 033805, Mar. 2014.
- [4] F. Freund, "Charge generation and propagation in igneous rocks", *J. of Geodynamics*, v.33, p.543-570, 2002.

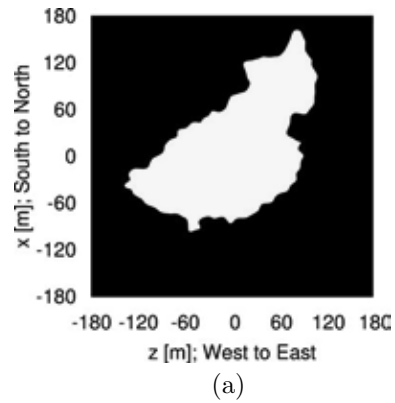
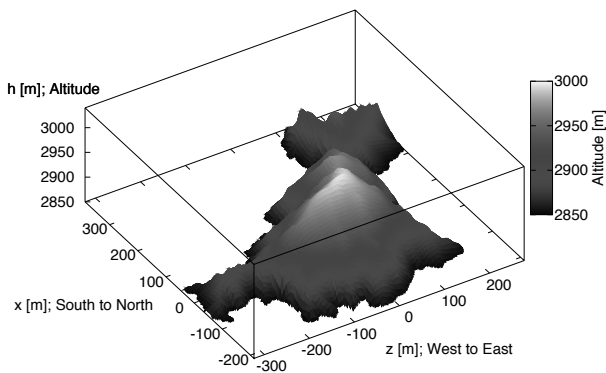


図 2: 剣岳頂上の 3 次元解析モデル。水平方向 x 軸（南から北）z 軸（西から東）、山頂位置が x z の原点。標高 h は y 軸（下から上）方向。

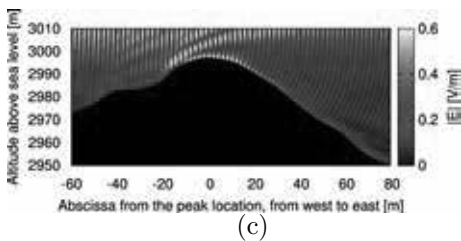
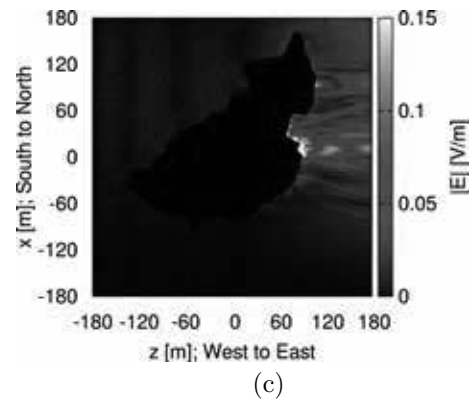
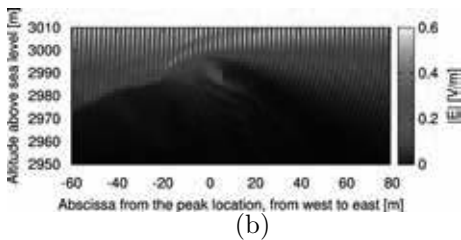
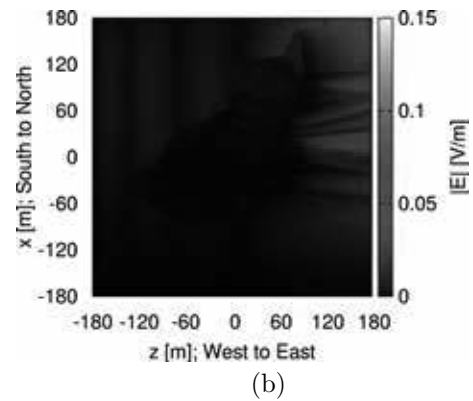
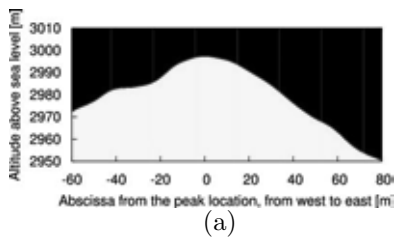


図 3: (a) 剣岳 3 次元モデルにおける頂上付近の比誘電率分布。黒の領域は空気  $\epsilon_{r1} = 1$ 、黄色の領域は山体  $\epsilon_{\infty} = 6$  であり、 $x = 0$  における垂直面上の電界分布。(b) および (c) 3 次元解析結果。西から電波が入射。(b) 電界分布  $|E|$ 、表面電荷が存在しない場合。(c) 同、表面電荷が存在する場合、ただし実効プラズマ周波数  $f'_p = 408$  MHz。

図 4: (a) 剣岳 3 次元モデルにおける頂上付近の比誘電率分布。黒の領域は空気  $\epsilon_{r1} = 1$ 、黄色の領域は山体  $\epsilon_{\infty} = 6$  であり、標高 2940m における水平面上の電界分布。(b) および (c) 3 次元解析結果。西から電波が入射。(b) 電界分布  $|E|$ 、表面電荷が存在しない場合。(c) 同、表面電荷が存在する場合、ただし実効プラズマ周波数  $f'_p = 408$  MHz。

# 「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」に関する大規模計算

横嶋 哲\*

\*静岡大学 学術院工学領域 数理システム工学系列

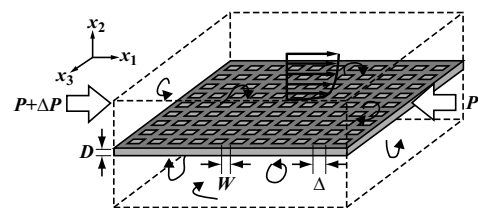
## 1 はじめに

「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」は、京都大学 学術情報メディアセンターのプログラム高度化支援事業（2015年度）に採択され、続いてスーパーコンピュータ共同研究制度（大規模計算支援枠（2015年度・後期））としても採択された。後者（大規模計算）は前者（プログラム高度化）の作業環境としても利用された。本報では後者の概要を報告する。前者の概要は文献[1]を参照されたい。

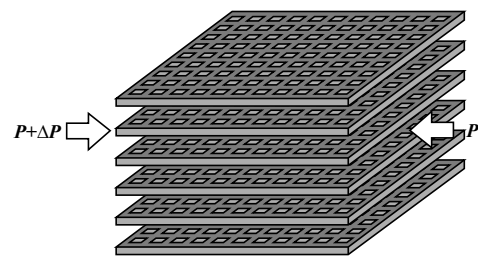
## 2 検討対象流れ：メッシュ状透過性平行平板間乱流

検討対象であるメッシュ状透過性平行平板間乱流（メッシュ・チャンネル乱流）の概略を図1に示す。図1(a)が本研究で実際に対象とした系を表す。全ての方向に周期境界条件が課されていることに留意されたい。すなわち、図1(a)は、図1(b)のように無数のメッシュ状境界が等間隔に並んだ系の幾何学的最小ユニットにあたる。

この流れの流体力学的な位置付けの詳細については文献[2]を参照されたい。以下ではその概要を述べる。図2の中央の絵は図1(a)と同じ系を、 $x_2$ 軸方向にメッシュ平板間距離の半分だけずらして描画したもので、2枚のメッシュ状平板は同一境界を表すことに留意されたい。メッシュ・チャンネル乱流ではメッシュの幾何学形状をメッシュ厚  $D$ 、メッシュ幅  $W$ 、メッシュ間隔  $S$  の3つのパラメータでコントロールする。この場合、間隔  $S$  をゼロとすることで、メッシュ・チャンネル乱流は完全不透過な古典的チャンネル



(a) flow to be studied.



(b) another view of the system.

図1: 検討対象流れの概要。

乱流（図2左）に、厚み  $D$  をゼロ、幅  $W$  と間隔  $S$  を同時にゼロに近づけることで、理想的な透過性 [3] を備えた完全透過チャンネル乱流 [4] に、それぞれ帰着する。すなわちメッシュ・チャンネル乱流は、その幾何学形状を系統的に変化させることによって、これら2つの理想的な系の結びつきを明らかにし、境界の透過性が壁乱流に及ぼす影響の理解に大きく貢献することが期待できる。

ここではメッシュ平板間距離を  $x_2$  軸方向の周期長さ  $L_2$  と一致させ、 $\delta = (1/2)L_2$  とする（すなわち  $\delta$  は平板間距離の半分）。 $x_1$  および  $x_3$  方向にそれぞれ  $L_1 = 3.84\delta$ 、 $L_3 = 1.92\delta$  の領域を確保し、 $x_1$  方向に摩擦レイノルズ数  $Re_\tau \equiv U_\tau \delta / \nu_f = 150$  となる一定の圧力差を課すことで流れを駆動した。

メッシュ形状について、ここでは境界粗度の影響

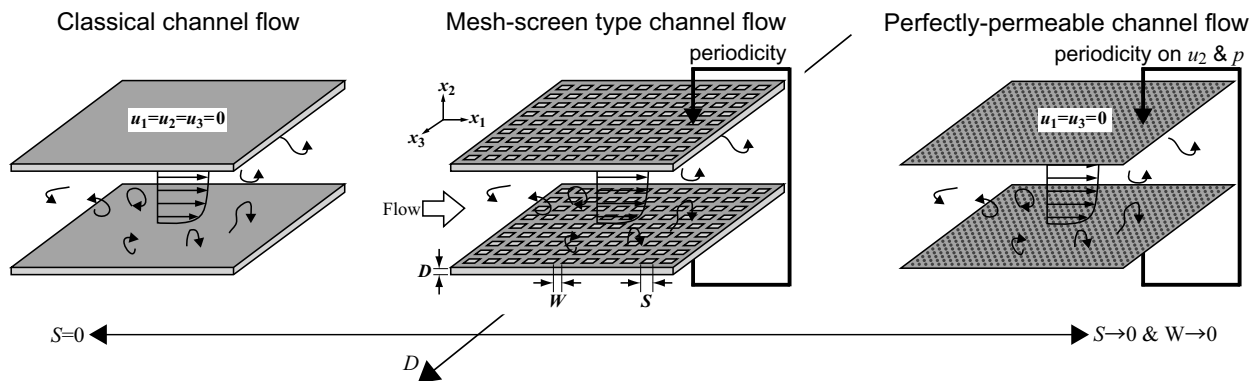


図 2: 古典的チャンネル乱流および完全透過チャンネル乱流 [4] に対する, メッシュ・チャンネル乱流 [2] の位置付け.  $S = 0$  で古典的チャンネル乱流,  $W \rightarrow 0$  かつ  $S \rightarrow 0$  の極限で完全透過チャンネル流にそれぞれ帰着.

表 1: 検討対象としたメッシュ状境界の幾何学形状.

Case	$\phi$	$S^+$	$W^+$	$S/\delta$	$W/\delta$
M25-12	0.25	12	12	0.08	0.08
M25-24	0.25	24	24	0.16	0.16
M25-36	0.25	36	36	0.24	0.24
M44-16	0.44	16	8	0.11	0.05
M44-32	0.44	32	16	0.21	0.11
M44-48	0.44	48	24	0.32	0.16
M56-18	0.56	18	6	0.12	0.04
M56-36	0.56	36	12	0.24	0.08
M56-54	0.56	54	18	0.36	0.12

を議論から排除するために  $D = 0$  とし, 空隙サイズ  $S$  と空隙率 (平板境界上を空隙が占める割合)  $\phi \equiv S^2/(S+W)^2$  を表 1 のように変化させた. 以下では壁変数 ( $U_\tau$  および動粘性係数  $\nu$ ) で規格化された物理量を添え字 + を用いて  $f^+$  のように表す.

メッシュ状平板が流れに及ぼす影響は埋め込み境界法 [5, 6] で表現した. 計算格子は全ての方向に  $\Delta^+ = 2$  で等間隔に配置した. 比較のため, 古典的チャンネル乱流および完全透過チャンネル乱流もメッシュ・チャンネル流と同じ計算領域でシミュレートした. ただしこの 2 ケースのみ, 境界法線方向の計算格子サイズを 1 粘性長で等間隔とした. 用いた支配方程式やその離散化手法などについては文献 [1] を参照されたい.

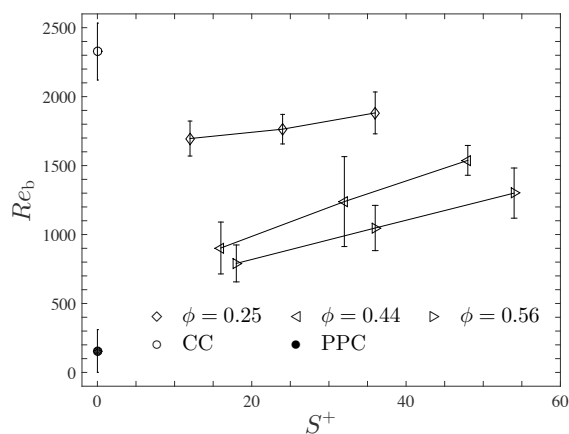


図 3: バルク・レイノルズ数の時間平均値 (プロット) と標準偏差 (エラーバー) の境界幾何学形状に対する依存性. ただし標準偏差は 10 倍に拡大して表示.

### 3 計算結果と考察

図 3 は各ケースから得られた, 断面平均流速  $U_b$  に基づくバルク・レイノルズ数  $Re_b \equiv U_b \delta / \nu$  の時間平均値と標準偏差を表す. ただし標準偏差は 10 倍に拡大して表示した. これより, 平板境界の空隙率  $\phi$  が増す, またはメッシュ空隙  $S$  が狭いほど流量が減り, すなわち抵抗が増すことがわかる. また, 透過性が増して流量が大きく低下した場合にも, その揺らぎの規模はほとんど弱まらない.

次に瞬時流れ特性のメッシュ形状に対する依存性を図 4 に示す. 図 4 には, (i) 速度勾配テンソルの第 2 不変量の等値面で抽出された瞬時渦構造, (ii) いくつかの 2 次元断面 ( $x_1 - x_2$  および  $x_2 - x_3$ ) 上に主流方向変動流速  $u_1 - \bar{u}_1$  のカラーコンター (赤/青は

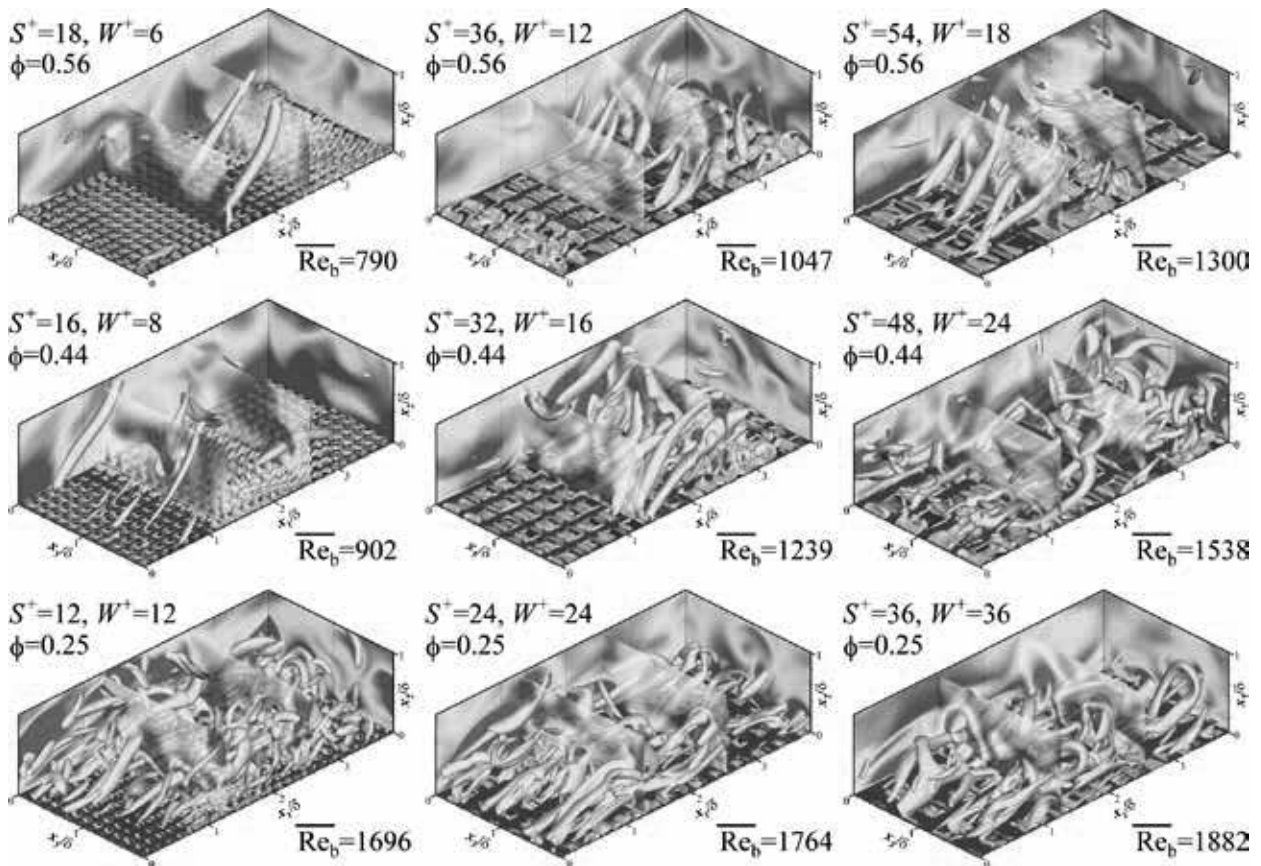


図 4: 瞬時流れ特性のメッシュ形状に対する依存性. 個々の瞬時流れスナップショットは (i) 速度勾配テンソルの第 2 不変量の等値面による渦構造の可視化, (ii) 主流速変動成分  $u_1 - \bar{u}_1$  のカラーコンターを  $x_1 - x_2$  および  $x_2 - x_3$  断面上で表示 (赤:瞬時局所的に平均流  $\bar{u}_1$  より高速; 青:平均流より低速), (iii) 瞬時流速  $u_2$  のカラーコンターを  $x_2 = 0$  平面上で表示 (赤:吹き出し ( $u_2 > 0$ ); 青:吸い込み ( $u_2 < 0$ )), を重ねて示す.

その領域が平均流  $\bar{u}_1$  より速い/遅い流体で占められていることを意味), および (iii) メッシュ状境界面上 ( $x_2 = 0$ ) ではメッシュ空隙での瞬時流速  $u_2$  のカラーコンター (赤は吹き出し ( $u_2 > 0$ ), 青は吸い込み ( $u_2 < 0$ ) を意味), を併せて表示した. 空隙率  $\phi = 0.25$  の場合にはメッシュ空隙サイズ  $S$  の値に依らず, 古典的チャンネル乱流と同様に主流方向に伸びた管状の渦構造が遍在し, その周囲でスウィープやイジェクションを誘起する様子が見られる. 空隙率  $\phi$  の値が 0.44, 0.56 と増すにつれて管状渦は減少し, メッシュ境界の縁に張り付いたひだのような構造が多く出現する. この傾向は空隙サイズ  $S$  が小さくなるにつれて強められる. 管状渦の減少に伴って, スウィープやイジェクションが流路横断方向に一樣に生じる傾向も認められる. すなわち, 空隙率を高めて空隙サイズを狭めたケースで生じた瞬時流

れ構造は, 完全透過チャンネル乱流で観察されたものと多くの共通点を有する.

乱れ強度の境界法線方向成分  $u_2^{\text{rms}}$  の境界上での値はメッシュ空隙を通じた流体の往来の活性の度合いを表し, 透過性境界の重要な特徴量のひとつと言える. ここではメッシュ状境界から計算格子 1 つ分 ( $\Delta^+ = 2$ ) 離れた位置における  $u_2^{\text{rms}}$  (ただしケース CC および PPC では境界上の値を使用) の境界幾何学形状に対する依存性を図 5 に示す. 空隙率  $\phi$  が高いほど, そして空隙サイズ  $S$  が小さいほど吹き出し/吸い込み強度が強まる傾向が認められる. 図 3 と併せると, 境界での吹き出し/吸い込み強度が強いほど抵抗が大きい. これは境界空隙を通して流体の往来が可能となり, より広い断面内で流体混合とそれに伴う運動量交換が活性化されたことで, より大きな抵抗が生じたと理解できる.



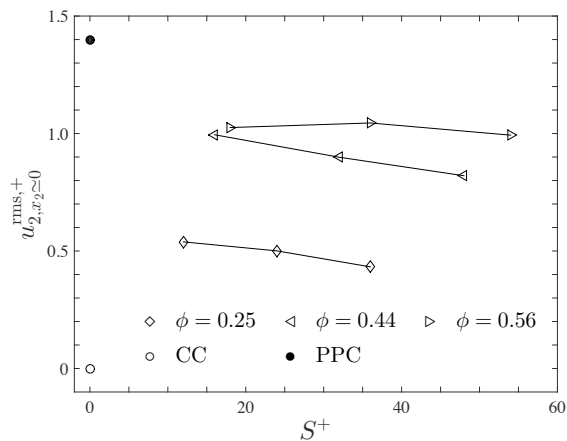


図 5: メッシュ境界空隙を過ぎる吹き出し/吸い込み速度  $u_2$  の乱れ強度の境界幾何学形状に対する依存性.

## 4 おわりに

本報ではこれまで最も研究が積み重ねられてきた壁乱流と言える平行平板間乱流（古典的チャンネル乱流）の平板に理想的な透過性を付加した系とみなせる完全透過チャンネル乱流（図 2 右）[4]，およびその一般化であるメッシュ・チャンネル乱流（図 2 中央）[2]の検討例を紹介し，境界の透過性が流れや抵抗特性に及ぼす影響を検討した。

メッシュ・チャンネル乱流においてメッシュ空隙サイズ  $S$  をゼロに近づけると古典的チャンネル乱流に， $S$  とメッシュ素材幅  $W$  を同時にゼロに近づける（非常に細い素材を用いて非常に目の細かなメッシュを組む）と完全透過チャンネル乱流に，それぞれ漸近することが数値実験によって示された。これは，完全透過チャンネル乱流で観察された，古典的チャンネル乱流とは質的にも大きく異なる力学機構 [4] が極限理想条件下でのみ生じる特異な存在ではなく，実在し得ることを意味する。

本報で示したメッシュ・チャンネル乱流の直接数値計算例は，計算領域および境界極近傍での空間解像度の影響をいくらか受けている可能性がある。これらの問題の克服，メッシュ厚み  $D$  の影響の把握，レイノルズ数依存性の理解など課題は多く，本研究はまだ緒に就いたばかりと言える。

謝辞：大規模計算の実施にあたって，クレイ・ジャパン・インクの鈴木 幸朗 様，および高橋 由樹 様から多大な協力を得ました。記して謝意を表します。

## 参考文献

- [1] 横嶋 哲: 「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」に関するプログラム高度化, 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.14 No.2, 2015 (印刷中) .
- [2] 横嶋 哲: 乱流中の透過性境界の抵抗特性, ながれ, 第 35 巻 第 4 号, pp.307–312, 2016.
- [3] Perot, B. & Moin, P.: Shear-free turbulent boundary layers. Part 1.: Physical insights into near-wall turbulence, *J. Fluid Mech.*, Vol.295, 199–227, 1995.
- [4] Yokojima, S.: Effect of wall permeability on wall-bounded turbulent flows, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol.80, 033401, 2011 .
- [5] Uhlmann, M.: An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows, *J. Comput. Phys.*, Vol.209, pp.448–476, 2005.
- [6] Kempe, T. and Fröhlich, J.: An improved immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particle laden flows, *J. Comput. Phys.*, Vol.231, pp.3663–3684, 2012.

## SC16 参加報告

平石 拓\*

\*学術情報メディアセンター

ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 分野の国際会議 SC16<sup>1</sup>が 2016 年 11 月 13 日から 18 日にかけて米国ユタ州ソルトレイクシティで開催されました。

SC は、最近では登録参加者数が 10,000 人を超える超大規模な会議です。学術会議として HPC 分野のトップカンファレンスに位置付けられるだけでなく、企業や大学・研究所等が出展する exhibition (見本市) も催される「HPC の祭典」的な性格もあります。また、世界のスーパーコンピュータの演算性能を競う Top500<sup>2</sup>の結果が発表される 1 年に 2 度の機会のひとつとしても知られています。

筆者を含む京都大学の教員も数名が参加し、今後の研究や次期スーパーコンピュータの調達などを見据えた情報収集および exhibition 展示などを行いました。京都大学の展示 (図 1) では、学術情報メディアセンターが 2016 年 10 月にサービスを開始した新スーパーコンピュータ Camphor 2 (Cray XC40) , 12 月にサービスを開始した Laurel 2 (Cray CS400 2820XT), Cinnamon 2 (Cray CS400 4840X) の紹介ならびに XC40 のコンピューティングボードの展示 (図 2) を行いました。また、メディアセンターのスーパーコンピューティング研究分野、ビジュアルライゼーション研究分野の研究成果である並列言語・並列実装技術や可視化技術などをパネルや大型ディスプレイを用いて行いました。

京都大学以外の国内研究機関でも、理化学研究所の「京」や「ポスト京」、筑波大学・東京大学の Oakforest-PACS, 産業技術総合研究所の ABCI (AI Bridging Cloud Infrastructure), 東京工業大学の TSUBAME3.0 といった稼働中のシステムや開発プロジェクトの紹介が行われていました。



図 1: SC16 の京都大学ブース

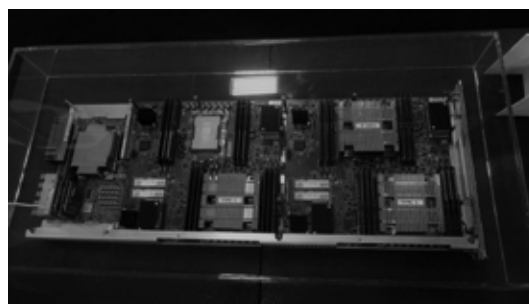


図 2: Cray XC40 のコンピューティングボード

SC16 での Top500 の 1 位は中国の Sunway Taihu-light (神威太湖之光) が 2 回連続で獲得し、4 位までのランキングにも変動がありませんでした。6 位には筑波大学・東京大学の新システム Oakforest-PACS がランクインしています。京都大学の Camphor 2 は 33 位 (国内では 4 位) にランクインしました。また、性能あたりの消費電力を競う Green500 では、Camphor 2 は 9 位にランクインしています。

次回の SC17 は、11 月 12 日～17 日に米国コロラド州デンバーで開催されます。SC17 にも引き続き参加し、ブース出展を行う予定です。

<sup>1</sup><http://sc16.supercomputing.org>

<sup>2</sup><https://www.top500.org/>

## システム A 運転状況 (2016 年 4 月 ~ 2016 年 9 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]
2016/04/01 0:00	2016/04/01 13:00	13.00
2016/06/07 9:00	2016/06/08 9:30	24.50
2016/08/15 17:00	2016/10/01 0:00	1111.00

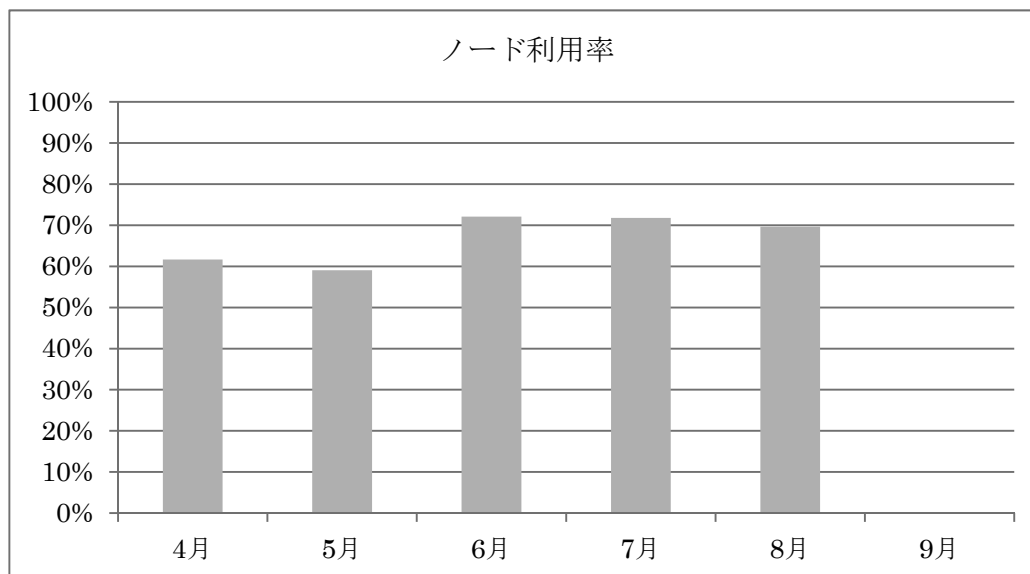
システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2016/05/19 4:21	2016/05/19 8:35	4.23

### 2) サービス状況

	サービス時間[h]	バッチ					
		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
4月	707.00	17,168	41,672	10,668,200	9,510,460	801.5	62 %
5月	739.77	17,434	68,466	12,322,300	10,913,500	871.5	59 %
6月	695.50	20,255	67,293	15,000,500	12,459,900	940.0	72 %
7月	744.00	21,757	79,478	16,640,600	14,630,600	940.0	72 %
8月	353.00	5,172	26,952	7,840,680	7,027,830	940.0	70 %
9月	0.00	0	0	0	0	0.0	0 %
計	3239.27	81,786	283,861	62,472,280	54,542,290	748.8	56 %

※システム更新に伴い、8月後半および9月はサービス休止



- 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 (2016 年 4 月 ~ 2016 年 9 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]
2016/04/01 0:00	2016/04/01 13:00	13.00
2016/06/07 9:00	2016/06/08 9:30	24.50
2016/08/15 17:00	2016/10/01 0:00	1111.00

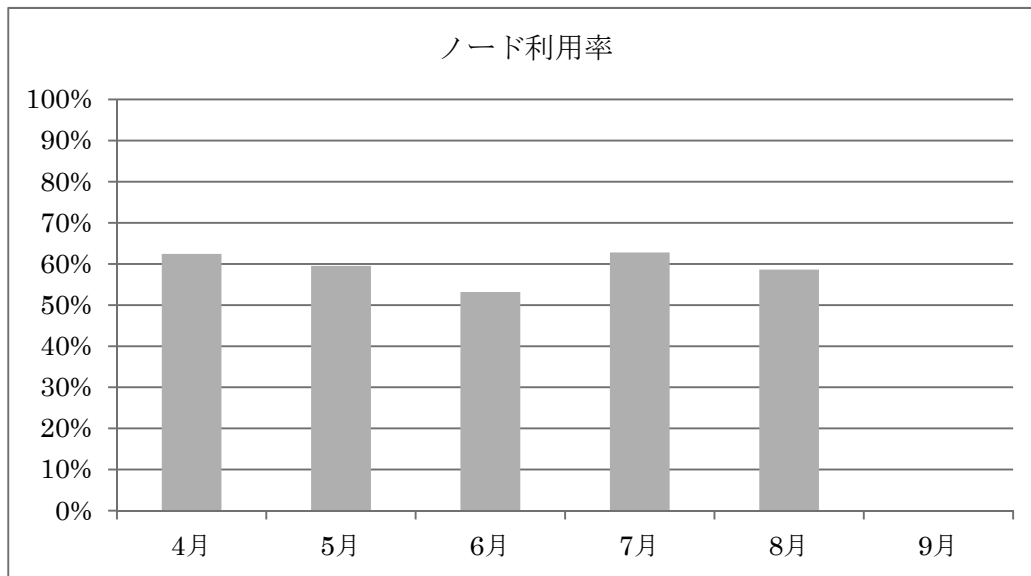
システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし	-	-

### 2) サービス状況

	サービス時間 [h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	707.00	43,914	250,318	3,341,310	253,938	539.1	62 %
5月	744.00	111,675	267,246	4,000,350	307,622	561.8	60 %
6月	695.50	156,066	230,240	3,388,670	264,601	587.0	53 %
7月	744.00	134,761	330,487	4,024,320	319,988	588.9	63 %
8月	353.00	40,454	314,590	2,323,610	182,678	587.8	59 %
9月	0.00	0	0	0	0	0.0	0 %
計	3243.50	486,870	1,392,881	17,078,260	1,328,827	426.1	49 %

※システム更新に伴い、8 月後半および9 月はサービス休止



- 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

# システム C 運転状況 (2016 年 4 月 ~ 2016 年 9 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]
2016/04/01 0:00	2016/04/01 13:00	13.00
2016/06/07 9:00	2016/06/08 9:30	24.50
2016/08/15 17:00	2016/10/01 0:00	1111.00

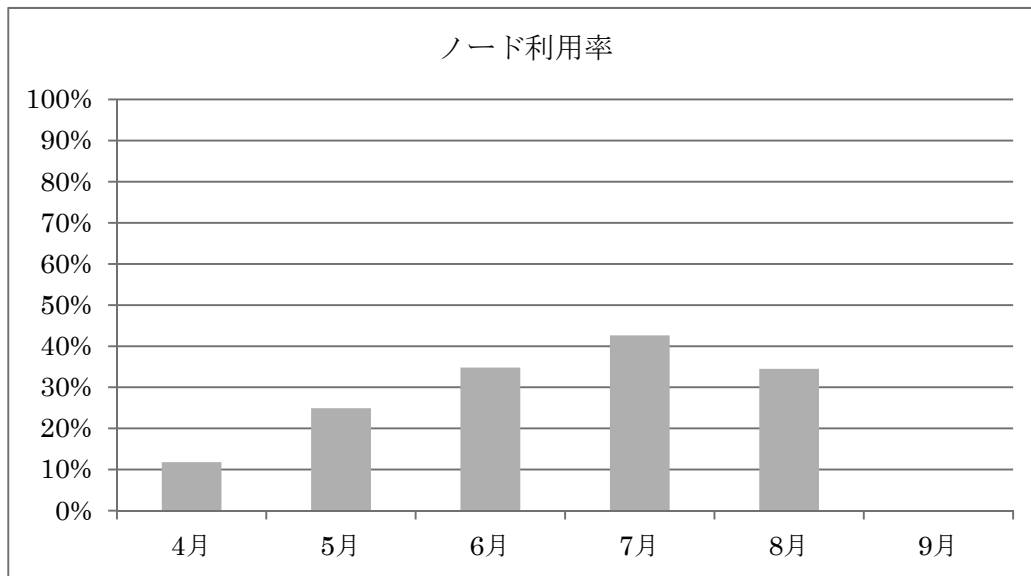
システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし	-	-

## 2) サービス状況

	サービス時間 [h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	707.00	808	893	23,024	1,019	10.1	12 %
5月	744.00	474	3,592	30,962	8,641	11.0	25 %
6月	695.50	1,789	8,330	86,212	50,227	12.0	35 %
7月	744.00	1,697	9,378	96,482	56,275	12.0	43 %
8月	353.00	861	5,573	53,897	38,761	12.0	34 %
9月	0.00	0	0	0	0	0.0	0 %
計	3243.50	5,629	27,766	290,577	154,923	9.5	25 %

※システム更新に伴い、8 月後半および9 月はサービス休止



- 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

## システム D 運転状況 (2016 年 4 月 ~ 2016 年 9 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]
2016/04/01 0:00	2016/04/01 13:00	13.00
2016/06/07 9:00	2016/06/08 9:30	24.50
2016/08/15 17:00	2016/10/01 0:00	1111.00

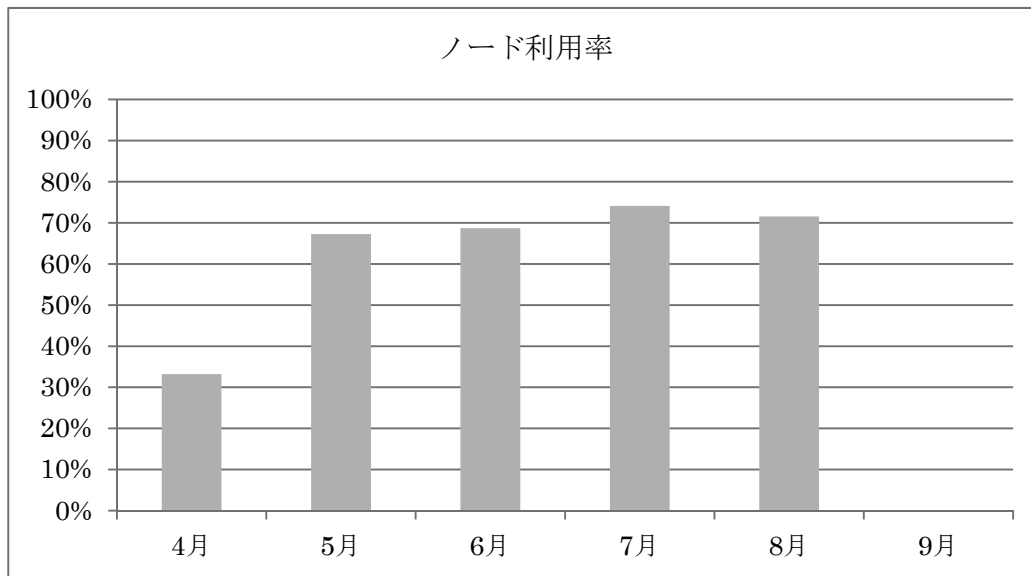
システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし	-	-

### 2) サービス状況

	サービス時間 [h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4 月	707.00	14,070	20,275	2,453,220	117,803	416.0	33 %
5 月	744.00	17,105	130,961	5,794,490	284,382	416.0	67 %
6 月	695.50	16,087	139,291	5,784,630	144,771	416.0	69 %
7 月	744.00	23,843	140,199	6,102,690	215,745	415.9	74 %
8 月	353.00	13,743	65,173	3,350,530	143,932	415.8	72 %
9 月	0.00	0	0	0	0	0.0	0 %
計	3243.50	84,848	495,899	23,485,560	906,633	346.6	52 %

※システム更新に伴い、8 月後半および 9 月はサービス休止



- 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

## システム E 運転状況 (2016 年 4 月 ~ 2016 年 9 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]
2016/04/01 0:00	2016/04/01 13:00	13.00
2016/06/07 9:00	2016/06/08 9:30	24.50
2016/08/15 17:00	2016/10/01 0:00	1111.00

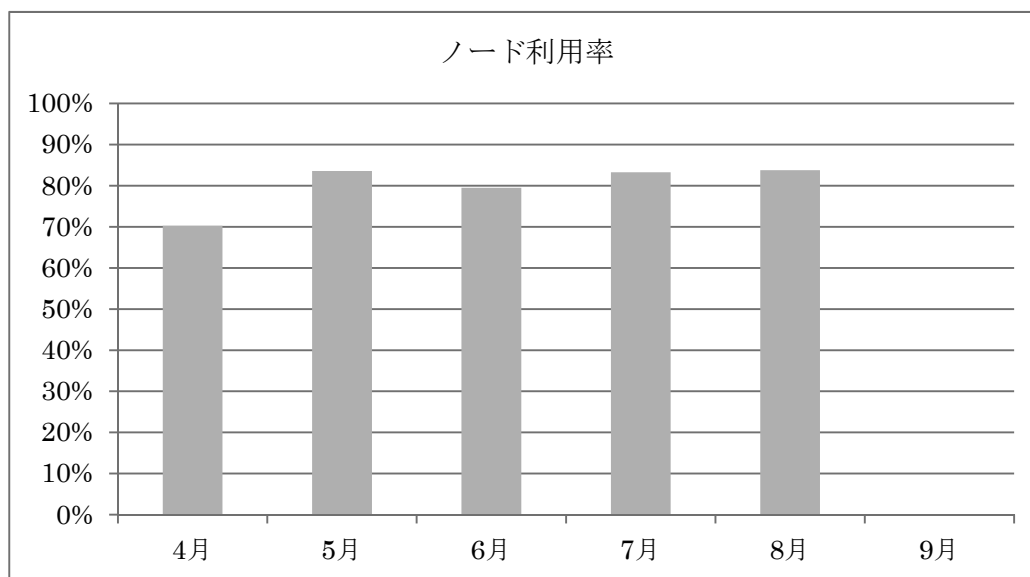
システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2016/08/09 16:52	2016/08/10 04:57	12.08

### 2) サービス状況

	サービス時間 [h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	707.00	3,513	2,653	1,159,560	26,778	233.5	70 %
5月	744.00	1,451	4,764	1,622,990	17,877	258.9	84 %
6月	695.50	3,004	6,556	1,397,190	22,762	288.0	79 %
7月	744.00	4,470	28,511	1,977,640	90,546	287.4	83 %
8月	340.92	939	7,295	896,538	62,367	287.8	84 %
9月	0.00	0	0	0	0	0.0	0 %
計	3231.42	13,377	49,779	7,053,918	220,330	225.9	67 %

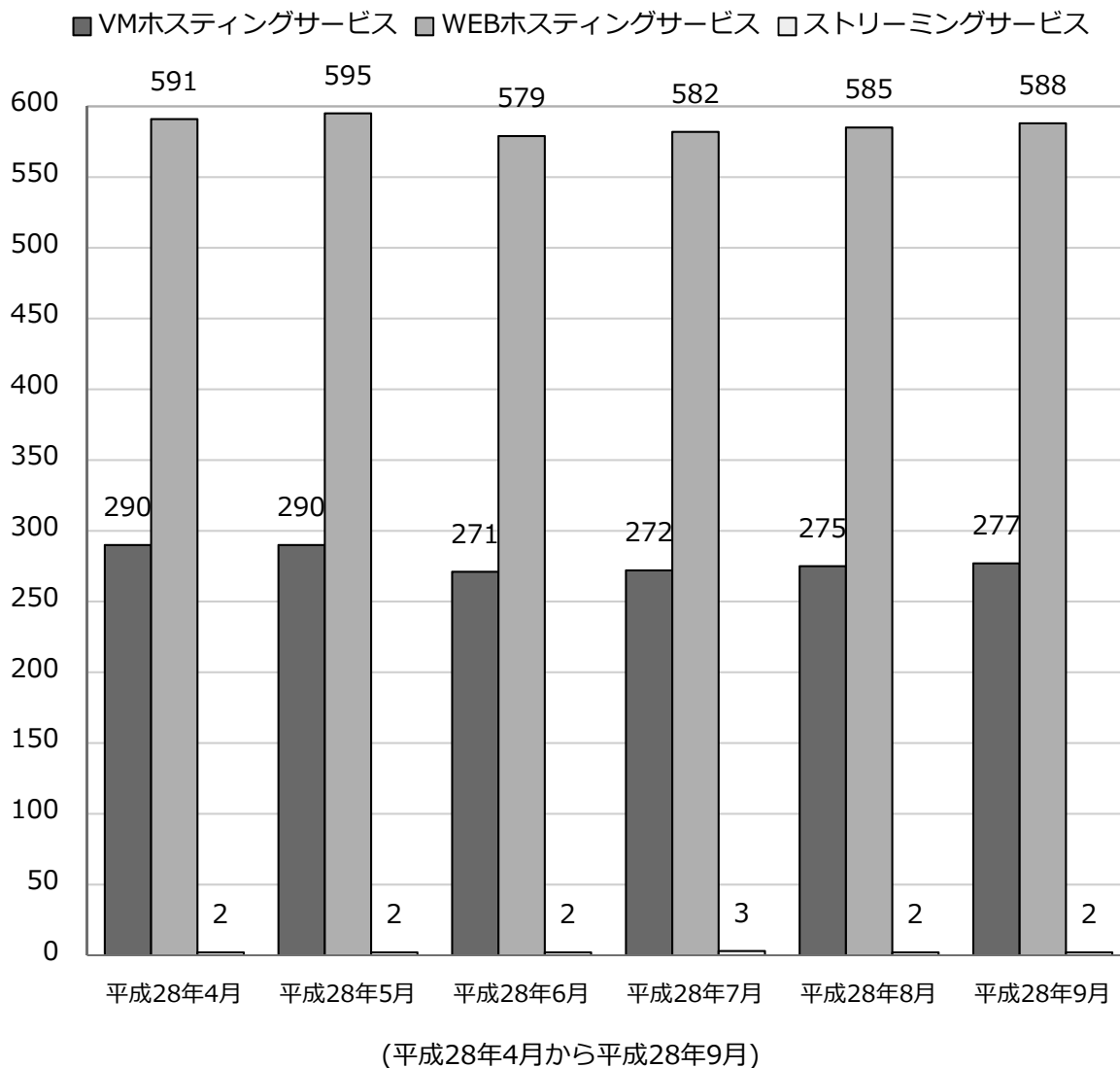
※システム更新に伴い、8月後半および9月はサービス休止



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

## 汎用コンピュータシステムのサービス状況

### 1. ホスティング・ホームページサービス利用状況



## 大型計算機システム利用承認件数について

平成28年9月末現在、大型計算機システムの利用件数は、2,894件となっています。



## センター利用による研究成果

—平成 27 年度計算機利用結果報告書から—

### 【1301 医用生体工学・生体材料学】

1. Kanehiro Matsuyama, Yasuhiro Ishidou, Yong-Ming Guo, Hironori Kakoi, Naohiro Shinohara, Yuhei Yahiro, Ichiro Kawanura, Takao Setoguchi, Shingo Maeda, Setsuro Komiya : Prediction of the Long-term Course of the Cementless Femoral Stem Based on Finite element Analysis and Mid-term Radiological Evaluation : The Orthopaedic Research Society (ORS) 2015 Annual Meeting, 2015
2. 石堂康弘, 松山金寛, 瀬戸口啓夫, 梶博則, 廣津匡隆, 郭永明, 小宮節郎 : X 線学的評価に基づく有限要素解析によるセメントレスシステムの長期経過予測 : 第 88 回日本整形外科学会学術総会, 2015
3. 松山金寛, 石堂康弘, 郭永明, 他 : 中期的 X 線学的評価に基づいたセメントレスシステムの有限要素解析と長期的 X 線学的評価の検証 : 第 46 回日本人工関節学会, 2016
4. Kanehiro Matsuyama, Yasuhiro Ishidou, Yong-Ming Guo, Hironori Kakoi, Naohiro Shinohara, Yuhei Yahiro, Ichiro Kawamura, Takao Setoguchi, Shingo Maeda, Setsuro Komiya : Finite Element Analysis of Cementless Femoral Stem Based on Mid-term and Long-term Radiological Evaluations : The Orthopaedic Research Society (ORS) 2016 Annual Meeting, 2016

### 【2202 自然災害科学】

5. Asano, K., H. Sekiguchi, T. Iwata, M. Yoshimi, T. Hayashida, H. Saomoto, and H. Horikawa : Modelling of wave propagation and attenuation in the Osaka sedimentary basin, western Japan, during the 2013 Awaji Island earthquake : Geophysical Journal International, Vol.204, No.3, pp.1678 - 1694, 2016

### 【4304 数理物理・物性基礎】

6. M. Tanaka, D. Teramoto : Modulation of homogeneous shear turbulence laden with finite-size particles : Journal of Turbulence, Vol.16, No.10, pp.979 - 1010, 2015

### 【4402 気象・海洋物理・陸水学】

7. Kazushi Takemura, Ishioka Keiichi, Shochi Shige : Development of a non-hydrostatic atmospheric model using the Chimera grid method for a steep terrain : Atmospheric Science Letters, Vol.114, No.November 2015, pp.109 - 114, 2015
8. 武村一史, 石岡圭一, 重尚一 : 重合格子法により地形表現を行う気象モデルへの雲微物理過程の実装 : 第 17 回非静力学モデルに関するワークショップ予稿集, 2015
9. 武村一史, 石岡圭一, 重尚一 : 重合格子法を用いた非静力学モデルへの雲微物理過程の導入 : 日本気象学会 2015 年度秋季大会予稿集, 2015
10. 武村一史, 石岡圭一, 重尚一 : 重合格子法を用いた非静力学モデルによる山岳波の数値実験 : 日本気象学会 2015 年度春季大会予稿集, 2015

### 【4801 機能材料・デバイス】

11. Genta Kawaguchi, Mitsuhiko Maesato, Tokutaro Komatsu, Hiroshi Kitagawa, Tatsuro Imakubo, Andhika Kiswandhi, David Graf, James S Brooks : Unconventional Magnetic and Resistive Hysteresis in an Iodine - Bonded Molecular Conductor : Angewandte Chemie International Edition, Vol.54, No.35, pp.10169 - 10172, 2015
12. Jared M Taylor, Tokutaro Komatsu, Shun Dekura, Kazuya Otsubo, Masaki Takata, Hiroshi Kitagawa : The Role of a Three Dimensionally Ordered Defect Sub-lattice on the Acidity of a Sulfonated Metal-Organic Framework : JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, Vol.137,

- No.35, pp.11498 - 11506, 2015
13. Tokutaro Komatsu, Jared M. Taylor, Hiroshi Kitagawa : Design of a Conducting Metal-Organic Framework: Orbital-Level Matching in MIL-140A Derivatives : INORGANIC CHEMISTRY, Vol.55, No.2, pp.546 - 548, 2015
  14. Genta Kawaguchi, Mitsuhiko Maesato, Tokutaro Komatsu, Tatsuro Imakubo, Hiroshi Kitagawa : Interplay between spin-density wave and 3 d local moments with random exchange in a molecular conductor : Physical Review B, Vol.93, No.7, pp.075124 - , 2016
- 【4905 工学基礎】
15. Shugo Yasuda, Ryoichi Yamamoto : Synchronized Molecular-Dynamics simulation for the thermal lubrication of a polymeric liquid between parallel plates : Computers and Fluids, Vol.124, pp.185 - 189, 2016
- 【5001 機械材料・材料力学】
16. 永田恵輔, 西川雅章, 北條正樹 : シェル要素による CFRP 膜面の展開挙動の解析 : 第 6 回日本複合材料会議 (JCCM-6) 講演論文集, 2015
  17. 橋爪良輔, 新玉重貴, 北條正樹, 西川雅章 : ボイドを含む CFRP 構造要素の強度解析手法の検討 : 第 6 回日本複合材料会議 (JCCM-6) 講演論文集, 2015
  18. 福造晃, 西川雅章, 北條正樹 : 不連続 CFRTP の塑性特性の実験と解析 : 第 6 回日本複合材料会議 (JCCM-6) 講演論文集, 2015
  19. 古賀貢史, 橋爪良輔, 新玉重貴, 西川雅章, 北條正樹 : X線 CT によるボイドの定量化と複合材剛性・強度への影響の解析 : 日本機械学会関西学生会平成 26 年度学生員卒業研究発表会講演論文集, 2015
  20. Masaaki Nishikawa, Ichiro Taketa, Kei Ueda, Masaki Hojo : Micromechanical Finite Element Analysis on Compressive Strength of Carbon Fiber-Reinforced Plastics : Proc. of 14th Japanese-European Symposium on Composite Materials, 2015
  21. 永田恵輔, 西川雅章, 北條正樹 : モード合成法を用いた CFRP 薄膜の変形挙動の解析 : 第 40 回複合材料シンポジウム 講演論文集, 2015
  22. 福造晃, 西川雅章, 北條正樹 : 不連続 CFRTP の塑性力学特性の微視的解析 : 第 1 回材料 WEEK 若手学生研究発表会 講演論文集, 2015
  23. 古賀貢史, 橋爪良輔, 新玉重貴, 西川雅章, 北條正樹 : CFRP 内部のボイドの観察と幾何形状を考慮した力学特性の有限要素解析 : 日本機械学会 M&M2015 材料力学カンファレンス 講演論文集, 2015
  24. Masayuki Uranagase, Ryosuke Matsumoto : Tension-compression asymmetry in uniaxial deformation of a magnesium bicrystal with [-1100] symmetric tilt grain boundary : Computational Materials Science, Vol.118, pp.124 - 132, 2016
- 【5004 流体工学】
25. Pillai Abhishek, Tomoaki Kitano, Ryoichi Kurose, Satoru Komori : Direct Numerical Simulation of Combustion Noise in Open Hydrogen Diffusion Jet Flames : In Proc. of International Gas Turbine Congress 2015 (IGTC2015), 2015
- 【5401 金属物性】
26. T. Ichitsubo, S. Okamoto, T. Kawaguchi, Y. Kumagai, F. Oba, S. Yagi, N. Goto, T. Doi, E. Matsubara : Toward "rocking-chair type" Mg-Li dual-salt batteries : J. Mater. Chem. A, Vol.3, pp.10188 - 10194, 2015
  27. S. Okamoto, T. Ichitsubo, T. Kawaguchi, Y. Kumagai, F. Oba, S. Yagi, K. Shimokawa, N. Goto, T. Doi, E. Matsubara : Intercalation and push-out process with spinel-to-rocksalt transition on Mg insertion into spinel oxides in magnesium batteries : Advanced Science, Vol.2, pp.1500072-1 - 1500072-9, 2015
  28. Y. Hinuma, Y. Kumagai, F. Oba, I. Tanaka : Categorization of surface polarity from a crystallographic approach : Computational Materials Science, Vol.113, pp.221 - 230, 2016
  29. K. T. Butler, Y. Kumagai, F. Oba, A. Walsh : Screening procedure for structurally and electronically matched contact layers for high-performance solar cells: hybrid

- perovskites : J. Mater. Chem. C, Vol.4, pp.1149 - 1158, 2016
30. A. A. Belik, W. Yi, Y. Kumagai, Y. Katsuya, M. Tanaka, F. Oba : LiNbO<sub>3</sub>-type oxide (Tl<sub>1-x</sub>Sc<sub>x</sub>)ScO<sub>3</sub>: High-pressure synthesis, crystal structure, and electronic properties : Inorganic Chemistry, Vol.55, pp.1940 - 1945, 2016
- 【5501 化工物性・移動操作・単位操作】
31. 岡本幸也, 高木洋平, 岡野泰則 : 高シュミット混合溶液における相分離ドメインと乱流渦構造の相関 : 日本流体力学会年会 2015 講演論文集, 2015
32. N. Adkar, T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano, S. Dost : Proc. of the joint conference of ISPS-6 and ITTW2015 : Numerical Simulation of the Effect of the Free Surface Shape on Marangoni Convection in a Ring-Shaped Liquid Film with Low Prandtl Number, Vol.FI-ST(A)-P07, 2015
33. N. Adkar, T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano : Numerical investigation of the effect of the liquid film volume on thermocapillary flow in a thin circular liquid film ~ various Prandtl number fluids ~ : 化学工学会第47回秋季大会, Vol.P122, 2015
34. T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano, S. Dost : Numerical investigation of oscillatory thermocapillary flows under zero gravity in a circular liquid film with concave free surfaces : Phys. Fluids, Vol.28, No.3, pp.032106 - , 2016
- 【5603 地球・資源システム工学】
35. Yumi Katasho, Yunfeng Liang, Sumihiko Murata, Yasuhiro Fukunaka, Toshifumi Matsuoka, Satoru Takahashi : Mechanisms for Enhanced Hydrophobicity by Atomic-Scale Roughness : Scientific Reports, Vol.5, No.13790, pp.1 - 12, 2015
36. Asuka Fukutome, Haruo Kawamoto, Shiro Saka : Gas-Phase Reactions of Glyceraldehyde and 1,3-Dihydroxyacetone as Models for Levoglucosan Conversion during Biomass Gasification : ChemSusChem, 2016
- 【5803 生物物理学】
37. Hiraku Oshima, Tomohiko Hayashi, Masahiro Kinoshita : Essential Roles of Water in Actin-Myosin Binding : Biophysical Journal, Vol.110, No.Issue 3, Supplement 1, pp.300a - , 2016
- 【6801 化学系薬学】
38. Masato Saito, Nobuya Tsuji, Yusuke Kobayashi, Yoshiji Takemoto : Direct Dehydroxylative Coupling Reaction of Alcohols with Organosilanes through Si-X Bond Activation by Halogen Bonding : Org. Lett., Vol.17, No.12, pp.3000 - 3003, 2015
39. Yusuke Kobayashi, Ryuta Kuramoto, Yoshiji Takemoto : Catalytic asymmetric formal synthesis of beraprost : Beilstein J. Org. Chem, Vol.11, pp.2654 - 2660, 2015

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	2.0	-
	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)		2.0	
	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)		2.0	
	タイプE	基本	100,000 円/年	E	共有	最大2ノード相当((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×2)		2.0	
グループ	タイプA1	最小	230,000 円/年	A	優先	4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)	336	16.0	8
		追加単位	115,000 円/年			2ノード((68コア、16+96GBメモリ)×2)		8.0	4
	タイプA2	最小	276,000 円/年	A	準優先	8ノード((68コア、16+96GBメモリ)×8)		19.2	16
		追加単位	69,000 円/年			2ノード((68コア、16+96GBメモリ)×2)		4.8	4
	タイプA3	最小	690,000 円/年	A	占有	8ノード((68コア、16+96GBメモリ)×8)		32.0	16
		追加単位	345,000 円/年			4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)		16.0	8
	タイプB1	最小	240,000 円/年	B	優先	4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)		16.0	8
		追加単位	120,000 円/年			2ノード((36コア、128GBメモリ)×2)		8.0	4
	タイプB2	最小	288,000 円/年	B	準優先	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)		19.2	16
		追加単位	72,000 円/年			2ノード((36コア、128GBメモリ)×2)		4.8	4
	タイプB3	最小	720,000 円/年	B	占有	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)		32.0	16
		追加単位	360,000 円/年			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)		16.0	8
	タイプC1	最小	150,000 円/年	C	優先	1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)		16.0	8
		追加単位	150,000 円/年			1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)		16.0	8
	タイプC2	最小	180,000 円/年	C	準優先	2ノード((72コア、3072GBメモリ)×2)		19.2	16
		追加単位	90,000 円/年			1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)		9.6	8
タイプE1	最小	280,000 円/年	E	優先	4ノード((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×4)	16.0	8		
	追加単位	140,000 円/年			2ノード((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×2)	8.0	4		
タイプE2	最小	336,000 円/年	E	準優先	8ノード((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×8)	19.2	16		
	追加単位	84,000 円/年			2ノード((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×2)	4.8	4		
タイプE3	最小	840,000 円/年	E	占有	8ノード((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×8)	32.0	16		
	追加単位	420,000 円/年			4ノード((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×4)	16.0	8		
大規模ジョブ	タイプA	最小	23,000 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	11,500 円/週(7日)			4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)			
	タイプB	最小	24,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)			
		追加単位	12,000 円/週(7日)			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)			
	タイプC	最小	15,000 円/週(7日)	C	占有	2ノード((72コア、3072GBメモリ)×2)			
		追加単位	7,500 円/週(7日)			1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)			
	タイプE	最小	28,000 円/週(7日)	E	占有	8ノード((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×8)			
		追加単位	14,000 円/週(7日)			4ノード((10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×4)			
専用クラスタ	-	最小	720,000 円/年	B	-	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)	-	32.0	16
		追加単位	360,000 円/年			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)	-	16.0	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。  
「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に規定するの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	11,300 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	13,200 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
VM ホスティングサービス	72,000 円/年	1 仮想マシンにつき
ホームページサービス	6,000 円/年	1 ドメイン名につき
ストリーミングサービス	6,000 円/年	1 申請につき

備考

1. 利用負担額は、総額表示である。
2. 上記表の汎用コンピュータシステムのサービスを利用するためには、大型計算機システムの利用者であることが必要である。
3. VM ホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことにより 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	18,000 円/年	2 コアにつき (最大 8 コアまで)
メモリ増量	18,000 円/年	8GB につき (最大 64GB まで)
ディスク増量	18,000 円/年	200GB につき (最大 1,000GB まで)

4. VM ホスティングサービスにおいて VMware を用いる場合は、下記の負担額を支払うことにより VMware の利用及び CPU、メモリ、ディスクを増量することができる。ただし、システム資源が限られているためサービスの提供を限定することがある。

区分	利用負担額	単位
VMware 利用	72,000 円/年	1 仮想マシンにつき
CPU 増量	36,000 円/年	2 コアにつき (最大 8 コアまで)
メモリ増量	36,000 円/年	8GB につき (最大 64GB まで)
ディスク増量	18,000 円/年	200GB につき (最大 1,000GB まで)

5. ホームページサービス及びストリーミ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公開スペースの上限を拡大することができる。

区分	利用負担額
公開スペース 20GB プラン	3,000 円/年
公開スペース 50GB プラン	9,000 円/年

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

別表3 スーパーコンピュータシステム

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	19.2	16	1,104,000 円/年
	12ノード(68コア、16+96GBメモリ)×12)	336	28.8	24	1,656,000 円/年
	16ノード(68コア、16+96GBメモリ)×16)	336	38.4	32	2,208,000 円/年
B	8ノード(36コア、128GBメモリ)×8)	336	19.2	16	1,152,000 円/年
	12ノード(36コア、128GBメモリ)×12)	336	28.8	24	1,728,000 円/年
	16ノード(36コア、128GBメモリ)×16)	336	38.4	32	2,304,000 円/年
C	2ノード(72コア、3072GBメモリ)×2)	336	19.2	16	720,000 円/年
	3ノード(72コア、3072GBメモリ)×3)	336	28.8	24	1,080,000 円/年
	4ノード(72コア、3072GBメモリ)×4)	336	38.4	32	1,440,000 円/年
E	8ノード(10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×8)	336	19.2	16	1,344,000 円/年
	12ノード(10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×12)	336	28.8	24	2,016,000 円/年
	16ノード(10コア、32GBメモリ+ 1MIC)×16)	336	38.4	32	2,688,000 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。
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。

## — 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
- システム E : camellia.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>
- ホームページ・ホスティングサービスに関する問い合わせ先  
**【クラウドコンピューティング掛】**  
E-mail : whs-qa@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7494  
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/whs/>

## 編 集 後 記

今号の SC16 参加報告記事を担当しました。この会議には、日本の大学・企業・報道関係者が数多く参加しており、日本語の参加報告記事も数多く公開されています。「SC16 ニュース」などでウェブ検索すると、写真つきの読み易い記事もいくつか見つかります。スパコン業界のトレンドを掴むのにもよいかと思いますのでご興味のある方は読んでみてください。

(副部長)

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. 15, No. 2

2017年 3月 30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. 075-753-7400  
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>  
印刷所 〒616-8102 京都市右京区太秦森ヶ東町 21-10  
株式会社エヌジーピー

広報編集部会

深沢 圭一郎 (部会長)

平石 拓 (副部長)

檀原 正憲

南雲 円

尾形 幸亮

高見 好男

元木 環

表紙デザイン：谷 卓司

(ティアンドティ・デザインラボ)