

全国共同利用版

広報

センター共同研究報告(平成28年度)

【巻頭言】「Vol.16, No.1 号の発刊に当たって」牛島 省【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠)】斎藤 隆泰◎梅山 有和◎岡本 幸也◎鬼頭(西岡) 宏任, 佐藤 竜馬, 重田 育照◎二宮 順一◎矢野 雅貴◎高木 洋平◎金谷 翔子◎斉木 吉隆◎安部 達也◎野村 怜佳, 高瀬 慎介, 森口 周二, 寺田賢二郎◎江口 俊和◎小林 幹◎STOYANOVA Petya Valentinova◎山守 優◎相馬 悠人◎中野 義明◎井町 宏人◎鈴木 聡◎小谷 拓磨, 森口 周二, 高瀬 慎介, 寺田 賢二郎◎吉田 敏哉◎小林 志保, 中田 聡史◎豊浦 和明◎井上 幹允◎藤道 宗人◎武藤 昌也◎佐々木 英一【プログラム高度化支援事業研究報告】野田 利弘, 豊田 智大◎高瀬 慎介

Vol.16, No.1 号の発刊に当たって

京都大学学術情報メディアセンター 牛島 省

本号では、京都大学学術情報メディアセンターにおいて実施された平成 28 年度の共同研究報告について特集いたします。平成 28 年度は、「若手・女性研究者奨励枠」において 27 件、「プログラム高度化共同研究」において 2 件の共同研究が実施されました。

学術情報メディアセンターでは、スーパーコンピュータ共同研究制度として、「若手・女性研究者奨励枠」、「大規模計算支援枠」、「プログラム高度化共同研究」という 3 種類の研究支援事業を実施しています。課題募集は年度開始前後に行われ、追加募集も実施される場合があります。詳細は、<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/support/kyodo/> をご覧下さい。応募された課題の採否は、スーパーコンピュータ共同研究企画委員会にて審査されます。

これらの共同研究制度のうち、「若手・女性研究者奨励枠」の応募資格は、(1)40 歳未満の若手研究者(学生を含む、性別は問わない)、あるいは、(2)女性研究者(年齢は問わない)、と平成 27 年度より拡大されており、スーパーコンピュータを利用することで学術的にインパクトがある成果を創出できる課題に対して、計算機利用負担金の全額または一部を本センターが負担しています。さらに、「若手・女性研究者奨励枠」は、平成 28 年度より JHPCN (学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点) の活動の一環となり、優れた課題は、JHPCN の萌芽型共同研究へ推薦されることになりました。推薦された課題は、JHPCN シンポジウムにてポスター発表を行うことが可能となるなどの特典がありますので、この共同研究制度をご活用ください。本号に掲載された 27 件の「若手・女性研究者奨励枠」の研究成果報告では、各種の流体および流体構造連成問題、破壊力学、波動問題、有機分子材料、量子化学、分子動力学計算、MRI データ解析、力学系軌道問題、カオス力学系、メモリ一貫性モデルなど多様な研究が行われ、全国 15 大学にわたる若手研究者との共同研究となりました。

また、「プログラム高度化共同研究」では、京都大学のスーパーコンピュータをグループコースまたは専用クラスターコースでご利用の研究グループ(JHPCN にて京都大学のスーパーコンピュータを利用する研究者も含む)を対象に、プログラムの制御構造・データ構造の改良による性能チューニングや並列化手法の改良、問題分割・負荷分散方式などの改良による大規模計算プログラムの高度化・高性能化を支援しています。平成 28 年度は、地盤の変形・破壊を扱う有限要素解析と、津波浮遊物が関係する流体構造解析のプログラム高度化支援を行いました。一般固有値解析における数値計算ライブラリの利用方法やハイブリッド並列計算法、また DEM と FEM をカップリングした解法に対する並列化など、様々な高度化・高性能化が行われており、計算効率を向上させる際の参考になると思います。

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

種々の波動問題に対する積分核に依存しない 演算子積分時間領域高速多重極境界要素法の開発

斎藤 隆泰**

*群馬大学 大学院理工学府 環境創生部門

1 はじめに

本研究では, 種々の波動問題に対する積分核に依存しない演算子積分時間領域高速多重極境界要素法を開発することを行う。

境界要素法 (BEM: Boundary Element Method) は, 波動問題に対する有効な解析手法として発展してきた。しかしながら, その時間領域解法には, いくつかの欠点が存在する。まず, 一般的に時間領域境界要素法は, 陰解法であるため, 大規模問題の解析は難しい点が挙げられる。すなわち, 計算効率の問題である。また, 時間増分が小さい場合に数値解が不安定になることも欠点として知られている。さらに, 時間領域境界要素法は, 基本解を用いて計算をする必要があるため, 基本解を閉じた形で求めることができない問題に対しては, 通常, 適用することができない。このことは, 時間領域境界要素法は限られた問題しか適用できない適用範囲の問題を持っていることとなる。このような欠点が原因となり, 時間領域境界要素法を用いた大規模波動解析はこれまでほとんど行われていないのが現状である。そこで, 本研究では, これら 3 つの欠点を克服し, 境界要素法の適用範囲を拡大した新しい時間領域境界要素法の開発を目指す。以下では, これら 3 つの欠点についてどのような方法を用いて対応したかについてまとめ, 簡単な数値解析例を示すと共に, 今後の課題について述べる。

2 演算子積分法の適用

まず, 本研究では, 時間領域境界要素法の時間方向の離散化に演算子積分法 (CQM: Convolution Quadrature Method)[1] を適用することを行う。演算子積分

法は, Lubich により提案された, 畳み込み積分を精度良く, 安定に計算する方法である。本研究では, この演算子積分法を時間領域境界積分方程式に現れる畳み込み積分に適用することで, 時間領域境界要素法における, 時間増分が小さい場合の数値不安定性の問題を解決することを行った。演算子積分法を用いた場合, 境界積分方程式における積分核は, 時間領域ではなく Laplace 変換領域でのものとなる。通常, 例えば粘弾性波動問題や, 飽和多孔質弾性波動問題のように弾性波速度が周波数に依存するような問題は, 時間領域で閉じた形の基本解を求めることはできないが, Laplace 変換領域の基本解は容易に求めることができる。すなわち, 演算子積分法の利用により, 時間増分が小さい場合の数値不安定性の問題と, 時間領域境界要素法の適用範囲の問題を改善することができる。

3 積分核に依存しない高速多重極法の適用

前節で述べた演算子積分法を適用したとしても, 結局の所, 異方性弾性波動問題のように Laplace 変換領域で閉じた基本解を得ることができないような問題もある。また, 演算子積分法を適用したとしても, 時間領域境界要素法の欠点である計算効率の問題を克服することにはならない。そこで, 本研究では, これらに対応するために, 積分核に依存しない高速多重極法 (KIFMM: Kernel Independent Fast Multipole Method) を適用することを考える。積分核に依存しない高速多重極法は, Ying ら [2] より提案された比較的新しい高速多重極法であり, 擬似的な多重極展開係数を作り出した後, 通常的高速多重極アルゴリズム

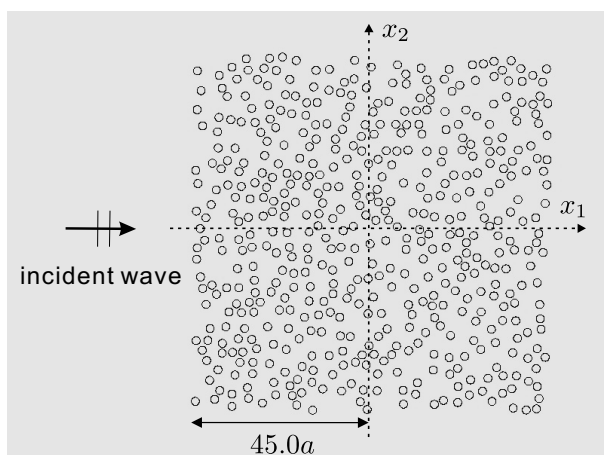


図 1: 解析モデル.

ムの下で計算を高速化する方法である. その際, 積分核の多重極展開を直接に必要としないため, 先に述べたように異方性弾性波動問題のような閉じた基本解が求まらず, 多重極展開が難しい問題に対しても高速多重極法の適用が可能であると考えられる. また, その際, 従来の高速多重極法で必要となった変形ベッセル関数等の複雑な関数を取り扱う必要も生じないことから, 本研究が将来有効な大規模波動解析手法と成り得る可能性を秘めている.

4 数値解析例

以下, 簡単な数値解析例を示す. 社会基盤構造物の維持管理において, 構造物を壊すことなくそれらの健全度を評価し (非破壊評価法), 健全度に応じて適切な補修・補強等を施すことは重要である. その非破壊評価法において, 現場で最も広く利用されている方法は超音波非破壊評価法であるが, 超音波は固体中では弾性波の性質を示すため, 超音波非破壊評価法の数値シミュレーションは, 弾性波動シミュレーションへと帰着される. そこで, ここでは, 種々の波動問題の中で最も基礎的はスカラー波動問題 (弾性波動問題における SH 波動問題) に対する本手法による解析結果を示す. 図 1 は 2 次元無限弾性体中の半径 a の 500 個の空洞群による入射スカラー波の散乱問題の解析モデルを示している. 入射波は x_1 軸の正の向きに波速 $c = 1$ で伝搬する平面波とし, 各空洞は, 72 境界要素でモデル化されている. 全時間ステップ数は 128 であることから, この問題の自由度は $4608000(72 \times 500 \times 128)$ である. 通常の時間領域境界要素法では, 当然, 記憶

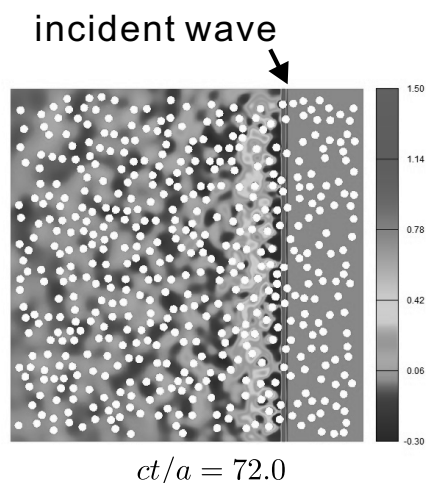


図 2: 空洞群周辺の弾性波動場.

容量の制限により解析することが難しい問題であるが, 本手法を用いることにより, 単一ノードの計算機でも解析が可能となっている. 図 2 は, 無次元化時刻 $ct/a = 72.0$ における解析結果であり, 入射波の波面が丁度左端の空洞に当たる時刻を $ct/a = 0.0$ としている. 入射波の波面が空洞群を通過し, それに伴う多重散乱波が生じている様子を見て取ることができる.

5 まとめと今後の課題

積分核に依存しない時間領域高速多重極境界要素法を開発した. 今後は超音波非破壊評価法に関する種々の弾性波動問題へ適用する予定である.

謝辞

本研究は平成 28 年度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) の支援により行われ, 現在も, 平成 29 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究 (jh170045, 研究代表者: 斎藤隆泰), にて引き続き京都大学の支援を受けている.

参考文献

- [1] Lubich, C.: Convolution quadrature and discretized operational calculus I, *Numer. Math.*, **52**, pp. 129-145, (1998).
- [2] Ying, L., Biros, G. and Zorin, D.: A kernel-independent adaptive fast multipole algorithm in two and three dimensions, *J. Comput. Phys.*, **196**, pp. 591-626, (2004).

光機能性有機分子材料の構造と電子構造の解明による有機系太陽電池の素子性能向上

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

ポルフィリンは 400~450 nm に Soret 帯と呼ばれる強い吸収と 550~600 nm に Q 帯と呼ばれる中程度の吸収をもち、色素増感太陽電池の増感色素として有望である。最近 Diau らは 800nm 程度までの光捕集能をもつ LDD1 というポルフィリンダイマーを用いることで変換効率 $\eta = 8.8\%$ を報告している。本研究では、この優れた光捕集能をもつポルフィリンダイマーのさらなる光捕集能向上を目指し、ジアリールアミノ基を *meso* 位に導入したポルフィリンダイマー ZnPTD を設計した (Figure 1)。

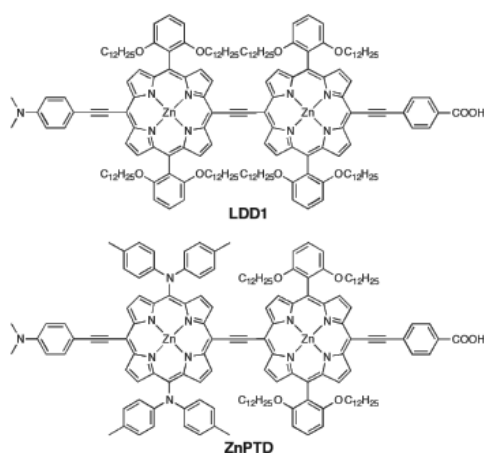


Figure 1. Molecular structures of porphyrins.

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

ZnPTD および LDD1 のエタノール/トルエン

(1/1)溶液中の吸収スペクトルを Figure 2 に示す。ZnPTD の吸収スペクトルは Soret 帯、Q 帯ともに LDD1 よりも長波長シフト・ブロード化しており、可視・紫外領域で光捕集能が改善されていることがわかった。

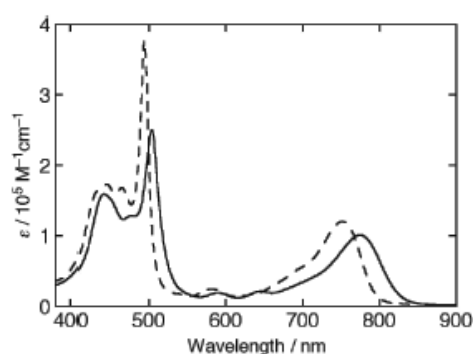


Figure 2. UV-vis absorption spectra of ZnPTD (solid line) and LDD1 (dashed line) in ethanol/toluene (v/v = 1/1).

色素増感太陽電池の作製と評価を行ったところ、ZnPTD において $J_{\text{sc}} = 16.0 \text{ mA cm}^{-2}$, $V_{\text{oc}} = 0.626 \text{ V}$, $FF = 0.615$, $\eta = 6.2\%$ 、LDD1 において $J_{\text{sc}} = 19.0 \text{ mA cm}^{-2}$, $V_{\text{oc}} = 0.633 \text{ V}$, $FF = 0.680$, $\eta = 8.2\%$ という結果が得られた。光捕集能の改善により、820nm 以降においては ZnPTD の方が LDD1 よりも高い IPCE 値(外部量子収率)を示している。しかし、より短波長の領域で ZnPTD の方が低い IPCE 値となっているために、結果として LDD1 よりも小さい J_{sc} 値になったといえる。この理由としては、2,6-ビス (ドデシルオキシ)フェニル基の数が LDD1 では4つであるのに対して、ZnPTD では2つしかないためダイマー間の

会合の影響が長鎖アルコキシ基の少ない ZnPTD で大きくなっていることが考えられる。

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 ZnPTD および LDD1 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。ZnPTD および LDD1 の HOMO-LUMO ギャップを比較すると ZnPTD (1.84 eV) < LDD1 (1.91 eV) となった。ZnPTD では LDD1 と比較して小さな HOMO-LUMO ギャップとなっており吸収の長波長シフトが予想されるが、これは実験結果と一

致する。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ため、ZnPTD でも LDD1 同様、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、HOMO の電子密度は吸着部位から遠い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 π -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, K. Kawamoto, K. Sugiura, Y. Fujimori, Y. Tsuji, K. Kurotobi, S. Ito and H. Imahori, "A Effects of Bulky Substituents of Push-Pull Porphyrins on Photovoltaic Properties of Dye-Sensitized Solar Cells", *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **8**, 15379-15390 (2016).
- [4] T. Higashino, K. Sugiura, Y. Tsuji, S. Nimura, S. Ito and H. Imahori, "A Push-Pull Porphyrin Dimer with Multiple Electron-Donating Groups for Dye-Sensitized Solar Cells: Excellent Light-Harvesting in Near-Infrared Region", *Chem. Lett.*, **45**, 1126-1128 (2016).

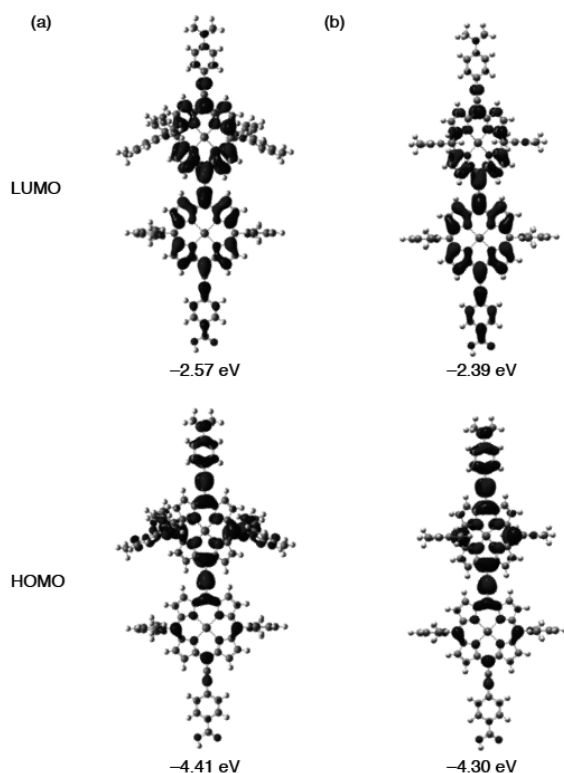


Figure 3. Selected molecular orbital diagrams for (a) ZnPTD and (b) LDD1 obtained by DFT calculations with B3LYP/6-31G(d). To simplify the calculations, alkyl chains on the diarylamino groups were replaced with methyl ones, and dodecyloxy groups on the phenyl groups were replaced with methoxy ones.

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、流動、伝熱、物質移動の移動現象と相分離現象とを相互に作用させ、熱交換器の伝熱効率を、相分離流体を利用して促進する手法開発を目指し、強制対流伝熱下における相分離現象の二次元数値解析を行った。結果から、相分離が生じた壁、出口付近で、相分離に起因する速度変動が生じ、局所的に伝熱が促進されることが観察出来た。以上から、あらかじめシミュレーションによって伝熱が促進される位置を知ることが熱交換器設計において重要であると考えられる。

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いる。加えて、局所的な物性の変化や、Korteweg 効果に起因する速度変動が知られており、これらの特徴から、石油の増進回収法や、多孔質材料形成、食料品生産まで幅広いプロセスでの応用が期待されており、自己組織化構造形成と流れ場との相互作用の理解が重要となっている。近年、相分離の工学的応用として、熱交換器の作動流体として、相分離流体を利用し、伝熱効率を促進する研究がなされている[1]。しかし、バルクの温度変化の測定が主であり、相分離流体による局所的な伝熱促進効果の解明はなされていない。また、実用化のためには、実験を行う前段階として、シミュレーションを行い、最適な溶液選択や設計指針を得ることで、効率の良いプロセス開発が期待される。そこで本研究では、強制対流伝熱下における相分離現象の二次元数値計算を行い、相分離による伝熱促進効果の局所的なメカニズムについて検討を行った。

2 解析手法

計算対象とした系は、実験[1]で用いられたアセトンとヘキサデカン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。相分離現象には、二成分の界面をオーダーパラメータによって拡散的に再現する手法であるフェーズフィールド法を用いた。本研究では、オーダーパラメータとして、アセトンのモル分率 x_{ac} を用いた。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、

$$\frac{\partial x_{ac}}{\partial t} + u_j \frac{\partial x_{ac}}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial \mu}{\partial x_j \partial x_j}$$

となる。ここで、 t は時刻、 x_j は座標、 u_i は速度、 Re は Reynolds 数、 Sc は Schmidt 数である。化学ポテンシャルは、正則溶液モデルを拡張した以下の One-parameter Margules Model[1]を用いた。

$$\mu = \log \frac{x_{ac}}{1 - x_{ac}} + 2 \frac{T_c}{T} (1 - 2x_{ac}) - \xi^2 \frac{\partial x_{ac}}{\partial x_j \partial x_j}$$

ここで、 ξ は界面幅であり、分子動力学シミュ

レーション[2]から、1 nm ほどであると考えられているが、本研究では、格子解像度の制限から、 10^3 cm とした。

流体場の支配方程式は、以下の連続式と Navier-Stokes 式、

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_i}{\partial x_i} &= 0, \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} &= -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \\ &\quad - \frac{RT_{c \rightarrow n} \xi_n^2}{M Re^2 \nu^2} \frac{\partial x_{ac}}{\partial x_j} \frac{\partial x_{ac}}{\partial x_i}\end{aligned}$$

である。ここで、 P は圧力、 ξ_n は、界面幅 (Navier-Stokes 式中では 1 nm に設定)、 R は気体定数、 T_c は相分離臨界温度 (アセトン、ヘキサデカン系では 301 K)、 M はモル質量である。Navier-Stokes 式中の右辺第三項は、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しており、相分離と流体場をカップリングしている
対流伝熱の支配方程式は以下のエネルギー式、

$$\begin{aligned}\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} &= \frac{1}{Re Pr} \frac{\partial T}{\partial x_j \partial x_j} \\ &\quad + 4 \frac{RT_c}{MC_p} \frac{1}{Re Sc} \frac{\partial x_{ac}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \mu}{\partial x_j}\end{aligned}$$

である。ここで、 T は温度、 Pr はプラントル数、 C_p は定圧比熱である。右辺第二項は相分離に伴って生じる混合エンタルピーの温度場への寄与を表している。時間積分には、一次精度オイラー陽解法を用いた。

計算領域は、直径 1 mm、長さ 5 mm の二次元チャンネルとし、境界条件も合わせて Fig. 1 に示す。格子点数は、壁垂直方向に 100 点、流れ方向に 500 点とした。計算条件は、 $Re = 0.8$ 、 $Pr = 13.8$ 、 $Sc = 200$ と仮定して行った。

3 結果と考察

相分離による強制対流伝熱への影響を検討するため、相分離がある場合 ($Re = 0.8$, $Sc = 200$) と無い

場合の局所 Nusselt (Nu) 数の分布を Fig. 2 に示す。Kays et al. によって求められている、一様壁温の円管内層流伝熱の局所 Nu 数の理論値も合わせて示す[3]。横軸は、温度境界層の解析に用いられる流れ方向の無次元長さであるグレッツ数とした。

結果から、相分離が無い場合の局所 Nu 数は、円管内層流伝熱の局所 Nu 数の理論値である約 3.7 に漸近していることが分かる。これは、設定した計算条件において、十分温度境界層が発達していることを示している。相分離がある場合の局所 Nu 数は、出口付近で約 1.09 倍増大しており、相分離によって伝熱が促進されたことがわかる。

相分離による伝熱促進効果の局所的なメカニズムを検討するため、時間 $t = 0.2$ s における壁垂直方向の速度成分の分布を Fig. 3 に、濃度分布を Fig. 4 に示す。結果から、壁、出口付近に速度変動が分布しており、Fig. 2 の局所 Nu 数が増大している領域と一致していることから、この速度変動が伝熱を促進したと考えられる。一方、濃度分布から、単相状態で流入した混合流体は、壁から相分離が開始し、出口に向かって成長する様子が観察された。これは、Fig. 3 で速度変動が分布している領域と一致しており、相分離によって速度変動が生じ、伝熱を促進したと考えられる。特に、相分離の成長している出口付近での速度変動が大きく、相分離の成長段階に応じて、伝熱促進効果に変化していると言える。

4 結言

強制対流伝熱下における相分離現象の二次元数値解析を行い、計算結果から、相分離を伴う多成分混合流体は、熱交換器内で相分離を生じる際に、速度変動を生じ、伝熱を促進することが分かった。また、促進効果の強さは、相分離の成長段階に応じており、実際の熱交換器の設計の際には、伝熱が強く促進される位置を知ることが重要であると言える。

参考文献

1. Ulmann A., Maeviski K. and Brauner N., “Enhancement of forced and free convection heat transfer rates by inducing liquid-liquid phase separation of a partially-miscible equal-density binary liquid system”, *Int. J. Heat Mass. Transfer*, **70**, pp. 363 - 377 (2014).

2. Gyula I. T. and Bjorn K., “Phase field modeling of spinodal decomposition in the oil/water/asphaltene system”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, 20259 (2015).

3. W. M. Kays, *Convective Heat and Mass transfer*, McGRAW-HILL BOOK COMPANY (1966).

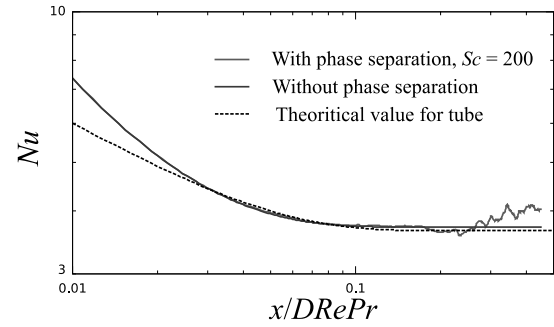


Fig. 2 Distribution of local Nu at $t = 0.2$ s, $Re = 0.8$, $Sc = 200$: Red line is with phase separation, Blue line is without phase separation and Black line is theoretical value for tube.

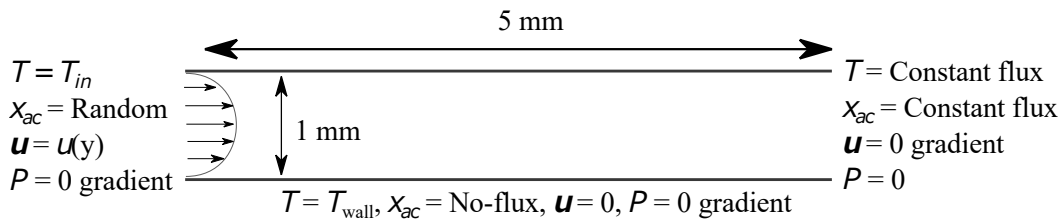


Fig. 1 Schematic of calculation domain and boundary conditions.

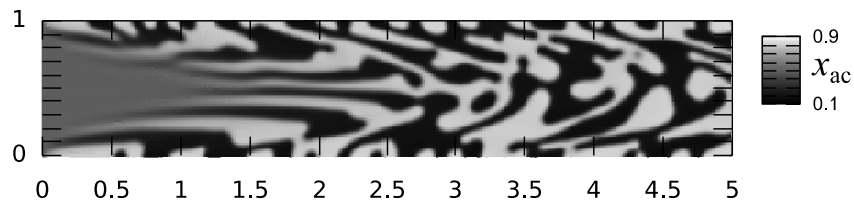


Fig. 3 Snapshot of concentration field at $t = 0.2$ s.

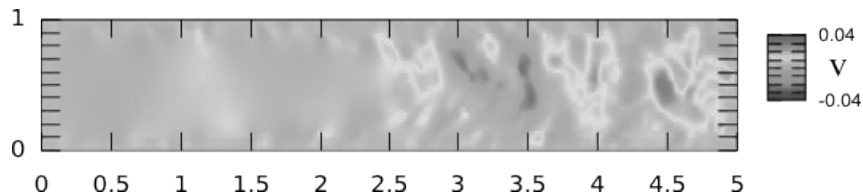


Fig. 4 Snapshot of vertical velocity field at $t = 0.2$ s.

Singlet Fission 相互作用の量子化学計算

鬼頭(西岡)宏任、佐藤竜馬、重田育照

筑波大学 計算科学研究センター

1 INTRODUCTION

Singlet Fission(SF: 一重項励起子分裂)は、光吸収によって一重項励起状態(S_1)になった分子が、隣接する基底状態(S_0)の分子にその励起エネルギーの一部を無輻射過程で移動することによって、三重項励起状態(T_1)の2つの分子が生成される現象である[1]。SF 自体は、1960 年代には既に、テトラセンやペンタセンなどのアセン分子結晶で起こることが観測されていた。しかし、SF を活用することで、単一接合太陽電池の持つ約 34%の太陽エネルギー利用効率限界(Shockley-Queisser limit)を約 46%まで改善する可能性が理論的に示されて以降[2]、ここ 10 年間で注目が集まり、盛んに研究が行われるようになった[1]。

SF は通常、以下の過程で説明される。



光吸収直後の S_1 が、隣接した2つの分子が作る”correlated triplet pair” ${}^1(T_1T_1)$ へ、スピン許容遷移で変換し、その後スピン・デコヒーレンスによって2つの三重項励起子が生成される。 S_0+S_1 から ${}^1(T_1T_1)$ への変換は、分子結晶のモフォロジーに依存して、数十フェムト秒から数百ピコ秒と大きく異なった反応時間が観測される。

本研究では、SF 反応時間を決定する因子である S_0+S_1 と ${}^1(T_1T_1)$ 間の電子的相互作用(SF 相互作用)を求める、新しい計算手法を開発した[3]。通常、材料系の有機分子励起状態計算では、計算コストと精度のバランスから、一電子励起配置間相互作用(CIS)法や時間依存密度汎関数(TDDFT)法が用いられる。しかし、CIS や TDDFT は一電子励起状態を記述する手法であり、 ${}^1(T_1T_1)$ のような多電子励起は考慮できない。そこで、完全活性空

間自己無撞着(CASSCF)法に基づき、SF に関与する電子配置(図 1)を適切に考慮して、SF 相互作用を従来よりも簡便に計算する方法を示す。[3]

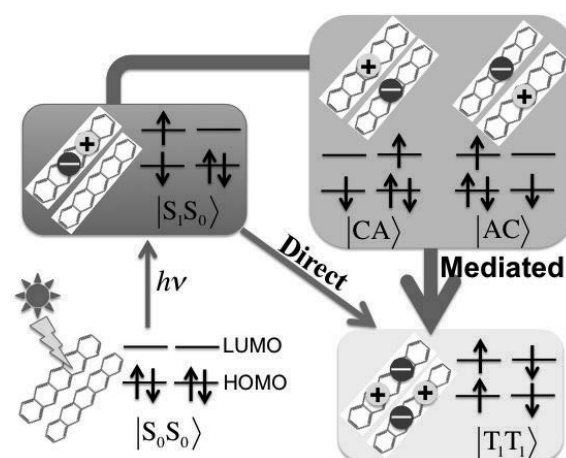


図 1 考慮する電子配置と SF 経路

2 METHODS

以下の手順による2段階のユニタリー変換を用いて SF を記述するための(準)透熱基底ハミルトニアンを作成する[3]。

- 分子結晶から、二量体モデルを作成
- 二量体のGSから S_0 までの6状態を、State-averaged(SA-)CASSCF(4,4)/6-31G(d)計算
- 手順(B)の最適化活性軌道をユニタリー変換し、フラグメント局在軌道を作成
- 手順(C)の局在活性化軌道を用いて CAS-CI(4,4)を実行し、配置間相互作用(CI)係数 C^A とエネルギーを保存
- 手順(C)の局在活性化軌道を用いて S_0S_1 や S_1S_0 、電荷移動励起子 AC, CA, ${}^1(T_1T_1)$ などの波動関数を ORMAS-CI 法[4]から求め、その CI 係数 $C^{D,ref}$ を保存

- F) 特異値分解から $\mathbf{C}^{\text{D,ref}}$ を再現するような $\mathbf{C}^{\text{A}}$ の実ユニタリー変換行列 $\mathbf{U}$ を決定
 G) 手順(D)のエネルギーを対角成分に持つ(準)断熱基底ハミルトニアンを行列 $\mathbf{U}$ からユニタリー変換して、透熱基底ハミルトニアン $\mathbf{H}^{\text{D}}$ を計算

上記の手順で作成された $\mathbf{H}^{\text{D}}$ を基に、Dexter 機構によるダイレクトな経路(図 1 青矢印)と、超交換機構による AC と CA をヴァーチャルに使った経路(図 1 赤矢印)を考慮し、式(1)を用いて SF 相互作用計算を実行した。

$$V = \langle S_1 S_0 | \hat{H}^{\text{D}} | T_1 T_1 \rangle - \frac{\langle S_1 S_0 | \hat{H}^{\text{D}} | \text{CA} \rangle \langle \text{CA} | \hat{H}^{\text{D}} | T_1 T_1 \rangle}{\langle \text{CA} | \hat{H}^{\text{D}} | \text{CA} \rangle - E_{\text{un}}} - \frac{\langle S_1 S_0 | \hat{H}^{\text{D}} | \text{AC} \rangle \langle \text{AC} | \hat{H}^{\text{D}} | T_1 T_1 \rangle}{\langle \text{AC} | \hat{H}^{\text{D}} | \text{AC} \rangle - E_{\text{un}}} \quad (1)$$

ここで E_{un} は、 $S_0 S_1$ と $1(T_1 T_1)$ のエネルギー($\mathbf{H}^{\text{D}}$ の $S_0 S_1$ と $1(T_1 T_1)$ の対角成分)平均値に設定する。CI 計算は、GAMESS に実装されている determinant CI コードを用いた。

3 RESULTS & DISCUSSION

Hsu らは、Spin-flip CIS(SF-CIS)と fragment spin difference(FSD)法を組み合わせ、ペンタセンとテトラセン、及びそれらの誘導体の分子結晶から二量体モデルを作成し、SF 相互作用の第一原理計算を実行した[5]。これらのアセン分子結晶は、構造だけでなく、SF 反応時間も実験的に分かっている[6]。そこで Hsu らの二量体モデルに我々の手法を適用し、その結果を比較した(表 1)。

表 1 SF 相互作用(meV)の計算結果

Dimer Model	Ours	Hsu's
Pentacene	50.19	14.75
TIPS-P	23.52	43.83
DTP	6.12	8.21
DBTP	0.082	0.054
DBP	0.001	0.023
DPP	0.072	0.087
Tetracene	17.09	11.38
Ruburene	0.014	0.012
DTT	2.686	20.7

表 1 から、ペンタセンと 6,13-di(2'-thienyl)テトラ

セン(DTT)以外では、我々の結果と Hsu らの結果は、良く一致していることが分かる。SF-CIS 計算では、 $1(T_1 T_1)$ を記述するためのスピン電子配置の一部が無視されている。また SF-CIS 計算は、スピン汚染の影響も含んでいる。一方、我々の CASSCF 計算は動的電子相関が考慮されないが、SF-CIS ではその一部が取り込まれている。これらの理由から、ペンタセンや DTT に対して、計算結果の違いが生じたと考えられる。

原因の一つに挙げた動的相関は $\mathbf{H}^{\text{D}}$ の対角成分に大きな影響を与えるが、式(1)の分母で E_{un} と差を取る際にそのエラーは相殺され、SF 相互作用に与える影響は小さくなると予想される。そこで、Van Voorhis らが同様の二量体モデルに対して制約 DFT(CDFT)-CI 法を用いた結果[6]と比較する。CDFT-CI 計算では、ペンタセンに対しては 84meV、DTT に対しては 6.2meV の SF 相互作用を持つ[6]。計算条件の違いはあるが、動的相関が十分に考慮された CDFT-CI 計算が、Hsu らに較べて、我々の結果と良く一致している。このことから、スピン汚染やアンバランスな電子配置が、Hsu らの結果を悪くしている可能性が高い。

今後、開発した手法を多参照摂動理論に適用できるように拡張することで、SF 相互作用への動的相関の影響をより精密に調べる予定である。

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]M.B. Smith and J. Michl, *Chem. Rev.* **110**, 6891 (2010); *Annu. Rev. Phys. Chem.* **64**, 361 (2013).

[2]M.C. Hanna and A.J. Nozik, *J. Appl. Phys.* **100**, 074510 (2006).

[3]H. Kitoh-Nishioka, R. Sato, and Y. Shigeta (in preparation).

[4] J. Ivanic, *J. Chem. Phys.* **119**, 9364 (2003).

[5] C.-H. Yang and C.-P. Hsu, *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 1925 (2015).

[6]S.R. Yost, et al. *Nature Chem.* **6**, 492 (2014).

高解像度大気海洋波浪結合モデルを用いた 海面物理モデルの現地観測結果に基づく検証

二宮 順一

金沢大学理工学域環境デザイン学系

1 はじめに

海洋の運動量や熱エネルギーは主に大気との間で交換されており、大気海洋間の相互作用を正しく理解することは海洋の流動や水温変化等の理解に直結する重要な課題である。海面での運動量輸送はバルク式として、

$$\tau = C_D \rho u^2$$

のように表現される。ここで、 C_D は海面抵抗係数、 ρ は大気密度、 u は10m高度での風速が用いられる。海面抵抗係数は観測結果から一定値ではなく、風速や海面の状態との相関を示すことが知られているが、実用的な観点から海面抵抗係数は風速の関数として定義された形が主流となっている。

海面抵抗係数に関連する研究は古くから行われている。一定値から始まり、風速の一次関数近似、海面の状態との関係性が議論されるようになってきた。一方で、近年まで25m/s以下程度の風速域までしかカバーしていなかったが、最近では高風速下での観測結果が得られた。高風速下では、海面抵抗係数は飽和して一定値もしくは風速の増加とともに減少する傾向が示された。海面抵抗係数は風速の一次関数として一定値まで増加し飽和する式や、一定値から減少する式、海面の状態の依存性のため、海面勾配や波齢の関数などの定式化がなされている。しかし、提案はされるものの検証することは全く進んでいない。そこで本研究では、大気海洋波浪結合モデルに様々な海面抵抗係数のモデルを適用して、高風速を伴う台風計算にどのような影響を与えるのか検討を行った。

2 研究手法

2.1 数値モデル

数値モデルには大気海洋波浪結合モデルとして開発された COAWST (A Coupled Ocean Atmosphere Wave Sediment Transport Modeling System) を用いる。これは、全てオープンソースの気象モデル WRF、海洋モデル ROMS、波浪モデル SWAN を MCT で結合したモデルである。

2.2 計算の概要

海面抵抗係数のモデルとして、本研究では風速依存の式 (Charnock)、波形勾配の式 (Taylor & Yelland)、波齢の式 (Drennan) の3式を用いる。これらの式は海面粗度を与えるものであるが、海面粗度は海面抵抗係数と1対1の関係になっている。

2.3 現地観測結果

検証に用いる現地観測結果は、アメリカと台湾の共同観測プロジェクト結果である ITOP (Impact of Typhoons on the Ocean in the Pacific) を用いる。このプロジェクトでは、台湾東沖の台風を対象として、航空機やドロップゾンデを利用した気象観測、海中固定式ブイや漂流式フロート、ドリフターを用いた海洋観測が行われた。

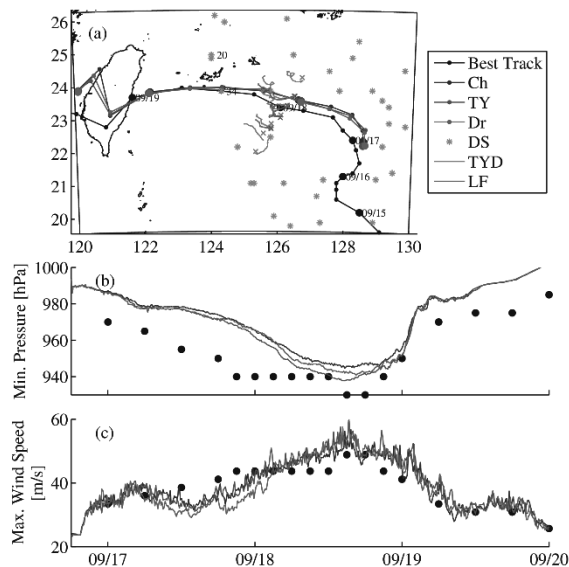


図 1 海面抵抗係数を変更した台風再現計算の結果 (a)台風経路 (Best Track と各計算結果および観測機器の投下位置や経路を示す.), (b)中心気圧の時間変化, (c)最大風速の時間変化

3 結果

気象場および海洋場に対する海面抵抗係数の影響について以下にまとめる.

3.1 気象場に対する海面抵抗係数の影響

海面抵抗係数を変更した台風の再現計算結果を図 1 海面抵抗係数を変更した台風再現計算の結果 (a)台風経路 (Best Track と各計算結果および観測機器の投下位置や経路を示す.), (b)中心気圧の時間変化, (c)最大風速の時間変化図 1 に示す. 経路, 最大風速に対する影響は小さいが, 中心気圧は 1010hPa を基準として気圧深度 70hPa に対して, 最大で約 10hPa の大きな差が見られた. 台風の再現がまだ十分でなく, 海面抵抗係数モデルの正しさについて議論できないが, 海面抵抗係数は台風の発達にも関連する重要なパラメータであることがわかる.

高風速域における海面抵抗係数と風速との関係を図 2 に示す. 風速の一次関数で示される直線的な分布と二次関数的な分布, 広がった分布と三種の分布が確認できる. 分布から明らかなように, 波浪依存のモデルでは同一の風速で様々な値を取りうる. また, 台風下において, 風速依存のモデ

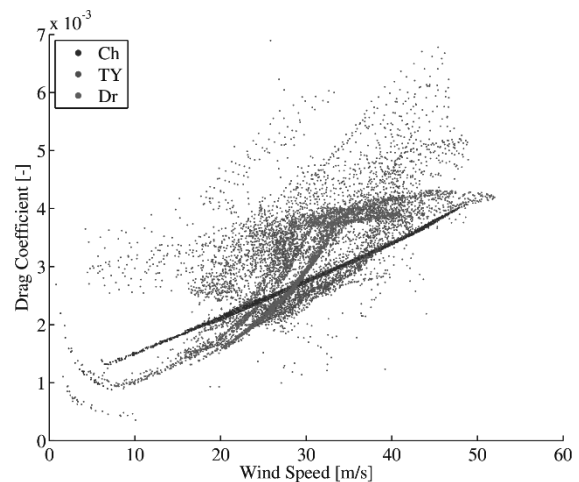


図 2 瞬間値から台風中心付近 100km の範囲から抽出した風速と海面抵抗係数の関係

ルでは海面抵抗係数を低風速域でやや大きく推定し, 30m/s を超えるような高風速域では海面状態に依存したモデルが大きく推定する傾向がある.

3.2 海洋場に対する海面抵抗係数の影響

海洋場に対する海面抵抗係数の影響として, 台風経路に最も近く, 水温変化が大きいドリフターによる観測結果を用いて比較を行った. 台風通過に伴って, 通常は cold wake という表層付近の水温低下が生じるが, 風速依存モデルによる結果では, この cold wake がやや弱く再現された. これは, 30m/s を超えるような強風速下での強混合において, 海面抵抗係数を小さめに推定して海洋への運動量輸送を比較的小さく見積もったためと考えられる. 一方で, 波浪依存モデルでは水温低下を過大に推定しており, これらの海面抵抗係数の分布幅の中に収まる分布があるものと考えられる.

4 まとめ

風速または海面の状態に依存する海面抵抗係数のモデルを適用した大気海洋波浪結合モデルを用いて, 強風を伴う台風の計算を行った. その結果, 低風速では風速依存のモデルが, 高風速では海面状態依存のモデルが海面抵抗係数を大きく推定する傾向が見られた. また, 大気側への影響として, 本実験では海面状態依存のモデルが台風強度を強く推定した. 海洋側への影響として, cold wake の再現に注目すると, 海面状態依存のモデルでは水温低下が過大に再現された.

iPS 細胞懸濁培養の最適化を目的とした攪拌槽内粒子挙動解析

矢野雅貴

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

本研究では、iPS 細胞の三次元的な浮遊培養の実用化を目指し、攪拌槽内粒子挙動の数値解析を行った。細胞培養に悪影響を及ぼすせん断応力と衝突頻度の二つの要素を求めて攪拌方法ごとに比較し、よりよい攪拌方法の知見を得た。その結果、振とう攪拌は底面に粒子がたまることで衝突頻度が増大することが分かった。この欠点を改善するため、一定時間ごとに攪拌方向を変更する正逆交互回転のしんとう攪拌を開発した。実際にこの攪拌方法は通常よりも粒子を浮遊させることができると分かった。その理由は流体に上下方向の速度が発生したからである。

1 緒言

iPS 細胞培養の産業化に向けて現在の熟練者による静置培養からプラントで行う自動化された懸濁培養にスケールアップすることが強く望まれている。しかし、実用化のためには攪拌方法や速度、槽形状など多くのパラメータを最適化する必要があり、これを実験のみで行うのは困難である。そこで数値解析が最適化のための重要なツールとなりうる。一般に多能性幹細胞はせん断応力が作用する状況下で分化し¹⁾、細胞塊が底面中央部に集積することで不均一な大きくなる。そこで本研究では、攪拌槽内の粒子挙動を解析する手法を開発し、一方向および正逆交互回転と往復運動の攪拌において細胞塊が受けるせん断応力や底面に接地する細胞塊数を算出し最適な攪拌方法についての検討を行った。

2 解析手法

流動の支配方程式は連続式と以下に示す Navier-Stokes 式である。 $\mathbf{U}$ は容器自体が動く速度ベクトルであり、攪拌方法によって異なる。なお回転運動に関しては通常の一方向攪拌のみでなく、一秒ごとに回転方向が逆転する正逆交互攪拌に関してもを行った。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \mathbf{v}_f) + \nabla \cdot (\rho_f \mathbf{v}_f \mathbf{v}_f) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu_f \nabla \mathbf{v}_f) + \rho_f \mathbf{g} - m_s \frac{d\mathbf{U}}{dt} + \mathbf{F}_\sigma \quad (1)$$

回転運動

$$\mathbf{U} = [-R_s \omega \sin \omega t, -R_s \omega \cos \omega t, 0] \quad (2)$$

往復運動

$$\mathbf{U} = [-R_s \omega \sin \omega t, 0, 0]$$

気液界面形状の解析には VOF 法を用いた。また iPS 細胞塊を粒子とみなし、その挙動解析には以下の Newton の運動方程式を用いた。²⁾

$$m_s \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_g - m_s \frac{d\mathbf{U}}{dt} \quad (3)$$

ここで添え字 f, s はそれぞれ流体と粒子を表しており、 $\mathbf{F}_\sigma$ は表面張力、 $\mathbf{F}_b$ は流体抵抗、 $\mathbf{F}_g$ は粒子に加わる浮力と重力、 $\mathbf{g}$ は重力加速度、 m は粒子の質量、 p は圧力、 t は時間、 $\mathbf{v}$ は速度、 μ は粘度、 ρ は密度、 R_s は回転半径 (12.5 mm)、 ω は角速度 (6.28 rad/s) である。解析領域は直径 42 mm、高さ 43.2 mm の円筒容器で攪拌速度は 60 rpm とした。また、壁、攪拌翼と粒子とは完全弾性衝突すると仮定した。粒子数は 192 個、直径は 0.2 mm、粒子と流体の比重は 1.04 とし、初期条件として粒子を等間隔に配置した。

3 結果と考察

Figure 1 (a) に往復運動、一方向および正逆交互回転運動時のせん断応力の平均値の時間変化を示す。回転運動の正逆交互攪拌、一方向攪拌、往復

運動の順に粒子に作用するせん断応力は小さくなった。また回転運動の正逆交互攪拌、往復運動ではせん断応力の値は大きく振動した。回転方向逆転時に大きなせん断応力が作用することから回転方向を逆転する際には速度変化をつけて徐々に行う必要があると考える。Figure 1 (b) に底面に接地している粒子数の時間変化を示す。回転運動の正逆交互攪拌、一方向攪拌、往復運動の順に底面に接地する粒子数が減少した。Figure 2 に中心軸を通る底面から 10 mm までの断面における上下方向の時間平均速度を示す。(a)より(b)の中心部の上向き速度が大きいことから、正逆交互攪拌の方が底面に接地する粒子数を減少させることができたと考えられる。

4 結言

iPS 細胞の懸濁培養実用化へ向けて、懸濁培養時の細胞塊挙動を解析する手法を開発し、往復運動、一方向および正逆交互回転運動攪拌におけるせん断応力、底面に接地する細胞塊数を求めることができた。また底面に接地する細胞塊数を減らすためには中心部の上向きの流れが重要であり、今後そのような特徴がより強い攪拌方法を開発する必要があることがわかった。

謝辞

本研究は一部国立研究開発法人日本医療研究開発機構 (AMED) の「再生医療の産業化に向け+た細胞製造・加工システムの開発」プロジェクトおよび MEXT 科研費 15H04173の助成を受けた。

参考文献

- [1] Adamo, L. *et al.*, Nature, **459**, 1131-1135 (2009).
- [2] Yamamoto, T. *et al.*, J. Chem. Eng. Jpn., *in press*.

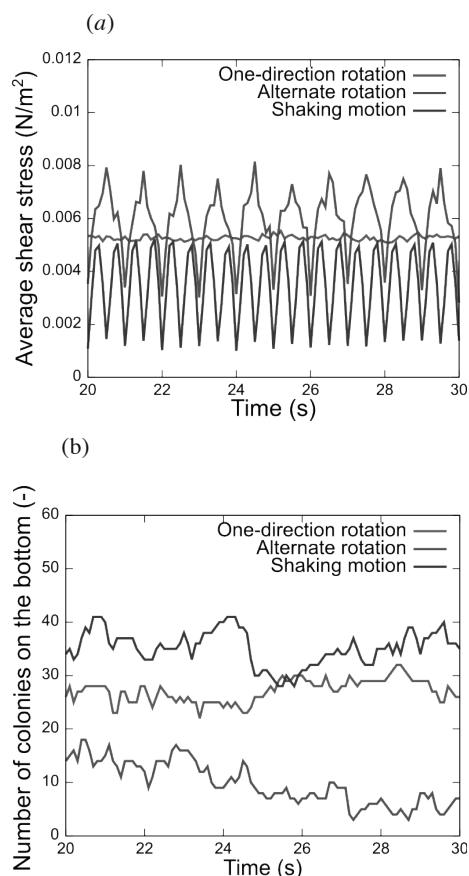


Figure 1. Time variation of
(a) average shear stress and
(b) number of colonies on the bottom.

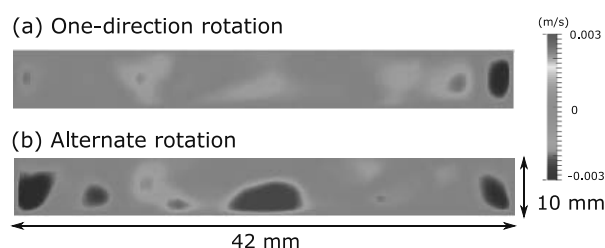


Figure 2. Time averaged of horizontal speed at sectional view at 30 seconds.

大規模津波による流出油の拡散挙動予測

高木 洋平

横浜国立大学大学院システムの創生部門

1 はじめに

将来の発生確率が高い南海トラフ地震では、東日本大震災と同様に、津波によるコンビナート地域からの油流出が懸念されている。大阪湾石油コンビナート地域では、小規模なタンクが集積している北港地域と、大型のタンクが多数存在する堺泉北地域が主な油流出による被害が予想される地域である。本研究では、この二地域から南海トラフ地震によって最大流出量の油が流出すると仮定し津波によってどれくらいの範囲に油が拡散するかを数値シミュレーションによって検討した結果を述べる。

2 解析手法

本数値解析では広域の津波による油流出の挙動を解析するが、実際の解析ではまずはじめに南海トラフを震源とする広域の津波計算を行い、得られた津波計算データを用いてタンク群からの油流出挙動を計算する。

津波計算は港湾空港技術研究所が開発したSTOC (Storm Surge and Tsunami Simulator in Oceans and Costal Areas) ^①を利用して行った。STOCは静水圧近似を用いた広域の津波シミュレータであり、地形情報や津波発生源での初期水位または断層の移動時間を入力することによって、計算領域内の各地点・各時刻における津波高さ・速度を出力として得ることができる。本解析では、地形情報については内閣府の南海トラフの巨大地震モデル検討会が公開しているデータを利用し、津波発生の初期条件である断層モデルに関しては、同検討会が報告している「三重県南部沖～徳島県沖」と「足摺岬沖」に「大すべり域+超大すべり域」を2箇所設定したケース11を利用した。

STOCによる津波計算では太平洋を含む広域の計算メッシュから大阪湾石油コンビナート地域の狭域の計算メッシュを作成し、計算格子を数段階にネスティングすることによって解析を行っている。大阪湾における大規模な油流出は図1に示す北港地域及び堺泉北地域であり、これらの地域で津波越流の可能性があるかどうかを津波計算の結果より確認を行った。初期流出開始位置とする石油タンク配置箇所での水位の時間変化を確認すると、各ポイントで海拔高度が異なるが、津波発生から100分～200分の間に越流が起こっていることがわかった。

北港地域及び堺泉北地域における想定される最大流出油は、大阪府石油コンビナート防災計画の見積もりによれば、北港地域で27227 kL、堺泉北地域で4838 kLがそれぞれ総量として推定されている。北港地域でタンクを集約した8点、堺泉北地域で4点の流出開始ポイントから津波の越流によって流出・拡散する数値シミュレーションを実施した。計算にはSTOCと同じく港湾空港技術研究所が開発したSTOC-OIL^②を利用した。STOC-OILでは流出した油を仮想的な粒子に置き換え、津波による移流や油粒子群の拡散を考慮しながら設定した粒子それぞれの運動軌跡をSTOCによる津波計算データを入力して追跡する。本解析では、前述の大阪府石油コンビナート防災計画の見積もりから、北港・堺泉北のそれぞれの地域に5000粒子ずつ設定し、追跡計算を行った。仮想粒子一つあたりの体積は、北港地域で5.42 m³、堺泉北地域で0.97 m³となっている。油の流出開始は、地震動による津波発生から各地域まで津波第一波が到達するまでの時間であり、北港地域で津波発生から126分後、堺泉北地域で137分後とした。

3 計算結果

図2に北港地域、堺泉北地域での津波到達後70分経過後の時間における油拡散結果を示す。北港地域では小型の石油タンクが多く初期流出量も多いため、陸側・海側の両方に多量の油が徐々に拡散してゆく様子が計算された。陸側においては、追跡計算をさらに継続して流出開始から90分が経過すると、住宅やオフィスが密集する難波及び梅田まで油が拡散しており、東日本大震災時の気仙沼地域のように津波火災が発生すると、甚大な被害を被ることが推定される。海側に流出・拡散する油粒子も多く、長期的な油流出が続くと海流・潮流の影響によって大阪湾全体に油が拡散し、大阪湾に停留する船舶や神戸地域も被害を受けることが予想される。一方、堺泉北地域での油流出範囲に注目すると、北港と同じく陸側の住宅街と海側の両方に油粒子が拡散していることがわかる。陸側への流出は南北に走る上町断層で止まっており、津波発生直後の避難としてはこの断層よりも内陸に避難することが重要である。

4 まとめ

本研究では広域津波シミュレーションと油粒子追跡計算を組み合わせた解析を、南海トラフ地震によって想定される大阪湾石油コンビナート地域で津波被害に対して行った。北港地域、堺泉北地域のタンク密集地域からの最大流出量見積もりを初期条件として流出油の津波による拡散範囲を数値予測した結果、両地域において市街地への多量の油拡散が発生し、津波火災の危険性があることがわかった。今後はシミュレーションの精度向上や火災シミュレーションへの連結を検討し、災害予測・防災技術の発展に貢献したい。

5 引用文献

- (1) 富田孝史・柿沼太郎：海水流動の3次元性を考慮した高潮・津波数値シミュレータSTOCの開発と津波解析への応用，港湾空港技術研究所報告，44，pp.83-98，2005.
- (2) 松崎義孝・藤田勇：海水面における流出油の拡散・移流に関する数値計算法の開発と油流

出事故の再現計算，土木学会論文集 B2，70，pp.15-30，2014.

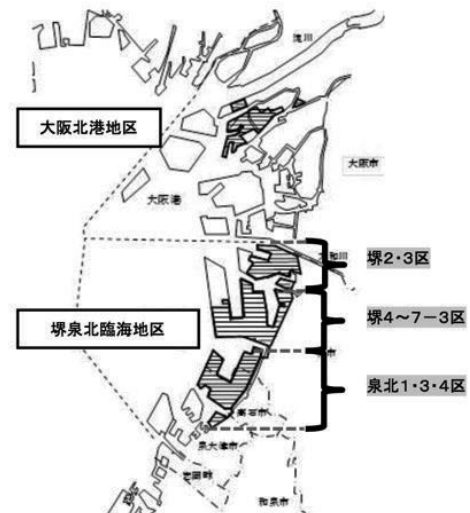


図1 大阪湾における石油コンビナート地域

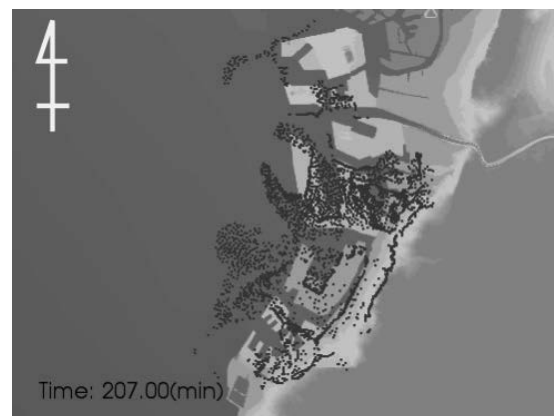
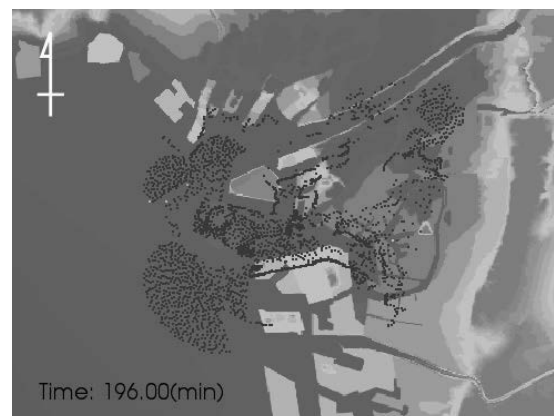


図2 大阪湾における越流発生後70分での油拡散範囲：(上)北港，(下)堺泉北

視聴覚モダリティ間デコーディングによる感覚間協応のメカニズムの解明

金谷翔子

京都大学 大学院人間・環境学研究科 共生人間学専攻 認知・行動科学講座

1 背景と問題

人間の脳においては、視覚、聴覚、触覚といった異なる感覚モダリティの情報は、異なる場所で、異なる方法によって表現される。しかし、我々は時に、別々の感覚モダリティの情報の間に何らかの共通性を感じることがある。例えば、楽器の絵や写真（視覚情報）と音（聴覚情報）はいずれも、例えば「バイオリン」といった共通の表象に結びつく。また、このような経験的な結びつきがない場合でも、例えば高い音には明るい色、低い音には暗い色が合うというように、本来は無関係な複数の特徴の間に非恣意的な対応が感じられることがあり、この現象は感覚間協応と呼ばれている[1]。複数感覚モダリティ間の共通性が、脳のどのような働きによって表現されているのかを調べることは、感覚モダリティに依存しない高次知覚、認知を支えるメカニズムの理解につながると考えられる[2]。本研究では、fMRI を用いて実験参加者が様々な視聴覚刺激を観察している際の脳活動を計測し、このデータに MVPA (Multivariate Pattern Analysis) 解析によるモダリティ間デコーディングを適用することで、視聴覚情報の共通性に関わる神経基盤の検討を行った。

2 実験方法

男女合わせて 16 名の成人が実験に参加した。経験に基づく視聴覚情報の対応について検討するため、風鈴および弦楽器のイラスト（二つずつ）、風鈴および弦楽器の音（二つずつ）を用意した。感覚間協応については、特によく報告されている、視覚刺激の形状と聴覚刺激の音響特徴の対応に着目した。まず、視覚刺激として、鋭角で構成され

た図形（鋭角図形）二つと、曲線で構成された図形（曲線図形）二つを用意した。また、聴覚刺激として、ソフトウェアシンセサイザーによって音響特徴を複雑に操作した電子音を多数作成し、その中から上述の四つの視覚刺激のそれぞれに最も合うと感じられるもの四つを、多数の学生に対して行ったアンケートの結果に基づいて選択した。図 1 は、これらの計 8 種類の視覚刺激、および計 8 種類の聴覚刺激のスペクトログラムを表す。

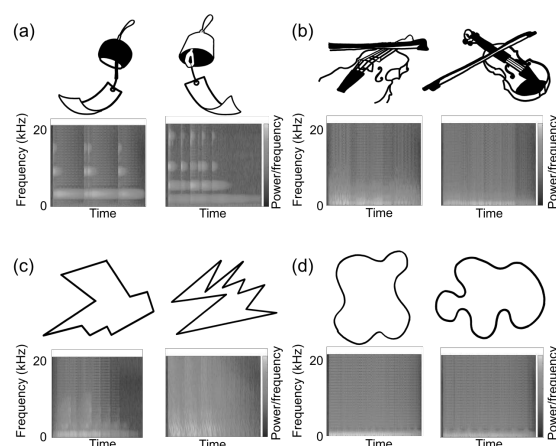


図 1 実験に用いた刺激

(a)風鈴のイラストと音、(b)弦楽器のイラストと音、(c)鋭角図形と適合する音、(d)曲線図形と適合する音。聴覚刺激のスペクトログラムは横軸が時間、縦軸が周波数、色がパワーを表す。

これらの視覚刺激、および聴覚刺激を一つずつ、モニタおよびイヤフォンによって呈示し、これを実験参加者が視聴している際の脳活動を fMRI によって計測した。全ての刺激を一回ずつ呈示する系列をブロックとし、実験全体で 10 ブロックを繰り返した。fMRI から得られる生の脳活動データに様々な下処理を加えた上で、以下の手順で MVPA 解析を行った。

3 解析方法

ある特定のブロック (e.g. ブロック 1) を除いた全てのブロックで取得した脳画像データを用いて、ある二カテゴリの刺激 (e.g. 鋭角図形と曲線図形) を観察している際の脳活動を判別するように、コンピュータプログラムに機械学習させる (デコーダの作成)。その上で、学習時に除外したブロック (e.g. ブロック 1) で取得した脳画像データをデコーダに入力し、学習させた二カテゴリの弁別が正しく行えるかどうか (e.g. 実際に鋭角/曲線図形を観察していた際の脳活動データが、正しく鋭角/曲線図形と判定されるかどうか) をテストする。さらに、テスト時に用いるブロックを入れ替えて、これを 10 回繰り返し (e.g. ブロック 1、ブロック 2、…ブロック 10)、全ブロックにおける平均正答率を求める。このような学習とテストを、視覚情報と聴覚情報の両方を表現していると考えられる様々な小領域 (Region of Interest, ROI) に対して行い、特に正答率の高くなる脳領域を探した。ROI として、全視覚刺激に対する平均脳活動と、全聴覚刺激に対する平均脳活動がどちらも一定以上の高い値を示した、楔部 (Cuneus)、楔前部 (Precuneus)、内側前頭回 (Medial Frontal Gyrus, MFG)、中心後回 (Post Central Gyrus, PCG) を設定した (図 2)。特に正答率の高くなる領域においては、当該の二カテゴリの刺激を識別するための情報が表現されていると考えられる。

4 結果

本研究では、抽象刺激については鋭角か曲線か、具体刺激については風鈴か絃楽器かを弁別させるように学習を行った。また、学習時には視覚 (V) 刺激観察時の脳活動、テスト時には聴覚 (A) 刺激観察時の脳活動を用いる V-A モダリティ間デコーディングと、学習時には聴覚 (A) 刺激観察時の脳活動、テスト時には視覚 (V) 刺激観察時の脳活動を用いる A-V デコーディングの両方を試みた。上述の ROI における MVPA の平均正答率を図 2 に示す。チャンスレベル (50%) よりも有意に高い正答率を示したのは、右中心後回 (V-A、風鈴/絃楽器)、右楔部と右中心後回 (A-V、風鈴/絃楽器)、右内側前頭回と左中心後回 (V-A、鋭角/曲線) であった。

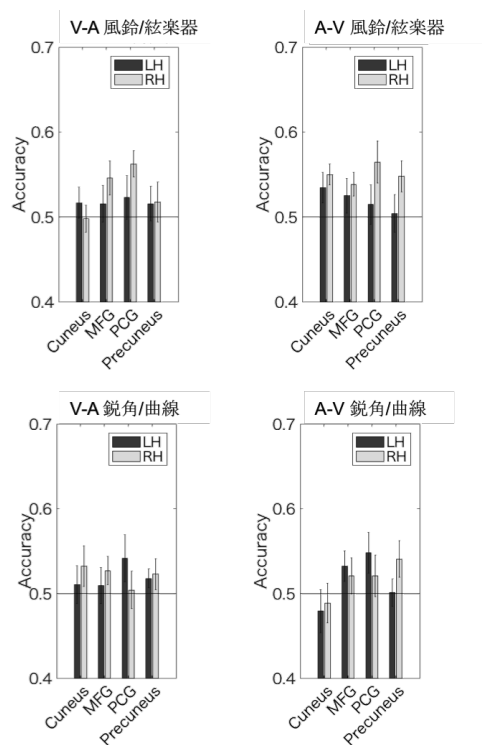


図 2 MVPA 平均正答率

上段は風鈴と絃楽器の弁別、下段は鋭角図形/音と曲線図形/音の弁別における正答率。LH は左半球、RH は右半球の結果を表す。

中心後回が多くの条件下で高い正答率を示したことから、この領域において視聴覚情報の共通性が比較的頑健に表現されている可能性がある。また、弁別させる刺激の種類 (風鈴/絃楽器、鋭角/曲線) によって異なる半球の中心後回が高い正答率を示し、かつ楔部や内側前頭回の正答率も刺激によって異なっていたことから、経験的に得られる視聴覚情報間の結びつきと、感覚間協応のような抽象的な視聴覚情報間の結びつきでは、異なるメカニズムが関与している可能性がある。

参考文献

1. Parise, C.V. and Spence, C., *Audiovisual crossmodal correspondences and sound symbolism: a study using the implicit association test*. *Experimental Brain Research*, 2012. **220**(3-4): p. 319-333.
2. Man, K., et al., *Sight and sound converge to form modality-invariant representations in temporoparietal cortex*. *Journal of Neuroscience*, 2012. **32**(47): p. 16629-16636.

高次元準周期軌道における準周期軌道の解析

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

1 概要

本稿では、高次元準周期軌道における回転数の高速計算法とその特性を明らかにした。その概要を複素エノン写像の Siegel ball に含まれる準周期軌道を例にとって紹介する。

2 重み付きバーコフ平均

バーコフのエルゴード定理は、エルゴード的な力学系の軌道 (x_n) に対して定義される何らかの量 f に対して、そのバーコフ平均 $B^N(f)(x) = \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n)/N$ は、軌道長 $N \rightarrow \infty$ で空間平均 $\int f d\mu$ に収束するというものである。但し、 μ は力学系の不変確率測度である。我々は、準周期軌道に纏わる各種の量の計算を高速化させることができる手法を提案した [1, 2]。

重み関数 $w: R \rightarrow [0, \infty)$ を無限回微分可能でかつ $(0, 1)$ で $w > 0$ 、それ以外で $w = 0$ となるものとする。以下では、特に

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

とする。これを用いて f の重み付きバーコフ平均 WB_N を $WB_p^N(f)(x) := \sum_{n=0}^{N-1} \hat{w}_{n,N} f(x_n)$ と定義する。但し、 $\hat{w}_{n,N} = \frac{w_p(n/N)}{\sum_{j=0}^{N-1} w_p(j/N)}$ である。力学系と f が C^∞ で、 w_p を上で示した性質をもつ C^∞ 重み関数として、更に若干の仮定を加えると、任意の自然数 m に対して、ある $C_m > 0$ が存在して、 $|WB_p^N(f)(x) - \int f d\mu| \leq C_m N^{-m}$ であることが示される [2, 3]。

3 複素エノン写像

Ushiki (2016) [4] を参考に複素エノン写像 $H_{\alpha,\beta}: \mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$ ($(\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2$)

$$H_{\alpha,\beta} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ \beta(y^2 + \alpha) - \beta^2 x \end{pmatrix} \quad (2)$$

における Siegel ball を調べた。ここでパラメタ α と β を、 $\alpha = 2 \cos \theta \cos \phi - \cos^2 \phi$, $\beta = \cos \theta + i \sin \theta$ とあらわすことにする。 $H_{\alpha,\beta}$ の不動点は、 $y_* = \cos \theta \pm (\cos \theta - \cos \phi)$ であるが、 $y_* = \cos \phi$ の方に着目して $\mu = \cos \phi + i \sin \phi$ とすると、この不動点におけるヤコビ行列の固有値は $\beta\mu$ と $\beta\bar{\mu}$ であり、その偏角は $\theta + \phi$ and $\theta - \phi \pmod{2\pi}$ である。パラメタを $(\theta = 0.664, \phi = 2.032)$ と設定し、初期値 $(x_0, y_0) = (-0.500 + 0.126i, -0.387 - 0.163i)$ としたときに得られる軌道を考察する。軌道を射影したものを図 1 に示す。左図は x の実部と虚部を射影したもので、右図は遅れ時間座標 (r_n, r_{n-2}) を射影した。ここで $r_n = \sqrt{(\operatorname{Re} x_n + 0.4)^2 + \operatorname{Im} x_n^2}$ である。それぞれ、 $(\operatorname{Re} x, \operatorname{Im} x) = (-0.4, 0)$ ならびに $(r_n, r_{n-2}) = (0.14, 0.145)$ から計測した角度変化を図 2(左上), (右上) に示した。これらの角度変化のバーコフ平均を重み付きバーコフ平均 (WB ならびに WB₂) によって計算すると、 $N = 10^6$ のオーダーの軌道長の場合に 4 倍精度の丸め誤差程度の高精度で回転数を同定することが出来た。ひとつめの回転数は $0.42908172657574982523291062605231270$ であり、これは $\rho_1 = (\theta + \phi)/2\pi = 0.42908172657574982523291062605229878$ 、もう一方は、 $0.64680568872546264456474361434588417$ であり、 $\rho_1 - \rho_2 = 2\phi/2\pi = 0.64680568872546264456474361434589842$ にそれぞれ 31 桁の精度で一致している。この結果からわかるように得られた二つの回転数は不動点の固有値に関連づいているものの、その線形結合の形で関連づいていることに注意したい [5]。なお、この精度の回転数を従来のバーコフ平均 B^N で得るためには、 N^{30} 程度の軌道長を要する。

4 まとめ

本稿では、エルゴード的な力学系における各種平均量を計算するために用いられるバーコフ平均計算を準周期軌道の場合に高速化させることができる重み付きバーコフ

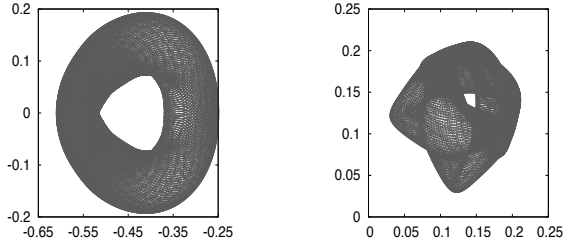


図 1: (a) $(\text{Re}x, \text{Im}x)$ 平面への軌道の射影. (b) 同じ軌道の (r_n, r_{n-2}) 平面への射影. ただし, $r_n = \sqrt{(\text{Re}x_n + 0.4)^2 + \text{Im}x_n^2}$.

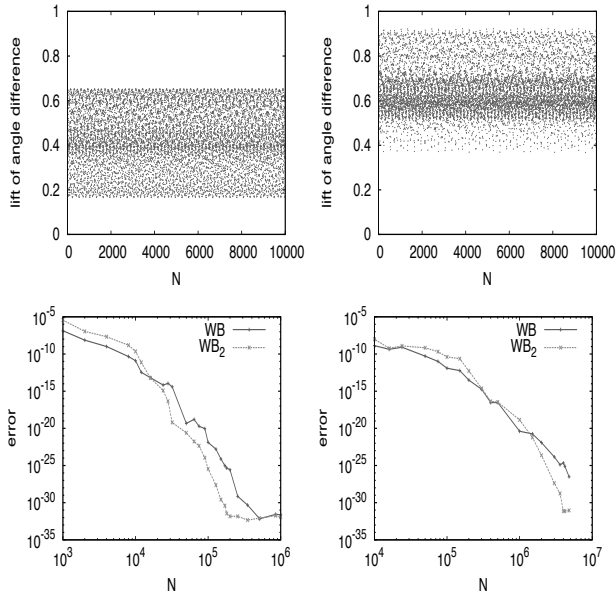


図 2: (a) 写像毎の $(\text{Re}x, \text{Im}x) = (-0.4, 0)$ からみた角度変化 (図 1(a) に対応). (b) 写像毎の $(r_n, r_{n-2}) = (0.14, 0.145)$ からみた角度変化 (図 1(b) に対応). (c) (a) の角度変化の重み付きパーコフ平均 (WB and WB₂) の ρ_1 への収束 ($\rho_1 = (\theta + \phi)/2\pi = 0.42908172657574982523291062605229878$). (d) (b) の角度変化の重み付きパーコフ平均 (WB and WB₂) の $\rho_1 - \rho_2$ への収束 ($\rho_1 - \rho_2 = 2\phi/2\pi = 0.64680568872546264456474361434589842$).

平均を用いて, 複素エノン写像の2次元準周期軌道を2種類の2次元面に射影したときの回転数を計算した. そして, 得られた2つの回転数と写像の不動点の固有値との間の関係を考察した.

5 謝辞

本稿で用いた複素エノン写像に関して, 京都大学の宇敷重廣先生に色々ご教示いただいた. 感謝申し上げます.

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.
- [2] S. Das, Y. Saiki, E. Sander and J. A. Yorke. Quantitative quasiperiodicity, *Nonlinearity*, accepted for publication in *Nonlinearity*, arXiv:1601.06051.
- [3] S. Das and J. A. Yorke. Super convergence of ergodic averages for quasiperiodic orbits, preprint, arXiv:1506.06810.
- [4] S. Ushiki. Abundance of Siegel balls in a family of Hénon maps, 2016, <http://www.math.h.kyoto-u.ac.jp/~ushiki/papers/AbundanceArt.pdf>
- [5] S. Das, Y. Saiki, E. Sander and J. A. Yorke. Solving the Babylonian Problem of quasiperiodic rotation rates, preprint, arXiv:1706.02595.

メモリー貫性モデルを考慮したモデル検査器の開発

安部 達也

千葉工業大学人工知能・ソフトウェア技術研究センター

abet@stair.center

1 はじめに

メモリー貫性モデルとは、複数のスレッドが共有メモリを利用する際の取り決めである。この取り決めが厳しいものである場合、例えば、あるスレッドが共有メモリを利用している際、他のスレッドがその利用を待たされるといったものである場合は並列処理の効率が下がってしまう。このため、現在、多くのコンピュータアーキテクチャやプログラミング言語がゆるいメモリー貫性モデルを採用している。しかし、メモリー貫性モデルがゆるすぎると、複数のスレッドによる共有メモリの誤操作により共有メモリ上のデータの整合性が崩れてしまう可能性があり、結果として正しい計算が行われなくなってしまうことが起こり得る。そこまでゆるすぎないにしても、プログラマの直観に合わないゆるいメモリー貫性モデルを採用したことにより、意図しない挙動を行うプログラムをプログラマが書いてしまう恐れがある。このため、どのメモリー貫性モデルを採用するかは処理の効率とプログラムのわかりやすさとのトレードオフの問題を抱えており、あるメモリー貫性モデルがいつも優れているというものではない。ゆえに、あるメモリー貫性モデル一つだけを固定して考えておけばよいというものではない。

今回、著者らが開発しているメモリー貫性モデルを入力にとれるモデル検査器 McSPIN のさらなる改良を行った [1]。モデル検査とは、アルゴリズムやプロトコルなどをモデリングして得られるプログラム（モデルと呼ばれる）を、その挙動の網羅的探索を行うことで検査するというプログラム検証手法の一つであり、モデル検査器とはその実装をいう。既存の多くのモデル検査器はゆるいメモリー貫性モデルを考慮していないため、ゆるいメモリー貫性モデルを採用している現代の計算機上のプログラム検証

をこれまで行うことができなかった。

メモリー貫性モデルを入力にとれるモデル検査器の開発にはいわゆる状態爆発の悪化という問題がある。そもそもモデル検査は、入力されるモデルが複数のスレッドが立ち上げられるものであれば、各スレッドが実行する命令の実行タイミングによって生成される状態の数の組合せ的増大問題、いわゆる状態爆発問題をはらんでいる。さらに悪いことに、ゆるいメモリー貫性モデルは従来は許容されなかった挙動を許容することがあるため、とり得る状態の数はさらに増大しがちである。今回、この状態爆発の悪化問題を緩和するための最適化とヒューリスティクスを提案し、その実装と評価を行った。

2 ステージ最適化とリオーダーリング制御ヒューリスティクス

ゆるいメモリー貫性モデルの下では命令の持つ複数の効果が互いにインタリーブして現れることがある。採用されるメモリー貫性モデルを解析することで、可能な時は命令の持つ複数の効果を個別に扱うのではなく、それらを統合（ステージと呼ぶ）して扱うことにより状態数の削減を行う、ステージ最適化を提案しその実装と評価のための実験を行った [3]。

また、モデル検査の反例発見法の一つであるヒューリスティック探索において、メモリー貫性モデルを考慮したモデル検査に特有のリオーダーリング、特に、リオーダーリングされる命令の数の増減に着目したヒューリスティクスである、リオーダーリング制御を提案し、その実装と評価のための実験を行った [2]。

実験に使ったプログラムは並行コピーガーベジコレクションアルゴリズム Chicken、Staccato、Stopless である。メモリー貫性モデルは逐次一貫性 (S)、トー

表 1: ステージ最適化の効果

MCM	algorithm	loop	without stages			with stages			mem. ratio (%)	net mem. ratio (%)	time ratio (%)		
				state (K)	memory (MB)	time (sec.)		state (K)				memory (MB)	time (sec.)
TSO	chicken	1	✓	108	8,595	132	✓	23	908	8	10.6	8.8	6.2
		2	✓	2,506	546,038	8,637	✓	534	24,960	433	4.6	4.5	5.0
	staccato	1	✓	141	14,918	236	✓	26	1,032	11	6.9	5.8	4.7
		2	✓	3,888	1,097,491	16,022	✓	733	43,432	735	4.0	3.9	4.6
	stopless	1	✓	90	28,183	378	✓	14	1,404	19	5.0	4.4	5.0
		2	✓	564	564,635	7,705	✓	87	18,885	585	3.3	3.3	7.6
PSO	chicken	1	✓	308	25,208	430	✓	65	1,652	28	6.6	5.9	6.6
		2	×	1,136	264,857	4,248	×	237	12,190	227	4.6	4.5	5.3
	staccato	1	✓	143	15,166	243	✓	26	1,032	11	6.8	5.7	4.7
		2	✓	4,020	1,144,602	16,975	✓	751	44,920	768	3.9	3.9	4.5
	stopless	1	✓	177	55,210	833	✓	30	2,520	46	4.6	4.3	5.5
		2	×	45	45,416	630	×	8	2,148	41	4.7	4.4	6.6

表 2: リオーダーリング制御の効果

algo- rithm	M C M	the original		the 1-local		the singular global		the increasing		the decreasing	
		mem. (MB)	time (sec.)	mem. (MB)	time (sec.)	mem. (MB)	time (sec.)	mem. (MB)	time (sec.)	mem. (MB)	time (sec.)
chicken	S	✓ 26522	369.69	✓ 26522	768.32	✓ 26522	929.13	✓ 26522	367.57	✓ 26522	379.39
	T	✓ 48163	709.24	✓ 48163	1333.47	✓ 48163	1372.40	✓ 48163	707.45	✓ 48163	712.32
	P	×	29328	×	19240	×	8586	×	29328	×	29662
	R	—	—	—	—	×	9792	—	—	—	—
staccato	S	✓ 51050	697.99	✓ 51050	1443.83	✓ 51050	1756.46	✓ 51050	697.98	✓ 51050	696.74
	T	✓ 82596	1198.35	✓ 82596	2365.73	✓ 82596	2391.03	✓ 82596	1197.39	✓ 82596	1202.74
	P	✓ 84669	1243.83	✓ 84669	2432.60	✓ 84669	2463.15	✓ 84669	1238.68	✓ 84669	1245.15
	R	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
stopless	S	✓ 24361	438.72	✓ 24487	937.88	✓ 24361	1407.18	✓ 24361	457.30	✓ 24361	386.11
	T	✓ 37472	658.28	✓ 37472	1349.94	✓ 37472	1755.94	✓ 37472	715.72	✓ 37472	636.66
	P	×	2543	×	1934	×	1653	×	2543	×	2409
	R	×	15330	×	11309	×	1669	×	15330	×	15129

タルストアオーダリング (TSO または T)、パーシャルストアオーダリング (PSO または P)、リラックストアメモリオーダリング (R) である。

表 1 はステージ最適化の効果を示すための実験の結果であり、[3] の記載を引用・省略したものである。いずれのケースにおいてもメモリ使用量・実行時間ともに改善している。通常、このような実験を行った場合の最適化による改善は、メモリ不足により実験が完了しないケースに最適化を適用すると実験が完了するというように質的に示されることが多いが、今回、1.5 TB という非常に大きな共有メモリを有する京都大学スーパーコンピュータシステム C を利用することによりどのくらい改善したかを量的に示すことに成功した。

表 2 はリオーダーリング制御の効果を示すための実験の結果であり、[2] の記載を引用・省略したものである。表 1 とメモリ使用量や実行時間に違いが見られるのは、これら二つの実験の間にモデルがより詳細化されたことと McSPIN の性能が改善されたことによる。この実験では本稿では省略しているが多くのケースを扱ったため共有メモリを 128 GB に制限し、それを超えた場合は検査を打ち切った。メモリ不足によりリオーダーリング制御を適用しても検査が

終了しなかったケースはリラックストアメモリオーダリング下における Staccato の挙動の検査だけであった。このケースのみを京都大学スーパーコンピュータシステム C により再実験を行い、このケースには反例が存在しない、つまり、リオーダーリング制御の適用範囲外であることを確認した。

参考文献

- [1] T. Abe and T. Maeda. A general model checking framework for various memory consistency models. In *Proc. of HIPS*, pages 332–341, 2014. <https://bitbucket.org/abet/mcspin/>.
- [2] T. Abe, T. Ugawa, and T. Maeda. Reordering control approaches to state explosion in model checking with memory consistency models. In *Proc. of VSTTE*, 2017. To appear.
- [3] T. Abe, T. Ugawa, T. Maeda, and K. Matsumoto. Reducing state explosion for software model checking with relaxed memory consistency models. In *Proc. of SETTA*, volume 9984 of *LNCS*, pages 118–135, 2016.

固液混相流の数値粘性測定

野村 怜佳^{*}，高瀬 慎介[†]，森口 周二[‡]，寺田 賢二郎[‡]

^{*}東北大学 工学研究科

[†]八戸工業大学 工学部 土木建築工学科

[‡]東北大学 災害科学国際研究所

1 はじめに

未曾有の被害規模となった2011年東日本大震災に際しては、従来の津波予測シミュレーションで正確な評価がされなかった土砂移動による被害拡大、復旧・復興の遅延が報告され、土砂移動と津波の同時解析の必要性が強く認識された。このような状況を打開するために、土粒子レベルの微視的な運動機構が反映された新たな固液混相流モデルによる広域流体土砂連成解析の必要性に迫られている。本研究は流体運動を特徴づける代表的な物性値である粘性に着目し、固液混相流の等価な均質流体としての、見かけの粘性を評価するための数値粘性測定手法を提案しさらに、複数の数値粘性測定試験を行った。流体運動の記述には三次元 Navier-Stokes 方程式を用い、土砂を剛体として個別要素法 (DEM) で表現する。また、水と土砂の相互連成解析には安定化有限被覆法 [1] を用いる。

2 粘性測定手法

2.1 Hagen Poiseuille 式による数値粘性測定

一般的に粘性が一意に定まらない非ニュートン流体の場合、ひずみ速度－粘性関係を類推する必要がある。ひずみ速度を任意の値に変化させた粘性測定を複数行う必要があるが、そのような測定が行えるのは、種々の計器の中で回転粘度計のみである。数値解析による粘性測定の場合、どのような測定系であっても、解析条件を自由に設定でき、どのような測定原理を用いても、ひずみ速度を自由に設定することで

レオロジカルな挙動の捕捉が可能となる。本研究では、細管粘度計の測定原理である Hagen-Poiseuille の法則を用い、管路内流れの数値シミュレーションを行うことによって等価な均質流体としての固液混合流体の粘性を測定する方法を提案する。土砂粒子の混入した流体の管路内の流れの現象の数値シミュレーションを実施して、その後処理において管路内の流れのミクロ変数を空間および時間的に平均化し、その値を以下に示す Hagen-Poiseuille 式に代入することで、粘性を得る。

$$\mu = \frac{\pi r^4 P_x}{8Q} \quad (1)$$

管路を用いた数値シミュレーションでは、入力条件として式 (1) の圧力勾配 P_x を既知量として与えて付随するひずみ速度を算出することができる。したがって本研究では、圧力勾配 P_x を任意に変化させて複数の解析を行い、提案する数値粘性測定法を適用して管路内での平均流量 Q を算出し、式 (1) から直接粘度を算定する。

3 粘性測定のための数値解析手法

3.1 安定化有限被覆法による流体固体連成解析

本研究では流体土砂の相互連成解析として有限被覆法 (Finite Cover Method, 以降 FCM) を採用する。FCM は有限要素法 (FEM) と異なり、要素内に流体と構造の境界が存在することを許容するため、その境界位置を正確に考慮した流れ場を求めることが可能である。本研究では、一次の四面体有限要素

の形状関数を重み関数として用いることにする。三次元流れ場の支配方程式に対して SUPG/PSPG 法 [2] を適用し、安定化有限被覆法による解析を行った。

3.2 土砂の剛体球モデリング

本研究では、流体内における土砂粒子を流体力が運動の駆動力として作用するものの、変形するほどの大きさを持たないものと仮定し、剛体として扱うことにする。解析手法として、粒子間・粒子壁間接触の表現を簡易に行える個別要素法 (Distinct Element Method 以降, DEM) を採用する。土砂の形状に関しては、既往手法において用いられてきた土砂の代表粒径などを基に、全剛体粒子を完全な球形としてモデル化する。

4 数値粘度測定結果

土粒子の体積率と粘性の影響について明らかにするために、圧力勾配 P_x を $-10.0[\text{Pa}/\text{m}]$ に固定し、粒子数 N を 67, 116, 243, 310 と変更させることで代表体積要素内における土粒子の混入数が異なるモデルによる数値粘度測定を行った。数値実験より算定される平均流量 Q を Hagen-Poiseuille 式に代入することで得られる粘性係数 μ についてまとめたグラフを図-1 に示す。縦軸は算出された粘性 μ を液相の粘性 $\mu_l (=0.01\text{Pa}\cdot\text{s})$ によって除した値であり、横軸は代表体積要素内に存在する土粒子体積 V_s を代表体積要素の全領域体積 V で除した値であり、どちらも無次元量である。この図から、土粒子の占める体積率が上昇するにつれ粘性が増加する傾向が観察できる。さらに管路内領域での挙動を詳しく見るために、最も高い粘性値が算定された $N=310$ のケースの管路内 y_1 - y_2 断面における流速分布を図-2 に示す。同図からは、平均流量に寄与しない接線方向成分 u_2 , u_3 が、粒子の混入により乱れた分布を持っていることが観察できる。個々の粒子の存在が流れに対する抵抗となっているためと考えられ、これらのミクロな場における散逸が粘性として表出していることが示唆される。

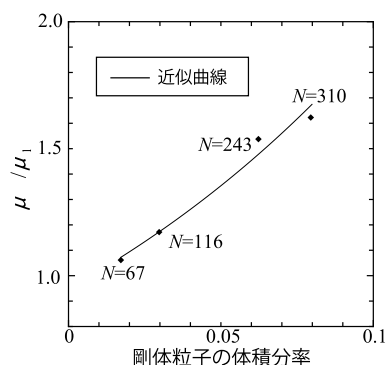


図 1: 数値粘度測定の結果：体積分率－粘性関係

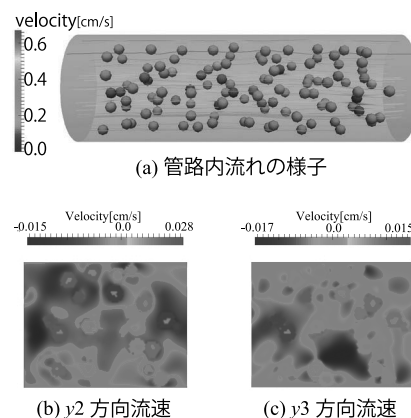


図 2: 管路流れ解析の様子

5 終わりに

本研究では、固液混相流を均質な単一流体としての代表的な物性値であるマクロ粘性の算定が可能となる数値材料試験手法を提案した。具体的には、Hagen-Poiseuille の法則を用いて管路内流れ解析による数値粘性測定手法を提案し、粘性の算出を可能とした。また土粒子の体積分率など異なる複数の解析条件を設定して数値粘度測定のカースタディを行った。

参考文献

- [1] 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.
- [2] Tezduyar, T. E. : Stabilized finite element formulations for incompressible flow computations, *Adv. Appl. Mech.*, 28, pp.1-44, 1991.

高プラントル数流体を用いた HZ 液柱内温度差マランゴニ対流の数値解析

—特異な対流場における熱的相互作用の影響—

江口 俊和

東京理科大学理工学研究科機械工学専攻

1 緒言

自由界面を有する気液界面において、温度差を付与すると表面張力差が発生する。この対流はマランゴニ対流と呼ばれ、微小重力環境下やマイクロスケール下で顕在化する、自然対流の駆動力の一つとして着目されている。例えば、単結晶材料生成法のひとつである floating-zone 法は、純度の高い単結晶材料を生成することができる。一方で、材料生産の高効率化のために、微小重力環境下で利用するとマランゴニ対流の不安定性によって生じる振動流が材料生成に悪影響を及ぼすことが知られている¹⁾。故に、マランゴニ対流の不安定性に関する理解や制御の観点で研究が行われている。

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」にて行なわれていた、MEIS(Marangoni Experiment in Space) や Dynamic Surf. と称される流体物理実験に参画していた。そして今後、JEREMI(Japanese European Research Experiments on Marangoni Instabilities) と称される、流体実験をおこなう予定である。図 1 は half-zone モデルと呼ばれる、floating-zone 法を模擬した、最も典型的なモデルである。上下壁面間に液柱を形成し、上部を加熱、下部を冷却することで液柱自由表面上に温度勾配を付与し、マランゴニ対流を発生させる。JEREMI では、気体側に強制対流を付与し、自由界面での熱伝達制御をおこなうこととなっている。

本研究は、マランゴニ対流の不安定化メカニズムの解明による理学的貢献、及び産業分野への波及効果を目指し、研究を実施している。本研究は、MEIS にて観測された、X 状構造と呼

ばれる、特異な対流場の発現領域、及び発現メカニズムを明らかにすることを目的とした。また、JEREMI に向けた準備研究の一助も担っている。

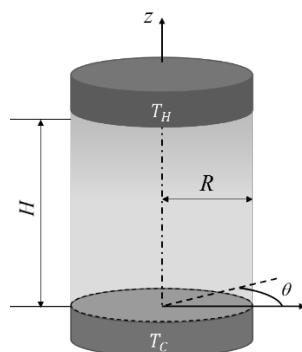


Fig. 1 The schematic image of a liquid bridge

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、 $\Gamma = 2.0$ で固定させた。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。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ことを仮定し、 Pr 数が 16 であるものとした。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した。

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

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

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

また、液柱自由表面上での熱の授受を記述す

る境界条件は、以下で定義した.

$$\left. \frac{\partial T^*}{\partial r^*} \right|_{surf} = -Bi(T^* - T_\infty^*) \quad (5)$$

$$T_\infty^* = T_C^* + \Delta T^* z^* \quad (6)$$

Bi は自由界面での熱の授受を示す無次元数, ビオ数(Biot 数)であり, hH/λ で示される. ただし, h : 周囲気体の熱伝達率, H : 液柱高さ, λ : 液柱の熱伝導率, である. 本研究では周囲気体領域を設けず, 液柱の自由表面の熱の授受をビオ数でモデル化した. 計算を行なう際は, 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. 特に, マランゴニ数は, 所定のマランゴニ数で十分発達させた後に, マランゴニ数を増大させていくという手順を繰り返した.

3 結果

図1は横軸に液柱自由表面上での熱伝達を示す無次元数, Bi を示し, 縦軸にマランゴニ対流の強さを示す無次元数, マランゴニ数(Ma)を示す. 中抜きの点が定常流, 中塗りの点が振動流を示し, $\times$ と実線はプロット点から予測される振動流遷移点, 臨界マランゴニ数(Ma_c)である. Bi が負のとき液柱全体は周囲気体から熱を受け取っており, 正のときは熱が周囲気体に逃げていることを示す. Bi が負から正の方向に向かってグラフをみると, Ma_c は減少から極小値を迎え, 再度急上昇したのちに, 一度 Ma_c が落ち着く. その後, Ma_c は最大値を迎え, 緩やかに減少していく. 振動流の状態は脈動振動流(standing waves, SW)と回転振動流(traveling waves, TW)の2つに分けられる. 本研究では, Ma_c の近傍で大きく分けて4つに分かれることが明らかになり, Bi の絶対値が比較的小さいところではTW, 一方 Bi が比較的大きいところではSWが安定的に発現することが明らかになった. 本研究結果で見られた, 二種類のTWの類別は, 先の宇宙実験でも同様の類別がされている²⁾. 従来の数値シミュレーションでは, 安定的にSWを発現させることが難しく, 十分発達した対流場ではSWからTWへと遷移していくが, 本研究はSWに関する新

たな知見を示すことができた. また, 先行研究で見られたX状構造は Bi が大きいところで, かつ対流場が強い領域にて発現することが明らかとなった. 一方で, Bi が小さいところでもSWが発現し, X状構造とは異なる新たなSWを初めて観測することができた. また, その内部構造もそれぞれ異なっている. 図5, 6はいそれぞれ, 一周期分のX状構造と新たなSWの内部構造で, 赤と紫はそれぞれ時間平均温度からの高温, 低温変動分を, 水色は等温面を示している. X状構造では, 低温変動分のロッド上部側が液柱自由表面に近づく, 二つに分かれると, 一つは液柱中心へと戻り, もう一つは液柱自由表面に沿って下部ロッド側へと向かっていく. 一方, 新たなSWはそれぞれの温度変動分が, 入れ替わっているような挙動をしていることが明らかとなった. SWは右回りのTWと左回りのTWの重ね合わせによって生じる振動流とされている³⁾. それぞれのSWは, 発現領域と内部構造の特性から, X状構造は Bi が正側で発現するTWの重ね合わせ, 新たなSWは Bi が負側で発現するTWの重ね合わせであることが推察される. 今回の新たなSWは実現象でこの対流場を未だに観測していないため, 実験において再現されることが今後望まれる.

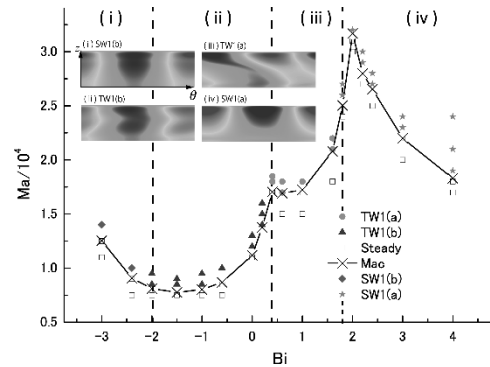


Fig. 2 The flow pattern map as a function of Bi .

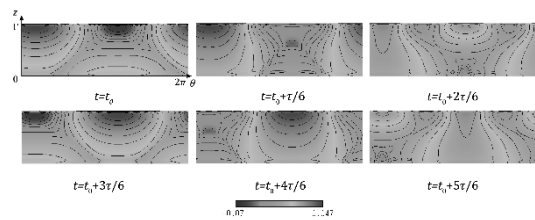


Fig. 3 The time series of X shape structure

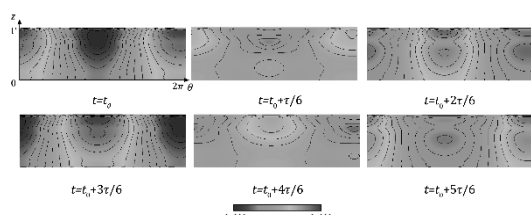


Fig. 4 The time series of another SW.

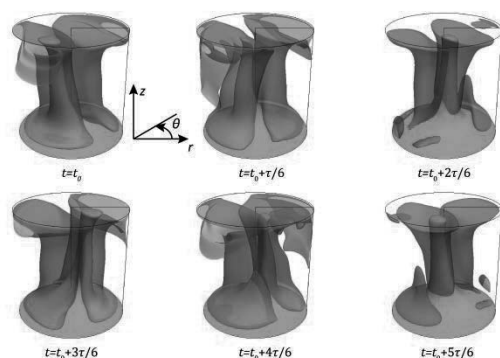


Fig. 5 The internal structure of X shape structure.

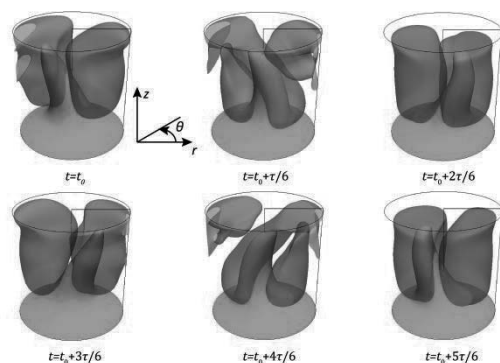


Fig. 6 The internal structure of another SW.

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液柱において、自由表面上で液柱と自由表面の熱伝達を無次元数 Bi で制御したモデルにて、臨界マランゴニ数の遷移過程、X 状構造の発現領域、発現条件を調査した。 Bi の大きさが比較的小さい領域では、TW の振動流が二種類見られ、その境界は、 Bi が正のところと小さな値であるところとなっていた。これは、先の宇宙実験で見られた傾向に非常に類似していた。 Bi の大きさが大きくなると、SW の振動流が二種類見られ、安定的に SW が発現することを数値シミュレーションで確認することができた。特に Bi が正の領域側では、対流場

を強くしたときに X 状構造が見られ、X 状構造の発現領域を明らかにした。 Bi が負の領域では、X 状構造とは異なる、新たな SW の振動流を発現し、内部構造を確認することができた。

5 参考文献

- 1) A. Cröll et al., *J. Cryst. Growth*, vol. 191, pp. 365–376, 1998.
- 2) T. Yano et al., *Phys. Fluids*, vol. 29, p. 44105, 2017.
- 3) K. Boronska and L. Tuckrman, *J. Fluid Mech.*, vol. 559, pp. 279–298, 2006.

カオス力学系におけるネットワーク解析

小林幹*

*立正大学経済学部

1 はじめに

カオス力学系にはカオスアトラクタに埋め込まれた加算無限個の不安定周期軌道が存在することが知られている [1, 2]. そして, カオス軌道はこれら加算無限個の不安定周期軌道間を不規則に遷移する現象であると考えられている. この不安定周期軌道間の不規則な遷移現象にはどのような統計性質が潜んでいるのかを明らかにすることが本研究の目的である. そのために, 我々はカオスの不安定周期軌道間の遷移現象をネットワークを使ってモデル化し, ネットワーク理論の観点からこの遷移現象を解析する. ネットワーク理論とは物 (ノード) と物 (ノード) との繋がり (リンク) を解析するためのもので, 自然, 生命や社会における様々な現象がネットワーク理論で説明されている [3].

ここでは, 不安定周期軌道をノードとみなし, カオス軌道を用いてノード間のリンクを構築する. これにより, カオスの不安定周期軌道間の不規則遷移現象を数理的にモデル化することが可能である. 本研究では, ネットワークの出次数に着目し, カオスのネットワークを解析する [4].

2 ネットワークモデルの構築

時間離散カオス力学系を例にしてネットワークモデルの構築アルゴリズムを述べる.

(1) カオス力学系においてカオスアトラクタ (カオティックサドルでも良い) に埋め込まれた不安定周期軌道をニュートン法などの方法を用いて数値的に見つける. 数値的に得られた不安定周期軌道を $UPO_m (m = 1, 2, \dots, M)$ と表すことにする.

(2) カオスアトラクタ (またはカオティックサドル) 上の適当な初期条件 x_0 からカオス軌道に沿った位置

を数値的に構成する. 時間 n ($n = 1, 2, \dots, N$) におけるその軌道の位置を $\{x_n\}$ と表す.

(3) 時間 n におけるカオス軌道に沿った位置 x_n からユークリッド距離の観点から最も近い不安定周期軌道を見つめる. (例えば, その不安定周期軌道を UPO_i とする.)

(4) 時間 $n + 1$ におけるカオス軌道に沿った位置 x_{n+1} からユークリッド距離の観点から最も近い不安定周期軌道を見つめる. (例えば, その不安定周期軌道を UPO_j とする.)

(5) UPO_i から UPO_j へリンクを張る (もし $i = j$ であれば自己ループを構成する.).

(6) (3) から (5) を繰り返す ($n = 0, \dots, N - 1$).

十分大きな数 N をもって以上の手続きを繰り返すことで, ノード数 M (これは不安定周期軌道の数に対応する) の有向ネットワークが構成される. 連続時間カオス力学系に対してはポアンカレ写像を考えることで同様の扱いが可能である.

3 ローレンツモデルのネットワーク構造

ローレンツモデルにおけるカオスのネットワークを構成する: $\dot{x} = -\sigma x + \sigma y, \dot{y} = -xz + rx - y, \dot{z} = xy - bz$, ただし, ここでは $\sigma = 10, b = 8/3$ と $r = 28$ の値を用いる. ネットワークを構成するために, ポアンカレ断面 $z = r - 1, \dot{z} > 0$ 上で与えられるポアンカレ写像を考える. ここで扱う不安定周期軌道の数 M は 1259 であり, これはポアンカレ写像周期で 14 までのほぼ全ての不安定周期軌道を網羅している.

図 1 は, ポアンカレ写像周期 14 の不安定周期軌道のみに着目した, 周期と次数との関係を示している.

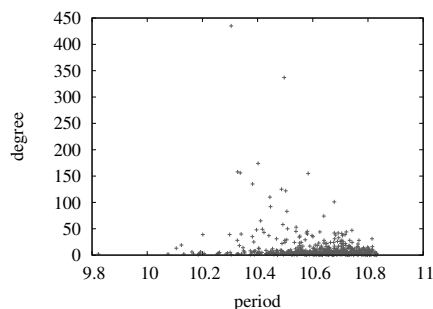


図 1: ローレンツモデルにおけるポアンカレ写像周期 14 の不安定周期軌道の周期と各々が持つ次数との関係. 周期と次数に明らかな相関は見られない.

図からは, 周期と次数に明らかな相関は見られない. つまり, ネットワーク化して得られる次数という特徴量は, 周期とは別の情報を含んでいると考えられる.

図 2 は, $N = 600000$ の長さのカオス軌道から構成されたネットワークの次数分布を表している. 次数分布は概ねべき的であると思われるので, ネットワークがスケールフリー性を持っていることが示唆される.

さらに, ローレンツモデルのネットワークの構造を明らかにするために, 平均パス長と, クラスター係数を示す. その際, ローレンツモデルのネットワークの定性的な特徴を明らかにするため, ローレンツモデルのネットワークと同じノード数 1259 と平均次数 40.119 をもつランダムネットワークと比較する. 表 1 より, ローレンツモデルのクラスター係数はランダムネットワークと比べて大きく, 平均パス長はローレンツモデルのネットワークの方が長いことが分かる. これにより, ローレンツモデルのネットワークがランダムネットワークよりは複雑な構造を持つが, いわゆる複雑ネットワークの構造と完全には一致しないことが示された.

Network	Properties	values
Random	Average path-length	1.98
	Clustering coefficient	0.03
Lorenz	Average path-length	2.58
	Clustering coefficient	0.18

表 1: ローレンツモデルのネットワークとランダムネットワークの構造の比較.

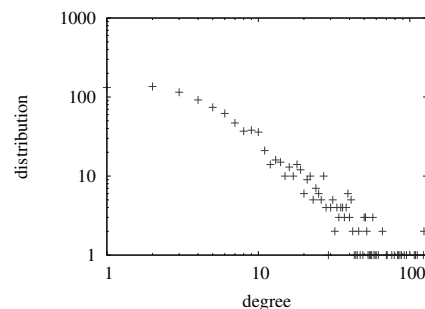


図 2: ローレンツモデルにおける周期 14 までの不安定周期軌道 1259 個を用いて構成したネットワークの次数分布. リンクの構成は $N = 600000$ の長さのカオス軌道を用いて行われている. 次数分布はべき的な関数と見ることができるので, ネットワークがフケールフリー性を有していると示唆される.

4 まとめ

本研究報告では, カオス軌道における不安定周期軌道間の不規則遷移現象をネットワークを用いて数理モデル化する方法を示し, その方法によってネットワーク化されたローレンツモデルのネットワークの構造を示した. 結果として, ローレンツモデルのネットワークは, 次数分布がべき的であったり, クラスター係数がランダムネットワークと比べて大きいなど, 単縦なランダムネットワークとは異なる構造を持っていることが明らかになった. [4] ではさらに, 次数とカオスの統計量との関連性も明らかにしており, カオスのネットワーク化がカオスの特徴付けるための方法として有益であることが示唆されている.

参考文献

- [1] P. Cvitanović, Physica D **51**, 138 (1991).
- [2] T. Kai and K. Tomita, Prog. Theor. Phys. **64**, 1532 (1980).
- [3] R. Albert and A.-L. Barabási, Rev. Mod. Phys. **74**, 47 (2002); R. Albert, H. Jeong, and A.-L. Barabási, Nature **406**, 378 (2000); R. Albert, H. Jeong, and A.-L. Barabási, Nature **401**, 130 (1999).
- [4] M. U. Kobayashi, and Y. Saiki, Chaos **27**, 081103 (2017).

Numerical investigation of the effect of hydrogel surface shape on drag performance in turbulent flow

STOYANOVA Petya Valentinova

大阪大学大学院 基礎工学研究科

Direct numerical simulation of turbulent channel flow with varying slip velocity on the walls was performed in order to investigate the drag reducing properties of hydrogel paints with rough surfaces. It was found that, as long as the water trapping effect persist, surfaces with higher mean peak-to-valley roughness can reduce drag better than smoother surfaces.

1 Introduction

In maritime transportation more than half of the total resistance is due to frictional drag, resulting in great losses for the shipping industry. Recently novel bioinspired hydrogel paints have been developed to meet the present requirements of non-toxicity. It was also found that hydrogel coatings can reduce the frictional resistance while still possessing hydrodynamic roughness. In order to take full advantage of that property the mechanism by which hydrogel paints influence the turbulent drag should be investigated. Shimada *et al.* [1] have suggested that hydrogels trap water in the dimples of the rough surface. This work presents a parametric study, where the water trapping effect is modeled as a local slip velocity boundary condition on a flat wall in direct numerical simulations (DNS) of turbulent channel flow.

2 Numerical method

The governing equations of the flow are the incompressible Navier - Stokes equations and the continuity equation, solved for constant

flow rate in a turbulent channel flow with infinitely-long parallel plates.

To simulate the effect of hydrogel roughness the velocity is considered at the plane at the levels of the tips of the dimples of wavy roughness such as the one shown in Fig. 1a. The following Navier slip boundary conditions [2] were applied symmetrically to the flat channel wall:

$$u_s = l_x \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{wall}, \quad w_s = l_z \left. \frac{\partial w}{\partial y} \right|_{wall} \quad (1)$$

where u_s and w_s are the slip velocities in the streamwise and spanwise direction, respectively, and l_x and l_z are the slip lengths. The latter were varied via filtering functions:

$$f_x = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \cos \left(\frac{2\pi}{\lambda_x} x \right) \right\}, \quad (2)$$

$$f_z = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \cos \left(\frac{2\pi}{\lambda_z} z \right) \right\} \quad (3)$$

$$l_x, l_z = f_x, f_z l_0 \quad (4)$$

to achieve the spatially changing slip velocity (Fig. 1b) corresponding to the spatially varying depth of the rough surface. l_0 corresponds to the maximum depth of the valleys.

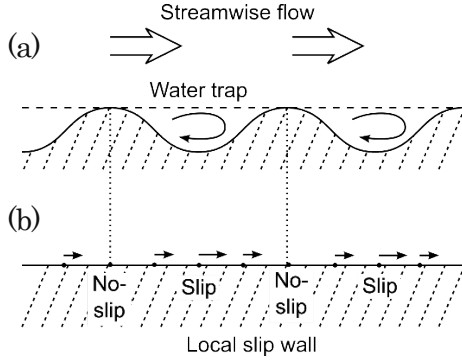


Fig. 1 Schematic (a) the water trap effect by rough hydrogel surface and (b) the local slip model.

The governing equations were discretized using 2nd order finite difference method. For the temporal integration of the convective and viscous terms 3rd order Runge-Kutta and Crank-Nicolson are used, respectively. A computational domain of size $4H\delta \times 2\delta \times 2H\delta$ and $128 \times 150 \times 128$ grid points was used in the streamwise (x), wall-normal (y) and spanwise directions (z), respectively. The simulations were performed at $Re = U_c \delta / \nu = 4200$ or $Re_\tau = u_{\tau_0} \delta / \nu \approx 180$, where U_c is the centerline velocity, δ is the channel half height, ν is the kinematic viscosity and u_{τ_0} is the friction velocity for no slip channel flow. In order to investigate how the size and height of the dimples affect the turbulent vortex structure near the wall we varied the reference slip length, and the streamwise and spanwise wavelengths as shown in Table 1. Hereafter, superscript “+” denotes quantities normalized by u_{τ_0} and ν .

Table 1. Parameters used in the DNS of turbulent channel flow.

Parameter	Value
Reference slip length, l_0^+	0.9, 1.8, 3.6
Streamwise wavelength, λ_x^+	275, 368, 550, 735, 1100
Spanwise wavelength, λ_z^+	50, 183

3 Results

The drag reduction ratio (DR) was defined as:

$$DR[\%] = \frac{\left(-dp/dx|_{no-slip}\right) - \left(-dp/dx|_{slip}\right)}{\left(-dp/dx|_{no-slip}\right)} \times 100 \quad (5)$$

where $-dp/dx|_{no-slip}$ and $-dp/dx|_{slip}$ are the mean pressure gradients under no-slip and slip conditions, respectively.

In the simulations the wavelength was chosen to be of the order of the turbulent structures in order to investigate the interaction between the varying slip velocity and turbulence. The effect of the different slip conditions on the drag reduction ratio is shown in Fig. 2. For the smallest slip length $l_0^+ = 0.9$ the drag reduction is about 1%, it rises to $\sim 2\%$ for $l_0^+ = 1.8$ and varies from 3.3% up to 5.2% for the largest slip length $l_0^+ = 3.6$. At the two small slip lengths the DR depends on the combination of streamwise and spanwise wavelengths and for the same slip length the difference between two wavelength combinations can be as high as $\sim 1\%$. This correlation, however, is mostly lost at $l_0^+ = 3.6$, where the DR increases with the increase of slip length. A possible explanation for this phenomenon might be the reduced surface-vortex interaction at larger slip lengths, then the no-slip areas act merely as obstacles that disturb the near-wall flow. The larger wavelength correspond to more gradual and less frequent disturbances leading to lower friction.

Figure 3a shows the mean streamwise velocity as function of the channel width for no slip and a slip case with $l_0^+ = 3.6$, $\lambda_x^+ = 550$, $\lambda_z^+ = 50$. As a result of the surface slip pattern the velocity is decreased everywhere in the channel. It also leads to reduced root mean square (rms) velocity fluctuations (Fig 3b).

To investigate the effect on the vortical structures the isosurfaces of the second

invariant of the velocity gradient tensor:

$$Q = -\frac{1}{2} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (6)$$

are plotted in Fig. 4. It can be seen from Fig. 4a and Fig. 4b that the slip conditions led to smaller number of vortices, but that the size of the structures was increased, i.e. under slip conditions the vortices are stabilized.

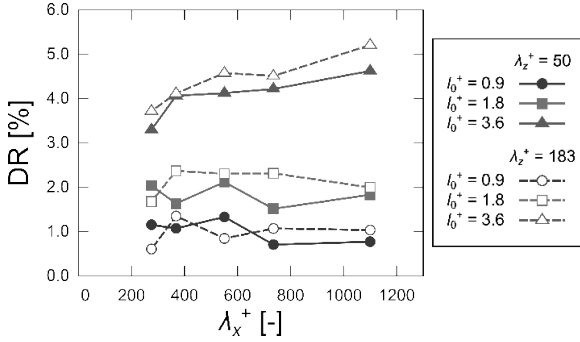


Fig. 2 Dependence of the drag reduction on the surface parameters.

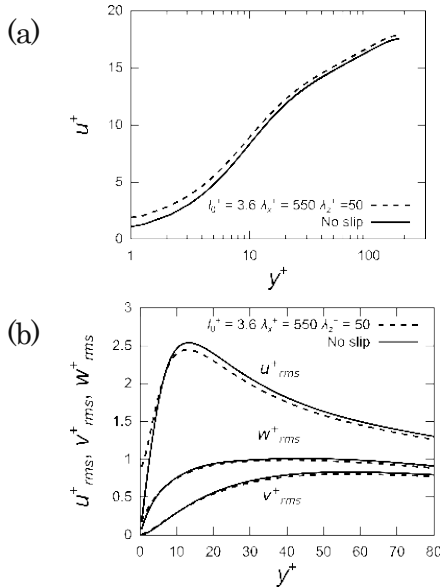


Fig. 3 Comparison of the (a) velocity profiles and (b) root mean square (rms) velocity fluctuations for no slip and slip case.

4 Conclusions

A three-dimensional direct numerical simulation of turbulent channel flow with varying local slip velocity condition was performed to model the effect of trapped water layer of hydrogel coating. The drag was reduced

in all cases and it decreased with increasing slip length, reaching up to 5 % reduction. It was found that for the small slip lengths the drag reduction depends strongly on the combination of wavelengths, but that the interaction between the different wavelengths is mostly lost for high slip lengths. Then the drag decreases with the increase in wavelength size. Finally, it was found that the slip conditions led to more stable vortical structures of lower intensity. The results from this research imply that, as long as the surface can trap water effectively, roughness with larger mean peak-to-valley height is better at reducing drag.

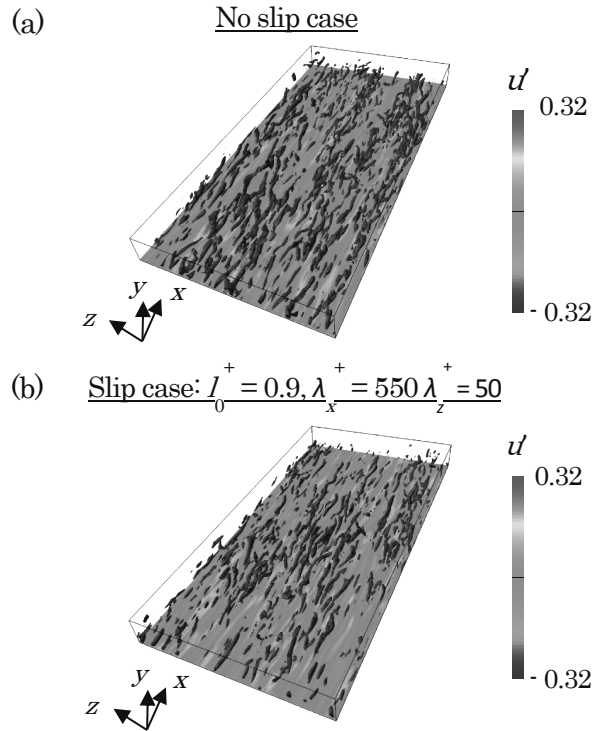


Fig. 4 Isosurfaces of the second invariant $Q=0.55$ (in blue) for (a) no slip case and (b) slip case $l_0^+=0.9, \lambda_x^+=550, \lambda_z^+=50$. In the plane: streamwise velocity fluctuations, u' .

References

1. N. Yamamori and M. Shimada, "Verification of the Reduction Effect of New Antifouling Paint for Ship bottoms 'LF-Sea®' on the Friction Resistance by

- Utilizing Actual Ships,”
TECHNO-COSMOS, 22 (2009), pp. 28-33.
2. T. Min and J. Kim, “Effects of Hydrophobic Surface on Skin-Friction Drag”, *Phys. Fluids*, 16 (2004), L55-L58.
 3. J. Kim, P. Moin and R. Moser, “Turbulence Statistics in Fully Developed Channel Flow at Low Reynolds Number”, *J. Fluid Mech.*, 177 (1987), pp. 133-166.

MuSTAR MD に基づくタンパク質構造変化の自由エネルギー経路計算手法の確立と応用

山守 優 *

*大阪大学基礎工学研究科

1 はじめに

タンパク質などの生体分子は、外部の摂動に伴う構造変化によって機能を発揮する。近年、計算機の発達に伴って、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) などの分子シミュレーション手法を用いて、生体高分子の機能メカニズム解明を行うことが強く動機づけられてきている。分子シミュレーションによる生体分子の機能解析のためには構造変化過程の再現・メカニズム解明が重要である。しかしながら現在の計算資源をもってしても、通常のシミュレーション手法を用いただけでは、m 秒 ~ 秒のスケールにおよぶ大規模な構造変化過程を再現することは困難である。この困難に対処するために、レプリカ交換法 [2]、Temperature Accelerated Molecular Dynamics [3]、メタダイナミクス [4] などのさまざまな効率的サンプリング法が開発されてきた。

本研究においては、筆者の開発した Multi-Scale Sampling using Temperature Accelerated and Replica-Exchange Molecular Dynamics (MuSTAR MD) [1] を拡張し、タンパク質などの生体高分子の機能メカニズム解明に有用な方法として確立することを目的として研究を遂行した。MuSTAR MD は、構造変化を適切に記述可能なように少数の自由度を Collective Variable (CV) として選択し、CV 部分を独立に時間発展させる拡張系を導入している。CV 系を介して精密な全原子モデルと効率的な粗視的モデルが相互作用するシミュレーションを行うことができる。更に、CV 系とその他のモデルとの結びつきの強さが異なる拡張系を複数個用意し、レプリカ交換によって結びつきの強さを交換することで、全ての拡張系に渡って粗視的モデルの効率性の高さと全原子

モデルの精度の高さを兼ね備えたサンプリング結果が得られるようになっている。筆者は、本手法を真空中のテスト系 (Alanine-dipeptide、Met-Enkephalin) に適用し、構造変化に関わる自由エネルギー変化を計算した。レプリカ交換法、レプリカ交換アンブレラサンプリング法、Temperature Accelerated MD、などの既存の手法と比較してサンプリング効率と自由エネルギー計算精度の両面での優越性を確認した (図 1)。

本研究においては、1) 溶媒を陽に含む系にも適用可能のように MuSTAR MD の拡張を行うこと及び 2) CV 選択法として、機械学習の分野で発達した疎構造学習を用いた CV 選択法の導入を行った。

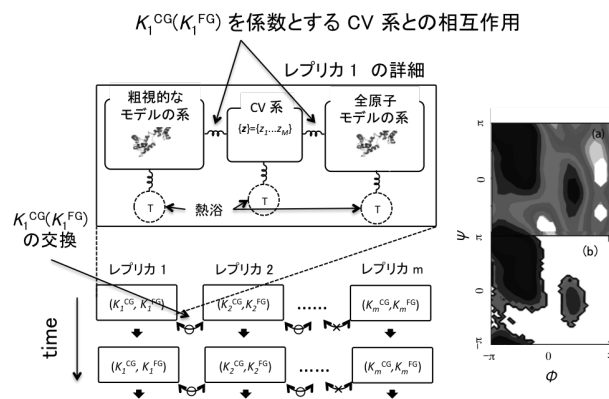


図 1: 左図は MuSTAR MD の概念図。右図は二面角空間に射影した真空中の Alanine-dipeptide の自由エネルギー地形。(a) MuSTAR MD、(b) レプリカ交換法による計算結果

2 結果および考察

2.1 MuSTAR MD の拡張

MuSTAR MD においては、以下のように全原子系、粗視系、CV 系の 3 種の系が同時進行で時間発展する拡張系を扱っている。

$$m_i^\alpha \ddot{x}_i^\alpha = -\frac{\partial V^\alpha(\mathbf{x}^\alpha, z)}{\partial \mathbf{x}_i^\alpha} - \frac{\partial W^\alpha(\mathbf{x}^\alpha, z)}{\partial x_i^\alpha} + (thr, \beta^\alpha) \quad (1)$$

$$m^z \ddot{z}_l = -\sum_{\alpha}^N \frac{\partial W^\alpha(\mathbf{x}^\alpha, z)}{\partial x_i^\alpha} + (thr, \beta^z) \quad (2)$$

ただし、 $\alpha = FG, CG_1, CG_2, \dots, m_i^\alpha, \mathbf{x}_i^\alpha, (thr, \beta^\alpha)$ はそれぞれの原子座標系の原子 i の質量、座標及び系の熱浴、 $m^z, z_l, (thr, \beta^z)$ は CV 系の仮想的な質量、座標、熱浴である。このときに全原子系と粗視系の計算を独立に行うように拡張した。このことによって、計算の大部分を占める全原子系の計算にオープンソースで高速な GROMACS を採用でき、高速化が可能となる。現在、GROMACS を用いたコードを開発中である。

2.2 CV 選択法の導入

MuSTAR MD の大規模系への適用にあたって重要になるのは、系の変化を記述する適切な少数の自由度を CV として選択することである。現状では、対象系への化学的・生物学的な知見に基づいて、重要な自由度を予測し、反応座標とみなすなどの手段をとる。系に対する事前の知識を前提とすることなく、重要な自由度を得ることを可能にする解析方法として、主成分解析がある。主成分解析は、原子座標のトラジェクトリに対して直交変換を行い、互いに相関のない座標の線形結合（主成分）を得る手法で、多くの研究で用いられている。この方法は、構造ゆらぎの記述に適しているが、構造変化の引き金になる短時間の変化の抽出には適していない。他の方法も、適用可能な自由度数の限界や抽出したモードを物理的にどのように解釈するかが自明でないなどの課題点を持つ。時系列データから少数の重要な相関を持つ変数の組み合わせを同定し、その組み合わせの時系列に沿った変化をもとに、変化に関係する自由度を抽出する方法である疎構造学習を、MD に適用して、新しい解析方法を模索した。疎構造学習とは、機械学習の分野において、多自由度の時系

列データへの異常箇所同定問題への解法として近年発達している方法である。異常箇所同定問題とは、訓練データが与えられているとして、新しい標本や一点データが与えられた時に、各次元に対して元の訓練データとの異常度を計算せよという問題である。疎構造学習においては、データの状態を変数間の関係に着目して記述する。このときに変数間の関係は、訓練データの精度行列 Λ として表現する。即ち、 Λ の (i, j) 成分が非零の値であるとき、 i 番目の自由度と j 番目の自由度に相関があることを意味する。このときに、精度行列 Λ が適切な疎行列で近似できるとき、多自由度のデータから重要な少数の自由度を抜き出したと言える。疎構造学習においては、精度行列が疎行列になりやすいような適切な事前分布の元で、事後確率最大原理に基づき、精度行列を求める。即ち、疎構造学習とは、直感的には理解不可能な多自由度の時系列データに対して、重要な変化を引き起こした自由度を異常度つきで特定することで、意味のある解釈を与えるための方法であるといえる。Chignolin に対する予備計算を行った。10 残基の de novo タンパク質 chignolin の C α 間距離の時系列に対して、疎構造学習を適用した。その結果、TYR2-TRP9 間距離と PRO4-GLY7 間距離に強い相関を持つことが検出できた。

3 結論

本研究では、テスト系において、既存の手法と比較してサンプリング効率と自由エネルギー計算精度において勝った効率的サンプリング手法 MuSTAR MD を、1) 溶媒を含む系にも適用可能 2) 疎構造学習を用いた CV 選択法の導入という二点において拡張するために研究を遂行した。

参考文献

- [1] Y. Yamamori, A. Kitao, Jour. Chem. Phys., 139, 145105, (2013).
- [2] Y. Sugita, Y. Okamoto, Chem. Phys. Lett., 314, 141-151, (1999).
- [3] L. Maragliano, E. Vanden-Eijnden, Chem. Phys. Lett., 426, 168-175, (2006).
- [4] A. Laio, M. Parrinello, PNAS, 99, 12562-12566, (2002).

破壊力学に基づく損傷モデルによる鉄筋コンクリートの

3次元破壊シミュレーション

相馬 悠人

茨城大学 理工学研究科 都市システム工学専攻

1 はじめに

社会資本への投資削減により，土木構造物の設計・維持管理の合理性が要求されている．それに伴い，建設材料である鉄筋コンクリート(以下，RC)の力学挙動をより詳細に予測や把握することへの重要性が増している．

RC 部材はコンクリートの破壊特性および鉄筋とコンクリートの相互作用により，大小様々なひび割れが進展する複雑な破壊挙動を示す．数値解析による RC 部材の破壊挙動を再現する試みは盛んに行われているが，RC 部材の破壊挙動を3次元で詳細に再現した例はほとんどない．

対して車谷らは，鉄筋とコンクリートの力学挙動を別々にモデル化し，鉄筋の幾何形状まで反映させた有限要素モデルを用いることで，RC 部材の破壊挙動を詳細に再現できる数値解析手法を開発した[1]．しかし，この方法は，鉄筋の幾何形状を有限要素モデルで再現するため，細かなメッシュが必要となる．複雑な配筋を有する実規模のRC部材への適用を考えた場合，内部構造を再現するのに，大規模な有限要素モデルが必要となる．

そこで本研究では，RC 部材の数値解析手法に領域分割法に基づくプロセス並列化を適用し，大規模シミュレーションを実行できる方法を開発する．そして，開発した数値解析手法の計算効率を検証し，実規模のRC部材への適用性を示す．

2 RC 部材の数値解析手法

2.1 鉄筋とコンクリートの材料モデル

RC 部材の破壊挙動を再現するためには，鉄筋

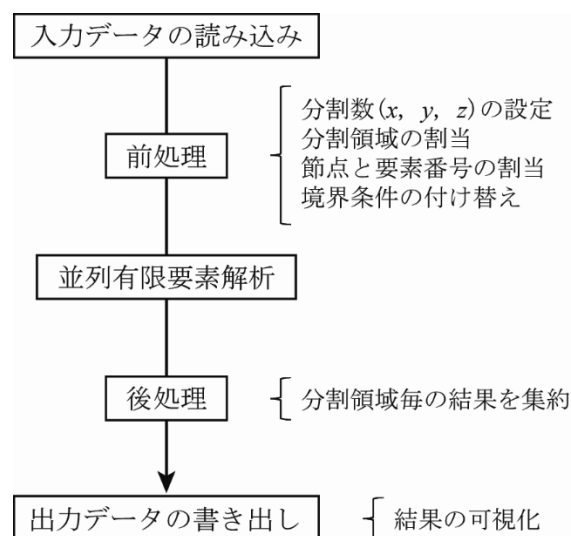


図-1 領域分割法による並列有限要素解析

とコンクリートの力学挙動のモデル化が重要となる．本研究では，車谷らが開発した数値解析手法を用いる[1]．この手法では，鉄筋の材料モデルに非線形等方硬化則に基づく von-Mises 塑性モデル，コンクリートの材料モデルに破壊力学に基づく等方性損傷モデルを適用している．

2.2 並列化

RC 部材の数値解析手法では，連立一次方程式の解法に対角スケーリングのみを施した共役勾配法を用いている．本研究では，主に連立一次方程式の解法の部分に，領域分割法に基づくプロセス並列化を適用している．

数値解析の手順を図-1 に示す．手順としては，入力データの読み込み後，前処理として，対象とする有限要素モデルの分割数の設定，分割領域の割当，節点と要素番号の割当，境界条件の付け替

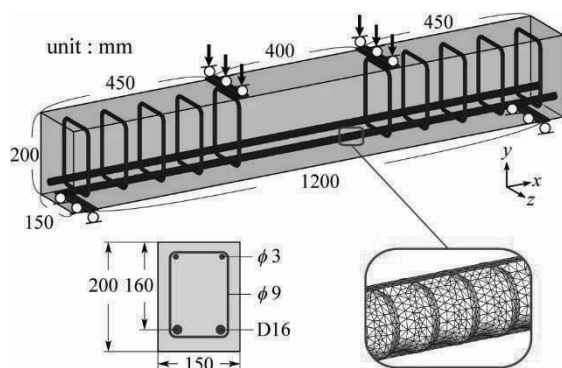


図-2 RC はりの有限要素モデル

えを行う。次に、分割領域毎にコアを割り当て、プロセス間で情報の送受信を行いながら並列有限要素解析を実行する。最後に、後処理として、分割領域毎の解析結果を集約し、有限要素モデル全体の解析結果を出力する。

3 大規模シミュレーションへの適用性

3.1 計算効率の検証

大規模シミュレーションへの適用性を示すため、開発した数値解析手法の計算効率を検証する。対象とする有限要素モデルは図-2に示すRCはりである。対称性を考慮し、解析範囲は1/4とした。一次の四面体要素を用い、節点数と要素数は135473と750042とした。強制変位12 mmを600 stepで与えた。この有限要素モデルにおいて、使用するコア数を8 ($2 \times 2 \times 2$)、16 ($4 \times 2 \times 2$)、32 ($8 \times 2 \times 2$)、64 ($16 \times 2 \times 2$)とし、計算時間を比較した。カッコ内は、 x, y, z 軸方向の分割数を示している。

図-3に計算時間とコア数の関係を示す。使用するコア数の増加とともに、計算時間が短縮されており、並列化による計算効率の向上が確認できた。以上より、開発した数値解析手法は、実規模のRC部材における大規模な有限要素モデルにおいても高速で解析が可能である。

3.2 解析結果

3次元でのひび割れ分布を図-4に示す。この可視化結果は、コンクリートの材料モデルに適用した損傷モデルにおける損傷変数の結果を3次元で可視化したものである。3次元で複雑に進展するひび割れを詳細に再現できていることが分かる。

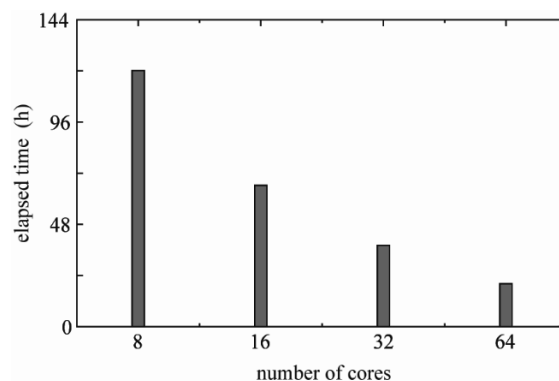


図-3 計算時間とコア数の関係

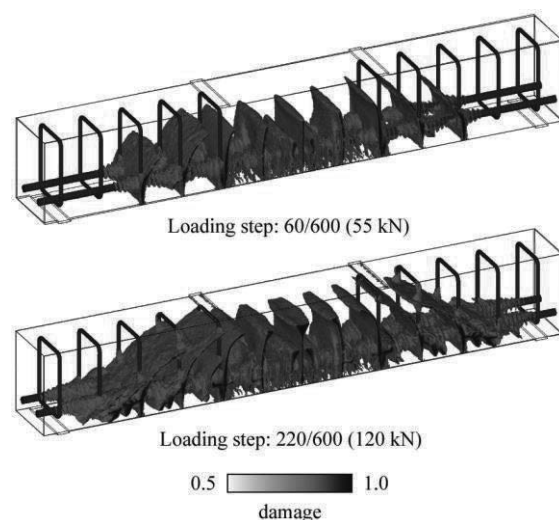


図-4 3次元でのひび割れ分布

4 おわりに

実規模のRC部材の詳細な破壊挙動を再現するため、RC部材の数値解析手法に領域分割法に基づくプロセス並列化を適用した。RCはりの有限要素モデルを対象とし、コア数と計算時間を比較した結果、計算効率の向上が確認でき、実規模のRC部材の数値解析において必要となる大規模な有限要素モデルにおいても、高速に数値解析を実行可能であることを示した。

参考文献

- [1] 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.

分子性導電・磁性材料の基底状態および励起状態に関する理論的解析

中野 義明

京都大学大学院理学研究科化学専攻

1 緒言

金属フタロシアニン(MPc)は、特異な光学・導電・磁気物性を示すことが期待され、光学、電子、光電子素子のセンサーや材料として利用されている。例えば $[M^{III}L_2Pc]^-$ ($M = Co, Fe; L = CN, Cl, Br$)から作製された部分酸化状態の塩は、半導体的、または、金属的導電性を示すようになる。また、 $[Fe^{III}(CN)_2Pc]^-$ から成る塩は巨大磁気抵抗を示す。一方、金属フタロシアニンは還元されることによって、金属状態や超伝導状態になることが理論的に予測されている。しかしながら、還元状態の金属フタロシアニンは大気中で不安定であるため、結晶構造の報告が少なく、構造-物性の相関が明らかになっていない。

本研究では、多成分法によって作製した2種類の同形錯体 $(Me_4P^+)[M^{IV}O(Pc^{3-})]^- (TPC)_{0.5} \cdot C_6H_4Cl_2$ ($M = Ti$ (**1**), V (**2**))の結晶構造、および、光学的・磁気的特性を調べた。ここで、TPCはトリプチセンである(Figure 1)。

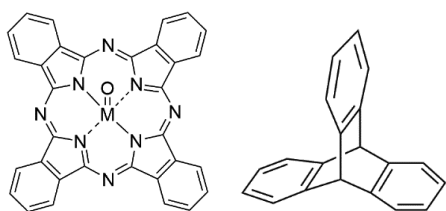


Figure 1. Molecular structures of $M^{IV}OPc$ ($M = Ti, V$) (left) and TPC (right).

2 結果と考察

多成分法は金属フタロシアニンやフラーレンのラジカルアニオン塩を作製するために開発された合成手法である。この方法では、有機カチオンが電荷を

制御する一方で、TPCのような有機分子がイオンラジカル塩の結晶構造を制御する役割を果たす。TPC分子は、有機イオンを収容するのに適した六角形の空隙を形成し、多成分錯体において層状構造を提供する。具体的には、 $TiOPc$ 、 $VOPc$ のラジカルアニオンを含む同形錯体**1**、**2**の結晶は以下のように得た。 Me_4PBr が過剰に存在するジクロロベンゼン中で $M^{IV}OPc$ をナトリウムフルオロヘキサケチルで還元した。さらにベンゾニトリル、TPCを加えた後、ヘキサンを反応液にゆっくりと拡散させることにより目的の単結晶を得た。

X線構造解析の結果、錯体**1**、**2**は同形であり、 $\{[M^{IV}O(Pc^{3-})]^- \}_2$ ダイマー層と $Me_4P^+ \cdot TPC \cdot C_6H_4Cl_2$ 層が交互に積層した層状構造となっていることが分かった。また、結晶構造を基に計算した錯体**1**、**2**における $\{[M^{IV}O(Pc^{3-})]^- \}_2$ ダイマー間の重なり積分は、ダイマー内の重なり積分の10分の1以下であり、ダイマー間の相互作用は極めて小さく、各ダイマーは孤立していることが分かった。

錯体**1**、**2**のUV-vis-NIRスペクトルを測定したところ、 Pc^{3-} に特徴的な吸収帯が観測される一方で、0.85 eV付近にも吸収帯が観測された。また、磁化率を測定したところ、 $[(Ti^{IV}OPc^{3-})]^-_2$ において $J/k_B = -123$ Kの反強磁性相互作用、また、 $[(V^{IV}OPc^{3-})]^-_2$ において $J_1/k_B = -105.0$ K、 $J_2/k_B = -15.2$ Kの反強磁性的相互作用が見積もられた。

そこで錯体**1**、**2**の電子状態を明らかにすべく、CAM-B3LYP/cc-pVTZ/cc-pVDZレベルで、 C_{4v} 対称性の $[MOPc]^0$ 、 C_{2v} 対称性の $[MOPc]^-$ 、 $[(MOPc)]^-_2$ ($M = Ti, V$)について理論的解析を行った。 $[TiOPc]^0$ 、 $[TiOPc]^-$ 、 $[(TiOPc)]^-_2$ のフロンティア軌道、電荷・スピン密度を比較することにより、 $[(TiOPc)]^-_2$ の半占(SO)軌道は、 $[TiOPc]^0$ のPc部位に広がった2重縮退した最低空(LU)軌道に由来することが分かった。

すなわち、 $[(\text{Ti}^{\text{IV}}\text{OPc}^{\cdot 3-})^-]_2$ という電子状態を支持する (Figure 2)。

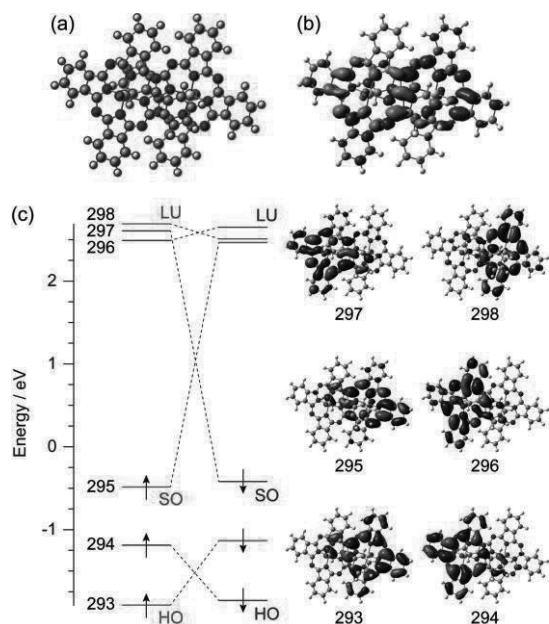


Figure 2. (a) Calculated $[(\text{TiOPc})^{\cdot -}]_2$ dimer. Monomers are highlighted in red and blue. (b) Calculated spin density. (c) Energy diagram for the frontier Kohn-Sham orbitals of the 1A state. The lines in red and blue are ascribed to the orbital levels mainly contributed by monomers in red and blue, respectively. HO, SO, and LU in red and blue indicate the highest occupied, singly occupied, and the lowest unoccupied orbitals of monomers shown in red and blue, respectively. The α -orbitals are shown on the right side.

次に、0.85 eV 付近の吸収帯の起源を明らかにするために同レベルで $[\text{TiOPc}]^0$ 、 $[\text{TiOPc}]^{\cdot -}$ 、 $[(\text{TiOPc})^{\cdot -}]_2$ の TD-DFT 計算を行い、実測スペクトルとの比較を行った。その結果、Q 帯の分裂等の分子内遷移を再現でき、0.85 eV 付近の吸収帯が $[\text{TiOPc}]^{\cdot -}$ 分子間の $\text{SO} \rightarrow \text{SO}/\text{LU}$ 遷移による電荷移動吸収帯であることが分かった (Figure 3)。 $[\text{VOPc}]^0$ 、 $[\text{VOPc}]^{\cdot -}$ 、 $[(\text{VOPc})^{\cdot -}]_2$ についても同様に電荷移動吸収帯と归属できた。一方、低スピン状態と高スピン状態の解析から、 $[(\text{TiOPc})^{\cdot -}]_2$ について、 $J = -196$ K の分子間反強磁性的相互作用、 $[\text{VOPc}]^{\cdot -}$ について $J = -23$ K の分子内反強磁性相互作用が見積もられた。すなわち、2 量体 $[(\text{VOPc})^{\cdot -}]_2$ において、分子間には Pc の積層により強い反強磁性的相互作用が働き、

分子内の V-Pc 間には弱い反強磁性的相互作用が働いていることが示唆された。これにより、実験的に求められた J_1 、 J_2 がそれぞれ分子間、および分子内反強磁性的相互作用に由来することが分かった。

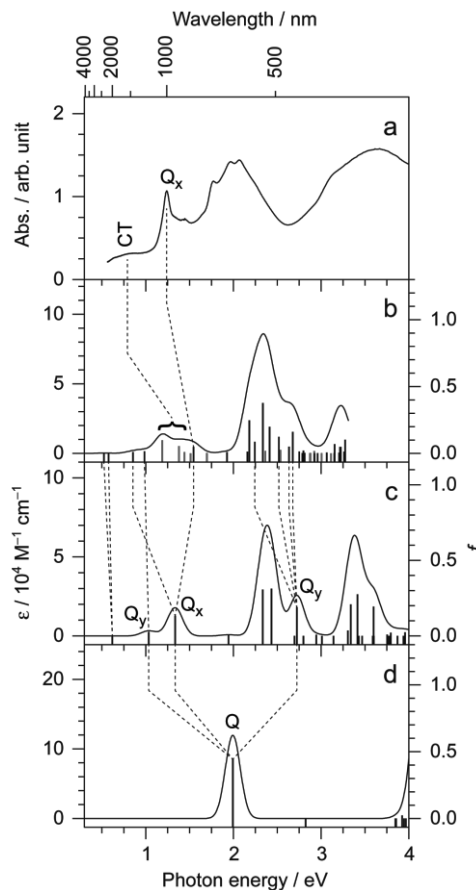


Figure 3. (a) The observed UV-vis-NIR spectrum of **1** in KBr. Calculated spectra of (b) the 1A state in $[(\text{TiOPc})^{\cdot -}]_2$ dimer, (c) the 2B_1 state in $[\text{TiOPc}]^{\cdot -}$ monomer, and (d) the 1A_1 state in $[\text{TiOPc}]^0$ monomer. The $\text{SO} \rightarrow \text{SO}$, $\text{SO} \rightarrow \text{LU}$, and $\text{HO} \rightarrow \text{LU}$ charge transfer transitions are indicated as red lines.

3 結言

$(\text{Me}_4\text{P}^+)[\text{M}^{\text{IV}}\text{O}(\text{Pc}^{\cdot 3-})]^- (\text{TPC})_{0.5} \cdot \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}_2$ の単結晶作製に成功し、結晶構造を明らかにした。また、光学・磁気的特性を実験・理論的に調べ、錯体中では $\text{Pc}^{\cdot 3-}$ ($S = 1/2$)、 Ti^{IV} ($S = 0$)、 V^{IV} ($S = 1/2$) の電子状態をとっていること、Pc-Pc 間、Pc-M 間の相互作用により物性が発現していることを明らかにした。今後は、より広範な金属フタロシアニン化合物について検討し、一般性を導出したいと考えている。

ポスト「京」100 ナノ電子状態計算むけの 超並列構造保存波束ダイナミクスソルバー開発

井町 宏人

鳥取大学

1 はじめに

有機物質の量子伝導シミュレーションのある定式化では時間依存非線形 Schrödinger 方程式

$$i\dot{\psi}(t) = H(t)\psi(t)$$

where $H(t) := H_0 - \gamma \text{diag}(|\psi_1|^2, \dots, |\psi_n|^2)$,

$$H_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}, H_0^T = H_0, \psi(t) \in \mathbb{C}^n, \gamma \in \mathbb{R}.$$

の数値解が必要になる。ここで、 H はハミルトニアンと呼ばれる行列である。次元 n は離散化の手法によるが、原子に局在する電子軌道の線形結合で解を表す LCAO 近似では、原子数に比例したオーダーになる。有機高分子集合体においては構造のもつ乱雑さが伝導度の決定において本質的であるため、必然的に原子数は大きくなり、現実の電子デバイスのスケールの系を扱おうとした場合 10^8 のオーダーに達する。このような系を扱うためには、その特性を生かした並列性の高い数値解法が必要になる。

時間依存非線形 Schrödinger 方程式は、ハミルトン系という著しい特性を持つ時間発展方程式のクラスに属する。その特性の一つはエネルギー保存性であり、この場合次で定義されるエネルギー

$$E(t) := \frac{1}{2} \psi(t)^\dagger H_0 \psi(t) - \frac{\gamma}{4} \sum_i |\psi_i(t)|^4$$

が時間非依存、すなわち

$$\frac{dE(t)}{dt} = 0$$

であることが示せる。エネルギー保存性やシンプレクティック性といった、系が本来持つ構造を離散化後も再現させるような数値スキーム（の導出法）は構造保存数値解法と総称され、定性的により数値解を生成することが知られている[1]。本稿では特に文献[2]で提案されている、ハミルトン系

に対するエネルギー保存連続段 Runge-Kutta 法を取り上げる。これは自然な並列性を持つという長所があり、その高並列実装を検討する。並列アルゴリズム設計の際には一般的に、計算対象に存在する並列化方向（行列の行方向 / 列方向など）のそれぞれを、計算機アーキテクチャに存在する並列化方向（ノード内並列 / ノード間並列など）にどう割り当てるかが重要な選択になる。例えば、非常に大まかな見積もりであるが、密行列アルゴリズムでは1ノードあたり最低 1000×1000 次元程度の部分行列を一度に扱わなければ並列化のオーバーヘッドが並列化による速度向上を上回ってしまう。この割り当ての選択を変更すると実装も大きな影響を受けるため、各並列化方向のサイズを事前にある程度想定しておくことが、高い実効効率の並列プログラムを素早く実装するために重要である。本稿では京都大学スーパーコンピュータシステムを含む多くのスーパーコンピュータで利用可能な、ノード間を MPI による分散並列化、ノード内を OpenMP でスレッド並列化するハイブリッド並列パラダイムを前提にする。

2 ハミルトン系に対するエネルギー保存連続段 Runge-Kutta 法

文献[2]では、連続段 Runge-Kutta 法と呼ばれる常微分方程式の数値解法のクラスについて、それが離散版のエネルギー保存性を満たすための（実質的な）必要十分条件、次数条件、および後述の並列化のための条件を明らかにし、これらを満たす6次精度までの数値スキームを実際に構成している。導出の詳細は省くが、 N 次元ハミルトン系に対する s 段スキームの計算手順は、ある sN 次

の非線形方程式に帰着され、さらにその解法に簡易ニュートン法を採用すると、最終的に s 個の独立な N 次元連立一次方程式

$$A_i x_i^{(k)} = b_i^{(k)} \quad (i = 1, \dots, s, A_i \in R^{N \times N}),$$

$$A_i = I_N - h \lambda_i J_0$$

が現れる。ここで、 k は簡易ニュートン法のステップ数、 h は時間刻み幅、 λ_i は方程式に依存しない実数、 J_0 は現在時刻におけるヤコビ行列である。非線形 Schrödinger 方程式においては $N = 2n$ である。これらの独立な連立一次方程式は並列に解くことができる。本研究ではこの部分の並列化を MPI のグループ機能により実装した。行列 A_i の疎性はハミルトニアン H のものを引き継いでいる。多くの場合、原子間相互作用の空間的な局所性により、これは疎になる。次節ではこれらの連立一次方程式の効率的な並列解法を検討する。

3 近似逆行列前処理付き GMRES 法

非対称連立一次方程式

$$Ax = b, A \in R^{N \times N} A \neq A^T$$

の数値解法のうち、ここでは残差最小化の原理に基づく疎行列反復解法である GMRES 法を取り上げる。疎行列反復解法で最も基本的かつ実行時間を占める操作は疎行列ベクトル積である。ここでは詳細は省くが、GMRES 法、疎行列ベクトル積ともに高効率な並列化の研究およびパッケージ化された実装が多数存在する。

反復解法では一般に前処理

$$MAx = Mb$$

の選択が非常に重要であるとされる。ここで M は前処理後の係数行列 MA の条件数が小さくなり、かつ M 自身と行列ベクトル積 $y \mapsto My$ の計算コストも小さいような行列である。 M は陽に計算されるとは限らない。本稿では前処理として、 M の各列を、連立一次方程式

$$Am_i = e_i \quad (i = 1, \dots, N)$$

の荒い近似解 m_i とする近似逆行列前処理を採用する。ここで e_i は i 番目の要素のみが 1 で他が 0 である単位ベクトルである。荒い近似解の生成には疎行列疎ベクトル積を用いた GMRES 法を数反復で停止させるという手法を取った。

近似逆行列前処理は本稿の問題設定において次の二点で有利である。第一は容易に並列化が可能な

点である。全体のコア数が 10^5 を超える近年の最大規模のスーパーコンピュータにおいても、行列次元 N が使用する計算機システム全体のスレッド数 p よりも十分大きいと仮定できるので、各 m_i の計算を 1 スレッド内で完結させても十分に並列性を利用できることになる。これは計算結果の分配といったわずかな後処理部分を除いて並列実装のコストがほとんどかからない。前処理の適用が GMRES 法本体で使用するのと同次元の行列による疎行列ベクトル積である点も、実装の容易さという点で有利である。

第二の利点は次回の連立一次方程式を解く際に再利用が可能な点である。簡易ニュートン法の反復では係数行列は一定であるから反復間で前処理行列 M を再利用できるのに加え、時間方向に連続的な現象の時間発展を扱っているので、次の時間ステップ t_{i+1} における係数行列 A は今の時間ステップ t_i におけるそれと近く、結果として t_i で計算した前処理行列 M は t_{i+1} でも有効と考えられる。こうした再利用による総計算コストの低減は多項式近似などの一部の前処理にはない優れた性質である。

4 おわりに

本稿では時間依存非線形 Schrodinger 方程式に適用可能な数値手法である、ハミルトン系に対するエネルギー保存連続段 Runge-Kutta 法を取り上げ、その並列実装を与え、その際に考慮すべき点を論じた。これらの論点は時間依存非線形 Schrodinger 方程式以外にも広く通じるものである。

<謝辞> 本共同研究制度を活用させて頂きましたことに感謝致します。

[1] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations, 2nd ed., Springer-Verlag, Heidelberg, 2006.

[2] Y. Miyatake and J. C. Butcher, A Characterization of Energy-Preserving Methods and the Construction of Parallel Integrators for Hamiltonian Systems, SIAM Journal on Numerical Analysis Vol. 54, Issue 3, pp. 1993-2013, 2016.

固相光化学反応の計算化学による解明

鈴木聡

京都大学 福井謙一記念研究センター

1 はじめに

本研究では固相光化学反応の機構を調べるための方法論の整備を行った。具体的には、励起状態での最小エネルギー経路(minimum energy path, 以下 MEP)を計算するため、string 法による構造最適化を実装した。また、ONIOM 法を用いた固相中での円錐交差構造最適化プログラムを実装した。本稿では前者について中心に述べる。

熱化学反応の機構を考える際、反応物と生成物をつなぐ、経路に沿った極大点すなわち遷移状態(transition state, 以下 TS)を議論するのが通常の手順である。典型的な手続きでは、まず、反応物と生成物の間の中間的な分子構造で Hessian を計算し、最寄りの極大値を得る。TS は一次の鞍点である必要があるので Hessian はちょうど一つ、負の固有値を持つ必要がある。TS での Hessian の固有ベクトルの方角に沿って少しずつポテンシャルエネルギー面 (以下 PES) を降りて行く IRC 計算を行うことで極小値に到達し、反応物と生成物を結ぶ経路を得ることができる。

一方、光化学反応では、熱平衡状態の分子が吸光し、分子構造はそのまま電子状態のみが励起されたフランクコンドン状態 (以下、FC 状態) が生成する。FC 状態から構造変化が起こり、蛍光や非断熱遷移が起こる。非断熱遷移は円錐交差の周辺でおこりやすい。しかしながら、FC 状態や円錐交差は非平衡点であるから、熱化学反応と同様の方法では MEP の計算ができない。そこで反応経路全体を最適化する string 法を用いた実装により、励起状態での MEP 計算を行えるようにした。

2 理論と計算方法

光化学反応では、熱平衡状態の分子が吸光し、分子構造はそのまま電子状態のみが励起されたフランクコンドン状態 (以下、FC 状態) が生成する。FC 状態から構造変化が起こり、蛍光や非断熱遷移が起こる。蛍光は励起状態の極小、非断熱遷移は状態間交差の周辺で起こりやすい。そこで、励起状態の PES 上で、FC 状態、極小点、TS、状態間交差を結ぶ MEP を計算し、熱化学反応と同様の議論を行いたい。問題は、FC 状態や状態間交差は極小値ではないため熱化学反応で行われるような IRC 計算を行ってもそれらは得られない、ということである。TS から IRC 計算を行う以外の方法として Nudged elastic band (NEB) 法や string 法による MEP 最適化が存在する。これらは反応経路そのものを初期推測から最適化してゆく方法である。これらの方法であれば端点を固定した条件下での MEP を計算することができる。

String 法では以下のような最適化サイクルにより MEP が得られる。

- ① 反応経路の端点を結ぶ経路上の N 点に対し各点でエネルギー勾配と経路の接ベクトルを計算する
- ② 勾配を接ベクトルに直交する成分に射影し、その射影に沿って各点のエネルギーを最小化するように各点を更新する
- ③ 更新された点をスプライン補間することで経路全体を補間する
- ④ 経路長を等分するように新たに N 点を取り直し、接ベクトルも更新する

このような更新を繰り返すことで、勾配の接ベクトルに直交する成分が 0 に収束し、MEP が得られる。ここで、この iteration の間で Hessian は必ずしも計算する必要がないのがポイントであ

る。円錐交差付近では多参照電子状態理論を用いる必要があるが、多参照電子状態理論の Hessian を実装していないプログラムが多く、Hessian が不要であることは大きなメリットとなる。本研究では②のステップで各点のエネルギーの和を L-BFGS 法で更新する方法[Sheppard, JCP, 128, 134106]を用いた。典型的な場合には端点も最適化し極小点を探すが、本研究では必要に応じて端点は固定することにした。

3 結果と考察

テスト計算として、ベンゼンの S_1 状態の極小構造と S_1/S_0 状態間の最小エネルギー円錐交差の間に存在する TS を求めた。まず S_1 状態の極小構造と円錐交差をそれぞれ計算し、その間を 13 点で内挿した。エネルギーと勾配は 2 状態平均 (6,6)CASSCF/6-31G で計算した。String 法による最適化は 10 回でほぼ収束し、極小値に比べ 105.0 kJ/mol 高い近似 TS を得た。この近似 TS から Hessian を用いた Newton-Raphson 法を行ったところわずか 3 回の iteration で TS を得ることができた。string 法で TS の十分そばまで収束しているためである。

これを踏まえて、4,5-bis ジアルキルアミノピレンの S_1 状態の極小構造と S_1/S_0 状態間の最小エネルギー円錐交差の間に存在する TS を求めた。円錐交差は事前に求めておき、円錐交差から基底状態の極小までの MEP を初期推測とし、 S_1 状態の PES 上で string 法による最適化を行なった。ここで、円錐交差から基底状態の極小までの MEP を初期推測とする理由は、簡便に得られる初期推測であり化学的に自然な（不自然に結合長が短いような構造を取らない）経路だからである。このような経路を初期推測とすれば比較的簡単に励起状態の TS を求めることができる。この結果、この分子では、 S_1 面の極小点からみてまずアミノ基の回転が起こり 60 kJ/mol の高さの TS に到達し、一度構造が緩和したのち、ピレン環の面外変革により 120 kJ/mol 程度の円錐交差に到達することがわかった。これらのエネルギーは FC 状態より低いため、光励起された 4,5-bis ジアルキルアミノピレンは円錐交差に到達し内部転換により失活していくものと考えられる。この分子は溶液中で

は蛍光量子収率が低く、凝集により蛍光量子収率が向上することが知られている [J. Org. Chem., 2017, 82, pp 6865]。得られた円錐交差はアルキルアミノ基の回転とピレン環の面外変角により大きな構造変化を伴うので、凝集により嵩高いアルキルアミノ基の回転が抑制され、結果的に内部転換が阻害されるものと考えられる。

漂流物の衝突力に関するばらつきの基礎的検討

小谷 拓磨^{*}，森口 周二[†]，高瀬 慎介[‡]，寺田 賢二郎[†]

^{*}東北大学 工学研究科 土木工学専攻

[†]東北大学 災害科学国際研究所

[‡]八戸工業大学 工学部 土木建築工学科

1 はじめに

津波による構造物の被害を考える上では、遡上した津波の波圧によって構造物が損壊する一次被害に加え、津波漂流物の衝突による二次被害も考慮すべきである。近年では、漂流物の衝突を考慮した防波施設や津波避難ビル、原子力発電所などの沿岸域の重要構造物の耐力設計に関するガイドライン [1] や、漂流物の衝突力想定に含まれる不確実性を考慮し確率論的にリスク評価を行おうとする試みがある [2]。これらに用いられる予測式では、漂流については解析的なアプローチ [3] が、衝突力については実験的なアプローチ [4] がなされている傾向にある。しかしながら、現状の津波避難ビル等の沿岸構造物の耐力設計には、3 次元的な漂流物同士の相互作用による漂流挙動によるばらつきや、漂流物の量による衝突力のばらつきを考慮した検討は十分ではない。そこで本稿では、複数の漂流物による複雑な漂流挙動を 3 次元的に考慮した衝突力に関する不確実性のパラメトリックスタディによる定量化のための基礎研究として、衝突力と各不確実性との関係を定性的に評価し、検討すべき不確実性の推定を行う。本稿ではその一例として、漂流物の質量・数・配置位置に関する衝突力の不確実性を仮定する。

2 解析モデル

本研究における解析モデルを図-1 に示す。固定された構造物の前に剛体を仮定した漂流物を配置し、ダムブレイク問題を解くことで、構造物の衝撃面における流体力と衝撃力を得る。解析モデルは、まず漂流物を配置しない Case-1 と、500kg、1000kg、1500kg

の漂流物を構造物の衝撃面から 400mm の位置に 1 つ配置した Case-2, Case-3, Case-4 によって、漂流物の質量の変化に伴う流体力と衝突力への影響を検証する。加えて、構造物の衝撃面から 100mm の位置に 500kg の漂流物を 1 つ配置した Case-5, Case-5 の漂流物の後方 100mm に同質量の漂流物を加え計 2 つを配置した Case-6, Case-5 の漂流物の側方各 50mm に同質量の漂流物を加え計 3 つを配置した Case-7 を検討することで、漂流物の量と配置の違いによる影響を検証した。なお本解析には、剛体と流体の相互作用を表現し得る手法として、有限被覆法に基づいた流体構造連成手法である中村ら [5] の手法を用いた。

3 解析結果

3.1 質量の変化による作用力の変化

Case-1～4 における構造物への流体力および漂流物の衝突力を図-2 に示す。Case-1 では漂流物が存在しないため流体力のみプロットしている。まず Case-1～Case-3 を比較すると、漂流物の質量が増加するにしたがって流体力は減少し、衝突力が上昇している傾向にある。これは質量が増加したために衝突力が増加したことに加え、流体力が漂流物を加速に必要な力へ変換され流体力が減少したものと考えられる。一方 Case-4 では、Case-2 および Case-3 に比べて流体力が卓越し、衝突力は小さくなった。すなわち、Case2 および Case3 とは逆の傾向となった。これは図-3 に示すように、段波先端で漂流物が加速した Case-2, Case-3 に比べ、Case-4 では漂流物の加速に時間を要した為に段波のみが流れ方向に先行し、衝突時には

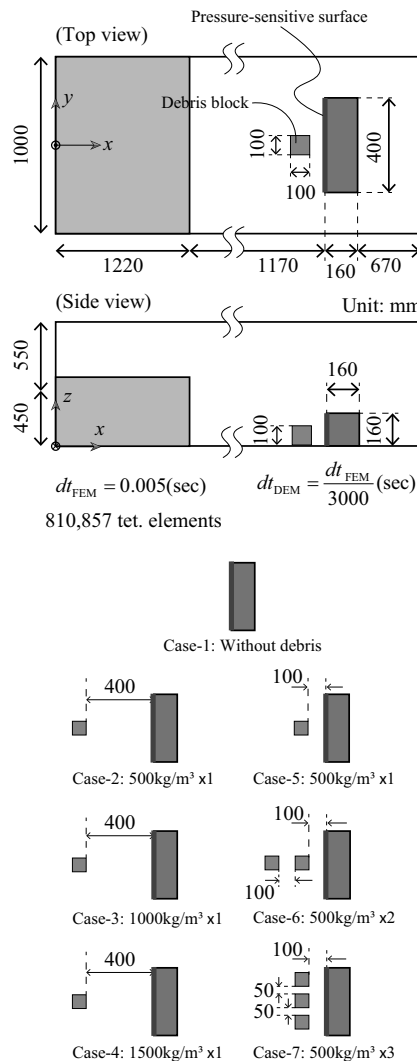


図 1: 解析モデル

先に構造物に到達した波先による鉛直上向きの力と、先行段波による衝突時の緩衝効果が作用したためと考えられる。このことから、質量の変化に対する衝撃力の傾向は単純な傾向ではないことが分かった。3次元的な挙動も考慮した定量化には、より多くの解析ケースを実施する事が必要である。

3.2 数・配置の違いによる作用力の変化

Case-5～7の解析結果を図-4に示す。Case-5とCase-6を比較すると、漂流物の増加に伴って流体力が減少していることが見て取れる。これは、流体力を受ける漂流物が増加したことによる明示的な結果と言える。しかし衝突力に関しては、後方漂流物による断続

的な衝突力が発生しており、Case-5とCase-6との間でピーク値の差は見られなかった。一方、Case-5とCase-7を比較すると、全漂流物が同時に衝突することにより、衝突力のピーク値がおおよそ3倍程度上昇していることがわかる。これらの結果から、瓦礫の数は衝突力に支配的であるが、それらの配置による衝突までの時間差についても十分に考慮しなければならないことが分かった。

4 まとめ

本研究では、漂流物の衝突力に関する不確実性の定量化に向け、漂流物の質量・数・位置が異なる解析モデルを用いて定性的な評価を行った。結果として以下の3点を得た。(i) 漂流物の質量の変化による衝突力の傾向は3次元的な挙動を考慮した定量化が必要であり、多くの計算ケースを検討すべきである。(ii) 衝突力に対して支配的なのは瓦礫の量であるが、傾向が単純であり、定量化には多くの計算ケースを要さないと考えられる。(iii) 衝突力に対する瓦礫の位置に関しては、衝突時の時間差を考慮すべきである。今後、更なる漂流物に関する不確実性の検討を行い、考慮すべき不確実性の選定を進めていく。

参考文献

- [1] Federal Emergency Management Agency: *Guidelines for design of structures for vertical evacuation from tsunamis*, 2nd edition (FEMA P-646), prepared by Applied Technology Council for Federal Emergency Management Agency, 2012.
- [2] 吉田郁政, 武内大記, 大森政則, 藤井直樹, 柳沢賢: 津波漂流物による衝突力ハザードの算定方法について, 土木学会地震工学論文集, Vol. 29, pp. 912-917, 2007.
- [3] 木原直人, 松山昌史, 藤井直樹: 漂流物挙動解析による津波漂流物衝突に関する確率論的評価手法, 土木学会論文集 B2 (海岸工学), Vol. 69, No. 2, pp. 341-345, 2013.
- [4] Ikeno, M., Takabatake, D., Kihara, N., Kaida, H., Miyagawa, Y. and Shibayama, A.: Improvement of collision force formula for woody debris by airborne and hydraulic experiments, *Coast. Eng. J.* Vol. 58, No. 4, 1640022, 2016.
- [5] 中村正人, 高瀬慎介, 樫山和男, 寺田賢二郎, 車谷麻緒: 有限被覆法に基づく自由表面を有する流体-構造連成解析手法の構築, 土木学会論文集 A2 (応用力学), Vol. 67, No. 2 (応用力学論文集 Vol. 14), 1199-1208, 2011.

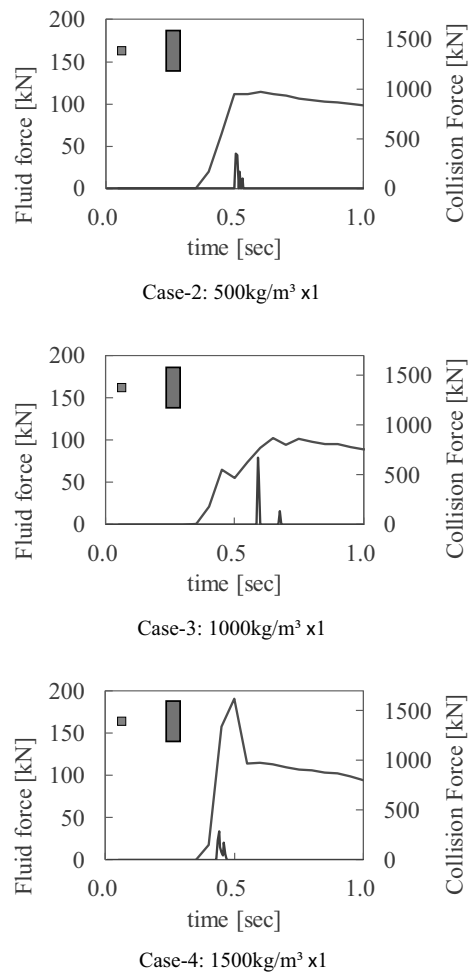
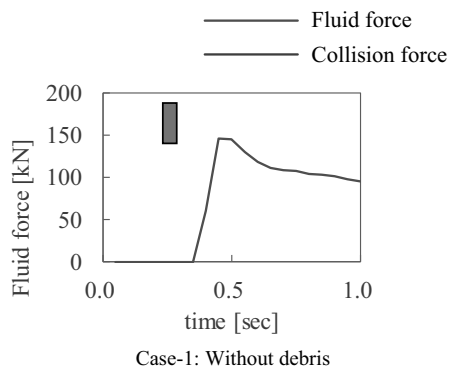


図 2: 解析結果 (Case-1~Case-4)

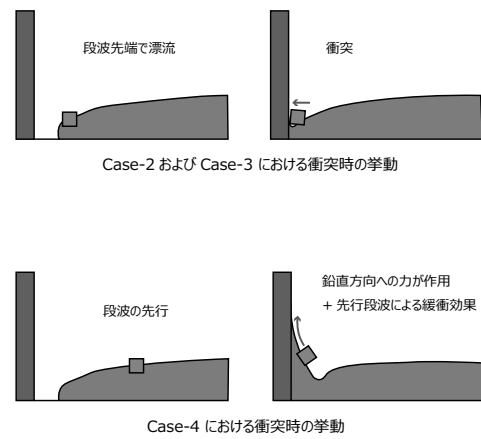


図 3: Case-2~Case-4 における衝突時の挙動の違い

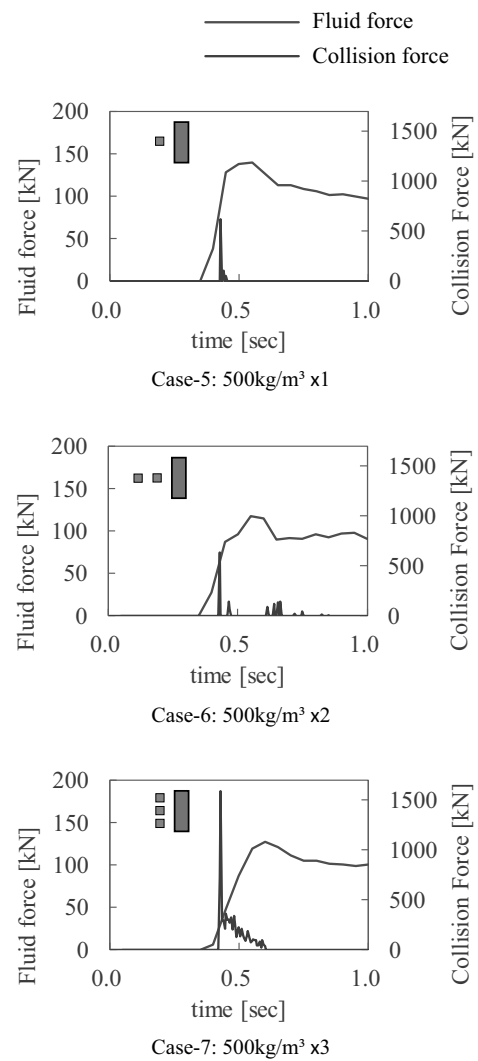


図 4: 解析結果 (Case-5~Case-7)

気象条件に応じた都市の境界層乱流の組織構造に関する研究

吉田 敏哉 *

*京都大学大学院理学研究科地球惑星科学科専攻

1 はじめに

人口構造物により被覆された都市地表面は気象環境を大きく変えるインパクトをもつため、ヒートアイランドや大気汚染といった都市特有の環境問題を引き起こす。これらの問題解決には、運動量・スカラー輸送を担う乱流に対して都市構造物が及ぼす影響を明らかにすることが重要である。

大気境界層内の乱流は空間的に組織だった構造（乱流組織構造）をしており、運動量やスカラーの大部分はこの構造に伴い輸送される。近年、観測や数値シミュレーションによって、都市構造物が立ち並んだような粗面上にはストリーク構造やヘアピン渦といった構造が存在することが示されてきた [1][2][3]。一方、実在する都市の構造物は非一様性が大きく、特に地面に近い高度において流れ場に与えるその影響は強まる。例えば Park et al. [4] は高層ビルの後流域に形成された局所的な渦構造の存在を示しており、都市構造物の幾何的な特徴と乱流組織構造の関係が示唆される。

そこで本研究では、建物近傍の詳細な流れ場を再現可能な Large-eddy simulation (LES) を用いて、実在都市における乱流組織構造の解析を行った。特に実在都市の構造物の特徴の 1 つである建物高さのばらつきの影響を評価した。また、地面近傍では機械的な作用による乱流生成が卓越するため、本研究では中立成層の気象条件に応じた組織構造を対象とする。以下では、LES の精度を検証するため行った実大気の観測結果との比較と、建物高さのばらつきの影響を評価するために行った感度実験の結果を示す。

2 観測との比較

本研究では計算領域として京都市内の南北 11 km・東西 2 km・高さ約 1 km の領域を再現し使用した。この計算領域は大気乱流観測が行われた京都大学防災研究所宇治川オープンラボラトリーを含むように設定しており、観測データと LES の結果を比較することが可能である。観測は鉄塔に取り付けられた超音波風速計とその鉄塔付近に設置したドップラーライダーによって行われた。

Fig. 1a に観測で得られた 4 事例 (D1-D4) と LES の平均主流風速の比較を示す。図は両対数軸で示した。LES と各観測事例のプロファイルはおおよそ $1/4$ の傾きに沿っていることが分かる。これは平均風速が高度のべき乗に比例していることを示しており、そのべき指数が $1/4$ 程度であることを意味する。Counihan[5] によると、都市および郊外地域におけるべき指数は 0.21 から 0.28 の範囲に入るため、観測・LES 共に観測地点におけるべき指数を正しく示している。

Fig. 1b に高度 25 m における主流風速成分のパワースペクトルを示す。ここでは LES と超音波風速計のプロファイルの比較を行っている。LES のプロファイルは観測データと共に乱流スペクトルに現れる慣性小領域での $-5/3$ 乗則（ここでは規格化により $-2/3$ 乗）が確認できるため、LES は風速の変動成分をよく再現できているといえる。

以上の結果より、本研究で使用した LES は中立成層下における都市構造物上の乱流をよく再現できるということが示された。

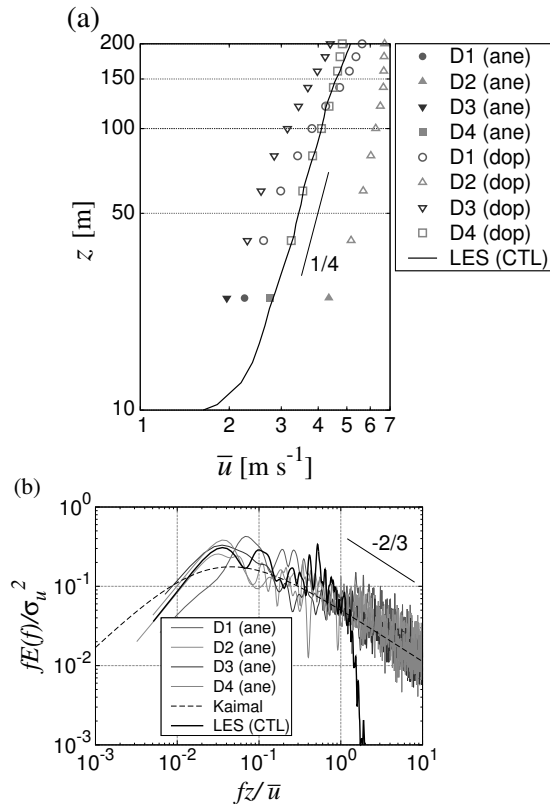


Fig 1: (a) Vertical profile of mean streamwise velocity in the observations and the LES. (b) Power spectra of streamwise component obtained from the sonic anemometer and the LES at 25 m.

3 建物高さのばらつきの影響

本研究では京都市の構造物を再現した計算 (CTL) 及び、その構造物全てを計算領域内の平均建物高さ (h_{all}) に揃えた場合の計算 (UNI) を実行した。Fig. 2a は計算領域内で空間平均されたレイノルズ応力の鉛直プロファイルである。図から h_{all} 以下では CTL と UNI の差はほとんどないことが分かる。一方、 h_{all} 以上では CTL の値が UNI より大きい傾向にあり、ピークの高度は CTL のほうが高いことが示された。

続いて、乱流組織構造への影響を調べるため運動量フラックスに関する4象限解析を行った。4象限解析は、水平風速の変動成分 u' と鉛直風速の変動成分 w' の符号に基づいて鉛直運動量フラックス $u'w'$ を4象限に分類し、各象限の値が運動量輸送に寄与する割合を調べる手法である。ここで、下向き運動量

フラックスに対応する第2象限の ejection 及び第4象限の sweep は組織構造に伴って発生することが知られており、これらの大きさを調べることで乱流構造の特徴を把握することが可能である。ここでは、sweep と ejection の差 ΔS_0 を用いて、ejection と sweep のどちらが卓越した流れ場であるかを調べた。Fig. 2b は空間平均された ΔS_0 の鉛直プロファイルである。CTL と UNI の ΔS_0 は高度とともに減少している。これは、建物が多く存在する地面近く

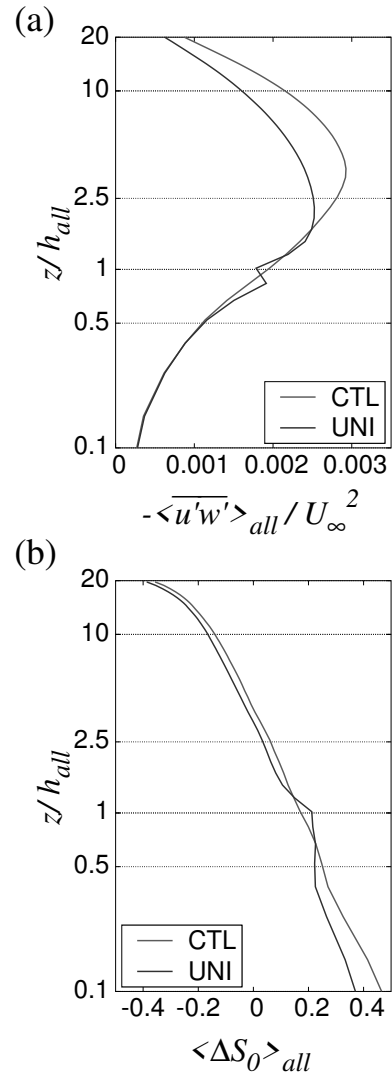


Fig 2: Vertical profiles of (a) Reynolds stress normalized by free stream velocity U_∞ and (b) ΔS_0 averaged spatially over the analysis region.

の高度では sweep が卓越するが、高度が上がるにつれ ejection の寄与が増加し、約 $2.5h_{all}$ を超えたあたりで ejection が卓越するというを示している。また、ほとんどの高度で CTL の値が UNI より大きいため、建物高さのばらつきは sweep の寄与を増加させる傾向があるということが分かる。

次に建物高さのばらつきの影響を定量的に示すため、計算領域を 1 km 四方の領域に区切り、領域毎に乱流統計量と粗度パラメータ λ_p (単位面積に含まれる建物の割合) を計算した。Fig. 3 はレイノルズ応力及び ΔS_0 と λ_p の関係を示している。ここでは Fig. 2 の結果に基づき、 $0.5h_{all}$ と $2.5h_{all}$ の高度のプロファイル調べた。Fig. 3a から $0.5h_{all}$ の高度では CTL と UNI 間でのレイノルズ応力の差はほとんどないことが分かる。一方、Fig. 3b より $2.5h_{all}$ では λ_p が約 0.3 を超えたところで CTL と UNI の差が現れる。これは建物高さのばらつきの効果は λ_p が約 0.3 を超えたときに顕在化することを意味している。続いて、Fig. 3c と 3d に ΔS_0 と λ_p の関係を示す。図から $0.5h_{all}$ の高度では CTL と UNI における ΔS_0 はほとんど λ_p に依存していないことが分かる。一方、 $2.5h_{all}$ の高度では、CTL の ΔS_0 は λ_p が 0.3 を超えたところで λ_p の増加とともに大きくなる傾

向が見られる。この特徴は Fig. 3b のレイノルズ応力と一致する。よって、 λ_p が 0.3 以上でみられたレイノルズ応力の増加は sweep により寄与されるということが示唆された。

4 まとめ

本研究では都市構造物の高さのばらつきと乱流組織構造の関係を調べるため、京都市の建物を再現した LES を実行した。計算領域は乱流観測が行われた施設を含むように設定し LES と観測の比較を行った。これにより、本研究で使用した LES は観測結果をよく再現できることを確認した。運動量フラックスに関して 4 象限解析を行うことにより、組織構造の特徴を示すパラメータ (ΔS_0) を算出し、このパラメータに対して建物高さのばらつきがどのように影響するかを調べた。その結果、組織構造に伴う下向き運動量輸送である ejection と sweep のうち、建物高さのばらつきは sweep を増加させる傾向があることを示した。さらに、この傾向は建物の密度に対応する粗度パラメータ λ_p が大きい領域で顕著になることを示した。

参考文献

- [1] Kanda, M, "Large-eddy simulations on the effects of surface geometry of building arrays on turbulent organized structures," *Boundary-Layer Meteorol* 118 (2006), pp. 151-168
- [2] Coceal, O et al, "Structure of turbulent flow over regular arrays of cubical roughness," *J Fluid Mech* 589 (2007), pp. 375-409
- [3] Yagi, A et al, "Nature of streaky structures observed with a Doppler Lidar," *Boundary-Layer Meteorol* 163 (2017), pp. 19-40
- [4] Park, Seung-Bu "Large-eddy simulation of turbulent flow in a densely built-up urban area." *Environ Fluid Mech* 15 (2015), pp. 235-250.
- [5] Counihan, J, "Adiabatic atmospheric boundary layers: a review and analysis of data from the period 1880-1972," *Atmos Environ* 9 (1975), pp. 871-905

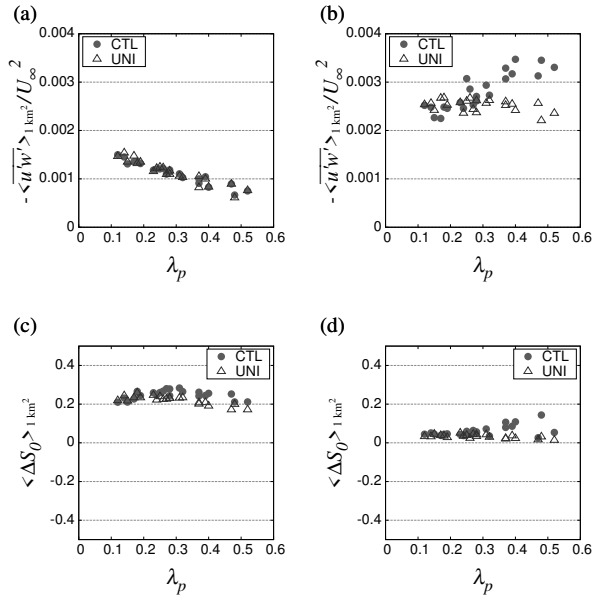


Fig 3: Variations of Reynolds stress normalized by U_{∞} at (a) $0.5h_{all}$ and (b) $2.5h_{all}$, and ΔS_0 at (c) $0.5h_{all}$ and (d) $2.5h_{all}$ with λ_p .

海色衛星データを用いた沿岸および陸棚海域における河川由来物質の 解析手法の開発

小林志保¹ 中田聡史²

¹ 京都大学フィールド科学教育研究センター

² 神戸大学海事科学研究科

1 はじめに

本研究課題では、近年公開された高頻度・高解像度の衛星データ(COMS/GOCI)を用いて沿岸および陸棚海域における河川由来物質の挙動を解析する手法を開発した。申請者らは平成 27 年 8 月と 11 月において、大阪湾における河川由来の溶存有機物濃度と衛星から得られる海色データとの間に一定の関係がみられることを見出している(Kobayashi et al.,2017)。平成 28 年には、対象領域を瀬戸内海沿岸から陸棚海域に広げ、数年分の衛星データを用いて河川由来物質の挙動を解析しモデル化する。本研究で使用する衛星データは 500 m の水平解像度、1 時間に 1 回の時間解像度であり、100 km 四方の広さがある対象領域のデータを数年分解析するためには汎用 PC のメモリー容量・計算能力では到底不可能である。そこで今回スーパーコンピュータを用いて対象領域のデータを解析した。

2 方法

平成 28 年 10 月から平成 29 年 3 月(11 月中旬から 2 月中旬までの繁忙期を除く)の期間中に、瀬戸内海沿岸から陸棚海域の毎時の衛星データ(COMS/GOCI)をダウンロードし、スーパーコンピュータにアップロードした。一方、平成 28 年 5 月、8 月、11 月に船舶により大阪湾から紀伊水道の 69 地点(図 1)において現地観測を行ない、表層水を採取するとともにその塩分を測定した。採取した水を濾過し、全炭素分析計(TOC-L,

Shimadzu)を用いて溶存有機炭素(DOC)濃度を測定するとともに、分光光度計(U-2900, Hitachi)を用いて有色溶存有機物の吸光係数(aCDOM)を測定した。現場で得られた DOC 濃度と aCDOM の関係、現場の aCDOM と海色衛星から得られる aCDOM の関係、および塩分と aCDOM の関係を調べ、河川由来の溶存有機物濃度を推定するモデルを作成した。溶存有機物濃度の動態を調べるため、メディアセンターの可視化アプリケーション等を利用して、定点データの抽出・可視化、作図等を行なった。

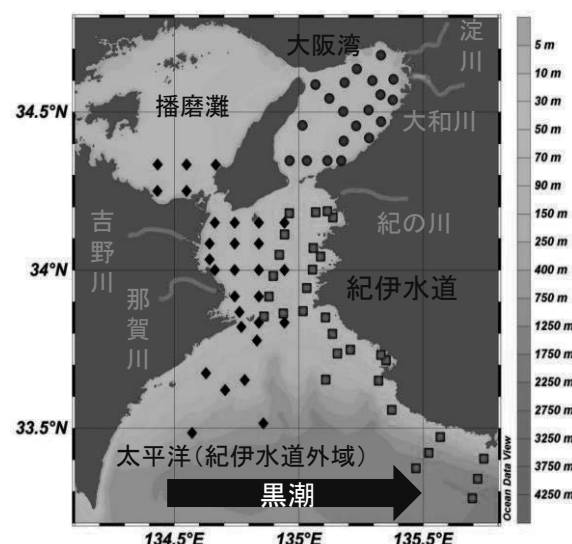


図 1 現地観測データの位置図。背景色は水深を表す。

3 結果と考察

現場採水によって得られた aCDOM と DOC 濃度との間の相関係数は高く($r = 0.95$), aCDOM

の分布から溶存有機物の分布がわかることが確認された。また塩分と aCDOM との間の相関係数も高く ($r = -0.80$)、塩分の低い河口域を由来とする溶存有機物の分布は、aCDOM の分布とほぼ一致することが示唆された。また海色衛星から得られる aCDOM と現場の aCDOM との間の相関係数は有意であった ($r = 0.55 \sim 0.78$)。

以上のことから、衛星データを用いて河川、河口域から陸棚海域に広がる溶存有機物の挙動を調べた。図2に、2014年7月25日9時の衛星aCDOM分布図を示した。このとき紀伊水道外域を通過する黒潮は、紀伊半島の潮岬から近い距離にあり、紀伊水道の東側に aCDOM の低い外洋系水が流入していた。一方、aCDOM、すなわち溶存有機物濃度は流量の大きい淀川が流入する大阪湾奥で最も高く、大阪湾の東岸に沿って高かった。また、紀伊水道北部から西部にかけてもその濃度は高く、紀伊水道西岸に沿って比較的高濃度の溶存有機物が紀伊水道外域に流出していることが伺われた。このような分布は、河川の流量が平水流量に近く、黒潮が接岸している際の典型的な例として頻繁に見られたが、一方で台風や大雨等の気象擾乱の後には、1日ごとに aCDOM の分布が大きく変化することが衛星データを用いて示された。

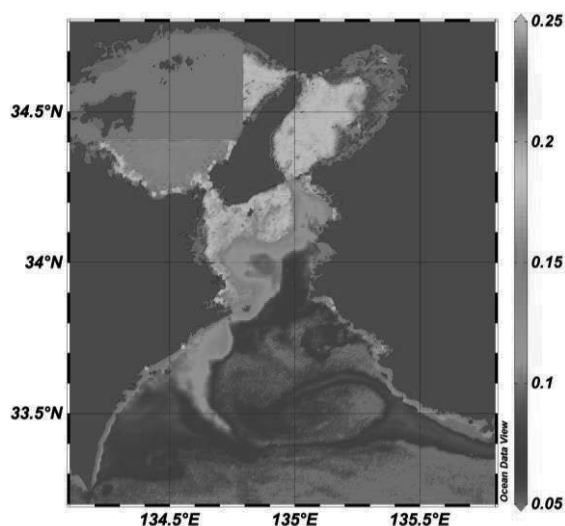


図2 海色衛星から得られた aCDOM の分布

4 まとめ

本研究により、衛星データの公開された平成 23 年から現在までの晴天日における、瀬戸内海沿岸

から陸棚海域の毎日・毎時の河川由来物質の分布が明らかになった。河川由来の溶存有機物については、近年内湾における水質環境管理を困難にする項目として、沿岸海域から陸棚海域におけるその挙動を解明する必要性が高まっている。本研究の成果は、河川由来の溶存有機物が陸棚海域の水質に及ぼす影響の解明につながり、内湾の水質環境管理に寄与する。また、河川由来の溶存無機物（栄養塩）については、沿岸で養殖されている海藻の生産に大きな影響を及ぼすことから、その挙動を解明することには水産上の意義がある。本研究の成果は、海藻養殖の適地および最適なタイミングを提案するために用いることができる。

謝辞

本研究における衛星データの解析は、平成 28 年度スーパーコンピュータ共同研究制度を利用して行いました。また、現地データの収集は、徳島県立農林水産総合技術支援センター 水産研究所、大阪府立環境農林水産総合研究所、和歌山県水産試験場、京都大学農学研究科海洋生物環境学分野の皆様のご協力の下に行なわれました。心からの感謝を申し上げます。

引用文献

Kobayashi S, Nakada S, Nakajima M, Yamamoto K, Akiyama S, Fuchi M, Hayashi M, Ishizaka J; Visualization of the Distribution of Dissolved Organic Matter in Osaka Bay Using a Satellite Ocean Color Sensor (COMS/GOCI), Journal of Water and Environment Technology, 2, 55–64, 2017.

硫酸ランタン $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ 結晶中における水拡散チャネルの発見

豊浦 和明

京都大学大学院工学研究科材料工学専攻

本研究では、100 ~ 250 °C の低温域において高速脱水・水和反応が報告されている硫酸ランタン $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ 中における水の存在状態および拡散メカニズムについて、第一原理計算に基づく理論解析を行った [1]. その結果、この結晶格子中の H_2O は水分子の形状を保ったまま存在し、その移動過程においても分子構造を維持していることが明らかとなった。また、MD シミュレーションで確認された水拡散の素過程についてエネルギープロファイルを評価した結果、 b 軸方向に沿った 1 次元拡散チャネルが存在することを明らかにした。一方、この拡散チャネルに沿った水の拡散係数は水和反応が進行する 250 °C で $10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ 程度であり、拡散距離は高々 1 μm であった。このことから、本系における高速脱水・水和挙動は、ここで見出された 1 次元拡散チャネルの存在だけでなく、反応時の結晶粒微細化や高速粒界拡散にも起因していることが示唆された。

1 緒言

100 ~ 250 °C の工場排熱の有効利用において、化学反応により蓄熱・放熱が可能な化学蓄熱技術の開発が期待されている。近年、我々の研究グループでは、この温度域における脱水・水和反応により吸熱・発熱を繰り返すことのできる硫酸ランタン $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ を見出した [2]. この化合物は、他の化学蓄熱材と比較して、脱水・水和反応が可逆的かつ速やかに進行するという特長を有している。本研究では、高速脱水・水和反応の起源を探ることを念頭に、第一原理計算を用いて $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ 結晶中における水の存在状態と拡散メカニズムを明らかにすることを目的とした。

2 計算手法

まず、 $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ 結晶中における水の存在状態について、水分子の様々な位置・配向に対する網羅的な構造最適化計算を行った。次に、水の拡散挙動を定性的に把握するために、分子動力学 (MD) 法に基づく拡散シミュレーションを行い、確認された水拡散の各素過程 (経路) に沿ったエネルギープロファイルを算出した。これらの計算は、すべて平面波基底 PAW 法 (VASP code) に基づいて行った。交換相関項には PBE_GGA, 平

面波打ち切りエネルギーは 400 eV とした。水の存在状態計算に対してはユニットセルを $1 \times 2 \times 2$ 倍に拡張したスーパーセル (272 原子)、拡散挙動解析にはプリミティブセルを $2 \times 2 \times 1$ 倍に拡張したセル (272 原子) を用いた。また、 k -point サンプリングは Γ 点のみとした。

3 結果と考察

まず、 H_2O の存在状態について、網羅的な構造最適化計算によって見出された H_2O の安定構造を図 1 に示す。 H_2O の OH 結合は SO_4 四面体ユニットを構成する近接 O イオン (O_{NN}) を向いており ($\text{O}_{\text{NN}}\text{H}$ 距離: $\sim 2 \text{ \AA}$)、水素結合の形成によりさらに安定化することも明らかとなった。

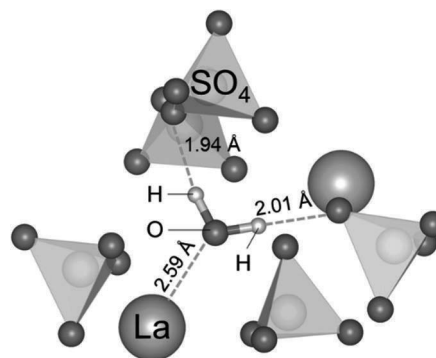


図 1 $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ 結晶中に見出された水の最安定サイトの局所構造。

次に、図1に示す水の最安定構造を始状態として、1500 Kで100 psのMDシミュレーションを行った。その結果、結晶内の等価な最安定サイト(図2a参照)を行き来する様子が見られたが、その移動過程においても、 H_2O は水分子の構造を維持していることが確認された。図2bおよび2cに、MDシミュレーション中に確認された隣接サイトを繋ぐ移動経路を模式的に示す。最も近接したサイト間を繋ぐpath 1は a 軸方向の短距離経路であり、path 2およびpath 3は、それぞれ b 軸方向にジグザグに繋がる経路である。第一原理計算を用いてこれら3つの経路に対するポテンシャル障壁を評価した結果、それぞれ、0.27, 0.81, および1.50 eVであった。したがって、この結晶中においては、path 1およびpath 2で構成される1次元チャネル(図3)に沿った水拡散が支配的であることが明らかとなった。

この結果を踏まえて、実験的に水和反応が開始する250 °Cにおける水の拡散係数 $D_{\text{H}_2\text{O}}$ を見積もったところ、 $10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ 程度であることがわかった。この値から見積もられる水の拡散距離は高々1 μm 程度($t \sim 10^2 \text{ s}$)であることを考えると、 $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ の高速脱水・水和反応は、本研究で明らかとなった水の1次元チャネルの存在だけでなく、反応時の結晶粒微細化や高速粒界拡散に起因することが示唆される。今後は、実験グループと連携して、本結晶の微細組織を明らかにすることを計画している。

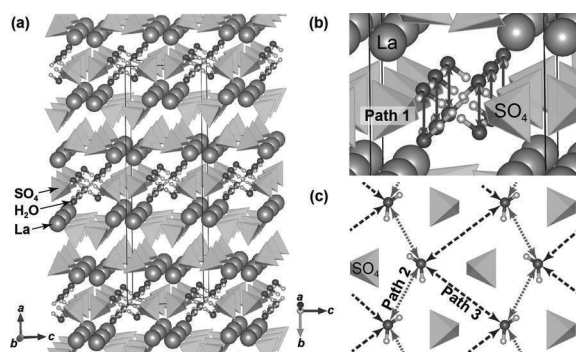


図2 (a) $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ 結晶中に存在する等価なすべての水の最安定サイト。(b)(c) MDシミュレーション中に見出された移動経路(paths 1~3)。

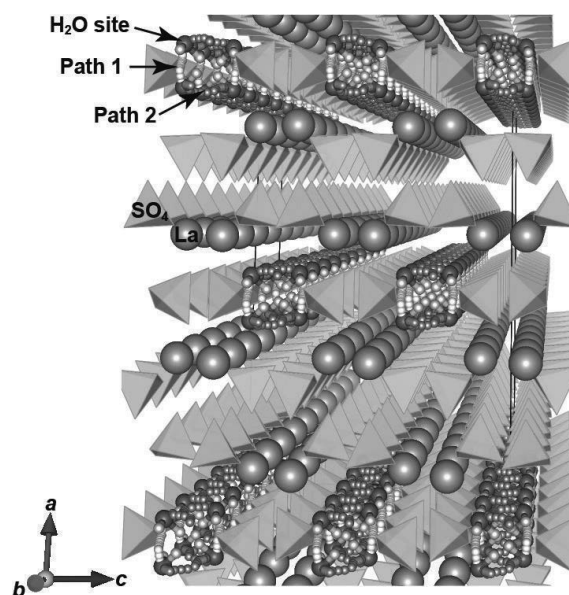


図3 path 1およびpath 2で構成される b 軸方向に沿った水の1次元チャネル。

4 結言

本研究では、 $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ の高速脱水・水和反応の起源を明らかにすることを念頭に、第一原理計算に基づく理論解析により結晶中の水拡散を定量評価した。その結果、結晶中の H_2O は水分子の形状を保ったまま存在し、その移動過程においても分子構造を維持していることが明らかとなった。また、MDシミュレーションで見出された移動経路のエネルギープロファイルを評価した結果、 b 軸方向に沿った1次元水拡散チャネルの存在を見出した。ただ、その移動に対するポテンシャル障壁は0.81 eVと比較的高く、水和開始温度における拡散距離は高々1 μm 程度であった。このことから、本系における高速脱水・水和挙動は、本研究で明らかとなった1次元拡散チャネルの存在に加え、反応時の結晶粒微細化や高速粒界拡散にも起因している可能性が示唆された。

- [1] K. Toyoura, H. Tai, N. Hatada, K. Shizume, T. Uda, *J. mater. Chem. A*, submitted.
- [2] N. Hatada, K. Shizume, T. Uda, *Adv. Mater.* **29**, 1606569 (2017).

粒子との接触を伴う液体挙動の直接数値解析

自由界面—固体物体間相互作用を考慮した多相直接数値解析

井上 幹允

東京理科大学大学院理工学研究科機械工学専攻

1 緒言

生活の中でもよく見られる流体現象である「濡れ」に注目する。濡れ現象とは液体が固体面に接触している現象である。濡れは身近に見られる現象のみならず、工業的にも広く見られる現象である。

近年、この現象を理解し応用・制御する動きが活発化している。例えば、テフロン加工が施されたフライパンや車のフロントガラスは撥水を促進するもの、一方、化粧品やコンタクトレンズなどは保水性を高めるため親水性を高めたものが作られている。また、製鉄工場において金属の精錬時に発生する煙霧の浄化効率向上のため、濡れたフィルターを用いている例^①もある。その上で重要なものが、固体との接触を伴った液体の挙動である。この液体と固体の接触は非常に単純な現象と思えるが、液体表面の変形、固液気接触界線の移動、接触で生じる液体 - 固体間の相互作用など様々な物理現象が複合したものであるため、極めて複雑なものとなる。界面の挙動に着目した研究は従来広く行われている。Glasheen & McMahon^②は円形ディスクを液体に押し当てた時の界面の挙動に着目した実験を行った。また、Deen et al.^③は液面への固体粒子の自由落下に関する数値解析を行った。界面の変形および粒子挙動について解析はされているが、しかし、粒子周りの濡れ性を考慮したものはいまだ少ない。そこで本研究では、液面への固体粒子の自由落下における、固液接触角（濡れ性）が粒子周りの流体および粒子そのものの挙動に及ぼす影響に注目し、volume of fluid (VOF)法^④と immersed boundary (IB)法^⑤を組み合わせた直接数値解析（direct numerical simulation, DNS）を行った。

2 計算方法

2.1 計算対象

今回解析対象として、等温環境下の容器内に静置した液面に対する、固体粒子の自由落下の系を用いた。図1に解析系を示す。3次元の矩形容器内に液体を静置し、液面近傍から粒子を自由落下させる。容器壁と液体との接触角は90°とした。

2.2 計算手法

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

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p_i}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{1}{\text{Fr}^2} \delta_{2i} + \frac{\kappa n}{\text{We}} + f_{pi} \quad (2)$$

式(1)は連続の式、式(2)はナビエーストークス方程式である。代表長さ $L = D_p/2$ 、代表速度 U 、代表時間 L/U 、代表圧力 ρU^2 として無次元化を行った。 u_i, x_i, p_i は各軸方向の速度成分、距離成分、圧力成分を示し、 t は時間、 κ は界面の曲率である。式(2)中の Re はレイノルズ数、 Fr はフルード数、 We はウェーバー数であり、それぞれ $\text{Re} = \rho U L / \mu$, $\text{Fr} = U / \sqrt{g L}$, $\text{We} = \rho U^2 L / \sigma$ と表される。ここで σ は表面張力係数を表す。本研究では外力項として重力項 ($1/\text{Fr}^2$) の他に二つ加えた。一つは continuum surface force (CSF)法^⑥により表面張力 ($F = \sigma \kappa n$) を考慮した表面張力項 ($\kappa n / \text{We}$)、もう一つは固体を流体場として解くことで生じる流体 - 固体間の相互作用力を考慮した相互作用力項 ($f_{pi} = \alpha(u_p - u_f) / \Delta t$) である。ここで n は界面に対する法線ベクトル、 α は格子内に含まれる粒子

の割合， u_p は粒子速度， u_f は流体速度を表す．表 1 に計算条件および解析に用いた初期条件を示す．

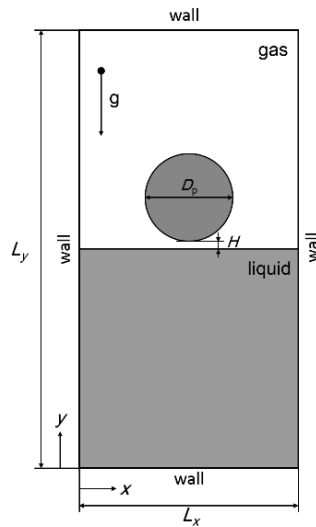


Fig. 1 Computational domain of the impact of a spherical particle upon a liquid in a pool.

Table 1 Computational conditions.

$N_x \times N_y \times N_z$	90×180×90
(x_p, y_p, z_p)	(5.0, 6.2, 5.2)
Re [-]	20
We [-]	0.40
Fr [-]	0.63
θ_w [°]	90
θ_p [°]	30, 60, 90, 120, 150

3 結果と考察

本研究では界面形状，特に固体粒子と液体形状の動的変化とそれに伴う圧力変化に注目した．まず，粒子と液体との接触角をパラメータとして行った粒子の液面への自由落下を考えた直接数値解析では，液面接触前後の粒子の落下速度の変化をみた．その結果を図 2 に示す．この結果より，液面形状が大きく変化する $t=1.5$ 以降において大きく違いが現れた．この結果から，粒子に対する接触角が粒子挙動に対して大きく影響を及ぼすことがわかった．

次に粒子周辺の圧力分布に着目した．図 3 に各時刻における粒子周辺圧力の分布をプロットしたグ

ラフを示す．この結果より，粒子上部と下部において著しい圧力の変化が生じていることがわかった．この粒子上部と下部での圧力の違いによって，粒子速度に変化が出たと考えられる．これより，粒子周囲流体の圧力が固体-液体間の相互作用に対して大きく影響を与えていることが推察される．また， $t=2.4$ において顕著な圧力変化が見られるが，この瞬間の液体形状に着目すると，粒子上部において左右から濡れ上がってきた液体が互いに接触する瞬間ということがわかった．このことから，液体の接触の瞬間の液体形状は粒子挙動に最も大きく寄与することが考えられる．

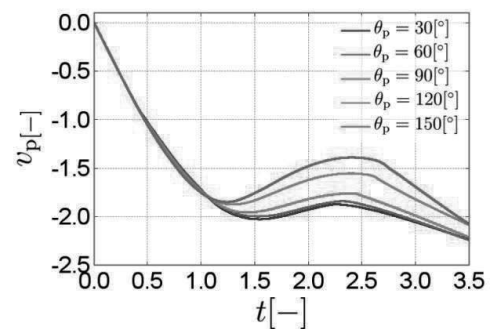


Fig. 2 Temporal variation of the particle velocity at each contact angle.

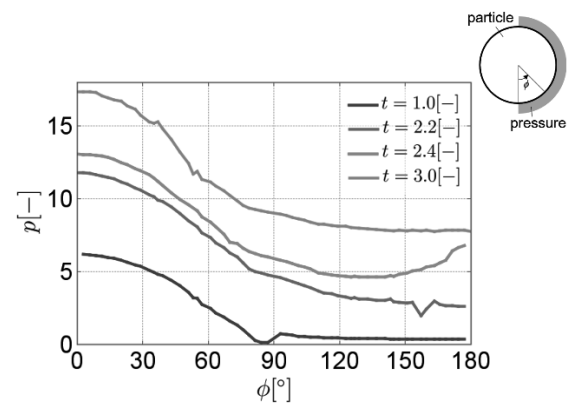


Fig. 3 Pressure distribution around the particle at each time.

4 結言

本研究では直接数値解析を用いて，静置した液体に対して粒子を落下させるという数値解析を行った．主に，粒子落下挙動および液体形状に対して，粒子の液体に対する濡れ性，粒子周辺圧力がどのように影響を与えるかを検証した．まず，接触角の影響を見たところ，粒子の液体に対する濡れ性つまり接触角によって粒子落下挙動が変化することを確

認した。次に、粒子周辺圧力に着目したところ、粒子上部と下部において圧力差が生じていることを確認した。そこでこの圧力差によって大きく粒子挙動が左右されることを推察した。

したがって今後としては、粒子挙動と圧力差の因果関係についてさらに追究していこうと考えている。また、濡れ性によって粒子周辺圧力がどのように変化するかの検証も平行して行っていこうと考えている。

5 参考文献

- [1] Agranovski, I. E. and Whitcombe, J. M., Chemical Engineering & Technology, 24-5 (2001), 513.
- [2] Glasheen, J. W. and McMahon, T. A., Physics of Fluids, 8.8 (1996), 2078.
- [3] Deen, N. G., van Sint Annaland, M. and Kuipers, J. A. M., Fifth International Conference on CFD in the Process Industries CSIRO, Melbourne, Australia, 13-15 December (2006).
- [4] Brackbill, J. U., Kothe, D. B. and Zemach, C., Journal of Computational Physics, 100-2 (1992), 335.
- [5] 酒井幹夫編著, 粉体の数値シミュレーション, (2012), 153.
- [6] Hirt, C. W. and Nichols, B. D., Journal of Computational Physics, 39-1 (1981), 201.

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の方々には多大なご協力を賜りました。ここに記し、感謝の意を表します。

高精度視覚質感記憶の心理学的基盤と神経機構の解明

藤道 宗人

京都大学大学院人間・環境学研究科共生人間学専攻

1 問題・目的

ヒトは様々な物体に囲まれて生活している。したがってヒトが安全に生活していくためには、これらの物体に対して適切に働きかける必要がある。物体の正確な認知はどのようなメカニズムに支えられているのだろうか。物体の形状や色の認知メカニズムについては多くの知見が存在するものの、物体表面の性質、すなわち質感の認知メカニズムについては研究が進み始めたところである。これまでヒトの質感認知メカニズムについて、知覚研究から、ヒトが物体の素材を瞬時に特定できることや腹側高次視覚野で質感を知覚処理していることが明らかにされてきた[1]。しかしながら、視覚記憶研究はほとんど行われていない。知覚は経験と学習無しに成立し得ないことを考えると、ヒトの質感認知メカニズムを解明するためには、視覚記憶についても検討する必要がある。また、知覚から視覚記憶に至る過程において、質感の視覚表象にどのような差異と共通性が存在するのかを解明する必要があるが、そのためには脳の情報表現を探ることが最も根本的である。したがって、本研究では質感の視覚記憶メカニズムを担う脳領域を解明することを目的とした。

2 方法

2.1 参加者

24名の京都大学生および大学院生(男性15名、女性9名)が実験に参加した。平均年齢は22.9

歳($SD=2.8$)であった。全ての参加者は正常な視力を有していた。実験は京都大学こころの未来研究センターのMRIスキャナー及び関連実験設備を用いて行った。

2.2 刺激

Ward (1992) の反射モデルのパラメータ[2]をFerwerda (2001) の変換式[3]を用いて変化させることで、粗さと光沢感がそれぞれ知覚的に等間隔に連続的に変化する球体画像セットを用意した。球体画像にはキッチンあるいはビル街の照明環境が照射されていた。

2.3 手続き

実験は粗さ記憶課題と光沢感記憶課題から成っていた。したがって、参加者は継時呈示される2枚のサンプル球体画像を見て、どちらの課題を行っているかを識別する必要があった。例えば2枚のサンプルが粗さの次元で変化していれば、粗さ記憶課題であった。2枚のサンプル球体画像の呈示後に、保持しておくべきサンプルを指示した。実験参加者は、試行の最後に呈示されるテスト球体画像と保持した画像を比較して、粗さの程度が小さい、または光沢感の強い方の画像を選択することが求められた。照明環境に依存しない質感の視覚記憶を検討するために、2枚のサンプルとテスト球体画像の照明環境は常に異なっていた。

3 解析

3.1 マルチボクセルパターン解析 (MVPA)

質感の視覚記憶情報を表現する脳領域を同定するために、本研究ではマルチボクセルパターン解析 (MVPA) を適用した。質感の見えは照明環境や形状、輝度ヒストグラムの歪度など、多次元の情報に影響を受けるため[4][5]、脳活動パターンの規則性を抽出する MVPA が有効な手法であると考えたのである。

本研究では、全脳に対して MVPA を行うサーチライト MVPA を実施し、質感視覚情報を保持する脳領域を探索した。その際、特に腹側高次視覚野と初期視覚野、そして頭頂間溝に着目した。これは、従来の質感知覚研究から質感知覚に腹側高次視覚野が関連すること[1]、そして視覚性短期記憶研究から初期視覚野や頭頂間溝が記憶保持に関与すること[6]が示されているからである。

さらに本研究では課題のタイムコースに沿って MVPA を実施し、着目した各脳領域の MVPA の正答率の変化を検討した。課題の中で参加者はまずどちらの記憶課題なのかを弁別して、その後は指示されたサンプルを保持しなければならない。したがって、弁別と保持という異なる課題要求によって関連領域に違いがあるか検討することができる。

3.2 解析手順

遅延期間中の脳活動に MVPA を適用した。実験の結果得られたある脳活動パターンが、粗さの記憶課題実行中の脳活動パターンなのか、光沢感の記憶課題実行中のパターンなのかを判別するデコーダを作成した。そして、作成したデコーダに、デコーダ作成時には使用していない脳活動パターンをテストさせて、それがどちらの質感記憶課題の活動であるかを判別させた。

4 結果・考察

腹側高次視覚野と初期視覚野、頭頂間溝における MVPA の正答率の推移を図に示す。腹側高次視覚野において、課題開始 6 秒前後の応答からチャンスレベル以上で課題の判別に成功した。課題

関連の脳活動が生じるまでのラグを考えると、課題開始 6 秒前後は記憶課題が粗さと光沢感のどちらであるかの弁別に対応していると考えられる。一方でその後の時間からチャンスレベル以上で課題の判別をすることはできなかった。

初期視覚野において、課題開始 6～12 秒後の全ての時間で課題を判別することはできなかった。また、頭頂間溝において、課題開始 6～12 秒後の全ての時間で課題を判別することに成功した。これらの結果から、質感の視覚記憶課題の情報が初期視覚野ではなく、腹側高次視覚野と頭頂間溝で表現されていることや、これらの領域の質感視覚記憶への関与は機能的に異なる可能性が示唆された。

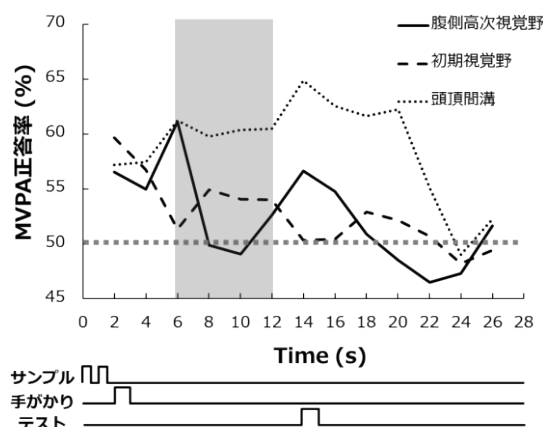


図 MVPA の正答率の推移。網掛けになっているのは考察対象の時間 (6～12 秒)。下図はサンプルと手がかり、そしてテストが呈示されたタイミングを表している。

5 参考文献

- [1] Wada, A., et al. (2014). *Neuroimage*, 98, 243–257.
- [2] Ward, G., J. (1992). *Comput Graph*, 26(2), 265–272.
- [3] Ferwerda, J., A., et al. (2001). *Proceedings of SPIE*, 4299, 291–301.
- [4] Fleming, R., W., et al. (2003). *J. Vision*, 3, 347–368.
- [5] Motoyoshi, I., et al. (2007). *Nature*, 447, 206–209.
- [6] Katherine, C., B., & Yaoda, X. (2016). *Nature Neurosci*, 19, 150–157.

臨界レイノルズ数における球の流体力に対する周囲の乱流場の影響

武藤昌也

京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻

臨界レイノルズ数条件下における一様気流中の球に付加する流体力が、周囲気流の乱流場の乱れの強さによってどのような影響を受けるかを調べた。計算の結果、乱れの少ない一様流中の球と比較して、球表面の圧力係数の変動や球後流の変動流が抑制されることが分かった。

1 緒言

乱流中での粒子や気泡のような分散相の運動を理解するには、それに掛かる様々な力について考慮することが重要である。しかし、従来、粒子の抗力係数は乱れの小さい一様流中で計測された実験値に基づいている。実際の工業プロセス内の分散固気二相流では、微粒子が分散する流れ場が乱れの小さい一様流であることはほとんど無い。この場合、境界層の発達や剥離の位置はもはや一様流中とは同様ではなく、非対称、非一様な流体力の作用により、その運動が一様流中とは大きく異なることが容易に推測される。昨今、工業プロセスにおける燃焼、粉体搬送技術の高度化に伴い、シミュレーションには解析精度の向上が要求されているが、多くの場合、微粒子の運動に対する周囲乱流場の影響が考慮されることはほぼ無い。

そこで本研究は、臨界レイノルズ数条件下において、一様気流中の球に付加する流体力が、周囲気流の乱流場の乱れの強さによって受ける影響を詳細に調べることを目的とする。

2 計算手法

本解析では、臨界レイノルズ数条件下での球周りの流れ場解析¹⁾²⁾³⁾に用いられた、解析領域および解析手法を用いる。解析領域の概略図を図1に示す。三次元矩形流路の中心に固定された直径44.7 mmの滑球周りの流れ場が解析される。解析格子は、球表面近傍および壁面近傍においてプリ

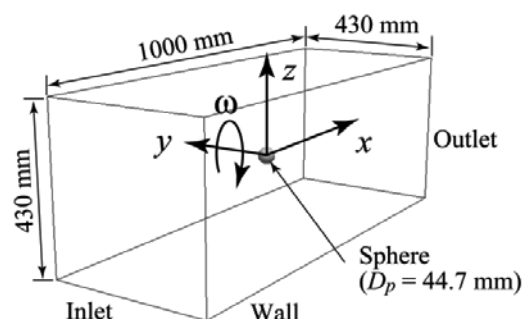


図1 球周り流れの解析領域 (Muto *et al.*¹⁾²⁾³⁾)

ズム要素、その他は四面体要素で空間的に分割されている。解析手法としては、非構造有限体積法に基づく Large-eddy simulation を用い、解析領域の流入境界からは、一様流に乱れを重ね合わせた流速を流入させた。乱れの生成手法として、Reynolds 応力のコレスキー分解に基づく方法⁴⁾を用いた。解析条件としては、平均流に基づくレイノルズ数が臨界レイノルズ数に近い 2.0×10^5 になるように主流流速を与えた。数値解析コードには、非構造格子有限体積法による非定常乱流解析コード FrontFlowRed/Comb を用いた。

3 計算結果と考察

図2、3に、球周りに一様流のみを与えた場合、および一様流に乱れを重ね合わせた流速を与えた場合の一様流方向無次元速度の瞬時分布および球表面の圧力係数 C_p の分布を示す。図2に対して図3では、球の上流迎えみ点から90度以降の下流表面において、 C_p の変動や後流流れ場の流速変動が抑

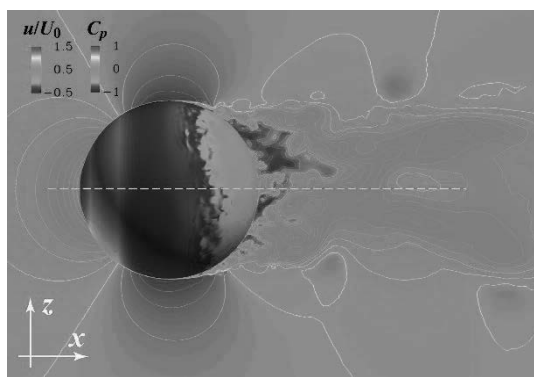


図2 球周りの瞬時流速場(変動風なし, Muto *et al.*²⁾)

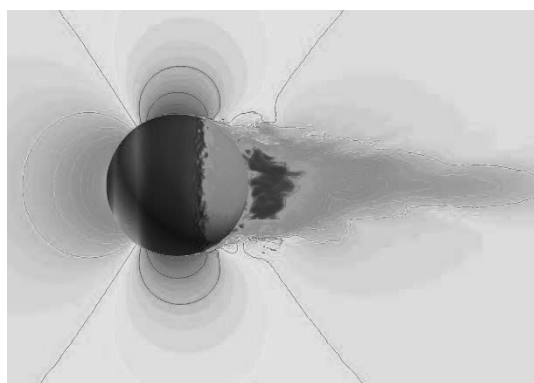


図3 球周りの瞬時流速場(変動風あり)

制されていることが分かる。これは、一様流に乱れを付加することにより、球表面の乱流遷移が促進され、一様流のみを与えた場合に見られた空間的に大きな流速変動がむしろ抑制されたことによると推測される。

次に、図4に図上流澱み点を0度とした $y = 0$ 断面内の圧力係数分布をプロットする。ただし、一様流のみを与えた場合は時間平均分布であり、一様流に乱れを重ね合わせた流速を与えた場合は瞬時分布である。一様流のみを与えた場合には、上流澱み点から92度における層流剥離に伴う圧力上昇と98度における再付着に伴う圧力低下の特徴が見られる。しかしながら、一様流に乱れを重ね合わせた流速を与えた場合は、一様流のみを与えた場合と比較して、90度近傍での圧力低下が大きく、より層流状態に近づくことが分かる。このことも、球周り流れの乱流遷移が促進され、境界層の剥離および再付着現象が下流に移動することを示唆している。今後、流体抗力を含むより詳細な解析の実施が望まれる。

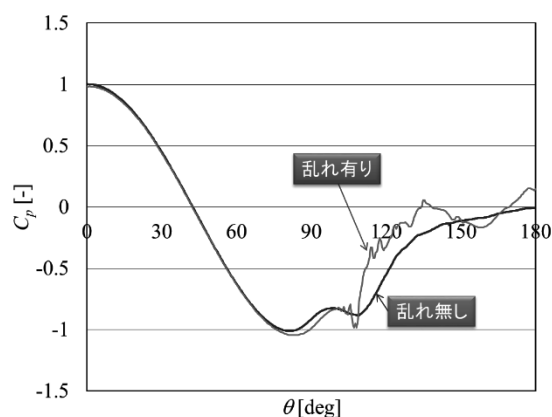


図4 球表面の圧力係数分布(乱れ無しのデータは武藤ら³⁾による)

4 結言

本研究では、臨界レイノルズ数条件下における一様気流中の球に付加する流体力が、周囲気流の乱流場の乱れの強さによってどのような影響を受けるかを調べた。計算の結果、乱れのない一様流中の球と比較して、球表面の圧力係数の変動や球後流の変動流が抑制されることが分かった。今後、流体抗力を含む詳細な解析の実施が望まれる。

参考文献

- 1) M. Muto, M. Tsubokura, N. Oshima, Numerical visualization of boundary layer transition when negative Magnus effect occurs, *Journal of Visualization*, Vol. 15(3), 261-268, 2012
- 2) M. Muto, M. Tsubokura, N. Oshima, Negative Magnus lift on a rotating sphere at around the critical Reynolds number, *Physics of Fluids*, Vol. 24, 014102 2012
- 3) 武藤昌也, 坪倉誠, 大島まり, 大島伸行, 周囲に周期変動が与えられた球に負荷する流体力, *日本機械学会論文集B 編*, Vol. 76, 563-569, 2010
- 4) Z.T. Xie and I.P. Castro, Efficient Generation of Inflow Conditions for Large Eddy Simulation of Street-Scale Flows, *Flow, Turbulence and Combustion*, Vol. 81(3), 449-470, 2008

3次元ナビエストークス流の過渡的乱れ

佐々木 英一

同志社大学理工学部

系のエネルギーを一定に保つ線形外力によって駆動される3次元周期箱領域の Navier-Stokes 流れの過渡的乱れについて調査した。この系における自明解である1次元せん断流が任意の Reynolds 数で線形安定であることを示した。乱流状態を初期条件に数値シミュレーションを行うと、動粘性係数が増加すると乱れは過渡的になり十分時間がたつと定常 Beltrami 流に漸近する。

1 はじめに

3次元周期箱流れは乱流の普遍的な統計則が発現する等方乱流の典型的なモデルである。近年、エネルギー注入率を一定に保った外力の下での3次元周期箱流れについて、乱流状態が過渡的となり、最終的に速度ベクトルと渦度ベクトルが平行な流れである定常 Beltrami 流れとなることが報告された(Linkmann & Morozov 2015, McComb et al. 2015)。壁面を有する流れでも過渡的乱れが存在することが報告されており(例えば Avila et al. 2011)、壁の有無にかかわらず過渡的乱れの発現は遷移過程における共通した性質であることが示唆される。

我々は系のエネルギーを一定に保つ線形外力によって駆動される3次元周期箱 Navier-Stokes 流れの過渡的乱れについて調査した。単純なせん断流が任意の Reynolds 数で線形安定であることを証明した。乱流状態を初期条件に数値シミュレーションを行うと、動粘性係数が増加すると過渡的乱れとなり定常な Beltrami 流に近づくことを見つけた。

2 問題設定

我々が扱う方程式は3次元周期境界条件における非圧縮 Navier-Stokes 方程式である：

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0.$$
ここで、 $\mathbf{u}$ は速度、 $\mathbf{f}$ は外力、 ν は動粘性係数、 p は圧力である。周期箱寸法は一辺の長さ $L = 2\pi$ の立方体領域である。外力は

$$\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{k}, t) = \begin{cases} \frac{\epsilon(t)}{2E_f(t)} \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t) & \text{for } 0 < |\mathbf{k}| < k_f \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

とした。ここで $\hat{\mathbf{f}}(\mathbf{k}, t)$ と $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t)$ はそれぞれ外力と速度場の波数 $\mathbf{k}$ の Fourier 係数であり、 E_f は波数ベクトルの大きさ $k_f = 2.5$ で Low-pass フィルターした速度場のエネルギー、 ϵ はエネルギー散逸率である。この外力により系の運動エネルギーは一定に保たれる。

数値計算は古典的ルンゲクッタ法と Fourier 展開によるスペクトル法を用いた。エイリアシング除去のため、一辺の格子点数 N と切断波数 T は $N > 3T + 1$ を満たす。格子点数は $N = 48$ とし、時間差分間隔は 10^{-3} とした。

3 結果と今後の課題

一つの方法にだけ速度を持つ1次元せん断流が任意の Reynolds 数で線形安定であることを証明した。このことは、乱流状態と層流状態を相空間で分割するエッジ状態が存在することを意味する。乱流状態を初期条件に数値シミュレーションを行うと、動粘性係数を増加させると乱れが過渡的になり、定常な Beltrami 流に近づくことが分かった。このことは1次元せん断流以外にも安定解が存在することを意味するが、安定解の吸引領域が相空間をどのように分割しているかわかっていない。乱流状態と安定解のエッジ状態を数値的に見つけ、不変解によって乱流状態からの離脱の機構を特徴づけることが今後の課題である。

動的／静的水～土骨格連成有限変形解析コードの高度化

～固有値解析に関わる高速化、並列化の検討～

野田利弘

豊田智大

名古屋大学 減災連携研究センター

名古屋大学大学院 工学研究科

1 平成 28 年度事業の概要と目的

筆者らが開発した地盤の動的／静的変形解析コード (GEOASIA® [1], [2]) に対して、平成 24 年度 (下半期) [3], 25 年度[4], 26 年度[5]に続き、平成 28 年度も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に採択していただいた。この概要を報告する。

本解析コードは、粘土や砂そして細粒分を多く含む中間土までを一貫して記述する弾塑性構成式 (All Soils) を搭載し、地盤の変形から破壊までの挙動 (All States) を、動的と静的とを問わずあらゆる外力条件 (All Round) の下で解析することを目指した解析コードである。本事業における平成 24～26 年度の目的は、大規模・高速化計算が実現できるよう当該解析コードの高度化・高性能化を図ることであり、OpenMP と MPI とのハイブリッド並列化、反復法ソルバである PETSc の組み込みや、領域分割法による並列処理による計算手法の導入などを実施した。

平成 28 年度の目的は、固有値解析に関する部分の高度化で、具体的には、一般化固有値解析に対応した数値演算ライブラリの調査に加え、当初用いていた Intel MKL (LAPACK) の GGEV[6]をオープンソース SLEPc (Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations) [7]に変更し、性能・計算結果の比較を実施した。

本稿では、当該解析手法における固有値解析の概要を説明した後、高度化を行った際の動作検証と性能評価について紹介する。

2 Foss の方法による固有値解析の概要

当該解析コードでは、材料非線形性を考慮するために増分型の弾塑性体構成式を用い、幾何学的非線形性を考慮するために updated Lagrange 法を用いる。このような方法で動的境界値問題を扱うためには、速度型運動方程式を解いて運動を求める必要がある。そこで、速度型運動方程式の弱形式を有限要素離散化した上で、土骨格の構成式として有効応力を用いて記述した弾塑性構成式を適用する。また、水～土骨格連成式については、飽和土の連続式および平均的な間隙水の流速式に基づいて、各要素の中心に間隙水圧 u を代表させる田村流[8]の物理モデルを拡張して用いる。さらに、有限要素法の速度場に線形制約条件が課せられる場合を考慮すると、最終的に解くべき連立常微分方程式は式(1)のように表される[1], [2]。

$$\begin{cases} [M]\{\dot{v}\} + [C^*]\{\dot{v}\} + [K]\{v\} - [L]^T\{\dot{u}\} - [C]^T\{\dot{u}\} = \{\dot{f}\} \\ [L]\{\dot{v}\} - [L]\{v\} + [H]\{u\} + [G]\{\dot{u}\} = \{\dot{f}_u\} \\ -[C]\{v\} = \{0\} \end{cases} \quad (1)$$

ここに、 $[M]$ は質量マトリクス、 $[K]$ は接線剛性マトリクス、 $[L]$ は土骨格の変位速度を土骨格の体積変化に変換するマトリクス、 $\{v\}$ は節点の変位速度ベクトル、 $\{\dot{u}\}$ は要素中心における土骨格から見た間隙水圧速度、 $[L]^T$ は $[L]$ を変形して作られるマトリクス、 $[H]$ は透水係数マトリクス、 $[G]$ は間隙率と水の圧縮率で与えられるマトリクスである。また、 $[C^*]$ は粘性境界を導入したことによって生じる減衰マトリクスであり、非比例減衰である。 $[C]$ は節点の運動に課される線形制約条件を表すマトリクス、 $\{\dot{u}\}$ は Lagrange の未定乗数であり、 $-[C]^T\{\dot{u}\}$ は制約条件を実現するのに必要な節点に作用する束縛力としての

物理的意味を持つ。

ここで、Foss の方法[9]に倣って、 $\{\dot{v}\}=\{\dot{w}\}$ とおくと、式(1)の斉次方程式は、式(2)のように書きかえることができる[10]。

$$\begin{cases} [M]\{\ddot{w}\} + [C^*]\{\dot{v}\} + [K]\{v\} - [L]^T \{\dot{u}\} - [C]^T \{\dot{u}\} = \{0\} \\ [M]\{\ddot{w}\} - [M]\{\dot{v}\} = \{0\} \\ [L']\{\dot{v}\} - [L]\{v\} + [H]\{u\} + [G]\{\dot{u}\} = \{0\} \\ -[C]\{v\} = \{0\} \end{cases} \quad (2)$$

式(2)の連立常微分方程式はさらに、マトリクス表現で次式のように表される。

$$[A]\{\dot{x}\} = [B]\{x\}, \quad [A] = \begin{bmatrix} [C^*] & [M] & -[L]^T & [0] \\ [M] & [0] & [0] & [0] \\ [L'] & [0] & [G] & [0] \\ [0] & [0] & [0] & [0] \end{bmatrix}$$

$$[B] = -\begin{bmatrix} [K] & [0] & [0] & -[C]^T \\ [0] & -[M] & [0] & [0] \\ -[L] & [0] & [H] & [0] \\ -[C] & [0] & [0] & [0] \end{bmatrix}, \quad \{x\} = \begin{Bmatrix} \{v\} \\ \{w\} \\ \{u\} \\ \{\dot{u}\} \end{Bmatrix} \quad (3)$$

ここで、式(3)の解 $\{x_0\}$ が、

$$\{x\} = \{x_0\}e^{i\lambda t}, \quad \{x_0\} = \left\{ \{v_0\}^T \{w_0\}^T \{u_0\}^T \{\dot{u}_0\}^T \right\}^T e^{i\lambda t} \quad (4)$$

と表されると仮定すると、次式で表される一般固有値問題が得られる。

$$\lambda[A]\{x_0\} = [B]\{x_0\} \quad (5)$$

複素固有値 λ の虚部によって減衰を考慮した固有振動数が、複素固有ベクトル $\{x_0\}$ の一部分である $\{v_0\}$ の実部と虚部の線形結合によって固有振動モードが与えられる。なお、この Foss の方法を用いると、解くべき元の数、変形解析時に比べて約2倍になる。

3 高度化 (SLEPc へ変更) の概要および動作検証と性能評価

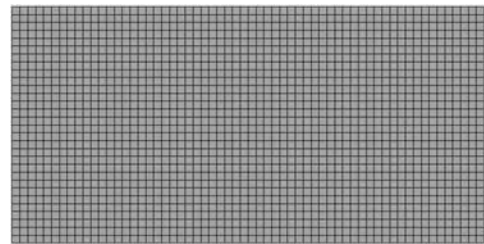
前章で述べた解析手法を用いたパソコンによる解析事例を文献[10]に示すが、この事例では、フルサイズ (密) 行列を入力として Intel MKL の GGEV を適用しているが、このライブラリには(1)密行列を対象としているため、規模が大きくなるに従い、行列の値の保管に要する配列のメモリ量が非常に大きくなる、(2)並列化に対応していない、などの問題があるため、特にパソコンレベルでは十分な計算ができなかった。

そこで、一般固有値解析の高度化を図るのに際し、

式(1)で示す $[M]$ と $[K]$ が疎行列で値が非対称であることを考慮して、行列形式を圧縮行格納方式 (CSR) に変更した上で、並列化とあわせて非対称行列に対応可能なオープンソース SLEPc に変更した。なお、この固有値ライブラリは、平成 26 年度までの高度化の際に搭載した PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) [11]を利用して開発されている固有値解析に関する数値演算ライブラリ群である。

今回の高度化による動作検証を行うため、図1に示す2次元有限要素メッシュである次の2種類を使用した。データ①：行列規模 1600×1600 (非零設定箇所：24856 (全要素の 0.97%))、データ②：行列規模 3660×3660 (非零設定箇所：101152 (全要素の 0.76%)) である。なお、データ①は一相系の場合、データ②は二相系の場合について固有値解析を実施している。また、データ②では、フルマトリクスでメモリを約 102MB/行列を使用している。

(a) データ①：1600×1600 (左端節点を拘束)



(b) データ②：3660×3660 (下部節点を拘束)

図1 動作確認に用いたメッシュ図

a)性能計測結果

性能計測結果として、Intel MKL (LAPACK) の GGEV との比較を表1に示す。なお、性能計測にあたっては、SLEPc のデフォルトの Krylovschur 法や Jacobi-Davidson 法など固有値ソルバによる違いや求解固有値数などの影響を調べている。ここでは、シリアル実行時で最も効果が得られた場合について、固有値求解解析に要した部分のみ時間を示している。

表1 高速化 (速度向上比) の効果

データ	GGEV	PETSc	速度向上比
①	67.43 s	1.67 s	40.4
②	812.55 s	1.70 s	480.0

データ規模が大きくなるに従い、GGEV に比べ速度向上が見られる。なお、SLEPc において並列化適用（プロセス並列、スレッド並列）時も調べている。このデータ①に、②については、シリアル実行時と比べて計算結果に差異はほとんど見られなかったが、データ②において行と列をそれぞれ 10 倍にしたデータなどデータ規模や条件設定によっては並列化による速度向上が得られる場合もあった。

b) 計算結果の検証

固有値、固有ベクトル（固有モード）などについて行った計算結果の比較検証結果について述べる。図2と図3はそれぞれ、データ①と②について、固有値が最も小さい固有モードから順に3つ目までを示す。

データ①については設定条件による計算結果の差異はほぼ見られなかった。一方で、データ②については、図3に示すように、設定条件により固有値や固有モードにやや差異が生じた。なお、固有値ライブラリの置き換え（GGEV or SLEPc）に伴い固有

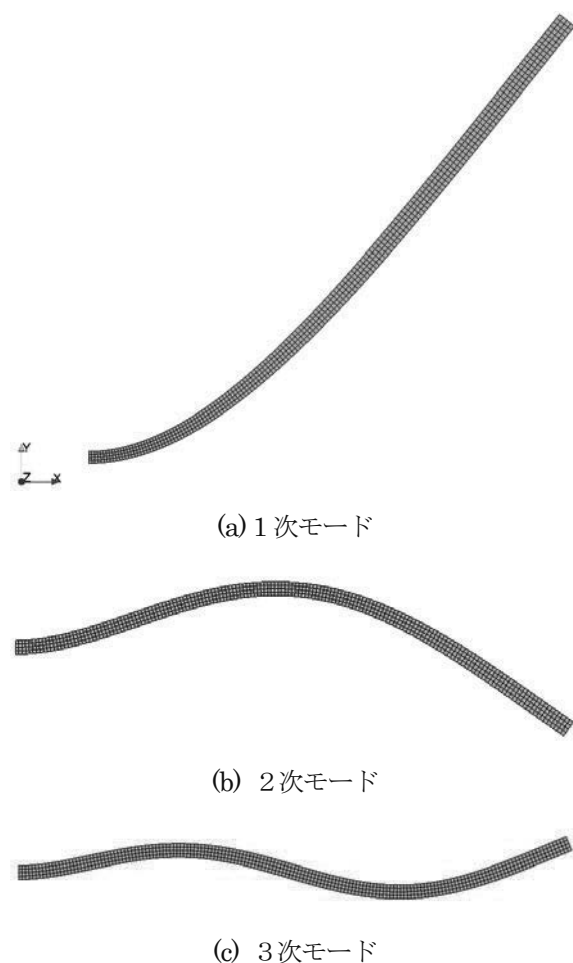
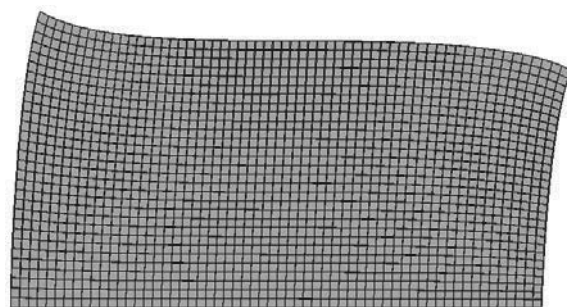
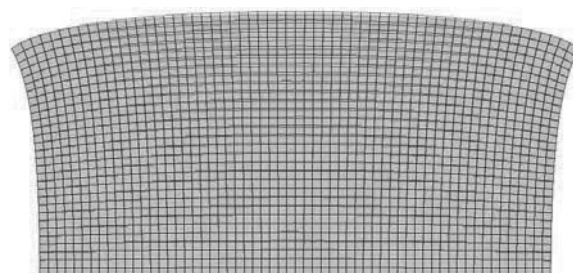


図2 計算結果（固有モード）（データ①）

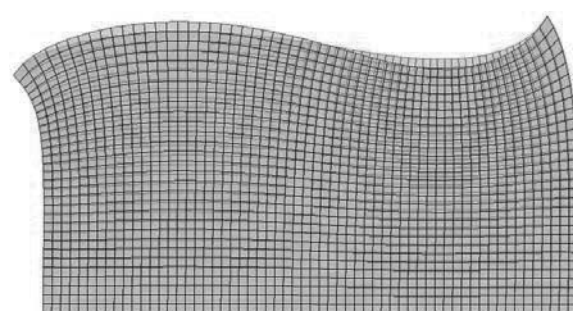
値の計算結果の際は生じていないため、固有値解析の入力に使われる材料の判定条件（弾性 or 弾塑性）がコンパイラ最適化オプションなどの設定条件に敏感に影響していた。



(a) 1 次モード



(b) 2 次モード



(c) 3 次モード

図3 計算結果（固有モードの比較）（データ②）

4 おわりに

平成 28 年度では、当該解析コードの一般固有値解析に関する部分において、高度化（SLEPc への変更）を図り、シンプルな形状に対する固有値解析を実施した。

- ・SLEPc 適用の際、行列の格納形式を密行列から疎行列（CSR 形式）へ変更し、これにより固有値解析の行列（剛性マトリクス、質量マトリクス）に対応する配列のメモリ量を大幅に減らすことができた。

- ・SLEPc での各種条件設定を行うことで、固有値求解箇所の性能比較では、GGEV と比較して、データ

① (節点数 805、要素数 640) で約 40 倍、データ② (節点数 1891、要素数 1800) で約 480 倍の速度向上できた。

・並列化 (プロセス並列、スレッド並列) では、シリアル実行の最速ケースでの更なる性能向上は今回の使用データでは見られなかった。一方で、データ規模を大きくしたケースでは、使用するデータや設定条件によって、並列化による速度向上が見込めることを確認できた。

なお、現時点では性能計測までは実施していないが、パソコンレベルでは時間的にも容量的にも計算できなかった 3 次元有限要素メッシュ (節点数 13971、要素数 12000) に対して今回の解析コードを適用した事例を図 4 に示しておく。ここでは直方体と形状は単純であるが、今後は複雑な 3 次元要素についても計算を実施してゆきたい。

謝辞 京都大学学術情報メディアセンターの中島浩教授および牛島省教授ならびにクレイ・ジャパン・インクの方々には、上述以外の点においてもご尽力いただきました。ここに深く謝意を表します。

参考文献

[1] Asaoka, A. and Noda, T. (2007): All soils all states all round geo-analysis integration, International Workshop on Constitutive Modelling - Development, Implementation,

Evaluation, and Application, Hong Kong, China, 11-27.

[2] Noda, T., Asaoka, A. and Nakano, M. (2008): Soil-water coupled finite deformation analysis based on a rate-type equation of motion incorporating the SYS Cam-clay model, Soils and Foundations, 48(6), 771-790.

[3] 野田利弘 (2013): 京都大学学術情報メディアセンター全国共同研究利用版広報, Vol.12, No.2, 33-35.

[4] 野田利弘 (2014): 京都大学学術情報メディアセンター全国共同研究利用版広報, Vol.13, No.2, 44-47.

[5] 野田利弘 (2015): 京都大学学術情報メディアセンター全国共同研究利用版広報, Vol.14, No.2, 31-34.

[6] Intel MKL (LAPACK), GGE: <https://software.intel.com/en-us/mkl-developer-reference-c-ggev>.

[7] SLEPc: <http://slepc.upv.es/>.

[8] 赤井浩一, 田村武 (1978): 弾塑性構成式による多次元圧密の数値解析, 土木学会論文集, 第 269 号, 95-104.

[9] Foss, K. A. (1958): Coordinates which uncouple the equations of motion of damped linear dynamic systems, Journal of Applied Mechanics, ASME, 32(3), 361-364.

[10] Shimizu, R. and Yamada S. (2013): Effect of seismic waves with different dominant frequencies on the delayed failure behavior of a soil structure-ground system, Proc. of the 18th International Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering, Paris 2013, 1599-1602.

[11] PETSc/Tao: <https://www.mcs.anl.gov/petsc/>.

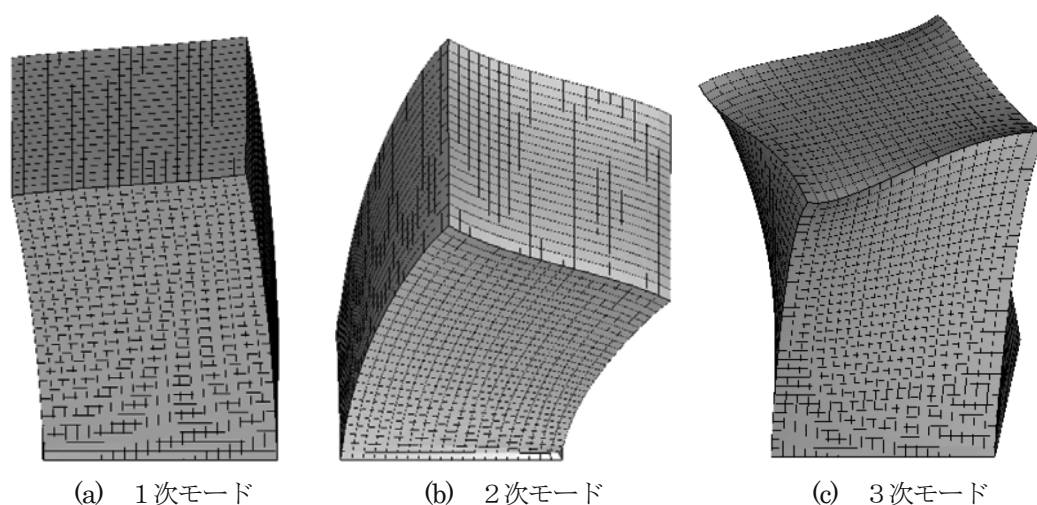


図 4 3次元の固有値解析の事例 (直方体、二相系、行列規模: 51690×51690、底面節点を拘束)

津波による瓦礫浮遊物を考慮した構造流体連成解析

高瀬 慎介 *

*八戸工業大学 工学部 土木建築工学科

1 はじめに

災害大国である我が国において、防災・減災を目的とした対策事業は幅広く展開されているが、それでもなお毎年のように災害の被害は繰り返している。これらの災害被害を効率的に制御するには、想定する災害に対して信頼性の高い被害予測を行うことが極めて重要な課題である。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し、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、構造物の移動・衝突には個別要素法を用いて、相互の連成解析を行う。昨年度の本プログラム高度化により MPI による並列が未対応であった個別要素法の解析部分が並列化され、MPI を用いた並列計算が可能となった。しかし、個別要素法では、逐次領域内の演算量が変化するため、広範囲での浮遊する構造物の解析では、その部分がボトルネックになっている。本手法の開発により、複数の構造物をモデル化し、実地形等を考慮した、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 Ω^M と支配方程式が満たされるべき物理領域 Ω^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、 ρ 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、 μ は粘性係数であり、 $\varepsilon(\mathbf{u})$ は次式で定義される変形速度テンソルである。

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

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。

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

ここで、 Ω^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、 $\bar{p}$ はペナルティ定数、 $\bar{\mathbf{u}}^h$ はペナルティ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 Ω_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、 τ_{supg} , τ_{pspg} , τ_{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、 ϵ は移動度、 δ は界面領域の代表幅である。また、 ϕ 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 をとるものとする。そして、各要素における流体の密度 ρ と粘性係数 μ は、液体 (水) と気体 (空気) の密度 ρ_l, ρ_g と粘性係数 μ_l, μ_g 、Phase-field 関数 ϕ 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。

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

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

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、 ω_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。

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

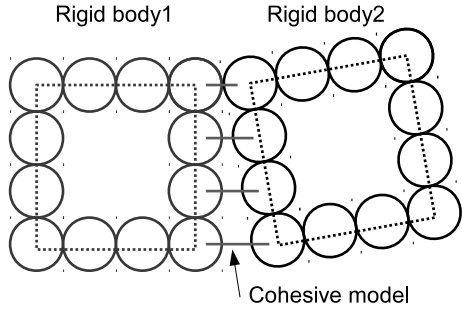


図 1: Cohesive model による DEM 剛体モデルの連結

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

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、 Δt 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 ω_g^n , ω_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 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。

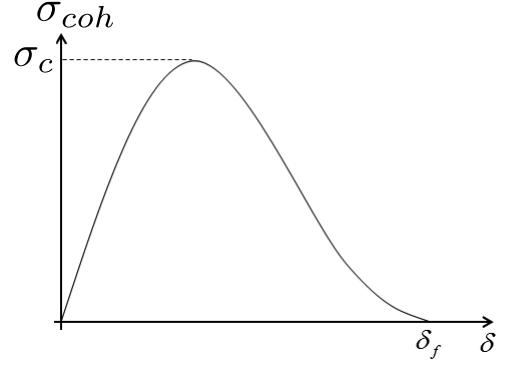


図 2: Cohesive model のイメージ

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

ここで、 σ_{coh} は結合力、 σ_c は結合力の上限值、 δ は開口量、 δ_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、複数ブロックの構造流体連成解析を示す。昨年のプログラム高度化において、非並列であった DEM の計算に対して、DEM の計算で用いるバックセルを領域分割することで MPI による並列計算が可能となった。図-3(a) に示す赤いボックスが各プロセッサに割り当てられる領域を表している。この方法では、図-3(b) に示すように計算が進むにつれ、剛体要素が偏ることにより、各プロセッサのロードバランスが悪くなり、並列度が低下していた。今年度のプログラム高度化では、図-3(c)(d) に示すように、剛体要素を包括するようにバックセルを動的に配置し、領域分割することで、並列密度を高くした。そのため、剛体要素の集積状態に合わせて計算領域を再設定しているので、並列度の低下も防げるようになっている。この方法により、図-4 に示すように、並列化性能の向上が見られた。

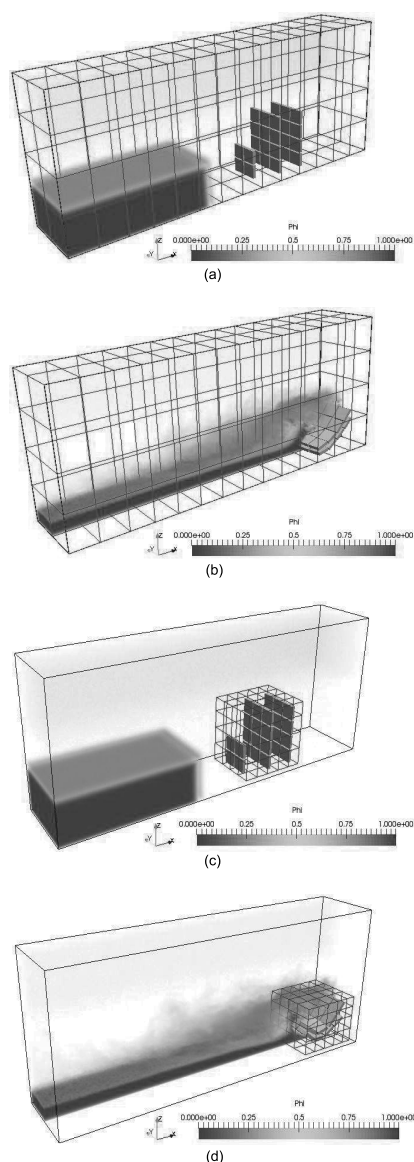


図 3: バックセルと解析結果

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。今年度導入した並列化方法により、昨年度に比べ、約 1.5 倍の並列化性能の向上が見られた。これにより、より大規模な実問題への適用が可能となる。

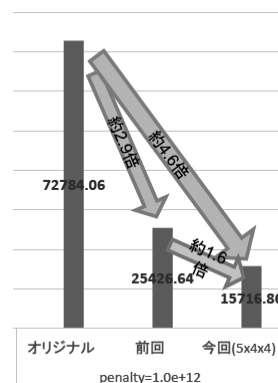


図 4: 並列化性能

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.
- [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.

システム A 運転状況 (2016 年 10 月 ~ 2017 年 3 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

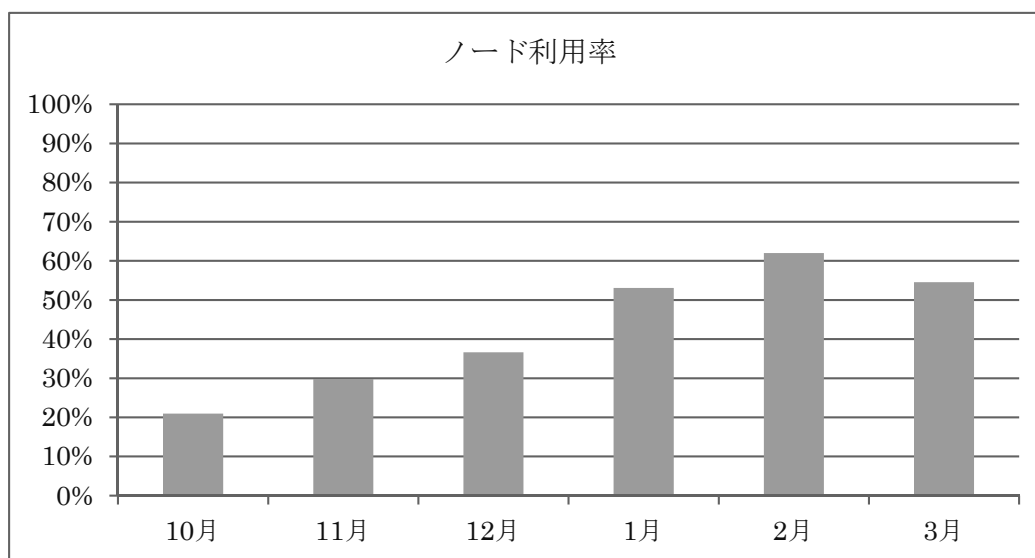
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2016/10/01 0:00	2016/10/03 9:00	57.00
2016/10/10 6:30	2016/10/12 9:45	51.25
2016/11/07 9:00	2016/11/08 9:30	24.50
2016/12/06 9:00	2016/12/06 18:00	9.00
2016/12/19 9:00	2016/12/27 10:00	193.00
2017/03/27 9:00	2017/04/01 0:00	111.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2016/11/22 15:12	2016/11/22 18:46	3.57
2017/01/21 0:25	2017/01/22 21:15	44.83
2017/01/23 15:30	2017/01/23 16:28	0.97
2017/02/06 8:53	2017/02/06 10:00	1.12
2017/02/07 12:30	2017/02/08 12:00	23.50
2017/03/07 20:32	2017/03/08 9:40	13.13
2017/03/15 2:36	2017/03/15 15:00	12.40

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
10 月	692.75	16,485	30,992	12,416,000	8,738,750	1499.5	21 %
11 月	692.50	15,192	58,473	21,149,300	14,375,800	1577.2	30 %
12 月	542.00	28,102	68,279	17,676,300	12,430,700	1630.4	37 %
1 月	698.20	43,034	183,775	40,817,900	24,715,500	1770.4	53 %
2 月	647.38	37,557	105,909	43,118,300	29,644,300	1783.6	62 %
3 月	605.83	89,115	155,250	44,271,800	27,890,000	1733.0	55 %
計	3878.66	229,485	602,677	179,449,600	117,795,050	1,665.7	43 %



- 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 B 運転状況 (2016 年 10 月 ~ 2017 年 3 月)

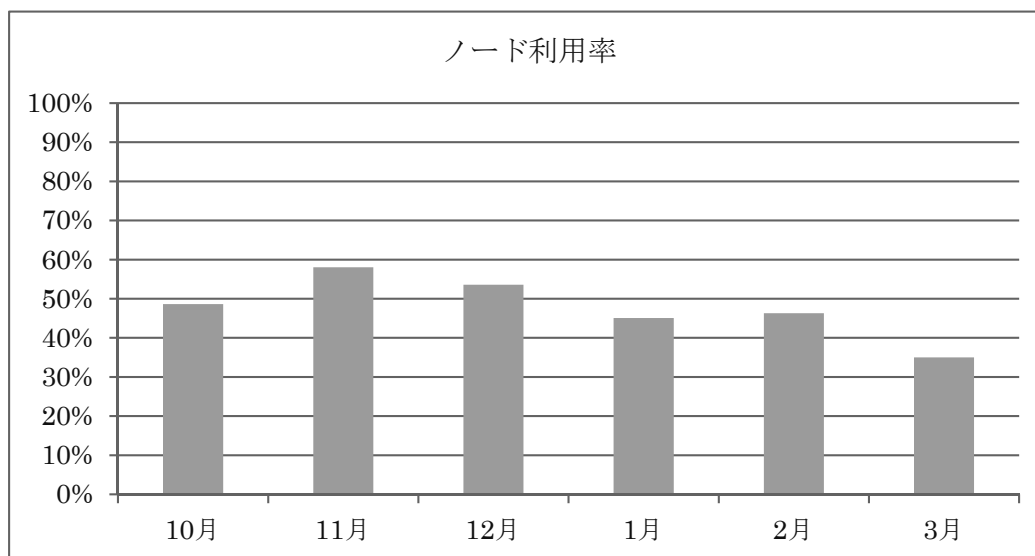
1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止			システムダウン障害発生状況		
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]	障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2016/10/01 0:00	2016/10/03 9:00	57.00	2016/11/22 15:12	2016/11/22 18:46	3.57
2016/10/10 6:30	2016/10/12 9:45	51.25	2017/01/08 14:00	2017/01/08 16:25	2.42
2016/11/07 9:00	2016/11/08 9:30	24.50	2017/01/21 0:25	2017/01/22 21:15	44.83
2016/12/19 9:00	2016/12/27 10:00	193.00	2017/01/23 15:30	2017/01/23 16:28	0.97
2017/03/27 9:00	2017/04/01 0:00	111.00	2017/01/31 20:40	2017/02/01 5:30	8.83
			2017/02/20 21:00	2017/02/21 9:15	12.25
			2017/03/13 0:00	2017/03/13 22:00	22.00
			2017/03/15 2:36	2017/03/15 15:00	12.40

2) サービス状況

	サービス時間[h]	パッチ					
		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
10 月	635.75	36,467	280,113	2,514,810	2,014,580	585.8	49 %
11 月	695.50	42,320	491,993	3,841,410	3,295,640	588.8	58 %
12 月	551.00	61,283	443,578	3,314,070	2,725,630	646.0	54 %
1 月	692.45	89,628	481,289	10,063,000	8,072,530	809.2	45 %
2 月	654.25	174,571	584,524	9,578,440	8,187,060	839.3	46 %
3 月	596.00	194,598	473,067	9,177,120	7,862,150	807.1	35 %
計	3824.95	598,867	2,754,564	38,488,850	32,157,590	712.7	48 %

※ 10-12 月は旧システム、1-3 月は新システムの稼働状況



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

システムC 運転状況 (2016 年 10 月 ~ 2017 年 3 月)

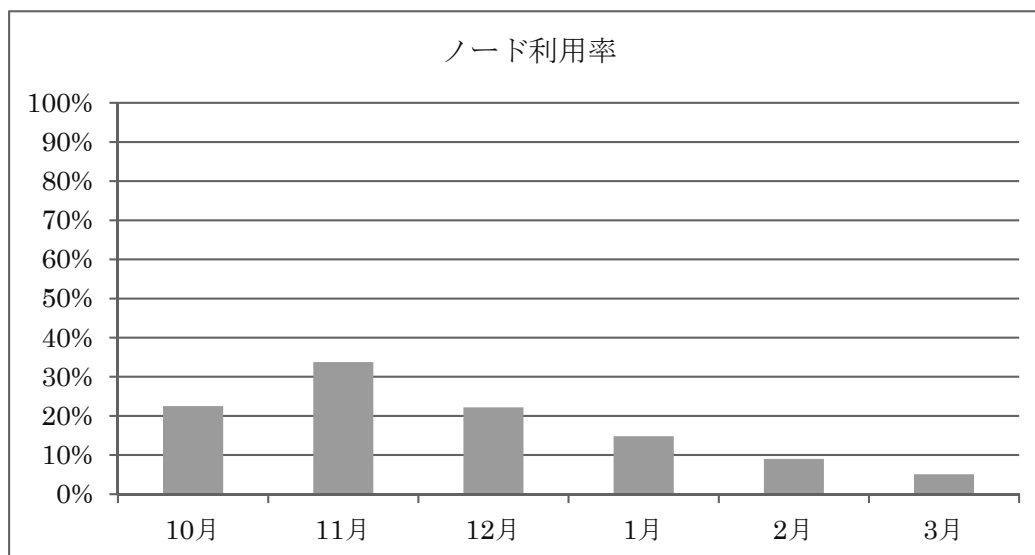
1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止			システムダウン障害発生状況		
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]	障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2016/10/01 0:00	2016/10/03 9:00	57.00	2016/11/22 15:12	2016/11/22 18:46	3.57
2016/10/10 6:30	2016/10/12 9:45	51.25	2017/01/21 0:25	2017/01/22 21:15	44.83
2016/11/07 9:00	2016/11/08 9:30	24.50	2017/01/23 15:30	2017/01/23 16:28	0.97
2016/12/19 9:00	2016/12/27 10:00	193.00	2017/01/31 20:40	2017/02/01 5:30	8.83
2017/03/27 9:00	2017/04/01 0:00	111.00	2017/03/15 2:36	2017/03/15 15:00	12.40

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
10 月	635.75	300	3,201	22,979	19,848	12.2	22 %
11 月	695.50	612	11,138	64,146	59,756	12.8	34 %
12 月	551.00	1,406	5,152	31,921	25,625	12.7	22 %
1 月	694.87	1,623	12,882	88,604	47,019	14.8	15 %
2 月	666.50	925	58,977	121,068	151,266	16.0	9 %
3 月	618.00	601	3,471	44,928	30,486	15.3	5 %
計	3861.62	5,467	94,821	373,647	333,999	14.0	18 %

※ 10-12 月は旧システム、1-3 月は新システムの稼働状況



- 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 10 月 ~ 2017 年 3 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2016/10/01 0:00	2016/10/03 9:00	57.00
2016/10/10 6:30	2016/10/12 9:45	51.25
2016/11/07 9:00	2016/11/08 9:30	24.50

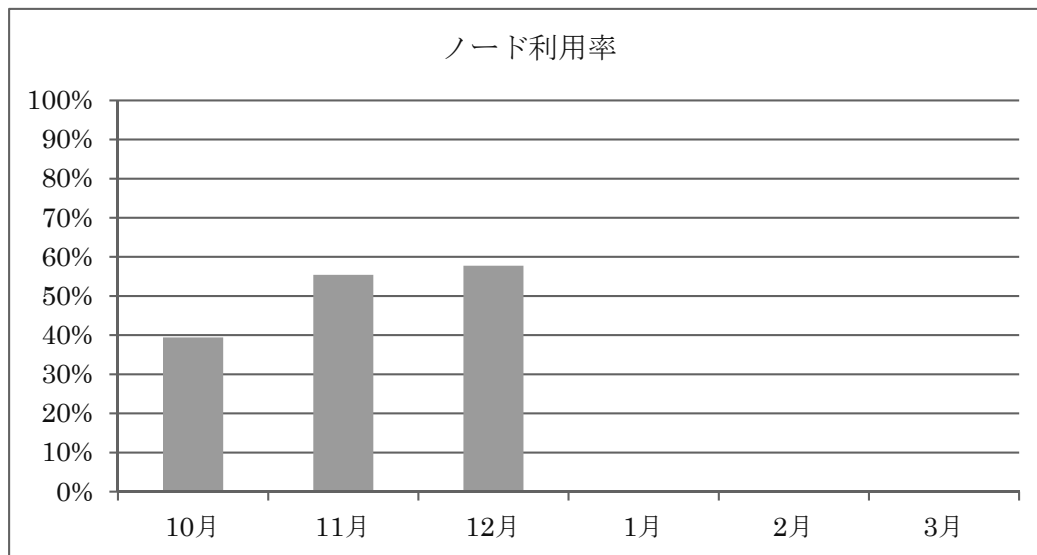
システムダウン障害発生状況

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
10 月	635.75	5,744	35,486	2,910,210	191,477	415.6	39 %
11 月	695.50	5,959	45,929	4,534,940	117,787	415.9	55 %
12 月	465.00	10,439	33,125	2,937,660	199,382	416.0	58 %
1 月	0.00	0	0	0	0	0	0 %
2 月	0.00	0	0	0	0	0	0 %
3 月	0.00	0	0	0	0	0	0 %
計	1796.25	22,142	114,541	10,382,810	508,646	207.9	25 %

※ システム更新に伴い、システム D は 12 月をもってサービス休止



- 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 10 月 ~ 2017 年 3 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

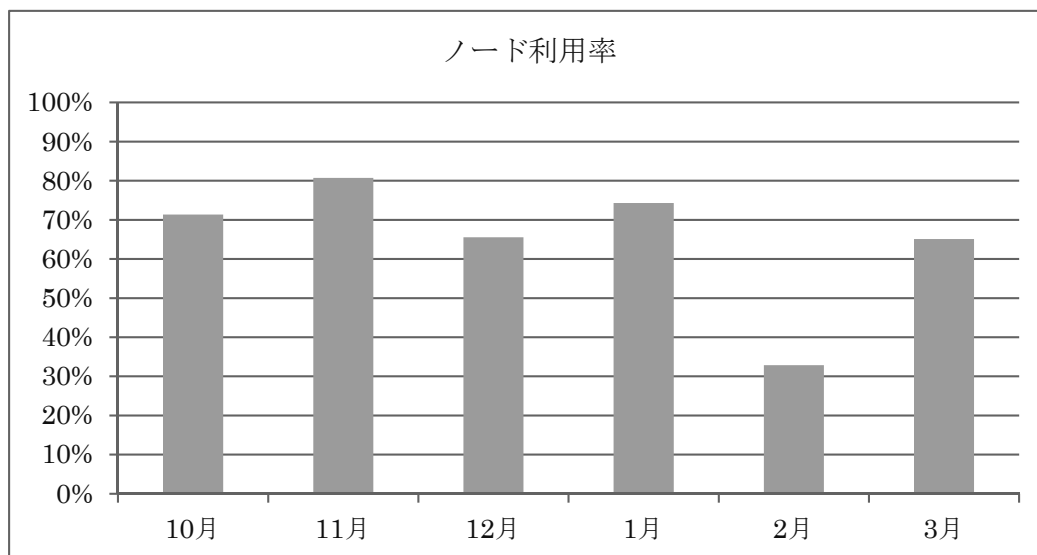
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2016/10/01 0:00	2016/10/03 9:00	57.00
2016/10/10 6:30	2016/10/12 9:45	51.25
2016/11/07 9:00	2016/11/08 9:30	24.50
2016/12/19 9:00	2016/12/22 10:00	73.00
2017/03/30 9:00	2017/04/01 0:00	39.00

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]
2017/01/08 2:15	2017/01/08 15:40	13.42

2) サービス状況

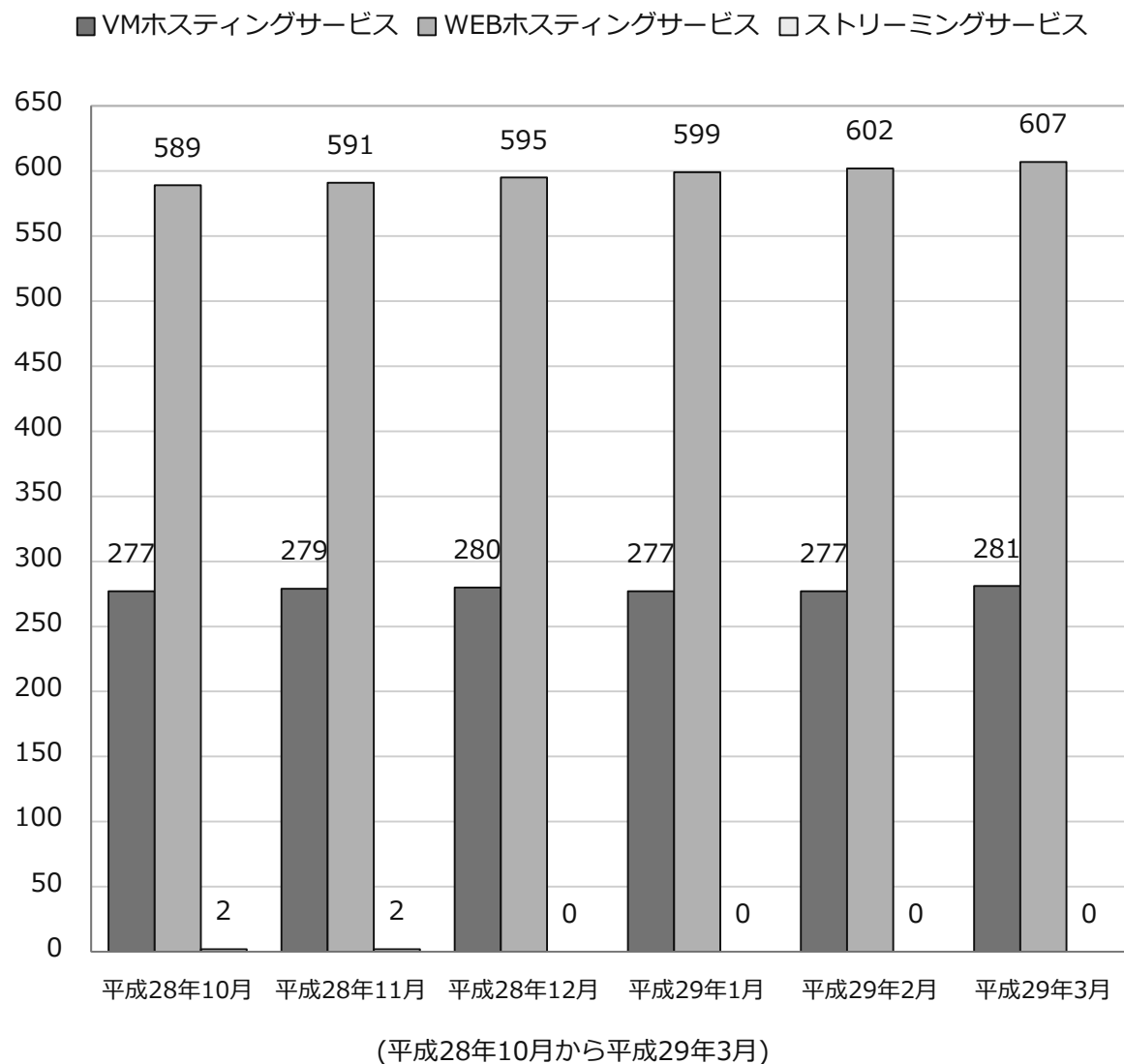
	サービス時間[h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
10 月	635.75	627	3,759	1,420,300	22,752	299.8	71 %
11 月	695.50	2,690	11,305	1,648,370	37,664	290.4	81 %
12 月	671.00	2,604	26,646	1,818,630	61,915	356.1	66 %
1 月	685.75	2,635	54,161	2,593,210	91,561	481.2	74 %
2 月	672.00	1,006	21,164	1,088,230	24,537	481.2	33 %
3 月	705.00	3,923	67,195	2,342,000	82,688	481.1	65 %
計	4065.00	13,485	184,230	10,910,740	321,118	398.3	65 %



- 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29年3月末現在、大型計算機システムの利用件数は、3,015件となっています。

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		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		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		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		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		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	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	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	-	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)およびブリポストアウェアの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必要がある。
- 「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に規定する額の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
仮想サーバホスティングサービス	36,000円／年	1仮想サーバにつき

備考

1. 利用負担額は、総額表示である。
2. 上記表の仮想サーバホスティングサービスを利用するためには、スーパーコンピュータシステムの利用者であること。
3. 1仮想サーバに割当ててシステム資源は、CPU:2コア、メモリ:4GB、ディスク:100GBである。
4. 仮想サーバホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことによりCPU、メモリ、ディスクを増量することができる。

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

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

別表3 スーパーコンピュータシステム

システム	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数	利用負担額
A	8ノード(68コア、16+96GBメモリ)×8)	336	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。

全国共同利用版広報・Vol.15(2016)総目次

[巻頭言]

Vol. 15, No. 1 号の発刊にあたって	1-1
Vol. 15, No. 2 号の発刊にあたって	2-1

[新スーパーコンピュータサービス開始]

新スーパーコンピュータ利用ガイド	1-3
新スーパーコンピュータ Camphor2 のベンチマーク評価報告	1-15

[研究会開催報告]

The 35th JSST Annual Conference (JSST2016) 開催報告	1-20
---	------

[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	2-3
乱流相分離制御による自己組織化構造の能動的選択	2-6
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	2-9
バイオフィルム成長に関する三次元モデルの構築	2-11
間欠性ダイナミクスの不安定周期軌道解析	2-14
運動量輸送と熱輸送の非相似性の最大化	2-16
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	2-18
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	2-21
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 —カオス・乱流化過程の解明に向けて—	2-23
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	2-25
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	2-29
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	2-31
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—	2-34

[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	2-36
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	2-41
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	2-45
「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	2-48
乱流輸送コード GKNET への運動論的電子の実装	2-52

[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	2-56
「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	2-60

[会議参加報告]

SC16 参加報告	2-64
-----------------	------

[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.....	1-22
汎用コンピュータシステムのサービス状況.....	1-27
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	2-65
センター利用による研究成果（平成 27 年度）	2-71

[資料]

大型計算機システム利用負担金 別表.....	1-28,2-74
全国共同利用版広報・Vol.14(2015)総目次.....	1-31
サービス利用のための資料一覧	1-33,2-77

[編集後記]

編集後記、奥付	1-34,2-78
---------------	-----------

— 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>

編 集 後 記

No. 1 の発刊が遅くなってしまいましたが、年度内に No. 2 の発刊も予定しております。No. 2 では、2017 年 10 月よりスパコンのサブシステム B/C で提供を開始したバーストバッファ（高速ストレージ）に関する特集を予定しております。最新の機能であり、やや使い所が難しいところもありますが、うまく利用できればファイルアクセス性能を大きく改善できる可能性もありますので、ご参考にしていただければと思います。

（副部会長）

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. 16, No. 1

2018年 1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（副部会長）

水谷 幸弘

南雲 円

熊谷 真由美

尾形 幸亮

高見 好男

表紙デザイン：谷 卓司

（ティアンドティ・デザインラボ）

目次

【巻頭言】

- ・ Vol.16, No.1 号の発刊にあたって 牛島 省 1

【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠)研究報告】

- ・ 種々の波動問題に対する積分核に依存しない演算子積分時間領域高速多重極境界要素法の開発 斎藤 隆泰 2
- ・ 光機能性有機分子材料の構造と電子構造の解明による有機系太陽電池の素子性能向上 梅山 有和 4
- ・ 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
- ・ Singlet Fission 相互作用の量子化学計算 鬼頭(西岡) 宏任, 佐藤 竜馬, 重田 育照 9
- ・ 高解像度大気海洋波浪結合モデルを用いた海面物理モデルの現地観測結果に基づく検証 二宮 順一 11
- ・ iPS細胞懸濁培養の最適化を目的とした攪拌槽内粒子挙動解析 矢野 雅貴 13
- ・ 大規模津波による流出油の拡散挙動予測 高木 洋平 15
- ・ 視聴覚モダリティ間デコーディングによる感覚間協応のメカニズムの解明 金谷 翔子 17
- ・ 高次元準周期軌道における準周期軌道の解析 斉木 吉隆 19
- ・ メモリー貫性モデルを考慮したモデル検査器の開発 安部 達也 21
- ・ 固液混相流の数値粘性測定 野村 怜佳, 高瀬 慎介, 森口 周二, 寺田賢二郎 23
- ・ 高プラントル数流体を用いた HZ 液柱内温度差マランゴニ対流の数値解析
ー 特異な対流場における熱的相互作用の影響ー 江口 俊和 25
- ・ カオス力学系におけるネットワーク解析 小林 幹 28
- ・ Numerical investigation of the effect of hydrogel surface shape on drag performance in turbulent flow
..... STOYANOVA Petya Valentinova 30
- ・ MuSTAR MD に基づくタンパク質構造変化の自由エネルギー経路計算手法の確立と応用 山守 優 34
- ・ 破壊力学に基づく損傷モデルによる鉄筋コンクリートの3次元破壊シミュレーション 相馬 悠人 36
- ・ 分子性導電・磁性材料の基底状態および励起状態に関する理論的解析 中野 義明 38
- ・ ポスト「京」100 ナノ電子状態計算むけの超並列構造保存波束ダイナミクスソルバー開発 井町 宏人 40
- ・ 固相光化学反応の計算化学による解明 鈴木 聡 42
- ・ 漂流物の衝突力に関するばらつきの基礎的検討 小谷 拓磨, 森口 周二, 高瀬 慎介, 寺田 賢二郎 44
- ・ 気象条件に応じた都市の境界層乱流の組織構造に関する研究 吉田 敏哉 47
- ・ 海色衛星データを用いた沿岸および陸棚海域における河川由来物質の解析手法の開発 小林 志保, 中田 聡史 50
- ・ 硫酸ランタン $\text{La}_2(\text{SO}_4)_3$ 結晶中における水拡散チャネルの発見 豊浦 和明 52
- ・ 粒子との接触を伴う液体挙動の直接数値解析
ー 自由界面ー固体物体間相互作用を考慮した多相直接数値解析 井上 幹允 54
- ・ 高精度視覚質感記憶の心理学的基盤と神経機構の解明 藤道 宗人 57
- ・ 臨界レイノルズ数における球の流体力に対する周囲の乱流場の影響 武藤 昌也 59
- ・ 3次元ナビエーストックス流の過渡的乱れ 佐々木 英一 61

【プログラム高度化支援事業研究報告】

- ・ 動的／静的水～土骨格連成有限変形解析コードの高度化
ー 固有値解析に関わる高速化、並列化の検討ー 野田 利弘, 豊田 智大 62
- ・ 津波による瓦礫浮遊物を考慮した構造流体連成解析 高瀬 慎介 66

【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 70
- ・ 汎用コンピュータシステムのサービス状況 75

【資料】

- ・ 大型計算機システム利用負担金 別表 76
- ・ 全国共同利用版広報・Vol.15(2016) 総目次 79
- ・ サービス利用のための資料一覧 81

【編集後記】

- ・ 編集後記、奥付 82