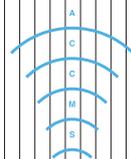


全国共同利用版

広報

センター共同研究報告(平成26年度)

【巻頭言】「Vol.14, No.2 号の発刊にあたって」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)】山本 卓也◎茂木 孝介◎Suddhasattwa Das, Yoshitaka Saiki, Evelyn Sander, James A Yorke◎鬼頭(西岡)宏任, 安藤 耕司◎中野 直人◎高木 洋平◎水口 尚◎中本 真義◎梅山 有和◎原田 浩平, 谷口 貴志◎中村 翔一 【プログラム高度化支援事業】中畑 和之◎野田 利弘◎車谷 麻緒◎森 知也 【スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠)】山本 義暢



Vol.14, No.2 号の発刊に当たって

京都大学学術情報メディアセンター 牛島 省

本号では、学術情報メディアセンターにおいて実施された平成 26 年度の共同研究報告について特集いたします。平成 26 年度は、若手研究者の支援事業に関して 11 件、プログラム高度化支援事業について 4 件、大規模計算の支援事業について 1 件の共同研究が実施されました。計算科学の広範な分野にわたる研究報告が掲載されていますので、関連する分野の研究者や学生の方の参考になると思います。

なお、これら 3 種類の共同研究制度のうち、「若手研究者奨励枠」は、平成 27 年度に実施された追加募集から「若手・女性研究者奨励枠」と変更され、(1)40 歳未満の若手研究者(学生を含む、性別は問わない)、(2)女性研究者(年齢は問わない)、の方を対象とする奨励制度となり、支援対象者の範囲を広げております。また、平成 28 年度より、この「若手・女性研究者奨励枠」は、文部科学大臣の認定を受けた 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、スーパーコンピュータを利用することで学術的にインパクトがある成果を創出できると期待される課題に対して、計算機利用負担金の全部または一部を本センターが負担しますので、ぜひ積極的にご利用ください。今回報告のあった 11 件には各種の流体計算、電荷移動問題、時系列データ解析、有機分子材料計算など多様な研究課題が含まれており、また、東北大学、東京理科大学、一橋大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、琉球大学と全国の若手研究者との共同研究となりました。

プログラム高度化支援事業では、スーパーコンピュータをグループコースまたは専用クラスタコースでご利用の研究グループを対象に、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 26 年度は、有限積分法 (FIT) による空洞を含む固体中の波動解析、地盤の有限変形解析、鉄筋コンクリート中のひび割れ進展解析、都市の人口規模・空間分布における秩序形成解析を行うプログラムの高度化を支援させていただきました。メニーコア (MIC) 環境でのプログラム高度化や、連立 1 次方程式の並列解法、経済学分野の問題を解析するためのハイブリッド解法など、様々な高度化・高性能化が行われており、数値計算研究者にとって最適化の良い指標となると思います。

また、大規模計算の支援事業に関しては、スーパーコンピュータをグループコースまたは専用クラスタコースでご利用の研究グループを対象に、例えば最大で 128 ノード × 2 週間の大規模ジョブコース利用を無償で実行できる支援を行っています。平成 26 年度は、高レイノルズ数チャンネル内の乱流解析の大規模計算の支援が行われ、その研究成果が報告されています。

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。

三次元非定常マランゴニ対流の解明

山本 卓也

大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻

1 緒言

気液界面上において温度勾配や濃度勾配が生じると、表面張力勾配が生じ、流れが発生する。この流れはマランゴニ対流(詳細については以下の文献[英文[1-2]、和文[3-4])を参照)と呼ばれ、半導体の作製プロセス等の応用面でも重要である。さらに、半導体の製造においては流体の不透明性より数値解析が幅広く研究に用いられている。

近年、数値解析においてはフリー(オープン)ソースの活用が叫ばれており、流体解析として非構造格子ベースの有限体積法で開発されたOpenFOAM[5-6]が広まりつつある。数値解析ではV&V(Verification and Validation)評価が非常に重要であるが、商用コードとは異なりフリーソースでは自分でV&V評価を行わざるを得ない。

そこで本報告では、フリーソースであるOpenFOAMを用いて、計算の解析精度が求められる流体不安定性の問題において検証を行った。検証問題として上記のマランゴニ対流の液柱における不安定性の計算を使用した。

2 数値解析手法

数値解析領域を Fig. 1 (a), (b) に示す。計算対象として国際学会 IMA-2 においてまとめられた検証問題[7]を使用する。上下に加熱・冷却ディスクを配置した液柱を想定し、この液柱の形状はストレート(a)と変形(接触角 60 度) (b)の場合を対象とし、液柱のアスペクト比(d/R)は1.2であるとした。また、液柱の表面は気液界面であるとし、液体部のみを計算した。液体として、Prandtl 数が0.01の流体を想定し、無重力条件、気液界面の動的変形なしを仮定した。

支配方程式として Navier-Stokes 式、連続式、Energy 式を用い、気液界面上にはマランゴニ対流境界条件・断熱条件、上下ディスクには壁面条件・固定温度を課し、上下ディスクの温度差によってマランゴニ対流を惹起させた。

離散化手法は空間に2次精度線形補間法、時間的に2次精度 Backward 法を用いた。非構造格子ベースの手法であるため、Laplacian 項に非直交補正を行う必要がある[8]。今回は陽的に直交補正を行う Over-relaxed approach[5]を用いた。

計算格子の概略図を Fig. 1 (c) に示す。不等間隔マルチブロック構造格子を用いた。計算格子解像度は先行研究の解像度を参考とした(Fig. 1 (c) 中の変数で $Nr = 35$, $Nz = 50$, $N\phi = 35$)。今回用いた OpenFOAM のバージョンは2.1.1である。

3 結果と考察

流れの様子を Fig. 2 に示す。自由表面に沿って高温ディスクから低温ディスク側に向かってマランゴニ対流が発生し、この流れは液柱中央部を通過して再び高温ディスク側に戻る。この流れは典型的な液柱内でのマランゴニ対流の特徴である。

ストレート液柱の場合の液柱中央高さ断面での速度ベクトルを Fig. 3 に示す。波数2のモードが発生しており、これは文献値[7]と一致している。しかし、陽的な非直交補正を行った場合(corrected, Fig. 3 (a) and (b))と行っていない場合(uncorrected, Fig. 3 (c) and (d))で流れの様子が異なる。非直交補正を行った場合には、発生すべきではない回転が見られ、非直交補正による数値誤差がこの回転を引き起こしたと考えられる。

変形液柱の場合の温度勾配の分布を Fig. 4 に示す。陽的な laplacian 項の補正をする場合(corrected)、

補正をしない場合(uncorrected)、半分補正する場合(limited 0.5)の結果をそれぞれ示している。補正をしない、または半分補正をする場合は Ferziger and Peric [8]にあるように、振動解(縞模様の温度勾配分布)が発生した。ストレート液柱の結果と合わせて考慮すると、直交補正を行うが非直交性を少なくする必要がある。ゆえに、先行研究等[7]ではあまり必要ではないとされた周方向の計算格子解像度を増大させる必要がある。周方向格子数を増加させた計算を行い、非直交補正有りで計算を行うと、先行研究と同様のモードが発生し、振動解等も見られなかった。

4 結言

本報告では、フリーソースである OpenFOAM を用いてマランゴニ対流の不安定性に対する V&V 評価を行った。OpenFOAM は非構造格子ベースの有限体積法のコードであるため、計算格子の非直交性より、laplacian 項に非直交補正を用いる必要がある。しかし、その非直交補正が非現実的な流れを引き起こす場合があることが分かった。高精度な計算が必要となる場合、計算格子の非直交性を少なくすることに注意する必要がある。本計算対象においては、先行研究ではあまり必要とされていない周方向の格子解像度が OpenFOAM では必要であるということが分かった。

引用文献

- [1] L. E. Scriven and C. V. Sterlning, *Nature*, **187**, 186-188 (1960).
- [2] H. Kuhlmann, *Thermocapillary convection in models of crystal growth* (Springer, Berlin, 1999).
- [3] N. Imaishi, *Int. J. Microgravity Sci.*, **31**, S5-S12 (2014).
- [4] S. Matsumoto *et al.*, *Int. J. Microgravity Sci.*, **31**, S13-S35 (2014).
- [5] H. Jasak, Ph. D. Thesis of the University of London, Imperial College of Science, Technology and Medicine (1996).
- [6] OpenFOAM (see <http://www.openfoam.com/>)
- [7] V. M. Shevtsova, *J. Cryst. Growth*, **280**, 632-651 (2005).
- [8] J. H. Ferziger and M. Peric, *Computational*

Methods for Fluid Dynamics (Springer, Berlin, 2002).

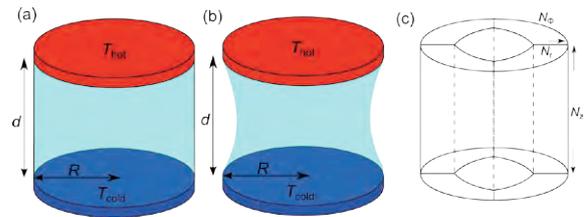


Fig. 1 Schematics of (a) straight and (b) deformed liquid bridges, and (c) the framework of the numerical grid.

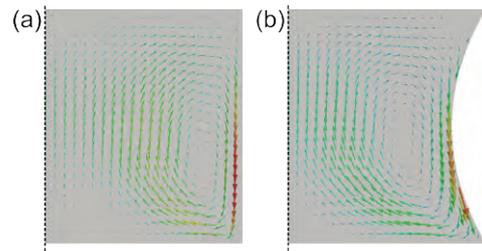


Fig. 2 Velocity distribution in a cross section in the perpendicular to the liquid bridge in (a) straight and (b) deformed liquid bridge.

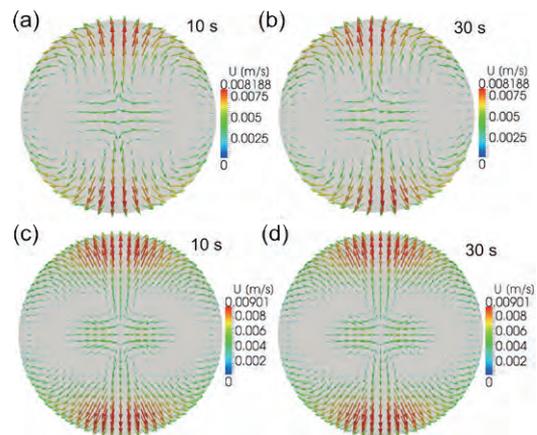


Fig. 3 Velocity vectors in a cross section of horizontal plane in the middle height: (a) corrected at 10 s, (b) corrected at 30 s, (c) uncorrected at 10 s, (d) uncorrected at 30 s.

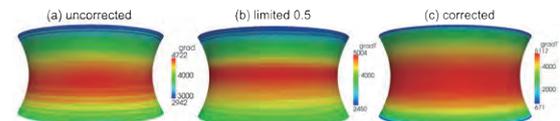


Fig. 4 Temperature gradient along the free surface: (a) uncorrected, (b) limited 0.5 and (c) corrected.

謝辞

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

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

日欧共同宇宙実験に向けて

茂木孝介

東京理科大学大学院理工学専攻機械工学研究科

1. 緒言

気液界面上に温度分布が存在する場合、表面張力の温度依存性によりマランゴニ対流が生じる。マランゴニ対流は微小重力環境下やマイクロナノスケール環境下で顕著化し、本質的な問題となりうる。

微小重力環境下は浮力対流が抑制されるため高品質な材料生成を行う上で理想的な環境である一方で、材料生成過程においてマランゴニ対流の不安定性により生じる振動流が悪影響を及ぼす事が知られている。そのため、マランゴニ対流の不安定性の理解、制御の観点から研究が進められてきた。

私の所属する研究室は、国際宇宙ステーション日本実験棟「きぼう」における流体物理宇宙実験に共同研究グループとして参画している。今回、2008~2013年にかけて実施された宇宙実験「マランゴニ対流におけるカオス・乱流とその遷移過程」の結果の理解を目的として、数値シミュレーションを行った。微小重力実験では背の高い液柱の長時間安定した実験が実施できる事が魅力の一つである。そのため微小重力実験では、地上では実現不可能な長液柱を作成し実験を実施した。

本研究は微小重力環境下におけるマランゴニ対流の不安定性の理解と対流場の遷移過程を明らかにする事を目的としている。、微小重力実験の結果と比較を行うため、長液柱を対象とし、液柱のアスペクト比を変化させ、対流場が不安定となる臨界マランゴニ数への依存性を調べた。マランゴニ数 (Ma) はマランゴニ対流の強さを表す無次元数であり温度差に起因する。また、微小重力実験の目的の一つである、カオス・乱流化過程を調べるため、Maを徐々に上昇させ対流場の遷移過程を調べた。

2. 計算モデル

高品質な材料生成法の一つであるFloating-zone法の代表的なモデルであるHalf-zoneモデル (HZモデル、図1) を研究対象とする。HZモデルはfloating-zone法の下半分の領域を模擬した簡易モデルであり、これまでのマランゴニ対流の不安定性の研究で慣例的に使われてきた。HZモデルにおいて、Maを大きくしていくと軸対称定常流が回転波に対して不安定となり、非軸対称周期流へと遷移する。

液柱の高さを H 、半径を R とし、アスペクト比を $\Gamma=H/R$ と定義する。上下ロッド間に液柱を形成し、上部ロッドを加熱、下部ロッドを冷却する事で液柱表面に温度分布を付加し、マランゴニ対流を発生させる。液柱は表面変形がない事を仮定し、液柱の周囲気体の影響を無視する。また、無重力であるとする。

支配方程式はNavier-Stokes方程式、連続の式、エネルギー方程式である。液柱の物性値としてプラントル数 (Pr) を 28として計算を行った。

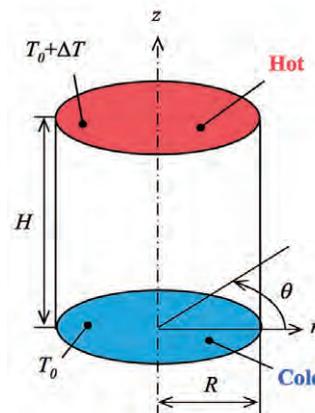


図1 HZモデルの図

3. 結果

臨界マランゴニ数、対流場遷移過程のアスペクト比依存性を示したグラフを図2に示す。アスペクト比の違いによって、二つの異なる対流場構造 (TW1a, TW1b) が観察された。この対流場は無限に長い液柱内対流場の線形安定性解析[1]の結果から予測されており、後に有限液柱である微小実験[2]によって観察されたものと同じのものである。二つの対流場はアスペクト比に依存して現れる。TW1aは長液柱にのみ存在し、微小重力実験でのみ観察する事が出来る。

グラフを見ると、アスペクト比を増加していく時、TW1aからTW1bに臨界モードが切り替わると臨界値が一度減少し、その後徐々に上昇していく。

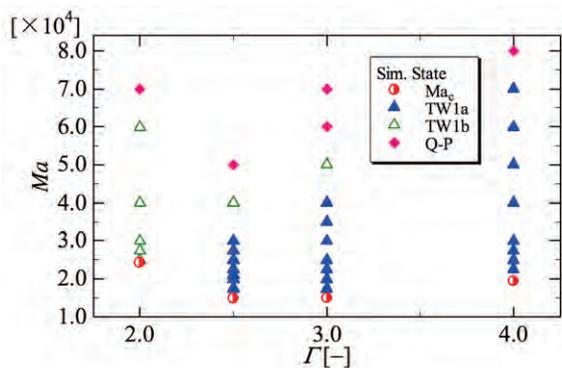


図2 臨界マランゴニ数と対流場遷移過程のアスペクト比依存性。

臨界マランゴニ数を超えて、さらにMaを大きくしていくとTW1aからTW1bに遷移することを明らかにした。その時の温度の変動分を図3に示す。マランゴニ対流の不安定性によって現れる図のような回転波をHydrothermal waveと呼ぶ。表面の温度分布から異なる対流場パターンを持つ事が分かる。(a),(c)は、「く」の字に曲がった温度分布を持つのにに対し、(b),(c)はライン状の構造をしている。

さらにマランゴニ数を大きくするとTW1aとTW1bが混在する準周期流(グラフではQ-Pとした)へと遷移する。TW1aからTW1bへの遷移領域はヒステリシスをもち、Ma数上昇条件、減少

条件で異なるMa数で遷移する。この領域ではTW1aとTW1bそれぞれが独立に存在する場合と、共存する場合とがあるようである。

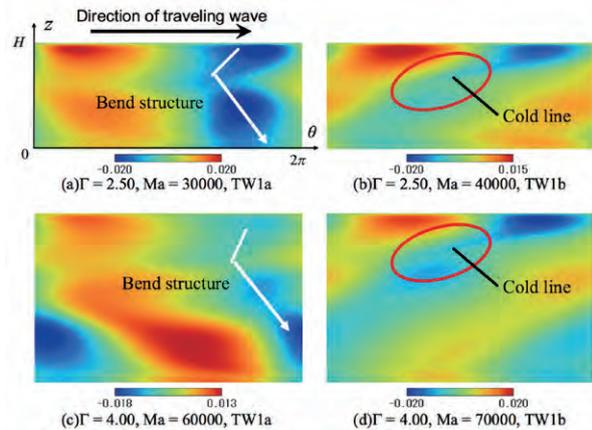


図3 液柱表面の温度変動分。

4. 結言

Pr = 28の流体、宇宙実験で実施された長液柱を対象とし数値シミュレーションを実施した。臨界マランゴニ数とアスペクト比の依存性、対流場の遷移過程を調べた。その結果、宇宙実験同様に異なる対流場が観察され、臨界マランゴニ数のアスペクト比依存性を明らかにした。

また、対流場の遷移過程はアスペクト比によって異なり、高アスペクト比 (2.5以上) では対流場の切り替わりにおいてヒステリシスが観察された。

今後は新規テーマであり、2018年から予定されている日欧共同宇宙実験に向けた予備計算を実施していく予定である。具体的には、液柱の周囲対流を制御する事によって臨界値の制御を目指す。

5. 参考文献

- [1] I. I. Ryzhkov, "Thermoapillary instabilities in liquid bridges revisited," Phys. Fluids **23**(8),082103 (2011)
- [2] T. Yano, K. Nishino, H. Kawamura, I. Ueno, and S. Matsumoto, "Instability and associated roll structure of Marangoni convection in Prandtl number liquid big with large aspect ratio," Phys. Fluids **27**, 024108 (2015)

準周期軌道に纏わる各種平均量の計算の高速化

Suddhasattwa Das¹, Yoshitaka Saiki^{2*}, Evelyn Sander³, James A Yorke¹

¹ University of Maryland, ² Hitotsubashi University, ³ Geroge Mason University.

1 はじめに

力学系の振る舞いは、安定周期軌道(不動点を含む)、準周期軌道、カオスの三つに大きく分類される。それらは例えばリアプノフ指数などの平均量によって特徴づけされるが、その収束は非常に遅く、実際に軌道が与えられたときに特に準周期軌道を判別することは難しい。また、準周期軌道の特徴づける回転数を高精度で同定することも同様の理由で困難であった。本研究では準周期軌道に纏わるこれらの量を高速で精度良く計算する方法を提案した。そこで、制限三体問題のある準周期軌道の回転数の計算を例にして、その手法を紹介する。

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、これに修正を加えることによって、準周期軌道に纏わる各種の量の計算を高速化させる。

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

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

とする。これを用いて f の重み付きバーコフ平均 WB_N を

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

と定義する。但し、

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

である。力学系と f が C^∞ で、 w 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、

$$\left| WB_N(f)(x) - \int f d\mu \right| \leq C_m N^{-m}$$

であることが示される [1].

3 制限三体問題

以下では、微分方程式 (4) であらわされる制限三体問題 [2] の準周期軌道に対して、重み付きバーコフ平均を応用する。

$$\begin{aligned} dq_1/dt &= p_1 + q_2, \\ dq_2/dt &= p_2 - q_1, \\ dp_1/dt &= p_2 - \mu(q_1 - 1 + \mu)d_m^{-3} - (1 - \mu)(q_1 + \mu)d_p^{-3}, \\ dp_2/dt &= -p_1 - \mu q_2 d_m^{-3} - (1 - \mu)q_2 d_p^{-3}. \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、

$$d_m = ((q_1 - 1 + \mu)^2 + q_2^2)^{0.5}, d_p = ((q_1 + \mu)^2 + q_2^2)^{0.5}.$$

であり、 $\mu = 0.1$ とする。系のハミルトニアン H は、

$$H = [(p_1^2 + p_2^2)/2] + [q_2 p_1 - q_1 p_2] - [\mu d_p^{-1} + (1 - \mu) d_m^{-1}] \quad (5)$$

である。 H をおよそ -2.63 の値に設定して、 $q_2 = 0$ かつ $dq_2/dt > 0$ によって定めたポアンカレ断面上の離散軌道、つまり 2次元写像について調べることにする。

以下で示す数値計算は 4 倍精度でおこない、数値積分はルンゲ=クッタの 8 次公式 [3]、時間刻みは 10^{-5} でおこなった。また、ポアンカレ断面上の軌道を精度良く求めるために、(4) を数値積分して断面を横切る直前の点を求めた後、従属変数 q_2 と独立変数 t の役割を入れ替えて、 q_2 を独立変数とみなしてポアンカレ断面にちょうど到達するようにルンゲ=クッタの 8 次公式を 1 ステップ分適用した。

このようにして得られた準周期軌道(軌道長 N) の時刻 n における点を x_n としたとき、図 1 で示すように (q_1, p_1) 平面上で q_1 軸とのなす角 ϕ_n を定め、時刻が 1 だけ進む毎の角の進み具合の平均(回転数)を重み付きバーコフ平均を用いて求めた。

* E-mail:yoshi.saiki@r.hit-u.ac.jp

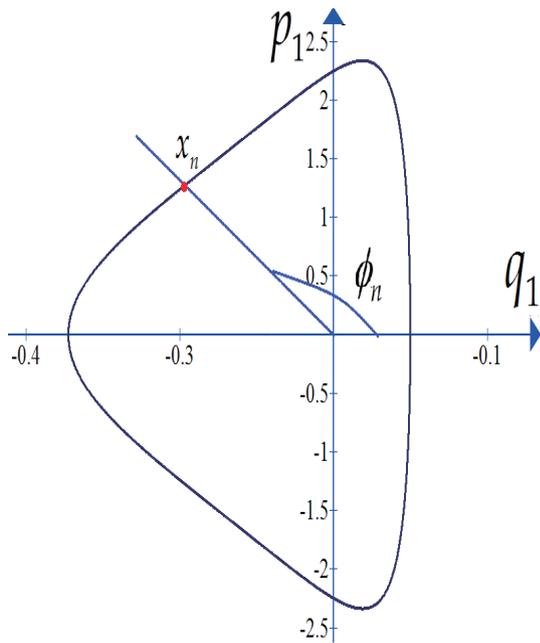


図 1: ポアンカレ断面上の準周期軌道. 時刻 n における軌道上の点 x_n を q_1 軸からのなす角 ϕ_n で捉える.

図 2 はこの計算で得られた回転数 ρ_N の想定される厳密値 (軌道長 $N^* = 400,000$ の場合の値で代用) からの誤差を軌道長 N の関数として示したものである. これから, $N = 20,000$ 程度において, 4 倍精度の計算精度の限界に近い 10^{30} にまで, 誤差が減少していることがわかる. また, 誤差の収束レートは $1/N^{15}$ 程度であることがわかる. N が十分大きくならないうちに 4 倍精度の計算精度に到達してしまうために収束レートは理論値 (N が十分大きいときには N に関する任意次の多項式より速く収束する) ほどには速くなっていないものの, バーコフ平均 B_N を用いた場合の誤差の収束レートである $1/N$ よりも圧倒的に高速化されていることがわかる. 実際, ある精度 (例えば 30 桁の精度) で回転数を求めることを考えると, 重み付きバーコフ平均 WB_N を用いた場合には, バーコフ平均 B_N を用いた場合に比べて, $1/10^{25}$ から $1/10^{20}$ 程度の長さの軌道で済む, すなわちそれだけ高速化されていることとなる.

4 まとめ

本研究では, 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のエルゴード定理に修正を加えて, なめらかな重みを用いた重み付きバーコフ平均を導入した. それを用いると準周期軌道に纏わる回転数の同定などが高速かつ高精度でおこなえることが確認された. この高速化はカオス軌道に対しては実現されな

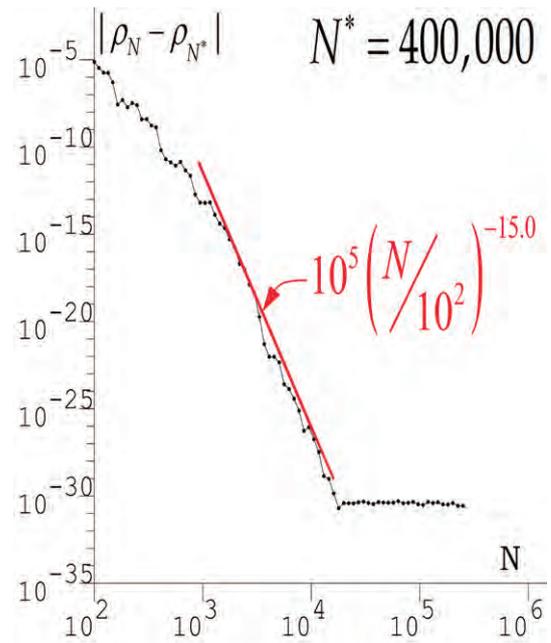


図 2: 図 1 に示した準周期軌道の回転数 ρ_N の誤差 (軌道長 N との対比). 誤差 $|\rho_N - \rho_{N^*}|$ (但し, $N^* = 400,000$) が 4 倍精度計算の計算精度の限界, すなわち丸め誤差のオーダー 10^{-30} 程度にまで誤差が減少すると数値計算上は収束したとみなせる.

いため, 収束スピードの差を用いてカオス軌道と準周期軌道の分類にも利用可能である [4]. また, 重み付きバーコフ平均の適用方法や特性に関する詳細, 制限三体問題以外の力学系に対する結果等は [5] を, 理論的背景に関しては [1] を参照いただきたい.

参考文献

- [1] S. Das and J. A. Yorke, Super convergence of ergodic averages for quasiperiodic orbits, preprint, arXiv:1506.06810.
- [2] J. B. Greene, Poincaré and the Three Body Problem, Amer. Math. Soc, 1996.
- [3] J. C. Butcher, Numerical Methods for Ordinary Differential Equations, Willy, 2nd edition, 2008.
- [4] S. Das, C. B. Dock, Y. Saiki, M. Salgado-Flores, E. Sander, J. Wu and J. A. Yorke, Measuring quasiperiodicity, preprint, arXiv:1512.07286.
- [5] S. Das, Y. Saiki, E. Sander and J. A. Yorke, Quantitative Quasiperiodicity, preprint, arXiv:1601.06051.

フラグメント分子軌道法と非経験的に最適化した長距離補正 密度汎関数法による電荷移動パラメータの高精度計算

鬼頭(西岡)宏任^{a)}、安藤耕司^{b)}

^{a)} 名古屋大学大学院理学研究科、^{b)} 京都大学大学院理学研究科

1 INTRODUCTION

有機 EL や有機薄膜太陽電池などの有機半導体を用いたデバイスの効率は、その有機半導体が持つキャリア移動度に大きく依存する。キャリア移動度を理論から見積もるには、分子間電子移動積分やサイトエネルギーなどの主要な電荷移動パラメータを、“分子環境下”における構成有機分子の電子状態から決定する必要がある。

本研究[1]では、フラグメント分子軌道(FMO)法を用いて生体・溶液系の電子移動反応を *ab initio* 精度で効率的に解析する手法[2]を基に、DNA、液体結晶や分子結晶、導電性ポリマーなどの電荷輸送の理論解析へ応用することを目指した。特に電子相関効果を適切に取り込むために、非経験的に最適化した(NET)長距離補正(LC)密度汎関数法(DFT)を FMO 法のフラグメント計算に採用した。最近報告された高精度波動関数理論ベンチマーク計算結果[3]と比較することで、我々の手法が現実的な系の“分子環境下”においても高精度かつ著しく低計算コストで電荷移動パラメータを計算することができることを示した。[1]

2 METHODS

FMO 線形結合(FMO-LCMO) 法[4]を用いると、他のフラグメントからの静電場環境下で解いたフラグメント単量体と二量体の Khon-Sham (KS)ハミルトニアンから全系の KS ハミルトニアンを構築することができる。p 型有機半導体に注目する場合、各フラグメント単量体の HOMO を基底分子軌道(MO)とする。その軌道空間に全系 KS ハミ

ルトニアンを射影することで、ホール伝導バンドを記述するタイトバインディング・ハミルトニアンが得られる。そのハミルトニアンの対角項がサイトエネルギー、非対角項が移動積分になる。

フラグメントの電子状態計算に用いた LC-DFT 法は、交換ポテンシャルが短距離で減衰するという DFT の欠点を克服するために、誤差関数とパラメータ μ を用いて以下の(1)式のように電子間のクーロン反発項を短距離と長距離に分割し、長距離部分には Hartree-Fock の正確な交換ポテンシャル式を使って計算している。

$$1/r_{12} = (1 - \text{erf}(\mu r_{12}))/r_{12} + \text{erf}(\mu r_{12})/r_{12} \quad (1)$$

LC-DFT 法は、電子移動に関与する HOMO と LUMO の軌道エネルギーが、イオン化ポテンシャル(IP)と電子親和力(EA)の計算値を再現するように μ を自己無撞着に最適化することが出来る[5]。こうして得られた気相中単分子の HOMO や LUMO の軌道エネルギーは、IP や EA の実験値や高精度波動関数計算結果を良く再現する[5]。従って分子集合体に対しては、非経験的に最適化した LC-DFT 法(NET-LC-DFT)と FMO 法と組み合わせることで、分子環境下の電子分極効果を取り込んだサイトエネルギー計算が可能になる。

3 RESULTS & DISCUSSION

まずイミダゾールとフランを“face-to-face”にスタックしたダイマーカチオン間の移動積分に対して、NET-LC-DFT の精度検証を行った(図 1)。論文[3(a)]から、MRCI+Q と NEVPT2 を用いた高精度波動関数計算結果を参照値として採用した。LC-BLYP が NET-LC-DFT を用いた計算結果であ

る。基底関数として重原子には cc-pVTZ を水素原子には cc-pVDZ を用いた。最適化されたパラメータ μ は両方とも 0.33 bohr^{-1} であり、汎用量子化学計算プログラム GAUSSIAN のデフォルト設定値 0.47 bohr^{-1} と大きく違っている。図 1 から、標準的に用いられる B3LYP 汎関数計算と比較して、我々の LC-BLYP 計算は高精度参照値を定量的に再現していることが分かる。

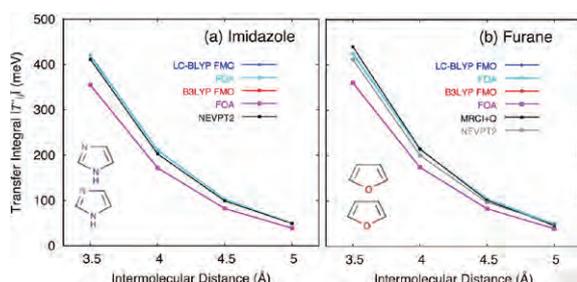


図 1 (a)イミダゾールと (b)フランのダイマーカチオン間移動積分の分子間距離依存性

次に核酸を構成する塩基の一つであるアデニン 8 量体を用いて、分子環境効果の重要性を示す。構造は、理想的な B-DNA 螺旋を取るよう作成した。パラメータ μ は 0.29 bohr^{-1} を、基底関数は 6-31G(d)を用いた。図 2 にサイトエネルギーの計算結果をプロットした。Dimer in Vac は二量体みの計算、Dimer in MM は二量体計算において残りのフラグメントを点電荷で近似したもの (QM/MM 計算)である。FOA は、電子分極効果を KS ハミルトニアンに考慮したが、基底 MO には考慮しなかった結果である。

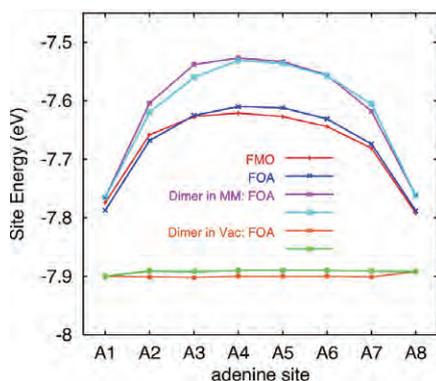


図 2 アデニン 8 量体のサイトエネルギー

環境効果を見捨てた Dimer in Vac と他の結果を比較すると、 $0.1 \sim 0.4 \text{ eV}$ の違いが現れていることがわかる。また、Dimer in MM と (FMO, FOA) の結果

から、前者で無視された電子分極の効果を考慮することで $\sim 0.1 \text{ eV}$ の違いが生じることが分かった。

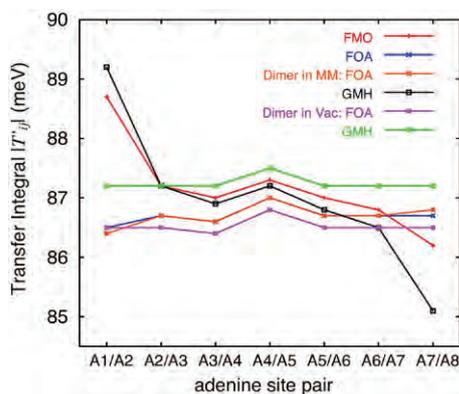


図 3 アデニン 8 量体の移動積分

図 3 には隣接アデニンサイト間の移動積分の計算結果をプロットしている。FMO 法と他の結果を比較すると、特に両端 (A1/A2, A7/A8) において移動積分値の顕著な違いが現れていることが分かる。

環境静電相互作用による軌道緩和 (電子分極) は、基底 MO と全系 KS ハミルトニアンに影響し、FMO 法は両方とも適切に考慮されている。図 2, 3 から、分子環境がこれら 2 つの因子を通して、どのようなバランスで電荷移動パラメータに影響を与えているかを解析することが可能である。

4 ACKNOWLEDGEMENTS

本研究は、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) と科研費新学術領域研究「 π 空間」(領域番号 2007) による。

- [1] H. Kito-Nishioka and K. Ando, *Chem. Phys. Lett.* **621**, 96 (2015).
- [2] (a) H. Nishioka and K. Ando, *J. Chem. Phys.* **134**, 204109 (2011).; (b) H. Kito-Nishioka and K. Ando, *J. Phys. Chem. B*, **116**, 12933 (2012).
- [3] (a) A. Kubas, et al., *J. Chem. Phys.* **140**, 104105 (2014).; (b) A. Kubas, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 14342 (2015).
- [4] (a) S. Tsuneyuki, et al., *Chem. Phys. Lett.* **476**, 104 (2009).; (b) T. Kobori, et al., *J. Chem. Phys.* **139**, 094113 (2013).
- [5] M.E. Foster and B.M. Wong *J. Chem. Theory Comput.* **8**, 2682 (2012).

射影された時系列データに対する 経験的確率微分方程式モデリングとアンサンブル軌道予測

中野直人*

*国立研究開発法人科学技術振興機構さきがけ, 北海道大学大学院理学研究院

1 はじめに

昨今の情報社会はビッグデータ時代を迎え、大量のデータが取得できるようになり、そのデータから対象とする現象の法則を経験的にモデル化する試みがなされている。データにあらゆる現象の振る舞いが含まれているとみなし、機械学習的なアプローチでモデル方程式を構成するのである。一方で、観測できるデータが現象の時間発展をつかさどる変数全てを網羅しているとは限らず、そのとき経験的モデリングでは観測できる一部分の変数だけでその現象を記述することになる。これは全て自由度を考慮する相空間ではなく、ある部分空間において予測モデルを構築することとなり、その部分空間への射影による情報欠損がそのモデルの記述力に重要な関わりをもつことになる。ここでは、ローレンツ方程式を題材に取り、その時系列データのある2次元平面に射影したデータから、どこまで元の時系列軌道を再現できるモデル方程式を構築できるか考察する。

2 データ

ここで用いるデータはローレンツ方程式

$$x' = p(y - x), \quad y' = -y + x(r - z), \quad z' = -bz + xy$$

の平面射影データである。ここで、パラメータは $p = 10$, $r = 28$, $b = 8/3$ とする。方程式の数値解は、初期値を $(x_0, y_0, z_0) = (1, 1, 1)$ とし、時間間隔 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ で4次ルンゲ=クッタ法で計算する。 $0 \leq t \leq 100$ までは遷移状態とみなし、アトラクタ上の軌道である $t_0 := 100 < t \leq 1100$ までの 10^7 個のデータを採取する(図1左)。さらにこれを $u = (x+y)/\sqrt{2}$, $v = z$ で定まる二次元射影 $(x, y, z) \mapsto (u, v)$ によって

(u, v) -平面に射影し、得られた $\{X_{t_n} = (u_{t_n}, v_{t_n})\}_{n=1}^{10^7}$ ($t_n = 100 + n\Delta t$) を解析する時系列データとする(図1右)。

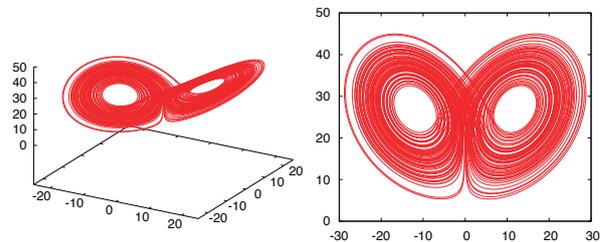


図1: (左) Lorenz system の数値解による軌道, (右) 平面に射影された Lorenz system の軌道.

3 手法

用いる手法は確率微分方程式 (SDE) モデリングであり、上記の時系列データから、次のように SDE $dX_t = A(X_t)dt + S(X_t)dW_t$ を経験的に構成する。平面を長さ1の正方形のセルに分割し、各セル \tilde{x}_m を通過するデータ点に対して、ある基準時刻 τ 後のデータ点の平均と共分散の変化率を計算する:

$$\tilde{A}^i(\tilde{x}_m; \tau) = \frac{\langle X_{t_n+\tau}^i - X_{t_n}^i \rangle_{\tilde{x}_m}}{\tau},$$

$$\tilde{B}^{ij}(\tilde{x}_m; \tau) = \frac{\langle (X_{t_n+\tau}^i - X_{t_n}^i)(X_{t_n+\tau}^j - X_{t_n}^j) \rangle_{\tilde{x}_m}}{2\tau} - \frac{\langle X_{t_n+\tau}^i - X_{t_n}^i \rangle_{\tilde{x}_m}^2}{2\tau}.$$

ただし、 $\langle \cdot \rangle_{\tilde{x}_m}$ はセル \tilde{x}_m を通過するデータ点に対するアンサンブル平均である。これは、平均的な状態変化度をドリフト項、軌道のばらつきを拡散項として持つような SDE をデータから経験的に構成する手法である。射影による情報欠損はこの拡散項によって補填されることとなる。この $\tilde{A} = (\tilde{A}^1, \tilde{A}^2)$ と

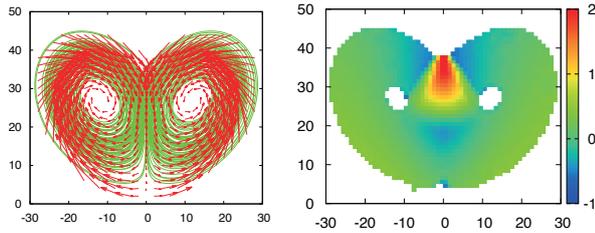


図 2: $\tau = 0.10$ のときの (左) ドリフトベクトル (背景の緑の軌道は射影データ), (右) 拡散の大きさ $\text{tr}\mathbb{B}$.

$\tilde{\mathbb{B}} = (\tilde{B}^{ij})$ が離散セル上に構成されたドリフトと拡散係数となる. SDE のノイズ係数の \mathbb{S} と拡散係数 \mathbb{B} との間には $\mathbb{B} = \mathbb{S}\mathbb{S}^T/2$ という関係があるため, \mathbb{S} を $2\mathbb{B}$ の平方根行列として与える.

4 結果

係数の評価時間を $\tau = 0.10$ として上記の方法で構成した $\tilde{\mathbb{A}}$ と $\tilde{\mathbb{B}}$ を図 2 に示す. 図 2(左) の緑の軌道で表された射影されたアトラクタの外縁部では, 軌道の速度が早いためにドリフトベクトルは軌道の接ベクトルとは異なるベクトルとして求められているが, 用いる評価時間 τ における平均的な変動成分を表している. また, アトラクタの中央部分では u -成分は非常に小さく, v -軸が負の方向の成分しか持たない. これは, 元の軌道は左右へ交差するデータがあるため, アンサンブル平均で相殺されているからである. すなわち, この部分ではドリフトベクトルだけでは軌道の変動成分を表し得ず, 振る舞いが決定論的でないことがわかる. これがデータの 2 次元射影による情報欠損の顕著な例であると言える. これを補填するのが拡散係数 \tilde{B} であり, 軌道交差部においてその大きさ $\text{tr}\tilde{\mathbb{B}}$ の値が大きくなっており, 一方でアトラクタ外縁部の決定論的領域ではその値が小さくなっている (図 2 右).

この経験的に構成された SDE を用いて実際に数値シミュレーションをおこなう. SDE の数値解の計算にはオイラー=丸山法を用いる (時間刻み幅 0.10). このとき, SDE の各係数は離散分割セル上にしか定義されていないため, 平面上の任意の点における係数の値は双一次補間を用いて計算する. 中心を $(u, v) = (20, 25), (20, 40), (0, 20)$ とするサイズ 1×1 のセル内に初期値に取った SDE の数値解をそれぞれ図 3(b), (d), (f) に, 同じセルを通過する射影されたデータ軌道を図 3(a), (c), (e) に示す. それぞれの軌

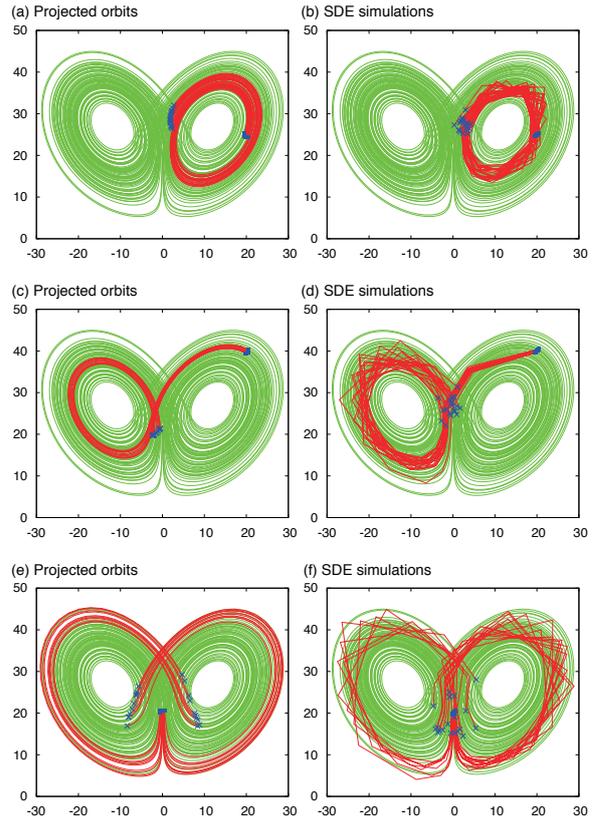


図 3: (a), (c), (e): 1×1 のセルを通過するデータの時間 1.0 までの軌道, (b), (d), (f): 同じセル内に初期値を持つ SDE シミュレーションの軌道. その中心はそれぞれ, (a), (b): $(20, 25)$, (c), (d): $(20, 40)$, (e), (f): $(0, 20)$ とし, ランダムに選ばれた 20 軌道ずつをプロット.

道は時間 1.0 の長さでプロットする. 図右側はデータから離散的に求められた統計的 SDE の数値解にも関わらず, 実際のデータの挙動と定性的に一致する. また, 平面上での軌道交差は自励系では起こし得ないが, このモデリング手法では適切な確率論的成分を抽出することでそれを達成しており, 適切な予測モデルの構築法としての期待が持たれる. この解析手法は射影演算子法との関連もあり, 理論的枠組みと統計計算的枠組みをつなぐ良いモデル問題となっており, さらなる発展が期待される. ■

参考文献

- [1] N. Nakano, M. Inatsu, S. Kusuoka, Y. Saiki, Time-series analysis and predictability estimates by empirical SDE modelling, Proceedings of the 47th ISICIE International Symposium on Stochastic Systems Theory and Its Applications, accepted.

相分離による自己組織化構造形成に与える乱流影響

高木 洋平

大阪大学大学院基礎工学研究科

1 諸言

二種類以上の成分から構成される材料流体は高温で熔融した状態では完全に混じり合っており、この混合流体を急冷などによって熱力学的に不安定な状態にすると各成分相に分離する。この相分離現象はスピノーダル分解と呼ばれ、相分離によって形成される自己組織化構造が多孔質形状を持つネットワーク構造となることから、機能性材料作製プロセスに応用されている。自己組織化構造の特徴を決定する要因としては化学的組成や熱力学条件が詳細に調べられているが、相分離発生時の流体力学的影響については未解明な部分が多い。そこで本研究では、相分離による流体力学的影響、特に乱流場の存在影響について二成分系流体を対象とした乱流シミュレーションを実施して調べた。

2 解析手法

初期成分比率が 50%-50%である非圧縮性の二成分混合流体(組成 A , B)に対して、各成分の質量密度 ρ_A , ρ_B から以下のオーダーパラメータを定義する。

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

ここで ρ_0 は混合状態での平均密度である。このオーダーパラメータに対して相分離の支配方程式は Cahn-Hilliard 方程式、

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

となる。ここで、 t は時刻、 \mathbf{x}_i は座標、 \mathbf{u}_i は速度、 Γ はモビリティパラメータ、 μ は化学ポテンシャルである。化学ポテンシャルは Landau-Ginzburg

型の自由エネルギーから求める。一方、流体場の支配方程式は連続の式と Navier-Stokes 方程式であり、Navier-Stokes 式で化学ポテンシャルの勾配による相分離寄与項を外力項として加えることによって相分離と流体場をカップリングする。これらの支配方程式は有限差分法によって空間離散化され、Runge-Kutta 法及び Crank-Nicholson 法を用いて時間積分された。

対象とした流れ場は均一に攪拌された乱流を単純化した一様等方乱流であり、各境界に周期境界条件を適用した立方領域を 256^3 の格子点で分割した。乱流場は乱流状態を維持するために強制外力を注入し、定常状態でのテイラーマイクロスケールに基づくレイノルズ数は 21 である。オーダーパラメータは初期条件としてホワイトノイズを加えて相分離が徐々に進行する条件とし、Cahn-Hilliard 式に含まれるパラメータは 3-methylpentane と nitroethane を用いた Pine et al.[1]の実験に対応する値を用いた。解析は Cahn-Hilliard 式と Navier-Stokes 方程式を連成する条件(SPTU)以外に、Cahn-Hilliard 式のみを解く場合(SP)と Navier-Stokes 方程式のみを解く場合(TU)も比較のために行った。

3 結果と考察

相分離による自己組織化構造の発現を見るために、オーダーパラメータの任意断面における時間発展を Fig. 1 に示す。まず流体場を考慮しない条件 SP の結果に注目すると、斑点状の相分離ドメインが現れて粗大化(ネットワーク化)する典型的なスピノーダル分解が数値的に再現できていることがわかる。これに対して流体場の影響を考慮する(条件 SPTU)と、分離した領域は現れるが乱流混合の影響を受けて引き伸ばされた薄い構造が入

り組んで存在しており、乱流の影響が相分離に強く現れていることがわかる。次に相分離が発生することによる乱流場への影響を調べるために、相分離が進行した時刻における流体場のエネルギー Spektrum を Fig. 2 に示す。ここで、比較のために乱流場のみ条件 TU の結果についても同時に示している。純粋な流体場のみエネルギー Spektrum は波数域 $k \sim 10^1 \cdot 10^2$ において慣性小領域が存在し、大スケールから小スケールへのエネルギーカスケードが見られているが、相分離を連成した場合、大スケール ($k < 10^1$) からエネルギーが著しく減少し、乱流のエネルギーカスケードが相分離の発生によって阻害されていることがわかる。乱流中の構造としては比較的スケールが大きいシート状の渦層と最小スケールに相当する渦管の存在が知られている [2] が、このエネルギー Spektrum の減少は相分離の効果が微細な渦管構造ではなく大きいスケールの渦層に対して現れていることを示唆している。この結果は Fig. 1 の可視化結果において層状の引き伸ばされた自己組織化構造が観察されたことにも一致している。

4 結言

本研究では相分離(スピノダル分解)を表現する Cahn-Hilliard 方程式を連成した乱流計算を、二成分系一様等方乱流を対象として行い、相分離による自己組織化構造の形成と乱流場の関連性について調べた。本研究で用いた計算条件では相分離の粗大化過程が乱流場の存在によって阻害され、自己組織化構造がシート状の乱流構造(渦層)と類似の形態となることがわかった。また、乱流のエネルギーカスケードの観点から相分離の影響を考えると、比較的大きいスケールにおいてエネルギーカスケードの初期段階が相分離によって抑制されており、この相分離が影響するスケール領域を能動的に制御することによって自己組織化構造を流体制御の観点から変化させることが期待できる。

参考文献

1. Pine, D. J., Eswar, N., Maher, J. V. and Goldburg, W. I., "Turbulent suppression of spinodal decomposition",

Phys. Rev. A, 29 (1984), pp.308-313.

2. Horiuti, K. and Takagi, Y. "Identification method for vortex sheet structures in turbulent flows", Phys. Fluids, 17 (2005), 121703.

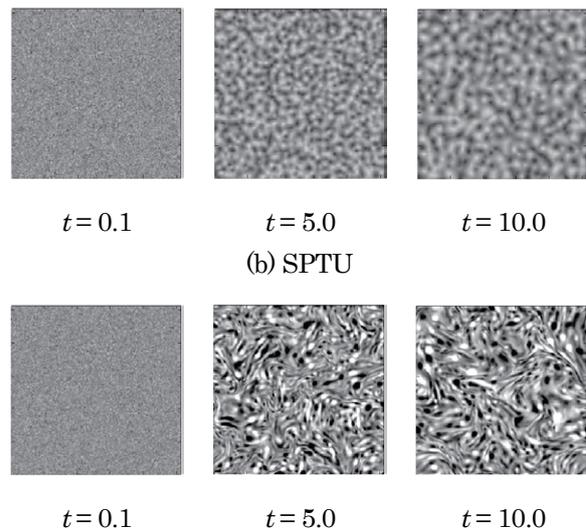


Fig. 1 Coarsening process of phase separation: (a) with only phase separation, (b) turbulent flow with phase separation.

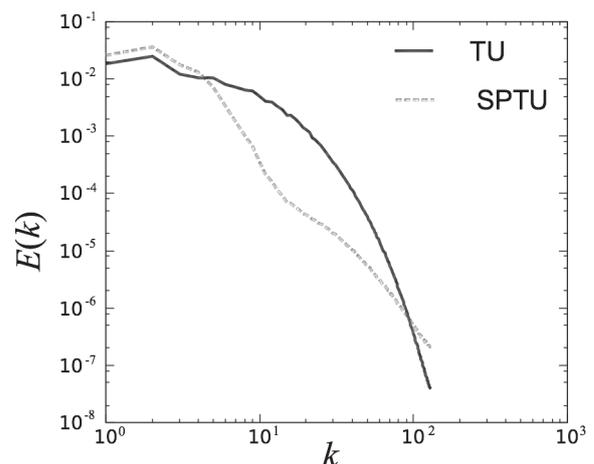


Fig. 2 Effect of phase separation on energy spectra.

液柱内の温度差と濃度差に起因するマランゴニ対流の不安定性の解明

水口 尚

琉球大学 工学部 機械システム工学科

1 緒言

半導体材料であるシリコンとゲルマニウムの合金 (Si/Ge) は従来のシリコン製チップに比べ大幅な消費電力の低減が可能のため、エレクトロニクス製品の更なる小型化、安定化を可能にする。しかし、シリコンとゲルマニウムの比重差が極めて大きいため通常の条件で融液から結晶を作製すると重力偏析が生じ、均一でかつ大型の結晶を作製することが困難になる。そこで重力偏析の生じない微小重力環境においてフローティングゾーン (FZ) 法を用いて Si/Ge バルク単結晶を作製することが提案されている。FZ 法の概略図を Fig.1 に示す。

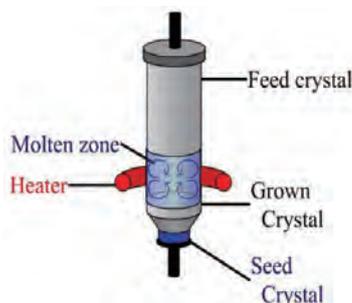


Fig.1 Schematic diagram of floating zone method.

FZ 法は、原料となる多結晶を上部から供給し、多結晶と単結晶の間に融液を作り、その全体を下方に移動させ融液を冷却して単結晶を得る方法である。融液の自由表面に温度差が大きいため不安定なマランゴニ対流が発生し、均一な結晶の成長を阻害する。そこで FZ 内マランゴニ対流に関して多くの研究がなされているが、そのほとんどが温度差に起因するマランゴニ対流を対象にしたものである。しかし、Si/Ge の結晶作製を対象とすると、結晶化の際に偏析係数が大きいため、融液内に濃度差が生じ、Si と Ge には表面張力に差があるので、濃度差に起因するマランゴニ対流も考慮する必要がある。そこ

で、Si/Ge 結晶作製を対象とし、温度差と濃度差両者に起因するマランゴニ対流の共存効果について一連の研究を行ってきた¹⁾。

本研究では温度差マランゴニ対流と濃度差マランゴニ対流の二つの対流が共存した場合の対流構造に及ぼす各対流の大きさの影響について調査した。

2 解析方法

解析には FZ 法の半分を模擬したハーフゾーンモデル (Fig.2(a)) を用いた。融液の物性値には Si/Ge (Pr 数 : 6.37×10^{-3} , Sc 数 : 14.0) をアスペクト比 ($As = L/a$) には 0.5 を用いた。また、無重力を想定するとともに、気液および固液界面形状は平坦とした。解析基礎式には連続式、Navier-Stokes 式、エネルギー方程式、拡散方程式を用い、これらの式を有限体積法によって離散化し PISO 法を用いて解析した。温度の境界条件は、上面を最低温度 T_c 、下面を最高温度 T_h で一定とし、側面の自由表面では断熱とした。また、濃度の境界条件は、模擬的に温度の境界条件と同様にした。速度の境界条件は、壁面上で no slip 条件とし、自由表面上では温度差と濃度差による表面張力差に起因するマランゴニ対流を考慮した。対流の強度を表すマランゴニ数を次に示す。

$$Ma_T = -\frac{\sigma_T \Delta T L}{\mu \nu}, \quad Ma_C = \frac{\sigma_C \Delta C L}{\mu \nu}$$

対流の向きは、温度差マランゴニ対流では温度が低い方が表面張力は大きいため、自由表面上を上昇する流れ、Si が Ge に比べ表面張力が大きいため、濃度差マランゴニ対流も自由表面上を上昇する流れになっており、両対流とも同方向に流れている。

初期条件として、速度なし、最低温度 T_c 、濃度 C_{Si}

(Si:100%, Ge:0%) で一様とした。解析に用いた格子(Fig.2 (b))は、側面の自由表面と上下の固液界面付近の格子が細くなるような 14.4 万の格子を用いた。これらの計算にはフリーの熱流体解析ソフトである OpenFOAM を使用した。

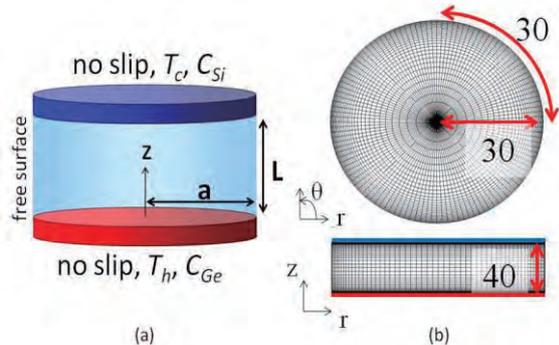


Fig.2 Schematics (a) and computational grid (b) of the liquid bridge.

3 結果と考察

Fig.3 には(a)に温度差マランゴニ対流のみ、(b)に濃度差マランゴニ対流のみ、(c),(d),(e),(f)に温度差と濃度差のマランゴニ対流が共存した場合の融液内の Si 濃度分布を示す。垂直断面図では、自由表面付近にマランゴニ対流による大きな渦ができており、その渦の大きさが周方向に変化し、水平断面図のように、周方向に規則的な模様の濃度分布になっている。(a),(c)は、定常流 ((a)は非軸対称定常流)、(b),(d),(e),(f)は、 $m=4,5,6,7$ (m :周方向の対称面数)の振動流となった。これらを温度差と濃度差のマランゴニ数でまとめた対流構造のマップを Fig.4 示す。縦軸上の温度差マランゴニ対流のみの場合は軸対称定常流から $m=3$ の非軸対称定常流に遷移し、横軸上の濃度差マランゴニ対流のみの場合は軸対称定常流から $m=4$ の振動流へと遷移した。このマップより、両対流が共存した場合は、温度差・濃度差マランゴニ数を大きくしていくと波数 (m) が大きくなった。濃度差マランゴニ対流だけでは、 $m=4$ の振動流だけであったが、温度差マランゴニ対流も共存することで波数の異なる振動流が得られた。 $Ma_c = 714$ 以下では $Mar = 2857$ まで大きくしても波数は大きくなり、定常流となることから、濃度差マランゴニ数がある程度大きくないと振動流にならないと考えられる。濃度差マランゴニ数の臨界値付近 ($Ma_c = 893, 1071$) では Mar を大きくすると一度振動流になり、さらに Mar を大きくすると

定常流となる。これは、濃度差マランゴニ対流に対して温度差マランゴニ対流が支配的になったためと考えられる。

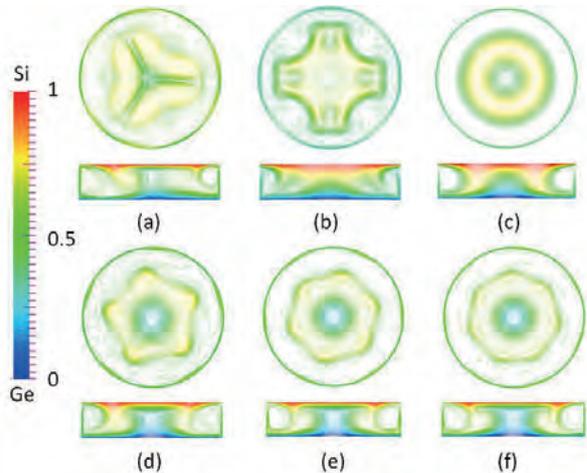


Fig.3 Concentration contours at 1000s ((a): $Mar = 2857, Mac = 0$, (b): $Mar = 0, Mac = 1786$, (c): $Mar = 714, Mac = 714$, (d): $Mar = 1071, Mac = 1786$, (e): $Mar = 2143, Mac = 1786$, (f): $Mar = 2857, Mac = 1786$)

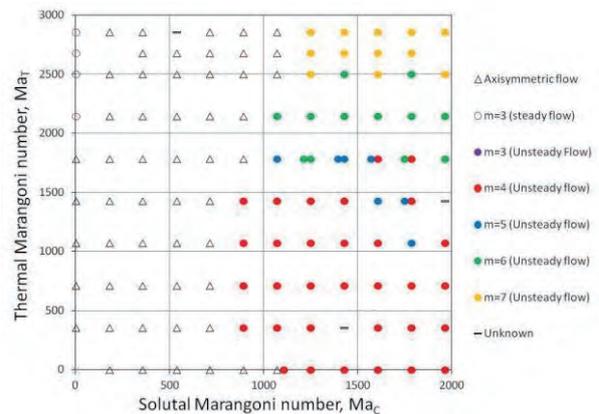


Fig.4 Flow mode map.

4 結言

温度差と濃度差に起因するマランゴニ対流の共存効果について数値解析を行ったところ、下記の知見を得た。

- 共存効果により波数 (m) が変化する。
- Ma_c の臨界値付近では Mar を大きくすると一度振動流になり、さらに Mar を大きくすると定常流となる。

引用文献

- (1) H.Minakuchi et al., *J. Crystal Growth*, **385** (2014) 61.

多孔質壁面による乱流構造の変化と抵抗低減効果

中本 真義

大阪大学大学院基礎工学研究科

1 緒言

船舶航行の障害となる海洋生物の付着の防止と、抵抗低減効果を併せ持つ船舶用機能性材料としてヒドロゲル塗料が知られている。ヒドロゲルによる抵抗低減には、ゲルのレオロジー特性等様々な要因が提案されているが、詳細なメカニズムの解明には至っておらず、最適な制御手法が確立されていない。本研究では、ヒドロゲル塗膜の性質を抽出し、単純な構成方程式によってモデル化する。そして、数値計算により、ヒドロゲル塗膜の抵抗低減メカニズムを明らかにし、ヒドロゲルの流体透過性による乱流抵抗への影響を議論する。

2 計算手法

解析対象は、平行平板間チャンネル乱流である。ヒドロゲルは十分に浸水させると架橋構造内に水が入り込み膨潤し、外圧によって内部の水を排出し収縮する。本研究では、この性質を多孔質体の浸透と湧き出しの現象に置き換え、骨格の変位を考慮しない Darcy 則によりモデル化[1]を行った (Fig. 1)。固体壁付近には、ヒドロゲル塗膜の厚みを考慮した多孔質体が存在している。支配方程式は Navier-Stokes 式、連続式である。壁面境界条件は no-slip 条件とし、主流方向、スパン方向には速度、圧力いずれに対しても周期境界条件を用いた。支配方程式は有限体積法により離散化し、時間発展には 1 次精度オイラー陰解法を用いた。離散化された方程式は PISO アルゴリズムによって解いた。チャンネル内部を流れる流量基準のレイノルズ数は、5600 である。

3 結果と考察

多孔質壁による乱流抵抗の増減効果を評価するために、抵抗低減率(DR)を、平滑壁面条件(C_f^0)に対する多孔質壁面条件(C_f^p)での抵抗係数の比から算出した。

$$DR[\%] = \left(1 - \frac{C_f^p}{C_f^0}\right) \times 100$$

抵抗係数 C_f は、完全に発達した平行平板間チャンネル乱流における FIK 恒等式より算出した[2]。各条件における C_f 、DR と平滑チャンネルにおける壁面摩擦速度によって無次元化された多孔質壁厚さ δ_p^+ を Table 1 に示す。多孔質体の厚みが流体領域の 3% と 5% のとき、抵抗低減効果を示した。このとき、多孔質体の厚さは、チャンネル乱流の境界層の厚み $y^+ \sim 10$ と同程度の大きさである。壁近傍における主流方向の速度変動(u')の可視化を Fig. 2 に示す。Figure 2(a)(c)の x 方向に伸びた縞状の領域は、高速・低速ストリークと呼ばれる。Figure 2(b)(d)の実線(黒・灰色)は乱流渦とエネルギー散逸の等値線をそれぞれ表している。多孔質体上では、ストリーク構造が多孔質体内部からの湧き出しによって崩壊し、エネルギー散逸が促進されるが、3%D のケースではストリーク構造が Flat と同等に維持されることが分かる。また、低速ストリーク構造は、壁の影響によって減速した流体が再びチャンネル中心へ巻き上げられることで形成されるため、低速ストリーク付近には渦構造と強い散逸が観察される。Flat では散逸領域が主に低速ストリーク下部に分布しているのに対し、3%D では低速ストリークの上で散逸領域が見られる。これは、多孔質体が境界層内の非常に遅い流れに接しており、内部からの湧き出しが強くないために、壁近

傍に低速度の流体が溜まり、この低速度の流体が固体壁との壁面摩擦を緩和していると考えられる。

4 結言

流体透過性を有するヒドロゲルでは、ヒドロゲル塗膜が乱流境界層と同程度の厚みをもつとき、壁付近の乱流構造が変化し、顕著な抵抗低減効果を示すことが分かった。本解析で示されたように抵抗低減効果が最大となるような塗膜厚みが存在するため、レイノルズ数依存性を検証し実際の機能性材料への応用を検討することが今後の課題である。

参考文献

1. Suga, K., Mori, M., Kaneda, M., Int. J. Heat Fluid Flow, Vol. 32, pp. 586-595 (2011).
2. Fukagata, K., Iwamoto, K. and Kasagi, N., Phys. Fluids, Vol. 14, pp.73-76 (2002).

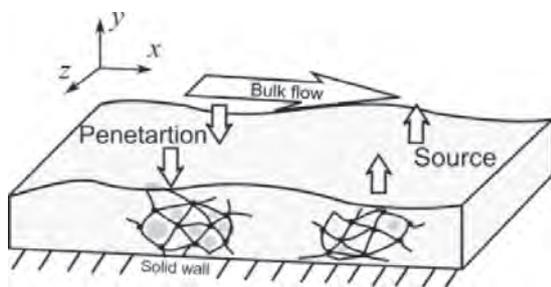


Fig. 1 Schematic diagram of a wall coated with hydrogel painting.

Table 1 Drag reduction ratio and friction coefficient.

Case	$C_f \times 10^3$	δ_p^+	DR[%]
Flat	7.25	-	-
1%D	7.31	2	-0.2
3%D	6.47	5	10.6
5%D	6.55	9	9.6
10%D	7.16	18	1.3
20%D	7.56	37	-4.3

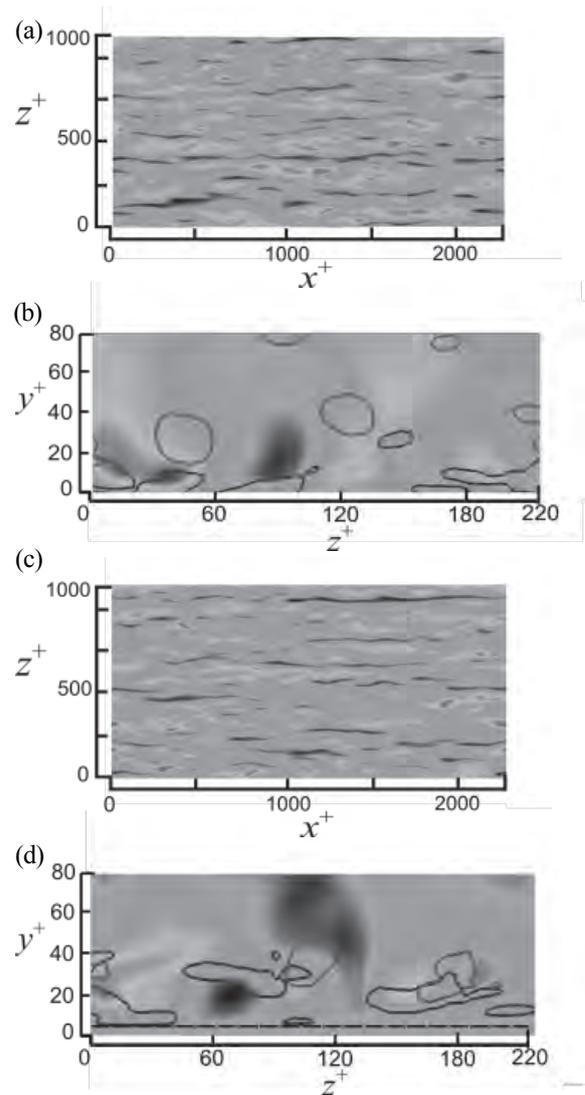


Fig. 2 Snapshots of the flow field around streak structure near the lower wall for the cases of Flat (a,b) and 3%D (c,d) in the x - z plane of $y^+ \sim 20$ (a,c) and the y - z plane of $x^+ \sim 1500$ (b,d). Black lines represent the contour of the second invariant of velocity gradient tensor, $Q^+ = 0.2$ and dark gray lines the dissipation rate, $\epsilon^+ = 2.8 \times 10^{-3}$.

有機太陽電池応用を目指した新規光機能性有機分子材料の構造と電子構造の解明

梅山有和

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻

1 緒言

色素増感太陽電池 (DSSC) に用いるレドックス対は、セル性能に大きな影響を与える。一般的なヨウ素レドックス対では、エネルギー準位のミスマッチにより開放電圧 (V_{oc}) が 0.7-0.8V 程度に制限されてしまうことが大きな問題であった。Grätzel らはヨウ素レドックス対よりも適切な酸化還元電位をもつコバルトレドックス対に注目し、YD2-*o*-C8 と組み合わせることで、 $V_{oc} = 0.965$ V、変換効率 $\eta = 11.9\%$ を達成した (Figure 1) ¹。コバルトレドックス対を用いる場合には、一般に界面での逆電子移動が速くなるため、YD2-*o*-C8 のように立体的に嵩高い置換基を導入した色素を用いる必要がある。そこで本研究では、以前当グループで開発した ZnPBAT²⁴ のメチル基を立体的に

かさ高い 2,6-ビス(オクチルオキシ)フェニル基に置き換えた ZnPBAT-*o*-C8 を設計した (Figure 1)。

2 結果と考察

2.1 新規ポルフィリン色素の諸物性と色素増感太陽電池への応用

ZnPBAT-*o*-C8、ZnPBAT、YD2-*o*-C8 のエタノール溶液中の吸収スペクトルを Figure 2 に示す。ZnPBAT-*o*-C8 の吸収スペクトルの Soret 帯は、ZnPBAT と同様に、短波長と長波長側に分裂しながらブロードとなり、450-500 nm 付近の光捕集能が改善されている。また、Q 帯も YD2-*o*-C8 と比べて長波長シフトし、長波長領域での光捕集能も向上していることがわかった。

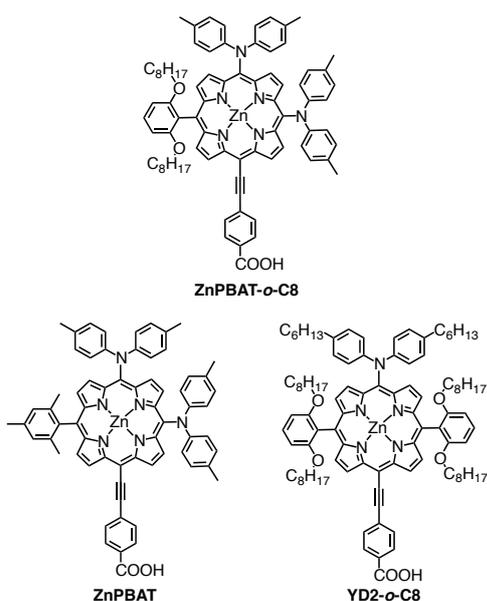


Figure 1. Structures of porphyrin compounds.

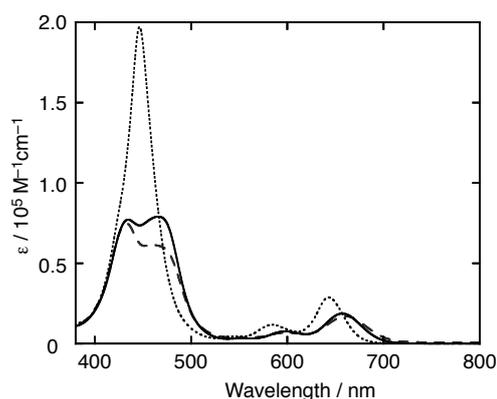


Figure 2. UV-vis-NIR absorption spectra of ZnPBAT-*o*-C8 (solid line), ZnPBAT (dashed line) and YD2-*o*-C8 (dotted line) in EtOH.

コバルト電解液を用いてセル作製を行なったところ、ZnPBAT-*o*-C8 では短絡電流密度 $J_{sc} = 13.2$

mA cm^{-2} , $V_{\text{OC}}=0.83\text{ V}$, 曲線因子 $ff=0.75$, $\eta=8.2\%$ という結果が得られた。ZnPBAT-*o*-C8 は YD2-*o*-C8 と比較し、 J_{SC} 、 V_{OC} 共に低下している。2,6-ビス(オクチルオキシ)フェニル基の数が YD2-*o*-C8 では 2 つであるのに対して、ZnPBAT-*o*-C8 では 1 つしかないため、ブロッキング効果が不十分で、酸化チタンの伝導帯から電解質酸化体への逆電子移動が起こりやすく、セル性能が低下したと考えられる。

2.2 理論計算

ポルフィリンの最安定化構造およびそのフロンティア軌道の電子構造について知見を得るために、密度汎関数法 (DFT) による理論計算 (B3LYP) を行った。基底関数系に 6-31G* を選択し、Gaussian 09 プログラムを用いた。Figure 3 に ZnPBAT-*o*-C8、ZnPBAT、および YD2-*o*-C8 の最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO) における電子密度分布を示す。一般に、アンカー部位の LUMO の電子密度が大きいほど、励起状態の色素と酸化チタンの 3d 軌道との間の電子カップリングが大きくなることが知られている。ZnPBAT-*o*-C8 は ZnPBAT や YD2-*o*-C8 と同様にアンカー部位の LUMO の電子密度が大きくなることがわかり、ZnPBAT-*o*-C8 の電子注入効率は ZnPBAT や YD2-*o*-C8 と同程度に高いと考えられる。そのため、コバルト電解液を用いた際の ZnPBAT-*o*-C8

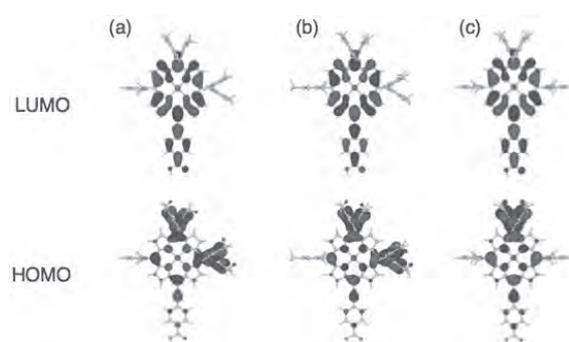


Figure 3. Some sets of molecular orbital diagrams for (a) ZnPBAT-*o*-C8 (left), (b) ZnPBAT (middle), and (c) YD2-*o*-C8 (right) obtained by DFT calculations with B3LYP/6-31G(d). To simplify the computations, alkyl chains on the diarylamino groups were replaced with methyl one, whereas octyloxy groups on the phenyl group were replaced with methoxy ones.

と YD2-*o*-C8 のセル性能の違いは、ブロッキング効果の違いにより、酸化チタンの伝導帯から電解質酸化体への逆電子移動が起こりやすさに差が生じたためと推察される。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] A.Yella, H.-W. Lee, H. N. Tsao, C. Yi, A. K. Chandiran, M. Nazeeruddin, E. W.-G. Diao, C.-Y. Yeh, S. M. Zakeeruddin and M. Grätzel, "Porphyrin-Sensitized Solar Cells with Cobalt (II/III)-Based Redox Electrolyte Exceed 12 Percent Efficiency", *Science*, **334**, 629-634 (2011).
- [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] H. Hayashi, A. S. Touchy, Y. Kinjo, K. Kurotobi, Y. Toude, S. Ito, H. Saarenpää, N. V. Tkachenko, H. Lemmetyinen, and H. Imahori, "Triarylamine-Substituted Imidazole- and Quinoxaline-Fused Push-Pull Porphyrin for High Performance Dye-Sensitized Solar Cell", *ChemSusChem*, **6**, 508-517 (2013).
- [4] T. Higashino, H. Imahori, "Porphyrins as Excellent Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: Recent Developments and Insights", *Dalton Trabs.*, **44**, 448-463 (2015).

急縮小・急拡大流路における高分子溶融体流れの マルチスケールシミュレーション

原田 浩平*, 谷口 貴志*

*京都大学大学院工学研究科 化学工学専攻

1 はじめに

高分子製品の製造では、成形加工の段階で高分子溶融体（高分子流体）の流動を制御する必要がある。このため、流体力学方程式(式(1))を用いた流動シミュレーションが行われてきた。

$$\rho \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right\} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \nabla P + \mathbf{F} \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{v} , ρ , P , $\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{F} はそれぞれ、速度、密度、圧力、応力、外力場である。高分子流体はマクロスケールの流動とミクロスケールの状態（高分子鎖同士の絡み合いや配向状態）が強く相関するため非常に複雑な振る舞いを示すことが知られている。このような流動特性は、式(1)中の応力 $\boldsymbol{\sigma}$ に集約される。

従来は、この応力 $\boldsymbol{\sigma}$ を速度勾配と少数のパラメータを用いた構成方程式から求め、シミュレーションを行ってきた。しかし、構成方程式を用いた方法では、用いた構成方程式そのものが必ずしも対象としている流体の記述に対して常に正しいとはいえない。また、たとえ広い流動領域で正しくレオロジー特性を再現しようとも、ミクロスケールの状態とマクロスケールの流動を直接関係づけることはできないし、製品の品質や特性に大きな影響を与えるミクロスケールの情報を得ることはできない。そこで、このような欠点を解消するためにミクロモデルとマクロモデルを相互に組み合わせて解くマルチスケールシミュレーション(MSS)法が提案されている。MSS法は、平行平板間や円柱周りといった比較的簡単な流路形状における単分散高分子流体流れについて成果を挙げている[1, 2]。しかし、工業的な問題にMSS法を応用するためには、より複雑な系での検討が必要である。そこで本研究では、工業的に用いられる典型的流路形状として急縮小・急拡大流路を採用し、よ

り現実的である多分散高分子流体流れにおいてMSS法が適用可能であるか検討を行った。

2 計算手法の概略

ミクロ・マクロ各スケールの概要とそれらを組み合わせたMSS法について以下で述べる。

2.1 マクロスケールの計算手法の概要

計算手法として粒子法[3]を採用した。粒子法は流体を流体粒子と呼ばれる要素に離散化して解く方法であり、ラグランジュ的描像に基づいている。応力は高分子鎖の微視的な状態から決定され、その値は高分子鎖の過去の変形履歴に依存する。そのため、過去の履歴を自然に取り入れることのできるラグランジュ的手法を用いた。

2.2 ミクロスケールの計算手法の概要

モデルとして、Slip-linkモデル[4]を採用した。Slip-linkモデルは、絡み合いによる束縛のために各高分子鎖がチューブ状の領域を運動するというレプテーション理論に基づくモデルである。Slip-linkモデルでは、各高分子鎖の絡み合い点(Slip-link)とそれを結んだ線(Primitive path)を考え、それらの運動を求める。また、絡み合いをバーチャルな情報として取り扱うため(図1)、計算負荷を大幅に低減することができる。具体的には以下の手順で計算を行った。

- (1) 流れ場によるアフィン変形
- (2) 式(2)に基づくPrimitive path長の変化
- (3) 高分子のレプテーション運動
- (4) Slip-linkの開放・生成

(5) 式 (3) による応力算出

$$\frac{dL}{dt} = -\frac{1}{\tau_R} (L(t) - L_{eq}) + \left(\frac{dL}{dt}\right)_{\text{affine}} + g(t) \quad (2)$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_e \left\langle \frac{r_\alpha r_\beta}{a|\mathbf{r}|} \right\rangle, \alpha, \beta \in \{x, y, z\} \quad (3)$$

ここで, L , L_{eq} はそれぞれ Primitive path の全長, バルク平衡時の全長, a は後述する空間単位である. τ_R は長さ L_{eq} の Primitive path の Rouse 緩和時間, $g(t)$ はランダムな熱揺動力による L の変動, \mathbf{r} は隣接する Slip-link 間の結合ベクトル, σ_e は後述する応力単位である. また, $\langle \dots \rangle$ は全 Primitive path での (\dots) の統計平均を表す.

2.3 MSS 法の概要 (図 1)

本研究では, マクロスケールの各流体粒子中に, Slip-link モデルを用いた高分子シミュレータを埋め込むことで MSS 法を実行した. 以下の手順で計算を行った.

- (1) マクロスケールの速度勾配場を計算
- (2) 求めた速度勾配場の下, 各流体粒子中で Slip-link モデルを用いたシミュレーションを行いマクロの応力場を計算
- (3) その応力場を用いて粒子法で式 (1) を解く

MSS 法では応力場を計算する際, ミクロスケールのシミュレーションを行う必要があり莫大な量の計算が必要となる. しかし, 本研究で用いた MSS 法は各流体粒子でミクロスケールの計算が独立であるため, 並列計算を行うことにより計算時間を大幅に低減することができるという特徴がある.

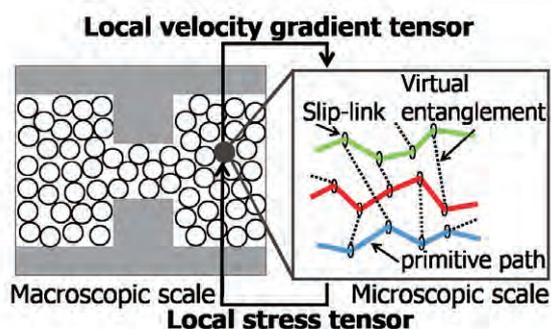


図 1: Multi-scale simulation method using the particle method and the slip-link model.

3 無次元化

マクロスケールの無次元化では,

空間単位 b : 流体粒子の初期間隔

時間単位 τ_e : ミクロスケールの単位時間

応力単位 η_0/τ_e , ここで, η_0 : ゼロせん断粘度
ミクロスケールの無次元化では,

空間単位 a : 平衡時の Slip-link 間の平均距離

時間単位 τ_e : 長さ a の Primitive path の
Rouse 緩和時間

応力単位 σ_e : Slip-link モデルの単位応力

とした. ここで, Slip-link モデルは十分粗視化されているため, マクロスケールの時間単位はミクロスケールと同じ時間単位を用いた. 以下に示す結果は, 上記の値を用いて無次元化されており, 無次元化された変数は*を付けて示す.

4 結果と考察

急縮小・急拡大流路での流動に対して MSS 法を適用した. ここで, 拡大部高さ, 縮小部高さはそれぞれ, $H_1^* = 48$, $H_2^* = 12$ とし, 圧力勾配 ($dP^*/dx^* = -5.0 \times 10^{-4}$) を印加した. また, 高分子流体は平衡時絡み合い数 $Z_{eq} = 8.74$ の高分子鎖からなる溶融体に, $Z_{eq} = 65.7$ の高分子鎖を 7.3w% 添加した多分散の系である. また, 統計精度向上のため各流体粒子中に高分子鎖数を $p = 1000$ と設定した.

図 2 に $t^* = 250$ での (i) ひずみ速度テンソルの xy 成分の絶対値 ($|D_{xy}^*|$) と (ii) 応力テンソルの xy 成分の絶対値 ($|\sigma_{xy}^*|$) を示す. またミクロスケールの情報として, 各流体粒子中の Primitive path を, 重心を原点として重ね合わせた図を図 3 に示す. ここでは見易さのため $Z_{eq} = 8.74$ の Primitive path のみを表示している. この図から大まかな高分子鎖の配向の様子がわかる. ここで, 図 3 の (a)~(c) は図 2 (i) 中の (a)~(c) とそれぞれ対応している. 図 4 は, (i) $Z_{eq} = 8.74$ の高分子鎖の絡み合い数 Z_{short} , (ii) $Z_{eq} = 65.7$ の高分子鎖の絡み合い数 Z_{long} の空間分布である. 中心部 ($y^* = 0$ 付近) の流れについて, 縮小部 (a) では x 方向の流速が増大するため高分子鎖は x 軸方向に伸張し配向した. 拡大部 (b) では y 軸方向に広がる流れが発生するため, 高分子は y 軸方向に配向した. 図 4 (i) より, Z_{short} は, $x^* > 6$ の領域で平衡時絡み合い数よりも低下していることがわかる. これは, 縮小部の強いせん断流動によって引き伸ばされた Primitive path (図 3 (c)) がこの領域では緩和するため, 末端の Slip-link が開放され生じたと考えられる. これは高

分子の履歴効果であり、適切に取り扱うことができているといえる。一方、 Z_{long} (図 4 (ii)) ではそのような低下は起きていないが、これは、 $Z_{\text{eq}} = 65.7$ の高分子鎖は $Z_{\text{eq}} = 8.74$ の高分子鎖に比べ Rouse 緩和時間が非常に長いためである。

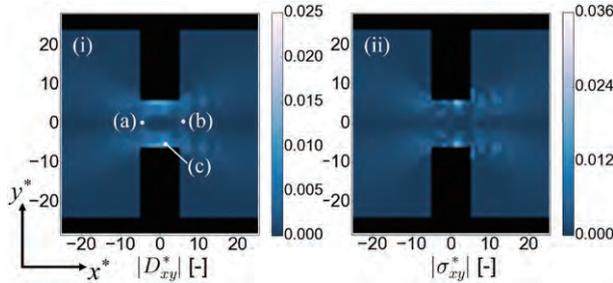


図 2: Distributions of (i) strain rate $|D_{xy}^*|$ and (ii) stress $|\sigma_{xy}^*|$ at $t^* = 250$.

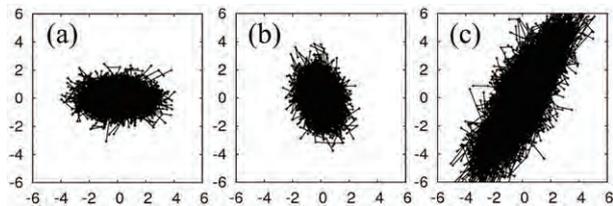


図 3: Configurations of primitive paths.

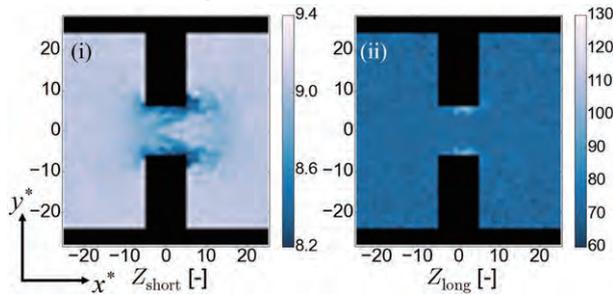


図 4: Distributions of entanglement number of (i) short polymers Z_{short} and (ii) long polymers Z_{long} at $t^* = 250$.

5 結言

MSS 法を急縮小・急拡大流路内の多分散高分子流体流れに適用し、マクロな流動とミクロな情報の関係について考察した。MSS 法は履歴効果を取り扱うことができ、複雑な系であっても有効であることを明らかにした。今後の方針としては、温度分布の導入や枝分かれのある高分子鎖への応用が考えられる。将来的には、MSS 法が工業的な問題に応用されることが期待される。

< 謝辞 >

本研究で用いた手法は、ミクロスケールの計算を行うため計算量が膨大となる。そのため、本共同研究制度で並列計算機を利用することで並列計算のプログラム開発を滞りなく進めることができた。ここに感謝の意を表したい。

参考文献

- [1] T. Murashima and T. Taniguchi, *Europhysics Letters*, **96**, 18002 (2011).
- [2] T. Murashima and T. Taniguchi, "Multiscale simulation of history-dependent flow in entangled polymer melts", *Europhysics Letters*, **96**, 18002 (2011).
- [3] J. J. Monaghan, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, **30**, 543 (1992).
- [4] M. Doi and J. Takimoto, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **361**, 641 (2003).

周囲気体を考慮した HZ 液柱内温度差マランゴニ対流における

粒子集合現象の数値解析

中村 翔一

東京理科大学大学院理工学研究科機械工学専攻

1 緒言

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

Smith と Davis [1]は、薄液膜において自由表面に対して水平方向の温度勾配が発生している場合、マランゴニ対流により hydrothermal wave(以下 HTW)が生じる流れの不安定性を線形安定性解析を用いて発見した。現在、図 1 のような Half-Zone 液柱(以下 HZ 液柱)はマランゴニ対流の不安定性を研究するための代表的な系となっている。HZ 液柱においてマランゴニ対流の強さを示す無次元数としてマランゴニ数(以下 Ma)がよく用いられている。Kamotani ら[2]は HZ 液柱において高プラントル数流体($Pr=24\sim 49$)を用いて実験的に自由表面での熱輸送を示すパラメータであるビオ数(以下 Bi)が臨界値に与える影響を示した。2014 年から実施されている日米共同宇宙実験では、Kamotani ら[2]の実験を元に Bi に着目している。さらに、2018 年から実施予定の日欧共同宇宙においても、 Bi と可視化用トレーサ粒子が一本の線内に集合する現象である粒子集合現象に焦点を当てた研究が行われる予定である。しかし、実験装置の制約上得られない情報も多く、数値解析による

アプローチが必要である。また、液柱だけでなく周囲気体も着目しているため、計算コストが非常に高くなりスーパーコンピュータの利用が不可欠である。本研究では、実験に近い条件で従来よりも広範囲な領域での数値解析を実施し、周囲気体が HZ 液柱内流れの不安定性に与える影響を調べることを目的としている。

2 数値解析手法

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

イブリット並列化を行った。

3 結果と考察

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

周囲気体を考慮した液柱と周囲気体を無視し自由表面に Bi に関する境界条件を定義した液柱の Bi 数と臨界値の関係を図 2 に示す。まず、二次元定常流から三次元振動流へ遷移する臨界マランゴニ数 Ma_{cr} の算出方法は Imaishi ら [4] の方法を用いた。局所的なビオ数を軸方向に平均したビオ数 Bi_{ave} は Ma_{cr} 上での値である。これを見ると、どの条件においても低 $Bi_{ave} (\leq 0.3)$ では Ma_{cr} が減少し、 $Bi_{ave} \geq 0.3$ では Ma_{cr} が増加している。この傾向は、Simic-Stefani ら [5] の実験結果と類似している。彼らは、 $I (=HR/H)$ 液柱高さ R 液柱半径) $= 0.55-1.28$ の範囲で蒸発による自由表面での $Bi (=3.2, 12.7)$ を比較し、 Bi を約 4 倍増加させたことで Ma_{cr} が約 2.5 倍増加したことを示している。また、彼らの実験結果では $I=1.05, Bi=3.2, Ma_{cr}$ が約 6500-7500 となっており計算結果 $I=1.0, Bi_{ave}=2.1, Ma_{cr}=6272$ と近い値になっていることから、今回の数値計算の妥当性が高いと言える。さらに、周囲気体を考慮した場合 $Bi_{ave}=0.8$ で従来の境界条件と比べ Ma_{cr} が約 1.5 倍変化していることからこの計算が必要不可欠であると言える。

図 3 は粒子集合現象の実験 [6] 及び数値解析結果を示している。計算条件は $I=0.66, Ma=7200$, 無次元粒子径 $dp=0.028$ であり、周囲気体を考慮していない液柱内に粒子を混入し計算している。実験結果と数値解析結果を比べると粒子集合現象の形が類似していることから計算の妥当性が高いと考えられる。

4 結言

より実験に近い条件である周囲気体を考慮した HZ 液柱の場合、従来の簡易的な境界条件と比べ、 Ma_{cr} が最大で 1.5 倍変化していることからこの計算手法が必要不可欠であると言える。また、粒子集合現象の数値解析を行い、実験結果と近い値を得ることができた。しかし、周囲気体を考慮した

場合さらに計算負荷が増加するため、今後はさらに並列化の効率を上げる必要がある。

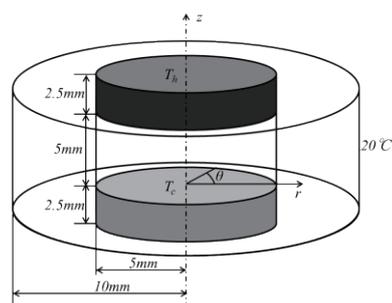


図 1 計算対象

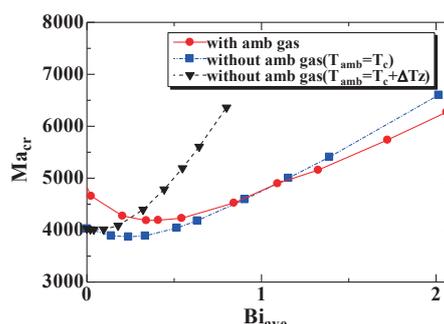


図 2 Ma_{cr} と Bi_{ave} の関係

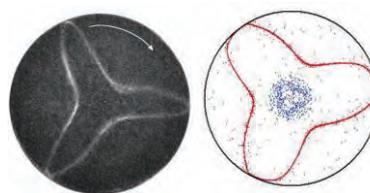


図 3 粒子集合現象

: 左 実験結果 [6] 右 数値解析結果

参考文献

- [1] M.K.Smith and S.H.Davis, J Fluid Mech, **132**, 119-144 (1983)
- [2] Y. Kamotani_et_al, Int. J. Heat Transfer, **46**, 3211-3220 (2003).
- [3] E.Hofmann, H.Kuhlmann, Phys. Fluids, **23**, 072106 (2011)
- [4] N.Imaishi_et_al, Crystal Growth **230**, 164-171 (2001)
- [5] S.Simic-Stefani_et_al, Int. J.Heat Transfer **49**, 3167-3179 (2006)
- [6] D.Schwabe_et_al, Phys. Fluids, **19**, 072102 (2007)

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

ディレクティブベースプログラミングによる FITの高速化と性能検証

中畑 和之 *

*愛媛大学大学院理工学研究科

1 はじめに

NVIDIA 社による統合開発環境 CUDA によって、GPU を用いた汎目的計算が一般技術者にも身近になって久しい。しかし、ソースコードを大幅に変更しなければ性能が発揮できないため、プログラミングの初学者にとっては敷居が高い。これに対して、ディレクティブベースにコードを挿入する OpenACC[1] の規格が発表されている。これは、ソースコードに並列化を指示する行を挿入するだけで GPU 計算が可能となり、手軽で可搬性の高いソフトウェアの開発環境として注目されている。GPU 計算の台頭を受けて、Intel 社から Xeon Phi[2] が発売され、このコプロセッサ上で並列計算を行う環境 (Many Integrated Core : MIC) も整備されつつある。Xeon Phi は、HPC 計算機の標準プロセッサとしても普及している Intel Xeon プロセッサの浮動小数点演算コアを利用しており、これをプロセッサ・チップ上に多数搭載した並列処理用の専用プロセッサである。また、GPU などのアクセラレータとは異なり、OS(Linux) を搭載し、IP アドレスをもつ独立した分散ノードとして動作することが特徴の 1 つである。MIC Offload[3] は OpenACC と同様にディレクティブベースにコードを追加するだけで並列演算を行うことができる。さらに、Xeon プロセッサと開発環境や数値演算ライブラリなどが共用できることから、既存の HPC 環境との親和性が高く、パフォーマンスの向上が見込める。OpenACC や MIC Offload は大量のスレッドを利用して並列処理することができる一方で、ホストとデバイスのデータ転送がボトルネックになることがあるため、コーディングする際に配慮する必要がある。また、デバイス側のメモリ容量に制限があることから、必要に応じて複数のデバイスを用いる。このときデ

バイス間の通信に MPI を用いることが多い。

平成 24, 25 年度にプログラム高度化支援事業に採択して頂き、有限積分法 [4](Finite Integration Technique : FIT) にイメージベース処理を組み合わせた超音波伝搬シミュレーション [5] の高速化についてアドバイスを頂いた。FIT は、支配方程式 (偏微分方程式) を微小四角形領域 (セル) で積分した後に離散化する手法であり、粒子速度と応力を時間ステップをずらして交互に計算して時間更新を行う。陽的に解の更新を行うため、マルチ CPU 使用時の並列計算効率がよいことが示された。平成 26 年度の高度化支援事業では、MIC Offload によるディレクティブベースプログラミングでイメージベース FIT の高速化を検討して頂いたため、それを報告する。また、比較のため OpenACC を用いて FIT を高速化したものを別途作成し、MIC Offload のコーディングと比較を行った。本支援事業では 3 次元 FIT の MIC 版をチューニングして頂いたが、申請者自身のコーディングによる OpenACC 版と比較するため、2 次元 FIT に書き直したもので両者を比べることとする。FIT のベクトル化する箇所や、ホスト-デバイス間のメモリ転送量・タイミングは MIC Offload と OpenACC で同じとし、両者の速度の違いを調べた。

2 アクセラレータの仕様とディレクティブプログラミング

2.1 アクセラレータ

GPU や Xeon Phi デバイスは、ホストと独立したメモリ空間を持っており、基本的にはディレクティブで指示した部分をデバイスで高速に実行するという意味でアクセラレータと呼ばれることが多い。MIC Offload 計算を行うために、京都大学スーパーコンビ

ユータシステム E に搭載されている Xeon Phi 5210D コプロセッサを用いた。Xeon Phi 5120D は、コア、キャッシュ、メモリ・コントローラ、PCIe クライアント・ロジック、双方向リング・インターコネクタから構成される。Intel 社の x86 アーキテクチャがベースのスカラユニットと 512 ビット幅の積和算ベクトルユニットを備えている。Xeon Phi 5120D は 60 個のプロセッサコアで、1 コアあたり 4 ハードウェア・スレッドをサポートしているため、全体では 240 スレッドが利用可能である。デバイスは 8GB のメモリを持ち、各デバイス間はリング・ネットワークで接続され、これらは PCIe 経由で外部からコントロールされる。

一方、OpenACC による計算を行うために、GPU ボードとして NVIDIA 社の Tesla C2075 を用いた。自身の研究室で所有するワークステーションに Tesla C2075 が実装されており、デバイスとホストのインターフェースは PCI Express 2.0 である。Tesla C2075 には 448 個のストリーミング・プロセッサ (SP) と呼ばれる最小単位の演算処理ユニットが存在する。この SP が 32 個集まって 1 つのストリーミング・マルチプロセッサ (SM) を形成する。SM にはワーブスケジューラが 2 個と命令を行うディスパッチユニットが 2 個あり、2 つのワーブを並列に実行することができる。GPU1 基あたりの DRAM は 6GB であり、大規模な計算を行う場合には、複数の GPU を使用することになる。特殊関数ユニット (SFU) では、正弦関数、余弦関数、相反関数、平方根などの命令を実行でき、各 SFU が 1 クロックで 1 スレッドの命令 1 個を実行するため、8 クロックで 1 ワーブが実行できる。

2.2 ディレクティブプログラミング

ディレクティブプログラミングの利点は、これらが使用できない環境では、その指示行は無視される点であり、並列環境と非並列環境でほぼ同一のソースコードを使用できることである。MIC Offload は OpenMP など並列化されたコードにディレクティブを挿入し、その並列領域をアクセラレータ上で実行するモデルである。ここでは、MIC Offload における Offload ディレクティブについて説明する。MIC Offload によるプログラミング例を図 1 に示す。主に用いるディレクティブは、以下の 3 つである。

- attributes offload ディレクティブ
- offload_transfer ディレクティブ

```
program testMIC
```

```
implicit none
real, dimension(:) allocatable :: x, y
integer :: n, i
```

```
!dir$ attributes offload : mic :: x,y
```

```
n = 10
allocate( x(n), y(n) )
x(:)=1; y(:)=2
```

MIC ヘータータ転送

```
!dir$ offload_transfer target(mic) &
in (y,x,n) : alloc_if(.true.) free_if(.false.)
```

```
!dir$ offload begin target(mic) &
nocopy(y,x,n)
```

```
!$ omp parallel
do i = 1, n
y(i) = y(i) + x(i)
end do
```

オフロード範囲の指定

```
!$ omp end parallel
```

```
!dir$ end offload
```

```
deallocate(x, y)
```

```
end program
```

図 1: MIC Offload を用いたプログラムの例

- offload ディレクティブ

まず、attributes offload ディレクティブは、モジュール変数をホストとデバイスの両方のメモリに割り当てることを示すために用いる。次に、offload_transfer ディレクティブは、データをホストとデバイス間でやりとりするために用いる。また、デバイス上でのメモリ確保も兼ねている。図 1 のプログラムの offload_transfer ディレクティブは、配列 x 、 y と変数 n をデバイス側にコピーし、メモリの割り当てを行い、メモリ解放はせずに常駐させるという指示である。offload ディレクティブは、処理をデバイス側で実行させるために用いる。通常は、OpenMP 指示行によってループが並列化されている箇所を指定する。また、signal 節と wait 節と組み合わせることで非同期データ転送を行うこともできる。

次に、OpenACC について述べる。これは、アク

セラレータ上で並列プログラミングを行うための標準規格であり、CUDA などの独自言語を用いることなく、手軽に並列プログラミングを行うことができる。既存のソースコードに OpenACC ディレクティブを追加すると、OpenACC 対応コンパイラは、ホスト (CPU 側) コードとデバイス (GPU 側) コードを自動生成する。OpenACC のディレクティブは Data 構文、kernels 構文、Loop 構文の 3 つからなる。図 2 に OpenACC を用いた簡単なプログラミング例を示す。Data 構文はホストとデバイス間のデータ転送を明示的に指示するためのディレクティブである。OpenACC では、この処理の導入が最も重要となる。また、Data 構文によって既にデバイス上で存在するデータに対して、ホスト上のデータと明示的に同期をとりたい場合は update 指示行を使用する。kernels 構文では、デバイス上に並列計算するループ対象部分を指定する。これは、ベクトル化・並列化可能なループを対象としており、ループの直前にディレクティブを挿入することにより、コンパイラが並列化コードを生成する。指定した領域は GPU で実行されるカーネルとして生成される。この構文では、ループのベクトル長や並列分割の方法を節を使用してユーザが明

```

program testACC

  implicit none
  real, dimension(:) allocatable :: x, y
  integer :: n, i

  n = 10
  allocate( x(n), y(n) )
  x(:)=1; y(:)=2
  デバイスへデータ転送
  !$ acc data copyin(x(1:n)) copy(y(1:n))

  !$ acc kernels
  !$ acc loop gang(32) vector(64)
  do i = 1, n
    y(i) = y(i) + x(i)
  end do
  !$ end kernels
  デバイス実行の範囲

  !$ acc end data

  deallocate(x, y)

end program

```

図 2: OpenACC を用いたプログラムの例

示的に指示することができる。図 2 にある **!\$acc loop gang(32) vector(64)** は、gang 分割 32 でベクトル長を 64 で並列分割を行うという意味である。worker は 1 つの実行ユニット内で細粒度の並列性の実行を行う単位であり、各 gang は 1 つ以上の worker を有する。vector は、worker 内部で実行される SIMD(Single Instruction Multiple Data) またはベクトル型の並列単位である。gang, worker, vector をそれぞれ CUDA で用いる計算単位で表すと、スレッドブロック、ワープ、スレッドとなる。

3 ディレクティブを導入した FIT

3.1 有限積分法 (FIT)

FIT の詳細な定式化については、過去の論文 [5] で記載されているので、ここでは簡単に述べる。直交座標系の位置ベクトルを $\mathbf{x}=(x_1, x_2)$ とし、面外方向 (x_3) の粒子速度を $v_3(\mathbf{x}, t)$ 、せん断応力を $\tau_{31}(\mathbf{x}, t)$ 、 $\tau_{32}(\mathbf{x}, t)$ とする。FIT は、運動方程式と構成則を領域 V で積分することによって、離散化式を導く。 V の大きさを画像データのボクセル (ピクセル) サイズと等しくすれば、例えば CT 画像などを簡単に数値シミュレーションに取り込めるのが特徴である。時間方向については、以下のような中心差分法で近似する。

$$\{\tau\}^{z+\frac{1}{2}} = \{\tau\}^{z-\frac{1}{2}} + \Delta t\{\dot{\tau}\}^z, \quad (1)$$

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

ここで、 z は整数、 Δt は時間ステップ幅である。上式は、速度 v_3 と応力 τ_{31} 、 τ_{32} を交互に時間更新する陽解法であることを示す。これらは、実際には $\tau_{31}(i, j)$ や $v_3(i, j)$ といった 2 次元配列を確保して、時間更新する毎にメモリを上書きしながら利用することになる。ここで、 i は x_1 方向、 j は x_2 方向のインデックスを表す。図 3 に FIT のフローを示す。更新の過程で、速度 v_3 は数値積分によって変位 u_3 に変換してファイル出力している。また、MPI 通信では、 v_3 の 1 レイヤー分の袖部を相互に転送する。

3.2 高速化・効率化のための改良

3.2.1 プログラムの基本的項目の修正

MPI と OpenMP を併用するため、デバイス-ホスト間のメモリコピーのタイミングとスレッドの同期に注意する必要がある。高度化の中で分かったことは、4 バイト程度の小さなスカラー変数のコピーで

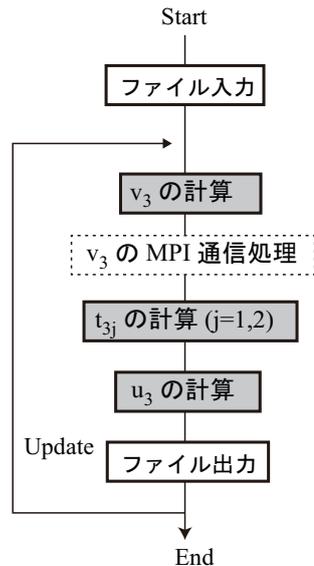


図 3: FIT のフローチャート

あっても相応のオーバーヘッドの原因となったことである。また、計算のセル領域で超音波の波源を探索するためのフラグ配列があったが、領域数に比べてほとんどヒットしないフラグについては、検索方法を変えるなどの必要があることがわかった。また、Xeon Phi ではベクトル化が重要であるが、間接参照等を含む場合にはベクトル化できていても、あまり良い性能が得られないこともわかった。

3.2.2 分岐処理の見直し

FIT では、自由反射境界(空洞)や PML などの境界条件を扱うことができる。これは、 $v_3(i, j)$, $\tau_{31}(i, j)$, $\tau_{32}(i, j)$ のすべてのカーネル計算に組み込まれている。これらの更新計算は i と j の 2 重ループとなっており、これらのループ中では、内点処理、空洞処理、PML の 3 つを場合分けしており、それぞれフラグをチェックすることで計算するかどうかを判定している。空洞については、計算領域の任意の場所にあるため、その数もケースバイケースである。しかし、PML については常に使用する訳では無く、しかも PML は計算領域の四隅のレイヤー部であるため、この処理を主要ループから分離する手法を採用した。FIT は陽解法であるので、メモリを節約するため $v_3(i, j)$, $\tau_{31}(i, j)$, $\tau_{32}(i, j)$ の更新時は、バッファ配列などを設けずに自身の配列に上書きする。しかし、PML 領域だけは別途配列を用意し、このバッファ配列を $v_3(i, j)$, $\tau_{31}(i, j)$, $\tau_{32}(i, j)$ にコピーする。従って、PML 領域は 1 ステップあたり 2 回計算が行われ

ることになる。

3.2.3 出力処理の最適化

FIT は陽解法であるので、定期的に計算結果を write する必要がある。非破壊検査への応用を考えて、粒子速度 (v_3) を数値積分して変位 (u_3) に換算し、それを出力する。全セル分の変位を出力すると膨大なファイル量になるため、実際には間引いて出力を行っている。高度化前のコードでは、この出力処理がネックとなっていた。出力する総数を L とすると、次のように出力バッファ Output にコピーしていた。

```

L = 0
do j = 1, M, K    ! x2 方向ループ (間引き : K)
  do i = 1, N, K  ! x1 方向ループ (間引き : K)
    L = L + 1
    Output(L) = u3(i, j)
  end do
end do
  
```

ここでは、出力バッファの番地 L について依存性があるため、ベクトル化の対象外となっていた。そこで、以下のように L でループを駆動し、 L から出力する位置の u_3 をコピーすることとした。 $i = 1 \sim N$ のうち N_i 個を取り出し、 $j = 1 \sim M$ のうち N_j 個を取り出して間引くとする。このとき $L = 1 \sim N_i \times N_j$ とし、依存性を解消するには、以下のように計算することにした。

```

do L = 1, N_i * N_j
  i = mod(L - 1, N_i) * K + 1
  j = mod((L - 1) / N_i, N_j) * K + 1
  Output(L) = u3(i, j)
end do
  
```

この方法であれば、コンパイラは依存性がないことを判断できるため、より効率的なコードが生成できる。

3.2.4 計算順序およびデータ転送のフロー

プログラム高度化後のフローチャートを図 4 に示す。高度化前のプログラム(図 3)では、粒子速度と応力を計算した後に変位 u_3 の計算を行っていた。高度化後は、図 4 に示すように、変位 u_3 をホストに転送しファイル出力する作業と、せん断応力のデバイス側での計算をオーバーラップさせている。

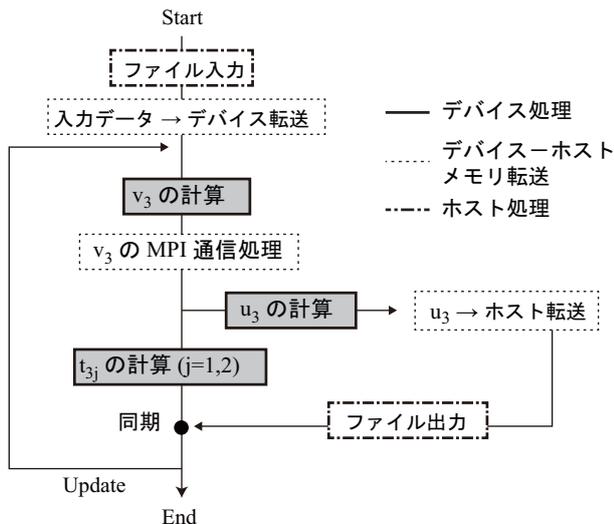


図 4: プログラム高度化後のフローチャート。

4 高速化性能の検証

計算例として、FIT による SH 波の伝搬の様子を図 5 に示す。ここでは、図 5 のような正方形の領域を対象として、セル数が 1000^2 , 2000^2 , 4000^2 , 5000^2 の場合における OpenACC と MIC Offload の実行時間を比較する。なお、時間更新は各セル数において 2000 ステップである。MIC Offload 計算を行うために、京都大学スーパーコンピュータシステム E に搭載されている Xeon Phi 5210D コプロセッサを用いた。また、OpenACC による計算を行うために、当方の研究室で有するワークステーション (NVIDIA 社の Tesla C2075 の GPU を搭載) を用いた。

ここで、性能

$$(P) = \frac{\text{CPU10 スレッドの計算時間}}{\text{アクセラレータの計算時間}}$$

と定義したものを指標として用いる。京都大学のスパコンと、研究室のワークステーションではノード間の通信環境が大きく異なるため、MPI 通信の比較は行っていない。CPU の 10 スレッド計算は、同じシステム E のコア (Intel Xeon E5 系, クロック 2.5GHz) を用いた。図 6 に計算性能の比較を示す。OpenACC では、vector(128), gang(4) と指定し、MIC 実行時には、59 コア 236 スレッドを利用して計算を行った。セル数が 1000^2 のとき、MIC Offload も OpenACC も CPU 計算よりも性能が小さいことがわかる。セル数が 2000^2 のとき、OpenACC は CPU 計算よりも高速化しているが、MIC Offload は CPU 計算の 2 倍程度の時間を

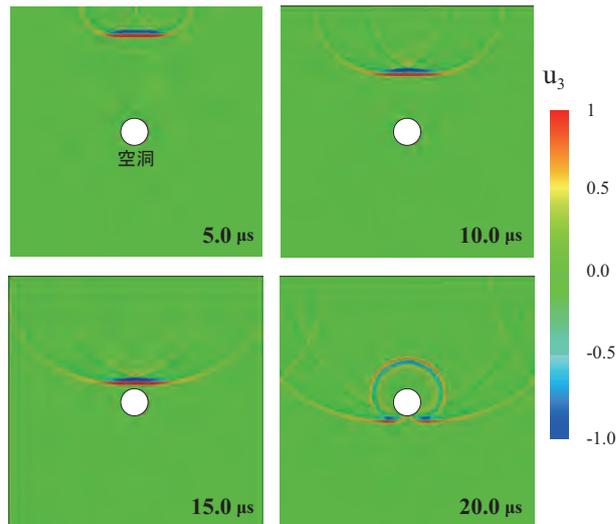


図 5: FIT による SH 波伝搬の計算例。

要している。セル数が増えると、OpenACC も MIC Offload も CPU 計算を上回るようになる。OpenACC の性能はセル数が 2000^2 以上では CPU 計算の 1.3 倍程度で頭止まりであるが、MIC Offload はセル数の増加と共に性能が向上している。

5 まとめ

本事業では、デバイス-ホスト間のメモリコピーのタイミングを意識したプログラミングフローや、分

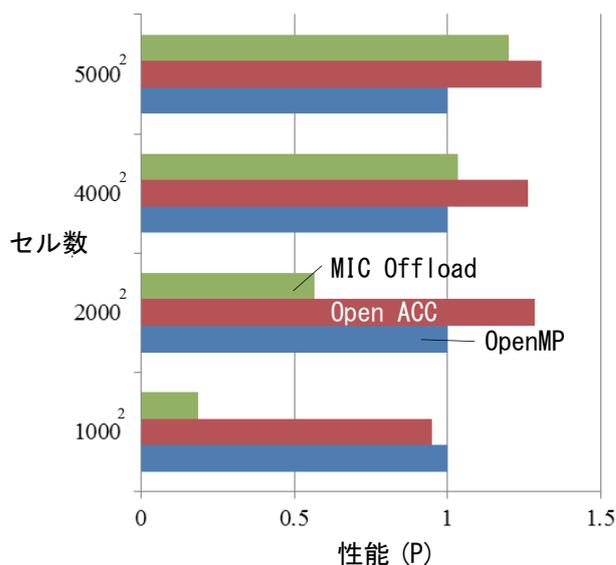


図 6: OpenMP(10 スレッド) の計算時間を基準とした場合の MIC Offload と OpenACC の計算時間の比較

岐処理の見直し，出力処理の最適化についてご指導を頂いた。これ以外にも，カーネルループのブロック化，ロードバランスの改善など，様々な取り組みをして頂いた。3次元版のFITでは，オリジナルコードをCPUのみで実行した場合と比較して，MIC Offloadでは約8.5倍の高速化が実現できた。また，自身でOpenACCコードを作成し，MIC Offloadコードと比較を行った。当方の所属する研究室のGPUボードのハードウェア上の制限もあって，2次元版FITでこれらと比較した。セル数が増えると，OpenACCもMIC Offloadも高速化の効率が向上する。OpenACCの性能は，セル数が少ないときでも発現するが，MIC Offloadはセル数の増加と共に性能が向上している。今後の課題は，アクセラレータを複数使用した場合（CPU間の通信が発生する場合）の高速化についても検討を行うことである。

謝辞： 有益なご助言を頂いた「スーパーコンピュータシステム共同研究企画委員会」の皆様，並びに，チューニングコードを提供して頂いたクレイ・ジャパン・インクの武田大輔様に感謝を申し上げます。

参考文献

- [1] 松岡聡，OpenACCを用いた大規模流体アプリケーションの高速化，学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 平成25年度共同研究 中間報告書，2013.
- [2] ジム・ジェファース，ジェームス・レインダース著/すがはらきよふみ訳，インテル Xeon Phi コプロセッサハイパフォーマンス・プログラミング，カットシステム，2014.
- [3] Developer Zone,
<https://software.intel.com/en-us/articles/the-heterogeneous-programming-model/>
- [4] P. Fellingner, R. Marklein, K.J. Langenberg and S. Klaholz, “Numerical modeling of elastic wave propagation and scattering with EFIT –elastodynamic finite integration technique”, *Wave Motion*, **21**, pp.47-66 (1995).
- [5] K. Nakahata, J. Chang, M. Takahashi, K. Ohira and Y. Ogura, Finite integration technique for coupled acoustic and elastic wave simulation and its application to non-contact ultrasonic testing, *Acoustical Science and Technology*, Vol.35, No.5, pp.260-268, 2014.

動的／静的水～土骨格連成有限変形解析コードの高度化

～領域分割法の適用の試み～

野田利弘

名古屋大学 減災連携研究センター

1 平成 26 年度事業の概要

筆者らが開発した解析コード (GEOASIA® [1], [2]) に対して、平成 24 年度 (下半期) [3]、平成 25 年度[4]に続き、平成 26 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。

本事業の目的は、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った。平成 24 年度においては、係数行列生成部 (KGRMAT) における OpenMP と MPI とのハイブリッド並列化を実現し、連立一次方程式の求解部分 (ソルバ) に直接法として MUMPS を、反復法として PETSc などを組み込み、当該解析コードを拡張した。平成 25 年度においては、KGRMAT における零対角要素の適切な処理のために PETSc ソルバにおける前処理を施すと同時に、性能向上に繋げるため、実行時スレッド数や Affinity 設定などを確認・検討した。

平成 26 年度は、更なる並列化による高度化のため、KGRMAT およびソルバ関連サブルーチンに対する領域分割法に基づくプロセス並列化を適用した。また、プロセス並列化のための領域分割方式、領域分割に対応した疎行列ソルバ、プロセス間通信方式などの検討を行うとともに、領域分割に基づくプロセス並列化の適用を行うに際しての技術調査を実施した。ここでは、領域分割法の検証結果を中心に紹介する。なお、領域分割法による並列処理は、計算対象領域を複数の領域に分割し、各分割領域をプロセス並列化の手法により並列処理し、領域境界間で必要な値の送受信をプロセス間通信により行う計算手法である。

2 領域分割法の GEOASIA への適用

図 1 は本解析コードに適用した際の処理手順フローを示す。今回適用した領域分割法では、分割条件の指定に伴う、領域割当、付番変更、境界条件などの付け替えを行う部分【前処理コード】、領域分割に伴い実際に並列計算を行う部分【GEOASIA 計算】および出力のための集約を行う部分【前処理コード】の 3 つに分けて計算を実施した。

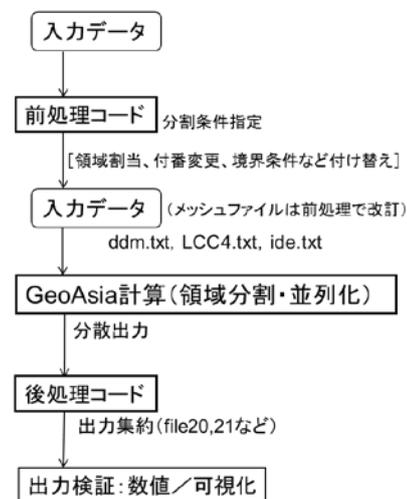


図 1 領域分割関連ファイルなど処理手順フロー

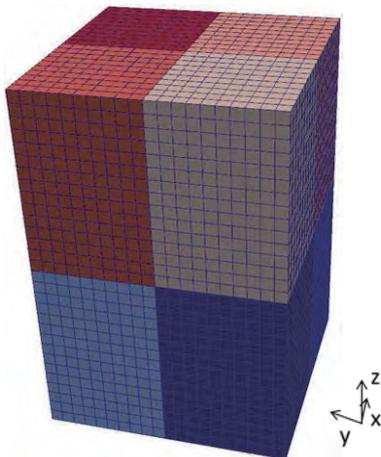
領域分割法に関する動作検証を行うため、表 1 に示す係数行列の特徴を有する 3 次元データを 4 種類使用した。1) 3D (要素数: 12,000, 節点数: 13,671), 2) 3DL (要素数: 96,000, 節点数: 102,541), 3) 煙突 half (要素数: 5,500, 節点数: 6,894), 4) 煙突 full (要素数: 11,000, 節点数: 13,239) である。

図 2 はこれらの分割の一例を示す。2)は 1)の xyz 方

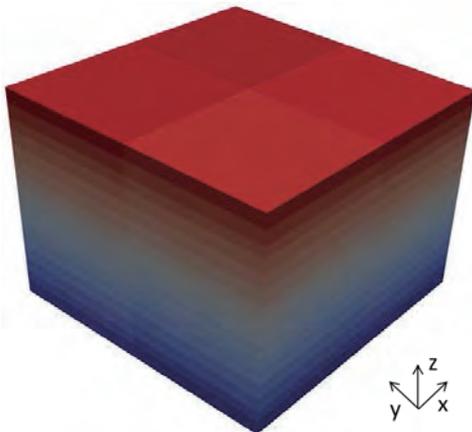
向をそれぞれ2倍の分割にしたもので、地表面中央に集中荷重が鉛直に与えられる。3)は4)の半分の断面である。また、煙突部分は弾性体で地盤部分は弾塑性体で異なる要素になっていて、地震動が地盤底面で水平に与えられる。なお、一定時間間隔 DT で収束計算を行いながら逐次時間を進めているが、表1の「計算ステップ数」とはその時に回数である。また、「制約条件」とは向かい合う側面で同一変位が生じるように土の変位場に課した条件を示す。

表1 テストデータ(係数行列:接線剛性マトリクス)

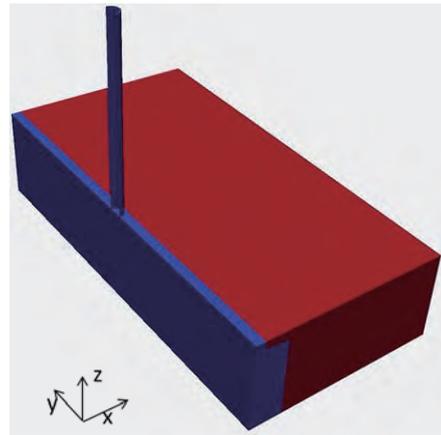
テストデータ名	係数行列非零成分数	解ベクトル成分数	計算ステップ数	制約条件
3DL	3,612,682	55,380	10	有
3D	28,756,582	413,160	10	有/無
煙突 half	1,543,042	24,182	1000	有
煙突 full	3,141,416	49,084	1000	有



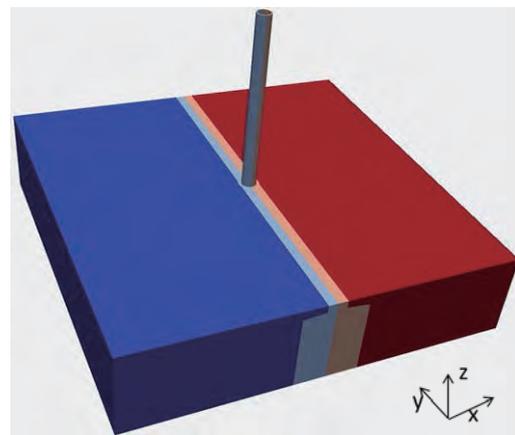
1) 3D (要素数: 8分割: $x_2 \times y_2 \times z_2$ の例)



2) 3DL (32分割: $x_2 \times y_2 \times z_{16}$ の例)



3) 煙突 half (2分割: $x_2 \times y_1 \times z_1$ の例)



4) 煙突 full (4分割: $x_2 \times y_1 \times z_1$ の例)

図2 動作検証に用いた3次元データ

3 実行性能計測結果

図3～図6には各データケースについて、全体とソルバ部の計測時間の一例を示す。図3と図4の1)と2)のデータについてはPETScでのソルバ部計測も抜粋も示す。縦軸はソルバライブラリ(棒グラフはPARDISO: PA、MUMPS: MU、PETSc: PEの違い)と並列度(PARDISOはスレッド並列のみ、MUMPS、PETScを用いた領域分割でz方向以外の分割を含む場合は括弧内に示す)、上横軸は計測時間(秒)を表す。PETScソルバ部では下横軸にプロファイル計測を行った際のソルバ部計測箇所SOLVE(2)(PETSc演算部)の(PETScのp1t1に対する)速度向上比を示している(折線)。なお、本計測で使用可能な計算リソースが8ノードまでであったため、p8以下は1ノード1プロセス、p16以上はノード内複数プロセスとしている。またpmtnはmヶのプロセス並列とnヶのスレッド並列を示す。

1)と2)のデータについては、特に PETSc による並列化効果が見られている。各サブルーチンでの速度向上比の詳細は省略するが、2)では p64t2(x と y 方向 2 分割、z 方向 16 分割)時に、シリアル (p1t1) 比で、係数行列作成ルーチン KGRMAT で約 120 倍、主要ソルバで約 12 倍、全体で約 23 倍速度が向上した (なお、PARDISO の p1t1 比ではソルバ部で 1) が 222 倍、2)が 1092 倍の速度向上比である)。

3DL データで制約条件無のケースは、計測結果を省略するが、一般的に制約条件有のケースに比べ早い傾向があり、有のケースの場合に収束しなかったケース (1) ,2)の x,y 方向 4,4 分割のケース) でも、収束が見られた。

次に、3)と4)のデータについては、PETSc を使用した場合、反復法収束計算における収束が得られなかったため、MUMPS を適用している。MUMPS は PETSc に比べ求解処理に時間がかかるものの、4)のデータの場合、p4t16 (水平方向 4 分割 (16 スレッド並列)、鉛直方向分割なし) 時に、p1t1 比で KGRMAT が約 68 倍、主要ソルバが約 8 倍、全体で約 13 倍速度が向上した。

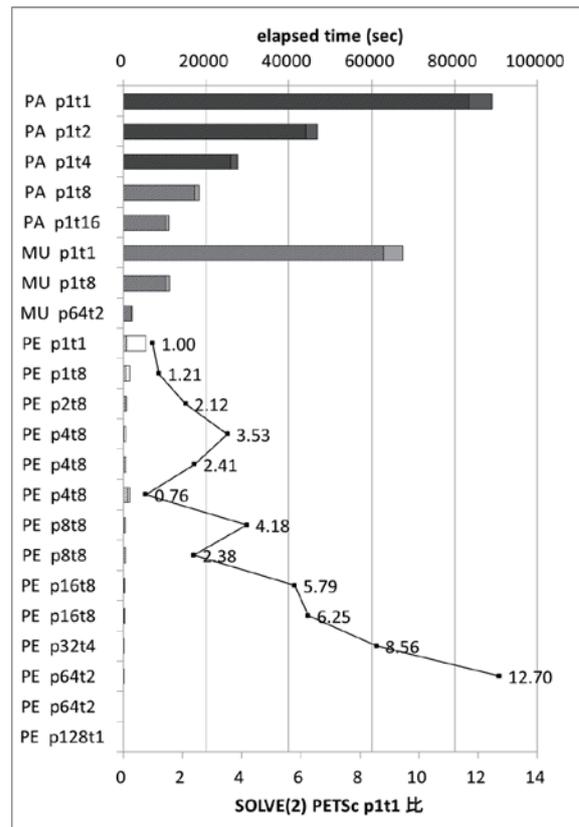


図4 性能計測結果 (3DL データ)

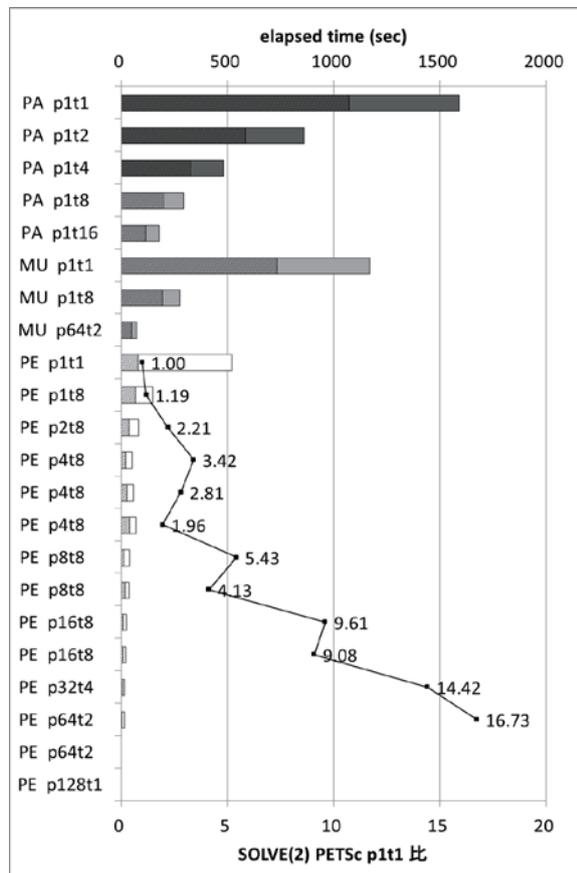


図3 性能計測結果 (3D データ)

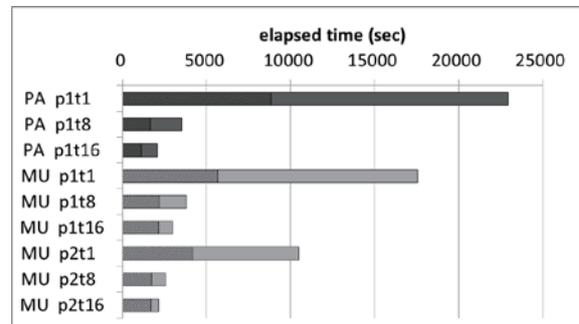


図5 性能計測結果 (煙突 half データ)

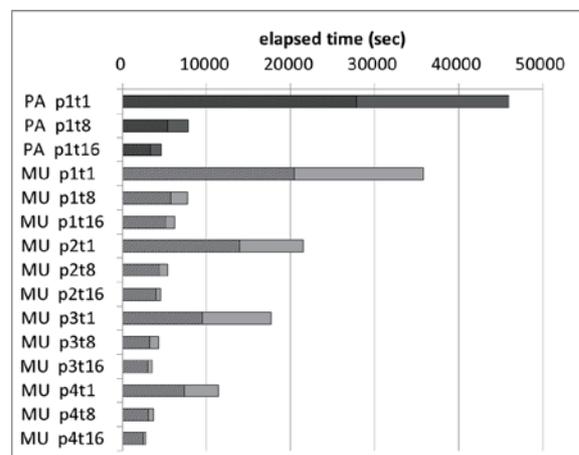


図6 性能計測結果 (煙突 full データ)

4 おわりに

平成 26 年度では、当該解析コードの係数行列作成やソルバ関連のサブルーチンに加えて、プロファイル計測での上位のサブルーチンなどに対して領域分割法を適用し、比較的シンプルな形状を有する解析対象の入力データを用いて実行性能解析を行った。

領域分割法を適用した場合とオリジナル解析コードの PARDISO シリアルの場合の解の精度の比較については省略するが、いずれの入力データ、並列化条件のもとで殆ど差がないことを確認した。

一方で、入力データの内、煙突データについては PETSc での収束は得られなかったこと、中間処理コードにおける任意形状での領域割当、入出力の改善など課題が残った。

平成 27 年度は、筆者のミスで本事業に申請できなかったが、上述のような課題が残っている。また、平成 25 年度終了時点での解析コードによっても、平成 25 年度の研究成果[4]に加えて、図 7 と図 8 のような解析結果[5]などが新たに得られている(計算条件を含む詳細は文献[5]を参照)。これは、解析コードが高速化されていて、系統的な計算ができる点が大きいです。今後、更なる研究を進めていくためにも、改めて平成 28 年度に向けて応募してゆけたらと考

えている。

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、上記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, Int. 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] 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] 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] 豊田智大・野田利弘・山田正太郎・浅岡顕(2015): 横ずれ断層に伴う地表面のリーデルセン断帯の発生に及ぼす材料的初期不整の影響, 第 50 回地盤工学会研究発表会, 2013-2014.

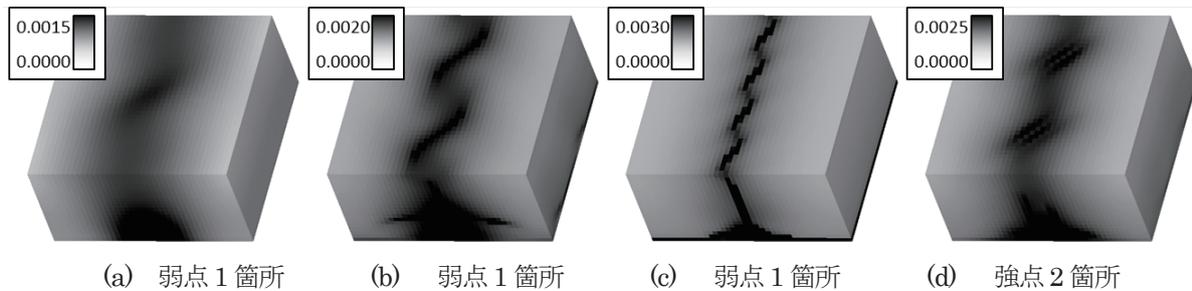


図 7 初期不整に応じたリーデルセン断帯発生状況の違い

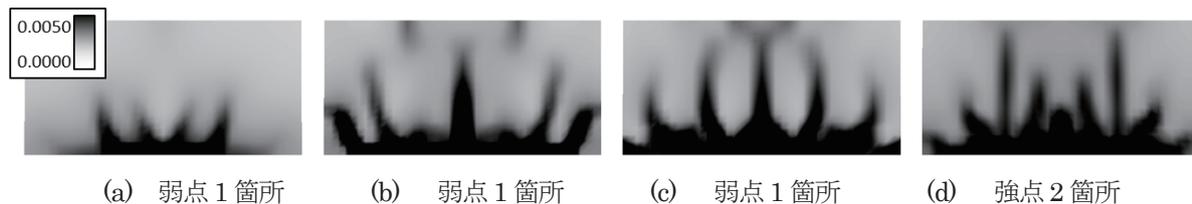


図 8 初期不整に応じたフラワー構造発生状況の違い

破壊力学に基づく損傷モデルを用いた 鉄筋コンクリートの3次元破壊シミュレーション

車谷 麻緒*

*茨城大学 工学部 都市システム工学科

1 はじめに

土木構造物の設計や維持管理の高度化において、鉄筋コンクリートの力学性状の評価は重要である。鉄筋コンクリートには大小様々なひび割れが発生する。鉄筋コンクリートに生じるひび割れは、部材の力学性能に影響を与えるだけでなく、力学性能に影響しないような微細なひび割れであっても、水やイオンの移動経路となって、部材の耐久性の低下に起因する。

コンクリートに発生するひび割れをモデル化およびシミュレートするには、時々刻々と移動する不連続な境界を追跡する必要があり、一般に困難な数値シミュレーションとなる。コンクリートの場合、多数のひび割れが複雑に発生・進展することになるので、その挙動を3次元で詳細に再現するのは容易ではない。実際に、鉄筋コンクリート内部におけるひび割れ進展挙動を3次元で精度よく詳細に再現した研究例はほとんど見当たらない。ひび割れ進展を3次元で詳細に追跡でき、かつ実験結果を定量的に再現できる数値解析手法の開発は、土木工学と計算力学分野における重要な研究課題であり、鉄筋コンクリートに生じる内部ひび割れを3次元で詳細にかつ定量的に再現できれば、土木構造物の維持管理を高度化することもできる。

そこで本研究では、準脆性材料の破壊力学に基づいて、材料の剛性を低下させる損傷モデルを定式化し、これを有限要素解析に導入することにより、鉄筋コンクリートのひび割れ進展挙動を3次元で詳細に再現できる数値解析手法を構築する。さらに、解析プログラムの並列化・高度化を行い、大規模シミュレーションと組み合わせることにより、損傷モデル

と剛性低下により、近似的に3次元ひび割れ進展解析を行うことができる。通常のFEMがベースであるので、FEMで培った技術はすべて利用することができる。信頼性のある数値解析を行うことができる。これにより、通常は目視できない鉄筋の周囲に発生するコンクリート内部のひび割れを3次元でシミュレートすることができ、土木構造物の維持管理に対する新たな知見を得ることができる。開発した方法を鉄筋コンクリートの3次元ひび割れ進展解析に適用し、大規模数値解析への適用性を検討するとともに、有限要素解析におけるメッシュサイズの依存性についても検討する。

2 数値解析手法

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

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

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

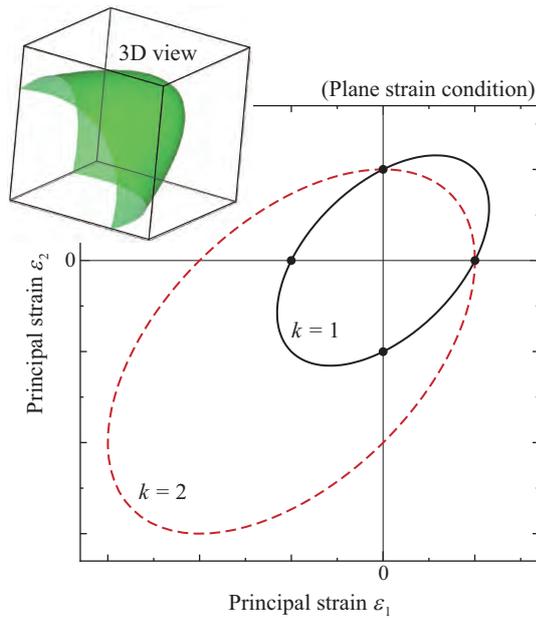


図 1: 2次元および3次元での主ひずみ空間における等価ひずみの等値面

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

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

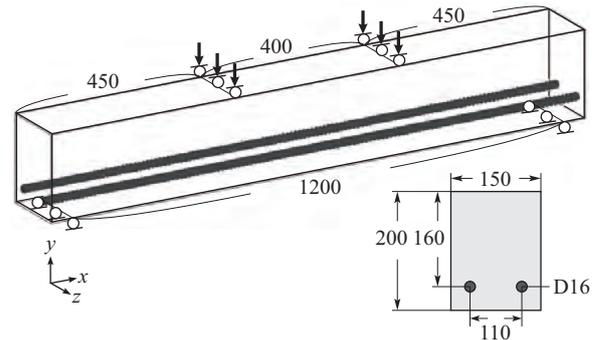
損傷は回復しないこととし、変形履歴における等価ひずみの最大値を $\kappa \geq 0$ で表すことにより、等方性の損傷モデルは次式で与えられる。

$$\sigma = (1 - D(\kappa)) c : \epsilon \quad (2)$$

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

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

ここで、 κ_0 は損傷開始時の等価ひずみである。損傷モデルによる非線形有限要素解析では、割線法と Newton-Raphson 法を合わせた陰的な解法により、コンクリートのひび割れ進展挙動を解析する。



Material parameter of concrete				
E	ν	κ_0	G_f	k
30 GPa	0.2	0.0001	0.1 N/mm	20
Material parameter of steel				
E	ν	—	—	—
200 GPa	0.2	—	—	—

図 2: せん断補強筋のない RC はりの解析条件と材料パラメータ

3 数値解析例

本研究で構築した破壊シミュレーション手法では、等方性の損傷モデルを用いて、コンクリートのひび割れ進展挙動をモデル化している。既往の損傷モデルを用いた有限要素解析では、解析結果がメッシュの寸法や分割に依存することが知られており、これを回避するために非局所モデルを用いることが多い。以下では、RC はりの破壊シミュレーションを対象に、メッシュサイズを小さくしていき、コンクリートのひび割れ進展挙動に対するメッシュサイズの影響について検討する。

3.1 解析対象と条件

解析対象は、図2に示すような、せん断補強筋（スターラップ）のない RC はりの4点曲げ試験である。主鉄筋は D16 の異形鉄筋とし、数値解析では異形鉄筋の幾何形状を忠実に有限要素メッシュに反映させることとする。メッシュ分割に対するシミュレーション結果の客観性を検証するため、全体を約 200 万、400 万、800 万、1600 万要素に分割した3次元有限要素モデルを数値シミュレーションの対象とする。有限要素には、1次の四面体要素を用いる。解析条件は、強制変位 2.5 mm を 200 ステップで載荷する変

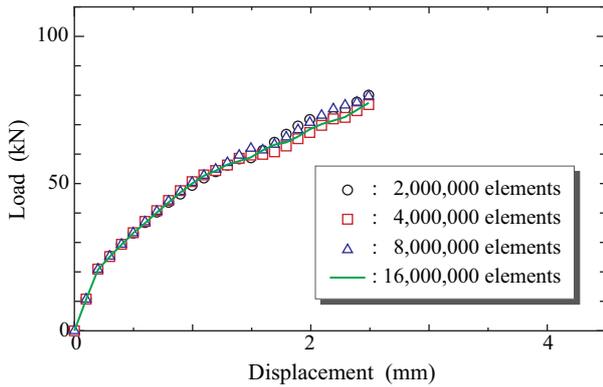


図3: メッシュサイズの異なる有限要素モデルに対する荷重-変位関係の比較

位制御試験とする。

鉄筋とコンクリートの境界面のモデル化について説明する。本研究では異形鉄筋の幾何形状を詳細にモデル化していることに加えて、節が表現できる程度の小さなメッシュサイズを与えている。そのため、特殊な界面要素や付着モデルを用いずに、境界面に位置する有限要素の応力集中によって、境界面から損傷が発生し、付着力が徐々に消失する過程を再現する。

一般に、せん断補強筋のないRCはりでは、鉄筋はほとんど塑性降伏せずに、コンクリートの破壊のみが進行し、せん断破壊に至ることが知られている。加えて、通常の有限要素解析においては、鉄筋の塑性変形はメッシュの寸法や分割に依存しないことから、ここでは鉄筋を線形弾性体として、鉄筋の降伏直前までを数値解析の対象とし、コンクリートのひび割れ進展挙動に対するメッシュ分割の依存性について比較・検討する。

3.2 解析結果と考察

解析結果として、荷重-変位関係を比較したものを図3に示す。メッシュサイズによって解析結果に若干の差異はあるものの、全体としての傾向はほぼ一致しており、メッシュ分割の相違が荷重-変位関係に与える影響は非常に小さいといえる。

次に、ひび割れの発生と進展の相違について検討する。モデル表面での等価ひずみの分布を比較したものを図4に示す。提案手法による3次元破壊シミュレーションは、ひずみの局所化によりひび割れを再

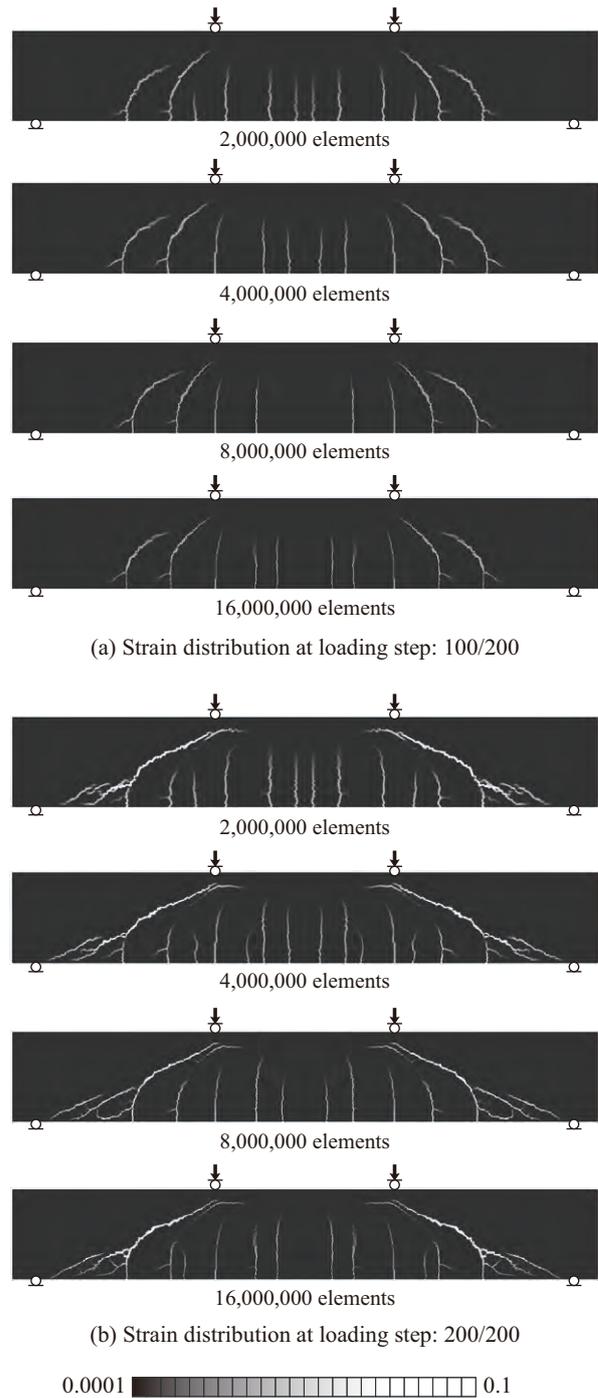


図4: メッシュサイズの異なる有限要素モデルに対するひび割れ分布の比較

現する方法であるので、ひずみの分布がひび割れの分布に対応する。どのようなひずみを可視化してもよいが、ここでは数値解析で利用している等価ひずみの分布を示している。メッシュサイズを小さくし

ていくと、ひび割れの本数や経路が変化しそうであるが、結果を見て分かるように、メッシュサイズを小さくしても、ひび割れの本数や経路はほとんど変化していない。その要因として、破壊エネルギーを考慮した損傷モデルを用いていることと、陰解法に基づく非線形有限要素解析を行っていることが挙げられる。

生じたひび割れの分布に着目すると、どのメッシュパターンにおいても、最初に曲げひび割れが発生した後、せん断破壊を示す典型的な斜めひび割れに発展する様子がシミュレートされている。以上の数値解析結果より、本研究でコンクリートの材料モデルに適用している等方性の損傷モデルと、これを有限要素解析に導入した破壊シミュレーション手法は、メッシュサイズに対する依存性が小さく、提案手法による破壊シミュレーションは客観性のある解析手法であることが分かる。

図5は、有限要素モデルのなかで最もメッシュサイズの小さい1600万要素モデルに対して、モデル内部の損傷分布を可視化した結果である。本研究では、異形鉄筋の幾何形状を忠実に考慮してメッシュ分割を行っているため、提案手法による破壊シミュレーションは、RCはりの表面から生じる損傷（ひび割れ）に加えて、RCはり内部の鉄筋の表面から発生・進展する損傷（ひび割れ）までを解析できる方法であることが見てとれる。

4 おわりに

本研究では、主にコンクリートの3次元ひび割れ進展解析プログラムの開発に重点をおき、鉄筋コンクリートにおける鉄筋には弾性モデルを適用した。鉄筋が塑性変形に達しない問題を対象に、本手法を適用した結果、実際の実験結果に近いひび割れ進展挙動を3次元で詳細に、かつメッシュサイズに影響されることなく再現することができた。本研究の成果 [2] は、学術雑誌に投稿中であり [3]、図5の数値解析結果は、可視化ソフトウェアの可視化事例として掲載されている [4]。

実際のRC部材の破壊挙動は、コンクリートのひび割れ進展挙動と鉄筋の塑性変形が組み合わさったものである。鉄筋とコンクリートはまったく異なる材料であり、ひび割れ進展挙動と塑性変形もまったく異なる力学挙動であることから、両者を組み合わ

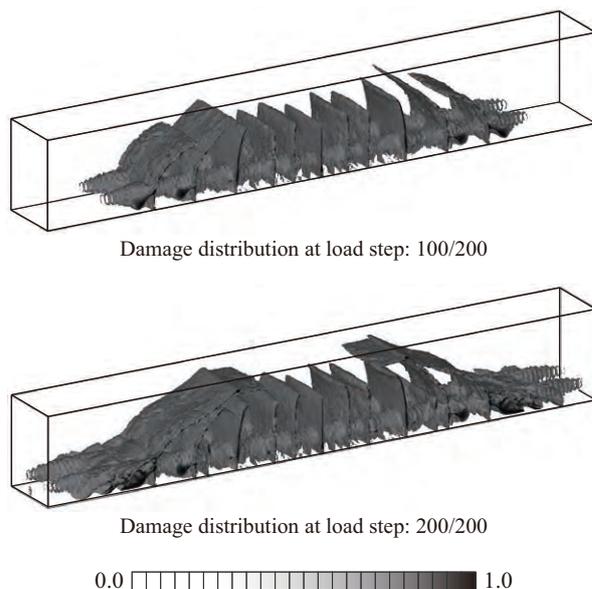


図5: メッシュサイズの小さい有限要素モデルの内部における3次元損傷分布

せた数値解析は、強い非線形性により不安定な数値解析になることが予想される。今後は、鉄筋の弾性限界後の塑性変形をモデル化し、鉄筋とコンクリートの両方の非線形力学挙動を3次元で詳細に再現できる解析プログラムを開発し、数値シミュレーションにより実験結果を定量的に再現できるかどうかを検討する予定である。

参考文献

- [1] 車谷麻緒, 寺田賢二郎, 加藤準治, 京谷孝史, 樫山和男, 「コンクリートの破壊力学に基づく等方性損傷モデルの定式化とその性能評価」, 日本計算工学会論文集, pp.20130015, (2013).
- [2] M. Kurumatani, S. Abe, Y. Nemoto, Y. Soma, N. Henmi, A method for fracture simulation of reinforced concrete using a damage model based on fracture mechanics for concrete, *The 3rd International Workshops on Advances in Computational Mechanics*, (2015).
- [3] 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, 投稿中.
- [4] CYBERNET AVS 可視化事例 (材料), <http://www.cybernet.co.jp/avs/example/category/>

都市の人口規模・空間分布における秩序形成

森知也

京都大学経済研究所

1 はじめに

先進諸国の多くでは8割以上の経済活動が都市に集積しており、これらの国々における地域・国際貿易を始めとする経済地理は、都市群の経済的構造と空間パターンで概ね特徴付けられることを意味する。興味深いことに、都市の人口規模、数、位置、産業構造の関係は顕著な秩序によって関連付けられることが知られている (Mori et al. [2])。図1は、日独米の都市規模分布、および、アメリカについては、4大都市 (ニューヨーク、ロサンゼルス、シカゴ、ダラス) 経済圏の都市規模分布を示している。地域経済圏は物流センサスを用いて同定されたもので、アメリカのような大国では複数の同規模の地域経済圏、日本やドイツ程度の規模なら国全体が概ね一つの地域経済圏で構成されている。図が示すように、地域経済圏単位では、都市規模分布の上部は概ね共通のべき乗則に従っている。さらに、このように同定された地域経済圏は階層構造を持ち、図2に示されるように、都市規模分布は地域経済圏間でフラクタル構造を持つ (Akamatsu et al. [1])。本研究では、このような都市規模分布の空間的フラクタル構造を再現できるミクロ経済学モデルの構築に取り組んだ。

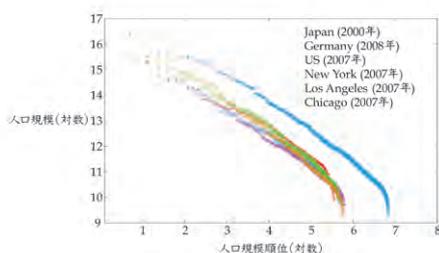


図1 日米独の都市規模分布

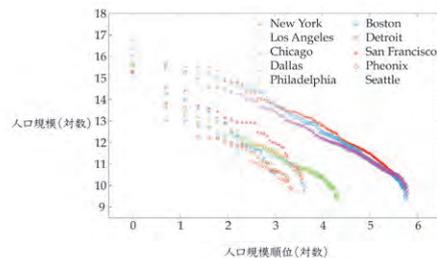


図2 都市規模分布のフラクタル構造

2 モデルと数値解析における課題

分析には、多産業・多地域に拡張した Pflüger [3] モデルを用いた。異なる産業は異なる種類の消費財を生産し、各種消費財はさらに多数の差別化された財バラエティで構成される。各産業の集積は、財の多様性を嗜好する消費者、生産における規模の経済、および、輸送費用の存在から生ずるフィードバック効果によって形成され、集積の規模と空間的周期は、フィードバック効果の大きさにより異なる。産業の集積はその生産財の消費者の集積を伴って都市を形成する。大都市は、共通の消費者を介して、複数の産業が集積することにより形成される。

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

3 結果

3.1 計算性能

図3は、プログラム高度化による計算効率の改善を、図4は、ノード/コア数と実行時間の関係を示している。いずれも、(地点数, 産業数) = (512, 256) の下で、5万回の短期均衡計算の所要時間で評価している。筆者によるオリジナル・プログラムに対して、高度化プログラムでは、より広範囲での並列化・効率化が行われ、4～5倍程度の速度改善があった。並列化は産業方向にのみであるため、並列化効率は総コア数 < 産業数の場合に限られるが、1ノード・28コアの場合に比べて最大で3倍程度高速化した。

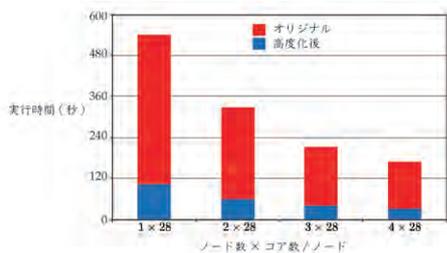


図3 パフォーマンス

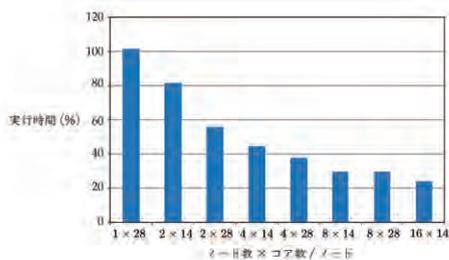


図4 並列化効率

3.2 シミュレーション結果

上記の計算効率比較に用いたシミュレーションの結果として、所与人口の労働者を産業 × 立地に対してランダムに配置した初期分布から導出した長期均衡を示す。図5は人口の空間分布を表しており(但し、立地空間は円周であり、地点0と地点512は同一である)、その空間パターンは近似的にフラクタル構造を持っていることがわかる。

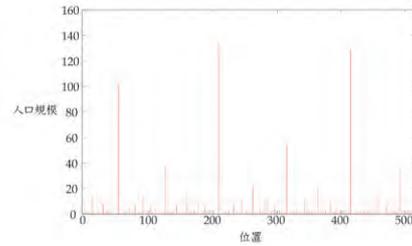


図5 都市の位置と人口規模

図6は、長期均衡における、代表的な4産業について各立地点での(潜在的な)利潤水準を示している。長期均衡で実現している各産業の利潤水準を1に正規化しており、産業立地は利潤水準 = 1の地点のみで起こり、それ以外には立地は無い。産業1, 2, 3, 4の順で、供給財の差別化程度は低く設定されている。図が示す通り、より差別化の程度が高い財を供給する産業の立地点には、必ず、より差別化の程度の低い財を供給する産業も立地しており、産業間で集積の空間的同期が起こっている。特に、産業1は図5に示される3大都市にのみ立地している。

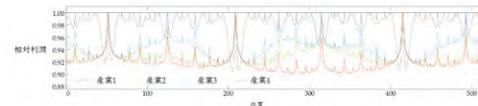


図6 産業集積の空間的同期現象

図7は、実際の地域経済圏と同じ方法で同定した仮想経済における地域経済圏単位の都市規模分布を示している。図2で示した現実の都市規模分布と同様に、空間的なフラクタル構造が発現する。(点線は経済全体の都市規模分布を示す。)

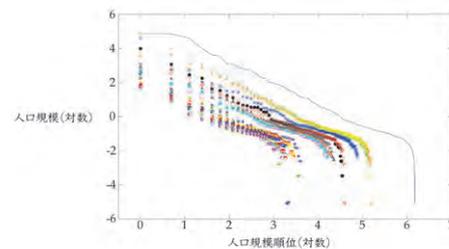


図7 都市人口規模分布

4 おわりに

本共同研究では、現実の空間経済において観察される、都市規模分布の空間的フラクタル構造と共通

べき乗則の創発を再現する数値解析プログラムを開発した。特に、計算の並列化と効率化によって、大規模なモンテカルロシミュレーションが可能になった。今後は、立地空間を2次元に拡張し、より現実的な設定の下で、現実に観察される秩序形成の再現を試みる予定である。

参考文献

- [1] Takashi Akamatsu, Tomoya Mori, and Yuki Takayama. Spatial coordination among industries and the common power law for city size distributions. Technical report, Institute of Economic Research, Kyoto University, 2015.
- [2] Tomoya Mori, Koji Nishikimi, and Tony E. Smith. The number-average size rule : A new empirical relationship between industrial location and city size. 48(1):165–211, 2008.
- [3] Michael Pflüger. A simple, analytically solvable, chamberlinian agglomeration model. *Regional Science and Urban Economics*, 34(5):565–573, September 2004.

高次精度差分法による高レイノルズ数チャンネル乱流場の大規模直接数値シミュレーション

山本 義暢

山梨大学大学院総合研究部

1 はじめに

非定常・3次元構造を有する乱流現象を解析する手法としては、その基礎方程式を数值的に解き、数値解を求める直接数値シミュレーション(Direct Numerical Simulation, DNS)が有力である。このDNSは渦運動の最小スケールから最大スケールを包括する格子が必要となるため、その計算負荷は莫大となる。しかし計算機性能の発展に伴いその適用範囲は拡大している。特に近年高レイノルズ数境界層流れにおける大規模構造^{1,2)}が注目を集めている。この大規模構造は境界層厚でスケールされる構造を有するとともに乱流統計量への影響²⁾も指摘されている。室内実験による研究ではこの大規模構造は、壁面摩擦速度(u_τ)と境界層厚(h)に基づくレイノルズ数(摩擦レイノルズ数: $Re_\tau = u_\tau h/\nu$, ν : 動粘性係数)において7300程度に達するとその影響が顕著になることが報告されている²⁾。

本研究ではこの大規模構造解析を目的として、京都大学学術情報メディアセンターCray・XE6・256ノードで実行可能な最大レイノルズ数: $Re_\tau = 4000$ のDNSを実行した。

2 直接数値計算の概要

本研究における直接数値計算の解析対象は、図1に示す、一定の圧力勾配で駆動される2次元チャンネル乱流場である。また基礎方程式は、非圧縮性流体の運動方程式、連続式及びパッシブスカ

ラを仮定した温度場の輸送方程式である。

空間離散化手法は、主流及びスパン方向に10次精度の中心差分法³⁾、壁垂直方向に2次精度の中心差分を使用する。時間進行は、対流項及び粘性項に2次精度Adams-Bashforth法、圧力項にEuler陰解法を適用し、Fractional step法により解く。この際圧力ポアソン解法には、高速フーリエ変換(x, z 方向)と3重対角行列解法(y 方向)による直接解法を使用する。境界条件は、主流及びスパン方向に周期境界条件、壁面でno-slip条件を課した。温度場に対しては壁温一定(上壁温度: θ_{top} > 下壁温度: θ_{bed})とし、主流及びスパン方向には周期境界条件を課した。

た。

表1に本研究でのレイノルズ数(Re_τ)、主流方向、壁垂直方向、スパン方向(x, y, z)の計算領域(L_x, L_y, L_z)、格子点数(N_x, N_y, N_z)、及び格子解像度($\Delta x^+, \Delta y^+, \Delta z^+$)を示す。なお、上付き添え字+は、摩擦速度(u_τ)と動粘性係数(ν)で規格化した値であることを示す。

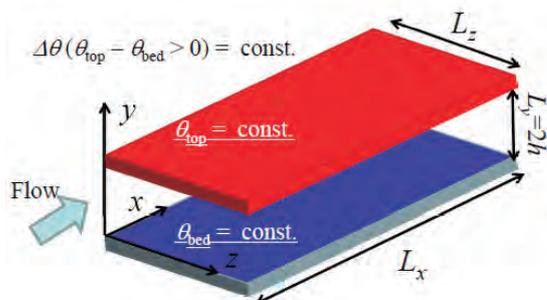


図1 計算体系と座標系

表 1 計算条件

	Re _τ	Domain (L _x /h, L _y /h, L _z /h)	Grid number (N _x , N _y , N _z)	Resolution (Δx ⁺ , Δy ⁺ , Δz ⁺)
present	4000	16, 2, 6, 4	5760, 2048, 3072	11.1, 0.5-8.0, 8.3
4)	4200	2π, 2, π	2048, 1081, 2048	12.8, 0.1-8.0, 6.4
5)	4079	6π, 2, 2π	8192, 1024, 4096	9.4, 0.1-54, 6.2

また表 1 には参考のため、同規模レイノルズ数の直接数値計算条件を併記している。

3 並列化

3.1 領域分割

本研究では、壁垂直方向 (y 方向) への MPI (Message Passing Interface) による領域分割による並列化を適用する。この際に否通用となる通信は、壁垂直方向の差分演算時に必要となる袖通信、圧力ポアソン方程式の 3 重対角行列解法時に必要となる all-to-all 通信となる。袖通信においては、隣接間通信となるが、通信データを連続データとするために、プログラミング上、y 軸方向は、3 次元配列の最外ループとした (fortran の場合)。さらにスーパーコンピュータ「京」のような 3 次元トラスであるが、隣接プロセスが必ずしも隣接ノードとはならない場合があるため、ノード配置マップを手動で作成し、隣接プロセスが隣接ノードとなるように工夫した (ただし Cray XE6 ではユーザがノード配置を指定できないため、本設定は使用していない)。

また all-to-all 通信は、3 重対角行列解法時に、分割方向 (y 方向) に再起参照関係となるために、これを回避するために分割軸の入れ替えを行うが、この際に必要となる。従来の並列化においては分割軸の入れ替えを z 軸方向に行っていたが、チャンネル乱流場では y 軸と z 軸方向の格子数が異なり、各プロセス間での通信量及び演算量のアンバランスが生じる可能性があった。そこで今回、分割軸の入れ替え時に転送配列を (x, z, y) の 3 次元配列から、(xz, y) の 2 次元配列とし、N_xN_z の格子数を MPI プロセスにより領域分割した。

・ OpenMP

また通信量の削減と並列ノード数を稼ぐことを目的として、ノード内は、OpenMP による並列化を計算コードのほぼ全領域に適用した。また 3 次

元計算の最外ループ (y 軸) で領域分割を行っている関係上、最外ループをさらに OpenMP で分割すると総並列数が結局 1 次元方向の格子数に制限されるため、OpenMP における collapse 機能を使用して、これを回避した。また 2D-FFT 部分においては、FFTW3.3 の OpenMP 版を適用した。

・ メモリ量削減

10 次精度差分法では、1 点の微係数を計算する際に、10 点 (拡散項では、20 点) のステンシルを要する。これに対処するために境界部分にステンシルを拡張すると大幅なメモリ増加をもたらすため、境界部分についてはリスト配列を使用し、メモリ量は高次精度差分法においても、2 次精度差分法の場合と同等となるようにした。

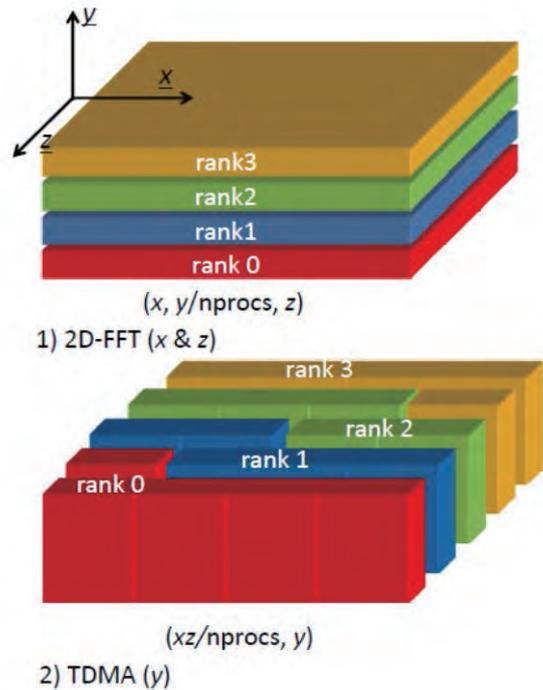


図 2 1次元領域分割 (FFT 及び TDMA の場合)

4 並列性能

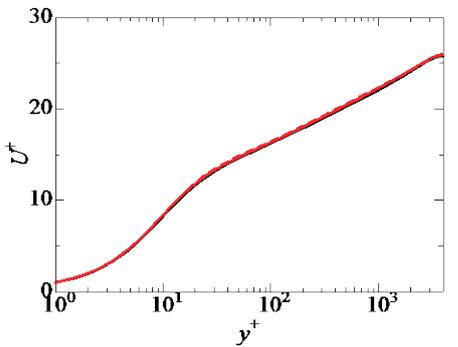
表 2 に Cray・XE6/256 ノード及び東京大学 FX10, 理化学研究所「京」での実行演算速度 (R_{max}) を示す。理化学研究所「京」では 21 Tflops の実行演算速度が得られており、これは理論性能 (R_{peak}) の約 8.2% に相当する。Cray・XE6 の場合は、実効演算速度が約 5 Tflops であり、実行効率は 6.1% とやや低めの値となった。この原因はノード間通

信 (特にall-to-all通信) の性能がやや落ちること及び演算部分の実行性能もやや低めとなっており、全体として 6%台の実行効率に留まってしまったものと考えられる。

表 2 実行演算速度の比較

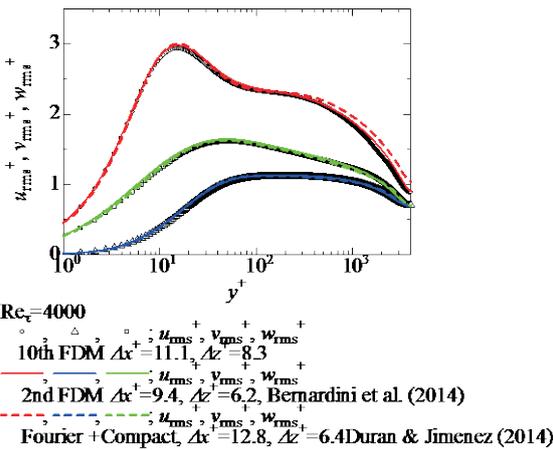
	#node	#MPI	#AP	#core	R_{peak}	R_{max}	R_{max}/R_{peak}
Cray・XE6	256	1024	8	8192	82 [Tflops]	5.0 [Tflops]	6.1 [%]
Fujitsu・FX10	512	512	16	8192	121 [Tflops]	9.6 [Tflops]	7.9 [%]
RIKEN・京	1024	1024	8	8192	128 [Tflops]	11.2 [Tflops]	8.5 [%]
	2048	1024	8	16384	256 [Tflops]	21.5 [Tflops]	8.2 [%]

5 計算結果と考察



$Re_\tau = 4000$
 — 10th FDM $\Delta x^+ = 11.1, \Delta z^+ = 8.3$
 — 2nd FDM $\Delta x^+ = 9.4, \Delta z^+ = 6.2$,
 Bernardini et al. (2014)
 - - - Fourier + compact, $\Delta x^+ = 12.8, \Delta z^+ = 6.4$,
 Duran & Jimenez (2014)

図 3 平均速度分布の比較

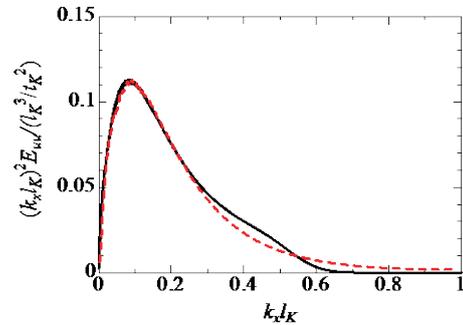


$Re_\tau = 4000$
 ○, 10th FDM $\Delta x^+ = 11.1, \Delta z^+ = 8.3$
 —, 2nd FDM $\Delta x^+ = 9.4, \Delta z^+ = 6.2$, Bernardini et al. (2014)
 - - -, Fourier + Compact, $\Delta x^+ = 12.8, \Delta z^+ = 6.4$ Duran & Jimenez (2014)

図 4 乱流強度分布の比較

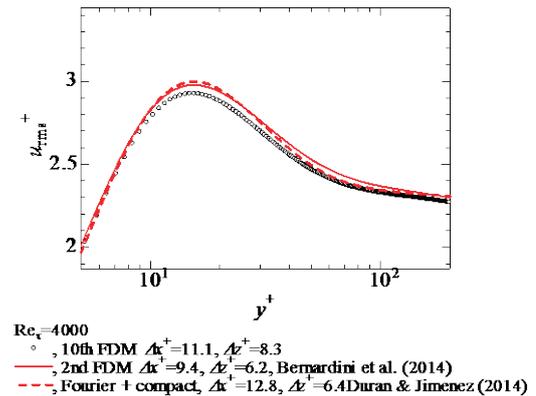
次に計算結果の比較を図 3 及び 4 に示す。図 3 における平均速度分布については、ほとんど差異は見受けられなかった。また図 4 に示す乱流強度分布においては、本計算結果と 2 次精度中心差分

法に基づく Bernardini et al. (4) の結果は良好に一致したものの空間離散化精度が高い、Duran & Jimenez (3) の計算とは、主流方向乱流強度において壁遠方 ($y^+ > 800$) にて違いが見られ、彼らの結果は本計算結果より大きな値となっている。



$y^+ = 800$
 — 10th FDM $\Delta x^+ = 11.1 (Re_\tau = 4000)$
 - - - spectral $\Delta x^+ = 16.7 (Re_\tau = 1000)$

図 5 散逸スペクトルの比較
(最小スケール渦の再現性)



$Re_\tau = 4000$
 ○, 10th FDM $\Delta x^+ = 11.1, \Delta z^+ = 8.3$
 —, 2nd FDM $\Delta x^+ = 9.4, \Delta z^+ = 6.2$, Bernardini et al. (2014)
 - - -, Fourier + compact, $\Delta x^+ = 12.8, \Delta z^+ = 6.4$ Duran & Jimenez (2014)

図 6 バッファ層における主流方向乱流強度の比較

そこで $y^+ = 800$ の高さにおける散逸スペクトル分布を図 5 に示す。本計算結果においては、解像度不足の影響は見られないため、上記乱流強度分布の違いは、離散化手法あるいは解像度の影響によるものではないと考えられる。この原因は、Lozano-Durana & Jimenez (3) のケースは若干レイノズ数が高い ($Re_\tau = 4200$) こと、また計算領域が小さいことによる大規模構造の過剰評価が影響しているのではと、推測される。また図 6 に示すバッファ層付近の主流方向乱流強度分布においては、2 次精度中心差分法が適用されている Bernardini et al. (4) の結果では、 $100 > y^+ > 30$ の領域で過剰評価

が見られた。これは低次精度の差分法を適用した場合に見られる特徴である。一方、本研究（10次精度差分法）の場合、上記の影響はないものの、ピーク値が過小評価されていることがわかる。これは主流方向の格子分解能がやや低いためと思われる。

大規模構造の特長である、スペクトル分布の第二ピーク²⁾を確認する。図7にpre-multiplied スペクトル（波数をかけたスペクトル）を示す。室内実験と類似した壁遠方領域での第2ピークの出現が明確に確認できる。ただしその値はまだ弱く、レイノルズ数を上げることにより強い影響が出現するものと考えられる。

最後に本研究では、速度場に加えて温度場（パッシブスカラー場）の計算を同時に行っているが、本研究で行った時間積分長では、発達場が得られることができなかった。この原因は大規模構造の揺らぎの影響により、低レイノルズ数の場合よりもより長い時間積分長が必要になるためと考えられる。

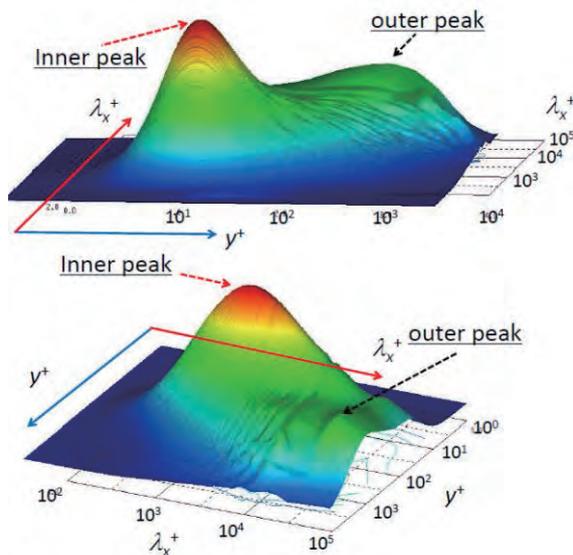


図7 主流方向 pre-multiplied スペクトルのコンター（Outer peak が第2ピークに相当）

6 まとめ

本研究では、京都大学学術情報メディアセンターのCray XE6/256 ノードを使用した大規模直接数値計算を実行した。その結果、実効演算速度で5

Tflops（実行効率約6%）が得られるとともに、 $Re_\tau=4000$ の数値解を得ることに成功した。同レイノルズ数の結果と比較し、基本特性はよく一致することが確認された。しかし主流方向乱流強度分布の過小評価及びスカラー場の未発達が生じており、解像度の上昇と時間積分長を増やす必要があることが判明した。時間積分長の増加は計算機占有時間の増加となり、本研究のような大規模ジョブではさらなる増加は難しく、実効性能をより高める必要があると考えられる。

参考文献

- 1) Kim, K. C., & Adrian, R. J. (1999), Very large-scale motion in the outer layer, *Physics of Fluids*, 11(2), 417-422.
- 2) Hutchins, N., & Marusic, I. (2007), Evidence of very long meandering features in the logarithmic region of turbulent boundary layers, *J. Fluid Mech.*, 579, 1-28.
- 3) Morinishi, Y., Lund, T. S., Vasilyev, O.V., and Moin, P. (1998), Fully Conservative Higher Order Finite Difference Schemes for Incompressible Flow, *J. Comp. Phys.* 143, 90-124.
- 4) Lozano-Durana, A. and Jimenez, J. (2014), Effect of the computational domain on direct simulations of turbulent channels up to $Re_\tau = 4200$, *Phys. Fluids*, 26, 011702.
- 5) Bernardini, M., Pirozzoli, S., and Orlandi, P. (2014), Velocity statistics in turbulent channel flow up to $Re_\tau = 4000$, *J. Fluid Mech.*, 742, 171-191.

システム A 運転状況 (2015 年 4 月 ~ 2015 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

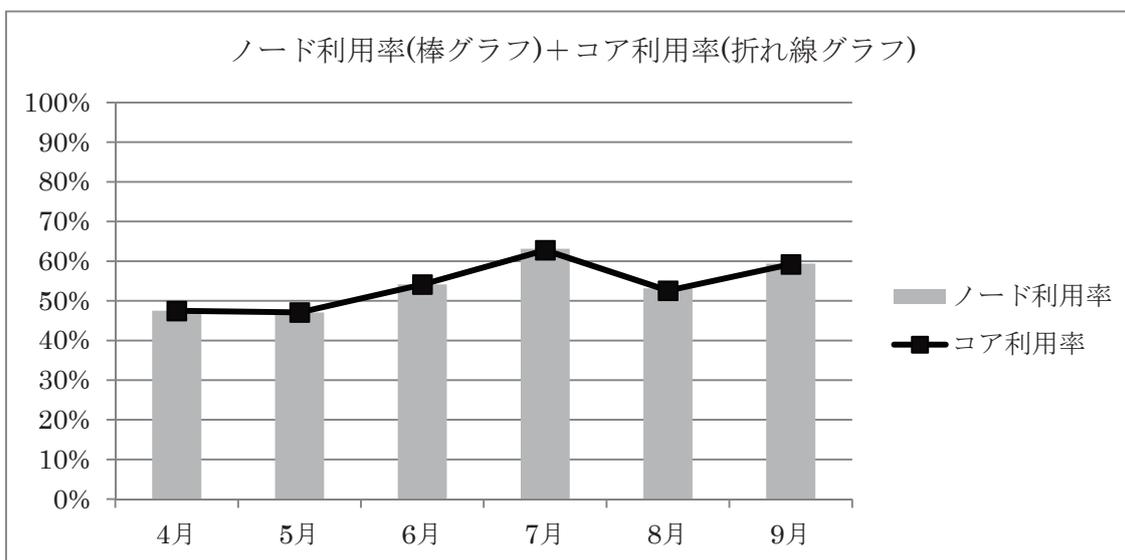
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2015/04/01 0:00	2015/04/02 9:00	33.00
2015/06/09 9:00	2015/06/10 9:30	24.50
2015/08/04 9:00	2015/08/05 9:30	24.50

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]
--------	----------	----------

2) サービス状況

	サービス時間 [h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	687.00	26,532	61,037	9,796,650	7,396,260	782.1	48 %
5月	744.00	35,566	50,344	8,287,300	7,049,130	751.9	47 %
6月	695.50	44,518	76,569	9,282,730	7,696,580	751.8	54 %
7月	744.00	30,534	63,981	11,240,500	9,893,430	752.0	63 %
8月	719.50	30,075	51,451	9,152,680	7,614,200	753.8	53 %
9月	720.00	30,591	59,057	9,958,610	7,842,360	751.8	59 %
計	4310.00	197,816	362,440	57,718,470	47,491,960	757.2	54 %



- 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 (2015 年 4 月 ~ 2015 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

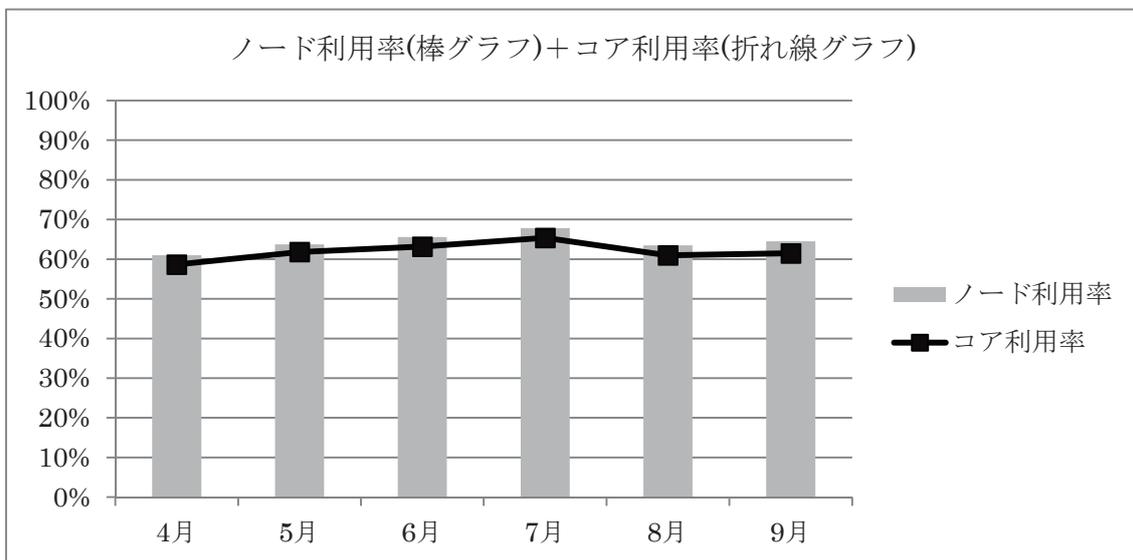
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2015/04/01 0:00	2015/04/02 9:00	33.00
2015/06/09 9:00	2015/06/10 9:30	24.50
2015/08/04 9:00	2015/08/05 9:30	24.50

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]
--------	----------	----------

2) サービス状況

	サービス時間[h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼働ノード数	ノード利用率
4月	687.00	61,517	170,148	2,926,430	213,727	511.3	61 %
5月	744.00	96,526	175,549	3,922,710	267,074	536.3	64 %
6月	695.50	73,642	240,809	3,977,930	307,175	525.6	66 %
7月	744.00	68,874	295,033	4,152,510	308,559	539.0	68 %
8月	719.50	103,781	257,457	3,599,500	292,702	536.3	64 %
9月	720.00	102,741	287,304	3,734,530	296,901	538.9	65 %
計	4310.00	507,081	1,426,300	22,313,610	1,686,138	531.3	64 %



- 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 (2015年4月～2015年9月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

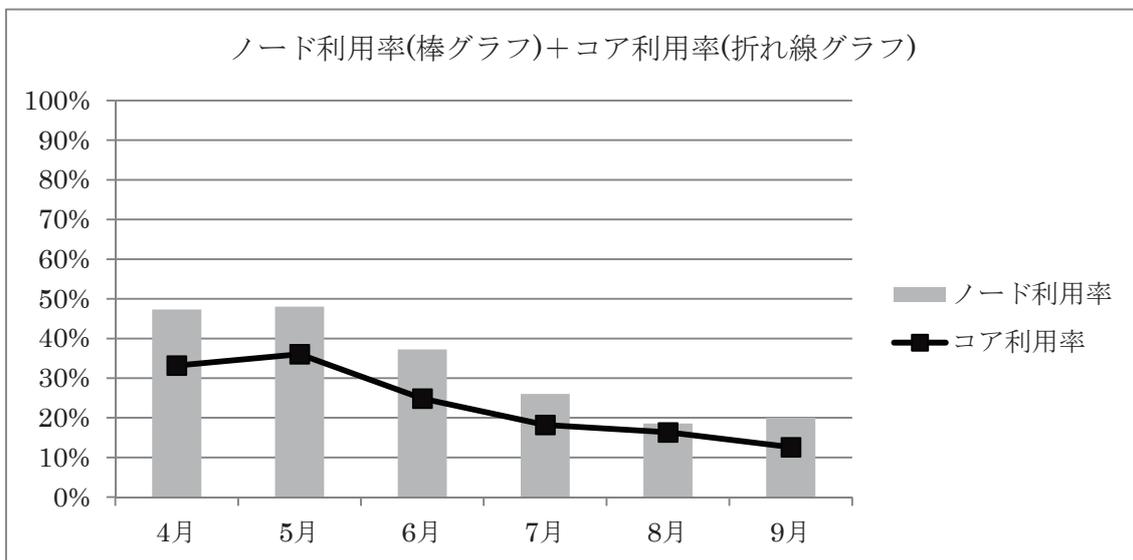
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2015/04/01 0:00	2015/04/02 9:00	33.00
2015/06/09 9:00	2015/06/10 9:30	24.50
2015/08/04 9:00	2015/08/05 9:30	24.50

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]
--------	----------	----------

2) サービス状況

	サービス時間[h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	687.00	672	7,396	84,597	55,498	12.3	47 %
5月	744.00	1,096	9,079	96,455	59,520	12.0	48 %
6月	695.50	1,031	8,386	79,405	44,914	12.0	37 %
7月	744.00	1,006	4,410	56,803	34,965	12.0	26 %
8月	719.50	762	1,655	45,389	33,046	11.9	19 %
9月	720.00	992	4,100	34,873	16,765	12.0	20 %
計	4310.00	5,559	35,027	397,522	244,707	12.0	33 %



- 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 (2015 年 4 月 ~ 2015 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

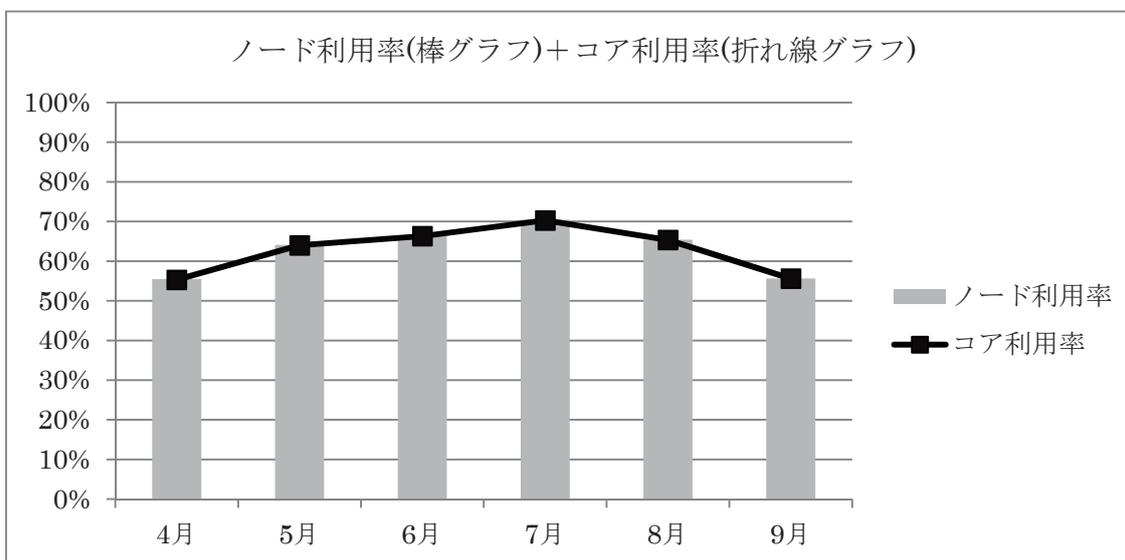
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2015/04/01 0:00	2015/04/02 9:00	33.00
2015/06/09 9:00	2015/06/10 9:30	24.50
2015/08/04 9:00	2015/08/05 9:30	24.50

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]
2015/05/05 15:00	2015/05/05 22:45	7.75

2) サービス状況

	サービス時間 [h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	687.00	5,509	31,657	4,078,360	187,950	357.3	56 %
5月	736.25	10,062	41,040	5,105,330	269,159	398.5	64 %
6月	695.50	15,942	58,826	5,465,200	310,326	415.8	66 %
7月	744.00	27,418	63,207	6,358,920	291,873	416.0	70 %
8月	719.50	12,546	73,955	5,359,440	303,489	416.0	65 %
9月	720.00	10,778	69,705	4,830,910	249,961	416.0	56 %
計	4302.25	82,255	338,389	31,198,160	1,612,758	403.3	63 %



- 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 (2015 年 4 月 ~ 2015 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

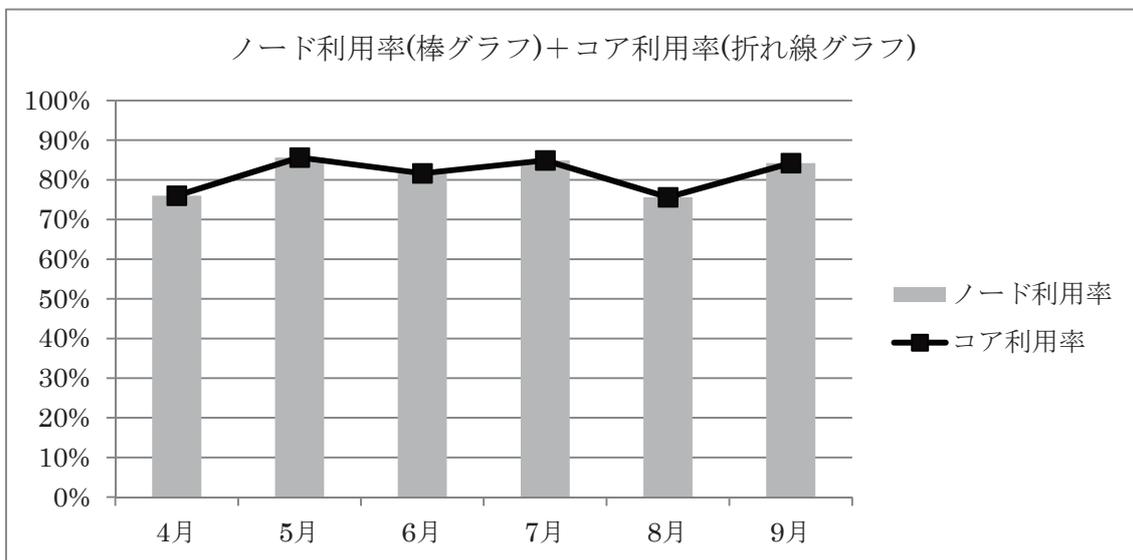
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2015/04/01 0:00	2015/04/02 9:00	33.00
2015/06/09 9:00	2015/06/10 9:30	24.50
2015/08/04 9:00	2015/08/05 9:30	24.50

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]
2015/04/07 9:00	2015/04/07 10:30	1.50
2015/04/09 8:40	2015/04/09 10:30	1.83

2) サービス状況

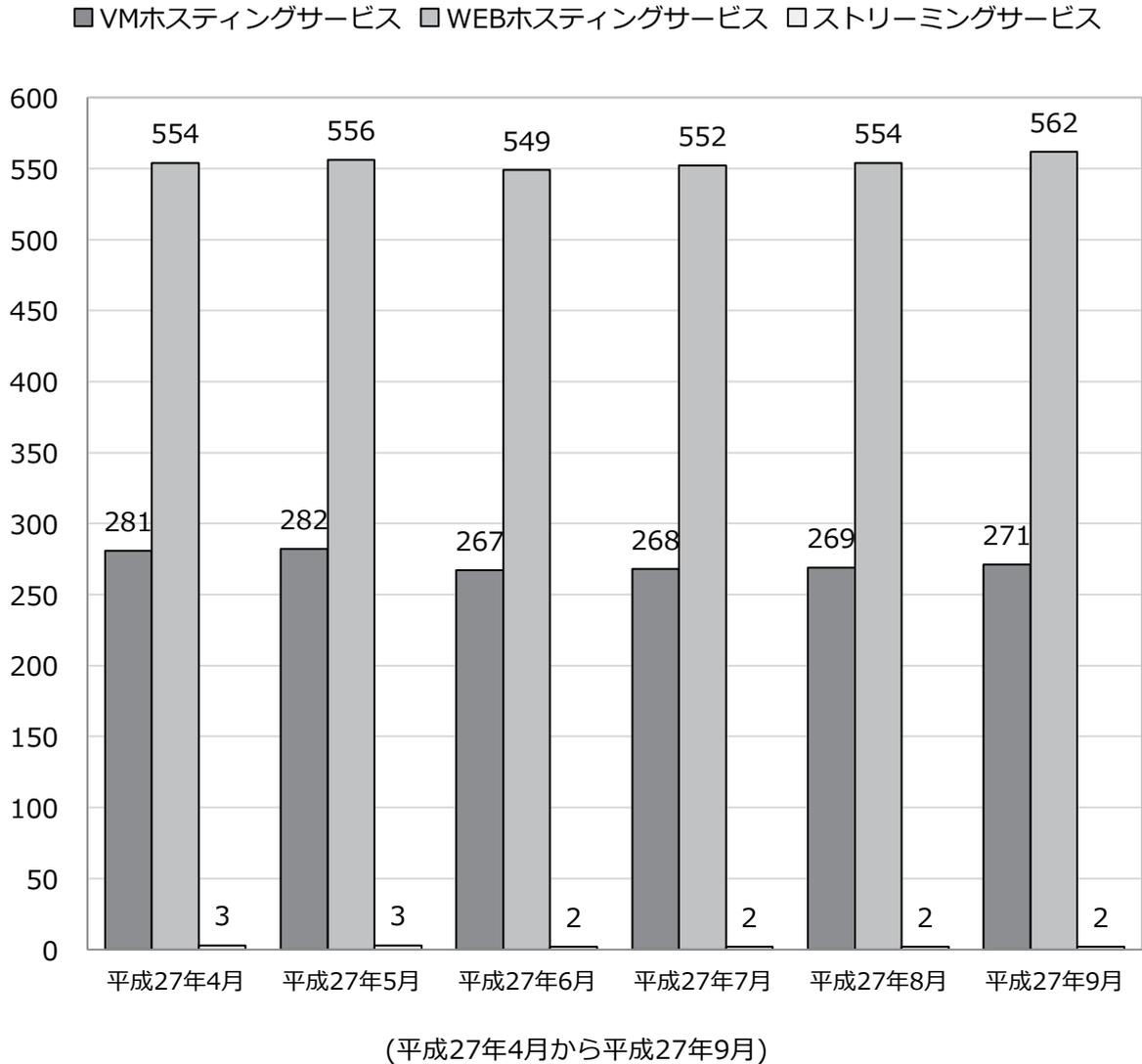
	サービス時間 [h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼働ノード数	ノード利用率
4月	683.67	2,545	7,802	2,046,000	59,226	363.7	76 %
5月	744.00	1,764	5,090	2,145,080	56,508	359.6	86 %
6月	695.50	2,012	5,712	2,200,800	75,703	360.0	81 %
7月	744.00	1,416	6,854	2,300,000	57,220	360.0	85 %
8月	719.50	2,410	9,395	1,969,270	126,659	359.8	76 %
9月	720.00	2,050	15,912	2,207,210	58,038	360.0	84 %
計	4306.67	12,197	50,764	12,868,360	433,353	360.5	81 %



- 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

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27年9月末現在、大型計算機システムの利用件数は、2,782件となっています。

センター利用による研究成果

—平成 26 年度計算機利用結果報告書から—

【1000 情報学】

1. Tatsuya Abe and Toshiyuki Maeda : A General Model Checking Framework for Various Memory Consistency Models : IEEE 28th International Parallel & Distributed Processing Symposium Workshops, pp. 332 - 341, 2014
2. Tatsuya Abe and Toshiyuki Maeda : Optimization of a General Model Checking Framework for Various Memory Consistency Models : Proceedings of the 8th International Conference on Partitioned Global Address Space Programming Models, 2014
3. Masatoshi Kawai, Takeshi Iwashita, and Hiroshi Nakashima : about 48hr to the review due : Proc. Intl. Mtng. High-Performance Computing for Computational Science, 2014
4. Takeshi Minami, Motoharu Hibino, Tasuku Hiraishi, Takeshi Iwashita, and Hiroshi Nakashima : Automatic Parameter Tuning of Three-Dimensional Tiled FDTD Kernel : Proc. Intl. WS. Automatic Performance Tuning, 2014
5. Shingo Okuno, Tasuku Hiraishi, Hiroshi Nakashima, Masahiro Yasugi, and Jun Sese : Parallelization of Extracting Connected Subgraphs with Common Itemsets : IPSJ Trans. Programming, Vol.7, No.3, pp. 22 - 39, 2014
6. Takeshi Iwashita, Naokazu Takemura, and Hiroshi Nakashima : A Fill-In Strategy for Fast ICCG Solver with SIMD Vectorization : Annual Meeting on Advanced Computing System and Infrastructure, 2015
7. Shingo Okuno, Tasuku Hiraishi, Hiroshi Nakashima, Masahiro Yasugi, and Jun Sese : Reducing Redundant Search using Exception Handling in a Task-Parallel Language : Annual Meeting on Advanced

Computing System and Infrastructure, 2015

【1500 生活科学】

8. Yosuke Horiba, Shigeru Inui, Yuki Maeda, Takaaki Shimada, and Hiromi Teraoka : Prediction of Diaper Shape While Worn by Using Finite Element Method - Focus on Posture of Open Legs Wearing Tape-Ty pe Baby Disposable Diaper : SEN-I GAKKAISHI, Vol.70, No.8, pp. 180 - 186, 2014

【4300 物理学】

9. Hirotaka Kitoh-Nishioka and Koji Ando : Charge-Transfer Matrix Elements by FMO-LCMO Approach: Hole Transfer in DNA with Parameter Tuned Range-Separated DFT : Chemical Physics Letters, Vol.621, pp. 96 - 101, 2015
 10. Yosuke Harashima, Kiyoyuki Terakura, Hiori Kino, Shoji Ishibashi and Takashi Miyake : First-Principles Study of Structural and Magnetic Properties of R(Fe,Ti)₁₂ and R(Fe,Ti)₁₂N (R=Nd, Sm, Y) : JPS Conf. Proc., Vol.5, pp. 011021-1 - 011021-8, 2015
 11. Ryuma Sato, Hirotaka Kitoh-Nishioka, Koji Ando, Takahisa Yamato : Computational study on the roles of amino acid residues in the active site formation mechanism of blue-light photore : Chemical Physics Letters, Vol.633, pp. 247 - 251, 2015
 12. Shun Sakuraba, Kiyoshi Asai, Tomoshi Kameda : Predicting RNA Duplex Dimerization Free-energy Changes Upon Mutations Using Molecular Dynamics Simulations : The Journal of Physical Chemistry Letters, Vol.6, pp. 4348 - 4351, 2015
- ### 【4400 地球惑星科学】
13. Kazem Ardaneh, Dongsheng Cai, Ken-Ichi Nishikawa, and Bertrand Lembège : COLLISIONLESS WEIBEL SHOCKS AND

- ELECTRON ACCELERATION IN GAMMA-RAY BURSTS : The Astrophysical Journal, Vol.811, pp. 57 (9pp), 2015
- 【4500 プラズマ科学】
14. Kevin Obrejan, Kenji Imadera, Jiquan Li and Yasuaki Kishimoto : Development of a global toroidal gyrokinetic Vlasov code with new real space field solver : Plasma and Fusion Research, 2014
 15. Kenji Imadera, Yasuaki Kishimoto, Kevin Obrejan Takuya Kobiki and Jiquan Li : Global Profile Relaxation Coupled with $E \times B$ Staircase in Toroidal Flux-Driven ITG Turbulence : Proceedings of 25th Fusion Energy Conference, 2014
- 【4600 基礎化学】
16. 河合信之輔 : 多自由度系ダイナミクスにおける隠された自由度の抽出 : 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015
 17. 河合信之輔, 田中明徳, 久邇実加子, 関根理香 : 水溶液中のイオンの拡散挙動における環境ダイナミクス : 日本化学会第 95 春季年会, 2015
- 【4800 材料化学】
18. K. Shizu, M. Uejima, H. Nomura, T. Sato, K. Tanaka, H. Kaji, and C. Adachi : Enhanced Electroluminescence from a Thermally Activated Delayed-Fluorescence Emitter by Suppressing Nonradiative Decay : Phys. Rev. Applied, Vol.3, No.1, pp. 014001-1 - 014001-7, 2015
 19. K. Shizu, H. Tanaka, M. Uejima, T. Sato, K. Tanaka, H. Kaji, and C. Adachi : Strategy for Designing Electron Donors for Thermally Activated Delayed Fluorescence Emitters : J. Phys. Chem. C, Vol.119, No.3, pp. 1291 - 1297, 2015
- 【5000 機械工学】
20. T.Kitano, J. Nishio, R. Kurose, S. Komori : Effect of ambient pressure on soot formation in oxy-fuel spray jet flame : In Proc. of The 15th International Heat Transfer Conference (IHTC-15) , Vol. DIGITAL LIBRARY, pp. IHTC15-8744 (15 pages) -, 2014
21. 森田早紀, 西川雅章, 北條正樹 : 有限要素解析を用いた角部を有する構造のための織物プリフォーム賦形における変形の評価 : 第 5 回日本複合材料会議 講演論文集, pp. 3B01 -, 2014
 22. 内藤悠太, 西川雅章, 北條正樹 : 形状記憶複合材料の展開のための加熱温度分布の検討 : 第 5 回日本複合材料会議 講演論文集, pp. 3C-09 -, 2014
 23. 西川雅章, 上田桂, 北條正樹, 武田一朗 : キンク損傷予測に基づく一方向繊維強化複合材料の圧縮強度解析法の検討 : 2014 年度 JCOM 若手シンポジウム 講演論文集, pp.27 -, 2014
 24. 橋爪良輔, 新玉重貴, 西川雅章, 北條正樹 : ひずみ不変量破壊理論を用いた CFRPL 字曲り梁の層間はく離強度解析 : 第 39 回複合材料シンポジウム 講演論文集, pp.79 -, 2014
 25. 北口尚紀, 金崎真人, 西川雅章, 北條正樹 : 熱融着を目的とした CF/PA6 複合材料の平行平板間における繊維・樹脂流動特性評価 : 第 39 回複合材料シンポジウム 講演論文集, pp.65 -, 2014
 26. 福造晃, 西川雅章, 北條正樹 : 射出成形された CFRTP の非線形力学特性の解析 : 第 39 回複合材料シンポジウム 講演論文集, pp. 81 -, 2014
 27. 森田早紀, 西川雅章, 北條正樹 : 角部を有する構造のための織物プリフォーム賦形における繊維束変形の評価 : 第 39 回複合材料シンポジウム 講演論文集, pp. 193 -, 2014
 28. 内藤悠太, 西川雅章, 北條正樹 : 展開時間を考慮した形状記憶複合材料の展開モデルの検討 : 第 58 回宇宙科学技術連合講演会 講演論文集, pp. 2M07 -, 2014
 29. 永田恵輔, 西川雅章, 北條正樹 : シェル要素を用いた展開膜の展開挙動の解析 : 第 58 回宇宙科学技術連合講演会 講演論文集, pp. 2M08 -, 2014
- 【5200 土木工学】
30. Taiki Fumuro, Seizo Tanaka, Kazuo Kashiya : Stabilized Finite Element Method for Large-Scale Tsunami Simulation : The 1st International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, pp. 210 - 213, 2014

31. 不室太希, 田中聖三, 川辺起史, 檜山和男 : 安定化有限要素法による大規模津波シミュレーションとその可視化 : 計算工学講演会論文集, 2014
32. 不室太希, 田中聖三, 檜山和男 : VOF 安定化有限要素法による大規模並列津波解析 : 第 28 回数値流体力学シンポジウム 講演要旨集, 2014
33. Yasuaki Ito, Hiromichi Shirato, Masaru Matsumoto, Kojiro Nozawa : Span-wise correlations of fluctuating lift forces on 2D rectangular cylinders : *Journal of Wind and Engineering*, Vol.11, No.2, pp.1 - 10, 2014
34. Yasuaki Ito, Hiromichi Shirato, Masaru Matsumoto : Research on span-wise correlations of fluctuating lift forces on rectangular cylinders with various side ratio : *Proceedings of 6th Computational Wind Engineering*, 2014
【5400 材料工学】
35. Y. Hinuma, A. Gruneis, G. Kresse, and F. Oba : Band alignment of semiconductors from density-functional theory and many-body perturbation theory : *Physical Review B*, Vol.90, No.15, pp. 155405-1 - 155405-16, 2014
36. Y. Kumagai, M. Choi, Y. Nose, and F. Oba : First-principles study of point defects in chalcopyrite ZnSnP₂ : *Physical Review B*, Vol.90, No.12, pp. 125202-1 - 125202-12, 2014
37. Y. Kumagai and F. Oba : Electrostatics-based finite-size corrections for first-principles point defect calculations : *Physical Review B*, Vol.89, No.19, pp. 195205-1 - 195205-15, 2014
【5500 プロセス工学】
38. T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano and S. Dost : Numerical investigation of the effect of free surface shape on the direction of thermocapillary flow in a thin circular pool : *J. Chem. Eng. Jpn*, Vol.48, pp. 407 - 417, 2015
39. Takuya Yamamoto, Youhei Takagi, Yasunori Okano, Sadik Dost : Liquid film volume effect on unsteady thermocapillary flow due to hydrothermal wave in a thin circular liquid film : *Proc. of The joint conference of 6th International Symposium on Physical Science in Space (ISPS6) and 10th International Conference on Two-Phase Systems for Space and Ground Applications (ITTW2015)*, pp. 16F1Ma-13 -, 2015
40. 山本卓也, 高木洋平, 岡野泰則 : 円形液膜内振動 Marangoni 対流に対する数値解析 : 日本流体力学会年会 2015 講演要旨集, 2015
【5600 総合工学】
41. Kazushi Sato and Katsuyoshi Fukiba : Effect of Wing Shape and Reynolds Number in Drag Reduction Method by Using Wing with Rotation Shaft : 11th International Conference on Flow Dynamics, 2014
42. 佐藤一志, 吹場活佳 : 自由回転軸を持つ翼型を用いた抗力低減法における翼形状と Re 数の影響 : 第 46 回流体力学講演会, 2014
【6200 林学】
43. 渡辺靖崇・鈴木保志・後藤純一・酒井寿夫 : 施業方法の違いによる人工林における土砂流出量の変化 : *森林利用学会誌*, Vol.29, No.3, pp. 149 - 156, 2014
【6800 薬学】
44. Nobuya Tsuji, Yusuke Kobayashi, Yoshiji Takemoto : Electrophilic iodine(I) compounds induced semipinacol rearrangement via C-X bond cleavage : *Chem. Commun.*, Vol.50, pp. 13691 - 13694, 2014
45. Chihiro Tsukano, Masataka Okuno, Hiromi Nishiguchi, Yoshiji Takemoto : Palladium(0)-Catalyzed Carbon[BOND]Hydrogen Bond Functionalization for the Synthesis of Indoloquinazolinones : *Adv. Synth. Catal.*, Vol.356, No.7, pp. 1533 - 1538, 2014
46. Yusuke Kobayashi, Shanji Li, Yoshiji Takemoto : Oxidant-Resistant Hydrogen-Bond-Donating Organocatalyst for Enantioselective Nucleophilic Epoxidation of α, β -Unsaturated Amides : *Asian. J. Org. Chem*, Vol.3, No.4, pp. 403 - 407, 2014
【9999 その他】
47. X.-Y. Jin, Y. Kuramashi, Y. Nakamura, S. Takeda, A. Ukawa : Critical endpoint of the finite temperature phase transition for three

flavor QCD : Physical Review D, Vol.91, pp.
014508 -, 2015

大型計算機システム利用負担金

別表1 スーパーコンピュータシステム

コース	タイプ	セット	利用負担額	提供サービス						
				システム	バッチ	システム資源	経過時間 (時間)	ディスク (GB)	利用者 番号	
エントリ	-	基本	12,600 円/年	B	共有	最大1ノード相当((16コア、64GBメモリ)×1)	1	60	-	
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((32コア、64GBメモリ)×4)	168	1,000	-	
	タイプB	基本	100,000 円/年	B	共有	最大4ノード相当((16コア、64GBメモリ)×4)	168	1,000	-	
	タイプC	基本	100,000 円/年	C	共有	最大2ソケット相当((8コア、384GBメモリ)×2)	168	1,000	-	
	タイプD	基本	100,000 円/年	D	共有	最大2ノード相当((28コア、64GBメモリ)×2)	168	1,000	-	
	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)	168	1,000	-	
	タイプG	基本	100,000 円/年	B (GPU)	共有	最大2ノード相当((16コア、64GBメモリ + 1GPU)×2)	168	1,000	-	
	グループ	タイプA1	最小	200,000 円/年	A	優先	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	336	8,000	8
追加単位			200,000 円/年	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)			-	8,000	8	
タイプA2		最小	240,000 円/年	標準優先		8ノード((32コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16	
		追加単位	120,000 円/年			4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	-	4,800	8	
タイプA3		最小	600,000 円/年	占有		8ノード((32コア、64GBメモリ)×8)	336	16,000	16	
		追加単位	300,000 円/年			4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000	8	
タイプB1		最小	250,000 円/年	B	優先	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	336	8,000	8	
		追加単位	250,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000	8	
タイプB2		最小	300,000 円/年		標準優先	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16	
		追加単位	150,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	-	4,800	8	
タイプB3		最小	750,000 円/年		占有	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	336	16,000	16	
		追加単位	375,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000	8	
タイプC1		最小	400,000 円/年	C	優先	2ソケット((8コア、384GBメモリ)×4)	336	8,000	16	
		追加単位	200,000 円/年			2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	-	4,000	8	
タイプC2		最小	240,000 円/年		標準優先	4ソケット((8コア、384GBメモリ)×4)	336	4,800	16	
		追加単位	120,000 円/年			2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	-	2,400	8	
タイプD1		最小	300,000 円/年		D	優先	4ノード((28コア、64GBメモリ)×4)	336	8,000	8
		追加単位	150,000 円/年				2ノード((28コア、64GBメモリ)×2)	-	4,000	4
タイプD2		最小	360,000 円/年	標準優先		8ノード((28コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16	
		追加単位	90,000 円/年			2ノード((28コア、64GBメモリ)×2)	-	2,400	4	
タイプD3		最小	900,000 円/年	占有		8ノード((28コア、64GBメモリ)×8)	336	16,000	16	
		追加単位	450,000 円/年			4ノード((28コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000	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)	336	8,000	8	
		追加単位	140,000 円/年			2ノード((10コア、32GBメモリ + 1MIC)×2)	-	4,000	4	
タイプE2		最小	336,000 円/年		標準優先	8ノード((10コア、32GBメモリ + 1MIC)×8)	336	9,600	16	
		追加単位	84,000 円/年			2ノード((10コア、32GBメモリ + 1MIC)×2)	-	2,400	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)	336	16,000	16	
		追加単位	420,000 円/年			4ノード((10コア、32GBメモリ + 1MIC)×4)	-	8,000	8	
タイプG1		最小	250,000 円/年	B (GPU)	優先	2ノード((16コア、64GBメモリ + 1GPU)×2)	336	4,000	8	
		追加単位	250,000 円/年			2ノード((16コア、64GBメモリ + 1GPU)×2)	-	4,000	8	
大規模ジョブ	タイプA	最小	20,000 円/週(7日)	A	占有	8ノード((32コア、64GBメモリ)×8)	-	-	-	
		追加単位	5,000 円/週(7日)			2ノード((32コア、64GBメモリ)×2)	-	-	-	
	タイプB	最小	24,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	-	-	-	
		追加単位	6,000 円/週(7日)			2ノード((16コア、64GBメモリ)×2)	-	-	-	
	タイプC	最小	20,000 円/週(7日)	C	占有	4ソケット((8コア、384GBメモリ)×4)	-	-	-	
		追加単位	10,000 円/週(7日)			2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	-	-	-	
	タイプD	最小	30,000 円/週(7日)	D	占有	8ノード((28コア、64GBメモリ)×8)	-	-	-	
		追加単位	7,500 円/週(7日)			2ノード((28コア、64GBメモリ)×2)	-	-	-	
	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	7,000 円/週(7日)			2ノード((10コア、32GBメモリ + 1MIC)×2)	-	-	-	
	タイプG	最小	24,000 円/週(7日)	B (GPU)	占有	4ノード((16コア、64GBメモリ + 1GPU)×4)	-	-	-	
		追加単位	12,000 円/週(7日)			2ノード((16コア、64GBメモリ + 1GPU)×2)	-	-	-	
	専用クラス	—	最小	750,000 円/年	B	-	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	-	16,000	16
			追加単位	375,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000	8
ライセンスサービス			20,000 円/年			可視化ソフト(AVS,ENVI/IDL)およびプリポストウェアの1ライセンスにつき				

備考

- 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
 - 大判プリンタサービス
 - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ライセンスサービスの申請には、大型計算機システムの利用者であることが必要である。
- 「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。
「標準優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。
「優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。
「占有」：稼働状況によらず記載値(以上)の計算資源が確保されることを保証する。
- ディスク容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。

6. グループコース及び専用クラスターコースのシステム資源は、下記の負担額を支払うことにより増量することができる。
なお増量は毎月1日に実施し、増量した資源は当該年度末までの期間にわたって利用されるものとする。

コース	タイプ	追加負担金額 (増量単位あたり)	システム資源増量単位	ディスク増量 (GB)
グループ	タイプA1	20,000 円/月	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプA2	12,000 円/月	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	4,800
	タイプA3	30,000 円/月	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプB1	25,000 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプB2	15,000 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	4,800
	タイプB3	37,500 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプC1	20,000 円/月	2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	4,000
	タイプC2	12,000 円/月	2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	2,400
	タイプD1	15,000 円/月	2ノード((28コア、64GBメモリ)×2)	4,000
	タイプD2	9,000 円/月	2ノード((28コア、64GBメモリ)×2)	2,400
	タイプD3	45,000 円/月	4ノード((28コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプE1	14,000 円/月	2ノード((10コア、32GBメモリ + 1MIC)×2)	4,000
	タイプE2	8,400 円/月	2ノード((10コア、32GBメモリ + 1MIC)×2)	2,400
	タイプE3	42,000 円/月	4ノード((10コア、32GBメモリ + 1MIC)×4)	8,000
タイプG1	25,000 円/月	2ノード((16コア、64GBメモリ + 1GPU)×2)	4,000	
専用クラスター	—	37,500 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	8,000

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

利用期間		3ヶ月	6ヶ月	9ヶ月		
グループ コース	タイプA1	最小 追加単位	80,000 円 120,000 円	180,000 円 180,000 円		
	タイプA2	最小 追加単位	96,000 円 48,000 円	144,000 円 72,000 円	216,000 円 108,000 円	
	タイプA3	最小 追加単位	240,000 円 120,000 円	360,000 円 180,000 円	540,000 円 270,000 円	
	タイプB1	最小 追加単位	100,000 円 100,000 円	150,000 円 150,000 円	225,000 円 225,000 円	
	タイプB2	最小 追加単位	120,000 円 60,000 円	180,000 円 90,000 円	270,000 円 135,000 円	
	タイプB3	最小 追加単位	300,000 円 150,000 円	450,000 円 225,000 円	675,000 円 337,500 円	
	タイプC1	最小 追加単位	160,000 円 80,000 円	240,000 円 120,000 円	360,000 円 180,000 円	
	タイプC2	最小 追加単位	96,000 円 48,000 円	144,000 円 72,000 円	216,000 円 108,000 円	
	タイプD1	最小 追加単位	75,000 円 37,500 円	150,000 円 75,000 円	225,000 円 112,500 円	
	タイプD2	最小 追加単位	90,000 円 22,500 円	180,000 円 45,000 円	270,000 円 67,500 円	
	タイプD3	最小 追加単位	225,000 円 112,500 円	450,000 円 225,000 円	675,000 円 337,500 円	
	タイプE1	最小 追加単位	70,000 円 35,000 円	140,000 円 70,000 円	210,000 円 105,000 円	
	タイプE2	最小 追加単位	84,000 円 21,000 円	168,000 円 42,000 円	252,000 円 63,000 円	
	タイプE3	最小 追加単位	210,000 円 105,000 円	420,000 円 210,000 円	630,000 円 315,000 円	
	タイプG1	最小 追加単位	100,000 円 100,000 円	150,000 円 150,000 円	225,000 円 225,000 円	
	専用クラスター	—	最小 追加単位	300,000 円 150,000 円	450,000 円 225,000 円	675,000 円 337,500 円

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

9. 機関・部局定額制度

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

10. 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	10,300 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	12,900 円/月	空冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき

別表2(汎用コンピュータシステム)

区分	利用負担額	単位
VMホスティングサービス	72,000円/年	1仮想マシンにつき
ホームページサービス	6,000円/年	1ドメイン名につき
ストリーミングサービス	6,000円/年	1申請につき

備考

1. 利用負担額は、総額表示である。
2. 上記表の汎用コンピュータシステムのサービスを利用するためには、大型計算機システムの利用者であることが必要である。
3. VMホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことによりCPU、メモリ、ディスクを増量することができる。

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

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

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

5. ホームページサービス及びストリーミングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことにより公開スペースの上限を拡大することができる。

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

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

別表3 スーパーコンピュータシステム(民間機関利用)

システム	システム資源	経過時間(時間)	ディスク(GB)	利用者番号	利用負担額
A	8ノード(32コア、64GBメモリ)×8	336	9,600	16	960,000円/年
	12ノード(32コア、64GBメモリ)×12	336	14,400	24	1,440,000円/年
	16ノード(32コア、64GBメモリ)×16	336	19,200	32	1,920,000円/年
B	8ノード(16コア、64GBメモリ)×8	336	9,600	16	1,200,000円/年
	12ノード(16コア、64GBメモリ)×12	336	14,400	24	1,800,000円/年
	16ノード(16コア、64GBメモリ)×16	336	19,200	32	2,400,000円/年
D	8ノード(28コア、64GBメモリ)×8	336	9,600	16	1,440,000円/年
	12ノード(28コア、64GBメモリ)×12	336	14,400	24	2,160,000円/年
	16ノード(28コア、64GBメモリ)×16	336	19,200	32	2,880,000円/年
E	8ノード(10コア、32GBメモリ+1MIC)×8	336	9,600	16	1,344,000円/年
	12ノード(10コア、32GBメモリ+1MIC)×12	336	14,400	24	2,016,000円/年
	16ノード(10コア、32GBメモリ+1MIC)×16	336	19,200	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。
2. ディスク容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。
3. 通年でなく利用する場合には、下記の負担額を支払うものとする。ただし、利用期間は当該年度内に限るものとする。

システム	システム資源	利用期間		
		3ヶ月	6ヶ月	9ヶ月
A	8ノード	240,000円	480,000円	720,000円
	12ノード	360,000円	720,000円	1,080,000円
	16ノード	480,000円	960,000円	1,440,000円
B	8ノード	300,000円	600,000円	900,000円
	12ノード	450,000円	900,000円	1,350,000円
	16ノード	600,000円	1,200,000円	1,800,000円
D	8ノード	360,000円	720,000円	1,080,000円
	12ノード	540,000円	1,080,000円	1,620,000円
	16ノード	720,000円	1,440,000円	2,160,000円
E	8ノード	336,000円	672,000円	1,008,000円
	12ノード	504,000円	1,008,000円	1,512,000円
	16ノード	672,000円	1,344,000円	2,016,000円

— サービス利用のための資料一覧 —

1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

- 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 D : magnolia.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム E : camellia.kudpc.kyoto-u.ac.jp

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

2. 問い合わせ先 & リンク集

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

編 集 後 記

情報環境機構のウェブページ

http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/supercomputer/coming_2016.html

等でもアナウンスされている通り，現行のスーパーコンピュータシステムのサービス（一部除く）は2016年8月中に終了し，10月より次期システムによるサービスを開始する予定です．本広報誌でも新システムの紹介記事を予定しておりますのでご期待ください．それに合わせてというわけでもないのですが，表紙などのデザインの刷新も計画しております．その際，この編集後記を残すのかということをやっと迷っております．編集委員の日記的な文章という意味での編集後記は今回か次回くらいが最後になるかもしれません．楽しく読んでいるので無くさないでくれという意見がありましたらご一報を．

(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. 14, No. 2

2016年3月14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

小林 寿

高見 好男

沢田 吉広

山口 倉平

元木 環

表紙デザイン：谷 卓司

(ティアンドティ・デザインラボ)

目次

【巻頭言】

- ・ Vol.14, No.2 号の発刊にあたって 1
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)研究報告】

- ・ 三次元非定常マランゴニ対流の解明 2
山本 卓也
- ・ 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 4
茂木 孝介
- ・ 準周期軌道に纏わる各種平均量の計算の高速化 6
Suddhasattwa Das, Yoshitaka Saiki, Evelyn Sander, James A Yorke
- ・ フラグメント分子軌道法と非経験的に最適化した長距離補正密度汎関数法による電荷移動パラメータの高精度計算 .. 8
鬼頭(西岡) 宏任, 安藤 耕司
- ・ 射影された時系列データに対する経験的確率微分方程式モデリングとアンサンブル軌道予測 10
中野 直人
- ・ 相分離による自己組織化構造形成に与える乱流影響 12
高木 洋平
- ・ 液柱内の温度差と濃度差に起因するマランゴニ対流の不安定性の解明 14
水口 尚
- ・ 多孔質壁面による乱流構造の変化と抵抗低減効果 16
中本 真義
- ・ 有機太陽電池応用を目指した新規光機能性有機分子材料の構造と電子構造の解明 18
梅山 有和
- ・ 急縮小・急拡大流路における高分子溶融体流れのマルチスケールシミュレーション 20
原田 浩平, 谷口 貴志
- ・ 周囲気体を考慮したHZ液柱内温度差マランゴニ対流における粒子集合現象の数値解析 23
中村 翔一

【プログラム高度化支援事業研究報告】

- ・ ディレクティブベースプログラミングによるFITの高速化と性能検証 25
中畑 和之
- ・ 動的/静的水～土骨格連成有限変形解析コードの高度化～領域分割法の適用の試み～ 31
野田 利弘
- ・ 破壊力学に基づく損傷モデルを用いた鉄筋コンクリートの3次元破壊シミュレーション 35
車谷 麻緒
- ・ 都市の人口規模・空間分布における秩序形成 39
森 知也

【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】

- ・ 高精度差分法による高レイノルズ数チャンネル乱流場の大規模直接数値シミュレーション 42
山本 義暢

【サービスの記録・報告】

- ・ スーパーコンピュータシステムの稼働状況とサービスの利用状況 46
- ・ センター利用による研究成果(平成26年度) 52

【資料】

- ・ 大型計算機システム利用負担金 別表 56
- ・ サービス利用のための資料一覧 59

【編集後記】

- ・ 編集後記, 奥付 60