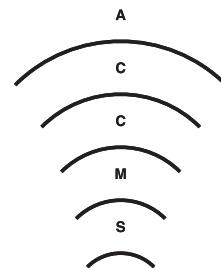


京都大学学術情報メディアセンター

Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University

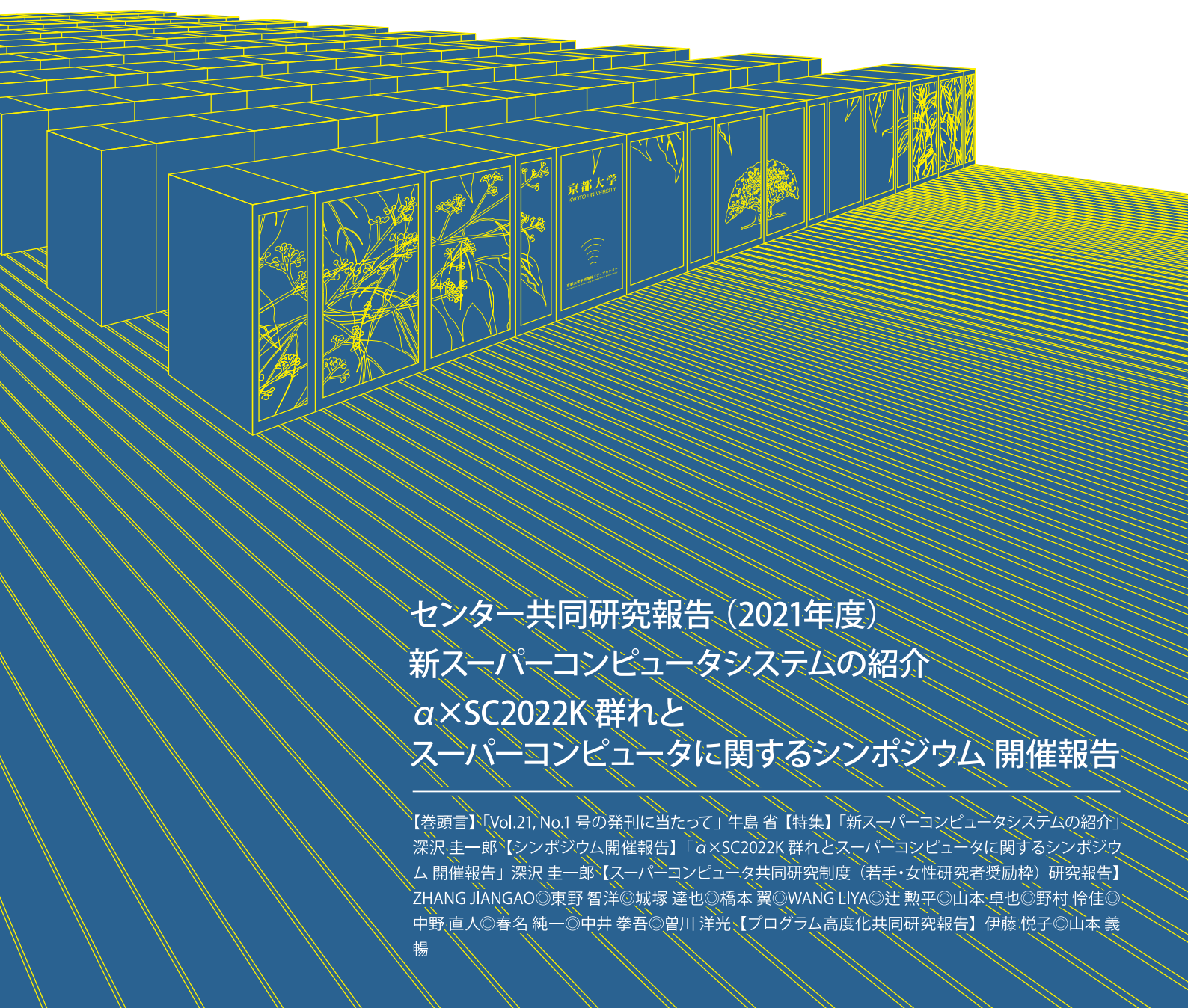


広報

全国共同利用版

Vol.21, No.1 2022

ISSN 1347-3581



センター共同研究報告（2021年度） 新スーパーコンピュータシステムの紹介 α ×SC2022K 群れと スーパーコンピュータに関するシンポジウム 開催報告

【巻頭言】「Vol.21, No.1 号の発刊に当たって」牛島 省【特集】「新スーパーコンピュータシステムの紹介」
深沢 圭一郎【シンポジウム開催報告】「 α ×SC2022K 群れとスーパーコンピュータに関するシンポジウム
開催報告」深沢 圭一郎【スーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性研究者奨励枠）研究報告】
ZHANG JIANGAO◎東野 智洋◎城塚 達也◎橋本 翼◎WANG LIYA◎辻 勲平◎山本 卓也◎野村 怜佳◎
中野 直人◎春名 純一◎中井 拳吾◎曾川 洋光【プログラム高度化共同研究報告】伊藤 悦子◎山本 義
暢

Vol.21, No.1 号の発刊に当たって

京都大学学術情報メディアセンター 牛島 省

本号では、京都大学学術情報メディアセンターにおいて実施された 2021 年度の共同研究報告について特集いたします。2021 年度は、12 件の「若手・女性研究者奨励枠」と 2 件の「プログラム高度化共同研究」による共同研究が実施されました。

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

上記の共同研究制度のうち、「若手・女性研究者奨励枠」の応募資格は、(1) 40 歳未満の若手研究者 (学生を含む、性別は問わない)、あるいは、(2) 女性研究者 (年齢は問わない)、とされています。この「若手・女性研究者奨励枠」では、スーパーコンピュータを利用することで学術的にインパクトがある成果を創出できる課題に対して、計算機利用負担金の全額または一部を本センターが負担しています。さらに、「若手・女性研究者奨励枠」は、JHPCN (学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点) の活動の一環と位置づけられており、優れた課題は、JHPCN の萌芽型共同研究へ推薦されます。推薦された課題は、JHPCN シンポジウムにてポスター発表を行うことが可能となるなどの特典がありますので、是非この共同研究制度をご活用ください。

本号に掲載された 12 件の「若手・女性研究者奨励枠」の研究成果報告では、複雑流体および流体構造連成問題、プラズマ計算、各種の分子構造・分子動力学計算などに加え、ニューラルネットワークや機械学習に関する課題など多様な研究が行われ、全国 7 大学の若手・女性研究者の研究をサポートいたしました。なお、JHPCN の萌芽型共同研究には 9 件の課題が採択されました。

「大規模計算支援枠」は、一定規模の計算資源を 2 週間程度ご利用頂くことが可能な共同研究制度で、利用負担金は本センターが全額負担するものです。2021 年度は応募がありませんでしたが、大規模計算の実施を希望される方はご検討ください。

また、「プログラム高度化共同研究」では、京都大学のスーパーコンピュータをグループコースまたは専用クラスターコースでご利用の研究者 (JHPCN および HPCI にて京都大学のスーパーコンピュータを利用する研究者も含む) を対象に、プログラムの制御構造・データ構造の改良による性能チューニングや並列化手法の改良、問題分割・負荷分散方式などの改良による大規模計算プログラムの高度化・高性能化などを支援しています。2021 年度は、(1) 高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と有限密度 2 カラー QCD の相図の決定、(2) 低メモリ・低コスト通信乱流大規模直接数値計算コードの高度化、という 2 件のプログラム高度化支援を行いました。これらの共同研究では、プロセス並列の通信の効率化やスレッド並列計算の高度化などの検討を加え、応募者に満足いただける性能向上を実現しました。

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。

新スーパーコンピュータシステムの紹介

深沢 圭一郎

京都大学学術情報メディアセンター

京都大学では、1969年にFACOM230をスーパーコンピュータという名称ではなく汎用コンピュータとして導入したことが、大規模計算機システム導入の始まりになっています。当初はその時代のスーパーコンピュータの代表的な構成ということもあり、ベクトル型CPUを搭載したシステムが導入されていましたが、2000年にHPC2500というスカラ型CPU（SPARC64V）を初めて導入し、2007年にはいわゆるT2Kスパコンとして4ソケット構成のx86型CPUを導入しています。その次のリプレイスでは、現在の構成に続くメニーコア型のシステムA、汎用型のシステムB、大規模共有メモリ型のシステムCが始まっています。今回のリプレイスにおいても、この考え方を踏襲し、メニーコア型かつ高メモリバンド幅のシステムA、汎用型かつ高メモリサイズのシステムB、大規模共有メモリ型のシステムCの導入を計画しました。更に機械学習向けとして小規模ですが、GPUといったアクセラレータを搭載したシステムの導入も計画しました。ストレージシステムでは、今回はバーストバッファではなく、SSDで構成された高速アクセスが可能なストレージの導入も計画しました。このようなシステムの導入を目指して、調達を行っていましたが、新型コロナウイルス感染症に影響された半導体不足、ウクライナ危機による物価高や円安などにより、調達時期が遅れてしまい、利用者の方には大変ご迷惑をおかけしています。この記事が執筆時点（10月末）では、新スパコンの契約が終わり、稼働に向けて全力で準備をしているところです。

この新スパコンですが、まとめると図1のようなシステムになりました。システムA（Camphor3）には新型Xeonと高メモリバンド幅を持つHBM2eを搭載したノードとなっており、ノード当たりの性能は6TFLOPSに近い性能となっています。システム全体では1120ノードとなっており理論性能は

5.8PFLOPS程度ということになっています。見かけ上の性能はあまり前システムAと比べて向上していませんが、HBM2eの効果により、これまでより高い実行性能となるアプリケーションが多いと考えています。

システムB（Laurel3）ではシステムAと同じ新型Xeonですが、DDR5を512GB/ノード搭載したシステムです。システムAの4倍のメモリサイズ、DDR系ということで低メモリアクセスレイテンシとなっています。システム全体では370ノードとなり、前システムBと比べてノード数が半分以下となっていますが、ノード当たりの性能がAVX-512対応やコア数増加により向上しており、2PFLOPSという性能となっています。

システムC（Cinnamon3）では、システムBの構成にメモリを2TB/ノードと増加させ、大規模共有メモリシステムとしています。こちらは前回と同じで16ノードとなっています。

今回新しく導入するシステムG（Gardenia）として、NVIDIA A100（80GB）を4枚/ノード搭載し、CPUはMilan世代のEPYC×2とDDR4 512GBとなっています。全体として16ノードと小規模ですが、主として1ノード利用を想定しており、ノード内GPUメモリが320GB（ノード内メインメモリは512GB）と多くあることで、ノード内で閉じる機械学習向けシステムとしています。

ストレージではHDDによる40PBとSSDによる4PBの容量を持つシステムを導入し、計算によるデータ出力だけでなく、様々なデータを集める場所としての利用も想定しています。データ収集にはVMホスティングサーバを利用することができます。今回の新システムとVMホスティングサーバとの間は、物理的に直結するネットワーク構成を踏襲しており、これまでと同様に効率的にご利用いただける環境となっています。

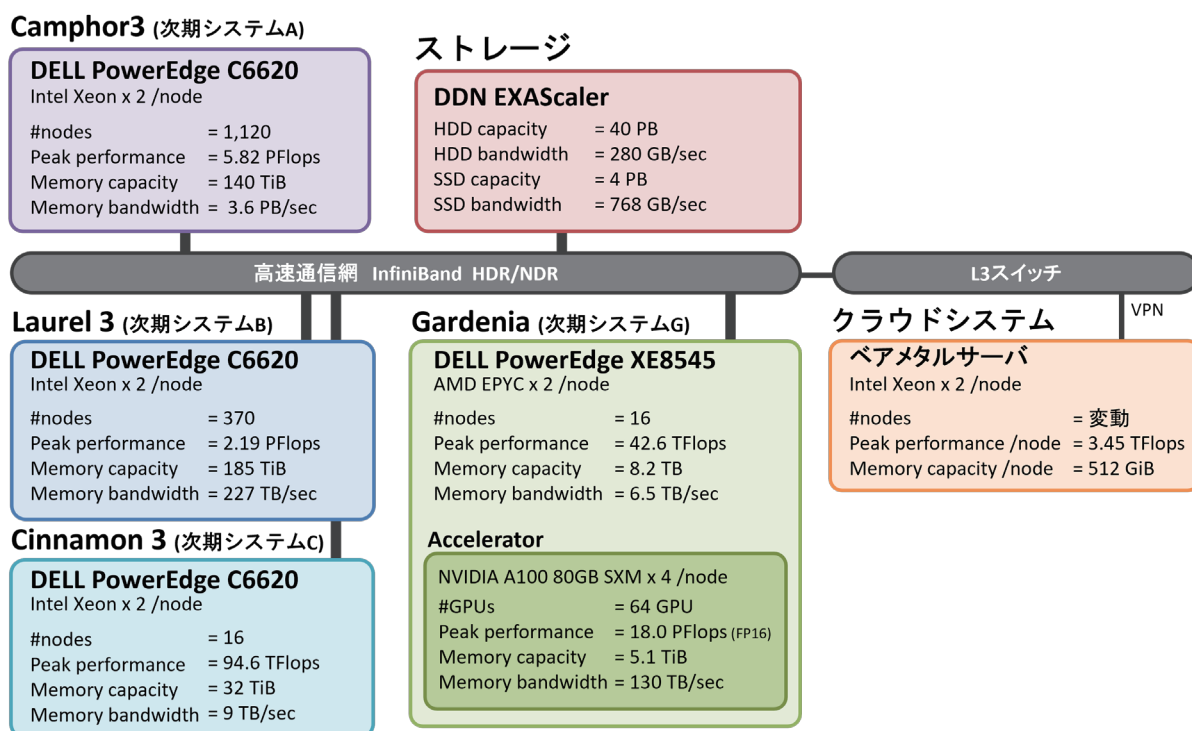


図1 新スーパーコンピュータシステム概要

利用開始時期に関しては、情報環境機構の次期スパコンの Web ページ (https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/supercomputer/other/coming_2022.html) を確認いただくと最新情報が公開されていますが、現在はシステム A と SSD による高速ストレージ以外を 2023 年 1 月頃に試験運用を開始し、すべてのシステムの運用開始を 2023 年 7 月に予定しています。このように計算資源が無い時期が長く続いてしまうため、クラウド資源の利用を準備しています。新スパコンではクラウドバースティングと呼ばれる計算資源のクラウド環境への拡張機能を持たせていました。これを利用し、2022 年の 11 月中には本年度 7 月まで利用いただいたスパコンユーザのみなさまへクラウド環境による計算機資源の提供を行う予定です。これ以外にも何らかの計算資源の提供や新システムのできる限りの早期提供を考えています。

これまではハードウェアの紹介でしたが、ジョブスケジューラやアプリケーションに関しても新スパコンでは変更があります。ジョブスケジューラでは、前システムでは PBS、その前は NQS と変更が続いていますが、今回も変更があり Slurm と呼ばれるオープンソースのスケジューラになりました。

Slurm は世界で多く利用されているスケジューラとなっています。これまでの京都大学のスパコンジョブスケジューラで行っていたことは、Slurm でも実現できるように準備していますので、一部スクリプト記述書式の変更が出るかもしれませんが、これまでと同様の機能はカバーされています。

一方でアプリケーションですが、近年のライセンス料の高騰に伴い、スパコン導入アプリケーションの整理を行いました。できる限り削減をしないために、一部アプリケーションでは永続ライセンスへの変更（サポートがなく、バージョンアップに制限あり）し、SAS は導入を見送りました。SAS に関しては個人利用ライセンスのご購入や他センターのご利用をお願いします。

今回のリプレイスでは、世界的な様々な状況により導入システムの資源削減や導入遅れなど現在もご迷惑をおかけしております。本来であれば、一部システムの性能評価などをご報告したいところでしたが、実機が無いため、性能に関しては次号への掲載を予定しています。利用者の期待に応えられるシステムを全力で準備していますので、運用開始までお待ちください。リプレイスへのご理解ご協力どうぞよろしくお願いいたします。

α×SC2022K 群れとスーパーコンピュータに関するシンポジウム

開催報告

深沢 圭一郎

京都大学学術情報メディアセンター

1 α×SCとは

京都大学学術情報メディアセンターと九州大学情報基盤研究開発センターでは「なにか×スパコン(SC)」というテーマを掲げることで、その「なにか」の分野とスパコンの分野で新しい共同研究が生まれることを期待したシンポジウムを年二回開催しています。2018年から開催しており今回が8回目の開催になります。様々な分野にコンピュータが利用されている現在では、スパコンセンターのあり方もこれまでとは変わる必要があります。そこで、これまでのスパコン利用者だけでなく、新しい分野にスパコンを使ってもらい、より良い成果やこれまでにない成果の創出に繋がるきっかけ作りが必要となると考え、シンポジウムを開催しています。

今回は、2022年度の京都大学担当回として、「なにか」を「群れ」としたα×SC2022K 群れとスーパーコンピュータに関するシンポジウムを2022年9月1日13時30分～18時15分に開催しました(2022KのKはKyotoのKです)。新型コロナウイルス感染症への対策として2021年度は一部講演者のみ現地参加とし、基本的にはリモートでの参加という形でしたが、2022年度は現地参加も可能なハイブリッド開催としました。

今回テーマを「群れ」とした理由は、筆者が研究代表者として、京都大学研究支援 SPIRITS 2021-2022年度「プラズマ粒子シミュレーションの応用による野生ウマの行動数値実験モデルの確立」というプロジェクトに採択されており、群れに関する研究者と繋がりを持たせたことによります(このプロジェクトとの共催としています)。また、九州大学情報基盤研究開発センターとの共催でもあります。SPIRITSとの共催のおかげで、昨年度に引き続き図



図1 α×SC2022Kのポスター

1のようなポスターを作成することができ、広報に活用できました。参加者は現地12名、リモートでは48名となり、現地参加者は少ないですが、この2年程度の間リモートでの参加が便利であり、会議などへの通常の参加方法になってきている結果ではないかと思われます。

2 シンポジウムの講演

シンポジウムでは、4名の研究者に「群れ」に関連するご講演をいただき、最後に全体を通した総合討論を行いました。シンポジウムの講演資料などは



図2 リモートでの開催風景（上津原さんのご講演時）

Web ページで公開していますので、ご興味のある方はご覧ください。Web ページの URL は <https://sites.google.com/kyoto-u.ac.jp/sc2022k/> になります。リモートの開催風景は図2のような様子でした。

シンポジウムでは、まず、村上 久（京都工芸繊維大学情報工学・人間科学系）助教に、「互いに動きを読み合うこと＝相互予期」に基づく群れの自己組織化に関してご講演をいただきました。村上先生は、イグノーベル賞を2021年に受賞されており、相互予期の研究はその受賞内容でもあります。続いて、SPIRITS プロジェクトの共同研究者でもある前田玉青（京都大学大学院理学研究科生物科学専攻 博士後期課程）さんが、ドローンによる観察が明らかにするウマの重層社会という題目で講演をされました。重層社会とは、ヒト社会のように、小さな群れが集まって高次の集団を作る社会であり、その様子をドローンでの観測と定量的解析を行っているというご講演でした。

休憩を挟んだ後、後半では衛星の群れということで、小型 SAR 衛星コンステレーションのご講演を上津原 正彦（株式会社 QPS 研究所）開発部部长に行っていただきました。QPS 研究所では2025年以降に合成開口レーダー(SAR)を有する小型衛星 36機でコンステレーションを構築計画しており、その運用に関してご紹介いただきました。次に、高見 利也（大分大学理工学部）教授による、動的モード分解による群れの運動分析というご講演がありまし

た。動物や人の集団の動きを時空間の単位要素へ分割する動的モード分解を利用した映像分析手法のご紹介がありました。

総合討論では、シンポジウムの講演内容に関する追加の議論やシンポジウムのテーマであるスパコンをどう活用するか、自分の研究にどのような機能があれば使いやすいのかなどの議論を行いました。分野が異なる群れに関する研究者が集まった場でしたので、お互いの研究分野との比較など、群れに関してこれまでに余りない視点からの議論もありました。実際の群れを観測した後、解析する流れが一般的ですが、近年のドローンやセンサなどを活用し、定量的にデジタル解析が進んでいるために、今後スパコンを利用した解析が力を発揮しそうな一方で、使いやすさ（利用申請含む）には改善がまだまだ必要だとコメントをいただきました。

3 シンポジウムを終えて

今回は SPIRITS プロジェクトとの共催によるシンポジウムの宣伝協力やハイブリッド開催により、例年より参加者が多くなりました。他のシンポジウムでも感じますが、総合討論や、質疑では会場にいる関係者からの発言が多く、議論を活発に行いたい場合は現地開催を強化する必要があると感じました。また、現地参加者間で、共同研究が始まったとの報告もあり、スパコンを基盤に異分野を上手く連携させることを今後も目指していきます。

Numerical simulation of Marangoni convection in a shallow rectangular cavity with a linear solutal boundary condition

ZHANG Jiagao

Graduate School of Engineering Science, Osaka University

1 Introduction

Marangoni convection usually occurs in a liquid layer with a free surface driven by the variation of free surface tension due to temperature gradients or concentration gradient. This convection has been of interest to researchers due to its rich dynamical features and its wide existence in nature and industrial processes, such as oceanography, droplets, thin-film coatings, and crystal growth.

Numerous fruitful research findings on Marangoni convection have been reported [1-3]. However, most of the studies only considered the pure thermal Marangoni effect, while the solutal Marangoni convection plays an important role in coating and crystal growth. To the best of our knowledge, there are few works focused on the solutal Marangoni flow. It would be an interesting phenomenon to investigate since it occurs in some processes. In this work, we perform a series of three-dimensional numerical simulations to study pure solutal Marangoni convection in a shallow rectangular cavity to shed further light on flow characteristics and flow pattern transition.

2 Numerical method

We consider a cavity filled with fluid, as shown in Fig. 1. The top boundary is the free surface, while the other boundaries are the cavity walls. The Cartesian coordinate system is adopted. The length, width, and depth of the cavity are L , L , and $0.1L$, respectively. High and low concentration

values, C_h and C_l , are set at the four boundary corners, and the linear solutal boundary condition is applied, as shown in Fig. 1(b).

The governing equations of the fluid flow in the cavity are written in dimensionless forms:

$$\text{Continuity:} \quad \nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (1)$$

$$\text{Momentum:} \quad \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \tau} + \mathbf{V} \cdot \nabla \mathbf{V} = -\nabla P + \nabla^2 \mathbf{V} \quad (2)$$

$$\text{Mass transport:} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + \mathbf{V} \cdot \nabla \Phi = -\frac{1}{Sc} \nabla^2 \Phi \quad (3)$$

The dimensionless concentrations is defined as $\Phi = (C - C_l)/(C_h - C_l)$, τ and P are the dimensionless time and pressure. $Sc = D/\nu$ is the Schmidt number, where ν is the dynamic viscosity and D is the diffusion coefficient of working fluid. In this study, calculation has been performed for the fluid with $Sc = 10$.

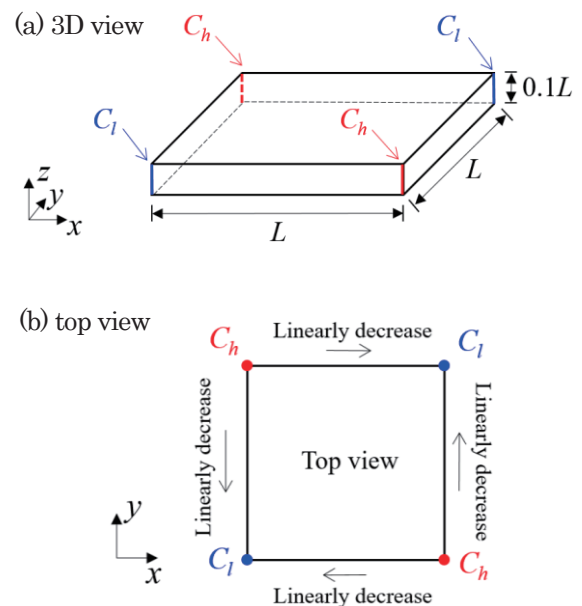
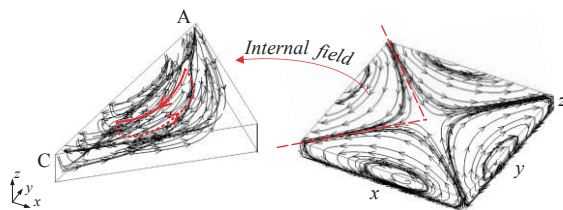


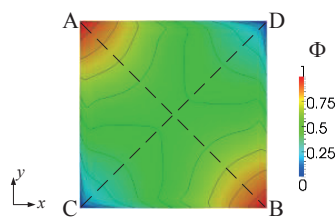
Fig. 1 The computational domain and the boundary conditions.

3 Results and discussion

When the Marangoni number is relatively small, the solutal Marangoni convection is steady state, which is called the basic flow hereafter. Figure 2 shows the streamlines and the iso-concentration lines of the typical basic flow at $Sc = 10$. The surface fluid flows from the high concentration spot (A) to the low concentration spot (C) with a certain curvature, and then returns back near the bottom due to the mass conservation, as shown in the internal field of Fig. 2(a). The Schmidt number of the working fluid in the present study is much larger than unity. It means that the relative contribution of the advective mechanism is more dominant than that of the diffusion. Thus, the mass transfer is greatly sensitive to the flow region and the iso-concentration lines are drastically distorted on the free surface, as shown in Fig. 2(b).



(a) streamlines of the internal field (left) and boundaries (right)



(b) iso-concentration lines on the top free surface

Fig. 2 A typical snapshot of the streamlines (a) and concentration field (b) of the basic flow.

Figure 3 shows the concentration and velocity distributions along the AB and CD diagonals at different solutal Marangoni numbers. The positions of AB and CD lines are shown in Fig. 2(b). Large concentration drops appear near the boundary corners due to the low mass diffusivity so that the concentration gradient in the middle part of the cavity is smaller than that of the

corners, as seen in Fig. 3(a). Also, as the solutal Marangoni number becomes larger, the concentration drops increase, and the solutal Marangoni effect enhances, resulting in a stronger fluid flow. Furthermore, every peak of the curves in Fig. 3(b) coincides with each vortex-center position.

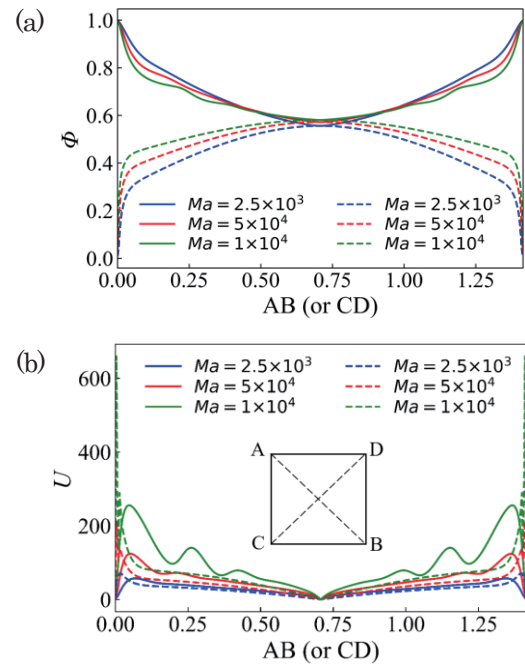


Fig. 3 Distributions of concentration Φ (a) and velocity U (b) along the diagonals on the free surface.

4 Conclusion

The basic flow is steady state and the flow structure remains symmetric along the diagonals. Large concentration drops appear in the vicinity of the boundary corners so that the effect of solutal Marangoni in the middle part of the free surface is weaker than at the corners, which greatly affect the flow structure in the whole system.

5 Reference

- [1] M. K. Smith, *Phys. Fluids*, **29** (1986) 3182.
- [2] L. Peng, *et al.*, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **50** (2007) 872.
- [3] T. Yano, *et al.*, *Adv. Space Res.*, **66** (2020) 2047.

高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と

電子物性の相関説明

東野 智洋

京都大学大学院工学研究科 分子工学専攻

1 緒言

ポルフィリンは400–450 nmにSoret帯と呼ばれる強い吸収と550–600 nmにQ帯と呼ばれる中程度の吸収をもち、増感色素として有望である。特に、ポルフィリンにドナー・アクセプターを導入したプッシュプル型色素は長波長領域での光捕集能の改善に伴って光電変換効率が向上し、10%を超える変換効率が達成されている^[1]。また、ポルフィリンに芳香環を縮環させて π 共役系を拡張することでも光捕集性能を向上させることができ、実際に芳香環を直接縮環させた色素を用いることで中程度の変換効率が達成されてきた^[2]。さらに我々は、メチレン鎖を介してチオフェン環を縮環させた色素 **T-iPr** を開発し、高いエネルギー変換効率を実現することに成功している (Figure 1) ^[3]。また、ポルフィリン色素の末端に嵩高い置換基を導入して電解液中のレドックス対が酸化チタン表面に接近することを抑制することで、酸化チタンレドックス対間の逆電子移動を抑制でき、エネルギー変換効率の向上が可能であることを見出している。そこで本研究では、ポルフィリン色素に嵩高い置換基を導入した色素 **T-Ph** および **T-tBuPh** を設計・合成した (Figure 2)。

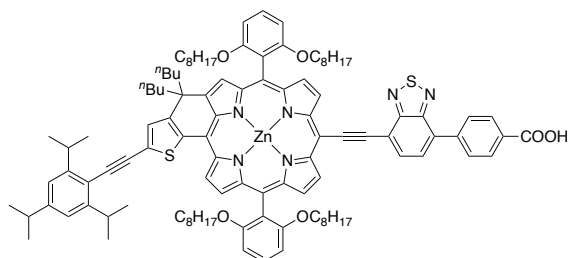


Figure 1. Methylene-bridged fused porphyrin dye **T-iPr**.

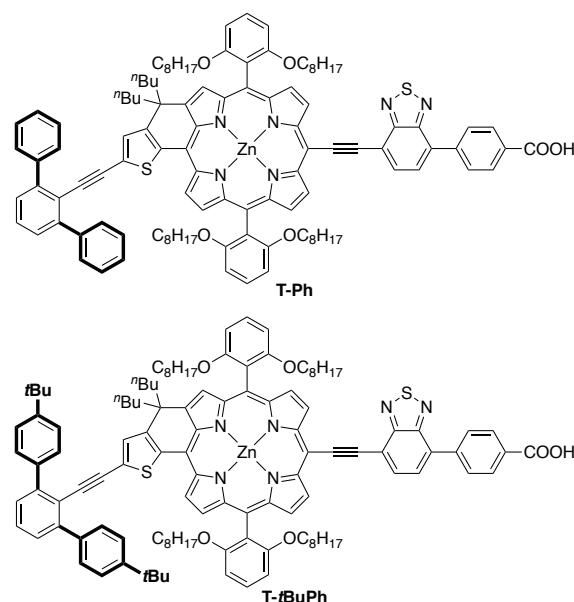


Figure 2. Molecular structures of porphyrin dyes.

2 結果と考察

2.1 ポルフィリン色素の物性と太陽電池性能評価

ポルフィリン色素 **T-Ph**, **T-tBuPh** の THF 中での吸収スペクトルを Figure 3 に示す。これら2つの色素間にはほとんど差がなく、色素末端に導入した置換基の嵩高さは光捕集特性に影響を与えないことがわかった。次に、色素増感太陽電池を作製し、セル性能評価を行ったところ、色素として **T-Ph** と **T-tBuPh** を用いたセルでの光電変換効率はそれぞれ7.36%、7.43%となった。これは、置換基の嵩高さが増大することで酸化チタンレドックス対間の逆電子移動が抑制され、光電変換効率の向上につながったと考えられる。

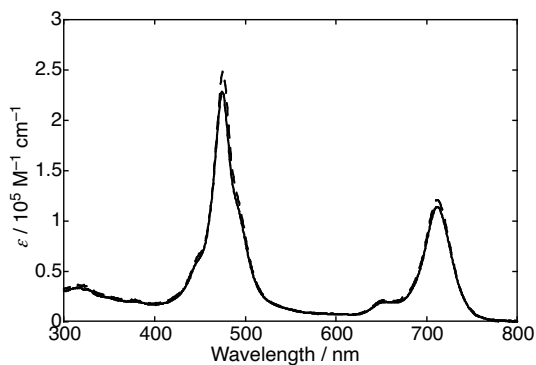


Figure 3. UV/vis absorption spectra of **T-Ph** (solid line) and **T-*t*BuPh** (dashed line) in THF.

現在、光電変換効率の向上を目指し、色素増感太陽電池セル作製条件の最適化を進めている。また、嵩高さを増大させて逆電子移動を効果的に抑制できるポルフィリン色素を設計・合成することで、さらなるエネルギー変換効率の向上が実現できると期待できる。

2.2 理論計算

ポルフィリン色素の最安定化構造およびそのフロンティア軌道の電子構造について知見を得るために、Gaussian09 プログラムを用いて密度汎関数法 (DFT) による理論計算を行った (B3LYP/6-31G(d))。ポルフィリン色素 **T-Ph**, **T-*t*BuPh** の HOMO、LUMO の準位は同じであり、それぞれ -4.57 eV, -2.67 eV であった。末端に導入したフェニル基や *t*-ブチルフェニル基にはほとんど HOMO や LUMO の分布が見られず、ポルフィリンの電子状態には影響を与えないことがわかった (Figure 4)。このため、光捕集特性に違いが見られなかったと考えられる。

また、**T-*t*BuPh** の *t*-ブチルフェニル基は **T-Ph** におけるフェニル基より嵩高く、ポルフィリン色素の横幅と同程度にまで張り出しているため、酸化チタン上に吸着している色素の隙間を通してレドックス対が酸化チタン表面に近づくことを抑制できると考えられる。その結果、酸化チタン-レドックス対間での逆電子移動を抑制でき、**T-*t*BuPh** を用いた場合に太陽電池性能の向上に繋がったと考えられる。このように、本計算結果は実験結果の理論的解釈の一助となった点で意義がある。

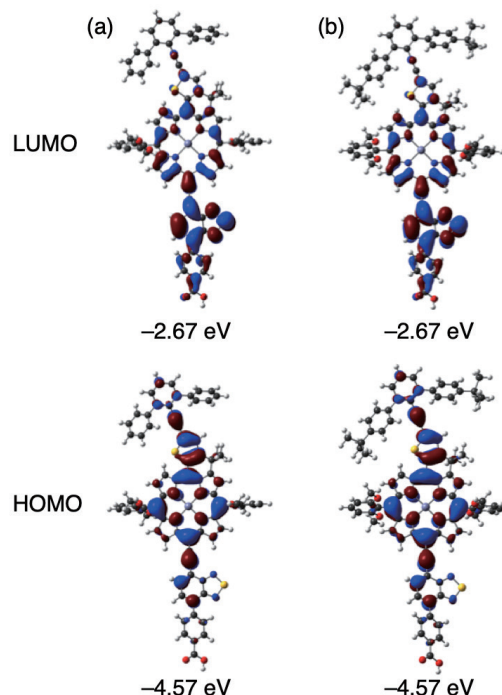


Figure 4. Selected Kohn-Sham orbitals for (a) **T-Ph**, and (b) **T-*t*BuPh** obtained by DFT calculations with the B3LYP/6-31G(d) level. To simplify the calculations, octyl and octyloxy groups on the *meso*-aryl groups were replaced with methyl and methoxy groups, respectively.

3 参考文献

- [1] A. Yella, C.-L. Mai, S. M. Zakeeruddin, S.-N. Chang, C.-H. Hsieh, C.-Y. Yeh, M. Grätzel, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 2973–2977.
- [2] H. Hayashi, A. S. Touchy, Y. Kinjo, K. Kurotobi, Y. Toude, S. Ito, H. Saarenpää, N. V. Tkachenko, H. Lemmetyinen, H. Imahori, *ChemSusChem* **2013**, *6*, 508–517; T. Higashino, H. Imahori, *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 448–463.
- [3] Y. Kurumisawa, T. Higashino, S. Nimura, Y. Tsuji, H. Iiyama, H. Imahori, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 9910–9919.

界面分光の分子動力学シミュレーション

城塚 達也

茨城大学工学部物質科学工学科

1 はじめに

埋もれた界面における電荷移動などの化学反応は生体機能や触媒反応など様々な分野で重要である。近年分光などの実験技術の向上により、その分子レベルでの反応メカニズムが明らかになってきた。理論計算の高精度化が求められている。しかし、実験を解析できる高精度な計算手法は発展途上である。そこで本研究では、第一原理計算を用いて荷電した界面のモデリング手法を開発し、その構造やダイナミクスを解析する。特に、本研究では純水中のベンチマーク計算を行ったのち、アモルファスシリカ・水界面などにおける構造やダイナミクスを調べる。

2 手法

まず、第一原理計算により水中の水分子の自己解離のシミュレーションでプロトン移動の反応座標を検討した。先行研究ではプロトン移動反応を記述する反応座標は結合長や配位数などに限られていたが、実験の pK_a の定量的な再現だけでなく遷移状態やプロトン移動後のイオン対の状態を定性的にも再現することが困難であった。 pK_a だけでなく活性化自由エネルギーも実験と定量的に比較できる計算手法が必要であるが、配位数はそのシンプルさ・扱いやすさから幅広い計算プログラムパッケージで利用可能であるため、多くの計算例がある。また、配位数にはパラメーター依存性などの問題があるため新たな反応座標の開発が必要であった。加えて、界面へなどの不均一系においても応用できるものが望ましい。

そこで、本研究ではアニオンとカチオンのイオ

ン間距離を反応座標に採用する。[1, 2] この座標は均一系だけでなく不均一系でも利用可能である。プログラムパッケージは `cp2k` を用いて、水中の水分子の自己解離反応をシミュレーションした。自由エネルギー曲面の計算ではアンブレラサンプリングを使用し、1次元および2次元の平均力ポテンシャルを計算した。水の構造を再現するにはDFT汎関数の選定も重要である。そこで、本研究では水256分子と `revPBE-D3` 汎関数を用いた。この汎関数では純水の動径分布関数をよく再現することが知られており、水の pK_a (pK_w) もよく再現することが期待されるためである。[3, 4] 続いて、不均一系への応用例としてアモルファスシリカ・水界面に本手法を応用し、界面分光などの実験で観測された pK_a と比較した。

3 結果

配位数とイオン間距離を反応座標に取った2次元平均力ポテンシャル曲面を計算したところ、計算された水分子の自己解離の pK_a は13.7となり実験値の14.0と良い一致を示した。本手法により高精度（実験と定量的に比較できる）に反応自由エネルギー曲面を計算できることがわかった。一方で、活性化自由エネルギーは20.9 kcal/molとなり実験値の23.9 kcal/molを約3 kcal/mol過小評価した。これは一般化勾配近似によるものだということが分かっており、ハートリーフォック交換を加えて `revPBE0-D3` 汎関数などを用いることなどによって制度を改善できることが示せた。化学精度（約1 kcal/mol）が求められる計算の場合、配位数だけでなくイオン間距離も加えて2次元の平均力ポテンシャルを用いる必要があるとわかっ

た。

続いて、アモルファスシリカ・水界面での計算では、表面のシラノール基の密度が 4.9 OH/nm² となり実験値と一致した。しかし、約 1.5 nm² の表面積を持つスラブではシラノール基の密度の標準偏差が非常に大きいため、1 つのスラブを用いる先行研究とは異なりいくつかのスラブの平均を用いる必要があることも判明した。シラノール基の界面となる角度は界面とほぼ平行となることも判明し、先行研究と多少異なることもわかり今後の界面分光で注意する必要があることが分かった。計算で得られたシラノール基の p*K*_a は 9.4 (ケイ酸水溶液)、7.7 (isolated silanol)、6.9-10.4 (geminal silanol)、5.4-12.6 (vicinal silanol) となり実験と良い一致を示した。本研究でも 2 次元の平均力ポテンシャルを用いており実験を定量的に再現したことから本手法の有効性を示すことができた。

4 おわりに

界面での脱プロトン化をシミュレーションするため配位数とイオン間距離による 2 次元の平均力ポテンシャルを用いて p*K*_a を計算する手法を構築した。今後は、ディープラーニングを組み合わせることにより計算コストを削減する予定である。以上で計算した界面について、現在界面分光スペクトルの計算法の構築をしている。申請者の先行研究[5-8]をさらに拡張し、分光スペクトルからわかる界面構造と光触媒反応メカニズムを議論する予定である。最終的に、第一原理分子動力学 (MD) シミュレーションを用いて固液界面をシミュレーションし、界面分光の 1 つである和周波発生 (SFG) 分光法を解析する。

以上に加えて、表面における二酸化炭素の水素化触媒のモデリング[9-10]も進めている。このような系に対しても本研究で開発した手法を応用していく予定である。

謝辞

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

参考文献

- [1] T. Joutsuka, *J. Phys. Chem. B*, 126 (24), 4565–4571, 2022.
- [2] T. Joutsuka, *ChemRxiv*, DOI: 10.26434/chemrxiv-2022-nfl1j.
- [3] T. Joutsuka and K. Ando, *J. Phys. Chem. B*, 124 (38), 8323–8330, 2020.
- [4] T. Joutsuka and K. Ando, *Chem. Lett.*, 50 (7), 1325–1328, 2021.
- [5] S. K. Reddy, R. Thiriaux, B. A. W. Rudd, L. Lin, T. Adel, T. Joutsuka, F. M. Geiger, H. C. Allen, A. Morita, and F. Paesani, *Chem*, 4 (7), 1629–1644, 2018.
- [6] T. Joutsuka, T. Hirano, M. Sprik, and A. Morita, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20 (5), 3040–3053, 2018.
- [7] T. Joutsuka and A. Morita, *J. Phys. Chem. C*, 122 (21), 11407–11413, 2018.
- [8] T. Joutsuka, H. Yoshinari, and S. Yamauchi, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 94 (1), 106–111, 2021.
- [9] T. Joutsuka, Ryu Hamamura, Kakeru Fujiwara, Tetsuo Honma, Masahiko Nishijima, and Shohei Tada, *Int. J. Hydrog. Energy*, 47, 21369–21374, 2022.
- [10] Shohei Tada, Nagomu Ochiai, Hiroka Kinoshita, Mitsuhiko Yoshida, Natsumi Shimada, Tatsuya Joutsuka, Masahiko Nishijima, Tetsuo Honma, Noriko Yamauchi, Yoshio Kobayashi, Kenta Iyoki, *ACS Catal.*, 12, 7748–7759, 2022.

三次元的な MHD プラズマダイナミクスの解明

橋本 翼

九州大学大学院理学府地球惑星科学専攻

1 はじめに

地球を取り巻く宇宙環境は、太陽風—磁気圏—電離圏 (S-M-I) といった大きさや性質の異なる領域が結合されている。それぞれの領域は独立したものではなく、磁場や電流を介して結ばれ、諸現象があった際はもう片方の系へとその情報が伝達されることで、物理ダイナミクスが進展する。そのため、諸現象を包括的に理解することが重要となる。

本研究は、太陽風—磁気圏(S-M)領域において、磁場の向きが北向きから南向きに不連続に変化する方向不連続面を持つ惑星間空間磁場 (Interplanetary Magnetic Field; IMF)が到達したときに生じる諸現象の再現と、そこで生じる物理ダイナミクスの解明を目的にした。IMFが実際にこのような状況になることは観測的にも確認されている。

S-M を複合的に再現できるのが数値シミュレーションであるが、広い宇宙環境において各物理量をグリッドごとに短いタイムスケールで計算するためには大規模な計算処理能力が必要になる。そのため、スーパーコンピュータを利用し研究を実施した。

2 研究手法

シミュレーションに関して、本研究では太陽風から磁気圏までを磁気流体とし、磁気圏内部境界として薄層電離圏を採用した REPPU(Reproduce Plasma Universe) コード (Tanaka, 2015[1])を用いた。このコードでは 50 もの物理量を解像度約 $300 \times 300 \times 300$ で計算、および再現するため大規模な計算処理能力を必要

とするためスーパーコンピュータを用い計算した。ジョブはハイブリッド並列を用い高速化を図っている。

3 結果

シミュレーション解析により、IMF の方向不連続面は磁気圏の昼側から夜側に移動するまでに、複数回の磁力線つなぎ代わり現象 (リコネクション) を繰り返し、磁気圏の磁場構造やプラズマ分布を大きく変化させているということが分かった。太陽風にともない IMF が北向きから南向きに不連続に変化することは、衛星磁場観測からも確認されている。その IMF が地球磁気圏に到達したとき、地球磁場による減速から北向き IMF と南向き IMF は急速に近づきリコネクションを起こす (図 1 上)。先行研究で、北向き IMF と南向き IMF がリコネクションを起こすことは示唆されていた (Maynard et al.,2002[2]; Samsonov et al., 2018[3]) が、本研究のシミュレーションによってそれを再現した。さらに本研究では、このリコネクションにより変化した磁場構造が、夜側まで移動する過程で複数回リコネクションが発生していることを明らかにした (図 1 下)。すなわち、リコネクションによる磁力線のつなぎ代わりによって、IMF や地球起源の磁力線が複雑化し、大きく磁気圏構造の変化をもたらすことが分かった (図 2)。このような磁力線構造変化は過去のシミュレーションや地上・衛星観測では指摘されたことがない。また本研究では、昼側におけるリコネクションや高緯度側で発生するリコネクションがそれぞれ 8 分間というタイムスケールで行われていることが分かった。

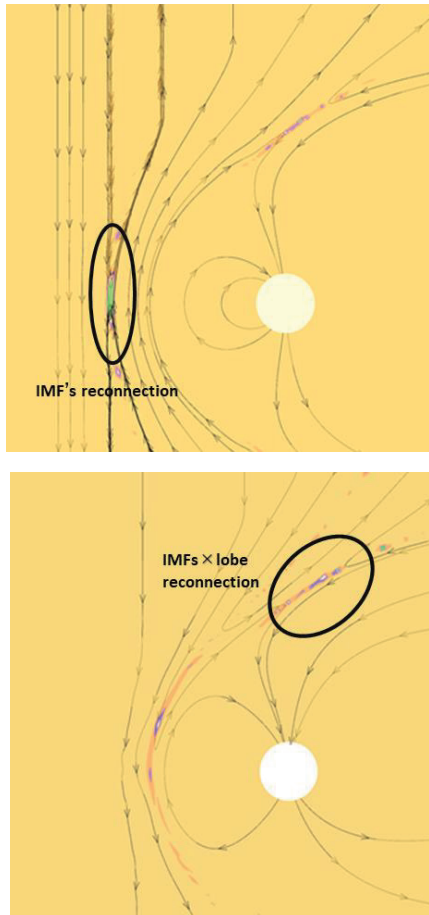


図1：IMF不連続面にもなうリコネクション、ラインは磁力線を示し、背景の色はリコネクションの発生の目安となる磁気拡散を示す。
 (上図：IMF不連続面間で生じる、北向きIMFと南向きIMFのリコネクション、
 下図：IMF不連続面と地球ローブ磁力線)

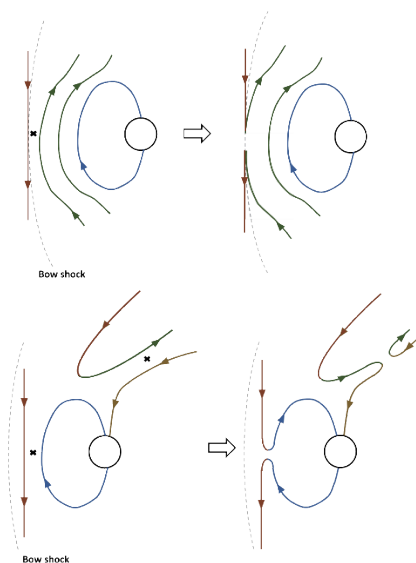


図2：図1の概念図、ラインは磁力線を示す。

4 おわりに

本研究では、太陽風—磁気圏(S-M)領域において、IMFの方向不連続面が磁気圏周辺に到達した際に複数回のリコネクションが生じることを、シミュレーションにより明らかにした。今後はこのリコネクションにともない放出されるリコネクションフローや磁気張力・磁気圧の時間変化についてその結果を可視化することで、発動しているダイナミクスの解明を行う。また、リコネクションの継続時間が8分間というタイムスケールであったことに対し、この数字がどのIMF状況下でも一般的なものであるかを検証するため、IMF By成分や動圧といったリコネクション効率を変化させる物理パラメータの値を変え、細かくシミュレーションを行う。

5 謝辞

本研究の計算の一部は、京都大学のスーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性奨励枠）に基づくものであり、ここに感謝の意を表す。

6 参考文献

- [1] Tanaka, T. (2015). In *Auroral Dynamics and Space Weather* (pp. 177–190). Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc.
- [2] Maynard, N. C., Sonnerup, B. U. Ö., Siscoe, G. L., Weimer, D. R., Siebert, K. D., Erickson, G. M., et al. (2002). *Journal of Geophysical Research*, 107(A12), 1456.
- [3] Samsonov, A.A., Sibeck, D.G., Dmitrieva, N.P., Semenov, Geophys. Res. Lett. (2017)

Numerical investigation for hydrodynamic characterization of orbitally shaken bioreactor in a suspension cell culture

WANG Liya

Graduate School of Engineering Science, Osaka University

1 Introduction

Orbitally shaken bioreactor (OSR) is one of the most frequently utilized bioreactor for the cultivation of stem cells, because they are manageable and easy-to-operate. However, the common OSR hardly meets the anticipated demands since cells migrate to the center and bottom of the tank due to the “Einstein's tea leaf paradox” [1,2]. It is well-known that the selection of a suitable bioreactor is especially important for biomedical and biotechnological development. Thus, a novel structure and geometry improvement of OSR is urgently developed.

Nowadays, many researchers have made great efforts to facilitate the innovation of culture bioreactors for laboratory studies and industrial applications. Horiguchi et al. developed a novel disposable bioreactor with an O-shaped dish and an O-shaped bag, neither of which contains a central region. The cells, therefore, are prevented from gathering at the bottom center region. In their experiment study, the cell aggregates can grow in the newly designed tank with similar diameter to aggregates without the evidence of necrotic cores. Because the O-shaped bioreactor could provide sufficient oxygen to the cell aggregates [3]. Furthermore, Zhu et al. investigated the effect the ratio between the inner diameter and outer diameter on the flow field, mass transfer and shear stress in the hollow OSR using numerical simulation. They suggested that the diameter ratio should be kept lower to achieve high oxygen transfer rate [4]. However, the effects

of cells behavior, shaking velocity and shaking radius still need for clarification. To this end, the numerical investigations on the OSR with a hollow wall are further carried out by investigating the oxygen supply ability, cells suspension amount and shear stress at various operational conditions.

2 Numerical method

The bioreactor rotates in an orbital manner. Therefore, the coordinates of the hollow vessel center is expressed as Eq. (1). The bioreactor which does not contain a central region is illustrated in **Figure 1**. The outer diameter of the tank is 84 mm and the tank height is 42 mm. The culture medium is assumed as water and its height keeps a fixed value 15 mm. The ratio of the inner diameter and outer diameter, shaking velocity (ω), and shaking radius (R) are the crucial variables, which play a key role in the hollow orbitally shaken bioreactor.

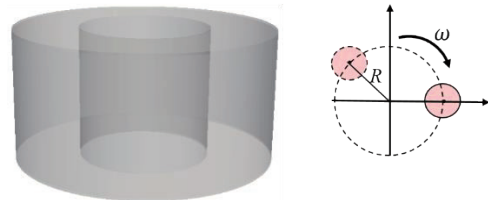


Fig. 1 Numerical simulation domain and shaking trajectory.

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \cos(\omega t) \\ -R \sin(\omega t) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

The governing equations for the liquid phase (air and water) are the Navier Stokes equations. In the multi-phase configuration, continuous species transfer (CST) method that is analogous to the VOF model, can be used to catch the oxygen concentration (C) in each phase [5], written as:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\mathbf{v}) = \nabla \cdot (D\nabla C) - \nabla \cdot \left(D \frac{H-1}{H\alpha+(1-\alpha)} C\alpha \right) \quad (2)$$

The percentage of afloat particles can be expressed by a nondimensional parameter. Here, we introduce the suspension ratio P_S defined as:

$$P_S = N_S / N_A \quad (3)$$

where N_S is the number of floating particles, and N_A is the total number of particles.

The shear stress acting on the particles is an essential factor to qualify the condition of cell suspension culture. Applying Stokes' approximation for flow around a sphere, the magnitude of shear stress over the surface of a spherical particle can be estimated in the following form:

$$|\tau| = \frac{2\mu_f |v_f - v_p|}{d_p} \quad (4)$$

3 Results and discussion

The oxygen mass transfer capability including is a crucial factor in the design, optimization and scale-up of the cell culture process. The results calculated using Equation (2) for two configurations are given in **Figure 2**. Results present a conspicuous distinction between these two cases. It is evident that the highest oxygen concentration is observed at the gas-liquid interface in both bioreactors. However, it also should be noted that the concentration is relatively poorer (blue region) at the central region for the conventional bioreactor. This is because the absence of the inner wall makes it easier for the flow to become turbulent. Consequently, it can be stated that the new bioreactor design introduced here optimizes the culture condition, particularly enhancing the oxygen mass transfer.

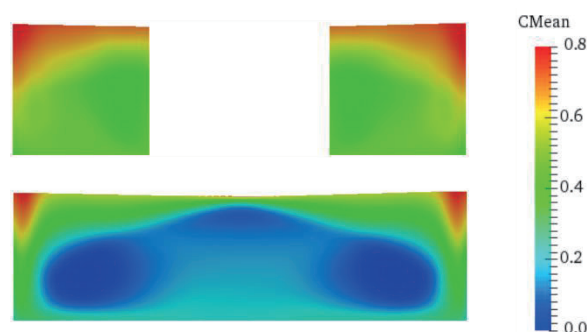


Fig. 2 Oxygen concentration distribution at a vertical cross section for the hollow bioreactor (upper panel) and conventional bioreactor (lower panel)

To get a comprehensive understanding of the new bioreactor, the suspension ratio (P_S) and shear stress ($|\tau|$) are further quantitatively evaluated. It is found that the suspension ratio is greatly increased without the increasing of the shear stress, which is highly expected.

4 Conclusion

Generally, the new bioreactor design developed here would offer a better process environment for sustaining adequate oxygen supply as well as suspension ability in the cell culture processing. This confirms that the bioreactor designed without an inner wall can be considered as a better candidate for iPS cell cultivation.

5 Reference

- [1] Yamamoto T, *et al.*, *J. Chem. Eng. Jpn.*, **51** (2018) 423–430.
- [2] Horiguchi I, *et al.*, *the Society of Chemical Engineers, Japan 81st Annual Meeting*, **E204** (2016).
- [3] Horiguchi I, *et al.*, *J. Vis. Exp.*, **e57922** (2019).
- [4] Zhu, L, *et al.*, *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, **94** (2019) 2212–2218.
- [5] Marschall H, *et al.*, *Chem Eng Sci* **78** (2012) 111–127.

水-土二相連成解析とマルチスケールモデリングによる

相転移型地盤崩壊シミュレータの構築

辻 勲平

九州大学大学院工学府建設システム工学専攻, 日本学術振興会特別研究員 DC2

1 はじめに

津波による防波堤の浸透・洗掘破壊や, 豪雨により発生した土石流や斜面崩壊, 河川堤防の決壊など, 水と土の混相流による自然災害が多発している. 水と地盤に関する混相流計算には, FEM や MPM を用いて地盤を連続体として扱うものが多い. 一方, 浸透流によって地盤内で局所的に生じる内部侵食の解析には, 土粒子の挙動を直接表現する個別要素法 DEM を用いた数値解析が実施されている. 本研究では, 豪雨による堤防決壊, 津波による港湾構造物の被災など, 水と土砂礫が入り混じる固液混相流による自然災害を再現し得る数値シミュレータの開発を目指した.

2 解析手法

2.1 ISPH 法による流体解析

水は非圧縮性流体として扱い, 地盤の間隙率 ε を介して, 地表流と浸透流を統一的に記述した Darcy-Brinkman 型の統一方程式を採用し, これを ISPH 法によって解く.

$$\frac{C_r(\varepsilon) D \bar{\mathbf{v}}_f}{\varepsilon} = -\frac{1}{\rho_f} \nabla P + \mathbf{g} + \nu_E(\varepsilon) \nabla^2 \bar{\mathbf{v}}_f$$
$$\begin{cases} -a(\varepsilon) \varepsilon \mathbf{v}_r - b(\varepsilon) \varepsilon^2 |\mathbf{v}_r| \mathbf{v}_r, & (\varepsilon < 0.8) \\ -c(\varepsilon) |\mathbf{v}_r| \mathbf{v}_r, & (\varepsilon \geq 0.8) \end{cases}$$

ここで $P, \mathbf{g}, \rho_f, \mathbf{v}_f, \mathbf{v}_r, C_r$ はそれぞれ, 圧力, 重力加速度, 流体密度, 流体速度, 仮想質量係数, 有効粘性係数を表す. ここで, ε は地盤の間隙率を示し, 計算対象の SPH 粒子の影響範囲に入る DEM 粒子の総体積から数値的に求める. 間隙率を用いて, ダルシー流速 $\bar{\mathbf{v}}_f = \varepsilon \mathbf{v}_f$ 及び地盤内の見かけの流体密度 $\bar{\rho}_f = \varepsilon \rho_f$ を得る. また, a, b, c, ν_E は抵抗係数, 粘性

係数を示す. 式(1)は ε をパラメータとして, 地表流と浸透流の両方に対応する式であり, 影響範囲内に土粒子がない場合 ($\varepsilon = 1$) は通常の Navier-stokes 方程式, 土粒子が存在する場合 ($\varepsilon < 1$) は, 右辺第4項以降の抵抗力項が作用する拡張ダルシー則を解く.

2.2 DEM による地盤の変形解析

土粒子の挙動は DEM で計算し, 球もしくは複数の球を剛体結合した要素で土粒子の形状を表現する. 各粒子・計算ステップ毎に運動方程式を解くことで捨石マウンドの変形を表現する.

$$m_s \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = m_s \mathbf{g} - \nabla P V_s + \mathbf{f}_d + \sum \mathbf{f}_c$$
$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}_s}{dt} = \sum \mathbf{m}_c - \mathbf{m}_r$$

ここで, $m_s, V_s, -\nabla P V_s, \mathbf{f}_d, \mathbf{f}_c$ はそれぞれ DEM 粒子の質量, 体積, 浮力, 抗力, 土粒子同士の接触力を示す. 接触力には, 一般の DEM 解析に用いられるバネ・ダッシュポットモデルを採用しているが詳細は割愛する. 流体との相互作用である抗力 \mathbf{f}_d に関して, 比較的大きな土粒子に対しては前報と同様に Darcy 流速を用いた抗力を算出し, 流体の抵抗力の反作用として計算する. 実際の現象では, 大きな土粒子同士の間隙に存在する小さな粒子は, その流失しやすさが想定されるため, 実流速を用いた抗力を適用して, 簡易的な半解像型連成を実施する方針とした. 土粒子の回転運動について, $I, \boldsymbol{\omega}_s, \mathbf{m}_c, \mathbf{m}_r$ は慣性モーメント, 角速度, 接線方向接触力によるトルク, 回転摩擦を示す.

3 非解像型連成による防波堤崩壊解析

上述の非解像型連成に基づいて、ISPH-DEMによる防波堤マウンドの浸透崩壊シミュレーションを実施した。図-1に示す解析結果のように、非解像型連成の場合は、捨石マウンドの変形を表現したが、ケーソンを倒壊に至らしめる局所的な噴砂を再現できなかった。そこで、Terzhagiの限界動水勾配に基づく破壊判定を導入し、破壊されたDEM粒子を流失したと仮定し、その粒子の質量を減少させた場合、ケーソン近傍で噴砂が生じ、ケーソンブロックが転倒、防波堤マウンドの崩壊に至る、実験^[1]と同じ傾向を再現できた^[2]（破壊判定を導入した計算については現在投稿中）。

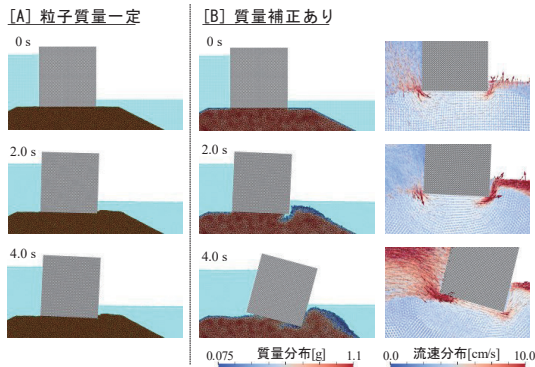


図-1 非解像型連成による防波堤浸透崩壊解析

4 解像・非解像型ハイブリッド連成

地盤の局所的な破壊を精緻に再現するには、間隙流を直接表現する解像型連成に基づく流体解析が有効だが、現状の手法では計算規模、精度の点から困難を極める。そこで、間隙内の複雑な流れを表現する手法へと改良すべく、まずはSPH法の従来の勾配モデルを見直し、1次コンシステンシーを有する勾配モデルを適用することで、従来手法で不可能だった負圧計算と、Karman渦列のような複雑な流れを表現出来る手法へと改良した。しかし、上述の間隙内部の流れを直接表現する解像型連成解析は、微視的なスケールの解析には有用であるものの、計算対象領域が大きくなるに連れて莫大な計算コストが生じることが予想される。そのため、大小の粒径の礫地盤内の局所的に大きな流速を持つ流れを効率的に計算する「解像・非解像型ハイブリッド連成手法」の開発を進めた。

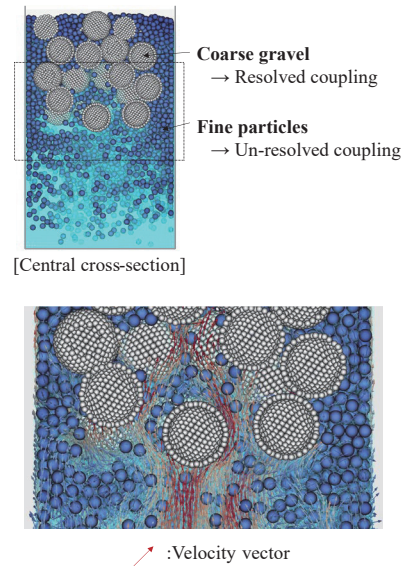


図-2 ハイブリッド連成による水-土粒子連成解析

5 まとめと今後の課題

本研究では、ISPH法による流体解析とDEMによる地盤の変形解析を、非解像型、解像型、そしてそれらハイブリッド法に基づく連成を行い、水-土混相流シミュレータを開発した。現在、ハイブリッド連成の高精度化と精度検証に取り組んでおり、今後、これら連成手法の使い分けにより、地盤の内部侵食を効率的に計算できる手法を目指す。また、均質化法等の平均化手法と組み合わせることで、内部侵食時の地盤の力学的特性を把握するマルチスケールモデリングへの展開を目指す。

謝辞：本研究はJSPS 科研費21J12338・20H02418、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（jh170016-NAH, EX21604）の支援を受けた。また、九州大学情報基盤研究開発センター研究用計算機システムの一般利用、京都大学学術メディアセンターのスーパーコンピュータを利用した。ここに記して謝意を表す。

参考文献：

- [1] Kasama, K., Zen, K., Nakagawa, Y., and Furukawa, Z. : Instability evaluation of rubble mound for breakwaters subjected to tsunami-induced overflow and seepage flow. *Soils and Foundations*, Vol.60 (6), pp.1532–1545, 2020.
- [2] 辻勲平, 浅井光輝, 笠間清伸 : ISPH-DEMによるマウンド変形・ケーソン滑動を考慮した防波堤浸透崩壊シミュレーション, *土木学会論文集A2 (応用力学)*, Vol.77, No.2, pp.I_105-I_116, 2021.

超音波キャビテーションマルチバブル動力学の探索

山本卓也

東北大学大学院工学研究科金属フロンティア工学専攻

1 緒言

液体中に超音波を照射すると、音響キャビテーションが生じ、キャビテーション気泡が大きく膨張、圧縮するのを繰り返す。圧縮時には、気泡内ぶが 100 気圧以上、5000 K 以上の温度になるとされ、熱分解に伴う化学反応が進行することで材料合成技術が開発されてきた[1]。また、このキャビテーションによって、合成された無機化合物の形態が変化することが知られている。このような超音波処理プロセスはキャビテーション気泡の運動や化学反応、音響流等が同時に発生することにより、複雑な現象となるため未解明な現象が数多く見受けられる。特に、複数気泡存在する条件では、クエンチングと呼ばれる反応が停止する現象[2]が知られており、複数存在する気泡の運動によって反応が停止すると考えられているが、その気泡運動までを詳細に解明できていない。

本研究では、マルチバブル系における音響キャビテーション気泡の運動を解明するため、複数気泡存在する条件において超音波を照射し、数値解析によってその気泡運動を調査した。

2 数値解析手法

支配方程式として、圧縮性 Navier-Stokes 式、連続式、energy 式を用い、気液混相流モデルの一つである Volume of Fluid (VOF)法と連成して解いた。VOF 法には代数的に界面再構築を行う方法[3]を利用し、計算負荷低減のため Adaptive Mesh Refinement (AMR)と組み合わせた。表面張力モデルとして Continuum Surface Force (CSF)モデル[4]を利用し、計算精度向上のために表面張力項計算時には Laplacian フィルタ[5]を導入した。詳細な数値モデルに関しては既報[6]の通りである。

計算領域は一辺 400 μm からなる立方体領域であるとし、計算領域中央に直径 20 μm の気泡を配置し、その気泡の周囲に正多面体の頂点位置に気泡を配置した。本計算では、正四面体、正六面体、正八面体の三種類の配置で、気液の物性は空気と水であるとした。中心気泡・周囲気泡間距離を 100, 150 μm とし、音圧振幅を 0.5 – 0.9 atm.として計算を行った。境界面で 20 kHz の超音波を照射し、気泡振動を調査した。

3 結果と考察

Figure 1 に様々な気泡配置の場合における中心気泡半径の時間変化を示す。音圧振幅が 0.7 atm. の場合の結果のみを示す。図中で Tetra は正四面体、Hexa は正六面体、Okta は正八面体の配置であり、それぞれ周囲気泡数は、4, 8, 6 個である。また、 R は中心気泡、周囲気泡間距離を表す。全ての条件において、時間と共に気泡は膨張し、圧縮時に非線形な振動を行う。また、周囲気泡数が増加するに伴い、気泡膨張時の最大半径が増加し、非線形振動時の振動振幅が増幅される。つまり、マルチバブル系においては、気泡の振動振幅が増幅される。

気泡の非線形振動の圧縮強度は最大気泡径に依存することが報告されている[7]。このため、気泡径が最大となる現象が重要となる。気泡径が最大になる時刻における気泡の時間変化を Fig. 2 に示す。周囲気泡が先に圧縮し、中心気泡の圧縮が遅れる。この圧縮の遅れによって気泡振動と超音波振動の位相差がより大きくなり、マルチバブル系において最大気泡径がより大きくなったと考えられる。

気泡振動振幅増幅を定量化するために、新しい変数を導入する。周囲気泡の影になることで音波伝

播遅れが生じるので、カバー率と名付けた中心気泡に対する投影面積と中心気泡の表面積の比を用いて定量化する。カバー率 r_{cov} は以下のように定義した。

$$r_{cov} = \frac{4\pi n R_{bubble}^2}{4\pi R^2} = \frac{n R_{bubble}^2}{R^2} \quad (1)$$

ここで、 n は周囲気泡数、 R_{bubble} は周囲気泡の半径である。以下の結果では、周囲気泡配置、周囲気泡数が異なる場合においても、全てカバー率のみから評価を行った。

Figure 3 に最大気泡径とカバー率の関係性を示す。Figure 3 (b)には単一気泡の場合との差を示す。最大気泡径は音圧振幅と共に増加するが、カバー率にも比例して増加する。このことから、気泡配置や気泡間距離に寄らず、カバー率のみから気泡振動振幅増幅を定量化することができた。

4 結言

本研究では数値解析を利用してマルチバブル系における気泡振動を調査し、以下の知見を得ることができた。

- マルチバブル系では気泡振動振幅が大きくなる。
- 周囲気泡の個数が大きくなり、周囲気泡との距離が短くなると、気泡の振動振幅が大きくなる。
- 周囲気泡の投影面積比であるカバー率を利用すると気泡振動増幅を整理でき、超音波振動中の最大気泡径はカバー率に比例する。

謝辞

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

参考文献

- [1] 日本音響学会、音響バブルとソノケミストリー (コロナ社、2012年)
- [2] S. I. Hatanaka *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* 40 (2001) 3856-3860.
- [3] H. Rusche, Ph. D. Thesis of Imperial College of Science, Technology and Medicine, London (2002).

[4] J. U. Brackbill *et al.*, *J. Comput. Phys.* 100 (1992) 335-354.

[5] D. A. Hoang *et al.*, *Comput. Fluids* 86 (2013) 28-36.

[6] T. Yamamoto, S. V. Komarov, *J. Appl. Phys.* 128 (2020) 044702.

[7] W. Lauterborn, T. Kurz, *Rep. Prog. Phys.* 73 (2010) 106501.

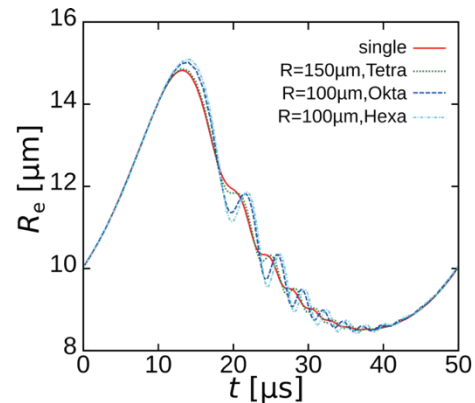


Figure 1 Time variation of equivalent bubble radius at 0.7 atm. in single- and multi-bubble systems.

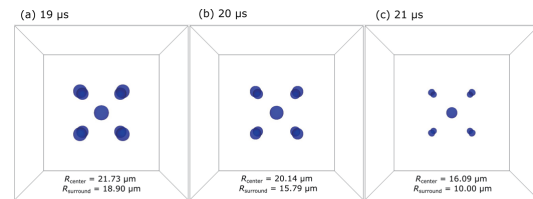


Figure 2 Time variation of cavitation bubble shape during their contraction half-period under the pressure amplitude of 0.9 atm. The distance between the center bubble and surrounding bubbles is 100 μm , and the bubble arrangement is regular hexahedron. Time is counted from the beginning of simulation.

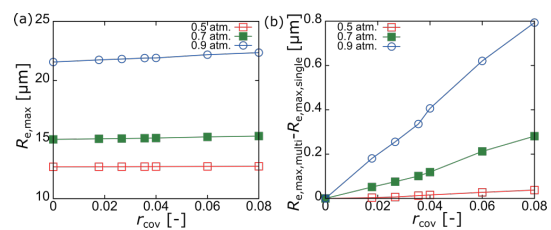


Figure 3 Relationship between the maximum equivalent radius of bubble and cover ratio at different pressure amplitudes: (a) minimum pressure and (b) difference in the minimum pressures between the multi-bubble and the single-bubble systems.

三次元数値流体解析による海岸林の津波防災効果機構の解明

野村怜佳*

*東北大学災害科学国際研究所

1 序論

自然生態系を活用したサステナブルな防災・減災設備として、森林の存在に期待が寄せられている。仙台防災枠組（国連防災世界会議）でも、その減災効果について言及されるなど、その期待は国際的にも高まっている。防災効果や機能限界の正確なアセスメントには、浸水シミュレーションを行うことが有効だが、既往の浸水シミュレーションの多くは、過度に単純化した海岸林モデルの利用を主流としており過小・過大な性能評価の可能性があった。複雑な樹木形状をモデル化し、樹木の減衰効果を評価するためには、三次元数値流体解析の実施が必須である。

本研究では、これまで過小・過大な評価がされていた樹木群の抵抗効果をより合理的に評価することを目的に、過度に単純化されていた海岸林を詳細にモデル化した三次元数値流れ試験を実施し、樹木の複雑な形状に起因した抵抗特性がマクロレベルでの減衰にどれほど効果を及ぼすのかを調査する。具体的には既往の研究の多くが採用していた円柱のようなシンプルなモデルと比較実験を行うことで (1) 詳細な樹木モデルなしには過小・過大な評価が起こる流れ、(2) 既往の単純モデルで合理的な評価が可能な流れ、の二つを明確化することを目指す。

2 数値流れ試験

本研究では矩形水路モデル内に設置した円柱モデル、樹木モデルの双方に対して三次元数値流体解析を実施し、両者の解析結果からそれぞれ減衰効果（例えば圧力・水深の低減傾向）を測定することで各モデルの防災効果を評価する、“数値流れ試験”の手続きを踏む。数値流れ試験の概念や各種境界条件の詳細については同様の設定を行っている既報 [1] を参照

されたい。これは、本研究が既報 [1] 同様に、マルチスケールモデルによる海岸林内流れのより合理的・正確なシミュレーションを最終目標として掲げていることによる。

2.1 流れの支配方程式

次に示される三次元 Navier-Stokes の運動方程式及び連続の式を安定化有限要素法 (SUPG/PSPG) [2, 3] により離散化し、解析することで三次元数値流体解析を実施した。

$$\left. \begin{aligned} \rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_f + \mathbf{b} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \right\} \text{in } Y_f, \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{u} は流速ベクトルを示しており、応力 $\boldsymbol{\sigma}_f$ は圧力 P 及びせん断応力ベクトル $\boldsymbol{\tau} = \mu_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \right)^T \right)$ とともに、次の式で定められる。

$$\boldsymbol{\sigma}_f = -P\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (2)$$

ここで \mathbf{I} は二階の恒等テンソルである。流体物性値である密度 ρ_f 及び粘性係数 μ_f についてはそれぞれ 25°C 温度下での水の物性値を与える。なお、時間方向の離散化にはクランクニコルソン法を用いた。自由表面の捕捉には Phase-Field 法 [4, 5] を用いている。

3 結果

序論で述べた (1) 及び (2) の各流れを明らかにするため、複雑な樹木モデル・簡素な円柱モデルの両方を用いた三次元数値流体解析を行った。より具体的には、(i) 樹木モデルが単独で配置された場合、(ii)

円柱モデルが単独で配置された場合, (iii) 樹木モデルが格子状に群配置された場合, (iv) 円柱モデルが格子状に群配置された場合, の4パターンの解析を実施した. 樹木モデル, 円柱モデルの双方は図1 aに示す.

一連の解析結果のうち, 次式に示す式より算定した流体の単位体積当たり運動エネルギー (= 動圧) を可視化した例を図1 bに示す.

$$\text{Dynamic pressure} = \frac{1}{2} \rho_f \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \quad [\text{Pa}]. \quad (3)$$

図1 から分かるように, 複雑な形状を有する樹木モデルでは, 簡易な円柱モデルと比較して, 流れの減衰効果が広範囲かつ流下方向に長く継続する. 水深・流速を変更した計24ケースの数値流れ試験結果からまとめたところ, 次のような知見を得ることができた.

- 樹木モデルの複雑形状が水没している場合であっても簡易な円柱モデルと同程度の減衰効果となる流れ条件の存在が確認された.
- 円柱モデルと樹木モデルの減衰効果は, 複雑形状が完全に水没し, 高い流速値が与えられたケースにおいて特にかい離が激しくなった.
- 従来の抗力算定に用いられていた投影面積のような二次元的指標ではなく, 没水部分の体積占有率などの三次元的指標を用いる方が正確な減衰効果評価が行える.

4 結論

本研究では, (1) 詳細な樹木モデルなしには過小・過大な評価が起こる流れ, (2) 既往の単純モデルで合理的な評価が可能な流れ, の二つを明確化することを目指し, 流速や水深を変更した複数の数値流れ試験を, 円柱モデルと樹木モデルの双方に対して実施した. 一連の結果から, (1) 及び (2) の流れの条件を定性的にまとめることができた. 従来手法で用いられてきた投影面積のような二次元的な指標を避け, 複雑形状の体積占有率などを利用した減衰性能評価が重要であることが明らかになった. より多くの数値流れ試験を行い, 三次元的な指標を用いた減衰効果性能を行うことで, 円柱モデルと樹木モデルの減衰性能に顕著なかい離が現れるしきい値を明らかにしていくことを今後の課題としている.

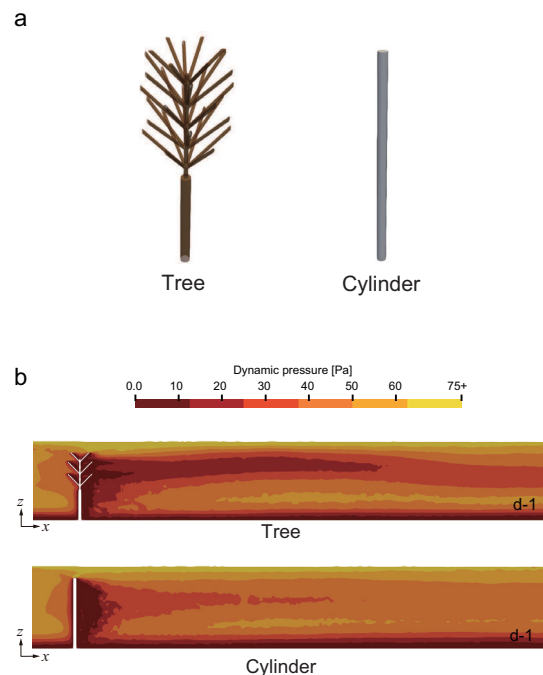


図1: a 数値流れ試験に用いた樹木モデル・円柱モデル, b 各モデル後背での動圧 (3) 分布の様子 (x - z 平面, 流下方向は右手側)

参考文献

- [1] Nomura, R., Takase, S., Moriguchi, S., Terada, K., and LeVeque, R. J. "Multiscale evaluation method of the drag effect on shallow water flow through coastal forests based on 3D numerical simulations", *Int J Numer Meth Fl*, 94(1), 32-58, 2022.
- [2] Brooks, A. N. and Hughes, T. J., "Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations", *Comput Method Appl M*, 32(1-3), 199-259, 1982.
- [3] Bova, S. W. and Carey, G. F., "A symmetric formulation and SUPG scheme for the shallow-water equations", *Adv Water Resour*, 19(3), 123-131, 1996.
- [4] Chiu, P. H. and Lin, Y. T., "A conservative phase field method for solving incompressible two-phase flows", *J Comput Phys*, 230(1), 185-204, 2011.
- [5] Takada, N., Matsumoto, J. and Matsumoto, S., "Phase-field model-based simulation of motions of a two-phase fluid on solid surface", *J Comput Sci Tech*, 7(2), 322-337, 2013.

代数幾何的手法とランダム行列理論を用いた再帰的ニューラルネットワークによる時系列スパースモデリング

中野 直人 *

* 明治大学大学院先端数理科学研究科

1 背景

人工ニューラルネットワークは脳神経科学のネットワークを模擬するために設計され、現代の機械学習技術の重要な基盤となっている。深層学習で用いられる前向きニューラルネットワークがよく知られているが、人工ニューロンの相互的な情報処理を真似た構造の再帰的ニューラルネットワークは時系列解析と相性が良いとされている。その中でも、人工ニューロン同士の結合を学習しないランダムネットワークを用いたモデルは、集団的カオスダイナミクスやノイズによるカオス抑制といった豊かな動力学的特性を持つ。さらに共通入力同期と呼ばれ、過去の履歴に関わらず同じ入力の下で内部ノード状態の任意の軌道が収束する現象が知られている。

これらの特徴からランダムネットワークは、学習の負荷が低いこともあいまって、リアルタイムでの情報処理へ応用されており、そのような枠組みの1つとして reservoir computing (RC) が用いられている。ここ数十年、計算性能の向上や動作原理の解明のために RC は多くの拡張がなされ、情報処理能力もさまざま尺度で評価されてきた。しかし RC の計算性能を最適化するための設計指針やそもそも RC がうまく機能する理由について、今のところ十分な理解は得られておらず、RC 自体の普遍的な記述が必要とされている。

2 手法

RC のようにノード間の相互作用によって情報処理を行うシステムに対しては、同じく多体間相互作用に対する統計物理による記述が重要であることが

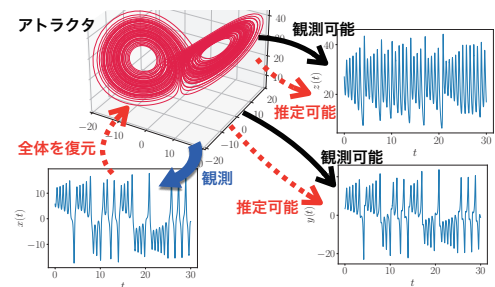


図 1: Lorenz 方程式の数値解. 左上の (x, y, z) の 3 変数の系から右下の x 変数のみを観測し、RC によってアトラクタを再構成して (y, z) を推定する。

知られている [2]. 本研究では RC の普遍的な性質を導くためにランダムネットワークを経路積分の方法を用いて解析した [3]. サイズ 500 のランダムネットワークを確率分布のパラメータ座標ごとにそれぞれ 100 アンサンブル構成し、RC による時系列推定タスクを学習する。性能評価はテストデータに対する平均二乗誤差 (MSE) の中央値と四分位範囲を用いる。相空間において確率分布のパラメータを変えて多アンサンブルの計算を行うため、スーパーコンピュータによる並列計算が威力を発揮する。

3 データ

ここではカオス時系列の代表例である Lorenz 方程式 [1] の時系列データを用いる。Lorenz 方程式は (x, y, z) の 3 変数の方程式で記述されるが (図 1 左上)、観測可能な変数は x だけとする (図 1 左下)。観測が部分的な状況で、観測データから力学全体を RC で再構成し、その他の変数 (図 1 右) を推定するタスクを行い、RC の性能を評価する。

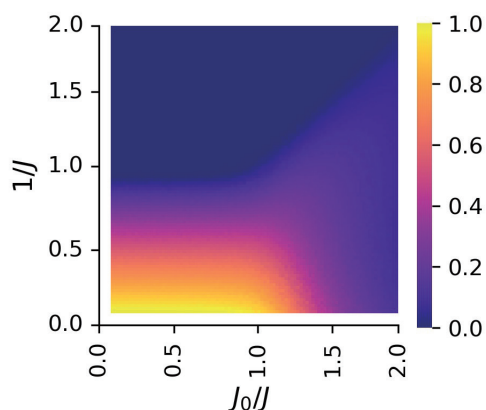
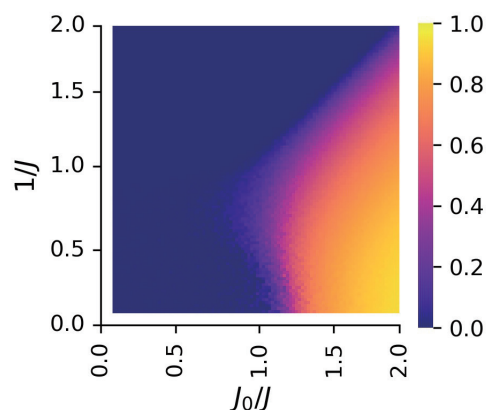


図 2: 十分時間発展させたガウシアンネットワークのノード値に対する (上) ノード間平均と (下) 分散のアンサンブル平均。

4 結果

図 2 は十分時間発展させたガウシアンネットワークのノード値に対する (上) ノード間平均と (下) 分散のアンサンブル平均の相図である。各パラメータ座標で $N(J_0/N, J^2/N)$ に従うガウス分布に従うランダムネットワークを用いた。横軸は J_0/J , 縦軸は $1/J$ である。これにより, ランダムネットワークは, ノード平均が 0, 分散が 0 の秩序相, 平均が正, 分散が 0 の偏極秩序相, 平均が 0, 分散が正のカオス相に分かれることが示された。

さらに, 時系列タスクの性能に対しては相転移が確認され, 相図で現れるネットワークの性質が大きく異なる相分離曲線の近傍で最適な学習性能が得られることがわかった。これを他の変数の推定タスクや確率分布を対象とすることで (未掲), RC のカオスの縁に対する新たな知見を得ることができた。

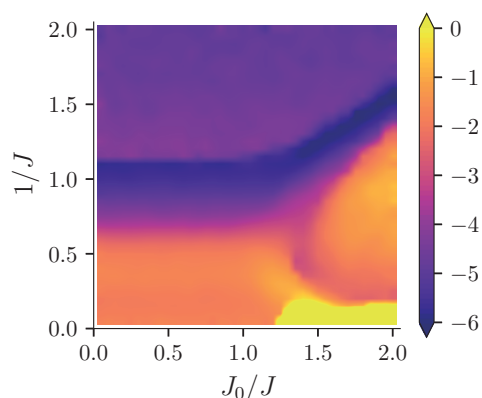
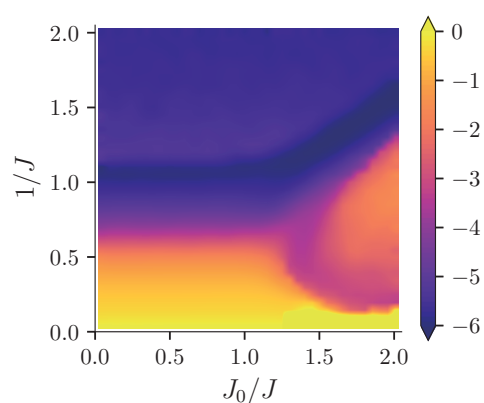


図 3: ガウシアンネットワークを用いた RC による時系列推定タスクのテストデータに対する平均二乗誤差の (上) アンサンブル中央値と (下) アンサンブル四分位範囲。

謝辞

本研究は京都大学スーパーコンピュータ共同研究制度 (若手・女性奨励枠) の活用によるものである。また, 本研究は春名純一氏, 兎子尾理貴氏 (京都大学理学研究科) との共同研究を含み, 科学研究費基盤研究 (C)(20K03747) の助成を受けた。ここに関係各位に対して感謝の意を表す。

参考文献

- [1] E. N. Lorenz, Deterministic Nonperiodic Flow, *J. Atmos. Sci.*, **20**, (1963).
- [2] H. Sompolinsky, A. Crisanti, and H. J. Sommers, Chaos in Random Neural Networks, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 259–262 (1988).
- [3] J. Haruna, R. Toshio and N. Nakano, Universality in reservoir computing and higher-order statistics, arXiv:2112.01886 (2021)

統計物理学模型との対応を利用した機械学習手法の性能評価

春名純一*

*京都大学大学院理学研究科物理学・宇宙物理学専攻

本稿は中野直人氏 (明治大学大学院 先端数理科学研究科 特任准教授) および 兎子尾理貴氏 (京都大学大学院理学研究科) との共同研究 [1] に基づくものである。

1 はじめに

人工ニューラルネットワークは現代の機械学習理論における本質的な基礎である。特に再帰的ニューラルネットワーク (RNN) は豊かな動力的特性 [2] を示し、リアルタイムでの情報処理に応用されている。そのような情報処理の枠組みの一つとして、リザーバ計算機 (RC) が挙げられる。RC はローレンツカオスなどの時系列予測に応用され成功を取めている。

一方で、リザーバ計算機により時系列予測がうまくいく理由や計算性能を最適化するための設計指針について、統一的な理解は得られていない。我々はこれらの解明を目指して、経路積分表示での生成関数の方法 [3-5] を用い、ノード数が十分大きい場合の RC の動力学について理論的に解析した。この結果、RC の動力学は結合定数の分布関数に応じて分類されることが判明した。これは、異なる分布関数を持っていても、同じ類 (“普遍類”) に属するネットワークはノード数が大きい極限において、同じ動力学を示すことを意味する。

我々はこの普遍類の検証するために、時系列予測タスクの大規模計算を行った。具体的には、普遍類の議論から、結合行列 J_{ij} を正規分布とガンマ分布からサンプリングしたとき、リザーバ計算機は異なる動力学を示すことが予言される。これらそれぞれの場合に、計算性能はどのように変わるか、および、計算性能が向上するパラメータの選択指針を得るため、ローレンツカオスの時系列予測を試みた。

2 セットアップ

RC では以下の (離散化された) 時間発展方程式を考える。

$$r_i(t+1) = -(1-\alpha)r_i(t) + \alpha \left(\sum_{i=j}^N J_{ij} \tanh(r_i) + \sum_{j=1}^{N_{\text{in}}} W_{ij}^{\text{in}} x_j + b_j \right) \quad (1)$$

$r_i(t)$ は N 成分実数ベクトル、 α は学習率と呼ばれる実数、 J_{ij} は $N \times N$ 行列、 b_j はバイアスと呼ばれる N 成分実ベクトル、 W^{in} は $N \times N_{\text{in}}$ 行列、 $x_i(t)$ は入力時系列で N_{in} 成分実ベクトルである。

具体的にはローレンツカオス時系列の X 座標の入力時系列とし、同時刻の Y 座標を予測することを試みた。ここではローレンツカオスの時間発展方程式

$$\begin{cases} x'(t) = -\sigma(x+y), \\ y'(t) = x(\rho-z) - y, \\ z'(t) = xy - \beta z \end{cases}$$

にて初期値を $x(0) = y(0) = z(0) = 1$ とし時間発展させた時系列を扱った。パラメータは $\sigma = 10, \rho = 28, \beta = 8/3$ とした。

具体的には $r_i(t=0)$ を $[0, 1]$ の一様分布からランダムに与え、その初期値を用いて式 (1) を $t=0$ から $t=200000$ まで計算し、 $r_i(t)$ の時系列を得た。このとき結合行列 J_{ij} は与えられた J_0 と J に対し、平均が J_0/N 、分散が J^2/N になるようにパラメータを調節した正規分布とガンマ分布からサンプリングした。この上で、ローレンツカオスの Y 座標の予測値を $\hat{y}(t) = \sum_j (W_{\text{out}})_j r_j(t)$ という線形変換で定める。 $r_i(t)$ の $t=5000$ から $t=100000$ までの時系列を学習データとし、 W_{out} を平均二乗誤差 $MSE := \sum_{t=5000}^{100000} (y(t) - \hat{y}(t))^2$ を最小にするものと

して選ぶ。こうして得られた W_{out} を用いて $\hat{y}(t)$ ($t \in [105000, 200000]$) をローレンツカオスの Y 座標の予測値とした。

こうして得られた学習データと予測データの平均二乗誤差を、 J_0/J と $1/J$ をそれぞれ $[0.1, 2.0]$ まで 0.02 刻みで変化させ、カラーマップを作成した。また相図の一点 ($J_0/J, 1/J$) に対して、 J_0 と J を固定し $r_i(t=0)$ について 100 アンサンブル計算を行った上で、そこで得られた学習データと予測データの平均二乗誤差 100 個ずつの平均 (アンサンブル平均) をカラーマップに表示した。

なおノード数 N は 500 、学習率 α は 0.2 とし、 W_{in} は $[-1, 1]$ の一様分布からサンプルし、 b_j は 0 とした。

3 結果および結論

紙面の都合上、学習誤差のカラーマップのみを紹介する。図 1 が正規分布の場合、図 2 がガンマ分布の場合である。同時に、予備計算で定常状態のリザーバー状態の相図についても計算しており、特に後者の場合を図 3 に示す。(統計力学的な類推ではリザーバー状態 $r_i(t)$ はスピンに対応し、この相図はその平均と分散をもとに描いたものである。)

学習誤差のカラーマップと統計物理学模型の相図を比較すると、これらが関連していることが示唆される。特に統計物理学模型にて相転移が起こるパラメータ付近 (各色の領域の境界) で、学習誤差が少なくなるという示唆を得た。今後は RC と統計物理学模型との関連について、経路積分表示での生成関数の方法から探っていくつもりである。

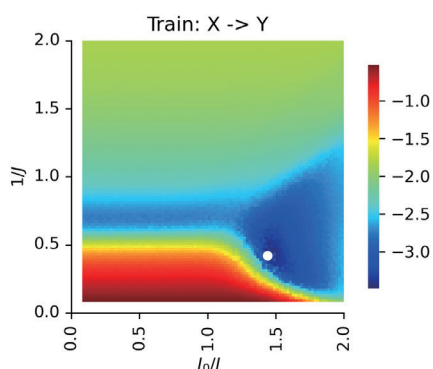


図 1: 結合定数を正規分布からサンプルしたときの学習誤差のカラーマップ ($N = 500, 100$ アンサンブル)

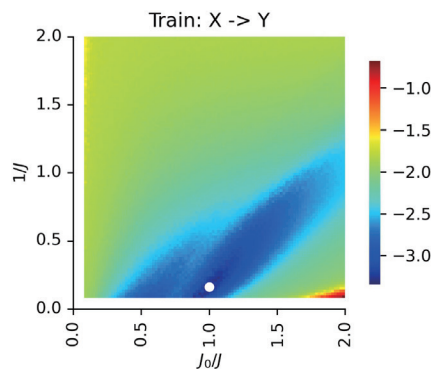


図 2: 結合定数をガンマ分布からサンプルしたときの学習誤差のカラーマップ ($N = 500, 100$ アンサンブル)

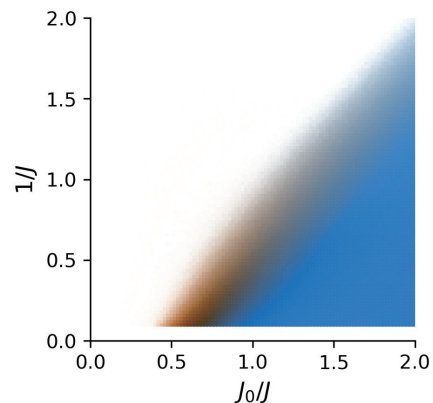


図 3: 結合定数をガンマ分布からサンプルしたときの定常リザーバー状態相図

参考文献

- [1] J. Haruna, R. Toshio, and N. Nakano, arXiv preprint arXiv:2112.01886 (2021).
- [2] H. Sompolinsky, A. Crisanti, and H. J. Sommers, Phys. Rev. Lett. 61, 259 (1988).
- [3] P. C. Martin, E. D. Siggia, and H. A. Rose, Phys. Rev. A 8, 423 (1973).
- [4] C. De Dominicis and L. Peliti, Phys. Rev. B 18, 353 (1978).
- [5] H. K. Janssen, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter 23, 377 (1976)

高次元ローレンツ系の機械学習モデリング

中井 拳吾 *

*東京海洋大学 学術研究院 流通情報工学部門

本稿は小林 幹氏 (立正大学経済学部), 齊木 吉隆氏 (一橋大学経営管理研究科) との共同研究に基づくものである.

1 はじめに.

近年, 機械学習の一種で, リカーレントネットワークをもったリザーバーコンピューティング [1, 2] が時系列やリャプノフ指数などの予測において有効であることが報告されている. 我々はこの機械学習手法を流体のエネルギー変数に適用し, 時間発展の予想等を成功させている [3, 4].

一方で, 流体力学を始めとした時系列データは, 初期の誤差が指数関数的に増加するカオス性により長時間予測ができないことが知られている. このため, 学習により得た時間発展モデルの解析には力学系構造の観点からの考察が必要である. 実際, 我々は不動点, 周期点のような力学系の不変集合といった各種力学系的性質が再現しうることを明らかにした [5]. 本研究では, 実際の現象でしばしば見られる力学系の双曲性を破綻させる構造不安定な力学系構造の再現性の考察に向けて, そのような構造不安定な力学系構造をもつ力学系の機械学習モデルの構築を行う.

2 リザーバーコンピューティング.

$d\phi/dt = \mathbf{f}(\phi)$ で表される力学系の変数, $\mathbf{u} = \mathbf{h}_1(\phi) \in \mathbb{R}^M$ について考える. ある時刻までの時系列データから入力変数 $\mathbf{u}(t)$ に対して出力が $\mathbf{u}(t + \Delta t)$ となるような時間発展モデルを機械学習によって構築する.

リザーバーコンピューティングの特徴の一つはニューラルネットワークの構造自体を学習しないため圧倒的に計算量が少なく済み, 代わりにニューラルネットワークの次元を大きくしている点である (詳細は [5]). このことによりダイナミクスが複雑なふ

るまいを示すとしても, それが決定論的である場合にはこの種の学習方法が有効である.

3 モデルの設定と結果.

3.1 設定.

N 次元のローレンツ方程式 (Lorenz96 system) [6]

$$\frac{dx_k}{dt} = x_{k-1}(x_{k+1} - x_{k-2}) - x_k + f, \text{ for } k = 1, \dots, N,$$

を考える. ただし, $x_{N+k} = x_k$ ($k = 1, \dots, N$) とする. ここでは不安定次元 (正のリャプノフ指数) が 2 である $(N, f) = (8, 6)$ の場合を考える. このアトラクタは, 不安定次元が 1 の周期軌道と不安定次元が 2 の周期軌道のいずれもが稠密に埋め込まれているヘテロカオス [7] であると考えられている [8].

方程式の時間により得られた変数 $(x_1(t), \dots, x_8(t))$ の時系列データを $\{\mathbf{u}\}$ としてリザーバーコンピューティングにより学習させて得られた時間発展モデルをどの程度再現するか解明する. ヘテロカオス性は力学系の双曲性を破綻させる典型的な構造であり, その構造不安定性から機械学習モデリングの困難さが予期された. 特に本誌では短時系列データ予測や長時間発展させて得られた時系列の潜在時間分布といった不変集合の再現性に注目する.

3.2 結果.

カオス性などにより長時間の時系列データ予測は困難であるが, 得られた機械学習モデルによって時系列データを精度良く予測できていることが確認された (図 1). また, 機械学習モデルの長時間発展を見ることによって正解のローレンツ方程式のアトラクタを再現することも確認された (図 2).

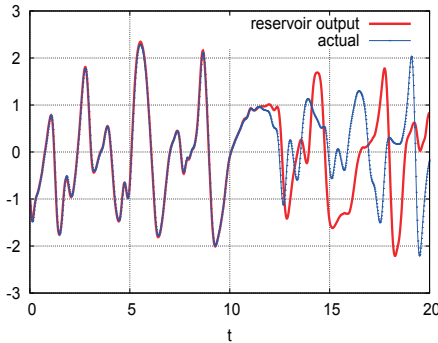


図 1: 時系列データ予測. ある時刻 $t = 0$ から構成した機械学習モデルによって予測された変数 x_1 の時系列データ (赤色) と対応するローレンツ方程式の時間発展により得られた変数 x_1 の時系列データ (青色) を書き出した.

4 まとめ.

構造不安定な力学系構造の典型例の一つのヘテロカオスであるローレンツ方程式について, その時系列データのみの学習によって機械学習時間発展モデルの構築を行った. このモデルにより時系列データ予測や不変密度分布などが再現されることを明らかにした. また, パラメータ $(N, f) = (8, 5.8), (8, 6.5)$ などの場合のローレンツ方程式に対しても同様にモデリングし, 予測がうまく行くことも確認した.

5 謝辞

中井は, 学長裁量経費-大学改革・機能強化等推進事業-の助成を受けている. また, 本研究でおこなった計算の一部は京都大学のスーパーコンピュータ共同研究制度 (若手・女性奨励枠) に基づく. ここに感謝の意を表す.

参考文献

- [1] H. Jaeger, and H. Haas, *Science*, 304, (2004), 78-80.
- [2] Z. Lu, J. Pathak, B. Hunt, M. Girvan, R. Brockett, and E. Ott, *Chaos* 27, (2017), 041102.

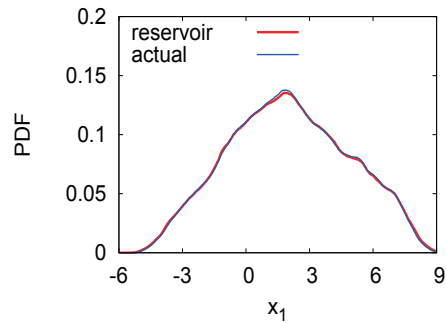


図 2: 変数の滞在時間分布. 構成した機械学習モデルによって予測された変数 x_1 の時系列データからその滞在時間分布を計算しプロットした. また, 対応する正解として, ローレンツ方程式の時間発展により得られた変数 x_1 の時系列データから滞在時間分布も計算し合わせてプロットした.

- [3] K. Nakai, and Y. Saiki, *Physical Review E* 98, (2018), 023111:1-6.
- [4] K. Nakai, and Y. Saiki, *Discrete and Continuous Dynamical Systems Series S*, (2021), 14:1079-1092.
- [5] M. Kobayashi, K. Nakai, Y. Saiki, and N. Tsutsumi, *Physical Review E* 104, (2021), 044215:1-7.
- [6] E. Lorenz, and K. Emanuel. *Journal of the Atmospheric Sciences* 45, (1998), 399414.
- [7] Y. Saiki, H. Takahasi, and J. A. Yorke, *Nonlinearity* 34, (2021), 5744.
- [8] Y. Saiki, M. A. F. Sanjun, and J. A. Yorke. *Chaos* 28, (2018), 103110.

計算化学的手法による様々な界面に対するカテコール構造の接着能解明

曾川 洋光

関西大学化学生命工学部

1 緒言

近年、環境負荷低減の観点から、バイオマスを活用した高性能材料の開発が強く求められている。申請者の研究グループでは、天然のイガイ接着タンパク質の接着機構に学び¹⁾、海藻由来の多糖類であるアルギン酸 (ALG) にドーパミン (DA) を化学修飾したカテコール含有アルギン酸 (ALGDA) を合成し、これが乾燥条件下で良好な接着能を示すことを見出している (図 1)²⁾。ALGDA はとりわけマイカ基板で最も良好な接着性を示し、次いでポリ塩化ビニル (PVC) 基板、アクリル (PMMA) 基板の順に接着強度が低下することも明らかとなっている。ALGDA に置換したカテコール基とマイカ基板上の水酸基は、水素結合を介して強く相互作用することで、接着強度が大きく向上したと考えられる。一方、

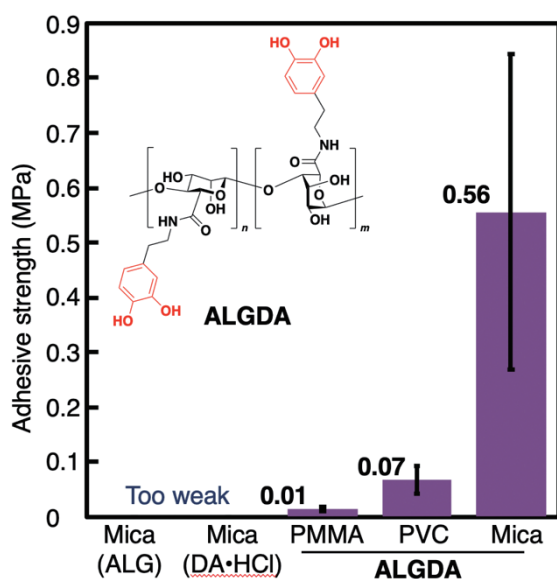


Figure 1. Chemical structure of ALGDA and adhesive strength evaluated by tensile tests (experimental values).

PVC 基板と PMMA 基板では、カルボン酸部位を有する PMMA が ALGDA のカテコール部分とより強く相互作用することが予想されたが、実際の結果はこれに反したものとなった。そこで本研究では、PVC や PMMA に対するカテコールの相互作用の大きさを見積もることで、実測との比較検討を行なった。

2 実験

第一に、PVC および PMMA 六量体モデルに対して Gaussian 16 を利用し、DFT 法を用いた構造最適化を行なった。PMMA 六量体モデルの立体規則性については、計算を容易にするためシンジオタクチック構造を採用した。また、DA との相互作用を算出するため、*N*-(3,4-dihydroxyphenethyl)acetamide (DA_{amide}) を PVC および PMMA 六量体モデル近傍に配置した構造最適化を行なった。各ポリマーモデルに対し、DA_{amide} の配置位置をいくつか変えたものを初期座標として計算を実施し、最も安定なエネルギー値をとったものを最適化後構造とした。いずれの計算も汎関数および基底関数にはそれぞれ ωB97X-D、6-31G(d,p) を使用した。

3 結果・考察

DFT 結果より算出したエネルギー値を表 1 に示す。DA_{amide} と各ポリマー六量体モデルのエネルギー値の和を基準値とし、DA_{amide} が各ポリマー鎖近傍に配置された際のエネルギー値を求めたところ、PVC および PMMA の各ポリマー六量体モデルで、エネルギーの値はそれぞれ -94.9 kJ/mol および -63.3 kJ/mol 安定化されることが明らかとなった。つまり、ALGDA にアミド結合を介して導入されたカテコー

Table 1. Relative Energies estimated by DFT method

combination	ΔE (kJ/mol)
DA _{amide} + 6-mer model of PVC	0.0
DA _{amide} on 6-mer model of PVC	-94.9
DA _{amide} + 6-mer model of PMMA	0.0
DA _{amide} on 6-mer model of PMMA	-63.3

^a Calculated by the DFT method (ω B97X-D/6-31G*). The ΔE were relative values using DA_{amide} + 6-mer model of PVC, and DA_{amide} + 6-mer model of PMMA as standards for estimation the interaction of catechol unit, respectively.

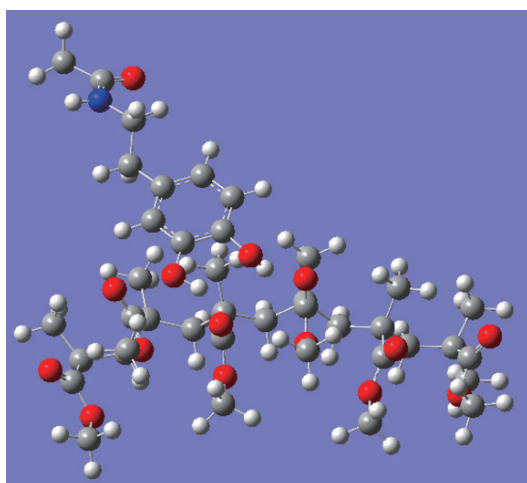
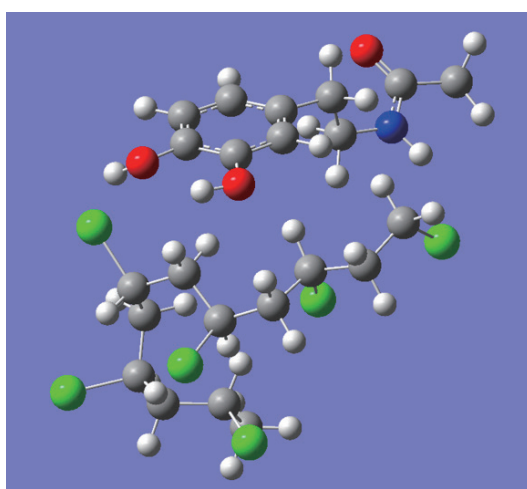


Figure 2. Optimized conformation of DA_{amide} on a 6-mer model of PVC (top) and PMMA (bottom). Gray: carbon; white: hydrogen; red: oxygen; blue: nitrogen, and green: chloride.

ルユニットは、PMMA 鎖よりも PVC 鎖とより強く相互作用することが計算科学的にも示された。DA_{amide} が各ポリマー六量体モデルと相互作用した

状態で再安定となった構造を図2に示す。PMMAでは、主鎖上に位置するメチル基が立体障害として作用することでDA_{amide}の近接を防ぎ、結果としてより相互作用しにくくなったものと推測される。加えて、PVCではカテコール部分だけでなく、アミド結合部分もポリマー近傍に近いコンフォメーションを取っており、これが構造安定化に寄与している可能性も示唆された。

4 まとめと今後の展望

本研究では、ALGDAの界面に依存した接着能に関する知見を得るため、DA_{amide}とPVCおよびPMMA六量体モデルの相互作用をDFT計算から算出した。その結果、DA_{amide}はPVCとより相互作用しやすいことが明らかとなり、実測の傾向を反映した結果が得られた。このことは、基板モデルと相互作用する部位の構造安定化の度合いを見積もることで、接着強度の大きさある程度予測できることを示しているとも言える。ただし、界面での分子のふるまい・挙動は複雑なものであることから、今回示したような単純な一分子同士の相互作用モデルではなく、分子動力学計算を用いた大規模シミュレーションによる相互作用予測が必要であるとも考えられる。これらの計算を実施することで、より正確な界面接着強度の計算科学的予測が達成可能になると期待される。

5 謝辞

本共同研究制度(若手奨励枠)を活用させて頂きましたことを、この場を借りて感謝致します。

6 引用文献

1. Y. Liu, K. Ai, L. Lu, *Chem. Rev.* **114**, 5057–5115 (2014).
2. S. Inata, H. Sogawa, F. Sanda, *Polym. Prepr. Jpn.* **70**(2), 1Pc53 (2021).

高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と 有限密度 2 カラー-QCD の相図の決定

伊藤 悦子

理化学研究所 数理解造プログラム(iTHEMS)

スーパーコンピュータ共同研究制度の「2021 年度プログラム高度化」により、格子 QCD の分野でよく用いられるラショナルハイブリッドモンテカルロ (RHMC)法のコードの高速化を行なった。演算・通信の改良により 12桁の精度を保ったまま、約 2.4 倍の高速化に成功した。

1 研究概要

本共同研究の背景には、関連研究として 2018 年度から学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)の公募型共同研究課題「高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と有限密度 2 カラー-QCD の相図の決定」でシステム A を利用していた事がある。

JHPCN での研究課題では、原子核の中の物理を記述するミクロな理論である量子色力学(QCD)のゲージ対称性の自由度の一つ落とした「2 カラー-QCD」の高密度領域で生じる超流動相の性質を解明することが目標となっている。これは、現在全くと言っていいほどわかっていない「中性子星の内部の現象に新たな知見を得る」と期待されている研究テーマである。

これまでに、図 1 のように 2 カラー-QCD の相図の決定をおこなってきた。主な成果としては超流動性の秩序変数であるダイクオーク凝縮を測定し、超流動相の直接証拠を得た事や、その超流動相は 100MeV 以下の低温で出現する事、またクオークの閉じ込めは BCS 相でも引き続き起こることなどが示された(文献[1],[2],[3])。つまり摂動的な描像ではない超流動相が広がっていることを示しており、非摂動的な第一原理計算の重要性が高まったと言える。今後、超流動相でのハドロンのスペクトル、相互作用ポテンシャル、状態方程式などの物理現象を調べるにあたって、コードの

高速化が急務となり、今回の共同研究に至った。

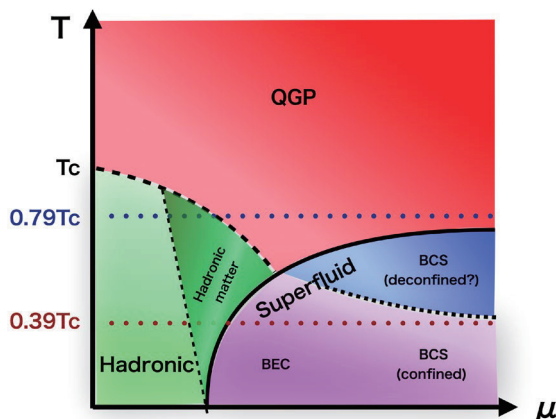


図 1: 2 カラー-QCD 相図 ($T=0.79T_c$ と $0.39T_c$ を調べた)

2 計算コードについて

本研究は、いわゆる「格子 QCD」分野の第一原理計算である。その計算手順は大きく 2 つである。

Step 1: モンテカルロ法を使い「ゲージ配位」をサンプリングする

Step 2: 生成した配位を使って物理量を測定する

Step 1 で一旦生成された配位は保存しておく事で、いつでも新しい物理量を測定するのに活用でき、分野の財産となっている。実際に、国際的

に公開・共有されている配位も存在する。

我々の研究においても JHPCN で獲得した計算時間のほとんどを Step 1 の配位生成に利用しており、例えば 32^4 の格子サイズの配位生成は足掛け 3 年に渡り行っている。このため、この部分の計算コードを少しでも高速化することで、研究に要する時間を大幅に縮減できる。

配位生成のアルゴリズムは、ハイブリッドモンテカルロアルゴリズムにラショナル近似を使った「ラショナルハイブリッドモンテカルロ法 (RHMC)」を用いている。これは、現実の QCD でも奇数個のクォークが存在する際に使われる手法であり、非常に汎用性が高い。オリジナルのコードは Fortran で書かれ、創業数 6587 行、並列化手法は分散メモリ型、MPI 並列化されていた。

3 プログラムの概要と高速化の問題点

高速化の対象となる RHMC アルゴリズムのコードは、以下で成り立っている。

- (1) ゲージ配位(バイナリーデータ)の読み込み
- (2) 乱数の生成
- (3) 行列の足し算・掛け算
- (4) マルチシフトソルバーによる逆行列の計算
- (5) ゲージ配位(バイナリーデータ)の書き出し

また、MPI 並列に関しては、現在対象としている計算は時空点が 32^4 の格子サイズであり、1core あたり $8x4x4x16$ の格子サイズの 512MPI 並列に分割している。演算のほとんどが各 core の計算であり、時々通信を行なっている状況である。

計算で最も時間のかかっている部分は、(4)のマルチシフトソルバーの部分である。また、この時に何度も(3)の行列演算のライブラリーが呼ばれている。また、(1),(2),(5)の部分は並列化されておらず効率が悪くなっているため、この辺りを MPI 化する改善も、当初は見込まれた。

基本的に物理学の研究者で構成されている JHPCN の共同研究のメンバーでは、これ以上のチューニングが難しかったため、このプログラム高速化の共同研究制度を利用して、ヒューレットパッカードの方を紹介していただき、共同研究を行うこととなった。

4 高速化の実行

4.1 共同研究の組織

ヒューレットパッカード (HPE) から伊藤泰善、原山卓也。JHPCN での研究組織から、飯田圭 (高知大) 石黒克也 (高知大)、村上耕太郎 (京都大)、伊藤悦子 (理研) が参加した。基本的には、HPE の二人が中心になって進めて、JHPCN 側からの参加者は、時々進捗等を伺う程度だった。

4.2 プログラムの構造の特徴

HPE の方によるプログラム分析結果では、(i) サブルーチンコールのネストの深さが大きい (最大 15 段)、(ii) ループ構造の末端で呼ばれるサブルーチン (ベクトル関連演算、MPI 関連) の粒度が小さい、(iii) MPI 関数は全て同期型関数を使用している点が挙げられた。

4.3 高速化の検討事項

(4) のマルチシフトソルバーの演算はインライン展開/ループ融合/スレッド並列化/BLAS ライブラリ置換、通信はインライン展開/非同期関数化/複数要素化の組合せで高速化の可能性を検討した。また、(3) のベクトル (行列) の演算は、インライン展開/スレッド並列化、通信はインライン展開/非同期関数化/演算・通信オーバーラップの組合せで高速化の可能性はある。そのほか、コンパイルオプション、Hugepage、Cray MPI 環境変数、rank 配置等での高速化の可能性はある。

一方で、並列化については、並列 I/O の適用による性能向上は期待できず、既存の I/O を含むサブルーチンのデータコピー部分をスレッド並列化することが、最小限の修正で最大の効果をもたらすことがわかった。

4.4 演算・通信高速化の実施

高速化にあたっての実施条件は以下のとおりである。

実施条件	
問題規模	1 種類 (格子サイズ: $32x32x32x32$)
プロセス数	512 (1 プロセスあたりの格子サイズ: $8x4x4x16$)
計算繰返し数 (*1)	10 (Nsweep)
実行結果検証方法	標準出力ファイルに対して grep Trj を実行し、最後の数字が 10 桁程度一致し、10 個のうち 8 個程度 accepted と表示されていること
性能確認方法	全体経過時間および標準出力中のタイマー出力
実行並列数 (*2) や 使用資源の条件	実行並列数: 8n64p1t メモリ使用量: 674 MiB ディスク使用量: 516 MB

この中で、まずは演算部分の高速化として、6種類の演算高速化手法を組み合わせ、オリジナル版(に PPN オプションを実行時に付与したもの)に対して、どの程度性能が向上するかを調べた結果が下の図2である。

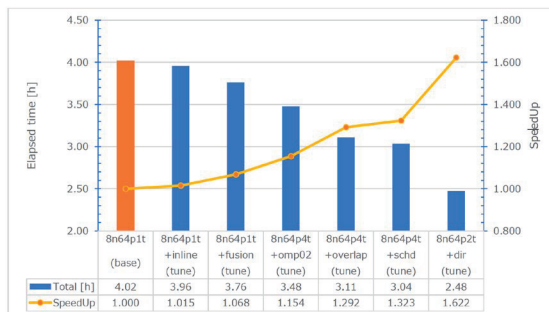


図 68 演算高速化性能評価結果まとめ

図 2: 演算高速化性能評価結果のまとめ (HPE からの報告書より抜粋)

具体的には、左から「インライン展開」「ループ融合」「スレッド並列化(omp2)」「演算・通信オーバーラップ」「ループスケジューリング」「SIMD化」をおこなっている。

効果として最も効いたのは「演算・通信オーバーラップ」の部分で、ここで 13.8%の性能向上が見られた。

6種類の演算高速化を行うことで、合計すると 1.622 倍の性能向上があり、4.02[h]かかっていた計算が 2.48[h]となった。

次に、通信部分の高速化についてまとめると、こちらも 6種類の高速度化手法の組み合わせを行い、オリジナル版(に PPN オプションを実行時に付与したもの)に対して、どの程度性能が向上するかを調べた結果が下の図3である。

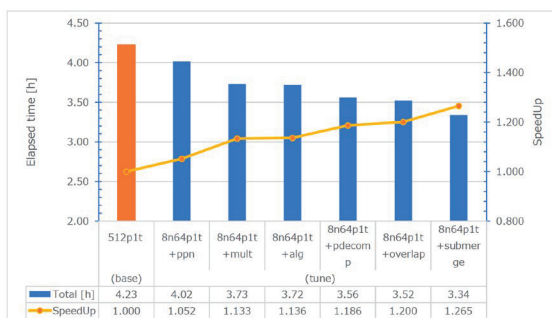


図 69 通信高速化性能評価結果まとめ

図 3: 通信高速化性能評価結果のまとめ

具体的には、左から「PPN(プロセッサ数の

明示的指定)オプション」「複数要素化」「アルゴリズムの変更」「プロセスデコンポジション」「演算・通信オーバーラップ」「サブルーチンマージ」を行なっている。効果として最も効いたのは、「複数要素化」の部分で、ここで 8.1%の性能向上が見られた。

これら 6種類の高速度化のみを行うと、合計として 1.265 倍の性能向上があり、4.23[h]かかっていた計算が 3.32[h]となった。

最後に、演算高速化と通信高速化の両方を組み合わせた結果が以下の図4である。

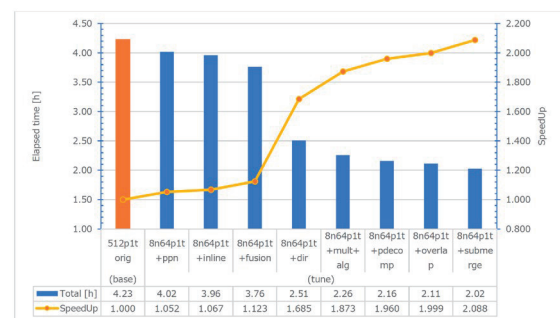


図 70 演算・通信高速化性能評価結果まとめ

図 4: 演算・通信高速化性能評価結果のまとめ

具体的には、左から「PPN (通信)」「インライン展開 (演算)」「ループ融合 (演算)」「SIMD化 (通信)」「複数要素化+アルゴリズムの変更 (通信)」「プロセスデコンポジション (通信)」「演算通信オーバーラップ」「サブルーチンマージ(通信)」を施している。全体を組み合わせた際は、SIMD化が大きく性能向上に影響し、56.2%の効果を上げた。

これら全てを取り入れると、オリジナル版 (に PPN 適用) した base コードと比較して、4.23[h]から 2.02[h]の実行時間の削減となり、2.088 倍の性能向上となった。

5 まとめと今後の展望

最終的に、本当のオリジナル版(PPN 適用なし)のコード実行から比較して、2.424 倍の性能向上が得られた。一方で実行結果は 12 桁以上の精度で一致しており、計算精度をほとんど落とすことなく高速化ができた事になる。約 2.4 倍の高速度というのは驚くべき成果である。おそらく物理の

研究者のみではここまでのチューニングを行うことはできなかったため、本共同研究ならではの成果と言えるだろう。

2022 年度は早速この高速化コードをシステム A で利用し、研究を進めている。また、この RHMC コードは、格子 QCD 分野で標準的なコードの一つとなっており、他のグループとも情報シェアが可能なため、ここでの報告の情報が広く伝わることを期待する。

参考文献

- [1] K.Iida, E.Itou, T.-G. Lee:
PTEP 2021 (2021) 1, 013B05
- [2] K.Iida, E.Itou, T.-G. Lee:
JHEP2001(2020)18
- [3] K.Ishiguro, K.Iida, E.Itou,
PoS (LATTICE2021) 063

低メモリ・低コスト通信乱流大規模直接数値計算コードの高度化

山本 義暢

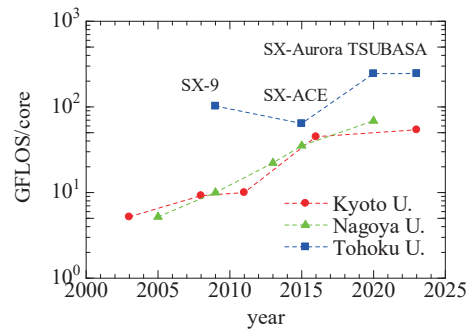
山梨大学大学院総合研究部

1 研究背景

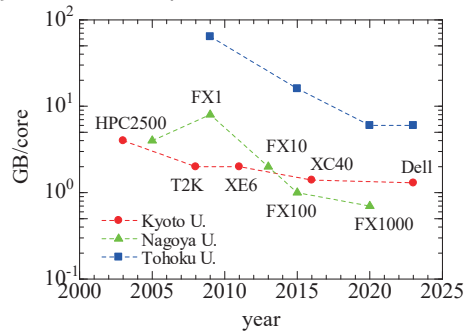
ノイマン型スーパーコンピュータの基礎を作ったフォン・ノイマンはその活用先として、乱流現象解明へのブレイクスルーを想定していた。実際彼の予測通り、1972年には初めての乱流直接数値計算(Direct Numerical Simulation, DNS)が行われ [1]、計算機性能の発展に伴いその対象レイノルズ数の拡張が試みられている(例えば、 [2], [3])。

乱流の DNS においては周期境界条件が適用できる形状においては、フーリエスペクトル法の適用が計算精度・効率の両面から最高のパフォーマンスを与え、標準手法として確立している。このスペクトル法を流体計算に適用する場合、Navier-Stokes 式の非線形項が主要演算部となり、一般には疑スペクトル法が適用される。疑スペクトル法では非線形項を物理空間で計算し、フーリエ空間に戻して計算を行う。そのため疑スペクトル法の計算コストは高速フーリエ変換(Fast Fourier Transform, FFT)のコストと同等となる。しかし FFT は並列効果を作るためには領域分割軸の転置(all-to-all 通信を伴う)が必要となり、近年のノード間結合が疎結合の超並列計算機では通信コストが極めて高く、大規模化つまりは対象 Re 数の拡張において深刻な問題となっている(例えば、 [4], [3])。ここで FFT の並列化効率は、MPI プロセスあたりのメモリ量が大きいほど有利となる。図 1 は京都大学、名古屋大学及び東北大学の全国共同利用施設として提供されているスーパーコンピュータにおける flat MPI を想定した場合の 1MPI プロセスあたりの理論演算速度(GFLOPS)とメモリ量(GB)の経年変化を示している。京都大学と名古屋大学は 2000 年初めまでは同機種(富士通 HPC2500)であったが、名古屋大学は富士通独自のスカラ並列機

(FX シリーズ;FX1, FX10, FX100 及び FX1000)を導入しているのに対し、京都大学は x86 タイプのスカラ並列機(T2K, Cray XE6, XC40, 及び 2023 年からは DELL C6620)が導入されている。一方東北大学はベクトル並列機(SX シリーズ; SX-9, SX-ACE, SX-Aurora TSUBASA)が導入されているのが特徴である。



(a) 理論演算速度/core



(b) メモリ量/core

図 1 京大、名大、東北大におけるスーパーコンピュータにおける理論演算速度・メモリ量の変化、(a)演算速度/core、(b)メモリ量/core

興味深いことに、図 1(a)に示すようにコア当たりの演算速度は増加し続けているのに対し、FX シリーズ及び SX シリーズのメモリ量は減少傾向にあることがわかる(図 1(b)参照)。一方京都大学のシステムは演算性能を向上させつつ、メモリ量は一定に保たれ

ていることが確認できる。つまり乱流の大規模 DNS においては、その優位性が FX 及び SX シリーズに対して x86 タイプとの差が縮小していることを示唆する。

そこで本研究では京都大学学術情報メディアセンターのシステム A(Cray XC40)を対象とし、筆者らがベクトル並列計算機上で開発してきた壁面乱流場の大規模 DNS コード [5] [6]の移植評価及びその高速化を試みる共同研究を実施した。

2 DNS コードの概要

2.1 対象とする流動場

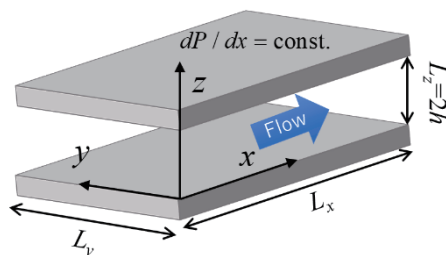


図2 チャンネル流とその座標系

本研究では図2に示す十分に発達したチャンネル流を対象とする。本流動場では、主流方向(x)及びスパン方向(y)に周期境界条件が適用でき、壁面(z=0, 2h, h:チャンネル半値幅)において no-slip 条件が適用される。流れ場の支配方程式は非圧縮性流体の Navier-Stokes 式と連続式であり、基本物理量は x, y, z 方向の速度 $\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}$ 及び一定密度で除した圧力 \tilde{p} となる。ここに上付き添え字 \sim は瞬間値であることを示している。流れ場の駆動力としては x 方向に一定の圧力勾配($\equiv F_x = u^2/h, u_c$:壁面摩擦速度)を課す。従って流動場の支配パラメータであるレイノルズ数は、壁面摩擦速度(u_c)とチャンネル半値幅(h)によって規定される($\equiv Re_\tau = u_c h / \nu, \nu$:動粘性係数)。

本流動場は実際の工学現象で頻出する非一様乱流のカノニカル流として知られており、1987年に初めての DNS [7]が行われた(x, y 方向にフーリエスペクトル法、z 方向に Chebyshev-tau 法)。このチャンネル流の DNS は一様等方性の DNS [1], [2], [3]に比べ時間積分長が大きくなり、計算コストはさらに増大する。

2.2 離散化手法

離散化手法としては、x, y 方向にフーリエスペクト

ル法を適用し、壁垂直方向(z)に2次精度中心差分法を適用する。時間積分は Fractional step 法に基づき、圧力項に Euler 陰解法、その他の項に2次精度 Adams-Bashforth 法を適用する。波数空間での圧力ポアソン方程式は、3重対角行列解法(Tri-Diagonal Matrix Algorithm, TDMA)による直接解法が適用される。従って主要演算部は、x, y 方向への2次元実フーリエ変換/逆変換と z 方向への TDMA となる。FFT について FFTW3.0 の逐次版を用い、コンパイラは Cray コンパイラを使用した。

2.3 領域分割方法

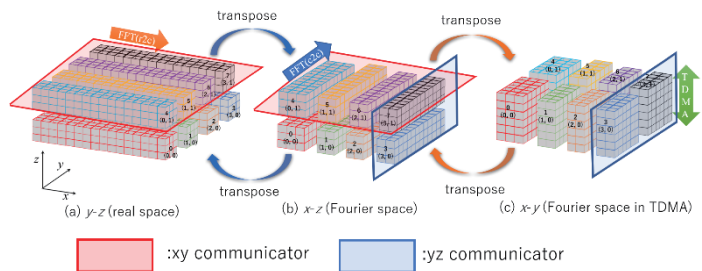


図3 2次元領域分割

・従来方法 領域分割方法として、超並列計算に対応できるように図3(a)に示す y 及び z 方向への2次元領域分割を適用する。しかし y 方向の FFT 及び z 方向への TDMA は領域分割方向への演算となり、従来の方法 [4], [8]では並列効果を作るために y 方向 FFT 時には $y \rightarrow x$ への分割軸の変更(図3(b)参照)及び z 方向 TDMA 時には $z \rightarrow y$ への分割軸の変更(図3(c))を行う必要がある。つまり速度3成分、非線形項6項とすると1stepあたり、 $x \rightarrow y$ への転置を9回、 $z \rightarrow y, y \rightarrow z$ の転置を1回、 $y \rightarrow x$ への転置を9回行うことになる。この転置は各領域分割コミュニケータ内での all-to-all 通信(a2a)により行われる。従って乱流の DNS における計算時間の大半はこの転置による通信時間が占めることになる [4], [8]。

・本手法 この転置コストを低減するために、z 方向の TDMA に対し、shift 通信と x, y 方向へのオーバーラップによる並列化手法 [9]を適用し、 $z \rightarrow y, y \rightarrow z$ の転置を回避する。一方 FFT 時の $x \rightarrow y, y \rightarrow x$ への転置は必要となるが、この分割方向(xy_communicator、図3参照)を直接結合ノードに割り当てることにより通信負荷を低減させる。Cray XC40 の Cray Aries+Dragonfly ネットワークシステムの場合は、4ノードが直接結合ノードとなる。

2.4 a2a 通信の低減化

本 DNS コードでは、FFT 時の $x \rightarrow y, y \rightarrow x$ への計 18 回の a2a が発生する。これを低減させるために、演算と通信のオーバーラップを導入している。具体的には x, y 方向 FFT は z 方向へ独立に行われることから、 z 方向 1 断面の a2a とその z 方向前後の FFT を同時に実行し a2a 通信の低減を図っている。この実装は OpenMP 機能を用いている。

3 性能評価条件

3.1 解析実体系

超大規模計算として想定している計算条件は x, y, z 方向に 14400, 13824, 5760 格子であり、必要メモリ量は約 150TB を要する。システム A(camphor2)では全 1920 ノード(メモリ量 160TB)で動作する規模であり、xy_communicator に 88 分割、 z 方向 480 分割、各 MPI プロセスに 3 つの OpenMP スレッドを配置する (88x480x3=126,720 コア)。但しシステム A ではこの体系での計測はできないため、簡易解析対象として z 方向に縮小した条件を設定した。なお参考のため、本体系を対象とできる理化学研究所「富岳」(Fugaku) 東京大学情報基盤センター Oakforest-PACS(OPF)での実行条件を表 1 に示す。

表 1 実体系での実行条件

system	#node	#mpi _xy	#mpi _z	# AP	#core
Camphor2	1920	88	480	3	126,720
OPF	1920	88	480	3	126,720
Fugaku	5760	192	480	3	276,480
Fugaku	8640	144	720	4	414,720

3.2 簡易解析対象

システム A(Cray XC40 8 ノード/528 コア)を対象として、 x, y, z 方向に 14400, 13824, 24 格子を適用する。領域分割は xy_communicator に 88 分割、 z 方向に 2 分割とし各 MPI プロセスに 3 つの OpenMP スレッドを配置した(88x2x3=528 コア)。この場合、xy_communicator 内の a2a は 4 ノード間となり、直接結合ノードでの実行を想定している。但し、シス

テム A の場合は実際のノード配置を指定することができないため、この 4 ノードが直接結合ノードに配置される場合とそうでない場合がランダムに発生し、性能評価において大きな負担となった。

4 性能評価結果

表 2 簡易体系での性能評価結果 : camphor2

FFT/a2a オ ーラップ	#node	#mpi _xy	#mpi _z	# AP	elapse [s]
あり	8	88	2	3	1842
なし	8	88	2	3	2056

表 2 に簡易体系を用いて 100step 分の時間積分に要した経過時間(wall-time)を示す。FFT と a2a のオーバーラップを用いた場合、18.4[s/step]を要する。また FFT と a2a のオーバーラップにより約 200 秒の時間短縮効果が得られていることが確認できる。

表 3 に理化学研究所「富岳」(Fugaku) 東京大学情報基盤センター Oakforest-PACS(OPF)を用いた実体系での測定結果を示す。

表 3 実体系での測定結果

system	#node	#mpi _xy	#mpi _z	# AP	s/step
OPF	1920	88	480	3	18.1
Fugaku	5760	192	480	3	4.8
Fugaku	8640	144	720	4	3.2

OPF とシステム A ではネットワークシステムがことなるため超並列計算時の単純な比較には注意を要するが、表 2 の簡易体系で見積もった 18[s/step] とほぼ同等であることが確認できる。理化学研究所の「富岳」においては、8640 ノードで 3.2[s/step] 演算速度 : 516[TFLOPS]での計算が可能であり、5760 ノードとの比較により算出した並列化効率は 99%を超えている。「富岳」での実行効率は理論性能の 1.8%程度であり、これを基に OPF での演算速度を見積もると、約 92[TFLOPS]となる。これは理論性能の 1.6%に相当する。なお OPF では大規模 HPC チャレンジにより 8192 ノードを使用しての評価も予定していたが、新型コロナウイルス感染症拡大防止によりキャンセルとなってしまった。

5 高速化の検討

本 DNS コードのさらなる高速化を目指し、非同期型 a2a による a2a 時間の短縮、MPI プロセス配置の手動設定等を検討したが、現段階で有効な結果は得られなかった。この理由は実体系では z 方向の MPI プロセスを 480 程度(480 ノード)用いるため、TDMA の評価も重要となるが、簡易体系では高々 2 ノードであるため TDMA 部分について簡易体系となっていないことが大きいと考えられる。またこれを評価するにはかなりノード数を増やすことが必要であり、今回の検討規模 (8 ノード) では困難であった。

6 まとめと今後の課題

本研究では、壁面乱流場の超並列大規模直接数値コードにおける京都大学システム A (camphor2) での性能評価を実施した。従来乱流の DNS においては、NEC/SX シリーズあるいは富士通/FX シリーズの適用が有用であったが、コア当たりのメモリ量が小さく、コア当たりのメモリ量及び演算速度のバランスに優れる Xeon Phi ベースの Camphor2 との差が短縮することが想定された(図 1 参照)。実際実コードを用いた評価においても Camphor2 と同じ Xeon Phi を用いる東京大学情報基盤センターOakforest-PACS においては、理化学研究所「富岳」(FX1000 相当)に匹敵する実行効率が得られることが確認できてた(表 3 参照)。京都大学の次期システム (DELL C6620) においては Camphor2 と同等のコア当たりのメモリ量が確保される予定であるため、本 DNS コードが有効に動作する可能性が高い。

一方京都大学システムでは最大実行可能ノード数がかかなり小さく抑えられているため実際の PRODUCTION RUN は実行できずまさに絵に描いた餅になってしまうことが残念である(Camphor2 では全 1920 ノードに対し、最大ジョブは高々 128 ノードしか利用できない)。今後は本評価に基づき、さらなる大規模化と高速化を実現するための基本戦略の策定、さらには実際の PRODUCTION RUN を実行できる環境の模索も重要と考えられる。

謝辞：本研究は京都大学学術情報メディアセンターとの共同研究 (高度化研究) により実施した。理化学研究所「富岳」を用いた評価は、HPCI 公募課題(ID: hp210125)により提供された資源を利用して行った。また本研究は栢森情報科学振興財団による研究助

成を受けて遂行した。記して謝意を表す。

参考文献

- [1] S. A. Orszag and G. S. Patterson, "Numerical Simulation of Three-Dimensional Homogeneous Isotropic Turbulence," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 28, no. 2, pp. 76-79, 1972.
- [2] Y. Kaneda, T. Ishihara, M. Yokokawa, K. Itakura and A. Uno, "Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in a periodic box," *Phys. Fluids*, vol. 15, no. 2, pp. L21-L24, 2003.
- [3] P. K. Yeung and K. Ravikumar, "Advancing understanding of turbulence through extreme-scale computation: Intermittency and simulations at large problem sizes," *Phys. Rev. Fluids*, vol. 5, no. 11, p. 110517, 2020.
- [4] J. Xu, "Benchmarks on tera-scalable models for DNS of turbulent channel flow," *Parallel Computing*, vol. 33, no. 12, pp. 780-794, 2007.
- [5] Y. Yamamoto and T. Kunugi, "Direct numerical simulation of a high-Froude-number turbulent open-channel flow," *Phys. Fluids*, vol. 23, no. 12, p. 125108, 2011.
- [6] Y. Yamamoto and T. Kunugi, "MHD effects on turbulent dissipation process in channel flows with an imposed wall-normal magnetic field," *Fusion Eng. Des.*, vol. 109, no. 111, pp. 1137-1142, 2016.
- [7] J. Kim, P. Moin and R. Moser, "Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number," *J. Fluid Mech.*, vol. 177, pp. 133-166, 1987.
- [8] M. Lee, N. Malaya and R. D. Moser, "Petascale direct numerical simulation of turbulent channel flow on up to 786k cores," in *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, 2013.
- [9] Y. Yamamoto and Y. Tsuji, "Numerical evidence of logarithmic regions in channel flow at $Re_\tau = 8000$," *Phys. Rev. Fluids*, vol. 3, no. 1, p. 012602, 2018.

システム A 運転状況 (2021 年 10 月 ~ 2022 年 3 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

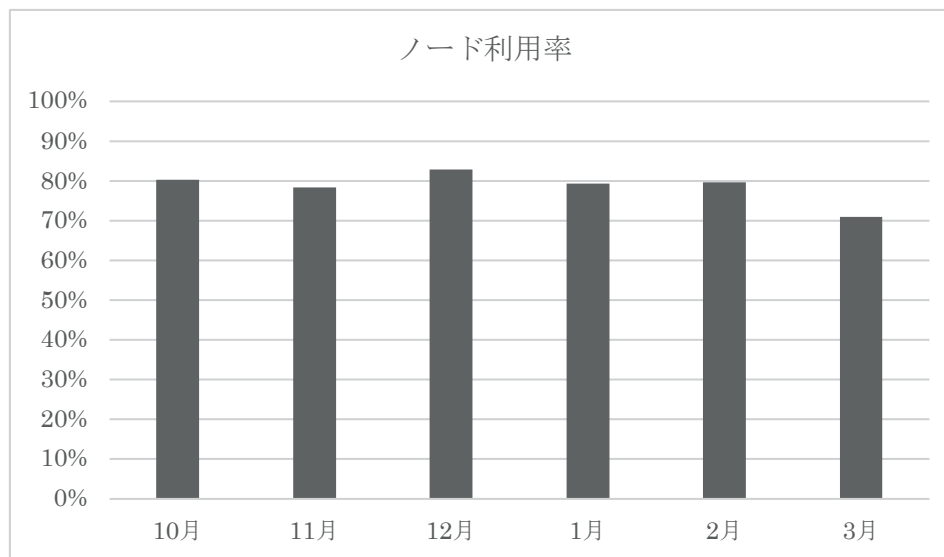
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2022/12/02 9:00	2022/12/02 14:00	5.00
2022/03/05 6:00	2022/03/07 9:00	51.00
2022/03/30 9:00	2021/03/31 24:00	39.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
10月	744.00	66,087	378,923	74,112,416	61,047,462	1794.3	80.3 %
11月	720.00	58,052	340,178	66,744,907	60,079,010	1797.0	78.3 %
12月	744.00	104,339	361,725	75,090,388	63,162,220	1798.1	82.8 %
1月	744.00	87,189	320,878	73,046,361	54,796,703	1799.4	79.3 %
2月	672.00	88,311	271,140	64,812,314	47,165,309	1798.1	79.6 %
3月	654.00	97,807	207,969	62,517,789	45,850,338	1705.0	70.9 %
計	4,278.00	501,785	1,880,812	416,324,175	332,101,042	1782.0	78.5 %



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

システム B 運転状況 (2021 年 10 月 ~ 2022 年 3 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

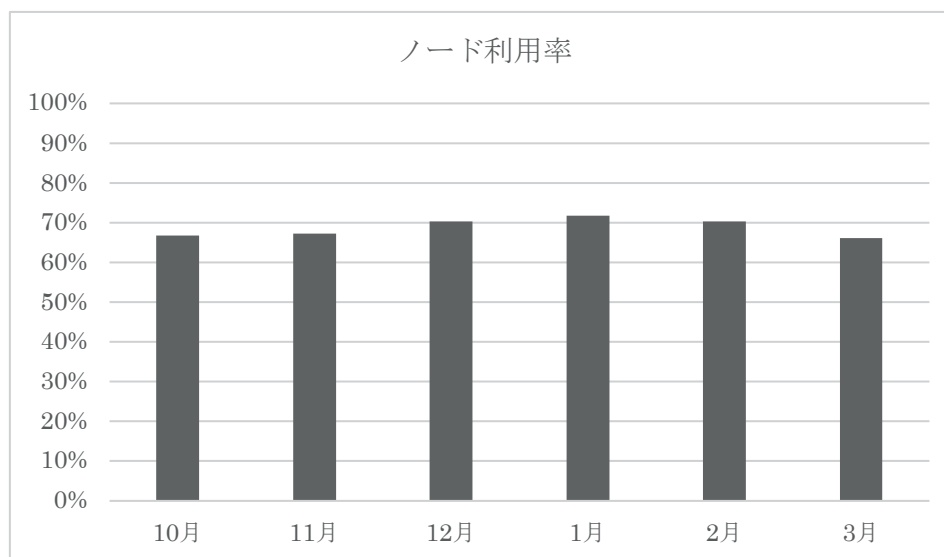
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2022/12/02 9:00	2022/12/02 14:00	5.00
2022/03/05 6:00	2022/03/07 9:00	51.00
2022/03/30 9:00	2021/03/31 24:00	39.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
10月	744.00	109,110	509,050	13,358,964	10,408,289	807.9	66.7 %
11月	720.00	135,180	921,764	13,768,690	11,345,109	807.8	67.3 %
12月	744.00	95,017	652,116	14,258,013	11,249,362	807.8	70.3 %
1月	744.00	136,636	809,456	14,688,547	11,116,104	807.9	71.8 %
2月	672.00	153,039	634,854	13,198,992	10,890,750	808.0	70.3 %
3月	654.00	101,477	355,201	12,944,393	10,920,315	787.9	66.1 %
計	4,278.00	730,459	3,882,440	82,217,598	65,929,928	804.6	68.8 %



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

システムC 運転状況 (2021年10月～2022年3月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

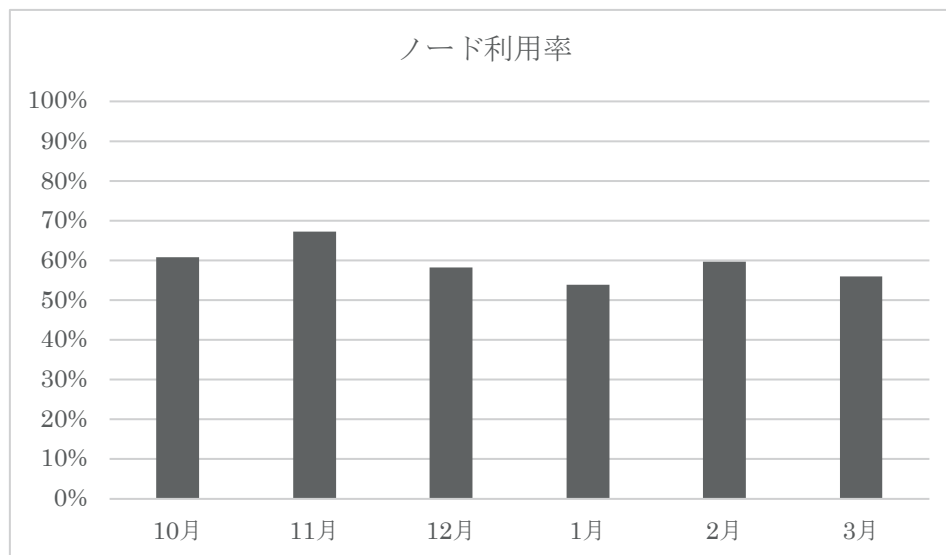
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2022/12/02 9:00	2022/12/02 14:00	5.00
2022/03/05 6:00	2022/03/07 9:00	51.00
2022/03/30 9:00	2021/03/31 24:00	39.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
10月	744.00	6,017	22,211	368,371	207,114	16.0	60.8 %
11月	720.00	8,581	28,686	383,286	262,904	16.0	67.3 %
12月	744.00	2,550	43,474	341,437	213,482	16.0	58.2 %
1月	744.00	2,554	39,770	250,922	153,604	16.0	53.8 %
2月	672.00	1,403	31,093	426,882	300,515	16.0	59.6 %
3月	654.00	3,936	31,659	321,845	167,326	15.8	55.9 %
計	4,278.00	25,041	196,893	2,092,742	1,304,944	16.0	59.2 %



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

別表1 スーパーコンピュータシステム

区分			利用負担額	提供サービス					
コース	タイプ	セット		システム	バッチ	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数
エントリー	-	基本	12,600 円/年	B	共有	最大0.5ノード相当((112コア、512GBメモリ)×0.5)	1	0.2	-
パーソナル	タイプA	基本	100,000 円/年	A	共有	最大2ノード相当((112コア、128GB高速メモリ)×2)	168	8.0	-
	タイプB	基本	100,000 円/年	B	共有	最大2ノード相当((112コア、512GBメモリ)×2)	168	8.0	-
	タイプC	基本	100,000 円/年	C	共有	最大1ノード相当((112コア、2048GBメモリ)×1)	168	8.0	-
	タイプG	基本	100,000 円/年	G	共有	最大1GPU相当((16コア、128GBメモリ+1GPU)×1)	168	8.0	-
グループ	タイプA0	最小/追加	80,000 円/年	A	準々優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプA1	最小/追加	200,000 円/年		優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプA2	最小/追加	240,000 円/年		準優先	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	336	19.2	6
	タイプA3	最小/追加	300,000 円/年		占有	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプB0	最小/追加	88,000 円/年	B	準々優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプB1	最小/追加	220,000 円/年		優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプB2	最小/追加	264,000 円/年		準優先	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	336	19.2	6
	タイプB3	最小/追加	330,000 円/年		占有	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプC0	最小/追加	96,000 円/年	C	準々優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプC1	最小/追加	240,000 円/年		優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプG0	最小/追加	64,000 円/年	G	準々優先	1GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×1)	168	6.4	2
	タイプG1	最小/追加	320,000 円/年		優先	2GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×2)	336	32.0	8
大規模ジョブ	タイプA	最小	80,000 円/週(7日)	A	占有	8ノード((112コア、128GB高速メモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	20,000 円/週(7日)			2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)		-	-
	タイプB	最小	88,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((112コア、512GBメモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	22,000 円/週(7日)			2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)		-	-
専用クラスター	タイプB	最小	660,000 円/年	B	-	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	-	32.0	8
		追加単位	330,000 円/年			1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)		16.0	4
ストレージ	大容量ストレージ	10,000 円/年	大容量ストレージ容量10TBの追加につき						
	高速ストレージ	10,000 円/年	高速ストレージ容量2TBの追加につき						
	ネットワークストレージ	5,000 円/年	ネットワークストレージ容量1TBの追加につき						
ライセンスサービス			20,000 円/年	可視化ソフト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（大規模ジョブコースは週単位）で算定している。また、総額表示である。パーソナルコース、グループコース又は専用クラスターコースを年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
 - 大判プリンタサービス
 - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ストレージコース、ライセンスサービスの申請には、スーパーコンピュータシステムの利用者であることが必要である。
- 「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。
「準々優先」：定常稼働状況において記載値の計算資源が確保されるようにベストエフォートのスケジューリングを行う。
「準優先」：定常稼働状況において記載値（以上）の計算資源が確保されるように準優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。
「優先」：定常稼働状況において記載値（以上）の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。
「占有」：稼働状況によらず記載値の計算資源が確保されることを保証する。
- ストレージ容量はバックアップ領域（最大で総容量の1/2）を含む。
- グループコース及び専用クラスターコースの利用者番号は、利用者あたり年額5,000円を負担することで追加できる。
- 機関・部局定額制度
他機関又は学内における部局（『国立大学法人京都大学の組織に関する規程』第3章第2節から第11節で定める組織をいう。）の組織が、その組織単位でグループコースサービスを利用申請する場合の利用負担額は、別表1に規定する1.5倍の額とする。
なお、利用負担額が年額150万円未満の場合は100人、年額150万円を超える場合は、150万円毎に100人までの利用者を認める。
ストレージは、1.5倍の容量とする。
- スパコン連携サービス
学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータシステムと密な連携により、学内における部局の組織が計算サーバ等を設置する場合下記の負担額を支払うものとする。

区分	冷却方式	利用負担額	利用負担額算定単位
スパコン連携サービス	水冷	16,800 円/月	水冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき
	空冷	20,000 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 アカデミッククラウドシステム

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

備考

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

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

5. 利用負担額は、当該年度(4月から翌年3月まで)の利用に対して年額として算定するが、年度途中から利用を開始する場合及び申請時において年度途中で利用を終了することが明らかな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)	ストレージ (TB)	無料 利用者数	利用負担額
A	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	336	19.2	6	960,000 円/年
	3ノード((112コア、128GB高速メモリ)×3)	336	28.8	9	1,440,000 円/年
	4ノード((112コア、128GB高速メモリ)×4)	336	38.4	12	1,920,000 円/年
B	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	336	19.2	6	1,056,000 円/年
	3ノード((112コア、512GBメモリ)×3)	336	28.8	9	1,584,000 円/年
	4ノード((112コア、512GBメモリ)×4)	336	38.4	12	2,112,000 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。
 年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
 なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
2. ストレージ容量はバックアップ領域（最大で総容量の1/2）を含む。

全国共同利用版広報・Vol.20(2021)総目次

[巻頭言]

Vol. 20, No. 1 号の発刊に当たって	1-1
Vol. 20, No. 2 号の発刊に当たって	2-1

[スーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性研究者奨励枠）研究報告]

機械攪拌中浮遊油膜巻き込みメカニズムの解明	1-2
高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と電子物性の相関解明	1-4
時系列リモートセンシングデータによる全球陸域統合環境モニタリング	1-6
自己集合性 1,3,5-Tri(benzoimidazolyl)benzene 誘導体の構造解析	1-8
界面分光の分子動力学シミュレーション	1-10
Numerical simulation of thermal-solutal Marangoni convection in a shallow rectangular model with mutually perpendicular temperature and concentration gradients.....	1-12
浮遊培養法による iPS 細胞作製技術の最適化を目的とした流動解析	1-14
数値シミュレーションを用いたウマの個体間に働く力の推定	1-16
ローレンツ方程式に対する機械学習によるモデリング	1-18
力学系と代数幾何の理論に基づくデータ駆動的スパースモデリング	1-20
第一原理計算による BaSi ₂ 太陽電池の接合パートナー探索	1-22
統計物理学模型との対応を利用した機械学習手法の性能評価	1-24
遷移金属による協奏的結合組み換えを利用した効率的分子変換	1-26

[プログラム高度化共同研究報告]

高周波加熱と磁気ノズルを利用した無電極プラズマ推進機の 2 次元軸対称プラズマ粒子計算	1-28
---------------------------------------------------	------

[中島浩先生追悼特集]

中島先生を偲んで	2-2
師曰く	2-3
中島浩先生を偲んで	2-4
中島浩先生を偲んで	2-5

[シンポジウム開催報告]

α × SC2021K 行動学とスーパーコンピュータに関するシンポジウム 開催報告	2-6
--------------------------------------------------------	-----

[サービスの記録・報告]

スーパーコンピュータシステムの稼働状況	1-32, 2-8
センター利用による研究成果（2020 年度）	2-11
データ消失障害報告	2-15

[資料]

大型計算機システム利用負担金 別表	1-36, 2-16
全国共同利用版広報・Vol.19(2020)総目次	1-39
サービス利用のための資料一覧	1-41, 2-19

[訃報]

訃報	1-42
----------	------

— サービス利用のための資料一覧 —

1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

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

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

2. 問い合わせ先 & リンク集

- 情報環境機構のホームページ
<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/>
- 学術情報メディアセンターのホームページ
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
- スーパーコンピュータシステムに関する問い合わせ先
 - 利用申請などに関する問い合わせ先
【情報環境支援センター】
E-mail : zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7424
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/>
 - システムの利用など技術的な問い合わせ先
【スーパーコンピューティング掛】
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/contact.html>

京都大学学術情報メディアセンター全国共同利用版広報 Vol. 21, No. 1

2022年 12月 9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. 075-753-7407
<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)
鳥生 大祐 (副部会長)
中西 健史
當山 達也
熊谷 真由美

表紙デザイン：中山 豊
(中山商店)

目次

【巻頭言】

- ・ Vol.21, No.1 号の発刊に当たって 牛島 省 1

【特集】

- ・ 新スーパーコンピュータシステムの紹介 深沢 圭一郎 2

【シンポジウム開催報告】

- ・ α × SC2022K 群れとスーパーコンピュータに関するシンポジウム 開催報告 深沢 圭一郎 4

【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性研究者奨励枠)研究報告】

- ・ Numerical simulation of Marangoni convection in a shallow rectangular cavity with a linear solutal boundary condition ZHANG Jiangaao 6
- ・ 高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と電子物性の相関解明 東野 智洋 8
- ・ 界面分光の分子動力学シミュレーション 城塚 達也 10
- ・ 三次元的な MHD プラズマダイナミクスの解明 橋本 翼 12
- ・ Numerical investigation for hydrodynamic characterization of orbitally shaken bioreactor in a suspension cell culture WANG Liya 14
- ・ 水-土二相連成解析とマルチスケールモデリングによる相転移型地盤崩壊シミュレータの構築 辻 勲平 16
- ・ 超音波キャビテーションマルチバブル動力学の探索 山本 卓也 18
- ・ 三次元数値流体解析による海岸林の津波防災効果機構の解明 野村 怜佳 20
- ・ 代数幾何的手法とランダム行列理論を用いた再帰的ニューラルネットワークによる時系列スパースモデリング 中野 直人 22
- ・ 統計物理学模型との対応を利用した機械学習手法の性能評価 春名 純一 24
- ・ 高次元ローレンツ系の機械学習モデリング 中井 拳吾 26
- ・ 計算化学的手法による様々な界面に対するカテコール構造の接着能解明 曾川 洋光 28

【プログラム高度化共同研究報告】

- ・ 高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と有限密度 2 カラー QCD の相図の決定 伊藤 悦子 30
- ・ 低メモリ・低コスト通信乱流大規模直接数値計算コードの高度化 山本 義暢 34

【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 38

【資料】

- ・ 大型計算機システム利用負担金 別表 42
- ・ 全国共同利用版広報・Vol.20(2021)総目次 45
- ・ サービス利用のための資料一覧 46