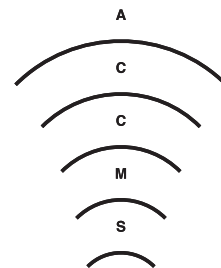


京都大学学術情報メディアセンター

Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University

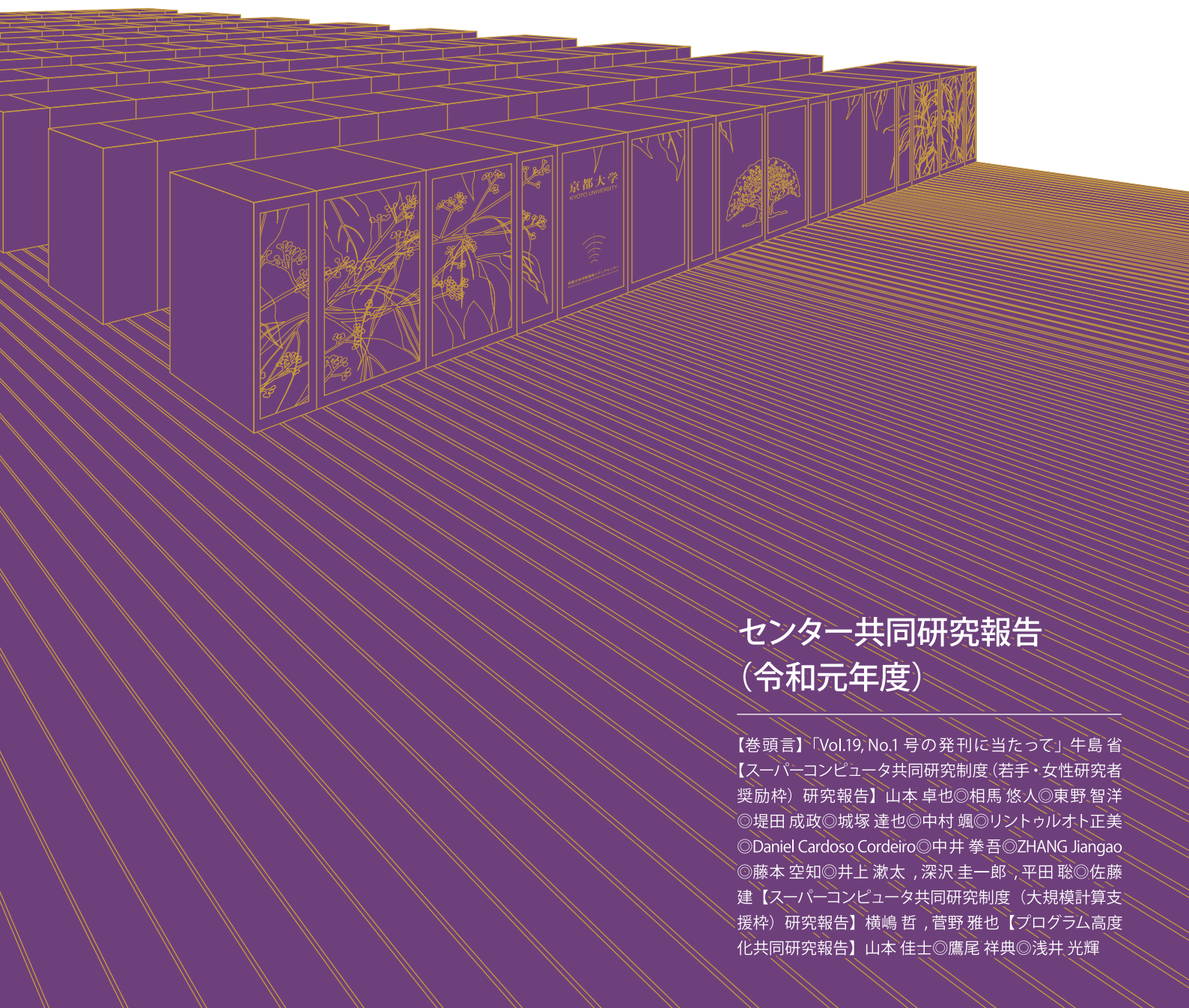


広報

全国共同利用版

Vol.19, No.1 2020

ISSN 1347-3581



センター共同研究報告 (令和元年度)

【巻頭言】「Vol.19, No.1号の発刊に当たって」牛島省
【スーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性研究者
奨励枠）研究報告】山本 卓也◎相馬 悠人◎東野 智洋
◎堤田 成政◎城塚 達也◎中村 颯◎リントウルオト正美
◎Daniel Cardoso Cordeiro◎中井 拳吾◎ZHANG Jiagao
◎藤本 空知◎井上 漱太，深沢 圭一郎，平田 聡◎佐藤
建【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】横嶋 哲，菅野 雅也【プログラム高度
化共同研究報告】山本 佳士◎鷹尾 祥典◎浅井 光輝

Vol.19, 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2019年度の共同研究報告について特集いたします。2019年度は、13件の「若手・女性研究者奨励枠」、1件の「大規模計算支援枠」、そして3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13件の「若手・女性研究者奨励枠」の研究報告では、複雑流体および流体構造連成問題、リモートセンシングによる環境モニタリング、ウマの群れの個体間の力学モデル計算、コンクリートの破壊力学、量子化学、各種の分子動力学計算、結晶生成などに関する多様な研究が行われ、全国7大学と国立高等専門学校1校の若手・女性研究者の研究をサポートいたしました。なお、JHPCNの萌芽型共同研究には10件の課題が採択されました。

「大規模計算支援枠」は、タイプAでは128ノード×2週間、タイプBでは64ノード×2週間までの計算資源・期間をご利用頂く共同研究制度で、利用負担金は本センターが全額負担するものです。2019年度の「大規模計算支援枠」では、透過性を有する平行平板間の乱流計算が行われました。約4億セルの大規模流体計算により、乱れ強度と平板の透過性の関係などが詳細に検討され、有用な成果が得られました。

また、「プログラム高度化共同研究」では、京都大学のスーパーコンピュータをグループコースまたは専用クラスターコースでご利用の研究者(JHPCNおよびHPCIにて京都大学のスーパーコンピュータを利用する研究者も含む)を対象に、プログラムの制御構造・データ構造の改良による性能チューニングや並列化手法の改良、問題分割・負荷分散方式などの改良による大規模計算プログラムの高度化・高性能化などを支援しています。2019年度は、(1) 3次元剛体バネモデルによるコンクリート構造物の変形・破壊シミュレーション、(2) 水を推進剤とする超小型マイクロ波放電式プラズマ源の3次元粒子計算、(3) 津波による木造家屋の瓦礫生成シミュレーションの高度化、という3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、スレッド並列化や入出力時のバッファリング、ベクトル化最適手法の導入、また、領域分割による粒子ソーティングの検討などが実施され、計算速度を高速化するとともに、プログラムの改良案などが示されました。

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。

液体攪拌操作における翼端渦と多相分散の関係性の解明

山本 卓也

東北大学大学院環境科学研究科先端環境創成学専攻、工学研究科金属フロンティア工学専攻

1 緒言

液体の攪拌操作は化学、金属、食品工場等各種産業で用いられるため、その原理を理解することは応用面で重要である。この液体をかき混ぜるといふ操作は非常に単純な操作ではあるものの、その混合中の液体中で発生する現象は非常に複雑である。また、液体だけではなく、気体や相分離する液体が存在している条件では連続相内の流動に加えて分散相との関係性も重要となる。

上記の攪拌操作に対して、これまでも数多くの研究が行われてきた。例えば、気泡吹き込みを伴う攪拌操作では、Hinze らの気泡径に対する相関式[1]に始まり、Zhou and Kresta [2]や Paul ら[3]によって review されているように、気泡径に対する大量の相関式が実験的に作成された。Zhou and Kresta [2]は平均エネルギー散逸率ではなく、局所最大エネルギー散逸率でスケーリングするとより正確に示すことができると示した。一方で、Andersson and Andersson [4]のように、乱流中の気泡や液滴の分裂モデルは気泡と乱流渦の関係性からモデル化されてきた。気泡や液滴と同程度のサイズの乱流渦が分裂に寄与するとされ、このような分裂モデルを元にポピュレーションバランスモデルが攪拌槽に拡張されている[5]。しかしながら、攪拌槽内での気泡分裂と乱流渦の関係性を実験、もしくは数値解析を利用して直接的に捉えたものは少ない。著者らは気泡分裂と渦の関係性を明確にするため一連の研究[6,7]を行い、攪拌翼後方から発生する翼端渦対間のせん断流によって気泡が分裂することを見出した。この研究では翼端渦対のせん断流によって段階的に小さい気泡へと分裂される現象（カスケード分裂）も確認されたが、翼端渦によって分裂した後にもう一段階分裂するメカニズムは定かでない。特に、エネルギーカス

ケードによって翼端渦から変化した渦が気泡を微細化するかに関しては理解されていない。気泡と同程度のサイズの乱流渦が分裂に寄与するのであれば、エネルギーカスケードによって生じた渦によって分裂される可能性も否定できない。

本研究では、上記メカニズムを解明する第一段階として、翼周辺の翼端渦構造を数値解析によって解明した。

2 数値解析手法

内径 192 mm、高さ 200 mm の円筒容器内にアルミニウム産業界で利用される 6 枚軸流翼である攪拌翼[8]を挿入し、300, 400 rpm で回転させた。この際の攪拌 Reynolds 数は 18000, 24000 である。

支配方程式は Navier-Stokes 式、連続式であるとした。攪拌翼の回転は Sliding grid 法を利用することで直接回転させ、sliding 界面では cyclic AMI 境界条件を利用した。また、容器上面の境界を除いて壁面条件を課し、上面では圧力勾配に応じた自由流入出条件を利用した。LES によって乱流をモデル化し、一方程式型サブグリッドスケールモデルを利用した。

空間の離散化手法として 2 次精度線形補間法、時間の離散化手法として 2 次精度 backward 法、速度圧力連成手法として PIMPLE アルゴリズムを利用した。計算格子は翼付近で細分化し、総計算格子数は約 1400 万であった。本計算はオープンソースである OpenFOAM を利用した。数値解析コードの検証は既往の研究[8]で行い、攪拌翼からの吐出流を正確に計算できた。

3 結果と考察

流れ場を発達させた後の翼端渦形状を Fig. 1 に

示す。翼端渦は速度勾配テンソルの第二不変量の等値面から渦を描画した。周方向渦度を利用して回転方向により渦を色分けした。翼端渦は翼後面で渦対として生成し、吐出流に乗って周方向へと移動する。攪拌槽側壁と軸の中央付近で翼端渦は散逸、構造が変化し、最終的には壁面に衝突することでその向きを変え、上下縦に伸びた渦へと変化し、最終的に散逸する。また、回転数を増加させることでより複雑な渦構造へ変化し、翼端渦の長さが伸長する。

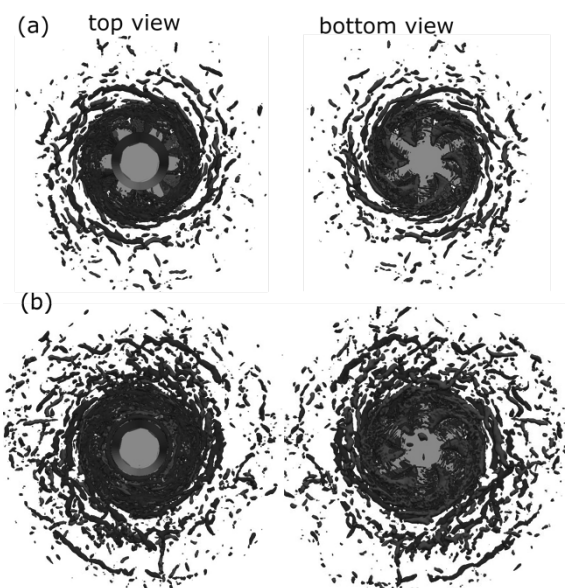


Fig. 1 Trailing vortices during mechanical stirring: (a) at 300 rpm and (b) 400 rpm.

翼端渦の特徴を評価するために、400 rpm の条件における回転方向によって渦を分離し表示した結果を Fig. 2 に示す。この際計算結果を見やすくするため、半径 35-90 mm の領域に存在する渦のみを示す。特徴的な構造として、翼端渦は翼付近から翼後方へ向かって真っ直ぐの渦が生成するが、距離が翼から離れるに従い、散逸するのに伴い螺旋状の渦が生成する。また、回転方向の異なる渦が交互に存在する。これは、翼付近で発生した翼端渦が交互に渦対として発生し、その後翼端渦が散逸することで、回転方向の異なる渦群が交互に存在するようになるからである。

先行研究によると、攪拌操作中に吹き込んだ気泡は主に翼から発生した翼端渦対の渦対間のせん断によって分裂する[7]。一方で、今回解明したように、攪拌翼から離れるにつれ渦構造が変化するが、渦の回転方向の揃った領域が発生する。このため、渦対間のような強いせん断力が発生するこ

とが難しくなり、気泡分裂に寄与するのが難しくなると考えられる。

4 結論

攪拌操作中の翼端渦と多相分散の関係性について解明するために、攪拌操作時の翼端渦構造を調査した。攪拌操作中では攪拌翼後面で翼端渦が形成し、それが吐出流に乗って径方向へと広がる。その広がる過程で翼端渦は構造が変化し、散逸するのに伴い、螺旋状の渦へと変化することが分かった。

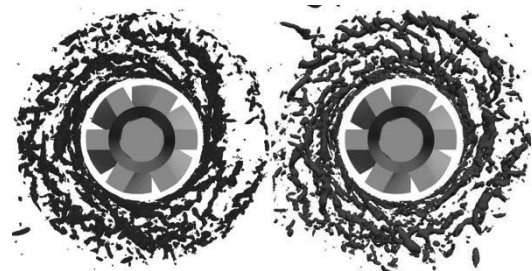


Fig. 2 Separated trailing vortices at 400 rpm.

参考文献

- [1] J. O. Hinze, *AIChE J.* **1**, 289-295 (1955).
- [2] G. Zhou and S. M. Kresta, *Chem. Eng. Sci.* **53**, 2063-2079 (1998).
- [3] E. L. Paul *et al.*, *Handbook of industrial mixing science and practice* (Wiley, Hoboken, 2004).
- [4] R. Andersson and B. Andersson, *AIChE J.* **52**, 2031-2038 (2006).
- [5] S. Solsvik *et al.*, *Ind. Eng. Chem. Res.* **55**, 2872-2882 (2016).
- [6] T. Yamamoto *et al.*, *Chem. Eng. Sci.* **197**, 26-36 (2019).
- [7] T. Yamamoto and S. V. Komarov, *Chem. Eng. Sci.* **207**, 1007-1016 (2019).
- [8] T. Yamamoto *et al.*, *J. Mater. Process. Technol.* **261**, 164-172 (2018).

謝辞

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

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

相馬 悠人*

*茨城大学大学院理工学研究科社会インフラシステム科学専攻

1 はじめに

土木構造物を構成する鉄筋コンクリートは、材料特性の異なる鉄筋とコンクリートを組み合わせた構造であり、鉄筋コンクリートの力学性能は、鉄筋とコンクリート間の付着挙動に大きく影響される。鉄筋とコンクリート間の付着は、主に界面の粘着力、摩擦抵抗力、鉄筋の節による支圧抵抗力によって成り立っている。鉄筋コンクリートの数値解析では、これらの付着要因を間接的にモデル化している方法がほとんどであり、直接解析に反映させた方法はほとんどなく、鉄筋の形状のモデル化のみで鉄筋コンクリートの付着性能を評価できる方法はほとんどない。

そこで本研究では、付着要因を直接反映させた数値解析を実施し、付着性能の異なるRCはりの破壊挙動の再現性を検証する。

2 数値解析手法

鉄筋には、非線形等硬化則に基づく von-Mises 塑性モデル、コンクリートおよび界面には、破壊面の摩擦接触を考慮した損傷モデル [1] を適用する。本研究で適用する損傷モデルでは、破壊面の開口挙動は次式で表される。

$$\sigma = (1 - D)C\varepsilon \quad (1)$$

ここで、 σ と ε はフォークト表記による応力ベクトルとひずみベクトル、 C は弾性係数マトリックス、 D は 0 ~ 1 の値を取る損傷変数である。

破壊面の摩擦接触を定式化するため、破壊面に直交する局所座標系を考える。以下では、ダッシュ付き表記 (\bullet') を局所座標系の変数とする。破壊面に対

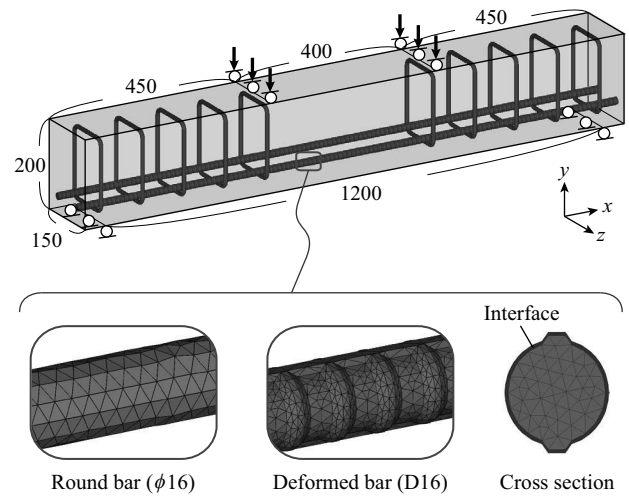


図 1: RC はりの有限要素モデル

して法線方向のひずみが $\varepsilon'_1 \leq 0$ のときに接触と判定し、法線方向の剛性を保持させることで接触力を表現する。法線方向の応力 σ'_1 は次式で表される。

$$\sigma'_1 = C_{11}\varepsilon'_1 + (1 - D)C_{12}\varepsilon'_2 + (1 - D)C_{13}\varepsilon'_3 \quad (2)$$

破壊面の固着や滑りを定式化するため、クーロンの摩擦則を導入する。摩擦応力 τ_f は次式で表される。

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

ここで、 μ は摩擦係数、 σ_n は垂直応力である。

摩擦応力と破壊面に平行に作用するせん断力の大きさ τ'_s を比較することで、破壊面の固着と滑りを判定する。 $\tau_f \geq |\tau'_s|$ では、せん断応力は次式で表される。

$$\tau'_{12} = G\gamma'_{12} \quad (4)$$

$$\tau'_{31} = G\gamma'_{31} \quad (5)$$

表 1: 材料パラメータ

	E	ν	σ_{y0}	Q	b	
Steel	200 GPa	0.3	380 MPa	200 MPa	40	
	E	ν	k	G_f	ε_0	μ
Concrete	30 GPa	0.2	20	0.1 N/mm	0.0001	—
Interface	200 MPa	0.2	20	0.4 N/mm	0.004	0.2

ここで、 G はせん断剛性である。

対して、 $\tau_f < |\tau'_s|$ では、せん断応力は次式で表される。

$$\tau'_{12} = (1 - D)G\gamma'_{12} + D\tau_f \frac{\gamma'_{12}}{\sqrt{\gamma'^2_{12} + \gamma'^2_{31}}} \quad (6)$$

$$\tau'_{31} = (1 - D)G\gamma'_{31} + D\tau_f \frac{\gamma'_{31}}{\sqrt{\gamma'^2_{12} + \gamma'^2_{31}}} \quad (7)$$

3 付着性能の異なる RC はりの破壊挙動の再現性

3.1 解析条件

図 1 に付着性能の異なる丸鋼と異形鉄筋を使用した曲げ破壊型の RC はりの有限要素モデルを示す。対称性を考慮し、解析範囲を 1/4 とした。要素には、四面体 1 次要素を使用する。鉄筋の表面形状を詳細にモデル化し、鉄筋表面に厚さ 0.5 mm の界面相を設けた。各モデルの節点数は約 15 万、要素数は約 80 万である。表 1 に材料パラメータを示す。強制変位 9 mm を 300 step で与えた。鉄筋の表面形状のモデル化のみを変え、2 ケースの解析を実施した。

3.2 解析結果

図 2, 3 に荷重 - 変位関係と内部の損傷分布を示す。異形鉄筋を用いた RC はりでは、典型的な曲げ破壊の力学挙動を示し、ひび割れが分散した結果となった。対して、丸鋼を用いた RC はりでは、異形鉄筋の節による支圧抵抗力がないため、最大荷重が低く、さらに低い荷重レベルで付着が消失するため、曲げひび割れのみが成長する違いが見られた。

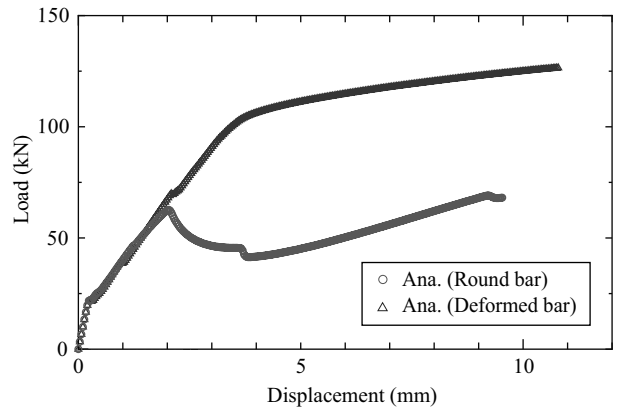
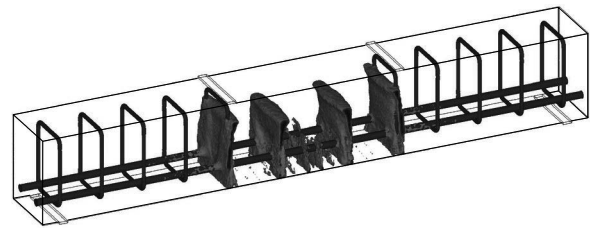
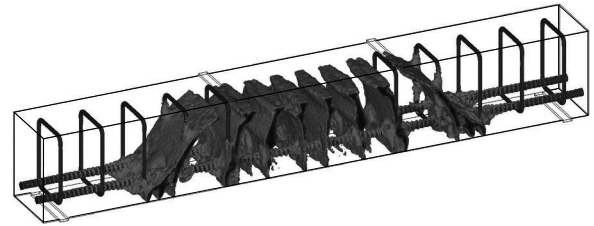


図 2: 丸鋼および異形鉄筋モデルにおける荷重 - 変位関係



(a) RC beam with round bars: 40/300 (49.1 kN)



(b) RC beam with deformed bars: 220/300 (120.0 kN)

0.0  1.0
Internal damage variable

図 3: 丸鋼および異形鉄筋モデルにおける内部の損傷分布

4 おわりに

本研究では、付着性能の異なる丸鋼と異形鉄筋を使用した曲げ破壊型の RC はりを対象とした数値解析を実施し、鉄筋の表面形状を変えるだけで、付着性能の異なる RC はりの破壊挙動を再現できることを示した。

参考文献

- [1] 相馬 悠人, 車谷 麻緒: 界面の摩擦接触を考慮した損傷モデルによる鉄筋コンクリートの破壊シミュレーション, 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol.75, pp.L165-L173, 2019.

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。そして実際に、様々なプッシュプル型ポルフィリン色素が開発され、高い光電変換効率が実現されてきた。また、色素を酸化チタン上に固定する吸着基はエネルギー変換効率だけでなく、セルの長期耐久性においても重要な役割を果たす。ポルフィリン色素の多くではカルボン酸吸着基が用いられてきたが、カルボン酸は酸化チタンから脱着しやすいことが太陽電池素子の耐久性を低下させる一因となっているため、より強く酸化チタンに吸着する吸着基の開発が望まれる。一方、カテコールは酸化チタンに強く吸着することが知られているが、カテコールの電子供与性のために、カテコールを用いた色素では光電変換効率が低い値に留まっていた^[1,2]。そのため、カテコールに電子求引性の置換基を導入することにより、カテコールの強い吸着能を活用しつつ、太陽電池性能

を向上させることができると考えた。そこで本研究では、カテコールに電子求引性のチアゾール基を縮環させた、チアゾロカテコール基を吸着基として用いたポルフィリン色素 **ZnPTC** を設計・合成した (Figure 1) ^[3]。

2 結果と考察

2.1 新規ポルフィリン色素の物性と太陽電池性能評価

参照色素 **YD2-o-C8** を用いて色素増感太陽電池セル作製条件の最適化を行った結果、**ZnPTC** を用いたセルでの光電変換効率は 4.87% となった。カルボン酸吸着基をもつ **YD2-o-C8** を用いたセルでの光電変換効率は 9.93% であり、チアゾロカテコール基を用いた色素では変換効率が低下することがわかった。しかしながら、カテコール吸着基を用いた色素で光電変換効率は 2% を超えるようなものではなく^[4]、特にポルフィリンとカテコールを組み合わせた色素では 1% にも満たないため^[2]、**ZnPTC** はカテコールを吸着基として用いた色素の太陽電池性能の最高値を更新した。これは、電子求引性のチアゾール基を縮環させたことにより、電子注入効率が向上したためであると考えられる。また、酸性あるいは塩基性溶液中における色素の酸化チタンからの脱着挙動を調べた結果、**ZnPTC** はカルボン酸吸着基をもつ色素 **YD2-o-C8** と比較して脱着しにくく、強い吸着能を持つことを明らかにした (Figure 2)。このことから、カテコール基に電子求引性置換基を導入した吸着基を適切に設計することにより、高い色素増感太陽電池性能と長期耐久性の実現が期待できると言える。

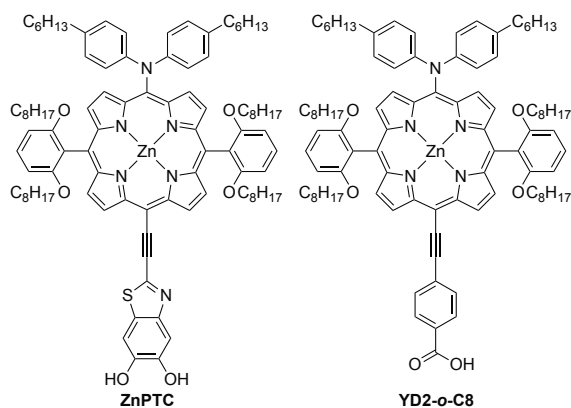


Figure 1. Molecular structures of porphyrin dyes.

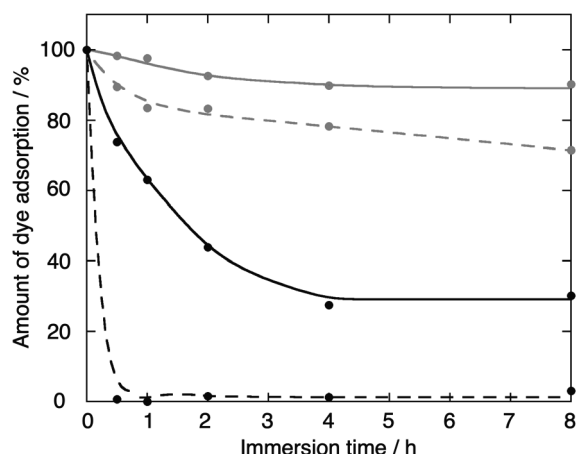


Figure 2. Plots of the amount of porphyrin dyes on the TiO_2 surface as a function of immersion time for **ZnPTC** (gray) and **YD2-o-C8** (black) under THF/ H_2O (1:1 v/v) solution containing 28 mM acetic acid (solid lines) and 0.1 mM NaOH (dashed lines).

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 **ZnPTC** の構造は、カルボン酸吸着基をもつ色素 **YD2-o-C8** とほぼ同じであり、カテコール吸着基は分子構造にほとんど影響を与えないことがわかった。また、Figure 3 にポルフィリン色素 **ZnPTC** および **YD2-o-C8** の最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO) における軌道分布を示す。**ZnPTC** のカテコール部分における LUMO の軌道分布は、**YD2-o-C8** のカルボキシル基部分における LUMO の軌道分布よりも小さくなっていった。吸着基部分の LUMO の軌道分布が小さいと、励起状態の色素からの電子注入の効率が低くなってしまふことが知られているため、電子注入効率はカルボキシル基の場合よりも低下してしまうと考えられた。加えて、**ZnPTC** のカテコール部分における HOMO の軌道分布は、**YD2-o-C8** のカルボキシル基部分における HOMO の軌道分布よりも大きくなっていった。吸着基部分の HOMO の軌道分布が大きいと、酸化チタンからの逆電子移動が起こりやすくなり、太陽電池性能が低下してしまうことが知られている。これらの要因により、光電変換

効率は 4.87% と中程度に留まったと考えられる。このように、本計算結果は実験結果の理論的解釈の一助となった点で意義がある。

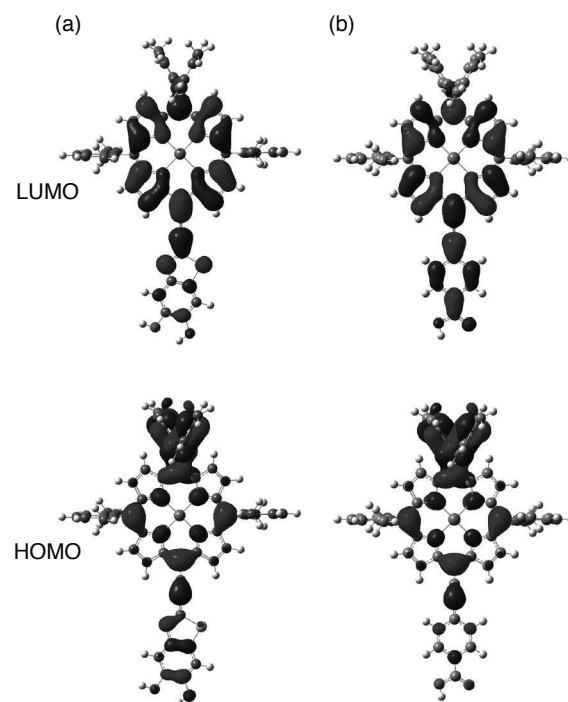


Figure 3. Selected Kohn-Sham orbitals for (a) **ZnPTC** and (b) **YD2-o-C8** obtained by DFT calculations with the B3LYP/6-31G(d) level. To simplify the calculations, hexyl groups on the diarylamino groups and octyloxy groups on the *meso*-aryl groups were replaced with methyl and methoxy groups, respectively.

3 参考文献

- [1] E. L. Tae, S. H. Lee, J. K. Lee, S. S. Yoo, E. J. Kang, K. B. Yoon, *J. Phys. Chem. B* **2005**, *109*, 22513–22522.
- [2] M. Adineh, P. Tahay, M. Ameri, N. Safari, E. Mohajerani, *RSC Adv.* **2016**, *6*, 14512–14521.
- [3] T. Higashino, H. Iiyama, Y. Kurumisawa, H. Imahori, *ChemPhysChem* **2019**, *20*, 2689–2695.

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

堤田 成政

京都大学地球環境学堂

1 はじめに

人工衛星をもちいた地球観測が 1980 年代から活発化し、これまでに膨大な衛星観測データが蓄積されてきた。それに伴い、断片的に撮影されてきたデータを経時的に、かつ全球的にくまなく利用可能とする観測データの整備が進められてきた。本研究では、そのような大規模な時系列リモートセンシングデータをもちい、気候変動や人為的改変の陸域への影響を明らかにし、気候変動予測や緩和策のための科学的知見を提供することを目的とする。具体的には、過去 35 年における森林増加/減少、農地拡大、砂漠化といったグローバルに起こる地理的現象を統合的にモデル化する。全球レベルで過去の陸域観測から蓄積された AVHRR CDR (Vermote et al., 2019) の日次データ (空間解像度約 5km) をもちいて、1982-2016 における土地被覆変動のダイナミクスをモデル化する。使用データは米国の NOAA より無償提供されているプロダクトを使用するが、データ量が膨大であり通常のワークステーションでの処理には限界がある。そのためスーパーコンピュータを利用し研究を実施する。

2 手法

過去 35 年間の土地被覆変動をモデル化するにあたり、土地被覆の地上参照データを収集することが必須である。ここでは、DISCover (1992-1993、空間解像度 1km) (Loveland et al., 2000) , GLC2000 (2000、空間解像度 1km) (Bartholome et al., 2005) , GlobCover (2005、空間解像度 300m) (Arino et al., 2007) の過去の土地被覆

データに着目し、9つの分類クラス (1. Evergreen/Deciduous Needleleaf Trees; 2. Evergreen/Deciduous Broadleaf Trees; 3. Mixed/Other Trees; 4. Shrubs; 5. Herbaceous Vegetation; 6. Cultivated and Managed Vegetation; 7. Non (Sparse) Vegetation; 8. Snow/Ice, and 9. Water-related) において AVHRR CRD データと同様の空間解像度に再集計し、均一な土地被覆を示したピクセルを地上参照データとした。AVHRR CDR は、観測バンドを 6つ有した全球をカバーする日次データであり、これを一年毎の平均、標準誤差を算出しまとめた。

これらのデータを一年ごとに Random Forest Classification (Breiman, 2001) に適用した。一年ごとに独立した土地被覆分類図を比較すると、分類誤差が伝搬してしまい (Post classification comparison problem)、正しく土地被覆変動をモデル化できない。そのため、一年ごとの Random Forest Classification の分類確率に着目し、これを時系列データとしてピクセルごとに多項ロジスティック回帰を適用し、土地被覆変動をモデル化した。

3 結果

1年毎の土地被覆分類図を作成した。これらの分類精度は平均で 96%となった。対象とした 35年間では「Evergreen/Deciduous Needleleaf Trees」が約 1,545,000km²、「Cultivated and Managed Vegetation」が約 99,140,000km²増加した一方で、その他の土地被覆は減少傾向を示した。地域レベルで見ると、サブサハラ地域で「Non (Sparse) Vegetation」から「Herbaceous

Vegetation」へ、またブラジル南東部では「Evergreen/Deciduous Broadleaf Trees」から「Cultivated and Managed Vegetation」への土地被覆変化が顕著であった。

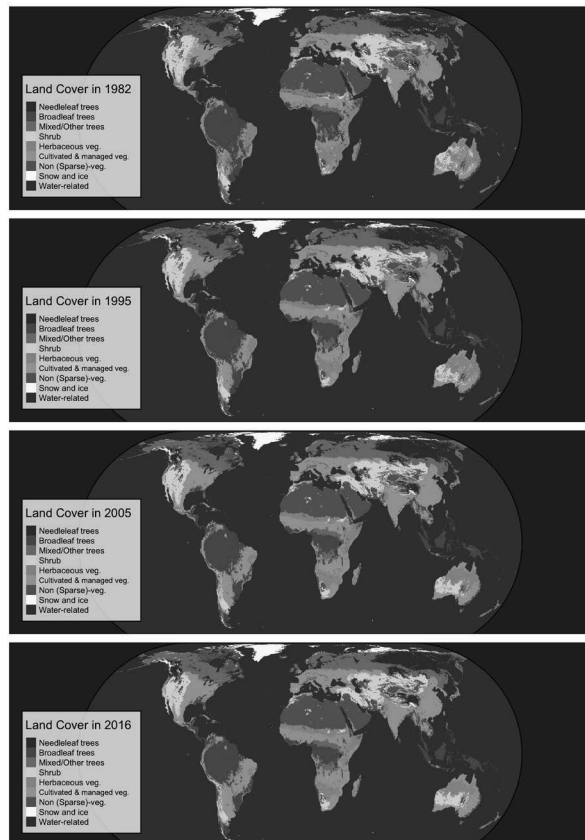


図1：土地被覆図の例（1982, 1995, 2005, 2016年）

4 おわりに

本研究では、1982～2016年の土地被覆変動を地球観測データをもとにしてモデル化を試みた。全体的な傾向の把握には成功した一方で、細かな課題として、(i) 時空間土地被覆参照データの収集方法の再検討、(ii) 本事例に適した機械学習モデルの選択・構築、(iii) 類似の土地被覆分類プロダクトとの比較、があげられる。今後はこれらの課題を中心に引き続き研究をすすめ、論文化をすすめたい。

5 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。

6 参考文献

[1] Arino, O., Gross, D., Ranera, F., Bourg, L., Leroy, M., Bicheron, P., ... Weber, J.-L. (2007). GlobCover: ESA service for Global Land Cover from MERIS. In I. 2007 (Ed.), Geoscience and remote sensing symposium, 2007 (pp. 2412–2415). IEEE.

[2] Bartholome, E., & Belward, A. S. (2005). GLC2000: A new approach to global land cover mapping from Earth observation data. *International Journal of Remote Sensing*, 26(9), 1959–1977.

[3] Breiman, L. (2001). Random forests. *Machine Learning*, 45(1), 5–32.

[4] Eric Vermote, Chris Justice, Ivan Csiszar, Jeff Eidenshink, Ranga Myneni, Frederic Baret, Ed Masuoka, Robert Wolfe, Martin Claverie and NOAA CDR Program (2019): NOAA Climate Data Record (CDR) of AVHRR Surface Reflectance, Version 5. NOAA National Centers for Environmental Information.

[5] Hansen, M. C., DeFries, R. S., Townshend, J. R., & Sohlberg, R. (2000). Global land cover classification at 1 km spatial resolution using a classification tree approach. *International Journal of Remote Sensing*, 21(6-7), 1331–1364.

[6] Loveland, T. R., Reed, B. C., Brown, J. F., Ohlen, D. O., Zhu, Z., Yang, L., & Merchant, J. W. (2000). Development of a global land cover characteristics database and IGBP DISCover from 1 km AVHRR data. *International Journal of Remote Sensing*, 21(6-7), 1303–1330.

界面分光の分子動力学シミュレーション

城塚 達也

茨城大学工学部物質科学工学科

1 はじめに

固体と液体の界面に代表される埋もれた界面は学術的・工業的に重要であるが、その分子レベルでの反応メカニズムの解析は実験的・理論的に難しい。そこで本研究では、分子動力学シミュレーションにより界面構造・ダイナミクスを解析し、近年発展が著しい和周波発生 (SFG) 分光法を申請者がこれまで開発してきた手法により解析する。特に、本研究では酸化チタン・水界面などにおける構造やダイナミクスを調べる。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、最終的に界面分光の1つである SFG 分光法を解析する。

2 手法

まず、第一原理 (DFT) 計算を用いて界面でのプロトン移動をシミュレーションするための一般的な手法を開発した。[1]これまでのシミュレーションでは化学反応を記述する反応座標は結合長などの構造を用いることが多かった。しかし、このような座標は固液界面などの不均一な系ではレアイベントをサンプリングするために高コストなシミュレーションが必要であった。そこで、本研究では Constrained density functional theory (CDFT)法を用いてドナーとアクセプターのエネルギー差を反応座標に採用する。プログラムパッケージは cp2k を用いて、ケイ酸の脱プロトン化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自由エネルギー摂動法を使用した。

その後、アナターゼ型酸化チタン界面での実験との共同研究を実施した。申請者は光触媒性能の

面選択性 (Domen *et al.*, *Nature* **581**, 411, 2020 など) に注目しており、Low-pressure chemical vapor deposition による実験との共同研究 (論文投稿中) により、(112) 面が特に高い反応性を示すことが実験的だけでなく理論的にも分かったため、この界面でのホールの安定性を調べる。シミュレーションには anatase (101), (001), (112), (100), (110)面を用いる。Generalized gradient approximation (GGA) に基づく汎関数では局在したホールは安定化しないため、本研究では CDFT 法と Hartree-Fock 交換エネルギーを 10.5%混合した hybrid 汎関数を用いる。

3 結果

ケイ酸の脱プロトン化反応をシミュレーション (Fig. 1 top) では、自由エネルギー摂動法を用いて計算されたケイ酸の脱プロトン化の自由エネルギー変化は 13.9 kcal/mol となり実験値の 13.5 kcal/mol と良い一致を示した。一方で、3点近似やガウス近似を用いると自由エネルギー変化はそれぞれ 12.4 kcal/mol と 40.3 kcal/mol となりより正確な自由エネルギー摂動法による結果と異なる。よって、化学精度 (約 1 kcal/mol) が求められる計算の場合、近似的手法ではなく自由エネルギー摂動法を用いる必要があるとわかった。また、自由エネルギー変化は約 10 ps 程度の分子動力学シミュレーションで収束したことから、CDFT 法により高精度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。

アナターゼ型酸化チタン界面での計算 (Fig. 1 bottom) では、ヒドロキシ基がない場合ではアナターゼ型酸化チタン表面でホールは安定に局在化

しないのに対し、ヒドロキシ基がある場合ではヒドロキシ基にホールが安定に局在することがわかった。これにより、アナターゼ型酸化チタン表面ではヒドロキシ基にホールが流れ、光触媒による酸化反応が進行すると考えられる。加えて、アナターゼ型酸化チタンでは(101)面が熱力学的に安定であるが、(112)や(001)表面の方がより安定にホールをトラップすることが判明した。この結果は(112)面における実験で見られた高い反応性を支持している。(001)表面での反応性はよくわかっていたが、(112)面の報告例は少ないため、今後の酸化チタンを使った光触媒材料開発にとって有益な知見である。

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の CDFT 分子動力学シミュレーションを応用し、自由エネルギー摂動法により高精度な自由エネルギー曲面を計算する手法を構築した。現在はこの手法を改良し通常の DFT 計算と同程度の計算コストで自由エネルギー計算する手法を開発し、アモルファスシリカ・水界面に応用し界面構造を明らかにする予定である。

近年では電極界面での界面分光測定も可能になりつつあるため、金属や半導体界面でのシミュレーションを行う。銅の CVD 法による堆積のシミュレーションを行い実験的に観測された律速段階を明らかにすることができた。[2-3] 今後は、酸化チタン・水界面での水分子の役割や異なる界面における反応性の違いなどを解析する予定である。

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[4-6]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。

謝辞

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

参考文献

[1] T. Joutsuka and K. Ando, *J. Phys. Chem.*

B, in press.

[2] T. Joutsuka and S. Yamauchi, *Chem. Phys. Lett.*, 741, 137108, 2020.

[3] T. Nishikawa, K. Horiuchi, T. Joutsuka and S. Yamauchi, *J. Cryst. Growth*, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2020.125849.

[4] 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.

[5] T. Joutsuka, T. Hirano, M. Sprik, and A. Morita, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20 (5), 3040–3053, 2018.

[6] T. Joutsuka and A. Morita, *J. Phys. Chem. C*, 122 (21), 11407–11413, 2018.

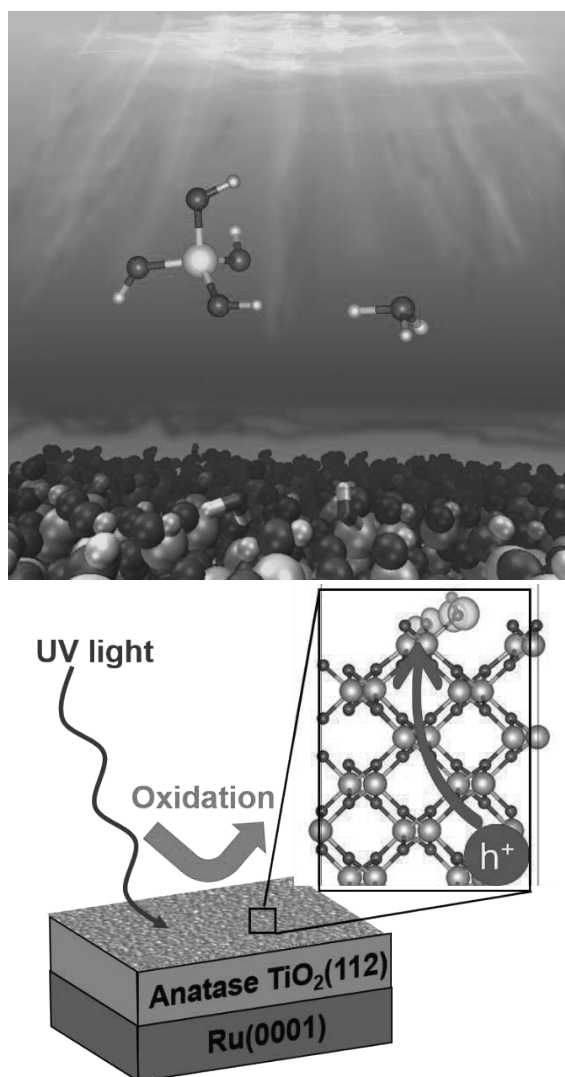


Figure 1. (Top) Aqueous silicic acid [1] (Bottom) Photocatalysis at anatase TiO₂(112).

水平基板上を濡れ拡がる液膜と単一球状粒子との相互作用による 接触界線近傍流体の加速現象に関する数値解析

中村 颯

東京理科大学理工学研究科機械工学専攻

1 緒言

濡れとは一般的に液体が固体表面上を拡がる現象である。濡れは自然界に偏在し、自然は濡れを有効に活用している。濡れの特徴は工業製品にも数多く応用されている。特に、熱の移動効率を高めるヒートパイプや、lab on a chip デバイスなど、液体の効率輸送を目的とした工業機器の向上のためには、固体表面上の液体の濡れ拡がりにおける物理的な理解とその効率的な制御が必要不可欠である。最近、水平基板上に静置された球状粒子と M-CL 近傍流体との相互作用の微視的な動力学が示された。Mu et al.^(1,2)は、水平基板上を濡れ拡がる液膜と基板上に静置された単一球状粒子との相互作用が、M-CL 近傍流体の急激な加速現象を誘起することを示した。また、連続的に微小構造体を配列することで、液体の輸送方向の制御が可能になることを示した。これらの加速現象は、球状粒子周りに形成される曲率を持った液体（メニスカス）に起因すると考えられている。実験では球形粒子及び円柱構造物と液膜の相互作用時のメニスカス形成過程を詳細に観察し、構造物周りに形成されるメニスカス形状が加速現象に及ぼす影響を示している。しかし、微小系のため液体の対流場の観察は困難であり、加えて加速現象に重要とされる圧力場の議論は欠けている。障害物形状の違いが液膜に及ぼす影響を十分に理解するためには、数値計算を用いた解析が必須である。

本研究では、数値解析を用いて粒子周りに形成される圧力場に着目し、動力的な観点から、連続的に配列された微小構造物と液膜間の相互作用による M-CL 近傍流体加速現象を描像する。本数値解析では粒子間距離をパラメータとし、その影響を考察した。

2 計算手法

本研究では、オープンソース数値流体解析ソフトウェアの OpenFOAM (Ver.5.0)を用いて数値解析を行った。気液二相流を扱う計算手法として Volume of fluid (VOF) 法⁽³⁾を用いた。本研究で扱う支配方程式は以下の三式となる。

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

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_{SV} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\mathbf{U}_r \alpha (1 - \alpha)) = 0 \quad (3)$$

式 (1)-(3) はそれぞれ、非圧縮性流体の連続の式、ナビエ・ストークス方程式、含有率 α の移流方程式である。 α は一つのセルにおける液相の体積分率を表す。本研究では Continuum surface force (CSF) 法⁽⁴⁾により界面張力を $\mathbf{F}_{SV} = \sigma \kappa \mathbf{n} = \sigma \kappa \nabla \alpha$ と表す。ここで、 σ 、 κ 、 \mathbf{n} はそれぞれ界面張力係数、界面曲率、界面の気体方向の法線ベクトルを表す。

本数値解析での解析対象を Fig.1 に示す。計算領域の寸法と格子数はそれぞれ $(L_x, L_y, L_z) = (300+L, 80, 150) \mu\text{m}$ 、 $(N_x, N_y, N_z) = (L_x/2, L_y/2, L_z/2)$ とした。ただし L は 2 粒子の中心間距離であり、本数値解析では 3 ケース ($L = 75, 100, 125$) の計算を行った。基板表面は、no-slip 条件を課している。上面 ($x, y = L_y, z$) は開放系、側面 ($(x, y, z = 0)$; $(x, y, z = L_z)$) は対称系である。2 つの粒子半径は $R_p = 25 \mu\text{m}$ であり、粒子、基板の接触角はそれぞれ $\theta_s = 5^\circ$ 、 $\theta_p = 20^\circ$ とした。液体は 2 cSt シリコンオイル、気体は空気の物性を模擬して用いる。液体の表面張力係数、密度、動粘度はそれぞれ $\sigma = 1.83 \times 10^{-2} \text{ N/m}$ 、 $\rho = 873 \text{ kg/m}^3$ 、 $\nu = 2.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ である。加えて、気体の密度、動粘度はそれぞれ $\rho_g = 1 \text{ kg/m}^3$ 、 $\nu_g = 1.48 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ である。重力加速度は $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ である。

3 結果と考察

数値解析によって同現象の再現を試みた。その結果、粒子周りにメニスカスが形成され、実験を忠実に再現することができた (Fig.2 挿入図)。M-CL 速度 U_{CL} は一つ目の粒子と接触後すぐに増加し、最大速度 $\max(U)$ に達した後減少した (Fig. 2)。二つ目の粒子と接触後も M-CL は同様の加速及び減速を示した。異なる粒子間距離で比較をすると、粒子間距離 L が大きい程二つ目の粒子と接触後の最大速度 $\max(U)$ が小さくなった。

粒子周りの圧力分布に着目すると、液膜が粒子と接触後、メニスカス内部は低圧になった (Fig. 3 (a))。また、粒子の上流及び下流側のメニスカス内部に圧力差 Δp が生じた。圧力差が最大になる時刻と M-CL が加速する時刻は殆ど一致しており、粒子周りの圧力差が液膜の駆動源であることを明らかにした (Fig. 3 (b))。加えて、粒子間距離 L が大きい程二つ目の粒子周りの最大圧力差 $\max(\Delta p)$ が小さくなることも本研究より明らかになった。

4 結言

以上より、粒子間距離の違いがメニスカス内部の圧力差に影響を及ぼし、その結果液膜挙動の違いが生じることを数値解析によって明らかにした。本研究では、簡易的に静置された基板上的粒子が省エネルギーで液膜を駆動、すなわちポンプの役割を果たしており、粒子間距離の違いによってポンプの性能が変化することを示している。本研究から得られた知見は、高効率液体輸送デバイスにおける、構造の最適化に密接に関わってくる。

5 参考文献

- [1] L. Mu, D. Kondo, M. Inoue, T. Kaneko, H. N. Yoshikawa, F. Zoueshtiagh and I. Ueno: Journal of Fluid Mech., 830 (2017) R1.
 [2] L. Mu, H. N. Yoshikawa, D. Kondo, T. Ogawa, M. Kiriki, F. Zoueshtiagh, M. Motosuke, T. Kaneko and I. Ueno: Colloids and Surf. A, 555 (2018) 615–620
 [3] C. W. Hirt and B. D. Nichols, Journal of

Computational Physics, 201 (1981) 39-1.

- [4] J. U. Brackbill, D. B. Kothe and C. Zemach, Journal of Computational Physics, 335 (1992) 100-2.

謝辞：本研究を進めるにあたり、京都大学学術情報メディアセンターの方々には多大なご協力を賜りました。ここに記し、感謝の意を表します。

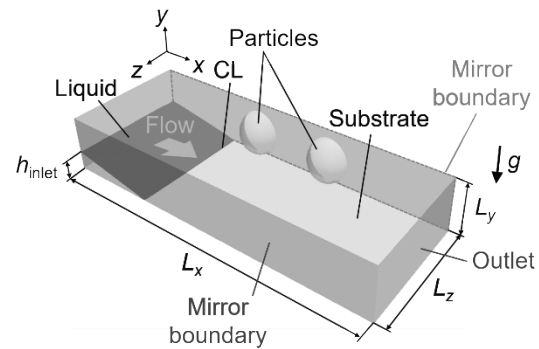


Fig. 1 Computational domain of spreading liquid film on horizontal substrate with two particles.

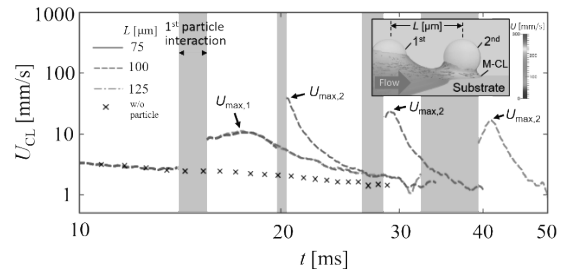


Fig. 2 Temporal variations of the CL velocity U_{CL} on substrates in the case of $L = 75, 100, 125$. The CL position is derived on the line ($x, y = 0, z = z_p$). Note that the CL position is not well defined in the gray area, in which the CL is traveling around the particle foot.

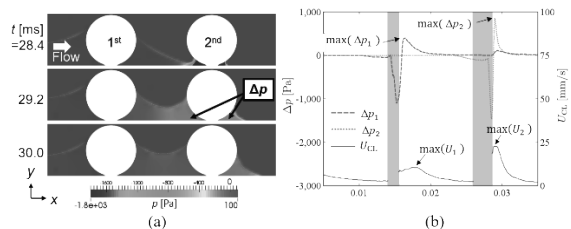


Fig. 3 (a) Temporal variation of pressure around particles. (b) Temporal variations of pressure difference between upstream and downstream sides in meniscus, and CL velocity U_{CL} .

N結合型糖鎖修飾によるタンパク質の機能制御の関連性

リントウルオト正美

京都府立大学大学院生命環境科学研究科応用生命科学専攻

1 緒言

細胞外のタンパク質や膜たんぱく質の多くが糖鎖修飾を受け、タンパク質の構造や機能に大きな影響を与えている。糖鎖修飾は新規医薬品や医療材料として注目され研究が多くなされてきたが、糖鎖はそのフレキシビリティの高さから固体結晶構造は得られておらず、機能との関連性は完全に解き明かされてはいない。

多様な組織で発現し様々な疾病との関連性が示唆されている kallikrein (KLK) ファミリーは異なる基質特異性を有するセリンプロテアーゼでこれまでに 15 のタンパク質が報告されている。KLK ファミリーの反応サイトに共通して存在する Loop 99 は酵素によってその長さは異なるが糖鎖結合部位を有しセリンプロテアーゼの基質特異性に関係していると考えられている¹⁾。

KLK ファミリーに属する KLK8 (neuropsin) は中枢神経系で発現しており、このタンパク質の機能障害により、記憶障害や精神疾患との関連性が示唆されてきた。本研究に先立って KLK8 とその基質である neuregulin-1 の複合体のモデルを用いた分子動力学計算を行った。その結果、KLK8 の基質特異性は基質のアミノ酸配列に左右され、基質が Loop 99 と効率的に相互作用を行うことが重要であることがわかった²⁾。さらに Loop 99 の N 結合型糖鎖修飾と機能制御の関連性について分子動力学法 (MD) 法を用いて研究を進めた。糖鎖修飾がない場合に比べ糖鎖修飾したモデルでは結合部位周辺のループの揺らぎに変化が表れ、特に Loop 99 の揺らぎが変化した。また、糖鎖修飾によって結合部位の構造が

影響を受けることがわかった。

これまでの計算では複雑なエネルギー曲面上の比較的似通った局所的な構造のサンプリングのみを行っている可能性はぬぐえない。今回はさらにサンプリング空間を広げた計算を行うことを目的として、拡張アンサンブル法の一つであるレプリカ交換法を用いた計算 (REMD) を用い、N 結合型糖鎖修飾のタンパク質の構造に与える影響と反応制御の関連性について調べた。

2 方法

N 結合型糖鎖修飾モデルとして、ヒト KLK8 (PDB ID:1npm) の Loop 99 内 Asn95 にアセチルグルコサミン (GlcNAc)、マンノース (Man)、ガラクトース (Gal) から成る糖鎖を結合したモデル、糖鎖なしの WT モデルを用いた。これらのモデル周辺 20 Å に水を、生理条件になるように Na⁺ と Cl⁻ を配置した。

MD 計算には Gromacs³⁾ を用い、アミノ酸残基には amber ff14SB 力場⁴⁾、糖鎖には GLYCAM06-j⁵⁾、水分子には TIP3P⁶⁾ を用いた。最急下法によるエネルギー最小化に続いてモデルに位置拘束を課した状態で 300 K まで昇温した。次に 1 ns かけて徐々に拘束を解除しながら、NPT 計算をおこなった。300 K から 450 K までの間の 70 個のレプリカを用意しそれぞれ 2 ns の平衡化を行い平衡構造とした。この際に Loop99 および糖鎖を除くたんぱく質の位置拘束を行い、Loop99 および糖鎖のみの構造サンプリングを行った。70 個のレプリカを用いて、REMD で 100 ns の計算を行った。

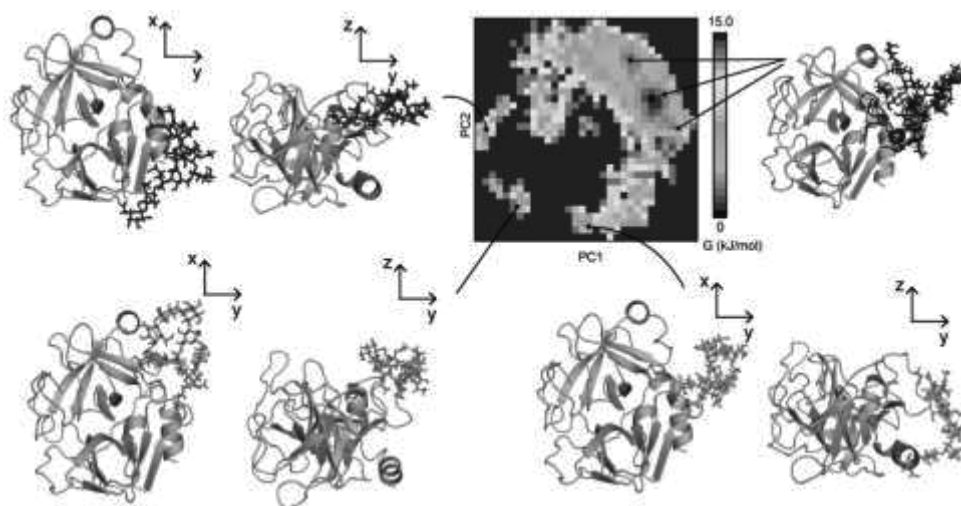


Fig. 1 Principle component analysis for 100 ns trajectory of N-linked glycosylated model. The sticks represent the sugar chain.

3 結果と考察

100 ns の trajectory を用いて主成分分析を行った結果、N 結合型糖鎖モデルにおいて糖鎖は (Fig. 1 右上) 主に初期構造の周り、すなわち主に溶媒中を揺らいでいた。しかし、Fig. 1、2 に示すように糖鎖がタンパク質表面上に沿う形の構造が現れており、これらの構造はレプリカアンサンブル法を使う前では見られなかった。また、タンパク質表面上に静電ポテンシャルをマッピングすると、糖鎖は正電荷を有するタンパク質表面上に沿うように存在していた。

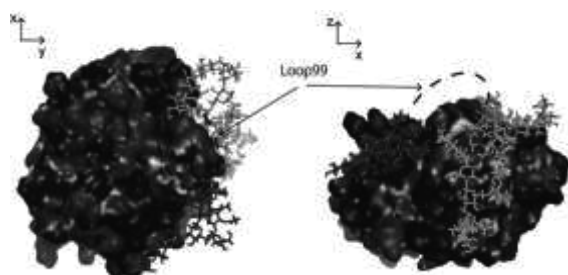


Fig. 2 The fluctuation of sugar chain on the protein surface of the glycosylated model. The sticks represent the sugar chain.

基質ポケット内は負電荷を有し、基質の切断点である Arg が接近しやすくなっている。一方で基質ポケット周囲は正電荷を有しておりこれをふさぐ形で糖鎖が存在していることから、糖鎖のこのような conformation は基質の接近に影響を与えることに

なると考える。

これらの構造では Loop99 と糖鎖以外のタンパク質構造の位置拘束を行っていたため、糖鎖の揺らぎによる基質ポケットの構造変化についての情報が得られない。これらの糖鎖の振る舞いによる基質ポケットの構造変化に関するシミュレーション及び解析をさらに行うことによって触媒活性との関連性が明らかになるであろう。また、シアル酸で延長した糖鎖は他タンパク質においてタンパク質機能との関連性も指摘されていることから検討が必要であると考えている。

4 参考文献

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

Numerical simulation of deepwater oil blowout

Crossflow and droplet size distribution

Daniel Cardoso Cordeiro

大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻化学工学領域

1 Introduction

In 2010, one of the largest offshore oil spills of all time happened in the Gulf of Mexico, USA. For the first time, the sub-sea injection of chemical dispersants was used to treat deepwater oil spills. However, with only few studies prior to its application, the overall effectiveness of this method is still questioned as appropriate measures of the oil droplets were not performed in situ.

In order to investigate the impact of the water current crossflow in an oil blowout, as real-scale experiments are clearly unfeasible, with the aid of numerical simulations it is possible to get some information that might help us improve our understanding of deepwater blowouts in a cross flow. The jet trajectories can be analyzed [1]. Specially, by using dimensionless numbers, it is possible to assess the effect of several parameters in the oil jet behavior. In this research, three parameters that influence the jet under crossflow are considered: the Weber number ($We_w = \rho_w U^2 D \delta$), the Reynolds number ($Re_w = \rho_w U D \mu$), and the inlet velocity ratio ($r = U_o / U_w$) [2], where ρ is the density, D is the oil inlet diameter, U is the inlet velocity, μ is the water viscosity, and the subscripts w and o indicates water and oil, respectively. We investigate the effect of these parameters on the behavior of the oil jet and the velocity field.

2 Numerical methods

To investigate the relationship between oil plumes and the aforementioned dimensionless numbers, numerical simulations of oil blowout in a cross flow were executed using the schematics shown in Fig. 1.

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

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

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

where \mathbf{u} is the velocity, α is the volume fraction, t is time, ρ is the density, p is the pressure, \mathbf{g} is the gravity acceleration, $\mathbf{F}_{S,k}$ is the surface tension force, $\mathbf{F}_{D,k}$ is the drag force, $\mathbf{F}_{vm,k}$ is the virtual mass force and the subscript k indicates the fluid phase. The Euler-Euler method was used to model the multiphase flow coupled with a Schiller-Naumann drag model. The open-source OpenFOAM v4.0 was used for the calculations.

3 Results and Discussion

Averaging the velocity and volume fraction for 30 seconds ($t = 10\text{ s} - t = 40\text{ s}$). In Fig. 2, the effect of varying the velocity ratio (r) on the oil

plume trajectory. The distances are non-dimensionalized by the oil inlet diameter, D . With the increase of Re_{water} , We_{water} , and r , the trajectories of the oil plumes centerlines were ascendant, while with lower r the plumes quickly became horizontal. These effects are highly dependent on the value of r , which seems to change the behavior of the plume in the interval $1 \leq r \leq 2$.

In Fig. 3, the oil mean velocity profiles for $r = 1$ were shown. As the oil plume developed, the oil plume was caught in the effect of the vortexes near the inlet, which did not happen so strongly in the values with r above 2. This mechanism could explain the strong dependence of the plume centerline tendency according to the r ratio.

4 Conclusion

The effects of the oil jet in a crossflow were investigated using an Euler-Euler multiphase numerical method.

The trajectory of the oil plume centerline was strongly affected by the ratio r between the oil inlet velocity and the water inlet velocity.

Vortexes near the inlet could be a mechanism in favoring the faster horizontal trend of the plume trajectory of the instead of a faster plume ascendance.

Techniques that could generate such a vortex near the well inlet could help in extending the residence time of oil in the deeper ocean which could enhance biodegradation.

Further research is needed to investigate the jet in the crossflow phenomenon.

References

[1] New, T. H. T. Lim, T & C. Luo, S. (2006). Effects of jet velocity profiles on a round jet in cross-flow. *Experiments in Fluids*.

[2] M.G. Pai, O. Desjardins, H. Pitsch. (2008).

Detailed simulations of primary breakup of turbulent liquid jets in crossflow. *CTR Annual Research Briefs*.

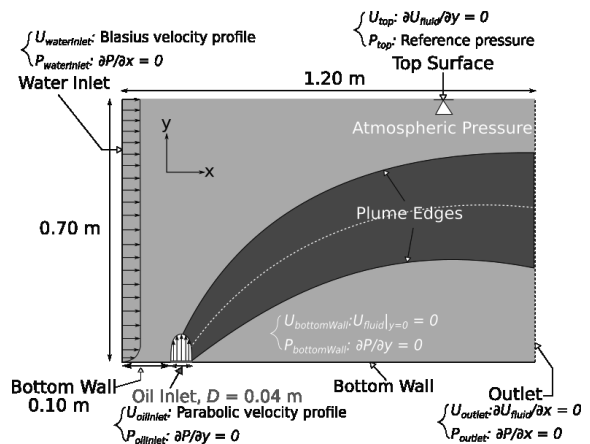


Figure 1: Schematics of oil jet in water crossflow including boundary conditions.

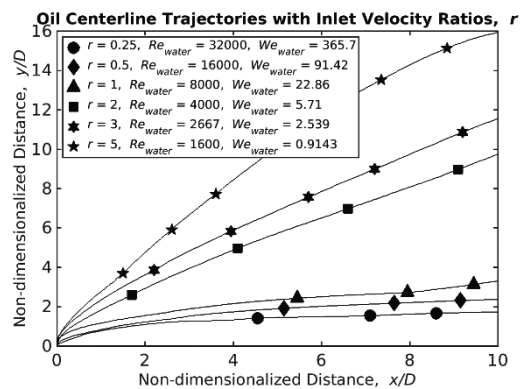


Figure 2: Oil jet centerline trajectory for varying Re_{water} , We_{water} , and r

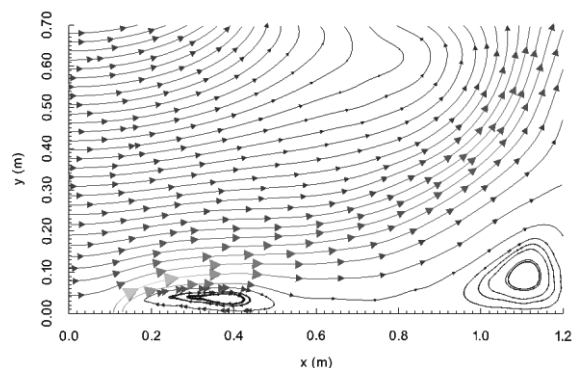


Figure 3: Oil mean velocity field and streamline for the case with $r = 1$.

流体の一変数時系列データに対する 機械学習によるモデルの構成

中井拳吾*

*東京海洋大学 学術研究院 流通情報工学部門

本稿は齊木 吉隆氏 (一橋大学経営管理研究科) との共同研究 [5] に基づくものである。

1 はじめに.

機械学習は物理学の様々な分野で注目されている。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 [3, 6] 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用いて流体のエネルギー変数のモデルを構成し、予想を成功させている [4]。

一方で、流体を始めとした高次元の力学系の時系列データを精度良くモデリングするためには効率よく学習することが求められる。そこで、時間遅れ座標系を使うことで予想の精度を上げた。また、良い時間遅れ座標系のとり方を用いることで流体のスカラーマクロ変数の時間発展モデルの構成をする。

2 リザーバーコンピューティング.

$d\phi/dt = \mathbf{f}(\phi)$ で表される力学系の変数, $\mathbf{u} = \mathbf{h}_1(\phi) \in \mathbb{R}^M$ と $\mathbf{s} = \mathbf{h}_2(\phi) \in \mathbb{R}^P$ について考える。ある時刻まで (学習時間と呼ぶ) の入力変数 \mathbf{u} , 出力変数 \mathbf{s} の時系列は既知とする。 \mathbf{s} の時系列を予測する時刻において、時系列データ \mathbf{u} は未知とする。物理的な知見を用いずに学習時間のデータセット $\{\mathbf{u}, \mathbf{s}\}$ のみからモデルを構築する。

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 入出力変数の設定.

テーラーマイクروسケールレイノルズ数. 周期境界条件の下で 3 次元非圧縮 Navier-Stokes 方程式の直接数値計算 [2] によって得られた時系列データをリザーバーコンピューティングの学習データとして用いる。ここでは、各時刻での流れの複雑さを表すテーラーマイクロスケールレイノルズ数 $\tilde{R}_\lambda(t)$ [1] に注目する。

時間遅れ座標系. M 次元の $\Delta\tau$ 時間遅れ座標系を入力変数 $\mathbf{u}(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_M(t))^T$, 出力変数 $\mathbf{s}(t) = (s_1(t), s_2(t), \dots, s_M(t))^T$ として導入する。ただし, $u_i(t) = s_i(t) = \tilde{R}_\lambda(t - (i-1)\Delta\tau)$ とする。

3.2 時間遅れ座標と遅れ時間の決め方.

自己相関関数. レイノルズ数 $\{R_\lambda(t)\}$ の自己相関関数を $C(x)$, その包絡線を $C_e(x)$ とする。図 1 に, $C(x)$ と $C_e(x)$ を書きだした。図 1 (左図) より, $C(x) = 0.7$ から 0.3 の値をとるのは, $x \approx 3.0$ から 5.0 の時である。このことから $\Delta\tau < 3.0$, ならば, $R_\lambda(t)$ と $R_\lambda(t - \Delta\tau)$ が似た動きをすることになり, 一方で, $\Delta\tau > 5.0$ ならば, 両者の相関が小さくなる。このことから, 時間遅れ座標系の遅れ時間 $\Delta\tau$ として $3.0-5.0$ から選ぶと良いと推測される。

実際, $\Delta\tau = 3.0-5.0$ について, 最適な遅れ時間 $\Delta\tau$ と遅れ次元 M の組み合わせについて調査した (表 1)。各 $(\Delta\tau, M)$ について, 各々 8160 パターンのニューラルネットワークについて学習を行い, 予想

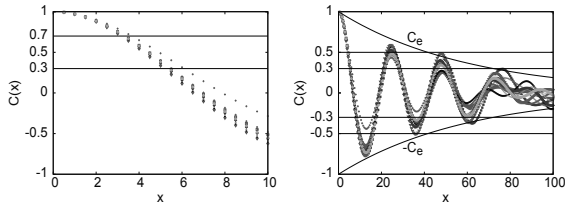


図 1: 時間遅れ x の時間に対する $\tilde{R}_\lambda(t)$ の自己相関関数 $C(x)$ と包絡線 $C_e(x)$ (右図) とその拡大図 (左図).

した変数 $\hat{s}_1(t)$ と $s_1(t)$ の時刻 $t \in [0, 60]$ ($t \in [0, 90]$) の差の最大値が $e_{60} = 0.14$ ($e_{90} = 0.30$) 以下になるものの個数を数えた.

$(e_{60}, e_{90}) = (0.14, 0.30)$

$\Delta\tau \setminus M$	11	12	13	14	15	16	17	18
3.0	0	0	0	0	1	19	24	43
3.5	0	0	11	20	28	57	48	21
4.0	3	18	43	107	59	21	14	2
4.5	14	43	54	21	15	8	1	1
5.0	24	26	19	9	1	1	1	0

表 1: 時間遅れ座標系の各遅れ時間 $\Delta\tau$ と次元 M での予測の成功回数

$\Delta\tau \approx 4.0$ かつ $M\Delta\tau \approx 55-60$ となるよう ($\Delta\tau, M$) を定めると, 予想のエラーがしきい値以下になる個数が最も多くなることが見て取れる. これらの値はそれぞれ, $C(\Delta\tau) \approx 0.45-0.55$ と包絡線 $C_e(M\Delta\tau) \approx 0.35-0.40$ に相当する (図 1 (右図)).

3.3 学習モデルによる時系列データ予測.

($\Delta\tau, M$) = (4.0, 14) のもとで時間遅れ座標系を考え, リザーバーコンピューティングにより時間発展モデルを 1 つ得た. このモデルを用いて様々な所からの時間発展予測を行った. レイノルズ数 $s_1 = \tilde{R}_\lambda$ の時系列データの予想がうまく行っていることを確認した (図 2). 図では, 比較のため Navier–Stokes 方程式の直接数値計算から得られた正解の時系列 $s_1 = \tilde{R}_\lambda(t)$ とあわせて書きだした.

4 まとめ

流体のマクロ変数として一変数時系列データであるレイノルズ数の挙動を表現するリザーバーモデルを時間遅れ座標系を使うことで構成した. また, この

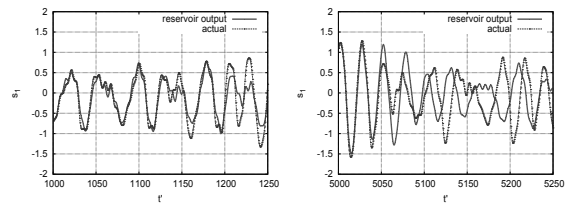


図 2: 学習により得たモデルの一つを用いて様々な時間 $T_{\text{out}} < t' < T_{\text{out}} + 250$ ($T_{\text{out}} = 1000, 5000$) での時系列データ予測を行った.

時間遅れ座標系の遅れ時間 $\Delta\tau$ と遅れ次元 M について, 自己相関係数 $C(\Delta\tau)$ が 0.45-0.55 かつ, 包絡線 $C_e(M\Delta\tau)$ が 0.35-0.40 を満たすように ($\Delta\tau, M$) を決めると最適であることがわかった. また, このようにして決めた遅れ時間座標系を元に学習したモデルは, 時系列データの予想ができ, 速度場が穏やかな流れから複雑な流れに時間間欠的に遷移する様子も再現することが確認できた.

5 謝辞

中井は, 本研究は JSPS 科研費 JP19J12482 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] T. Ishihara and Y. Kaneda, In Statistical Theories and Computational Approaches to Turbulence (2003), pp. 177–188.
- [2] K. Ishioka, GFD Dennou Club, (1999), <http://www.gfd-dennou.org/arch/ispack/>.
- [3] H. Jaeger, and H. Haas, Science, 304, (2004), pp. 78-80.
- [4] K. Nakai, and Y. Saiki, Physical Review E 98, (2018), 023111:1-6.
- [5] K. Nakai, and Y. Saiki, Discrete and Continuous Dynamical Systems Series S, (2020), doi: 10.3934/dcdss.2020352.
- [6] Z. Lu, J. Pathak, B. Hunt, M. Girvan, R. Brockett, and E. Ott, Chaos, 27, (2017), pp. 041102. pp. 391-403.

Numerical simulation of the transport phenomena occurring in the Bottom Seeded Solution Growth (BSSG) process of SiC

ZHANG Jiangaο

Graduate School of Engineering Science, Osaka University

1 Introduction

Silicon carbide (SiC) is a promising wide-bandgap semiconductor material for power devices due to its high electrical breakdown field and high thermal conductivity. The performance of SiC devices strongly depends on the quality of the grown SiC crystal because of high-dislocation density and high-residual stress. In order to avoid these disadvantages, solution growth processes have been developed to produce high-quality crystals since these processes are performed at the condition close to thermodynamic equilibrium. One example of such solution growth processes is the Top-Seeded Solution Growth (TSSG) method. However, it was found that, in this growth process, the Marangoni convection developing along the melt surface is strong and affects the crystal homogeneity. To overcome this issue, we numerically study the Bottom Seeded Solution Growth (BSSG) method for the growth of SiC, since the Marangoni convection is not significant because the seed is at the bottom of the crucible. Also, this technique had shown a reduction in dislocation density in the growth of GaAs [1].

Most numerical simulations were conducted in the 2D axisymmetric model [2, 3]. In this study, we carried out a 3D numerical simulation to investigate the transport phenomena occurring during the BSSG process of SiC. The coil frequencies have a significant effect on electromagnetic and buoyancy flows, and the Marangoni, electromagnetic, and buoyancy forces are the essential parameters of the growth of SiC crystal. Yamamoto et al. [4] examined, in the TSSG process, the effect of coil frequency on flow patterns in a different furnace configurator, but the crystal growth rate and its uniformity were not considered. In the present BSSG method, the effect of the magnetic field induced by the radio

frequency coil on the crystal growth rate and its uniformity will be comprehensively considered.

2 Numerical method

The BSSG furnace configuration is schematically shown in Fig. 1. The radio coil is set outside the insulator, and the Si-C melt is heated by the crucible, which is heated by the induction coil. The simulation was based on the integrated process model [5, 6] and carried out separately for the three stages: (i) the electromagnetic field, (ii) the temperature field, and (iii) the fluid flow in the melt. We first get the Lorentz force, and the heat generation densities from step (i). After that, we compute the temperature field (step (ii)) by using the heat generation densities from step (i). In the end, we carry out the melt flow in the step (iii) by using the heat generation densities and Lorentz force from step (i) and the boundary condition of temperature from the step (ii).

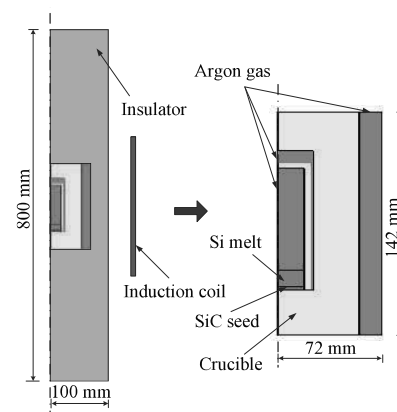


Figure 1 Schematic view of the growth setup

3 Results and discussion

The computed maximum values of the Lorentz force density in the melt and the Joule heat density in the whole

furnace are plotted in Fig. 2 and Fig. 3. The maximum Joule heat density increases with the coil frequency. On the other hand, the maximum Lorentz force in the melt increases quickly at the low coil frequency. When the frequency exceeds a certain value (5kHz), the Lorentz force decreases with the increase of the coil frequency.

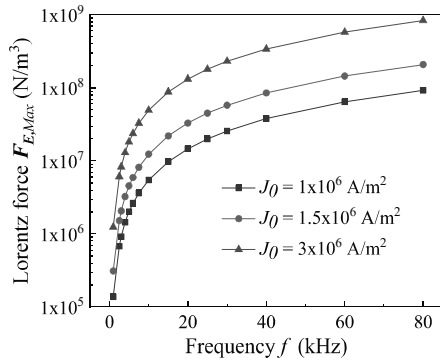


Figure 2 The maximum value of Joule heat density in the furnace at various frequencies and current densities.

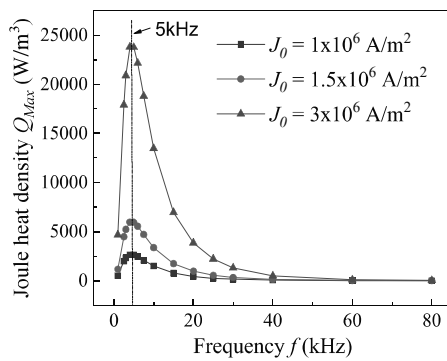


Figure 3 The maximum value of Lorentz force density in the melt at various frequencies and current densities.

We can also find that the maximum Lorentz force value is located at the center edges of the melt for low frequencies while it is located at the top and bottom corner of the melt for high coil frequencies due to the skin effect, which may affect the flow structure in the melt.

Figure 4 shows the effect of the coil frequencies on the growth rate. For all the cases investigated, we only enhance the current intensity to increase the temperature of the melt. As seen, the growth rate increases with the increase of the temperature. More carbon will dissolve from the crucible walls, and the concentration of carbon in the Si-melt will be high at a higher temperature. As a result, carbon flux at the growing interface will increase.

Besides, we can also find that the growth rate will increase with the decrease of the coil frequency at the same

temperature value when the coil frequency is lower than 30 kHz. It happens because the stronger Lorentz force will be generated in the melt at the low frequencies, and the electromagnetic flow is dominant. This developed flow thins the concentration boundary layer along the crystal growth interface and consequently makes the growth rate higher. The flow structures in the melt are almost identical, and this indicates that the frequency has no significant effect on the uniformity of crystal growth. When the coil frequency is higher than 30 kHz, the growth rates almost keep the same because Marangoni flow is dominant.

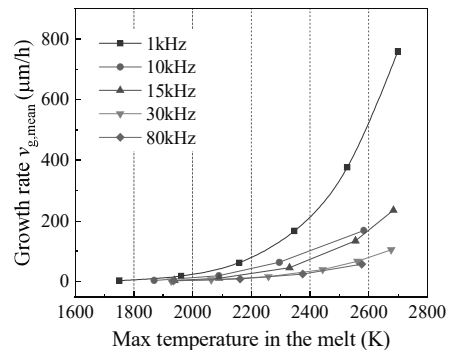


Figure 4 The time-averaged growth rate at various frequencies.

4 Conclusion

The influence of coil frequencies on the crystal growth rate and its uniformity during the BSSG process of SiC is numerically investigated. The result shows that the coil frequencies strongly affect the growth rate and have no significant effect on the uniformity of crystal growth. The growth rate can be enhanced at low frequency because of the more potent Lorentz force. For low-frequency coil, the electromagnetic flow is dominant. However, Marangoni flow is dominant when the coil frequency exceeds a specific frequency.

5 Reference

- [1] K. Hoshikawa, et al., *J. Cryst. Growth*, **94** (1989) 643.
- [2] K. Ariyawong, et al., *Mater. Sci. Forum*, **71** (2014) 778.
- [3] T. Umezaki, et al., *Mater. Sci. Forum*, **31** (2015) 821.
- [4] T. Yamamoto, et al., *J. Cryst. Growth*, **474** (2017) 50.
- [5] P.M. Gresho, et al., *J. Cryst. Growth*, **85** (1987) 40.
- [6] J.J. Derby, et al., *J. Cryst. Growth*, **97** (1989) 792.

高プラントル数液柱温度差マランゴニ対流における 自由表面を介した熱損失の影響に関する数値解析

藤本 空知

東京理科大学大学院理工学研究科機械工学専攻

1 緒言

シリコン単結晶生成の一つにフローティングゾーン(FZ)法がある。多結晶ロッドの一部をリング状のヒーターで溶解させる方法で、坩堝など他の物質に接触することがないため高品質な結晶を生成できる。溶解部は表面張力により保持されるため地上では小径でなければならないが、軌道上、つまり微小重力下では大径化が可能である。さて、溶解部を保持する表面張力だが、温度差により張力差が生じ、溶解部内にはマランゴニ対流が生じる。微小重力化では浮力対流よりもマランゴニ対流が支配的となり、単結晶表面に欠陥縞を作ることが明らかになった^[1]。以上を背景に、マランゴニ対流の不安定性の現象解明、制御等を目的に研究が行われるようになった。

本研究ではFZ法を簡略化させ、図1に示すハーフゾーン液柱モデルを用いる。高温の上部ディスク、低温の下部ディスクの間に液体が保持されており、自由表面上の表面張力差によりマランゴニ対流が発生する。温度差がある閾値を超えると二次元対称流が不安定性を起す。この不安定性に様々なパラメータが影響を与えることが明らかにされている。プラントル数 ($Pr = \nu/\kappa$, ν : 動粘性係数, κ : 熱拡散率) を例に挙げると、低Pr数流体の場合は不安定後三次元定常流となりその後三次元振動流となるが、高Pr数流体の場合は不安定後直ちに三次元振動流へ遷移する^{[2][3][4]}。

そして近年、液体が周囲の気体に熱を損失する度合いも不安定性に影響を与えることが確認された^{[5][6]}が、その原因の解明は行われていない。本研究では熱伝達の度合いをビオ数 ($Bi = Hh/\lambda$, h : 周囲気体の熱伝達率, λ : 液体の熱伝導率) で表し数値計算及び解析を行い上記原因の解明を

目的とする。また、今後行われる予定の流体実験である JEREMI(Japanese European Research Experiment on Marangoni Instabilities)に向けて知見を蓄積することも目的である。

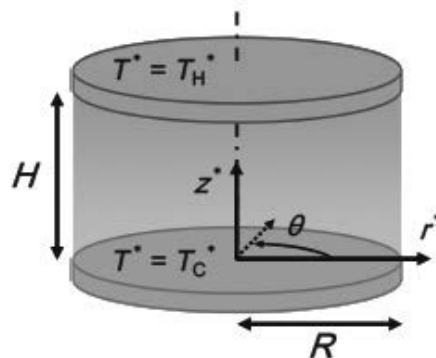


Fig.1 Schematic diagram of Half-Zone model

2 計算手法

図1のように液柱高さをH、半径をRとする。 $\Gamma = H/R$ で定義されるアスペクト比は2.0とした。上下壁面の温度をそれぞれ T_H, T_C とし、温度差は $\Delta T = T_H - T_C$ と定義する。非圧縮性ニュートン流体を仮定し、表面張力を除く物性値の温度依存性を無視した。円柱座標系(r, θ, z)を用いて、無次元化した支配方程式(連続の式、Navier-Stokes式、エネルギー方程式)を以下に示す。

$$\nabla \cdot \vec{u}^* = 0$$

$$\frac{\partial \vec{u}^*}{\partial t} + (\vec{u}^* \cdot \nabla) \vec{u}^* = -\nabla p^* + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{u}^* + \frac{Bd}{Re} T^* \vec{e}_z$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t} + (\vec{u}^* \cdot \nabla) T^* = \frac{1}{RePr} \nabla^2 T^*$$

ここで \vec{u}^* は無次元速度ベクトル、 p^* は無次元圧力、 $T^* = (T - T_C)/\Delta T$ は無次元温度である。以下では無次元を表す*は省略する。Prは2cSt シリコンオイルを模擬して28.6とする。Reは対流の

強さを表すパラメーターであり、以下のように定義する。

$$Re = \frac{|\sigma_T|H\Delta T}{\rho v^2}$$

ここで σ_T は表面張力温度係数、 ρ は密度である。
Bdは動的ボンド数であり以下のように定義される。

$$Bd = \frac{\rho g \beta H^2}{|\sigma_T|}$$

ここで g は重力加速度、 β は体積膨張率である。
今回は地上実験を模擬して0.34とした。

上下ディスクとの速度の境界条件はノンスリップ、温度はそれぞれ T_H, T_C で一定とした。自由表面における速度の境界条件は表面張力と剪断応力の釣り合いから導出される、いわゆるマラン後に境界条件を採った。さらに熱の授受に関する境界条件はBiでコントロールするよう以下に示す式で定義した。

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{\text{surf.}} = -Bi(T - T_{\text{amb}})$$

T_{amb} は周囲気体温度を示す。今回は $T_{\text{amb}} = T_C$ としている。先行研究によりBiが正の領域、すなわち液柱が熱を損失する場合に臨界値がBiに敏感であることが明らかにされたため、本研究でもBi数を正の領域で変化させる。

線形安定性解析 (Linear Stability Analysis, LSA) と直接数値計算 (Direct Numerical Simulation, DNS) により計算する。LSA手法はFujimoto et al.(2019)と同様である^[7]。

パラメータを表1にまとめる。

Table1 Numerical conditions

Prandtl number	Pr	28.6
Aspect ratio	Γ	2.0
Ambient gas temperature	T_{amb}	$T_C (=0)$
Dynamic Bond number	Bd	0.34
Biot number	Bi	0.0~4.0
Reynolds number	Re	LSA: Free DNS: 900~1450
Grid size	(N_r, N_θ, N_z)	LSA: (67, 61, 120) DNS: (50, 48, 100)

3 結果

LSAによる中立安定曲線を図2に示す。今回の計算パラメータでは周方向波数 $m=1$ が臨界となった。Bi数によって臨界値での固有値(ここではHydrothermal wave, HTWと呼ぶこととする)が変化することが確認できた。Biの低いものからHTW(b),(a'),(a)とする。固有関数が増えるBi域では急激に対流が安定化されることが明らかになった。

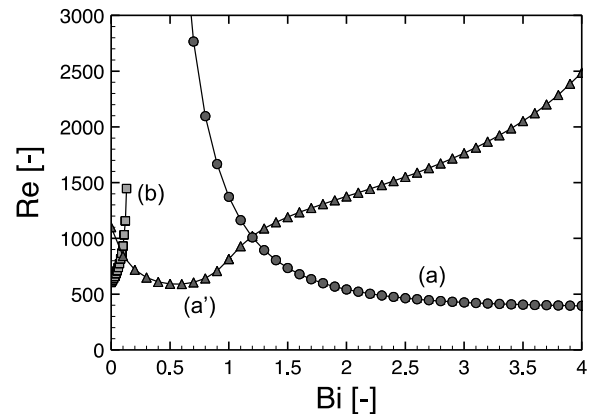


Fig.2 Neutral curves as a function of Bi

固有値の変化や安定化の原因を調査するため、エネルギー解析を行った。計算手法はWanschura et al.(1995)によるものを参考にした。熱的不安定に注目するため、速度変動による基本温度場の熱エネルギー対流輸送から生じるIt1(半径方向エネルギー生成)、It2(高さ方向エネルギー生成)を出力する。HTW(a')と(a)の識別は液柱内部の温度変動分布が指標となるため、三次元構造を観察した。各固有関数を観察できる $Bi = 0.0, 0.5, 2.0$ における臨界直上の温度変動、It1、It2の三次元分布を図3に示す。HTW(b)に関しては、中央の大きな構造はIt1、上部ディスク付近の小さな構造はIt2による寄与があ。HTW(a')、(a)に関しては中央の細くつながる構造はIt1、上下ディスク付近の大きな構造はIt2による寄与があった。It2は発現した全固有関数でそれぞれ違う分布を示したため、It2の方が強く固有値の分岐を引き起こしていると考えられる。

宇宙実験や地上実験で得られた粒子集合現象 (Particle Accumulation Structure, PAS)について、重

力の有無により粒子不在領域に違いが確認された。Bd=0.0 とした計算結果も併せて実験結果と比較することで温度変動分布との相関が確認されたが、原因解明には至らなかった。更なる解析を進め原因の調査を行うことが今後の方針である。

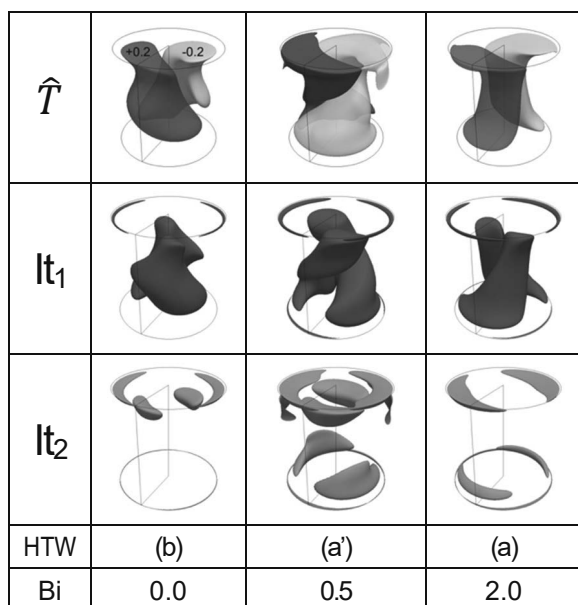


Fig.3 Bird-eye view of the isosurfaces of $\hat{T} = \pm 0.2, It_1 = +5$ and $It_2 = +5$ (Pr=28.6, $\Gamma = 2.0, T_{amb} = T_c, Bd = 0.34, LSA$)

直接数値計算においても同様のエネルギー解析を行った。直接数値計算は計算負荷が高いが Re 数を指定して対流を再現できる。Bi=0.5 とし、Re=1050, 1250, 1450 で一次不安定後定常状態となった時間での温度変動、 It_1 、 It_2 の三次元分布を図4に示す。 It_1, It_2 のカラーリングは温度変動を表す。LSA と無次元化の方法が異なるため絶対値は異なるが、構造は似たものを再現できた (図3の Bi=0.5 参照)。Re=1050, 1250 には大きな変化は確認できないが、Re=1450 まで増加させると液柱中心付近で It_1 が弱まり、 It_2 が強まることが分かった。また、時間変化による構造変化も確認されたことから、Re=1450 では二次不安定が起こっている可能性も示唆された。エネルギー生成の成分のうちどの項が支配的であるか、またエネルギー生成の時間変化がどのように二次不安定に影響を与えているかの調査と解明を今後の課題とする。

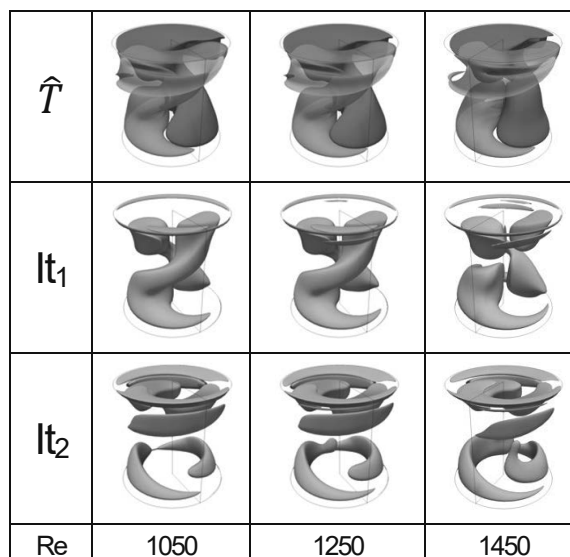


Fig.4 Bird-eye view of the isosurfaces of $\hat{T} = \pm 0.02, It_1 = +0.2$ and $It_2 = +0.2$ (Pr=28.6, $\Gamma = 2.0, T_{amb} = T_c, Bd = 0.34, DNS$)

4 結言

高 Pr 数流体長液柱について地上実験を模擬した線形安定性解析及びエネルギー解析を行った。エネルギー解析結果の三次元構造可視化から固有値分岐の原因調査が進み、ねじれ成分を生み出しているのは It_1 であり、さらに HTW(a') と (a) の分岐には It_2 が影響していることを示した。また PAS に関しても実験との相関を確認することができ、宇宙実験への知見蓄積に貢献できた。DNS によりより詳しく対流を調査でき、二次不安定現象解明の端緒を開くことができた。

5 参考文献

- [1] A Cröll et al., J. Cryst. Growth, 191 (1998) 365.
- [2] Wanschura et al., Phys. Fluids, 7 (1995) 912.
- [3] Preisser et al., J. Fluid Mech., 126 (1983) 545.
- [4] Leypoldt et al., J. Fluid Mech., 414 (2000) 285.
- [5] B. Xun et al., Int. J. Heat Mass Transf., 54 (2011) 1698.
- [6] Wang et al., Int. J. Heat Mass Transf., 50 (2007) 4195.
- [7] Fujimoto et al., J. Microg. Sci. Appl., 36 (2019) 360204.

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

井上漱太¹、深沢圭一郎²、平田聡¹

1: 京都大学野生動物研究センター

2: 京都大学学術情報メディアセンター

1 はじめに

動物が群れをなし、動きを同調させる現象は古くから研究者の興味をひいてきた。近年、計測・計算技術の急激な発展によって、一動物レベルでの行動ルールの解明を目指す研究が高まりを見せている。Couzin らは Attraction、Alignment、Repulsion という3種類の力の相互作用により、動物の群れにおけるさまざまな振る舞いが説明できると提唱した[1]。これにより、巨大な群れにおいても、近傍の個体との局所的なインタラクションが、群れの全体の維持機構であることが理論的に提示された。その後、魚類の群れにおいて、個体の加速度を定量的に計測することにより、この理論の有効性がすでに検証されている[2]。

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

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

互作用を、距離を変数にもつ関数によってモデル化し、シミュレーションをおこない、野外観察によって得られたデータの再現を目指した。

2 野外観察

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

3 ウマの個体間に働く力の数値シミュレーション

力の数値シミュレーションのために、一動物の周囲に重力のように”場”を導入し、距離が遠いと Attraction として、距離が近いと Repulsion として働く力を以下のように定めた。

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

この関数において r は個体間の距離をあらわし、

r_a は Attraction と Repulsion の境界値である。本研究では、各群れの個体数と同数の点を 2 次元平面上にランダムに配置した状態から、 F を個体間に作用させ、一定ステップ後に点間の距離を測定した。これを観察で得られた画像の枚数分繰り返した。そして、測定された個体間距離の分布を、野外観察により得られた分布とピーク位置および残差平方和 (RMSE)をもとに比較し、 a , b , c , d , r_a の最適パラメータセットを探索した。合計で各群れにつき 1171800 通りのモデルを試した。

4 相互作用モデル

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

5 結果

ウマの群れにおける任意の 2 個体の距離を最もよく説明するモデルは、メトリック距離を 7 body length (BL) 以内に作用させるものだった (Figure 1)。また、Attraction と Repulsion は 3.5-4 BL 以内で逆転すると推定された (Figure 2)。

6 考察

これまで大きな体サイズ動物の群れにおける局所的行動ルールの解明に試みた研究は限られていた。本研究では、ドローン技術を用いた高精度計測とスーパーコンピュータを用いたシミュレーションによって、ウマの個体間の距離を調節しているインタラクションの推定をおこなった。その結果、ウマにおいても、近傍の個体との局所的な相互作用によって距離を調節していることが示唆された。また、この結果は、群れサイズにかかわらず局所的な相互作用で群れのふるまいが説明できる可能性を提示しており、群れサイズの小さな動物種という観点からも興味深い知見を提供している。

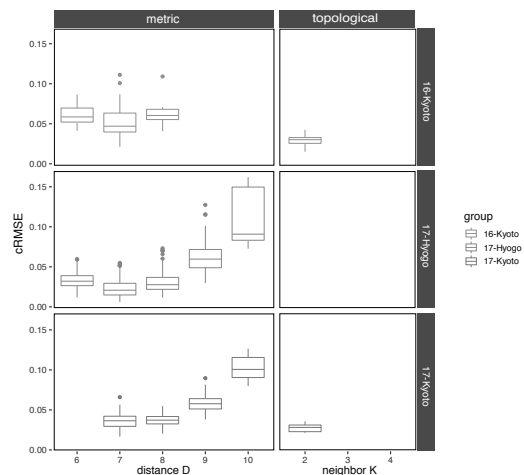


Figure 1 インタラクションタイプおよびその範囲におけるシミュレーション結果と実測値との誤差

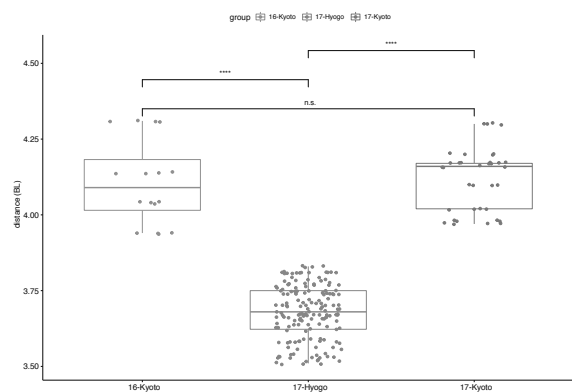


Figure 2 推定された Attraction と Repulsion の逆転距離

6 参考文献

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

リモートセンシングなどの大規模環境データ解析による環境社会問題への 応用、社会実装実験

佐藤 建

国立高等専門学校機構一関工業高等専門学校未来創造工学科

1 宮城県伊豆沼の環境

宮城県伊豆沼内沼自然公園は宮城県北部に位置する自然湖沼である。この伊豆沼周辺では毎年10万羽以上の渡り鳥が飛来して越冬しており、湿地保全に関するラムサール条約にも登録される国際的にも重要な湿地である。かつてはアサザやガガブタ、ヒシなどの豊かな水性植物群落が広がっていたが最近の30年程度で大きく環境が変化している。

伊豆沼では最多時期には水面の85%をハスが占めるなど環境の生物多様性が失われつつあることが懸念されている。宮城県ではヒメビシ、ガガブタは県の絶滅危惧種Ⅰ類、アサザはⅡ類となっており、環境省ではヒメビシがⅡ類、ガガブタ、アサザは準絶滅危惧種とされている（宮城県レッドリスト、2016；環境省レッドリスト、2020）。

伊豆沼は春季から夏季にかけて植生が成長し、現在では上記のように夏季にハスによって湖面がほぼ覆われる。ハスの繁茂は水質の悪化や浅底化にも寄与していることが分かっている。また伊豆沼の水質悪化についてはCOD値が観測されている湖沼の中で最も高いような状態となっている（環境省、平成30年度公共用水域水質測定結果）。湖沼環境の人為的復元およびそのための研究開発が試みられており、ハスの刈り取りのための機器の開発と運用を行うほか、マコモなどの植栽が行われている。

冬季は渡り鳥が飛来する時期である。伊豆沼周辺に数多く訪れる渡り鳥は湖面から潜水してハスの地下茎（レンコン）などの植物を食べている。これらの渡り鳥は湖が完全に凍結するような場所をさけて来訪しているものの、伊豆沼など周辺の

湖沼でも冬季には湖面が部分的には凍結して鳥の行動も制限される。

広域の情報を取得できるUAVやIoT、衛星データによるセンシングの応用は伊豆沼のような広い環境を調査するために有効な手段となる。湖沼内および湖沼周辺の植生の分布とその季節的な変化を把握する手法としてIoTによる湖面撮影データ、UAVへの搭載が可能な農業用の簡易マルチスペクトルカメラを応用した手法を提案し、伊豆沼を対象としたモニタリング観測を行った。これらのデータを機械学習、統計、画像処理手法を用いて解析をおこなった。

2 環境データ取得

寒冷地域では低温環境での行動のリスク、積雪環境での広範囲移動の困難、交通・行動範囲の減少から人間活動が制限される。このためUAVやIoTデータによるセンシングの応用は有効な手段となる。本研究では伊豆沼での計測実験のために遠隔カメラやUAVによる分光画像計測を行った。

伊豆沼では環境省によって伊豆沼・内沼サンクチュアリセンターに設置されている遠隔カメラ（Webカメラ）によるタイムラプス撮影が行われている。伊豆沼の冬季環境データとこのタイムラプス画像を利用して伊豆沼の冬季環境情報の解析を行った。撮影間隔は1時間に1回であり途中配置やカメラの変更があるも2002年から現在まで継続して撮影されている。

UAVによる撮影は2019年5月から11月にかけて週1回程度で行われた。分類のために室内実験により各植物の分光特性の計測実験も行っている。UAVにはマルチスペクトルカメラが搭載され、

撮影により可視から近赤外までの波長ごとの反射強度が得られる。

3 伊豆沼の凍結情報解析

伊豆沼・内沼サンクチュアリセンターに設置されている遠隔カメラには 2002 年から現在まで大量の撮影画像が記録されており、これを管理する環境省自然環境局生物多様性センターから画像データを提供いただいた。これに対し Superpixel によるセグメンテーションを行ったところ湖沼が凍結していないときは矩形での協会分割が行われるのに対し、湖沼が凍結しているときは氷縁に沿って境界分割された。

こうした画像特徴を利用し、さらにタイムラプス画像を動画化して湖水変動の確認もおこない湖面凍結の日数の変化を調べた。集計を行ったところ 2010 年代前半でも冬季(10~12月)の凍結日数が 2010 年代後半では 40 日以上あったのに対し 20 日程度と減少していることがわかった。

冬季期間の湖面は 3 つの期間に分類される (i). 初頭の時期。ハスなどの植生の一部が湖面に残る。凍結はほとんど行わない。(ii). 湖面凍結が起り、時に数日以上凍結が起きる。湖面の植生はなくなっている。(iii). 晩冬の時期となると湖面の凍結はおこらず、湖面に植生が確認できない。

以前は凍結後に数日以上継続して凍結していることが多かったが近年は凍結したその日や翌日には融解していることも見受けられる。画像解析からは凍結が起りやすい領域も確認された。

4 UAV 撮影画像解析による植生分類

UAV による分光計測画像から植生判別モデルを作成することで、植生分布をマッピングする。各バンドの画像情報を用い画像の選択領域内について特徴量を説明変数として機械学習を行う。計測画像群のマルチスペクトル情報からイネ科(ヨシ、マコモなど)と浮葉植物(ハス、アサザ、ガガブタ、ヒシなど)の植生判別を行うための判別モデルの作成を行った。

計測を行った測定日の日別で植物種ごとに 1 シーンを選択し、分光情報を利用した特徴量を判別モデル学習用のデータセットとした。機械学習の手法はランダムフォレストである。モデルの作成

に使用したデータとは別のシーンから作成した検証用データセットを用いて判別モデルの精度検証を行った。

精度検証の結果イネ科植物と浮葉植物の 2 群判別の正答率が 90%以上となり、2 群判別が十分可能であると言える。各植物の分類を行う 6 群判別もトップ 1 分類結果が 60%となり詳細分類についてもある程度の分類が可能であると考えられるが、イネ科植生間の分類に困難があった。

5 総括

宮城県伊豆沼において UAV やリモートカメラ画像等を用いた湖面環境情報の取得を行った、機械学習や画像処理などのデータ処理によるタイムラプスカメラ画像解析から冬季凍結期間の定量化を行いその減少を示した。分光画像情報を利用した UAV による植生撮影画像の機械学習により夏季の植生分類モデルを作成した。

今後は冬季の湖面環境の分類の自動化のための統計・機械学習解析を行う。植生は成長段階により期間毎に植生の情報が変動することも考えられるためそれらを考慮した分類を検証することなどの課題があげられる。

伊豆沼の湖面環境の画像データは 2002 年から一貫して計測される長期的なデータとなっており、年代ごとの湖水変化を示すことが可能となった。過去の画像には大型台風による水位の変動なども記録されている。自然公園の管理や防災データ取得などのため継続的なデータの取得と保全が必要であり、そうしたデータの解析により新しい知見を得ることが可能になる。

謝辞：本研究の一部はスーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性奨励枠)によるものである。伊豆沼における遠隔カメラ画像は自然環境局環境省生物多様性センターから取得した。

メッシュ・チャンネル乱流の超高解像度 DNS

横嶋 哲*，菅野 雅也†

*静岡大学 学術院工学領域 数理システム工学系列

†静岡大学 大学院総合科学技術研究科 工学専攻 数理システム工学コース

1 はじめに

透過性を有する境界は、浸透床や樹林帯に代表されるように、特に自然界に遍在するものの、その影響の理解は不透過な境界と比べて不十分である。著者らはこれまで、完全発達したチャンネル乱流の境界にシンプルな透過性を付加した系を対象とした数値実験を行い、その抵抗特性や乱流変調について検討してきた [1, 2, 3]。特に文献 [2, 3] では、チャンネル乱流の上下の壁を、メッシュ状の透過性境界で置き換え、境界法線方向にも周期性を課した系（以下、“メッシュ・チャンネル流”と呼称）を対象として、その空隙特性を系統的に変化させた数値実験を行ってきた。

本報は、文献 [3] で報告した数値実験結果に関して、特に空間解像度依存性について検討を行うものである。

2 対象流れ，数値計算法，先行研究で得られた主要な知見と本研究の位置付け

本章では、本研究の先行研究にあたる文献 [2, 3] の概略と、それらに対する本研究の位置付けを示す。

2.1 対象流れ，数値計算法，先行研究で得られた主要な知見

検討対象であるメッシュ・チャンネル流の概略を図 1 に示す。(a) は実際に検討対象とした系の概略を表す。(a) は、(b) のように多数のメッシュ状平板境界が等間隔に設置された系の幾何学的最小ユニット (1

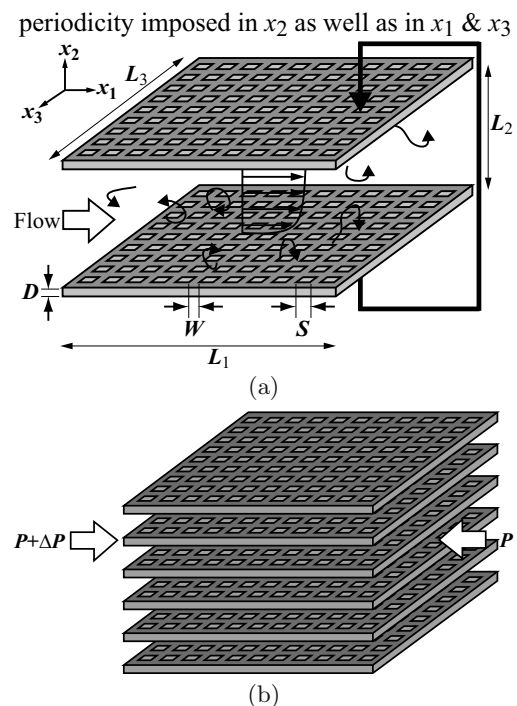


図 1: (a) メッシュ・チャンネル乱流の概略。全ての方向に周期境界条件を課しており、上下に配置されたメッシュ状境界は同一境界を指す。(b) (a) はこのように多数のメッシュ状平板境界が等間隔に並んだ系の幾何学的最小ユニット（すなわち 1 層分）を計算対象としたとも解釈できる。

層分）と解釈できる。(a) では全ての方向にそれぞれ周期長 L_1 , L_2 , L_3 で周期境界条件を課しており、(a) の上下 2 枚のメッシュ状平板は実際には同一境界を指す。平板間距離を $2\delta (= L_2)$ として、主流方向に $L_1 = 3.84\delta$ ，横断方向に $L_3 = 1.92\delta$ の計算領域を確保した。メッシュ状境界の形状はメッシュ素材幅 W ，空隙サイズ S （空隙は x_1 - x_3 平板面内で正方形と仮定），平板厚 D で規定される。本研究では平板面上

表 1: 文献 [3] で検討対象としたメッシュ状平板境界の幾何学特性と摩擦レイノルズ数 Re_τ の一覧. M00-00 は空隙サイズ $S = 0$, すなわち古典的な不透過チャンネル乱流を表す.

Case	ϕ	S/δ	W/δ	S^+	W^+	$S/\Delta x$	$W/\Delta x$	$L_1/(S+W)$	$L_3/(S+W)$	Re_τ
M00-00	0	0	∞	0	∞	0	∞	0	0	152.2
M25-02	0.25	0.02	0.02	3.0	3.0	3	3	96	48	152.4
M25-04	0.25	0.04	0.04	7.7	7.7	6	6	48	24	192.0
M25-08	0.25	0.08	0.08	16.2	16.2	12	12	24	12	202.1
M25-16	0.25	0.16	0.16	28.8	28.8	24	24	12	6	179.8
M25-24	0.25	0.24	0.24	40.6	40.6	36	36	8	4	169.1
M39-05	0.39	0.03	0.02	8.9	5.3	5	3	72	36	266.9
M39-10	0.39	0.07	0.04	21.8	13.1	10	6	36	18	327.7
M39-15	0.39	0.10	0.06	28.4	17.1	15	9	24	12	284.3
M39-20	0.39	0.13	0.08	33.5	20.1	20	12	18	9	251.4
M44-05	0.44	0.05	0.03	19.6	9.8	8	4	48	24	366.7
M44-11	0.44	0.11	0.05	33.0	16.5	16	8	24	12	309.7
M44-21	0.44	0.21	0.11	47.9	23.9	32	16	12	6	224.3
M44-32	0.44	0.32	0.16	61.7	30.9	48	24	8	4	192.9
M56-06	0.56	0.06	0.02	25.1	8.4	9	3	48	24	418.8
M56-12	0.56	0.12	0.04	39.2	13.1	18	6	24	12	326.5
M56-24	0.56	0.24	0.08	59.0	19.7	36	12	12	6	245.7
M56-36	0.56	0.36	0.12	76.5	25.5	54	18	8	4	212.6
M69-10	0.69	0.10	0.02	39.2	7.8	15	3	32	16	392.1
M69-20	0.69	0.20	0.04	56.6	11.3	30	6	16	8	282.8
M77-14	0.77	0.14	0.02	49.2	7.0	21	3	24	12	351.3
M77-28	0.77	0.28	0.04	72.2	10.3	42	6	12	6	257.8

を空隙が占める割合を表す空隙率 $\phi \equiv S^2/(S+W)^2$ と空隙サイズ S をパラメータとして境界の空隙特性をコントロールした. これとは独立に厚み D によって境界粗度の影響を制御できるものの, 本研究では境界の透過性の影響の理解に議論を集中するため, $D = 0$ とした.

文献 [2] では, 図 1(a) の直方体領域 ($3.84\delta \times 2\delta \times 1.92\delta$) を $288 \times 150 \times 144$ の立方体計算セルで離散化した. 断面平均流速 U_b とチャンネル半幅 δ に基づくバルク・レイノルズ数 $Re_b = 2300 \cdot$ 摩擦レイノルズ数 $Re_\tau = 150$ の通常のチャンネル乱流 (粘着・不透過な滑面平板境界で構成される) を比較検討のベースとして, 全ての検討ケースで流れの駆動力を同一の値に固定した (すなわち, Re_τ は全ケースで 150). この場合, 計算格子幅は全ての方向に一樣に 2 粘性長となる.

文献 [3] では, 文献 [2] と比べて空間解像度を全方向に 2 倍 (すなわち $576 \times 300 \times 288$ の立方体計算セルで離散化, 時間分解能も 2 倍に) とした. 文献 [3] においても, 比較検討のベースとなる流れは $Re_b = 2300 \cdot Re_\tau = 150$ の通常のチャンネル乱流であるものの, ここでは全ての検討ケースで $Re_b = 2300$ を瞬時レベルで一定に保つように, 主流方向の流れ駆動力を制御した. この場合, 計算格子幅は境界が不透過な場合 (表 1 中のケース M00-00) には全ての方向に一樣に 1 粘性長となるものの, 透過性を付したケースにおける壁座標での計算格子解像度は計算結果に依存する (後述の表 1 中の Re_τ).

メッシュ状平板境界が流れに及ぼす影響は Uhlmann の提案する埋め込み境界法 [4] を用いて表現した. 数値計算法の詳細については文献 [5, 6] を参照されたい.

文献 [3] で検討したメッシュ境界の幾何学特性を

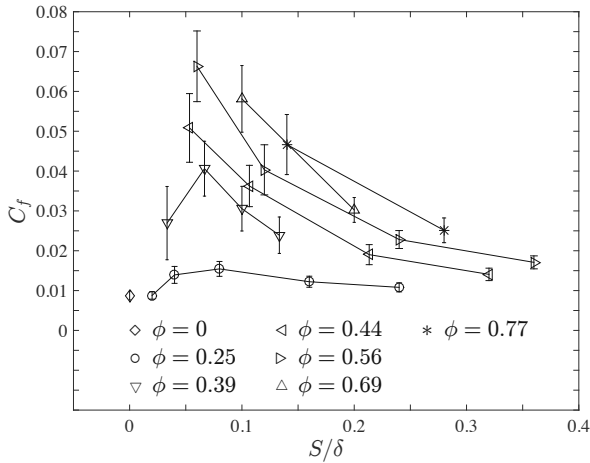


図 2: 摩擦係数 C_f の時間平均値 (プロット) と標準偏差 (エラーバー) の境界幾何学特性依存性. ただし標準偏差は 2 倍に拡大して表示.

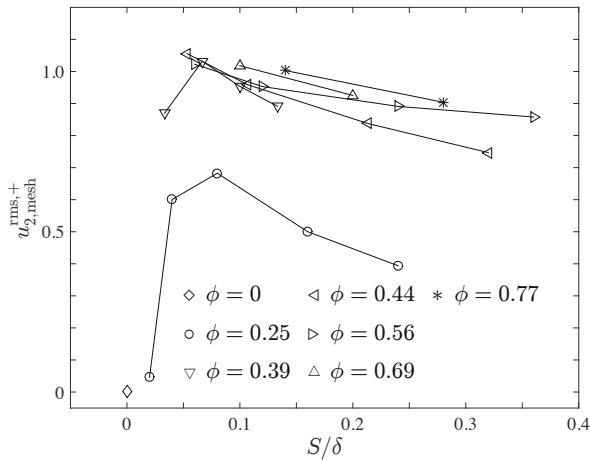


図 3: メッシュ状境界空隙での吹き出し/吸い込み強度 (メッシュ状平板境界上での境界法線方向乱れ強度) $u_{2,mesh}^{rms}$ の境界幾何学特性依存性.

表 1 にまとめた. 空隙率 ϕ を 6 段階 (0.25, 0.39, 0.44, 0.56, 0.69, 0.77) に変化させ, それぞれの空隙率に対してメッシュ間隔 S (空隙サイズ) を系統的に変化させ, 計 21 種類のメッシュ状境界を対象とした. 文献 [3] では空間解像度を上げたことによって, 文献 [2] (空隙率は 0.25, 0.44, 0.56 の 3 段階, 計 9 種類) と比べて, 境界の幾何学特性をより広範に変化させることが可能となった. M00-00 は $S = 0$ の古典的チャンネル乱流を意味する.

図 2 は, 各ケースで得られた摩擦係数 $C_f \equiv 2u_\tau^2/U_b^2$ (u_τ は壁面摩擦速度を表す) の時間平均値と標準偏差のメッシュ幾何学特性に対する依存性を表す. 本数値実験の M00-00 (古典的チャンネル乱流, 図 2 で

は $\phi = 0$ と表記) から求めた摩擦係数の時間平均値は $\bar{C}_f = 8.61 \times 10^{-3}$ であり, Iwamoto *et al.*[7] によるスペクトル法に基づくチャンネル乱流の DNS 結果 ($Re_\tau = 150$) である $\bar{C}_f = 8.76 \times 10^{-3}$ と誤差 1% 程度で一致した. 図 2 から, 流れ抵抗と境界形状の関係について, 以下の 2 つの傾向が読み取れる. (i) 空隙率 ϕ が高いほど抵抗は増加する. (ii) ϕ の値が同じであれば, 空隙サイズ S が小さいほど抵抗が強まる. しかし, $\phi = 0.25$ と $\phi = 0.39$ の場合に上記の傾向から乖離するデータも見られた. すなわち, $\phi = 0.25$ の場合には $S/\delta = 0.08$, $\phi = 0.39$ の場合には $S/\delta = 0.07$ の場合に抵抗が最も強く, S をさらに小さくすると, 双方のケースともに古典的チャンネル乱流 ($\phi = 0$) のデータに帰着する傾向が認められる.

次に, 各ケースで求めた乱れ強度の境界法線方向成分 u_2^{rms} の境界上での値 (境界空隙での流体の吹き出し/吸い込みの強度を表現) のメッシュ幾何学特性に対する依存性を図 3 に示す. 図 2 と傾向は一致しており, すなわち, メッシュ空隙での吹き出し/吸い込みが強まると主流の疎通能力が低下することが読み取れる. また, 図 2 で空隙率 ϕ を固定した場合に C_f がピーク値をとる空隙サイズ, すなわち $\phi = 0.25$ における $S = 0.08\delta$ および $\phi = 0.39$ における $S = 0.07\delta$ は, これ以上小さな空隙は流体が自由に往来できない臨界値を表すと考えられ, この臨界空隙サイズが何で規定されるかは非常に興味深く, 今後の解明が期待される.

2.2 本研究の位置付け

表 1 から読み取れるように, 空隙率 ϕ をある値に固定した場合に最も空隙サイズ S が小さいケース (すなわち, M25-02, M39-05, M44-05, M56-06, M69-10, M77-14) においては, 空隙サイズ S またはメッシュ素材幅 W は高々計算セル 3 または 4 つ分に過ぎず (表 1 の $S/\Delta x, W/\Delta x$ がそれらに対応), 境界近傍では流速は遅いことを考慮しても, この空間分解能によるメッシュ空隙内や素材幅周りの流動の再現性には懸念が残る. この点について検討するため, 本研究では特に, 最も摩擦係数 C_f が大きな M56-06, および最も摩擦係数が小さい (古典的チャンネル乱流に最も近い) M25-02 の 2 ケースについて, 時空間解像度を文献 [3] に対してさらに 2 倍 (すなわち,

図 1(a) の直方体領域を $1152 \times 600 \times 576$ の立方体計算セルで離散化，時間分解能も 2 倍に) とした数値実験を行う。

なお， $3.84\delta \times 2\delta \times 1.92\delta$ の計算領域は，通常のチャンネル乱流（境界が不透過）においてはいわゆるミニマル・ユニット [9] に近い条件ではあるものの，表 1 中の一部のケースを対象として，主流方向の計算領域を 2 倍 ($L_1 = 7.68\delta$)，あるいは横断方向の計算領域を 2 倍 ($L_3 = 3.84\delta$) とした計算を実施し，これら水平方向の計算領域サイズは 2.1 節の議論にあまり影響しないことを確認した [8]。また，境界法線 (x_2) 方向に対して，図 1(b) の幾何学的最小ユニット (1 層分) を対象として周期境界条件を課す (図 1(a) ことについても，2 層分に対して周期境界条件を課した計算を表 1 中の一部のケースを対象として実施し，2.1 節の議論にほとんど影響しないことを確認済みである [8])。

3 数値実験結果と考察

図 4 および図 5 はそれぞれ図 2 および図 3 に対応するもので，今回新たに $1152 \times 600 \times 576$ の計算格子を用いて数値実験を行った M56-06 と M25-02 の 2 ケースについて，文献 [3] の計算結果と比較を行ったものである。空間解像度を上げた結果，M56-06 では摩擦抵抗係数 C_f が低下，M25-02 ではやや増加した。また，M56-06 では吹き出し/吸い込み強度 u_2^{rms} は低下，M25-02 では増加した。これらの結果は，文献 [3] の空間解像度では，少なくとも今回検討対象とした 2 ケースに関して，定量的な議論が可能なデータは得られていないことを意味する。他方で，文献 [3] および文献 [2] で得られた，摩擦係数 C_f とメッシュ状境界空隙での吹き出し/吸い込み強度 u_2^{rms} の相関関係，すなわち，メッシュ空隙での吹き出し/吸い込みが強まると主流の疎通能力が低下する，という知見は本数値実験結果を加えてもなお成立しており，図 4 から見出された 2 つの傾向 ((i) 空隙率 ϕ が高いほど抵抗は増加する。(ii) ϕ の値が同じであれば，空隙サイズ S が小さいほど抵抗が強まる。) および， $S/\delta \approx 0.07 - 0.08$ 近辺に，流体が自由に行き来が可能な空隙サイズの臨界値が存在するという知見はそのまま成り立つことも考えられ，今後の検討課題である。

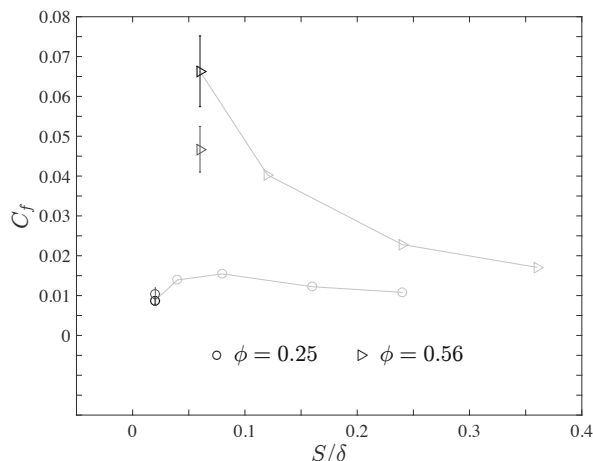


図 4: 摩擦係数 C_f の境界幾何学特性依存性: 赤， $576 \times 300 \times 288$ で得られた結果 (文献 [3])；黒， $1152 \times 600 \times 576$ で得られた結果 (本研究)。

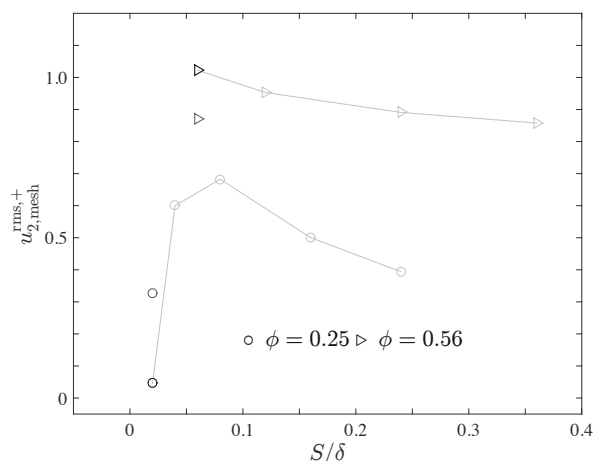


図 5: メッシュ状境界空隙での吹き出し/吸い込み強度 u_2^{rms} の乱れ強度の境界幾何学特性依存性: 赤， $576 \times 300 \times 288$ で得られた結果 (文献 [3])；黒， $1152 \times 600 \times 576$ で得られた結果 (本研究)。

参考文献

- [1] Yokojima, S., Effects of wall permeability on wall-bounded turbulent flows, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol.80, 033401, (2011).
- [2] 横嶋 哲, 乱流中の透過性境界の抵抗特性, *ながれ*, Vol.35, No.4, pp.307-312, (2016).
- [3] 菅野 雅也, 横嶋 哲, 透過性メッシュ状境界を用いたチャンネル乱流の DNS, 日本機械学会 第 97 期流体工学部門講演会 講演論文集, OS 8-06, (2019).
- [4] Uhlmann, M., An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows, *J. Comput. Phys.*, Vol.209, pp.448-476, (2005).

- [5] 横嶋 哲, 「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」に関するプログラム高度化, 京都大学 学術情報メディアセンター 全国共同利用版 広報, Vol.14, No.2, pp.48-51, (2016).
- [6] 横嶋 哲, 「メッシュ状透過性平行平板間乱流の直接数値シミュレーション」に関する大規模数値計算, 京都大学 学術情報メディアセンター 全国共同利用版 広報, Vol.14, No.2, pp.60-63, (2016).
- [7] Iwamoto, K., Suzuki, Y. & Kasagi, N., Reynolds number effect on wall turbulence: toward effective feedback control, *Int. J. Heat Fluid Flow*, Vol.23, pp.678-689, (2002).
- [8] 菅野 雅也, 横嶋 哲, メッシュ状透過性境界を有するチャンネル乱流 DNS における計算領域サイズと空間解像度依存性, 日本機械学会 東海支部 第 69 期総会・講演会, (2020).
- [9] Jimenez, J. & Moin, P., The minimal flow unit in near-wall turbulence, *J. Fluid Mech.*, Vol.225, pp.213-240, (1991).

水・熱移動を考慮した3次元剛体バネモデルによるコンクリート構造物の長期変形・ひび割れ進展挙動および動的破壊挙動の高解像度シミュレーション

山本 佳士

法政大学 デザイン工学部 都市環境デザイン工学科

1 はじめに

近年、インフラ構造物の適切な維持管理、あるいは長寿命化という観点から、様々な要因により劣化したコンクリート構造物の残存性能評価が重要な課題になってきている。特に、原子力発電施設等の重要構造物では、精度の高い数値解析モデルにより長期挙動予測および性能評価を行うことが望まれている。このような背景から、近年、コンクリート構造物の各種応答予測を対象としたベンチマーク実験およびブラインド解析が国内外で精力的に実施されている。例えば、フランス電力 (EDF) は、実規模の原子炉格納容器のモックアップを製作し、施工段階から経時変形・ひび割れ進展挙動、透気性 (遮蔽性) を計測するとともに、それらを対象としたオープン参加のブラインド解析を実施し、現在の数値解析技術の予測性能を評価する試みを行っている (VeRCoRs プロジェクト¹⁾)。なお、同プロジェクトでは、最終的にシビアアクシデント下における予測精度の確認を行うために、前述の実規模モックアップに対して火災を想定した温度変化作用下の応答を計測する予定になっている。

コンクリート構造物の代表的な数値解析手法としては非線形 FEM が挙げられ、これまでに多くの研究開発と適用が行われてきた。コンクリート材料・構造の力学挙動の特徴としては、ひび割れ、ひび割れ面のせん断伝達、鉄筋等、異材料間の付着すべり等の不連続挙動が挙げられる。連続体力学を基本とした FEM で上記のような不連続挙動を表現するためには工夫が必要であり、現在では、複数のひび割れおよび鉄筋を含んだ鉄筋コンクリート (RC) 要素の力学応答を空間平均化して評価する、分散ひび割れ・分散鉄筋モデルの適用が主流である。この

手法は、地震動等の作用を受ける RC 構造物の耐力やマクロな変形性能を精度良く予測することには成功しているものの、前述のように複数のひび割れを平均化して扱っているため、個々のひび割れの位置、幅、角度等の詳細情報を評価することができない。したがって、様々な要因で発生、進展するひび割れに起因して局所的に変化する透気性、透水性を評価することは難しい。その他、高解像度メッシュを用いた手法²⁾や、X-FEM の適用³⁾などにより、FEM を用いて RC 部材の不連続挙動を直接扱う手法が提案されているものの、まだ検討段階である。

一方、著者らは、現在の数値解析技術では評価が難しい、前述のひび割れ詳細情報および RC 構造物の破壊・倒壊挙動を精度良く再現することを目的として、剛体バネモデル⁴⁾ (以下、RBSM) を基本とした解析手法・モデルの開発を行ってきた。RBSM は対象を剛体要素と要素間のバネで離散化する手法であり、開発当初は規則配列要素が用いられていたが、Voronoi 分割を用いたランダム形状要素 (図-1) の適用⁵⁾により、あらかじめ破壊面を想定する必要がなくなり、コンクリートのひび割れ進展予測手法として有用なツールになってきている。著者らは、

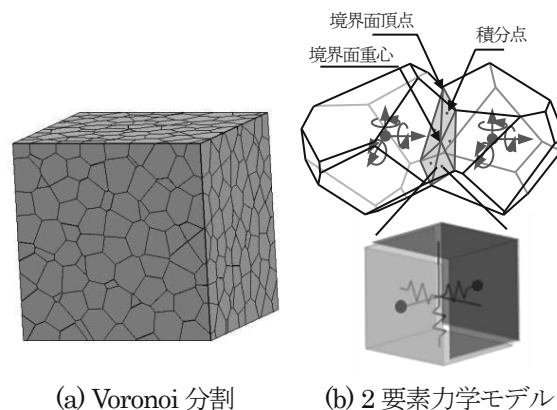


図-1 RBSM の概要

これまでに各種応力下におけるコンクリートのひび割れ詳細情報、ひずみ軟化・局所化挙動等を定量的に再現できる構成モデルの開発、付着すべり挙動を考慮した鉄筋モデルの導入、動的解析への拡張等を行ってきた⁶⁾⁷⁾⁸⁾。さらに、水・熱移動解析と前述のRBSMとを連成させた手法を開発し、コンクリート構造物の、施工段階から供用期間中の任意の時点までの、1)水和反応、温度応力、乾燥収縮、クリープ等に伴う変形・ひび割れ進展性状、および任意の時点における2)透気性(遮蔽性能)、3)耐震性能、4)耐火性能を、再現可能な解析システムを開発している⁹⁾¹⁰⁾¹¹⁾¹²⁾。なお、RBSMを用いて、コンクリートの軟化・変形局所化挙動を再現するために、数mmから数10mmスケールのメッシュを使用する必要がある。すなわち、手法の性能を維持した上で実規模の構造物の性能評価、あるいは前述のベンチマーク実験(数m~数10mスケール)の数値解析を効率的に行うためには、解析プログラムの高速化が必須である。このような背景から著者は本プログラム高度化事業に応募した。以下に、提案する解析手法の概要とその適用例、プログラムの高度化の成果、および今後の課題について述べる。

2 解析手法の概要

RBSMは前述のように対象を剛体要素と要素間のバネで離散化する手法である。剛体要素は要素内の自由度評価点に、並進3方向、回転3方向の自由度を持ち、剛体変位場を仮定して2つの要素が共有する境界面上の任意点のバネのひずみを評価する(図-1)。バネに引張軟化、すべり軟化等の非線形構成モデルを適用して、仮想仕事の原理を用いて増分形の線形化剛性方程式を導出し、ニュートンラプソン法を用いて非線形問題を解いている。定式化および提案する構成モデル、材料パラメータの決定方法等の詳細は参考文献6)を参照いただきたい。前述のように数mmから数10mmスケールのメッシュを使用し、提案する構成モデルと材料パラメータを

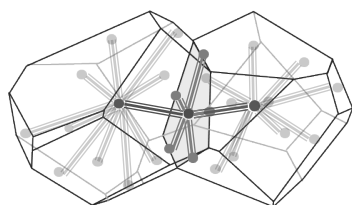


図-2 Voronoi 分割上の FEM 要素配置

用いることで、各種応力下におけるコンクリートのひずみ軟化・局所化挙動を再現することができる。鉄筋は梁要素でモデル化し、鉄筋軸方向および鉄筋軸直交方向のバネからなるリンク要素を介してRBSM要素に結合している⁷⁾。鉄筋軸方向のバネに非線形性を導入することで鉄筋-コンクリート間の付着すべり挙動を再現することができる。

水分移動および熱移動は、拡散方程式を離散化した2節点1次元FEM要素により表現する。同要素は、Voronoi分割の母点およびVoronoi面重心、Voronoi辺上の点を結ぶネットワーク上に配置される(図-2)。RBSMでは、ひび割れの幅を要素間の相対変位を用いて定義しているが、このひび割れ幅の拡大に応じて、水分・熱移動を表現する1次元FEM要素の面積を増加させることにより、ひび割れの増加に応じて、局所的かつ不連続に見かけの物質拡散係数が変化する挙動を表現できる。

本解析プログラムでは、時間ステップ毎に、まず、水分移動および熱移動を解き、それぞれの解析から各要素の水分量の変化(すなわち乾燥の進展)および温度の変化を算定する。水分の変化から乾燥収縮ひずみを、温度変化から熱膨張(収縮)ひずみを評価し、それらと等価なバネひずみを初期ひずみとしてRBSMに与えて全体の変形挙動を解いている。時間ステップ毎に、上記の計算を繰り返していくことで、弱連成の枠組みで簡単に温度変化や乾燥収縮に伴う変形・ひび割れ進展解析を行っている。また、任意の時刻から、単調載荷解析あるいは地震応答解析を実施することも可能である。

3 解析手法の適用例

前章で示したように、本解析プログラムは、地震・衝撃作用下の動的応答解析や水分・熱移動に伴う乾燥収縮、高温作用下の応答、各種劣化進展、長期変形・ひび割れ進展解析など、広範な問題の数値解析が可能である。本章では本解析プログラムの適用例の概略を示す。

3.1 地震・衝撃・火災作用を受けるコンクリート構造物の応答シミュレーション

図-3および図-4に、正負交番繰返し载荷を受ける

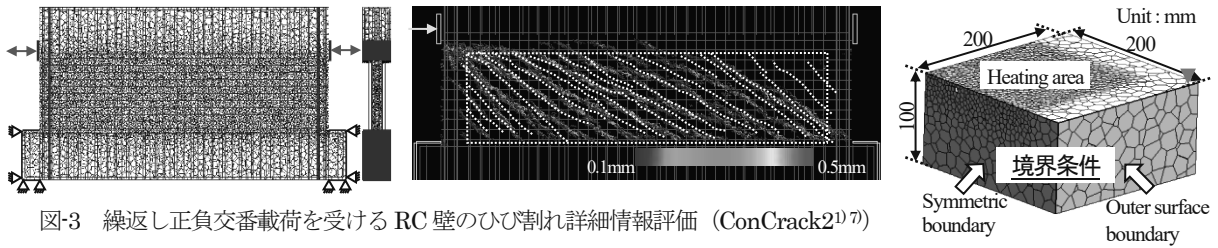


図-3 繰返し正負交番荷重を受ける RC 壁のひび割れ詳細情報評価 (ConCrack2¹⁾ 7)

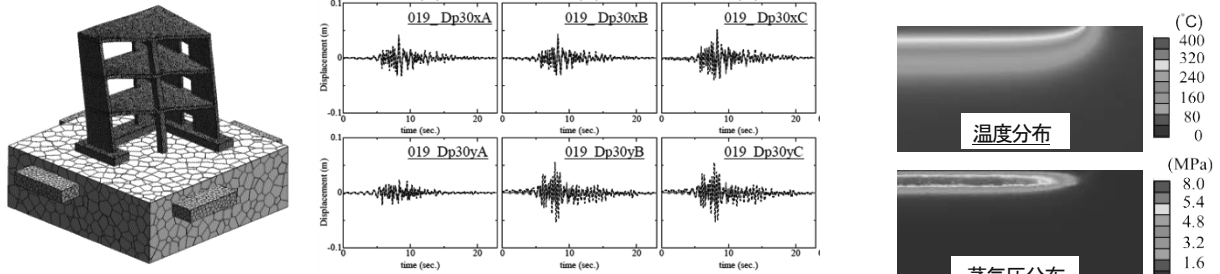


図-4 RC 建屋の模型供試体 (1/4 スケール) の振動実験の解析 (SMART2013¹³⁾)

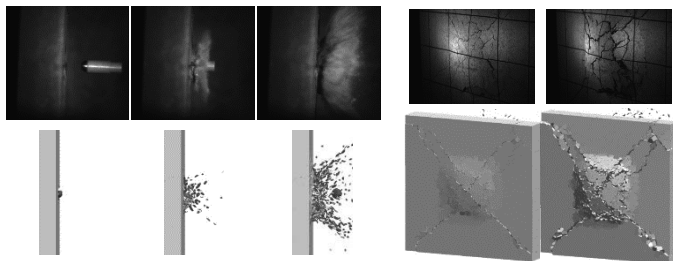


図-5 高速衝突を受ける RC 板の局部破壊解析⁸⁾

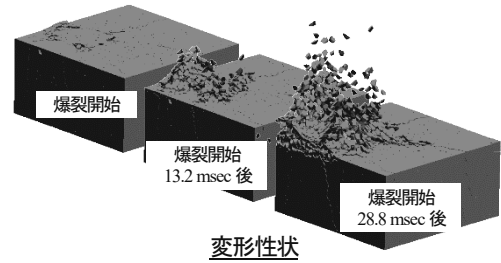


図-6 高温荷重を受けるコンクリートの爆裂挙動シミュレーション¹²⁾

RC 壁の応答シミュレーション、および RC 建屋の地震応答シミュレーションの例を示す。本解析は、ひび割れ詳細情報、3次元地震応答等に対する予測技術の現状を把握することを目的として実施された、ベンチマーク解析 (ConCrack2¹⁾ および SMART2013¹³⁾ で実施したものである。ベンチマーク解析の結果およびその評価は、参考文献 1)7) において紹介されているが、提案手法は、マクロな荷重変位応答に加え、ひび割れの幅、角度、間隔などのひび割れ詳細情報、破壊モードを良く再現していた。図-5 には、剛飛翔体の高速衝突(飛翔体: 50g の鋼球、衝突速度: 300~500m/s)を受ける RC 板の解析の例⁸⁾ を示す。参考文献に示すように提案モデルは、破壊限界速度、破壊モードに加え、高速カメラによって観察された、ひび割れ発生タイミング、ひび割れの進展速度までを再現している。図-6 には、コンクリート供試体表面に高温を与えた解析の一例を示す¹²⁾。解析では、蒸気圧および熱の移動をシミュレートする 2 層の FEM 要素と RBSM を連成させている。高温荷重により、表面からコンクリートの温度が上昇し、さらに温度上昇に応じてコンクリート

内の蒸気圧が急激に増加し、蒸気圧の作用を受けてコンクリートが爆裂している。

3.2 コンクリート構造物の長期変形・劣化挙動シミュレーション

図-7 に乾燥収縮によりひび割れが生じた RC 壁部材の正負交番荷重実験の解析結果を示す⁹⁾。解析は、乾燥収縮ひび割れが生じた RC 壁の剛性を過小評価する傾向にあるものの、乾燥収縮ひび割れの有無によって変化する荷重時のひび割れ分散性状や、破壊モード、最大荷重を妥当に再現していた。図-8 にはアルカリ骨材反応 (ASR) により劣化した RC 壁部材の正負交番荷重実験の解析結果を示す¹⁰⁾。なお、本解析は、経済協力開発機構 / 原子力機関 (OECD/NEA) の原子力施設安全委員会 (CSNI) の下で実施されたベンチマーク解析 (ASCET phase II) で実施したものである。提案モデルは、ASR 劣化に伴うひび割れが、荷重時に発生・進展するひび割れの分散性や角度に与える影響を評価し、結果として健全供試体と ASR 劣化供試体間で、終局変位、破壊モード、局所化位置が変化する様子を参加チー

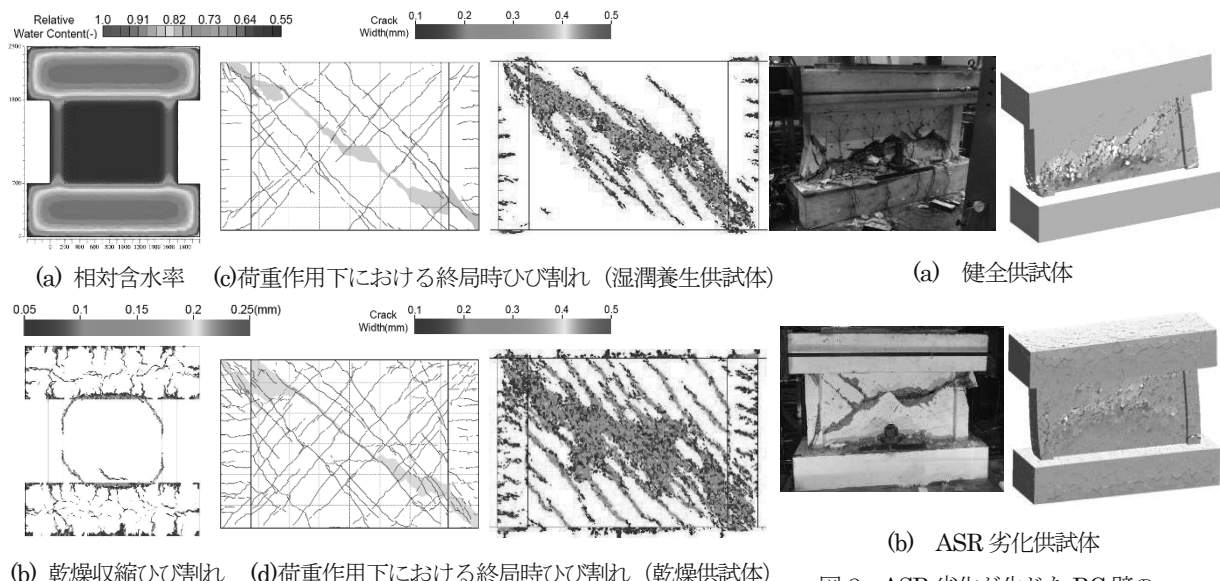


図-7 乾燥収縮によりひび割れが生じた RC 壁の正負交番載荷解析⁹⁾ 図-8 ASR 劣化が生じた RC 壁の正負交番載荷解析¹⁰⁾ (ASCET phase-II)

ムの中で唯一再現していた。

4 プログラム高度化の成果と今後の課題

本プログラム高度化事業による、解析プログラムの計算速度向上効果を評価するために、図-7に示したシミュレーションを、改善前のプログラムおよび改善後のプログラムを使用して実施した。なお、プログラム改善のための主な実装の内容は、プログラム内のスレッド並列化領域の拡大である。RBSMの要素数を約 10000 および約 30000 とした、2種類の計算規模で検討を行ったところ、いずれの計算規模でも計算速度は約 2 倍程度向上した。

解析プログラムの改善により、ここで検討した範囲内では約 2 倍程度の速度の向上が確認されたが、前述のような実規模構造レベルのシミュレーションのためにはさらなる高速化、効率化が必要である。今後は、詳細なひび割れ・損傷情報を評価したい領域では RBSM を用い、その他の領域では FEM を用いて粗い解像度で効率的に解析を行う、RBSM と FEM とを結合した解析手法の開発とその高度化を行っていく予定である。

参考文献

- 1) J. Mazars et al. : Behavior and Assessment of Massive Structures : An Overview of the French Research Programs CEOS.fr and VeRCoRs, Proceeding of FraMCoS-9, (CD-ROM), 2016.
- 2) M. Kurumatani et al. : Damage model for simulating

- chloride concentration in reinforced concrete with internal cracks, Cement and Concrete Composites, Vol.84, pp.62-73, 2017.
- 3) C. Chung et al. : Diagonal Crack Propagation Analysis of Reinforced Concrete Beams Using XFEM, Proceeding of ASEM 17, 2017.
- 4) Kawai, T. : New Element Models in Discrete Structure Analysis, 日本船舶学会論文集, 第 141 号, 1977.
- 5) 竹内則雄ら: ポロノイ分割を用いた RBSM による無筋コンクリート梁の寸法効果解析, 構造工学論文集, 40A, 519-527, 1994.
- 6) 山本佳士ら: 3次元剛体バネモデルによるコンクリート供試体の圧縮破壊解析, 土木学会論文集 E, Vol.64 No. 4, pp. 612-630, 2008.
- 7) Y. Yamamoto et al. : Crack propagation analysis of reinforced concrete wall under cyclic loading using RBSM, European Journal of Environmental and Civil Engineering, 18(7), 780-792, 2014.
- 8) 山本佳士ら: RBSM による高速衝突を受けるコンクリート板の局部破壊挙動評価に関する基礎的研究, 構造工学論文集 Vol.61A, 2015.
- 9) H. Sasano et al. : Impact of Drying on Structural Performance of Reinforced Concrete Shear Walls, Journal of Advanced Concrete Technology, Vol.16, No.5, pp.210-232, 2018.
- 10) 杉本啓太: ひび割れ詳細情報の再現に着目した ASR-RBSM の開発および ASR 劣化した RC 部材の破壊機構評価, 名古屋大学修士論文, 2018.
- 11) P. SRIMOOK : Development of Simulation Method for Air Leakage Through Concrete Containment Structure under Service and Accidental Condition using RBSM 名古屋大学修士論文, 2020.
- 12) H. Nakamura et al. : Simulation about Effect on Explosion Spalling of Thermal Stress and Vapor Pressure, 2nd International Workshop on Concrete Spalling due to Fire Exposure, pp.213-219, 2011.
- 13) B. Richard et al. : SMART 2013 Lessons learned from the international benchmark about the seismic margin assessment of nuclear RC buildings, Engineering Structures, 161, 207-222, 2018.

水を推進剤とした超小型マイクロ波放電式プラズマ源を対象とした

3次元プラズマ粒子計算

鷹尾 祥典*

*横浜国立大学 大学院工学研究院 システムの創生部門

1 はじめに

近年、大学や中小企業など比較的小規模な組織でも運用が可能な超小型衛星の研究開発が盛んに行われている。超小型衛星は短期間・低コストで製作できるため、教育や技術実証、商用利用など幅広いミッションに用いられている。既に年 300 基が打ち上げられ、今後もさらに伸びると予測されている [1]。

これまでは技術的な制約から推進機を搭載しない小型衛星がほとんどであったが、最近では小型推進機の開発も進み、搭載する例が増えてきている。例えば、東京大学と NExt generation Space system Technology Research Association (NESTRA) によって開発された 50 kg 級の超小型衛星 HODOYOSHI-4 には小型イオン推進システム (MIPS: Miniature Ion Propulsion System) が搭載され、2014年10月に宇宙空間での運用に成功した。この MIPS にはイオン源と中和器にマイクロ波アンテナとリング状磁石を用いた ECR (Electron Cyclotron Resonance) 放電を採用している [2]。

MIPS は従来から利用されている Xe ガスを推進剤に利用する都合、これ以上の小型が難しい一方、今でも大半の小型衛星は 10 kg 以下であり、更なる小型化が求められている。そこで、高圧ガス系が不要な液体推進剤として、安価、かつ、完全無毒で安全な水を新たに推進剤として利用することで推進システムの小型化を目指している。

一方、水分子は Xe と比較して放電を維持することが難しく、特にイオンビームを電氣的に中和する中和器には Xe より多くの流量を投入する必

要があり、性能低下を招いている。この性能改善のため中和器から効率的に電子を引き出すことが必要であるが、小さい放電室のため実験だけですべての現象を把握することは難しい。そのため、数値計算を用いたプラズマ放電ならびに電子引き出し機構の解析が求められている。

これまでに、プラズマ生成から電子引き出しまでを統一的に解析できる 3次元プラズマ粒子計算モデルを構築し [3]、まずは Xe を対象に中和器からの電子引き出し機構の解析を行ってきた [4, 5]。当時、1つの条件当たり十分な時間平均を取って統計的に信頼できる解析結果を得るためには、最低でも 1 ヶ月以上 (～数ヶ月) 計算を続ける必要があり、平成 29 年度プログラム高度化支援事業第 2 期を利用するに至った。

前回の高度化支援により、システム B において、72 スレッドで 23 倍のスケーラビリティを得られた。今回、分子性の水を利用することで、考慮する反応および粒子種が大幅に増え [6]、また、より細かい現象を把握するためセル幅を半減させた都合、更なる高度化が必要となった。

2 数値計算手法

推進剤が Xe から水に変更となっても、計算対象の構造は同じである。また、解析手法についても同様であるが、以下に簡単に示す。

図 1 に本研究が対象とする小型マイクロ波放電式中和器の計算領域を示す [7]。金属面とプラズマ源の境界においてその中心を原点とする直交座標系を設定した。プラズマ源を $20 \times 20 \times 4 \text{ mm}^3$ の

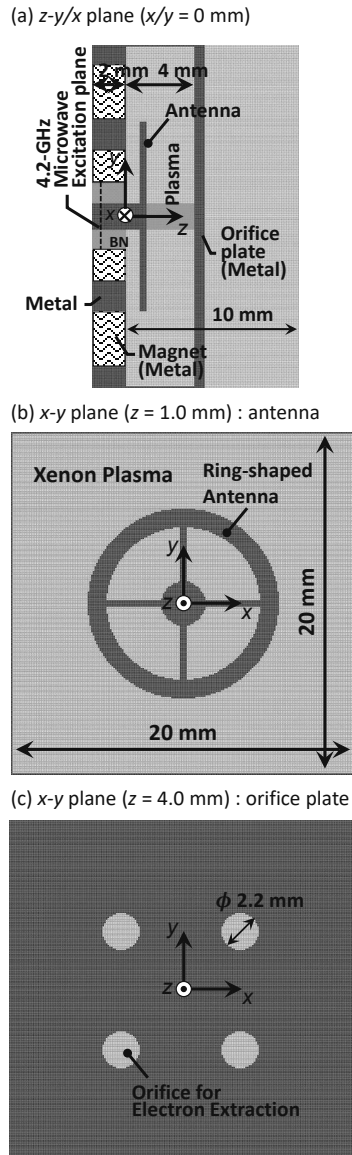


図1: 解析対象とする電子源の構造 [7]
(JSASS-2016-4687 ©日本航空宇宙学会)

領域とし、その内部 ($z=1.0$ mm) にはリング状アンテナが配置されている。また、プラズマ源の下流側 ($z=4.0$ mm) には4つの穴を持つ厚さ0.6 mmのオリフィス面を備えており、この面から $z=10$ mm までを電子引き出しの解析領域とした。オリフィス面を含む金属面のポテンシャルはゼロとし、電子引き出しのために $z=10$ mm でのポテンシャルは20 Vとした。

本研究で用いる粒子計算法は Particle-in-Cell (PIC) 法であり、荷電粒子と中性粒子との衝突を Monte Carlo collision (MCC) 法により考慮している。計算セルは各方向とも0.1 mmの等間隔格子であり、計算は以下の仮定の下で行った。(i) 荷電

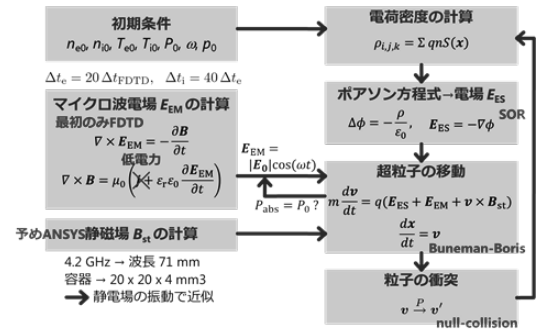


図2: 計算フローチャート

粒子は電子および H_2O^+ , OH^+ , H^+ , H^- , O^- , OH^- とする。(ii) 中性粒子は300 Kのマクスウェル分布で、時間的・空間的に一様とする。(iii) 荷電粒子と中性粒子の衝突は、弾性・励起・電離・解離・電子付着の各衝突および電荷交換衝突を考慮する。(iv) マイクロ波による磁場は、永久磁石による静磁場と比べて小さいため無視する。(v) 本研究ではマイクロ波の電力が小さいためにプラズマ電流の影響を無視する [8]。

図2に本計算のフローチャートを示す。はじめに初期条件を与え、定常状態におけるマイクロ波による電磁場を得るために Finite-difference Time-domain (FDTD) 法によりマクスウェル方程式を解く。このとき、時間ステップは $\Delta t_{EM} = 1.49 \times 10^{-13}$ s (4.2 GHz マイクロ波の1/1600周期) である。次に、PIC/MCC法により粒子の運動を、時間ステップ $\Delta t_e = 5.95 \times 10^{-12}$ s (マイクロ波の1/40周期) の下で解く。マイクロ波電場の時間変化は、先ほど求めた定常状態のマイクロ波電場 \mathbf{E}_0 を用いて、 $\mathbf{E}_{EM} = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t)$ で与えられる。また、永久

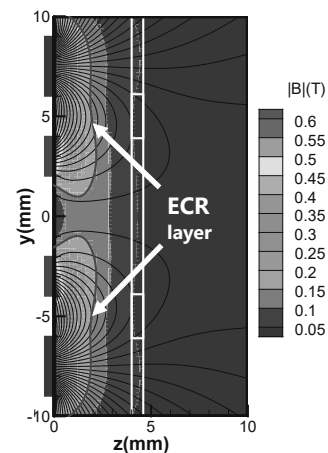


図3: 磁束密度分布 [7]

(JSASS-2016-4687 ©日本航空宇宙学会)

磁石による静磁場 B_{st} は ANSYS を用いて解析している (図 3)。マイクロ波周波数 4.2 GHz はイオンプラズマ周波数と比べて非常に大きいため、計算時間短縮の都合イオンの運動では E_{EM} を無視し、静電場 E_{ES} はマイクロ波 1 周期で平均化した値を用いて、時間ステップ $\Delta t_i = 2.38 \times 10^{-10}$ s (マイクロ波の 1 周期) で更新している。本研究ではプラズマ吸収電力 P_0 を入力パラメータとしており、イオンと電子の運動方程式を解く前後での粒子の運動エネルギーの差から得られる電力 P_{abs} が P_0 を満たすように E_0 を調節している。上記の計算を定常解が得られるまで繰り返し行う。

計算条件は、マイクロ波周波数 $f = 4.2$ GHz、吸収電力 $P_0 = 2.0$ W である。電子とイオンの初期温度をそれぞれ 2.0 eV、0.05 eV とし、いずれも初期密度 $1 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$ で一様に分布させた。その他、モデルの詳細は過去の文献に委ねる [3-6]。

3 プログラム高度化内容と性能評価

図 2 のフローチャートが示すように、本プログラムで大部分の計算時間を占めるのは個々のプラズマ粒子の運動変化を求めるループとなる。

平成 29 年度におけるプロファイル計測の結果によると、中でもポアソン方程式を解いてプラズマポテンシャルを求めるサブルーチンが実に全体の 90% を占めている事が明らかになった。これは高度化前のプログラムにおいて、図 1 の計算領域が示すようにプラズマが分布する領域にアンテナやオリフィスなどが存在するため、遅くとも最も単純でバグが潜みにくいことを優先し SOR 法を採用した事に起因している。また、最内ループに IF 文を用いて計算領域内のプラズマの有無を判断している点も要因として挙げられる。

ポアソン方程式の高速化において、SOR 法では配列の FLOW 依存 (前方依存)、ANTI 依存 (後方依存) が存在するためコンパイラによるベクトル化およびスレッド並列が効かない状況である。この状況を改善するため、まずは最内ループ内に存在する IF 文において TRUE と FALSE のいずれの場合でも演算式を共通化するマスク方式を採用して IF 文を除去した。これにより、本来ポアソン方程式を解かず済むアンテナやオリフィスプレート内部についてもポアソン方程式を解く演算を

行う必要が生じるが、複雑な境界条件を判定する必要なく並列化することが可能になる。

次に、ループ内の依存関係を回避するために RedBlack 法を採用することにした。また、現状扱っている粒子数から 1000 倍以上粒子を増やさない限り、システム B の 1 ノードで実行可能なレベルであり、かつ、ポアソン方程式を解くサブルーチン内でのメモリ使用量も 100 MB 程度と小さく、格子間隔や粒子数に依存しないことからプロセス並列ではなくスレッド並列を採用した。

これらの対策の結果、ポアソン方程式を解くサブルーチンにおいて、オリジナル (ln1p1t) に対してスレッド並列化 (ln1p36t) の適用により、43.7 倍の高速化が実現できた。その他、細かいチューニングを施すことで最終的には約 53 倍の高速化を達成している。なお、SOR 法とは演算順序が異なるため、計算結果の完全一致は得られないが、両解法における計算結果の差異は実用上問題ないレベルであった。

ポアソン方程式を解くサブルーチンの高速化が実現出来た結果、全計算時間に占める割合は 50% 程度まで削減できた。その結果、計算格子内のプラズマ粒子の位置から計算格子の各コーナーのグリッドへ電荷などを割り当てる allocation のサブルーチンが計算時間全体に占める割合が大幅に増加し 30% 程度を占めるに至った。この allocation の計算時間削減のため、粒子番号によるデータ並列化、omp atomic によるループ内排他処理、データ移動量削減、スレッド同期削減など施すことにより 15% まで低下した。

その他のサブルーチンについても細かいチューニングを行った結果、プログラム全体としては、オリジナルのコードに対してスレッド並列化 (ln1p36t) で約 28.6 倍まで高速化することができた。

この状況において、今回、更なる高度化を図るため、領域分割法と粒子ソート法を組み合わせた。具体的には、前述の allocation のサブルーチンにおいて、粒子数による並列化から、格子空間領域の分割による並列化への対応となる。そのため、分割した各領域に含まれる粒子数と粒子番号の配列を生成する必要があり、新たなサブルーチン div1d を作成し、allocation 呼び出しの前に div1d を呼び出す方式とした。その結果、allocation そのものの

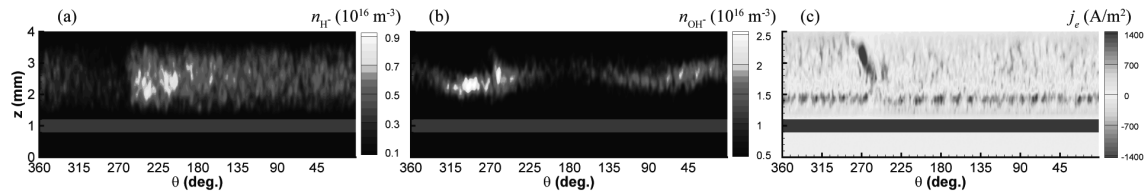


図 4: 負イオン密度および電子電流密度の周方向分布 [6] (©AIP Publishing)

速度はメモリアクセスの改善から 3 倍程度の速度向上が得られた一方、前処理の div1d における経過時間が加算されるため、全体としては約 1 割程度の性能低下に至った。

次に、上記に加えて、粒子ソートを行うことにより、div1d におけるデータ局所性による性能向上を図った。結果として、div1d は 1.5 倍程度の速度向上となったが、全体としては高度化前のコードと同等程度の性能になった。

結果として、今回の高度化においては、平成 29 年度の高度化を凌駕する性能は得られなかった。しかしながら、平成 29 年度の高度化により得られたコードを水に適用することにより、負イオンを含む放電に特有な不安定性などが分かっており (図 4) [6]、今後このコードを利用して、電子引き出し効率の向上を目指した解析を進めていく予定である。

謝辞

プログラム高度化の実施にあたって、HPE の伊藤 泰善 様には大変ご尽力いただきました。また本研究は、JSPS 科研費 JP16H06370 の助成を受けて実施されました。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- [1] Nano/Microsatellite Market Forecast 2020 (SpaceWorks Enterprises, Inc., 2020).
- [2] Koizumi, H., Komurasaki, K., Aoyama, J., and Yamaguchi,

K.: Engineering Model of the Miniature Ion Propulsion System for the Nano-satellite: HODOYOSHI-4, Trans. JSASS Aerospace Tech. Japan, **12** (2014), pp. Tb_19–Tb_24.

- [3] Takao, Y., Koizumi, H., Komurasaki, K., Eriguchi, K., and Ono, K.: Three-dimensional particle-in-cell simulation of a miniature plasma source for a microwave discharge ion thruster, Plasma Sources Sci. Technol., **23** (2014), pp. 064004-1–11.
- [4] Takao, Y., Hiramoto, K., Nakagawa, Y., Kasagi, Y., Koizumi, H., and Komurasaki, K.: Electron extraction mechanisms of a micro-ECR neutralizer, Jpn. J. Appl. Phys., **55** (2016), pp. 07LD09-1–5.
- [5] Hiramoto, K., Nakagawa, Y., Koizumi, H., and Takao, Y.: Effects of $E \times B$ drift on electron transport across the magnetic field in a miniature microwave discharge neutralizer, Phys. Plasmas, **24** (2017), pp. 064504-1–5.
- [6] Nakamura, K., Koizumi, H., Nakano, M., and Takao, Y.: Effects of negative ions on discharge characteristics of water plasma source for a miniature microwave discharge ion thruster, Phys. Plasmas, **26** (2019), pp. 043508-1–11.
- [7] 平本謙太, 中川悠一, 小泉宏之, 小紫公也, 鷹尾祥典: 小型マイクロ波放電式中和器のプラズマ源における $E \times B$ ドリフトの効果, 第 58 回宇宙科学技術連合講演会講演集, 2016, JSASS-2016-4687.
- [8] Takao, Y., Eriguchi, K., Ono, K., Sugita, Y., Koizumi, H., and Komurasaki, K.: A Validation Study of a 3D PIC Model for a Miniature Microwave Discharge Ion Thruster, 50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conf., 2014, AIAA-2014-3829.

巨大津波遡上時の木造家屋の瓦礫生成過程シミュレーションの高度化

浅井光輝

九州大学大学院工学研究院社会基盤部門

1 はじめに

2011年東北地方太平洋沖地震で生じた大規模な津波により、沿岸域の木造家屋の多くは瓦礫となった。津波と瓦礫が混在して遡上することで、人的・経済的損失が拡大した。瓦礫の総量は約2000万トンにも及び、災害復旧時にはその膨大な瓦礫の処理に時間を有し、復旧・復興が遅れが生じた。今後、南海トラフなど、同規模の地震・津波被害が生じる危険性が高いことが指摘されている。この規模の津波からの構造物等の被害をゼロにすることは非現実的であることから、人的被害をゼロにするために津波遡上現象の予測精度を向上させると同時に、瓦礫の総量とその拡散状況を事前評価することで災害後の復旧活動に備えておく必要がある。

以上の背景から地震および津波に対する木造家屋倒壊解析を都市全体規模で実施するためのツールの開発を行った。この解析のためには、GISデータ等から都市全域の建物のモデル化を自動化し、また広域な領域に含まれる多数の家屋の非線形解析をロバストに実施できるツールが望まれる。そこで本研究では建物の倒壊解析に実績のあるASI-Gauss法を解析手法として選択し、大規模解析を実施するための改良を行った。また木造家屋のモデル化には建築分野の設計基準に準拠した強度を付与することで建築年代に整合した倒壊解析を実施し、地震動による都市全体に存在する木造家屋の崩壊予測を可能とした。

2 ASI-Gauss法とその高速化

本研究では構造解析手法としてASI-Gauss法を採用した。ASI-Gauss法は筑波大学磯部らによって開発されたFEM解析手法である。1部材を2つの

線形チモンエンコはり要素だけで分割し、数値積分点をシフトすることではりの崩壊現象を適切に表現する手法であり、Updated Lagrangianの定式化により大変形までを解析可能な有限変形弾塑性解析方法である。また破断後は、要素の断面力を解放することで表現している。降伏関数として次式を採用した。本研究では M_x 、 M_y 、 N はそれぞれ x 、 y 軸回りの曲げモーメント、軸力とし、次式に示す降伏関数を用いた。ここで、右下添え字の“0”は全断面塑性値であることを示す。

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

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

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

前述のソルバーOpenMP化と、接触探索アルゴリズムを改良した結果、十分な高速化を達成した。性能評価に使用したモデルは、図-1に示す要素数：

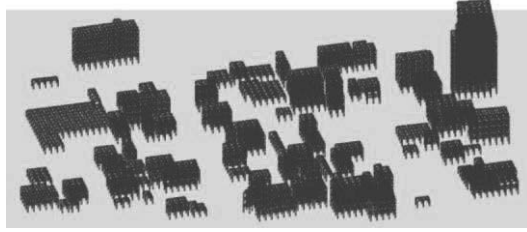


図-1 モデル小
(要素数：43934，節点数：30370)

43934，節点数：30370 のモデルである。このモデルを用いて、1000 ステップの計算に要する時間を測定した。OpenMP 化コードの解析環境は、京都大学「Camphor 2」、1 ノード、64 スレッドである（京コンピュータ停止後、別途自身で計算機環境は調達した）。その結果、従来のコードでは 33 時間 32 分要した計算時間が、OpenMP 化により 13 時間 37 分になり、約 2.5 倍の高速化を達成した。特にソルバーのサブルーチン単体に着目すると、35 倍高速化（並列化効率：57%）した。この結果から、ソルバーは大幅に高速化したものの、他の計算効率が低いサブルーチンが、解析時間の多くを占めていることが 2.5 倍の高速化に留まっている要因であった。

次に接触探索アルゴリズムの改良を実施した。従来のコードでは、一要素が、その他すべての要素に対し、接触探索のための計算を行っていた。無駄な計算を削減するために、解析領域をセル単位で分割し、接触探索の候補を自身のセルと近傍のセルのみに限定することで接触探索の高速化を実現した。その結果、図-1 と同様のモデル・解析条件において、接触探索アルゴリズム改良後のコードでは、解析時間が 13 時間 37 分から 2 時間 11 分になり、さらに 6 倍近く高速化することができた。（ソルバーと併せると約 15 倍の高速化を実現。）

以上の高速化は、非線形解析までに留まっており、ASI-Gauss 法一番の特徴である崩壊後の解析まで実施すると、急激に解析速度の低下を招いていた。図-1 と同様のモデルでは、全体剛性行列構築に 7 秒要したのに対し、図-2 に示す要素数：217 万、節点数 155 万オーダーのモデルでは約 5 時間要していた。接触計算では、ギャップ要素を追加し、その要素を介して接触要素間の力を伝えている。そして全体剛性行列を再び構築している。そのため接触判定・接触解除判定されるたびに、ギャップ要素が増減し、約 5 時間かけて全体剛性行列を一から作り直



図-2 モデル大
(要素数：217 万，節点数：155 万)

していることが問題であった。そこで上記アルゴリズムの見直しを行い、約 9 秒で計算できるように改良した（約 1830 倍の高速化）。

以上、ソースコードの OpenMP 化、接触探索・全体剛性行列構築アルゴリズムの改良を行い、ASI-Gauss 法は大規模崩壊解析が実施可能となった。

3 木造家屋モデル化指針

本研究で対象とする木造家屋の軒数は非常に多く、建物ごとの詳細なモデル化は不可能である。そのため一軒一軒の詳細なモデル化はせず、簡易的にモデル化し、建築年代ごとに適用された建築基準法に基づいた耐力を保有させる方針とした。図-3 に示すように、木造家屋をはり要素によりモデル化を行った。厳密なモデル化はせず、層せん断力と層間変形角の関係から、構造物全体としての耐力を設定した。木造家屋を柱、梁、壁、屋根（床）の 4 つの要素に分類し、壁と屋根（床）要素はブレースに置換、屋根（床）は剛体床と仮定した。モデルの重量は、「2012 年改訂版 木造住宅の耐震診断と補強方法」より代表的な建築年代ごとの床面積当たりの重量を参照することで決定した。屋根（床）の重量を梁と屋根要素に、外壁、内壁の重量を柱と壁要素に分配した。部材の降伏は、層間変形角がある閾値に達したとき、降伏と判断した。例えば、1959 年基準に準拠する図-4 の場合、壁を構成する要素は層間変形角が $1/120 \text{ rad}$ 、柱を構成する要素は $1/30 \text{ rad}$ に達した時に降伏させ、要素端部に塑性ヒンジを形成させた。スギの材料特性を用い、降伏後は完全弾塑性体と仮定した。以上のように、木造家屋をはり要素にてモデル化し、建築基準法に準拠した耐力を持たせる方針とした。

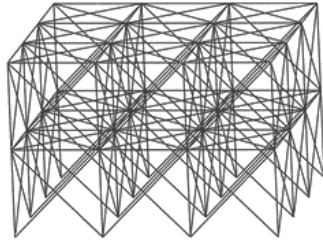


図-3 木造家屋モデル

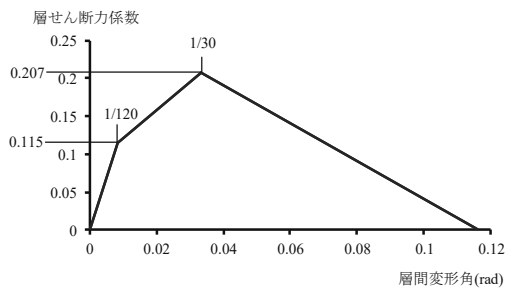


図-4 層せん断力と層間変形角の関係 (1959年基準)

1,514,782 (絶対偏差 : 1.1 %) であった. 領域分割の結果, 各領域の平均解析時間は 28 時間 28 分 (Camphor 2 : 20 ノード, 68 スレッド, 1000 ステップ) に抑えることができ, 都市全体の弾塑性地震応答解析 (変位入力) が数日の内に完了できるようになった. 図-7 に 2 区画を可視化した結果を示す. カラーコンターは水平変位を意味する. 背の高い建物ほど大きく揺れていることがわかる. なお, 解析では要素の破断, 接触はなく, 都市全域モデルには, 個々のモデル耐力が未設定, 壁ブレースの未設定であること留意しておく.

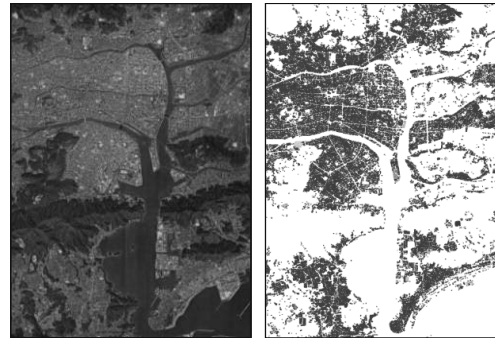


図-5 高知市モデル

4 都市全域モデルの自動化処理

都市全域のモデル化には, 地理情報システム (GIS) を用いた. GIS より得られる建物の立体位置情報と数値標高データから, 都市全域の建物モデルを構築できる. また同データから, 津波遡上解析に必要な地表面モデルの作成も可能である. 本研究で対象とする都市は, 高知県高知市とした. ASI-Gauss 法を用いた都市全域のモデル化及び地震応答解析を達成後は, SPH 法と連成解析することで, 地震・津波に対する都市全域の木造家屋倒壊解析を実施する方針である.

高知市モデルの概要を次に示す. 領域 : 7 km × 10 km, 建物数 : 82,916, 要素数 : 43,411,162, 節点数 : 30,295,639, データサイズ : 9.5 GB (図-5). 単一の計算機でも解析できないことはないが, 数日の間に解析を終了させるためには, 複数の計算機による同時処理を行うことにした. このため, 複数の計算機に計算負荷が一致するように領域分割を行った. その例として, 高知市全域モデルを 20 区画に分割した例を示す (図-6). このモデルの平均要素数は 2,170,558 (絶対偏差 : 0.3 %), 平均節点数は



図-6 高知市モデルの領域分割

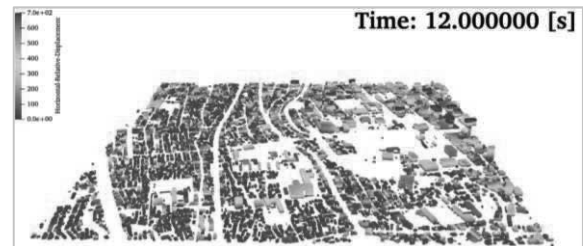


図-7 地震応答解析結果 (2 区画分のみ)

5 都市全域モデルによる木造家屋倒壊解析例

都市全域の木造家屋倒壊解析の実現可能性を確認するため、1区画のモデルを用いて、1000ステップ、実時間20秒の計算を実施した。木造家屋相当の節点数1000未満のモデルに対して、弱い強度を設定し、地震動は変位入力した。要素の破断、接触、接触解除、地面との接地を考慮した。その結果、56.6時間で計算を終えることを確認した（結果出力を除けば42.2時間）。図-8に1区画モデルを拡大した結果を示す（0秒、7秒）。カラーコンターは鉛直変位を意味する。要素の破断が210809回、要素間の接触が5524回発生しており、破断後に接地したと判定された回数は29311回あり、全体剛性行列の形状が37854回変わる計算であった。全体剛性行列構築アルゴリズムの改良により、現実的な時間内で計算でき都市規模の崩壊解析が可能になった。以上、都市全域の木造家屋倒壊解析の実現可能性検討を行った。各種アルゴリズムの改良により、大規模崩壊解析が数日のうちに終了することを確認できた。今後、壁ブレースを追加した都市モデルに木造家屋の物性値・断面形状を適用し、年代ごとの倒壊過程の評価へと発展させる予定である。

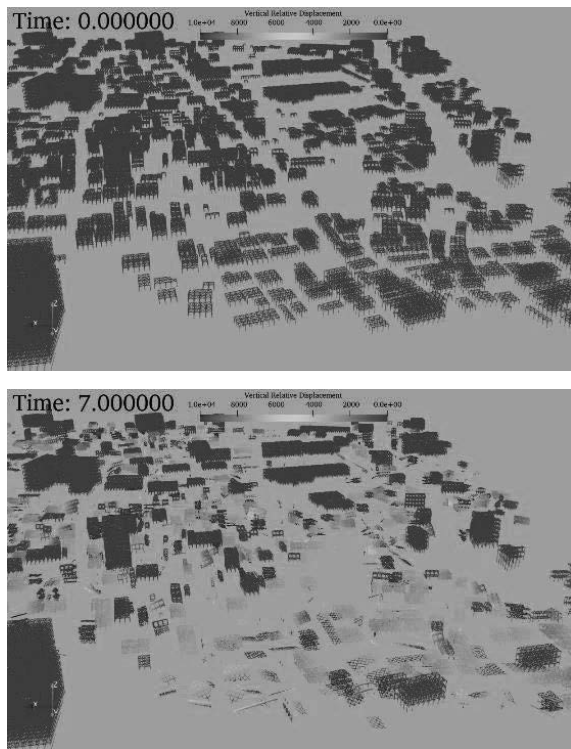


図-8 木造家屋倒壊解析（初期モデルと地震動流力後7秒後）

6 おわりに

地震動による都市全域の木造家屋倒壊解析を実施するために、ASI-Gauss法を高速化させ、また建築基準に整合した木造家屋のモデル化方法を整備した。都市全体の木造家屋を効率よくモデル化するため、GISで登録された情報から建物モデルを自動生成した。また構造解析手法のOpenMP化、アルゴリズム改良をすることで、上記の解析を現実的な時間内で実施可能にした。今後は、まず過去の地震被災事例との比較による木造家屋倒壊解析の妥当性を確認し、さらにはASI-Gauss法による家屋の解析と津波遡上解析法を連成することで、地震だけでなく津波に対する都市全域の木造家屋倒壊予測技術への発展が望まれる。

本研究は京都大学学術情報メディアセンター2019年度スーパーコンピュータ共同研究制度・プログラム高度化に採択いただき、特に連立一次方程式ソルバーの高速化を実施していただいた。ここに記して感謝の意を表す。

システム A 運転状況 (2019 年 10 月 ~ 2020 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

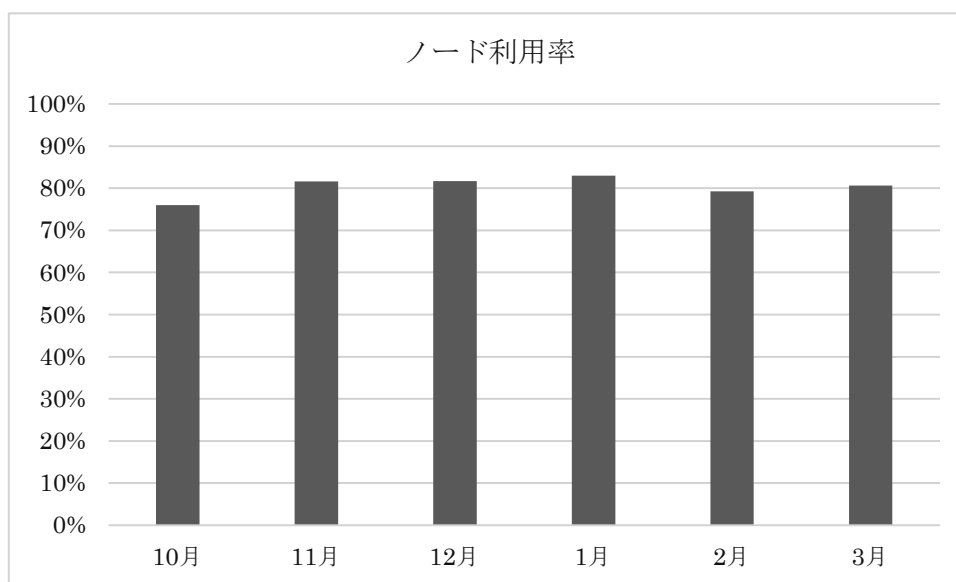
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2019/10/14 9:00	2019/10/17 16:55	81.00
2019/12/05 9:00	2019/12/05 11:30	6.00
2020/03/30 9:00	2020/03/31 24:00	39.00

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]
2019/11/11 14:20	2019/11/11 20:08	5.80

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	662.40	36,918	182,302	57,866,786	46,713,480	1745.7	76.0 %
11月	715.20	36,386	222,566	69,326,480	57,355,983	1798.2	81.6 %
12月	744.00	50,889	285,720	73,444,981	57,553,181	1795.6	81.7 %
1月	744.00	73,141	284,384	76,523,814	54,088,568	1795.5	83.0 %
2月	696.00	98,596	230,007	67,725,077	49,308,813	1792.6	79.3 %
3月	705.60	50,476	250,096	71,487,519	56,244,208	1798.7	80.6 %
計	4,267.20	346,406	1,455,075	416,374,657	321,264,233	1787.7	80.4 %



- 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 (2019 年 10 月 ~ 2020 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

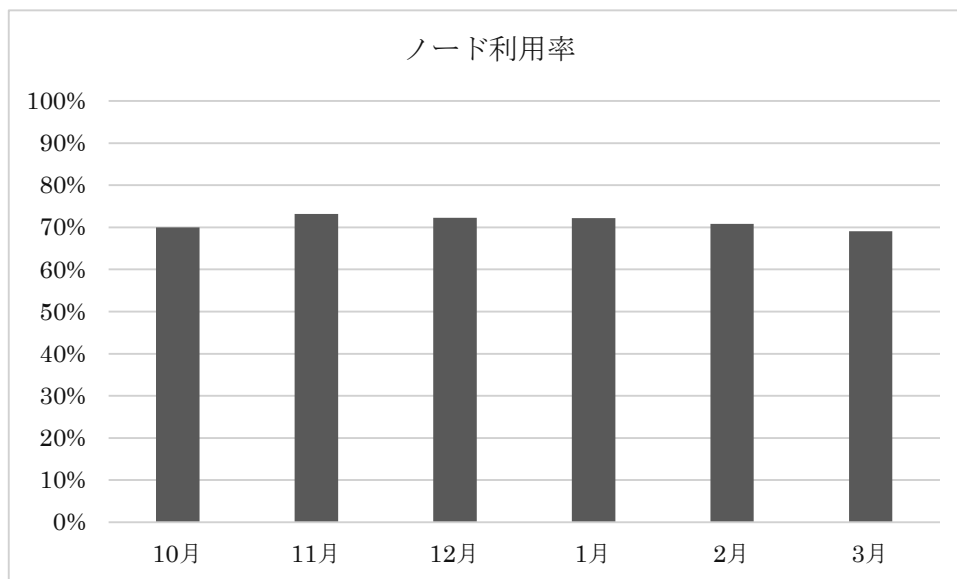
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2019/10/14 9:00	2019/10/17 16:55	81.00
2019/12/05 9:00	2019/12/05 11:30	6.00
2020/03/30 9:00	2020/03/31 24:00	39.00

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]
2019/11/11 14:20	2019/11/11 20:08	5.80

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	662.40	119,090	657,152	11,986,043	9,221,575	779.0	70.0 %
11月	715.20	138,853	765,685	14,054,172	11,550,943	807.9	73.2 %
12月	744.00	153,638	791,775	14,589,627	12,012,627	807.6	72.3 %
1月	744.00	336,625	893,723	14,805,263	12,319,297	808.0	72.2 %
2月	696.00	165,011	753,756	13,723,839	11,204,145	808.0	70.8 %
3月	705.60	113,642	624,961	13,506,733	10,670,110	808.0	69.1 %
計	4,267.20	1,026,859	4,487,052	82,665,677	66,978,697	803.1	71.3 %



- 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 (2019年10月～2020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

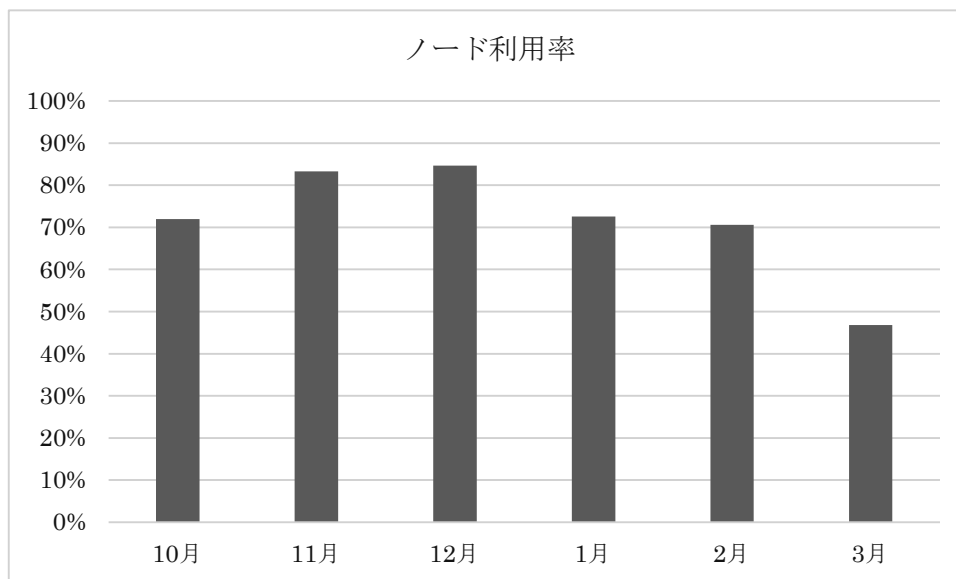
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2019/10/14 9:00	2019/10/17 16:55	81.00
2019/12/05 9:00	2019/12/05 11:30	6.00
2020/03/30 9:00	2020/03/31 24:00	39.00

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]
2019/11/11 14:20	2019/11/11 20:08	5.80

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	662.40	3,705	32,427	376,447	256,345	15.7	72.0 %
11月	715.20	20,808	25,688	508,109	478,321	16.0	83.3 %
12月	744.00	4,314	31,717	526,731	550,943	15.9	84.7 %
1月	744.00	4,613	37,859	516,085	573,616	16.0	72.6 %
2月	696.00	3,134	22,247	378,711	251,428	16.0	70.6 %
3月	705.60	2,300	28,396	304,021	236,200	15.9	46.8 %
計	4,267.20	38,874	178,334	2,610,104	2,346,853	15.9	71.7 %



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

別表1 スーパーコンピュータシステム

			利用負担額	提供サービス						
コース	タイプ	セット		システム	バッチ	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数	
エントリ	-	基本	12,600 円/年	B	共有	最大1ノード相当((36コア、128GBメモリ)×1)	1	0.2	-	
パーソナル	タイプA	基本	100,000 円/年	A	共有	最大4ノード相当((68コア、16+96GBメモリ)×4)	168	3.0	-	
	タイプB	基本	100,000 円/年	B	共有	最大4ノード相当((36コア、128GBメモリ)×4)		3.0		
	タイプC	基本	100,000 円/年	C	共有	最大1ノード相当((72コア、3072GBメモリ)×1)		3.0		
グループ	タイプA1	最小	200,000 円/年	A	優先	4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)	336	24.0	8	
		追加単位	100,000 円/年			2ノード((68コア、16+96GBメモリ)×2)		12.0	4	
	タイプA2	最小	240,000 円/年		準優先	8ノード((68コア、16+96GBメモリ)×8)		28.8	16	
		追加単位	60,000 円/年			2ノード((68コア、16+96GBメモリ)×2)		7.2	4	
	タイプA3	最小	600,000 円/年		占有	8ノード((68コア、16+96GBメモリ)×8)		48.0	16	
		追加単位	300,000 円/年			4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)		24.0	8	
	タイプB1	最小	210,000 円/年	B	優先	4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)		24.0	8	
		追加単位	105,000 円/年			2ノード((36コア、128GBメモリ)×2)		12.0	4	
	タイプB2	最小	252,000 円/年		準優先	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)		28.8	16	
		追加単位	63,000 円/年			2ノード((36コア、128GBメモリ)×2)		7.2	4	
	タイプB3	最小	630,000 円/年		占有	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)		48.0	16	
		追加単位	315,000 円/年			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)		24.0	8	
	タイプC1	最小	130,000 円/年	C	優先	1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)		24.0	8	
		追加単位	130,000 円/年			1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)		24.0	8	
	タイプC2	最小	156,000 円/年		準優先	2ノード((72コア、3072GBメモリ)×2)		28.8	16	
追加単位		78,000 円/年	1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)			14.4	8			
大規模ジョブ	タイプA	最小	20,000 円/週(7日)		A	占有	8ノード((68コア、16+96GBメモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	10,000 円/週(7日)				4ノード((68コア、16+96GBメモリ)×4)			
	タイプB	最小	21,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)				
		追加単位	10,500 円/週(7日)			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)				
	タイプC	最小	13,000 円/週(7日)	C	占有	2ノード((72コア、3072GBメモリ)×2)				
		追加単位	6,500 円/週(7日)			1ノード((72コア、3072GBメモリ)×1)				
専用クラスタ	-	最小	630,000 円/年	B	-	8ノード((36コア、128GBメモリ)×8)	48.0	16		
		追加単位	315,000 円/年			4ノード((36コア、128GBメモリ)×4)	24.0	8		
ストレージ容量追加			10,000 円/年	ストレージ容量10TBの追加につき						
ライセンスサービス			20,000 円/年	可視化ソフト(AVS.ENVI/IDL)およびプリポストウェアの1ライセンスにつき						

備考

- 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。パーソナルコース、グループコース又は専用クラスタコースを、年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
 - 大判プリンタサービス
 - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ストレージ容量追加、ライセンスサービスの申請には、スーパーコンピュータシステムの利用者であることが必要である。
- 「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。
「準優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。
「優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。
「占有」：稼働状況によらず記載値の計算資源が確保されることを保証する。
- ストレージ容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。
- グループコース及び専用クラスタコースの利用者番号は利用者あたり年額5,000円を負担することで追加できる。
- 機関・部局定額制度
他機関又は学内における部局(『国立大学法人京都大学の組織に関する規程』第3章第2節から第11節で定める組織をいう。)の組織が、その組織単位でグループコースサービスを利用申請する場合の利用負担額は、別表1に規定する1.5倍の額とする。なお、利用負担額が年額150万円未満の場合は100人、年額150万円を超える場合は、150万円毎に100人までの利用者を認める。ストレージは、1.5倍の容量とする。
- スパコン連携サービス
学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータシステムと密な連携により、学内における部局の組織が計算サーバ等を設置する場合、下記の負担額を支払うものとする。

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

別表2 汎用コンピュータシステム

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

備考

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

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

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

別表3 スーパーコンピュータシステム

システム	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数	利用負担額
A	8ノード(68コア、16+96GBメモリ)×8)	336	28.8	16	960,000 円/年
	12ノード(68コア、16+96GBメモリ)×12)	336	43.2	24	1,440,000 円/年
	16ノード(68コア、16+96GBメモリ)×16)	336	57.6	32	1,920,000 円/年
B	8ノード(36コア、128GBメモリ)×8)	336	28.8	16	1,008,000 円/年
	12ノード(36コア、128GBメモリ)×12)	336	43.2	24	1,512,000 円/年
	16ノード(36コア、128GBメモリ)×16)	336	57.6	32	2,016,000 円/年
C	2ノード(72コア、3072GBメモリ)×2)	336	28.8	16	624,000 円/年
	3ノード(72コア、3072GBメモリ)×3)	336	43.2	24	936,000 円/年
	4ノード(72コア、3072GBメモリ)×4)	336	57.6	32	1,248,000 円/年

備考

1. 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。パーソナルコース、グループコース又は専用クラスターコースを、年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
2. ストレージ容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。

全国共同利用版広報・Vol.18(2019)総目次

[巻頭言]

Vol. 18, No. 1 号の発刊にあたって	1-1
Vol. 18, No. 2 号の発刊にあたって	2-1

[スーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性研究者奨励枠）研究報告]

機械攪拌操作時気泡巻き込みに対する数値解析	1-2
大規模溶解炉における溶融アルミニウム機械攪拌時の流動解明	1-4
界面分光の分子動力学シミュレーション	1-6
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	1-8
無重力下での高プラントル数流体における 温度差マランゴニ効果に起因する液柱内対流場の二次不安定性	1-10
Adjoint sensitivity 解析を用いたパワーデバイス用半導体製造装置の最適設計のための数値解析	1-13
ウマの個体間に作用する力の解明に向けた数値シミュレーション	1-15
界面の摩擦接触を考慮した損傷モデルによる鉄筋コンクリートの 3 次元破壊シミュレーション	1-17
N 結合型糖鎖修飾によるタンパク質の機能制御の関連性	1-19
都市構造物の幾何的特徴がもたらす大気乱流の空間スケールへの影響	1-21
Numerical simulation of InGaSb crystal growth under micro-gravity onboard the International Space Station	1-23
3 次元流体変数の予測	1-25
Numerical simulation of deepwater oil blowout-Turbulent jets and droplet size distribution	1-27
分子動力学計算による膜貫通型ペプチドとリン脂質二重膜の相互作用ダイナミクス	1-29

[プログラム高度化共同研究報告]

分子シミュレーションによるヌクレオソーム構造変化の網羅的探索	1-31
巨大津波遡上時の木造家屋の瓦礫生成過程シミュレーション	1-33
異方性弾性波動問題に対する演算子積分時間領域境界要素法の高性能化	1-37
飽和土の大規模変形・流動計算を目的とした固液混合 MPM の開発	1-41
強い音響異方性を有する CFRP に対する開口合成法の高速度実行	1-45

[ARM プロセッサの性能評価]

Marvell ThunderX2 評価機の紹介	2-2
ThunderX2 評価機を利用した MHD シミュレーションコードの性能評価	2-4

[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	1-50, 2-10
センター利用による研究成果（平成 30 年度）	2-13

[資料]

大型計算機システム利用負担金 別表	1-54, 2-18
全国共同利用版広報・Vol.17(2018)総目次	1-57

サービス利用のための資料一覧.....1-59,2-21

[奥付]

奥付1-60,2-22

— サービス利用のための資料一覧 —

1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

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

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

2. 問い合わせ先 & リンク集

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

京都大学学術情報メディアセンター全国共同利用版広報 Vol. 19, No. 1

2020年 10月 30日 発行

編集者 京都大学学術情報メディアセンター
全国共同利用版広報編集委員会
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

広報編集委員会

深沢 圭一郎 (部会長)

平石 拓 (副部会長)

熊谷 真由美

尾形 幸亮

表紙デザイン：中山 豊

(中山商店)

目次

【巻頭言】

- ・ Vol.19, No.1 号の発刊に当たって 牛島 省 1

【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性研究者奨励枠)研究報告】

- ・ 液体攪拌操作における翼端渦と多相分散の関係性の解明 山本 卓也 2
- ・ 界面の摩擦接触を考慮した損傷モデルによる鉄筋コンクリートの3次元破壊シミュレーション 相馬 悠人 4
- ・ 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 6
- ・ 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 堤田 成政 8
- ・ 界面分光の分子動力学シミュレーション 城塚 達也 10
- ・ 水平基板上を濡れ拡がる液膜と単一球形粒子との相互作用による接触界線近傍流体の加速現象に関する数値解析
..... 中村 颯 12
- ・ N結合型糖鎖修飾によるタンパク質の機能制御の関連性 リントウルオト正美 14
- ・ Numerical simulation of deepwater oil blowout — Crossflow and droplet size distribution
..... Daniel Cardoso Cordeiro 16
- ・ 流体の一変数時系列データに対する機械学習によるモデルの構成 中井 拳吾 18
- ・ Numerical simulation of the transport phenomena occurring
in the Bottom Seeded Solution Growth (BSSG) process of SiC ZHANG Jianguo 20
- ・ 高プラントル数液柱温度差マランゴニ対流における自由表面を介した熱損失の影響に関する数値解析
..... 藤本 空知 22
- ・ 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 井上 漱太, 深沢 圭一郎, 平田 聡 25
- ・ リモートセンシングなどの大規模環境データ解析による環境社会問題への応用、社会実装実験 佐藤 建 27

【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】

- ・ メッシュ・チャンネル乱流の超高解像度DNS 横嶋 哲, 菅野 雅也 29

【プログラム高度化共同研究報告】

- ・ 水・熱移動を考慮した3次元剛体バネモデルによるコンクリート構造物の
長期変形・ひび割れ進展挙動および動的破壊挙動の高解像度シミュレーション 山本 佳士 34
- ・ 水を推進剤とした超小型マイクロ波放電式プラズマ源を対象とした3次元プラズマ粒子計算 鷹尾 祥典 38
- ・ 巨大津波遡上時の木造家屋の瓦礫生成過程シミュレーションの高度化 浅井 光輝 42

【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 46

【資料】

- ・ 大型計算機システム利用負担金 別表 50
- ・ 全国共同利用版広報・Vol.18(2019)総目次 53
- ・ サービス利用のための資料一覧 55

【奥付】

- ・ 奥付 56