

スーパーコンピューティング ニュース

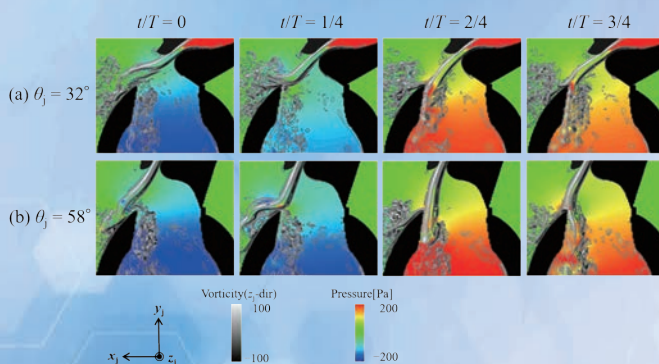
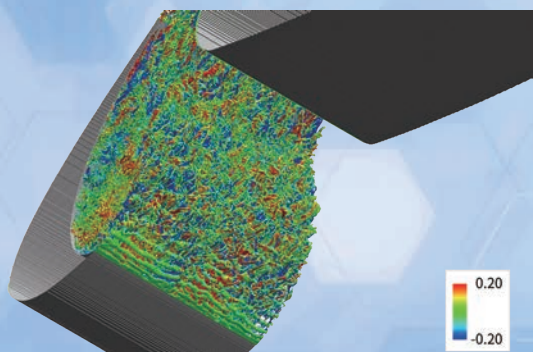
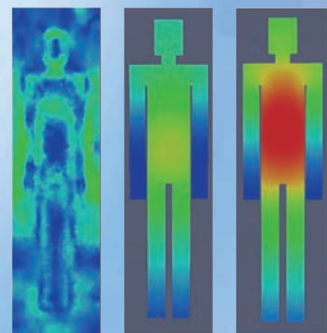
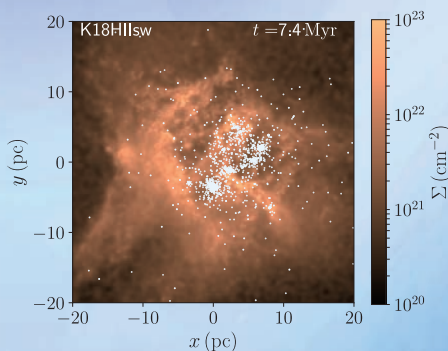
# SUPERCOMPUTING NEWS

東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティング部門

## Vol.22, Special Issue 1

2020.9

特集：2019年度「若手・女性利用者推薦」前期・後期課題 成果報告



表紙の画像は、以下の課題より提供を受けております。

- 医療応用を見据えた電磁界－熱伝導連成解析システムの包括的な高速化・高度化  
(八戸工業大学 工学部 杉本振一郎)
- 階層型直交格子法を用いた航空機高揚力装置の近傍場音響予測  
(東京大学大学院 工学系研究科 航空宇宙工学専攻 菅谷圭祐)
- フルートの吹込み角度による音色変化のメカニズム解明  
(豊橋技術科学大学 小野木君枝, 横山博史, 飯田明由)
- 大質量星団形成過程の解明  
(東京大学大学院 理学系研究科 藤井通子)

# 目 次

## 特集：2019 年度「若手・女性利用者推薦」前期・後期課題 成果報告

2019 年度特集号発行にあたって……………	1
下川辺隆史（東京大学情報基盤センター）	
LBM-LES を用いた市街地大気汚染拡散大規模非定常高速解析手法の開発……………	5
韓 夢濤（東京大学生産技術研究所）	
大岡龍三（東京大学生産技術研究所）	
菊本英紀（東京大学生産技術研究所）	
カスケード選択型分子動力学シミュレーションで実現する 環状ペプチドの膜透過シミュレーション……………	13
原田隆平（筑波大学計算科学研究センター）	
次世代気象ライブラリによる，台風内部の雷にエアロゾルが与える影響評価……………	19
佐藤陽祐（北海道大学理学研究院）	
超音波キャビテーション気泡の分裂、崩壊、合メカニズムの解明……………	25
山本卓也（東北大学大学院工学研究科金属フロンティア工学専攻 東北大学大学院環境科学研究科先端環境創成学専攻）	
医療応用を見据えた電磁界-熱伝導連成解析システムの包括的な高速化・高度化……………	30
杉本振一郎（八戸工業大学工学部）	
低質量星団におけるブラックホール連星形成とその金属量依存性……………	41
熊本 淳（東京大学）	
階層型直交格子法を用いた航空機高揚力装置の近傍場音響予測……………	48
菅谷圭祐（東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻）	
様々な初期質量の大質量星から前兆ニュートリノに関する系統的な研究……………	56
加藤ちなみ（東北大学大学院工学研究科）	

フルートの吹込み角度による音色変化のメカニズム解明.....	62
小野木君枝（豊橋技術科学大学）	
横山博史（豊橋技術科学大学）	
飯田明由（豊橋技術科学大学）	
大質量星団形成過程の解明.....	69
藤井通子（東京大学大学院理学系研究科）	
MPS 法への新規高速化手法の実装と評価 .....	75
宮島敬明（理化学研究所計算科学研究センター）	

# 2019 年度特集号発行にあたって

下川辺 隆史

東京大学情報基盤センター

## 1. はじめに

本特集号は、東京大学情報基盤センター（以下、センター）で実施した 2019 年度「若手・女性利用者推薦」前期・後期に実施され本期間で終了した課題の成果報告をまとめたものです。

## 2. 若手・女性利用者推薦

センターでは、若手研究者（40 歳以下、学生を含む）及び女性研究者（年齢は問わない）による、スーパーコンピュータ、大規模ネットワーク機器などの大型計算資源を使用した研究を対象とした公募型プロジェクトを実施しています。

センターの教員による審査の上、年間で数十件程度の優れた研究提案を採択しております。採択された課題では申請した計算資源を無料で使用することができます。

前期・後期の半年単位で募集を行う一般枠と、学部学生・大学院生を対象とし、主に夏期における利用を想定したインターン制度があります。一般枠（前期・後期）では、1 人で行う研究課題を募集します。一般枠の課題は半年単位の実施となります。ただし、前期に課題が採択されている場合、それを継続する課題として後期に継続課題として応募することが可能で、採択された場合には、最長で 1 年間の課題実施が可能です。インターン制度では、1 人で行う研究課題または 2 人以上のメンバーで構成された研究グループで行う研究課題を募集します。

一般枠で採択された課題のうち、特に優れた課題で「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）」の萌芽型共同研究課題の条件を満たすものについては、本センターより同拠点萌芽型共同研究課題として推薦する予定です。同拠点共同研究課題審査委員会で審査の上、JHPCN の萌芽型共同研究課題としても採択された場合、毎年 7 月に開催される JHPCN のシンポジウムにて発表の機会が与えられる場合があります。本制度に採択された課題は終了後、得られた成果をもとに、「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）」の公募型共同研究（一般課題、国際課題、企業課題）等へと進展することが大いに期待されます。なお、インターン制度で採択された課題は JHPCN 萌芽型共同研究課題としての推薦は行いません。

本制度の詳細は、以下の Web ページをご覧ください。

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/young/>

## 3. 2019 年度「若手・女性利用者推薦」前期・後期 採択課題

2019 年度「若手・女性利用者推薦」前期の課題公募では、表 1 に示した 17 件の課題が採択されました。後期の課題公募では、後期からの継続課題を含み、表 2 に示した 21 件の課題が採択されました。本特集号では前期・後期で実施期間が終了した 27 件の課題のうち 11 件の課題の成果報告が掲載されています。なお、採択された課題のうち 3 件の前期課題については、2019

年 12 月 3 日に開催された「若手・女性利用者推薦」成果報告会<sup>1</sup>で、その成果が報告されました。

表 1 2019 年度「若手・女性利用者推薦」前期 採択課題

課題名	代表者名	所属
LBM-LES を用いた市街地大気汚染拡散大規模非定常高速解析手法の開発 <sup>†</sup>	韓 夢濤	東京大学 生産技術研究所
波形インバージョンによる地球マントル最下部における低速度異常の詳細推定 <sup>*‡</sup>	鈴木 裕輝	東京大学大学院 理学系研究科
分子動力学計算によるアミロイド凝集様態の理論的解析 <sup>*‡</sup>	大滝 大樹	長崎大学大学院 医歯薬学総合研究科
Gibbsite における空孔が摩擦特性へ与える影響の解明 <sup>*‡</sup>	奥田 花也	東京大学大学院 理学系研究科
カスケード選択型分子動力学シミュレーションで実現する環状ペプチドの膜透過シミュレーション <sup>†</sup>	原田 隆平	筑波大学 計算科学研究センター
First cluster におけるブラックホール連星の形成 <sup>†‡</sup>	藤井 通子	東京大学
次世代気象ライブラリによる、台風内部の雷にエアロゾルが与える影響評価	佐藤 陽祐	名古屋大学 工学研究科
高速化データ駆動科学を用いた陽電子回折実験のデータ解析 <sup>*‡</sup>	田中 和幸	鳥取大学大学院 持続性社会創生科学研究科
超音波キャビテーション気泡の分裂、崩壊、合一メカニズムの解明 <sup>*</sup>	山本 卓也	東北大学大学院 環境科学研究科
医療応用を見据えた電磁界-熱伝導連成解析システムの包括的な高速化・高度化 <sup>*</sup>	杉本 振一郎	八戸工業大学
Numerical simulation of deepwater oil blowout: turbulent jets and droplet size distribution <sup>*‡</sup>	Daniel Cardoso Cordeiro	大阪大学大学院 基礎工学研究科
複雑ネットワークに基づく熱硬化性樹脂の構造物性研究 <sup>‡</sup>	天本 義史	九州大学 先導物質化学研究所
ミニマルスパン・チャネル乱流の直接数値計算による乱流伝熱解析 <sup>*‡</sup>	関本 敦	大阪大学 基礎工学研究科
世界最高レイノルズ数乱流データベース構築のための GPU-DNS コードの作成 <sup>*‡</sup>	関本 敦	大阪大学 基礎工学研究科
科学技術計算の効率の超並列化に向けた静的負荷分散を行う DSL の開発 <sup>*‡</sup>	西田 秀之	東京大学大学院 情報理工学系研究科

<sup>1</sup> [https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/y\\_report/2019/2019F\\_report.php](https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/y_report/2019/2019F_report.php)

課題名	代表者名	所属
低質量星団におけるブラックホール連星形成とその金属量依存性*	熊本 淳	東京大学 理学系研究科
CENP T 天然変性領域の翻訳後修飾が結合機構へ及ぼす影響の研究†	山守 優	産業技術総合研究所 人工知能研究センター

\* 2019 年度後期に継続課題として採択された課題です。

† 「若手・女性利用者推薦」成果報告会で成果報告された課題です。

‡ 論文投稿中などのために、本特集号には成果報告が掲載されていない課題です。これらの成果報告は、次号以降に掲載される予定です。

表 2 2019 年度「若手・女性利用者推薦」後期 採択課題

課題名	代表者名	所属
Gibbsite における空孔が摩擦特性へ与える影響の解明*‡	奥田 花也	東京大学大学院 理学系研究科
波形インバージョンによる地球マントル最下部における低速度異常の詳細推定*‡	鈴木 裕輝	東京大学大学院 理学系研究科
大規模な共溶媒分子動力学シミュレーションによる至適共溶媒セットの構築‡	柳澤 溪甫	東京大学大学院 農学生命科学研究科
高速化データ駆動科学を用いた先端量子ビーム回折実験のデータ解析*‡	田中 和幸	鳥取大学大学院 工学研究科
ロボット遠隔操作のための複数台搭載魚眼カメラを用いた周囲環境の 3 次元再構成‡	小松 廉	東京大学大学院 工学系研究科
階層型直交格子法を用いた航空機高揚力装置の近傍場音響予測	菅谷 圭祐	東京大学 工学系研究科
分子動力学計算によるアミロイド凝集様態の理論的解析*‡	大滝 大樹	長崎大学大学院 医歯薬学総合研究科
様々な初期質量の大質量星から前兆ニュートリノに関する系統的な研究	加藤 ちなみ	東北大学 工学研究科
超音波キャビテーション気泡の分裂、崩壊、合一メカニズムの解明*	山本 卓也	東北大学大学院 環境科学研究科
Investigation of the droplet Weber number behavior in a deepwater oil blowout*‡	Daniel Cardoso Cordeiro	大阪大学大学院 基礎工学研究科
並列プログラミングモデル HPX と XMP の比較と改善‡	姜 蘇航	東北大学 情報科学研究科
フルートの吹込み角度による音色変化のメカニズム解明	小野木 君枝	豊橋技術科学大学 機械工学専攻
マルチスケール分子シミュレーションによる受容体チロシンキナーゼの構造モデリング‡	森 義治	北里大学 薬学部

課題名	代表者名	所属
科学技術計算の効率的超並列化に向けた静的負荷分散を行う DSL の開発*‡	西田 秀之	東京大学大学院 情報理工学系研究科
大質量星団形成過程の解明	藤井 通子	東京大学大学院 理学系研究科
低質量星団におけるブラックホール連星形成とその金属量依存性*	熊本 淳	東京大学 理学系研究科
MPS 法への新規高速化手法の実装と評価	宮島 敬明	理化学研究所 計算科学研究センター
CO2 地中貯留ための二相流流動と岩盤力学の連成解析‡	張 毅	地球環境産業技術研究機構
ミニマルスパン平行平板間乱流の直接数値計算による乱流伝熱解析*‡	関本 敦	大阪大学大学院 基礎工学研究科
世界最高レイノルズ数乱流データベース構築のための GPU-DNS コードの作成*‡	関本 敦	大阪大学大学院 基礎工学研究科
医療応用を見据えた電磁界-熱伝導連成解析システムの包括的な高速化・高度化*	杉本 振一郎	八戸工業大学

\* 2019 年度前期からの継続課題です。

‡ 論文投稿中などのために、本特集号には成果報告が掲載されていない課題です。これらの成果報告は、次号以降に掲載される予定です。



# LBM-LES を用いた市街地大気汚染拡散大規模非定常

## 高速解析手法の開発

韓 夢濤

東京大学生産技術研究所

大岡 龍三

東京大学生産技術研究所

菊本 英紀

東京大学生産技術研究所

### 1. はじめに

近年、格子ボルツマン法 (lattice Boltzmann method, LBM) に基づいた Large-Eddy Simulation (LBM-LES) を用いた建築環境の気流解析例が報告されている。従来の有限体積法に基づいた LES (FVM-LES) に比べ、LBM-LES は、アルゴリズムがより単純なため、建築環境のような高 Reynolds 数乱流に関する高速な LES を実現できる可能性が示している[1, 2]。

LBM では、格子ボルツマン方程式で数値計算を行う。本研究で用いられる外力項を含む格子ボルツマン方程式 (lattice Boltzmann Equation, LBE) は式(1)で表される。

$$f_a(\mathbf{r} + \Delta t \mathbf{e}_a, t + \Delta t) - f_a(\mathbf{r}, t) = \Omega_a(\mathbf{r}, t) + F_a \quad (1)$$

LBE は、粒子分布関数の時間と空間変化を表しているが、LBE に対して Chapman-Enskog の多尺度分析を行うことで、低 Mach 数における連続式と Navier-Stokes 方程式等巨視的な流体支配方程式を導出できる[13, 14]。また、一度分布関数が決まれば、流れ場の巨視的な密度と速度は式(2)で求められる。

$$\rho = \sum_a f_a(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_a \mathbf{e}_a f_a(\mathbf{r}, t), \quad p = \rho e_s^2 \quad (2)$$

FVM-LES を用いて建築環境のような高 Reynolds 数の乱流場を予測する際に、壁近傍の格子が十分細かくなければ、壁面のせん断応力を正しく再現できないことが良く知られている[3]。その対策としては、壁近傍の格子の稠密化はもちろんであるが、その他にも壁領域付近の適切な速度プロファイルモデル化した壁関数を用いたせん断応力の評価も広く使用されている。現在、2層モデル[4]、対数則[5]、および Spalding 則[6, 7]等様々な壁関数が提案されている。その中でも、Spalding 則は、粘性底層と対数層両方の速度プロファイルを滑らかに接続し、1つの方程式を用いて壁付近の2つの層をモデル化に表現でき、現在 FVM-LES でも広く使われている[8-10]。

LBM-LES では、最も広く採用されている壁境界条件は FVM での no-slip 境界に対応する bounceback 境界条件[11]である。bounceback では、粒子が壁に衝突した後、前方に跳ねるのではなく、入射方向と逆向きの後方に跳ね返る。したがって、壁面において接線方向の速度成分が

ゼロであり、法線方向の質量フラックスもゼロである。

LBM-LES において広く採用されている離散速度スキームは、DdQq スキームである[12]。このスキームの主な特徴の一つは、解析領域全体において様な正立方格子を使用することである。すなわち、計算領域の大きな部分と壁近傍の格子寸法が同様である。この状況では、壁近傍の格子が非常に粗い場合、bounceback 境界を用いた LBM-LES は FVM-LES と同様に壁面のせん断応力を正しく再現できない。したがって、高 Reynolds 数乱流において壁面せん断応力を適切に評価するためには、FVM-LES と同様に、LBM-LES においても壁関数を組み込むことが必要である。

そこで本研究では、壁関数を利用した新しい LBM の壁境界条件「wall-function bounce」境界を提案し、LBM の解析コードに実装する。そして、壁関数として Spalding 則を採用し、乱流チャネル流れを対象とした解析を実施し、提案した WFB 境界の有効性の検証を行う。

## 2. 壁関数が境界条件への組み込み

本節では、提案する Wall-function bounce の導出を説明する。まず、LBM において no-slip 境界条件の bounceback (以下 BB) 境界と free-slip 境界条件の相違を考察し、Wall-function bounce (以下 WFB) の中核的発想を示す。それに続き、3次元問題の D3Q 19 スキーム (Fig. 1) に基づき、WFB の実装方法を説明する。

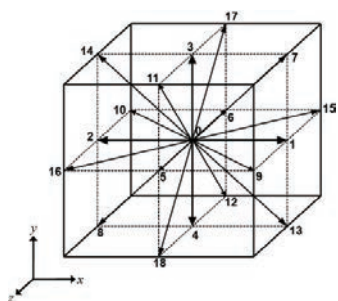


Fig. 1 Lattice of D3Q19

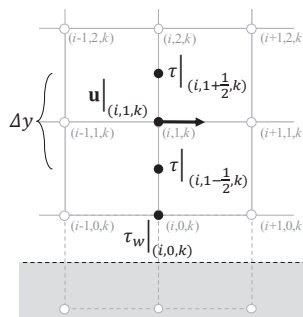
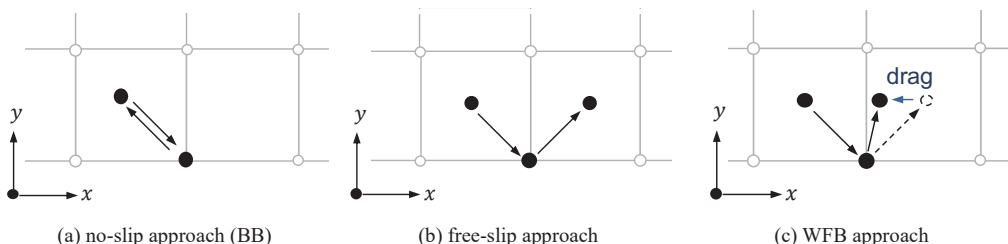


Fig. 3 Relationship between momentum variation and shear drag

LBM における最も広く使われている壁境界は BB 境界である。BB 境界において、入射した粒子は壁に衝突し、前方に跳ねるのではなく入射方向に跳ね返る[15] (Fig. 2a)。一方、LBM の free-slip 境界条件では、衝突した粒子は前方に跳ねる (Fig. 2b)。したがって、no-slip (BB) と free-slip 境界条件の区別は、単に対角線方向の前向きと後ろ向きの分布関数の値の交換でしかない。

壁関数を利用する場合は、Fig. 2c に示すように、free-slip 境界 (せん断応力無し) を基準に壁面のせん断応力を加え、その応力によって壁に衝突した粒子を減速させる必要があると考えられる。したがって、壁関数の効果は、前述の対角線方向の前向きと後ろ向きの分布関数の値を調整することで達成できる。



(a) no-slip approach (BB)

(b) free-slip approach

(c) WFB approach

Fig. 2 The difference among no-slip, free-slip, and WFB approaches

次に、壁関数に従い、より定量的に対角方向分布関数の調整を行う方法を考える。ここで、 $y$  方向を法線とする面が壁境界と仮定する。 $f_a^*$ を（壁関数を考慮しない）衝突後の $f_a$ 、 $\tilde{f}_a$ をさらに WFB 境界により修正した $f_a$ と定義する。 $\rho$ と $\mathbf{u}$ は、WFB 境界により得られる密度と速度である。

Fig. 3 に示すように離散点を定義し、境界層理論によると、壁近傍の離散化する運動量方程式は式(4)のように単純化することができる。

$$\frac{\rho \mathbf{u}|_{(i,1,k)}^t - \rho \mathbf{u}|_{(i,1,k)}^{t-\Delta t}}{\Delta t} = -\frac{\tau|_{(i,1+\frac{1}{2},k)} - \tau|_{(i,1-\frac{1}{2},k)}}{\Delta y} + \dots \quad (4)$$

ここで、 $\dots$ は運動量方程式における移流項と圧力勾配項である。

さらに、式 (4) は次の2つの式に分解できる。

$$\frac{\rho \boldsymbol{\nu}|_{(i,1,k)}^t - \rho \mathbf{u}|_{(i,1,k)}^{t-\Delta t}}{\Delta t} = -\frac{\tau|_{(i,1+\frac{1}{2},k)} - 0}{\Delta y} + \dots \quad (5a)$$

$$\frac{\rho \mathbf{u}|_{(i,1,k)}^t - \rho \boldsymbol{\nu}|_{(i,1,k)}^t}{\Delta t} = -\frac{0 - \tau|_{(i,1-\frac{1}{2},k)}}{\Delta y} = \frac{\tau_w|_{(i,0,k)}}{\Delta y} \quad (5b)$$

ここで、free-slip 境界条件（境界面上に無せん断応力）における仮想運動量 $\rho \boldsymbol{\nu}$ を導入した。これは、時間ステップ $t$ と $t - \Delta t$ の間の運動量変化における中間的かつ仮想的な状態である。

式 (5a)は、並進ステップおよび仮の free-slip 境界条件（右辺第1項分子の0）の下での運動量変化（ $\rho \mathbf{u}|_{(i,1,k)}^{t-\Delta t} \rightarrow \rho \boldsymbol{\nu}|_{(i,1,k)}^t$ ）を表す。本過程は LBM の並進過程で実行され、特別な処理は必要ない。本ステップにおいて、式 (5) の $\dots$ の項の効果が自動的に入っている。式 (5b) は、衝突ステップにおいて壁面のせん断応力 $\tau_w|_{(i,0,k)}$ を投入することによる運動量の修正（ $\rho \boldsymbol{\nu}|_{(i,1,k)}^t \rightarrow \rho \mathbf{u}|_{(i,1,k)}^t$ ）を表す。

次に、式 (5b) を $x$ と $z$ 成分に分解すれば（ $y$ 方向は法線方向であり、対応成分の速度はゼロ）、 $\tau_w$ は $x$ 方向成分 $\tau_{w,x}$ と $z$ 方向成分 $\tau_{w,z}$ に分解できる。同様に、 $\rho \mathbf{u}$ および $\rho \boldsymbol{\nu}$ は、 $\rho u_x$ 、 $\rho u_z$ および $\rho \nu_x$ 、 $\rho \nu_z$ にそれぞれ分解できる。したがって、次の両式が得られる。

$$\rho u_x|_{(i,1,k)} - \rho \nu_x|_{(i,1,k)} = \frac{\Delta t}{\Delta y} \tau_{w,x}|_{(i,0,k)} \quad (6a)$$

$$\rho u_z|_{(i,1,k)} - \rho \nu_z|_{(i,1,k)} = \frac{\Delta t}{\Delta y} \tau_{w,z}|_{(i,0,k)} \quad (6b)$$

次に、運動量の変化を分布関数の変化として表現する。本研究では、Fig. 1 に示すような3次元問題の D3Q19 離散速度スキームを用いる。D3Q19 の粒子速度 $\mathbf{e}_a$ は Table 1 に示す[15]。

Table 1 Discrete velocity vectors  $\mathbf{e}_a$  of D3Q19

$a$	$\mathbf{e}_a$	$a$	$\mathbf{e}_a$	$a$	$\mathbf{e}_a$
0	(0, 0, 0)	1, 2	( $\pm 1$ , 0, 0)	3, 4	(0, $\pm 1$ , 0)
5, 6	(0, 0, $\pm 1$ )	7, 8	( $\pm 1$ , $\pm 1$ , 0)	9, 10	( $\pm 1$ , 0, $\pm 1$ )
11, 12	(0, $\pm 1$ , $\pm 1$ )	13, 14	( $\pm 1$ , $\mp 1$ , 0)	15, 16	( $\pm 1$ , 0, $\mp 1$ )
17, 18	(0, $\pm 1$ , $\mp 1$ )				

式 (2) に従い、先ず free-slip 境界条件界を考慮すると、次の質量と運動量の式が成立する。

$$f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 + f_9 + f_{10} + f_{11} + f_{12} + f_{13} + f_{14} + f_{15} + f_{16} + f_{17} + f_{18} = \rho \quad (7a)$$

$$f_1 - f_2 + f_7 - f_8 + f_9 - f_{10} + f_{13} - f_{14} + f_{15} - f_{16} = \rho \nu_x \quad (7b)$$

$$f_3 - f_4 + f_7 - f_8 + f_{11} - f_{12} - f_{13} + f_{14} + f_{17} - f_{18} = \rho \nu_y = 0 \quad (7c)$$

$$f_5 - f_6 + f_9 - f_{10} + f_{11} - f_{12} - f_{15} + f_{16} - f_{17} + f_{18} = \rho v_z \quad (7d)$$

一方、WFB境界において、速度は $u_x, u_y$ と $u_z$ に変化し、密度 $\rho$ が変化しない。ここで、 $v_y = u_y = 0$ 。前述の発想に基づき、壁関数の効果は対角線方向の分布関数を割り当て表現する。したがって、WFB境界において、 $f_7, f_{11}, f_{14}$ と $f_{17}$ は $\tilde{f}_7, \tilde{f}_{11}, \tilde{f}_{14}$ と $\tilde{f}_{17}$ にそれぞれ変わる。質量と運動量の式は次のように変わる。

$$f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + \tilde{f}_7 + f_8 + f_9 + f_{10} + \tilde{f}_{11} + f_{12} + f_{13} + \tilde{f}_{14} + f_{15} + f_{16} + \tilde{f}_{17} + f_{18} = \rho \quad (8a)$$

$$f_1 - f_2 + \tilde{f}_7 - f_8 + f_9 - f_{10} + f_{13} - \tilde{f}_{14} + f_{15} - f_{16} = \rho u_x \quad (8b)$$

$$f_3 - f_4 + \tilde{f}_7 - f_8 + \tilde{f}_{11} - f_{12} - f_{13} + \tilde{f}_{14} + \tilde{f}_{17} - f_{18} = \rho u_y = 0 \quad (8c)$$

$$f_5 - f_6 + f_9 - f_{10} + \tilde{f}_{11} - f_{12} - f_{15} + f_{16} - \tilde{f}_{17} + f_{18} = \rho u_z \quad (8d)$$

さらに、 $f_7, f_{14}$ と $f_{11}, f_{17}$ は互いに独立である。したがって、式(6)-(8)から次式が得られる。

$$\tilde{f}_7 = f_7 + \frac{\Delta t}{2\Delta y} \tau_{w,x}, \quad \tilde{f}_{14} = f_{14} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \tau_{w,x}, \quad (9a)$$

$$\tilde{f}_{11} = f_{11} + \frac{\Delta t}{2\Delta y} \tau_{w,z}, \quad \tilde{f}_{17} = f_{17} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \tau_{w,z}. \quad (9b)$$

式(10)における $f_7, f_{11}, f_{14}, f_{17}$ が free-slip 境界における衝突後の分布関数であるので、衝突ステップの前は、 $f_{13}, f_{18}, f_8, f_{12}$ にそれぞれ対応する。したがって、WFB境界において、境界面の格子点の衝突ステップは下式のようにまとめられる。

$$\tilde{f}_7 = f_{13} + \frac{\Delta t}{2\Delta y} \tau_{w,x}, \quad \tilde{f}_{14} = f_8 - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \tau_{w,x}, \quad (10a)$$

$$\tilde{f}_{11} = f_{18} + \frac{\Delta t}{2\Delta y} \tau_{w,z}, \quad \tilde{f}_{17} = f_{12} - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \tau_{w,z}. \quad (10b)$$

式(10)は、本研究で提案したWFBの衝突ステップ最終アルゴリズムである。それらは、壁面のせん断応力 $\tau_w$ により減衰した速度を壁面の隣接格子に足すことを示している。 $\tau_{w,x}$ と $\tau_{w,z}$ は、壁関数から得られた $\tau_w$ の $x$ 成分と $z$ 成分であり、次のように解ける。ここで負号は、せん断応力 $\tau_{w,x}$ と $\tau_{w,z}$ が、接線成分速度の対応成分 $u_x$ と $u_z$ の逆方向にあると示している。

$$\tau_{w,x} = -\frac{u_x}{\sqrt{u_x^2 + u_w^2}} \tau_w, \quad \tau_{w,z} = -\frac{u_z}{\sqrt{u_x^2 + u_w^2}} \tau_w \quad (11)$$

次は、壁面のせん断応力 $\tau_w$ を計算する方法を説明する。本研究では、式(12)で示されるSpalding則を用いる。

$$y^+ = u^+ + e^{-\kappa B} \left[ e^{\kappa u^+} - 1 - (\kappa \cdot u^+) - \frac{(\kappa \cdot u^+)^2}{2} - \frac{(\kappa \cdot u^+)^3}{6} \right] \quad (12)$$

ここで、 $\kappa = 0.41, B = 5.5, y^+ = \frac{y}{u_\tau}, u^+ = \frac{|u|}{u_\tau}, u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$ 。なお、 $y^+$ と $u^+$ は摩擦速度 $u_\tau$ で無次元化された壁からの距離と速度である。

式(12)の両辺に $\tau_w$ が含まれるため、陰的数値解法により数回の繰り返し計算によって、Spalding則に基づく壁面せん断応力 $\tau_w$ を求める。

以上の方法により、WFB境界は実装される。注目すべきことに、提案したWFB境界条件においては、壁関数は必ずしもSpalding則に限定されない。壁面の適切なせん断応力 $\tau_w$ が計算できる限り、任意種類の壁関数をWFB境界条件に実装できる。

### 3. 解析と検証

#### 3. 1. 乱流チャンネル流れの概要

本研究で提案した WFB 境界条件の検証を目指し、乱流チャンネル流れを用いて LBM-LES (MRT モデル[16])の解析を行う。解析対象 (Fig. 4) は、Moin ら [17] と同じく、主流方向  $x$ 、壁面垂直方向  $y$ 、スパン方向  $z$  の各方向にそれぞれ  $2\pi D$ 、 $2D$ 、 $\pi D$  とした。 $D$  (チャンネルの半幅の高さ) と摩擦速度  $u_\tau$  で定義される  $Re_\tau = u_\tau D / \nu$  は 640 である (チャンネル中心の平均速度で定義される  $Re$  は約 13800)。本研究では標準 Smagorinsky SGS モデル ( $C_s = 0.1$ [18]) を使い、van-Driest 型減衰関数[19]を組み込んだ。 $x$ 方向と $z$ 方向の境界は周期的であり、 $y$ 方向の境界は BB 或いは WFB 境界を実装する壁である。発達した乱流を十分長い時間サンプリングした後、応力の平衡状態が達成され、壁面の摩擦速度  $u_\tau$  は概ね理論値 640 に近い値となった。したがって、解析結果を  $D$  と  $u_\tau$  の理論値で無次元化する。ケース設定は Table 2 に示す。

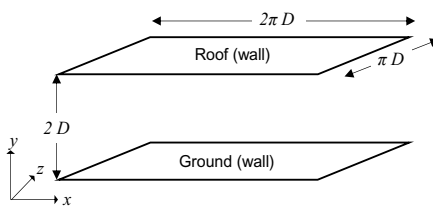


Fig. 4 Simulation domain of the channel flow

Table 2 Case settings

Test case	Grid resolution	Mesh quantity	$y^+$ at the first layer grid	y-direction B.C.
D20_BB	D/20	128(x) × 40(y) × 64(z)	32	BB
D20_WFB				WFB
D40_BB	D/40	256(x) × 80(y) × 128(z)	16	BB
D40_WFB				WFB

壁関数の検証には、壁近傍の第一層格子を対数層または遷移層に配置する ( $y^+$  を大きくする) のが必要である。しかしながら、第一層格子を対数層に配置すれば、格子が粗すぎ、解析領域全体の解析精度が低下する可能性がある。したがって、本研究では、格子解像度が  $D/20$  と  $D/40$  を使い、第一層格子を遷移層に配置した ( $y^+ \sim 32, 16$ )。非圧縮性流れを扱う場合、LBM は擬似圧縮性方法であるため、不適切な離散時間刻みを使用すると、圧縮率誤差が生じる可能性がある [20]。これを回避するために事前計算を行い、格子解像度  $D/20$  と  $D/40$  の離散時間刻みは、それぞれ  $1/800$  と  $1/1600$  秒とした。

#### 3. 2. 解析結果

各ケースの時間平均速度プロファイル及び Hussain ら [21] の実験結果を Fig. 5 に示す。BB 境界の欠陥のために、緩衝層 ( $y^+ < \sim 100$ ) では、特に第一層格子においては、 $D20\_BB$  と  $D40\_BB$  は時間平均速度を過小評価した。格子解像度の向上に伴い、偏差は部分的に補正された。一方、 $D20\_WFB$  と  $D40\_WFB$  では、第一層格子点の速度は概ね Spalding 則のプロファイルの上に位置し、実験値ともよりよく一致した。したがって、WFB 境界条件は Spalding 則に従って壁面のせん断応力を正しく再現し、速度を修正したと示している。

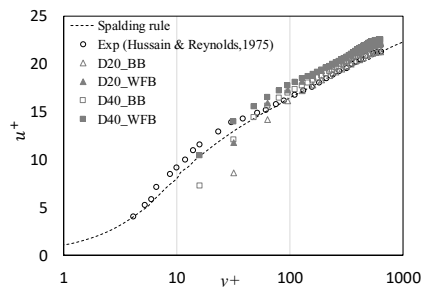


Table 3 Value of  $b$  for each case

Case name	$b$	Case name	$b$
D20_BB	5.6	D20_WFB	6.5
D40_BB	6.2	D40_WFB	6.8
Exp (Hussain & Reynolds, 1975)	5.4		

Fig. 5 Distribution of time-averaged velocity

壁からの距離の増大に伴い、慣性力が支配的になり、次の式で表される対数則に従うことになる ( $y^+ > \sim 100$ )。

$$\frac{|\langle \mathbf{u} \rangle|}{u_\tau} = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + b \quad (15)$$

ここで、 $\kappa = 0.41$ はカルマン定数であり、 $b$ は実験条件によって多少のばらつきがみられるが約 4.8~5.9 の範囲の値が報告されている[22]。本研究の計算結果として得られた各ケースの  $b$  の値を Table 3 に示している。対数層において、各ケースの平均速度は、実験値より過大評価された。なお、WFB の場合では、BB より平均速度はさらに大きくなった。それは、今回用いた格子解像度が壁面近傍の乱流場を再現するのに必ずしも十分でなく、精度をよく捉えなかったことが原因のひとつだと考える。それでも、全ケースは概ね対数則に領域が生じた。

Fig. 6 は、各方向成分の変動速度の標準偏差  $\sqrt{\langle u_x'^2 \rangle}$ ,  $\sqrt{\langle u_y'^2 \rangle}$  及び  $\sqrt{\langle u_z'^2 \rangle}$  をそれぞれ示している。Hussain らの実験結果以外、Clark [23]の実験値をも添付した。BB 両ケースにおいて、壁近傍の  $\sqrt{\langle u_x'^2 \rangle}$  は実験値に比べて大きな差異があった (Fig. 6a) が、WFB はその差異をある程度補正した。壁近傍の  $\sqrt{\langle u_y'^2 \rangle}$  は、BB と WFB の両方の場合で過小評価された (Fig. 6b)。これは格子が十分に細かくない LES 計算の共通の傾向である[24]。一方、すべてのケースにおいて、 $\sqrt{\langle u_z'^2 \rangle}$  は過大評価されたが (Fig. 6c)、それらの分布傾向は実験値と同様であった。さらに、壁面における格子点の平均速度と変動速度の両方に対し、BB と同様に、WFB の値はゼロに維持した。

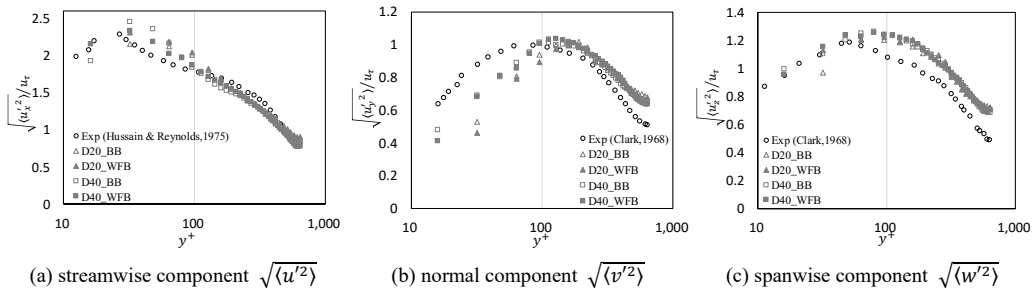


Fig. 6 Results of the fluctuating velocity

#### 4. おわりに

本研究では、壁関数を LBM の境界条件に組み込んだ wall-function bounce (WFB) を提案した。WFB において、壁関数として Spalding 則を実装した。さらに、LBM-LES 使用した乱流チャンネル流れを用い、提案した境界条件の検証を行った。WFB の基本的考え方は、free-slip (無壁面せん断応力) 境界を基準に、壁関数から計算された壁面のせん断応力によって壁面近傍の流体を減速する。その速度変化に基づき、一部の分布関数を修正し、そのせん断応力の効果を反映する。

WFB は、壁面のせん断応力を適切に再現でき、BB 境界条件に比べて壁近傍の速度の予測精度を改善した。提案した WFB は、建物周辺や都市空間における大規模乱流の LBM-LES をより適用する と考える。これは今後の研究課題とする。

## 5. 謝辞

本研究の一部は、日本学術振興会特別研究員奨励費（DC2, KAKENHI 18J13607/Mengtao Han）、及び東京大学情報基盤センター若手・女性利用制度の助成を受けた。ここに記して深甚なる謝意を表します。最後、本研究に有益な御助言を賜った東京大学生産技術所の半場藤弘教授に謝意を表します。

## 記号表

$\mathbf{e}_a$ :	a 番目の粒子離散速度ベクトル, $\text{m s}^{-1}$	$\mathbf{r}$ :	粒子の空間位置ベクトル, $\text{m}$	$f_a$ :	a 番目の粒子離散速度ベクトル $\mathbf{e}_a$ に対応する分布関数
$e_s$ :	LBM における音速	$t$ :	ある時刻, $\text{s}$	$\Delta t$ :	時間ステップ, $\text{s}$
$\Omega_a$ :	衝突関数	$\rho$ :	流体密度, $\text{kg m}^{-3}$	$p$ :	局所圧力, $\text{Pa}$
$F_a$ :	a 方向の外力	$\nu$ :	流体動粘性係数, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$	$\nu_{total}$ :	流体総動粘性係数, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
$\tau$ :	緩和時間	$C_s$ :	Smagorinsky 定数	$y$ :	壁からの距離, $\text{m}$
$y^+$ :	壁からの無次元距離, $= yu_\tau/\nu$	$u_\tau$ :	壁面の摩擦速度, $\text{m s}^{-1}$	$\tau_w$ :	壁面せん断応力, $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$
$\tau$ :	応力, $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$	$D$ :	チャネル高さの半幅, $\text{m}$	$\mathbf{u}$ :	風速ベクトル, $\text{m s}^{-1}$
$\boldsymbol{\nu}$ :	free-slip 境界条件における仮想速度, $\text{m}^1 \text{s}^{-1}$	$x, y, z$ :	空間座標の 3 方向成分 (主流方向、壁面に垂直方向、スパン方向)	$u_x, u_y, u_z$ :	$\mathbf{u}$ の 3 方向成分, $\text{m s}^{-1}$ (主流方向、壁面に垂直方向、スパン方向)
$\nu_x, \nu_y, \nu_z$ :	$\boldsymbol{\nu}$ の 3 方向成分, $\text{m s}^{-1}$ (主流方向、壁面に垂直方向、スパン方向)	$\sqrt{\langle u_x'^2 \rangle}, \sqrt{\langle u_y'^2 \rangle}, \sqrt{\langle u_z'^2 \rangle}$ :	変動風速の標準偏差の 3 方向成分, $\text{m s}^{-1}$ (主流方向、壁面に垂直方向、スパン方向)		

## 添字と計算記号

$f_a^*$ :	衝突ステップによる更新した分布関数 $f_a$	$\tilde{f}_a$ :	WFB による修正した $f_a$	$\Phi _{(i,j,k)}$ :	格子点 $(i, j, k)$ における物理量 $\Phi$
$\Phi ^t$ :	時刻 $t$ の時の物理量 $\Phi$	$ \Phi $ :	ベクトル $\Phi$ の大きさ	$\langle \Phi \rangle$ :	物理量 $\Phi$ の時間平均

## 参考文献

- [1] M. Han, R. Ooka, H. Kikumoto, Lattice Boltzmann method-based large-eddy simulation of indoor isothermal airflow, *Int. J. Heat Mass Transf.* 130 (2019) 700–709. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.10.137.
- [2] M. Han, R. Ooka, H. Kikumoto, Comparison between lattice Boltzmann method and finite volume method for LES in the built environment, in: 7th Int. Symp. Comput. Wind Eng. 2018, Seoul, 2018; pp. 2–5.
- [3] W. Versteeg, H.K. and Malalasekera, An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. Pearson Education., 44 (2007).
- [4] H. Werner, H. Wengle, Large-Eddy Simulation of Turbulent Flow Over and Around a Cube in a Plate Channel, in: *Turbul. Shear Flows 8*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1993; pp. 155–168. doi:10.1007/978-3-642-77674-8\_12.
- [5] G. Grötzbach, Direct numerical and large eddy simulations of turbulent channel flows, *Enycl. Fluid Mech.* 6 (1987) 1337–1391.
- [6] B.E. Launder, D.B. Spalding, The numerical computation of turbulent flows, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 3 (1974) 269–289. doi:10.1016/0045-7825(74)90029-2.
- [7] D.B. Spalding, A Single Formula for the “Law of the Wall,” *J. Appl. Mech.* 28 (1961) 455. doi:10.1115/1.3641728.
- [8] T. Stathopoulos, B.A. Baskaran, Computer simulation of wind environmental conditions around buildings, *Eng. Struct.* 18 (1996) 876–885. doi:10.1016/0141-0296(95)00155-7.
- [9] Y. Toparlar, B. Blocken, P. Vos, G.J.F. van Heijst, W.D. Janssen, T. van Hooff, H. Montazeri, H.J.P. Timmermans, CFD simulation and validation of urban microclimate: A case study for Bergpolder Zuid, Rotterdam, *Build. Environ.* 83 (2015) 79–90. doi:10.1016/J.BUILDENV.2014.08.004.
- [10] H. Kikumoto, R. Ooka, M. Han, K. Nakajima, Consistency of mean wind speed in pedestrian wind environment

- analyses: Mathematical consideration and a case study using large-eddy simulation, *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 173 (2018) 91–99. doi:10.1016/j.jweia.2017.11.021.
- [11] D.P. Ziegler, Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations, *J. Stat. Phys.* 71 (1993) 1171–1177. doi:10.1007/BF01049965.
- [12] Y.H. Qian, D. D’Humières, P. Lallemand, Lattice bkg models for navier-stokes equation, *Epl.* 17 (1992) 479–484. doi:10.1209/0295-5075/17/6/001.
- [13] 韓夢濤, 大岡龍三, 菊本英紀, 4055.格子ボルツマン方程式から流体支配方程式の誘導 その1 格子ボルツマン方程式の Chapman-Enskog 展開, in: 日本建築学会関東支部2017年度 (第88回) 研究発表会研究報告集, 2018; pp. 199–202.
- [14] 韓夢濤, 大岡龍三, 菊本英紀, 4056.格子ボルツマン方程式から流体支配方程式の誘導 その2 連続の式と Navier-Stokes 式の導出, in: 日本建築学会関東支部2017年度 (第88回) 研究発表会研究報告集, 2018; pp. 203–206.
- [15] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E.M. Viggien, *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*, Springer, 2017. doi:10.1007/978-3-319-44649-3.
- [16] D. d’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, L.-S. Luo, Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions, *Philos. Trans. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* 360 (2002) 437–451. doi:10.1098/rsta.2001.0955.
- [17] P. Moin, J. Kim, Numerical investigation of turbulent channel flow, *J. Fluid Mech.* 118 (1982) 341–377. doi:10.1017/S0022112082001116.
- [18] R.S. Rogallo, P. Moin, Numerical Simulation of Turbulent Flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 16 (1984) 99–137. doi:10.1146/annurev.fl.16.010184.000531.
- [19] E.R. Van Driest, On Turbulent Flow Near a Wall, *J. Aeronaut. Sci.* 23 (1956) 1007–1011. doi:10.2514/8.3713.
- [20] 韓夢濤, 大岡龍三, 菊本英紀, 格子ボルツマン法を用いた建築周辺気流のLES その2 Turbulent channel flowを対象としたベンチマークテスト, in: 日本建築学会大会学術講演梗概集 (北陸) 2019年9月, 2019; pp. 661–662.
- [21] A.K.M.F. Hussain, W.C. Reynolds, Measurements in Fully Developed Turbulent Channel Flow, *J. Fluids Eng.* 97 (1975) 568. doi:10.1115/1.3448125.
- [22] 堀内潔, Large Eddy Simulationにおける移流項の近似法について, *生産研究.* 38 (1986) 576–579. <http://ci.nii.ac.jp/naid/10004231338/ja/> (accessed November 7, 2019).
- [23] J.A. Clark, A Study of Incompressible Turbulent Boundary Layers in Channel Flow, *J. Basic Eng.* 90 (1968) 455. doi:10.1115/1.3605163.
- [24] U. Piomelli, J.H. Ferziger, P. Moin, Models for large eddy simulations of turbulent channel flows including transpiration, *Stanford Univ. Rep.* (1987) TF-32.



# カスケード選択型分子動力学シミュレーションで実現する環状ペプチドの膜透過シミュレーション

原田 隆平

筑波大学計算科学研究センター

## 1. はじめに

平成 31 年度 (前期) スーパーコンピューター若手・女性利用者推薦制度の採択課題「カスケード選択型分子動力学シミュレーションで実現する環状ペプチドの膜透過シミュレーション」の研究成果を報告する。報告内容は、採択期間において開発を進めた膜透過シミュレーション実現の計算手法の紹介と、モデル環状ペプチドへの適用である。

## 2. イントロダクション

生体膜から薬剤分子を生体内に取り込み、疾患原因となる標的分子と相互作用して活性阻害した後、生体外へ排出されるプロセスにおいて、膜透過に伴う薬剤分子の構造変化を解析することは、有益な設計情報を提供する。薬剤設計の主流は、抗体医薬をはじめとするバイオ医薬である。しかしながら抗体医薬にも、(1) タンパク質であるため経口投与が困難、(2) サイズの大きさから細胞内に侵入困難など、今後解決すべき問題点が存在する。近年、抗体医薬の問題点を打開すべく、「中分子医薬」が注目を浴びている。中分子医薬は分子量が 500~2000 であり、低分子医薬と抗体医薬の中間に位置する。中分子医薬の中でもペプチド医薬は、アミノ酸を線形に連結することが容易であり、経口投与可能な薬剤を合成できる。しかし、線形ペプチドのサイズは大きく、生体膜を透過して生体内へ侵入することが困難であり、抗体医薬の問題点(2)を依然として解決していない。問題を解決する化合物として、「中分子環状ペプチド」が注目を浴びている。中分子環状ペプチドは、アミノ酸が環状骨格を形成したペプチドであり、アミノ酸を環状につなぐことでサイズを小さくできる。また、親水性と疎水性のアミノ酸を調整して設計すれば、環状構造の特性を活かすことで、生体膜外では親水性のアミノ酸を外側に、生体膜内では疎水性のアミノ酸を外側に配置した立体配座を選択できるので両親媒となり、生体膜の内外を容易に透過できる。更に、環状構造であるため、線形ペプチドと比較して生体内で分解し難くなるため、活性効率が上昇する。以上より中分子医薬は、低分子医薬と抗体医薬に代わるブレイクスルーとして期待されている。しかし、環状ペプチドを実験的に合成可能でも、生体膜透過時の構造変化を追跡することは困難な場合が多い。そこで、膜透過プロセスの詳細な遷移過程を抽出できれば、薬剤設計に有益な構造情報を提供できる。膜透過プロセスを抽出する計算科学的なアプローチとして、分子動力学シミュレーション (MD) は中分子環状ペプチドの構造変化を原子レベルの高分解能で追跡できる。しかし、現状の MD を用いて低い計算コストで膜透過プロセスを抽出することは技術的な面から難しい。何故ならば、中分子環状ペプチドが膜透過するために要する時間

スケールと比較し、現状のMDが追跡可能な時間スケールが極めて短いからである。本研究では、現実的な計算コストで膜透過プロセスを抽出するために我々が開発した生体分子のレアイベントサンプリング法である「Parallel Cascade Selection MD (PaCS-MD)」[1]を適用する。PaCS-MDは、生体分子の機能発現に重要な長時間ダイナミクス（レアイベント）を効率的に抽出する分子シミュレーション技術である。本研究では、中分子環状ペプチドの膜透過プロセスをレアイベントと見なし、PaCS-MDを適用して抽出することを立案した。将来的にPaCS-MDを適用し、膜透過に伴う中分子環状ペプチドの透過性を見積もることができれば、中分子医療において、どの様にアミノ酸配列を設計すれば効率的に膜透過を実現するかに関する配列情報を提供できる点において重要性がある。また、技術的な観点から、PaCS-MDを用いた膜透過性の評価スキームを構築後、開発した分子シミュレーション技術をパッケージ化し、理論・実験研究者に利用可能な形で公開を目指す。

### 3. 計算手法の構築

#### 3.1 Parallel Cascade Selection MD (PaCS-MD)

カスケード型超並列シミュレーションは、「初期構造の選択」と「選択した初期構造からリスタートする短時間MDシミュレーション」による「構造リサンプリング」を繰り返すことにより遷移経路を探索する。これまでに我々が開発してきた計算手法に関しては、レビュー論文 [2, 3] を参照にされたい。本手法は、バイアスをかけることなく構造間の遷移経路を探索する。従来法では、構造遷移を促進するため系の温度を高温にしてMDシミュレーションを実行するか、系の特定の部分に外力や外部ポテンシャルといった「バイアス」を付加することがほとんどである [4, 5]。従来法に対して本手法は、反応座標を設定してしまえば、遷移確率が高い初期構造を選択し、短時間MDシミュレーションにより構造リサンプリングを繰り返していただけなので、バイアスは使用しない。更に、パラメータを最適化するための準備計算も必要としない。本手法により効率的に構造探索が可能であるのは、構造リサンプリングを通して「稀にしか発生しない分子構造」の出現確率を選択的に上昇させているからである。図1に本手法の概念図を示す。図1に示す様に、始構造からスタートして終構造へ遷移する可能性が高い候補構造を反応座標に基づき選択し、短時間MDシミュレーションをリ

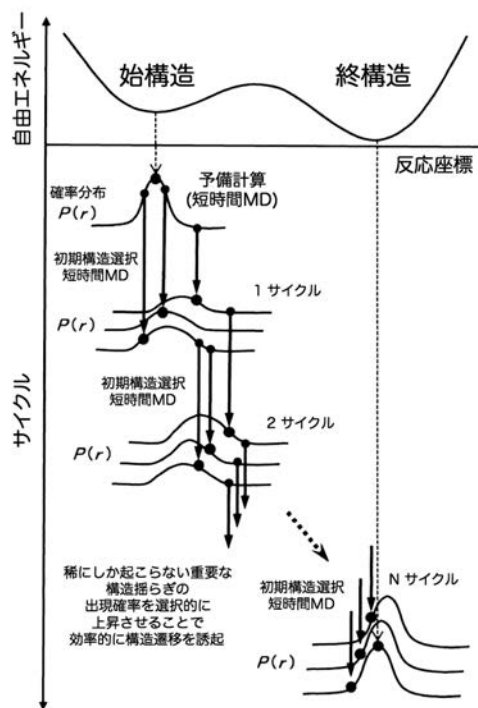


図1: カスケード型超並列シミュレーション

スタートさせるサイクルを繰り返すことで、徐々に構造分布が終構造近傍に近づいていく。手法適用にあたり様々な反応座標が考えられるが、終構造が分かっている場合に関して、終構造に対する平均自乗距離 (root-mean square deviation: RMSD) が考えられる。例えば、構造リサンプリングにより得られるトラジェクトリを RMSD の値でランキングし、値の小さい順にスナップショットを複数個選択し、短時間 MD シミュレーションの初期構造として構造探索していくことにより、徐々に終構造へ近づいていき、レアイベントを抽出することができる。ここで、反応座標は任意に指定可能であり、RMSD に限らず指定できる。実際の適用では、抽出したいレアイベントを的確に記述する合理的な反応座標を指定することが重要になることに注意されたい。

### 3.2 PaCS-MD による環状ペプチドの膜透過プロセス抽出

中分子環状ペプチドの膜透過プロセスは、現状の MD が到達可能な時間スケールより遥かに長時間の時間スケールで起こるレアイベントであるため、レアイベントサンプリング法である PaCS-MD を適用し、膜透過プロセスを抽出する。具体的には、PaCS-MD を中分子環状ペプチドの膜透過プロセス抽出に適用し、膜透過時の構造遷移を解析する。

デモンストレーションとして、脂質二重膜 (POPC) で生体膜を模し、環状ペプチドと共に計算機上にモデリングする。ここで、図2に示す様に PaCS-MD の始構造を (膜透過前)、終構造を (膜透過後) に設定する。また、初期構造を選択する指標として透過方向に Z 軸を定義し、環状ペプチドの Z 座標に注目する。膜透過に関する遷移経路を抽出するため、PaCS-MD のサイクル毎に、常

に Z 座標が大きな値を持つ中分子環状ペプチドの構造を初期構造に選択し、短時間 MD をリスタートする。上述のサイクルを繰り返すことで、常に膜内部に透過する確率が高いスナップショットから優先的に短時間 MD をリスタートすることになるので、抽出確率を上昇させることができる。最終的に、サイクルを十分繰り返した後、環状ペプチドの膜透過プロセスを抽出できる。ターゲットとして、簡単なモデル環状ペプチドを用いて POPC の膜透過プロセスを抽出できるか検証し、本計算手法の妥当性を評価する。

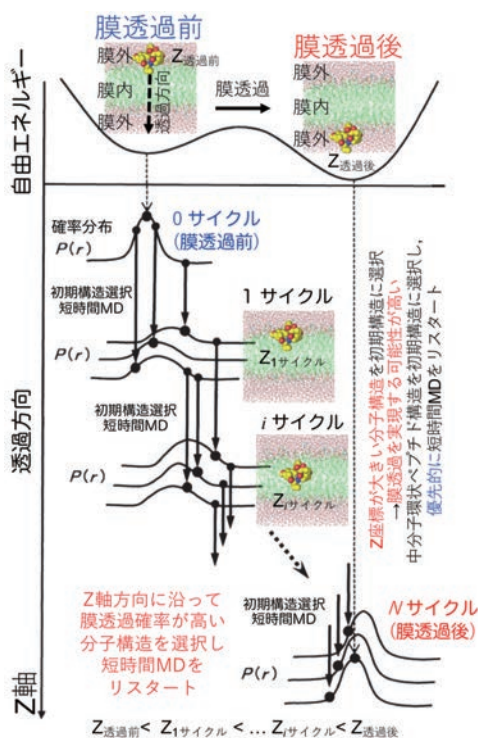


図2: PaCS-MD による膜透過プロセス抽出

### 3.3 PaCS-MD を用いたモデル環状ペプチドの膜透過プロセスの抽出

デモンストレーションとして、計算手法をモデル環状ペプチドの POPC の膜透過プロセス抽出に適用した。計算手順として、モデル環状ペプチドを POPC の上方にモデリングし、膜透過方向を Z 方向と定義し、PaCS-MD のサイクル毎に一番 Z 座標が大きいスナップショットを次のサイクルの初期構造に選択し、構造リサンプリングを繰り返した。図 3

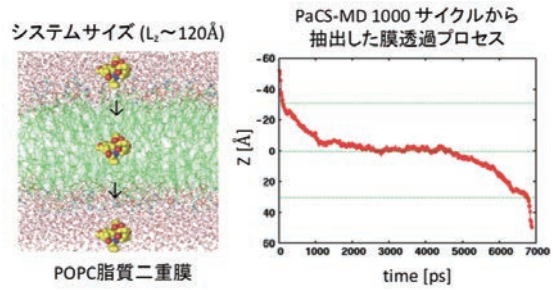


図 3: PaCS-MD による抽出した膜透過プロファイル

に PaCS-MD を 1,000 サイクル繰り返した後に得られた膜透過プロセスの Z 軸方向への射影 (モデル環状ペプチドの透過プロファイル)を示す。図 3 に示す様に、PaCS-MD を用いることで POPC の上方から下方へモデル環状ペプチドの膜透過プロセスを抽出できていることが分かる。次に、モデル環状ペプチドが膜表面から膜内部へ透過する際の構造変化を調べてみると、モデル環状ペプチドの分子構造が大きく構造変化していることが分かった (図 4 を参照)。具体的には、水中から膜内部へ透過する際に、疎水性官能基であるメチル基 ( $\text{CH}_3$ ) 部分を内側の疎水コアから外側へフリップする構造変化が観測された。具体的には、図 4 に示す様に、膜表面で水中から膜内部へ透過時のモデル環状ペプチドの慣性半径と露出表面積を調べてみると、いずれも値が急激に大きくなる傾向を示した。この現象は、モデル環状ペプチドの疎水基が水中では内側の疎水コアにコンパクトにパックされた状態にあるが、膜内部は疎水環境であるので、親和性を高めるために、疎水官能基が外側へ押し出さ、フリップすることで安定化するためだと考えることができる。環状ペプチドは、親水基と疎水基を両方持ち合わせることで細胞内外との親和性を調節できる点から判断して、PaCS-MD が抽出したモデル環状ペプチドの構造変化は妥当である。本研究成果が示す様に、環状ペプチド

の親水性と疎水性の調節を、疎水官能基のフリップに基づく構造変化として計算化学的に観測できた点において、将来的に中分子創薬への応用が期待できる。今後は、PaCS-MD で抽出した膜透過プロセスの自由エネルギープロファイルを計算するスキームを PaCS-MD とマルコフ状態モデル [6-8] を組み合わせること

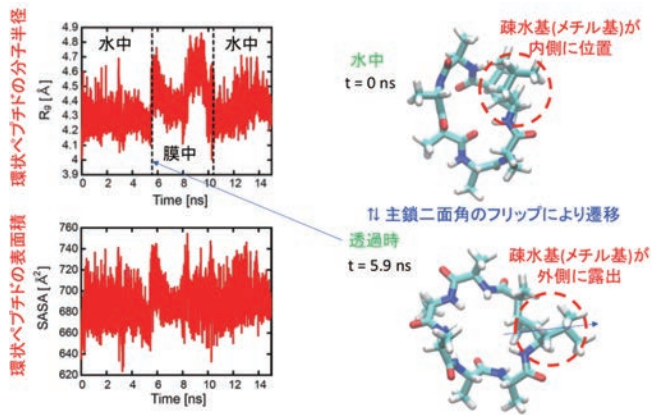


図 4: 膜透過時のモデル環状ペプチドの構造変化 (分子半径と表面積)

で構築し、定量的な膜透過性評価を実現したい。

#### 4. まとめと今後の展望

本研究では、PaCS-MD を環状ペプチドの膜透過プロセスの抽出に適用し、実際にその素過程の抽出に成功した。今後の課題としては、PaCS-MD で抽出した膜透過トラジェクトリを自由エネルギー上で定量的に評価することである。自由エネルギー計算は様々なアプローチが考えられるが、出来るだけ計算コストが少ない方法論を構築していきたい。例えばマルコフ状態モデルの構築と PaCS-MD を併用することで、比較的低い計算コストで自由エネルギープロファイルを計算可能かもしれない。しかし、1回の膜透過プロセスだけでは統計量が足りず、信頼性の高いマルコフ状態モデルを構築できないかもしれない。故に、PaCS-MD に加えて他のサンプリング手法を併用することで最小自由エネルギープロファイルを計算するスキームなどが必要になるかもしれない。具体的には、既存のパスサンプリング法 [9, 10] との併用が考えられる。具体的には、最初に PaCS-MD で数本膜透過プロセスを効率的に生成しておき、パスサンプリング法により最適な透過経路かどうか判定するスキームである。今後は、PaCS-MD が生成するレアイベントの定量的評価を見据え、より強力な計算手法に発展させていく予定である。

#### 5. 謝辞

本研究は、東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」2019年度(前期)の採択課題として、Reedbush-H を用いて行われた。

#### 参考文献

1. Harada, R. & Kitao, A. (2013) Parallel cascade selection molecular dynamics (PaCS-MD) to generate conformational transition pathway, *J. Chem. Phys.* **139**, 035103-1-10.
2. Harada, R., Takano, Y., Baba, T. & Shigeta, Y. (2015) Simple, yet powerful methodologies for conformational sampling of proteins, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 6155-6173.
3. Harada, R. (2018) Simple, yet Efficient Conformational Sampling Methods for Reproducing/Predicting Biologically Rare Events of Proteins, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **91**, 1436-1450.
4. Torrie, G. M. & Valleau, J. P. (1977) Non-Physical Sampling Distributions in Monte-Carlo Free-Energy Estimation - Umbrella Sampling, *J. Comput. Phys.* **23**, 187-199.
5. Torrie, G. M. & Valleau, J. P. (1977) Monte-Carlo Study of a Phase-Separating Liquid-Mixture by Umbrella Sampling, *J. Chem. Phys.* **66**, 1402-1408.
6. Lane, T. J., Bowman, G. R., Beauchamp, K., Voelz, V. A. & Pande, V. S. (2011) Markov State Model Reveals Folding and Functional Dynamics in Ultra-Long MD Trajectories, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 18413-18419.
7. Weber, J. K. & Pande, V. S. (2011) Characterization and Rapid Sampling of Protein Folding Markov

State Model Topologies, *J. Chem. Theory Comput.* **7**, 3405-3411.

8. Husic, B. E. & Pande, V. S. (2018) Markov State Models: From an Art to a Science, *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 2386-2396.

9. Maragliano, L., Fischer, A., Vanden-Eijnden, E. & Ciccotti, G. (2006) String method in collective variables: Minimum free energy paths and isocommittor surfaces, *J. Chem. Phys.* **125**, 024106-1-15.

10. Maragliano, L. & Vanden-Eijnden, E. (2007) On-the-fly string method for minimum free energy paths calculation, *Chem. Phys. Lett.* **446**, 182-190.

# 次世代気象ライブラリによる、台風内部の雷にエアロゾルが 与える影響評価

佐藤 陽 祐

北海道大学理学研究院

## 1. はじめに

雷はそれ自身が高度に電子化された現代社会において大きな脅威となるだけでなく、豪雨をもたらす積乱雲に伴って発生することから、古くから気象学の研究対象であった。雷は豪雨・豪雪をもたらす積乱雲中で、霰を主成分とする雲粒（雲粒には液滴・霰・氷晶・雪片・雹など様々な種類のものがあるが本稿では、それらを総称して雲粒と呼ぶ）が発生し、霰が氷晶や雪片と言った他の固相の雲粒と衝突することで電荷分離が起きて<sup>1</sup>生じる電氣的な偏りを中和する現象であると考えられている。

この霰と氷晶・雪片との衝突プロセスは雲粒のサイズ、形状、表面状態、密度などの、雲の微物理特性に大きく依存する。そのため、雷の基礎的な特性に積乱雲の微物理特性が密接に関わっていると考えられる。この雲の微物理特性に関する研究は様々な手法で古くから行われており、雲粒の微物理特性は大気中の小さな粒子：エアロゾルに大きく依存し、エアロゾルの増減に伴って雲の微物理特性が変化することが知られている（エアロゾル雲相互作用<sup>2,3</sup>）。このエアロゾルの増減に伴う微物理特性が変化によって、積乱雲から発生する降水のタイミングや、降水量が変化することも報告されている<sup>4</sup>。前述のように雷放電が雲の微物理特性に大きく依存することを考慮すれば、雲の微物理特性に大きな影響のあるエアロゾルにも雷の頻度や特性が依存することが考えられる。実際に近年の雷を直接扱った数値気象モデル（雷気象モデル）によるアメリカ大陸のスコールラインを対象とした研究では、エアロゾルの数密度が増加することにより、雷の発生頻度が増加するといった報告<sup>5</sup>がされており、雷とエアロゾルの関係に関する研究が進められている。

本研究に先行する研究（平成30年度後期、若手・女性利用課題：次世代気象気候ライブラリを用いた雷の発生プロセスの解明、以下、先行する研究と表記）では、雷気象モデルを用いて、台風周辺の雷と台風のライフサイクルに関する数値実験を行なった。台風の雲は積乱雲によって構成されていることから、台風の雷特性に関してもエアロゾルが影響していることが予想されるが、雷を直接扱うことのできる雷気象モデルを用いた、台風周辺の雷とエアロゾルに関する数値実験はほとんど行われていない。

そこで、本研究では台風周辺で発生する雷にエアロゾルが与える影響を、気象雷モデルによる数値実験から調査することを目指した。

## 2. 手法と実験設定

### 2.1. 数値モデル

実験に用いた気象モデルは次世代気象気候ライブラリ Scalable Computing for Advanced Library and Environment (SCALE<sup>6,7</sup>) version 5.0.0 に雷コンポーネント<sup>8</sup>を実装した気象モ

デルである。SCALE は有限体積法によって空間離散化を行い、大気密度、温位、比湿などのスカラー量はグリッドの中央で、3次元の運動量はグリッドの側面に定義する Arakawa-C 格子を採用している。時間積分は3段の Runge-Kutta 法を採用し、比湿などのトレーサーについては非負保証のスキームを用いて、負値が発生することを抑制している。素過程として雲微物理過程<sup>9-11</sup>、乱流輸送<sup>12-14</sup>、地表面フラックス<sup>15</sup>、放射モデル<sup>16</sup>、都市モデル<sup>17</sup>などが実装されている。本研究で用いた雷コンポーネントはこれらの素過程の一つであり、著者が自ら開発して SCALE に実装し、先行する研究でその妥当性を評価した。

この雷コンポーネントは、雲粒を含めた水物質が持つ電荷を予報変数とし、電荷分離過程（水物質が電荷を獲得する過程）、電荷の移動、電場の計算、放電（中和：水物質が電荷を失う過程）から成る。電荷分離は Takahashi (1978)<sup>1</sup> の室内実験によって提唱された着氷電荷分離機構を以下のように実装した。着氷電荷分離機構では、雲内であられ (Graupel) と氷または雪が衝突し、併合せずに弾む際に電荷分離が生じるという機構である。SCALE の雲微物理モデル内で、あられを含んだ水物質が衝突することで水物質が成長するプロセスは陽に計算されている。この計算から算出される、あられと氷・雪との衝突の割合などを用いて、単位時間あたりにあられと氷、またはあられと雪が衝突し弾むことで、あられ、雪または氷が獲得する電荷分離量 ( $d\rho_g/dt$ ,  $d\rho_{i,s}/dt$ ) は式(1), (2)のように計算される。

$$\frac{d\rho_g}{dt} = \delta\rho \int_0^\infty \int_0^{r_2} n_g(r_1)n_{i,s}(r_2)\pi(r_1+r_2)|V_g(r_1) - V_{i,s}(r_2)|E_{coll}(1 - E_{coal})dr_1dr_2, \quad (1)$$

$$\frac{d\rho_{i,s}}{dt} = -\frac{d\rho_g}{dt}. \quad (2)$$

ここで  $n$  は水物質（あられ、雪、氷など）の数濃度、 $V$  は水物質の終端落下速度、 $r$  は水物質の半径であり、下付き文字の  $g$ ,  $i$ ,  $s$  などはあられ、氷、雪を表す。また  $E_{coll}$  は衝突確率、 $E_{coal}$  は併合確率である。 $\delta\rho$  は1回の衝突と弾みによってあられが獲得する電荷分離量であり、Takahashi (1978)<sup>1</sup> の室内実験により作成されているルックアップテーブルからデータベースを作成した。式(1)右辺の $\delta\rho$ 以外の部分が単位時間あたりにあられと雪または氷が衝突して弾む確率である。

電荷分離過程によって電荷を獲得した水物質は風や水物質の落下とともに移動する。水物質の密度やサイズの違いによって雲内に電荷の空間分布が生成される。この電荷密度の空間分布と電位 ( $\phi$ ) の関係式

$$\Delta\phi = -\frac{\rho(x,y,z)}{\epsilon}. \quad (3)$$

を用いて、計算領域全体の電位が、また電位と電場 ( $\mathbf{E}$ ) の関係

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi. \quad (4)$$

を用いて計算領域全体の電場が求まる。これらの計算で計算領域内の水物質がもつ電荷密度、電位、電場が3次元で求まる。

放電（中和）過程は放電経路を予測しない Fierro et al. (2013)<sup>18</sup> のパラメタリゼーションを用いた。このパラメタリゼーションでは電場の絶対値がある閾値 ( $E_{int}$ ) を超えた場合に放電が起こり、水物質の電荷密度の絶対値を小さくする（すなわち中和する）。これらのパラメタリゼーションの詳細は参考文献を参照されたい。



## 2.2. 実験設定

実験設定は、先行研究<sup>19</sup>に基づいた理想実験とした。この実験設定では海水温が一定（300 K とした）の周期境界条件の計算ドメイン（3000 km 四方）の中心に、半径 750 km（最大の渦半径は 120 km、最大風速は  $20 \text{ ms}^{-1}$  とした）の渦を初期に置き、 $f$ -面近似でコリオリ力 ( $f = 5 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ) を与え<sup>20</sup>、台風の発生から定常状態に達するまでの数値実験を行う。水平解像度は 5 km、鉛直解像度は 200 m ~ 1040 m（上層ほど粗い）とし、モデル上端は 21 km に設定した。また雲微物理モデルは Seiki and Nakajima (2014)<sup>10</sup>、乱流モデルは Nakanishi and Niino (2006)<sup>13</sup>、放電モデルは Fierro et al. (2013)<sup>18</sup> を  $E_{int} = 110 \text{ kV m}^{-1}$  として用いた。

本研究ではエアロゾルの影響を評価するため、エアロゾルの数濃度を変化させた感度実験を行なった。本研究で用いた雲微物理モデル<sup>10</sup>ではエアロゾルの数濃度 ( $N_{cen}$ ) を以下の式で診断する。

$$N_{cen} = N_0 s^k, \quad (5)$$

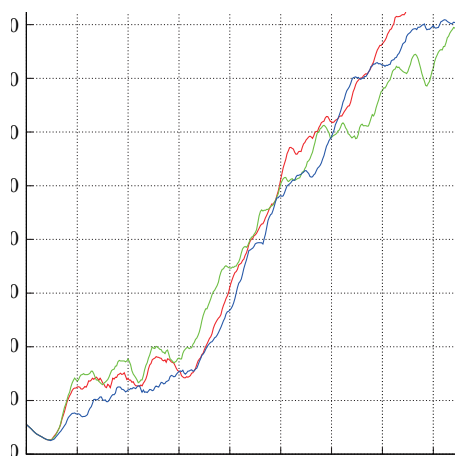
ここで、 $N_0$  は定数、 $s$  は過飽和度、 $k (= 0.462)$  は定数である。エアロゾルの影響を評価するために  $N_0$  を 10, 50, 100（デフォルト値）、500, 1000  $\text{cm}^{-3}$  と変化させて数値実験を行なった。

雷を考慮した計算は計算コストが高いため、全ての実験で雷なしで、193 時間積分を行い、193 時間から雷を考慮して 48 時間実験を行なった。解析は、台風の強度変化に関しては計算開始から 193 時間を解析し、雷に関しては、雷を考慮した計算開始から 12 時間はスピニアップタイムとして解析せず、計算の最後 36 時間のみを解析した。

なお実験設定の詳細は、本研究の成果をまとめた文献<sup>8</sup>を参照いただきたい。

## 3. 結果

本稿では台風周辺で発生する雷の頻度や、雲粒の電荷分布に関する解析を中心に行う。また本研究で用いる雷コンポーネントの発雷数は必ずしも観測される発雷数には対応していない。観測とモデルの発雷数を合わせるような改良を行うことは今後の課題であるが、相対的な発雷頻



第1図：高度 1 km における、台風の最大風速と時間の関係。赤、青、緑線はそれぞれ  $N_0 = 10, 100, 1000 \text{ cm}^{-3}$  の結果を示す。Sato et al. (2019)<sup>8</sup> より引用。

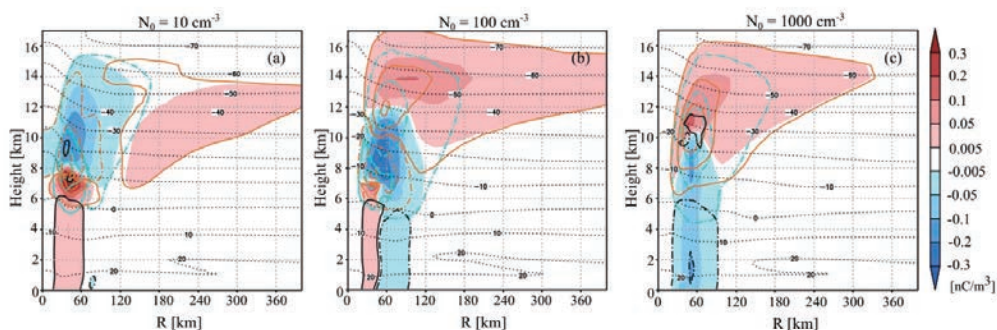
度の大小関係を議論することは可能である。そこで、本研究で発雷頻度を議論する際は、主に発雷頻度の大小関係のみを議論する。

図 1 は雷を考慮せずに計算を行なった 193 時間までの発雷数と台風の強度の指標となる高度 1 km での最大風速の時間変化である。エアロゾルの数濃度によらず、最大風速は計算開始から 60 時間程度は  $20 \text{ ms}^{-1}$  程度で、 $t = 70$  時間程度から急激に最大風速が強くなり、その後、徐々に風速の強化が続き、 $t = 160 \text{ h}$  から風速が一定となる定常状態となる。この傾向は実験設定の参考とした先行研究<sup>19</sup>と同様の傾向であり、SCALE によって台風のライフサイクルが妥当に再現されたことが確認されたことを示しているが、同時に、エアロゾルが台風の強度に与える影響は小さいことを示唆している。これはエアロゾルが増加すると台風の強度が変化すると報告している先行研究<sup>21</sup>とは必ずしも一致しない。しかしながら、この先行研究との結果の違いは以下のように解釈でき、本研究の結果は必ずしも先行研究と矛盾しないと考えられる。

先行研究で対象とされた台風は外側降雨帯と呼ばれる降水バンドが見られ、この外側降水帯の積乱雲からもたらされる降水がエアロゾルの増加によって減少し、それによって台風中心部と外側降雨帯の気圧差を変化させることで台風の強度が変化すると報告していた。一方、本研究で計算された台風は、外側降雨帯を持たない台風である。そのため先行研究で見られたような中心と外側降雨帯の気圧差が変化するという現象が起こらなかったと考えられる。本研究で用いた数値モデルでも外側降雨帯を持つ台風が再現されれば、同じような結果になることが見込まれる。

次に、雷をもたらす台風内部の雲粒の電荷分布にエアロゾルが与える影響を考察する。図 2 は計算の最後 36 時間で平均した、台風内部の電荷密度の分布である。エアロゾル数濃度の変化によって、電荷の分布が大きく変化していることが見て取れる。具体的には、エアロゾルの数濃度がデフォルト値 ( $N_0 = 100 \text{ cm}^{-3}$ ) の時は (図 2b)、電荷の分布は、中心付近で下層から正→負→正という 3 極構造になっている。また台風中心から 50 ~ 100 km 付近では負→正という 2 極構造になっている。このような中心付近での 3 極構造と、中心から数十 km 外側での 2 極構造という結果は台風を対象とした過去の数値的な研究でも報告されており<sup>22</sup>、妥当な計算結果になっているといえる。

エアロゾルがデフォルトに比べて減少した時 ( $N_0 = 10 \text{ cm}^{-3}$ : 図 2a) は上層の正の電荷は、 $N_0 = 100 \text{ cm}^{-3}$  の時に比べ不明瞭ではある。しかしながら、図 2a のように動径方向に平均すると上層の正電荷が不明瞭になるものの、個々の雲では 3 極構造になっており、エアロゾルがデフォ



第 2 図：計算の最後 36 時間で平均した電荷分布の高度-動径方向の距離断面の電荷密度の分布 (a, b, c) はそれぞれ  $N_0 = 10, 100, 1000 \text{ cm}^{-3}$  の結果を表す (Sato et al. 2019)<sup>8</sup>。

ルト値に比べて減少した場合でも3極構造は見られると言える。

一方、エアロゾルが増加した時(図2c)は、3極構造が見られず、下層から負→正の2極構造になっていることがわかる(個々の雲で見ても2極構造となっている)。数値実験の結果を解析した結果この2極構造の原因は以下のように説明できた。エアロゾルが増加すると、雲粒のサイズが減少する結果、高度 $z = 6 \sim 8$  kmで霰と氷・雪の衝突が起こっていない。エアロゾルの数濃度がデフォルト値の時は、この高度(6 ~ 8 km)で霰と氷・雪の衝突によって生じる電荷分布では、霰は正に帯電し、この正に帯電した霰が重力落下することで下層の正電荷を形成している。しかし、エアロゾルの数濃度が多い時( $N_c = 1000 \text{ cm}^{-3}$ )はエアロゾル雲相互作用によって雲粒が小さくなる。そのため、この高度(6 ~ 8 km)で霰と氷・雪の衝突が起こりにくくなり、正電荷を持った霰がこの高度で発生していなかった。その結果、霰が重力落下することで形成される下層の正電荷が生じず、3極構造が形成されないことがわかった。

次に放電の頻度を見ると、エアロゾルの影響によって、2極構造になっている時、放電の頻度は10倍程度大きくなっていった。放電は式(3)で求められる電場の絶対値がある閾値(本研究では $110 \text{ kV m}^{-1}$ )を超えた時に起こるが、電場は電荷分布の3階微分で計算されるため、放電が発生する高度10~12 kmの電場が3極構造より2極構造の時の方が大きくなりやすい。そのため、エアロゾルが増加して電荷の構造が2極になった時に放電の頻度が大きくなっていると考えられる。

#### 4. 結論とまとめ

本研究では、台風周辺の発雷頻度、電荷分布、台風の強度にエアロゾルが与える影響を評価した。本研究で対象とした台風では、エアロゾルが台風の強度に与える影響は小さかったが、台風内部の電荷分布にエアロゾルが与える影響は大きく、エアロゾルが増加した時は、電荷の分布が下層から負→正の2極構造、エアロゾルが減少すると下層から正→負→正の3極構造となり、エアロゾルが多く2極構造となった時の方が、発雷頻度が大きいことが明らかになった。今後は本研究で行なった理想実験以外に、現実事例を対象とした数値実験を行い、将来的に雷予測を行うための基盤創生の足がかりとすることを目指す。

#### 謝辞

本研究は東京大学情報基盤センター、若手・女性利用制度のほか、文部科学省科研費(基盤C: 17K05659)、理化学研究所基礎科学特別研究員制度(XXVII-008)の助成を受けて行われました。

#### 参考文献

1. Takahashi, T. Riming Electrification as a Charge Generation Mechanism in Thunderstorms. *J. Atmos. Sci.* **35**, 1536–1548 (1978).
2. Albrecht, B. A. Aerosols, cloud microphysics, and fractional cloudiness. *Science* **245**, 1227–1230 (1989).
3. Twomey, S. The Influence of Pollution on the Shortwave Albedo of Clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences* **34**, 1149–1152 (1977).
4. Rosenfeld, D. *et al.* Flood or drought: how do aerosols affect precipitation? *Science* **321**, 1309–1313 (2008).
5. Mansell, E. R. & Ziegler, C. L. Aerosol Effects on Simulated Storm Electrification and Precipitation in a Two-Moment Bulk Microphysics Model. *J. Atmos. Sci.* **70**, 2032–2050 (2013).
6. Nishizawa, S., Yashiro, H., Sato, Y., Miyamoto, Y. & Tomita, H. Influence of grid aspect ratio on planetary boundary layer turbulence in large-eddy simulations. *Geosci. Model Dev.* **8**, 3393–3419

- (2015).
7. Sato, Y. *et al.* Impacts of cloud microphysics on trade wind cumulus: which cloud microphysics processes contribute to the diversity in a large eddy simulation? *Prog. Earth Planet. Sci.* **2**, 23 (2015)., doi:10.1186/s40645-015-0053-6
  8. Sato, Y., Miyamoto, Y. & Tomita, H. Large dependency of charge distribution in a tropical cyclone inner core upon aerosol number concentration. *Prog. Earth Planet. Sci.* **6**, 62 (2019). doi:10.1186/s40645-019-0309-7
  9. Tomita, H. New Microphysical Schemes with Five and Six Categories by Diagnostic Generation of Cloud Ice. *J. Meteorol. Soc. Japan* **86A**, 121–142 (2008).
  10. Seiki, T. & Nakajima, T. Aerosol Effects of the Condensation Process on a Convective Cloud Simulation. *J. Atmos. Sci.* **71**, 833–853 (2014).
  11. Suzuki, K., Nakajima, T., Nakajima, T. Y. & Khain, A. P. A Study of Microphysical Mechanisms for Correlation Patterns between Droplet Radius and Optical Thickness of Warm Clouds with a Spectral Bin Microphysics Cloud Model. *J. Atmos. Sci.* **67**, 1126–1141 (2010).
  12. Brown, A. R., Derbyshire, S. H. & Mason, P. J. Large-eddy simulation of stable atmospheric boundary layers with a revised stochastic subgrid model. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **120**, 1485–1512 (1994).
  13. Nakanishi, M. & Niino, H. An Improved Mellor–Yamada Level-3 Model: Its Numerical Stability and Application to a Regional Prediction of Advection Fog. *Boundary-Layer Meteorol.* **119**, 397–407 (2006).
  14. Deardorff, J. W. Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorol.* **18**, 495–527 (1980).
  15. Uno, I., Cai, X.-M., Steyn, D. G. & Emori, S. A simple extension of the Louis method for rough surface layer modelling. *Boundary-Layer Meteorol.* **76**, 395–409 (1995).
  16. Nakajima, T., Tsukamoto, M., Tsushima, Y., Numaguti, A. & Kimura, T. Modeling of the Radiative Process in an Atmospheric General Circulation Model. *Appl. Opt.* **39**, 4869 (2000).
  17. Kusaka, H., Kondo, H., Kikegawa, Y. & Kimura, F. A Simple Single-Layer Urban Canopy Model For Atmospheric Models: Comparison With Multi-Layer And Slab Models. *Boundary-Layer Meteorol.* **101**, 329–358 (2001).
  18. Fierro, A. O., Mansell, E. R., Macgorman, D. R. & Ziegler, C. L. The Implementation of an Explicit Charging and Discharge Lightning Scheme within the WRF-ARW Model: Benchmark Simulations of a Continental Squall Line, a Tropical Cyclone, and a Winter Storm. *Mon. Weather Rev.* **141**, 2390–2415 (2013).
  19. Miyamoto, Y. & Takemi, T. A Transition Mechanism for the Spontaneous Axisymmetric Intensification of Tropical Cyclones. *J. Atmos. Sci.* **70**, 112–129 (2013).
  20. Rotunno, R. & Emanuel, K. A. An Air–Sea Interaction Theory for Tropical Cyclones. Part II: Evolutionary Study Using a Nonhydrostatic Axisymmetric Numerical Model. *J. Atmos. Sci.* **44**, 542–561 (1987).
  21. Rosenfeld, D. *et al.* Aerosol Effects on Microstructure and Intensity of Tropical Cyclones. *Bull. Am. Meteorol. Soc.* **93**, 987–1001 (2012).
  22. Fierro, A. O. & Mansell, E. R. Electrification and Lightning in Idealized Simulations of a Hurricane-Like Vortex Subject to Wind Shear and Sea Surface Temperature Cooling. *J. Atmos. Sci.* **74**, 2023–2041 (2017).

# 超音波キャビテーション気泡の 分裂、崩壊、合一メカニズムの解明

山本 卓也

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

## 1. はじめに

熔融金属系でのプロセス技術の一つに超音波鋳造(Eskin and Eskin, 2014)がある。この鋳造方法では熔融金属へ超音波を照射することで、熔融金属中に含まれる不純物粒子や金属間化合物を微細化し、鋳造した金属の力学的特性を向上させることができる。このため、古くから研究が行われており、微細化する条件は調査されてきた。一方で、熔融金属中へ超音波を照射するので、現象をその場観察することは困難であり、諸説提案されているものの、その不純物や金属間化合物の微細化メカニズムは定かでない。

超音波を液体中へと照射した場合、キャビテーションと呼ばれる現象が発生し、液体中に微細な気泡が生じる(Yasui, 2017)。この気泡は超音波によって膨張、収縮を繰り返し、条件によっては崩壊、分裂、合一、衝撃波の発生を伴う。この気泡振動時にラジカルの発生に伴う有機物の分解、還元反応の促進が生じ、局所高温高圧場が発生することによる粒子の溶解、局所低温場の発生による核生成等様々な現象が同時に発生すると推測されている。しかしながら、サブマイクロからサブミリメートルまでの空間スケールで多数の現象が同時に発生しているため、そのメカニズムを解明することは非常に困難である。

本申請では、超音波照射条件下での単一キャビテーション気泡の分裂メカニズム、不均一核生成したキャビテーション気泡の離脱メカニズムに着目し、数値解析を利用することでそのメカニズムを解明した。

## 2. 数値解析手法

支配方程式は以下の Navier-Stokes 式、連続式、エネルギー式である。

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{S}_u \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} C_p T) = +\nabla \cdot (k \nabla T) + S_T \quad (3)$$

ここで、 $\rho$ は密度、 $\mathbf{u}$ は速度、 $t$ は時間、 $p$ は圧力、 $\mu$ は粘度、 $\mathbf{S}_u$ はNS式の生成項、 $C_p$ は比熱、 $T$ は温度、 $k$ は熱伝導率、 $S_T$ はエネルギー式の生成項である。また、気体の圧縮性を考慮し、完全気体、完全液体近似を用いた状態方程式を利用し、密度変化を定義した。

気液混相流モデルとして、以下の方程式で表される圧縮性を考慮した代数的 Volume of Fluid(VOF)を利用した。

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\alpha) + \nabla \cdot (\mathbf{u}_r \alpha (1 - \alpha)) = -\frac{\alpha}{\rho_l} \frac{D\rho_l}{Dt} \quad (4)$$

ここで、 $\alpha$ は液体の体積分率、 $\mathbf{u}_r$ は気体液体間相対速度、 $\rho_l$ は液体密度である。 $\alpha$ は液体で1、気体で0、0から1の間で界面であると定義し、上記の液体率の移流方程式を解くことで、界面形状を捕捉した。

界面曲率の計算の際に Laplace フィルターを導入し、表面張力を表現する Continuum Surface Force (CSF)モデルに利用する曲率計算精度を向上させた。また、気泡は大きく膨張、収縮することから界面付近のみ計算格子解像度を向上させる Arbitrary Mesh Refinement (AMR)法を導入した。更なる計算手法の詳細に関しては、既報(Yamamoto *et al.*, 2019)を参照されたい。

計算領域を Fig. 1 に示す。本研究では2種類の現象に着目し、1. 超音波照射時における単一気泡分裂挙動を解明し、2. 円錐状のキャビティに不均一核生成した気泡の離脱挙動を解明した。境界条件としては圧力勾配に応じた自由流入出条件を課し、圧力の正弦波を境界で与えた。ここでの圧力振幅は 0.5-0.95 atm. であり、圧力振動周波数は 20 kHz であるとした。

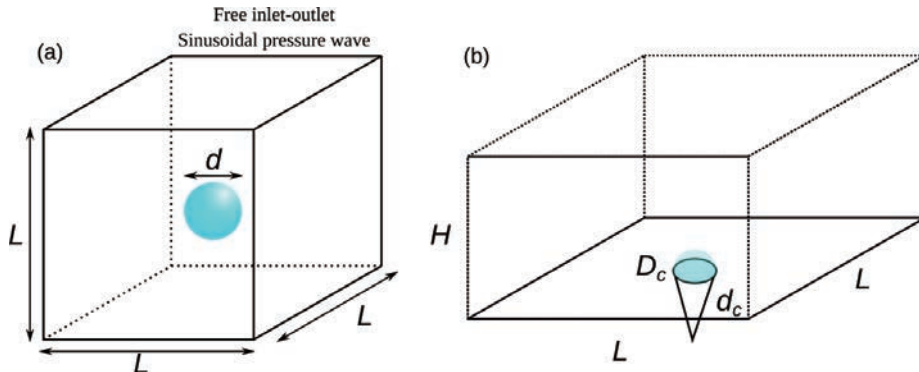


Fig. 1 Schematic diagrams of calculation domains in the cases of (a) fragmentation of acoustic cavitation bubble and (b) detachment of acoustic cavitation bubble nucleated heterogeneously at a conical crack.

### 3. 単一気泡分裂挙動の解明

直径 20  $\mu\text{m}$  の単一気泡を超音波によって振動させた結果を示す。Figure 2 は気泡中心と境界で与えた圧力変動を示す。圧力振幅が小さい場合には与えた圧力と同様に気泡が振動するが、圧力振幅が大きくなると、気泡振動と与えた圧力振動の位相がずれ、非線形振動を発生させる。この非線形振動によって Rayleigh 収縮が発生し、加圧時に急に圧縮し、気泡は振動を繰り返す。

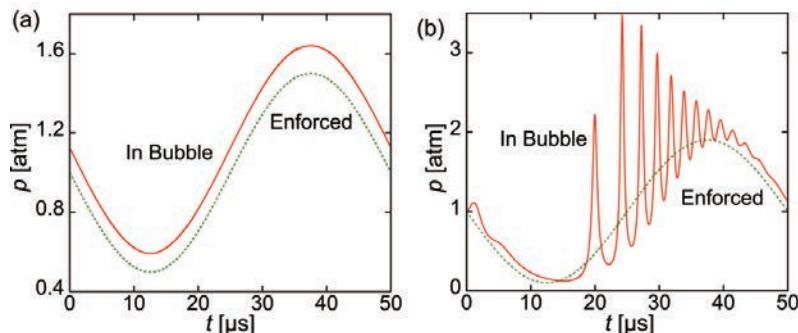


Fig. 2 Time variation of pressure at the bubble central location and imposed pressure: The pressure amplitude is (a) 0.5 atm. and (b) 0.9 atm.

また、圧力振幅が大きい場合の気泡の変形挙動を Fig. 3 に示す。圧力振幅が小さい場合は音圧に応じて気泡が膨張、収縮するが、圧力振幅が大きい場合には気泡が非球形に振動する。Rayleigh 収縮後に気泡は非球形へと変化し、細かな振動を繰り返すうちにその変形度は増大する。圧力振幅がさらに大きい場合には、気泡は Rayleigh 収縮後の細かな振動中に分裂する。また、同様条件で実験を行った場合でも同様に、Rayleigh 収縮後の振動中に分裂することがわかった。Rayleigh 収縮中には、液体の速度が 100 m/s を超え、高速にリバウンドしている最中に擾乱が少しでも入れば、気泡は非球形振動になり、最終的に分裂するものと考えられる。実験、計算の動画も著者らの論文(Yamamoto *et al.* 2019)にて公開されているので、詳細な気泡運動に関してはそちらを参照されたい。

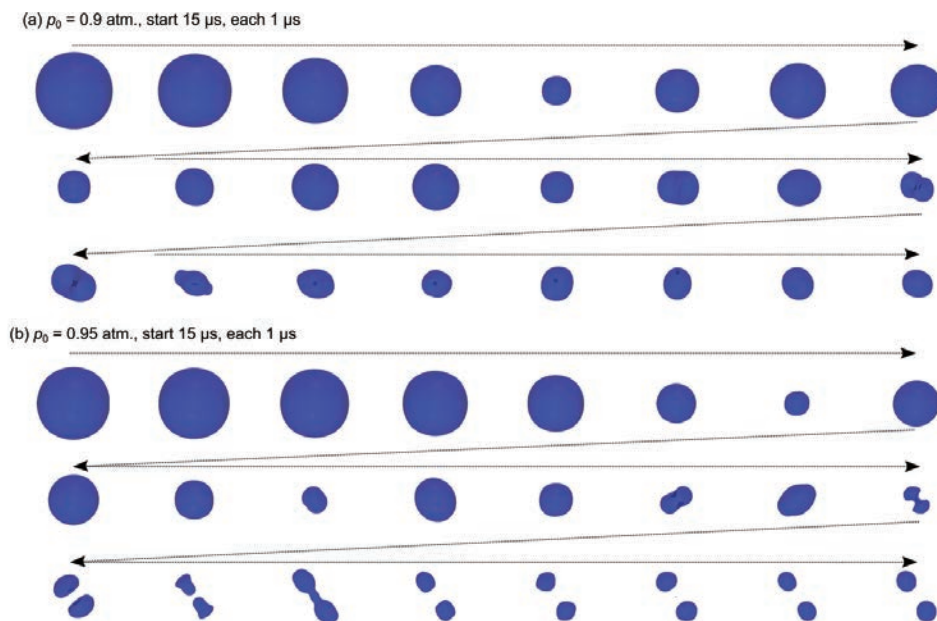


Fig. 3 Time variation of bubble under high-pressure amplitude: (a) 0.9 atm, and (b) 0.95 atm.

#### 4. 円錐キャビティからの気泡離脱挙動の解明

上記の気泡分裂挙動は単一気泡に超音波を照射した場合ではあるが、実際の超音波処理ではあまり考えられない状況である。超音波を照射し音響キャビテーションが生じるが、その際にはまず、超音波ホーンや不純物粒子表面等で不均一核生成が発生すると考えられる。その際に核生成後の気泡挙動に関しては明らかではない。そこで、Fig. 1 (b)に示すような円錐キャビティに不均一核生成した気泡を想定し、そこに超音波を照射した場合の気泡運動を調査した。

円錐キャビティのアスペクト比を変更し、気泡振動に対する円錐キャビティ形状の影響を調査した。ここでは、キャビティ半径を変化させずにその深さを変更した。Figure 4 に気泡内圧力変動に対するキャビティ形状の影響を示す。キャビティのアスペクト比が大きいほど非線形振動が強くなり、気泡が不安定化する。また、キャビティの大きさを変更した結果を Fig. 5 に示す。特に大きいキャビティにおいて気泡振動の位相が圧力振動の位相とずれ、強い非線形振動を示す。この場合における気泡運動を Fig. 6 に示す。特に大きいキャビティの場合には液体ジェットが発生し、気泡がキャビティから離脱する。つまり、液体ジェットが気泡離脱の主要因であることが

わかる。

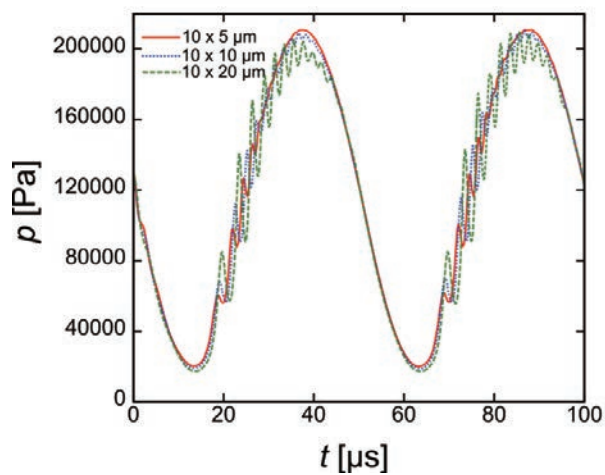


Fig. 4 Time variation of bubble pressure in cracks with different aspect ratios at 0.9 atm. pressure amplitude.

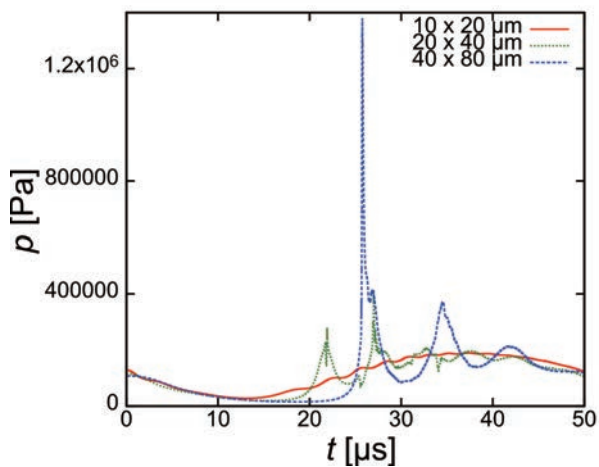


Fig. 5 Time variation of bubble pressure in cracks with different sizes at 0.8 atm. pressure amplitude.

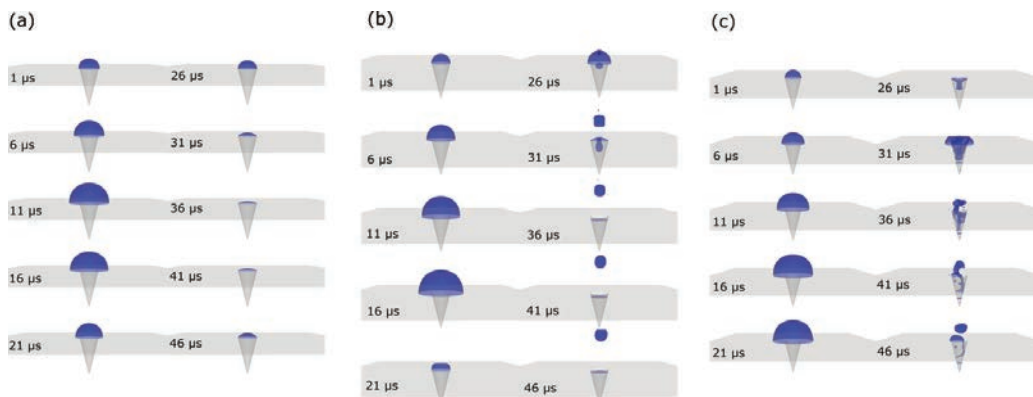


Fig. 6 Dynamic behavior of a bubble depending on the crack size at 0.8 atm. pressure amplitude: (a)  $10 \times 20 \mu\text{m}$ , (b)  $20 \times 40 \mu\text{m}$ , and (c)  $40 \times 80 \mu\text{m}$  crack.



上記のように気泡はそのキャビティ形状に応じて線形振動、非線形振動、液体ジェット生成の3種類の現象が発生する。それらのパターンを Fig. 7 にまとめた(Yamamoto and Komarov, 2020)。キャビティ径  $D_c$  が大きい場合、圧力振幅  $P$  が大きい場合には、気泡が非線形振動、さらには液体ジェットが発生する。キャビティで不均一核生成した気泡は、キャビティが大きく音圧振幅が大きいほど液体ジェットを発生させ、気泡を離脱させることができる。この離脱した気泡は上記で説明したように分裂を行うことで気泡数が増加していくと考えられる。これらのことより、不均一核生成するためのキャビティ形状も超音波処理の効率にも影響を及ぼすことが示唆される。

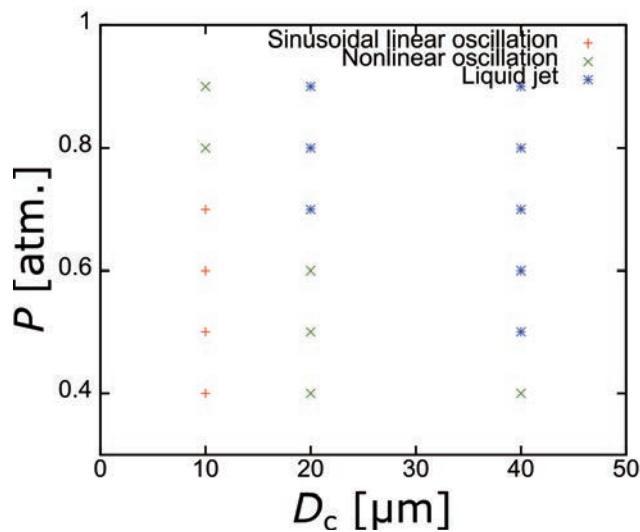


Fig. 7 Stability diagram of acoustic cavitation bubble depending on the crack size and pressure amplitude.

## 5. 結論

超音波照射時の音響キャビテーション気泡の分裂、崩壊メカニズムを探るため数値解析を行った。単一気泡の分裂は Rayleigh 収縮後の非球形振動の増幅によって引き起こされ、不均一核生成した気泡は液体ジェットによって離脱することがわかった。また、液体ジェットの発生条件も定量的に評価することができた。一方で、単一気泡の挙動までしか解明できておらず、超音波照射時の音響キャビテーション気泡の動力学的全容を解明するためには更なる研究が必要である。

## 参考文献

- G. I. Eskin, D. G. Eskin, *Ultrasonic treatment of light alloy melts* (CRC Press, Oxford, 2014).  
 K. Yasui, *Acoustic cavitation and bubble dynamics* (Springer Briefs in Molecular Science: Ultrasound and Sonochemistry, 2017).  
 T. Yamamoto, S.-i. Hatanaka, S. V. Komarov, *Ultrason. Sonochem.* 58 (2019) 104684.  
 T. Yamamoto, S. V. Komarov, *J. Appl. Phys.* 128 (2020) 044702.

# 医療応用を見据えた

## 電磁界-熱伝導連成解析システムの包括的な高速化・高度化

杉本 振一郎

八戸工業大学 工学部

### 1. はじめに

高周波誘電加温による癌の温熱療法の効果を定量的に評価するために情報通信研究機構が公開している数値人体モデル[1]の高周波電磁界-熱伝導連成解析に取り組んでいる。この数値人体モデルは1辺2mmのボクセルから成るため、有限要素法ではボクセル由来の階段形状が電界の反射や回折を起こして精度が低下してしまう。また温熱療法の対象となる癌の直径は数mm程度であるため、2mm幅のボクセルでは解像度が十分ではない。これらの問題の解決にはボクセルを分割した四面体をベースにスムージングする技術[2]の導入や要素の細分割[3]が有効であるが、これらは解析対象の自由度を飛躍的に増やしてしまう。例えば1辺0.25mmのボクセルで人体を分割し、さらにボクセルを四面体に分割した高周波電磁界解析モデルの自由度は約1,300億になり、電界の反射や回折を低減させるためのスムージングを施すと自由度はさらに何割か増えてしまう。

階層型領域分割法(Hierarchical Domain Decomposition Method: HDDM)は領域分割法[4]-[6]を並列計算機環境に効率よく実装するための1手法である。大規模問題を効率よく数値計算することのできる手法としてよく知られており、分散メモリ環境で良好な並列効率を得られることが期待できる[7]。HDDMは大規模な構造解析[8]や熱伝導解析[9]、電磁界解析[10]-[11]に適用され、構造解析では1,000億自由度の解析[12]に成功している。

一方、電磁界解析では電場、磁場に空間的な広がりがあるため解析したい機器だけでなくその周辺の空間も解析対象としなければならない、解析領域が大きくなりやすい。また電磁波を対象とする場合には要素の辺長を電磁波の波長の10分の1以下にする必要があり、大きく広がる空間を大きな要素で埋めることができない。さらに電磁場の様子を詳細に知りたい箇所は機器の中でも特に薄い構造をしているうえ、電磁界解析で用いる反復法の収束性はアスペクト比に非常に敏感であるため扁平な要素でそれらをモデル化することができない。そのため電磁界解析のためのメッシュは大自由度になりやすく、機器の丸ごと解析では簡単に数千万～数億自由度のモデルになってしまう。

また電磁界解析では本来非定常である問題を、商用電源および電磁波が正弦波的に規則正しく変化することを利用して時間微分項 $\partial/\partial t \partial/\partial t$ を $-i\omega$  ( $i$ は虚数単位、 $\omega$ は角周波数)とおくことで複素数での求解を一度だけ行う準定常問題としている。そのため演算カーネルは他の物理現象ではあまり現れない複素数の疎行列ベクトル積となる。さらに、節点に自由度がある通常の節点要素ではなく辺に自由度を持つ辺要素を用いる、行列に不定性があったり悪条件であったりする、など、他の物理現象に比べて大規模問題において収束解を得ることが難しく、計算時間も長くな

りやすい。

このようなことから電磁界解析での並列化研究はなかなか浸透してこなかった。そのため電磁界-熱伝導連成解析などの電磁界解析と連携しなければならない連成解析では、電磁界解析で扱える規模の制限から扱えるモデルの規模がなかなか大きくなかった。

近年、電磁界解析で複素対称行列の求解に広く用いられてきた共役直交共役勾配(Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient: COCG)法[13]よりも共役直交共役残差(Conjugate Orthogonal Conjugate Residual: COCR)法[14]が大規模な解析で反復回数および計算時間の面で有利なことがわかってきた[15]。また、最小残差(MINRES)法を複素対称行列向けに拡張した MINRES-like\_CS 法、準最小残差(QMR)法を用いた場合も、COCG 法に比べて計算時間を削減できることがわかってきた[16]。これらを並列電磁界解析モジュール ADVENTURE プロジェクト[17]の ADVENTURE\_Magnetic (AdvMag)に実装して大規模解析に取り組んだ結果、数値人体モデルの高周波電磁界解析について 2016 年に 300 億自由度[18]、2019 年に 1,300 億自由度[19]の解析に成功した。

そこで、電磁界解析に AdvMag を、熱伝導解析には同じく ADVENTURE プロジェクトの並列熱伝導解析ソルバ ADVENTURE\_Thermal (AdvThermal)を用いた電磁界-熱伝導連成解析システムの研究開発を行っている。将来的に電磁界解析で 1 兆自由度、熱伝導解析で 1,000 億自由度の大規模な連成解析を行うことを目指して、AdvMag, AdvThermal それぞれの高速化・高度化に取り組むとともにシステム全体を包括的に高速化・高度化することで、スーパーコンピュータ上で電磁界-熱伝導連成解析を効率的に行えるシステムを研究開発することを目指している。

本稿では、2019 年度の若手・女性利用課題に採択された研究の中で取り組んだ成果も含め、大規模な数値人体モデルの高周波電磁界-熱伝導連成解析に向けて、高周波電磁界解析の結果を用いた熱伝導解析を比較的小規模なメッシュを用いた連成解析を例に、電磁界-熱伝導連成解析システムの研究開発状況について紹介する。

## 2. 高周波電磁界-熱伝導連成解析

温熱療法は通常体温 36~37°C から、癌が死滅する 42~43°C 程度に加温するものであり、温度変化はわずか 5°C 程度である。そのため電磁界解析に関する物性値の温度による変化は無視できる程度である。そこで本研究では電磁界解析の結果を熱伝導解析に用いる片方向連成解析を行う。

また数値人体モデルは CT や MRI から得られた断層画像から生成されるボクセルメッシュが基本となる。しかしこのようなメッシュでは、メッシュ形状に起因する電界の反射や回折による精度低下が生じる。このような精度低下を押さえるために、将来的には四面体ベースのスムージング技術を用いる必要がある。そこで本研究では数値解法には有限要素法をベースにした階層型領域分割法を用いることとする。片方向連成であるため電磁界解析と熱伝導解析のソルバはそれぞれ独立したものでよく、電磁界解析には AdvMag、熱伝導解析には AdvThermal を用いる。

まず AdvMag を用いた高周波電磁界解析では、電場を求め、そこから加温による発熱密度を求める。領域  $\Omega$  を考え、その境界を  $\partial\Omega$ 、境界上の単位法線ベクトルを  $n$  とする。Maxwell 方程式より導かれる電界  $E$  [V/m] を未知関数とするベクトル波動方程式を考える。

$$\operatorname{rot} \left( \frac{1}{\mu} \operatorname{rot} E \right) - (\omega^2 \epsilon - i\omega\sigma)E = i\omega J \quad \text{in } \Omega, \quad (1)$$

$$E \times n = 0 \quad \text{on } \partial\Omega, \quad (2)$$

$$J = \sigma \hat{E}. \quad (3)$$

ここで、 $\mu$ は透磁率[H/m],  $\epsilon$ は誘電率[F/m],  $\sigma$ は導電率[S/m],  $J$ は放射源の電流密度[A/m<sup>2</sup>]である。 $\hat{E}$ は既知の電界であり、式(3)は式(1)へ代入される。境界条件の式(2)を満たすよう式(1)を解くことによって、 $E$ が得られる。

次に式(1)の弱形式を導き、領域 $\Omega$ の有限要素分割を考える。 $E$ をNedelecの四面体一次要素(辺要素)で近似し、 $J$ を通常四面体一次要素で近似する。 $E_h, J_h$ をそれぞれ $E, J$ の有限要素近似とすると次のような有限要素方程式が導かれる。

$$\iiint_{\Omega} \operatorname{rot} E_h \cdot \frac{1}{\mu} \operatorname{rot} E_h^* dv - \iiint_{\Omega} (\omega^2 \epsilon - i\omega\sigma) E_h \cdot E_h^* dv = \iiint_{\Omega} i\omega J_h \cdot E_h^* dv. \quad (4)$$

ここで、 $E_h^*$ は任意の試験関数である。

式(4)を解いて得られた $E_h$ より、要素ごとの渦電流密度 $J_{e_h}$ [A/m<sup>2</sup>]を求める。

$$J_{e_h} = \sigma E_h. \quad (5)$$

$J_{e_h}$ は複素数であり、実部 $J_r$ 、虚部 $J_i$ を用いて、その振幅 $J_m$ 、および実効値 $J_E$ は次のように求められる。

$$J_m = \sqrt{J_r^2 + J_i^2}. \quad (6)$$

$$J_E = \frac{1}{\sqrt{2}} J_m. \quad (7)$$

よって、加温による要素ごとの発熱密度 $\tilde{f}$ [W/m<sup>2</sup>]は次のように与えられる。

$$\tilde{f} = \frac{J_E^2}{\sigma} = \frac{J_m^2}{2\sigma} = \frac{J_r^2 + J_i^2}{2\sigma}. \quad (8)$$

$\tilde{f}$ を内部発熱の一部として熱伝導解析で用いる。

AdvThermalでは、Poisson方程式を解くことにより温度分布を求める。ヒトは恒温動物であるため筋肉などでの産熱により体温を一定に保っている。そこでまずは成人男性の産熱量37.5 kcal/m<sup>3</sup>・hr [20]を用いて熱伝導解析を行い、深部温度が37°C程度になるよう人体表面の熱伝達係数を同定する。次に同定した熱伝達係数を用いるとともに、内部発熱を産熱と加温による発熱を合わせたものとして熱伝導解析を行えば、高周波電磁界-熱伝導連成解析を行ったことになる。

### 3. 階層型領域分割法

前述の通り階層型領域分割法は領域分割法を並列計算機環境に効率よく実装するための 1 手法である。大規模問題を効率よく数値計算することのできる手法としてよく知られており、分散メモリ環境で良好な並列効率を得られることが期待できる。

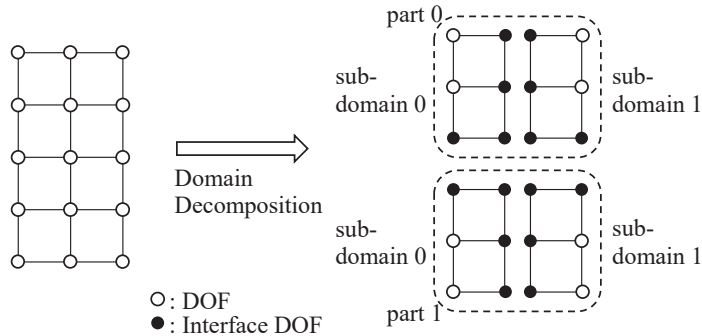


図 1. 階層型の領域分割。

階層型領域分割法では要素の重なりがないように解析領域を part と subdomain からなる階層構造に分割する(図 1)。

$$\Omega = \bigcup_{i=0}^{N_p-1} \bigcup_{j=0}^{N_s-1} \Omega^{(i,j)}. \quad (9)$$

ここで、 $\Omega^{(i,j)}$  は part  $i$  中の subdomain  $j$  を表す。上付き添え字  $(i,j)$  は領域  $\Omega^{(i,j)}$  に関連する項目であることを表す。 $N_p$ 、 $N_s$  はそれぞれ part 数、part あたりの subdomain 数を表し、 $N_s$  は全 part で等しいとする。図中の黒丸は part、subdomain 間で共有される自由度であり、インターフェース自由度と呼ばれる。

解くべき有限要素方程式を行列形式で表す。

$$Ku = f. \quad (10)$$

式(10)は高周波電磁界解析では式(4)、熱伝導解析では Poisson 方程式となる。式(10)に階層型領域分割法を適用すると、次のように書ける。

$$\begin{bmatrix} K_{II} & K_{IB} \\ K_{IB}^T & K_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_I \\ u_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_I \\ f_B \end{bmatrix}. \quad (11)$$

ここで、 $u_B$  はインターフェース自由度であり、

$$\begin{aligned}
K_{II} &= \begin{bmatrix} K_{II}^{(0,0)} & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & K_{II}^{(0,N_s-1)} & & \\ & & & K_{II}^{(1,0)} & \\ & 0 & & & \ddots \\ & & & & & K_{II}^{(N_p-1,N_s-1)} \end{bmatrix}, \\
K_{IB} &= \begin{bmatrix} K_{IB}^{(0,0)} R_B^{(0,0)} \\ \vdots \\ K_{IB}^{(0,N_s-1)} R_B^{(0,N_s-1)} \\ K_{IB}^{(1,0)} R_B^{(1,0)} \\ \vdots \\ K_{IB}^{(N_p-1,N_s-1)} R_B^{(N_p-1,N_s-1)} \end{bmatrix}, \\
K_{BB} &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} K_{BB}^{(i,j)} R_B^{(i,j)}, \\
f_i &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_I^{(i,j)T} f_I^{(i,j)}, \\
f_B &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} f_B^{(i,j)},
\end{aligned}$$

である。下付添え字  $I, B$  はそれぞれ subdomain 内部の自由度、インターフェース自由度に関する項であり、 $R_I^{(i,j)}, R_B^{(i,j)}$  は自由度をそれぞれ subdomain 内部の自由度、またはインターフェース自由度へと制限する 0-1 行列である。式(11)より自由度をインターフェース自由度に静的縮約したインターフェース問題が以下のように得られる。

$$Su_B = g. \quad (12)$$

ただし、

$$\begin{aligned}
S &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} S^{(i,j)} R_B^{(i,j)}, \\
S^{(i,j)} &= K_{BB}^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)T} \left( K_{II}^{(i,j)} \right)^\dagger K_{IB}^{(i,j)}, \\
g &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} \left( f_B^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)T} \left( K_{II}^{(i,j)} \right)^\dagger f_I^{(i,j)} \right),
\end{aligned}$$

であり、 $S$  はシュア補元行列、 $S^{(i,j)}$  は領域  $\Omega^{(i,j)}$  におけるローカルシュア補元行列である。ここで  $K_{II}^{(i,j)}$  は特異行列であるため、式中の  $\left( K_{II}^{(i,j)} \right)^\dagger$  は一般化逆行列である。階層型領域分割法では並列環境下で式(12)を共役勾配(Conjugate Gradient: CG)法や共役直交共役勾配(Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient: COCG)法などの反復法で解き、得られた  $u_B$  を Dirichlet 条件として式(13)を解くことで、全体の解を得る。

$$K_{II}^{(i,j)} u_I^{(i,j)} = f_I^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)} R_B^{(i,j)} u_B \quad i = 0, \dots, N_p - 1, j = 0, \dots, N_s - 1. \quad (13)$$

階層型領域分割法では、それぞれの MPI プロセスが 1 つの part を担当する。そのため、part 間で共有されるインターフェース自由度についてプロセス間通信でデータを送受信しなければならない。階層型領域分割法では part と MPI プロセスは 1 対 1 で対応するので、簡単のために本稿では 0 番目と 1 番目の MPI プロセスをそれぞれ part 0, part 1 と呼ぶ。

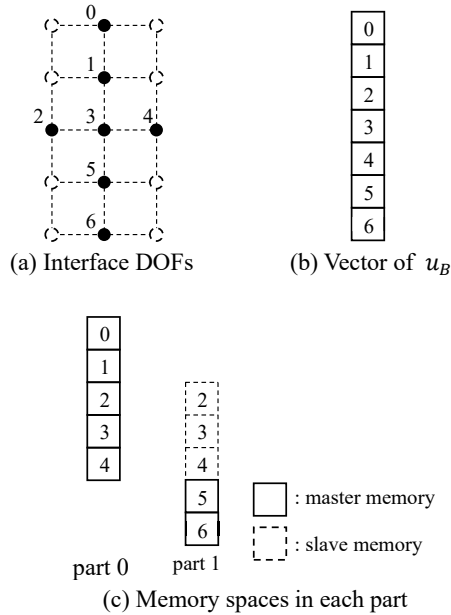


図 2. インターフェース自由度のメモリ空間。

図 1 のケースでは、7 つのインターフェース自由度(図 2 (a))があり、 $u_B$  は 7 つの要素をもつベクトル(図 2 (b))である。しかし解析領域は分割されているため、ベクトルのデータはそれぞれの MPI プロセスに分散して記憶されている。さらに、part 間で共有されているインターフェース自由度はそれぞれの MPI プロセスにメモリが確保されている。ここで、同一のインターフェース自由度について複数のメモリが確保されているため、いずれか一つをマスターメモリとして定める。本稿では、同一のインターフェース自由度に対してメモリが確保されている part の中で、part 番号の最も小さいものが持つメモリをマスターメモリとする。2~4 番のインターフェース自由度は part 0 と part 1 に共有されているので、part 0 のメモリがマスターメモリとなり、part 1 のメモリはスレーブメモリとなる(図 2 (c))。それぞれの part では、マスターメモリ、スレーブメモリを持つインターフェース自由度をそれぞれ基本インターフェース自由度、従属インターフェース自由度と呼ぶ。part 0 ではすべてが基本インターフェース自由度である。一方、part 1 では 2~4 が従属インターフェース自由度、5, 6 が基本インターフェース自由度である。プロセス間通信は、シユア補元行列の行列ベクトル積を行う際に part 間で共有されているインターフェース自由度について行われる。まず従属インターフェース自由度の情報が、その基本インターフェース自由度を持つ part へと送られる。その後、それぞれの part で必要な処理をした結果を基本インターフェース自由度を持つ part からその従属インターフェース自由度を持つ part へ送り、スレーブ

メモリへコピーする。

プロセス間通信を行うため、通信テーブルを作る。まず、インターフェース自由度の part 内でのローカルな通し番号を、従属インターフェース自由度、基本インターフェース自由度の順につける(図 3 左)。このとき、part 0 の 2~4, part 1 の 0~2 について、part 0, part 1 が持つ通信テーブルはそれぞれ図 3 右上と右下のようになる。それぞれの通信テーブルにおいて、「part 0」「part 1」は通信相手である。また、「:」に続く数字は、その通信相手とデータを送受信する必要があるインターフェース自由度の数である。例えば、part 0 が part 0 と通信する必要はないため、「part 0:」の次の数字は「0」である。また、part 1 とは 3 つのインターフェース自由度について通信を行うので、「part 1:」の次の数字は「3」となる。これらの数字が 1 以上である場合には、次の行にデータを送受信するインターフェース自由度のローカルな通し番号を必要なだけ並べる。ここで、part 0 の 0 と 1 のように、同じ part 内の subdomain 間でしか共有していないインターフェース自由度は通信テーブルには含まれない。プロセス間通信はこれらの通信テーブルに基づいて行われる。

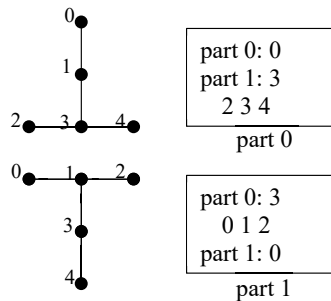


図 3. それぞれの part でのインターフェース自由度の通し番号と通信テーブル。



#### 4. 数値解析例

約70万自由度の簡易人体モデル(図 4)を作成し、連成解析を試行した。このモデルでは胸部の治療を想定して、胸部の骨、肺、心臓を再現している。

まず基礎代謝(筋肉などによる産熱)のみを考慮した熱伝導解析を行い、深部温度が37°C程度になるように人体表面の熱伝達係数を同定した。しかる後に上半身の上に置いたアンテナから電磁波を照射することを想定した連成解析を行い、体内の温度が加温によって上昇することを確認した(図 5)。

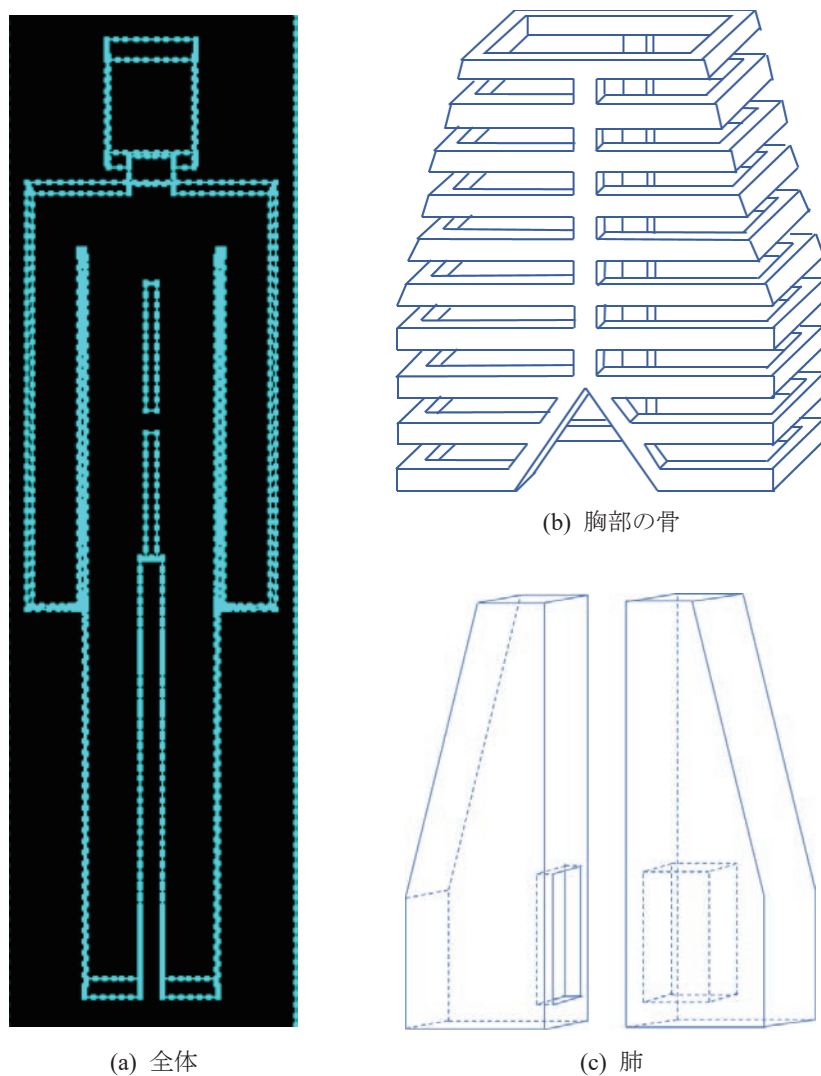


図 4. 簡易数値人体モデル。

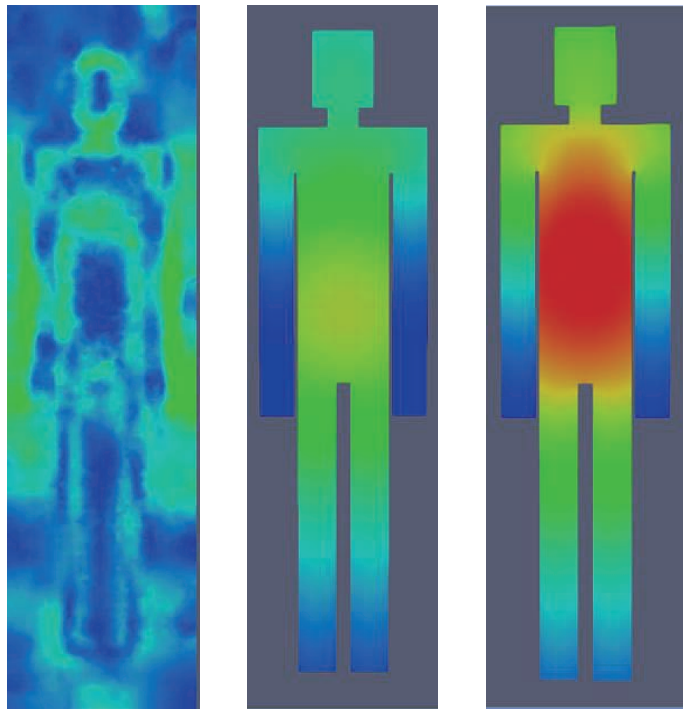


図 5. 数値解析結果。

左：磁場，中：温度分布(産熱のみ)，右：温度分布(加温あり，連成解析)

## 5. おわりに

本稿では研究開発中の高周波電磁界-熱伝導連成解析システムを用いて、約 70 万自由度の簡易人体モデルにより連成解析を試行した。今後は CT で得られたデータから生成された数値人体モデルを用いた連成解析を行い、温熱療法の効果を定量的に評価するためのシステムの研究開発をさらに進めていく。

## 謝 辞

本研究の一部はは東京大学情報基盤センター若手・女性利用者推薦，JSPS 科研費 17H02829，17H03256，青森県工業技術教育振興会，および高橋産業経済研究財団の助成を受けて実施された。

ここに記し、感謝の意を表す。

## 参 考 文 献

- [1] 情報通信研究機構 電磁環境研究室 HP: <http://emc.nict.go.jp/index.html>
- [2] A. Takei, K. Murotani, S. Sugimoto, M. Ogino and H. Kawai: "High-Accuracy Electromagnetic Field Simulation using Numerical Human Body Models", IEEE Transaction on Magnetics, Vol.52, Issue 3, 7402704, 4p (2016).
- [3] K. Murotani, S. Sugimoto, H. Kawai and S. Yoshimura: "Hierarchical Domain Decomposition with Parallel Mesh Refinement for Billions-of-DOF Scale Finite Element Analyses", International Journal

of Computational Methods, Vol.11, Issue 4, p.1350061-1 - 1350061-30 (2014).

- [4] R. Glowinski, Q.V. Dinh and J. Periaux: "Domain decomposition methods for nonlinear problems in fluid dynamics", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.40, Issue 1, pp.27-109 (1983).
- [5] A. Quarteroni and A. Valli: "Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations", Clarendon Press, Oxford (1999).
- [6] A. Toselli and O. Widlund: "Domain Decomposition Methods: Algorithms and Theory (Springer Series in Computational Mechanics)", Springer (2004).
- [7] R. Shioya and G. Yagawa: "Iterative domain decomposition FEM with preconditioning technique for large scale" problem, *ECM'99 Progress in Experimental and Computational Mechanics in Engineering and Material Behaviour*, pp.255-260 (1999).
- [8] S. Yoshimura, R. Shioya, H. Noguchi and T. Miyamura: "Advanced general-purpose computational mechanics system for large-scale analysis and design", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol.149, Issue 1, pp.279-296 (2002).
- [9] A.M.M. Mukaddes, M. Ogino, M. H. Kanayama and R. Shioya: "A scalable balancing domain decomposition based preconditioner for large scale heat transfer problems", *JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering*, Vol.49, No.2, pp.533-540 (2006).
- [10] H. Kanayama and S. Sugimoto: "Effectiveness of A- $\square$  method in a parallel computing with an iterative domain decomposition method", *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol.42, Issue 4, pp.539-542 (2006).
- [11] A. Takei, S. Yoshimura and H. Kanayama: "Large-scale parallel finite element analyses of high frequency electromagnetic field in commuter trains", *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, Vol.31, No.1, pp.13-24 (2008).
- [12] M. Ogino and R. Shioya: "Scalable non-overlapping domain decomposition method for finite element simulations with 100 billion degrees of freedom model", *Proceedings of the 1st International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental problems*, pp.96-99 (2014).
- [13] H.A. Vorst and J.B.M. Melissen: "A Petrov-Galerkin type method for solving  $Ax=b$  and where A is symmetric complex", *IEEE Transaction on Magnetics*, Vol.26, No.2, pp.706-708 (1990).
- [14] T. Sogabe and S.L. Zhang: "A COCR method for solving complex symmetric linear systems", *Journal of Computational and Applied Mechematics*, Vol.199, No.2, pp.297-303 (2007).
- [15] M. Ogino, A. Takei, H. Notsu, S. Sugimoto and S. Yoshimura: "Finite element analysis of high frequency electromagnetic fields using a domain decomposition method based on the COCR method", *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, Vol.61, pp.173-181 (2013).
- [16] M. Ogino, A. Takei, S. Sugimoto and S. Yoshimura: "A numerical study of iterative substructuring method for finite element analysis of high frequency electromagnetic fields", *Computational & Mathematics with Applications*, Vol.72, Issue 8, pp.2020-2027 (2016).
- [17] ADVENTURE プロジェクト HP: <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/>
- [18] S. Sugimoto, A. Takei and M. Ogino: "Finite element analysis with tens of billions of degrees of freedom in a high-frequency electromagnetic field", *Mechanical Engineering Letters*, Vo.3 (2017).

- [19] S. Sugimoto, A. Takei and M. Ogino, "High-Frequency Electromagnetic Field Analysis with 130 Billion of Degrees of Freedom", The 38th JSST Annual Conference, International Conference on Simulation Technology, pp.290-295 (2019).
- [20] 中山昭雄, "温熱生理学", 理工学社, 1981.

# 低質量星団におけるブラックホール連星形成とその金属量依存性

熊本 淳  
東京大学

## 1. まえがき

本稿では平成 31 年度（後期）若手・女性利用課題へ採択された「低質量星団におけるブラックホール連星形成とその金属量依存性」の成果報告を行う。また、本稿の内容は Monthly Notices of the Royal Astronomical Society にて発表した論文[1]の概要である。

## 2. はじめに

### 2. 1. ブラックホール連星の合体による重力波の検出

2016 年 2 月、LIGO (Laser Interferometer Gravitational-Wave Observatory) による初の重力波直接検出が成功したと発表された[2]。この検出された重力波の波形を解析した結果、ブラックホール同士の合体起源の重力波であると推定された。また、合体したブラックホールの質量は、それぞれ太陽質量の約 36 倍、約 29 倍と推定された。

その後も世界的な重力波の観測プロジェクトは継続され、複数のブラックホール連星の合体イベントを起源とすると考えられる重力波が検出された。これらの観測結果は数十太陽質量のブラックホール連星が多数存在することを示唆する結果であった。これらの結果は、なぜこのような大質量のブラックホール連星が多く存在するのかという疑問を引き起こした。現在もブラックホールの合体起源と思われる重力波も多く検出されており、これらの観測を説明するような理論モデルを考えることが極めて重要である。

### 2. 2. ブラックホール連星の形成過程

重力波を放出して合体するようなブラックホール連星の形成過程は主に 2 つの有力なシナリオが提案されている。1 つは大質量星同士の連星がブラックホール連星に進化するシナリオである。若くて重い主系列星の多くが連星として観測されていることから、多くの主系列星は生まれながらにして連星として形成されると考えられることがしばしばある。このような連星について、特に重い大質量星連星が進化する際に、common-envelope を起こし軌道が縮むことがある。この効果の結果として、軌道長半径の小さいブラックホール連星が形成されると考えられている[3, 4]。

もう 1 つのシナリオは、星の高密度な領域で複数の星が力学相互作用を行うことで連星が形成されるシナリオである。特に高密度な星団のコア内には大質量星から進化したブラックホールが多く存在する。これらのブラックホール同士が力学相互作用を繰り返すことにより、軌道長半径の小さいブラックホール連星が形成される[5]。星団内におけるブラックホール連星の形成過程では、球状星団 ( $10^5$ – $10^6$  太陽質量) が重力波を放出するような軌道長半径の小さいブラックホール連星の形成の場となると考えられてきた。その理由には、ブラックホールになるような大質量星が多く存在すること、重力ポテンシャルが深くブラックホールが星団内に留まり易いことな

どが挙げられる。一方、散開星団 ( $10^3-10^4$  太陽質量) では、形成されるブラックホールの数も限られており、重力ポテンシャルも浅いことから、合体して重力波を放出するようなブラックホール連星の形成は難しいと考えられてきた。

しかしながら、星団の数は球状星団よりも散開星団の方が数多く形成されている [6]。そのため、個々の星団で形成されるブラックホール連星は少なくとも、全体としては有力なブラックホール連星形成の場になりうる。そこで、我々はこれまでの研究で重力波源天体であるブラックホール連星の起源として散開星団内でのブラックホール連星の形成に着目し、重力多体シミュレーションを用いて、ブラックホール連星の特徴を解明するための研究を行った [7]。その結果、散開星団では球状星団とは異なる形成過程でブラックホール連星を形成していることを発見した。図 1 は球状星団と散開星団でのブラックホール連星形成過程の違いを示す。100 太陽質量の星がブラックホールに進化する時間が約 300 万年であるのに対して、今回用いた星団では、コア崩壊時間がより短いものになっている。また、質量が重い星団ほどコア崩壊時間は長くなる傾向にあり、球状星団ではコア崩壊時間がブラックホール形成時間よりも長くなる。その結果として、球状星団 (図 1 上段) ではブラックホールが形成された後に、星団のコア崩壊が起こる。その後、高密度なコア内での三体相互作用により、連星の形成進化が起こる。一方、散開星団 (図 1 下段) では大質量星がブラックホールへ進化する前にコア崩壊が起こる。その結果、大質量星がブラックホールへ進化する前に連星を形成する。この大質量星連星が進化する時に common-envelope を経てコンパクトなブラックホール連星を形成する。このことから、従来の想定以上のブラックホール連星が散開星団で形成されることを示した。

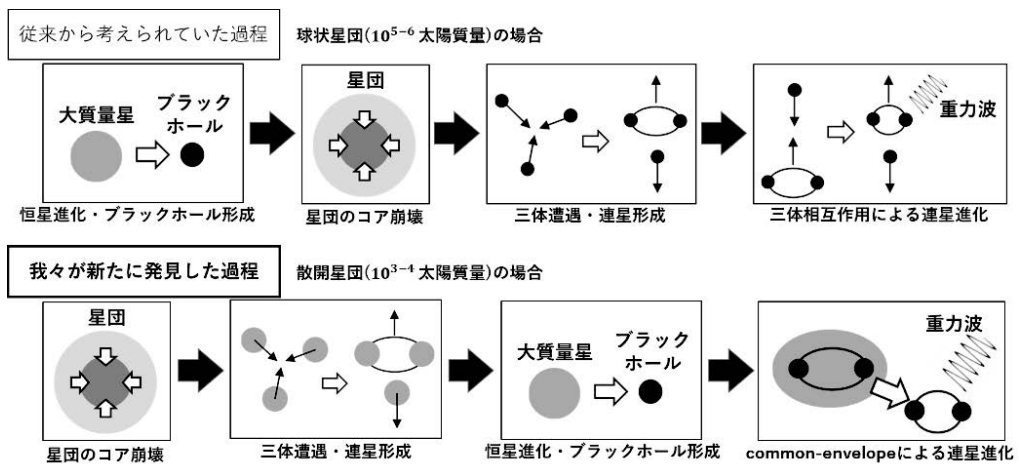


図 1 : 球状星団と散開星団でのブラックホール連星形成過程の違い

球状星団の大部分が 120 億年以上前に形成されたと考えられるのに対し、散開星団はあらゆる時代に形成されることが期待される。一方で、金属量が大きい星団では恒星風の影響で大質量ブラックホールの形成が難しく、連星ブラックホールの合体率が小さくなる。そこで我々は、近傍での散開星団起源の連星ブラックホール合体の合体率を求めるために、金属量が異なる星団について、星団の進化を計算した。本研究では散開星団程度の星団について 0.1, 0.25, 0.5, 1.0 太陽金属量のモデルについて計算を行った。これらの計算結果から、各金属量の星団が形成される典

型的な宇宙年齢における星形成率密度を考慮し、近傍での連星ブラックホールの合体率密度を推定する。

### 3. シミュレーションの方法と星団モデル

今回の計算では星団を数千個の星からなる重力多体系として扱う。星団は初期に高密度であり、このような重力多体系の力学進化の計算には多くの計算コストが必要なる。また、それぞれの星の進化に伴う半径の変化や質量放出等の非線形な物理過程が複雑に絡み合う。また、連星進化と星団全体の進化ではタイムスケールが大きく異なる。これらの物理を同時に計算するために、大規模な計算機を用いた数値シミュレーションによる研究が必要不可欠となる。

ひとつの星団モデル内で形成されるブラックホール連星は数個程度と予想される。さらに、そのうち重力波放射し得るブラックホール連星は数十個に1個程度である。重力波放射について統計的に議論を行うためには複数の星団について計算を行う必要がある。そのため、重力N体シミュレーションコード NBODY6++GPU[8]を用いて、Reedbush-Lにて計算を行った。以下に今回の計算についての要点をまとめる。

#### 3. 1. 初期条件

表1に今回用いた星団モデルの初期条件について、主なパラメータをまとめる。2500 太陽質量の星団について金属量の異なる4つのモデルについて計算を行った。

初期条件として、星団を構成する星は 0.08 から 150 太陽質量の主系列星とし、質量分布は Kroupa の初期質量関数[9]に従うように乱数で与えた。図2は Kroupa の初期質量関数を示す。この条件の時、期待される星の平均質量は 0.586 太陽質量である。

表1：シミュレーションモデル

	星団質量 [太陽質量]	金属量 [太陽金属量]	ラン数
Model A	2500	0.1	360
Model B	2500	0.025	500
Model C	2500	0.5	1000
Model D	2500	1	1000

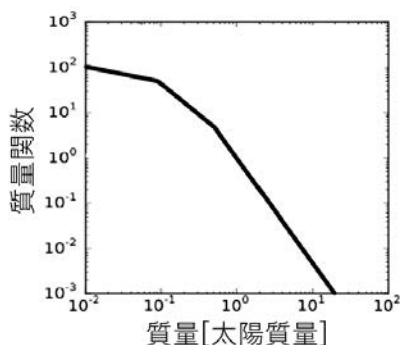


図2：Kroupaの初期質量関数

星団のモデルとしてPlummer modelを採用した。このモデルの密度分布 $\rho(r)$ は以下の式で与えられる。

$$\rho(r) \propto \left(1 + \frac{r^2}{r_p^2}\right)^{-5/2}$$

ここで、 $r$ および $r_p$ は星団中心からの半径およびスケール半径である。本研究ではスケール半径は、0.31pcとした。この時、星団の全質量の半分が含まれる半径 (Half-Mass Radius) 内の平均密度が

$$\rho_{hm} = 10^4 M_{\odot} \text{pc}^{-2}$$

となる。

### 3. 2. N体シミュレーション

重力N体シミュレーションコードNBODY6++GPU[8]を用いて、星団進化のシミュレーションを行った。NBODY6++GPUは星団計算用の重力多体計算コードNBODY6を並列計算機、GPU計算機対応にアップデートしたもので、より高速に計算ができる。また、重力多体計算に加えて、星の進化ライブラリや連星計算が可能なパッケージが含まれており、星団に関する先行研究でも多く使用されている。

個々の星の運動については4次のエルミート法を用いて計算する。今回のシミュレーションでは、初期に連星は存在しないが星の重力三体相互作用により連星を形成する。これらの連星の運動を計算するためのタイムステップは星団全体の計算のためのタイムステップよりもかなり短くなってしまふ。そこで、連星の軌道計算のためにKS法と呼ばれる方法が本シミュレーションコードには実装されている。

### 3. 3. 星の進化

今回用いたシミュレーションコードには星の進化モデル[9]が実装されている。このモデルでは、初期質量、金属量の関数として恒星の質量や半径の時間進化を計算する。図2は初期の恒星質量と損後に形成されるブラックホール質量の関係を各金属量のモデルについて示す。 $Z=0.02$ が太陽金属量に相当する。金属量が大きいモデルでは恒星が進化する時に星風によって多くの質量が失われる。そのため、最終的に形成されるブラックホールの質量は小さくなる。

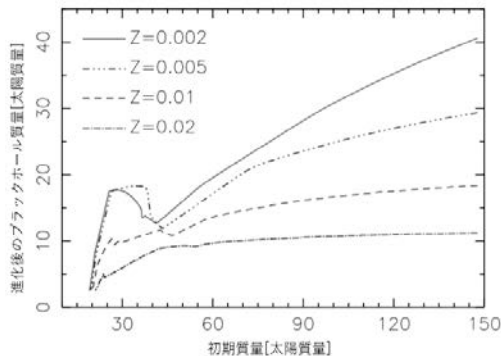


図2：各金属量における恒星の初期質量と進化後に形成されるブラックホール質量の関係。



$Z=0.02$  が 1 太陽金属量に相当する。

類似の先行研究では球状星団に着目したものが大多数である(例: [5], [10])。散開星団に着目した先行研究も存在するが初期から連星を加え、その後の連星進化を調べている(例: [11])。我々の研究の特色は散開星団に着目し、連星形成過程から調べた点である。

#### 4. ブラックホール連星形成

シミュレーションの結果、各金属量の散開星団モデルでブラックホール連星が形成された。このようなブラックホール連星が実際に観測で発見されているような重力波を放出するか調べる必要がある。ブラックホール連星は重力波放出しながら少しずつ軌道を縮めていき最終的に合体する。観測で見つかるような重力波はこの合体の時に放出されるものである。ある連星が合体するまでの時間は以下の式で表される。

$$t_{GW} \sim 1.2 \times 10^4 \left[ \frac{M_1}{30M_{\odot}} \right]^{-3} \left[ \frac{a}{1\text{AU}} \right]^4 \frac{g(e)}{q(1+q)} \text{Gyr},$$

$$g(e) \equiv \frac{(1-e^2)^{3.5}}{1 + \frac{73}{24}e^2 + \frac{37}{96}e^4}$$

ここで、 $a$ と $e$ はそれぞれ連星の軌道長半径と軌道離心率を表す。 $M_1$ は連星を構成する星のうち重い星の質量を表し、 $q$ は連星を構成する2つの星の質量比である。

上記の式から得られる時間が宇宙年齢よりも短くなければ、現在の観測で重力波として検出されない。ここではシミュレーション内で形成された各ブラックホール連星について合体までの時間を調べ、140億年以内に合体するようなブラックホール連星の数を調べた。表2は今回のシミュレーションの結果から得られたブラックホール連星の数と、それらの連星の中でも140億年以内に合体する連星の数を示す。

表2：シミュレーション内で形成されたブラックホール連星の数

	ラン数	ブラックホール連星数	140億年以内に合体する ブラックホール連星数
Model A	360	338	37
Model B	500	487	17
Model C	1000	988	32
Model D	1000	877	7

各モデルで金属量の違いはあるが、いずれのモデルでもひとつの星団当たり約1個のブラックホール連星が形成されていることがわかる。しかし、宇宙年齢以内に合体するようなブラックホール連星の数はモデルによって顕著な差が見られた。金属量が大きいモデルほど星団ひとつあたりに得られるブラックホール連星数は少ないという結果が得られた。この結果は、質量が大きいブラックホールを含む連星ほど合体時間が短くなるという傾向が反映された結果であると考えられる。

## 5. 近傍宇宙におけるブラックホール連星の合体率密度

上述の結果から各金属量の星団一つ当たりによりの程度のブラックホール連星が形成され、現在のどのくらいの割合で重力波が検出されるか見積もることができる。近傍宇宙におけるブラックホール連星の合体率密度を計算するためには、これらの結果に加え、それぞれの金属量の星団がいつどのくらい形成されるかの情報を加味して計算する必要がある。一般的な傾向としては、昔の宇宙ほど金属量の小さい星団がより多く形成される。

本研究では、各金属量の星団が形成される星形成率密度として、銀河の観測から示唆される結果[12]を用いた。その結果としてブラックホール連星の近傍での合体率密度は約  $70 \text{ yr}^{-1}\text{Gpc}^{-3}$  と推測された。この値は、これまでの重力波の観測から示唆される値とよく一致する[13]。

さらに、連星の主星質量ごとの合体率密度を推定した。図3のヒストグラムは我々のシミュレーションから予想される連星ブラックホールの合体率密度を表す。この結果は重力波の観測から予期される結果とよく一致していることがわかる。

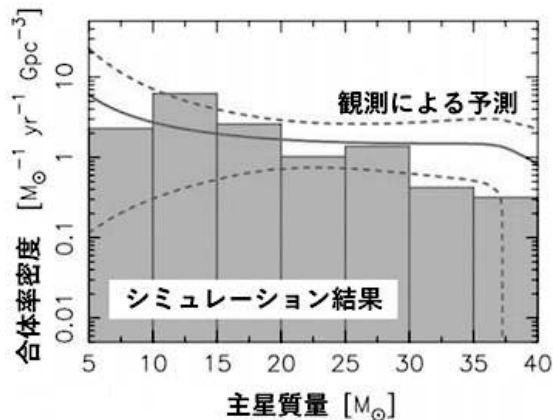


図3：連星ブラックホールの近傍での合体率密度の主星質量依存性  
シミュレーション結果(ヒストグラム)と観測による予測  
(実線:平均値, 破線:90%信頼区間の両端)の比較。

## 6. まとめ

近傍での散開星団起源の連星ブラックホール合体の合体率を求めるために、金属量が異なる星団について、重力N体シミュレーションコードNBODY6++GPUを用いて、Kroupaの初期質量関数に従う0.08から150太陽質量の主系列星からなる星団の進化を計算した。本研究では散開星団程度の星団について0.1, 0.25, 0.5, 1.0太陽金属量のモデルについて計算を行った。さらに、銀河の金属量進化史を考慮することで、近傍での合体率への寄与を推定した。その結果、散開星団起源の連星ブラックホールの近傍での合体率密度は約  $70 \text{ yr}^{-1}\text{Gpc}^{-3}$  と推測され、重力波の観測から示唆される連星ブラックホール合体率密度とよく一致することが分かった。

## 参 考 文 献

- [1] Kumamoto J., Fujii M. S., Tanikawa A., 2020, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 495, 4268
- [2] Abbott B. P., et al., 2016, Physical Review Letters, 116, 241103
- [3] Kinugawa T., Inayoshi K., Hotokezaka K., Nakauchi D., Nakamura T., 2014, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 442, 2963
- [4] Belczynski K., Holz D. E., Bulik T., O' Shaughnessy R., 2016, Nature, 534, 512
- [5] Portegies Zwart S. F., McMillan S. L. W., 2000, Astrophysical Journal, 528, L17
- [6] Portegies Zwart S. F., McMillan S. L. W., Gieles M., 2010, Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 48, 431
- [7] Kumamoto J., Fujii M. S., Tanikawa A., 2019, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 486, 3942
- [8] Wang L., Spurzem R., Aarseth S., Nitadori K., Berczik P., Kouwenhoven M. B. N., Naab T., 2015, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 450, 4070
- [9] Kroupa P., 2001, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 322, 231
- [10] Fujii M. S., Tanikawa A., Makino J., 2017, Publications of the Astronomical Society of Japan, 69, 94
- [11] Ziosi B. M., Mapelli M., Branchesi M., Tormen G., 2014, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 441, 3703
- [12] Chruslinska M., Nelemans G., 2019, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 488, 5300
- [13] Abbott B. P., et al., 2019, Astrophysical Journal, 882, L24

# 階層型直交格子法を用いた航空機高揚力装置の

## 近傍場音響予測

菅谷 圭祐

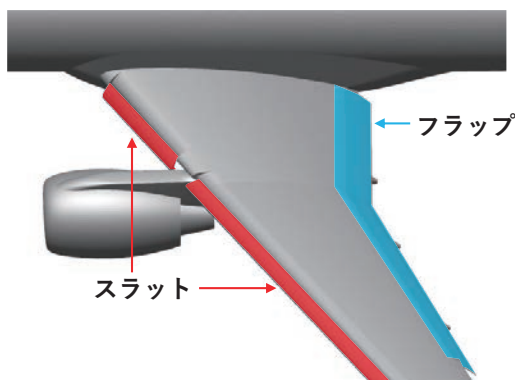
東京大学大学院 工学系研究科 航空宇宙工学専攻

### 1. 序論

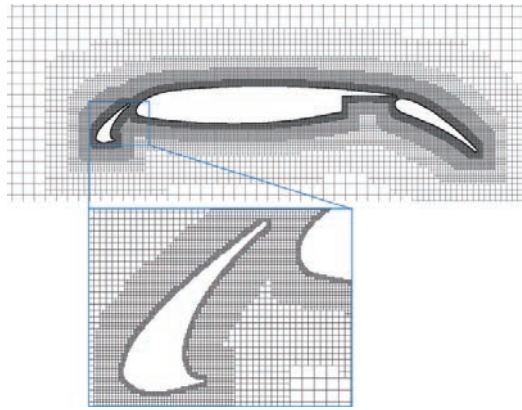
近年の航空輸送への需要の高まりに伴い、航空機の低騒音化は設計・開発における重要な課題となっている<sup>1</sup>。着陸時の航空機はエンジンの出力を小さくするため、高揚力装置（第1図）や降着装置から発生する機体騒音が相対的に大きくなる<sup>2</sup>。そこで数値流体力学（Computational Fluid Dynamics, CFD）を用い、機体騒音が発生するメカニズムを理解し設計に反映することは、低騒音な航空機を設計するために重要である。

CFDによる解析では、航空機の壁面とその周りの空間を離散化した計算格子を生成する必要がある。高揚力装置や降着装置は形状が複雑なため、計算格子の生成が解析のボトルネックである。そこで複雑な形状に対し自動・ロバストに計算格子を生成可能な直交格子法が、近年注目されている（第2図）<sup>3-7</sup>。直交格子法による解析では、計算格子が物体の壁面に沿わず計算の精度が低下することが課題であったが、壁面近傍の流れをモデル化する手法（埋め込み境界法と壁関数）を組み合わせることで、精度の良い計算が可能になりつつある。

本研究では、壁面近傍の流れをモデル化する手法を組み合わせた直交格子法による、航空機からの機体騒音の予測精度を検証する。計算対象は、国内外のワークショップでの課題として利用され、風洞試験や他のCFDソルバとの比較が可能な、30P30N高揚力装置である。本研究には、東京大学 李家・今村研究室で開発中の、直交格子流体ソルバ University of Tokyo Cartesian-grid-based automatic flow solver (UTCart) を利用する<sup>6</sup>。



第1図：航空機の高揚力装置。



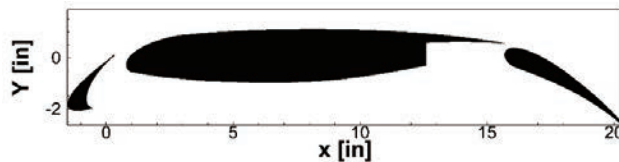
第 2 図: 高揚力装置周りに生成された直交格子の例.

## 2. 計算対象

第 3 図は、本研究の計算対象である 30P30N 高揚力装置の形状である．30P30N 高揚力装置は、BANC workshop<sup>8</sup>や Fourth Aerodynamic Prediction Challenge (APC-IV)<sup>9</sup>でワークショップの課題として採用された形状で、風洞試験の結果が公開されている<sup>10</sup>．第 1 表は計算条件である．

第 1 表: 計算条件.

代表長さ $c_{ref}$ [mm]	457.2
一様流マッハ数 $M_\infty$	0.17
翼弦長基準のレイノルズ数	$1.71 \times 10^6$
一様流温度 [K]	295.56
迎角 [deg]	5.5



第 3 図: 30P30N 高揚力装置.

## 3. 計算手法

UTCart では、Discrete Forcing 型の埋め込み境界法 (Immersed Boundary 法, IB 法) と壁関数を用いて壁面境界条件を課す<sup>6</sup>．第 4 図 は、本研究で用いる IB 法の概略図である．はじめに計算格子のセルを、流体領域に存在するセル (Fluid Cell), 壁面と交差するセル (Wall Cell), 物体の内側に埋没するセル (Body Cell) に分類する．次に Fluid Cell と Wall Cell のセル境界中心 (Face Center, FC) に、境界条件を課す．FC を通る壁面に対する法線の上に Image Point (IP) を配置し、IP での基本変数と壁面での条件から、FC での基本変数を決定する．IP を必ず流体領域に配置するため、IP と壁面の距離である IP 長さを壁面での格子幅の二倍とする．最後に Wall Cell に隣接する Fluid Cell (図 1 の Cell  $i$ ) と FC での基本変数を利用し、非粘性流束を計算する．また粘性流束は壁関数を用いて計算する．第 2 表 は FC に課す壁

面境界条件である。下添字の FC は Face Center, IP は Image Point,  $i$  は FC に隣接するセルを意味する。

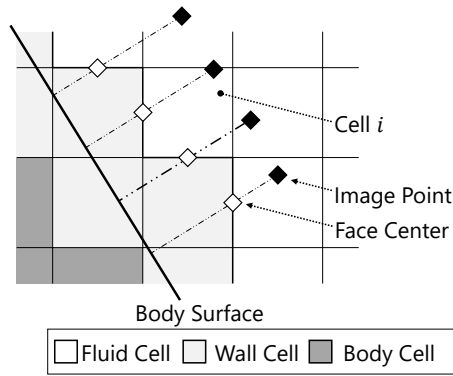
第 3 表に数値計算手法を示す。支配方程式は圧縮性 RANS 方程式で、乱流モデルは SA モデルをベースにした DDES-p である<sup>11</sup>。非粘性流束の評価には、四次精度風上バイアスキームと SLAU を用いる<sup>12,13</sup>。時間積分は MFQS 陰解法と Dual time stepping による二次精度後退差分法である<sup>12,14</sup>。時間刻み幅  $\Delta t$  は  $3.32 \times 10^{-7}$  [s] である。この時間刻み幅では、音速と一様流速度から計算されるクーラン数  $(U_\infty + a_\infty)\Delta t/\Delta x$  は、スラット内側でおおよそ 1.4 である。内部反復の回数は、内部反復中に密度の L2 残差が一桁減少するように、5 回とする。非定常解析は以下の手順で行う。はじめに、非定常解析の初期条件として、定常 RANS 解析を行う。定常 RANS 解析の初期条件は一様流である。次に非定常 DDES 解析により、非定常な流れ場の過渡計算をする。過渡計算時間  $T_{transient}$  は、 $U_\infty T_{transient} / c_{ref} \sim 6$  となるよう、0.0471 [s] とする。対応する計算ステップ数は 142000 ステップである。最後にサンプリング計算を行う。サンプリング時間  $T_{sampling}$  は、過渡計算時間と同じである。サンプリング計算中の揚力係数の変化は 1% 程度で、空力係数はドリフトしていない。

第 2 表: IB 法を用いた境界条件.

$u_{t,FC}$	$u_{t,IP} - \left\{ \frac{\partial f_{wall}}{\partial y^+} (y^+) \right\} (y_{IP}^+ - y_{FC}^+) u_\tau$
$u_{n,FC}$	$u_{n,IP} d_{FC} / d_{IP}$
$T_{FC}$	$T_{IP} - \left. \frac{dT}{dy} \right _{IP} (y_{IP} - y_{FC})$
$p_{FC}$	$p_i$
$\rho_{FC}$	$\gamma p_{FC} / T_{FC}$

第 3 表:数値計算手法.

支配方程式	圧縮性 RANS 方程式
乱流モデル	SA モデルベースの DDES-p
時間積分	MFQS 陰解法と Dual Time Stepping による 二次精度後退差分
非粘性流束評価	四次精度補間+SLAU
粘性流束評価	二次精度中心差分
勾配評価	WLSQ(G)



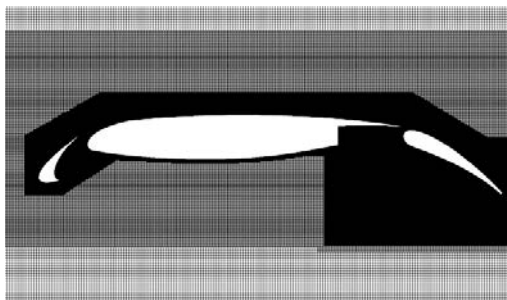
第 4 図:埋め込み境界法の概念図.

#### 4. 計算格子

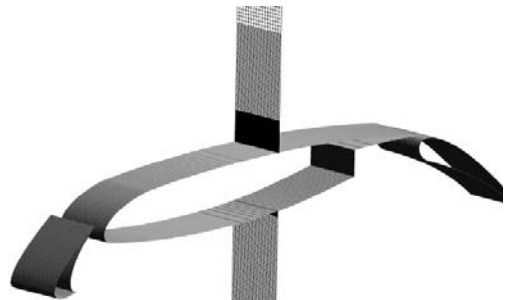
第 4 表と第 5 図に本研究で用いる計算格子の情報を示す. 計算格子のセルは全て立方体である. セル数は  $1.04 \times 10^8$  であり, 計算領域の大きさは翼弦長の 100 倍である. 格子のスパン方向長さは, 翼弦長の 0.11 倍である. スラットの壁面での格子幅は 0.1 [mm] である. またスラット後縁から放出されるカルマン渦を計算するために, スラット後縁に細かな格子を配置する. 後縁厚みが 0.6 [mm] であるのに対し, スラット後縁での格子幅を 0.05 [mm] とする. 主翼とフラップの上面側の最小格子幅は 0.2 [mm] であり, 下面側は 0.4 [mm] である. 外部境界には, スパン方向には周期境界条件を, それ以外にはリーマン不変量を考慮した遠方境界条件を課す.

第 4 表:計算格子の情報.

セル数	$1.04 \times 10^8$
スラットでの格子幅 [mm]	0.1
スラット後縁での格子幅[mm]	0.05
母翼とフラップ上面の格子幅 [mm]	0.2
母翼とフラップ下面の格子幅 [mm]	0.4
計算領域の大きさ	翼弦長の100 倍
スパン方向長さ [mm]	50.8



(a) 全体図



(b) スパン方向のセルの分布

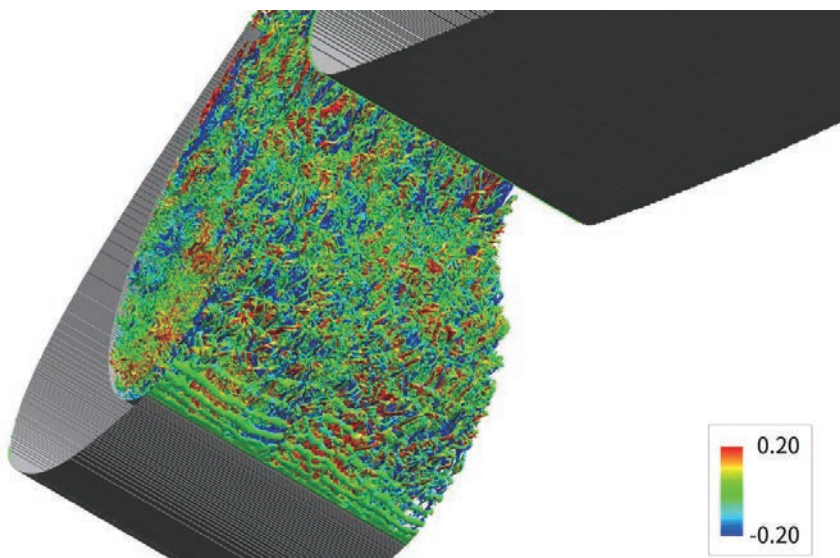
第 5 図:計算格子.

## 5. 並列計算

本研究では、東京大学情報基盤センターが運営する Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステムを用いた並列計算をする。並列計算は Flat MPI で行い、Oakbridge-CX の計算ノードを 16 ノード用い 896 並列で計算する。計算格子の分割には METIS ライブラリを用いる<sup>15</sup>。計算に要した CPU 時間は、過渡計算とサンプリング計算を合わせて  $2.9 \times 10^6$  [hour] である。

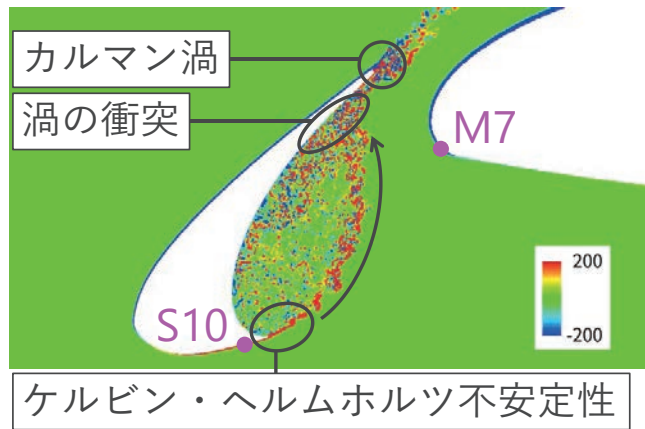
## 6. 計算結果

第 6 図はスラットでの瞬時流れ場で、速度テンソルの第二不変量 (Q 値) の等値面である。等値面は、スパン方向速度で色付けされている。スラット下面側の角部であるカスプよりせん断層が生じ、スラット内側のコーブを囲んでいる。またせん断層が三次元的な渦になり、スラット後縁側でスラットと衝突し、縦渦が生じている。第 7 図はスラットでの瞬時流れ場のスパン方向渦度分布である。第 8 図(a)は、著者らが過去に文献<sup>16</sup>で行った、直交格子法による 30P30N 高揚力装置周りの非定常流れ計算の結果である。文献<sup>16</sup>では第 8 図(b)の、セル数が  $1.8 \times 10^7$ 、スラットでの格子幅が本研究の格子幅の 4 倍の計算格子を用いている。第 7 図と第 8 図を比較すると、コーブでの渦度分布が大きく異なり、本研究では細かな渦が解像されている。また第 8 図と異なり、第 7 図ではスラット後縁からカルマン渦が放出されている。これは、本研究ではスラット後縁に対し特に細かな格子を配置したため、計算格子でスラットの後縁厚みを再現できたことが原因である。第 9 図は表面での圧力のパワースペクトル密度 (PSD) で、風洞試験の結果と比較している。圧力の取得位置は、第 7 図の S10 と M7 である。カルマン渦が原因の 20 [kHz] 程度のピークについて、周波数と PSD レベルが風洞試験と良く一致している。1 [kHz] から 2 [kHz] のピークは、ピーク周波数が風洞試験と概ね一致している。1 [kHz] から 2 [kHz] のピークは、風洞試験と文献<sup>16</sup>の計算結果と比べて PSD レベルが過小評価されているが、同様の傾向は物体適合格子での解析でも観察されている<sup>17</sup>。

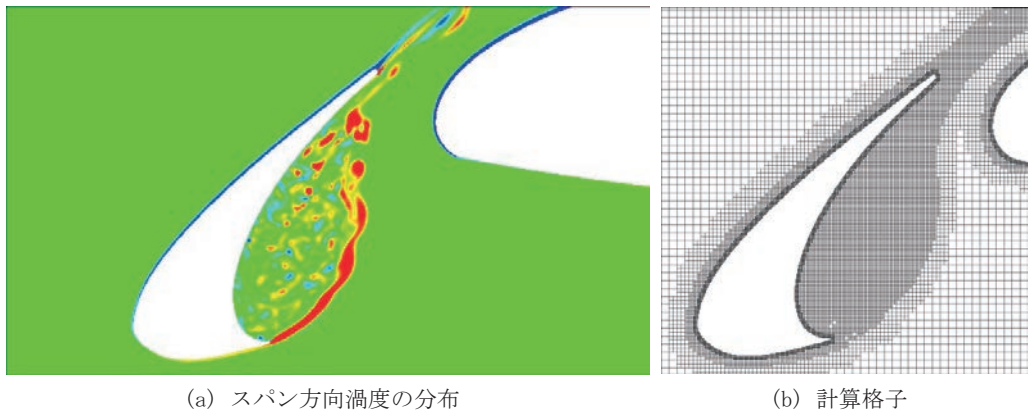


第 6 図:スラット内側での Q 値の等値面。スパン方向速度で色付けしている。

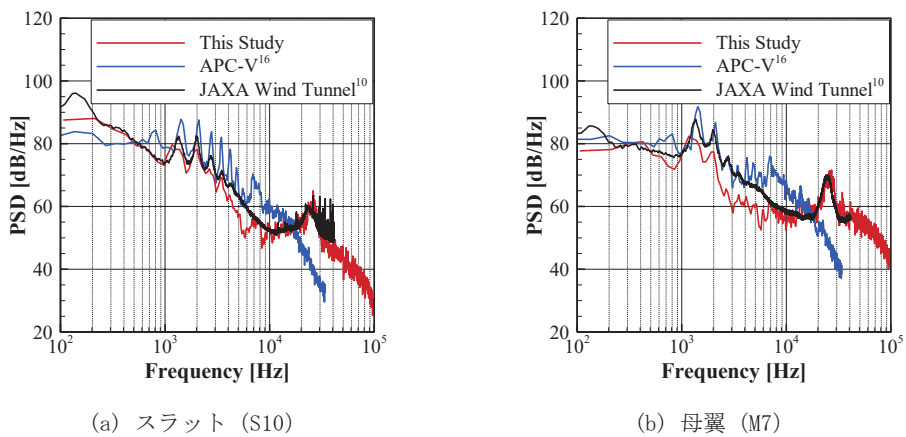




第7図: スパン方向渦度の分布.



(a) スパン方向渦度の分布 (b) 計算格子  
第8図: 文献<sup>16</sup>での直交格子法を用いた30P30N高揚力装置周りの非定常流解析.



(a) スラット (S10) (b) 母翼 (M7)  
第9図: 表面での圧力のPSD.

## 7. 結論

本研究では、直交格子法による航空機からの機体騒音の予測精度を検証することを目的とし、30P30N 高揚力装置の非定常流れを解析した。壁面近傍の流れは、IB 法と壁関数でモデル化した。支配方程式は圧縮性 RANS 方程式で、乱流モデルには SA モデルをベースにした DDES-p を利用した。計算格子のセル数は 1.04 億セルであり、特にスラット全体とスラット後縁で格子を細分化した。近傍場での音響予測の精度を評価するため、表面での圧力の PSD を風洞試験と比較した。その結果、スラット後縁から放出されるカルマン渦が原因のピークについて、ピーク周波数と PSD レベルが風洞試験と良く一致した。また 1 [kHz] から 2 [kHz] の特徴的なピークは、ピーク周波数が風洞試験と概ね一致した。本研究より、直交格子法を用いて航空機からの機体騒音を精度良く予測できることがわかった。

## 謝 辞

本研究は東京大学 今村 太郎 准教授の指導の下行われた。また本研究は東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」2019 年度後期課題として行われた。計算結果の可視化には、Intelligent Light University Partner Program (UPP) の提供を受け、FieldView を用いた。ここに感謝の意を表す。

## 参 考 文 献

1. Yamamoto, K., Ura, H., Yokokawa, Y., Imamura, T., Nakakita, N., Camargo, H., Remillieux, M., Boor, Z., Burdisso, R. A., Ng, W. F., Uchida, H., and Ito, T., “Aeroacoustic Testing of a High-Lift Device Model in the Virginia Tech Anechoic Wind Tunnel,” 13th CEAS-ASC Workshop & 4th Scientific Workshop of X3-Noise, Bucharest, Romania, 2009.  
DOI: 10.13140/2.1.1975.0726
2. Dobrzynski, W., “Almost 40 Years of Airframe Noise Research: What Did We Achieve?,” *Journal of Aircraft*, Vol. 47, No. 2, 2010, 353-367.  
DOI: 10.2514/1.44457
3. Mittal, R., and Iaccarino, G., “Immersed Boundary Methods,” *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 37, No. 1, 2005, pp.239-261.  
DOI: 10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743
4. Nakahashi K., “Immersed Boundary Method for Compressible Euler Equations in the Building-Cube Method”, 20th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, AIAA 2011-3386, Honolulu, Hawaii 2011.  
DOI: 10.2514/6.2011-3386
5. Capizzano, F., “Turbulent Wall Model for Immersed Boundary Methods,” *AIAA Journal*, Vol. 49, No. 11, 2011, pp. 2367-2381.  
DOI: 10.2514/1.J050466
6. Tamaki, Y., and Imamura, T., “Turbulent Flow Simulations of the Common Research Model Using Immersed Boundary Method,” *AIAA Journal*, Vol. 56, No. 6, 2018, pp. 2271-2282.  
DOI: 10.2514/1.J056654
7. Péron, S., Benoit, C., Renaud, T., and Mary, I., “An immersed boundary method on Cartesian

- adaptive grids for the simulation of compressible flows around arbitrary geometries,” *Engineering with Computers*, 2020.  
DOI: 10.1007/s00366-020-00950-y
8. Choudhari, M., and Lockard, D. P., “Assessment of Slat Noise Predictions for 30P30N High-Lift Configuration from BANC-III Workshop,” 21st AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference, AIAA 2015-2844, Dallas, Texas, USA, 2015.  
DOI: 10.2514/6.2015-2844
  9. “Fourth Aerodynamics Prediction Challenge (APC-IV),” JAXA Special Publication, JAXA-SP-18-008, 2019.
  10. Murayama, M., Yokokawa, Y., Ura, H., Nakakita, K., Yamamoto, K., Ito, Y., Takaishi, T., Sakai, R., Shimoda, K., Kato, T., and Homma, T., “Experimental Study of Slat Noise from 30P30N Three-Element High-Lift Airfoil in JAXA Kevlar-Wall Low-Speed Wind Tunnel,” 2018 AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference, AIAA 2018-3460, Atlanta, Georgia, USA, 2018.  
DOI: 10.2514/6.2018-3460
  11. Imamura, T., and Tamaki, Y., “Unsteady Flow Simulation around Two-Wheel Main Landing Gear based on Compressible Navier-Stokes Solver with Immersed Boundary Method,” AIAA AVIATION 2020 FORUM, 2020.  
DOI: 10.2514/6.2020-2579
  12. Shima, E., and Kitamura, K., “Parameter-Free Simple Low-Dissipation AUSM-Family Scheme for All Speeds,” *AIAA Journal*, Vol. 49, No. 8, 2011, pp. 1693-1709.  
DOI: 10.2514/1.J050905.
  13. Tamaki, Y., and Imamura, T., “Efficient dimension-by-dimension higher order finite-volume methods for a Cartesian grid with cell-based refinement,” *Computers & Fluids*, Vol. 144, 2017, pp. 74 - 85.  
DOI: 10.1016/j.compfluid.2016.12.002
  14. Jameson, A., “Time dependent calculations using multigrid, with applications to unsteady flows past airfoils and wings,” 10th Computational Fluid Dynamics Conference, 1991.  
DOI: 10.2514/6.1991-1596
  15. METIS - serial graph partitioning and fill-reducing matrix ordering,  
<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/overview>, retrieved on July 29, 2020.
  16. Sugaya, K., Shu, K., Imamura, T., and Tamaki, Y., “Unsteady Aerodynamic Prediction of 30P30N Using Hierarchical Cartesian Mesh and Adaptive Mesh Refinement,” JAXA Special Publication: Fifth Aerodynamics Prediction Challenge (APC-V), JAXA-SP-19-008, 2020, pp. 43 - 51.
  17. Ueno, Y., and Ochi, A., “Airframe Noise Prediction Using Navier-Stokes Code with Cartesian and Boundary-fitted Layer Meshes,” 25th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference, AIAA 2019-2553, Delft, The Netherlands, 2019.  
DOI: 10.2514/6.2019-2553

# 様々な初期質量の大質量星から前兆ニュートリノに関する系統的な研究

加藤 ちなみ

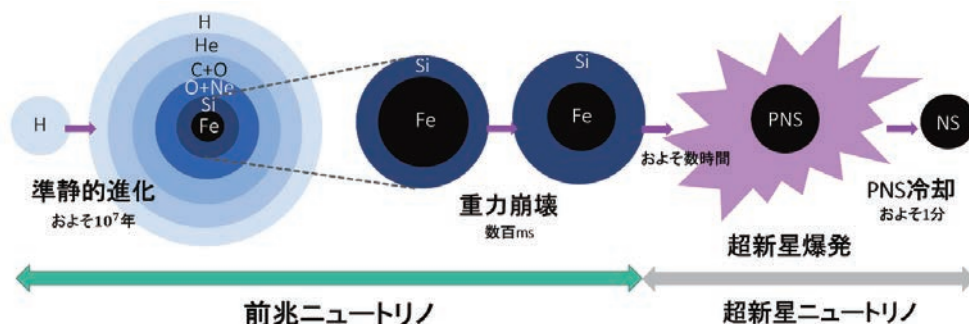
東北大学 大学院工学研究科

## 1. はじめに

宇宙に数多く存在する恒星は、生まれたときに持っている質量によって全く異なる進化をする。一番身近な恒星である太陽は炭素や酸素で構成される中心核をもつ**白色矮星**となって一生を終える。一方で、太陽の8倍以上の初期質量をもつ**大質量星**は鉄が主成分の核が形成した後、「**超新星爆発**」と呼ばれる大規模な爆発を起こす。現在、未だに爆発メカニズムや爆発前の親星の構造など多くの不明な点が残されている。爆発によって中心部で生成された重元素が散布されることで周囲の化学組成が変化するため、これらの解明は銀河や太陽系における化学進化の解明にもつながる。また、星内部は非常に高温・高密度( $10^{14}\text{g/cm}^3$ ,  $10^{12}\text{K}$ )になるため、超新星爆発自体が地球上では実証できない理論の実験場になりうる。そこで、本研究では大質量星・超新星爆発に残された未解明な点を「ニュートリノ観測」を用いて明かすことを目的としている。

## 2. 大質量星の進化と超新星爆発

恒星は水素ガスが集まることで誕生し、中心部で核融合反応を起こして進化とともに重元素を合成する。大質量星の場合は、水素→ヘリウム→炭素→ネオン→酸素→ケイ素の順に核融合反応を起こし、最終的に鉄が主成分の中心核が形成される。鉄は最も安定な原子核であるため核融合反応はこれ以上起こらず、代わりに吸熱の鉄の光分解反応や自由陽子による電子捕獲反応が起こる。これによって、星を支えていた中心部の圧力が減少し中心核が不安定化する(**重力崩壊**)。その後、重力崩壊によって中心密度は単調に増加していき原子核密度( $10^{14}\text{g/cm}^3$ )に達すると、核力によって再び中心核が安定化する。これにより不安定部と安定部の境界に衝撃波が形成されて外側へと伝搬していく(**コアバウンス**)。この衝撃波が星の表面に達したときに超新星爆発が起きる。これらの一連の進化は第1図を参照していただきたい。



第1図：大質量星の進化と超新星爆発。

大質量星が誕生してから超新星爆発によって一生を終えるまでの一連の進化を表している。本研究では特に準

静的進化と重力崩壊に注目している。また、コアバウンスより前に放出されるニュートリノを前兆ニュートリノ、後に放出されるニュートリノを超新星ニュートリノと呼んでいる。ここで PNS は原始中性子星、NS は中性子星を意味している。

### 3. ニュートリノの役割とその観測の重要性

上で述べた大質量星の進化や超新星爆発のダイナミクスにおいて「ニュートリノ」が非常に重要な役割を担っている。ニュートリノは物質との反応確率が小さいため、爆発前の星の中心部で生成されても自由にそこから抜け出すことができ、中心部の冷却に大きく寄与している。また、超新星爆発に対しては衝撃波が星表面に到達するためにニュートリノによる加熱が必要不可欠であることが最近の数値計算によって示されている。つまり、これらのニュートリノを検出することで恒星進化や爆発メカニズムに対する重要な情報を得ることができる。実際に、1987年に起きた超新星爆発の際にカミオカンデなどの地上のニュートリノ観測装置で初めて超新星爆発由来のニュートリノを検出し、爆発メカニズムの理解が大きく進歩した。当時から30年が経過した現在ニュートリノ検出技術は大いに発展し、次の超新星爆発の際にはより多くの詳細な情報を得ることができると期待されている。そこで、次の観測から正確に情報を得るためにより現実的なニュートリノの理論予想が強く求められている。

大質量星の進化・超新星爆発から放出されるニュートリノは放出される段階によって前兆ニュートリノと超新星ニュートリノに分けられて研究が進められており(第1図)、本研究では特に前兆ニュートリノに注目する。前兆ニュートリノは実際に観測された超新星ニュートリノよりも放出数が少なく、エネルギーも低いいため検出が難しいとされてきた。しかし、近年の検出技術の発展により検出可能性がでてきた。前兆ニュートリノ検出の重要性は主に①恒星進化理論への制限②超新星爆発の予兆であり、特に重要なのは②である。超新星爆発は私たちの銀河では数百年に1回の非常にレアなイベントであり、また爆発自体はほんの一瞬の出来事であるため電磁波などの他の検出方法で超新星爆発を確実にとらえるためには事前に爆発を予知する必要がある。前兆ニュートリノは太陽系近傍の親星からであれば爆発の数日前から検出されることが最近の研究で分かっている。そのため前兆ニュートリノ検出は超新星爆発を確実にとらえるために欠かせない予兆となる。

### 4. 様々な初期質量の大質量星からの前兆ニュートリノ放出の系統的な調査

2019年度若手・女性利用課題として採択された課題においては、様々な異なる初期質量をもつ大質量星からの前兆ニュートリノ放出を系統的に計算し、初期質量や恒星中心部の物理量などとの相関関係の調査を行った。これまでの研究ではいくつかの典型的な初期質量をもった恒星からの前兆ニュートリノ放出に注目し、ニュートリノ検出器における前兆ニュートリノの観測可能性を議論してきた。しかし実際に太陽系近傍に存在する超新星爆発の候補天体は太陽の9倍-40倍以上の広い初期質量の範囲を持っている。また、恒星進化は初期質量に強く依存するため、より現実的な理論予想のためには前兆ニュートリノの初期質量依存性の調査が必要不可欠である。

今回用いた大質量星の初期質量は太陽質量の10倍~40倍までの23モデルである。これらを用いて以下のアウトラインにそって研究を行った。

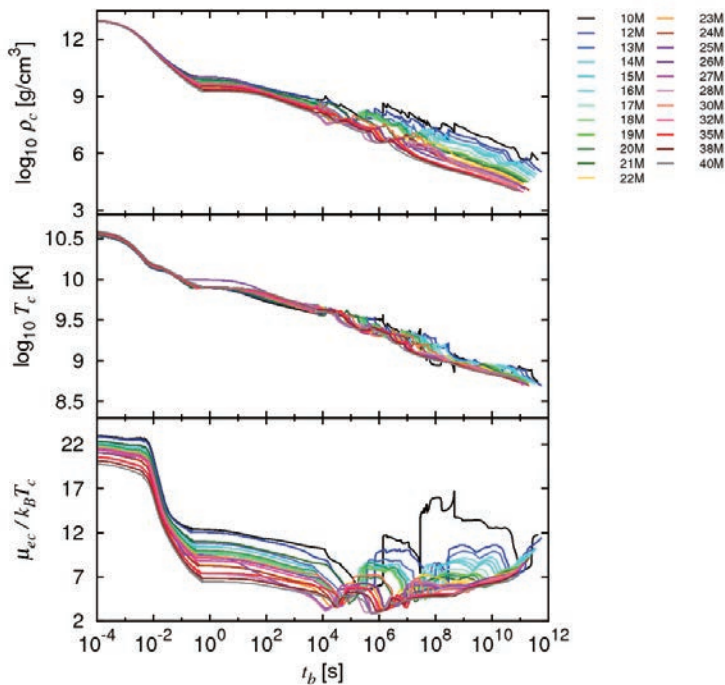
- ① 大質量星の準静的進化および重力崩壊段階の進化計算
- ② ①で得られた結果を用いたニュートリノ光度及びエネルギースペクトルの計算

③ 得られたニュートリノ光度と恒星進化において重要な物理量との相関調査

Reedbush スーパーコンピュータシステムにおいて計算を行ったのは、①の重力崩壊段階の進化計算である。重力崩壊段階中は2で述べた通り中心核が不安定になっているため、ダイナミカルな流体方程式を解く。また、中心部では密度が非常に高くなっているためニュートリノも物質と反応し熱化されるため、同時にニュートリノに対する Boltzmann 方程式を解く必要がある。実際に本研究ではMPI/OpenMPIの hybrid 並列化を用いたニュートリノ輻射流体計算コードを用いた。

得られた大質量星の中心密度・温度・縮退度の時間発展は第2図の通りであった。この図より同時刻において比較をするとわかることは以下の通りである。

- ① 準静的段階では常に軽い星ほど中心密度が高く、その特徴が重力崩壊段階で見られなくなる。
- ② 準静的段階では重い星ほど中心温度が高いが、重力崩壊直前からその特徴が見られなくなる。
- ③ どの段階においても軽い星ほど縮退度が高い(つまり、コンパクトな星である)。



第2図: 様々な初期質量の大質量星の中心密度・温度・縮退度の時間発展。

今回用いた 23 個の大質量星モデルの中心密度(上)・中心温度(中)・縮退度(下)の時間発展を表している。横軸の時間はコアバウンスを基準に定義しており、炭素の核融合反応が始まるまで遡っている。 $t > 0.1 - 1s$  が準静的段階、 $t < 0.1 - 1s$  が重力崩壊段階である。

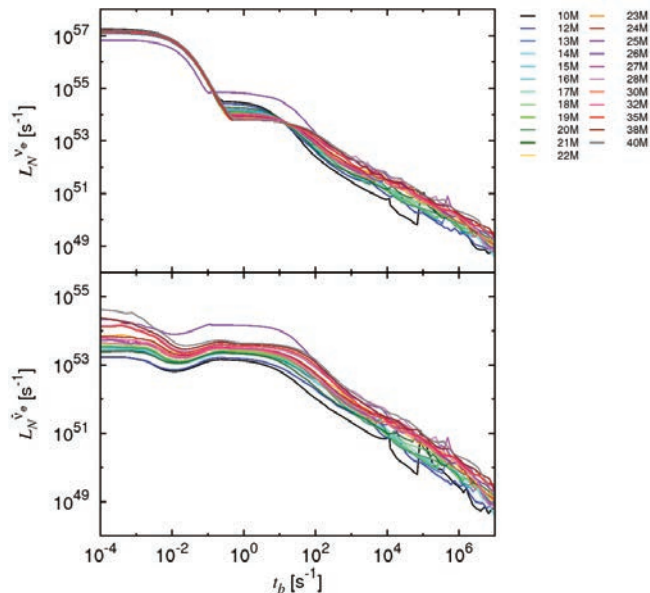
そして得られた準静的進化・重力崩壊段階の計算をもとに6種類のニュートリノ放出反応(自由陽子による電子捕獲・原子核による電子捕獲・原子核による陽電子捕獲・電子陽電子対消滅・ $\beta^\pm$ 崩壊)からの電子型・反電子型ニュートリノ光度およびスペクトルを計算した。得られた結果は第3図である。初期質量による電子型及び反電子型ニュートリノ光度の違いは最大で10-80倍程度に達し、前兆ニュートリノ観測の理論予想において初期質量が非常に重要なファクターであ

ることがはっきり示された。また、この図からわかる光度の初期質量依存性は以下の通りである。

- ① 準静的段階における電子型ニュートリノは、進化初期では重い星ほど高い光度を持っているのに対し、 $t \sim 1$ s でその関係性が逆転している。一方で、重力崩壊段階の電子型ニュートリノは初期質量によらず同じ光度の時間発展をしている。
- ② 反電子型ニュートリノは進化段階によらず、重い星ほど高い光度を持っている。

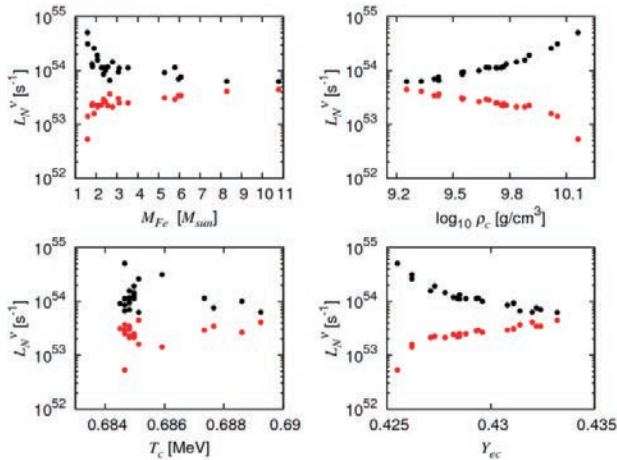
これらの結論は第2図で示した中心密度や温度などの特徴から理解することができる。電子型ニュートリノは原子核や自由陽子による電子捕獲反応によって支配的に放出されるため、密度・温度がどちらも高い状況でより多く放出される。一方で、反電子型ニュートリノに対しては $\beta^-$ 崩壊による放出が支配的であり、温度が高く比較的密度が低い状況が好ましい。

続いて実際の観測から恒星内部の情報を引き出すために、電子型・反電子型ニュートリノ光度と恒星進化において重要な物理量との相関調査を行った。今回の解析では各モデルの重力崩壊開始時における鉄コアの質量( $M_{Fe}$ )、中心密度、中心温度、 $Y_{ec}$ =中心電子数密度/中心バリオン数密度との相関に注目した。得られた結果は第4図であり、特に中心密度と光度、 $Y_{ec}$ と光度に強い相関関係が見られた。これは光度の時間発展同様に支配的なニュートリノ放出過程から理解することができる。先日受理された私たちのグループの論文において、本来はローカルなニュートリノ放出数を空間積分して得られるニュートリノ光度を中心物理量(密度・温度・ $Y_{ec}$ )の関数としてみなし、簡易的に観測量であるニュートリノ光度を理解できることを示した。この論文では太陽質量の15倍の初期質量をもつモデルのみを用いていたが、この第4図はその解析を異なる初期質量の星に対しても拡張できる可能性を示唆しているおり、今後取り組むべき課題である。



第3図：電子型・反電子型ニュートリノ光度の時間発展。

今回用いた23個の大質量星モデルの電子型(上)、反電子型(下)のニュートリノ光度の時間発展を表している。横軸の時間はコアバウンスを基準に定義しており、炭素の核融合反応が始まるころまで遡っている。 $t > 0.1 - 1$ s が準静的段階、 $t < 0.1 - 1$ s が重力崩壊段階である。



第4図：電子型・反電子型ニュートリノ光度との相関関係。

重力崩壊開始時の電子型(黒)、反電子型(赤)のニュートリノ光度と恒星進化において重要な物理量との相関関係を表している。左上から順に鉄核の質量( $M_{Fe}$ )、中心密度、中心温度、 $Y_{ec}$ =中心電子数密度/中心バリオン数密度を横軸に取っている。ただし、太陽質量の25倍の初期質量をもつモデルはこの図から除いている。

## 5. まとめと今後

本研究では超新星爆発メカニズムやその親星における未解明な点を前兆ニュートリノの観測から解き明かすことを最終的な目標としている。そのために恒星の持つ初期質量に対する前兆ニュートリノ光度の依存性を系統的に調査した。実際に恒星進化は初期質量に強く依存し、特に準静的段階において中心密度や温度、縮退度に違いが見られた。具体的に同時刻で比較すると軽い星ほど中心密度は常に高いのに対し、中心温度は重い星ほど高くなっている。これらの特徴はニュートリノ光度にもそのまま表れている。原子核および自由陽子による電子捕獲反応が電子型ニュートリノ放出において支配的であり、 $t > 10s$ では温度が高い重たい星で $t < 10s$ では密度が高い軽い星で電子型ニュートリノが多く放出されている。一方で、温度が高く密度が比較的低い状況が好ましい $\beta^-$ 崩壊が支配的に放出する反電子型ニュートリノは、密度が低い重たい星で多く放出されることがわかった。どちらの光度も最大で10-80倍の違いが見られ、前兆ニュートリノ検出の予想において初期質量が重要なファクターであることが分かった。これをもとに実際の観測から恒星内部の情報を引き出すために重要となる光度と恒星物理量との相関調査を行った。そして、特に電子型・反電子型ニュートリノの光度と密度・ $Y_{ec}$ に対して強い相関関係が見られた。今後は、ニュートリノ光度を中心密度・温度・ $Y_{ec}$ の関数としてみなし、より相関が強い物理量の調査を継続して行っていく予定である。また、実際の近傍親星を想定した場合のニュートリノ検出数の見積もりについても行う予定である。

## 参考文献

- [1] 山田章一『超新星』, 日本評論社, 2016
- [2] Hirata, K., et al., "Observation of a Neutrino Burst from the Supernova SN1987A", Physical Review Letters, Vol 58, No 14 (1987)
- [3] Odrzywolek, A., Misiaszek, M. and Kutschera M., "Detection possibility of the



- pair-annihilation neutrinos from the neutrino-cooled pre-supernova star” ,  
Astroparticle Physics, Vol 21, Issue 3, pp.303 (2004)
- [4] Kato, C., et al., “Neutrino emissions in all flavors up to the pre-bounce of massive stars and the possibility of their detections” , The Astrophysical Journal, Vol. 848, pp. 48 (2017)
- [5] Nakamura, K., et al., “Multi-messenger signals of long-term core-collapse supernova simulations: synergetic observation strategies” , Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Vol 461, Issue 3, pp.3296 (2016)
- [6] Yoshida, T., et al., “One-, Two-, and Three-dimensional Simulations of Oxygen Shell Burning Just Before the Core-Collapse of Massive Stars” , The Astrophysical Journal, Vol 881, pp.16 (2019)
- [7] Nagakura, H., Sumiyoshi, K. and Yamada, S., “Three-dimensional Boltzmann-Hydro code core-collapse in massive stars I. special relativistic treatments” , The Astrophysical Journal Supplement Series, Volume 214, pp.16 (2014)
- [8] Kato, C., Hirai, R. and Nagakura, H., “The sensitivity of presupernova neutrinos to stellar evolution models” , Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Vol 496, Issue 3, pp.3961 (2020)

# フルートの吹き込み角度による音色変化のメカニズム解明

小野木君枝, 横山博史, 飯田明由

豊橋技術科学大学

## 1. 緒言

フルートは、リコーダーやオルガンパイプなどと同じエアリード楽器に属する楽器で、流れと音が相互に作用して発音する。フルートからの発生音は、楽器形状のほか、唇形状や唇と楽器との相対的な位置関係といった演奏時の物理的諸条件（吹鳴条件）によって変化する<sup>1</sup>。安藤<sup>1</sup>は、フルート演奏での吹鳴条件が基本周波数や音色（倍音構造）に与える影響について、人工吹鳴機を用いた実験によって調査した。この研究によると、倍音構造に主に影響する吹鳴条件は、エッジに対する呼気ジェットの相対的な高さ（偏心値）、呼気ジェット出口とエッジとの距離、流量と考えられている。さらに、小野木ら<sup>2</sup>は、吹き込み角度も倍音構造に影響することを人工吹鳴機実験および熱線計測から明らかにした。これら吹鳴条件のうち、偏心値と倍音構造の関係については、フレッチャー<sup>3</sup>と吉川<sup>4</sup>が簡易オルガンパイプを対象として理論的に説明しているが、それ以外の吹鳴条件が倍音構造に影響するメカニズムについては未だ不明点が多い。このメカニズムを明らかにするため、流れと音を同時に解く計算手法である空力音直接計算は有効な手段と考えられ、これまでもエアリード楽器の発音メカニズムの調査に用いられてきた<sup>5,6</sup>。しかし、フルートを対象として空力音直接計算を行った例は、現時点では数少ない。フルートの場合は、共鳴管長手方向と息の流れる方向が直行するため3次性を考慮する必要がある。さらに、人が吹き得る音を計算で再現するためには、人の吹鳴条件を模擬した条件で計算を行う必要がある。こうしたことが、適用例が少ない理由として考えられる。

そこで本研究では、吹き込み角度が倍音構造に影響するメカニズムを解明することを目的として、実際の演奏状態を模擬した条件下でフルートの空力音直接計算を行い、吹き込み角度変化時の発生音と流れ場の変化を調査する。計算には、実際のフルート形状を用い、予備実験で実測した人間演奏者の吹鳴条件で3次元空力音直接計算を行う。計算結果の妥当性は、人工吹鳴機を用いて予備計測した音と比較して検証する。

## 2. 計算手法

### 2. 1. 計算条件

呼気ジェットとフルートの幾何学的位置関係は、吹き込み角度  $\theta_j$ 、エッジに対する呼気ジェットの偏心値  $y_{j,e}$  および呼気ジェット出口からエッジまでの距離  $l$  によって変化する<sup>1</sup>。これら吹鳴条件の定義を図1に示す。吹き込み角度  $\theta_j$  は、呼気ジェット進行方向とウィンドウ水平線のなす角度、偏心値  $y_{j,e}$  は、エッジから呼気ジェット進行方向までの距離、距離  $l$  は、口腔モデル出口

<sup>1</sup> Ando, *J. Acoust. Soc. Jpn.*, 26 (6), 253–260, 1970

<sup>2</sup> Onogi et al., *Proc. International Symposium on Music Acoustics 2019*

<sup>3</sup> Fletcher and Douglas, *J. Acoust. Soc. Am.*, 68 (3), 767–771, 1980

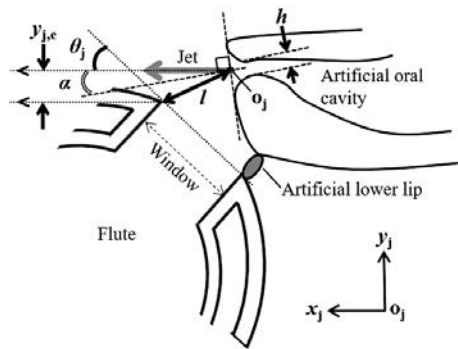
<sup>4</sup> Yoshikawa, *J. Acoust. Soc. Jpn.*, 5 (1), 17–29, 1984

<sup>5</sup> Yokoyama et al., *J. Acoust. Soc. Am.*, 138 (2), 858–873, 2015

<sup>6</sup> Onogi et al., *J. Acoust. Soc. Am.*, 146 (2), 1427–1437, 2019

中心  $o_j$  からエッジまでの距離である。  $\theta_j$  および  $y_{j,e}$  で基準とした呼気ジェット進行方向は、本研究の予備実験で測定した、楽器が無い状態での呼気ジェット進行方向である。呼気ジェット進行方向を  $x_j$  軸、その垂直方向を  $y_j$  軸、管長手方向を  $z_j$  軸とし、値は口腔モデル出口狭窄部の高さ  $h$  で無次元化する。口腔モデルとウィンドウの  $z_j$  方向中心断面は一致しており、吹鳴条件  $\theta_j$ 、  $y_{j,e}$  および  $l$  は、この断面 ( $z_j = 0$ ) で定義される。

人の実演奏状態を再現するため、予備実験では、人間がフルート頭部管を吹いている状態で、シュリーレン法を用いて呼気ジェットを可視化して吹き込み角度  $\theta_j$  を、写真計測により距離  $l$  を測定した。本研究では、実測した人間演奏状態の吹き込み角度  $\theta_j = 39^\circ$  で計算および実験を行い、計算の妥当性を検証した。また、吹き込み角度変化の影響を調べるため、実演奏で人間が変化させうる範囲<sup>1</sup>の下限付近  $\theta_j = 32^\circ$  と上限付近  $\theta_j = 58^\circ$  に対して計算を行った。このさいの偏心値は、実演奏で人間が変化させうる範囲<sup>1</sup>の中央付近の値  $y_{j,e}/h = 0.69$  に設定した。距離  $l$  は実測した人間演奏状態に、流量  $Q$  は、人間演奏者と人工吹鳴機の放射音を比較することによって見積もった値に設定した。計算と実験で用いた吹鳴条件を表 1 に示す。

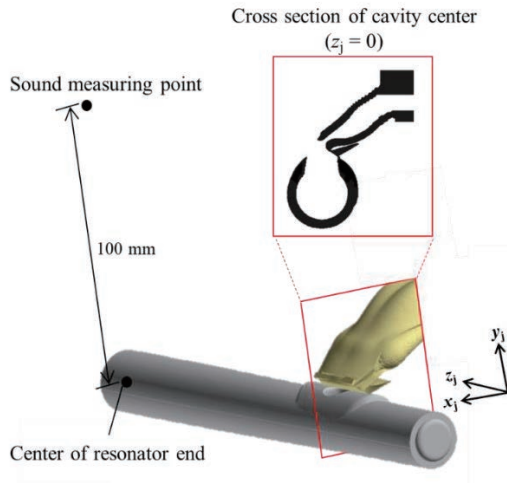


第 1 図：呼気ジェット条件の模式図

第 1 表：計算および実験における吹鳴条件

吹鳴条件	値		
吹き込み角度 $\theta_j$ [ $^\circ$ ]	39	32	58
エッジに対する呼気ジェットの偏心値 $y_{j,e}/h$	0	0.69	
唇からエッジまでの距離 $l/h$	5.6		
流量 $Q$ [L/min]	16.0		
口腔モデル出口断面平均流速 $U_0$ [m/s]	21.5		

表 1 の吹鳴条件で口腔モデルと楽器の幾何学的位置関係を設定した計算モデルを図 2 に示す。本研究では、頭部管を対象とする。口腔モデル形状は、人がプラスチック製頭部管を吹鳴している状態で撮影した MRI 画像をもとに作成した。



第2図：計算モデル

## 2. 2. 支配方程式と差分スキーム

流れと音の連成作用を再現するために、式(1) - (3)に示す三次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式を支配方程式とし、空間差分には6次精度コンパクトスキーム（境界では4次精度）<sup>7</sup>，時間積分は3次精度ルンゲクッタ法<sup>8</sup>を用いて空力音直接計算を行った。直行格子上で複雑形状を再現するため Volume Penalization 法を用いた。

$$\mathbf{Q}_t + (\mathbf{F}_x - \mathbf{G}_x)_x + (\mathbf{F}_y - \mathbf{G}_y)_y + (\mathbf{F}_z - \mathbf{G}_z)_z = \mathbf{V}, (1)$$

$$\mathbf{V} = -\left(\frac{1}{\phi} - 1\right)\chi \begin{pmatrix} \partial \rho u_i / \partial x_i \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \phi = 0.25, (2)$$

$$\chi = \begin{cases} 1 & \text{(inside object)} \\ 0 & \text{(outside object)} \end{cases}, (3)$$

ここで、 $\mathbf{Q}$ は保存量ベクトル、 $\mathbf{F}$ は非粘性流束ベクトル、 $\mathbf{G}$ は粘性流束ベクトル、 $\mathbf{V}$ は外力項 (Volume Penalization 項)、 $\phi$ は多孔質媒体の孔隙率、 $\chi$ はマスク関数をそれぞれあらわす。解析手法の詳細については、文献5を参考にされたい。最小格子間隔は、口腔モデル出口周辺

<sup>7</sup> Lele, *J. Comp. Phys.*, 103, 16-42, 1992

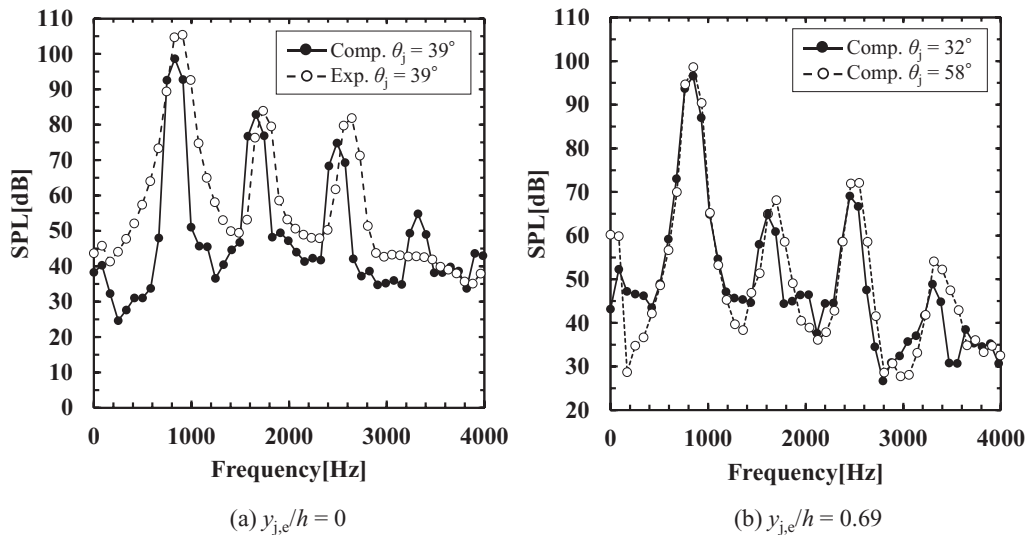
<sup>8</sup> Jameson *et al.*, *AIAA Paper* 83-1929

の 0.05 mm であり，格子数は約  $1.5 \times 10^8$  である。

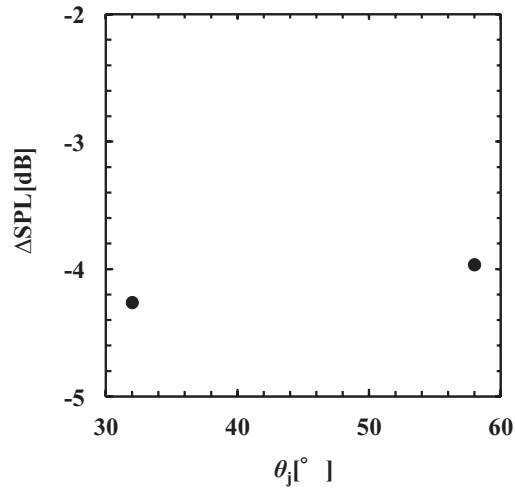
### 3. 結果

#### 3. 1. 放射音

頭部管後端から距離  $r = 100$  mm の位置で計測した放射音の音圧スペクトルを図 3 に示す。図 3(a) は， $\theta_j = 39^\circ$  での計算と実験の比較を，図 3(b) は吹き込み角度を変化させた計算結果をあらわす。周波数解像度は 84 Hz である。図 3(a) から，計算，実験とも基本周波数  $f_1$  は 840 Hz 付近であり，ほとんど一致していることが確認できる。さらに，計算の 2, 3 次倍音  $f_2, f_3$  のピークが， $f_1$  のそれぞれ 2, 3 倍の周波数付近にあらわれていることから，計算でこれら倍音放射のための共鳴管内圧力変動を再現できたと考えられる。図 3(b) から，吹き込み角度を増加させることによって， $f_1$  の音圧レベルはほとんど変化していないが， $f_2, f_3$  の音圧レベル(以下， $SPL_2, SPL_3$ )はともに増加している。このときの  $f_2, f_3$  の音圧レベル差  $\Delta SPL (= SPL_2 - SPL_3)$  を図 4 に示す。 $\theta_j = 32^\circ$  と比較して  $\theta_j = 58^\circ$  はわずかに 2 次倍音の音圧レベルが相対的に増加している。



第 3 図: 音圧スペクトル

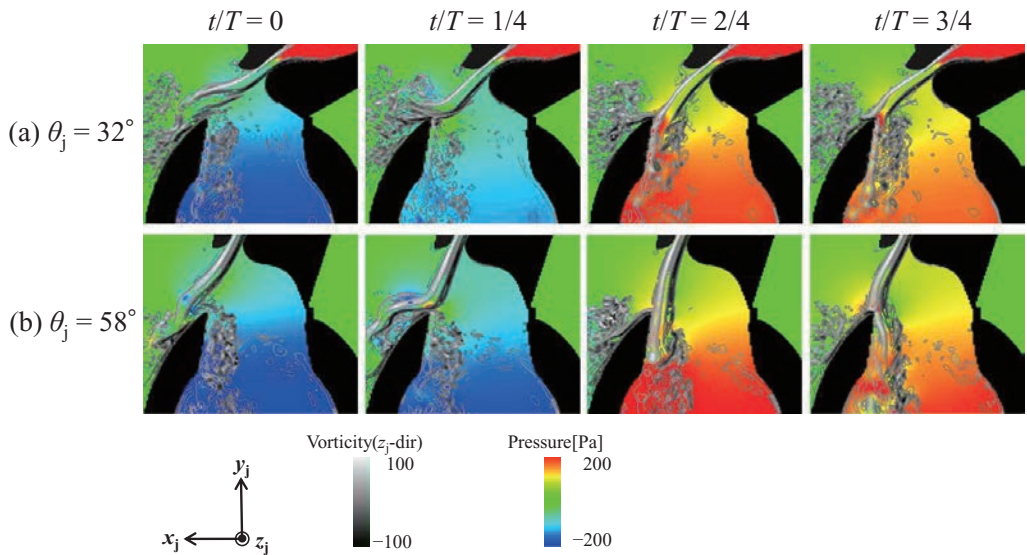


第4図: 2次倍音の3次倍音に対する音圧レベル差

### 3. 2. 流れ場

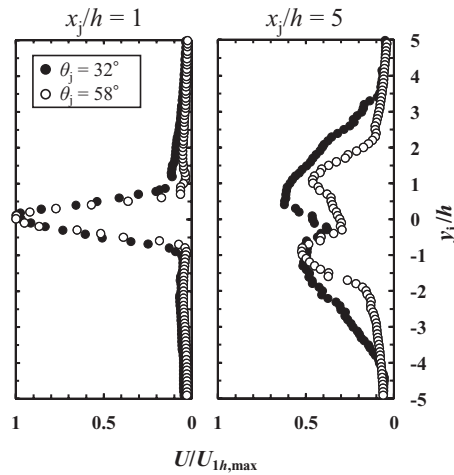
計算で得られた渦度および圧力分布の時間変化を図5に示す。 $T$ は基本周期をあらわし、 $r = 100 \text{ mm}$ での放射音圧が最大になる瞬間を $t=0$ とした。共鳴管内の圧力が、基本周波数(半波長モード)で周期的に変化している。共鳴管内が低圧時( $t/T=0$ )、ジェットはエッジの外側を向き、共鳴管内が高圧時( $t/T=2/4$ )、ジェットはエッジの内側を向いている。このジェットと共鳴管内圧力の変動の位相関係は、音響的パワー生成に適した位相関係<sup>9</sup>である。ジェットがエッジ内側を向いているとき( $t/T=2/4$ )、 $\theta_j=32^\circ$ ではエッジ内側の壁面に沿って高圧領域が発生しているが、 $\theta_j=58^\circ$ では壁面に沿った高圧領域はみられない。さらに、 $\theta_j=32^\circ$ と比較して $\theta_j=58^\circ$ は、ジェット進行方向がエッジ内側壁面により平行である。このため、ジェットが壁面に沿って流れ、壁面沿いに高圧領域が発生しなかったと考えられる。

<sup>9</sup> Yoshikawa *et al.*, *J. Sound Vib.*, 331, 2558-2577, 2012



第 5 図：渦度および圧力分布の時間変化( $z_j = 0$ )

計算で得られた  $x_j/h = 1, 5$  における時間平均場の流速プロファイルを図 6 に示す。流速は、 $x_j/h = 1$  での最大流速  $U_{1h,max}$  で無次元化されている。口腔モデル出口付近 ( $x_j/h = 1$ ) では、 $\theta_j = 32^\circ$ 、 $\theta_j = 58^\circ$  とともに、原点 ( $y_j = 0$ ) 付近を中心にジェットが吹き出ている。エッジ付近 ( $x_j/h = 5$ ) では、 $\theta_j = 32^\circ$  の流速プロファイルは管外側 ( $y_j > 0$ )、 $\theta_j = 58^\circ$  は管内側に傾いた分布をしている。吹き込み角度を増加させると、ジェットはより管内側に傾くと考えられる。これは、図 5 に示したように、吹き込み角度を増加させるほど、ジェットがエッジ内側壁面に沿って流れやすいためだと考えられる。吹き込み角度の変化によって、ジェットが偏向することで、エッジ ( $x_j/h = 5.6 = l/h$ ,  $y_j/h = 0$ ) とジェットとの実効的な偏心値も変化する可能性が考えられる。フルートと同じエアリード楽器に属するオルガンパイプの放射音に対する理論的な計算<sup>4</sup>では、偏心値の絶対値が大きいほど 3 次倍音に対して 2 次倍音が優勢になることが示されている。図 3 (b) に示した音圧スペクトルで、 $\theta_j = 32^\circ$  と比較して  $\theta_j = 58^\circ$  でより 2 次倍音が優勢であったことから、 $\theta_j = 58^\circ$  でより実効的偏心値が大きいと推察される。これを明らかにするため、今後は、瞬時場の流速プロファイルをもとに実効的偏心値を算出し、吹き込み角度変化ともなう実効的偏心値の変化と音との関連について調査する。



第6図:時間平均場の流速プロファイル

#### 4. 結言

本研究は、吹き込み角度が倍音構造に影響するメカニズムを解明することを目的として、人の実演奏状態を模擬した計算モデルを用いて、3次元空力音直接計算を行った。その結果、実験と同等の基音周波数を計算で再現できていることが確認できた。このことは、ジェットと管内圧力の変動の位相関係が、基本周波数での音の発振に良好な関係であったことから確認できる。吹き込み角度を変化させて計算を行った結果、吹き込み角度の増加にともない、わずかに2次倍音が優勢になった。また、時間平均場の流速プロファイルを調べた結果、吹き込み角度の増加にともない、ジェットが管内側に傾くことがわかった。これは、計算の可視化結果に示されたように、吹き込み角度を大きくすると、ジェット進行方向とエッジ内側壁面の成す角度が平行に近づき、ジェットがより管内に流れ込みやすくなるためと考えられる。吹き込み角度が増加するとジェットが管内側に傾くため、エッジとジェットの実効的偏心値が増加し、2次倍音が増加したと考えられるが、これについてはより詳細な調査が必要である。今後は、各吹き込み角度のジェットの实効的偏心値を算出し、倍音構造変化との関係性を明らかにする。

#### 謝辞

本研究を進めるにあたって、有元 慶太様には、有益な助言をいただきました。また、本研究は、文部科学省「フラッグシップ2020プロジェクト」、東京大学情報基盤センター「スーパーコンピューター若手・女性利用制度」の助成を受けたものです。ここに記して感謝いたします。



# 大質量星団形成過程の解明

藤井通子

東京大学大学院理学系研究科

## 1. 背景

星は、**分子雲**と呼ばれる主に水素から成る低温の星間ガスをゆりかごとして生まれる。分子雲の中でも特に密度の高い領域では、ガスが自己重力によって収縮し、やがて星となることが知られている。多くの星は単独よりも集団で生まれることが、近年の観測からわかりつつある。星が集団で生まれると、**アソシエーション**や**星団**と呼ばれる多くの星からなる系へと成長すると考えられている。このように、銀河内の星の多くは、分子雲から星団やアソシエーションとして生まれるため（以下、まとめて星団と呼ぶ）、分子雲での星形成を経た星団形成過程を明らかにすることは、銀河内での星形成過程の解明に繋がる重要な研究テーマである。

また、**大質量星**の形成場所としても、星団は注目されている。大質量星は、周囲のガスを電離したり、輻射圧や星風で周囲のガスを押し下げるため、星が集団で形成する際には、他の星の形成を阻害し、分子雲での星形成を終わらせる役割を果たすと考えられている。このような大質量星が周囲のガスに与える影響をまとめて、**大質量星からのフィードバック**と呼ぶ。このように、星団形成は、主に、分子雲の収縮、複数の星の形成、大質量星からのフィードバック、星形成の終了、という過程に分けられるが、これらは複雑に絡み合っている。そのため、星団形成シミュレーションでは、これらの過程を全て取り入れて計算する必要がある。

## 2. 新しいシミュレーションコード

星団形成シミュレーションにおいて、分子雲のシミュレーションは流体計算、星の運動についてはN体計算を用いて行われる。流体計算には、粒子を用いて流体を表現する Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)法と、メッシュを用いる方法があるが、本研究ではSPH法を用いる。分子雲からの星団形成シミュレーションでは、まず、分子雲のシミュレーションから始め、密度が高くなった場所に、sink 粒子と呼ばれる粒子を置き、その粒子が条件を満たした周りのガス粒子を吸い込むよう設定し、星形成を扱うことが多い。しかし、計算結果が、ガス粒子を吸い込む半径 (sink 半径) やガス粒子の質量分解能に依存してしまうため、星一つ一つの形成を再現し、形成した星が観測されているような質量関数を再現するようシミュレーションを行うためには、非常に高分解能の計算を行う必要がある。そのため、大質量星団形成を扱うことは難しい。

一方、近年では、複数の星をまとめた数十太陽質量の星をまとめたものを1粒子として置き、大質量星団形成シミュレーションを行う例が増えている。複数の星をまとめて1粒子で表現する手法は、系全体が星団よりも数桁大きな規模となる銀河のシミュレーションではよく用いられている。この手法は simple stellar population (SSP) **近似**と呼ばれている。SSP 近似では、1星粒子がある質量関数に従った複数の星を含むと仮定し、フィードバックは、その中に含まれる複数の星からの合計を周りのガスに与える。1星粒子が1つの星団を表すような手法である。計算量を減らすことができる代わりに、質量の異なる星一つ一つの運動や、質量によって異なる強さのフィードバックをそれぞれの場所で与える、といった効果を無視することとなる。

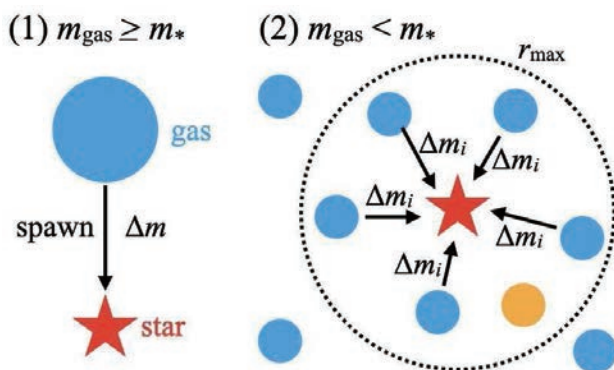
星団では、星同士の近接遭遇による星の軌道の変化が頻繁に起こり、連星の形成や、連星と周囲の星の3体相互作用による高速度星の形成が起こることが知られている。このような星団の**力学的進化**は、星団の形成中に始まり、最終的に形成する星団の密度やサイズ等に影響を与えると考えられる。上記のような星団内での強い重力散乱を扱うためには、星の軌道を高次の積分法を用いて計算する必要があるが、これまでの星団形成シミュレーションではそのような扱いはほとんどされていない。また、SSP 近似を用いる場合、星の軌道を正しく扱うことはできない。

本研究の目標は、星一つ一つを分解し、星一つ一つの軌道を高精度で積分し、星団形成時の力学進化を正しく取り入れた大質量星団形成シミュレーションを行うことである。本研究では、1. 大質量星団を扱うために、sink 粒子は用いず、銀河形成シミュレーションで使われる確率的な星形成の手法を用いて星形成を扱い、2. SSP 近似は用いず、星一つ一つをその質量の粒子をして再現し、3. 星の運動は高精度で数値積分することで、星団の力学進化を正しく扱う、ことを目標としたコードを開発する。以下、個々の手法について詳しく記述するが、コード開発は、主に銀河形成シミュレーション用に開発された SPH/N 体計算コード「ASURA」(Saitoh 2009, 2017) [1][2]を用いて行う。

### 3. 確率的星形成

銀河形成シミュレーションと同様に、温度と密度の閾値を決め、それらを満たしたガス粒子に対して乱数を振り、局所的な自由落下時間に依存した星形成確率と比べ、そのガス粒子が星形成するかどうかを決める。もし、星形成する場合、その星の質量は、やはりあらかじめ決めておいた質量関数(観測的に得られたもの)からランダムに選ぶ。ただし、ランダムに選ばれた星の質量が、周囲のガス粒子の総質量を超えないように制限をかける。そうすることで、ガスが十分でない領域で、質量保存則を満たさない大質量星を形成しないように制限する。

形成する星の質量が決まったら、決められた範囲のガス粒子から、形成する星の質量に相当する分の質量を一律に減らし、新しい星を形成させる(図1)。このとき、ガス粒子から最大5割の質量までしか減らせないように制限し、星形成後のガスのふるまいが不安定にならないようにしている。

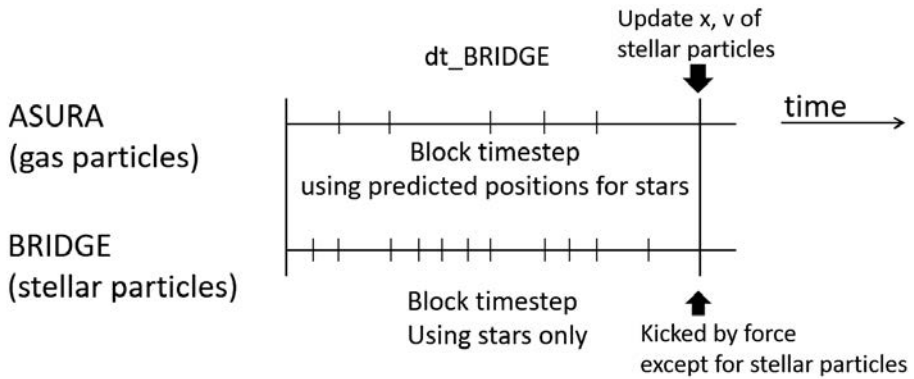


第1図: 星形成時の手続きの模式図。

形成する星の質量がガス粒子の質量より小さい場合は、左図のように、1ガス粒子から1星粒子に質量を分け与えて形成する。形成する星の質量が1ガス粒子より大きい場合は、 $r_{\max}$  以内にあるガス粒子から質量を分け与えて1つの星を形成する。

#### 4. 積分法

星粒子の積分は、6次精度のエルミート法で行う。ガス粒子の積分は、ツリー法を用いて、2次精度のリープフロッグ法で行う。どちらも、粒子ごとに刻み幅を変えることができる独立時間刻みを使用する。星粒子がガス粒子から受ける重力は、一定時間刻みごとに、速度キックとして与えられる。この手法は、「BRIDGE」法(Fujii et al. 2007) [3]として、実装された手法の拡張である。ツリー法とリープフロッグ法の組み合わせは、高速で、多くの粒子を短時間で積分できるが、星同士の近接遭遇を積分するには、高次の方法が向いている。そのため、ガス粒子には ASURA に組み込まれているツリー法とリープフロッグ法を用いて系全体を積分し、星粒子については、一定時間ごとに BRIDGE にコピーし、一定時間(dt\_BRIDGEの間)、直接計算法と6次エルミート法を用いて高精度に積分して、位置と速度を更新した後、ASURA 側にその結果を返す。さらに、星粒子については、重力ソフトニングによる近距離での重力を人為的に弱める手法を用いずに計算を行う。また、この一定時間の間は、ASURA、BRIDGE それぞれで独立に、より小さい刻み幅で積分を行う。



第2図：積分法の模式図。

ASURA では、ガス粒子のみを積分する。BRIDGE では、星粒子のみを積分する。一定時間刻み(dt\_BRIDGE)で、星粒子の位置は ASURA 側にコピーされ、星粒子はガス粒子の重力による速度変化を受ける。その間の時間は、それぞれの粒子の時間刻みで積分される。

#### 5. 大質量星からのフィードバック

大質量星からのフィードバックとして、HII 領域(大質量星周りで水素ガスが電離されている領域で、その温度は1万Kに達する)、星風、超新星爆発が考えられる。超新星爆発は、大質量星が形成して数百万年以上が経過した後には起こるため、星団形成過程では、HII 領域と星風がまず影響を及ぼす。そこで、この2つを実装する。

HII 領域については、正しくは、輻射輸送を解いて、輻射流体計算を行う必要がある。しかし、計算コストが大きいため、本研究では、星から単位時間あたりに放出される光子数と周囲のガスの密度から、電離される半径(Strömgren 半径)を計算し、その半径内のガス粒子にエネルギーを与えて1万Kまで温度を与えることでHII 領域の形成をモデル化する。この方法は、銀河形成シミュレーションで用いられており、ASURA にも実装されていたが、今回、星の質量ごとに単位時間当たりの光子数(Lanz & Hubeny 2003) [4]を計算できるよう改良を行った。

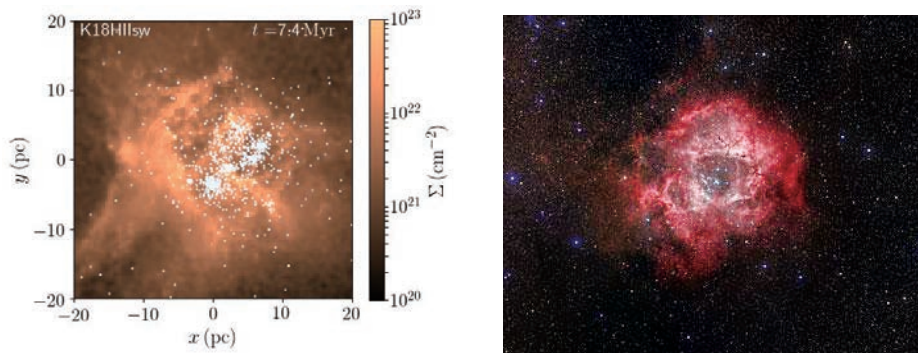
HII 領域では輻射圧によるガスの加速が起こる。モデル(Renaud et al. 2013) [5]を用い、光

子数に比例した速度で、HII 領域内のガス粒子に外側に向かう速度を与えることで、輻射圧による運動を実装した。

星風によるフィードバックは、輻射圧と同じ手法で実装し、輻射圧による速度変化に対する星風による速度変化の割合をパラメータとして与える。

## 6. 初期条件

初期条件には、星団形成シミュレーションでよく用いられる乱流を与えた一様密度の球を用いる。メッシュ法を用いた輻射流体計算で行った結果と比較するため、Kim et al. (2018) [6] と同様の分子雲のサイズ(20 pc)と質量( $10^5$  太陽質量)でテスト計算を行った。重力ソフトニングは 0.075 pc とし、ガス粒子の質量を 0.1 太陽質量とした。



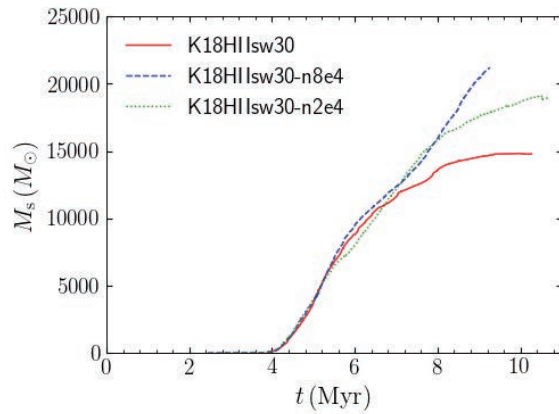
第3図: シミュレーションで得られた星団形成領域(左)と実際の星団形成領域。

左図はシミュレーションで得られた結果。白点は1太陽質量以上の星で、大きさは星の質量を表す。右図は実際の星団形成領域(NGC2246、Credit: John Corban & the ESA/ESO/NASA Photoshop FITS Liberator)。点が星、赤い「もや」がガス。中心部のガスの穴は、大質量星によるフィードバックによってできたものであると考えられている。

## 7. 結果

図3(左)は、シミュレーションで得られたガスと星の分布である。一方、図3(右)は、実際に観測された星団形成領域(NGC2246、バラ星雲)である。このように、シミュレーションは、分子雲中で複数の星が形成し、大質量星からのフィードバックによって、星団形成領域の中心にガスの穴ができる仮定を再現している。

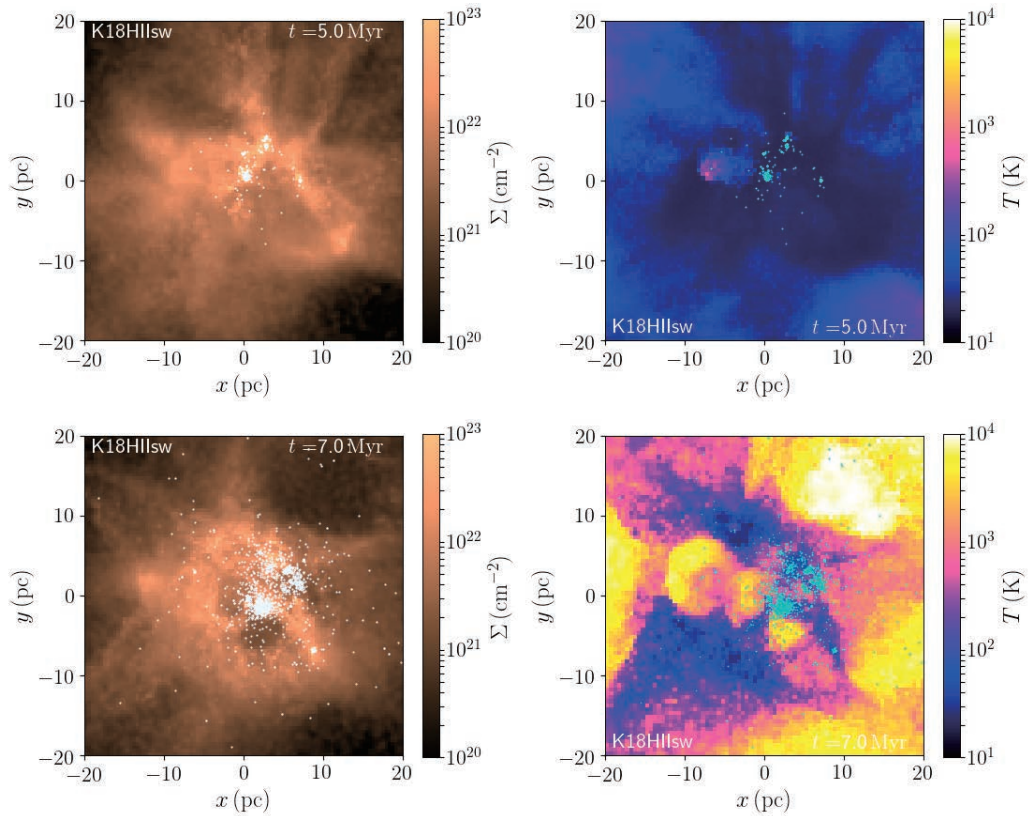
図4は、シミュレーションで形成した星の総質量の時間進化である。各線は、星形成を起こすための密度閾値の違いを示している。結果が密度閾値に依存するのであれば、密度閾値を高く設定するほど、形成する星の総質量が減ると予想されるが、結果は、中間の密度閾値の時に、最も多くの星が形成されている。これは、密度閾値は重要なパラメータではなく、それよりも、いつ、どこで大質量星が形成するか、また、形成した大質量星が連星との3体相互作用で星団外に脱出するタイミングといった、星を一つ一つ分解し、星の近接遭遇を正しく解いた結果表れる効果に依存していることを示している。このように、大質量星の形成するタイミングや、大質量星が星団を脱出するタイミングで結果が2割ほど変わるため、同じような質量、サイズの分子雲であっても、そこから形成する星団の質量は、2割ほどバラつきが出る可能性を示唆している。

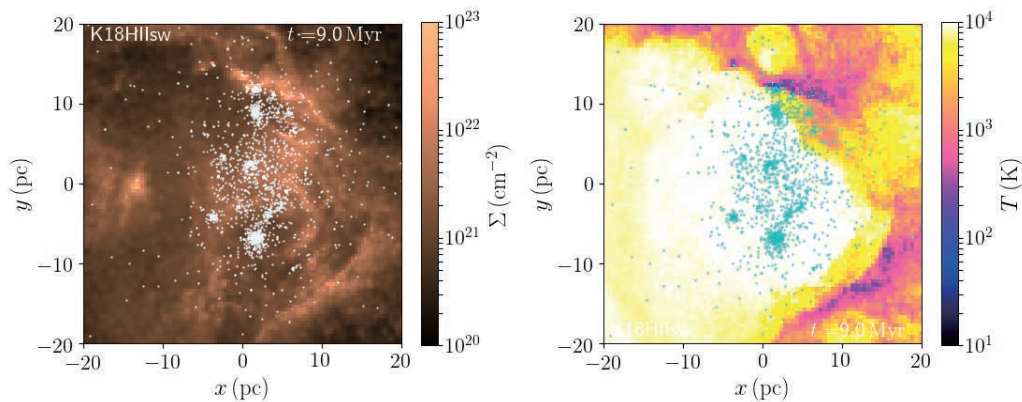


第4図：形成した星の総質量の時間進化。

各線は、星形成を起こすための密度閾値を変えた計算の結果で、この場合、閾値による結果の違いは少ない。

図5は、星団形成領域の面密度マップと温度マップの時間進化を示したものである。温度マップを見るとわかるように、3体相互作用で星団を脱出した大質量星が、周りのガスを電離しながら進んでいくのがわかる。これは、これまでのシミュレーションでは再現できなかった現象である。





第5図：星団のスナップショット。

左列はガスの密度マップ、右列はガスの温度のマップ。点は星を表し、大きさは星の質量に依存する。

## 8. まとめ

本研究では、大質量星団形成シミュレーションのための新しいコードの開発とそのテストを行った。先行研究にならい、乱流を持つ分子雲のシミュレーションを行った結果、先行研究と同様の結果が得られた。また、星同士の近接遭遇を再現できるようにコードを改良した結果、星の3体遭遇によって一部の大質量星が高速で星団を脱出し、周囲のガスを電離する様子が見られた。今後は、このコードを用いて、分子雲の密度や質量を変えた計算を行い、母体となる分子雲と形成する星団の関係を明らかにする。

## 謝 辞

本研究のシミュレーションはOakbridge-CXの他、国立天文台 天文シミュレーションプロジェクトのATERUI2を利用して行われました。

## 参 考 文 献

- [1] Saitoh T. R., Daisaka H., Kokubo E., Makino J., Okamoto T., Tomisaka K., Wada K., Yoshida N., PASJ, 61, 481, 2009
- [2] Saitoh T. R., AJ, 153, 85, 2017
- [3] Fujii M., Iwasawa M., Funato Y., Makino J., PASJ, 59, 1095, 2007
- [4] Renaud F., et al., 436, 1836, 2013
- [5] Lanz T., Hubeny I., ApJS, 146, 417, 2003
- [6] Kim J. G., Kim W. T., Ostriker E. C., 2018, ApJ, 859, 68, 2018

# MPS 法への新規高速化手法の実装と評価

宮島 敬明

理化学研究所 計算科学研究センター

## 1. はじめに

Moving Particle Simulation (MPS) 法は、水などの大変形を伴う非圧縮性流体を解析対象にしている。MPS 法は粒子系シミュレーションに分類され、計算対象を多数の仮想粒子として分割し、各粒子と近傍粒子との相互作用から物理量の計算を行う。大規模解析に対応すべく、近傍粒子の探索処理をスレッド並列化し、計算領域を複数プロセスに動的に分割して処理時間の短縮を図っている。本年度は、プログラム全体の GPU 化に取り組んだ。

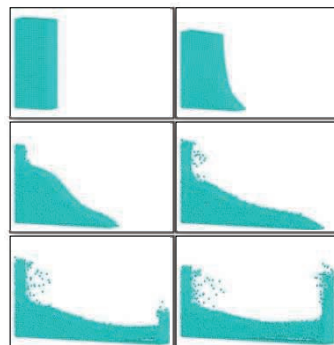


図 1: シミュレーション例

## 2. 研究背景

1. MPS 法は大変形を伴う非圧縮性流体のシミュレーションに用いられ、粒子系シミュレーションに分類される [4]。空間を格子で分割し、各格子が物理量を保持するオイラー的な手法の格子法と異なり、移動する粒子が物理量を持つラグランジュ的な手法である。図 1 に MPS 法による水柱崩壊問題のシミュレーション結果を示す。各粒子の速度などの物理量は近傍粒子との相互作用を元に計算されるため、全粒子がそれぞれの近傍粒子を探索する必要がある。この近傍粒子探索の処理は、ランダムアクセスと間接参照、不定ループなどを持ち、計算時間の大半を占める。MPS 法の計算精度は使用する粒子数によって大きく左右される。室谷らの京を持ちいた先行研究では、4.0km × 3.5km の津波のシミュレーションに 2 億 6 千万個の粒子を利用している [5]。各粒子が独立して近傍粒子を探索し相互作用を計算するため、並列度は粒子数に比例して増加するが、同時に計算負荷も増加する。その結果、シングルノードでの計算時間の大半が近傍粒子探索となり、この部分の高速化が MPS 法全体の高速化の鍵となる。MPS 法の GPU への実装はいくつかの先行研究が存在する [9]。

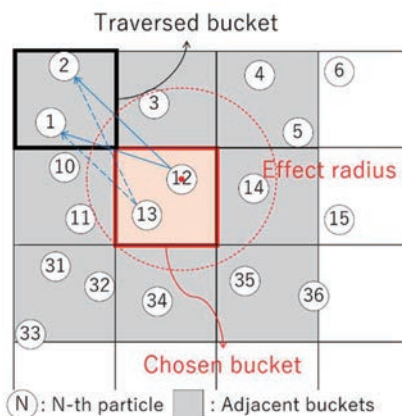


図 2: バケット法を用いた近傍粒子探索

陽解法 MPS 法は、粒子系シミュレーションの 1 つであり、水などの非圧縮性流体を多数の仮想粒子に分割し、各粒子と近傍粒子との相互作用から物理量の計算を行う。大規模解析と計算精度向上のためには粒子の個数を増やす必要があるが、粒子数に比例して近傍粒子を探索する処理（近傍粒子探索）も所要時間が大幅に増加する。図 2 に示すように近傍粒子探索にバケット法を採用した上でスレッド並列化し、計算領域を複数プロセスに動的に分割して処理時間の短縮を図っている。Reedbush-H を用いたこれまでの研究で、GPU 化と領域分割により近傍粒子探索は高速化されたが、動的領域分割とそれに伴う不規則な通信がボト

ルネックとなることがわかっている。

### 3. 本年度の目標

本年度は以下の問題の評価を行い、原因を探った。

#### (ア) Managed memory 機能を使った完全 GPU 化

これまでは近傍粒子探索を行うサブルーチンのみを GPU 化の対象としていた。実際の大規模シミュレーションを行うには、全体の移植が必要である。手始めに Reedbush-H に搭載されている P100 の Managed memory 機能を使い、全体の GPU 化を行う。データ転送の最適化は今後の課題とする。

### 4. MPS 法とデータ構造

ここでは内製 MPS 法の全体像と採用しているデータ構造について述べる。

#### 4. 1 支配方程式

MPS 法は以下の計算ステップを目的のシミュレーション時間に到達するまで繰り返す。なお、 $r_j - r_i$  は対象粒子  $i$  と近傍粒子  $j$  との距離計算を示す。

- Step 0) 計算領域の初期値を設定
- Step 1) 仮速度の計算
- Step 2) 仮位置を計算
- Step 3) 粒子数密度と圧力の計算
- Step 4) 圧力勾配の計算
- Step 5) 粒子の位置を計算
- Step 6) 次の時間ステップへ (Step 1~6 を繰り返す)

以下に各計算ステップの概要を示す。

#### Step 0) シミュレーションの初期値を設定

MPS 法では初期値として、近傍粒子の距離の重み平均  $\lambda^0$  と初期の粒子数密度  $n^0$  を求める。

$$\lambda^0 = \frac{\sum_{j \neq i} (|r_j^0 - r_i^0|)^2 \omega(|r_j^0 - r_i^0|)}{\sum_{j \neq i} \omega(|r_j^0 - r_i^0|)}$$

$$n^0 = \sum_{j \neq i} \omega(|r_j^0 - r_i^0|)$$

#### Step 1) 仮速度の計算

計算ループでは、まず下式を用いて各粒子の仮速度を求める。右辺 第 2 項と第 3 項はそれぞれ粘性と重力である。

$$u_i^* = u_i^k + \Delta t \left\{ \left( v \frac{2d}{\lambda^0 n^0} \sum_{j \neq i} (|u_j^k - u_i^k|) \omega(|r_j - r_i|) \right) + g \right\}$$

ただし、 $k$  はタイムステップ、 $t$  は実時間、 $i$  と  $j$  は粒子の番号、 $\nu$  は動粘性率、 $d$  はシミュレーションの次元数、 $g$  は重力加速度、 $u_i^k$  は時刻  $k$  での粒子  $i$  の速度、 $u_i^*$  は時刻  $k$  での粒子  $i$  の仮速度である。

#### Step 2) 仮位置を計算

続いて、Step 1 で得られた仮速度を用いて各粒子の仮位置を求める。



$$r_i^* = r_i^k + \Delta t u_i^*$$

ただし、 $r_i^k$  は時刻  $k$  での粒子  $i$  の位置である。

### Step 3) 粒子数密度と圧力の計算

その後、各粒子の次のタイムステップの圧力を求める。

$$n_i^* = \sum_{j \neq i} \omega(|r_j^* - r_i^*|)$$

$$P_i^{k+1} = c^2 \frac{\rho^0}{n^0} (n_i^* - n^0)$$

ただし、 $P_i^{k+1}$  は時刻  $k$  での粒子  $i$  の圧力、 $c$  は音速、 $n_i^*$  は時刻  $k$  での粒子  $i$  の仮の粒子数密度である。

### Step 4) 圧力勾配の計算

そして、各粒子の圧力から圧力勾配を求める。

$$\langle \nabla P \rangle_i^{k+1} = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left( \frac{(P_j^{k+1} - P_i^{k+1})(r_j - r_i)}{|r_j - r_i|^2} \omega_{grad}(|r_j - r_i|) \right)$$

ただし、 $\omega_{grad}$  は後述する重み関数である。

### Step 5) 粒子の位置を計算

最後に、次のステップの最終的な速度と位置を求める。

$$u_i^{k+1} = u_i^* - \Delta t \left( \frac{1}{\rho} \nabla P \right)_i^{k+1}$$

$$r_i^{k+1} = r_i^* - \Delta t \left( \frac{1}{\rho} \nabla P \right)_i^{k+1}$$

ただし、 $u_i^{k+1}$  と  $r_i^{k+1}$  は時刻  $k+1$  での粒子  $i$  の粒子の速度と位置である。

### Step 6) 次の時間ステップへ

次のタイムステップの計算を開始するために、粒子の最大速度  $u$  から実時間  $\Delta t$  を求める。

## 4. 2 データ構造

我々は、連結リストを用いたデータ構造を採用している。これは、MPS法をプロセス並列化し、大規模シミュレーションを行う際に必須となる。特に、負荷分散のために計算領域を自由な形状で分割しなければならないことが要因である。MPS法は粒子が移動するため、計算領域の中で粒子の偏りが発生し、各計算ノードで負荷が一定にならない。負荷を分散させるために、グラフ分割を応用して計算領域を分割する手法が知られており、我々も同様の方法を採用している。分割された計算領域は、矩形以外の複雑な形状を取るため、隣接するバケット同士の関係は柔軟に変更できなければならない。また、隣接するプロセスが隣のバケットを計算しているとは限らない。インデックスを用いて隣接するバケット同士の関係を表現する場合、矩形以外の形状に対応することが難しい。また、隣の計算領域をどのプロセスが担当しているかを把握することも難しい。連結リストを用いて隣接するバケット同士を表現することで、形状の変化に柔軟に対応可能である。加えて、隣のバケットをどのプロセスが計算しているかを管理することが容易である。

バケット1つは、連結リストと内部の状態を保持する構造体として定義されている。内部の状態を保持する構造体は、バケット内に存在する粒子の数や粒子の物理量へのインデックスを持つ。このインデックスをもとに物理量を保持する配列へアクセスする。

## 5. OpenACCによるデータ構造のGPU実装

OpenACCはGPU向けのプログラマベースのコンパイラである。CPU側のデータ構造をGPU側で利用出来るようにするには、Deep Copyという問題を解決する必要がある。Deep Copyは、CPU側のポインタがGPU側では使えないという問題で、ポインタを使ったデータ構造を採用している場合には実装上の大きな問題となる。Managed memoryの機能を利用してもこの問題は解決できない。この問題に対処するために、OpenACCではdeclare dataクローゼやupdate dataクローゼ、declare linkクローゼが用意されている。なお、公開されている資料は非常に少なく、実装には手探り感が否めない。

GPU化にあたり、連結リストをポインタではなくバケットの番号とすることで、ポインタの使用を回避した。ポインタの使用を回避することで、managed memoryを利用することができ、移植性は大きく向上した。参照の回数も変更はないと思われる。PGI Compilerに” - ta=tesla:managed”のオプションを付与し、managed memoryを有効にして、データの比較を行った。その結果、GPUとCPUで結果が一致することが確認された。

## 6. まとめ

本年度は、データ構造のGPU化を行い、Managed memoryを用いて内製プログラム全体のGPU化を行った。今後は、Managed memoryを使わずに、OpenACCのdataディレクティブを用いた実装を行う予定である。

東京大学情報基盤センター・スーパーコンピューティングニュース  
Vol. 22 Special Issue 1 (2020. 9)

**【編集】**

東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング研究部門  
東京大学情報システム部情報基盤課スーパーコンピューティングチーム  
// 情報戦略課研究支援チーム

**【発行】**

東京大学情報基盤センター  
〒113-8658 東京都文京区弥生2-11-16  
(電話) 03-5841-2717 (ダイヤルイン)  
(FAX) 03-5841-2708