

東京大学情報基盤センター

トライアルユース利用成果報告書

提出日：2020年 6月 4日

研究題目 (申込課題名)	ナノ構造液体分離膜の分子動力学計算		
フリガナ 氏名 (※1)	印	利用者番号 (プロジェクトコード)	
所属 (※2)			職名
利用計算機 システム	Reedbush-U		
申込区分	<input checked="" type="radio"/> ① 無償トライアルユース <input checked="" type="radio"/> ② 有償トライアルユース		
コース	1. パーソナルコース 2. グループコース <input checked="" type="radio"/> ③ グループコース (※3 1口・2口・3口) (企業利用)		
利用期間	2019年4月 ～ 2020年3月		
成果公開 (※4)	◆グループコース（企業利用）のみ <input checked="" type="radio"/> ① 即時公開 2. 公開延期（成果公開予定： 年 月）		
公開延期の理由	◆上記（成果公開）で「2. 公開延期」を選択された場合はその理由をご記入願います。		

本報告書は、利用状況調査等に活用し、センター広報・Web ページには利用件数を公開いたします（グループコース（企業利用）を除く）。

- ※1 グループコースの場合は、利用申込書に記載した代表者名を記入してください。
- ※2 企業の方の場合は、企業名および部署名を記入してください。
- ※3 Oakbridge-CX, Oakforest-PACS を利用した場合のみ、いずれかに○をつけてください。
- ※4 グループコース（企業利用）については、本報告書の内容は原則公開され、センター広報・Web ページに公開されます。ただし、利用者の申出により最大で2年間公開を延期することができます。

- 本報告書は、利用期間終了後1ヶ月以内に東京大学 情報システム部 情報戦略課 研究支援チームまでご提出ください。
- 本様式の変更はできません。

受付日	年 月 日	受付印	
-----	-------------	-----	--

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。

1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

ナノ構造内の液体分離は物理化学的に重要な問題であり、これまで分子動力学計算による検討を続けてきた。本研究では、液体分離のアナロジーを利用して歩行者流を自己駆動粒子群でモデル化し、オープンソースコード「Lammps」を用いた大規模計算により解析する。

2) 利用意義

分子動力学計算は古くから液体の平衡系の物性評価や、非平衡系の輸送現象の解明に用いられてきた。液体を構成する粒子を、人や車などの社会システムの流れの構成要素に見立てることで、社会システムの輸送現象を液体の流動現象とのアナロジーを用いて解析することが出来る。この研究を通じて、分子動力学計算の社会システムへの応用の可能性を見極めることが出来る。

3) スーパーコンピューターを利用する必要性

分子動力学タイプのシミュレーションを、空間的非一様性を持ちレアイベントを含むような系に適用する場合、統計的再現性を確保するために長時間、大規模な計算結果の平均を取る必要があり、この問題をスーパーコンピューターの利用により解決可能かどうかを早期に見極める必要がある。

2. 成果の概要

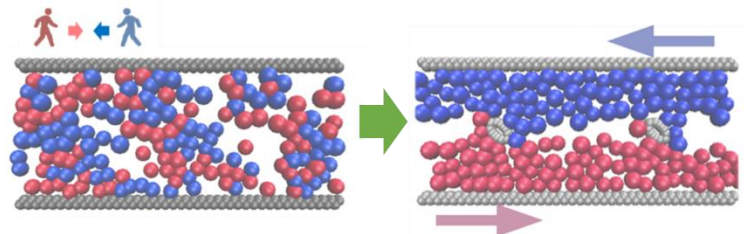
1) 今後得られるであろう成果の見通し

※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

(1. **計算科学**、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他)

本研究では、移動手段の中でも最も基礎的な手段である歩行者流に着目し、物理化学の分野で用いられる分子動力学シミュレーションを応用して、歩行者の流動を解析した。具体的には、図1に示すように、廊下内を対向して移動する歩行者群を考え、廊下内に設置された障害物が歩行者流に及ぼす影響をしらべた。シミュレーションには、分子動力学計算のためのオープンソースコード「Lammps」を用いた。

歩行者の運動は、Social forceモデルと呼ばれる相互作用ポテンシャルを用いて模擬した。そのために、オリジナルのLammpsのコードを改変した。まず、改変したLammpsコードがスパコン上で正常に動作することと、計算結果の妥当性を確認した。



動作確認後、設置する障害物の形状が歩行者流に与える影響を調べた。その結果、互いに反対方向に向かう歩行者のグループが自発的に分離し、その分離作用が流れを効率化することを示した(図1)。

図1. 廊下における歩行者対向流のシミュレーション結果。青い粒子が左、赤い粒子が右に移動する歩行者を示す。障害物の設置により、右側通行を促され、流れが効率化する。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

※ パーソナルコースを利用された企業の方およびグループコース(企業利用)の場合のみ記入

弊社と関連会社は今後、自動車に限らずモビリティ全般を考慮した輸送の効率化を目指している。本研究で得られた結果は、移動可能な障害物と歩行者との相互作用により、歩行者流が効率化することを示唆する重要な結果であり、モビリティインフラ設計に組み入れることで世の中に貢献することが見込める。今後は、実用化を目指した実験による実証に繋げていきたい。

3) その他の成果

得られた成果は論文として発表し、関連する特許を出願した：

[1]S. Koyama, D. Inoue, A. Okada and H. Yoshida, SWARM2019, Okinawa, pp. 314-318, 2019

[2]S. Koyama, D. Inoue, A. Okada, H. Yoshida, EPL (Europhysics Letters), **129**, 50005, 2020

[3]特願 2020-43474