

スーパーコンピューティング ニュース

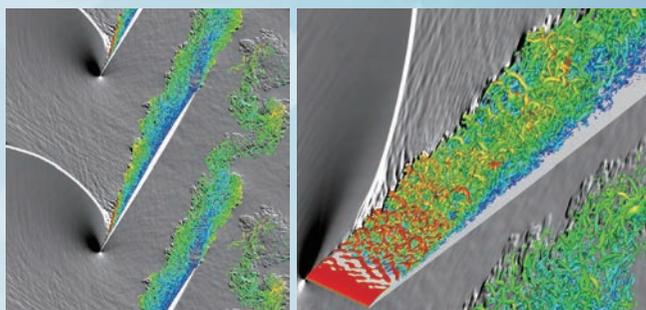
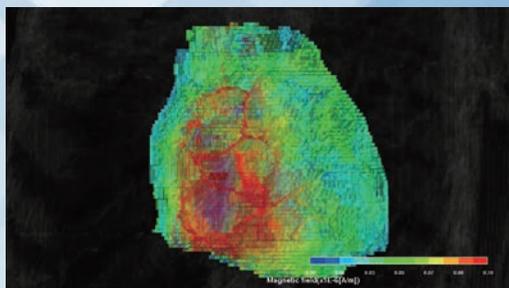
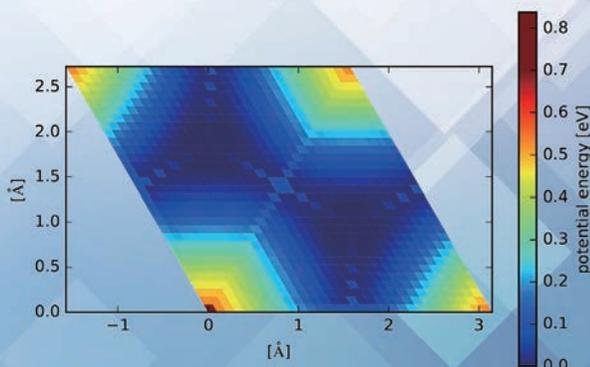
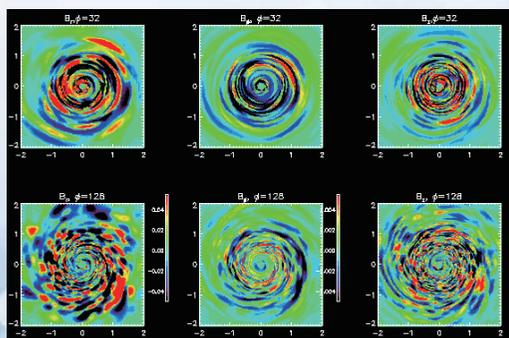
SUPERCOMPUTING NEWS

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.20, No.Special Issue 2

2018.8

特集：平成29年度「若手・女性利用者推薦」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。

- **brucite** の積層不整様式の決定とその摩擦特性
(東京大学大学院 理学系研究科地球惑星科学専攻 奥田 花也)
- 遷音速失速領域における航空エンジンファン翼列の **Large Eddy Simulation**
(東京大学大学院 工学系研究科航空宇宙工学専攻 立石 敦)
- 磁気回転不安定性によるブラックホール降着流の角運動量輸送機構の解明
(九州大学大学院 理学研究院物理学部門 町田 真美)
(自然科学研究機構 国立天文台理論研究部 川島 朋尚)
(鹿児島大学 理学部 工藤 祐己)
- 1,000 億自由度規模の電磁界解析を可能とするための、
階層分割型数値計算フレームワーク **ADVENTURE_Magnetic** の高並列化・高速化研究
(八戸工業大学 工学部機械工学科 杉本 振一郎)

目 次

特集：平成 29 年度「若手・女性利用者推薦」後期課題 成果報告

平成 30 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）	
陽解法を用いた軸受の流体構造連成解析	4
深川宏樹（九州大学大学院工学研究院機械工学部門）	
brucite の積層不整様式の決定とその摩擦特性	10
奥田花也（東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻）	
カスケード型超並列シミュレーションに立脚した遷移経路探索法の開発と FtsZ 細胞分裂ダイナミクスへの適用	15
原田隆平（筑波大学計算科学研究センター）	
壁面流における持続乱流の発生過程	22
清水雅樹（大阪大学大学院基礎工学研究科） Paul Manneville（Ecole Polytechnique）	
遷音速失速領域における航空エンジンファン翼列の Large Eddy Simulation	27
立石 敦（東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻）	
磁気回転不安定性によるブラックホール降着流の角運動量輸送機構の解明	35
町田真美（九州大学大学院理学研究院物理学部門） 川島朋尚（自然科学研究機構国立天文台理論研究部） 工藤祐己（鹿児島大学理学部）	
ハイブリッドクラスタシステムにおける通信削減タイル QR 分解実装	42
高柳雅俊（山梨大学大学院情報機能システム工学専攻）	
1,000 億自由度規模の電磁界解析を可能とするための、 階層分割型数値計算フレームワーク ADVENTURE_Magnetic の 高並列化・高速化研究	50
杉本振一郎（八戸工業大学工学部機械工学科）	

耐 CO アノード用錯体触媒の機構解明と設計に向けた第一原理計算 59
多田幸平（産業技術総合研究所電池技術研究部門）

平成 30 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）で実施した平成 29 年度「若手・女性利用者推薦」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、概ね 40 歳以下の若手研究者（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（継続申請と再審査の上、最大で 1 年間の実施が可能）と、学部・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、インターン制度それぞれについて、パーソナルコース（個人単位で実施）、グループコース（グループ単位で実施）があり、様々な研究スタイルに対応しています。

採択された課題のうち、「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、同拠点共同研究課題審査委員会での審査の上、JHPCN の萌芽型共同研究課題としても採択され、更に毎年 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。

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. 平成 29 年度「若手・女性利用者推薦」後期 採択課題

平成 29 年度「若手・女性利用者推薦」後期の課題公募では、表 1 に示した 16 件の課題が採択されました。2 件の課題は、平成 30 年度前期に継続され実施されています。本特集号では後期で実施期間が終了した 14 件の課題のうち 9 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 13 件の課題については、平成 30 年 6 月 4 日に開催された「若手・女性利用者推薦」成果報告会¹で、その成果が報告されました。

¹ https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/y_report/h29/H29IL_report.php

表1 平成29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
陽解法を用いた軸受の流体構造連成解析 [†]	深川 宏樹	九州大学大学院 工学 研究院
brucite の積層不整様式の決定とその摩擦特性 [†]	奥田 花也	東京大学 理学系研究 科 (採択時：東京大学 理学部)
カスケード型超並列シミュレーションで探る FtsZ の細胞分裂ダイナミクス [†]	原田 隆平	筑波大学 計算科学研 究センター
タンパク質-リガンド複合体への共溶媒効果の系統 的解析 ^{†‡}	山守 優	産業技術総合研究所 人工知能研究センター
壁面流における持続乱流の発生過程 [†]	清水 雅樹	大阪大学大学院 基礎 工学研究科
分子動力学シミュレーションによる多剤排出トラ ンスポーターAcrB と基質間の反応機構の解明 ^{†‡}	篠田 恵子	東京大学 先端科学技 術研究センター
遷音速失速領域における航空エンジンファン翼列 の Large Eddy Simulation [†]	立石 敦	東京大学大学院 工学 系研究科
全原子 MD を用いた高分子混合系の相溶性評価手 法の開発 ^{†‡}	山田 一雄	大阪大学 基礎工学研 究科
磁気回転不安定性によるブラックホール降着流の 角運動量輸送機構の解明 [†]	町田 真美	九州大学大学院 理学 研究院物理学部門
ハイブリッドクラスタシステムにおける通信削減 タイル QR 分解実装 [†]	高柳 雅俊	山梨大学大学院 情報 機能システム工学専攻 (採択時：山梨大学大 学院 総合研究部工学 域)
全球雲解像モデル NICAM を用いた水惑星実験によ る海面水温変動と熱帯の湿潤対流活動の共鳴時定 数の決定*	末松 環	東京大学大学院 理学 系研究科
1,000 億自由度規模の電磁界解析を可能とするた めの、階層分割型数値計算フレームワーク ADVENTURE_Magnetic の高並列化・高速化研究	杉本 振一郎	八戸工業大学 工学部 (採択時：諏訪東京理科 大学)
耐 CO アノード用錯体触媒の機構解明と設計に向け た第一原理計算 [†]	多田 幸平	産業技術総合研究所 エネルギー・環境領域 電池技術研究部門
密度汎関数法を用いた凝縮系の電荷分布とその溶 媒和構造依存性の解明 ^{†‡}	石井 良樹	大阪大学大学院 基礎 工学研究科

課題名	代表者名	所属
Taylor-Couette 流れ と Taylor-Couette-Poiseuille 流れにおける熱伝達とトルク性能の LES 解析*	藤本 慶	東京農工大学大学院 工学府
南極大型大気レーダーPANSY で観測された大気重力波の数値モデル再現実験による力学特性の解明 †‡	佐藤 薫	東京大学大学院 理学 系研究科

* 平成 30 年度前期に継続課題として採択された課題です。これらの課題は、継続課題と合わせて成果報告されます。

† 「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。

陽解法を用いた軸受の流体構造連成解析

深川宏樹

九州大学大学院工学研究院機械工学部門

1. はじめに

本稿では「陽解法を用いた軸受の流体構造連成解析」について報告をする。現在の製品設計では CAD がよく用いられる。この CAD データを用いて、シミュレーションによる製品性能の事前検証ができれば、設計工程を高速化できる。例えば、流体軸受の事前検証には、潤滑油の流れで生じる力で軸受が変形する様子を知る必要がある。一般に、複雑な工業製品の検証では大規模な流体構造連成解析が必要とされる。本研究では、設計工程の改善(工数削減と精度向上)を目的として、スーパーコンピュータで数千億自由度の大規模流体構造連成解析を可能とするソルバーの開発を行った。

解析対象をレシプロエンジンで使われるクランクシャフトとコンロッドの接合部の流体軸受とした。コンロッドとはピストンをクランクシャフトに結合する部品であり、ピストンの上下運動をクランクシャフトへの回転運動にして伝達する。コンロッドの軸受とクランクシャフトの軸との隙間は潤滑油で満たされており、軸の回転に伴って油膜内に流れが生じる。潤滑油が狭小部に向かって流れる領域では、油膜内の圧力が高くなり荷重を支える。一方、狭小部から潤滑油が通り抜けていく領域では、圧力が溶解気体の析出圧力まで低下してキャビテーションが発生する。自動車エンジンは稼働時に毎分数千回転し、軸受と軸の間にある油膜の狭小部は $0.1\mu\text{m}$ になり、軸受面上にかかる圧力は局所的に百 MPa に達する。流体軸受の動解析を精度良く行うには、十分に細かいメッシュで大規模なモデルを高速に解くソルバーが必要である。

一般に大規模な流体構造連成解析は計算量や並列度の観点から難しいとされている。また、近年の並列計算機はメモリバンド幅が演算性能に比べて極端に低い。つまり、Byte/Flop(B/F)が低い。このような計算機の演算性能を引き出すにはレジスタやキャッシュメモリが有効に使え、通信量を抑えられる参照の局所性が高い計算方法を用いる必要がある。

従来の大規模流体構造連成解析には、流体と構造の方程式を各々独立に解き、境界面を修正して解を収束させる反復法が良く用いられてきた。しかし、反復法で解を収束させるには流体と構造の方程式を何度も解く必要があり、計算量が膨大になる。特に、有限要素法による応力解析ではメモリバンド幅が必要であり、近年の B/F 値の低い計算機では計算速度が上がらない。そもそも反復法では、流体軸受の弾性流体潤滑解析のように薄膜を扱う問題で解を収束させるのは難しい。したがって、流体軸受の数値解析では並列性能がでない直接法を用いる他なく、スーパーコンピュータを用いた大規模計算は不可能だった。

そこで、我々は大規模な流体構造連成解析を実現するために、完全陽解法によるソルバーを開発した。完全陽解法では、ある領域の時刻 $t + \Delta t$ の状態を時刻 t の近傍の物理状態から求める。この方法は参照の局所性が高く、等分に解析モデルを領域分割すれば並列度は 100%になる。つまり、大規模なモデルではコア数の増加に比例して計算速度を上げることができる。また、この方法は Byte/Flop(B/F)の低い GPU コンピューティングにも向いている[1]。

2 章で流体軸受の形状データの説明をする。3 章で軸受が変形しない場合の流体潤滑 (HL) モデル、4 章で軸受が弾性変形する弾性流体潤滑 (EHL) モデルでのシミュレーションの結果を述べる。5 章でスーパーコンピュータを使ったときのソルバーの計算性能について説明する。6 章で本研究のまとめを述べる。

2. 流体軸受の解析モデル

流体軸受のモデルについて説明する。

2.1. 構造格子の配置

流体軸受の模式図を図1に示す。中心は軸、外側は軸受、隙間は潤滑油をそれぞれ表す。図1では構造格子の配置が見やすいように油膜厚さを大きく表示した。実際には、軸半径を30 mm、軸受厚みを30 mm、軸方向長さを100 mm、半径隙間を30 μm とした。偏心量(軸と軸受との軸心のズレ)を1.5 μm とし、偏心率(偏心量/半径隙間)を0.95とした。構造格子を円周方向に100、軸方向に5、半径方向に5ずつ配置した。油膜部分は動径方向を一層とした。圧力変化が激しい最狭部では、計算精度を良くするために構造格子を小さくした。大気圧下での潤滑油密度を $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$ とし、粘度を $\eta = 10 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ とした。回転数を1000 rpm、つまり、軸と油膜との境界面の移動速度を $u = 3.14 \text{ m/s}$ とした。

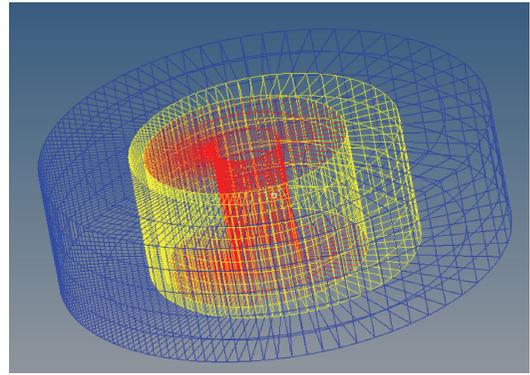


図1: 流体軸受の構造格子の模式図

中心部分の赤が軸、外側部分の青が軸受、隙間にある黄色が油膜を表す。油膜は実モデルよりも厚めに表示した。

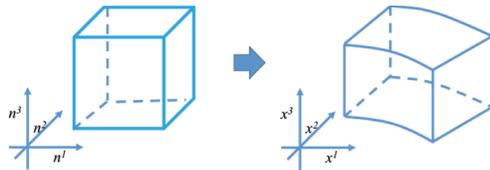


図2: 自然座標系から空間座標系への座標変換
形状関数より自然座標系 $\mathbf{n} := (n^1, n^2, n^3)$ から空間座標系 $\mathbf{x} := (x^1, x^2, x^3)$ への座標変換が定まる。

2.2. 六面体二次要素

図2のように自然座標系 (n^1, n^2, n^3) から空間座標系 (x^1, x^2, x^3) への座標変換を考える。有限要素法では各格子の自然座標 \mathbf{n} から空間座標 \mathbf{x} への写像は形状関数 $N^\alpha(\mathbf{n})$ を用いて $x^i(\mathbf{n}) = x_\alpha^i N^\alpha(\mathbf{n})$ で与えられる。ここで x_α^i は空間座標における節点番号 α での i 成分の値である。6面体二次要素では節点は20個ある。表1に要素の中心点を原点にした場合の節点番号と自然座標との対応を示す。形状関数 $N^\alpha(\mathbf{n})$ は次の関数を用いて表2で与えられる[2]。

$$l(\mathbf{r}) := -\frac{1}{8}(1-r^1)(1-r^2) \quad (1)$$

$$(1-r^3)(2+r^1+r^2+r^3),$$

$$m(\mathbf{r}) := \frac{1}{4}(1-r^2)(1-r^3) \quad (2)$$

$$(1-r^1r^1)$$

表1: 20節点6面体要素の節点番号と自然座標

節点番号	n^1	n^2	n^3	節点番号	n^1	n^2	n^3
1	-1	-1	-1	11	0	1	-1
2	1	-1	-1	12	-1	0	-1
3	1	1	-1	13	0	-1	1
4	-1	1	-1	14	1	0	1
5	-1	-1	1	15	0	1	1
6	1	-1	1	16	-1	0	1
7	1	1	1	17	-1	-1	0
8	-1	1	1	18	1	-1	0
9	0	-1	-1	19	1	1	0
10	1	0	-1	20	-1	1	0

表2: 形状関数

$N^1 = l(n^1, n^2, n^3)$	$N^2 = l(-n^1, n^2, n^3)$	$N^3 = l(-n^1, -n^2, n^3)$	$N^4 = l(n^1, -n^2, n^3)$
$N^5 = l(n^1, n^2, -n^3)$	$N^6 = l(-n^1, n^2, -n^3)$	$N^7 = l(-n^1, -n^2, -n^3)$	$N^8 = l(n^1, -n^2, -n^3)$
$N^9 = m(n^1, n^2, n^3)$	$N^{10} = m(n^2, n^3, -n^1)$	$N^{11} = m(n^1, -n^2, n^3)$	$N^{12} = m(n^2, n^3, n^1)$
$N^{13} = m(n^1, n^2, -n^3)$	$N^{14} = m(n^2, -n^3, -n^1)$	$N^{15} = m(n^1, -n^2, -n^3)$	$N^{16} = m(n^2, -n^3, n^1)$
$N^{17} = m(n^3, n^1, n^2)$	$N^{18} = m(n^3, -n^1, n^2)$	$N^{19} = m(n^3, -n^1, -n^2)$	$N^{20} = m(n^3, n^1, -n^2)$

自然座標系での各要素の形状情報は、自然座標上の計量テンソル g に集約される。この計量テンソルの成分を g_{ij} とすると、体積要素は $\sqrt{g} := \sqrt{\det g_{ij}}$ と計算できる。計量テンソル g_{ij} は、空間座標上の計量テンソル δ_{kl} から次で求まる。

$$g_{ij} = \delta_{kl} \frac{\partial x^k}{\partial n^i} \frac{\partial x^l}{\partial n^j} \quad (3)$$

ここで空間座標がカルテシアン座標の場合に、 δ_{kl} はクロネッカーデルタになる。

3. 流体軸受の解析モデル流体潤滑 (HL) モデルでのシミュレーション

軸と軸受を剛体として流体潤滑解析を行った。

3.1. 流体の支配方程式

本ソルバーでの流体の支配方程式は、連続の式とナビエ・ストークス方程式である。これらの式を自然座標系で与え、離散化して、完全陽解法で解く。潤滑油の質量密度を ρ としたときに、単位体積内の総質量は双対作用素 $*$ を用いて $*\rho = \sqrt{g}\rho$ となる。連続の式は次となる。

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathcal{L}_{\mathbf{u}^\#}\right)(*\rho) = 0 \quad (4)$$

ここで、 $\mathcal{L}_{\mathbf{u}^\#}$ は速度場 $\mathbf{u}^\#$ に関する Lie 微分である。一般に微分形式に対する Lie 微分は、外微分 d と $\mathbf{u}^\#$ による内部積 $\iota_{\mathbf{u}^\#}$ を用いて $\mathcal{L}_{\mathbf{u}^\#} := d\iota_{\mathbf{u}^\#} + \iota_{\mathbf{u}^\#}d$ となる。なお、 $\mathcal{L}_{\mathbf{u}^\#}(*\rho) = d\iota_{\mathbf{u}^\#}*\rho$ と計算でき、流量 $\iota_{\mathbf{u}^\#}*\rho$ の発散を表す。ナビエ・ストークス方程式は、

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathcal{L}_{\mathbf{u}^\#}\right)\mathbf{u} = \frac{1}{2}d\iota_{\mathbf{u}^\#}\mathbf{u} - \frac{1}{\rho}(dP - \eta\Delta\mathbf{u}) \quad (5)$$

となる。ここで $\mathbf{u} := g(\mathbf{u}^\#,)$ とし、圧力 P は密度 ρ の関数とした[3, 4]。ラプラシアン Δ は接続 ∇ を用いて $\Delta\mathbf{u} = g^{ij}\nabla_i\nabla_j u_k dn^k$ で与えられる。空間は曲率ゼロのユークリッド空間なので、 $\Delta = d*d* - *d*d$ 、つまり、 Δ はホッジラプラシアンと同じになる[5]。本ソルバーでは $*\rho$ と \mathbf{u} の時間発展を計算する。

3.2. 圧力分布と密度分布の計算結果

軸が高速回転すると、流体軸受の油膜内では局所的に低圧または高圧になる領域ができる。大気圧下になると油膜内では負圧を妨げるようにキャビテーションが発生する。そこで、圧力を密度の関数として、大気圧以下にはならないとした。我々は、時間刻みを $0.1 \mu\text{s}$ とし、自然座標系での空間刻みを 2.0 として、式(4)と式(5)を完全陽解法で計算した。物理量の空間配置にスタッガード格子を用いた。つまり、各要素の中心と壁面にそれぞれ $*\rho$ と \mathbf{u} を配置した。軸が回転し始めて 7.5 ms 後に質量密度 ρ の分布が時間変化しない定常状態になった。このときの軸方向中央部の圧力分布を図3に、質量密度分布を図4にそれぞれ示す。ここで θ を周方向の角度とした。隙間が最も狭くなる場所を 0 とし、最も広くなる場所を $\pm\pi$ とした。潤滑油は θ の正の方向に流れているとして、 θ 方向(周方向)の境界条件を周期的境界条件とした。圧力分布(図3)と質量密度分布(図4)から、大気圧下では $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$ あった質量密度 ρ が低圧領域では 300 kg/m^3 まで下がっていることがわかる。これは低圧領域では気泡が発生し、平均質量密度が大きく下がっていることを示す。

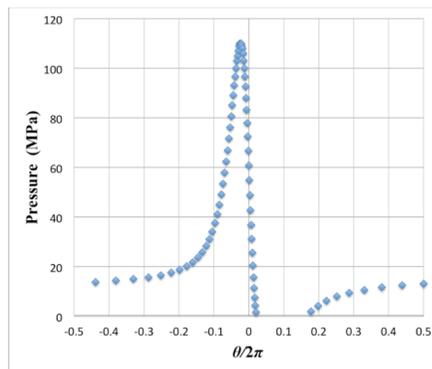


図 3: 7.5ms 後の圧力分布

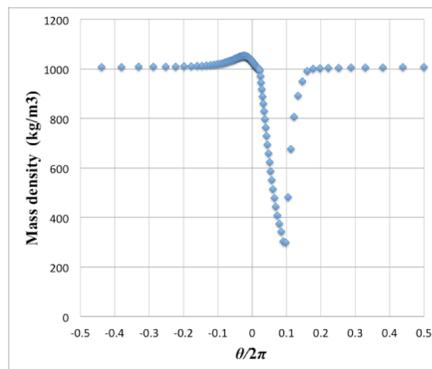


図 4: 7.5ms 後の密度分布

3.3. 計算精度の検証

計算精度を検証するために、本ソルバーの計算結果とレイノルズ方程式をガウス＝ザイデル法で解いた結果[6]を比較した。レイノルズ方程式とは、質量保存の式とナビエ・ストークス方程式から導出される式であり、次で与えられる。

$$\left[\sum_{i=1,2} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\rho h^3}{12\eta} \frac{\partial P}{\partial x^i} \right) \right] - u_m \frac{\partial(\rho h)}{\partial x^i} = 0 \quad (6)$$

ここで h は膜厚であり、 u_m は油膜を挟む境界面の移動速度の平均値である。油膜内圧力 P の分布は、 ρ, h, u_m の分布から求まる。ガウス＝ザイデル法では、式(6)の密度 ρ は定数として圧力 P を求める。この P から ρ を求め、この ρ を式(6)に再代入して、

P を再計算する。この操作を解が収束するまで繰り返す。キャビテーションを含めるには圧力 P が負圧になるとゼロに置き換える操作をする。この方法では、キャビテーション発生場所での連続の式が満たされないため、一般には正しい圧力分布が得られない。しかし、 $\theta = \pm\pi$ で $P=0$ となる境界条件下では、正しい圧力分布が求まることが知られている。この圧力分布と我々のソルバーでナビエ・ストークス方程式を同じ境界条件で解いた結果を比較した。商用汎用流体解析ソフトウェアでは、偏心率が低い緩い条件でも数値解がレイノルズ方程式を解いた場合と一致しないことが報告されている[7]。一方、我々のソルバーでは図5で示すようにレイノルズ方程式(-印)とナビエ・ストークス方程式(+印)の圧力分布は一致した。

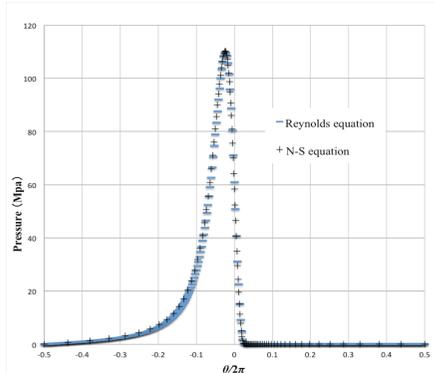


図5: ナビエ・ストークス方程式とレイノルズ方程式の圧力分布の比較

4. 弾性流体潤滑 (EHL) モデルでのシミュレーション

流体軸受では軸の回転時に油膜の狭小部が高圧になる。前章では軸と軸受を剛体とみなした。しかし、実際には軸と軸受は剛体ではなく、油の圧力により弾性変形する。本研究では、軸を剛体とみなし、軸受の弾性変形を考慮した場合のシミュレーションも行った。本章では、最初に軸受の弾性変形の支配方程式について説明をし、次にシミュレーション結果を示す。

4.1. 軸受の支配方程式

自然座標系で見たときに軸受は動かないとすると、軸受のひずみの時間変化は自然座標系での計量テンソル g の時間変化を使って次で表せる。

$$\frac{\partial}{\partial t} e_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} g_{ij} \quad (7)$$

軸受の応力テンソル κ_j^i は $e_j^i := g^{ik} e_{kj}$ の関数になる。本研究ではフックの法則を用いた。

$$\kappa_j^i = \frac{E}{(1+\nu)} \left(e_j^i + \frac{\nu}{(1-2\nu)} \delta_j^i e_k^k \right), \quad (8)$$

ここで鋼のヤング率を $E = 211.4\text{GPa}$ とし、ポアソン比 $\nu = 0.293$ とした。

軸が高速回転していると高圧領域では軸受が歪み、油膜と軸受の境界面が移動する。我々のソルバーでは、油膜内の圧力 P と軸受の歪みによる応力 κ_j^i の関係から1ステップごとに境界面の移動を求めている。

4.2. 圧力分布と軸受の変形量

軸受が全く変形しない流体潤滑(HL)モデルと軸受が変形する弾性流体潤滑(EHL)モデルの圧力分布の比較を図6に示す。両モデルの偏心量は一定とした。EHLモデルでは軸受が弾性変形すると、その分油膜厚さが変化する。HLモデルとEHLモデルの圧力分布を+と×記号でそれぞれ表す。軸受の凹み、すなわち変形量を●記号で示す。EHLモデルでは軸受が高圧領域で押し広げられるため、圧力がHLモデルに比べて低くなる。つまり、流体軸受のシミュレーションでは、軸受の弾性変形を含めないと正しい圧力分布が得られないことがわかる。

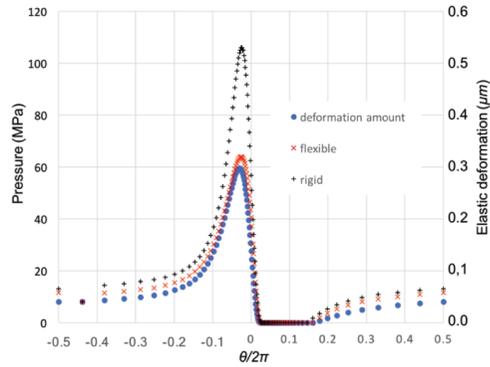


図6: HLモデルとEHLモデルでの圧力分布と軸受の変形分布

5. 並列計算機における本ソルバーの性能

本節では、並列計算機を用いたときの本ソルバーの性能について述べる。

5.1. 従来手法の問題点と本ソルバーの利点

流体構造連成解析では、流体と構造で異なるソルバーを使う反復法がよく用いられる。この方法で流体軸受のシミュレーションをするには、次のように計算する。流体側ではレイノルズ方程式を用いて油膜内の圧力分布を計算し、この圧力分布を構造解析の境界条件にして軸受の凹みを計算する。凹みにより隙間分布が変われば、流体解析の境界条件も変わり、圧力分布が変わる。再び圧力分布から隙間分布を求め、解が収束するまで反復計算を行う。しかし、この方法では、圧力が高い場合には解は収束しない。仮に計算できたとしても、大自由度になると計算量が膨大になる。一般に陰解法や有限要素法を用いた場合には、自由度 n のモデルに必要な計算量は $O(n^2) \sim O(n^3)$ となる。スーパーコンピュータで構造解析に必要な線形問題を解くには、共役勾配法などの並列性能が出しやすい方法が用いられる。共役勾配法では疎行列ベクトル積(SpMV)が計算の大部分を占め、これを演算律速で行うにCSR形式やELLPACK形式を用いた場合には $B/F > 10$ が必要である[8]。しかしながら、近年のプロセッサは $B/F < 1$ なので、SpMVはバンド幅律速になり十分にプロセッサの演算性能を活かせない。

本ソルバーは完全陽解法で計算するので、物理量(密度、速度場、節点位置)は1ステップ前の周囲にある要素の物理量だけで求まる。この方法では線形問題を解く必要がなく、先程述べた演算量やメモリバンド幅の問題がない。また、本ソルバーは自由度 n のモデルに必要な計算量は $O(n)$ であり、1ステップあたりのメモリ転送量が少ない。更に、非線形問題を解く場合には、キャッシュメモリ上のデータを再利用でき、よりプロセッサの性能を引き出せる。

5.2. 大規模並列計算機を用いた場合の本ソルバーの性能の検証

2017年7月に九州大学情報基盤研究開発センターのPRIMERGY CX400を使用して、本ソルバーの強スケーリングでの並列性能を実測した。図7で示すように、フラットMPIでの本ソルバーを実行した場合に、計算速度はコア数に比例して理想的に向上している。最後のほうでコア数の増分以上に計算速度が上がっているのは、キャッシュメモリにデータが載ったからだと推測する。なお、本ソルバーは23616並列を使った場合に1600億自由度の計算をすることができた。このように、本ソルバーは大型並列計算機を用いた大規模モデルのシミュレーションに向いている。

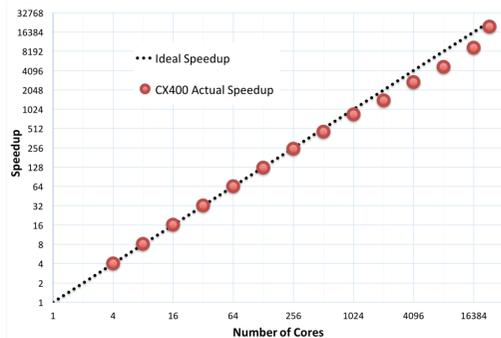


図7: コア数と計算速度

5.3. GPU を用いた場合の本ソルバーの性能の検証

2017年12月に東京大学情報基盤センターの Reedbush-H を使い, GPU を用いた本ソルバーの高速化の可能性を検証した。使用した GPU(NVIDIA TESLA P100 for NVLink-Optimized Servers) の B/F 値は $0.138(\text{B/F})=0.732(\text{TByte/s})/5.3(\text{TFlop/s})$ であり B/F 値は小さい。したがって, SpMV が $10(\text{B/F})$ であることを考慮すると, GPU 一枚あたりの SpMV の計算速度は, 高々 $73.2(\text{GFlop/s})=0.732(\text{TByte/s})/10(\text{Byte/Flop})$ である。計算負荷の重い計量テンソル g を GPU で計算すると, GPU 一枚あたりの計算速度は $337(\text{GFlop/s})$ であり, GPU の性能を引き出していることが分かる。

6. まとめ

本研究では大規模流体構造連成解析ソルバーを開発し, 流体軸受の EHL 解析を行った。1章で述べたように, 流体と構造を別々のソルバーで解き, 反復計算で解を収束させる方法では, 大規模な流体構造連成解析を行うのは難しい。しかし, 本ソルバーでは, 完全陽解法を用いた参照の局所性が高い実装することで, 並列計算機を使った大規模解析を可能にした。

謝辞

本研究は総合科学技術・イノベーション会議の SIP(戦略的イノベーション創造プログラム)「革新的燃焼技術」の支援を受けて行った。ソルバーの作成には九州大学理学部の福谷貴一氏, 九州大学工学部の寺内優人氏, 平健太郎氏, 新垣翔太氏, 及びフィクスターズの丸石崇史氏の協力を得た。Google の小田啓太氏には研究初期段階で助言を頂いた。東京大学先端科学技術研究センターの中田陽介氏と楽天技術研究所の江木聡志氏には微分形式の議論をして頂いた。

本研究の数値計算は, PRIMERGY CX400 (九州大学情報基盤研究開発センター)と Reedbush (東京大学情報基盤センター)上で実行されたものである。これらスーパーコンピュータの使用にあたっては, それぞれ九州大学情報基盤研究開発センターの「平成29年度(前期)先端的計算科学研究プロジェクト」と東京大学情報基盤センターの「平成29年度(後期)若手・女性利用者推薦課題」の支援を受けた。九州大学情報基盤開発センターの南里豪志准教授には PRIMERGY CX400 を動かす際に, 東京大学情報基盤センターの下川辺隆史准教授には GPU による高速化の際に助言を頂いた。本研究成果は九州大学大学院工学研究院の八木和行准教授との共同研究に基づく。以上, 多くの人の助力を得て, 本研究の遂行できたことに心から感謝申し上げます。

参考文献

- [1] T. Shimokawabe, T. Aoki, J. Ishida, K. Kawano, & C. Muroi: 145 TFlops Performance on 3990 GPUs of TSUBAME 2.0 Supercomputer for an Operational Weather Prediction, In Proc. Int. Conf. Comp. Sci., 4 (2011) 1535.
- [2] 久田 俊明, 野口 裕久: 非線形有限要素法の基礎と応用, 丸善, (1996), p114.
- [3] H. Fukagawa & Y. Fujitani: A Variational Principle for Dissipative Fluid Dynamics, Prog. Theor. Phys., 127, 5 (2012) 921.
- [4] 深川 宏樹: 散逸系の変分原理 日本物理学会誌 Vol. 72, No. 1, 2017, p34.
- [5] 酒井 隆: リーマン幾何学, 裳華房, (1992), p 48.
- [6] C. H. Venner & A. A. Lubrecht: Multilevel Methods in Lubrication, Elsevier, Amsterdam, (2000).
- [7] Y. Qiu & M.M. Khonsari: On the Prediction of Cavitation in Dimples Using a Mass-Conservative Algorithm, ASME J. Tribology, 131, 4 (2009) 1.
- [8] N. Bell & M. Garland, Efficient Sparse Matrix-Vector Multiplication on CUDA, Technical report NVR-2008-004, NVIDIA Corporation, 2008.

brucite の積層不整様式の決定とその摩擦特性

奥田花也

東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻

1. 研究の背景

層状鉱物は天然断層に多く観察されることが知られ、層状でない一般的な岩石に比べて低い摩擦係数を持つことが実験的に知られている (Byerlee, 1978)。近年では 2011 年の東北地方太平洋沖地震の震源域にあたる日本海溝のプレート境界で層状鉱物が局在して発見されており (Chester et al., 2013), 層状鉱物の摩擦特性は地震発生の理解に向けて多く研究がなされている (Moore & Lockner, 2004)。層状鉱物の摩擦係数は実験によって調べられ、鉱物種の差異や、同じ鉱物でも配位するイオン種の差異、相対湿度などで摩擦係数が変化することが明らかになってきた (Behnsen & Faulkner, 2012; Kawai et al., 2015; Tetsuka et al., 2018)。そのため、層状鉱物の摩擦特性は鉱物の原子スケールの物性に依存することが示唆されている。我々の研究グループでは層状鉱物の主要な剪断面となる層間での変形に注目し、原子スケールの物性が層状鉱物の摩擦係数に与える影響を調べている。本研究では層状鉱物にはしばしば観察される積層不整を対象に、まず安定な構造を求め、次にその摩擦特性を明らかにし、通常積層時と積層不整時で摩擦特性が異なるかを検討する。本稿では積層不整時の構造と通常積層時との摩擦特性の定性的な差異について述べる。

2. 対象物質, 計算手法, 計算条件

接触する二つの面は見かけの接触面に比べて非常に小さいナノスケールの真の接触面で接触しており、真の接触面での摩擦特性が見かけの摩擦特性を支配する (Scholz, 2002)。そこで本研究では層状鉱物の二層が剪断されるとき摩擦特性を計算する。対象物質は計算コストの観点から単位格子当たりの原子数が 5 個と少ない水酸化マグネシウムの層状鉱物 brucite を用いた。この brucite は上下の層が 180 度回転した積層不整構造を持つことが知られているため (Kogure & Bunno, 1998; 図 1), 本研究ではこの構造について計算を行う。

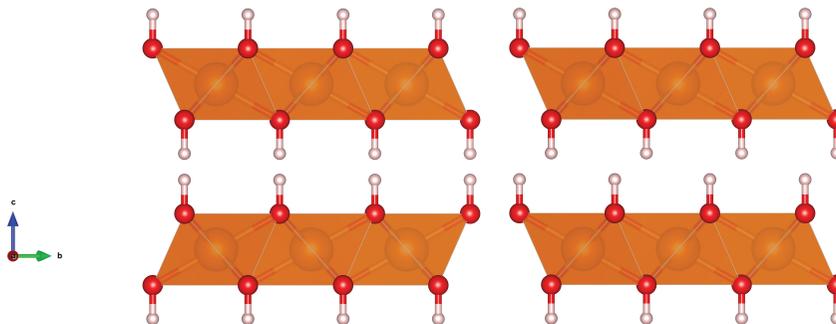


図 1 : 層状鉱物 brucite の 180 度の積層不整構造(左)と, brucite の通常積層構造(右)。

橙色, 赤色, 白色の球がそれぞれ Mg, O, H 原子を示す。Mg と O 原子は MgO_6 の八面体構造をとる。積層不整時は上下の層が 180 度回転している。なおこの図は最安定構造を示すものではなく、剪断前の初期構造に採用した構造である。この構造から下の層を固定し、上の層を動かしてポテンシャルエネルギーを計算する。

まず上下の層間距離を層に鉛直方向に変化させたときのポテンシャルエネルギー変化を計算する(安定位置からみて -0.5 \AA から 1.2 \AA まで 0.05 \AA 刻みで35点)。この求めたポテンシャルエネルギー変化の鉛直方向の変位微分は垂直応力に対応し、この操作によって、ある垂直応力を掛けた時の層間距離と系が持つポテンシャルエネルギーを決定できる。次に下の層の位置を固定した状態で、上の層を水平方向に動かし、動かし先で同様に垂直応力に対する層間距離とポテンシャルエネルギーの関係を計算する。水平方向には約 0.1 \AA 刻みの格子点を設定し、それらの点上で計算を行う(bruciteのa軸方向の単位格子の大きさは約 3.1 \AA であるので、格子点はa軸とb軸がなす(0001)面上において全部で 32×32 の1,024点)。これによりある垂直応力下で剪断されたときの層間距離の変化およびその時のポテンシャルエネルギー変化を求めることができる。求めたポテンシャルエネルギーのすべり方向の変位微分を取ることである垂直応力下での剪断応力が計算される。手法の詳細はZhong & Tománek(1990)を参照のこと。

ポテンシャルエネルギーの計算は密度汎関数法に基づく第一原理電子状態計算によって行った。計算にはQuantum ESPRESSO 第一原理電子状態計算ソフトウェア(Giannozzi et al., 2009)を用い、交換相関汎関数にPBE(Perdew et al., 1996), van der Waals力の補正にDFT-D2法(Grimme, 2006), 擬ポテンシャルにGBRVポテンシャル(Garrity et al., 2014), カットオフエネルギーは波動関数に対して 40.0 Ry , 電子密度に対して 320.0 Ry , K点メッシュはMonkhorst & Pack (1976)の手法に基づき $6 \times 6 \times 4$, エネルギーの収束条件は 0.01 mRy , 力の収束条件は 0.1 mRy/Bohr を用いた。計算はReedbush-Uシステムを用い、各計算点($35 \times 32 \times 32$ の合計35,840点)に対して2ノード64コア並列環境によって3次元の電子密度のFFT計算を並列化した。

3. 結果

積層不整構造を剪断した際のポテンシャルエネルギーの変化は図2のようになる。本研究では、積層不整時の初期構造(図2の原点に対応)には図1に示したような、上下の層のOH基が垂直に並ぶ構造を採用しており、計算結果からその構造は最もポテンシャルエネルギーが高く、不安定なことが分かる。また、積層不整時の最安定構造は図3のように、Mg原子とOH基が垂直に並ぶ構造であることが明らかとなった。

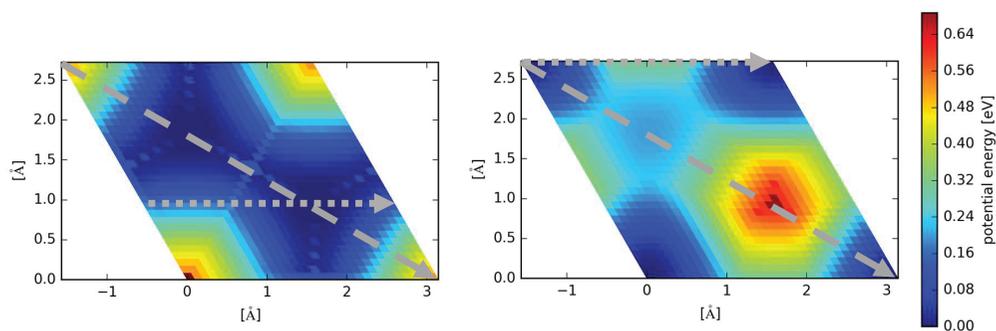


図2: 上下の層を剪断させた時の積層不整時(左)と通常積層時(右;平成29年度前期課題結果より)のポテンシャルエネルギー変化(垂直応力 1.0 nN 時)。

積層不整時は中央部に見られる二つの極小点の構造において最安定構造をとることが分かる(図3参照)。このポテンシャルエネルギーの変化の変位微分から剪断応力を計算することができる。灰色の点線と破線の矢印は図4で示す剪断応力を計算したすべり方向を示している。

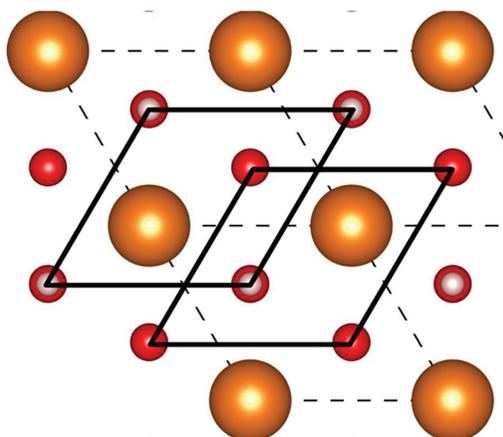


図 3：積層不整時の結晶構造。

点線および原子は計算時に固定した下の層の原子配置を示す。太線は最安定構造時の上の層の位置を示す。図 2 に見られるように対称な安定位置が存在し、上の層の Mg 原子が下の層の OH 基と直列する結晶構造となる。

4. 積層不整構造の摩擦特性

計算したポテンシャルエネルギーの変化の変位微分を取ることによって、設定したすべり方向に剪断したときの、ある垂直応力下での剪断応力を計算することができる。本稿では図 2 に示した灰色の点線矢印([100]方向)および破線矢印([120]方向)のすべり方向に関して、積層不整時と通常積層時の摩擦特性の比較を行った結果を紹介する。なお、積層不整の場合と通常積層の場合両方において、最安定構造を通るようなすべり方向を設定している。比較に用いる剪断応力は、計算された剪断応力の変化の正值をとる部分に関する平均の剪断応力を採用している。結果を図 4 に示した。ここから積層不整の場合の方が通常積層に比べて高い剪断応力を示すことが分かる。剪断応力は図 2 に示したポテンシャルエネルギーの安定な位置から不安定な位置に層が移動することにより発生し、ポテンシャルエネルギーを登る際の傾きが大きい方が高い剪断応力を示す。そのため、[120]方向に関しては、通常積層の方が剪断中のポテンシャルエネルギーが高い領域が多いが、積層不整の方が高い剪断応力を必要とする。一方、[100]方向の場合、剪断中のポテンシャルエネルギーの形状はほぼ同じで、通常積層の方が高いポテンシャルエネルギーを必要とするため、通常積層の方が高い剪断応力を示す。これらの結果から、積層不整構造の摩擦特性はすべり方向による剪断応力に差があり、通常積層に比べてすべりやすい方向とすべりにくい方向が共存することが分かる。摩擦の凝着説(Bowden & Tabor, 1950)に基づいて、brucite の降伏強度を 4.0 GPa(Okuda et al., submitted)として摩擦係数を求めると、[100]方向の通常積層の場合 0.22, 積層不整の場合 0.31, [120]方向の通常積層の場合 0.40, 積層不整の場合 0.44 となる。そのため断層中の粒子の積層状態およびすべり方向によってその摩擦係数が低下する可能性があり、断層中の粒子の向きやすべり方向を検討することによって摩擦特性を推定することが可能となる。

5. まとめ

本研究では層状鉱物 brucite の積層不整構造に対して、その安定構造および摩擦特性を密度汎関数法に基づく第一原理電子状態計算によって求めた。その結果、積層不整構造には二つの安定位置が存在し、その摩擦特性はすべり方向によって通常積層より高い剪断応力を示す場合と低い剪断応力を示す場合とがあることが明らかになった。そのため実験や断層の観察などから、地震

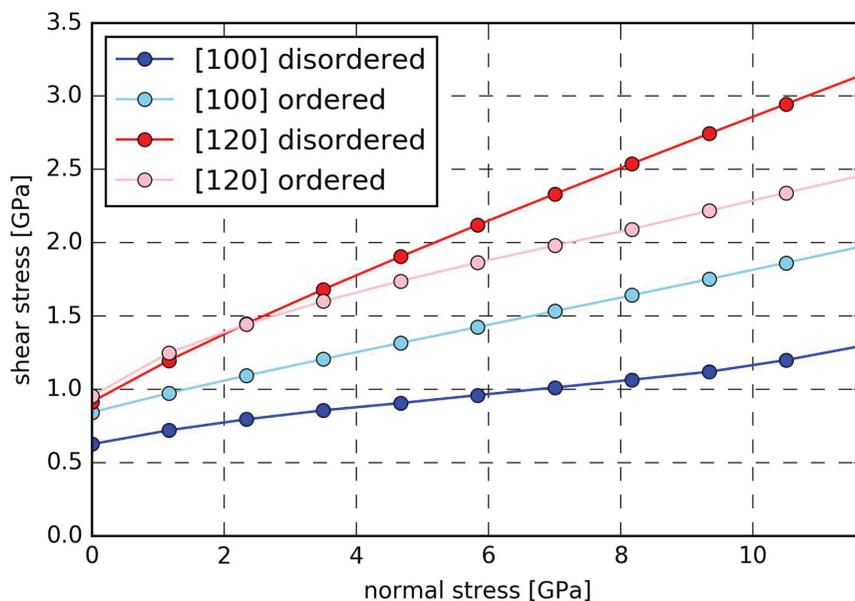


図4：[100]方向と[120]方向でのすべり方向に対する垂直応力と剪断応力の関係。

[100]方向に滑らせた場合、積層不整が、[120]方向の場合、通常積層がより低い剪断応力を取り、すべりやすい構造であることが分かる。

発生時の断層中での鉱物の積層状態および断層のすべり方向に対する鉱物の配列方向などを明らかにしていくことが必要である。また、今後は別の鉱物での計算を行い、イオン種や結晶構造の摩擦特性への影響を明らかにしていく予定である。

謝 辞

本研究は東京大学情報基盤センターの Reedbush-U システムを用い、東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」平成 29 年度後期課題によって行われた。また河合研志准教授(東京大学理学系研究科地球惑星科学専攻)、佐久間博主任研究員(国立研究開発法人物質・材料研究機構 NIMS)には多くの指導、助言をいただいた。

参 考 文 献

- Bowden, F. & Tabor, D. (1950) The friction and lubrication of solids. *Oxford University Press*
- Byerlee, J. (1978). Friction of rocks. *Pure Appl. Geophys.*, 116(4-5), 615-626.
<https://doi.org/10.1007/BF00876528>
- Chester, F. M., Rowe, C., Ujiie, K., Kirkpatrick, J., Regalla, C., Remitti, F., ...
 Toczko, S. (2013). Structure and Composition of the Plate-Boundary Slip Zone for the 2011 Tohoku-Oki Earthquake. *Science*, 342(6163), 1208-1211.
<https://doi.org/10.1126/science.1243719>

- Garrity, K. F., Bennett, J. W., Rabe, K. M., & Vanderbilt, D. (2014). Pseudopotentials for high-throughput DFT calculations. *Comput. Mater. Sci.*, *81*, 446-452.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.08.053>
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *J. Phys. Condens. Matter*, *21*(39), 395502. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- Grimme, S. (2006). Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *J. Comput. Chem.*, *27*(15), 1787-1799.
<https://doi.org/10.1002/jcc.20495>
- Kawai, K., Sakuma, H., Katayama, I., & Tamura, K. (2015). Frictional characteristics of single and polycrystalline muscovite and influence of fluid chemistry. *J. Geophys. Res. : Solid Earth*, *120*(9), 6209-6218. <https://doi.org/10.1002/2015JB012286>
- Kogure, T. & Bunno, M. (1998). Microstructure of nemalite, fibrous iron-bearing brucite. *Mineralogical Journal*, *20*(3), 127-133. <https://doi.org/10.2465/minerj.20.127>
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, *13*(12), 5188-5192. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- Moore, D. E., & Lockner, D. A. (2004). Crystallographic controls on the frictional behavior of dry and water-saturated sheet structure minerals. *J. Geophys. Res.*, *109*(B3), B03401. <https://doi.org/10.1029/2003JB002582>
- Okuda, H., Kawai, K., & Sakuma, H. First-Principles investigation for frictional characteristics of brucite and its application for macroscopic frictional characteristics of sheet-structure minerals. submitted to *J. Geophys. Res. : Solid Earth*
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.*, *77*(18), 3865-3868.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Scholz, C. (2002). The mechanics of earthquake and faulting 2nd edition. *Cambridge University Press*
- Tetsuka, H., Katayama, I., Sakuma, H. & Tamura, K. (2018). Effects of humidity and interlayer cations on the frictional strength of montmorillonite. *Earth, Planets and Space*, *70*(1), 56, <https://doi.org/10.1186/s40623-018-0829-1>
- Zhong, W., & Tománek, D. (1990). First-principles theory of atomic-scale friction. *Phys. Rev. Lett.*, *64*(25), 3054-3057. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.3054>

カスケード型超並列シミュレーションに立脚した遷移経路探索法の開発と FtsZ 細胞分裂ダイナミクスへの適用

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 29 年度(前期・後期)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「カスケード型超並列シミュレーションに立脚した遷移経路法の開発」及び「カスケード型超並列シミュレーションで探る FtsZ の細胞分裂ダイナミクス」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遷移経路探索法の紹介と、計算手法を適用した FtsZ 細胞分裂ダイナミクスの解析である。

2. イントロダクション

タンパク質の機能発現に関係する構造遷移は、通常の分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) シミュレーションが到達可能な時間スケールと比較して長時間の確率過程において観測される「レアイベント」である。故に、シミュレーションの時間スケールの制約から、通常の MD シミュレーションによりレアイベントを再現することは困難である場合が多い。このため、時間スケール問題の打開にむけてアルゴリズム開発が盛んに行われている。特に、タンパク質の MD シミュレーション専用の汎用計算機の開発が進んでいる。代表的な例として、米国 D. E. Shaw リサーチが保有する汎用計算機 "Anton" は、マイクロ秒からミリ秒に至る MD シミュレーションを可能にした。具体的な例として、比較的残基数の小さなタンパク質に対して、溶媒を露に含んだ全原子レベルのフォールディングシミュレーションを実現している [1-5]。しかしながら、研究室レベルの計算機を利用して機能発現の時間スケールに至る MD シミュレーションを実行することは依然として困難である。また、レアイベント自体が確率過程であることから、長時間 MD シミュレーション実行しても再現出来る保証がないため、不確実性が伴う。故に、レアイベントを再現する計算手法の開発が望まれている。

研究代表者は、生体機能に重要な構造遷移であるレアイベントを再現する計算手法の開発を進めてきた。本報告で解説する「カスケード型超並列シミュレーション」は、レアイベントを再現する遷移経路探索法である。本手法では、長時間 MD シミュレーションを実行する代わりに、初期構造の異なる短時間 MD シミュレーションを超並列に実行する「構造リサンプリング」のサイクルを繰り返すことで、効率的な遷移経路探索を実現する。また、構造遷移を促進するため、サイクル毎に短時間 MD シミュレーションの初期構造を再選択し、Maxwell-Boltzmann 分布に従い初期速度を与え直すことにより、カスケード的に構造リサンプリングを繰り返す。本手法を適用し効率的な遷移経路探索を実現するためには、構造リサンプリング毎に遷移確率が高い初期

構造を選択する必要があるため、適切な反応座標の設定が重要となる。

本報告では、これまでに開発した遷移経路探索法であるカスケード型超並列シミュレーションに属する計算手法: (1) Parallel Cascade Selection MD (PaCS-MD) [6-12], (2) Fluctuation Flooding Method (FFM) [13], (3) Outlier FLOODing (OFLOOD) method [14-18], (4) TaBoo SeArch algorithm (TBSA) [19-21], (5) Structural Dissimilarity Sampling (SDS) [22,23]の中から、平成29年度(前期)に開発・改良を進めた PaCS-MD を中心に解説する。また、平成29年度(後期)の採択課題の PaCS-MD のアプリケーションとして、細菌の細胞分裂ダイナミクスに深く関係しているタンパク質である FtsZ に適用した研究成果[24]も解説する。PaCS-MD 以外の計算手法に関しては、レビュー論文[25]を参照にされたい。

3. カスケード型超並列シミュレーション

3.1 遷移経路探索法の設計指針

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。本手法の特徴的な点として、バイアスをかけることなく構造間の遷移経路を探索可能である。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った [26,27]。バイアスは、付加する位置や付加する大きさ、向き、時間などパラメーターを最適化した上で適用しなければならないので、パラメーター最適化の準備計算が必要となる。また、系のサイズが大きくなるにつれて、パラメーターの最適化自体が困難となる場合もあるため、構造探索の計算時間よりもパラメーターの最適化にかかる計算時間の方が長くなる可能性もある。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けるので、バイアスは使用しない。更に、パラメーター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スタートさせ

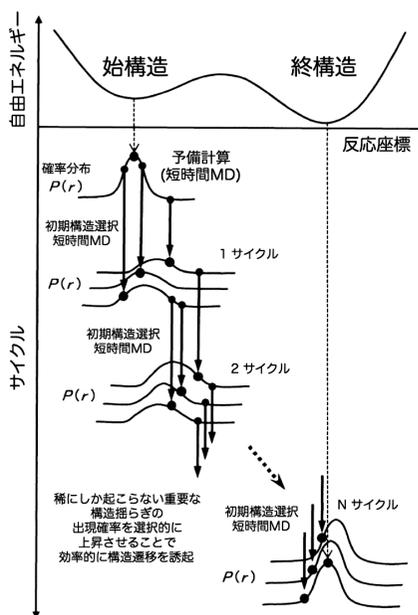


図1: カスケード型超並列シミュレーション

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、最も単純な例として、終構造が分かっている場合には、終構造に対する平均自乗距離(Root Mean Square Deviation: RMSD)が考えられる。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く。図2に本手法のフローチャートを示す。

図2では、反応座標に射影した値(measures)に基づき、N個の初期構造(seed-1, seed-2, ..., seed-N)を選択し、短時間MDシミュレーションを並列に実行することで遷移経路を探索する。

サイクル毎に、収束条件(終構造に対するRMSDや構造分布)を確認し、条件を満たしていればサイクルを終了する。そうでない場合は、収束条件を満たすまでカスケード的に構造リサンプリングを繰り返す。遷移経路探索後は、必要に応じてアンブレラサンプリング(Umbrella Sampling: US) [26,27]と多重ヒストグラム法(Weighted Histogram Analysis Method: WHAM) [28-30]を併用することで、自由エネルギーを計算する。

その他の自由エネルギー計算法として、マルコフ状態モデル(Markov State Model: MSM)を利用することが可能である。具体的には、MDシミュレーションの各スナップショットを離散化された確率過程の1状態と見なすことで、トラジェクトリがマルコフ連鎖で記述できると仮定する。この仮定に基づけば、生体分子の状態空間はマイクロな状態に離散化され、状態間の遷移確率をMD計算のトラジェクトリから容易に見積もることが出来る。状態空間の離散化は、トラジェクトリをクラスタリングし、マイクロな状態を定義することで行う。具体的には、適切な反応座標を決定後、MDシミュレーションから得られるタンパク質構造をマイクロな状態に割り当てる。ここで、MDシミュレーションから系の時間発展が得られているので、マイクロな状態間の遷移を数え上げることが出来る。また、得られた遷移回数を元に遷移行列(T)を最尤法により推定する。系がマルコフ過程で記述出来るとすると、平衡状態に達したとき、 $\pi = T\pi$ (π : 平衡状態の確率分布)で表される。最終的に、上記の固有値問題を解くことで固有値及び固有ベクトルを求めれば平衡状態(定常状態)の確率分布が分かるため、自由エネルギーを見積もることが出来る。計算の詳細は、文献[7,8,31]を参照されたい。US/WHAMを用いる方法と比較して、MSMを併用する方法は追加計算なしに自由エネルギー計算が可能であるため、計算コストを抑えることが出来る。

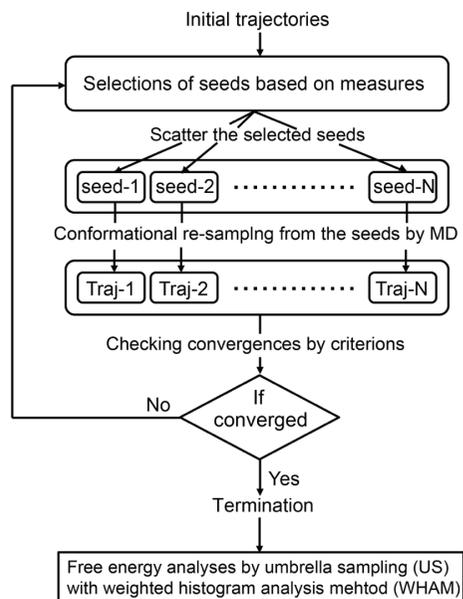


図2: フローチャート

3.2 Parallel Cascade Selection MD (PaCS-MD)

PaCS-MD は、始構造と終構造が既知の場合に構造類似性を表す反応座標を設定し、トラジェクトリが終構造へ収束していくように短時間 MD シミュレーションを繰り返す。前述の様に、最も単純な反応座標として構造間の構造類似性を表す RMSD が考えられる。もちろん、様々な反応座標を設定することも可能である。PaCS-MD では、遷移確率の高い初期構造から短時間 MD シミュレーションを用いた構造サンプリングを実行することで外部摂動に頼ることなく遷移経路を探索可能である。PaCS-MD の手順は下記の通りである。(1) 終構造に対する RMSD の値により MD のスナップショットをランキング。(2) 構造類似性が高い(RMSD の値が小さい)上位の複数のスナップショットを初期構造とし、短時間 MD シミュレーションを独立に実行。実際の計算では、サイクルあたり 10 初期構造を選択し、初期構造あたり 100 ps の短時間 MD シミュレーションを実行した。(1), (2)のサイクルを RMSD の値が十分小さくなるまで繰り返す。また、 $RMSD < 1.0 \text{ \AA}$ を収束条件とした。

全原子モデルを用いた PaCS-MD のアプリケーションとして、人工タンパク質 Chignolin(10 残基)のフォールディング過程と加水分解酵素 T4 lysozyme(164 残基)の open-closed 構造変化を再現した計算結果を報告する。Chignolin の始構造として完全に伸びきったアミノ酸構造をモデリングし、天然構造を終構造とした。T4 lysozyme は野生型の open 構造と closed 構造を始・終構造とし、両方向の構造遷移を再現した。終構造に対する RMSD を反応座標と

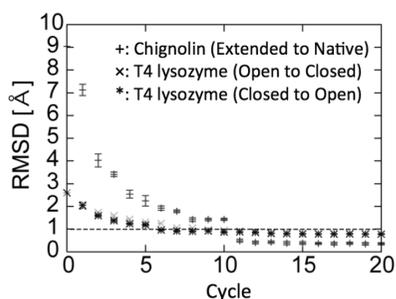


図3: 終構造対に対する RMSD の変化

して、サイクルあたり RMSD の値が小さい上位 10 個のスナップショットを初期構造に選択し、短時間 MD シミュレーションをリスタートさせることにより遷移経路を探索した。図3に終構造に対する RMSD の変化を示す。図3から分かるように、どちらのシステムも 10 サイクル程度(1 ns 秒程度)で RMSD が 1.0 \AA 以内に収束しており、始構造から終構造へ至る遷移経路を再現することが出来ている。

それぞれのサイクルでどのように初期構造が選択されていくかを追跡し、トラジェクトリをつなぎ合わせるにより、始構造から終構造へ至る擬似的な遷移経路 (リアクティブトラジェクトリ) を生成することが出来る。リアクティブトラジェクトリの物理的解釈として、現実的に可能な構造変化経路候補の 1 つと考えることができ、様々な用途に利用可能である。例えば、構造遷移経路のリファイメントとして Transition Path Sampling [32,33]や String 法[34,35]の初期経路パスとして利用することが可能である。また、アンブレラサンプリングを用いてリアクティブトラジェクトリ周辺の自由エネルギー地形を計算することも可能である。図4に PaCS-MD で生成した Chignolin のリアクティブトラジェクトリの射影を示す。この射影から、変性構造(Extended)からスタートし、天然構造構造(Native)へ至る Chignolin のフォールディング経路が生成されている。

ることが分かる。10本のリアクティブトラジェクトリの中には、フォールディングの途中でミスフォールド(Mis-fold)構造を経由して天然構造へ折り畳まれる遷移経路も存在していることが分かる。

尚, PaCS-MD を拡張することで、終構造が未知の場合でも適用可能である non-targeted PaCS-MD も開発している。紙面の都合上、その詳細は割愛させて頂くが、興味のある方は文献[36]を参照されたい。また、冒頭で記載した OFLOOD 法, TBSA, SDS などの構造探索法も終構造が未知でも適用可能であり, PaCS-MD を拡張した計算手法である。

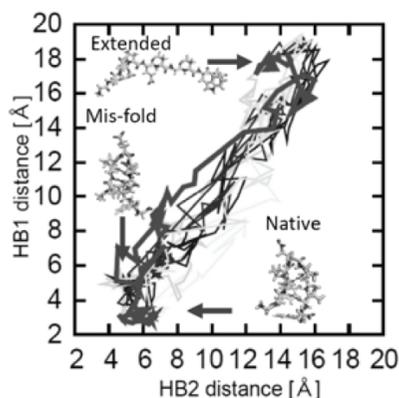


図4: 10本のChignolinのフォールディング経路の反応座標空間(主鎖水素結合距離:HB1, HB2)への射影。矢印は、遷移経路における代表構造を表す。

3. PaCS-MD 適用に基づく FtsZ 細胞分裂ダイナミクスの解析

PaCS-MD のアプリケーションとして、細菌の細胞分裂に深く関係しているタンパク質 FtsZ に適用した研究成果[24]を紹介する。FtsZ は、細胞膜の内側にリング状のフィラメントである Z リングを形成し、ダイナミックに離合集散を繰り返すことで細胞膜に陥入を生じさせる(図5左上)。この細胞膜の陥入はZリングの収縮により起きると考えられるが、その分子メカニズムには未解明な部分が多い。平成平成29年度(後期)は、PaCS-MD のアプリケーションとして立命館大学・松村教授の研究グループが X 線構造解析により決定した黄色ブドウ球菌 FtsZ の結晶構造をもとに、細菌の細胞分裂タンパク質の動的秩序解析を行った。

FtsZ に関して興味深いことに、X 線結晶構造解析から同一結晶中に立体構造が大きく異なる 2 つの状態(T-state, R-state)が存在していることが判明した(図5左下)。同一種で状態の異なる 2 構造が得られた研究報告はなく大変貴重な実験結果であるため、PaCS-MD を適用することで FtsZ モノマーの T-R 状態間の構造遷移経路を探索し、細胞分裂タンパク質の動的秩序過程の解析を行った。

PaCS-MD で探索した T-R 状態間の遷移経路を解析したところ、状態遷移における重要なアミノ酸残基のメカニズムを突き止めることができた。

具体的には、29番目のアルギニン残基(Arg29)に

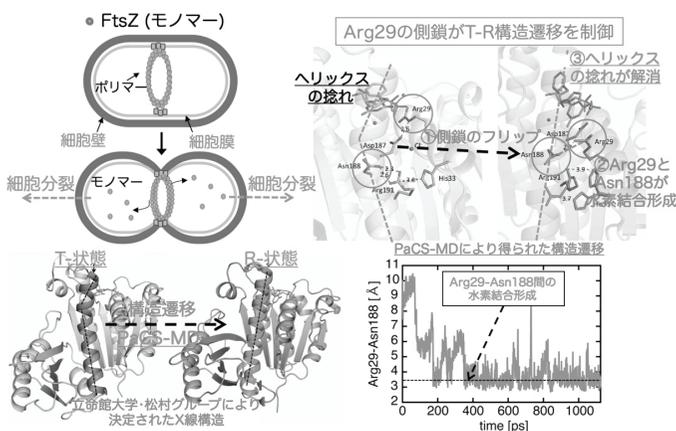


図5: 黄色ブドウ球菌由来の FtsZ モノマーの状態遷移メカニズム

注目したところ、側鎖のフリップがスイッチとなり状態遷移を制御していることが明らかになった。具体的には、図 5 右上に示す様に Arg29 の側鎖がフリップすることで Asn188 の側鎖と水素結合を形成し、FtsZ 中央に存在しているヘリックスが捩れた構造から捩れが解消された直線的な形状に構造遷移するメカニズムを解明した。一般的に、タンパク質側鎖のフリップは長時間スケールスケールで観測されるレアイベントであり、通常の MD シミュレーションで抽出することは困難を伴う。実際に、PaCS-MD で抽出した Arg29-Asn188 の水素結合距離の時系列データを解析したところ、T-R 状態遷移で Arg29-Asn188 間に水素結合が形成されていることが分かる(図 5・右下)。更に遷移経路を解析したところ、FtsZ は 2 状態状態の構造遷移において基質である GDP を段階的に認識・解除しており、中間体構造を経て多段階に状態遷移していることを突き止めた。

本研究において、実験と計算化学が密に連携することで FtsZ の構造揺らぎと T-R 状態間構造遷移におけるメカニズムを解明し、FtsZ ポリマーの離合集散の関係を解明するための足がかりを築くことが出来た。本報告は FtsZ モノマーを中心とした解説であったが、現在 FtsZ ポリマーの計算を継続し計算結果を解析している段階にあり、今後はより生体環境に近いモデルを用いて詳細な細胞分裂過程の動的秩序解明を進めていく。

参考文献

- [1] D.E. Shaw, M.M. Deneroff, R.O. Dror, J.S. Kuskin, R.H. Larson, J.K. Salmon, C. Young, B. Batson, K.J. Bowers, J.C. Chao, M.P. Eastwood, J. Gagliardo, J.P. Grossman, C.R. Ho, D.J. Ierardi, I. Kolossvary, J.L. Klepeis, T. Layman, C. Mcleavey, M.A. Moraes, R. Mueller, E.C. Priest, Y.B. Shan, J. Spengler, M. Theobald, B. Towles, S.C. Wang, *Commun. Acn.* **51** (2008) 91-97.
- [2] J.L. Klepeis, K. Lindorff-Larsen, R.O. Dror, D.E. Shaw, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **19** (2009) 120-127.
- [3] D.E. Shaw, P. Maragakis, K. Lindorff-Larsen, S. Piana, R.O. Dror, M.P. Eastwood, J.A. Bank, J.M. Jumper, J.K. Salmon, Y.B. Shan, W. Wriggers, *Science* **330** (2010) 341-346.
- [4] K. Lindorff-Larsen, S. Piana, R.O. Dror, D.E. Shaw, *Science* **334** (2011) 517-520.
- [5] S. Piana, K. Lindorff-Larsen, D.E. Shaw, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **110** (2013) 5915-5920.
- [6] R. Harada, A. Kitao, *J. Chem. Phys.* **139** (2013) 035103.
- [7] R. Harada, Y. Nishihara, N. Wakai, A. Kitao, *AIP Conf. Proc.* **1618** (2014) 86-89.
- [8] A. Kitao, R. Harada, Y. Nishihara, D.P. Tran, *AIP Conf. Proc.* **1790** (2016) 020013.
- [9] R. Harada, Y. Shigeta, *J. Comput. Chem.* **38** (2017) 2671-2674.
- [10] R. Harada, Y. Shigeta, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **90** (2017) 1236-1243.
- [11] R. Harada, Y. Shigeta, *Chem. Lett.* **46** (2017) 862-865.
- [12] R. Harada, Y. Shigeta, *Mol. Simul.* **44** (2018) 206-212.

- [13] R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, *J. Chem. Phys.* **140** (2014) 125103.
- [14] R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, *Chem. Phys. Lett.* **639** (2015) 269-274.
- [15] R. Harada, T. Nakamura, Y. Takano, Y. Shigeta, *J. Comput. Chem.* **36** (2015) 97-102.
- [16] R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, *J. Comput. Chem.* **37** (2016) 724-738.
- [17] R. Harada, T. Nakamura, Y. Shigeta, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **89** (2016) 1361-1367.
- [18] R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, *J. Comput. Chem.* **38** (2017) 790-797.
- [19] R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, *Chem. Phys. Lett.* **630** (2015) 68-75.
- [20] R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, *J. Comput. Chem.* **36** (2015) 763-772.
- [21] R. Harada, Y. Takano, Y. Shigeta, *J. Chem. Theory Comput.* **12** (2016) 2436-2445.
- [22] R. Harada, Y. Shigeta, *J. Chem. Theory Comput.* **13** (2017) 1411-1423.
- [23] R. Harada, Y. Shigeta, *J. Comput. Chem.* **38** (2017) 1921-1929.
- [24] J. Fujita, R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, H. Matsumura, *J. Struct. Biol.* **198** (2017) 65-73.
- [25] R. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 6155-6173.
- [26] G.M. Torrie, J.P. Valleau, *J. Comput. Phys.* **23** (1977) 187-199.
- [27] G.M. Torrie, J.P. Valleau, *J. Chem. Phys.* **66** (1977) 1402-1408.
- [28] S. Kumar, D. Bouzida, R.H. Swendsen, P.A. Kollman, J.M. Rosenberg, *J. Comput. Chem.* **13** (1992) 1011-1021.
- [29] M. Souaille, B. Roux, *Comput. Phys. Commun.* **135** (2001) 40-57.
- [30] J.S. Hub, B.L. de Groot, D. van der Spoel, *J. Chem. Theory Comput.* **6** (2010) 3713-3720.
- [31] D.P. Tran, K. Takemura, K. Kuwata, A. Kitao, *J. Chem. Theory Comput.* **14** (2018) 404-417.
- [32] C. Dellago, P.G. Bolhuis, P.L. Geissler, *Advan. Chem. Phys.*, **123** (2002) 1-78.
- [33] P.G. Bolhuis, D. Chandler, C. Dellago, P.L. Geissler, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **53** (2002) 291-318.
- [34] L. Maragliano, A. Fischer, E. Vanden-Eijnden, G. Ciccotti, *J. Chem. Phys.* **125** (2006) 024106.
- [35] L. Maragliano, E. Vanden-Eijnden, *Chem. Phys. Lett.* **446** (2007) 182-190.
- [36] R. Harada, A. Kitao, *J. Chem. Theory Comput.* **11** (2015) 5493-5502.

壁面流における持続乱流の発生過程

清水雅樹

大阪大学大学院 基礎工学研究科

Paul Manneville

Ecole Polytechnique

1 はじめに

円管流, 平行平板間流等, 基本的な壁面剪断流の乱流遷移は本質的に亜臨界遷移を示す. 亜臨界遷移は層流解が安定なレイノルズ数にも拘わらず, 乱流も安定に存在できる場合に生じ, 層流に十分な攪乱を与えることで乱流遷移が可能である. 図1に乱流への遷移の分類を示す. 一般的に亜臨界遷移の場合, 乱流への道筋が不明である場合が多く, これまではナビエ-ストークス方程式の非自明解の分岐を用いて, いわゆる力学系のアプローチによる解明が多く試みられてきた. ここ10年程度でのこうした試みは, 様々な壁面流での, 乱流遷移時の局在乱流の構造や, 過渡的乱流の発生過程等を見事に再現し, 定性的な説明に成功してきた. しかし, 実際の遷移レイノルズ数等, 定量的な評価は不可能であり, 高次元力学系における全体像の把握が困難であることが所以である.

こうした点を打開するかのように, 近年の研究によって, 持続乱流の開始が Directed Percolation(DP) 普遍クラス [1] に属する相転移の枠組みによって解釈できることが示されてきた. Avila et al.(2011)[2] は円管流において, 確率過程の観点から, 局在乱流(乱流パフ)の消滅確率と分裂確率が等しくなるレイノルズ数を遷移レイノルズと定義した. この研究結果は, Pomeau の予想 [3] を再燃させることになり, 臨界現象の統計物理を扱う DP と乱流遷移の関連が調べられることになった. Lemoult et al.(2016)[4] は1次元方向にのみ乱流が拡大可能な系において, 乱流遷移が空間1次元の DP 普遍クラスに見事に一致することを示した. また, Sano and Tamai (2016)[5] は平行平板間流の実験によって, 空間2次元の DP と一致することを示した. しかし, 平行平板間流においては, 彼らが示した遷移レイノルズ数よりも十分小さなレイノルズ数で, 安定して存在する局在乱流 [6,7] が観測されており, DP との矛盾が指摘されていた. そこで, 我々は十分な空間領域と積分時間による数値計算を実行し, 乱流遷移における局在乱流と DP との関連を調べ, 壁面乱流の乱流遷移の全貌を解明することを目的とする.

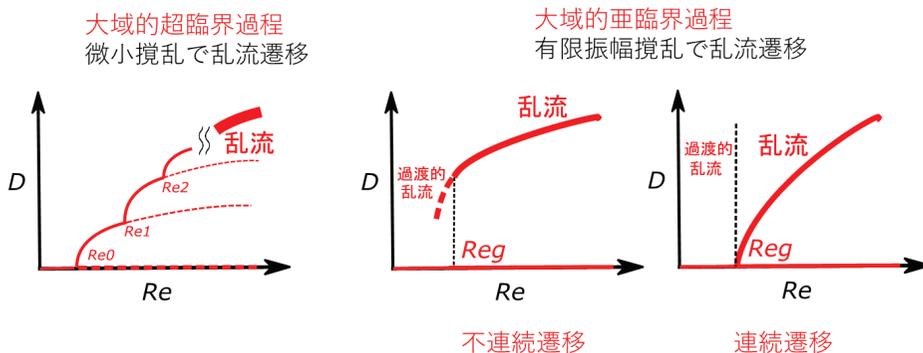


図1 乱流への超臨界遷移と亜臨界遷移. 横軸にレイノルズ数, 縦軸に層流からの距離を表す. 実線は安定状態, 点線は不安定状態を表す.

2 システム・数値計算法

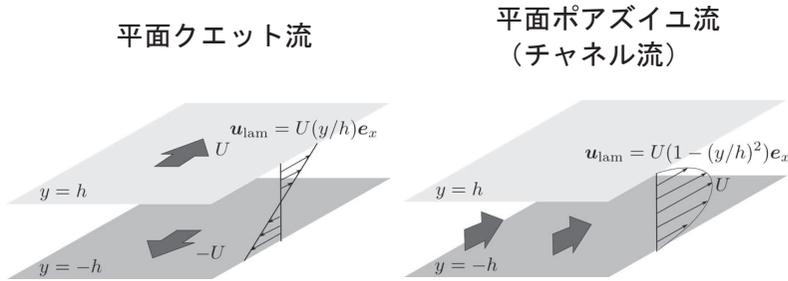


図2 代表的な平行平板間の流れ.

平行平板の間の流れを考える．流れが壁の相対運動によって駆動される場合を平面クエット流，体積力によって駆動される流れをチャネル流と呼ぶ．流れは非圧縮ナビエ-ストークス方程式に従い，壁面では粘着境界条件，壁に平行な2方向には周期境界条件とする．図2にこれらの流れの形状と層流解を示す．図2での速度 U ，距離 h を用いてレイノルズ数は $Re = Uh/\nu$ (ν は動粘性係数) で定義される．以上の系でのパラメータは，レイノルズ数 Re と壁方向の周期 (L_x, L_z) である．平面クエット流では $(L_x, L_z) = (500h, 500h), (1000h, 1000h)$ のいずれかであり，チャネル流では $(L_x, L_z) = (500h, 250h)$ とする．数値計算は，ガラキンスペクトル法を用い，各方向に用いるフーリエ変換のサイズは $(\frac{4608L_x}{1000h}, 64, \frac{9216L_z}{1000h})$ である．この解像度は，平面クエット流での乱流パターンの分岐点の Re シフトが 1% 以下になるように設定している．以下では，長さに h ，速度に U を用いて無次元化した量を用いる．

3 結果

3.1 チャネル流

まず，チャネル流における乱流遷移の結果を述べる．図3にレイノルズの変化によるパターン変化を示す． $Re = 850, 1050$ では斜め 45° 程度に傾いたバンド状の乱流構造が見られ，下流の端に活発な攪乱源を伴う．このバンドを局在乱流バンド (LTB) と呼ぶ． $Re \lesssim 1000$ では LTB の向きはどちらかの方向が優位であり，例えば図3の $Re = 850$ では上向きが優位になっている．系の対称性より，下向きも同様に存在し，どちらに傾くかは初期条件次第である．この対称性の破れは， $Re \simeq 1000$ におけるピッチフォーク分岐によって生じている．図3 $Re = 1050$ では両方の向きが混在していることがわかる．我々はこの分岐近傍の変化を，LTB の生成と消滅の素過程を考慮したモデルを用いて，定性的に説明した．詳細は現在投稿中の論文にまとめているので，それを参照して頂きたい．以降の Re では LTB がネットワークを形成し，段階的に乱流領域が支配的となる．

$Re \simeq 1000$ の分岐点よりも大きい Re では，本質的に2方向に乱流の拡大が可能になる．この変化が乱流遷移と DP を結びつける所以であると考えられる．図4に乱流領域の割合の Re 依存性を示す．実線の曲線との一致は，乱流遷移が DP とよく一致していることを表している． $Re \simeq 1000$ を境に低 Re 側の部分では，乱流は1方向にしか拡大が出来ないため，DP から外れると考えられる．

乱流領域の測定の詳細，その他の重要な分岐については，投稿中の我々の論文を参照して頂きたい．

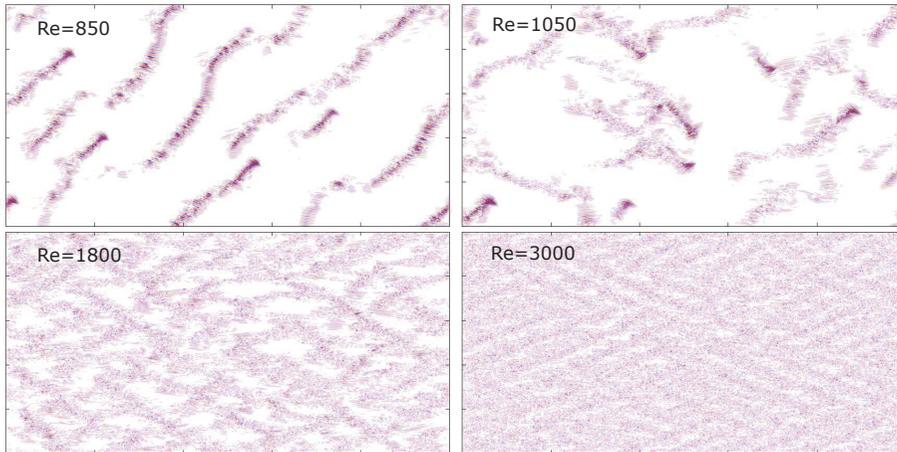


図3 チャンネル流での乱流のパターン変化. カラーは中央面での壁垂直成分を表す. 流れは右方向である.

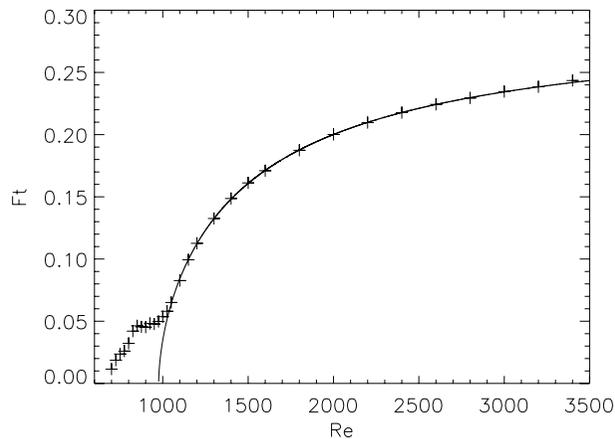


図4 乱流の割合 F_t の Re 依存性. 実線は DP 臨界指数を用いた曲線当てはめである.

3.2 平面クエット流

次に、平面クエット流における乱流遷移の結果を報告する。図5はいくつかのレイノルズ数 Re で、壁に平行な面内での乱流分布を示す。計算領域は平面間半幅を1として、壁面平行方向に 1000×1000 である。 Re と共に乱流領域の割合は増加する。（ $Re \simeq 420$ でパターンなしの乱流に遷移する。）図6は、攪乱エネルギー E_{2d} の Re 依存性を示す。 E_{2d} は主流に垂直な速度成分の2乗和（層流で0）の時間・空間平均量であり、乱流領域が占める空間割合におよそ比例する。 E_{2d} が0.008あたりの乱流は乱流バンドと呼ばれる状態で、この状態は不連続な乱流遷移を示すことが従来から知られている。一方、破線付近の乱流は層流から連続的に遷移し、 $Re_c \simeq 337.5$ を境に乱流領域が現れることが分かる。空間2次元の DP 普遍クラスにおける臨界指数 $\beta = 0.58$ を用いて、 $E_{2d} = A \left(\frac{Re - Re_c}{Re_c} \right)^\beta$ にあてはめた曲線が図中の破線である。サンプル数がまだ不十分ではあるが、大領域での数値計算を行った結果、無秩序な乱流パターンの連続遷移が存在し、DP 普遍クラスに属することが明らかになってきた。

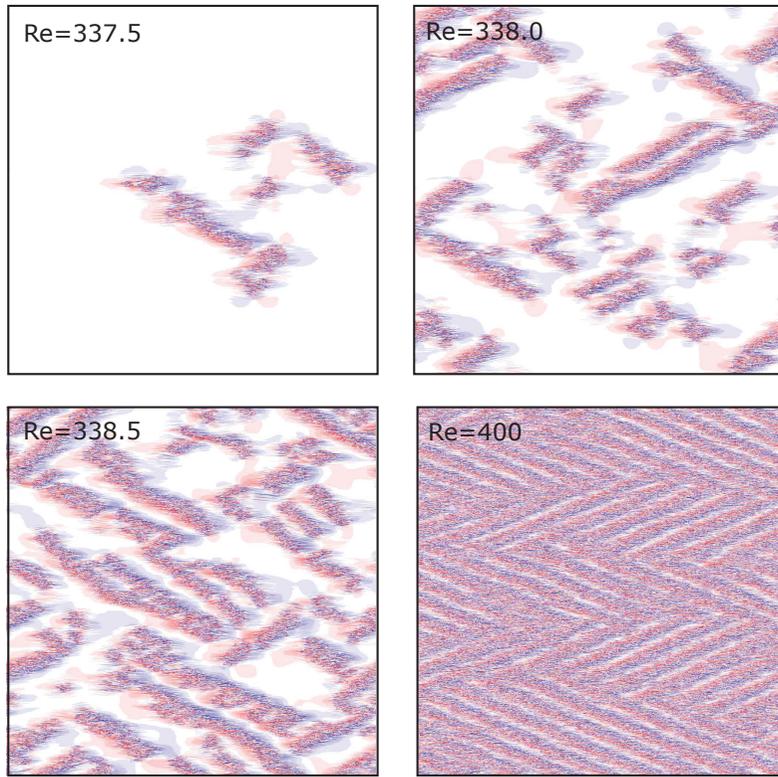


図5 壁面平行面内の乱流分布。カラーは中央面での壁垂直成分を表す。流れは右方向である。

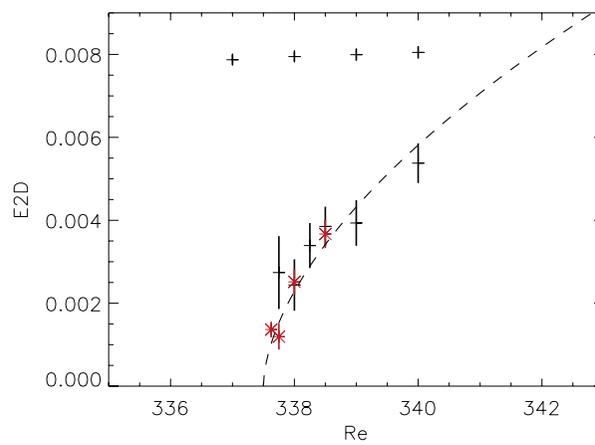


図6 攪乱エネルギーのレイノルズ数依存性。赤シンボルは 1000×1000 、黒シンボルは 500×500 の壁面平行方向のサイズの結果。点線は DP 臨界指数を用いた当てはめ曲線である。

4 結言

チャンネル流, 平面クエット流の大領域かつ長時間の数値計算を行うことで, Re の準静的な変化に対する乱流状態の変化を初めて観測することが出来た. どちらの流れにおいても, 乱流遷移は連続的に生じ, 少なくとも部分的には空間 2 次元の DP 普遍クラスによく一致する. チャンネル流では低 Re で局在乱流バンドが安定に存在し DP との一致が見られないが, 徐々に 2 方向に乱流の拡大が可能になり DP に一致してくる. この境目の分岐を捉えることが出来た. 平面クエット流では, チャンネル流で見られた安定な局在乱流バンドが存在しない. また, 乱流遷移はかなり狭い Re の範囲で生じることが分かった. これらのため, 連続的な乱流遷移を観測するのに, 大きな計算領域を必要とする. 今後, もう少し精度の高い乱流遷移の観測を行うことを目標にしたい.

参考文献

- [1] M. Henkel, H. Hinrichsen and S. Lubeck, Non-equilibrium phase transitions, vol. 1: Absorbing phase transitions Springer (2008).
- [2] K. Avila, D. Moxey, A. de Lozar, M. Avila, D. Barkley, and B. Hof. The onset of turbulence in pipe flow, *Science* **333**, 192 (2011).
- [3] Y. Pomeau. Front motion, metastability and subcritical bifurcations in hydrodynamics. *Physica D* **23**, 3–11 (1986).
- [4] G. Lemoult, L. Shi, K. Avila, S. V. Jalikop, M. Avila, and B. Hof. Directed percolation phase transition to sustained turbulence in Couette flow, *Nature Phys.* **12**, 254 (2016).
- [5] M. Sano and K. Tamai. A universal transition to turbulence in channel flow, *Nature Phys.* **12**, 249 (2016).
- [6] T. Kanazawa, M. Shimizu and G. Kawahara. Extended Abstracts. Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference October 28–30, Okinawa, Japan (2017).
- [7] J.J. Tao, B. Eckhardt and X. M. Xiong, Extended localized structures and the onset of turbulence in channel flow, *Phys. Rev. F* **3**, 011902(R) (2018).

遷音速失速領域における航空エンジンファン翼列の Large Eddy Simulation

立石 敦

東京大学大学院 工学系研究科 航空宇宙工学専攻

1. はじめに

極限的な軽量化と高性能の両立が要求される航空用エンジンファンの開発においては、すべての作動条件で異常な翼振動を起こさないよう空力・構造・振動を同時に評価し進めるコンカレント設計が主流となっている。振動解析においても実現象を高い精度で予測する手法が求められているが、申請者らが過去に実施した、ファンブレードで生じる「失速フラッター」と呼ばれる自励振動の解析では、フラッターの発生範囲が試験よりも大きく算出され、さらなる精度向上が必要とされた[1]。

航空用エンジンのファンブレードは翼相対流入マッハ数が超音速の条件で設計されるため、翼厚さが薄く、前縁の鋭い翼型が使用される。このような翼列が失速フラッターの発生点付近で作動する場合、翼列への相対流入角が大きく、また相対流入マッハ数が音速に近い条件となる。翼振動解析に用いた流体解析結果を詳細に観察した結果、鋭い前縁をもつファン翼の前縁における、亜音速流れ特有の「前縁剥離」現象と、負圧面前縁が超音速付着流となり下流に強い衝撃波と剥離が生じる「遷音速流」の切り替わり過程が、乱流モデルによる解析でうまく捉えられていない可能性があることが、上記ミスマッチの原因であることが考察された。

そこで本研究では、鋭い前縁をもつ航空用エンジンファン翼列が失速点付近で作動する条件において、亜音速・前縁剥離流れと剥離・衝撃波を伴う遷音速流れの切り替わり過程にみられる流体現象を明らかにするため、Large Eddy Simulation (LES)を用いた解析を実施した。解析条件は、亜音速流入条件において前縁で大剥離を起こすインシデンス 10 度について、流入マッハ数を 0.8 から 1.0 までスイープし、衝撃波の形成過程や前縁付近の流れ現象を観察した。

2. 数値解析手法

2. 1. 解析コード概要

全ての解析は、自作の圧縮性 LES コードを用いて実施する。基礎方程式は以下に示す、密度加重平均フィルタの施された圧縮性 Navier-Stokes 方程式である。

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) = \nabla \cdot (\alpha \nabla \bar{\rho}) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \otimes \tilde{\mathbf{v}} + \bar{p}) = \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\tau}_{\text{SGS}}) + \nabla \cdot [\tilde{\mathbf{v}} \otimes (\alpha \nabla \bar{\rho}) + (\beta \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}) \mathbf{I}] \quad (2)$$

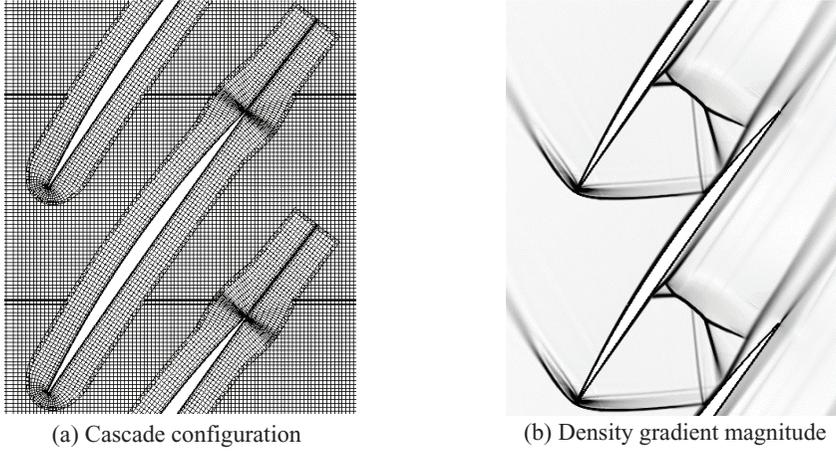


Fig.1. An example of numerical setup and result by overset mesh

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{e}_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{h}_t \tilde{\mathbf{v}}) = \nabla \cdot (\tilde{\tau} \tilde{\mathbf{v}} - \tilde{\mathbf{q}} - \mathbf{q}_{\text{SGS}}) + \nabla \cdot \left[\frac{\tilde{v}^2}{2} \alpha \nabla \tilde{\rho} + (\beta \nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}) \tilde{\mathbf{v}} \right] \quad (3)$$

$$\tilde{e}_t = \tilde{e} + \frac{\tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\mathbf{v}}}{2} + k_{\text{SGS}}, \quad \tilde{h}_t = \tilde{h} + \frac{\tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\mathbf{v}}}{2} + k_{\text{SGS}} \quad (4)$$

$$k_{\text{SGS}} = \frac{\tilde{v} \tilde{v} - \tilde{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\mathbf{v}}}{2}, \quad \tau_{\text{SGS}} = -\tilde{\rho} (\tilde{\mathbf{v}} \otimes \tilde{\mathbf{v}} - \tilde{\mathbf{v}} \otimes \tilde{\mathbf{v}}), \quad \mathbf{q}_{\text{SGS}} = \tilde{\rho} (\tilde{h} \tilde{\mathbf{v}} - \tilde{h} \tilde{\mathbf{v}}) + \tilde{\rho} \frac{\tilde{v} \tilde{v} - \tilde{v} \tilde{v}}{2} \quad (5)$$

これらを一般曲線座標系上で Cell-center 型の有限差分法により離散化する。内挿、差分は非粘性項に Lele の三重対角型コンパクトスキーム[2]、粘性項に陽の中心内挿・差分スキームをそれぞれ用いて計算しており、形式的に4次精度を保ちつつ高波数領域の分散誤差を減らすように係数を調整している。時間進行は二次精度の三点後退差分であり、ADI法による陰解法を3回の内部反復と組み合わせて用いる。また、格子点一点おきの振動により生じる計算不安定を防ぐため、Visbal and Gaitonde の8次精度三重対角ローパスフィルタ[3]（フィルタ係数0.495）を毎時間ステップ終了後に適用する。添字 SGS の付く項はフィルタ操作により現れる項であり、Sub-Grid Scale (SGS) モデルによるモデル化が必要である。本コードでは、前述のローパスフィルタ操作がSGSモデルの役割を担うと期待し、SGSモデルは用いない (Implicit LES)。なお、作動流体は熱的に完全な理想ガスの空気とする。

さらに、強い衝撃波が生じる流れ場を数値粘性のない中心差分スキームで安定に解析するため、Localized Artificial Diffusivity と呼ばれる人工粘性を用いる。衝撃波捕獲項として Kawai and Lele の提案する体積粘性項[4]を、また接触面捕獲項として Terashima らにより提案された密度拡散項[5]をそれぞれ用いており、これらの拡散係数は、強い圧縮部や密度不連続の存在する部分にのみ作用するように設計されている。

境界での擾乱の反射を抑制し準定常状態への収束を早めるため、流入・流出境界条件として、Poinsot and Lele により提案された、特性境界条件に基づく無反射境界条件[6]を用いる。流入境界ではエントロピ、全温度、流れ角が、また流出境界では静圧が弱く固定されている。

以上の数値解析手法におけるスキームの詳細と基礎的な検証は、文献[7]を参照されたい。

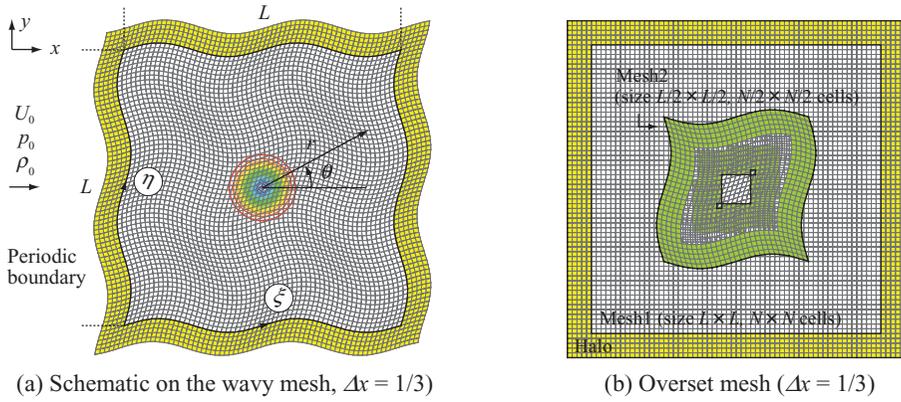


Fig. 2. Schematic of the vortex advection test case

本研究では、翼スタガ角の大きい翼列に対して、格子幅が均一で直交性の良い格子を簡便に生成するため、複数の構造格子をパッチワーク的に接続して流れ場を解析する、重合格子手法を用いる。Fig. 1 に、重合格子による翼列流れ解析の一例を示す。Fig. 1 (a) の解析領域は、翼周りの物体適合格子と背景格子から構成され、これらは流れ場の情報を互いに内挿しあうことで接続されている。Fig. 1 (b) は超音速流入となる翼列流れの解析結果であり、前縁で生じる弧状衝撃波、翼間に生じる衝撃波、剥離領域付近の λ 型衝撃波などがはっきりと解像されていることがわかる。

2. 2. 重合格子の誤差低減: Radial Basis Function による内挿

重合格子を用いた LES で重要となるのが、格子間の内挿によって生じる誤差の低減である。本研究では解像度の高いスキームを用いていることから、内挿の誤差が十分小さくないと内点スキームの性能を十分生かすことができない。格子間の内挿には通常簡便な Trilinear 内挿が用いられるが、予備的な解析により Trilinear 内挿では多大な数値誤差が発生することが判明した。したがって、誤差を低減するため Radial Basis Function (RBF) を用いた新たな内挿手法を考案し、導入した。

RBF を用いた関数 f の内挿は、二点間の距離のみの関数 $\phi(\xi, \xi_i)$ の重み w による線形結合として、一般に Eq. (6) のように書ける。本研究では基底関数には Eq. (7) で表される正規分布を用い、そのパラメタ ϵ は $\epsilon = 0.05$ とした。また、流体解析ではしばしば非常にアスペクト比の大きい格子が現れるため、物理空間中の距離ではなく、計算空間中の距離によって二点間の距離を評価する。 N は内挿に用いられる点の個数であるが、内挿を受ける点からの L_∞ 距離が 3 以内となる点を用いる。このとき、用いるデータ点の最大個数とステンシルは多次元の 6 次精度ラグランジュ補間と同一で、3 次元の場合には $6^3 = 216$ 点となる。

$$f(\xi) = \sum_{i=1}^N \phi(\xi, \xi_i) w_i = \phi(\xi)^T \mathbf{w} \quad (6)$$

$$\phi(\xi, \xi_i) = e^{-(\epsilon|\xi - \xi_i|)^2} \quad (7)$$

RBF によって再構築される関数 f と各データ点が一致する条件より、重み w に関する連立

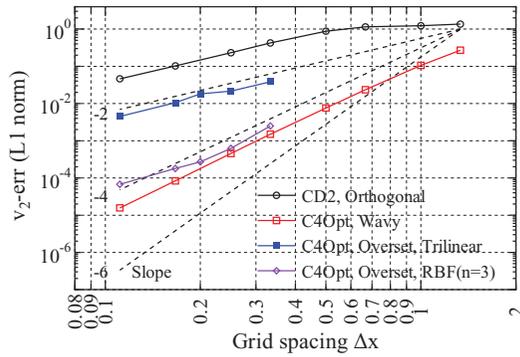


Fig. 3. Numerical error in the vortex advection test case

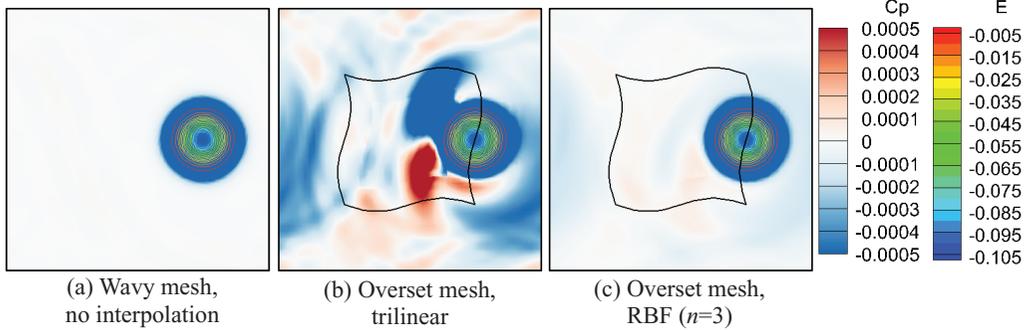


Fig. 4. Behavior of numerical error around the overset boundary (pressure coefficient and entropy, $\Delta x = 1/3$)

一次方程式が Eq. (8) のように求まる。行列を反転させ、最終的にデータ点の値と内挿係数で表した RBF 内挿は Eq. (9) のように書ける。ここに、 $\phi(\xi_0)^T \Phi^{-1}$ は重み係数ベクトル、 \mathbf{f} は全データ点の値からなるベクトルである。

$$\phi(\xi_i, \xi_j) w_j = f(\xi_i) \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, N \quad (8)$$

$$\Phi \mathbf{w} = \mathbf{f}$$

$$f(\xi_0) = \phi(\xi_0)^T \Phi^{-1} \mathbf{f} \quad (9)$$

重み係数は格子と内挿位置によってのみ決まるため、前処理として計算前にこれらを求め、外部データとして保存すればよい。また、RBF はデータ点を部分的に削除できるため、重合格子生成時に無効化されたセルが多少あっても内挿操作を行うことができる。

2. 3. 渦移流問題を用いた内挿手法の評価

RBF 内挿による誤差の低減効果を確認するため、渦の移流問題を用いた評価を行った。Fig. 2 に、渦移流問題の模式図と格子を示す。単一の渦が一樣流中に置かれ、3 方向を周期境界で接続された計算領域（一辺の長さ $L = 20$ ）を移流する。初期条件は Eq. (10) で与えられ、一樣流マッハ数 M_0 、スワール強さ ε_0 、渦のサイズ R_0 はそれぞれ 0.5, 0.5, $4/3$ である。

$$v_1 = V_0 - V_r \exp\left(\frac{r^2}{2R_0^2}\right) \frac{y}{r}, \quad v_2 = V_r \exp\left(\frac{r^2}{2R_0^2}\right) \frac{x}{r}, \quad (10)$$

Table 1. STCF5 specifications in this study

Pitch/Chord	s/c	0.95
Span/Chord	l/c	1.33
Stagger angle	γ	59.3deg
Incidence	i	10deg
Inlet Mach No.	M	0.5, 0.8, 0.9, 1.0
Reynolds No.	Re	300k

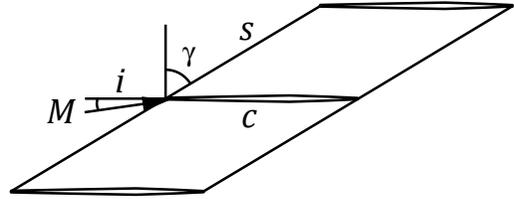


Fig. 5. Schematic of STCF5 cascade

$$p = p_0 - \frac{\rho_0 V_0^2}{2} \exp\left(\frac{r^2}{R_0^2}\right), \quad V_0 = M_0 \sqrt{\gamma \frac{p_0}{\rho_0}}, \quad V_r = \varepsilon_0 V_0$$

渦が解析領域を一周した際の初期条件からの変化を、格子幅に対してプロットすることで誤差の大きさを評価する。比較のため、Fig. 2 (a) のような波状の連続な格子と、Fig. 2 (b) に示す重合格子を用意した。また、スキーム間の比較のため 2 次精度中心差分スキームも用いる。

Fig. 3 に、y 方向速度の誤差の L1 ノルムを示す。波状格子上の 4 次精度最適化スキームの結果は、格子幅の-4 乗に比例して誤差が単調に減少している。一方重合格子を用いた場合には Trilinear 内挿を用いると誤差が急増するが、RBF 内挿を用いると連続な格子の場合とほとんど同様のオーダーの誤差に落ち着いている。

今回の 4 次精度最適化スキームと Trilinear 補間による重合格子の結果は、領域全体を 2 次精度スキームで解くより概ね 1 桁程度低い誤差が得られており、格子間の内挿誤差が悪くてもある程度は内点スキームを改良する意味があるといえるだろう。

Fig. 4 に、渦が重合格子部分を通過する際に生じる誤差を、瞬時の圧力場（圧力係数）により示す。Trilinear 補間では格子の境界から非常に大きな圧力波が生じてしまうが、RBF 補間ではそれが大きく抑制されている。

以上のことから、高解像度スキームを用いた重合格子の解析では、内点スキームの性能を十分活かすために、誤差の小さい内挿手法を選択することが非常に重要であるといえる。

3. ファン翼列モデル

本研究ではファン翼列の解析モデルとして、Fransson と Verdon によってまとめられたターボ機械空力弾性問題の公開テストケースのうちの 1 つである、5th Standard Configuration 翼列 [8]を用いた。翼列モデルの詳細を Table 1 に、概観を Fig. 5 に示す。この翼列は軸流ファンまたは圧縮機の翼端部分を模擬しており、非常に鋭い前縁・後縁をもつ薄翼で構成されている。風洞試験は ONERA (Office National d'Études et de Recherches Aéronautiques) で行われ、広範なインシデンス角 ($i = 2 \sim 12$ deg), 流入マッハ数 ($M = 0.5 \sim 1.0$) について翼面上圧力分布の計測が行われている。

公開されている試験条件は翼弦長に基づくレイノルズ数が $Re = 1.4 \times 10^6$ 以上と非常に大きく、本公募で得られる計算リソースでの解析は難しい。本研究の目的はマッハ数を変化させた際の前縁剥離流れ場の変化を調べることであるから、流入マッハ数 4 ケース (0.5, 0.8, 0.9,

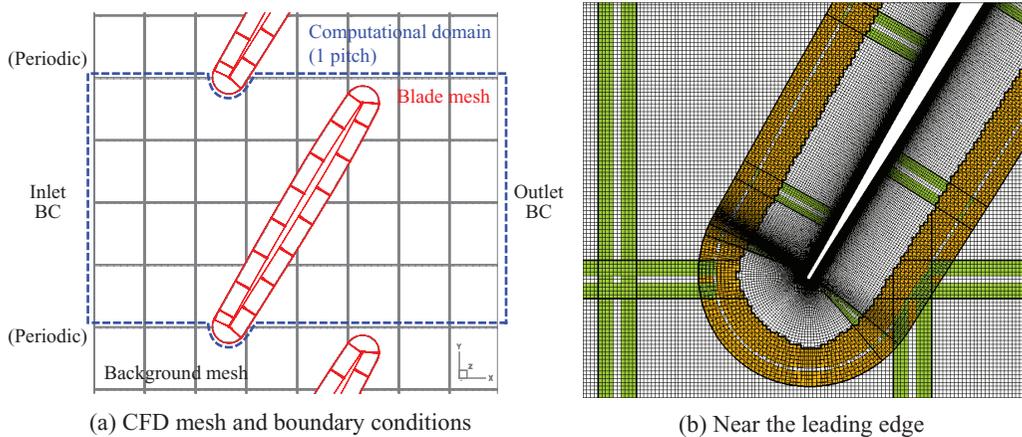


Fig. 6. Computational setup of STCF5 cascade

1.0) を実行できる計算規模となるよう、レイノルズ数を $Re = 3.0 \times 10^5$ まで低下させた。

Fig. 6 に、本研究における解析のセットアップを示す。Fig. 6 (a) は重合格子のレイアウトと境界条件である。格子は背景格子 (611×380×360) と翼格子 (1288×100×360) の2つの構造格子からなり、これらは並列計算のため250個のサブブロックに分割される。各ブロックの5点の袖領域を含め、格子点数は約1億7700万点である。境界条件として、翼面上では粘着壁条件を与える。流入部ではエン트로ピ、全温度、流れ角を、流出境界では静圧を弱く固定し、特性無反射境界条件を併用する。

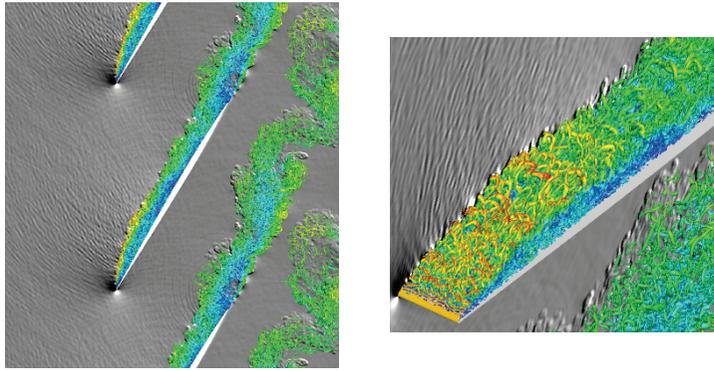
Fig. 6 (b) に、前縁付近の格子の拡大図と、これら格子がどのように接続されているかを示す。緑のセルは同一格子グループ内での通信(背景同士、翼同士)、オレンジのセルは異なる格子グループ間(背景・格子間)での通信が生じる。この通信はMPIによって行われ、事前に算出した重合格子の接続情報と、プロセスが担当するブロック番号のリストから通信テーブルが自動的に決定されるようになっている。

解析は東京大学と筑波大学で共同運用されているOakforest-PACSを用いた。並列化はMPIとOpenMPを併用し、1ケースあたり16ノード、1ノードあたり16プロセス、1プロセスあたり16スレッドの設定での解析を実施した。プログラムのチューニングには極力SIMD演算が用いられるようコンパイラのメッセージを確認したり、手動でOMP SIMDの命令文を書き加えたりしている。

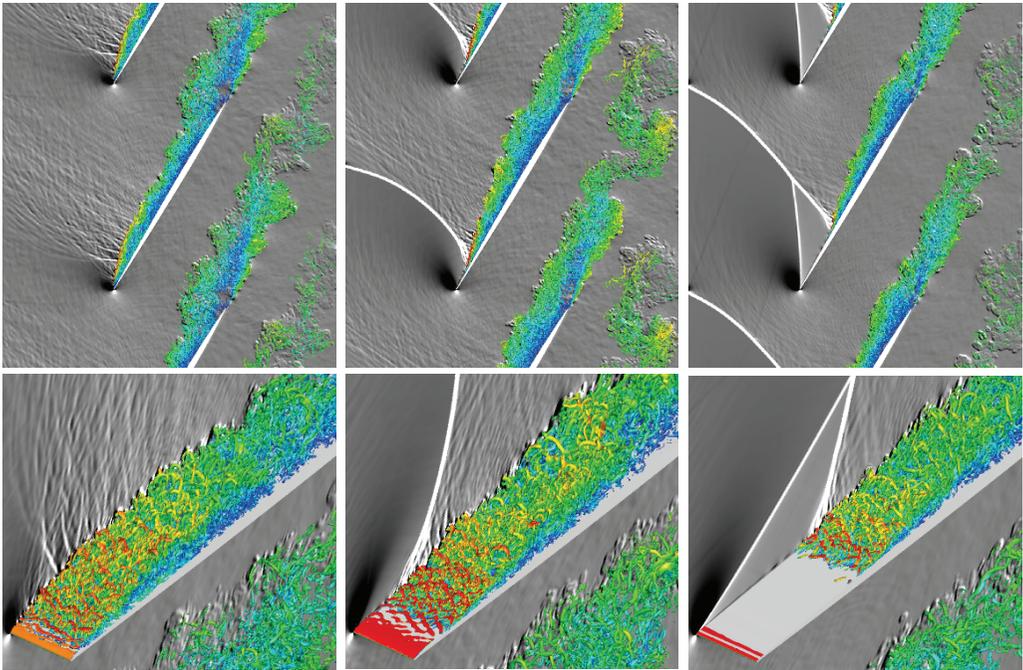
4. 結果

Fig. 7 に、得られた流れ場の概要を示す。(a)から(d)に向かい $M = 0.5$, $M = 0.8$, $M = 0.9$, $M = 1.0$ を狙い条件を設定したケースであるが、キャプションには解析中で落ち着いたマッハ数を示している。特に $M = 1.0$ に近づくとマッハ数の調整が難しく、狙ったマッハ数からずれてしまった。そのため、流入マッハ数の厳密な設定方法の確立は今後の課題である。

Fig. 7 では白黒のコンターで翼弦方向の密度勾配を、また虹色で乱流の渦構造と局所マッハ数を示している。最もマッハ数が低い $M = 0.50$ では、衝撃波のように不連続な密度勾配は流れ場中に確認できず、全域が亜音速となっており、前縁から大きな剥離が生じていることがわか



(a) Mach 0.50



(b) Mach 0.81

(c) Mach 0.93

(d) Mach 1.07

Fig. 7. Effect of Mach number on the flow field. Chordwise density gradient is shown by grayscale contour. The vortical structure is visualized by the positive isosurface of Q criterion colored with local Mach number.

る。 $M = 0.81$ のケースでも $M = 0.50$ と同様に前縁剥離が生じているが、剥離せん断層の上側に強く微細な密度勾配 (Shocklets) が形成されている。

さらにマッハ数を上げて $M = 0.93$ となると、前縁から 10% 翼弦長ほどは翼負圧面上が超音速となり、その下流に強い離脱衝撃波が形成されている。同時に、その足元から大きく剥離している様子が観察できる。この状態の衝撃波や剥離開始位置は非常に不安定であり、解析中に絶えず振動していた。最後に $M = 1.0$ を狙ったケースでは、 $M = 1.07$ と過大なマッハ数が得られてしまった。この条件では、前縁から 30% 翼弦長ほどが超音速領域に包まれ、 $M = 0.93$ のケースと同様に、衝撃波の足元で剥離する。しかし、剥離領域の大きさは $M = 0.93$ よりも小さ

く、衝撃波位置も非常に安定していた。

5. まとめ

本課題では、遷音速翼列流れの大規模 LES を実施することで、マッハ数をスイープした際の前縁剥離消失と、離脱衝撃波の形成過程を観察することができた。本解析に際しては、重合格子の接合部で生じる誤差を低減でき、かつ内挿に用いるデータ点の削除も容易な、RBF を用いた新しい内挿手法も開発できた。さらに、 $M=1$ に近い亜音速流入条件は非常に条件の設定が困難であり、何らかの工夫が必要なことも判明した。今後、コードを改良し、乱流モデルの評価に用いることができるような、より品質の高い解析結果が得られるように解析手法の改良を進めたい。

謝辞

本課題は東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」平成 29 年度（後期）の課題として行われたものである。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] Tateishi, A., Watanabe, T., Himeno, T., Aotsuka, M., and Murooka, T., “Verification and Application of Fluid-Structure Interaction and a Modal Identification Technique to Cascade Flutter Simulations”, *International Journal of Gas Turbine, Propulsion and Power Systems*, Vol. 8, No. 3, pp.20-28, 2016.
- [2] Lele, S. K., “Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution”, *Journal of Computational Physics*, 103, pp. 16-42, 1992.
- [3] Visbal, M. R. and Gaitonde, D.V., “On the Use of High-order Finite-Difference Schemes on Curvilinear and Deforming Meshes”, *Journal of Computational Physics*, 181, pp. 155-185, 2002.
- [4] Kawai, S. and Lele, S. K., “Localized Artificial Diffusivity Scheme for Discontinuity Capturing on Curvilinear Meshes”, *Journal of Computational Physics*, 227, pp. 9498-9526, 2008.
- [5] Terashima, H., Kawai, S. and Koshi, M., “Consistent Numerical Diffusion Terms for Simulating Compressible Multi-component Flows”, *Computers & Fluids*, 88, pp. 484-495, 2013.
- [6] Poinso, T. J. and Lele, S. K., “Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows”, *Journal of Computational Physics*, 101, pp.104-129, 1992.
- [7] Tateishi, A., Watanabe, T., and Himeno, T., “Development and Validation of a Compressible Large-Eddy Simulation Code with Overset Mesh Method”, *ASME Paper GT2017-64195*, 2017.
- [8] Fransson, T. H. and Verdon, J. M., “Updated Report on Standard Configurations for Unsteady Flow Through Vibrating Axial-Flow Turbomachine Cascades: Status as of July 1991”, Technical Report, Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden and United Technologies Research Center, East Hartford, Connecticut, USA, URL: [http://www.energy.kth.se/proj/projects/Markus Joecker/STCF/](http://www.energy.kth.se/proj/projects/Markus_Joecker/STCF/), 1992.

磁気回転不安定性によるブラックホール降着流の角運動量輸送機構の解明

町田 真美

九州大学大学院理学研究院物理学部門

川島 朋尚

自然科学研究機構国立天文台理論研究部

工藤 祐己

鹿児島大学理学部

1. はじめに

はくちょう座 X-1 などの X 線連星や活動銀河中心核で観測される莫大なエネルギー放射は、中心のブラックホールの回りに形成される降着円盤におけるエネルギー解放によって説明することができる。降着円盤のエネルギー源は回転するプラズマが角運動量を失って中心天体に落下する際に解放する重力エネルギーであり、角運動量輸送は磁気回転不安定性(MRI, Balbus & Hawley 1991)によって生成される磁気乱流が担っていると考えられている。すなわち、MRI は降着円盤におけるダイナミクスとエネルギー変換メカニズムの本質を担っていると考えられる。しかし依然として MRI 駆動ダイナモによる磁場増幅と降着円盤システム全体に与える影響については十分に理解されていない。その原因はシミュレーションの空間解像度にある。

MRI による角運動量輸送に関する数値実験は、円盤の一部を取り出した局所計算(Hawley et al. 1995, Matsumoto et al. 1995, Sano et al. 2004, Sorathia et al. 2012 他)、降着円盤全体を計算領域に含む非相対論的な大局的計算(Matsumoto et al. 1999, Hawley et al. 2000, Machida et al. 2000 他)や相対論的な大局的計算(Gammie et al. 2003, De Villiers et al. 2005, McKinney et al. 2012 他)で多数行われてきているが、MRI の成長率が最大になる波長を十分に解像できる領域は非常に限られていた。そのため、高空間分解能が担保できる降着円盤の一部を取り出す局所計算において、MRI の飽和を調べる研究が続いた。局所計算において、鉛直方向重力を考慮しない場合、空間解像度を高くすると局所的な乱流によって磁場が散逸してしまうこと、そのために MRI の最大成長波長を十分分解できる解像度であっても MRI によって生成される磁場強度の値は飽和しないことが報告された(Sano et al. 2004 他)。その後の多数の研究により、流体粘性と磁気年生の比である磁気ブランドル数が飽和値に大きな影響を与える事が指摘されている(Minoshima et al. 2015)。一方、鉛直方向重力を考慮した局所計算の場合、流体粘性を考慮せずとも磁場が飽和する事が知られている(Simon et al. 2011 他)。これらの研究は、磁場生成と維持は、系を特徴付ける典型的な長さが必須であることを示唆する。

降着円盤全体を計算領域に含む大局的計算は、局所計算ほどの高空間分解を達成できないため、鉛直重力を考慮した数値計算であっても、解像度依存性の問題が残っている。Hawley et al. (2013)は、一般相対性理論の効果を模した Pseudo-Newtonian ポテンシャルを用いて降着円盤内の MRI の乱流に関する収束テストを行った。この論文では $(N_r, N_\phi, N_z)=(512, 128, 512)$ メッシュ($dr=0.078r_s$ (r_s はシュバルツシルト半径)、 $d\phi=0.0123[\text{rad}]$)を最高解像度とし、それ以下の空間解像度のシミュレーション結果と比較している。その結果、角運動量輸送パラメータ α に相当する磁気ストレスとガス圧の比は、メッシュ数への依存性はあまりみられない事が示された。しかし、質量降着率や鉛直磁場と方位角方向磁場のエネルギー比などは、最高解像度の結果とそれより少ないメッシュ数で異なっており、収束しているかは未だ判然としない。また、彼らの計算では、方位角方向の計算領域が $0 < \phi < \pi/2$ であるために、最も効率率的に角運動量輸送を行う事ができる方位角方向波数 $m=1, 2$ のモードを追う事ができない。

加えて近年、同様の乱流状の構造を扱う問題である太陽の対流層研究において極めて重要な発見があった。数値計算の分解能を上げると小スケールの乱流運動が卓越して磁場が散逸するが、さらに解像度を上げると小スケール乱流によって増幅された磁場が乱流運動を抑制して実効的な粘性を高め、大スケールの磁場構造が生成、維持されることが明らかになったのである(Hotta et al. 2016)。差動回転円盤における MRI の成長と円盤ダイナモについても高解像度の計算を行えば同様に小スケールの乱流から大局構造を誘起する事が期待されるが、これまでの大局的な計算において、そのような兆候は見られない。このことは、これまでよりも高い空間解像度で降着円盤シミュレーションを実施することの必要性を強く示唆している。

2. 数値計算手法と初期条件

本課題は、降着円盤全体を計算領域に含む大局的な 3 次元磁気流体数値実験を行っている。基礎方程式は散逸性の磁気流体方程式を用い、太陽フレアの数値計算で用いられる異常抵抗モデルを採用している(Yokoyama & Shibata 1994)。数値計算コードは、宇宙プラズマ用の電磁流体公開コードである CANS+の円筒座標系コードを用いている(Matsumoto et al. 2018)。CANS+では、HLLD 近似リーマン解法を用いた有限体積法を採用し、Flux の補間に MP5 法を適用する事で空間 5 次精度を担保している。また、時間方向の積分は、TVD ルンゲクッタ法を用いて 3 次精度を保証している。磁場のガウスの法則を保つために、9wave 法を用いた divB クリーニングを行っている。CANS+は MPI と openMP のハイブリッド並列を実装しており、本課題でもハイブリッド並列で数値計算を行っている。

数値計算の初期条件として、重力・遠心力・ガス圧勾配・磁気圧勾配が釣り合った角運動量一定の回転平衡トーラスを仮定している(Okada et al. 1996)。ここでは、トーラスは $15r_s$ に圧力中心を持ち、磁場は、初期状態では方位角方向成分のみを持つとする。このトーラスを、静止した希薄なハローの中に置く。中心ブラックホールの重力ポテンシャルは、擬ニュートンポテンシャルを用いる事で一般相対論的效果を近似している。ガスは断熱を仮定しており、自己重力は無視している。このような平衡状態に対して、速度に摂動を与えて、その時間進化を追っている。本課題では、規格化のユニットとして、圧力中心の位置での半径、回転速度を採用している。そのため、 $15r_s$ を規格化半径、その位置でのケプラー回転速度を規格化速度としている。初期のプラズマ β (ガス圧と磁気圧の比)は 100 を仮定し、規格化半径でのコロナの密度は

トーラスのガス密度の 10^{-4} としている。

本研究課題では、磁気エネルギーや質量降着率に対する方位角方向の解像度の依存性を調べる。この数値計算は、円筒座標系を用いているため、特に方位角方向の空間解像度が動径方向、鉛直方向に比べて低くなる傾向にある。そこで、本課題では、特に方位角方向の空間解像度の違いが結果にどのように影響を与えるかを調べる。計算領域は動径方向、鉛直方向にそれぞれ $130r_s$ 、方位角方向を 2π としている。メッシュ数は、 $(N_r, N_\phi, N_z) = (256, N_\phi, 512)$ とし、 N_ϕ のメッシュ数により、低解像度(32)、中解像度(64)、高解像度(128)の3モデルを検討する。

3. 結果

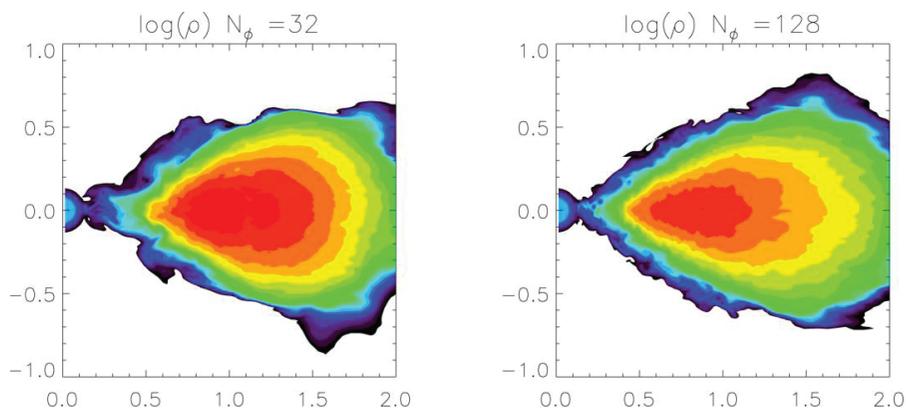


図 1：密度断面図

r-z 面の密度断面図を示す。左は低解像度モデル、右は高解像度モデル

図 1 に回転軸を含む面 (r-z 面) の密度断面図を示す。この結果は、初期 t-トーラスの圧力中心 ($15r_s$) で約 19 回転した時の結果である。質量降着はトーラス表面から生じやすい傾向にあるため、降着ガスと静水圧平衡コロナとの間で速度シアが生じる。このため、一般にトーラス表面ではケルビン・ヘルムホルツ不安定性が成長する。本課題では、動径方向の空間解像度は固定されているが、高解像度モデルでは、トーラス表面のケルビン・ヘルムホルツ不安定による揺らぎは、より短波長の成分が成長しているのがわかる。一方、低解像度モデルは、大きな揺らぎとなっているため、中心近傍の降着ガスに上下非対称性が現れている。さらに、動径方向外側に膨張する様が見て取れる。密度断面図の高密度領域の分布を見ると、高解像度モデルの結果では、高密度領域が内側に移動していることがわかる。これは、低解像度モデルよりも早い質量降着が生じていることを示唆している。トーラスガスの質量降着は、MRI による角運動量の外向きの輸送に起因している。密度断面図から、予想通り方位角方向解像度の違いによって、角運動量輸送率に違いが生じることが推測される。

図 2 に質量降着率の時間進化を示す。ここで、質量降着率は鉛直方向に $z = \pm 7.5r_s$ の範囲を通過した質量で評価している。左は、半径 $r = 0.26r_0 = 4r_s$ 、右は半径 $r = 0.6r_0 = 9r_s$ の円筒面を通過する質量降着率である。黒線、破線、グレー線はそれぞれ低解像度モデル、中解像度モデル、高解像度モデルの結果を示している。横軸は、規格化半径の位置での回転数を示す。

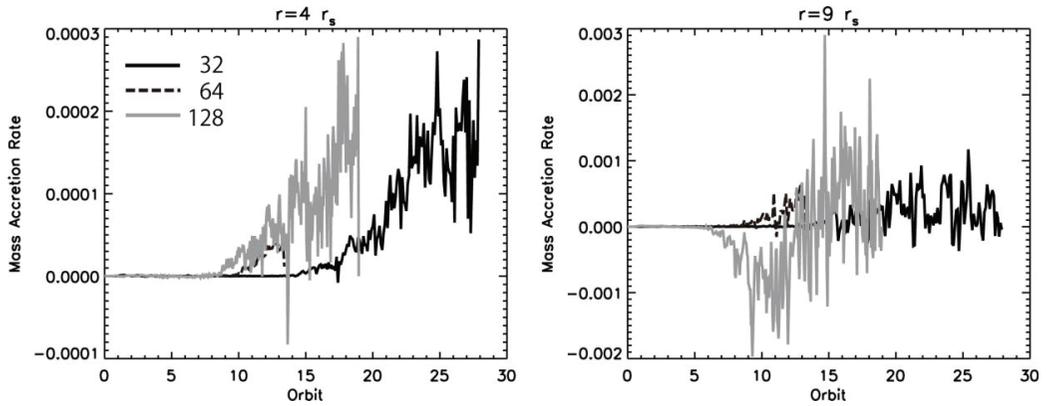


図 2 : 質量降着率の時間発展

質量降着率の時間進化を示す。横軸は規格化半径の位置での回転数、縦軸は質量降着率である。黒線が低解像度モデル、破線が中解像度モデル、グレーが高解像度モデルの結果を示している。質量降着率は、高さが赤道面対称に $7r_s$ の領域を通過する流束で測定しており、左が $r=4r_s$ 、右は $r=9r_s$ の面を通過する正味の質量降着率に相当する。

図 2 左からわかるように、図 1 の密度断面図から想定された通り、高解像度モデルは、中心に近い領域で、早い質量降着率の立ち上がり見られ、中解像度、低解像度と質量降着の開始が遅れていることが見て取れる。一方、図 2 右では、高解像度モデルは、10 回転までの間は、正味の値では外向きの角運動量輸送をしており中心に落下するものはごく一部である事がわかる。しかし、中解像度、低解像度の結果は、そのような正味外向きに輸送される傾向は見られず、遠方から順に落下している。今回の数値計算で得られた結果の範囲では、高解像度モデル、中解像度モデルとも質量降着は未だ準定常状態にいたって無いため、さらに数値計算を進める必要がある。しかし、低解像度モデルでは、25 回転以降、準定常状態となっている。

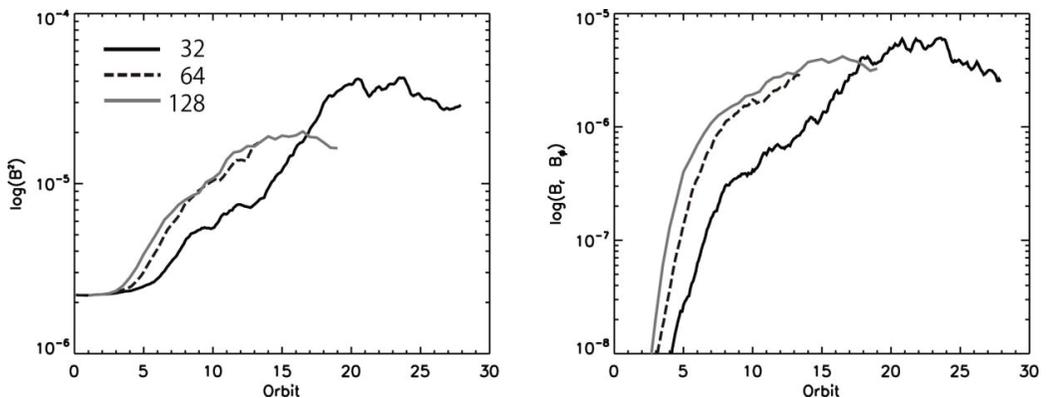


図 3 : 磁気エネルギーの時間発展

体積平均した磁気エネルギー(左)と Maxwell 応力の非対角成分(右)の時間発展を示す。平均領域は、 $9 < r < 13$, $|z| < 5$, $0 < \phi < 2\pi$ の範囲である。実線、破線、点線はそれぞれ高解像度モデル、中解像度モデル、低解像度モデルに相当する。

図 3(左)に磁気エネルギーの時間進化の図を示す。実線、破線、グレーは低解像度モデル、中解像度モデル、高解像度モデルの結果である。磁気エネルギーは動径方向に $9 < r < 13$ 、鉛直方向に対称に $|z| < 5$ 、方位角方向に 2π の範囲で平均化している。その結果、高解像度モデルの方が、立ち上がり早く、短時間で磁場が生成され始めている事がわかる。MRI は小さな波数であっても成長可能であるため、小スケールの摂動をとらえる事ができる高解像度モデルが早く成長を始める。線形段階においては、成長率に相当する傾きは高解像度、中解像度はほぼ等しい値を示すが、低解像度は他のモデルと比べ成長率が低い傾向にある。しかし、非線形成長フェーズに入ると、高解像度モデルの方が早く散逸し、飽和値が小さくなる事が示された。この結果は、太陽の対流層の数値計算で示される空間解像度を中程度によくすると、小スケール乱流によって磁場が散逸し、大局的な磁場を生成しにくくなる傾向と一致している。高解像度モデルの質量降着率は準定常状態か否かが判別できなかったが、磁気エネルギーの時間進化をみると、高解像度モデルも準定常状態に達しているとみられる。図 3(右)は、Maxwell 応力の非対角成分の時間進化を示す。これは、ガス圧で規格化すると角運動量輸送率に相当する。準定常状態に達したときには、磁気エネルギー同様、低解像度の方が高い値を示している。しかし、低解像度の場合の磁気エネルギーの飽和値が、高解像度の結果の 2 倍であるのに対して、Maxwell 応力の非対角成分は、1.5 倍程度の差となっている。これは、各成分の最大性長波長が、空間解像度に線形に比例していないことを示唆している。

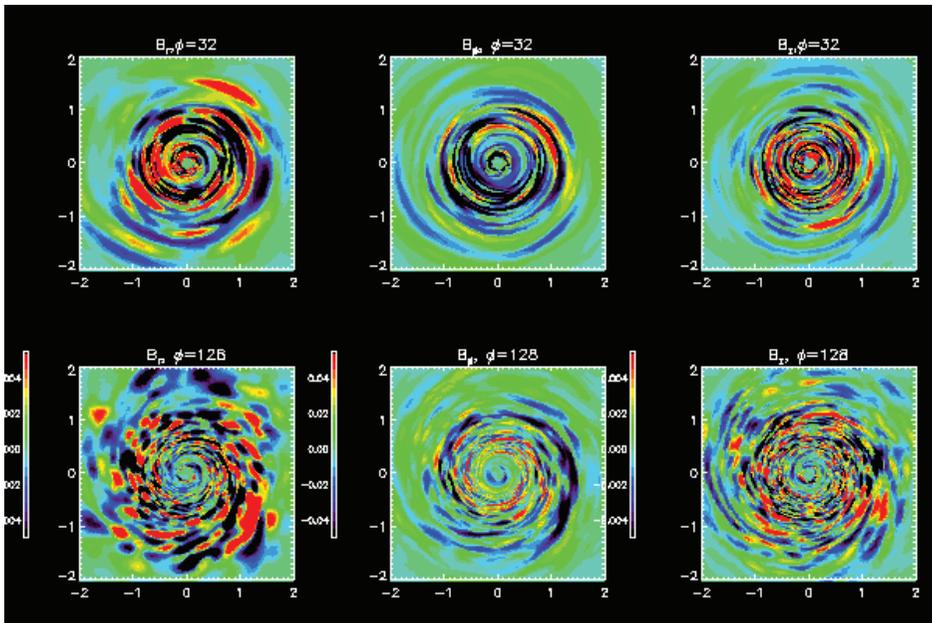


図 4 : 赤道面磁場分布

時刻 $t=180t_0$ での赤道面上の磁場分布。カラスケールは磁場の向きと大きさを示す。上段は低解像度モデル、下段は高解像度モデルの結果を示す。左から順に、動径方向成分、方位角方向成分、鉛直方向成分の結果を示す。

図 4 に赤道面上の磁場分布を示す。上段は低解像度モデル、下段は高解像度モデルである。

低解像度の結果は、3成分の方位角方向波数が同程度であるのに対して、高解像度モデルでは、動径方向、鉛直方向成分により細かな構造が表れている一方、方位角方向波数は8程度で空間分解能への依存性が低いことがわかる。この結果が、磁気エネルギーとMaxwell応力非対角成分の解像度依存性の違いに現れている。この課題では、方位角方向の解像度のみを変化させているが、鉛直方向、動径方向波数に対しても高空間分解の結果では、高周波数が表れている。以上の結果から、空間解像度を上げると、小スケールの乱流を生成し、局所的に散逸するために磁気エネルギー、質量降着率ともに、飽和値は低下する傾向にある事がわかる。

4. まとめ

降着円盤で成長する磁気回転不安定性の空間解像度依存性を調べるために、散逸性磁気流体数値計算を行った。本研究課題においては、先行研究において計算コストがかかることから最も空間解像度の低く設定されていた方位角方向のメッシュ数に着目し、大局的な降着円盤における質量降着率、磁気エネルギーの増幅と飽和、物理量の空間分布の方位角方向の空間解像度依存性を調べた。その結果、空間解像度が高いモデルの磁気エネルギーは、早く増幅を開始するが、磁気エネルギーの飽和値は低くなる傾向にある事がわかった。これは、高解像度とすることで、小スケールの乱流を追う事が可能になるため、小スケールでの磁気散逸が優勢となり結果的に大局的な強い磁場構造ができにくい事を示している。この傾向はHotta et al. (2016)における太陽ダイナモと似ており、より空間解像度が高い計算を実施すれば小スケールの乱流が形成されつつも再び大局的な磁場も形成されることが予想され、降着円盤におけるダイナモ機構の本質に迫れると期待される。近年急速な発展を見せた太陽ダイナモ計算との類似性に着目することで降着円盤における磁場増幅の空間解像度依存性を調べた数値実験は本研究が初めてであり、今回の結果を踏まえた大規模数値実験を「京」で開始したところである。

また、今回の数値実験では、方位角方向の空間分解能のみを細かくし、鉛直方向、動径方向は固定している。しかし、鉛直方向の乱流構造も方位角方向の空間分布と相関し、方位角方向に小スケールを追う事のできる場合には、動径方向・鉛直方向にも小スケールの乱流を生成する事もわかった。そのため、準定常状態に達した後は、角運動量輸送率が低下し、質量降着率は高解像度モデルのほうが低くなりそうである。この傾向は、円盤の一部を取り出す局所的な計算と似た傾向にある。しかし、さらに大規模な数値実験を実施すれば、高解像度な場合に大局的磁場が形成されることで質量降着率が高くなる可能性があり、降着円盤におけるダイナミクスとエネルギー開放率に関する新たな知見が得られると期待される。

謝辞

本研究課題は、平成29年度東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」(前期・後期)の支援の元進められた。数値計算はOakforest-PACSを用いて行っている。本研究の成果をもとに、平成30年度HPCI利用研究課題において、京の通年の利用が採択された。ここに謝意を表する。

参考文献

- De Villers, J.-P., Hawley, J. F., Krolik, J. H., & Hirose, S. 2005, ApJ, 620, 878
- Gammie, C. F., McKinney, J. C., & Toth, G. 2003, ApJ, 589, 444

- Hawley, J. F., Gammie, C. F., & Balbus, S. A. 1995, ApJ, 440, 742
- Hawley, J. F. 2000, ApJ, 528, 462
- Hawley, J. F., Richers, S. A., Guan, X., & Krolik, J. H. 2013, ApJ, 772, 102
- Hotta, H., Rempel, M., & Yokoyama, T. 2016, Science, 351, 1427
- Machida, M., Hayashi, M., & Matsumoto, R. 2000, ApJ, 532, L67
- Matsumoto, R., & Tajima, T. 1995, ApJ, 445, 767
- Matsumoto, R. 1999, in *Astrophysics and Space Science Library*, Vol. 240, *Numerical Astrophysics*, ed. S. M. Miyama et al. (Dordrecht: Springer Science), 195
- Matsumoto, Y. et al. submitted to PASJ
- McKinney, J. C., Tchekhovskoy, A., & Blandford, R. D. 2012, MNRAS, 423, 3083
- Minoshima, T., Hirose, S., & Sano, T. 2015, ApJ, 445, 767
- Okada, R., Fukue, J., & Matsumoto, R. 1989, PASJ, 41, 133
- Sano, T., Inutsuka, S., Turner, N. J., & Stone, J. M. 2004, ApJ, 808, 54
- Simon, J. B., Hawley, J. F., & Beckwith, K. 2011, ApJ, 730, 94
- Sorathia, K. A., Reynolds, C. S., Stone, J. M., & Beckwith, K. 2012, ApJ, 749, 189
- Yokoyama, T., & Shibata, K. 1994, ApJ, 436, L197

ハイブリッドクラスタシステムにおける

通信削減タイル QR 分解実装

高柳雅俊

山梨大学大学院情報機能システム工学専攻

1. はじめに

高い性能対消費電力比を有する GPU を汎用計算に用いる GPU コンピューティングが一般的になりつつある。先日発表された Top500[1]においても、多くのスーパーコンピュータで GPU が採用されている。そのため、このような並列計算環境を支援するためのソフトウェアが強く求められている。科学技術計算の様々な場面で使用される行列計算ライブラリを例に挙げると、CPU/GPU ヘテロジニアスシステム向けに開発された MAGMA ライブラリ[2]があるが、上述した並列計算環境向けのライブラリは筆者の知る限り存在しない。

本研究では、基本的な密行列計算の 1 つである QR 分解のヘテロジニアスクラスタシステム上での実装を行う。QR 分解は、特異値分解や固有値分解で用いられ、データマイニングや画像解析など多くの分野で利用される数値計算である。これらの問題は QR 分解による前処理、後処理が計算時間の大部分を占めるため、行列分解の高速化を行うことが計算全体の高速化につながる。行列分解の高速化手法としてタイルアルゴリズムが考案されている[3, 4]。タイルアルゴリズムによる密行列の行列分解は、並列実行可能な細粒度のタスクを多数生成し、これらを非同期に実行することで、並列計算資源への負荷不均衡を減らすことが可能である。

一方、分散メモリ環境においては通信回数を削減することが重要な課題となるが、QR 分解に対しては CAQR アルゴリズムが提案されている[5]。

筆者は CPU/GPU クラスタシステムにタイル CAQR アルゴリズムを、OpenMP 4.0 の task 構文による動的タスクスケジューリングと、MPI, cuBLAS を用いて実装し高速化を行った。本研究では、その実装の詳細と性能評価について報告する。

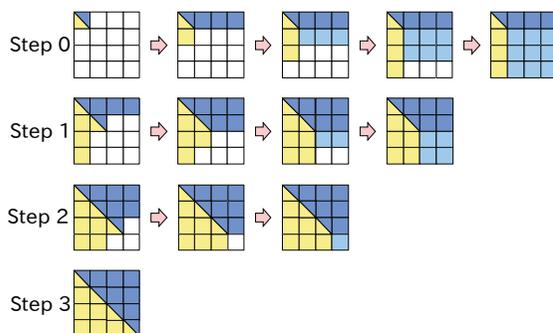
2. QR 分解

本稿では、 $m \times n$ ($m \geq n$) の行列 A に対する QR 分解を考える。QR 分解の計算アルゴリズムには、グラム・シュミットの直交化や、ギブンス回転、ハウスホルダー変換を用いたものがあるが、数値的に安定なハウスホルダーQRを用いる。QR 分解は固有値問題や特異値分解の前処理などに用いられており、数値線形代数計算の重要なアルゴリズムである。QR 分解を含む行列分解の効率的な手法として、ブロックアルゴリズムやタイルアルゴリズムが提案されている。本研究ではタイルアルゴリズムを用いる。

2. 1. タイルアルゴリズム

タイルアルゴリズムでは、行列を小行列 (タイル) に分割し、カーネルと呼ばれるタスクを 1 または 2 タイルごとに実行し、各タイルの分解、更新を行う (図 1)。適切なタイルサイズを選択することで、並列計算資源に対して適切な量のタスクの生成が可能である。また、各タス

クを非同期に実行することで、並列計算資源を可能な限り稼働状態にできるため、高速な実行が期待できる。



第1図：タイルアルゴリズム

タイル QR 分解では次の4種類のカーネルが使用される。ここで、行列 $A(m \times n)$ をタイルサイズ $b \times b$ で分割したとき、行列 A は $p \times q$ 個のタイル $A_{i,j}$, ($i = 0, 1, \dots, p-1$), ($j = 0, 1, \dots, q-1$)からなる。ただし、 $p = \lceil m/b \rceil$, $q = \lceil n/b \rceil$ とする。

- GEQRT

対角タイル $A_{k,k}$ ($k = 0, 1, \dots, q-1$)に対してQR分解を行い、上三角行列 $R_{k,k}$ を生成する。このとき、直交行列 Q は陽に生成されず、compact-WY法[6]により単位下三角行列 $V_{k,k}$ と上三角行列 $T_{k,k}$ の2つの変換行列が生成される。

$$R_{k,k} \leftarrow (I - V_{k,k} T_{k,k}^T V_{k,k}^T) A_{k,k}$$

- TSQRT

GEQRTで生成された上三角行列 $R_{k,k}$ ($k = 0, 1, \dots, q-1$)と、その下のタイル $A_{i,k}$ ($k < i < p$)の2つを組にしてQR分解を行い、 $R_{k,k}$ の更新を行う。このとき、変換行列として正方行列 $V_{i,k}$ と上三角行列 $T_{i,k}$ が生成される。

$$\begin{pmatrix} R_{k,k} \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow \left(I - \begin{pmatrix} I \\ V_{i,k} \end{pmatrix} T_{i,k}^T (I \quad V_{i,k}^T) \right) \begin{pmatrix} R_{k,k} \\ A_{i,k} \end{pmatrix}$$

- LARFB

GEQRTカーネルで生成された変換行列 $V_{k,k}$, $T_{k,k}$ を、同一列の右タイル $A_{k,j}$ ($k < j < q$)に適用して後続行列の更新を行う。

$$A_{k,j} \leftarrow (I - V_{k,k} T_{k,k}^T V_{k,k}^T) A_{k,j}$$

- SSRFB

TSQRTカーネルによって生成された変換行列 $V_{i,k}$, $T_{i,k}$ をその右タイルの二組 $A_{k,j}$, $A_{i,j}$ ($k < i < p$, $k < j < q$)に適用して更新を行う。

$$\begin{pmatrix} A_{k,j} \\ A_{i,j} \end{pmatrix} \leftarrow \left(I - \begin{pmatrix} I \\ V_{i,k} \end{pmatrix} T_{i,k}^T (I \quad V_{i,k}^T) \right) \begin{pmatrix} A_{k,j} \\ A_{i,j} \end{pmatrix}$$

4種類のカーネルのうち、GEQRT, TSQRTを分解カーネル、LARFB, SSRFBを更新カーネルと呼ぶ。4つのカーネルを繰り返し適用する事でタイルQR分解を行う。

これら4種類のカーネルには実行時に依存関係が存在する。タイルの上から下を i 方向、左から右を j 方向、図1のStepを k 方向とする。同一タイル列の分解または更新カーネルは同時に1カーネルしか実行できない。この i 方向の逐次性を i 方向依存とよぶ。同一タイル行に対する更

新カーネルは、最左列の分解カーネル実行後、変換行列が生成された後ならば並列に同時実行可能である。これを j 方向依存とよぶ。第 k ステップにおけるすべてのカーネルは、適用するタイルの1つ前のステップ $k-1$ のカーネルが終了していなければ実行できない。この依存関係を k 方向依存とよぶ。この3種類の依存関係が解消されたタスクから実行可能である。

本研究では、OpenMP 4.0 から導入された task 構文の depend 節を用いて動的スケジューリングの実装を行う。depend 節では依存関係を以下の3種類で記述する。

- in 指定されたデータが入力先
- out 指定されたデータが出力先
- inout 指定されたデータが入出力先

データ依存のある引数を指定することで、そのデータ依存が解消されたタスクから実行される。以下にタイル QR 分解の動的スケジューリング実装の擬似コードを示す。

```

for k=0 to q-1 do
  #pragma omp task depend (inout:Ak,k) depend (out:Vk,k, Tk,k)
  (Rk,k, Vk,k, Tk,k) ← GEQRT(Ak,k)
  for j=k+1 to q-1 do
    #pragma omp task depend (inout:Ak,j) depend (in:Vk,k, Tk,k)
    (Ak,j) ← LARFB(Ak,j, Tk,k, Vk,k)
  end for
  for i=k+1 to p-1 do
    #pragma omp task depend (inout:Rk,k, Ai,k) depend (out:Vi,k, Ti,k)
    (Rk,k, Ti,k, Vi,k) ← TSQRT(Rk,k, Ai,k)
    for j=k+1 to q-1 do
      #pragma omp task depend (inout:Ak,j, Ai,j) depend (in:Vi,k, Ti,k)
      (Ak,j, Ai,j) ← SSRFB(Ak,j, Ai,j, Ti,k, Vi,k)
    end for
  end for
end for

```

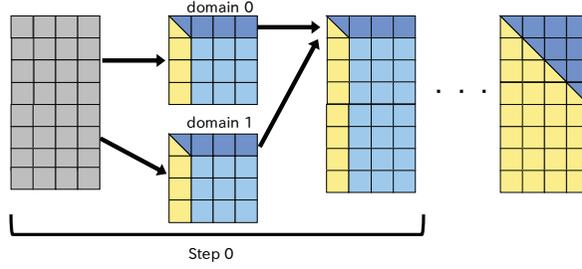
3. 通信削減型アルゴリズム

分散メモリ型並列計算機におけるプログラムの実行時間は、計算時間とノード間のデータ移動にかかる通信時間の2つが大部分を占める。一般的に、ノード数を増加させるとノード間のデータ通信時間が増加するため、通信時間の削減を行うことが重要な課題である。そのため、ノード間通信の削減を行った QR 分解アルゴリズムである Communication-Avoiding QR (CAQR) が考案された[5]。本研究では、タイル化された行列データに対して CAQR アルゴリズムを実装する。

3. 1. タイル CAQR アルゴリズム

タイル CAQR では、タイルに分割された行列 A を縦方向にドメインとよばれる領域に分割し、各ノードにドメインを配置する。図2では行列 A を2つのドメインに分割している。それぞれ

のドメインごとにタイル QR 分解の第 k ステップのタスクを実行し最上位タイルの上三角化を行う（ローカル QR 分解）。その後、各ドメインの上三角化された最上タイル行に対して QR 分解を行う。このドメイン間に対する処理をマージ処理とよぶ。マージ処理が終了すると、第 k ステップが終了する。ドメインに分割することでドメイン間のマージ処理による演算量が増えるが、ドメインごとに並列にローカル QR 分解を行うことが可能なため、 i 方向の並列性が向上する。また、CAQR ではマージ処理時のみドメイン間の通信が必要となるため、クラスタシステム上にタイル QR 分解を実装した時と比較して、通信回数は少なくなる。



第 2 図：タイル CAQR アルゴリズム（2 ドメイン分割）

タイル CAQR ではタイル QR 分解の 4 カーネルに加えて、マージ処理を行う 2 つのカーネルが必要となる。

- TTQRT

上三角行列 $R_{h1,k}$, $R_{h2,k}$ の 2 つを組にして QR 分解を行い、 $R_{h1,k}$ の更新を行う。このとき、変換行列として上三角行列 $V_{h2,k}$ と上三角行列 $T_{h2,k}$ が生成される。

$$\begin{pmatrix} R_{h1,k} \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow \left(I - \begin{pmatrix} I \\ V_{h2,k} \end{pmatrix} T_{h2,k}^T \begin{pmatrix} I & V_{h2,k}^T \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} R_{h1,k} \\ R_{h2,k} \end{pmatrix}$$

- TTMQR

TTQRT カーネルによって生成された変換行列 $V_{h2,k}$, $T_{h2,k}$ をその右タイルの二組 $A_{h1,j}$, $A_{h2,j}$ ($k < j < q$) に適用して更新を行う。

$$\begin{pmatrix} A_{h1,j} \\ A_{h2,j} \end{pmatrix} \leftarrow \left(I - \begin{pmatrix} I \\ V_{h2,k} \end{pmatrix} T_{h2,k}^T \begin{pmatrix} I & V_{h2,k}^T \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} A_{h1,j} \\ A_{h2,j} \end{pmatrix}$$

本研究では、タイル CAQR アルゴリズムを CPU/GPU ヘテロジニアスクラスタシステムへの実装を行う。次節では GPU 実装について詳細を示す。

4. ヘテロジニアスクラスタシステムでのタイルアルゴリズム実装

4. 1. 更新カーネルの GPU 実装

後続行列更新を行う SSRFB カーネルについて前節で述べた。以下は SSRFB カーネルを BLAS ルーチンを用いて実装したものである。ここで、 W は作業領域である。

$$W = A_{k,j} + V_{i,k}^T A_{i,j} \quad (\text{GEMM})$$

$$W = T_{i,k}^T W \quad (\text{TRMM})$$

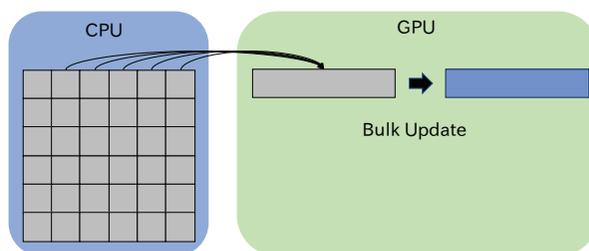
$$A_{k,j} = A_{k,j} - W \quad (\text{AXPY})$$

$$A_{i,j} = A_{i,j} - V_{i,k} W \quad (\text{GEMM})$$

上の式から、SSRFB カーネルは L3 BLAS 演算が大部分を占めている。また、他の更新カーネルも同様に L3 BLAS が主要演算である。本研究では更新カーネルを cuBLAS [7] を用いて実装し、後続行列更新処理を GPU に割り当てる。一方、逐次処理が多い GEQRT, TSQRT, TTQRT カーネルおよび GPU の制御を CPU で行う。また、大規模な行列へ適用するために、行列データは CPU のホストメモリ上に確保し、タイルデータが必要となった時に GPU へと送受信する。そのため、更新カーネル実行の度に CPU-GPU 間で変換行列、後続行列のデータ通信が発生する。以下では本研究で実装した 2 種類の GPU 更新手法について説明する。

4. 2. Bulk Update

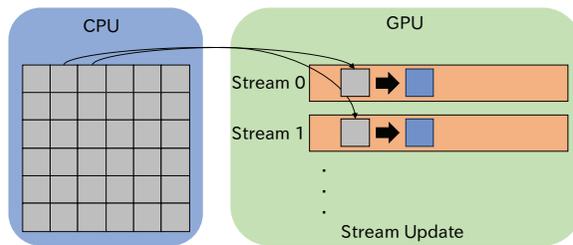
従来の GPU プログラミングでは 1 つのカーネル内で GPU の全スレッドを使用した並列計算を行うことで、GPU の計算性能を生かしている。そのため、GPU の全計算資源が稼働状態となるように、大きな行列に対して行列演算を行うことでより高い処理性能が得ていた。しかし、本実装におけるタイル CAQR アルゴリズムでは、GPU で処理する更新カーネルは 1 または 2 タイルのみに適用される。タイルサイズを大きくすると、更新カーネルは GPU により高速に計算されるが、分解カーネルの逐次処理に時間がかかり、GPU の処理開始が遅延しボトルネックとなってしまう。そこで、小さいタイルサイズを選択しつつ GPU の性能を発揮させる方法として Bulk Update [8-11] が提案された。Bulk Update では図のように、並列実行可能な j 方向のタイルを 1 つの長方形列にまとめ、一度に更新カーネルを適用する。長方形列にしてまとめて更新を行うことで、GPU での更新カーネルの性能を向上できる。



第 3 図 : Bulk Update の更新手法

4. 3. Stream Update

NVIDIA 社の Kepler アーキテクチャ以降の GPU では、異なる CUDA ストリームに複数の GPU タスクが投入された時、可能ならばそれらが自動的に並列実行される。そこで図 4 のように、各タイル列に対応する CUDA ストリームを作成し、各タイル列の更新タスクを投入する。こうすることで並列実行可能な更新カーネルが非同期に並列実行できるため、性能向上につながる。この更新手法を Stream Update と呼ぶ [12]。Bulk Update 実装では、一度に更新タスクを適用するため、タスク粒度が大きくなり、タイルアルゴリズムの「細粒度タスクの非同期実行」という特徴と相反する。しかし、Stream Update では、細粒度のタスクのまま実行が可能であり、複数カーネルの同時実行により、計算資源の稼働率を向上させることが可能と考えられる。一方で、タイルサイズ分の小さなデータ転送が頻発する。ホスト-デバイス間の双方向データ通信は逐次実行であるため、性能を阻害する可能性がある。これら 2 種類の更新手法を Reedbush-H 上に実装した。



第4図：Stream Update の更新手法

5. 性能評価実験

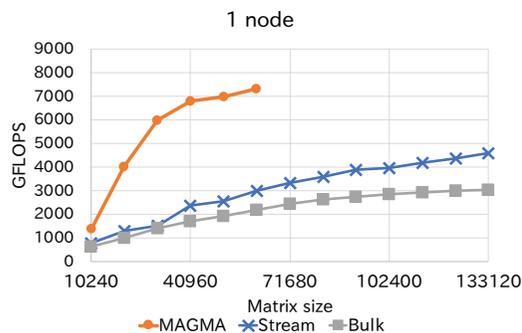
東京大学情報基盤センターの Reedbush-H 上でタイル CAQR の実装を行い、正方行列に対する QR 分解の性能評価を行った。使用した開発環境は表 1 のとおりである。GPU で実行される更新タスクには上記 2 種類の手法が実装されている。Reedbush-H 上で、2 種類の実装および MAGMA の性能比較および、1 ノードから 16 ノードを使用した並列化効率の性能測定を行った。タイルサイズについてはチューニングを行い、各行列サイズに対して最適なタイルサイズを選択した。

表 1：使用した開発環境

コンパイラ	Intel C++ コンパイラ 17.0.1.132
MPI ライブラリ	Intel MPI 2017.1.132
BLAS	Intel MKL 17.1.132
CUDA & cuBLAS	8.0.44
MAGMA	2.2.0

5. 1. シングルノード

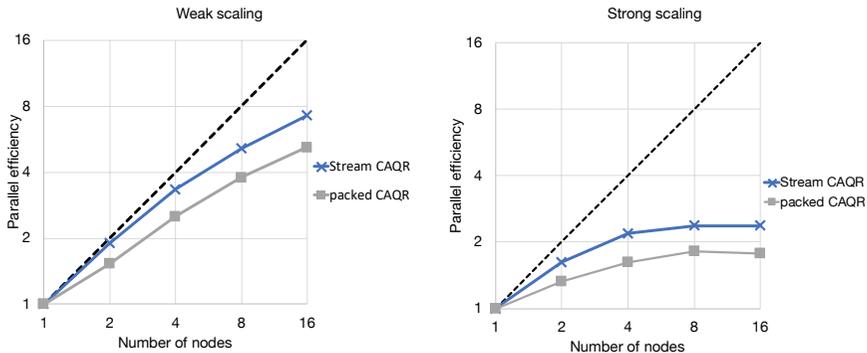
最初に、Reedbush-H の 1 ノードを使用して、正方行列に対して各実装の QR 分解と MAGMA ライブラリ実装の実行速度を比較した (図 5)。今回行った Stream Update と Bulk Update では、Stream Update 実装の方が実行速度が速かった。これは、OpenMP と CUDA Stream による非同期実行が影響したと考えられる。Stream Update 実装は MAGMA のピーク性能の約半分の性能だが、MAGMA と比較して約 2 倍のサイズの正方行列に対して QR 分解を実行することができる。MAGMA は全行列データを GPU メモリ上に保存し、CPU で実行される分解タスクに必要なパネル部分をメインメモリ上に転送する方式を取る。しかし、我々の実装では個々の更新タスクに対して毎回 CPU-GPU 間の転送が必要であるため、MAGMA よりも多くのデータ転送が必要となる。そのため、MAGMA が処理できる行列サイズでは非常に大きな性能差が生じてしまう。



第5図：1 ノードによるタイル CAQR 性能測定

5. 2. マルチノード

Stream Update と Bulk Update の2つの手法を使用して、weak scaling の性能評価を行った。1 ノードあたりの行列サイズを 81920×81920 とし、1 ノードから 16 ノードまでの台数効果を測定した。行列データはタイル行ごとに 1D ブロックサイクリックデータ分散で各ノードに分散させている。weak scaling の測定結果を図7に示す。2種類の実装のうち Stream Update 実装の方が高い並列化効率を示し、16 ノード使用時に理想性能の約50%の性能となっている。これは、タイル CAQR アルゴリズムによる縦方向の並列化が影響していると考えられる。



第6図：タイル CAQR アルゴリズムの weak scaling (左図) および strong scaling (右図)

次に、Stream Update と Bulk Update の strong scaling の性能評価を行った。行列サイズを 102400×102400 の正方行列に固定し、1 ノードから 16 ノードまでの台数効果を測定した。測定結果を図8に示す。行列データの分散方法は、weak scaling と同様に 1D ブロックサイクリックデータ分散で行っている。この測定実験においても、Stream Update 実装の方が高い並列化効率を得られたが、16 ノードに注目すると十分な並列化性能とは言えない。この原因は、ノード数が増加させると、プロセス数も増加するため、ドメイン内タイル QR 分解の並列度は向上するが、1 プロセスが処理するドメイン内のタイル数が少なくなり、またドメイン間のマージ処理回数が増え、ドメインのマージ処理がボトルネックとなる。これが、並列化効率が阻害され十分な性能が得られない要因であると考えられる。

6. おわりに

今回、タイル CAQR アルゴリズムの CPU/GPU クラスタシステム実装を行い、Reedbush-H を使用した性能評価を行った。本稿では、MAGMA ライブラリとの性能比較および、クラスタシステムでの並列化効率の測定を行った。性能測定実験では、weak scaling で16 ノード使用時に理想性能の約50%の性能が得られ、大規模並列環境でのタイル CAQR アルゴリズムの有用性が見られることがわかった。ただし、タイルアルゴリズムでは適切なタイルサイズを選択しなければ高い性能が得られず、この実験でもタイルサイズチューニングのために複数回のパラメータ探索が必要であった。そのため、事前に実行時間の予測を行うために、性能モデルによるタイルサイズチューニングが必要である。

謝辞

本研究は「東京大学情報基盤センター 平成29年度若手・女性利用推薦課題」における採

択課題「ハイブリッドクラスタシステムにおける通信削減タイル QR 分解実装」によって行われたものです。本研究では、東京大学情報基盤センターの Reedbush-H を使用させていただきました。この場を借りてお礼申し上げます。

参考文献

- [1] Top500, <https://www.top500.org>
- [2] MAGMA, <https://icl.cs.utk.edu/magma/>
- [3] Buttari, A., Langou, J., Kurzak, J. and Dongarra, J.: Parallel tiled QR factorization for multicore architectures, *Concurrency and Computation, Practice and Experience*, Vol. 20, No. 13, pp. 1573 – 1590, 2008.
- [4] Buttari, A., Langou, J., Kurzak, J. and Dongarra, J.: A class of parallel tiled linear algebra algorithms for multicore architectures, *Parallel Computing*, Vol. 35, pp. 38 – 53, 2009.
- [5] Demmel, J. W., Grigori, L., Hoemmen, M. and Langou, J.: Communication-avoiding parallel and sequential QR and LU factorizations: theory and practice, Technical Report UCB/EECS-2008-74, LAPACK Working note 204, 2008.
- [6] R. Schreiber and C. Van Loan: A storage-efficient WY representation for products of Householder transformations, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol.10, Num. 1, pp. 52 – 57, 1989.
- [7] NVIDIA, NVIDIA Developer cuBLAS Web Page, <https://developer.nvidia.com/cublas>
- [8] 高柳雅俊, 鈴木智博: マルチ GPU 環境におけるタイル CAQR アルゴリズムの実装, 日本応用数学会 2014 年度年会 (2014)
- [9] 高柳雅俊, 鈴木智博: CPU/GPU 混在環境における再帰的タイル QR 分解, 日本応用数学会 2015 年度年会 (2015)
- [10] 高柳雅俊, 鈴木智博: CPU/GPU 混在環境における再帰的タイル QR 分解の動的スケジューリング実装, 日本応用数学会 第 12 回研究部会連合発表会 (2016)
- [11] 高柳雅俊, 鈴木智博: クラスタ型ヘテロジニアス環境におけるタイル QR 分解, 日本応用数学会 2016 年度年会 (2016)
- [12] 高柳雅俊, 鈴木智博: CPU/GPU クラスタシステムにおけるタイル QR 分解の実装と性能評価, 第 23 回計算工学講演会 (2018)

1,000億自由度規模の電磁界解析を可能とするための、 階層分割型数値計算フレームワーク ADVENTURE_Magnetic の 高並列化・高速化研究

杉本振一郎

八戸工業大学 工学部 機械工学科

1. 数値人体モデルの大規模電磁界解析への取り組み

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]の高周波電磁界解析に取り組んでいる。この数値人体モデルは1辺2 mm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程度であり、2 mm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0.5 mm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160億になり、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。

FDTD法により0.5 mm幅のボクセルを用いた数値人体モデルの電磁線量測定問題の解析がすでに行われている[4]。しかし、FDTD法は陽解法に基づく時間発展問題であるため膨大な時間ステップが必要となり、計算時間が非常に長くなってしまう。そこで我々は階層型領域分割法(Hierarchical Domain Decomposition Method: HDDM)を用い、時間微分項 $\partial/\partial t$ を $-i\omega$ (i : 虚数単位, ω : 角周波数)で置き換えた時間調和問題の解析に取り組んでいる。

HDDMは領域分割法[5]-[7]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[8]。HDDMは大規模な構造解析[9]や熱伝導解析[10]、電磁界解析[11]-[12]に適用され、構造解析では1,000億自由度の解析[13]に成功している。また時間調和問題は電磁波や交流電流など正弦波状に変化する現象に適用することのできる手法であり、本来は多くの時間ステップで実数の行列を解かなければならない非定常問題を複素数の行列を一度だけ解く準定常問題に変換することで計算時間を大きく削減できる。これまでにHDDMと時間調和問題を渦電流問題に適用し、35億自由度の解析[14]に成功している。また高周波電磁界問題では1辺2 mmのボクセルを2回細分割した0.5 mmボクセルを四面体に分割した160億自由度数値人体モデル、および300億自由度簡易温熱治療器モデルの解析[15]にも成功している。

本研究では数値人体モデルにおいて直径1 mmの癌も解析対象とするため、解像度0.1 mmのメッシュを用いた解析を最終的な目標としている。しかしこのような要素サイズのメッシュは1兆自由度規模となり、非構格子を用いた解析でこのような規模を扱うには現在はソフトウェア、ハードウェアの両面から困難である。そこで0.5 mmのボクセルをさらに細分割した解像度0.25 mm、1,280億自由度の解析を次の目標として設定し、研究を進めている。ADVENTUREプロジェクト[16]では数万～数十万ノード規模の超並列計算機環境において大規模電磁界解析を行うことを目的に、並列電磁界解析ソルバADVENTURE_Magnetic (AdvMag)の開発を進めている。その一環として、2016年度のFX10スーパーコンピュータシステム「大規模HPCチャレンジ」にて研究

課題「ADVENTURE_Magneticによる100億自由度数値人体モデルの高周波電磁界解析」を実施し、前述のとおり160億自由度の数値人体モデル(解像度0.5 mm)を10分、300億自由度の簡易温熱治療器モデルを19分で解析することに成功している。しかしFX10では全ノードを用いても300億自由度の解析がメモリ搭載量の観点から限界であることがわかっている。一方Oakforest-PACS (OFP)では全ノードを用いれば1,800億自由度程度まで扱うことができると予想される。そこでOFP上で最大2,048ノードを用いてAdvMagの並列性能を評価し、1,000億自由度規模の電磁界解析を行うための初期検討を行った。

本稿では、FX10での100億自由度規模の解析とその可視化、1,000億自由度規模の電磁界解析を行うための初期検討について報告する。

2. 100億自由度規模の電磁界解析

2.1. 有限要素方程式

領域 Ω 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。

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

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

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

ここで、 i は虚数単位、 μ は透磁率[H/m]、 ω は角周波数[rad/s]、 ϵ は誘電率[F/m]、 σ は導電率[S/m]、 J は放射源の電流密度[A/m²]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 Ω 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 を通常の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。

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

ここで、 E_h^* は任意の試験関数である。

2.2. 階層型領域分割法(Hierarchical Domain Decomposition Method: HDDM)

HDDMでは要素の重なりがないように解析領域を分割するが、このときpartとsubdomainからなる階層構造が作られる(図1)。

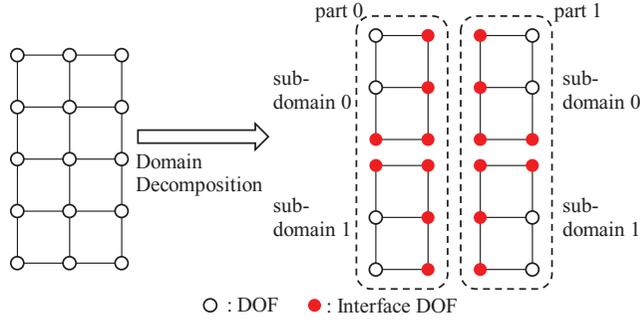
$$\Omega = \bigcup_{i=0}^{N_p-1} \bigcup_{j=0}^{N_s-1} \Omega^{(i,j)}. \quad (5)$$

ここで、 $\Omega^{(i,j)}$ はpart i の中の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、subdomain数を表す。ここで、 N_s はすべてのpartで等しい。図1の例ではまず2つのpartに分割し、それぞれのpartは2つのsubdomainに分割されている($N_p = N_s = 2$)。図中の赤丸は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。

領域 Ω で考える有限要素方程式(4)を以下のように行列形式で表す。

$$Ku = f. \quad (6)$$

ここで、 K は係数行列、 u は未知自由度、 f は右辺ベクトルを表す。式(6)にHDDMを適用すると、次のように書ける。



○ : DOF ● : Interface DOF
図 1. 階層型の領域分割.

$$\begin{bmatrix} K_{II} & K_{IB} \\ K_{IB}^T & K_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_I \\ u_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_I \\ f_B \end{bmatrix}. \quad (7)$$

ここで,

$$K_{II} = \begin{bmatrix} K_{II}^{(0,0)} & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & K_{II}^{(0,N_s-1)} & & \\ & & & K_{II}^{(1,0)} & \\ 0 & & & & \ddots \\ & & & & & K_{II}^{(N_p-1,N_s-1)} \end{bmatrix}, \quad K_{IB} = \begin{bmatrix} K_{IB}^{(0,0)} R_B^{(0,0)} \\ \vdots \\ K_{IB}^{(0,N_s-1)} R_B^{(0,N_s-1)} \\ K_{IB}^{(1,0)} R_B^{(1,0)} \\ \vdots \\ K_{IB}^{(N_p-1,N_s-1)} R_B^{(N_p-1,N_s-1)} \end{bmatrix},$$

$$K_{BB} = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} K_{BB}^{(i,j)} R_B^{(i,j)}, \quad f_I = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_I^{(i,j)T} f_I^{(i,j)}, \quad f_B = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} f_B^{(i,j)},$$

であり, 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ることを示す. $R_I^{(i,j)}$, $R_B^{(i,j)}$ 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(7)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.

$$S u_B = g. \quad (8)$$

ただし,

$$S = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} S^{(i,j)} R_B^{(i,j)}, \quad S^{(i,j)} = K_{BB}^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)T} \left(K_{II}^{(i,j)} \right)^{-1} K_{IB}^{(i,j)},$$

$$g = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} \left(f_B^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)T} \left(K_{II}^{(i,j)} \right)^{-1} f_I^{(i,j)} \right),$$

であり, S はシユア補元行列, $S^{(i,j)}$ は領域 $\Omega^{(i,j)}$ におけるローカルシユア補元行列, g は凝集された右辺ベクトルである.

HDDM では, まず並列環境下で共役直交共役勾配 (Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient: COCG) 法や共役直交共役残差 (Conjugate Orthogonal Conjugate Residual: COCR) 法などの反復法を用いて式(8)を解くことでインターフェース自由度の解を得る. 続いて, それぞれの subdomain でインターフェース自由度を Dirichlet 条件と考えて式(9)を解くことで, subdomain 内部の自由度の解を得る.

$$K_{II}^{(i,j)} u_I^{(i,j)} = f_I^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)} R_B^{(i,j)} u_B, \quad i = 0, \dots, N_p - 1, j = 0, \dots, N_s - 1. \quad (9)$$

サイズの大きな行列を並列環境下で保持することは, 通信やメモリ使用量などの点で大きな不利益を伴う. そこで HDDM では, 式(8)を解く際に S を陽に求めずに計算を行う. 反復法の演算で

は S の行列ベクトル積演算が必要であるが、これをsubdomainでの演算をもってあてる。 S とベクトル x の積 y は以下のように考えられる。

$$\begin{aligned}
 y &= Sx \\
 &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} S^{(i,j)} R_B^{(i,j)} \cdot x \\
 &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} S^{(i,j)} x^{(i,j)} \\
 &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} y^{(i,j)}.
 \end{aligned} \tag{10}$$

ただし、

$$x^{(i,j)} = R_B^{(i,j)} x, \quad y^{(i,j)} = S^{(i,j)} x^{(i,j)} = \left\{ K_{BB}^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)T} \left(K_{II}^{(i,j)} \right)^{-1} K_{IB}^{(i,j)} \right\} x^{(i,j)},$$

であり、各subdomainで求められた $y^{(i,j)}$ の重ね合わせにより y が求められることがわかる。ここで、 $z^{(i,j)} = \left(K_{II}^{(i,j)} \right)^{-1} K_{IB}^{(i,j)} x^{(i,j)}$ とすると、 $z^{(i,j)}$ は以下のようにsubdomainでの有限要素計算により求めることができる。

$$K_{II}^{(i,j)} z^{(i,j)} = K_{IB}^{(i,j)} x^{(i,j)}. \tag{11}$$

2.3. 数値人体モデルの解析

本節では160億自由度の数値人体モデルをCOCG法またはCOCR法を用いて解析する。成人男性の数値人体モデル(図2)は周辺の空気領域も含めて $320 \times 160 \times 866$ 個の2mm幅のボクセルから成る。モデルのサイズは $x=0.64$ m, $y=0.32$ m, $z=1.732$ mである。身体組織の誘電率や導電率などの物性値は、理化学研究所が公開している身体組織物性値データベース[17]のデータを用いる。放射源としてダイポールアンテナ($L=0.5$ m)が胸の上($H=0.06$ m)に設置されており、印加する電流を0.8 Aとする。電流の周波数は300 MHzとする。このモデルのボクセルを四面体に分割し、2回細分割することで解像度0.5 mm相当の要素数14,188,544,000、自由度16,605,276,424のメッシュを生成する。COCG法、COCR法とも、簡易対角スケーリングを前処理としてインターフェース問題の求解に用い、収束判定値を 10^{-7} とする。部分領域問題の求解には不完全Cholesky分解による直接法を用いる。計算にはOakleaf-FXの全ノードを用いる。9,600のMPIプロセスを起動し、それぞれのプロセスは8つのスレッドを起動することとする。

表1に計算結果、図3に収束履歴を示す。300 MHzでのCOCR法の計算時間は約10分であり、このモデルを効率よく解析できた。

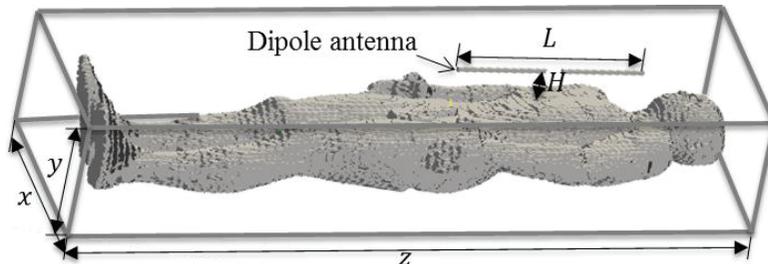


図2. 数値人体モデル。

表 1. 計算結果.

Iterative method of interface	Iterations	Elapsed time [s]
COCG	1,021	1,480
COCR	206	601

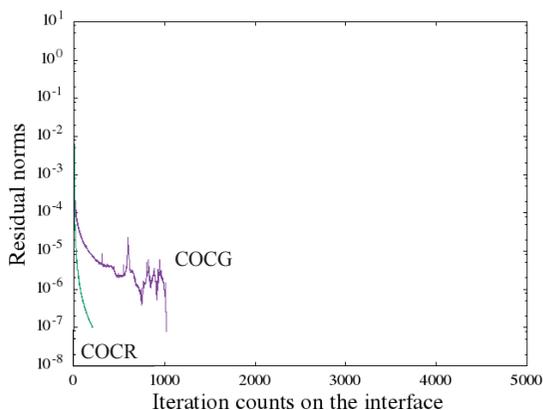


図 3. 収束履歴.

2.4. 大規模可視化[19]

解析で得られたデータは領域分割されたメッシュなどの入力データ(9,600個, 約1.7 TB)と, 有限要素方程式から得られる解と磁場, 電場, 渦電流密度の実部と虚部を含む解析結果(9,600個, 約2.0 TB)である. 解析結果は倍精度で, ADVENTUREプロジェクト独自のバイナリ形式(AdvIO)で記録されている. 階層型の領域分割(partとsubdomain)に基づき解析結果も分割されている. それぞれの物理量でsubdomainごとにデータが分割され, 一つのファイルに一つのpartのデータがまとめて記録されている. これらのファイルを可視化に用いる. なおOakleaf-FXでは9,600ものプロセスが同時に書き込むと20分程度で終わるはずの結果出力が2時間経っても終わらないなどの問題が発生し, 解析結果を十分に残せなかった. そこで後述するように同時書き込みの制限とファイルの圧縮機能を導入することで, OFP上で新たに得られた解析結果も可視化に用いた.

可視化は名古屋大学情報基盤センターの大規模可視化システムUV2000 [20]上でAVS/Express Developer Edition 8.4.1 fcs linux_64_el6 (AVS)を用いて行った. メッシュと解析結果を記録しているAdvIOはAVSで読み込むことができないため, まずこれらをAVSが読み込むことのできるUCDファイル[21]に変換した. この過程でsubdomainデータのマージ, 倍精度データの単精度への変換を行いUCDファイルは9,600個, 537 GBとなった. 続いて臓器ごとに特定の物理量を取り出してUCDファイルよりも高速に読み込むことのできるHDF5ファイル[22]に変換し, 心臓の磁場の実部を記録したHDF5ファイルは約757 MBとなった. さらに癌の治療効果を検討する際には特定の断面の情報があればよく, また物理量ごとに検討したい値の範囲が限定できるので, 可視化に必要なデータは断面を含めた臓器の形状情報, 臓器表面や断面での色情報となり, データ量を大きく減らすことができる. このようなデータをAVSで作成し, 3D AVS Player (Player)で読み込むことのできる4Dアニメーション(動画を再生しながら視点変更が可能)ファイルであるGFAファイルに変換し, Playerで最終的な可視化結果を得た. 心臓のGFAファイルは約50 MBとなった.

図 4に心臓のメッシュ, 図 5に心臓表面の磁場, 図 6に右上半身の磁場の等値面の可視化結果を示す. 可視化に必要な情報とファイル形式の選別を適切に行うことで100億自由度を超える規

模の可視化が可能であることを示し、高周波誘電加温による癌の温熱療法において大規模解析の結果を使った治療効果の検討の可能性を示した。

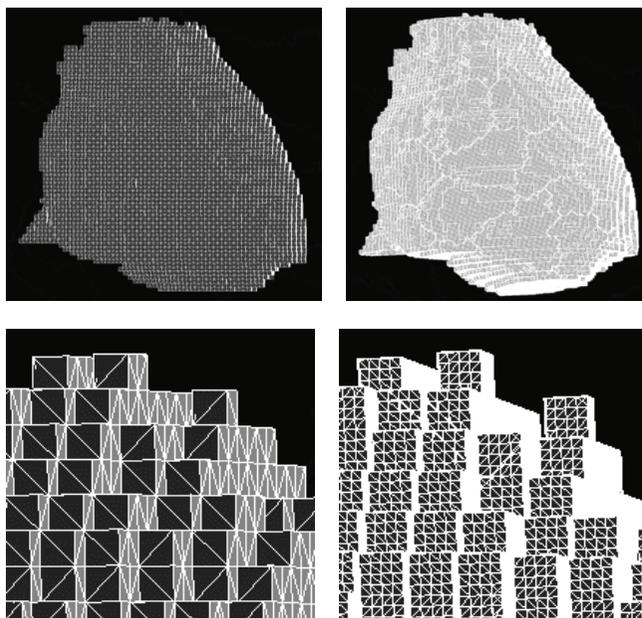


図 4. 心臓のメッシュ.

(左上：解像度 2 mm 全景，右上：解像度 0.5 mm 全景，
左下：解像度 2 mm 左心房周辺，右下：解像度 0.5 mm 左心房周辺)

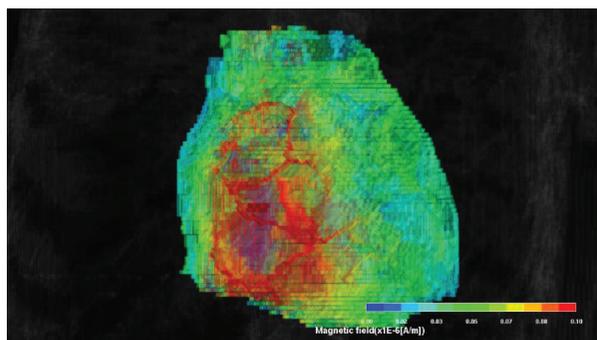


図 5. 心臓表面の磁場.

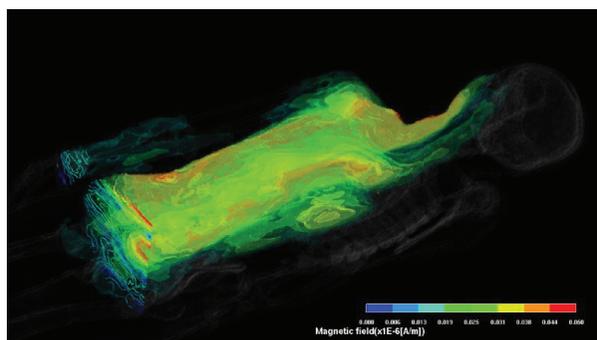


図 6. 右上半身の磁場の等値面.

3. 1,000 億自由度規模の電磁界解析のための初期検討

平成 29 年度 東京大学情報基盤センター「若手・女性利用」後期において「1,000 億自由度規模の電磁界解析を可能とするための、階層分割型数値計算フレームワーク ADVENTURE_Magnetic の高並列化・高速化研究」を実施した。この中で 1,000 億自由度規模の電磁界解析を行う上での課題を洗い出すため、OFP においてウィークスケールリングおよびストロングスケールリングをノード内、および複数のノードにて行い AdvMag の性能を評価した。その結果を受けて各種パラメータの調整と、MPI プロセス数とスレッド数のバランスを検討した。その結果、現状では全 8,208 ノードを用いる際には 1 ノードあたり 16 の MPI プロセス、MPI プロセスあたり 17 スレッドとし、領域分割は MPI プロセスあたり 8,840 領域が良いのではないかとあたりをつけてその後のテストを行った。テストでは辺要素を用いるために必要な処理の部分で並列数の増大にあわせて処理時間が大幅に増える現象が確認され、今後の課題となった。また 2016 年度の FX10 スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」を実施した際、9,600 のプロセスが一斉に結果の書き込みを行うと著しく書き込みに時間がかかるようになったり、書き込みに失敗したりしてしまいほんの一部の解析結果しか残せなかった。さらに自由度が増えると必要なディスク容量も大きくなる。OFP 上で行った 160 億自由度の解析では障害は発生しなかったが、本課題で対象にするのは 1,000 億自由度規模であり、プロセス数も 13 万を超え、再び障害が発生する可能性がある。そこで同時に書き込みを行うプロセス数を制限する機能、および出力後にファイルをシステムコールによって GNU zip 形式で圧縮する機能を開発した。この機能を使用することにより入出力にかかる時間は増えてしまうが、確実に解析結果を残すことを優先できる。

今後は OFP の大規模 HPC チャレンジでの 1,280 億自由度数値人体モデルの電磁界解析を目指し、さらなる検討を行っていく。

謝 辞

本研究で用いた計算機リソースの一部は東京大学情報基盤センターの FX10 スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」および東京大学情報基盤センター「若手・女性利用」により提供された。

本研究の一部は JSPS 科研費 15K17499, 17H02829, 17H03256, および独立行政法人 科学技術振興機構の戦略的研究推進事業 CREST の助成を受けて実施された。

数値人体モデルの解析および電磁界解析ソルバの高速化において宮崎大学工学部 武居周准教授および名古屋大学情報基盤センター 荻野正雄准教授の支援を受けた。

AVS を使用するにあたって名古屋大学情報連携統括本部 高橋一郎特任主席技師およびサイバネットシステム株式会社 汎用可視化技術グループの皆様の支援を受けた。

ここに記し、感謝の意を示す。

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 Transactions 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, pp.1350061-1 - 1350061-30, 2014.
- [4] J. Chakarothai, K. Wake and S. Watanabe, Scalable GPU-parallelized FDTD method for analysis of large-scale electromagnetic dosimetry problems, Applied Computational Electromagnetics Society Journal, Vol.31, No.6, pp.661-668, 2016.
- [5] R. Glowinski, Q.V. Dinh, 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.
- [6] A. Quarteroni and A. Valli, Domain decomposition methods for partial differential equations, Clarendon Press, 1999.
- [7] A. Toselli and O. Widlund, Domain decomposition methods: Algorithms and theory (Springer Series in Computational Mechanics), Springer, 2004.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] A. M. M. Mukaddes, M. Ogino, 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, Issue 2, pp.533-540, 2006.
- [11] H. Kanayama and S. Sugimoto, Effectiveness of $A-\phi$ method in a parallel computing with an iterative domain decomposition method, IEEE Transactions on Magnetics, Vol.42, Issue 4, pp.539-542, 2006.
- [12] 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.
- [13] M. Ogino and R. Shioya, Scalable non-overlapping domain decomposition method for finite element simulations with 100 billion degrees of freedom model, Proceedings of 1st International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, pp.96-99, 2014.
- [14] 杉本振一郎, 田上大助, 荻野正雄, 武居周, 金山寛, 階層型領域分割法による時間調和渦電流解析の収束性改善, 日本シミュレーション学会論文誌, Vol.7, No.1, pp.11-17, 2015.
- [15] 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, Vol.3, 10p, 2017.
- [16] ADVENTURE プロジェクト HP: <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/>
- [17] 理化学研究所生物情報基盤構築チーム HP: <http://cfd-duo.riken.go.jp/cbms-mp/j/>

- [18] Y. Kanai, Description of TEAM Workshop Problem 29: Whole body cavity resonator, Technical Report of TEAM Workshop in Tucson, 1998.
- [19] 杉本振一郎, 高橋一郎, 荻野正雄, 武居周, 160 億自由度数値人体モデルの高周波電磁界問題の大規模可視化, 第 23 回計算工学講演会論文集, 6p, 2018.
- [20] 名古屋大学情報基盤センタースーパーコンピュータシステム HP:
<http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/>
- [21] AVS/Express ユーザーズ・ガイド, サイバネットシステム株式会社, 2017.
- [22] The HDF Group HP: <https://www.hdfgroup.org/>

耐 CO アノード用錯体触媒の機構解明と設計に向けた第一原理計算

多田 幸平

産業技術総合研究所・電池技術研究部門

1. はじめに

固体高分子型燃料電池 (PEFC) 用アノード触媒に使用される Pt 微粒子には、改質ガス中の CO により被毒されるという難点がある。一方、一般的なアノード材料 (Pt やカーボン, Pt-Ru 合金など) に担持された Rh^{III} ポルフィリン錯体は CO を電気化学的に酸化することができる [1]。つまり、Rh^{III} ポルフィリン錯体をアノードに担持することによって CO を除去したうえで電子を取り出せるようになる。そして、この CO 電気化学酸化は従来の耐 CO アノードである Pt-Ru 合金よりも低い過電圧で進行する [2]。そのため、Rh^{III} ポルフィリン錯体は新規な耐 CO アノード材料として期待が持たれるが、その活性やコストにおいて課題が残っている。また、Ru 合金化による耐 CO 性能の向上とは機構が異なっている可能性があり、その詳細機構に関しても不明な点が多い。そこで本研究では、Rh^{III} ポルフィリン錯体による CO 酸化機構の解明に向けて、(1) Rh^{III} ポルフィリン自身の CO 活性化能力の検討 [3] と (2) Rh^{III} ポルフィリン錯体とカーボン電極の相互作用の検討 [3] を、新規な耐 CO アノード錯体設計に向けて、(3) ポルフィリン類縁体であるフタロシアニン錯体との比較検討を行った。

2. 計算手法・モデル

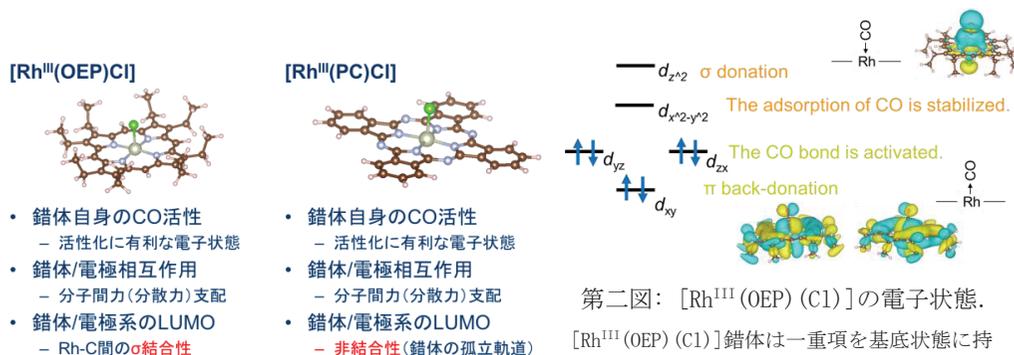
上記 3 点の検討を密度汎関数理論に基づく電子状態計算によって行った。交換相関汎関数には GGA-PBE を使用し、平面波基底による波動関数の展開を行った。波動関数のカットオフエネルギーは 400 eV とし、 Γ 点のみ計算した。分散力による安定化を考慮するため、DFT-D 法による分散力補正を行った。計算プログラムには VASP を使用した。

Rh^{III} ポルフィリン錯体として [Rh^{III}(OEP)(Cl)] 錯体 (OEP = オクタエチルポルフィリン) を、その類縁体として [Rh^{III}(PC)(Cl)] 錯体 (PC = フタロシアニン) を計算した。グラファイト電極は 1 層のグラフェンで近似し、その (0001) 面と錯体との相互作用を検討した。本研究で報告する結果においてグラファイトの層数依存性は重要でないことは確認している [3]。[Rh^{III}(OEP)(Cl)]/graphite の安定吸着構造は約 2000 通りの構造を計算して求めた。[Rh^{III}(PC)(Cl)]/graphite の安定吸着構造は [Rh^{III}(OEP)(Cl)] の計算結果を参考にして約 200 通りの構造で計算を行い求めた。また、本研究で報告する構造は構造最適化によって得られた構造である (グラファイトの構造は固定)。

3. 結果・考察

第一図に、本研究の要点をまとめた。[Rh^{III}(OEP)(Cl)] 錯体は CO を強く吸着できると同時に CO 結合を活性化することができ (第二図)、これは [Rh^{III}(PC)(Cl)] 錯体も同様である。[Rh^{III}(OEP)(Cl)]/graphite 間の主要な引力相互作用は分散力であり、吸着によって錯体の電子

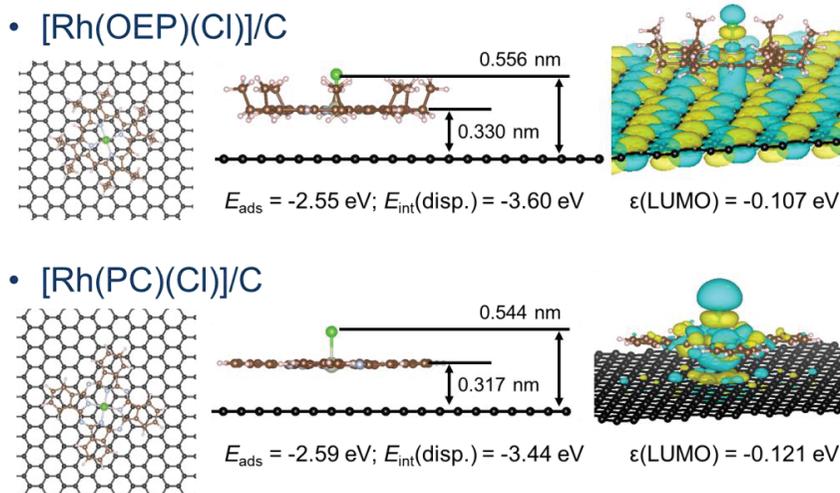
状態は大きく変化しないことが明らかとなった (第三図). $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{PC})(\text{Cl})]$ 錯体も同様に分散力によって吸着されるため, 両錯体の CO 活性化能に大きな違いは無いと考えられる. だが, グラファイト吸着状態の LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) には大きな違いがあり, $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{OEP})(\text{Cl})]$ /graphite 間が結合性であるのに対し, $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{PC})(\text{Cl})]$ 間是非結合性である (第三図). この違いは $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{PC})(\text{Cl})]$ の LUMO が $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{OEP})(\text{Cl})]$ 錯体の LUMO よりも深いことに起因すると考えられる. この結果から, $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{OEP})(\text{Cl})]$ 錯体は CO の 2 電子酸化で生じる電子を電極へ素早く受け渡すことができるが, $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{PC})(\text{Cl})]$ 錯体ではその電子移動が遅いことが予想される. より詳細な比較検討には電圧印加時の電子状態の解析が必要であり, その検討は今後の展望の一つである.



第一図: 本研究の要約.

第二図: $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{OEP})(\text{Cl})]$ の電子状態.

$[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{OEP})(\text{Cl})]$ 錯体は一重項を基底状態を持つ. この電子状態では σ 供与によって CO 分子が強く吸着され, π 逆供与によって CO 結合が活性化される.



第三図: $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{OEP})(\text{Cl})]$ /graphite と $[\text{Rh}^{\text{III}}(\text{PC})(\text{Cl})]$ /graphite の計算結果.

E_{ads} は吸着による安定化を, $E_{\text{int}}(\text{disp.})$ は分散力による安定化を示す(負に大きい方が安定). $\epsilon(\text{LUMO})$ は LUMO の軌道エネルギー (負に大きい方が深い LUMO).

参 考 文 献

- [1] S. Yamazaki, T. Ioroi, K. Yasuda et al., *J. Phys. Chem. C*, 2010, **114**, 21856–21860
- [2] S. Yamazaki, T. Ioroi, T. Kobayashi et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2006, **45**, 3120–3122
- [3] K. Tada, S. Tanaka, S. Yamazaki et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, under review

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. 20 No. Special Issue 2 (2018. 8)

【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