

スーパーコンピューティング ニュース

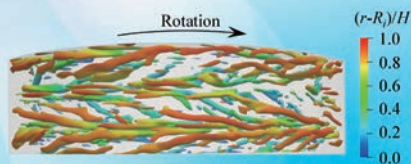
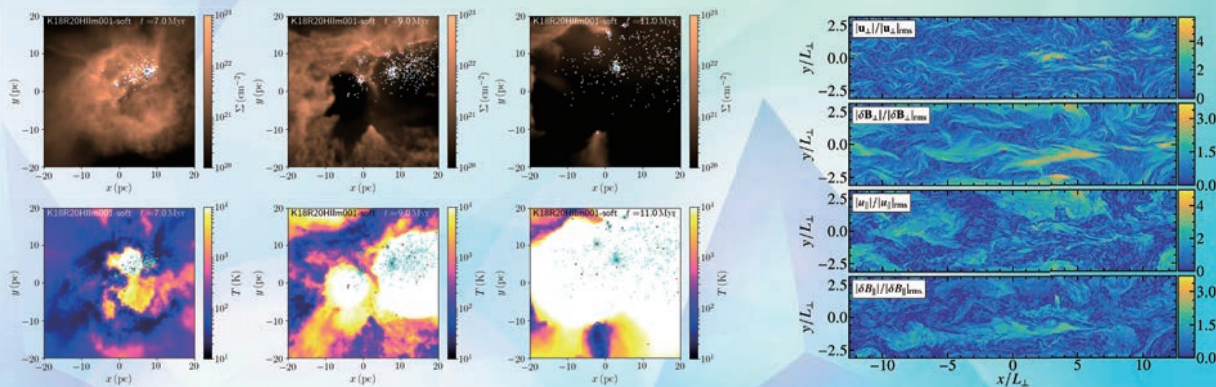
SUPERCOMPUTING NEWS

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.23, Special Issue 1

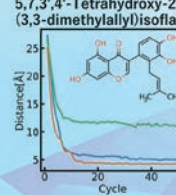
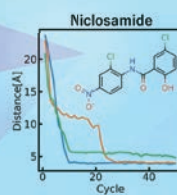
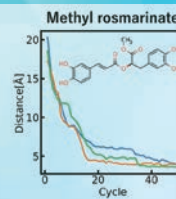
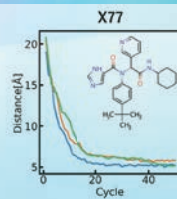
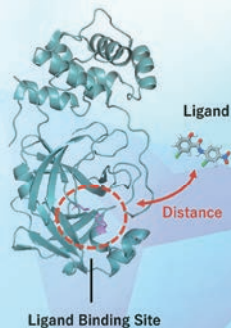
2021.8

特集：2020年度「若手・女性利用者推薦」前期・後期課題 成果報告



(a) $Ta = 4000$, $Re = 0$ ($Q^* = 0.002$)

Id-PaCS-MD for SARS-CoV-2 Main Protease



表紙の画像は、以下の課題より提供を受けております。

- ・内側円筒が回転する同心二円筒間環状流路内の熱伝達と摩擦抵抗に Taylor 渦の移流が与える影響の LES 解析
(東京農工大学大学院 工学府機械システム工学専攻 大竹 啓太)
- ・クライオ電子トモグラフィーによる in situ 構造生物学
(山梨大学大学院総合研究部医学域 小田 賢幸)
- ・大質量星団形成シミュレーション (東京大学大学院 理学系研究科 藤井 通子)
- ・PaCS-MD に基づく効率的リガンド結合経路探索法の開発
(筑波大学計算科学研究センター 原田 隆平)
- ・降着円盤における微小スケール乱流の特性解明
(東北大学 学際フロンティア研究所 川面 洋平)

目 次

特集：2020 年度「若手・女性利用者推薦」前期・後期課題 成果報告

2020 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）	
内側円筒が回転する同心二円筒間環状流路内の熱伝達と摩擦抵抗に Taylor 渦の 移流が与える影響の LES 解析	5
大竹啓太（東京農工大学大学院工学府機械システム工学専攻）	
ペアリング暗号に適した楕円曲線の探索	13
照屋唯紀（産業技術総合研究所）	
クライオ電子トモグラフィーによる in situ 構造生物学	21
小田賢幸（山梨大学医学部解剖学講座構造生物学教室）	
分子動力学シミュレーションによる自己炎症性疾患に関わるタンパク質の研究	28
大滝大樹（長崎大学生命医科学域（医学系）分子標的医学研究センター）	
構造ガラスにおける限界安定性の研究	35
島田真成（東京大学総合文化研究科）	
第一原理計算と機械学習を用いた新物質の合成条件予測	43
倉田伊織（東京大学工学系研究科物理工学専攻）	
大質量星団形成シミュレーション	49
藤井通子（東京大学大学院理学系研究科）	
Numerical simulation of deepwater oil blowout : crossflow effect	55
Daniel Cardoso Cordeiro（大阪大学基礎工学研究科）	
正方形ダクト乱流の直接数値計算の GPU 加速	57
関本 敦（岡山大学学術研究院環境生命科学学域）	
渦電流-熱伝導連成解析システムの構築と包括的な高速化・高度化	65
杉本振一郎（八戸工業大学）	

PaCS-MD に基づく効率的リガンド結合経路探索法の開発	75
原田隆平 (筑波大学計算科学研究センター)	
降着円盤における微小スケール乱流の特性解明	81
川面洋平 (東北大学学際科学フロンティア研究所)	
Large-eddy simulations of nearshore offshore wind farms and their interactions with atmospheric boundary layer	87
Jay Prakash Goit (Department of Mechanical Engineering, Kindai University)	
電氣的・熱的効果によるキャビティ音制御の数値解析	94
大竹克也、大森康瑛、横山博史 (豊橋技術科学大学)	
階層型直交格子法と壁面モデルを用いた LBM による航空機高揚力装置の空力音響解析	102
前山大貴 (東京大学大学院工学系研究科)	

2020 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 2020 年度「若手・女性利用者推薦」制度に採択され、実施した課題の成果報告をまとめたものです。

2. 若手・女性利用者推薦

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

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

前期・後期の半年単位で募集を行う一般枠と、学部学生・大学院生を対象とし、主に夏期における利用を想定したインターン制度があります。一般枠（前期・後期）では、1 人で行う研究課題を募集します。一般枠の課題は、1 年または半年単位（後期は半年のみ）の実施となります。インターン制度では、1 人で行う研究課題または 2 人以上のメンバーで構成された研究グループで行う研究課題を募集します。

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

本制度の詳細は、以下の Web ページをご覧ください。

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

3. 2020 年度「若手・女性利用者推薦」前期・後期・インターン 採択課題

2020 年度「若手・女性利用者推薦」前期の課題公募では、表 1 に示した 28 件の課題が採択されました。後期の課題公募では、表 2 に示した 4 件の課題が採択されました。インターンの課題公募では、表 3 に示した 5 件の課題が採択されました。本特集号では前期・後期・インターンで実施された 37 件の課題のうち 15 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 9 件の前期・後期課題については、2021 年 6 月 10 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。

表 1 2020 年度「若手・女性利用者推薦」前期 採択課題

課題名	代表者名	所属
内側円筒が回転する同心円筒間環状流路内の熱伝達と摩擦抵抗に Taylor 渦の移流が与える影響の LES 解析	大竹 啓太	東京農工大学大学院 工学府
ペアリング暗号に適した楕円曲線の探索 [†]	照屋 唯紀	国立研究開発法人 産業技術総合研究所 サイバーフィジカルセキュリティ研究センター
クライオ電子トモグラフィーによる in situ 構造生物学 [†]	小田 賢幸	山梨大学大学院 総合研究部
動的膜の分子動力学計算 [‡]	小山 志穂里	株式会社 豊田中央研究所
南極海における棚氷融解のフィードバック現象の解明 [‡]	木村 仁	国立研究開発法人 海洋研究開発機構
分子動力学シミュレーションによる自己炎症性疾患に関わるタンパク質の研究	大滝 大樹	長崎大学大学院 医歯薬学総合研究科
構造ガラスにおける限界安定性の研究	島田 真成	東京大学 総合文化研究科
コミュニケーションにおける情報量と音声的余剰性の関係 [‡]	橋本 大樹	上越教育大学 (採択時：東京大学教養学部)
第一原理計算と機械学習を用いた新物質の合成条件予測 [*]	倉田 伊織	東京大学 工学系研究科
磁気単極子秩序形成の有限温度解析 ^{*†‡}	奥村 駿	東京大学 工学系研究科
実機単段遠心ブロウで生じるサージ点近傍非定常失速現象の大規模圧縮性 LES 解析 ^{†‡}	塚本 和寛	日立製作所 研究開発グループ
全ゲノム配列情報と画像クラスタリング技術の融合による希少難治性疾患の層別・分類手法の開発 ^{†‡}	川口 修治	京都大学大学院 医学研究科附属ゲノム医学センター
革新的抗血小板薬創製に向けた第 XI 因子・トロンビンと血小板膜糖蛋白 GPIb α および von Willebrand 因子複合体の結合エネルギー計算 [‡]	中山 正光	東海大学 内科学系
汎関数繰り込み群による量子スピン液体候補物質の物性解明 ^{†‡}	福井 毅勇	東京大学大学院 理学系研究科

¹ https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/y_report/2020/2020_report.php

課題名	代表者名	所属
FDPs を用いた土/水連成数値モデルの開発に関する研究 [‡]	平田 紗椰	神戸大学大学院 工学研究科
微視的界面構造に基づくナノコンポジットの機械的特性の発現メカニズム [‡]	屋山 巴	工学院大学 先進工学部
大質量星団形成シミュレーション [†]	藤井 通子	東京大学大学院 理学系研究科
波形インバージョンによる地球マントル最下部の詳細構造推定 [‡]	鈴木 裕輝	東京工業大学 理学院 (採択時：東京大学大学院 理学系研究科)
Weather Forecasting: Physical Model Acceleration using Machine Learning and High-Performance Computing ^{*‡}	Maha Mdini	理化学研究所 計算科学研究センター
半古典輸送理論に基づいた電子・光融合シミュレーション [‡]	谷 水城	東京大学大学院 工学系研究科
機械学習による時系列データの学習過程の解明 [‡]	中井 拳吾	東京海洋大学 学術研究院 (採択時：東京大学大学院 数理科学研究科)
流動及び岩盤力学の逆解析により地層水理パラメータの推定 [‡]	張 毅	公益財団法人 地球環境産業技術研究機構
Numerical simulation of deepwater oil blowout: crossflow effect	Daniel Cardoso Cordeiro	大阪大学大学院 基礎工学研究科
散開星団起源ブラックホール連星の形成と特徴 [‡]	熊本 淳	東京大学 理学系研究科
GPU 加速 DNS コードを用いた正方形ダクト乱流の直接数値計算	関本 敦	岡山大学 (採択時：大阪大学 基礎工学研究科)
Couette-Poiseuille 流れにおける大規模構造の解析 [‡]	関本 敦	岡山大学 (採択時：大阪大学 基礎工学研究科)
随伴変数法とベイズ最適化による Top-Seeded Solution Growth 法を用いた SiC 結晶成長における断熱材分布最適化 [‡]	竹原 悠人	大阪大学大学院 基礎工学研究科
渦電流-熱伝導連成解析システムの構築と包括的な高速化・高度化	杉本 振一郎	八戸工業大学

* 実施期間が半年の課題です。無印は実施期間が1年の課題です。

† 「若手・女性利用者推薦」成果報告会で成果報告された課題です。

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

表2 2020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
PaCS-MDに基づく効率的リガンド結合経路探索法の開発	原田 隆平	筑波大学 計算科学研究センター
Coarse-graining Model for Monte Carlo Simulation of Spin Configurations in Ferromagnets ^{†‡}	李 其放	東京大学 新領域創成科学研究科
降着円盤における微小スケール乱流の特性解明 [†]	川面 洋平	東北大学 学際フロンティア研究所
Large-eddy simulations of nearshore offshore wind farms and their interactions with atmospheric boundary layer	Goit Jay Prakash	近畿大学 工学部

後期採択課題の実施期間は半年です。

† 「若手・女性利用者推薦」成果報告会で成果報告された課題です。

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

表3 2020年度「若手・女性利用者推薦」インターン 採択課題

課題名	代表者名	所属
単眼カメラによる距離推定技術に関する研究 [‡]	牛 昭峰	奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科
繰り込み群による冷却極性分子系での量子スピン液体実現可能性の探索 [‡]	福井 毅勇	東京大学大学院 理学系研究科
極低温推進薬の軌道上貯蔵・輸送に向けた減圧沸騰現象の解明と予測手法の開発 [‡]	谷 和磨	東京大学大学院 工学系研究科
電氣的・熱的效果によるキャビティ音制御の数値解析	大竹 克也	豊橋技術科学大学大学院 工学研究科
階層型直交格子法と壁面モデルを用いたLBMによる航空機高揚力装置の空力音響解析	前山 大貴	東京大学大学院 工学系研究科

インターン採択課題の実施期間は半年です。

‡ 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。

内側円筒が回転する同心二円筒環状流路内の熱伝達と 摩擦抵抗に Taylor 渦の移流が与える影響の LES 解析

大竹 啓太

東京農工大学大学院機械システム工学専攻

1. はじめに

電気モータやガスタービンなどの回転機械において、エネルギー効率向上のための効果的な冷却および摩擦抵抗低減が求められている。したがって、回転機械内の流れにおける熱伝達および摩擦抵抗に対する理解が重要となる。本課題では、熱伝達の指標としてヌセルト数（流れによる熱伝達と流体の熱伝導の比を表す無次元数）を、摩擦抵抗の指標としてトルク係数（回転に起因する摩擦抵抗）と軸方向摩擦係数（軸方向の流れ（貫流）がある場合の軸方向の摩擦抵抗）を用いて評価する。回転機械内の流れは、内壁が回転する同心二円筒間環状流路内の流れに単純化することができる。そのため、以下では内壁が回転する同心二円筒間環状流路について述べる。

内壁が回転する同心二円筒間環状流路内の流れにおいて、テイラー数 Ta （内壁の回転数を表す無次元数）がある閾値を越えると、内壁の回転による遠心力が原因となり、周方向に回転軸を持つリング状の渦構造（Taylor 渦^[1]）が現れ、この流れを Taylor-Couette 流れと呼ぶ。更に内側円筒の回転数が増加すると定常状態から非定常状態に遷移し、波状の渦である wavy vortex を経て乱流へ遷移する^[2]。

Taylor-Couette 流れに軸方向の流れ（貫流）が重畳された流れは、Taylor-Couette-Poiseuille 流れと呼ばれ、このような流れはガスタービン、電気モータなどで見られる。Taylor-Couette-Poiseuille 流れでは貫流が流れを安定化するため、Taylor 渦が形成される閾値は Taylor-Couette 流れよりも上昇する上、Taylor 渦が貫流によって軸方向に移動することが報告されている^[3]。したがって、Taylor-Couette-Poiseuille 流れでの流れ場は Taylor-Couette 流れの流れ場と異なる。

そこで、本研究の先行研究である大澤^{[5][6]}、藤本^[7]は、壁面摩擦抵抗を層流寄与項と乱流寄与項に分解する FIK 恒等式^[4]を参考に、Taylor-Couette 流れ、Taylor-Couette-Poiseuille 流れのヌセルト数、トルク係数と軸方向摩擦係数に対し、移流、乱流輸送、分子拡散の3項の貢献度を求める恒等式を導出した。このように、ヌセルト数、トルク係数、軸方向摩擦係数を移流、乱流輸送、分子拡散の3つの貢献度を定量的に評価するのは初の試みであった。その結果、Taylor-Couette 流れにおけるヌセルト数、トルク係数に対しては共に移流項が支配的であることがわかった^[5]。

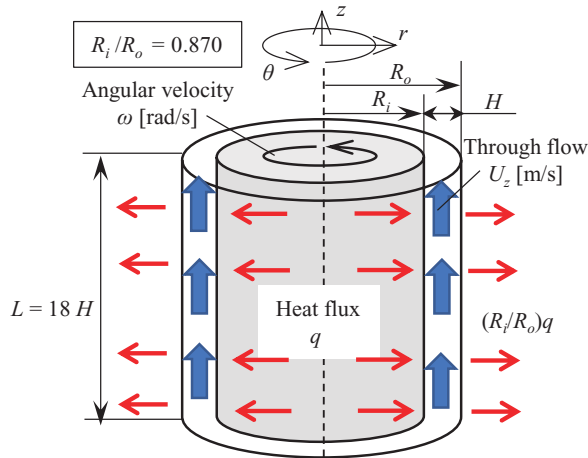
しかし、この方法では、Taylor-Couette 流れでは Taylor 渦による移流の影響を評価できていたが、Taylor-Couette-Poiseuille 流れでは Taylor 渦が貫流によって軸方向に押し流されるため、静止座標系の下で時間平均および周・軸方向平均を行うと移流項の影響がほぼゼロとなり評価できていなかったという問題があった。そのため、本研究では Taylor-Couette-Poiseuille 流れにおいて Taylor 渦を追跡し、Taylor 渦による移流の影響を評価することを主眼とした。

Taylor 渦を追跡するためには、Taylor 渦とともに移動する座標系の下で平均操作を行う必要がある。そこで Taylor 渦とともに移動する座標系の提案を試みた。しかし、軸方向平均速度で移動する座標系、貫流平均流速で移動する座標系で観測する様に処理を施したものの、Taylor 渦はそれぞれ揺動しながら流れるためいずれも Taylor 渦の移動を正しく表現することはできなかった。したがって、本研究の主眼とした Taylor 渦の追跡は叶わなかった。そのため、以下は従来と同じ方法（静止座標系の下で時間平均・周および軸方向平均による統計量の算出）を用い、先行研究^{[5][6][7]}よりも高乱流域において行った熱伝達・摩擦抵抗の評価について記す。

2. 数値解析手法

図 1 に、計算領域の模式図を示す。内側円筒と外側円筒の半径比は $R_i/R_o=0.87$ 、流路高さは H [m] である。軸方向長さは、Taylor-Couette-Poiseuille 流れを計算する際は $18H$ [m]、Taylor-Couette 流れの場合には $9H$ [m] とした。ここで R [m] は円筒半径、添え字 i, o はそれぞれ内側および外側円筒を表す。内側円筒は角速度 ω [rad/s] で回転し、内側円筒・外側円筒に滑りなし条件、周および軸方向は周期境界条件を課した。また、等熱流束で内側円筒を加熱 (q [W/m²])、外側円筒を冷却 ($(R_i/R_o)q$ [W/m²]) した。計算領域の周方向サイズは 90 度とし、計算格子は構造格子を用いた。格子数は $Ta = 4000$ 、 $Re = 4000$ の場合で半径 (r)、周 (θ)、軸 (z) 方向にそれぞれ 104, 288, 400 であり、内側円筒における周・軸方向速度の半径方向の勾配を用いて定義した摩擦速度で規格化した格子解像度は $\Delta r^+ = 0.30 \sim 7.6$ 、 $(r\Delta\theta)^+ = 8.8 \sim 10.0$ 、 $\Delta z^+ = 10.7$ である。計算条件として、テイラー数 $Ta (=R_i\omega H/\nu)$ および貫流レイノルズ数 $Re (=U_z(2H)/\nu)$ を $(Ta, Re) = (4000, 0)$, $(4000, 1000)$, $(4000, 4000)$, $(4000, 8000)$, $(4000, 12000)$, $(8000, 0)$, $(8000, 1000)$, $(8000, 4000)$, $(12000, 0)$ とした。ここで ν [m²/s] は動粘度、 U_z [m/s] は貫流平均流速を表す。

支配方程式は、非圧縮流れの連続の式、Navier-Stokes 方程式、エネルギー方程式である。周期境界条件下で軸方向に貫流を重畳するため、Navier-Stokes 方程式に平均圧力勾配を付加した。式の離散化には有限体積法を用い、OpenFOAM-6 を用いて解析を行った。時間の離散化は 2 次精度後退差分を、空間の離散化には 2 次精度中心差分を用いた。LES の Sub-Grid Scale (SGS) モデルとして、Smagorinsky 定数を流跡線に沿って平均化する Lagrangian dynamic Smagorinsky モデル^[8]を用いた。



第1図: Taylor-Couette-Poiseuille 流れの場合の計算領域。

Taylor-Couette 流れの場合には、軸方向長さは $9H$ [m] とした。

3. 評価方法

本研究では、先行研究^{[5][6][7]}が提案した、内側円筒が回転する同心二円筒環状流路内のヌセルト数 Nu 、トルク係数 C_M 、軸方向摩擦係数 C_f を移流、乱流輸送および分子拡散の貢献度に分解する式(1)、(2)、(3)を用い、 Nu 、 C_M 、 C_f に対する各項の貢献度を評価した。

$$Nu = \frac{2}{\alpha \Delta \bar{T}} \int_{R_i}^{R_o} \left(\frac{r}{R_i} \langle \bar{u}_r \bar{T} \rangle + \frac{r}{R_i} \langle \bar{u}_r \bar{T}' \rangle - \frac{r}{R_i} \alpha \left\langle \frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \right\rangle \right) dr \quad (1)$$

$$C_M = \frac{1}{(R_i \omega)^2 R_i^2 H} \int_{R_i}^{R_o} \left(r^2 \langle \bar{u}_r \bar{u}_\theta \rangle + r^2 \langle \bar{u}_r \bar{u}_\theta' \rangle - r^3 v \left\langle \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\bar{u}_\theta}{r} \right) \right\rangle \right) dr \quad (2)$$

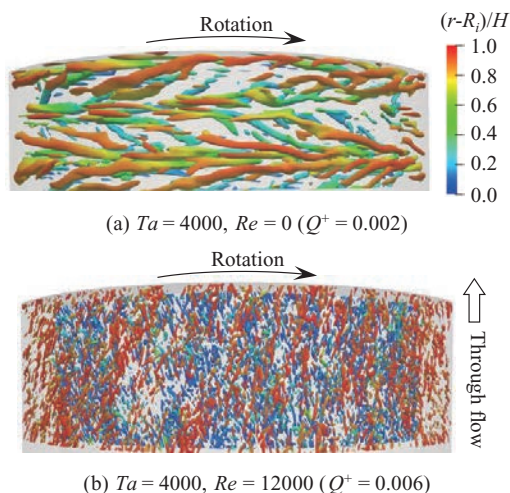
$$C_f = \frac{8H}{U_z^2 (R_o^2 - R_i^2)} \left\{ \frac{1}{R^2 - R_i^2} \int_{R_i}^R \left(r^2 \langle -(\bar{u}_r \bar{u}_z) \rangle + r^2 \langle -(\bar{u}_r \bar{u}_z') \rangle + r^2 v \left\langle \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial r} \right\rangle \right) dr \right. \\ \left. + \frac{1}{R_o^2 - R^2} \int_R^{R_o} \left(r^2 \langle \bar{u}_r \bar{u}_z \rangle + r^2 \langle \bar{u}_r \bar{u}_z' \rangle - r^2 v \left\langle \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial r} \right\rangle \right) dr \right\} \quad (3)$$

式(1)、(2)、(3)は流れの完全発達を仮定し、円筒座標系におけるエネルギー方程式、周・軸方向の Navier-Stokes 方程式を半径方向に積分することで導出した。ここで α [m²/s] は温度伝導率、 $(\bar{\quad})$ は時間平均成分、 (\quad) は変動成分、 $\langle (\quad) \rangle$ は周・軸両方向平均を表す。また、 $\Delta \bar{T} (= \langle \bar{T} \rangle_{r=R_i} - \langle \bar{T} \rangle_{r=R_o})$ は両円筒間の時間平均温度の差である。式(3)における R [m] は、全応力(レイノルズ応力と粘性応力の和)がゼロの位置と定義した。式(1)、(2)、(3)それぞれの $r=R_i$ から $r=R$ までの積分値を流路内側における貢献度、 $r=R$ から $r=R_o$ までの積分値を流路外側における貢献度とした。

4. 解析結果および考察

4.1 渦の可視化

図 2 に内層スケール()⁺で規格化した速度勾配テンソルの第 2 不変量 Q^+ の等値面を示す。図 2(a) の $Ta = 4000$, $Re = 0$ では、渦管が周方向に並んでおり、周方向の剪断応力が支配的である。一方、図 2(b) の $Ta = 4000$, $Re = 12000$ では、渦管は軸方向に傾いて並んでいる。したがって、 Re の増加によって、貫流が流れに及ぼす影響が増すことがわかる。



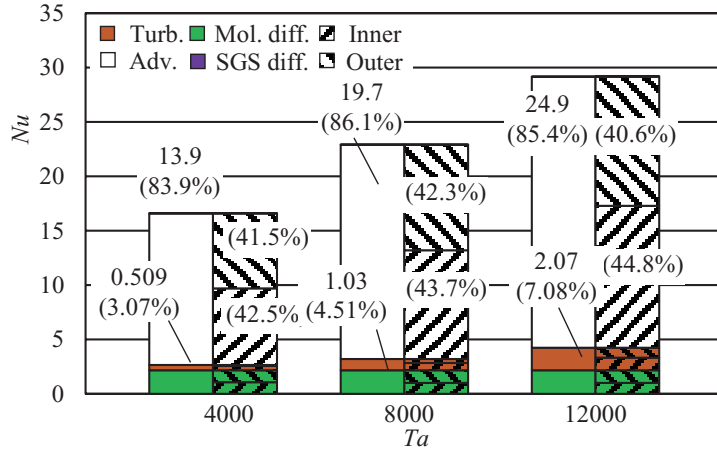
第 2 図: 速度勾配テンソルの第 2 不変量の等値面。

カラーコンターは半径方向座標を表す。

4.2 熱伝達 (ヌセルト数) の評価結果

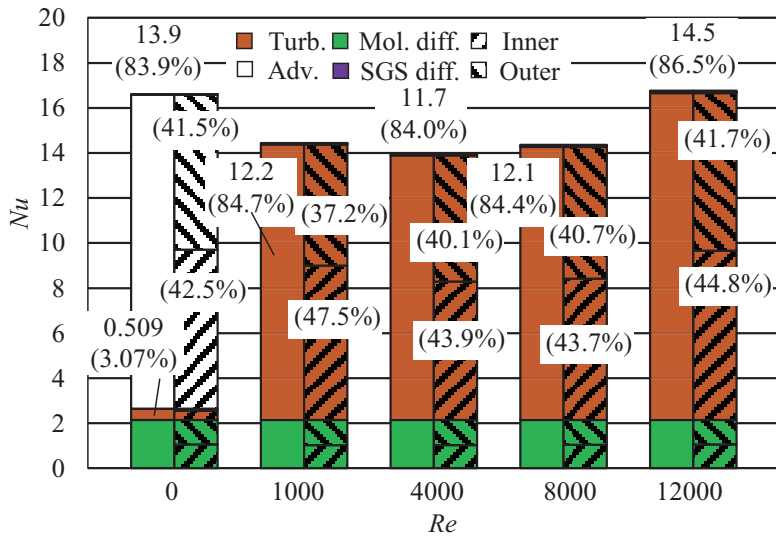
図 3 に、式(1)で評価した、 $Re = 0$ におけるヌセルト数 Nu への移流、乱流輸送および分子拡散の貢献度を示す。(同一の Re において) 内壁回転が熱伝達に及ぼす影響を評価する。 Ta の増加とともに移流項および乱流輸送項が増加し、結果として Nu も増加した。

図 4 に、式(1)で評価した、 $Ta = 4000$ におけるヌセルト数 Nu への移流、乱流輸送、分子拡散の貢献度を示す。この図より (同一の Ta において) 貫流が熱伝達に及ぼす影響を評価する。貫流がない場合 ($Re = 0$) では移流項の貢献度が支配的である。一方、貫流がある場合では移流項の影響が消滅し、乱流輸送項が支配的となった。この原因は、移流項は Taylor 渦に起因する $r-z$ 面内の循環流れによるが、貫流が重畳されると Taylor 渦が軸方向に押し流され、時間平均と周・軸方向空間平均を行うと Taylor 渦の影響が消えるためである。また、乱流輸送項の流路内側・外側での貢献度に注目すると、 $Re = 1000$ では流路内側が外側よりも 10.2 ポイント大きく、 $Re = 12000$ では流路内側が外側よりも 3.4 ポイント大きくなり、高 Re では乱流輸送項の流路内側と外側の貢献度の差が小さくなる。これは、 Re が低い $Re = 1000$ では内壁回転の影響が大きいため、内壁回転によって流路内側での流れが不安定となり、流路外側と比較して流路内側の貢献度が大きくなる。一方、 Re が高い条件 ($Re = 12000$) では、貫流が流れ場に与える影響が増加し、内壁回転が流れ場に及ぼす影響が相対的に小さくなるためである。



第3図: 貫流がない場合における, $Ta = 4000, 8000, 12000$ におけるヌセルト数に対する各項の貢献度。

それぞれの棒グラフの左側は流路全体における値, 右側の右上がりの斜線部分は流路内側における値, 右側の右下がりの斜線部分は流路外側における値を表す。棒グラフの緑の部分は分子拡散項の貢献度を, 茶色の部分は乱流輸送の貢献度を, 白の部分は移流項の貢献度を表す。



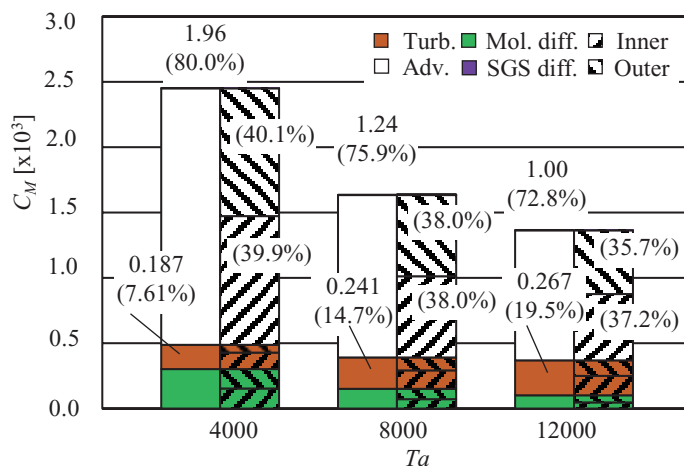
第4図: $Ta = 4000$ における, $Re = 0, 1000, 4000, 8000, 12000$ のヌセルト数に対する各項の貢献度。

それぞれの棒グラフの左側は流路全体における値, 右側の右上がりの斜線部分は流路内側における値, 右側の右下がりの斜線部分は流路外側における値を表す。棒グラフの緑の部分は分子拡散項の貢献度を, 茶色の部分は乱流輸送の貢献度を, 白の部分は移流項の貢献度を表す。

4.3. 周方向摩擦抵抗（トルク係数）の評価結果

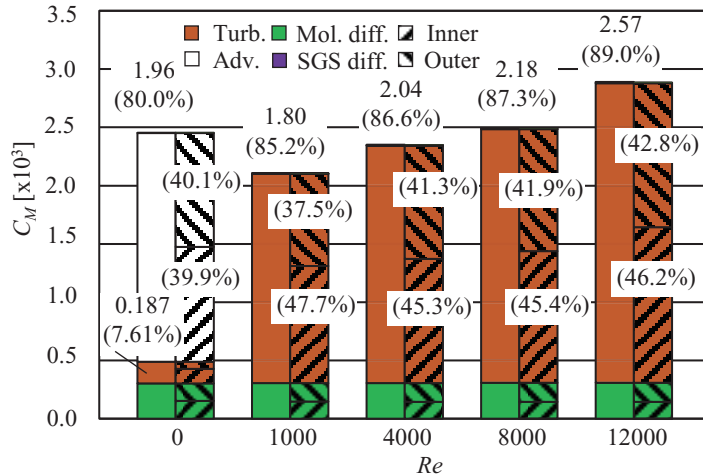
図5に、式(2)で評価した、 $Re = 0$ におけるトルク係数 C_M への移流，乱流輸送および分子拡散の貢献度を示す。テイラー数 Ta の増加に伴い，乱流輸送項の貢献度のみ増加するが，移流項，分子拡散項の貢献度は減少した。各ケースで移流項が70%以上を占めているため，移流項の増減の影響を大きく受け，結果として Ta の増加に伴い C_M は減少した。

図6に、式(2)で評価した， $Ta = 4000$ におけるトルク係数 C_M への移流，乱流輸送および分子拡散の貢献度を示す。ヌセルト数と同様に， $Re = 0$ では移流項が支配的だが， $Re = 1000$ 以降では乱流輸送項の貢献度が支配的となり，貢献度は Re の増加に伴い更に増加した。



第5図：貫流がない場合における， $Ta = 4000, 8000, 12000$ におけるトルク係数に対する各項の貢献度。

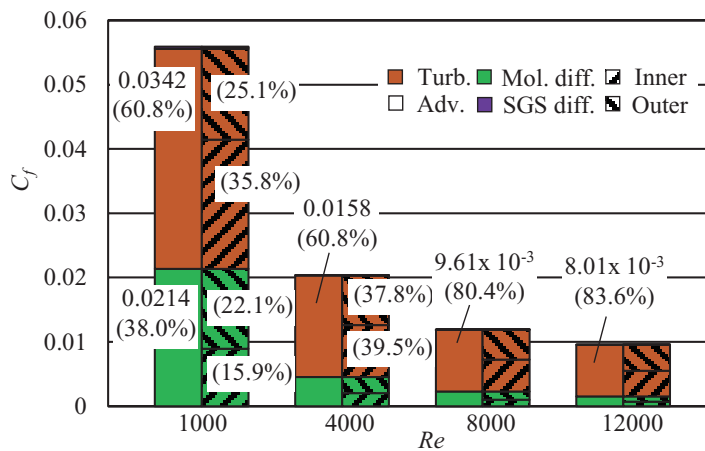
それぞれの棒グラフの左側は流路全体における値，右側の右上がりの斜線部分は流路内側における値，右側の右下がりの斜線部分は流路外側における値を表す。棒グラフの緑の部分は分子拡散項の貢献度を，茶色の部分は乱流輸送の貢献度を，白の部分は移流項の貢献度を表す。



第6図: $Ta = 4000$ における, $Re = 0, 1000, 4000, 8000, 12000$ のトルク係数への各項の貢献度。それぞれの棒グラフの左側は流路全体における値, 右側の右上がりの斜線部分は流路内側における値, 右側の右下がりの斜線部分は流路外側における値を表す。棒グラフの緑の部分は分子拡散項の貢献度を, 茶色の部分は乱流輸送の貢献度を, 白の部分は移流項の貢献度を表す。

4.4. 軸方向摩擦抵抗 (軸方向摩擦係数) の係数

図7に, 式(3)で評価した, $Ta = 4000$ における, $Re = 1000$ から 12000 の軸方向摩擦係数 C_f への移流, 乱流輸送および分子拡散の貢献度を示す。図11より, Re の増加に伴い, C_f は減少していく。各項の内訳に着目すると, Re の増加に伴い乱流輸送項の貢献度の割合が増加し, $Re = 12000$ では 83.6% となり, 乱流輸送項の貢献度が支配的となった。



第7図: $Ta = 4000$ における, $Re = 1000, 4000, 8000, 12000$ の軸方向摩擦係数への各項の貢献度。それぞれの棒グラフの左側は流路全体の値, 右側の右上がりの斜線部分は流路内側の値, 右側の右下がりの斜線部分は流路外側の値を表す。緑の部分は分子拡散項の貢献度を, 茶色の部分は乱流輸送の貢献度を表す。

5. 結論

本研究では、Taylor-Couette 流れおよび Taylor-Couette-Poiseuille 流れに対し流れ場および温度場の LES 解析を行い、内壁回転および貫流が熱伝達および摩擦抵抗に及ぼす影響を評価し、以下の結論を得た。

1. 本課題の主眼であった「Taylor-Couette-Poiseuille 流れにおいて、Taylor 渦の移流が熱伝達・摩擦抵抗に与える影響」を評価するためには、Taylor 渦とともに移動する座標系から時間平均・周および軸方向平均を行う必要がある。しかし、Taylor 渦の移動を正しく表現することができなかった。
2. 以下は従来の方法（静止座標系の下で時間平均・周および軸方向平均による統計量の算出）について記す。ヌセルト数 Nu について、 $Re = 0$ において、 Ta の増加に伴い Nu は増加し、 $Ta = 12000$ では、 $Ta = 4000$ と比較して 1.76 倍大きい。一方、 $Ta = 4000$ において、 Re の増加に伴い Nu は $Re = 0$ から 4000 まで減少し、 $Re = 12000$ まで増加した。 $Re = 0$ では移流項が、 $Re = 1000$ 以降では乱流輸送項が支配的であった。トルク係数 C_M について、 $Re = 0$ において、 Ta の増加に伴い C_M は減少し、 $Ta = 12000$ では、 $Ta = 4000$ と比較して 0.56 倍小さい。一方、 $Ta = 4000$ において、 Re の増加に伴い、 C_M は $Re = 0$ から 1000 まで減少し、それ以降 $Re = 12000$ まで増加した。 $Re = 0$ では移流項が、 $Re = 1000$ 以降では乱流輸送項が支配的となった。軸方向摩擦係数 C_f について、 $Ta = 4000, 8000$ において、 Re の増加に伴い、 C_f は減少した。

参 考 文 献

- [1] Taylor, G. I., *Philosophical Transactions A, Royal Society of London*, Vol. 223, (1923), pp. 289-343.
- [2] Coles, D., *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 21, No.3(1965), pp. 385-425.
- [3] Lueptow, R. M., Docter, A., Min, K., *Physics of Fluids A*, Vol. 4, No. 11(1992), pp. 2446-2455.
- [4] Fukagata, K., Iwamoto, K., Kasagi, N., *Physics of Fluids*, Vol.14, No.11(2002), pp. L73-L76.
- [5] Ohsawa, A., Murata, A., and Iwamoto, K., *J. of Thermal Science and Technology*, Vol.11, No.2(2016), DOI: 10.1299/jtst.2016jtst0027.
- [6] Ohsawa, A., Murata, A., Iwamoto, K., *Journal of Thermal Science and Technology*, Vol.11, No.2(2016), DOI: 10.1299/jtst.2016jtst0031.
- [7] 藤本, 東京農工大学大学院修士論文, (2018)
- [8] Meneveau, C., et al., *J. Fluid Mech.*, Vol. 319, (1996), pp.353-385.

1. はじめに

楕円曲線上に構成できるペアリングと呼ばれる演算を用いることで、有用な機能と高い性能を合わせ持つ暗号方式が構成できることが示された [14, 12]。その後、ペアリングを用いた ID ベース暗号や短い電子署名、集約署名、効率的な放送型暗号、属性ベース暗号など、数多くの暗号方式が提案されている [6]。これらペアリングを用いた暗号技術を総称してペアリング暗号と言う。

安全なペアリング暗号を実現するためには、安全性の根拠となる有限体離散対数問題および楕円曲線離散対数問題の困難性を十分に持つ楕円曲線を使用する必要がある。つまり、現時点で判明している解読法である数体篩法や関数体篩法、Pollard の ρ 法などに対し、十分な耐性を持つ楕円曲線を使用しなければならない。そして実用的なペアリング暗号を実現するためには、安全な楕円曲線の中から高速な暗号方式の実装を可能とする楕円曲線を使用することが望ましい。

本課題では、安全性や効率性の要件を考慮したペアリング暗号に適した楕円曲線を大規模に探索するプログラムを作成する。そして、実際に探索実験を行うことで、最良のペアリング暗号に適した楕円曲線の選定に貢献することを目標とする。

本稿の構成： 第 2 節ではペアリング暗号に関する数学的基礎について解説する。第 3 節では、ペアリング暗号の効率的な計算に適した楕円曲線の探索方法や要件について解説し、これを踏まえて、第 4 節で本課題で開発した探索プログラムについて述べ、第 5 節で開発したプログラムを用いて実施した実験とその結果について解説する。最後に第 6 節で本課題をまとめる。

2. 数学的準備

ここでは、探索の対象となるペアリング暗号に適した楕円曲線とその周辺の数学的背景について解説する。ここでは、ペアリング演算については紹介しない。詳細は [6] を参照願いたい。

諸定義： 正整数 n に対して、0 から $n-1$ までの整数の集合を $\langle n \rangle := \{0, \dots, n-1\}$ と書く。非ゼロ整数 z の符号付き 2 進数展開を $z = \sum_{i=0}^m s_i 2^i$ ($i \in \langle m+1 \rangle$ について $s_i \in \{-1, 0, 1\}$) となるような有限個の数値列 s_0, s_1, \dots, s_m とする。ここで、非ゼロで m が最大の s_m を z の最上位 (非ゼロ) ビット (most significant bit)、 m を最上位 (非ゼロ) ビット位置 (most significant bit position) と呼び、 $\text{hw}(z) := \#\{s_i \mid s_i \neq 0\}$ をハミング重み (Hamming weight) と呼ぶ。また、符号付き 2 進数展開 s_0, \dots, s_m を、対応する整数 $z = \sum_{i=0}^m s_i 2^i$ へと変換する写像を SB2Int と書く。

楕円曲線： p を 3 より大きい素数とし、 \mathbb{F}_p を体位数が p の有限体とする。 \mathbb{F}_p 上定義される楕円曲線 E/\mathbb{F}_p (または単に E) は、 X と Y を変数とする方程式 $Y^2 = X^3 + aX + b$ で定義される。ここで、 $a, b \in \mathbb{F}_p$ かつ $4a^3 + 27b^2 \neq 0$ とする。 l を正の整数とし、 \mathbb{F}_{p^l} を \mathbb{F}_p の l 次拡大体とする。 E の \mathbb{F}_{p^l} -有理点群 $E(\mathbb{F}_{p^l})$ とは、 $E(\mathbb{F}_{p^l}) := \{(x, y) \in \mathbb{F}_{p^l} \times \mathbb{F}_{p^l} \mid y^2 = x^3 + ax + b\} \cup \{\infty\}$ である。ここで、 ∞ は無限遠点である。

$E(\mathbb{F}_{p^l})$ には加法を定義可能であることがわかっており、これを $+$ で表す。そして、 $E(\mathbb{F}_{p^l})$ は単位元を ∞ 、点 $P = (x, y) \in E(\mathbb{F}_{p^l})$ の逆元 $-P$ を $-P := (x, -y)$ とする群 (アーベル群) を成す。整数 α について、 $[\alpha]P$ は、 $\alpha > 0$ ならば、 $[\alpha]P := \sum_{i=1}^{\alpha} P$ 、 $\alpha < 0$ ならば、 $[\alpha]P := [-\alpha](-P)$ 、

$\alpha = 0$ ならば、 $[\alpha]P := \infty$ とする。 $E(\mathbb{F}_{p^\ell})$ の要素数を群位数と呼び、 $\#E(\mathbb{F}_{p^\ell})$ と書く。 n を正の整数とする。 E の n -ねじれ点群 $E[n]$ とは、 $E[n] := \{(x, y) \in E \mid [n](x, y) = \infty\}$ である。また、 E/\mathbb{F}_p の p^ℓ -フロベニウス準同型写像 π_{p^ℓ} とは、 $\pi_{p^\ell}((x, y)) := (x^{p^\ell}, y^{p^\ell})$ である。 E/\mathbb{F}_p について、 $\#E(\mathbb{F}_p) = p + 1 - t$ となるような整数 t が存在する。この t は (フロベニウスの) トレースと呼ばれ、 $|t| \leq 2\sqrt{p}$ を満たす。

ある E/\mathbb{F}_p について、ある非平方数を D 、ある整数を f として、 $Df^2 = 4p - t^2$ という方程式を構成できる。これは Complex Multiplication (CM) 方程式と呼ばれ、 D は E の CM 判別式と呼ばれる。逆に CM 方程式が存在する場合、これに対応するような楕円曲線 E が存在する。CM 方程式から E を求める方法は CM 法 [13] と呼ばれる。

ペアリング： r を素数とし、 $\gcd(r, p) = 1$ および $r \mid \#E(\mathbb{F}_p)$ および $r^2 \nmid \#E(\mathbb{F}_p)$ を満たすものとする。 $r \mid (p^k - 1)$ となるような最小の正整数 k を、 E/\mathbb{F}_p の位数 r に関する埋め込み次数と呼ぶ。 μ_r を 1 の r 乗根の集合とする。定義より、 $\mu_r \subseteq \mathbb{F}_{p^k}$ である。 $\mathbb{G}_1 := E[r] \cap \ker(\pi_p - [1])$ および $\mathbb{G}_2 := E[r] \cap \ker(\pi_p - [p])$ とする。この時、非退化かつ双線形性を持ち、効率的に計算可能な写像 $e : \mathbb{G}_1 \times \mathbb{G}_2 \rightarrow \mu_r$ が存在する [11]。この e をペアリングと呼ぶ。

$P \in \mathbb{G}_1, Q \in \mathbb{G}_2$ とする。 Q より定まる正規化された E 上の次数 r のある有理関数 $f_{r,Q}$ を用いて、ペアリングの計算は $f_{r,Q}(P)^{\frac{p^k-1}{r}}$ と記述できる。次数 T の有理関数の評価値 $f_{T,Q}(P)$ と $[T]Q$ を求めるアルゴリズムは Miller のアルゴリズムと呼ばれる。また、 $(p^k - 1)/r$ 乗算は最終べき乗算と呼ばれる。どちらも符号付きバイナリ法 (または signed double-and-add 法とも呼ばれる) による反復計算で値を求める。Miller のアルゴリズムにおいては有理関数の次数 T が反復計算のパラメータであり、 $O(\log T)$ 回程度の有限体演算で計算できる。最終べき乗算も同じく符号付きバイナリ法により計算できる。しかし、 r や p^k が非常に巨大であるため、ペアリングの計算コストは大きい。高速にペアリングを計算可能な楕円曲線を選ぶことが、実用的なペアリング暗号の実装において重要な課題となる。

離散対数問題： 位数が素数 r の巡回群 \mathbb{G} について、 \mathbb{G} の群演算をここでは乗法 \cdot で記述する。 $g, h \in \mathbb{G}$ を入力に取り、 $g^x = h$ となるような整数 x を求める問題を離散対数問題 (Discrete Logarithm Problem, DLP) と呼ぶ。 \mathbb{G} が有限体の乗法群の部分群ならば、この問題は有限体離散対数問題 (Finite Field DLP, FFDLP) と呼ばれ、楕円曲線の有理点群の部分群ならば、楕円曲線離散対数問題 (Elliptic Curve DLP, ECDLP) と呼ばれる。ペアリング $e : \mathbb{G}_1 \times \mathbb{G}_2 \rightarrow \mu_r$ を使用するペアリング暗号では、その安全性を保証するためには、使用する楕円曲線 E/\mathbb{F}_p より定義される $\mathbb{G}_1, \mathbb{G}_2, \mu_r$ における全ての DLP が計算困難であることが要求される。一般的な FFDLP の最速の求解法は数体篩法または関数体篩法であり、求解にかかる時間は $\log p^k$ の準指数オーダーである。一般的な ECDLP の最速の求解法は Pollard の ρ 法であり、求解にかかる時間は $\log r$ の指数オーダーである。よって、十分に大きい r と p および埋め込み次数 k を持つ楕円曲線を使用することが、安全なペアリング暗号を実現するために重要である。

3. ペアリング暗号の効率的計算に適した楕円曲線

ここでは、ペアリング暗号の効率的な計算に適した楕円曲線の生成方法や、その要件を解説する。

曲線族： CM 法 [13] を利用することで、素数群位数 r や体位数 p および埋め込み次数 k を事前に定め、対応する楕円曲線 E を生成できる。しかし、暗号技術として利用可能な適切な条件を満

たす r, p, k および E の組みを求めることは一般的に難しい。この問題を解決する方法として、曲線族を用いて効率的に適切な楕円曲線を探査する方法が提案されている [7]。曲線族を利用した探索方法では、 k と CM 判別式 D を固定し、 r, p 、トレース t を自由に設定するのではなく、CM 方程式など必要な関係を満たす有理数係数多項式 $r(X), p(X), t(X)$ で表現されるものとして抽象化し、そして $r(z)$ と $p(z)$ が適切な楕円曲線 E を与える整数 z を探索する。この $k, D, r(X), p(X), t(X)$ の 5 つ組みを曲線族と呼び、代表的なものとして、Barreto–Lynn–Scott (BLS) 曲線族や Kachisa–Schaefer–Scott (KSS) 曲線族がある。例えば、埋め込み次数が 16、CM 判別式が 1 の KSS 曲線族 KSS16 は次の多項式により定義される：

$$\begin{aligned} t(X) &= (2X^5 + 41X + 35)/35, & r(X) &= (X^8 + 48X^4 + 625)/61250, \\ p(X) &= (X^{10} + 2X^9 + 5X^8 + 48X^6 + 152X^5 + 240X^4 + 625X^2 + 2398X + 3125)/980. \end{aligned} \quad (1)$$

なお、Guillevic [8, 9] は、いくつかの曲線族について、128 bit 安全性を持つ楕円曲線を生成するために必要な、曲線族に与える整数 z のビット長を見積もった。この見積もりによって得られる楕円曲線に関する r と p のビット長を、一部の曲線族について表 1 に示す。

効率的なペアリング計算法： Miller のアルゴリズムと最終べき乗算の両方に共通する効率化の基本的なアイデアは、素体 \mathbb{F}_p の拡大体で高速に計算することができる p べき乗算を利用することである。Miller のアルゴリズムでは $f_{r,Q}(P)$ と $[r]Q$ を計算する。この時、 r を p 進数展開 $r = \sum_{i=0}^d h_i p^i$ し、反復計算のパラメータが係数列 h_0, \dots, h_d となるようにアルゴリズムを変形できる。例えば、式 (1) に示した KSS16 については、ペアリング計算の効率的なアルゴリズムを次のような式で表現できる [15]：

$$e(P, Q) := \left((f_{X,Q}(P) \cdot \ell_{[X]Q, [p]Q}(P))^{p^3} \cdot \ell_{Q,Q}(P) \right)^{\frac{p^{16}-1}{r}}. \quad (2)$$

ここで、 $\ell_{A,B}$ は、直観的には楕円曲線 E 上の点 A と B を通る直線である（厳密な定義は割愛する）。最終べき乗算においても、同様に $(p^{16}-1)/r$ の p 進数展開を考えることで高速化が可能である（展開式が複雑なため、ここでは割愛する）。

また、Miller のアルゴリズムと最終べき乗算、それぞれの反復計算パラメータの p 進数展開は、式 (2) に示すように、曲線族の多項式表現の形式で得ることが可能である。これにより、曲線族を用いて楕円曲線を生成する前に、整数 z を与えた際のペアリングの計算コストをある程度推定できる。必ずしも最速のペアリング計算が可能となる保証は無いが、いくつかの BLS 曲線族や KSS 曲線族、Guillevic [8] による見積もりの報告に挙げられている曲線族に共通する性質として、曲線族に与える整数 z の符号付き 2 進数展開について、そのハミング重みが小さければ、その楕円曲線におけるペアリングの計算コストも小さい傾向がある。

zk-SNARK に適した楕円曲線： ペアリングに基づくいくつかの暗号方式は、その高速計算のために、使用する楕円曲線に対して特別な条件を要求するものがある。代表的なものがブロックチェーンにおけるプライバシー保護技術として利用されているゼロ知識簡潔非対話証明 *zk-SNARK* (Zero-Knowledge Succinct Non-interactive ARGument of Knowledge) [4] である。ここで、ペアリングの入出力となる 3 つの群 $\mathbb{G}_1, \mathbb{G}_2, \mu_r$ の群位数 r をある正の整数 κ とある奇数 u により $r-1 = 2^\kappa u$ と表現する時、 $\text{adic}_2(r) := \kappa$ とする。zk-SNARK 方式の高速計算を適用するためには $\text{adic}_2(r)$ がある程度大きい必要があり、 $\text{adic}_2(r) \geq 30$ が望ましいとされている [4]。

第 1 表: Guillevic [9] が見積もった 128 bit 安全性を持つ楕円曲線の候補の一部。 d はツイスト次数。ビット長が小さいほど性能が良い。

曲線族	r (bit)	p (bit)	$p^{k/d}$ (bit)	p^k (bit)	曲線族	r (bit)	p (bit)	$p^{k/d}$ (bit)	p^k (bit)
BN	446	446	892	5343	FM17	296	447	894	5356
BLS12	299	446	892	5352	KSS16	256	330	1320	5268

4. 探索プログラムの開発

ここでは、本課題で行ったプログラムの開発について述べる。

探索方針： 第 3 節で行った解説から、次のような楕円曲線の探索方針を定める。

方針 1 (zk-SNARK 方式の高速計算に適した楕円曲線). 曲線族 $k, D, p(X), t(X), r(X)$ を使用して zk-SNARK 方式に適した高速にペアリングが計算可能な楕円曲線を得るためには、次のような条件を満たす整数 z を探索する:

1. $p(z)$ と $r(z)$ が同時に素数となり、そのビット長は十分に大きい。
2. $\text{hw}(z)$ が小さい。
3. $\text{adic}_2(r(z))$ が大きい。特に $\text{adic}_2(r(z)) \geq 30$ が望ましい。

表 1 に挙げている曲線族のうち、BN, BLS12 (他の埋め込み次数の BLS 曲線族も含む), FM17 の曲線族に対して探索方針 1 に基づき楕円曲線を探索することは容易である。なぜならば、それら曲線族の $r(X)$ の定数項は 1 であり、有理数係数多項式 $g(X)$ によって $r(X) - 1 = g(X) \cdot X$ と分解が可能のため、 $\text{adic}_2(r(z))$ が大きくなるように z を設定することが比較的容易となる可能性が高いからである。しかし KSS16 の $r(X)$ の定数項は有理数であり、このような構造を持たない。よって、ハミング重みが小さく、 $\text{adic}_2(r(z))$ が大きい楕円曲線を発見することは困難であると予想される。

本課題の目的は、上記のように、困難な探索方針と曲線族についても所望の楕円曲線が発見できるように、大規模に楕円曲線の探索を行うプログラムを開発することである。そして、実際に実験を行い、その結果を観察することで、最良の楕円曲線の選択に貢献することを目標とする。

探索アルゴリズム： 探索方針 1 に基づく探索を、次の手続きを並列に処理することで行う:

- 最上位ビット位置 m とハミング重み w を入力に取り、そのような符号付き 2 進数展開 s_0, \dots, s_m を生成し、さらにこれに対応する整数 $z = \sum_{i=0}^m s_i 2^i$ に変換する。
- 曲線族 $k, D, p(X), t(X), r(X)$ と整数 z を入力に取り、 $p(z)$ と $r(z)$ が同時に素数となるか判定する。

ここで、符号付き 2 進数展開 s_0, \dots, s_m について、 s_0, \dots, s_m の値のうち、非ゼロの個数が w となる展開全ての集合を $\text{SB}_{m,w}$ と書く。なお、 $\#\text{SB}_{m,w} = 2^w \cdot \binom{m}{w-1}$ である。

開発および実験環境： 本課題では Oakbridge-CX [2] を使用した。その主な理由は、Python 処理系を拡張することで実装されている数式処理系 SageMath [3] の上でプログラムを開発し、開発工数を削減するためである。また、並列化を行うために mpi4py [1] (Python 用の MPI ラッパー) を使用した。

素数判定： 整数 z を代入した $p(z)$ と $r(z)$ が素数か否かを判定するために、SageMath が提供している `is_pseudoprime` 関数と `is_prime` 関数を使用した。前者は確率的な素数判定を行うため

高速に判定できる。そこで、最初に `is_pseudoprime` 関数を使用して素数判定を行い、これが真になった場合に続けて `is_prime` 関数を実行し、素数であるか否かを最終的に判定するような実装を行った。なお、 $p(z)$ と $r(z)$ のどちらかが有理数となった場合や、判定の結果が偽となった場合には、処理を打ち切っている (early abort)。このように実装することで、 $p(z)$ と $r(z)$ の素数判定の効率化を図った。

整数の並列生成： 探索を並列に行うためには、符号付き 2 進数展開 $s \in SB_{m,w}$ を素直に 1 つずつ直列に生成するのではなく、並列に生成する必要がある。そのために、整数と $SB_{m,w}$ の 1 対 1 対応を与える rank/unrank 関数 (完全ハッシュ関数とその逆関数) を構成する。展開 $s \in SB_{m,w}$ は、最大の非ゼロビット位置が m である w 個の非ゼロビットの位置とその各ビットの符号により表現可能である。つまり、 $\langle m \rangle$ から $w-1$ 個の整数を選ぶ組み合わせにより展開の最上位ビット以外の非ゼロビット位置を生成し、次にその各ビットの符号の列 $\{-1, 1\}^w$ を割り当てることにより、 $SB_{m,w}$ の要素を生成できる。そこで、 m 個の要素から $w-1$ 個選ぶ組み合わせ (総数 $\binom{m}{w-1}$) と $\{-1, 1\}^w$ (総数 2^w) の 2 つの対象それぞれの rank/unrank 関数を利用し、 $\langle \#SB_{m,w} \rangle = \{0, \dots, 2^w \cdot \binom{m}{w-1} - 1\}$ と $SB_{m,w}$ の要素の rank/unrank 関数を構成した。この $\text{unrank} : \langle \#SB_{m,w} \rangle \rightarrow SB_{m,w}$ を使用することで、任意の展開 $s = (s_0, \dots, s_m) \in SB_{m,w}$ と対応する整数 $z = \sum_{i=0}^m s_i 2^i$ を並列に生成できるようになる。

注意 1. 符号付き 2 進数展開による表現は冗長である。すなわち、1 つの整数 z に、 $z = \sum_{i=0}^m s_i 2^i$ ($i = \langle m+1 \rangle$ について $s_i \in \{-1, 0, 1\}$) となるような数値列 s_0, s_1, \dots, s_m が唯一とは限らない。そのため、上記の unrank 関数を用いて生成した展開 $s \in SB_{m,w}$ より得られた整数 $z = \text{SB2Int}(s)$ を求め、さらにその絶対値について符号付き 2 進数展開の 1 つである NAF (Non-adjacent form) [10] を求め、その結果得られた符号付き 2 進数展開を元々の z の正負に応じて各非ゼロの符号を反転させた $s'_0, s'_1, \dots, s'_{m'}$ を z の符号付き 2 進数展開として使用した。よって、プログラム実行時に指定した最上位ビット位置 m とハミング重み w とは異なる最上位ビット位置 m' とハミング重み w' を持つ z が得られる場合がある。なお、NAF への変換を実行した結果得られた符号付き 2 進数展開について、最上位ビット位置 m から数えて 3 つのビットが $s_{m-2} = \mp 1, s_{m-1} = 0, s_m = \pm 1$ であった場合、これを $s_{m-2} = \pm 1, s_{m-1} = \pm 1, s_m = 0$ と、最上位ビット位置が 1 小さい表現に変更することができる。なお、この場合は $m' = m-1, w' = w$ となる。Miller のアルゴリズムや最終べき乗算は z のビット長が短い程 (最上位ビット位置が小さい程)、計算コストが小さいため、このような変更を行うと有利となる可能性がある。

並列探索： 整数列 $\langle \#SB_{m,w} \rangle$ を分割し、それらを MPI により管理されるプロセスに割り当て、unrank 関数を使用することで並列に探索を行うことができる。しかし、ランダムに取り出した展開 $s \in SB_{m,w}$ について、 $p(\text{SB2Int}(s))$ と $r(\text{SB2Int}(s))$ が同時に素数となる事象を考えた時、その分布は不明である。つまり、 $SB_{m,w}$ を MPI が管理するプロセス数に等分割し、これを各プロセスに割り当てて並列に探索を行った場合、作業量が一定となる保証が無いため、最も作業量が大きいプロセスが終了するまで探索処理が終了しない。本課題では、分布の特定ではなく、producer-consumer スタイルによる並列探索を行うことで効率化を図る。各プロセスには、producer と consumer どちらかの役割が与えられる。また、consumer の役割を与えるプロセスの数を多く取るようにする。そして、次に述べるような処理を並列に行う。 $SB_{m,w}$ を適切な大きさに分割する。Producer 役のプロセスは、分割された $SB_{m,w}$ を管理し、consumer 役のプロセスに未探索の分割された整数列を割り当てる。Consumer 役のプロセスは、割り当てられた整数列を

第 2 表: 探索範囲 S_1 に対する探索結果

整数 z	$\text{adic}_2(z)$	$\text{hw}(z)$	r (bit)	p (bit)
$-2^{34} + 2^{27} - 2^{23} + 2^{20} - 2^{11} + 2^0$ ([9] より)	4	6	257	330
$-2^{34} - 2^{29} + 2^{24} - 2^{21} - 2^{19} - 2^{17} - 2^{15} - 2^{11} - 2^9 - 2^7 + 2^2 - 2^0$	20	12	257	331
$2^{34} + 2^{30} + 2^{26} - 2^{24} + 2^{21} - 2^{19} - 2^{17} - 2^{15} - 2^{11} - 2^9 - 2^7 + 2^2 - 2^0$	20	13	257	331
$-2^{34} - 2^{32} - 2^{30} - 2^{28} - 2^{25} - 2^{19} + 2^{17} + 2^{15} + 2^{11} + 2^9 + 2^7 - 2^2 + 2^0$	20	13	260	335
$-2^{35} + 2^{31} + 2^{26} + 2^{22} - 2^{19} + 2^{17} + 2^{15} + 2^{11} + 2^9 + 2^7 - 2^2 + 2^0$	20	12	264	340
$2^{34} + 2^{29} - 2^{27} - 2^{25} - 2^{23} - 2^{21} + 2^{17} - 2^{15} - 2^{11} - 2^9 - 2^7 + 2^2 - 2^0$	21	13	257	331
$2^{34} + 2^{33} - 2^{29} + 2^{27} + 2^{25} - 2^{23} + 2^{17} - 2^{15} - 2^{11} - 2^9 - 2^7 + 2^2 - 2^0$	21	13	261	336
$-2^{35} - 2^{31} - 2^{25} + 2^{21} - 2^{19} + 2^{17} - 2^{15} - 2^{11} - 2^9 - 2^7 + 2^2 - 2^0$	22	12	265	341

第 3 表: 探索範囲 S_2 に対する探索結果

整数 z	$\text{adic}_2(r)$	$\text{hw}(z)$	r (bit)	p (bit)
$2^{78} - 2^{76} - 2^{28} + 2^{14} + 2^7 + 2^0$ ([8] より)	4	6	605	766
$2^{78} + 2^{65} + 2^{46} - 2^{11} - 2^9 - 2^7 + 2^2 - 2^0$	17	8	609	771

unrank 関数を用いて曲線族の多項式に代入すべき整数 z の展開に変換し、 $p(z)$ と $r(z)$ が同時に素数になる整数 z を保存する。そして、割り当てられた整数列に対する全ての処理が終わった際には、次に探索すべき整数列を producer 役のプロセスに対して要求する。このような方法で作業量を均等化し、並列探索の性能向上を図った。

5. 実験

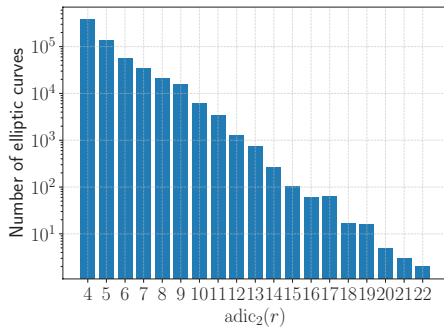
ここでは、開発したプログラムを用いて実施した探索実験について述べる。

探索対象の設定： 曲線族として KSS16 を用いて探索を行った。探索対象となる整数の集合 $SB_{m,w}$ の最上位ビット位置 m は、Guillevic [8] による見積もりを参考に、128 bit 安全性と 192 bit 安全性の達成に必要な最上位ビット位置に近い値とした。具体的には $m \in \{33, 34, 35, 77, 78\}$ と設定した。ハミング重みについては、 $w = 1$ から順に 1 つずつ増やしながら設定し、探索を行った。

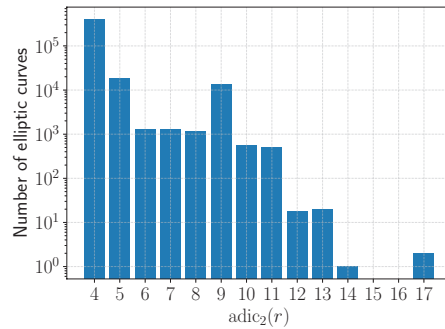
探索結果の概要： 最上位ビット位置 $m \in \{33, 34\}$ についてはハミング重み $w \in \{1, \dots, 13\}$ まで、 $m = 35$ については $w \in \{1, \dots, 12\}$ まで探索を行った。この探索が完了した範囲を S_1 と書く。 S_1 に対する探索について、重複を排除せずに数え上げて 12 105 138 309 966 個 ($\approx 2^{44}$ 個) の整数を列挙し、657 578 個 ($\approx 2^{20}$) の楕円曲線を発見した。しかし、発見した楕円曲線のうち、最大の $\text{adic}_2(r)$ は 22 であった。

最上位ビット位置 $m \in \{77, 78\}$ についてはハミング重み $w \in \{1, \dots, 8\}$ まで探索を行った。この探索が完了した範囲を S_2 と書く。 S_2 に対する探索について、重複を排除せずに数え上げて 2 137 041 827 694 個 ($\approx 2^{41}$ 個) の整数を列挙し、434 731 個 ($\approx 2^{19}$) の楕円曲線を発見した。発見した楕円曲線のうち、最大の $\text{adic}_2(r)$ は 17 であった。

探索範囲 S_1 に対する探索により発見した楕円曲線のうち、 $\text{adic}_2(r) \geq 20$ であり、群位数が 256 bit 以上の楕円曲線を与える整数 z を表 2 に示す。また、 S_2 に対する探索により発見した楕円曲線のうち、 $\text{adic}_2(r) \geq 16$ であり、体位数が 766 bit 以上の楕円曲線を与える整数 z を表 3 に示す。なお、表 2 と表 3 それぞれについて、比較のためにハミング重みが小さい整数 z も示す。 S_1 と S_2 それぞれについて、発見した楕円曲線の $\text{adic}_2(r)$ の頻度分布を図 1 に示す。



(a) S_1 の探索結果



(b) S_2 の探索結果

第 1 図: 発見した楕円曲線の $\text{adic}_2(r)$ の頻度分布

考察： 本課題では $\text{adic}_2(r) \geq 30$ となるような楕円曲線を発見できなかった。そこで、実験結果を元に発見するために必要な計算量を見積もる。探索範囲 S_1, S_2 について、発見した楕円曲線の個数の \log_2 の値と最大の $\text{adic}_2(r)$ の値が比較的近いこと、そして、図 1a に示す S_1 の探索結果の対数頻度分布が線形に減少していることから、楕円曲線の群位数 r を符号無し 2 進数展開 $r = \sum_{i=0}^m b_i 2^i$ (ここで $i = \langle m+1 \rangle$ について $b_i \in \{0, 1\}$) を考えた時、探索により発見される楕円曲線の r の下位のビット b_0, b_1, \dots の分布は独立様であると仮定する。このような仮定を置いた場合、 $\text{adic}_2(r) = \gamma$ となるような楕円曲線を発見するためには 2^γ 個の楕円曲線を発見する必要があると考えられる。目標は $\gamma \geq 30$ であり、今回実施した実験では、探索範囲 S_1 と S_2 それぞれについて $2^{30-20} = 1024$ 、 $2^{30-19} = 2048$ となるため、今回使用した 17280 ノード時間の 2048 倍の 35389440 ノード時間の計算量を投げれば、 $\text{adic}_2(r) \geq 30$ となる楕円曲線を発見できるという見積もりとなる。この見積もりは、探索方針 1 に示すような $\text{hw}(z)$ が小さく $\text{adic}_2(r(z))$ が大きい楕円曲線を本課題で実装したアルゴリズムで探索することは難しく、さらなる高速化やアルゴリズムの改良が必要であることを示唆している。

注意 2. 上記の見積もりは根拠が不明瞭な経験則に基づくものであり、背後にある数学的な構造を明らかにしていないこと、作成したプログラムのプロファイリングに基づく見積もりではないため、実際には大きな誤差が生じる可能性や逸脱する可能性が否定できないことに注意。

また、表 2 および表 3 に示す整数 z の符号付き 2 進数展開による表現を観察すると、ビット位置 0 から 17 付近までに共通あるいは類似のパターンが表れていることがわかる。これは、探索空間にある整数のうち、適切な楕円曲線を与え、その $\text{adic}_2(r)$ が高い整数の分布には何らかの構造が存在することを示唆している。これを明らかにし、整数の生成に活用することができれば、探索アルゴリズムの改良が可能となるかもしれない。

6. まとめ

本課題では、探索方針 1 に基づく並列に楕円曲線を探索するプログラムを作成した。これを用いて、KSS16 曲線族に対して探索を行った。ある程度の範囲について探索を行ったが、KSS16 について $\text{adic}_2(r)$ が十分に大きい楕円曲線を発見することはできなかった。また、本課題で実装したアルゴリズムを用いて探索方針 1 に基づく探索、すなわち、 $\text{hw}(z)$ が小さく $\text{adic}_2(r(z))$ が大き

い適切な楕円曲線を与える整数 z を探索することは難しく、さらなる高速化あるいはアルゴリズムの改良が必要であると考えられる。また、実験により得られた整数には、一定のパターンがあることがわかった。これを解析し、アルゴリズムの改良に活かすことの検討が今後の課題である。今回は Cheon の攻撃法 [5] を考慮していない。この攻撃法の対象となる zk-SNARK 方式が存在するため、Cheon の攻撃法を考慮したパラメータや探索方針の調整を検討することも、今後の課題である。

参 考 文 献

- [1] “mpi4py · pypi,” <https://pypi.org/project/mpi4py/>.
- [2] “Oakbridge-CX スーパーコンピュータシステム,” <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/>.
- [3] “SageMath – open-source mathematical software system,” <https://www.sagemath.org/>.
- [4] E. Ben-Sasson et al., “SNARKs for C: verifying program executions succinctly and in zero knowledge,” in *CRYPTO 2013*, 2013, pp. 90–108.
- [5] J. H. Cheon, “Discrete logarithm problems with auxiliary inputs,” *J. Cryptol.*, vol. 23, no. 3, pp. 457–476, 2010.
- [6] N. El Mrabet and M. Joye, Eds., *Guide to Pairing-Based Cryptography*. Chapman and Hall/CRC, 2016.
- [7] D. Freeman et al., “A taxonomy of pairing-friendly elliptic curves,” *J. Cryptol.*, vol. 23, no. 2, pp. 224–280, 2010.
- [8] A. Guillevic, “A short-list of pairing-friendly curves resistant to special TNFS at the 128-bit security level,” in *PKC 2020*, 2020, pp. 535–564.
- [9] ———, “Pairing-friendly curves,” <https://members.loria.fr/AGuillevic/pairing-friendly-curves/>, 2021, (Accessed 2021/06/04).
- [10] D. Hankerson et al., *Guide to Elliptic Curve Cryptography*. Springer-Verlag New York, Inc., 2004.
- [11] F. Hess, “Pairing lattices,” in *Pairing 2008*, 2008, pp. 18–38.
- [12] A. Joux, “A one round protocol for tripartite Diffie-Hellman,” *J. Cryptol.*, vol. 17, no. 4, pp. 263–276, 2004.
- [13] K. Rubin and A. Silverberg, “Choosing the correct elliptic curve in the CM method,” *Math. Comput.*, vol. 79, no. 269, pp. 545–561, 2010.
- [14] R. Sakai et al., “Cryptosystems based on pairing,” in *SCIS 2000*, January 2000, pp. 26–28, in Japanese.
- [15] X. Zhang and D. Lin, “Analysis of optimum pairing products at high security levels,” in *INDOCRYPT 2012*, 2012, pp. 412–430.

クライオ電子トモグラフィーによる *in situ* 構造生物学

小田賢幸

山梨大学医学部解剖学講座構造生物学教室

1. 電子顕微鏡を用いた構造生物学の歴史

構造生物学とは、X線や電子線、核磁気共鳴などを用いてタンパク質の三次元構造を解析する学問である。その歴史は1958年のKendrewらによるミオグロビンのX線結晶構造¹より始まり、Klugらによる電子顕微鏡によるヒトパピローマウイルスの構造解析²、Wüthrichらによるタンパク質分解酵素阻害剤 IIA の NMR 構造³と続いた。しかし原子分解能に達する X 線結晶解析や NMR と異なり、電子顕微鏡によって解かれた構造は辛うじて alpha-helix などの二次構造がわかるか、あるいは丸いか伸びているか平たいかという大まかな形状しかわからないことが多く、しばしば“blob-ology”と揶揄された。この不名誉な状況を変えたのが、Direct electron detector の開発である。従来の CCD/CMOS カメラでは、電子線をシンチレータに当て発生した光子を検出していたが、これでは光子の散乱が大きく分解能が大きく損なわれていた。そこで開発されたのが Active Pixel Sensor 技術⁴で、電子線を直接 CMOS センサーで検出することにより 1 つの電子を 1 ピクセル以下の分解能で検出できるようになった。この Direct electron detector の開発は驚異的な detective quantum efficiency の向上をもたらし、電子線によるタンパク質構造解析を飛躍的に発展させた。特に、電子線の照射によるタンパク質分子の位置のブレを frame 毎にトラックすることで補正できるようになったことで分解能はさらに向上した⁵。このような“Resolution Revolution”と呼ばれる技術革新⁶は、2017年のノーベル化学賞にクライオ電子顕微鏡技術を開発した3名の研究者が選ばれることで世界的に注目されることとなり、構造生物学はトップジャーナルの常連となるほど生物学において大きな存在感を獲得した。

構造生物学者は未だ興奮冷めやらぬといった雰囲気であるが、同じように構造解析に電子線を用いる材料工学の研究者と話すとき「現行の CMOS になんの問題があるのか」と議論が噛み合わないことが多い。これはタンパク質が電子線損傷に極めて弱いことに起因する。タンパク質の電子顕微鏡観察は液体窒素温度下で行っているにも関わらず、僅か5 electron/Å²の照射でカルボキシル基が脱落しジスルフィド結合の解離が生じる⁷。従って構造生物学においては材料工学で用

¹ Kendrew JC et al A three-dimensional model of the myoglobin molecule obtained by x-ray analysis Nature 181: 662-6. 1958.

² Crowther RA et al Three Dimensional Reconstructions of Spherical Viruses by Fourier Synthesis from Electron Micrographs Nature 226: 421-425. 1970.

³ Williamson MP et al Solution conformation of proteinase inhibitor IIA from bull seminal plasma by 1H nuclear magnetic resonance and distance geometry. J. Mol. Biol. 182: 295-315. 1985.

⁴ Milazzo AC et al Active pixel sensor array as a detector for electron microscopy. Ultramicroscopy 104: 152-9. 2005.

⁵ Lin X et al Electron counting and beam-induced motion correction enable near-atomic-resolution single-particle cryo-EM. Nature Methods 10: 584-590. 2013

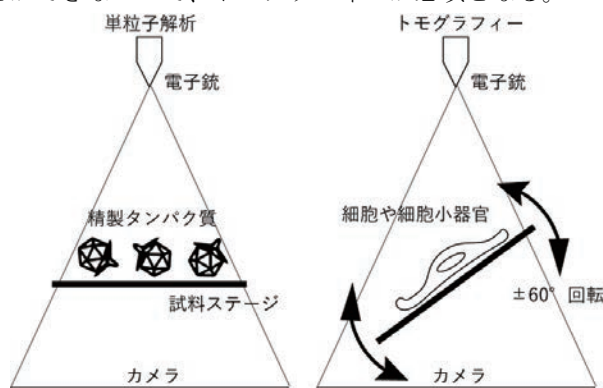
⁶ Kühlbrandt W. The resolution revolution. Science 343: 1443-1444. 2014.

⁷ Hatte J et al Analysis of Global and Site-Specific Radiation Damage in Cryo-EM. Structure 26: 759-66. 2018.

いられる線量とは桁違いに少ない電子線しか当てられない。タンパク質の原子構造は弱い電子線照射でぼんやりと見える数十万から数百万の画像を平均化することでようやく得ることができるもので、日常的にその場観察で原子を見ている材料工学とは全く世界観が異なるのである。

2. クライオ電子顕微鏡による構造解析法

上記のように、タンパク質は極めて電子線に弱く構造解析には手間がかかる。一般に用いられている電子顕微鏡用の生体試料調製は、真空下での観察と電子線損傷からの保護を目的として化学架橋剤や重金属染色、脱水と樹脂包埋といった harsh な処理が行われる。これではタンパク質の native な構造を得ることができないので、無固定・無染色・水和状態のタンパク質を電子顕微鏡で観察する方法がクライオ電子顕微鏡法である⁸。この技術は、直径約 1 μm の孔が空いたカーボン膜にタンパク質水溶液を載せ、ろ紙で液体を吸い取った後に孔に張った厚さ数十～数百 nm の水の膜を液体エタンで急速凍結することで、タンパク質分子を非晶質の氷の膜に包埋するものである。この凍結試料からタンパク質の構造を解析する方法は、単粒子解析とトモグラフィーの2つが主である(第1図)。単粒子解析は、タンパク質が氷の中で様々な方向を向いて包埋されていることを利用して、画像から各分子の投影像を切り出し、中心断面定理を用いて逆空間で三次元情報を再構築し、それを逆フーリエ変換することでタンパク質の三次元構造を得る方法である。またトモグラフィーは、一つの試料を回転し連続傾斜像を撮影することで様々な角度からの投影像を得て、それを逆投影で三次元再構築する方法である。トモグラフィーは一つの試料から三次元構造を得ることができるという利点があるが、一つの試料に 40～60 回電子線照射をする必要があるため、一つの試料に 1 回だけ照射すればよい単粒子解析と比較すると各傾斜画像の S/N 比は非常に小さくなる。また、電子線照射により試料が次第に変形すること、傾斜した氷表面の電荷により電子線が曲がること、高傾斜において試料が厚くなり非弾性散乱によるノイズが大きくなること、傾斜角度に限界があるので情報欠落が不可避であることなど不利な点が多く、単粒子解析と比べるとトモグラフィーは普及していない。しかし細胞小器官あるいは細胞そのものなどの *in situ* 構造は、大きく不均一な試料は単粒子解析を用いることができないので、トモグラフィーが必須となる。



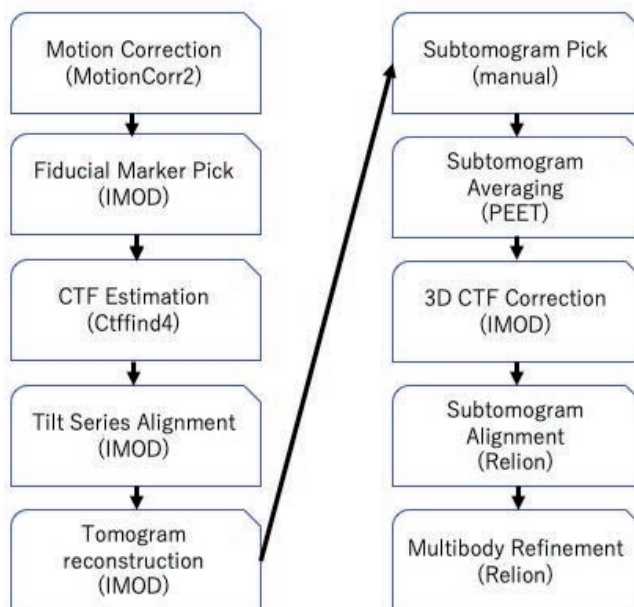
第1図: 単粒子解析とトモグラフィーの比較。Murata and Wolf より改変⁹。

⁸ Dubochet J. et al Electron microscopy of frozen water and aqueous solutions. J. Mol. Biol. 128: 219-237. 1982.

⁹ Murata K and Wolf M. Cryo-electron microscopy for structural analysis of dynamic

3. クライオ電子トモグラフィーの画像処理

凍結試料の連続傾斜像を1データ撮影するのに約20分ほどかかるので、電子顕微鏡の補正作業や試料位置合わせを含め1日に50データセット程度撮影することができる。これらのデータからタンパク質の三次元構造を得る工程は以下のようになる(第2図)。



第2図:クライオ電子トモグラフィーのデータ解析工程。括弧内はプログラム名。

1 データセットは通常 -60° から $+60^{\circ}$ の傾斜角を 3° 間隔で撮影された40枚の投影像(4,092×5,760 pixels each)から構成され、それぞれの投影像はさらに20 framesに分割されているので1日の撮影で出力される総データ量は 2.6×50 GB程度になる。データ解析の最初の工程はframe間のブレ修正である(Motion Correction)⁵。連続する2つのframe間の相関を取ることでブレの方向と大きさを求め、平均することでブレ補正をするわけであるが、実際は試料の位置によってブレのベクトルは異なるため、1 frameを12箇所程度に分割し各場所におけるブレを相関から求め、spatiotemporally-smooth 2D polynomial functionとして算出する¹⁰。GPUにより高速化が可能で、1つの連続傾斜データセットを処理するのに10分程度であるから次の試料を撮影中に処理が終わる計算である。なお解像度を原子分解能まで向上させるためには12箇所程度の分割では不足しており分子単位でmotion correctionを行う必要があるが¹¹、S/N比が小さいトモグラフィーにおいては困難であり、一部のS/N比が高い試料でのみ行われているが応用範囲は狭くない¹²。次の工程は、傾斜像間の位置関係

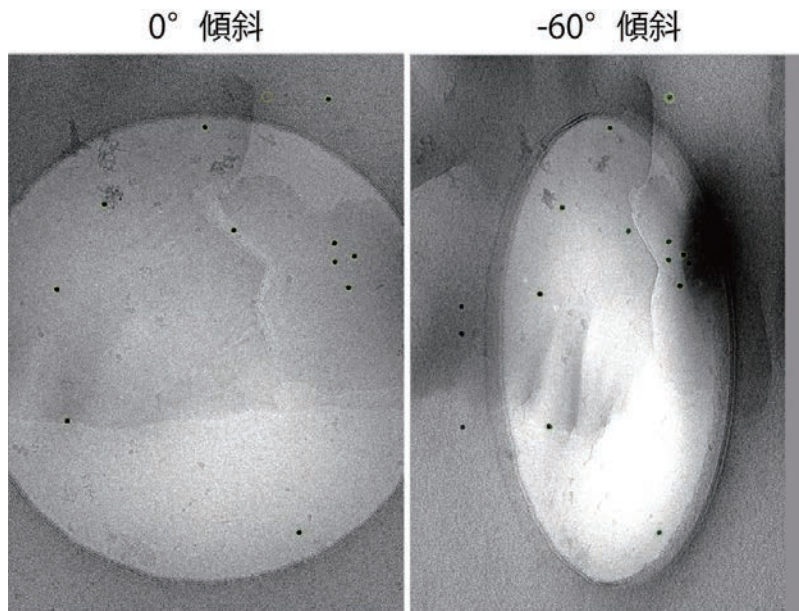
biological macromolecules. *Biochem. Biophys. Acta* 1862: 324-334. 2018.

¹⁰ Zheng et al MotionCor2 - anisotropic correction of beam-induced motion for improved cryo-electron microscopy. *Nat. Methods.* 14: 331-332. 2017.

¹¹ Zivanov et al A Bayesian approach to beam-induced motion correction in cryo-EM single-particle analysis. *IUCrJ* 6: 5-17. 2019.

¹² Tegunov et al Multi-particle cryo-EM refinement with M visualizes ribosome-

を補正するための fiducial marker を拾う作業である。理想的には撮影している試料内の任意の構造が各傾斜像においてどこに存在するか assign すれば良いが、クライオ像はコントラストが低いので直径 5~15 nm の金コロイド粒子を試料に混ぜることで marker とする(第 3 図)。コントラストの高い金コロイド粒子の位置を傾斜像毎に assign することで連続傾斜像の中で観察対象の構造をトラックすることができる。



第 3 図:金コロイド粒子を用いた fiducial marker pick(緑丸)。

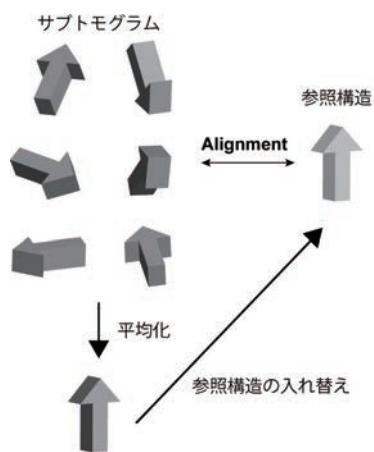
次の工程は contrast transfer function (CTF) 補正である。クライオ電子顕微鏡撮影ではぼんやりとしか見えない生体試料のコントラストを上げるために、単粒子解析においては 1~2 μm 程度、トモグラフィーにおいては 3~6 μm 程度の underfocus で撮影する。この“defocusing”により画像は逆空間においてコントラストが oscillate する位相コントラスト伝達関数 CTF によって modulate されることになる。空間周波数によってはコントラストが 0 になったり、非常に小さくなったりするので、underfocus の値を画像毎に変化させることで情報の欠落を補完することになる。またコントラストが反転している周波数領域については、正しいコントラストに反転させる必要があるので、各画像の underfocus 値を正確に求め、CTF 補正をしなければならぬ¹³。クライオ電子トモグラフィー、特に高傾斜像においてコントラストの低い画像の CTF 測定は困難であるため、単粒子解析と比較してトモグラフィーの underfocus 値は大きくせざるを得ない。最近 Volta phase plate の使用により小さな underfocus 値でも高いコントラストを得ることができるようになったが¹⁴、照射電子線量が限られるトモグラフィーでは小さな underfocus の画像から正確な推定を行うことが困難であり、高解像度情報の解析には適していない。以上の工程で連続傾斜像から三次元トモ

antibiotic complex at 3.5 Å in cells. *Nat. Methods.* 18: 186-193. 2021.

¹³ Zanetti G et al Contrast transfer function correction applied to cryo-electron tomography and sub-tomogram averaging. *J. Struct. Biol.* 168: 305-312. 2009.

¹⁴ Danev R et al Using the Volta phase plate with defocus for cryo-EM single particle analysis. *eLife* 6:e23006. 2017.

グラムを再構成するに必要な情報が揃ったので、逆投影による再構成を行う¹⁵。中心断面定理により、3D object の二次元投影像の 2D フーリエ変換は元の 3D object の 3D フーリエ変換の中心断面に対応するので、各傾斜像を傾斜角に合わせて逆空間に配置すればトモグラムを再構成することができる。しかし、等間隔の角度で撮影された連続傾斜像のフーリエ変換を逆空間に配置すると、空間周波数が小さい部分では情報が密になり空間周波数が大きい部分では情報が疎になるので、単純な逆投影で得られるトモグラムは低解像度情報が強調されたものになる。これを補正するため、radially weighted 逆投影を行い高解像度成分の底上げを行う。このような weighted-backprojection(WBP)が基本的なトモグラム再構成の方法であるが、再構成したトモグラムから連続投影像を作成し、元データとの差分が小さくなるように iteration を行う Simultaneous Iterative Reconstruction Technique (SIRT) という方法も存在する¹⁶。SIRT で得られるトモグラムは確かにコントラストが高くなるが、あくまで低解像度成分が補正されているだけで、高解像度情報が改善しているわけではない。時間がかかる SIRT を行うよりは、シンプルに WBP で済ませるのが実用的である。再構成されたトモグラムは高傾斜情報が欠け、S/N 比も小さいので目的の分子構造情報を得ることはできない。そこでトモグラムの一部を切り出し、そのサブトモグラムを平均化することで高解像度情報の獲得と情報欠損の埋め合わせを行う¹⁷。平均化には、サブトモグラムをオイラー角回転、XYZ 軸移動変換を行い、参照三次元構造と最も相関する変換を求め平均化、それを新たな参照構造とする、という操作を繰り返し構造を収束させる(第 4 図)。



第 4 図: サブトモグラム平均化

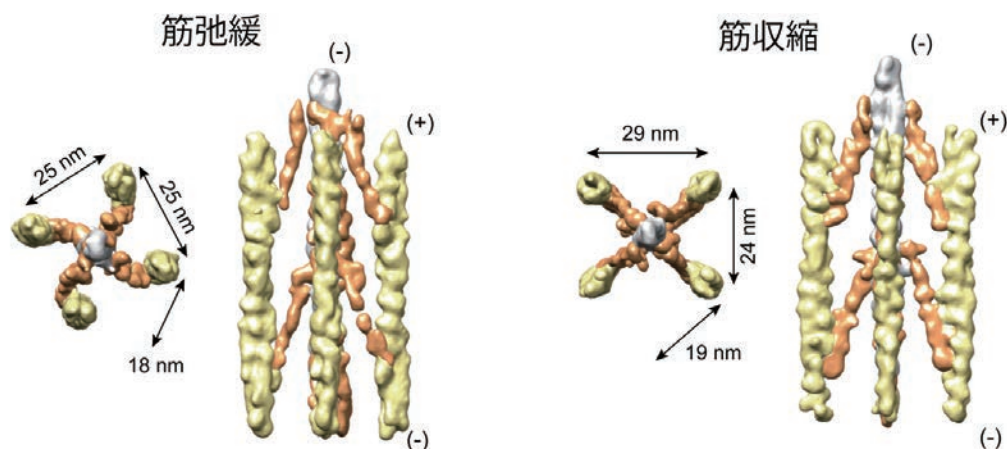
初期値の参照構造には任意のサブトモグラムを用いるか、あるいは 2^n 個 (512 か 1,024) のサブトモグラムを 2^{n-1} 対のペアに分け、各ペア間で相関を取り重ね合わせることを n 回繰り返す bias-free reference generation を行う。これで理論上構造解析は終わるはずであるが、primitive な averaging では高解像度に達することは難しい。そこで行う次の工程が 3D CTF 補正である。

¹⁵ Kremer JR et al Computer visualization of three-dimensional image data using IMOD. J. Struct. Biol. 116:71-76. 1996.

¹⁶ Gilbert P. Iterative methods for the three-dimensional reconstruction of an object from projections. J. Theor. Biol. 36: 105-117. 1972.

¹⁷ Nicastro D. et al The molecular architecture of axonemes revealed by cryoelectron tomography. Science 313:944-948. 2006.

トモグラム再構成前に行った CTF 補正は二次元投影像に対して行った処理であるが、この方法では各サブトモグラムについて正確な CTF 補正は行われていない。なぜなら傾斜軸からの距離や試料の Z 位置によって各サブトモグラムの underfocus 値は異なるからである。さらに電子線損傷の蓄積値と傾斜角によって投影像の包絡関数も変わるので、それらを加味した三次元の CTF を用いてサブトモグラムの補正を行う必要がある¹⁸。3D CTF 補正をかけたサブトモグラムを単粒子解析と同じサブルーチンで align するのが次の工程である¹⁹。前述の primitive なサブトモグラム平均化とは異なり、Relion を用いた subtomogram alignment はオイラー角の sampling rate と translational search の範囲を iteration 毎の解像度推定に基づいて求めるため、overfitting を防ぎつつより高い解像度を得ることができる。しかしトモグラフィーで撮影するような構造は不均一性が高いものが多く、通常の alignment では解像度が伸びないことが多い(第 5 図)²⁰。



第 5 図:心筋 Z 帯の平均化サブトモグラム。筋弛緩状態と筋収縮状態で構造が変化している。アクチン繊維 (黄色、灰色) と α アクチニン (橙色) が判別できるが、解像度は低い。

トモグラフィーで解析される多数のタンパク質分子の複合体は、各サブユニット間の位置関係に揺れがあることが多く、これが構造の不均一性をもたらしている。このような揺れる複合体構造の解像度を向上させる方法が multi-body refinement である²¹。第 5 図の例では、アクチン繊維と α アクチニン分子の位置関係に揺れがある。そこでアクチン繊維と α アクチニン分子に対し別個にオイラー回転角と XYZ 軸移動値を与え、構造を収束させる。この際、 α アクチニン分子がアクチン繊維との結合部位を中心として回転しているという前提の元に回転角と軸移動値に縛りを与える。この工程により解像度が向上したアクチン繊維、 α アクチニン分子の構造が得られ、

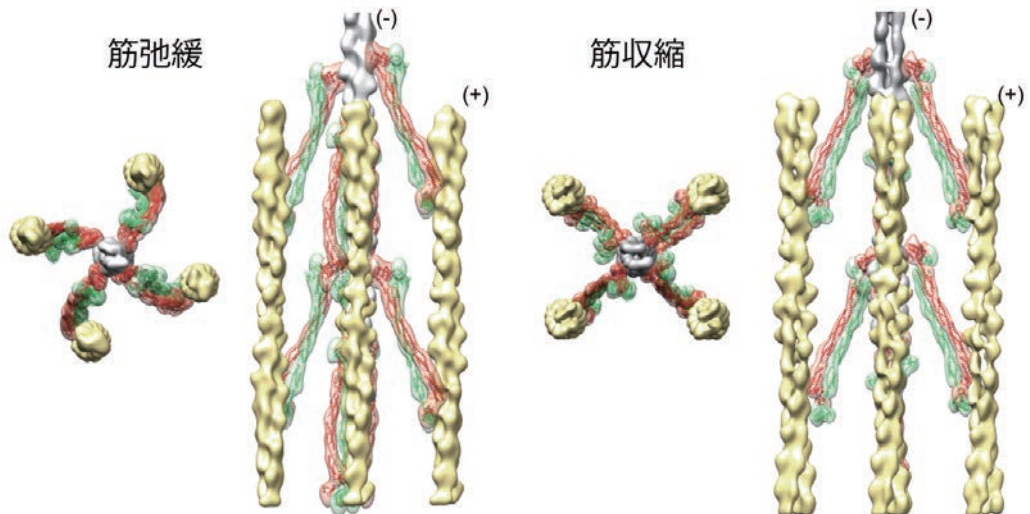
¹⁸ Turonova B et al Efficient 3D-CTF correction for cryo-electron tomography using NovaCTF improves subtomogram averaging resolution to 3.4 Å. *J. Struct. Biol.* 199: 187-195. 2017.

¹⁹ Bharat TAM and Scheres SHW Resolving macromolecular structures from electron cryo-tomography data using subtomogram averaging in RELION. *Nat. Prot.* 11: 2054-2065. 2016

²⁰ Oda T and Yanagisawa H. Cryo-electron tomography of cardiac myofibrils reveals a 3D lattice spring within the Z-discs. *Comm. Biol.* 3:585. 2020.

²¹ Nakane T et al Characterisation of molecular motions in cryo-EM single-particle data by multi-body refinement in RELION. *elife* 7:e36861. 2018.

さらにそれら二構造の相対的なオイラー角と軸移動値の範囲が判明する。最終的な結果にはそれらの値の中央値を取り、アクチン繊維と α アクチニン分子の構造を重ね合わせることで「揺れていない」複合体構造を示すことができる（第6図）²⁰。



第6図:Multi-body refinementで解像度が向上した心筋Z帯の平均化サブトモグラム。 α アクチニン二量体の各分子（赤色、緑色）を判別することができる。

4. おわりに

本研究において主に Relion プログラムを用いたサブトモグラム平均化と multi-body refinement に Reebush-L を利用した。サブトモグラムの構造解析、特に multi-body refinement は GPU 負荷が大きく Reebush-L のスペックでもかなり厳しい計算量であった。今回の multi-body refinement においては2つのアクチン繊維と2つの α アクチニン単量体の 4-body refinement が必要であり、一回の計算が 200 時間を超えるため Reebush-L の walltime を超過しプロセス管理が煩雑であった。最終的に 16 回の 4-body refinement を筋弛緩、筋収縮の2状態に対して行った。今後、タンパク質の構造解析に求められる PC スペックは益々高くなり、GPU の品薄状況を考えても個々の研究室で整備できる計算環境には限界があり共通計算機センターの需要は高まっていくと考えられる。Reebush 退役後の GPU 計算機のスペックには期待と不安があるが、今後も共通計算資源の供給を継続して頂きたい。

参 考 文 献

小田賢幸『クライオ電子トモグラフィーの実用技術』, 顕微鏡, 53(1):18-23. 2018

分子動力学シミュレーションによる自己炎症性疾患に関わるタンパク質の研究

大滝大樹

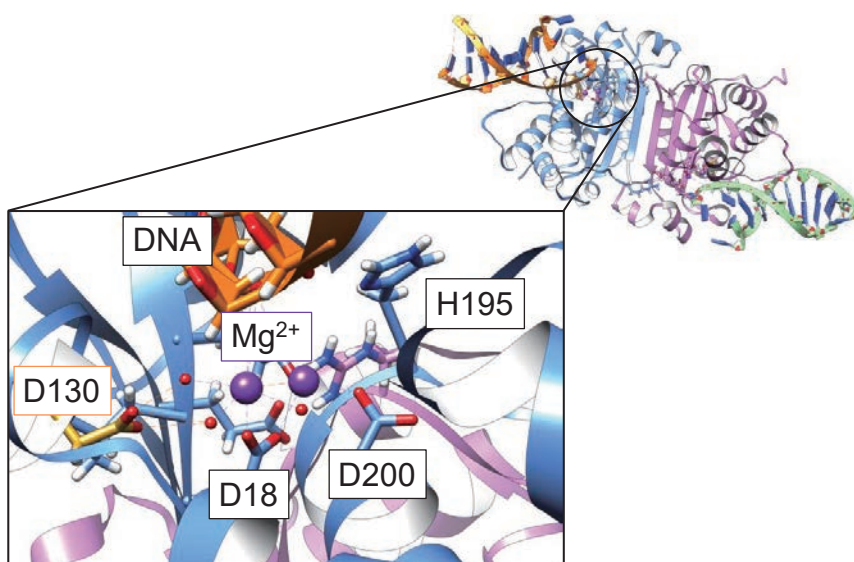
長崎大学 生命医科学域（医学系） 分子標的医学研究センター

1. はじめに

自己炎症性疾患は、もともと人間に備わっている自然免疫の異常によって炎症反応が起こり、臓器に障害を生ずる疾患の総称である。原因・機序などにおいて不明な点も多く、病態の解明および治療法の開発が喫緊の課題である。大規模ゲノム解析により遺伝子変異と疾患の関係が明らかになってきており、自己炎症性疾患疾患においても責任遺伝子が次々と同定されている。一方、遺伝子がコードするタンパク質を考えると、遺伝子変異がタンパク質の機能に及ぼす影響およびそのメカニズムについては不明な点が多い。本研究では、遺伝子変異がタンパク質に及ぼす影響を調べることを目的として、自己炎症性疾患であるエカルディ・グティエール症候群 (Aicardi-Goutières Syndrome: AGS) に関わるタンパク質 TREX1 と、家族性地中海熱 (Familial Mediterranean Fever: FMF) に関わるタンパク質 Pyrin について変異型のモデルを作成し、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) シミュレーションを行った。

2. TREX1 タンパク質の計算

TREX1 は、逆転写で生じた異常な DNA を分解する酵素である。酵素反応の活性中心には 2 個の



第 1 図: TREX1-DNA 複合体の構造 (PDB: 5YWS)。

2つのプロトマーが会合して二量体を形成し、各プロトマーがDNAと結合している。拡大部は反応の活性中心を表す。活性中心には2つのMg²⁺イオンが存在する。本稿における分子図はUCSF Chimera[1]を用いて作成した。

Mg²⁺イオンが存在し、反応に重要な役割を担っている（第1図）。AGS以外にも全身性エリテマトーデス（Systemic Lupus Erythematosus: SLE）、家族性凍瘡状狼瘡（Familial Chilblain Lupus: FCL）、大脳白質脳症を伴う網膜血管障害（Retinal Vasculopathy with Cerebral Leukoencephalopathy: RVCL）などの免疫系疾患の患者にも *TREX1* 遺伝子に変異が見られ、酵素作用が失活することが知られている[2]。最近、長崎大学病院の SLE 患者から *TREX1* における稀少変異 D130N（130 番目のアミノ酸残基におけるアスパラギン酸（D）からアスパラギン（N）への変異）が見つかった。この変異が *TREX1* タンパクに与える影響を調べるために、変異型のモデリングおよび MD シミュレーションを行った。

2. 1. 計算方法

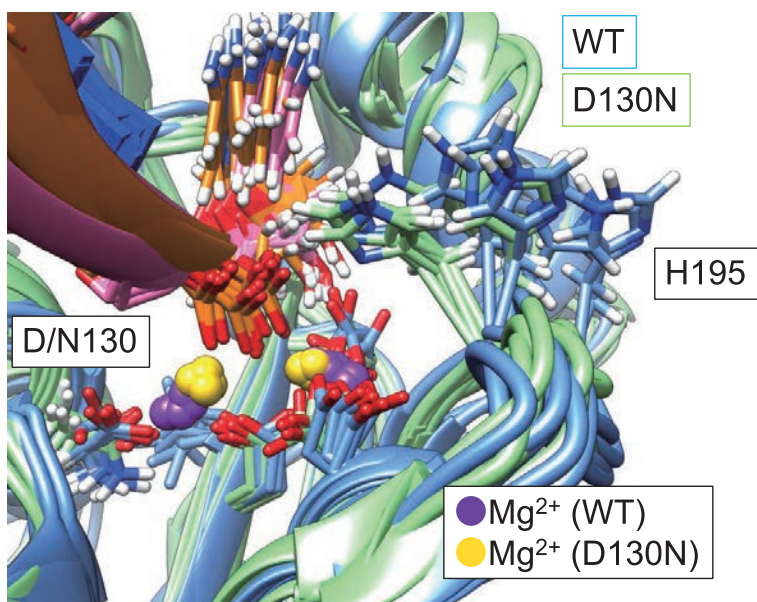
変異型のモデリングは野生型 *TREX1* と DNA の複合体 (PDB: 5YWS) [3] を出発点とし、SCWRL4[4] を用いて D130N 変異体を作成した。タンパク質の末端は、N 末端側、C 末端側をそれぞれアセチル化、N-メチルアミド化することでキャップした。

MD 計算は GROMACS[5] を用いて Reedbush-H 上で行った。力場は、タンパク質に AMBER ff99SB*-ILDN[6, 7], DNA に ParmBSC0[8, 9], 水分子には TIP3P[10] を用いた。*TREX1* の活性中心にある Mg²⁺ には Allnér らのパラメータ[11]を用いた。野生型と D130N 変異型のそれぞれについて、独立した 150 ns の MD シミュレーションを 3 回ずつ行った。van der Waals 相互作用のカットオフは 1.2 Å とし、クーロン力による静電相互作用の計算には Particle Mesh Ewald 法[12]を用いた。系の温度は Velocity-rescaling 法[13]により 300 K に制御し、圧力は Berendsen 法[14]により 1 bar に制御した。MD 計算の時間刻みは 2 fs とした。スナップショットは 10 ps 毎に取得し、50-150 ns のトラジェクトリを用いて解析を行った。水素結合解析は AmberTools17[15]を用いて行った。

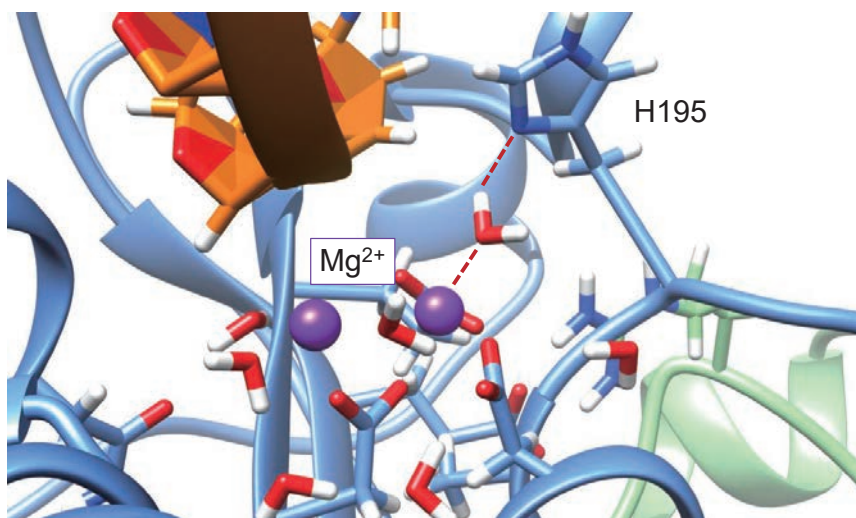
2. 2. 結果

第2図に MD 計算終了時（150 ns）の活性中心周りのスナップショットを重ねたものを示す。まず、Mg²⁺イオンの位置に着目すると、野生型 (Wild Type: WT) と比べて、D130N 変異型では変異が起きた N130 側の Mg²⁺イオンの位置が大きく変化し、2つの Mg²⁺イオン間の距離が短くなっている。これは側鎖が生体環境下で負電荷を持つアスパラギン酸（D）から電気的に中性であるアスパラギン（N）へ変異したことにより、N130 が Mg²⁺イオンを引き寄せられなくなったためと考えられる。Mg²⁺イオン間の距離は酵素反応の効率を大きく左右する[16]。この結果は、D130N 変異型では酵素反応の効率が大きく低下する可能性を示唆している。

次に H195 に注目すると、WT の 6 枚のスナップショットでは MD シミュレーション終了時において側鎖の位置が散らばっているのに対し、D130N 変異型では 1 つを除いてほぼ同じ位置にあり、活性中心側を向いていることが分かる。50-150 ns のトラジェクトリに対し H195 の側鎖のゆらぎの大きさ[17]を計算すると、WT の平均値は 0.23、D130N の平均値は 0.09 であり、トラジェクトリを通して D130N の方が側鎖のゆらぎが小さいことが分かった。トラジェクトリを解析した結果、D130N では H195 と Mg²⁺が水分子を介して相互作用しており、これにより H195 の側鎖が内側に閉じた状態で固定されることが分かった（第3図）。H195 は *TREX1* の酵素分解反応で重要な役割を果たす。反応サイクルにおいて、分解反応中は活性中心側に閉じている H195 が外側に開くことで、分解後の DNA 末端がリリースされる[16]。今回のシミュレーション結果は、DNA 分解反



第2図: MDシミュレーションの最後 (150 ns) のスナップショット。
WT, D130N それぞれについて, 3回のシミュレーション結果 (計6個) を重ね合わせている。



第3図: D130N変異型のスナップショット。

Mg^{2+} イオンが水の酸素原子と静電相互作用し, 水の水素原子が H195 の側鎖の窒素原子と水素結合している (赤点線)。

応が起きたとしても, 反応後に生成物をリリースできない可能性を示している。

次に, DNA の C3' 末端周りの相互作用をグラフで表示したものを第4図に示す。野生型では Mg^{2+} の片方が水分子を介して DNA の C3' 末端と相互作用しているのに対し, D130N では 2 つの Mg^{2+} が直接 C3' 末端と相互作用している。これにより, D130N 変異型では C3' 末端と Mg^{2+} の静電相互作用が必要以上に強くなり, 分解後の C3' 末端が活性中心から適切にリリースされず, TREX1 の機能が失われる可能性がある。これも, 変異により Mg^{2+} の位置が大きく変化して DNA 末端のリ

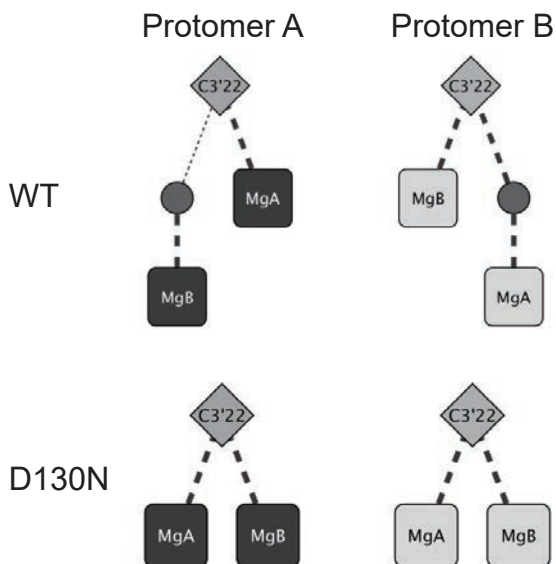
ン酸側に移動したことが理由の一つと考えられる。

このように、TREX1 の D130N 変異型では Mg²⁺ の位置が変化し、その影響から活性中心周りの相互作用が大きく変化することが分かった。これにより、DNA 分解反応の効率が低下すること、また、生成物が適切にリリースされなくなることが、TREX1 が機能を失う原因であることを示すことができた[18]。

3. Pyrin タンパク質の計算

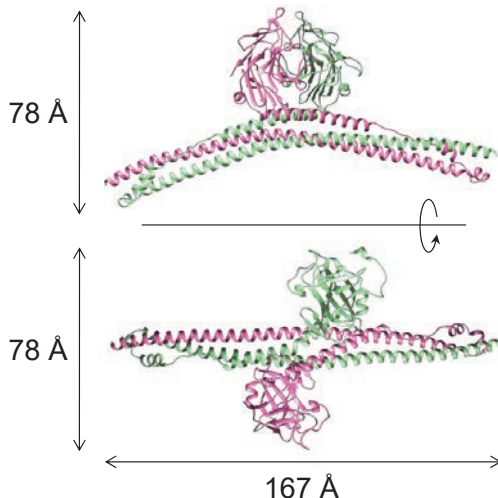
FMF は遺伝性の自己炎症性疾患の 1 つであり、周期的な発熱、関節炎、漿膜炎などを伴う。全世界で 10 万人以上の患者がいると推定されている。「家族性地中海熱」という病名の通り地中海沿岸地方の民族に多く見られる疾患であるが、日本国内でも 500-1000 人程度の患者がいると推定されている。

FMF の責任遺伝子として *MEFV* 遺伝子が特定されている。*MEFV* 遺伝子は 10 個のエクソン領域 (exon 1-10) から構成されており、FMF 患者には exon 10 に変異が多く見られることが分かっている。代表的な例として M694V, M680L, M694I などが挙げられる。最近、長崎大学のグループは、exon 10 領域の変異 I729M を発見した[19]。しかし、既存の変異も含め、変異と疾患に伴う炎症の機序との関係は明らかになっていない。



第 4 図: WT と D130N 変異型における相互作用グラフ。

C3' 末端 (C3' 22) と Mg²⁺イオン (MgA, MgB) の間で相互作用があるところを点線でつないでいる。線が太いものほど相互作用が強い。丸は水分子を表す。



第 5 図: Pyrin タンパク質二量体の分子モデル。

長いヘリックス領域 (Coiled Coil と呼ばれる) とコンパクトに丸まっている B30.2 領域から構成される。

TRIM20 タンパク (PDB: 4CG4) から作成。

本研究では、*MEFV* 遺伝子がコードする Pysin タンパク質に注目した。MD シミュレーションを行い、構造変化および相互作用の違いから変異が Pysin タンパク質に与える影響を調べることを目的とした。

3. 1. 計算方法

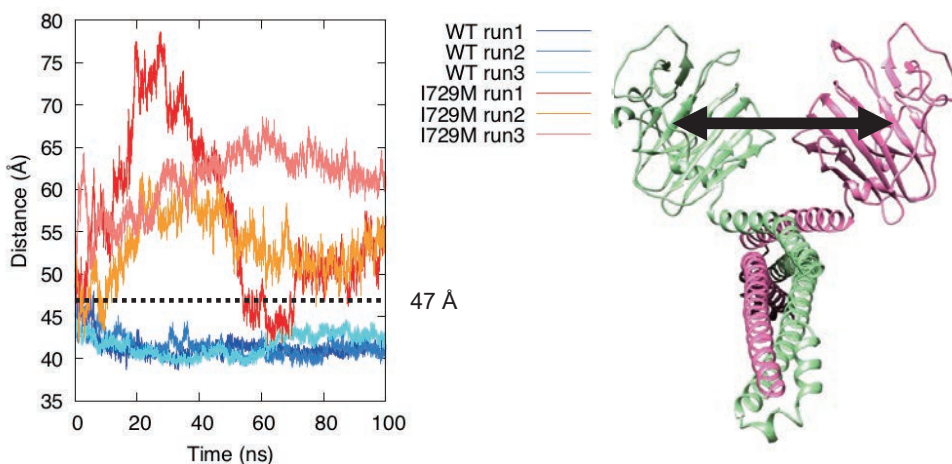
Pysin タンパク質二量体 (PDB : 4CG4, 第 5 図) [20] を用い、exon 10 領域を含む部分の野生型および変異型のモデルを作成した。第 5 図に示すように Pysin タンパク質は異方性が大きく、一方向に非常に長い構造を持つ。周囲に十分量の水分子を配置したシミュレーション系の総原子数は約 60 万個であった。このモデルを用い、各モデルにつき 100 ns の独立した MD シミュレーションを 3 回ずつ行った。力場は AMBER ff99SB-ILDN を用いた [6]。その他の計算条件は TREX1 と同様である (2. 1 節を参照)。

3. 2. 結果

第 6 図に、Production Run (0-100 ns) における WT, I729M における B30.2 領域の重心間距離の時間変化を示す。結晶構造では約 47 Å と報告されており [20]、野生型においては run 1-3 のいずれも短い距離 (40-42 Å) を保っている。一方、I729M では重心間距離が結晶構造のものよりも長くなり、計算中に大きく変動していることが分かる。他の変異型では、野生型と同程度の距離になるものも見られたが、計算により振る舞いは異なっており、3 回の計算全てにおいて安定して 40-42 Å の距離を保っていたのは野生型のみであった。また、トラジェクトリを観察していると、Coiled Coil 領域もシミュレーション中に大きくたわみ、全体的に柔らかい構造をしていることが明らかになった。詳細な解析のためには、計算時間を延長する必要があると考えられる。

4. まとめと今後の展望

本研究では自己炎症性疾患に関わるタンパク質 TREX1 および Pysin を対象に、遺伝子変異がタンパク質の構造および機能に及ぼす影響を調べることを目的として、MD シミュレーションを行った。



第 6 図: 野生型 (WT), I729M における B30.2 領域の重心間距離。

各モデルにつき run 1-3 の MD シミュレーションの結果を表示。結晶構造では重心間距離は約 47 Å である (文献 [19])。

TREX1 のシミュレーションでは D130N 変異により Mg^{2+} イオンの位置が変化し、それに伴い活性中心の相互作用が変化することが分かった。これにより、DNA 分解反応の効率が低下する可能性や、反応が進んだとしても生成物を適切にリリースできなくなる可能性が示唆された。これらの理由により、D130N 変異型では TREX1 の DNA 分解酵素としての機能が失われていると考えられる [18]。今後は患者から報告されている他の変異型に対しても計算を行い、変異の影響を調べていく予定である。

Pyrin のシミュレーションでは、変異型では B30.2 領域が大きく動き、重心間距離が大きく変動する様子が見られた。また、全体的に柔らかい構造をしていることが分かり、シミュレーション時間を延長する必要があると判断した。引き続き計算を行い、詳細な解析を行っていく。

謝 辞

本研究は『2020 年度 東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」』の支援を受けて行われたものです。数値計算は東京大学情報基盤センターの Reedbush-H を用いて行われました。また、本研究は科学研究費助成事業（若手研究：19K16058）の支援を受けています。

参 考 文 献

- [1] E.F. Pettersen, T.D. Goddard, C.C. Huang, G.S. Couch, D.M. Greenblatt, E.C. Meng, T.E. Ferrin, UCSF Chimera-A visualization system for exploratory research and analysis, *J. Comput. Chem.* 25 (2004) 1605-1612.
- [2] G.I. Rice, M.P. Rodero, Y.J. Crow, Human disease phenotypes associated with mutations in TREX1, *J. Clin. Immunol.* 35 (2015) 235-243.
- [3] K.-W. Huang, T.-C. Liu, R.-Y. Liang, L.-Y. Chu, H.-L. Cheng, J.-W. Chu, Y.-Y. Hsiao, Structural basis for overhang excision and terminal unwinding of DNA duplexes by TREX1, *PLoS Biol.* 16 (2018) e2005653.
- [4] G.G. Krivov, M.V. Shapovalov, R.L. Dunbrack, Improved prediction of protein side-chain conformations with SCWRL4, *Proteins: Struct. Funct. Bioinform.* 77 (2009) 778-795.
- [5] M.J. Abraham, T. Murtola, R. Schulz, S. Páll, J.C. Smith, B. Hess, E. Lindahl, GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers, *SoftwareX* 1-2 (2015) 19-25.
- [6] K. Lindorff-Larsen, S. Piana, K. Palmo, P. Maragakis, J.L. Klepeis, R.O. Dror, D.E. Shaw, Improved side-chain torsion potentials for the Amber ff99SB protein force field, *Proteins: Struct. Funct. Bioinform.* 78 (2010) 1950-1958.
- [7] R.B. Best, G. Hummer, Optimized molecular dynamics force fields applied to the helix-coil transition of polypeptides, *J. Phys. Chem. B* 113 (2009) 9004-9015.
- [8] A. Pérez, I. Marchán, D. Svozil, J. Sponer, T.E. Cheatham, C.A. Laughton, M. Orozco, Refinement of the AMBER force field for nucleic acids: Improving the description of α/γ conformers, *Biophys. J.* 92 (2007) 3817-3829.
- [9] A.T. Guy, T.J. Piggot, S. Khalid, Single-stranded DNA within nanopores: conformational dynamics and implications for sequencing; a molecular dynamics

- simulation study, *Biophys. J.* 103 (2012) 1028-1036.
- [10] W.L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J.D. Madura, R.W. Impey, M.L. Klein, Comparison of simple potential functions for simulating liquid water, *J. Chem. Phys.* 79 (1983) 926-935.
- [11] O. Allnér, L. Nilsson, A. Villa, Magnesium ion-water coordination and exchange in biomolecular simulations, *J. Chem. Theory Comput.* 8 (2012) 1493-1502.
- [12] U. Essmann, L. Perera, M.L. Berkowitz, T. Darden, H. Lee, L.G. Pedersen, A smooth particle mesh Ewald method, *J. Chem. Phys.* 103 (1995) 8577-8593.
- [13] G. Bussi, D. Donadio, M. Parrinello, Canonical sampling through velocity rescaling, *J. Chem. Phys.* 126 (2007) 014101.
- [14] H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola, J.R. Haak, Molecular dynamics with coupling to an external bath, *J. Chem. Phys.* 81 (1984) 3684-3690.
- [15] D.A. Case, D.S. Cerutti, I. T.E. Cheatham, T.A. Darden, R.E. Duke, T.J. Giese, H. Gohlke, A.W. Goetz, D. Greene, N. Homeyer, S. Izadi, A. Kovalenko, T.S. Lee, S. LeGrand, P. Li, C. Lin, J. Liu, T. Luchko, R. Luo, D. Mermelstein, K.M. Merz, G. Monard, H. Nguyen, I. Omelyan, A. Onufriev, F. Pan, R. Qi, D.R. Roe, A. Roitberg, C. Sagui, C.L. Simmerling, W.M. Botello-Smith, J. Swails, R.C. Walker, J. Wang, R.M. Wolf, X. Wu, L. Xiao, D.M. York, P.A. Kollman, AmberTools17, University of California, San Francisco, 2017.
- [16] S.L. Bailey, S. Harvey, F.W. Perrino, T. Hollis, Defects in DNA degradation revealed in crystal structures of TREX1 exonuclease mutations linked to autoimmune disease, *DNA Repair* 11 (2012) 65-73.
- [17] J.E. Fuchs, B.J. Waldner, R.G. Huber, S. von Grafenstein, C. Kramer, K.R. Liedl, Independent metrics for protein backbone and side-chain flexibility: Time scales and effects of ligand binding, *J. Chem. Theory Comput.* 11 (2015) 851-860.
- [18] Y. Endo, T. Koga, H. Otaki, K. Furukawa, A. Kawakami, Systemic lupus erythematosus overlapping dermatomyositis owing to a heterozygous TREX1 Asp130Asn missense mutation, *Clin. Immunol.* 227 (2021) 108732.
- [19] Y. Endo, T. Koga, H. Otaki, D. Sasaki, R. Sumiyoshi, K. Furukawa, Y. Tanaka, Y. Katsunori, A. Kawakami, Idiopathic multicentric Castleman disease with novel heterozygous Ile729Met mutation in exon 10 of familial Mediterranean fever gene, *Rheumatology* 60 (2021) 445-450.
- [20] C. Weinert, D. Morger, A. Djekic, M.G. Grutter, P.R. Mittl, Crystal structure of TRIM20 C-terminal coiled-coil/B30.2 fragment: Implications for the recognition of higher order oligomers, *Sci. Rep.* 5 (2015) 10819.

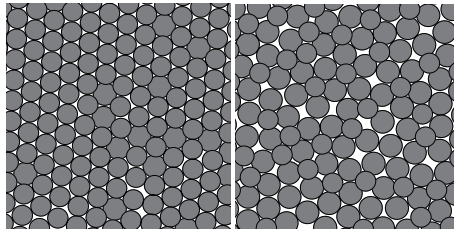
構造ガラスにおける限界安定性の研究

島田 真成

東京大学総合文化研究科

1. はじめに

一般に、液体を結晶化が阻害されるほど素早く冷却すると、構成粒子の構造が液体のように乱雑なまま、固体のように剛性を獲得する[1]。このような非平衡状態がガラスであり、粒子が整然と並んでいる結晶とは異なる固体である（第1図）。ガラスは日常にありふれており、最も身近な例として、窓ガラスなどに使用されるシリカガラスが挙げられる。しかし、泡や砂などの粉粒体と呼ばれる物質も多数集まるとガラスのように振る舞うことが知られており、我々の生活にガラス的な状態をとる物質は多い。これらのガラス状態は、それを構成する物質こそ違っても、様々な面で普遍的な性質を示す。例えば、多くの物質において、ガラス化する直前の液体の粘性は冷却に伴って何桁も急激に増大する。このような異常な遅い動力学は、しばしば *arrested dynamics* と呼ばれ、ガラス研究の中心的対象の一つである。

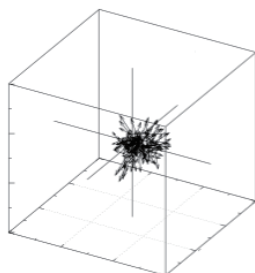


第1図：分子シミュレーションで作られた典型的な結晶（左）とガラス（右）。

同じ粒子からなる液体でも、ゆっくりと冷却するか素早く冷却するかによって結晶（左）にもガラス（右）にもなりうる。結晶中では粒子が概ね整然と並んでいる一方で、ガラス中の粒子は乱雑に詰め込まれている。

ガラスには他にも様々な普遍的性質があり、研究者の興味をひいてきた。ここでは特に、本研究の主眼でもある固体の基準振動モードについて詳しく説明する。結晶の基準振動モードは、全て平面波である。これはまさに音波そのものであり、結晶の熱物性や力学物性を支配している。一方ガラスの場合、平面波とは全く異なる基準振動モードが低周波数領域に二種類観測される。一種類目として、平面波のように空間的に広がっているものの、乱雑な振動を示すモードが1 THz程度の周波数スケールに観測される[2]。近年では *anomalous modes* と呼ばれるようになったこのモードは、粉体のシミュレーションによって状態密度が周波数の二乗に比例していることが示唆されている。一方、1 THz よりも十分低周波数の領域には、空間的に局在化した振動が観測されている（第2図）[3, 4]。この局在振動の状態密度が周波数の四乗に比例しているということは、かなり広いクラスのガラス形成物質において確認されている。このベキ則はゼロ周波数まで続き、ガラスの限界安定性 (*marginal stability*) と呼ばれる性質と密接に関わっていると考えられている[5]。ガラスは固体として力学的に安定であるものの、ごく微小の摂動で構造が破壊

されることが分かっており、この性質が限界安定性である。例えば、ガラスにせん断をかけて破壊する数値実験を行うと、破壊が起きるひずみ量が熱力学極限でゼロに収束していく[6]。せん断による破壊が起きるときは、ガラス中で最小の周波数を持つ局在振動の周波数がゼロになり、その振動方向が力学的に不安定化することが分かっている。つまり、ガラスが限界安定であるためには、局在振動がどこまでも低周波数領域まで上述のベキ則に従って存在し続けることが重要である。



第2図：分子シミュレーションで作られたガラス中の局在振動。

箱全体にガラスを構成する粒子が詰まっているが、その中から局在振動で強く振動する粒子のみを可視化した図。矢印の方向が振動方向であり、その始点に粒子が位置している。

一方、ゲルと呼ばれる物質も、ガラスとよく似た性質を持っている。ゲルとは、一般的に構成粒子が何らかのネットワーク構造を形成し剛性を持っている物質であるが、その多くはガラスのような不規則構造を形成する[7]。ゲルは、ネットワークの性質に基づいて化学ゲルと物理ゲルに大別される。前者は、ネットワークが架橋構造などの化学反応によって形成されるものであり、構造がほぼ永久的に維持される。一方後者は、分子間力によって緩やかなネットワーク構造が一時的に形成されるのみであり、コロイド系がその代表である。このように、物理ゲルは明確にネットワーク構造が同定できず、同じく不規則構造を持つガラスとはしばしば区別することが難しい。両者の違いをどのように理解するかということは、近年のソフトマター分野において精力的に研究されてきた。

本研究では特に、物理ゲルの代表的な形成過程の一つである arrested phase separation[7] というプロセスに着目し、ガラスとゲルの違いを限界安定性に基づいた議論によって明確にする。通常の気液相分離では、高温の様な流体を相分離が起きる温度まで冷却することで、高密度の液体相と低密度の気体相に分離する。一方 arrested phase separation は、冷却先の温度が十分低温であった場合に起きる。具体的には、液体相がガラス転移を起こす温度よりも低温まで冷却すると、液体相の動力学が遅くなっているために相分離が完全には進行できず、ネットワーク状の構造が長時間安定に出現する。この状態が物理ゲルの一種である。本研究では、arrested phase separation を起こす最も極端な状況である、ゼロ温度への急冷を考える。この場合は、熱ゆらぎの効果が完全に排除できるため、系の力学的な性質のみに着目することができる。

また、このような低温での気液相分離は、粘弾性相分離[8]と呼ばれるクラスの現象の一例となっている。一般に、相分離を起こす二相の粘弾性的な性質が大きく異なると、相分離の過程でネットワーク構造のみならず、様々な形態の相分離状態が観察される。この現象はソフトマター系において非常によく見られるものであり、本稿の最後に議論するように本研究はこのような幅

広いクラスの現象まで射程に入れうるものである。

2. 数値計算手法

2. 1. モデル

本研究では、質量 m の3次元単一成分粒子系を使用した。粒子間の相互作用には標準的な分子間力のモデルである Lennard-Jones ポテンシャル

$$\phi_0(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right]$$

を使用した。ここで、 r は粒子間距離、 ϵ と σ はそれぞれエネルギーと長さの次元を持った定数である。以下本稿では、長さ、質量、時間の単位をそれぞれ $\sigma, m, \sqrt{m\sigma^2/\epsilon}$ として表現する。本来この相互作用は無限遠方まで値を持つが、数値シミュレーションでは有限の距離で相互作用を切断し、それ以上離れた粒子同士は相互作用をしないとする近似を用いるのが一般的である。切断の方法は何通りか考えられるが、本研究では切断する距離 $r_c = 2.5$ で相互作用の一階微分が連続にゼロに接続されるように切断した。すなわち、

$$\phi(r) = \begin{cases} \phi_0(r) - \phi_0(r_c) - \phi'_0(r_c)(r - r_c) & (r < r_c) \\ 0 & (r > r_c) \end{cases}$$

がシミュレーションで実際に使用した関数形である。

このポテンシャルを使用し、分子動力学シミュレーションを行った。粒子数 $N = 1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000, 64000$ のシステムそれぞれについて100個の独立なガラス配置を生成した。具体的には、温度 $T = 2.0$ で平衡化した液体配置をゼロ温度まで急冷するシミュレーションを行うことで、終配置として固体として安定なガラス配置を得た。急冷の方法としては、一般に最適化問題を解くためのアルゴリズムである最急降下法を利用している。これは、ランジュバン方程式のゼロ温度極限とみなすこともできる簡便な急冷手法である。全てのシミュレーションは、パッケージソフトウェアである LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [9]を用いて行った。短距離相互作用系の分子動力学シミュレーションは、並列化による計算速度の向上がかなり見込め、本研究では最大 100 コア程度の CPU を用いた並列化計算によって大量の配置を生成することに成功した。

2. 2. 振動モード解析

我々が得たゼロ温度のガラス配置は、力学的に安定である。言い換えれば、系はポテンシャルエネルギーの極小点に位置しているということである。本研究で行った振動モード解析とは、数学的にはポテンシャルエネルギーの極小点でヘッセ行列の固有値と固有ベクトルを求めることに対応する。この固有値は、極小点周りのポテンシャルの曲率に対応し、物理的にはその平方根がモードの固有周波数となる。我々の考えているシステムは、3次元で粒子数 N の $3N$ 次元系であるため、ヘッセ行列も $3N$ 次元行列であり、粒子数 N が大きくなるほど大規模な行列の対角化計算が要求される。しかし、我々が興味を持っているのは最低周波数領域のモードのみであるため、固有値の小さいモードだけ効率的に求められれば良い。本研究では、このような目的のために作られたアルゴリズムである Arnoldi 法を実装した ARPACK (ARnoldi PACKage) [10]と、Krylov-Schur 法を実装した SLEPc (Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations) [11]というパッケージを使用した。前者はそのままでは並列化計算には対応していないため、小さい行列

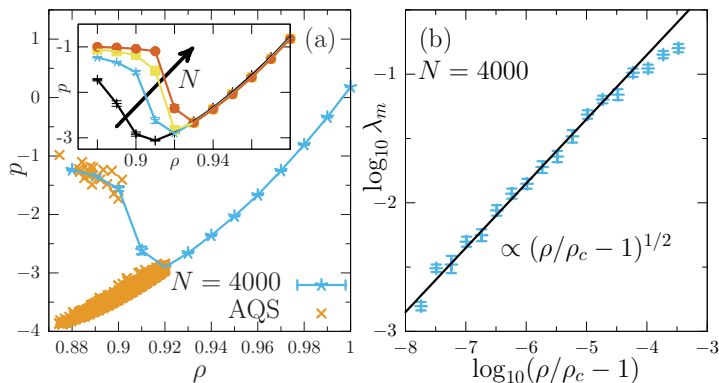
を対角化するために使用し、大規模な行列に対しては後者を用いた。これらのパッケージによって、ヘッセ行列の固有値 λ_α と固有ベクトル $\vec{e}_\alpha = (\vec{e}_{\alpha 1}, \dots, \vec{e}_{\alpha N})$ を求めた。ここで、 \vec{e}_α は α 番目($\alpha = 1, \dots, 3N$)の $3N$ 次元ベクトルであり、その成分である $\vec{e}_{\alpha i}$ は i 番目の粒子の振動方向を示した3次元ベクトルである。また、固有周波数を $\omega_\alpha = \sqrt{\lambda_\alpha}$ と書く。

3. 結果

3. 1. 相分離と固有ベクトルの関係

まず始めに、系の粒子数密度 ρ を変化させたときの圧力変化を考える。粒子数密度を変化させる方法は何通りもあり得るが、本研究では二種類の方法を比較することにした。第一の手法は、始めに準備する液体の時点で密度の異なる配置を用意しておくという方法である。この手法で、4000粒子系にたいして圧力の変化をプロットしたものが、第3図(a)に示された線で繋がれたデータである。これを見ると、密度 $\rho = 0.92$ より高密度領域では、密度が下がれば圧力も下がるという関係であるが、より低密度領域では逆に密度低下に伴って圧力が上がっている。これは、通常の相分離を記述する van der Waals の状態方程式の振る舞いによく似ており、まさに気液相分離のゼロ温度極限と呼ぶべき現象である[12]。ゼロ温度の相分離の結果、 $\rho = 0.92$ 以下の配置ではガラス配置中に空洞が開く。また、この圧力密度曲線は、気液相分離が見られる密度領域で強いシステムサイズ依存性を示す。これを確認するため、第3図(a)のインセットに、粒子数 $N = 1000, 4000, 16000, 64000$ の場合のデータを示した。

密度を変化させる第二の手法は、ある密度で得られたガラス配置を準静的に膨張させることで密度を下げるものである。このようなゼロ温度での変形は、しばしば athermal quasi-static (AQS) などと呼ばれ、ガラスの文脈でよく使われてきた。粒子数 $N = 4000$ のシステム20サンプルに対して、密度 $\rho = 0.92$ から出発して密度を下げた際のデータが、第3図(a)にバツ印で示されている。このプロセスでは、密度変化比 10^{-8} 程度で圧力が2倍程度劇的に増加する現象が見られ、この現象が見られた時点で膨張を止めた。後でも議論するがこれが相分離であり、圧力変化後の系には空洞が開いている。このデータを見ると、第一の方法で密度を変化させた場合に比べて、かなり低密度になっても相分離が起きないことがわかる。



第3図：圧力および最小固有値の密度依存性

(a) 圧力密度曲線。全体として van der Waals の状態方程式によく似た振る舞いをする。(b) 最小固有値の密度依

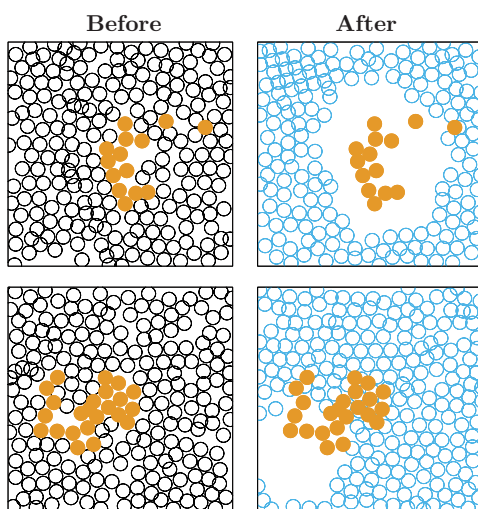
存性。相分離が起きる密度 ρ_c に向かって固有値がゼロになっている。

第二の手法で見られた、相分離に伴う劇的な圧力変化を理解するため、圧力変化が起こる直前の密度領域で振動モード解析を行った。第3図(b)では、ガラス配置中の最低周波数モードの固有値 λ_m が、密度に対してどのように変化するかを示した。ここで、 ρ_c とは圧力変化が見られる密度である。この図から ρ_c に向けて固有値がゼロになることが分かり、

$$\lambda_m \propto \left(\frac{\rho}{\rho_c} - 1 \right)^{1/2}$$

というべき則が見られる。ガラスにせん断をかけた際に見られる降伏現象においても、最小固有値のひずみ依存性が同じべき則に従うことが知られており [13]、本研究で観測している現象は、数理的には降伏現象と同じものであることが示唆された。

最小固有値の振る舞いが分かったので、次にこの固有値に対応する固有ベクトルを調べる。このベクトルは、第一項で触れたとおり空間的に局在化している。第4図に、圧力変化が見られる前後でのガラス配置のスナップショットを示した。これは、三次元のガラスの一部を二次元にスライスしたものである。左側の before と表示されている二配置が圧力変化直前、右側の after と表示されているのが、before のそれぞれに対応する圧力変化直後の配置である。前者は相分離前であり、ほぼ様な粒子配置になっている一方で、後者では相分離が起こった結果として粒子が存在する領域と、存在していない空洞領域が見られる。さらに、圧力変化直前の配置に対して振動モード解析を行い、最小固有値に対応する固有ベクトルにおいて、強く振動する粒子だけを選んで塗りつぶしている。また、圧力変化直後の配置にもその粒子を重ねて表示した。これを見ると、相分離の際に発生する空洞は、最小固有値に対応する固有ベクトルが局在化している領域と相関があることがわかる。これは第3図(b)で見たように、最小固有値がゼロになった瞬間、その固有値に対応する固有ベクトルの方向の運動が不安定になり、空洞が発生するというを示している。



第4図：相分離前後での粒子配置と局在振動。

相分離が起きる直前 (after) および直後 (before) の配置のスナップショット。直前の配置の最小固有値に対応

する固有モードにおいて、最も強く振動する粒子を選んで塗りつぶしてある。また、塗りつぶされた粒子は相分離直後の配置にも重ねて表示されている。

3. 2. 振動エネルギーの空間分布

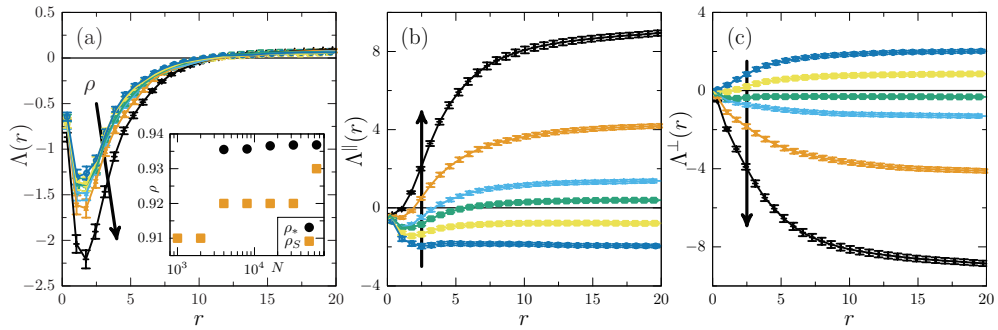
前節までの議論によって、相分離が起こる際は系の最小固有値がゼロになり、それに対応する固有ベクトルの方向の運動が不安定化することが分かった。このようなメカニズムは、せん断を加えたときの降伏現象でも見られるが、この場合は空洞が発生しない。降伏現象が起きた後の配置も、一様な粒子配置が維持される。この相分離特有の現象である空洞の発生を力学的に理解するべく、我々は振動モードの energy profile [14] という量を計算した。そのためには、モードの振動エネルギーについて考える必要がある。あるモード \vec{e} において、粒子 i が成る振動エネルギーは

$$\delta E_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left[\phi''_{ij}(r_{ij})(\vec{n}_{ij} \cdot \vec{e}_{ij})^2 + \frac{\phi'_{ij}(r_{ij})}{r_{ij}} (\vec{e}_{ij}^\perp)^2 \right] =: \delta E_i^\parallel + \delta E_i^\perp$$

と書ける。ここで、 $\vec{n}_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij}}{r_{ij}}$ は、粒子 j から粒子 i の向きを向いている単位ベクトルであり、 $(\vec{e}_{ij}^\perp)^2 = (\vec{e}_{ij})^2 - (\vec{n}_{ij} \cdot \vec{e}_{ij})^2$ である。ここで、第一項のポテンシャルの二階微分に依存する項は、標準的なバネのエネルギーに対応している。一方で、第二項のポテンシャルの一階微分に依存する項は、バネが自然長から歪んでいるために現れる項であり、弾性体力学において残留応力の起源となる。最右辺ではこの二つの項からの寄与を分解している。また、前者は粒子間距離が伸び縮みするような、ベクトル \vec{n}_{ij} に対して平行な運動からの寄与であり、後者は垂直な運動からの寄与である。例えば斥力相互作用の場合は $\phi'' > 0$ かつ $\phi' < 0$ であるため、 δE^\parallel は常に正、つまり力学的に安定であるが、 δE^\perp は常に負で不安定である。実際、斥力相互作用しか持たない粉体系で見られる低エネルギー励起は、両者のバランスによって安定性がコントロールされていることが知られている。しかし、本研究で使用している Lennard-Jones ポテンシャルは、粒子間距離に応じて斥力にも引力にもなり得るため、平行成分と垂直成分のバランスはより複雑になる。この粒子ごとに定義された振動エネルギーを元に、energy profile は以下の式で定義される。

$$\Lambda(r) = \sum_{i=1}^N \theta(r - |\vec{r}_i - \vec{r}_c|) \delta E_i = \int_{|\vec{x}| < r} d\vec{x} \delta E(\vec{x})$$

ここで、 $\theta(x)$ は Heaviside の step 関数であり、 $\delta E(x) = \sum_i \delta E_i \delta(\vec{r} - (\vec{r}_i - \vec{r}_c))$ は振動エネルギー密度である。また、 \vec{r}_c は振動エネルギーが最も負の粒子の位置である。先行研究により、振動エネルギーが最も負の粒子が局在振動中で最も大きく振動していることが分かっているため、これは局在振動の「中心」と呼ぶべき位置である。さらに、energy profile の定義式中で、 δE_i を δE_i^\parallel や δE_i^\perp に置き換えた関数も自然に定義することができ、これらを $\Lambda^\parallel(r)$ と $\Lambda^\perp(r)$ と書くことにする。



第5図: Energy profile の密度依存性。

Energy profile の (a) 合計, (b) 平行成分, (c) 垂直成分を示した。密度は矢印の向きに $\rho = 0.92, 0.93, 0.94, 0.95, 0.97, 1.0$ となっている。(a) のインセットでは, 第1図で示した圧力密度曲線の極小点 ρ_S と, energy profile の平行成分が符号を変える密度 ρ_* のシステムサイズ N 依存性を示した。

第5図に, (a) $\delta E(r)$, (b) $\delta E^{\parallel}(r)$, (c) $\delta E^{\perp}(r)$ の三種類の energy profile を示した。ここでは, $N = 4000$ 粒子系の結果を示しているが, システムサイズ効果が見られないことは確認している。また, 密度は矢印の向きに $\rho = 0.92, 0.93, 0.94, 0.95, 0.97, 1.0$ となっており, これらは前節で第一の手法と呼んだ, 初期の液体配置の時点で密度を決めて冷却した配置である。まず(a)に示した全エネルギーで計算した energy profile を見てみると, この密度範囲ではほとんど関数形が変化しないことが分かる。原点で負のエネルギーから始まり, 減少して最小値に達した後増加に転じ, 最終的に正の値に収束している。このような振る舞いは斥力しか持たない粉体系でも見られ, 極小値をとる距離スケールが, 局在振動の局在長に対応している。しかし, 振動エネルギーを平行成分と垂直成分に分解してみると顕著な密度依存性が現れる。最高密度の $\rho = 1.0$ では, (b) で示した $\delta E^{\parallel}(r)$ はほとんど常に正であり, (c) で示した $\delta E^{\perp}(r)$ はほとんど常に負である。これはつまり, $\rho = 1.0$ では斥力が支配的であり, 引力部分は摂動的な役割しかないという意味である。しかし密度を下げていくと, $\delta E^{\parallel}(r)$ は減少, $\delta E^{\perp}(r)$ は増加し続け, ついには符号が反転してしまう。すなわち, 密度の低下とともに引力の寄与が支配的になったということであり, これは引力系特有の現象である。次項では, この現象を元に気液相分離ひいてはゲルについて考察する。

4. 結論・今後の展望

前項で, 密度の低下とともに energy profile における平行成分と垂直成分の安定性が変化する現象を観察した。ここでは, これが気液相分離, すなわち前項で見た固有値がゼロになり空洞が生じる現象にどう影響を与えているのか考察する。そのためには, 第一項で述べた限界安定性 [5] の概念が重要になる。ガラス系が限界安定であるという事実は, せん断変形をかけた際の塑性変形が起きるひずみ量が, 熱力学極限でゼロになるという観測から支持されている。これはまさに熱力学極限では限りなく低エネルギーの局在振動モードが存在し, それが変形に伴って直ちに不安定化するということの帰結である。そのため, 局在振動モードの安定性が変化すれば, それに伴って起こる破壊現象も定性的に変化するはずだ。つまり, 前項の第5図で観察されたような, 平行成分の振動エネルギーの符号が正から負に転じ, 平行成分の運動の不安定化が起きると同時に, 系は膨張に対して空洞を生じる。よって, 熱力学極限において気液相分離が起こる密度

は, $\delta E^{\text{II}}(r)$ の符号が負に転じる値であると考えられる。通常ゼロ温度極限での気液相分離密度は, 第1図で示したような圧力密度図の極小点として定義されるが, これはシステムサイズ依存性が非常に強い。一方で, energy profile の符号が負に転じる密度はシステムサイズ依存性がほとんどない (第5図インセット参照)。よって, この議論はガラスと相分離領域, すなわちゲルをエネルギー的に明確に区別するのみならず, 数値的にも, 気液相分離のゼロ温度極限を安定して測定することを可能にする。

ここで観測している気液相分離現象は, 粘弾性相分離[8]の極端な一例であり, 類似の現象は幅広い系で観測できる。本研究で我々が導入した測定手法は, 系の詳細によらず行えるものであるため, 我々の手法を他のソフトマター系に適用することで粘弾性相分離の理解に新たな光を当てることができるだろう。

5. 謝辞

本研究は, 大山倫弘氏 (東京大学総合文化研究科, 産総研 MathAM-OIL) との共同研究である。また, 本研究は日本学術振興会特別研究員奨励費 (19J20036, 20J00802) および科学研究費助成事業若手研究 (20K14436) の支援を受けて行われた。数値計算は東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」に基づき, 同センターの Oakbridge-CX を用いて行われた。

参 考 文 献

- [1] L. Berthier and G. Biroli, *Rev. Mod. Phys.* 83, 587 (2011)
- [2] P. Charbonneau et al., *Phys. Rev. Lett.* 117, 045503 (2016)
- [3] E. Lerner et al., *Phys. Rev. Lett.* 117 035501 (2016)
- [4] H. Mizuno et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 114, E9767 (2017)
- [5] M. Müller and M. Wyart, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 6, 117 (2015)
- [6] S. Karmakar et al., *Phys. Rev. E* 82, 055103 (2010)
- [7] E. Zaccarelli, *Journal of Physics: Condensed Matter* 19, 323101 (2007)
- [8] H. Tanaka, *J. Phys. Condens. Matter* 12, R207 (2000)
- [9] www.lammps.org
- [10] www.caam.rice.edu/software/ARPACK/
- [11] slep.c.upv.es
- [12] S. Sastry et al., *Phys. Rev. E* 56, 5533 (1997)
- [13] C. E. Maloney and A. Lemaitre, *Phys. Rev. E* 74, 016118 (2006)
- [14] M. Shimada et al., *Phys. Rev. E* 98, 060901 (2018)

第一原理計算と機械学習を用いた新物質の合成条件予測

倉田 伊織

東京大学 工学系研究科 物理工学専攻

1. はじめに

近年、計算機のハードとソフトの改良が進んだことで、第一原理的な電子構造計算（第一原理計算）を高精度かつ高速に行えるようになってきた。物性もある程度は計算機の中で予測可能になり、銅酸化物高温超伝導に類似したNi超伝導の候補物質をスクリーニングする[1]など、理論計算からの物質設計が可能となってきた。また、データ科学を応用したマテリアルズインフォマティクスの研究も盛んになってきており、実現したい物性を出す候補物質を提案することが可能となっている[2]。

しかしながら、提案された組成と構造を持つ物質を狙って実験的に創り出すことは難しい。なぜなら、実現可能な物質は熱力学的に安定である必要があるが、そのシミュレーションには多数回の第一原理計算及び高次元の大域的最適化（結晶構造予測）が必要であり、既存の計算方法だけではそのような安定性を確認することができないなど、現状では計算側に多くの問題点が存在するからである。

特に高圧合成法では、高圧で大域的安定な物質をクエンチにより準安定相として得ることを可能にし、通常の固相反応法では得られない新物質の開拓が可能である[3]。しかしながら、1度の実験の合成実験には多くの時間と労力が必要とされる上に、並列で実験を行うことができないため、新たな高圧相の探索は遅れている。また、materials project[4]に代表されるような現在公開されているハイスループット計算のデータベースでは、0 K, \square GPaの条件で計算が行われており、準安定相の熱力学的な安定条件は不明であるため、その相図をそのまま活用することは難しい。

そのため、合成したい条件と探索したい結晶構造全てに対して第一原理計算を行ってエネルギーを評価する必要があるが、1回1回の第一原理計算が重いようでは、結晶構造探索はかなりの計算資源を消費してしまう。さらに、3元系以上では温度と圧力以外にも化学ポテンシャルが重要となってくる。図1に示すように、3元系Ba-Rh-OのうちBaO, RhO₂をエネルギーの基準に取った場合の凸包ではBaRhO₃が安定構造として得られているのに対し、Ba, Rh, Oをエネルギーの基準に取った場合の凸包ではBaRhO₃が安定構造として得られていない。そのため、安定性を評価するには様々な組成比で計算を行う必要がある。

以上から、与えられた合成条件と結晶構造に対するエネルギー（及び局所最適化のためのforce）の評価を高速化することが、合成条件予測への近道であることがわかる。そこで、本研究では第一原理計算を機械学習により置換する（原子間ポテンシャルの機械学習）、特にBa-Rh-Oの系において、どの組成比に対してもエネルギーを予測できるモデルの構築を目指した。

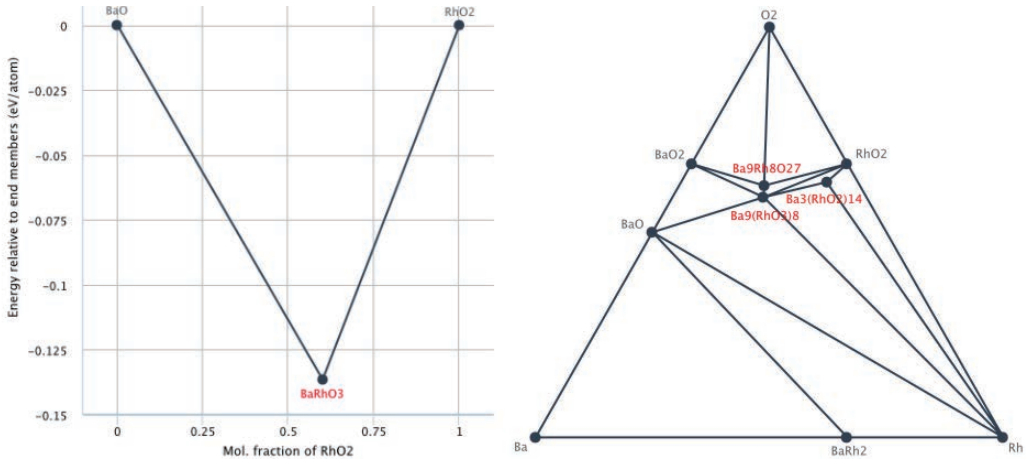


図 1: Ba-Rh-O3 元系における凸包。[4]より取得。

2. 原子間ポテンシャルの機械学習

ここでは、原子間ポテンシャルを機械学習で構築する手法について述べる。全エネルギーをユニットセル内の各原子のローカルなエネルギーからの寄与と分解して考える。このとき、ある原子 i に注目した場合の、その原子のまわりの環境を記述子として与えてやれば、その記述子を用いて全エネルギーを回帰することができるようになる。このような記述子には以下のような条件が必要である。

- 異なる物質どうしが異なる表現になりかつ、完全系を張ること
- 物理的な対称性操作(特に空間の回転/鏡映/並進、2つの原子の置換)に対して不変または共変であること
- 原子数が変わっても扱いやすいこと

現在、多種多様な記述子が提案されているが、本質的には Behler-Parrinello タイプ[5]及び SOAP タイプ[6]がベースである。

また、機械学習モデルについても Neural Network (NN) 及び Gaussian Process Regression (GPR) の 2 種類が提案されている。以下では、[7]に従い、SOAP タイプベースの記述子で GPR を用いる手法について述べる。

図 2(a) の原子 i 周辺の環境 ρ_i においてエネルギーカーネルを

$$k(\rho_i, \rho_j) = \sum_{n=2}^N \sum_{\substack{i_{n-1} > \dots > i_1 \in \rho_i^{(n)} \\ j_{n-1} > \dots > j_1 \in \rho_j^{(n)}}} \sum_{P_n} \delta_{s_{i_1, \dots, i_{n-1}}, P_n} s_{j_1, \dots, j_{n-1}} k_n(\mathbf{d}_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}}, P_n, \mathbf{d}_{j_1, j_2, \dots, j_{n-1}})$$

と構成する。ここで、 P は原子の入れ替えに関する和であり、 k_n は n 体のカーネルを表現する量である。2, 3 体では具体的にハイパーパラメータ σ, l を用いて

$$k_2(\mathbf{r}_{i,i_1}, \mathbf{r}_{j,j_1}) = \sigma_{s,2}^2 \exp\left(-\frac{(\mathbf{r}_{i,i_1} - \mathbf{r}_{j,j_1})^2}{2\ell_2^2}\right) f_{\text{cut}}(\mathbf{r}_{i,i_1}, \mathbf{r}_{j,j_1})$$

$$k_3(\mathbf{d}_{i,i_1,i_2}, \mathbf{d}_{j,j_1,j_2}) = \sigma_{s,3}^2 \exp\left(-\frac{\|\mathbf{d}_{i,i_1,i_2} - \mathbf{d}_{j,j_1,j_2}\|_2^2}{2\ell_3^2}\right) f_{\text{cut}}(\mathbf{d}_{i,i_1,i_2}, \mathbf{d}_{j,j_1,j_2})$$

ここで、3体の原子環境においては $\mathbf{d}_{i,i_1,i_2} = (r_{i,i_1}, r_{i,i_2}, r_{i_1,i_2})$ とまとめて表記しており、 f_{cut} はカットオフを表す関数である。それぞれのイメージ図は図2(b), (c)である。

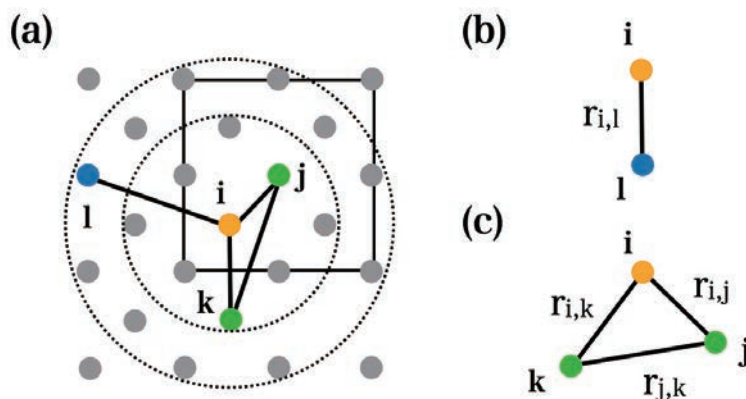


図2: (a)原子周辺環境の図 (b)2体(c)3体カーネルの図。[7]より作成。

これらのカーネルは座標で微分可能であるため、エネルギーカーネルから force カーネルが得られる。

GPR を用いることで予測値の分散(不確かさ)が評価できるため、それを用いてアクティブラーニングを行うことができる。具体的には、あるデータ点の構造から Molecular Dynamics (MD)を短時間行って新たに生成したデータ点での不確かさを評価することで、学習データに追加するかどうか、すなわち第一原理計算を行うかどうかを判定することができる。そのため、第一原理計算を行う回数を減らすことができる。また、ハイパーパラメータを最尤推定で求めることもできるため、パラメータフリーなモデルを構築できる。

3. 結果

本研究では、学習データを集めるために Quantum Espresso[8]のGPU版を用いることを試した。しかしながら、比較的小さな結晶系ではCPU版を用いた方が速く計算が終わるため、主にはCPU版を用いた。

前述の通り、高压合成に対しては圧力に対するセルの変形を考慮する必要があるため、ストレスカーネルを実装した。これはビリアル定理から算出される。

初めに、Ba-Rh-0の3元型でのランダムな組成及びランダムな結晶構造を準備し、第一原理計算を行って、初期の学習データを100点準備した。次に、GPRを行い、アクティブラーニングを進めたが、十分な精度(今回は0.01 eV/atom)に達する前に学習データが多くなってしまいメモ

りに乗り切らなかった。

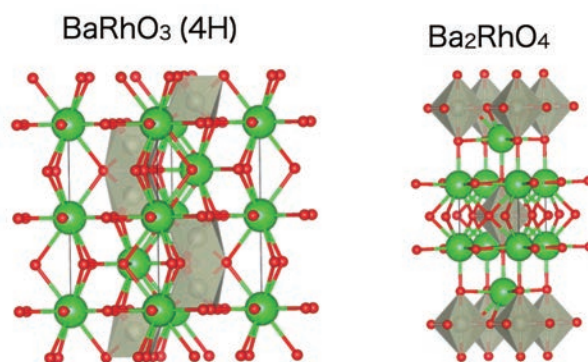


図3: BaRhO₃ と Ba₂RhO₄ の結晶構造。図の作成には VESTA[8]を用いた。

そこで、Ba-Rh-O のうち、BaO-RhO₂ の組み合わせのみにおいて実験を行った。この組み合わせにおいては、Rh 周辺の価数が 4 価近くで固定されローカルな構造が類似するため、学習データの数も減らせ、安定に学習できることが想定される。実際、図3に示すように Rh 周辺の酸素環境は 8 面体をベースに構成される。1 例として、Ba₂RhO₄ 単体では学習を進めることは出来なかったが、BaRhO₃ を学習した後に Ba₂RhO₄ を学習データに加えると学習が可能になるという現象が観測された。

また、学習済みモデルを用いて Convex Hull (CH) の評価を行った。その結果、図4に示すように 10 GPa 下での CH が得られたが、BaRhO₃ が安定構造として得られておらず、これは[3]の第一原理計算による結果とは異なる傾向を示している。エネルギーの微小なエラー (Ba₂RhO₄ と BaRhO₃ の合計 0.04 eV/Atom) により CH からずれてしまうため、実際に機械学習モデルを結晶構造予測に用いる場合には、CH の周辺を第一原理計算で再評価することが必要であると考えられる。

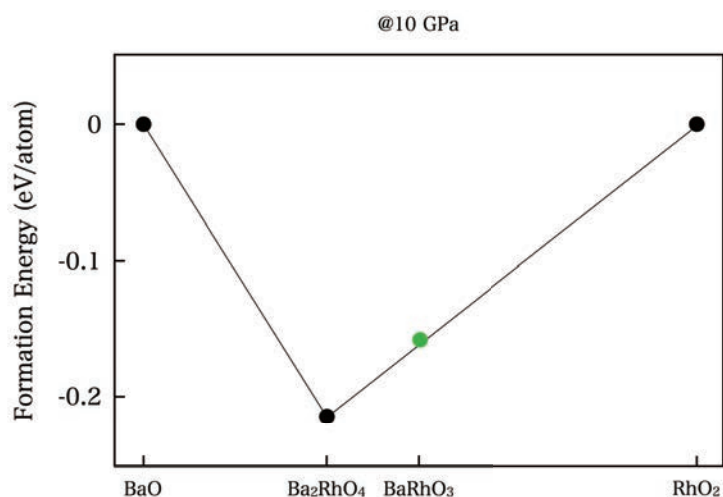


図4: BaO-RhO₂ の 10 GPa 下での、GPR モデルによる CH

4. 結論とまとめ

本研究では、ガウス過程回帰により原子間ポテンシャルを作成することで結晶構造予測を試みた。

結晶構造予測においては、与えられた化学式における最安定な結晶構造を探索するのみならず、組成比の異なる組み合わせについても安定性を評価することで、初めて妥当性のある結果を得ることが出来る。

しかしながら、3 元系に対しては、その組み合わせの数の多さから全てを同時にガウス過程回帰で force を学習させることが現実的ではないことがわかった。ガウス過程回帰ではデータの数 N に対して $O(N^2)$ のメモリを要し、全組成比空間を一度に低次元にマップすることができなかった。

ただし、2 つの組成比の異なる物質間における転移学習は可能であったため、学習データの追加シーケンスを上手く設計することで、3 元系に対してもガウス過程回帰で force を学習できる可能性が考えられる。だが現実的には、結晶構造予測のための原子間ポテンシャルの機械学習においては、メモリ量の関係から Neural Network による手法に軍配が上がると考えられる。

参 考 文 献

- [1] M. Hirayama, T. Tadano, Y. Nomura, and R. Arita, Materials Design of Dynamically Stable d9 Layered Nickelates, *Phys. Rev. B Condens. Matter* 101, 075107 (2020).
- [2] J. Schmidt, M. R. G. Marques, S. Botti, and M. A. L. Marques, Recent Advances and Applications of Machine Learning in Solid-State Materials Science, *Npj Computational Materials* 5, 83 (2019).
- [3] I. Kurata, J. A. Flores-Livas, H. Sugimoto, H. Takahashi, H. Sagayama, Y. Yamasaki, T. Nomoto, R. Arita, and S. Ishiwata, High-Pressure Synthesis of Ba₂RhO₄, a Rhodate Analog of the Layered Perovskite Sr-Ruthenate, *Phys. Rev. Materials* 5, 015001 (2021).
- [4] A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W. D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder, and K. A. Persson, Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation, *APL Materials* 1, 011002 (2013).
- [5] J. Behler and M. Parrinello, Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces, *Phys. Rev. Lett.* 98, 146401 (2007).
- [6] A. P. Bartók, R. Kondor, and G. Csányi, On Representing Chemical Environments, *Phys. Rev. B Condens. Matter* 87, 184115 (2013).
- [7] J. Vandermause, S. B. Torrisi, S. Batzner, Y. Xie, L. Sun, A. M. Kolpak, and B. Kozinsky, On-the-Fly Active Learning of Interpretable Bayesian Force Fields for Atomistic Rare Events, *Npj Computational Materials* 6, 1 (2020).
- [8] P. Giannozzi, O. Baseggio, P. Bonfà, D. Brunato, R. Car, I. Carnimeo, C. Cavazzoni, S. de Gironcoli, P. Delugas, F. Ferrari Ruffino, A. Ferretti, N. Marzari, I. Timrov, A. Urru, and S. Baroni, Quantum ESPRESSO toward the Exascale, *J. Chem. Phys.* 152, 154105 (2020).

[9] F. Izumi and K. Momma, Three-Dimensional Visualization in Powder Diffraction, in Vol. 130 (Trans Tech Publications Ltd, 2007), pp. 15-20.

大質量星団形成シミュレーション

藤井 通子

東京大学大学院理学系研究科

1. 背景・目的

星は分子雲と呼ばれる低温の星間ガスから生まれる。星の多くは星団(数千から数百万個の星の集まり; 図1)として集団で生まれるため、分子雲からの星団形成過程を明らかにすることは、星形成過程の解明に繋がる重要な研究テーマである。特に、大質量星団は、星の進化を経て、ブラックホール連星を形成し、これらが合体することで重力波を出すため、現在、非常に注目されている。これまでの星団の形成・進化のシミュレーションは、高分解能かつ、様々な物理現象(星間磁場や大質量星による輻射や質量損失によるフィードバックなど)をより精密に扱う方向に進んでいた。しかし、このような超高分解能シミュレーションでは、 10^3 太陽質量程度の比較的小さな星団しか扱うことができない。その一方、 10^4 太陽質量を超えるような大質量星団がブラックホール連星形成においては重要であり、さらに、そのような大質量星団の形成過程は、未だ謎が多い。本研究課題では、新規開発の流体+重力多体計算(N体計算)コードを用い、これまでより大質量の星団形成シミュレーションを星同士の近接遭遇を分解して行い、大質量星団の形成・進化過程を明らかにすることを目的とする。



図1：オリオン大星雲(Orion Nebula)とその中心部分にある Orion Nebula Cluster (ONC)。

ONCは形成したばかりの星団であり、その中の大質量星からのフィードバックによって、オリオン大星雲の明るい部分が形成したと考えられている。NASA, ESA, M. Robberto (Space Telescope Science Institute/ESA) and the Hubble Space Telescope Orion Treasury Project Team

2. 手法：「ASURA+BRIDGE」を用いた N 体/流体シミュレーション

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

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

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

本研究の目標は、星一つ一つを分解し、星一つ一つの軌道を高精度で積分し、星団形成時の力学進化を正しく取り入れた大質量星団形成シミュレーションを行うことである。本研究では、

1. 大質量星団を扱うために、計算コストの高い sink 粒子は用いず、銀河形成シミュレーションで使われる確率的な星形成の手法を用いて星形成を扱う
2. SSP 近似は用いず、星一つ一つをその質量の粒子をして再現する
3. 星の運動は高精度で数値積分することで、星団の力学進化を正しく扱う
4. 大質量星からのフィードバックは輻射輸送を解くのではなく、密度が一樣であった時に電離される半径を解析的に求め、その領域のガスの温度を 10⁴K に上げるという簡易的な方法を用いるコードの開発を行った。流体計算、星形成、大質量星からのフィードバックは、主に銀河形成シミュレーション用に開発された SPH/N 体計算コード「ASURA」(Saitoh 2009, 2017) [1][2]を用いて行った。星の軌道の計算は、「BRIDGE」(Fujii et al. 2007) [3]、「PeTar」(Wang et al. 2020) [4]を用いて行った。

3. 初期条件

初期条件には、星団形成シミュレーションでよく用いられる乱流を与えた一様密度の球を用いる。メッシュ法を用いた輻射流体計算で行った結果と比較するため、Kim et al. (2018) [5]、Fukushima et al. (2020) [6]と同様の分子雲のサイズ(20 pc)と質量(10^5 太陽質量)でテスト計算を行った。重力ソフトニングは 0.075 pc とし、ガス粒子の質量を 0.1 太陽質量とした。Kim et al. (2018)と Fukushima et al. (2020)の違いは、使用したコードの他、分子雲の初期のビリアル比(ガス全体の運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの比)であり、それぞれ、1 と 0.25 である。ビリアル比が 0.5 より小さい場合、その系は力学的に冷たく、中心に向かってガスが落ち込んでいくこととなる。

4. 結果

図 2、図 3 はそれぞれ、Kim モデルと Fukushima モデルについて、今回のシミュレーションで得られたガスと星の分布である。ビリアル比が大きい Kim モデルでは、複数の星団が形成したのに対し、ビリアル比が小さい Fukushima モデルでは、中心にガスが落ち込み、一つの大質量星団が形成した。

これまでのシミュレーションとの比較のため、星と星との間に働く重力を近傍である一定以上に大きくならないようにする手法(ソフトニング)を用い、星の近接遭遇による散乱が起らないようにした計算も行った。ソフトニングあり・なしの場合について、形成した星の総質量の時間進化を図 4 に示す。この図からわかるように、同じガスの質量分解能の計算で比較した場合、分子雲の初期条件において、ビリアル比が 0.5 より大きかった場合、ソフトニングがある場合の方が形成した星の総質量がやや大きかった。一方、初期条件のビリアル比が 0.5 より小さい場合、ソフトニングがない場合の方が、形成した星の総質量は大きかった。この結果は、星団中心で起こる星同士の近接遭遇によって、星団の外側へと弾き出される星の有無によって説明できる。

ビリアル比が 0.5 より小さい場合、ガスの密度がガス雲の中心で非常に高くなり、そこで星形成が起こる。ガスの密度が高いため、大質量星が複数形成しても、すぐには星団中心のガスを電離することができず、星形成が続き、十分な数の大質量星が形成して初めて星団中心のガスも電離され、星形成が終わる。ソフトニングがある計算の場合、星団中心で形成した大質量星は星団中心にとどまり続ける一方で、ソフトニングがない場合、星同士の近接遭遇により、一部の大質量星が星団の外縁部は、または星団外へと弾き出される。星団の外縁部は星団中心と比べて数桁ガスの密度が低いため、ソフトニングがある場合は、星団の外縁部が中心から弾き出された大質量星によってまず電離される(図 3)。その結果、低温ガスの一部が圧縮され、高密度の低温ガスとなり、そこで星形成が起こる。

一方、ビリアル比が 0.5 より大きい場合、複数の小さな星団が同時に形成し始める(図 2)。小さな星団は、その中で大質量星が形成するとすぐにガスが電離され、星形成が止まる。さらに、星団から弾き出された星が、星団周囲のガスを電離し、星団に落ち込む冷たいガスもなくなるため、ソフトニングがある場合の方が、形成する星の総質量は小さくなることがわかった(図 4 左)。

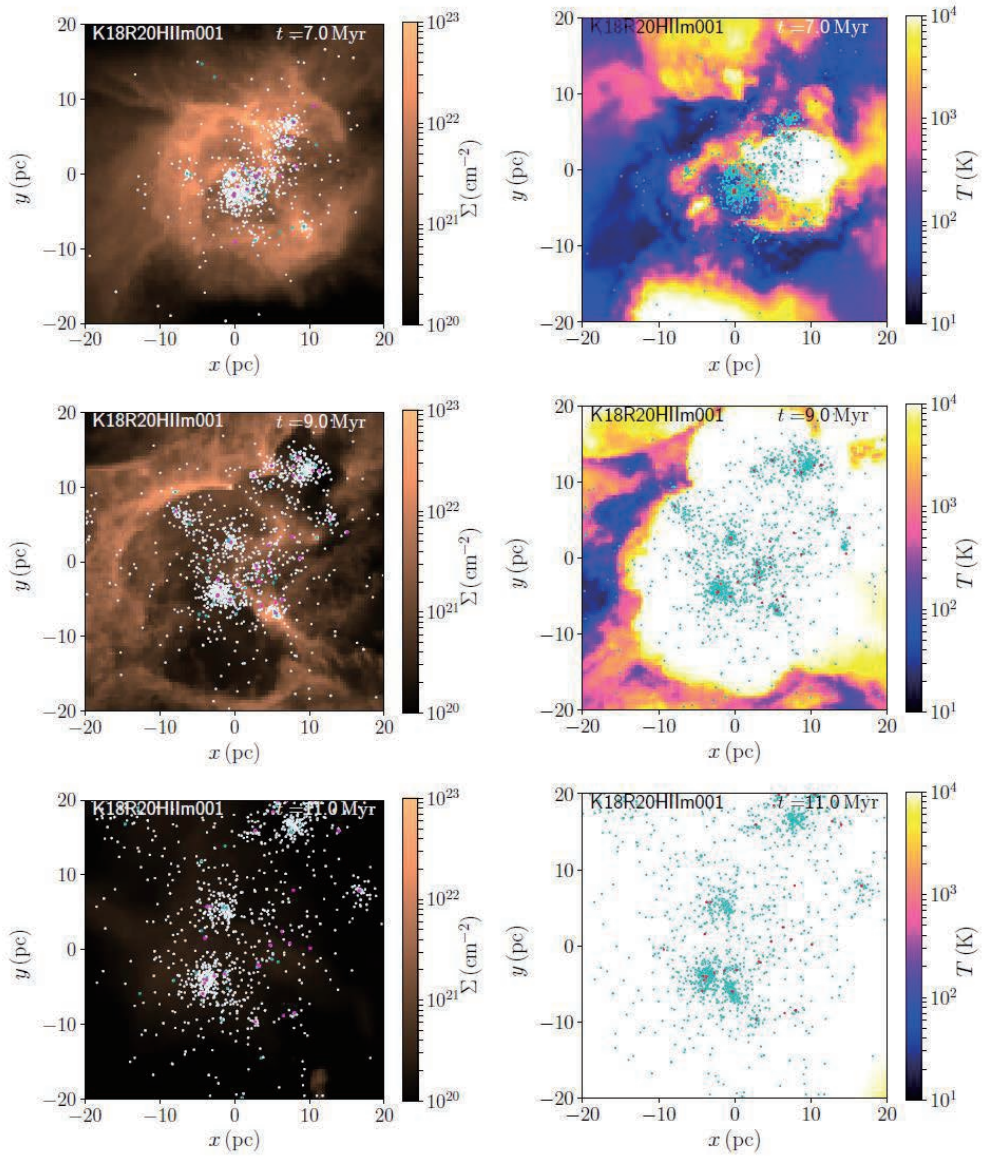


図2 : Kim モデル (ビリアル比=1) の時間進化。左 : ガスの面密度分布と星の分布 (白、マゼンタ、シアン)。大質量星はマゼンタ、シアンでプロット。右 : ガスの温度と星の分布 (シアン、赤)。大質量星は赤でプロット。図は、Fujii et al. (2021)[7] より。

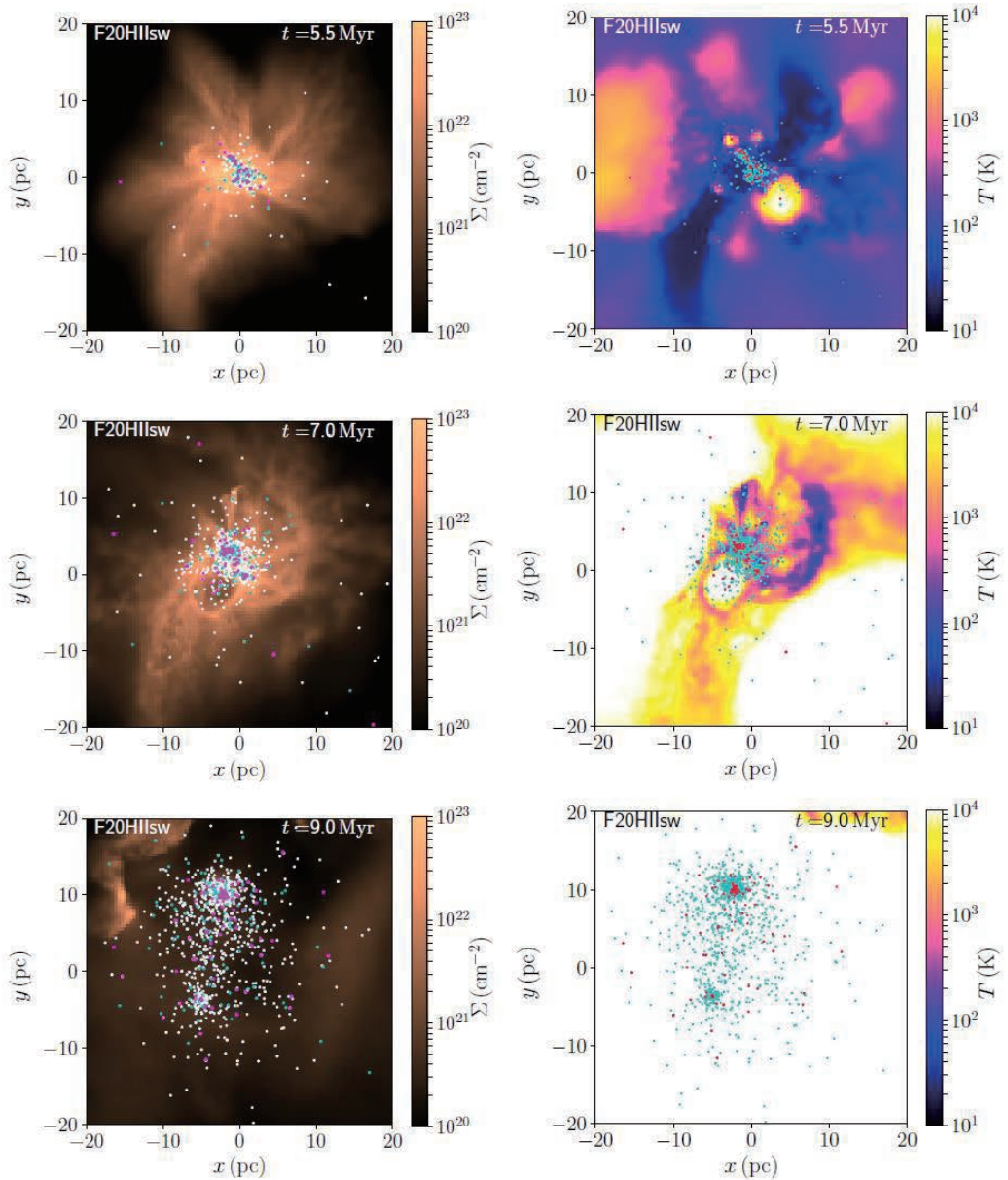


図3 : Fukushima モデル (ピリアル比=0.25) の時間進化。左 : ガスの面密度分布と星の分布 (白、マゼンタ、シアン)。大質量星はマゼンタ、シアンでプロット。右 : ガスの温度と星の分布 (シアン、赤)。大質量星は赤でプロット。図は、Fujii et al. (2021) [7] より。

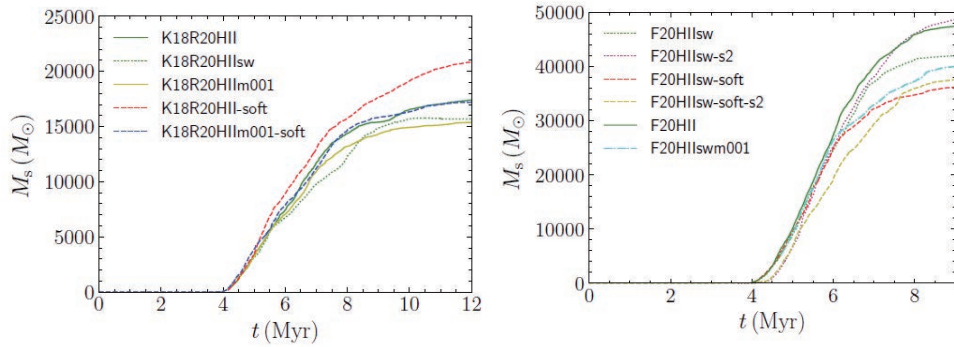


図4：形成した星の総質量（左：Kimモデル、右：Fukushimaモデル）。図はFujii et al. (2021) [7]より。softはソフトニングありの計算、s2は初期乱流のランダムシードが異なるモデル。

5. まとめ

本研究では、新規開発コード「ASURA+BRIDGE」を用いて、大質量星団形成シミュレーションを行った。先行研究にならい、乱流を持つ分子雲のシミュレーションを行った結果、先行研究と同様の結果が得られた。また、本研究に用いたコードでは、星同士の近接遭遇を正しく計算することができるため、星の3体遭遇によって一部の大質量星が高速で星団を脱出し、周囲のガスを電離する様子が見られた。この脱出する大質量星によるフィードバック（周囲のガスの電離や星風）の影響は、系のビリアル比によって異なり、ビリアル比が大きい場合には、星団の星形成を抑制し、ビリアル比が小さい場合には逆に星形成を推し進める働きをすることがわかった。これらの結果は査読付き論文として出版予定（Fujii et al. 2021, 印刷中）[7]である。

謝辞

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

参考文献

- [1] Saitoh T. R., Daisaka H., Kokubo E., Makino J., Okamoto T., Tomisaka K., Wada K., Yoshida N., PASJ, 61, 481, 2009
- [2] Saitoh T. R., AJ, 153, 85, 2017
- [3] Fujii M., Iwasawa M., Funato Y., Makino J., PASJ, 59, 1095, 2007
- [4] Wang L., Iwasawa M., Nitadori K., Makino J., MNRAS, 497, 1, 2020
- [5] Kim J-G., Kim W-T., Ostriker E. C., ApJ, 859, 1, 2018
- [6] Fukushima H., Yajima H., Sugimura K., Hosokawa T., Omukai K., Matsumoto T., MNRAS, 497, 3, 2020
- [7] Fujii M. S., Saitoh T. R., Hirai Y., Wang L., PASJ, 2021

Numerical simulation of deepwater oil blowout: crossflow effect

Daniel Cardoso Cordeiro
大阪大学基礎工学研究科

1. Introduction

In 2010, one of the largest offshore oil spills of all time happened in the Gulf of Mexico, USA. For the first time, the sub-sea injection of chemical dispersants was used to treat deepwater oil spills. However, with only few studies prior to its application, the overall effectiveness of this method is still under investigation as appropriate measures of the oil droplets were not performed in situ. In order to investigate the impact of the water current crossflow in an oil blowout, we apply Computational Fluid Dynamics simulation to study this phenomena by using dimensionless numbers, which allow us to assess the effect of several parameters in the oil jet behavior.

In this research, we investigate three parameters that influence the jet under crossflow: the Weber number ($We_w = \rho_w U^2 D / \sigma$), the Reynolds number ($Re_w = \rho_w U D / \mu$), and the inlet velocity ratio ($r = U_o / U_w$), where ρ is the density, D is the oil inlet diameter, U is the inlet velocity, μ is the water viscosity, and the subscripts w and o indicates water and oil, respectively.

2. Numerical Methods

The numerical simulations of oil blowout in a cross flow were executed using the schematics shown in Fig. 1a. The governing equations solved are the Continuity (Eq. 1) and Navier-Stokes (Eq. 2) equations:

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

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

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

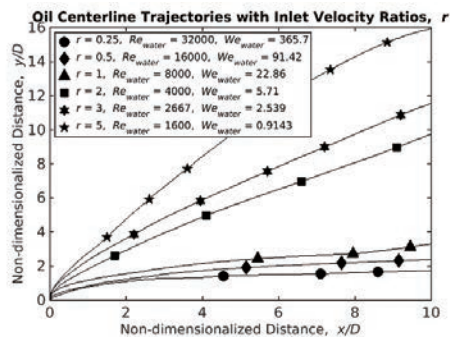
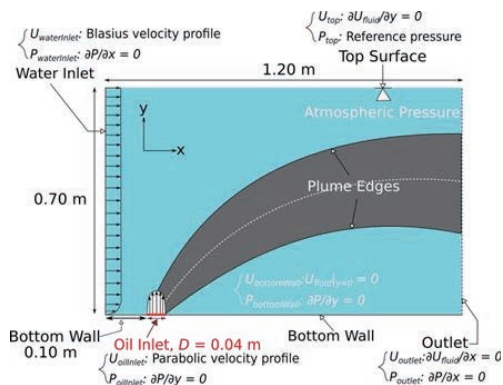


Figure 1: Schematics of oil jet in water crossflow including boundary conditions (left) and oil jet centerline trajectory for varying Re_{water} , We_{water} , and r (right).

3. Results and Discussion

The velocities and volume fraction were averaged for 30 seconds (from $t = 10 - 40$ s). In Fig. 1b, the effect of varying the velocity ratio (r) on the oil plume trajectory. The distances are non-dimensionalized by the oil inlet diameter D . With the increase of Re_{water} , We_{water} , and r , the trajectories of the oil plumes centerlines were ascendant, while with lower r the plumes quickly became horizontal. These effects are highly dependent on the value of r , which seems to change the behavior of the plume in the interval $1 \leq r \leq 2$.

As the oil plume developed, the oil plume was caught in the effect of the vortices near the inlet, which did not happen so strongly in the values with r above 2. This mechanism could explain the strong dependence of the plume centerline tendency according to the r ratio.

4. Conclusion

The effects of the oil jet in a crossflow were investigated using an Euler-Euler multiphase numerical method. The trajectory of the oil plume centerline was strongly affected by the ratio r between the oil inlet velocity and the water inlet velocity. Vortices near the inlet could be a mechanism in favoring the faster horizontal trend of the plume trajectory of the instead of a faster plume ascendance. Techniques that could generate such a vortex near the well inlet could help in extending the residence time of oil in the deeper ocean which could enhance biodegradation. Further research is needed to investigate the jet in the crossflow phenomenon.

References

- [1] New, T. H. T. Lim, T & C. Luo, S. (2006). Effects of jet velocity profiles on a round jet in cross-flow. *Experiments in Fluids*.
- [2] M.G. Pai, O. Desjardins, H. Pitsch. (2008).

正方形ダクト乱流の直接数値計算の GPU 加速

関本 敦

岡山大学学術研究院 環境生命科学学域

1. はじめに

矩形ダクトなど角を有する流路内の乱流 (図 1(a)) は、熱交換器内部などの熱伝達効率に直結する工学上重要な流れである。正方形ダクト内乱流の平均流には、主流に垂直方向の二次流れがみられる (図 1(c))。この平均二次流れは、プラントルの第二種二次流れと呼ばれ、その大きさは主流の数%程度であるが、主流の平均的な分布にも影響し、熱や物質輸送に大きく関わる。乱流中の大小さまざまなスケールの渦が側壁の影響を受け、それらの統計的振る舞いに異方性が生まれるためである ([1, 2])。乱流のレイノルズ平均応力などの統計量の定量的な評価には、Navier-Stokes 方程式の直接数値計算 (Direct numerical simulation, DNS) 用いられ、得られた乱流統計量は乱流の基礎研究、及び乱流モデル開発の良い参照データとして重要であり、データベースとして公開されている。特に、高レイノルズ数の DNS のデータは、実験では得ることができない 3 次元流れ場の時系列データであり、時々刻々と変化する流れの構造から特徴を抽出し、高精度の乱流モデルを構築するために有用である。これらのビッグデータから有用な情報を抽出するためには、高い情報処理技術が必要である。

乱流の DNS には、少ない格子点数でも高精度に計算できるスペクトル法がよく用いられる。初期の DNS ではベクトル計算機で高速に実施されていたものが、スカラーコンピュータで並列数を上げて計算するものへと変遷し、分散メモリ環境で多くの計算ノードを利用するために、MPI と OpenMP のハイブリッド計算が必須となっている。さらに、近年は、機械学習研究の後押しによって、GPU を搭載した計算機がスーパーコンピューティングセンターで導入されることが多くなってきた。計算機の性能向上がヘテロジニアス環境によって実現されており、研究で用いるプログラムもそれに追随する必要に迫られている。そこで、本稿では、正方形ダクト乱流の DNS コードのボトルネックとなる Helmholtz 方程式の解法を GPU 化して、性能評価を行った結果を紹介する。

2. なぜ正方形ダクト乱流の DNS か？

世界最大規模の正方形ダクト乱流の直接数値シミュレーション (DNS) は現在は $Re_\tau \approx 1000$ 程度 [3, 4] であるが、平行平板間チャンネル乱流や境界層乱流データベースでは摩擦速度に基づくレイノルズ数 Re_τ は 8000 程度である [5, 6]。また、平行平板間チャンネル乱流や円管内乱流については、GPU を用いた直接数値計算も実施されつつあるが ([7, 8])、GPU を用いた流体の大規模計算の例は少ない。計算機の性能向上がヘテロジニアス環境 (GPU などのアクセラレータを利用した環境) で維持されているという現状があり、その計算機環境に合わせた乱流の高精度 DNS コードの開発には人的・時間的コストがかかるためであると考えられる。

計算機の性能は約 7 年で 100 倍になっていることから、正方形ダクト乱流の DNS において断面の 1 辺の格子点数 N を 2 倍にするためには約 4 年かかると見積もることができる。現在では、高レイノルズ数 ($Re_\tau = 2000$ 程度, $N \approx 1000$) を実現できると期待できる。つまり、既往の研究 [4] の 2 倍程度のレイノルズ数、また、著者の以前の DNS ($Re_\tau = 200-300$, $N = 256$) [2] の約 10 倍のレイノルズ数の乱流を実現することに相当する。

チャンネル乱流や境界層乱流では、流れ方向やスパン方向に周期性を課して、フーリエ級数展開を適用する。壁面に垂直な方向が1方向のみで、スペクトル法や高精度なコンパクト差分法 [9] を用いた大規模数値計算では各時間ステップで解くべき Helmholtz 方程式や Poisson 方程式は1次元となる。Helmholtz 方程式の解法部分は、その他の計算部分 (FFT や非線形項の計算の為の微分操作など) と同程度であり、並列性能を高く保ったまま計算規模を大きくできる。しかしながら正方形ダクトでは、壁面に垂直な方向が2方向あるため、解くべき Helmholtz 方程式が2次元となり計算コストが大きい [10] (数値計算の詳細は以前の記事 [11] の式 (7)(8) 参照)。過去に行った正方形ダクト乱流の DNS のスペクトル法 [2] では、行列積の計算を用いる為、計算コストは、ダクト断面の1辺の格子数を N とすると $O(N^3)$ で増大する。後の研究 [3, 4] でも、同様に2次元の Helmholtz ソルバーのコストが問題となる。スペクトル法を用いないという選択もあるが、差分法で高精度を維持するには多くの格子数が必要であり、大規模な計算機環境が必須となり、保存するデータ容量も膨大である。そんな中、最近では、機械学習の GPU 利用に見られるように、行列積の演算を高速に行えるようになってきた。そこで、本稿では、スペクトル法の精度を維持しながら計算コストのボトルネックとなる2次元ヘルムホルツ方程式の解法を GPU で加速させた方法の詳細を報告する。3章では、2次元の Helmholtz ソルバーの計算アルゴリズムを説明し、続く4章で、BLAS を利用した行列積の計算を GPGPU ライブラリ cuBlas に置き換える方法を解説する。科学計算でよく用いられる Fortran を用いて実装しており、コンパイラにも依存しない実装とした。性能評価を行い、GPU が P100 (Reedbush) と A100 (Wisteria Aquarius) での結果も掲載する。

3. 計算手法

スペクトル法による正方形ダクトの直接数値計算 (DNS) のアルゴリズムと並列化の方法については、[11] を参照して頂きたい。乱流渦を十分に解像するために壁面近傍に格子を細かく切る必要があり、刻み時間ステップの制約を緩和するために、粘性項は時間に対して陰的に取り扱うため、流れの時間発展の反復ごとに速度と圧力のポアソン方程式を解く必要がある。ある時刻での3次元の速度と圧力場については、管軸方向にフーリエ級数展開をすることで、速度と圧力の各フーリエ係数について、2次元の Helmholtz 方程式 ([11] の (7)(8) 式) を得る。これを適切な境界条件の下で解くが、この解法部分で行列積の演算を必要とする。 x 方向速度 u の波数 k_x に対するフーリエ

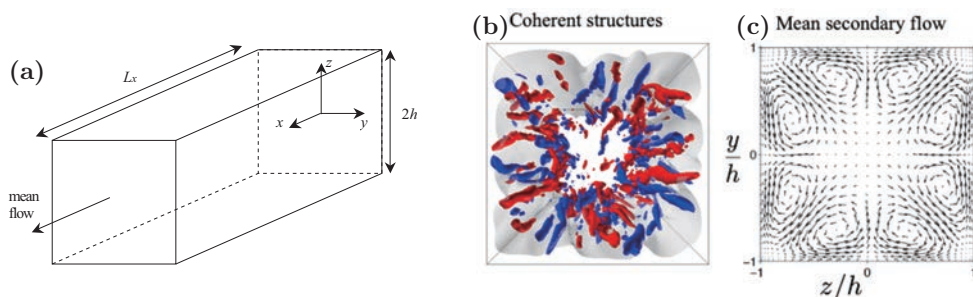


図1 (a) 正方形ダクトの外観. (b) 乱流中の瞬時渦の様子. 流れ方向の等値面を灰色で、時計回り・反時計回りの渦構造を赤と青で示す. 流れは手前から奥. (c) 断面内平均二次流れ.

係数 \hat{u} を例に、2次元の高速対角化解法 [10] を説明する．解くべき Helmholtz 方程式は、

$$\nabla_{2D}^2 \hat{u}(y, z) - a\hat{u}(y, z) = F \quad (1)$$

ここで、 $\nabla_{2D}^2 \equiv \frac{\partial}{\partial^2 y} + \frac{\partial}{\partial^2 z}$ 、で、 a は流れ方向の波数 k_x に依存する定数、 F は Navier-Stoke 方程式の非線形項と圧力勾配と境界条件から求まる． $U = (U_{j,k}) = \hat{u}(y_j, z_k)$ 、 y 方向と z 方向の格子点数を同じ N として、境界条件も考慮した微分係数行列を D として、

$$D^2 U + U(D^2)^T - aU = F \quad (2)$$

と表現する．本研究では、チェビシェフ・ガウス・ロバット配置された点 ($y_j = \cos(\pi j/N)$ 、 $z_k = \cos(\pi k/N)$) を考えるため $D(= D_y = D_z)$ は密な実対称行列である（フーリエ係数の実部と虚部は別々に計算する）．対角化 $D^2 = P\Lambda P^{-1}$ を施し、 $\tilde{U} = P^{-1}UP^{-T}$ 、 $\tilde{F} = P^{-1}FP^{-T}$ とおくと、 $(P\Lambda P^{-1})^T = P^{-T}\Lambda P^T$ に注意して、

$$(P\Lambda P^{-1})U + U(P^{-T}\Lambda P^T) - aU = F \quad (3)$$

$$\Lambda\tilde{U} + \tilde{U}\Lambda - a\tilde{U} = \tilde{F} \quad (4)$$

$$\tilde{U}_{j,k} = \frac{\tilde{F}_{j,k}}{\lambda_j + \lambda_k - a} \quad (5)$$

である．したがって、解は $U = P\tilde{U}P^T$ と求まる． P^{-1} とその転置行列 P^{-T} 、及び固有値ベクトル Λ を予め計算しておき、以下の3つの手順

$$\text{(Step 1)} \quad \tilde{F} = P^{-1}FP^{-T}$$

$$\text{(Step 2)} \quad \text{式 (5)}$$

$$\text{(Step 3)} \quad U = P\tilde{U}P^T$$

を実装すれば良い．Step 1 と 3 では、2回ずつ行列積の倍精度演算を行うためボトルネックとなる．行列積の計算は、Level 3 BLAS の DGEMM を使い、GPU の場合は CUBLAS を適用する．ここで、 N が大きい場合に行列積 $C = AB$ を高速に実行するための工夫をする．メモリへのアクセスが連続的になるように、行列 A の転置操作を先にしておいてから、DGEMM ルーチンに渡し、 $C = (A^T)^T \times B$ を計算させると非常に高速である．また、Step 2 の分母の計算は固有値の和を要素に持つ行列 $E_{j,k} = \lambda_j + \lambda_k$ を用意しておく．最終的に、以下のような実装となる．

$$\text{(Step 1)} \quad \tilde{F} (= P^{-1}FP^{-T}) = \left\{ \frac{\left[\begin{array}{c} (P^{-T})^T \times F \\ \text{(i) dgemm} \end{array} \right]^T}{\text{(ii) transpose}} \right\} \times P^{-T}$$

(iii) dgemm

$$\text{(Step 2)} \quad \tilde{U}_{j,k} = \frac{\tilde{F}_{j,k}}{E_{j,k} - a}$$

$$\text{(Step 3)} \quad U (= P\tilde{U}P^T) = \left\{ \frac{\left[\begin{array}{c} (P^T)^T \times \tilde{U} \\ \text{(i) dgemm} \end{array} \right]^T}{\text{(ii) transpose}} \right\} \times P^T$$

(iii) dgemm

4. GPU 化の詳細な実装方法

現行の DNS プログラムは Fortran で書かれており、今回は過去の遺産を有効利用しながら GPU での高速化を目指す。OpenACC では十分に高速化できない場合もあり、人類の宝である Blas ライブラリの利用を心がける。また、MPI 並列計算のように明示的に GPU デバイスへのデータ転送の命令を書き、Intel Fortran から cuBlas を呼び出す仕様とした。これには、CUDA のインストールフォルダ (CUDA_INSTALL_DIR)/src/にある wrapper と interface を利用する (fortran.c, fortran.h, fortran_common.h)。微分係数行列が疎な場合は、cuSparse ライブラリ用の cusparse_fortran.c, cusparse_fortran.h, cusparse_fortran_common.h が利用できる。cuBlas のバージョン v8 から v11 までは同じもので動作するのを確認したが、cuSparse を呼び出す場合は v10 から v11 で仕様が変わっているので注意する。cuSparse ではバッチ化された処理も利用できる。cuBlas のライブラリで対応できない式 (5) の計算と転置行列については、CUDA でソースコードを C interface と合わせて用意する必要がある。以下に行列の転置の CUDA コードを示す (Coalesced Transpose, NVIDIA ブログ “An Efficient Matrix Transpose in CUDA C/C++” (<https://developer.nvidia.com/blog/efficient-matrix-transpose-cuda-cc/>)より)。

Listing 1 GPU メモリ上での行列転置関数 (my_transpose.cu).

```
#include <ctype.h>
#include <stdio.h>
#include <string.h>
#include <stddef.h>
#include <stdlib.h>
#if defined(__GNUC__)
#include <stdint.h>
#endif /* __GNUC__ */
#include "cuda.h"
#include "cuda_runtime.h"
// #include <cublas.h>
#include <cublas_v2.h>

#define TILE_DIM 32
#define BLOCK_ROWS 8

typedef size_t ptr_t;

__global__ void transposeCoalesced(double *odata,
                                   double *idata, int width, int height)
{
    __shared__ double tile[TILE_DIM][TILE_DIM];
    int xIndex = blockIdx.x*TILE_DIM + threadIdx.x;
    int yIndex = blockIdx.y*TILE_DIM + threadIdx.y;
    int index_in = xIndex + (yIndex)*width;
    xIndex = blockIdx.y * TILE_DIM + threadIdx.x;
    yIndex = blockIdx.x * TILE_DIM + threadIdx.y;
    int index_out = xIndex + (yIndex)*height;
```



```

for (int i=0; i<TILE_DIM; i+=BLOCK_ROWS) {
    tile[threadIdx.y+i][threadIdx.x] =
        idata[index_in+i*width];
}
__syncthreads();
for (int i=0; i<TILE_DIM; i+=BLOCK_ROWS) {
    odata[index_out+i*height] =
        tile[threadIdx.x][threadIdx.y+i];
}
}
// interfaces
extern "C" {
    int transpose_gpu_(ptr_t *handle, const int *Nx, const int *Ny,
        const double *alpha, const ptr_t *devPtrA, ptr_t *devPtrC)
    {
        double *A = (double *)(*devPtrA);
        double *C = (double *)(*devPtrC);
        const int size_x = *Nx;
        const int size_y = *Ny;
        // execution configuration parameters
        dim3 grid(size_x/TILE_DIM, size_y/TILE_DIM), threads(TILE_DIM,BLOCK_ROWS);
        transposeCoalesced<<<grid, threads>>>(C, A, size_x, size_y);
        return 0;
    }
}

```

以下のようにオブジェクトファイルを生成する。

Listing 2 fotran.c のコンパイル

```

CUDAINC = /$(CUDA_INSTALL_DIR)/$(CUDA_VER)/include/
CUDALIB = /$(CUDA_INSTALL_DIR)/$(CUDA_VER)/lib64/
CCFLAGS = -DARCH_64=1 -DCUBLAS_GFORTRAN -I$(CUDAINC)
icc -c $(CCFLAGS) fortran.c
nvcc -c $(CCFLAGS) my_transpose.cu

```

Fortran ソースコードとリンクさせるには、以下のオプションを付けておく。

```

-I$(CUDAINC) -L$(CUDALIB) -lcudart -lcublas -lcublas_device \
-lcudadevrt [-lCUSPARSE]

```

ここまでで、cuBlas を利用する準備ができた。次に、実際の Fortran コードの書き換えの例を Step 1-(i) dgemm, $(P^{-T})^T \times F$ で示す。オリジナルの CPU 版コードの dgemm に関わる allocate と call 部分である。予め $N \times N$ の行列 P^{-T} が計算済みで PM1T に格納してある。

Listing 3 Fortran オリジナルコード例

```

allocate(PM1T(N,N),F(N,N),FT(N,N))
... ! pre-process of P, PT, PM1, PM1T, E !
call dgemm('t','n',N,N,N,1.d0,PM1T,N,F,N,0.d0,FT,N)

```

はじめに, cublas の初期化をしておく. 自作の transpose 関数ではデバイスの handle が必要なのでここで作成しておく.

Listing 4 Fortran から cuBlas を初期化

```
external cublas_init, cusparse_create
integer*8 handle
...
call cublas_init
istat = cusparse_create(handle)
```

次に, GPU メモリ上に int8 型のデバイスポインタを定義し, cublas_allocate を用いて GPU デバイス上で配列領域を確保する. 以下は, プリプロセスで計算した double 型 $N \times N$ 配列 PM1T を転送する例である. GPU メモリにデータを送るには, このポインタと行列のサイズを指定して, cublas_set_matrix を用いる (メモリの確保に失敗したときはエラーメッセージを表示させないと気付かずにそのまま実行される).

Listing 5 Fortran から cuBLAS でデバイスメモリにコピーする例

```
external cublas_alloc, cublas_set_matrix
integer*8 dp_PM1T, devPtrF, devPtrFT
...
istat= cublas_alloc(N*N, 8, dp_PNM1T)
if (istat.ne.0) write(*,*) 'cublas alloc. error: PNM1T',istat
istat= cublas_set_matrix(N, N, 8, PM1T, N, dp_PM1T, N)
if (istat.ne.0) write(*,*) 'cublas setmat error: PM1T',istat
```

また, GPU に送る配列 F と GPU メモリ上で一時的に FT を保存しておく領域を確保して初期化しておく.

```
istat= cublas_alloc(N*N, 8, devPtrF)
istat= cublas_set_matrix(N,N,8,0.d0,0,devPtrF,1) ! zero
istat= cublas_alloc(N*N, 8, devPtrFT)
istat= cublas_set_matrix(mm2+1,mm2+1,nk,0.d0,0,devPtrFT,1) ! zero
```

cuBlas の実行と転置操作は以下ようになる.

```
external cublas_set_matrix, cublas_dgemm, transpose_gpu
...
istat = cublas_set_matrix(N,N,8,F,N,devPtrF,N)
istat = cublas_dgemm('t', 'n', N,N,N,1.d0,dp_PM1T,N,devPtrF,N.0.d0,devPtrFT,N)
istat = transpose_gpu(handle,int(N,kind=8),int(N,kind=8),1.d0, &
                      devPtrFT,dp_tmp2d)
...
```

最終的に Helmholtz ソルバーの結果 U をデバイスメモリから取り出すには, cublas_get_matrix を用いる.

```
external cublas_get_matrix
...
istat = cublas_get_matrix(N,N,8,devPtrU,N,U,N)
```

プログラムの最後に `cublas_free` と `cublas_shutdown` で GPU メモリを開放しておく。

5. 性能評価

2次元 Helmholtz 方程式の CPU 版の結果と GPU 版の性能比較を図 2 に示す。(現在試行利用中の Wisteria Aquarius (A100) での性能評価も合わせて示す。) CPU での実行時間は N^3 で増えていることが確認できる。それに対して, GPU での実行時間(ホストメモリからデバイスメモリのデータ移動の時間を含む)から, $N \approx 1000$ で 10 倍程度の高速化が達成できており, N が大きいほど高速化率も高い。Wisteria では小さいデータ ($N < 512$) を送ると逆に性能が落ちる傾向が見られたが, $N > 1000$ では P100 よりも早い。これは GPU デバイスへのデータの送受信の速度向上が要因である。(PCI express Gen3 と Gen4 では, 転送速度は 2 倍の性能差がある。)

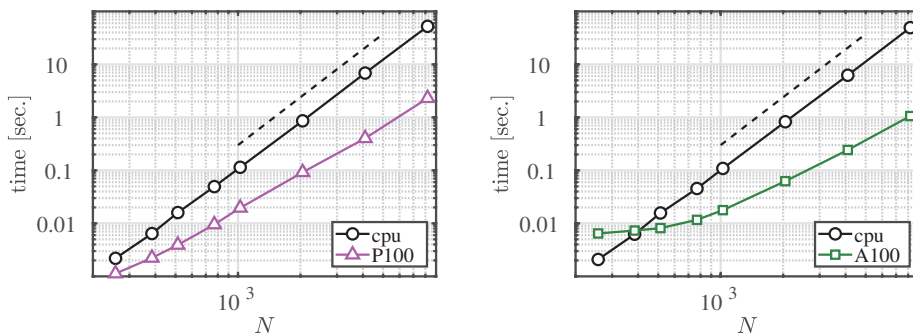


図 2 Helmholtz ソルバーの性能評価. 実行時間計測にはホストメモリから GPU デバイスメモリへのデータ転送を含む。CPU での実行時間(黒)と GPU での実行時間(マゼンタが Reedbush-H, P100, 緑は Wisteria-A, A100)を縦軸に, 横軸 N は, 1 辺の格子点数。破線は N^3 のスケーリングの傾きを示す。

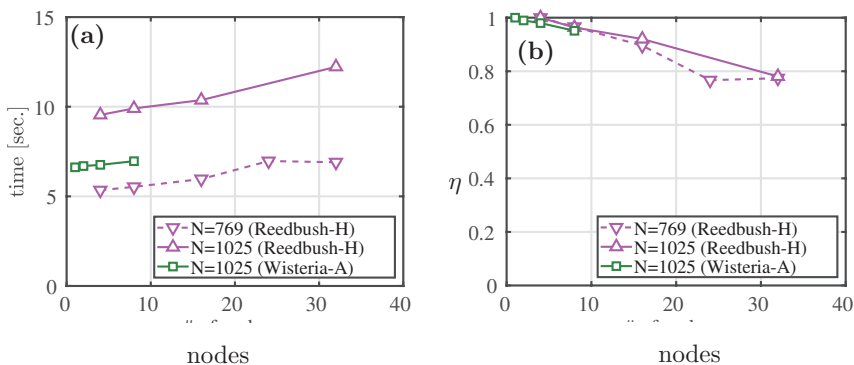


図 3 Weak scaling の結果. (a) DNS コード全体の実行時間計測結果. 格子点数は $N_x = 96 \times (node), N_y = N_z = N$. (b) 並列化効率(マゼンタが Reedbush-H (32 process/node), 緑は Wisteria-A (32 process/node) の結果.)

コード全体の Weak scaling の結果を図 3 に示す。同じ規模の計算でも Wisteria-A の方が高速に計算できるが, InfiniBand EDR と InfiniBand HDR の違いによって, 通信性能が大きく向上したのが主な要因である。

6. まとめ

今回実装した2次元 Helmholtz ソルバーの GPU 加速によって、ダクトの DNS 計算でボトルネックは取り除けた。CPU 環境では GPU を使えば恐ろしく計算規模を大きくすることができる。今回は、複数 GPU 利用では 1GPU の場合と比べて 10~20% 程度しか高速化できず、2GPU 以上の有効利用の課題が残った。現状の CPU/GPU ハイブリッドコードでは、1CPU あたり 1GPU で加速するのが効率がよく、Reedbush-H の構成で大量の計算ノードを用いるのが良さそうである。Reedbush-H では、 $3072(x) \times 1025(y) \times 1025$ の計算規模で 32 ノードを利用すると、1step の計算時間が 12 秒程度であった (図 3(a))。プロダクトランの十分な統計量が得られる 100 万ステップの計算にはおよそ 10 万ノード時間程度で Reedbush-H (P100 \times 2) で 3 ヶ月程度である。

情報基盤センターで導入されている複数 GPU を利用した流体計算の為に、結局、フル GPU バージョンのコード開発が必要である。GPU プログラミングも MPI 並列計算と同様、まだ学んでいない人にとっては非常にとっつきにくいイメージがあるが、少し頑張れば最初の障壁を乗り越えれば、得られるものは大きい。MPI 並列に馴染みがある人が GPU 利用する場合は、cuBlas ライブラリでも OpenACC であっても、はじめから CPU/GPU 間のデータ転送については明示的にコーディングする方がよい。最新の A100 では GPU 上のメモリが 40GB もあるので、少ない格子点数で高精度の結果が得られるスペクトル法を用いると、1GPU だけでも中規模計算を高速に実施できる。1 ケースの超大規模計算を目指すだけでなく、パラメータを振りながら小中規模の計算を多く行う研究での利用価値も高いと思われる。

謝辞

若手利用推薦課題「世界最高レイノルズ数乱流データベース構築のための GPU-DNS コードの作成」(2019 年度) 及び「GPU 加速 DNS コードを用いた正方形ダクト乱流の直接数値計算」(2020 年度) の援助を受けた。また、結果の一部は Wisteria/BDEC-01 での試行利用を活用した。

参考文献

- [1] S. Gavrilakis, *J. Fluid Mech.* **244**, 101 (1992).
- [2] A. Pinelli, M. Uhlmann, A. Sekimoto, G. Kawahara, *J. Fluid Mech.* **644**, 107 (2010).
- [3] 河原源太, 中辻竜也, 清水雅樹, ウルマン・マルクス, ピネリ・アルフレド, 日本機械学会年次大会 **2012**, J054023 (2012).
- [4] 森下誠, 河原源太, 清水雅樹, 流体工学部門講演会講演論文集 **2016**, 1008 (2016).
- [5] M. Lee, R. D. Moser, *J. Fluid Mech.* **774**, 395–415 (2015).
- [6] Y. Yamamoto, Y. Tsuji, *Phys. Rev. Fluids* **3**, 012602 (2018).
- [7] A. Vela-Martín, M. P. Encinar, A. García-Gutiérrez, J. Jiménez, *arXiv:1808.06461* (2019).
- [8] J. M. López, *et al.*, *SoftwareX* **11**, 100395 (2020).
- [9] S. K. Lele, *J. Comput. Phys.* **103**, 16 (1992).
- [10] P. Haldenwang, G. Labrosse, S. Abboudi, *J. Comput. Physics* **55**, 115 (1984).
- [11] 関本敦, 河原源太, M. Uhlmann, P. Alfredo, 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 **10 (5)** (2008).

渦電流-熱伝導連成解析システムの構築と

包括的な高速化・高度化

杉本振一郎

八戸工業大学

1. はじめに

向きと強度が変化する交流電流の周囲では電流の変化に応じて磁場が変化し、その中に金属や炭素などの導電体を置くと導電体中に渦電流が流れる。導電体には電気抵抗があるため渦電流が流れることによりジュール熱が発生し、導電体は自己発熱する。このように誘導加熱とは、交流電流などによる磁場の変化によって導電体を非接触で自己発熱させる加熱方法である。誘導加熱には、

- ・ 被加熱物そのものに発熱させるため熱損失が小さい
- ・ 短時間で急速な加熱が可能
- ・ 他の加熱方法に比べて設備がコンパクト
- ・ 局部加熱であるため周辺への影響が小さい

といった利点があり、産業界では金属材料の溶解や溶接、焼き入れなど、効率的な加熱や局所的な加熱が必要な用途で幅広く用いられている。また一般家庭にも電磁(IH)調理器やIH式電気炊飯器といった誘導加熱を利用した機器が普及している。

一方、渦電流は表皮効果により導電体表面に集中する。そのとき渦電流が流れる領域の表皮深さは交流電流の周波数の0.5乗に反比例し、周波数が高くなるほど浅くなる。そのため誘導加熱の数値シミュレーションでは、周波数が高くなるほど表面付近のメッシュをより細かく分割する必要がある。時間調和渦電流-熱伝導連成解析を行えるソフトウェアは、数百万自由度くらいであれば可能なものがすでに市販されているが、交流電流の周波数が高く表皮深さが浅い誘導加熱の精度の高い詳細な解析には、電磁界解析で1億自由度以上、熱伝導解析でも1,000万自由度以上が必要であると考えられる。そのような対象の数値シミュレーションでは十分な予測の精度を確保しつつ計算時間を抑えるため、スーパーコンピュータの活用が必須である。そこでスーパーコンピュータ上で動作する、時間調和渦電流-熱伝導連成解析システムの研究を行っている。

階層型領域分割法は領域分割法[1]-[3]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、スーパーコンピュータで現在主流の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[4]。HDDMは大規模な構造解析[5]や熱伝導解析[6]に適用され、構造解析では1,000億自由度の解析[7]に成功している。著者は共同研究者らとともに階層型領域分割法を主に電磁界解析分野へ適用する研究を行っており、非線形静磁場問題[8]や時間調和渦電流問題[9]、高周波電磁界問題[10]-[11]、モータや発電機などの移動体を含む非定常渦電流問題[12]-[13]において数億自由度の解析をスーパーコンピュータ上で効率よく行うことに成功している。特に高周波電磁界問題では、1,300億自由度数値人体モデルの解析を約15分で行うことに成功[14]し、さらに大きな1兆自由度規模の解析にも挑戦している。これらの成果はADVENTURE_Magnetic (AdvMag)

という並列電磁界解析ソルバとしてまとめ、ADVENTURE プロジェクトのホームページ[15]でオープンソースのソフトウェアとして公開している。同じく階層型領域分割法が適用された並列熱伝導解析ソルバ ADVENTURE_Thermal (AdvThermal) もまた公開されている。

スーパーコンピュータ上で動作する時間調和渦電流-熱伝導連成解析システムには、時間調和渦電流解析、熱伝導解析をそれぞれスーパーコンピュータ上で行うことができるソフトウェア、それらを連携させるために時間調和渦電流解析の結果から発熱量を計算して熱伝導解析の入力データを作るカップリングソフトウェアが必要である。そこで時間調和渦電流解析には前述の AdvMag、熱伝導解析には AdvThermal を用いることとした。またカップリングソフトウェアは、スーパーコンピュータ上で電磁波による人体への加温を扱う高周波電磁界-熱伝導連成解析システムの研究開発においてこれまでに得られた知見を活用して研究開発した。このカップリングソフトウェアで AdvMag と AdvThermal をつなげることで、数億自由度規模の交流電流による誘導加熱の数値シミュレーションが可能なシステム(図 1)を構築する。

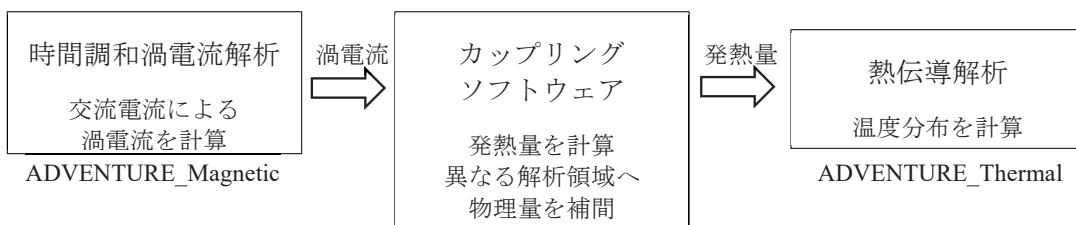


図 1. 時間調和渦電流-熱伝導連成解析システム。

本稿では、2020 年度の若手・女性利用課題に採択された研究の中で取り組んだ成果も含め、大規模な時間調和渦電流-熱伝導連成解析に向けて、電磁調理器モデルを用いた連成解析を例に、時間調和渦電流-熱伝導連成解析システムの研究開発状況について紹介する。

2. 時間調和渦電流-熱伝導連成解析

AdvMag を用いた時間調和渦電流解析では、要素ごとの渦電流密度 J_{e_h} [A/m²] を求め、それを用いてカップリングソフトウェアで要素ごとの発熱量 \dot{f} [W/m³] を求める。ここで J_{e_h} は次のように複素数である。

$$J_{e_h} = J_r + iJ_i. \quad (1)$$

i は虚数単位、 J_r 、 J_i は渦電流密度の実部と虚部である。このとき、渦電流密度の振幅 J_m [A/m²]、および実効値 J_E [A/m²] は、

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

$$J_E = \frac{1}{\sqrt{2}} J_m, \quad (3)$$

である。よって、 \dot{f} は次式より求められる。

$$\tilde{f} = \frac{J_E^2}{\sigma} = \frac{J_m^2}{2\sigma} = \frac{J_f^2 + J_i^2}{2\sigma}. \quad (4)$$

AdvThermal では \tilde{f} を入力として定常の熱伝導解析を行う。

3. 階層型領域分割法

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

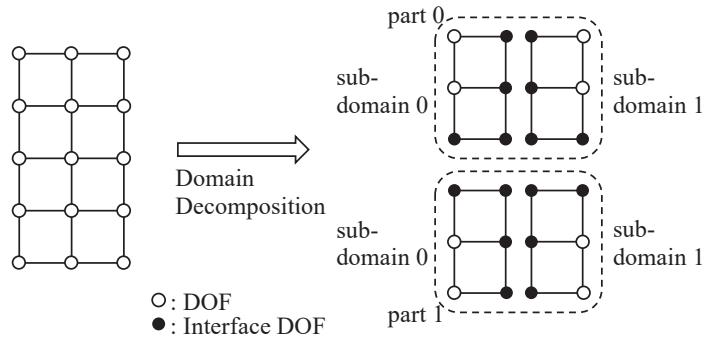


図 2. 階層型の領域分割.

階層型領域分割法では要素の重なりがないように解析領域を part と subdomain からなる階層構造に分割する(図 2).

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

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

解くべき有限要素方程式を行列形式で表す。

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

式(6)に階層型領域分割法を適用すると, 次のように書ける。

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

ここで、 u_B はインターフェース自由度であり、

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

である．下付添え字 I , B はそれぞれ subdomain 内部の自由度，インターフェース自由度に関する項であり， $R_I^{(i,j)}$, $R_B^{(i,j)}$ は自由度をそれぞれ subdomain 内部の自由度，またはインターフェース自由度へと制限する 0-1 行列である．式 (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、

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

であり、 S はシュア補元行列、 $S^{(i,j)}$ は領域 $\Omega^{(i,j)}$ におけるローカルシュア補元行列である．ここで時間調和渦電流解析において $K_{II}^{(i,j)}$ は特異行列であるため、式中の $\left(K_{II}^{(i,j)} \right)^\dagger$ は一般化逆行列であ

る. また熱伝導解析においては $(K_H^{(i,j)})^\dagger$ は通常の逆行列である. 階層型領域分割法では並列環境下で式(8)を共役勾配(Conjugate Gradient: CG)法や共役直交共役勾配(Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient: COCG)法などの反復法で解き, 得られた u_B を Dirichlet 条件として式(9)を解くことで, 全体の解を得る.

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

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

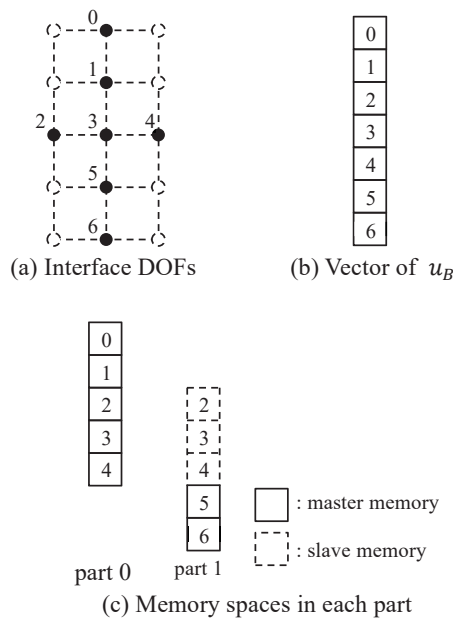


図 3. インターフェース自由度のメモリ空間.

図 2 のケースでは, 7 つのインターフェース自由度(図 3 (a))があり, u_B は 7 つの要素をもつベクトル(図 3 (b))である. しかし解析領域は分割されているため, ベクトルのデータはそれぞれの MPI プロセスに分散して記憶されている. さらに, part 間で共有されているインターフェース自由度はそれぞれの MPI プロセスにメモリが確保されている. ここで, 同一のインターフェース自由度について複数のメモリが確保されているため, いずれか一つをマスターメモリとして定める. 本稿では, 同一のインターフェース自由度に対してメモリが確保されている part の中で, part 番号の最も小さいものが持つメモリをマスターメモリとする. 2~4 番のインターフェース自由度は part 0 と part 1 に共有されているので, part 0 のメモリがマスターメモリとなり, part 1 のメモリはスレーブメモリとなる(図 3 (c)). それぞれの part では, マスターメモリ, スレーブメモリを持つインターフェース自由度をそれぞれ基本インターフェース自由度, 従属

インターフェース自由度と呼ぶ。part 0 ではすべてが基本インターフェース自由度である。一方、part 1 では2~4が従属インターフェース自由度、5、6が基本インターフェース自由度である。プロセス間通信は、シュア補元行列の行列ベクトル積を行う際に part 間で共有されているインターフェース自由度について行われる。まず従属インターフェース自由度の情報が、その基本インターフェース自由度を持つ part へと送られる。その後、それぞれの part で必要な処理をした結果を基本インターフェース自由度を持つ part からその従属インターフェース自由度を持つ part へ送り、スレーブメモリへコピーする。

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

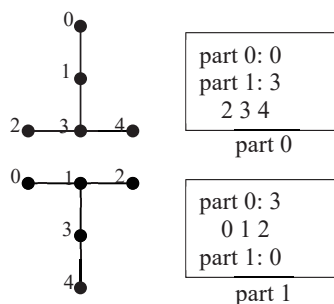


図 4. それぞれの part でのインターフェース自由度の通し番号と通信テーブル。

4. 数値解析例

構築したシステムの検証には電磁調理器モデルを用いた。このモデルは4重の加熱コイル(図5)と鍋(図6)、そしてそれらを取り巻く空気領域からなる。

時間調和渦電流解析は加熱コイル、鍋、空気領域を解析対象として AdvMag を用いて行う。加熱コイルは磁気抵抗率 $7.957747e+05$ m/H とし、20 kHz の電流を流すこととする。鍋はステンレス SUS304 で、磁気抵抗率 $7.81250e+05$ m/H、導電率 $1.388888e+06$ s/m とする。空気領域の磁気抵抗率 $7.957747e+05$ m/H とし、また加熱コイルと鍋を内包する十分に大きな領域として -450 mm $\leq x \leq 450$ mm, -450 mm $\leq y \leq 450$ mm, -300 mm $\leq z \leq 450$ mm の範囲を設定した。図7は約1,500万自由度のメッシュにおける鍋内側の底面での渦電流密度の実部である。加熱コ

イルの直上で渦電流密度が大きくなり、加熱コイルの内側と外側では小さくなっていることがわかる。

熱伝導解析は鍋のみを解析対象として AdvThermal を用いて行う。熱伝導率 $21.5 \text{ W/m}^\circ\text{C}$ 、密度 $7,930 \text{ kg/m}^3$ 、比熱 $500 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$ として、時間調和渦電流解析で得られた渦電流密度から求めた発熱量を内部発熱として与える。図 8 は鍋内側の底面での温度分布である。図 7 における渦電流密度が高いところと、図 8 における温度の高いところが一致しており、連成解析を正しく行っていることがわかる。

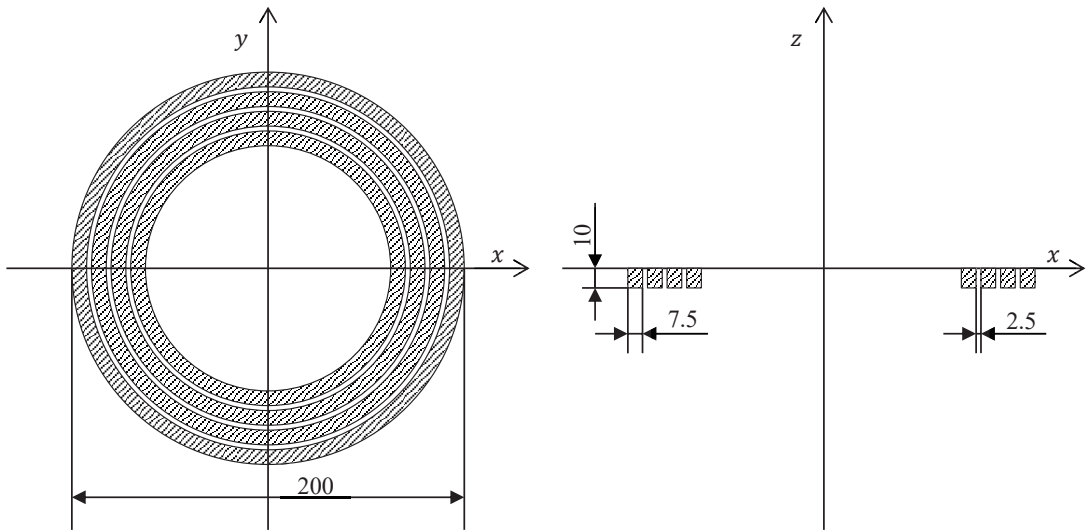


図 5. 加熱コイル[mm].

左： $z = 0$ の xy 平面，右： $y = 0$ の zx 平面

幅 7.5mm，厚さ 10mm のコイルが 2.5mm の間隔をおいて 4 重に配されている。

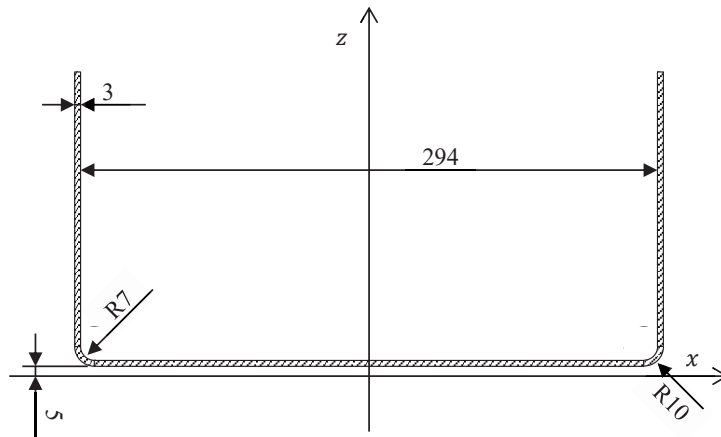


図 6. 鍋($y = 0$ の zx 平面) [mm].

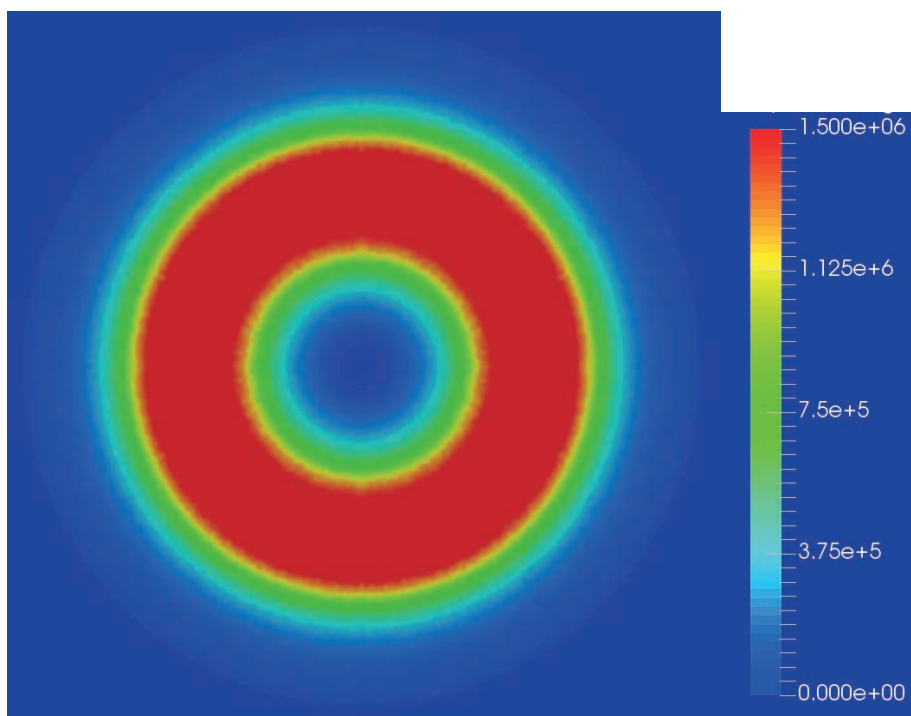


図 7. $z = 8$ mm の渦電流密度(実部) [A/m²].

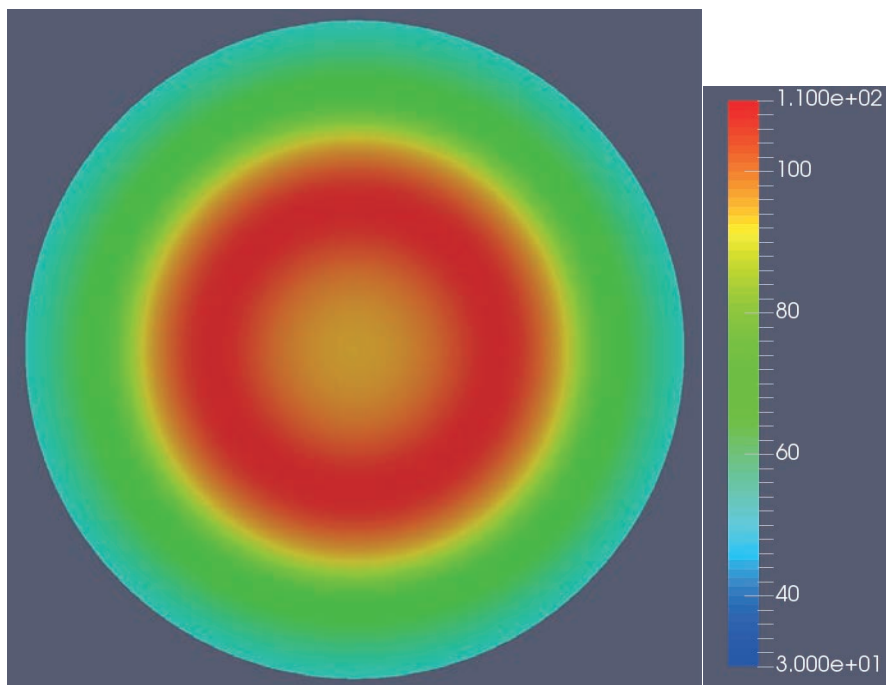


図 8. $z = 8$ mm の温度分布 [°C].

次に約 1.5 億自由度のモデルをスーパーコンピュータ上で解析し、計算時間を計測した。用いたスーパーコンピュータは東京大学情報基盤センターの Oakforest-PACS スーパーコンピューター

タである。このスーパーコンピュータのノードには Intel Xeon Phi 7250 を搭載する Fujitsu PRIMERGY CX1640 M1 が用いられており、1 ノードあたり 68 コア搭載している。時間調和渦電流解析では最小で 64 ノード、最大で 1,024 ノードを用いることとし、約 300 万自由度の鍋のみを解析対象とする熱伝導解析では時間調和渦電流解析の 64 分の 1 のノードを用いることとする(表 1)。いずれもノード内の 68 コアすべてを計算に用いる。カップリングソフトウェアは並列化されていないため 1 ノードを割り当て、68 コアのうち 1 コアのみ用いる。表 2 はそれぞれの計算時間である。並列化されている時間調和渦電流解析、熱伝導解析はノード数を増やすことで概ね計算時間を減らせているが、並列化されていないカップリングソフトウェアの計算時間はほとんど変わらず、ボトルネックとなっていることが確認できた。

表 1. 計算に使用したノード数

	A	B	C	D	E
時間調和渦電流解析	64	128	256	512	1,024
カップリングソフトウェア	1	1	1	1	1
熱伝導解析	1	2	4	8	16

表 2. 計算時間[s]

	A	B	C	D	E
時間調和渦電流解析	804	439	260	175	131
カップリングソフトウェア	1,099	1,107	1,056	1,034	1,012
熱伝導解析	89	62	49	48	63
総計	1,992	1,608	1,365	1,257	1,206

5. おわりに

スーパーコンピュータ上で動作する時間調和渦電流-熱伝導連成解析システムを構築し、約 1.5 億自由度の電磁調理器モデルでその性能を検証した。今後はカップリングソフトウェアの並列化により全体の計算時間削減を試みる。

また時間調和渦電流解析で用いる物性値には温度依存性があり、1,000°C 近い温度変化があるような場合には物性値の変化を無視できない。今後はスーパーコンピュータ上で効率的に温度依存性を考慮できる手法についても検討していく。

謝 辞

本研究の一部は東京大学情報基盤センター若手・女性利用者推薦、および JSPS 科研費 17H02829 の助成を受けて実施された。

ここに記し、感謝の意を示す。

参 考 文 献

- [1] R. Glowinski, Q.V. Dinh and J. Periaux: “Domain Decomposition Methods for Nonlinear Problems in Fluid Dynamics”, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.40, Issue 1,

pp.27-109 (1983)

- [2] A. Quarteroni and A. Valli: "Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations", Clarendon Press, Oxford (1999)
- [3] A. Toselli and O. Widlund: "Domain Decomposition Methods, Algorithms and Theory (Springer Series in Computational Mechanics)", Springer (2004)
- [4] 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)
- [5] 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).
- [6] A.M.M. Mukaddes, M. Ogino, M. H. Kanayama and R. Shioya: "A scalable balancing domain decomposition based preconditioner for large scale heat transfer problems", JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering, Vol.49, No.2, pp.533-540 (2006).
- [7] M. Ogino and R. Shioya: "Scalable non-overlapping domain decomposition method for finite element simulations with 100 billion degrees of freedom model", Proceedings of the 1st International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental problems, pp.96-99 (2014).
- [8] S. Sugimoto, M. Ogino, H. Kanayama and S. Yoshimura: "Introduction of a Direct Method at Subdomains in Non-linear Magnetostatic Analysis with HDDM", 2010 International Conference on Broadband, Wireless Computing, Communication and Applications, pp.304-309 (2010)
- [9] 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)
- [10] A. Takei, M. Ogino and S. Sugimoto, "High-Frequency Electromagnetic Field Analysis by COCR Method using Anatomical Human Body Models", IEEE Transactions on Magnetics, Vol.54, Issue 3, online, 7204204, 4p (2018)
- [11] 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, p.16-0067, online, 10p (2017)
- [12] S. Sugimoto, M. Ogino, H. Kanayama and A. Takei: "Hierarchical Domain Decomposition Method for Devices including Moving Bodies", Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering, Vol.4, Issue 1, pp.99-116 (2018)
- [13] 杉本振一郎: 「階層型領域分割法での周期境界条件の効率的な考慮」, 電気学会論文誌 B, Vol.139, No. 11, pp.637-642 (2019)
- [14] S. Sugimoto, A. Takei and M. Ogino, "High-Frequency Electromagnetic Field Analysis with 130 Billion of Degrees of Freedom", The 38th JSST Annual Conference, International Conference on Simulation Technology, pp.290-295 (2019)
- [15] ADVENTURE プロジェクト HP: <https://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/>

PaCS-MD に基づく効率的リガンド結合経路探索法の開発

原田 隆平

筑波大学計算科学研究センター

1. はじめに

2020 年度 (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「PaCS-MD に基づく効率的リガンド結合経路探索法の開発」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標的タンパク質に対する基質 (リガンド) 結合経路を抽出する計算手法の開発である。

2. イントロダクション

生体内では、タンパク質をはじめとする生体分子が機能を担うことで、生命を維持している。基質 (リガンド) は、タンパク質と特異的に結合する低分子であり、シグナル伝達など多彩な機能を担っている。リガンドとタンパク質の相互作用は、生命の機能解明や創薬ターゲットとして重要な役割を担う。近年、計測技術の進歩により、リガンドとタンパク質の高解像度の複合体構造が決定され、生命機能や創薬ターゲットの解明が急速に進んでいる。

しかしながら、タンパク質とリガンドの相互作用を理解するためには、複合体構造だけではなく、リガンド結合経路の探索が必要である。結合経路を探索するにあたり、分子動力学シミュレーション (MD) は強力な研究手段である。MD は、運動方程式を数値計算することで、タンパク質ダイナミクスを追跡することができ、リガンドとタンパク質との相互作用を詳細に解析することができる。しかしながら、標的タンパク質とリガンド結合は、通常の MD が追跡可能な時間スケールよりも遥かに長時間で観測される「生物学的レアイベント」であるため、抽出が困難である。故に、リガンドと標的タンパク質が結合し、複合体を形成する素過程を抽出する「レアイベントサンプリング手法」の開発が望まれている。

本研究では、リガンドと標的タンパク質の結合過程をレアイベントとして抽出する計算手法を開発する。具体的には、タンパク質の遷移経路をレアイベントとして効率的に抽出する目的で開発した「Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD)」[1-10] をリガンド結合経路探索に拡張する。拡張にあたり、熱揺らぎの範囲において特定の反応座標方向に沿った結合経路探索を加速するため、リガンドが複数存在する環境下における PaCS-MD を実行可能な ligand-docking-PaCS-MD (ld-PaCS-MD) を開発する。

一般的に MD を用いた標的タンパク質へのリガンド結合経路探索は、リガンドのポテンシャルを操作する手法が広く利用されている。一方において、タンパク質は溶媒環境で立体構造を変化させるため、リガンドのポテンシャル操作が結合経路探索に与える影響を考慮しなければならない。ここで、PaCS-MD はタンパク質などの構造変化 (構造遷移) を効率的に探索可能なレア

イベントサンプリング手法である。図 1 に示すように、PaCS-MD の具体的な計算手順は、(1) 複数の短時間 MD から遷移確率の高い分子構造を選択し、(2) 選択構造を初期構造として再び短時間 MD を実行し繰り返すことで、効率的な構造探索を可能にする。非常に単純な計算スキームであるが、(1)と(2)からなるサイクルを繰り返すだけで、効率的に生体分子の構造遷移を誘起させることが可能である。常に遷移確率の高い分子構造を選択し、選択した分子構造から短時間 MD を繰り返すサイクルにより、生体機能に関する重要な構造変化を効率的に引き起こすことが可能になる。PaCS-MD は様々なターゲットに適用され、生体機能に重要な構造遷移の抽出に成功してきた。[11-13] 本研究では、従来の PaCS-MD を拡張し、タンパク質 1 分子のみならず、リガンドと標的タンパク質が結合し、複合体を形成する素過程を抽出する。具体的には、標的タンパク質に加え、リガンドの自由度も考慮した複合系において適用可能な形式に拡張し、ld-PaCS-MD を開発する。

ld-PaCS-MD では、標的タンパク質の周囲に複数のリガンドをランダムに配置し、短時間 MD が生成したスナップショットの中から、リガンドの重心と結合部位間の距離を計算・ランキング後、最近接のスナップショットから順に上位 n 個を新たな初期構造として選択し、短時間 MD をリスタートさせることで、リガンドの結合確率を上昇させる。これら一連のサイクルを繰り返す行うことで、効率的な結合経路探索を実現する。ld-PaCS-MD の独創性は、バイアスの少ない環境においてリガンド結合過程抽出の効率化が可能となる点である。また、PaCS-MD のアルゴリズムをリガンド結合経路探索に特化させ、他のリガンド結合探索手法とは異なるアプローチに基づき、リガンド結合経路の探索を効率化させる。

3. 計算手法の構築

3.1 Parallel Cascade Selection MD (PaCS-MD)

PaCS-MD 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」による「構造リサンプリング」を繰り返すことにより遷移経路を探索する。これまでに我々が開発してきた計算手法に関しては、レビュー論文 [14,15] を参照にされたい。本手法は、バイアスをかけることなく構造間の遷移経路を探索する。従来法では、構造遷移を促進するため系の温度を高

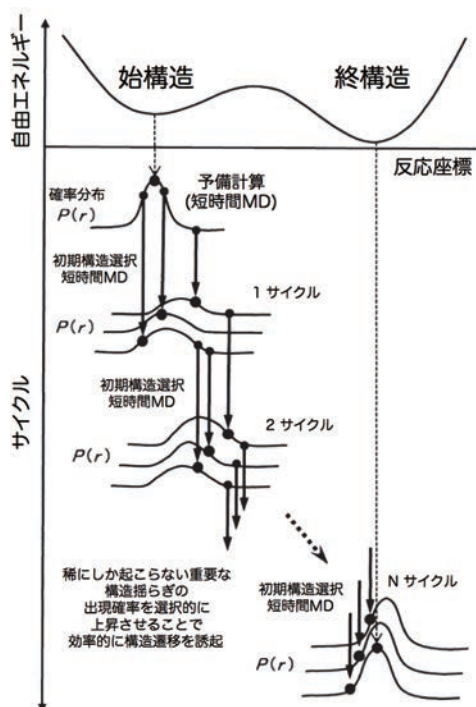


図 1: PaCS-MD の概念図

温にして MD を実行するか、系の特定の部分に外力や外部ポテンシャルといった「バイアス」を付加することがほとんどである [16,17]. 従来法に対して本手法は、反応座標を設定してしまえば、遷移確率が高い初期構造を選択し、短時間 MD により構造リサンプリングを繰り返していただくだけで、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 をリスタートさせるサイクルを繰り返すことで、徐々に構造分布が終構造近傍に近づいていく. 手法適用にあたり様々な反応座標が考えられるが、終構造が分かっている場合に関して、終構造に対する平均自乗距離 (root-mean-square deviation: RMSD) が考えられる. 例えば、構造リサンプリングにより得られるトラジェクトリを RMSD の値でランキングし、値の小さい順にスナップショットを複数個選択し、短時間 MD の初期構造として構造探索していくことにより、徐々に終構造へ近づいていき、レアイベントを抽出することができる. ここで、反応座標は任意に指定可能であり、RMSD に限らず指定できる. 実際の適用では、抽出したいレアイベントを的確に記述する合理的な反応座標を指定することが重要になることに注意されたい.

3.2 ld-PaCS-MD によるリガンド結合過程の抽出

ld-PaCS-MD は、リガンドが複数個存在する混雑環境において PaCS-MD を実行し、リガンド結合に伴う複合体形成プロセスの抽出する. 図 2 に示すように、ld-PaCS-MD は活性部位とリガンドの重心の距離を反応座標として、重心間距離が近い MD スナップショットを意図的に選択し、短時間 MD を繰り返す. 具体的には、サイクル毎に活性部位-リガンド重心間距離で MD スナップショットをランキングし、上位構造を複数個選択し、短時間 MD の初期構造とする. 常に重心間距離が小さい MD スナップ

ショットから構造リサンプリングを繰り返す. ここで、複数のリガンドを配置することで、より効率的にリガンド結合プロセスを抽出することができる. また、リガンド濃度があまりにも高くなりすぎると、リガンド同士が凝集してしまう可能性があるため、ある程度低濃度の環境下において ld-PaCS-MD を実行する必要がある.

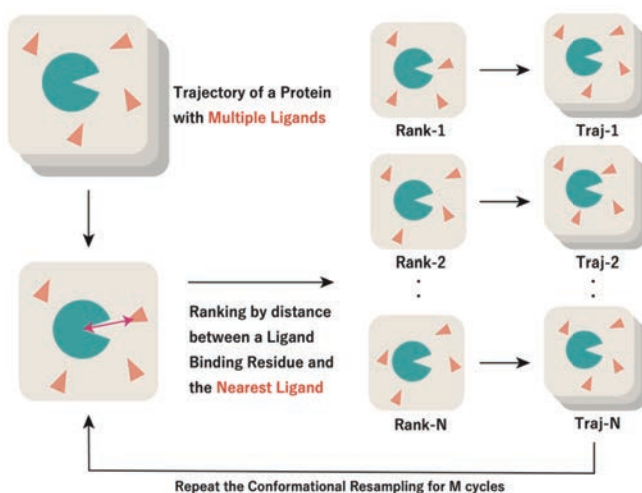


図 2: ld-PaCS-MD によるリガンド結合過程抽出

3.3 Id-PaCS-MD によるリガンド結合過程抽出

Id-PaCS-MD のデモンストレーションとして、加水分解酵素 (T4 リゾチーム) にリガンド (ベンゼン) が結合する過程を抽出した. T4 リゾチームがベンゼンに結合した複合体構造として, X 線結晶構造を参照し, 複合体構造に到達するように Id-PaCS-MD のサイクルを進めた.

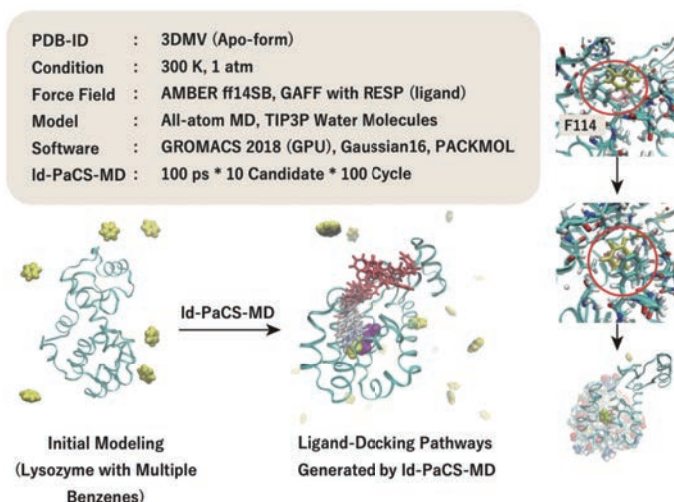


図 3: Id-PaCS-MD による抽出した T4 リゾチームとベンゼンの結合過程

図 3 に示すように, T4 リゾチームの周りに 6 個のベンゼンをランダムに配置し, Id-PaCS-MD を適用し, リガンド結合過程を抽出した. 計算効率の比較として, 通常の MD, 通常の PaCS-MD のリガンド結合過程の抽出プロファイル (活性部位とリガンド重心間距離 vs. サイクル数) を図 4 に示す. 図 4 (右) に示すように, 通常の MD (100 ns) はサイクルに対して活性部位とリガンドの重心距離が収束しておらず, T4 リゾチームに結合する結合過程を抽出できていない. 図 4 (中) に示すように, 通常の PaCS-MD (リガンド 1 個を配置) は 3 回のトライアルのうち 2 回のみプロファイルが収束しており, 1/3 の確率でリガンド結合過程を抽出できている. これらに対し, Id-PaCS-MD (リガンドを 6 個配置) は, トライアル全て (3/3 回) においてプロファイルが収束し, リガンド結合過程を抽出できており, 計算効率の高さを示している.

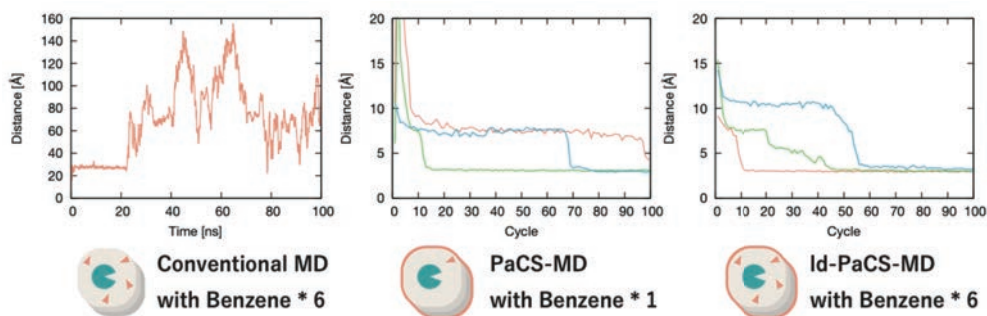


図 4: (左) 通常の MD. (中) PaCS-MD. (右) Id-PaCS-MD のリガンド結合プロファイル

次に、アプリケーションとして SARS-CoV2 メインプロテアーゼ 図 5 (左) のリガンド結合プロセスを ld-PaCS-MD により抽出した。図 5(右) に示すように、4 種類のリガンド (A, B, C, D) について、ld-PaCS-MD のサイクルに対して活性部位とリガンドの重心距離が減少・収束しており、4 つのリガンドに対して 1 つの試行 (リガンド C) を除き、全ての試行でリガンド結合プロセスの抽出に成功していることが分かる。これらのアプリケーションは、ld-PaCS-MD のサンプリング効率の高さ、および実用性を示している。

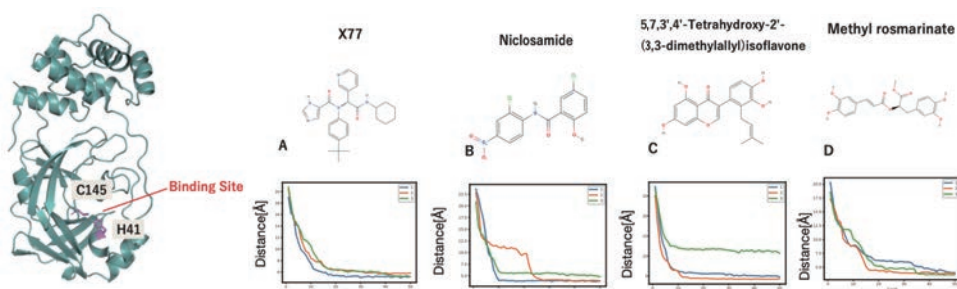


図 5: ld-PaCS-MD により抽出した SARS-CoV2 メインプロテアーゼの
リガンド結合過程 (リガンド 4 種類)

4. まとめと今後の展望

ld-PaCS-MD により、標的タンパク質とリガンドの詳細な結合過程が解明されれば、実際に薬剤がタンパク質と結合する素過程を観察することが可能になる。このような結合過程は、実験で観察することが困難であるため、貴重な情報となる。また、結合過程においてどのような相互作用が働き、リガンドと標的タンパク質が結合しているかに関して、時々刻々相互作用の移り変わりが解析できるので、実際の薬剤設計における設計指針を立てやすくなる。このように、ld-PaCS-MD の開発により、創薬研究への応用が期待される。

5. 謝辞

本研究は、東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」2020 年度 (後期) の採択課題として、Reedbush-H を用いて行われた。

参考文献

- [1] R. Harada, A. Kitao, J. Chem. Phys. 139 (2013) 035103-035101-035110.
- [2] R. Harada, Y. Nishihara, N. Wakai, A. Kitao, ICCMSE 2014 1618 (2014) 86-89.
- [3] R. Harada, A. Kitao, J. Chem. Theory Comput. 11 (2015) 5493-5502.
- [4] R. Harada, Y. Shigeta, J. Comput. Chem. 38 (2017) 2671-2674.

- [5] R. Harada, Y. Shigeta, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 90 (2017) 1236-1243.
- [6] R. Harada, A. Shigeta, *J. Chem. Theory Comput.* 14 (2018) 3332-3341.
- [7] R. Harada, V. Sladek, Y. Shigeta, *J. Chem. Theory Comput.* 15 (2019) 5144-5153.
- [8] R. Harada, V. Sladek, Y. Shigeta, *J. Chem. Inf. Model.* 59 (2019) 5198-5206.
- [9] R. Harada, R. Yoshino, H. Nishizawa, Y. Shigeta, *J. Mol. Graph. Model.* 92 (2019) 94-99.
- [10] R. Harada, K. Yamaguchi, Y. Shigeta, *J. Chem. Theory Comput.* 16 (2020) 6716-6725.
- [11] A. Kitao, R. Harada, Y. Nishihara, D.P. Tran, *Aip Conf Proc* 1790 (2016).
- [12] R. Sato, R. Harada, Y. Shigeta, *Biophys. Physicobiol.* 13 (2016) 311-319.
- [13] J. Fujita, R. Harada, Y. Maeda, Y. Saito, E. Mizohata, T. Inoue, Y. Shigeta, H. Matsumura, *J. Struct. Biol.* 198 (2017) 65-73.
- [14] R. Harada, Y. Takano, T. Baba, Y. Shigeta, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 6155-6173.
- [15] R. Harada, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 91 (2018) 1436-1450.
- [16] G.M. Torrie, J.P. Valleau, *J Comput Phys* 23 (1977) 187-199.
- [17] G.M. Torrie, J.P. Valleau, *J. Chem. Phys.* 66 (1977) 1402-1408.

降着円盤における微小スケール乱流の特性解明

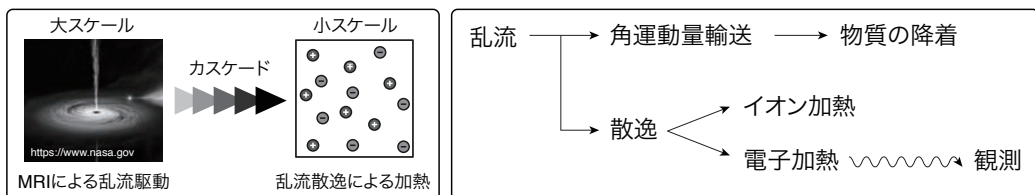
川面 洋平

東北大学学際科学フロンティア研究所

1. はじめに

光を発しないブラックホールを“見る”ためにはどうすればよいのだろうか。手がかりは「降着円盤」と呼ばれるブラックホールを取り巻くプラズマ流にある。降着円盤中で、プラズマは高温に加熱され電磁波を放射するため、降着円盤を観測することで間接的にブラックホールに関する情報（スピン等）を得ることができる。国際プロジェクト Event Horizon Telescope (EHT) では、銀河中心における降着円盤を観測しており、先日、M87 におけるブラックホールシャドーの画像が初公開され話題を呼んだ[1]。一方、観測結果から実際に降着円盤で何が起きているかを解釈するためには、理論とのすり合わせが必須である。また、直接計測ができない物理量は観測量と無矛盾な理論モデルから推測する必要がある。

そのための鍵となるのが**プラズマ乱流**である。天体の周囲を回転する物質が天体に落ち込むためには角運動量を失う必要がある。しかし宇宙プラズマにおける分子粘性は極めて低いため、物質が角運動量を失うためには、乱流による実行的な粘性が必要だと考えられている。従って降着円盤はすべからず乱流状態にある。乱流に起因するもう一つの重要な現象として**プラズマ加熱**がある。乱流のエネルギーを担っているのは電磁場や圧力場の揺動であるが、この揺動は降着円盤の厚み程度の大きさを持った“大スケール”において磁気回転不安定性(MRI)によって駆動される[2]、非線形効果によってより小さいスケールへと運ばれ(カスケード)、最終的に粒子運動サイズの“小スケール”において散逸される(図1左)。散逸したエネルギーはプラズマの熱エネルギーへと変換(加熱)される。今回 EHT が観測した降着円盤では、イオンと電子は異なる温度を持っていると考えられているが、EHT が観測できるのは電子からの光のみであるため、**乱流による加熱がイオンと電子のどちらをより加熱するかが EHT の観測結果を解釈する上で重要**である(図2右)。今回の EHT の論文ではイオンと電子の加熱比を適当なパラメータを用いて仮定しているが、パラメータのとり方次第で観測を説明できるシナリオが複数存在してしまうため[3]、イオンと電子の加熱比を物理的に決定する必要がある。

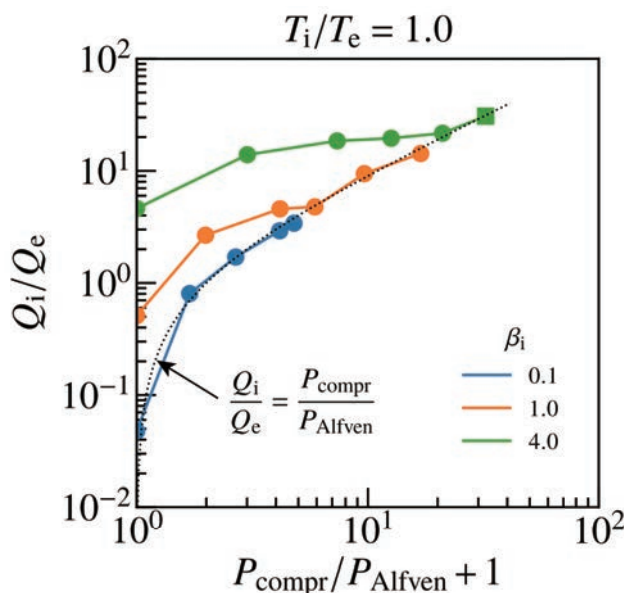


第1図: 降着円盤における乱流エネルギーの流れの模式図。

(左) 降着円盤のサイズと同程度大スケールにおいて MRI によって乱流が駆動され、非線形効果によってより小さいスケールにエネルギーが運ばれ、粒子運動のスケールで熱エネルギーへと散逸する。(右) 乱流によって角運動量が輸送され物質が降着すると同時に散逸が生じる。散逸したエネルギーはイオンと電子を加熱するが、そのうち電子加熱のみが放射として観測される。

2. ジャイロ運動論的乱流によるイオン・電子の加熱配分

しかし、乱流が MRI によって駆動されるスケールと乱流が散逸する微小スケールを同時に解くことは現在の数値計算資源では不可能である。そこで筆者らは大スケールと微小スケールを分割して解き、それぞれの結果を組み合わせることで降着円盤におけるイオンと電子の加熱比を求めるところを目指している。Kawazura et al., 2020 ではジャイロ運動論乱流の直接数値シミュレーションから微小スケールにおけるイオンと電子の加熱比を調査した[4]。その結果、イオンと電子の加熱比は慣性領域における Alfvén 的揺動と圧縮的揺動の比の増加関数になることが明らかになった(図 2)。そこで、次の疑問となるのが、「大スケールにおいて MRI によって駆動される乱流における Alfvén 的揺動と圧縮的揺動の比はいくらか?」である。本研究では電磁流体力学(MHD)の数値計算を用いてこの問題の答えを出すことを目標とする。



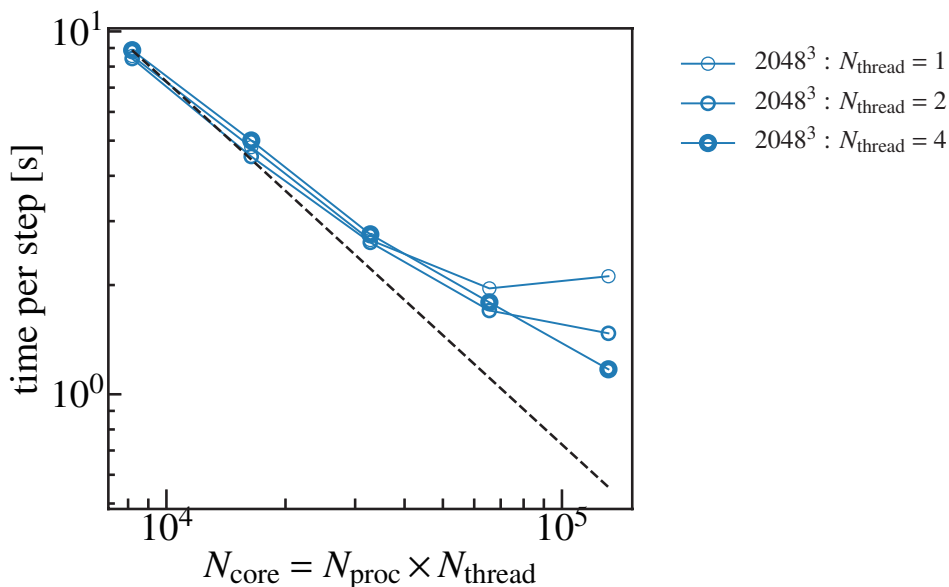
第2図: ジャイロ運動論的乱流におけるイオンと電子の加熱比。

縦軸はイオンと電子の加熱比、横軸は慣性領域における Alfvén 的揺動と圧縮的揺動の比。色の違いはイオンの圧力と磁場の圧力の比 β_i 。いずれの β_i についてもイオンと電子の加熱比は圧縮的揺動と Alfvén 的揺動の比の増加関数となる。

3. 差動回転を考慮した簡約化電磁流体力学モデルとシミュレーションセットアップ

上記の通り、本研究の目標は MRI 乱流における Alfvén 的揺動と圧縮的揺動の比を求めることである。この比を数値シミュレーションから求めるためには、慣性領域を $k_{\parallel}/k_{\perp} \ll 1$ が成立するスケールまで解像する必要がある。ここで k_{\parallel} 及び k_{\perp} は磁場に対して水平及び垂直方向の波数を意味する。このスケールまで至らなければ、Alfvén 的揺動と圧縮的揺動がカップルしているため、解像度の上昇とともに比が変わる可能性がある。しかし、過去の研究から MRI 乱流には非局所エネルギー伝達が存在するため、慣性領域を十分解像することが困難であることが知られていた[5]。そこで本研究では、降着円盤の方位角方向に背景磁場が存在する場合を仮定する。このときは MRI の最大成長モードが $k_{\parallel}/k_{\perp} \ll 1$ を満たすため、 $k_{\parallel}/k_{\perp} \ll 1$ のオーダーリングをかけた MRI を考えることが出来る。

本研究では、降着円盤における MHD に $k_{\parallel}/k_{\perp} \ll 1$ のオーダーリングをかけた簡約化 MHD (RRMHD) を数値的に解く。x,y,z 方向それぞれに周期境界条件を課すことが出来るので、擬スペクトル法を用いてシミュレーションを行う。擬スペクトル法では各ステップで FFT と逆 FFT を行う必要があるため、並列分割の仕方が鍵となる。これまで降着円盤のシミュレーションで広く用いられてきた擬スペクトル法コード SNOOPY [6] では 1 次元分割が用いられてきた。そのため、 N^3 のグリッドに対して N プロセスしか使うことが出来ず、計算規模に成約がかかっていた。そこで本研究では 2 次元分割のライブラリ P3DFFT [7] を用いることで N^3 のグリッドに対して N^2 プロセスまで使えるコードを開発した。図 3 に開発したコードの Oakforest-PACS におけるスケーリングを示す。2048³ グリッドに対して 10⁵ プロセス程度までスケーリングしており、2 次元分割の効果が得られている。本研究では最大で 256×1024×1024 グリッドの計算を行い、プラズマ圧と磁気圧の比 β が 0.1, 1, 10 の 3 ケースを調査した。



第3図: Oakforest-PACS における新コードのスケーリング。

4. シミュレーション結果

まず図 4 に、MRI が非線形飽和したときの速度場と磁場の分布を示す。降着円盤の同径方向 (x 方向) に引き伸ばされた構造が見られるが、これは MRI によって生じるチャネル流の名残に相当する。また、背景磁場に垂直な速度分布は細かいフィラメント状の構造を持っていることが見て取れる。

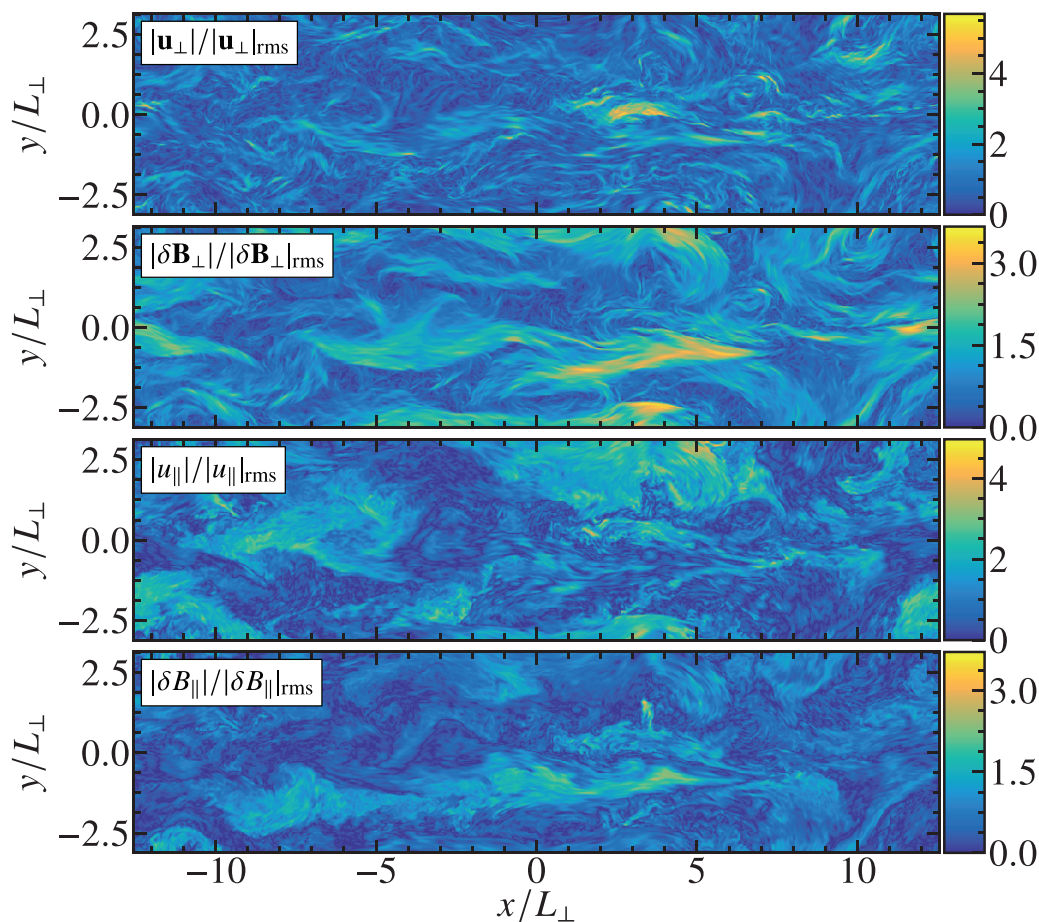
次に、図 5 に非線形項と線形項の波数空間スペクトルを示す。RRMHD では Alfvén 的揺動と圧縮的揺動が線形項によってのみカップルする。そのため、非線形項が線形項を上回っているときは Alfvén 的揺動と圧縮的揺動がデカップルしているということを意味する。実際に図 5 を見てみると、 β の値に依らず、MRI の駆動スケール (図の左端) から十分小さいスケールに行けば非線形項が線形項を上回っていることが分かる。従って、本シミュレーションでは Alfvén 的揺動

と圧縮的揺動がデカップルするスケールを解像できているということが示された。

次に、図6にグリッドスケールで測った圧縮的揺動と Alfvén 的揺動のエネルギーフラックスの比を示す。いずれの β でも 圧縮的揺動と Alfvén 的揺動のエネルギーフラックスの比はおおよそ 2であることが分かる。また、図中の線の色は異なる解像度に対応するが、解像度を下げてもエネルギーフラックスの比はほとんど変わらない。これは図5において低解像度のグリッドスケール $k_{\perp}L \approx 40$ あたりでも非線形項が線形項より十分大きく、Alfvén 的揺動と圧縮的揺動がデカップルしていることを示している。

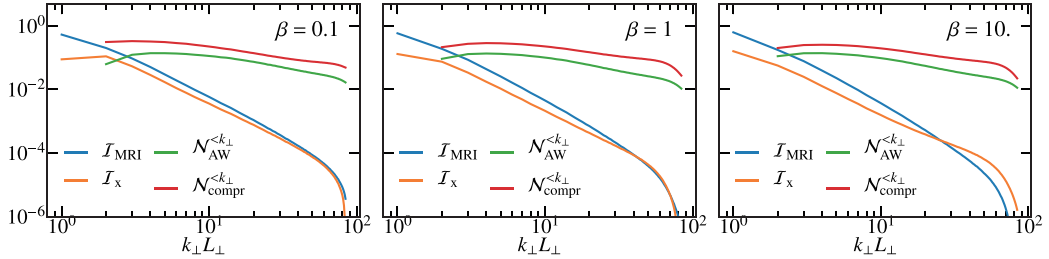
4. まとめと今後の課題

本研究では降着円盤の方位角方向に背景磁場が存在するときに限定して、MHD を簡約化した RRMHD を用いてシミュレーションを行った。その結果、微小スケールで Alfvén 的揺動と圧縮的揺動がデカップルすることが示され、また、圧縮的揺動と Alfvén 的揺動のエネルギーフラックスの比がほぼ 2 であることが分かった。この結果を Kawazura et al., 2020 で得られたイオンと電子の加熱比の結果と組み合わせると、降着円盤では常にイオンが選択的に加熱されるということになる。今後は、背景磁場を仮定しない一般的な状況における計算を行う予定である。



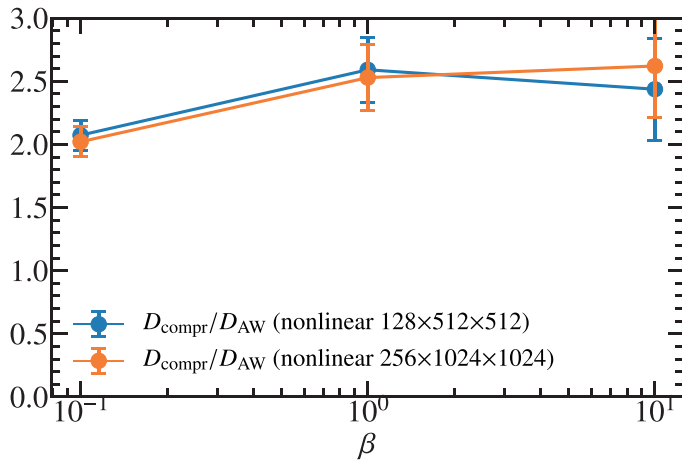
第4図: $\beta=1$ のときの乱流場の分布。

上から、方位角方向背景磁場に対して垂直な速度場、垂直な磁場変動、水平な速度場、水平な磁場変動の分布。前者2つはAlfvén的揺動、後者2つは圧縮的揺動に対応する。x軸は降着円盤の同径方向、y軸は降着円盤に垂直な方向を示す。垂直速度場は細かい構造を持つが、それ以外の場は大きい構造を持つ。x方向に引き伸ばされた構造は、MRIに初期に作られたチャンネル流の名残に相当する。



第5図：非線形カスケードと線形項それぞれのスペクトル。

Alfvén的揺動と圧縮的揺動のカップリングがオレンジ線で表される、一方、赤線と緑線は非線形効果によってより小さいスケールに流れるエネルギーフラックスを表す。非線形項が線形項を上回るとAlfvén的揺動と圧縮的揺動がデカップルすることが示されるので、本シミュレーションではデカップルが成立するスケールまで十分解像出来ていると言える。



第6図：圧縮的揺動とAlfvén的揺動のエネルギーフラックス比。

横軸はプラズマの圧力と磁場の圧力の比 β に対応する。いずれの場合も、圧縮的揺動はAlfvén的揺動に対しておよそ2倍のエネルギーフラックスを持っている。線の色は異なる解像度に対応する。

参考文献

- [1] EHT Collaboration 2019 First M87 Event Horizon Telescope results. I. The shadow of the supermassive black hole. *Astrophys. J. Lett.* **875**, L1.
- [2] Balbus, S. A. & Hawley, J. F. 1991 A powerful local shear instability in weakly

- magnetized disks. I Linear analysis. *Astrophys. J.* **376**, 214.
- [3] EHT Collaboration 2019 First M87 Event Horizon Telescope Results. V. Physical origin of the asymmetric ring. *Astrophys. J. Lett.* **875**, L5.
- [4] Kawazura, Y., Schekochihin, A. A., Barnes, M., TenBarge, J. M., Tong, Y., Klein, K. G. & Dorland, W. 2020 Ion versus electron heating in compressively driven astrophysical gyrokinetic turbulence. *Phys. Rev. X* **10**, 041050.
- [5] Lesur, G. & Longaretti, P. Y. 2011 Non-linear energy transfers in accretion discs MRI turbulence. I. Net vertical field case. *Astron. Astrophys.* **528**, A17.
- [6] <https://ipag.osug.fr/~lesurg/snoopy.html>
- [7] <https://p3dfft.readthedocs.io>

Large-eddy simulations of nearshore offshore wind farms and their interactions with atmospheric boundary layer

Jay Prakash Goit

Department of Mechanical Engineering, Kindai University

1. Introduction

Many countries around the world have set ambitious targets for renewable energy and have planned phase-out of fossil-fuel based energy generation. In this regard, offshore wind energy has been experiencing a promising penetration in both established wind energy markets of Europe and in the emerging markets of Asia. According to the Global Wind Energy Council (GWEC), the overall installation capacity of offshore wind was 23 GW by the end of 2018¹. While, the current share of offshore wind is only four percent of the total cumulative wind power generation, the GWEC projection shows that its annual installation rate will exceed 6 GW in the near future. The primary motivation behind offshore wind energy development is that the offshore sites are generally characterized by higher and uniform wind speeds, leading to higher capacity factors. In the context of Japan, the “Marine Renewable Energy Utilization Act 2019” was passed in order to accelerate the development of offshore wind energy coastal area². Furthermore, government has designated 11 offshore sites for wind energy development; four of those sites have already seen initial development with the start of planning and site assessments.

Majority of those offshore wind energy developments are planned in the nearshore regions, starting from a few kilometers to 10 to 20 km from shores. Further offshore, water depth can be significant, thus making it less feasible for the fixed-bottom wind turbines. However, power output and loads of wind turbines installed in nearshore regions will be affected by onshore terrain which slow down the wind speed and increase the turbulence level for wind blowing from land to sea. When air flows from land towards sea, it experiences change in surface roughness, and the process is essentially rough-to-smooth surface transition. It has been reported that during the rough-to-smooth surface transition, the initial rough surface flow dictates the rate of diffusion and turbulence level for a considerable distance over the downstream smooth surface³. Furthermore, the internal boundary layer (IBL) that develops following a rough-to-smooth transition has slow growth rate, resulting in a slower recovery of the boundary layer. Recently, Goit *et al.*⁴ conducted a LiDAR-based measurement campaigns at a test facility 3.5 km offshore from the coast characterized by moderately complex terrain and 50 m tall cliff. The measurement showed that on average the wind blowing from land was 35% lower than that blowing from the sea. Thus, the effect of onshore terrain to the offshore wind farm near the coast can be significant.

Several studies have investigated the interaction between offshore wind farms and atmospheric boundary layer (ABL) (see e.g. Porte-Agel *et al.*⁵). However, the effect of coastal terrain on the offshore wind farms has not received sufficient attention. The current study employs large-eddy simulations (LES) to investigate the effect of onshore terrain on the evolution of atmospheric boundary layer (ABL)—when it transitions from land to sea—and evaluate how such transition influence the performance of nearshore offshore wind farms.

2. Numerical Method

The open source CFD software OpenFOAM⁶, is employed to perform LES of a neutrally stratified ABL. The governing flow equations are the filtered Navier-Stokes equations given by:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + f_i \quad (2)$$

where $\tilde{u}_i = [\tilde{u}_1, \tilde{u}_2, \tilde{u}_3]$ is the resolved velocity field corresponding to streamwise, vertical and spanwise directions, \tilde{p} is the pressure field, ρ is the air density, ν is kinematic viscosity, τ_{ij} is subgrid-scale

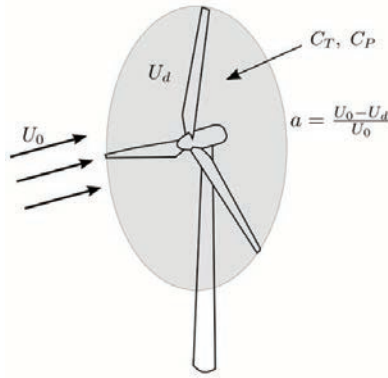


Figure 1: Schematic of the actuator-disk model implementation.

stress. The term f_i represents the force exerted by wind turbine on the flow field and is explained further below. Wall-Adapting Local Eddy-viscosity (WALE) model is employed to model the effect of subgrid-scale stresses on the resolved flow equations⁷.

In this study, inlet boundary condition is imposed using the time varying turbulent flow fields which is generated in a separate precursor simulation. The outflow boundary conditions are set to zero-gradient for the velocity and fixed value for the pressure. Slip condition for velocity, and zero-gradient for pressure are applied as the top boundary condition. The spanwise boundary conditions are periodic. The boundary condition at the bottom surface is imposed using a wall stress model which is a function of a velocity field at the first vertical grid point and the surface roughness height. The wall boundary condition enforces constraint on the turbulent viscosity (ν_T)⁶.

Force due to wind turbine (f_i) is modelled using actuator-disk model (ADM). Figure 1 shows the schematic of this model implementation. In the ADM, the axial force induced by a wind turbine on the flow is uniformly distributed over a semi-permeable disk. This axial force (F_i) is defined using characteristic thrust coefficient (C_T) of a turbine,

$$F_i = \frac{1}{2} C_T \rho U_0^2 A_d \quad (3)$$

where U_0 is the free stream velocity and $A_d = \pi D^2/4$ is the rotor surface area. Implementation of this model for a lone standing wind turbine is straightforward. For a wind farm however, it is not easy to define

free stream velocities for downstream turbines. To overcome this issue, the proposed model assumes the validity of blade element momentum (BEM) theory for all turbines in a farm. This allows to exploit following relations of axial induction factor (a), C_T and power coefficient (C_P)⁸.

$$a = \frac{U_0 - U_d}{U_0}$$

$$C_T = 4a(1 - a) \quad (4)$$

$$C_P = 4a(1 - a)^2$$

where U_d is wind speed at the disk. Since C_T and C_P of the wind turbine, a can be expressed as

$$a = 1 - C_P/C_T, \quad (5)$$

substituting, for a from Eq. (5) into Eq. (4), one can estimate possible free stream velocity from wind speed at the rotor disk, which can be obtained from the simulation. However, in order to avoid numerical oscillation, the thrust force computed using above relations are projected onto simulation grid using Gaussian projection,

$$f_i = \frac{F_i}{\Delta V} \frac{1}{\varepsilon^3 \pi^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{\varepsilon^2}\right) \quad (6)$$

where ΔV is the volume of simulation grid cell, ε is a filter width and r is the distance between actuator point and the target grid point.

3. Results and Discussions

Four main simulations were performed for this study:

- (i) Sea-to-land transition of ABL
- (ii) Land-to-sea transition of ABL
- (iii) Wind farm simulation with offshore only condition
- (iv) Wind farm simulation with land-to-sea transition of ABL

Onshore and offshore surfaces are modelled by imposing roughness heights of $z_{0,land} = 0.2$ m and $z_{0,sea} = 0.001$ m, respectively. The size of the computation domain for the simulation cases (i), (ii) and (iv) was $L_x \times L_y \times L_z = 15\text{km} \times 1\text{km} \times 3\text{km}$, while that for the simulation case (iii) was $L_x \times L_y \times L_z = 13\text{km} \times 1\text{km} \times 3\text{km}$. The domain for land-to-sea transition cases (i) & (iv) started with 2 km of land surface and that for sea-to-land transition case (ii) started with 2 km of sea surface. Grid resolutions in streamwise, vertical and spanwise directions are $dx \times dy \times dz = 10 \text{ m} \times 5 \text{ m} \times 8 \text{ m}$ resulting in the total number of grid points of 97.5×10^6 for case (iii) and 11.25×10^7 for other three cases. Wind farm simulations were performed with 50 turbines in 10×5 grid arrangement. Streamwise and spanwise spacing are 7D and 5D respectively, with the rotor diameter (D) being 120 m.

3.1 Atmospheric Boundary Layer Fields

Figure 2 shows vertical profiles of streamwise mean velocity obtained from the ABL simulations. For both roughness height, i.e., $z_{0,land}$ and $z_{0,sea}$, profiles agree with the logarithmic profiles upto the height of 200 m. Above 200 m, gradual increase in the log-lawmismatch can be observed. Note that the vertical line shows the hub height position of the wind turbine simulated in cases (iii) and (iv).

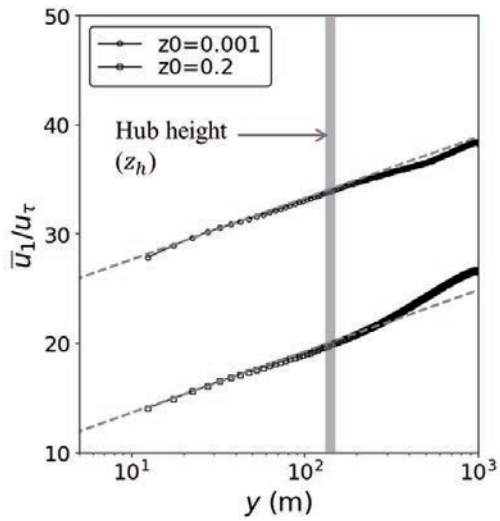
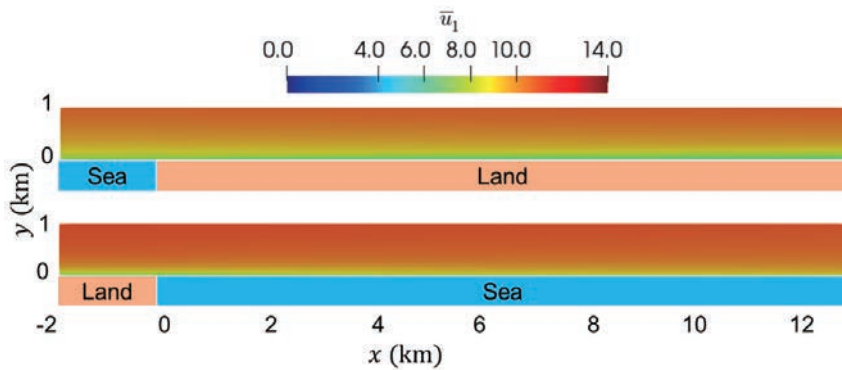
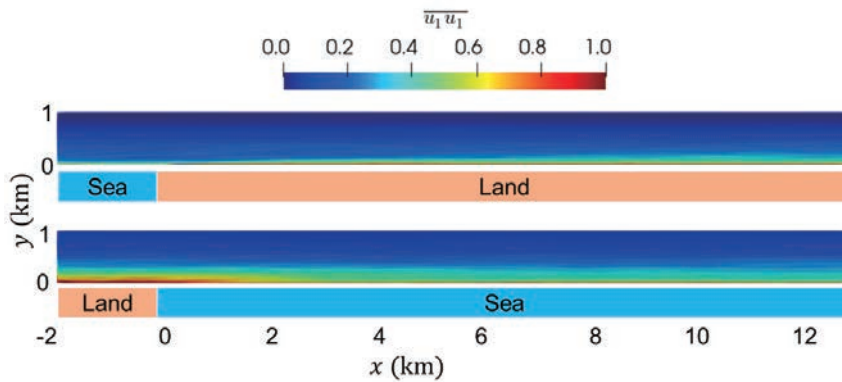


Figure 2: Streamwise mean velocity profiles.



(a) streamwise mean velocities



(b) streamwise component of the normal stresses.

Figure 3: Streamwise-vertical plane showing mean velocities and normal stresses.

Figure 3 shows the streamwise-vertical plane of mean velocity and normal stress fields for ABL

simulations (**Case i and Case ii**). In the mean velocity fields, wind speed in the surface region is slowing down for sea-to-land transition, while it accelerates for land-to-sea transition. This slow down and acceleration can be observed right after the step change in the surface roughness and are essentially the IBL. The downstream evolution of the IBLs are more obvious in normal stress and shear stress (not shown here) fields. Sea-to-land transition, which results into the increase in the surface roughness, increase the turbulence level in the surface region. The normal stress for this case seems to gets higher right from the transition point. For the land-to-sea transition, which results into the drop in the surface roughness, the turbulence level is supposed to decrease after the transition. However, this is happening gradually. The original turbulence level prevails for roughly 2 km even after the transition. Significant amount of turbulence level can be observed in the entire streamwise domain considered in this study. This shows that the onshore turbulence can influence wind farm performance as far as 10 km or more offshore from the coast.

3.2 Wind Farm Simulations

Figure 4 compares snapshots of instantaneous velocity fields in hub height and vertical planes for Case iii (offshore only) and Case iv (land-to-sea transition). Wakes from turbines can be observed extending all along the turbine columns with instances of wake meanderings. Flow fields are more turbulent in Case iv. Time-averaged flow fields are compared in 5 which shows contours of mean velocities and streamwise normal stresses in the vertical plane along the rotor center. In addition to the original IBL due to land-to-sea transition, a new IBL develops from the first turbine row in both the cases. Though not quantitatively analyzed, IBL for land-to-sea transition case is slightly thicker. Note that driving pressure in the precursor simulations for both the cases was adjusted such that the mean wind speed in the upper part of the domain would be same in both simulations. The normal stress contours show that turbulence induced by wind farm is significant. Qualitatively, no significant difference in the normal stress evolution for the Case iii and Case iv can be observed. Furthermore, the normal stress due to land to sea transition observed in ABL simulation (see Figure 3 (b)) is not sufficiently large compared to the turbine-induced stresses. Nevertheless, the IBL height is larger for the land-to-sea transition case. This may be because the inflow is more turbulent in the land-to-sea transition case, thus triggering the faster growth of the IBL.

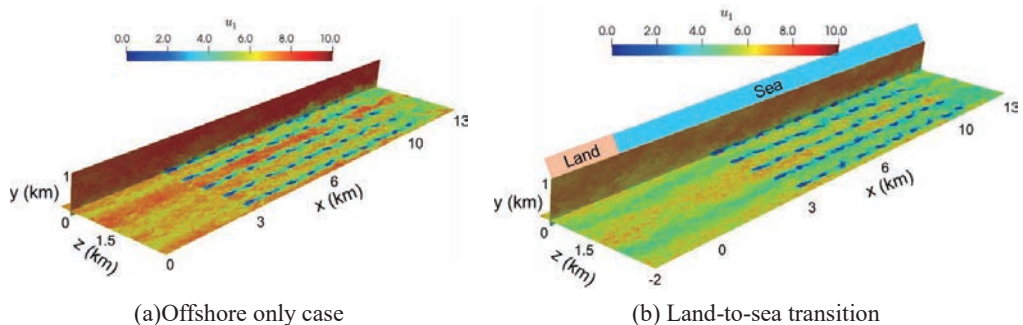
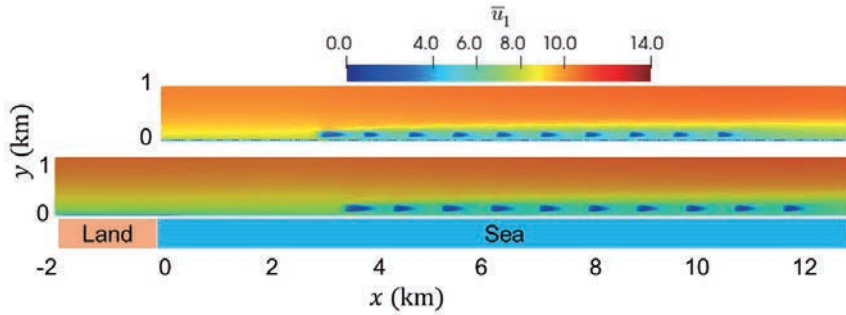
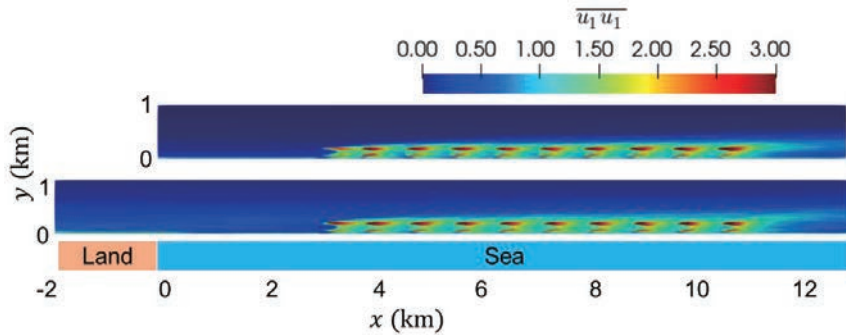


Figure 4: Instantaneous velocity fields. Horizontal planes are taken along the hub height.



(a) streamwise mean velocities



(b) streamwise component of the normal stresses.

Figure 5: Streamwise-vertical plane showing mean velocities and normal stresses inside the wind farms.

In order to evaluate the effect of land-to-sea transition, we have compared the time-and-row averaged power output as a function of turbine row in Figure 6. The power has been normalized by the power of the first turbine row from Case iii (offshore only case). It is interesting to observe that although the power output from the first turbine row is slightly higher for offshore only case, for the downstream rows, land-to-sea transition case produce higher power. This normalized power for land-to-sea transition was about 10% higher compared to offshore only case. This may be because higher turbulence in the land-to-sea transition case would improve the energy entrainment from the flow above the wind farm.

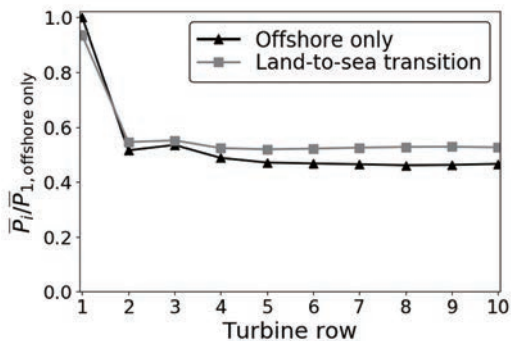


Figure 6: Time-and-row-averaged power output.

4. Summaries

In this study we have investigated the effect of coastal terrain on the performance of nearshore offshore wind farms and flow characteristics inside the farms. To that end, two LES cases were defined using the characteristic surface roughness of land and sea surfaces. In the ABL simulations of land-to-sea transition and sea-to-land transition, internal boundary layer (IBL) could be observed to develop from the point of step change in surface roughness. However, the downstream evolution of the IBL was more obvious in normal and shear stresses fields compared to the mean velocity fields. In the wind farm simulation cases wind farm induced IBL and turbulence were dominant. However, the IBL height was larger for the land-to-sea transition case. This could be attributed to the higher inflow turbulence level in this case. In terms of power output land-to-sea transition case produced 10% higher power. Difference in power output was predominantly observed for downstream rows. This may be due to the fact that the higher inflow turbulence in land-to-sea transition would improve the energy entrainment thus bringing more energy from the flow above in the wind farm region.

Acknowledgements

The author acknowledges Supercomputing Division of The University of Tokyo for providing computational resources for this work under “Program for Young Researchers” FY 2020. The author also acknowledges Dr. Asim Önder of National University of Singapore for his collaboration in this extended project.

References

1. *GWEC Global Wind Report 2019.*; 2019.
2. Ministry of Economy, Trade and Industry:
<https://www.meti.go.jp/press/2019/07/20190730001/20190730001.html>.
<https://www.meti.go.jp/press/2019/07/20190730001/20190730001.html>. Accessed November 4, 2020.
3. Antonia RA, Luxton RE. The response of a turbulent boundary layer to an upstanding step change in surface roughness. Part 2. Rough-to-smooth. *J Fluids Eng Trans ASME*. 1972;53(4):737-757.
doi:10.1115/1.3425174
4. Goit JP, Yamaguchi A, Ishihara T. Measurement and Prediction of Wind Fields at an Offshore Site by Scanning Doppler LiDAR and WRF. *Atmosphere (Basel)*. 2020;2020(11):442.
doi:doi:10.3390/atmos11050442
5. Porte-Agel F, Wu YT, Chen CH. A numerical study of the effects of wind direction on turbine wakes and power losses in a largewind farm. *Energies*. 2013;6(10):5297-5313. doi:10.3390/en6105297
6. OpenFOAM. <https://www.openfoam.com/>. Accessed July 18, 2020.
7. Nicoud F, Ducros F. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity. *Flow, Turbul Combust*. 1999;62:183-200. doi:10.1016/j.jcp.2004.10.018
8. Manwell JF, McGowan JG, Rogers AL. *Wind Energy Explained: Theory, Design and Application.*; 2009. doi:10.1002/9781119994367

電氣的・熱的効果によるキャビティ音制御の数値解析

大竹克也、大森康瑛、横山博史

豊橋技術科学大学

1. はじめに

鉄道の車両連結部や工業製品の部品組み合わせにおける窪み部（キャビティ）まわりの流れから発生する空力音（キャビティ音）は、単一の周波数で強い音が発生する場合があります、低減手法の確立が求められている。近年ではさらにこうした騒音が有するエネルギーを有効に活用することも期待されている。

流体制御デバイスとしてプラズマアクチュエータ¹⁾（PA）（薄い誘電体に隔てられた電極対に高周波交流高電圧を印加し生じる誘電体バリア放電を利用して気流を発生させるもの）が注目されている。PAは翼のはく離制御に有効であることが示されているがPAによるキャビティ音の制御の研究は少ない。PAは電氣的に流れを制御でき時間応答性が高いという利点があり、PAのオン・オフを時間的に切り替える間欠制御を行うことで、消費電力の削減が期待できる。しかし、適切な間欠制御の手法や音の低減機構は明らかになっていない。

キャビティ音の低減に加え、キャビティ音の持つ音響エネルギーを有効利用する方法として、熱音響ヒートポンプ現象²⁾に着目した。熱音響ヒートポンプ現象とは音響エネルギーにより熱輸送が生じる現象であり、特に狭い流路を有する多孔体や平板列（スタック）に温度こう配を発生させることができる。熱音響ヒートポンプはヒータや冷凍機として使用できるとともに、熱電対素子などにより発電も可能である。しかし、熱音響ヒートポンプ現象において空力音を用いた報告は少なく、キャビティ音など空力音を用いる場合に熱音響ヒートポンプ現象が効果的に生じる条件を明らかにすることが求められている。

本課題では、PAの適切な制御条件を明らかにすることを目的として、まずキャビティ内の音圧レベルの情報を基にフィードバック制御を行った場合について流れと音の直接計算を実施した。さらに、間欠周波数が制御効果に及ぼす影響を明らかにするため、フィードバック制御時にPAがオン・オフと切り替わった間欠周波数を参考に、種々の間欠周波数について時間的に間欠周波数を一定とした場合の制御効果を調査した。また、キャビティ流れにおいて効果的に熱音響ヒートポンプ現象が生じる条件を明らかにすることを目的とし、スタックを有するキャビティ周りの流体音響解析とスタックの熱伝導解析を連成した解析を実施し、特に主流マッハ数が熱音響ヒートポンプ現象に及ぼす影響について調査した。

2. 計算手法

2. 1. 対象とした流れ

2. 1. 1. 電氣的効果によるキャビティ音制御

図1に解析対象とするキャビティ流れおよびPA形状を示す。座標系は原点をキャビティ前縁とし、流れ方向を x 方向、鉛直方向を y 方向、スパン方向を z 方向とした。実験において強いキャビティ音が観測された条件を参考に、キャビティ長さ L は20 mm、深さ D は10 mmとした。主流速度 U_0 は30 m/s（主流マッハ数 $M \equiv U_0/c = 0.087$ ）とした。PA形状および印加電圧条件は実

験により効果的な発生音の低減効果が得られた条件³⁾を参考にし、図1に示すように、上部・下部電極対をスパン方向に間隔 $s=4\text{ mm}$ ($s/L=0.2$) にて配置し、大きさ $V_{pp}=5.4\text{ kV}$ の交流電圧（駆動周波数 4.2 kHz ）を印加した。

フィードバック制御時は、キャビティ上流側壁面 ($x=0, y=-0.5D, z=0$) における音圧レベルを評価関数とした。非制御時および十分に音が低減されたPA連続駆動時のキャビティ音の強さを参考に、評価関数の閾値を 115 dB とし、閾値以上の発生音が観測された場合にPAを駆動した。間欠周波数を時間によらず一定とした制御では、間欠周波数を $f_i=30\text{--}750\text{ Hz}$ とし、間欠周期中のPAをオンとする時間割合を表す間欠比は $R_d=0.5$ とした。

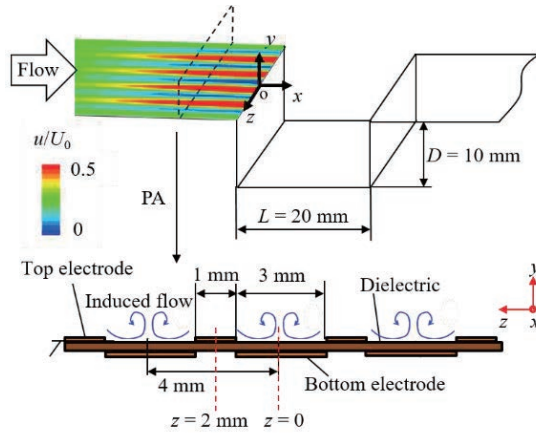


図1: キャビティ流れおよびPA形状。

解析対象とするキャビティ流れおよびPA形状。PA駆動時はスパン方向に非一様な流れがキャビティに流入する。

2. 1. 2. 熱的效果によるキャビティ音制御の数値解析

図2に対象とするスタックを有するキャビティ周りの流れの体系を示す。また、スタックに関しては、下端を原点に鉛直方向に y_s 軸をとった。キャビティ長さには前述した値であり、キャビティ深さと長さの比は音響共鳴を伴う強いキャビティ音が観測された条件を参考に $D/L=2.5$ とした。キャビティ長さを基準としたレイノルズ数を $Re_L=4\times 10^4$ と一定とし、主流マッハ数 M は音響共鳴が強く発生する 0.087 と 0.26 の2条件にて計算を行った。

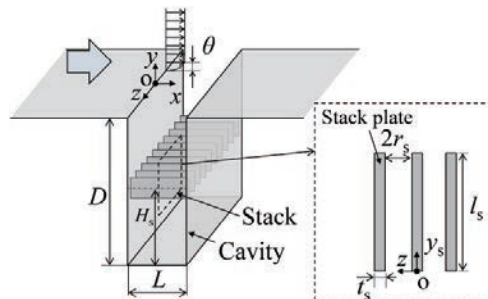


図2: スタックを有するキャビティ周りの流れ。

キャビティ内に熱音響効果を生じさせるためにスタックを設置した場合のキャビティ流れの模式図。

スタックは温度こう配を効果的に発生させるため熱伝導率の低いセラミック材の平板列を想定した。効果的に熱音響効果が発生するスタック設置位置 H_s およびスタック長さ l_s は共鳴周波数の音波の波長と関連し、ここではスタックのないキャビティ流れの共鳴周波数 1.5 kHz ($M = 0.087$), 14 kHz ($M = 0.26$) の 1/4 波長の長さ L_a を代表長さとした。スタックの長さ l_s/L_a 、キャビティ底部からのスタック位置 H_s/L_a は先行研究^{4),5)}を参考にそれぞれ 0.1, 0.5 程度とした。また、スタックの平板間距離は水力半径 r_s がスタック壁面近傍の熱境界層厚さ $\delta_a = (2\alpha/\omega)^{1/2}$ (α は気体の熱拡散率、 ω は音波の角周波数) と同程度となるように設定した。

2. 2. 支配方程式および離散化手法

流れと音の連成現象を再現するために 3 次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式およびエネルギー保存式を支配方程式とした。PA による制御を行う際は、方程式に運動量付加の影響を表す項を加えた。また、スタックを再現するために Volume Penalization (VP) 法⁶⁾を用いた。VP 法は運動方程式の右辺に外力項を追加し、物体部が含まれる格子点で物体の速度と温度を与えることにより物体の形状を表現する。スタック内の温度場解析については、2 次元熱伝導方程式を支配方程式とした。

流体音響解析の空間差分には 6 次精度コンパクトスキーム⁷⁾ (境界では 4 次精度)、時間積分は 3 次精度ルンゲクッタ法を用いて数値解析を行った。スタックの温度場解析には空間微分には 2 次精度の中心差分、時間積分には 1 次精度の陽解法を用いた。

本計算のような圧縮性解析の時間ステップは音速に基づくクーラン数により決まる。 $M=0.087$ の計算を例にした場合、本計算で用いた計算格子の最小格子幅は 0.008 mm であり、時間ステップは 0.8×10^{-8} s となる。流れ場が安定し、制御やスタックの有無が音圧スペクトルや温度場に及ぼす影響を調査するため計 0.1 s 程度の解析を行った。必要なステップ数は 1250 万ステップ、計算格子点数は最大で 1000 万点規模となり、16 ノードを用いて計算するために約 30 d (待ち時間は含めていない) 必要であった。

3. 計算結果

3. 1. 電氣的効果によるキャビティ音制御

3. 1. 1. フィードバック制御

図 3 に、非制御時の流れ場を初期場としてフィードバック制御を行った際の評価位置 ($x=0, y=-0.5D, z=0$) での基本周波数における音圧レベルの時間変化を示し、時間 0 は制御を始めた時間である。図より概ね周期的に PA のオン・オフが切り替わるようになった $t=27.9$ ms 以降では、間欠周波数は 50–100 Hz の範囲であり、間欠比は 0.6 程度であった。また、図 5 に示すように、遠方での音圧測定点 ($x/L=6.75, y/L=21.5, z=0$) では、非制御時に対して基本周波数の音圧レベルが平均的に約 12 dB 低減した。

図 4 に、速度こう配テンソルの第二不変量 q と低圧領域により微細および大規模な渦構造をそれぞれ可視化したものを、変動圧力の分布とともに示す。PA がオフに切り替わった直後の時刻 ($t=28.75$ ms) では、3 次元的な微細な渦構造の生成が活発な流れ場となっていることがわかる。発生音が大きくなり始めた直後の時刻 ($t=31.25$ ms) では、キャビティ音の原因となる大規模渦構造が生成されていることがわかる。このことは、大規模渦構造が生成されることにより、キャビティ音が大きくなり始めることを意味する。

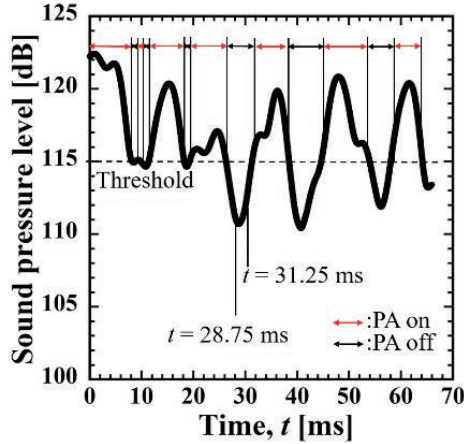


図 3: 基本周波数における音圧レベルの時間変化。

フィードバック制御時の評価位置における基本周波数の音圧レベルの時間変化を表す。閾値よりも音圧レベルが大きくなった際に PA がオンとなる。

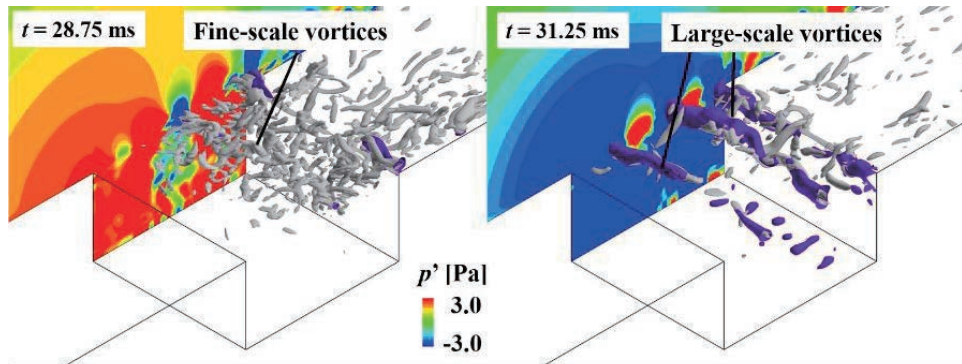


図 4: 第二不変量 $q/(U_0/L)^2 = 70$ (灰色)、低圧領域 $p' = -20$ Pa (紫色) の等値面と変動圧力分布。

PA がオフに切り替わった直後の時間 ($t = 28.75$ ms) と、発生音が大きくなり始めた直後の時間 ($t = 31.25$ ms) の渦構造と変動圧力分布を表す。

3. 1. 2. 間欠周波数が制御効果に及ぼす影響

時間的に間欠周波数を一定 (間欠比 $R_d = 0.5$) とした条件において、間欠周波数が制御効果に及ぼす影響を議論する。フィードバック制御における PA の間欠周波数を参考に、間欠周波数を $f_i = 30\text{--}750$ Hz の範囲で変化させた。図 5 には基本周波数における発生音 ($x/L = 6.75, y/L = 21.5, z = 0$) への制御効果を実験結果とともに示す。低減効果は間欠周波数により大きく変化し、実験・計算どちらの結果においても $f_i = 200$ Hz において最大の低減効果が得られ、本計算では約 16 dB 発生音が低減された。この間欠周波数はフィードバック制御時の間欠周波数に対して、2-4 倍程度の周波数に相当する。

図 6 に制御時の流入境界層内 ($x = 0, y/\theta = 1.0$) における流れの非一様性の時間変化を示す。時間 $t_f = 0$ は PA がオフになった瞬間を意味する。スパン方向の非一様性 NH は式 (1) により評価した。

$$NH = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n_z} \left(\frac{u_k - \bar{u}}{U_0} \right)^2} \quad (1)$$

ここで n_z はスパン方向の格子点数、 u_k は k 番目の格子点における流れ方向速度、上線はスパン方向の平均値を意味する。図より $f_i = 50, 200$ Hz の比較的低い間欠周波数では、PA をオンにすることで非一様性が増大し、最大値は $NH = 0.2$ となることがわかる。一方、 $f_i = 400, 750$ Hz と間欠周波数が高くなると、間欠周期中の最大の非一様性は減少する。これは PA による誘起流によって流入境界層が十分非一様になるために必要となる時間に対して、間欠周期中の PA がオンとなる時間が相対的に短くなったためと考えられる。このため、図 5 に示したように $f_i = 200$ Hz より高い間欠周波数では制御効果が小さくなったと考えられる。

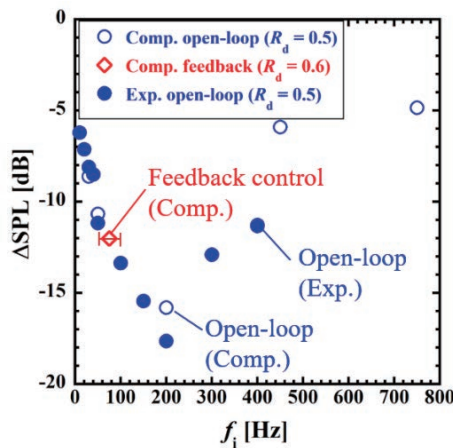


図 5: 発生音への制御効果。

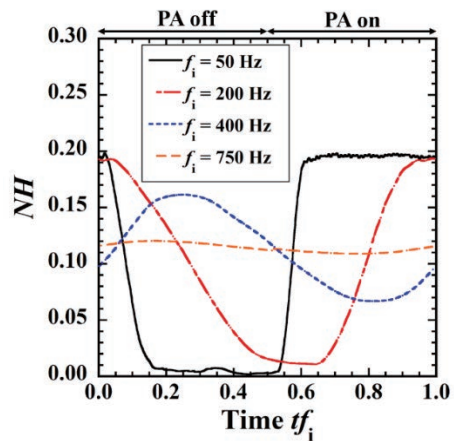
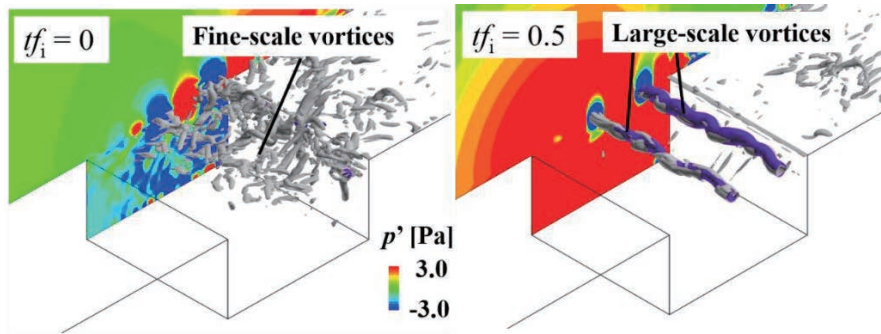


図 6: 流入境界層の非一様性の時間変化。

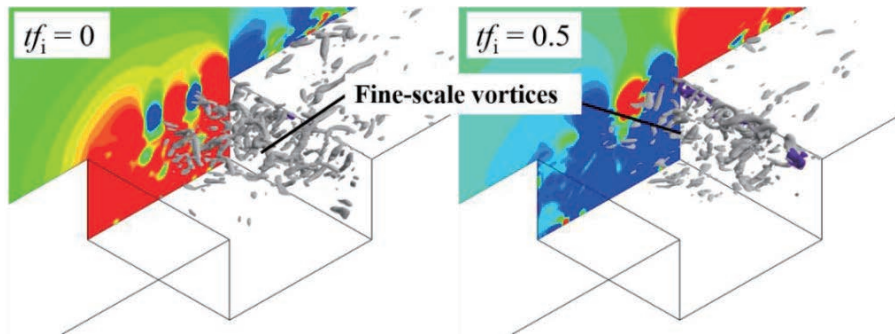
図 5 は発生音への制御効果を示しており、縦軸の 0 は非制御時の基本周波数と同じ音圧レベルを意味する。図 6 は各間欠周波数でのキャビティに流入する境界層内のスパン方向の非一様性を示している。

3. 1. 3. PA オン・オフによる流れ場の変化

図 7 に制御時での渦構造および変動圧力の等高線を示す。速度こう配テンソルの第二不変量 q の等値面により微細な渦構造を、低圧領域によりキャビティ音の原因となる大規模渦構造を抽出している。図 7 (a) において、低い間欠周波数 $f_i = 50$ Hz では、PA がオンからオフへ切り替わる時間 $t f_i = 0$ では大規模渦構造がみられず、三次元的な微細な渦構造が活発に生成される流れ場となっている。一方、時間 $t f_i = 0.5$ では大規模渦構造が現れており、PA のオン・オフの切り替えに対しキャビティ音の原因となる渦構造も抑制・再形成されることがわかる。図 7 (b) より、効果的な間欠周波数 $f_i = 200$ Hz では大規模渦構造の生成は常に抑制された状態となることがわかる。これは、PA がオフとなっている時間が、自励振動が再び増幅するために必要な時間に比べ相対的に短いためと考察された。



(a) $f_i = 50$ Hz



(b) $f_i = 200$ Hz

図 7: 第二不変量 $q/(U_0/L)^2 = 70$ (灰色)、低圧領域 $p' = -20$ Pa (紫色) の等値面と変動圧力分布。

渦構造と変動圧力分布。(a) は効果的な間欠周波数より低い間欠周波数 $f_i = 50$ Hz、(b) は効果的な間欠周波数 $f_i = 200$ Hz での結果をそれぞれ示す。キャビティ音の原因となる大規模渦構造を抑制できているかが発生音の低減に関連する。

3. 2. 熱的効果によるキャビティ音制御

3. 2. 1. スタックが音場に及ぼす影響

図 8 にスタックあり・なしの条件についてキャビティ底部 ($x/L = 0.5, y/D = -1.0$) での音圧レベルを示す。周波数 f はキャビティ長さ L および主流速度 U_0 を基準としたストローハル数 $St \equiv fL/U_0$ で表され、共鳴周波数 f_r の無次元周波数は $St_r \equiv f_r L/U_0$ となる。低マッハ数 $M = 0.087$ では、スタックを設置することにより共鳴周波数が $St_r = 1.04$ から $St_r = 1.46$ に変化した。また、スタックの設置により共鳴周波数での音圧レベルは 7 dB 低減された。一方、高マッハ数 $M = 0.26$ においては基本周波数の変化は見られず、スタックあり・なしの両条件で、 $St_r = 1.04$ において共鳴音が発生した。スタックなしの条件に比べてスタックありの条件での音圧レベルは 3 dB 低減された。マッハ数が低い場合スタックが共鳴状態へ及ぼす影響が強まると考えられる。

3. 2. 2. スタックの温度分布

図 9 に予測されたスタックの温度分布を示す。横軸の y_s 方向位置はスタック長さ l_s で無次元化し、縦軸はスタック上端部の温度 T_t を基準としスタック長さ l_s で正規化している。スタック端部間の平均的溫度こう配を評価すると、低マッハ数 $M = 0.087$ においては 0.048 K/m とわずかな温度こう配であったが、高マッハ数 $M = 0.26$ ではより大きな温度こう配 9.6 K/m を得た。低マッ

ハ数において温度こう配が低かった原因の1つとして、共鳴周波数が変化したことにより音波の波長とスタック設置位置の関係が変化することが考えられる。また、本結果より高いマッハ数では熱音響ヒートポンプ効果がより効果的に発生することを確認した。

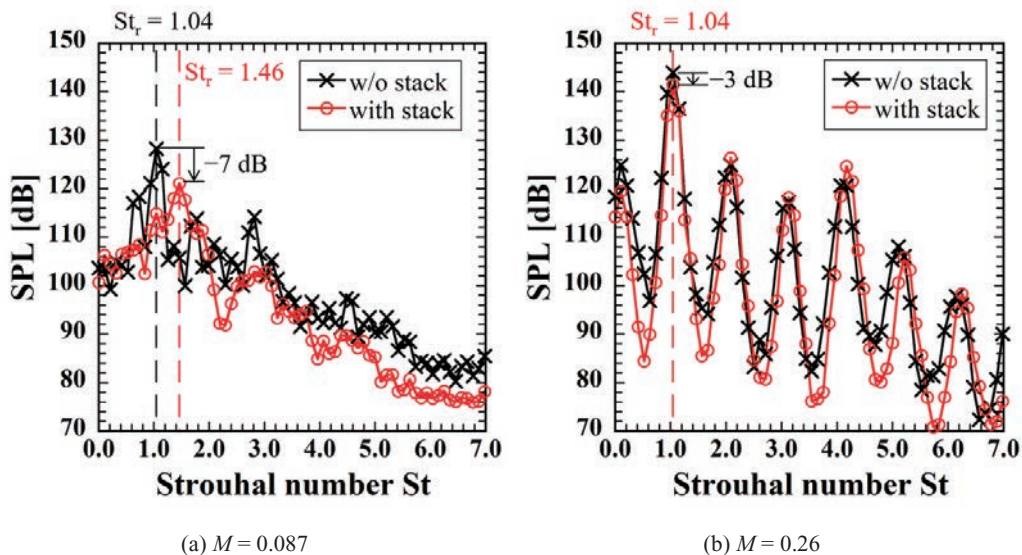


図 8: キャビティ底部 ($x/L=0.5, y/D=-1.0$) における音圧スペクトル。

左図が低マッハ数 $M = 0.087$ での音圧スペクトル、右図が高マッハ数 $M = 0.26$ での音圧スペクトル。

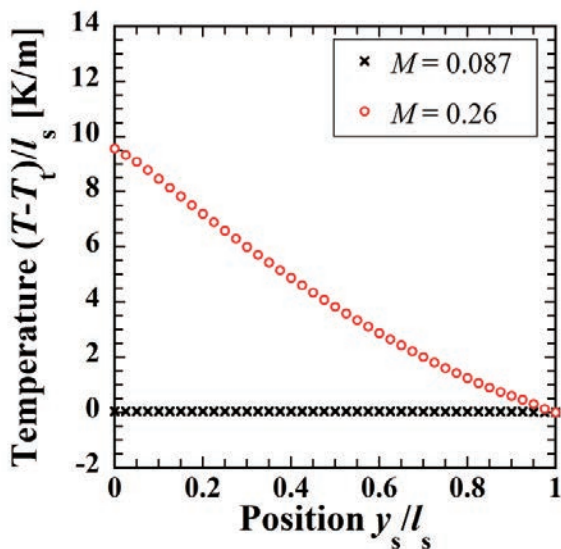


図 9: スタックの温度分布。

各条件でのスタックの温度分布。縦軸のスタック温度は、スタック上端部の温度 T_t との差をスタック長さ l_s で除したもの。

4. おわりに

本研究ではキャビティ周囲の流れから発生する空力音であるキャビティ音を対象として、プラズマアクチュエータを用いた電気的効果を用いた制御および細管流路を有するスタックをキャビティ内部に挿入し熱音響効果を利用した制御に関して数値解析を実施し、以下の知見を得た。

1. プラズマアクチュエータをフィードバック制御における間欠周波数の 2 から 4 倍の適切な周波数で間欠駆動することにより効果的に空力音を低減することが可能である。
2. 適切な間欠周波数で制御を行った場合、プラズマアクチュエータにより流入境界層の非一様性が高くなり、かつ音源となる大規模渦構造が常に抑制された。
3. スタックを挿入した場合、マッハ数に依らず発生音は低減した。特にマッハ数を大きくすることで、熱音響ヒートポンプ効果が効果的に発生し、スタック端部間により高い温度こう配が発生した。

謝 辞

本研究成果は「若手・女性利用者推薦」制度の支援を受け実施されました。本課題では、流体、音響、電気的効果および熱的効果が連成した解析であり長い計算時間が必要となり、本課題で与えて頂いた計算リソースにより研究を大きく前進させることができました。ここに謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) M. L. Post et al., “Separation Control on High Angle of Attack Airfoil Using Plasma Actuators”, AIAA J., **42** (11), pp. 2177-2184, 2004.
- 2) P. Merkli, H. Thomann, “Thermoacoustic effects in a resonance tube”, J. Fluid Mech. **70** (1), pp.161–177, 1975.
- 3) I. Tanimoto et al., “Effects of electrode arrangement of plasma actuators on noise control in cavity flow”, Proc. Inter-Noise 17, pp. 4541-4550, 2017.
- 4) J. Wheatley et al., “Experiments with an intrinsically irreversible acoustic engine”, Phys. Rev. Letters, **50**, pp.499–502, 1983.
- 5) Y. Kishino et al., Effects of stack position on thermoacoustic heat pump in a rectangular resonator, Proc. 26th International Congress on Sound and Vibration, 2019.
- 6) Q. Liu, O. V. Vasilyev, “A Brinkman penalization method for compressible flows in complex geometries”, J. Comput. Phys., **227**, pp.946–966, 2007.
- 7) S. K. Lele, “Compact finite difference schemes with spectral-like resolution,” J. Comput. Phys. **103** (1) pp.16–42, 1992.

階層型直交格子法と壁面モデルを用いたLBMによる航空機高揚力装置の空力音響解析

前山大貴
東京大学大学院工学系研究科

1 序論

CFD(computational fluid dynamics)を用いた次世代の航空機空力設計ツールとして、large-eddy simulation (LES) [1] への期待が近年高まっている。LESは支配的なエネルギー保有域の乱流スケールを計算格子と数値計算スキームで直接解像し、保有エネルギーが小さく普遍的な小スケールの乱流成分のみをモデル化するCFDの手法であるが、LESを航空機空力設計へ応用する際の大きな課題が、高レイノルズ数壁乱流の計算コストである。航空機の空力設計では、主翼コード長ベースで $Re_c \approx 10^7$ のオーダーにもなる高レイノルズ数条件での空力予測が必要であるため、現在の航空機設計の現場では、Reynolds-averaged Navier-Stokes(RANS)乱流モデルを用いた定常CFDによる空力予測が主流である。定常CFDでは非定常な境界層剥離や再付着現象が支配的な流れ場を高精度に予測することが困難であるため、離着陸性能を決める最大揚力やパフケット現象などのフライトエンベロープ境界付近の空力予測に対し、RANS解析よりも準第一原理的なLESを応用することが期待されている。しかしながら、乱流境界層はレイノルズ数依存性の強いマルチスケール現象であり、境界層厚さに対して壁面近傍10%程度の境界層内層域の乱流スケールは、レイノルズ数の増加に対して急激に小さくなる。航空機の外部流に代表される高レイノルズ数壁乱流を、境界層内層域までLESで直接解像することは、最先端のスーパーコンピュータを使用しても不可能である。この問題を解決する一つのアプローチとして、近年LESの壁面近傍モデリングが盛んに研究されている[2][3]。LES壁面近傍モデリングでは、レイノルズ数が増加するとエネルギースケールが急激に小さくなる境界層内層域の乱流ダイナミクスを、計算格子で解像せずにモデル化する。境界層内層域まで直接解像するLESに必要な計算格子点数は $Re^{13/7}$ に比例するのに対し、内層域をモデル化するLES壁面近傍モデリングに必要な計算格子点数は Re に比例するとの推算結果も報告されている[4]。境界層内層域の乱流ダイナミクスをモデル化することで、高レイノルズ数壁乱流解析の計算コストが大幅に小さくなるため、LESを用いた航空機の空力設計が現実的となると期待されている。

本研究の目的は、格子ボルツマン法(lattice Boltzmann method: LBM)[5]に基づくLES壁面近傍モデリングの開発である。LBMは低マッハ数粘性流体に対するCFDの手法であり、複雑な流れ場に対しても計算アルゴリズムが単純で並列性能が高いことから、航空機の空力設計に向けたLESのツールとしても注目されている。LBMの壁面近傍モデリングに関する既往研究も存在するが[6]、厳密な検証は格子線が壁面境界に沿った物体適合格子の場合に限定されており、格子線と壁面境界が一致しない物体非適合格子における壁面近傍モデリングの適用にはまだ課題が残されている。

本稿では、2020年度(インターン)若手・女性利用課題において実施した、物体非適合格子上で乱流境界層のプロファイルを再現可能な壁面近傍モデリングを航空機高揚力装置翼型(30P30N)周りの流れ場解析へ応用した結果について報告する。続く第2章でLBMの基礎方程式と、壁面近傍モデリングの概要について説明する。第3章では、30P30Nの解析結果について示す。最後に、第4章で結論を述べる。

2 数値計算手法

2.1 LBMの基礎方程式

LBMは、流体を有限個の速度をもつ多数の仮想粒子の集合体で近似し、各粒子の衝突と並進とを粒子の速度分布関数を用いて逐次計算することで、その速度分布関数のモーメントから巨視的流れ場を求める数値計算手法である。質量や運動量といったマクロ量の保存則(Navier-Stokes方程式)ではなく、流体を微視的立場からとらえる気体分子運動論をアナロジーとするCFDの手法である。流体を構成する仮想粒子を用いて定式化を行うが、その仮想粒子の挙動を直接追いかける粒子法ではなく、格子法の一つである。

ある時刻 t に座標 \mathbf{x} に存在する粒子速度 ξ_i をもつ仮想粒子の速度分布関数を $f_i(\mathbf{x}, t)$ と表すと、 $f_i(\mathbf{x}, t)$ の時間発展は以下の格子ボルツマン方程式(lattice Boltzmann equation: LBE)に従う。

$$f_i(\mathbf{x} + \xi_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i(f(\mathbf{x}, t)), \quad (1)$$

ここで、下付き添え字の i は、離散化された粒子速度の方向インデックスである。式(1)の左辺は、粒子速度 ξ_i をもつ分布関数の並進運動を表す移流項であり、右辺の Ω_i が衝突項である。

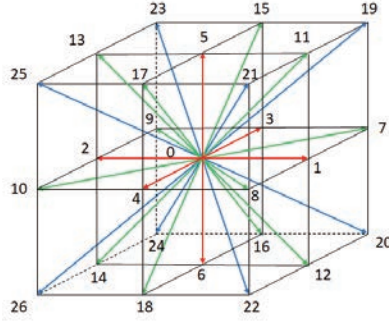


Figure 1: D3Q27 model.

等温場の格子気体モデルはいくつか提案されているが、本研究では空間3次元の27速度モデル(D3Q27モデル)を用いる。(Figure 1).

流れ場のマクロ量である密度と運動量は、それぞれ分布関数の0次及び1次のモーメントによって計算される。

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (2)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i f_i \boldsymbol{\xi}_i. \quad (3)$$

熱力学的な平衡状態にある分布関数を平衡分布関数 f_i^{eq} と呼び、以下のように密度と流速から計算される。

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho(\mathbf{x}, t) \left[1 + \frac{\boldsymbol{\xi}_{i\alpha} u_\alpha(\mathbf{x}, t)}{c_s^2} + \frac{u_\alpha(\mathbf{x}, t) u_\beta(\mathbf{x}, t)}{2c_s^2} \left(\frac{\boldsymbol{\xi}_{i,\alpha} \boldsymbol{\xi}_{i,\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right], \quad (4)$$

ここで α と β は座標軸方向を表すインデックスであり、総和規約に従う。また w_i は離散化された粒子速度の方向インデックス i によって決まる重み係数である。

本研究では、高レイノルズ数流れにおける数値的安定性を考慮し、衝突項 Ω_i の演算に Geier らによって提案されたキュムラントモデル [7] を使用する。

2.2 LBM の壁面近傍モデリング

本研究では、分布関数の再構築に基づく壁面近傍モデリング [6] を、物体非適合直交格子でも計算できるように発展させる。再構築モデルでは、LBM の分布関数を平衡成分 f_i^{eq} と非平衡成分 f_i^{neq} に分け、各々を独立に計算することで壁面境界セル (中心座標 \mathbf{x}_{bc}) における分布関数をそれらの合計として再構築する。

$$f_i(\mathbf{x}_{bc}, t) = f_i^{eq}(\mathbf{x}_{bc}, t) + f_i^{neq}(\mathbf{x}_{bc}, t). \quad (5)$$

平衡分布関数の再構築に必要な速度 \mathbf{u}_{bc} は壁面近傍モデリングから求め、密度 ρ_{bc} は壁面法線方向の隣接セル (中心座標 \mathbf{x}_{norm} , Figure 2 参照) の値を与える。また、非平衡成分についても密度と同様に、壁面法線方向の隣接セル \mathbf{x}_{norm} の値を与える。本研究では、格子線が壁面境界に一致しない物体非適合格子でも壁面モデルの計算を可能とするため、壁面法線方向に設置した Image Point (IP) を用いて壁関数を駆動する (Figure 2)。分布関数を再構築する壁面境界セルは物体内部に定義し、壁面境界セルのセル中心を通る壁面法線方向に IP を設置する。なお、IP の壁面からの距離は、 $d_{IP} = 3.5\Delta x$ で固定する。

境界層方程式をアンサンブル平均することで、境界層内層域における全せん断応力のバランス式が導ける。

$$(\bar{\mu} + \bar{\mu}_i) \frac{d\bar{U}}{dY} - \bar{\rho} \bar{U}' V' = \bar{\tau}_w, \quad (6)$$

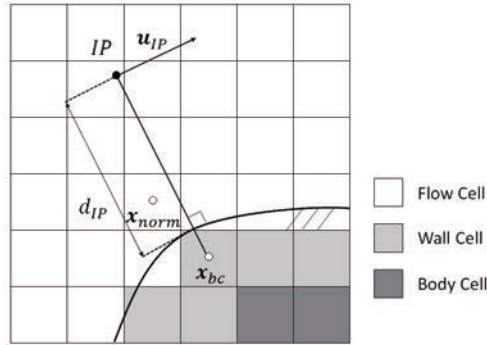


Figure 2: Illustration of image point (IP), wall boundary cell \mathbf{x}_{bc} and wall normal cell \mathbf{x}_{norm} used in the proposed near-wall modeling boundary condition (this figure illustrates 2D case for simplicity).

ここで、 Y は壁座標における壁面鉛直座標、 U, V はそれぞれ壁面接線、法線方向の速度であり、ダッシュ付きの量は平均成分からの変動量を表す。また、 μ と μ_t はそれぞれ粘性係数と渦粘性係数、 τ_w は壁面せん断応力である。上線はアンサンブル平均を表している。また境界層内層域の対数層では、以下の対数則 (log-law) が成り立つことが知られている。

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + B, \quad (7)$$

ここで、 $\kappa=0.41$ 、 $B=5.0$ であり、摩擦速度 $u_\tau (= \sqrt{\tau_w/\rho})$ を用いて、 $u^+ = U/u_\tau$ 、 $y^+ = u_\tau Y/\nu$ である。IP において、式 (7) を駆動し、Newton 法を用いて壁面せん断応力 τ_w を求める。

RANS では格子で直接解像されるレイノルズ応力が存在しないことから、式 (6) と式 (7) より、

$$\mu_{t,RANS} = \rho \kappa u_\tau Y, \quad (8)$$

であれば、対数層におけるせん断応力のバランスが満たされる (混合長モデル)。この式は、以下のように歪み速度テンソル $S_{\alpha\beta}$ を用いて書き直せる。

$$\mu_{t,RANS} = \rho (\kappa Y)^2 \sqrt{2S_{\alpha\beta}S_{\alpha\beta}}. \quad (9)$$

LBM では、歪み速度テンソル $S_{\alpha\beta}$ は、分布関数の非平衡成分に対する 2 次モーメントから求める。

$$S_{\alpha\beta} = -\frac{\omega_\nu}{2\rho c_s^2 \Delta t} \sum_i \xi_{i\alpha} \xi_{i\beta} f_i^{neq}, \quad (10)$$

一方で、LES の壁面近傍モデリングでは格子で直接解像されるレイノルズ応力が存在する。壁面モデル内で解像するレイノルズ応力が存在する場合、その影響を考慮しないと壁面応力を過大評価してしまうことが示されている [9]。以下では、計算格子で解像されるレイノルズ応力を考慮した渦粘性プロファイル $\mu_{t,mod}$ の与え方について説明する。

対数層における支配的な乱流渦のスケール L_s は、壁面までの距離 Y が大きくなるにつれ増大する [9]。LES において格子幅 Δx は計算格子で解像可能な最小の渦スケールに相当すると考えられるため、 $L_s/\Delta x$ は乱流渦が格子で解像されるかどうかを決定するパラメータである。つまり、 $L_s/\Delta x$ がある値 α より小さければ、格子で解像されるレイノルズせん断応力は無視できるほど小さい。その場合には、全ての乱流渦は RANS によってモデル化されるべきである。逆に、 $L_s/\Delta x > \alpha$ であれば、壁面モデル内で解像している支配的な乱流渦運動が存在し、渦粘性は RANS の値よりも小さくするべきである。LES の壁面近傍モデリングでは、LES の情報を壁面モデルの式に与えるマッチング点 $Y = h_{wm}$ (本モデルでは IP 高さに相当 $h_{wm} = d_{IP}$) が対数層に存在し、その高さにおいて大規模渦が LES によって十分に解像されていることが前提条件である。つまり、RANS 渦粘性を減じ始める位置をクリティカル点と定義する (壁面からの距離 d_{crt}) と、格子で解像されているレイノルズせん断応力を考慮しなければいけない領域 ($d_{crt} < Y < d_{IP}$) が必ず存在する。以上の条件をまとめると以下ようになる。

1. $L_s \leq \alpha \Delta x$ の時、 $\mu_{t,mod} = \mu_{t,RANS}$

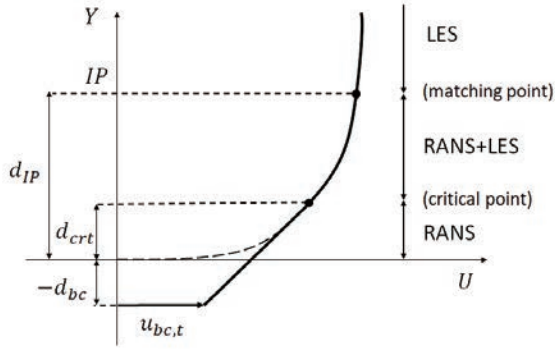


Figure 3: Illustration of the wall tangential velocity $u_{bc,t}$ at the wall boundary cell x_{bc} .

2. $Y = d_{IP}$ で, $\mu_{t,mod} = \mu_{t,SGS}$

3. 対数層における乱流渦の長さスケール L_s は, 壁面からの距離 Y に応じて増加

これらの条件を満たす渦粘性プロファイルとして, 本研究では以下の修正渦粘性 $\mu_{t,mod}$ を仮定する.

$$\mu_{t,mod} = \mu_{t,RANS}K^\gamma + \mu_{t,SGS}(1 - K^\gamma), \quad (11)$$

$$K = \max \left[\min \left\{ \frac{d_{IP} - Y}{d_{IP} - d_{crt}}, 1 \right\}, 0 \right], d_{crt} = \alpha' d_{IP}, \quad (12)$$

ここで, α' はクリティカル点の位置を決定するパラメータであり, $\alpha'=0.4$ とする. また, γ はブレンディング関数の形を決定するパラメータであり, 本研究では $\gamma=2.0$ とする. 修正渦粘性 $\mu_{t,mod}$ を用いて, キュムラントモデルの緩和率 ω_ν を修正緩和率 $\omega_{\nu,mod}$ に修正し, 衝突演算を行う.

$$\omega_{\nu,mod} = \left(\frac{\mu + \mu_{t,mod}}{\rho c_s^2 \Delta t} + \frac{1}{2} \right)^{-1}. \quad (13)$$

乱流境界層の壁面近傍における急峻な速度勾配は直交格子では解像できないため, 壁面近傍における保存則の破綻を抑制するために速度プロファイルを線形に近似する手法が提案されている [10]. 本研究では, 完全に RANS としてモデル化する領域と, 速度分布を線形に近似する領域を一致させる (Figure 3).

$$u_{bc,t} = u_{crt,t} - \frac{dU}{dY} \Big|_{Y=d_{crt}} \cdot (d_{crt} - d_{bc}), \quad (14)$$

ここで, $u_{bc,t}$, $u_{crt,t}$ はそれぞれ, 壁面境界セル, クリティカル点における接線方向速度, d_{bc} は壁面セルの壁面からの距離である. 以上の速度プロファイルの修正に付随して, セン断応力のバランス式を満足する要請から, RANS 渦粘性が以下のように修正される.

$$\mu_{t,RANS} = \begin{cases} \rho(\kappa d_{crt})^2 \sqrt{2S_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta}} & (0 < Y \leq d_{crt}) \\ \rho(\kappa Y)^2 \sqrt{2S_{\alpha\beta} S_{\alpha\beta}} & (d_{crt} \leq Y \leq d_{IP}), \end{cases} \quad (15)$$

なお, 壁面境界セルの法線方向速度 $u_{bc,n}$ は, 以下のように壁面法線速度を IP と壁面の間で線形近似することで求める.

$$u_{bc,n} = \frac{d_{bc}}{d_{IP}} u_{IP,n}. \quad (16)$$

ここで, $u_{IP,n}$ は IP における壁面法線速度である.

以上で求めた ρ_{bc} , u_{bc} , $f_i^{neq}(x_{bc}, t)$ から, 壁面境界セル x_{bc} の分布関数を再構築し (式 (5)), 壁面境界条件とする.

3 検証計算

3.1 計算条件

LBMの壁面近傍モデリングを用いて高揚力装置翼型(30P30N)周りの流れ場を解析し、複雑形状周りの流れ場解析に対する応用可能性を検証する。30P30Nは、BANCのワークショップ[11]の課題の一つであり、Figure 4のような形状をもつ。スラット及びフラップ収納時の翼型を基準とした代表長さは $C_{ref}=18[\text{in}]$ ($0.457[\text{m}]$)である。計算には階層型直交格子(Figure 5)を使用し、解像度の異なる計算格子(coarse, medium, fine)を用いて解析を行うことで、格子解像度の影響を調査する。Table 1に各計算格子の詳細を示す。壁面近傍の最小格子幅 Δx_{min} は、全コンポーネント(スラット, 母翼, フラップ)で一定である。スパン方向長さは $2[\text{in}]$ ($0.11 \times C_{ref}$)とし、周期境界条件を課す。外部境界は代表長さの100倍以上遠方にとる。一様流速は $U=58$ $[\text{m/s}]$ ($M=0.17$ に相当)とし。一様流速と代表長さから決まるレイノルズ数は $Re=1.71 \times 10^6$ に設定する。本計算では、一様流に対する迎角が $\alpha=5.5^\circ$ となるケースのみ計算する。SGS渦粘性 $\mu_{t,SGS}$ は標準スマゴリンスキーモデルによって与え、スマゴリンスキー定数の値は $C_s=0.2$ とする。計算によって得られた表面圧力のPSD(power spectral density)を実験結果[12]と比較する。なお、時間平均値は物理時間で 0.11 $[\text{s}]$ の時間平均から求める。



Figure 4: Configuration of the 30P30N three-element high-lift airfoil.



Figure 5: Hierarchical Cartesian grid around 30P30N.

3.2 計算結果

3.2.1 瞬時の乱流構造

Figure 6は、Q値の等値面による瞬時の乱流渦構造の可視化図である。スラット領域に流れの再循環領域が形成され渦構造が発達している。また、母翼の前縁で流れ場が乱流に遷移し、後縁に向かうほど乱流境界層が発達している。

Table 1: Properties of the calculation grid used for the simulation of 30P30N

grid	Δx_{min} [in]	$\Delta x_{min}/C_{ref}$	time-step Δt [s]	total number ($\times 10^6$)
coarse	1.6×10^{-2}	8.67×10^{-4}	6.7×10^{-7}	13
medium	7.8×10^{-3}	4.34×10^{-4}	3.4×10^{-7}	51
fine	3.9×10^{-3}	2.17×10^{-4}	1.7×10^{-7}	137

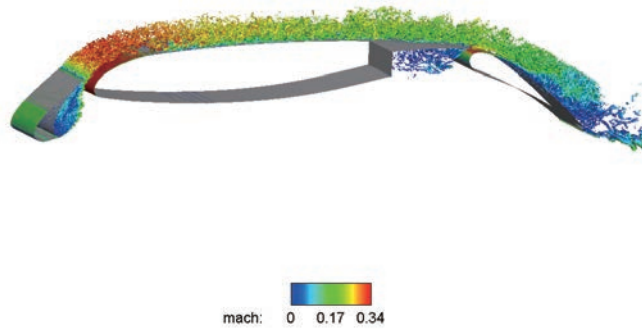


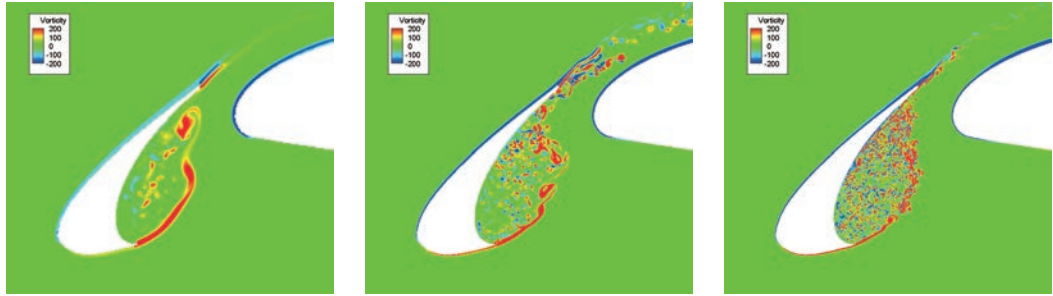
Figure 6: Iso-surface of the Q-criterion around the three-element airfoil (colored by Mach number).

3.2.2 瞬時のスパン方向渦度分布

前節で確認されたようにスラットにおける再循環領域と下流へ流れるせん断層に分かれる再付着点近傍の流れ場は主要な騒音発生源であるため、翼型から発生する騒音予測のためには高精度な解析が要求される。スラット領域の瞬時のスパン方向渦度分布 $\omega_z C_{ref}/U$ を Figure 7 に示す。ここで、 ω_z がスパン方向の渦度であり、代表長さと同様流速で無次元化している。Figure 7 より格子解像度が上がるほど、細かい渦構造が解像されている。また、スラットのカスプから放出されるせん断層の崩壊が、格子解像度が上がるにつれて早まっていることが確認できる。

3.2.3 表面圧力の Power spectral density (PSD)

Figure 8 は、表面圧力のデータサンプル点を示しており [12]、Figure 9 はそのうち、S10, S11, S12, M7 における本計算によって得られた PSD と実験結果 [12] との比較を示している。Figure 9 より、計算格子が細かくなるにつれて実験結果に近づく傾向にあることが確認できる。特に、fine 格子の計算によって得られた S11 と S12 における 10^3 から 10^4 [Hz] のナローバンドピーク (NBPs) のレベルは、実験結果と良好に一致している。一方で、S10 と M7 における NBPs は、fine 格子においても実験結果よりも高い値を示している。S10 と M7 における実験で計測されている 2×10^4 [Hz] から 3×10^4 [Hz] の高周波のピークについては、本研究では捉えられていない。S10 と M7 における高周波のピークは、スラット後縁から放出されるカルマン渦に起因しており、Figure 7c から、fine 格子でもカルマン渦列が高精度に解像できていないと考えられる。高周波のピークを捉えるためには、スラット後縁の格子解像度を更に高めることが必要である。



(a) coarse.

(b) medium.

(c) fine.

Figure 7: Instantaneous spanwise vorticity on the mid-plane cross section.

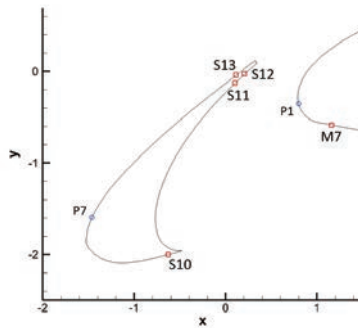


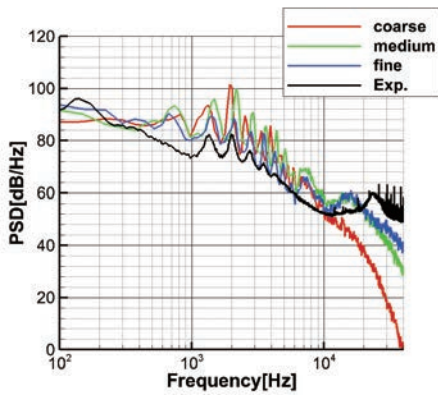
Figure 8: Data sampling position for PSD of the surface pressure [12].

4 結論

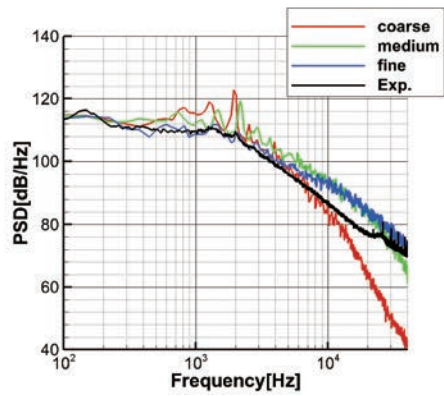
本稿では、物体非適合直交格子上で計算可能な LBM の壁面近傍モデリングを用いて、30P30N 周りの非定常流れ場解析を行った結果について報告した。航空機の高揚力装置翼型のような比較的複雑な形状周りの流れ場でも、壁面近傍モデリングを用いて安定に計算できることが確認された。また、表面圧力の PSD について実験計測値との比較を行い、計算格子を細かくするほど実験値に近づく傾向があることが確認された。

References

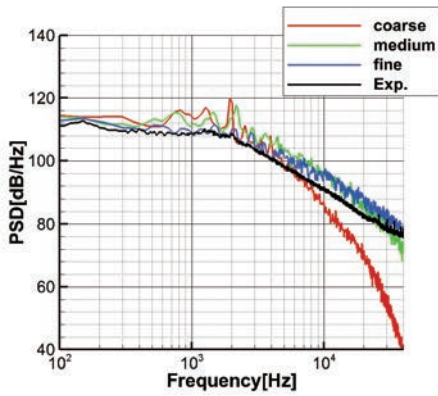
- [1] Sagaut, Pierre. Large eddy simulation for incompressible flows: an introduction. Springer Science & Business Media, 2006.
- [2] Bose, Sanjeeb T., and George Ilhwan Park. "Wall-modeled large-eddy simulation for complex turbulent flows." *Annual Review of Fluid Mechanics* 50 (2018): 535-561.
- [3] Larsson, Johan, et al. "Large eddy simulation with modeled wall-stress: recent progress and future directions." *Mechanical Engineering Reviews* 3.1 (2016): 15-00418.
- [4] Choi, Haecheon, and Parviz Moin. "Grid-point requirements for large eddy simulation: Chapman's estimates revisited." *Physics of fluids* 24.1 (2012): 011702.
- [5] Aidun, Cyrus K., and Jonathan R. Clausen. "Lattice-Boltzmann method for complex flows." *Annual review of fluid mechanics* 42 (2010): 439-472.



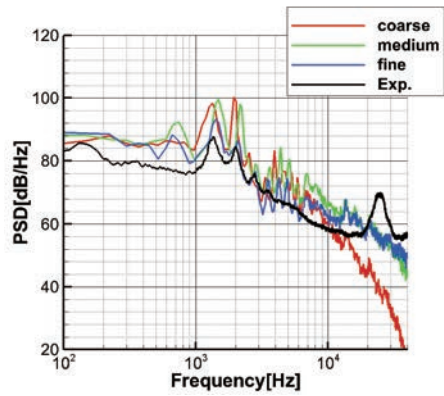
(a) S10.



(b) S11.



(c) S12.



(d) M7.

Figure 9: PSD of the surface pressure.

- [6] Malaspinas, Orestis, and Pierre Sagaut. "Wall model for large-eddy simulation based on the lattice Boltzmann method." *Journal of Computational Physics* 275 (2014): 25-40.
- [7] Geier, Martin, et al. "The cumulant lattice Boltzmann equation in three dimensions: Theory and validation." *Computers & Mathematics with Applications* 70.4 (2015): 507-547.
- [8] Tamaki, Yoshiharu, Ryoji Takaki, and Soshi Kawai. "Wall-modeled large-eddy simulations on non-body-conforming Cartesian grids: Analysis of the conservation laws." *AIAA Scitech 2020 Forum*. 2020.
- [9] Kawai, Soshi, and Johan Larsson. "Dynamic non-equilibrium wall-modeling for large eddy simulation at high Reynolds numbers." *Physics of Fluids* 25.1 (2013): 015105.
- [10] Tamaki, Yoshiharu, Motoshi Harada, and Taro Imamura. "Near-wall modification of SpalartAllmaras turbulence model for immersed boundary method." *AIAA Journal* 55.9 (2017): 3027-3039.
- [11] Choudhari, Meelan M., and David P. Lockard. "Assessment of slat noise predictions for 30P30N high-lift configuration from BANC-III workshop." 21st AIAA/CEAS aeroacoustics conference. 2015.
- [12] Murayama, Mitsuhiro, et al. "Experimental study on slat noise from 30p30n three-element high-lift airfoil at jaxa hard-wall lowspeed wind tunnel." 20th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference. 2014.

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. 23 Special Issue 1 (2021. 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
〒227-0882 千葉県柏市柏の葉6-2-3
(電話) 04-7133-4663(ダイヤルイン)