兵庫県立大学

データ計算科学連携センター

2021 年度 利用報告書集

Annual Report

Center for Cooperative Work on

Data science and Computational science

April 2021 - March 2022

兵庫県立大学

University of Hyogo

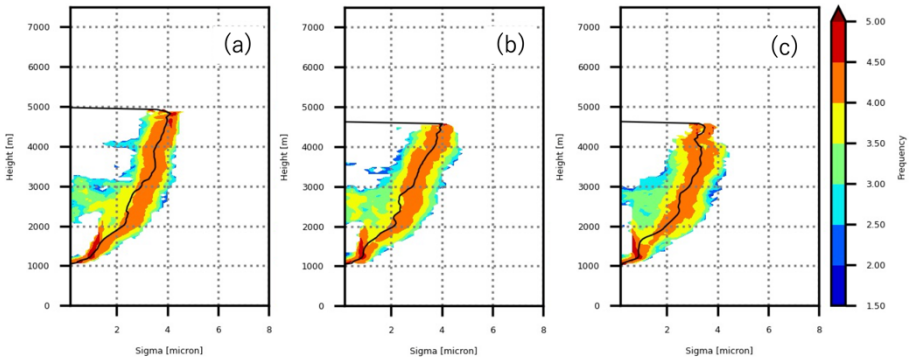
気象気候ライブラリ SCALE を用いた雄大積雲を対象とした国際モデル間比較（ICMW）への参画

佐藤 陽祐 [A]
北海道大学理学研究院 [A]
（世話人：島 伸一郎）

本研究では，次世代気象気候ライブラリ Scalable Computing for Advanced Library and Environment（SCALE, Nishizawa et al. 2015, Sato et al. 2015）に実装された，ビン法雲モデルを用いて雄大積雲を対象とした国際モデル間比較プロジェクト（ICMW）に参画した．気象現象を対象とした数値計算では，気象モデルと呼ばれるシミュレーションコードが用いられる．この気象モデルにはさまざまな要素が含まれており，そのうちの雲微物理モデルが，大気中で発生する雲・降水の物理プロセスを計算する．雲微物理モデルにもさまざまな種類のものがあるが，本研究では気象モデルの各格子の雲粒のサイズの分布（粒径分布）をビンに区切って直接表現するビン法モデルを用いて研究を行なった．具体的には SCALE に実装されたビン法雲モデル（SCALE-Bin: Suzuki et al. 2010）を用いて，ICMW に参画した．

この国際モデル間比較プロジェクトは，粒子法雲モデルとビン法雲モデルのみの参画することが認められたプロジェクトであり，独立に開発された複数の粒子法雲モデルとビン法雲モデルによって，条件を揃えて行なった計算結果を比べることで，気象モデルで計算される雲粒の粒径分布の不確実性の大きさと，その不確実性を生み出す原因を明らかにすることを目的としている．本研究では，ICMW で指定された数値実験とその解析結果を，ICMW の取りまとめをしている，本研究の世話人の島准教授に提供することで ICMW に参画した．

解析から，SCALE-Bin によって計算された雲の基本的な物理量（雲粒の有効半径や雲粒数濃度など）は，ICMW に参画した他の 6 つのモデルと似通っており，SCALE-Bin が他の雲微物理モデルと同等の物理性能を示していることが示された．これに加え，本研究では，粒径分布を表現するためのビンの数（粒径分布の解像度に相当）が雲粒の粒径分布に与える影響を明らかにするために，ビンの数を 33，60，100 と変化させた数値実験を行い，ビンの数が計算結果に与える影響を調べた．解析の結果から，ビンの数を変化させても，粒径分布の広がりの大きさを示す標準偏差が変化しないことが明らかになった（図）．これは，ビンの数が少ない場合に粒径分布の幅が広がるという，先行研究で言われてきた結果と異なり，この原因を調べるために，今後更なる解析が必要であることが明らかになった．



図：SCALE-Bin で計算された各高度における粒径分布の標準偏差の頻度分布．(a), (b), (c)はそれぞれビンの数が 33，60，100 の時の結果を示す

発表

(Session organized) Case 3. Isolated cumulus congestus based on SCMS campaign: comparison between Eulerian bin and Lagrangian particle-based microphysics, the 10th International Cloud Modeling Workshop, 27th July 2020. https://youtu.be/03WgWoDTHSI

(Oral presentation) Shin-ichiro Shima, Wojciech W. Grabowski, Kamal Kant Chandrakar, Jinghua Chen, Kyoungock Choi, Piotr Dziekan, Ah-hyun Kim, Toshiki Matsushima, Seiya Nishizawa, Yousuke Sato, Lulin Xue, Seong Soo Yum, Piotr Żmijewski, "Report of the isolated cumulus congestus case from the International Cloud Modeling Workshop 2021: comparison between Eulerian bin and Lagrangian particle-based microphysics", International Conference on Clouds and Precipitation 2021, online, 2 to 6 August 2021.

(Workshop summary) Xue, L., Bera, S., Chen, S., Choudhary, H., Dixit, S., Grabowski, W. W., Jayakumar, S., Krueger, S., Kulkarni, G., Lasher-Trapp, S., Mallinson, H., Prabhakaran, T., & Shima, S. (2022). Progress and challenges in modeling dynamics-microphysics interactions: from the Pi chamber to Monsoon convection, Bulletin of the American Meteorological Society (published online ahead of print 2022). https://doi.org/10.1175/BAMS-D-22-0018.1

プラズマ物理に関するシミュレーションの共同研究

西村 征也, 照屋 貴大
法政大学理工学部電気電子工学科
（世話人：沼田 龍介）

1. 研究背景と研究目的

天体近傍の宇宙空間や磁場閉じ込め装置においては、高温プラズマが背景磁場に磁化された状態にある。このような磁化プラズマにおいては、磁気流体力学的不安定性が発生する。地球磁気圏におけるプラズマは地磁気を介して電離層プラズマと結合している。電離圏におけるプラズマの揺らぎが磁気圏におけるアルフベン波を励起し、このアルフベン波が電離圏におけるプラズマの揺らぎを増幅する現象をフィードバック不安定性と呼ぶ。フィードバック不安定性はオーロラのカーテン状や渦巻き状の自発的な構造形成を説明するための理論である。

近年のフィードバック不安定性の理論研究においては、磁気圏モデルに対して運動論的効果を加味したモデルが用いられている。本研究においては、磁気圏に対してジャイロ流体モデルを適用し、フィードバック不安定性の非線形シミュレーションを行い、非線形発展について詳細な解析を行った。また、運動論的効果を正確に取り扱うために、磁気圏モデルにジャイロ運動論モデルを適用する手法の開発に取り組んだ。

2. ジャイロ流体モデルを用いた研究の成果

磁気圏に対してジャイロ流体モデルを適用してフィードバック不安定性の非線形シミュレーションを実施した。磁力線に垂直な面内における正負を含む 600 個の波数に対して計算を行った。フィードバック不安定性の非線形発展においては、磁力線に垂直な面内において、オーロラのひらひらと揺らめく現象に類似した構造が観察される。そこで、フィードバック不安定性の伝搬する方向に対して、平行な方向と垂直な方向に対する 2 次元の時系列データに対してスペクトル解析を行った。その結果、伝播方向に対してはほぼ同じ位相速度で伝播する特徴がある一方で、伝播方向に垂直な方向に対しては比較的ブロードな振動数スペクトルを持つことが明らかになった。また、モデル方程式をエネルギーの式に書き換えることによってエネルギー輸送経路を分析した。その結果、非線形発展において駆動されるモードの主な駆動源が電磁的非線形性であることが明らかになった。

3. ジャイロ運動論モデルを用いた研究の成果

磁気圏に対してジャイロ運動論モデルを適用するために必要なシミュレーション手法の開発を行った。フィードバック不安定性においては磁気圏と電離圏の結合を考えるが、ジャイロ運動論モデルの様な速度空間の自由度を持つモデルに対してどのように結合を表現するかは自明ではない。本研究においては、分布関数を速度空間において偶関数成分と奇関数成分に分離する手法を新たに導入した。この手法に基づいてフィードバック不安定性の線形安定性解析を再訪問した。その結果、従来の解析解から予測される最も不安定な解に相当する不安定性の励起が観察された。また、解析解と数値解の間にわずかな誤差が生じることが観察されたが、これは解析解の導出において仮定されている平面波近似が部分的に破綻していることが原因であることが明らかになった。

論文

[1] S. Nishimura and R. Numata, “Linear stability analysis of feedback Instability using gyrokinetic model of magnetosphere”, J. Phys. Soc. Jpn., Vol. 90, 094901 (2021).

学会発表

[1] 照屋貴大，西村征也，佐々木真, “フィードバック不安定性の非線形発展における時空間構造”, 日本物理学会 2021 年秋季大会，オンライン開催, 23aB1-7, 9/23 (2021). [口頭発表]

[2] 西村征也，沼田龍介, “磁気圏のジャイロ運動論的モデルを用いたフィードバック不安定性の線形安定性解析”，地球電磁気・地球惑星圏学会第150回総会・講演会，オンライン開催, R008-08, 11/4 (2021). [口頭発表]

[3] 照屋貴大，西村征也，佐々木真, “フィードバック不安定性の非線形発展における時空間構造”, 地球電磁気・地球惑星圏学会第150回総会・講演会，オンライン開催, R008-09, 11/4 (2021). [口頭発表]

[4] 西村征也，沼田龍介, “磁気圏のジャイロ運動論的モデルを用いたフィードバック不安定性の線形安定性解析”, NIFS共同研究研究会「核融合プラズマの運転制御に関するシミュレーション研究の進展」，オンライン開催, 12/2 (2021). [口頭発表]

[5] S. Nishimura and R. Numata, “Linear stability analysis of feedback Instability using gyrokinetic model of magnetosphere”, American Geophysical Union Fall Meeting, SM55A-1769, Online, 17 December (2021). [ポスター発表]

[6] T. Teruya, S. Nishimura, M. Sasaki, “Spatiotemporal structure in nonlinear evolution of feedback instability”, American Geophysical Union Fall Meeting, SA25A-1962, Online, 14 December (2021). [ポスター発表]

計算物質科学から発する計測インフォマティクスに関する研究

草部 浩一
兵庫県立大学大学院理学研究科
（世話人：島 伸一郎 准教授）

計算物質科学の分野には、物質を構成する電子の特性を個々の物質に応じて決定しながら、物質中の原子配置や配列、その結果得られる多体電子系の相転移現象と応答特性を調べる、電子状態計算理論が含まれる。その一つの方法論として、密度汎関数理論に立脚して多体相関効果を評価する手法は、近年では酸化物の電子状態相図の決定（論文５）、高温超伝導体の設計（論文６）、物質設計に基づくスピンエレクトロニクス・デバイス（論文２、学会発表６，７）、測定型量子計算素子の物質設計（論文３，４、学会発表１）などの成果を与えるマテリアルズ・インフォマティクスの他にも、実測データに基づく未知の光誘起相転移現象解明に寄与する計算事例（論文１、学会発表２）、GaAs 表面の光励起過程の解析方法開発（学会発表４，５）、グラファイト振動子を応用した生体センサーに関する基礎解析（学会発表３）などの、実験とシミュレーションが連携した共同研究でも、重要視されてきている。特に、Bi_2Se_3 の表面構造の違いによる仕事関数の変化と局所状態密度の変化は、光電子顕微鏡観察結果を説明する可能性がある。データ計算科学連携センターのスーパーコンピュータにより大メモリジョブを通じてこの解析を進め、実験との直接比較を試みている。（図１参照）

私達の共同研究グループでは、ナノメートルスケールにあるグラフェン構造を用いてそこに積極的に原子欠損を生成することで得られる触媒能賦活化法を設計してきた。この兵庫県立大学・大阪大学・法政大学・㈱ダイセルによる共同研究（その他１）では、最近の TPR 実験により、原子欠損をもつグラフェンにおいて、鎖状アルカンの分解を促進する触媒機能がこれまでの常識を超えて低温から発生することが明らかになってきた。これを、理論シミュレーションから裏付け、さらなる高活性脱水素触媒を理論設計するため、密度汎関数法計算に基づく脱水素反応経路決定を行った。それと同時に、触媒物質の合成プロセスにおける時間依存計測スモールデータを、AI によりその場解析する必要性が見出された。そこで、物質調整を行う賦活化プロセス（粒子線照射）において、発光スペクトルの理論解析を行った。その結果、分子脱離のその場観測を支援する計測法が開発可能となってきた。（図２参照）また、進化的アルゴリズムを組み合わせた爆轟反応機構解明も推進している。そこではコンポジット系を与える物質構造中での酸化・還元反応描像が明らかになってきている。（その他２）

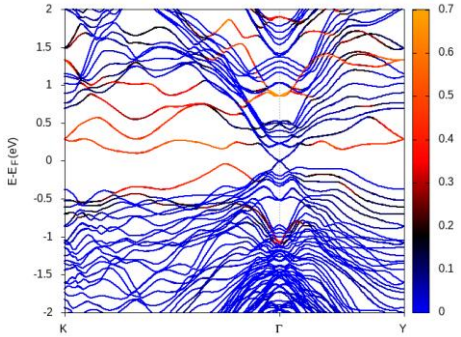


図１ Bi_2Se_3 の Bi 表面における表面バンド

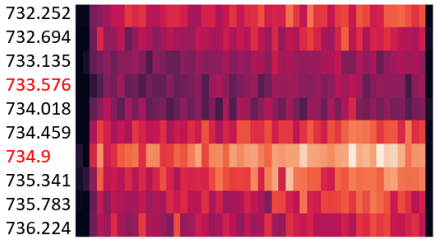


図２ 発光スペクトル(縦軸波長[nm])による脱離分子種の fast.ai を活用した同定（横軸は時間[sec]）

論文

1. Masaya Nagai, Yuhei Higashitani, Masaaki Ashida, Koichi Kusakabe, Hirohiko Niioka, Azusa Hattori, Hidekazu Tanaka, Goro Isoyama, Norimasa Ozaki, "Terahertz-induced martensitic transformation in partially stabilized zirconia", Research square, DOI:10.21203/rs.3.rs-130295/v1 (19 pages) (Preprint).
2. H. Harfah, Y. Wicaksono, G. K. Sunnardianto, M. A. Majidi, K. Kusakabe, "High magnetoresistance of a hexagonal boron nitride-graphene heterostructure-based MTJ through excited-electron transmission", Nanoscale Adv., 4, 117 -124 (2022). DOI: 10.1039/D1NA00272D
3. N. Morishita, Y. Oishi, T. Yamaguchi, K. Kusakabe, "S=1 antiferromagnetic electron-spin systems on hydrogenated phenalenyl-tessellation molecules for material-based quantum-computation resources", Appl. Phys. Express 14, 121005 (2021). DOI: 10.35848/1882-0786/ac3b9d
4. N. Morishita, K. Kusakabe, "Zero-energy modes in a super-chiral nanographene network of phenalenyl-tessellation molecules", Phys. Lett. A, 408, 127462 (2021). https://doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127462
5. S. Teranishi, K. Nishiguchi, S. Yunoki, K. Kusakabe, "Effect of on-site Coulomb repulsion on ferromagnetic fluctuations in heavily overdoped cuprates", J. Phys. Soc. Jpn., 90, 094707 (2021). (7 pages) https://doi.org/10.7566/JPSJ.90. 094707
6. S. Teranishi, K. Nishiguchi, K. Kusakabe, "Material Optimization of Potenetial High-Tc Superconducting Single-layer Cuprates", J. Phys. Soc. Jpn., 90, 054705 (2021). (5 pages) https://doi.org/10.7566/JPSJ.90.054705

学会発表

1. 森下直樹，草部浩一, "フェナレニル充填型分子に基づくナノグラフェン構造における有効量子多体模型", 日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン 2021.9.22）
2. 永井正也，東谷悠平，芦田昌明，草部浩一，新岡宏彦，服部梓，田中秀和，磯山悟朗，尾崎典雅, "正方晶ジルコニアの THz 誘起相変態：紫外・中赤外光励起での照射効果", 日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン 2021.9.20）
3. 大石泰弘，草部浩一, "グラフェン上吸着リンカー分子の理論的構造解析",日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン 2021.9.22）
4. 大内涼雅，草部 浩一, "第一原理計算に基づく GaAs 表面における 1 次過程光電子放出強度の評価の理論的検",応用物理学会関西支部 2021 年度 第 2 回講演会（オンライン 2021 年 10 月 15 日）
5. 大内涼雅，草部浩一，福本恵紀，石田邦夫, "第一原理計算に基づく GaAs 表面における 1 次過程光電子放出強度の評価の理論的検証",日本物理学会第 77 回年次大会（オンライン 2022.3.16）
6. Halimah Harfah, Yusuf Wicaksono, Gagus K. Sunnardianto, Muhammad A. Majidi, Koichi Kusakabe, "High magnetoresistance of hexagonal boron nitride-graphene heterostructure-based MTJ through excited-electron transmission", 2022 年第 69 回応用物理学会春季学術講演会（青山学院大, 2022 年 3 月 24 日）
7. Yusuf Wicaksono, Halimah Harfah, Gagus K. Sunnardianto, Muhammad A. Majidi, Koichi Kusakabe, "The Importance of Interface in Controlling Mass Gapped Dirac Cone of Graphene Through Pseudospin via Magnetic Proximity Effect", 2022 年第 69 回応用物理学会春季学術講演会（青山学院大, 2022 年 3 月 25 日）

その他

1. 草部浩一,「爆轟ススの非酸化的脱水素触媒としての実用化を目指した基礎研究」, 共同研究 大阪大学大学院基礎工学研究科産学連携センター・ダイセル-エンジニアリング・サイエンス共同研究講座 (2021 年 9 月 15 日～2022 年 3 月 31 日)
2. 草部浩一,「分子動力学計算と進化的アルゴリズムを組み合わせた爆轟反応機構の計算科学的研究」, 共同研究 大阪大学大学院基礎工学研究科産学連携センター・ダイセル-エンジニアリング・サイエンス共同研究講座（2021 年 9 月 15 日～2022 年 3 月 31 日）

可逆性高分子材料におけるシクロデキストリンの相互作用解析

高島 義徳[A]，河合 優作[A]，朴 峻秀[A]，以倉 崚平[A]，小西 昴[A]，吉田 大地[A]，朝木 佑貴[A]，
山下 尚輝[A]，和田拓真[A]，大崎 基史[A]，石井 良樹[B]，鷲津 仁志[B]
大阪大学高等共創研究院・大学院理学研究科[A]，
兵庫県立大学大学院情報科学研究科・兵庫県立大学データ計算科学連携センター[B]
（世話人：鷲津 仁志）

高分子材料の中でもシクロデキストリンによる包接化合物は，優れた力学特性や自己修復特性を示すことから，大きな注目を集めている。そのような高分子材料は，シクロデキストリンによる包接構造の違いによって可動性架橋や可逆性架橋と呼ばれており，包接現象の性質が機能解明の鍵と期待される。そのうち，可動性架橋による全原子分子シミュレーションは達成されており（Mayumi, Okazaki and Ito et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **141**, 9655 (2019).），計算機研究を活用した新しい高分子材料開発の地歩が確立しつつある。一方で，可逆性架橋による高分子包接化合物の全原子分子シミュレーションはほとんど報告されておらず，ホスト–ゲスト相互作用に関する分子表現の難しさが一つの課題としてあげられる。

阪大，兵庫県大からなる本共同研究チームでは，阪大高島研の実験組成に対応する計算科学的な解析を実施している。特に，シクロデキストリン系高分子包接化合物の材料特性を分子論的に予測するため，シクロデキストリンに対する各種高分子モノマーの包接特性に関する全原子分子動力学シミュレーションを，兵庫県大・鷲津研の計算機クラスターを用いて解析した。石井はモノマー溶液を対象とした包接現象の探索スキームを構築し，河合・朴・以倉・小西・吉田・朝木・山下・和田は水溶液やモノマー溶液におけるシクロデキストリンの包接特製やモノマー溶液におけるモノマー種の違いについて検討・解析した。これにより DMAA というモノマーの混合割合が増えるとシクロデキストリンのホスト–ゲスト相互作用が向上するとともに，溶媒効果によってDMAA種だけでなくEA種も包接されやすくなることを解明し，優れたモノマー種の混合割合を計算科学的に予測することに成功した。この混合組成は，実験的にも優れた力学特性を示す組成であることが判明し，さらなる実験測定からシクロデキストリンによる“シングルクロス/デュアルクロスネットワーク高分子材料”の最良組成探索へと拡張可能と期待されることが分かった。本研究は，JSPS 新学術領域研究「水圏機能材料」における共同研究であり，Springer Nature の国際学術誌「*NPG Asia Materials*」に掲載された。

論文

Y. Kawai, J. Park, Y. Ishii, O. Urakawa, S. Murayama, R. Ikura, M. Osaki, Y. Ikemoto, H. Yamaguchi, A. Harada, T. Inoue, H. Washizu, G. Matsuba, Y. Takashima, "Preparation of Dual Cross-Network Polymers by Knitting Method and Evaluation of Their Mechanical Properties", *NPG Asia Mater.* **14**, 32-pp.1-11 (2022).

学会発表

河合 優作，朴 峻秀，石井 良樹，村山 駿介，以倉 崚平，大﨑 基史，池本 夕佳，浦川 理，山口 浩靖，井上 正志，原田 明，鷲津 仁志，松葉 豪，高島 義徳，"可動性デュアルクロスネットワーク材料の作製と力学特性評価"，第 70 回高分子討論会，2021 年 9 月 6-8 日.

潤滑油添加剤の吸着過程に関する研究

土屋 巧[A], 田所 千治[A], 長嶺 拓夫[A]
埼玉大学大学院理工学研究科[A]
（世話人：鷲津 仁志）

機械の高効率化のために潤滑油による更なる低摩擦化の要求が高まっている．潤滑油は基油と添加剤から成り，添加剤はわずかな添加量（< 0.1 w%）であっても優先的に添加剤が摩擦面に吸着し，吸着膜が形成される．吸着膜は，境界潤滑下において固体面同士の直接接触を妨げ，摩擦・摩耗の大幅な低減に寄与することが知られている．しかしながら，吸着膜の成長過程や成長分布，成長速度に影響する因子など，摩擦面における添加剤の吸着現象の詳細については明確になっていない．本研究では，別途実施する実験とともに分子動力学法により添加剤分子の吸着過程を予測して，吸着現象の影響因子とメカニズムを調べることで，潤滑油による低摩擦化に寄与する条件を見出すことを目的としている．本報では，単純なモデル潤滑油の組合せに生じる吸着現象に対して，吸着量の傾向を簡易的に調べた解析結果を示す．

モデル潤滑油として，基油にはヘキサデカン（HD）を用い，添加剤にはステアリン酸（SA），エライジン酸（EA），オレイン酸（OA）を用いた．解析空間（縦×横×高さ）に添加剤 10 分子と基油 40 分子を配置して，1000 K で 0.5 ns 間アニールした．その後，解析空間の上下を鉄基板（Fe）で挟み，系の温度を 25℃に設定して，吸着の様子を調べた．ただし，下側の鉄基板の表面は，正に帯電させた．

Fig. 1 に SA/HD の 25℃の条件における解析結果を示す. 解析空間の上下が鉄基板, 橙色の分子が SA, 灰色の分子が HD である．解析開始直後では解析空間の中央付近に HD と SA が凝集し，その後，脂肪酸のカルボキシ基の負の極性により，凝集分子が正に帯電させた下側の鉄基板の表面に引き寄せられることがわかった．Fig. 1 の解析結果をもとに，帯電した鉄基板の近傍に存在するカルボキシ基の数を調べた結果を Fig. 2 に示す．赤色は SA/HD，緑色は EA/HD，青色は OA/HD を示している．OA/HD は吸着速度が比較的遅く，SA/HD は吸着速度が速い傾向は，実験結果との定性的な一致が認められた．

今後，吸着速度に対する初期配置や解析時間，温度の影響を調べる必要はあるが，実験結果の傾向について分子動力学の数値シミュレーションによる予測の可能性が示された本結果は有用と考えている．

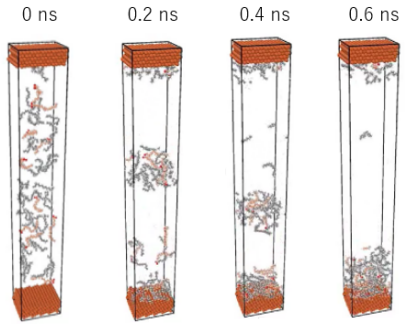


Fig. 1. Snapshots for SA/HD_25℃

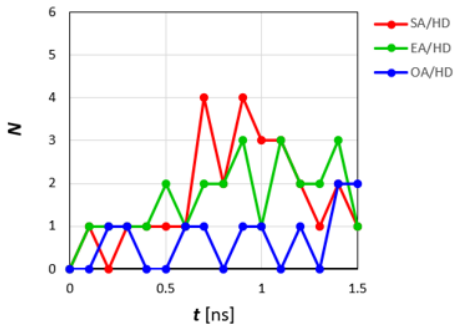


Fig. 2. Number of adsorbed carboxy groups

分子動力学計算を利用するカルボキシベタインの水和構造の解明に関する研究

水本 康平[A], 石井 良樹[B]、鷲津 仁志[B]、甲元 一也[A]
甲南大学フロンティアサイエンス学部[A]
兵庫県立大学大学院情報科学研究科，兵庫県立大学データ計算科学連携センター[B]
（世話人：鷲津 仁志）

極限環境生物が細胞内に高濃度で蓄積するベタイン誘導体は、外部環境がもたらす浸透圧ストレスに応答して産生される。我々はその構造と機能の関係を調べるためにグリシンベタインを基体としたアナログライブラリーを開発し、酵素の活性や安定性に及ぼす影響を研究してきた。その中で図１の誘導体が優れた活性化、安定化効果を発現することを見出した。溶液物性解析によって、誘導体は大きな水和層を有し、そこから親水性物質を排他することが活性化、安定化の要因であることが示唆された。しかし、実験的に水和構造を解析することには限界がある。そこで本研究では分子動力学（MD）計算を用い、カルボキシベタインの水和構造を可視化し、類似した活性を持つスルホベタイン、アミン *N*-オキシドと比較した。

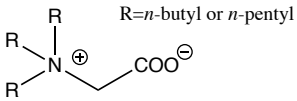


図１　生体分子の活性化、安定化効果を示すベタイン誘導体の化学構造

Gaussian16 によって各分子の再安定構造を計算し、ユニットセル（一辺：39.3485 Å）中央に配置した後、2000 分子の水を配置し、MD で計算した。各分子はアニオン性官能基が水と水素結合を形成しており、その数はカルボキシベタイン（C_1、C_4）で 4.38、4.04、スルホベタインで 6.00、5.95、アミン *N*-オキシドで 3.00、2.69 となった。アルキル鎖が伸長するとアニオン性官能基を起点とした水素結合ネットワークが共通して弱まることが示された。アニオン性官能基の酸素原子上の電荷の変化はカルボキシベタインで-0.647→-0.597、スルホベタイン-0.542→-0.550、アミン *N*-オキシドで-0.594→-0.548 となり、カルボキシベタイン、アミン *N*-オキシドでは水との電荷的な相互作用が弱まった。しかし、スルホベタインでは変化が確認されなかったことからアルキル鎖による立体的な効果も加味されている可能性が考えられる。一方、アンモニウム基に着目すると、カルボキシベタインのアンモニウム基の窒素原子の電荷がアルキル鎖の伸長に伴い+0.162→+0.748 と 0.586 も大きくなった。スルホベタイン、アミン *N*-オキシドと比較してその変化量は大きく、アンモニウム基近傍での水和がカルボキシベタイン特有の現象を引き起こしていることが示唆された。今後は、そちらについて評価を行いながら、カルボキシベタインの持つ特異な水和環境について理解を深めたいと考えている。

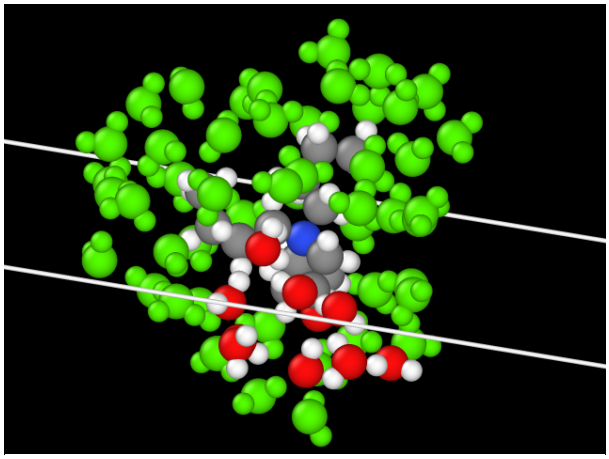


図1 アンモニウム基に3つの n-ブチル基が導入されたカルボキシベタインの水和構造。カルボキシレートに水素結合した水分子は赤と白色で、４Å以内に存在する水和水を緑色で表している。

自己組織化イオン液晶のシミュレーション研究のための学学連携

加藤 隆史[A]，朝倉 和宏[A]，上田 哲也[A]，中島 佑佳[A]，三上 喬弘[A]，
加藤 利喜[A]，渡辺 豪[B]，石井 良樹[C]，鷲津 仁志[C]
東京大学大学院工学系研究科化学生命工学専攻[A]，北里大学理学部物理学科[B]，兵庫県立大学大学院情報科学研究科・兵庫県立大学データ計算科学連携センター[C]
（世話人：鷲津 仁志）

イオン液体的な親水基と大きな疎水性基を結合した分子はジャイロイドやカラムナーなどのナノメートルサイズの自己組織化構造を形成することが知られておりイオン液晶と名付けられている（Kato et al., *Nat. Rev. Mater.* 2017.）。このような自己組織化イオン液晶は，親水基が集合してナノチャネルを形成し，ナノチャネルを通して水やイオンを選択的に輸送する。そのためこのイオン液晶は，水処理膜設計への応用が大きな注目を集めており（Sakamoto and Kato et al., *Adv. Sci.* 2018.），ナノチャネルにおける水やイオンの挙動を説明する観点から，計算機シミュレーションを用いた分子シミュレーション研究が要請されている。

東大，北里大，阪大，兵庫県大からなる本共同研究チームでは，東大加藤研の実験に対して他の大学が計算科学的な解析を実施している。イオン液体系で考案してきた凝縮系の量子化学計算による自己無撞着モデリングを応用することで，自己組織化イオン液晶分子の全原子モデルを新たに開発し，大規模分子動力学（MD）シミュレーションによる，ジャイロイド・カラムナー型自己組織化様態の再現に成功した。この方法論では，凝縮系で生じる電子密度移動・誘電分極などの多体効果を考慮しながら，高精度な分子力場を構築できる。そのため液晶分子の双極子モーメントを正確に表現でき，自己組織化様態とナノチャネル構造，イオン伝導率の実験値を高い確度で再現できた。さらに本手法を応用することで，機能性液晶のナノチャネルが輸送する水分子のふるまいの解明に成功した。本成果は，2021 年 7 月に国際学術誌「Science Advances」に掲載され，表紙イメージを飾った（右図）。

本課題では，兵庫県立大鷲津研の計算機クラスターで自己組織化イオン液晶の MD シミュレーションを石井が実施しつつ，このイオン液晶のモデリングのための大規模量子化学計算を並行して兵庫県立大 SIM スパコン Fat ノードで実施した。また石井・渡辺は，兵庫県立大学鷲津研の計算機クラスターでさらに広範な液晶材料の MD シミュレーションとその解析を実施するとともに，朝倉・上田・中島・三上・加藤（利）は，同じく兵庫県立大学鷲津研の計算機クラスターで液晶分子や様々な高分子系の構造物性について解析・考察し，計算科学の手法に関して理解を深めた。

論文

Y. Ishii, N. Matubayasi, G. Watanabe, T. Kato, H. Washizu, “Molecular Insights on Confined Water in the Nanochannels of Self-Assembled Ionic Liquid Crystal”, *Sci. Adv.* **7**, eabf0669-pp.1-14 (2021).

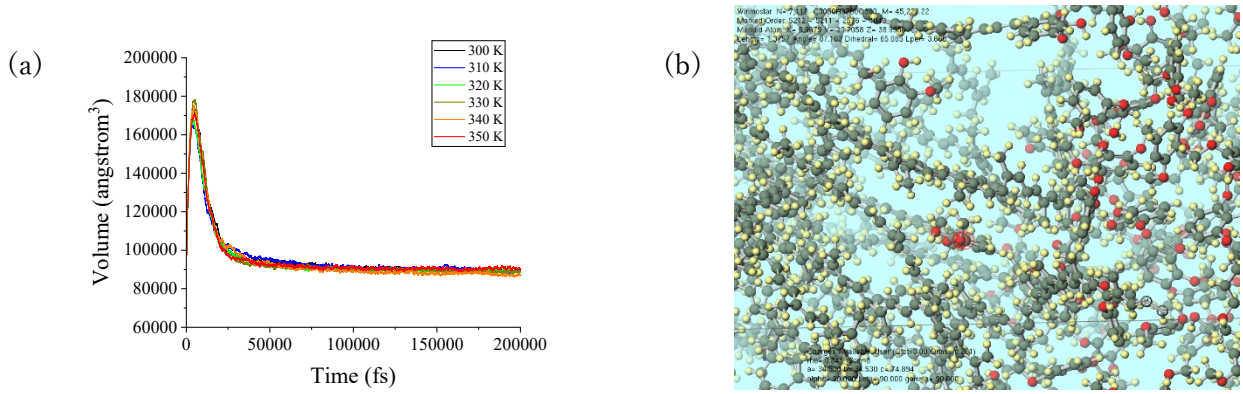
天然ゴムと臭気成分の相互作用に関する研究

阿知良　浩人[A]
兵庫県立工業技術センター[A]
（世話人：兵庫県立大学大学院情報科学研究科　教授　鷲津　仁志）

天然ゴムはパラゴムの木の樹液から始まり、主成分の *cis*-1,4-ポリイソプレンの他、微量のタンパク質・脂質・糖などの非ゴム成分も含まれている。これらの非ゴム成分が腐敗するのを防ぐために、ギ酸などの酸で凝固して不純物を除去し、シート状に加工されたものを燻煙室に 1 週間ほど吊るしてから輸送される。このように、燻煙処理された天然ゴムは Ribbed Smoked Sheet(RSS)と呼ばれ、県内の中小ゴム製造業で最も多く取引されている。RSS の特有の臭気はゴム製造現場に悪影響をおよぼすという問題があり、消臭技術は確立されていない。先行研究により、RSS の主な臭気成分は 2,6-dimethoxyphenol などのフェノール類であり、燻煙室で使用されている燻煙チップの熱分解によるものであることが示唆された。本研究では、分子動力学シミュレーションにより *cis*-1,4-ポリイソプレンと 2,6-dimethoxyphenol の 2 成分系のモデルを作成し、ゴム分子とフェノールに働く相互作用について評価することで、ゴム分子がなぜフェノール類を吸着しやすいのかを明らかにすることを目的とする。

ゴム分子のモノマーである *cis*-1,4-isoprene および 2,6-dimethoxyphenol の構造最適化は Gaussian により B3LYP /6-31G(d, p)の条件で計算し、RESP 電荷を割り当てた。力場は Dreiding を選択し、両成分とも周期境界条件を与えて NPT アンサンブル計算を実行した。その時、ゴム分子は重合度が 15 で 30 本のポリマー鎖の集団モデルを、2,6-dimethoxyphenol は 100 個の集団モデルを作成した。NPT アンサンブル計算による平衡化を確認してから、2 つの集団モデルの間に界面を形成し、300～350 K で 10 K ずつ昇温させた時の NPT アンサンブル計算を行った。

ゴム分子・フェノールおよび 2 成分系の集団モデルは 100～200 ps で体積および密度がほぼ一定になったことから、各モデルが平衡状態に達したと考えられる。2 成分系の平衡化モデルの体積は温度に関係なくほぼ一定であった（図 a)。200ps 後の 2 成分系の構造に着目すると、界面中で一部のフェノールがゴム分子の間に挟まれている構造が確認された（図 b）



図（a）NPT アンサンブル計算による 2 成分モデルの体積変化（b)最終構造の拡大図

油中における粘度調整剤挙動のシミュレーション解析による解明

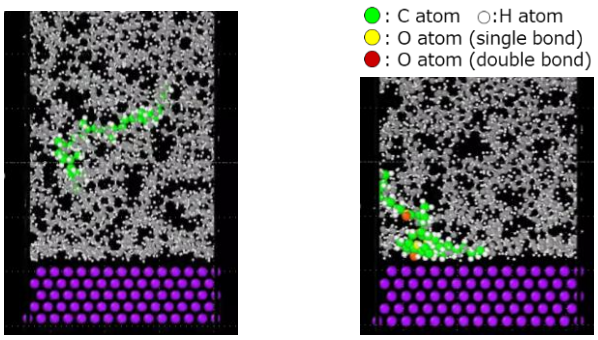
山本 周平，遠藤 聡太，神尾 和教，石井 良樹[A]，デボプラサット タルクダー[A]，
ハージュー コーサー[A]，沢井 源太郎[A]，河北 恭佑[A]，富山 栄治[A]，鷲津 仁志[A]
三井化学株式会社，兵庫県立大学大学院情報科学研究科[A]
（世話人：兵庫県立大学大学院情報科学研究科　鷲津 仁志 教授）

地球球温暖化防止のため，自動車や建設機械をはじめとする産業機械では CO_2 排出量の低減を目的にエネルギー効率の向上が一層強く求められており，潤滑油による潤滑機械の省燃費化は潤滑機械の物理的な改良による省燃費化と比べて費用対効果に優れるため重要な技術として期待されている．作動油は，建設機械等の油圧システム中を循環して動力伝達や潤滑・防錆・冷却を担う潤滑油であり，その流体中では循環を妨げる副次流が発生することが知られているが，近年，液状オレフィンコポリマー（L-OCP）を粘度調整剤として処方した作動油では，副次流の発生が少なくエネルギー効率で優位に作用することが報告されている[1),2)]．本研究では，同現象の解明のため，粘度調整剤分子の金属配管表面への吸着による流体の循環阻害に着目し，分子動力学（MD）シミュレーションを用いて，L-OCP およびポリメタクリレート（PMA）の基油中での金属壁面との相互作用を解析した．

本シミュレーションは，模式化した L-OCP，PMA，基油として 3,5-ジエチルドデカンを用いて，液相の上下に金属壁面を模した固相（α-Fe 結晶構造）を配置させたモデルを使用し，LAMMPS(Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)にて，基油 299 分子中における L-OCP および PMA それぞれ 1 分子の吸着挙動を全原子 MD シミュレーション（各計算時間 10 ns）により解析した（Fig. 1）．

L-OCP および PMA を液相の下部に初期配置してシミュレーション解析を行った結果, L-OCP は PMA と比較して金属表面への吸着頻度および時間が短いことが明らかとなった．L-OCP では分子末端から金属壁面へ接近し，一時的な吸着・脱離となるのに対し，PMA では分子末端から金属壁面へ接近後，極性基部が金属表面へ強く吸着される傾向にあることが確認された．

本解析により，L-OCP，PMA で金属壁面への吸着挙動が異なることが明らかとなり，これにより L-OCP 処方作動油がエネルギー効率で優位に作用している可能性が示唆された．今後は，シミュレーション解析の再現性を確認していくと共に L-OCP および PMA の分子構造を最適化し，分子量や分岐構造が及ぼす流体への影響を検証することを計画している．



a) L-OCP（t=10 ns）　　b) PMA（t=10 ns）

Fig. 1 Snapshots of the adsorption process

文献

1) M. Moon, Lubes 'n' Greases, 25 (No. 10), 20 (2019) 34.

2) I.K. Karathanassis, E. Pashkovski, M. Heidari-Koochi, et al., J. Nonnewton. Fluid Mech. 275, (2020) 104221.

学会発表

山本 周平，神尾 和教，石井 良樹，鷲津 仁志，”油中の粘度調整剤ポリマーに関する分子動力学シミュレーション”，トライボロジー会議 2021 秋 松江，（オンライン），10. 29（2021）．［シンポジウム］

Shuhei Yamamoto, Sota Endo, Kazunori Kamio, Yoshiki Ishii, Deboprasad Talukdar, Kosar Khajeh, Gentaro Sawai, Kyosuke Kawakita, Eiji Tomiyama, Hitoshi Washizu, “Molecular Dynamics Simulation on the Behavior of Viscosity Modifying Polymers in Oil”, 23rd International Colloquium Tribology” (ONLINE), Stuttgart/Ostfildern, Germany, 1. 26（2021）．［Presentation Type: Oral］

分子動力学に関する研究

増山　達郎, 加藤　早紀 [A]
住友化学株式会社 [A]
（世話人：）鷲津　仁志　教授

住友化学株式会社 情報電子化学品研究所 フォトレジスト G にて MD 計算を活用したフォトレジストの開発に取り組んでいる。MD 計算手法の基礎として溶媒や低分子を用いて分子の電荷計算、構造最適化計算、NVT プロセス、NPT プロセス等の計算を実施した。本計算手法を参考に、フォトレジストの素材について MD 計算を実施し、得られた計算結果を元に更なる検討を継続している。

分子動力学計算を用いた防錆性能へのアプローチ

髙田 真太郎 [A]
ミネベアミツミ株式会社　技術本部　技術開発部門　材料技術開発部 [A]
（世話人：鷲津 仁志 教授）

基油違いおよび防錆添加剤の違いの防錆性能について、腐食試験と分子動力学計算を行った。腐食試験では、基油違いについては極性油である DOS と非極性油である PAO4 の比較を行い、添加剤違いについてはジノニルナフタレンスルホン酸バリウム(BaS)とジ(2-エチルヘキシル)アミン(Amine)をそれぞれ DOS に 5wt%添加したサンプルの比較を行った。腐食試験として、塩水噴霧試験を行った。金属板に SPCE 板を用いた。基油違いの試験については 15 分間の試験を行った。添加剤違いについては 15 分間では殆ど腐食しなかったため、180 分間の試験を行った。基油違いおよび添加剤違いの腐食試験結果をそれぞれ Fig. 1、Fig. 2 に示す。基油違いでは、DOS は、PAO4 より腐食面積が小さく、添加剤違いでは DOS+BaS(5%)の方が、DOS+Amine(5%)より腐食面積が小さかった。腐食面積が小さいほど防錆性能が高いと考えられる。

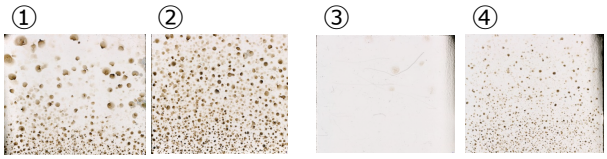


Fig. 1 腐食試験結果　基油違い（①:DOS, ②PAO4)、添加剤違い(③:DOS+BaS, ④DOS+Amine)

分子動力学計算では、基油違いでは DOS と PAO4 の金属への吸着性の比較を行い、添加剤違いではジノニルナフタレンスルホン酸と(2-エチルヘキシル)アミンの金属への吸着性の比較を行った。吸着エネルギーを導出するための系については、固体壁に Fe(110)面を用い、それぞれ分子 1 個を Fe 上に配置した。有機分子内の力場として Dreiding 力場を用いた。すべての Fe 原子に対して van der Waals ポテンシャルを設定し、Fe 原子の運動は凍結させ、長距離クーロン力については Multi-level Summation Method を用い、温度は 25℃とした。吸着エネルギーは、添加剤分子が Fe 表面に吸着する前後のエネルギーとし、分子サイズが大きいほど吸着エネルギーが大きくなるため、分子量で除したもので比較する。各計算結果を Fig. 2、Fig. 3 に示す。基油違いについては DOS の方が PAO4 より吸着性が高い結果を示し、添加剤違いについてはジノニルナフタレンスルホン酸の方がアミンより吸着性が高い結果を示した。基油違いおよび添加剤違いの腐食試験結果と比較すると、いずれも吸着性が高いことと腐食面積が小さいこと（防錆性能が高いこと）に関係していることが示唆される。以上より、防錆性能に対して分子の吸着計算によりアプローチできると考えられる。

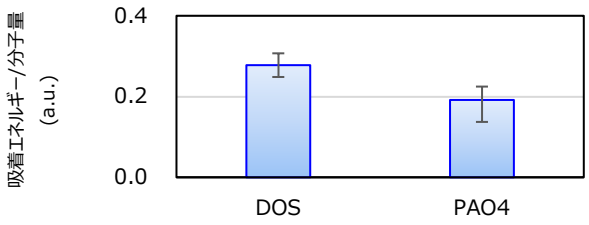


Fig. 2 基油違いの吸着計算結果

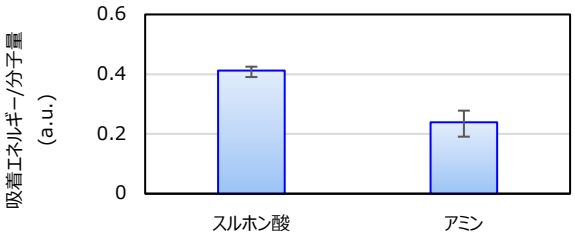


Fig. 3 添加剤違いの吸着計算結果

リン，イオウ系反応型潤滑油添加剤の作用機構に関する理論的研究

濱野　藍 [A]
出光興産株式会社　次世代技術研究所 [A]
（世話人：鷲津　仁志教授）

【背景・目的】

弊社では兵庫県大鷲津研究室と共同で，洋上風車用潤滑油添加剤の高性能化，長寿命化を目的に，リン系耐摩耗剤，イオウ系極圧剤の開発を進めている.これまでに機械学習を用いた高性能化要件の検討を行ってきたが予測モデルが合わず，また金属基板への反応膜形成機構も不明であるといった課題があった.そこで，過去の実験結果を基に，分子動力学や第一原理計算などのシミュレーションを用いて反応膜形成機構の解析を行った.

【結果・考察】

（1）分子動力学シミュレーションによる吸着エネルギーの算出

分子動力学シミュレーションソフト LAMMPS を用い，Fe(110)スラブに対し，リン系添加剤 4 種，イオウ系添加剤 5 種を表面近傍にモデリングし，界面からの引き離しによる全エネルギー差から吸着エネルギーを算出した.その結果，リン系添加剤のほうが高い吸着エネルギーを示し（吸着による安定化が大きい），鉄界面に対する吸着性が高い可能性が示唆された.しかしながら，算出した吸着エネルギーと添加剤分子表面積に強い相関が見られ，vdW 相互作用を過大評価してしまったことが考えられる.そこで，次項では電子的な相互作用を考慮することのできる第一原理計算を用いた，より精度の高い吸着エネルギーの算出を行った.

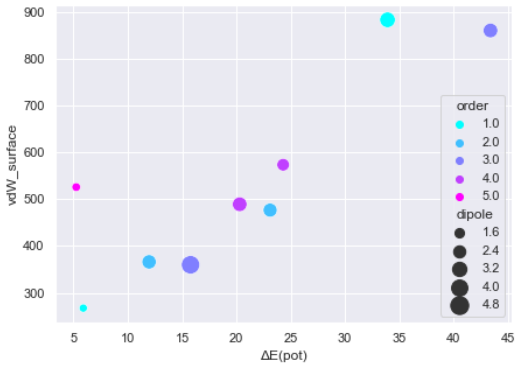


図 1. 吸着エネルギーと分子表面積の相関関係

（2）第一原理計算による吸着エネルギーの算出

第一原理計算ソフト VASP を用い，Fe_2O_3 や Fe に対するリン系添加剤，イオウ系添加剤の吸着エネルギーの算出を行った.算出には以下の式を用いた.

$$E_{ads} = E_{slab+molecule} - E_{slab} - E_{molecule}$$

Fe_2O_3 と Fe 上ではイオウ系添加剤のほうが吸着による安定化が大きく，イオウ系が優先して吸着する可能性が示唆された.さらに，Fe 界面上ではイオウ系添加剤のスルフィド結合の解離，鉄原子との結合生成が見られ，イオウ系反応膜形成初期段階における構造変化が確認された.

【今後の課題】

第一原理計算では基油などの他分子（多分子系）や温度，圧力，摺動など実際の環境が考慮できないところが課題である.そこで，今後は反応力場を用いた分子動力学を実施し，実際の系に近い状態における反応をシミュレーションし，メカニズム解明へとつなげることを考えている.　　以上

第一回水圏アカデミアインターンシップ

鷲津 仁志
兵庫県立大学大学院情報科学研究科・データ計算科学連携センター
（世話人：鷲津 仁志）

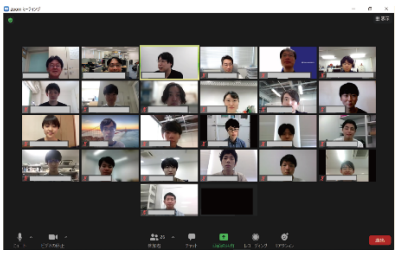
新学術領域研究「水圏機能材料: 環境に調和・応答するマテリアル構築学の創成」のアカデミアインターンシップを、2021 年 9 月 20 日(月) から 10 月 1 日（金）にかけてオンラインで開催した。このインターンシップは、本領域の計画研究に参画する研究グループに所属する実験系の学生と若手研究者を対象に、分子シミュレーションを用いた材料研究について体験することで、それぞれの扱っている分子系に対する理解を深めることを目的とした。

初日、9 月 20 日は領域代表の東京大学加藤隆史教授の挨拶があり、続いて、兵庫県立大学の鷲津および石井特任講師から、分子シミュレーションを用いた水圏機能材料の研究事例について紹介をした。実習のテーマは、大きく分けて 2 つ企画した。テーマ 1: 水溶液中の有機分子の水和シミュレーション、テーマ 2: 有機溶媒（モノマー）中のシクロデキストリンの包摂シミュレーション。いずれのテーマも、1. 分子を描いて　2. 量子計算してモデルを決めて　3. 分子集団の中に入れて　4. 物性解析する、というプロセスを経る。どちらのテーマについても、有機分子およびモノマーは任意の分子とした。これにより、参加している各研究室のテーマにあわせた分子を試してみることができる。講習そのものは Zoom を用いて行い、ファイルの提示や回収、時間外の相談などに Slack を用いた。その他の固定資料は、鷲津研究室のウェブサーバに提示した。個別の作業や質疑応答は、Zoom のブレイクアウトルームにおいて行った。

参加者は分子設計ソフト、量子化学計算、分子動力学計算などにすぐに慣れて、思い思いの分子を描き、計算機上で溶液構造を計算した。解析手法としては、基本的な手法である動径分布関数から、専門家でも若干難しい溶媒和自由エネルギー解析までを実施した。最終日には、指導教員たちも参加し、成果発表会を実施した。参加者を下記に記す。

朝倉 和宏[A]，上田 哲也[A]，中島 佑佳[A]，三上 喬弘[A]，加藤 利喜[A]，加藤 隆史[A]，河原 道治[B]，塩本 昌平[B]，田中 賢[B]，山岡 賢司[C]，藤井 義久[C]，朝木 佑貴[D]，山下 尚輝[D]，和田 拓真[D]，高島 義徳[D]，鈴木 駿[E]，本田 理貴[E]，菱田 真史[E]，河北 恭佑[F]，濵野 耀介[F]，荒木 陸[F]，岡部 侑弥[F]，片山 渓太郎[F]，長谷川 智也[F]，端山 昌樹[F]，石井 良樹[F]，鷲津 仁志[F]

東京大学 大学院工学系研究科[A]，九州大学先導物質化学研究所[B]，三重大学・大学院工学研究科[C]，大阪大学高等共創研究院・大学院理学研究科[D]，筑波大学・数理物質系化学域[E]，兵庫県立大学大学院情報科学研究科・シミュレーション学研究科・データ計算科学連携センター[F]



超水滴法を用いた降雨の研究

戸田　幹人[A]
兵庫県立大学大学院情報科学研究科，客員教授[A]
（世話人：島　伸一郎）

兵庫県立大の島伸一郎准教授との共同研究として、降雨現象と大気の集団運動の関連を解明する手法の開拓を行っている。特に重要と考えられる集団運動として渦運動に着目し、風速の数値データから Lagrangian 描像の抽出や、wavelet 変換を利用した階層的な解析を目指し、アルゴリズムの開発を行っている。

学会発表

下村真唯，戸田幹人，　島伸一郎，　”超水滴法を用いた降雨の研究”，

研究集会「ダイナミカルシステムとその周辺」，オンライン，２月６日（２０２２年）.

SCALE-SDM による PI Chamber 再現数値実験サポート

高橋 伸吉
東京コンピュータサービス株式会社 神戸支店 システム部
（世話人：島 伸一郎 准教授）

島准教授が中心となって開発した、「超水滴法(Super-Droplet Method, SDM)」とは、大気中の雲・エアロゾル・降水粒子の運動と変化を、確率的な粒子法を使って統一的に計算する方法である。

超水滴法の特徴として、原理的な物理法則に基づいて粒子群の状態変化を計算することが出来、また、同等の精度を持つ既存の手法に比べ速く計算できる事が理論的に示唆されている。

今回は、最先端の手法である超水滴法を、次世代の大型計算機で性能が出る SCALE ライブラリの力学コア上に実装したプログラムである「SCALE-SDM」を用いて、以下の各作業を実施した。

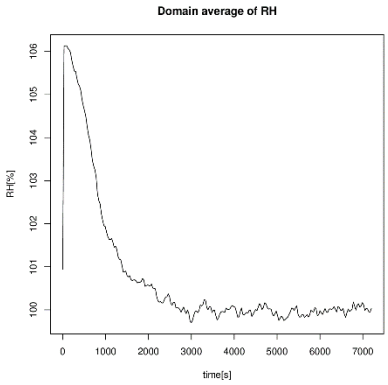
1. SCALE-SDM 本体の改修（計算領域に存在する超水滴のみを保存するよう変更）
2. 数値実験結果の解析プログラムのメモリ効率化改善
3. PI Chamber（ミシガン工科大学に設置されている雲生成チャンバーの名称）再現数値実験の高解像度化

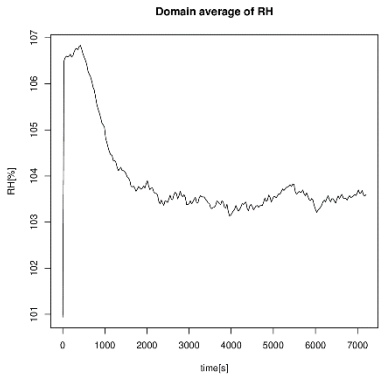
このうち、1, 2 の各作業は、Bitbucket 内の開発用リポジトリにプログラムを格納した。
3 の作業は、1 及び 2 の各作業結果を利用して、空間の解像度（グリッド）を、6.25cm 立方より 3.125cm 立方に高解像度化して再現数値実験を行った。

なお、3 の作業に当たって、初めにエアロゾルを注入しない条件の下で、側壁の湿度をいくつか変えて再現数値実験を実施し、定常状態で相対湿度が 103%近くになる側壁の湿度を特定する作業を実施した。

下の図は、経過時間（横軸）と領域内の相対湿度（縦軸）のグラフであり、側壁の湿度設定は、それぞれ左が 60%、右が 70%の図である。

これらの図より、定常状態（概ね 3000[s]以降)の相対湿度が 103%付近になるのは、70%弱と判断し、島様との協議の結果、側壁の湿度を 68.5%と決定した。
今年度は側壁の湿度の決定までを行い、次年度ではエアロゾルを注入する条件で再現数値実験を実施予定である。





SPH 法を用いた摩擦摩耗焼付き計算モデルの開発

杉村　奈都子, 鷲津 仁志
計算力学研究室,兵庫県立大学大学院情報科学研究科
（世話人：鷲津　仁志）

2021 年度も引き続き、貴シミュレーション学研究科・鷲津研とともに、機械摩擦・摩耗・発熱のメソスケールにおける機構の解明をめざして SPH 法に従う計算モデルの構築に取り組んだ。

これまでに、SPH モデルの非等方性粒子モデルへの拡張、計算から可視化までの固体摩擦シミュレータの整備を進め、NEDO や AICE などと鷲津研との共同研究案件を補完すべく計算を実施した。

2021 年度は境界潤滑摩擦を対象とした現実的な計算モデルへの拡張を目標として、実界面性状における固体摩擦、潤滑油を陽に扱う系への拡張、ミクロ系に起因する摩擦要素をメソ系に繰り込む相互作用のスケールボトムアップ（MC ブラウニアンダイナミクス法を用いた方法等）に関する補足計算を行った。これは、メソスケールのトライボロジー現象解明に欠かせないモデル追加であり、メソスケールにおいて摩擦により塑性流動が起こり大きな発熱を起こす様子を、界面相互作用の強弱や荷重の大小を考慮して議論するのに役立てられた。

油中における粘度調整剤挙動のシミュレーション解析による解明

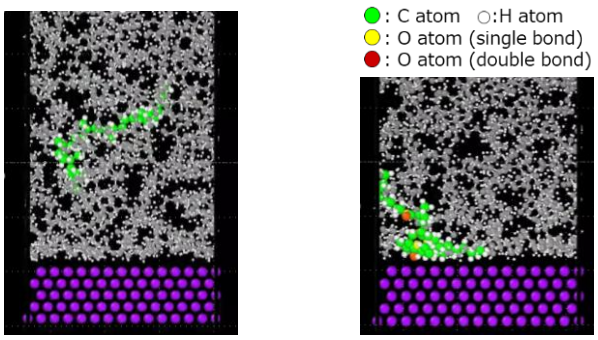
山本 周平，遠藤 聡太，神尾 和教，石井 良樹[A]，デボプラサット タルクダー[A]，
ハージュー コーサー[A]，沢井 源太郎[A]，川北 恭佑[A]，富山 栄治[A]，鷲津 仁志[A]
三井化学株式会社，兵庫県立大学大学院情報科学研究科[A]
（世話人：兵庫県立大学大学院情報科学研究科　鷲津 仁志 教授）

地球球温暖化防止のため，自動車や建設機械をはじめとする産業機械では CO_2 排出量の低減を目的にエネルギー効率の向上が一層強く求められており，潤滑油による潤滑機械の省燃費化は潤滑機械の物理的な改良による省燃費化と比べて費用対効果に優れるため重要な技術として期待されている．作動油は，建設機械等の油圧システム中を循環して動力伝達や潤滑・防錆・冷却を担う潤滑油であり，その流体中では循環を妨げる副次流が発生することが知られているが，近年，液状オレフィンコポリマー（L-OCP）を粘度調整剤として処方した作動油では，副次流の発生が少なくエネルギー効率で優位に作用することが報告されている[1),2)]．本研究では，同現象の解明のため，粘度調整剤分子の金属配管表面への吸着による流体の循環阻害に着目し，分子動力学（MD）シミュレーションを用いて，L-OCP およびポリメタクリレート（PMA）の基油中での金属壁面との相互作用を解析した．

本シミュレーションは，模式化した L-OCP，PMA，基油として 3,5-ジエチルドデカンを用いて，液相の上下に金属壁面を模した固相（α-Fe 結晶構造）を配置させたモデルを使用し，LAMMPS(Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)にて，基油 299 分子中における L-OCP および PMA それぞれ 1 分子の吸着挙動を全原子 MD シミュレーション（各計算時間 10 ns）により解析した（Fig. 1）．

L-OCP および PMA を液相の下部に初期配置してシミュレーション解析を行った結果, L-OCP は PMA と比較して金属表面への吸着頻度および時間が短いことが明らかとなった．L-OCP では分子末端から金属壁面へ接近し，一時的な吸着・脱離となるのに対し，PMA では分子末端から金属壁面へ接近後，極性基部が金属表面へ強く吸着される傾向にあることが確認された．

本解析により，L-OCP，PMA で金属壁面への吸着挙動が異なることが明らかとなり，これにより L-OCP 処方作動油がエネルギー効率で優位に作用している可能性が示唆された．今後は，シミュレーション解析の再現性を確認していくと共に L-OCP および PMA の分子構造を最適化し，分子量や分岐構造が及ぼす流体への影響を検証することを計画している．



a) L-OCP（t=10 ns）　　b) PMA（t=10 ns）

Fig. 1 Snapshots of the adsorption process

文献

1) M. Moon, Lubes 'n' Greases, 25 (No. 10), 20 (2019) 34.

2) I.K. Karathanassis, E. Pashkovski, M. Heidari-Koochi, et al., J. Nonnewton. Fluid Mech. 275, (2020) 104221.

学会発表

山本 周平，神尾 和教，石井 良樹，鷲津 仁志，”油中の粘度調整剤ポリマーに関する分子動力学シミュレーション”，トライボロジー会議 2021 秋 松江，（オンライン），10. 29（2021）．［シンポジウム］

Shuhei Yamamoto, Sota Endo, Kazunori Kamio, Yoshiki Ishii, Deboprasad Talukdar, Kosar Khajeh, Gentaro Sawai, Kyosuke Kawakita, Eiji Tomiyama, Hitoshi Washizu, “Molecular Dynamics Simulation on the Behavior of Viscosity Modifying Polymers in Oil”, 23rd International Colloquium Tribology” (ONLINE), Stuttgart/Ostfildern, Germany, 1. 26（2021）．［Presentation Type: Oral］

SST Sensitivity of Madden-Julian Oscillation in MIROC6

Ching-Shu Hung, Hiroaki Miura
Department of Earth and Planetary Science, Graduate School of Science, The University of Tokyo, Japan

Ocean coupling is known to improve the Madden-Julian Oscillation (MJO) simulation in climate models (e.g., DeMott et al. 2015). Through comparing fully coupled models and atmosphere-only models forced with observed monthly SSTs, many studies have reported the importance of sub-monthly ocean-atmosphere feedbacks to the mean state moisture pattern and MJO eastward propagation (e.g., DeMott et al. 2019). To further understand what aspects of SST anomalies (e.g., phasing, pattern, or persistence) in coupled models are most important for tropical mean state moisture patterns and MJO propagation, the MJO SST sensitivity Model Intercomparison Project (MSMIP) is initiated. The MSMIP is designed to understand the effects of sub-monthly SST variability to MJO simulation and their robustness across climate models. This study contributes to the MSMIP using the sixth version of the Model for Interdisciplinary Research on Climate (MIROC6) developed by the Japanese modeling community. Experimental design and preliminary results are summarized as bellows.

The MSMIP consists of five model experiments: one fully coupled (CGCM) and four atmosphere-only model configurations with different prescribed SSTs (AGCM_x). The settings for CGCM correspond to the CMIP6 historical run. This CGCM simulation provides the input SSTs prescribed in AGCM_x experiments. AGCM_mon uses monthly mean SSTs, which removes all sub-monthly SST variability. AGCM_1drandpt uses pointwise randomly shuffled daily SST anomalies (SSTA) to break both the pattern and persistence in sub-monthly SST variability. AGCM_1drandpatt uses randomly shuffled daily SSTA patterns to retain the effects of pattern. AGCM_5drandpatt uses randomly shuffled 5-day running SSTA chunks to retain both pattern and persistence. The five experiments were run from 1951 to 1954. Figure 1 shows the longitude-time evolution of 20-100 day rainfall anomalies in GPCP observation and the five MIROC6 experiments. Clear eastward propagation of MJO signals can be found in the CGCM, AGCM_5drandpatt, and AGCM_mon run, while the propagating signals are less clear in the AGCM_1drandpatt and AGCM_1drandpt run. This result suggests that the pattern and persistence in sub-monthly SST variability might help eastward propagation of MJO. However, the AGCM_mon run forced with monthly mean SST also simulated a clear eastward propagation during the four-year period. Further investigation and longer simulation are needed to obtain statistically robust conclusions. The five experiments are planned to run from 1985 to 2014 in the following fiscal year.

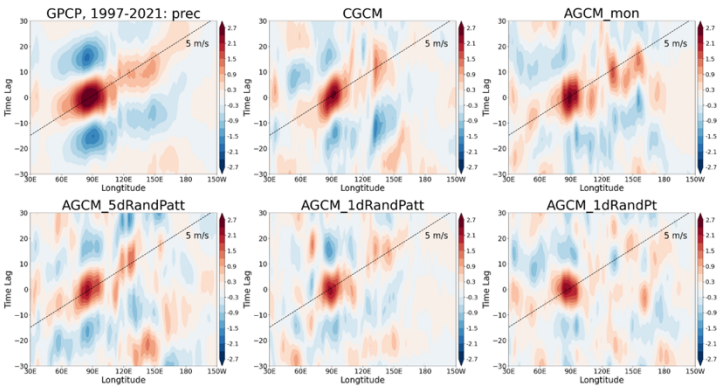


Figure 1. Boreal winter tropical (10°S–10°N) 20–100-day rainfall anomalies (mm day^{-1}) correlated with 20–100-day tropical Indian Ocean (10°S–10°N, 75°E–100°E) rainfall as a function of time lag and longitude.

大規模並列シミュレーションを用いた建築構造物の

耐震性評価に関する共同研究

猿渡智治
株式会社 JSOL エンジニアリング事業本部
（世話人：兵庫県立大学減災復興政策研究科長　永野康行教授）

■研究背景

建築構造物の非構造部材や建設中建物の仮設状態等の地震時挙動を，大規模並列シミュレーションを用いて詳細に明らかにすることにより，被災時の非難行動計画の高精度化や事業継続性の高度化に寄与する事を目的とした．

■研究テーマ毎詳細

①：超軽量新耐震システム天井の地震応答解析

2011 年 3 月 11 日に発生した東日本大震災では多くの吊天井が損傷落下し尊い人命が失われた．これを受け 2013 年の国土交通省告示第 771 号によって「特定天井」が定義され，同年建築基準法施行令第 39 条が改正された．筆者らはさらに耐震性を高めたアルミフレーム構造をもつ新型超軽量天井の設計開発を行い，建物全体規模の耐震性能について数値シミュレーションによる評価を行った．数値モデルは実機を忠実にモデル化する事とし，主要構造部材は細部の形状を正確にモデル化するとともに，部品間の接触も考慮した．結果，特定天井を上回る高い耐震性能を数値解析により確認した．

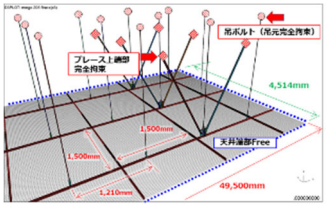


図-1　天井解析モデル概略図

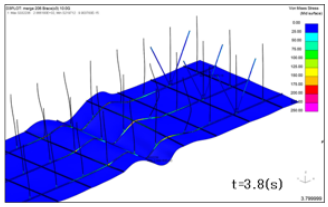


図-2　耐震性評価解析結果

②：空調ダクトの地震時挙動と損傷評価

天井内に配置された空調ダクトや設備機器の耐震性能は設計者の知見に依存しており，建物構造部材の様な定量的な安全性基準を持たない．また生産工場等では建物が健全であっても設備機器の損傷によって操業停止に至るなど，BCP の観点からも設備機器の耐震性評価は重要である．筆者らは天井内空調ダクトの地震時損傷に着目し，数値シミュレーションによって耐震対策案の効果を確認するとともに経済的な対策指標の検討を行った．数値モデルは実機の形状と境界条件を忠実に再現する事とし，ダクトは吊部材及び補強材との間に接触を定義する事による吊構造とした．結果補強部材の追加により部材近傍の局所ひずみが増大するが，補強部材の配置によっては損傷部品の点数が減少する事が分った．今後 BCP を視野に入れ，損傷最適化等の検討等を進める．

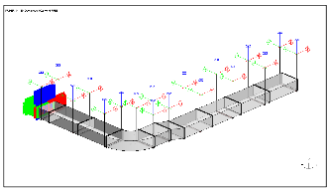


図-3　空調ダクトモデル概略図

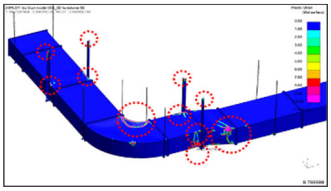


図-4　空調ダクト地震応答解析結果

③：建設中仮設構造の接合部詳細解析

建設中の柱-柱仮設には建て入れ建て直し治具が用いられており，構成部材単体レベルでの安全性評価は実施されているが地震時における仮設構造全体の詳細な振る舞いについては未知の部分が多い．地震による仮設構造部の損傷は人的事故につながるだけではなく，経済的損失や復旧作業による時間的損失に直結する為，耐震性能や終局挙動に関する詳細な解析が必要となる．建設中建物の耐震性評価を行うにあたり仮設柱接合部の詳細解析を実施し，建て入れ建て直し治具の耐震性評価を行った．

結果，各部材単位の挙動は実機を適切に表現しており，今後これらを組み合わせた仮設構造全体の地震時挙動について検討を進める．

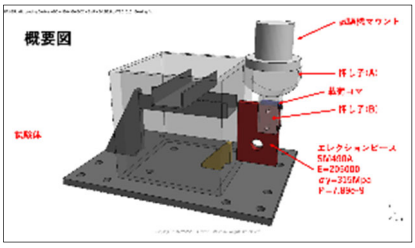


図-5　部材要素試験①モデル概略

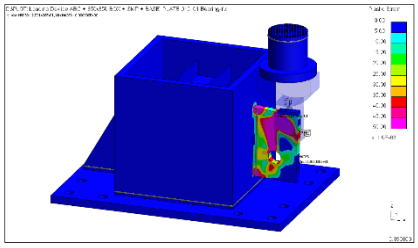


図-6　部材要素試験①解析結果

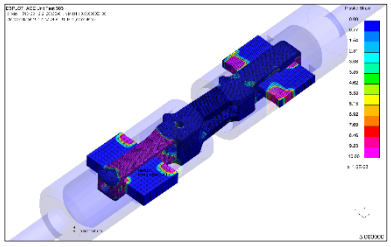


図-7　部材要素試②解析結果

■論文

[1] Yoshitaka Ushio, Tomoharu saruwatari and Yasuyuki Nagano, “Elastoplastic FEM analysis of earthquake response for the field-bolt joints of a tower-crane mast.”, Advances in Computational Design, Vol.4, No.1, pp053-072, 2019.4 [DOI: http://dx.doi.org/10.12989/acd.2019.4.1.053]

[2] Yoshitaka Ushio, Tomoharu saruwatari and Yasuyuki Nagano, “A new design method for site-joints of the tower crane mast by non-linear FEM analysis. “, Advances in Computational Design, Vol.4, No.4, pp343-365, 2019.4 [DOI: http://dx.doi.org/10.12989/acd.2019.4.4.343]

[3] Zhilun Lyu, Masakazu Sakaguchi, Tomoharu saruwatari and Yasuyuki Nagano, “Tests of integrated ceilings and the construction of simulation models.”, Advances in Computational Design Vol.4, No.4, pp.381-395, 2019.4 [DOI: http://dx.doi.org/10.12989/acd.2019.4.4.381]

■口頭発表（国際会議）

[4] Yasuyuki Nagano, Yoichi Mukai, Kensuke Yasufuku, Yasunori Mizushima, Tomoharu Saruwatari, “KEY ELEMENT BUILDINGS DESIGN METHOD WITH BIDIRECTIONAL EVALUATION BETWEEN STRUCTURAL ANALSYSIS AND EVACUATION ANALYSIS.”, The 13th World Congress on Computational Mechanics (WCCM 2018), Jul-2018, [(#MS1013TS8-2)]

[5] Tomoharu Saruwatari, Yasuyoshi Umezu, Yoshitaka Ushio, Lyu Zhilun, Yasuyuki Nagano, “EARTHQUAKE RESPONSE ANALYSIS OF NON-STRUCTURAL MEMBERS OF BUILDING BY USING THE LARGE-SCALE PARALLEL CALCULATION METHOD”, The 13th World Congress on Computational Mechanics (WCCM 2018), jul-2018

[6] Tetsuhiro Ueda, Tomoharu Saruwatari, Yasuyuki Nagano, “Prediction of Collapse during Earthquake Considering the Condition of Concrete Block Walls”, The 3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, Mar 11, 2020. [(#MS14-1)12J-4]

[7] Masakazu Sakaguchi, Tomoharu Saruwatari, Yasuyuki Nagano, “Characteristic Evaluation of Materials and Joints of the New Ultralight Seismic System Ceiling”, The 3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, Mar 11, 2020. [(#MS14-1)12J-5]

■口頭発表（国内会議）

[8] 細江英侍，猿渡智治，永野康行，“多段階レベルの地震時におけるコンクリートブロック塀の被害予測”，日本建築学会近畿支部研究発表会, 2019

[9] 細江英侍，猿渡智治，永野康行，“多段階レベルの地震時におけるコンクリートブロック塀の被害予測”，日本建築学会学術講演会梗概集, Vol.2019, pp.325-326, 2019-07

[10] 牛尾好孝，猿渡智治，永野康行，“タワークレーンマストのボルト引張接合部の非線形解析”，日本建築学会学術講演会梗概集, Vol.2018, pp.459-460, 2018-07

[11] 呂志倫，阪口正一，猿渡智治，永野 康行，“天井面構成部材の十字形部分骨組について　その３　ビーム要素による解析的検討”，日本建築学会学術講演会梗概集, Vol.2018, pp.987-988, 2018-07

生体親和性高分子の水和構造に関する研究

西浦　聖人，河口　淑乃 A
第一工業製薬株式会社，研究本部 A
（共同研究先：兵庫県立大学，鷲津　仁志 教授）

■背景

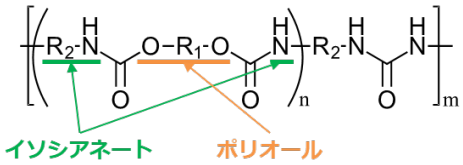
生体親和性を有する高分子は医療用品や再生医療、検査研究などの目的のもと用いられており、高齢化社会においてはこれらの材料の開発促進が重要な役割を担うことになる．ここでは生体親和性の発現機構の解明を目的に、材料の生体親和性と水和構造の関係性を調査する．

■概要

生体親和性材料であるウレタン高分子において、構造の異なる脂肪族イソシアネートで構成された 2 種類のポリウレタンの水和構造を解析することを目的に、まずは各々のモノマーブレンド系での水和状態を MD 計算によりシミュレーションした．

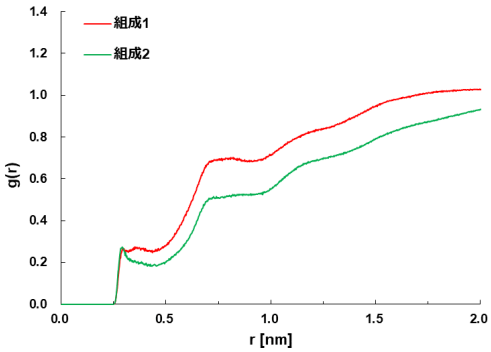
■内容

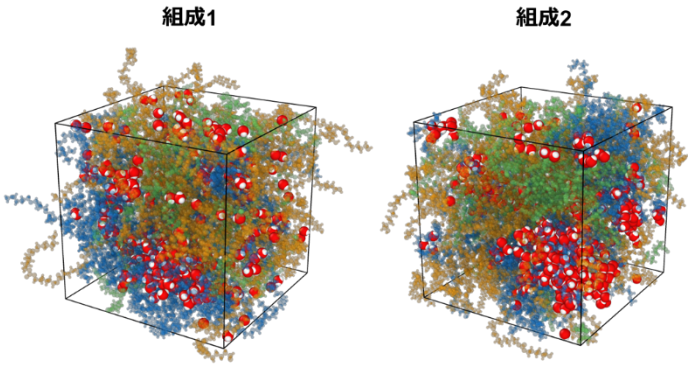
ウレタン高分子はポリオールとイソシアネートの縮合反応により生じるウレタン結合有する高分子である．（右図）ポリオールに 2 種類の異なる構造を有する脂肪族イソシアネートをそれぞれ混合したモノマーブレンドのシミュレーションを実施した．次にそれぞれのモノマーブレンド系に水を添加した場合のモノマーと水の相互作用を評価した．



■結果

R2 モノマー末端の O 原子と水分子の O 原子の動径分布関数から、組成 1 の方が組成 2 よりも同半径において R2 モノマー周辺の水の存在確率が大きく、また可視化結果から組成 2 の方が水のゆらぎが大きかった．





■今後の予定

本研究にてモノマーブレンド系の MD 計算により R2 モノマー構造により組成間に水の存在状態に差

が生じることが示唆された。今後は、高分子モデルを作成し同様に MD シミュレーションを実施することで水との相互作用を解析する.

スーパーコンピューターを活用した構造解析手法の研究

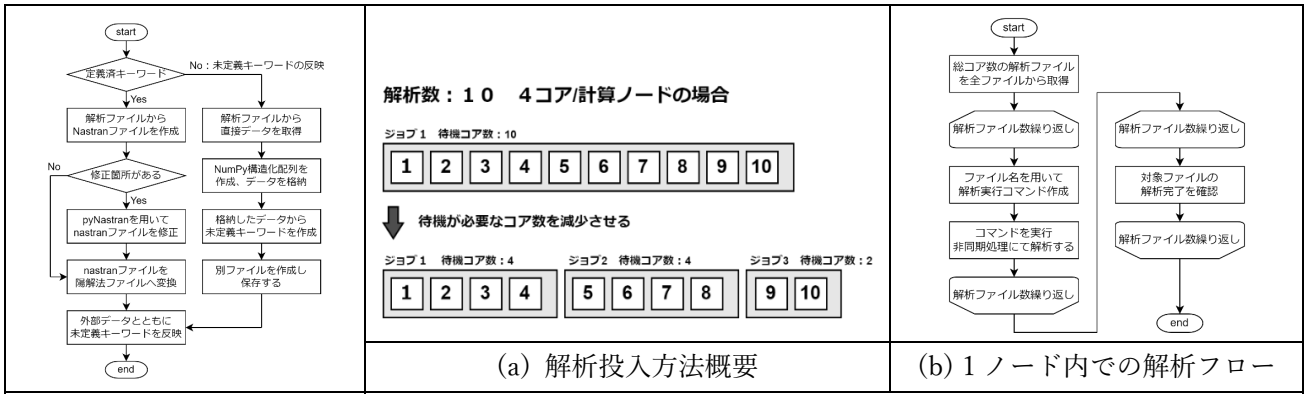
水島 靖典
兵庫県立大学環境人間学部環境人間学科
（世話人：教授・永野 康行）

１．はじめに

近年のコンピュータの発展に伴い、建築構造物の地震応答解析に対して質点系振動解析のみならず、大規模な立体フレーム解析などが行われ始めている。このような大規模な解析を行うには多数のコアを用いた並列計算が必要である。しかしながら通常の建築構造設計で用いられる解析プログラムでは動的陰解法が一般的に用いられており、並列化を施すにはコストを要する。一方、建築物の構造解析に比較的並列計算との親和性が高い動的陽解法を用いた研究も報告されており、その有効性が示されている。慣例的に用いられてきたプログラムを別プログラムに置き換える場合には、パラメトリックスタディにより、その解析結果の違いを把握する必要がある。本研究で対象とする立体フレーム解析は変数が膨大であるため、検討数が数千オーダー必要であると考える。しかしながら、手作業で数千オーダーのパラメトリックスタディすることは現実的ではない。本研究では、自動で数千個の立体フレームモデルを生成し、生成された立体フレームモデルの時刻歴応答解析についてパラメトリックスタディを自動で実施する手法を構築する。最終的には２つのプログラムによる時刻歴応答解析結果について収集することで、両者の地震応答解析結果の差異について分析を行う。

２．陰解法プログラム入力ファイル(プログラム 1)の陽解法プログラム(プログラム 2)入力ファイルへの書換え

既存プリポストプログラムから生成された大量のプログラム 1 の入力データをプログラム 2 の入力ファイルへ自動的に書き変える。そのフローチャートを図１に示す。また、生成された大量のプログラム２の入力ファイルを用いてスーパーコンピュータ上でプログラム２を実行するフローチャートを図２に示す。プログラム２はスーパーコンピュータ上に実装されている、PBS(Portable Batch System)を用いて効率的に解析を行う。



(a) 解析投入方法概要　(b) 1 ノード内での解析フロー

図１　変換プログラム　図２　スーパーコンピュータ上での解析実行方法

３．まとめ

建築構造物の大規模な立体フレームを自動的に生成し、スーパーコンピュータ上で解析する枠組みを構築した。今後はプログラム間の結果の比較を実施していく予定である。

論文

筒井寛太，郷原昌樹，水島靖典，永野康行，”検討数が数千オーダーである立体フレームモデルの時刻歴応答解析”，**日本建築学会近畿支部研究報告集**，構造系，出版中.

筒井寛太，郷原昌樹，水島靖典，永野康行，”検討数が数千オーダーである立体フレームモデルのための材料特性テスト”，**第 66 回理論応用力学講演会講演論文集**，出版中.

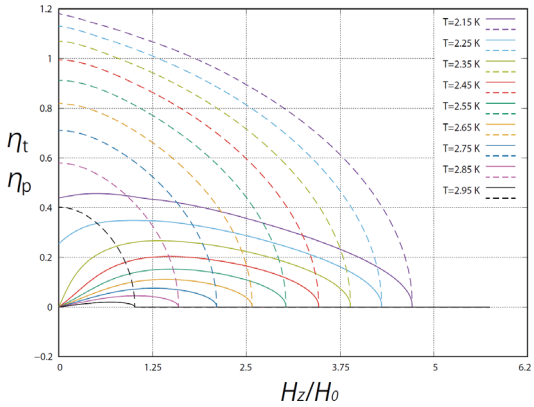
郷原昌樹，筒井寛太，水島靖典，永野康行，”検討数が数千オーダーである立体フレームモデルの連続実行”，**第 66 回理論応用力学講演会講演論文集**，出版中.

磁場による chiral 安定化と常磁性 chiral 電流の Ginzburg-Landau 方程式によるシミュレーション

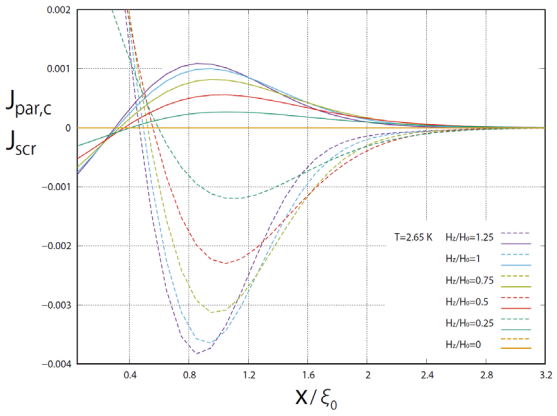
兼安 洋乃，大塚 剛生，春名 信吾
兵庫県立大学大学院理学研究科
（世話人：島 伸一郎）

不均一系の磁場誘起 Chiral 現象について、Ginzburg-Landau 理論に基づいて研究を行った。2 成分の超伝導秩序変数で表された chiral 状態の Ginzburg-Landau 方程式を、quasi-Newton 法で数値的に解いて、磁場中の秩序変数成分と超伝導電流の解析を行った。モデルは超伝導体端からの距離において不均一な超伝導臨界温度を設定した 1 次元モデルで、chiral 磁化軸に平行な磁場を印加する場合を設定した。

chiral 状態の内部磁化と外部磁場とが結合した磁場に応答する性質を解析するため、chiral 状態の磁場への敏感さに対して磁場を小幅変化させた解析を行った。この様な解析を、Ginzburg-Landau 方程式で秩序変数成分とベクトルポテンシャルを自己無撞着に求めて行うには、計算高速化が必要である。そのため、秩序変数とベクトルポテンシャルの超伝導体端からの距離依存性の計算を、SX-Aurora TSUBASA のベクトル化を用いて処理することで高速化した。



方程式の数値解として得た超伝導秩序変数成分とベクトルポテンシャルから、chiral 転移、chiral 安定化とそれに伴う常磁性 chiral 電流の磁場・温度依存性を解析した。 右上図は、超伝導秩序変数成分(η_t, $i\eta_p$)の温度ごとの磁場依存性を示している。ゼロ磁場で温度が低温になり T=2.3K で chiral 転移する不均一系モデルにおいて、T=2.3K 以上の non-chiral 状態(η_t のみの 1 成分状態)に chiral 磁化軸に平行な磁場 H_z をかけると、第 2 成分の η_p が誘起されて 2 成分状態(η_t, $i\eta_p$)の chiral 状態に転移する。右下図は、T=2.65 K の距離 x における常磁性 chiral 電流 $J_{par,c}$ とスクリーニング電流 J_{scr} の磁場依存性を示している。ゼロ磁場では non-chiral 状態のために chiral 電流 $J_{par,c}$ は生じていないが、磁場が印加されると chiral 状態に転移して常磁性 chiral 電流が誘起される。



解析で示したこれらの磁場誘起 chiral 現象が、Sr_2RuO_4 共晶で期待出来ることを、トンネルコンダクタンスの磁場依存性との比較から述べた。又、一軸圧下 Sr_2RuO_4 や圧力下 UTe_2 について不均一状態を考えた場合の、磁場誘起 chiral 現象の可能性を考察した。

成果の一部は論文にまとめて workshop で講演した。本研究は理学研究科博士課程前期 2 年生(大塚)と 1 年生(春名)が参加しており、内容を国際 workshop 等で講演して、一部を卒業論文にまとめた。

論文

Hirono Kaneyasu, Kouki Otuka, Singo Haruna, Shinji Yoshida, Susumu Date , “Simulation of Field-induced Chiral Phenomena in Inhomogeneous Superconductivity”, Sustained Simulation Performance 2021; Proceedings of the Joint Workshop on Sustained Simulation Performance, 31th and 32nd,15 pages (2022年,印刷中) [招待,査読無].

Shinji Yoshida, Arata Endo, Hirono Kaneyasu, Susumu Date, “First Experience of Accelerating a Field-Induced Chiral Transition Simulation Using the SX-Aurora TSUBASA”, Supercomputing Frontiers and Innovations 8(2) 43-58 (2021)[査読有].

学会発表

大塚剛生, 春名信吾, 兼安洋乃, “Ginzburg-Landau 理論に基づいた数値シミュレーションによる超伝導の磁場依存性の研究”, 大阪大学サイバーメディアセンター公募型利用制度成果報告会, 2022 年 3 月 10 日 大阪大学サイバーメディアセンター [口頭講演].

兼安洋乃, “不均一な超伝導状態における磁場誘起 chiral 転移と常磁性電流”, 京都大学基礎物理学研究所研究会「非自明な電子状態が生み出す超伝導現象の最前線：新たな挑戦と展望」, 2021 年 12 月 23 日 京都大学基礎物理学研究所 [口頭講演]

Kouki Otsuka, Shingo Haruna, Hirono Kaneyasu, “Spin susceptibility and field-induced chiral stability in non-unitary superconductivity”, Oxide Superspin 2021 (OSS2021), JSPS-EPSRC-CNR/SPIN-IBS CORE-TO-CORE WORKSHOP 2021 年 12 月 15 日 JSPS-EPSRC-CNR/SPIN-IBS CORE-TO-CORE [ポスター講演]

兼安洋乃, “UTe_2 を対象とした自発磁化超伝導の磁場依存性と電流”, 第 8 回 HPCI システム利用研究課題 成果報告会 2021 年 10 月 29 日 [ポスター講演].

兼安洋乃, “自発磁化軸に垂直な磁場下における自発磁化スピン三重項超伝導と電流”, JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第 13 回 シンポジウム 2021 年 7 月 9 日 [口頭講演].

その他

春名信吾,「局所的に高い T_c を持つ chiral 超伝導の磁場中における軌道磁化反転の機構」, 卒業論文（理学部 物質科学科）, 2022 年 3 月.

大塚剛生,「磁場誘起 chiral 現象の Ginzburg-Landau 方程式によるシミュレーション」, 博士課程前期研究課題（理学研究科物質科学専攻）, 2021 年度.