文部科学省 先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業 『みんなのスパコン』 TSUBAME による日本再生

東京工業大学 TSUBAME 産業利用

平成 26 年度利用終了課題 利用成果報告書

東京工業大学 学術国際情報センター

共同利用推進室

http://www.gsic.titech.ac.jp/kyoyo

平成 26 年度終了課題 利用成果報告書

(利用区分別採択日順)

利用 区分	課題名	企業名	頁
	リチウムイオンニ次電池正極材料の第一原理計算	古河電気工業株式会社 次世代電池研究開発センター	1
	無機材料開発への第一原理計算の活用	株式会社 ニコン	5
	電子写真システム設計における電磁場計算の高速化	株式会社 リコー	9
	ホモジナイザーを用いた撹拌混合による 乳液製造のスケールアップに関する解析	株式会社 資生堂 生産技術開発センター	13
۲ ۲	LTE-Advanced における 大型車両内電磁界特性に関する基礎検討	株式会社パナソニックシステ ムネットワークス開発研究所	17
ノイアルユー	大規模シミュレーションによるレーダの車両搭載時の特性 把握	古河電気工業株式会社 自動車電装技術研究所	21
よ	大容量の行動関連データを使った 最適シミュレーション及び暗黙知の利用	株式会社 電通国際情報サービス	25
	減衰を考慮した高周波数領域までの 音響構造連成シミュレーション大規模化技術の検討	フォスター電機株式会社	29
	広域都市環境の大規模計算による検討	清水建設株式会社 技術研究所	33
	三次元電磁界シミュレータを用いた 静電気放電イミュニティ試験に於ける PCB/Package/Chip のイミュニティ解析	ルネサスシステムデザイン 株式会社	37
	ーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーー	株式会社パナソニックシステ ムネットワークス開発研究所	41

利用 区分	課題名	企業名	頁
	気象イベントを考慮した建築環境の解析評価	清水建設株式会社 技術研究所	47
	鋼中析出物の水素捕捉能の高精度計算	新日鐵住金株式会社	51
有償利用(成果公開)	拡張アンサンブルシミュレーションによる タンパク質とリガンドの結合構造予測の展開	武田薬品工業株式会社 医薬研究本部	55
	電子デバイス材料の計算機設計	太陽誘電株式会社	59
	理論計算に基づく有機半導体材料の開発	住友化学株式会社 先端材料探索研究所	63
	衛生陶器混相流シミュレーションの 商品設計および販促への展開	TOTO 株式会社 技術開発センター	69
	塗エスラリーの分子シミュレーション	トヨタ自動車株式会社	77
	ワイヤレス電力伝送による 漏えい電波の環境解析技術の研究開発	株式会社パナソニックシステ ムネットワークス開発研究所	81
	大容量データ伝送用ミリ波アンテナの レドームに関する基礎検討	スタッフ株式会社	87

利用課題名 リチウムイオン二次電池正極材料の第一原理計算 英文: An ab initio study of Li-ion battery cathode material

風間 吉則、谷村 雄大、幡谷 耕二

Yoshinori Kazama, Yudai Tanimura, Koji Hataya

古河電気工業株式会社 横浜研究所 次世代電池研究開発センター

Battery Materials R&D Center, Yokohama R&D Laboratories, FURUKAWA ELECTRIC CO., LTD. http://www.furukawa.co.jp/

リチウムイオン二次電池用の正極活物質としてケイ酸塩系正極活物質 $Li_2MSiO_4(M)$ 遷移金属)が注目を集めている。 Li_2MSiO_4 は組成式内に Liを2つ含んでおり、2電子反応を起こす高容量材料として期待されている。理論容量は 330 mAh/g であるが、 Li_2FeSiO_4 は 1電子反応までしか起こらず、 Li_2MnSiO_4 はサイクル特性に課題があることが知られている。更なる特性向上を目指し、MやSiに代わる置換元素を選定するため、TSUBAMEを用いた大規模計算の有用性を検討することを目的とした。本報告では $Li_xMSiO_4(M = Mn, Fe, Co, Ni)$ について格子定数の構造緩和と平均電位計算を行ったことについて報告する。

Silicate-based active materials Li_2MSiO_4 (*M* transition metal) attracts attention as cathode active materials for the lithium ion battery. Li_2MSiO_4 includes two Li per formula unit and is expected as high capacity materials causing 2 electron reactions. The theoretical capacity is 330 mAh/g, however, $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ exhibits only 1 electron reaction, and $\text{Li}_2\text{MnSiO}_4$ has inferior cycling performance. Aiming at further characteristic improvement, we examined the usefulness of the large-scale calculation using TSUBAME to choose a substituted element for *M* and Si. In this report, we performed the structure optimization of the lattice constant and average electric potential calculation about Li_xMSiO_4 (*M* = Mn, Fe, Co, Ni).

Keywords: 第一原理計算、リチウムイオン二次電池、正極材料、Li2MSiO4、結晶構造

背景と目的

低炭素社会の実現に向け、電気自動車や電力貯蔵 用途への大容量リチウムイオン電池への要求が高まっ ている。より一層の性能向上のため、正極、負極、電解 質など、リチウムイオン電池の様々な部材の研究開発 が進められている。

次世代電池研究開発センターでは、正極活物質材 料の研究開発を進めており、特に近年注目を集めてい る、ポリアニオン系の Li₂MSiO₄(M: 遷移金属)の可能 性を検討した。Li₂MSiO₄は組成式内に Li を 2 つ含ん でおり、2 電子反応を起こす高容量材料として期待され ている。理論容量は 330 mAh/g を持ち、低コストかつ 熱安定性に優れ、多くの大学や企業が研究開発を行っ ている。

正極活物質 Li_2MSiO_4 において、 Li_2FeSiO_4 は1電 子反応までしか起こらず[1]、 Li_2MnSiO_4 はサイクル特 性に課題があることが知られている[2]。これらの課題 を解決するにあたり、MやSiに代わる置換元素を選定 し、活物質として最適な組成や結晶構造を、実験的に 見出だしていくのは非常に時間を要する。そこで、計算 科学的手法を用い、容量特性やサイクル特性に優れた 材料設計を行い、実験にフィードバックしていく。多数の 元素種と原子数の取り扱いを検討するため、通常の PC だけでは計算資源に限界がある。そこで TSUBAMEを使用することで、大規模な計算を短期間 で行い、実験では検討しきれない部分や、実験では知 り得ない特性などを分析し、開発を促進することが目的 である。材料開発の発展のために、大規模計算および 高速計算による設計の精密化は不可欠であり、実験的 には観測することができない情報を計算により得ること で、他の材料への更なる開発を促進するとともに、高性 能・高効率な二次電池を実現していく。

概要

リチウムイオン二次電池用の正極活物質 Li₂MSiO₄ (M: 遷移金属)の第一原理計算を行う。図 1 に示す空 間群 Pmn21 の結晶構造を用い、正極材料 Li2MSiO4 の安定結晶構造と電子状態、および凝集エネルギーを シミュレーションにより検討した。また、リチウムイオン 脱挿入による充放電での結晶構造の変化と安定状態 を計算し、系の持つ平均電位計算を行った。本報告で 構築した計算手法などを用いて、将来的には大規模な 系の取り扱いを行うことにより、より実際の系に近い計 算を行い、実験値との比較を行うことは長期的な目標 である。



図 1. Li₂FeSiO₄の結晶構造. (空間群: Pmn2₁)

結果および考察

第一原理計算ソフトは Quantum Espresso を用い、 500 eV のカットオフエネルギーを有する平面波基底関 数を用い、k 点サンプリング数は構造最適化において は $2 \times 2 \times 2 を$ 、エネルギー算出時においては $4 \times 4 \times 4$ を使用した。交換相関ポテンシャル GGA+U では U = 5 eV を使用し、電子スピンを考慮した。シミュレーション の初期構造には空間群 $Pmn2_1$ を持つ結晶構造を用い、 格子定数の初期値は文献値[3](計算値)を使用した。 空間群 $Pmn2_1$ の単位格子内には Li が 4 個、遷移金 属及び Si が 2 個、O が 8 個含まれており、全部で最大 16 個の原子を取り扱い、計算を行った。

上記計算を行うに当たり、本利用課題で使用できる 計算資源(TSUBAME ポイント)を有効に利用しつつ、 計算時間をなるべく短くするため、一度の計算で利用 する node 数と npool 数の最適化を行った。使用した 1 node に対しては 8 core を基本として検討を行った。計 算対象には、Li₂FeSiO₄ のエネルギー計算を採用した。 図 2 に標準 node 数および標準 npool 数を用いたとき の計算時間と消費した TSUBAME ポイントを示した。

ここで Quantum Espresso で設定できるオプション の一つ「npool」について説明する。各 k 点に対して、 core を分割して割り当てた並列計算を行うことで、計算 効率を向上させることができ、npool はその core の分 割数を表す。npool の最適値は k 点数や core 数に依 存するので、系を変えるたびに最適化が必要である。

図 2 に示すように、標準 node 数および標準 npool 数の使用に対して、node 数を増やすことで計算時間を 大幅に短縮することができたが、一方でTSUBAMEポ イントは若干多く必要となった。npool 数を改善すること で計算時間は更に短縮され、かつ使用した TSUBAME ポイントも標準条件よりは少なく抑えること ができた。従って本利用課題においては、この計算条 件を基本として検討を進めた。

表 1 および表 2 に、LixFeSiO4 および LixMnSiO4 の構造緩和計算結果による格子定数の値を示している。 構造緩和計算の結果、文献値とほぼ同等の値を得るこ



図 2. Li₂FeSiO₄のエネルギー計算における node 数と npool 数の関係と計算時間と TSUBAME ポイント.

表 1.Li_xFeSiO₄の格子定数の文献値[3]と計算値[Å].

	Li ₂ FeSiO ₄		LiFe	SiO_4	${ m FeSiO_4}$		
	文献	計算	文献	計算	文献	計算	
а	6.32	6.27	6.08	6.05	6.07	6.05	
b	5.38	5.35	5.63	5.63	5.61	5.73	
с	5.00	4.99	5.04	4.98	5.30	5.49	

表 2.Li_xMnSiO₄の格子定数の文献値[3]と計算値[Å].

	${\rm Li}_2{\rm MnSiO}_4$		$LiMnSiO_4$		$MnSiO_4$	
	文献	計算	文献	計算	文献	計算
а	6.37	6.31	6.26	6.21	6.17	6.12
b	5.43	5.41	5.42	5.40	5.70	5.72
с	5.04	5.02	5.15	5.18	4.85	4.96

とができ、上記計算条件で第一原理計算による物性予 測に十分な値を得られることが分かった。

図3には、第一原理計算により平均電位を求める方 法の概念図を示している。第一原理計算により、組成 式内のLiが2個、1個、0個のときの、系の構造最適 化と凝集エネルギーを求め、更にLi単体での構造最 適化と凝集エネルギーを求める。それらの値を図3に 示す Nernst の式に当てはめ平均電位を算出する。

表 3 には、Li_xFeSiO₄ および Li_xMnSiO₄ の平均電 位の計算結果を示している。文献値(計算値)と比較す ると、0.1~0.2 V 程度の差異はあるものの、概ね文献 値と同様の値を得ることができ、上記計算条件にて平 均電位の見積もりが可能であることが分かった。

図 4 には、上記と同様の方法で Li_xCoSiO₄ および Li_xNiSiO₄ についても平均電位計算を行った結果を、 Li_xFeSiO₄ および Li_xMnSiO₄ の結果とともに示してい る。Li_xCoSiO₄はV₁およびV₂のどちらも文献値の値か ら約 0.3 V 低い値となった。文献[4]によっては 0.1V 程 度の差しかないものもあるが、Li_xCoSiO₄ については 良好な実験結果が存在しないため、この計算結果が妥 当な結果であったか判断は難しい。Li_xNiSiO₄ につい ては文献値とほぼ同等の値を得ることができ、本報告 の方法で系の予測を行えることが分かった。



図 3. 平均電位計算の概念図.

表 3. Li_xMSiO₄の平均電位[V]. 文献値は[3]の値.

	F	^r e	Mn		
文献 計算		文献	計算		
V_1	3.2	3.42	4.1	4.18	
V_2	4.8	4.70	4.5	4.38	



図 4. 平均電位計算の結果と文献値[3]との比較.

まとめ、今後の課題

リチウムイオン二次電池用の正極活物質 Li₂MSiO₄ について、第一原理計算を用いた結晶構造の構造最 適化と、凝集エネルギーの計算による平均電位の算出 を行った。文献値を初期値として、それらの値と比較を 行ったところ、文献値とほぼ同等の平均電位を得ること ができ、TSUBAME を用いて行った本報告における計 算手法で活物質の物性予測が行えることが分かった。

今後はこれらの計算手法を用い、更に他の M や Si に置換する元素を検討し、活物質の材料開発にフィー ドバックしたい。更に、単位格子を複数個用意した超格 子の結晶構造を用い、大きなセルを用いたシミュレーシ ョンを行うことで、実際の系に近い状況を作り、電子状 態の細かい変化などを追えるようにしたい。その中で、 充放電に伴う Li 拡散の様子や、Li 脱挿入に伴って起 こる結晶構造の変化などの観察、更には Li の拡散に 伴う活性化障壁の計算や、Li の移動パスの予測など、 実験的には観測が難しい部分のメカニズム解明に適用 していく。

これら超格子の計算や、Li の拡散パス・挙動に関す る計算については、大規模な計算を行う必要があり、 かつ企業の研究開発においては特にその迅速性が求 められる。これらを満足するために TSUBAME のよう なスーパーコンピュータを使用することは非常に有効で あり、今回の検討により、その有用性を確認することが できた。今後、上記のような更なる課題の検討を進め、 電池材料のみならず、これらの計算ノウハウを他の材 料へも展開していきたい。

参考文献

A. Kojima, T. Kojima, T. Sakai, J. Electrochem.
 Soc. 2012, 159 (5): A525-A531.

[2] T. Muraliganth, K. R. Stroukoff, A. Manthiram,

Chem. Mater., 2010, 22 (20), 5754–5761.

[3] M. E. Arroyo-de Dompable, M. Armand, J.M.

Tarascon, U. Amador, Electrochem. Comm. No.8, 2006, 1292-1298.

[4] G. Zhong, Y. Li, P. Yan, Z. Liu, M. Xie, H. Lin, J.

Phys. Chem. C 2010, 114, 3693-3700.

利用課題名 無機材料開発への第一原理計算の活用

英文: First principles calculations for development of inorganic material

松成 秀一

Shuichi Matsunari

(株)ニコン

Nikon

固体酸化物の第一原理的電子状態計算は、密度汎関数理論の発展により、数百原子程度のセルにおいても適 用可能となってきている。しかし、一般的な交換相関相互作用近似ではバンドギャップが小さめに計算される傾向に ある。本課題では、40原子イットリア(Y2O3)のバンドギャップ計算にG0W0近似を適用し、その近似の有効性および、 並列計算の有効性を検証した。まず GW 計算による補正効果を検証した結果、一般的な汎関数(GGA)では実験値 に対し 70%程度の計算値になったのに対し、GW 計算では実験値に近い計算結果が得られた。今回計算に用いた 条件では、36core 並列まで直線的なスピードアップが見られ、並列計算が十分有効であることが分かった。

In this report, we discuss band gap calculations of a 40-atom yttria (Y_2O_3) crystal within the G_0W_0 approximation and the parallelization efficiency of those calculations. The calculated band gap is confirmed to be improved by the approximation. When four hundred bands are used, a linear decrease in the total calculation time is observed for parallelization with up to 36 cores (3 nodes). This improved efficiency is important for larger systems.

Keywords: 電子構造, バンドギャップ, GW 近似, 第一原理計算

背景と目的

第一原理電子状態計算は方法論の発展と計算機の 高性能化により、欠陥の形成・ダイナミクスから光吸収 スペクトルなどの光学特性まで幅広く、応用へ向けた研 究が活発に進んでいる。電子系の交換相関相互作用 に対し、局所密度近似(LDA)や一般化勾配近似 (GGA)は第一近似として広く用いられ、結晶の格子定 数・結合距離等の構造的物性や化学反応過程におけ るエネルギー変化、相安定性などの算出について、信 頼性の程度も調べられており、実験だけからはわから ない状態の検証・予測に応用することも可能となってき ている。しかし、電気伝導特性・光学特性にとって重要 な物性値であるバンドギャップは実験値に対し大きく過 小評価されるという問題がよく知られている。実験値が わかっている系であれば、それを用いて経験的に補正 をすることも可能であるが、実験的な観測結果がない 系や不純物や結晶性の影響で材料本来の値と異なっ ている実験例もある。よって、第一原理計算を無機材 料開発に活用する上で、バンドギャップを高精度に予 測することは重要な課題である。LDA, GGA による限 界を乗り越えるため、交換項にHF近似を混合したハイ ブリッド汎関数を用いる方法など高精度な計算手法が 開発されている。その中で、本研究では多体量子論に 基づく摂動補正を加える GW 近似に注目し、 TSUBAMEを用いてその有用性を検討した。

GW計算は一般的なGGA計算よりも負荷が大きく、 数 10 原子規模の計算でも並列計算を有効に使う必要 がある。本プロジェクトでは、無機材料における GW 計 算、及び GW 計算並列化の有効性を検証することを目 的とし、40 原子の酸化イットリウムを例として実施した。

概要

本研究では、図1に示さている酸化イットリウムY₂O₃ について、GGA 及びG₀W₀計算によりバンドギャップを 調べた。バンドギャップの GGA 計算値は実験値の 70%程度であるが、GW 計算による値は実験値に近く、 高精度計算による改善が見られた。今回用いた G₀W₀ 計算は無機材料におけるバンドギャップの予測に利用 できる。

また、今回検証した条件では 36 コア並列までスピー

5

ドは直線的に上昇した。この結果によりTSUBAMEの ようなスパコンを用いれば、今回検証したより大きなサ イズの結晶セル(より多くのバンド数が必要となる系)の 計算も可能であることがわかった。



図1.酸化イットリウム(Y₂O₃; Bixbiyte,希土類C型蛍石)の結晶構造 (conventional cell, 80 原子)。緑色の 球がイットリウム、赤色が酸素を表す。

計算方法

ABINIT コードを用いて計算を行った[1,2]。交換相 関汎関数には GGA を用い、内殻電子はノルム保存擬 ポテンシャルを用い明示的には扱わない[3]。GW 計算 では DFT 計算から直接得られるグリーン関数 Go と、 分極関数、誘電関数の計算を介して得られる遮蔽クー ロン相互作用 Woを用いた GoWo 計算を使用した。その 際、GoWo 計算に使用するバンド数を少なくする手法を 一貫して用いた[4]。Y2O3 結晶の格子定数には GGA で緩和した値 10.878Å を用いた。これは実験値 10.60Å[5]に対して 2.6%程度の相対誤差である。 GoWo 計算では、同じ格子定数をもつ 40 原子の primitive cell を用いた。GoWo 計算における逆格子空 間 Brillouin zone 内の平均には、4×4×4のk点メッ シュを用いたが、計算時間ベンチマークでは 2×2×2 のk点メッシュを用いた。

結果および考察

GGA 計算によって得られた Y₂O₃ (conventional cell)のエネルギーバンド図を図2に示す。伝導帯の底 はガンマ点にある。一方で、価電子帯の頂上は詳細に 見るとガンマ点からわずかにずれている。しかし、ガン マ点付近ではかなりなだらかになっており、エネルギー 的にはほとんどガンマ点と変わらないため、本研究の GW 近似ではガンマ点でのギャップを計算し比較する。 GGA 計算によって得られたバンドギャップの値は 4.08 eV であり実験値 5.8 eV[6]に対して、70%程度過小評 価されている。



図2. Y₂O₃エネルギーバンド構造。

GW 計算では摂動計算のための非占有軌道の数に 対する収束性が問題となる。近年、Bruneval らが開 発した手法により、バンド数に対する収束性が著しく 向上することがわかっている[4]。ABINITではこの手 法を実装しており、GW 計算の実用を後押ししている。 図3に Y₂O₃ の系でバンド数に対するバンドギャップ値 の収束性を検討した結果を示す。占有軌道のバンド数 は 96 であるので、4 から 5 倍程度のバンド数で収束し ていることがわかる。

バンド数 500 での G_0W_0 計算によるバンドギャップ値 は 5.76 eV となり、実験値(5.8eV[6])と近い値が得ら れた。その他の半導体・酸化物系でも系統的に、 G_0W_0 計算により約 10%以内の誤差に収まることが知られて おり、今回検証した Y_2O_3 の系でも、妥当な計算が可能 であることが確認できた。



図3. Y₂O₃ におけるバンドギャップ値のバンド数に対す る収束性。

以上の結果を踏まえ、並列計算の有効性の検証を 行った。バンド数は400とし、2×2×2のk点メッシュを 用いた。ベンチマーク計算を行った結果を図4に示す。 ノード数(並列コア数)としては 1(12), 2(24), 3(36), 4(48), 6(72)で計算を行い、DFT 波動関数を求める部 分も含めた GoWo 計算全体の計算時間をまとめた。図 4(b)から、今回用いた条件では36コア(3ノード)並列程 度までスピードは直線的に上昇し、それ以上で並列効 率が著しく下がることがわかる。12 コアより小さな並列 数では4日以内で計算が終わらない可能性があるため 検証を行っていないが、GW 計算において並列計算が 有効に利用できることがわかった。より大きなセル(バ ンド数)の計算では、今回よりも優れた並列効率が期待 できる。

まとめ、今後の課題

無機材料のバンドギャップ値の予測に関して、GGA 計算では不十分であるが、G₀W₀計算を用いることで、 GGA 計算より信頼性の高い結果が得られ、40 原子程 度のセルでも実用的な時間内で計算が可能である。よ り大きなセルでの並列効率は今回よりも優れているた め、TSUBAME のような 100 コア並列も可能なスパコ ンを使えば、GW 計算を材料開発へ活用することが十 分可能であると考えられる。100 原子程度の GW 計算 は荷電点欠陥の形成エネルギー計算にも適用可能で ある。 今回、摂動補正の最低次である GoWo計算を用いた が、より高精度にバンドギャップを計算するためには、 セルフコンシステントに計算する方法や vertex 項を加 える方法などを検討することが必要である。また、今回 は価電子帯頂上と伝導帯の底の DFT 一電子エネルギ ー(固有値)への補正を計算し、バンドギャップのみに 注目したが、バンド図を計算する場合はワニエ関数を 使用するなどの工夫が必要になる。



図4. G₀W₀ 計算ベンチマーク結果。(a)計算コア数と全体の計算時間。 (b)ノード数と(1 ノード計算に対する)ス ピードアップ。

参考文献

- [1] X. Gonze et al., Z. Kristallogr. 220, 558-562 (2005).
- [2] X. Gonze et al., Phys. Comm. 180, 2582-2615 (2009).
- [3] M. Fuchs and M. Scheffler, Comput. Phys. Commun. 119, 67 (1999).
- [4] F. Bruneval and X. Gonze, Phys. Rev. B 78, 085125 (2008).
- [5] E. A. Stern, M. Newville, B. Ravel et al. Physica B, 208—209 (1995).
- [6] J. Robertson, J. Vac. Sci. Tech. B, 18(3), 1785-1791 (2000).

電子写真システム設計における電磁場計算の高速化 The Study of Speed up for an electrostatic field simulation in electrostatic photography system design

> 利用課題責任者 羽山 祐子 Yuko Hayama

株式会社 リコー RICOH Co.Ltd http://www.ricoh.co.jp

電子写真方式を利用した画像装置内での用紙詰まりの要因となる,用紙巻き付きのメカニズムを解明する 為に,電界計算と用紙変形計算を連成した解析ツールを開発した.このツールは,用紙の搬送速度と電荷の 移動速度の差が大きく,連成時に膨大な計算回数が必要となり,計算時間が実用的な解析ツールとしてのレ ベルに達していなかった.今回の利用課題では,並列化と数値解析ライブラリを利用し,用紙巻き付きシミ ュレータの計算速度の向上を目指した.その結果,計算速度の向上が実現し,巻き付き解析ツールとしての, 実用的な適用の可能性を確認することが出来た.

The simulation tool has been developed to figure out the mechanism of paper deformation at second transfer processes in electrophotography system. The simulation demands enormous time steps, because the electric charge speed is almost million times faster than the paper feeding speed. It is difficult to practically use at design stage. In use challenge of TSUBAME, we aimed to improve computational speed of the simulation tool by using parallelization and numerical analysis library. As a result, it could be showed the possibility of practical applying of the numerical methods.

Keyword: paper deformation, electrophotography system, numerical calculation, parallelization

背景と目的

用紙に文字や画像を印刷する画像形成装置では, 高い品質を提供し続けるために,用紙の搬送状態を 管理することが重要である.Fig.1 に示すような電 子写真方式では,電界を利用して画像形成を行うこ とから,用紙が周囲の電界によって変形するため, 用紙挙動はより複雑なものとなる.例えば,中間転 写ベルトから用紙に画像を転写するプロセスでは, 用紙周辺に高い電界が生じるため,適切なバイアス を用いなければ,用紙がローラに巻きつく不具合が 生じる.このような用紙の静電巻き付きは,電子写 真方式の不安定性をもたらす要因であり,高品質を 達成するためには,そのメカニズムを解明すること が重要となる.

このような静電巻き付きのメカニズムを解明するため に、我々はこれまでに、電界計算と用紙の変形計算に よる連成解析ツールを開発してきた.このツールは、電 界計算にオームの法則による部材内の電荷移動や,ロ ーラと用紙間の放電現象を考慮しており,実機内の詳 細な現象まで再現するように設計された.



Fig.1 電子写真装置の概略図

一方でこのツールには計算時間に課題を残す.本ツ ールは一回の計算に数日程度の計算時間を要する.よ って,用紙やローラの物性値,プロセス条件等を振って 計算が可能な,解析ツールとしての実用化にまでは至っていない.これは,用紙の搬送がミリ秒オーダーで起こるのに対して,電荷移動がナノ秒オーダーの現象であることから,十分な計算精度を得るためには膨大な計算ステップが必要になることが原因である.

今回の利用課題では、TSUBAME を利用して、並列 化と数値計算ライブラリを利用したチューニングによる 用紙巻き付きシミュレータの計算速度の向上を確認し、 静電巻き付き解析への実用化の見込みを得ることを目 的とする.

概要

電子写真プロセスでは、画像が形成される過程で、 電場が重要な役割を果たす.その為、電場の状態を管 理することが重要である.しかし一方で、電場を直接観 察、計測することが困難である.したがって、シミュレー ションを利用した現象解析、予測のニーズは高い.

《解析対象となる現象》

解析対象である, Fig.1 内のAの領域について, Fig.2 に実験機による可視化結果を示す. 用紙は正しく搬送 され, 正常に次のプロセスに送られていることが分かる.



Fig.2 転写プロセス内の用紙搬送状態可視化結果

しかしながら, 搬送される用紙が薄く腰が弱い場合に は, 印加した電圧により発生した電界により, 用紙が変形 して搬送される. Fig.3 に印加電圧を, -1000V~-5000V の範囲で異ならせた条件での, 用紙搬送の可視化結果 を示す. -1000V の印加条件では, 用紙が印加ローラ側 に大きく変形していることが分かる. 印加電圧を下げてい くと, 変形量が小さくなり, -4000Vでは変形方向が2次転 写ローラ側に変化する.

このように,用紙の変形挙動は,印加する電圧によって も変形度合いや,変形方向が異なってくる.また,用紙 の電気抵抗,厚み,などによっても異なることが分かっている.



Fig.3 印加電圧による用紙変形の違い

《解析モデルと手法》

静電気力による用紙の変形計算の概要と手順を説 明する.

計算の対象は, Fig.1 内の A の転写領域であり, 印 加ローラ, 転写ベルト, 用紙, 各物質間の空気層, 2 次 転写ローラの層により形成される. Fig.4 に今回対象と した, 解析モデルのメッシュ例を示す. このモデルにて, 各ローラ, 転写ベルト, 用紙内の電荷移動と, パッ シェンの法則に基づく各物質間での電荷移動を考慮 した差分法による電界計算が実施される[1][2][3]. 静電気力は, 計算された電界強度と用紙上に発生し た電荷により計算される [4].



Fig.4 解析モデルメッシュ例

用紙変形は,用紙を梁とみなし,計算された用紙 上の静電気力により,一次元のFEM計算で求める[5]。

全体の計算のフローを Fig.5 に示す. 初期は用紙 がローラ間のニップ部から排出した時の解析モデル を作成する. そのモデルに対し,オームの法則,放 電を考慮した電界解析を行う. 電界解析では,電荷 の移動時間を考慮して,計算のタイムステップは 10⁻⁶~ 10⁻⁸ 秒に設定している.電界解析の計算を一定時間実 施し,計算が収束した後,電界内で用紙に働く静電気 力を計算する. 次にその静電気力に対して,用紙変 形計算を行う. その変形位置に合わせて,電界計算 の領域のメッシュを作りなおし、次の静電界解析を 行う.このサイクルを一定の用紙排出量ごとに繰り 返した.計算は所定の排出量において終了させる.



Fig.5 静電気力による用紙変形計算のフロー

結果および考察

本計算手法のホットスポットである, 電界計算の連立 方程式ソルバについて2種類の高速化を検討した.

一つ目は, Red-Black SOR 法を用いた並列化である. 差分法の領域を 4 分割して, OpenMP を利用した並列 化を行った.

二つ目は、数値計算ライブラリである LAPACK[6]を 利用した方法である.本計算モデルでは係数行列が帯 行列となるので、帯行列用の直接法ソルバを利用した. また、本ソルバは標準で OpenMP の並列化に対応して おり、並列化による高速化も検討した.

以上の高速化手法を静電巻き付き解析シミュレータ に実装した.以下にテスト計算の結果について説明す る.

まず,二つのソルバの並列化効率を確認した.Fig.6 に16スレッドまでの計算速度倍率を示す.Fig.6より,両 ソルバで16スレッドまで並列化による計算速度向上が 確認できる.それぞれ,16スレッドでSOR法は3.8倍, 直接法では2.3 倍の計算速度向上を達成した.



次に、二つのソルバを利用して計算速度向上の最適 化を行った.検討の結果、Red-Black SOR 法をベースと して、一定の反復回数を超えたときのみ、直接法を利用 するハイブリッドソルバが最も計算時間を短縮できること が分かった. SOR 法の計算時間は、その反復計算の初 期値に大きく依存する.よって、電界計算内で放電判定 が生じた場合や、用紙変形計算を行った直後は電界が 大きく変化するため、前計算結果を初期値として利用し た場合、収束には多くの反復が必要になる.一方で、直 接法は常に一定の計算時間で解を得ることができる.よ って、SOR 法の反復回数に閾値を設けて、一定回数を 超えたときのみに直接法を利用するように最適化した.

最後に、本シミュレータを利用して印加電圧条件を振った際の用紙巻き付きの傾向について、実験結果との 比較を行った.計算条件は Table.1 の通りである.各印 加電圧の用紙巻き付きの計算結果を Fig.7 に示す.結 果を, Fig.3 に示した実験結果と比較すると、本シミュレ ータにより、用紙巻き付き方向の傾向を再現できたこと が分かる.また、本計算は先述したハイブリッドソルバを 利用することで、高速化を行う前と比べて、計算時間を 8分の1に短縮することが出来た.

		Table 1	計算条件				
印加電圧	[V]	-1000,	-2000, -3	8000, -400	0, -5000		
用紙特性							
厚∂	⊁[um]				70		
電気抵抗[Ωm] 5×1							
さ	ヤング率[N/m ²] 6.48×10						
密度[kg/m ³] 845							
印加電圧[V]	-1000	-2000	-3000	-4000	-5000		

Fig.7 用紙巻き付き計算結果

まとめ、今後の課題

計算結果

本プロジェクトでは,TSUBAME を利用し,静電 巻き付きシミュミレータの高速化を確認した.電界 計算に,Red-Black SOR法と,直接法のハイブリッ ド化を利用し計算速度の向上を図り,最終的に,8 倍の高速化を達成した.本結果により,静電巻き付 きシミュレータの実用化への見込みが得られたと判 断する.

今後,本シミュレータをメカニズム解析や,設計 開発へ展開していく.

参考文献

- [1] 長尾剛次他,静電転写部における用紙変形の基礎
 的解析 Japan Hardcopy 2003 Fall 論文集
 P.53-56
- [2] Toyoshige Sasaki etc. Second Transfer Process Simulation II Society for Imaging Science and Technology Nip24 and Digital Fabrication 2008 p.342—345
- [3] 門永雅史 中間転写ベルトの2次元電界シミュレ
 ーション 日本画像学会誌 244 号 2003
 p.128—135
- [4] H.H.ウッドソン,J.R.メルヒャー MIT コアカリキュラム電気力学 Ⅱ 産業図書
- [5] 大学課程 材料力学 オーム社 中山秀太郎
- [6] Anderson E., Bai Z., Bischof C., Blackford S., Demmel J., Dongarra J., Du Croz J, Greenbaum A., Hammarling S., McKenney A., Sorensen D., LAPACK User's Guide 3rd edition, SIAM, 2000

利用課題名 ホモジナイザーを用いた撹拌混合による乳液製造のスケールアップに関する解析 CFD for an establishment of scale-up procedure in manufacturing of emulsion by using of homogenizer

> 利用課題責任者 横川 佳浩 Yoshihiro Yokokawa

所属 株式会社資生堂 生産技術開発センター Technology & Engineering Center Shiseido Co., Ltd. http://www.shiseido.co.jp

乳液の製造においては、撹拌混合の強さによって、得られる乳化粒子の大きさが異なり、その結果、粘度等の物性が変化し、使用感の全く異なるものが出来上がる。機械力による乳化の場合、設備のせん断力が乳化の進行に寄与していると考えられる。乳液の調製に広く使われる設備として、ホモジナイザーがある。粒子法に基づく流体解析により、非ニュートン高粘度流体が、ホモジナイザーを通過する際に受ける最大せん断力を算出した。その結果、流体の受けるせん断力は分布を持ち、回転数が大きいほど分布幅は大きいことが判った。回転数の違いによるせん断力の強さおよび分布の差は、サイズ違いのホモジナイザーでも生じる。少量スケール用ホモジナイザーで調製される乳液を大容量用ホモジナイザーを用いて再現するためには、今回、得られた最大せん断力分布が有効な指標になると考えられた。

In manufacturing milky lotion, that is emulsion, the size of emulsion particle is determined by the strength of mixing equipment. For details, the shear force of the mixer is thought to contribute the progress of emulsification. The homogenizer is widely used to produce emulsion. We found out the strength and distribution of the shear force of liquid treated by the homogenizer in various rotating speed. As a result, the acquired data of the shear force led us the understanding the ability of emulsification in the different size of homogenizers. The analysis of the shear force data could be useful indicator in the scale-up process.

Keywords: 流体解析、粒子法、乳化、ホモジナイザー、せん断

背景と目的

化粧品、食品を初め、広く製造業では、液体の撹拌混 合により目的物を調製することが多い。化粧品の製造 においては、本来、混合されにくい複数の原料を均一 に混合し、目的とする混合物(化粧品中味)を得るが、 全く同一の原料を同じ比率で使用しても、混合の仕方 によって得られる混合物の物性(使用性)は大きく異な る。特に乳液・クリームの調製においては、強いせん断 力をかけて乳化【注釈 1】することが多いが、得られた 乳化粒子の大きさによって粘度等の物性が異なり、製 品特性に大きな影響を与える。そのため、せん断力の 制御は極めて重要となるが、実際の製造設備が液体に 与えるせん断力を測定することができないため、理論 ではなく実験結果から製造工程を設定することとなる。 我々は、流体解析を用いて、乳化工程によく用いられ るホモジナイザー【注釈 2】が生み出すせん断力を明ら かにすることを目的とした。新規処方の化粧品中味の 製造においては、まず少量スケール(1 L 程度)で確立 された調製方法を参考に大容量(50~1000 L)の製造 釜を用いた製造工程にスケールアップすることとなるが、 少量用および大容量用の異なるサイズのホモジナイザ ーのせん断力を明らかにすることで、スケールアップ時 の理論的な指標が設定可能になると考えられる。ホモ ジナイザーは、0.5 mm の狭い空間に強いせん断力を かけて乳化を引き起こす設備である。解析においては、 この微小空間を通過する流体を解析可能な精度で設 備全体の解析を行う必要があるため、TSUBAME によ る大規模計算を行うこととした。

本研究では、液体流れの数値解析に有効な粒子法に 基づく商用プログラム「Particleworks」を用いて解析

13

を行なった。さらに、非定常計算において、粒子が過去 に受けたせん断力を保持し、最大値を表示するモジュ ールも開発した。その結果、ホモジナイザーを通過した 流体が受けたせん断力の最大値の分布を明らかにす ることができ、装置のせん断力を把握することができた。 今後、得られたデータをもとにスケールアップの指標を 設定することが可能と考えられる。

【注釈1】

乳化:水と油のように混ざり合わない2つの液体に界面 活性剤を加え、一方の液体(連続相)中に他方が微粒 子(分散相)として分散して存在させること。化粧品の乳 液、クリームには、W/O 乳化(連続相:水、分散相:油) か O/W 乳化(連続相:油、分散相:水)があり、これに 粉末が加えられるものもある。

【注釈 2】

ホモジナイザー:本研究では、プライミクス社製 ホモミ クサーMARKIIをモデルとして解析を行った。

概要

乳液やクリーム等の製品の製造においては、乳化工程 が存在する。乳化方法の中でも、設備の機械力による 強いせん断力で乳化を行う場合、設備のせん断力を把 握することで、乳化粒子の制御が可能と考えられる。 我々は、粒子法に基づく流体解析ソフト 「Particleworks」を用いて、乳化物の調製のために広 く用いられるホモジナイザーのせん断力の解明を試み た。乳化に用いられるホモジナイザーは、攪拌翼が周 囲の壁から 0.5 mm 内側を毎分、数千回転で回転する 設備で、この高速回転により強いせん断力を生み出す

とともに流体を吸引・吐出し、 製造釜内の流体の混合も促 進する装置である。(図1)解 析の対象とする流体は、ニュ ートン流体である水および乳 液の代表として B 型粘度計で



およそ 10 Pa・s の粘度特性を有する高粘度の非ニュー トン流体(図2)とした。ホモジナイザーの吐出量および 通過した中味のせん断速度分布を粒子法解析により 求めようとすると計算負荷が極めて高くなるため、吐出 量については、格子法による解析および実測により求 めた。(図3) せん断力解明のための解析では、ホモジ



ナイザー下部の吸引部分に流入 ロを設定し、得られた吐出量を与 えて計算した。(図4)乳化の進行 とともに生成する乳化粒子は小さ くなるが、乳化粒子の大きさは、 流体が受けた最大のせん断力に



inflow 义 4 よって決定されると考えられる。定常状態での瞬間の せん断速度分布は通常の解析で得ることができるが、 ホモジナイザーを通過する流体が受けた最大のせん断 力を知る必要がある。そこで、粒子法解析において、各 粒子が受けたせん断力の履歴を保持し、その最大値を 示すモジュールも合わせて作成した。(図 5)



図 5. 最大せん断速度表示モジュール・イメージ図

結果および考察

ホモジナイザー処理された流体が受けるせん断力を知 るため、最大せん断力分布表示モジュールを用い、簡 素化したモデルで解析を行った。水および高粘度流体 の流入量をそれぞれ 8.65×10⁻⁴ m³/s、4.92×10⁻⁴ m³/s とし、7000 rpm で回転させたホモジナイザー通 過後の流体が受けた最大せん断力はそれぞれ(図6) に示す分布を持つことが明らかになった。いずれも正 規分布に近い分布を示し、水と比較して高粘度流体の 方が受けるせん断力は小さいことが確認された。次に ホモジナイザーの回転数を変えて解析を行った。その 結果、水および高粘度流体の最大せん断速度分布は それぞれ(図7)に示す分布となった。いずれの流体も 回転数が高いほど強いせん断力分布となり、分布の幅 は広がることが判った。実際の乳化工程においては、 処理時間が長くなるにつれて、流体は何度もホモジナ イザーを通過することになる。そこで、繰り返しホモジナ イザーを通過した高粘度流体が受ける最大せん断速 度分布と回転数の関係を調べた。理論上は低い回転 数によって生まれる弱いせん断力でも時間をかけて繰 り返しホモジナイザーを通過させることで高回転数で処 理した場合と同程度のせん断力を与えることができるこ ととなる。しかし、解析から得られた最大せん断速度分 布からは、化粧品製造の現実的な時間範囲では、回転





図 6-2. 最大せん断速度分布(高粘度流体)



図 7-1. 回転数・最大せん断速度分布データ(水)



瞬間せん断速度コンター図

11 7000rpm 900



図 7-2. 回転数・最大せん断速度分布データ (高粘度流体)

数の違いによるせん断力の差を補うことができないと 考えられた。(図8)例えば、9000 rpmで10回ホモジナ イザーを通過した高粘度流体の90%以上が受けるせ ん断力を、7000 rpmによる繰り返し処理で達成するこ とは困難である。(図9)乳液の製造においては、これま で解析してきた少量用ホモジナイザーよりおよそ5倍の







図 9.10 パス時の最大せん断速度分布の比較

大きさのホモジナイザーを用いることが多い。大容量用 ホモジナイザーは、少量用とほぼ同じ機構であるが、サ イズが違うため、回転によって流体に与えるせん断力 およびその分布は異なる。乳液の処方ごとに、目的と する乳化物を得るために必要なせん断力を最大せん 断力分布から求めることで、スケールアップの指標を設 定できると考えられた。

まとめ、今後の課題

我々は、粒子法解析により、ホモジナイザーが流体 に与えるせん断力および本設備を通過した流体が、そ の過程で受ける最大せん断力の分布を把握することに 成功した。この結果から、目的とする乳液の製造のた めに必要なせん断力を算出することができるようになっ た。この必要せん断力がスケールアップの指標として 有効と考えられた。今後、実際の乳液製造に使用する 大容量用ホモジナイザーのせん断力について解析を行 うとともに、そこから算出したスケールアップ指標の設 定および有用性の検証を行う。

利用課題名 LTE-Advanced における大型車両内電磁界特性に関する基礎検討

英文 A Study on the Electromagnetic-field Characteristic in a Large-scale Vehicle in LTE-Advanced

利用課題責任者 斎藤 裕

Yutaka Saito

所属 株式会社パナソニック システムネットワークス開発研究所

Panasonic System Networks R&D Lab. Co., Ltd. http://panasonic.co.jp/avc/psnrd/

邦文抄録(300字程度)

近年,自動車から得られる多種多様な情報を活用するクラウドサービスが注目されている. 無線通信シ ステムとしては LTE-Advanced や無線 LAN などが想定されており,それぞれのシステムに適したアンテナ を自動車に搭載することが必要となる. この自動車クラウド化の流れはバスなどの業務用車両から普及す ることが考えられ,大型車両に搭載されるアンテナ性能の評価が求められる. しかしながら,大型車両に 搭載されたアンテナの放射性能を測定するためには多大な時間と労力が必要であり,また電磁界シミュレ ーションでは空間メッシュ数が大規模になる課題がある. そこで本報告では, LTE-Advanced を解析対象の システムとし, 3.5GHz 帯アンテナをバスに搭載した場合のアンテナ性能について,スーパーコンピュータ TSUBAME2.5 を用いた電磁界シミュレーションにより解析する.

英文抄録(100 words 程度)

The cloud service system which uses various data from vehicles has been attracting much attention in recent years. The use of LTE-Advanced and Wireless LAN is proposed for its wireless communication system. Since the cloud service is introduced in advance into the vehicle for business use, the evaluation of the antenna performance installed on the large-scale vehicle, such as the bus and the truck, is required. However, the antenna measurement with large-scale vehicle involves immense amount of time and effort, and the antenna electromagnetic simulation requires the enormous analysis meshes because of the volume of the vehicle. In this paper, we adopt the LTE-Advanced as the target system of the cloud service, and evaluate the 3.5 GHz antenna performance installed on the bus by electromagnetic simulation using supercomputer TSUBAME 2.5.

Keywords: Electromagnetic simulation, Large-scale vehicle, Cloud service, LTE-Advanced

1. まえがき

近年,自動車から得られる多種多様な情報(ビッグデー タ)を活用するクラウドサービスに注目が集まっている [1].自動車のクラウド化を実現するための無線通信シス テムとして,LTEやLTE-Advanced,無線LANなどが想定 されており,それぞれのシステムに適したアンテナを自動 車に搭載することが必要となる.この自動車クラウド化の 流れは,一般乗用車への適用に先駆けてバスやトラックな どの業務用車両から普及が進むことが想定され,これらの 大型車両に各無線通信システム用アンテナを搭載した場 合のアンテナ性能評価が求められる.

しかしながら、大型車両に搭載されたアンテナの性能を 車両全体の影響を含めて測定するには大掛かりな設備と 膨大な労力が必要となるため、電磁界シミュレーションを 用いてアンテナ性能を解析することが望ましい[2]. また, 例えば LTE-Advanced や無線 LAN などの数 GHz 帯におけ る大型車両全体を含む電磁界シミュレーションでは,解析 空間を波長の数十分の一程度の大きさで分割する必要が あることから,大規模な空間メッシュでの解析が必要とな る.現在,電磁界シミュレーションで用いられている一般 的なスタンドアロン型計算機では,1億個程度のメッシュ 数のモデルの解析が限界であるため,並列処理によって大 規模メッシュの解析が可能なスーパーコンピュータの利 用が有効となる.

本利用課題では,基礎検討として,3.5GHz帯の LTE-Advancedを解析対象のシステムとし,大型車両のバ スに搭載されるアンテナの性能をスーパーコンピュータ TSUBAME2.5[3]を用いて電磁界解析する.実際の構造を

モデリングしたバスモデル車両内に 3.5GHz で動作するア ンテナを配置し、バス全体の影響を含めたアンテナ放射指 向性を解析すると共に,バス車両内の電磁界分布を可視化 する. また, バス車両内の構造物の座席シートなどによる 反射・減衰特性について解析し、その影響を検証する.以 上の検討により,使用ノード数と解析時間の関係を把握し, 電磁界シミュレーションにおける TSUBAME2.5 活用の有 効性について検討する.

2. 解析モデルと解析条件

表1に解析条件を示す.計算機システムはスーパーコン ピュータ TSUBAME2.5, 電磁界解析には有限積分法を用 いた電磁界シミュレータである CST 社の MICROWAVE STUDIO[4]を使用する. 解析周波数は LTE-Advanced を想 定し 3.5GHz としている.

表 1 解朳条件					
計算機システム	TSUBAME 2.5				
電磁界解析	MICROWAVE STUDIO				
解析周波数	3.5 GHz				
車両モデル	バス				
アンテナ	1/4 波長モノポールアンテナ				
	①前方ダッシュボード上配置				
アンテナ	②後方ダッシュボード上配置				
配置位置	③ルーフ中央裏配置				
	④ルーフ後方裏配置				
解析メッシュ数	24.9 億メッシュ				

図1に本検討で用いる大型車両のバスモデルを示す.大 きさは全長 8990mm×全幅 2315mm×全高 2980mm, ボデ ィ及びホイールは金属,座席シート,ダッシュボード,窓 ガラス,バンパーは誘電体でモデリングしている.

図2にアンテナモデルを示す. 3.5GHz で動作するアン テナとして、一般的な車両搭載アンテナである1/4波長モ ノポールアンテナを採用した.

図3にアンテナ配置位置を示す.バス車両内へのアンテ ナ配置として、①前方ダッシュボード上配置、②後方ダッ シュボード上配置, ③ルーフ中央裏配置, ④ルーフ後方裏 配置の4通りを検証する.アンテナの配置向きは、①②の ダッシュボード上配置では図2に示す座標軸の向き(アン テナ素子がルーフ側) であり、③④のルーフ裏配置では図 2においてアンテナをX軸中心に180回転させた向き(ア ンテナ素子が床側)である.

以上の解析条件でモデル1条件あたりの解析メッシュ数 は 24.9 億メッシュとなり、一般的なスタンドアロン型計 算機での MICROWAVE STUDIO で解析可能な約1億メッ シュを大きく超えているため、TSUBAME2.5 での解析が 必要である.



図2 解析モデル (アンテナ)



2315mm

図1 解析モデル (バス)



図3 アンテナ配置位置

3. 解析結果

3.1. アンテナ放射指向性の比較

図 4 に各アンテナ配置位置におけるアンテナ放射指向 性を示す. XY 面(水平面)と XZ 面(垂直面)を記載し ている.車両搭載条件において,アンテナ配置位置によっ て放射指向性が大きく変化することが確認できる. XZ 面 の放射指向性より,①②のダッシュボード上配置では天頂 方向,③④のルーフ裏配置では地面方向に最大放射方向が 向くことがわかる.また,車両の影響で放射指向性に多数 のヌルが発生している.



図4 アンテナ放射指向性

3.2. 車両内の電界分布の比較

図 5 に各アンテナ配置位置における車両内の電界分布 の比較を示す. それぞれ XZ 面の電界分布であり, 図中の ピンク点はアンテナ配置位置を示している. ③のルーフ中 央裏配置の場合に, 比較的バス車両全体に電界が分布しや すい傾向が確認できる。一方, ①②のダッシュボード上配 置や④のルーフ後方裏配置では, アンテナが車両の端に配 置される条件のため, アンテナが配置される車両端の反対 側における電界強度が低いことがわかる. また, 座席シー トや運転席背面の仕切り板の遮蔽の影響によって電界強 度が低下する傾向も確認できる.

3.3. 座席シートの影響

図 6 に座席シートの有無に対するアンテナ放射指向性 の比較を示す.アンテナ配置位置は③のルーフ中央裏配置 とした.座席シートを取り除いても,最大放射方向などの 放射指向性の傾向は大きく変化しないことが確認できる. ただし,座席シートなしでは座席シートによる誘電損失分



図5 車両内の電界分布

だけアンテナ効率が改善するため,放射指向性が全体的に 大きくなっている.その改善量は今回の解析モデルでは約 2dBである.

図 7 に座席シートの有無に対する車両内の電界分布の 比較を示す.アンテナ配置位置は③のルーフ中央裏配置と した.座席シートの遮蔽によって電界が減衰する傾向や, 座席シートからの反射波に起因する定在波が発生するこ とが確認できる.

4. TSUBAME ノード数と解析時間の関係

図8にTSUBAMEノード数と解析時間の関係を示す. 解析モデルは③のルーフ中央裏配置のモデルを用い,解析 メッシュ数は表1の通り24.9億メッシュである.図8よ り,ノード数を増やすことで解析時間が低減する傾向が確 認できる.今回の解析モデルでは,48ノード程度以上で 解析時間がほぼ飽和すると考えられる.

5. まとめ

本利用課題では、スーパーコンピュータ TSUBAME2.5 を用いて、バスに搭載される 3.5GHz 帯アンテナの特性を 電磁界シミュレーションにより解析した.バス車両内のア ンテナ配置位置により放射指向性が大きく変化し、車両中 央のルーフ裏にアンテナを配置する場合に比較的バス全 体に電界が分布する傾向である.座席シート等の遮蔽によ って電界強度が低下するため、車両の端にアンテナが配置 される場合は、その反対側における電界強度が低くなるこ



図6 放射指向性に対する座席シートの影響

とを把握した.また,TSUBAME2.5の48ノードを用いた 並列解析により約25億メッシュのモデルを約5時間で解 析でき,電磁界シミュレーションにおけるTSUBAME2.5 の有用性を確認した.

本検討はスーパーコンピュータ活用による電磁界解析 の基礎検討の位置付けであり、さまざまなアンテナ形式の 差,乗客などの人体の影響,更には性能改善の検討などが 今後の研究課題となる.

参考文献

- K. Mase, "Information and Communication Technology and Electric Vehicles — Paving the Way towards a Smart Community," IEICE TRANS. COMMUN., Vol. E95-B, No. 6, Jun. 2012.
- [2] S. Horiuchi et al., "Comparisons of Simulated and Measured Electric Field Distributions in Cabin of a Simplified Scale Car Model," IEICE TRANS. COMMUN., Vol. E90 -B, No. 9, Sep. 2007.
- [3] 東京工業大学 学術国際情報センター TSUBAME (http://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame)
- [4] CST MICROWAVE STUDIO (http://www.cst.com/)







利用課題名 大規模シミュレーションによるレーダの車両搭載時の特性把握

英文: Evaluation of electromagnetic characteristics of radar within car environment by large scale simulation

利用課題責任者 井上 大輔 Daisuke Inoue

所属 古河電気工業株式会社 Furukawa Electric Co., Ltd. http://www.furukawa.co.jp/

邦文抄録(300字程度)

TSUBAME を用い、準ミリ波レーダの自動車搭載を想定した大規模電磁界シミュレーションを行った。昨年度のトラ イアルに続き、さらなる規模拡大やモデル詳細化への対応として計算の効率化の妥当性確認と、実際の車両構造に 即したモデル化スキームの開発と車両搭載を想定したシミュレーションを実施した。計算の効率化として CPU マルチ コア駆動による TSUBAME の能力の十分な活用やメッシュの改善の効果が確認できた。また車両構造のモデル化 では新たに 3D スキャナを活用した大規模解析ルーチンの可能性や、より実物に近い解析を示すことができた。 英文抄録(100 words 程度)

The large-scale electromagnetic simulation which estimates the car installing situation of the quasi-millimeter wave band radar was performed using TSUBAME. Following the last year's trial, we newly confirmed the validity of efficiency of calculation as correspondence to further scale expansion and model detailing and developed the modeling scheme with the actual vehicle structure and the simulation which assumed the car installing situation. We showed the enough utilization of TSUBAME with driving CPU multi-core and the effect of the mesh improvement. Furthermore, we showed the possibility of the large-scale analysis routine with 3D scanner newly and the more actual analysis by modeling of the vehicle structure.

Keywords: 5つ程度 Electromagnetic, simulation, radar, bumper, 3D

背景と目的

交通事故死傷者数を減少させるための安全技術 開発や今後の段階的な自動運転へ技術開発が各国 で進められている。国内では、今後高齢ドライバーの 増加する状況に対しても、予防安全技術の適用が望 まれる。現状、交通事故の約半数以上が交差点に おいて事故が発生しているとされており[1]、周辺を 見渡すことができるような広角なセンサは有用であ る。これまでにレーザレーダ、電波式レーダ、画像セ ンサなど様々なセンサが商品化されてきているが、 その中で電波式レーダは耐候性に優れているとされ ている。また、ミリ波に比べ、準ミリ波のレーダは一 般的に安価であり、普及拡大が現在進んでいる。

通常レーダはバンパー裏側、何らかの車体構造物上に配置される。しかしながら、レーダはこれら搭載状態によって電波特性に大きな影響をうけるとされている[2]。この状況でも十分な電波特性を保持す

ることが現状の技術的な課題となっている。

従来は多大な工数の試作試験を実施することに より、搭載時の特性の把握や改善検討を行ってきた。 一方、シミュレーションを用いた検証は、開発の加速 への期待は高いものの、準ミリ波波長で車体を解析 する場合、その規模の大きさが課題であった。

昨年度のTSUBAMEトライアルユースより、電磁 界シミュレーションの実験結果との整合性の確認や、 GPU 活用による計算の高速化が確認できている。 実際の車両規模を想定した大規模モデルであっても シミュレーションを開発ルーチンへの組み込むことが できる可能性を示せていた。

しかしながら、上記はあくまで簡易モデルでの解 析にすぎない。今後、実際に即した解析構造におけ る解析のためのモデルの詳細化や解析領域の拡大 等に対応するため、新たなモデル化スキームの開発 やシミュレーションの効率化検証が必要であると考 えられる。本プロジェクトでは、TSUBAME により大 規模シミュレーションを実施し、これら準ミリ波レーダ の自動車搭載にかかる現実的な課題に対して、シミ ュレーションのさらなる有用性について示す。

概要

CST 社製 MW-studio ver2013 また ver2014 によ るシミュレーションを TSUBAME 上で実施した。モデ ルとしては準ミリ波 ISM バンド 24.15GHz で動作す るレーダ単体を基本状態(=①)とし、その前面にバ ンパーや車体をごく簡易に模擬したプラスチック板と 金属板を装荷したモデル(=②)、また実際の車両構 造物を模擬すべく新たに 3D スキャナを活用し車両 構造をデータ化したモデル(=③)を試行した。

まず、TSUBAME 上 MW-studio のバージョンア ップによる大規模解析の効率化について確認する。 ver2013 においては MPI クラスタ時に限り、マトリク ス計算(matrix cal)プロセス時に CPU がマルチコア 駆動できずシングルコア駆動となる課題があった。 TSUBAME2.5 において CPU コア 12 ヶ(Thin ノー ド 2CPU × 6 コア)が本来駆動可能であるが、 ver2014 からは MPI クラスタ時も同プロセスでマル チコア駆動が可能となった。さらに、ver2014 では従 来のメッシュ生成設定が変更されており、新たな設 定を利用することでメッシュ数の低減が可能とされて いる。上記 2 点で期待される計算効率化について② モデルにおいて確認を行う。



図1 ②曲面板装荷

次に実際の車両構造の詳細化について検討行う。

今回は新たに 3D スキャナの活用を導入し、実際の 車両約 1.5m 程度の範囲の金属ボディ、バンパーそ れぞれを 3D データとして記録し、メッシュ化やファイ ル形式の変換等を行った上で MW-studio のモデラ 上へインポートを実現した。これらによりシミュレータ 上でのモデル化だけでなく、実物にある程度即した 構造の解析ができることが期待される。なお、図2に おいて、半透明で示すものはバンパーである。



図2③車両構造装荷

結果および考察

図 3 に計算の効率化検討に関する結果を示す。 図 3(a)ではメッシュ数、図 3(b)では計算時間を各計 算条件において示す。②の曲面板装荷モデルにお いて、各バージョン、各メッシュによる比較を行った。 ver2014へのアップグレードにより、マトリクス計算プ ロセスにおける CPU マルチコア駆動による高速化 が確認できた。当モデルではトータル計算時間として 約3割程度の高速化が可能となり、TSUBAMEクラ スタのポテンシャルを十分活用できるようになった。 ー方メッシュ生成に関しては、従来のオブジェクトの 構造特徴点全てをメッシュ起点としていた設定 (=legacy)と、新たに導入されたオブジェクトのエッジ に接する面をメッシュ起点とする設定(=new)の差異 を確認した。結果、今回の設定においてはCST社推 奨のとおり、メッシュ数低減が図れ、それに応じた解 析時間の低減も実現することができた。

なお計算結果に関しては、バージョン違いによる 特性差異はなく、メッシュ設定違いによる特性差異 はごく微小であったことは確認している(結果割愛)。 また、ここでの解析はいずれもSキューでの実施、①

22

においてのみ 6 ノード、②③は 24 ノードという条件で ある。









次に実際の車両搭載を想定した結果を示す。図 4 に図 1 ①②に加え、図 2 ③の車両構造装荷モデル のシミュレーション結果として、レーダ水平方向の放 射特性を示す。この結果からは、①の基本状態から 従来②簡易板モデルで発生した細かなリップルは③ 車両構造モデルにおいて見られないものの、一部角 度にて大きな放射特性の落ち込みの発生が確認さ れる。これらから、細かなリップルは簡易板が 2 次元 的(上下方向で変化がない)形状となっており端部条 件が揃うことで発生していた特殊なものであり、実際 の車両構造では発生の程度が小さいことが想定さ れる。一方で実際の車両搭載において、特定角度で の大幅な利得劣化、検知性能劣化の存在は示唆さ れるため、注意深い搭載条件調整が必要とされる。

さらに図 5 に図 2 ③におけるレーダ断面の電界 分布を示す。図5からは、バンパーとボディの間の広 範な領域に電磁界成分の広がりが確認できることか ら、車両構造の影響をレーダ電波環境の設計の考 慮にいれる必要性が考えられる。これは昨年度トラ イアルにおける簡易板と同様の結果であるが、今回 新たに実際の車両構造においても確認された。

なお、③モデルは 32 億メッシュであり、当方経験 上過去最大メッシュ数となっている。②モデルと比較 すると若干の増加にとどまるが、前述のメッシュ数低 減等計算効率化を図った上での数字であり、実質上 昨年度の 1.5 倍程度の規模のモデルの計算を実現 することができた。ここで③がメッシュ数規模に対し て計算時間が長い結果となっているが、これはメッシ ュの各ノード振り分け時に偏りが発生したことと、 GPUメモリを一部オーバしCPU計算を行ったことが 要因である。この状況の改善やさらなる規模拡大の 可能性として、より多ノードの使用は試みたが、24 ノ ードより多いノードでの解析に課題があり、実施でき ていない。解析モデルによって一部ノードのメモリ使 用量が異常増加する現象が原因であり、今後のソフ トウェアバージョンアップ等での改善が望まれる。

また、3D スキャナを活用したモデル化に関しては 具現化できたものの、レーダ、バンパー、ボディの相 対位置関係の合わせ込み等に課題も見られた。





図5 電界分布 車両構造モデル

23

まとめ、今後の課題

TSUBAME を用い、準ミリ波レーダの自動車搭載 を模擬した大規模電磁界シミュレーションを行った。 今回は新たにさらなる規模拡大への対応として計算 の効率化の妥当性確認と、実際の車両構造に即し たモデル化スキームの開発と車両搭載を想定したシ ミュレーションを実施することができた。これらから、 より実物の車両状況に近い高度なシミュレーション の実現性を示すことができた。

なお、今回は大規模性として昨年度トライアルに比 ベ1.5倍オーダ規模32億メッシュの解析を実現でき たが、さらなる大規模化実現には多ノードの安定活 用が不可欠であろうと考えられる。また TSUBAME 自体の今後のバージョンアップによるポテンシャル の伸長にも期待したい。

参考文献

- [1] 平成 24 年中の交通事故発生状況, 警視庁
- [2] Adv. Radio Sci., 7, 61–65, 2009 79 GHz UWB automotive short range radar – Spectrum allocation and technology trends

利用課題名 大容量の行動関連データを使った最適シミュレーション及び暗黙知の利用 英文: Tacit knowledge and use of optimal simulation using large amounts of data related behavior

佐々木 武

Takeshi Sasaki

所属

株式会社 電通国際情報サービス Information Service International-Dentsu,Ltd. URL http://www.isid.co.jp

我々の課題は、膨大なデータが日々蓄積される今日の消費者生活において、広告業務の媒体計画作成に携わる人 向けの業務システムを提供しており、顧客が求める期日迄に媒体計画を策定する機能を実現することが困難なケー スがあるということである。昨年度、シンプルな課題において高速化が図れたが、より複雑な条件における高速化を 目指し、CPUレベルの並列化、GPUレベルの並列化をチューニング検証することが今回の目的である

Keywords: Media-Mix Optimized Media Planning Unit-Vehicle

背景と目的

広告キャンペーンにおいて、様々な条件 例えば、「地 区」、「媒体種類」、「媒体予算」、「媒体出稿期間」、「最適化 指標」などがあり、その条件から媒体への接触ローデータを 元に、ビジネスロジックの実装をコンピュターリソースを用い て最適化された媒体計画を算出するアプリケーションを 我々は提供している。昨今の広告媒体の状況は取り分け Internet 媒体の種類の多さ、ビジネス・ルールの複雑さな どがめまぐるしい速さで変わっており、媒体組合せが膨大で あり、日々増大している。複数の媒体及びその個々メニュー のうち、目標に対し最適化された媒体計画を出力するため に掛ける時間が膨大になりつつある。集計時間を待つ非効 率性と機械損失を含めた

本プロジェクトでは、昨年度のTSUBAME上での実行時 間「4時間58分」に対し半分の時間「2時間30分」を目標に、 2倍の処理速度を得るために 既存のボトルネック部分 CPU の並列化を行い、GPU 演算に回る部分も大きな分岐 の単位で並列化をめざす。

概要

媒体計画立案のための条件を下記のようにした。

- 広告ターゲット=「4歳以上男性または女性」
- 広告出稿エリア=「関東エリア」
- 対象媒体 A 案=「TV」、「ラジオ」
- 対象媒体B案=「TV」、「ラジオ」、「雑誌」、「新聞」、
 「屋外・交通」、「Internet」
- 各媒体は スポット広告も番組に見立てて集計
- 出稿予算A案=「1億円」(各媒体 10%刻みで構成)
- 出稿予算 B 案=「1億円」(各媒体 10%刻みで構成)
- 最適化指標=広告接触回数「3回」
- 最適化目標=最適化指標到達率「35%」
- 予算許容指数=1.2(倍)

これらの条件を元に、最適化された媒体計画を算出する。

結果および考察

◆現行の処理概要は下記に処理概要フローを示す。

(A 案)

【広告ターゲット(標的)処理】







共通の処理は、従来型の GPGPU の処理内容を踏襲。

GPGPUの(B案)の場合

(A案)においては、「TV」「ラジオ」の組合せが2媒体で 固定されていたので、最終的な GPGPU の処理は、1つの 組合せブロックのまま処理するだけで済む。

(B 案)の場合においては、6媒体の並列処理を行う。 この場合、組合せが少ない媒体新聞などは、他媒体より 先に終了するが、全媒体の組合せ最適を行うには全部が 終了することが必要になる。そのため、管理機能を新たに 構築して、「媒体組合せ」、「予算比の組合せ」、「GPU 集計 の制御」、「共通部分の GPU 結果共有」、「GPU 結果の保 存」の機能を管理機能側が制御し、GPU の演算分と切り分 ける。

◆管理機構概要

管理機構

■媒体組合せ管理機能

◎組合せマトリ	ノックス	生成	機能									
	1)	2)	3)	4)	5)	6)	7)	8)	9)	10)		N)
TV		•	۲	•	•	•	•	•	٠	•	•••	•
ラジオ	•					•	•	•	•			•
雑誌		•				•				•		•
新聞			•				•			•		•
屋外·交通				•				•			• • •	•
Internet					•				•			•

◎組合せ 依存関係作成機能

	主	従			
【1)系】	1)	6)	7)	8)	9)
TV			٠	•	•
ラジオ	•		•	٠	•
雑誌		•			
新聞			•		
屋外·交通				•	
Internet					•



:





※ 複数媒体の媒体組合せは集計開始時に条件指定で きる。

:

 Step1: 全ての媒体において、単媒体の処理を集計する。

Step2: 単媒体処理が終わったもので、2媒体の組合せ が可能なものを「主系」とし、アサイン可能な CPU に対し て処理を指示する。

Step3:「主系」の「予算比率」分の組合せ演算を「GPU」 で集計する。

Step4: その結果を共通で利用するため一度 CPU 側の メモリに保存する Step5:「従系」媒体および予算の組合わせを CPU の 管理機能が組合せを作成し、「GPU に処理依頼」を実行 する。その際、「主系」の結果を共有し無駄な演算をせず に済むようにする。

Step6:「従系」媒体の集計が終了した場合、結果を管 理機構に戻す。

Step7: 管理機構は「従系」で「未集計」の組合せを、新 たに GPU に割り当て集計処理を実施する

Step8: 全ての割り当ての集計が終了したら、集計結果 をファイルに出力し終了する。

【各 GPU での処理】

GPGPU で処理する主要処理の概念図。



実測度の計測:

1) MPI による CPU 側処理の並列化の影響調査

(同一条件での試行回数5回の平均値)

【A 案】2媒体

No.	サーバ様式	経過時間				
1	NormalLinux(NonMPI)	354 分	(5時間54分)			
2	DualCPU Linux(MPI)	312 分	(5時間12分)			
3	DualCPU Linux(MPI)【Tuning】	183 分	(3時間3分)			

CPU 処理の高速化を図り、MPU 処理の昨年比約「1.70 倍」の高速化を実現できた。従来型(一昨年前)の MPI 無し の場合と比較した場合には、「1.93 倍」の高速化が図れた。

【B 案】6媒体

No.	サーバ様式	経過時間				
1	NormalLinux(NonMPI)	675 5	分(11時間15分)			
2	DualCPU Linux (MPI)	596 5	分 (9時間56分)			
3	DualCPU Linux (MPI) [Tuning]	348 5	分(5時間48分)			

媒体数を増やした【B 案】の場合においても、今回の Tuning版・MPUにおける高速処理の比率は【A案】とほぼ 同等であった。(Tuning 無し)MPI比「1.71」倍。MPI 無し・ 比「1.93 倍」という数字であった。

6媒体の組合せにおいて、媒体の特性などがあり新聞や雑誌などは組合せが限定的にしか発生しないため、TV などに比べて合計処理時間が短いため、単純に媒体数の比(2:6)である「3倍」という時間にはなっていない。(NormalLinux NonMPIで「1.9倍」)

2) GPU 並列化の影響調査

(同一条件での試行回数5回の平均値)

【A 案】2媒体

No. サーバ様式	経過時間			
1 DualCPU Linux+CUDA(GPU)	298 分	(4時間58分)		
2 Linux (MPI) [Tuning] + CUDA(GPU) [Tuning]	137 分	(2時間17分)		

MPI+Tuning による高速化係数 = 「2.17」倍

【B案】6媒体

No. サーハ禄式	経過時間	
1 DualCPU Linux+CUDA(GPU)	571 分 (9時間31分)	
2 Linux (MPI) [Tuning] + CUDA(GPU) [Tuning]	271 分 (4時間31分)	

MPI+Tuning による高速化係数 = 「2.1」倍

媒体数を増やした「B 案」においても、2媒体の「A 案」とほ ぼ同じで、MPI+Tuningを行った方が約「2.1」倍高速化が 実現できた。ただし、「B 案」の方が「0.07」倍ほど、高速化 の効率が落ちている。この部分は、複数媒体の組合せ集計 において「管理機能」が存在するオーバーヘッドが、若干発 生している。

まとめ、今後の課題

今期の目情である2媒体で「2時間 30 分」以内は、実現 できた。課題については、(B 案)の場合において、6媒体 の並列処理で、組合せが少ない媒体新聞などは、他媒体よ り

先に終了するが、全媒体の組合せ最適を行うには全部が 終了することが必要になる。結果一部の GPU のリソースが 「待ち」になっている。

これ以上の高速化を図る場合、一番長く処理時間が掛る媒体を更に並列処理をすることが必要である。今回の試みで はその部分まで踏むこむことが出来なかった。1媒体あたり の処理を内部で細分化して、共通機構側に進捗情報を共 有する仕組みが新たに必要でありこの部分の改善が今後 の高速化を図るチューニング・ポイントとなる。

利用課題名 減衰を考慮した高周波数領域までの音響構造連成シミュレーション大規模化技術の検討

英文: Study of large scale simulation technology of acoustic-structural coupling with dumping at a high frequency range

利用課題責任者 笹島 学

Manabu Sasajima

所属 フォスター電機株式会社

Foster Electric Co., Ltd. URL http://www.foster.co.jp

邦文抄録

小型の音響機器は、狭い音響伝達経路での空気の粘性による減衰効果の影響が相対的に大きくなる。しかし、一般的な音響解析手法はこの影響が少ないものとして、無視して行われることが多い。また、解析対象とする周波数を 人の可聴周波数帯域とした場合、特に高い周波数での振動を表現するには、波長に依存した非常に小さなサイズ の要素分割が必要となる。しかし、要素数が膨大となり、計算規模が大幅に増加してしまう問題が生じるため実用的 な解析は困難であった。本件は空気粘性を考慮した、可聴域の高周波数帯域までの音響構造連成シミュレーション 実用化のための大規模解析手法を検討する。

英文抄録

In the case of small audio equipment, effect of damping of the attenuation material and the shape of the acoustic transmission path effect are larger than the case of general audio equipment. However, acoustic analysis is performed without regard to this effect in general. The audible frequency band of human frequency to be analyzed, the element size must be very small size that depends on the wavelength. However, analysis became difficult by large number of elements. This study is to examine the large-scale analysis for structural acoustic coupled simulation that considers the air viscosity.

Keywords: 音響機器、有限要素法、音響構造連成解析、空気粘性

背景と目的

イヤホンなどの小型の音響機器では、音響伝達経路 の狭さによる減衰効果が音響特性に与える影響が他 の音響問題と比べて相対的に大きい。しかし、一般的 によく行われている音響解析手法は空気の粘性による 影響が少ないものとして、この影響を無視して行われる ことが多い。よって、一般的な音響解析手法を小型の 音響機器に適用すると、実験結果とは大きく異なったシ ミュレーション結果となってしまう。また、特に閉じた狭 い空間では音源となる振動板の振動が周囲の空気の 圧力変動による影響を受けることもわかっているが、一 般的な音響解析手法は空気の圧力である音圧を未知 数として定式化されるため、音源となる振動板の振動を、 音響解析と連成させて解析することは簡単ではなかっ た。一方、解析対象とする周波数の範囲を、人の可聴 周波数帯域とされている 20Hz から 20kHz とした場合に は、特に高い周波数で振動の現象を表現するためには、 波長に依存した要素サイズが必要となることから、要素

の最大サイズを約 3mm 以下にする必要がある。さらに、 空気要素の節点変位を未知数として定式化した場合は、 スムーズに節点を変位させるため、さらに領域の要素 分割数を増やし、要素サイズを小さくする必要がある。 しかし、解析モデルの要素数が膨大となり、計算規模 が大幅に増加してしまう問題が生じ、一般的なワークス テーションでは実用的な解析は困難であることがわか ってきた。さらに、スーパーコンピュータ TSUBAME を用 いても、その解析時間から、所望の解析を行うことは難 しいことがわかった。本件ではスーパーコンピュータ TSUBAME を用いて空気の粘性を考慮した、可聴域の 高周波数帯域までの音響構造連成大規模解析のシミ ュレーション実用化のための手法を検討する。

概要

(1)音響構造連成有限要素の定式化

直交デカルト座標系と、四面体定ひずみ要素を考える。要素内の任意の点でのx方向変位を u, y方向変位

を u_y 、z方向変位を u_z とすると、ひずみエネルギ \tilde{U} は以下のように表せる。

$$\widetilde{U} = \frac{1}{2} E \iiint_{e} \left(\frac{\partial u_{x}}{\partial x} + \frac{\partial u_{y}}{\partial y} + \frac{\partial u_{z}}{\partial z} \right)^{2} dx dy dz \cdots (1)$$

ここで、Eは体積弾性率である。変位の時間微分をuと表現すると、運動エネルギ \widetilde{T} は以下のように表せる。

$$\widetilde{T} = \frac{1}{2} \iiint_{e} \rho\{\dot{u}\}^{T} \{\dot{u}\} dx dy dz \qquad \cdots (2)$$

ここで、 ρ は要素密度、Tは転置行列を表す。また、粘性エネルギ \tilde{D} は以下のように表せる。

$$\widetilde{D} = \iiint_{e} \frac{1}{2} \{ \overline{T}^{T} \} \Gamma dx dy dz \qquad \cdots (3)$$

 $\{\overline{T}\}$ は粘性による応力ベクトル、 Γ はひずみベクトルで

ある。さらに、ポテンシャルエネルギ \widetilde{V} は以下のように 表せる。

 $\widetilde{V} = \int_{\Gamma} \{u\}^T \{\overline{P}\} d\Gamma + \iiint_e \{u\}^T \{F\} dx dy dz \quad \cdots (4)$

ここで、 $\{\overline{P}\}$ は表面カベクトル、 $\{F\}$ は物体カベクトル、 $\int_{\Gamma} d\Gamma$ は要素境界での積分を表す。次に、粘性減衰を 考慮した音響解析モデルとして要素運動方程式の定式 化を考える。全エネルギ \widetilde{E} は次式となる。

$$\widetilde{E} = \widetilde{U} + \widetilde{D} - \widetilde{T} - \widetilde{V} \qquad \cdots (5)$$

さらに、以下のラグランジュの方程式を用いると、要素 離散化方程式が求められる。

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial \dot{u}_{ei}} - \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial u_{ei}} + \frac{\partial \widetilde{U}}{\partial u_{ei}} - \frac{\partial \widetilde{V}}{\partial u_{ei}} + \frac{\partial \widetilde{D}}{\partial u_{ei}} = 0 \qquad \cdots (6)$$

ここで、 $\{u_e\}$ 、 $\{\dot{u}_e\}$ は節点変位ベクトル、節点速度ベクトルである。式(1)~式(4)を用いて式(6)を整理すると、次の要素離散化方程式を得る。ただし、変位は角周波数 ω の周期応答としている。

$$-\omega^{2}[M_{e}]\{u_{e}\}+[K_{e}]\{u_{e}\}+j\omega[C_{e}]\{u_{e}\}=\{f_{e}\}\quad\cdots(7)$$

ここで、 $[M_e]$ 、 $[K_e]$ 、 $[C_e]$ はそれぞれ要素質量行列、要素剛性行列、要素減衰行列である。また、 $\{f_e\}$ は節点カベクトルである。この方程式を変位について解けば、全ての節点変位が求められる。

(2) プログラムについて

プログラムの開発言語は FORTRAN、コンパイラは Intel コンパイラを用いている。このプログラムを用い、 TSUBAME 上で約100万要素の構造音響連成モデル を解析してみたところ 1 周波数あたり約90時間かかる ことがわかった。全可聴領域の周波数特性を把握する ためには少なくとも数十回の解析が必要になることを 考えると、一つの周波数特性を得るために1から2カ月 かかることになり、解析時間が実用上の大きな問題と なっていた。そこで、行列ソルバの改良により解析時間 の短縮をはかった。

目標は従来プログラムを用いた場合の解析時間の 十分の一以下とし、実用化の数値目標としては、100万 要素程度のモデルを解析する場合の解析時間を、1 周 波数あたり「30 分以下」とした。この場合、20 周波数分 の計算を約10時間でできるため、実用的な計算時間で あると考えた。プログラムの計算プロセスごとの時間を 調査したところ、解析時間の大半はスカイライン法によ る複素連立1次方程式を解くプロセスに費やされている ことが分った。そこで、プログラムの行列ソルバを効率 の良いものに入れ替え、解析時間全体の短縮を試み た。



図1 使用した四面体要素と解析モデル、解析例

今回は、直接法で比較的取り扱いが容易ということで、インテルのマスカーネルライブラリ(MKL)から直接 法の疎行列連立一次方程式ソルバである PARDISO を 導入した。PARDISO は、大規模な疎行列対称連立線 形方程式を解くことができ、高速で、メモリ効率がよく、 安定しているソフトウェアとされている。また、複素連立 線形方程式も解くことが可能である。

結果および考察

図1に今回使用した四面体要素、および例として、約 165,000 要素の解析モデルと解析結果を示す。また、解 析に用いた全てのモデル名称と概略の要素数を表1に まとめる。各モデルの要素は全て四面体で、節点は×、 y、z方向の3自由度を持っているが、境界条件や形状 等は統一していないので、計算の条件としては完全に 同一にはなっていない。

図2に行列ソルバにスカイライン法を用いた従来プロ グラムと、行列ソルバを PARDISO に置き換えたプログ ラムを用いた解析について、各解析モデルの解析時間 を示す。縦軸の解析時間は対数目盛りとしてある。 PARDISO を用いることによって、どのモデルにおいても 解析時間は約100分の1となっていることが分る。可聴 領域全域の周波数特性を把握するためには少なくとも 数十回の解析を繰り返すことを考えると、実用上の効 果は非常に大きいと思われる。たとえば、これまで1カ 月必要であった周波数特性を得るための計算が半日 でできるようになった。

また、この計算時のメモリ使用量をまとめ図3に示す。 この図より、PARDISO を用いることによって、どのモデ ルにおいても使用メモリ量は約 4 分の1となっているこ とが分る。従来プログラムと比べ大幅に使用メモリの削 減ができていることが確認できた。

表 1	テストモデル名は	および概略要素数
1		

モデル名	概略要素数(個)
50K model	50,000
165K model	1,650,000
600K model	600,000
1M model	1,000,000

まとめ、今後の課題

スーパーコンピュータ TSUBAME を用いた空気の粘

性を考慮した可聴域の高周波数帯域までの音響構造 連成大規模解析のシミュレーション実用化のため、解 析の効率化手法を検討した。



図2 各モデルの解析時間比較



図3 各モデルの使用メモリ量比較

従来のプログラムでは、解析時間が実用上の大きな 問題となっていた。そこで、行列ソルバの改良により解 析時間の短縮を図った。今回は疎行列連立一次方程 式の直接法ソルバである PARDISO を導入し、いくつか のモデルを計算してみたところ解析時間が約100分の 1、使用メモリ量が約4分の1になった。よって、本検討 での目標は十分に達成できた。

今後、従来解析が困難であった全可聴帯域での、高 精度の音響解析シミュレーション技術の実用化が進む と考えられる。引き続き、PARDISOの解析規模の上限 を確認するとともに、場合によってはさらなる大規模化 のため、反復法の行列ソルバも試していきたい。

利用課題名 広域都市環境の大規模計算による検討 英文:Large scale simulation for the global urban environment

利用課題責任者 佐々木 澄

Sasaki Kiyoshi

所属: 清水建設(株)技術研究所 Affiliation: Institute of Technology, Shimizu Corporation URL: http://www.shimz.co.jp

本利用課題では、「商用アプリバンドル型トライアルユース」に提供された商用アプリを活用して、TSUBAME スパコンの計算資源を利用するとともに、広域都市環境評価における大規模計算検討を行った.また、プリ・ポストの自動処理環境を構築し、広域市街地や複雑形状市街地を対象として最大2億メッシュ規模の都市環境解析を実施した.本商用アプリにおいてその大規模計算の性能特性を確認し、システムの実用性を明らかにした.

A large scale simulation for a global urban environment is investigated using commercial software which is provided on TSUBAME2.5 supercomputer. An automatic Pre-post processing system has been developed to handle the large-scale model instead of using the GUI system of the software. Urban environment analysis of 200M meshes has also carried out to clarify the performance of the software in the computation of such large-scale model.

Keywords: Urban Environment, Large-Scale Simulation, Building, Commercial Software

背景と目的

新たに高層建物,あるいは大規模構造物を建てる際 には,風の状況変化に従う影響は無視できない場合が 多く,風環境や風騒音などの問題が生じる場合もある. こうした建設による問題や障害の発生を未然に防ぐため には,風環境の変化や風騒音の発生状況を風洞実験 や数値流体計算などの方法により予測し,事前に調査・ 検討および対策の立案を行う必要がある.都市部では, 高層ビルが密集し,周辺から受ける影響が大きくなるが, 実験装置の制約などにより風洞実験による予測は限界 があり,広域を考慮できる大規模数値流体計算の実施 が必要となる.

前年度では、TSUBAME スパコンの「商用アプリバン ドル型トライアルユース」に提供された商用アプリを活用 し、利用計算環境の整備と、実中層市街地の建物群に 対象とした風環境解析を実施した.また、数千 CPUコア 規模より本アプリの並列性能を調べており、アプリのシミ ュレーションのコア部分に対して大規模並列処理とその 計算時間の短縮化を確認していた.なお、本検討には 1 千万格子規模(現状の建築分野における大規模計算 と相当)を対象として, 商用アプリのプリ・ポストよりモデ ルの作成と可視化までの一連処理を確認していた.

本利用課題では,数千万また数億計算格子規模の 風環境解析を対象として,モデルの作成や計算結果の 可視化処理とその計算の安定性等,商用アプリの検討 課題として行い,必要となる環境を整備するとともに,本 商用アプリの大規模計算環境を確立する.

概要

「商用アプリバンドル型トライアルユース」に提供され た商用アプリは、風・温熱環境や騒音などの建築環境 問題の評価に多くの実績を持っているアプリケーション として知られているため、本利用課題はその応用検討を 重視せず、TSUBAME2.5 計算資源の利用による大規 模計算検討と大規模データハンドリングおよび一連自 動計算環境の構築を行った.ここで、シミュレーションの 部分について商用アプリのコア部分のバッチ処理を活 用して、プリ・ポスト部分ついて独自な環境を整備した. また、5 千万および2億計算メッシュ規模の広域市街地 などの風環境解析を実施し、構築された計算環境の有
効性を明らかにした.

結果および考察

1. データハンドリング

GUI は視認性に優れ, 直感的な操作ができるため, 利便性の観点で多くの商用アプリが整備されている. し かしながら, 数億計算メッシュ規模の扱いや大規模処理 を行う際には, 現状の計算機の性能よりその生産性が 著しく低下し, 本来のアプリの性能を十分に発揮できる ケースがある. 特に, TSUBAME の計算環境ではデー タハンドリングや計算処理などが遠隔操作より行われて いるため, その操作性が不適である.

本利用課題では、その大規模処理を行うため、図-1 に示すように既存の商用アプリに提供された処理プロセ スに対して新たな一連の自動処理環境を構築していた. まずは、大規模モデルの作成について独自のプリ自動 処理環境を構築して、メッシュデータの変換などにより 本商用アプリの必要な計算モデルを作成した.また、計 算部分について商用アプリのバッチ処理より行われて おり、得られた計算結果はデータの変換より独自の自 動ポスト処理より可視化される.

これよりすべての作業は自動的に行われており,大 規模モデルの取扱いに対してモデルの作成から解析 及び可視化の一連のプロセスはスムーズに行われる.



(a) 商用アプリの既存処理方法



(b) 本課題の大規模計算処理方法図-1 計算データハンドリング

2. 計算モデルと結果

本課題で構築した自動処理環境の有効性を確認する ためには、広域市街地また複雑形状市街地を対象とし て、計算モデルの作成と可視化およびシミュレーション を行った.図-2には4km×4km広域市街地の計算領域、 計算メッシュ、および計算から得られた地上50mの風速 と建物壁面風圧コンターの拡大図を示す.計算メッシュ は非構造格子であり、その全体は約5千万メッシュであ る.風上側の高層建物群から発生されたウェークは、周 辺に与える影響も確認できる.



(a) 計算領域



(b) 計算メッシュの一部拡大図



(c) 風速・風圧コンターの一部拡大図 図-2 広域市街地

(様式20)成果報告書



大規模計算を実現できており、本商用アプリのシミュレ ーションコアの有効性を確認できた.今後は計算環境 等を応じて本商用アプリを積極的に活用していきたいと 考えている.

(a) 計算領域



(b) 計算メッシュとその拡大図



(c) 風速・風圧コンター図-3 複雑形状市街地

一方,図-3には1.6km×1.6km市街地であるが,建物 形状が複雑であり,その形状を再現するために非常に 高解像度の計算メッシュを利用する必要がある.図-3(b) は計算メッシュとその一部拡大図を示す.建物形状の 他,ベランダなども細かく再現されることが分かる.全体 は約2億計算メッシュである.図-3(c)は計算から得られ た地上5mの風速と建物壁面風圧コンターとその拡大 図を示す.建物形状の影響や周辺による影響等は確認 できる.

まとめ、今後の課題

本利用課題では、「商用アプリバンドル型トライアルユ ース」に提供された商用アプリの活用および大規模計 算検討を行った. TSUBAME 計算環境では本商用アプ リ GUI よりモデル作成・可視化等、遠隔操作で大規模 データハンドリングとしては困難であることを確認した. また、本商用アプリ GUI 依存しない新たな独自のプリ・ ポスト処理環境を構築し、データフォーマットの変化作 業と自動バッチ処理の活用により数億メッシュレベルの

平成26年度 TSUBAME 産業利用トライアルユース 成果報告書

利用課題名 三次元電磁界シミュレータを用いた静電気放電イミュニティ試験に於ける PCB/Package/Chip のイミュニティ解析 (継続課題)

英文: Immunity analysis of PCB/Package/Chip in the electrostatic discharge test using the three-dimensional electromagnetic field simulator

賀 文寿、永野 民雄

Fumikazu Ga, Tamio Nagano

所属: ルネサスシステムデザイン株式会社

Affiliation: Renesas System Design Co., Ltd.

URL: http://www.renesas.com/

静電気放電(ESD)イミュニティの実験環境を含む大規模モデルに対して、3次元電磁界シミュレータによる ESD イミュニティ解析を検討した。シミュレーションと実測の相関性を確認し、実用的な時間範囲内で解析できることを確 認した。スーパーコンピューターTSUBAME による大規模 3 次元電磁界解析は、ESD イミュニティ設計に有用であ ることを示した。

Electrostatic discharge (ESD) immunity analysis using 3-dimensional (3D) electromagnetic field simulator for large-scale models, including ESD immunity test environment, have been studied. The correlation between simulations and measurements is confirmed, and the analysis can be finished within a practical time. The large-scale 3D electromagnetic field analysis by the TSUBAME supercomputer is demonstrated to be useful in designing ESD immunity.

Keywords: 電磁界シミュレーション Electromagnetic field simulation、静電気放電 Electrostatic discharge(ESD)、イミュニティ Immunity、プリント回路基板 Printed Circuit Board (PCB)、 大規模集積回路 Large Scale Integration (LSI)

背景と目的

電子機器の低電圧化、高速化に伴い、静電気が起 因の誤動作が発生しやすくなってきている。静電気放 電(ESD)による破壊や誤動作を防止するため、ESD イミュニティ試験[1]が規格化され、製品に対する ESD イミュニティ試験が行われている。

低コストで ESD イミュニティに強い PCB/Package/ Chip を設計するには、ESD イミュニティ試験でノイズ がどの経路をたどってチップに伝搬し、誤動作を引き起 こしているかを理解することが重要である。一つのアプ ローチとして、3 次元電磁界シミュレーションによるノイ ズの可視化がある[2]、[3]。

一般の PC 環境では、基準グラウンド面、水平結合 板、ESD ガン、PCB/Package/Chip 等を含む ESD イ ミュニティ試験の実環境を 3 次元電磁界シミュレータで 解析することは、使用メモリ、解析時間の観点から困難 である。

本プロジェクトでは、スーパーコンピューター

TSUBAME を利用し、ESD イミュニティ試験の 3 次元 電磁界解析を行い、ノイズの伝搬経路の可視化を含む ESD イミュニティの設計手法を構築することを目的とし た。

平成 25 年度に同課題名で、3 次元電磁界解析によるノイズ伝搬のメカニズムについて検討を行った。しかし、実機試験結果とシミュレーションとの比較考察には 至らず、LSI モデルや、解析条件などについて課題が 残る結果となった[4]。

本検討では、平成25年度の課題に対して、LSIモ デル、ケーブルモデル、励起源などをより実体に合せて 3次元電磁界解析を実施し、試験と解析結果は傾向一 致という結果を得た。また、ノイズの伝搬経路の可視化 を実施し、実用的な時間範囲内で解析できることを確 認した。

前回と今回の検討を通じて、TSUBAMEによる大規 模3次元電磁界解析は、ESDイミュニティ設計に有用 であることを示した。 概要

CST STUDIO SUITE 2014 を用いて[5]、ESD イミュニティ解析の検討を行った。

シミュレーションモデルを図 1 に示す。実試験環境に 合わせて、基準グラウンド面、水平結合板、ケーブル、 ESD ガン[6]、絶縁シート、PCB、LSI 等をモデル化し た。図 1 のモデルを用いて 3D 電磁界解析を行い、試 験との比較、ノイズの伝搬経路の可視化を行った。





図1 シミュレーションモデル

結果および考察

PCB 上電源配線パターンが共通と分離の 2 種類の 評価ボード(以降、電源共通ボードまたは電源分離ボ ードと呼ぶ)に対して、IEC61000-4-2 に準拠した試験 環境で、ESD ガンによる接触放電試験を実施した。

試験結果により、LSI の誤動作耐圧は、電源共通ボ ードより電源分離ボードの方が低い。よって、LSI に伝 搬するノイズは、電源分離ボードの方が大きいと考えら れる。

図 2 に Chip の電源端子でのノイズ波形のシミュレ ーション結果を示す。図 2(a)に前年度モデルのノイズ 波形を示すように、LSI に伝搬するノイズは電源共通 ボードの方(青線)が大きい。この結果は試験傾向と異 なる。 そこで、下記のモデル改良を行い、3次元電磁界解 析を実施した。

-LSI モデルの電源構造を改良する

- ーケーブルモデルの長さ、設置状態をより実体に 合わせる
- -ESD ガンの出力は実測に合うように、励起信号を 調整する

図 2(b)に改良モデルのノイズ波形を示す。LSI に伝 搬するノイズは電源分離ボードの方(赤線)が大きい。 試験と解析結果は傾向一致という結果が得られた。

ノイズの伝搬経路を可視化した表面電流分布を図3 に示す。TSUBAMEを使用して、図1に示すモデル 全体の表面電流分布が得られた。しかし、表示用 PC マシンの性能制限で、局部の表面電流分布しか表示で きず、課題があった。



図 2 シミュレーション結果



図3 表面電流分布

今回のシミュレーション時間を表1に示す。約200M メッシュ規模のモデルに対して、TSUBAMEの4ノー ドでの計算時間は約5hであり、実用的な時間範囲内 で解析できることを確認した。

PCとTSUBAME の計算時間の比較を図 4 に示 す。一般的な PC 環境で、基準グラウンド面、水平結合 板、ESD ガン、PCB/Package/Chip 等を含む ESD イ ミュニティ試験の実環境を解析すると、推定の計算時 間は 1200 h 以上となる。一方、TSUBAME での計算 時間は約 5 h で、240 倍以上の時間短縮効果が得ら れた。

表 1. シミュレーション時間

メッシュ数	使用ノード数*	計算時間
200M	4	$5 \mathrm{h}$
*1 / ― ド・19CDU フア 3CDU		





図4 PCとTSUBAME の計算時間の比較

まとめ、今後の課題

TSUBAME を利用して、ESD イミュニティの実験環 境を含む大規模モデルに対して、3 次元電磁界解析を 実施した。

LSI モデル、ケーブルモデル、励起源などをより実体 に合せて 3 次元電磁界解析を実施した結果、試験と解 析結果は傾向一致の結果を得た。また、200M メッシュ 規模のモデルに対して、TSUBAME の 4 ノードでの計 算時間は約 5 h であった。これらの結果から、 TSUBAME による大規模モデルの ESD イミュニティ 解析の実用性を確認できた。本技術はノイズの可視化、 誤動作のメカニズム解明、イミュニティ設計・対策の応 用に期待される。 ノイズの可視化の検討を行った。しかし、大規模モデ ルのノイズ可視化データに対して、表示用 PC マシンの 性能が追いつかず、全体表示困難の課題があった。

今後、メッシュ数を削減して、計算の高速化、表示の 容易化を図る。

謝辞

本プロジェクトにおきまして、多くのご支援を頂いた東 京工業大学学術国際情報センター共同利用推進室、 CST STUDIO SUITE ソフトウェアのサポートを頂いた 株式会社エーイーティーに深く感謝いたします。

参考文献

- IEC61000-4-2, Testing and measurement techniques - Electrostatic discharge immunity test, Edition 2.0, 2008.12
- [2] http://www.fujitsu.com/jp/solutions/businesstechnology/tc/fields/cae/poynting/esd-pcbchassis.html
- [3] 賀 文寿,秋山 雪治,白井 淳一, "電磁界シミ ュレーションによる ESD イミュニティの解析"2013
 年第 27 回エレクトロニクス実装学会春季講演大 会 14C-11
- [4] 秋本 哲也、"三次元電磁界シミュレータを用いた 静 電 気 放 電 イミュ ニ ティ 試 験 に 於 け る PCB/Package/hip のイミュニティ解析" 平成 26 年度 東京工業大学 TSUBAME 産業利用シン ポジウム pp.147~150
- [5] https://www.cst.com/
- [6] S. Caniggia, F. Maradei, "Circuit and Numerical Modeling of Electrostatic Discharge Generators," IEEE Transactions on Industry Applications, Vol. 42, pp. 1350-1357, Nov. 2006.

平成 26 年度 TSUBAME 産業利用トライアルユース 成果報告書

利用課題名 ワイヤレス電力伝送による漏えい電波の環境解析技術の研究開発

英文 Research and Development of Environment Analysis Technique of Leaked Electromagnetic Field from Wireless Power Transfer

利用課題責任者 池田 和彦 Kazuhiko Ikeda

所属 株式会社パナソニック システムネットワークス開発研究所

Panasonic System Networks R&D Lab. Co., Ltd. http://panasonic.co.jp/avc/psnrd/

邦文抄録(300字程度)

家庭用電子機器などの充電に用いられるワイヤレス電力伝送(WPT:Wireless Power Transfer)システム が近年検討されている.WPTシステムから漏えいする電磁界は他の様々な無線機器に影響を与える可能性 があり、その干渉影響を定量的に評価する必要がある.WPTシステムの設置が想定される戸建て住宅など では、近傍に無線通信機器が存在し、それらに影響を及ぼす恐れのある周波数帯の漏えい電磁界評価が必 要である.しかしながら、戸建て住宅全体の漏えい電磁界を測定するには多大な時間と労力がかかり、ま た電磁界シミュレーションでは空間メッシュ数が大規模になる課題がある.そこで本報告では、WPTシス テムの高調波である 87 MHz、815 MHz、2.497 GHzの漏えい電界の戸建て住宅内特性を、スーパーコンピ ュータ TSUBAME2.5 を用いて電磁界解析し、測定結果と比較検証する.

英文抄録(100 words 程度)

The wireless power transfer (WPT) system for electronics devices has been actively developed in recent years. Since the electromagnetic field leaked from the WPT system may cause the false operation of other devices, it is required to quantitatively evaluate the electromagnetic interference. In the housing environment, the WPT system is located generally close to the wireless communication devices. Therefore, the quantitative evaluation of the leaked electromagnetic field in various installation environments is indispensable. However, the measurement in the whole house involves immense amount of time and effort, and the electromagnetic simulation requires the enormous analysis meshes because of the volume of the house. In this paper, we evaluate the leaked electric field at 87 MHz, 815 MHz and 2.497 GHz in the house by electromagnetic simulation using supercomputer TSUBAME 2.5. The comparison between the simulation and measurement results is discussed.

Keywords: Electromagnetic simulation, Wireless power transfer, Leaked electromagnetic field

1. まえがき

近年,電気自動車や家庭用電子機器などの充電に用いら れるワイヤレス電力伝送(WPT:Wireless Power Transfer) システムが検討されている[1],[2].WPT システムから漏え いする電磁界は他の様々な無線機器の誤作動の要因にな り得るため,漏えい電磁界の強度規制値が盛んに議論され ている.多種多様なWPT システムからの漏えい電磁界に よって引き起こされる干渉問題が重要な課題となってお り,様々な設置環境における定量的な評価がWPT システ ムの実現には必要不可欠である.

例えば、戸建て住宅では、WPT システムの近傍に様々 な無線通信機器が存在し、それらに影響を及ぼす恐れのあ る周波数帯の漏えい電磁界評価が必要である.しかしなが ら、戸建て住宅内全体の漏えい電磁界強度を測定するには 膨大な時間と労力がかかるため、電磁界シミュレーション を用いて漏えい電磁界分布を解析することが望ましい.し たがって、WPT システムの設置が想定される戸建て住宅 や商用施設における、広範囲の周波数領域の漏えい電磁界 の解析技術が必要である.戸建て住宅全体を含む電磁界シ ミュレーションは大規模な空間メッシュでの解析となる ため、並列処理によって大規模メッシュの解析が可能なス ーパーコンピュータの利用が有効となる.

本利用課題では、ラジオ受信機,携帯端末,無線 LAN ルータへの干渉を想定し,WPT システムの高調波である 87 MHz,815 MHz,2.497 GHz の漏えい電界の戸建て住宅 内特性をスーパーコンピュータ TSUBAME2.5[3]を用いて 電磁界解析する. 戸建て住宅及び漏えい電界の波源をモデ リングして住宅モデル内の漏えい電界分布を解析し, 住宅 内における一部の場所での測定結果と比較することで, 解 析モデルの妥当性を検証する.また, 各周波数における使 用ノード数と解析時間の関係を把握し, 電磁界シミュレー ションにおける TSUBAME2.5 活用の有効性を検討する.

2. 解析モデルと解析条件

表1に解析条件を示す.計算機システムはスーパーコン ピュータ TSUBAME2.5, 電磁界解析には有限積分法を用 いた電磁界シミュレータである CST 社の MICROWAVE STUDIO[4]を使用する. 解析周波数は, ラジオ受信機, 携 帯端末, 無線 LAN ルータへの干渉を想定し 87 MHz, 815 MHz, 2.497 GHz としている.

計算機システム		TSUBAME 2.5	
電磁界解析		MICROWAVE STUDIO	
解析周波数		87 MHz, 815 MHz, 2.497 GHz	
波源	87 MHz	直径 5cm 巻き数 3T コイル	
	815 MHz	88.5×88.5 mm パッチアンテナ	
	2.497 GHz	28.9×28.9 mm パッチアンテナ	
受信 機器	87 MHz	電界プローブ	
	815 MHz	スマートフォン	
	2.497 GHz	無線 LAN ルータ	
住宅モデル		戸建て実験住宅モデル	
波源の配置位置		1 階リビングの TV ラック内	
受信機器の配置位置		1階キッチン,2階子供部屋	

表1 解析条件

図1に本検討で用いる住宅モデルを示す.住宅モデルと して、パナソニック保有の戸建て実験住宅をモデリングし ている.住宅モデルの大きさは19×14×8mである.

図2に波源モデルを示す.それぞれの周波数で高い電界 強度を放射するために周波数ごとに波源モデルを設計し ており,87 MHz では直径5 cm 巻き数3T のスパイラルコ イル、815 MHz では88.5×88.5 mm 素子のパッチアンテナ, 2.497 GHz では28.9×28.9 mm 素子のパッチアンテナを波 源として用いる.

図3に受信機器モデルを示す.87 MHz では電界プロー ブ,815 MHz ではスマートフォン(端末下部のモノポール アンテナ),2.497 GHz では無線 LAN ルータ(端末側部 のダイポールアンテナ)を受信機器として用いる.

図4に波源の配置位置及び観測区間の場所(=受信機器の配置位置)を示す.波源は1階リビングの壁掛けTVへの電力伝送を想定し,1階リビング壁面のTVラック内に配置している.波源の配置向きは,図1及び図2の座標軸



図2 解析モデル(波源)





(b) 815MHz



-Q

(a) 87MHz

(a) 1階

図3 解析モデル (受信機器)



(b) 2階

図4 波源の配置位置と観測区間(受信機器の位置)



図1 解析モデル (戸建て実験住宅)

の通りであり,壁面に対してコイルまたはパッチアンテナ が水平(=地面に対して垂直)となる.また,様々な無線 機器の設置が想定される1階キッチン及び2階子供部屋に 図3の受信機器を配置し,図4に示す観測区間内を移動さ せた場合の電界強度または受信電力を観測する.

3. 解析結果と測定結果の比較

本章では,住宅内の漏えい電界について解析結果と測定 結果を比較検証し,解析モデルを構築する.解析周波数 87 MHz,815 MHz,2.497 GHzの順で検討し,全ての周波 数において解析結果と測定結果の差分が小さい解析モデ ルの構築が目標である.

3.1.87 MHz の解析結果と測定結果の比較

87 MHz では,解析結果と測定結果の比較の指標として 電界プローブで観測した電界強度を用いる.

図5に初期住宅モデルを示す.初期住宅モデルは,住宅 モデルの各構造に設定する材質を4種類のみとした簡易 モデルであり,屋根・外壁・内壁の材質を木に,地面・石 垣の材質をコンクリートに,玄関のドア・浴室・太陽光パ ネル・屋外設備の材質を金属に,窓ガラスの材質をガラス に設定している.

図 6 に初期住宅モデルにおける電界強度の解析結果と 測定結果の比較を示す.波源の送信電力は10dBmとし,







図 6 初期住宅モデルでの電界強度(87 MHz)

電界プローブを1階キッチン及び2階子供部屋の観測区間 内を移動させた場合の電界強度の解析結果と測定結果を 記載している.電界強度は3軸合成値とした.図6より, 1 階キッチンにおいて解析結果と測定結果の電界強度の 差分が大きいことがわかる.これは,初期住宅モデルに実 験住宅との差異があるためと考えられ,住宅モデルの改良 が必要である.

図7に住宅モデルの改良箇所を示す.初期住宅モデルと 実験住宅との差分として,以下の8項目を抽出した.

- ① 基礎のコンクリート内部の鉄筋を追加
- ② 階層間の金属製の梁を追加
- ③ バルコニー床の材質を変更(鋼板を模擬)
- ④ 階段手すりの金属製の支柱を追加
- ⑤ 窓ガラスの材質を変更(UV カットガラスを模擬)
- ⑥ 屋根の材質を変更(遮熱仕様鋼板を模擬)
- ⑦ 外壁の材質を変更(サイディング材を模擬)
- ⑧ 内壁と天井の材質を変更(石膏ボードを模擬)







⑥ 屋根の金属化

 ④ 階段手すりの支柱追加

⑦ 外壁の材質変更



⑤ 窓ガラスの材質変更

図7 住宅モデルの改良箇所



図8 改良住宅モデルでの電界強度(87 MHz)

図 8 に①~⑧の項目を全て反映した改良住宅モデルに おける電界強度の解析結果と測定結果の比較を示す.初期 住宅モデルでは差分が大きかった 1 階キッチンで解析結 果の電界強度が増大し,測定結果との差分が低減すること が確認できる.改良住宅モデルを用いることで,観測区間 における解析結果と測定結果の電界強度の区間平均値の 差分を1階キッチンでは2.2 dB,2階子供部屋では2.0 dB まで低減できている.また,①~⑧の項目をそれぞれ検証 した結果,①基礎内部の鉄筋追加,③バルコニー床の金属 化,⑦外壁の材質変更が87 MHzの電界強度に与える影響 が特に大きいことを確認している.

3.2.815 MHz の解析結果と測定結果の比較

815 MHz では,解析結果と測定結果の比較のための指標 として,受信機器(スマートフォン)で観測した受信電力 から波源の送信電力を減算することで算出した伝搬損失 を用いる.住宅モデルとしては,87 MHz で構築した改良 住宅モデルを使用する.

図 9 に改良住宅モデルにおける伝搬損失の解析結果と 測定結果の比較を示す.815 MHz では波長が観測区間より も短く,区間内にヌルが多数存在するため,伝搬損失の



図9 改良住宅モデルでの伝搬損失(815 MHz)



図 10 改良住宅モデルでの伝搬損失(2.497 GHz)

移動区間中央値(区間長:4波長)を算出してグラフに記載している.図9より,1階キッチン,2階子供部屋共に解析結果と測定結果の電界強度がよく一致することが確認できる.観測区間における区間中央値の差分は1階キッチンでは0.1 dB,2階子供部屋では1.5 dBである.

3.3. 2.497 GHz の解析結果と測定結果の比較

2.497 GHz では,815 MHz の場合と同様に,解析結果と 測定結果の比較のための指標として伝搬損失を用いる.住 宅モデルは87 MHz 及び815 MHz と同様の改良住宅モデ ルを使用する.

図 10 に改良住宅モデルにおける伝搬損失の解析結果と 測定結果の比較を示す.815 MHz の場合と同様, 伝搬損失 の移動区間中央値(区間長:4波長)をグラフに記載して いる.電界強度の区間中央値の差分は1 階キッチンでは 2.3 dB, 2 階子供部屋では3.3 dB 程度である.2.497 GHz においても,87 MHz 及び 815 MHz と同様の改良住宅モデ ルを用いることで解析結果と測定結果がよく一致してお り,本解析モデルは妥当であると考えられる.

4. 住宅内の漏えい電界分布の解析

本章では、3章で構築した解析モデルを用いて、各解析 周波数の住宅内における漏えい電界を解析する.





図 11 住宅内における電界分布 (87 MHz)

図 11, 図 12, 図 13 に 87 MHz, 815 MHz, 2.497 GHz の住宅内電界分布の解析結果をそれぞれ示す. 住宅モデル は改良住宅モデル, 波源は表 1 及び図 2 で説明した通りで あり,送信電力は各周波数で同様としている. 図 11~図 13 の比較により,波源の違い(87 MHz: 微小コイル, 815 MHz 及び 2.497 GHz: パッチアンテナ)による電界分布の 差や,周波数が高いほど漏えい電界の直進性が強まる傾向 などが確認できる.

5. 解析モデルのメッシュ数と解析時間

表2に各解析周波数におけるメッシュ数,ノード数,解 析時間の関係を示す.それぞれ改良住宅モデルでの値を記 載している.本検討で用いた電磁界シミュレーションでは, 周波数に応じて解析メッシュ数が指数関数的に増大し,膨 大な解析時間が必要となる.このため,815 MHz では TSUBAME 2.5 による16ノード並列計算,2.497 GHz では 56ノード並列計算を用い,解析時間を約10時間に抑えた.

6. まとめ

本利用課題では、スーパーコンピュータ TSUBAME2.5 を用いて、漏えい電界の住宅内特性を電磁界シミュレーシ ョンにより解析した.解析結果と測定結果を比較すること で、住宅の基礎内部の鉄筋や外壁の材質が漏えい電界に与 える影響が大きいことを把握した.測定結果と傾向が一致







(b) 2階

図 12 住宅内における電界分布 (815 MHz)

する解析モデルを構築し,住宅内における 87 MHz,815 MHz 及び 2.497 GHz の漏えい電界分布を解析した. TSUBAME2.5 の 56 ノード並列計算により約 52 億メッシ ュのモデルを約 10 時間で解析でき,電磁界シミュレーシ ョンにおける TSUBAME2.5 の有用性を確認した.

なお,本研究は総務省平成26年度電波資源拡大のため の研究開発「ワイヤレス電力伝送による漏えい電波の環境 解析技術の研究開発」の一部である.

参考文献

- Q. Chen et al., "Antenna Characterization for Wireless Power Transmission System Using Near Field Coupling," IEEE Antennas and Propagation Magazine, Vol. 54, No. 4, Aug. 2012.
- [2] J. Kim et al., "Electromagnetic Interference and Radiation from Wireless Power Transfer Systems," 2014 IEEE International Symposium on Electromagnetic Compatibility, Aug. 2014.
- [3] 東京工業大学 学術国際情報センター TSUBAME (http://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame)
- [4] CST MICROWAVE STUDIO (http://www.cst.com/)

表2 メッシュ数・ノード数・解析時間の関係

解析周波数	メッシュ数	ノード数	解析時間
87 MHz	0.5 億	1	4 時間
815 MHz	11 億	16	10 時間
2.497 GHz	52 億	56	10 時間





図 13 住宅内における電界分布 (2.497 GHz)

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 産業利用 成果報告書

利用課題名 気象イベントを考慮した建築環境の解析評価 英文: Building Environment Analysis under considering Weather Events

利用課題責任者 PHAM VAN PHUC

所属: 清水建設(株)技術研究所 Affiliation: Institute of Technology, Shimizu Corporation URL: http://www.shimz.co.jp

本利用課題では、TSUBAME スパコンに WRF 気象モデルを導入して、気象イベントを考慮できる建築環境の上空における大型台風や竜巻・突風等の局所的な気象現象の再現を試みる.本報では、過去に発生した竜 巻イベントを対象として、初期データや解析条件及びネスティング方法等の検討により積乱雲や竜巻等の発達で きるメソサイクロンの再現を確認し、そのイベントの再現性とWRF 気象モデルの有効性を明らかにした.

A meso scale meteorogical model has been used to develop the analysis system of build environment considering the effects of extreme weather events such as large typhoons, tornadoes. Several initial meteorogical conditions and nesting methods were investigated and it success to reproduce a mesocyclone that needs for the developing of the cumulonimbus and tornado.

Keywords: Typhoon, Tornado, WRF, Building Environment, Weather Event

背景と目的

台風や竜巻・突風などの気象イベントによる人的,経済的ロスは極めて大きい.特に,竜巻・突風では建物や 鉄道施設に甚大な被害が発生しており,内閣府の防災 基本計画にも風水害に係る事象として竜巻などの突風 が明記され,竜巻・突風の発生予測は先端科学技術の 開発として重点的に取り組まれている.また,米国で 2011年に発生した竜巻は,多数の死傷者の発生に加 えて原子力発電施設の稼働に影響を与えるなど,気象 イベントは国際社会にも大きなインパクトを与えた.

そこで、本利用課題はまず、TSUBAME スパコンの 計算資源を活用して、気象モデルを導入することにより、 これらの気象イベント、特に竜巻イベントの再現を試み た.これより、既存に開発された広域建築環境解析との 連携を行い、記録結果や観測データとの比較により、そ の気象イベントの特徴と、地上付近建築環境等へ与え る影響を調べており、気象イベントを考慮できる合理的 な建築環境の構築を目指すものである.

概要

本研究では、気象モデルとして、米国大気研究セン ター(NCAR)等が中心となって開発したメモ気象モデ ル WRF(Weather Research and Forecasting Model)¹⁾を採用した. WRF は圧縮性の非静力学モデ ルで, 物理・境界層過程と地表面過程を含んでいる.

また,対象とした気象イベントは2012年5月6日12 時35分頃に茨城県常総市で発生した竜巻(フジタスケ ールF3)によって,特に茨城県常総市とつくば市で建 築物等の多くの被害が生じた.図-1はその竜巻による 建物の転倒被害である.建物の安全設計においてはこ れらの転倒被害の詳細な解明は急務となる.

解析としては,異なる数値予報データとネスティング 方法を用いて,そのイベントの再現性を検討していた. こうした局所的なイベントの再現にもかかわらず,用いた 計算領域の影響が大きいことを確認し,広域な気象モ デル解析の必要性を確認できた.



図-1 竜巻による建物の転倒被害

計算概要

計算期間は対象とした竜巻発生日(2012年5月6日 0:00:00~18:00:00)とした.

初期値・境界値は, 異なる気象データと計算手法を 検討したが, 本報では NCEP (National Centers for Environmental Prediction) の全球客観解析データ FNL と気象庁の全休数値予報モデル GSM (Global Spectral Model)データの結果を紹介する.

計算領域は,親領域として水平解像度を 16km,格 子数(nx=300,ny=300),対象とした気象イベントの発生 位置である中心緯度・経度を北緯 36.11 度,東経 139.95 度とした.また,局所的な気象イベントを再現す るためには,計算規模・計算間隔と計算領域の広さが 計算結果に及ぼす影響を考慮して,4 段階 2-way ネス ティングで計算領域を設定した.

図-2 には計算領域,ネスティング領域と対象イベントの発生地点の概要を示す.なお,鉛直方向の気圧準拠 座標については地表から30層を設定した.

結果および考察

図・3,4には、GSM データとFNL データを用いた第 4 領域のWRFの計算結果(5km 高度における上空の 風速・気温・相対湿度の分布と海面気圧分布)を示す. それぞれは時刻3時,6時,9時と12時の結果となって いる.なお,対象とした竜巻イベントの発生時刻は12時 前後となる.それぞれのデータの結果については、上 空の気温や相対湿度は概ね同様な傾向である.また, 当日の気象観測データより上空の気温は-18 度や、地 上の相対湿度は61%に記録されており、計算の妥当性 を概ねを確認できた.

上空風速分布については GSM データを用いた場合, 時刻9時に対象としたイベントの発生位の北側に小さな メソサイクロンが発生していることを確認できるが,その 後は北の方に移動してしまうことが分かる.

一方, FNL データを用いた場合, 時刻9時には同様 なメソサイクロンが東側に発生している. 時間を経過す ると対象としたイベントの発生位置に移しており, 時刻1 2時前後にその発生位置に到達している様子を確認で きる. こうしたメソサイクロンは, 竜巻をもたらした積乱雲 にともなうと考えられる.

第1領域









図-4 FNL データを用いた WRF 計算結果

まとめ、今後の課題

本利用課題では,WRF 気象モデルを導入して, TSUBAME スパコンで複数計算条件や計算領域ネス ティング方法と気象データを用いて,過去に発生した実 在大型竜巻の再現計算を試みた.全球客観解析デー タFNLを用いた場合や4段階2-wayネスティングでの 計算により竜巻をもたらしなり得るようなメソサイクロンの 再現を確認し,竜巻再現の可能性を明らかにした.

今後は、高解像度計算領域や高度の乱流モデルを用 いて、WRF の大規模計算を行うことにより、竜巻再現と 地上付近の流れ場等の特性を明らかにする.

参考文献

1) WRF(2014): http://wrf-model.org/index.php

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 産業利用 成果報告書

利用課題名 鋼中析出物の水素捕捉能の高精度計算

英文: Calculation of hydrogen trapping at precipitate in steel

澤田 英明

Hideaki Sawada

新日鐵住金株式会社 先端技術研究所

Advanced Technology Research Laboratories, Nippon Steel & Sumitomo Metal Corporation http://www.nssmc.com

鉄鋼業では、いかに鋼を高強度化するかということに注力してきたが、高強度化が進むにつれて、水素脆化という問題にも対処する必要性が高まってきた。その対処のために利用されているのが析出物であり、析出物は水素を一時的に捕捉し、後に環境の水素が少なくなった時に捕捉されていた水素を放出することでその役割を果たしている。今回、大規模第一原理電子状態計算パッケージ OpenMX での計算に必要な Fe、Nb、Cの基底関数の最適化を行い、bcc-Fe、NbC の格子定数、体積弾性率などの基本的物性値を再現することのできる基底関数の作製に成功した。加えて、大規模計算を実施するために必要なオーダーN 法のパラメータについても網羅的に検討を実施し、計算精度と計算速度の両者を満足するパラメータの選択に成功した。

So far steel industry has mainly focused on strengthening of steel, however, hydrogen embrittlement has become important subject as strength of steel is enhanced. Precipitates are used to inhibit the hydrogen embrittlement. Specifically hydrogen atoms are trapped at precipitates temporally, and the trapped hydrogen atoms are released when hydrogen concentration in steel decreases. The basis functions of Fe, Nb and C were successfully optimized so as to reproduce the basic properties, namely, lattice constants and bulk moduli of bcc iron and NbC. Furthermore, the parameters for order-N method were also optimized in order to carry out large scale simulation.

Keywords: first-principles calculation, order-N method, hydrogen enbrittlement, precipitate, steel

背景と目的

鉄鋼材料に要求される特性として特に重要なのは、 構造物を維持するための強度であり、それは自動車用 鋼板のように衝突時にキャビンを守る強度から、建造 物のように長期にわたって構造を保つ強度、ボイラー 管などのように高温での安定した強度まで多岐にわた る。そして、鉄鋼業の歴史としては、いかに鋼を高強度 化するかということに注力してきた。しかし、高強度化 が進むにつれて、水素脆化という問題にも対処する必 要性が高まってきた。それは、強度が高まるほど水素 脆化に対する感受性が高まるためであるが、その対処 のために利用されているのが析出物である。析出物と して頻繁に使われているのは、VCなどのNaCl型の析 出物であり、水素が大量に鋼中に侵入した際に、析出 物で一時的に捕捉し、後に環境の水素が少なくなった 時に捕捉されていた水素を放出している。それによって、 脆性破壊につながる粒界の水素捕捉量を少なくするこ とが可能となる。しかし、NaCl 型の析出物においても、

どこに水素が捕捉されているかは明確には分かってい ないために、水素捕捉能を高める方策は不明である他、 析出物種による水素捕捉能の違いは分かっていない。 昨年度、NaCl型の析出物であるNbCと鉄母相との部 分整合界面での水素捕捉位置を調べた。しかし、他析 出物や他の欠陥の水素捕捉能との比較をするために は計算精度を上げる必要があることが分かり、それに 取り組んだ。計算手法については、第一原理計算の大 規模化可能なオーダーN法のプログラム OpenMX(東 京大学尾崎教授開発)を用い、計算機資源として TSUBAME を利用させて頂き、計算精度向上のため の基底関数の最適化に取り組んだ。

概要

最適化を行った基底関数を用い、Fe/NbC 整合界面 の計算を対角化法とオーダーN 法で行い、その結果を 比較した。図 1 はその結果を示すが、オーダーN 法 の結果は対角化法の結果を良く再現していることが



(図 1) Fe/NbC 整合界面の全エネルギーの c 軸長依存性。

結果および考察

材料の物性、特性は全て電子状態に起因している。 しかし、全ての物理量を電子状態から求めることは現 時点では不可能なため、原子間に働く力を経験的、若 しくは、第一原理計算によって決定されたパラメータを 用いる古典分子動力学法を用いたり、原子を扱わず、 空間的なメッシュ点での相を熱力学関数によって決定 しながら組織変化を追うフェーズフィールド法なども用 いて、多種多様な物性値を計算機シミュレーションによ って導出することが試みられている。ただ、古典分子動 カ学法の原子間に働く力として、高い信頼性を有して いるのは単元素のポテンシャルが中心で、複数種の元 素が存在する系でのポテンシャルについては、信頼性 が低下するというのが現状である。そのため、複数種 の元素を含む系や欠陥を含む系の物性値を高い精度 で求めようとすれば、電子状態から決定していくことが 肝要となる。電子状態から決定するということは第一原 理計算と呼ばれる手法を用いることに直結するが、現 在の計算機を用いて一般的に行うことができる計算規 模は数 100 原子以下であり、複雑な構造(金属系の材 料を考えた場合には、粒界、異相界面などの欠陥がそ の1つである)の物性の導出を考えた場合には少なくと も1000原子以上の大規模な電子状態計算を行う必要 がある。しかしながら、従来から用いられている第一原 理計算手法に必要な計算量は計算規模(原子数)の 3

乗に比例しており、計算規模を大きくすることは容易で はない。例えば、20年後に計算可能な計算規模は、計 算機の能力がムーアの法則に従って向上したとしても、 従来の第一原理計算法では 52 倍程度であり、1 万原 子程度といったところである。その問題を解決する1つ の方法としてオーダーN 法と呼ばれる手法がある。オ ーダーN法というのは計算量が計算規模に比例する方 法という意味であり、この手法を用いれば、20 年後に は 145000 倍の規模、つまり、原子数にすれば、5000 万原子に近い原子数の計算が可能ということになる。 逆にいえば、オーダーN 法の開発を行わない限り、近 い将来に計算規模を大きく増やすことは不可能である。 オーダーN法は、ワニア関数や密度行列の局在性を利 用することによって、計算規模を低減させる手法である。 現在、オーダーN法の1つのプログラムとして、東京大 学尾崎教授が開発している OpenMX を使用している が、その中では局在基底として原子様数値基底(一電 子コーン・シャム軌道を擬原子軌道、つまり、球面調和 関数と動径分布関数の積、の線型結合で表現)を用い ている。実際に計算を行うためには、この局在基底を 適用対象に対して最適なものを選ぶ必要があり、その 最適化を行った。



(図 2)基底関数 Fe5.5H-s2p2d1 を用いた時の対角化
 法とオーダーN 法での bcc-Fe の全エネルギーの格子
 定数依存性。

図 2 は bcc の Fe における全エネルギーの格子定数 依存性である。Fe5.5H-s2p2d1 は、カットオフ半径が 5.5a.u.で、基底関数として s 軌道を1つ、p 軌道を2つ、 d 軌道を1つ使用したもので、充分な精度で VASP の

52

結果を再現していることが分かる。対角化法では計算 する系全体の電子状態を一度に計算することになるが、 オーダーN 法ではある原子の電子状態をその周囲の 物理的に切り出されたクラスタに対する固有値問題を 解くことによって求め、その足し合わせによって全系の 電子状態を得ることになる。そのため、これらの基底関 数を用いてオーダーN 法の計算を行うためには、どの ようなクラスタを考えるかを決める必要がある。図 3 に は、クラスタに入る原子数(表 1 の計算手法の()中の 数字)を変化させたときの計算結果を示したが、オーダ ーN 法での計算が対角化法の結果を再現していること が分かる。

(表1)対角化法とオーダーN法で計算されたbcc-Feの平衡格子定数と体積弾性率。

計算手法	平衡格子定数 (Å)	体積弾性率(MPa)
対角化法	2.8432 (0.5%)	201. 3 (6. 8%)
オーダーN法1 (330)	2. 8374 (-0. 3%)	216. 3 (14. 8%)
オーダ-N法2 (258)	2. 8432 (0. 5%)	201. 3 (6. 8%)



(図 3)基底関数 Nb7.0-s2p2d1、C6.0-s2p2d1 を用いた時の対角化法とオーダーN 法での NbC の全エネルギーの格子定数依存性。

図3はNbCにおける全エネルギーの格子定数依 存性であるが、Nb7.0-s2p2d1、C6.0-s2p2d1が充 分な精度でVASPの結果を再現していることが分 かる。更に、クラスタに入る原子数(表2の計算 手法の()中の数字)を変化させたときの計算結 果を示した。表2から分かるように、オーダーN法の計算によって、対角化法によって計算された格子定数と体積弾性率を良く再現していることが分かる。

(表 2)対角化法とオーダーN 法で計算された NbC の平衡格子定数と体積弾性率。

計算手法	平衡格子定数	体積弾性率(MPa)
	(Å)	
対角化法	4. 5014 (-0. 3%)	298. 0 (3. 8%)
オーダ-N法1	4. 4980 (-0. 4%)	301. 2 (4. 9%)
(340)		
オーダーN法2	4. 4980 (-0. 4%)	301. 2 (4. 9%)
(256)		

上で最適化された基底関数を用い、Fe/NbC 整合界 面の計算を実施した。具体的には、基底関数 Fe5.5s2p2d1、Nb7.0-s2p2d1、Ti7.0-s2p2d1、 C6.0-s2p2d1を用い、Fe/NbC 整合界面の計算を、対 角化法とオーダーN 法で行い、その結果を比較した。 図1には Fe/NbC の整合界面に対する結果を示すが、 オーダーN 法の結果は対角化法の結果を良く再現して いることが分かる。

まとめ、今後の課題

Fe、Nb、C に対して基底関数の最適化を行い、 bcc-Fe、NbC の格子定数、体積弾性率などの基本的 物性値を再現することのできる基底関数の作製に成功 している。加えて、大規模計算を実施するために必要 なオーダーN 法のパラメータについても網羅的に検討 を実施し、計算精度と計算速度の両者を満足するパラ メータの選択に成功した。

今年度作製した基底関数を用い、鋼中での析出物 の水素捕捉能のより高精度な計算を実施していく予 定である。

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 産業利用 成果報告書

利用課題名 拡張アンサンブルシミュレーションによるタンパク質とリガンドの結合構造予測の展開 英文: Applications of Prediction Method of Protein-ligand Binding Modes by Generalized-ensemble Simulations

利用課題責任者 田中 稔祐

Toshimasa Tanaka

所属 武田薬品工業株式会社 医薬研究本部 化学研究所

Medicinal Chemistry Research Laboratories, Pharmaceutical Research Division, Takeda Pharmaceutical Company Limited http://www.takeda.co.jp

邦文抄録 二次元レプリカ交換法を膜タンパク質(GPCR の一つであるβ2 adrenergic receptor)に対して適 用したところ、予測構造は実験構造とよく類似しており、結合モードを再現できることが分かった。このことは本 課題を通して開発した手法が水溶性タンパク質だけでなく膜タンパク質に対しても適用可能であることを示唆し ている。一方で、新たな課題として膜タンパク質の系ではリガンドが脂質二重膜の膜面にトラップされてしまう場 合があることが分かった。これはサンプリング上必ずしも好ましくないため、今後さらに改良と検証を進めて行き たい。さらに JNK3 に対して結合自由エネルギー計算を実施したところ、複数の異なる結合モードから正しい結 合モードを計算により判別できた。

英文抄録 We applied two-dimensional replica-exchange method for the prediction of a membrane protein (β 2 adrenergic receptor) system, and found that our method successfully predicted the structure close to the experimental one. This indicates that the method developed through this research might be applied not only to soluble proteins but also membrane proteins. However, we encountered a new difficulty that a ligand tends to be trapped around the membrane surface. We also performed binding free energy calculations for the JNK3 system, and found that the correct biding mode was distinguished computationally.

Keywords: replica-exchange umbrella sampling, molecular dynamics, protein-ligand binding, computer-aided drug design, free energy calculation.

背景と目的

タンパク質に結合する分子(リガンド)の結合構造や 結合の強さを予測することは、様々な生体反応を理解 し制御するために極めて重要であり、ドラッグデザイン にとっても有用性が高い。

そこで我々はこれまでにレプリカ交換法に基づく高精 度なリガンド結合モードの予測法を開発してきた[1-4]。 本課題では、特に膜タンパク質の一つであるβ2 adrenergic receptor に対して、開発した手法を適用し、 膜タンパク質系に対する適用可能性と課題を調査する と共に、結合自由エネルギー計算との連携を強化する ことを目的として研究を実施した。 概要

従来の手法では実験を置き換えるレベルに至ってお らず、それを目指したシミュレーション手法のさらなる高 精度化と検証が必要とされている。本利用課題では相 互作用の物理化学的背景の理解に基づいた論理的な 医薬品の分子設計を可能とするために、昨年度までに 開発した二次元レプリカ交換法を膜タンパク質に対して 適用し、結晶構造解析が困難な膜タンパク質に対して の有効性を一例で示した。図1は膜タンパク質の一つ であるβ2 adrenergic receptor に対して開発した手法 を適用した結果であり、図1 左のようにリガンドが溶媒 側にいる構造から始めて、図1 右のように実験と近い 構造を安定構造として検出できた。



(pulled to the membrane surface)

green, yellow: simulatior blue: experiment 図 1 β2 adrenergic receptor に対する結合モード予 測計算の初期構造(左)と予測結合モード(右)

また、自由エネルギー計算との連携を強化に取り組 んだ。図2はドッキングから予測されるリガンドの4つの 異なる結合モードであり、それぞれに対して結合自由エ ネルギー計算を実施したところ、実験と近い正しい結合 モードが最安定であった。



図 2 JNK3 に結合するリガンドの結合モードの結合自 由エネルギー計算による判別

さらに主成分解析などの手法を用いた機能性ダイナ ミクスの解析をめざし、GPU を効率的に使用した長時 間分子動力学計算を実施した。現在、構造の安定性、 長時間運動モード、構造変異のしやすさ、などについて 実験データと比較しながら解析を鋭意進めている。 結果および考察

最初に、開発した手法を膜タンパク質の一つである $\beta 2$ adrenergic receptor の系(PDB ID: 2RH1)に対し て適用した(手法の詳細については[1-4]を参照)。



図 3 β 2 adrenergic receptor の系のスナップショット

図 3 はシミュレーションの代表的なスナップショット を示しており、リガンドが溶媒側にある場合や、膜面付 近にある場合、タンパク質のヘリックス間にある場合な ど様々な構造を探索していることが分かる。全てのレプ リカの情報を集めてタンパク質とリガンドの距離につい ての平均カポテンシャルを計算し、安定な結合距離を 予測することができる。図1左に、予測されたリガンドの 結合モードと実験の結合モードとの比較を示す。完全 ではないものの、計算により予測された構造は概ね位 置向き共に実験構造と一致していることが分かる。

次に、JNK3 の系(PDB ID: 1PMV)でドッキングに より予測した4つの異なる結合モード(図2左)から正し いモードを結合自由エネルギー計算により識別できる か調べた。図4 は複合対中での<dU/dλ>の静電項と vdW 項をそれぞれ示す。共に収束にとって必要な滑ら かな曲線となっている。





計算から予測された結合自由エネルギーは、図2の 左上、右上、左下、右下の結合モードで、それぞれ -11.9, -8.9, -8.9, -8.0 kcal/molであり、左上の結合モ ードが安定性が高いと予測された。図2右に示すように 実験の結合モードと予測モードを比較したところよく一 致していた。また、予測された値-11.9 kcal/mol は実験 の結合自由エネルギー-10.5 kcal/mol とも数値的に近 かった。

まとめ、今後の課題

二次元レプリカ交換法を膜タンパク質(GPCR の一 つであるβ2 adrenergic receptor)に対して適用し、実 験と近い結合モードを予測できるという有望な結果を得 た。このことは開発した手法が水溶性タンパク質だけで なく膜タンパク質に対しても適用可能であることを示唆 している。特に膜タンパク質は結晶化が一般的に困難 であり、計算によりリガンドの結合モードを高精度に予 測できれば、大きなインパクトになると考えられるため、 今後さらに改良と検証を進めて行きたい。また、JNK3 の系に対して結合自由エネルギー計算を実施したとこ ろ、複数の異なる結合モードから正しい結合モードを計 算により判別できることが分かった。さらに、GPU を使 用した長時間ダイナミクスを調べる計算も開始し、いく つかのターゲットタンパク質に対して 1 マイクロ秒程度 の長時間計算を、比較のため異なる複数の初期構造 や初期速度を用いて実施した。構造の安定性、長時間 運動モード、構造変異のしやすさ、などのタンパク質に よる違いの知られている実験データと比較しながら解 析を鋭意進めている。

参考文献

1. H. Kokubo, T. Tanaka, Y. Okamoto, Ab initio prediction of protein-ligand binding structures by replica-exchange umbrella sampling simulations, J. Comput. Chem. 32, 2810-2821 (2011). 2. H. Kokubo, T. Tanaka, Y. Okamoto, Two-dimensional replica-exchange method for predicting protein-ligand binding structures, J. Comput. Chem. 34, 2601-2614 (2013). 3. H. Kokubo, T. Tanaka, Y. Okamoto, Prediction of Protein-Ligand Binding Structures by Replica-Exchange Umbrella Sampling Simulations: Application to Kinase Systems, J. Chem. Theory Comput. 9, 4660-4671 (2013). 4. Y. Okamoto, H. Kokubo, T. Tanaka, Prediction of Ligand Binding Affinity by the Combination of Replica-Exchange Method and Double-Decoupling Method, J. Chem. Theory Comput. 10, 3563-3569 (2014)

共同利用 成果報告書 平成 26 年度 課題種別

利用課題名 電子デバイス材料の計算機設計

英文:Computational design of materials for electronic devices

渥美 照夫、岩崎 誉志紀 Teruo Atsumi, Yoshiki Iwazaki,

太陽誘電株式会社

TAIYO YUDEN CO., LTD. http://www.yuden.co.jp/jp/

本報告では、電子デバイス用途材料として多用される遷移金属酸化物と電極界面の酸素欠陥安定性に関する第一 原理計算として、ペロブスカイト型構造酸化物のチタン酸ストロンチウムと白金(Pt)電極を例に報告する。さらに、電 子デバイス用途・有機電解液の大規模計算に向けて、GPGPU(General-purpose computing on graphics processing units)を活用した古典 MD の検討結果についても報告する。

We report first-principles theoretical study of oxygen vacancy at the interface between perovskite-type oxide (strontium titanate) and metal-electrode (platinum). Especially, we will force on the stability of the oxygen vacancy at the metal/insulator interface. Furthermore, we also present our study on classical MD simulations with GPGPU aiming the clarification of properties observed in electrolytic solutions used for energy storage devices.

Keywords: First-principles calculation, perovskite, interface, classical molecular dynamics, electrolytic solution

背景と目的

電子デバイスに用いられる無機材料、有機材料には 様々な機能・特性の発現が求められている。半導体や 酸化物等の無機材料においては、ナノレベルオーダー の電極界面構造がデバイスの信頼性や特性に大きく 影響する事が知られており、これらの理解と制御が材 料開発における鍵となる。また、リチウムイオン電池や リチウムイオンキャパシタ等のエネルギーデバイス開 発では、使用される電解液の物性予測に対し古典分子 動力学(Molecular dynamics: MD)シミュレーションに よる大規模計算が有効である事が示されているが、こ れらの理論計算は GPGPU (General-purpose computing on graphics processing units)の活用に より高速化や大規模化が可能である事が期待される。

本利用課題では、実験のみのアプローチでは理解が 困難なこれらの課題に対して原子レベルでの計算機シ ミュレーションを行い、そのベースとなる基礎技術開発 を目指した。本報告書では、「(1)第一原理計算による 誘電体/電極界面検討」と「(2)古典 MD シミュレーション による電解液検討」について報告する。

(1)第一原理計算による誘電体/電極界面検討¹ 概要(1)

誘電体/電極界面における酸素欠陥(Vo)の挙動は積 層セラミックキャパシタ(MLCC)の特性と高い関連性を 持っており、例えば界面付近の Vo量とデバイス寿命と の関連性や、チタン酸バリウムと Ni 電極界面に、O が 欠乏した Ba-Ti-Ni 合金層が存在する事が報告されて いる。しかし界面近傍の Voを、直接実験で測定する事 は困難であり、その挙動については不明点も多い。そ こで本研究では、代表的なペロブスカイト型酸化物であ るチタン酸ストロンチウム(SrTiO3:ST)と Pt 電極をモデ ルとして取り上げ、第一原理計算により酸化物/金属界 面における Voの安定性を調査した。

第一原理計算は、密度汎関数法の GGA+U 法 (U_{Ti}=3eV)を用い、計算パッケージは VASPを使用した。 構造は、スラブモデルを用い、真空中 ST 薄膜 (ST/Vac.)と ST-Pt 電極(ST/Pt)について検討した(Fig. 1)。ST/Vac.は、ST(100)面の両端を TiO₂-term か SrO-term になるように切り出し、真空層 20Å を加えた。 ST/Pt は、ST(100)面に Pt(100)面を接合させたモデル をいくつか検討し、最安定な構造(TiO₂-term の ST に Pt を接合)を用いた。いずれも構造最適化計算により 安定化させ、これに $V_0 \ge I = 1-10$ (/は界面からの層 数)の位置に導入し、さらに構造最適化計算(格子定数 は固定)を行った。



Figure 1. Structure of slab models. I mean number of layer from interface.

結果および考察(1)

電極界面からの距離に対する V₀の生成エネルギー ΔEvoを下記の式(1)に従って求めた。

 $\Delta E_{\rm VO} = E_{\rm (O \ defect \ ST \ slab)} + 1/2 E_{\rm (O2 \ gas)}$

-E(Perfect ST slab) (1)

ここで、E(O defect ST slab)は酸素欠陥を含むスーパーセル の全エネルギー、*E*(Perfect ST slab)は完全 ST 結晶の全エ ネルギー、E(02 gas)は酸素分子の全エネルギーである。 得られた結果を Fig. 2 に示す。Fig. 2 には ST: 3×3×3 サイズのセルを用いて計算されたバルクSTの ΔE_{VO} が 黒実線で同時に示されている。ST/Vac.では、Vo 位置 や末端構造によらず、bulk とほぼ同じ Vo 生成エネル ギー値となった一方、ST/Pt では Pt 電極に近いほど ΔE_{VO} が低くなった。特に $I = 1, 2 \sigma V_0$ は bulk におけ る値と比べて、それぞれ 2.56eV, 1.32eV 安定化してお り、Pt 電極近傍で Vo が大きく安定化することが分かっ た。Pt電極による Vo安定化が生じる要因はいくつか想 定されるが、Voの生成により結晶内に放出された余剰 電子が Pt 電極へ移動して Voの生成が促進されている 可能性がある。そこで Vo導入前後のST/Ptに対して電 荷解析 (Bader charge analysis)を適用し、ST から Pt への電荷移動量 (CT_{STtoPt})を求めた (Fig. 3)。Vo 添 加前(破線)の CT_{STtoPt} は 0.04 であり、ST と Pt を接合 しただけでは、殆ど電荷移動しない。一方、Vo 添加後 の CT_{STtoPt} は、0.41~0.97 となっており、Pt 電極に近 い程 ST から Pt へ電荷移動することが分かった。この 移動量と、AEvoには相関があり、Voの安定化がPt電 極への電荷移動によるものであると推測された。



まとめ、今後の課題(1)

第一原理計算により ST/Pt 界面では、Pt 電極に近い ほど Vo が安定化することが分かった。また、安定化要 因の一つとして界面間電荷移動が関係していると推測 された。しかしながら、今回用いたモデルでは、セルサ イズが小さいため、深さ方向への収束性を検討するに は不十分であり、面方向の影響を考慮することが出来 ないため、今後の課題としてより大きなセルによる検討 が必要と考えている。

(2) 古典 MD シミュレーションによる電解液検討 概要(2)

昨年度の検討では、純溶媒の古典 MD シミュレーション(Gromacs)のベンチマークテストを行い、GPGPU

の有効性と10万原子程度のシミュレーションが実用的 に計算可能であることを確かめた。本年度は、リチウム イオン電池等の開発で重要となるリチウムイオンの拡 散係数を求める事を目的として、電解質を添加したシミ ュレーションを行った。

計算条件は、溶媒 2,000 分子に電解質を 0.0, 0.5, 1.0, 2.0M 添加したものについて、平衡化の後に熱平 衡状態のシミュレーションを行った。溶媒は、エチレンカ ーボネート(EC), プロピレンカーボネート(PC), ガンマ ブチロラクトン(GBL), ジメチルカーボネート(DMC), エ チルメチルカーボネート(EMC), ジエチルカーボネート (DEC)の6種、電解質は[BF4⁻+Li⁺], [PF6⁻+Li⁺]の2種 とした(原子数は 20,000~39.881)。

初期構造は、分子をランダム配置したものを用い、 NPT アンサンブル(温度と圧力はそれぞれ 300K, 1atm)のシミュレ―ションを実施した。平衡化は時間刻 み 0.5fsを 6,000,000step(300ps)、熱平衡状態は時間 刻み 0.2fsを 20,000,000step(4ns)で行った。また、ポ テンシャルとして、溶媒は general AMBER 力場を、電 解質は文献値[Journal of Molecular Liquids 148 (2009) 99–108]を用いた。

結果および考察(2)

熱平衡状態のシミュレーションの平均二乗変位 (MSD)から求めた拡散係数 Dを Fig. 4 に示す。これか ら、電解質濃度が高いほど、いずれも D が減少する事 が示された。また、電解質の種類に対する D の変化と して、 $D(\text{solvent})>D(\text{anion})>D(\text{Li}^+)$ といった、実験と対 応する傾向が得られた。今回の計算結果では、 BF_4 の ほうが PF_6 +より D(anion)と $D(\text{Li}^+)$ の値が大きくなって おり、実験とは逆の傾向を示しているが、この原因の一 つとして、電解質が全て解離しているという条件で計算 を行っている事などが考えられる。

まとめ、今後の課題(2)

電解質を含めた電解液の古典 MD シミュレーション を行い、リチウムイオン等の拡散係数を求めた。その結 果、実験とおおよそ対応する傾向が得られた。今後の 課題として、電解質による差を再現するために、解離度 の考慮等を検討していく必要があると考えられる。また、 実デバイスで用いられている電解液の組成は、より複 雑(添加物、混合溶媒)であり、これを扱うには、より多 くの分子による計算が必要となると予想される。



Figure 4. Diffusion coefficient(D) of (a) [BF₄+Li⁺] or
(b) [PF₆+Li⁺] added electrolytic solution.

1第32回強誘電体応用会議 20-B-04「ペロブスカイト型酸化物/金属界面における酸素欠陥生成メカニズムに関する第一原理計算」

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 産業利用 成果報告書

理論計算に基づく有機半導体材料の開発 Theoretical Design of Advanced Organic Semiconductor

栗田 靖之

Yasuyuki Kurita

住友化学株式会社·先端材料探索研究所 Advanced Materials Research Laboratory, Sumitomo Chemical Co., Ltd. http://www.sumitomo-chem.co.jp/

第一原理バンド計算により、チオフェン系高分子の固体状態では、一部の例外を除き、スタッキング相互作用 によって孤立状態よりもヘテロ環間の捩れ角が小さいという結果を得た。この捩れ角減少に伴い、フルオレン系 高分子も含めたイオン化ポテンシャルの固体状態における実測値と高分子鎖1本に関する計算値との間の相関 係数は 0.778 から 0.949 に向上した。固体状態モデルから切り出した高分子鎖3本について計算したイオン化ポ テンシャルは、高分子鎖間の分子軌道相互作用により、高分子鎖1本を切り出した場合より小さくなるが、固体状 態における実測値との相関係数は 0.953 であり、向上幅は僅かであった。

With first-principles band calculations, the torsion angle between heterocycles in the solid state thiophene-type conducting polymer is predicted to be smaller than that in the isolated state except a few cases. By this change in torsion angles, the correlation coefficient between the experimental ionization potentials of solid state polymers and the calculated ones for single polymer chains is improved from 0.778 to 0.949. The ionization potential calculated for the three polymer chains extracted from the solid state model is lower than that calculated for the single chain because of the molecular orbital interaction between polymer chains. The correlation coefficient for the three polymer chains model is 0.953, which is almost the same as that for the single polymer chain model.

Keywords: 有機エレクトロニクス材料/導電性高分子/イオン化ポテンシャル/密度汎関数法

背景と目的

有機EL(電界発光)ディスプレーや有機トランジスタ ー、有機太陽電池といったデバイスを実現するための 材料として有機半導体の開発が進められている。その 中でも導電性高分子材料は、インクジェット法や印刷法 等の安価なデバイス作製プロセスを適用可能なため、 注目を集めている。また、その柔軟性を活かし、フレキ シブルディスプレーやフレキシブル太陽電池など、新し い形態の製品を作ることが可能である。

上記有機半導体材料の重要な特性の一つに、電極 からのキャリア(電子 or ホール)注入性がある。キャリア 注入性が良いほど、低電圧でデバイスを駆動することが でき、消費電力を低く抑えることができる。有機半導体 のイオン化ポテンシャルは、上記ホール注入性に関係 があると考えられており、有機半導体材料を設計する上 で重要な指標である。

本プロジェクトでは、2013 年度、高分子系有機半導

体について、密度汎関数法を用いて計算した孤立状態 の1分子構造を固定し、複数分子間の相対配置のみを 分子力場法で最適化して固体状態モデルを構築し、イ オン化ポテンシャルを計算した。その際、チオフェン系 高分子について、アルキル側鎖の炭素原子を、それが 属するヘテロ環平面上に固定すると、ヘテロ環間の捩 れ角が小さくなり、フルオレン系高分子も含めたイオン 化ポテンシャルの実測値と計算値の相関が高くなること を見出した¹⁾。一方、X線回折実験に基づいて、上記ア ルキル側鎖はヘテロ環平面上にないと推定した研究が ある²⁾。以上のことから、固体状態では、ヘテロ環間の捩 れ角は孤立状態における捩れ角よりも小さいが、その原 因は、アルキル側鎖がヘテロ環平面上に存在すること ではなく、分子間のスタッキング相互作用にあると推定 した。

そこで本年度は、高分子間の相対配置だけでなく、 分子間スタッキング相互作用による高分子の構造変化 も考慮した計算を、第一原理バンド計算法を用いて実施した。その結果、チオフェン系高分子の固体状態におけるヘテロ環間の捩れ角は、孤立状態における捩れ角よりも小さいと推定された。また、フルオレン系高分子も含めたイオン化ポテンシャルの実測値と計算値の相関は、孤立状態の構造で計算するよりも高くなった。

概要

1)高分子系有機半導体の固体状態モデルの構築

高分子の構造は、第一原理バンド計算プログラム VASP³⁾を利用し、周期的境界条件下、密度汎関数 法を用いて計算した。密度汎関数には、ファンデル ワールス力を考慮した PBE-D2⁴⁾を採用した。

孤立状態の構造は、大きなユニットセルを設定し、 高分子間の相互作用が十分小さい状態で計算した。 計算対象とした高分子の側鎖は炭素数6以上で、高 分子間の相互作用を小さくするには、かなり大きなユ ニットセルを設定する必要があり、計算時間がかかる ため、側鎖を全て n-Pr で置換した(孤立状態の場合、 n-Pr よりアルキル側鎖を長くしてもヘテロ環間の捩 れ角とイオン化ポテンシャルの計算値の変化は小さ い)。

固体状態の構造を計算する場合は、実際の側鎖を 用いた。高分子間のスタッキング相互作用に側鎖間 の相互作用も加わるため、n-Pr に置換すると高分子 間の距離が変化し、その結果、イオン化ポテンシャ ルの計算値も変化するからである。構造は複数構築 した中から最も安定なものを選択した。

2) 高分子系有機半導体のイオン化ポテンシャルの計算

1)で求めたユニットセルを拡張してスーパーセル を構築し、その中からチオフェン環12個程度の長さ の部分を切り出し、末端を水素原子で封止してモデ ル高分子鎖とした(図1)。孤立状態の構造について は、高分子鎖1本から電子を1個取り去った状態と元 の状態とのエネルギー差を密度汎関数法(密度汎関 数 B3LYP⁵⁾、基底関数 6-31G*⁶⁾)で計算し、イオン 化ポテンシャルとした。固体状態については、高分 子鎖1本、或いは、スタッキングした高分子鎖3本を スーパーセルから切り出し、イオン化ポテンシャルを 計算した。イオン化ポテンシャルの計算には Gaussian09 プログラム⁷⁾を用いた。イオン化ポテンシ ャル実測値(固体状態、光電子分光法による測定) は文献を参照した⁸⁾。



図1. 計算した高分子系有機半導体のモデル

結果および考察

各高分子の固体状態モデルの構造を図2~図10に 示す(上下方向にスタックした高分子鎖は2本のみ示し、 それぞれの高分子鎖を色分けした)。チオフェン系高分 子では、高分子主鎖間でヘテロ環同士がπ-πスタック するが、フルオレン系高分子では、フルオレン環の上下 に出たアルキル側鎖のため、π-πスタックが起こらない 構造が計算された。



図2. T1(図1)の固体状態モデルの構造



図3. T2(図1)の固体状態モデルの構造



図5. T4(図1)の固体状態モデルの構造



図4. T3(図1)の固体状態モデルの構造



図6. T5(図1)の固体状態モデルの構造



図7. T6(図1)の固体状態モデルの構造



図8. F1(図1)の固体状態モデルの構造



図9. F2(図1)の固体状態モデルの構造



図10. F3(図1)の固体状態モデルの構造

図11に孤立状態と固体状態の共役環間の捩れ角 計算値の差を示す。チオフェン系高分子ではT4以外 は固体状態の捩れ角の方が孤立状態の捩れ角よりも 小さい。これは高分子鎖間のスタッキング相互作用 が原因と考えられる。

図12に孤立状態モデルの高分子鎖1本、図13 に固体状態モデルから切り出した高分子鎖1本、



図11. 固体状態と孤立状態の共役環間の捩れ角の差(θ1~4の定義は図1参照)

図14に固体状態モデルから切り出した高分子鎖3 本のイオン化ポテンシャル計算値に対し、固体状態 の高分子のイオン化ポテンシャル実測値をプロット した。相関係数は、それぞれ0.778、0.949、0.953 である。孤立状態から固体状態になる際の共役環間 の捩れ角の変化により、相関が大幅に向上した。高 分子鎖間の分子軌道相互作用によりイオン化ポテン シャルの計算値は小さくなるが、相関係数の向上幅 は小さい。



図12. 固体状態における高分子のイオン化 ポテンシャル実測値と孤立状態モデルの高分 子鎖1本のイオン化ポテンシャル計算値との 関係



図13. 固体状態における高分子のイオン化 ポテンシャル実測値と固体状態モデルから切 り出した高分子鎖1本のイオン化ポテンシャル 計算値との関係



図14. 固体状態における高分子のイオン化ポテ ンシャル実測値と固体状態モデルから切り出した 高分子鎖3本のイオン化ポテンシャル計算値との 関係

まとめ、今後の課題

第一原理バンド計算により、チオフェン系高分子の 固体状態では、一部の例外を除き、スタッキング相互 作用によって孤立状態よりもヘテロ環間の捩れ角が 小さいという結果を得た。この捩れ角減少に伴い、フ ルオレン系高分子も含めたイオン化ポテンシャルの 固体状態における実測値と高分子鎖1本に関する計 算値との間の相関係数は 0.778 から 0.949 に向上し た。固体状態モデルから切り出した高分子鎖3本に ついて計算したイオン化ポテンシャルは、高分子鎖 間の分子軌道相互作用により、高分子鎖1本を切り 出した場合より小さくなるが、固体状態における実測 値との相関係数は 0.953 であり、向上幅は僅かであっ た。

今後の課題は、イオン化ポテンシャルの実測値と 計算値の差がより小さい計算モデルと計算方法の探 索である。図13においては、実測値と計算値の差は 比較的小さいが、より現実に近いモデルに関する図1 4では差が大きい。また、別系統の高分子系有機半 導体についても検討し、チオフェン系、及びフルオレ ン系と比較する予定である。

参照文献

- (http://www.gsic.titech.ac.jp/sites/default/files/ H25_sangyo_sumitomo-chem.pdf)
- Y. Olivier, D. Niedzialek, V. Lemaur, W. Pisula, K. Müllen, U. Koldemir, J. R. Reynolds, R. Lazzaroni, J. Cornil, and D. Beljonne, *Adv. Mater.*, 26, 2119– 2136 (2014).
- 3) a) G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B*, 47, 558
 -561 (1993).
 - b) G.Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*, 54, 11169–11186 (1996).
- 4) a) J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865–3868 (1996).
 - b) S. Grimme., *J. Comp. Chem.*. 27, 1787–1799 (2006).
- 5) a)A. D. Becke, J. Chem. Phys., 98, 5648-5652 (1993).
 - b) C. Lee, W. Yang, and R. G. Parr, *Phys. Rev. B*,
 37, 785–789 (1988).
- 6) P. C. Hariharan and J. A. Pople, *Chem. Phys. Lett.*, 16, 217–219 (1972).
- 7) Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Ivengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R.

L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A.
Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich,
A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V.
Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, Gaussian, Inc.,
Wallingford CT, 2009.

- a)T. Yamanari, T. Taima, J. Sakai, and K. Saito, Solar Energy Materials & Solar Cells, 93, 759–761 (2009).
 - b) I. McCulloch, M. Heeney, M. L. Chabinyc,
 D. DeLongchamp, R. J. Kline, M. Cölle, W.
 Duffy, D. Fischer, D. Gundlach, B. Hamadani,
 R. Hamilton, L. Richter, A. Salleo, M. Shkunov,
 D. Sparrowe, S. Tierney, and W. Zhang, *Adv. Mater.*, 21, 1091–1109 (2009).
 - c) J. Hwang, E.-G. Kim, J. Liu, J.-L. Brédas, A. Duggal, and A. Kahn, *J. Phys. Chem. C*, 111, 1378–1384 (2007).

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 産業利用 成果報告書

利用課題名 衛生陶器混相流シミュレーションの商品設計および販促への展開

英文: Multiphase fluid simulations of sanitary wares for designing and promotions

池端 昭夫 吉田 慎也 Akio Ikebata Shinya Yoshida

TOTO 株式会社 生産技術本部

Production Technology Division, TOTO LTD. http://www.toto.co.jp

邦文抄録(300字程度)

平成 25 年 12 月~平成 26 年 3 月の有償利用により、TSUBAME2.5 においてあらゆる衛生陶器商品の薄膜陶器 表面流れをシミュレートできるようになり、現在新商品設計に活用している。次の課題として、洗浄時の水はねの評 価を行うための技術開発を実施した。新しい保存型運動量解法を提案し、実機とは異なる「水はね」現象を抑制する ことができた。また流体解析技術を販売の第一線におけるお客様プレゼンツールとしても活用するための技術開発 を併せて行った。レイトレーシング法により複雑な気液混相流を鮮明に可視化することで、展示会や新商品説明にお いて顧客に製品の価値伝達をスムーズに伝えることに寄与した。

英文抄録(100 words 程度)

We are now applying our multiphase simulation code which was developed on our research in TSUBAME projects from November, 2013 to March, 2014 to designing various products. Moreover, we have been developing the evaluation method of droplet motions at water flushing. For the sake of suppressing "spurious motions of droplets" on the numerical solutions, we will propose new numerical method, "Conservative Momentum Method". On the other hand, we continue to apply our simulation technology to supporting sales of our products as the presentation tools. We contributed to sending "values of our products" to many customers with our visualization tools using Ray-tracing method.

Keywords: multiphase flow, house hold equipment, sanitary ware, UTI-VSIAM3, CIP

背景と目的

少子高齢化の進展により住宅着エ戸数が伸び悩む 中、住宅設備機器業界ではリフォーム分野に力を入れ てきており、取り換え需要喚起の近年の大きな販売施 策の柱として、エコ・省エネの観点からの節水型商品の 販売が拡大してきている。また国内のみならず海外に おいても、地球温暖化対応や気候変動による砂漠化問 題、発展途上国の衛生問題の観点から、節水型住設 機器の輸出や現地生産が拡大している。しかし衛生陶 器では競争激化から、12L→6L→4L と急激に節水化 が進展し、衛生陶器表面の汚れ残りや衛生面での懸 念などの声が上がってきており、お客様の懸念を払拭 するための評価技術の開発は急務となっている。実機 評価では測定のばらつきや条件設定、測定負荷等の 問題により全てをまかなうことは不可能であり、シミュレ ーションによる洗浄性能評価の実現は積年の課題であ る。さらに世界的な競争に生き残るため、これらの節水 技術を積極的にアピールし顧客からの信頼を獲得する

こともまた求められている。

こういった課題に対し、昨年度まで TSUBAME 有償 利用で大規模多相流体解析コードを開発し、陶器表面 の薄膜流れの評価が可能となったが、商品開発に適用 した段階で、洗浄時の水はねが新たな課題と判明した。 これは節水型トイレの場合、規定の洗浄性能をクリア するために流速が増大する傾向にあり、洗浄時の水同 士の衝突における水はねを発生しやすくなっているた めと推測される。すなわち洗浄性能と水はねは相反す る傾向にあり、双方のバランスを取った設計が必要とな る。したがって洗浄時の水はね量も、事前評価で定量 的にシミュレーションできる技術が新たに求められるよ うになった。

概要

平成 25 年 12 月~平成 26 年 3 月の有償利用により、 TSUBAME2.5 に最適化した大規模並列 GPGPU クラス ター対応の混相流シミュレーションコードを開発し、あら
ゆる衛生陶器商品において薄膜陶器表面流れを精度 よく再現できるようになった。現在当社での様々な衛生 陶器新商品設計に活用している。

次の課題として、洗浄時の水のはねの評価を行うた めの数値計算手法およびシミュレーションコードを開発 し、TSUBAME2.5 にて検証を実施する。また流体解析 技術を販売の第一線におけるお客様プレゼンツールと しても活用するための高品位可視化処理手法の開発 を併せて行い、TSUBAME2.5 での混相流シミュレーシ ョン結果にて効果を確認する。

結果および考察

1. 水はねシミュレーション

昨年度までに開発した UTI-VSIAM3[1]に基づく混 相流シミュレーションコードを 4 種類の衛生陶器製品 に適用し、衛生陶器上部への水はね量を計算した。 図1に製品Aにおける実験結果との比較を示す。明ら かに水はね量が実験よりも過大であり、符合しないこ とが判明した。

次に、シミュレーションコードに LES 乱流モデルを 追加し、再び4種類のモデルの計算を実施した。LES モデルは通常のスマゴリンスキーモデルを採用した。 図2で明らかなように水はね量は実験値に近づけるこ とができているが、図3に示す4種類の製品間の傾向 が実験とは一部異なることが分かった。その原因を詳 しく確認したところ、製品Bにおいて図4に示すように、 実機では観測されない、吐水口での「水はね」が発生 していることが分かった。水はねの原因としては、図4 の流速ボリュームレンダリング値を見ると、「水はね」 直前に赤色で示される高流速の塊が吐水口付近で 発生しており、この塊が引き金となって吐水口付近で 破裂が生じたものと推測される。しかし単に高流速の 塊が生じるだけでは、通常は吐水速度が増大するだ けで、進行方向ではない上方向に向かって液滴が上 昇する現象は考えにくい。そこで一つの仮説として、 吐水口近傍の空気が、高流速の塊によって強く圧縮 され、それが出口で解放される際に空気の破裂流速 が、液体部に数値計算誤差により拡散し、運動量保 存則に見合わない水とびが発生していると推察した。

昨年度までに開発した混相流シミュレーションコー

ドは、一般的な計算手法と同様に、NS 運動方程式

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}\right) = \left(R.H.S\right) \tag{1}$$

を非保存型の定式化

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \left(R.H.S \right)$$
(2)

に変形した式に沿って流体計算することでロバストな シミュレーションを実現している。これは、水と空気の ような密度比が 1000 倍も変わる混相流において、元 の NS 運動方程式の形で計算した場合、流速は

$$\mathbf{u} \equiv \frac{\rho \mathbf{u}}{\rho} \tag{3}$$

すなわち運動量を密度で割って計算されるため、気 液界面近傍セルにおいて、式(3)の分母の密度の計 算誤差により、非常に大きな流速のジャンプを生じる 可能性があり、非保存型解法ではこの問題を回避す ることができるからである。しかしながら、この非保存 型方程式では、陽的に運動量保存性を保証していな いため、数値計算上の誤差により、運動量保存性が 大幅に悪化する可能性がある。今回の水はね不具合 は、この運動量保存性の誤差に起因していると推測 される。

そこで、従来の非保存型運動量保存式解法に変わ り、保存型運動量保存式解法を用いて流速を計算す る新しい手法を開発した。式(3)における流速の不安 定性を抑制するため、分母の運動量と分子の密度を 全く同じ移流計算定式化により更新することにより、 流速の安定化を図った。

式(1)の運動量保存則を運動量について計算する 際に、同時に質量保存則を密度について計算する。

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}\right) = 0 \tag{4}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} \right) = 0 \tag{5}$$

式(4)、(5)の左辺第一項により、運動量および密度が 更新されるが、このままでは式(3)の問題は解消され ない。そこで、各時刻ステップに流速と流体率から運 動量と密度を都度計算し、式(4)、(5)に代入して運動 量と密度を更新して、式(3)により流速を求める。流速 を決めたら、運動量と密度は破棄する。 計算精度とロバスト性を考慮し、式(4)、(5)を次元分 割型 CIP-CSL 法により計算する。UTI-VSIAM3 と同 様に、物理量の VIA(=Volume Integrated Average)と SIA(=Surface Integrated Average)の2種類の値を用い て高次精度計算を行う。

本手法に基づく多相流体解析の具体的な計算手順は次のとおりである。

- 1) 流体率 F^n より、密度 ρ^n の VIA および SIA を計算
- *i=x,y,z* について、次元分割型移流計算により保存型 CIP 法を用いて計算
 - 2-1) pⁿの SIA-*i* を補正

2-2)
$$(\rho \mathbf{u})^* = \rho^n \mathbf{u}^n - \Delta t \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \mathbf{u})^n$$

2-3) $\rho^* = \rho^n - \Delta t \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i)^n$

2-4)
$$\mathbf{u}^* = (\rho \mathbf{u})^* / \rho^*$$

- 2-5) Time Evolution Converting[2]を 用いて SIA-j ($i \neq j$)の \mathbf{u}^* を更新
- 流体率 Fⁿ⁺¹を UTI-VSIAM3 および STAA により 移流計算
- 粘性項、表面張力項、重力項および圧力項を通
 常のプロジェクション法にて計算し、uⁿ⁺¹を更新

様々なテスト計算の結果では、上記アルゴリズム のとおり、運動量および密度の移流計算は次元分割 型で計算し、一方水と空気の界面を表す流体率の移 流計算は従来どおり非次元分割型解法で計算する方 法が、計算の安定性の面で最も良い結果が得られ た。

上記 2-1)の SIA の補正は、2-4)の分母の密度 ρ^* が 急激に小さくならないようにするためのものである。具 体的には、2-3)の密度の移流計算において、図5のよ うな上流側が空気の気液界面が通過するときに、 ρ^{n} の SIA-*i* の急激な密度低下が生じる可能性があるた め、上流側の ρ^{n} -VIA が、空気に近いある一定の値 以下になったときに、界面の ρ^{n} -SIA を上流側の ρ^{n} -VIA の値に書き換える上流化を行う。この計算手法 では ρ^{n} -VIA については何も補正を行わないので、密 度の保存性については問題が生じないと考えられる。

まず一般的なダム崩壊流れテスト計算により、本手 法の妥当性を確認した。図6に計算結果を従来手法 と比較して示す。計算の途中経過は従来手法同様極 めて安定であり、また計算結果もほぼ同等の結果が 得られることが分かった。

次に、気体と液体の密度比が 10⁶ 倍と極めて大き い条件における液滴運動のベンチマークテスト[3]を 実施した。計算条件は、図7の左側から右側方向に 水平に 1.0 の流速を円形の液滴に与え、気体部分は 初期流速 0 として計算を実施した。計算結果は、図7 のとおり従来の非保存型運動量解法では液滴の変 形が生じるのに対し、今回の保存型解法では変形が 生じることなくほぼ理論解どおりの結果が得られてお り、計算誤差による異なる相への流速の数値拡散が 抑えられていることが分かった。

以上のベンチマークテストの結果を踏まえ、今回の 保存型運動量解法を衛生陶器製品Bのシミュレーシ ョンに適用した。図8にシミュレーション結果を示す。 流速分布を見ると従来手法とは大きな違いは見当た らないものの、従来手法ではどうしても抑えることがで きなかった上方への水はねが完全に抑制できており、 実験と同様の吐水の傾向が得られた。この結果より、 今回の保存型運動量解法は運動量の保存性を改善 し、水の不自然な動きを解消する効果があることが分 かった。

従来型手法における製品Bの計算結果で見られた 吐水口の「水はね」は、製品Aおよび製品Cの計算結 果ではほとんど生じていないことが判明した。したが って今回の保存型運動量解法により、図3のBの水 はね量が他の製品の水はね量よりも相対的に少なく なることが期待される。今後、この保存型運動量解法 を他の製品にも同様に適用し、水はね量が実験と同 様の傾向を得られるか検証していく。



experiment 1.5mm mesh 0.8mm mesh





experiment 1.5mm mesh 0.8mm mesh









図5. 界面 j-1/2 において ρ^n -SIA が急激に低下する 状況の例



図8. 非保存型運動量解法による製品Bの計算結果 上図:上方から見た流路の流速の絶対値 下図:側方から見た水はねのようす 2. 混相流シミュレーションのコミュニケーションツール
 への適用

TSUBAME により非常に細かいメッシュサイズのシ ミュレーションが可能となり、実製品の流れの傾向を 良く表せるようになってきたことから、TSUBAME のシ ミュレーションを実物に変わる代替可視化ツールとし ても利用できるようになってきた。衛生陶器の流れの 場合、水の流れは至るところで渦や乱流が発生し複 雑な流れ場となるが、これらの流れを分かりやすく可 視化することで、製品ごとの流れの特徴を第三者に 明確に伝えることができる。このためには、

①流体シミュレーションの精度が十分高いこと

②シミュレーション結果の可視化精度が十分高いことの2点の条件が必要である。これまでの検討で①は かなり達成できるようになってきたことから、今回②に ついても検討を行う。

流体シミュレーション結果の可視化精度とは、各時 刻における水や空気、物体などのシーンにおける各 構造体に対して行う照明シミュレーションの精度に相 当する。水の場合は透過体であるため、水の表面に 到達した光線は屈折および反射を繰り返し、複雑な 光線経路を辿る。この複雑な計算を実施する手法とし て、レイトレーシングが広く用いられている。レイトレー シングは一般的に CG の手法として認識されているが、 本来は忠実に光線追跡を実行し、実写と同様の画像 を得る照明シミュレーション手法である。

これまで TSUBAME では GPGPU 並列処理を用い たレイトレーシングプログラムが開発された事例[4]が あるが、今回は水の高品位レンダリングを目的とする ため汎用ツール POV-Ray Ver3.7 を利用した。Ver3.7 では、処理ピクセルごとに光線追跡深度に大きなばら つきを生じる水のレンダリングをマルチスレッド並列 処理により効率的に処理可能である。ただし POV-Ray 自体に水を忠実に表示するマテリアルは用 意されていないため、水の屈折率は実物に近い値を 使用する一方、拡散反射係数、鏡面反射係数などの 各物体表面物性は、レンダリング結果を見ながら細 かく調整していった。またもう一つの重要な点として照 明の強さや位置、個数の最適化も行った。これは、水 自体には本来色がないため、水の存在を可視化する ためには、水の反射や屈折による輝度の変化を適切 に表現する必要があるからである。水の流れの実験 を高速度カメラで動画撮影するときにストロボやレフ 板の位置を細かく調整するのと全く同様であり、可視 化という点において両者に違いはないといえる。これ まで当社のレンダリングでは、色がない水の識別を際 立たせるために背景に様々な物体を置いて、その背 景像が屈折することで流れを可視化するという一般 的な手法を用いていたが、今回の高品位レンダリング では、照明の調整を最適化することにより、背景の物 体を配置することなく水の動きを明確化することを目 指した。

図9に当社の衛生陶器海外市場向け新製品にお ける TSUBAME シミュレーション結果を可視化レンダ リングにより作成した動画の一例を示す。本シミュレ ーションは、0.8mm メッシュを使用している。本動画に より、当社が「トルネード洗浄」とよんでいる螺旋状の 渦流れが、大小無数の気泡の動きにより的確に捉え られ、螺旋状の渦が固体を巻き込むように排出してい く過程が分かりやすく示されている。このことにより、 当社製品独自の流れである「トルネード洗浄」の商品 価値を分かりやすく顧客に伝えることが可能となった。 図10には、内部流れを微小のトレーサーにより可視 化した例を示す。トレーサーは非常に軽いと仮定し、 水の各時刻、各座標における流速ベクトルに沿って 並進させ、その流速ベクトルの $rot \mathbf{u} = \nabla \times \mathbf{u}$ を計算 し粒子の各軸方向の三次元角速度を計算して回転さ せる方法を用いた。この粒子の動きを追跡することに より、時々刻々変化する内部の大まかな三次元流れ 構造を把握することができる。

また図11には、他社製品との流れの違いを、流速 ベクトルとともに比較したものを示す。他社製品は両 側から水が流れるため中心で両者がぶつかり、エネ ルギーロスを起こしているが、当社製品は均一な反 時計回りの流れを生成するため、無駄なエネルギー ロスがなくしっかり陶器表面を洗い流せることが明確 になった。

このようにして作成された可視化動画を元に映像 用に加工されたものは、海外大規模展示会 KBIS(米、 2015.1)および ISH(独、2015.3)にて展示され、来場

74

者に当社製品の独自性と価値を伝達することに寄与 した。





図10. 海外市場向け衛生陶器製品流れ (トレーサー微粒による内部流れの可視化)





図9. 海外市場向け衛生陶器製品流れ (固体を含む内部の流れの可視化)





図11. 海外市場向け衛生陶器製品流れ (他社製品との流れの比較、上:当社、下:他社)

まとめ、今後の課題

衛生陶器の流体シミュレーションは、TSUBAME 上 での高精度な流体解析により、以前の PC ベースのシミ ュレーションよりも画期的に適用範囲が拡大しており、 これまではシミュレーション精度や可視化品質の面で 活用できなかった洗浄時の水はね評価や営業支援に 応用範囲を拡大している。本年度の検討では、水はね 評価について本来実機では発生しない数値計算上の 「水はね」という課題が明らかになり、保存型運動量解 法に基づく新しい計算手法の提案および検証を行い、 課題の解決を確認した。また営業支援については、 TSUBAME の高精細なシミュレーション結果を活用して、 従来のポストプロセッサと比較して内部の複雑流れの 大幅に鮮明な可視化を達成した。

今後は保存型運動量解法による新しいシミュレーションコードを他の衛生陶器製品にも適用し、水はね量の 傾向が実機と一致するか検証していく。また可視化に ついては様々な製品の営業支援に展開していく予定で ある。

参考文献

- A. Ikebata, Y. Muraoka, F. Xiao: Multiphase fluid simulations on a multiple GPGPU PC using unsplit time integration VSIAM3, Progress in NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY, 2, pp.491-497 (2011)
- [2] F. Xiao: Unified formulation for compressible and incompressible flows by using multi-integrated moments I: one-dimensional inviscid compressible flow, Journal of computational physics, 195, pp.629-654 (2004)
- [3] M. Raessi, H. Pitsch: Consistent mass and momentum transport for simulating incompressible interfacial flows with large density ratios using the level set method, Computers & Fluids, 63, pp.70-81 (2012)
- [4] P. V. PHUC: 建築物の室内外環境の連成解析 とその高速化技術の開発,共同利用(産業利 用トライアルユース:先端研究施設共用促進事 業『みんなのスパコン』TSUBAME によるペタ

スケールへの飛翔) 成果報告書 (2010)

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 産業利用 成果報告書

利用課題名 塗エスラリーの分子シミュレーション 英文: Molecular Dynamic Simulation of Slurry Coating Process

諸星 圭

Kei Morohoshi

トヨタ自動車株式会社

Toyota Motor Corporation http://www.toyota.co.jp/

スラリー塗エプロセスを分子レベルでシミュレーションする手法を開発し、TSUBAME と粗視化分子動力学法を 用いた大規模計算を行うことで材料開発への活用を可能にした。溶媒の蒸散モデルと多孔質構造中の拡散評価法 を開発して塗エプロセスを計算した。溶媒蒸散に伴い微粒子と高分子の構造化が進み、多孔質構造体が形成され る様子を再現することができた。また、塗工に用いる分子が塗工後の特性に及ぼす影響についても調べた。

Slurry coating process has been investigated by using coarse-grained molecular dynamics simulations. Supercomputer TSUBAME enables to deal with large-scale calculations, and that can realize a design of molecular structure. We reproduce the process that some fillers and polymer chains are gradually gathered during evaporation and finally form to complicated porous structure.

Keywords: electrode structure, evaporation, coarse-grained molecular dynamics, bead-spring model

背景と目的

スラリーの塗工は、燃料電池やリチウムイオン電池 の電極作製などで幅広く行われている工業プロセスで、 微粒子と溶質を溶媒に混ぜたスラリーを基板の上に塗 布した後に溶媒を蒸発させて微粒子と溶質からなる多 孔質構造を得るプロセスである(図 1)。構造体の形状 によって電極特性が変わるので、特性を高めるための 改善が生産技術と材料開発の両面から行われている。 しかしその方法は経験的・試行錯誤的であることが多く、 特に材料開発面では用いる材料の組成と得られる構 造体の特性との関係がよくわかっていない。



禄:微粒子、赤:溶質高分子、青:溶媒低分子

材料開発としては、微粒子の表面改質や溶質高分 子の分子構造変更により構造体としての特性向上を図 りたいが、そういった分子レベルの情報がどう構造形成 に作用するのかを直接観測することは難しく、また個々 の分子を表現してシミュレーションを行うには規模が大 きすぎる。そこで、TSUBAME を利用することにより規 模の問題を解決し、分子モデルでの動力学シミュレー ションを実施して塗エプロセスで起きている現象を解明 することを目指した。ただし、TSUBAME を使用しても 個々の原子をあらわに扱うことは困難であるため、複 数の原子をまとめてひとつの粒子として扱う粗視化分 子動力学法を用いることにした。

概要

計算には粗視化手法のひとつであるビーズ-スプリン グモデルを用いた[1]。スラリー中の微粒子・溶質高分 子・溶媒低分子は図2のようにモデル化し、微粒子を構 成する粒子間には結合を設定して球形状を保つように した。非結合粒子間の相互作用には Lennard-Jones ポテンシャルを用いた。

$$U_{\rm LJ}(r) = \begin{cases} 4\varepsilon_{ij} \left\{ \left(\frac{\sigma_{ij}}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r}\right)^6 \right\} + \varepsilon_{\rm LJ}, & r \le r_c \\ 0, & r > r_c \end{cases}$$

ここでrは粒子間距離、 ε_{LJ} は $r = r_c$ でポテンシャルを連続にするための定数である。本研究では全ての粒子で $\sigma_{ij} = \sigma$ 、 $r_c = 2.5\sigma$ とした。結合粒子間には FENE ポテンシャルを追加した[1]。

高分子の分子構造を変えると鎖の剛直性が変わる ことがあり、材料開発では重要な特性のひとつである。 そのため、連続して結合している 3 粒子間に調和振動 子型の曲げポテンシャルを適用して剛直性を表現し た。

$$U_{\text{bend}}(\theta) = \frac{1}{2}k_i(\theta - \theta_0)^2$$

ここで θ は結合角度の外角、 k_i は曲げ弾性定数、平衡角 θ_0 は0とした。



図2 微粒子・溶質高分子・溶媒低分子のモデル

溶媒の蒸散は、気相と液相が共存するときの気相領 域の端から粒子を削除することでモデル化し、削除す る時間間隔を変えることで蒸散速度の違いを表現でき るようにした[2]。溶媒粒子間に働く引力が弱いと液体と しての凝集を再現できないため、図3に示すように引力 の大きさを変えて気液界面を保持できるか調べた結果 から、 $\varepsilon = 1.0$ を用いることとした。



蒸散後の構造体として重要となる輸送特性は、燃料

電池の水素イオンなら高分子中を、リチウムイオン電 池のリチウムイオンなら電解液部分になる空孔中を、ま た電子なら微粒子中を移動するため、経路毎に拡散性 を評価しなければならない。そこで、蒸散後の粒子分布 から微粒子・高分子・空孔の3次元メッシュを作成し(図 4)、メッシュ毎に拡散方程式を解いて特性を評価するこ とにした[3,4]。



図 4 拡散経路の抽出 緑:微粒子、赤:高分子、青:空孔

モデリングには材料物性解析ソフトウェアJ-OCTAを [5]、計算には並列化分子動力学エンジン VSOP を[5]、 拡散評価には衝撃・構造解析ソフトウェア LS-DYNA を[6]、それぞれ用いて行った。

結果および考察

スラリー塗エプロセスの計算結果を図 5 に示す。溶 媒が蒸散していき、それに伴って微粒子と高分子の構 造化が起こり、複雑な構造体が形成される様子が再現 できている。最終構造が多孔質形状となっているか調 べるために、隙間に球を詰めていくことにより空孔の分 布を解析した。結果を図 6 に示す。空孔が構造体全域 に存在し、大きなものでは微粒子と同程度の大きさをも つ多孔質構造であることがわかった。



図 5 スラリー塗エプロセスの計算



図6 空孔の分布

材料開発の手段のひとつとして溶質高分子の分子 構造を変更し、鎖の剛直性が変わった場合の影響につ いて調べた。柔軟な高分子では曲げ弾性定数kを 0 に、 剛直な高分子では 1.5 に設定して計算した。蒸散後の 構造体における高分子中の拡散を評価すると、柔軟な 高分子では 0.46 なのに対して剛直な高分子では 0.22 と約半分であった。拡散評価に用いた高分子のメッシュ を見ると微粒子を被覆している高分子が薄くなっており (図 7)、また空孔分布を解析して空孔率を求めると 0.53 から 0.51 に減少していることから、高分子が剛直 になると微粒子への吸着量が減って一部が空孔中で 凝集することがわかった。従って輸送特性を考えるとき に、剛直性は高分子の経路を細くして拡散性を低下さ せていることが明らかになった。



まとめ、今後の課題

スラリーの塗エプロセスを分子レベルでシミュレーシ ョンする手法を開発し、TSUBAME と粗視化分子動力 学法を用いることで初めて材料開発への活用を可能に した。溶媒の蒸散に伴い微粒子と高分子が構造化して 多孔質構造が形成される様子を再現した。溶質高分子 が輸送特性に与える影響について調べたところ、剛直 性が高分子の経路を細くして拡散性を低下させること がわかった。今後は微粒子の表面改質や蒸散速度の 違いによる影響について検討する。

参考文献

- [1] K. Kremer ,G. S. Grest, J. Chem. Phys., 92, 5057 (1990)
- [2] M. Tsige, T. R. Mattsson, G. S. Grest, *Macromolecules*, 37, 9132 (2004)
- [3] G. Dorenbos, V. A. Pomogaev, M. Takigawa,
 K. Morohoshi, *Electrochemistry Communications*, 12, 125 (2010)
- [4] G. Dorenbos, K. Morohoshi, *Energy Environ.* Sci., 3, 1326 (2010)
- [5] http://www.j-octa.com/jp/
- [6] http://cae.jsol.co.jp/product/struct/lsdyna/

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 産業利用 成果報告書

ワイヤレス電力伝送による漏えい電波の環境解析技術の研究開発

Research and development of environment analysis technique of leaked electromagnetic field from wireless power transfer

池田 和彦

Kazuhiko Ikeda

(株)パナソニックシステムネットワークス開発研究所 Panasonic System Networks R&D Lab. Co., Ltd. http://panasonic.co.jp/avc/psnrd/

家庭用電子機器などの給電に用いられるワイヤレス電力伝送(WPT)システムが近年検討されている. WPT シス テムから漏えいする電磁界は,他の電子機器の動作に影響を及ぼす可能性があるため,漏えい電磁界による干渉 影響の把握が課題であり,様々な設置環境や周波数帯における定量的な評価が必要となる.WPT システムでは, 数次高調波における漏えい電磁界も発生することから,GHz 帯を使用する無線機器への干渉も懸念されるため, GHz 帯の漏えい電磁界評価も必要である.そこで本研究開発では,これまでに筆者らが開発した Ray Launching 法による電波伝搬シミュレータを用いて,戸建て実験住宅内のWPTシステムからの漏えい電磁界特性を解析し,測 定結果との比較検証を行う.また,TSUBAME 2.5を用いた並列計算により,実用的な時間内に大規模な空間にお ける漏えい電磁界特性の解析が可能となることを示す.

The wireless power transfer (WPT) system has been actively developed in recent years. Since the electromagnetic field leaked from the WPT system may interfere with the other devices that use the GHz band, it is required to quantitatively evaluate the electromagnetic interferences over a wide range of frequencies in various installation conditions. In this paper, we propose an approach for analysis the electromagnetic field of the high-harmonic component or the microwave WPT system in the case-study house by simulation using the Ray Launching method. The validity of the proposed simulation method is confirmed by comparing the simulation and the measurement results. Moreover, we also show that the electromagnetic field properties in a huge space can be analyzed within a practical time using the supercomputer TSUBAME 2.5.

Keywords: 無線電力伝送, 漏えい電磁界, Ray Launching

<u>背景と目的</u>

近年,電波の利用方法としては,通信だけではなく, 電力伝送技術が注目されている.2015年以降の実用 化が予定されているワイヤレス電力伝送(WPT)システ ムとして,電気自動車用の大電力(数 kW)を伝送する ものや,家電機器用の中電力(数百 W)を伝送するも のなど,多種多様な方式開発が進められている.

WPT システムは、一般家庭や集合住宅への普及が 見込まれており、使用範囲として住宅内に限らず屋外 の駐車場も含めた広い空間が想定されている.上記の ような環境において、今後普及が進む WPT システム と他の機器との共存を図るためには、WPT システム から発生する数十kHz~数GHzの広い周波数範囲に わたる漏えい電波が近接する機器に与える影響を解析 することが必要となる.しかしながら,数+ kHz~数 GHz の周波数範囲において漏えい電波の様々な特 性をシミュレーションにより評価する技術はこれまで確 立されていない.漏えい電波の特性を FDTD(Finite-Difference Time-Domain)法などの電 磁界シミュレーション技術により解析する場合は,計算 規模は波長に依存する.例えば3.5GHz帯や5.3GHz 帯などの周波数帯では,住宅内またはそれ以上の空 間で計算規模が膨大となり,実用的な時間内に解析す ることが困難となる.

本研究開発では, WPT システムをはじめとする各 種電子機器が密集して設置された環境における漏えい 電波の特性を解析できるシミュレーション環境の構築を 目的として, 3.5GHz帯と5.3GHz帯の漏えい電磁界を

81

対象に次に示す検証を行う. 幾何光学的解析手法に基 づく Ray Launching 法電波伝搬シミュレータを開発し, 戸建て実験住宅内における WPT システム漏えい電磁 界の測定結果とシミュレーション結果の差分±5dB 以内 を目標に比較検証を行うことで,本シミュレーションの 妥当性を示す.また,本シミュレータに対し,スーパーコ ンピュータ TSUBAME 2.5 を用いた並列計算の適用 により,戸建て実験住宅周辺の構造物を含む大規模な 空間において,実用時間内に漏えい電磁界特性の解 析が可能となることを示す.

<u>Ray Launching 法の概要</u>

Ray Launching 法を用いた幾何光学伝搬解析手法 は、送信点から放射される電波を図 1 に示すように電 波を光線(Ray)とみなし、送信点から離散的に放射した Ray が受信点に到達するまでの軌跡を求めることで送 受信間の電波伝搬特性を推定する解析手法である. こ の解析手法は、計算量が送信点から放射される Ray 間の離散角度に依存する. そのため、大規模な空間に おいても、他の解析手法(例えば FDTD 法)と比較して 計算量を抑えられる利点がある.

Ray Launching法の特性として, 放射した各 Ray が 受信点に到達するまでの軌跡計算を独立に行えること が挙げられる.本特性を利用し,各 Ray について並列 計算を行うことにより,計算時間を短縮することができ る.図2に,本シミュレーションで採用した並列計算方 法を示す.TSUBAME 2.5 は複数の計算ノードが高速 通信で接続された構成であるため,送信点から放射さ れる Ray を方向毎に分割し,各計算ノードに配分する ことで複数の計算ノードを用いた並列計算を行う.



図 1 Ray Launching 法



図 2 TSUBAME 2.5 を用いた並列計算方法

<u>戸建て実験住宅におけるシミュレーション条件</u>

図 3 及び図4に実験住宅モデルを示す.また,図4 に示すように,住宅周辺の建物からの反射等により住 宅内の漏えい電磁界電界特性が影響を受けるため, 150m四方の構造物もモデル化した.WPTシステムの 設置位置(送信位置)は実験住宅内の一階リビングとし, 伝送距離が数m程度のマイクロ波帯を利用するシステ ムを想定して図5に示す放射パターンを有する指向性 アンテナを用いる.受信機器には被干渉機器として 3.5GHz帯は携帯電話端末,5.3GHz帯は無線LAN ルータを想定し,図6に示す放射パターンを有するア ンテナを用いる.測定結果とシミュレーション結果の比 較は,見通し内外を含む4箇所について,漏えい電磁 界の受信電力の中央値を比較することで行う.また計 算条件は反射回数10,透過回数10,回折回数2,放 射離散角度1度とする.



図 3 実験住宅モデル



図 4 実験住宅周辺の構造物





図 6 受信機器の放射パターン

シミュレーション結果と測定結果の比較検証

3.5GHz 帯及び 5.3GHz 帯について, 二階子供部屋 における測定結果とシミュレーション結果の 30cm 区間 毎の中央値を比較した結果を図 7 に示す. 図 7 中の Sim.model(a)は, 参考文献[3]に基づいて電気定数を 実験住宅内の各壁面に適用した結果であり, Sim.model(b)は外壁の電気定数を変更した結果であ る. Sim.model(a)は, 一部区間で測定結果との差分が 大きく, 測定結果と差異があることがわかる.

【考察】

Sim.model(a)における差分要因として,住宅内の部 材のうち,外壁を経由して到来する伝搬路に着目する. 外壁経由の伝搬路は図 8 に示すように屋内における 外壁反射波と屋外からの外壁透過波が到来することを シミュレーション結果より解析した.外壁は内部に断熱 材や内壁側の石膏ボード等の複数材質によって構成さ れ,構造が複雑である.従って,外壁の電気定数が測 定環境と異なり,透過時または反射時の減衰量の差異 が差分要因と推測した.

そこで外壁の電気定数を測定環境と同等に調整する ため、実験住宅の屋外において WPT システムからの 漏えい電波を測定し、そのパスロスから外壁における 透過波の減衰量を推定した.表 1 は外壁透過波の減 衰量から推定した電気定数の変更前後を比較したもの である.電気定数変更後の Sim.model(b)は透過時の 減衰量が電気定数変更前に対し約 5dB 低下し、同様 に反射時の減衰量は電気定数変更前に対し約 8dB 低 下することがわかる.





図 8 着目した二階子供部屋に到来する伝搬路

表	1	外壁の電気定数変更前後の比較
---	---	----------------

外壁の	比誘	導電率	反射時の	透過時の
電気定数	電率	[S/m]	減衰量	減衰量
Sim.model(a)	2.8	5×10^{-2}	9.4dB	12.2dB
Sim.model(b)	10.9	1×10^{-2}	$1.5 \mathrm{dB}$	7.5dB

【結果】

前記考察と同様に実験住宅内の各壁面(内壁,ドア, 窓等)について電気定数を変更した結果を図 9 及び図 10 に示す. 図 9 に示す 3.5GHz 帯及び図 10 に示す 5.3GHz 帯の共に測定結果とシミュレーション結果の差 分が±5dB 以内となることを確認できる. 以上より, 壁 面の電気定数を適切に設定することで測定結果とほぼ 一致するシミュレーション環境を構築した.



図 9 各測定箇所における測定結果とシミュレーション 結果の比較(3.5GHz帯)



図 10 各測定箇所における測定結果とシミュレーショ ン結果の比較(5.3GHz帯)

<u>計算速度向上効果検証</u>

前節で述べたように、本シミュレーションではスーパ ーコンピュータTSUBAME 2.5 について複数の計算ノ ードを用いた並列計算が可能である. 並列計算による 計算速度の向上効果を検証するため、表 2 に示す計 測条件に従って計算時間を計測した. 表 3 は計算時 間の計測結果であり、図 11 は計算ノード数に対する 計算速度向上度を示したものである. なお、計算速度 向上度は1計算ノード時の計算時間に対する計算時間 の短縮割合を示し、下記の式より計算する.

計算速度向上度 =
$$\frac{\frac{1}{3} \frac{g}{J} - \kappa_{\delta 1} 0}{\frac{1}{3} \frac{g}{J} - \kappa_{\delta 1} 0}$$
 (式 1)

表 3 に示すように、複数計算ノードを用いた並列計 算により約 20 倍の計算速度向上効果が得られ、1 時 間以内に住宅モデルの漏えい電磁界解析が可能とな った. 一方、図 11 が示すように、計算ノード数 30 以上 において計算速度向上度が飽和することがわかった.

【考察】

所定以上の計算ノード数において計算速度向上度 が飽和する要因として,計算ノード毎の計算量に偏りが あることが考えられる.前節で述べたように本シミュレ ーションの並列計算は方向毎に分割した放射 Ray を各 計算ノードに配分する方法を採用している. 例えば, 特定の方向に遮蔽物となる壁面が多い場合は, 該当方向に配分された計算ノードの計算量が増加し, 計算ノード間で計算量に偏りが生じることが考えられる. このような場合, 特定の計算ノードの計算量がボトルネックとなり, 計算ノード数を増加した場合においても所望の計算速度向上効果を得られない.

計算ノード間の計算量の偏りを改善する方法として, 各計算ノードに配分した放射 Ray を定期的に再配分す る方法が考えられる.改善案では,放射 Ray の再配分 の際に,計算ノード間に放射 Ray に関する情報のデー タ転送が発生するが,TSUBAME 2.5の計算ノード間 は表 2 中に示すように最大 80Gbps の高速通信が可 能な Infiniband を用いて接続されているため,全体の 計算時間に対するデータ転送時間の占める割合は少 ないと考えられ,計算ノード間の計算量偏りの解消によ り計算速度の向上が期待できる.

項目	值
CPU	Intel Xeon X5670 2.93GHz,
	6cores x 2slot, with Hyper Threading
搭載メモリ	54 GByte
計算ノード間接続	QDR Infiniband x2 (80Gbps)
計算ノードあたりの	1 プロセス
MPI プロセス数	
計算ノードあたりの	24 スレッド
マルチスレッド数	
最大使用メモリ	48 GByte
計算ノード数	1~100 ノード
周波数帯	1) 3.5GHz 帯,
	2) 5.3GHz 帯
MPI バージョン	1.1

表 2 計算時間の計測条件

表 3 計算時間の計測結果

周波数帯	計算時間			
	ノード数 1	ノード数 30		
3.5GHz 帯	21.36 hour	0.97 hour		
5.3GHz 帯	11.54 hour	0.68 hour		



図 11 計算ノードに対する計算速度向上度

<u>まとめ</u>

Ray Launching 法シミュレーションにより戸建て実 験住宅内の WPT 漏えい電磁界特性を解析し、住宅内 部材のうち壁面の電気定数を適切に設定することで測 定結果とシミュレーション結果の差分が±5dB 以内とな り、シミュレーションの妥当性を示した。

また、TSUBAME 2.5を用い、Ray Launching法に おける放射 Ray 毎の軌跡計算を複数の計算ノード間で 並列計算を行うことにより、実験住宅内の WPT システ ム漏えい電磁界特性解析を 1 時間以内で計算が可能 なシミュレーションシステムを構築した。

今後は、戸建て実験住宅以外の住宅モデルにおけ る検証を通してのシミュレーション精度の向上と、大型 店舗等の大規模モデル解析に向けて計算ノード間の計 算量の偏り解消による計算速度改善に取り組む。

なお、本研究は総務省平成26年度電波資源拡大の ための研究開発「ワイヤレス電力伝送による漏えい電 波の環境解析技術の研究開発」の一部である。

参考文献

[1] 篠原 真毅, 電気学会論文誌B, Vol.J96-B, No.9,
 pp.881-893, "無線電力伝送の送電距離に対する理
 論と技術"

[2] 高木他,信学技報,AP2003-159,RCS2003-165,
 "FDTD 法とRay-Launching 法による携帯機アンテナの実効利得評価"

[3] 近藤孝亮他,信学技報,EMCJ2005-109 (2005-11),
 "室内における建築材料電気特性モデルベース測定法の測定条件についての実験的検討"

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 産業利用 成果報告書

利用課題名 大容量データ伝送用ミリ波アンテナのレドームに関する基礎検討 英文: A Study on radome for millimeter-wave antenna

> 利用課題責任者 千葉 修二 Shuji Chiba

所属 スタッフ株式会社

STAF corporation. URL http://www.staf.co.jp/

邦文抄録(300字程度)

屋外で使用される大容量データ伝送用ミリ波帯アンテナに装着されるレドームの厚みに注目し検討を行った。レド ームの厚みは電気的特性、機構的強度を考慮し 2mm~3mm に設定した。TSUBAME を用いた電磁界解析で、レ ドームの厚みを細かく可変させた時のアンテナの指向性ならびにアンテナ利得を示している。その結果をも元にレド ームの厚みの最適値について示した。

英文抄録(100 words 程度)

We studied the thickness of the radome in the millimeter-wave band antenna for outdoor. The thickness of the radome, in consideration of electrical characteristics and mechanical strength, was set from 3 mm to 2 mm. Shows an antenna directivity and antenna gain obtained when varied the thickness of the finely radome in electromagnetic analysis using TSUBAME. We shows the optimum value of the thickness of the radome the result based on.

Keywords: radome, electromagnetic simulation, horn antenna,

背景と目的

近年モバイル端末の普及、およびコンテンツ情報量 の増大に伴い、通信ネットワークトラフィックが爆発的に 増大しているなか、ミリ波帯 E-Band(71GHz~86GH z)を使用した大容量のデータ伝送が可能な無線装置 が注目されている。使用されるアンテナにおいては、通 信距離の確保、通信の安定化などを実現する為にアン テナに求められる性能は、高利得化、低サイドローブ化 など極めて高く、また屋外で使用するため、気象の悪条 件も考慮したものが必要となる。気象の悪条件からア ンテナを保護する役割でレドームを装着するが、レドー ムに求められる性能は電波の透過率が高く、機械的に 強く、耐候性に優れていることが求められる。ミリ波帯 アンテナにおいてレドームの影響は大きいことが予想さ れ、高いアンテナ性能を維持しつつ優れた耐候特性を 確保するためには、レドームの最適化は極めて重要で あり大きな課題となる。

上記課題に対し電磁界解析を用いてミリ波帯アンテ ナにおけるレドームの影響を明らかにすることを目的と している。レドームのパラメータとしては、厚み、誘電率、 形状など様々あるが、本課題においては、レドームの 厚みに対する指向性の変化と利得の変化に的を絞り、 基礎的なデータの取得を行った。

概要

本課題は、基礎的なデータの取得を目的としている 為、検討アンテナはホーンアンテナを採用している。そ の構成を図1に示す。

レドームの影響を確認する為に電磁界解析実施モデ ルは、レドームなしモデル図 1 を基本状態とし、次にレ ドームありモデル図 2 としている。

レドームは天面の厚みを機構的な強度を加味し 2mm~3mmとし0.1mm刻みで可変(図3)、電磁界解 析を実施し、指向性と利得をレドームなし状態とレド ームの厚みtを可変したものと比較する事で、ミリ波 E-Band帯の71GHzと76GHzにおけるレドームの 影響を確認する。



図 1 ホーンアンテナ:角すいホーン /レドームなしモデル基本状態





図3 レドーム天面厚みt可変

結果および考察

図 4(a)(b)に図 1 と図 3 の電磁界解析の結果として 71GHz、76GHzの利得とレドーム厚みの関係を示す。 厚みを可変する事で利得が変化している事が解る。 71GHzの利得は、レドームなし状態を基準とすると 2.1mm で 1dB 悪く、2.8mm で 1.5dB 程度良くなり、 2mm、2.4mm、3mm でレドームなし状態と同等の利 得となっている。76GHzの利得はレドームなし状態を 基準とすると 2.1mm で 2dB 程度良く、2.6mm で 2dB 程度悪くなり、2.4mm と 2.8mm でレドームなし状態と 同等の利得となっている。

71GHz と 76GHz では利得の変化傾向の違いが見 られた。これは 71GHz の波長 $\lambda = 4.23$ mm に対し 76GHz では波長 $\lambda = 3.95$ mm となりこの差が影響して いると考える。

71GHzの利得とレドーム厚みの関係 ・レドームなし 19.0 ----レドーム厚み可変 17.0 15.0 [편 13.0 ₩ 〒 11.0 9.0 7.0 1.9 2 2.1 2.5 2.6 2.7 2.2 2.3 2.4 2.8 2.9 3.1 ーム天面の厚み【mm】 レド 図4(a)



次に図 5(a)(b)に 71GHzの指向性とレドーム厚み の関係を示す。グラフにはレドームなし状態図 1 と、利 得と厚みの関係から利得の変化が大きかった 2.1mm、 2.8mmと変化が少なかった 2mm、2.4mm、3mmを比 較したものとなっている。H 面の結果からは、レドーム の厚み 2.4mm、2.8mmにおいて指向性の変化が大き く、一方 E 面は、2.4mmにおいて0°~10°付近で指 向性の変化が見られたが、それ以外の所では厚みに 関係なく変化量は少ない結果となった。今回の条件に おいて 71GHzではレドームの厚みを 2mm または 3mmにする事でレドームによる影響を最小限に抑える ことが可能と考える。

88





76GHz レドームの厚みとH面の指向性の変化 20 15 10 5 0 (dBi) -5 ノド・ ーム厚み2.0 ₩ 2 -10 - レドーム厚み2.1mm -レドーム厚み2.4mm -15 レドーム厚い2.6mm -20 -**レドーム厚み**2.8mm -25 レドームなし -30 10 30 0 20 40 50 60 80 70 角度【deg】 ⊠ 6(a)



次に図 6(a)(b)に 76GHz の指向性とレドーム厚み の関係を示す。グラフにはレドームなし状態図 1 と、利 得と厚みの関係から利得の変化の大きかった 2.0mm と 2.1mm、2.6mm、利得の変化が少なかった 2.4mm と 2.8mm、を比較したものとなっている。H 面の結果は 厚み 2.0mm が最も指向性の変化が少なく、2.4mm で 指向性の変化が大きい結果となっている。一方 E 面の 結果はどの厚みにおいても指向性の変化が少ない結 果となっている。今回の条件において 76GHz では、レ ドームの厚みを 2.0mm にする事でレドームの影響を最 小限に抑える事が可能と考える。

まとめ、今後の課題

ミリ波アンテナにおけるレドームの厚みの影響を電磁界解析にて確認した。レドームの厚みを可変することで、利得、指向性が変化する事を確認できた。また、この結果から影響の少ないレドームの厚みが確認でき、今回の条件においてはレドームの厚みを 2mm にする事でレドームの影響を最小限に抑えられることが解った。

今回は71GHzと76GHzに周波数を絞ってレドーム の影響を確認したが、今後は周波数の範囲を広げ (81GHz~86GHz)レドームの影響を確認し、厚み以外 のパラメータ(比誘電率、レドーム形状など)の影響も確 認する予定である。

文部科学省 研究開発施設共用等促進費補助金 先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業

東京工業大学 TSUBAME 産業利用 平成 26 年度利用終了課題 利用成果報告書

平成 28 年 2 月 29 日発行

国立大学法人 東京工業大学

学術国際情報センター 共同利用推進室

〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1 E2-6

URL http://www.gsic.titech.ac.jp/

E-mail kyoyo@gsic.titech.ac.jp

本書に記載の記事・写真等の二次使用を禁じます。これらの情報は著作権法上認められ た「私的利用」または「引用」の条件をみたした場合を除いて、著作権者に無断で転載、複 製、放送、公衆送信、翻訳、販売、貸与等の利用を禁じます。