

Wed. May 31, 2023

Room C

OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

[C-01] OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc. (1)

座長:嶋田 宗将(理化学研究所)

9:30 AM - 10:30 AM Room C (2F Conference Room 201A)

[C-01-01] 広範囲・高解像度 LES に基づく高層建築物の風圧力推定

*河合 英徳¹、田村 哲郎² (1. お茶の水女子大学、2. 東京工業大学)

9:30 AM - 9:45 AM

[C-01-02] CUBEフレームワークを利用したボクセルトポロジー最適化による固有値最大化

*和田 有司¹、嶋田 宗将²、西口 浩司³、岡澤 重信⁴、坪倉 誠^{2,5} (1. 東京工業大学、2. 理化学研究所、3. 名古屋大学、4. 山梨大学、5. 神戸大学)

9:45 AM - 10:00 AM

[C-01-03] 非対称トレッドパターンを有する乗用車用タイヤの路面接触に着目した流れの分析

*掛上 剛¹、倉石 孝²、徐 兆京¹、金子 隆太郎¹、滝沢 研二¹、Tezduyar Tayfun E.^{2,1} (1. 早稲田大学、2. ライス大学)

10:00 AM - 10:15 AM

[C-01-04] Droplet/Aerosol Dispersion Simulation for Assessing the Infection Risk Due to Airborne Virus in a Sport Stadium Type Environment
スポーツスタジアム型環境における空中ウイルス感染リスク評価のための液滴・エアロゾル分散シミュレーション*金 相元¹、大西 順也¹、Bale Rahul^{1,2}、坪倉 誠^{1,2} (1. 理化学研究所、2. 神戸大学)

10:15 AM - 10:30 AM

OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

[C-02] OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc. (2)

座長:河合 英徳(お茶の水女子大学)

10:45 AM - 11:30 AM Room C (2F Conference Room 201A)

[C-02-01] Building-Cube法に基づく大規模非定常流れのトポロジー最適化

*勝又 稜平¹、西口 浩司¹、干場 大也¹、加藤 準治¹ (1. 名古屋大学)

10:45 AM - 11:00 AM

[C-02-02] オイラー型有限体積法による自動車コンポーネン

ト構造の超並列弾塑性解析

*竹内 秀輔¹、西口 浩司¹、干場 大也¹、加藤 準治¹、岡澤 重信² (1. 名古屋大学、2. 山梨大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[C-02-03] 界面不連続性を有する流体-構造連成問題に適した陰的オイラー型有限体積法

*西口 浩司¹、近藤 景斗¹、嶋田 宗将²、干場 大也¹、加藤 準治¹ (1. 名古屋大学、2. 理化学研究所)

11:15 AM - 11:30 AM

OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

[C-03] OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc. (3)

座長:西口 浩司(名古屋大学)

1:15 PM - 2:15 PM Room C (2F Conference Room 201A)

[C-03-01] (キーノート講演)「富岳」を利用した大規模なフラグメント分子軌道計算について

*望月 祐志^{1,2}、坂倉 耕太³、中野 達也⁴、土居 英男¹、奥脇 弘次¹、秋澤 和輝¹、北原 駿¹、太刀野 雄介¹、松岡 壮太¹、小沢 拓⁵、大島 聡史⁶、片桐 孝洋⁷ (1. 立教大学、2. 東京大学、3. 公益財団法人計算科学振興財団、4. 国立医薬品食品衛生研究所、5. 株式会社J SOL、6. 九州大学、7. 名古屋大学)

1:15 PM - 1:45 PM

[C-03-02] BCMを用いた複雑形状を有する構造物の耐風設計のための流れ場解析

*長尾 悠生¹、田村 哲郎²、河合 英徳³、丸山 勇祐¹ (1. 前田建設工業、2. 東京工業大学、3. お茶の水女子大学)

1:45 PM - 2:00 PM

[C-03-03] Safely evaluation of indoor spaces through simulation of CO2 exhalation and ventilation
*ばれらふーる^{1,2}、Li Chung-gang²、Ito Kazuhide³、Tsubokura Makoto (1. RIKEN、2. Kobe University、3. Kyushu University)

2:00 PM - 2:15 PM

OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

[C-01] OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

(1)

座長:嶋田 宗将(理化学研究所)

Wed. May 31, 2023 9:30 AM - 10:30 AM Room C (2F Conference Room 201A)

[C-01-01] 広範囲・高解像度 LES に基づく高層建築物の風圧力推定

*河合 英徳¹、田村 哲郎² (1. お茶の水女子大学、2. 東京工業大学)

9:30 AM - 9:45 AM

[C-01-02] CUBEフレームワークを利用したボクセルトポロジー最適化による固有値最大化

*和田 有司¹、嶋田 宗将²、西口 浩司³、岡澤 重信⁴、坪倉 誠^{2,5} (1. 東京工業大学、2. 理化学研究所、3. 名古屋大学、4. 山梨大学、5. 神戸大学)

9:45 AM - 10:00 AM

[C-01-03] 非対称トレッドパターンを有する乗用車用タイヤの路面接触に着目した流れの分析

*掛上 剛¹、倉石 孝²、徐 兆京¹、金子 隆太郎¹、滝沢 研二¹、Tezduyar Tayfun E.^{2,1} (1. 早稲田大学、2. ライス大学)

10:00 AM - 10:15 AM

[C-01-04] Droplet/Aerosol Dispersion Simulation for Assessing the Infection Risk Due to Airborne Virus in a Sport Stadium Type Environment スポーツスタジアム型環境における空中ウイルス感染リスク評価のための液滴・エアロゾル分散シミュレーション

*金 相元¹、大西 順也¹、Bale Rahul^{1,2}、坪倉 誠^{1,2} (1. 理化学研究所、2. 神戸大学)

10:15 AM - 10:30 AM

9:30 AM - 9:45 AM (Wed. May 31, 2023 9:30 AM - 10:30 AM Room C)

[C-01-01] 広範囲・高解像度 LES に基づく高層建築物の風圧力推定

*河合 英徳¹、田村 哲郎² (1. お茶の水女子大学、2. 東京工業大学)

CUBE フレームワークを利用した ボクセルトポロジー最適化による固有値最大化

Eigenvalue maximization by voxel topology optimization using CUBE framework

和田 有司¹⁾, 嶋田 宗将²⁾, 西口 浩司³⁾, 岡澤 重信⁴⁾, 坪倉 誠^{2) 5)}
Yuji Wada, Tokimasa Shimada, Koji Nishiguchi, Shigenobu Okazawa, and Makoto Tsubokura

¹⁾東京工業大学 未来産業技術研究所 (〒 226-8503 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259-R2-26, E-mail:ywada@sonic.pi.titech.ac.jp)

²⁾理化学研究所 計算科学研究センター (〒 650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26)

³⁾名古屋大学 大学院工学研究科 土木工学専攻 (〒 464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町)

⁴⁾山梨大学 工学域 機械工学系 (〒 400-8511 山梨県甲府市武田 4-3-11)

⁵⁾神戸大学 システム情報学研究科 (〒 657-8501 兵庫県神戸市灘区六甲台町 1-1)

Topology optimization to obtain a conceptual structure of an automobile frame that satisfies NVH performance from a large domain of metal blocks requires a small volume fraction constraint and sufficient element resolution. In this study, we implemented a voxel topology optimization framework based on the CUBE framework to perform eigenvalue maximization of the structure in a massively parallel environment and measured its parallelization performance.

Key Words : *Topology optimization, Finite element method, Building-cube method, Eigenvalue analysis, Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method*

1. 背景

トポロジー最適化^[1-4]は、許容された設計空間の中で目的関数を最大または最小となるよう部材・材料の配置を空隙含めて決定する最適化手法のひとつで、設計者に有効な示唆をもたらすものとして、近年産業応用が進んでいる。三次元構造物の設計にはボクセルトポロジー最適化^[2]がよく知られており、大設計領域で三次元構造物を設計する際に剛性マトリクスの再計算が不要であるため大きく計算量を削減することができる。トポロジー最適化の大規模化については、数百万から数億要素規模で体積制約 1-10%程度の計算例が報告されている^[5-7]。この反面、自動車フレームにおいては、設計者が期待する設計領域に対して実際の材料が通る体積は 1%以下であり、解像度不足によりこのような要求に答えられていない現状がある。

自動車フレームの設計においては、静剛性だけでなく NVH(Noise, Vibration, Harshness) 性能の向上もまた期待される。トポロジー最適化を利用して固有値^[8]や動剛性^[8-10]の最大化については報告されているが、大規模並列環境における最適化性能に関する検討は限定されている。

著者ら^[11,12]は大領域・高解像度・低体積制約を実現するトポロジー最適化フレームワークの構築と最適化性能に関する検討を行っている。理化学研究所により開発されている階層直交格子を利用した有限体積法流体解析ソフトである CUBE^[13]は、Building Cube Method(BCM^[14])を利用することで超並列計算機環境においてメモリ分散環境での高い並列化効率を得ることできる。BCMは解析空間を CUBE と呼ばれるセル集合で分割することにより直交格子による離散化を行い、

CUBE における流体解析は埋め込み境界法で形状の表現を行う。西口らは BCM を利用した VOF 法によるオイラー型有限体積法による強連成の流体構造連成解析^[15]、およびマーカー粒子による構造解析^[16]を提案している。また嶋田らは CUBE におけるマーカー粒子を用いた流体構造連成解析を提案している^[17]。

本研究では上記の BCM ボクセルトポロジー最適化フレームワークを利用して、構造体の固有値の最大化に関するトポロジー最適化を実装し、その性能について検討する。巨大並列環境での固有値ソルバとしては Locally Optimal Block Preconditioned Conjugate Gradient (LOBPCG) 法^[18,19]を使用する。

本稿では、スーパーコンピューター富岳^[20]を利用した大並列環境において、CUBE 環境で実装された LOBPCG 法の並列化性能の検討、トポロジー最適化の例題でその精度を確認した後に、車体ホワイトボディフレーム規模の大規模・低体積制約ボクセルトポロジー最適化について検討する。

2. CUBE フレームワーク内での固有値ソルバ

Fig.1 にボクセルトポロジー最適化フレームワークを示す。ユーザーは CAD 等で作成した設計領域をに対し、(A) 形状を表現するのに十分な精度で要素分割したメッシュファイルを準備し、同時に境界条件を適用する範囲を示す領域も同ファイルに三次元要素として追加する。このモデルで解析をするわけではないので要素サイズや要素品質は悪くて問題ない。

この有限要素モデルを一度 STL に変換するなどして、BCM 格子生成ソフト (Gridgene^[21]) へ入力し、必要な解像度を指定した上で (B)BCM グリッドファイルを準

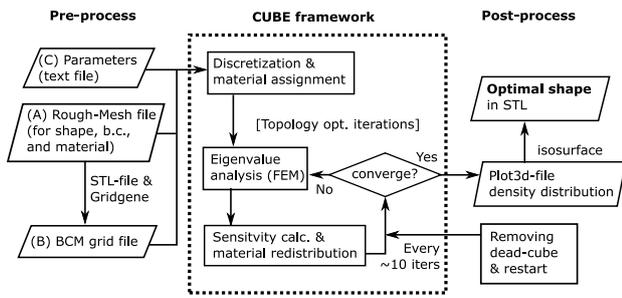


Fig.1 Procedure of topology optimization using CUBE framework.

備する。トポロジー最適化フレームワークでは階層直交格子生成機能を抑制すると、構造内部に流体点を指定して設計領域が解析領域外にならないように留意する。CUBE グリッドの生成は長くとも数分で完了する。

トポロジー最適化は (A) 形状ファイルと (B) BCM グリッドファイル、および (C) 最適化設定ファイルで動作する。形状ファイル情報から各セルに初期密度情報を設定する離散化処理はプログラム中で長くとも数十分で完了し、以降は CG 法ソルバによる有限要素解析と最適性規準法^[1]による密度再分配が反復される。

本フレームワークの利点は、このプレ処理の軽量性と高速性である。(A)(B)の両ファイルは大きくとも 1 Mbyte 以下で容易に編集できる。一般的な非構造格子の有限要素法トポロジー最適化でも四面体要素を使用すれば自動メッシュは可能であるが、数百万要素を超えたあたりからメッシュファイルが巨大になり編集性が著しく低下する。また、一度メッシュを切ってしまうと解像度の変更には再度高負荷なメッシュ分割を繰り返す必要がある。本手法では解像度の変更も (B) グリッドファイルの再生成により容易に可能である。

本稿のトポロジー最適化は SIMP 法^[3]を用いる。各セルには空隙と母材の間の中間密度状態 ρ , ($0 \leq \rho \leq 1$) を許容し、密度の再分配により最終的な密度状態を決定するものである。中間材料の剛性はそのヤング率が密度のべき乗 p (通常は $p = 3$) に比例するものとして扱うことで剛性のスケールングをする。要素の質量は密度に比例するものとする。密度 ρ は階層直交格子のセル中心に定義される。構造体の形状はこのグレースケールの濃淡で表現される。一方で、有限要素法の自由度は各セルの節点に配置される。

直交格子領域における初期設計領域が存在しない領域や、密度が ρ_{del} を下回ったセルは、剛性をもたない空隙 $\rho = 0$ として取り扱う。この際に、空隙セルのみに囲まれた節点自由度については数値的不安定を抑制するために拘束するものとする。

直交格子領域は CUBE と呼ばれるセルの直方体集合単位により分割され、各 CUBE ごとに MPI プロセスに割り当てることで並列処理を実施する。領域の接続はセル中心および節点物理量とも MPI プロセスによる袖領域の交換で達成される。セル中心・節点物理量の両方を接続する関係上、流体計算における BCM の利点の一つである二倍領域との階層接続は不可能である。しかしながら、初期設計領域のサイズに対応してコネク

ティビティを有する CUBE 領域に分割することで、単純な直交格子法と比べて使用メモリや計算量を削減することができる。

セル j の剛性行列 $[k_j]$ および質量行列 $[m_j]$ はセルの密度 ρ_j を用いて下記のように表すことができる。質量行列は固有値ソルバの計算量から集中質量行列を使用する。

$$[k_j] = \rho_j^p [k_e], [m_j] = \rho_j [m_e] \quad (1)$$

$$[k_e] = \int [B^T][c_0][B]d\Omega \quad (2)$$

$$[m_e] = I \int (d/8)d\Omega \quad (3)$$

B, c_0, d_0, I, Ω 行列はそれぞれ形状関数のひずみ行列、母材の弾性率テンソル、母材の重量密度、単位テンソル、セル体積である。ボクセルトポロジー最適化の大きな利点として、すべてのセルで要素形状が等しいためあらかじめ $[k_e], [m_e]$ を計算しておけば各セルの剛性・質量行列はこれらの定数倍で容易に計算できる点にある。これは CG 法など行列積を繰り返して進行するソルバにおいて、計算負荷の大きい要素剛性行列をメモリに保持したり再計算しなくて済むので計算量を大きく削減することができる。

固有値最大化における i 番目の固有値 λ_i に関する要素 j の感度は、固有ベクトル x が質量行列で正規化されているとき下記の式で表すことができる。

$$\frac{\partial \lambda_i}{\partial \rho_j} = x_i^T \left(\frac{\partial [k_j]}{\partial \rho_j} - \lambda_i \frac{\partial [m_j]}{\partial \rho_j} \right) x_i \quad (4)$$

チェッカーボード密度分布の抑制のために最近傍要素との空間平均^[3,11]を適用する。事前に感度を正側にバイアスした後、密度の再分配には最適性規準法^[1,8]を使用する。

また、最適化反復の途中で構造体の一部が主たる構造から遊離して固有値算出に悪影響を及ぼすことがある。この対策としては、遊離部分の構造を空隙とすることで対策する。遊離構造の検出には、要素感度のうちひずみエネルギーが主となる正の応力感度が感度平均より高くなるセルに主要構造部フラグを与え、塗りつぶしアルゴリズムの要領で構造の連結している隣接セルにフラグを伝搬する。伝搬を反復してもフラグを有さないセルが遊離構造と判定される。

3. LOBPCG 法と大規模並列化効率

本研究で利用する LOBPCG 法 (CG 法) のアルゴリズムを下記に示す。ただし、 x_i, w_i, p_i, y_i がそれぞれモード番号 i に対する LOBPCG における解、残差、探索方向、作業領域ベクトルである。要求モード数を M とする。 $c=(1:自由, 0:拘束)$ が自由度の拘束状態を設定するベクトルであり、事前に空隙要素 ($\rho = 0$) の探索を行い空隙要素に囲まれた節点の自由度について c ベクトルの該当要素をゼロとすることで拘束する。 m は対角化全体質量行列ベクトルで事前に質量行列 m_j を積算することで求めておく。 \circ は配列積 (アダマール積) とする。 ϵ_{tol} は相対残差の終了条件である。

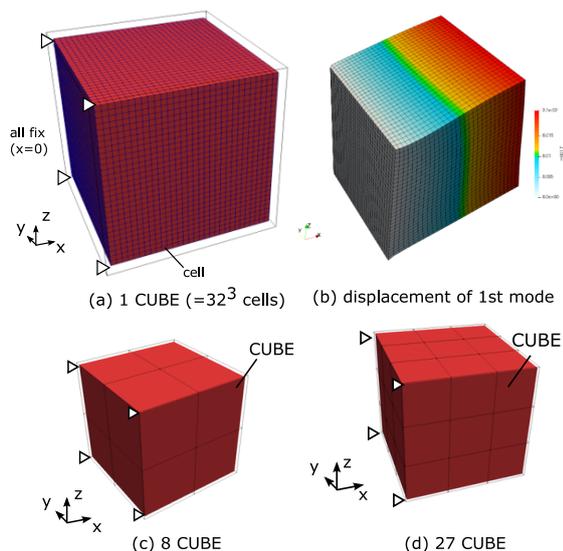


Fig.2 Cubic cantilever, the problem for the weak scaling measurement.

1. $\mathbf{x}_i := \{\text{normalized random vector}\}, \mathbf{p}_i := 0$
2. $\mu_{i0} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}), r_{i0} = |\mathbf{A}(\mathbf{x}) - \mu_{i0}\mathbf{B}(\mathbf{x})|$
3. $\mathbf{x}_i := \{\text{initial guess from previous topology iteration}\}$
4. **do loop:**
5. $\mu_i = \mathbf{x} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}), \mathbf{w}_i := \mathbf{A}(\mathbf{x}) - \mu_i\mathbf{B}(\mathbf{x})$
6. $r_i = |\mathbf{w}_i|$, normalize \mathbf{w}_i
7. **break** if $\max(r_i/r_{i0}) < \epsilon_{\text{tol}}$
8. $\mathbf{Z} := [\mathbf{x}_i, \mathbf{w}_i, \mathbf{p}_i]$
9. $\mathbf{S}_A := \mathbf{Z}^T \mathbf{A}(\mathbf{Z}), \mathbf{S}_B = \mathbf{Z}^T \mathbf{B}(\mathbf{Z})$
10. $[\lambda_i, \mathbf{V}] := \text{dsygv}(\mathbf{S}_A, \mathbf{S}_B), \mathbf{V} := (\beta_{ki}, \alpha_{ki}, \gamma_{ki})^T$
11. $\mathbf{y}_i := \sum_k \alpha_{ki}\mathbf{w}_k + \beta_{ki}\mathbf{x}_k + \gamma_{ki}\mathbf{p}_k, \mathbf{x}_i := \text{normalize}(\mathbf{y}_i)$
12. $\mathbf{y}_i := \sum_k \alpha_{ki}\mathbf{w}_k + \gamma_{ki}\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_i := \text{normalize}(\mathbf{y}_i)$
13. **end loop**

dsygv は $(3M \times 3M)$ 規模の対称な小規模密行列に対する一般化固有値問題の求解であり λ_i が固有値, \mathbf{V} が固有ベクトルである. 本研究ではヤコビ法を使用している. 剛性行列に関する行列積 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ は下記の手順で算出する.

1. **function** $\mathbf{A}(\mathbf{x})$:
2. $\mathbf{y} = \mathbf{c} \circ \sum_j [k_j]\mathbf{x}$
3. **return** \mathbf{y} after Halo communication

質量行列に関する行列積 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ および正規化処理は下式の通り.

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mathbf{m} \circ \mathbf{x} \quad (5)$$

$$\text{normalize}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} / \sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x})} \quad (6)$$

上記の LOBPCG 法で保持すべきメモリの最低量は, 上の状態ベクトルと各要素の密度と目的関数に対する感度であり, $(3 \times (4M + 2) + 2) \times (\text{セル数})$ となる. 本研究では全体剛性行列を作成しないため, この分のメモリは必要としない. なお, 実際の実装では追加の作業領域とセル物理量を 5 つ保持する圧縮性流体フレームワークの流用のため $(5 \times (4M + 4) + 5) \times (\text{セル数})$ のメモリを確保している.

Fig.2(a) のような立方体状の領域に対して, $x = 0$ 側面を完全拘束した片持りの固有振動モードを算出す

Table1 Problem settings for weak scaling measurement. Note that 1 CUBE is 32^3 cells; and $k=10^3$, $M=10^6$, and $G=10^9$.

| CPU(=CUBEs) | DOFs | Fugaku Nodes |
|-------------|-------|--------------|
| 1 | 86.5k | 1 |
| 8 | 739k | 1 |
| 27 | 2.54M | 1 |
| 64 | 6.10M | 2 |
| 216 | 20.8M | 5 |
| 512 | 49.5M | 11 |
| 4 096 | 400M | 86 |
| 32 768 | 3.21G | 683 |
| 262 144 | 25.7G | 5462 |

る問題を用いて計算速度性能を検討する. 袖領域の取り扱いの関係上, 材料は計算領域に対して 1 要素後退した位置に配置する. 例えば, この問題を 32^3 セルの 1CUBE で準備するとき, 構造要素は 30^3 だけ配置することになる. 本稿通して, 設計領域の材料は鋼材を想定し, ヤング率 200 GPa, ポアソン比 0.3 を使用するものとする. 等しい構造を有するモデルを市販の有限要素法ソフト (LS-DYNA R13.1) の結果と固有周波数を比較し, $\epsilon_{\text{tol}} = 10^{-8}$ とすると倍精度浮動小数の精度で結果が一致するのを確認している.

このような問題に対して, ウィークスケーリング性能を測定する. 計算機 1 コアあたり 1CUBE(= 32^3 セル) を処理させる点を変更せず, Fig.2(b) のように領域を相似的に分割することで, 使用コア数と問題の規模を同時に拡大し CG 法部分の計算時間の変化を測定する. LOBPCG 法は自由度が大きくなると相対残差基準での収束回数が増加するが, 今回は計算速度の測定であるため反復回数は 1000 回で固定とした.

Table 1 に計算ケースと使用セルと自由度を示す. CUBE 環境で有限要素法を運用する都合で最外セルには要素を配置していないためセル数から単純に自由度を計算できない点に注意されたい. 計算には理化学研究所のスーパーコンピューター富岳^[20]を使用した. 富岳は 1 ノードあたり 48 演算コアを有するので, 1 ノードあたり 48CUBE を割り当てることとなる. また, 高帯域メモリを共有し 12 演算コアを 1 単位とする CMG(Core Memory Group) 単位でのプロセス分割が有効とされている. 本報告では, MPI+OpenMP ハイブリッド並列を 1CMG あたり 1 プロセス (1 ノードあたり 4 プロセス) で実施した.

Fig. 3 に, 要求モード $M=1, 2, 4$ としたときの問題の規模 (CUBE 数) と計算時間の関係を示す. 比較のために静剛性解析の場合の計算時間^[11] も同時に示している. 固有値計算においても, 並列性能は問題の拡大に対してほとんど変化せず, 大規模並列環境を活かせる性能を示しているといえる. 262 kCUBE のときの計算速度は 1CUBE の場合と比較して, $M=1, 2, 4$ のときそれぞれ 0.50, 0.54, 0.58 であった.

静剛性は CG 法の 1 反復あたりの剛性行列積演算が 1 回であるのに対して, LOBPCG 法は 1 反復で $3M$ 回

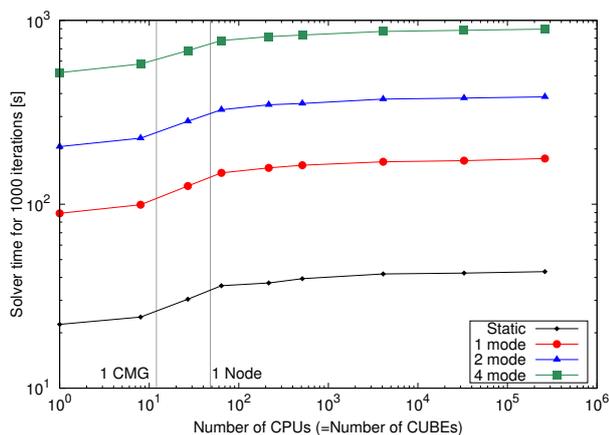


Fig.3 Weak scaling characteristic of PCG solver with 1,000 iteration.

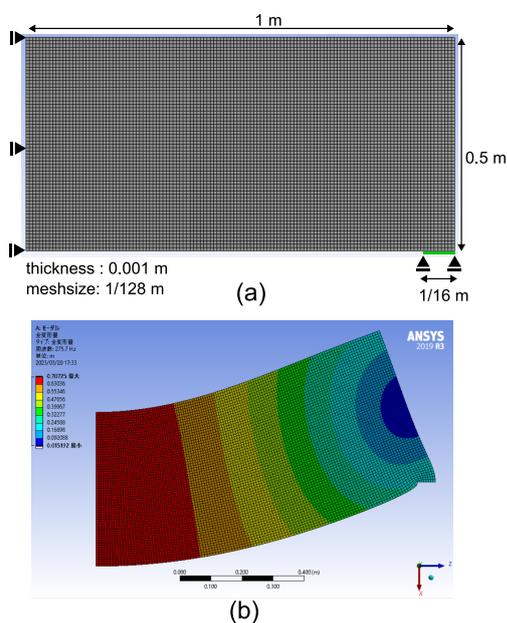


Fig.4 (a) Simple beam half model boundary conditions and (b) first bending mode.

の剛性行列積演算と $6M$ 回の質量行列積演算を必要とする。262 kCUBE のとき、静剛性に対する計算時間の比は $M=1,2,4$ のときそれぞれ 4.12, 8.91 20.82 であり、概ね要求モード数に相応しい計算量の増加であると理解できる。

4. 単純梁の固有値最大化検証

Fig.4(a)に示す単純梁のトポロジー最適化を実施し、市販のトポロジー最適化プログラム(ANSYS 2019R3, Mechanical Workbench)と比較することでその性能を評価する。計算モデルは高さ 0.5 m, 中央から梁端までの長さ 1m の 1/2 対称モデルを想定し、梁端から $1/16 (=0.0625)$ m の領域を高さ方向に滑り拘束する。面内メッシュサイズは $1/128 (=0.0078125)$ m, ANSYS 側の設定の都合により厚み方向 0.001 m の三次元要素を使用し、厚み (y) 方向片側面の面外方向変位は拘束する。最適化対象モードは (b) に示す 1 次の曲げ振動とする。

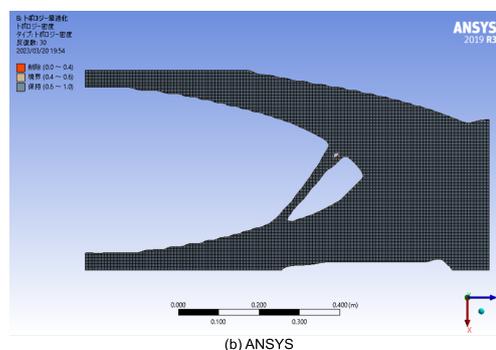
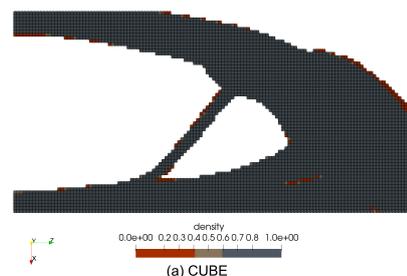


Fig.5 Optimal shape of first bending mode frequency maximization.

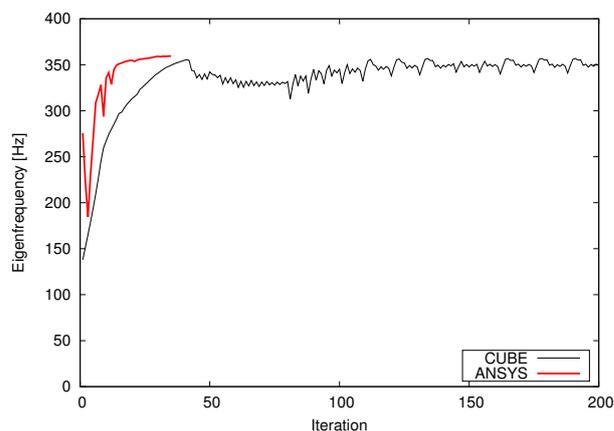


Fig.6 Eigenfrequency history of eigenvalue optimization.

CUBE 側の設定として、低密度要素を空隙と判定する要素削除密度は現在の設計領域の最大密度 ρ_{max} を使用して、下記を使用した。

$$\rho_{del} = 0.05\rho_{max} \quad (7)$$

静剛性^[11]で一般的に使用される削除密度より大きい ρ_{del} 値を利用するのは、低密度要素の音速低下による要素単位の不安定振動を抑制するためである。

Fig.5(a)に CUBE での最適形状、(b)に ANSYS の最適形状を示す。細部の梁の形成や密度分布に若干差はあるが、概ね同じ意図を示す形状が得られている判断できる。

Fig.6 に最適化反復と 1 次モード周波数の履歴を示す。CUBE の反復最終値が 349 Hz であるのに対して、ANSYS は 359 Hz であり、性能は 97% に留まる結果になった。また CUBE は一度周波数において極大値をとっているものの、中間密度部分を排除するために ANSYS

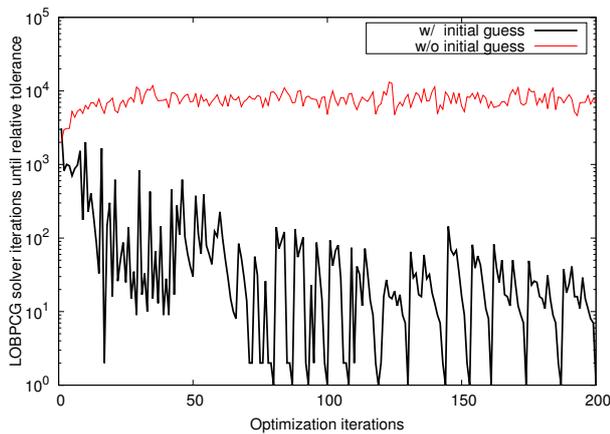


Fig.7 LOBPCG solver iterations until relative tolerance with and without initial guess.

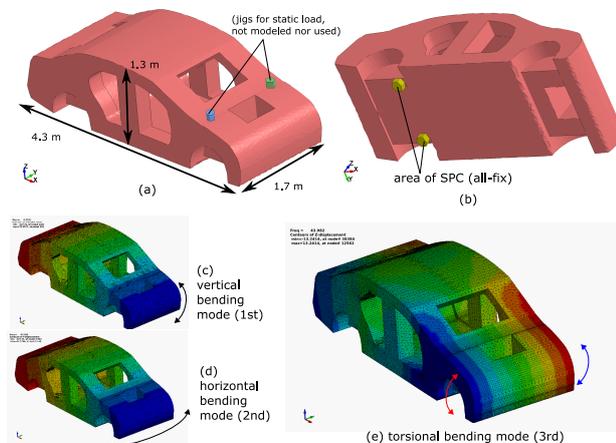


Fig.8 Boundary conditions and eigenmodes for vehicle frame optimization.

より多くの最適化反復を必要としている。これは今回既実装のバイアス付き最適性規準法を用いて最適化を実施したのが理由であり、CONLIN^[22]やMMA^[23]など感度が正負に及ぶことが正しく想定されている数値最適化手法を用いることで改善することが予想される。

Fig.7にCUBEにおける固有値最大化において、LOBPCGの初期値を最適化前反復における固有ベクトル初期値を与えた場合とそうでない場合のLOBPCGの反復数を示す。相対残差は $\epsilon_{tol} = 10^{-5}$ を使用した。初期値を使用した場合は大きく反復回数が低減可能であり、最適化全体で合計反復数を97%低減することができる。

5. 車体フレームの固有値最大化

Fig.8(a),(b)に車体フレーム形状を模した初期形状と境界条件を示す。本形状はCCSAで公開されている有限要素モデルであるTOYOTA Yaris 2010^[24]のフレーム部位を概ね覆うようにCADで作成し、形状表現が維持される程度のメッシュサイズで要素分割したものである。図中の車体部に配置された円筒構造が境界条件の範囲指定であり、有限要素法としてはモデル化されず、該当する範囲の節点に単点拘束や節点荷重を与える。今回は

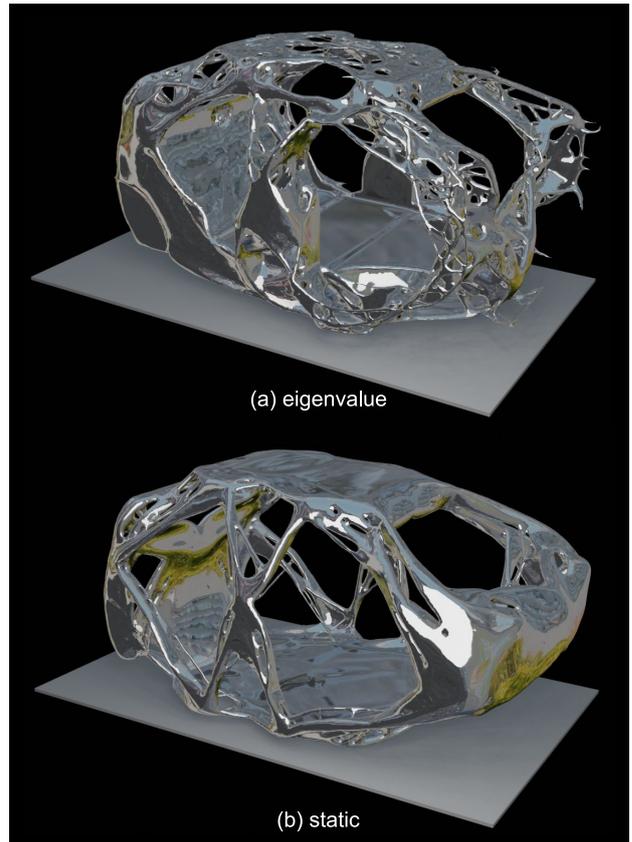


Fig.9 Optimal shape of (a) eigenvalue and (b) static optimization.

荷重条件は使用しないので(a)のほうの円筒領域は使用しない。母材設計領域は4454 L(重量35 t)である。

Fig.8(c)-(e)に低次の固有モードを示す。最適化目的としては3次のねじり振動モードの固有値周波数を最大化することである。体積制約は5%(体積222L,重量1.74 t相当)とし、モードの遷移による不安定性を抑制するために要求モード数は4とする。LOBPCG法の相対残差は 10^{-5} とする。

上記のモデルをセルの解像度10 mm, 1 CUBE= 16^3 セルで分割した結果、CUBE数は5648, 全セル数は2313万, 初期構造の自由度数3727万となった。最適化は富岳118ノード, 471プロセス(1プロセス12共有メモリ並列)で実行した。最適化時間は38.5時間であった。

Fig.9に固有値最大化後の最適形状を示す。参考のために、同解像度での静剛性ねじり荷重最大化結果を示す。両者ともねじり変形に対する剛性を増加させる方向の最適化であるため形状に共通点が多い。この反面、固有値最大化と静剛性最大化の違いとしては、前節の単純梁のように固定点近傍に材料を集めることで固有周波数を増加させる作用が(a)の固有値最大化のトポロジーでは見られる点と梁自身の共振を抑制するために微細な形状が発生しやすいことが挙げられる。

6. 結論

大領域の金属ブロックからNVH性能を満足する自動車フレームの概念構造をトポロジー最適化で得るには、数%以下の体積制約と十分な要素解像度を要する。本研

究では CUBE フレームワークと LOBPCG 法を利用したボクセルトポロジー最適化フレームワークを実装することで、超並列環境下で構造物の固有値最大化を実施し、単純梁と車体フレームの例題を通して最適化性能を測定した。

謝辞: 本研究は、HPCI システム利用研究課題 (課題番号: hp220172, hp220249) を通じて、理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施しました。

参考文献

- [1] M.P. Bendsøe, and N. Kikuchi, "Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol.71, no.2, pp.197-224, 1988.
- [2] 藤井大地, パソコンで解く構造デザイン, 丸善, 2002.
- [3] M.P. Bendsøe, *Topology Optimization: Theory, Methods, And Applications*, Springer, 2003.
- [4] 西脇眞二, 泉井一浩, 菊池昇, トポロジー最適化 (計算力学レクチャーコース), 一般社団法人日本計算工学会 (編), 丸善出版, 2013.
- [5] T. Borrvall, and J. Petersson, "Large-scale topology optimization in 3d using parallel computing," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol.190, no.46, pp.6201-6229, 2001.
- [6] J. Baiges, J. Martínez-Frutos, D. Herrero-Pérez, F. Otero, and A. Ferrer, "Large-scale stochastic topology optimization using adaptive mesh refinement and coarsening through a two-level parallelization scheme," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol.343, pp.186-206, 2019.
- [7] T.W. Chin, M.K. Leader, and G.J. Kennedy, "A scalable framework for large-scale 3d multimaterial topology optimization with octree-based mesh adaptation," *Advances in Engineering Software*, vol.135, p.102682, 2019.
- [8] Z.D. Ma, N. Kikuchi, and I. Hagiwara, "Structural topology and shape optimization for a frequency response problem," *Comput. Mech.*, vol.13, no.3, pp.157-174, Dec 1993.
- [9] S. Nishiwaki, K. Saitou, S. Min, and N. Kikuchi, "Topological design considering flexibility under periodic loads," *Structural and Multidisciplinary Optimization*, vol.19, no.1, pp.4-16, Mar 2000.
- [10] L. Shu, M.Y. Wang, Z. Fang, Z. Ma, and P. Wei, "Level set based structural topology optimization for minimizing frequency response," *Journal of Sound and Vibration*, vol.330, no.24, pp.5820-5834, 2011.
- [11] 和田有司, 嶋田宗将, 西口浩司, 岡澤重信, 坪倉誠, "Building cube method を利用した車体フレームのボクセルトポロジー最適化," *日本計算工学会論文集*, vol.2021, pp.20210019-20210019, 2021.
- [12] 和田有司, 嶋田宗将, 西口浩司, 岡澤重信, 坪倉誠, "車体構造のトポロジー最適化における板金形成の促進," *計算工学講演会論文集* Vol. 27, pp.F-03-06, june 2022.
- [13] N. Jansson, R. Bale, K. Onishi, and M. Tsubokura, "CUBE: a scalable framework for large-scale industrial simulations," *The International Journal of High Performance Computing Applications*, vol.33, no.4, pp.678-698, 2019.
- [14] K. Nakahashi, "Building-cube method for flow problems with broadband characteristic length," *Computational Fluid Dynamics 2002*, eds. S.W. Armfield, P. Morgan, and K. Srinivas, pp.77-81, Springer Berlin Heidelberg, 2003.
- [15] K. Nishiguchi, R. Bale, S. Okazawa, and M. Tsubokura, "Full eulerian deformable solid-fluid interaction scheme based on building-cube method for large-scale parallel computing," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol.117, no.2, pp.221-248, 2019.
- [16] 西口浩司, 嶋田宗将, 大高雅史, 岡澤重信, 坪倉誠, "ラグランジュマーカー粒子を用いたオイラー型有限体積法による圧縮性固体解析," *土木学会論文集 A2 (応用力学)*, vol.75, no.2, pp.I237-I248, 2019.
- [17] T. Shimada, K. Nishiguchi, R. Bale, S. Okazawa, and M. Tsubokura, "Eulerian finite volume formulation using lagrangian marker particles for incompressible fluid-structure interaction problems," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol.123, no.5, pp.1294-1328, 2022.
- [18] A.V. Knyazev, "Toward the optimal preconditioned eigensolver: Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol.23, no.2, pp.517-541, 2001.
- [19] 日本計算工学会編, 固有値計算と特異値計算, 丸善出版, 東京, Japan, 12 2019.
- [20] 理化学研究所計算科学研究センター (R-CCS), "システム紹介," URL:<https://www.r-ccs.riken.jp/jp/fugaku/overview/system.html>, 2020, (参照 2021-03-24).
- [21] T. Ishida, S. Takahashi, and K. Nakahashi, "Efficient and robust cartesian mesh generation for building-cube method," *Journal of Computational Science and Technology*, vol.2, no.4, pp.435-446, 2008.
- [22] C. Fleury, "Conlin: an efficient dual optimizer based on convex approximation concepts," *Structural optimization*, vol.1, pp.81-89, 1989.
- [23] K. Svanberg, "The method of moving asymptotes—a new method for structural optimization," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol.24, no.2, pp.359-373, 1987.
- [24] Center for Collision Safety and Analysis, "2010 toyota yaris coarse finite element model version 11," URL:<https://www.ccsa.gmu.edu/models/2010-toyota-yaris>, dec 2016, (参照 2020-10-01).

10:00 AM - 10:15 AM (Wed. May 31, 2023 9:30 AM - 10:30 AM Room C)

[C-01-03] 非対称トレッドパターンを有する乗用車用タイヤの路面接触に着目した流れの分析

*掛上 剛¹、倉石 孝²、徐 兆京¹、金子 隆太郎¹、滝沢 研二¹、Tezduyar Tayfun E.^{2,1} (1. 早稲田大学、2. ライス大学)

Droplet/Aerosol Dispersion Simulation for Assessing the Infection Risk Due to Airborne Virus in a Sport Stadium Type Environment

Kim Sangwon¹⁾, Onishi Junya¹⁾, Bale Rahul¹⁾ and Tsubokura Makoto^{1,2)}

1) Ph.D, RIKEN, Center for Computational Science (7-1-26, Chuo Ward, Kobe, 650-0047, Japan)

2) Ph.D. Department of Computational Science, Kobe University (1-1 Rokkodaicho, Nada Ward, Kobe, 657-8501, Japan)

This study investigates the droplet dispersion and infection risk for airborne diseases in various seating arrangements and wind flow conditions in flat and inclined environments. A numerical framework 'CUBE', which is combined a fully compressible Navier-Stokes solver and a Lagrangian droplet dynamics model to enable large-scale parallel simulations, are utilized. This framework is built on a BCM meshing methodology to model the Eulerian mesh and decomposed Lagrangian marker particle data on each cube unit to ensure efficient parallel performance. Numerical results show that droplet dispersion and infection risk are strongly dependent on seating arrangements and wind direction. For instance, wind flow from 90° can significantly reduce local concentration of droplet dispersion and global infection risk than those of wind flow from 0°. Thus, proper seating arrangements can effectively reduce infection risk in different environments and wind flow conditions to minimize the spread of airborne diseases.

Key Words : *Building-Cube Method, Dose-response model, COVID-19, Immersed boundary method, Droplet/Aerosol transmission*

1. Introduction

While some airborne diseases, such as the common cold and seasonal influenza, are not very severe, several highly infectious and communicable diseases have emerged in recent decades [1, 2, 3]. In particular, as we all know, COVID-19 rapidly transformed from a local epidemic to a global pandemic since its emergence, and the usage of masks can help contain the spread of COVID-19.

However, in social situations where wearing a mask is not possible, there remains infection risk when people gather in densely packed outdoor stadiums or concert halls. In such circumstances, airborne dispersion of virus-laden sputum droplets can result in airborne disease transmission, posing a significant risk to public health. To investigate these severe situations, the numerical simulation has significant potential to predict the spread of infectious diseases in advance for various situations.

In this work, we investigate the dispersion of sputum droplets due to speaking to better understand on the dynamics of disease transmission by analyzing the effect of wind directions and velocity on infection risk. To that end, we adopt a fully compressible Navier-Stokes solver wherein the evaporated phase of the droplet and its effect on droplet evaporation is modelled [6, 7], and a discrete Lagrangian droplet model was used to model droplet transport and evaporation.

2. Governing Equations

The discretized equations for conserving mass, momentum, and energy with gas phase species reside on the Eulerian mesh. The conservation equations are provided in compact vector notation as follows:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{S} \quad (1)$$

Here, the vector \mathbf{U} and \mathbf{S} represent the primitive flow variables and the source term, respectively, while \mathbf{F} encompasses both the convective and diffusive terms, \mathbf{U} and \mathbf{F} are given below.

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e \\ \rho Y_k \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + P \delta_{i1} - \mu A_{i1} \\ \rho u_i u_2 + P \delta_{i2} - \mu A_{i2} \\ \rho u_i u_3 + P \delta_{i3} - \mu A_{i3} \\ \rho(\rho e + P)u_i - \mu A_{ij}u_j + q_i \\ \rho u_i Y_k - \rho \hat{u}_i^k Y_k \end{pmatrix} \quad (2)$$

The source term \mathbf{S} in the governing equation arises from the buoyancy term and the evaporation of droplets. The source term vector is expressed as follows:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ (\rho - \rho_0)\mathbf{g}_1 \\ (\rho - \rho_0)\mathbf{g}_1 \\ (\rho - \rho_0)\mathbf{g}_1 \\ (\rho - \rho_0)\mathbf{g}_i u_i \\ S_{\rho Y_k} \end{pmatrix} \quad (3)$$

where ρ and ρ_0 represent the local and far-field ambient densities, respectively, while \mathbf{g} represents the acceleration due to gravity. S_{pY_k} represents the species source terms.

3. Droplet Equations

The single droplet model is utilized for simulating the sputum droplet dynamics. In this method, the evaporation and transport of each droplet are individually tracked. The model primarily focuses on the interaction of each droplet with the surrounding gas phase, as well as solid surfaces [8]. The governing equations for droplet transport, dispersion, and settling of the droplets are provided as below.

$$\frac{d\mathbf{x}_d}{dt} = \mathbf{u}_d \quad (4)$$

$$\frac{d\mathbf{u}_d}{dt} = \frac{3C_d \rho}{4d_d \rho_d} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_d) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_d| + \mathbf{g} \quad (5)$$

where \mathbf{u}_d , \mathbf{x}_d represent the droplet velocity and position, and the droplet drag coefficient C_d is defined as a function of the droplet Reynolds number with the droplet diameter, d_d .

The droplet evaporation is modeled using the energy balance equation to monitor the droplet surface temperature and the evaporation mass flux equation. The energy balance equation is given as follows:

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{Nu c_p f_1}{3Pr c_l \tau_d} (T - T_d) + \frac{1}{m_d} \left(\frac{dm_d}{dt} \right) \frac{L_V}{c_{p,d}} \quad (6)$$

Here, m_d represents the mass of the droplet. T_d , and T temperature of the droplet and the ambient air, respectively. L_V denotes the latent heat of evaporation at the droplet temperature. f_1 is a correction factor for heat transfer due to droplet evaporation [9, 10]. Second, in order to evaluate the evaporation mass flux for tracking the mass of the droplet, we employ the non-equilibrium Langmuir-Knudsen model [11], and the equation is given as follows:

$$\frac{dm_d}{dt} = - \frac{m_d}{\tau_d} \left(\frac{Sh}{3Sc} \right) \ln(1 + B_m) \quad (7)$$

Where Sh , Sc and B_m represent the Sherwood, Schmidt numbers, and the mass transfer number, respectively. Additional information can be discovered in the studies conducted by Bale et al [6, 12].

4. Numerical Method

In this work, we employ the Building Cube Method (BCM) [13] for meshing methodology to model the Eulerian mesh as shown in Fig. 1. BCM decomposes the computational domain into discrete blocks known as cubes, which have equal sides at the same level. Based on problem requirements, larger cubes are successively subdivided into finer cubes, creating a hierarchy of smaller cubes over layers of larger cubes with a refinement ratio

of two. As a result, the cubic unit of the computational domain serves as the fundamental unit for domain decomposition during parallel computing, offering excellent scalability.

To model solid geometries immersed in the fluid, we adopt a discrete forcing immersed boundary method [14, 15]. This approach is also employed to model the sputum droplets. Here, a collection of the same sized droplet is grouped into a computational parcel. Lagrangian data structures for both cases are treated as the same discretization strategy as BCM for computational performance optimization. For domain decomposition in parallel computing, the computational domain is divided so that the Eulerian mesh and the Lagrangian marker particles spatially overlap.

We use a split time integration approach, separating the temporal integration of fluid flow equations and the species transport equations, to investigate the impact of droplet dispersion on disease spread over extensive spatial distances and long time periods. This approach is feasible if there is no strong coupling between the fluid flow and species transport equations. Therefore, the coupling mechanism for the sputum droplet modelling adopts a weak one-way coupling between the two equations. In this approach, the species transport is influenced by the fluid flow, but the species concentration remains unaffected. Moreover, to maintain numerical stability, the effect of droplet evaporation is incorporated only into the species transport equations, while the droplet source term for the fluid flow equations is ignored. This weak one-way coupling approach is frequently employed in modeling sputum droplet dispersion since the contribution of droplets to fluid flow, in terms of momentum and energy, are anticipated to be negligible [16, 17].

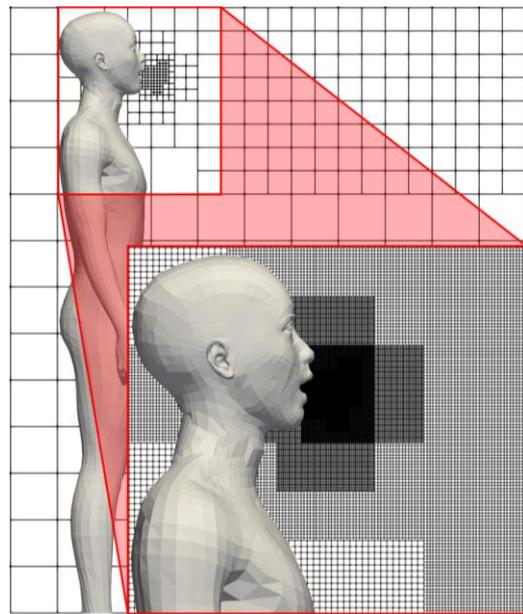


Fig. 1 Example on discretization of a computational domain into cubic blocks and subdivision of cubes into cells (close-up).

5. Sputum Droplet Modeling

This section outlines the modeling parameters for simulating sputum droplets as follows. The distribution of droplet diameters and numbers for loud speaking, adopted for the numerical simulations in this work, further details available in Bale et al. [18]. For the flow generated from the mouth during speech, we adopt a sinusoidal model, and the flow velocity over one cycle of counting from one to ten, including the two inhalations. Details can be found in the work of Gupta et al. [19]. The final parameter for the mouth opening, an average mouth opening size of 4 cm^2 was reported by Gupta et al. [2]. We choose a circular surface with an area of 6 cm^2 to model the mouth opening during speech by assuming it is larger than the opening during cough.

6. Boundary and Initial Conditions

In all cases presented in this work, the ambient air conditions are approximated as follows: 60% relative humidity, 300 K temperature and 1 atm pressure. Stagnant ambient air is applied as the initial condition for the simulations. The initial conditions for the droplets are set as follows: 0 m/s velocity, 1000 kg/m^3 density, and 307 K temperature. The droplets are driven by the flow at the time of injection to the domain. A relatively large computational domain is -25m to 25m along the x , y , and z directions. The droplet dispersion was investigated under the conditions of no wind and wind flow condition ($u = 0.3 \text{ m/s}$).

The surface temperature of the human body is set to 300K to account for the effects of buoyancy-driven flow. For speaking simulations, the speech flow boundary condition is imposed through the mouth model. We consider the dispersion of droplets in a flat and inclined environment as shown in Fig. 2. The seating arrangements are three representative types as follows: full, staggered, and grid types. In case of the arrangement of grid type, it can be different depending on the position of the infected person. Thus, we adopted three different positions for grid type as shown in Fig. 3.

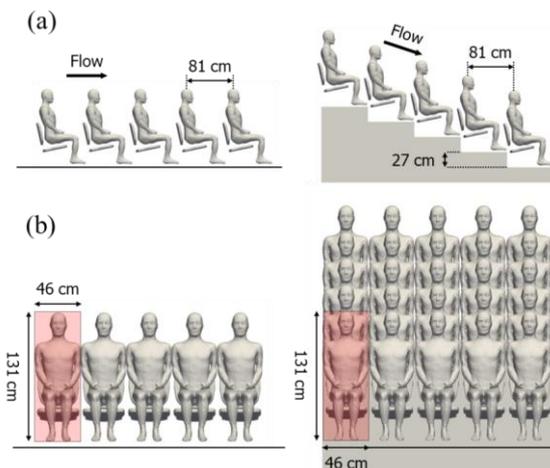


Fig. 2 Geometry as flat and inclined environments.

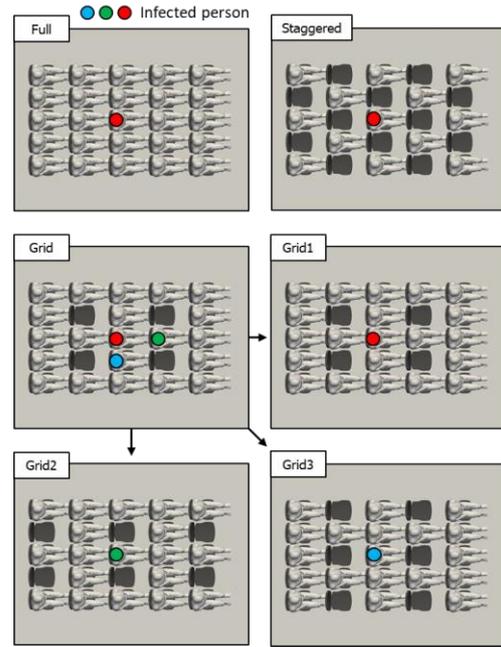


Fig. 3 Seating arrangements for full, staggered, and grid types. The grid type has three different arrangements.

7. Infection Risk Evaluation

To assess the infection probability, we used the dose-response model [20, 21] which is widely used for quantifying the risk of airborne diseases such as COVID-19. The model assumes that the average number of viral particles needed to infect an individual is N_0 , and the infection follows a Poisson process. Thus, the probability of infection P can be expressed as

$$P = 1 - e^{\left(-\frac{N}{N_0}\right)} \quad (8)$$

where N is the total number of virions inhaled. In order to compute P , both N and N_0 must be estimated. A range of values for N_0 have been reported in some literature [22, 23]. In this study, we choose a value of 900, which lies within the reported range. The number of inhaled virions N depending on the total duration of exposure T and the amount of air inhaled by a person breathing at the rate of B , is obtain the following expression.

$$N(x, T) = \frac{B\rho_v}{v_B} \int_0^T v_d^0(t) dt \quad (9)$$

In activities such as speaking and singing over extended periods, the rate of droplet generation and dispersion is expected to reach a quasi-steady state. In this state, the integral term in the above equation can be simplified to

$$N(x, T) = \frac{B\rho_v}{v_B} \bar{v}_d^0(x) T \quad (10)$$

where \bar{v}_d^0 is the quasi-steady state rate of droplet ejection volume entering the breathing zone. Further details of the model can be found in previous work [18]. Consequently, to assess the infection risk of an individual upon exposure to the droplets, the total number of droplets within the vicinity of an individual is

measured. For simplicity, a small rectangular region surrounding the mouth and nose has been chosen to represent the breathing zone. In this study, we select a $10 \times 10 \times 15 \text{cm}^3$ rectangular region that approximates the exhalation and inhalation volume of the speaking model. The method for tracking the droplets in the respective breathing zones are shown in Fig. 4. For simplicity, we tracked the same droplet even if it existed in the same breathing zone at the next time step or passed the previous breathing zone and entered different breathing zones.

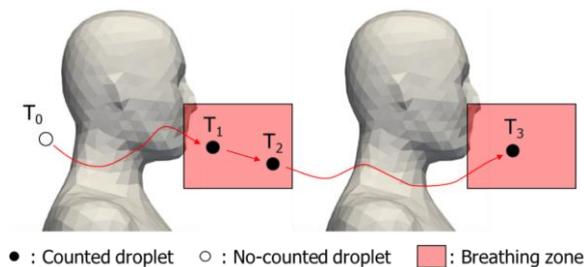


Fig. 4 A schematic of droplet tracking in the respective breathing zone.

8. Numerical Results on Infection Risk

Some snapshot of the droplet dispersion in full conditions at the flat/inclined seating arrangement is presented in Fig. 5 for no wind cases and Fig. 6 for wind blows from backside, and the droplets colored in dark blue generated by subjects. For no wind conditions, It can be seen that the dispersion of droplets can be differ as the seating environment, for instance, the droplet of a flat environment dispersed shorter distance than that of inclined conditions because the jet flow from the mouse in a flat environment is blocked by the individual front of the subject. Meanwhile, in an inclined environment, there is an open region at the front side of the subject so that the droplet disperses to the far field. In case of wind conditions, the dispersion of droplets can be different by different flow characteristics as environment induced from wind flow.

For instance, the droplet of a flat environment is dispersed in not only the front side but also the back side. This is due to the cavity and downflow generated by wind flow between the subject and the person downstream. Thus, a droplet accumulated there and propagated on the sides of the subject, and if there was a gap between the persons, the droplet spread to the backside. Meanwhile, that inclined environment only dispersed front and downside with spreading both sides than flat environments because of the open region at the front side of the subject and wind flow. The difference in the overall infection risk of individuals as two environments and wind conditions can be appreciated by comparing the infection matrices presented in Fig. 7. In this matrix, each element is corresponding with the location of each individual, the infection risk is calculated for

an exposure of 60 minutes based on the average exposure rate of a given subject to droplets and aerosols from the simulation.

As the infection matrix notes that, a clustering of infection risk around the infected subject are clearly shown. In infection risk distribution of no wind condition, both environmental conditions are shown higher risk in front of the subject. As shown by the droplet dispersion in Fig. 5, the infection risk increases from the fourth column line while increasing in front of the subject and crossing over the fifth column line in case of inclined environment. Meanwhile, in case of wind flow condition, it reduces the local concentration of droplets at the fourth column line but increases the infection risk on second and third column lines where the side and backside of the subject. Eventually, these spreading infection risks around the subject by wind flow conditions increase the global infection risk. These features that increase risk are shown in the inclined environment.

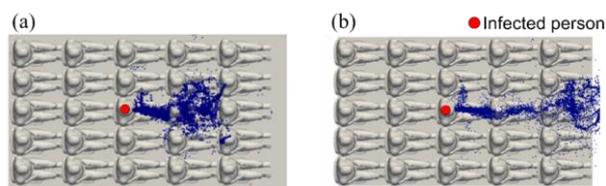


Fig. 5 Droplet dispersion in full conditions at (a) flat and (b) inclined seating arrangement, no-wind conditions.

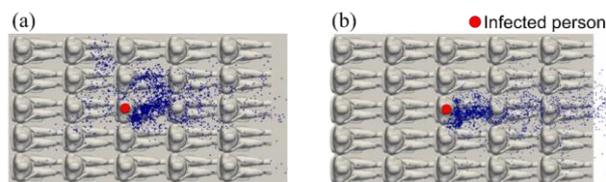


Fig. 6 Droplet dispersion in full conditions at (a) flat and (b) inclined environments, wind conditions from 0° .

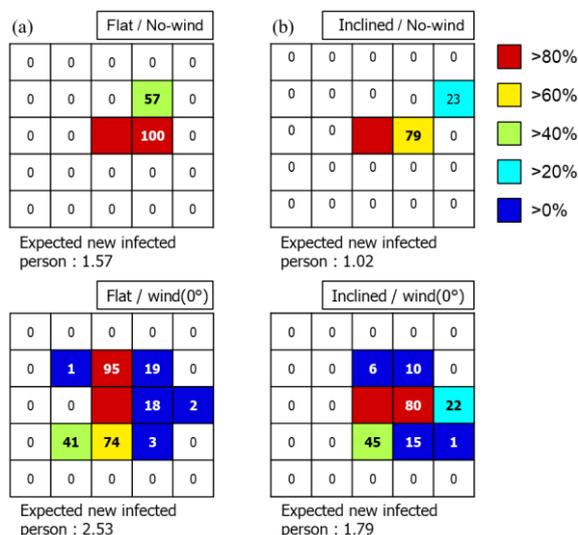


Fig. 7 Distributions of infection risk in full conditions at (a) flat and (b) inclined environment, no-wind (Top), and wind (Bottom) conditions.

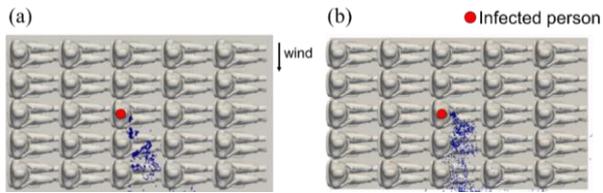


Fig. 8 Droplet dispersion in full conditions at (a) flat and (b) inclined environments, wind conditions from 0°.

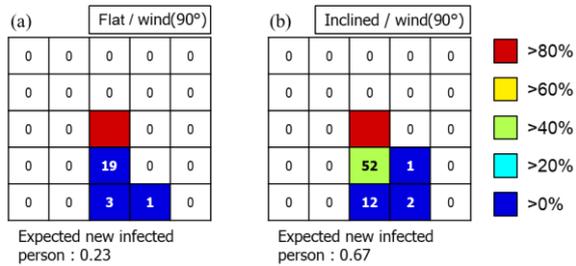


Fig. 9 Distributions of infection risk in full conditions at (a) flat and (b) inclined environment, wind conditions from 90°.

The droplet dispersion in Fig. 8 is presented on full conditions at the flat/inclined seating arrangement for wind blows from the side. The droplets in both environments are quickly transferred to the side of the subject so that is not accumulated between individuals. With this trend, global infection risk, as shown in Fig. 9, from both environments significantly decreased than those of no-wind and wind flow from the backside.

Thus, we can understand that the dispersion of droplets is strongly dependent on the wind direction. From the side view of Fig. 8, we can see that the droplet dispersed widely after passing the human models. This means that the infection risk increases somewhat as the numerical model extended. Some snapshot of the droplet dispersion in staggered conditions at the flat/inclined seating arrangement is presented in Fig. 10 for no wind cases and Fig. 11 for wind blows from backside. The infection risk for both conditions are described in Fig. 12.

For no wind conditions, both environments show a similar feature that the droplets are floated far field than those of full conditions due to the open region in front of the subject. Meanwhile, the dispersion of droplets is different as the seating environment, for example, the droplets on a flat environment and no-wind condition are accumulated in front of the individual on the fifth column line causing significant increase in infection risk. On the other hand, the trend of droplet dispersion on inclined environments and no-wind conditions is similar with those of flat and no-wind conditions, however, the difference of altitude decreases the infection risk.

In case of wind conditions, the droplet in both environments disperses on front and downside, and the cavity flows in the

open region in front of the subject and the staggered seating arrangement gives space which droplet can pass through there. Eventually, the local concentration of droplets and infection risk were reduced. Meanwhile, the droplets of inclined environments are dispersed downside induced by wind so that the infection risk increases than that of no-wind conditions. Thus, proper seating arrangement can act effectively to prevent infection risk as a given environment and wind flow conditions.

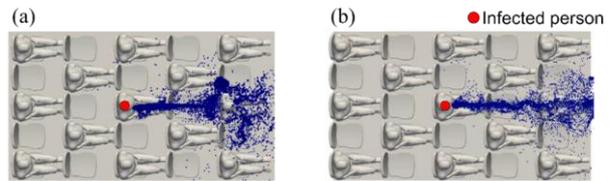


Fig. 10 Droplet dispersion in staggered conditions at (a) flat and (b) inclined seating arrangement, no-wind conditions.

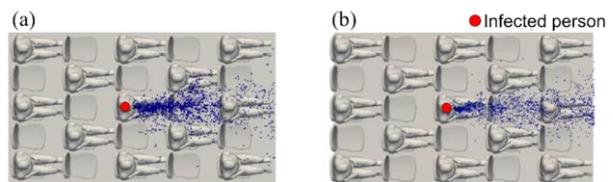


Fig. 11 Droplet dispersion in staggered conditions at (a) flat and (b) inclined environments, wind conditions from 0°.

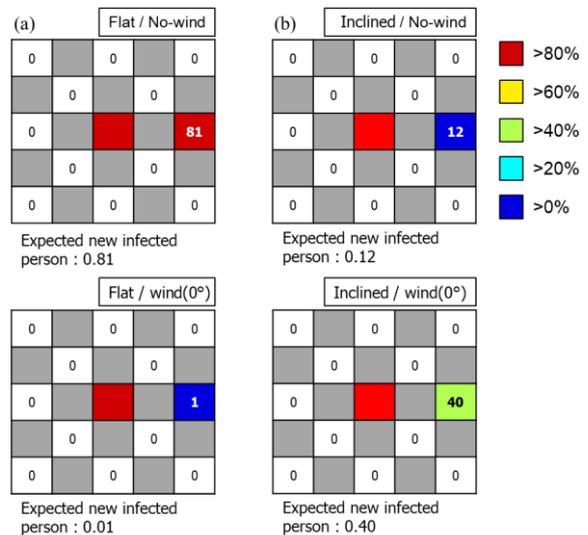


Fig. 12 Distributions of infection risk in staggered conditions at (a) flat and (b) inclined environment, no-wind (Top), and wind (Bottom) conditions.

9. Conclusion

In this study, we have investigated the droplet dispersion and infection risk in different seating arrangements and wind flow conditions as flat and inclined environments. To do that, we have presented a numerical framework developed for the simulation of large-scale droplet dispersion for COVID-19 type pandemic. The numerical results indicate that the dispersion of

droplets and infection risk are strongly dependent on the seating arrangement and wind direction by reducing the local concentration of droplets or spreading to other regions. Furthermore, the wind flow in different directions can also significantly affect the droplet dispersion and infection risk.

Thus, Proper seating arrangements can be effective in reducing the infection risk in two different environments and wind flow conditions. These findings can provide important insights for designing effectively to reduce infection risk in public places.

Acknowledgement: This work was supported by JST CREST, Grant Number JPMJCR20H7, Japan, and through the computing resources provided on the Fugaku supercomputer by the RIKEN Center for Computational Science and through the HPCI system research project (Project ID:hp220183)

Reference

- [1] Gralton, J., Tovey, E., McLaws, M.L., and Rawlinson, W.D. The role of particle size in aerosolised pathogen transmission : a review. *J. Infect.* 62(1), pp.1–13, 2011.
- [2] Gupta, J.K., Lin, C.H., and Chen, Q. Flow dynamics and characterization of a cough. *Indoor Air.* 19(6), pp.517–525, 2009.
- [3] Wei, J. and Li, Y. Airborne spread of infectious agents in the indoor environment. *Am. J. Infect. Control* 44(9), S102–S108, 2016.
- [4] Löhner, R., Antil, H., Idelsohn, S., and Oñate, E. Detailed simulation of viral propagation in the built environment. *Comput. Mech.* 66(5), pp.1093–1107, 2020.
- [5] Redrow, J., Mao, S., Celik, I., Posada J.A., and Feng, Z.G. Modeling the evaporation and dispersion of airborne sputum droplets expelled from a human cough. *Build. Environ.* 46(10), pp.2042–2051, 2011.
- [6] Bale, R., Wang, W.H., Li, C.G., Onishi, K., Uchida, K., Fujimoto, H., Kurose, R., and Tsubokura, M. A Scalable Framework for Numerical Simulation of Combustion in Internal Combustion Engines. *PACS'20.* pp.1–10, 2020.
- [7] Li, C.G., Tsubokura, M., and Bale, R. Framework for simulation of natural convection in practical applications. *Int. Commun. Heat Mass Transfer* 75, pp.52–58, 2016.
- [8] Kitano, T., Nishio, J., Kurose, R., and Komori, S. Effects of ambient pressure, gas temperature and combustion reaction on droplet evaporation. *Combust. Flame*, 161(2), pp.551–564, 2014.
- [9] Baba, Y. and Kurose, R. Analysis and flamelet modelling for spray combustion. *J. Fluid Mech.* 612, pp.45–79, 2008.
- [10] Nakamura, M., Akamatsu, F., Kurose, R., and Katsuki, M. 2005. Combustion mechanism of liquid fuel spray in a gaseous flame. *Phys. Fluids*, 17(12), 123301, 2005.
- [11] Miller, R.S., Harstad, K., and Bellan, J. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *Int. J. Multiph. Flow*, 24(6), pp.1025–1055, 1998.
- [12] Bale, R., Li, C.G., Yamakawa, M., Iida, A., Kurose, R., Tsubokura, M., Simulation of droplet dispersion in COVID-19 type pandemics on fugaku. *PASC'21*, pp.1–11, 2021.
- [13] Nakahashi, K. Building-Cube Method for Flow Problems with Broadband Characteristic Length. *Computational Fluid Dynamics 2002.* Springer Berlin Heidelberg, pp.77–81, 2003.
- [14] Bale, R., Patankar, N.A., Jansson, N., Onishi, K., and Tsubokura, M. Stencil Penalty approach-based constraint immersed boundary method. *Comput. Fluids*, 200, 104457, 2020.
- [15] Bhalla, A.P.S., Bale, R., Griffith, B.E., and Patankar, N.A. A unified mathematical framework and an adaptive numerical method for fluid-structure interaction with rigid, deforming, and elastic bodies. *J. Comput. Phys.* 250, pp.446–476, 2013.
- [16] Liu, L., Wei, J., Li, Y., and Ooi, A. Evaporation and dispersion of respiratory droplets from coughing. *Indoor Air.* 27(1), pp.179–190, 2017.
- [17] Xie, X., Li, Y., Chwang, A.T.Y., Ho, P.L., and Seto, W.H. How far droplets can move in indoor environments-revisiting the Wells evaporation-falling curve. *Indoor air.* 17(3), pp.211–225, 2007.
- [18] Bale, R., Iida, A., Yamakawa, M., Li, C.G., and Tsubokura, M. Quantifying the COVID19 infection risk due to droplet/aerosol inhalation. *Sci Rep* 12, 11186, 2022.
- [19] Gupta, J.K. Lin, C.H., Chen, Q. Characterizing exhaled airflow from breathing and talking. *Indoor Air.* 20(1), pp.31–39, 2010.
- [20] Watanabe, T., Bartrand, T.A., Weir, M.H., Omura, T., and Haas, C.N. Development of a dose-response model for sars coronavirus. *Risk Anal. Int. J.* 30, pp.1129–1138, 2010.
- [21] Watanabe, T., Bartrand, T.A., Omura, T., and Haas, C.N. Dose-response assessment for influenza a virus based on data sets of infection with its live attenuated reassortants. *Risk Anal. Int. J.* 32, pp.555–565, 2012.
- [22] Prentiss, M., Chu, A., and Berggren, K.K. Superspreading events without superspreaders: Using high attack rate events to estimate N_0 for airborne transmission of COVID-19. *MedRxiv*, 2020.
- [23] Augenbraun, B.L., Lasner, Z.D., Mitra, D., Prabhu, S., Raval, S., Sawaoka, H., Doyle, J.M. Assessment and mitigation of aerosol airborne SARS-CoV-2 transmission in laboratory and office environments. *J. Occup. Environ. Hyg.* 17(10), pp.447–456, 2020.

OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

[C-02] OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

(2)

座長:河合 英徳(お茶の水女子大学)

Wed. May 31, 2023 10:45 AM - 11:30 AM Room C (2F Conference Room 201A)

[C-02-01] Building-Cube法に基づく大規模非定常流れのトポロジー最適化

*勝又 稜平¹、西口 浩司¹、干場 大也¹、加藤 準治¹ (1. 名古屋大学)

10:45 AM - 11:00 AM

[C-02-02] オイラー型有限体積法による自動車コンポーネント構造の超並列弾塑性解析

*竹内 秀輔¹、西口 浩司¹、干場 大也¹、加藤 準治¹、岡澤 重信² (1. 名古屋大学、2. 山梨大学)

11:00 AM - 11:15 AM

[C-02-03] 界面不連続性を有する流体-構造連成問題に適した陰的オイラー型有限体積法

*西口 浩司¹、近藤 景斗¹、嶋田 宗将²、干場 大也¹、加藤 準治¹ (1. 名古屋大学、2. 理化学研究所)

11:15 AM - 11:30 AM

Building-Cube 法に基づく 大規模非定常流れのトポロジー最適化

Topology Optimizaion of Large-Scale Transient Flow
based on the Building-Cube Method

勝又稜平¹⁾ 西口浩司²⁾ 干場大也³⁾ 加藤準治⁴⁾
Ryohei Katsumata, Koji Nishiguchi, Hiroya Hoshiha, Junji Kato

¹⁾名古屋大学 大学院工学研究科 (〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町名古屋大学工学部 8 号館北棟 3 階,

E-mail: katsumata.ryohei.a3@s.mail.nagoya-u.ac.jp)

²⁾博 (工) 名古屋大学 大学院工学研究科 准教授, E-mail: kojinishiguchi@nagoya-u.ac.jp

³⁾博 (工) 名古屋大学 大学院工学研究科 助教, E-mail: hiroyahoshiha@nagoya-u.jp

⁴⁾Dr.-Ing. 名古屋大学 大学院工学研究科 教授, E-mail: junjikato@civil.nagoya-u.ac.jp

Recently, topology optimization methods have been applied not only to structural problems but also to fluid flow problems. Our research focuses on topology optimization for unsteady flows, which are important from an engineering point of view. However, unsteady flow topology optimization requires a fine mesh and hence a huge computational cost. Therefore, we propose a large-scale unsteady flow topology optimization based on the building-cube method (BCM), which is suitable for massively parallel computing. BCM is one of the hierarchical Cartesian mesh methods and is confirmed to have good scalability. The governing equations are discretized by a cell-centered finite volume method based on the BCM, and the sensitivity of the objective function is computed by a sensitivity analysis based on the continuous adjoint method. Several numerical examples will be used to discuss its applicability to large-scale computations.

Key Words : *Topology optimization, Unsteady flow, Building-cube method, Finite volume method*

1. 緒言

トポロジー最適化は、物理的・数学的な理論に基づいて最適な設計を行う手法の一つであり、最も自由度の高い設計を可能とする最適化手法である。固体力学問題を対象として発展してきたトポロジー最適化は、近年は流体・熱伝導・電磁気・音響など、様々な物理現象に対してその理論が拡張されている。

流体問題のトポロジー最適化は、定常 Stokes 流を対象としたトポロジー最適化 [1] から、定常の Navier-Stokes 流を対象としたもの [2] へと拡張されていった。Zhou ら [3] は、レベルセット法を用いて定常 Navier-Stokes 流のトポロジー最適化を行っている。以上の流体トポロジー最適化の研究では、定常状態が仮定されている。

それらに対して、Deng ら [4] や Kreissl ら [5] は非定常流に対するトポロジー最適化手法を提案している。非定常流に対しても、レベルセット法を用いてトポロジー最適化を行った例 [6][7] が存在する。こういった非定常流体に対するトポロジー最適化では、定常流と比べて大きな計算コストが必要となるため、既往の研究 [8] では最大でも約 50 万の格子解像度となっており、扱うことのできる非定常流体問題は限られている。したがって、より広範な非定常流体問題のトポロジー最適化を行うために、大規模計算に適した手法、すなわち並列化効率の高い数値解法が必要である。

一方、近年の並列計算機の指数関数的性能向上により、高解像度の計算メッシュを用いた並列計算が可能と

なりつつある。そういった大規模計算に有効な手法として、階層型直交メッシュ法の一つである building-cube 法 (building-cube method; BCM) [9] が提案されている。高い並列化効率を有し、メッシュの局所細分化による複雑形状のメッシュ生成が容易であることから、Navier-Stokes 流 [10][11][12] や流体-固体連成問題 [13][14] のシミュレーションにおいて、近年注目を集めている。BCM の並列化性能に関する研究 [15] では、ウィークスケールリングで高い並列化効率を誇ることが報告されている。

以上の背景を踏まえ、我々は大規模並列計算に適する BCM を用いた非定常流れトポロジー最適化手法を提案する。トポロジー最適化における非定常 Navier-Stokes 方程式は、BCM に基づくセル中心有限体積法により離散化する。目的関数の感度は随伴変数法に基づく連続的感度解析によって求める。

2. 支配方程式

計算領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ ($N = \{2, 3\}$) において、位置 $\mathbf{x} \in \Omega$ および時刻 $t \in [0, T]$ における速度、圧力、外力をそれぞれ \mathbf{u} , p , \mathbf{f} とする。このとき、非定常・非圧縮性流れの支配方程式である、運動方程式 (Navier-Stokes 方程式) および連続の式は以下の式で表せる。

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla \cdot [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] + \mathbf{f},$$

$$\text{in } \Omega \times [0, T] \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (2)$$

ここで、 ρ は質量密度、 μ は粘性係数である。速度には、以下の初期条件 \mathbf{u}_0 を与える。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \text{in } \Omega \quad (3)$$

また、ディリクレ境界 Γ_D およびノイマン境界 Γ_N において、以下の境界条件 \mathbf{u}_D および \mathbf{g} を与える。

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_D(\mathbf{x}, t), \quad \text{on } \Gamma_D \times [0, T] \quad (4)$$

$$\{-p\mathbf{I} + \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top]\} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, t), \quad \text{on } \Gamma_N \times [0, T] \quad (5)$$

ここで、 \mathbf{I} は単位テンソル、 \mathbf{n} は境界 $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ における外向き単位法線ベクトルである。

固体領域については、先行研究 [1] において、速度 $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ となるように埋め込み境界法に基づく仮想的な外力を与える手法が提案されている。これを密度法によるトポロジー最適化に適用し、以下の式で表される仮想外力を計算領域 Ω に与える。

$$\mathbf{f} = -\alpha\mathbf{u} \quad (6)$$

ここで、 α は固体を多孔質体として仮定したときの透過抵抗係数を表す。透過抵抗係数 α は、各計算セルの流体体積率を表す最適化設計変数 $\gamma(\mathbf{x}) \in [0, 1]$ ($\gamma = 0$ のとき固体、 $\gamma = 1$ のとき流体) を用いて次式で表される。

$$\alpha(\gamma) = \alpha_{\min} + (\alpha_{\max} - \alpha_{\min}) \frac{q(1-\gamma)}{q+\gamma} \quad (7)$$

ここで、 α_{\min} 、 α_{\max} はそれぞれ α の最小値、最大値であり、 $q (> 0)$ は式 (7) で表される α の補間関数において、凸性を制御するためのパラメータである。 $\alpha_{\min} = 0$ 、 $\alpha_{\max} = \infty$ とすることで、流体領域の流れ場には影響を及ぼさず、固体領域では速度をほとんどゼロにすることができる。ただし、数値解析上、無限大の値は扱うことができないため、 α_{\max} については十分大きな有限の値を設定する。

3. トポロジー最適化問題

上述の支配方程式を用いて、非定常・非圧縮性流れに対するトポロジー最適化問題を以下のように設定する。

$$\min J(\mathbf{u}, p; \gamma) \quad (8)$$

$$\text{s.t. } \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$$

$$= -\nabla p + \mu \nabla \cdot [\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top] - \alpha\mathbf{u}, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (9)$$

$$-\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (10)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \text{in } \Omega \quad (11)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_D(\mathbf{x}, t), \quad \text{on } \Gamma_D \times [0, T] \quad (12)$$

$$\{-p\mathbf{I} + \mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top]\} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, t), \quad \text{on } \Gamma_N \times [0, T] \quad (13)$$

$$G(\gamma) = \frac{1}{V_0} \int_{\Omega_D} \gamma \, d\Omega \leq \theta \quad (14)$$

$$0 \leq \gamma \leq 1 \quad (15)$$

ここで、 $J(\mathbf{u}, p; \gamma)$ は目的関数、 $G(\gamma)$ は体積制約関数であり、 $V_0 = \int_{\Omega_D} d\Omega$ は設計領域 Ω_D の体積、 $\theta \in (0, 1]$ は

流体領域の体積割合上限である。式 (9)–(13) は支配方程式による等式制約、式 (14)–(15) は流体領域の体積上限や設計変数の上限・下限による不等式制約を表している。式 (9) の外力項 \mathbf{f} に式 (6) で示した仮想的な外力を用いることで、固体領域を含む計算領域を統一的に取り扱う。なお、感度解析において得られる随伴方程式を簡単にするため、式 (10) に示す連続の式に負符号を用いている。目的関数 J は、抵抗力および流体粘性によるエネルギー散逸とし、以下のように設定する。

$$J(\mathbf{u}, p; \gamma) = \int_0^T \int_{\Omega} \alpha \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \, d\Omega dt + \int_0^T \int_{\Omega} \frac{\mu}{2} [\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top] : [\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top] \, d\Omega dt \quad (16)$$

勾配法に基づいて設計変数を更新し、最適形状を求めるためには、設計変数の微小変動 $\delta\gamma$ に対する目的関数や制約関数の変動量 (感度) を求める必要がある。本研究では、連続随伴変数法 [16] を用いた目的関数の感度の導出を行う。 $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ 、 $\tilde{p}(\mathbf{x}, t)$ を随伴変数とし、以下に示す随伴方程式を満足する $\tilde{\mathbf{u}}$ 、 \tilde{p} を求める。

$$-\rho \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} - \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\tilde{\mathbf{u}} + \rho(\nabla\mathbf{u})^\top \tilde{\mathbf{u}} = -\nabla \tilde{p} + \mu \nabla \cdot [\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^\top] + 2\mu \nabla \cdot [\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top] - \alpha \tilde{\mathbf{u}} - 2\alpha\mathbf{u}, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (17)$$

$$-\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = 0, \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (18)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, T) = \mathbf{0}, \quad \text{in } \Omega \quad (19)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}, \quad \text{on } \Gamma_D \times [0, T] \quad (20)$$

$$\{-\tilde{p}\mathbf{I} + \mu[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^\top]\} \cdot \mathbf{n} = -\rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})\tilde{\mathbf{u}} - 2\mu[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^\top] \cdot \mathbf{n}, \quad \text{on } \Gamma_N \times [0, T] \quad (21)$$

式 (17)–(21) によって求めた随伴変数を用いると、目的関数の変動 δJ は次の式で求められる。

$$\delta J = \int_0^T \int_{\Omega} \left[-(\alpha_{\max} - \alpha_{\min}) \frac{q(q+1)}{(q+\gamma)^2} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \right] \delta\gamma \, d\Omega dt \quad (22)$$

なお、式 (14) に示す体積制約関数 G の感度 δG は、次式によって陽的に計算することができる。

$$\delta G = \frac{1}{V_0} \int_{\Omega_D} \delta\gamma \, d\Omega \quad (23)$$

得られた感度を用いて、勾配法に基づいて設計変数を更新し、最適解の探索を行う。

4. 数値解析手法

支配方程式 (9)–(13) および随伴方程式 (17)–(21) は、フラクショナルステップ法を用いて解かれる。フラクショナルステップ法は、速度場と圧力場を分離して時間進行を行う数値解法であり、次の手順で計算される。

1. 中間速度を計算する。
2. 中間速度を用いて、圧力ポアソン方程式より次ステップの圧力を計算する。

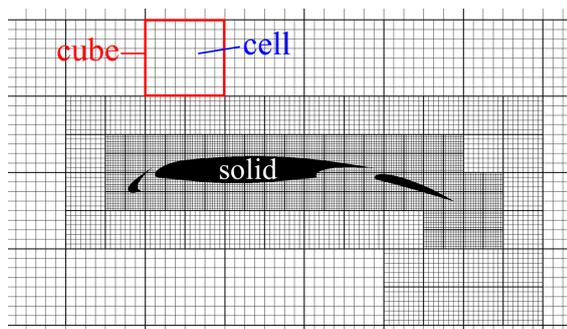


図-1 BCMによるメッシュ分割の例

3. 中間速度および圧力を用いて、速度修正式より次ステップの速度を計算する。

本論文では、データ構造が簡素なセル中心有限体積法を用いて空間方向に離散化を行う。すなわち、速度 u 、圧力 p 、設計変数 γ はセル中心において定義するコケート配置法を用いる。中間速度を求める際は、移流項および粘性応力項は2次精度中心差分法で離散化される。圧力ポアソン方程式は、圧力項を2次精度中心差分法で離散化し、Red/Black オーダリングにより色分けされた逐次過緩和法 (Successive Over Relaxation Method; SOR 法) により解く。その際、Rhie-Chow 法を用いて圧力振動を回避する。なお、随伴方程式で初期条件にあたる式 (19) は、時刻 $t = T$ における条件式となっているため、随伴方程式は時間に関して逆方向に解いていく必要がある点に注意が必要である。

前述したように、非定常流に対するトポロジー最適化では詳細なメッシュ分割が必要となり、膨大な計算コストを要する。そのため、本研究では大規模並列計算に適した building-cube 法 (BCM) に基づくセル中心有限体積法により支配方程式を離散化し、超並列計算機を使用して計算を行う。BCM は階層型直行メッシュ法の一つであり、図-1 に示すように、計算領域は「キューブ」と呼ばれる立方体領域に分割され、各キューブは等間隔で同数のセルにさらに分割される。並列計算の際、各計算コアには同数のキューブが割り当てられ、各キューブ内で空間ループ処理が実行される。これにより、各コアは同数のセルを分担することになるため、各コアの計算不可が均一となる。さらに、簡素なデータ構造により、メモリアクセスが局所的かつ連続的になりやすい。このような計算負荷の均一化やメモリアクセスの局所化・連続化により、BCM では高い並列化効率を得ることが可能である。また、BCM は各セルのコネクティビティ情報が不要なため、メッシュデータのファイルサイズやメモリ使用量が抑えられるという特長がある。

5. 数値解析例

数値計算例の一部として、ここでは3次元絞り管問題を示す。3次元の立方体領域 (寸法 $1 \times 1 \times 1$) を計算領域 Ω とし、時刻 $t \in [0, T]$ においてトポロジー最適化を行う。計算領域 Ω および設計領域 Ω_D の寸法・境界条件を図-2 に示す。流入境界ではポアズイユ流れを仮定し、速度の法線成分 u_n とし、以下の形で非定常流

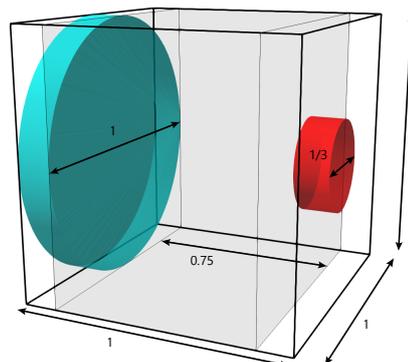


図-2-a 寸法

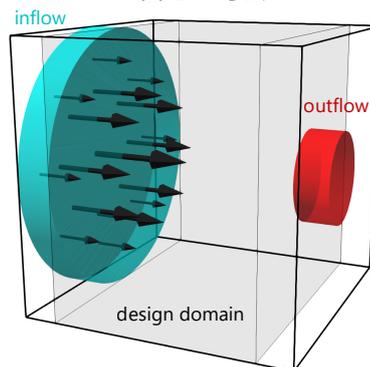


図-2-b 境界条件

図-2 計算領域 Ω および設計領域 Ω_D

入速度を与えている。

$$u_n = \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \sin^2 \frac{\pi t}{2T} \quad (24)$$

ここで、 r は円形の流入境界の中心からの距離、 R は円形の流入境界の半径である。本計算例では $R = 0.5$ とし、したがって $0 \leq r \leq 0.5$ である。また、最終時刻 $T = 0.1$ としている。

トポロジー最適化における流体体積制約の上限値は、 $\theta = 0.2$ (設計領域 Ω_D の体積の20%) としている。BCM に基づき、計算領域 Ω を4096個のキューブに分割し、約1700万セルの計算メッシュを生成、4096並列でトポロジー最適化計算を実施した。

最適化結果として得られた最適構造を、初期構造および最適化過程とともに図-3 に示す。図の灰色の領域が流体領域を表している。図より、非定常流入条件を有する3次元計算において、提案手法を用いてグレースケールの少ない明瞭な構造が得られたことが定性的に確認できる。また、総セル数が約1700万のメッシュを用いた3次元計算でも、提案手法によりトポロジー最適化が可能であることが示された。

さらに、最適構造において流れが適切に制御できているか確認するため、得られた最適構造における流れ場の計算を行った。計算結果として、速度ベクトル場を図-4 に示す。図の灰色の領域は、図-3-f の最適構造を表している。得られた最適構造によって、図のように流れが制御できていることが確認できる。

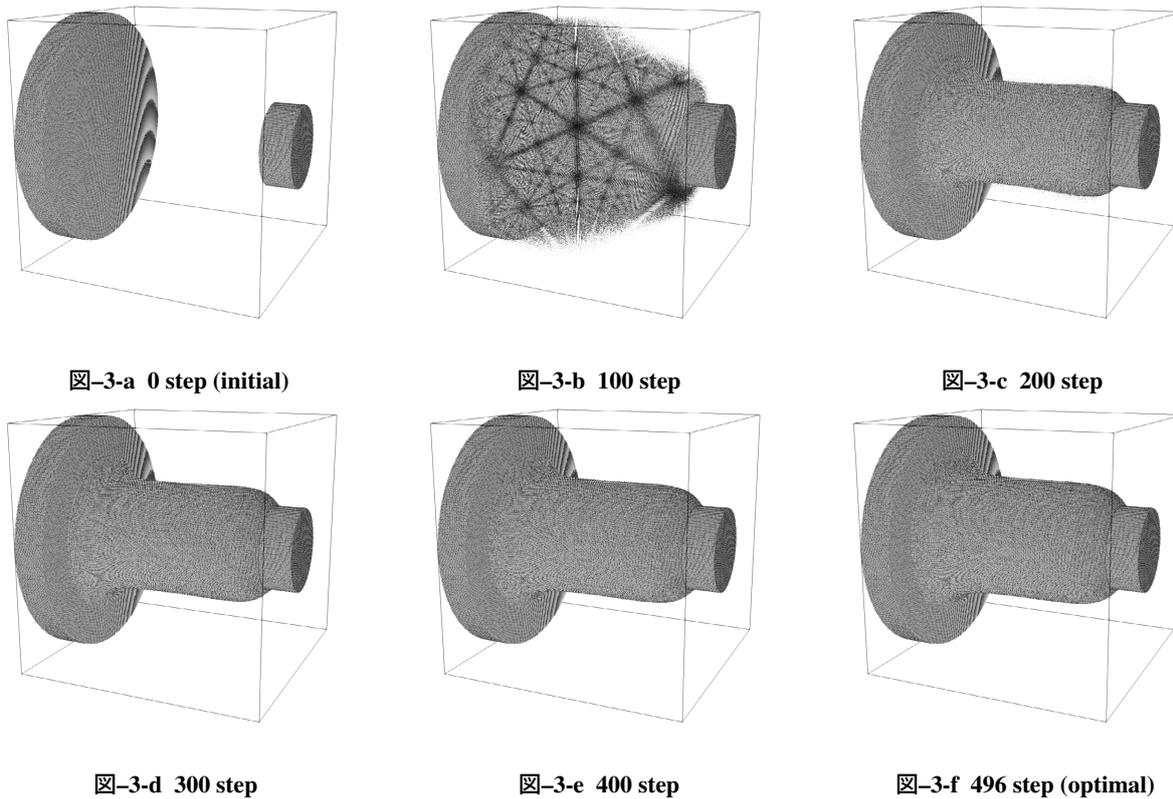


図-3 最適化過程および最適化結果

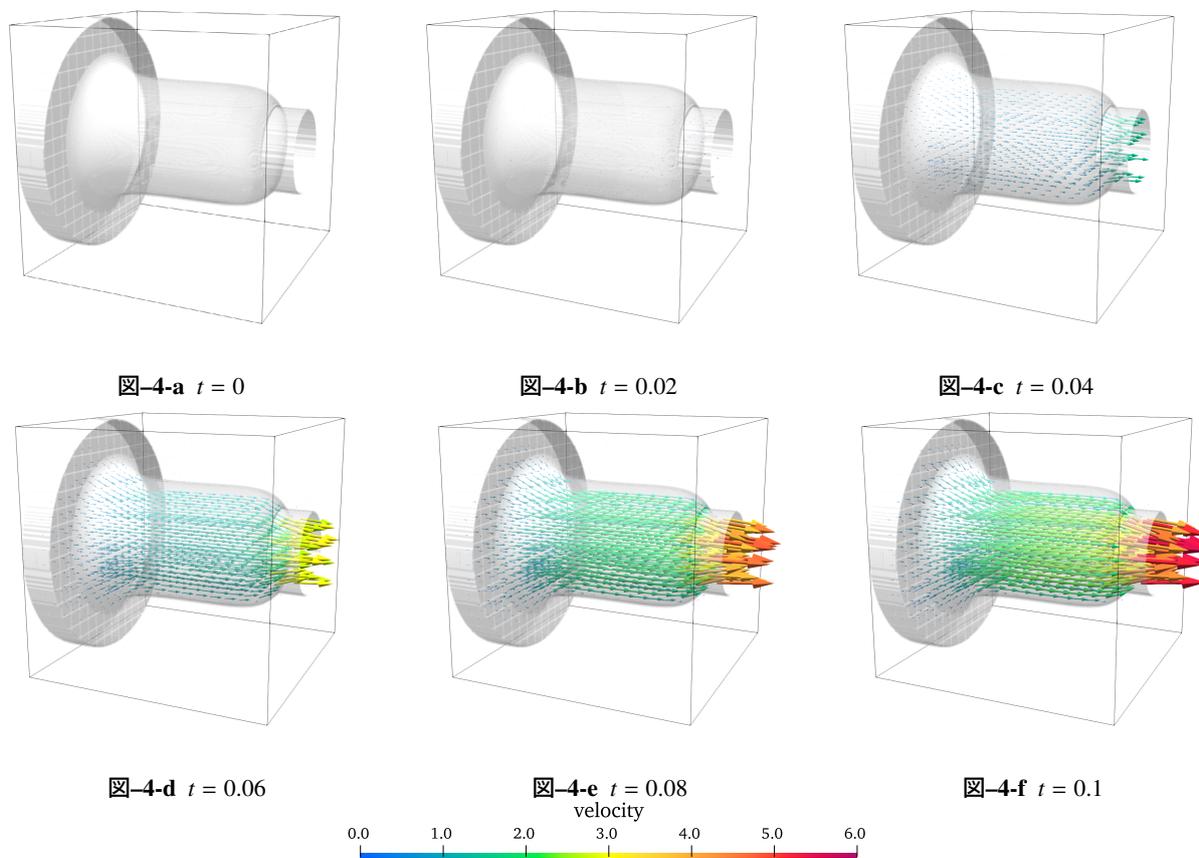


図-4 最適構造における速度場

6. 結言

本研究では、大規模並列計算に適する BCM に基づくセル中心有限体積法を用いた、非定常流体のトポロジー最適化手法を提案した。トポロジー最適化における数値解析手法や数値解析例の詳細については、講演会の当日に紹介予定である。

参考文献

- [1] Borrvall, T. and Petersson, J.: Topology optimization of fluids in stokes flow, *International journal for numerical methods in fluids*, Vol.41, No.1, pp.77–107, 2003.
- [2] Gersborg-Hansen, A., Sigmund, O., and Haber, R. B.: Topology optimization of channel flow problems, *Structural and multidisciplinary optimization*, Vol.30, pp.181–192, 2005.
- [3] Zhou, S. and Li, Q.: A variational level set method for the topology optimization of steady-state navier–stokes flow, *Journal of Computational Physics*, Vol.227, No.24, pp.10178–10195, 2008.
- [4] Deng, Y., Liu, Z., Zhang, P., Liu, Y., and Wu, Y.: Topology optimization of unsteady incompressible navier–stokes flows, *Journal of Computational Physics*, Vol.230, No.17, pp.6688–6708, 2011.
- [5] Kreissl, S., Pingen, G., and Maute, K.: Topology optimization for unsteady flow, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.87, No.13, pp.1229–1253, 2011.
- [6] Deng, Y., Zhang, P., Liu, Y., Wu, Y., and Liu, Z.: Optimization of unsteady incompressible navier–stokes flows using variational level set method, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol.71, No.12, pp.1475–1493, 2013.
- [7] Coffin, P. and Maute, K.: A level-set method for steady-state and transient natural convection problems, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol.53, pp.1047–1067, 2016.
- [8] Chen, C., Yaji, K., Yamada, T., Izui, K., and Nishiwaki, S.: Local-in-time adjoint-based topology optimization of unsteady fluid flows using the lattice boltzmann method, *Mechanical Engineering Journal*, Vol.4, No.3, pp.17–00120, 2017.
- [9] Nakahashi, K.: Building-cube method for flow problems with broadband characteristic length, *Computational Fluid Dynamics 2002: Proceedings of the Second International Conference on Computational Fluid Dynamics, ICCFD, Sydney, Australia, 15–19 July 2002*, pp. 77–81, Springer, 2003.
- [10] Kim, L., Nakahashi, K., Jeong, H., and Ha, M.: High-density mesh flow computations by building-cube method, *Journal of mechanical science and technology*, Vol.21, pp.1306–1319, 2007.
- [11] Onishi, K., Tsubokura, M., Obayashi, S., and Nakahashi, K.: Vehicle aerodynamics simulation for the next generation on the k computer: part 2 use of dirty cad data with modified cartesian grid approach, *SAE International Journal of Passenger Cars-Mechanical Systems*, Vol.7, No.2014-01-0580, pp.528–537, 2014.
- [12] Jansson, N., Bale, R., Onishi, K., and Tsubokura, M.: Cube: A scalable framework for large-scale industrial simulations, *The international journal of high performance computing applications*, Vol.33, No.4, pp.678–698, 2019.
- [13] 西口浩司, 岡澤重信, 坪倉誠, et al.: 大規模並列計算に適した階層型直交メッシュ法による完全オイラー型固体-流体連成解析, *土木学会論文集 A2 (応用力学)*, Vol.73, No.2, pp.I.153–I.163, 2017.
- [14] Nishiguchi, K., Bale, R., Okazawa, S., and Tsubokura, M.: Full eulerian deformable solid-fluid interaction scheme based on building-cube method for large-scale parallel computing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.117, No.2, pp.221–248, 2019.
- [15] Ando, K., Bale, R., Li, C., Matsuoka, S., Onishi, K., and Tsubokura, M.: Digital transformation of droplet/aerosol infection risk assessment realized on “fugaku” for the fight against covid-19, *The International Journal of High Performance Computing Applications*, Vol.36, No.5-6, pp.568–586, 2022.
- [16] Othmer, C.: A continuous adjoint formulation for the computation of topological and surface sensitivities of ducted flows, *International journal for numerical methods in fluids*, Vol.58, No.8, pp.861–877, 2008.

オイラー型有限体積法による自動車コンポーネント構造の超並列弾塑性解析

Massively parallel simulation of vehicle component structure considering elasto-plasticity with Eulerian finite volume method

竹内秀輔¹⁾ 西口浩司²⁾ 干場大也³⁾ 加藤準治⁴⁾ 岡澤重信⁵⁾
Shusuke Takeuchi, Koji Nishiguchi, Ryohei Katsumata, Hiroya Hoshiba, and Junji Kato

¹⁾名古屋大学大学院 工学研究科 (〒 464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町, E-mail: takeuchi.shusuke.c5@s.mail.nagoya-u.ac.jp)

²⁾博 (工) 名古屋大学大学院 工学研究科 准教授 (E-mail: kojinishiguchi@civil.nagoya-u.ac.jp)

³⁾博 (工) 名古屋大学大学院 工学研究科 助教 (E-mail: hiroyahoshiba@nagoya-u.jp)

⁴⁾Dr.-Ing. 名古屋大学大学院 工学研究科 教授 (E-mail: junjikato@nagoya-u.jp)

⁵⁾博 (工) 山梨大学大学院 総合研究部 教授 (E-mail: sokazawa@yamanashi.ac.jp)

With the growing interest in large-scale parallel simulations of vehicle structure dynamics, Eulerian methods using Cartesian meshes have been a renewed attention. Eulerian methods are attractive for large-scale parallel computing, generating mesh fastly, and for simulating large deformations. In this study, we propose Eulerian finite volume formulation using marker particles with elastoplasticity. We spatially discretize basic equations with finite volume method using BCM for massively parallel computing of vehicle structures such as B-pillar.

Key Words : Eulerian method, Finite volume method, Elastoplasticity, Vehicle structure dynamics

1. 緒言

自動車構造解析の大規模並列シミュレーションへの関心と必要性が高まる中、固定直交メッシュに基づくオイラー型構造解析は有効な数値解法の一つである。過去数十年間に渡り、非構造メッシュを用いたラグランジュ型有限要素法は、衝突解析、強度・剛性解析など数多くの性能評価に用いられている。しかし、固定直交メッシュに比べ、非構造メッシュに基づく有限要素法で高い並列化効率を得ることは容易ではない [1]。さらに、幾何学的に複雑な構造である車両構造の非構造メッシュの生成は、数週間オーダーの時間を要する問題がある [2,3]。

直交メッシュを用いたオイラー記述に基づく固体解析 [4]~[6] は、大規模並列計算、解析メッシュの自動かつ高速な生成、破断を含む大変形問題のシミュレーションに適している。西口ら [7,8] は、階層型直交メッシュ法的一种であるビルディング・キューブ法 (BCM) [9] を用いた完全オイラー型流体-構造強連成解法を提案し、数十万コアレベルの超並列計算環境における高い並列化効率を確認している。また西口ら [11,12] は、固体領域を表現するためのマーカー粒子を新たに導入し、固体体積率や固体に関する物理量をマーカー粒子の情報を利用して計算するオイラー型構造-流体統一解法を提案している。オイラー型構造-流体統一解法は、固体界面及び固体内部変数の数値拡散を回避することで解析精度が向上された。しかし、これらの手法 [10,11,12] は、弾塑性を考慮した自動車構造の超並列計算に適用するには至っていない。

以上の背景から、本研究では、マーカー粒子を用い

たオイラー型有限体積法による弾塑性解析手法を提案する。本手法の妥当性を円筒の3点曲げ問題により検証する。また、Bピラーなどの自動車コンポーネント構造の超並列計算を行う。

2. 基礎方程式

本研究においては、次に示す連続の式、運動方程式を支配方程式として利用する。塑性域での変形は非圧縮性と近似できること、また数値計算の安定性のため、本研究では非圧縮性の仮定の下で計算を行う。

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} \quad (2)$$

ここで、 ρ は質量密度、 \mathbf{v} は速度、 $\boldsymbol{\sigma}$ はコーシー応力テンソル、 \mathbf{b} は単位質量当たりの物体力をそれぞれ表す。

また、次に示す変形勾配テンソルの時間発展式を用いて、固体の変形勾配テンソル \mathbf{F} を評価する。ここで、 \mathbf{L} は速度勾配テンソルである。

$$\frac{D\mathbf{F}}{Dt} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{F} \quad (3)$$

3. 構成方程式

固体の構成方程式として、文献 [13] に記載されている、線形等方硬化を伴う von-Mises 型の降伏関数を用いた弾塑性構成則を利用し、超弾性モデルを弾性変形の定式化に利用する。以降においてその概要を記載する。

まず、乗算分解をし変形勾配テンソル \mathbf{F} を次の様に弾性成分 \mathbf{F}_e と塑性成分 \mathbf{F}_p に分解する。

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_s \mathbf{F}_p \quad (4)$$

また、塑性右コーシー・グリーン変形テンソル \mathbf{C}_p 、弾性左コーシー・グリーン変形テンソル \mathbf{B}_e はそれぞれ次のように表すことができる。

$$\mathbf{C}_p = \mathbf{F}_p^T \mathbf{F}_p \quad (5)$$

$$\mathbf{B}_e = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_e^T \quad (6)$$

なお、塑性右コーシー・グリーン変形テンソル \mathbf{C}_p と弾性左コーシー・グリーン変形テンソル \mathbf{B}_e には次の関係が成り立つ。

$$\mathbf{B}_e = \mathbf{F} \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{F}^T \quad (7)$$

次に、超弾性モデルのひずみエネルギー関数 Ψ は、次の通りに表される。

$$\Psi = G [(\ln \lambda_{e,1})^2 + (\ln \lambda_{e,2})^2 + (\ln \lambda_{e,3})^2] + \frac{\lambda}{2} (\ln J)^2 \quad (8)$$

ここで、 G はせん断弾性係数、 $\lambda_{e,1}, \lambda_{e,2}, \lambda_{e,3}$ は主軸方向の弾性ストレッチ、 λ はラメの第一定数を表す。また、主軸方向の弾性ストレッチと弾性左コーシー・グリーン変形テンソルの関係は次の通りである。

$$\mathbf{B}_e = \sum_{\alpha=1}^3 \lambda_{e,\alpha}^2 \mathbf{n}_\alpha \otimes \mathbf{n}_\alpha \quad (9)$$

ここで、 \mathbf{n}_α は主軸方向の単位ベクトルを表す。そして、超弾性モデルのひずみエネルギー関数 Ψ を用いて、コーシー応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}$ は次のように表される。

$$\boldsymbol{\sigma} = \sum_{\alpha=1}^3 \sigma_{\alpha\alpha} \mathbf{n}_\alpha \otimes \mathbf{n}_\alpha ; \sigma_{\alpha\alpha} = \frac{1}{J} \frac{\partial \Psi}{\partial \ln \lambda_{e,\alpha}} \quad (10)$$

なお、 $\sigma_{\alpha\alpha}$ はコーシー応力テンソルの主応力成分であり、実際にひずみエネルギー関数を代入して計算すると次の通りになる。

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \frac{2\mu}{J} \ln \lambda_{e,\alpha} + \frac{\lambda}{J} \ln J \quad (11)$$

さらに、 $\sigma_{\alpha\alpha}$ を偏差応力成分 $\sigma'_{\alpha\alpha}$ と静水圧 p に分解すると次の通りになる。

$$\sigma_{\alpha\alpha} = \sigma'_{\alpha\alpha} + p \quad (12)$$

$$\sigma'_{\alpha\alpha} = \frac{2\mu}{J} \ln \lambda_{e,\alpha} - \frac{2\mu}{3J} \ln J \quad (13)$$

von-Mises 型の降伏関数 f については、次の通りに表される。

$$f = \sqrt{\frac{3}{2} (\boldsymbol{\tau}' : \boldsymbol{\tau}')} - \bar{\tau}_y \quad (14)$$

ここで、 $\boldsymbol{\tau}'$ はキルヒホッフ応力テンソルの偏差成分、 $\bar{\tau}_y$ は降伏応力を示す。また、降伏応力 $\bar{\tau}_y$ については、線形等方硬化則に基づき、体積変化率 J 、初期降伏応力

$\bar{\sigma}_y^0$ 、硬化係数 H 、相当塑性ひずみ $\bar{\epsilon}_p$ を用いて次の通りに求めることができる。

$$\bar{\tau}_y = J(\bar{\sigma}_y^0 + H\bar{\epsilon}_p) \quad (15)$$

塑性流れ則に関しては、次に示す関連流れ則を利用する。

$$\mathbf{l}_p = \dot{\gamma} \frac{\partial f(\boldsymbol{\tau}, \bar{\epsilon}_p)}{\partial \boldsymbol{\tau}} \quad (16)$$

ここで、 \mathbf{l}_p は塑性変形速度、 $\dot{\gamma}$ は塑性乗数である。

4. 数値解析手法

本研究では、著者らの既往論文 [10,11,12] に記載されている方法と同様に、空間離散化にコロケート変数配置による有限体積法を用いた上で、空間固定の直交メッシュで連続の式 (1) と運動方程式 (2) を計算する。時間進行方向については、フラクショナル・ステップ法を用いることで次ステップの速度と圧力を求める。

固体領域を表すマーカー粒子においては、マーカー粒子自体の移動、変形勾配テンソル \mathbf{F} の時間発展式、構成方程式に関する計算を行うと同時に、経路依存変数である変形勾配テンソル \mathbf{F} 、塑性右コーシー・グリーン変形テンソルの逆テンソル \mathbf{F}_p^{-1} 、相当塑性ひずみ $\bar{\epsilon}_p$ を保持する。

また本研究では、メッシュの局所細分化が可能で並列化効率に優れたビルディング・キューブ法 (BCM) を用いる。BCM は階層型直交メッシュ法の一つであり、図-1 に示すように解析領域はキューブと呼ばれる立方体領域に分割された後、各キューブは同数のセルで等間隔に分割される。局所的に細かいキューブを配置することができるため複雑な形状を有する固体界面の補足が容易である。さらに、各キューブは同数の直交等間隔セルで分割されているため、シンプルなアルゴリズムを保つことができ、高い並列化効率を得ることが可能である。

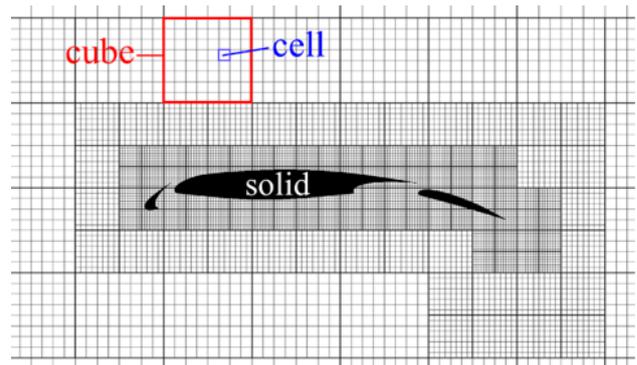


図-1 BCMにおけるキューブ分割の例

5. 数値解析例

本手法の妥当性を検証するため、図-2 に示すように円筒の3点曲げ問題の解析を行う。円筒の形状は、外半径 15.6 mm、厚さ 2 mm、長さ 200 mm である。また、半径 5 mm の円柱剛体を3点に配置する。上端の剛体に対して、 z 軸負の方向に速度を与え、剛体の変位が

40 mm となるまで円筒を曲げる。使用ハードウェアはスーパーコンピュータ「富岳」であり、MPI ランク数 320, OpenMP スレッド数 8 のハイブリッド並列計算を行った。

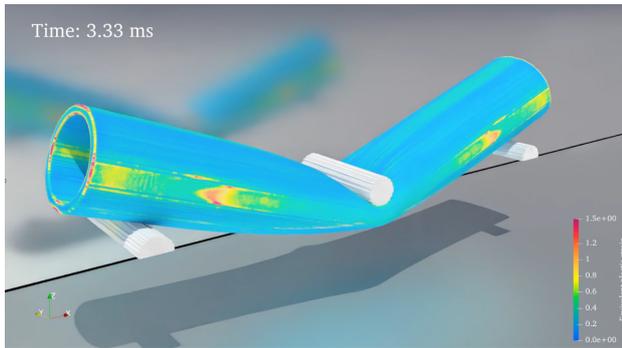


図-2 円筒の3点曲げ問題

円筒は、低炭素鋼を想定し、表-1 に示す材料物性を与える。解析結果については、講演会の当日に紹介する。

表-1 材料物性

| | |
|--|------|
| Mass density ρ_s [kg/m ³] | 7830 |
| Young's modulus E [GPa] | 207 |
| Yield stress σ_Y [MPa] | 210 |
| Hardening coefficient H , [MPa] | 300 |

6. 結言

本研究においては、自動車コンポーネント構造の超並列計算を目的とした、マーカー粒子を用いたオイラー型有限体積法による弾塑性解析手法の概要を説明した。提案手法、数値解析手法の詳細や、特に円筒の3点曲げ問題とBピラーの超並列計算の解析例については講演会の当日に紹介する。

謝辞: 本研究は、HPCIシステム利用研究課題(課題番号:hp220249)を通じて、スーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受け、実施した。ここに記して謝意を表す。

参考文献

- [1] Kondo K, Minami K, Hasegawa Y, Umetani H, Setoyama Y, Horita T, Kanazawa H. Performance evaluation using LS-DYNA hybrid version on the K Computer. Proceedings of 9th European LS-DYNA Conference. 2013, 9 pages.
- [2] Leidinger LF, Breitenberger M, Bauer AM, Oberbichler T, Hartmann S, Wuchner R, Bletzinger KU, Dudeck F, Song L. Explicit Isogeometric B-Rep Analysis on Trimmed NURBS-Based Multi-Patch CAD Models in LS-DYNA. Proceedings of 12th European LS-DYNA Conference. 2019, 8 pages.
- [3] スズキ株式会社 榎山武士,private communication, 2019.
- [4] Benson DJ. COMPUTATIONAL METHODS IN LAGRANGIAN AND EULERIAN HYDROCODES. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. **99**(2-3), pp.235–394, 1992.
- [5] Benson DJ. A MULTIMATERIAL EULERIAN FORMULATION FOR THE EFFICIENT SOLUTION OF IMPACT AND PENETRATION PROBLEMS. *Computational Mechanics*, **15**(6), pp.558–571, 1995.
- [6] Nishiguchi K, Okazawa S, Tsubokura M. Multimaterial Eulerian finite element formulation for pressure-sensitive adhesives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **114**(13), pp.1368–1388, 2018.
- [7] 西口浩司, 岡澤重信, 坪倉誠. 大規模並列計算に適した階層型直交メッシュ法による完全オイラー型固体-流体連成解析, 土木学会論文集 A2 (応用力学), **73**-2, pp.I153–I163, 2017.
- [8] Nishiguchi K, Bale R, Okazawa S, Tsubokura M. Full Eulerian deformable solid-fluid interaction scheme based on building-cube method for large-scale parallel computing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **117**(2), pp.221–248, 2019.
- [9] Nakahashi K. Building-cube method for flow problems with broadband characteristic length. *Computational fluid dynamics 2002*. Springer, Berlin, Heidelberg, pp.77–81, 2003.
- [10] 西口浩司, 岡澤重信, 坪倉誠. 非圧縮性固体-流体連成解析のための陰的 Particle-in-cell 法. 土木学会論文集 A2 (応用力学), **74**(2), pp.I253–I263, 2018.
- [11] 西口浩司, 嶋田宗将, 大高雅史, 岡澤重信, 坪倉誠. ラグランジュマーカー粒子を用いたオイラー型有限体積法による圧縮性固体解析. 土木学会論文集 A2 (応用力学), **75**(2), pp.I237–I248, 2019.
- [12] Shimada, T., Nishiguchi, K., Bale, R., Okazawa, S., Tsubokura, M. Eulerian finite volume formulation using Lagrangian marker particles for incompressible fluid-structure interaction problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **123**(5), pp.1294–1328, 2022.
- [13] J. Bonet and RD. Wood: Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis, Cambridge university press, 1997.

界面不連続性を有する流体-構造連成問題に適した 陰的オイラー型有限体積法

Implicit Eulerian finite volume method
for fluid-structure interaction problems with interface discontinuity

西口浩司¹⁾ 近藤景斗²⁾ 嶋田宗将³⁾ 干場大也⁴⁾ 加藤準治⁵⁾
Koji Nishiguchi, Keito Kondo, Tokimasa Shimada, Hiroya Hoshiba, Junji Kato

¹⁾博 (工) 名古屋大学 大学院工学研究科 准教授, (〒 464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町,
E-mail: kojinishiguchi@civil.nagoya-u.ac.jp)

²⁾名古屋大学 大学院工学研究科 博士前期課程学生, E-mail: kondo.keito.n9@s.mail.nagoya-u.ac.jp

³⁾博 (工) 理化学研究所 計算科学研究センター 特別研究員, E-mail: tokimasa.shimada@riken.jp

⁴⁾博 (工) 名古屋大学 大学院工学研究科 助教, E-mail: hiroyahoshiba@nagoya-u.jp

⁵⁾Dr.-Ing. 名古屋大学 大学院工学研究科 教授, E-mail: junjikato@civil.nagoya-u.ac.jp

We propose an implicit Eulerian finite volume method for fluid-structure interaction (FSI) problems with interface discontinuity to relax the limitation of time increment stemming from solid stress waves. The reference map method is used to compute solid deformation stably for interface discontinuity of velocity gradient. Moreover, we linearize a solid stress term using a fourth-order Jacobian tensor related to the left Cauchy-Green deformation tensor. To validate the proposed approach, we compute several FSI problems.

Key Words : Eulerian method, Fluid-structure interaction, Interface discontinuity

1. 緒言

変形を伴う固体と流体の連成 (fluid-structure interaction; FSI) 問題に対する数値解法は、境界適合メッシュを用いる方法と境界非適合メッシュを用いる方法に大別される。境界適合メッシュを用いる手法として、Arbitrary Lagrangian Eulerian(ALE)法 [1,2,3,4], Deforming-Spatial-Domain/Stabilized Space-Time(DSD/SST)法 [5, 6,7,8,9,10] などが代表的な手法として挙げられる。これらの方法では、変形する固体界面を高精度に追跡でき、経路依存性のある固体の構成則を容易かつ高精度に計算できる利点がある。ただし、幾何学的に複雑な構造のメッシュ生成に多大な時間と労力が必要になる場合がある [11]。また、固体の大変形問題ではメッシュ破綻を回避するためにリメッシングが必要である。

一方、境界非適合メッシュを用いる手法は、mixed Lagrangian-Eulerian法、ラグランジュ型解法、オイラー型解法に大別される。Mixed Lagrangian-Eulerian法としては、immersed boundary法 [12,13,14,15], immersed finite element法 [16,17], immersed continuum法 [18,19], immersed interface法 [20]が挙げられる。これらの方法では、固体をラグランジュメッシュ、流体をオイラーメッシュでそれぞれ計算する。つまり、境界適合メッシュを用いる方法と同様に、幾何学的に複雑な構造のメッシュ生成に多大な時間と労力が必要になる場合がある [11]。また、固体の大変形問題ではメッシュ破綻を回避するためにリメッシングが必要である。ラグランジュ型解法としては、particle finite element method(PFEM)[21,22,23]が挙げられる。PFEMにおいては、空間上を移動する粒子を流体領域と固体領域の有限要素の節点とするため

メッシュ破綻は生じない。類似の手法として、material point method(MPM)[24]を用いた一体型FSI解法 [25,26]があり、この方法においても固体と流体の双方を粒子で表す。ただし、上記のPFEMおよびMPMでは、流体領域に配置された粒子の空間的局所化を回避するため、粒子の再配置が必要である。粒子の再配置が不十分な手法として、固体をMPM、流体をオイラーメッシュで別々に解く分離型FSI解法 [27,28,29]も提案されている。

オイラー型解法 [30,31,32,33,34,35,36,37,38,39,40,41, 42]は、固体と流体の双方を空間固定のオイラーメッシュ上で数値的に解く手法である。特に直交メッシュを用いた場合、複雑形状のメッシュ生成が容易かつ高速であり、超並列環境で高い並列化効率を得やすいという利点がある [43,40]。従来のオイラー型解法では、物質界面および固体内部変数の移流方程式を計算する必要がある。高精度な移流スキームを用いたとしても、解析が進むにつれて生じる物質界面および固体内部変数の数値拡散を回避することは原理的に不可能である。そこで、物質界面および固体内部変数の数値拡散を回避するために、固体領域を陽的に表現するマーカー粒子を新たに導入し、そのマーカー粒子に固体内部変数を保持させることで数値拡散を回避する方法が提案されている [44,45,11,46]。ただし、マーカー粒子を用いたオイラー型FSI解法 [45,46]では、固体の弾性率が上昇するにつれて、固体と流体の界面近傍における速度勾配の不連続になり、不自然な応力振動が生じる問題がある。また、固体応力波に起因する時間増分が制約が厳しくなり、タイムステップ数が増大する問題がある。前者の

問題を解決するため、著者らは reference map 法 [47,41] を用いたオイラー型 FSI 解法を提案した [48]。一方、後者の問題は残されたままである。

以上より本研究では、固体応力波に起因する時間増分制約を緩和するため、Reference map 法と陰的時間積分法を用いたオイラー型流体-構造連成解析法を提案する。そして、複数のベンチマーク問題において、提案手法の妥当性と有用性を検証する。

2. 基礎方程式

(1) 基礎方程式の空間平均化・混合化

オイラー型 FSI 解法では、一つの計算セルに複数の物質が存在し得る。これを扱うため、本研究では非圧縮性の仮定の下、空間平均化・混合化した基礎方程式を用いる [39,40]。

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{mix}} = 0 \quad (1)$$

$$\rho_{\text{mix}} \left\{ \frac{\partial \mathbf{v}_{\text{mix}}}{\partial t} + (\mathbf{v}_{\text{mix}} \cdot \nabla) \mathbf{v}_{\text{mix}} \right\} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}} + \rho_{\text{mix}} \mathbf{b} \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{v}_{mix} 、 ρ_{mix} 、 $\boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}}$ はそれぞれ次のように表される物理量である。

$$\mathbf{v}_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \bar{\mathbf{v}}_i, \quad \rho_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i, \quad \boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \bar{\boldsymbol{\sigma}}_i \quad (3)$$

検査体積において体積平均化を行った連続の式 (1) と連続体の運動方程式 (2) を支配方程式として用いることによって、各物質が混合体として扱われるので、複数種類の物質に対する個々の支配方程式を個別に解く必要がなくなり、統一的な解析が可能となる。そのため、複数種類の物質に関する連成問題の取り扱いが容易になる。

(2) 構成方程式

本研究では、固体の構成方程式として、粘性応力を付加した非圧縮性 neo-Hooke 体を仮定する [20]

$$\boldsymbol{\sigma} = G(\mathbf{B} - \mathbf{I}) + 2\mu\mathbf{D} - p\mathbf{I} \quad (4)$$

ここで、 G はせん断弾性係数、 \mathbf{B} は左コーシー・グリーン変形テンソル、 μ は粘性係数、 \mathbf{D} は流体の変形速度テンソル、 p は圧力、 \mathbf{I} は単位テンソルである。本研究では、Reference map 法 [47] に基づき、変形勾配テンソル \mathbf{F} の逆テンソルから変形勾配テンソルを求めることで、固体変形を評価する。

$$\mathbf{F} = \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} \right)^{-1}, \quad \mathbf{B} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T \quad (5)$$

既往のオイラー型解法では固体ひずみ評価において速度勾配テンソルが用いられてきたが [39,40,46,48]、界面で速度勾配が不連続な問題では数値不安定を生じる。一方、Reference map 法では、変形勾配テンソルの逆テンソルを用いることで、速度に依存しない変形評価が可能である [48]。なお、本研究ではマーカー粒子を介して固体内部変数を計算するため、従来のオイラー型固体解析において必要であった移流方程式を計算する必

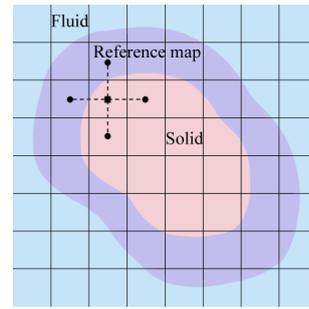


図-1 Reference map の補間

要はなく、Reference map である \mathbf{X} の移流による数値不安定は原理的に発生しない。

一方、流体の構成方程式として非圧縮性 Newton 流体の構成方程式を仮定する。

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\mathbf{D} - p\mathbf{I} \quad (6)$$

3. 数値解法

本手法では、空間固定されたオイラーメッシュ上において基礎方程式および空間微分量について解き、固体領域（固体物質点）を表すマーカー粒子において固体の構成方程式を計算する。オイラーメッシュ上では、フラクショナルステップ法により連続の式および運動方程式を速度場と圧力場に分離し、セル中心有限体積法により空間離散化を施す。

4. Reference map の補間

固体の初期位置ベクトルである Reference map はマーカー粒子が保持し、これをオイラーメッシュに補間することで変形勾配テンソルを求める [48]。なお、オイラーメッシュで Reference map の空間微分、すなわち変形勾配テンソルの逆テンソルを計算するため、図に示すように、固体領域外にも Reference map を補間する。

5. 固体応力項の線形化

ここでは、フラクショナル・ステップ法により圧力場を分離した運動方程式の移流項、応力項の時間積分法について述べる。移流項については、固体応力波に起因する時間増分制約を受けないため、陽解法である 2 次精度のアダムス・バッシュフォース法を用いる。一方、応力項については、固体応力波に起因する時間増分制約を緩和するため、半陰解法である 2 次精度のクラーク・ニコルソン法を用いる。移流項にアダムス・バッシュフォース法、応力項にクラーク・ニコルソン法を適用した運動方程式を次式に示す。

$$\rho_{\text{mix}} \frac{\mathbf{v}^* - \mathbf{v}^n}{\Delta t} + \frac{3}{2} (\mathbf{v}^n \cdot \nabla) \mathbf{v}^n - \frac{1}{2} (\mathbf{v}^{n-1} \cdot \nabla) \mathbf{v}^{n-1} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}}^* + \rho_{\text{mix}} \mathbf{b} \quad (7)$$

中間速度 $\mathbf{v}_{\text{mix}}^*$ を求めるには、 $\boldsymbol{\sigma}_{\text{mix}}^*$ を未知数 $\mathbf{v}_{\text{mix}}^*$ の関数として定式化する必要がある。解析領域に存在する

物質が固体と流体の2物質の場合、 σ_{mix}^* は

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{mix}}^* &= \sigma_s^* \phi_s^* + \sigma_f^* (1 - \phi_s^*) \\ &= G(\mathbf{B}^* - \mathbf{I})\phi_s^* + 2\mu\mathbf{D}(1 - \phi_s^*) \\ &= G(\mathbf{B}^* - \mathbf{I})\phi_s^* + \mu(\nabla\mathbf{v}^* + \nabla\mathbf{v}^{*T})(1 - \phi_s^*)\end{aligned}\quad (8)$$

と表せる。ここで、以下の線形化を仮定することで、固体の偏差応力項 σ_{mix}^* と中間速度 $\mathbf{v}_{\text{mix}}^*$ の関係式を定義する。

$$\begin{aligned}\sigma_s^* &\simeq \sigma_s^n + \frac{\partial\sigma_s}{\partial\mathbf{B}} : \nabla\mathbf{B}^n \\ &= \sigma_s^n + \frac{\partial\sigma_s}{\partial\mathbf{B}} : (\mathbf{B}^* - \mathbf{B}^n)\end{aligned}\quad (9)$$

ここで、 $\frac{\partial\sigma_s}{\partial\mathbf{B}}$ は4階のヤコビアンテンソルであるが、本研究で用いる非圧縮性 neo-Hook 体の構成方程式では、式(4)より $\frac{\partial\sigma_s}{\partial\mathbf{B}}$ の成分は定数になる。

左コーシー・グリーン変形テンソル \mathbf{B}^* については、左コーシー・グリーン変形テンソルの時間発展式の速度項にクラック・ニコルソン法を適用して時間方向に離散化することで、 \mathbf{B}^* と $\mathbf{v}_{\text{mix}}^*$ の関係式を導出する。左コーシー・グリーン変形テンソルの時間発展式は次式で示される。

$$\frac{D\mathbf{B}}{Dt} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}^T \quad (10)$$

式(10)をクラック・ニコルソン法を用いて時間方向に離散化すると、次式で示される。

$$\begin{aligned}\frac{\mathbf{B}^* - \mathbf{B}^n}{\Delta t} &= \left(\frac{\nabla\mathbf{v}^{n+1} + \nabla\mathbf{v}^n}{2} \right) \cdot \mathbf{B}^n + \\ \mathbf{B}^n \cdot \left(\frac{\nabla\mathbf{v}^{n+1} + \nabla\mathbf{v}^n}{2} \right)^T &= \sigma_s^n + \frac{\partial\sigma_s}{\partial\mathbf{B}} : (\mathbf{B}^* - \mathbf{B}^n)\end{aligned}\quad (11)$$

式(5)を \mathbf{B}^* と $\mathbf{v}_{\text{mix}}^*$ を用いて分離すると、以下の式を得る。

$$\mathbf{B}^* - \mathbf{B}^n = \frac{\Delta t}{2} (\nabla\mathbf{v}^* + \nabla\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{B}^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{B}^n (\nabla\mathbf{v}^* + \nabla\mathbf{v}^n)^T \quad (12)$$

$$\mathbf{B}^* - \mathbf{B}^n = \frac{\Delta t}{2} (\nabla\mathbf{v}^* + \nabla\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{B}^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{B}^n (\nabla\mathbf{v}^* + \nabla\mathbf{v}^n)^T \quad (13)$$

式(9)、(12)より、固体の偏差応力項 σ_s^* は

$$\begin{aligned}\sigma_s^* &= \sigma_s^n + \\ \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial\sigma_s}{\partial\mathbf{B}} : \{ &(\nabla\mathbf{v}^* + \nabla\mathbf{v}^n) \cdot \mathbf{B}^n + \mathbf{B}^n (\nabla\mathbf{v}^* + \nabla\mathbf{v}^n)^T \}\end{aligned}\quad (14)$$

となる。本研究では、次式に示す相対誤差が収束判定値未満になるまで運動方程式(5)の反復計算を行うことにより中間速度 $\mathbf{v}_{\text{mix}}^*$ を計算する。

6. 数値解析例

提案手法の妥当性と有効性を検証するため、固体と流体の界面で速度勾配が不連続になるキャビティ流れ中に超弾性体を設置した問題 [20] の数値計算を行う。問題設定図は図2に示す。領域全体に流体を配置し、 x 座標上面 ($z=2$) に初期速度場 $v_x=1$ を設定し、固体領域は $(x,z) = (1.6, 1.5)$ を中心とする半径0.2の円領域である。解析領域上端以外の壁面には滑り境界条件を与える。固体と流体の物性値(無次元量)を、表1に示す。

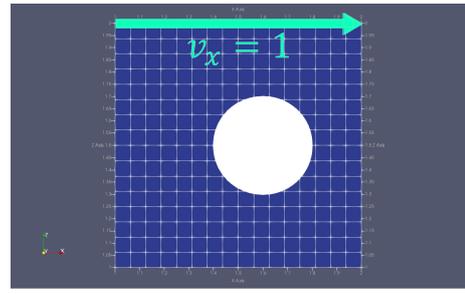


図-2 キャビティ流れ問題における初期配置・速度場

表-1 キャビティ流れ問題における物性値

| Solid: Hyperelastic solid | |
|---------------------------------------|----------------------|
| Mass density ρ_s | 1.0 |
| Shear elastic modulus G | 10, 20, 30 |
| Viscosity μ_s | 1.0×10^{-2} |
| Fluid: incompressible Newtonian fluid | |
| Mass density ρ_f | 1.0 |
| Viscosity μ_f | 1.0×10^{-2} |

7. 参照解との比較 ($G=10$)

解析領域は 256×256 に均一に分割したオイラーメッシュを用い、無次元時間 $t=7.03$ までの計算を行った。時間ステップ数は固体応力のクーラン条件が0.4になるよう設定しており、 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-3}$ である。また、生成された総粒子数は59776個である。

次に、固体変形を Zhao ら (2008) [20] の参照解と比較した図を図3に示す。Zhao らの参照解は黒線、提案手法の数値解は緑線で表す。

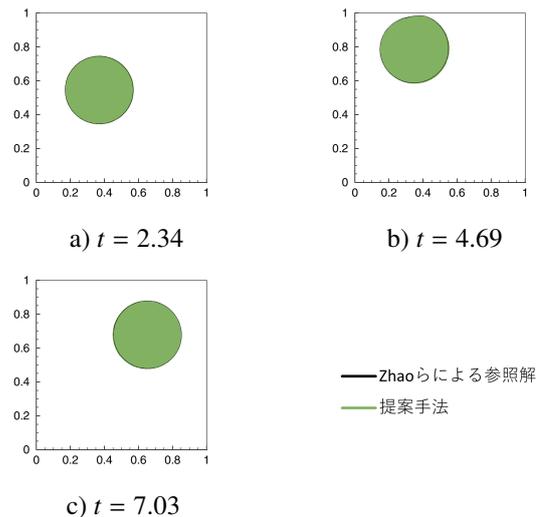


図-3 固体変形比較

図3より、提案手法の固体変形は 256×256 のメッシュにおいて参照解と精度良く一致していることが確認される。

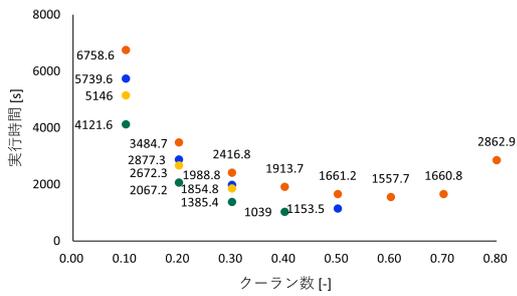
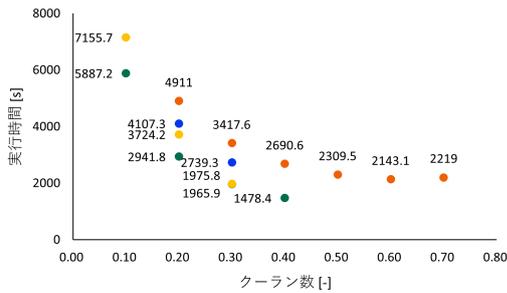
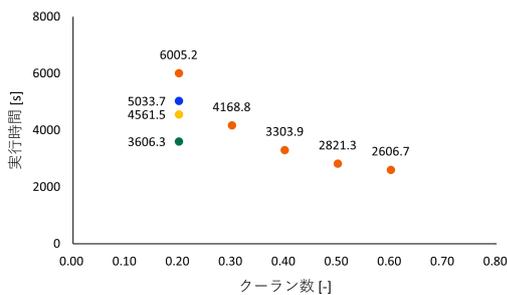
d) $G = 10$ e) $G = 20$ f) $G = 30$ 

図-4 実行時間比較

8. 時間増分制約の緩和による計算高速化効果の検証 ($G=10, 20, 30$)

次に、提案手法による時間増分制約の緩和の有効性を定量的に検証するため、 $G = 10, 20, 30$ の場合を計算する。なお、粘性係数 μ は 1.0×10^{-3} とし、固体応力項の時間積分法について半陰解法のクランク・ニコルソン法と陽解法のアダムス・バッシュフォース法の2通り、固体ひずみ評価法について Reference map 法と速度勾配法の2通り、合計4通りの場合について、実行時間を比較する。その他の計算条件は前節と同一である。なお、固体応力波伝搬速度に対するクーラン数は、0.1から0.8まで0.1刻みで、それぞれの場合を計算しているが、計算が発散した場合は図4にプロットしていない。

図4より、Reference map 法では $G = 20, 30$ において提案手法(図4では「半陰解法・RMT」と表記)が優位になり、固体応力項にアダムス・バッシュフォース法と

適用した場合と比較して、計算実行時間が $G = 20$ では約22%、 $G = 30$ では約48%短縮化されることが確認できる。また、せん断弾性係数 G の値が大きくなるほど計算可能なクーラン数が減少することが確認できる。

9. 結言

本研究では、Reference map 法を用いた陰的オイラー型固体-流体連成解法を提案し、キャビティ流れ問題を用いてその妥当性と有効性を検証した。すなわち、提案手法により時間増分制約が緩和され、弾性率が高い問題では計算実行時間が約48%短縮化されることを示すことができた。今後は、オイラー型解法の特徴を生かして、大規模並列計算が必要な3次元問題に適用することが課題である。

参考文献

- [1] Belytschko, T., Fluid-structure interaction, *Computers & Structures*, **12**-4, 1980, pp. 459–469.
- [2] Nitikitpaiboon, C., and Bathe, K., An arbitrary Lagrangian-Eulerian velocity potential formulation for fluid-structure interaction, *Computers & structures*, **47**-4-5, 1993, pp. 871–891.
- [3] Hu, H. H., Patankar, N. A., and Zhu, M., Direct numerical simulations of fluid–solid systems using the arbitrary Lagrangian–Eulerian technique, *Journal of Computational Physics*, **169**-2, 2001, pp. 427–462.
- [4] Liu, J., A second-order changing-connectivity ALE scheme and its application to FSI with large convection of fluids and near contact of structures, *Journal of Computational Physics*, **304**, 2016, pp. 380–423.
- [5] Tezduyar, T., Behr, M., and Liou, J., A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—the DSD/ST procedure: I. The concept and the preliminary numerical tests, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **94**-3, 1992, pp. 339–351.
- [6] Tezduyar, T. E., Behr, M., Mittal, S., and Liou, J., A new strategy for finite element computations involving moving boundaries and interfaces—

- the deforming-spatial-domain/space-time procedure: II. Computation of free-surface flows, two-liquid flows, and flows with drifting cylinders, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **94**-3, 1992, pp. 353–371.
- [7] Hughes, T. J., and Stewart, J. R., A space-time formulation for multiscale phenomena, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **74**-1-2, 1996, pp. 217–229.
- [8] Mittal, S., and Tezduyar, T. E., Parallel finite element simulation of 3D incompressible flows: Fluid-structure interactions, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **21**-10, 1995, pp. 933–953.
- [9] Tezduyar, T. E., Sathe, S., Keedy, R., and Stein, K., Space-time finite element techniques for computation of fluid-structure interactions, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **195**-17-18, 2006, pp. 2002–2027.
- [10] Takizawa, K., Henicke, B., Puntel, A., Spielman, T., and Tezduyar, T. E., Space-time computational techniques for the aerodynamics of flapping wings, *Journal of Applied Mechanics*, **79**-1, 2012.
- [11] 西口浩司, 嶋田宗将, 大高雅史, 岡澤重信, 坪倉誠, ラグランジュマーカー粒子を用いたオイラー型有限体積法による圧縮性固体解析, 土木学会論文集 A2 (応用力学), **75**-2, 2019, pp. I.237–I.248.
- [12] Peskin, C. S., Flow patterns around heart valves: a numerical method, *Journal of computational physics*, **10**-2, 1972, pp. 252–271.
- [13] Peskin, C. S., The immersed boundary method, *Acta numerica*, **11**, 2002, pp. 479–517.
- [14] Mori, Y., and Peskin, C. S., Implicit second-order immersed boundary methods with boundary mass, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **197**-25-28, 2008, pp. 2049–2067.
- [15] Huang, W.-X., and Sung, H. J., An immersed boundary method for fluid-flexible structure interaction, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **198**-33-36, 2009, pp. 2650–2661.
- [16] Liu, W. K., Liu, Y., Farrell, D., Zhang, L., Wang, X. S., Fukui, Y., Patankar, N., Zhang, Y., Bajaj, C., Lee, J., and others, , Immersed finite element method and its applications to biological systems, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **195**-13-16, 2006, pp. 1722–1749.
- [17] Liu, W. K., Tang, S., and others, , Mathematical foundations of the immersed finite element method, *Computational Mechanics*, **39**-3, 2007, pp. 211–222.
- [18] Wang, X. S., From immersed boundary method to immersed continuum methods, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, **4**-1, 2006.
- [19] Wang, X. S., An iterative matrix-free method in implicit immersed boundary/continuum methods, *Computers & structures*, **85**-11-14, 2007, pp. 739–748.
- [20] Zhao, H., Freund, J. B., and Moser, R. D., A fixed-mesh method for incompressible flow-structure systems with finite solid deformations, *Journal of Computational Physics*, **227**-6, 2008, pp. 3114–3140.
- [21] Idelsohn, S. R., Marti, J., Limache, A., and Oñate, E., Unified Lagrangian formulation for elastic solids and incompressible fluids: application to fluid-structure interaction problems via the PFEM, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **197**-19-20, 2008, pp. 1762–1776.
- [22] Becker, P., Idelsohn, S. R., and Oñate, E., A unified monolithic approach for multi-fluid flows and fluid-structure interaction using the particle finite element method with fixed mesh, *Computational Mechanics*, **55**-6, 2015, pp. 1091–1104.
- [23] Cremonesi, M., Franci, A., Idelsohn, S., and Oñate, E., A state of the art review of the particle finite element method (PFEM), *Archives of Computational Methods in Engineering*, **27**-5, 2020, pp. 1709–1735.
- [24] Sulsky, D., Chen, Z., and Schreyer, H. L., A particle method for history-dependent materials, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, **118**-1-2, 1994, pp. 179–196.
- [25] York, A. R., Sulsky, D., and Schreyer, H. L., The material point method for simulation of thin membranes, *International journal for numerical methods in engineering*, **44**-10, 1999, pp. 1429–1456.
- [26] York, A. R., Sulsky, D., and Schreyer, H. L., Fluid-membrane interaction based on the material point method, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **48**-6, 2000, pp. 901–924.
- [27] Guilkey, J., Harman, T., and Banerjee, B., An Eulerian-Lagrangian approach for simulating explosions of energetic devices, *Computers & structures*, **85**-11-14, 2007, pp. 660–674.
- [28] Gilmanov, A., and Acharya, S., A hybrid immersed boundary and material point method for simulating 3D fluid-structure interaction problems, *International journal for numerical methods in fluids*, **56**-12, 2008, pp. 2151–2177.
- [29] Sun, L., Mathur, S. R., and Murthy, J. Y., An unstructured finite-volume method for incompressible flows with complex immersed boundaries, *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, **58**-4, 2010, pp. 217–241.
- [30] Richter, T., and Wick, T., Finite elements for fluid-structure interaction in ALE and fully Eulerian coordinates, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **199**-41-44, 2010, pp. 2633–2642.
- [31] Sugiyama, K., Ii, S., Takeuchi, S., Takagi, S., and Matsumoto, Y., A full Eulerian finite difference approach for solving fluid-structure coupling problems, *Journal of Computational Physics*, **230**-3, 2011, pp. 596–627.
- [32] Ii, S., Sugiyama, K., Takeuchi, S., Takagi, S., and Matsumoto, Y., An implicit full Eulerian method for

- the fluid–structure interaction problem, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **65**-1-3, 2011, pp. 150–165.
- [33] Takagi, S., Sugiyama, K., Ii, S., and Matsumoto, Y., A Review of Full Eulerian Methods for Fluid Structure Interaction Problems, *Journal of Applied Mechanics*, **79**-1, 2012.
- [34] Laadhari, A., Ruiz-Baier, R., and Quarteroni, A., Fully Eulerian finite element approximation of a fluid-structure interaction problem in cardiac cells, *International journal for numerical methods in engineering*, **96**-11, 2013, pp. 712–738.
- [35] Sun, P., Xu, J., and Zhang, L., Full Eulerian finite element method of a phase field model for fluid–structure interaction problem, *Computers & Fluids*, **90**, 2014, pp. 1–8.
- [36] Valkov, B., Rycroft, C. H., and Kamrin, K., Eulerian method for multiphase interactions of soft solid bodies in fluids, *Journal of Applied Mechanics*, **82**-4, 2015, p. 041011.
- [37] Sugiyama, K., Ii, S., Shimizu, K., Noda, S., and Takagi, S., A full Eulerian method for fluid-structure interaction problems, *Procedia Iutam*, **20**, 2017, pp. 159–166.
- [38] Pironneau, O., Handling contacts in an Eulerian frame: a finite element approach for fluid structures with contacts, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, **32**-2-3, 2018, pp. 121–130.
- [39] Nishiguchi, K., Okazawa, S., and Tsubokura, M., Multimaterial Eulerian finite element formulation for pressure-sensitive adhesives, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **114**-13, 2018, pp. 1368–1388.
- [40] Nishiguchi, K., Bale, R., Okazawa, S., and Tsubokura, M., Full Eulerian deformable solid-fluid interaction scheme based on building-cube method for large-scale parallel computing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **117**-2, 2019, pp. 221–248.
- [41] Jain, S. S., Kamrin, K., and Mani, A., A conservative and non-dissipative Eulerian formulation for the simulation of soft solids in fluids, *Journal of Computational Physics*, **399**, 2019, p. 108922.
- [42] Shin, S., Chergui, J., and Juric, D., Interaction of a deformable solid with two-phase flows: An Eulerian-based numerical model for fluid-structure interaction using the level contour reconstruction method, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **92**-11, 2020, pp. 1478–1505.
- [43] 西口浩司, 岡澤重信, 坪倉誠, 大規模並列計算に適した階層型直交メッシュ法による完全オイラー型固体-流体連成解析, 土木学会論文集 A2 (応用力学), **73**-2, 2017, pp. 153–163.
- [44] Sugiyama, K., Nagano, N., Takeuchi, S., Ii, S., Takagi, S., and Matsumoto, Y., Particle-in-cell method for fluid-structure interaction simulations of neohookean tube flows, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, **59**, 2011, pp. 245–256.
- [45] 西口浩司, バレラフル, 岡澤重信, 坪倉誠, 非圧縮性固体-流体連成解析のための陰的 Particle-in-cell 法, 土木学会論文集 A2 (応用力学), **74**-2, 2018, pp. I.253–I.263.
- [46] Shimada, T., Nishiguchi, K., Bale, R., Okazawa, S., and Tsubokura, M., Eulerian finite volume formulation using Lagrangian marker particles for incompressible fluid-structure interaction problems, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **Accepted**, 2021.
- [47] Kamrin, K., Rycroft, C. H., and Nave, J.-C., Reference map technique for finite-strain elasticity and fluid–solid interaction, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **60**-11, 2012, pp. 1952–1969.
- [48] 宗将嶋田, 浩司西口, Christian, P., 重信岡澤, 誠坪倉, Reference map 法を用いたマーカー粒子によるオイラー型流体-構造連成解析, 日本計算工学会論文集, **2022**, 2022, pp. 20220002–20220002.

OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

[C-03] OS01 高性能計算とその産業応用：自動車・土木・建築・航空, etc.

(3)

座長:西口 浩司(名古屋大学)

Wed. May 31, 2023 1:15 PM - 2:15 PM Room C (2F Conference Room 201A)

[C-03-01] (キーノート講演)「富岳」を利用した大規模なフラグメント分子軌道計算について

*望月 祐志^{1,2}、坂倉 耕太³、中野 達也⁴、土居 英男¹、奥脇 弘次¹、秋澤 和輝¹、北原 駿¹、太刀野 雄介¹、松岡 壮太¹、小沢 拓⁵、大島 聡史⁶、片桐 孝洋⁷ (1. 立教大学、2. 東京大学、3. 公益財団法人計算科学振興財団、4. 国立医薬品食品衛生研究所、5. 株式会社JSOL、6. 九州大学、7. 名古屋大学)

1:15 PM - 1:45 PM

[C-03-02] BCMを用いた複雑形状を有する構造物の耐風設計のための流れ場解析

*長尾 悠生¹、田村 哲郎²、河合 英徳³、丸山 勇祐¹ (1. 前田建設工業、2. 東京工業大学、3. お茶の水女子大学)

1:45 PM - 2:00 PM

[C-03-03] Safely evaluation of indoor spaces through simulation of CO2 exhalation and ventilation

*ばれ らふーる^{1,2}、Li Chung-gang²、Ito Kazuhide³、Tsubokura Makoto (1. RIKEN、2. Kobe University、3. Kyushu University)

2:00 PM - 2:15 PM

「富岳」を利用した大規模なフラグメント分子軌道計算 について

Large-scale fragment molecular orbital calculations on the supercomputer Fugaku

望月祐志^{1,2)}, 坂倉耕太³⁾, 中野達也⁴⁾, 土居英男⁵⁾, 奥脇弘次⁶⁾, 秋澤和輝⁷⁾, 北原駿⁷⁾,
太刀野雄介⁷⁾, 松岡壮太⁷⁾, 小沢拓⁸⁾, 大島聡史⁹⁾, 片桐孝洋¹⁰⁾

Yuji Mochizuki, Kota Sakakura, Tatsuya Nakano, Hideo Doi, Koji Okuwaki, Kazuki Aksawa, Shun Kitahara,
Yusuke Tachino, Sota Matsuoka, Taku Ozawa, Satoshi Ohshima, and Takahiro Katagiri

- 1) 理博 立教大学理学部 教授 (〒171-8501 東京都豊島区西池袋3-34-1, E-mail : fullmoon@rikkyo.ac.jp)
- 2) 理博 東京大学生産技術研究所 リサーチフェロー (〒153-8503 東京都目黒区駒場4-6-1)
- 3) 博(工) 計算科学振興財団 担当課長 (〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-28 計算科学センタービル)
- 4) 博(理) 国立医薬品食品衛生研究所 室長 (〒210-9501 神奈川県川崎市川崎区殿町3-25-26)
- 5) 博(理) 立教大学理学部 助教 (〒171-8501 東京都豊島区西池袋3-34-1)
- 6) 博(理) 立教大学理学部 研究員 (〒171-8501 東京都豊島区西池袋3-34-1)
- 7) 学(理) 立教大学理学部 大学院生 (〒171-8501 東京都豊島区西池袋3-34-1)
- 8) 博(工) (株)JSOL 部長 (〒102-0074 東京都千代田区九段南1-6-5 九段会館テラス)
- 9) 博(工) 九州大学情報基盤研究開発センター 准教授 (〒819-0395 福岡県福岡市西区元岡744)
- 10) 博(理) 名古屋大学情報基盤センター 教授 (〒464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町)

For the supercomputer Fugaku, we have improved ABINIT-MP (which is a program for fragment molecular orbital (FMO) calculations) to perform interaction analysis on proteins related to infectious diseases and to evaluate parameters for coarse-grained simulations of mesoscale systems. This document summarizes the current status of ABINIT-MP on Fugaku and various related applications.

Key Words : *Fragment molecular orbital, FMO, ABINIT-MP, Fugaku*

1. はじめに

理化学研究所の計算科学研究センター(R-CCS)に設置されたスーパーコンピュータ「富岳」は、2020年度の試行的運用を経て2021年度から正式運用され、計算科学の研究開発だけでなく産業界での利用も広がりつつあります。「富岳」はTop500的には首位ではなくなりましたが、多様な分野で様々なプログラムを使うことができる点で実用性の高いスーパーコンピュータであると言えます。本稿では、私たちが自主開発しているフラグメント分子軌道(FMO)法[1,2]のプログラムABINIT-MP[3,4]を「富岳」の上で用いた研究活動についてご紹介させていただきます。

2. FMO計算とABINIT-MP

FMO計算のスキームとABINIT-MPプログラムの特徴については、2020年度の新型コロナウイルスの特別プロジェクトの成果と合わせて本学会の会誌「計算工学」の26号の解説[5]に書かせていただいたことがあります。そこで、ここではダイジェスト的な記載に留めます。

FMO法[1,2]では、対象系をフラグメントに分割します。タンパク質では、アミノ酸残基がフラグメントの単位になるのが普通です。ここで、個々のフラグメントをモノマ

ー、その2量体すなわち対をダイマーと呼びます。モノマー計算の段階では、与えられた基底関数の下、分子軌道法の基本近似であるハートリーフォック(HF)によって各モノマーの分子軌道・電子密度を互いに環境静電ポテンシャル(ESP)を自己無撞着的(SCC条件)に課しつつ決定する反復計算が必要となります。これにより、各モノマーに対して分極効果が導入されます。モノマーSCCの反復数は30~60回程度ですが、完了後に個々のモノマーに対して通常は2次の摂動論(MP2)で電子相関を取り入れ、HFでは記述されない分散力系の安定化を考慮します。ABINIT-MPのMP2モジュールは通信頻度が少なく、DGEMM処理で高速に実行できます[6]。ダイマー段階では、SCCで決まったESPの下でHF計算が行われ、電子の非局在化効果を取り入れられます。こうして得られたモノマーとダイマーのHFエネルギーのリストから対象系の全電子エネルギーが得られますが、実効的に多体効果が取り込まれていますので、フラグメント分割が妥当であれば精度は問題ありません。MP2計算は個々のダイマーに対しても行い、電子相関エネルギーを加法的に補正します。

FMOの特徴は、計算完了後にフラグメント間の相互作用エネルギー(IFIEないしPIEと呼ばれます)が得られるこ

とで、計算対象の相互作用解析に好適な数値指標となります。これ故に、FMO計算は生物物理や理論創薬の分野で重用されて多種多様な研究成果が上がっています[1,2]。

FMO法では、フラグメント分割に水素原子でのキャップを用いませんが、タンパク質の場合にはペプチド結合部でなく α 炭素とカルボニル炭素の間で切断される点には注意が必要です。また、ESP計算や離れたモノマーの対からなるダイマーの計算には近似を導入して高速化しています。並列化は、フラグメント内とフラグメントのリスト(モノマーとダイマー)の2階層で行われますので、スケラブルな処理が可能です。

FMO計算が可能なプログラムはABINIT-MP[3,4]の他、GAMESS-US[7,8]、PAICS[9]がありますが、スーパーコンピュータでのルーチン的な実行が可能な点ではABINIT-MPにメリットがあります。ABINIT-MPの並列化はflat MPIとOpenMP/MPI混成の両方に対応しており、「富岳」では後者でFMO-MP2ジョブを流すことが通常です。また、3次の摂動計算(MP3)が可能な点も特徴です。FMO-MP3ジョブのFMO-MP2に対する相対コストは、MP3エネルギーに関するテンソル縮約計算がDGEMM主体[10]となっているため、ノード数を十分確保できれば約2倍で済みます。

3. 2020年度の新型コロナウイルスの特別プロジェクト

2020年になって新型コロナウイルス感染症(COVID-19)の状況の厳しさが顕在化し、試行的な運用が始まる4月には「富岳」特別プロジェクト[11]に参画するお話をR-CCSからいただきました(HPCI課題番号g9330001)。ABINIT-MPの当時の最新版は、ポスト「京」プロジェクト-重点課題6で整備していたVer. 1 Rev. 20でした。いざテスト計算を始めてみますと、フラグメント間相互作用エネルギーの成分分解の機能等でMPI通信周りの問題が顕在化し、半月程で修正してVer. 1 Rev. 22に更新し、本計算に供することになりました。このRev. 22は、2020年の6月にVer. 1系の最終版としてリリースされました。

前出の「計算工学」の解説[5]では、事例としてメインプロテアーゼと阻害剤N3の複合体(PDB-ID=6LU7)の多構造サンプルに対するFMO-MP2計算[12]、ならびにスパイクタンパク質の2種の構造(PDB-ID=6VXX&6VYB)のFMO-MP3計算[13]を紹介しました。前者では、古典力場の分子動力学(MM-MD)シミュレーションの軌跡から液滴モデルを千個切り出して計算し、N3とファーマコフォアのアミノ酸残基との相互作用エネルギーを統計的に評価し、単一のPDBの結晶構造での評価の「限界」を示しましたが、主成分解析(PCA)と特異値分解(SVD)を援用したデータ科学的な考察[14]も行いました。メインプロテアーゼのMP2計算は、スーパーコンピュータ利用のタイプとしてはcapacity computingに該当します。一方、後者のスパイクタンパク質のMP3計算は1点構造ですが、3.3千残基・フラグメントの大規模系で演算数の多い使い方ですので

capability computingに当たります。この計算では、受容体結合部位(RBD)が開いた構造では内部の安定化エネルギーが減じており、ヒトのアンジオテンシン変換酵素2(ACE2)への結合により、それが(ある程度)補完されることが示されました。スパイクタンパク質の内部状態の解析の第二報[15]では、テンソル分解の一種であるCP分解を用いて3つのタンパク質鎖間の相互作用に重要な残基群をコンパクト特定することにも成功しています。

新型コロナウイルスのFMO計算のプロジェクトでは、MM-MDシミュレーションの軌跡からの液滴構造群への整形、一連のFMOジョブ投入、結果logファイルからの相互作用エネルギーリスト等の重要情報の抽出、さらにテンソル分解の実行など、一連の入力・出力データの扱いのために、Python系のスクリプトがいろいろ開発されました。これらは、2021年度以降に改良・汎用化され、FMO応用計算の実行の利便性を高めています。

4. Ver. 2系への移行/高速化と大規模系対応

2021年度から「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」(JPHCN)[16]のプロジェクト課題「FMOプログラムABINIT-MPの高速化と超大規模系への対応」が始まり、2023年度も継続しています(jh210036-NAH→jh220010→jh230001)。この研究開発活動は、2020年度の「富岳」での新型コロナウイルスに関する応用計算で認識した2つの問題点に対する改善を図ることを主に意図したものです。問題点の1つ目は、百個~千個の多構造サンプルの扱いが常套となりつつあるため、ノード数が豊かな「富岳」を頂点とするA64FXスーパーコンピュータでの高速化の必要性です。2つ目は、数万フラグメントの大規模系への対応で、Ver. 1 Rev. 22では上記のスパイクタンパク質が結晶構造単体で水和条件無しで扱わざるを得なかったことに対する「忸怩たる思い」から来ています。高速化に関しては、計算化学の研究者だけでなく、学際的な視点から計算機科学の高性能計算(HPC)分野の方々と連携する体制を取りました。応じて、作業のプラットフォームを「富岳」と同系の名古屋大学の「不老」Type Iとしました。

既述の新型コロナウイルスの応用事例で示されたように、これからのFMO計算の方向性が多サンプルの統計的な相互作用解析、数千残基以上の大規模系のルーチン的な扱いとなってVer. 1系とは変わるため、Ver. 2系に開発・リリースの版体系を移行しました。最初のリリースは2021年9月のVer. 2 Rev. 4です[17]。

高速化についてですが、まず小規模なベンチマーク系でのFMO-MP2ジョブのプロファイリングを取りました。その結果、基底関数添字の2電子積分の生成が全コストの約1/2、生成された積分からHF計算を行う処理が同約1/4を占めていることがわかりました(合わせると3/4)。MP2計算の実体は、2電子積分の4段での線形変換(基底関数添字→分子軌道添字)ですのでDGEMM処理が可能であり、積分生成は一度で済むことが多いので相対コストは小さく

なります。そこで、積分生成を高速化の第一対象としました。ABINIT-MPの積分ルーチン群は小原の漸化式アルゴリズムに基づき、4個の軌道タイプの組み合わせに応じて自動コーディングツールによって作成されています。A64FX系の高速化の基本レシピの一つはSIMD化です。OCL指示詞の挿入と一部作業配列のスカラ変数化を、コストが相対的に大きい(ss|ss)~(ss|sd)の15個のルーチンに対して手動で行い、コンパイルオプションも見直しました。その他、プリント量の削減や通信量の低減なども行いました。これらの細かな改良を反映したVer. 2 Rev. 4は、従前のVer. 1 Rev. 22に比べてFMO-MP2計算で1.2~1.4倍の加速をA64FXスーパーコンピュータ上で得ました。

次に大規模系の扱いです。ABINIT-MPのVer. 1系までは、可視化解析を重視して専用のGUIの利用を前提としてきましたが、データの受け渡しをファイル経由としており、対象系が大きくなると容量が増大するだけでなく、FMO計算の実行中に保持するためのメモリの要求も大きくなり、結果的に扱える系のサイズに制限がかかります。実のところ、Ver. 1 Rev. 22では「富岳」の上で5.5千フラグメントが限界となり、スパイクタンパク質の液滴モデルは計算不可でした。そこで、Ver. 2系では可視化解析を諦める決断をし、関連する配列群を削除しました。削除は未だ途上ではありますが、Ver. 2 Rev. 4では1.1万フラグメントのインフルエンザウイルスのヘマグルチニンとFab抗体2つの複合体の液滴モデルをFMO-MP3レベルで扱えるようになりました(フラグメント数で2倍の系)。

ABINIT-MPのVer. 2 Rev. 4の機能では、動的分極率の算定、多層FMO近似による重要領域のみのMP2/MP3計算がサポートされました。また、相互作用エネルギーの機械学習用の記述子データのダンプも対応しました。

Ver. 2 Rev. 4は、「富岳」を頂点とするHPCIの主要拠点にライブラリ(バイナリ)として整備しました。この際、可視化解析を重視する利用者のためにVer. 1 Rev. 22も併存させています。例えば、「富岳」ではSpack環境でどちらのバイナリも使うことが出来ます。

Ver. 2 Rev. 4のリリース後、高速化のための改良をさらに進めました[18]。2電子積分の生成ルーチンに関してはレジスタスピルを低減するためにループ分割も行い、HF計算でのFock行列の構築からif分岐を排除しました。また、モノマーSCCでの反復のAnderson外挿をFockベースから密度ベースに変えるオプションも追加して回数を減らすと共に、2電子積分のバッファリング機能(一度生成した積分をインコアで保持する)も実装しました。これらの改造を反映させた作業版のRev. 6では、A64FX上のFMO-MP2ジョブではVer. 1 Rev. 22比で1.5~2倍の加速となりました(最良のケースでは2.5倍に到達)。しかし、理論ピークFLOPS値に対する効率としては3%程に留まっており、さらなる改善が必要です。

大規模系への対応については発想を変えたアプローチを取り、ABINIT-MP本体ではなく液滴モデルのPDB構造

データを前処理するPythonスクリプトを新規開発しました。このスクリプトには、タンパク質から離れて相互作用の少ない水分子群をクラスタリングし、総フラグメント数を減らす機能があります。また、表面糖鎖とGlnの結合の切断も行えます。この前処理により、スパイクタンパク質(PDB-ID=6XLU)の液滴モデルの総フラグメント数を1.8万から1万にまで実効的に削減でき、「富岳」でのFMO-MP2計算が可能となりました。

ABINIT-MPの次のリリース版はVer. 2 Rev. 8で、2023年6月の完成を予定しています。Rev. 4からの機能面での強化では、相互作用エネルギー解析での成分分解が詳細化され、多層FMO近似領域での励起エネルギーとイオン化エネルギーの算定も可としました。これらの機能はタンパク質やDNAなどの生体分子だけでなく、機能性有機分子の解析にも使えます。HPCI拠点のライブラリとしては、2023年度夏季以降にRev. 4を置き換える形でRev. 8を整備する形になりそうです。

5. Ver. 2系のABINIT-MPを使ったウイルスタンパク質の応用計算

Ver. 2系の改良はJHPCNのプロジェクトで主に進めてきましたが、連動する「富岳」の一般課題で感染症対策の一助を意図した応用計算を、改良されたABINIT-MPを使いながら2021年度から行っています(hp210026→hp220025→hp230017)。複数のテーマが流れていますが、ここではウイルス関係の2つの系列を紹介します。

新型コロナウイルスに関する計算では、野生株と3種の変異株(アルファ株、デルタ株、オミクロン株)のRBDとACE2の複合体(PDB-ID=6M0Jをベースにモデリング)に対するMM-MD/FMO連携の計算を行い、界面付近のRBD-ACE2残基間の相互作用エネルギーをサンプル構造方向にスタックした3階テンソルをCP分解して解析しました。結果logのデータ量は数TBとなるため、スクリプトを用いて準自動的に処理しましたが、特にオミクロン株におけるRBD-ACE2の相互作用様態が野生株に比べて大きく異なることが固有値・重みと固有ベクトルの成分からコンパクトに理解できました。一方、静的な解析では野生株との差が大きく見られたアルファ株[19]はオミクロン株に比べると野生株に近いことも分かりました。スパイクタンパク質(PDB-ID=6XLU&6XM0)については、糖鎖を含めた状態で液滴モデルでのMM-MD/FMOによる本計算を進めているところです(機動的課題(一般)のhp220352枠も利用)。

新型コロナウイルスのパンデミックが起きるまで、最も懸念されていたのは強毒性の(鳥)インフルエンザウイルスですが、現在でも潜在的な危険性は変わっていません。こうしたこともあり、十数年前に神戸大学の田中成典先生らと手掛けたヘマグルチニン(HA)とFab抗体の複合体[10,20-23]をMM-MD/FMO連携シミュレーションで再訪することにしました。具体的には、HA単量体とFabの系

(PDB-ID=1E08), HA3量体と2つのFabの系(PDB-ID=1KEN)を取り上げており, 統計的な相互作用エネルギー解析に加えてCP分解も使って解析しています. これらの抗原-抗体間の相互作用の特徴は「水分子の介入」で, RBD-ACE2の場合とはかなり異なっています(「濡れた界面」でのタンパク質間相互作用とも言えます). 以前のFMO解析では, 計算力の制約からPDBの単一構造の扱いが「事実上の限界」でしたが, 「富岳」の大きな計算力によってMM-MD由来の多構造での解析から「よりリアルな描像」が得られるようになりました. ただ, 重要な残基対, あるいは変異可能性箇所と同定に関しては, 静的構造-動的構造で定性的には一致する結果になっていることは書き添えます. HA-FabとHA3-Fab2の比較では, 後者の方では3体のタンパク質間相互作用があるため, より複雑ですがCP分解で理解できるものと考えています.

6. 粗視化シミュレーションとの接続

ここまでは, FMO計算をタンパク質の相互作用解析に応用する例を挙げてきましたが, 方向を変えて粗視化シミュレーション手法の1つである散逸粒子動力学(DPD)の粒子間の有効相互作用(χ)パラメータをFMO計算によって決定[24,25]するFMO-DPDについて記したいと思います. χ パラメータの算定はワークフロー化されたFCEWS(FMO-based Chi-parameter Evaluation Workflow System)としてまとめられており, Pythonベースのスクリプトコマンドによって(準)自動的に行えます. ここで, 計算コストを決めているのは粗視化セグメントあたり2千配置分行われるFMO計算です. 2成分系でも自身の対を含むために6千回のジョブが必要なため, 多成分系では十万を超えることがあります. FMO-DPDシミュレーションは, これまで脂質膜/ベシクル[26-29]や電解質膜[30], あるいはペプチド[31]に対して成功裏に適用されました. また, 粗視化構造を原子レベルに復元するリバースマッピングのユーティリティDSRMS(DPD-based Structure Reverse Mapping System)も整備しつつあります. さらに, (株)JSOLが提供しているJ-OCTA[32]にFCEWSがバンドルされていることもあり, 産業界でも利用が広がり始めています.

こうした状況も意識した上で, 「富岳」のcapacity computing力に期待して2021年度の「富岳」の機動的課題(一般)に産学連携のメンバ構成で申請して採択されました(11月からの1年間のプロジェクト: hp210261). 産業界からは, (株)JSOLを幹事に(株)ブリジストン, (株)東レ, 日本触媒(株), 東洋紡(株)が参画し, 月に一度のZoomオンラインでの会合を行いつつ進めました. 前半は「富岳」でのFCEWS利用への慣れの期間とし, 後半は各社独自のテーマで実施しましたが, 2022年夏季からの「富岳」のノード数制限によるジョブ待ち行列の延伸は深刻で, 残念ながら思うようには進められませんでした. ただ, 活動を通じてコミュニティが形成されたこともあり, その発展も意図して2023年度の「富岳」の産業課題に申請して採択さ

れました(hp230016). FCEWSの改良も進めており, 機械学習による相互作用エネルギーの予測によって必要なジョブ数を削減する前処理システムを開発し, 従来の1/2~1/3程度で済むようになりましたので, 「富岳」での χ パラメータ算定に要する時間も減り, 応用展開が加速するものと期待しています.

7. まとめと今後

本稿では, FMOプログラムABINIT-MPに関わる2020年度からの話題をスーパーコンピュータ「富岳」に関連してまとめてみました. ABINIT-MP本体の改良と機能強化は今後も続けていく必要があり, ポスト「富岳」を睨めばGPU(などの演算加速器)への対応も不可避ですので, そのための「助走」を始めたところです. 応用計算では, MM-MD/FMO連携シミュレーションの常態化は自明ですので, ジョブの自動投入と回収, そしてデータ科学的な処理のためのスクリプトツールをさらに整備する予定です. また, 水のクラスタリング処理後も数万フラグメントに達する膜タンパク質の液滴モデルの扱いも依然として課題です. FMO-DPD系では, 機械学習の導入と共に生体分子への適用を広げたいと考えています.

8. 謝辞

2020年度からのABINIT-MPの「富岳」での利用は, HPCI課題{g9330001, hp210026, hp210261, hp220025, hp220352, hp230016, hp230017}に依ります. また, 高速化と大規模系対応に関連してはJHPCN課題{jh210036-NAH, jh220010, jh230001}の枠で進めました. 富士通SS研の「A64FXシステムアプリ性能検討ワーキンググループ」の活動とも重なりました. 資金面では, 立教大学SFRと企業様からの指定寄付や公益的共同研究からのサポートを得ています.

2020年度の「富岳」の新型コロナウイルスの特別プロジェクトは, 田中成典先生, 大阪大学の福澤薫先生らとのコラボレーションで進めました. 2021年度からの「富岳」でのタンパク質の応用計算でのMM-MDシミュレーションの実施は, 慶應義塾大学の泰岡顕治先生, 平野秀典先生, 山本詠士先生にお願いしています. 最後に, 東京大学での数々のプログラム開発プロジェクトの中でABINIT-MPを長年ご支援いただいた加藤千幸先生, 吉村忍先生, 中島研吾先生にもこの場を借りて深謝します.

参考文献

- [1] "The Fragment Molecular Orbital Method: Practical Applications to Large Molecular Systems", ed. D.G. Fedorov and K. Kitaura, CRC Press (2009).
- [2] "Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method - Enhanced Performance and Applicability", ed. Y. Mochizuki, S. Tanaka and K. Fukuzawa, Springer (2021).
- [3] S. Tanaka et al., "Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems",

- Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16** (2014) 10310-10344.
- [4] Y. Mochizuki et al., "The ABINIT-MP Program" in Ref. [2], pp. 53-67.
- [5] 望月祐志 他, "新型コロナウイルスのタンパク質に関するフラグメント分子軌道計算の事例", *計算工学*, **26** (2021) 4204-4209.
- [6] Y. Mochizuki et al., "Large scale FMO-MP2 calculations on a massively parallel-vector computer", *Chem. Phys. Lett.*, **457** (2008) 396-403.
- [7] G. M. J. Barca et al., "Recent developments in the general atomic and molecular electronic structure system", *J. Chem. Phys.*, **152** (2020) 154102-1-26.
- [8] D. G. Fedorov, "The fragment molecular orbital method: theoretical development, implementation in GAMESS, and applications", *WIREs Comput. Mol. Sci.*, (2017) e1322-1-17.
- [9] T. Ishikawa et al., "Theoretical study of the prion protein based on the fragment molecular orbital method", *J. Comput. Chem.*, **30** (2009) 2594-2601.
- [10] Y. Mochizuki et al., "Large-scale FMO-MP3 calculations on the surface proteins of influenza virus, hemagglutinin (HA) and neuraminidase (NA)", *Chem. Phys. Lett.*, **493** (2010) 346-352.
- [11] <https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/topics/fugaku-coronavirus/>
- [12] R. Hatada et al., "Statistical interaction analyses between SARS-CoV-2 main protease and inhibitor N3 by combining of molecular dynamics simulation and fragment molecular orbital calculation", *Appl. Phys. Express*, **14** (2021) 027003-1-5.
- [13] K. Akisawa et al., "Interaction analyses on SARS-CoV-2 spike protein based on fragment molecular orbital calculations", *RSC Adv.*, **11** (2021) 3272-3279.
- [14] S. Tanaka et al., "Dynamical Cooperativity of Ligand-Residue Interactions Evaluated with the Fragment Molecular Orbital Method", *J. Phys. Chem. B*, **125** (2021) 6501-6512.
- [15] K. Okuwaki et al., "Collective residue interactions in trimer complexes of SARS-CoV-2 spike proteins on the basis of fragment molecular orbital method", *Appl. Phys. Express*, **15** (2021) 017001-1-9.
- [16] <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>
- [17] 望月祐志 他, "FMOプログラムABINIT-MPの整備状況2021", *J. Comput. Chem. Jpn.*, **20** (2021) 132-136.
- [18] 望月祐志 他, "FMOプログラムABINIT-MPの整備状況2022", *J. Comput. Chem. Jpn.*, in press.
- [19] K. Akisawa et al., "Fragment Molecular Orbital Based Interaction Analyses on Complexes Between SARS-CoV-2 RBD Variants and ACE2", *Jpn. J. Appl. Phys.*, **60** (2021) 090901-1-5.
- [20] T. Iwata et al., "Theoretical analysis of binding specificity of influenza viral hemagglutinin to avian and human receptors based on the fragment molecular orbital method", *Comput. Bio. Chem.*, **32** (2008) 198-211.
- [21] K. Takematsu et al., "Possibility of Mutation Prediction of Influenza Hemagglutinin by Combination of Hemadsorption Experiment and Quantum Chemical Calculation for Antibody Binding", *J. Phys. Chem. B*, **113** (2009) 4991-4994.
- [22] A. Yoshioka et al., "Prediction of probable mutations in influenza virus hemagglutinin protein based on large-scale ab initio fragment molecular orbital calculations", *J. Mol. Graph. Mod.*, **30** (2011) 110-119.
- [23] A. Yoshioka et al., "Antigen-antibody interactions of influenza virus hemagglutinin revealed by the fragment molecular orbital calculation", *Theor. Chem. Acc.*, **130** (2011) 1197-1202.
- [24] K. Okuwaki et al., "Fragment Molecular Orbital-based Parameterization Procedure for Mesoscopic Structure Prediction of Polymeric Materials", *J. Phys. Chem. B*, **122** (2018) 338-347.
- [25] 奥脇弘次 他, "フラグメント分子軌道(FMO)法を用いた散逸粒子動力学シミュレーションのための有効相互作用パラメータ算出の自動化フレームワーク", *J. Comput. Chem. Jpn.*, **17** (2018) 102-109.
- [26] H. Doi et al., "Dissipative particle dynamics (DPD) simulations with fragment molecular orbital (FMO) based effective parameters for 1-Palmitoyl-2-oleoyl phosphatidyl choline (POPC) membrane", *Chem. Phys. Lett.*, **684** (2017) 427-432.
- [27] 土居英男 他, "散逸粒子動力学におけるシリカー脂質膜界面付近の水の取扱い", *J. Comput. Chem. Jpn.*, **16** (2017) 28-31.
- [28] 新庄永治 他, "X線小角散乱と散逸粒子動力学法を用いた脂質膜およびベシクル形成メカニズムの解明", *J. Comput. Chem. Jpn.*, **17** (2018) 172-179.
- [29] H. Tanaka et al., "Self-Degradable Lipid-Like Materials Based on "Hydrolysis accelerated by the intra-Particle Enrichment of Reactant (HyPER)" for Messenger RNA Delivery", *Adv. Funct. Mater.*, **30** (2020) 1910575-1-17.
- [30] K. Okuwaki et al., "Theoretical Analyses on Water Cluster Structures in Polymer Electrolyte Membrane by Using Dissipative Particle Dynamics Simulations with Fragment Molecular Orbital Based Effective Parameters", *RSC Adv.*, **8** (2018) 34582-34595.
- [31] K. Okuwaki et al., "Folding simulation of small proteins by dissipative particle dynamics (DPD) with non-empirical interaction parameters based on fragment molecular orbital calculations", *Appl. Phys. Express*, **13** (2020) 017002-1-4.
- [32] <https://www.jsol-cae.com/product/material/jocta/>

BCMを用いた複雑形状を有する 構造物の耐風設計のための流れ場解析

The Analysis of Flow Field for Wind Resistance Design
of Structures which have Complex Shapes using BCM

長尾悠生¹⁾, 田村哲郎²⁾, 河合英徳³⁾, 丸山勇祐⁴⁾

Yuki NAGAO, Tetsuro TAMURA, Hidenori KAWAI and Yusuke MARUYAMA

- 1) 工修 前田建設工業 ICI総合センター (〒302-0021 茨城県取手市寺田5270, E-mail: nagao.yu@jcity.maeda.co.jp)
2) 工博 東京工業大学 環境・社会理工学院 名誉教授 (〒152-8550 東京都目黒区大岡山2-12-2, E-mail: tamura.t.ab@m.titech.ac.jp)
3) 工博 お茶の水女子大学 基幹研究院自然科学系 准教授 (〒112-0012 東京都文京区大塚2-1-1, E-mail: kawai.hidenori@ocha.ac.jp)
4) 工博 前田建設工業 ICI総合センター (〒302-0021 茨城県取手市寺田5270, E-mail: maruyama.y@jcity.maeda.co.jp)

In this study, we show the results of applying a calculation method using a fully orthogonal lattice system (CUBE) based on Building Cube Method to building structure model with complex shapes (setback and eccentricity at the top). In addition, the application results of a simple prismatic structure model under the condition that a rotation angle of 15 degrees were given to the inflow wind, which was performed as the first stage of application, are also described.

Key Words : CUBE, Building Cube Method, Setback, Eccentricity, Prismatic Structure, 15degrees

1. はじめに

近年の建設技術の向上に伴い、国内の建築物および構造物の高層化・長大化が進んでいる。このような建築物・構造物においては、風荷重が卓越するケースが多く、CFDを用いた流れ場解析の実施により建物表面に作用する風圧力を推定し、その結果を元に外装材風荷重等の検討を行う必要がある。

複雑形状を持つ建物の解析を行う際には、建物周辺の流れ場を再現するために、メッシュ生成に多大な時間と労力を要することが問題であった。この問題に対しJansonらは階層型直交格子ソルバーCUBE(Complex Unified Building cubE)[1]を開発し、周辺流れ場を再現した。CUBEは、キューブとそれらを分割するセルと呼ばれる要素から成る完全直交格子システムを持ち、メッシュの自動生成が可能・高い並列化効率を得ることができる等の特徴を持つ為、複雑形状を持つ高層・大規模建築物の解析への応用が期待されている。

筆者らはこれまで、本手法を用いた単純角柱構造物の解析実施による適用検証および複雑形状を持つ高層・大規模建築物の解析による流れ場の確認等を行ってきた。本研究では、本計算手法の適用検証として行った、流入角度15度の条件下での単純角柱構造物(1:1:3)の計算と、本計算手法の応用として取り組んだ、上部に複雑形状(セットバック・偏心)を持つ高層建築物モデルの計算・分析結果について報告する。

2. 目的

本研究では、CUBEの適用検証及び応用解析として行った、流入角度15度の条件下における単純角柱構造物と複雑形状を持つ建築物モデルの計算を実施し、各計算ケース周辺の流れ場の確認を行う。角柱構造物モデルについては、平均・変動風圧係数分布を作成し、既往の論文結果との比較により、分布の対応を確認する。複雑形状モデルの計算においては、各層での渦構造や振動特性が異なることが想定されるため、側面や後流での流れ場を確認し、各層で比較、結果の差異を確認する。上記2点を確認するために、モデル周辺に測定点を配置し、時系列データの取得および分析を行う。各計算モデルと測定点の配置概要を図1に示す。複雑形状モデルは1/300スケール、単純角柱モデルは1/400スケールで作成した。本計算手法では高い並列化効率実現のために完全な直交格子を用いており、モデルが回転している・複雑形状を有する等の場合は、モデルとメッシュ境界が必ずしも一致しないことにより、モデル境界面で不自然な挙動が発生するという問題がある。そこで本手法ではモデル境界に埋め込み境界法(Immersed Boundary Method)[2]を用いることで、この問題を回避している。モデル表面付近は埋め込み境界法に基づく強制外力の影響を強く受けることが考えられるため、測定点は建物モデル境界から数セル分離した位置に配置している。

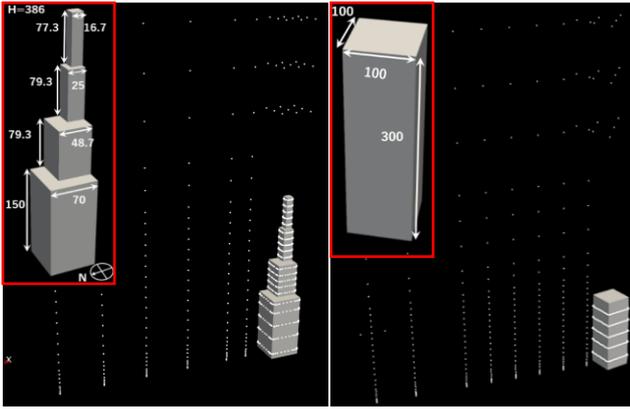


図-1 解析モデル概要と測定点配置 (寸法単位: mm)
(左: 複雑形状モデル・右: 15度角柱(1:1:3)モデル)

3. 計算の概要

各計算ケースの計算条件とメッシュ概要を表1、図2に示す。計算領域の寸法については、CUBEが2の累乗則に基づいて格子分割を行うため、各辺の長さが2の累乗数となるよう設定した。図2に示す格子1つがキューブであり、1つのキューブ内には、16×16×16個のセルが充填されている。複雑形状モデル周辺の計算格子については各層で一様なメッシュ分割とし、後流においても渦構造の様子を詳細に確認するため、同様に高解像度のメッシュ分割としている。15度角柱については図2下方側面において剥離せん断層が広がることが想定されるため、側面の高解像度領域を拡張したメッシュ分割としている。複雑形状モデルの解析における流入風については、今回は第一段階の取り組みとして、各層の渦発生周期及びピークが明瞭に現れやすい様流での計算としている。

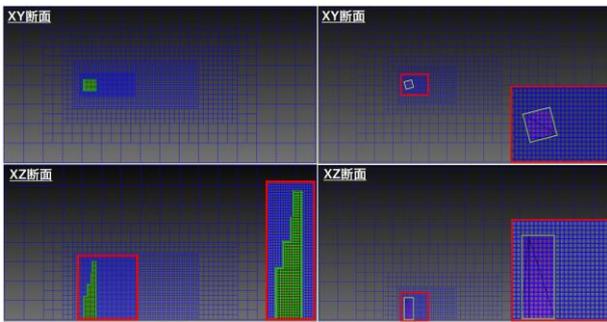


図-2 計算メッシュ概要
(左: 複雑形状モデル・右: 15度角柱モデル)

表-1 各ケースの計算条件

| | 複雑形状モデル | 15度角柱 |
|---------|---|---------------------------|
| 計算領域 | 1.024×2.048×1.024(m) | 2.048×4.096×2.048(m) |
| 最小セルサイズ | 0.50(mm) | 1.0(mm) |
| 格子数 | 3億2000万 | 7200万 |
| 格子分割 | 1層目: B/140, 2層目: B/97 3層目: B/50, 4層目: B/34 | B/100 |
| U, dt | 10(m/s) / 2.0d-5(s) | 10(m/s) / 2.5d-5(s) |
| 空間離散化 | 二次中心差分(移流項目_風上0%) | 二次中心差分(移流項目_風上5%) |
| 乱流モデル | - | Dynamic Smagorinsky model |
| 境界条件 | 流入: PLUG / 流出: CONV | 流入: 流入変動風(III) / 流出: CONV |
| | 側面・上面: SLIP / 床面: NOSLIP | |
| 時間積分 | Crank-Nicolson法 | |
| 圧力ソルバー | Solver: MGV / Iteration number: 30 / Pressure Convergence: 1.0d-5 | |

4. 計算結果

4-1. 15度角柱モデルの計算結果の可視化・分析

本節では、本計算手法の適用検証として行った、流入角度15度の条件下での単純角柱構造物の計算及び可視化・分析結果について述べる。風圧係数の面分布については図3左に示すような面1~4を設定し、風圧係数分布曲線については図3右に示すように、各高さでの分布曲線を作成した。測定点については前述のIBMの導入による影響を避けるため、角柱表面よりやや離れた位置に設置し、一面につき21点(一層で84点)配置している。

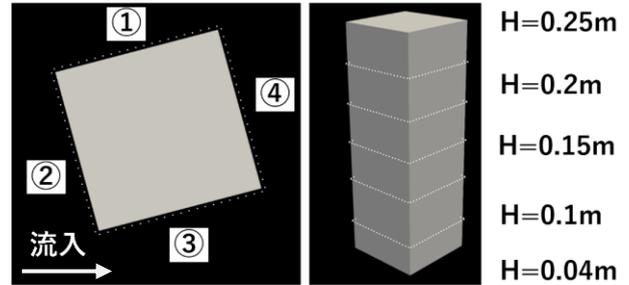


図-3 15度角柱の各面設定と各層の測定点概要

4-1-1. 15度角柱モデルの三次元渦構造の可視化

まずは、15度角柱の三次元渦構造の可視化結果について述べる。図4に、各側面における圧力等値面を示す。下図左の面3においては、面2から流れが大きく剥がれ、面1前縁上部より逆円錐状の渦構造が形成されていることが確認される。また、その渦構造が面3下方に降下し、前縁下方にも比較的強い圧力分布が出ていることで、面3上下端部にて局部負圧が発生している。下図右の面1においては前縁上部の表面付近で剥離が起こり、面1下流付近で流れの再付着が起こる様子も確認され、隅角部での剥離性状の違いにより、各側面で異なる渦構造が発生することを確認した。

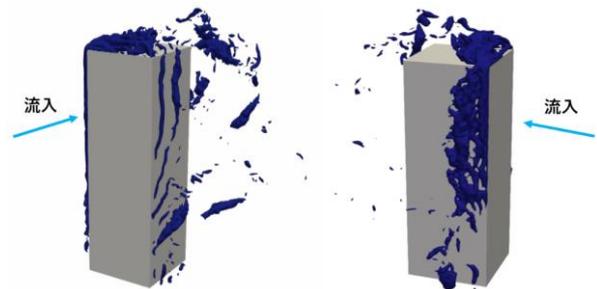


図-4 15度角柱の圧力等値面
(左: 面3分布 右: 面1分布)

4-1-2. 15度角柱の風圧係数分布曲線及び面分布

本節では、角柱表面及び各高さでの風圧係数分布の分析結果について述べる。風圧係数分布曲線については、実時間10分間分の計算を実施し、計算安定性に欠ける計算初期2分間分の時刻歴データを棄却して作成した。

図5・6に、各高さでの平均・変動風圧係数分布曲線図を示す。平均風圧係数分布曲線については、CFD適用ガイド([3]日本建築学会出版)に記載のベンチマーク問題の結果と、既往の研究論文(丹原ら[4]2018)の解析及び風洞実験結果・CFD適用ガイド許容範囲との比較を行っている。なお、ここでは代表例として、高さ0.15m(0.5H)、0.25m(0.83H)での分布曲線(図中青線)を示している。図5左のベンチマーク問題との比較では、各高さ・各面で分布曲線が高精度で一致する結果となった。これまで、CUBEを用いた計算による角柱の分布曲線分析においては、モデル境界にIBMを用いている影響で、角柱隅角部では表面圧力の再現性に乏しいことが課題となっていたが、今回の計算結果では面1表面付近で発生する局部負圧等、当該部分における圧力性状を捉えることができていた。これは、剥離せん断層の広がりやを考慮して、側面の高解像度領域を広くとったことが関係していると考えられる。既往論文における解析・風洞実験結果についても同様に、概ね一致する結果となることを確認した。変動風圧係数分布については、三次元圧力等値面の分析結果で述べたように、面1表面付近での剥離により発生する負圧、面3前縁から剥離により生じる逆円錐渦の後方回り込みによって発生すると考えられる、面4での局部負圧の様子等、特徴を捉えることができていた。しかし、本計算でモデル境界にIBMを用いている関係で測定点を表面から離して配置しているため、変動値についてはこの距離の影響を強く受けることが考えられ、実際の分布と比較して過大評価となっている可能性がある。この問題については今後、測定点の設置距離と表面風圧係数分布との関係を明らかにすることで、その影響を確認する必要がある。

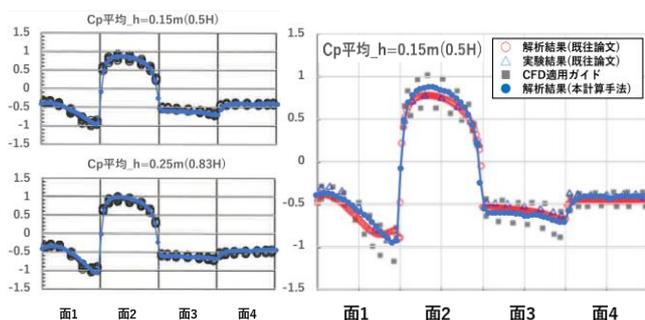


図-5 平均風圧係数分布_既往実験・解析結果との比較

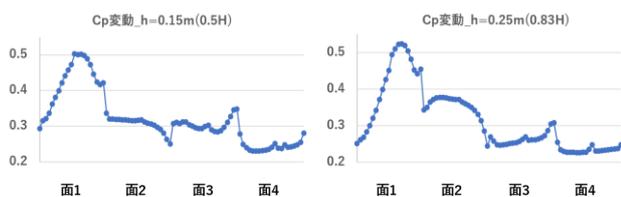


図-6 変動風圧係数分布曲線

(左 : 0.15m(0.5H), 右 : 0.25m(0.83H))

次に、平均・変動風圧係数面分布の分析結果について述べる。図7に、各面での平均・変動風圧係数分布を示す。平均風圧係数においては圧力等値面の分析結果で述べたように、面1表面付近での流れの剥離により前縁で大きな負圧が発生している様子や、面3上部での逆円錐状による負圧発生と、それが下方で再び大きな負圧として現れている様子等、各面での剥離性状の違いにより表面圧力の分布性状が異なることを確認した。また、背面においては面3で大きく剥離して形成された逆円錐状渦構造が後方に回り込みを起すことにより発生する、負圧分布が確認できる。変動風圧係数においても同様に、面1前縁上部および、面3前縁上下端部での変動値が大きいことを確認した。なお、面1の負圧の大きい位置が後方にややずれているように見えるが、これは圧力等値面の分析で述べたように、面1側後方で起こる再付着による影響と考えられる。

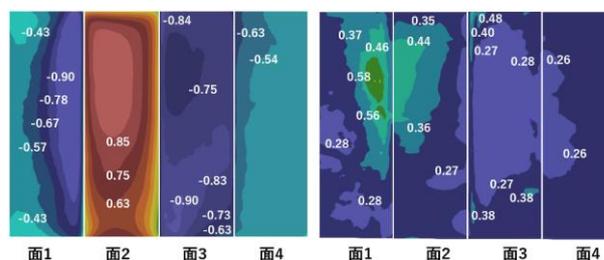


図-7 15度角柱の風圧係数面分布

(左 : 平均風圧係数・右 : 変動風圧係数)

4-2. 複雑形状モデルの計算結果

本節では複雑形状モデルの計算結果より、各層における流速及び圧力分布を確認し、後流の渦構造について検討する。また、15度角柱と同様、時系列データ分析も行う。図8に示すようなLayer1~4を設定し、各層における流速・圧力分布の確認と分析を行った。

4-2-1. 各層の流速・圧力分布の可視化・分析

図9・10に、各層のX方向流速分布と圧力等値面の瞬間値の分布を示す。流速分布においては、後流で周期的な流れ場の形成が確認され、各層においてその周期が異なる様子が確認された。また、side1の方向において、負の流速域が後方に伸びる様子が比較的頻繁に確認され、これは各層がside1側に偏心しているために側面が一致しており、各高さで周期が一致しやすいことが原因と考えられる。一方、side2では平面が大きく変化するlayer2・3において、側面近傍に負の流速域が滞留する様子が確認された。これは平面変化が起こる部分で発生する渦構造に起因する、変動圧力によるものと考えられる。圧力等値面においては、各層の前縁から流れが剥離し、負圧のバブルを形成していることが確認できる。この渦構造についても周期性が確認されるが、

各層において渦放出周期は異なっている。この周期性の違いが、建物全体として制振側に働く可能性があると考えられる。この影響についての詳細な検討は、測定点より取得した圧力の時刻歴データから周期性を確認し、各層でのストローハル数の比較等により明らかにする予定である。

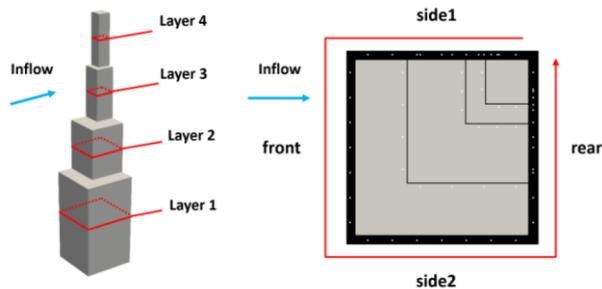


図-8 各層代表レイヤーの設定とモデル測定点の配置

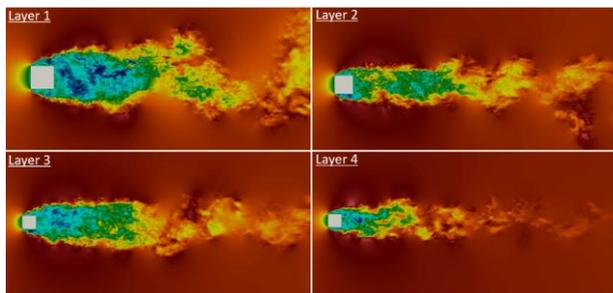


図-9 各層のX方向流速の分布

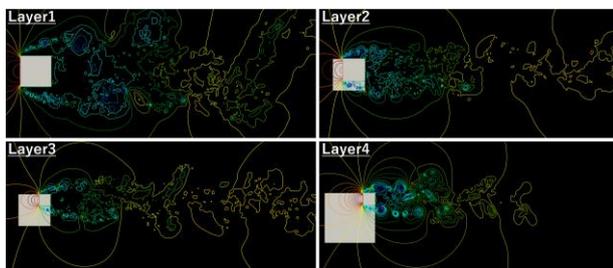


図-10 各層の圧力等値面

4-2-2. モデル周辺の三次元渦構造の可視化・分析

次に、モデル周辺の三次元渦構造を確認するために、三次元圧力等値面の可視化を行った。図11に、ある瞬間での三次元圧力等値面の可視化結果を示す。左図の平面変化がある側面では、最下層でチューブ状の渦構造が発生し、後方へ流下していく様子が確認されるが、2層目以降では別の渦構造が生成されているように見える。対して右図の一樣側面を持つ側では、各層で同一の渦構造が発生しているように見える。これは、モデル上部が偏心していることにより、各層で側面位置が同じである面・異なる面があるためと考えられる。side2では各高さで側面が一致せず、剥離のタイミングがずれることで明確な渦構造が確認できないが、side1においては、剥離のタイミングが一致しやすいことが考えられる。

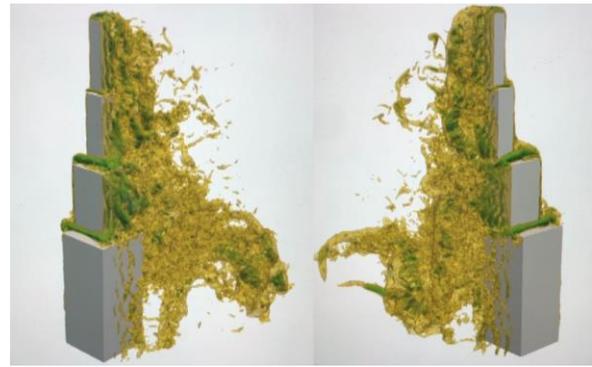


図-11 三次元圧力等値面(左:side2, 右:side1)

4-2-3. 時系列データの分析_風圧係数分布曲線

本節では、測定点より得られた時系列データの分析結果について述べる。図12・13に、各層での平均・変動風圧係数分布曲線を示す。各分布曲線は実時間8分間分の計算を行い、計算安定性に欠ける計算初期の2分間分の時刻歴データを棄却して作成している。平均風圧係数分布については、正面での正圧や背面の圧力回復等、各層で概ね同様の傾向が確認できるが、2層目以降の側面2において、反対側の側面1と比較して負圧が若干強く出ている。これは、前述の平面変化が起こる部分において発生する変動圧力の影響によるものと考えられる。変動風圧係数分布については、平均風圧係数分布においても確認された両側面の非対称性がより顕著に表れている。Layer2においては、背面の分布が他の高さ異なる分布となっているが、これはLayer2が、平面が大きく変化する階層に挟まれているため、各平面変化部分で発生する変動圧力が当該高さでの背面圧力性状に干渉し、影響を与えているものと考えられる。

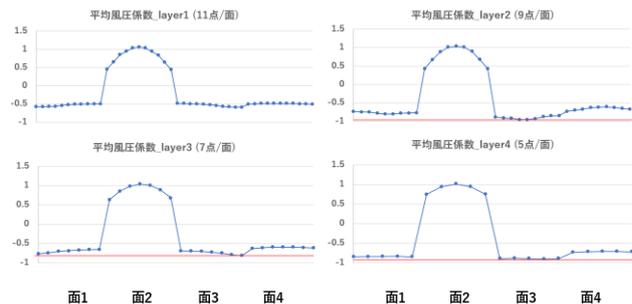


図-12 各層の平均風圧係数分布曲線

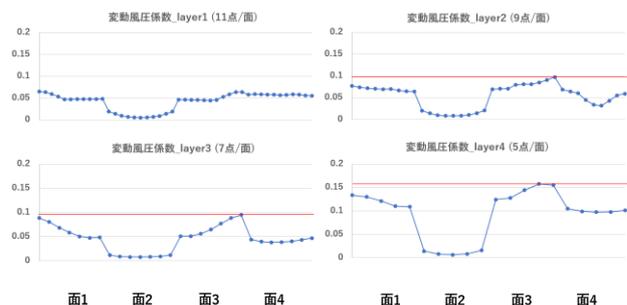


図-13 各層の変動風圧係数分布曲線

5. 結論

本研究では、BCM法に基づく完全直交格子システムを持つシミュレーションフレームワーク(CUBE)を用いた計算手法の適用検証として、15度の流入角度を与えた条件下での単純角柱構造物の解析、本計算手法の応用として上部に複雑形状(セットバック及び偏心)を持つ構造物の解析を行った。以下に各解析ケースの計算結果の可視化・分析、時系列データ分析により得られた知見等について述べる。

(1) 15度角柱の圧力等値面の可視化により、各面付近の圧力性状の確認を行い、各側面隅角部での剥離や発生する渦構造の違いを明らかにした。面1前縁においては、角柱表面付近で流れの剥離が起り、面後方で再付着が起こる様子を確認した。反対の面3においては、流れが大きく剥がれることで逆円錐状の渦構造が形成され、面3上下端部において局部負圧が発生する様子が確認された。

(2) 15度角柱周辺に設けた測定点より取得した時刻歴データ及び計算結果の可視化により、角柱表面での平均・変動風圧係数の分布曲線・面分布図を作成し、結果の分析を行った。平均風圧係数分布曲線については、CFD適用ガイドのベンチマーク問題での結果及び既往の解析・風洞実験と良く対応することを確認し、側面解析領域の広範囲を高解像度分割としたことで、側面隅角部における再現性が増す可能性があることを示した。平均風圧係数面分布においては、面1と面3での剥離性状の違いによる渦構造の差異、面3で発生する逆円錐状渦による上下端部の局部負圧、その巻き込みにより背面上部に発生する負圧等、特徴を捉えていることを確認した。変動風圧係数分布曲線・面分布については平均分布と同様、両側面で発生する渦構造に起因する局部負圧の影響等の特徴を捉えることができていたが、IBM導入による測定点配置距離の問題で、全体的に値が過大評価となっている可能性があるため、測定点の配置距離と分布性状の関係について、今後詳細な検討を行う必要があると考えられる。

(3) 上部に複雑形状を有する構造物モデルの解析を実施し、各層での流速・圧力の分布性状、測定点より取得した時系列データ分析結果の比較を行った。各層中心断面(layer1~4)での流速・圧力分布図の確認においては、各層後流で異なる周期を持つ渦構造の発生、剥離せん断層の揺らぎを確認した。流速分布については、一様側面を持つside1での負の流速域が後方に伸びる様子が確認され、各高さにおける側面が一致するため、流れの周期が一致しやすい可能性があることを示した。反対に平面形状が

異なるside2においては、表面付近に負の流速域が滞留する様子が、断面が著しく変化した階層直上にあるlayer2とlayer3の平面分布において確認され、平面変化部分において複雑な渦構造の発生による変動圧力の影響が関係している可能性を示した。圧力分布図については、正面隅角部から流れが剥離することにより、各層で異なる周期を持った負圧のバブルが放出される様子を確認し、各層の形状の違いによる渦放出周期のずれが、建物全体として制振側に作用する可能性があることを示した。この影響については、測定点より取得した圧力の時刻歴データから周期性を確認し、各層でのストローハル数を比較すること等により今後明らかにする必要がある。

(4) 複雑形状モデルの圧力等値面の可視化を行うことにより、複雑モデル周辺における三次元渦構造の分析を行った。各層で側面が一致しているside1においては、ある瞬間に高さ方向に一貫した渦構造が生成されることが確認できるのに対し、平面変化により各高さで側面が一致しないside2においては、高さ方向で一貫した渦構造が生成されないことを確認した。これより、各層の平面形状の違いによる影響だけではなく、上部の偏心により後方に生成される渦構造が両側面で非対称となり、後方の流れ場をより複雑にしている可能性がある。

(5) モデル周辺に設置した測定点より取得した時系列データの分析により、各層の中心高さにおける平均・変動風圧係数分布曲線の作成・比較を行った。平均風圧係数分布曲線においては、各層で概ね一般的な角柱構造物と同様の分布となるが、前述の平面形状変化部分において発生する変動圧力の影響によりside2の負圧が若干大きく出ており、両側面で非対称となることを確認した。特にlayer2においてはその非対称性が比較的顕著に表れ、平面が変化する部分における変動圧力の影響を受けているものと考えられる。変動風圧係数分布曲線においては前述の傾向がより顕著に表れ、layer2背面のみ他の層と異なる分布となっていることを確認したが、これは平面形状が著しく変化する階層に挟まれていることにより、その部分から発生する複雑な渦構造に起因する変動圧力の影響を上下から受けていることが原因であると考えられる。

謝辞:

本研究は令和4年度HPCIシステム利用研究課題(課題番号: hp210262)を通じて、国立大学法人東京工業大学との共同研究にて、理化学研究所が提供するスーパーコンピュータ富岳の計算資源提供を受け、実施したものである。

6. 今後の予定

本研究における今後の予定・課題について述べる。
15度角柱については、風圧係数分布曲線及び面分布の分析でも述べたように、角柱表面近傍がIBMに基づく強制外力の影響を受けないように、角柱表面から距離をとって配置している。そのため、風圧係数分布、特に変動風圧係数分布においては、測定点の配置距離によって値が大きく変化する可能性が考えられる。そのため、角柱表面から計算メッシュ何格子分離して測定点を配置するかをパラメータとして、取得した時系列データより作成した分布曲線の変化を確認する等の検討が必要になると思われる。複雑形状モデルの計算においては、上部形状・偏心の影響をより詳細に確認するため、これらをパラメータとしてモデルを数パターン作成して結果の比較を行い、モデル周辺の流速・圧力場の差異を確認する必要がある。圧力変動による振動の有無に関する検討については、各層の渦放出周期の違い及び平面変化部分における後流での縦渦の干渉等不明な点が多いため、時系列データ波形のスペクトル分析等を行うことにより、各層の周期性を確認する予定である。また、本研究では第一段階として一様流を使用しているため、今後は自然流に近い乱流中での計算を実施する予定である。

参考文献

- [1] Niclas Janson, Rahul Bale, Keiji Onishi, and Makoto Tsubokura: *CUBE: A scalable framework for large scale industrial simulations_ International Journal of High Performance Computing Applications 33(100)_Dec 2018*
- [2] Duong Dung, Tetsuro Tamura, Hidenori Kawai, Bale Rahul, Keiji Onishi, Makoto Tsubokura: *BCM-LES of Pressure Fluctuations on 2D Square Cylinder with IBM-Based Treatments*
- [3] 建築物荷重指針を活かす設計資料2—建築物の応答・風荷重評価/CFD適用ガイド—：日本建築学会，p.384-387, Feb 2017.
- [4] 丹原 千里, 小野 佳之, 飯田有未, 田村 哲郎：LES細密計算に基づく三次元角柱の局部負圧特性とピーク評価に関する研究, 第25回風工学シンポジウム(2018)

Safely evaluation of indoor spaces through simulation of CO₂ exhalation and ventilation

Rahul Bale ^{1) 2)} Chung-Gang Li ³⁾ Kazuhide Ito ⁴⁾ and Tsubokura Makoto ^{5) 6)}

¹⁾Graduate School of System Informatics, Kobe University (Kobe, Japan.)

²⁾RIKEN Center for Computational Science (Kobe, Japan, E-mail: rahul.bale@riken.jp)

³⁾Department of Mechanical Engineering, National Chung Hsing Univeristy (Taiwan. , E-mail: cgli@gs.ncku.edu.tw)

⁴⁾Faculty of Engineering Sciences, Kyushu University (Fukuoka, Japan. , E-mail: ito@kyudai.jp)

⁵⁾RIKEN Center for Computational Science (Kobe, Japan.)

⁶⁾Graduate School of System Informatics, Kobe University (Kobe, Japan. , E-mail: mtsubo@riken.jp)

The importance of indoor space safety has been highlighted due to the COVID-19 pandemic. Assessing indoor environments' safety by directly measuring human-generated air pollutants like CO₂ has been suggested as one of methods to analyze indoor safety. This is assuming a strong correlation between CO₂ levels and the presence of infectious pathogens. This study examines the accuracy of this assumption by conducting a comparative analysis of infection risks in indoor settings using CO₂ dispersion simulations and discrete droplet dispersion simulations.

Key Words : COVID, Indoor Air contamination, Pathogen transmission

1. INTRODUCTION

Airborne spread of virus-containing sputum droplets can lead to airborne disease transmission, posing a significant threat to public health. In recent decades, various highly infectious and communicable diseases have emerged, such as Severe Acute Respiratory Syndrome (SARS), H1N1 influenza, and Coronavirus Disease 2019 (COVID-19). Since its appearance, COVID-19 has quickly become a lethal pandemic, causing hundreds of millions of infections and millions of deaths (source: JHU COVID-19 resource). Moreover, the indirect impact of the pandemic due to job loss and major economic contraction is hard to measure. The evidence on COVID-19 so far indicates that potential modes of SARS-CoV-2 transmission include respiratory droplets, direct person-to-person contact, and contact with surfaces (fomite mode of transmission). Direct person-to-person transmission and fomite transmission can be reduced through proper hygiene practices, but controlling airborne transmission is much more difficult. As a result, airborne transmission is probably the main reason for COVID-19 becoming a global pandemic (Center for Disease Control, CDC, USA). The use of masks has been widely recognized and adopted as an effective way to limit airborne transmission. The importance of indoor ventilation and air circulation in reducing airborne transmission cannot be emphasized enough. A well-mixed indoor environment with a high air exchange rate per person can significantly improve indoor space safety. In light of this, a practical method for evaluating an indoor space's ventilation system is by measuring the CO₂ level within the space. This makes it easier for policymakers to issue guide-

lines for CO₂ levels in public indoor spaces. While measuring CO₂ levels and providing guidelines for them is convenient, it is uncertain whether the infection risk in indoor spaces due to airborne pathogens is strongly correlated with CO₂ levels. To this end, in this work, we conduct a comparative study to examine the correlation between CO₂ levels and infection risk in a simplified indoor space. We use infection risk assessment based on discrete droplet simulations as the foundation for the comparative analysis. We employ a fully compressible Navier-Stokes solver, where the evaporated phase of the droplet and its effect on droplet evaporation are modeled. A discrete Lagrangian droplet model is used to model droplet transport and evaporation. The droplet model is connected to the flow equations to enable weak two-way coupling between the droplets and the flow, where the droplets are affected by the flow, while the opposite is not allowed; however, the vapor phase of the droplets is influenced by droplet evaporation. CO₂ is modeled as a passive scalar through a species transport equation.

2. GOVERNING EQUATIONS

The sputum droplet dispersion is modelled through a combination of a Lagrangian frame for the droplet dynamics and the air/gas flow dynamics are modelled on a conventional fixed Eulerian mesh. The conservation equations for mass, momentum, energy are solved on the Eulerian mesh. Species transport equations are considered to account for the humidity variation around the mouth during a cough. The conser-

vation equations in the compact form are given by

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{S}, \quad (1)$$

where \mathbf{U} and \mathbf{F} are given below.

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} [1.25]\rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e \\ \rho Y_k \end{pmatrix}, \mathbf{F}_i = \begin{pmatrix} [1.25]\rho u_i \\ \rho u_i u_1 + P\delta_{i1} - \mu A_{i1} \\ \rho u_i u_2 + P\delta_{i2} - \mu A_{i2} \\ \rho u_i u_3 + P\delta_{i3} - \mu A_{i3} \\ \rho(\rho e + P)u_i - \mu A_{ij}u_j + q_i \\ \rho u_i Y_k - \rho \hat{u}_i^k Y_k \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ (\rho - \rho_0)g_1 \\ (\rho - \rho_0)g_2 \\ (\rho - \rho_0)g_3 \\ (\rho - \rho_0)g_i u_i \\ S_{\rho Y_k} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Here, the density of the gas/air is represented by ρ and the viscosity is given by μ . \mathbf{u} , e and P represent the velocity, total specific energy and the pressure, respectively. Species mass fraction and diffusion velocities of the k^{th} species are given by Y_k and \hat{u}_i^k , respectively. (u_1, u_2, u_3) are the components of the velocity vector \mathbf{u} along the principal directions 1, 2, 3. \mathbf{g} is the acceleration due to gravity (eg. $\mathbf{g} = (0, 0, -9.81)m/s^2$). Of the species source terms $S_{\rho Y_k}$, the non-droplet vapor species are zero. The definition of the total specific energy is given by the following equation

$$e = \frac{P}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}u_i u_i, \quad (3)$$

where γ is the ratio of the gas specific heat capacities. The heat flux \mathbf{q} is given by

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T, \quad (4)$$

where λ is the thermal diffusivity, and \mathbf{A} is the velocity gradient tensor. The diffusion velocities of the chemical species may be expressed as a function of species diffusivity D_k as

$$\hat{u}_i^k Y_k = D_k \nabla Y_k. \quad (5)$$

(1) Droplet Model

We adopt a one-way coupling approach for the droplet transport and evaporation model, wherein it is assumed that the effect of droplet motion and evaporation on the ambient air is negligible while the droplet transport and evaporation are directly linked to the airflow and temperature [3]. The equations modelling the transport, evaporation and the rate

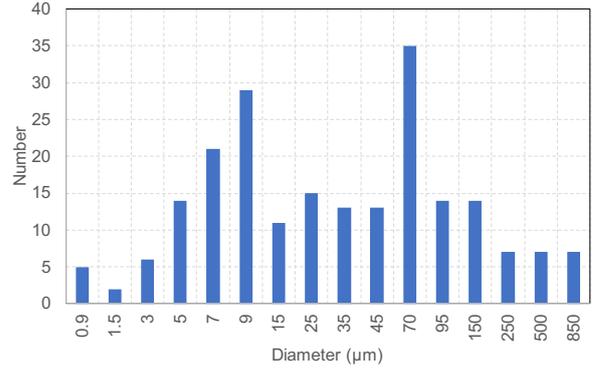


Fig. 1 a) Distribution of droplet diameter at the time of injection[1].

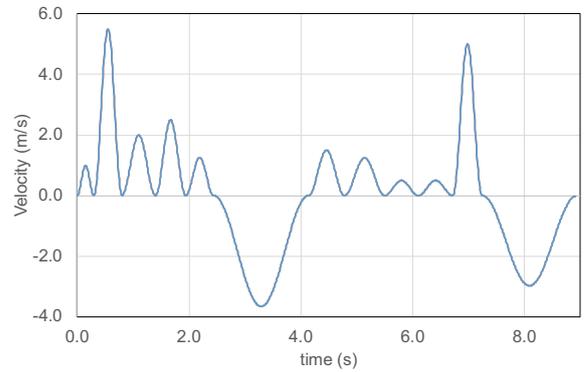


Fig. 2 The velocity profile of flow generated during the speech as function of time[2].

of change of droplet temperature are given by the equations below

Given below are the equations governing the rate of change of droplet mass, m_d , velocity, \mathbf{u}_d , temperature, T_d and position.

$$\frac{d\mathbf{x}_d}{dt} = \mathbf{u}_d, \quad (6)$$

$$\frac{d\mathbf{u}_d}{dt} = \frac{3C_D}{4d_d} \frac{\rho}{\rho_d} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_d) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_d|, \quad (7)$$

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{Nu}{3Pr} \frac{c_p}{c_l} \frac{f_1}{\tau_d} (T - T_d) + \frac{1}{m_d} \left(\frac{dm_d}{dt} \right) \frac{L_V}{c_{p,d}}, \quad (8)$$

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{m_d}{\tau_d} \left(\frac{Sh}{3Sc} \right) \ln(1 + B_M). \quad (9)$$

Here, \mathbf{x}_d , \mathbf{u}_d , m_d , and T_d are the droplet position, velocity, mass and temperature, respectively. T is the temperature of the ambient air, L_v the latent heat of evaporation at the droplet temperature. c_p and c_l are the specific heat at constant pressure of the ambient air and the specific heat capacity of the liquid droplet, and τ_d is the response time of the droplet. f_1 is a correction to the heat transfer due to evaporation of the droplet[4]. Nu & Pr are the Nusselt and Prandtl

Table 1 The initial and flow conditions of the indoor setup.

| | |
|--|--------|
| Ventilation Flow rate (m ³ /hr) | 576 |
| No. Air Exchanges (1/hr) | 12 |
| Inlet/Outlet Velocity (m/s) | 1.778 |
| Inlet CO ₂ level (ppm) | 400 |
| Inlet Temp. (K) | 300 |
| AC Flow rate (m ³ /hr) | 1200 |
| AC inlet velocity (m/s) | 2.2371 |
| AC inlet Temp. (K) | 293 |
| AC suction velocity (m/s) | 0.7994 |
| Room Temp. (K) | 297 |
| Ambient humidity (RH) | 60 |
| Human body surface Temp. (K) | 300 |
| Human exhalation CO ₂ (ppm) | 40000 |

numbers, respectively [5,6]. B_m is the mass transfer number (details of which can be found in [3]), and Sh & Sc are the Sherwood and Schmidt numbers, respectively. Under a unit Lewis number assumption $Pr = Sc$. For the evaluation of the Prandtl number the standard definition is used, where as the Nusselt number [7,8] is evaluated using the expression is given below along with the definition of τ_d .

$$\tau_d = \frac{\rho_d d_d^2}{18\mu} \quad (10)$$

$$Nu = 2 + 0.552 Re_s^{1/2} Pr^{1/3} \quad (11)$$

$$Sh = 2 + 0.552 Re_s^{1/2} Sc^{1/3} \quad (12)$$

In the above equation ρ_d is the density of the droplet and Re_s is the Reynolds number based on the slip velocity of a droplet with respect to the gas phase flow velocity, $u_{slip} = \max(|\mathbf{u} - \mathbf{u}_d|)$

$$Re_s = \frac{\rho u_{slip} d_d}{\mu} \quad (13)$$

The drag coefficient of the droplet, C_D , depends on its Reynolds number and is given by

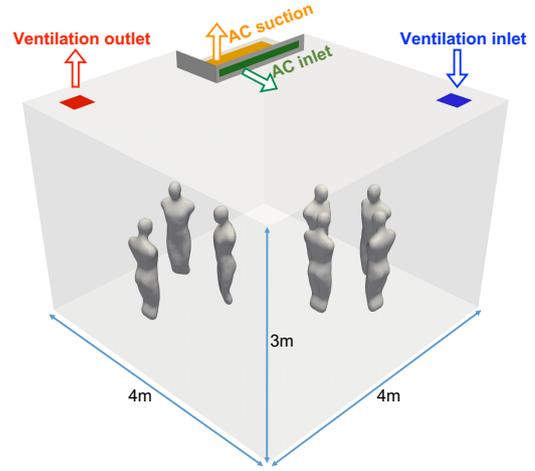
$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} \left(1 + \frac{1}{6} Re_d^{2/3}\right) & Re_d < 1000, \\ 0.424 & Re_d > 1000, \end{cases} \quad (14)$$

and the droplet Reynolds number is given by

$$Re_d = \frac{\rho(\mathbf{u} - \mathbf{u}_d)d_d}{\mu} \quad (15)$$

3. Simulation Setup

The mouth flow generated while counting from 1 to 10 in English is employed to model speech flow. The flowrate of speech is represented by $\dot{q} = A_i \sin^2(\pi t/T_i)$, where A_i

**Fig. 3 The geometry of the indoor environment adopted for the present work along with the human subjects within the room.**

and T_i denote the amplitude and period of the i^{th} utterance, respectively. To precisely model respiratory flow during speech, we include inhalation along with the expiratory flow of speech, ensuring mass balance of respiratory flow throughout one speech cycle. Inhalation phases are added after the words 'five' and '10', resulting in a net flow rate of one speech cycle equaling 0. The flow velocity when applying this speech model to a mouth opening with an area of 6 cm² is depicted in Fig. 2. The net flow rate of the speaking model is 22.74 L/min (or 3.388 L/cycle). While literature provides data on the size/area of mouth opening during a cough[9], information for speech is unavailable. Gupta et al.[9] report an average mouth opening area of 4 cm² for coughing. We assume that the mouth opening area for speech is slightly larger than that during a cough, choosing a value of 6 cm².

Droplet size distribution reported in literature varies significantly. Loudon and Roberts, and Duguid and Chao et al. report peak droplet counts of 6 μm and 12 μm , respectively, while Xie et al.[10] report a value as high as 50 μm . Given the disparate droplet size distribution data in the literature, we adopt a combination of these figures. The droplet diameter distribution used in this work is illustrated in Fig. 2.. Droplets are injected into the domain at the circular mouth model at time instants corresponding to the peak velocity of each utterance.

The indoor space geometry utilized in this work is depicted in Fig.3. The room has a floor area of 4 × 4m² and a height of 3 m. The ventilation system includes a fresh air inlet and a stale air outlet located on diagonally opposite roof corners. The room also features an air-conditioning system with a suction vent that removes air from the room and an inlet vent that supplies cool or hot air. Seven human subjects are represented by simplified human figurines in the room. The subjects are divided into two groups of three and four

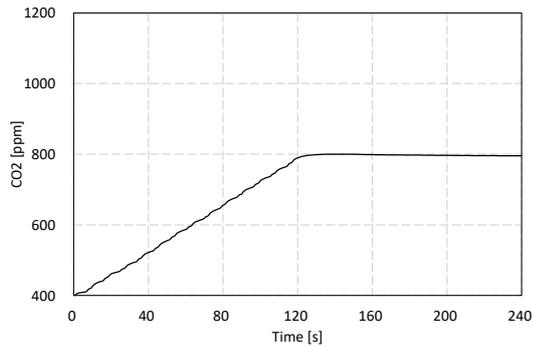


Fig. 4 Evolution of room averaged CO₂ level as the speaking model is turned off after 120s.

individuals facing each other, assuming conversation. During the simulation, all subjects are presumed to be speaking using the speech model shown in Fig.2. The ventilation rate, AC settings, and initial conditions are summarized in Table 1. A Neumann or zero gradient boundary condition is applied to scalar species such as H₂ and CO₂ at room outlet vents (Ventilation outlet and AC suction) and the mouth geometry during the inhalation phase. Finally, the net mass flux of all scalar species removed from the room through the AC suction vent is reintroduced via the AC inlet vent, assuming no mass loss and maintaining net scalar mass conservation

4. RESULTS

(1) Verification

The following verification case was adopted to confirm that the Dirichlet and Neumann boundary conditions used for scalar species are suitable and that the scalar species mass is conserved when recycled through the AC system. The ventilation system is deactivated, the AC system remains operational during the simulation, and the human subject's speaking model is switched off after 120s. This configuration aims to raise the CO₂ scalar mass in the room due to expiration during speech and maintain a stable value once the speaking model is turned off. The room's average CO₂ mass, expressed in parts per million, is illustrated in Fig. 4. As intended by the setup, the CO₂ level in the room increases steadily until the speaking model is turned off at 120s, after which it remains constant. The simulation continues until 240s, during which the total mass of CO₂ scalar decreases by 0.5%.

(2) Comparison of aerosol and CO₂ distribution

Two distinct simulations were conducted to compare CO₂ levels and distribution with droplet/aerosol concentration and distribution: First, a scalar diffusion simulation was used to model CO₂ diffusion and accumulation within the indoor space. Second, a droplet dispersion simulation was performed to examine the dispersion dynamics of discrete droplets exhaled during speech. In both simulations, the sim-

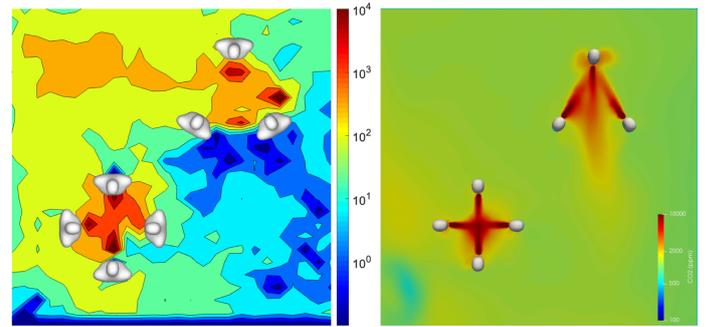


Fig. 5 A comparison of distribution of (left) virion concentration evaluated from droplet dispersion simulation and (right) CO₂ level minus the ambient CO₂ level (400ppm) on a plane located at 1.6m from the ground .

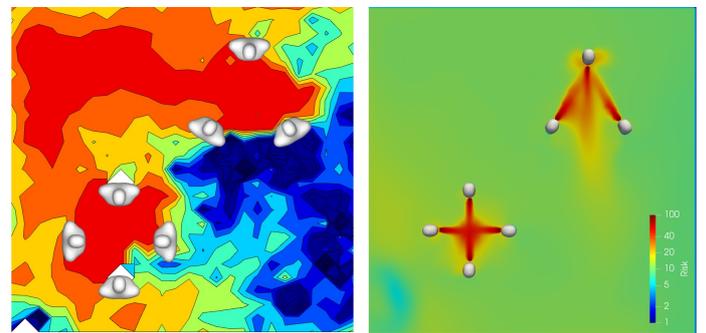


Fig. 6 The distribution of CO₂ and virion concentration in Fig. 5 converted to probability of infection.

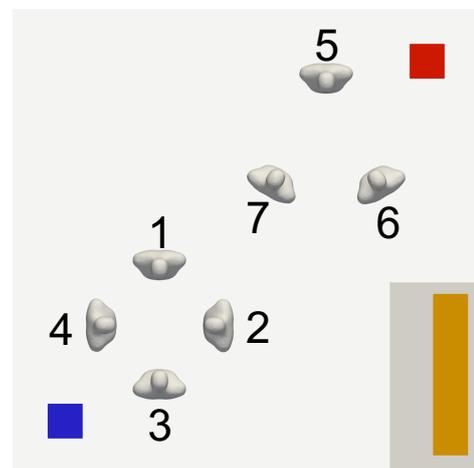


Fig. 7 Numbering of the human subjects

ulation was run for 100s initially to develop the flow, followed by the exhalation of CO₂ and droplets. After starting CO₂ exhalation, the simulation continued for 900s, whereas the droplet dispersion simulation lasted for only 100s. The shorter duration of the droplet simulation is mainly due to the computational load imbalance resulting from droplet ac-

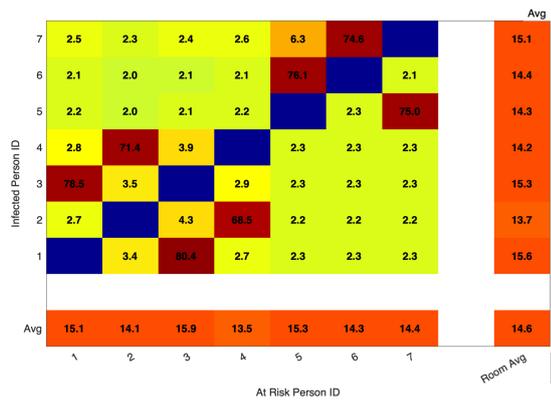


Fig. 8 The infection risk matrix for an exposure period of 15 mins based on CO₂ distribution. The color scheme of the matrix is matched with that of Fig. 9.

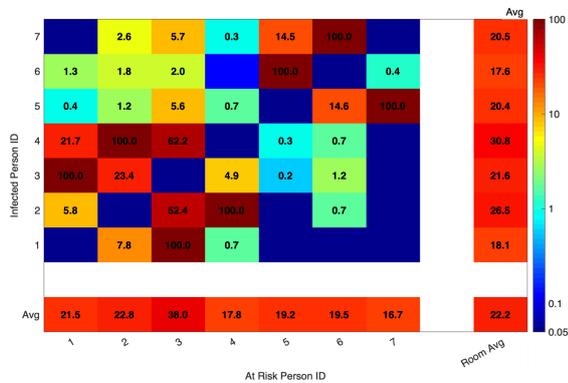


Fig. 9 The infection risk matrix for an exposure period of 15 mins based on the droplet distribution.

accumulation in certain areas of the computational domain. Nonetheless, we believe the comparison presented in this work will be informative and valuable to the reader.

The time-averaged distribution of CO₂ levels and virion concentration on a plane parallel to and situated 1.6m above the ground is shown in Fig.5. The droplet concentration on the mentioned plane can be converted into virion concentration by considering the virion density in the sputum. For further information on the conversion methodology and relevant parameters, readers are directed to our previous work [11]. The comparison demonstrates that the local distribution of droplets/virions and CO₂ differ significantly. This disparity becomes even more pronounced when the CO₂ and droplet distribution are converted into a probability of infection (the methodology details can be found in [11]), which is displayed in Fig.6. In both comparisons, the distribution between the human subjects is similar, with the primary difference arising in the area below the AC. In other regions, the difference is not as substantial.

(3) Comparison of person to person infection

The source contamination from human subjects can be separately tracked to assess the infection risk they pose to one another. To accomplish this, droplets emitted from each subject are marked with a unique identifier, and a distinct scalar transport equation is assigned to each subject to differentiate the CO₂ emitted by them. The number of human subjects is displayed in Fig.7. The person-to-person risk of infection can be evaluated using an infection risk matrix. The infection risk matrix based on CO₂ levels and droplet concentration under each subject's nose is presented in Figs.8&9. The infection matrix interpretation is as follows: the matrix rows represent an infected person, and the matrix columns represent a subject who may be at risk of becoming infected. The rows are numbered from bottom to top, the columns from left to right, and the numbers correspond to the person ID in Fig 7. The matrix entry corresponding to the first row and second column indicates the risk of infection for person 2 due to contaminants generated by person 1. The row labeled 'Avg' provides the average infection risk for a given person, considering contaminants from all other individuals in the room. Similarly, the 'Avg' column shows the average infection a given person is likely to cause due to contaminants generated by that person. Lastly, the matrix's bottom-right corner entry offers the room-averaged infection risk, assuming any one of the occupants may be randomly infected. Note that the matrix diagonal entries are, by definition, 0, as infected persons cannot infect themselves.

A comparison of the risk matrix reveals two main observations. First, the infection risk distribution within the matrix, the infection risk across the two groups, varies between the two methods. Second, the room and averaged infection risks are similar across the two methods, though not identical. Due to a more uniform distribution of CO₂ within the space, the infection risk of a subject from one group caused by an infected subject from the other group is non-zero and uniform. In contrast, the droplet simulation results indicate that individuals in groups 5-7 are less likely to be infected by persons in the 1-4 group, while persons in the 1-4 group are at risk due to individuals in the 5-7 group. This difference may result from the shorter simulation period of the droplet simulation. The person and room average infection risk are similar across the two methods mainly because the averaged data is dominated by a given subject's high infection risk due to a nearby neighbor.

5. Summary

This study offers a comparative examination of CO₂ diffusion and droplet dispersion simulations, with the main objective being to ascertain if CO₂ can serve as a suitable proxy for infection risk due to droplet inhalation in indoor environments. To achieve this, droplet dispersion simulation results, in terms of droplet and virion concentrations, were juxtaposed with CO₂ diffusion simulation outcomes. Our analysis revealed that the distribution of virion concentrations and

CO₂ levels within the indoor space varied. The disparity between the findings might stem from the droplet simulation duration being insufficient for yielding accurate steady-state statistics. Consequently, enabling a longer simulation duration for the droplet simulation is essential for a more dependable comparison. The person-to-person infection risk comparison exhibited greater consistency between the two methodologies since this approach primarily concentrates on the area between human subjects, where the agreement between the two methods is stronger.

REFERENCES

- [1] J. Wei and Y. Li, "Airborne spread of infectious agents in the indoor environment," *American journal of infection control*, vol. 44, no. 9, pp. S102–S108, 2016.
- [2] J. K. Gupta, C.-H. Lin, and Q. Chen, "Characterizing exhaled airflow from breathing and talking," *Indoor air*, vol. 20, no. 1, pp. 31–39, 2010.
- [3] T. Kitano, J. Nishio, R. Kurose, and S. Komori, "Effects of ambient pressure, gas temperature and combustion reaction on droplet evaporation," *Combustion and Flame*, vol. 161, no. 2, pp. 551–564, 2014.
- [4] M. Nakamura, D. Nishioka, J. Hayashi, and F. Akamatsu, "Soot formation, spray characteristics, and structure of jet spray flames under high pressure," *Combustion and Flame*, vol. 158, no. 8, pp. 1615–1623, 2011.
- [5] M. Nakamura, F. Akamatsu, R. Kurose, and M. Katsuki, "Combustion mechanism of liquid fuel spray in a gaseous flame," *Physics of Fluids*, vol. 17, no. 12, p. 123301, 2005.
- [6] Y. Baba and R. Kurose, "Analysis and flamelet modelling for spray combustion," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 612, pp. 45–79, 2008.
- [7] W. Ranz and W. R. Marshall, "Evaporation from drops i," *Chem. eng. prog.*, vol. 48, no. 3, pp. 141–146, 1952.
- [8] W. Ranz and W. R. Marshall, "Evaporation from drops ii," *Chem. eng. prog.*, vol. 48, no. 3, pp. 173–180, 1952.
- [9] J. Gupta, C.-H. Lin, and Q. Chen, "Flow dynamics and characterization of a cough," *Indoor air*, vol. 19, no. 6, pp. 517–525, 2009.
- [10] X. Xie, Y. Li, H. Sun, and L. Liu, "Exhaled droplets due to talking and coughing," *Journal of the Royal Society Interface*, vol. 6, no. suppl.6, pp. S703–S714, 2009.
- [11] R. Bale, A. Iida, M. Yamakawa, C. Li, and M. Tsubokura, "Quantifying the covid19 infection risk due to droplet/aerosol inhalation," *Scientific reports*, vol. 12, no. 1, pp. 1–15, 2022.