



The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology

Student Session Proceedings





Doshisya University Kyoto, JAPAN September 1–3,2021 **Supporting Companies**





ii

Session Schedule

Day 1 (Wednesday, 1st September, 2021)						
Time	Hall A	Hall B	Hall C	Hall D	Hall E	
09:30 - 09:45	Opening Ceremony (Hall A)					
09:45 - 10:45		Plenary Tal	k 1 (Symposium	n 1, Hall A)		
10:45 - 11:00		Gr	oup Photo (Hall	A)		
11:00 - 12:15	Symposium 1 ① Invited Talk 1 Tutorial Talk 1 Session 1 (2)	OS8 ① Session 5 (4)	OS3 + OS9 (1) Session 8 (3)	OS2 ① Session 12 (3)	OS7 ① Session 16 (3)	
12:15 - 13:30	Lunch Time					
13:30 - 14:15	Corporate Seminar ① (Hall A) Differential equations and machine learning/neural networks <i>Koji Maruyama (Wolfram Research)</i>					
14:30 - 15:30	Symposium 1 (2) Session 2 (3)	OS8 ② Session 6 (3)	OS3 + OS9 (2) Session 9 (3)	OS2 ② Session 13 (3)	OS7 ② Session 17 (3)	
15:45 - 16:45	Symposium 1 ③ Session 3 (3)	OS8 ③ Session 7 (3)	OS3 + OS9 (3) Session 10 (3)	OS6 ① Session 14 (3)	OS11 (1) Session 18 (3)	
17:00 - 18:00	Symposium 1 ④ Session 4 (3)		Symposium 2 ① Session 11 (3)	OS6 2 Session 15 (2)	OS11 (2) Session 19 (2)	

Day 2 (Thursday, 2nd September, 2021)						
Time	Hall A	Hall B	Hall C	Hall D	Hall E	
09:00 - 10:00		Plenary Tal	k 2 (Symposium	n 2, Hall A)		
10:15 - 11:15	Symposium 1 (5) Session 20 (3)	Symposium 2 ② Invited Talk 2 Invited Talk 3 Session 22 (2)	Symposium 3 ① Session 24 (3)	OS11 ③ Session 26 (3)	OS1 ① Session 28 (3)	
11:30 - 12:30	Symposium 1 (6) Session 21 (3)	Symposium 2 ③ Session 23 (2)	Symposium 3 (2) Session 25 (3)	OS10 ① Session 27 (3)	OS1 (2) Session 29 (3)	
12:30 - 13:30	Lunch Time					
13:30 - 14:15	Corporate Seminar (2) (Hall A) The Trends of Latest Personal Supercomputer: Performance and App Support Status Keiou Nishimura and Rika Yamashita (Visual Technology)					
14:30 - 15:00	Plenary Talk 3 (Symposium 3, Hall A)					
15:00 - 15:05	Announcement about JSST2022 (Hall A)					
15:15 - 16:15	Shotgun Presentations of Student Session (Hall A)					
16:30 - 18:00	Student Session (Poster Session, Remo)					

Day 3 (Friday, 3rd September, 2021)						
Time	Hall A	Hall B	Hall C	Hall D	Hall E	
09:00 - 10:00	Ple	nary Talk 4 + In	vited Talk 4 (Syr	nposium 3, Hall	A)	
10:15 - 11:15	OS4 ① Session 30 (3)	RS (1) Session 33 (3)	Symposium 3 ③ Tutorial Talk 2 Session 36 (2)	OS10 ② Session 39 (3)	OS5 ① Session 42 (3)	
11:30 - 12:45	OS4 (2) Session 31 (2)	RS (2) Session 34 (2)	Symposium 3 (4) Session 37 (3)	OS10 ③ Session 40 (3)	OS5 (2) Session 43 (3)	
12:45 - 13:30	Lunch Time					
13:30 - 14:15	OS4 ③ Session 32 (2)	Symposium 2 (4) Session 35 (2)	Symposium 3 (5) Session 38 (2)	OS10 ④ Session 41 (2)	OS5 ③ Session 44 (2)	
14:15 - 14:30	Break					
14:30 - 15:00	Closing Ceremony (Hall A)					

Symposium1

Plenary Talk

Presenter:

Prof. Hiroaki Natsukawa

Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University

Title:

Understanding System Dynamics by Combining Data-Driven Analysis and Information Visualization

Abstract:

Natural systems are often complex and dynamic. Reductionism is not universally applicable for natural complex systems found in biology and elsewhere where behavior is driven by complex interactions between many components acting together in time nonlinear dynamic systems. In this talk, I will introduce a minimalist paradigm, empirical dynamic modeling (EDM), for studying non-linear systems. It is a data-driven approach that uses timeseries information to study a system by reconstructing its attractor (a geometric object) that embodies the rules of a full set of equations for the system. Particularly, I will introduce a few recent works of visual analytics to support the identification and mechanistic interpretation of system states using integration EDM with visualization techniques, leads to our understanding of complex dynamics.

Biography:

Hiroaki Natsukawa is a junior associate professor / senior lecturer in Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University. He received a Ph.D. in engineering from Kyoto University in 2013. Although formally trained as a researcher in the field of biomedical engineering at Kyoto University, He has successfully crossed fields into other areas such as information visualization, neuroscience, and more recently into nonlinear dynamics. Currently, he has worked in the field of information visualization and his work focuses on developing visual analytics systems enabling data-



driven analytical reasoning by empirical dynamic modeling in collaboration with UC San Diego. He is currently an associate editor of Journal of Visualization, was a The 36th Annual Meeting of Japan Biomagnetism and Bioelectromagneics Society Local Committee, IEEE PacificVis 2019 Poster Co-chairs, IEEE PacificVis 2018 Publication Chair, The 47th Symposium of Visualization Society of Japan Organizer, NICOGRAPH International 2017 Local Committee Chair, JSST2016 Publication Chair, JHBM18 Local Committee.

Invited Talk

Presenter:

Prof. Tomohiro Sogabe

Department of Applied Physics, Nagoya University

Title:

Computation of Singular Values for Generalized Tensor Sum

(Joint work with Asuka Ohashi (National Institute of Technology, Kagawa)

Abstract:

We consider computing singular values of the generalized tensor sum of the form

$$T := I_n \otimes I_m \otimes A + I_n \otimes B \otimes I_{\ell} + C \otimes I_m \otimes I_{\ell}, \tag{1}$$

where *I* is the $n \times n$ identity matrix and $A \in R^{\ell \times \ell}$, $B \in R^{m \times m}$, $A \in R^{n \times n}$. The mathematical symbol \otimes denotes tensor product (or Kronecker's product). A simple example of the tensor product is given below.

$$A \otimes B := \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{12}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{12} \\ a_{21}b_{11} & a_{22}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{12}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{21} & a_{22}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{22} \end{bmatrix}$$



where $A := \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$. Similarly, $A \otimes B \otimes C$ is calculated recursively by $(A \otimes B) \otimes C$ or $(A \otimes B) \otimes C$. The size of the generalized tensor sum *T* in (1) is of $n^3 \times n^3$, which can be extremely large even if matrices *A*, *B*, *C* are small. Indeed, for *A*, *B*, *C* being 1,000 × 1,000 matrices, the generalized tensor sum

T can be a 1,000,000,000 × 1,000,000,000 matrix.

Though the generalized tensor sum T can be very large, it is easy to compute some fundamental quantities of linear algebra, such as determinant and eigenvalues. In fact, the eigenvalues of T can be written as the sum of eigenvalues of relatively much smaller matrices A,B, and C than T. On the other hand, unlike eigenvalues, it is difficult to compute the singular values of T since there is no such a simple relation between the singular values of T and the singular values of A,B, and C.

In this talk, we present recent progress on efficient computational algorithms [1,2,3] for some specific singular values of the generalized tensor sum *T*, which are based on the use of the notion of numerical multilinear algebra.

References

[1] A. Ohashi, T. Sogabe, On computing maximum/minimum singular values of a generalized tensor sum, Electronic Transaction on Numerical Analysis, 43 (2015), pp. 244-254.

[2] A. Ohashi, T. Sogabe, On computing the minimum singular value of a tensor sum, Special Matrices, 7 (2019), pp. 95-106.

[3] A. Ohashi, T. Sogabe, On computing an arbitrary singular value of a tensor sum, in preparation.

Biography:

Tomohiro Sogabe was graduated from the department of Applied Physics, the University of Tokyo in 2001 and received Ph.D. from the same university in 2006. He worked at Nagoya university as an assistant professor, and Aichi prefectural university as an associate professor. He is currently an associate professor at the department of Applied Physics, Nagoya University, Japan. He served as editors of JSIAM Letters, the Transactions of JSIAM, and currently he serves as an editor of JJIAM journal, Springer. He will be a member of the board of directors of JSIAM from June 2021. His research interests include numerical linear algebra, numerical multilinear algebra, and scientific computing. He published more than 70 international journal papers and 15 domestic journal papers include applied mathematics journals, computational physics journals and quantum computing journal, such as AMC, AML, ETNA, JCAM, JJIAM, NLAA for applied mathematics; IEEE TMTT, JCP, PRB, PRE for computational physics; QIC for quantum computing journal.

Tutorial Talk

Presenter:

Prof. Kuniyoshi Abe

Faculty of Economics and Information, Gifu Shotoku Gakuen University

Title:

A Numerical Study of Parallel Variants of GPBiCG Method with Stabilization Strategy for Solving Linear Equations

(Joint work with Soichiro Ikuno and Gerard L.G. Sleijpen)

Abstract:

The hybrid Bi-conjugate gradient (Bi-CG) methods such as Bi-CG stabilized (Bi-CGSTAB), Generalized Product-type based on Bi-CG (GPBiCG) are wellknown for efficiently solving linear equations, but we have seen the convergence behavior with a long stagnation phase. In such cases, it is important to have Bi-CG coefficients that are as accurate as possible. We introduce the stabilization strategy for improving the accuracy of the Bi-CG coefficients.

On present petascale high-performance computing hardware, the main bottleneck for efficient parallelization is the inner products which require a global reduction. The parallel variants of Bi-CGSTAB reducing the number of global communication phases and hiding the communication latency have been proposed. In this paper, therefore, following the analogy of Cools et al., we design parallel variants of GPBiCG, and examine the convergence speed of the parallel variants with the stabilization strategy.

Biography:

Kuniyoshi Abe obtained Ph. D at Nagoya University in 1999. He began his career as Assistant professor at Anna National College of Technology in 1998. He moved to Advanced Computing Center, RIKEN as a Contract researcher in 1999. He was associate professor at Faculty of Economics and Information, Gifu Shotoku University in 2003, and is professor from 2012. His research field is numerical linear algebra, especially, he is interested in fast and iterative solvers for linear equations.



Symposium2

Plenary Talk

Presenter:

Prof. Hajime Ishihara

Department of Materials Engineering Science, Osaka University

Title:

Interaction of Optical Vortex and Matter Systems: from Microscopic to Macroscopic Regimes and Linkage between Them

Abstract:

A remarkable effect in the interaction between the optical vortex and matter systems is the transfer of the orbital angular momentum. A lot of theoretical and experimental demonstrations have been conducted for macroscopic rotational manipulation of matters from microscale to nanoscale objects. On the other hand, in the microscopic regime, the optical vortex changes the selection rule of electronic transitions, which induces unconventional spin dynamics in solids. Interestingly, the macroscopic and microscopic degrees of freedom are sometimes linked to each other in a unique way via linear and nonlinear optical responses. In this talk, I will present some examples of the above topics and puzzling aspects about them.

Biography:

Hajime Ishihara is a Professor in Graduate School of Engineering Science at Osaka University. Since 2016, he has been the project representative of JSPS Grand-in Aid for Scientific Research on Innovative Area "Nano-Material Manipulation and Structural Order Control with Optical Forces". His research interests are the microscopic interaction between light and nanostructures and the optical functionalities arising from their interaction. He is the fellow of the Japan Society of Applied Physics.



Invited Talk

Presenter:

Prof. Yoshiki Kohmura

RIKEN SPring-8 Center

Title:

Generation of X-ray Vortices by Bragg Reflection from Crystals and Microscopy to Diagnose Topological Charge Distribution

Abstract:

We developed a method to transfer the structure of dislocation in a crystal to the Bragg X-ray wave front and performed a phase measurement that could diagnose the dislocation. This method helps to enhance the functionality of materials affected by dislocations. The two-beam X-ray interferometry was performed to measure the Bragg reflected X-ray wave front from a spiral dislocation area in a SiC crystal. As a result, a pair of fork patterns was observed. The number of fringes changed by +1 and -1 at the phase anomalies due to generation of an X-ray vortex with the topological charge of +1. Kinematic diffraction simulation showed that X-ray vortices are generated on Bragg reflected X-rays from spiral dislocation areas. This result is realized by using sufficiently large spatial coherence of the irradiated X-rays.

Biography:

Yoshiki Kohmura is currently a Team Leader of Synchrotron Radiation Imaging Instrumentation Team at SPring-8 facility, Japan. He received his PhD in the Department of Physics, Graduate School of Science, the University of Tokyo in 1994. He has been working for RIKEN SPring-8 Center since 1996. He is involved in developing various x-ray optical elements and methodologies for synchrotron radiation experiments. In the past ten years, he studied the novel waveguiding phenomenon of x-rays occurring inside slightly deformed crystals and its application to fast switching of x-rays.



Invited Talk

Presenter:

Dr. Toru Tsujimura

National Institute for Fusion Science, National Institutes of Natural Sciences



Title:

Propagation Properties of Optical Vortex in Magnetized Plasma

Abstract:

We investigated theoretically propagation properties of an optical vortex with a helical wavefront in cold uniform magnetized plasmas in an electron cyclotron (EC) range of frequencies. We describe the effects of the helical wavefront of the vortex EC wave on the wave fields in magnetized plasmas as anisotropic media. These effects become significant as the topological charge of the vortex EC wave increases or the distance from the phase singularity becomes small. The different propagation properties are also confirmed in the propagation of Laguerre–Gaussian beams on threedimensional simulations with the finite element method. We found a remarkable phenomenon on mode conversion in the vortex EC wave propagation, which suggests an optical vortex can be a new tool to heat highdensity plasmas.

Biography:

Toru li Tsujimura received the B.Eng., M.Eng., and D.Eng. Degrees from the University of Tokyo in 2009, 2011, and 2014, respectively. Since 2014, he has been working as an assistant professor at National Institute for Fusion Science, National Institutes of Natural Sciences (NINS). His current research focuses on wave heating in fusion plasma at the Large Helical Device. He was a representative of NINS programs for cross-disciplinary study in 2018 and 2019, leading the program on helical wavefront measurements of optical vortices emitted by high-energy electrons.

Symposium3

Plenary Talk

Presenter:

Prof. Kenichi Yoshikawa

Self-organization Science Research Center, Doshisha University / Institute for Advances Study, Kyoto University

Title:

Cooperation of Real-World Modeling with Simulation toward the Problem "What is Life?"

Abstract:

Living matter is manipulating large number of different molecules to create spatio-temporal self-organization. Currently, many numerical studies have been carried out to shed light on the underlying mechanisms of life. Sometimes, these studies remain as a possible explanatory interpretation because of the complexity of actual living systems. In the present talk, I would like to show some examples of real-world modeling, which help us to obtain deeper understanding in biological systems. 1) Emergence of cell-like structure and function under crowding condition with macromolecules. 2) Self-organization of cellular assembly. 3) Self-generation of macroscopic regular motion for the assembly of nano-scaled self-propelling objects.

Biography:

Name Kenichi Yoshikawa URL: http://dmpl.doshisha.ac.jp/ Academic Degree PhD, Physical Chemistry, Graduate School of Engineering, Kyoto University (1976)



Professional Appointments 1998 – 2012 Professor, Department of Physics, Graduate School of Science, Kyoto University 2011 – 2014 Chair, Commission of Biological Physics C6, IUPAP 2012 – Professor, Faculty of Life and Medical Sciences, Doshisha University 2019-Specially Appointed Prof., Institute for Advances Study, Kyoto University

Plenary Talk

Presenter:

Prof. Helmut Schiessel

Cluster of Excellence Physics of Life, Technical University Dresden

Title:

The mechanical genome

Abstract:

In addition to the classical layer of genetic information, DNA molecules also carry other layers of information. Two possible layers are discussed. One is a mechanical layer, namely that the base pair sequence influences the mechanical and geometrical properties of the DNA molecules which in turn might guide their packing inside the cell. A second possible layer is the speed of translation in the protein-producing ribosomes where the speed influences the quality of the protein product. We demonstrate that the degeneracy



Biography:

Helmut Schiessel studied physics in Freiburg where he did his Ph.D. in theoretical polymer physics in 1997. He then worked as a postdoc at two Universities of California, in Santa Barbara and in Los Angeles. In 2000 he joined the MPI for Polymer Research in Mainz where he was in charge of a biophysics research project. From 2005 to 2020 Schiessel headed the chair of Theoretical Physics of Life Processes at the Lorentz Institute, Leiden University. Since January he heads the group Theoretical Physics of Living Matter at the Cluster of Excellence Physics of Life.

Invited Talk

Presenter:

Prof. Yoshiteru Yonetani

National Institute for Quantum and Radiological Science and Technology



Title:

Water on the DNA Surface: Microscopic Insight from Molecular Dynamics Simulations

Abstract:

Water on the DNA surface exhibits characteristic behavior such as ice-like water network along the narrow groove of DNA. By using molecular dynamics simulations, we obtained detailed picture for such water; our characterization fully describes the water network patterns and their sequence variation [Biophys. J. 97, 1138 (2009)]. Analysis on such water network further revealed microscopic origin of the slow water-exchange kinetics [Biophys. Chem. 160, 54 (2012)]. As another relevant topic, I will also mention a relation with DNA damage production. Our recent study [Chem. Phys. Lett. 749, 137441 (2020)] found that site-dependent water accessibility for DNA backbone is well correlated with the probabilities of DNA damage production by OH radical attacking. This suggests that the site-dependent hydration property is a key factor for DNA damage production.

Biography:

Yoshiteru Yonetani received B.E. and Dr. degrees from Keio University in 1998 and 2002, respectively. He worked as a postdoctoral researcher at Nara Women's University (2002-2003) and Japan Atomic Energy Agency (2004-2008). He is currently a senior researcher in National Institutes of Quantum and Radiological Science and Technology. His current interests include molecular dynamics and quantum dynamics in biological and chemical physics.

Tutorial Talk

Presenter:

Dr. Miyuki Sasaki

Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science, Japan Atomic Energy Agency



Title:

Visualization of Dose Rate Distribution around Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant using Artificial Neural Networks.

Abstract:

This study proposes a method of visualizing the ambient dose rate distribution using artificial neural networks (ANN) from airborne radiation monitoring results. The ANN method was applied to the results of the airborne radiation monitoring which was conducted around the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant by an unmanned aerial vehicle. The ANN was constructed by training data consisting of input variable dataset (radiation count rate, altitude, topographic data, photographic RGB data) and objective variable dataset (the air dose rate data at 1 m above the ground level). The reliability of the ANN method was evaluated by comparison with the ground-based survey data. The dose rate map created by the ANN method reproduced ground-based survey results better than traditional methods.

Biography:

Miyuki Sasaki received Dr. Eng. degrees from the University of Nagoya, Japan, in 2021. She became a researcher at the Japan Atomic Energy Agency in 2015. Her current research interests include radiation measurement.

Committee

General Chair: Hiroaki Nakamura (National Institute for Fusion Science)

Conference Chair:

Takahiro Kenmotsu (Doshisha University)

Conference Co-Chair:

Susumu Fujiwara (Kyoto Institute of Technology) Katsuhiko Yamaguchi (Fukushima University)

Program Chair:

Seiki Saito (Yamagata University) Hiroshi Tamura (Chuo University)

Program Co-Chair:

Nobuaki Ohno (University of Hyogo) Yoshihide Shibata (National Institute of Technology, Gifu College) Yoshihisa Fujita (Ritsumeikan University)

Post-Conference Chair:

Susumu Fujiwara (Kyoto Institute of Technology)

Post-Conference Co-Chair:

Tomoko Mizuguchi (Kyoto Institute of Technology) Hiroaki Ohtani (National Institute for Fusion Science) Daisuke Ishihara (Kyushu Institute of Technology)

Publication Chair:

Taku Itoh (Nihon University)

Publication Co-Chair:

Hiroto Tadano (University of Tsukuba) Soichiro Ikuno (Tokyo University of Technology)

Finance Chair:

Hiroki Sakuta (Doshisha University)

Publicity Chair: Satoshi Takatori (Doshisha University)

Exhibition Chair:

Yoji Matsumoto (Cybernet Systems Co., Ltd.)

Conference Adviser:

Amane Takei (University of Miyazaki) Takuo Yasunaga (Kyushu Institute of Technology) Motoi Wada (Doshisha University)

Table of Contents for Student Session

Day 2 (Thursday, 2nd September, 2021)

Stu	ident Session (Poster Session)
P01	Defect Detection by Simulation and Machine Learning
P02	Short-term prediction using RBF network with coordinate transformation
P03	Discrimination of Japanese drum player using machine learning9 Kanako Toyoda, Hirosh Tamura
P04	Perception of Direction of Moving SoundsStudy on Adaptive Method
P05	A Method for setting up Servers for Edge Computing in Fifth-Generation Mobile Communication Systems
P06	Solving Sudoku with Graph Convolutional Networks
P07	On delivery methods using UAV in hilly and moun-tainous areas
P08	Development of visualization system for radiation by mixed reality technolog
P09	Computation of Micro-particles and Fluid Flow through Porous Structure
P10	UAV assisted Survivor Search Scheme with Survivor Density Distribution Prediction 36 Chen Haosong, Kazutoshi Yoshii, Shigeru Shimamoto
P11	Elastodynamic analysis of elastic wave scattering using coupling method of CQBEM and FEM
P12	Particle-scale FSI computation for internal fluidization in gravel-particle bed by upward water jet
P13	Embodiment Design of Biped Robot for Walking on Rough Ground

P14	Effect of Adsorption and Reactive Behavior of Water Vapor in Reactive Magnetron Sputtering Simulations using Berg's Model
P15	Target ionization and surface damage models of graphite via nanosecond pulseirradiationJames Edward Hernandez, Kengo Moribayashi, James Koga, Motoi Wada
P16	Analysis of the space charge effect in an ion mobility spectrometer
P17	Molecular Dynamics Simulation of Clustered DNA Damage Composed of Apurinic/Apyrimidinic Sites
P18	Consideration of environment-friendly manufacturing in China
P19	The study on effects of wireless standards on dense Wi-Fi environments with NS3 69 <i>Hiroshi Iwata, Sakie Horiuchi</i>
P20	Computational method for interactions between deformable objects and fluid flows using immersed boundary method and mass spring model
P21	Simulation of elastic waves in micropolar bimaterials using 2-D M-EFIT
P25	Molecular Dynamics Study of Water Dynamics in Zwitterionic Polymer Brush-Water In- terface
P26	Development for High-Speed of High-Frequency Electromagnetic Fields Solver: ADVEN- TURE_FullWave
P27	Development and application for wave-sound field Solver: ADVENTURE_Sound85 Ryo Yoshidome, Amane Takei
P28	Molecular dynamics simulation and numeric calculation of a damaged polyethylene assuming tritium substitution and decay
P29	Magnetization process analysis of magnetic material with void defect

P30	Mechanical properties of hydrogen embrittled austenitic stainless steel
P31	Simulation for estimation of radiation source distribution measured by NaI(Tl) scintillation detector
P32	Simulation of thermoluminescence measurement of structural materials
P33	Study for Development and application of Nonsteady High-Frequency Electromagnetic Field method
P34	Localization phenomenon of large and small particles by congestion degree and boundary conditions : Cell model experiment on cm scale
P35	Sightseeing Guidance System to Maximize Satisfaction Using Real-Time Spot Information
P36	Evaluation of solvent-accessible surface area of back- bone hydrogen in telomeric DNA for studying tritium resistance of DNA
P37	Smart Diagnosis on Disease State based on Characteristic Cracking Pattern by Stretching Response of Tissue Slice

シミュレーションと機械学習による 内部欠陥判定 Defect Detection by Simulation and Machine Learning

白藤優^{1*},山田知典¹ Yu Shirafuji^{1*},Tomonori Yamada¹

1東京大学大学院 工学系研究科 システム創成学専攻

¹ Department of System Innovation, Graduate School of Engineering, University of Tokyo shirafuji-yu@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

Abstract. It is very important to detect defects in structures to prevent accidents related to them. A conventinal way depends on experts' experiences and skills. Therefore some researches where people try to create a system to detect defects by using machine learning have been conducted. However, it is diffuclt to collect sufficient data points which you use for machine learning in the real world. In our research, I created data points by using computer simulation and completed machine learning by using these data points. Furthermore, considering cases where simulations require huge computation costs, we conducted numerical experiments to find out a way to create highly accurate machine learning methodology with small data points. Concretely we introduced the theory of design of experiments to a sampling of machine learning and confirmed an improvement of the accuracy of the system.

Keywords: Computer simulation, Machine learning, Design of experiments

1. はじめに

様々な構造物の事故を防ぐには構造が有する欠陥を未然に発見することが重要に なる¹⁾。従来、このような欠陥発見のために打音検査が用いられることが一般的であ るが、これは専門家の経験に頼った方法であるため、近年このような非破壊検査に機 械学習の技術が利用されている²⁻³⁾。しかし機械学習による欠陥判定システムには十 分な学習データが必要になる一方で欠陥を有する構造についてデータを収集するこ とは難しい。そのためシミュレーションによって学習データを作成することでこの課 題を解決する研究が行われている。つまりシミュレーションでデータセットを作成し、 それらを学習に用いることで、観測することができる情報から構造物の内部欠陥情報 の推定システムを作成することを目標とした研究である。しかしシミュレーションに 大きな計算量と時間がかかることはこのアプローチの課題だ。そのため可能な限りシ

ミュレーションにより作成するデータ数を減らすことが求められている。本研究では、 シミュレーションと機械学習を利用して欠陥情報を推定するシステムを作成し、その システムを利用して実験を行うことで少ないデータ数で高精度のシステムを作成す る方法について考える。また行うシミュレーションについてはまずは予備的な検討と して、2次元の定常熱伝導の温度分布シミュレーションとした。

2. 内部欠陥を有する構造のモデル化

本研究では単純化のため構造、構造が有する欠陥どちらについても正方形とした。 また本研究では構造に対して定常熱伝導シミュレーションを行うため、メッシュを作 成する必要がある。そのため正方形上に 2500 個の点を取りこれらの点を頂点とする 直角三角形を1要素として切り分けた。またこれらの点を頂点として、大きさ1から 大きさ5の正方形欠陥を作成した。そのため図1のように内部に1m四方から5m四方 の正方形欠陥を有する49m四方の正方形構造を作成した。

3. 定常熱伝導シミュレーション

本研究では有限要素法による定常熱伝導のシミュレーションを行うことで温度分 布データを作成するプログラムを実装した⁴⁾。境界条件は左辺の中心を100℃、右辺 を0℃とした。これを2章で作成した構造に対して実行することで、各構造の温度分 布データを作成した。またデータのまとめ方について、入力となる温度分布について は今回観測できる表面と考えられる左辺一辺に注目し、欠陥がない場合の左辺一辺と の温度差をまとめた。また出力については1m四方から5m四方の欠陥の大きさと位置 を示す欠陥中心の座標をデータセットにまとめた。



図1 定常熱伝導シミュレーション実行例

4. 機械学習

本研究では特徴量の抽出に優れた畳み込みニューラルネットワーク(CNN)のモデル を実装した^{5,6)}。このモデルを利用して欠陥の位置と大きさに関する推定を回帰問題 として取り組んだ。本論文では大きさ推定の説明に集中する。またデータについては 3章で作成したデータセットを4:1に学習データと訓練データにランダムで分け学習 を行った。

4.15層ニューラルネットワークモデルによる学習結果

まずはモデルを、入力層、畳み込み層、プーリング層、全結合層、出力層からなる 単純なものとし、学習を行った。正答とする基準を誤差0.5以下、誤差が欠陥の大き さの20%以下とした場合の正答率を算出したところ、基準を絶対値とした場合、欠陥 が大きいほど精度が落ちていること、基準を相対値とした場合、欠陥が小さいほど精 度が落ちていることが確認できた。

4.29層ニューラルネットワークモデルによる学習結果

層数にルールはないが一般的に層を増やせば精度が向上することから⁷⁾畳み込み層と プーリング層を3セット重ね、モデルを深くし同様に学習を行った。その時の結果を 先程の結果と比較したものが以下の図2,図3である。正答とする基準がどちらの場 合も4.1のモデルよりも十分精度が上がっていることが確認できる。



単純なモデル
 今回のモデル



図 2 大きさ毎正答率比較:誤差 0.5 以下 図 3 大きさ毎正答率比較:誤差 20%以下 4.3 データを減らした場合

これまでは全てのデータを用いて学習を行ってきたが現実的ではないため、データ 数を 250 から 5000 まで 20 段階で変更しその時 loss を比較した。またこの際、実行 時間削減のためはじめに作成した単純なモデルを利用した。その時の loss の経過が 下の図 4、最終的な loss の値が下の図 5 のようになった。これらからデータ数が少 なくなると誤差が大きくなる傾向があること、またデータ数 250 では大きく精度が落 ちていることが確認できる。



図4各データ数のloss経過:大きさ推定 図5各データ数の最終的なloss:大きさ推定

5. 実験、考察

前章で利用するデータを少なくすると精度が落ちること、またデータ数が250の時 は特に精度が落ちていることが確認できた。本章では少ないデータ数でも精度を保つ ための方法を見つけるため実験を行う。具体的には学習に用いるデータをランダムで はなく、実験計画法に基づいて選択することによって効率的に学習を進め、結果とし て高精度の推定システムが作成できるのか確認する。

5.1 実験方法

前述の通りこの実験ではデータ選択に実験計画法を用いることで少ないデータ数 で高精度が実現できるのか確認する。実験計画法とは効率の良い実験方法を設計し結 果を適切に解析することを目的としており、各変数が結果にどのように影響している かという関係を効率的に求めるための手法である。今回はこの実験計画法の直行配列

実験という手法を利用する。これは実験の組み合わせを工夫することで少ない実験数 で各因子の結果への影響を知る手法である。今回の問題は因子については欠陥の大き さ、欠陥のx座標、y座標の3つ、水準については欠陥の大きさ1m四方から5m四方、 位置についても5分割した時のどこに属するかと考えることで5つと考えることでき るため、3因子5水準の直行配列実験を応用した。つまり5水準直交表に基づいて学 習データを選ぶことで精度の向上を目指す。その他の設定については4.1で単純なモ デルで学習した際と同様にし、その場合の結果と比較する。

5.2 実験結果

実験計画法に基づいて 250 から 1000 個のデータを選び学習を行った際の loss と 4.1の loss を比較したものは下の図 6 のようになっている。この結果から少ないデ ータ数で loss が小さくなっていること、またデータ数が 250 の際には大きく loss が 小さくなっていることが確認できる。



■以前の学習 ■実験計画法による学習

図6 実験計画法 loss 比較:大きさ推定

おわりに

シミュレーションにより作成したデータセットを機械学習に用いることで構造の内 部欠陥判定システムを作成した。また本システムを利用した実験から実験計画法に基 づいたデータ選択が少ないデータでの効率的な機械学習に有効であることを示した。

参考文献

- [1] 田中正吾,山田実『信号伝播モデルに基づく電磁波レーダによるコンクリート構造物の非破壊検査』,計測自動制御学会,39(5),pp.432-440
- [2] 高橋修司, 宮島雅弥, 堀口敦史, 中上京治, 茂木和弘, 白石洋一, 須田高史 『機械学習 を用いた打音による鋼管柱の非破壊欠陥推定』, 検査技術, 23(10). pp. 15-23
- [3] 堀辺忠志, 岡村弘之『ニューラルネットワークによるき裂を有するはりの逆問題 解析』, 日本機械学会, 64 (617). pp. 1-6
- [4] 邵長城『基本からわかる有限要素法』森北出版株式会社, 2008
- [5] Keras, https://keras.io/,2021.07.01.
- [6] Diederik Kingma; Jimmy Ba Adam: A Method for Stochastic Optimization, arXiv:1412.6980v1,2021.07.01
- [7] 岡谷貴之『画像認識のための深層学習の研究動向』,人工知能学 会,31(2),pp.169-179

Short-term prediction using RBF network

with coordinate transformation

Kohei Saito^{1*}, Satoshi Kitayama²

¹Graduate school of natural science and technology, Kanazawa University ²Advanced manufacturing technology institute, Kanazawa University ksaitou.cl.816@stu.kanazawa-u.ac.jp

Abstract. In this paper, we present a short-term prediction using RBF network with affine transformations. By incorporating an affine coordinate transformation into the conventional RBF network, we can make predictions that take into account the direction of the data. In other words, the prediction is performed in a rotational coordinate system and the predicted value are returned to an absolute coordinate system. It is found from numerical result that the prediction accuracy is improved by using affine transformation.

Keywords: Short-term prediction, RBFnetwork, Time series, Affine transformation

1. Introduction

RBF network is one of the artificial neural networks that use Gaussian functions as basis functions. Short-term prediction by RBF network has been shown to be highly accurate and computationally inexpensive⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾. However, short-term prediction using RBF networks does not take into account the direction of the time series. So, we introduce a method considering the direction of the time series by affine transformation.

2. Short-term prediction of time series using RBF network

Nonlinear modeling with RBF networks $\tilde{y}^{(t)}$ can be expressed as follows

$$\tilde{y}^{(t)} = \sum_{j=1}^{m} w_j^{(t-\tau)} K\left(\boldsymbol{x}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_j^{(t-\tau)}\right)$$
(1)

Where t is the current time, τ is the delay time, m is the number of training data, and, $w_i^{(t-\tau)}$ is the *j*-th weight.

 $K(\mathbf{x}^{(t-\tau)}, \mathbf{x}_j^{(t-\tau)})$ represents the basis function at the current time and is given by

$$K\left(\boldsymbol{x}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{j}^{(t-\tau)}\right) = \exp\left(-\frac{\left(\boldsymbol{x}^{(t-\tau)}, -\boldsymbol{x}_{j}^{(t-\tau)}\right)^{T}\left(\boldsymbol{x}^{(t-\tau)}, -\boldsymbol{x}_{j}^{(t-\tau)}\right)}{r_{j}^{2}}\right)$$
(2)

In the above equation, $x_j^{(t-\tau)}$ and r_j are the center and radius of the *j*-th basis function. Learning in RBF network is to find the weight vector $w^{(t-\tau)}$ in equation (1), which is obtained by the following equation.

$$\boldsymbol{y}^{(t-\tau)} = \left(\boldsymbol{K}^{(t-\tau)T}\boldsymbol{K}^{(t-\tau)} + \boldsymbol{\Lambda}\right)^{-1} \boldsymbol{K}^{(t-\tau)T} \boldsymbol{y}^{(t)}$$
(3)

 $K^{(t-\tau)}$, Λ in the above equation are expressed by the following equations, respectively.

$$\boldsymbol{K}^{(t-\tau)} = \begin{bmatrix} K\left(\boldsymbol{x}_{1}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{1}^{(t-\tau)}\right) & K\left(\boldsymbol{x}_{1}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{2}^{(t-\tau)}\right) & \cdots & K\left(\boldsymbol{x}_{1}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{m}^{(t-\tau)}\right) \\ K\left(\boldsymbol{x}_{2}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{1}^{(t-\tau)}\right) & K\left(\boldsymbol{x}_{2}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{2}^{(t-\tau)}\right) & \cdots & K\left(\boldsymbol{x}_{2}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{m}^{(t-\tau)}\right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K\left(\boldsymbol{x}_{m}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{1}^{(t-\tau)}\right) & K\left(\boldsymbol{x}_{m}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{2}^{(t-\tau)}\right) & \cdots & K\left(\boldsymbol{x}_{m}^{(t-\tau)}, \boldsymbol{x}_{m}^{(t-\tau)}\right) \end{bmatrix}_{m \times m}$$

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda \end{bmatrix}_{m \times m}$$
(4)

In equation (5), λ represents the parameter for the weight. (e. g. $\lambda = 1.0 \times 10^{-2}$)

Therefore, the predicted value $\tilde{y}^{(t+\tau)}$ at time $t + \tau$ is calculated as follows using the input data at $\mathbf{x}^{(t)}$ the current time.

$$\tilde{y}^{(t+\tau)} = \sum_{j=1}^{m} w_j^{(t-\tau)} K\left(\boldsymbol{x}^{(t)}, \boldsymbol{x}_j^{(t-\tau)}\right)$$
(6)

3. RBFnetwork incorporationg affine transformation

3.1 Affine-RBF network



Fig.1Coordinate transformation for output vector using affine transformation

We focus on the direction of time series. The time series are fixed in an absolute coordinate system, but they are converted to a rotating coordinate system using affine transformation (Fig. 1). In Fig. 1 the black dots indicate the output vector and the white dots indicate the predicted points.

3.2 Conversion using Affine Transformation

(a) Output vector conversion method

The output vector in the rotating coordinate system $Y_j^{(t)}$ (j = 1,2,3) shown in Fig. 1 (a) is the output vector in the absolute coordinate system. It can be obtained using Eq. (7).

$$\begin{cases} t^* \\ Y_j^{(t*)} \end{cases} = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & -t_0\cos\theta - y_0\sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta & t_0\sin\theta - y_0\cos\theta \end{bmatrix} \begin{cases} t \\ y_j^{(t)} \\ 1 \end{cases} \quad j = 1, 2, \cdots, m$$
(7)

(b) Input vector conversion method



(a) Absolute coordinate system (b)Rotated coordinate system

Fig.2 Coordinate transformation for input vector using affine transformation

The coordinate transformation of the *K*-th input vector $x_{j,K}^{(t)}(K = 1, 2, \dots, k : j = 1, 2, \dots, m)$ is performed as shown in Fig. 2.(T_0, x_0, K) in Fig. 2 (a) shows the time in the absolute coordinate system, and this point corresponds to the origin O in the rotating coordinate system in Fig. 2 (b).

The K-th element of the j-th input vector in the rotating coordinate system is given by Eq. (8).

$$\begin{cases} (t-i\tau) * \\ X_{j,K}^{(t-i\tau)*} \end{cases} = \begin{bmatrix} \cos\theta_K & \sin\theta_K & -t_0\cos\theta_K - x_{O,K}\sin\theta_K \\ -\sin\theta_K & \cos\theta_K & t_0\sin\theta_K - x_{O,K}\cos\theta_K \end{bmatrix} \begin{cases} t-i\tau \\ x_{j,K}^{(t-i\tau)} \\ 1 \end{cases} \quad i = 1,2,\cdots,p(8)$$

Then, short-term prediction using the RBF network is performed in the rotating coordinate system.

When converting the predicted value \tilde{Y} in the rotating coordinate system to the absolute coordinate system again, the calculation is performed using the equation (9) without using the inverse matrix of the equation (7).



Fig. 3 Relation between rotated and absolute coordinate system

Here, the relationship between the absolute coordinate system and the rotating coordinate system shown in Fig. 3 is given by Eq. (10).

$$\begin{cases} t+\tau\\ \tilde{y}^{(t+\tau)} \end{cases} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & t_0\\ \sin\theta & \cos\theta & y_0 \end{bmatrix} \begin{cases} (t+\tau) *\\ \tilde{y}^{(t+\tau)*}\\ 1 \end{cases}$$
(10)

3.3 Example of short-term prediction by RBF network using affine transformation

An example of short-term prediction by RBF network to Delayed logistic equation (Eq.11) shown below and short-term prediction by RBF network using affine transformation is shown (Fig. 4). Here, $a = 1.3, b = 1, \tau = 1$ initial value $\phi = 0.1$ is used⁽⁴⁾. The solid line shows the time series data, and the white circle shows the prediction. When the white circle is on the solid line, it means that the prediction is highly accurate. It is found from the numerical result that the prediction accuracy is improved by the proposed method.



Fig.4 Illustrative example of nonlinear prediction of using Affine-RBF network

4. Coclusion

In this paper, we propose a method for short-term prediction using RBF network with affine transformation. The conventional training data is fixed in the absolute coordinate system, and the prediction accuracy is insufficient. By applying the proposed method to the Delayed logistic equation, the prediction accuracy by the proposed method is improved than that of the conventional method.

References

- [1] He,X. and Lapedes,A.,Nonlinear modeling and prediction by successive approximation using radial basis functions,*Physica D* Vol.70(1993),pp,289-301
- [2] Gan, M., Peng, H., and Dong, X. P., A hybrid algorithm to optimize RBF network architecture and parameters for nonlinear time series prediction, Applied *Mathematical Modelling*, Vol. 36, Issue 7 (2012), pp.2911-2919.
- [3] Du, H. and Zhang, N., Time series prediction using evolving radial basis function networks with new encoding scheme, *Neurocomputing*, Vol. 71 (2008), pp.1388-1400.
- [4] Aihara,Kazuyuki, Basics and Applications of Chaotic Time Series Analysis, Sangyou Tosho(2000).(Japanese)

機械学習を使用した和太鼓演奏者の判別 Discrimination of Japanese drum player using machine learning

豊田 佳奈子 ¹,田村 裕 ^{1*} Kanako TOYODA¹,Hirosh TAMURA^{1*}

1中央大学大学院 理工学研究科

¹Graduate school of Science and Engineering, Chuo University

*tamura@elect.chuo-u.ac.jp

Abstract. The AI boom is occurring due to improvements in computer functions. Machine learning can play music automatically. However most of those are Western music. There is a previous study of automatic Japanese drums performance. In this research, We distinguish between performance of Japanese drum experts and automatic performance .

Keywords: Computer simulation, Machine learning, Japanese drum

1. まえがき

近年は計算機の能力向上や深層学習の技術が発達しAIブームが起きている。深層学 習では膨大なデータからAIが自ら学習し特徴を取得できるようになり、文字の生成 や音楽の自動演奏を行うことが可能になった。この様な音楽演奏や楽譜の生成の歴史 は長く、初めは音楽を作る為の作曲方法の知識を実装した[1]。次に音楽のデータベ ースを使用し[2]、その後統計的な確率モデルを基に自動的に制作[3]が可能になった。 しかしこの様にして制作される音楽のほとんどが西洋の音楽が多く日本古来の音楽 の自動演奏というものはまだあまり事例がない。

埼玉県秩父地方に分布し古くから伝承されている秩父屋台囃子[4]というお囃子が ある。これは秩父夜祭で演奏され、楽器の編成は大太鼓、小太鼓、笛、鉦である。秩 父屋台囃子は大太鼓と小太鼓が一緒に練習を行うものであるが、地方の過疎化問題な どで継ぎ手が減少してしまい大太鼓の演奏者と小太鼓の演奏者が同時に練習する機 会が減ってきている。ここで、大太鼓や小太鼓の演奏方法を機械学習[5]により学習 させ自動演奏を可能にすることで、演奏者が個人で練習する機会を増やし伝統の保存 に役立てようとする研究が存在する。先行研究[6][7]では和太鼓の自動演奏に焦点を 当てていたが、出来上がった音声データが実際のお囃子に近いかを判定する際に秩父 屋台囃子を知っている知っていないに関係なく複数人にアンケートを行うことでし

か実現出来ていなかった。そこで本研究では、自動演奏が実際の演奏に近いのかを人間の感覚ではなく客観的に評価し判別する一環として、機械学習による小太鼓の自動 演奏と熟練者の演奏した小太鼓の演奏を判別するプログラムの作成を目標とした。

2. 研究手順

本研究で使用した特徴量は1分間での拍数を表す BPM、フーリエテンポグラムと呼ばれるノベルティファンクションに対し、短時間フーリエ変換を適用し得られた振幅 スペクトルの2つである。使用した学習方法は、SVM[8]、決定木[9]、3最近傍法[10]、 ベイズ分類器[11]である。

1) SVM は Support Vector Machine の略で、入力されたデータを2グループに分け る為に境界線を引くことを考え、境界線に最も近いグループの異なる2点と境界線の 距離がもっとも大きくなるように境界線を引くことを考えるアルゴリズムである。

2)決定木は、木構造を用いて入力されたデータに条件を与え2分割することを繰り 返し、子ノードに割り当て、最終的に子ノードに存在するデータが1種類になるまで 条件を与え続けるアルゴリズムである。

3)3 最近傍法は、新しいデータを入力しグループを割り当てる際に、新しく入力さ れたデータから最も近く、且つ既にグループを割り当てられたデータを3つ選び、選 ばれたデータの中で数の多い方のグループに新しいデータを割り当てるというアル ゴリズムである。

4) ベイズ分類器は、ベイズの定理を用い、データの特徴量は独立で互いに相関がない と仮定したとき、まず初めにデータが与えられたときの全ての推定の確率を求め、最も確 率の高い推定結果を出力するアルゴリズムである。

BPM を特徴量としたとき、熟練者の演奏した小太鼓の音源データと、機械学習によ り作成した小太鼓の自動演奏の音源データを共に Python 用音楽解析モジュールであ る LibROSA [12]を利用し 120 秒分取り込んだ。その後 2 秒ごとに音源を区切りデー タセットを作成した。フーリエテンポグラム特徴量としたとき、熟練者の演奏した小 太鼓の音源データと、機械学習により作成した小太鼓の自動演奏の音源データを共に LibROSA を利用し 120 秒分取り込んだ。その後、5 秒、10 秒と音源を区切りデータセ ットを作成した。

3. 研究結果及び考察

BPM を特徴量として使用した時の判別精度の結果を表1に記した。フーリエテンポ グラムを特徴量として使用した時の判別精度の結果を表2に記した。

特徴量	学習方法	判別精度	
BPM	SVM		47%
BPM	決定木		57%
BPM	3最近傍		53%

表1 BPM を特徴量としたときの判別結果

表 2	フ	ーリエテン	/ポグラ♪	ふを特徴量と	しデータセッ	ト数を変	化させたと	きの判別結果
-----	---	-------	-------	--------	--------	------	-------	--------

特徴量	学習方法	判別精度(5秒ごと区切った)	判別精度(10秒ごと区切った)
フーリエテンポグラム	svm	100%	100%
フーリエテンポグラム	決定木	93%	100%
フーリエテンポグラム	3最近傍	100%	100%
フーリエテンポグラム	ベイズ分類器	98%	99%

BPM を特徴量として使用したとき表 1 を見ると判別出来ている確率は 50%前後と 全く判別することが出来なかった。これは使用した熟練者の音源と機械学習による自 動演奏の音源では図1及び図2を見ればわかるようにテンポに違いがほとんどなく1 分間での拍数を表す BPM では判別することが出来なかったことが原因だと考えられ る。図1及び図2は横軸が時間(seconds)であり縦軸は振幅である。テンポの違いか ら演奏者を判別したかったので新しくフーリエテンポグラムを特徴量として使用し た。このとき表2よりどの学習方法でも熟練者の演奏と機械学習による自動演奏を判 別出来ている事が分かる。フーリエテンポグラムは発音のタイミングが分かりやすい ように加工した信号であるノベルティファンクションに対し、短時間フーリエ変換を 適用し得られた振幅スペクトルである。本研究では音源を5秒又は10秒ごとに配列 に格納しそのデータにフーリエテンポグラムを適用させた。これは区切られた音声デ ータごとに窓関数をかけ周波数分析を行うことになるため、発音のタイミングと小太 鼓演奏の音の高低を考慮することができ、特徴量を上手く作れたのではないかと考え られる。更に図3及び図4を見ると、熟練者のスペクトログラムでは0[dB]のときの 周波数は 384[Hz]であり、自動演奏のスペクトログラムは 0[dB]のときの周波数は 128[dB]となっている。このことからも演奏の特徴の違いが表れている。図3、図4共 に横軸は時間(minutes)を表し縦軸は周波数(Hz)を表しており、色で1分間での拍数 を表している。

表2を見ると曲を区切る長さを5秒から10秒にすると精度が高くなっていること が分かる。これを確認するために今までの3つの学習方法とは異なるベイズ分類器と いう学習方法を使用し、この学習方法でも判別精度を上げることが出来た。以上から、 入力した音源を短時間フーリエ変換する際に5秒ずつ区切ったものよりも10秒ずつ 区切ったものの方が音声信号の情報量が大きくなり特徴量として良いものになった のではないかと考えられえる。



図1 時間ごとの熟練者の演奏の振幅を表す波形



図2時間ごとの機械学習による自動演奏の振幅を表す波形



図3熟練者の演奏のスペクトログラム

図4自動演奏のスペクトログラム

4. 今後の課題

今後の課題としては以下の2点が考えられる。1つ目は、今回の研究では秩父屋台 囃子の小太鼓の音声データが熟練者によって演奏されたものか、機械学習による自動 演奏かを判別することしかできない。よって機械学習による演奏が上達しているかを 判別することは実現出来ていないので今後の課題である。2つ目は、今回は秩父屋台 囃子の小太鼓の演奏に限定して研究を行ったが他の打楽器でも違いを判別できるか 検証することも今後の課題である。

参考文献

[1] Sundberg, J., Askenfelt, A. and Fryden, L.: Musical Performance, A Synthesis-by-RuleApproach, Computer Music Journal, Vol.7, pp.37-43(1983).

[2] Cope, D.: Machine Models of Music, MIR Press, pp.403-425(1992).

[3] Pachet, F. and Roy, P.: Markov Constraints: Steerable Generation of Markov Sequences, Constraints, Vol.16, No.2, pp.148-172(2011).

[4] www.asahi-net.or.jp/~qj4t-nkmr/yataibayashi2/yataibayashi.htm

[5] https://www.codexa.net/what-is-machine-learning/

[6] 佐藤信太郎 "和楽器における機械学習を用いた演奏支援システムについて"中央大学理工学研究科電気電子情報 通信工学専攻 修士論文 2019

[7] 岡本和巳 ″機械学習を用いた和太鼓の自動演奏について″中央大学理工学部電気電子情報通信工学科 卒業論文 2019

[8] https://avinton.com/academy/svm

[9] https://qiita.com/3000manjPY/items/ef7495960f472ec14377

[10] https://qiita.com/yshi12/items/26771139672d40a0be32#:

[11] https://qiita.com/aflc/items/13fe52243c35d3b678b0

[12] https://www.wizard-notes.com/entry/music-analysis/librosa

移動音の移動方向知覚に関する研究 -適応法による検討-Perception of Direction of Moving Sounds. -Study on Adaptive Method-

瀧澤 哲^{1,*}, 工藤 彰洋¹ Tetsu Takizawa^{1,*}, Akihiro Kudo¹

1 苫小牧工業高等専門学校

¹National Institute of Technology, Tomakomai College

*tt20805@tomakomai.kosen-ac.jp

本論文のフルペーパーは、日本シミュレーション学会論文誌に掲載されています.

DOI: https://doi.org/10.11308/tjsst.14.71

第5世代移動通信システムにおけるエッジコンピ

ューティング用サーバの設置方法について A Method for setting up Servers for Edge Computing in Fifth-Generation Mobile Communication Systems

江原 亮太¹, 田村 裕^{1*} Ryota EHARA¹, Hiroshi TAMURA^{1*}

¹中央大学大学院 理工学研究科 ¹Gladuate School of Science and Engineering, Chuo University * tamura@elect.chuo-u.ac.jp

Abstract. While the 5th generation mobile communication system (5G) has improved communication speed and capacity compared to the conventional communication systems, it also has the problem of reduced communication range and obstacle tolerance. To solve this problem, a method called mobile edge computing (MEC) has been proposed, in which a Simplified server is installed close to the terminal to perform some of the processing on its behalf, thereby reducing the burden on the main server and shortening the communication distance at the same time. In this paper, we will examine the location of a simple server that enables efficient communication under the assumption that the server is installed in a base station.

Keywords: Fifth Generation Mobile Communication Systems, Mobile Edge Computing

1. まえがき

従来の移動通信システム(4G や LTE と呼ばれるシステム)より通信能力を向上させた 第5世代移動通信システム(Fifth Generation Mobile Communication Systems:以降5G と表記する)が現在普及に向けて整備が進められている。5G は通信速度や通信容量の向 上を達成した反面、通信範囲の縮小や直進性の強化による対障害物耐性の低下、通信量の 肥大化によるメインサーバの処理能力の限界による処理作業の遅延といった問題が生じ ている[1]。前者2点の問題については中継用の基地局を増やすことで対処している。一 方後者の問題を解決するにあたり、端末-メインサーバ間の通信路上に簡易的な処理用 サーバを設置して一部の処理を肩代わりさせるモバイルエッジコンピューティング (Mobile Edge Computing System:MEC)という技術の導入が考えられている[2]。

本稿では、この簡易サーバ(以降 MEC サーバと表記する)の配置について、中継用の基地局の一部に MEC サーバを設置する条件下で、通信効率の良いサーバの設置場所を検討していく。

2. シミュレーション

高速通信を保持するためには、基地局から一定の距離以内に MEC サーバを設置す る必要がある。この時必要なサーバの数が少なくなるように設置方法を検討する。

1×1[km²]の2次元空間をシミュレーションエリアとし、エリア内に母点をランダムに配置する(図1)。この母点を基地局の設置箇所とし、エリア内のすべての基地局がMECサーバを仲介して相互に高速通信を行える状態が成立するよう、MECサーバを基地局上に設置していく。5Gでの高速通信を成立させる条件として、静止時に通信距離が約0.3[km]の状態で成立している[3]ことから、本稿では半径0.25[km]圏内で高速通信が成立するという条件のもとMECサーバを設置する。また、MECの並列処理の上限を直接接続する基地局5基分と仮定してシミュレーションを行う。

シミュレーションの初期状態として、MEC サーバが設置されておらず、最初のサ ーバ設置場所を任意の基地局から1基選ぶ場合(パターン①)と、あらかじめなるべく 均等な配置になるよういくつかの MEC サーバを設置した状態を考え、後者について 4 等分した場合(パターン②)と9 等分した場合(パターン③)の2 つのパターンで初期 の MEC サーバの配置を考える。

まず、設置された MEC サーバの高速通信圏を確認し、サーバと接続されていない 基地局から優先的にサーバの接続上限まで接続していく。その後エリア内の全ての MEC サーバの高速通信圏内にある基地局 (図2の黒円内の母点)からサーバ未接続の 基地局(マークのついてない母点)を優先してランダムに1基選択し、新たな MEC サ ーバを設置する。この作業を繰り返し、エリア内のどの MEC サーバにも接続してい ない基地局が存在しないかつすべての MEC サーバが高速通信のみで相互接続できる 状態になった時にシミュレーションを終了する。

これらのシミュレーションを 10 通りの基地局の配置で実行し、MEC サーバの設置 数の平均をとる。また、基地局数を変化させた場合について同様にシミュレーション を行う。

シミュレーションの設定を表1にまとめる。



(基地局 30 基)



図 2. MEC サーバ(赤円)への接続例 (接続済み基地局:青円)
表 1. シミュレーション設定				
シミュレーションエリア	1[km]×1[km]の2次元空間			
基地局(母点)配置	ランダム			
高速通信圈	半径0.25[km]圈内			
MEC-基地局間接続条件	MECの高速通信可能領域内			
MECサーバの接続上限	基地局5基分(サーバを設置した基地局を含む)			
MECの初期配置パターン	①0基、②5基(4等分+エリア中心)、③9基(9等分)			
MEC設置割合算出方法	(MEC設置数/基地局数)×100[%] (下限20%)			

3. 結果と考察

表1の設定を適用し、基地局数が30基の場合および50基の場合についてシミュレーションを行った。シミュレーション結果の一例を図3~図6に示す。また、シミュレーション結果について、基地局の総数に対するMECサーバの設置割合の平均を表2に示す。

基地局数が30基の場合、あらかじめMECを設置するパターン②や③よりMECサ ーバを設置していない状態から開始したパターン①のほうがMECサーバの総設置割 合が明らかに少なくなる傾向がみられる。基地局数が少ないとき、配置状況次第では 基地局が密集している空間や反対に基地局がほとんどない空間が生じる。均等配置で は基地局の配置状況に関係なくエリア内になるべく等分にMECサーバを設置した状 態を初期状態とするため、密集地帯に設置されたサーバがカバーしきれずに追加設置 量が多くなったり、基地局間距離が離れているためにMECサーバ同士の高速通信を 成立させるためにサーバを多数設置する必要ができてしまうことが要因となり、結果 としてMECサーバの総設置割合が多くなる傾向がみられるものと考えられる。

基地局数が 50 基の場合、傾向は 30 基の場合に類似しているが、MEC サーバの総設置割合の差が小さくなっている。これは基地局数が増えたことにより、パターン①の場合でも必要な MEC サーバの設置数が増え、あらかじめ設置しているパターン② や③の状況に近づいたためと考えられる。



図 3. パターン①(30 基)の例



図 4. パターン②(50 基)の例 (赤円は初期配置上の MEC サーバ)



図 5. パターン③(30 基)の例

図 6. パターン③(50 基)の例

表 2.	シ	Ξ	ユ	レー	シ	Э	ン結果
~~ =-	•	``	-	•	•		• 11H / IN

シミュレーション	パターン①		パターン②		パターン③	
	30基	50基	30基	50基	30基	50基
MEC総配置割合	34.30%	23.20%	59.30%	25.60%	47.00%	33.20%

4. まとめと今後の課題

本稿では、MEC サーバを用いた高速通信を実現する際、MEC サーバの設置数を最 小化するためにはパターン②や③が必ずしも有効な手法ではないという結果が得ら れた。

今回のシミュレーションでは、エリア内に通信の妨げとなりうるような障害物が配置されていない平面空間を舞台としたが、現実空間により近いシミュレーションを行う上では電波を遮断しうる障害物が存在する空間でのシミュレーションが必要であると考えられる。また、基地局以外のところに MEC サーバを配置していく場合についての設置手順の考案も今後の課題として考慮していく必要がある。

参考文献

[1] 5Gの商用化から普及に向けての課題:株式会社 日立ソリューションズ・クリエイト ト

https://www.hitachi-solutions-create.co.jp/column/mobile/5g-task.html 最終閲覧日:2021年7月14日

- [2] 5Gの技術を整理する 当初はなぜ高速大容量通信しか使えないのか?:5Gビジネスの神髄に迫る ITmedia Mobile
 https://www.itmedia.co.jp/mobile/articles/2004/24/news083_2.html
 最終閲覧日:2021年7月14日
- [3] 岸山祥久,原田篤,余波、ベンジャブールアナス,奥村幸彦:"ミリ波を用いた超高速・長距離伝送の5G屋外実験",NTT DOCOMO テクニカルジャーナル Vol.26 No.1 PP.25-32, 2018.

グラフ畳み込みネットワークによる数独の解法 Solving Sudoku with Graph Convolutional Networks

石井 宏一郎¹, 田村 裕^{1*} Koichiro Ishii¹, Hiroshi Tamura^{1*}

1 中央大学大学院 理工学研究科

*tamura@elect.chuo-u.ac.jp

Abstract. Sudoku is a puzzle type in which a 9×9 grid is filled in with numbers, based on numbers that have already been filled in. Graph convolutional networks (GCN) have recently become a popular method for deep learning using graph representations. This paper considers Sudoku as a graph structure and tries to these puzzles using GCN. In solving Sudoku puzzles, individuals use the candidate numbers in the blank fields as clues. With a GCN, these candidates can be regarded as features for learning. Therefore, we thought this structure would more easily reveal Sudoku's features for learning and how they operate, making the learning process more closely resemble the way humans solve puzzles. Additionally, Sudoku puzzles have recently been created with different rules, and this GCN model is sufficiently flexible to be applied to these new puzzles. We prepared some learning models with different structures and feature values. In the paper's final section, we compared and discussed differences in these models' learning accuracy.

Keywords: Machine learning, Sudoku, GCN

1. まえがき

ディープラーニングによる機械学習は技術の発展と共に大きく進化を遂げたと同時に、世間一般にも広く知られるようになった。この要因の一つとして、画像処理分野への機械学習の適用が大きな成功を収めたことが挙げられる。この分野では順伝搬型ニューラルネットワークの一つ、畳み込みニューラルネットワーク(CNN; Convolutional Neural Network)が主流に使用されている。ここで用いられる畳み込み演算は、入力データに対して同じ次元を持ったフィルタをずらしながら積和計算するため、データの形状を維持したまま学習が可能なことが特徴である。しかし、この演算は格子状などの一定の規則性が入力データの形状に必要とするために、任意の形をしたデータに対しては適用できなかった。そこで任意の構造を持ったデータ、主にグラフ構造に対しても畳み込みニューラルネットワークと同様の処理によって学習する方法がこれまでに様々考案され、その一つがグラフ畳み込みネットワーク(GCN; Graph

Convolutional Network)である[1]。

本論文ではグラフ畳み込みネットワークを利用し、数独[2][3]の解答を試みる。数 独の解答への畳み込みニューラルネットワーク(CNN)の適用はこれまでいくつか存 在し[4][5]、99%の精度を出している。この方法ではフィルタを用いて数独の問題の 各行、各列、各ブロックでの特徴を取り出すことで学習する。この時フィルタは複数 個用意され、この数によって精度が変動するため、各区画の特徴を正しく把握するこ とが難しい。そこでグラフ畳み込みネットワークを用いることによって各マスの接続 関係から得られる各マスの特徴を数独に適用することで、人間が解く際に参考にする 「候補」と特徴量を対応づけることができ、特徴を理解しやすく、また解き方を人間 らしさに近づけることができると考えた。

2. グラフ畳み込みネットワーク

ノードとノード間を結ぶエッジから構成される構造をグラフ構造と呼ぶ。グラフは ノードごとの接続関係に規則性がないため、通常の畳み込み演算をそのまま適用する ことができない。そこで接続しているノードからと自身のみの情報を足し合わせた後、 重みを乗じることで自身の情報を更新するという操作により、畳み込み演算を定義し ている。ノードiにおける畳み込み演算は以下の式で表される[1]。

$$h_i^{(l+1)} = \sigma(\sum_{j \in N_i^k} \frac{1}{c_{i,j}} W_1^{(l)} h_j^{(l)} + W_0^{(l)} h_i^{(l)})$$

ここで $c_{i,j}$ は正規化をするための定数、 N_i^k はノード i から k 以下の距離でつながっている近傍ノードの集合、 $W^{(l)}$ はネットワークの1層における学習重み行列、 $\sigma(\cdot)$ はネットワークの出力を決定する活性化関数を表す。

また、この畳み込み処理の概略図を以下図1に示す。各点において隣接している点 から矢印の方向に情報を取り込む。最後に活性化関数に通して1層の処理が終了する。 本論文では活性化関数として、0以下なら「0」、0よりも上であれば「入力値と同 じ値」を返す関数 ReLU を用いている。



3. 数独の解法への適用

人間が実際に数独を解く際、それぞれのマスに入る数字の候補を絞っていく。この 解き方と同様に、初期配置から各マスの候補をベクトルに対応させたものを各点の特 徴とし、グラフ畳み込みネットワークを構成することで、数独の学習を試みた。すで に最初に数字が配置されているマスは情報を更新する必要はないが、そのままの構造 であるとすべての点(マス)が情報を更新する対象となるため、問題の空欄のみが更 新し続けるような構造にする。ネットワークの出力と正解ラベルとの差を交差エント ロピー誤差として表すと、繰り返し回数(横軸)による誤差(縦軸)の推移は以下のよう になった。また、ネットワーク層は3層である。





以上の結果よりエントロピー誤差は全体的には減少しているが振動は続いてしま っており、問題によって精度に大きなブレができてしまっていると考えられる。 次に、実際にはどの程度の正解率になるのかを調べるために、教師データとテスト

データからそれぞれ1問を選び、その問題の正解率が繰り返し回数によってどのよう に変化するかを調べた。縦軸は正解率、横軸はエポック数をそれぞれ表す。



図3 同じ問題の1エポックごとの正解率

JSST 2021

図より、およそ8割の正解率を保ってはいるが、すべてのマスを正解させることは できていない。人間が解くときは1マス1マスを確実に埋めていく、この方法を真似 して、ネットワーク出力の確率が高いマスから1つずつ埋めていくようなループ構造 にしてみたが、結果は図3と同じであった。結果としてこの構造では完全に一問を解 くことは難しい。

4. まとめと今後の課題

数独をそのままグラフ畳み込みネットワークに適用させたときの学習は、結果として まだ精度の面に難が残る結果となった。数独はルールとして数字に意味を持たず、各数 字の場所の入れ替えが可能なほか、記号などで代替することができる。今回はこのよう な性質を学習が不十分であったと考えられる。学習データの難易度を非常に簡単にする ことや、候補の表し方をベクトルでなく、1つの数にまとめることで、点や辺の特徴を さらに特徴づけたものとすることなどをすることにより、この性質を十分に学習させる 改善が今後の課題となる。

数独の問題の難易度は、問題の空欄の数によってある程度分類されているが、この空 欄の数と難易度は一般的には比例しないため、製作者によって決定されることが多い。 このように数独の難易度はいまだ明確に定義できていない。ニューラルネットワークに より難易度を計算する手法なども提案されているが[6]、特徴の人間らしさをもつ GCN に よって数独の解法、テクニックを何らかのフィルタとして表現することによって、将来 解法の難易度などの人間が理解できる根拠による難易度の定義ができるのではと考えて いる。

参考文献

[1]立花誠人 村田剛志:構造特徴とグラフ畳み込みを用いたネットワークの半教師あ り学習 人工知能学会論文誌 34(5), B-IC2 1-8, 2019

[2]Tom Davis: "The Mathematics of Sudoku | Mathematical Circles Topics"

http://www.geometer.org/mathcircles/ (2021 年閲覧)

[3]数独 - Wikipedia

https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%95%B0%E7%8B%AC (2021 年閲覧)

[4] Shiva Verma: "Solving Sudoku with Convolution Neural Network | Keras" (2019)

<u>https://towardsdatascience.com/solving-sudoku-with-convolution-neural-network-ker</u> <u>as-655ba4be3b11</u> (2021 年閲覧)

[5] GitHub, "nnethercott /Sudoku-CNN"

https://github.com/nnethercott/Sudoku-CNN (2021 年閲覧)

[6] 天野秀亮 篠埜功 杉本徹: ニューラルネットワークによる数独の難易度判定手法の提案 信学技報, vol. 112, no. 319, AI2012-17, pp. 13-18, 2012 年 11 月.

無人航空機を利用した中山間地域における配達に

ついて

On delivery methods using UAV in hilly and mountainous areas

增子 裕斗^{1*}, 田村 裕² Yuto MASHIKO^{1*}, Hiroshi TAMURA²

1中央大学大学院 理工学研究科

¹ Graduate School of Science and Engineering, Chuo University *tamura@elect.chuo-u.ac.jp

Abstract. UAV(drones) are growing rapidly and expectations for drones are rising for a variety of reasons. This paper shows the usefulness of delivery using drones. The result of the simulation shows that it was found that four drones are required to work for one car. In addition, the fastest delivery can be completed by flying the drone in parallel with the car and delivering it.

Keywords: Computer simulation, Drone, Delivery Service

1. まえがき

近年、特に中山間地域において、「買い物難民」と呼ばれる自身で身体的理由や経済的理由等により買い物に行くことができず、日用品を買うことが困難となる人々及びその現象が問題となっている。この問題の解決策の1つとして流通業の強化がある。その中でも商品そのものが家の玄関までやってくる「宅配サービス」について本稿では考える。宅配業の者が利用者が頼んだ商品を届けてくれるので、利用者本人は家から出ることなく食料品や日用品などの生活必需品のみでなく、娯楽品なども手に入れることが出来る。

しかし、昨今のインターネットの普及につれインターネットショッピング等の利用 者が増え、宅配業車にかかる負担が以前よりはるかに増している。その結果、宅配業 者は1日に150~200個の配達を行うことになっている。

そこで、本稿では人による配達ではなく、小型無人航空機(ドローン)を用いた荷

JSST 2021

物配達について考える。現在ドローン市場は急速に成長しており、少子高齢化による 慢性的な労働力不足や人件費高騰による省力化・無人化の促進と低コスト化などの理 由によりドローンへの期待が高まっている[1]。実際に、2021年1月に楽天が三重県 にある離島への配送サービスを行っている[2]。本項では、まずドローン1台による配 達に必要な時間と自動車1台による配達に必要な時間とを比較して、ドローン1台分 の働きについて考察する。さらに、ドローン単独だけでなく、自動車とドローンとを 併用する形で配達を行うときについても考え、その場合に必要な時間を比較すること で、ドローンの有用性ついて検討を行う。また、それぞれの場合における環境への影 響についても考察する。

2. シミュレーション

今回のシミュレーションにおけるモデルは10[km]×10[km]の正方形エリアとする。 その中心の座標は(5000,5000)であり、エリアの四隅の差表を(0,0)、(10000,0)、(0,10000)、 (10000,10000)とする。

このエリア内において、中心に配送拠点を置き、配達利用者の家を100軒ランダム に配置する。このエリアについて概形を図2-1に示す。利用者は場合によりドローン による配達なのか自動車による配達なのかを決定する。場合については、ドローン1 台による配達を行う場合、自動車1台における配達を行う場合、自動車とドローンを 各1台ずつ用いた場合の大きく分けて3つの場合について考える。自動車とドローン とを用いた場合のそれぞれの動きについて図2-1に追記し示す。

ドローンの速度については、実際に岩手県において実験に使用されたドローンをも とに 55[km/h]として考える[3]。また、ドローンの配達については、基本的に目的の配 達が終了したら中央の配送拠点に戻り次の配達分の荷物を積むこととする。ただし、 自動車とドローンを併用した場合については、ドローンは中央の配送拠点に戻らず、 同エリア内を走行している自動車のもとへ飛行し、そこで次の配達分の荷物を受け取 るものとする。また、自動車については、基本的に時速 60[km]で走行するものとし、 ランダムで一時停止や信号待ち等を考慮した待機時間を考慮してシミュレーション を行うこととする。また、荷物の積み下ろしや受け渡しの時間は考慮しないものとす る。



3. 結果と考察

二次元エリア下におけるシミュレーションの結果を表 3-1 に示す。

まず、ドローン及び自動車について、各々一台のみを用いた配達について考える。 ドローン一台のみでの配達を方法1、ドローン一台のみでの配達だが、一度に2件分 の荷物を配達できるものとする配達を方法2、自動車一台の配達を方法3とする。本 稿では、ドローンは一度に1件または2件分の荷物しか積むことができず、その都度 荷物を積みに配送拠点に戻らなくてはならないため、サービス利用者の家から家へと 配達を行うことが出来る自動車に比べ2~3.5倍の時間がかかってしまうと考られる。 つまり、自動車一台分の働きをするためには2~4台のドローンが必要となる。

次に、ドローンと自動車を一台ずつ利用した場合の方法4について考える。100件 全ての配達を終える時間は最も速くなっていることがわかる。特にドローンによる配 達については、ドローン1台による配達にかかる時間と比べ4分の1倍と大幅に短 縮されていることがわかる。これは、単純に自動車との併用による配達件数の減少も あるがそれと同時にドローン1台による配達の時とは異なり、ドローンは毎回の配 達時にエリア中央の配送拠点に戻らずに、エリア内を走行する自動車の元へと飛行す るため、このような結果になったと考られる。ドローンによる配達を行う場合、どう しても一度に多量の荷物を積むことが不可能であるため、往復の行程が必須になって しまう。配達にかかる時間を少なくするということは、この往復の工程に必要な時間 を少なくするということであるので、今回のように自動車に並走する形で配達を行う ことで、配達全体に必要な時間を少なくすることが出来ている。ドローンを用いた配 達を行う場合、必要な時間を少なくするにはドローンが何も持たずに飛行している時 間を短くすることが重要だと考えられる。また、配達時間を減少することで、ドライ バーへの負担を減らすことができるが、ドローンを操縦する人間を別に配置する必要 がある。

本条件のもとで、ドローン一台あたりの二酸化炭素の排出量は自動車一台の二酸化 炭素の排出量と比べ、配達件数が同数の場合ドローンの方が約2[kg]程少ない[4]。二 酸化炭素の排出量を一日の配達で約2[kg]減少できるとすると年間で700[kg]以上減 少することができる。

	配達にかかった時間			
シミュレーション条件	二次元エリア			
	ドローン	自動車		
方法1	約 14 時間	_		
方法 2	約9時間	_		
方法3	_	約4時間		
方法4	約 3.5 時間	約 3.5 時間		

表 3-1.シミュレーション結果

4. まとめと今後の課題

本論文では、ドローンを利用した効率の良い配達の仕方について検討を行った。ドローンをうまく活用することで、配達全体にかかる時間を短くできることがわかった。また、 ドローンを使い配達時間を減少させることで、CO2 排出量についても減少できることが わっかたので、ドローンによる配達は環境に優しいという側面も持つといえる。

今後の課題として、地形による変化であったり、家の配置に偏りがあったりと、今回シ ミュレーションを行った場合以外の点にも考慮しなくてはならない。それを考慮したシ ミュレーションを行うことでより精度の高い結果を得ることができると考えている。

参考文献

- [1] 野波健蔵 「「空の産業革命」をもたらすドローンの課題と展望」
 計測と制御 56 巻 1 号 P2 2017 年
 https://www.jstage.jst.go.jp/article/sicejl/56/1/56/2/ article/-char/ja/
- [2] 「楽天、自動飛行ドローンによる配送サービスを離島で提供」楽天株式会社2021年1月6日

https://corp.rakuten.co.jp/news/update/2021/0106_01.html

[3] 「DJI 社製「QS8」を使用した、孤立病院への救援物資輸送に成功!」株式会社 シーカー 2018 年 12 月 10 日

https://prtimes.jp/main/html/rd/p/00000019.000025357.html

[4] Jennifer Langston「Drone vs. truck deliveries: Which create less carbon pollution?」
 UNIVERSITY of WASHINGTON 2017 年 3 月 30 日

Drone vs. truck deliveries: Which create less carbon pollution? | UW News (washington.edu)

複合現実技術を用いた放射線可視化システムの開発 Development of visualization system for radiation by mixed reality technology

飯田 聖人¹, 工藤 颯太郎¹, 河原 梨花², 山口 克彦³, 齋藤 誠紀^{1*} Masato Iida¹, Sotaro Kudo¹, Rika Kawahara², Katsuhiko Yamaguchi³, Seiki Saito^{1*}

山形大学 工学部 情報・エレクトロニクス学科
 ²福島大学院 共生システム理工学研究科 環境放射能学専攻
 ³福島大学 理工学群 共生システム理工学類

¹ Department of Informatics and Electronics, Faculty of Engineering, Yamagata University
² Major in Environmental Radioactivity, Faculty of Symbiotic Systems Science, Fukushima University
³ Faculty of Symbiotic Systems Science, Cluster of Science and Technology, Fukushima University
*saitos@yz.yamagata-u.ac.jp

Abstract. The accident at the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant on March 11, 2011, released a large amount of radioactive materials. It is difficult to work safely only by measuring radiation doses. Moreover, the visualization of the radiation enhances the safety of the work. Therefore, we develop a system that display radiation trajectories and doses by mixed reality technology. In this system, HoloLens2 scans QR codes which contain the information of radiation source. The trajectories of radiation are calculated by a Monte Carlo code PHITS to display on the HoloLens2 screen. **Keywords:** Radiation, Mixed reality, HoloLens

1. 研究背景·目的

2011 年 3 月 11 日に発生した福島第一原子力発電所事故により,大量の放射性物質が 放出された.その影響により,バリケードなど物理的な防護措置が実施され,避難が求め られている区域が現在も存在する.居住可能な区域が増えるように除染作業が実施され ている.

除染作業は線量計測を実施しながら行われる.しかし,放射線を直接目で見ることはで

JSST 2021

きないため、安全な場所を把握しながら作業することが難しい.そこで、本研究では、複 合現実(Mixed Reality: MR)技術を用いて除染作業を補助するシステムを開発する.仮想 空間内に放射線の軌跡や線量を表示し、放射線源や線量を目視で確認できる除染・廃炉作 業補助 MR システムの構築を目指す.

2. 放射線可視化システムの概要

本研究では HoloLens2 という Microsoft 社の MR ゴーグルを用いる. 開発している MR システムは主に HoloLens2, 計算サーバからなる. 計算サーバは, PHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System) [1] と PHITS 制御コードの2つの要素から構成される. PHITS は「あらゆる物質の中で放射線挙動を核反応モデルや核データなどを用いて模擬するモ ンテカルロ計算コード」である. α 線, β 線, γ 線, 中性子線などの放射線のシミュレー ションが可能である. 放射線可視化システムは以下のように動作する.

- ① HoloLens2 の環境認識カメラを用いて線源,遮蔽物の種類,形状,エネルギーが記録 された QR コードを読み取る.
- ② 入手した情報を計算サーバに送る.
- ③ 入手した情報から計算サーバで PHITS 制御コードを実行して PHITS 実行に必要な入 カファイルを作成する.
- ④ 計算サーバで PHITS を実行して線源から放射された放射線の軌跡を計算する.
- ⑤ 計算結果をダウンロードし, HoloLens2 の画面に表示する.

本システムで可視化した中性子線の様子を図1 に示す.円筒形の線源から放出される 中性子線が空気中を進む様子が確認できる.

現在は QR コードを用いて線源, 遮蔽物の情報を読み取っているが, 将来は計測した線 量をもとに線源を特定 [2] することを検討している.また, 周辺環境の三次元情報を計 算に取り入れ遮蔽物によって放射線が遮蔽される様子も計算することを予定している. 本研究における線源, 遮蔽物等の情報の送信とサーバで実行されたシミュレーション結 果の受信を第5世代移動通信システム(5G)を用いて高速に行うことを目指す.



図1 HoloLens2 で可視化した円筒形の線源から放射される中性子線の様子.

参考文献

- [1] T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, P. E. Tsai, N. Matsuda, H. Iwase, N. Shigyo, L. Sihver, K. Niita: Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02, *J. Nucl. Sci. Technol.* 55:5-6 (2018), 684-690.
- [2] T. Uemura, K. Yamaguchi: Estimation of radiation source distribution using machine learning with γ ray energy spectra, *J. Adv. Simulat. Sci. Eng.* 7:1 (2020), 71-81.

JSST 2021

Computation of Micro-particle Dynamics in a Filtration Process with the Coulomb Interaction

Nobuyuki Hirooka^{1,*} and Satoru Ushijima²

¹Department of Civil and Earth Resources Engineering,Doctoral Program,Kyoto University ²Academic Center for Computing and Media Studies (ACCMS), Kyoto University

*hirooka.nobuyuki.85e@st.kyoto-u.ac.jp

The full paper of this paper has been published in Transaction of the Japan Society for Simulation Technology.

DOI: https://doi.org/10.11308/tjsst.14.96

UAV assisted Survivor Search Scheme with Survivor

Density Distribution Prediction

Chen Haosong^{1*}, Kazutoshi Yoshii^{2,4}, Shigeru Shimamoto³

¹Department of Computer Science and Engineering, School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University

*hchen53@ruri.waseda.jp, kazutoshi@suou.waseda.jp, shima@waseda.jp

Abstract. UAVs, which stands for the unmanned aerial vehicle, are being used more and more in disaster search and rescue (SAR) missions due to their fast response time and wide field of view. However, using UAVs in disasters also comes with issues of time and energy constraints. In this paper, we addressed the problem by utilizing the call detail records(CDR) to extract the cellular activity distribution beforehand, and use it in machine learning to predict the future cellular activity distribution, which can be used by the rescue workers to understand what the survivor distribution is like, and plan an optimal UAV SAR mission based on it.

Keywords: UAV, Machine Learning, Call Detail Records, Flight Simulation

1. Introduction

UAV, which stands for the unmanned aerial vehicle, has been used more and more in the civil field. And one of such use cases is using the UAV for search and rescue missions during natural disasters.

However, one of the main challenges of using UAVs in the search and rescue mission is the energy limitation [1]. Currently, most UAVs use batteries as their energy source. On the other hand, a search and rescue mission is a time-critical mission. Less search time can mean a higher probability of finding survivors [2].

Given the above challenges, this paper proposed a new method to conduct UAV's search and rescue mission by using the data in the call detail records to generate a survivor density distribution map before the mission start and thus giving rescue workers a clearer image of the disaster-stricken area to plan to an optimal search and rescue mission under a limited time frame and energy source.

We also did UAV flight simulation tests in our research to find out the best search pattern.

2. Call Detail Record and datasheet description

Call Detail Record(CDR) is the data record that is generated by telephone switch and contains the important detail of that particular telecommunication activity, such as the approximate location of the activity and the destination of the activity [3]. In other words, each time you make

a phone call, send a message, or browse a webpage, a cell tower will be connected. And the database of the mobile network will record a metadata, which is the call detail record. Knowing the approximate location of each mobile communication activity and the universal adoption of smartphones means the data generated in the mobile communication network may be one of the best ways to estimate survivor distribution patterns after natural disasters.

The CDR dataset we used in this research was obtained from Telecom Italia which has been made public [4]. This dataset contains cellular activities of the city of Milano over 2 months of time.

We aggregate all the cellular activities based on their associated location in the SQL database, to calculate the total number of cellular activities in each grid cell. Then we used QGIS and the OpenStreetMap generated heat map of this result. Fig.1 shows the mentioned heat map and the metric of the heat map.

3. Machine learning on the data

Although we can extract the cellular activity distribution map during the normal time, this might not be the case for the time of natural disaster. It's possible that telecommunication infrastructure can be damaged in disasters [5]. And thus makes it hard or impossible to extract data from it during the time of disaster. We proposed a method to use past cellular activity distribution as training material to train a machine learning model, which will be able to predict the cellular activity distribution during the time of natural disaster. The rescue worker or the UAV operator can still use it as a reference to plan an optimal UAV search and rescue mission even if the telecommunication infrastructure is damaged.

Since we extract the cellar activity distribution from over 60 days of CDR and with dates, the



Fig. 1. The visualized heatmap

data we used here is the time series data, which is a series of data points with timestamps. In order to use machine learning on time series data, we need to convert it into supervised data first. The method we used to convert the data is called the sliding window, which used previous time steps to predict the next time step. Sliding window can convert a sequence of interrelated data points into supervised data.

We used 6 different machine learning models on our data to predict future cellular activity distribution during disasters, which are baseline model, ARMA, random forest regressor, XGBoost, LSTM and 1 dimensional CNN. We also calculate the MSE(mean squared error) value of each model for evaluation purpose.

Fig. 2 compared the MSE value result of all models we used in our research. For the baseline model or the naive model, we used it as the evaluation reference for other models. The baseline model has the MSE value of 167, and other models' error values are all lower than it, which means it's reasonable to use other models in our research. Since the data we used is stationary, ARMA also had a good performance with the MSE of 112, because ARMA is good for predicting stationary data. Random Forest and XGboost also performed very good, and outperformed the ARMA model in our case with the MSE of 67 and 52. Random Forest uses bagging in the training process which reduces the variance [6]. We believed this can be one of the factors that contributed to its good performance in our case. XGboost outperformed Random Forest slightly in our case. For LSTM model, we used the typical vanilla LSTM model, which consists of a single hidden layer and an output layer. We set the model with 100 LSTM units in the hidden layer to do the prediction. After training the model with our data, we got the second best result among all models in terms of MSE value with the MSE of 25. For the CNN model, since our data is time series data which is a sequence of input. We used the 1 dimensional CNN in which the kernel only moves in 1 direction and is usually used for time series prediction. Our 1D CNN consists of 1 convolutional layer, 1 maxpooling layer, 1 flatten layer, 1 fully connected layer and an output layer. The 1D CNN has a similar performance compares to the LSTM model with the MSE value of 18.

4. UAV Flight Simulation

We also did simulated UAV flights to find out the optimal search pattern for UAV's search and rescue operation during disaster. We simulated 3 search patterns, which are parallel track in Fig.3, creeping line in Fig.4 and expanding square in Fig.5. These are common patterns used by rescue teams. We used the UAV simulation software SITL(software in the loop) simulator



<u>JSST2021</u>



Fig. 3. Parallel Track





Fig. 5. Expanding Square



to do the flight simulation. For the simulation parameters, we set the altitude to 100 meters, the searching area to a 0.6 kilometers area, the UAV type to quadcopter, and the ground speed to 5 meters per second. We showed the result in Fig. 6. Parallel Track has the best performance with the time consumption of 1400 seconds, and creeping line has the worst performance with the time consumption of 2100 seconds.

References

- A. L. Adams et al., "Search is a time-critical event: when search and rescue missions may become futile," Wilderness Environ. Med., vol. 18, no. 2, pp. 95–101, Summer 2007.
- [2] J. Steenbruggen, E. Tranos, and P. Nijkamp, "Data from mobile phone operators: A tool for smarter cities?," Telecomm. Policy, vol. 39, no. 3–4, pp. 335–346, 2015.
- [3] J. Wang, "Charging information collection modeling and analysis of GPRS networks," IEEE Trans. Syst. Man Cybern. C Appl. Rev., vol. 37, no. 4, pp. 473–481, 2007
- [4] T. Italia, "Telecommunications SMS, Call, Internet MI." Harvard Dataverse, 2015.
- [5] G. O'Reilly, A. Jrad, R. Nagarajan, T. Brown, and S. Conrad, "Critical infrastructure analysis of telecom for natural disasters," in Networks 2006. pp. 1–6.
- [6] Medium. 2021. Decision Trees and Random Forests. [online] Available at: < https://bit.ly/3gHTFqt>

Elastodynamic analysis of elastic wave scattering using coupling method of CQBEM and FEM

Haruhiko Takeda^{1*} and Takahiro Saitoh¹

¹Department of Civil and Environmental Engineering, Gunma University, Japan

*t160c056@gunma-u.ac.jp

Abstract. The Convolution Quadrature Boundary Element Method (CQBEM) is known as a new time-domain Boundary Element Method (BEM). The Finite Element Method (FEM) is a very popular simulation tool for various engineering problems. However, the FEM cannot deal with infinite regions without any modifications. On the other hand, the CQBEM can treat such regions because the time-domain fundamental solutions used in the CQBEM satisfy the radiation condition automatically. Therefore, in this study, a coupling method of the CQBEM and the FEM is developed for elastic wave scattering analyses in infinite regions. As numerical examples, elastic wave scattering in inhomogeneous media is demonstrated using the proposed method.

Keywords: Finite element method (FEM), Boundary element method(BEM), Time-domain, Convolution quadrature method (CQM),

1. Introduction

The Convolution Quadrature Boundary Element Method (CQBEM) is known as a new timedomain Boundary Element Method (BEM) and effective for wave propagation in homogeneous regions. The Finite Element Method (FEM) is a very popular simulation tool for various engineering problems and can deal with inhomogeneous regions. However, the FEM generally has trouble in treating wave propagation in infinite regions. Therefore, it is significant to develop a new wave propagation simulation tool which can treat both inhomogeneous and infinite regions. Therefore, in this study, a coupling method of the CQBEM and the FEM is developed for 2-D inplane elastic wave propagation. As numerical examples, elastic wave scattering in homogeneous media is demonstrated using the proposed method.

2. CQBEM and FEM

As mentione in section 1, the FEM is known as one of the very popular simulation tools. Therefore, the brief description of the CQBEM is discussed in this section. In general, the classical time-domain BEM cannot produce stable numerical solutions if we use small time step size. The CQBEM was developed to overcome this difficulty. The Convolution Quadrature Mehotd (CQM), first proposed by Lubich [1], accurately approximates the convolution integrals by a quadrature formula using the Laplace-transform. The CQBEM is a combined method of the time-domain BEM and the CQM. Schantz et al.[2] and Saitoh et al.[3] have solved many wave problems, such as elastodynamic and viscoelastic wave problems, using the CQBEM.

3. Numerical examples

Some numerical examples are shown in this section. A multiple scattering problem for 2-D elastodynamics is solved by the proposed method. Numerical analysis model and results can be seen in Fig.1. 2-D elastic wave propagation in an inhomogeneous and infinite elastic solid is simulated by the proposed method. The inhomogeneous region inside the dashed square in Fig.1(a)-(d) is modelized by the image-based method [4] for a concrete block and analyzed by the voxel FEM. The infinite region outside the inhomogeneous region is treated by the CQBEM. Two types of materials (aggregates), which have different elastic constants exist in the inhomogeneous region. The continuous boundary condition on the dashed square for the displacement and traction is imposed in order to combine both CQBEM and FEM. As shown in Fig.1, an incident plane P-wave coming from the infinite horizontal direction propagates the inhomogeneous region, and some of them are scattered and the rest are transmitted. It can be seen that scattered waves and the incident P-wave propagate to the infinite region without any reflections because the CQBEM can satisfy the radiation condition.

4. Conclusion

The coupling method of CQBEM and FEM for 2-D elastodynamics was developed in this study. In the future, the adaptive cross approximation (ACA) method will be applied to save the CPU time and memory.



Fig.1: Numerical analysis model and 2-D elastic wave fields at various times.

References

- C. Lubich : Convolution quadrature and discretized operational calculus I, *Numer. Math*, Vol.52(1988), pp.129-145.
- [2] M. Schanz and H. Antes.: Application of operational quadrature methods in time domain boundary element methods, *Meccanica*, Vol.32(3) (1997), pp. 179-186.
- [3] T. Saitoh, F. Chikazawa and S. Hirose: Convolution quadrature time-domain boundary element method for 2-D fluid-saturated porous media, *Appl. math. Model.*, Vol.38 (2014), pp.3724-3740.
- [4] K. Terada, T. Miura and N. Kikuchi: Digital image-based modeling applied to the homogenization analysis of composite materials, *Comput. Mech.*, Vol.20(4) (1997), pp.331-346.

JSST 2021

Particle-scale FSI computation for internal fluidization in gravel-particle bed by upward water jet

S. Ushijima^{1,*}, J. Ohno², D. Toriu¹, Y. Ueno²

¹Academic Center for Computing and Media Studies (ACCMS), Kyoto University ²CERE, Graduate School of Engineering, Kyoto University

*ushijima.satoru.3c@kyoto-u.ac.jp

Abstract. The internal fluidization in a gravel-particle bed by the vertically-upward water jet entering from the bottom surface was investigated with experiments and the computations taking account of the particle-scale fluid-solid interactions (FSI). In computations, the fluid forces acting on about 5,100 gravel particles, each of which is represented with multiple tetrahedron elements, were calculated from the pressure and viscous terms. As a result, it was shown that the calculated unsteady characteristics of the internal fluidization and failure are in good agreement with the experimental results. The consideration was also made in terms of the relationships between the fluid dynamic pressure p' and the effective stress σ' in the initial shape of the gravel layer.

Keywords: Internal fluidization, fluid-solid interaction (FSI), Parallel computation

1. Introduction

It has been reported that the serious ground collapses and failures sometimes arise due to the leakage of the fluids from the underground pipes through which water and oil are transported. Thus, such problems have been investigated from experiments and numerical simulations [1],[2],[3]. In this paper, in order to understand the internal fluidization and resulting failure of a gravel-particle bed by the vertically-upward water jet entering from the bottom surface. For that purpose, the unsteady processes are investigated with the experiments and the particle-scale fluid-solid interaction (FSI) numerical prediction using parallel computations. The predicted results were compared with the experimentally obtained behaviors. The mechanisms of the internal fluidization was discussed using the numerically obtained fluid forces acting on the particles and pore fluid pressures.

2. Outline of Experiments

Figure 1 shows the outline of the main part of the experimental setup and computational area. The lengths indicated in Fig. 1 are as follows: $l_1 = 350$, $l_2 = 40$ and $l_3 = 200$ [mm],

while $h_g \approx 100 \text{ [mm]}$ and $h_w \approx 300 \text{ [mm]}$. The inner diameter of the bottom pipe *D* is 31 [mm], from which the water jet of the average velocity 0.21 [m/s] enters in the vertically upward. As shown in Fig. 1, gravel particles of the average diameter 7 [mm] were filled in the gravel box. The approximate depth of the gravel bed is 100 [mm] and the porosity is about 0.44.



Fig.1: Experimental tank and computational area (left = front-, right = side-view)

3. Particle-scale FSI computations

The fluidized processes of the gravel bed were numerically simulated using the computation method proposed in [4]. Figure 2 (a) illustrates the Eulerian cells used for fluid computations as well as the Lagrangian unstructured cells representing a gravel particle. As schematically shown in Fig. 2, the Eulerian cell size is 0.6 [mm], which is sufficiently finer than the gravel particle size (7 [mm]), so that the surrounding flows around a particle can be resolved. The total number of the gravel particle is about 5,100, each of which is represented with about 100 tetrahedron elements. The massive computations were executed with 272 parallel computations with the domain decomposition as shown in Fig. 2 (b).





(a) Eulerian and Lagrangian cells (b) Domain decomposition for parallel computation

Fig.2: Computation cells and parallel computation

Figure 3 shows the comparisons between experiments and computations for the unsteady processes from initial condition to the fluidization of gravel particles and final penetration of the jet flow throughout the bed. The color contours in the calculated results show the magnitude ω of the vorticity vector of the fluid. The range of ω shown in Fig. 3 is between 0 [1/s] (blue) and 600 [1/s] (red).



(a) experiment: t = 0.00 [s], computation: t = 0.00 [s]



(b) experiment: t = 0.51 [s], computation: t = 0.495 [s]





(d) experiment: t = 3.02 [s], computation: t = 3.00 [s]

Figure 4 shows the distributions of positive $p' - \sigma'$, where p' is pore dynamic pressure among particles and σ' is the effective stress in the initial gravel bed shape calculated with the specific gravity (about 2.59) and the porosity (about 0.43). The range of $p' - \sigma'$ shown in Fig. 4 is between 0 [Pa] (blue) and 600 [Pa] (red). Figure 4 also shows the fluid forces $F_F = |F|$ calculated from the pressure and viscous terms in the fluid computations. It can be seen that the fluidized areas, where $p' - \sigma'$ and F_F are relatively high, are closely related to the unsteady behaviors of gravel particles in the bed.

Fig.3: Comparisons of gravel particles (left = experiments, right = computations)



Fig.4: Distributions of $p' - \sigma'$ (left) and F_F (right)

References

- [1] Alsaydalani, M. and Clayton, C.: Internal fluidization in granular soils, *Journal of Geotechnical* and Geoenvironmental Engineering, Vol. 140, No. 3, p. 04013024, 2014.
- [2] He, Y., Zhu, D. Z., Zhang, T., Shao, Y. and Yu, T.: Experimental observations on the initiation of sand-bed erosion by an upward water jet, *Journal of Hydraulic Engineering*, Vol. 143, No. 7, p. 06017007, 2017.
- [3] Ngoma, J., Philippe, P., Bonelli, S., Radjaï, F. and Delenne, J.-Y.: Two-dimensional numerical simulation of chimney fluidization in a granular medium using a combination of discrete element and lattice Boltzmann methods, *Physical Review E*, Vol. 97, No. 5, p. 052902, 2018.
- [4] Ushijima, S., Toriu, D., Yanagi, H. and Tanaka, H.: Numerical prediction for transportation of gravel particles and saltation-collapse equilibrium due to vertical jet, *Journal of Applied Mechanics, JSCE Ser.A2*, Vol. 75, No. 2, pp. I.289–I.300, 2019.

JSST2021

Embodiment Design of Biped Robot for Walking on

Rough Ground

Kakeru Yokoyama^{1*}, Van-Tinh Nguyen², Hiroshi Hasegawa¹

¹Systems Engineering and Science, Graduate School of Engineering and Science, Shibaura Institute of Technology, Japan

²School of Mechanical Engineering, Hanoi University of Science and Technology, Vietnam *mf20083@shibaura-it.ac.jp

Abstract. Biped robots consume a lot of energy due to the attitude control during walking, which causes the running time to be shortened. The robot that simulates arm swing walking, which is a passive human movement, are optimized by simulating with mechanical analysis software without considering joints and actuators. Therefore, the design on details of mechanism of the biped robot is expected for this work. As a result of simulation, the model of this study generally walked stably, however it is necessary to improve the width of the body in the front-back direction for further walking stability.

Keywords: Embodiment design, Multibody dynamics analysis, Biped robot

1. Introduction

Many biped robots have been researched and developed to support human daily life in a more sophisticated way, and some of them can walk with a stable behavior even on rough ground. On the other hand, their energy consumption is high, which is one of the reasons for the decrease in running time, since actuators such as servomotors are frequently used for postural control. To solve this problem, V.T. Nguyen et al. focused on the passive motion of the human upper body to optimize the robot's gait, and developed a basic model in which the shoulder and the opposite hip joint are connected by a spring damper [1]. This basic model was designed without considering the detailed mechanisms of the actuators and joints and the interference of the mechanisms, and it is difficult to reflect the model directly in actual machines. In this study, we will perform an embodiment design that can be fabricated from the basic model [1].

2. Walking simulation for embodiment design

The basic model [1] and the designed embodiment model are shown in Figure 1. A multi-dynamics simulation is performed to confirm the walking behavior of the embodiment model. For this simulation, we use the mechanical analysis software Adams from MSC Software. For the walking behavior, a gait function derived from the human walking pattern is used. The characteristics are expressed and formulated by using triangular functions from the data of the human walking cycle [2]. The gait function is shown in Equation (1). $\varphi_i(t) = a_i + b_i \cos(\omega t) + c_i \sin(\omega t) + d_i \cos(2\omega t)$ (1)

where φ_i is the angle of the joint, t is the time, ω is the angular velocity, and a_i , b_i , c_i , and d_i are the coefficients.

By changing these coefficients, we can derive the gait function to be assigned to the embodiment model. In this study, we use the same parameters as in the basic model [1]. The angle trajectories of each joint in this study are shown in Figure 2.



Figure 1 Right: basic model. Left: embodiment model



Figure 2 Angular trajectories

3. Results and Discussion

Figure 3 shows the graphs of the lateral and vertical displacements of the head in the gait of the basic model [1] and the embodiment model. The horizontal direction shows that the difference in displacement between the basic model [1] and the embodiment model is larger. This is due to the fact that the embodiment model is wider in the front-back direction than the basic model [1], which tends to swing back and forth during walking. It is considered that this resulted in an unstable posture on the rough ground, which caused the robot to move in a slightly slanted direction. On the other hand, in the vertical direction, the period of the displacement was constant after 4 seconds, which is the period of the flat ground, and it can be concluded that the robot of the embodiment model walked stably. Using the information obtained from this study, we believe it is necessary to make improvements in order to reduce the width of the robot in the front-back direction additionally.



(b) vertical direction

Figure 3 Comparison of head displacement during walking

References

- [1] V.T. Nguyen, D. Kiuchi, H. Hasegawa: Development of Foot Structure for Humanoid Robot Using Topology Optimization, *Tech Publications, Advanced Engineering Forum*, volume:29 (2018).
- [2] N. Ito, H. Hasegawa: The Robust Design to Generate the Gait Pattern of a Small Biped Robot, *Japan Society for Design Engineering*, *Design Engineering*, volume: 45, (6), (2010) (in Japanese).

Effect of Adsorption and Reactive Behavior of Water Vapor in Reactive Magnetron Sputtering Simulations using Berg's Model

Allen Vincent B. Catapang^{1,*} and Motoi Wada¹

¹Graduate School of Science and Engineering, Doshisha University

*cyjf3301@mail4.doshisha.ac.jp

Abstract.

The time-resolved Berg's model was developed as a first-order model for describing the surface processes occuring at different regions in a reactive magnetron sputtering discharge. In this study, the effect of using a highly adsorptive gas, water vapor, as reactive gas in Berg's model is investigated. The contributions due to parameters affecting the adsorption onto the surface, the flow rate, Q_r , sputtering yield ratio of metal to compound, $\frac{Y_c}{Y_m}$, sticking coefficient, α , and surface site density, n_s , were investigated and the results were compared to obtained experimental data.

Keywords: Reactive Magnetron Sputtering, Water Vapor, Berg's Model

1. Introduction

As compared to sputtering with inert gases, the presence of a reactive gas in plasma often results to complex behavior, such as the hysteresis of process parameters and discharge instabilities. To explain the nonlinear plasma behavior, multiple models have been explored, such as Berg's model, which has served as a basic, fundamental model, and the Reactive Sputter Deposition (RSD) model [1, 2].

Water vapor has been used in plasma-based processes, such as surface modification and thin film deposition. In deposition processes, it is used as a substitute to conventional oxygen gas as well as a measure to introduce hydrogen into the plasma. Particularly in semiconducting oxides, the added hydrogen acts as a shallow donor dopant, improving film conductivity and reducing crystal lattice stress without extensively changing the band structure of the film [3]. However, the behavior of water vapor in vacuum processes can be complex, since there can be multiple interactions involved [4]. Modelling of the process would clarify and explain the observed phenomena involved, allowing for a more widespread use of water vapor in film deposition.

Shown in Fig. 1 is the time-resolved pressure as the plasma is ignited, and fitting of Berg's model to experimental data. An initial drop in the pressure is observed, followed by a gradual, successive recovery towards a saturation level. In this paper, Berg's model was used to investigate the water vapor plasma and explain the observed change in pressure, with an emphasis on the parameters that are highly affected by reactive and enhanced adsorption behavior.



Figure 1: Measured pressure of the reactive magnetron sputtering discharge at varying initial pressures of pure water vapor, at 100 mA discharge current and a 70mm- ϕ metallic Zn (99.2%) target, and the fitting of Berg's model to the pressure at 1.0Pa.

2. Simulation Model

In this study, the model used is Berg's time-resolved model, one of the fundamental, firstorder models used in reactive magnetron sputtering [2]. This model simplifies some of the complicated but important phenomena, however, it has been able to identify key processing problems, such as the hysteresis of discharge parameters [1]. Thus, this model can be reasonably used to identify the key mechanisms involved when water vapor is utilized in reactive magnetron sputtering.



Figure 2: The processes involved in the time-resolved Berg's model

As shown in Fig. 2, the pressure of a reactive magnetron sputtering system can be described by the flow of gas in the reactive sputtering chamber, where Q is the gas flow rate, with the subscript denoting the region (r: reactive gas flow, s: substrate, t: target), v is the chamber volume (in m³), k_b is Boltzmann's constant, and T is the temperature. For Q_{pump} ,

the flow rate depends on the pumping speed, S (in $\frac{m^3}{s}$).

$$F_r(T) = \frac{p(t)}{\sqrt{2\pi m_r k_b T}} \tag{1}$$

The values of Q_s and Q_t are determined by the flux towards the surface, F_r , obtained from the kinetic theory of gases in Eq. 1, the sticking probability of the reactive gas molecule on the surface, α , the area, A (in m²), and the compound fraction at the surface, θ . The value of θ is important, as the presence of the compound determines the gettering of the reactive gas molecule as it interacts with the metallic particle. At the target surface, this describes the poisoning phenomena, while at the substrate, it determines the uniform film composition. In Fig. 2, the value of θ is dependent on the surface site density, n_s , with a base value related to the atomic surface density of the material, the flux towards the surface, and the removal or deposition of material, determined by J_{ion} , the ion current density, and the sputtering yield, Y. The parameter z is the stoichiometric factor of the oxide compound. By solving the equations simultaneously, the change in pressure for reactive magnetron sputtering can be determined [1, 2].

3. Results

To understand the effect of the parameters, the difference of water vapor to conventional gases must be established. First, the dissociation of the water molecule can result to distinct species, O, H and OH. These molecules behave differently in sputtering and film formation. Second, water easily adsorbs onto a surface. Multilayer adsorption usually occurs, with a desorption energy ranging from 0.8 to 8 eV, depending on the type of bond and the thickness of the adlayer.

Shown in Fig. 3 are the effects of specific parameters determined to be affected by the difference in behavior. First is the flow rate of the reactive gas. As the flow rate is increased, the initial drop in pressure becomes more prominent, since there is an increased flux of molecules that can contribute to the surface processes that consume the reactive gas.

The second parameter is the ratio of the sputtering yield of the metal and the compound. At decreased values of the compound sputtering yield, other surface process can be accounted for, such as redeposition or readsorption. At low ratios, the saturation pressure increases due to a decreased contribution of Q_s and Q_t as the compound is formed at the surfaces, indicating decreased gettering when more compound is present.

The third parameter is the sticking coefficient, α . The magnitude of the coefficient determines how tightly a molecule will adhere on the surface, and given the concentration of plasma near the target, the value of α_t is expected to be less than that of α_s due to energetic particle bombardment. From the fitting of the experimental data at 1.0Pa, α_t was at 9×10^{-5} , while α_s is at 1×10^{-4} . As shown in Fig. 3, higher values of α_t results to a more prominent drop in the pressure, since it influences the consumption of gas at the target, while higher values of α_s increases the saturation pressure level, due to increased compound formation at the substrate area.

Lastly, the surface site density, n_s is changed to account for the possible multilayer adsorption of the molecule at the surface, in the form of $k(n_s)$. At the initial pressure considered, water vapor favors the formation of multiple layers through physisorption, leading to an increased site density for compound formation. As seen in Fig. 3, the time at which the



Figure 3: Effect of the parameters, flow rate (top left, 0.11-0.27sccm), $\frac{Y_c}{Y_m}$ (top right, 0.001-0.009), α (bottom right, $2x10^{-5}-1x10^{-4}$), and n_s (bottom left, 400-1000 layers) in the time-resolved Berg's model. The default values for the parameters are: flow rate=0.19sccm, $\frac{Y_c}{Y_m}$ =0.003, $\alpha_t = 9x10^{-5}$, $\alpha_s = 1x10^{-4}$, and $n_s = 850$ layers.

pressure minima occurs shifts and the rate of increase to the saturation pressure is delayed at a higher number of layers, since there are more reaction sites for compound formation.

By combining the effect of the parameters, the observed pressure of water vapor plasma can be explained, and an appropriate fitting of the experimental data to the model can be performed. By using this model, it allows us to predict the behavior of the plasma, and the film formation process when water vapor is used.

References

- K. Strijckmans, R. Schelfhout, D. Depla: Tutorial: Hysteresis during reactive magnetron sputtering processes, *Journal of Applied Physics*, 124 (2018), 241101-1– 241101-30.
- [2] S. Berg, T. Nyberg: Fundamental understanding and modeling of reactive sputtering processes, *Thin Solid Films*, 476 (2005), 215–230.
- [3] C.G. Van De Walle: Hydrogen as a cause of doping in zinc oxide, *Physical Review Letters*, 85 (2000), 1012–1015.
- [4] A. Berman: Water vapor in vacuum systems, Vacuum, 47 (1996), 327-332.

Target ionization and surface damage models of graphite via nanosecond pulse irradiation

James Edward Hernandez^{1,*}, Kengo Moribayashi², James Koga², Motoi Wada¹

¹Graduate School of Science and Engineering, Doshisha University ²Kansai Photon Science Institute, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology

*cyjd3302@mail4.doshisha.ac.jp

Abstract. A numerical model of nanosecond pulsed laser ablation on a graphite surface is being developed. The rates of photoionization of carbon atoms released by the ablation are evaluated. Total ion energy of irradiated atoms are calculated via photoionization rates using Monte Carlo simulation.

Keywords: Nanosecond laser, Laser ablation, Numerical Modelling

1. Introduction

Nanosecond laser ablation is widely employed in pulsed laser deposition and mass spectrometry [1, 2]. Ablation of the target via a nanosecond laser involves several mechanisms such as ion formation, target heating, and particle expulsion, which are heavily dependent on the laser parameters. In the initial phase of laser ablation, primary interaction involves photoionization of target bound states via the laser field, followed by plasma formation and collisions between electrons and atoms [3]. In nanosecond laser ablation, the electron emission is described to be thermionic, rather than dominated by photoionization [4]. Following the electron production, ions are formed from the surface due to electron-atom collisions, and a plasma is formed which is assumed to follow a Maxwellian distribution [5]. The plasma formation implies that the temperature exceeds the vaporization threshold of the target. Simulations are performed to quantify the target ablation rate evolution using thermal model, whereby the ablation rate stabilizes after tens of ns following the laser pulse [6]. The aforementioned models refer to the case where the target is at a previously unablated state (i.e. a fresh target). In this work, electron production in the geometry of a formed cavity is investigated, focusing on the plasma formation in the context of ion and electron generation. Electron production is simulated using Monte Carlo methods [7]. The simulation employs a vacuum environment.

2. Numerical model

The simulation is set up in 3D coordinates with x is specified along the target surface normal. A 1064 nm wavelength laser with full width half maximum (FWHM) of 5 ns and 5 GW/cm² laser intensity is incident on a graphite target at x = 0, y = 0, z = 0. The pulse peak is located at t = 30 ns. The timestep used is 1 ps. Atoms are placed in 3D coordinates each with spacing dr = 0.2 nm to simulate graphite density, with n_2 atoms placed in the x-plane and $n_1 \times n_1$ atoms in the y-z plane. Here $n_2 = 10, n_1 = 20$ is employed. The atoms are located on the target surface are arranged in the y-z plane labelled from 1-100, and 101-200 for x = dr, and so on.

The incident laser is represented by a Gaussian source term and is described as

$$S(x, y, z, t) = I_o e^{(-x/\lambda_D)} e^{-\frac{(t-t_{peak})^2}{2\sigma_t^2}} e^{-\frac{(y-y_c)^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{(z-z_c)^2}{2\sigma_z^2}}$$
(1)

where I_o is the peak laser intensity, $\lambda_D = 1.5 dr$ is the decay rate of the laser intensity along the target surface normal. First, we show the ionization probability due to multiphoton ionization (MPI). The probability for an electron to change the level from a ground state to an excited state is given by [8]

$$P_{MPI} = \omega \left(\frac{B}{E_{\omega}}\right)^{3/2} \left(\frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma^2}}\right)^{5/2} S\left(\gamma, \frac{B+\Phi_p}{E_{\omega}}\right)$$
(2)

$$\exp\left(-\frac{2(B+\Phi_p)}{E_{\omega}} \left(\sinh^{-1}\gamma - \gamma\frac{\sqrt{1+\gamma^2}}{1+2\gamma^2}\right)\right),$$

$$S(\gamma, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-2[\langle x+1\rangle - x+n]\right) \left(\sinh^{-1}\gamma - \frac{\gamma}{\sqrt{1+\gamma^2}}\right) \times$$
$$\Phi\left(\sqrt{\left(\frac{2\gamma}{\sqrt{1+\gamma^2}}(\langle x+1\rangle - x+1)\right)}\right)$$

where $E_{\omega} = \hbar \omega$ is the photon energy, $\gamma = \sqrt{B/(2\Phi_p)}$ is the Keldysh parameter, with $B, \Phi_p = e^2 E^2/4m\omega^2$ being the ionization potential and potential energy. Angle brackets represent the conversion to integer value. The function $\Phi(x)$ is the Dawson integral. [9]

The laser strikes the target with a FWHM defined by σ_y and σ_z in Eq. 1 corresponding to a diameter of 2 nm. The penetration of the laser depends on λ_D assumed to be 1.5 dr. When the laser irradiates the target, the atoms ionize according to P_{MPI} . A random number R_N is generated for each timestep such that when $R_N < P_{MPI}$ the atom ionizes and a photoelectron is ejected with a velocity $\sqrt{2(nhv - \phi)/m_e}$ with a random direction. Electrons are assumed to follow Maxwell-Boltzman characteristics, so the velocity is $v = \sqrt{k_b T/m_e}$. Electrons are accelerated due to the laser field via the ponderomotive force whose magnitude is $a_{pond} = e^2 m_e^2 E^2/\omega^2$, where e,m_e , and ω are the electronic charge, mass, and laser frequency, and laser electric field respectively. Electron-electron collisions reduce the particle velocity by $m_e \vec{v} v_{ee}$, where v_{ee} is the electron-electron collision frequency. Fig. 1 shows the temporal laser pulse shape with the P_{MPI} for varying laser intensities. The power law dependence of the P_{MPI} with the laser intensity is shown.



Figure 1: (left) Laser intensity and P_{MPI} for varying laser intensity, (right) Dependence of P_{MPI} on laser intensity



Figure 2: (left) Time evolution of ionized atoms for varying laser intensities, (right) maximum number of ionized atoms versus peak laser intensity

3. Results

Figure 2 shows the time evolution of the maximum number of photoionized atoms $n_{i,max}$ for varying laser intensities. Increase in ion number is observed with laser intensity, indicating the higher number of available photons for ionization. As the laser intensity increases, the saturation of the ion number occurs earlier relative to the laser pulse. This number is plotted against the peak laser intensity, as shown in the right figure of Fig. 2. Rapid increase in ionization rate is observed for lower laser intensities. Fig. 3 shows the atom label vs time for varying laser intensity. Large number of atoms are ionized on the surface, and at the center (vicinity of $n_1 = 50$) even before the time for the laser to reach its peak intensity. This shows the preferential direction of ionization at the target center. Figure 4 (right) shows the total target energy as a function of time. Ion energies rapidly increase at an earlier phase for increasing laser intensity. Future work will incorporate motion of the ionized atoms which is neglected in the current model.



Figure 3: (left) Atom label vs time for varying laser intensity, (right) target total energy vs time for varying laser intensity

References

- [1] H. Jadhav, A.K. Singh, S. Sinha: Pulsed laser deposition of graphite in air and in vacuum for field emission studies, *Mat. Chem. Phys.*, 162 (2015), 279-285.
- [2] A. O'Keefe, M. M. Ross, A. P. Baronavski: Production of large carbon cluster ions by laser vaporization, *Chem. Phys. Lett.*, 130:1, 2 (1986), 17-19.
- [3] S. Amoruso, R. Bruzzese, N. Spinelli, R. Velotta: Characterization of laser-ablation plasmas, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 32 (1999), 131-172.
- [4] J. F. Ready: Effects of High Power Laser Radiation, Academic Press, (1971), 134-135.
- [5] M. Aden, E. W. Kreutz, A. Voss: Laser-induced plasma formation during pulsed laser deposition, J. Phys. D: Appl. Phys., 26 (1993), 1545-1553.
- [6] S. Sinha: Nanosecond laser ablation of graphite: A thermal model based simulation, *J. Laser Appl.*, 30 (2018), 012008.
- [7] K. Moribayashi: Spherically symmetric models for x-ray damage and the movement of electrons produced in non-spherically symmetric targets such as bio-molecules, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 43 (2010), 165602.
- [8] Y. Kishimoto, S. Kato: Modeling of Ionization in Particle Simulation, J. Plasma Fusion Res., 90, 7 (2014), 412-418.
- [9] F. G. Lether: Constrained near-minimax rational approximations to Dawson's integral, *Appl. Math. Comput.*, 28, 2-3 (1997), 267-274.

Analysis of the space charge effect in an ion mobility spectrometer

Keith Nealson M. Penado^{1,*}, James Edward A. Hernandez¹, Allen Vincent B. Catapang¹, Motoi Wada¹

¹Graduate School of Science and Engineering, Doshisha University

*cyjf3303@mail4.doshisha.ac.jp

Abstract. Ion mobility spectrometry has been a useful tool in the detection of dangerous substances such as explosives and narcotics. The application of this method has expanded to the analysis of atmospheric pressure plasma. Under ambient conditions, the density of gas particles is much greater than the density of ions present in the spectrometer such that Coulomb's forces do not dominate as much. However, the space charge contributions of the ions to the mass analysis electric field should affect the resolution of the spectrometer signal. This study aims to analyze this effect by using a collisional model based upon the hard-sphere model and the Monte Carlo method. The results of the simulation will then be compared with experimental results to determine the accuracy of the model.

Keywords: Plasma physics, Monte Carlo method, Computer simulation

1. Introduction

Ion Mobility Spectrometry (IMS) is an electrophoretic analysis method used to identify ions in a swarm based on their mobility, K, in a buffer gas. The mobility is related to the drift velocity, v_d , of the ion as it moves through the spectrometer guided by the electric field, E [1];

$$v_d = KE \tag{1}$$

The intrinsic characteristics of the ions such as mass, charge, and structure affect its mobility. The combination of such characteristics interacting with the electric field and gas results to the separation of the swarm into discrete groups which would be analyzed at the end of the spectrometer [2]. If the density of ions that enter the spectrometer is much less than the density of the gas particles, then the Coulomb interactions between the ions will not dominate. However, the high density ions should affect the local space charge of the system which could influence the drift behavior of the swarm as they move across the IMS. This phenomenon will be clarified by simulating the behavior of Ar^+ ions in the IMS using the hard-sphere collisional model and the Monte-Carlo method.


Figure 1: Schematic drawing of the IMS device (left) and the corresponding potential field distribution (right) along the z = 0 plane. The IMS device shows (a) the opening orifice, (b) the electrode plate, (c) the insular spacers, (d) the end plate detector, and (e) the cyclindrical shielding. The potential distribution was calculated using the AMaze software.

2. Computational Method

The IMS device used in this study exhibits a local electric field of E = 300 V/cm at the center under ambient temperature and pressure (T = 273.15 K, P = 1 atm) with air being the buffer gas. The collisions between ions and gas particles are treated as hard sphere collisions [3, 4], with the probability, p, being a reduced exponential function of the ratio of the distance travelled by the ion, df, and its respective mean free path, λ (Eq.2). The mean free path, λ , is given by a standard equation (Eq.3) with pressure, P, temperature, T, and, the radius of the gas particle, d, as its factors. The simulation assumes that a collision occurs if a random number between 0 and 1 is greater than the probability, p.

$$p = 1 - \exp\left(-df/\lambda\right) \tag{2}$$

$$\lambda = \frac{k_b T}{\pi d^2 P \sqrt{2}} \tag{3}$$

The current simulation utilizes Coulomb's law to approximate the space charge contribution of an ion by defining a voltage threshold of $2 \mu V$ from an individual point charge. To further clarify the space charge effect, the current model multiplies the voltage contribution of each particle by a factor of 10. This voltage contribution is added to the background potential matrix before allowing the particles to move for each time step iteration.

The ion trajectories and time of flight signal will be obtained for the case with the inclusion and absence of the space charge effect. The mobilities of the ions will also be compared based upon the results of the simulation.

3. Results and Discussion

The ion trajectories (Fig.2) and time of flight signal (Fig.3) for the movement of particles in the absence, and presence of the space charge contributions for Ar^+ ions are shown in the figures below. The time steps used in these cases were chosen such that any further decrease in the time step will not result to any change in the peak drift time.



Figure 2: Ion trajectories of 10 Ar^+ ions with (left) and without (right) space charge contributions. In the absence of a space charge, ions were made to interact only with the electric field such that their trajectories are independent from each other.

The number of particles detected at the end of the spectrometer is greatly reduced with the addition of the space charge effect. Peak reduced mobility values for both cases however, is around 1935 cm²/Vs. The resolution of the spectra varies; with the FWHM values being 4.98 μs , and 1.05 μs for the spectrum with and without charge contributions respectively. This suggests that the space charge effect of ions results to the broadening of the spectral peak. Increasing gas temperature from 273 K to 300 K in the case with the space charge contributions results to a sharper spectrum. The FWHM value at a gas temperature of 300 K is around 4.78 μs .



Figure 3: Time of flight signal of 10,000 Ar⁺ ions with and without space charge contributions at a spectral resolution of 0.15 μs . Peak time of flight for both cases is around 51.67 μs .



Figure 4: Time of flight signal of 10,000 Ar⁺ ions with the space charge contribution at gas temperatures of 273 K, and 300 K. Spectral resolution is 0.15 μ s

Further investigation with other models to approximate the space charge will be needed to investigate the actual behavior of particles in the experimental system since the current simulation could only compute up to 10^4 particles efficiently. With an increase in the number of particles, the multiplicative modification to the space charge contribution can be removed which will result to a more accurate representation of the system. The results of the simulation will also be compared to actual experimental results to determine the validity of the model used in this study.

References

- G. Eicemann, Z. Karpas, H. Hill Jr.: Ion Mobility Spectrometery (3rd Ed.), Parkway NW: CRC Press (2014).
- [2] S. Harvey, R. MacPhee, C. Barran: Ion mobility mass spectrometry for peptide analysis, *Methods*, 54 (2011), 456–461.
- [3] J. Xu, W. Whitten: Monte Carlo simulation of ion transport in ion mobility spectrometry, *Int. J. Ion Mobil. Spec.*, 11 (2008), 13–17.
- [4] A. Appelhans, D. Dahl: Measurement of external ion injection and trapping efficiency in the ion trap mass spectrometer and comparison with a predictive model, *Int. J. Mass Spec.*, 216 (2002), 269–284.

脱塩基部位からなるクラスターDNA 損傷の

分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Clustered DNA Damage Composed of Apurinic/Apyrimidinic Sites

寺川 和志^{1*}, 川波 竜太¹, LI HAOLUN¹, 藤原 進¹, 水口 朋子¹, 米谷 佳晃², 中村 浩章^{3,4}

Kazushi Terakawa^{1*}, Kawanami Ryuta¹, Haolun Li¹, Susumu Fujiwara¹, Tomoko Mizuguchi¹, Yoshiteru Yonetani², Hiroaki Nakamura^{3,4}

> ¹京都工芸繊維大学, ²QST, ³名古屋大学, ⁴核融合研 ¹Kyoto Inst. of Tech., ²QST, ³Nagoya Univ., ⁴NIFS

*m1672015@edu.kit.ac.jp

Abstract. DNA はアルキル化や酸化、放射線照射などに弱く、これらを受けると損 傷してしまう。DNA 損傷には、8-オキソグアニン(80xoG)、脱塩基部位(AP 部位)、一 本鎖切断 (SSB)、二本鎖切断 (DSB) などがある。複数の DNA 損傷が局所的に発生 (クラスター化) すると、細胞中の酵素による修復が困難となるため細胞死やがん化 の原因になる。AP 部位は DNA 中の塩基が脱離している状態であり、DNA に大きな 影響を与える SSB や DSB につながる。本研究では、AP 部位からなるクラスター DNA 損傷の構造変化を明らかにするため、AP 部位を有する損傷 DNA の分子動力 学シミュレーションを行い、DNA の構造変化を解析した。

Keywords: molecular dynamics simulation, apurinic/apyrimidinic (AP) site, clustered DNA damage

1. Introduction

DNA はデオキシリボースとリン酸からなる主鎖と、リン酸に結合している塩基から構成される多くの生物の遺伝情報の継承と発現を担う物質であり、2本のポリヌクレオチド鎖は相補的な塩基対(A-T塩基対、G-C塩基対)間の水素結合により結合し、 右巻き二重らせん構造をとっている。

DNA はアルキル化や酸化、放射線照射などに弱く、これらを受けると損傷してし まう。特に 2011 年の福島原発事故で、放射線汚染が問題となった。放射線は細胞に 当たると、細胞の中にある遺伝子の本体である DNA に傷をつけることがある。DNA 損傷には DNA のグアニン塩基が酸化されてしまう 8-オキソグアニン(80x0G)、塩基 が脱離してしまう脱塩基部位(AP 部位)、DNA 二重らせん構造の片方が切れてしまう 一本鎖切断(SSB)または両方が切れてしまう二本鎖切断(DSB)などがある。これらの損 傷が局所的に集まることをクラスター化と呼ぶ。これらの傷は通常、体内の酵素によ り修復されるが、傷が多かったり、傷がクラスター化すると酵素による修復が不十分 になり、細胞死やがんに繋がることがある。DNA の相補鎖内でのクラスターDNA 損 傷の分子動力学(MD)シミュレーションは行われており[1]、本研究では同一鎖内での クラスターDNA 損傷について MD シミュレーションを行い、DNA の構造の変化を解 析した。

2. Models & Simulation

以下のように未損傷 DNA と損傷 DNA に対して平衡化を行った。シミュレーションソフトは分子設計、MD 計算、計算結果の解析などを行うことができる、Amber20 を用いた。

2.1 未損傷 DNA

Amber20 の Nucleic Acid Builder モジュールを用いて未損傷の DNA を作成した。 次に、Amber20 の xLEAP モジュールを用いて、電荷を中和するために対イオン (Na⁺) を入れ、DNA の周りを溶媒(水)で満たした。DNA の力場は Amber20 の bsc1 力場を、 水の力場は TIP3P 力場を用いた。続いて、溶媒と対イオンのエネルギーを最小化した 後、系全体のエネルギーを最小化した。得られた配置を初期配置として、一定体積の 周期境界条件の下、系の温度を 0 K から 310 K まで昇温した。(20ps, 10,000 ステッ プ,1 ステップ=2 fs) 。そして、温度を 310 K に維持し、一定圧力(1 atm)の周期境界 条件の下、9ns (4,500,000 ステップ)の平衡化を行った。

2.2 損傷 DNA

このようにして平衡化した未損傷 DNA(Fig.1 (a)) に、脱塩基部位を1か所または2 か所挿入した(Fig.1 (b))。Amber20の xLEAP モジュールを用いて、電荷を中和するた めに対イオン (Na⁺)を入れ、DNA の周りを溶媒(水)で満たした。DNA の力場は AP 部 位に関する補正を含む bsc1 力場を、水の力場は TIP3P 力場を採用した。対イオンと 溶媒を加えてそれらのエネルギー最小化を行い、その後系全体のエネルギーを最小化 した。その配置を初期配置として、一定体積の周期境界条件の下、系の温度を 0K か ら 310K まで昇温した(100ps, 50,000 ステップ)。さらに、温度を 310K に維持し、一 定圧力(1atm)の周期境界条件の下、25ns の平衡化を行った (12,500,000 ステップ)。上 記のプロセスを Fig.2 に示す 7 種類の損傷 DNA に対して行った。損傷 DNA の構 造変化を調べるため、損傷 DNA の平均二乗偏差(RMSD)と溶媒接触表面積(SASA)の 解析を行った。また、比較のため未損傷 DNA に対しても同様の解析を行った。

JSST 2021



Fig.1 Snapshots of (a) an undamaged equilibrated DNA ("undamaged" in Fig.2) and (b) a damaged DNA ("seq-5" in Fig.2).

			strand2	< /	strand1		
G - A G G A A T A T G T C T C T A T G C T G G G - C C - A T A T G T C T C T A T G C T G G A - C G A - C C - C	G - A G G A A T A T G T C T C T A G G C T C - A G G A A T A T G T C T C T A T G C T G G G C C C C - A C C C C C C C - A C C C C C	G - A G G A A T A T G T C T C T A T G C T C C T T A T A C A C A C T A T G C T G G G T C C T T A T A C A X A G X T A C G A C C C C C C C C C C C C C C C C	strand2: G - C T - A C - G T - A A - T T - A A - T T - A A - T C - G A - T X - C G - C A - T C - G A - T C - G C - G C - G C - G C - G A - T C - G C - T C - G C - C - G C	GTCCTTATGCTCTATGCTGG GTCCCTTATACAXAGATACGACCC	strand1 G - C A C - G G C - G G T - A T A - T A T C - T C - T A - T A C - T C T A - T C C - T A T - A T C - T C C - G A - T A T - A T C - T C C - G A - T A C - T C C - G A - T A C - T C - G C - G A - T A C - T C - G C - G A - T A C - T C - G C - G A - T A C - T C - G C - G A - T A C - T C - G C - G A - T A C - T C - G C - G A - T A C - T C - G C - G A - T A C - C C C - G A - C C C - G A - C C C C C - G A - C C C C C C C C C C C C C C C C C C	G - A G G A A T A T G T C T C T A T G C T C C T T A T A T G T C T C T A T G C T G G G	G A G G A T G C T C C - A A T A C A C T G C T C T G C T G G
undamaged	seq-5	seq-3	seq-1	seq0	seq+1	seq+3	seq+5

Fig.2 Models of clustered DNA damage composed of AP sites: an undamaged DNA, damaged DNA with one AP site (seq0) and damaged DNAs with two AP sites in the same strand (seq ± 1 , 3, 5). X represents an AP site.

3. Results

3.1 Root Mean Square Deviation

AP 部位による構造の変化を解析するため、平均二乗偏差(RMSD)を計算した。 RMSD(Root Mean Square Deviation)は以下の式で表され、ある構造 $\{r_i\}$ と参照構造 $\{r_i^0\}$ とのずれを記述する。構造がどれだけ変化したかの指標になる。RMSD の値が大きいとより構造が変化しているといえる。iは計算した原子の番号を表し、Nは計算した原子の個数を表す。

$$\text{RMSD} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \frac{(r_i - r_i^0)^2}{N}}$$

DNA 主鎖(P, O, C を対象) についての RMSD を 2ps ごとに計算した。未損傷 DNA 及び損傷 DNA の時間に対する RMSD を Fig.3 に示す。



Fig.3 Temporal evolution of RMSD of damaged DNAs composed of AP sites and an undamaged DNA.

Fig.3 によると、未損傷 DNA の RMSD(undamaged)より、損傷 DNA の RMSD(seq0, seq±1,3,5)が大きい傾向にあると判断できる。全時間の RMSD の平均値の大きさを比較すると、seq0 < undamaged < seq-3 < seq+3 < seq+5 < seq+1 < seq-1 < seq-5 となった。 seq-5 では主鎖の曲がりが他の DNA より大きくなっているのを確認でき、RMSD の 平均値が大きくなっている原因だと推測される。損傷 DNA は未損傷 DNA より構造 が変化しているといえる。

3.2 Solvent-Accesible Surface Area

OH ラジカルが DNA に接近することで、水素引き抜きなどにより DNA に損傷が生じる。OH ラジカルの電気双極子モーメントは H₂O の電気双極子モーメントと値が近く静電特性が似ている。また、水の接近数と溶媒接触表面積(SASA)は相関があるため、H₂O の SASA を計算することによって OH ラジカルによって損傷を受けやすい部位の予測をすることができる[2]。SASA(Solvent-Accessible Surface Area)とは、溶質分子が溶媒に接触する曲面の面積のことであり、SASA の値が大きいほど OH ラジカルとの接近回数が多くなり、損傷を受けやすいと予測される。

今回は、DNA 主鎖の H1', H2'1, H2'2, H3', H4', H5'1, H5'2 の7つの H 原子の SASA の時間平均を計算した。H2'=H2'1+H2'2, H5'=H5'1+H5'2 とした。H 原子からの距離 を 1.4Å に指定して計算を行った。各 DNA の SASA を Fig.4 に示す。

Fig.4 によると、損傷 DNA の SASA は未損傷 DNA と比べて、塩基脱離した糖の H2' は値がかなり大きくなっており、H4'と H5'は値が小さくなっていた。したがって、 塩基が脱離している部分は溶媒と接触しやすいため、損傷を受けやすいと予測できる。



Fig.4 The values of SASA for an undamaged DNA and various damaged DNAs. The vertical axis represents SASA in units of $Å^2$. The upper panels represent strand1 and the lower panels represent strand2 for each DNA.

4. Future Work

引き続き MD 計算を行い、DNA の構造変化に対して、その変化を特徴づける物理 量を定義し、定量的に評価を行う。また、構造の変化、SASA の変化と糖の Cl'間距 離に相関があるかどうか評価を行う。

References

- E. Bignon, H. Gattuso, C. Morell, F. Dehez, A. G. Georgakilas, A. Monari, and E. Dumont (2016). *Nucleic Acids Research*. 44, 8588-8599
- [2] Y. Yonetani, H. Nakagawa (2020). Chemical Physics Letters. 749, 137441

環境を考慮した中国での製造に関する検討 Consideration of environment-friendly manufacturing in China

周 沛涵, 杉本 等, 大塚 晃

ZHOU PEIHAN, Hitoshi Sugimoto, Akira Otsuka

事業創造大学院大学 〒950-0916 新潟県新潟市中央区米山3丁目 1-46

Graduate Institute for Entrepreneurial Studies, Niigata, 950-0916 Japan

jma11202097zp@jigyo.ac.jp, sugimoto.hitoshi@jigyo.ac.jp, otsuka.akira@jigyo.ac.jp

Abstract. In China, "Green" is a priority of the national economic and social development plan, and environmentally friendly manufacturing is important. In order to achieve environmentally friendly manufacturing, it is also necessary to optimize the allocation of energy resources in material procurement, production and distribution. In this paper, we will consider the concept of environmentally friendly manufacturing.

Keywords: Green manufacture, environment-friendly

1. はじめに

持続可能な社会実現に向けて、環境への配慮が重要であり、製造業における環境の 対応は喫緊の課題となっている。中国では、今後の国民経済・社会発展計画において、 「グリーン(環境)」が重点事業として挙げられている。2021年3月の全国人民代表 大会(全人代)で承認された「国民経済・社会発展第14次5ヵ年規画と2035年まで の長期目標要綱」では、「グリーン発展の推進」が重要事項として今後5年間の活動 内容として挙げられており、中国の発展において、イノベーションに加え、人と自然 の調和が方策であることが示されている。^{[1,[2]}

中国において、イノベーションを進めるためには製造におけるグリーン化、「グリ ーン製造」が重要である。グリーン製造の実現のためには、製造機器の高度化に加え、 資材調達、生産、物流におけるエネルギーなどの資源の投入の最適配置も必要となる。 本稿では、環境に配慮した製造である、グリーン製造の考え方について検討する。

2. 中国の「グリーン発展の推進」

中国第14次五ヵ年規画におけるグリーン発展の推進の概要を説明する。第13期全国人民代表大会(全人代)第4回会議は2021年3月に北京市で開幕され、第14次5ヵ年(2021~2025年)と2035年までの長期目標綱要案が発表された。第14次5ヵ年計画におけるグリーン発展の推進の位置付けを図1に概要を示す。^{[3],[4]}



第14次5力年規画

図1 中国グリーン発展の推進の位置付け

第14次5カ年規画では、次の通り計画されている。第11篇 「グリーン発展の推進」は、人間と自然の協和共存を促進する。第39章「開発モードのグリーン化を加速する」は、生態の優先順位とグリーン開発を順守し、総合的な資源管理、科学的な配分、節約を行う。更に、リサイクルを促進し、質の高い経済発展と生態環境の高度の保護を促進する。

第39章の中の、第1節は「資源利用効率を総合的に向上」、第2節は、「資源循環 システムを構築」、第3節は、「グリーン経済を積極的に発展させる」、第4節は、「グ リーン開発政策体系の構築」である。グリーン製造関連の具体的な標準では、高エネ ルギー、高排出なプロジェクトを無条件で実施することを抑制し、エコへの転換を推 進する。また、省エネ、クリーン生産、クリーンエネルギー、カーボンニュートラル、

エアコンや暖房などの基礎的な設備をグリーン化すること、および電気自動車などの グリーンサービス産業を強化し、契約エネルギー管理、契約節水管理、環境汚染の管 理を推進、グリーン発展の法律と政策保障を強化する。省エネ・環境保全と資源総合 利用に有利な税収政策を実施する。また、グリーン化を進める企業への融資を優先す る取り組みであるグリーン投資へも力を入れる。但し、自然資源の有償利用制度を健 全化し、自然資源、汚水ごみ処理、水資源、エネルギーなどの分野では、各業界にお いては、自然資源の保護に努めるように価格を改善している。固定資産投資プロジェ クトの省エネ審査、省エネ監察を行い、各業界のエネルギーの使用についてコントロ ールする管理制度の改革を推進する。

3. グリーン製造の考え

製造業のグリーン化においては。資材調達、生産、流通に加え、消費するエネルギー、環境保護措置を考えることが必要である。まずは、必要な時間を必要な場所に投資する」というジャストインタイム(JIT)の考え方^[5]を基本として、環境&エネルギー (Environment&Energy)に配慮した生産を検討する。

図2に環境&エネルギージャストインタイム(E-JIT)の概要を示す^[6]。



図2 E-JIT 概要

ある製品を製造する上では、生産資産(部品)の調達、および生産資源(電力、水 など)が必要となる。そして、各生産工程で必要な部品、資源の配置、および生産工

程で取られる環境保護措置を検討する必要がある。さらに、生産資産を生産現場へ運 ぶための資源も検討が必要となる。今後の製造においては、各生産工程と、生産資産、 生産資源、環境保護措置、部品の物流の最適化が課題となる。

グリーン製造の評価においては、使用される生産資源、環境保護措置を最小化しつつ、製品製造を最大化する最適化の E-JIT 生産管理ツールが必要となる。今後は、E-JIT 生産管理ツールの要件を検討する。

4. おわりに

本稿では、製造業における環境の対応として、中国におけるグリーン製造の考えと して E-JIT を検討した。今後、環境と製造の定量化のためのツールの検討を進め、中 国グリーン製造の評価手法を構築する。

References

[1] 日本貿易振興機構(JETRO), "全人代、次期5カ年規画と2035年までの長期目標綱 要案を発表", https://www.jetro.go.jp/biznews/2021/03/38a0764930a67b96.html (2021年6月21日参照)

[2] 独立行政方針経済産業研究所, "始動する中国における第 14 次五ヵ年計画 — 「質の高い発展」を目指して —", https://www.rieti.go.jp/users/chinatr/jp/210415kaikaku.html (2021年6月 21日参照)

[3] 中华人民共和国国家发展和改革委员会,"中华人民共和国国民经济和社会发展第 十四个五年规划和 2035 年远景目标纲要"

https://www.ndrc.gov.cn/xxgk/zcfb/ghwb/202103/t20210323_1270124.html (2021 年6月21日参照)

[4] THE STATE COUNCIL THE PEOPLE'S REPUBLIC OF CHINA, http://english.www.gov.cn/ (2021年6月21日参照)

[5] 大野耐一, "トヨタ生産方式", ダイヤモンド社, 1978年5月

[6] 富澤克行, "三菱電機事業概要&智能製造理念", 瀋陽市智能製造解決方案説 明会, 2019 年 3 月

NS3 を用いた無線通信規格が 過密な Wi-Fi 環境に与える影響に関する研究 The study on effects of wireless standards on dense Wi-Fi environments with NS3

岩田 寛司^{1*}, 堀内 咲江² Hiroshi Iwata^{1*}, Sakie Horiuchi²

¹岐阜工業高等専門学校 先端融合開発専攻 ²岐阜工業高等専門学校 電気情報工学科

¹Gifu National College of Technology, Department of Advanced Fusion Development ²Gifu National College of Technology, Department of Electrical and Information Engineering

*2021y10@stu.gifu-nct.ac.jp

Abstract. Currently, there are many wireless LANs. Therefore, some wireless LANs have no choice but to use the same frequency channel, and it causes the degradation of throughput. In this paper, we investigate the effects of wireless standards on dense wireless LANs environments. In particular, we focus on the throughput of wireless LANs based on IEEE802.11n, IEEE802.11ac, and IEEE802.11ax. Further we analyze the throughput characteristics.

Keywords: Wireless LAN, Troughput, Capture effect, Interference, NS3

1. はじめに

現在の社会では、モバイル端末の利用増加に伴い、Wi-Fiも広く普及している.都市部の駅やカフェなどの人の多く集まる場所では、モバイルWi-Fiやテザリングを使用するユーザが増加し、Wi-Fiの密集地帯が発生している現状がある.そのような状況により、同じチャネルを使用するWi-Fiが増加し、通信品質の劣化につながると懸念される.研究[1]では、過密な無線LAN環境に対して、干渉とキャプチャ効果を考慮したスループット計算シュミレータを開発した.これに加えて実験[2]では、同様な環境に対して実機を用いた実験により、各無線LANおよび全体のスループット特性について調査を行っている.これらの研究では、1台のアクセスポイント(以下、AP)

に1台の端末が帰属したものを1つの無線LANとし、同一の周波数チャネルを使用 する複数の無線LANが格子状に存在する環境でのスループット特性を調査している. 研究結果より、無線LAN同士の距離が0.6m程離れている場合、無線LANの台数が 数台程度のときはキャプチャ効果によりスループットは向上するが、台数がさらに増 加すると干渉の影響が強くなりスループットが劣化することが述べられている.しか しながら、これらの研究は無線通信規格としてIEEE802.11gのみを対象としている. 近年では端末数の増加に対応した新たな無線通信規格が標準化されているため、これ らの無線通信規格に対する干渉やスループット特性の究明が求められる.本研究では、 ネットワークシミュレータNS3を用いて無線通信規格が過密なWi-Fi環境に与える 影響について調査を行う.限られた範囲内で同一の無線通信規格を使用するWi-Fiを 多数配置し、それによるスループット特性とその原因について考察していく.

2. 関連技術

近年,無線通信規格として,IEEE802.11n(以下,11n),IEEE802.11ac(以下,11ac), IEEE802.11ax(以下,11ax)が標準化され,広く利用されている.11nは複数の送受 信アンテナを搭載することで,2つのデータストリームを同時に空間多重して送受信 する MIMO 技術や,搬送波数の増加,隣接したチャネルを繋ぐチャネルボンディン グにより,スループットの向上を実現する.11acはチャネルボンディングや MIMO を拡張した MU-MIMO (Multi User Multi-Input Multi-Output)により,1つのアクセス ポイントから複数の端末に対して同時に送信することが可能となる.11axでは,複数 のサブキャリアをユーザチャネルとして分割し,複数のユーザに割り当てることによ って,多くのユーザの通信を同時に行うことができる変調方式である OFDMA や,1 つのチャネルで1対多で通信を実現する MU-MIMO によって,多数の端末が同じチ ャネルを使ってもスループットの減少を抑えられるようになっている.

3. 研究内容

本研究では,限られた範囲内で同一の無線通信規格を使用するWi-Fiを多数配置し, 通信を行った場合のスループット特性について調査する.本実験で使用するモデルを 図1に示す.1台のAPと1台の端末のセットを1つのWi-Fiとし,同一周波数のチ ャネルを使用するWi-Fiを格子状に増加させた場合の総スループットの変化を調査 する.この時,APと端末の間には障害物はなく,Wi-Fi同士の距離dは,d=0.3,0.6[m] の値をとる.その他のパラメータは表1に示す.各Wi-Fiの使用する規格は統一とし, 11n, 11ac, 11axのそれぞれの場合についてシミュレーションを行う.本研究ではネ ットワークシミュレータNS3を用いる.NS3は離散イベントシミュレータであり, 以下の式(1)で各Wi-Fiのスループット*Ti*を導出する.*Ti*は送信されるパケット数 *Pi*からシミュレーション時間*S*で割ることで導出できる.シミュレーション時間*S*は, 全端末が未送信であった平均時間*S1*,送信パケットの衝突が発生し,パケット送信が 失敗した平均時間*S2*,相手側でエラーが発生した平均時間*S3*,パケット送信の衝突が 起こらず正常に送信パケットが送れた平均時間*S4*の和である.本研究では,各Wi-Fi のスループット*Ti*の総和をトータルスループットとする.

$$T_i = \frac{P_i}{S} = \frac{P_i}{S_1 + S_2 + S_3 + S_4} \quad \cdots \quad (1)$$



図1 Wi-Fiの配置

表1 パラメータ

Traffic	飽和モード
伝送レート	Auto
通信プロトコル	UDP
トラフィックの方向	uplink
使用チャネル	CH1

4. 数值例

本研究のシミュレーション結果を図 2, 図 3 に示す. 図 2 には Wi-Fi 間の距離 d=0.6[m]の場合,図 3 は d=0.3[m]の場合それぞれについて,配置する Wi-Fi の数を増 加させた際のトータルスループットを示している.図 2 より,Wi-Fi 数が少数の場合 は、いずれの規格においても Wi-Fi が 1 台の時よりも高いスループットを示してい る.これはキャプチャ効果により、送信パケットの衝突が発生するにも関わらず、パ ケット送信が成功しスループットの向上に繋がったと考えられる.しかしながら、Wi-Fi 数がさらに増加した場合、いずれの規格でもスループットが劣化しており、中でも 11n のスループットの劣化が著しいことが分かる.理由として 11n では OFDM や MIMO などが用いられているため、干渉が大きくなった場合のスループットの劣化 を抑えられなかったと考えられる.図 3 より、Wi-Fi 数が増加するといずれの規格に おいてもスループットが劣化している.とりわけ、11n と 11ac のスループットの劣化 が顕著に現れており、一方で 11ax ではスループットの劣化が抑えられていることが 分かる.これは、11ax の OFDMA によって多数の Wi-Fi が同じチャネルを使っても効 率よく通信することが可能となり、スループットの劣化を抑えられたと考えられる.



図2 d=0.6[m]におけるスループットの変化



図3 d=0.3[m]におけるスループットの変化

5. まとめと今後

本研究では NS3 を用いて限られた範囲内で同一の無線通信規格を使用する Wi-Fi を多数配置し、それによるスループット特性を調査した.これにより、11n は干渉に よるスループットの劣化が激しく、Wi-Fi 数が少数かつ密集していない環境でないと 理想的なスループットを実現することができないことがわかった.11ac は Wi-Fi 間の 距離が 0.6m 程度であれば、ある程度のスループットが担保されているが、それより も近くに配置されるとスループットが急激に劣化した.一方で、11ax の Wi-Fi を近距 離に配置した場合でもスループットの劣化を抑えられた.これによって、11ax は近距 離に多数の Wi-Fi を配置してもスループットの劣化が抑えられると言える.今後は伝 送レートの変化や再送率なども調査し、各規格にどのような特徴が現れるかをさらに 検証していく予定である.

参考文献

- [1] 堀内咲江, 三好一徳, 村瀬勉, 橘拓至: 過密な無線 LAN におけるキャプチャ効 果を考慮したシミュレーション性能評価, *信学技報*, vol. 114, no. 371, NS2014-150 (2014), pp. 19-24
- [2] 堀内咲江, 村瀬勉, 橘拓至: 電波干渉とキャプチャ効果の影響に関する実験調 査, *ITRC-NWGN*(2017)

Computational method for interactions between deformable objects and fluid flows using immersed boundary method and mass spring model

Niku Guinea^{1,*}, Daisuke Toriu², Satoru Ushijima²

¹Department of Civil and Earth Resources Engineering, Graduate School of Engineering, Kyoto University ²Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University

*guinea.niku.25w@st.kyoto-u.ac.jp

The full paper of this paper has been published in Transaction of the Japan Society for Simulation Technology.

DOI: https://doi.org/10.11308/tjsst.14.78

Simulation of elastic waves in micropolar bimaterials using 2-D M-EFIT

Yusuke Suzuki^{1*} and Takahiro Saitoh²

^{1, 2}Department of Civil and Environmental Engineering, Gunma University, Japan

*t160c050@gunma-u.ac.jp

Abstract. In this research, a micropolar elastic wave simulation tool, which is called M-EFIT (Micropolar-Elastodynamic Finite Integration Technique), is developed. As numerical examples, elastic wave propagation and scattering in a micropolar bimaterial are demonstrated by the proposed method.

Keywords: Elastic waves, Micropolar-elastodynamic finite integration technique (M-EFIT), Finite difference time-domain method (FDTD), Micropolar-elastodynamics

1. Introduction

The concretes, bedrocks, and bones are known as microscopic materials. In general, the microscopic property is not considered in the classical elastodynamic theory. In order to integrate the microscopic property into the classical elastodynamic theory, Eringen proposed the micropolar elastodynamic theory. However, elastic wave simulation tools based on the micropolar elastodynamic theory have hardly been developed. Therefore, in this research, a micropolar elastic wave simulation tool, which is called M-EFIT (Micropolar Elastodynamic Finite Integration Technique), is developed. The EFIT is a kind of the FDTD (finite difference time-domain method), and has been developed by Nakahata et al. [1]. This EFIT is extended to 2-D micropolar-elastodynamic problems in this research. Some numerical examples for wave propagation and scattering in a 2-D micropolar bimaterial are demonstrated by the proposed method.

2. M-EFIT formulation

The EFIT is a grid-based numerical simulation method based on the FDTD ,and can easily treat the boundary conditions on the interface between different materials. Considering the $x_1 - x_3$ plane as a 2-D inplane problem, the equation of motions for the stress $\sigma_{\beta\alpha}$ and the couple stress m_{ij} , respectively, can be rewritten as follows:

$$\rho \ddot{u}_{\alpha} = \frac{\partial \sigma_{\beta\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \rho b_{\alpha} , \ \rho j \ddot{\phi}_{2} = \frac{\partial m_{\alpha 2}}{\partial x_{\alpha}} + e_{2\alpha\beta}\sigma_{\alpha\beta} + l_{2}$$
(1)

where ρ is the density of a micropolar elastic material, u_{α} is the displacement, j is

the micro moment of inertia, ϕ_2 is the micro rotation, b_{α} is the body force, and l_2 is the body couple force. $e_{2\alpha\beta}$ is the permutation symbol and () show the partial derivative with respect to time *t*. In addition, the constitutive equations for the stress $\sigma_{\alpha\beta}$ and the couple stress m_{ij} can be obtained as follows:

$$\dot{\sigma}_{\alpha\beta} = \lambda \frac{\partial \dot{u}_{\gamma}}{\partial x_{\gamma}} \delta_{\alpha\beta} + (\mu + \kappa) \frac{\partial \dot{u}_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} + \mu \frac{\partial \dot{u}_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} - (\mu + \kappa) e_{2\alpha\beta} \dot{\phi}_2 - \mu e_{2\beta\alpha} \dot{\phi}_2$$
(2)

$$\dot{m}_{\alpha 2} = 4GN^2 l^2 \frac{\partial \dot{\phi}_2}{\partial x_{\alpha}} \tag{3}$$

where $\delta_{\alpha\beta}$ is the Kronecker delta, and the parameters, λ , μ , κ , G, N and l are the micropolar elastic constants [2]. Equations (1)-(3) are discretized by using the EFIT scheme for time and space [1]. The detail is skipped for the page limitation.

3. Numerical example

Numerical examples can be seen in Fig.1. In this simulation, the grid size Δd and time step size Δt are given by $\Delta d = 1.0 \times 10^{-2}$ and $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$, respectively. The upper and lower materials are a micropolar and a conventional elastic material, respectively. The micropolar elastic constants are given by $\mu = 1.0, \lambda = 1.5, \kappa = 1.0$ and $\rho = 4.5$. On the other hand, the lower conventional isotropic material parameters are $\mu = 1.0, \lambda = 1.5, \kappa = 0.0$ and $\rho = 4.5$. A sinusoidal particle velocity is given at the top center of the upper material. As shown in Fig.1(a) and (b), primary and secondary waves (P and S waves) exist in the both upper and lower materials, and reflected by the interface drawn by the white line in Fig.1. However, the micro rotational wave (M wave) can exist in the micropolar material only.

4. Conclusion

In this research, M-EFIT was developed and some numerical examples are demonstrated. In the near future, this work will be extended to 3-D micropolar elastodynamic problems.



Fig.1: Elastic wave propagation in a micropolar bimaterial at (a) $80\Delta t$ for P and S waves, (b) $190\Delta t$ for P and S waves (c) $80\Delta t$ for M wave and (d) $190\Delta t$ for M wave.

References

- K. Nakahata, S. Hirose, F. Schubert, B. Köhler: Image based EFIT simulation for nondestractive ultrasonic testing of austenitic steel, *Journal of solid mechanics and materials engineering*, Vol.3(12), (2009), 1256-1262.
- [2] T. Fukui, Y. Okui: Boundary element analysis of scattering problems in two dimensional micropolar elasticity, *Elsevier*, 283-292.

Molecular Dynamics Study of Water Dynamics in Zwitterionic Polymer Brush-Water Interface

Yuya Fujinaga^{1*}, Susumu Fujiwara², Tomoko Mizuguchi²

¹Graduate school of science and technology, Kyoto Institute of Technology ²Faculty of Materials Science and Engineering, Kyoto Institute of Technology *m0672023@edu.kit.ac.jp

Abstract. Polymer brushes have a protein antifouling effect to a biomaterial in vivo. The dynamics of water in polymer brush-water interface is studied by the molecular dynamics simulations to clarify the molecular mechanism of the protein antifouling effect. In addition, we also clarify the relationship between the structural characteristics of polymer brushes and the dynamics of water.

Keywords: Polymer brush, Molecular dynamics simulation, Dynamics of water, 2-methacryloyloxyethyl phosphorylcholine, Hydrogen bond, Tacticity

1. Introduction

The surface properties of a material can be modified by polymer brushes which are obtained by growing polymers on the surface of the material at high density. Polymer brushes give a protein antifouling effect to the material^[1]. The protein antifouling effect is very useful for preventing protein adsorption which triggers the biological defense system when the material is used in vivo, and therefore the application of polymer brushes to the medical field has attracted attention in recent years. As grafted polymer chains for polymer brushes, we selected twitterionic 2-methacryloyloxyethyl phosphorylcholine (MPC), a biomaterial used in various medical devices. The dynamics of water in polymer brush-water interface is important for understanding the protein antifouling effect. Clarification of the dynamics of water enables the production of MPC polymer brushes with higher function, and is expected to lead further use in the medical field. In the field of polymer brushes research, the type of a polymer and the control of graft density have received much attention, but structural characteristics such as the tacticity of a polymer chain and graft position of polymer brushes have received less attention. In this study, we focused on the relationship between structural characteristics and the dynamics of water. To this end, we performed molecular dynamics simulations of the systems composed of water and MPC polymer brushes with various structural characteristics.

2. Simulation model and method

2.1 Moleculer model

We used an all-atom MPC polymer brush model in which we grafted polymer brushes on the *x-y* plane (8 nm×8 nm) of the MD box. Water molecules were placed on the layer of the polymer brushes. As an initial configuration, we used the model after performing energy minimization (Fig.1). We prepared MPC polymer brush by using Winmostar^[2]. As for force fields, we adopted TIP3P for water and general AMBER force fields (GAFF) for MPC polymer brush^[3]. As a point charge for each atom, we adopted the Restrained Electrostatic Potential (RESP) charge calculated by Winmostar.

2.2 Simulation method

We performed MD simulations by Gromacs^[4] with the model under the NPT (constant number of atoms, constant pressure, and constant temperature) emsemble and 2D periodic boundary conditions in *x* and *y* directions. Since this study assumes the condition in vivo, we set T = 310 K and P = 1 atm.

3. Simulation Results

We show snapshots of polymer brush-water interface at 0 ps and 10 ps in Fig. 2. We can see from this figure that water molecules penetrated into the layer of the polymer brushes at 10 ps while the water layer and the polymer-brush layer are separated in the initial configuration at 0 ps. From our simulation data, we calculate the number and the lifetime of hydrogen bonds, the diffusion coefficient of water, and so on, to understand the dynamics of water in polymer brush-water interface.

References

- Y. L. Liu, D. Zhang, B. P. Ren, X. Gong, L. J. Xu, F. A. Zhang, Y. Chang, Y. He, and J. Zheng: Molecular simulations and understanding of antifouling zwitterionic polymer brushes, *J. Mater. Chem. B*, 8:17(2020), 3814-3828.
- [2] https://winmostar.com/jp/.
- [3] topolbuild1_2_1.tgz in

http://www.gromacs.org/Downloads/User_contributions/Other_software.

[4] https://www.gromacs.org/.

JSST2021



Figure 1 Initial configuration of our simulation model. Polymer brushes are placed below water molecules.



Figure 2 Snapshots of polymer brush-water interface (a) at 0 ps and (b) at 10 ps.

高周波電磁界ソルバ: ADVENTURE_FullWaveの高速化開発

Development for High-Speed of High-Frequency Electromagnetic Fields Solver: ADVENTURE_FullWave

大中 健登^{1*} Kento Ohnaka^{1*}

武居 周¹ Amane Takei¹

¹宮崎大学 工学部 電気システム工学科

¹Department of Electorical and Systems Engineering, Faculty of Engineering,

Miyazaki University

^{*}hl16004@student.miyazaki-u.ac.jp

Abstract. Thigh-frequency electromagnetic fields solver: ADVENTURE_FullWave is a finite element analysis software in the parallel computational mechanics system: ADVENTURE System. The ADVENTURE_FullWave can perform detailed, high-speed, and high-efficiency finite element analyses of large-scale electromagnetic field problems using the hierarchical domain decomposition method (HDDM) and the corresponding parallel distributed processing environment. The result of performance evaluations of the ADVENTURE FullWave will be shown in the conference.

Keywords: Finite element method, Electromagnetic fields, Large-scale analysis, Hierarchical domain decomposition method

1. 背景

近年の計算機の性能向上と数値計算技術の進歩により,計算機を用いた,高周波帯 域の電磁界解析が普及した.これにより,アンテナ等の開発・設計において,実際に 機器を試作し,測定を行わなくとも,電磁界の振る舞いを予測することが出来るよう になり,開発期間の短縮や開発コストの削減に非常に有用なツールとして広く利用さ れるようになった.オープンソースソフトウエア ADVENTURE_FullWave[1]もその 1つであり,解析モデルの作成・メッシュ生成・境界条件設定などで ADVENTURE

System の各種モジュール群を基盤に用いた解析システムの構築とともに運用される. ADVENTURE_FullWave は大規模解析に向けた並列計算手法として領域分割法を 適用しており,また領域分割法に基づく並列化手法として COCG 法などの反復法を 用いた反復型領域分割法を,さらに階層型領域分割法(HDDM)の適用により複数 の計算機による並列計算・負荷分散を実現している.これに加えて基盤とする ADVENTURE System による特徴として,数千万~数億に及ぶ自由度メッシュによ る詳細な解析が行えること,数万に及ぶプロセッサから成る超並列計算環境において も高い並列効率を得られること,PC クラスタから超並列計算機まで多様な並列分散 環境に対して優れた移植性をもつことなどが挙げられる.

このように本システムには多様な並列分散環境に対応しながら高精細モデルを用 いた大規模解析が行える利点がある一方,計算時間がかかるという高周波解析特有の 問題があるため,特に並列計算におけるハイブリッド並列化の適用や線形代数ソルバ の変更などの,並列計算機環境上でのコードチューニングにより処理速度のさらなる 高速化や反復法の収束性改善が求められる.

そこで、本研究ではまずハイブリッド並列化をはじめとするコードチューニングに よる高速化を検討し、今後の開発指針を得る.

2. 基礎式

2.1. ベクトル波動方程式

解析領域 Ω を考え,その境界を $\partial\Omega$ とする.変位電流を含む Maxwell 方程式より 導かれる電界 E[V/m]を未知関数としたベクトル波動方程式(1)を考える.

$$\operatorname{rot}\left\{(1 / \mu) \operatorname{rot} \mathbf{E}\right\} - \omega^{2} \varepsilon \mathbf{E} = j\omega \mathbf{J} \quad \text{in } \Omega \tag{1a}$$

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = 0 \quad \text{on } \partial \Omega \tag{1b}$$

 $\mathbf{J} = \sigma \hat{\mathbf{E}} \tag{1c}$

電界は単一角周波数 ω [rad/s]をもち、 μ は透磁率[H/m]、 ϵ は複素誘電率[F/m]、 σ は導電率[S/m]、J は電流密度[A/m²]を表す. j は虚数単位 (j = $\sqrt{-1}$)、n は境界に おける外向き法線ベクトルである. 複素誘電率 ϵ は $\epsilon = -\sigma/j\omega$ で与えられる. 解く べき方程式は式(1a)であり、電界 E を未知数とした E 法として定式化される. 本定式化において単一角周波数 ω 、透磁率 μ 、複素誘電率 ϵ を既知量とし、放射源と して電流密度 J を直接、あるいは式(1c)より既知電界 Ê を与える. また、得られた電 界 E より Maxwell 方程式の1つである式(2)を用いて磁界 H[A/m]を計算する.

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} - \mathbf{j}\omega\mu\mathbf{H} = 0 \tag{2}$$

2.2. 有限要素定式化

式(1a)より弱形式を導き,領域 Ω の有限要素分割を考える. 電界 **E** を Nedelec 四 面体一次要素(辺要素)で近似し,電流密度 J を通常の四面体一次要素で近似する. **E**_h, J_h をそれぞれ **E**, J の有限要素近似とする. **E**^{*}_h は任意の試験関数とする.

$$\iiint_{\Omega} (1/\mu) \operatorname{rot} \mathbf{E}_{h} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{E}_{h}^{*} \, \mathrm{dv} - \omega^{2} \iiint_{\Omega} \varepsilon \mathbf{E}_{h} \cdot \mathbf{E}_{h}^{*} \, \mathrm{dv} = j \omega \iiint_{\Omega} \mathbf{J}_{h} \cdot \mathbf{E}_{h}^{*} \, \mathrm{dv}$$
(3)

式(3)を解くべき有限要素方程式とする.

3. 階層型領域分割法(HDDM)

並列有限要素法において最も有効な解法の1つであるとされる領域分割法では,解 析領域全体をいくつかの部分領域に分割し,各部分領域に関する有限要素計算と,各 部分領域境界上のつり合いをとる反復計算とを交互に行い,部分領域境界のつり合い が取れた時点で領域全体の解とする.解析領域の自由度は部分領域内部の自由度と境 界上の自由度とに分けられ,静的縮約により内部の自由度を消去し境界上の自由度の みからなる方程式(インターフェース問題)を導出する.インターフェース問題を解 く方法として共役勾配法(CG法)などの反復法を用いる反復型領域分割法を用いる が,CGループ内各ステップでの部分領域内部の自由度を求める箇所において計算負 荷が特に大きくなることがわかっている.この増大負荷を超並列計算機上で調整しな がら効率的に解くための手法として階層型領域分割法を導入する.

図1および2に階層型領域分割法における領域分割とデータ分配の例を表す模式図 を示す.階層型領域分割法では、まず全体領域を複数のパート(part)に分割し、さ らに各 part をいくつかの部分領域(subdomain)に分割することで2段階の階層を もつ領域分割を行う.part単位のデータは同個数の Parent と呼ばれるプロセッサに 分配され、メモリ上に記憶される.これにより Parent の数を増やすほどより大規模 な計算に対応することが可能となる.計算負荷が大きく増大する部分領域内部の自由 度を求める箇所において、subdomain を適切な大きさ(ADVENTURE_FullWave では1 subdomain あたり要素数にして 100~200 が適当)に調節して分割していくこ とで、効率的な計算処理を実現できる.



図1. 階層型領域分割法による領域分割



図2. 複数プロセッサへのデータ分配

4. 計算機環境および性能評価

性能評価に用いる計算機は、筆者らの研究室で所有する PC クラスタ Tomahawk で ある.本計算機は、Intel Core i7-2600K のマルチコア CPU および 32GB のメモリ が搭載されている PC クラスタであり、25 台(100 core)を用いた.用いたコンパイラ は gcc である.また、並列化ライブラリとして MPI(Message Passing Interface)を 用いる.また、ダイポール・アンテナモデル[3]を用いた計測結果を表 1 に示す.本 結果に関する詳細な考察は、講演にて述べる.

解析周波数	$1.0~\mathrm{GHz}$
要素数	15,712,684
辺自由度数	5,599,463
計算時間[s]	1,998
反復回数[回]	6,578

表 1.計測結果

参考文献

- [1] 武居 周, 室谷 浩平, 吉村 忍, 金山 寛: 数値人体モデルを用いたマイクロ波帯 域の有限要素電磁界解析, 日本シミュレーション学会論文, Vol.4:No.3 (2021), pp.81-95
- [2] 武居 周, 杉本 振一郎, 荻野 正雄, 吉村 忍, 金山 寛: 階層型領域分割法におい て部分領域に直接法を適用した高周波電磁場の大規模解析, 電気学会論文誌 A (基礎・材料・共通部門誌), Vol.130:No.3 (2010), pp.239-246
- [3] 東 勇,山田 知典,武居 周:反復型領域分割法に基づくマイクロ波シミュレーション,日本シミュレーション学会論文誌, Vol.10:No.1 (2018), pp.25-33

波動音響解析ソルバ: ADVENTURE_Soundの開発と応用

Development and application for wave-sound field Solver: ADVENTURE_Sound

吉留 涼^{1*} Ryo Yoshidome^{1*} 武居 周¹

Amane Takei¹

¹宮崎大学 工学部 電気システム工学科 ¹Department of Electorical and Systems Engineering, Faculty of Engineering, Miyazaki University *hl18048@student.miyazaki-u.ac.jp

Abstract. The wave-sound fields analysis solver: ADVENTURE_Sound is a finite element analysis software in the parallel computational mechanics system: ADVENTURE System. The ADVENTURE_Sound can perform detailed, high-speed, and high-efficiency finite element analyses of large-scale wave-sound field problems using the hierarchical domain decomposition method (HDDM) and the corresponding parallel distributed processing environment. The result of performance evaluations of the ADVENTURE_Sound will be shown in the conference.

Keywords: Finite element method, Wave-sound fields, Large-scale analysis, Hierarchical domain decomposition method

1. 背景

近年の計算機の性能向上と数値計算技術の進歩により,計算機を用いた,波動音響 解析が普及した.これにより,コンサートホールや楽器の設計において,実際に実物 やモックアップを試作し,測定を行わなくとも,音の振る舞いを予測することが出来 るようになり,コンサートホールの建設や楽器の制作期間の短縮やコストの削減に非 常に有用なツールとして広く利用されるようになった.オープンソースソフトウエア ADVENTURE_Sound[1]もその1つである.ADVENTURE_Sound は,これまで小 規模に留まっていた解析規模を一気にライブハウス・コンサートホールのスケールの 計算を可能とした並列計算コードである.並列化手法として,領域分割法を適用して おり,また領域分割法に基づく並列化手法として COCG 法などの反復法を用いた反

JSST <u>2021</u>

復型領域分割法を,さらに階層型領域分割法(HDDM)の適用により複数の計算機に よる並列計算・負荷分散を実現している.加えて基盤とする ADVENTURE System による特徴として,数千万~数億に及ぶ自由度メッシュによる詳細な解析が行えるこ と,数万に及ぶプロセッサから成る超並列計算環境においても高い並列効率を得られ ること,PC クラスタから超並列計算機まで多様な並列分散環境に対して優れた移植 性をもつことなどが挙げられる.

本研究では、ADVENTURE_Sound を数千万要素を超える高精細モデルによる解 析が必要となるバイオリンの設計に適用するために,必要となる並列計算機能の強化 として,まずハイブリッド並列化をはじめとするコードチューニングによる高速化を 検討し、今後の開発指針を得る.

2. 基礎式

2.1. Helmhortz 方程式

指定境界内部の解析領域Ωにおいて,音源をもつ音場内の速度ポテンシャルに関す る波動方程式は次式で表される[2].

$$\nabla^{2}\phi - \frac{1}{c^{2}}\frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}}\phi = q$$
(1)
ただし、 ϕ は速度ポテンシャル、 c は音速、 q は音源の分布関数である.
ここで、定常状態を考えるため、 $\phi = \phi exp(-j\omega t)$ とすると(1)式は

$$\nabla^2 \Phi + \frac{\omega^2}{c^2} \Phi = q \tag{2}$$

となり、解くべきHelmholtz方程式を得る.ここに、jは虚数、 ω は角周波数である.

また,音圧pは未知数である速度ポテンシャル Φ を求めたのちに次式で求められる. $p = -j\omega\rho\Phi$ (3)

ここに, *ρ*は媒質の密度[kg/m³]である.

2.2. 有限要素定式化

式(2)にガラーキン法を適用することで弱形式化し、有限要素法により近似すると 次式が得られる[3].

$$\iiint_{\Omega_e} \nabla \Phi_h \cdot \nabla \Phi_h^* d\Omega_e - \frac{j\omega\rho}{Z_n} \iint_{\Gamma_e} \Phi_h \Phi_h^* d\Gamma_e - k^2 \iiint_{\Omega} \Phi_h \Phi_h^* d\Omega_e = 0.$$
(4)

(4)式を解くべき有限要素方程式とする. ϕ は未知数となる速度ポテンシャル, kと ω は 波数ならびに角周波数, ρ は密度, そして Z_n 固有音響インピーダンスである.

3. 計算機環境および性能評価

性能評価に用いる計算機は、筆者らの研究室で所有する PC クラスタ Tomahawk で ある.本計算機は、Intel Core i7-2600K のマルチコア CPU および 32GB のメモリ が搭載されている PC クラスタであり、25 台(100 core)を用いた.用いたコンパイラ は gcc である.また、並列化ライブラリとして MPI(Message Passing Interface)を 用いる.また、バイオリン簡易モデルを用いた計測結果を表1に示す.本結果に関す る詳細な考察は、講演にて述べる.

解析周波数[Hz]	500 Hz
要素数	2,956,804
自由度数	4,005,344
計算時間[s]	23.59s
反復回数[回]	14回

表 1.計測結果

参考文献

- [1] ADVENTURE Project Homepage [Online]: https://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/.
- [2] N. Sakamoto, T. Otsuru, R. Tomiku, S. Yamauchi, "Reproducibility of sound absorption and surface impedance of materia ls measured in a reverberation room using ensemble averaging technique with a pressure-velocity sensor and improved calibration," Applied Acoustics, vol.142, no.15, pp.87-94, 2018.
- [3] 武居 周, 工藤彰洋, "並列有限要素法に基づく1億自由度超の波動音響解析,"日本シミュレーション学会論文誌, vol.12, no.2, pp.76-84, 2020.

Molecular dynamics simulation and numeric calculation of a damaged polyethylene assuming tritium substitution and decay

Ryuta Kawanami^{1,2*}, Susumu Fujiwara³, Hiroaki Nakamura^{4,5}, Kazumi Omata^{6,7}

 ¹Graduate School of Science and Technology, Kyoto Institute of Technology
 ²Quantum Beam Science Research Directorate and Institute for Quantum Life Science, National institute for Quantum and Radiological Science and Technology
 ³Faculty of Materials Science and Engineering, Kyoto Institute of Technology
 ⁴Department of Helical Plasma Research, National Institute for Fusion Science
 ⁵Department of Energy Engineering and Science, Nagoya University
 ⁶Clinical Research Center, National Center for Global Health and Medicine
 ⁷Departments of Hematology, Rheumatology, and Infectious Diseases, Kumamoto University

*m0672007@edu.kit.ac.jp

Abstract. It is important to simulate how the structure of a molecule, such as DNA, responds when subjected to tritium substitution and decay. This is because structural changes in DNA can inhibit enzymatic repair. We have observed the response of single-stranded polyethylene, a simpler polymer, by molecular dynamics simulations and attempted to make theoretical predictions based on non-equilibrium statistical mechanics. As a result, we found that we could predict the response to some extent for low damage rates.

Keywords: Molecular dynamics simulation, Linear response theory, Theoretical calculation, Tritium, Polymer, Decay effect

1. Introduction

The accident at the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant in 2011 resulted in the generation of a large amount of radiation-contaminated water. Although the radionuclide removal system (ALPS) can remove radioactive materials other than tritium, the treatment of the resulting tritiated water has become a problem. The main target of tritium is DNA, which is responsible for the production of proteins. Although the effects of tritium on macromolecules have been studied [1,2,3], the biological effects of tritium have not yet been elucidated. One possibility is that the structural changes in the damaged DNA may inhibit enzymatic repair. There is also the possibility that strand breaks will be induced. Therefore, it is important to discuss the structural changes of tritium-damaged DNA. However, many interactions such as base stucking, hydrogen bonding between interstrand bases, and shielding of the negative charge of phosphate

groups by cations contribute complexly to the stability of DNA. Therefore, in this study, we will investigate the structural changes in polyethylene, a simpler polymer macromolecule, instead of those in DNA, a complex macromolecule.

Tritium beta decay occurs with a short half-life of 12.3 years, producing helium-3. The range of the beta-electrons in water is at most $6\mu m$, so external exposure is not a problem. What can be a problem is when tritiated water is absorbed into the human body; either the tritiated water near the DNA emits beta electrons, or the hydrogen in the DNA in contact with the tritiated water is replaced by tritium and it decay. We focused on the latter, the decay of tritium in DNA given by tritiated water and the change in its structure. This is a unique effect of tritium, a radioactive isotope of hydrogen.

The structural change after tritium damage can be studied by molecular dynamics (MD) simulations. Another approach is to predict the response function using theories in nonequilibrium statistical mechanics. It has been suggested that this can be used to calculate the response of damaged molecules from MD simulations of equilibrium (undamaged) system [4]. In the second half of this paper, we will compare the response functions calsulated by the theory with actual MD simulations of damaged molecules and discuss their validity.

2. Simulation

In this study, a model of unbranched, single-chain polyethylene was used. Each carbon and the hydrogen bonded to it is coarse-grained, with a particle number of 3000. Damage due to tritium substitution and decay was represented by changing the type of coarse-grained particle to one with one hydrogen removed (e.g. $CH_2 \rightarrow CH$, $CH_3 \rightarrow CH_2$). Assuming that the damage caused by tritium is completely random, the ratio for the number of particles is $f_{\rm H}$.

Try to evaluate the structural change of polyethylene with the global orientation order parameter P_2 as follows.

$$P_2 = \left(\frac{3\cos^2 \Phi - 1}{3}\right)_{\text{all-bond}}$$

When polyethylene is at 250K in vacuum (Figure 1), the global orientation order parameter P₂ of polyethylene with $f_{\rm H} = 0$ is 0.431. On the other hand, P₂ for $f_{\rm H} = 0.1$ is 0.404 and there is no significant difference. We decided to investigate the potential energy of the system.



Figure 1. Top and side views of polyethylene; $f_{\rm H} = 0$ (left), $f_{\rm H} = 0.1$ (right). The large spheres indicate the damaged sites.



Figure 2. Potential energy relaxation of damaged polyethylene. They are approaching the value of $f_{\rm H} = 0$ with oscillation.

Figure 2 shows the relaxation of the potential energy $E = E_{\text{bond}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{torsion}} + E_{\text{LJ}}$ of the system at $f_{\text{H}} = 0.1$ and $f_{\text{H}} = 0.01$ at 250K. The value settled at equilibrium is the same as that for $f_{\text{H}} = 0$, which means that the polyethylene transitions to a slightly different structure after the decay. In fig. 1, the potential energy oscillates with a buzzing motion, which is thought to be the oscillatory particles with different frequencies or masses.

3. Linear response theory

Linear response theory is used to predict the response of damaged polyethylene. In this theory, the response function of a system subjected to a weak perturbation is obtained as a functions of the physical quantity in equilibrium. Suppose that in the past when t < 0, the system follows the Hamiltonian H^0 . When a perturbation H'(t) is added at the moment t = 0, the physical quantity B of the system evolves according to $H(t) = H^0 + H'(t)$. Suppose that the perturbation term H'(t) of the Hamiltonian can be devided into F(t) and $A(\Gamma)$, where F(t) is a time-dependent external field term and the conjugate $A(\Gamma)$ is a quantity that depends on the phase spase. In this study, we consider tritium damage as a perturbation, which is given by $f_{\rm H}$ simultaneously at t = 0. The physical quantity we want to predict is the potential energy. That is, let F(t) be a unit step function with value at t > 0 and $A(\Gamma)$ be the potential energy of the system itself. Linear response theory gives the response function $\phi(t)$, which is a function only of B in equilibrium and the time derivative \dot{A} of the potential energy. Specifically, it is expressed as a time correlation function of B and \dot{A} at equilibrium.

$$\phi_{BA}(t) = \beta \langle B(t) \dot{A}(0) \rangle \tag{1}$$

$$\langle \Delta B \rangle = \int_{-\infty}^{t} dt' \,\phi_{BA}(t-t')F(t') \tag{2}$$

4. Discussion

We first analytically derived the \dot{A} corresponding to $E_{\rm bond}$, $E_{\rm angle}$ and $E_{\rm torsion}$, respectively. Then, we substituted the result of $f_{\rm H} = 0$ into that equation and calculated the response function numerically for $f_{\rm H} = 0.1$. The ensemble average in Equation (1) is for 2000 samples. In the integration of the response function in Equation (2), the calculated response function is shifted so that the values do not diverge.

The result show that for $f_{\rm H} = 0.1$, the predictions differ by a factor of 10 (Figures 1 and 2). A possible reason for this is that for a large fraction of damage, $f_{\rm H} = 0.1$, the nonlinear term is large, i.e., the damage site has a strong effect of changing the structure in a concerted manner.

In the future, we will verify whether the results are consistent with the actual simulation values for $f_{\rm H} = 0.01$ and even smaller fractions. We will also calculate the global orientation order parameter P_2 and the other quantities that represent structural

 $\begin{array}{c} 5000 \\ f_{\rm H} = 0.1 \\ 4000 \\ 3000 \\ 2000 \\ 0.0 \\ 1.0 \\ 2.0 \\ 3.0 \\ 4.0 \\ 5.0 \\ time \ t \ (ps) \end{array}$

Figure 3. Relaxation of polyethylene potential energy calculated based on linear response theory.

changes as physical quantities B to be predicted.

References

- S. Fujiwara, H. Nakamura, H. Li, H. Miyanishi, T. Mizuguchi, T. Yasunaga, T. Otsuka, Y. Hatano, S. Saito: Computational strategy for studying structural change of tritiumsubstituted macromolecules by a beta decay to helium-3, J. Adv. Simulat. Sci. Eng., 6:1 (2019) 94-99.
- [2] H. Li, S. Fujiwara, H. Nakamura, T. Mizuguchi, T. Yasunaga, T. Otsuka, T. Kenmotsu, Y. Hatano, S. Saito: Structural changes in tritium-substituted polymeric materials by a beta decays: A molecular dynamics study, Plasma Fusion Res., 14 (2019) 3401106.
- [3] H. Li, S. Fujiwara, H. Nakamura, T. Mizuguchi, A. Nakata, T. Miyazaki, S. Saito: Structural change of damaged polyethylene by beta-decay of substituted tritium using reactive force field, Jpn. J. Appl. Phys., 60 (2021) SAAB06.
- [4] R. Kubo: Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Process. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems, J. Phys. Soc. Jpn., 12:6 (1957), 570-586

void 欠陥を有する磁性体の磁化過程解析 Magnetization process analysis of magnetic material with void defect

五十嵐靖幸^{*}, 山口克彦 Yasuyuki Igarashi^{*}, Katsuhiko Yamaguchi

福島大学 共生システム理工学研究科 Graduate School of Symbiotic Systems Science and Technology, Fukushima University *s2170005@ipc.fukushima-u.ac.jp

Abstract. Assuming iron clusters with void defects, we analyzed how the defects affect the magnetization process using the LLG equation. When the cluster had void defects, changes of energy were seen in the exchange energy and magnetic dipole energy as the domain wall passed through the defect

Keywords: LLG equation, micro magnetic simulation, domain wall displacement, void defect

1. はじめに

バルクハウゼンノイズ(BHN)は、鉄などの磁性体が磁化される過程で、磁壁が不 連続に移動することで発生する^[1]. 磁壁の不連続な移動は磁性体内の欠陥や析出物 などに、磁壁移動がトラップされることによって引き起こされる^[1]. すなわち BHN は 磁性体内の欠陥に敏感であることから、鉄鋼材料の劣化具合を測定する非破壊検査 に用いられている. 磁壁が磁性体内の void 欠陥を通過する際に、磁壁は欠陥にトラッ プされて磁気双極子エネルギーが減少する説が唱えられている^[2]が、欠陥が磁壁に与 える影響を微視的に解析した例は少ない. そこで微視的な磁化解析に用いられる Landau-Lifshitz-Gilbert(LLG)方程式を使用して, void 欠陥を含む磁性体の磁化過程解析 をおこなった.

2. 手法

まず磁化の時間変化を計算する際に用いられる LLG 方程式について(1)式に示す. $dM/dt = -\gamma M \times H_{eff} + (\alpha/M_s)M \times dM/dt$ (1) (1)式中のMは磁化ベクトル, γはジャイロ磁気定数($\gamma = 1.76 \times 10^7 [1/Oe \cdot s]$), H_{eff} は 有効磁場, α はギルバート減衰定数($0 \le \alpha \le 1$), M_s は自発磁化である. Heffを算出する式を(2)式に示す.

 $H_{eff} = -\partial E_{tot} / \partial (M_s \alpha)$ (2) また、 E_{tot} について(3)式に示す.

 $E_{tot} = E_{ext} + E_{ani} + E_{ex} + E_{dp}$ (3)

*E*tot は以下で述べるエネルギーの総和である. ゼーマンエネルギー*E*ext は外部から磁性体中に印加した磁場によるエネルギー, 異方性エネルギー*E*ani は磁性体中の磁気モーメントを磁化しやすい方向(容易軸)から磁化しにくい方向(困難軸)にねじ向けるのに必要なエネルギー, 交換エネルギー*E*ex は磁性体中で隣接する磁気モーメントに働く交換相互作用によるエネルギーで, 磁気双極子エネルギー*E*dp は磁性体中の磁気モーメント同士に働く磁気双極子相互作用によるエネルギーである.これらのエネルギーは磁気モーメントの方向より算出させる.

計算には、M.R.Scheinfein らによって作成された LLG Micromagnetic Simulator(以下、 LLGシミュレータ)というLLG方程式を用いて解析を行えるシミュレーションソフト を用いた. LLG シミュレータでは、計算を想定する磁性体クラスタの大きさ、想定す る材料の物性パラメータ、境界条件、計算開始時の磁性体の磁化(初期磁化)、印加す る外部磁場、欠陥の設定をすることができる.物性パラメータには材料ごとに異なる ものとして、M_s、交換スティフネス定数A、異方性定数Kがある. Aは交換エネルギー の計算、Kは異方性エネルギーの計算に用いられる.以上のような各条件を LLG シミ ュレータで設定して、磁化解析をした.

3. 結果

解析は、サイズが 400×20×20[nm³]の直方体クラスタを想定して行った. 材料は、鉄 鋼材料に用いられる鉄を想定して、計算に使用する物性パラメータは M_s =1714[emu/cm³], A=1.5[µerg/cm]^[3], K=4.7×10⁵ [erg/cm³]^[4]とした. void 欠陥は 2×2×2[nm³]のサイズで、クラスタ左端から100[nm]離れた所の中央部に、以下の Fig.1 に示すように配置した. 外部磁場は、印加時間を 0~5600[ps]、大きさを -10000[Oe]~10000[Oe]の間で変化させて Fig.2 に示すように、クラスタの長手方向に 印加した.



また,境界条件は,磁壁の発生を1つにして解析しやすくするために,クラスタの両端の磁化を外側に固定するように設定した.そして,初期磁化はランダムになるように設定し,計算を行った.

結果として、磁壁が欠陥を通過する 5148[ps]のときに、void 欠陥の有無による変化 が、交換エネルギー E_{ex} と磁気双極子エネルギー E_{dp} にみられた.磁壁が通過する時間 付近の、void 欠陥の有無による E_{ex} の変化を Fig.3 に、 E_{dp} の変化を Fig.4 にそれぞれ示 す.冒頭の説では、磁壁が void 欠陥を通過する際には E_{dp} は減少するとしていたが、逆 に増加していて、通過直後の 5154[ps]のときには下がっている.一方、 E_{ex} は磁壁が void 欠陥を通る際には下がり、通過直後にはあがっている.これはミクロスケール のクラスタや欠陥を想定して計算を行ったため、 E_{dp} より量子力学的なエネルギーで ある E_{ex} の方が磁壁のトラップに影響を及ぼしたと考えられる.よって今後は欠陥の 大きさを大きくしたり、欠陥の数を多くしたりした場合、 E_{ex} と E_{dp} にどのような影響 がみられるかを解析していくことを考えている.実際、磁性体内の欠陥の数や大きさ は様々であり、より多くの void 欠陥を想定して解析を行うことで、現実的な磁性体 を想定して非破壊検査に生かすことが期待できる.



Fig.3 Changes of E_{ex} with or without a defect

Fig.4 Change of E_{dp} with or without a defect

参考文献

- [1] 古屋泰文, バルクハウゼンノイズ法による非破壊材料評価, 溶接学会誌, 64 巻, pp.120-125, 1995.
- [2] Louis Néel, Effet des cavités et des inclusions sur le champ coercitif, Cahiers de physique, N°25, pp.21-44, 1944.
- [3] 近角聰信, 強磁性体の物理(下), 裳華房, p.175, 1995.
- [4] 近角聰信,太田恵造,安達健五,津屋昇,石川義和,磁性体ハンドブック,朝倉書店, p.779,2000.

水素脆化を受けたオーステナイト系ステンレス鋼

の機械的特性評価 Mechanical properties of hydrogen embrittled austenitic stainless steel

内田圭祐^{*}, 山口克彦 Keisuke Uchida^{*}, Katsuhiko Yamaguchi

福島大学 共生システム理工学研究科 Faculty of Symbiotic Systems Science,Fukushima University s2170008@ipc.fukushima-u.ac.jp

Abstract.In this study, we performed a finite element analysis of hydrogen embrittlement. The value of the nucleation void volume ratio in the Gurson model was modified to represent hydrogen embrittlement. To evaluate the analytical results, the length variation of the width of the parallel section of the specimen and the fracture elongation were calculated. The length of the width of the parallel part of the specimen showed a similar trend to that of the hydrogen embrittlement. The fracture elongation also showed a similar trend to that of the hydrogen embrittlement case. The results suggest that the hydrogen embrittlement test can be qualitatively described by varying the nucleation void volume ratio.

Keywords: Hydrogen embrittlement, Austenitic stainless steel, FEM, Gurson

1. 諸言

水素ステーションの実現に向けてさまざまな研究が行われている.その中で,材料に水 素が侵入することで強度と延性を低下させる水素脆化という現象が問題であり,この現 象に対する材料の強度の研究が行われている.水素脆化が顕著であるほど,引張試験の前

後での断面積の変化量が増加しにくくなると考えられる.また,水素脆化が生じると破断 ひずみが低下するという研究報告がある ^D.水素脆化のメカニズムの一つとして水素助 長歪誘起空孔理論が提案されている.この理論は水素が侵入することにより転位の易動 度を増加させることでボイドの生成とその凝集を助長するというモデルである².先行研 究では,この理論に基づき低炭素パーライト・フェライト鋼の3点曲げ試験によるR曲 線の水素脆化の有限要素法解析が行われた³.実際の解析では,水素脆化を表現するため にボイドの生成・成長を表すGurosnモデル⁴を適用した³.本研究では,Gursonモデ ルを用いて引張試験に関する水素脆化試験をオーステナイト系ステンレス鋼(以下, SUS304)で有限要素法解析を行えるか検討した.

2. 水素脆化試驗解析

本研究で使用した有限要素解析のソフトウエアは MSC 「 Marc (MSC Software 製)である. このソフトではボイドの生 成・成長を表す Gurson モデルが導入されている. 水素脆化試 験の 2 次元解析モデルを図 1 に示す. 図 1 は引張試験の JIS 規 格の 14B 号試験片の平行部である. 境界条件は平行部の上端 を拘束し下端を強制変位させるように設定した. 本研究で使用 した SUS304 の縦弾性係数 *E* は 195.85 GPa, ポアソン比 *v* は 0.29, 降伏応力 *oy* は 332 MPa とする ^{5,6)}. また, Gurson



モデルのパラメータは SUS304 の Gurson モデルに関する論文 図1 解析モデル を参照してパラメータを決定した.このときのパラメータを表1に示す⁵⁾. q_1 , q_2 は降伏 曲面係数, f_0 は初期ボイド体積比, f_c は臨界ボイド体積比, f_F は破壊ボイド体積比, e_N は 核生成平均ひずみ, S_N は標準偏差を表している.本研究では,水素を侵入させたと仮定 するためにボイド核生成の体積比 f_N を 0.01~0.03 へそれぞれ変更した.

表1 Gurson モデルのパラメータ

\mathbf{q}_1	\mathbf{q}_2	\mathbf{f}_0	$\mathbf{f}_{\mathbf{c}}$	\mathbf{f}_{F}	$\epsilon_{\rm N}$	$\mathbf{S}_{\mathbf{N}}$
1.5	1	0.002	0.03	0.156	0.54	0.09

3. 解析結果

解析の評価を行うために、試験片の破断面の長さ ΔA と破断伸び λ_{max} を算出した. ΔA は次式(1)のように算出される.元の試験片の平行部の幅の長さ I,破断後の試験片の平行部の幅の長さを A とする.

$$\Delta A = l - A \tag{1}$$
式(1)から算出した結果を表 2 に示す. 試験片の標点間距離を 25.6mm とし,水素脆化前後の標点間距離の変位から算出した破断伸び *A max* を表 3 に示す. *L* は破断の際の標点間距離の伸び, *A max* は破断伸びを表している.

fx	0.01	0.02	0.03
A [mm]	3.45	3.58	3.77
$\Lambda A [mm]$	2 55	2.42	2.23

表2 破断面の長さを比較

\mathbf{f}_{N}	0.01	0.02	0.03
L [mm]	35.9	35.0	34.8
λ_{max} [mm]	10.3	9.4	9.2

表3 破断伸びの比較

表 2 から、ボイド核生成の体積比 fwの値が上がると破断面の長さ ΔA の値が小さくなることがわかった.これはボイド核生成の体積比 fwが増加したことで、ボイド体積比がより早く破壊ボイド体積比 frまで達したからだと考えられる.また、試験片の厚み方向の破断面の長さの変化量は試験が一方向にしか力がかからない試験であるうえ、ポアソン比 ν が一定であるので、ボイド核生成の体積比 fwが大きくなるほど小さくなると考えられる.よって、ボイド核生成の体積比 fwが大きくなるほど、試験前後の断面積の変化量は小さくなることが見込まれる.このことから、Gurson モデルのボイド核生成の体積比 fwを変更すれば水素脆化を表現することができると考えられる.

表3から、ボイド核生成の体積比 f_N が増加すると破断伸び λ_{max} が低下することがわかった.これはボイド核生成の体積比 f_N が増加したことで、ボイド体積比がより早く破壊ボイド体積比 f_F まで達したためだと考えられる.この結果から、ボイド核生成の体積比 f_N を使用すれば水素脆化で生じる現象の一つである破断伸び λ_{max} の低下を表現することができる可能性があると考えられる.

4. 結言

本研究では、水素脆化試験を想定した解析を行うために Gurson モデルを用いて有限 要素法解析を行った.解析結果から、Guroson モデルで水素脆化の絞り、破断伸びを表 現することができる可能性があることがわかった.今後は、引張強さを比較するために荷 重-伸び線図を算出したいと考えている.

- 小出賢一,南孝男,安樂敏朗,岩瀬明宏,井上博之,250℃の高圧水素ガス中での SUS304 鋼の水素脆化感受性,材料と環境,2014,523-527.
- 桃谷裕二,低炭素マルテンサイト鋼の水素脆性破壊挙動におよぼす変形条件の影響,京都大学,博士論文,2017.
- 3) 南雲道彦, 水素が関与する破壊の特徴, Vol. 56, No. 4, 2007.
- Hiroshi YOSHIDA, Michihiko NAGUMO, FEM Analysis of Crack Growth in Fracture Transition Region for Steels with Different Void Nucleation Frequency.ISIJ International, Vol. 38, No. 2, 1998, 196-202.
- 5) Jianpeng Dong, Shilong Wang, Jie Zhou, Chi Ma, Sibao Wang, Bo Yang, Experimental and numerial investigation on the shearing process of stainless steel thin-walled tubes in the spent fuel reprocessing, 2019.
- 6) 新潟県工業技術総合研究所, http://www.iri.pref.niigata.jp/topics/H29/29kin24.html, 21th, June, 2021.

NaI(TI)シンチレーション検出器を用いた放射線源

分布測定のシミュレーション

Simulation for estimation of radiation source distribution measured by NaI(TI) scintillation detector

菅 蒼太, 山崎 はるか, 山口 克彦 Sota Suga, Haruka Yamazaki, Katsuhiko Yamaguchi

1福島大学 共生システム理工学研究科

Graduate School of Symbiotic Systems Science and Technology, Fukushima University *s2170025@ipc.fukushima-u.ac.jp

Abstract. The purpose of this study is to safely store substances with high concentrations of radioactivity generated by the accident at the Fukushima Daiichi Nuclear Disaster. In this study, we simulated the radiation field for a measurement system using four NaI (Tl) scintillation detectors. As a result, it clarified that how the spectral pattern changes with and without the shield.

Keywords: Safety store, Radiation source distribution

1. まえがき

福島第一原子力発電所事故により,放射性物質である燃料と原子炉の構造体などが 溶融後,冷却・固化高濃度の放射性物質を含む燃料デブリ(以下,燃料デブリ)が大量 に生成された.近年,この燃料デブリを原子炉建屋内から安全に取り出し,保管する ための容器の具体的な提案も行われてきている.燃料デブリから放出される放射線量 を定量的に評価するためには,容器内で不均一に存在している放射性燃料と遮蔽材料 の分布を明らかにすることが重要となる.

そこで、NaI(TI)シンチレーション検出器(以下、NaI スペクトロメータ)を用いて、 外部から放射線を測定する装置を試作している.この装置を使用して様々な方向から スペクトルを測定し、その強度に差が生じれば遮蔽材料や高線量を示す位置が推定で き、収納缶の内部構造も推定ができると予想される.今回のシミュレーションでは、 複数本の NaI スペクトロメータを様々な方向に配置し、測定することで遮蔽材料の効 果の有無を判別すること、またスペクトルの測定に最適な本数や配置を決定すること を目的としている。

以上を踏まえ,放射性燃料と遮蔽材料が不均一に分布したモデル試料を想定し,試料から放出される y 線スペクトルの遮蔽材料における依存性をモンテカルロ計算コ

ード PHITS (particle and Heavy Ion transport code System)を用いて測定に先駆けて実施 したシミュレーション結果を報告する^[1].

2. 方法

解析にあたり,放射線源は¹³⁷Cs(全吸収ピークのエネルギー:0.662MeV)を,遮蔽材料には鉛(特性 X 線のエネルギー:0.083MeV)を用いた.

測定系を真上から見たものの一例を Fig.1 に示す。Fig.1 に示した NaI スペクトロメ ータは4本であるが、実際には4本以外に複数本使用している.二次元平面上の中心 に¹³⁷Cs線源を置いて、複数本の NaI スペクトロメータの検出部の先端から線源まで の距離が一定になるよう配置した.また中心に置いた¹³⁷Csの一部を遮蔽材料で覆い、 複数のうちいくつかの NaI スペクトロメータを遮るように遮蔽材料を配置した。また NaI スペクトロメータの本数や、線源に対する角度を変化させ、各方向からγ線スペ クトルを測定した.二次元平面上でエネルギースペクトルを測定することにより、放 射線源と遮蔽材料との関連性を検討した.



Fig.1 Measurement system using NaI (Tl) scintillation detector

3. 結果

Fig.2(a)に放射線源に対して遮蔽材料を用いていないもの,Fig.2(b)に放射線源に対して遮蔽材料を用いたものをそれぞれを示す.今回のシミュレーションで,¹³⁷Csの0.66MeVの全吸収ピークでは約2倍の変化が見られ,0.1MeVの低エネルギー側では,遮蔽材料が無い場合に現れていた¹³⁷Csの0.032MeVの特性X線ピークが,遮蔽材料がある場合には現れず、代わりに鉛の0.083MeVの特性X線ピークが出現している。下図からは鉛の遮蔽材料による変化が見受けられ,鉛の遮蔽材料による遮蔽効果は大きな影響を及ぼすことが分かった.今後,複数のNaIスペクトロメータから検出されるエネルギー強度の相対関係から,スペクトルパターンを解析していくことで高濃度のデブリを含む格納容器の内部状況が分かると予想される.



4. 参考文献

[1] Sato T, Iwamoto Y, Hashimoto S, Ogawa T, Furuta T, Abe S, Kai T, TsaiP, Matsuda N, Iwase H, Shigyo N, Sihver L and Nitta K, "Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02," Journal of Nuclear Science and Technology, 2018,5-6.

構造材料を対象とした熱ルミネッセンス 測定のためのシミュレーション Simulation of thermoluminescence measurement of structural materials

上杉 美咲^{*}, 高瀬 つぎ子, 山口 克彦 Misaki Uesugi^{*}, Tsugiko Takase, Katsuhiko Yamagushi

福島大学 共生システム理工学研究科

Graduate School of Symbiotic Systems Science and Technology, Fukushima University

*s2170007@ipc.fukushima-u.ac.jp

Abstract. A Monte Carlo simulation was performed to analyze the glow curve for calculating the integrated radiation dose of structural materials using thermoluminescence. In our experiments, we found that the shape of the glow curve changed when the sample was irradiated for a long time. This study enabled us to calculate the glow curve of a thermo-fluorescent material with a single trap. The glow curve of a thermo-fluorescent material with a single trap can be calculated by using this method.

Keywords: Boltzman distribution, Dosimeter, Thermoluminescence, Monte Carlo simulation

1. まえがき

外部から放射線などの刺激を受けた物質を加熱すると発光する熱ルミネッセンス (Thermoluminescence:TL)という現象がある.TLの発光量は放射線吸収量と比例する ため、積算放射線量を推定することが可能であり、広島・長崎に投下された原爆から 出たγ線量^[1]の算出にも用いられてきた.2011年3月に発生した福島原子力発電所の 事故においても、事故発生から10年が経過しており、当時の空間線量を直接求める ことが困難になっている.そこで、発電所周辺の構造材料から熱蛍光物質を採取しTL 法を用いることで、原爆同様、放射線量を間接的に推定可能であると考えた.

積算放射線量は、グロー曲線と呼ばれる熱蛍光物質を加熱したときの熱蛍光物質温度とその温度における熱蛍光量の関係^[2]より算出されるため、測定系の精度が要求される.製作した測定系の精度を調べるため、一般的な熱蛍光物質である CaSO₄:Tm のTL 測定を行った. CaSO₄:Tm は、 β 線と γ 線の年間線量決定に高感度で安定性が良い素子であるという特徴^[3]をもつため、TL の測定に多く用いられている.

CaSO₄:Tm の TL 測定より,放射線照射直後に測定した試料と,照射後5ヶ月経過 したのちに測定した試料を比較すると,グロー曲線に違いが見られた.これを Fig.1 に示す.照射直後に測定した試料においては2つのピークが確認できたものの,照射 後5ヶ月経過したのちに測定した試料では1つのピークしか確認できなかった.時間 経過により熱蛍光物質のトラップ準位が変化したと考えられる.照射後の時間経過に よるグロー曲線への影響が分かれば,照射後の保管期間に応じて適切な解析を行うこ とができる.本研究では,積算放射線量推定の精度確立のために,試料照射後の時間 経過によるグロー曲線の変化を解析することを目的とした.



2. 手法

Fig.2 にエネルギーバンドモデルによる熱蛍 光過程を示す.熱蛍光物質に放射線が当たると, 相互作用により電離する.電離した電子は励起 され価電子帯から伝導帯へと移動する.伝導帯 の電子は捕獲中心に捕捉され準安定状態とな り,ホールは物質中に捕捉され蛍光中心となる. この状態の物質を加熱すると,電子が捕獲中心 から伝導帯へと移動し,蛍光中心のホールと再 結合する.このとき,伝導帯と蛍光中心のエネル ギー差が TL として発光する.

本研究では、捕獲中心から伝導帯へと移動し た電子の数を TL 発光強度とし、ボルツマン分布 を用いて算出した.ボルツマン分布を(1)式に示 す.



(1)

ここで, I(T)は温度 T での TL 強度, n_0 はトラップされている総電子数, Eは伝導帯と蛍光中心のエネルギー差, kはボルツマン定数である.この式より確率条件を設定し,モンテカルロ法を用いて TL の発光機構を解析した.

 $I(T) = n_0 \exp\left(-E/kT\right)$

3. 結果と考察

伝導帯と蛍光中心のエネルギー差 E が 0.10~0.15eV の場合のグロー曲線推定結 果を Fig.3 に示す. TL の発光機構の通り, エネルギー準位差に依存してピーク温度が 異なることが確認でき, 1 つのトラップを持つ熱蛍光物質のグロー曲線を算出するこ とができた. この推定結果を用いると, CaSO4:Tm は 0.11eV と 0.14eV のトラップを もっており, 照射後の時間経過により 0.11eV のトラップ準位が移動したと考えられ る. この手法を応用すると, CaSO4:Tm のように 2 つのトラップを持つ熱蛍光物質の グロー曲線の算出ができ,時間経過によるトラップ準位の移動過程の解析を行えると 期待できる.



Fig.3 Glow curve by simulation

- [1] 市川米太,熱ルミネッセンスによる原爆線量の測定I広島・長崎の被爆瓦の示す発 光曲線,奈良学芸大学紀要.自然科化学,12,pp.51-57(1964).
- [2] 眞正浄光,古場裕介,熱蛍光線量計の諸特性と応用研究の紹介,放射線科 学,103,p.13(2017).
- [3] 長友恒人,山本健司,熱ルミネッセンス年代測定法におけるガンマ線年間線量測 定法の簡便化-市販 TLD カプセルを用いる試み-,古文化財教育研究報 告,15, pp. 31-39(1986).

非定常高周波電磁界解析手法の開発と応用の検討

Study for Development and application of Nonsteady High-Frequency Electromagnetic Field method

西村 聡汰^{1*} Souta Nishimura^{1*}

武居 周¹ Amane Takei¹

¹宮崎大学 工学部 電気システム工学科 ¹Department of Electorical and Systems Engineering, Faculty of Engineering, Miyazaki University * hl18034@student.miyazaki-u.ac.jp

Abstract. The high-frequency electromagnetic fields solver: ADVENTURE_FullWave is a finite element analysis software in the parallel computational mechanics system: ADVENTURE System. The ADVENTURE_FullWave can perform detailed, high-speed, and steady-state high-efficiency finite element analyses of large-scale electromagnetic field problems using the hierarchical domain decomposition method (HDDM) and the corresponding parallel distributed processing environment. However, also non-steady analysis is required. In this research, we study and develop the non-steady high-frequency electromagnetic field method. The detail of non-steady high-frequency electromagnetic field analysis will be discussed on the patch antenna problem in the JSST2021 conference.

Keywords: Finite element method, Electromagnetic fields, Large-scale analysis, Hierarchical domain decomposition method

1. 背景

近年の計算機の性能向上と数値計算技術の進歩により,計算機を用いた,高周波帯 域の電磁界解析が普及した.これにより,アンテナ等の開発・設計において,実際 に機器を試作し,測定を行わなくとも,電磁界の振る舞いを予測することが出来るよ うになり,開発期間の短縮や開発コストの削減に非常に有用なツールとして広く利用 されるようになった.オープンソースソフトウエア ADVENTURE_FullWave[1]もそ の1つであり,解析モデルの作成・メッシュ生成・境界条件設定などで ADVENTURE

System の各種モジュール群を基盤に用いた解析システムの構築とともに運用される. 本解析コードは,高精細モデルを用いた定常問題の大規模解析が行える利点がある 一方,非定常計算に対応していないため,電子回路設計等で EMC などの評価に適用 することができない.

そこで、本研究ではまず有限要素法に基づく高周波電磁界解析の非定常計算機能について検討し、今後の開発指針を得る.

2. 基礎式

2.1. 時間変動場のベクトル波動方程式

電磁界の基礎方程式である Maxwell の方程式のうち,(1a)式の Faraday の法則, (1b)の Ampere-Maxwell の法則と,電界,磁界に関連する構成則(1c)により時間変動 場Ωの電界*E*を未知関数としたベクトル波動方程式(2)が導かれる[1].

$$rot \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \tag{1a}$$

$$rot \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \tag{1b}$$

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E}, \boldsymbol{B} = \boldsymbol{\mu} \boldsymbol{H} \tag{1c}$$

$$rot \left\{ \left(\frac{1}{\mu}\right) rot \mathbf{E} \right\} + \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \qquad \text{in } \Omega$$
(2a)

$$\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \partial \Omega \tag{2b}$$

$$J = \sigma \widehat{E}$$
 (2c)

ここで、Eは電界、Hは磁界、Dは電東密度、Bは磁東密度、 ϵ は誘電率、 μ は透磁率、Jは 電流密度、nは境界における外向き法線ベクトル、tは時刻である。解くべき方程式は 式(2a)であり、電界Eを未知数とした E 法として定式化される。本定式化において、 透磁率 μ 、複素誘電率 ϵ を既知数とし、放射源として電流密度Jを直接、あるいは式(1c) より既知電界 \hat{E} を与える。また、得られた電界Eより(1a)式を用いて磁界Hを計算する。

2.2. 有限要素定式化

式(1a)より弱形式を導き、領域 Ω の有限要素分割を考える. 電界 **E** を Nedelec 四面体一次要素(辺要素)で近似し、電流密度 **J** を通常の四面体一次要素で近似する. E_h, J_h をそれぞれ **E**, **J** の有限要素近似とする. E_h^* は任意の試験関数とする[2].

$$\iiint_{\Omega} (1/\mu) \operatorname{rot} \mathbf{E}_{\mathrm{h}} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{E}_{\mathrm{h}}^{*} \, \mathrm{dv} + \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} \iiint_{\Omega} \quad \varepsilon \mathbf{E}_{\mathrm{h}} \cdot \mathbf{E}_{\mathrm{h}}^{*} \, \mathrm{dv} = -\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{\Omega} \mathbf{J}_{\mathrm{h}} \cdot \mathbf{E}_{\mathrm{h}}^{*} \, \mathrm{dv}$$
(3)

式(3)を解くべき有限要素方程式とする.時間発展は Newmark-β法による陰的解法に

より扱う[3].

3. 数值例

性能評価に用いる計算機は、筆者らの研究室で所有するマルチコア PC である.本計算機は、Intel Core i7-2600K のマルチコア CPU および 32GB のメモリが搭載されている PC であり、並列化ライブラリとして MPI(Message Passing Interface)を用いる.図1(a)に示す要素数10万程度の円形パッチアンテナを波源として、(3)式に基づく電磁界解析を行った結果を図1(b)に示す.本数値例では、パッチアンテナに対して図1(b)に示す電圧波形を得た.本数値例に関して式(3)を導入して解析を行った。詳細な議論は講演にて行う.



- Jian-Ming Jin: The Finite Element Method in Electromagnetics Third edition, Willey, 2014
- [2] A. Takei, S. Sugimoto, M. Ogino, S. Yoshimura and H. Kanayama: Full Wave Analyses of Electromagnetic Fields with an Iterative Domain Decomposition Method, IEEE Transactions on Magnetics, Vol. 46, No. 8, pp.2860-2863(2010) DOI: 10.1109/TMAG.2010.2044775.
- [3] 村上裕哉,山本広太,工藤彰洋,武居周,"時間領域並列有限要素法に基づく大規模音響解析",日本シミュレーション学会論文誌, Vol.10, No.4, pp.89-98 (2018)
 DOI: 10.11308/tjsst.10.89.

混雑度と境界条件による大小粒子の局在化現象: cm スケールでの細胞モデル実験 Localization phenomenon of large and small particles by congestion degree and boundary conditions : Cell model experiment on cm scale

黑田真帆^{1*}, 鷹取慧¹, Chwen-Yang Shew², 剣持貴弘¹, 吉川研一¹ Maho Kuroda^{1*}, Satoshi Takatori¹, Chwen-Yang Shew², Takahiro Kenmotsu¹ Kenichi Yoshikawa³

> ¹同志社大学 生命医科学研究科 ² ニューヨーク市立大学 ¹ Facul. of Life and Med. Sci. Doshisha Univ. ² Dept. of Chem. City Univ. of New York *ctuf0018@mail4.doshisha.ac.jp

Abstract. The various molecules and organelles in living cells are suitably positioned within the cell to carry out their functions at the appropriate time. The nucleus moves toward and maintains its position at the center of the cell. We conducted a real-space experiment in which the intracellular structure was modeled by large and small particles. In our experiments, we focus on that the inside of the cell is very crowded and that there are non-equilibrium fluctuations. From the results of this experiment, it was clarified that the behavior of particles differs depending on the degree of congestion and the softness of the boundary conditions.

Keywords: Self-organization, Non-equilibrium fluctuation, Molecular dynamics simulation

1. 序論

細胞内の生体分子は秩序構造を維持することで正常に機能している.細胞内の秩序 形成メカニズムを明らかにすることは、細胞を自律的に機能する生命システムとして 捉えることを可能とし、生命科学だけでなく、医学・医療分野の基礎的な知見となる ことが期待される.しかし、細胞内の生体分子の自律的な秩序形成メカニズムについ ては未解明な点が多い.

細胞内秩序構造の中でも本研究で注目しているのが、細胞核の細胞内配置である. 多くの真核細胞において細胞核は細胞の中央付近に位置している[1]. また、細胞内 は、生体高分子が1g中に0.3~0.5g存在する混雑した環境であるということと、常に エネルギーの消費が行われており、著しい非平衡ゆらぎに晒されていることが細胞内 の生体高分子の秩序だった構造や機能に直接関係していると考えられている[2].本 研究では、実際に細胞内の生体高分子の挙動を観察することは困難であるため、細胞 内の環境を模擬できる、加振器を基軸とした実空間モデルを採用する.本研究では、 生体高分子に見立てた大きさの異なる多数の粒子が、ゆらぎを受けながら、どのよう に自発的に秩序を形成するかを明らかにする.また、分子動力学やモンテカルロシミ ュレーションを実施し、理論的な考察も行い、実験結果との検証から物理モデルを構 築する.

2. 実験方法

実験には主に大球、小球、お皿のような容器、加振器を用いる.壁面と底面が曲面 で繋がれた容器を使用し、容器内に直径 15mmの大球 1 つと直径 6mmの複数の小 球を入れ、加振器を用いて振動を加える.加振は周波数を 60Hz、振幅を 0.25mm、 最大加速度を18m/s²とする.図1に加振器の実験系と実験条件をまとめた図を示す.



図1 (a)加振器の実験系と加振のデータ (b)容器,小球の寸法

このように容器の壁面と底面が曲面で繋がれていることにより,柔軟性によるバネのような効果が現れることを期待した.

容器底面部に小球を敷き詰めた時(小球が150個)を混雑度100%に設定し、小球の数を変えることで混雑度20%、40%、60%、80%の状態を作る.また、加振はいずれも300秒間行い、0秒の時は大球を小球のクラスターの端部に置く.

3. 研究結果

加振時に大球が示す軌跡を時間的に可視化したものを図2に示す.図2から混雑度 が高くなるにつれて大球の軌跡がフラットな底面と曲面の境界である黒点線付近に 集中していることから,混雑度が高いほど大球は境界付近に局在化していることがわ かる.

また、内部と外部での存在比を order parameter とし解析したところ、今回の実験系では、臨界点近傍の振る舞いが現れることも明らかとなった. その図を図3に示す. 図の横軸は容器中心からの距離を表しており、左端が容器中心である. 図3から、混 雑率20%、40%では中心側でグラフが落ち込んでいるが、混雑率60%で臨界近傍の様 子を示し、混雑率80%で外側でグラフが落ち込んでいる.



図2 各混雑度における大球の軌跡の時間推移。 黒実線が容器の壁面、黒点線が容器底面の境界を表す。



図3 大球の自由エネルギー曲線

4. まとめ

本研究では、大小粒子集団にゆらぎを印加した場合に混雑度と境界条件によって大 球の局在位置がスイッチングすることを見出だしている.その結果は Shew らによる モンテカルロ法のシミュレーションにより得られた結果と同様になったと考えるこ とができる[3].また、本研究では cm スケールでの実験を行っているので、加振器を 用いてゆらぎを発生させており、細胞スケールでの Brown 運動とは、ゆらぎの起源 が異なっている。このような違いにも拘わらず、スケールの異なる実験系が同様の傾 向を示していることは興味深い。本研究を実施することで得られる知見は、細胞を構 成する生体高分子がゆらぎを受けながらどのように自発的に秩序を形成し、生体機能 を発揮しているのかについてその仕組みを明らかにし、生命現象の本質的な理解を促進するものである.

- [1] Tanimoto, H., Kimura, A., Minc, N., Shape–motion relationships of centering microtubule asters, Journal of Cell Biology, vol.212, no.7, (2016), pp.777-787.
- [2] Oda, S., Kubo, Y., Shew, C. Y., & Yoshikawa, K. (2016). Fluctuations induced transition of localization of granular objects caused by degrees of crowding. Physica D: Nonlinear Phenomena, 336, 39-46.
- [3] Shew, C. Y., Oda, S., & Yoshikawa, K. (2017). Localization switching of a large object in a crowded cavity: A rigid/soft object prefers surface/inner positioning. The Journal of chemical physics, 147(20), 204901.

Sightseeing Guidance System to Maximize Satisfaction Using Real-Time Spot Information*

Yuya Sato¹, Yoko Nakajima², Hirotoshi Honma^{2,*}

¹Advanced Course of Electronic and Information System Engineering, National Institute of Technology Kushiro College
²Department of Creative Engineering, National Institute of Technology Kushiro College

*honma@kushiro-ct.ac.jp

Abstract. In this study, we challenged the provision of sightseeing routes using real-time information such as weather and congestion. This is a system that allows tourists to input their wishes and provides them with the best sightseeing route based on their wishes and real-time information, using graphs and optimization problems. We succeeded in providing a tourist route using this method, but confirmed that it is still far from practical use.

Keywords: Graph theory, Discrete optimization, Operations research

1. Introduction

The Eastern Hokkaido region, in which Kushiro City is located, is an area of impressive natural beauty, which features the Kushiro Marshes, the largest marshlands in Japan, as well as both the Akan and Mashu national parks. Additionally, it is home to the historically-recognized Ainu culture, which has received a significant amount of attention in recent years from many quarters. The region has received recognition for the national government's measures in regard to the Mizu-no-Kamui tourist area and Wide-area tourist route, which promote tourism.

Currently, Kushiro City provides tourists with the Kushiro Akan Mashu Hospitality Navi APP., which enables tourists to use LPQA and free public Wi-fi, regional bus company shared locations, and AI chat bot services focusing on tourism. However, a current issue is that data with different properties are being used in independent environments, and there is no collaboration with, or utilization of, other services.

In this study, we imagine a virtual environment in the near future, in which a high-speed communication network is provided in the Eastern Hokkaido region, thus enabling weather, temperature, humidity, specific event, and congestion information for each sightseeing spot

^{*}This work was partially supported by JSPS KAKENHI Grant Number 19K11834, 20K11093, and Cooperative Education/Research Project between Toyohashi University of Technology and National Institute of Technology.

to be acquired in real time, and we undertake the challenge of developing a sightseeing guidance system that can maximize the individual satisfaction levels of each tourist visiting Eastern Hokkaido under this environment.

2. System Overview

This system consists of local information on the weather, temperature, humidity, specific events (content/time/cost), and congestion, etc., for the various sightseeing spots, a database for setting the satisfaction levels of travelers, which fluctuate in combination with these factors, and map data that include the route and necessary time to move between each sight-seeing spot.

By inputting the requirements of the user into the system (departure/arrival location, departure/arrival time, time allowed for sightseeing, meal requests, costs), it provides a sightseeing plan that will maximize the satisfaction level of the user within the time allotted for tourism. An image of the system is shown in Figure 1.



Figure 1: Image of route provision

A mathematical optimization model was used to derive the optimal tourist route. This reduces the confusion experienced by the traveler in selecting from multiple routes provided by guidebooks. Additionally, as, depending on the sightseeing spot, there may be cases in which the satisfaction level fluctuates based on the weather, level of congestion, and events, in this way, the optimal route can be provided, and the traveler can enjoy sightseeing.

3. Current Situation and Future Outlook

To date, we have completed the creation of an optimization model for providing sightseeing routes and a database of sightseeing spots in Kushiro City and other areas in the eastern Hokkaido region, which consists of basic information about these spots. Based on these data, we have also succeeded in providing tourist routes for each request.

Future tasks include the development of an interface and system for actual use. In addition, it is necessary to acquire and operate real time data to the extent possible. The final goal is to make the information of tourist attractions more realistic by having actual tourists use the system.

^{JSST 2021} **DNA**のトリチウム耐性検討のための DNA テロメ ア構造中水素の溶媒接触表面積の計算

Evaluation of solvent-accessible surface area of backbone hydrogen in telomeric DNA for studying tritium resistance of DNA

土田 陽平^{1*}, 齋藤 誠紀¹, 中村 浩章², 米谷 佳晃³, 藤原 進⁴ Yohei Tsuchida^{1*}, Seiki Saito¹, Hiroaki Nakamura², Yoshiteru Yonetani³, Susumu Fujiwara⁴

1山形大学

²核融合科学研究所 ³量子科学技術研究開発機構 ⁴京都工芸繊維大学

¹ Yamagata University
 ² National Institute for Fusion Science
 ³ National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology
 ⁴ Kyoto Institute of Technology

* t212989m@st.yamagata-u.ac.jp

Abstract. Tritiated water is generated under the decommissioning process of the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station. In addition, tritium is planning to use as fuel in fusion power plants, which is expected as a future power generation technology. Therefore, it is important to understand the impact of tritium on biomolecules in living organisms including human in detail. We aim to elucidate the mechanism of DNA damage due to the radioactive decay effect that occurs when light hydrogen in human DNA is replaced with tritium, using molecular dynamics (MD) methods. To understand the decay effect on DNA, first, it is necessary to evaluate the replaceability of light hydrogen to tritium for each hydrogen in DNA. In this study, to evaluate the degree of replaceability of the backbone hydrogen atoms in telomeric DNA of human, solvent-accessible surface area (SASA) is calculated for the data obtained by MD simulation. As a result, it is found that the SASA of H5 hydrogen is large in the hydrogen atoms in the backbone.

Keywords: DNA, solvent-accessible surface area, tritium, radioactive decay effect

1. 研究背景·目的

現在、東京電力福島第一原子力発電所で発生したトリチウムの残留している処理水

の処分方法について、多くの議論が交わされている。また、核融合発電は、重水素と トリチウムの核融合反応を用いた発電方法である。燃料として使用される重水素とリ チウムは海水から無尽蔵に採取できる。また発電の際、高レベルの放射性廃棄物が発 生しないため、放射線被ばくの危険性も低い。このような事情から、トリチウムの生 体分子への影響を詳細に解明することが求められている。本研究では、ヒト DNA 中 の軽水素がトリチウムに置換した際に生じる壊変作用による DNA 損傷のメカニズム を、分子動力学法を用いて解明することを目指している。そこで、分子動力学法を実 施する前段階として、トリチウム置換しやすい場所を特定するため溶媒接触表面積を 計算した。

2. シミュレーションモデル [1]

水分子で満たした100Å×100Å×100Åの計算領域に、ヒトDNAのテロメア構造を配置する。テロメア構造の配列はTCTAGGGTTAGGGTTAGである。DNAの電荷を中和 するため、イオン濃度が0.15 mol(生体内の濃度)となるようにNa⁺とCI⁻を追加しイ オン化を行った。シミュレーションモデルを図1に示す。



図1 DNAシミュレーションモデル[1]

周囲の水分子は非表示とした。MDシミュレーションには、LAMMPSを用い、力場に はReax-FF(CHON-2017_weak)を用いる。*x*, *y*, *z*方向には周期境界条件を課した。粒子数 *N*、圧力*P*、温度*T*が一定の条件下(*NPT*アンサンブル)で計算した。熱・圧力浴はNosé-Hooverを使用した。人体中の温度・圧力に近くなるように、設定圧力、温度はそれぞ れ1.0 atm、310 Kとした。時間ステップは0.25 fsとし、100 psの間の運動を計算した。 ここで、水分子で囲まれた DNA の水素における OH ラジカルの反応率と溶媒中の 水素における溶媒接触表面積には相関関係があることが知られている[2]。本研究で も、ヒト DNA 中の溶媒接触表面積がトリチウム置換のしやすさと相関があると考え、 ヒト DNA 中バックボーン水素について MD 計算から得た原子の位置座標を用いて溶 媒接触表面積を計算した。

3. 計算結果 [1]

溶媒接触表面積の時間平均を、DNAの2本鎖strand1、strand2ごとに計算したうちの



命名規則は文献[3]に従っており、H2およびH5の溶媒接触表面積は、H2'とH2"およびH5'とH5"の溶媒接触表面積の値を足し合わせて求めた。エラーバーは標準偏差を示している。また、DNAバックボーン部におけるH5水素の溶媒接触表面積の時間平均を計算し、どの塩基においても、H5'の溶媒接触表面積が大きいとH5"の溶媒接触表面積も大きくなる傾向があることが確認できた。

本予稿では、DNA構造の熱振動による溶媒接触表面積の動的変化について論じた。 ポスターセッションでは、DNA中水素の溶媒接触表面積とDNA中水素の配置の関係 を解明することを目的に、任意の塩基配列のDNAの軽水素における溶媒接触表面積 の動的変化について論じたい。

- [1] 土田陽平,齋藤誠紀,中村浩章,米谷佳晃,藤原進:分子動力学法を用いた DNAテロメア構造中バックボーン水素の溶媒接触表面積の評価,日本シミュレ ーション学会論文誌,13,(2021),32-26.
- [2] Y. Yonetani, H. Nakagawa: Understanding water-mediated DNA damage production by molecular dynamics calculation of solvent accessibility, *Chem. Phys. Lett.*, 749 (2020), 137441.
- [3] D. Sy, C. Savoye, M. Begusova, V. Michalik, M. Charlier, and M. Spotheim-Maurizot: Sequence-dependent variations of DNA structure modulate radiation-induced strand breakage, *Int. J. Radiat. Biol.*, 72, (1997), 147-155.

新規な病態計測法:組織の伸展応答パターンの活用 Smart Diagnosis on Disease State based on Characteristic Cracking Pattern by Stretching Response of Tissue Slice

田上 幸步^{1,*}, 鷹取 慧¹, 剣持 貴弘¹, 吉川 研一¹ Tagami Yukiho^{1,*}, Satoshi Takatori¹, Takahiro Kenmotsu¹, Kenichi Yoshikawa¹

¹ 同志社大学大学院 生命医科学研究科 医工学・医情報学専攻 医工学コース

¹Faculty of Life and Medical Sciences, Doshisha University

*ctuf0033@maail4.doshisha.ac.jp

本論文のフルペーパーは、日本シミュレーション学会論文誌に掲載されています.

DOI: https://doi.org/10.11308/tjsst.14.133