

## 平成24年度北海道大学情報基盤センター共同研究成果報告書

1. 研究領域番号 A1 大規模計算機シミュレーション
2. 研究課題名 計算科学フロンティア
3. 研究期間 平成24年4月23日 ~ 平成25年3月31日

## 4. 研究代表者

氏名	所属機関・部局名	職名	備考
中村 知裕	北海道大学 低温科学研究所	講師	

## 5. 研究分担者

氏名	所属機関・部局名	職名	備考
大宮 学	北海道大学 情報基盤センター	教授	
斉木 吉隆	北海道大学 大学院理学研究院	助教	
小林 幹	東北大学 原子分子材料科学高等研究機構	助教	
高井 伸雄	北海道大学 大学院工学研究院	准教授	
重藤 迪子	北海道大学 大学院工学研究院	博士課程3年	
毛利 哲夫	北海道大学 大学院工学研究院	教授	
陳 迎	東北大学 国際教育院 大学院工学研究科	准教授	
西垣 肇	大分大学 教育福祉科学部	准教授	
大上 真寅	北海道大学 大学院環境科学院	修士課程2年	

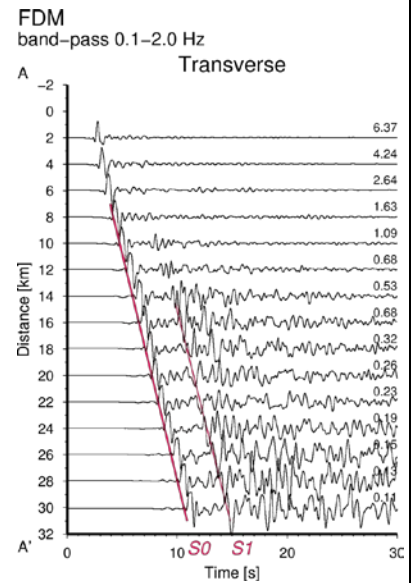
## 6. 共同研究の成果

本共同研究により、本学情報基盤センターのスーパーコンピュータ HITACHI SR16000 をプラットフォームとする計算科学研究を進め、(1)力学系数理、(2)都市防災、(3)合金材料、(4)海洋力学において、下記の成果を得た。また、分野を超えて共通する計算科学的要素についての情報共有および異分野に跨がる学際的視野拡大のため、HSS ワークショップを活用して会合を開催した。

(1) 力学系数理：ホモクリニック接触等の力学系の大域的なふるまいを理解することにより、複雑現象の背景メカニズムが明らかになると期待できる。そこで我々は力学系に埋め込まれておりダイナミクスの骨格となる無限個の不安定周期軌道に着目し、周期の短い数千個を大型計算機を用いて網羅的に検出して多様体構造を調べた。また、不安定周期軌道間のネットワーク構造を明らかにした。

(研究成果のつづき)

(2) 都市防災：2010年12月2日に札幌市里塚付近で発生した地震に関して、産業技術総合研究所(AIST)による3次元地下構造モデルを用いて、広帯域3次元差分シミュレーション(FDM)を実施した。震源から北西へ向けての測線で波形の伝播を検討すると(右図)、観測記録でも見られた波線理論では再現不可能な特異な直達波・反射波を再現することが出来た。さらに、FDMの断面スナップショットを用いてこれらの波が堆積層と地震基盤境界で生成される Diffracted Wave であることを特定することが出来た。



(3) 合金材料：合金材料の効果的な材料設計には、電子・原子の挙動解明と内部組織の制御を全スケール域に渡って整合的(seamless)に実行し得る手法の開発が必須である。本研究では、特に、Fe-Si系合金を対象にして、強度・靱性の発現機構を電子状態から明らかにすることを試みた。電子状態計算とクラスター変分法を組み合わせる大規模計算等を行い、脆性延性転移温度に与える磁性や規則化の効果について明らかにした。

(4) 海洋力学：海洋において、渦による輸送混合過程は海水流動や物質循環を理解・予測する上で重要である。本研究では特に、海峡部で強い潮流により生成される渦対・渦列に注目して数値実験を行い、従来の水槽実験により示されていたレイノルズ数依存性を再現した。さらに、水槽実験では極めて困難な高レイノルズ数において、渦対が渦列との相互作用により低レイノルズ数の時と大きく異なる振舞を示すことを明らかにした。

論文・学会発表等

Miki U. Kobayashi and Yoshitaka Saiki, Manifold Structures of Unstable Periodic Orbits and the Appearance of Periodic Windows in Chaotic Systems, 2013, 投稿準備中.

Shigefuji, M., T. Sasatani, and N. Takai : A Preliminary Study of Strong Motion Records in the Sapporo Metropolitan Area during the 2010 Central Ishikari Earthquake, Proc. Of 15th World Conference of Earthquake Engineering, No.3877, 2012.

Arkapol Saengdeejing, Ying Chen, Ken Suzuki, Hideo Miura, Tetsuo Mohri. First-principles study on the dilute Si in bcc Fe: Electronic and elastic properties up to 12.5 at.%Si. Computational Materials Science 70, 100-106, 2013.

Yasunori Yamada and Tetsuo Mohri. Analysis of Dislocation Core Structure in B2 Ordered Phase by Cluster Variation Method. Materials Transactions 53, pp.1571-1577, 2012.

Tetsuo MOHRI. Short Range Ordering and Local Displacement of Alloys Studied by CVM. Comp. Mat. Sci. and Engr. 1 pp. 1250018-1 (12pages), 2012.

中村知裕,大上真寅.潮流により生成される渦のシミュレーション. 第11回 HSSワークショップ/第9回創成シンポジウム, 2013年3月4日(月), 北海道大学, 札幌.