

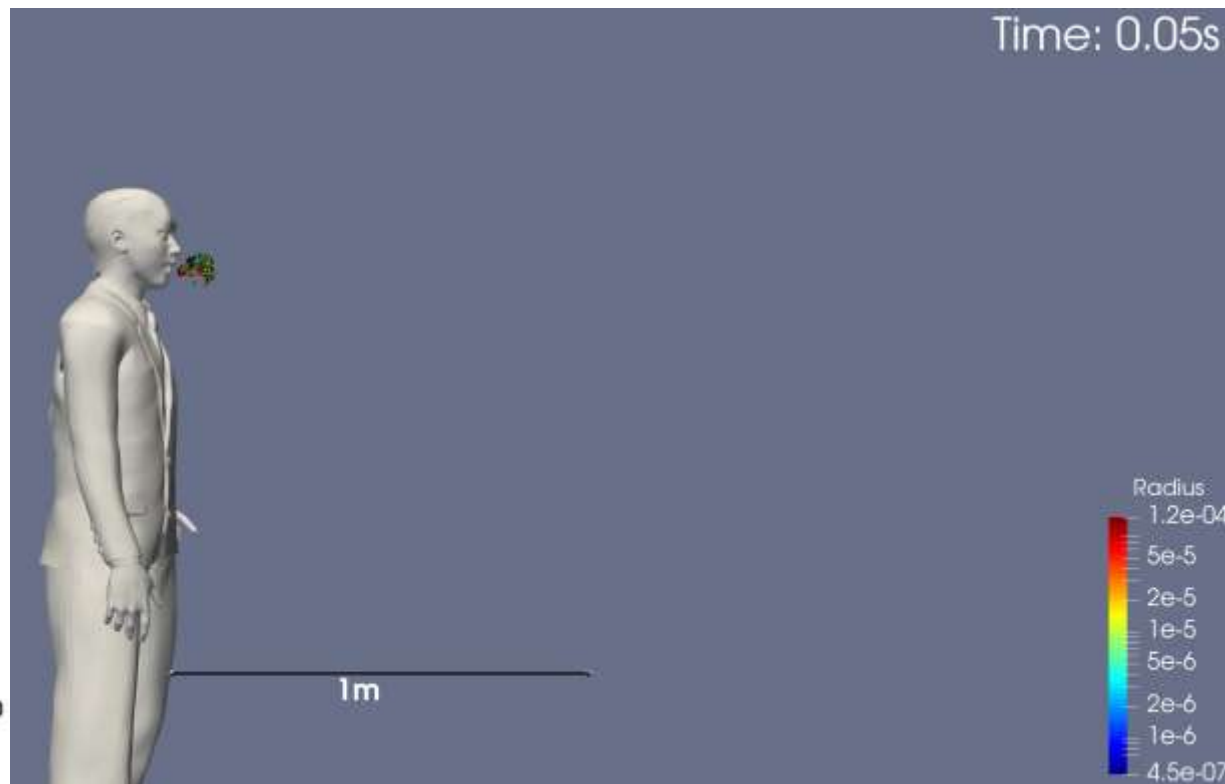
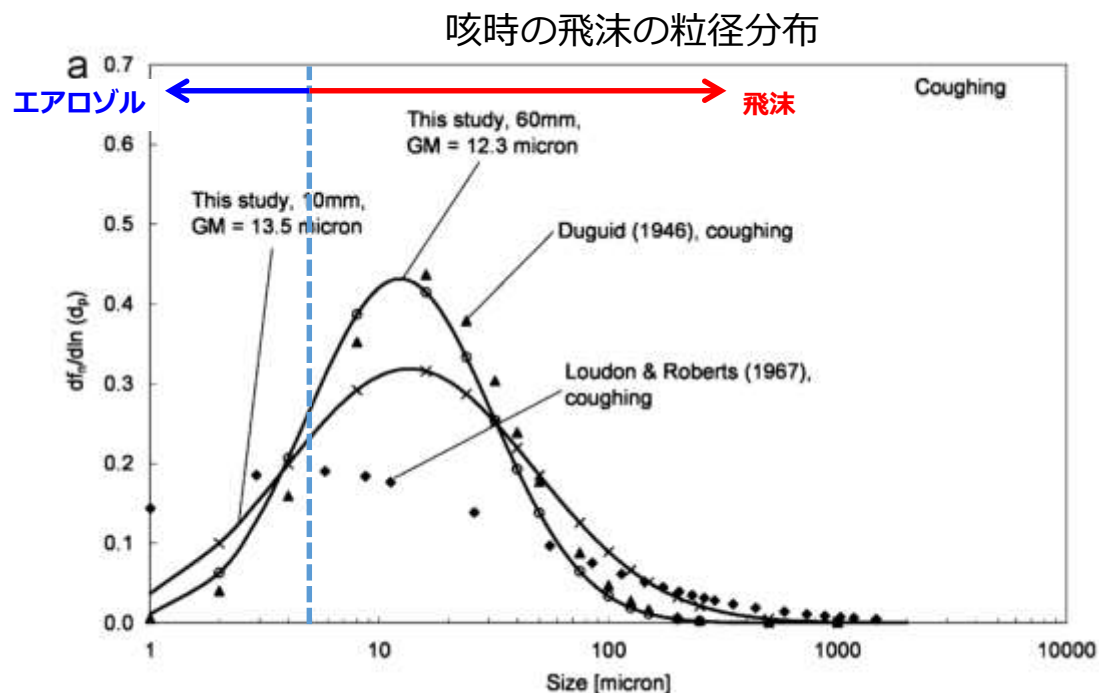
ウイルス飛沫・エアロゾル飛散シミュレーション と計算科学の社会貢献

神戸大学大学院システム情報学研究科 教授
理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー
坪倉 誠

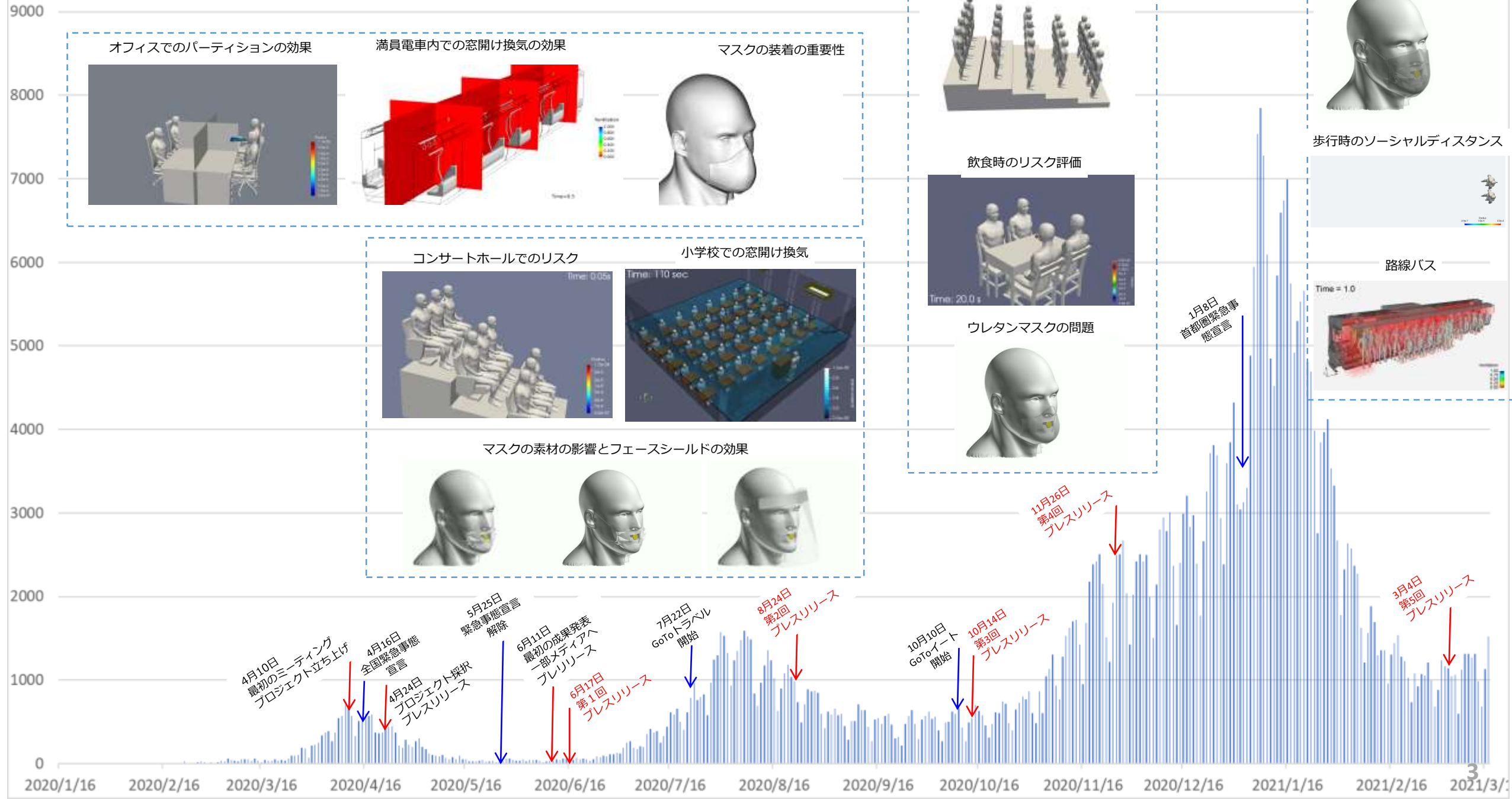
富岳コロナ対策プロジェクト飛沫感染グループ

2021年度第2回計算科学フォーラム
2021年3月24日 16:00～16:45

- ウイルスに対する盲目的な恐れ，根拠のない侮りは，**ウイルスが目に見えないから**。
- ウイルス飛沫の飛散，拡散経路を，空気と粒子の運動**シミュレーション**で予測する。
- **スパコン富岳の能力を活用**して，詳細な物理モデル（蒸発，壁付着等）を用い，様々な状況や条件を調べ，**感染リスク低減のための対策**を検討する。
- 目に見えない飛沫を可視化し，社会に発信することで，飛沫に対して**正しい理解**と**感染予防の啓発**を行う。
- 闇雲に恐れさせず，必ずリスク低減のための**対策と対**にして発信する。



PCR 検査陽性者数(単日)



基礎方程式 (Navier-Stokes)

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial z} = 0$$

$$U = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e \end{Bmatrix} \quad F = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - \tau_{xx} \\ \rho vu - \tau_{xy} \\ \rho wu - \tau_{xz} \\ \rho(e + \frac{V^2}{2})u + pu - k \frac{\partial T}{\partial x} - u\tau_{xx} - v\tau_{xy} - w\tau_{xz} \end{Bmatrix} \quad p = \rho RT$$

	Algorithm	Numerical method
Time advancement	Implicit	Unified Time Stepping Scheme + LUSGS
Convective terms	Roe scheme	Roe Low Mach Fix – Preconditioning Roe
Reconstruction	MUSCL	5 th order (Multi-dimensional limiting)
Viscous terms		2 nd Central difference

Flow Solver

Eulerian Mesh

Conservation Equations

Navier-Stokes

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{S}, \quad S_{\rho Y_k} = -\frac{1}{\Delta V} \sum_n \frac{dm_{d,k}}{dt}$$

Species transport

time stepping

Lagrangian Particles

Spray equations

Particle tracking

$\bar{W}$ - Average molecular wt of the gas phase
 W_V - Molecular wt of water vapor
 P_{sat} - Saturated vapor pressure
 $Y_{V,s}$ - Vapor surface mass fraction
 Y_V - mass fraction of vapor in the far field.
 $X_{V,s}$ - Mole fraction of vapor at droplet surface
 Sc - Schmidt number
 Pr - Prandtl number

Particle Motion Model

$$\frac{d\mathbf{x}_d}{dt} = \mathbf{u}_d, \quad \frac{d\mathbf{u}_d}{dt} = \frac{6}{8} \frac{\rho_g}{d_d \rho_d} |\mathbf{u} - \mathbf{u}_d|$$

$$(\mathbf{u} - \mathbf{u}_d) C_d$$

$$C_d = \begin{cases} 0.424 & Re_p > 1000 \\ \frac{24}{Re_p} \left(1 + \frac{1}{6} Re_p^{2/3}\right) & Re_p \leq 1000 \end{cases}$$

$$Re_p = \frac{\rho_g |\mathbf{u} - \mathbf{u}_d| d_d}{\mu}$$

Evaporation Model

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{Nu}{3Pr} \left(\frac{c_p}{c_l}\right) \left(\frac{f_2}{\tau_d}\right) (T - T_d) \frac{1}{m_d} \left(\frac{dm_d}{dt}\right) \frac{L_V}{c_{p,d}}$$

$$\dot{m}_d = -\frac{m_d}{\tau_d} \left(\frac{Sh}{3Sc}\right) \ln(1 + B_M)$$

$$Nu = 2 + 0.552 Re_s^{1/2} Pr^{1/3}$$

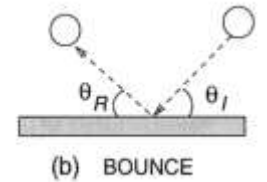
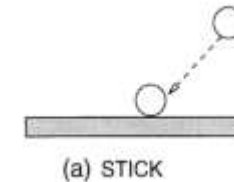
$$Sh = 2 + 0.55 Re_s^{1/2} Sc^{1/3}$$

$$B_M = \frac{Y_{V,s} - Y_V}{1 - Y_{V,s}} \quad \tau_d = \frac{\rho_d d_d^2}{18\mu}$$

$$Y_{V,s} = \frac{X_{V,s}}{X_{V,s} + (1 - X_{V,s}) \bar{W}/W_V} \quad X_{V,s} = \frac{P_{sat}}{P}$$

Wall Reflection Model

Regime transition state	Critical Weber number
Adhesion (stick/spread) → splash	$We_c \approx 2630 \cdot La^{-0.183}$



$$We = \rho V_{IN}^2 d_I / \sigma$$

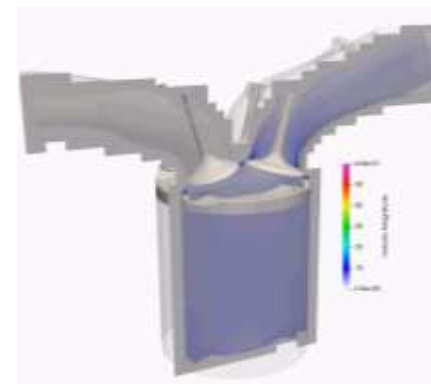
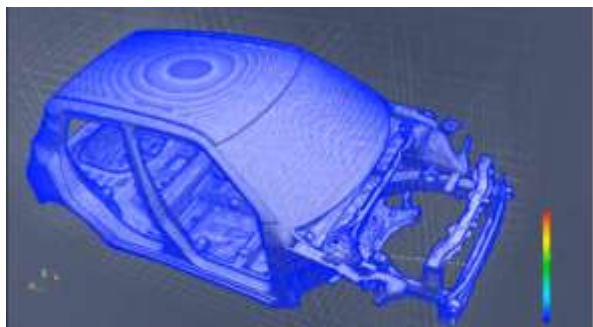
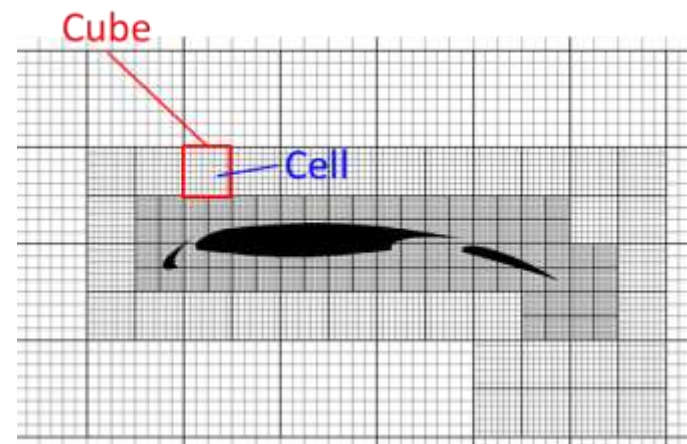
$$La = \rho \sigma d_I / \mu^2$$

複雑流体・構造現象を大規模計算するための共通基盤シミュレーションフレームワーク

- 階層直交格子有限体積法
- 流体解析にはLESを採用した高精度解析
- 熱流体運動・構造変形・化学反応が共存する複雑現象場に対してスケーラブルな連成アルゴリズム
 - トップダウンに全体構造が見渡せる統一的数据による偏微分方程式解法
 - 流体と構造を連続体として統一的に扱える基礎方程式

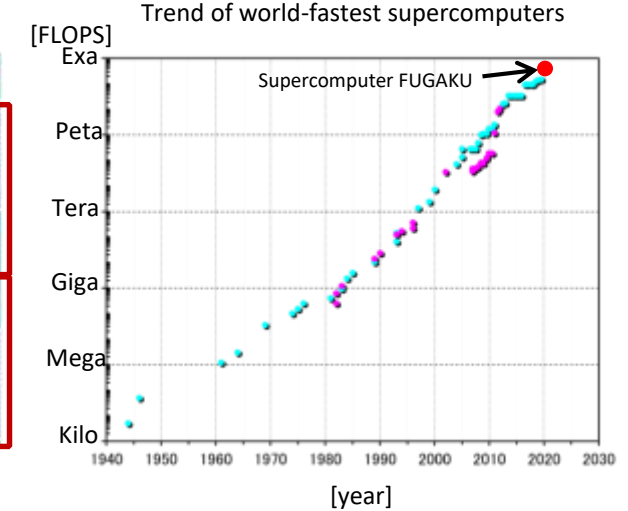
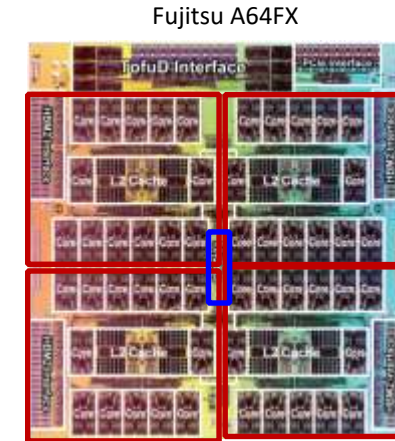
プログラムの特徴

- Building Cube Method (Nakahashi et al., 2003)
 - プロセッサ単体性能の向上と超並列環境に適したデータ構造
- Immersed Boundary Method (Fadlun et al., 2002, Rahul et al., 2020)
 - 複雑形状や移動境界に適した境界処理
- Dirty CAD treatment (Onishi et al., 2013)
 - 産業界で用いられているCADデータ（部材間ギャップ, 重なり, 厚み無し等）に対応した高速なメッシュ作成

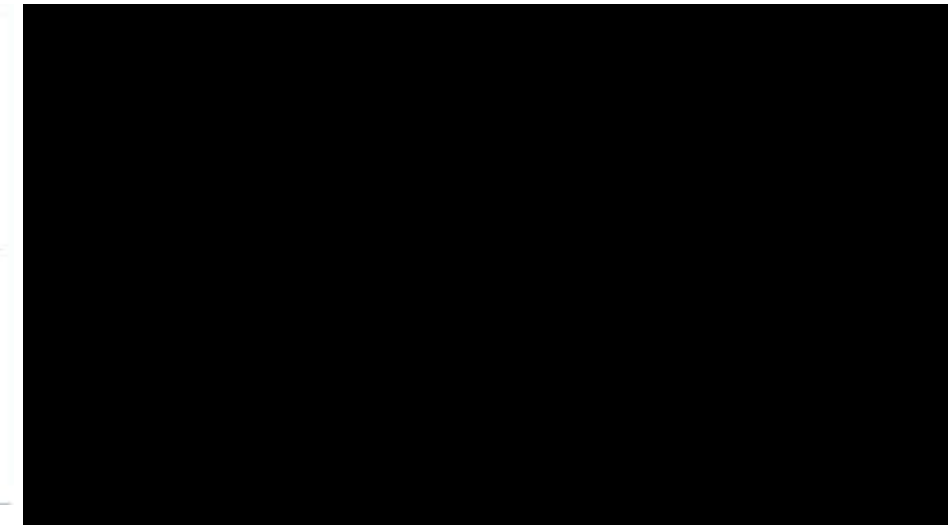


スーパーコンピュータ「富岳」

- 相理論演算性能：488PFLOPS（倍精度）
- LINPACK実行性能：442.01PFLOPS
（82.3%, 2020秋）
- 総ノード数：158,976個（京の約2倍）
（384ノード×396ラック+192ノード×36ラック）
- ノード単体性能：3.072TF（京の約24倍）
 - 命令セットアーキテクチャ：ARMv8.2-A SVE 512bit
 - 計算コア数：48 cores (+ 2 for OS)（京の6倍）
 - メモリとバンド幅：HBM2 32 GB（京の約2倍），1024 GB/s（京の約16倍）
- インターコネクト：Tofu Interconnect D
- 四冠達成(二期連続)：ISC(2020)とSC(2020)
 - Top500(442.01PFLOSP)
 - 密行列連立一次方程式
 - LU分解
 - HPCG(16.00PFLOSP)
 - 粗行列連立一次方程式
 - 共役勾配法
 - HPL-AI(2.00EFLOPS)
 - AI性能
 - Graph500(102.95TFLOPS)
 - グラフ探索性能（データ処理）



富岳ヴァーチャルツアー



圧縮性・単相流・キャビティ流れ・コールドフロー

- ・ 流束計算：Roe_LM
- ・ 粘性項：2次精度中心差分
- ・ 時間進行：RK3NODT
- ・ 時間ステップ：500
- ・ 内部反復回数：1
- ・ キューブ数： $2 \times 24 \times 2 = 96$
- ・ セル数/キューブ： $16 \times 16 \times 16$
- ・ 総セル数： $96 \times 16^3 = 393,216$
- ・ 袖領域幅：2
- ・ 境界条件
 - ・ 天井面：流速規程，その他の壁：滑り無し
- ・ コンパイルオプション
 - ・ -Kfast,ocl,openmp,preex,simd=2,mfunc=3

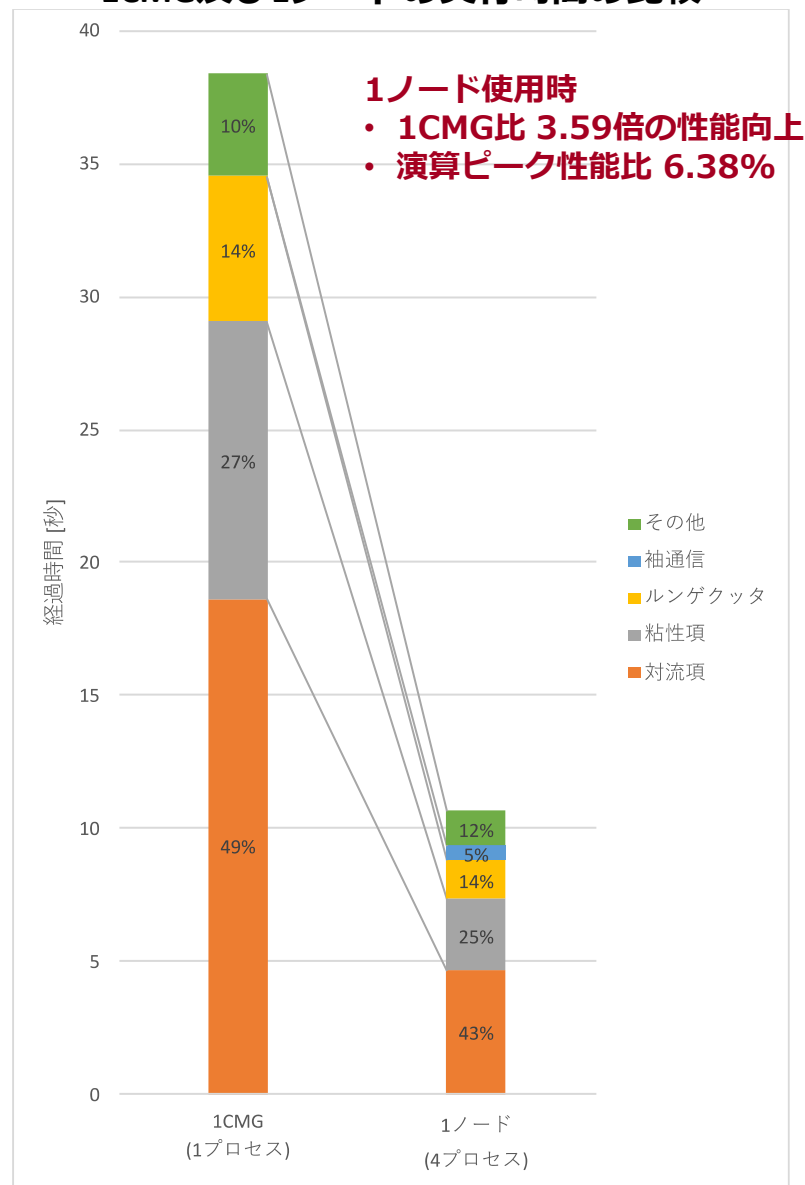
キューブ内のセル数をもっと増やすことでノード性能の向上は期待できるが、その分、複雑形状に対する汎用性が犠牲になる。

時間積分ループの性能

()内はピーク比

	実行時間	演算性能 [GFLOPS]	メモリスループット [GB/s]
1CMG	38.40 s	59.96 (7.09%)	48.44 (18.92%)
1ノード	10.67 s	215.84 (6.38%)	171.90 (16.78%)

1CMG及び1ノードの実行時間の比較



圧縮性・単相流・キャビティ流れ・コールドフロー

- 流束計算：Roe_LM
- 粘性項：2次精度中心差分
- 時間進行：RK3NODT
- 時間ステップ：500
- 内部反復回数：1
- キューブ数/ノード： $2 \times 48 \times 2 = 192$
- セル数/キューブ： $16 \times 16 \times 16$
- セル数/ノード： $192 \times 16^3 = 786,432$

1ノード実行時のキューブ配置 (2x48x2) 2ノード実行時のキューブ配置 (2x96x2)

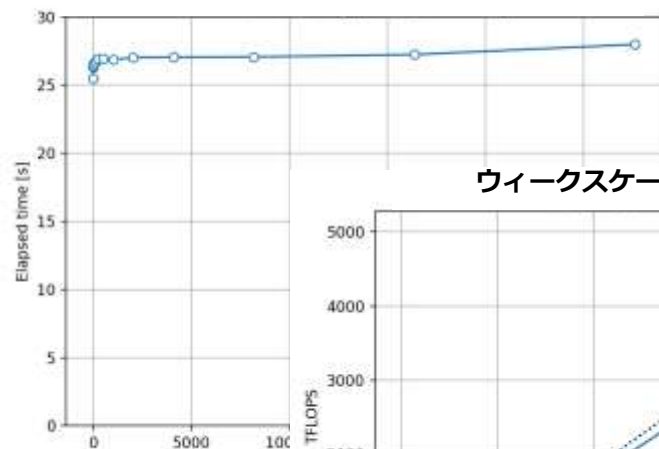


4プロセスで分割

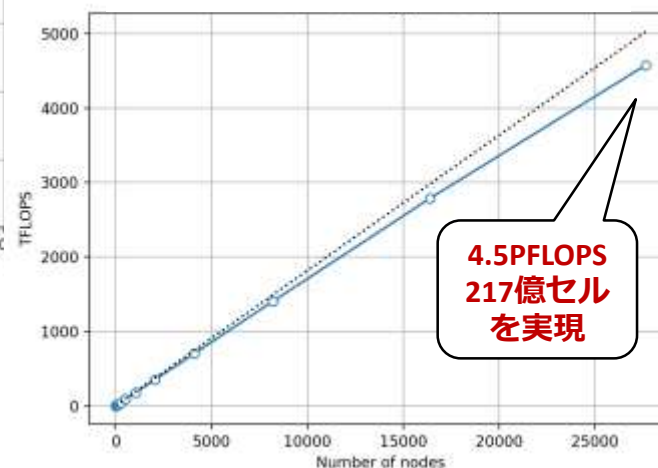
8プロセスで分割

ノード数	総セル数	経過時間	GFLOPS	ピーク比	スケーリング
1	786,432	25.48 s	0.18	5.38 %	100.00 %
64	50,331,648	26.56 s	11.16	5.16 %	95.94 %
128	100,663,296	26.72 s	22.18	5.13 %	95.37 %
256	201,326,592	26.94 s	44.00	5.09 %	94.57 %
512	402,653,184	26.92 s	88.09	5.09 %	94.67 %
1,024	805,306,368	26.86 s	176.55	5.10 %	94.87 %
4,096	3,221,225,472	27.05 s	701.37	5.07 %	94.22 %
8,192	6,442,450,944	27.07 s	1401.68	5.06 %	94.15 %
16,384	12,884,901,888	27.24 s	2785.88	5.03 %	93.56 %
27,648	21,743,271,936	27.98 s	4575.74	4.90 %	91.07 %

ウィークスケーリング (経過時間)



ウィークスケーリング (FLOPS)



富岳チューニング状況（演算カーネル性能）

各カーネルの1CMG性能

()内はピーク比

	対流項	粘性項
キューブ数	96	96
実行時間	20.09 秒	8.36 秒
FLOPS	82.78 GFLOPS (10.78 %)	58.34 GFLOPS (7.62 %)
メモリスループット	13.34 GB/s (5.21 %)	62.46 GB/s (24.40 %)
L1Dミス率*	3.22 %	15.24 %
L2ミス率*	0.74 %	3.19 %

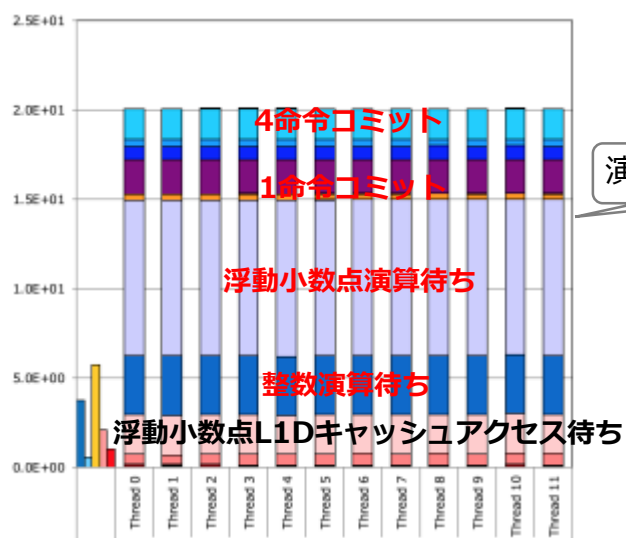
L1Dミス率が高く、キャッシュがうまく使えていない

(*) ミス率 = $\frac{\text{ミス数}}{\text{ロード} + \text{ストア命令数}}$

各サイクルの処理内容の内訳

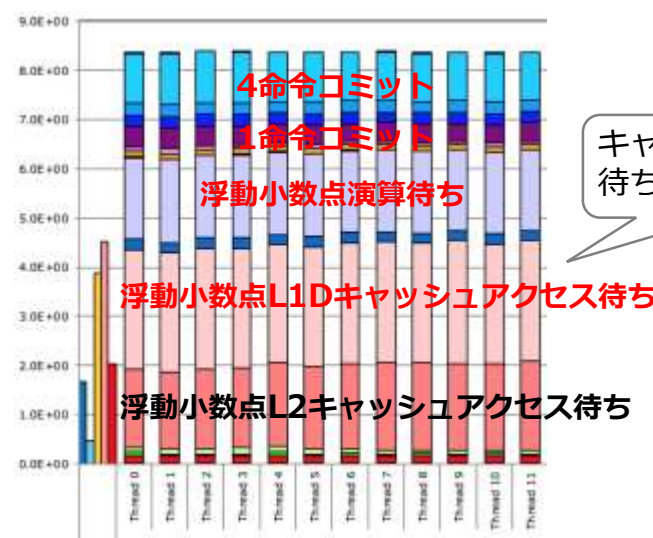
メモリスループットに対して演算性能が高い → 演算ネックの状態

対流項



演算効率の改善が必要

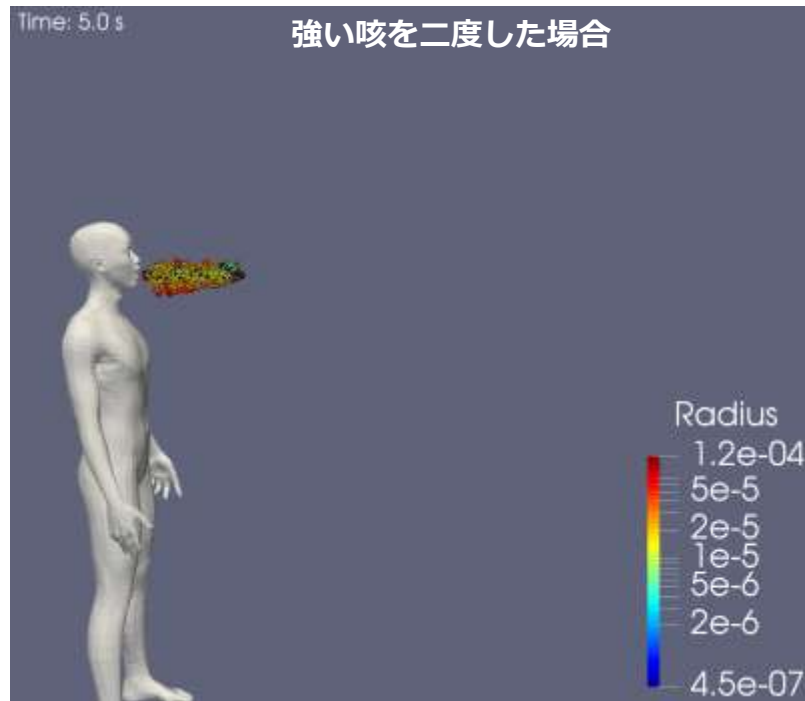
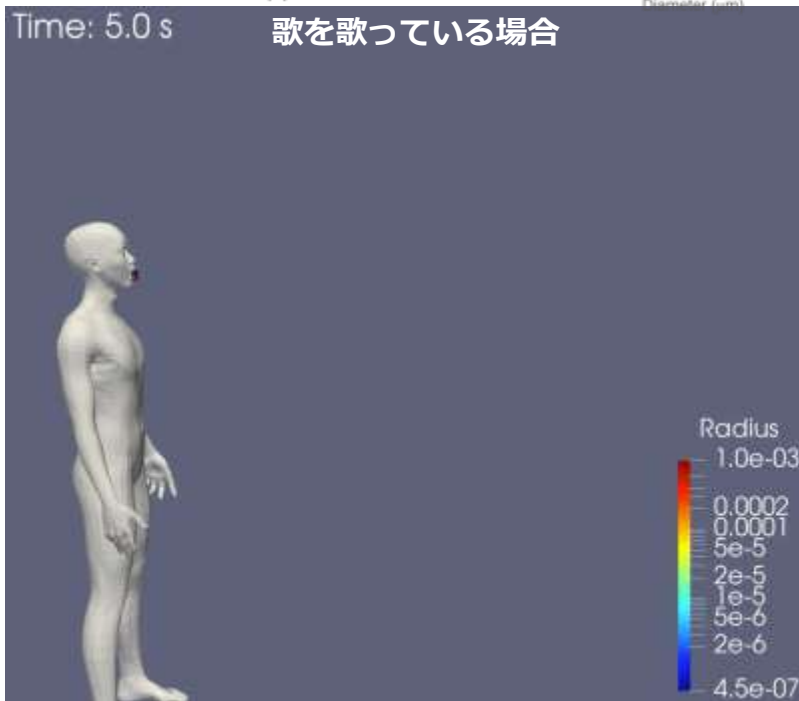
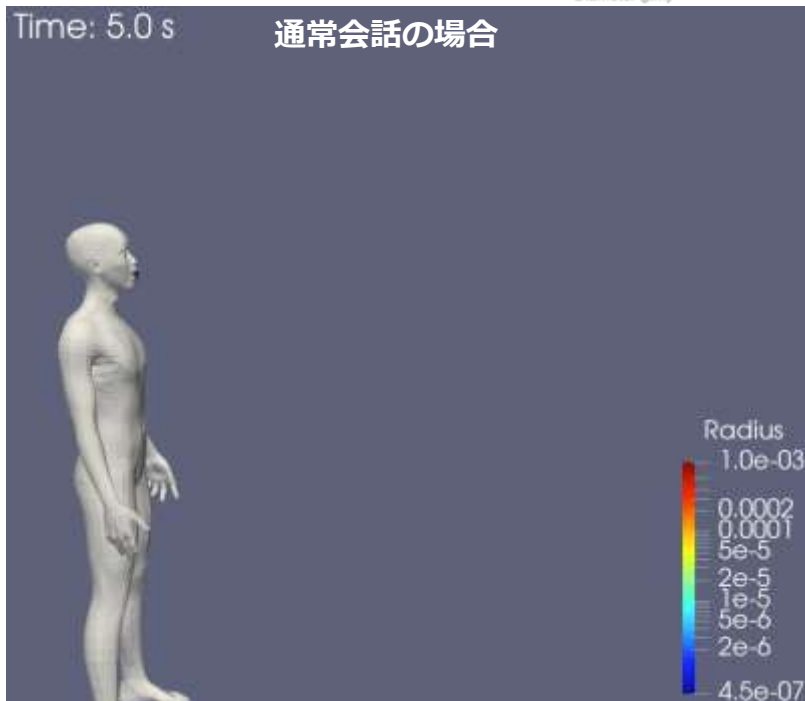
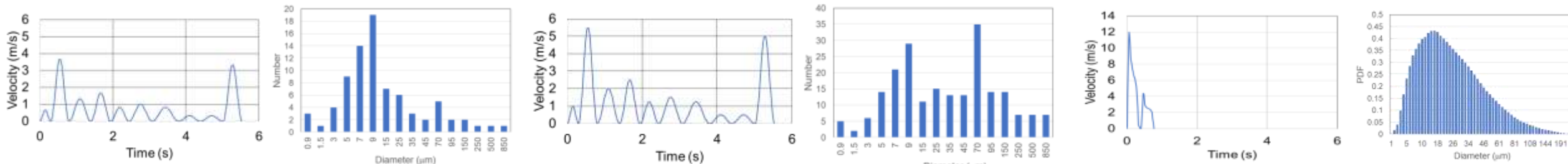
粘性項



キャッシュ利用効率の改善が必要

通常に会話している時や歌を歌っている時の飛沫の飛び方は、咳とどのように違うのか？

- 会話は、英語でone, two, three, ..., tenを5.5秒で発話し、それを繰り返す（1分で約9000個の飛沫・エアロゾル）
- 歌は、大きな声でone, two, three, ..., tenを5.5秒で発話し、それを繰り返す（1分で約25000個の飛沫・エアロゾル）
- 咳は強く2回する（総計3万個程度の飛沫・エアロゾル）
- 色は飛沫のサイズ（赤：百ミクロン，青：0.5ミクロン）



マスク素材の違いが飛沫飛散に与える影響

マスク素材のフィルター捕集効果と通気性能の関係：実験計測結果（豊橋技科大）

- 通気性とフィルター捕集効率（素材そのものの性能）の関係。（シミュレーションの計算条件として利用）
- 傾きが大きいほど、息苦しくなくて捕集性能が高い素材

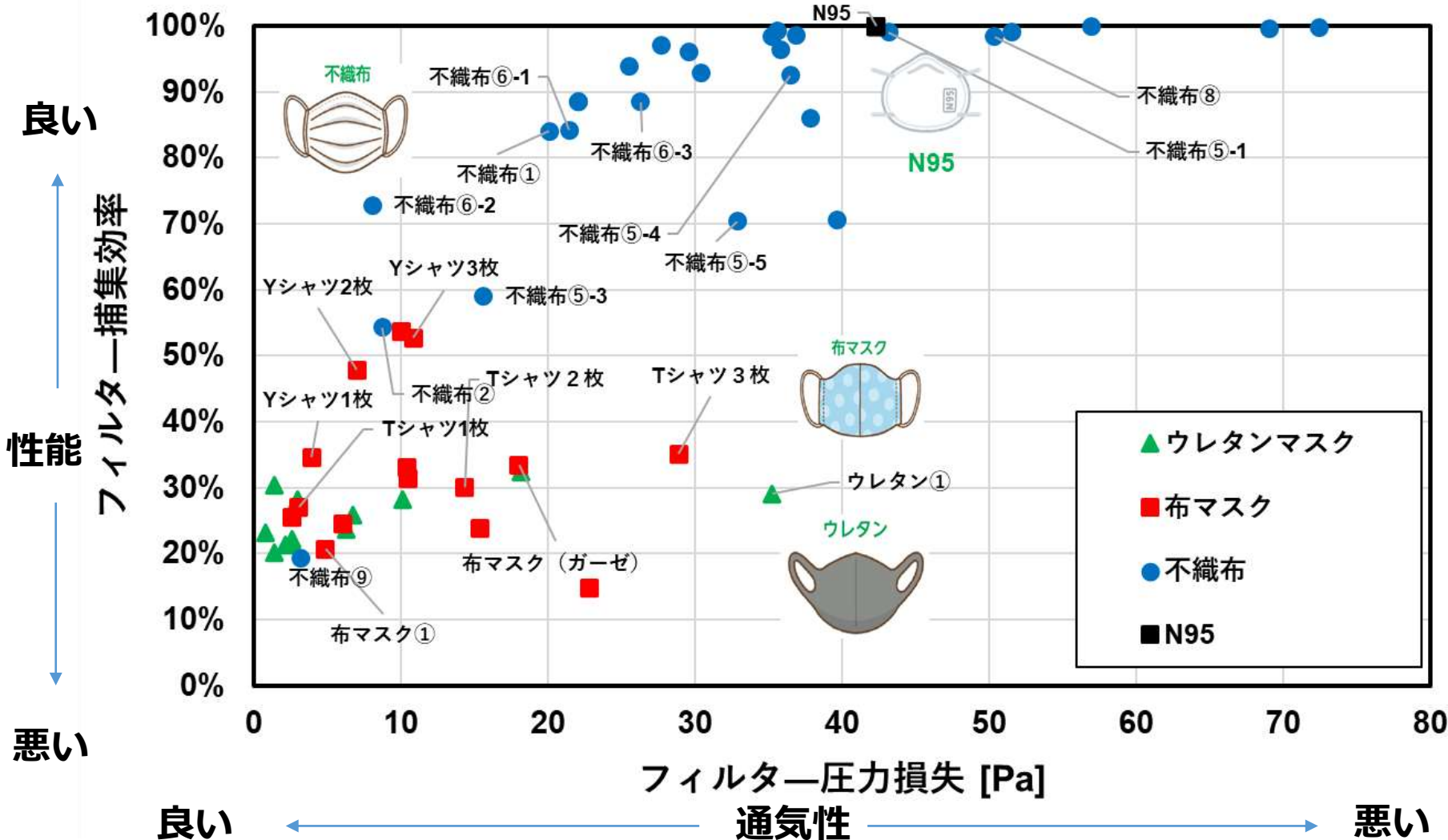
マスクフィルターを円管に取り付け、フィルター上流と下流の粒子数をパーティクルカウンター（飛沫の数を計測する装置：粒子直径 $0.3\mu\text{m}\sim 10\mu\text{m}$ ）を用いて計測する。

（面速度： $3.8\text{cm/s}\sim 3.8\text{m/s}$ ）
フィルター内外の粒子数からフィルタ効率を求める。

同時にマスク前後の圧力損失も計測する。流量 $3.8\text{L/min}\sim 52.5\text{L/min}$



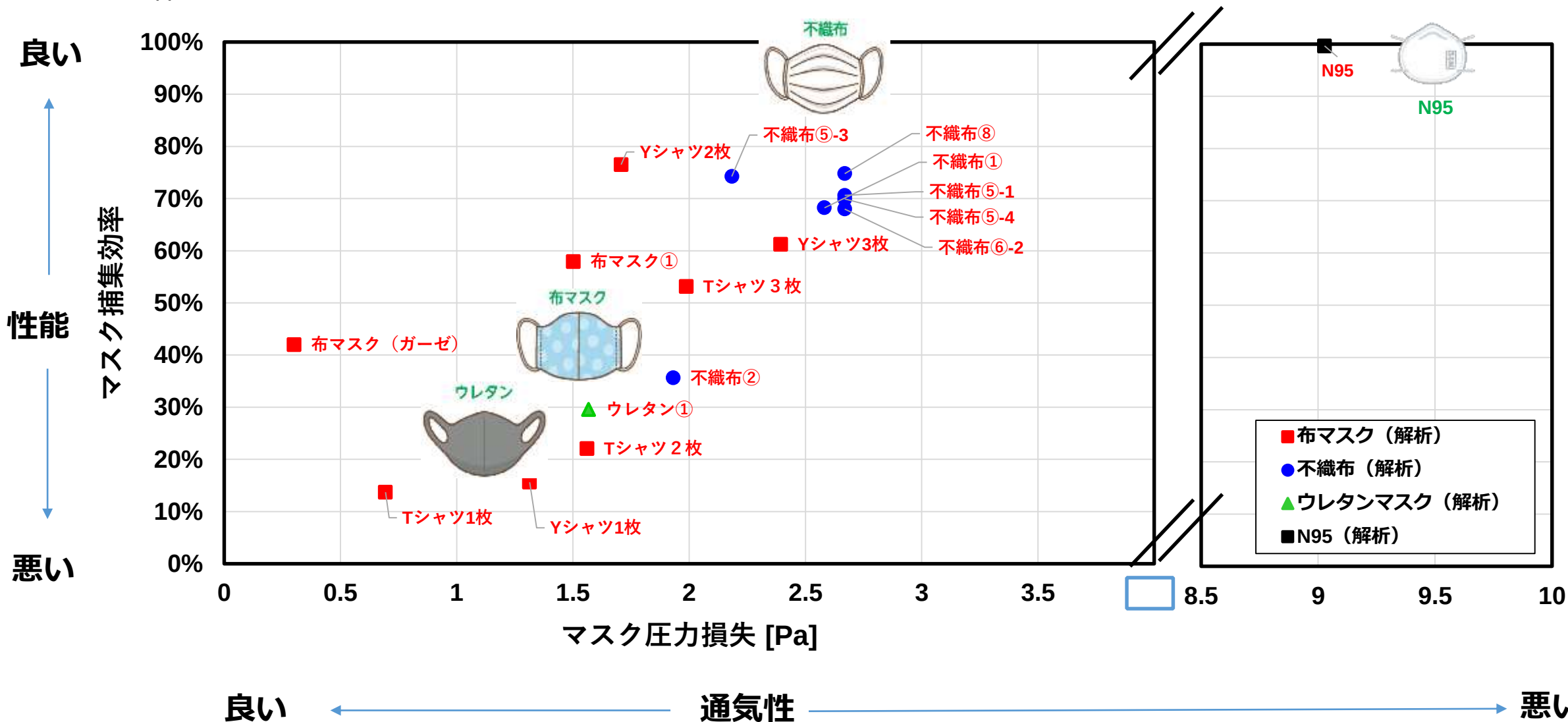
パーティクルカウンター
カノマックス Model 3889



マスク素材の違いが飛沫飛散に与える影響

マスク装着時の実効性能について

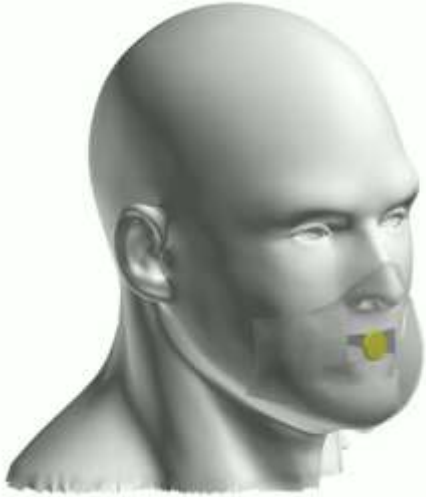
- マスク装着時の通気性能（実際にマスクを装着した際の性能）とマスク捕集性能（実際にマスクを装着した際の性能）の関係



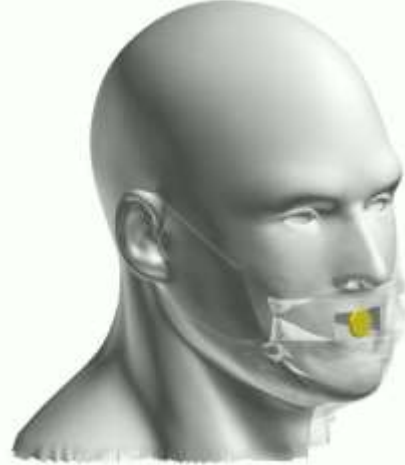
マスク素材違いの影響

黄：隙間放出
赤：マスク・顔付着
青：マスク透過

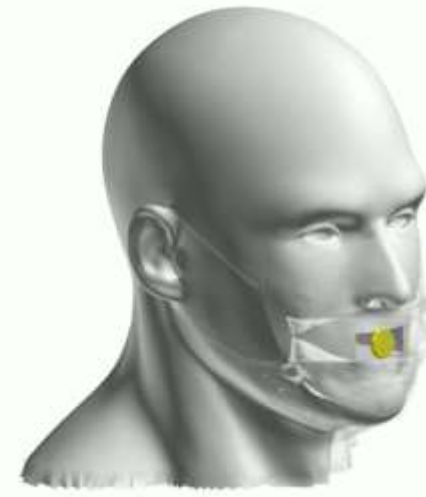
ウレタンマスク



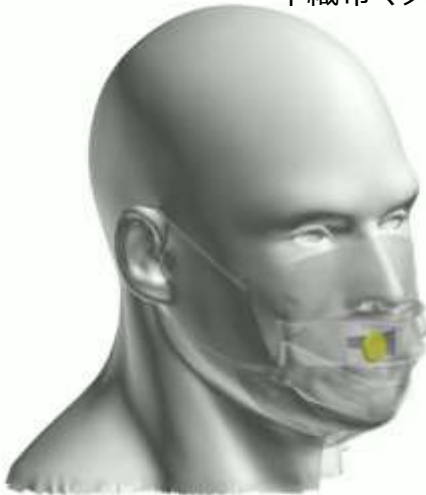
布マスク（綿）マスク



布マスク（ポリエステル）マスク



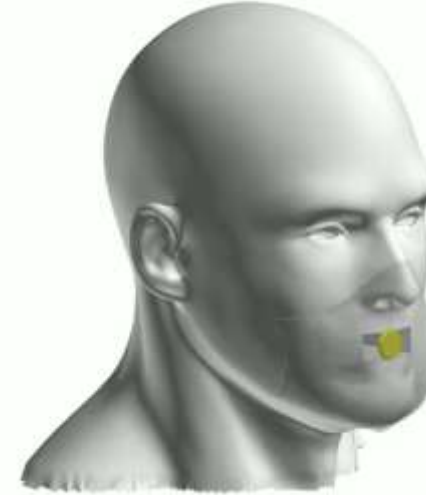
不織布マスク①



不織布マスク②



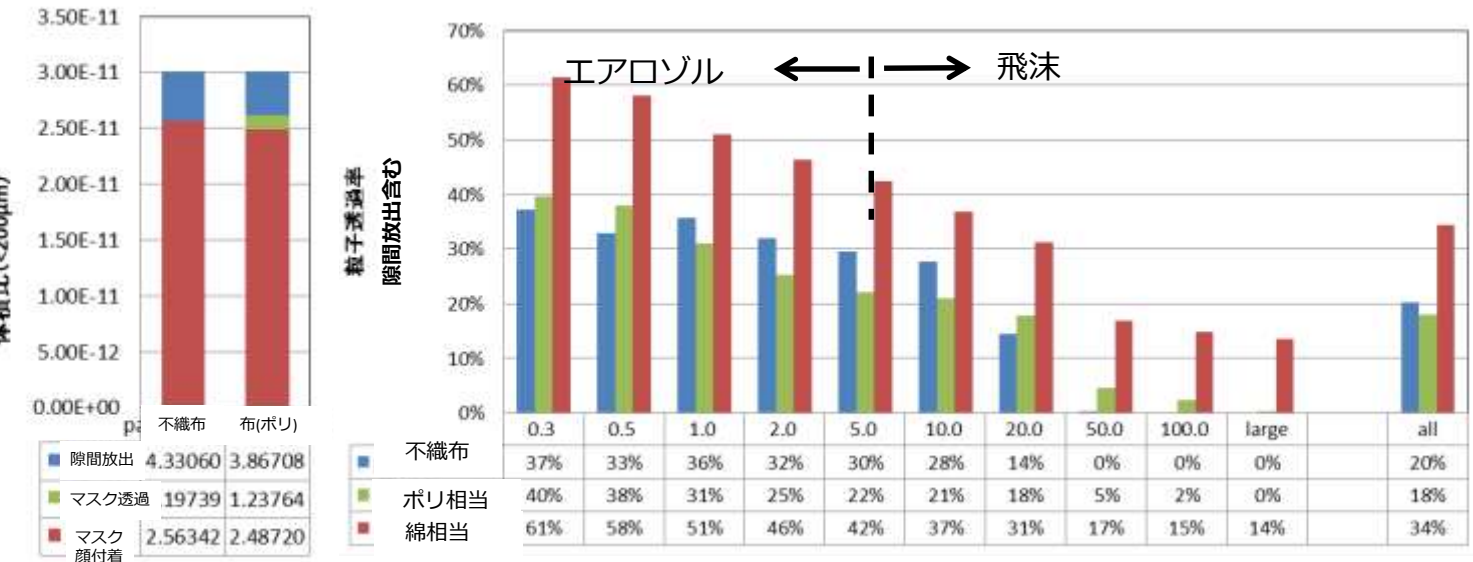
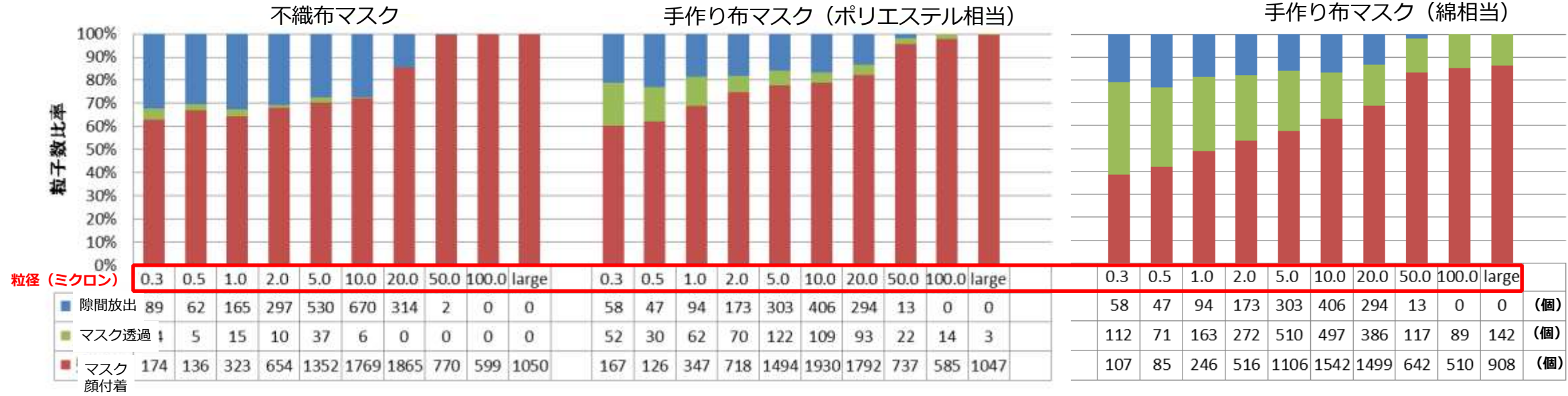
N95



マスクの素材の影響について

不織布マスクと手作り布マスクの比較

- 粒径ごとのマスク透過率



- 不織布の方が手作りマスクより、飛沫の粒子数でみた場合の全般的な性能（赤）は高い。ただし飛沫の体積でみるとどちらも8割の飛沫が捕集されており、布マスクでもリスク低減効果は期待できる。
- 布マスクは不織布マスクより空気抵抗が少なく、その分マスクのフィルタ部分に入る（緑・赤）粒子も多い。一方、不織布マスクはフィルタの空気抵抗が大きいいため、隙間からの漏れが多い。
- 両者ともエアロゾル粒子は全体の約40～50%程度が漏れる。

不織布マスクの付け方による性能の違いについて

- 鼻の金具（ノーズフィッター）の効果

流体計算前に有限要素法でマスクの変形を求める（流体計算中はマスクの変形は固定）



[タイトフィット]

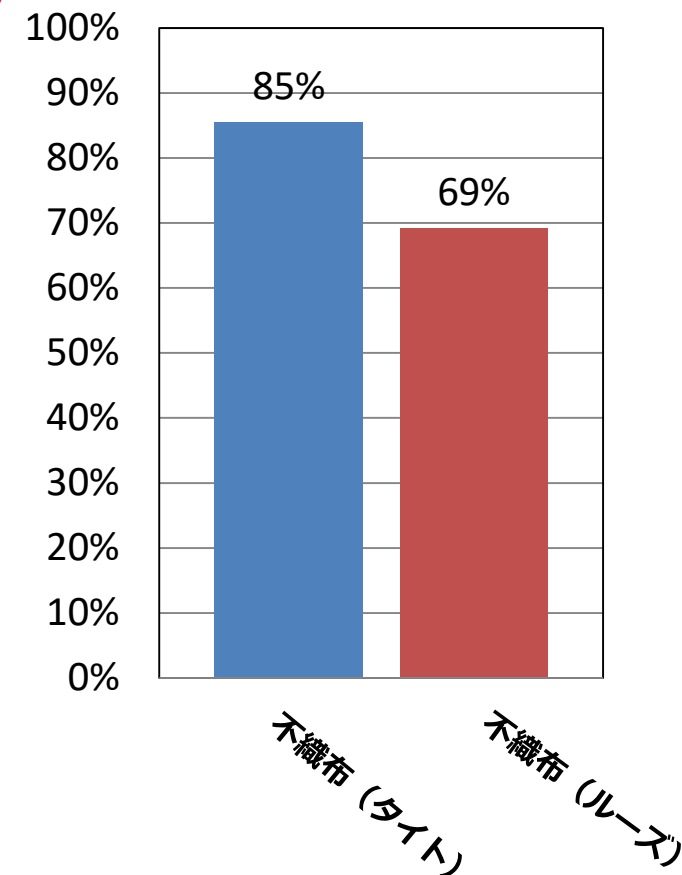
金具を鼻の形状に沿って変形させて装着する。目元は概ねマスクと接触している。



[ルーズフィット]

金具を鼻に沿って折り曲げずにそのまま装着する。

飛沫の捕集効果



二重マスクの効果について

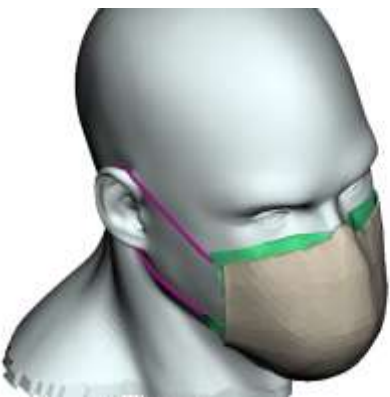
不織布1枚（ルーズフィット）



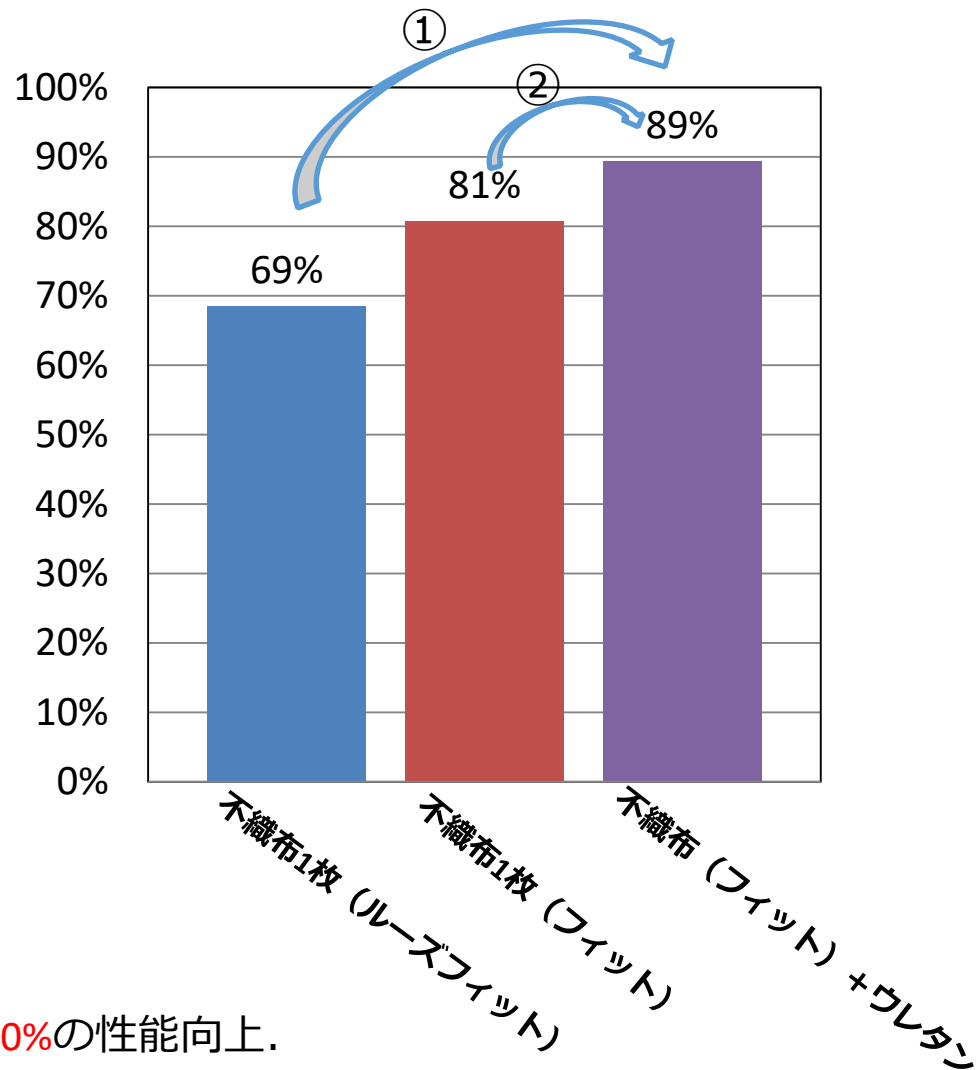
不織布1枚（フィット）



二重マスク
不織布（フィット）+ウレタン



飛沫の捕集効率



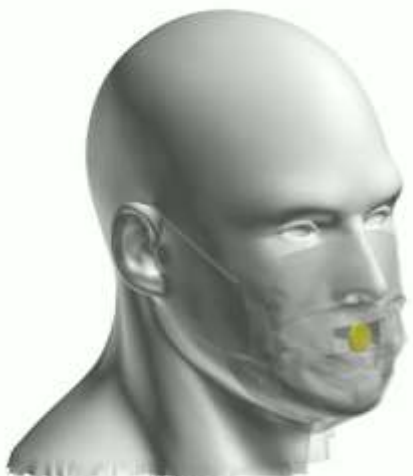
①ルーズフィットの状態から二重にして一枚目をフィットさせると考えると20%の性能向上。

②もともと一枚目をフィットさせていた状態と比較すると8%の性能向上

③ノーズフィッターをタイトフィットさせた一枚と比較すると4%の性能向上

二重マスクの効果について

不織布1枚ルーズフィット (69%)



不織布1枚フィット (81%)



二重マスク (89%)
不織布 (フィット) + ウレタン



不織布1枚タイトフィット (85%)

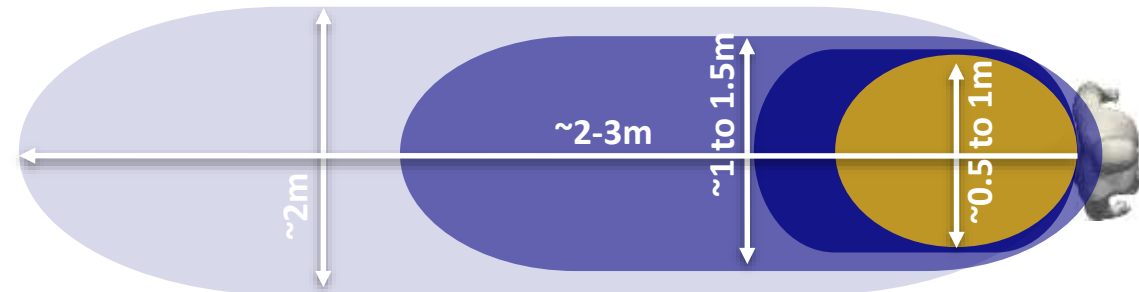
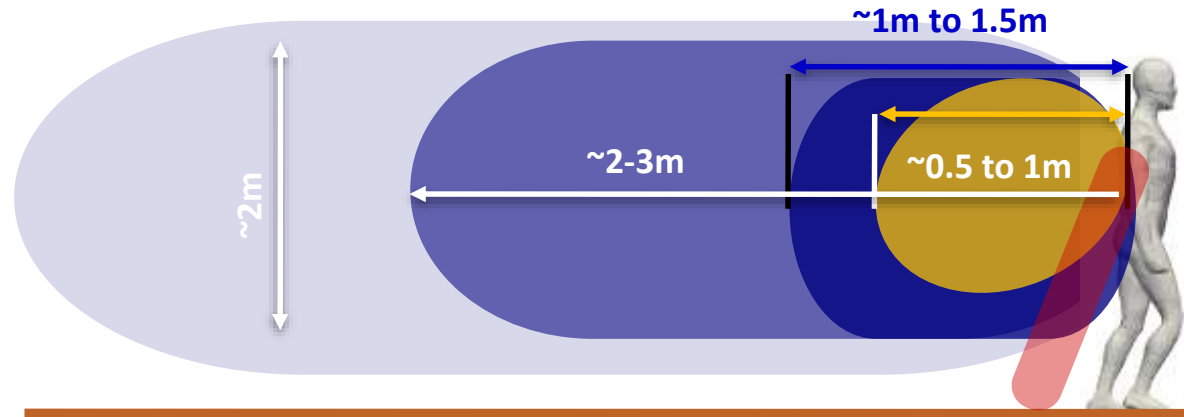
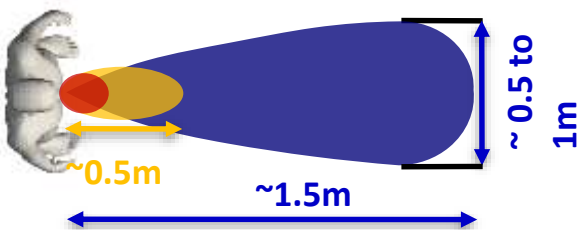
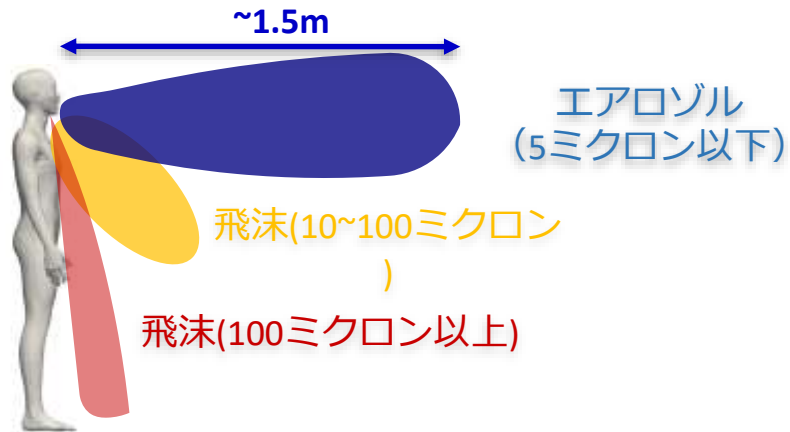


赤：マスクで補足
青：マスクを透過
黄：隙間からのもれ

マスクを二重にしても性能が単純に足し算になるわけではない。フィルタ性能が向上する分、顔やマスク間の隙間からの漏れが発生する。結果的に性能の良いマスクを1枚、タイトに装着することとあまり性能は変わらない。

皆さんに知って頂きたいこと

- 通常の会話に対して、歩行時の会話や運動時は、飛沫・エアロゾルの飛散の様子が大きく異なります。歩行時は、後方に飛沫が集中する領域が発生し、その大きさは通常の会話時に対して大きくなります。また、そのサイズは歩行速度が速くなると大きくなります。



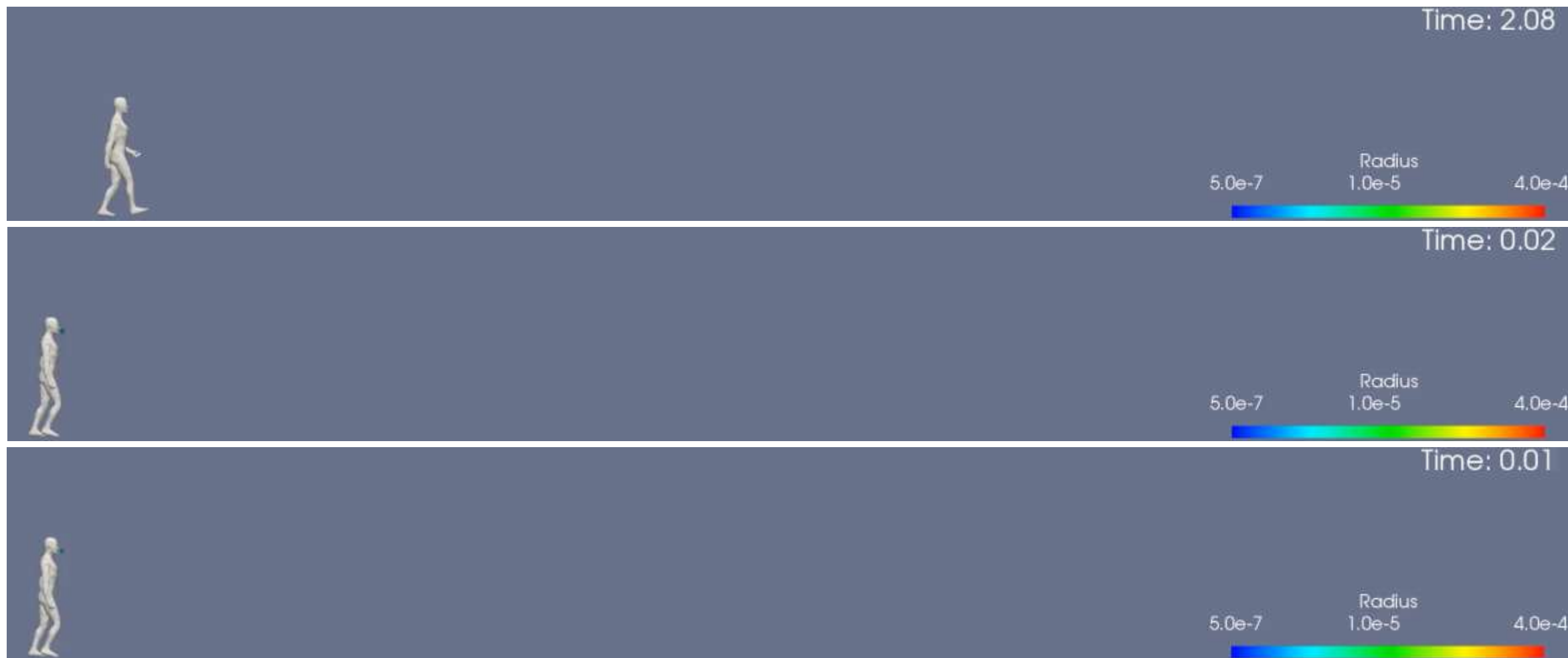
マスクの効果

- マスク無し（左）とマスク有り（右）の比較

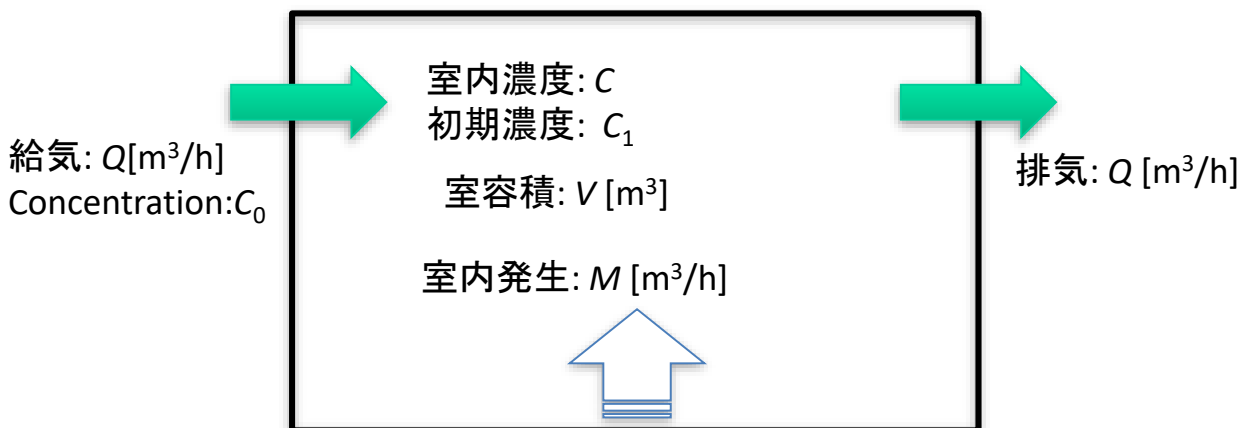


静止時に対して歩行時の飛沫の飛び方はどのように変わるでしょうか？

- 時速2.3km, 4.6km, 9.2kmで歩行しながら会話した場合の飛沫の飛び方を比較



カラオケ店での換気量の計算
(ACの効果)



瞬時一様拡散を仮定するとある時刻での室内濃度は...

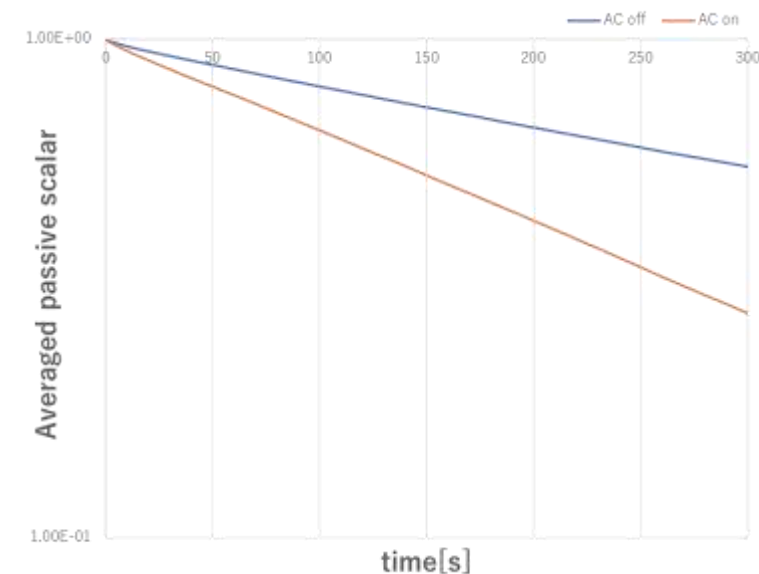
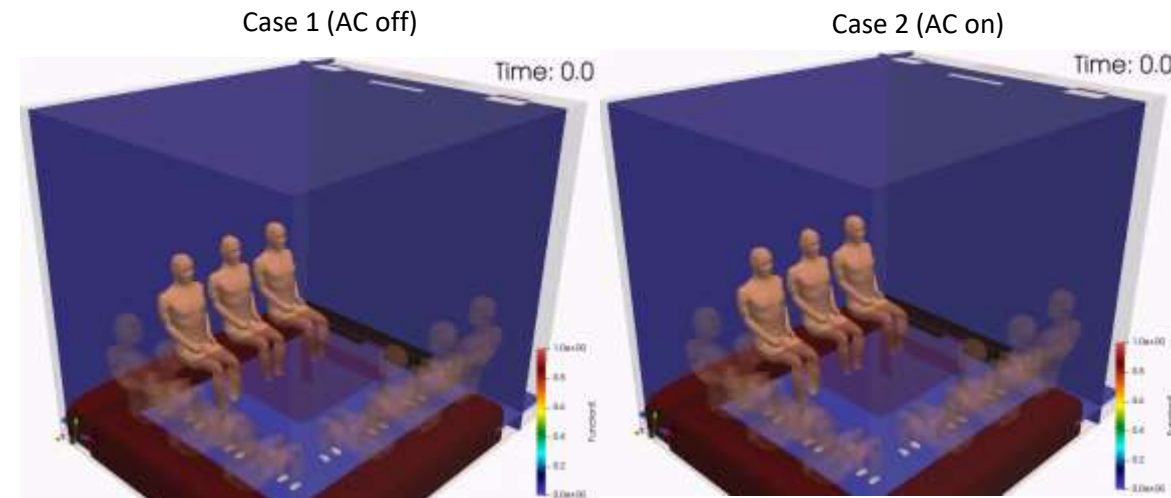
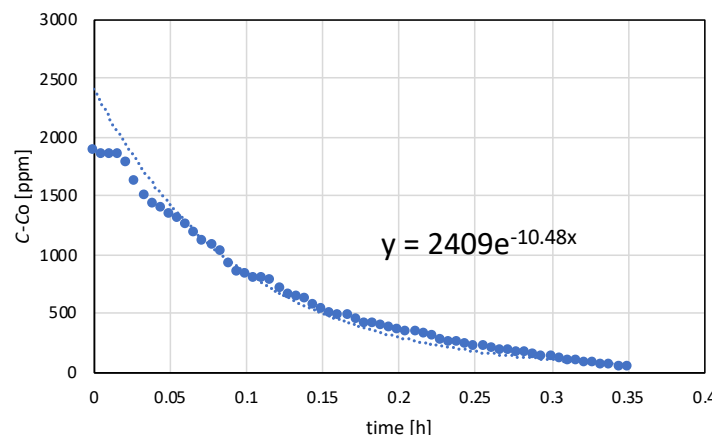
$$C = C_0 + (C_1 - C_0)e^{-\frac{Q}{V}t} + \frac{M}{Q}(1 - e^{-\frac{Q}{V}t})$$

初期値としてトレーサーガスで部屋を満たし, その減衰を計測

$$C - C_0 = (C_1 - C_0)e^{-\frac{Q}{V}t}$$

換気回数[回/h]

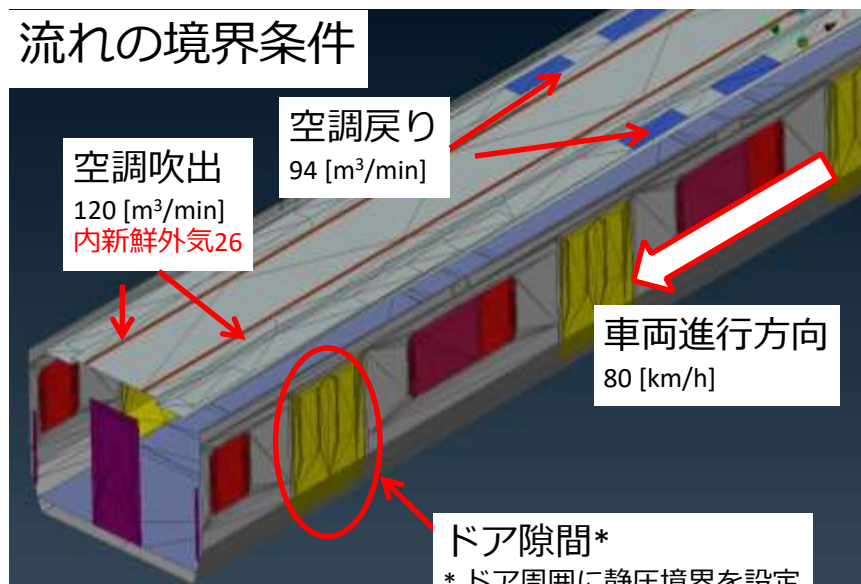
$$= \frac{Q: \text{換気量} [\text{m}^3/\text{h}]}{V: \text{室容積} [\text{m}^3]}$$



通勤列車内における窓開けとドア開閉による換気効果の評価

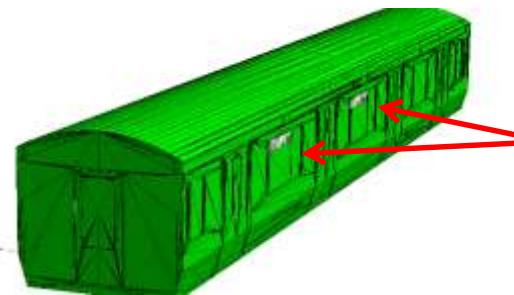
- ・ 走行する列車内の窓開けによる換気性能と、駅停車時におけるドア開閉による換気効果について調べる。
- ・ 列車走行時の車速は**時速80キロ**，混雑時を想定して**乗客229人**を配置
- ・ エアコン設定は，空調戻りに達した新鮮・汚染空気量を空調吹出に時々刻々フィードバックして設定
- ・ 窓は，車両片側2か所（計4か所），ドア開閉は片側のみ4か所を想定．ドアは2秒で開き，3秒で閉じる．

流れの境界条件



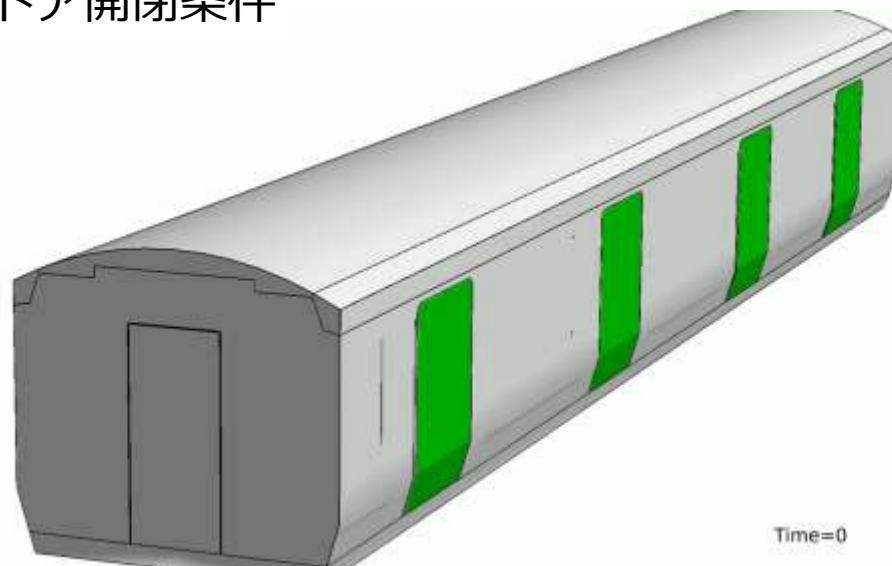
(参考) 古賀, 東日本旅客鉄道(株)向けE235系車両用空調装置の特長とメンテナンス性向上, 三菱電機技報, Vol.92(7), pp.410-413, 2018.

窓開け条件



- ・ 窓開け箇所と量
車両中央部の2か所（左右計4か所）を，5，10，15，20cm下方に開く

ドア開閉条件



- ・ 片側のドアのみ開閉
- ・ 開閉のタイミング
0~10 [s] : 静止
10~12 [s] : ドア開
12~42 [s] : 静止
42~45 [s] : ドア閉
45~ [s] : 静止

車内の換気の様子（色は換気率）：

- 車内の空気に新鮮空気（外気）が含まれる割合。混雑時，窓を開けることで車内の換気が促進される。換気は車内上面の中央から後方にかけて進んでいく一方，前方空気はややよどみ気味。

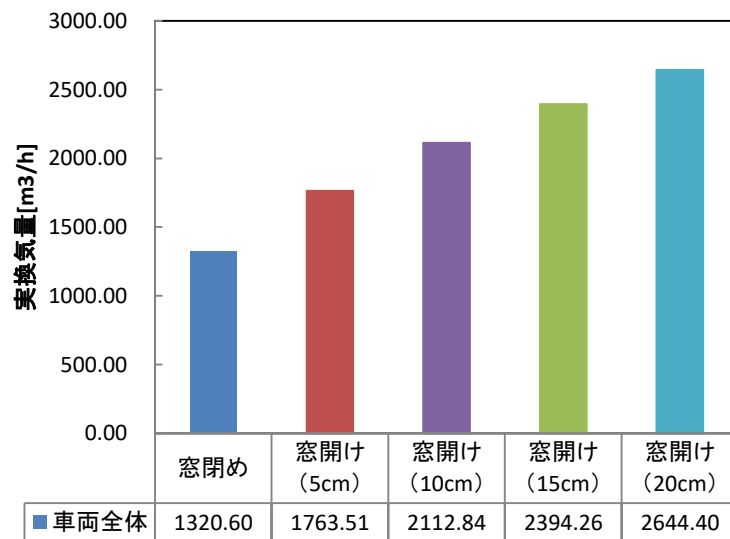
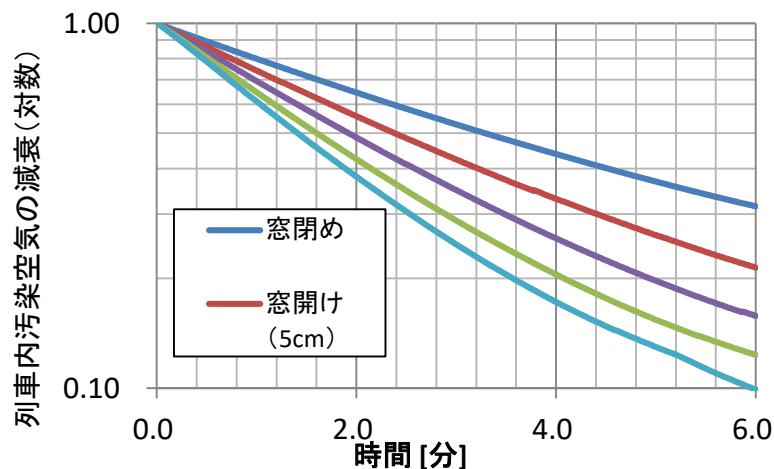
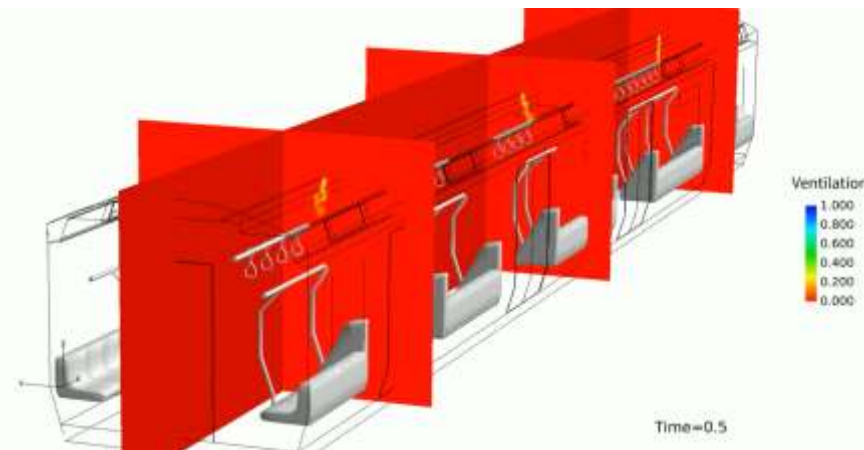
全ての窓を閉めた状態（エアコンのみ）



窓開け10cm



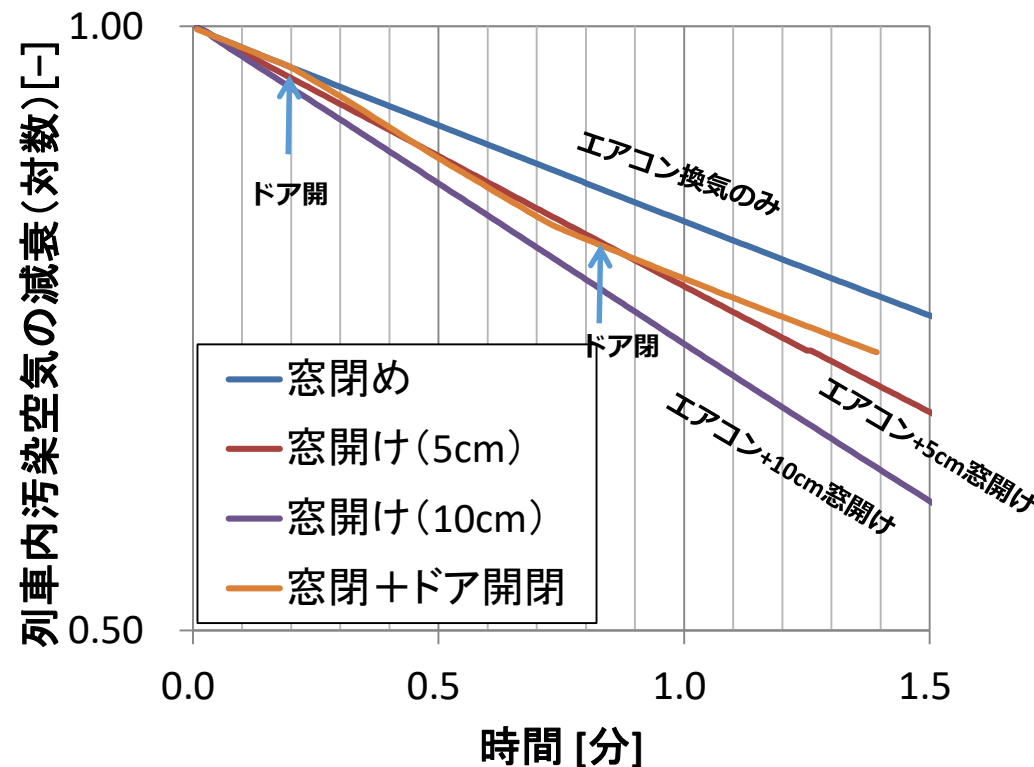
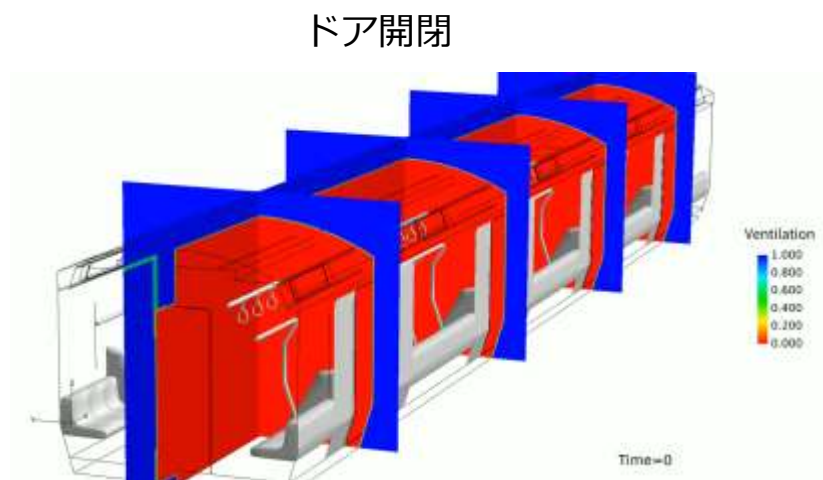
窓開け20cm



- 窓開け量にほぼ比例して実換気量が増えている。窓閉めでは1時間に10回（約6分に1回）換気されている

車内の換気の様子（色は換気率）：

- ドア開閉による換気の様子。ただし、ドア開閉時には列車は停止条件であることに注意。
- ドアが開いた瞬間、車内の空気がドア下側から排出され、車外の空気がドア上側から入り込んでいる様子がわかる。列車ドア入口付近空気は勢いよく交換されるが、ドア閉め後に再び一定の濃度になるように攪拌され、窓開け5cmの結果に近い解となり落ち着く。



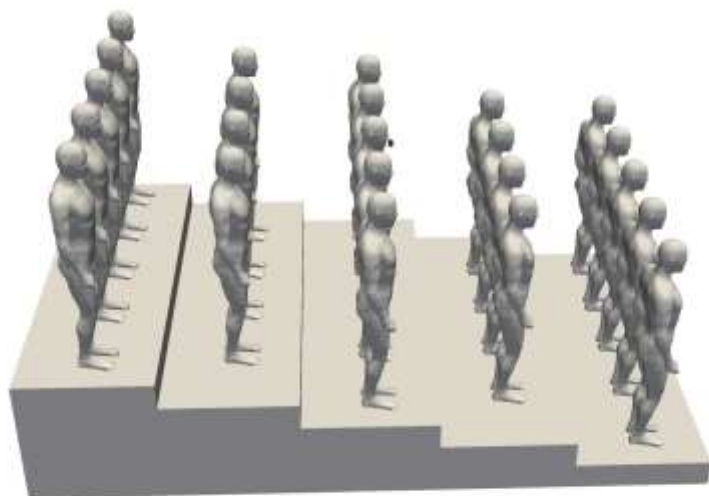
- ドア開閉による換気量（約1.4分間の評価）は、窓開け約5cm相当
- 窓を閉めて2分間隔で停車する列車と、5cm窓を開けて20分間隔で停車する電車の換気性能はほぼ同じ。

合唱活動での感染リスクを下げるためには？

- 音楽活動の中で合唱は最もリスクが高いものの一つ

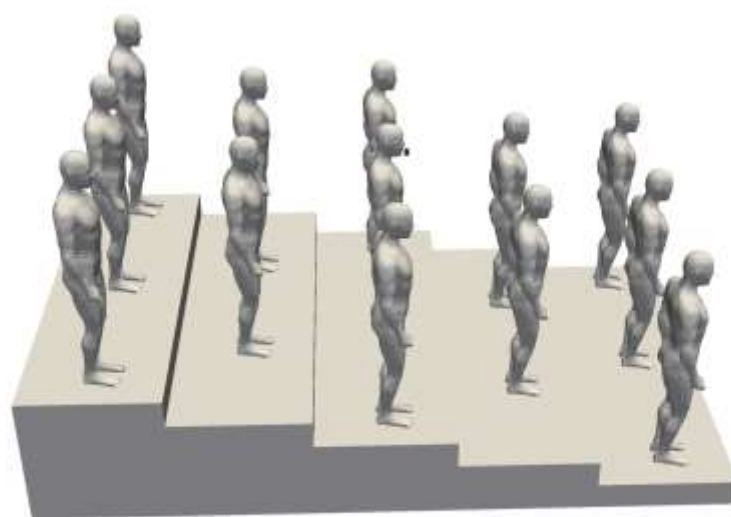
通常状態

Time: 0.000000



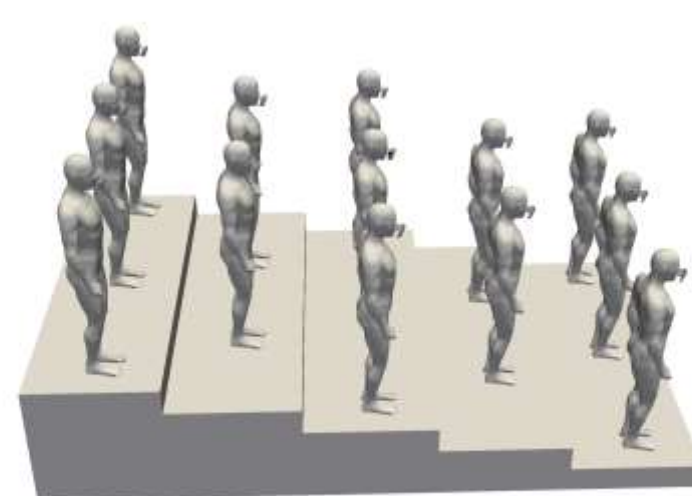
参加者を半分（距離）

Time: 0.000000



参加者を半部にしてマウスガード着用

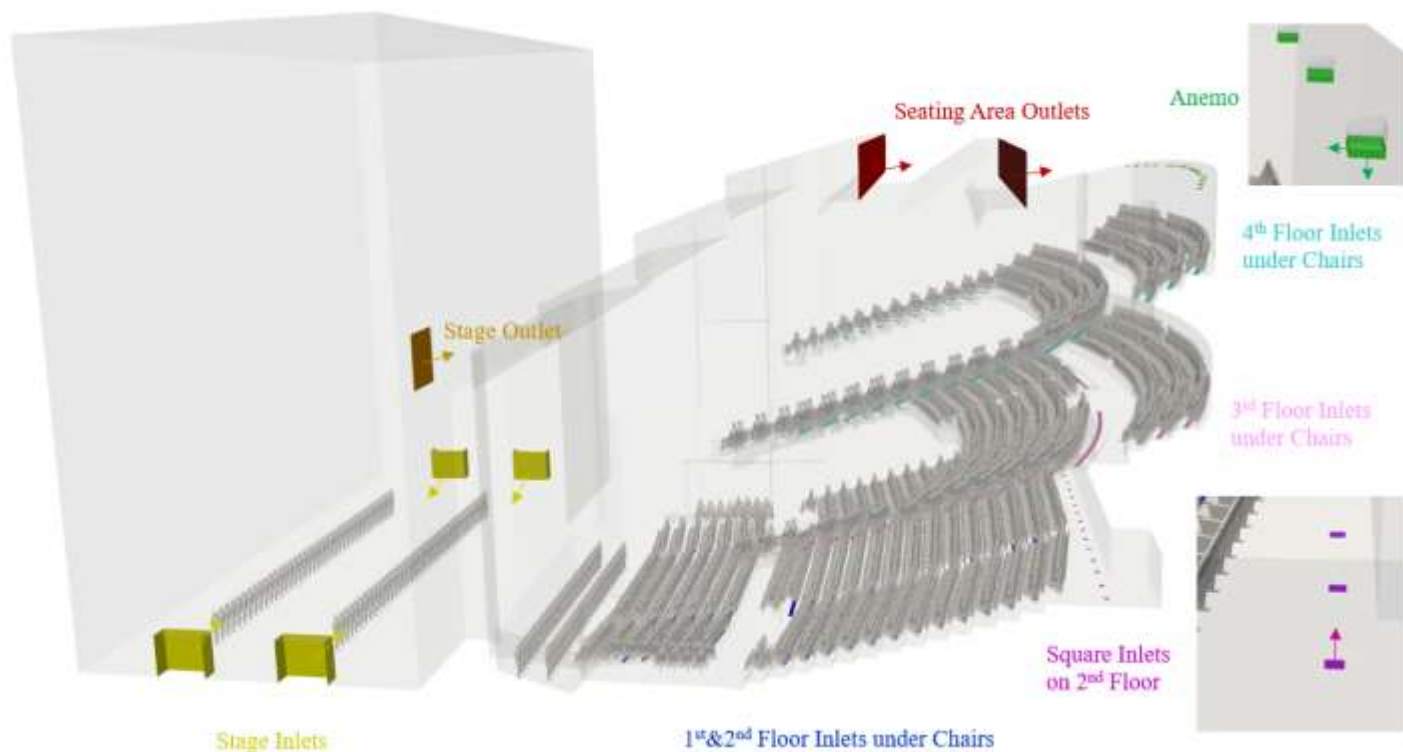
Time: 0.000000



- 全員が合唱することで後ろから前への弱い流れが誘起
- 飛沫については前列に高い感染リスク
- エアロゾルについては人の発熱によるサーマルプルームでより速く拡散
- 距離をとることで、直接飛沫がかかるリスクは減少
- エアロゾルの拡散は人が減ることで弱まる
- マウスガードをすることで、飛沫・エアロゾル共に遠くに飛ぶ効果を抑制

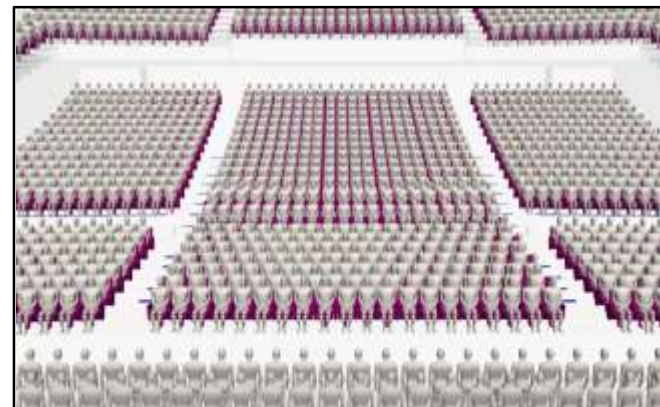
コンサートホールにおける実換気量の評価と空気質の調査

- 2000人程度の定員の実際の多目的ホールを対象 (14000m³).
- 満席状態での観客, オーケストラピット, ステージの人体発熱や, ステージライトからの発熱, 及び客席下のエアコン吹き出しを含む空調状態を再現.



Inlets	Velocity (m/s)
Stage inlets	0.261
Inlets on 1 st &2 nd Floor under Chairs	0.136
Square Inlets on 2 nd Floor	1.25
Inlets on 3 rd Floor under Chairs	0.192
Inlets on 4 th Floor under Chairs	0.151
Anemo	1.111/0.278

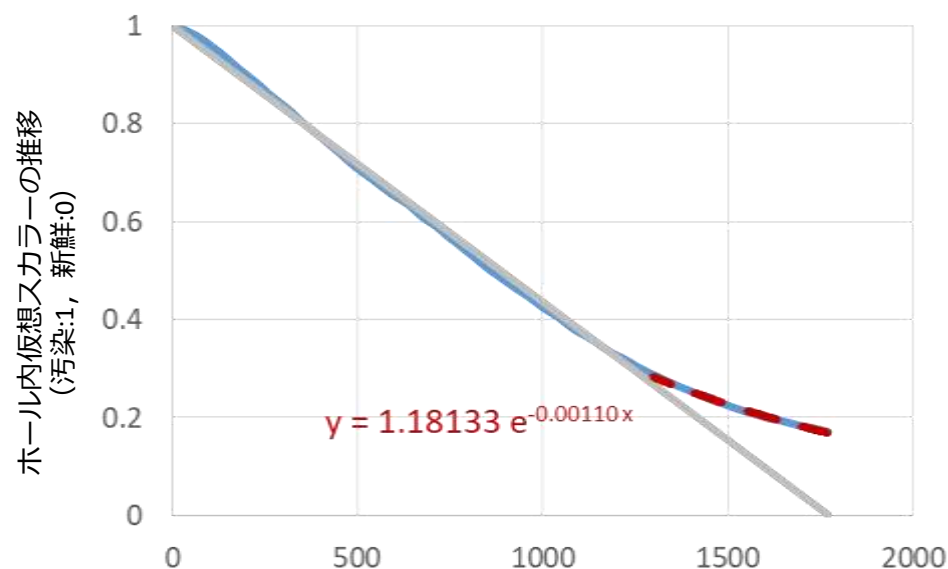
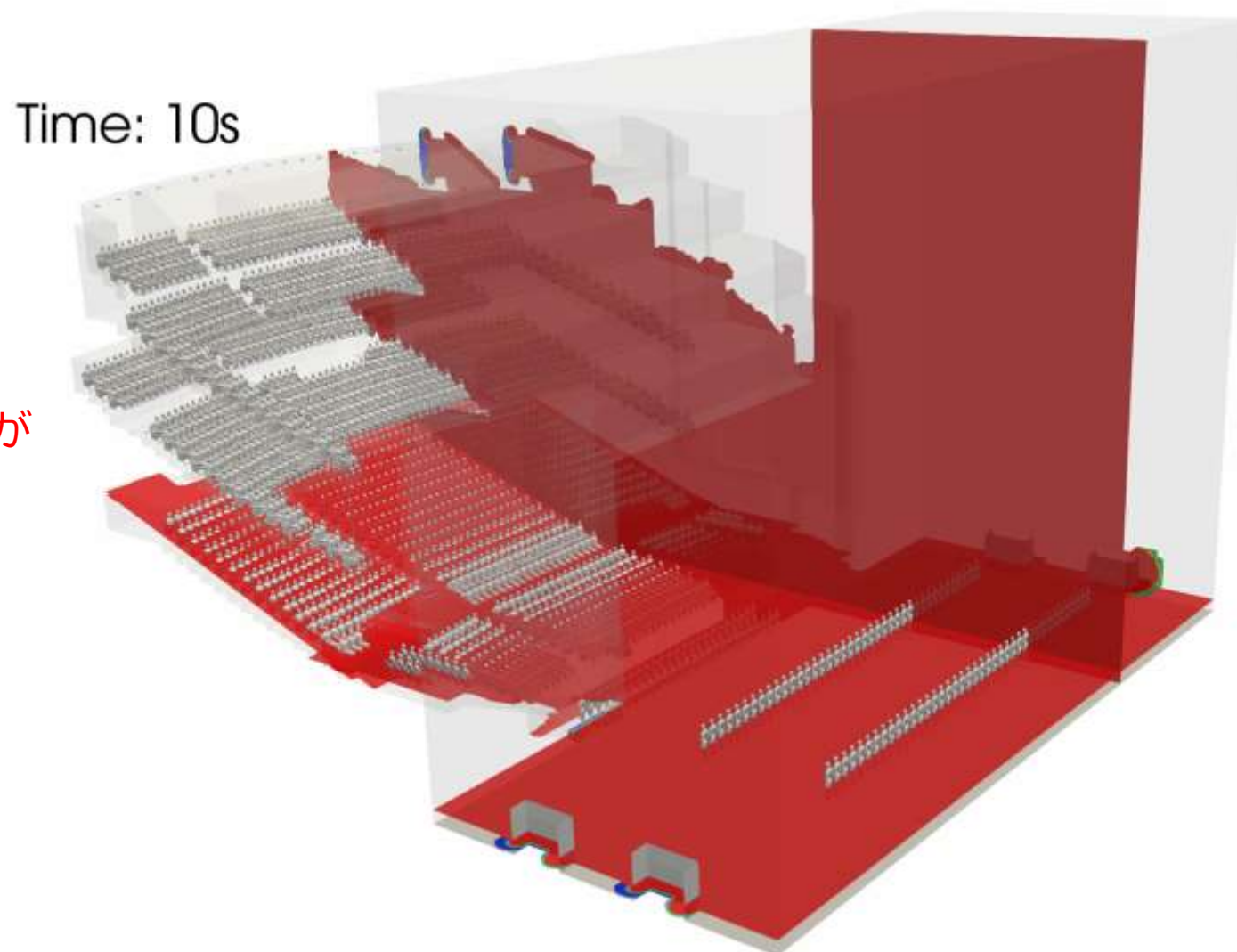
Outlets	Velocity (m/s)
Stage Outlet	-1.404
Seating Area Outlets	-0.212



設計換気量と実換気量の比較

- 設計換気量
 - 新鮮空気流量 $66,310 \text{ m}^3/\text{h}$
 - ホール体積: $32,661 \text{ m}^3$
 - 換気時間 1773秒
- 実換気量
 - 1200秒まではほぼ設計換気量で推
 - その後一様拡散性状へ移行

客席と比較してステージ上の換気がやや悪いが
全体的に良好な換気が維持されている



- シミュレーションによる飛沫感染に関するリスク評価と対策を社会に情報発信
- 富岳の計算資源により、数多くのケースに対して社会が求めるタイミングで迅速に発信
- 飛沫感染の理解とその対策に対する啓発に貢献
 - テレビ・ラジオ：250件，新聞：260件，ウェブ記事：1030件（3月12日現在）
- **人は結局，見たいものしか見ない？**
 - 発信した内容に対してメディアが報道する内容は限定的（報道以外にも色々やってます）
 - 数値に対する解釈は人により大きく異なる（フェースガードはOK?NG?）
 - シミュレーションに対する勝手な誤解（〇〇だから信用できない）
 - 富岳をつかったからこそその誹謗中傷（富岳でそんなことするな）
- **現在のシミュレーションの限界**
 - 入力条件（飛沫の発生数やマスクの流体特性）は実験に頼っている
 - 発症リスクについては言及が難しい（体内に取り込まれる飛沫の数や量のみの評価）

本活動に関連した産学官連携

ステアリングメンバー



理化学研究所



神戸大学



国立大学法人
豊橋技術科学大学



京都工芸繊維大学
KYOTO INSTITUTE OF TECHNOLOGY



大阪大学
OSAKA UNIVERSITY



東京工業大学
Tokyo Institute of Technology



九州大学



National Univ. of Singapore

協力メンバー



TOYOTA



JAPAN AIRLINES



大王製紙株式会社



ZEN-ON Music Company LTD Since 1931



TOYOTA
CUSTOMIZING &
DEVELOPMENT



SUNTORY TOPPAN

行政機関



文部科学省



国土交通省
Ministry of Land, Infrastructure, Transport and Tourism



内閣官房
Cabinet Secretariat



Kobe

- 「新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用について」
(文部科学省/理研)
- 「スマートライフ実現のためのAI等を活用したシミュレーション調査研究」 (内閣官房)
- 「新型コロナウイルス感染症対応HPCI臨時公募 (課題番号hp200154) (東大Oakbridge-CX)」
(HPCI)