



大阪大学サイバーメディアセンター 計算機利用ニュース

Vol. 5 No.1 2009.12

第8号

Cybermedia Center, Osaka University



大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）

主なサービス内容	係・連絡先等	月～金	土・日・祝日
----------	--------	-----	--------

・開館時間（吹田本館）

センター見学の申込	情報推進部情報企画課 総務係（1F） 電話 06-6879-8804 soumu@cmc.osaka-u.ac.jp	8:30～12:15 13:00～17:15	閉 館
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（1F） 電話 06-6879-8980,8981 kaikei@cmc.osaka-u.ac.jp		
利用案内受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用者講習会受付、広報、 計算機マニュアル・図書の閲覧、貸出	情報推進部情報企画課 情報企画班（1F） 電話 06-6879-8807,8808 usersv@cmc.osaka-u.ac.jp		
利用方法問い合わせ スーパーコンピュータ、PCクラスタ等の 利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館2F） 電話 06-6879-8812,8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp		

・サービス時間

スーパーコンピュータ、PCクラスタ等	オンラインサービス 24時間365日（注）
--------------------	-----------------------

（注）障害の発生等により、予告なしにサービスを中止することがあります。
計画停電・定期保守によりサービスを停止することがありますが、この場合はホームページに掲載します。

・大規模計算機システムURL

大規模計算機システムホームページ	http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
大規模計算機システムポータル （スーパーコンピュータ等についての情報を提供 しています。マニュアルの閲覧、パスワード の変更などが行えます。）	https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp

・利用相談

プログラム、センターの利用に関する 質問・相談	利用相談を電子メールで受け付けます。 E-mail: hpc-support@hpc.cmc.osaka-u.ac.jp に質問・相談をお寄せください。 ※お問い合わせの際には、利用者番号をお申し出ください。
----------------------------	---

大規模計算機システム

利用者報告

【論文】

- ・弱い背景磁場のある電子・イオンプラズマ中の非相対論的な無衝突衝撃波の2次元PICシミュレーション ----- 3
加藤 恒彦・高部 英明 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター

【利用者体験談】

- ・レーザー研利用者の体験談と講習会について ----- 7
福田 優子 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター
- ・スーパーコンピュータによる非圧縮流れの並列数値計算 ----- 10
吉田 尚史 信州大学工学部環境機能工学科
- ・一ユーザーからみたCMCスーパーコンピューターシステム ----- 12
駒 美保 沼津工業高等専門学校
- ・Hot gluons and strings inside SX-8 supercomputer ----- 13
Maxim Chernodub ツール大学理論数理物理教室
- ・RCNP大型計算機を用いた超変形⁴⁰Caにおける8重極振動モードの研究 ----- 14
小笠原 弘道 大阪府立工業高等専門学校
- ・原子核の様々な構造の共存 ----- 15
谷口 億宇 理化学研究所 仁科加速器研究センター 原子核理論研究室
- ・第14回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップについて
岸 浩史 中西 寛 笠井 英明 大阪大学大学院工学研究科 ----- 16

弱い背景磁場のある電子・イオンプラズマ中の非相対論的な無衝突衝撃波の 2次元 PIC シミュレーション

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 加藤恒彦、高部英明

イントロダクション

我々の銀河系の星々の間の空間や、銀河と銀河の間の空間など、宇宙空間の大部分は高温で希薄なプラズマで満たされている。このような高温希薄なプラズマ中では、プラズマを構成する個々の荷電粒子間のクーロン衝突は極めて稀であり、電場や磁場の変動を伴ったプラズマの集団現象がそのダイナミクスを支配する。この特性から、この種のプラズマは「無衝突プラズマ」と呼ばれる。

無衝突プラズマ中にも衝撃波が発生し、「無衝突衝撃波」と呼ばれる。粒子間の衝突無しに発生するこの種の衝撃波はそのメカニズムも非常に複雑で、静電場が主に関係するもの、背景磁場が重要となるもの、あるいは自己生成磁場が重要となるものなど、様々な種類があり、それ自体が研究の対象である。また、無衝突衝撃波は宇宙線などの高エネルギー粒子を作り出す加速機構であるとも考えられており、その点においても重要な現象である。

無衝突衝撃波は、地球近傍では人工衛星により直接的に観測されており、また実験的にも静電衝撃波と呼ばれる種類の衝撃波が生成されている [1, 2, 3]。近年の大出力レーザー実験装置を用いれば、 $V \sim 1000 \text{ km s}^{-1}$ 程度の速度を持つプラズマ流を生成することが可能であり [4]、実際に、いくつかの衝撃波生成実験も行われている [5, 6, 7, 8]。宇宙空間においては、もっぱら可視光や電波、X線などによる観測に頼るしかないが、様々な衝撃波が観測されている。

宇宙空間における無衝突衝撃波のうちでも重要なものは、超新星残骸の衝撃波である。これは超新星爆発で飛び散った星内部の物質が周りの星間物質にぶつかって生成される衝撃波で、星間物質中（電子・イオンプラズマ中）を典型的には秒速数千キロの速度で伝搬する。また、超新星残骸の衝撃波は、 10^{15} eV までのエネルギーの宇宙線を加速する起源であるとも考えられており、実際、 10^{14} eV 程度にまで加速された電子によるシンクロトロン X線も観測衛星により観測されている [9, 10]。

近年、宇宙物理の分野においてもプラズマの粒子シミュレーションを用いて無衝突衝撃波を調べることが行われてきている。特に、背景磁場が無くても、相対論的な流速のプラズマ中に無衝突衝撃波が生成されることが2次元や3次元のシミュレーションにより明らかになった [11, 12]。この種の衝撃波では、衝撃波遷移層で Weibel 不安定性 [13, 14] により自己生成磁場ができ、この磁場が散逸を担う点で特徴的であり、“Weibel-mediated shock” と呼ばれる。さらに、非相対論的な流速でも同様な衝撃波が発生することが示されている [15]。

一方、星間空間には弱いながらも背景磁場が存在する。その強さは典型的には $3 \mu\text{G}$ 程度である。以下では、衝撃波の速度 V_{sh} が与えられたときに、その速度を持つプラズマの運動エネルギー密度と磁場のエネルギー密度の比として定義される σ パラメータによって

磁場の強さを表す。

$$\sigma \equiv \frac{B_0^2/8\pi}{n_{e0}(m_e + m_i)V_{\text{sh}}^2/2}, \quad (1)$$

ここで、 B_0 が背景磁場の強さ、 n_{e0} がプラズマの数密度、 m_e 、 m_i はそれぞれ電子、陽子の質量である (cgs-Gauss 単位系)。星間物質中のプラズマの数密度は $0.01 - 1 \text{ cm}^{-3}$ 程度であり、超新星爆発に伴う衝撃波（速度は $1000 - 10,000 \text{ km s}^{-1}$ 程度）では、この σ は、だいたい $10^{-3} < \sigma < 10^{-6}$ の範囲の小さな値になる。しかし、この弱い磁場があるために、衝撃波が完全に背景磁場のない場合の “Weibel-mediated shock” とは異なる構造も持つ可能性もある。

本研究の目的は、このような弱い背景磁場がある場合の衝撃波の構造を見ることである。そのために2次元の電磁粒子シミュレーション (PIC シミュレーション) を行う。プラズマは電子・イオンプラズマで、その中の非相対論的な衝撃波を考える。

シミュレーション

弱い背景磁場を持つ電子・イオンプラズマ中の非相対論的な衝撃波の形成過程を調べるため、2次元の電磁粒子シミュレーション (PIC シミュレーション) を行った。シミュレーションでは、電磁場はグリッド上で Maxwell 方程式を用いて計算され、荷電粒子については個々の粒子の運動が相対論的な運動方程式を用いて計算される [16]。使用したシミュレーションコードは、空間座標は2次元で、粒子の速度ベクトル、および電場・磁場のベクトルは3次元で扱われる「2D3V コード」と呼ばれる種類のものである。

以下では、シミュレーション平面を $x-y$ 平面とし、それに垂直に z 軸を取る。また、時間の単位として電子プラズマ振動数の逆数 $\tau = \omega_{\text{pe},0}^{-1}$ を、長さの単位として電子表皮長 $\lambda_e = c\omega_{\text{pe},0}^{-1}$ を用いる。ここで c は光速で、 $\omega_{\text{pe},0} \equiv (4\pi n_{e0}e^2/m_e)^{1/2}$ は系の特徴的な電子数密度 n_{e0} により決まる電子のプラズマ振動数である。同様に、電場・磁場の単位としては電子数密度により決まる次の量を用いる： $E_* = B_* = c(4\pi n_{e0}m_e)^{1/2}$ 。

シミュレーションでは、良く用いられる「インジェクション法」と呼ばれる方法で衝撃波を発生させた。これは簡単に言えば、プラズマを壁にぶつけて衝撃波を発生させる方法である。まず、シミュレーションボックス内の「左側」(x 小) と「右側」(x 大) にそれぞれ粒子を反射する壁を設け、2つの壁の内側にプラズマを構成する荷電粒子を一様に配置する。プラズマは初期にシミュレーション系で右側 ($+x$ 方向) に運動しているとし、それぞれの粒子に $+x$ 軸方向に平均速度 V を与え、さらに熱速度をランダムに生成して加える。ここで電子とイオンの温度は等しいとする。シミュレーションがスタートするとプラズマの右端の粒子は右の壁に衝突して反射され、跳ね返った粒子と流入してくる粒子との間

にプラズマの不安定性が発生することにより衝撃波が形成されていく¹。

背景磁場があるプラズマ中の衝撃波を考えるので、初期磁場として B_0 を y 方向に一様に配置する。このとき、プラズマの静止系で電場がゼロになる条件を課すとシミュレーション系では z 方向に電場 $E_0 = -VB_0/c$ が現れることになるので、この電場も同時に配置する。なお、磁化パラメータ σ を用いると、背景磁場の強さは以下のように書ける。

$$B_0 = [(1 + m_i/m_e)\sigma]^{1/2} (V/c)B_* \quad (2)$$

ただし、衝撃波の実際の伝搬速度はシミュレーションを試みなければわからないため、以下では、衝撃波速度 V_{sh} の代わりにシミュレーション系（これは衝撃波の下流静止系でもある）で見た上流の流速 V を用いて σ を定義する。

$$\sigma \equiv \frac{B_0^2/8\pi}{n_{e0}(m_e + m_i)V^2/2} \quad (3)$$

以下の計算では、系の物理サイズを $4480\lambda_e \times 280\lambda_e$ 、グリッドサイズを 4096×256 とし、約1億の粒子を計算に使用した。なお、計算の都合上、イオンの質量として $m_i = 20m_e$ を取り、初期の流速は $V = 0.45c$ とした。

計算は、大阪大学サイバーメディアセンターの SX9 を使用して行った。コードは C 言語で記述し、1 ノード (16CPU) 用に最適化（ベクトル化および自動並列化）を行った。電磁場の時間発展の計算にはスペクトル法を使用した²が、その際のフーリエ変換には SX コンパイラの ASL ライブラリを使った。

結果

ここでは $\sigma = 10^{-5}$ の場合の結果を示す。図 1 は、時刻 $\omega_{pe}t = 5380$ でのイオンの数密度である。色が上流数密度 n_{e0} で規格化した数密度を表す。図の左側が衝撃波の上流領域で、右側が下流領域、その間の $3400 < x/\lambda_e < 3500$ の領域に衝撃波の遷移層がある。遷移層内には、背景磁場のない場合の Weibel-mediated shock [15] と同様のフィラメント状構造が見られ、その下流側に高密度領域があることがわかる。

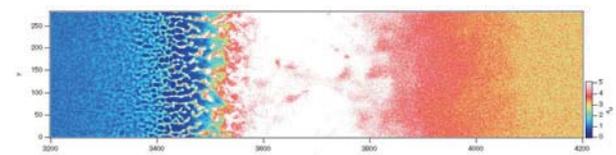


Fig. 1 上流数密度 n_{e0} で規格化したイオンの数密度。初期の流速は $V = 0.45c$ 、磁場の強さは $\sigma = 10^{-5}$ の場合である。時刻は $\omega_{pe}t = 5380$ 。横軸、縦軸はそれぞれ x 軸、 y 軸で、ともに単位は電子表皮長である。図の左側が衝撃波の上流、右側が下流にあたり、その間に衝撃波遷移層がある。遷移層の中には、フィラメント状の構造が見える。

図 2 は、イオンの数密度の時間進化を示したものである。横軸が x 軸で、縦軸が時間、色は y 方向に平均したイオン数密度を示す。衝撃波の遷移層は、数密度のジャンプとして見える。一つ重要な点は、衝撃波の伝

搬速度が $\omega_{pet} = 2500$ 付近を境に $V_{sh,d} \sim -0.19c$ から $\sim -0.11c$ に急に変わることである（ここで、衝撃波の速度は下流で測ったものである）。これは、背景磁場の影響がほとんど無い Weibel-mediated shock 的な衝撃波から背景磁場が重要となる衝撃波への遷移と考えられる。実際、ここでは図は示さないが、衝撃波の構造は $\omega_{pet} < 2500$ ではほとんど背景磁場が無い場合と同様である。遷移の時刻は、背景磁場中のイオンのサイクロトロン時間 $T_g \equiv 2\pi/\omega_{ci}$ の 4 分の 1 程度（つまり背景磁場でイオンが 90 度ぐらい曲げられるまでの時間）にほぼ等しい。ここで $\omega_{ci} \equiv eB_0/m_i c$ はイオンのサイクロトロン振動数である。

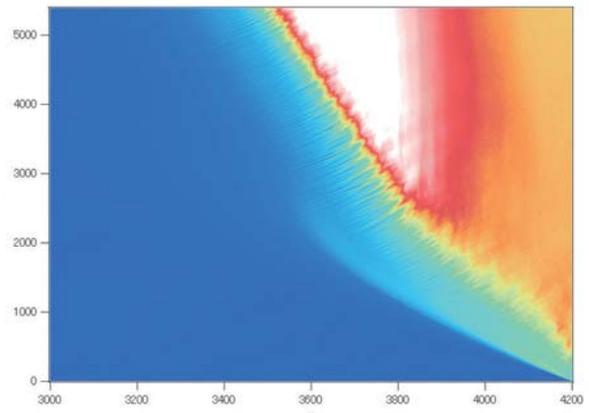


Fig. 2 イオン数密度の時間進化。横軸は x 軸、縦軸は時間、色は y 方向に平均したイオン数密度を表す。シミュレーションは図 1 と同じものである。時刻 $\omega_{pet} = 2500$ 付近で、衝撃波の構造や伝搬速度が急に変わるのがわかる。

図 3 に衝撃波近傍のいくつかの物理量のプロファイルを示す。（プロファイルは y 方向には平均したものである。）上がイオン数密度、下が各方向の磁場成分である。衝撃波遷移層の中でイオンの平均密度が急速に増加し、同時に強い磁場もそこで作られていることがわかる。磁場が最も強いところでは背景磁場の 50 倍程度になり、そのエネルギー密度は（下流静止系で見た）上流のプラズマの運動エネルギーの約 1% にも達する。この磁場が上流から来る粒子の軌道を大きく曲げて等方化し、衝撃波の実効的な散逸を担っていると考えられる。このパラメータ ($\sigma = 10^{-5}$) の場合、背景磁場の圧縮により作られる B_y 成分よりも Weibel 不安定性により作られたと考えられる B_x 成分や B_z 成分が卓越することは注目し値する。Weibel 不安定性の効果は 2 次元以上のシミュレーションでないと取り入れられないため、これまでの 1 次元シミュレーションで得られた構造とは大きく異なる構造である。

図 4 には、電流密度と磁場の各成分を示す。背景磁場 (B_y) は衝撃波の遷移層で圧縮される。これは 1 次元のシミュレーションと基本的に同じであるが、今の場合はその揺らぎが大きい。特徴的な点は、遷移層の上流側の端に電流フィラメント (J_x と J_z 成分) が多数見られることである。イオン数密度 (図 1) で見られたフィラメント状の構造は、この電流フィラメントの存在を反映したものである。これらの電流フィラメントにより、主に B_x 、 B_z 成分が作られる。

¹どのような不安定性が励起されるかは状況に依存し、また常に衝撃波が形成されるとも限らない。

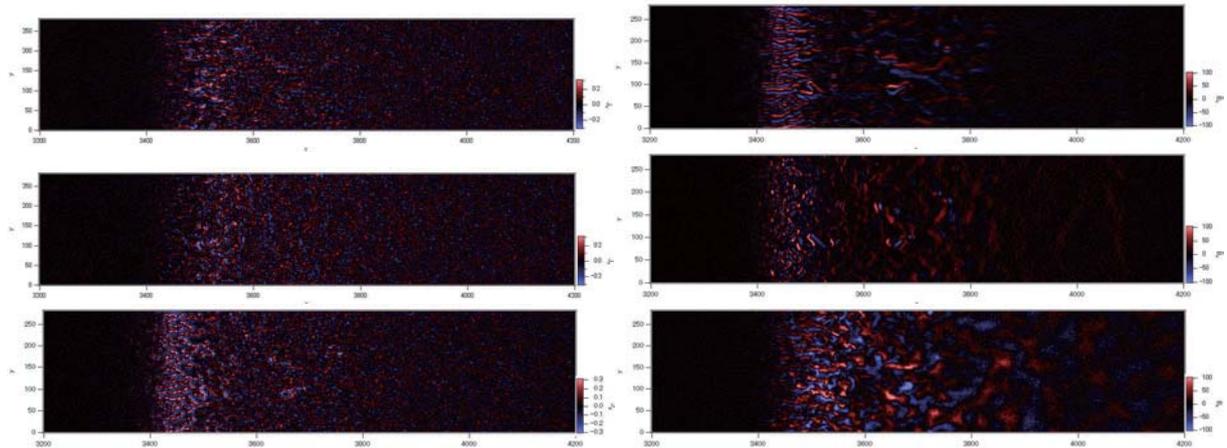


Fig. 4 左：電流密度の各成分（上から順に J_x 、 J_y 、 J_z ）。右：磁場の各成分（上から順に B_x 、 B_y 、 B_z ）。

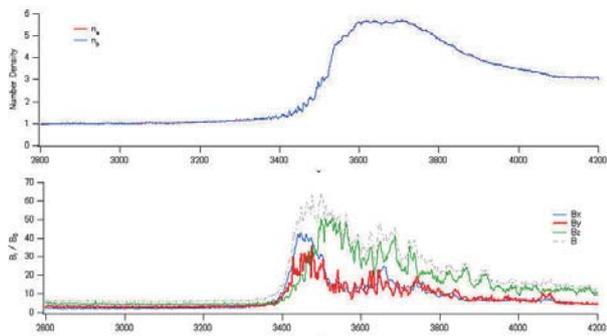


Fig. 3 衝撃波近傍の n_{e0} で規格化したイオン数密度のプロファイル（上）と上流の背景磁場の強さ B_0 で規格化した磁場の各方向成分（下）： B_x （青）、 B_y （赤）、 B_z （緑）、および大きさ $|B|$ （黒点線）。遷移層内での密度の急速な増加と磁場の生成がわかる。また、磁場は背景磁場を圧縮した成分 (B_y) よりも Weibel 不安定性に起因する成分 (B_x 、 B_z) のほうが卓越する。

ディスカッション

すでに述べたように、シミュレーションでは現実よりも小さいイオン質量 (m_i) を用い、初期のプラズマの速度 (V) も現実よりも大きい。これがシミュレーションの結果に大きな影響を与えるかについて簡単な考察をする。上記のシミュレーション結果からわかるように、今回の設定では、衝撃波は主に磁場によって構造が作られる。遷移層付近の磁場は、大きく分けて2つの起源があり、1つは上流の背景磁場を圧縮してできるもの、もう一つは、遷移層での Weibel 型の不安定性により作られるものである。それぞれの特徴的なタイムスケールは、イオンサイクロトロン時間 $T_g \propto \omega_{ci}^{-1}$ と Weibel 不安定性の成長時間 $T_W \propto (\omega_{pi} V)^{-1}$ である。ここで ω_{pi} はイオンのプラズマ振動数である。ここで、もし σ パラメータを一定にする条件の下で m_i 、 V 、 B を変化させると、この2つのタイムスケールは同じ依存性で変化することがわかる。

$$T_g \propto T_W \propto m_i/B. \quad (4)$$

従って、2つのタイムスケールの比は、同じ σ であれば同じであり、言い換えれば、 m_i 、 V 、 B が異なっても σ が同じであれば、衝撃波の構造も大きくは変わらないと考えられる。

現在の大型の高出力レーザー実験装置を用いると、 $\sim 1000 \text{ km s}^{-1}$ 程度の速度を持つプラズマ流を生成することが可能である。従って、もし磁化されたプラズマをこの速度で生成できれば、それを何かにぶつけることでここで述べたような衝撃波の実験的再現が可能である。例として、プラズマの数密度が $n_{e0} = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ で流速が $V = 1000 \text{ km s}^{-1}$ の場合の、ある σ に対して必要な実際の磁場の強度を、イオンのサイクロトロン時間とジャイロ半径とともに、表1に挙げてある。多くのレーザー実験で使用可能な磁場の強さは 10^5 G 以下であり、実験領域のサイズは数ミリ以下であるため、 $\sigma = 10^{-3}$ または $\sigma = 10^{-4}$ ぐらいのパラメータが最も実験がしやすいと考えられる。

Table 1 プラズマの数密度が $n_{e0} = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ で流速が 1000 km s^{-1} の場合の、 σ パラメータと、対応する磁場の強さ B_0 、イオンのサイクロトロン時間 T_g 、イオンジャイロ半径 r_g の関係。ここで、イオンの質量は陽子質量 $1836m_e$ で計算している。

σ	B_0 (G)	T_g (s)	r_g (m)
10^{-2}	4.6×10^5	1.4×10^{-9}	2.3×10^{-4}
10^{-3}	1.4×10^5	4.7×10^{-9}	7.3×10^{-4}
10^{-4}	4.6×10^4	1.4×10^{-8}	2.3×10^{-3}
10^{-5}	1.4×10^4	4.7×10^{-8}	7.3×10^{-3}

結論

我々は2次元の電磁粒子シミュレーションを行い弱い背景磁場を持つ電子・イオンプラズマ中の無衝突衝撃波について調べた。ここでは $\sigma = 10^{-5}$ の場合について述べたが、遷移層の上流側に Weibel 型不安定性による電流フィラメントが多数でき、それが強い磁場を作ることがわかった。磁場の強さは背景磁場の圧縮により作られる磁場よりも強く、衝撃波の構造に重要な寄与をする。従来の1次元シミュレーションでは系の対称性から Weibel 型不安定性の効果を取り入れることができないため、フィラメント状磁場の生成は大規模な2次元シミュレーションで初めて調べることが可能になったと言える。

謝辞

本研究は科研費（若手研究 B（加藤）：20740136）の助成を受けたものである。数値シミュレーションの実行には、大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータ SX9 を使用させていただいた。

REFERENCES

- [1] Taylor, R. J., Baker, D. R., & Ikezi, H. 1970, Phys. Rev. Lett., 24, 206
- [2] Cohn, D. B., & MacKenzie, K. R. 1972, Phys. Rev. Lett., 28, 656
- [3] Ikezi, H., Kamimura, T., Kako, M., & Longren, K. E. 1973, Phys. Fluids, 16, 2167
- [4] Takabe, H., et al. 2008, Plasma Phys. Control. Fusion, 50, 124057
- [5] Bell, A. R., Choi, P., Dangor, A. E., Willi, O., and Bassett, D. A. 1988, Phys. Rev. A, 38, 1363
- [6] Woolsey, N. C., et al. 2001, Phys. Plasmas, 8, 2439
- [7] Romagnani, L., et al. 2008, Phys. Rev. Lett., 101, 025004
- [8] Sakawa, Y., et al. 2008, J. Phys Conf. Series, 112, 042020
- [9] Koyama, K., Petre, R., Gotthelf, E. V., Hwang, U., Matura, M., Ozaki, M., & Holt, S. S. 1995, Nature, 378, 255
- [10] Bamba, A., Yamazaki, R., Yoshida, T., Terasawa, T., & Koyama, K. 2005, Astrophys. J., 621, 793
- [11] Kato, T. N. 2007, Astrophys. J., 668, 974
- [12] Spitkovsky, A. 2008, Astrophys. J. Lett., 673, L39
- [13] Weibel, E. S. 1959, Phys. Rev. Lett., 2, 83
- [14] Medvedev, M. V., & Loeb, A. 1999, Astrophys. J., 526, 697
- [15] Kato, T. N., & Takabe, H. 2008, Astrophys. J. Lett., 681, L93
- [16] Birdsall, C. K., & Langdon, A. B. 1991, Plasma Physics via Computer Simulation (IOP Publishing: Bristol).

「レーザー研利用者の体験談と講習会について」

福田 優子

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター

はじめに

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター（以下、レーザー研と略す）では、研究の初期から計算機シミュレーションが重要な役割を担っており、30年以上にわたる歴史があります。

ベクトル化や自動並列を駆使した SX9 を用いるような大規模シミュレーションだけでなく、MPI 並列プログラムを PCC クラスタで実行するなど多様な利用方法で研究を行っています。私自身は、運用管理をメインに行ってききましたが、レーザー研の利用者からいろいろな声を聞いていますので、この機会に、いくつか具体的な事例をご紹介します。講習会開催に関する苦労話も披露いたしますので、皆様からのご希望やご意見をいただけたら幸いです。

スパコン利用者体験談

レーザー研のスパコンなどを使った研究成果は、ホームページ[1]で公開していますので、ぜひご参照ください。MPI や HPF による並列プログラムの利用者もいますが、レーザー研の利用者は、ベクトル化と自動並列化を駆使し、自分でプログラミングして研究するというスタイルが主流となっています。ベクトル化と自動並列化は、素直なプログラミングで高速化が図れます。自分でプログラムを開発している多くの研究者から、プログラミング作業に過大な時間をとられることなく、効率よくプログラムの開発と研究が行え、サイバーメディアセンター（以下、CMC と略す）のスーパーコンピュータシステムは使いやすく、研究を効率よく進めることができるという声をよく聞きます。このような声は、なかなか届かないので、ぜひこの機会にお伝えしたいと思います。

スーパーコンピュータで大規模な計算をする多くの利用者は、計算そのものだけでなく、データの蓄積、解析、可視化にも苦勞しています。現在のシ

テムではトータル 1 PB ものディスクがあり、大規模シミュレーションの生データも長期間保存することができ、front 端末に導入された AVS や IDL を用いてデータを転送することなく解析・可視化を行うことができるので、非常に便利になりました。2008 年 10 月に開催されたスーパーコンピュータシンポジウムでも、CMC のシステムはディスク容量が大きいのが非常に素晴らしいという声が聞かれました。メモリが大きく、高速に計算できるようになれば、出力されるデータもどうしても大きくなり、ある程度の期間保存しておける領域は必須ですが、いくら容量が大きくなったといっても、無限の容量があるわけではありませんので、ひとりひとりの利用者が全体のシステムのことも考えて利用するということは、今後もぜひ心がけていただきたいと思います。

2005 年度に卒業した平尾俊幸君が残してくれた研究成果を図 1 に示します。

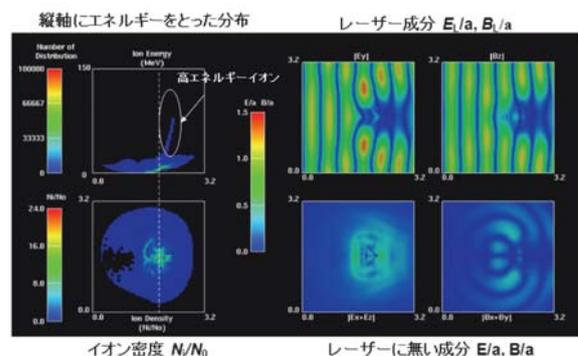


図 1 超高強度レーザーとクラスタの相互作用に関する研究成果（平尾俊幸提供）

メモリ 70GB、ベクトル演算率 99.4%、MPI による並列化を行い、当時の SX5 で 240 時間もの CPU 時間を必要としました。データ容量が大きいため、パラレル AVS (AVS-PCE) を用いた可視化をレーザー研で初めて行いました。当時は、データをレーザー研に転送してから可視化する必要があったために、シミュレーションデータを転送するのに時間も手間もかかっていました。当時の CMC のディスクは現在のよ

うに大きくはありませんでしたので、データ出力領域を限定する、単精度、あるいは、もっと精度の小さいデータに圧縮する、常にファイルを転送しては消すという作業をしながら研究をすすめる必要がありました。その前の SX4 の時代には、スーパーコンピュータなのだから、なんでもパソコンより速いと誤解した利用者が、スーパーコンピュータ上で compress コマンドを使って大量の大容量データを圧縮しようとして、システムに大きな負荷を与え、他の利用者に迷惑をかけたこともあります。また、大量のデータを手元のワークステーションに転送しようとしてレーザー研のネットワークを停止状態にさせてしまったなどの事例もありました。スーパーコンピュータで大規模なシミュレーションをしようとする方は、データの保存や解析に関する、その時点で最善の方法について、システム管理者とも相談していただきたいと希望しています。

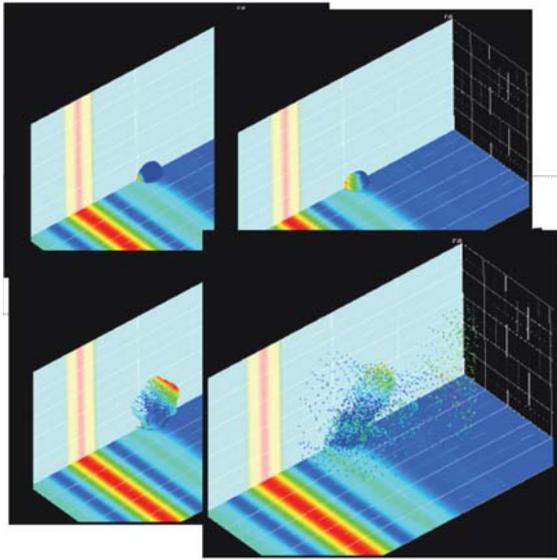


図2 3次元粒子シミュレーションの結果例
(松本拓也提供)

2007年1月のスーパーコンピュータシステムの更新により、ディスク容量も大きくなり、front 端末で AVS や IDL というソフトウェアが使えるようになったため、データ転送の苦勞がなくなり、便利になりました。2009年3月に卒業した松本拓也君は、データの転送では苦しみませんでした。データが大きくなったために可視化にどうしても時間がかかり苦勞したので、修士論文を書いたあとで、並列可視化 (AVS-PST) のためのサンプルデータと、このよう

な表示をしたかったというサンプルを残してくれました(図2)。KGT さんに協力いただき、並列 AVS-PST を用いたサンプルデータとして提供したいと考えていますので、興味のある方はご連絡ください。

2007年1月に SX8R のサービスが始まってすぐに当時、特任研究員だった沼波政倫氏(現核融合科学研究所)は、MPI だけでなく、HPF による並列プログラムの実行を行いました。ベクトル化率は、ほぼ100%で、250GB のメモリを使用して10時間程度の計算が必要でした。これも front 端末の AVS を利用して可視化したため、データ転送が不要で、大変便利にはなりましたが、シミュレーションデータを手動で可視化するのは効率が悪いので、定型的な可視化作業については、RCM システム[2]を用いた自動可視化の環境を構築しました[3]。可視化などの作業は、極力自動化したいという要望は強いですし、そのための環境も整いつつあるのですが、使いこなすためには、利用者自身も労力も時間もかける必要があります。ハードルが高いのも事実です。せっかくのノウハウがなかなか引き継げないという問題もあり、情報共有の仕組みの提供など、さらに検討したいと思っています。

レーザー研では、PCC クラスタで MPICH やインテル MPI を利用するだけでなく、CMC と共同して遠隔地にあるスーパーコンピュータをグリッド環境で実際に利用する研究も行ってきました[4]。GRID-MPI を用いた先進的な環境での経験は、実際の運用にも生かされ、CMC の PCC クラスタ環境の整備にも貢献してきたと考えています。現在では、ベクトル化に向かない大規模プログラムの複数の利用者が PCC クラスタで MPI プログラムを実行しています。

SX9 の C を用いた自動並列プログラムを開発した加藤氏と、SX9 の1ノードで500GB以上のメモリを利用するような大規模な自動並列のプログラムを開発した田口氏には、今年度のスーパーコンピュータシンポジウム[5]で発表していただくようお願いしてあります。ぜひ、こちらもご参加ください。

講習会について

ベクトル化と自動並列の基礎知識は、パソコンや

PCC クラスタなどで計算する場合にも知っておいて損はなく、レーザー研の学生には、一度は勉強することを強くお勧めしてきました。講習会を聞いただけで全て分かるということはありませんが、一度聞いておくと、イメージがつかめ、その後理解を深めていくことが多いようです。卒業した学生から、もっと学生のときに講習会を聞いておけばよかった、もっと勉強しておけばよかったと聞いたことが何度かあります。就職してしまうとなかなか時間もとれません。ぜひ、学生の中に講習会もご活用ください。

レーザー研では、例年、学生が配属される春と、大学院入試後の夏休み期間に講習会を開催してきました。2004年からサイバーメディアセンターと共催できるものは共催し、内容をさらに充実できるように努力しています。レーザー研固有の講習会情報も含めて公開していますので、ぜひ参考にしてください[6]。講習会をいつ実施するか、どのような内容で実施するかは、常に悩んでいます。講習会后、講義が始まるまでの夏休み期間に実際に試してみる時間がとれるので、8月末から9月上旬の時期がベストであると考えていますが、最近はこの期間に、インターンシップに参加する学生も現れ始めており、ますます開催時期が難しくなりつつあると感じています。希望されるみなさん全員の都合のよい時期に講習会を実施することは難しいので、何回か実施できるといいのですが、なかなか難しいのが実情です。CMC と協力して改善していきたいと考えています。みなさんいつがよいでしょうね？

今年からは、SuperComputing Contest[7]の経験の初心者むけテキストへの反映や、実際のチューニング事例を公開し、中上級者の方の講習会での紹介などをCMC 東田先生にお願いし、私自身もとても楽しみにしています。定員いっぱいになる前に、ぜひお早目にお申し込みください。

昨年までの講習会開催情報も[6]で公開していますので、参考にいただき、今年はどうなっているのですか？こんな講習会もしてほしい、この時期にも実施してほしいなどの希望を伝えていただくと、主催者側も大変元気になります。

さいごに

レーザー研の利用者の声は参考になりましたでしょうか。同じような苦勞をされている方の参考になり、みなさんと情報を共有するきっかけになれば、幸いです。

参考文献

- [1] スーパーコンピュータを用いた研究の紹介
<http://www.ile.osaka-u.ac.jp/research/cmp/research/research.html>
- [2] RCM システム
<http://www.i4s.co.jp/rcm/rcmabs.html>
- [3] 「Workflow, XML-DB 機能を有する Web ポータル型シミュレーション支援システム」西原功修他、SS2008
- [4] グリッド上で世界最大級の広域ベクトル型スーパーコンピュータ連携について
～大規模ベクトル計算クラウドも視野に
<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/news/news20090528.html>
- [5] スーパーコンピュータシンポジウム
<http://www.ile.osaka-u.ac.jp/research/cmp/cmc/ss2009/>
- [6] レーザー研の講習会情報
http://www.ile.osaka-u.ac.jp/research/cmp/kousyukai/kousyukai_keii.html
- [7] SuperComputing Contest
<http://www.gsic.titech.ac.jp/supercon/main/att/wiki/index.php?Supercomputing%20Contest>

スーパーコンピュータによる非圧縮流れの並列数値計算

吉田 尚史

信州大学 工学部 環境機能工学科

1. はじめに

私は大学院修士課程の研究テーマで流れの数値計算を始めて以来、非圧縮流れの数値計算の研究を行ってきました。初めて使ったスーパーコンピュータは FACOM VP200 で、演算性能は 500MFLOPS でした。大阪大学サイバーメディアセンターの SX-9 は VP200 の約 32,000 倍の理論性能を持っています。スーパーコンピュータの演算速度が対数スケールで高速化してきたのは、ハードウェアとソフトウェアの並列化技術の進歩によるもので、それにより大規模な流れの計算が可能になりました。しかしユーザにとっては、スーパーコンピュータの性能を十分に引き出す大規模高速計算が簡単にできるわけではありません。スーパーコンピュータのアーキテクチャと並列システムに合った並列計算法の使用やプログラミングを行うことが必要となります。

私はサイバーメディアセンターを 2008 年から利用しています。これまでにサイバーメディアセンターと NEC の協力をいただき、高速な並列計算を実現することができました。本稿はその過程を紹介し、これからスーパーコンピュータを使ってみたいと考えている方や、同じような問題に悩んでいるユーザの参考になれば幸いです。

2. 非圧縮流れの数値計算

非圧縮流れの支配方程式はナビエ・ストークス方程式と連続の式です。流れ場の代表速度と代表長さで無次元化したベクトル形の式は次式となります。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

式(1)(2)を時間について差分し、時刻 n の既知量から次の時刻 $n+1$ の速度・圧力を求める解法は、Fractional Step 法を使っています。既知の時刻から次式で中間速度 \mathbf{u}^* を計算します。

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \frac{3}{2}(\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n - \frac{1}{2}(\mathbf{u}^{n-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n-1} \\ = -\nabla P^n + \frac{1}{Re} \frac{\nabla^2 \mathbf{u}^* + \nabla^2 \mathbf{u}^n}{2} \end{aligned}$$

\mathbf{u}^* は連続の式(2)を満たさないので、時刻 $n+1$ で式(2)を満たすように次式で修正します。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla \phi \quad (3)$$

ここでスカラー関数 ϕ は圧力の時間変化量を表し、式(3)を連続の式(2)に代入して得られる ϕ のポアソン方程式を解いて求めます。

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (4)$$

このポアソン方程式を精度良く解くことが重要です。なぜなら ϕ の誤差から連続の式の誤差 $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} \neq 0$ が生じ、非圧縮条件が満たされなくなります。また、ポアソン方程式は楕円型であるため、 ϕ の誤差は流れ場全域に影響を及ぼします。実際の計算過程においてもポアソン方程式の計算が重要です。式(4)を空間について差分した連立一次方程式を解きます。係数行列は非対称規則的スパース行列です。この連立一次方程式の数値解法には反復解法を用います。ポアソン方程式の反復計算が全体の計算量の約 95% 程度を占めるため、ポアソン方程式計算の高速化が全体の計算量を減らす鍵となります。

3. 流れ場と計算時間の検討

計算対象の流れ場は図 1 の二次元乱流噴流です。直交座標系で、計算領域は $36 \times 26 \times 15$ 、計算格子点数は $451 \times 283 \times 150$ の約 1,915 万点です。

プログラムの計算時間の検討を行いました。計算時間の比較のポイントは、前節で述べた連立一次方程式の反復計算の計算速度です。以前から使用してきた反復解法プログラムと、SX-9 で利用できる科学技術数値計算ライブラリ ASL を使用した場合の計算時間を比較しました。従来からの反復解法は ILU 分

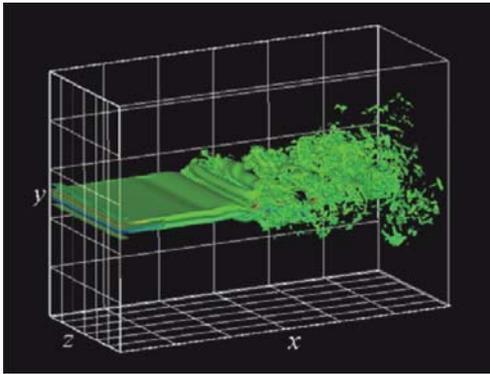


図1 二次元乱流噴流の渦度場

解付き Bi-CGSTAB 法でシングル CPU 用のプログラム (以下オリジナル版と呼びます) です。ASL のサブルーチンは、シングル CPU 版 PBCGSTAB 法の WET7SS と、並列処理版 BCGSTAB 法の QXE030 を用いました。SX-9 を使用して実測した 1 ステップ当たりの計算時間は、オリジナル版が 193 秒、WET7SS が 102 秒、そして QXE030 での 15CPU 並列処理が 455 秒でした。ASL の並列処理版が最も遅いという結果となりました。

4. プログラムの並列化

昨年 10 月に開催されたスーパーコンピュータシンポジウムにおいて、並列化の問題を発表する機会を得ました。前述の結果を報告しセンターと相談させていただきました。NEC に調査していただき、QXE030 は不規則行列用であるため規則行列の高速計算向きではないこと、規則行列用の WET7SS の並列化は行われないことが分かりました。そしてセンターと NEC にご協力をいただき、オリジナル版に対してチューニングと並列化を行えることとなりました。以下、チューニングと並列化の概要を述べます。

(1) ベクトル化の促進

コンパイラが自動ベクトル化できないが、ベクトル化可能であると分かっている DO ループに対し、コンパイラ指示行を挿入してベクトル化を行いました。

(2) ADB の活用

SX-9 には ADB (Assignable Data Buffer) と呼ばれる新しいバッファ機能があります。DO ループ内で繰り返しアクセスする配列を ADB 上に保持することで、その配列に高速にアクセスできるようになります。

ADB 機能が有効に使用できる DO ループにコンパイラ指示行を挿入してアクセス時間の短縮を行いました。

(3) 並列化

オリジナル版のプログラムはそのままで並列化が困難です。その理由は、ILU 分解における前進代入や後退代入計算で行列全体への大域的依存性があるからです。この前処理を並列化する方法として局所 ILU(0) 分解法を用いました。z 方向を領域分割し、分割境界で領域外の値の依存関係を無視します。そして自動並列化機能で各領域を並列処理するプログラムにしました。自動並列化は 1 ノード 16CPU 内に限られますが、MPI のようにプログラムを大幅に書き換える必要がありません。実行結果の proginf 情報から各 CPU の実行時間がほぼ均等となっていることが分かり、うまく並列化できたとと言えます。

作成したプログラムで長時間計算を行い、計算時間を比較しました。表 1 に 1 ステップ当たりの計算時間の比較を示します。並列版は z 方向格子点数 150 を割り切れる CPU 数を使用しました。倍率はオリジナル版に対する並列版の計算時間の比です。並列効果は並列版の 1CPU に対する倍率です。チューニングとノード内並列化によってオリジナル版に対し約 16 倍の高速化を図ることができました。

表 1. 計算時間の比較および並列効果

プログラム	CPU	時間(s)	倍率	並列効果
オリジナル	1	147.2	-	
並列	1	84.4	1.7	-
並列	5	20.6	7.1	4.1
並列	10	17.8	8.2	4.7
並列	15	9.4	15.7	9.0

5. おわりに

作成した並列計算プログラムを使用して SX-9 の性能を有効に利用し様々な流れの大規模計算を行っていく予定です。チューニングと並列化の詳細はサイバーメディアセンターの Web で公開されますので、そちらをご参照ください。最後に、ご協力をいただきました大阪大学サイバーメディアセンターと NEC の関係者の皆様に深く感謝いたします。

「ユーザーからみた CMC スーパーコンピューターシステム」

駒 美保

沼津工業高等専門学校

私は、2002 年頃から大阪大学核物理研究センターの共同利用という形で大規模計算機システムのスーパーコンピュータ用いて格子 QCD シミュレーションに基づくハドロン物理の研究をしています。研究の中身については 2007 年の計算機利用ニュース第 5 号で紹介させていただいたので、本稿では私がこのシステムをどのように使ってきたかということをおまえて、ユーザーの立場から見た本計算機システムの利点、今後のシステムへの要望を述べさせていただきます。

私にとって本システムの特長は「ベクトルパラレルコンピュータ SX を含むシステム」であることと「マシントイムの事前申請・研究内容の審査がなく、フェアシェアジョブスケジューリングシステムで運用されているシステム」であることです。私が利用していた他の計算機センターの中には、毎年研究計画と業績リストを添えて CPU 時間を申請し、審査の後に合計 CPU 時間と 1 ヶ月ごとの CPU 時間が割り当てられる、という手順を踏んでようやく計算が始められる、というようなところもありました。そのときには計算を進めたいときに月の割当 CPU 時間を使いきってしまっていたり、一方コードに不具合が見つかって計算が進められず CPU 時間を無駄にしてしまったり、というようなことが往々にしてありました。本システムの場合には、そのように月ごとの CPU 時間を気にする必要がないので研究の進捗状況に応じて CPU を使うことができます。スケジューリングシステムも、高い稼働率を保ちつつも過度に待たされることなくジョブが走ってくれるのでよく機能していると思います。また、研究内容の事前審査がないということで、書類作成の負担がなく、自由な発想で研究を進められる非常に使いやすいシステムです。

しかし、CPU 時間や研究内容の事前審査がないということは、研究者の側に計算機を効率よく使う

努力をする責任がある、ということだと思います。つまり、ユーザーは魅力ある研究テーマを選択し、きちんと結果を出して成果報告をすると同時に、限られた CPU 資源を有効利用するために、ある程度の時間を割いて計算コードの最適化にも取り組む必要があります。一方この最適化という作業は一旦始めると際限がなく、どこまでやれば良いかの見極めが難しいです。もし、センターの側から 1CPU あたりの演算性能・ベクトル化率・同時 CPU 実行時間の経過時間に対する割合など、計算コードのパフォーマンスに対しての努力目標か、全実行ジョブに対するこれらの数値の平均値などを出してもらえれば、自分のコードに更なる最適化が必要か、またどの程度の時間と労力を割くべきかを判断する良い目安になると思います。

現在は、SX のような比較的少数の高価なベクトルプロセッサを用いるマシンより数万の単位で並列化された汎用プロセッサを持つクラスタ型のマシンの方が高速計算機の主流になっているようです。しかし、コードの最適化手法とプロセッサの構造は密接に関連しているため、一般に SX で高パフォーマンスを示すように最適化されたコードはそのままクラスタ型マシンで高速に実行できる訳ではありません。一方、基本構造が同じであれば、更新された計算機でも、過去に最適化したコードで最初からそれなりのパフォーマンスを出すことができます。従って、いろいろ流行はあると思いますが、現在のコードを活かし、過去のチューニングの努力を無駄にしないために、計算機システムの根幹部分はなるべく変更しないでほしいと思います。

私は、本システムは、研究者の立場から見て非常に使いやすいシステムだと思います。ですから、このシステムのユーザーに求められる責任を忘れずに、今後も現在のような運用体制を維持してもらえよう、ユーザーとして努力していきたいと思っています。

Hot gluons and strings inside SX-8 supercomputer

Maxim Chernodub

Laboratoire de Mathématiques et Physique Théorique, UMR CNRS 6083,

Université de Tours, Parc de Grandmont, 37200, Tours, France

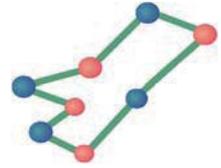
In recent years research on very hot and superdense quark-gluon plasma became a major development in the theory of strong interactions, Quantum Chromodynamics. This very exotic form of matter is likely to be formed in heavy ion collisions at Relativistic Heavy Ion Collider in Brookhaven, USA. In forthcoming years other powerful experiments will join the international race towards new discoveries in physics of the plasma. These are ALICE experiment at the Large Hadron Collider in CERN (located at the boarder between France and Switzerland), Facility for Antiproton and Ion Research experiment at GSI (Darmstadt, Germany), and Nuclotron-based Ion Collider facility (Dubna, Russia).

The quark-gluon plasma is a state of matter which existed in the very early Universe when our World was just hundreds microseconds old. The experiments show that this state of matter has unexpected properties. For example, the plasma turns out to be a perfect liquid rather than a weakly interacting gas of quarks and gluons.

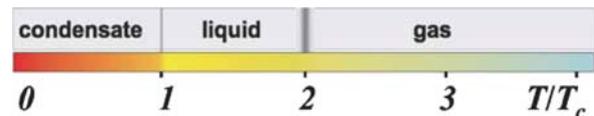
The plasma can be studied directly, at heavy ion accelerators, and indirectly, via numerical simulations using modern computer facilities. It is difficult to overestimate significance of numerical simulations for the plasma research. The total costs (building, running, maintaining, and analyzing the data) of the real experimental facilities are many orders of magnitude higher compared to the costs of numerical lattice simulations. On the other hand both approaches provide important and valuable information about the properties of this exotic state of matter.

Computer simulations at SX-8 supercomputer at RCNP have revealed that the quark-gluon plasma

contains monopole-like and vortex-like magnetic objects made of gluons. These gluomagnetic objects (which are of a topological nature)



form chains: the monopoles and antimonopoles are connected to each other by the vortex segments (as illustrated in the Figure above). The magnetic defects may exist in various forms depending on the temperature T of the system, as shown in the Figure below (the temperature is given in units of the critical temperature $T_c \approx 170$ MegaElectronVolt $\approx 2\,000\,000\,000\,000$ Kelvin corresponding to the deconfinement transition).



The computer simulations show that the magnetic defects provide a large contribution to the energy density and pressure of the gluon plasma[1]. The thermodynamical significance of the magnetic objects indicates that the quark-gluon plasma contains a developed network of the magnetic flux tubes.

Although our understanding of the strongly interacting plasma is getting much better, many mysteries – mostly related to exotic transport properties of the plasma – still remain unsolved. The research using the supercomputer will provide further valuable developments to resolve these mysteries.

[1] M. N. Chernodub, Atsushi Nakamura, V. I. Zakharov, Phys.Rev.D78, 074021 (2008); M.N. Chernodub, Katsuya Ishiguro, Atsushi Nakamura, Toru Sekido, Tuneo Suzuki, V.I. Zakharov, Proceedings of Science LAT2007, 174 (2007).

「RCNP 大型計算機を用いた 超変形 ^{40}Ca における 8 重極振動モードの研究」

小笠原 弘道

大阪府立工業高等専門学校

研究の概要と手法

私は、角運動量が大きくなると原子核の状態がどのように変化するか、それは微視的に（核子の自由度から）はどのように理解できるか、といったことに興味を持っています。その観点から、原子核が高速回転したときに現れる（かも知れない）これまでに知られていない状態への相転移の前駆現象（ソフトモード）になり得る、振動励起モードの探求を研究テーマとしています。

研究の手法としては平均場近似に基づいたものですが、近年実験データが増えてきている不安定核も研究の対象にしたいと考えているため、平均場中の核子の運動を記述する Schrödinger 方程式を実空間の座標を離散化した表示で解くようにしています。このようにすることにより、Fermi 面が散乱状態への閾値に近い不安定核において重要になる、散乱状態にある核子も取り扱えるようになります。また、軸対称でない形状を持った状態や形状が軸対称であっても回転運動によって軸対称性が破られた状態を扱うため、実空間の座標として 3 次元の直交座標を用いています。この 3 次元実空間座標表示による計算は、軸対称性を仮定した実空間座標表示による計算や調和振動子基底を用いた計算に比べて計算量が格段に多くなります。このような計算においては、多数の格子点について足し上げるような手順が多くなっており、RCNP のベクトル型計算機が大きな威力を発揮してくれます。また、後に具体的にご紹介するような、原子核の角速度を少しずつ変化させていったときに振動モードの性質がどのように変わっていくかといったことを調べる場合には、計算量はさらに多くなりますが、1 度に多くの計算資源を使うことができる RCNP の計算機システムによって、このような大規模な計算が現実的な時間で実行できるようになっています。

以下では、私がこれまでに行ってきた研究の一つをご紹介します。

高速回転する超変形 ^{40}Ca における 8 重極振動モード

2001 年に、 ^{40}Ca において、長軸と短軸の比が約 1:2 のレモン形の状態である超変形状態およびそれらがいろいろな角運動量で回転した状態からなる超変形回転バンドが発見されました。私は、この ^{40}Ca の超変形回転バンドの上に 8 重極振動モードと呼ばれる振動モードが励起するか、励起すればそれはどのような性質を持つか、ということの数値計算に基づいて調べました。8 重極振動モードとは、原子核が洋梨形やバナナ形などの空間反転に関して非対称な形に揺らぐ奇パリティの振動モードであり、これがソフト化すれば洋梨形やバナナ形などの変った形状をもった状態が現れる可能性があります。

RCNP の大型計算機による大規模な計算とその結果の分析により、次のことが分かりました。

回転していない超変形 ^{40}Ca にはいくつかの奇パリティ振動モードが励起します。その中の一つで比較的高いエネルギーを持った 1 粒子・1 空孔的な励起モードは Coriolis 力に敏感であるという性質を持っており、超変形 ^{40}Ca が回転するとその励起エネルギーを減少させます。これにより、このモードは、低エネルギー領域にあった集団的な 8 重極振動モードと準位混合し、集団的な振動モードになります。この励起エネルギーの減少と集団性の増大が振動モードのソフト化を示しています。この振動モードはバナナ形の成分をある程度もっており、そのソフト化の先に空間反転対称性と軸対称性を同時に破った形状を持つ状態が現れる可能性を示しています。これはエキゾチック変形状態と呼ばれ、これまでにどの原子核においても観測されていない状態です。

「原子核の様々な構造の共存」

谷口 億宇

理化学研究所 仁科加速器研究センター 原子核理論研究室

はじめに

私の専門は原子核構造論で、主に原子核にエネルギーを与えたときの構造変化について理論的に研究しています。通常の卓上計算機では遂行困難な大規模な計算が必要であるため、RCNP スーパーコンピュータなどを利用して研究を進めています。

RCNP スーパーコンピュータを用いた成果として、 ^{40}Ca の研究を紹介し、その後に使用した感想などを述べます。

研究成果

1. 原子核の構造変化

原子核は、原子から電子を剥ぎ取ったもので、数個～数百個の陽子と中性子から構成されています。中学校の理科の教科書でも記述がありますので、ご存知の方も多いと思います。

原子核はエネルギーや角運動量(回転の勢い)により、様々な構造が変化します。例えば、基底状態(最も安定な状態)では球形であった原子核でも、わずかのエネルギーを与えただけで、超変形状態と呼ばれる長軸と短軸の長さの比が2:1ほどになるような劇的な構造変化を起こしたりします。

2. ^{40}Ca の低エネルギー状態の構造

^{40}Ca は、基底状態は球形ですが、低エネルギー状態に、通常変形回転帯と超変形回転帯の2つの変形回転帯(変形し、それが回転することにより現れる状態群)が存在することが実験的に知られていました。また、そのうちの通常変形回転帯は α (^4He 原子核)と ^{36}Ar がくっついたような構造をしているという研究や、非軸対称変形をしているという研究がありましたが、それらを統一的に扱った研究はありませんでした。私たちは、それらの構造や、さらには超変形状態までも統一的に理解することを目的に研究をすすめました。

研究の結果、通常変形回転帯は非軸対称変形構造と α - ^{36}Ar 構造の2面性があることがわかりました。また、同様の2面性は超変形状態にも現れることがわかりました。四重極電気遷移強度(エネルギーが与えられた原子核から発せられる電磁波の強さで、変形の指標ともなる)は実験値とよく一致しました。これらの成果は国際誌に論文発表しました。計算の多くはRCNP スーパーコンピュータを用いて遂行しました。

感想と要望

RCNP スーパーコンピュータでは NEC の SX シリーズが採用されています。SX シリーズはベクトル計算機であり、特徴として高速化が容易であることが挙げられます。自動ベクトル化機能などにより、ソースコードをわずかにチューニングするだけで高速計算されます。それにより、プログラム開発の時間を削減でき、計算結果の解釈などの「物理」に力を注ぐことが出来ます。

また、門戸が広く開かれているというのも特筆すべき点です。使用申請は簡単で、審査も迅速に行っていただけます。これは学生などがスーパーコンピュータの使い方を学ぶ上でも重要なことです。これからも、このような運用を続けることを要望致します。

第 14 回 コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD®) ワークショップについて

大阪大学大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻

岸浩史, 中西寛, 笠井秀明

1. はじめに

理論物性学すなわち、「マテリアルの特性を自然界の第一原理である量子力学を用いて理論的に予測する学問領域」は、近年、情報技術の進歩とともに発展し、基礎科学研究や、様々な工学的応用開発プロジェクトにおいて重要な役割を果たしている。現在、理論物性学、およびその応用、副次的波及分野は、広大な学問分野（材料科学、コンピュータサイエンス、化学、生物学、医学、薬学等）を包含するに到っている。

理論物性学によるマテリアルの研究は、その正確さと信頼性の向上により、これまで産業界で行われてきた経験的、実験的研究に置き換わりつつある。コンピュータの量的な進歩は、理論物性学に質的な飛躍を生み、より現実系のシミュレーションが可能となりつつある。このトレンドは、今後も続くと考えられ、益々拡大することが予想される。産業界での活躍の場として、特にエレクトロニクス・デバイス、化学合成、製薬等の部門が挙げられる。その他多くの分野でも、環境高負荷型の経験にもとづく実験的手法は、理論物理学的手法に置き換わり、開発スピードを加速していく。

しかし、新たな研究手法が創出され、急速に発展しているにも関わらず、現在なお、大学および諸研究機関で研究者がチャレンジすべき多くの問題が山積している。これまでの経験的な組み合わせ論的新素材開発手法のみ

では、新しい知見に到達するまでの研究の効率化と省資源化・環境調和性の実現についての総合的検討の現代の必要性に対処が難しく、また、理論的な研究開発手法のみでは、研究者の予め想定した仮設の中でしか現象を解釈されず、仮説の枠組みから外れた事象は捨象されてしまう可能性がある。国家プロジェクトとして次世代スパコンが開発されている現在、巷では計算科学の統合が叫ばれているが、そのためには真の意味で、理論と実験の研究分野の枠を超えた協調が必要である。

我々研究グループは、このような状況においてブレークスルーとなり得る研究手法であるコンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD®)を提唱してきた。このコンピュータショナル・マテリアルズ・デザインとは、実験値や経験的パラメータに依存しない信頼性の高い量子シミュレーションを援用することで原子スケールの観点から現実の物質の持つ物性を解析し、その解析結果を、実証実験を行う研究分野にフィードバックするというスタイルをとることで、理論的手法と実験的手法を有機的に結合し、新物質・新デバイスの研究開発を進める研究手法である。次節では、このコンピュータショナル・マテリアルズ・デザインについて紹介する。

2. コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン

まず、コンピュータショナル・マテリアル

ズ・デザインに用いられる計算手法の主幹を成す第一原理計算について簡単に紹介する。この計算手法は、密度汎関数理論に基盤を置いており、実験値や経験的パラメータに頼らない物性予測が可能となる。第一原理計算手法の開発と、最近の計算機性能の飛躍的な発展により、量子力学に基づいたコンピューショナル・マテリアルズ・デザインが現実性を増しており、このコンピューショナル・マテリアルズ・デザインを用いた知的設計手法の産業への応用展開が期待されている。特に、コンピューショナル・マテリアルズ・デザインを用いた先行的特許出願についてもその戦力的重要性が高まるものと期待されている。

しかし、第一原理計算に基づくシミュレーションにより得られる知見は、与えられた物質の構造に対して、その物性を解析・評価するのみであり、未知の物質の物性を解析し、望む物性を持つ物質のデザインを自発的に発見するまでには至らない。そこで提唱されるのがコンピューショナル・マテリアルズ・デザイン・エンジンをを用いた研究手法である。

(図1参照)。

コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン・エンジンは3つの主要部分から構成されている。量子シミュレーション、物理機構の演繹、仮想物質の推論である。ここではまず、望む物性をもつ候補となる物質を構築し、その構造に基づいてシミュレーションを行う。その計算結果から仮想物質が持つ物性やその発現機構を定量的に評価する。そして、その定量的評価に基づいて、より望ましい物性を発現するであろう仮想物質を推論し、その仮想物質が望む物性をもつかどうかを検証するために再度シミュレーションを行う。ここで望む物性が得られていない場合は、不発現機構を演繹し、再度、リファイルして仮想物質を推論する。というように、これまでの処理を再帰的に行うことによってより望ましい物質に仮想物質を近づけていく。このような、シミュレーションに基盤をおく新規物質の開発は、実際に物質を製造する実験的なアプローチに比べ、設備投資等のコストを計算コストに置き換えることができるといった点で優れていると考えられる。さらにこれらの計算

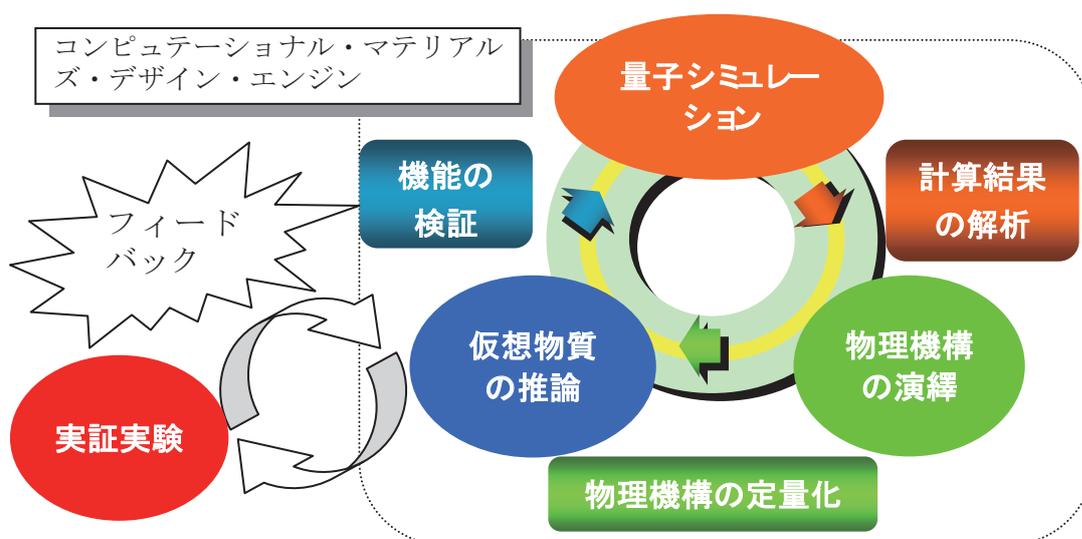


図1 コンピューショナル・マテリアルズ・デザインの概要図

から得られた解析結果を、実証実験を行う研究分野にフィードバックすることで、より実現可能性の高い新物質・新デバイスの研究開発を行うことが出来る。

また、我々はこういったコンピューショナル・マテリアルズ・デザインを提唱するとともに、物質の諸特性やダイナミクスの理論的研究分野で活躍する研究者養成も積極的に進めている。その一例がコンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップである。我々は、平成 14 年度から春と秋、年 2 回の割合で開催してきた。次節では当該ワークショップの趣旨と、2009 年 3 月 2 日 (月) から 3 月 6 日 (金) に開催された第 14 回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップについて記載する。

3. コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップ

このワークショップは、コンピューショナル・マテリアルズ・デザインの可能性を展望するとともに、その基本となる最先端の計

算手法を学び、実際にマテリアルズ・デザインを体験することにより、物質科学の新しいパラダイムに対応できる基礎能力をつけることを目的として開催しているチュートリアルを主とするワークショップである。

基礎コース、専門コース、先端コースと学習レベルに応じた 3 つのコースを設けており、基礎コースでは第一原理計算の基礎理論講義、第一原理計算入門実習を行う。専門コースでは、コンピューショナル・マテリアルズ・デザインの実習 (複数種類のコードから希望するコードを選択して実習) を行う。先端コースでは、コンピューショナル・マテリアルズ・デザインの実践研究を行う。さらに、全コースにおいて、コンピューショナル・マテリアルズ・デザインの先端事例講義を受講することで、実際の産業応用例等について学ぶ。これまでの受講生はのべ 600 人におよび、学生だけでなく大学教員、独立行政法人研究所や特殊法人研究所、民間企業に勤務する研究者の方にも参加頂いている。

第 14 回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップは、



図 2 第 14 回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップ記念撮影

大阪大学豊中キャンパスのサイバーメディアセンター(CMC)で実施した。受講生が用いる端末には、通常 PC クラスタとして使用している教室端末 (Express5800/56Xd×464 ノード, 総演算性能: 17.2TFLOPS, 総メモリ: 0.9TB, Xeon 2.33GHz (Woodcrest), Dual Core) を用い、教室別に 40 台, 30 台, 16 台の合計 86 台を利用した。計算を実装する計算機には、PC クラスタ (Express5800/120Rg-1×128 ノード, 総演算性能: 6TFLOPS, 総メモリ: 2TB, Xeon 3GHz (Woodcrest), Dual Core) の内、5 ノード(20CPU)を占有ノードとして利用し、必要に応じて、それ以外のノードも用いた。計算コードとしては、コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイングループが展開する CMD®-Pack から、「Naniwa, Machikaneyama, ABCAP, ES-opt, State-Senri, RSPACE, OSAKA2K, HiLAPW」といった計算コードの実習等を通じて、各々特徴にあった計算を体験して頂いた。また、CMD 計算コードの権利保有者が設定する計算コードの 利用条件にしたがって利用者が利用できるような双方に利便性がある学術情報・流通システムである「計算機マテリアルデザイン・コピーマート」の講義を通じて、集積された知的資産を内外の研究者が利用・活用できるシステムについて学習してもらった。

ワークショップは 5 日間、密度の濃い時間割で進み、なおかつ夜間の講義もあるハードスケジュールであったにも関わらず、受講生の講義に対する熱心な姿勢や講師・チューターと交わされる白熱したディスカッションから、当該ワークショップに対する期待の大きさが窺い知ることができた。

幸いにして、事後のアンケートにおいても

「非常にレベルの高い研究成果に触れる事ができ、勉強になりました。」や「今回で 4 回目の受講になります。しっかり勉強させて頂きました。大変有難うございました。」等のご意見を頂くことができた。今後もこのワークショップが理論物性学の正しい理解と、その役割を社会にアピールする役割を担い、途切れなく続くことを願ってやまない。

4. 最後に

今回、第 14 回コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップを CMC で開催するに際して、会場や各施設の手配から実習のための計算機・端末機器の調整等まで気持ちよくご対応頂きました、大阪大学サイバーメディアセンターのご担当者の方々に厚く御礼申し上げます。

またこの報告により皆様が、コンピュータショナル・マテリアルズ・デザインや大阪大学サイバーメディアセンターの利用に対し、興味を持って頂けたら、コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン関係者の大きな喜びである。この分野の研究者が更に増え、活発な議論が進むことは願ってもないことであり、更なる発展を遂げるためにも多くの研究者が本研究分野に参加されることを期待している。

参考文献

笠井秀明, 赤井久純, 吉田博編「計算機マテリアルデザイン入門」大阪大学出版会

センター報告

・2008年度大規模計算機システム利用者論文、研究成果一覧	-----	23
・平成20年度大阪大学近藤賞受賞	-----	32
・大規模計算機システム Q&A・LINK集	-----	33
・平成21年度大規模計算機システム利用相談員・指導員名簿	-----	35
・平成21年度大規模計算機システム利用相談員・指導員自己紹介	-----	36

2008年度大規模計算機システム利用論文、研究成果一覧

この論文、研究成果等一覧は、本センター大規模計算機システムを利用して2008年4月から2009年3月までに得られた研究成果等について、利用者から報告されたものを一覧として掲載しています。

1 学術雑誌掲載論文

- [1] T. Johzaki, Y. Nakao, K. Mima: “Implosion and Core Heating Requirements in Sub-Ignition Experiments FIREX-I”, *Physics of Plasmas*, Vol.15 , No.6, pp. 062702-1-7, 2008.
- [2] N. J. Turner, T. Sano: “Dead Zone Accretion Flows in Protostellar Disks”, *Astrophysical Journal*, Vol. 679, Issue 2, L131-L134, 2008.
- [3] Tien Quang Nguyen, Mary Clare Sison Escan~o, Reiko Tanaka, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “The adsorption of NO on various metal tape-porphyrins: A first principles study”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 77, 14706, 2008.
- [4] Mary Clare Sison Escan~o, Tien Quang Nguyen, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “Bonding of Pt/Fe overlayer and its effects on atomic oxygen chemisorption from density functional theory study”, *Surface Science*, 602, 3415, 2008.
- [5] Mary Clare Sison Escan~o, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “Pt monolayer on Fe(001) as an alternative cathode catalyst: a first principles study”, *Surface and Interface Analysis*, 40, 1085, 2008.
- [6] Mohammad Kemal Agusta, Melanie David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “SO₂ reaction on Cu(100): SO₃ structure and formation -Density Functional Theory Investigation-”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 77, 84601, 2008.
- [7] Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “Coadsorbed H and CO interaction on platinum”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 10, 6052, 2008.
- [8] Emi Minamitani, Robert Roleda, Wilson Agerico Din~o, Tomoya Kishi, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “Effect of change in number of conduction electrons on the spin configuration in transition metal oxides”, *Surface and Interface Analysis*, 40, 1078, 2008.
- [9] Hirofumi Kishi, Nobuki Ozawa, Melanie Y. David, Tanglaw A. Roman, Nelson B. Arboleda Jr. , Wilson A. T. Din~o, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Fumiyoshi Takano, Hisashi Shima, Hiro Akinaga: “Density functional theory based evaluations of the reactive ion etching process model for TiO₂(anatase) thin film”, *Journal of the Vacuum Society of Japan*, 51, 63, 2008.
- [10] Tien Quang Nguyen, Mary Clare Sison Escan~o, Nobuaki Shimoji, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “DFT study on the adsorption of NO on iron tape-porphyrin”, *Surface and Interface Analysis*, 40, 1082, 2008.
- [11] Eben Sy Dy, Hideaki Kasai, Carl Redshaw: “Mounting a Hydrogenase Analogue on Calixarenes--Designing a Nature-Inspired Solid State Catalyst for Fuel Cells by Density Functional Theory”, *Surface and Interface Analysis*, 40, 1092, 2008.
- [12] Koichiro Kasai, Joaquin Lorenzo Valmorina Moreno, David Melanie Yadao, Abdulla Ali Abdulla Sarhan, Nobuaki Shimoji, Hideaki Kasai: “First Principles study of electric and magnetic properties of 3d transition metal filled single-walled carbon nanotubes”, *Japanese Journal of Applied Physics*, 47, 2317, 2008.
- [13] Nobuki Ozawa, Nelson Buntimil Arboleda Jr., Hiroshi Nakanishi, Nobuaki Shimoji, Hideaki Kasai: “Adsorption and diffusion property of a hydrogen atom on a Pd₃Ag(111)”, *Surface and Interface Analysis*, 40, 1108, 2008.
- [14] Melanie David, Koichiro Kasai, Joaquin Lorenzo Moreno, Hideaki Kasai: “Understanding the bond-making and bond-breaking of Fe-filled SWNT on Ni(111)”, *Surface and Interface Analysis*, 40, 1098, 2008.
- [15] Nelson Buntimil Arboleda Jr., Hideaki Kasai: “Potential Energy Surfaces for H₂ Dissociative Adsorption on Pt(111) Surface - Effects of Vacancies”, *Surface and Interface Analysis*, 40,

- [16] Yoshiyuki Kubota, Mary Clare Sison Escano, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “Electronic Structure of LiSi”, *Journal of Alloys and Compounds*, 458, 151, 2008.
- [17] Nobuki Ozawa, Nelson Buntimil Arboleda Jr., Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “First principles study of hydrogen atom adsorption and diffusion on Pd₃Ag(111) surface and in its subsurface”, *Surface Science*, 602, 859, 2008.
- [18] Nobuki Ozawa, Tanglaw Roman, Melanie David, Hirofumi Kishi and Hideaki Kasai: “Modeling the reactive ion etching process for the CoO(001) surface via first principles calculations”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20, 355006, 2008.
- [19] Tien Quang Nguyen, Mary Clare Sison Escano, Nobuaki Shimoji, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai: “Adsorption of diatomic molecules on iron tape-porphyrin: A comparative study”, *Physical Review B*, 77, 195307, 2008.
- [20] 原口 亮, 芦原 貴司, 藤堂 貴弘, 難波 経豊, 村上 慎吾, 倉智 嘉久, 中沢 一雄: “3次元心室壁モデルにおけるスパイラルリエントリーの in silico フィラメント動態解析 -致死的不整脈防御機構としての心室較差の電気生理学的意-, ” *生体医工学*, 46(6), pp.660-666, 2008.
- [21] 芦原貴司: “臨床応用を見据えた心臓不整脈のシミュレーション”, *日本医用画像工学会誌 (MIT)*, 26, pp.93-98, 2008.
- [22] Y. Gohda and A. Oshiyama: “Intrinsic ferromagnetism due to cation vacancies in Gd-doped GaN: First-principles calculations”, *Phys. Rev. B* 78, 161201 (R), 2008
- [23] Y. Fujimoto, T. Koretsune, S. Saito, T. Miyake, and A. Oshiyama: “ A new crystalline phase of four-fold coordinated silicon and germanium”, *New Journal of Physics* 10, 083001, 2008.
- [24] S. Okada: “ Energetics of carbon peapods: radial deformation of nanotubes and aggregation of encapsulated C₆₀”, *Phys. Rev. B* 77, 235419, 2008.
- [25] S. Berber and A. Oshiyama: “Atomic and electronic structures of divacancy in carbon nanotubes”, *Phys. Rev. B* 77, 165405, 2008.
- [26] J.-I. Iwata, K. Shiraishi and A. Oshiyama: “ Large-Scale density-functional calculations on Si divacancies”, *Phys. Rev. B* 77, 115208, 2008.
- [27] K. Takai, K. Shiraishi and A. Oshiyama: “Ge vacancies at Ge/Si interfaces: stress enhanced pairing distortion”, *Phys. Rev. B* 77, 045308, 2008.
- [28] S. Okada: “Energetics of nanoscale graphene ribbons: “Edge geometries and electronic structures”, *Phys. Rev. B*, 77, 041408(R), 2008.
- [29] Takuya Tsuji, Akihito Ito, Toshitsugu Tanaka: “Multi-scale characteristics of clustering particles”, *__Powder Technology*, Vol. 179, pp.115-125, 2008.
- [30] Takuya Tsuji, Keizo Yabumoto, Toshitsugu Tanaka: “Spontaneous structures in three-dimensional bubbling gas-fluidized bed by parallel DEM-CFD coupling simulation”, *Powder Technology*, Vol. 184, pp.132-140, 2008.
- [31] D. Matsunaka and Y. Shibutani: “Electronic states and adhesion properties at metal/MgO incoherent interfaces: First-principles calculations”, *Physical Review B*, Vol. 77, No.2, pp. 165435-1-6, Apr. 2008.
- [32] Kohji Machitani, Hidefumi Sakamoto, Yoshio Nakahara, Keiichi Kimura: “Syntheses of Tetraazacrown Ethers Bearing a Spirobenzopyran and Three Carboxymethyl Moieties and Their Metal-ion Complexing Behavior”, *Analytical Sciences*, Vol.24, No.4, pp.463-469, Apr. 2008.
- [33] Shintaro Takeuchi, Isao Morita and Takeo Kajishima: “Motion of particle agglomerate involving inter-particle force in dilute suspension”, *Powder Technology*, Vol.184, pp.232-240, May 2008.
- [34] J. Zheng, K.. Mima, Z. M. Sheng Y. T. Li, “Phase space modulation of laser produced protons with a double-foil target generation of quasi-monoenergetic proton beams”, *Physics of Plasmas*, Vol. 15, No. 5, 053106”, May 2008.
- [35] M. Wakeda, Y. Shibutani, S. Ogata and J. Park: “Multiple shear banding in a computational amorphous alloy model”, *Applied Physics A: Science & Processing*, Vol. 91, No. 2, pp. 281-295, May 2008.

- [36] S. Fujioka, M. Shimomura, Y. Shimada, S. Maeda, H. Sakaguchi, Y. Nakai, T. Aota, H. Nishimura, N. Ozaki, A. Sunahara, K. Nishihara, N. Miyana, Y. Izawa, K. Mima: “Pure-tin microdroplet irradiated with double laser pulses for efficient and minimum-mass extreme-ultraviolet light source production”, *Applied Physics Letters*, Vol. 92, No. 24, p. 241502, June 2008.
- [37] T. Kawamura, T. Kai, F. Koike, S. Nakazaki, Y. Inubushi, Y. Okano, S. Fujioka, H. Nishimura, T. Nakamura, T. Johzaki, H. Nagatomo, and K. Mima: “Study on anisotropic fast electron transport by polarized K-shell radiation in ultra-short intense laser produced plasmas”, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 112, p. 022097, June 2008.
- [38] T. Nakamura, K. Mima, H. Sakagami, T. Johzaki, H. Nagatomo: “Generation and confinement of high energy electrons generated by irradiation of ultra-intense short pulses onto cone targets”, *Laser Part. Beams*, Vol. 26, Issue 2, 207-212, June 2008.
- [39] 岡林希依, 太田貴士, 梶島岳夫: “キャビテーションと乱流要素渦の相互作用”, *混相流研究の進展* Vol.3, pp.1-8, Jun.2008.
- [40] F. Wang, S. Fujioka, H. Nishimura, D. Kato, Y. Li, G. Zhao, J. Zhang, H. Takabe: “Experimental evidence and theoretical analysis of photoionized plasma under x-ray radiation produced by an intense laser”, *Physics of Plasmas*, Vol. 15, p. 073108, July 2008.
- [41] P. Ye, A. Takata, M. Nunami, M. Murakami, and K. Nishihara: “Multi-Species Ion Acceleration in Expansion of Finite-Size Targets”, *Plasma and Fusion Research*, Vol. 3, pp.035:1-5, July 2008.
- [42] H. Tanaka and Y. Shibutani: “Large Deformability of 2D Framed Structures Connected by Flexible Joints”, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, Vol. 2, No. 8, pp.1037-1048, Aug. 2008.
- [43] J. Durand, B. Julia-Diaz, T. -S. H. Lee, B. Saghai and T. Sato: “Coupled-channels study of the π - $p \rightarrow \eta$ process”, *Physical Review C* 78, pp. 025204 1-12, Aug. 2008.
- [44] Tsutomu Ikeno and Takeo Kajishima: “Analysis of dynamical flow structure in a square arrayed rod bundle”, *Nuclear Engineering and Design*, Online 公開 Sept. 2008.
- [46] M. Yamamoto, D. Matsunaka and Y. Shibutani: “Modeling of Heteroepitaxial Thin Film Growth by Kinetic Monte Carlo”, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 47, No. 10, pp. 7986-7992, Oct. 2008.
- [47] K.-W. Park, C.-M. Lee, M. Wakeda, Y. Shibutani, E. Fleury and J.-C. Lee: “Homogeneous deformation of bulk amorphous alloys during elastostatic compression and its packing density dependence”, *Scripta Materialia*, Vol. 59, No.7, pp. 710-713, Oct. 2008.
- [48] 廣瀬 研二, 榎本 俊之: “大口径シリコンウェーハの高平坦両面研磨加工に関する研究(加工条件の最適化)”, *日本機械学会論文集(C 編)*, Vol.74, No.746, pp.267-272, Oct. 2008.
- [49] Kenji Hirose, Toshiyuki Enomoto: “Achievement of high flatness of large diameter silicon wafer in double-sided polishing -optimization of polishing conditions based on kinematical analysis-”, *Proc. 23rd Annual Meeting of the American Society for Precision Engineering*, pp.96-399, Oct. 2008.
- [50] H. Shiraga, N. Mahigashi, T. Yamada, S. Fujioka, T. Sakaiya, K. Shigemori, M. Nakai, H. Azechi, A. Sunahara: “Streaked X-Ray Backlighting with Twin-Slit Imager for Study of Density Profile and Trajectory of Low-Density Foam Target Filled with Deuterium Liquid”, *Review of Scientific Instruments*, Vol. 79, No. 10, pp. E916, Oct. 2008.
- [51] Y. Masada, T. Sano: “Axisymmetric Magnetorotational Instability in Viscous Accretion Disks”, *Astrophysical Journal*, Vol. 689, No.2, pp. 1234-1243, Oct. 2008.
- [51] H. Nagatomo, T. Johzaki, A. Sunahara, T. Nakamura, H. Sakagami, K. Mima: “Target design for high-density non-spherical implosion in fast ignition”, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 112, 022053, Oct. 2008.
- [52] A. Fujinami, S. Ogata, H. Kimizuka and Y. Shibutani: “The Energetics of Large Deformations of a Single Polyimide Molecular Chain: DFT and MO Calculations”, *Macromolecular Theory and Simulations*, Vol. 17, No. 9, pp. 488-495, NOV. 2008.
- [53] K.-W. Park, C.-M. Lee, M. Wakeda, Y. Shibutani,

- M. L. Falk and J.-C. Lee: “Elastostatically induced structural disordering in amorphous alloys”, *Elastostatically induced structural disordering in amorphous alloys*, *Acta Materialia*, Vol. 56, No. 19, pp. 5440-5450, Nov. 2008.
- [54] Weimin Zhou, Hongbo Cai, Hideo Nagatomo, Tomoyuki Johzaki, Atsushi Sunahara and Kunioki Mima: “Proton Acceleration in the Interaction of an Intense Laser with a Cone Plasma Target and Coated Proton Layer”, *Plasma and Fusion Research*, Vol. 3, 062, Nov. 2008.
- [55] Junichi Haruyama, Makiko Ohtake, Tsuneo Matsunaga, Tomokatsu Morota, Chikatashi Honda, Yasuhiro Yokota, Carle M. Pieters, Seiichi Hara, Kazuyuki Hioki, Kazuto Saiki, Hideaki Miyamoto, Akira Iwasaki: “Lack of exposed ice inside lunar south pole Shackleton Crater”, *Science*, Vol. 322, pp. 938-939, Nov. 2008.
- [56] H. Takabe, T. N. Kato, Y. Sakawa, Y. Kuramitsu, T. Morita, T. Kadono, K. Shigemori, K. Otani, H. Nagatomo, T. Norimatsu, S. Dono, T. Endo, K. “High-Mach number collisionless shock and photo-ionized non-LTE plasma for laboratory astrophysics with intense lasers”, *Plasma Phys. Control. Fusion*, Vol. 50, No. 12, pp. 124057-1~15, Dec. 2008.
- [57] Tsuneo Matsunaga, Makiko Ohtake, Junichi Haruyama, Yoshiko Ogawa, Ryosuke Nakamura, Yasuhiro Yokota, Tomokatsu Morota, Chikatashi Honda, Masaya Torii, Masanao Abe: “Discoveries on the lithology of lunar crater central peaks by SELENE Spectral Profiler”, *Geophys. Res. Lett.*, 35, L23201, Dec. 2008.
- [58] Weimin ZHOU, Kunioki MIMA and Hideo NAGATOMO: “Particle-in-Cell Simulation of the Measurement of Laser Wakefields with Raman Scattering of Probe Laser Light”, *Plasma and Fusion Research*, Vol. 3, 063, Dec. 2008.
- [59] K. Kamiya, Y. Shigeta and A. Oshiyama: “Effects of hydrogen-bonding environments on protonation states around the entrance of proton transfer pathways in cytochrome c oxidase”, *Proc. Int Conf on Theory and Application of Computational Chemistry*, AIP Conference Proceedings, 1102, 257, 2009.
- [60] K. Kamiya, S. Yamamoto, K. Shiraishi and A. Oshiyama: “Significant change in electronic structures of heme upon reduction by strong coulomb repulsion between Fe d electrons”, *J. Phys. Chem. B* 113, 6886, 2009.
- [61] W. M. Zhou, K. Mima, T. Nakamura, T. Nagatomo: “Probing of nonlinear evolution of laser wakefield by Raman scattering of laser light”, *Physics of Plasmas*, Vol. 15 Issue 9 093107, Jan. 2009.
- [62] A. Fujinami, D. Matsunaka and Y. Shibutani: “Water wettability/non-wettability of polymer materials by molecular orbital studies”, *Polymer*, Vol. 50, No. 2, pp. 716-720, Jan. 2009.
- [63] T. Johzaki, Y. Sentoku, H. Nagatomo, H. Sakagami, Y. Nakao, K. Mima: “Core heating properties in FIREX-I ~ influence of cone tip ~”, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, Vol. 51 No. 1, pp. 014002, Jan. 2009.
- [64] T. Tsuru, Y. Shibutani and Y. Kaji: “Fundamental interaction process between pure edge dislocation and energetically stable grain boundary”, *Physical Review B*, Vol. 79, No. 1, pp. 012104-1-4, Jan. 2009.
- [65] Junichi Haruyama, Makiko Ohtake, Tsuneo Matsunaga, Tomokatsu Morota, Chikatashi Honda, Yasuhiro Yokota, Masanao Abe, Yoshiko Ogawa, Hideaki Miyamoto, Akira Iwasaki, Carle M. Pieters, Noriaki Asada: “.Long-lived volcanism on the lunar farside revealed by SELENE Terrain Camera.” *Science*, Vol. 323, pp. 905-908, Feb. 2009.
- [66] Seiji Nakashima, Dan Ricinschi, Jung Min Park, Takeshi Kanashima, Hironori Fujisawa, Masaru Shimizu, and Masanori Okuyama: “Ferroelectric and structural properties of stress-constrained and stress-relaxed polycrystalline BiFeO₃ thin films”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 105, No. 6, pp. 15, March 2009.
- [67] 渋谷陽二, 譯田真人: “金属ガラスの機械的特性と変形機構”, *Journal of the Society of Materials Science, Japan*, Vol. 58, No. 3, pp. 199-204, Mar. 2009.

2 国際会議会議録掲載論文

- [60] K. Kamiya, S. Yamamoto, K. Shiraishi and

- [1] Koichi TSUJIMOTO, Taiga ISHIKURA, Toshihiko SHAKOUCHI and Toshitake ANDO: "Direct numerical simulation of active-controlled impinging jets ", Proc. 2nd The 2nd International Conference on Proc. 2nd The 2nd International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows, CDROM, 2008.
- [2] Ken Naitoh, Yuki Nakagawa, and Hiromu Shimiya: "Stochastic-determinism approach for simulating the transition points in internal flows with various inlet disturbances ", Proceedings of 5th International Conference on Computational Fluid Dynamics, ICCFD5, Korea, Springer-Verlag, 2008.
- [3] K. Uchida: "Quantum effects of capacitance in nano-scale devices", ECS Transactions, 13, 51, 2008.
- [4] H Takechi and S Miyashiro: "Integration of Information Technology in Engineering Syllabus of National College of Technology", JSEE Conference, International Session Proceedings, W-04, 2008.
- [5] Kengo Ueyama, Yukio Iida, Akitoshi Ito, and Noriaki Muranaka: "Feeding Power Method to RFID Tags in Specific Distance, -Basic Study by Using Two Loop Antennas-", Proceedings of 3rd International Laser, Light-Wave and Microwave Conference , ILLMC 2008, pp. PS-9, April 2008.
- [6] Akitoshi Ito, Yukio Iida, Kengo Ueyama, and Noriaki Muranaka: "Power Supplying Method to RFID Tags in Specific Distance by Using the Small Loop and Small Dipole Antennas", Proceedings of 3rd International Laser, Light-Wave and Microwave Conference, ILLMC 2008, pp. PS-10, April 2008.
- [7] Yukio Iida: "Proposal of Receiving Antenna for Power Supplying to the RF Tags in a Specific Distance", Proceedings 3rd International Laser, Light-Wave and Microwave Conference, ILLMC 2008, pp. PS-11, April 2008.
- [8] Nobuyuki Shimizu, Yutaka Miyazaki, Yukio Iida, and Yasuhisa Omura: "A Study of Waveguides Made of Photonic Crystals with Rectangular Arrangement of Rectangular Air Holes", Proceedings International Conference on Photonic in Switching 2008, PS 2008, pp. P-13, April 2008.
- [9] Ryuichi Iwata, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima and Masahiro Taniguchi: "Direct numerical simulation of bubble-particle interaction by combination of immersed-boundary and volume-of-fluid methods" 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, a2289 (CD), Jun 2008.
- [10] Takayuki Yukimoto, Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi: "Numerical investigation of the agglomerating behavior of particles governed by van der Waals forces" 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, a2410 (CD), Jun. 2008.
- [11] Kie Okabayashi, Takashi Ohta, Takeo Kajishima: "Direct numerical simulation of interaction between cavitation and turbulence vortices" 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, a2294 (CD), Jul. 2008.
- [12] Kie Okabayashi, Takeo Kajishima, Takashi Ohta: "On the subgrid scale modeling of cavitating turbulence considering fine-scale elementary vortices" WIMRC 2nd International Cavitation Forum 2008, Warwick, England, pp.97-101, Jul. 2008.
- [13] Atsushi Ueyama, Kousuke Tamura, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima: "Coupled finite element and immersed boundary method for the computation of interaction of multiple deformable particles/structures with a fluid flow" 8th World Congress on Computational Mechanics, Venice, Italy, a2358 (CD), Jul. 2008.
- [14] Y. ONO and T. Tamura: "LES OF FLOWS AROUND A CIRCULAR CYLINDER IN THE CRITICAL REYNOLDS NUMBER REGION", BBAA VI International Colloquium on: Bluff Bodies Aerodynamics & Applications Milano, Italy, pp. 269-272, July, 20-24 2008.
- [15] Takeo Kajishima, Takashi Ohta: "Numerical simulation of unsteady cavitating flows in two-dimensional cascades", WIMRC 2nd International Cavitation Forum 2008, Warwick, England, pp.240-245, Jul. 2008.
- [16] Hidetoshi Kakinishi, Masayuki Miyamoto, and Yukio Iida: "Silicon-oxide T-shaped Waveguide for Control Light of All-Optical Switch", Proceedings International Conference on Photonic in Switching 2008, PS 2008, pp. P-5, August 2008.
- [17] Ryuichi Iwata, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima:

- “Direct Numerical Simulation of Dispersed Three-Phase Flows by Immersed Boundary Method”, US-Japan Seminar on Two-Phase Flow Dynamics, Santa Monica, California, USA, V-3 (CD), Sept. 2008.
- [18] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, Ryuichi Iwata, Atsushi Ueyama, Masahiro Taniguchi, Kousuke Tamura: “Combination of immersed-boundary method and finite-element or volume-of-fluid method to deal with multiple deformable boundaries”, 7th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, Sapporo, E324 (CD), 2008.10.13-16. Sept. 2008.
- [19] H. Nagatomo, T. Johzaki, T. Nakamura, H. Sakagami, Y. Nakao, T. Taguchi, A. Sunahara, K. Nishihara, K. Mima: “Fast Ignition Integrated Interconnecting Code (FI3) - Integrated Simulation and Element Physics -”, IAEA, Proceedings of Fusion Energy Conference, CN-165/IFP-18, Oct. 2008.
- [20] Daniel Fuentes del Rio, Takeo Kajishima, Takashi Ohta: “Numerical simulation of a buoyant jet in a cross-flow”, 7th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, Sapporo, M141 (CD), 2008.10.13-16. Oct. 2008.
- [21] M. Higuchi, N. Furushiro, T. Yamaguchi, T. Sugimoto, N. Matsumori, H. Ogura, S. Shimada: “Mechanochemical Diamond Stone Containing BaSO₄ Abrasive”, Proc. ASPE 2008 Annual Meeting, vol. 44, pp.392-395, Oct., 2008.
- [22] Y. Uda, S. Shimada, Y. Go: Study of an Interpolation of Flatness Data Measured by Successive Differential Laser Auto-collimation”, Proc. ASPE 2008 Annual Meeting, vol. 44, pp.603-606, Oct., 2008.
- [23] Ryuichi Iwata, Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi: “Immersed boundary and VOF coupling method for bubble-particle interaction problems”, 61st Annual DFD Meeting, Division of Fluid Dynamics, American Physical Society, San Antonio, Texas, USA, No.LP4, pp.244, 23-25. Nov. 2008.
- [24] Seiji Nakashima, Jung Min Park, Takeshi Kanashima, Hironori Fujisawa, Masaru Shimizu, and Masanori Okuyama: “Enhancement of Ferroelectric Properties of Epitaxial BiFeO₃ thin films on La-doped SrTiO₃ single crystal”, 2008 Material Research Society Fall Meeting, pp79, Boston, USA, Dec. 2008.
- [25] S. Matsunaga: “Structure and Atomic Dynamics of Silver Halide Mixtures”, Progress of Theoretical Physics Supplement, 178, pp. 113-119, 2009.
- [26] S. Matsunaga: “Structural features of superionic phase in AgBr-CuBr system by molecular dynamics simulation”, Journal of Physics: Conference Series, 144, 012011, 2009.
- [27] Kengo Ueyama, Yukio Iida, Akitoshi Ito, and Noriaki Muranaka: “Power Feeding to RFID Tags Within Specified Distance and Transponder Control Signal”, Proceedings of Progress In Electromagnetics Research Symposium 2009, PIERS 2009, pp. 527-529, March 2009.
- [28] Akitoshi Ito, Yukio Iida, Kengo Ueyama, and Noriaki Muranaka: “Coupling of Transmitting/Receiving Antennas and Super Regenerative Transponder (SRGT) for RFID Tags”, Proceedings of Progress In Electromagnetics Research Symposium 2009, PIERS 2009, pp. 530-532, March 2009.
- [29] Yukio Iida: “Novel Super Regenerative Transponder (SRGT) for RFID Tags and ASK signals”, Proceedings of Progress In Electromagnetics Research Symposium 2009, PIERS 2009, pp. 543-546, March 2009.

3 国内研究会等発表論文

- [1] 小野佳之, 田村哲郎: “超臨界域における円柱まわりの流れに関するLES解析”, 日本流体力学会年会2008講演要旨集, pp.335-336.
- [2] 小野佳之, 田村哲郎: “超臨界域における円柱まわりの流れに関するLES解析”, 第20回風工学シンポジウム論文集, pp.385-390, 2008.
- [3] 辻本公一, 位田貴彦, 石倉大雅, 社河内敏彦, 安藤俊剛: “DNSによる衝突噴流の構造解析”, 日本機械学会2008年度年次大会講演論文集, pp.257-258, 2008
- [4] 四宮大夢, 内藤健: “管内乱流遷移位置の直接数値解析”, 第22回数値流体力学シンポジウム予稿集, 2008.

- [5] 原口 亮, 芦原 貴司, 八尾 武憲, 藤堂 貴弘, 難波 経豊, 村上 慎吾, 倉智 嘉久, 中沢 一雄: “ 頻脈性不整脈の興奮伝播ダイナミクスにおける心室較差の役割”, 第47回生体医工学会大会, May 2008.
- [6] 藤堂 貴弘, 原口 亮, 難波 経豊, 八尾 武憲, 芦原 貴司, 東 将浩, 稲田 紘, 倉智 嘉久, 中沢 一雄: “ フィラメントの挙動から見たスパイラルリエントリーの持続性の判定に関する研究”, 第 47 回生体医工学会大会, May 2008.
- [7] 芦原 貴司, 八尾 武憲, 原口 亮, 中沢 一雄, 藤堂 貴弘, 難波 経豊, 池田 隆徳, 伊藤 誠, 堀江 稔: “ ヒト慢性心房細動に対するマルチチャネル遮断薬の効果に関する in silico 研究,” 第 47 回生体医工学会大会, May 2008.
- [8] K. Uchida: “Quantum Effects of Capacitance in Nano-Scale Devices”, 213th ECS (Electro-Chemical Society) Meeting, Phoenix, May, 2008.
- [9] A. Oshiyama: “ Large-scale density-functional calculations using realspace parallel computation technique”, 1st Int. Conf. of The Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nano science, Tokyo, June 3 - 7, 2008. technique”, 1st Int. Conf. of The Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nano science, Tokyo, June 3 - 7, 2008.
- [10] Y. Fujimoto, T. Korestune, S. Saito, T. Miyake, and A. Oshiyama: “Structural and electronic properties of new crystalline phase of Si and Ge”, International Conference on Quantum Simulators and Design, Tokyo, Jun.6-2, 2008.
- [11] 辻拓也, 藪本恵三, 川口寿裕, 田中敏嗣: “3次元気泡流動層内において形成される循環構造について”, 日本混相流学会年会講演会 2008, pp.16-17, Aug. 2008.
- [12] 原口 亮, 芦原 貴司, 藤堂 貴弘, 難波 経豊, 村上 慎吾, 倉智 嘉久, 中沢 一雄: “ 3次元心室壁モデルにおけるスパイラルリエントリーの in silico フィラメント動態解析～致死的不整脈防御機構としての心室較差の電気生理学的意義～”, 生体医工学シンポジウム 2008, Sept. 2008.
- [13] 高井俊平, 島田尚一, 樋口誠宏, 山口智実, 古城直道, 吉永実樹: “ 単結晶ダイヤモンド切削工具の損耗機構”, 2008年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, pp.801-802, Sept. 2008.
- [14] 高橋功奈, 古城直道, 山口智実, 樋口誠宏, 島田尚一, 吉永実樹: “ 合成ダイヤモンド工具の耐磨耗性の評価”, 2008 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, pp.45-46, Sept. 2008.
- [15] 廣瀬 研二, 榎本 俊之: “ 大口径シリコンウェーハの高平坦両面研磨加工に関する研究 -加工条件およびワークホール配置の最適化-”, 2008 年度精密工学会秋季大会学術講演会, pp.437-438, Sept. 2008.
- [16] 斉藤稔, 伊庭幸人: “ 拡張アンサンブル法によるラマヌジャングラフのエントロピー”, 日本物理学会講演概要集, 第 63 巻, 第 2 号, 第 2 分冊, p.272, Sept. 2008.
- [17] K. Kamiya, Y. Shigeta, A. Oshiyama: “ A novel proton transfer through peptide group in protein”, Theory and Application in Computational Chemistry, Shanghai, Sep, 2008.
- [18] 比江島俊彦: “ 超音速縦渦の線形安定解析”, 第 43 回「境界層遷移の解明と制御」研究会, 宇宙航空研究開発機構特別資料 JAXA-SP 講演論文集, pp.1-4, Oct. 2008.
- [19] Y. ONO and T. Tamura: “ LES of flows around a circular cylinder at critical and supercritical Reynolds numbers”, 61th annual meeting Division of fluid dynamics American physical society, Nov. 2008.
- [20] 原口 亮, 芦原 貴司, 鈴木 慎悟, 難波 経豊, 藤堂 貴弘, 八尾 武憲, 村上 慎吾, 倉智 嘉久, 池田 隆徳, 中沢 一雄: “ 貫壁性再分極時間の差が頻脈性不整脈の興奮伝播ダイナミクスに与える影響について”, 第 25 回日本心電学会学術集会, Nov. 2008.
- [21] 藤堂 貴弘, 原口 亮, 難波 経豊, 芦原 貴司, 八尾 武憲, 東 将浩, 池田 隆徳, 中沢 一雄: “ フィラメントの挙動から見たヒト心室形状モデルにおける興奮波の分裂現象に関する研究”, 第 25 回日本心電学会学術集会, Nov. 2008.
- [22] 原口 亮, 芦原 貴司, 八尾 武憲, 難波 経豊, 藤堂 貴弘, 村上 慎吾, 倉智 嘉久, 池田 隆徳, 中沢 一雄: “ 貫壁性再分極時間の差が増悪すると 3次元スパイラルリエントリーの分裂が促進される: シミュレーションモデルによる検討”, 第 24 回心電情報処理ワークショップ, Nov. 2008.

- [23] 藤堂 貴弘, 原口 亮, 難波 経豊, 芦原 貴司, 八尾 武憲, 東 将浩, 池田 隆徳, 中沢 一雄: “ヒト心室形状モデルにおける興奮波の分裂現象に関する研究-フィラメントの挙動に基づく考察-”, 第 24 回心電情報処理ワークショップ, Nov. 2008.
- [24] 三好 崇夫, 宮崎 靖大, 奈良 敬: “SUS329J3L からなる周辺単純支持板の終局圧縮挙動”, 鋼構造年次論文報告集, Vo.16, pp.47-52, Nov. 2008.
- [25] 吉田 尚史, 渡辺 崇: “非圧縮流れの有限差分法計算における流出境界条件の研究”, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会講演論文集, pp.568-569, Nov. 2008.
- [26] 井上 暢, 吉田 尚史, 稲村 純平, 渡辺 崇: “キャビティを過ぎる自励振動流の負方向底面駆動速度による制御の数値解析”, 日本流体力学会第 22 回数値流体力学シンポジウム講演要旨集, p.111, Nov. 2008.
- [27] 岡田 晋: “カーボン系構造変化の第一原理シミュレーション”, 第 4 回励起ナノプロセス研究会, 応用物理学会, 和歌山大学サテライト, Nov. 2008.
- [28] Yoshiyuki Egami: “Electron-transport property calculation for graphene strips with defects”, The 11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN11), National Sun Yat-sen University, Kaohsiung, Taiwan, November 2008.
- [29] 比江島俊: “縦渦と衝撃波の相互作用の数値結果と縦渦の不安定性について”, 第 22 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, B5-1, (CD), pp.1-6, Dec. 2008.
- [30] 稲村 純平, 吉田 尚史, 井上 暢, 渡辺 崇: “キャビティを過ぎる二次元非圧縮流れの振動モード変化の数値シミュレーション”, 日本流体力学会第 22 回数値流体力学シンポジウム講演要旨集, pp.110, Dec. 2008.
- [31] 吉田 尚史, 井上 暢, 稲村 純平, 渡辺 崇: “キャビティを過ぎる自励振動流の正方向底面駆動速度による制御の数値解析”, 日本流体力学会第 22 回数値流体力学シンポジウム講演要旨集, p.112, Dec. 2008.
- [32] 井上 批露騎, 吉田 尚史, 信田 創: “二次元噴流の直接数値計算における境界条件の研究”, 日本流体力学会第 22 回数値流体力学シンポジウム講演要旨集, p.195, Dec. 2008.
- [33] 辻拓也, 田中大輔, 田中敏嗣: “埋め込み境界法と局所細密格子との組み合わせによる粒子系混相乱流の高解像度シミュレーション”, 第 22 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, Dec.2008.
- [34] A. Oshiyama: “Cation vacancies in nitride semiconductors: Possibility of intrinsic ferro- magnetism”, JST-DFG Workshop on Nano-electronics, Kyoto, January 21-23, 2009.
- [35] Yoshiyuki Egami, Tomoya Ono, and Kikuji Hirose: “First-principles Study on Electron Transport Property through Graphene Strips”, Nagasaki Symposium on Nano-Dynamics 2009 (NSND2009), Bunkyo-campus of Nagasaki University, Nagasaki, Japan, January 2009.
- [36] A. Oshiyama: “Real-space density-functional-theory scheme and its application to large systems”, Supercomputing in Solid State Physics, Kashiwa, Chiba, February 16-19, 2009.
- [37] S. Okada: “Energetics of Nanographite Ribbons”, Okazaki Conf 2009, Okazaki Conference Center, Okazaki, February 21-23, 2009.
- [38] 中村玲王奈, 高谷裕浩, 林照剛: “光放射圧制御微粒子工具によるナノ加工の研究—微粒子工具近傍のエネルギー分布解析—”, 2009 年度精密工学会春季大会学術講演会, Mar. 2009.
- [39] 道畑正岐, 林 照剛, 高谷 裕浩: “レーザトラッピングプローブを用いたナノ 3 次元形状計測に関する研究 (第 4 報)”, 2008 年度精密工学会秋期大会学術講演会講演論文集, pp. 473-474, 11. Mar. 2009.
- [40] 吉田 尚史, 中西 洋輔, 井上 暢, 稲村 純平, 渡辺 崇, “開いたキャビティを過ぎる自励振動流の吹出しと吸込みを用いた制御の数値解析”, 日本機械学会北陸信越支部第 46 期総会講演会論文集, Mar. 2009.
- [41] 吉田 尚史, 南條 晋也, 井上 批露騎, 信田 創: “二次元噴流の直接数値計算における境界条件の研究”, 日本機械学会北陸信越支部第 46 期総会講演会論文集, pp.521-522, Mar. 2009.

- [42] 糸生 祐輔, 吉田 尚史, 北谷 敬志: “三角柱に衝突する二次元噴流の三次元数値解析”, 日本機械学会北陸信越支部第 46 期総会講演会論文集, pp.523-524, Mar. 2009.
- [43] 池田 浩人, 副島 啓司, 湯川 美穂, 岩瀬 由紀子, 安藝 初美: “統合失調症治療薬リスペリドンと茶葉カテキン類との複合体形成機構”, 日本薬学会第 129 年会, Mar. 2009.
- [44] 古城直道, 平田崇哲, 樋口誠宏, 山口智実, 松森昇, 尾倉秀一, 島田尚一: “酸化セリウムによる工学ガラスの超仕上げ”, 2009 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp.233-234, Mar. 2009.
- [45] 田中宏明, 島田尚一: “分子動力学法による新炭素材料の可能性 (第 1 報) -モデリングと結晶構造の安定性-”, 2009 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp.335-336, Mar. 2009.
- [46] 瀬戸健太, 古城直道, 樋口誠宏, 山口智実, 斎藤賢一, 島田尚一: “分子動力学法によるダイヤモンド切削工具の強度の解析”, 2009 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp.337-338, Mar. 2009.
- [47] 斉藤稔, 伊庭幸人, 福島孝治: “拡張アンサンブル法によるランダム行列の最大固有値分布 II”, 日本物理学会講演概要集, 第 64 巻, 第 1 号, 第 2 分冊, p.323, Mar. 2009.
- [48] 押山淳: “ナノ構造体の面白さ - 電子論による機能探索”, 第 56 会応用物理学関係連合講演会シンポジウム, 筑波大学, Mar. 2009.
- [49] 山田 啓太, 土肥慶祐, 江上 喜幸: “第一原理計算による電極間架橋有機分子鎖の電気伝導特性予測”, 日本物理学会 2009 年年次大会, 立教大学, 立教大学池袋キャンパス, 東京都豊島区, Mar.2009.

平成20年度大阪大学近藤賞受賞

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 福田優子

平成21年4月23日、24日の2日間にわたり開催された、大阪大学レーザーエネルギー学研究センターの「レーザー研シンポジウム2009—平成20年度共同研究成果報告会—」の中で、平成20年度大阪大学近藤賞の授与式も行われ、元サイバーメディアセンターシステムの職員であった宮永勢次氏が技術賞を受賞されました。

この賞は、レーザーエネルギー学の研究開発向上などを含め技術的に顕著な貢献のあった国内外の若手技術者に授与されるものです。宮永氏の受賞は、「レーザーエネルギー学のためのスーパーコンピュータシステムの運用管理技術」というタイトルで、受賞理由は、「レーザーエネルギー学、特に複雑系のプラズマ・シミュレーションを行うために不可欠な、スーパーコンピュータ利用に関し、大阪大学レーザーエネルギー学研究センターと大阪大学サイバーメディアセンターとのインターフェースとなり、この分野の下支的な活動を継続的に行ってきた。この貢献に対して技術賞を授与する。」というものでした。

大阪大学サイバーメディアセンター、核物理研究センター、レーザーエネルギー学研究センターは、平成8年よりサイバースーパーコンピュータシステムの共同運用を行い、これまでに数々の最先端システムの導入を進め、スーパーコンピュータシステムの実稼働率は75%と、驚異的な高効率のシステム運用を実現しています。宮永氏は、サイバーメディアセンターの職員として、スーパーコンピュータを含む全システムの運用管理の実質的な担当を担い、最新鋭で安定したシステム提供に大きく貢献してきたことが認められました。

今回の受賞は、宮永氏個人だけでなく、サイバーメディアセンターの東田氏を始めとする全てのスタッフのみなさんと、外川氏を始めとする核物理センターのスタッフ、そしてレーザー研の私たちの努力も認めていただいたということで、非常にうれしく思っています。

宮永氏は平成21年4月より、大阪大学総務部総務課PMO準備室に移動され、HPC分野からは離れられましたが、今までの経験を生かして、新しい分野で活躍されています。私たちも、この受賞を励みとして、これからも、3センターで協力してスーパーコンピュータシステムをよりよくしていく努力を続けたいと考えています。最後に、本HPCシステムの発展を長期に渡り支援いただいている日本電気株式会社のみなさんに謝意を表します。

■近藤賞受賞に関するホームページ

<http://www.ile.osaka-u.ac.jp/zone2/openspace/topics/news/H20kondo.html>



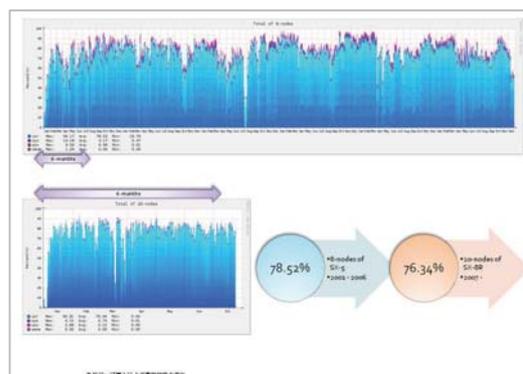
左から米田審査委員長、受賞者（宮永氏、藤岡氏）、西田理事・副学長

■スーパーコンピュータを用いたレーザーエネルギー学研究の研究成果一覧に関するホームページ

<http://www.ile.osaka-u.ac.jp/research/cmp/research/research.html>



■スーパーコンピュータシステム全体の稼働率



大規模計算機システム Q&A・LINK 集

1. パスワード変更をしたいのですが？

<https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/> に Web からアクセスし、ログイン ID、パスワードの入力を行って、新パスワードを指定します。この時、MAC O/S を利用されていれば、Firefox か Netscape でご利用ください。

2. 研究室のパソコンからスパコンを利用したいのですが、どうすれば良いのでしょうか？

下記の URL にスーパーコンピュータ利用入門の講習会資料がありますので、ご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/sx-kiso1.pdf>

3. 大規模計算機システムにログインする方法を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。接続方法がわかります。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/login.html>

4. 大規模計算機システムにファイル転送を行いたいのですが？

WinSCP を使用してファイル転送を行います。下記の URL を参照ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/file transfer.html>

5. 大規模計算機システムを利用する場合の資格を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。利用資格を知ることができます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shikaku/index.html>

6. 大規模計算機システムの負担金一覧表を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。負担金一覧表がわかります。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/futankin/index.html>

7. 大規模計算機システムの申請関係の情報を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。申請書及び内容を知ることができます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shinsei/forms.html>

8. 大規模計算機システムの試用制度について知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。制度の申し込み及び内容を知ることができます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/futankin/shiyou.html>

9. 大規模計算機システムのサポート情報を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。種々の情報等を掲載していますので、ご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/support/inquiry.html> 問合せ先情報

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/support/advisor.html> 利用相談員情報

10. 他の6大学情報基盤センターの情報を知りたいのですが？

下記の URL をご覧ください。他大学情報基盤センターへリンクしています。

<http://www.cmc.osaka-u.ac.jp/j/intro/link.html>

11. Web上のマニュアルを参照できませんか？

下記の URL から大規模計算機システムのポータルにログインするとスーパーコンピュータシステムなどのマニュアル参照する事ができます。

<https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

平成21年度大規模計算機システム利用相談員・指導員名簿
(任期：平成22年3月31日まで)

・利用相談員

氏名	所属	職名
高木 達也	大阪大学 大学院薬学研究科	教授
山井 成良	岡山大学 総合情報基盤センター	教授
武知 英夫	阿南工業高等専門学校 機械工学科	准教授
石定 惇	大阪大学 大学院基礎工学研究科	大学院学生 (博士後期)

・利用指導員

氏名	所属	職名
板野 智昭	関西大学 システム理工学部	准教授
藤 堅正	近畿大学 理工学部	講師
武知 英夫	阿南工業高等専門学校 機械工学科	准教授

平成21年度大規模計算機利用システム相談員 自己紹介

たかぎ たつや
高木 達也

(大阪大学大学院薬学研究科生命情報環境科学専攻・教授)

初めまして。大阪大学大学院薬学研究科の高木達也と申します。よろしくお願ひ申し上げます。

数えてみれば、1983年からだと思いますので、大型計算機センター時代からもう27年も、相談員をさせて頂いております。この間、相談内容も大きな変化がありました。当初は、皆さんプログラムを自ら組まれる方ばかりでしたので、Fortran（当時はFORTRAN77）のプログラミング方法が主たる問い合わせでしたが、現在は、アプリケーションの使い方が、主たる質問内容になっています。こうした変化がそのまま、計算機を取り巻く社会環境の変化を表していると思っております。

さて、特に実験・観測研究者の皆さん、皆さんのお手元には大量の実験・観測データが、解析できないで残っていませんか。たとえば、

- ・オミクスデータ
- ・大量のアンケート結果
- ・数理的解析を行いたい文献データ
- ・疫学、臨床データ
- ・雑多なテキストの山

などは、宝の山かも知れません。そのような場合には、どうか一度ご相談下さい。適切なデータ解析方法をご提示できるかも知れません。これからは、大量の網羅の実験データを、数理的に解析することにより、情報を得る時代になってきました。これまでよりもっと、実験研究者とデータ解析研究者の密な語り合いが必要だと、私は考えています。

やまい なりよし
山井 成良

(岡山大学総合情報基盤センター 教授)

岡山大学総合情報基盤センターの山井と申します。ご存知の方もおられると思いますが、平成9年11月まで大阪大学大型計算機センター研究開発部に在籍しておりました。

さて、私の担当領域ですが、大規模計算機システムの基本的な利用法およびネットワークサービス全般とさせていただきます。遠隔地からの利用に関する相談や電子メールやSSHなどの利用におけるトラブルに関する質問も歓迎します。

本年度も微力ながら皆様のお役に立てれば幸いです。

たけち ひでお
武知 英夫

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

- ・ psuiteを使用してプログラム単位の自動並列ジョブのトレースが表示できるが、プロセスレベルのト

レース機能をもつVampirがSX8以降、突然SXから消滅していた。

- 旧版のホームページは既に存在せず、著作権元が変更になったことと連動して？ 版そのものが大きく改訂の後、マルチノードMPI対応になっていた。
- このVampirトレースは、MPIジョブ実行中のプログラム最少単位でCPU占有状況を可視化できる。目的はCPU負荷分散を最適化し、実行速度を向上する目的がある。
- なんとかではあるが、年が明けてからVampirトレースを正常終了できるようになった。以前の汎用機では、仮想記憶メモリでのローダーのマッピングを一応理解したつもりでいたが、MPIローダーに関しては未だに全く手探り状態が続いている。
- 自動ベクトル化や自動並列化では何とか支援を提供できると考えますが、大規模MPIユーザーから相談があるとしたら、相談員本人が抱える質問に回答頂くことがありますので宜しくお願いします。

いしきだ じゅん
石 定 惇

(大阪大学大学院 基礎工学研究科 物質創成専攻 大学院生 (DC))

密度汎関数理論に基づいた第一原理計算手法を用いた物性研究をおこなっています。

研究内容は、シリコン中の格子欠陥に関するもので、空孔欠陥によって引き起こされると考えられているシリコン結晶の弾性ソフト化という現象のメカニズムを第一原理分子動力学シミュレーションを用いて調べています。

サイバーメディアセンターの大規模計算機上で使用している計算プログラムは主にOsaka2kとpwscf (Quantum Espresso) と呼ばれるものです。

平成21年度大規模計算機システム利用指導員 自己紹介

いたの ともあき
板野 智昭

(関西大学 システム理工学部 物理・応用物理学科・准教授)

大阪府出身で吹田市にある府立千里高校卒業後、駿台予備校での真黒な浪人生活を経て、晴れて京都大学理学部に進学、高校で大好きになった物理学を修めました。趣味は旅と読書とサイクリングで、特に旅では見知らぬ土地で友を作ることが好きです。研究に新しいアイデアをもたらすにも、旅とサイクリングによるリフレッシュが効果的(すなわち仕事の一部)だと信じていますが、最近では雑務に追われてなかなかできておりません。

さて、私の専門は流体物理で、研究と計算機は切っても切り離せない関係にあります。計算機環境は愛用のラップトップにインストールしたLinuxで、研究時間の大半は計算機の前で過ごしてきました。(ただし最近では雑用が多く、机の前に座る時間が激減しています。)阪大のメディアセンターではありませんが、大型計算機も使い始めて10年くらいになるでしょうか。長年の一利用者としてあちこちの計算機センターでお世話になっていきますので、その視点から皆さんのお役に立てればと思っています。

ふじ けんしょう
藤 堅正

(近畿大学 理工学部 電気電子工学科・講師)

近畿大学の藤です。エネルギー材料(核燃料・原子炉材料)に関する実験系の研究室ですが、核燃料内部の化学状態を検討するための多相化学平衡計算や、燃料被覆管の水蒸気酸化シミュレーションあるいは燃料被覆材と核分裂生成物との固相反応の挙動解析に関する計算でサイバーメディアセンターを利用しております。

また、電子エネルギーレベルの計算を少しだけお手伝いすることもあります。何れもFORTRANを使用している関係上、研究室で適宜FORTRANのご相談を承っております。宜しくお願いします。

たけち ひでお
武知 英夫

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

- ・平成21年になって相当ビッグな相談が飛び込んできました。長年に指導員に携わっていると、引き受けるべき相談内容の範疇に付いて苦慮することが多々あります。質問する側は相談の中で自分の専門領域のプログラミングアルゴリズムに関して応援を仰ごうとしますが、相談担当者のテリトリーとして、SXで実行エラーを生じているジョブに関してトレース情報の添付がある場合に限るという大きなヘッジが存在します。
- ・相談する側の一方的な思い込みによる場合が殆どではあるのですが、並列化やベクトル化のオンラインチュートリアルをリアルタイムでお引き受けすることは殆ど不可能です。
- ・では指導員制度で何が期待できるのかという点に付いては、SXとユーザーの間でポータルとし

での機能(セキュリティポリシー準拠)を提供し、サイバーを中心とする複数人で問題に対応する体制があります。サイバーでは、対応を受けた相談員の気休めメールが暫くして返ってくるような体制ではありません。

- トレース情報の提供がなく、近未来に投入予定のコンカレントジョブに付いて壮大なる抱負を相談として持ち込むユーザーに関しては、1ノード8 CPUまで対応する世界屈指の自動ベクトル化と自動並列化がコンパイル変数一個で可能なSXジョブで実行するよう勧めております。

利用規程等

• 規程関係	43
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程	43
サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧	44
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規	45
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員指導員内規	45
大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程	45
ネットワーク専門部会内規	46
• 附表	47
大規模計算機システム ホスト一覧	47
SX-8R、SX-9及びPCクラスタのジョブクラス一覧	47

・ 規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

第1条 この規程は、大阪大学サイバーメディアセンター(以下「センター」という。)が管理・運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーションシステム(以下「大規模計算機システム」という。)の利用に関し必要な事項を定めるものとする。

第2条 大規模計算機システムは、学術研究及び教育等のために利用することができるものとする。

第3条 大規模計算機システムを利用することのできる者は、次の各号のいずれかに該当する者とする。

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員(非常勤講師を含む。)及びこれに準ずる者
- (2) 大学院の学生
- (3) 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関(前号に掲げる機関を除く。)で、センターの長(以下「センター長」という。)が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
- (6) 第1号、第3号又は第4号の者が所属する機関との共同研究に参画している民間企業等に所属し、専ら研究に従事する者
- (7) 前各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者

第4条 大規模計算機システムを利用しようとする者は、所定の申請を行い、センター長の承認を受けなければならない。

2 前項の申請は、大規模計算機システム利用の成果が公開できるものでなければならない。

第5条 センター長は、前条第1項による申請を受理し、適当と認めたときは、これを承認し、登録番号を与えるものとする。

2 前項の登録番号の有効期間は、1年以内とする。ただし、当該会計年度を超えることはできない。

第6条 大規模計算機システムの利用につき承認された者(以下「利用者」という。)は、申請書の記載内容に変更を生じた場合は、速やかに所定の手続きを行わなければならない。

第7条 利用者は、第5条第1項に規定する登録番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 利用者は、当該申請に係る利用を終了又は中止したときは、速やかにその旨をセンター長に届け出るとともに、その利用の結果又は経過を所定の計算機利用報告書によりセンター長に報告しなければならない。

2 前項の規定にかかわらず、センター長が必要と認めた場合は、計算機利用報告書の提出を求めることができる。

第9条 利用者は、研究の成果を論文等により公表するとき

は、当該論文等に大規模計算機システムを利用した旨を明記しなければならない。

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

第11条 前条の利用経費の負担額は、国立大学法人大阪大学諸料金規則に定めるところによる。

第12条 前条の規定にかかわらず、次の各号に掲げる場合については、利用経費の負担を要しない。

- (1) センターの責に帰すべき誤計算があったとき。
- (2) センターが必要とする研究開発等のため、センター長が特に承認したとき。

第13条 利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。

- (1) 学内経費(科学研究費補助金を除く。)の場合にあっては、当該予算の振替による。
- (2) 前号以外の場合にあっては、本学が発する請求書の指定する銀行口座への振込による。

第14条 センター長は、この規程又はこの規程に基づく定め違反した者その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生じさせた者があるときは、利用の承認を取り消し、又は一定期間大規模計算機システムの利用を停止させることがある。

第15条 この規程に定めるもののほか、大規模計算機システムの利用に関し必要な事項は、センター長が定める。

附 則

- 1 この規程は、平成12年4月1日から施行する。
- 2 大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程(昭和43年9月18日制定)は、廃止する。
- 3 この規程施行前に大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程に基づき、平成12年度の利用承認を受けた利用者については、この規程に基づき利用の登録があったものとみなす。

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成13年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年6月19日から施行し、平成14年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成15年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年2月15日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成20年4月16日から施行する。

大規模計算機システム利用負担額一覧

平成 21 年 4 月 1 日付けで国立大学法人大阪大学諸料金規則が改正され、大規模計算機システム利用負担額が下記のとおり変更となりました。

(**斜体太ゴシック**になっている部分が今回新規又は追加された部分です。)

区分	計算機資源の シェア値	スーパーコンピュータ				ファイル 利用の 制限	年間負担額 (後期利用は半額)
		SX-8R		SX-9			
		並列実行 CPU数	メモリ制限	並列実行 CPU数	メモリ制限		
基本負担額	1	4	16GB	備考 11	備考 11	50GB	0 円 (備考 7)
	1	4	16GB	備考 11	備考 11	50GB	1 万円
	10	4	32GB	4	256GB	1TB	10 万円
	50	8	制限なし	8	512GB	2TB	50 万円
	100	制限なし	制限なし	制限なし	制限なし	3TB	100 万円
	260	制限なし	制限なし	制限なし	制限なし	4TB	200 万円
	450	制限なし	制限なし	制限なし	制限なし	5TB	300 万円
ファイル追加 オプション	ファイル追加 100GB につき						1 万円
消費税額	上記負担額で算出した合計額に 100 分の 5 を乗じて得た額						

備考

- 基本負担額は年度の最初の登録時に算出する。
- 各基本負担額の制限内でスーパーコンピュータ、クラスタシステム、ファイルなど計算機資源を利用できる。
- 基本負担額 1 万円の場合、登録者数は 1 名とする。その他の場合、登録者数は特に制限を設けない。
- 後期 (10 月～3 月) 利用の基本負担額及びファイル追加オプションは、年間負担額の半額とする。
- 上記の基本負担額以外に 50 万円単位での申請を 1,000 万円単位で受け付ける。その場合のシェア値及びファイル利用の制限の設定については以下のとおりとする。
シェア値は、300 万円未満が基本負担額の 1.3 倍、300 万円以上が基本負担額の 1.5 倍とする。
ファイル利用の制限は、50 万円につき 0.5TB を加算する。
- ファイルサーバはファイル使用量の制限内で利用できる。なお、制限値以上の利用は 50GB 単位での追加オプションとなる。
- 別に定める試用制度による利用を認められた者は、基本負担額 1 万円の場合と同じ資源を、登録のあった月から、前期 (4 月～9 月) 3 ヶ月間、又は後期 (10 月～3 月) 1 ヶ月無料で利用できる。ただし、当該会計年度を越えてからの利用はできないものとする。
- 大学院の学生が基本負担額 1 万円で利用する場合、負担額を半額とする優遇措置を受けられる。
- 企業利用者は、科学研究費補助金及び共同研究プロジェクトでの利用を除き負担額を 3 倍の設定とする。
- 先端研究施設共用イノベーション創出事業に係る利用期間は四半期単位とする。なお、負担額は前項の年間負担額の 1/4 とする。
- 試用制度及び基本負担額 1 万円で SX-9 を利用する場合、ジョブクラス表のデバッグクラス (DBG9) のみを可能とする。**

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規

第1条 この内規は、大阪大学サイバーメディアセンター（以下「センター」という。）が管理運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーション（以下「大規模計算機システム」という。）の試用制度を利用するための必要な事項を定める。

第2条 試用制度は、初めてセンターの大規模計算機システムを利用する者（以下「利用者」という。）に一定の期間利用させることによって、同システム利用についての知識の向上と教育研究活動と学習に役立てることを目的とする。

第3条 試用制度を利用することができる者は、次の各号のいずれかに該当するものとする。

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員（非常勤講師を含む。）及びこれに準ずる者
- (2) 大学院の学生
- (3) 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関（前号に掲げる機関を除く。）で、センターの長（以下「センター長」という。）が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
- (6) 前各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者

第4条 利用者は、所定の申請書により申請し、センター長の承認を得なければならない。ただし、上記の申請はセンターホームページから行えるものとする。

第5条 センター長は、前条の申請について適当と認めた場合は、当該利用番号を与えて承認するものとする。

第6条 利用者の有効期間は、前期（4月～9月）3ヶ月間、又は後期（10月～3月）1ヶ月間とする。ただし、当該会計年度を超えることはできないものとする。

- 2 基本負担額 10,000 円の場合と同じ計算機資源を利用可能とする。
- 3 利用有効期間を超えた場合は、強制的に利用を取り消すものとする。

第7条 利用者は、当該利用番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 センター長は、この内規に違反した場合、もしくは氏名等を偽り利用した場合、その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生ぜしめた場合には、当該利用の承認を取り消すことがある。

附則

この内規は、平成12年11月30日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附則

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

附則

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

附則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員指導員内規

第1条 大阪大学サイバーメディアセンター（以下「センター」という。）は、センターが管理・運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーション（以下「大規模計算機システム」という。）の共同利用の効果を高め学術研究の発展に資するため、大規模計算機システム利用相談及び指導活動（データベース開発指導を含む。）を行う。

2 前項の目的のため、センターに利用相談員（以下「相談員」という。）及び利用指導員（以下「指導員」という。）を置く。

第2条 相談員及び指導員は、共同利用有資格者の中から広報委員会が候補者を推せんし、教授会の議を経てセンター長が委嘱する。

第3条 相談員及び指導員の任期は、4月1日又は10月1日から1カ年とする。ただし、再任を妨げない。

第4条 相談員は、電子メール等を利用しオンラインで、第1条第1項のセンター利用相談活動を行うものとする。

第5条 指導員は、所属の地区協議会連絡所において、第1条第1項のセンター利用指導活動を行うものとする。

第6条 相談員及び指導員には、センター利用相談及び指導の必要上、計算機利用のために特定の番号を与えることができる。

2 前項に係る利用経費の負担額は免除する。

第7条 センターは、相談員及び指導員に対し相談及び指導上必要な資料もしくは情報を提供するものとする。

第8条 センターは、相談員及び指導員に対する研修会並びに研究連絡会等を実施するものとする。

2 前項の企画及び実施に当たっては、広報委員会が企画・立案し、教授会の承認を得るものとする。

第9条 相談員には、第6条第1項の目的以外においても、一定量の大規模計算機システム使用にかかるジョブ優先処理等の特典を与えることができる。

第10条 この内規に定めるもののほか、必要な事項については広報委員会で検討後、教授会の議を経てセンター長が別に定めるものとする。

附則

この内規は、平成12年11月30日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程

第1条 大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会（以下「本会」という。）は、大阪大学サイバーメディアセンターが管理・運用する共同利用・共同利用拠点のスーパーコンピュータシステム、コンピュータシステム及び関連するネットワーク（以下「大規模計算機システム等」という。）の利用を希望し、本会に所属するものの利便をはかることを目的とする。

第2条 本会の事務局を大阪大学サイバーメディアセンター内に置く。

第3条 本会は、大阪、和歌山、奈良、兵庫、岡山、香川、愛媛、高知及び徳島の9府県内にある連絡所をもって会員とする。

2 上記以外で、理事会が特に認めた連絡所は会員とすることができる。

第4条 連絡所を設けようとするものは、責任者を定め、連絡所登録申請書を本会事務局へ提出し、理事会の承認を受けなければならない。

2 前項の連絡所の廃止をするものは、連絡所廃止届を本会事務局へ提出しなければならない。

3 連絡所の責任者は、その連絡所に所属し、大規模計算機システム等を利用するものを代表して、必要な事務を処理する。

第5条 本会は、第1条に示された目的を達成するため、次の事業を行う。

- 一 会員の登録承認
- 二 大阪大学サイバーメディアセンターと会員間の連絡及び調整
- 三 他の地区協議会との事務連絡及び情報交換
- 四 その他理事会が必要と認めた事項

第6条 本会に会長1名、理事若干名の役員を置く。

2 本会に幹事若干名を置き、役員を補佐せしめることができる。

3 幹事は、理事会の承認を経て、会長が委嘱する。

第7条 会長は本会を代表し、本会の業務を総括する。

2 会長は理事の互選によって定める。

3 会長の任期は2年とし、再任を妨げない。ただし、任期途中で交代した会長の任期は、前任の会長の残任期とする。

第8条 理事は会員の互選によって定める。

2 理事の任期は2年とし、再任を妨げない。ただし、任期途中で交代した理事の任期は、前任の理事の残任期とする。

第9条 会長は理事会を招集し、その議長となる。

2 理事会は次の事項を審議する。

- 一 連絡所の設置の承認
- 二 事業計画の立案並びに実行
- 三 その他会長が必要と認めた事項

3 理事会は、理事現在数の2分の1以上の出席がなければ開催することができない。ただし、あらかじめ委任状を提出したものは出席者とみなす。

4 理事会の議事は、出席者の過半数をもって決し、可否同数のときは、議長が決する。

第10条 会長は年1回以上総会を招集し、その議長となる。

2 総会は次の事項を審議する。

- 一 本会規程の改廃
- 二 事業報告
- 三 事業計画
- 四 その他理事会が必要と認めた事項

3 総会は、会員現在数の5分の1以上の会員が出席しなければ開催することができない。ただし、あらかじめ委任状を提出したものは出席者とみなす。

4 総会の議事は、出席者の過半数をもって決し、可否同数のときは議長が決する。

第11条 本会は、特定事項の審議等のため、必要に応じて専門部会を置くことができる。

2 専門部会に関し必要な事項は、本会が別に定める。

附 則

この改正は、平成12年10月4日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成14年10月15日から施行し、平成14年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成17年10月14日から施行し、平成17年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成21年10月16日から施行し、平成21年4月1日から適用する。

ネットワーク専門部会内規

第1条 大型計算機利用大阪地区(第6地区)協議会(以下「第6地区協議会」という。)規程(以下「協議会規程」という。)第11条に規定する専門部会として、ネットワーク専門部会(以下「専門部会」という。)を置く。

第2条 専門部会は、学術研究、教育活動等を支援するネットワークの情報交換等の便宜を図り、地域に貢献することを目的とする。

第3条 専門部会は、次の各号に掲げるものをもって構成する。

- 1 協議会規程第3条に規定する会員
- 2 その他専門部会が必要と認めた者

第4条 専門部会に部会長を置き、第6地区協議会会長が指名する。

2 部会長は、専門部会を招集し、その議長となる。

第5条 専門部会は、通常は年1回、第6地区協議会の開催に併せて開催することとし、必要に応じて開催することができる。

附 則

この内規は、平成14年10月15日から施行し、平成14年4月1日から適用する。

・ 附表

大規模計算機システム ホスト一覧

サーバ名	ホスト名
ログインサーバ※	login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
ファイル転送サーバ	ftp.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
Mail サーバ	mail.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp

※スーパーコンピュータなどの演算システムへは、ログインサーバ経由での接続となります。
(ホスト一覧表には明記していません)

SX-8R、SX-9 及び PC クラスのジョブクラス一覧

スーパーコンピュータと PC クラスのジョブ資源制限値は次のとおりです。

クラス	経過時間		使用 CPU 数		主記憶 (GB)	
	既定値 (分)	最大値 (時間)	既定値	最大値	既定値	最大値
DBG	1(1 分)	1(10 分)	1	4	1	16
SX8F(SXF)	1	24	1	8	1	120
SX8L(SXL)	1	120	1	32	1	1000
SX8L(届出制)	1	240	1	64	1	2000
DBG9	1(1 分)	1(10 分)	1	4	1	128
SX9	1	24	1	64	1	4000
SX9(届出制)	1	240	1	128	64	8000
PCC	1	720(4CPU まで)	4	128	16GB/ノード	
		120(16CPU まで)				
		24(128CPU まで)				

(注)DBG クラス、経過時間の括弧内の数字は CPU 時間の既定値と最大値です。

募 集

- ・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について ----- 51

大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

センターでは、大規模計算機システムを利用して研究したことを主体とする内容の広報誌の発行を予定しています（年2回）。この広報誌に掲載する次の内容の記事を募集しますので、皆様のご投稿をお待ちします。

1. 随筆
2. 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発の紹介
3. プログラムの実例と解説
4. その他、広報誌に掲載するにふさわしいもの

*投稿いただいた方には、掲載した広報誌5部を進呈いたします。

【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
 - ・ ページ設定（Microsoft Word2003 の設定です。）
 - ・ 用紙サイズ A4縦
 - ・ 1 ページの文字数と行数：行数 50、行送り 18.2pt、1頁2段書き
 - ・ フォント 本文 MS明朝10Point
題名 MSゴシック14Point、
執筆者氏名 MS明朝10Point、なお、姓と名の間及び機関と学部と専攻名の間は半角スペースを入れる。
 - ・ 余白 上 20mm、下 20mm、左右 20mm、印刷形式：標準
 - ・ その他 セクションの開始位置：次のページから開始
用紙の端からの距離：ヘッダ 15mm、フッタ 17.5mm
垂直方向の配置：上寄せ
 - ・ 文字等の設定
 - ・ 年は西暦で記述する。
 - ・ 数字、英字は半角（書式：times new roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角
 - ・ 文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧は全角
 - ・ 日本語文中の句読点は半角の“、”“。”を使用せず、全て全角の“、”“。”とする。
2. Microsoft Word2003 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、pdfファイルに変換してください。
3. 原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。
usersv@cmc.osaka-u.ac.jp
なお、送信の際、件名を「計算機利用ニュース原稿」と入力くださるようお願いいたします。
4. 原稿ファイルの容量が10MBを超える場合は、CD-R等の電子媒体に記録のうえ以下の送付先にお送りください。

【原稿の送付先】

〒567-0047

大阪府茨木市美穂ヶ丘5-1 大阪大学情報推進部情報企画課情報企画班

【注意事項】

1. お送りいただいた原稿を掲載する際、原稿の修正をお願いすることがありますのでご了承ください。
2. 提出いただいた原稿は、サイバーメディアセンターのホームページにて公開いたしますので、ご了承ください。

広報委員会委員

小田中 紳 二 (委員長、大阪大学サイバーメディアセンター)
藤 堅 正 (近畿大学理工学部)
豊 永 昌 彦 (高知大学理学部)
前 迫 孝 憲 (大阪大学大学院人間科学研究科)
養 老 真 一 (大阪大学大学院法学研究科)
小 郷 直 言 (大阪大学大学院経済学研究科)
阿 部 浩 和 (大阪大学サイバーメディアセンター)
清 川 清 (大阪大学サイバーメディアセンター)
竹 蓋 順 子 (大阪大学サイバーメディアセンター)
時 田 恵一郎 (大阪大学サイバーメディアセンター)
馬 場 健 一 (大阪大学サイバーメディアセンター)

大阪大学サイバーメディアセンター

計算機利用ニュース 2009年度 Vol.5 No.1

2009年12月発行

編集者 大阪大学サイバーメディアセンター
広報委員会

発行者 大阪府茨木市美穂ヶ丘5-1 (〒567-0047)
大阪大学サイバーメディアセンター
Cybermedia Center, Osaka University
Tel: 06-6879-8808
URL: <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/>

印刷所 大阪市福島区玉川3-6-4
阪東印刷紙器工業所

目 次

大規模計算機システム利用者報告 …………… 1	利用規程等 …………… 41
【論 文】	・規程関係 …………… 43
・弱い背景磁場のある電子・イオンプラズマ中の 非相対論的な無衝突衝撃波の 2次元PICシミュレーション 加藤 恒彦、高部 英明 …………… 3	大阪大学サイバーメディアセンター 大規模計算機システム利用規程 …………… 43 大阪大学サイバーメディアセンター 大規模計算機システム利用負担額一覧 …… 44 大阪大学サイバーメディアセンター 大規模計算機システム試用制度利用内規 …… 45 大阪大学サイバーメディアセンター 大規模計算機システム利用相談員指導員内規… 45 大型計算機利用大阪地区（第6地区） 協議会規程 …………… 45
【利用者体験談】	ネットワーク専門部会内規 …………… 46
・レーザー研利用者の体験談と講習会について 福田 優子 …………… 7	・附表 …………… 47
・スーパーコンピュータによる非圧縮流れの 並列数値計算 吉田 尚史 …………… 10	大規模計算機システム ホスト一覧 …… 47 SX-8R、SX-9及びPCクラスタの ジョブクラス一覧 …………… 47
・一ユーザーからみた CMCスーパーコンピューターシステム 駒 美保 …………… 12	募 集 …………… 49
・Hot gluons and strings inside SX-8 supercomputer Maxim Chernodub …………… 13	・大規模計算機システムを利用して行った 研究・開発等の記事の募集について …… 51
・RCNP大型計算機を用いた 超変形 ⁴⁰ Caにおける8重極振動モードの研究 小笠原 弘道 …………… 14	
・原子核の様々な構造の共存 谷口 億宇 …………… 15	
・第14回コンピューショナル・マテリアルズ・ デザイン(CMD®)ワークショップについて 岸 浩史、中西 寛、笠井 秀明 …… 16	
センター報告 …………… 21	
・2008年度大規模計算機システム利用者論文、 研究成果一覧 …………… 23	
・平成20年度大阪大学近藤賞受賞 …………… 32	
・大規模計算機システムQ&A・LINK集 …… 33	
・平成21年度大規模計算機システム利用 相談員・指導員名簿 …………… 35	
・平成21年度大規模計算機システム利用 相談員・指導員自己紹介 …………… 36	

(お願い)

このニュースは、本センター利用者（利用登録者）の皆様にご配布しています。
お近くの研究者・大学院生の方にも、このニュースをご回覧くださるようお願い申し上げます。