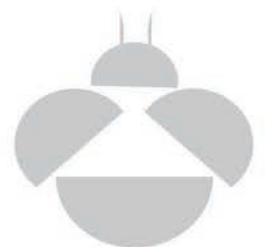


CYBERMEDIA HPC JOURNAL

Cybermedia Center, Osaka University

No. 4



July, 2014.

目 次

特 集	1
・大阪大学サイバーメディアセンターでの可視化サービス	3
下條 真司、伊達 進、清川 清、安福 健祐、竹村 治雄	
・「うめきた」産学連携拠点	11
下條 真司	
・阪大の高解像度立体 VR 可視化システムの利用事例の紹介	15
萩田 克美	
大規模計算機システム利用者研究報告	21
・格子QCD計算によるハドロン間相互作用およびハドロン構造の解明にむけて	23
池田 陽一	
・圧縮性流体差分計算のための C++コードのベクトル化	27
岩本 幸治、村上 匡且	
・高性能光学素子の型加工におけるダイヤモンド切削工具の損耗機構	33
島田 尚一、宇田 豊、本田 索郎	
・Ab Initio Study of Tetragonal Co-Doped BiFeO ₃ with Low-Spin and Intermediate-Spin Co ...	37
Dan Ricinski	
・数値シミュレーションによる量子重力の研究	41
花田 政範	
・分子雲コア中での星形成の数値シミュレーション	45
町田 正博	
・電子状態計算に基づくナノスケール物質の物性解明と物質設計	49
岡田 晋、丸山 実那、山中 綾香	
センター報告	53
・2013 年度大規模計算機システム利用による研究成果、論文一覧	55
・第 19 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2013)報告および 第 20 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2014)告知	73
・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	75
・2014 年度大規模計算機システム利用講習会	77
・2013 年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	78
・2014 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	104
・2014 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	105
・2014 年度大規模計算機システム利用相談員	106
・大規模計算機システム FAQ	111
・サイバーメディアセンターIT コア棟新営及び吹田本館改修工事について	119
・次期スーパーコンピュータ	121

利用規程等	125
• 規程関係	127
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	127
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	129
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	131
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内規	131
• 附表	133
大規模計算機システム ホスト一覧	133
SX-8R, SX-9 及び PC クラスターのジョブクラス一覧	133
2013 年度大規模計算機システム稼働状況	135
 募 集	 137
• 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	139
• 大規模計算機システム利用案内	140

特 集

- 大阪大学サイバーメディアセンターでの可視化サービス 3
下條 真司、伊達 進、清川 清、安福 健佑、竹村 治雄
大阪大学サイバーメディアセンター
- 「うめきた」産学連携拠点 11
下條 真司 大阪大学サイバーメディアセンター
- 阪大の高解像度立体 VR 可視化システムの利用事例の紹介 15
萩田 克美 防衛大学校応用物理学科

を図 1 に示す。本システムでは、利用者が電子顕微鏡や高度先進医療機器等の科学データ計測機器より取得される時間解像度および空間解像度の高いデータ、大規模計算機資源を利用して取得された解析結果やシミュレーション結果に対して、それらのデータ所在を意識することなく、ネットワークを介してアクセス、可視化できるようにすることを目的とする。そのため、本システムは、それらデータの意味を情報欠損なく提供可能とする高精細・高解像度大規模可視化装置、および、科学データ計測機器から取得された大容量データや、「京」を中核とする HPCI システムでの大規模な計算結果を共有可能にするための大規模可視化処理用ネットワークストレージから構成されている。さらに、大規模可視化装置は、用途、設置場所を考慮して、本センター豊中データステーションおよび本センターのうめきた拠点に分散配置されている。

これらをまとめると、今回導入したシステム構成は以下の通りとなる。以降の節で、これらの構成要素について、システム概要、想定用途の視点から概説する。

- 1) 高精細立体表示装置@豊中データステーション
- 2) 高精細立体表示装置@うめきた拠点
- 3) 大規模可視化処理用ネットワークストレージ

これらの装置は、高速ネットワークに接続され、連携して動作することが可能となっている。

2.2 高精細立体表示装置@豊中データステーション

図 2 に本センター豊中データステーションに導入した高精細立体表示装置を示す。図 2a は乗用車のモデルを実寸台で立体視している様子であり、図 2b は本年のいちょう祭における一般向けの施設公開の様子である。本システムは、水平 150 度程度の超広視野を有する 1920x1080(フル HD) 50 インチプロジェクションモジュール 24 面(約 5000 万ピクセル)、および、バックエンドで可視化処理を行う画像処理用 PC7 台から構成される、通常の会議室のメインス

クリーンとしての利用も可能な、世界最大級の高精細 3 次元タイルドディスプレイによる 24 面大型立体表示システムである。2.4 節でまとめる大規模可視化処理用ネットワークストレージと高速ネットワークで接続することにより、世界最大級の高精細画像を立体かつインタラクティブに表示するシステムとして構築されている。

本システムは、高速な学内ネットワークで接続され、2.4 節に記すネットワークストレージと接続することにより、世界最大級の高精細画像を立体かつインタラクティブに表示することを可能とする。図 3 に示すように、Intel Xeon 2.5GHz プロセッサ 2 個、64GB の主記憶、NVIDIA 製 GPU Quadro K5000 を有する計算機 7 台から構成される画像処理用 PC クラスタは、本表示システムで表示を行う可視化処理を高速に行うことが可能である。さらに、この画像処理用 PC クラスタは用途に応じて、稼働オペレーティングシステムを Windows あるいは Linux に起動時に選択できるようデュアルブート構成としており、「京」を中核とする HPCI における多様な需要やニーズに対応できるよう構成している。また、利用者となるユーザの視点に合わせた高精細表示が可能となるように、OptiTrack Flex138 カメラモーショントラッキング装置等を具備する構成となっている。また、こうした可視化結果を多人数で同時に眺めることが可能となるように、複数の表示装置からの入力をオンデマンドかつ簡単に操作できるよう、マトリクススイッチ、ミキサー、パワーアンプなどの AV 機器、テレビ会議システムを操作可能とする制御システムを導入している。さらに、これらの大規模可視化立体表示システムを容易に利用できるよう、産業・学術分野で多く使われる汎用的な可視化ソフトウェアおよび VR ユーティリティについて導入している(表 1, 表 2)。

本高精細立体表示装置は従来の CAVE システムの後継として、HPCI と連動した可視化に関する全国共同利用施設としての利用促進を行っていくことを想定している。将来的には、50 名程度のキャパシティを備える一般的な会議室としても利用可能な設備と

2.3 高精細立体表示装置@うめきた拠点

本センターでは、「HPCI と連動するネットワーク共有型可視化システム(CyberCommons)」の導入に先立ち、2013年4月に開業された、大阪府大阪市北区のグランフロント大阪[3] タワーC9階に、情報通信研究機構(NICT)、関西大学、関西学院大学、大阪電気通信大学、バイオグリッド関西、コンソーシアム関西、サイバー関西プロジェクト(CKP)と共同で、大規模計算結果などの可視化によるアウトリーチと共同研究、産学連携を目指したコラボレーションオフィス VisLab Osaka をうめきた拠点として開設している。本オフィス VisLab Osaka には、本センター、CKP [4]、NICT と NTT 西日本が協力することによって、世界でも最先端のネットワークが整備されつつある。すなわち、NII が運営する学術機関用のネットワーク、SINET4、NICT が運営する研究開発用テストベッド JGN-X を利用することが可能となる。

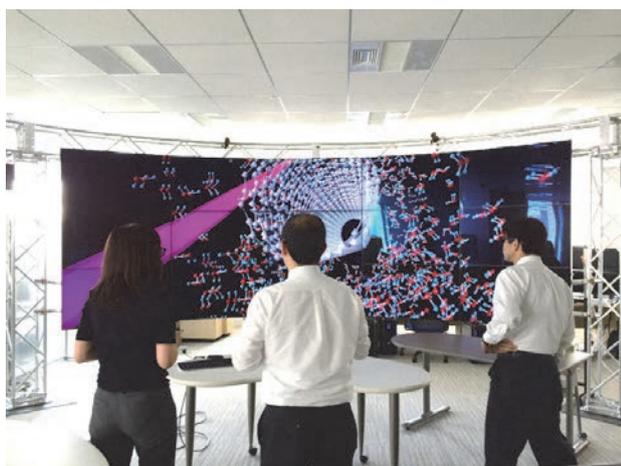


図4：高精細立体表示装置@うめきた(シリンダリカル立体表示システム、データ提供東京理科大学工学部山本貴博氏)

システム全体構成(うめきた)

特徴：15面偏光立体視方式によるシリンダリカル表示システム(6830x2304ドット)

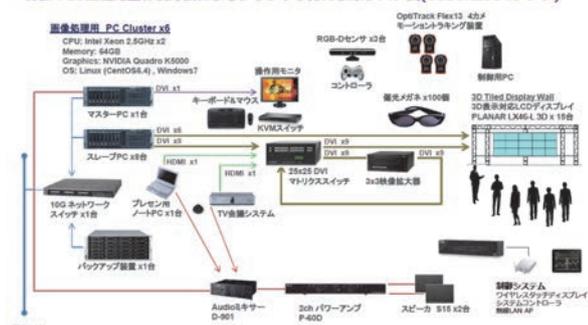


図5：高精細立体表示装置@うめきた(シリンダリカル立体表示システム)の構成

うめきた拠点に図4に示される高精細立体表示装置を導入した。図4はカーボンナノチューブと水分子を立体視している様子である。本システムは、1366×768(WXGA)の高解像度を有する46インチLCD15面(約1600万ピクセル)、および、バックエンドで可視化処理を行うことのできる画像処理用PC5台から構成される。本システムはイリノイ大学シカゴ校のEVL(Electric Visualization Lab[5])の方々の様々な助言を得ながら、規模は小さいながらCAVE2™と同等のシステムとなっている。

本システムは、本センター豊中データステーションに設置された24面大型立体表示システムと同様に、高速な学内ネットワークで接続され、2.4節に記すネットワークストレージと接続することにより、世界最大級の高精細画像を立体かつインタラクティブに表示することを可能とする。Intel Xeon 2.5GHz プロセッサ2個、64GBの主記憶、NVIDIA製GPU Quadro K5000を有する計算機6台から構成される画像処理用PCクラスタは、本表示システムで表示を行う可視化処理を高速に行うことが可能である。さらに、この画像処理用PCクラスタは用途に応じて、稼働オペレーティングシステムをWindowsあるいはLinuxに起動時に選択できるようデュアルブート構成としており、「京」を中核とするHPCIにおける多様な需要やニーズに対応できるよう構成している。また、利用者となるユーザの視点に合わせた高精細表示が可能となるように、OptiTrack Flex134 カメラモーショントラッキング装置等を具備する構成となっている。また、こうした可視化結果を多人数で同時に眺めることが可能となるように、複数の表示装置からの入力をオンデマンドかつ簡単に操作できるよう、マトリクススイッチ、ミキサー、パワーアンプなどのAV機器、テレビ会議システムを操作可能とする制御システムを導入している。さらに、これらの大規模可視化立体表示システムを容易に利用できるよう、表1、表2に示す汎用可視化ソフトウェアおよびVRユーティリティを導入している。

本センターではうめきた拠点を産学連携拠点と位

置づけ、HPCI の普及啓蒙、産業界の利用促進を行っていくことを想定している。また、豊中データステーションと同様に遠隔会議設備も備わっており、ネットワークを介して他の装置と連携して動作することができる。そのため、大規模データの可視化はもとより、画面を分割して利用することで、遠隔会議を行いながら他の可視化装置と連動して、データの解析を行うといった、複数の遠隔拠点と連携して共同研究を推進することを可能にする研究基盤としての利用方法を想定している。

2.4 大規模可視化用ネットワークストレージ

20CPU コア、64GB 主記憶から構成される計算ノード 64 台を高速インターコネクト技術 InfiniBand FDR により相互接続した PC クラスタシステム (128CPU、1280 コア) に、ハードディスク 432TB および SSD 730GB のネットワークストレージ、NVIDIA 製 Tesla K20 48 枚、NVIDIA 製 GRID K2 2 枚からなる GPGPU の計算資源を大規模データ可視化の要望に応じて自在に再構成できる、大規模可視化システムのためのネットワークストレージ用 PC クラスタとして導入している (図 6)。

本システムの特徴は、計算資源をプール化し、HPCI サービス提供に際して、汎用演算装置、特定演算用アクセラレータや拡張 I/O デバイス装置を利用者の要請に応じて、並列可視化処理や広域ファイル共有用途にその一部や全部を再構成可能とする点である。この特徴を実現するために、汎用演算ノードと、特定演算用アクセラレータや拡張 I/O デバイスを搭載する拡張 I/O ノードによって構成し、これらを、高性能演算用クラスタリング・ネットワーク、計算資源再構成用ネットワークおよびコモディティ・ネットワークからなる複層構成のネットワーク接続装置により相互接続している。具体的には、図 1 に示すように、ハードディスク 432TB および SSD 730GB のネットワークストレージだけでなく、NVIDIA 製 Tesla K20、NVIDIA 製 GRID K2 といった GPGPU 資源を、利用者の需要者ニーズに応じて自在に計算ノードに接続することを可能とする ExpEther

を中核とする再構成可能クラスタとして実現した。また、計算ノード間は InfiniBand FDR により相互接続し、広帯域低遅延の通信により、大規模な計算を高速に行うことを可能とした。本システムの性能特性を表 3、4 にまとめる。



図 6：大規模可視化ネットワークストレージ

表 3：ネットワークストレージ用 PC クラスタシステム・プロセッサ性能

	ノード性能	クラスタ性能 (56 ノード)
プロセッサ数	20	1120
演算性能	0.4 TFlops	22.40 TFlops
主記憶容量	64 GB	3584 GB

表 4：ネットワークストレージ用 PC クラスタシステム・GPU 性能

	GPGPU	GPGPU 性能 (48 ノード)
演算性能	1.17 TFlops	56.16 TFlops

3. 可視化サービス

3.1 サービス概要

本センターでは、前節で紹介した「HPCI と連動するネットワーク共有型可視化システム (CyberCommons)」を核として、本センターの一般利用者だけでなく、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI) [2]や学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN) [7]で選定された課題研究者に対して、現在可視化サービスを開始したところである。現時点で提供を開始あるいは予定している、以下の可視化サービスにむけた取り組みを紹介する。

- 1) 講習会、セミナー、ワークショップ開催
- 2) 可視化相談窓口の開設
- 3) うめきた拠点サービス
- 4) 大規模可視化に関する研究開発

3.2 講習会、セミナー等の開催

利用者に対してシステムに導入されたソフトウェアやツールの利用方法を修得する機会を提供することは、サービスセンターとしての非常に重要なユーザ支援となる。本センターでは、今日までも本センターの利用者や本センターの大規模計算機資源の利用を検討されている方を対象に、大阪大学キャンパス内において、IDL 利用入門、AVS 可視化処理入門、AVS 可視化処理応用といった可視化に関連したサービスを行ってきた [9]。本センターでは、引き続きこれらの講習会を継続するとともに、可視化技術およびその最新動向についての情報提供を積極的に行っていく。

3.3 可視化相談窓口の開設

可視化は、扱うデータによって利用する可視化技術・技法が多様に異なる。また、利用できるソフトウェアも多様に異なる。そのため、利用者が本センターあるいは他拠点の大規模計算機資源を用いて解析結果やシミュレーション結果を取得したとしても、直観的に分かりやすく可視化を行えない場合が多々ある。また、今日の計測技術の発展によって時

間・空間的解像度が非常に高い科学データが取得可能になりつつある一方、利用者はそれらの大規模データを欠損なく表示することに苦勞する場合がある。さらに、ある拠点で取得したデータを、他の拠点に転送し計算を行い、その後、さらに他の拠点で可視化を行いたい、遠隔の地点と同じ画面を見ながら、議論したいといった、ネットワークを利用し複数の拠点にまたがる科学研究を実施したい場合、情報科学を専門としない利用者にとっては、どのような計算技術、ネットワーク技術、可視化技術を利用すればよいのか分からない場合がある。

本センターでは、そのような視点から、利用者が直接本センターの担当教員に相談できる相談窓口を開設すべく準備を進めている。本サービスは、本センターおよびうめきた拠点において、利用者の利便性にあわせて提供予定である。

3.4 うめきた拠点利用サービス

本センターの利用者ならびに利用を検討している方向けに、うめきた試行サービス [10] を開始している。うめきた試行サービスは、大規模計算や可視化、アウトリーチに関するセミナー、ワークショップ、研究集会などの開催といった利用用途に限定して、2.3 節で紹介した本センターのうめきた拠点を対象となる利用者に提供するサービスである。JR 大阪駅、阪急梅田駅から徒歩 5 分以内にある立地条件であるため、すでに数多くの問い合わせと利用実績がある。関心のある方は、本センターの可視化サービスウェブページ [10] を参照されたい。

3.5 大規模可視化に関する研究開発

本センターでは、本システムの導入に先立ち、システムの一部や全部を再構成し、ユーザに提供する計算技術の実現にむけて研究開発[6]をすでに推進している。また、同時に、遠隔地に配置された、本節で概説したようなシステム上で解析・シミュレートされたデータを、ユーザのインタラクティブな可視化操作と Software Defined Networking (SDN)を連動させ、2.2 および 2.3 節で概説したような可視化装

置上でシームレスに可視化するための技術開発に関する研究開発[7]もまた進めている。

4. おわりに

京や HPCI システムの整備により、大規模計算環境が整い、その利用が進むに従って、どのように大規模な計算結果を容易に理解できるようわかりやすく見せるかという「大規模データの可視化」がますます重要になってきている。また、市民や異分野の研究者に研究成果をわかりやすく示すことも重要になってきている。そのため、HPCI システムの中にスーパーコンピュータと連動する可視化装置群が設置され、それらを連動させながら、各地の研究者や市民を巻き込んだ研究成果の可視化を進める必要がある。

本センターはこのような大規模データの可視化をサービス面、研究面からも推進することを目指している。

参考文献

- (1) 清川 清, ミランダ ミゲル, 野崎 一徳, 安福 健祐, 伊藤 一男, 岩田 恭典: "HOPE-高精細没入型周壁面ディスプレイの開発", 日本バーチャルリアリティ学会 大会論文集, 2C2-2, Sep. 2007.
- (2) High Performance Computing Infrastructure (HPCI), <https://www.hpci-office.jp/>.
- (3) Grand Front Osaka, <http://www.grandfront-osaka.jp/>.
- (4) Cyber Kansai Project (CKP), <http://www.ckp.jp/>.
- (5) Electric Visualization Lab, <http://www.evl.uic.edu/index.php>
- (6) 多田大輝, 市川晃平, 伊達進, 阿部洋丈, 下條真司, "オーバレイネットワークを用いたマルチサイト仮想クラスタ構築システム", 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム 第40号, vo.5, no. 5, pp. 76-89, 2012.
- (7) Tomoya Furuichi, Susumu Date, Hiroaki Yamanaka, Kohei Ichikawa, Hirotake Abe, Haruo Takemura, and Eiji Kawai, "A prototype of network failure

avoidance functionality for SAGE using OpenFlow", *Proceedings of 2012 IEEE 36th International Conference on Computer Software and Applications Workshops*, pp.88-93, Jul. 2012

- (8) Joint Usage/Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures (JHPCN), <http://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>.
- (9) 大阪大学サイバーメディアセンター利用者講習会 2013, <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/news/news20130501.html>.
- (10) 可視化サービス, <http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp/>.

「うめきた」産学連携拠点

下條 真司

大阪大学 サイバーメディアセンター

本センターは昨年4月のグランフロント大阪開業時より、情報通信研究機構（NICT）、関西大学、関西学院大学、大阪電気通信大学、バイオグリッド関西、コンソーシアム関西、サイバー関西プロジェクト（CKP）と共同で大阪うめきたの知的創造拠点ナレッジキャピタルに大規模計算結果などの可視化によるアウトリーチと共同研究、産学連携を目指した“コラボレーションオフィス” VisLab OSAKA”を開設している。また、ナレッジキャピタル内の楽しく先端技術に触れることのできる交流施設 The Lab では、可視化結果や様々な研究成果をわかりやすく公開する展示やワークショップを行っている。うめきたでは、大規模計算結果の「可視化」と共有を目指した新しい利用体験を提供することを狙っている。本稿では、この新たな取り組みについて紹介する。

はじめに

昨年4月26日、JR大阪駅の北に新しい街 Grand Front Osaka が開業した。巨大なビル4棟からなり、レストランやショップ、ホテル、マンションを抱える大型商業施設であるが、その真ん中二棟（タワーBとC）の低層階はいささかユニークな施設「ナレッジキャピタル(Knowledge Capital)」である(図1)。このナレッジキャピタルは人間の創造性と技術を掛け合わせることで、新たな価値を創造するというコンセプトに基づき造られたうめきたのシンボルともいえるゾーンである。このコンセプトを簡単にいうと「街中のイノベーションパーク」であると思っている。本センターは、当初よりこのコンセプトに賛同し、街の立ち上げにも深く関わりながら、ここに“VisLab OSAKA”という大規模データの可視化をテーマとした産学連携施設を立ち上げている。「可視化」とは、本センターのスーパーコンピュー

タの計算結果のような大量の情報をわかりやすく提示することで、直感的な理解を促し、新たな知見を得ることを指す。昨年10月からは試行サービスとして本センター利用者を対象に本施設の試行利用を開始し、本年4月からは、うめきた産学連携施設内にも豊中と同様の大規模可視化装置が設置され、大量情報の表示と共有が行えるようになっている。

ナレッジキャピタルの現状



図1 グランフロント大阪

ナレッジキャピタルは、都市型のサイエンスパークと見ることが出来る。その中には、サイエンスパークに入居する研究所や大学が入るナレッジオフィス、入居者や外部の人々との交流を図るナレッジサロン、小規模オフィスであるコラボオフィス、ナレッジシアター、コンベンションセンター、Future Life Showroom、そして、最新の研究成果の展示場であるThe Labを備えている。各施設が、ナレッジキャピタル構想の実現の為に、連携している。例えば、Future Life Showroomは単なる企業のショールームではなく、各企業が少しずつ工夫をして製品コンセプトを提示したり、実験的な試みを行っている。ナレッジオフィスには、我々を始め、関西大学や大阪工業大学などが、町中キャンパスを開いている。本学では他に、環境イノベーションデザインセンター

(CEIDS) が、サテライトオフィス『地域共創ラボ うめきた』を開設し、人材育成活動を始めている。

The Lab はナレッジキャピタル内のユニークな展示場、博物館である。そこでは、出展者が最新の研究成果や製品のプロトタイプを展示している。そこを訪れる人が最新の研究成果に触れることができるとともに、コミュニケーターといわれるメディアータにより、研究者は自分の研究がどのように評価されるか、どのように使われるか、ひいてはどうか説明すればわかってもらえるのか、といった反応を実感し、研究に反映させることができる。企業は、製品のプロトタイプを展示することによって、市場に出す前の消費者の反応を得ることができるとともに、新しいニーズへのヒントをつかむことができるかもしれない。また、出展者や研究者同士が The Lab の展示を介してお互いに刺激し合い、新たな研究やビジネスチャンスにつながる可能性もある。オープンイノベーションと参加型研究開発の拠点を狙ったものであり、本センターがオフィスを設置したねらいもそこにある。

VisLab OSAKA

ナレッジキャピタルのコンセプトである人間の想像力を生かした未来生活の価値発信のためには、技術だけが先行してもうまくいかない。技術を人に優しく、時には、飼いならして行く必要がある。これには、デザインやアートが必要である。ルネッサンスやダビンチを例に出すまでもなく、科学技術の発展はそのあり方を含めて、芸術に大きく影響を与えてきたし、芸術も絵の具や遠近法など、科学技術との関係は切っても切れない。

このような科学技術と芸術の融合が今こそ必要である。とくに、そのようなスキルを持った人材を育てることが重要であるという認識は、多くの大学で共有されている。MIT の medialab, スタンフォードの D-school, UIUC の e-dream institute などがそれである。このような学際的、国際的、分野融合型の人材育成を「可視化」というキーワードを通じて行っていくとするのが、本センターが主体となって始め

ている VisLab OSAKA というグループの活動である。現在は、大阪大学、NICT、関西大学、関西学院大学、大阪電気通信大学、NPO 法人バイオグリッド関西、CKP、がそれぞれの得意分野を活かしながら、活動を行っている。

産学連携施設利用の概要

VisLab OSAKA の活動の拠点がタワーC 9 階の産学連携施設である。本施設には、大阪大学と NTT 西日本、NICT、CKP が協力することによって、世界でも最先端のネットワークが引かれている。すなわち、国立情報学研究所 (NII) が運営する学術機関用のネットワーク SINET4、NICT が運営する研究開発用テストベッド JGN-X を引き込んでいる。ここは、外部との接続とともに、ナレッジシアターや The Lab への実験用ネットワークの展開拠点となっている。したがって、本学のスーパーコンピュータをはじめとする様々な資源を利用した可視化結果をうめきた内に展開することが可能である。NICT 側のスペースには、大規模可視化装置として、24 面タイルドディスプレイ、3D 表示が可能な 10 面タイルドディスプレイを備えている。阪大側のスペースには、本年 4 月に新たに大規模可視化装置が導入されている

(図 2)。このオープンスペースでは、大規模可視化装置を利用した様々な形の研究集会、セミナーなどを行うことができる。すでに、昨年 10 月 1 日から、本センターが、主としてセンター利用者を対象として、9 階スペースを活用する試行サービス始めている (図 3)。

ここに設置された大規模可視化装置は、豊中の装置と互換性を持ち、大規模高精細な 3D 機能により AVS などのソフトウェアで作成された可視化結果を表示するとともに、TV 会議システムを備え、可視化結果を共有しながら、遠隔サイトとディスカッションを行うといったことが可能である。可視化装置の詳細については、当該論文を参照されたい。本施設は、これまでも講習会や研究セミナーに用いられてきた。利用者の利便性の為の無線 LAN サービス、eduroam も最近開始された。これにより、eduroam

参加大学であれば、無線LANローミングサービスを受けることができる。



図2 9F 産学連携施設に設置された大規模可視化装置



図3 オープンスペースでの会議の様様(バイオグリッドと共催の講習会)

おわりに

うめきたのナレッジキャピタルは、大阪駅直結の絶好のロケーションであり、また、広く人びとに研究成果を公開する施設 The Lab も備えている。本施設を通じた産学連携などの研究活動が広がることを期待している。現在行われている試行サービスは、10月から本格的利用へと展開していく予定である。利用については当センターにお気軽にご相談いただきたい。

阪大の高解像度立体 VR 可視化システムの利用事例の紹介

萩田 克美

防衛大学校 応用物理学科

1. はじめに

誰もが知るとおり、一般社会における Visualization 技術は、ブラウン管から液晶パネルへの移行程度の技術変化ではなく、一般生活に大きな影響を与えている。特に、CG (コンピュータ・グラフィックス) という視点では、ゲームや映画などが、発展の原動力である。計算機を用いたシミュレーションにおいては、その結果を可視化し、観察することは、重要な研究手段とされてきた。最近のスーパーコンピュータ (High Performance Computing) では、演算能力は飛躍的に向上し、生み出されるデータは爆発的に増大している。この HPC の成長により、従来に比べ近似の少ない計算が実現する研究分野や、従来よりも大きなシステムサイズを扱う研究分野がある。大規模可視化処理技術の視点では、後者に関し、深刻な問題になりつつある。特に、愚直に可視化することが困難になり、データを保存し転送することも難しくなっている。この問題に対しては、データ転送圧縮なども含むアルゴリズム的な改善の他に、(スパコン性能に追従した経済的に合理的な範囲での) ハードウェアのアップグレードも、重要な要素である。

探索的な大規模可視化を実現できる高解像度表示装置によって、仮想現実 (VR) 空間内で、自由に探索し、シミュレーション結果、特に、複雑な 3 次元構造の空間認知や挙動の把握が、促されると期待している。高精細高解像度表示装置においては、電子顕微鏡や実写のカメラで撮影された広い空間の像を、人間が前後左右に動きながら、じっくりと観察することで、気づきを促されることが期待される。

大阪大学サイバーメディアセンターでは、可視化に関するサービス・プロバイダーとしての活動 (可視化サービス <http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp>) を開始したと伺っている。2014 年 5 月の学園祭 (いちょう祭)

では、サイバーメディアセンターの施設見学を行い、盛況であったと伺っている (図 1 参照)。(著者も、VR コンテンツを提供し、協力させていただいた。)

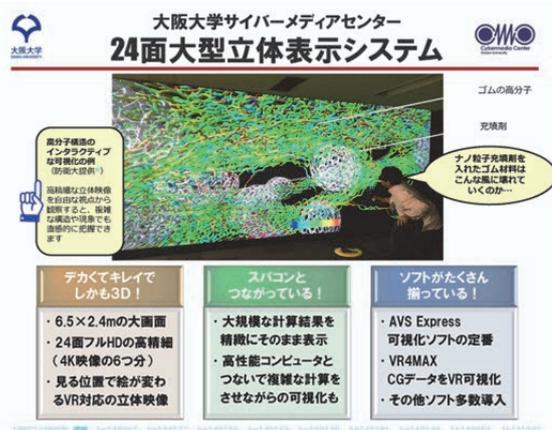


図 1 : 2014 年のいちょう祭でのデモンストレーション

また、我々の JHPCN (学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点) の公募課題 (課題番号: 14-NA28) では、大阪大学、名古屋大学、東北大学の高精細高解像度可視化装置 (図 2 参照) を、シミュレーション結果や複雑な 3 次元構造についてのディスカッション (探索的発見、理解共有) に活用する計画である。特に、ネットワークを活用した連携が実現するように、利用技術の検討を深めている。

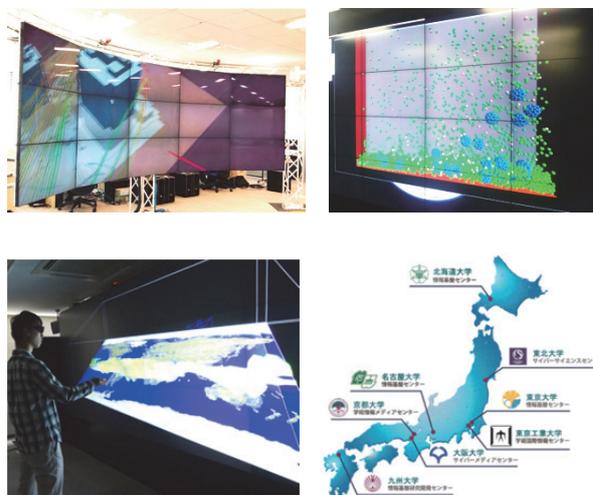


図 2 : 阪大 (うめきた拠点)、名古屋大、東北大の高精細高解像度可視化装置と、JHPCN ネットワーク型研究拠点

2. 複雑な 3 次元形状の VR 可視化

物質材料系の研究や教育において、原子分子の 3 次元空間中での複雑な形状が様々な物性に影響を与えることから、その複雑な形状を観察し、空間認知することは、一定の意味がある。

原子の結晶の 3 次元構造は、古くから研究され、網羅的に知られている。多くの読者になじみのあるものは、立方晶の単純な結晶格子である、ダイヤモンド格子（配位数 4）、単純立方格子（配位数 6）、体心立方格子（配位数 8）などであろう。これらは、立方晶で配位数を制約した下で、均等で等方的であるという条件を課した場合に得られるものである。配位数 3 でも同様な条件で、格子を定めることができる。1932 年に Leaves ら[1]が、このネットワーク構造（Laves graph 3_1 ）を提案している（図 3 左）。

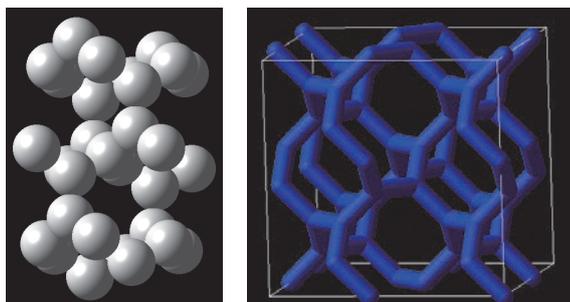


図 3 : Laves らが示した 3_1 グラフと、SRS 格子

結晶学の観点では、この構造をもつ SrSi_2 に由来した SRS 格子[2]や、Well's (10, 3)-a グラフ[3]と呼ばれている。一方で、離散微分幾何の観点では、 $K4$ 対称性を持つ数学的意味から、 $K4$ 格子[4]と呼ぶ場合もある。（なお、SRS という呼称は、現在、IUPAC proposal として、その名称の登録が検討されており、今後、名称が統一されていくのかも知れない。）Laves graph 3_1 において接触する 2 つの球の中心間を接続した線で、図 3 右に示す SRS 格子を得ることができる。このグラフは、 $I4_1\bar{3}2$ の対称性を持ち、空間群 214 番として分類されている。このような構造は、原子が粒子の位置を占めるものだけではない。ブロックコポリマーなどの高分子相分離系では、エネルギーが極小状態での界面が、Triply Periodic Minimal Surface（立方晶での極小曲面）の G-surface（図 4）と呼ばれる構造が、入れ子になった、double gyroid 構造と

いうものが観察されている。その片方のみを取り出すと、single gyroid 構造になる。これらの構造の認識においても、興味深い歴史がある。文献[5]などにに基づき、年代順に整理して紹介する。「Single gyroid 構造は、Luzzati らが、1967 年に実験的に発見した。1969 年に、Alan Schoen は、この gyroid 面が、TPMS であることを、指摘した。また、Double gyroid 構造は、Thomas らにより、1986 年に実験的に発見されていたが、当時は、別の構造と認識していた。1994 年の Hajduk らと Shulz らの 2 つのグループによる独立な実験で、double gyroid 構造の存在が確認された。」なお、この double gyroid 構造は、 $Ia\bar{3}d$ の対称性を持ち、空間群の 230 番目として分類されている。double gyroid 構造の発見以降、格子状の形状から gyroid lattice という用語もよく用いられている。

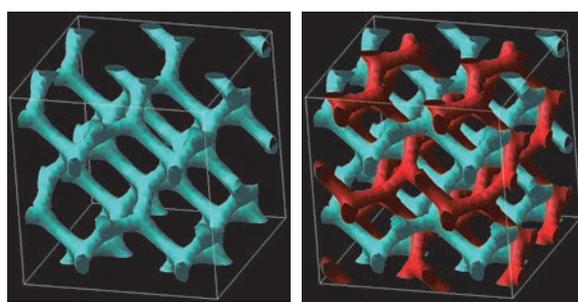


図 4 : single gyroid 構造と double gyroid 構造

前段の説明が長くなったが、このような複雑に込み入った形状（配置やネットワーク）が、同一の物であることを直感的に理解する手段として、VR 援用は 1 つの選択肢である。3 次元構造の VR を手軽に行う手段として、AVS/Express で作られる gfa ファイルを用いる方法がある。この形式のファイルは、レンダリングの中間ファイルを保存しており、3D AVS Player というフリーソフトで再生することができる。（最近、Windows 版に加えて、Linux 版が配布されている。）（同様のことは、AVS-Field 形式や PDB 形式などのデータを共有し、設定条件も共有すれば、VMD でも実現できる。）

3 次元での幾何構造に関する研究書籍においては、下図のような Stereo Pair イメージが紙面上に掲載される場合がある。個人的な感想ではあるが、Stereo Pair イメージに適応するための目の動きに集

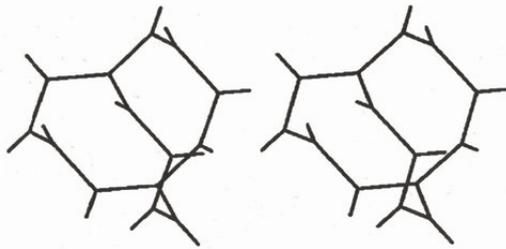


図5：Stereo pair of image of a portion of the net for the Heesch-Laves sphere packing 3_1 . (This picture is reprinted from book “New Geometries for New Materials” by E.A. Lord, A. L. Mackay, S. Ranganathan. The HPC journal received permission to the reprint from Cambridge University Press.)

中力が取られ、画像が飛び出るとは確認できるが、じっくりと構造を観察することは難しい。なお、これへの簡単な処方は次の通りである。スキャナー等で取り込み映像化し、Bino3d[6]と呼ばれる3次元動画再生ソフトで、Nvidiaの3dVisionによる立体視で観察することが簡単にできる。(これにより、参考文献[5]とした「New Geometries for New Materials」に示された多くのStereo Pairイメージをストレスなく観察することが可能となった。)

いま、2視点からの立体視について紹介したが、多視点の画像から、複雑な立体構造の推定・再構成についても、最近の進展は興味深い。建造物などの立体構造物の自動的なモデリングを目的として、Many multi-view stereo (MVS) algorithmsが、GoogleやMicrosoft、Industrial Light & Magicなどにより、勢力的に検討されている。詳細は省くが、技術的ポイントは、画像中の特徴点抽出と3次元形状とカメラの位置を同時に復元する手法 (Structure from Motion) である。Bundler (by Noah Snavely)やCMVS (by Yasutaka Furukawa and Jean Ponce)で、実際に、double gyroid 構造 (2unit cells) について、360度をぐるりと1度刻みで用意した360枚の画像からの再構成を試みた所、図6右の結果が得られた。当たり前ではあるが、内部ほど構造の再現は悪いが、表面近くは再現できている。このような情報処理技術を、材料研究の世界で、情報科学と計算科学の協働により、活用できる日が来ることを期待している。

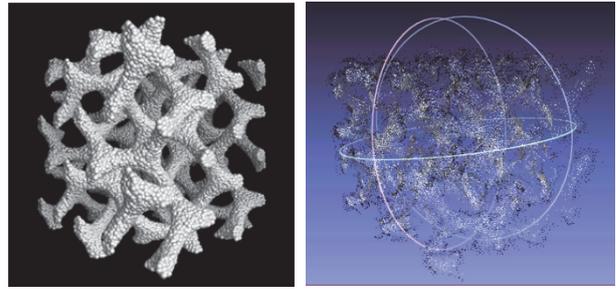


図6：入力画像の1例と再構成した立体構造のsnapshot

3. 高精細高解像度の大規模可視化

大阪大学サイバーメディアセンターの先端的な高精細高解像度可視化装置では、11520 x 4320 (豊中) や 6830 x 2304 (うめきた拠点) といった、研究室レベルで対応可能な4Kディスプレイよりも高解像度な環境を共同利用することができる。このような環境は、サイエンスのみならず、社会データのグラフ関係の表示や文化財・美術品の鑑賞などでも、活用されることが期待される。

本章では、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模可視化システムを用いて、高精細高解像度の可視化を行った事例を紹介する。

最近の粒子系シミュレーションでは、粒子数が、数千万以上を扱う事が普通になり、愚直な可視化は技術的に難しくなっている。あらかじめ、予想される構造を取る場合や、粗視化の手続きが明確な場合については、工夫した可視化を施すことが可能となる。しかしながら、未知の構造をとるものを可視化する場合、愚直な可視化と慎重な観察は、アプローチの一つとして重要であると考えられる。また、高精細高解像度の表示装置の最大解像度を活かした詳細部分の観察も魅力的な機能の一つである。(過去には、表示装置がなかったため、B0で300dpiのポスタープリンタの利用を念頭にした約17000x12000の解像度のBitmap作成をAVS/Expressやその派生品で検討したことがある。) 特に、部分部分の可視化では見えなかった大域的な構造や挙動などの認知への活用が期待される。加えて、超並列プログラム開発・改造時においても、可視化してしまえば一目で分かる誤りなどの気づきにも繋がると考えられる。

ここ数年、我々は、自然科学研究機構の若手連携

プロジェクトや、JHPCN 公募研究や名大 HPC プロジェクトの課題において、超多粒子系の可視化について、分野横断的に検討してきた。これらでは、プラズマ・天文・材料などの粒子系シミュレーション分野では、1 億を超えるような多数の粒子を扱うようになり、可視化が困難になってきたという背景がある。異なる分野の若手研究者が、議論したり、ノウハウを交換したりすることで、可視化する技術の研鑽を行ってきた。それらの枠組で、天文のシミュレーション結果の可視化ソフト Zindaiji3[7]を用いて、高分子材料の粗視化 MD シミュレーション結果の高品位な高解像度可視化動画の作成を試みた。ここでは、約 1 千万粒子の系を試験的に扱った。模型の詳細説明は避けるが、この系は、バネビーズ模型の高分子（図 7）と、ナノ粒子（図 8）から構成される系である。ここで、ナノ粒子の大きさは、高分子の太さの約数十倍であり、高分子と大きさの差がある。

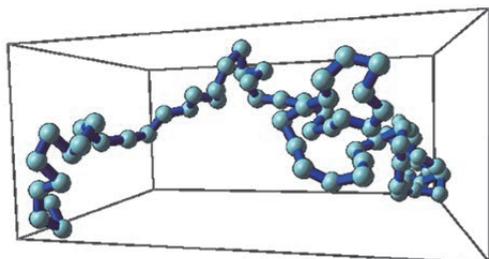


図 7 : バネビーズ模型の高分子鎖の模式図

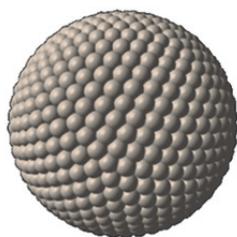


図 8 : ナノ粒子の模式図

Zindaiji3 では、カメラパス付きの povray[8]用の入力ファイルを作成することができる。ここでは、Zindaiji3 を、色づけやオブジェクトの大きさを決める可視化表現設定と、カメラパスの設定の 2 つの目的で利用した。この系について、高分子とナノ粒子を画面表示させると、図 9 左のようになる。GPU で処理が加速されているものの、一度の描画に数分の

時間を要する。このレスポンスで、カメラパスの設定作業を行うことは困難である。そこで、カメラパスの設定時には、全てのオブジェクトのデータを用いず、特徴点となる物体を粗視化したものを配置した空間（図 9 の右）で作業した。図 9 右のデータで作成したカメラパス情報を用いて、図 9 左に対応する povray のシーンファイルをレンダリングした。

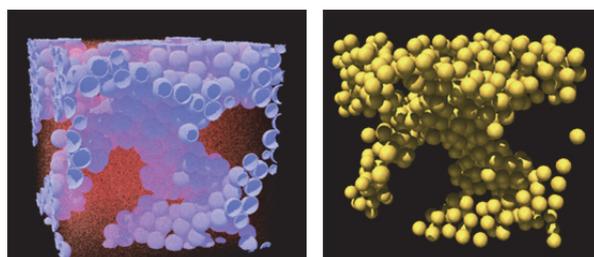


図 9 : 超多粒子系の高品位高解像度可視化の例（左図で、青色がナノ粒子を表し、茶色が高分子を表している。右図は、ナノ粒子 1 つを球で表現している。）

この povray 処理のシーンファイルは、約 1GB ある。Povray3.7 では、rendering 時にスレッド並列化され rendering の性能は向上している。しかしながら、この系の場合、アプリケーションの全体性能としては、一時ファイルの出力が律速となる。改善には、図 1 0 と図 1 1 に示すように、povray-3.7 のコードで 2 カ所の改造が必要である。また、バッチジョブでは、標準出力ファイルのサイズ軽減として、作業状況を実況する出力の抑制も必要な改造である。

```

146,156c146
<                                     //path = "/tmp/";
<     char *tmpdir;
<     tmpdir=getenv("TMPDIR");
<     if(tmpdir == 0) {
<         tmpdir = "/tmp";
<     } else {
<         printf("TMPDIR (2) is set to %s %n",tmpdir);
<     }
<                                     path = tmpdir;
<                                     path = path + "/";
<
---
>                                     path = "/tmp/";

```

図 1 0 : vfe/unix/unixoptions.cpp の diff

```

116d115
<     { "Create_Continue_Trace_Log",
kPOVAttrib_BackupTrace, kPOVMSType_Bool },
247d245
<     { "CC", kNoParameter,
kNoParameter, kPOVAttrib_BackupTrace },

```

図 1 1 : source/frontend/processrenderoptions.cpp の diff

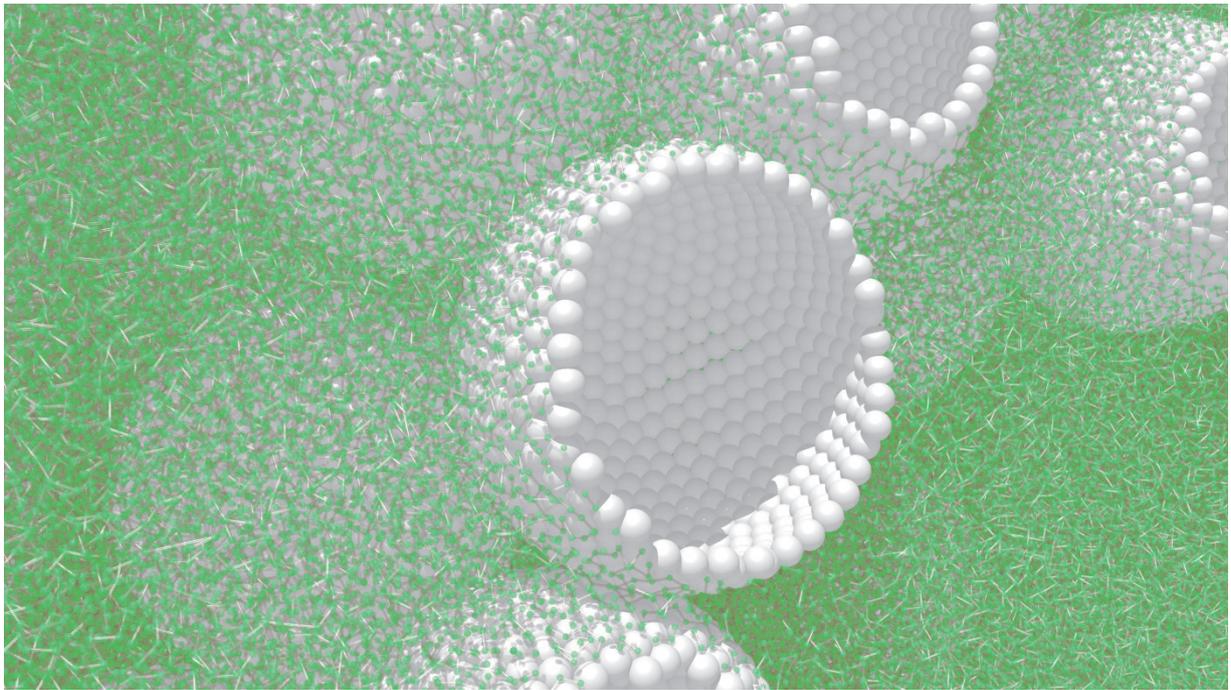


図 1 2 : 超多粒子系の高品位高解像度可視化の例 (600dpi で、4K 解像度 3840x2160 に対応。)

VCC (大規模可視化システムの計算クラスター) の最初の大規模試験として、全 56 ノードを同時に利用して、豊中の 24 面タイルドディスプレイの (ベゼル部を加えた) フル解像度 (11540x4332) での povray レンダリングを実施した。ここで、VCC の各ノードには 20Cores 搭載されていることから、1 ノード毎に 1 コマのレンダリングを行い、20 スレッドの SMP 並列として実行した。また、IO 処理を高速化するために、/dev/shm を利用した。(各ノードのメモリ使用量は、約 52GB であった。) 結果的には、滞りなく、約 1000 コマの PNG ファイルをレンダリングするこ

とができた。(なお、一枚の PNG は、約 40~80MB であった。) その一例を図 12 に示す。なお、図 12 の大きさを 600dpi の印刷をした場合、4K の解像度 (3860x2160) となる。(印刷状況によっては困難かも知れないが、) 広い領域について、高分子を表す ball-stick を一つ一つ見ることができる。特に、高輝度のディスプレイ環境では、高いコントラストにより、鮮明に見ることができる。最後に、povray では、ガラス玉のように、光が透過し屈折する可視化表現を得意としている。(図 1 3 参照)

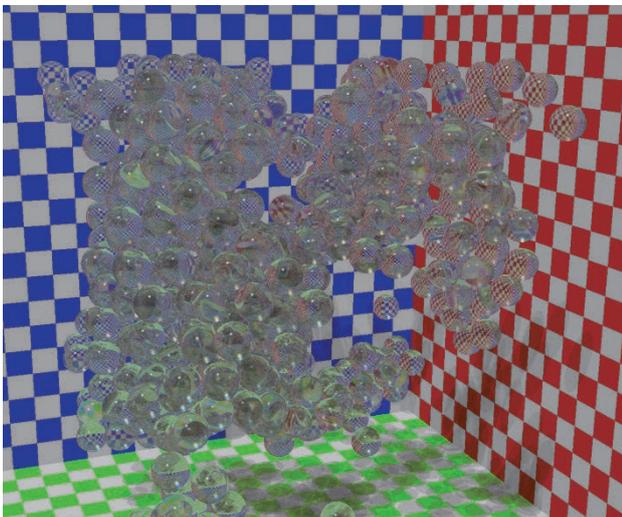


図 1 3 : povray でナノ粒子をガラス玉とした表現例

4. 今後と展望

高精細高解像度可視化装置と大規模可視化技術は、大規模シミュレーションの時代においては、ナショナル・インフラとして、皆が利用できる共同利用として整備されることが望ましいと考えられる。観察の補助道具として利用する点でも、一般公開／アウトリーチの場面でも、有効と想像している。ゲームや映画での CG の発達により、一般の人々にとっても、高品位な可視化は、当然のものになっている。そのような一般目線を踏まえつつ、大規模シミュレーション研究の立場で可視化を考えると、大規模可視化技術という苦勞に直面する。超多粒子の系

の大規模 VR 可視化については、Computing としての力技と、効果的な簡易表現の、うまい組み合わせが有効打となる。有志の若手研究者で模索をしているところであるが、この領域への可視化の専門研究者の貢献を望んでいる。現在では、計算と可視化をリアルタイムで行う、interactive なシミュレーションも、(バックエンドの計算クラスターと連携し) 大規模かつ高解像度なものを扱うことが可能になり、活用が望まれる。さらに、一般向けには、Compelling な可視化が望ましく、Human Interface Device 等との連携を含め、情報技術分野のコモディティ技術・民生品を利活用することも重要であると考えている。

5. 大阪大学サイバーメディアセンターへの期待

大阪大学サイバーメディアセンターに導入された高精細高解像度可視化装置は、実際に目にする、確かに、研究室レベルのハイビジョン画質と比べ、とても素晴らしい施設であることが分かる。観察の補助道具という視点からすると、使いやすさが、重要な要素となる。現実問題として、研究室レベルでも 3D VR 技術の活用は進んでおり、昔に比べて、技術的優位性を示すことが難しくなっている。

これまでの VR 可視化装置について苦言を呈すると、サービス提供の視点が大いに欠けていたと思われる。VR 可視化が一般化し、その大規模装置の恩恵を一般的なユーザーが受けたいと考える時代を見据えれば、大きな変革が必要である。かねてより、筆者は、先端的な可視化装置において探索的可視化での空間認知や新たな気づきなどを期待し、その利用を試してきた。正直言えば、これまで、ユーザーが利用する共同利用装置としては、利便性が悪かった。今後、高精細高解像度可視化装置が、観察の補助用具として、大いに活用されるためには、複数の定番ソフトが、いつでも、確実に動く、安定したサービス提供が最低条件であると著者は思う。加えて、この高精細高解像度可視化装置を活かすための大規模可視化技術の提供も重要であると考えられる。

全国共同利用の大型計算機センターとして「可視化サービス」(<http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp/>) を、大々

的に標榜した大阪大学サイバーメディアセンターには、大いに期待したいと考えている。

なお、本文章で紹介した多くのコンテンツは、大阪大学の高精細高解像度可視化装置にて、デモとして視聴していただけることを宣伝しておく。

謝辞

CAVE の利用をはじめとして、長年にわたり、大阪大学 清川清准教授、下條真司教授には、VR の利活用の検討に協力いただき、感謝しております。ダブルジャイロイド構造 (SRS 格子) に関する知見については、著者の学生時代から、(同級生である) 旭川医大 寺本敬准教授には、多くのアドバイスを頂きました。超多粒子系の可視化に関しては、自然科学研究機構の若手連携プロジェクトなどを通じて、核融合研 大谷寛明准教授、伊藤篤志助教、広島大学 加藤恒彦特任助教、東工大 齋藤貴之准教授、元国立天文台 武田隆顕博士 (Zindaiji3 の開発者) には、有益な議論をして頂きました。高分子粗視化 MD シミュレーションは、トヨタテクニカルディベロップメント (株) との共同研究の成果である。可視化検討の全般において、サイバネットシステム (株) に、ご協力いただき、感謝いたします。

参考文献

- (1) H. Heesch, F. Laves, Z. Kristallogr., **85**, 443-458, (1933).
- (2) O'Keeffe, et. al. Acc. Chem. Res. A **41**, 1782-1789 (2008). (doi:10.1021/ar800124u)
- (3) A. F. Wells, Acta Crystallogr., **7**, 535-544, (1954).
- (4) T. Sunada, Not. Am. Math. Soc. **55**, 208-215 (2008).
T. Sunada, Correction, Not. Am. Math. Soc. **55**, 343 (2008).
- (5) E. A. Lord, A. L. Mackay, and S. Ranganathan, "New Geometries for New. Materials", Cambridge University Press (2006).
- (6) <http://bino3d.org/>
- (7) <http://qcgame.web.fc2.com/ZINDAIJI3/Zindaiji3Top.html>
- (8) <http://www.povray.org/>

研究報告

※「研究報告」では、利用者様が大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システムを、どのように利用しておられるのか報告いただいております。今回は、特に活用いただいている方々から頂いた研究報告を掲載します。

- ・格子 QCD 計算によるハドロン間相互作用およびハドロン構造の解明にむけて 23
池田 陽一 理化学研究所仁科加速器研究センター

- ・圧縮性流体差分計算のための C++コードのベクトル化 27
岩本 幸治 愛媛大学大学院理工学研究科
村上 匡且 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター

- ・高機能光学素子の型加工におけるダイヤモンド切削工具の損耗機構 33
島田 尚一、宇田 豊 大阪電気通信大学工学部機械工学科
本田 索郎 大阪府立産業技術総合研究所

- ・Ab Initio Study of Tetragonal Co-Doped BiFeO₃ with Low-Spin and Intermediate-Spin Co 37
Dan Ricinski 東京工業大学大学院総合理工学研究所

- ・数値シミュレーションによる量子重力の研究 41
花田 政範 京都大学基礎物理学研究所白眉センター

- ・分子雲コア中での星形成の数値シミュレーション 45
町田 正博 九州大学大学院理学研究院地球惑星科学部門

- ・電子状態計算に基づくナノスケール物質の物性解明と物質設計 49
岡田 晋、丸山 実那、山中 綾香 筑波大学大学院数理物質科学研究科

格子QCD計算によるハドロン間相互作用およびハドロン構造の解明にむけて

池田 陽一

理化学研究所 仁科加速器研究センター

1 QCDとハドロン間相互作用

原子核・ハドロン物理の素粒子基礎理論は強い相互作用を記述する量子色力学 (QCD) であると考えられている。強い相互作用ならびに、電磁気力、弱い相互作用を含めた素粒子標準模型はこれまで多くの成功を収めている。一方で、素粒子より大きなスケールの世界において、これらの力が一体どのように示現しているのかという問いは、現在でも非常に大きな謎として残っている。例えば、原子核物理の礎を与える核力は、これまで現象論的に実験で得られた散乱位相差を再現するように構築されてきた。遠方 ($r \simeq 2\text{fm}$) における湯川のパイオン交換力、中間距離 ($r \simeq 1\text{fm}$) におけるパイオンより重たい中間子交換力、近距離 ($r \simeq 0.5\text{fm}$) の斥力というように決められてきた。

しかしながら、現代的な視点では、核子やハドロンはそもそも素粒子ではなく、クォーク・グルーオンの複合粒子であることが分かっており、QCDを基礎としてどのように核力が理解されるかという問いに答える必要がある。さらに、ストレンジおよびチャームクォークを含む系では実験データが足りない、または存在しないことがあり、現象論的核力のような相互作用の決定方法は困難となるため、QCDからハドロン間の相互作用を導出することは、今後の原子核・ハドロン物理に大きなインパクトをもたらすとともに、急務の課題と言える。

本稿では、大阪大学核物理研究センターの全国共同利用における、大規模数値計算によって大きな進展をとげている格子QCDシミュレーションを用いたハドロン間相互作用ならびにハドロン構造を解明するための試みについて紹介する。上に述べたように、QCD第一原理計算によるハドロン間相互作用の決定は、原子核・ハドロン物理に対して素粒子標準模型からの基礎付けを与えることになる。これらの研究の最新の成果について紹介すると共に、今後の展望についての解説も行う。

2 ハドロン間“ポテンシャル”の定式化

QCDから厳密にハドロン間相互作用を計算するにはどうすればよいであろうか。ここでそもそも問題となるのが、ハドロン間相互作用をどう定義すれば良いか解らないという点である。QCDのような場の量子論においては、仮想的な粒子・反粒子の対生成・消滅が無限に起こっており、通常、相互作用を定義する時に必要な、ハドロン間の距離といった類の概念が明確に定義できないためである。この問題に対する解決方法は、石井・青木・初田によって与えられ [1]、その後の発展と共に HAL QCD 法¹と名付けられた [2]。この方法では、ポテンシャルを直接定義するのではなく、まず散乱問題を考え、相互作用を特徴付ける散乱位相差を通して、ハドロン間相互作用を“ポテンシャル”の形で定義するというものである。散乱位相差そのものは観測量なので、場の量子論でも明確に定義できることがポイントである。以下、実際にどのようにしてポテンシャルを定義するのか、具体的に見ていく。

定式化のスタート地点は同時刻の Nambu-Bethe-Salpeter (NBS) 波動関数である：

$$\psi_k(\vec{r}, t) = \langle 0 | \phi_1(\vec{r}/2, t) \phi_2(-\vec{r}/2, t) | W_k \rangle . \quad (1)$$

ここで、 $\langle 0 |$ 、 $| W_k \rangle$ はそれぞれ QCD の真空と相対論的エネルギー W_k (運動量が \vec{k}) の二粒子の散乱状態を表す。この NBS 波動関数は、相互作用が無視できるほど小さくなるような、二粒子間の距離が大きくなる領域においてヘルムホルツ方程式を満たす。このため、軌道角運動量 l の NBS 波動関数は次の漸近形を持つことが示される：

$$\psi_k^{(l)}(r, t) \propto \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta(W_k))}{kr} \cdot e^{-iW_k t} . \quad (2)$$

$\delta(W_k)$ はエネルギー W_k での散乱位相差である。つまり、場の理論で定義される NBS 波動関数は、量子力学

¹Hadron to Atomic nuclei from Lattice QCD collaboration の略称。

の波動関数と形式的に全く同様の形になっており、場の理論における散乱位相差の情報をもつNBS波動関数を介して、ポテンシャルが決定できることを示している。実際、エネルギーに依らないポテンシャル $U(\vec{r}, \vec{r}')$ はSchrödinger方程式

$$2\mu \int d\vec{r}' U(\vec{r}, \vec{r}') \psi_k(\vec{r}', t) = (\nabla^2 + \vec{k}^2) \psi_k(\vec{r}, t) \quad , \quad (3)$$

により決定される。ここで $\mu = (m_1 + m_2)/m_1 m_2$ は二粒子の換算質量である。

格子QCDシミュレーションにおいては、ポテンシャルを求める際の系統誤差などをうまくコントロールするために、 $R(\vec{r}, t) \equiv \sum_k \psi_k(\vec{r}, t) / \exp[-(m_1 + m_2)t]$ を定義し、時間依存型のSchrödinger方程式

$$\int d\vec{r}' U(\vec{r}, \vec{r}') R(\vec{r}', t) \simeq \left(-\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2\mu}\right) R(\vec{r}, t) \quad , \quad (4)$$

から決定される[3]²。一般にQCDにより定義されるポテンシャル $U(\vec{r}, \vec{r}')$ は非局所形をしている。この非局所ポテンシャルを微分展開することで、中心力、テンソル力、スピン・軌道力などを順次決定していくことができる。

3 チャーム・クォーク物理への応用

HAL QCD法を用いたチャーム・クォークを含む物理系への応用について解説する。チャーム・クォークの物理は、J-PARC、Belleなどの日本の加速器実験ならびにBES、GSIなど世界の加速器実験でも調べられるハドロン物理学の主要なテーマである。特に、クォーク模型で良く再現される通常のハドロンとは異なるエキゾチック・ハドロンが実験的に報告される事例が多々あり、こうしたエキゾチック・ハドロンの構造の計算や未知の粒子の予言は急務の理論的課題となっている。ここでは、チャーム・クォークを含むクォーク四個が最低含まれるようなテトラクォーク T_{cc} の格子QCDシミュレーションを用いた解析を紹介する。

T_{cc} はチャーム・クォークを二個含み軽い \bar{u} 、 \bar{d} 反クォークを最低二個含むようなエキゾチック・ハドロンの候補である。 T_{cc} はクォーク模型のより予言され[4]、強い相互作用によって DD および DD^* といった中間子の閾値への崩壊が許されない束縛状態となることが期待されている。未だ実験研究により確認はされていないが、もし存在すれば、チャーム・クォークのスペクトルとロスコピーに非常にインパクトをもたらすものである。特に、クォーク模型の予言では、 $\bar{u}\bar{d}$ のアイソスピン0($I=0$)のスカラー・ダイクォークに強い

引力が働くとしてされており、ハドロン内部のカラー自由度ならびに相互作用を T_{cc} の構造から解析できる可能性がある。一方、 $\bar{u}\bar{d}$ の $I=1$ は斥力であるために、 T_{cc} が存在するのであれば、 $I=0$ であるとされている[5]。本研究では、 T_{cc} の存在の可能性を、 $I=0$ 、1の DD および DD^* の数値散乱実験を格子QCDにより行い、ポテンシャルを導出することで探った[6]。

図1に $I=0$ チャンネルのS波の DD^* (スピン・パリティ $J^\pi=1^+$ チャンネル)のポテンシャルを、本研究で用いられたパイオン質量 $M_\pi=410, 570, 700\text{MeV}$ の場合において示す。格子QCDシミュレーションにおいても、クォーク模型の予言と同じくして、強い引力のポテンシャルが得られた。

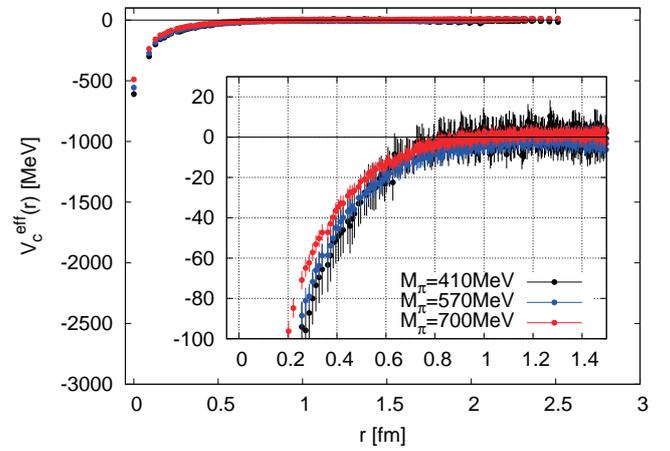


図1: $I=0$ チャンネルにおけるS波 DD^* ポテンシャル。シミュレーションに用いられたパイオン質量の依存性もともに示す。

図2に $I=1$ チャンネルのS波の DD と DD^* (スピン・パリティ $J^\pi=0, 1^+$ チャンネル)のポテンシャルを示す。 $I=1$ のチャンネルにおいても、クォーク模型の予言のように斥力のポテンシャルが得られた。以上から、格子QCDシミュレーションの結果は $\bar{u}\bar{d}$ のダイクォークの相関により理解されると言える。

$I=0$ チャンネルは引力ポテンシャルのため、束縛状態(T_{cc})が存在するかどうかを調べるのは興味深い。既に、ポテンシャルが格子QCDにより計算されているので、このポテンシャルを用いてSchrödinger方程式を解くことで散乱位相差の計算ができる。束縛状態が存在する場合には、準位反発のため散乱位相差が引力ポテンシャルであっても斥力的に見える。図3に散乱位相差の計算結果を示す。図3は明らかに散乱位相差が正の値となっていることを示している。これは、散乱位相差が引力的であることの証拠であり、束縛状態の T_{cc} が存在していないことを意味する。

²相対論的な補正項に関しては無視した。

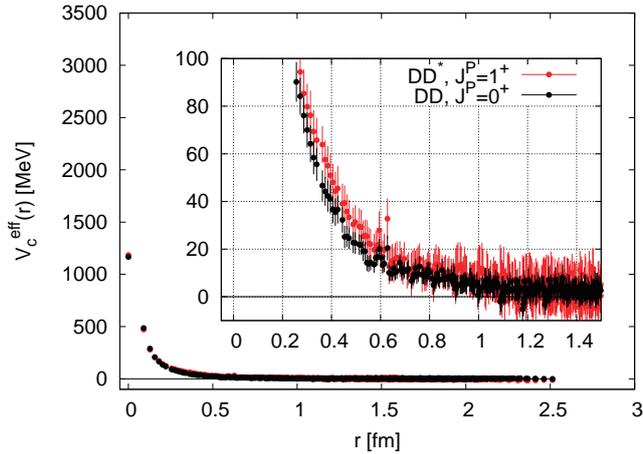


図 2: $I = 0$ チャンネルにおける S 波 DD^* ポテンシャル。パイオン質量が $M_\pi = 410\text{MeV}$ の結果を示す。

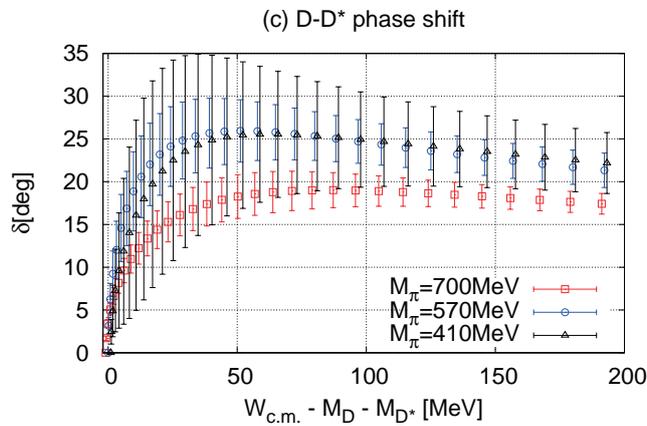


図 3: $I = 0$ チャンネルにおける S 波 DD^* 散乱位相差の散乱エネルギー依存性。シミュレーションに用いられたパイオン質量の依存性もともに示す。

本研究から、クォーク模型により予言されるダイクォーク相関が QCD の予言と定性的に一致していることが理解された。しかし一方で、格子 QCD シミュレーションから T_{cc} の存在は確認されなかった。 T_{cc} が本当に存在するかを決定するには、クォーク質量が現実的な格子 QCD シミュレーションが必要であり、今後の課題である。

4 おわりに

本稿で大阪大学核物理研究センターの全国共同利用におけるスーパーコンピューター SX を用いた、格子 QCD シミュレーションを用いたエキゾチック・ハドロンの解析方法を紹介してきた。現在、格子 QCD シミュレーションは新たな局面を迎えている。一つには、大阪大学核物理研究センターは Japan Lattice Data

Grid(JLDG)[7] のフロントエンドとして機能しており、JLDG に登録すれば、誰でも格子 QCD シミュレーションを始めることが可能であり、初学者でも利用しやすい環境にある。さらに、近年の格子 QCD シミュレーションのアルゴリズムの発展にともない、現実的クォーク質量での計算が可能となりつつある。

大阪大学核物理研究センターの全国共同利用におけるスーパーコンピューター SX は、比較的自由に使用することが可能である。特に、研究成果をあらかじめ予想することが難しい新しい発想を見いだす研究の計算において、自由に利用できる環境が日本にあることは大変好ましく、著者自身も非常に有り難く感じる。また、今後 SX-ACE が導入され計算パフォーマンスの大幅な向上も期待され、現実的なクォーク質量での格子 QCD シミュレーションも可能となることもうれしい限りである。さらに、外川浩章氏からの利用者に対するお知らせやメンテナンス、問題があった際の迅速な対応とともに、信頼できる使用環境を構築して頂いていることにも感謝したい。今後も、新しい研究を促すことのできる、現在のような運用をして下さることを切に希望している。

参考文献

- [1] N. Ishii, S. Aoki and T. Hatsuda, Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 022001; S. Aoki, T. Hatsuda and N. Ishii, Prog. Theor. Phys. **123** (2010) 89.
- [2] S. Aoki *et al.* [HAL QCD Collaboration], PTEP **2012** (2012) 01A105.
- [3] N. Ishii *et al.* [HAL QCD Collaboration], Phys. Lett. B **712** (2012) 437.
- [4] H.J. Lipkin, Phys. Lett. **B 172** (1986) 242; S. Zouzou, B. Silvestre-Brac, C. Gignoux and J. M. Richard, Z. Phys. C **30** (1986) 457.
- [5] S. H. Lee and S. Yasui, Eur. Phys. J. C **64** (2009) 283; T. F. Carames, A. Valcarce and J. Vijande, Phys. Lett. B **699** (2011) 291.
- [6] Y. Ikeda *et al.* [HAL QCD Collaboration], Phys. Lett. B **729** (2014) 85.
- [7] Japan Lattice Data Grid, <http://www.jldg.org>

圧縮性流体差分計算のための C++コードのベクトル化

岩本 幸治¹⁾、村上 匡且²⁾

¹⁾愛媛大学大学院 理工学研究科

²⁾大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター

1. はじめに

2011年11月、大阪大学基礎工学研究科の河原源太先生のご紹介で著者の1人である村上匡且先生が取り組まれている爆縮の数値計算をすることになった。「圧縮性流体の数値計算ができればよいから」ということであったが、不勉強な筆者には爆縮なんて現象は聞いたことがなく、どういう計算をすれば良いのかを自分なりに理解するまでに1か月ほどかかった。要は以下のようなことであった。球面状の衝撃波が中心に向かって収縮し、その後中心から反射する現象を考える。中心から衝撃波までの距離 R が時間の累乗で変化すると仮定する（とりあえずの仮定であるが、解いてみると仮定を満たす解があることが分かる）。さらに半径位置 r を R で無次元化した無次元座標 ξ を定義する。このようにすると、流体の速度、密度、圧力などの物理量が ξ を変数とする無次元関数を含む形で表すことができ、その関数を求めておけば任意の時間、半径位置における物理量を1つにまとめて表現することができるというものである。これは Guderley の自己相似解として知られているのである[1]。Guderley の自己相似解が表す流れは3次元球対称流れであるが、今回の計算では超球幾何形状と呼んでいる、いわばトランペット状にした壁面を使用するもので、球対称の場合よりも高圧、高密度にガスを圧縮できる。その流れを数値計算で示してほしいというものであった。

計算自体は軸対称流れ（2次元流れに多少の付加項が付いたもの）である。筆者は学生時代に圧縮性流体の差分計算を行っていたが、その当時の計算コードは FORTRAN77 で書かれていた。計算環境が変わり、最近の筆者はもっぱら C++ でコードを書くようになっていた。これからも環境は大きく変わらないと思ったので、これを機にコードを C++ で書き直

した。とはいえさほど大した苦労はなく、1ヶ月ほどでできた。というのも、擬似圧縮性法[2]による3次元数値計算コードを C++ であらかじめ作っていたからである。擬似圧縮性法は圧縮性流体の解法を非圧縮性流体に拡張したものであるため、圧縮性流体のプログラムと類似点がかかなり多い。

計算結果の一例を図1に示す。図は比熱比 7/5 で計算したものである。 τ は衝撃波が焦点に到達するまでの理論上の時間であり、負または正の時間 t においてそれぞれ衝撃波が収縮または反射する。図1では各時間において広がり大きい場合と小さい場合を示しており、軸対象流れの断面のうち、上半分を表示している。広がり大きい場合は収縮時の $t/\tau = -0.2$ において衝撃波の変形が見られる。それに対して広がり小さい場合は反射後 ($t > 0$) においても面状の衝撃波を維持している。これは球対称流れに対してより厳密に行った線形安定解析で定性的に説明できる[3]。

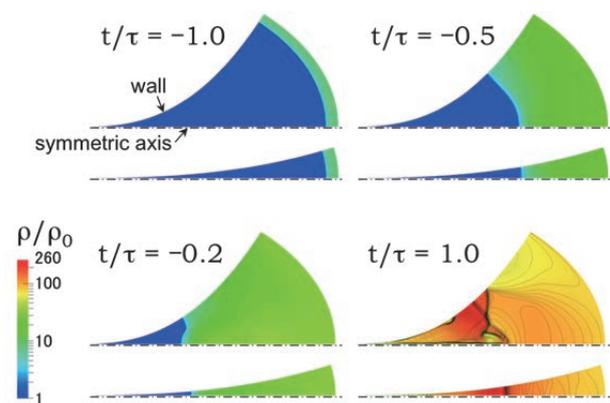


図 1：超球幾何形状中の爆縮における密度のカラーコンター[3]

パラメータを変えて図1のような計算を計算しているうちに、高圧縮条件（壁面の曲率が大きい）では衝撃波が中心に収束する際に非常に小さな時間ス

テップをとらないと負の絶対温度にアンダーシュートしてしまうことが分かった。そのため計算時間が予想以上にかかってしまうようになった。少しでも計算が速くなるよう村上先生と相談したところ、「阪大 ILE にあるスパコンを使えばどうか？」というご提案をいただいた。そこで阪大 ILE を訪問し、ILE の長友英夫先生や計算機室の福田優子さんからベクトル型スパコン SX-8R の使い方をご説明いただいた。このとき初めてベクトル計算機の実態を知り、ベクトル化のためにコードの書き直しが必要で、筆者が好んで使用している C++ で書き直している人はほとんどいないために自身でノウハウを蓄積するしかない、という現実を知らされることになった。

少しずつ問題を解決し、1 年弱を経てようやくベクトル計算機を使う甲斐のある計算が可能になった。ベクトル演算率も 97% にまで向上した。本稿では C++ でベクトル化コードに書き直した際に参考にしたもの、初心者では気づきにくい点、およびベクトル演算率向上に貢献したテクニックを紹介する。

2. C++ によるベクトル化コードの作成

2.1 参考にした資料

コンパイラの使い方は阪大サイバーメディアセンターのポータルシステムから入手できる手引書[4]から学んだ。基本的にはこれだけで十分であった。ただ、発生する様々なエラーを調べているうち、ベクトル計算とは何か？という基本的なことを理解しないと解決できない気がしてきた。そこでベクトル化についても学ぶようになった。それには講習会の資料[5]が役立った。

後述するように、最初の段階ではほとんどのループがベクトル化されなかった。言語に特有の問題があるかもしれないと考えて Web で検索したところ、C 言語のソースを SX4 用にチューニングした方による記事[6]を見つけた。この記事は日記風書かれており、短くまとめられていて助かった。とくに組み込みでない関数をループ内で呼び出すとベクトル化しないことをこの記事で初めて知った。(手引書[4]125 ページにも記載はあるが、当初は見つけられ

なかった。)

2.2 extern "C" ブロックでリンクエラーを起こす場合

あまり起こらないかもしれないが、最初に経験したエラーを紹介する。多くの流れ場の差分計算プログラムがそうであるように、ソースは複数のファイルに分散され、Makefile で管理している。Makefile の中ではそれぞれのソースファイルをまず

```
> sxc++ -c ソースファイル.cpp (または c)
```

(オプション-c でコンパイルのみを行い、リンクを起動させない) で拡張子 o のオブジェクトファイルに変換し、最後に

```
> sxc++ オブジェクトファイル 1.o オブジェクトファイル 2.o …
```

というふうにリンクしていた。ここで include するヘッダファイルのプロトタイプ宣言が extern "C" ブロック内に入っているとリンクエラーを起こす。理由は簡単で、sxc++ -c によってオブジェクトファイルを作るとソースの拡張子が何であれ全て C++ のソースとして扱われるからである。よってコンパイルされて出来る関数は全てマングルされた名前を持つ(関数の仮引数の型情報を付け加えた名前に変換される)。一方、extern "C" ブロック内にプロトタイプ宣言がある関数はマングルされていない名前でプログラムから探される。そんな名前の関数はあるはずもなく、リンクエラーを起こす。今回は extern "C" ブロックがなくてもよいプログラムであったので、それらを全て取り除いた。これによってコンパイルが通るようになった。

知識のある方ならば extern "C" ブロック内にプロトタイプ宣言がある関数のソースは sxc++ でコンパイルしなければいけないと即座に指摘されるであろう。しかし、それが分からなかった。というのは Linux の g++ やオプション/Tp つきの Visual C++ でコンパイルする場合はリンクエラーが起こらないからである。C++ 用であるにもかかわらず、これらのコンパイラは extern "C" ブロック内で宣言されている関数に対しては名前をマングルしない。これを全てのコ

ンパイラで共通の仕様と勘違いしていた。g++や Visual C++に既に慣れておられる方は陥るかもしれない問題なので念のために記しておいた。

なお、後に分かったことであるが sxc++でも extern "C"ブロック内にプロトタイプ宣言がある関数の名前をマングルさせないようにすることも出来る。それは以下のように、途中でオブジェクトファイルを作らずに一気にリンクまで行うことである。

```
> sxc++ ソースファイル 1.cpp (または c) ソース  
ファイル 2.cpp (または c) ...
```

2.3 自作クラスが保有するポインタによる自動ベクトル化の阻害

ようやくコンパイラが通るようになったが、編集リスト (手引書[4]199 ページ)を確認すると、ほとんどのループが自動ベクトル化されていなかった。原因の1つは、前述のように組み込みでない関数をループ内で呼び出していたことである。呼び出している関数の命令を全てループ内に直接書き込み、再びコンパイルしてみた。しかし、まだベクトル化されない部分が多々あった。手引書[4]を調べるうちに、自作クラスが保有するポインタが自動ベクトル化を阻害していることが分かった。これらのポインタは配列を動的に確保するために使用している。自作クラスが保有するポインタは関数の単位を超えて生存するため、別の関数でアドレスを共有する命令を追加することもできる。もしアドレスが共有されていたら、データ依存関係が発生するかもしれない。とすればふつうのスカラー計算と異なる計算をベクトル計算が行う可能性がある。よって自動ベクトル化をコンパイラが回避していたのである。よく見ると手引書[4]120 ページに同じ趣旨が記されているが、クラスが保有するポインタにも当てはまるということに当初は気がつかなかった。

プログラマが「アドレス共有の心配はない」ということをコンパイラに指示すれば上記の問題は解決でき、その方法は手引書[4]に示されている。コンパイラオプション-pvctl,nodep と-Orestrict=value である。前者は繰り返しループにおいてデータ依存関係

がないこと、後者は value の値によってアドレス共有がない範囲をプログラマが保証する。筆者の場合、アドレスを共有するポインタが一切ないので、-Orestrict=all を使用した。(次節で示すように、実際はアドレスを共有するポインタを作っている。しかしそれらのポインタがループ内で同時に現れることがないため、-Orestrict=all で問題ない。)

2.4 ベクトル長を長くするための工夫

オプション-Orestrict=all により多くのループが自動ベクトル化された。2次元流れのプログラムなので、その時点での筆者のプログラムは各次元でループを持ち、2重ループになっていた。この場合、ベクトル化は内側のループにのみ適用される。内側のループの繰り返し数 (=対応する方向の格子点数) が小さい場合、ベクトルレジスタを持って余して非効率である。手引書[4]を見ると、最大ベクトルレジスタ長は 256 と書いてある。今回の計算では、256 回よりもかなり小さい繰り返しになることもある。そこでループを一重化し、レジスタを効率よく活用することを考えた。ループの一重化はコンパイラオプション-pvctl,collapse によってもできるが、思わぬ副作用が起こっても困るので、1次元配列に2次元データを直線的に格納し、さらにループが一重になるようにプログラムを書き換えた。ただし、以下のような工夫を行い、必要に応じて2次元配列にもなり得る配列を使用した。

具体的には以下の4つのマクロを作成した。マクロ NEW_1D_ARRAY はメモリ確保失敗時に警告を表示する。宣言時にポインタを0で初期化しておけば、DELETE_1D_ARRAY によって不用意な解放を行うリスクを避けることができる。これらはいずれも補助的なものであり、2次元計算で用いる配列の確保および解放はマクロ NEW_2D_ARRAY_AS_1D と DELETE_2D_ARRAY_AS_1D が行う。

```
#define NEW_1D_ARRAY (/* 要素の型 */ type, ¥  
/* ポインタ */ ptr, /* 要素数 */ imax) ¥  
if (! (ptr = new (std::nothrow) ¥  
type[imax])) { ¥
```

```

printf("%s (%u): ", ¥
__FILE__, __LINE__); ¥
perror(NULL); ¥
exit(EXIT_FAILURE); ¥
} // ptr[0], ..., ptr[imax - 1]でアクセス
// #include<new>が必要
#define DELETE_1D_ARRAY( /* ポインタ */ ptr) ¥
if(ptr) { ¥
delete[] ptr; ¥
ptr = 0; ¥
} // NEW_1D_ARRAY で確保したメモリの解放
#define NEW_2D_ARRAY_AS_1D( ¥
/* 要素の型 */ type, ¥
/* 2次元配列としてのポインタ */ ptr2D, ¥
/* 1次元配列としてのポインタ */ ptr1D, ¥
/* 第1次元方向要素数 */ imax, ¥
/* 第2次元方向要素数 */ jmax, ¥
/* 作業整数 */ j) { ¥
NEW_1D_ARRAY(type, ptr1D, (imax)*(jmax)); ¥
NEW_1D_ARRAY(type *, ptr2D, jmax); ¥
for(j = 0; j < (jmax); j++) { ¥
ptr2D[i] = ptr1D + j*(imax); ¥
} ¥
} // ptr2D[0][0], ...,
// ptr2D[jmax - 1][imax - 1]でアクセス,
// ptr[j][i] = ptr1D[j*imax + i]
#define DELETE_2D_ARRAY_AS_1D( ¥
/* 2次元配列としてのポインタ */ ptr2D, ¥
/* 1次元配列としてのポインタ */ ptr1D) { ¥
DELETE_1D_ARRAY(ptr1D); ¥
DELETE_1D_ARRAY(ptr2D); ¥
} // NEW_2D_ARRAY_AS_1D で確保した
// メモリの解放

```

計算空間の第 1, 2 次元方向の格子点数をそれぞれ $imax, jmax$ とし、格子点ごとの物理量を `double` 型で格納する配列を動的に確保、解放する場合を例としてマクロの使用法を述べる。配列には 1 および 2 次元配列の 2 つの表現があり、それぞれのポインタを `a1D, a2D` とする。まず

```

double *a1D = 0, **a2D = 0;
int j; // 作業整数
NEW_2D_ARRAY_AS_1D(double, a2D, a1D, imax, jmax,
j);

```

によってポインタ宣言および配列を動的に確保する。実際に `double` 型の値を格納するのは `a1D` に割り当てられた 1 次元配列であり、その要素数は $imax*jmax$ である。これに格子点ごとの物理量が直線的に格納される。具体的に述べると、計算空間内の任意の格子点の第 1, 2 次元のアドレスをそれぞれ $i (= 0 \sim imax - 1), j (= 0 \sim jmax - 1)$ とすれば、その格子点での物理量を `a1D[j*imax + i]` に格納するようにする。`a1D` を一重化ループで使用すれば繰り返し数は $imax*jmax$ になり、 $imax$ または $jmax$ で繰り返すよりもベクトルレジスタを有効に使える。`a1D` は単調な繰り返しになるループ、特に差分計算のループで用いる。差分でよく用いられる `a1D[k]` (k はループ内で用いるインデックス) に隣接する要素にアクセスする場合、第 1, 2 次元方向でそれぞれ `a1D[k±1], a1D[k±imax]` を利用すれば良いだけであり、コードの可読性を落とすこともない。

ただし境界近傍でステンシル構成格子点を変化させたり、境界条件で値を代入したりする場合で `a1D` を使っているとコードの可読性が落ちる。そこで用いられるのが配列 `a2D` である。`a2D` には $jmax$ 個の要素をもつポインタ配列が割り当てられ、各要素が `a1D` で $i = 0$ になる場所を指すようにマクロ内の `for` 文で指定している。これにより、`a1D[j*imax + i] = a2D[j][i]` の関係を満足させる。`a2D` を用いれば、例えば $i = imax - 1$ の点は `a2D[j][imax - 1]` と表記でき、`a1D[j*imax + imax - 1]` と書くよりも可読性が高い。C 言語の 1 次元配列の定義どおりに第 1 次元方向のインデックスを最後にしている、つまり `a2D [i][j]` ではなく `a2D [j][i]` でアクセスすることに注意が必要かもしれない。境界条件などは適用させる格子点数が差分に比べて小さいため、ループをベクトル化してもそれほど効率は上がらない。ならば可読性を優先させた方が得策と考えた訳である。なお、メモリの解放では以下のように書けばよい。

DELETE_2D_ARRAY_AS_1D(a1D, a2D);

以上のアイデアは実は筆者オリジナルのものではない。学生時代にご指導いただいた現青山学院大の横田和彦先生から FORTRAN77 で書かれた圧縮性流体の数値計算プログラムをいただいたことがある。そのプログラムにこのアイデアが盛り込まれていた。ただし、実装には EQUIVALENCE 文 (メモリ共有を指定する) が使用されていた。具体的には以下のように書くだけでよい。

```
DIMENSION A1D(IMAX*JMAX), A2D(IMAX, JMAX)
```

```
EQUIVALENCE(A1D, A2D)
```

FORTRAN の場合、2 次元配列の構成要素は DO 型並びで途切れなくメモリ上に並ぶことが保証されている。これと 1 次元配列でメモリを共有することにより、今の例では $A1D((J-1)*IMAX+I) = A2D(I, J)$ の関係を持たせる (FORTRAN ではインデックスが 1 から始まるため、表現が多少異なる)。この機能を C++ で実現させるために先に示したマクロを作成した。

2.5 ISNAN、ISINF の取り扱い

前説のマクロを使った配列を用いて一重化ループに書き直し、コンパイルしたところ、それらのループは 1 つを除いて全て自動ベクトル化された。ベクトル化されない部分のメッセージを見ると、

```
Vectorization obstructive procedure reference. :  
_Dtest
```

と表示されていた。_Dtest という手続きが何なのか分からなかったが、ベクトル化できたループとそのループが異なるのはループ内でマクロ isnan と isinf を使っていたことであった。これらは計算の発散を検出するために使用している。実際にこれらのマクロをコメントアウトすると自動ベクトル化できた。しかし、これらのマクロの機能をどうしても使いたかった。というのは、計算が発散したときの対策は決まっており、時間ステップを小さくして再計算するしかない。ならばプログラムが自動で行った方が計算機の稼働率が高くできるからである。そこで自動ベクトル化を阻害せずに isnan や isinf と同じ機能

を持つ以下の 2 つのマクロを作成した。

```
#define ISNAN(x) ((x) != (x))
```

```
#define ISINF(x) ((x) == INFINITY || ¥
```

```
(x) == -INFINITY) // #include<math.h>が必要  
マクロ ISINF(x) は単に等価演算子によって x が ±  
INFINITY に等しい時は非 0、それ以外は 0 を返すだけ  
である。これと同じ方法で ISNAN(x) を定義すると、  
実際に x が NAN であっても 0 を返してしまい、  
上手く行かない。そこで上のように定義した。これ  
は NAN は NAN 自身と比較しても等しくならない性  
質を利用したものである。これらを組み込んでテス  
トしたところ自動ベクトル化され、なおかつ問題な  
く動作した。
```

2.6 最終的に利用しているコンパイルオプション

これまでの改良を経て、筆者が最終的に使用するようになったコンパイルオプションを以下に示す。

```
> sxc++ -K exceptions -pi auto -O restrict=all -R  
summary diaglist fmtlist -P auto -pvctl fullmsg  
ソースファイル.cpp (または c) ...
```

自動ベクトル化はできないが自動並列化ならば可能という部分もあったため、オプション -P auto も使用している。また、簡易解析機能 (どの関数がどのくらい時間を消費しているかなどの情報を得ることができる。手引書[4]210-222 ページに記載) を使用するときには上に加えて -ftrace オプションを使用する。これらオプションの説明を手引書[4]から抜粋して表 1 に示す。

2.7 実行結果

プログラム実行後に標準エラー出力ファイルに実行結果が出力される。ようやくコンパイルが通った時点でのコード (改良前) とこれまでに述べた改良を行った後のコード (改良後) で同一の計算を実行してみた。実行結果のうち、ベクトル計算に関するものを表 2 に示す。改良前と比べると、計算にかかる時間は約 1/13 になり、2.4 節で述べた方法により平均ベクトル長が 4 から 102 に増加した。ベクトル

表 1: コンパイラオプション (手引書[4]より抜粋)

オプション	説明
-K exceptions	例外処理機能の使用を許可
-pi auto	自動インライン展開機能を使用
-O restrict=all	全てのポインタ、リファレンスが restrict 修飾されたものとして、最適化、自動ベクトル化、自動並列化を適用
-R summary diaglist fmtlist	サマリリスト、診断メッセージリスト、編集リストを出力
-P auto	自動並列化機能を使用
-pvctl fullmsg	ループに関する詳細なベクトル化/並列化診断メッセージを出力
-ftrace	簡易性能解析機能(ftrace 機能)により性能解析できるオブジェクトファイル、実行ファイルを生成

演算率も 1% から 97% に増加させることができ、アムダールの法則[5, 6]により期待したベクトル化性能が得られるとされる 95% に近い値になった。

3. おわりに

C++ で書かれた 2 次元圧縮性流体の差分コードを SX-8R 向けに改良し、可能な限り多くの自動ベクトル化を達成できた。本稿ではその際の注意点やテクニックを紹介した。このコードを用いて、今後も多くのパターンの超球幾何形状中の爆縮計算を行い、その特性を明らかにしていきたい。

今回紹介したテクニックは、それほど難しいものではない。また、2.4 節で述べた方法は OpenMP によるループ並列化 (ループの手前に #pragma omp parallel for を書き込む) にも有効である (持て余すスレッドが少なくなる)。現在、パーソナルワークステーション (1 年前購入、100 万円程度) でも計算を行っているが、g++ と OpenMP によって SX-8R と同程度の性能を引き出すことができる。次期 SX-Ace の性能に期待したい。

表 2: 実行結果

	改良前	改良後
Real Time (経過時間) (sec)	1092	82.14
Vector Time (ベクトル命令実行時間) (sec)	54.87	60.33
Inst. Count (全命令実行数) (= ex)	5.632×10^{11}	1.176×10^{10}
V. Inst. Count (ベクトル命令実行数) (= vx)	1.255×10^9	2.812×10^9
V. Element Count (ベクトル命令実行要素数) (= ve)	5.136×10^9	2.876×10^{11}
A. V. Length (平均ベクトル長) (= ve/vx)	4.093	102.3
V. Op. Ratio (ベクトル演算率) (= $100 * ve / (ex - vx + ve)$) (%)	0.906	96.98

参考文献

- (1) Landau, L. D., Lifshitz, E. M., Fluid Mechanics 2nd Ed., Elsevier, pp. 406-411, (1987).
- (2) Stuart E. Rogers, Dochan Kwak, AIAA Journal, 29-4, pp. 603-610, (1991).
- (3) Murakami, M., Sanz, J., Iwamoto, Y., EPL, 100, 24004, 6 pp. (2012).
- (4) 日本電気株式会社, SX システムソフトウェア C++/SX プログラミングの手引 (G1AF28-13), 入手先<<https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/secure/manual/R18.1J/g1af28j/g1af28-13.pdf>>, (参照日 2014 年 4 月 27 日), (1999).
- (5) 日本電気株式会社, スーパーコンピュータシステムを利用した例題によるベクトル化・並列化入門, 入手先<<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/sx-vecpara.pdf>>, (参照日 2014 年 4 月 27 日), (2007).
- (6) 増田耕一, 平田和久, “SX4 ベクトル化日記”, 神戸大学情報基盤センター広報誌 MAGE, 27-19, 入手先<http://www.istic.kobe-u.ac.jp/activity/mage/m27/27_SX4.pdf>, (参照日 2014 年 4 月 27 日), (1998).

高機能光学素子の型加工におけるダイヤモンド切削工具の損耗機構

島田 尚一⁽¹⁾、宇田 豊⁽¹⁾、本田 索郎⁽²⁾

⁽¹⁾大阪電気通信大学 工学部 機械工学科、⁽²⁾大阪府立産業技術総合研究所

1. はじめに

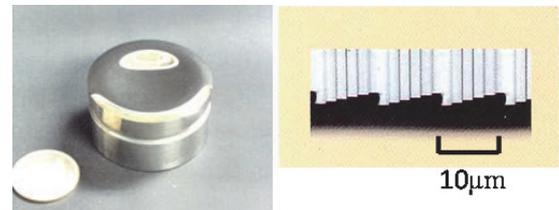
非球面鏡やレンズ、マルチステップ回折格子、フレネルレンズ、マルチレンズアレイなどの高機能光学素子の需要は近年益々増加している。図1に例を示すように、これらの光学素子は複雑な曲面やアスペクト比の高い三次元形状を持ち、一般的には、型を用いてガラスや樹脂を成形して製作される。型の加工には、工具輪郭の転写性が高く、微細形状の高効率加工ができる、ダイヤモンド工具を用いた超精密切削加工が最も適している。

一方、耐熱性の高い鉄系金属やニッケルなどの型材は、ダイヤモンド工具が激しい損耗を示すため、この方法では加工できない。ニッケル (Ni) に 10~14%のリンを添加したニッケルリン (Ni-P) メッキ層はなんとかダイヤモンド工具で削ることができ、精細型材として多く使用されているが、耐熱性が鉄系材料に比べて低く、厚さが 100 μm 程度の薄いメッキ層であるためアスペクト比の大きな型は加工が困難である。また、Ni を加工するときの損耗機構、P の添加による損耗抑制機構は、今のところ、よく分かっていない。

本研究は、まず Ni の加工におけるダイヤモンド工具の損耗機構および P の添加による損耗抑制機構を明らかにし、その結果を鉄系材料の加工における損耗抑制に応用し、高精度・高能率という超精密切削加工の特性を生かした耐熱性の高い高精細型の実用的な加工技術を開発しようとするものである。

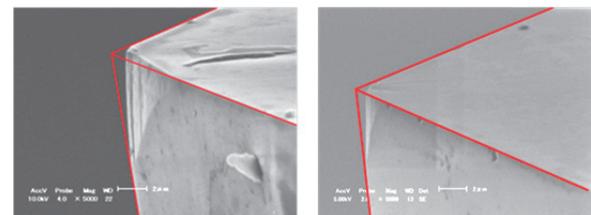
2. 切削実験および接触加熱損耗試験

図2は Ni および Ni-P を先端角 130° の直線切刃ダイヤモンド工具で切削したときの工具先端部の損耗を示す[1]。切削速度、切込み、送りはそれぞれ 3.3 m/s、3.5 μm 、2.5 $\mu\text{m}/\text{rev}$ である。Ni の切削においては、切削距離が 20m で既に工具寿命を超えた大きな



(a)非球面レンズ (b)マルチステップ回折格子

図1. 高機能光学素子用精細型の例



(a) Ni 20m 切削後 (b) Ni-P 1400m 切削後

図2. Ni および Ni-P の切削における工具損耗

損耗を示しているが、Ni-P では、1400m の切削後でも Ni に比べて損耗はかなり少なく P の添加が損耗を抑制していると考えられる。

次に、切削中の工具先端の雰囲気模擬したダイヤモンドと被削材との接触加熱損耗試験を行った[1]。ダイヤモンドの平板試料に Ni ワイヤおよび Ni に Ni-P をメッキしたワイヤを載せ、 4.2×10^{-3} Pa の真空中で 473 K から 773 K までの温度で 3 時間加熱したときのダイヤモンドの損耗量を求めた。Ni-P に比べて、Ni の方が損耗量はほぼ 2 倍と大きく、損耗量のアレニウスプロットはともに直線となった。また、ダイヤモンド円錐を用いた種々の被削材の単粒研削実験では炭素鋼や鋳鉄などの硬さの高い被削材よりも軟らかい純鉄や Ni の研削の方が激しい損耗を示すことが分かっている[2]。これらの実験結果は、鉄やニッケルの加工におけるダイヤモンド工具の損耗は機械的な摩耗ではなく熱化学的な損耗であることを示唆している。

3. 損耗機構解明のための第一原理計算

3.1 Ni とダイヤモンドとの相互作用

Ni および Ni-P の切削におけるダイヤモンド工具損耗の素過程を解明するために、被削材とダイヤモンドとが接触したときの相互作用の第一原理解析を行った。計算には実空間差分法に基づく高精度第一原理分子動力学法を用いた[3]。

ダイヤモンド(100)表面のモデルとして、 $C_{10}H_{14}$ クラスタを用いた。図3は緩和後のクラスタモデルを示す。モデル最下端の炭素原子が被削材と相互作用をするラジカルカーボンであり、この炭素原子以外のダングリングボンドは水素原子で終端化している。白字の数値は個々の原子に所属する価電子数の指標であるアトミックポピュレーションを表す。また、黄字の数値は化学結合に関与する電子数の指標であるボンドポピュレーションを表し、その変化が相互作用前後の化学結合の強さの変化を示す。

Ni 表面のモデルは以下の手順で求めた。まず全方向周期境界を持つ fcc 構造単位胞からなる Ni バルクのモデルを用いて最安定構造の格子定数を求めると 3.49 \AA となり、文献値である 3.52 \AA とほぼ等しくなった。この単位胞を並べて $x \times y \times z$ 方向に $2 \times 2 \times 1$ 単位胞の大きさを持つ Ni 薄板のモデルを作った。 x および y 方向は周期境界、 z 方向は非周期境界とし、 z 方向を緩和させて表面の安定構造を求めたところ、格子定数はバルクよりやや大きい 3.50 \AA となった。図4に作成した Ni(100)表面を示す。Ni 原子のアトミックポピュレーションは全て約 10.0 となった。

図5は Ni 表面モデルにダイヤモンド表面モデルを、Ni 原子のブリッジサイトにダイヤモンドのダングリングボンドが相互作用するように、 z 方向から近づけたときの最安定構造を示す。この時のラジカルカーボンと表面 Ni 原子との距離は 1.50 \AA となった。相互作用後のラジカルカーボンのアトミックポピュレーションは 4.108 から 4.913 に増加した。また、ラジカルカーボンと相互作用している Ni 原子のアトミックポピュレーションは 10.00 から 9.73 に、その周辺の Ni 原子のそれらも 9.84 から 9.92 程度に減少した。この結果はラジカルカーボンと Ni 原子の間

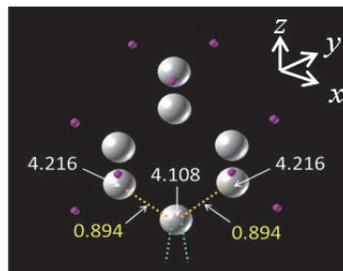


図3. ダイヤモンド(100)表面モデル

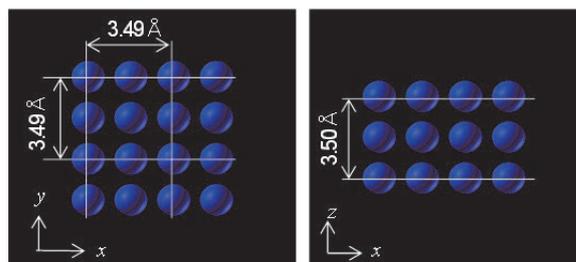


図4. Ni (100)表面モデル

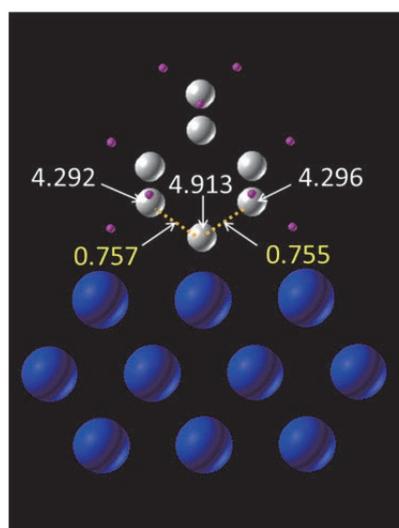


図5. ダイヤモンドと Ni 表面との相互作用

にイオン結合が生じていることを示している。一方、ラジカルカーボンのバックボンドポピュレーションは 0.894 から 0.755、0.757 と減少しており、共有結合強度が弱まっている。また、0.114、0.115 と小さい値であるが、ラジカルカーボンと Ni 原子の間のボンドポピュレーションが増加し、結合が生じていることが分かる。これらの結果から、ダイヤモンド表面炭素原子は切削熱によって自身の持つ運動エネルギーが大きくなると脱離して、Ni 表面に残り、ダイヤモンドが損耗すると考えられる。

3.2 Ni-P とダイヤモンドとの相互作用

次に、Ni-P とダイヤモンドとの相互作用を解析した。図3に示したNi表面モデルの格子間に、型材として一般的な、重量パーセントで12%相当のP原子を、ランダムに配置し、緩和させた後のモデルを図6に示す。元のfcc構造はひずみ、小さいモデルではあるが、Ni原子の動系分布からは、実際のメッキ層と同様に、アモルファスに近づいていると考えられる。NiおよびPのアトミックポピュレーションはそれぞれ6.3から6.4、9.6から9.8となっており、両者の間にイオン結合が生じている。

このNi-P表面モデルにダイヤモンド表面モデルを、Ni原子のブリッジサイトにダイヤモンドのダングリグリングボンドが相互作用するように、z方向から近づけたときの最安定構造を図7に示す。この時のラジカルカーボンと表面Ni原子との距離はNi表面の時よりもやや小さく1.10Åとなった。相互作用後のラジカルカーボンのアトミックポピュレーションは4.869となり、Niとの相互作用の時よりも増加が少なく陰イオン化の程度が小さい。ラジカルカーボンと相互作用しているNi原子のアトミックポピュレーションは9.3から9.7程度に減少しており、陽イオン化しているが、既にPとの相互作用を生じており、ラジカルカーボンとのイオン結合性はNiの場合に比べてかなり小さいと考えられる。また、ラジカルカーボンのダングリグリングボンドポピュレーションは0.007、0.088であり、Ni原子とのそれが0.114、0.115であったのと比べるとかなり小さい。一方、ラジカルカーボンのバックボンドポピュレーションは0.743と0.751であり、Niとの相互作用の時と大差がない。

これらの結果から、Ni-P表面でもラジカルカーボンとNi原子の間に結合は生じているが、Ni表面の場合と比べてその強度は弱く、ダイヤモンド表面炭素原子は脱離しにくいと考えられる。

4. 表面炭素原子の脱離エネルギーの比較

被削材表面と相互作用するダイヤモンド表面炭素原子の脱離の生じやすさを比較するために、ラジカ

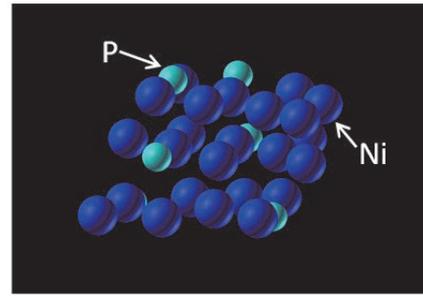


図6. Ni-P表面モデル

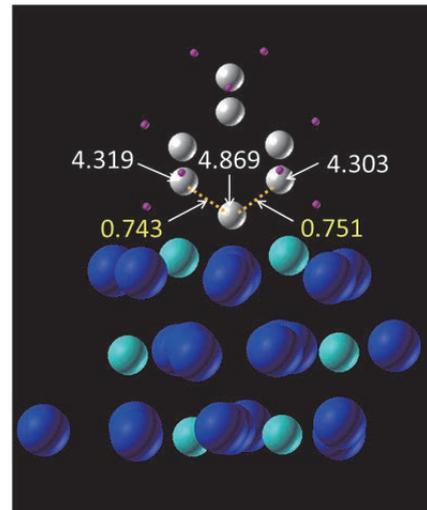


図7. ダイヤモンドとNi-Pとの相互作用

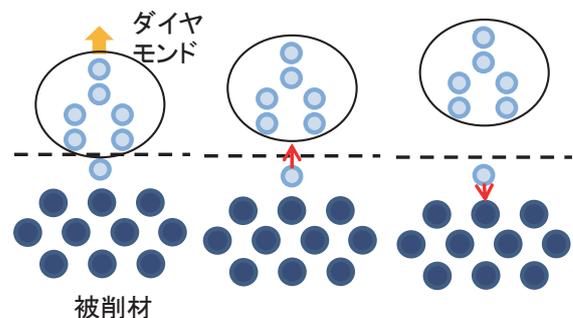


図8. ラジカルカーボン脱離エネルギーの推定

ルカーボンの脱離エネルギーの比較を試みた。図8に示すように、ラジカルカーボンを被削材表面に残して、ダイヤモンドを少し引き上げると、ラジカルカーボンには元のダイヤモンド側に戻ろうとする力が働く。引き上げる距離を徐々に大きくしてゆくと、ある引き上げ距離でラジカルカーボンに働く力が被削材側に変わる。この時のトータルエネルギーと最安定状態でのトータルエネルギーとの差が脱離エネ

ルギーに相当すると考えられる。本来は、引き上げ過程での緩和のために、原子配置に変化が生じるが、ここではそれを無視している。しかし、相対的な脱離エネルギーの比較は可能であると思われる。

計算の結果、Ni 表面と相互作用するラジカルカーボンの脱離エネルギーは 5.01 eV、その時の引き上げ距離は 1.10 Å であるのに対し、Ni-P と相互作用する時は、それぞれ、5.70 eV、1.05 Å となった。なお、相互作用をしていないダイヤモンド表面からのラジカルカーボンの脱離エネルギーは 7.87 eV と求まった。これらの結果は Ni よりも Ni-P と相互作用する時の方がダイヤモンド表面炭素原子の脱離が生じにくいことを示唆している。

5. おわりに

Ni の加工におけるダイヤモンド工具の損耗は、ダイヤモンド表面炭素原子と被削材表面 Ni 原子との相互作用によって両者の間にイオン結合が生じ、さらに、炭素原子のバックボンドの結合強度が低下するために、切削熱によって炭素原子の運動エネルギーが増加すると、炭素原子が結合を切って脱離することによって生じると考えられる。また、Ni 中に P を添加することによって、Ni と P がイオン結合し、炭素原子に対する反応性が低下して脱離が生じにくくなるため、ダイヤモンド工具の損耗が抑制されると考えられる。これらの結果はより耐熱性の高い鉄系金属に、適切な元素を添加することによって、ダイヤモンド工具で加工できる可能性があることを示唆しており、耐久性の高い高精細金型の実現が期待できる。

機械加工の分野でも、要求される加工精度が高まるにしたがって、従来無視されていた加工の素過程に含まれる微視的な問題が顕在化してきた。ここで紹介したような、工具の熱化学的損耗などはその好例であり、問題解明に対する第一原理計算の有用性が明らかになったといえよう。

第一原理計算には大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システムおよび東京大学物性研究所のスーパーコンピュータを利用した。また、解

析には大阪大学大学院工学研究科附属超精密科学研究センターの小野倫也助教らの開発による、実空間差分法に基づく高精度第一原理分子動力学法を使用させていただいた。量子力学さえ分からない素人に対し、使用をご快諾いただき、懇切なご指導、ご助言を賜った小野倫也助教、現北海道大学大学院工学研究院応用物理学部門の江上喜幸助教に深甚の謝意を表します。

参考文献

- [1] N. Furushiro, et al., *Annals of the CIRP*, **59**, 105-108, (2010).
- [2] T. Tanaka, et al., *Annals of the CIRP*, **30**, 241-245, (1981).
- [3] T. Ono, K. Hirose, *Physical Review Letters*, **82**, 5016-5019, (1999).

Ab Initio Study of Tetragonal Co-Doped BiFeO₃ with Low-Spin and Intermediate-Spin Co

Dan Ricinski

Tokyo Institute of Technology, Interdisciplinary Graduate School of Science and Engineering

1. Introduction

Magnetoelectric multiferroics continue to attract considerable attention in view of applications to non-volatile memories and spintronic devices [1]. Among them, a lot of research is focused on bismuth ferrite (BiFeO₃, BFO), which is one of the few multiferroics with magneto-electric coupling measurable at room temperature. Although BFO has robust ferroelectricity due to its large (even giant) spontaneous polarization [2-3], it is antiferromagnetic (AFM) with a rather weak magnetization. Thus one has to imagine ways to enhance its weak BFO magnetism and magneto-electric coupling. Here we show that doping of BFO with Co with a low-spin (LS) or intermediate-spin (IS) electronic configuration not only dramatically increases its magnetization, but significantly enhances the magneto-electric coupling as well [4].

2. Technical Details of First Principles Calculations

All first-principles calculations have been done using the density functional theory, under the spin-polarized local density approximation including the correction for the strongly correlated 3d electrons of Fe and Co (LDA+U), as implemented in the ABINIT package [5]. For the electronic wavefunctions we used plane-waves truncated at 400 eV, while for all chemical elements we have used projected-augmented wave pseudo-potentials [6]. We have included both valence and semicore states into our calculations, specifically Fe's and Co's 3d and 4s electrons, Bi's 6s and 6p electrons, and O's 2s and 2p electrons. The Brillouin zone integrations were done on a 4x4x4 k-point grid and all structural optimizations were

performed until atomic forces are smaller than 2 meV/Å.

3 Results and Discussion

Using 2x2x2 supercells with eight BFO formula units and substituting some of the Fe atoms with Co with HS, LS or IS electron configuration, we have investigated the energetics, structure and magneto-electric properties of 12.5% Co-doped BFO (further referred to as BFCO12). For 50% Co-doped BFO (further referred to as BFCO50), both 2x2x2 and 1x1x2 supercells have been used. In all calculations A-type, C-type and G-type AFM ordering has been implemented (see Fig. 1).

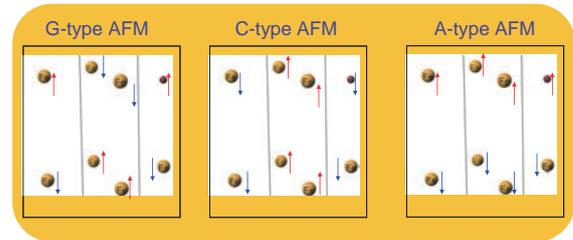


Figure 1: Schematic representation of Fe–Co periodicity inside the 2x2x2 supercells used for calculations of BFCO12 and A-, C-, G-type AFM ordering. The arrows indicate the spin orientation; a Co has replaced a Fe in upper right corner of the supercell only.

The LS-Co electronic configuration has completely occupied d_{xy} , d_{xz} and d_{yz} orbitals with both d_{z^2} and $d_{x^2-y^2}$ empty (i.e., zero magnetic moment overall), whereas IS-Co has singly occupied d_{xy} and $d_{x^2-y^2}$ orbitals, filled d_{xz} and d_{yz} orbitals and empty d_{z^2} orbitals (i.e., a magnetic moment of $2\mu_B$), as seen in Fig. 2. Under these circumstances, BFCO12 (BFCO50) becomes ferromagnetic with a total magnetic moment of $0.625\mu_B/\text{f.u.}$ ($2.5\mu_B/\text{f.u.}$) with LS-Co, and ferrimagnetic

with a total magnetic moment of $0.375\mu_B/\text{f.u.}$ ($1.5\mu_B/\text{f.u.}$) with IS-Co, respectively. These values are a significant increase compared to the case of HS-Co, where the total magnetic moment is $0.125\mu_B/\text{f.u.}$ and $0.5\mu_B/\text{f.u.}$ for BFCO12 and BFCO50, respectively. Hence the magnetization of BFCO would dramatically increase with a change in electronic configuration of Co^{3+} ion from HS to LS or IS.

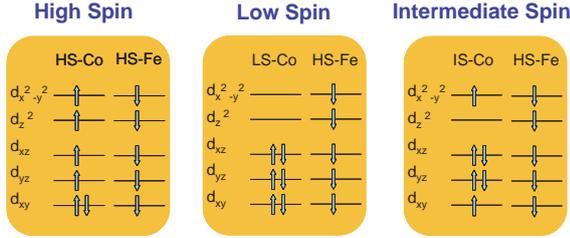


Figure 2: Illustration of HS-Fe, HS-Co, LS-Co and IS-Co electronic configurations of magnetic ions in the BFCO supercells used for calculations.

The calculations have further revealed that, irrespective on Fe/Co ratio and the type of AFM ordering, the calculated total energy of the tetragonal BFCO supercells with LS-Co and IS-Co is always larger than that for HS-Co (Fig. 3). Furthermore, the tetragonal phase with lowest energy has G-type AFM ordering for both the LS-Co and IS-Co, This may reflect the fact that once the Co spin is reduced, the type of AFM ordering in BFCO will be decided by HS-Fe ions, which exhibit G-type AFM ordering in undoped BFO.

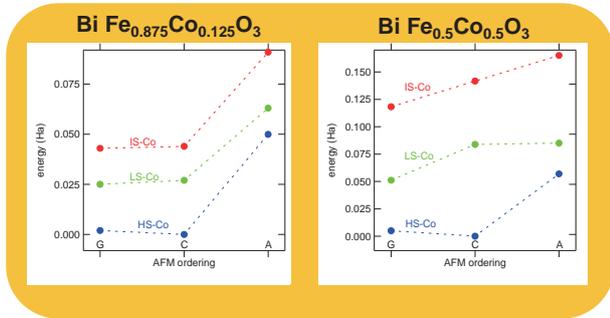


Figure 3: Total energy for tetragonal BFCO12 (left) and BFCO50 (right) with HS-Co, LS-Co and IS-Co and G-type, C-type and A-type AFM ordering.

Examining the tetragonality ratios estimated using the lattice constants resulted from structural relaxation of each tetragonal supercell, we remark in Fig. 4 a significant drop in c/a simultaneously with magnetic moment collapse. The decrease in tetragonality ratio is particularly severe in case of BFCO50, which tends to become pseudo-cubic in case of C-type AFM ordering, as seen in Fig. 4. We also found a significant change in tetragonality ratio (more than 2%) in BFCO with LS-Co and IS-Co caused by changing the type of AFM ordering between G-type, C-type and A-type. The dependence of c/a on the type of AFM ordering is even more pronounced in case of BFCO50 (with a more than 8% variation, as indicated by Fig. 4(b)). Such a significant impact of the type of AFM ordering on the tetragonality ratio (which can be considered to be, to a first approximation, proportional to the spontaneous polarization) in compounds with unconventional electronic configuration of Co adds up to strong magneto-electric coupling. This effect appears to be a consequence of the geometrical frustration associated to the unconventional spin configurations of Co^{3+} (and is thus unlikely to appear in BFCO with HS-Co).

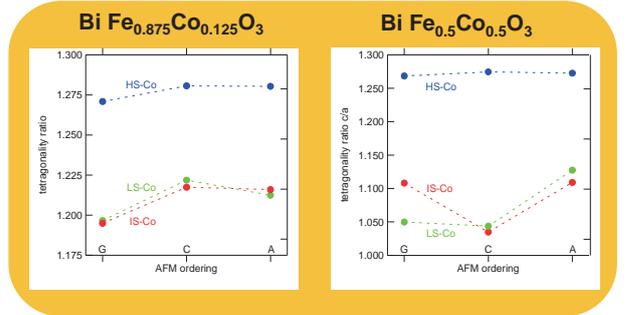


Figure 4: c/a ratio for tetragonal BFCO12 (left) and BFCO50 (right) with HS-Co, LS-Co and IS-Co and G-type, C-type and A-type AFM ordering.

Fig. 3 reveals that BFCO with A-type AFM ordering always have the highest total energy among the tetragonal structures with various spin configurations for Co^{3+} . Because of this, it would be interesting to identify

ways to reduce the total energy of such A-type AFM ordered tetragonal structures. Considering the BFCO supercells with HS-Co, IS-Co and LS-Co, particularly useful would be to somehow lower the total energy simultaneously with a transforming of the A-type AFM ordered structures (which are actually ferromagnetic due to uncompensated magnetic ions at B-site perovskite positions) into ferromagnetic ones. Such a ferrimagnetic-to-ferromagnetic phase transition could be moments of Fe and/or Co ions in the supercell. In the case of a BFCO12 supercell, one could reverse the magnetic moment of the Fe^{3+} ion located oppositely from the Co ion along [111] direction, or along [110] direction, or along [001] direction, or reversing the magnetic moment of the Co^{3+} ion itself, as indicated in Fig. 5.

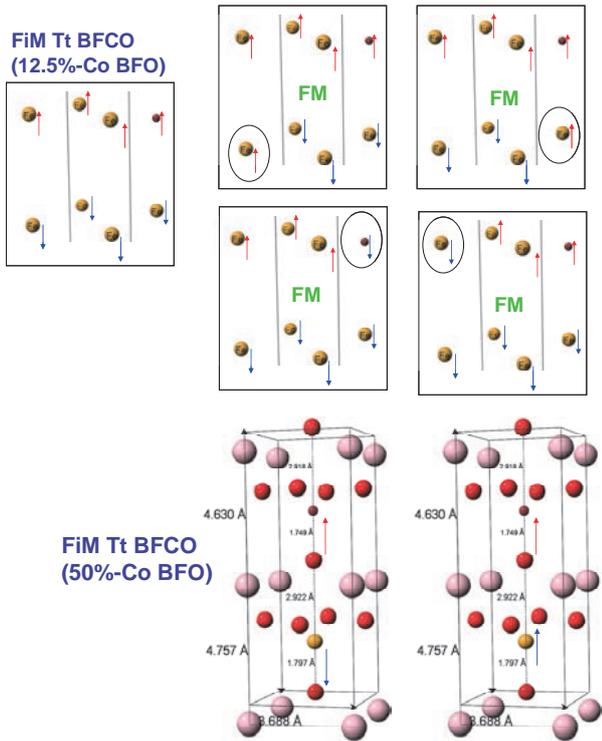


Figure 5: Schematics of triggering a ferromagnetic (FiM) to ferromagnetic (FM) phase transition in BFCO12 (top) and BFCO50 (bottom). The Co ion is placed in upper right corner of the 2x2x2 BFCO12 supercell (top) and in upper perovskite block of BFCO50 1x1x2 supercell (bottom).

The effect of such a ferrimagnetic-to-ferromagnetic phase transition on total energy and tetragonality ratio

can be assessed from Fig. 6. We note that one can indeed reduce the total energy of tetragonal BFCO12 with A-type AFM ordering, with lowest energy corresponding to reversing the Fe^{3+} ion which is placed oppositely to Co^{3+} along [001] in case of supercells with LS-Co and IS-Co, and the Co^{3+} ion itself in case of compounds containing HS-Co. Furthermore, upon reversal of the magnetic moment for one of the magnetic ions, the tetragonality ratio changes significantly in case of BFCO with LS-Co and IS-Co and negligibly in case of BFCO with HS-Co, as seen in Fig. 6.

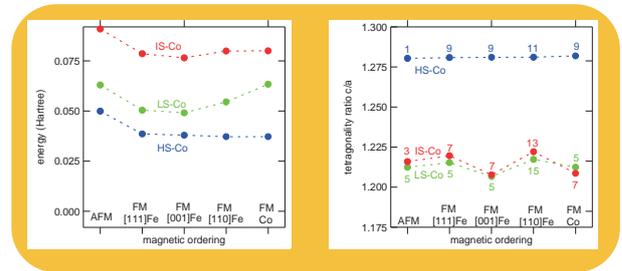


Figure 6: Total energy (left) and c/a (right) calculated for ferrimagnetic-to-ferromagnetic phase transitions triggered in tetragonal BFCO12 with A-type AFM ordering and HS-Co, LS-Co and IS-Co by reversing the magnetic moment of one of the magnetic ions. Numbers inside right figure indicate the magnetic moment for that case.

On the other hand, Fig. 7 reveals that the calculated total energy of the tetragonal BFCO50 with A-type AFM ordering reduces upon reversing the magnetic moment of the Fe^{3+} ion only in the case of IS-Co spin configuration (it stays constant in case of LS-Co and even increases when Co^{3+} is in HS state). Thus, in BFCO50, only in case of IS-Co does a ferrimagnetic-to-ferromagnetic phase transition result in a more stable state than the original tetragonal structure with A-type AFM ordering. As seen in Fig. 7 this phase transformation occurs simultaneously with a significant drop in c/a , again proving that BFCO with IS-Co is expected to have robust magneto-electric coupling.

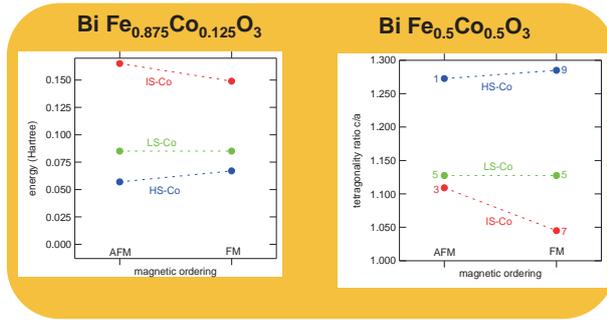


Figure 7: Total energy (left) and c/a (right) calculated for ferrimagnetic-to-ferromagnetic phase transitions triggered in tetragonal BFCO50 with A-type AFM ordering and HS-Co, LS-Co and IS-Co by reversing the magnetic moment of Fe.

5. Conclusion

Our *ab initio* calculations suggest that BFO-based multiferroics with unconventional spin configurations of magnetic ions should be helpful in achieving robust magneto-electric coupling for materials at room temperature. The present results suggest that tetragonal Co-doped BFCO with low-spin and intermediate-spin electronic configuration of Co allow to achieve robust coupling between the spontaneous polarization (assumed here proportional to c/a ratio) and magnetization of such compounds on one hand, and the type of AFM ordering on other hand. Furthermore, we have found an intriguing possibility to enhance the magnetization of tetragonal BFCO compounds with intermediate-spin Co, while remaining coupled to their ferroelectricity, by inducing a ferrimagnetic-to-ferromagnetic phase transition.

Acknowledgements

This research was supported by the Grant-in-Aid for Scientific Research (C) 24560007 provided by the Japanese Ministry of Education, Sports, Culture, Science and Technology. All first-principles calculations have been done using the high performance computing system (PC cluster) of the Cybermedia Center, Osaka University.

References

- 1) N. A. Spaldin and M. Fiebig: *Science* 309 391 (2005).
- 2) K. Y. Yun, D. Ricinski, T. Kanashima, M. Noda and M. Okuyama: *Jpn. J. Appl. Phys.* 43 L647 (2004).
- 3) D. Ricinski, K. Y. Yun and M. Okuyama: *J. Phys. Condens. Matter* 18 L97 (2006).
- 4) D. Ricinski: *Jpn. J. Appl. Phys.* 52 09KB01 (2013).
- 5) X. Gonze et al. *Computer Phys. Comm.* 180 2582-2615 (2009).
- 6) M. Torrent, F. Jollet, F. Bottin, G. Zerah, and X. Gonze: *Comput. Mat. Science* 42 337 (2008).

数値シミュレーションによる量子重力の研究

花田 政範

京都大学 基礎物理学研究所白眉センター

1. はじめに

本研究では「量子重力」を考える。なぜ量子重力を考えるかというモチベーションを理解するために、有名な例として、ホーキングの情報喪失問題から話を始めたい。

真空とは文字通り空っぽで何も無い状態だと思われがちであるが、実は量子力学的な効果で粒子と反粒子が対生成・対消滅を繰り返している非常にダイナミックな状態である。ただ、対生成された粒子は我々の眼に見える前にすぐに対消滅してしまうので、普通は真空から粒子が放出される様子を見る事は出来ない。ホーキングは、普通でない状況 - ブラックホールの表面 - では何が起きるかを考察した [1]。ブラックホールはあらゆるものを飲み込み、「光すら逃げ出せない」と言われる。ブラックホールの表面で対生成された粒子も、ブラックホールに飲み込まれるはずである。ホーキングはこのプロセスを詳細に分析し、「負のエネルギー」を持った粒子がブラックホールに吸い込まれ、通常の「正のエネルギー」の粒子はブラックホールに吸い込まれずに飛び出してくる事を発見した。「負のエネルギー」の粒子を吸い込む事で、ブラックホールはどんどん軽くなり、やがて蒸発してしまう。この様子を我々がブラックホールの外から観察すると、「光すらも逃げ出せない」はずのブラックホールから徐々に粒子が放出され、その分だけブラックホールが軽くなり、やがて蒸発するように見える。

この発見はそれ自体すでに驚きであったが、ホーキングは更に衝撃的な予言をした。ブラックホールが蒸発するプロセスは、古典力学でも量子力学でも決して破れた事のない基本原理 -- 「情報の保存」 -- と相容れず、量子力学の理論体系の根本的な変更を迫るというのである。

「情報の保存」の意味を理解するために、例とし

て天気予報を考える。明日の天気を知りたければ、今日の各地の気温や気圧をもとにシミュレーションをする。もちろん無限の精度でシミュレーションをする事は不可能なので、大気を上下と水平方向に格子に分割し、時間も離散的に区切って近似計算をする。予報の精度を上げたければ、メッシュをどんどん細かくしていけば良い。原理的には、空気や海中の水分子1つ1つの位置と運動量や太陽から受け取る熱量などのあらゆる情報を無限の精度で知っていて、無限に細かい格子でシミュレーションが出来れば、無限の精度で天気予報を的中させる事が出来る。逆に、今日の天気からさかのぼって、100年前の天気を再現する事も出来る。すなわち、100年前の天気の情報には失われず、今日の天気の情報の中にこっそりと隠れている。このような「情報の保存」は量子力学でも成り立ち、基本原理の一つであると認識されている。

今日の天気が100年前の天気を知っているように、ブラックホールも、何を吸い込んだかを記憶していると思うのが自然である。そして、ブラックホールが蒸発するときには、ブラックホールから飛び出してくる粒子の振る舞いを無限の精度で観測できれば、何が吸い込まれたかを原理的には判定できると期待したくなる。しかし、ホーキングは、ブラックホールから放出される粒子の振る舞いは何が吸い込まれたかによらずに完全に同じであり、情報は失われてしまうと結論づけた。これをホーキングの情報喪失問題と呼ぶ。

2. マルダセナ予想

ホーキングの予言が正しければ、量子力学という根本的な物理法則を書き変えなければならない。一方で、この予言が間違っていたとしても、ロジックの誤りを見つけ出す過程で物理法則の理解が深まると期待される。そのため、数多くの物理学者が情報

喪失問題の解決に取り組んで来た。20年以上に渡る論争の末、ホーキングが計算で考慮してなかった重力の量子論的な効果を正しく取り入れれば情報は失われない事が示せるのではないかと言う考え方が大勢を占めるようになった。そして、1990年代後半の超弦理論の爆発的な進展の中で、ブラックホールの蒸発が、量子重力の効果も含めて、行列を変数とするある種の量子力学系を用いて記述できてしまうという驚くべき予想が提唱されるに至った[2]。この予想は、提唱者の名前を取ってマルダセナ予想と呼ばれる。ブラックホールを記述すると期待される量子力学系は重力とは一見何の関係もない文字通り普通の量子力学系で、量子力学の基本原則である「情報の保存」を満たす。従って、マルダセナ予想が正しければ、情報は失われず、量子力学を書き変える必要はなくなる。

3. マルダセナ予想の量子重力レベルでの検証

マルダセナ予想は提唱直後から多くの研究者の注目を集め、その正しさをサポートする状況証拠が多数見つかった。しかし、量子力学の側で解析的な計算が可能なのは対称性による物理量への制限が大きい特別な状況で、かつ量子重力の効果が消えるような極限（行列のサイズ N が無限に大きい「ラージ N 極限」）がほとんどであり、蒸発するブラックホールの量子重力的性質が記述できるかどうかは定かではなかった。そこで我々はこの量子力学系のエネルギーと温度の関係をモンテカルロ法で数値シミュレーションし、重力側の計算と比較した。行列サイズ N が大きい場合については既に 2008 年にシミュレーションを行い、マルダセナ予想を支持する結果が得られていた。素朴には N が小さい方が計算が楽なのではないかと思われるかも知れない。しかし、 N が大きい時には比較的高温でマルダセナ予想が検証できたが、量子重力の効果を見るには N を小さくするだけでなくより低温を調べる必要があり計算量が大きい事には変わりはない。更に、 N を小さくすると、量子重力の効果に起因するブラックホールの不安定性を反映して、シミュレーションが不安定になってしまう。この不安定性は物理的に重要な意味が

あるが、シミュレーションをする上では障害となるので、不安定性とうまく付き合う方法を探して、五年近くに渡って様々な試行錯誤を重ねた。詳細は割愛するが、2013年の初めに、ようやくシミュレーション手法が確立できた。その手法を用いて高エネルギー加速器研究機構(KEK)のクラスターシステム KEKCC でシミュレーションを開始した。行列のサイズ N は 3,4,5 の三通り、温度 T を最終的にシミュレーションを断念したものも含め約 10 通り、連続極限を取るために各 (N,T) 毎に 5 通りのシミュレーションを行った。これだけでパラメーターが既に 150 通りであるが、当初の予想よりも多くの統計が必要になった事から各パラメーター毎に 5~40 通りの別乱数でのシミュレーションを行った。このように計算量が大きくなった事から、KEKCC に加え、HPCI を通じて提供された阪大サイバーメディアセンターのクラスターシステムも使用する事にした。シミュレーション結果は重力側で計算された量子重力の効果を綺麗に再現し、マルダセナ予想の量子重力レベルでの成立を示唆するものとなった。この結果は Science で発表された。

4. おわりに

今回の研究結果は、マルダセナ予想が量子重力のレベルで正しく、ブラックホールの蒸発に伴って情報が失われる事は無いことを強く示唆するものである。今後更に詳細なシミュレーションを行い、理論的な考察と比較して行く事で、ブラックホールから情報が帰ってくる仕組みを詳細に理解することが出来ると考えられる。また、マルダセナ予想の応用は情報喪失問題に限らず、超弦理論の立場から宇宙論を展開したり、強結合の量子力学系を理解したりすることも可能になると期待されており、そのような観点からも今回行ったようなシミュレーションが重要になると考えている。このような基礎的な研究は直ちに金銭的な利益にはつながらないので、公的機関の支援が不可欠である。HPCI と阪大サイバーメディアセンターの支援には深く感謝している。

参考文献

- (1) S. W. Hawking, Nature 248, 30 (1974)
- (2) J. M. Maldacena, Adv. Theor. Math. Phys. 2,

231(1998).

- (3) M. Hanada, Y. Hyakutake, J. Nishimuta and S. Takeuchi, Phys. Rev Lett. 102, 191602 (2009).
- (4) M. Hanada, Y. Hyakutake, G. Ishiki and J. Nishimura, Science (2014) [4月17日オンライン版]

分子雲コア中の星形成の数値シミュレーション

町田 正博

九州大学 大学院理学研究院 地球惑星科学部門

1. はじめに

星は宇宙の最も基本的な構成要素であるため、その形成過程を理解することは重要である。観測から星は銀河内の複数の領域で集団的に誕生していることが分かっている。様々な観測によって我々近傍の星形成領域は詳しく調べられており、以下のことが理解されている。(1) 星は分子雲コアと呼ばれる低温で比較的密度が高いガスのかたまりの中で誕生する、(2) 星が誕生する際にはジェットとアウトフローというガスの放出現象を示す、(3) 生まれたばかりの星（原始星）の周りには星周円盤が出来、その内部で惑星が誕生する。

しかし、観測のみによって星が誕生する過程を理解することは困難である。実際に観測から分かるのは、“星が誕生する直前の初期条件である分子雲コア”と“星が誕生してしばらく経過した後の結果である原始星、ジェット、円盤”などであり、星が誕生する現場（つまり星形成過程）は、密度が濃いガス雲中であるために如何なる波長の電磁場を用いても観測する事は難しい。そのため星形成過程を理解するためには、数値シミュレーションが必要となる。我々は、星形成の母体となる分子雲コアを初期条件としてその重力収縮から星や円盤が出来る過程、またはアウトフローやジェットが駆動する過程を調べてきた。

2. 計算の設定と計算手法

上記のように星は分子雲コアの中で誕生する。分子雲コアは詳細に観測されており、密度分布、角運動量や磁場の強さと向きなどの情報が詳細に分かっている。円盤形成やアウトフロー、ジェットの駆動には分子雲コアの磁場、回転が重要となる。シミュレーションで星形成過程を理解するためには、観測されているような分子雲コアを初期条件としてその

重力収縮の過程を計算する。しかし、分子雲コアと原始星の空間スケールは大きく異なる。分子雲コアは $>10^4$ AU のスケールを持つのに対して、星の半径は ~ 0.01 AU であるため空間スケールが6桁以上も異なる。この大きく異なる空間スケールを解像するために、我々は多層格子法という計算手法を用いている。図1は、多層格子法のご概念図である。実際には

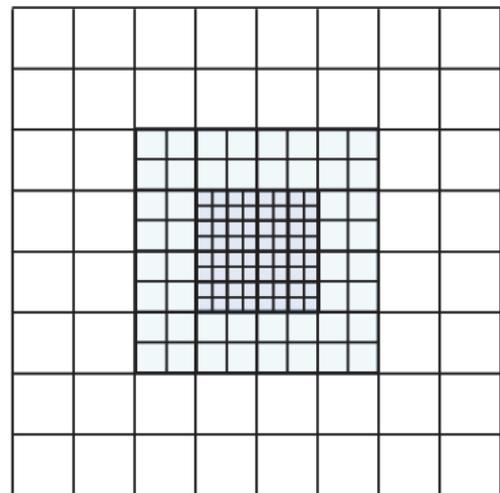


図1：多層格子法のご概念図

3次元であるが、理解しやすさのため2次元で表示している。多層格子法は、図のように空間分解能の低いグリッドで全体を覆いながら、細かいグリッドで空間分解能の必要な領域を覆う手法であり、粗いグリッドから細かいグリッドまでを一体として時間推進する。この手法により、原始星と分子雲コアという空間スケールが大きく異なる天体の両方を同時に空間解像することが出来る。

また、分子雲コアは、ほぼ中性の水素分子から成っているが、ある程度イオン化しているため磁場と中性ガスは良く結合している。しかし、分子雲コアが収縮して密度が上昇すると電子が分子雲中にわずかに含まれるダストに吸着するためにイオン化度が低下し、磁場がオーム散逸によって散逸する。その散逸の過程も正しく計算するために Resistive MHD 方程式を解き、分子雲の進化を計算する。

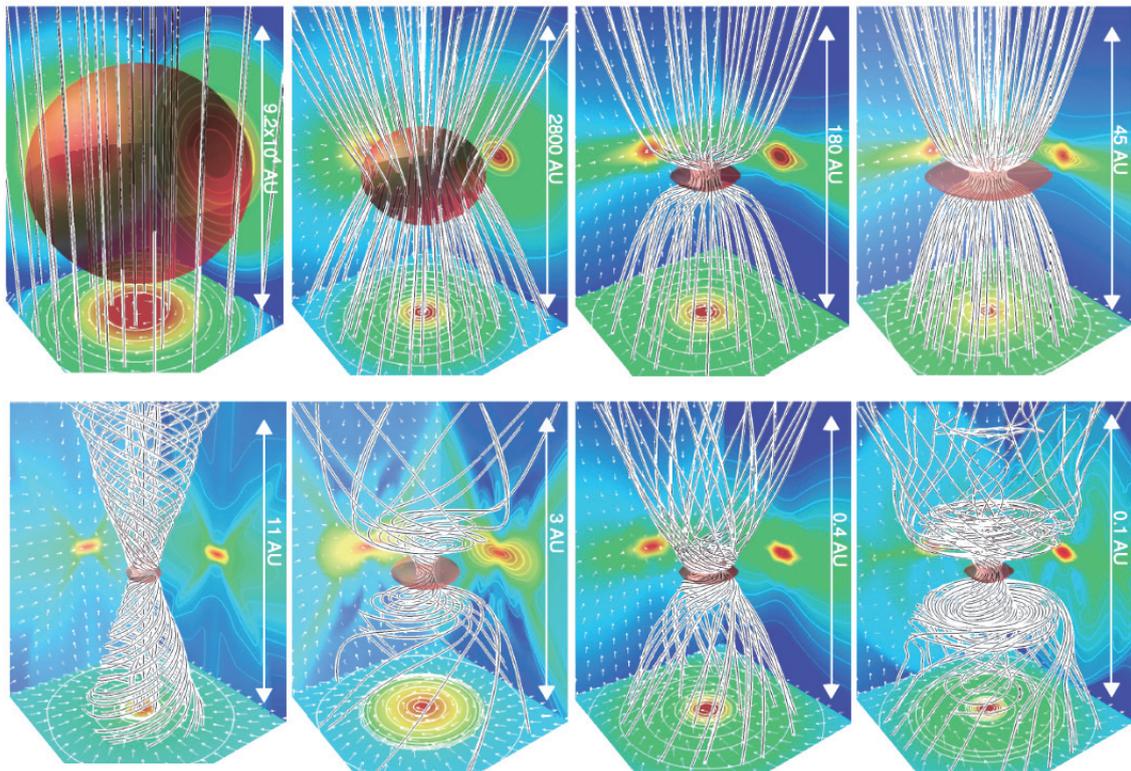


図 2 : 前期段階の進化

2. 星形成の前期段階の計算

星形成過程は、理論的にガスが収縮して原始星が誕生する前の“前期段階(ガス収縮段階)”と原始星形成後にガスが降着する“後期段階(ガス降着段階)”に分けられる。我々の近年の研究によってガス降着段階の進化は、ほぼ理解することが出来た[1]-[5]。

図 2 は、分子雲コア収縮後、原始星が出来るまでの構造の進化を示している。原始星は、収縮する分子雲コアの中心部分で形成するため各々のパネルで空間スケールが異なっている。図中の白黒の線は磁力線を表している。また、高密度領域を赤の等密度面で、中心部の密度・速度構造を壁面に投影している。

図から分かるように分子雲コアが収縮すると共に磁力線が中心部に束ねられていく。中心密度が $\sim 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ を超える中心部分が光学的に厚くなり温度(圧力)が上昇しファーストコアという天体が(一時的に)形成する。ファーストコアは非常に緩やかに断熱的に収縮するために、収縮のタイムスケールが回転のタイムスケールよりも長くなり磁力線が捻られて回転と磁場の効果により低速のアウトフローが駆動する。その後、中心密度がさらに上昇し $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

を超えると水素分子の解離が起こり、その吸熱反応により第二収縮を起こす。水素分子がほぼ水素原子に変換されるとガスは再び断熱的になり収縮が止まり原始星が誕生する(図 2 の右下のパネルの赤い部分)。誕生した原始星は高速で回転しているために磁力線を激しく捻り高速のジェットが駆動する。

このように分子雲の収縮中にはファーストコアと原始星という異なる天体出来るために、異なる 2 つのフロー(低速のアウトフローと高速のジェット)が現れる。

3. 星形成の後期段階の計算

我々や他のグループの研究によって原始星が出来るまでの分子雲の進化は詳しく解明された。しかし、この過程で誕生する原始星の質量(形成時のジーンズ質量で決まる)は太陽の千分の 1 程度(ほぼ木星の質量)であり、太陽質量まで成長するためには、原始星にガスが降着する過程(後期段階)を長時間計算する必要がある。ガスの降着はおよそ 10-100 万年続くと考えられている。しかし、原始星、または原始星からのジェットまでを空間分解してしまうと、計算のタイムステップが非常に短くなってしま

い（～秒のオーダー！）太陽質量程度の星が誕生するまでの計算は困難になる。

この困難を克服するためにシンクセルという手法が用いられる。シンクとはすい込み口のことであり、文字通りシンクセル内に落ち込んだ高密度のガスを吸い込む（吸い込んだガスは中心星の重力源としてのみ扱う）。この種の計算の典型的な時間尺度は自由落下時間であり密度の $1/2$ 乗に反比例する。そのため、高密度ガスを取り除くとタイムステップを長く取ることが出来、長時間の計算が可能になる。他方、高密度ガスが存在する原始星近傍の領域は空間解像できないというデメリットがある。しかし、原始星形成後は原始星ではなく星周円盤にガスが降着し、星周円盤は原始星よりずっと大きい空間スケールを持つためにこのような扱いが可能となる。

図3にシンクセルを導入した場合の星周円盤の成長を示している。近年、磁場の効果によって角運動量が過剰に輸送されてしまい、回転円盤（星周円盤）

円盤）は惑星形成の母体であるため、円盤が出来ないという事は星・惑星形成過程において様々な矛盾を生じさせる。しかし、我々の計算によりシンクセルを導入した際にファーストコアを十分な空間精度で分解すれば回転円盤が形成することが分かった。これは、ガスの収縮が一時的に高密度のファーストコア中で止まり、磁場が散逸するために磁気制動が非効率的になるためである [6], [7]。

図4は円盤形成後にさらに計算を進めた様子を異なるスケールで表示している。左側のパネルはより大きなスケールでの表示で、図中のオレンジ色の領域はガスが流出している（アウトフロー）領域である[8]。また、右上のパネルから中心部分では円盤が出来ており、アウトフローは円盤の外縁部から駆動しているのが分かる。さらに右下のパネルでは、円盤の中で分裂が起こり、惑星質量の分裂片が誕生している。

円盤の中心部分は電離度が低く磁場が散逸しているために磁場が非常に弱い。そのため、アウトフローが駆動する事はできない（アウトフローは磁気遠心力という磁場と回転の効果によって駆動する）。結果として円盤内縁部では、磁場による角運動輸送が効率的ではなく回転円盤が形成する。回転円盤は遠心力によって支えられているために、ガスが効率的に中心星に落下することは出来ない。他方、円盤の外縁部ではアウトフローや磁気制動によって効率的に角運動量が外層に輸送されてガスは円盤内縁に落下（移動）する。これらの効果のために円盤内縁部にガスがたまり円盤の面密度が上昇し、自己重力によって円盤内部で分裂が起こる。図4の右下のパネルの惑星質量天体はこの過程によって形成した。

図5は円盤内縁の分裂によって形成した惑星質量天体の軌道運動を示している。円盤中で誕生した分裂片の多くは、最終的には中心星に落下する。この段階では、中心星は分裂片の落下によってその質量を増加させる。また、いくつかの分裂片は中心星に落下することなく生き残った。これらの分裂片は直接撮像で観測されている中心星から遠い軌道を周回する惑星になる可能性もある[9]。

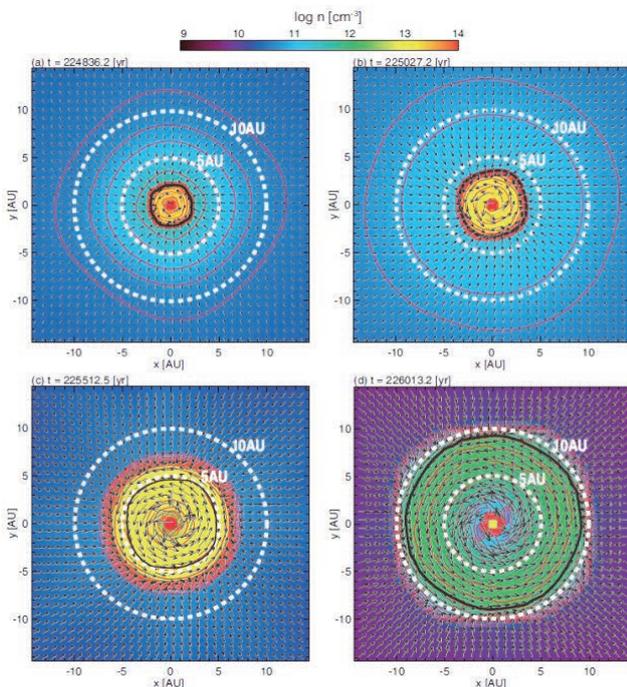


図3：後期段階の円盤形成過程

が形成されないという問題（Magnetic Braking Catastrophe）が指摘されていた。これは、具体的には、磁気制動により円盤の角運動量が落下中のガスに輸送されてしまい、円盤を形成せずに中心星に直接落下してしまうという問題である。観測的に星周円盤は確認されており、また星周円盤（原始惑星系

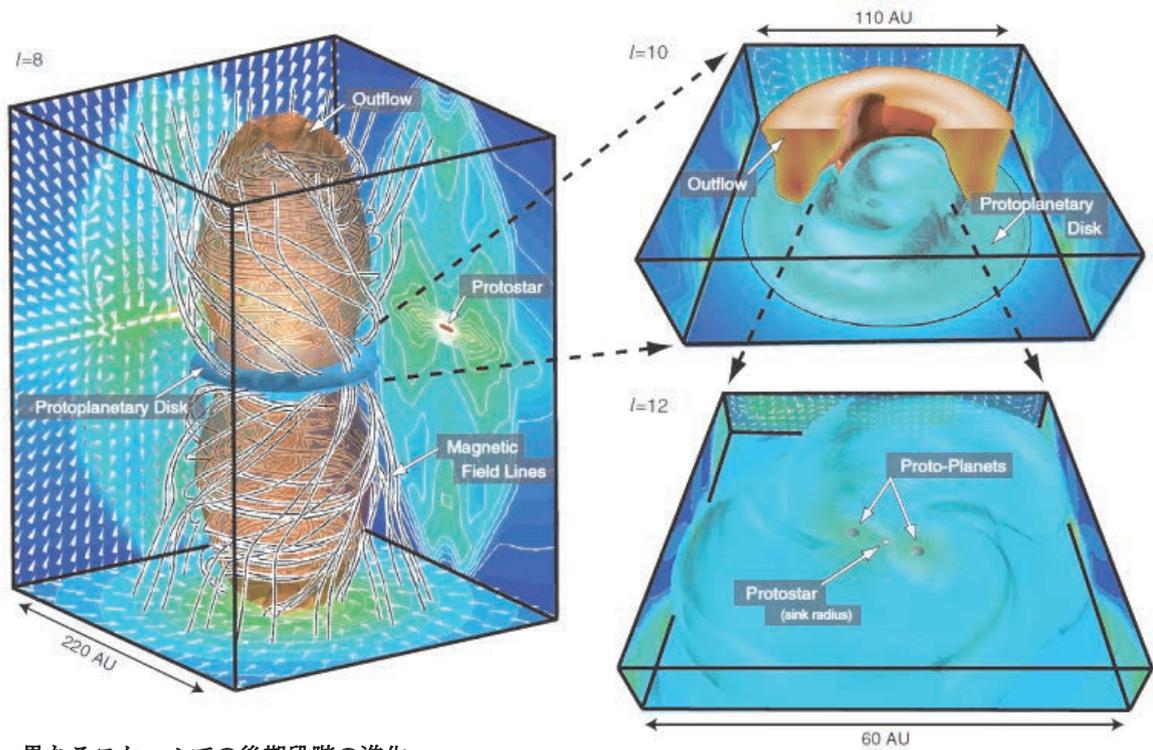


図4：異なるスケールでの後期段階の進化

5. まとめと今後の研究

今まで数値シミュレーションを用いて、分子雲コア中での星形成過程の計算を行い、原始星の形成過程、ジェット、アウトフローの駆動メカニズム、円盤とガス惑星の形成過程を解明してきた。しかし、上記のように後期段階の計算はシンクセルを用いているために原始星近傍を分解できていない。そのため、図3、図4から分かるように原始星近傍から駆動する高速ジェットの効果が無視されている。今後

は、中心星までを分解した星形成過程の数値計算を実行し、星形成過程をより詳細に理解することを計画している。

参考文献

- (1) Machida, M. N., Tomisaka, K., Matsumoto, T., and Inutsuka, S. (2008), ApJ, 677, 327-347.
- (2) Machida, M. N., Inutsuka, S., and Matsumoto, T. (2008), ApJ, 676, 1088-1108.
- (3) Machida, M. N., Inutsuka, S.-i., and Matsumoto, T. (2007), ApJ, 670, 1198-1213.
- (4) Machida, M. N., Matsumoto, T., Hanawa, T., and Tomisaka, K. (2005), MNRAS, 362, 382-402.
- (5) Machida, M. N., Matsumoto, T., Tomisaka, K., and Hanawa, T. (2005), MNRAS, 362, 369-381.
- (6) Machida, M. N., Inutsuka, S., and Matsumoto, T. (2011), PASJ, 63, 555-.
- (7) Machida, M. N., Inutsuka, S., and Matsumoto, T. (2014), MNRAS, 438, 2278-2306.
- (8) Machida, M. N. and Hosokawa, T. (2013), MNRAS, 431, 1719-1744.
- (9) Inutsuka, S., Machida, M. N., and Matsumoto, T. (2010), ApJ, 718, L58-L62.

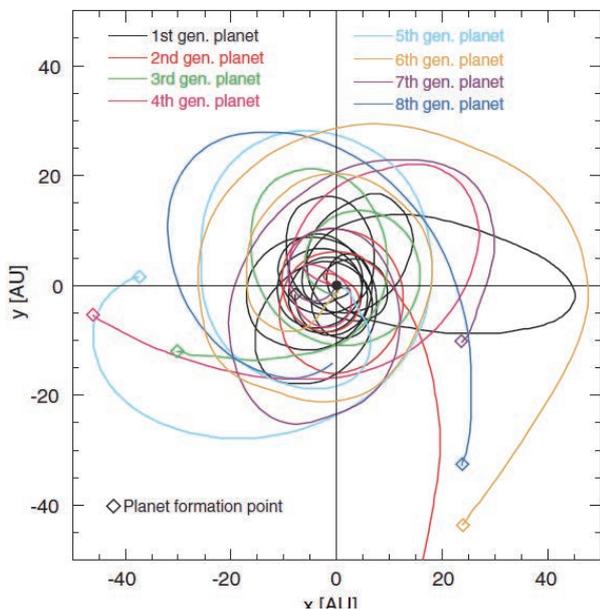


図5：円盤中で誕生した惑星質量天体の軌道運動

電子状態計算に基づくナノスケール物質の物性解明と物質設計

岡田 晋、丸山 実那、山中 綾香
筑波大学大学院 数理物質科学研究科

1. はじめに

半導体デバイスの集積化、高速化に伴う計算機の性能向上は、これまで困難であったナノスケールを有する物質系に対する高精度な物性計算を容易にした。実際、90年代では、60個の炭素原子からなるサッカーボール状分子である C_{60} フラーレンの高精度な電子状態計算の実施には、大学の大型計算機センターにある、SX-4 や VPP500 といったベクトル型のスーパーコンピュータを用いる以外に手段は無かった。しかし、今では同じ系を手持ちのノート PC で難なく計算することが可能となっている。つまり、今日ではナノスケール物質に対する計算科学のプラットフォームは完全にコモディティーベースの計算機に移行している。そのような現状の中、大型計算機センターに設置されている計算機を用いた計算物質科学研究の一つの潮流は、超大規模計算や超高精度計算の方向に向かっている。そのような大規模計算の例として、2011年にゴードンベル賞を受賞した、京コンピュータを用いた10万個のシリコン原子系の実空間法による第一原理計算が上げられる。この計算では、京コンピュータにおいて3ペタフロップス(実行効率で40%)をたたき出し、まさに京コンピュータのパフォーマンスをフルに使った成果と言える。この計算は半導体デバイス中で用いられるシリコンナノワイヤの実サイズの計算と言う意味でも非常に重要な成果である。

ナノスケールを有する物質のサイエンスに着目すると、その物性現象が必ずしもサイズだけに依存していないことがわかる。すなわち、同じサイズにおいても、僅かな原子構造の違いによって全く異なる物性現象の発現があり得る。有名な例としてカーボンナノチューブの電子構造があげられる。CNTでは、同じ直径を有していても、円周方向の原子配列

の違いに依存して、半導体、金属となることが知られている。この場合、サイズは固定されたパラメータで、その下で形状というパラメータ空間での物性探索となる。この形状と言うパラメータ空間は、一見非常に狭いように感じられるが、ナノスケールを有する物質系の原子数が数百個程度であり、その可能な配置の組み合わせが形状の鍵になることに注意すると、非常に広いパラメータ空間での物性探索となる。そのような問題を包含する現象に対しては、速やかに可能なパラメータ下での電子物性解明が実行出来る環境が必要不可欠のものである。すなわち、単体で程々の実行性能と、コモディティーシステムと比して広いメモリーバンド幅を有する大型計算機システムがナノスケール物質科学の推進を加速するものである。本稿では、そのような多様な物性現象が期待される系として、我々の最近の研究成果である種々のナノカーボン物質複合系の電子物性に関する NEC SX-8, SX-9 上での計算の成果を紹介する。

2. 計算手法

通常、孤立したナノカーボン物質、特に3配位炭素原子からなるグラファイト系ナノ物質の電子物性は原子サイト間の電子の飛び移りを考えた強束縛近似(TBA)により、十分に定性的な記述が可能であることが知られている。しかし、異種物質が導入された複合構造体中に於いては、異種物質とグラフェン間の相互作用が自明ではなく、TBAを超えた取り扱いが必要となってくる。ここでは、密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理電子状態計算の手法を適用した。すなわち、Kohn-Sham方程式と呼ばれる、一体のシュレーディンガー方程式に類似した非線形の方程式を自己無撞着に解くことにより、系の基底状態を求めるものである。実際のDFT計算に際して

は、電子間の交換相関相互作用として局所密度近似 (LDA)、原子イオンの取り扱いに関しては擬ポテンシャルを用いた。さらに、波動関数は平面波によって展開した。このような取り扱いにより、ナノカーボン物質との相互作用が不明な異種物質を含む複合構造体の電子物性を定性的、かつある程度の定量性を持って議論することが可能である。さらに、外部電界も広義の異種物質として看做し、電界下でのナノカーボン物質の物性の探索を行うため、有効遮蔽媒質法と呼ばれる方法を DFT と組み合わせて適用した。すなわち、電界を計算に用いた単位包の端に設置された有効遮蔽媒質を用いて生成させ、その下での電子のポアソン方程式を Kohn-Sham 方程式と同時に自己無撞着に解くことで電界下における量子論的な基底状態の電子密度を与えることが可能である。

3. 電界下での有限長 CNT の電子物性

CNT は次世代半導体デバイス候補として多くの注目を集めている。種々の電子デバイス中に於いて、一般に CNT は既存のテクノロジーを担う異種物質との複合構造の形成が本質となっている。たとえば、CNT を担持する基板や電極金属などが上げられる。これらの現実の物質に加えて、電子デバイスにおいては電界という広義の異種物質の存在もデバイス機能制御においては避けて通れない問題である。実際、電界効果トランジスタ応用において、CNT は電荷蓄積に関わる鉛直電界と、電流制御に関わる平行電界の二つの電界に晒されることとなる。ここでは、平行電界下におかれた有限長 CNT の電界による電子物性変調、特に電界遮蔽効果に対する CNT の形状依存性を紹介する[1,2]。

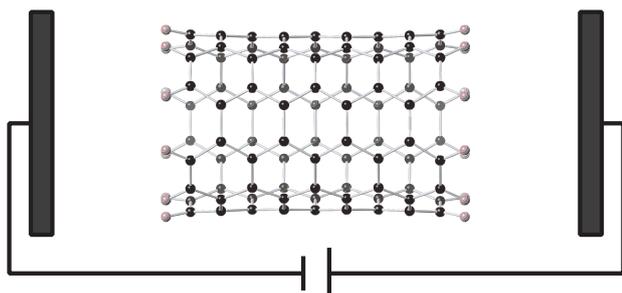


図 1 : 計算に電界下での有限長 CNT の構造モデル

図 1 に計算に用いた構造モデルを示す。2つの完全導体からなる対向電極の間に有限長の CNT を配置し、電極間に電位差 $0.25\text{V}/\text{\AA}$ を印加する。電極間に挟み込む CNT は直径が 7\AA で円周方向の原子配列がアームチェア型の CNT(a-CNT)と、直径が 7\AA で円周方向の原子配列がジグザグ型の CNT(z-CNT)を考えた。これらの有限長の CNT の端の炭素原子は全て水素原子で終端されており、ゼロ電界の下で構造の最適化により安定構造を決定し、安定構造の下で電界を CNT に印加した。

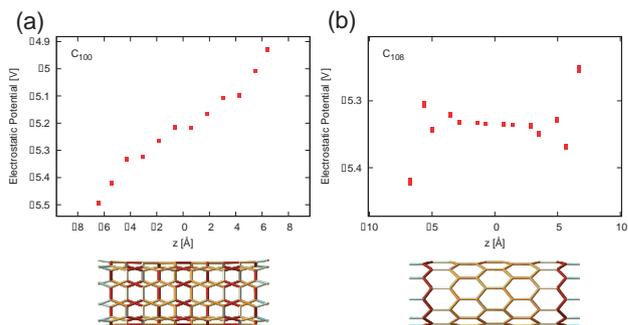


図 2 : 各原子位置に於ける(a)有限長 a-CNT、(b)有限長 z-CNT の静電ポテンシャル

図 2 (a)に電界下における a-CNT の静電ポテンシャルの原子位置依存性を示す。外部電界の存在により右肩上がりのポテンシャルのプロファイルを見ることが出来る。このポテンシャルをより詳細に眺めてみると興味深い事実に気がつく。すなわち、ポテンシャルの勾配が原子位置に強く依存し階段状に振る舞う様子をみることが出来る。これは、なんらかの詳細な原子構造、もしくは原子位置での外部電界遮蔽の強弱が存在していることを示唆している。そこで、炭素結合間距離に着目して有限長 a-CNT の構造解析を行うと、ポテンシャルの階段状変調とボンド長の間に関係が存在していることがわかった。ポテンシャル勾配の小さい領域が炭素結合長の短い領域 (ボンド長= 1.41\AA 以上) と、ポテンシャル勾配の大きい領域がボンドの長い領域 (ボンド長= 1.42\AA 以下) と一対一に対応している。このボンド長に依存した遮蔽の強弱は、共有結合に於ける電荷密度で説明できる。すなわち電荷密度が高くボンド長の短い2重ボンドにおいて、電荷による強い遮蔽が平

坦なポテンシャル勾配を生み出す。他方、結合長の短い1重ボンド領域では、電荷密度の低いために遮蔽効果が弱く急なポテンシャル勾配となる。この事実は、ナノスケールを有する炭素ネットワーク物質に於いて、その電子物性のごく僅かな構造の違い、ここでは0.01Åのオーダーの違いに依存すると言うことを示している。

では、原子配列の違いは何を生み出すであろうか？図2(b)に平行電界下におけるz-CNTの静電ポテンシャルの原子位置依存性を示す。驚くべきことに、端近傍の原子サイトにおいてポテンシャルが激しく振動していることがわかる。特に端とその一個内側の原子サイト間のポテンシャル勾配が外部電界に対して逆向きの勾配となっていることがわかる。すなわち、z-CNTの端では外部電界に対して過剰な遮蔽が誘起されることを示している。この過剰な遮蔽は端の原子配列にのみ依存し、直径に依存していないことが、直径の異なるz-CNTに対する同様の計算から明らかになった。実際、直径が6Å、8Åのz-CNTでも同様の過剰遮蔽の発現が見られる。この特異な遮蔽現象はz-CNTの端のジグザグ型の原子配置が誘起する特異な端局在状態（エッジ状態）によるものであることが詳細な電子構造解析から明らかになった。

4. トポロジカル欠陥を有する2次元炭素シートの物質設計

グラフェンは蜂の巣格子故に、原子欠陥やトポロジカル欠陥の導入による多様な物性変調が実現される。これらの導入された欠陥は、パーフェクトな6員環ネットワークにとってある種の不純物（あきらかに点欠陥、他の多角形員環は”不純”要素となるのが容易に想像可能）として振る舞う。すなわち、種々の欠陥を有するグラフェンもナノカーボンと異種物質複合構造体としての視点から眺めることが可能である。ここでは、極限までトポロジカル欠陥を包含する2次元炭素ネットワークの物質設計とその物性解明の結果を示す[3]。ここでは、5員環が3つからなる環状炭化水素分子、アセペンタレン(C₁₀H₆)

に着目した。この分子は結合交代を考えないと3回対称軸を有しており、この分子をユニットとした内部構造を持つ蜂の巣格子を構築することが可能である。しかしながら、アセペンタレンはお椀状の分子であり、そのまま重合させてネットワーク構造を構築しても、平面状の構造が得られる保証は無い。すなわち、分子の形状を反映した凸凹のリップルを有する2次元ネットワークとなる可能性がある。

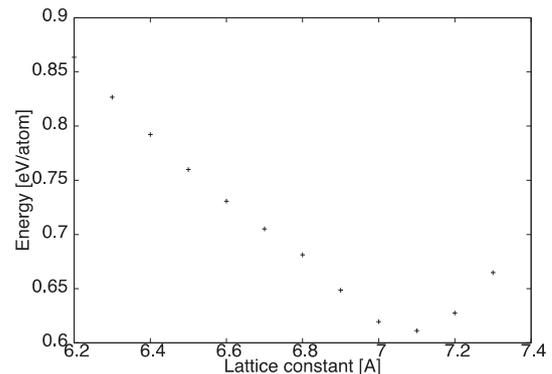


図3：5員環sp²ネットワークの全エネルギーの格子定数依存性

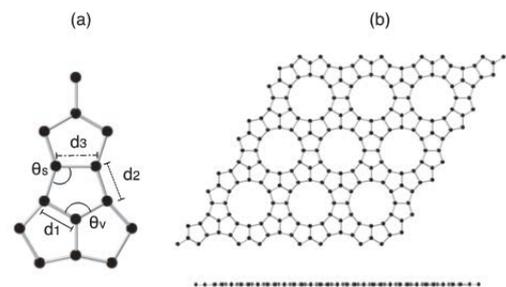


図4：5員環sp²ネットワークの構造。(a)ユニットセルを構成する原子構造。(b)最安定構造の上面図と側面図

図3にアセペンタレンを構成単位とする5員環ネットワークシートの全エネルギーの格子定数依存性を示す。格子定数a=7.1Åで全エネルギー0.6eV/atomで極小をとり準安定構造が存在することがわかる。また興味深いことに、構造最適化の初期構造としてお椀状のアセペンタレン構造を仮定したにもかかわらず、準安定構造は完全な平面構造となることがわかる(図4)。またこの平面構造は熱擾乱等に対して非常にロバストであることが第一原理分子動力学計算の結果から明らかになった。さらに興味深いこと

に、このシートは完全に電子的に飽和した sp^2 炭素ネットワーク、すなわち全ての炭素原子が 3 配位を有しており、局所的に完全にグラフェンの炭素と等価であるにも関わらず、逆格子空間の中心 (Γ 点) 近傍に平坦なバンドが発現することがわかった。さらに、この平坦バンドがフェルミレベルにかかることによりスピンの分極がシート上に誘起されることが明らかになった。図 5 にシート上に誘起された分極スピンの空間分布を示す。図から明らかなように、分極下スピンは強磁性的にシート上に広がっており、そのスピンモーメントは $0.62 \mu_B/nm^2$ となることがわかった。この結果は、5 員環のみからなる 2 次元 sp^2 炭素シートが強磁性炭素同素体の候補となり得ることを示したものである。

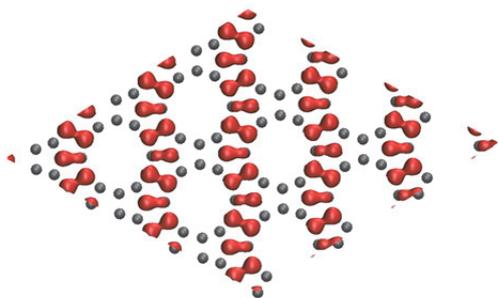


図 5 : 5 員環 sp^2 ネットワークのスピンの空間分布

5. まとめ

本稿では異種物質によるグラフェンの電子物性変調について、最近の我々の研究の成果を中心に紹介した。ここでは、異種物質としてグラフェンのデバイス動作時に本質となる外部電界、トポロジカルな欠陥に着目し、これらがグラフェンの特徴的な電子構造を大きく変調すること、全く予期せぬ特異な物性を誘起することを密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算から明らかにした。

参考文献

- (1) Yamanaka and S. Okada: "Electronic Properties of Carbon Nanotubes under an Electric Field", Appl. Phys. Express, **5**, 095101 (2012).
- (2) Yamanaka and S. Okada: "Anomalous Electric-Field Screening at Edge Atomic Sites of Finite-length Zigzag

Carbon Nanotubes", Appl. Phys. Express **6**, 045101 (2013).

- (3) M. Maruyama and S. Okada: "A Two-dimensional sp^2 Carbon Network of Fused Pentagons: All Carbon Ferromagnetic Sheet" Appl. Phys. Express **6**, 095101 (2013).

センター報告

・ 2013 年度大規模計算機システム利用による研究成果、論文一覧	55
・ 第 19 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2013)報告および 第 20 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2014)告知	73
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	75
・ 2014 年度大規模計算機システム利用講習会	77
・ 2013 年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	78
・ 2014 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	104
・ 2014 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	105
・ 2014 年度大規模計算機システム利用相談員	106
・ 大規模計算機システム FAQ	111
・ サイバーメディアセンターIT コア棟新営及び吹田本館改修工事について	119
・ 次期スーパーコンピュータ	121

2013 年度大規模計算機システム利用による研究成果、論文一覧

この一覧は、本センター大規模計算機システムを利用して 2013 年 4 月から 2014 年 3 月までに得られた研究成果について、利用者から報告されたものを掲載しています。

1 学術雑誌掲載論文

- [1] 佐藤範和, 梶島岳夫, 竹内伸太郎, 稲垣昌英, 堀之内成明, “直交格子法における物体境界近傍の直接離散化法 (速度場と圧力場の整合性を考慮した高精度化)”, 日本機械学会論文集B編, Vol.79, No.800, pp.605-621, 2013.4.
- [2] 梶島岳夫, 竹内伸太郎, 大森健史, “粒子流・気泡流の数値計算”, ながれ, Vol.32, No.3, pp.227-232, 2013.6.
- [3] 佐藤範和, 梶島岳夫, 竹内伸太郎, 稲垣昌英, 堀之内成明, “直交格子を用いた対流熱伝達計算における物体境界近傍の直接離散化法”, 日本機械学会論文集B編, Vol.79, No.803, pp.1219-1231, 2013.7.
- [4] Shintaro Takeuchi, Takaaki Tsutsumi, Takeo Kajishima, “Effect of temperature gradient within a solid particle on the rotation and oscillation modes in solid dispersed two-phase flows”, International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol.43, pp.15-25, 2013.10.
- [5] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, “Simulation of fluid-structure interaction based on an immersed-solid method”, Journal of Mechanical Engineering and Sciences, Vol.5, pp.555-561, 2013.12.
- [6] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Effects of curvature and vorticity in rotating flows on hydrodynamic forces acting on a sphere”, International Journal of Multiphase Flow, Vol.58, pp.292-300, 2014.1.
- [7] Takaaki Tsutsumi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Heat transfer and particle behaviours in dispersed two-phase flow with different heat conductivities for liquid and solid”, Flow, Turbulence and Combustion, Vol. 92, Issue 1-2, pp.103-119, 2014.1.
- [8] 藤原 忍, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “高濃度粒子が存在する流れ場に壁面が与える影響について (粒子が移動を伴う場合)”, 混相流, Vol.26, pp.489-497, Apr. 2013.
- [9] Takuya Tsuji, Eiji Narita, Toshitsugu Tanaka, “Effect of a wall on flow with dense particles”, Advanced Powder Technology, Vol.24, pp.565-574, Apr. 2013.
- [10] Takuya Tsuji, Kyohei Higashida, Yoshitomo Okuyama, Toshitsugu Tanaka, “Fictitious particle method: a numerical model for flows including dense solids with large size difference”, AIChE Journal, Vol.60, pp.1606-1620, May 2014.
- [11] Febdian Rusydi, Mohammad Kemal Agusta, Adhitya Gandaryus Saputro, Hideaki Kasai, “A Theoretical Study of Ligand Effects on the Electronic Structures of Ligated Zinc Porphyrin using Density Functional Theory”, Journal of the Vacuum Society of Japan, Vol.57(3), pp.102-110, 2014.
- [12] Allan Abraham B. Padama, Bhume Chantaramolee, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, “Hydrogen atom absorption in hydrogen-covered Pd(110) (1x2) missing-row surface”, International Journal of Hydrogen Energy, Vol.39(12), pp.6598-6603, 2014.
- [13] Yasutaka Tsuda, Kohei Oka, Takamasa Makino, Michio Okada, Wilson Agerico Dino, M. Hashinokuchi, Akitaka Yoshigoe, Yuden Teraoka, Hideaki Kasai, “Initial stages of Cu₃Au(111) oxidation: oxygen induced Cu segregation and

- the protective Au layer profile.”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol.16(8), pp.3815-3822, 2014.
- [14] Ferensa Oemry, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyoshi Maekawa, Kazuo Osumi, Kaoru Sato, “Adsorbed oxygen-induced cluster reconstruction on core-shell Ni@Pt and Pt clusters”, *Journal of Alloys and Compounds*, Vol.594(1), pp.93-101, 2014.
- [15] Allan Abraham B. Padama, Kohei Oka, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai, “Analysis of the changes in electronic structures and work function variation in alkali metal - metal surface systems”, *Journal of the Vacuum Society of Japan*, Vol.57(1), pp.27-31, 2014.
- [16] Joaquin Lorenzo Valmorina Moreno, Allan Abraham Bustria Padama, Hideaki Kasai, “A density functional theory-based study on the dissociation of NO on CuO(110) surface”, *CrystEngComm*, Vol.16, pp.2260-2265, 2014.
- [17] Adhitya Gandaryus Saputro, Hideaki Kasai, “Density functional theory study on the interaction of O₂ and H₂O₂ molecules with the active sites of cobalt-polypyrrole catalyst”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.83, pp.24707-1, 2014.
- [18] Koji Shimizu, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai, “Dynamics of Mu, H, D, and T Absorption into Pd(111): Isotope Effects”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.83, pp.013601, 2014.
- [19] Joaquin Moreno, Melanie David, Hideaki Kasai, “Interaction of Oxygen With Fe Nanowire-Filled Single-Walled Carbon Nanotubes”, *Advances in Natural Science*, Vol.6(4), pp.1-5, 2013.
- [20] Ryan Lacdao Arevalo, Mary Clare Sison Escano, Hideaki Kasai, “Mechanistic insight into the Au-3d metal alloy-catalyzed borohydride electro-oxidation: From electronic properties to thermodynamics”, *ACS Catalysis*, Vol.3, pp.3031-3040, 2013.
- [21] Kuniyuki Miwa, Mamoru Sakaue, Hideaki Kasai, “Interplay between Plasmon Luminescence and Vibrationally Resolved Molecular Luminescence Induced by Scanning Tunneling Microscopy”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.82, pp.069715-1 - 069715-5, 2013.
- [22] Kuniyuki Miwa, Mamoru Sakaue, Hideaki Kasai, “Vibration-assisted upconversion of molecular luminescence induced by scanning tunneling microscopy”, *Nanoscale Research Letters*, Vol.8, pp.204, 2013.
- [23] Mary Clare Sison Escaño, Hideaki Kasai, “First-principles study on surface structure, thickness and composition dependence of the stability of Pt-skin/Pt₃Co oxygen-reduction reaction”, *Journal of Power Sources*, Vol.247, pp.562-571, 2013.
- [24] Allan Abraham B. Padama, Hideaki Kasai, Yogi Wibisono Budhi, “Hydrogen absorption and hydrogen-induced reverse segregation in palladium-silver surface”, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol.38, No.34, pp.14715-14724, 2013.
- [25] Adhitya Gandaryus Saputro, Hideaki Kasai, Koichiro Asazawa, Hirofumi Kishi, and Hirohisa Tanaka, “Comparative Study on the Catalytic Activity of the TM-N₂ Active Sites (TM= Mn, Fe, Co, Ni) in the Oxygen Reduction Reaction: Density Functional Theory Study”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.82, No.11, pp.114704, 2013.
- [26] Nobu C. Shirai and Macoto Kikuchi, “Structural flexibility of intrinsically disordered proteins induces stepwise target recognition”, *The Journal of Chemical Physics*, 139, 225103, 2013.
- [27] Katsuyoshi Matsushita and Macoto Kikuchi, “Short Polypeptide with Metastable Structures”, *Interdiscip. Info. Sci.*, 19, 29, 2013.
- [28] Ken Watanabe, Hikaru Kawamura, Hiroki

- Nakano, Toru Sakai, “Quantum spin-liquid behavior in the spin-1/2 random Heisenberg anti-ferromagnet on the triangular lattice”, *J. Phys. Soc. Jpn.* 83, 034714, 2014.
- [29] Shin Inada, Takako Ono, Nitaro Shibata, Michiaki Iwata, Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Kazuyuki Mitsui, Mark R. Boyett, Haliza Dobrzynski, Kazuo Nakazawa, “Simulation study of complex action potential conduction in atrioventricular node”, *Conf Proc IEEE Med Biol Soc* 2013, 6850-6853.
- [30] Ebihara, Y. and T. Tanaka, “Fundamental properties of substorm-time energetic electrons in the inner magnetosphere”, *J. Geophys. Res.*, 118, 1589-1603, DOI: 10.1002/jgra.50115, 2013.
- [31] Takahiro Endoh, Takeshi Matsuno, Yutaka Yoshikawa and Eisuke Tsutsumi, “Estimates of the turbulent kinetic energy budget in the oceanic convective boundary layer”, *Journal of Oceanography*, 70, 1, 971-983, 2014 年 1 月.
- [32] Yusuke Maruyama, Tetsuro Tamura, Yasuo Okuda, Masamiki Ohashi, “LES of fluctuating wind pressure on 3D square cylinder for PIV-based inflow turbulence”, *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, Vol. 122, pp.130-137, 2013.
- [33] Machida, M. N., Inutsuka, S., and Matsumoto, T., “Conditions for circumstellar disc formation: effects of initial cloud configuration and sink treatment”, *MNRAS*, 65-, 2014 年 1 月.
- [34] Machida, M. N. and Doi, K., “The formation of Population III stars in gas accretion stage: effects of magnetic fields”, *MNRAS*, 435, 3283-3305, 2013 年 11 月.
- [35] Takahashi, S. Z., Inutsuka, S., and Machida, M. N., “A Semi-analytical Description for the Formation and Gravitational Evolution of Protoplanetary Disks”, *ApJ*, 770, 71, 2013 年 6 月.
- [36] Machida, M. N. and Hosokawa, T., “Evolution of protostellar outflow around low-mass protostar”, *MNRAS*, 431, 1719-1744, 2013 年 5 月.
- [37] Takahiro Tsukahara, Masaaki Tanabe, Yasuo Kawaguchi, “Effect of fluid viscoelasticity on turbulence and large-scale vortices behind wall-mounted plates”, *Advances in Mechanical Engineering*, Vol. 2014, Article ID 823138 (12 pages), Mar. 2014.
- [38] Hirohito Ikeda, Yukiko Sano, Tomonori Matsubara, Mitsunobu Kawahara, Miho Yukawa, Masao Fujisawa, Eiji Yukawa, Hatsumi Aki, “Drug-Tea Polyphenol Interaction: Incompatibility between Oral Solution of Antipsychotic Propericiazine and Green Tea Drink”, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, Vol. 113, No.3, pp. 1135-1138, Sep. 2013.
- [39] Kodai Yamamoto, Taro Matsuo, Hiroshi Shibai, Yoichi Itoh, Mihoko Konishi, Jun Sudo, Ryoko Tanii, Misato Fukagawa, Takahiro Sumi, et al., “Direct Imaging Search for Extrasolar Planets in the Pleiades”, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, Vol.65, No.4, 90, Aug. 2013.
- [40] Tomoyuki Hirouchi, Yoji Shibutani, “Mechanical Responses of Copper Bicrystalline Micro Pillars with $\Sigma 3$ Coherent Twin Boundaries by Uniaxial Compression Tests”, *Materials Transactions*, Vol. 55, No. 1, pp.52-57, 2014.
- [41] 渋谷 陽二, 譯田 真人, 吉川 高正, “非晶性金属材料の材料力学 (不均質欠陥理論に基づく弾塑性有限要素解析)”, *日本機械学会論文集 (A編)*, 79 卷, 808 号, pp.113-123, 2013.
- [42] Daisuke Matsunaka, Yasuaki Ohnishi, Yoji Shibutani, “Effects of Stacking Fault Energy on Fundamental Deformation Modes in Single Crystalline Magnesium by Molecular Dynamics Simulations”, *Materials Transactions*, Vol. 54, No. 11, pp.2093-2097, 2013.
- [43] Yoji Shibutani, Tomoyuki Hirouchi, Tomohito Tsuru, “Transfer and Incorporation of Dislocations to $\Sigma 3$ Tilt Grain Boundaries under Uniaxial

- Compression”, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, vol. 7, No. 6, pp.571- 584, 2013.
- [44] Tomoyuki Hirouchi, Yoji Shibutani, “Explicit Distinctions between 2D MPF Grain Growth Simulations and EBSD Analyses to Determine Driving Mechanism of Grain Growth”, *Materials Transactions*, Vol. 54, No. 10, pp.1884-1893, 2013.
- [45] 荒木 敏弘, 渋谷 陽二, “薄板構造柱の軸圧縮不安定挙動に及ぼす形状効果”, *日本機械学会論文集(A編)*, 79 巻, 804 号, pp.253-264, 2013.
- [46] Daisuke Matsunaka, Akira Kanoh, Yoji Shibutani, “Energetic Analysis of Deformation Twins and Twinning Dislocations in Magnesium”, *Materials Transactions*, Vol. 54, No. 8, pp. 1524-1527, 2013.
- [47] S. Ohnishi, Y. Ikeda, H. Kamano, and T. Sato, “Signature of strange dibaryons in kaon- and photon-induced reactions”, *Phys. Rev. C* 88 (No.2, August) (2013) 025204 1-13 , DOI 10.1103/PhysRevC.88.025204.
- [48] N. Yamanaka, T. Sato, and T. Kubota, “R-parity violating supersymmetric Barr-Zee type contributions to the fermion electric dipole moment with weak gauge boson exchange”, *Phys. Rev. D* 87 (No.11, June) (2013) 115011 1-13 , DOI 10.1103/PhysRevD.87.115011.
- [49] C. Alexandrou, E. B. Gregory, T. Korzec, G. Koutsou, J. W. Negele, T. Sato, and A. Tsapalis, “Determination of the $\Delta(1232)$ axial and pseudoscalar form factors from lattice QCD”, *Phys. Rev. D* 87 (No.11, June) (2013) 114513 1-24, DOI 10.1103/PhysRevD.87.114513.
- [50] H. Kamano, S.X. Nakamura, T. -S. H. Lee, and T. Sato, “Nucleon resonances within a dynamical coupled-channels model of πN and γN reactions”, *Phys. Rev. C* 88 (No.3, September) (2013) 035209 1-51 , DOI 10.1103/PhysRevC.88.035209 .
- [51] Kenji Kiyohara Hiroshi Shioyama, Takushi Sugino, Kinji Asaka, Yasushi Soneda, Kiyooki Imoto, and Masaya Kodama, “Phase transition in porous electrodes. III. For the case of a two component electrolyte”, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 138, 234704, 2013.
- [52] H. Nagatomo, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima, H. Shiraga and H. Azechi, “Computational study of strong magnetic field generation in a nonspherical, cone-guided implosion”, *Nuclear Fusion*, Vol.53, 6, 063018, May 2013.
- [53] JOHZAKI Tomoyuk, SUNAHARA Atsushi, NAGATOMO Hideo, SAKAGAMI Hitoshi, FUJIOKA Shinsuke, SHIRAGA Hiroyuki, MIMA Kunioki, “Enhancement of Energy Coupling Efficiency in Fast-Ignition Laser Fusion by Electron Beam Guiding with Self-Generated Magnetic Field”, *J. Plasma Fusion Res.*, Vol.89, No.7, 456 - 461, Jul. 2013.
- [54] Hata M., Sakagami H., Johzaki T., et al., “Effects of laser profiles on fast electron generation under the same laser energy”, *LASER AND PARTICLE BEAMS*, Vol.3, No.3, pp371-377, Sep. 2013.
- [55] H. Azechi, K. Mima, S. Shiraga, S. Fujioka, H. Nagatomo, T. Johzaki, T. Jitsuno, M. Key, R. Kodama, M. Koga, K. Kondo, J. Kawanaka, N. Miyanaga, M. Murakami, K. Nagai, M. Nakai, H. Nakamura, T. Nakamura, T. Nakazato, Y. Nakao, K. Nishihara, H. Nishimura, T. Norimatsu, P. Norreys, T. Ozaki, J. Pasley, H. Sakagami, Y. Sakawa, N. Sarukura, K. Shigemori, T. Shimizu, A. Sunahara, T. Taguchi, K. Tanaka, K. Tsukakimoto, Y. Fujimoto, H. Homma, A. Iwamoto, “Present status of fast ignition realization experiment and inertial fusion energy development”, *Nuclear Fusion*, vol.53, num.10, p.104021, Oct. 2013.

- [56] T. Yanagawa, H. Sakagami, and H. Nagatomo, “Simulation analysis of the effects of an initial cone position and opening angle on a cone-guided implosion”, *Phys. Plasmas* 20, 102703, October 2013.
- [57] M. Hata, H. Sakagami, T. Johzaki and H. Nagatomo, “Effects of laser temporal profile on fast electron characteristics”, *EPJ Web of Conferences* 59, 17004, Nov. 2013.
- [58] H. Sakagami, T. Johzaki, T. Taguchi and K. Mima, “Suppression effects of Weibel instability for fast electron divergence”, *EPJ Web of Conferences* 59, 17016, Nov. 2013.
- [59] T. Johzaki, A. Sunahara, S. Fujioka, H. Nagatomo, H. Sakagami and K. Mima, “Fast electron beam guiding for effective core heating”, *EPJ Web of Conferences* 59, 03010, Nov. 2013.
- [60] Takayoshi Sano, Tsuyoshi Inoue, Katsunobu Nishihara, “Critical Magnetic Field Strength for Suppression of the Richtmyer-Meshkov Instability in Plasmas”, *Physical Review Letters*, vol. 111, 205001, Dec. 2013.
- [61] G. Huser, N. Ozaki, T. Sano, Y. Sakawa, K. Miyanishi, G. Salin, Y. Asaumi, M. Kita, Y. Kondo, K. Nakatsuka, H. Uranishi, T. Yang, N. Yokoyama, D. Galmiche, R. Kodama, “Hugoniot and mean ionization of laser-shocked Ge-doped plastic”, *Physics of Plasmas*, vol. 20, 122703, 11pp, Dec. 2013.
- [62] N. J. Turner, M.-H. Lee, T. Sano, “Magnetic Coupling in the Disks around Young Gas Giant Planet”, *Astrophysical Journal*, vol. 783, 14, 15, pp, Feb. 2014.
- [63] A. Zhidkov, S. Masuda, S.S. Bulanov, T. Hosokai, J. Koga, R. Kodama, *Phys. Rev.*, ST (2014) submitted.
- [64] Junghun Shin, Alexei Zhidkov, Zhan Jin, Tomonao Hosokai, Ryosuke Kodama, “Selective-mode terahertz emission from rippled air irradiated by femtosecond laser pulses”, *Applied Physics Express*, 受理 (2014年3月10日).

2. 国際会議会議録掲載論文

- [1] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, “Heat Transfer in Fluid-Particle Two-Phase Media”, *International Workshop on Numerical Simulations of Particle/Droplet/Bubble-laden Multiphase Flows*, 2013.5.
- [2] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, “Direct numerical simulation of heat transfer in fluid-particle two-phase media”, *International Conference on Multiphase Flow 2013*, Keynote-7B, 2013.5.
- [3] Takaaki Tsutsumi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Dispersed two-phase flow behaviours and heat transfer with different ratios of solid-liquid heat conductivities”, *International Conference on Multiphase Flow 2013*, ICMF2013-643, 2013.5.
- [4] Tadashi Ochiai, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, “Numerical Investigation of Droplet Motions on Heterogeneous Surfaces”, *International Conference on Multiphase Flow 2013*, 2013.5.
- [5] Shogo Kawamoto, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, “Development of interface capturing method for dissolving bubbly flow”, *International Conference on Multiphase Flow 2013*, ICMF2013-688, 2013.5.
- [6] Tetsuya Oshio, Takeo Kajishima, “Large eddy simulation of turbulent cavitating flow around a hydrofoil”, *4th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow*, ASCHT0175-T02-1-P, 2013.6.
- [7] Kyohei Izumi, Takeo Kajishima, “Numerical method of moving interface accompanied with evaporation using boundary conditions based on molecular gas dynamics”, *4th Asian Symposium*

- on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, ASCHT0188-T02-1-P, 2013.6.
- [8] Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Numerical modeling of biological fluid-structure interaction involving contact of elastic objects and concentration diffusion through permeable membrane”, Joint EURO-MECH/ERCOFTAC Colloquium 549 - Immersed Boundary Methods, pp.127-129, 2013.6.
- [9] Norikazu Sato, Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, Masahide Inagaki, Nariaki Horinouchi, “A Cartesian grid method using a direct discretization approach for simulations of heat transfer and fluid flow”, Joint EUROMECH / ERCOFTAC Colloquium 549 - Immersed Boundary Methods, pp.56-58, 2013.6.
- [10] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, “Simulation of fluid-structure interaction based on an immersed-solid method”, 2nd International Conference on Mechanical Engineering Research, Keynote-2, 2013.7.
- [11] Azusa Ito, Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Numerical analysis of the interaction between fluid and flexible fibres clamped on elastic walls”, 2nd International Conference on Mechanical Engineering Research, No.p167, 2013.7.
- [12] Changhwa Han, Takeo Kajishima, “One-equation subgrid scale model for large eddy simulation of weakly compressible flow”, 8th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Poster P23, 2013.8.
- [13] Takeo Kajishima, Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, “The effect of streamline curvature on the fluid force acting on a solid particle”, 4th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows (ICJWSF), ICJWSF2013-IL07, Nagoya, 2013.8.
- [14] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Decoupling the effects of the streamline curvature and the vorticity on the hydrodynamic forces acting on a spherical particle in rotating flows”, 66th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics, No.G8.4, Pittsburgh, PA, 2013.11.
- [15] Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Numerical simulation of diffusion through permeable membrane using an un-conformable mesh”, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics, No.1415, 2013.12.
- [16] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “The modeling of the effect of the streamline curvature for the fluid force on a sphere”, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics, No.1229, 2013.12.
- [17] Takaaki Tsutsumi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Effect of temperature gradient within solid particles for dispersed two-phase flow and heat transfer”, 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics, No.1416, 2013.12.
- [18] Takuya Tsuji, Kyohei Higashida, Yoshitomo Okuyama, Toshitsugu Tanaka, “Validation study of a numerical model for the flows including dense solids with large size difference”, Proceedings of 8th International Conference on Multiphase Flow, No.980, May 2013.
- [19] Zaidi A. Ali, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka, “Dynamic behavior of sedimenting particles at moderate Reynolds number”, Proceedings of 8th International Conference on Multiphase Flow, No.450, May 2013.
- [20] Shinobu Fujihara, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka, “Effect of wall on the flow with dense solid particles”, Proceedings of 8th International Conference on Multiphase Flow, No.830, May

- 2013.
- [21] Tran Phan Thuy Linh, Mamoru Sakaue, Musa Alaydrus, Triati Dewi Kencana Wungu, Susan Menez Aspera, Hideaki Kasai, Tatsumi Ishihara, “Alkaline-earth doped effect on oxygen vacancy migration in monoclinic lanthanum germanate: first-principles calculation”, ECS Transactions, Vol.57(1), pp.1077-1083, 2013.
- [22] Mamoru Sakaue, Hideaki Kasai, Tatsumi Ishihara, “Computational Studies on Ionic and Electronic Conduction of Rare-Earth-Based Oxides Based on Density Functional Theory”, ECS Transactions, Vol.57, No.1, pp.2411-2418, 2013.
- [23] Susan Meñez Aspera, Mamoru Sakaue, Musa Alaydrus, Triati Dewi Kencana Wungu, Tran Linh PhanThuy, Hideaki Kasai, Tatsumi Ishihara, “Investigations on the Structural and Electronic Properties of Pure and Doped Bulk Pr₂NiO₄ through First Principles Calculations”, ECS Transactions, Vol.57, No.1, pp.2753-2762, 2013.
- [24] Hideaki Kasai, Susan Meñez Aspera, Adhitya Gandaryus Saputro, “Development of Novel Materials Through Computational Materials Design (CMD)”, ECS Transactions, Vol.53, No.37, pp.1-6, 2013.
- [25] Musa Alaydrus, Mamoru Sakaue, Susan Meñez Aspera, Triati Dewi Kencana Wungu, Tran Linh PhanThuy, Hideaki Kasai, Tatsumi Ishihara, “First-principles Study of the Lattice Strain Effects on the Ionic Migration Barrier of Sm-doped Ceria”, ECS Transactions, Vol.57, No.1, pp.2733-2739, 2013.
- [26] Triati Dewi Kencana Wungu, Mamoru Sakaue, Susan Meñez Aspera, Tran Linh PhanThuy, Musa Alaydrus, Hideaki Kasai, Tatsumi Ishihara, “First Principles Study on the Electronic Structure and Properties of Sr- and Mg- Doped LaGaO₃”, ECS Transactions, Vol.57, No.1, pp.2715-2722, 2013.
- [27] Shin Inada, Daniel T. Harrell, Takako Ono, Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Halina Dobrzynski, Haruo Honjo, Nitaro Shibata, Takanori Ikeda, Kazuyuki Mitsui, Naomasa Makita, Itsuo Kodama, Mark R. Boyett, Kazuo Nakazawa, “Multi-scale simulation studies of excitation conduction from the sinoatrial node to the ventricles in the heart”, The 2nd HD Physiology International Symposium: Multi-Level Systems Biology, 2013 (2013/6/28-29, Tokyo).
- [28] Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Shin Inada, Takanori Ikeda, Kazuo Nakazawa, “Rotational anisotropy prevents transition of tachycardia to fibrillation in ventricles under the large transmural dispersion of depolarisation - A simulation study -”, The 2nd HD Physiology International Symposium: Multi-Level Systems Biology, 2013 (2013/6/28-29, Tokyo).
- [29] Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Shin Inada, Takanori Ikeda, Kazuo Nakazawa, “Simulation studies of tachyarrhythmias in a 3-D ventricular wall model: implications for electrophysiological heterogeneity and rotational anisotropy”, 35th Annual International IEEE EMBS Conference, 2013 (2013/7/3-7, Osaka).
- [30] Kazuya Tsuboi, Eiji Tomita, Tatsuya Hasegawa, “Chemical Effects on Turbulent Premixed Flames nearby a Wall Surface”, 24th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, 187, August 2013.
- [31] Yutaka Yoshikawa, “Competing roles of surface heating and the earth rotation in scaling wind-induced mixing layer depth”, Joint Assembly IAHS-IAPSO-IAPSEI, Gothenburg, Sweden, July 2013.
- [32] K. Tsujimoto, N. Shibata, T. Shakouchi and T. Ando, “DNS of Dynamic Vector-Controlled Free Jets”, The 9th European Fluid Mechanics Conference, USB memory, p.1, 2012.
- [33] K. Tsujimoto, N. Shibata, T. Shakouchi, and T. Ando, “Analysis of dynamic- controlled round jet using POD and DMD”, Proceeding of the 14th

- European Turbulence Conference USB, 1p., 2013.
- [34] T. Koide, K. Tsujimoto, T. Shakouchi, and T. Ando, "Analysis of Jet-Jet Interaction of multiple impinging jet using DNS", Proceeding of the 14th European Turbulence Conference USB, 1p., 2013.
- [35] K. Tsujimoto, N. Shibata, T. Shakouchi, and T. Ando, "Structural Analysis of Dynamic-controlled jet using DNS", Proceedings of International Conference On Jets, Wakes and Separated Flows, CD-ROM, 6p., 2013.
- [36] T. Koide, K. Tsujimoto, T. Shakouchi, and T. Ando, "DNS analysis of multiple impinging jets", Proceedings of International Conference On Jets, Wakes and Separated Flows, CD-ROM, 6p., 2013.
- [37] Yuto Sakuma, Tetsuro Tamura, "DNS of tornado type of vertical vortex under convective condition", The 6th International Symposium on Computational Wind Engineering, 2014.
- [38] Tsuyoshi Nozu, Tetsuro Tamura, Takeshi Kishida, Akira Katsumura, "Combined model of structured and unstructured-grid system for wind pressure estimation of a tall building", 6th European and African Conference on Wind Engineering, 2013.
- [39] Kataoka, H. and Tamura, T, "Hybrid RANS/LES Simulation of Wind Flow over An Urban Area", 12th Americas Conference on Wind Engineering, 2013.6.
- [40] Kataoka, H. and Tamura, T, "Study on the relationship between roughness parameters and vertical wind velocity profiles over an urban area by LES", 6th International Symposium on Computational Wind Engineering, 2014.6 (投稿中).
- [41] Haruka Etoh, "Aerodynamics of Simplified Waveriders", The 29th International Symposium on Space Technology and Science, 2013-s-105-g, Nagoya, Japan, June 7, 2013.
- [42] T.Kuramoto, N.Tsuboi, H.Nagai, K.Asai, "Numerical study on shock wave interaction over compression corner with 30 deg. in hypersonic flow," ISSW29, 0246-000035, Madison(USA), 2013,7.14~19.
- [43] Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, Hiroshi Terashima, "Numerical Study for Real Gas Effects on Shock Tube Problem in Supercritical Condition", 29th International Symposium on Space Technology and Science, 2013-s-01-o-2, June, 2013.
- [44] Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, Hiroshi Terashima, "Numerical Study of Cryogenic Coaxial Jet under Supercritical Condition", AIAA SciTech2014, AIAA 2014-0136, Feb., 2014.
- [45] Takayuki Araki, Youhi Morii, Nobuyuki Tsuboi, Koichi A. Hayashi, "Detailed Investigation on the Wave Structures in Ethylene/Oxygen Detonations in Narrow Channels", 9th High Energy Materials, HEMs-39, ISAS/JAXA, Kanagawa, Japan, October 8th, 2013.
- [46] Araki T., Morii Y., Tsuboi N., Hayashi A.K., "Evaluation of Chemical Reaction Models and Numerical Simulations of Detonations in C2H4/O2 Mixtures", 24th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, #57, 2013.
- [47] Sugiyasu T., Morii Y., Tsuboi N., Asahara M., Hayashi A.K., "Numerical Simulations on Propagating Process of H2/O2/H2O Cylindrical Detonation with Detailed Reaction Model", 24th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, #158, 2013.
- [48] Motonaga T., Yoshida K., Morii Y., Murakami K., Susa A., Tsuboi N., Hayashi A.K., "Experimental Study on CH4/O2 Detonation Characteristics near Propagation Limit: Influence of Initial Pressure and Equivalence Ratio on Cellular Structure", 24th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, #237, 2013.
- [49] Watanabe Y., Tsuboi N., Kojima T., Hayashi A.K., "Thrust Performance Estimation on Rotating Detonation Engine Using Two-Dimensional Numerical Simulations Isp under Low-Pressure En-

- vironment”, 24th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, #117, 2013.
- [50] Yuichi Togashi, “Complex Intramolecular Mechanics of Protein Machines”, Abstracts of the 7th International Conference on Engineering of Chemical Complexity, June 2013.
- [51] Yuichi Togashi, “Structural Dynamics of Molecular Machinery: A Modeling Scheme of Chromatin”, Abstracts of the 2nd International Symposium of the Mathematics on Chromatin Live Dynamics, Mar. 2014.
- [52] Masaaki Tanabe, Takahiro Tsukahara, Yasuo Kawaguchi, “DNS study on vortices induced by flat-plate vortex generator in drag-reducing turbulent flow,”, Proceedings of the 12th International Symposium on Fluid Control, Measurements, and Visualization, OS8-4-4 (8 pages), Nov. 2013.
- [53] Satoshi Ii, Shigeo Wada, “Numerical study of acoustic fluctuations in low Mach number flows with a projection-based method”, Advances in Computational Fluid-Structure Interaction and Flow Simulation, abstract (1 page), March, 2014.
- [54] Yoji Shibutani, Masato Wakeda, Takamasa Yoshikawa, “Finite Element Simulations of Shear Bands in Amorphous Metals Based on Heterogeneous Defects Theory”, 1st International Materials, Industrial, and Manufacturing Engineering Conference (MIMEC2013), Malaysia, December, 2013.
- [55] Yoji Shibutani, Tomohito Tsuru, Tomoyuki Hirouchi, “Defects Interactions between Dislocations and Grain boundaries by Molecular Dynamics Simulations”, 3rd International Conference on Material Modelling 2013 (ICMM), Poland, September, 2013.
- [56] Yoji Shibutani, Tomohito Tsuru, Tomoyuki Hirouchi, “Near-field Defects Interaction between Dislocations and Grain boundary”, International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4), Tokyo, July, 2013.
- [57] Daisuke Matsunaka, Takayoshi Teramoto, Yoji Shibutani, “First-principles study of twin boundaries and solute atoms in Mg alloys”, International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4), Tokyo, July, 2013.
- [58] Yoji Shibutani, Tomoyuki Hirouchi, “Defect Interactions of Grain Boundaries observed in Bicrystalline Micropillars under Nanoindentation”, International Symposium on Strength of Fine Grained Materials - 60 Years of Hall-Petch, Tokyo, July, 2013.
- [59] Daisuke Matsunaka, “A Theoretical Study of Impurity Effects on High-Tc Cuprate Superconductors and Diluted Magnetic Semiconductors”, International Workshop on the Theory of Dense Kondo Systems - 30 Years after the Yoshimori-Kasai Model and Beyond, Osaka, March, 2013.
- [60] T. Sato, “Nucleon resonances from the dynamical coupled channel approach of meson production reactions”, 5th workshop of the APS topical group on hadron physics, (at Denver USA, April 10-12 2013).
- [61] T. Sato, “Nucleon resonances from the dynamical coupled channel approach of meson production reactions”, The 9th international workshop on the physics of excited nucleons, (at Peniscola Spain, May 27-30 2013).
- [62] T. Sato, “Meson production amplitudes from the dynamical coupled channel model”, The 7th international workshop on pion-nucleon partial wave analysis and the interpretation of baryon resonances, (at Camogli Italy, September 23-30 2013).
- [63] T. Sato, “Dynamical understanding of baryon resonances”, The 13th international conference on

meson-nucleon physics and the structure of the nucleon, (at Rome Italy, September 30-October 4 2013).

- [64] Cardinal, M.G., A. Yoshikawa, H. Kawano, H. Liu, M. Watanabe, S. Abe, T. Uozumi, G. Maeda, T. Hada, and K. Yumoto, “Capacity building activities at ICSWSE”, International CAWSES-II Symposium, SS5p1-006, 21 November 2013 (18–22 November 2013), Nagoya University Toyoda Auditorium, Nagoya.
- [65] Watanabe, M., S. Sakito, T. Tanaka, H. Shinagawa, and K. T. Murata, “Convection and Birkeland currents associated with IMF BY triggered theta auroras: An MHD modeling”, International CAWSES-II Symposium, SS4p2-019, 21 November 2013 (18–22 November 2013), Nagoya University Toyoda Auditorium, Nagoya.
- [66] Maeda, G., K. Yumoto, H. Kawano, A. Yoshikawa, H.Liu, M. Watanabe, S. Abe, T. Uozumi, A. Ikeda, and M. G. Cardinal, “MAGDAS activities of year 2013”, International CAWSES-II Symposium, SS3p2-059, 21 November 2013 (18–22 November 2013), Nagoya University Toyoda Auditorium, Nagoya.
- [67] T. Yanagawa, H. Sakagami, and H. Nagatomo, “Three-dimensional simulations of asymmetric implosion for cone-guided targets”, Proceedings of IFSA 2011 – Seventh International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, EPJ Web of Conferences 59, 03008, November 2013.
- [68] Toshihiro Taguchi, Thomas M. Antonsen, Jr. and Kunioki Mima, “Suppression of beam merging and hosing instabilities in the magnetized fast ignition”, Proceedings of IFSA2013, to be published.
- [69] T. Johzaki, K. Mima, S. Fujioka, H. Sakagami, A. Sunahara, H. Nagatomo, H. Shiraga, “Electron beam guiding by strong longitudinal magnetic fields”, 8th international conference on inertial fusion sciences and applications (IFSA2013), Nara, Japan, Sep.8-13, 2013 to be published in

the IOP Journal of Physics: Conference Series.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] 梶島岳夫, “混相流および流体・構造連成問題の数値シミュレーション”, 第6回 ビヨンド・シミュレーションフォーラム, 講演No.2, 2013.5.
- [2] 竹内伸太郎, 堤貴昭, 梶島岳夫, “分散混相流中における流体粒子相互作用および熱伝達の数値シミュレーション”, 関西伝熱セミナー「先の先の伝熱技術in六甲」, 2013.9.
- [3] 日角友香, 大森健史, 西田翔吾, 山口康隆, 梶島岳夫, “固気液三重線を含む流れの流体力学的記述に関する分子動力学的考察”, 日本流体力学会年会 講演論文集, No.L0011-3, 2013.9.
- [4] 大塩哲哉, 梶島岳夫, “1 方程式型ダイナミックSGSモデルを用いた翼周りのキャビテーション乱流に対するLES”, 日本機械学会 流体工学部門講演会論文集, No.0435, 2013.11.9.
- [5] Shintaro Takeuchi and Lucy Zhang, “流れと柔軟構造物の連成シミュレーション”, 京都大学数理解析研究所研究集会「生物流体力学における流れ構造の解析と役割」, 2013.11.
- [6] 日角友香, 大森健史, 西田翔吾, 山口康隆, 梶島岳夫, “動的濡れを伴う液滴内の流れと固気液三重線近傍の応力分布に関する分子動力学的考察”, 第27回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, No. E02-5 (USB), 2013.12.
- [7] 高木大輔, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “振動流駆動の二重円管型熱交換器におけるオリフィス形状が熱交換特性に与える影響”, 第27回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, No. A10-5 (USB), 2013.12.
- [8] 梶島岳夫, 竹内伸太郎, “固液二相流における粒子群の挙動と熱伝達”, 京都大学数理解析研究所研究集会「大スケール流体運動と乱流揺らぎ」, 2014.1.
- [9] 宮内優, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “透過膜にお

- ける濃度ジャンプを考慮した有限要素解析による拡散の数値シミュレーション”, 日本機械学会 第 26 回バイオエンジニアリング講演会講演論文集, No.1G34, 2014.1.
- [10] 山田遼, 梶島岳夫, “低マッハ数近似解法を用いたオープンキャビティ流れの解析”, 日本機械学会 関西学生会卒業研究発表講演会 講演前刷集, p.12.22, 2014.3.
- [11] 佐藤亘, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “数値解析による強制対流下の固液分散二相流における熱伝達特性に関する研究”, 日本機械学会 関西学生会卒業研究発表講演会 講演前刷集, p.7.11, 2014.3.
- [12] 福岡宏紀, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “直交格子上における厚みのない膜を含む流れ場の直接離散化法”, 日本機械学会 関西支部第 89 期定時総会講演会 講演論文集, No.144-1, p.8.2, 2014.3.
- [13] 大塩哲哉, 梶島岳夫, “LES を用いた Clark-Y11.7%翼周りのキャビテーション乱流に対する非定常解析”, 日本機械学会 関西支部第 89 期定時総会講演会 講演論文集, No.144-1p.8.19, 2014.3.
- [14] 田中 敏嗣, 穂山 祐一, 辻 拓也, “付着性を有する粒子せん断流のDEM解析 (バネ定数の影響と動的付着力モデルの検討)”, 粉体工学会 2013 年度春期研究発表会要旨集, pp.45-46, May 2013.
- [15] 辻 拓也, 東田 恭平, 奥山 佳那, 田中 敏嗣, “高濃度固気二相流中に存在する粗大物体の挙動予測モデル”, 粉体工学会 2013 年度春期研究発表会要旨集, pp.111-112, May 2013.
- [16] 岩崎 大継, 若松 知哉, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “体積力型埋め込み境界法における固体界面-直交格子の相対位置依存性について”, 混相流シンポジウム 2013, D131, Aug. 2013.
- [17] 長谷 遼太, 田中 敏嗣, 川口 寿裕, 辻 拓也, 鷺野 公彰, “メゾスコピックMPS-DEMカップリングモデルによる固液二相流の数値解析”, 混相流シンポジウム 2013, D134, Aug. 2013.
- [18] 奥山 佳那, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “気泡流動層中に存在する粗大物体の運動について”, 混相流シンポジウム 2013, D143, Aug. No.2013.
- [19] 藤原 忍, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “壁面近傍における高濃度固気混相流の直接数値計算 (粒子群運動に対する壁面の影響)”, 日本流体力学会年会 2013, A01-3, Sep. 2013.
- [20] 奥山 佳那, 東田 恭平, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “流動層中で浮沈挙動する粗大物体に働く力について”, 第 19 回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム, pp.62-65, Nov. 2013.
- [21] 岩崎 大継, 若松 知哉, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “部分的なVP法の導入による体積力型埋め込み境界法の改良”, 第 27 回数値流体力学シンポジウム, C09-1, Dec. 2013.
- [22] 高木洋平, “相分離を伴う一様等方乱流シミュレーション”, 第 27 回数値流体力学シンポジウム, A02-3, Dec. 2014.
- [23] 高木洋平, 藤村行正, 岡野泰則, “相分離での自己組織化構造形成過程に及ぼす乱流影響”, 化学工学会第 79 年会, Q204, Mar. 2014.
- [24] 伊井仁志, 和田成生, “透過性を有する弾性膜カプセルの変形と濃度輸送の連成解析手法の提案”, 日本機械学会第26回計算力学講演会, 講演予稿集 (2 ページ), 2013 年 11 月.
- [25] Katsuyoshi Matsushita, Sugihara Hidetoshi, Macoto Kikuchi, Tomoaki Nogawa, Munetaka Sasaki, “Network Analysis of Protein Folding Kinetics Based on Monte Carlo Method”, FSPIP 2013, Kyoto, 2013 7 月.
- [26] Katsuyoshi Matsushita, Hidetoshi Sugihara, Macoto Kikuchi, Tomoaki Nogawa, Munetaka Sasaki, “Probability flow on the protein folding energy landscape”, 第 19 回交通流のシミュレーションシンポジウム 論文集, 61-64, (written in Japanese), 2013.
- [27] 松下勝義, 杉原秀理, 菊池誠, 能川知昭, 佐々木志剛, “タンパク質構造からのエネルギー地形再現”, 定量生物学の会 第 6 回年会, 大阪大学, 2013 年 11 月.

- [28] K. Matsushita, H. Sugihara, M. Kikuchi, T. Nogawa and M. Sasaki, “Dynamical Property due to Frustration Induced Intrinsic Disorder of NRSF/REST”, The 51st Annual Meeting of the BSJ, 国立京都国際会館, 2013年10月.
- [29] 松下勝義, 菊池誠, 能川知昭, 佐々木志剛, “Wang-Landau法によるタンパク質折り畳み経路のサンプリング”, 日本物理学会 2013年秋季大会, 徳島大学, 2013年9月.
- [30] 松下勝義, 菊池誠, 能川知昭, 佐々木志剛, “タンパク質のエネルギー地形探索: マルチカノニカル法によるアプローチ”, 統計物理の新展開 2014, 北海道大学, 2014年3月.
- [31] Nobu C. Shirai and Macoto Kikuchi, “Macromolecular crowding effect on fibril formation of α -synuclein”, The 51st Annual Meeting of the BSJ, 国立京都国際会館, 2013年10月.
- [32] 白井伸宙, 菊池誠, “天然変性タンパク質の構造ゆらぎを生かした密度変化誘起型シグナル伝達過程II”, 日本物理学会, 徳島大学, 2013年9月.
- [33] 白井伸宙, 菊池誠, “統計力学モデルで探る天然変性タンパク質の機能 — 混雑した環境下でのシグナル伝達に注目して”, 蛋白質科学会, 鳥取, 2WC-3, 2013年6月.
- [34] 原口亮, 芦原貴司, 稲田慎, 池田隆徳, 中沢一雄, “コンピュータシミュレーションによる致死性不整脈発現の評価: 心室較差と線維走向ねじれによる催不整脈性作用に着目して”, 第33回日本ホルター・ノンインベシブ心電学研究会 (2013/6/8, 東京), 心電図, Vol. 34, Supplement 2, p. 32, 2014.
- [35] 本田索郎, 足立和俊, 上田順弘, 榮川元雄, 山口勝己, 宇田豊, 島田尚一, “鉄系材料の超精密切削加工におけるダイヤモンド工具の摩耗抑制—被削材の窒化処理による摩耗抑制効果—”, 2014年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp497-498, Mar.2014.
- [36] 比江島 俊彦, 小野 達也, “超音速縦渦導入ストラットから生成される循環値の評価”, 日本流体力学会年会 2013 講演論文集, 175, pp.1-4, Sep. 2013.
- [37] 前岡 洋平, 比江島 俊彦, “AWストラットを用いた超音速燃焼に関する数値計算”, 日本機械学会講演論文集, No.144-1, 1-15, pp.1, Mar. 2014.
- [38] 坪井 和也, 富田 栄二, 長谷川 達也, “固体壁面とその近傍での熱化学的条件が水素—空気乱流予混合火炎に及ぼす影響”, 日本機械学会第26回計算力学講演会論文集, 213, Nov. 2013.
- [39] 坪井 和也, 富田 栄二, 長谷川 達也, “Pt表面とその近傍での熱化学的条件が水素—空気乱流予混合火炎に及ぼす影響”, 第51回燃焼シンポジウム講演論文集, pp. 518-519, Dec. 2013.
- [40] 吉川 裕, “海面加熱時の混合層深度に関する考察”, 研究集会「宗谷暖流を始めとした対馬暖流系の変動メカニズム」, 北海道大学, 2013年7月.
- [41] 吉川 裕, “海面加熱時の風成流・風成乱流のスケーリング則”, 2013年度日本海洋学会秋季大会, 北海道大学, 2013年9月.
- [42] 小出貴弘, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNSによる多重衝突噴流の熱流動特性解析”, 日本機械学会 2013年度年次大会講演論文集, USB, 5p., 2013.
- [43] 小野寺冬真, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “回転モードによるダイナミック制御した自由噴流のDNS”, 日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集, USB, 2p., 2013.
- [44] 小出貴弘, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNSによる多重衝突噴流の噴流間干渉の非定常解析”, 日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集, USB, 2p., 2013.
- [45] 小野寺冬真, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “回転モード下におけるダイナミック制御噴流のDNS”, 第27回数値流体力学シンポジウム講演論文集, USB, 4p., 2013.
- [46] 小池直紀, 辻本公一, 小出貴弘, 社河内敏彦, “ノズル回転制御下における衝突噴流のDNS”, 第27回数値流体力学シンポジウム講演論文

- 集, USB, 3p., 2013.
- [47] 佐久間悠人, 田村哲郎, 細井友貴, “浮力場における鉛直渦に基づく突風作用に関するDNS解析”, 日本流体力学会年会 2013.
- [48] 細井友貴, 田村哲郎, “温度成層を有する粗面乱流境界層の乱流構造に関するLES解析”, 第27回数値流体力学シンポジウム.
- [49] 坂井敦紘, 武藤大貴, 坪井伸幸, 寺島浩史, 根岸秀世, “液体ロケットエンジンミキサ一部における超臨界圧極低温水素混合流れの数値解析”, 第91期日本機械学会流体工学部門講演会, #0633, 2013.11.
- [50] 衛藤遥, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “ウェーブライダー形状の空力特性評価: 形状の簡易化がオフデザイン特性へ与える影響”, 第57回宇宙科学連合講演会, 3H08, 2013.10.
- [51] 成宮匡, 坪井伸幸, 伊藤隆, “数値解析を用いたエアロスパイクノズルの性能評価: コニカルノズルとの比較”, 第57回宇宙科学技術連合講演会, 2H14, 2013.10.
- [52] 倉本健史, 武藤大貴, 坪井伸幸, 永井大樹, 浅井圭介, “極超音速流れにおける30°ランプ周りの衝撃波干渉の数値解析: 流れ場の非定常性について”, 第91期日本機械学会流体工学部門講演, 0901, 2013.11.
- [53] 衛藤遥, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “簡易Waverider形状の空力特性評価: 風洞試験及び数値解析による検証”, 平成25年度宇宙航行の力学シンポジウム, 2013.12.
- [54] 杉安孝幸, 森井雄飛, 坪井伸幸, 朝原誠, 林光一, “詳細化学反応モデルを用いた直接起爆デトネーションの数値解析: 1次元及び2次元解析における不安定性の影響”, 火薬学会2013年度秋季研究発表会, pp.37-40, 2013.12.
- [55] Veyrat-Charvillon Alan, Tsuboi Nobuyuki, Asahara Makoto, Nonomura Taku, Hayashi A. Koichi, “Numerical analysis of 2D detonation propagation in H₂/Air mixture combustion by using high resolution schemes”, 第51回燃焼シンポジウム, E311, 2013.12.
- [56] 原野孝也, 渡辺裕介, 坪井伸幸, 小島孝之, 林光一, “数値解析によるローテーティングデトネーションエンジンの推進性能評価: 回転デトネーションの数及び燃焼器サイズによる影響”, 日本機械学会九州支部第67期総会・講演会, #102, 2014.3.
- [57] 黒川久仁彦, 坪井伸幸, 倉本健史, “極超音速流れにおけるランプ模型周りの流れ場の数値解析: ランプ角度の影響”, 日本機械学会九州支部第67期総会・講演会, #219, 2014.3.
- [58] 武藤大貴, 坪井伸幸, 寺島洋史, “超臨界圧力下における極低温同軸噴流への噴射形状の及ぼす効果に関する数値解析”, 日本機械学会九州支部第67期総会・講演会, #802, 2014.3.
- [59] 浦優介, 衛藤遥, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “Waverider形状の熱的影響に関する数値解析”, 日本機械学会九州支部第67期総会・講演会, #804, 2014.3.
- [60] 渡辺裕介, 坪井伸幸, 原野孝也, 小島孝之, 林光一, “ローテーティングデトネーションエンジンの運転条件と性能評価: 格子解像度がIspに与える影響”, 日本機械学会九州支部第67期総会・講演会, #806, 2014.3.
- [61] 芝尾将史, 坪井伸幸, 伊藤隆, “数値解析によるエアロスパイクノズルの性能評価: 内部ノズル形状の影響”, 日本機械学会九州支部第67期総会・講演会, #808, 2014.3.
- [62] 坂本まい, 坪井伸幸, 武藤大貴, “ハイブリッドロケット内部の3次元非定常圧縮性流れの数値解析: 乱流モデルによる影響”, 日本機械学会九州支部第67期総会・講演会, #811, 2014.3.
- [63] 杉安孝幸, 森井雄飛, 坪井伸幸, 朝原誠, 林光一, “H₂/O₂/H₂O予混合気中での直接起爆爆轟の数値解析: 臨界起爆エネルギーの評価”, 平成25年度衝撃波シンポジウム, 2014.3.
- [64] 大仲修平, 羅志偉, 富樫祐一, “スケールフリー性を持った触媒反応ネットワークにおける分子数の離散性の影響”, 日本物理学会2013年秋季大会, 28aPS120, Sept. 2013.

- [65] Yuichi Togashi, “Screening for Mechanical Communication in Proteins by Coarse-Grained Molecular Dynamics”, 日本生物物理学学会第 51 回年会, 2P046, Oct. 2013.
- [66] Yuichi Togashi, “Spying “Minorities” in Reaction Networks in the Cell”, 留日中国人生命科学協会第 15 回総会・学術集会, Nov. 2013.
- [67] 富樫 祐一, “分子間相互作用と化学反応の「ゆらぎ」とは?—遺伝子発現という奇妙なシステムに対する理論の試み”, 第 36 回日本分子生物学会年会, 2AW2-1, Dec. 2013.
- [68] 富樫 祐一, “分子機械システムの力学的応答: 遺伝子の構造と発現をつなぐ理論に向けて”, 数学協働プログラム「生命ダイナミックスの数理とその応用」, Jan. 2014.
- [69] 富樫 祐一, “粗視化モデルによるタンパク分子の力学応答の解析(2)”, 日本物理学会第 69 回年次大会, 29pAA7, Mar. 2014.
- [70] 嶺岸 卓也, 高橋 通博, 塚原 隆裕, 川口 靖夫, “粘弾性流体乱流おける低レイノルズ数型 k-εモデルの改良”, 第 91 期日本機械学会流体力学部門講演会 講演論文集, #0319 (4 pages), Nov. 2013.
- [71] 松中大介, 妹尾健二郎, 大西恭彰, 渋谷陽二, “第一原理計算によるマグネシウム合金の欠陥エネルギーに対する添加元素の影響”, 日本金属学会 2014 年春期講演大会, 2014.
- [72] 渋谷陽二, 大西恭彰, 松中大介, “欠陥構造を反映した異種原子間ポテンシャルを用いたマグネシウム合金Mg-Xの延性と靱性の評価”, 日本金属学会 2014 年春期講演大会, 2014.
- [73] 松中大介, 渋谷陽二, “Mg基LPSO構造の溶質濃化層に関する第一原理解析”, 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014.
- [74] 大西恭彰, 松中大介, 渋谷陽二, “欠陥構造を反映した異種原子間ポテンシャルを用いたマグネシウム合金Mg-Yの分子動力学シミュレーション”, 日本機械学会関西支部第 89 期定時総会講演会, 2014.
- [75] 宮部菜苗, 垂水竜一, 渋谷陽二, “強楕円性崩壊を用いた異方性金属の力学的安定性解析”, 日本機械学会関西支部第 89 期定時総会講演会, 2014.
- [76] 池田健二郎, 渋谷陽二, “レベルセット転位動力学法による均質化された介在物まわりの転位の挙動”, 日本機械学会関西支部第 89 期定時総会講演会, 2014.
- [77] 行広健太, 渋谷陽二, 廣内智之, “双結晶マイクロピラー試験片を用いた降伏挙動の方位依存性”, 日本機械学会関西支部第 89 期定時総会講演会, 2014.
- [78] 妹尾健二郎, 大西恭彰, 松中大介, 渋谷陽二, “マグネシウム合金開発のための第一原理CAE手法の検討”, 日本機械学会関西学生会平成 25 年度学生員卒業研究発表講演会, 2014.
- [79] 飯森理人, 池田健二郎, 渋谷陽二, “レベルセット法による介在物界面はく離の発展挙動”, 日本機械学会関西学生会平成 25 年度学生員卒業研究発表講演会, 2014.
- [80] 本上菜花, 垂水竜一, 稲葉築, 渋谷陽二, “ゲージ理論を用いた刃状転位群の安定配置解析”, 日本機械学会関西学生会平成 25 年度学生員卒業研究発表講演会, 2014.
- [81] 奥田将祐, 王延暉, 渋谷陽二, “ナノインデンテーションを用いた高分子材の温度依存特性の評価”, 日本機械学会関西学生会平成 25 年度学生員卒業研究発表講演会, 2014.
- [82] 渋谷陽二, 譚田真人, 吉川高正, “非晶性金属材料における体積塑性ひずみの役割”, 第 57 回日本学術会議材料工学連合講演会, 2013.
- [83] 大西恭彰, 松中大介, 渋谷陽二, “置換型溶質原子とマグネシウム母材との原子間相互作用の同定”, 日本機械学会第 26 回計算力学講演会, 2013.
- [84] 宮部菜苗, 垂水竜一, 渋谷陽二, “非線形弾性理論による結晶性金属の力学的安定性解析”, 日本機械学会第 26 回計算力学講演会, 2013.
- [85] 松中大介, 大西恭彰, 渋谷陽二, “分子動力学法を用いたマグネシウムにおけるき裂伝ば解析”, 日本機械学会M&M2013 材料力学カンフ

- アレンス, 2013.
- [86] 渡辺正和, “定常沿磁力線電流の駆動機構: プラズマ対流を用いた一般論”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 電磁圏物理学シンポジウム, 九州大学西新プラザ, 福岡, 2014年3月18日 (2014年3月18日-2014年3月19日).
- [87] 岩木美延、渡辺正和、堀智明、西谷望, “交換型磁力線再結合: 観測による検証の試み”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 電磁圏物理学シンポジウム, 九州大学西新プラザ, 福岡, 2014年3月18日 (2014年3月18日-2014年3月19日).
- [88] 吉岡大樹、渡辺正和、藤田茂、田中高史、品川裕之、村田健史, “サブストーム開始時におけるグローバル磁場トポロジー変遷”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 電磁圏物理学シンポジウム, 九州大学西新プラザ, 福岡, 2014年3月18日 (2014年3月18日-2014年3月19日).
- [89] 小中原祐介、渡辺正和、田中高史、藤田茂、久保田康文、品川裕之、村田健史, “シータオーロラ形成時における磁気圏構造とプラズマ対流: 次世代磁気圏-電離圏結合系シミュレーションコードによるMHDモデリング”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 電磁圏物理学シンポジウム, 九州大学西新プラザ, 福岡, 2014年3月18日 (2014年3月18日-2014年3月19日).
- [90] 渡辺正和, “圧力勾配駆動沿磁力線電流におけるプラズマ対流の役割”, 第4回極域科学シンポジウム, 講演番号OS-P16, 国立極地研究所, 立川, 2013年11月15日 (11月12日-11月15日).
- [91] 小中原祐介、渡辺正和、田中高史、藤田茂、久保田康文、品川裕之、村田健史, “シータオーロラ形成時における磁気圏構造とプラズマ対流: 次世代磁気圏電離圏結合系シミュレーションコードによるMHDモデリング”, 地球電磁気・地球惑星圏学会 第134回講演会, 講演番号R006-P007, 高知大学朝倉キャンパス, 高知, 2013年11月5日 (11月2日-11月5日).
- [92] 渡辺正和, “圧力勾配駆動沿磁力線電流におけるプラズマ対流の役割”, 地球電磁気・地球惑星圏学会 第134回講演会, 講演番号R006-48, 高知大学朝倉キャンパス, 高知, 2013年11月4日 (11月2日-11月5日).
- [93] 渡辺正和, “圧力勾配駆動沿磁力線電流におけるプラズマ対流の役割”, 第9回磁気圏-電離圏複合系における対流に関する研究会, 名古屋大学太陽地球環境研究所, 名古屋, 2013年8月29日 (8月28日-8月29日).
- [94] Maeda, G., K. Yumoto, H. Kawano, A. Yoshikawa, A. Ikeda, T. Uozumi, H. Liu, S. Abe, M. Watanabe, M. Cardinal, “MAGDAS Activities in Australia Since 2005”, AOGS Annual Meeting 2013, ST08-21-A012, Brisbane Convention & Exhibition Centre, Brisbane, Australia, 28 June 2013 (24-28 June 2013).
- [95] 渡辺正和、崎戸伸太郎、田中高史、品川裕之、村田健史, “シータオーロラに付随する電離圏対流と沿磁力線電流: MHDモデリング”, 日本地球惑星科学連合 2013年大会, 講演番号PEM28-14, 幕張メッセ国際会議場, 千葉, 2013年5月23日 (2013年5月19日-5月24日).
- [96] Cardina, M. G., K. Yumoto, H. Kawano, A. Yoshikawa, H. Liu, M. Watanabe, S. Abe, T. Uozumi, G. Maeda, “MAGDAS capacity building activities at ICSWSE”, JpGU meeting 2013, GEJ04-04, 幕張メッセ国際会議場, 千葉, 2013年5月20日 (5月19日-5月24日).
- [97] 佐藤 一志、吹場 活佳, “自由回転軸を持つ翼型を用いた抗力低減法における翼型の運動”, 第45回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 1D09, July 2013.

4. その他

- [1] 坂元玄太, “DEM シミュレーションによる添加粒子径が粒子層の充填率向上に及ぼす影響”, 2014年3月, 岡山大学大学院 自然科学研究科 化学生命工学専攻 修士論文.
- [2] 川原光喜, 森永理香, 池田浩人, 湯川美穂, 湯川栄二, 安藝初美, “緑茶カテキンとピペラジン環含有薬物との相互作用の熱力学的解析”, Shizuoka, Aug. 2013, 第11回次世代を担う若手のためのフィジカル・ファーマフォーラム.
- [3] 池田浩人, 川原光喜, 湯川美穂, 藤澤雅夫, 湯川栄二, 安藝初美, “くすりとお茶の相互作用”, Chiba, Nov. 2013, 第49回 熱測定討論会.
- [4] 川原光喜, 池田浩人, 湯川美穂, 藤澤雅夫, 湯川栄二, 安藝初美, “ピペラジン骨格を有する薬物と緑茶ポリフェノールとの相互作用におけるシクロデキストリン類の添加効果”, Chiba, Nov. 2013, 第49回 熱測定討論会.
- [5] M. Konishi, T. Matsuo, H. Shibai, K. Yamamoto, J. Sudo, M. S. Samland, M. Fukagawa, Y. Itoh, T. Sumi and SEEDS collaborators, “Direct Imaging Search for Extrasolar Giant Planets around 100 Myr-old Stars with Subaru Telescope”, Hawaii, USA, Dec. 2013, The 5th Subaru International Conference.
- [6] 山本広大, 松尾太郎, 芝井 広, 住 貴宏, 深川美里, 小西美穂子, 須藤 淳, Matthias S. Samland, 伊藤 洋一, 田村元秀, HiCIAO/AO188/Subaruチーム, “SEEDSによる散開星団での系外惑星探査4”, 東北大学, 2013年9月, 日本天文学会2013年秋季年会.
- [7] Matthias S. Samland, T. Matsuo, H. Shibai, K. Yamamoto, M. Konishi, J. Sudo, M. Fukagawa, T. Sumi, HiCIAO/AO188/Subaru Team, “SEEDS Direct Imaging Survey of Ursa Major Members”, 東北大学, 2013年9月, 日本天文学会2013年秋季年会.
- [8] 岩木美延, “交換型磁力線再結合: 観測による検証の試み”, 九州大学理学部地球惑星科学科 特別研究論文, 2014年2月, 九州大学理学部.
- [9] 吉岡大樹, “サブストーム開始時における磁場トポロジー変遷: MHDシミュレーションモデリング”, 九州大学理学部地球惑星科学科特別研究論文, 2014年2月, 九州大学理学部.
- [10] M. Inoue, K. Kaneko, “Cooperative adaptive responses in gene regulatory networks with many degrees of freedom”, The 2013 Symposium on Complex Biodynamics and Networks, Yamagata, 2013.
- [11] M. Inoue, K. Kaneko, “Cooperative adaptive responses in gene regulatory networks with many degrees of freedom”, The 4th Symposium on Systems and Synthetic Biology, Hong Kong, 2013.
- [12] M. Inoue, K. Kaneko, “Cooperative adaptive responses in gene regulatory networks with many degrees of freedom”, 第51回日本生物物理学会年会, 京都, 2013.
- [13] 佐野孝好, “惑星科学応用を目的とした液体水素のレーザー衝撃圧縮実験”, 2013年度低温工学・超伝導学会関西支部第1回講演会, 大阪大学レーザーエネルギー学研究中心, 2013年5月.
- [14] Takayoshi Sano, “Hugoniot temperature measurements of Sapphire using laser-induced decaying shocks”, the 7th International workshop on Warm Dense Matter, Saint Malo, France, Jun. 2013.
- [15] T. Sano, K. Nishihara, C. Matsuoka, T. Inoue, Y. Masada, A. Kageyama, “Numerical studies on the magneto-hydrodynamical evolutions of Richtmyer-Meshkov instability”, 4th International Conference on High Energy Density Physics, Palais du Grand Large, Saint-Malo, France, Jun. 2013.
- [16] Takayoshi Sano, “Hugoniot temperature measurements of Sapphire using laser-induced decaying shocks”, 2013 APSSCCM/AIRAPT JOINT CONFERENCE, Seattle, Jul. 2013.
- [17] Takayoshi Sano, “Numerical studies on the

- magneto-hydrodynamical evolutions of Richtmyer-Meshkov instability”, The 12th Asia Pacific Physics Conference of AAPPS 2013, 幕張メッセ, Jul. 2013.
- [18] Takayoshi SANO, Katsunobu NISHIHARA, Chihiro MATSUOKA, Tsuyoshi INOUE, Youhei MASADA, Akira KAGEYAMA, “Numerical studies on the nonlinear evolutions of Richtmyer-Meshkov instability in magnetized plasmas”, The Eighth Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, Nara Prefectural New Public Hall, Sep. 2013.
- [19] Hideo NAGATOMO, Tomoyuki JOHZAKI, Atsushi SUNAHARA, Hitoshi SAKAGAMI, Akio NISHIGUCHI, Takayoshi SANO, Kunioki MIMA, Shinsuke FUJIOKA, Hiroyuki SHIRAGA, Hiroshi AZECHI, “Compression of the Magnetic field in a Coned-guided Implosion”, The Eighth Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, Nara Prefectural New Public Hall, Sep. 2013.
- [20] 藤岡慎介, 砂原淳, 城崎知至, 長友英夫, 石原和大, 白神宏之, 疇地宏, “高効率な高速点火レーザー核融合実現のための基礎研究プラットフォームの構築”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学 常三島キャンパス, 2013 年 9 月.
- [21] 長友英夫, 城崎知至, 砂原淳, 坂上仁志, 三間圀興, “爆縮による外部磁場の圧縮に関するシミュレーション”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学 常三島キャンパス, 2013 年 9 月.
- [22] 城崎知至, 砂原淳, 藤岡慎介, 長友英夫, 有川安信, 白神宏之, 坂上仁志, 三間圀興, “高速点火核融合における高速イオン加熱効果 I”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学常三島キャンパス, 2013 年 9 月.
- [23] 城崎知至, 千徳靖彦, 坂上仁志, 三間圀興, 砂原淳, 長友英夫, “超強磁場下での相対論レーザープラズマ相互作用 II”, 日本物理学会 第 69 回年次大会, 東海大学湘南キャンパス, 2013 年 9 月.
- [24] 瀬戸慧大, 張森(岡山光量子研), 甲賀ジェームス(原研関西), 長友英夫, 中井光男, 三間圀興, “真空揺らぎによる放射の反作用の安定化モデル”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学 常三島キャンパス, 2013 年 9 月.
- [25] 坂和洋一, 蔵満康浩, 森田太智, 山浦裕太, 石川大志, 佐野孝好, 森高外征雄, 乗松孝好, 高部英明, 井上和哉, 下田諒, 富田健太郎, 内野喜一郎, 松清修一, 長峰和慶, 米田仁紀, 大西直文, 水田晃, 西田明憲, 兒玉了祐, D. Yuan, Y. Li, K. Zhang, F. Wang, J. Zhong, R. Crowston, N. Woolsey, H. Doyle, G. Gregori, A. Pelka, M. Koenig, J. Boudenne, C. Michaut, A. Spitkovsky, N. L. Kugland, J. S. Ross, H.-S. Park, B. Remington, “無衝突衝撃波のレーザー模擬実験の成果”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学 常三島キャンパス, 2013 年 9 月.
- [26] 佐野孝好, 西原功修, 井上剛志, “磁場中における Richtmyer-Meshkov 不安定の非線形成長過程”, 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 中間報告会, タイム 24 ビル(2 階) (東京都江東区青海 2 丁目 4 番 32 号) 2013 年 10 月.
- [27] H. Nagatomo, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima, “Magnetic field compression in an implosion for fast ignition”, 55th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Denver, Colorado, Nov. 2013.
- [28] Takayoshi Sano, Katsunobu Nishihara, Chihiro Matsuoka, Tsuyoshi Inoue, Youhei Masada, Akira Kageyama, “The growth of Richtmyer-Meshkov instability in magnetized plasma”, 55th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Denver, Colorado, Nov. 2013.
- [29] Toshihiro Taguchi, Thomas M. Antonsen, Jr. and Masahiko Inoue, “Selective emission of low frequency electromagnetic wave due to an interaction between strong laser field and single-walled carbon nanotubes”, Bulletin of the American Physical Society, p.215, Nov. 2013.

- [30] Toshihiro Taguchi, “Kinetic simulations of intense laser plasma interaction and their applications”, 2013 US-Japan JIFT Workshop on New Aspects of Plasma Kinetic Simulations, Toki, Japan, Nov. 2013.
- [31] 藤岡慎介,Zhang Zhe,石原和大,池之内孝仁,城崎知至,砂原淳,山本尚嗣,中島秀紀,近藤康太郎,渡辺二太,坂上仁志,Santos J. JoaoF, Giuffrida LorenzoF,有川安信,長友英夫,三間罔興,西村博明,疇地宏,“レーザー駆動高強度磁場の発生と高速点火レーザー核融合への応用”, プラズマ・核融合学会第 30 回年会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013 年 12 月.
- [32] 瀬戸慧大,張森,甲賀ジェームス,長友英夫,中井光男,三間罔興,“非線形QED効果による放射の反作用の安定モデル”, プラズマ・核融合学会第 30 回年会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013 年 12 月.
- [33] 中村勇太,佐野孝好,村上匡且,“爆縮過程におけるRichtmyer-Meshkov不安定の数値シミュレーション”, プラズマ・核融合学会第 30 回年会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013 年 12 月.
- [34] 白神宏之,西村博明,中井光男,村上匡且,坂和洋一,長友英夫,重森啓介,藤岡慎介,有川安信,坂上仁志,尾崎哲,田口俊弘,城崎知至,砂原淳,“レーザー核融合実験炉における 炉心プラズマ設計”, プラズマ・核融合学会第 30 回年会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013 年 12 月.
- [35] 長友英夫,城崎知至,砂原淳,坂上仁志,有川安信,藤岡慎介,白神宏之,“高速点火実験炉におけるコーン付爆縮に関する物理と炉心設計”, プラズマ・核融合学会第 30 回年会, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013 年 12 月.
- [36] 城崎知至,千徳靖彦,砂原淳,有川安信,藤岡慎介,白神宏之,“爆縮コア加熱に対する高速イオンの寄与I”, プラズマ核融合学会 第 30 回年回, 東京工業大学大岡山キャンパス, 2013 年 12 月.
- [37] 藤岡慎介,Zhang Zhe,石原和大,池之内孝仁,城崎知至,砂原淳,山本尚嗣,中島秀紀,近藤康太郎,渡辺二太,坂上仁志,Santos J. Joao,Giuffrida Lorenzo, Wang Feilu, Zhong Jiayong,有川安信,長友英夫,三間罔興,西村博明,疇地宏,“高出力大エネルギーレーザーを用いたキロテスラ磁場の発生とその応用”, レーザー学会学術講演会第 34 回年次大会, 北九州国際会議場, 2014 年 1 月.
- [38] Toshihiro Taguchi, Kunioki Mima, “Suppression of the Weibel instability by an application of a strong magnetic field”, HEDS in Asia 2014, Busan, Korea, Jan. 2014.
- [39] 佐野孝好, “Magnetohydrodynamic evolutions of Richtmyer-Meshkov instability in plasmas”, Japan-US Workshop on Laboratory Astrophysics -Collisionless shock experiment using high-power laser systems, 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター,2014 年 2 月.
- [40] 長友英夫,朝比奈隆志,佐野孝好,城崎知至,砂原淳,坂上仁志,三間罔興,“キロテスラ級磁場のレーザー爆縮への影響”, 日本物理学会第 69 回年次大会, 東海大学 平塚キャンパス, 2014 年 3 月.
- [41] 田口俊弘,T. M. Antonsen,三間罔興,“高強度磁場中における電子ビーム不安定性の非線形発展”, 日本物理学会予稿集, 2014 年 3 月.

第 19 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2013) 報告および 第 20 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2014) 告知

大阪大学サイバーメディアセンター准教授 降旗 大介

1. 世界的にもユニークな「電腦甲子園」

昨年 2013 年 8 月 19 日から 23 日までの 5 日間にわたって、高校生・高専生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2013)」が開催されました。このコンテストは、2 名又は 3 名を 1 チームとする高校生・高専生の参加者たちが、与えられた課題を解くプログラムを 3 日間に渡って作成し、最終日にスーパーコンピュータで実行して、解答の正確さや計算の速さを競うもので、そのレベルの高さから、別名「電腦甲子園」とも呼ばれています。過去の出場者が大学進学後に国際大学対抗プログラミングコンテストで活躍するなど、次世代の情報科学を担う若手育成にも貢献しており、2008 年度の文部科学大臣賞も受賞しています。

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東京工業大学(東工大)学術国際情報センター(Global Scientific Information and Computing Center:GSIC)の単独主催でしたが、2006 年の第 12 回からは大阪大学(阪大)(Cybemedia Center:CMC)も共同主催しています。予選に参加したチームの中から、富士川以東 50Hz 地域からは 10 チームが、60Hz 地域からはやはり 10 チームが参加します。2013 年もそうでしたが、東工大と阪大の二つの会場で同時に開催した年は、wiki やポリコムなどで相互に交流し、開会式・表彰式などもポリコムを使って二元中継で行って来ました。このコンテストは 5 日間にも渡る合宿型で、実際にスーパーコンピュータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。2007, 2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が使われました。やや原則から外れますが 2013 年は東工大 GSIC の Tsubame 2.0 が使われ、GPU(Graphics Processing

Unit)による超並列計算が有効な問題が出題されました。

2 予選

2013 年の予選課題は 6 月 3 日に下記の SuperCon web に公表されました。この予選課題を解くプログラムを作成し、6 月 21 日正午までにプログラムを含む必要書類を添付してメールで申し込んでもらいました。2013 年は 39 チームが予選に参加し、本選への選出は狭き門となりました。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくても学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。例えば、2013 年の予選課題はすごろくに模した、多くの選択肢の中に指示された解があるかどうかを判定する問題が出題されました。これも含め、過去の予選課題、本選課題は SuperCon web に全て掲載されています。また、参加者が 2 名以上集まらない人のために、希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書いたら、「スーパーコン 1 級」が認定されます。問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

3 本選

本選の初日は開会式で参加チームの紹介、本選課題の発表、攻略法の解説がありました。その後、スーパーコンピュータを利用するためのオリエンテーションと並列計算についての講義が行われ、チームごとに本選課題を解くためのプログラム設計に入ります。そして、本選 2 日目から 4 日目の午前中まではチームごとにプログラムを作成します。この間コンテスト OB を含む大学生・大学院生がチューターとしてバグ取りなどを手伝います。ただし、課題そのものに関する助言はしません。最終日の成果発表会、表彰式の後には懇親会も行われます。高校生・高専生の参加者たちと、両大学の教員、学生チュ

ーターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

4 SuperCon 2014 の告知

2014年は8月18日から22日までの5日間での開催を予定しています。予選課題は6月2日に公表予定で、課題提出〆切は6月21日正午です。使用するスパコンは、2013年と同じ東工大GSICのものですが、機材はバージョンアップされた、より強力なTsubame 2.5を利用する予定です。本年はSuperConの第20回という節目の年にあたりますので、参加者により喜んでいただけるよう様々な工夫を凝らそうと関係者一同考えています。本稿が皆様のお目に触れるときには既にスケジュールが進行しているかもしれませんが、もしも可能ならばみなさまも周囲の高校生にSuperCon2014というものがあり、大変に楽しい行事であることを呼びかけてください。また、来年以降、すなわちSuperCon2015以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

5 Web

<http://www.gsic.titech.ac.jp/supercon/> がコンテストページです。ぜひ一度ご覧ください。

大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学サイバーメディアセンター准教授 降旗 大介

1. 目的

サイバーメディアセンターの関係者は、如何にしたら導入している大規模計算機システムをユーザにより有効活用してもらえるかを日々考えています。その一環として、マニュアル等の充実、ユーザからの質問をメールなどで受け付ける仕組みの構築、FAQ の整備検討などを行っておりますが、その中でも重要と位置づけているのが講習会です。講習会は大規模システムの開発や管理などを行っている関係者とユーザが直接やりとり出来る場でもあり、お互い大変貴重な機会のため、講習会講師だけでない関係者も立ち会うことがしばしばです。その講習会の内容としては、スーパーコンピュータの OS としての Unix 環境についてのものやそのハードウェアについての概要説明、また、ユーザにとって重要な並列計算の概要から各種プログラミング技法の詳細に至るまで、そして専門家用の特殊なソフトウェアについてのものなど、ユーザの要望に沿ったものとなっています。詳細については次ページに講習会のリストが掲載されております。また、サイバーメディアセンター大規模計算機システムの web ではより詳細について掲載をしておりますので、ぜひご覧ください。

2. 多忙な方も参加しやすく

サイバーメディアセンターの講習会の特徴として、原則として年に2回、ほぼ同じ内容の講習会を開催する点があげられます。毎年、6月頃と9月頃に集中的に開催しています。これは、学期始めや学期末を外して欲しい、あまり年度の後ろ側だと学生の研究開始に間に合わないなどのユーザの声を反映したもので、なるべく多くのユーザが参加できるようにと工夫した結果です。また、講師を確保しにくい特殊なソフトウェアの講習会については、東北大学と

協力してテレビ会議システムを用いることで講師を確保し、講習会を開催しています。こうした努力のせいか各講習会ともに一定数のユーザの参加をいただいております。ユーザの皆様は役に立っていると考えています。

3. 初学者に優しく

毎年おおよそ10回以上の講習会を開催しておりますが、そのうちの3、4回は初学者が対象の内容のものです。具体的には、Unix の簡単な操作方法についてや、スパコンハードウェアの概要説明、並列計算の概念のみの説明などからなります。スパコンを使うユーザというところから知識やプログラミング技法について大変なプロフェッショナルばかりかと思われがちですが、どなたにも「初めての時」はあるものですし、細かい技術についてはマニュアルが有っても、基礎的な概念についてはどこにも記載が無いということも珍しくないのです。サイバーメディアセンターはこうした点を補い、より広い分野・方面の方にユーザとしてシステムを使ってもらえるべく、常に初学者に優しくありたいと考えてこのような構成にしています。

4. プロフェッショナルな方も

もちろん、サイバーメディアセンターはプロフェッショナルなユーザへの支援も怠らず、専門的な内容についても講習会を行っています。並列計算のプログラミング技法 MPI についての講習会や、IDL、AVS、Gaussian といった専門家用のソフトウェアの講習会も行っています。一部の講習会は、大規模計算機システムの開発そのものを行っている会社から技術者を講師として招き、非常に微細な部分に至るまで技術的な話を聞くことが出来る機会としています。

5. ぜひフィードバックを

このように、様々な工夫と努力のうえに行われている講習会ですが、大規模計算機システムのユーザの使い方は日々変わっていくものですから、講習会もそれに合わせて変化、進歩していく必要があります。

しかし、それにはユーザの方々の意見がなにより重要です。そのフィードバックの先に、より良い講習会の実現が有ります。ユーザの皆様におかれましては、遠慮をせずに、いつでも構いませんので、講習会についての要望をぜひサイバーメディアセンターまでお聞かせください。

2014年度大規模計算機システム利用講習会

講習会名	開催日時	講師	開催場所
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	6月3日	サイバーメディアセンター教員	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 小会議室
スーパーコンピュータ概要と スーパーコンピュータ利用入門	6月9日	サイバーメディアセンター教員 レーザー研 技術専門職員 情報基盤課 職員	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
スーパーコンピュータと 並列コンピュータの高速化技法の基礎	6月17日	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
MPIプログラミング入門	6月24日	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
HPFプログラミング入門	6月26日	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
IDL 利用入門	6月10日	Exelis VIS(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 小会議室
AVS可視化処理入門	9月16日	サイバネットシステム(株)	未定
AVS可視化処理応用	9月17日	サイバネットシステム(株)	未定
並列計算入門	9月頃 開催予定	サイバーメディアセンター教員	未定
スーパーコンピュータ概要と スーパーコンピュータ利用入門	12月～2月 開催予定	サイバーメディアセンター教員 レーザー研 技術専門職員 情報基盤課 職員	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟
スーパーコンピュータと 並列コンピュータの高速化技法の基礎	12月～2月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟
MPIプログラミング入門	12月～2月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟
HPFプログラミング入門	12月～2月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟

テレビ会議システムによる講習会

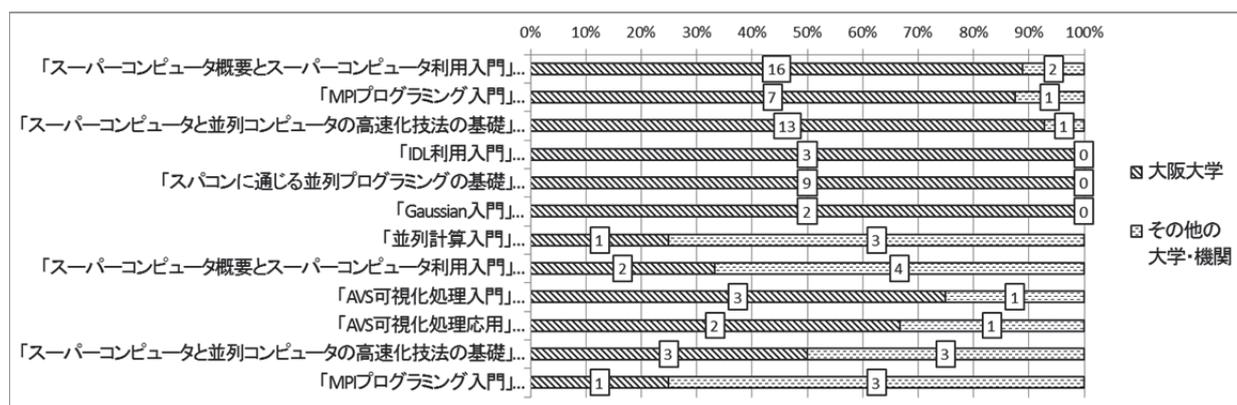
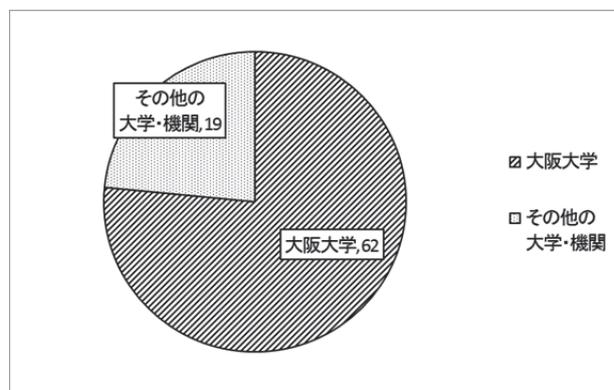
講習会名	開催日時	開催機関	受講場所
Gaussian講習会	8月頃予定	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 小会議室

2013 年度大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

1. 所属等についてお教えてください。

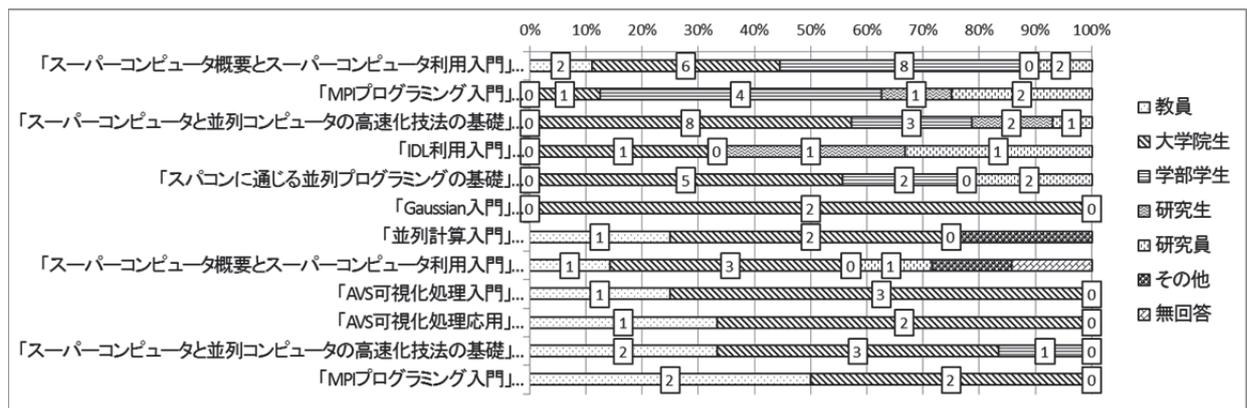
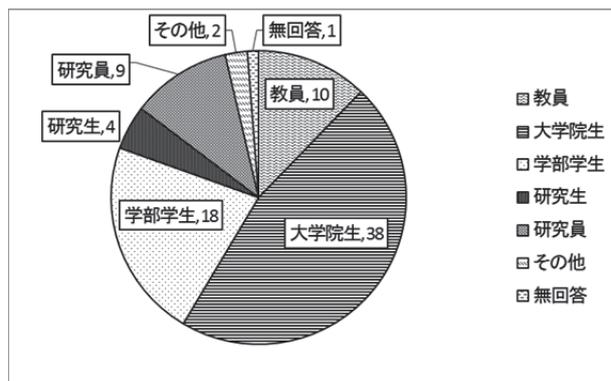
所属:

講習会名	大阪大学	その他の大学・機関	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	16	2	0	18
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	7	1	0	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	13	1	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	3	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	9	0	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	2	0	0	2
「並列計算入門」 2013/9/3	1	3	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	2	4	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	3	1	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	2	1	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	3	3	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	1	3	0	4
合計:	62	19	1	82



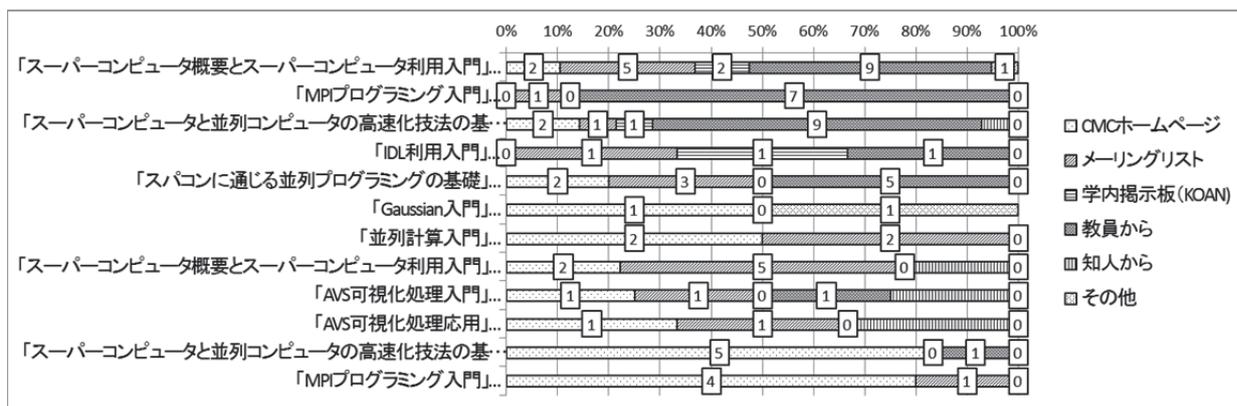
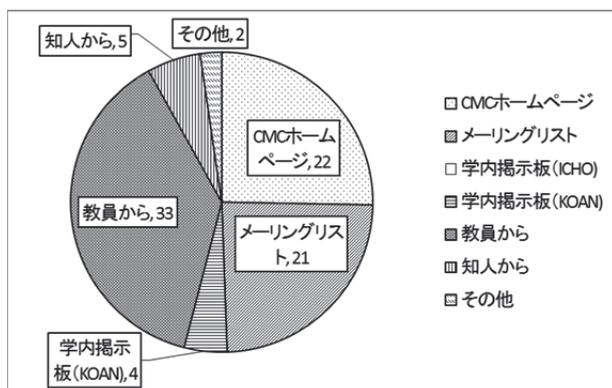
職種:

講習会名	教員	技術職員	事務職員	大学院生	学部学生	研究生	研究員	その他	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	2	0	0	6	8	0	2	0	0	18
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	0	0	0	1	4	1	2	0	0	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	0	0	0	8	3	2	1	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	0	0	0	1	0	1	1	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	0	0	0	5	2	0	2	0	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	0	0	2	0	0	0	0	0	2
「並列計算入門」 2013/9/3	1	0	0	2	0	0	0	1	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	1	0	0	3	0	0	1	1	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	1	0	0	3	0	0	0	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	1	0	0	2	0	0	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	2	0	0	3	1	0	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	2	0	0	2	0	0	0	0	0	4
合計:	10	0	0	38	18	4	9	2	1	82



2. 今回の講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)

講習会名	CMCホームページ	メーリングリスト	学内掲示板 (ICHO)	学内掲示板 (KOAN)	教員から	知人から	SNSから	その他	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	2	5	0	2	9	0	-	1	0	19
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	0	1	0	0	7	0	-	0	0	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	2	1	0	1	9	1	-	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	0	1	0	1	1	0	-	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	2	3	0	0	5	0	-	0	0	10
「Gaussian入門」 2013/8/9	1	0	0	0	0	0	-	1	0	2
「並列計算入門」 2013/9/3	2	2	0	0	0	0	0	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	2	5	0	0	0	2	0	0	0	9
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	1	1	0	0	1	1	0	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	1	1	0	0	0	1	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	5	0	0	0	1	0	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	4	1	0	0	0	0	0	0	0	5
合計:	22	21	0	4	33	5	0	2	0	87



3. 今回の講習会に参加した理由を教えてください。

2013/6/3(月)「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」

職名	コメント
教員	今後研究での利用を予定しているため
教員	スパコンの研究利用を考えているため
学部学生	大規模計算機システムを研究で使うため
学部学生	大規模計算機システムについて詳しく知りたいから
学部学生	今後の研究に大規模計算機システムを利用しようと考えているから
学部学生	今後、研究で利用する可能性があるため
学部学生	研究において数値解析をする際にスーパーコンピュータを利用する可能性があるため
大学院生	計算機の知識が研究に必要だから
学部学生	研究でスパコンを使わせていただくので、使用方法及びスパコンについての知識を学ぶために参加しました
学部学生	研究でスパコンを利用するかもしれないから
学部学生	パソコンの知識を得たかったから
大学院生	スーパーコンピュータ、並列化に関する基礎知識を習得するため
大学院生	今後、スーパーコンピュータを使ってシミュレーションをしてみたいと考えているため
研究員	今後、スパコンを使用する予定があるため
大学院生	研究室で数値計算をするノウハウを持った人があまりいなかったこと、単純に興味を持ったため
大学院生	スパコンを利用したいため
研究員	サイバーメディアセンターの計算機(特にスーパーコンピュータ)の使い方を知らなかったから

2013/6/10(月)「MPI プログラミング入門」

職名	コメント
学部学生	研究で並列プログラミングをする必要があるため
学部学生	研究で使う必要があるため
学部学生	プログラムの並列化に関して興味があったから
研究員	近日中に並列化をする予定
学部学生	今後の研究に役立つと思うので
研究生	研究で必要だから
研究員	私は理論物理(方程式を立てる)が主な仕事ですが、自前の方程式の数値計算を外注するのは、待っている間落ち着かないので自力でグラフを作る所まで至るため
大学院生	CMCの計算機について理解を深めるため

2013/6/11(火)「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」

職名	コメント
大学院生	研究のため
大学院生	興味があった
研究生	近日中にスパコンかPCクラスタを使う予定があるため
研究員	MPIとともに大規模計算の予定なので
研究生	研究で必要だから
大学院生	自作プログラムの計算コストが大きいので、並列化を考えていたから
大学院生	スパコンを使用したかったため
学部学生	研究で並列計算や、スパコンを使う可能性があるから
学部学生	今後の研究での計算で、大規模計算機を使うことが不可欠だったから
学部学生	今後の研究に必要なかもしれないため
大学院生	使っていることについて詳しく知りたかったから
大学院生	研究で数値計算をしており、興味があったから
大学院生	ベクトル機利用のため
大学院生	スパコンを使うため

2013/6/21(金)「IDL 利用入門」

職名	コメント
研究員	コンターマップを描く事が多いため。大量のデータを解析するため、自分で解析プログラムを組みたいため
研究生	先生からのご指示です
大学院生	医療の技術に適用したいと思ったため

2013/6/27(木)「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」

職名	コメント
研究員	復習のため
研究員	並列計算に興味があるため
大学院生	並列プログラミングを研究で使う予定があるので
大学院生	教授から勧められたため
大学院生	先生の勧めによる
大学院生	教員から勧められたため
大学院生	今後の研究に必要なと考えたため
学部学生	並列プログラミングをする必要があるかもしれないから
学部学生	今後の研究に役立つと思ったから

2013/8/9(金)「Gaussian 入門」

職名	コメント
大学院生	今後、Gaussianを使用する予定があるので、Gaussianとはどのような事ができるのかを知るため
大学院生	Gaussianを使うつもりなので、その手助けになれば良いと思って

2013/9/3(火)「並列計算入門」

職名	コメント
大学院生	研究でMPIを使用する上で、並列計算に関する知識があっても良いと思ったから
教員	並列計算を始めたい。阪大の並列計算機システムを知りたい
その他	FX10でのMD計算SWの講習会に参加した事から、並列化をもう少し詳しく知りたくなったため
大学院生	並列化の全体の話に興味があった。研究室でスパコンを使ってはいたが、全体像がわかっていなかった

2013/9/10(火)「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」

職名	コメント
大学院生	自分の研究に生かせるかもしれないので、使い方を学びたいため
大学院生	現在、大規模計算機システムを使用して研究を行っているが、今後引き続き研究を続けるにあたって、基本的な知識を持っていた方が便利であるため
教員	大規模計算機システムを利用するため
研究員	スーパーコンピュータの利用法についてしりたかったため
大学院生	今後、研究でスーパーコンピュータを用いる可能性があるため
NPO理事	大阪大学のスーパーコンピュータ(PCクラスタ)を利用したことがあり、HPCIでの並列コンピューティングについて知識を得るため

2013/9/11(水)「AVS 可視化処理入門」

職名	コメント
教員	AVS/Expressの使い方を勉強したいため
大学院生	興味があるため
大学院生	大阪大学の大規模計算機システムを利用しているため必要になると思ったので
大学院生	研究でAVSを使っているため

2013/9/12(木)「AVS 可視化処理応用」

職名	コメント
教員	AVS/Expressの使い方を勉強するため
大学院生	AVSを利用する機会が今後増えそうだったため

2013/9/18(水)「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」

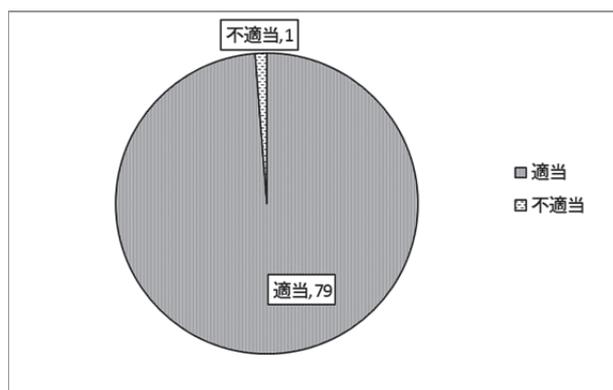
職名	コメント
大学院生	スーパーコンピュータと並列計算に興味があったため
教員	標題の技法の基礎を勉強したいため
大学院生	今後の研究に役立てるため
学部学生	研究に利用するため
教員	MPIの講習会と合わせて、自作プログラムの高速化法を勉強するため

2013/9/19(木)「MPIプログラミング入門」

職名	コメント
教員	複数ノードを使用するためにはMPIが必要であるため
教員	標題の入門技法を身につけるため
大学院生	今後の研究に役立てるため

4. 今回の講習会の開催日は適切でしたか。

講習会名	適当	不適当	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	17	0	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	8	0	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	14	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	3	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	9	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	1	1	2
「並列計算入門」 2013/9/3	4	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	6	0	6
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	4	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	3	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	6	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	4	0	4
合計:	79	1	80



「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11(火)

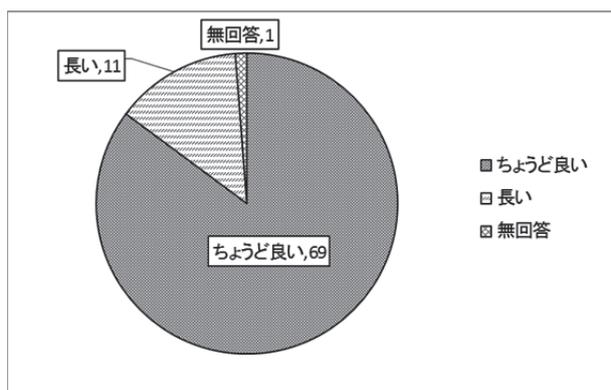
選択	職名	コメント
適当	大学院生	学会の前と後を除く月が良いです(×:2~4月、7~10月) 6月と11月ぐらいが良い気がします

「Gaussian 入門」 2013/8/9(金)

選択	職名	コメント
不適当	大学院生	阪大の連絡バスがある時期が良かった

5. 今回の講習会の時間は適当でしたか。

講習会名	ちょうど良い	長い	短い	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	11	6	0	0	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	7	1	0	0	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	12	2	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	3	0	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	9	0	0	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	2	0	0	0	2
「並列計算入門」 2013/9/3	4	0	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	4	2	0	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	4	0	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	3	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	6	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	4	0	0	0	4
合計:	69	11	0	1	81



「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3(月)

選択	職名	コメント
長い	教員	UNIXの説明は30分くらいで済みそう
ちょうど良い	大学院生	スパコンの現状や、プログラミングの流れをとらえられたから
ちょうど良い	大学院生	休憩と講習の時間バランスが良く、終始集中して臨めたため
長い	大学院生	京の説明が少し長く、先にある程度実習した上で聞いた方が実感を持ちやすかった
長い	大学院生	午前中の説明が長すぎました。逆にHadoopとかの説明が無かったのが悲しいです。今、流行りのビッグデータの概要だけでも知りたかったです

「MPI プログラミング入門」 2013/6/10(月)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	研究生	1日で一通りの基礎を学ぶことができた
ちょうど良い	大学院生	座学と演習(実習)がちょうど良い配分で、飽きなかった

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11(火)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	大学院生	丁寧でわかりやすかった
ちょうど良い	大学院生	十分時間がとれた
長い	大学院生	説明が長かった気がしました。もっと演習したかったです

「IDL 利用入門」 2013/6/21(金)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	研究員	忙しい先生等は、時間が取りにくいかもしれないです
ちょうど良い	大学院生	内容も面白く、演習も適度にあるため、眠たくならずすみしました

「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27(木)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	研究員	内容に対して、適当な長さだと感じた
ちょうど良い	大学院生	途中、休憩をはさむなどの配慮で、集中して聴講できた
ちょうど良い	大学院生	内容的にも、初心者にも、ちょうど良い程度だと思ったので

「並列計算入門」 2013/9/3(火)

選択	職名	コメント
大学院生	ちょうど良い	座学のための講習会としては適切だから
教員	ちょうど良い	疲れていないから

「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10(火)

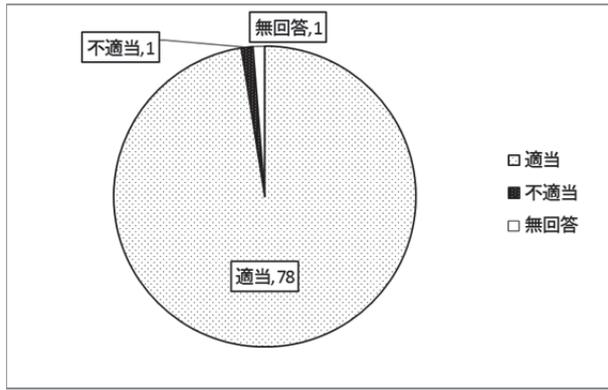
選択	職名	コメント
長い	大学院生	午前中の計算機システムの紹介は、もっと手短かにしてほしい

「MPI プログラミング入門」 2013/9/19(木)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	大学院生	内容の説明や、演習問題のために十分な時間を取っていたと思うため

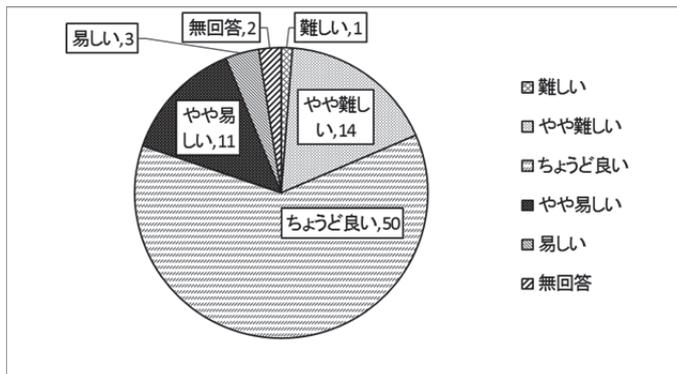
6. 会場の大きさ、場所は適当でしたか。

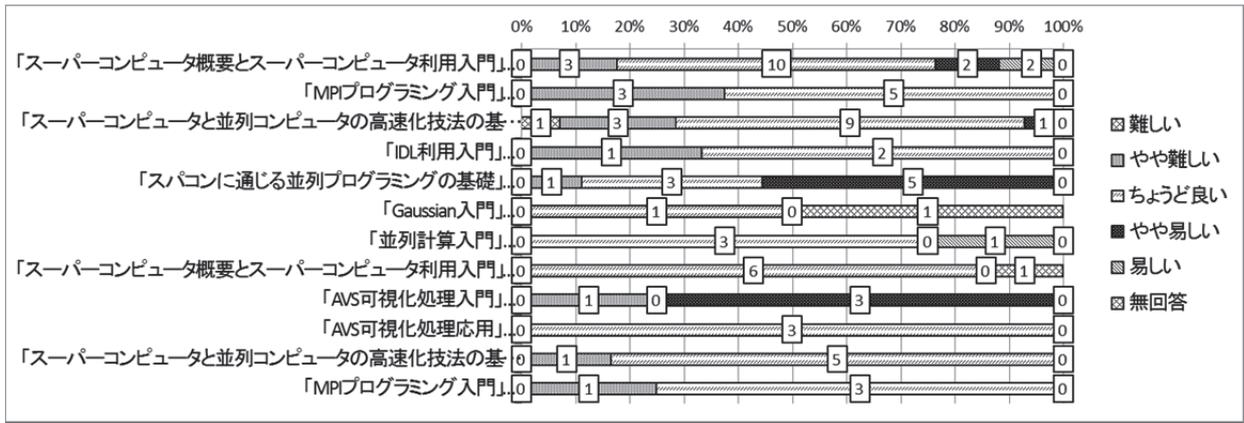
講習会名	適当	不適当	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	16	0	0	16
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	8	0	0	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	14	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	3	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	9	0	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	2	0	0	2
「並列計算入門」 2013/9/3	4	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	6	0	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	4	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	3	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	5	1	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	4	0	0	4
合計:	78	1	1	80



7. 今回の講習会の内容はどうでしたか。

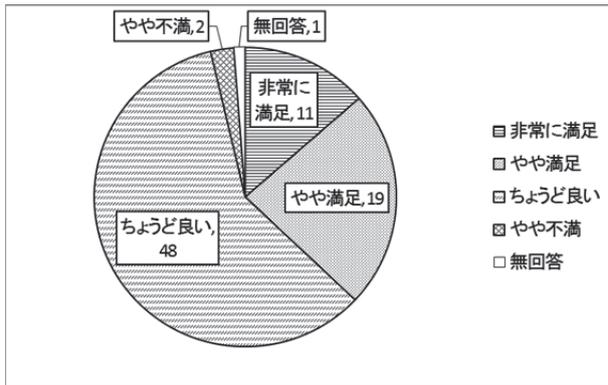
講習会名	難しい	やや難しい	ちょうど良い	やや易しい	易しい	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	0	3	10	2	2	0	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	0	3	5	0	0	0	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	1	3	9	1	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	0	1	2	0	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	0	1	3	5	0	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	0	1	0	0	1	2
「並列計算入門」 2013/9/3	0	0	3	0	1	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	0	0	6	0	0	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	0	1	0	3	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	0	0	3	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	0	1	5	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	0	1	3	0	0	0	4
合計:	1	14	50	11	3	2	81

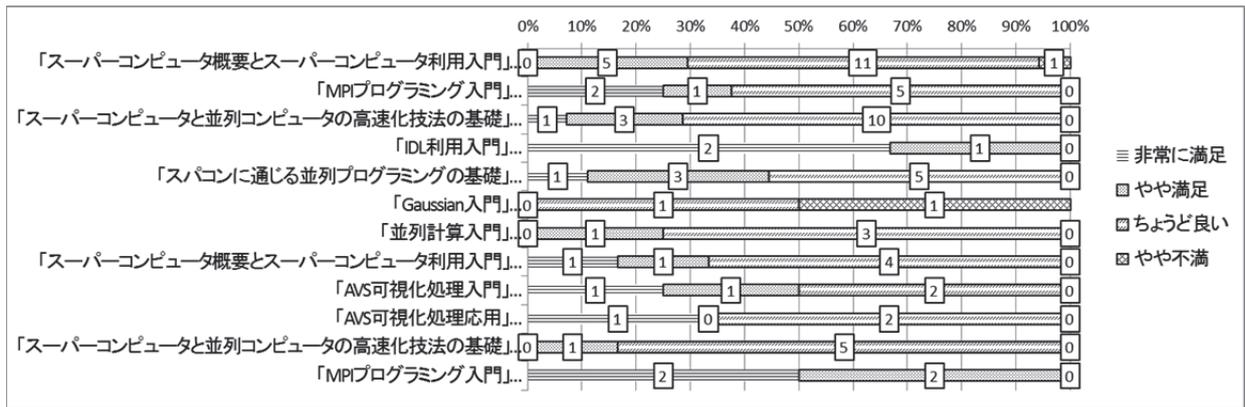




8. 今回の講習会で取り扱った内容量はどうか。

講習会名	非常に満足	やや満足	ちょうど良い	やや不満	非常に不満	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	0	5	11	1	0	0	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	2	1	5	0	0	0	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	1	3	10	0	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	2	1	0	0	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	1	3	5	0	0	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	0	1	1	0	0	2
「並列計算入門」 2013/9/3	0	1	3	0	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	1	1	4	0	0	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	1	1	2	0	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	1	0	2	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	0	1	5	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	2	2	0	0	0	0	4
合計:	11	19	48	2	0	1	81





「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3(月)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	教員	PCC、SX8、SX9をどう使い分けるか
やや満足	大学院生	午後の演習には満足でした。もう少し課題をやりたかったのですが。
やや不満	研究員	UNIXの基礎については、別の機会でもよかったように思います。 (スーパーコンピュータに直接関係ないので)

「MPI プログラミング入門」 2013/6/10(月)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	研究生	さらに高度な内容へつながる例題があれば更に良かった
ちょうど良い	研究員	物理問題を具体的に取り扱いってもらえると、気合が入ります
ちょうど良い	大学院生	1度で良いから、SX-9の全ノードを使ってMPI並列でどれだけ速くなるか体験してみたい

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11(火)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	研究生	PCクラスタとスパコンSXの使用目的による使い分けのようなことをもっと知りたいと思いました
ちょうど良い	研究員	具体的な物理モデルの計算例が欲しかった
やや満足	大学院生	OpenMPについてもっと聞きたかった

「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27(木)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	研究員	できれば実際のシミュレーション、例えば物理シミュレーションのどこに並列化を使っているのかなども知りたい

「Gaussian 入門」 2013/8/9(金)

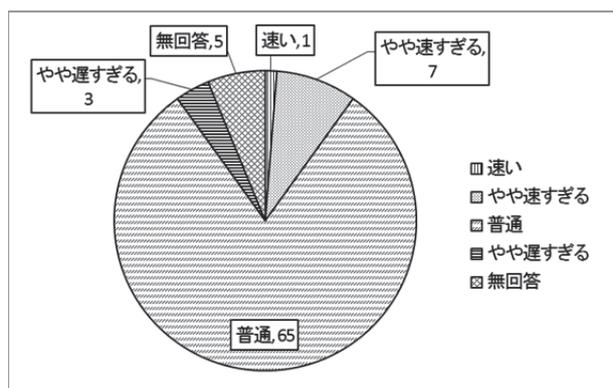
選択	職名	コメント
やや不満	大学院生	もう少し実際の計算例を教えて欲しかった(実習で行うかもしれないけれども)

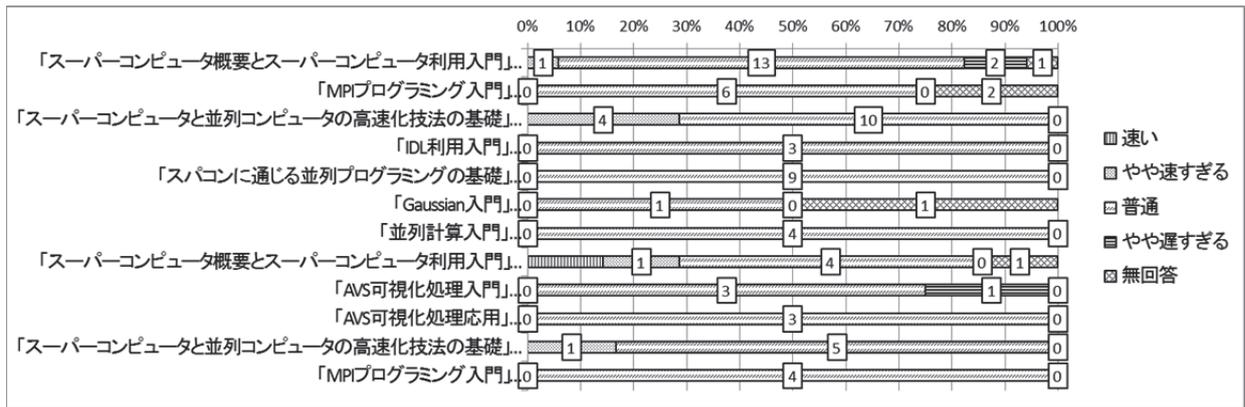
「並列計算入門」 2013/9/3(火)

選択	職名	コメント
やや満足	大学院生	MPIプログラミングの方法

9. 今回の講習会での講師の進め方はどうでしたか。

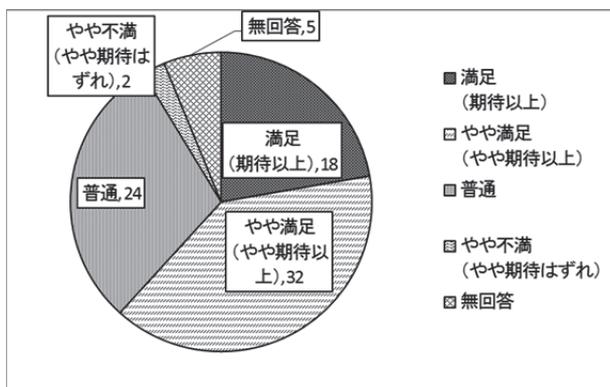
講習会名	速い	やや速すぎる	普通	やや遅すぎる	遅い	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	0	1	13	2	0	1	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	0	0	6	0	0	2	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	0	4	10	0	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	0	0	3	0	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	0	0	9	0	0	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	0	1	0	0	1	2
「並列計算入門」 2013/9/3	0	0	4	0	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	1	1	4	0	0	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	0	0	3	1	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	0	0	3	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	0	1	5	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	0	0	4	0	0	0	4
合計:	1	7	65	3	0	5	81

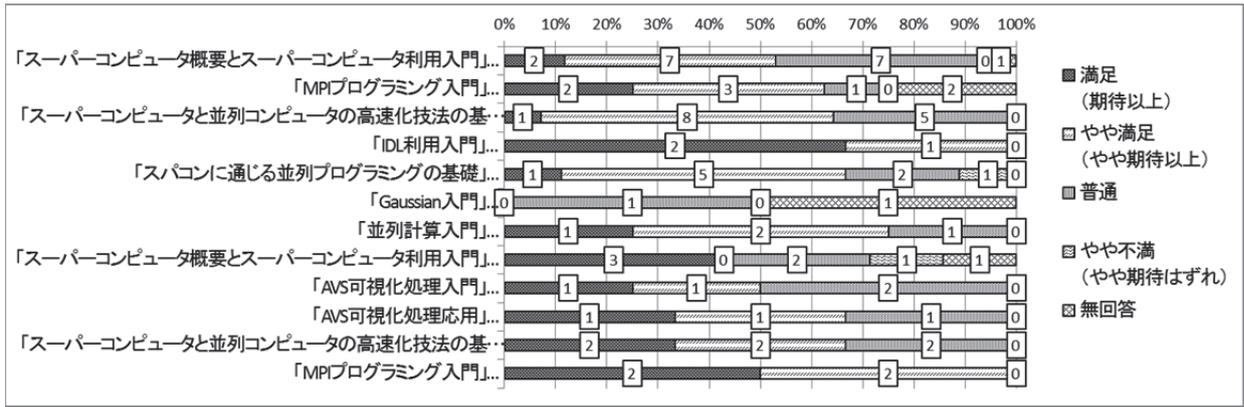




10. 今回の講習会の満足度は？

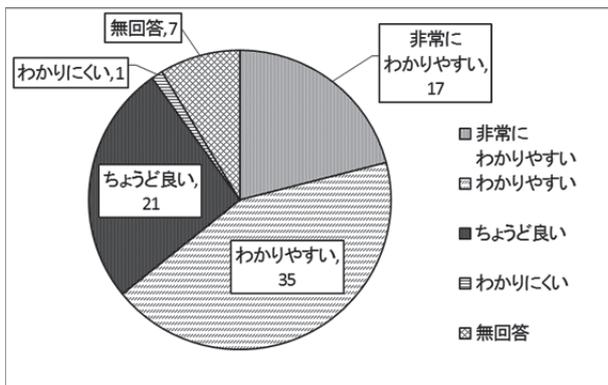
講習会名	満足 (期待以上)	やや満足 (やや期待以上)	普通	やや不満 (やや期待はずれ)	不満 (期待はずれ)	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	2	7	7	0	0	1	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	2	3	1	0	0	2	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	1	8	5	0	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	2	1	0	0	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	1	5	2	1	0	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	0	1	0	0	1	2
「並列計算入門」 2013/9/3	1	2	1	0	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	3	0	2	1	0	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	1	1	2	0	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	1	1	1	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	2	2	2	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	2	2	0	0	0	0	4
合計:	18	32	24	2	0	5	81

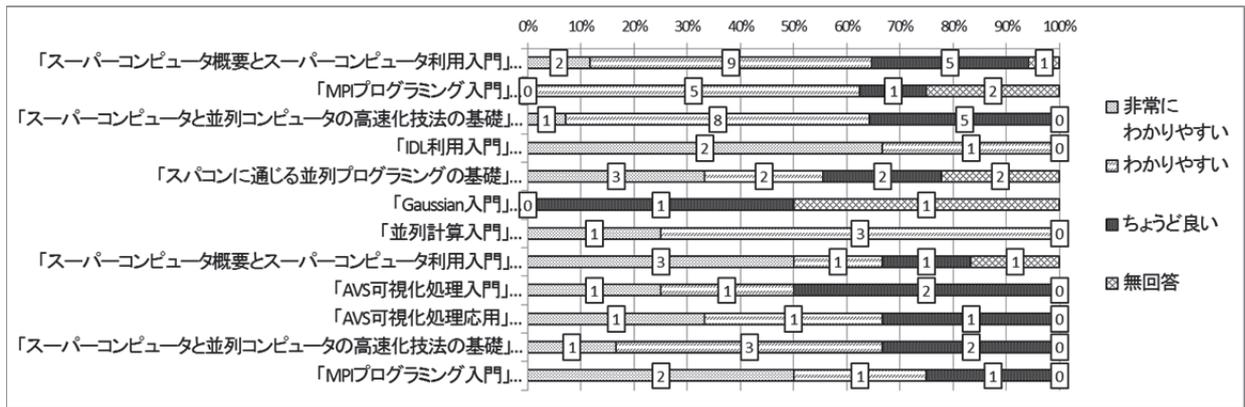




11. 今回の講習会の資料はどうでしたか。

講習会名	非常にわかりやすい	わかりやすい	ちょうど良い	わかりにくい	非常にわかりづらい	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	2	9	5	0	0	1	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	0	5	1	0	0	2	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	1	8	5	0	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	2	1	0	0	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	3	2	2	0	0	2	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	0	1	0	0	1	2
「並列計算入門」 2013/9/3	1	3	0	0	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	3	1	1	1	0	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	1	1	2	0	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	1	1	1	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	1	3	2	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	2	1	1	0	0	0	4
合計:	17	35	21	1	0	7	81





「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3(月)

選択	職名	コメント
わかりやすい	教員	エキストラ・タイプが良かった
非常にわかりやすい	学部学生	初心者向けの基礎から詳しく書かれていたので、わかりやすかったです
非常にわかりやすい	学部学生	スライドがとても見やすかった
わかりやすい	大学院生	私は今までプログラミングをしたことがなかったので、その概要をレクチャーしてくださって良かったから
わかりやすい	大学院生	スライドの内容に飛躍がなく、理解しやすかった

「MPI プログラミング入門」 2013/6/10(月)

選択	職名	コメント
わかりやすい	学部学生	回答例があり、参考になった
わかりやすい	大学院生	基本的なMPIの概要について分かった気がする

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11(火)

選択	職名	コメント
非常にわかりやすい	大学院生	スライドだけ見ても理解できるようになっていた
ちょうど良い	研究生	説明の順番と一致していてわかりやすかった
わかりやすい	大学院生	図がたくさん載っていたので、わかりやすかった

「IDL 利用入門」 2013/6/21(金)

選択	職名	コメント
非常にわかりやすい	大学院生	わかりやすかったので。問題もついていましたし

「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27(木)

選択	職名	コメント
非常にわかりやすい	研究員	情報がオーバーフローするほど、押しつけられなかったため
回答なし	研究員	PowerPointのスライド資料も欲しかった
非常にわかりやすい	大学院生	例え(Unixや並列化の説明)がとても分かりやすい

「Gaussian 入門」 2013/8/9(金)

選択	職名	コメント
ちょうど良い	大学院生	基本事項から説明してもらい分かりやすかった。もう少し深く話しても良かったと思う

「並列計算入門」 2013/9/3(火)

選択	職名	コメント
わかりやすい	大学院生	図などが多く掲載されていたから
わかりやすい	大学院生	絵、表が見やすく、わかりやすかった
非常にわかりやすい	その他	画面の鮮明さ、フォントの良さ、内容のまとめ

「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10(火)

選択	職名	コメント
わかりやすい	大学院生	資料はわかりやすかったが、スクリーンに表示されているスライドの文字が小さく見難かった
わかりにくい	研究員	前半は専門用語が多過ぎて理解が困難だった。むしろその用語の意味を教えて欲しかった

「AVS 可視化処理応用」 2013/9/12(木)

選択	職名	コメント
非常にわかりやすい	大学院生	UI部分の画像を含め、自分のデータに応用しやすい説明だった

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18(水)

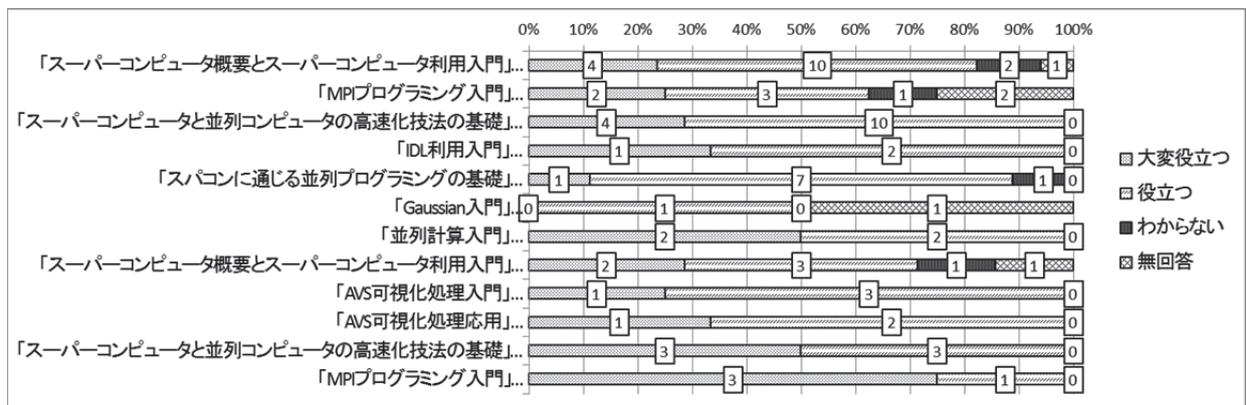
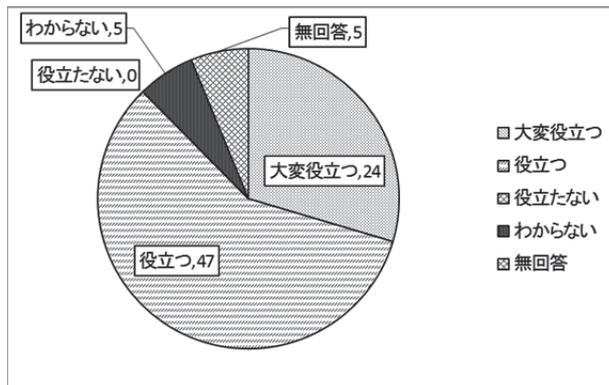
選択	職名	コメント
ちょうど良い	大学院生	網掛けが消えているのが少々気になった

「MPI プログラミング入門」 2013/9/19(木)

選択	職名	コメント
非常にわかりやすい	大学院生	プログラムの記述例や付録による説明が豊富であったため

12. 今回の講習会は皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。

講習会名	大変役立つ	役立つ	役立つたない	わからない	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	4	10	0	2	1	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	2	3	0	1	2	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	4	10	0	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	1	2	0	0	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	1	7	0	1	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	1	0	0	1	2
「並列計算入門」 2013/9/3	2	2	0	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	2	3	0	1	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	1	3	0	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	1	2	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	3	3	0	0	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	3	1	0	0	0	4
合計:	24	47	0	5	5	81



「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3(月)

選択	職名	コメント
役立つ	学部学生	並列プログラミングへの導入として良かったと思う
わからない	学部学生	具体的な計算方法をまだ習っていないので
役立つ	大学院生	研究内容が計算時間の短縮化であるため
大変役立つ	研究員	スパコンを使用する予定
わからない	大学院生	現状では、使う予定はあまりありませんが、秋以降になったら、実際に使う機会が必要になるかもしれないため

「MPI プログラミング入門」 2013/6/10(月)

選択	職名	コメント
役立つ	研究員	多粒子系を扱うには、おそらく避けては通れないので
大変役立つ	大学院生	いつか大規模なシミュレーションをやろうと思っているため

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11(火)

選択	職名	コメント
大変役立つ	大学院生	ベクトル化が大変参考になった
役立つ	研究生	研究の効率が良くなると思う
大変役立つ	大学院生	今、研究室にあるプログラムに適用しようと思うため
役立つ	大学院生	ベクトル化率の確認や改善の方法が分かった
役立つ	大学院生	研究で数値計算を行うため(流体計算など)
役立つ	研究員	PCCユーザなので

「IDL 利用入門」 2013/6/21(金)

選択	職名	コメント
役立つ	研究員	学んでいて、使えそうだと思う状況がいくつか思い浮かんだ
大変役立つ	大学院生	配列に適用しやすそうです

「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27(木)

選択	職名	コメント
役立つ	大学院生	今後もし使う場合があるときの場合に、今から勉強しておくべきこと(プログラミング、emacsなど)を実感できたから
わからない	大学院生	今後どのような研究を行うか分からないので

「Gaussian 入門」 2013/8/9(金)

選択	職名	コメント
役立つ	大学院生	Gaussianの本を読むにあたって、必要な知識を得られたと思う

「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10(火)

選択	職名	コメント
大変役立つ	大学院生	現在、研究でスーパーコンピュータを利用しているため

「AVS 可視化処理入門」 2013/9/11(水)

選択	職名	コメント
役立つ	大学院生	Fortranのデータファイルを処理できるようになるため

「AVS 可視化処理応用」 2013/9/12(木)

選択	職名	コメント
大変役立つ	大学院生	現在使用しているParaviewよりも柔軟性があると思えるため

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18(水)

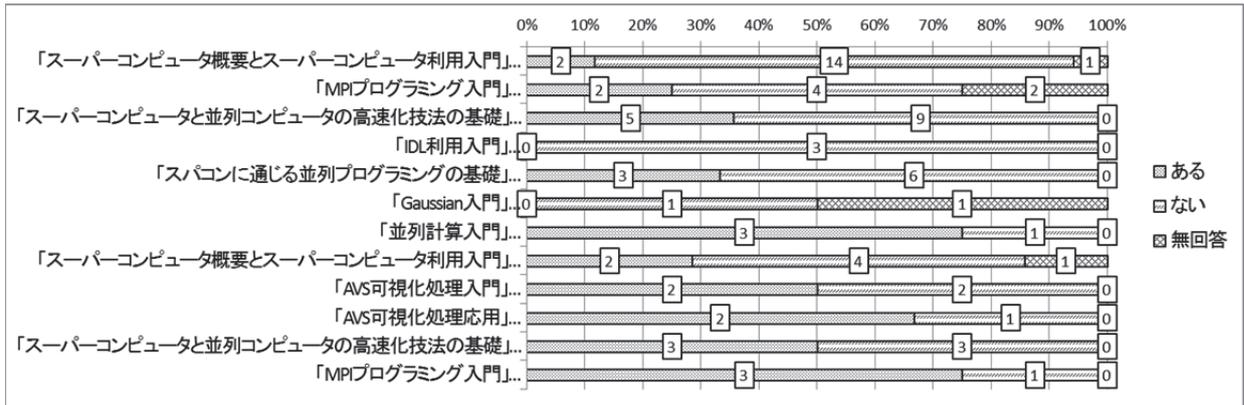
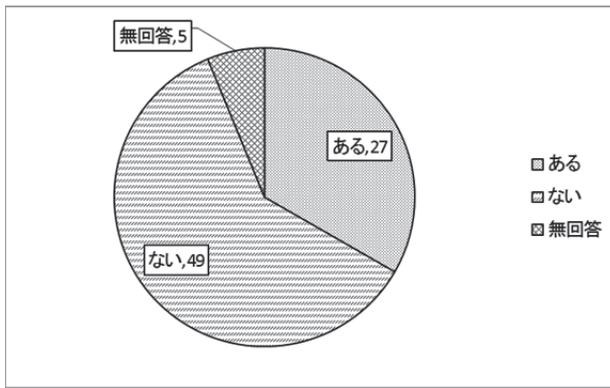
選択	職名	コメント
大変役立つ	大学院生	MPIを用いた並列計算コードのチューニングをこれから行うため

「MPI プログラミング入門」 2013/9/19(木)

選択	職名	コメント
大変役立つ	大学院生	現在使用しているコードの改良に役立つ内容だったため

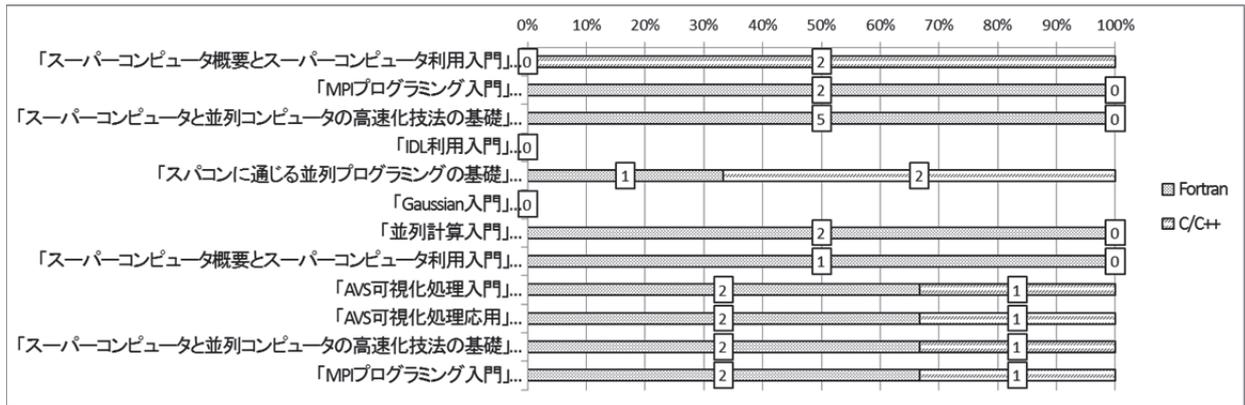
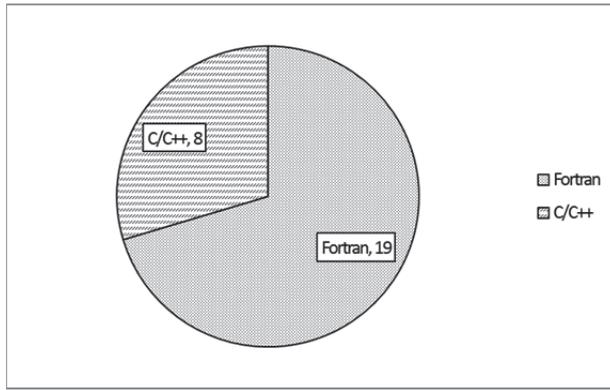
13. 他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。

講習会名	ある	ない	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	2	14	1	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	2	4	2	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	5	9	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	0	3	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	3	6	0	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	1	1	2
「並列計算入門」 2013/9/3	3	1	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	2	4	1	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	2	2	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	2	1	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	3	3	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	3	1	0	4
合計:	27	49	5	81



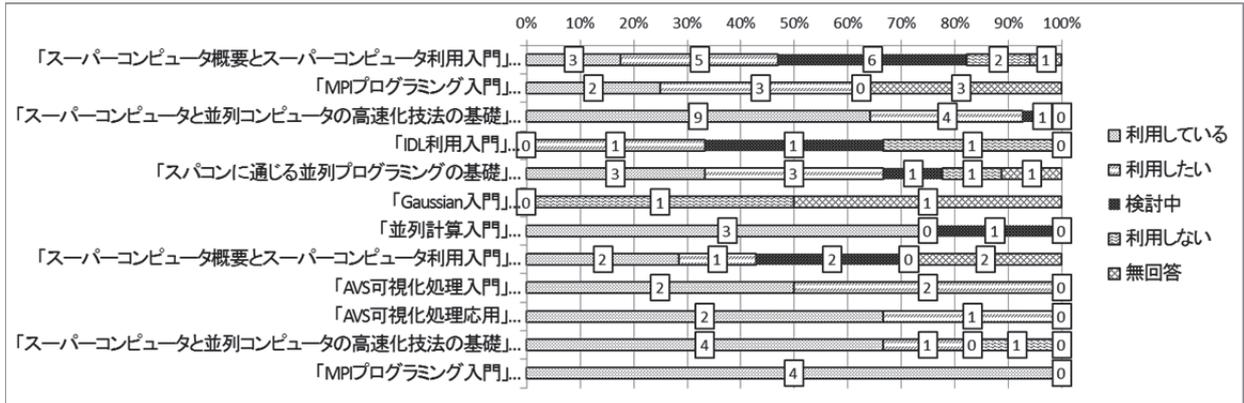
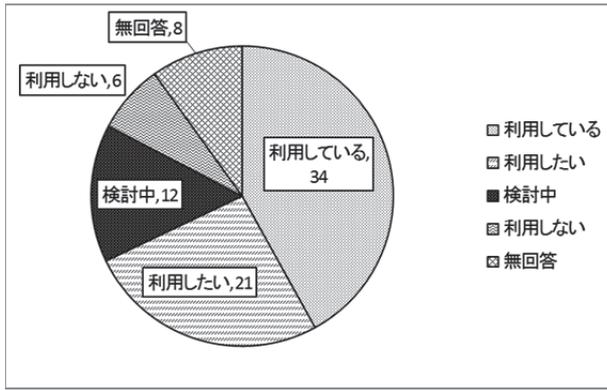
14. 問13で「ある」と回答された方へ。利用方法についてご記入ください。(複数回答可)

講習会名	Fortran	C/C++	他の言語	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	0	2	0	15	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	2	0	0	6	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	5	0	0	9	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	0	0	0	3	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	1	2	0	6	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	0	0	2	2
「並列計算入門」 2013/9/3	2	0	0	0	2
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	1	0	0	6	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	2	1	0	1	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	2	1	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	2	1	0	0	3
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	2	1	0	1	4
合計:	19	8	0	49	76



15. サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。

講習会名	利用している	利用したい	検討中	利用しない	無回答	合計
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3	3	5	6	2	1	17
「MPIプログラミング入門」 2013/6/10	2	3	0	0	3	8
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11	9	4	1	0	0	14
「IDL利用入門」 2013/6/21	0	1	1	1	0	3
「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27	3	3	1	1	1	9
「Gaussian入門」 2013/8/9	0	0	0	1	1	2
「並列計算入門」 2013/9/3	3	0	1	0	0	4
「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/9/10	2	1	2	0	2	7
「AVS可視化処理入門」 2013/9/11	2	2	0	0	0	4
「AVS可視化処理応用」 2013/9/12	2	1	0	0	0	3
「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18	4	1	0	1	0	6
「MPIプログラミング入門」 2013/9/19	4	0	0	0	0	4
合計:	34	21	12	6	8	81



「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3(月)

選択	職名	コメント
利用したい	大学院生	利用したいと思っておりますが、まだコードが追いついていません

「MPI プログラミング入門」 2013/6/10(月)

選択	職名	コメント
利用したい	学部学生	まだ学部生なので、申請できない
利用している	研究員	レーザー研所属なので

「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27(木)

選択	職名	コメント
利用したい	学部学生	院生になったら使用できる予定

「Gaussian 入門」 2013/8/9(金)

選択	職名	コメント
利用しない	大学院生	他の研究室でできるため必要ない (研究室でできなくなれば利用するかもしれない)

16. 大規模計算機システムで提供を希望するライブラリ、アプリケーション等ありましたらご記入ください。

「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3(月)

職名	コメント
教員	ANSYS ls-dyna
教員	統計ソフト(R, STATA等)

「MPI プログラミング入門」 2013/6/10(月)

職名	コメント
研究員	フルパッケージのGaussian。今のサイバーメディアセンターはGaussViewが無いので

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11(火)

職名	コメント
研究生	自分のパソコンで、Mathematicaを使っているのですが、これは可能ですか？
研究員	Gaussianに対応したGaussView
大学院生	Linux向けの「Root」や「C++」にも対応していただきたい

「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」 2013/6/27(木)

職名	コメント
研究員	せっかくGaussianが導入されているので、GaussViewも導入してもらえると嬉しい

「並列計算入門」 2013/9/3(火)

職名	コメント
教員	J-OCTA(株式会社 JSOLが開発)

「AVS 可視化処理入門」 2013/9/11(水)

職名	コメント
大学院生	OpenFOAMを実装して欲しい

「AVS 可視化処理応用」 2013/9/12(木)

職名	コメント
大学院生	OpenFOAM 2.2.0とOpenFOAM-1.6.extの実装

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18(水)

職名	コメント
教員	J-OCTA

「MPI プログラミング入門」 2013/9/19(木)

職名	コメント
教員	J-OCTA

17. その他、ご意見・ご要望があれば些細なことでも結構ですのでご記入ください。

「スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門」 2013/6/3(月)

職名	コメント
大学院生	Vi, emacs等のエディタの扱いで苦勞したので、その説明は軽くして欲しかった。
研究員	C/C++使用者なので、FORTRAN中心に話が進むのは、なじみにくかった。しかし、福田先生の話は一般性があり、分かりやすかったです。 <質問>スーパーコンピュータ用C++コンパイラ(sxc++)のC++言語仕様への対応状況について知りたい。(パソコンのC++プログラムを移植する時、どう書き換えたらよいか)

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/6/11(火)

職名	コメント
大学院生	もう少し説明に抑揚を付けた話し方をお願いします

「Gaussian 入門」 2013/8/9(金)

職名	コメント
大学院生	阪大だと声が凄く聞き取り難かった。カメラがあるのもよく分からなかった。実習もできたら良かったと思う。今回の説明だけで実際にGaussianを使えるかと問われると不明。

「スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎」 2013/9/18(水)

職名	コメント
大学院生	普段はC言語でプログラムを作成しているため、C言語のコードがあれば、さらにありがたいと思いました

2014 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況

HPCI システムは、個別の計算資源提供機関ごとに分断されがちな全国の幅広いハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ユーザ層が全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し提供することを目的として構築され、2012 年 10 月より運用開始しました。北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学の各情報基盤センター、及び理化学研究所が資源提供機関となり、「京」を始めとする計算機資源や、共有ストレージ、ネットワーク、認証基盤、可視化装置等といったシステムを、中立・公正で科学的・技術的・社会的根拠に基づき配分・提供しています。

■大阪大学計算機資源を利用する採択課題一覧

平成 26 年度公募で採択された課題 (利用期間平成 26 年 4 月～平成 27 年 3 月)

利用枠	利用資源	研究課題名	課題代表者 所属機関
京以外 一般課題	汎用コン クラスタ	大規模数値シミュレーションで解き明かす超弦理論の物理	京都大学
京以外 一般課題	汎用コン クラスタ	超高強度レーザーによる多様な量子ビーム発生	レーザー技術 総合研究所
京以外 一般課題	SX-8R SX-9	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション	九州大学
京以外 一般課題	SX-9	光エネルギー利用デバイス設計の高精度化・最適化	物質・材料 研究機構
京以外 一般課題	SX-ACE	共変型非アファイン粘弾性に基づく界面活性剤添加における抵抗低減機構の解明	東京工業大学
京以外 一般課題	SX-ACE	量子モンテカルロ法による 強相関 2 次元ディラック電子系の物性解明	理化学研究所
京以外 一般課題	大規模可視化 対応 PC クラスタ	物質材料系の可視化駆動型サイエンスの HPC 活用研究	防衛大学校
京以外 産業利用課題 (実証利用)	SX-9 SX-ACE	南海トラフ巨大地震による長周期地震動評価 2	(株) 大林組 技術研究所
京以外 産業利用課題 (実証利用)	大規模可視化 対応 PC クラスタ	新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築	京都大学
京以外 産業利用課題 (実証利用)	SX-ACE	粉体－流体連成解析によるボールミルの大規模シミュレーション	住友電気工業 株式会社

2014 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況

「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」は、北海道大学、東北大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ 8 つの共同利用の施設を構成拠点とし、東京大学情報基盤センターがその中核拠点として機能する「ネットワーク型」共同利用・共同研究拠点として、文部科学省の認可を受け、2010 年 4 月より本格的に活動を開始しました。

本ネットワーク型拠点の目的は、超大規模計算機と大容量のストレージおよびネットワークなどの情報基盤を用いて、地球環境、エネルギー、物質材料、ゲノム情報、Web データ、学術情報、センサーネットワークからの時系列データ、映像データ、プログラム解析、その他情報処理一般の分野における、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきたいわゆるグランドチャレンジ的な問題について、学際的な共同利用・共同研究を実施することにより、我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展に資することにあります。本ネットワーク型拠点には上記の分野における多数の先導的研究者が在籍しており、これらの研究者との共同研究によって、研究テーマの一層の発展が期待できます。

2014 年度の課題募集には合計 53 件の応募があり、東京大学情報基盤センターで開催された課題審査委員会及び運営委員会にて審議され、34 件が採択されました。このうち 5 課題が大阪大学を利用することとなっています。

課題代表者	研究課題名	課題代表者 所属機関	利用大学
萩田 克美	大規模データ系の VR 可視化解析を効率化する多階層精度圧縮数値記録(JHPCN-DF)の実用化研究	防衛大学校	北大、東北大、名大、阪大
萩田 克美	High-end VR のシステム・コモディティ化の実証検証	防衛大学校	東北大、名大、阪大
石川 清志	次世代パワーデバイス実現に向けた大規模・大領域半導体デバイスシミュレーションの研究	半導体理工学研究センター	阪大
森田 裕史	フィルター充填系高分子材料の粗視化分子動力学解析の連携型 HPC 活用研究	産業技術総合研究所	北大、東北大、東工大、名大、阪大
棟朝 雅晴	スパコンとインタークラウドの連携による大規模分散設計探査フレームワークの構築	北海道大学	北大、東北大、阪大、九大

2014 年度大規模計算機システム利用相談員

【利用相談員】 委嘱期間：平成 26 年 4 月 1 日～平成 27 年 3 月 31 日

氏 名	所 属	職 名
高木 達也	大阪大学大学院薬学研究科	教 授
外川 浩章	大阪大学核物理研究センター	助 教
福田 優子	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	技術専門職員
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
松浦 史法	阿南工業高等専門学校機械工学科	准教授
野崎 一徳	大阪大学歯学部附属病院	助教
伊達 進	大阪大学サイバーメディアセンター	准教授
降旗 大介	大阪大学サイバーメディアセンター	准教授
吉野 元	大阪大学サイバーメディアセンター	准教授

2014 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 医療薬学専攻 教授)

大阪大学大学院薬学研究科の高木達也と申します。よろしくお願い申し上げます。

大型計算機システム利用相談員の前身であるプログラム相談員に就任させて頂いたのは、もう 30 年以上前になると思います。当時、分子軌道法プログラム、Gaussian の実質上最古のバージョンになる Gaussian70 をセンターに移植するのに苦労していましたので、お声がかかったように記憶しています。その後継になるソフトの利用相談が、ここ 10 年ばかりの担当のほとんどです。Gaussian だけでなく、GAMESS や GROMACS など、計算化学のソフトウェアも増えてきました。Gaussian の元々の作成者の J.A.Pople 先生は、(たぶん)このプログラムの作成による量子化学の普及により、ノーベル化学賞を受賞しておられます。いかなる新規かつ応用性の広い理論、手法も、一般に普及しなければ絵に描いた餅にすぎません。いえ、私は、新しい、あるいは改良した理論、手法を普及させるのは、研究者の説明責任の一環だと考えています。

以前、別の雑誌にも書いたことがあるのですが、計算化学で利用するモデルシステム(例えば、タンパク質の分子動力学計算)は、何でもかんでも現実に近いモデルを構築するのがすべてだとは考えていません。Alder 転移などは、現実と少し異なるモデルが発見してくれた現象です。理想モデルが、時として、驚くような結果をもたらすことがあり、これが科学の発展につながっていくのだと、私は考えています。

私たち利用相談員が、利用者の皆様の研究に関して、少しでもそのお役に立てるならば、望外の喜びです。

とがわ ひろあき
外川 浩章

(大阪大学核物理研究センター 助教)

私は、原子核物理学の実験的な研究を行うために必要な、計算機とネットワークの整備・運用に長期間携わってきたので、そのノウハウを活かして、スパコンの整備・運用を行っている。アルゴリズム等の深い相談には対応できないが、中程度までの利用方法に関しては、広く浅く相談を受けられると思う。

ふくだ ゆうこ
福田 優子

(大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 技術専門職員)

大阪大学レーザーエネルギー学研究センターの福田優子です。私は、研究室に配属された初めてシミュレーションをする情報系以外の理系の大学生、大学院生の方などを近くでサポートしてきました。その経験と、講習会などでいただいたみなさんの質問や、協力いただいたアンケートなどを生かして、「パソコン&スーパーコンピュータで計算するための基礎知識」という自習書にまとめたものを、以下の WEB で公開しています。

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

スーパーコンピュータは利用しないけど、パソコンは利用するという方のお役にもたてるようにと願って作成しました。一度参照していただき、コメントや質問などをいただけたら大変ありがたいです。

また、Fortran のよい入門書がないという私の要望に応じて、レーザー研の共同研究者である摂南大学の田口先生が「Fortran スマートプログラミング (2013 年度版)」を提供してくださったので、それも公開してい

ます。ぜひご利用ください。

初心者の方は、大学にいる間に一度は講習会を受講されることを強くお勧めします。いくら教科書がよくても講義を聞かないと分からないのと同じですよね。サイバーメディアセンターの講習会や、プログラム相談をぜひご利用ください。

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、最近は雑務と子守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、これまでの研究時間の大半は愛用計算機の前で過ごしてきました。ただし最近は雑用が多く、机の前に座って時間をかけて一つの疑問について執念深く熟考するという習慣が激減しています。これも時代の流れかとは思いますが、一生をかけて達成すべきような本当に大きな意義のある身のある仕事にとりかかることが難しい、大変世知辛い世の中に周りの環境は変化しているように感じます。こんなことを国全体を挙げてやっているのでは、現状維持でさえ難しい日本の国力が落ちるばかりではないかと心配していますが、さりとて政治家に立候補しようとは思っていません。話は脱線しました。実験等における学生指導などで最近は大型計算機の使用時間が減っていますが、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のお世話になって居ります。

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。何れも専ら**FORTRAN**を使用している関係上、研究室で適宜**FORTRAN**とバッチジョブ利用のご相談を承っております。宜しくお願ひします。

まつうら ふみのり
松浦 史法

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

平成25年10月から利用相談員を務めさせていただくことになりました。専門分野は可視化学で、2D/3Dの流体の可視化計測のほか、サイエンティフィックアートとして流体以外の幅広い分野へ可視化技術を応用する研究を行っています。画像処理や解析処理、三次元再構成などで計算機を利用してきました。まだ勉

強中であり至らない点も多くあると思いますが、皆様のお役に立てれば幸いです。どうぞよろしくお願いいたします。

のざき かずのり
野崎 一徳

(大阪大学歯学部附属病院 医療情報室 助教)

普段は、歯科用帰納演繹システムの研究開発を行っています。様々な次元のデータから医療現場に有効な情報を抽出するために、システム全体の効率化、高速化にも取り組んでおります。また、FrontFlow/Blue等の数値流体力学計算をSX上で走らせる際に、直面する様々な問題について解決した経験があります。有限要素等による数値流体力学計算のPre/Post処理、特にCT/MRI等の画像情報から興味領域の抽出手法等について経験があります。また、学内・学外ネットワークを使った情報共有等についても経験があります。

だて すすむ
伊達 進

(大阪大学サイバーメディアセンター 准教授)

大阪大学サイバーメディアセンターの伊達です。

これまでクラスタ、グリッドなどの分散並列計算技術を応用した研究開発を行ってきました。学生時代は画像処理、信号処理といった分野で、MPIプログラムの開発などを行い、大型計算機センター時代のExemplarやSXを使った経験があります。

2013年4月よりサイバーメディアセンター応用情報システム研究部門に着任し、サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの運用に携わることになりました。皆様方からの相談を伺いながら、サイバーメディアセンターの大規模計算機システムをより使いやすいものにできるよう努力したいと考えています。

ふりはた だいすけ
降旗 大介

(大阪大学サイバーメディアセンター 准教授)

数値解析の理論分野を主に研究しております。普段は偏微分方程式の数値解析においてどのような数値スキームを構築すべきかという、やや理論的な面において研究をしておりますので、現場にてプログラミングおよびその性能で悩んでおられる方に直接お役に立てるか自信のないところではありますが精一杯努めさせていただこうと思います。

大型計算機を初めて触ったのは学部4年生の頃で、ファイルシステムが型付された形式のもので随分と戸惑った記憶があります。その頃の記憶から比べますと、今のシステムは随分と Unix 寄りになり、大いに進化したのだなと感じます。その後、ベクトル化率の向上がそのまま性能向上と信じていた時代がしばらく続いたと思っていましたら今や並列化に頭を悩ます時代へと移り、プログラミングがいよいよ難しくなっていると言えそうです。

各種アプリケーションやライブラリも巨大化し、かつ複雑化しつつある昨今、こうしたものについての困難や疑問に直接お答えする能力が自分にあるかは疑わしいですが、数値解析のアルゴリズムや方法論といった、より根本的な部分についてはある程度お答えすることも可能かと思えます。そうした方向でなにかお役に立てそうでしたら幸甚です。

よしの はじめ
吉野 元

(大阪大学サイバーメディアセンター 准教授)

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算科学研究部門に2014年4月1日着任しました吉野 元と申します。専門分野は物性物理の理論・数値的研究で、主な研究テーマは、固体物理からソフトマターにまで跨る広い意味でのガラス系の物理です。これまでスーパーコンピュータのユーザとしては、東大物性研究所、京大基礎物理学研究所、阪大サイバーメディアセンターなどのスーパーコンピュータ(並列マシン)を利用して分子動力学シミュレーションやモンテカルロシミュレーションなどを行って来ました。今後、ユーザの観点から見てより利用しやすい、また新規参入しやすいシステムにしてゆくにはどうすれば良いかを考えながら、利用相談員としての業務にあたって行きたいと思っております。どうぞよろしくお願いいたします。

大規模計算機システム FAQ

I. 利用方法

1 ログインについて

計算機を使用するには ssh で接続します。ssh クライアントソフトは Windows 環境では Putty、TeraTerm などが一般的に利用されています。

1.1 SX-9、SX-8R、汎用コンクラスタを利用する場合

接続する場合、接続先ホスト名に” **login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp** ”、プロトコル（サービス）は”SSH”、TCP ポートは”22”を指定します。（以下の画面は TeraTerm の場合）

ログインするとメニュー画面が表示されますので、Frontend Terminal(fronta-fronttd)の番号(1~4)を入力しフロントエンド端末に接続します。フロントエンド端末でプログラムのコンパイル、バッチリクエストの投入、計算結果の確認などを行います。

1.2 大規模可視化対応 PC クラスタを利用する場合

接続する場合、接続先ホスト名に” **xlogin.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp** ”、プロトコル（サービス）は”SSH”、TCP ポートは”22”を指定します。（以下の画面は TeraTerm の場合）

ログインすると自動的にフロントエンド端末に接続します。フロントエンド端末でプログラムのコンパイル、バッチリクエストの投入、計算結果の確認などを行います。

ログイン：トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	接続できない	インターネットに接続できているか	
		接続先ホスト名が間違っていないか	ホスト名：login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
		TCP ポートが間違っていないか	TCP ポート：22
		SSH で接続しているか	Telnet では接続不可
		ファイアウォールやネットワークの設定で SSH、TCP ポート 22 の使用を許可しているか	
2	ログインできない	ユーザ名（利用者番号）が間違っていないか	
		パスワードが間違っていないか	忘れた場合は「III.利用手続き」の「4. パスワード忘れについて」を参照
		利用期限が切れていないか	
3	文字化けが発生している	文字コードの設定が間違っていないか	login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp は「EUC」 xlogin.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp は「UTF-8」になります。

2 プログラムのコンパイルについて

プログラムのコンパイルはフロントエンド端末で行います。

2.1 SX-9、SX-8R を利用する場合

% sxf90 test.f90 —— (SX用Fortranクロスコンパイラの実行)

% sxc++ test.c —— (SX用Cクロスコンパイラの実行)

SX 用クロスコンパイラは SX-8R 用のロードモジュール(a.out)をフロントエンド端末で作成します。
SX-9 用のロードモジュールを作成する場合はオプションに” -cfsx9” を付けてください。

2.2 汎用コンクラスタ、大規模可視化対応 PC クラスタを利用する場合

% ifort test.f —— (Intel FORTRANコンパイラの実行)

% icc test.f —— (Intel Cコンパイラの実行)

Intel コンパイラは汎用コンクラスタ、大規模可視化対応 PC クラスタで実行するロードモジュール (a.out)を作成します。

コンパイラ一覧

	C	C++	FORTRAN
Intel コンパイラ	% icc test.c	% icpc test.c	% ifort test.f
MPI コンパイラ	% mpicc test.c	% mpicpc test.c	% mpif77 test.f % mpif90 test.f
SX用クロスコンパイラ	% sxc++ test.c	% sxc++ test.c	% sxf90 test.f
SX-9 用の場合は” -cfsx9” オプションを利用			

※MPI コンパイラや、その他詳細な利用方法については、以下のページをご参照ください。

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/service/front_guide.html

コンパイル：トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	コンパイルできない	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		コンパイラのパスが間違っている (Intel MPI)	パス : /opt/intel/mpi/4.0.3/bin64 コマンド : C : mpiicc、C++ : mpiicpc、 Fortran : mpiifort
		コマンド名が間違っている	
2	コンパイルエラーが発生する	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		オプションの指定が間違っている	
		リンク先ライブラリの指定が間違っている	汎用コンクラスタ用ライブラリか SX 用ライブラリか確認する
		リンカオプションの指定順が違う	リンカオプションは対象ファイルより後、また“-l”は“-L”より後に指定する
		文字コードが「SJIS」、改行コードが「CRLF」になっている (主に Windows 上で作成したファイルを FTP 転送した場合に発生)	以下のコマンドで文字コードを「EUC」、改行コードを「CR」に変換する nkf -e -Lu [ファイル] > [一時ファイル] mv [一時ファイル] [ファイル]
		配列のサイズなど、使用メモリサイズが大きい	以下のオプションを指定する Intel コンパイラ : -mcmmodel=large -shared-intel SX クロスコンパイラ : -size_t64 (C/C++)、-ew (Fortran)

3. プログラムの実行について

コンパイルしたロードモジュール (a.out) をスーパーコンピュータ及び PC クラスタで実行するには、NQS スクリプトファイルを作成し、バッチリクエストとして投入します。

キュー名 (以下の「#PBS -q SX9」) を指定し、バッチジョブの投入先を設定してください。キュー名は以下の通りです。スクリプトファイルの作成には、vi などのエディタをご利用ください。

キュー名	バッチジョブ投入先	キュー名	バッチジョブ投入先	キュー名	バッチジョブ投入先
SX9	SX-9	HCC-S	汎用コン クラスタ	VCC	大規模 可視化対応 PCクラスタ
SX8F	SX-8R	HCC-T		GVC	
SX8L		HCC-M			

NQS スクリプトの例

```
#!/bin/csh
#PBS -q SX9 # (バッチリクエストを投入する計算機のキュー名の指定)
#PBS -l cpunum_job=2,memsz_job=4GB,elapstim_req=0:30:00 # (使用するCPU数・メモリ量・時間を指定)

cd $PBS_O_WORKDIR # (qsub実行時のカレントディレクトリへ移動)
./a.out # (プログラムの実行)
```

バッチリクエストの投入は、”qsub”コマンドを使います。

正常にバッチリクエストを受け付けるとリクエスト ID が付けられます。

```
% qsub [スクリプトファイル名]
Request 12345.sx9 submitted to queue: SX9.
```

↑

受け付けたバッチリクエストには リクエスト ID が付けられる。

トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	正常に投入できない	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		キュー名が違う	“#PBS -q”で指定しているキュー名を確認する
		オプションが違う	“-q”、“-l”など、各行のオプションに間違いがないか確認する
		パラメータが違う	“cpunum_job”など、各行のパラメータの綴り等に間違いがないか確認する

4. バッチリクエストの確認について

バッチリクエストの状態は以下のコマンドで確認できます。バッチリクエストは投入が完了すると最初「QUE」状態になります。次に、実行開始時間が決まりスケジュールされると「ASG」状態になり、実行が開始されると「RUN」状態になります。実行が終わると以下のコマンドの表示がなくなり、実行結果がファイルに出力されます。

<code>% sstat</code>	—— (SX-8R、大規模可視化対応PCクラスタのバッチリクエストの実行開始時間を確認)
<code>% sstat9</code>	—— (SX-9のバッチリクエストの実行開始時間を確認)
<code>% sstatgcc</code>	—— (汎用コンクラスタのバッチリクエストの実行開始時間を確認)

バッチリクエスト：トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	実行されない	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		NQS スクリプトファイルの”cpunum_job”の値が大きい	指定可能な最大値以下の値を指定する 汎用コンクラスタ：2、SX-8R：8、SX-9：16
		NQS スクリプトファイルの改行コードが「CRLF」になっている（Windows上で作成したファイルをFTP転送した場合に主に発生）	FTP転送時に”テキストモード”で転送するか、以下のコマンドを実行する nkf -e -Lu [ファイル]>[一時ファイル] mv [一時ファイル][ファイル]
		NQS スクリプトファイルの最終行に改行がない（cshスクリプトの場合）	最終行にコマンドを記述している場合、改行を入れる
		NQS スクリプトファイルのプログラムの指定が間違っている	指定ファイル名、パス、実行権限、バイナリ形式（HCC用、SX-8R用、SX-9用）等を確認する
		NQS スクリプトファイルの”#PBS”行の間に通常のコマンド行がある	”#PBS”行を全て記述後、通常のコマンド行を記述する
2	エラーが発生する	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		プログラム実行中に時間切れになる	NQS スクリプトファイルの”elapstim_req”の値（経過時間）を大きくする
		メモリが足りない（”Exceeded memory size limit”等のエラーが出る）	NQS スクリプトファイルの”memsz_job”の値（ノード当たりのメモリサイズ）を大きくする
		”Batch job received signal SIGXRLG1. (Exceeded RLG1 limit)”というエラーが出る	標準出力、標準エラー出力をリダイレクトなどでファイルに出力するようにする
		”[エラーコード] [メッセージ] PROG=[ソースファイル] ELN=[行](YYYYY) TASKID=Z”というフォーマットのエラーが出る	[ソースファイル]の[行]を[メッセージ]に従って修正する 最適化による影響の場合は、最適化レベルを落としてリコンパイルする

5. ファイル転送について

ファイルサーバ”ftp.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp”に SSH に対応したファイル転送ソフト (Unix/Linux : sftp、scp、Windows : WinSCP など) で接続します。

詳細な設定、手順は次の URL をご覧ください。(sftp、scp、WinSCP を例に手順を説明しています)

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/file_transfer.html

ファイル転送：トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	接続できない	インターネットに接続できているか	
		接続先ホスト名が間違っていないか	ホスト名 : ftp.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
		TCP ポートが間違っていないか	TCP ポート : 22
		SFTP で接続しているか	FTP では接続不可
		ファイアウォールやネットワークの設定で SSH、TCP ポート 22 の使用を許可しているか	

6. パスワードの変更について

次の URL から大規模計算機システムポータルにログインし、「パスワード変更」のタブを選択してください。

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

※Mac OS の Internet Explorer でのご利用は非推奨となっておりますのでご注意ください。

なお、フロントエンド端末での”passwd”コマンドでは変更できませんのでご注意ください。

より詳細な利用方法はこちら

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

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/service/front_guide.html

II. サポート、マニュアル

1. サポートについて

お問い合わせ頂く内容により担当部署が変わります。

- 大規模計算機システムの利用に関する質問や、問い合わせ先が不明な質問は、次の情報推進部 情報基盤課 研究系システム班宛にお問い合わせください。

メール (system@cmc.osaka-u.ac.jp)、または電話(06-6879-8813)

- 大規模計算機システムで実行するプログラム等に関する質問は、次の利用相談員宛にお問い合わせください。

メール(hpc-support@hpc.cmc.osaka-u.ac.jp)

なお、利用相談員については次の URL をご覧ください。

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

- その他、問い合わせ先等の詳細は次の URL をご覧ください。

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

2. マニュアルについて

次の URL から大規模計算機システムポータルにログインしてください。「マニュアル」のタブを選択すると、メーカー提供のマニュアルがご覧になれます。また、「講習会資料」のタブを選択すると講習会で使用した資料もご覧になれます。

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

III. 利用手続き

1. 利用資格について

大学等の研究者や大学院生等がご利用になれます。利用資格の詳細は次の URL をご覧ください。

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

また、平成 23 年度から民間企業の方も利用の申請が可能となりました。詳細は次の URL をご覧ください。

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

2. 利用負担金について

大規模計算機システムの利用負担金は、登録時に一定額を支払って頂く年間定額制をとっており、登録後の利用による利用負担金は発生しません。なお、利用負担金の金額に応じてジョブ実行優先順位（フェアシェア値）、並列実行 CPU 数、メモリサイズ、ファイル使用量などの利用可能な資源に制限をかけています。詳細は次の URL をご覧ください。

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

3. 利用申請について

大規模計算機システムを利用される方は、次の URL にある「大規模計算機システム Web 利用申請システム」より申請ください。

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

4. パスワード忘れについて

大規模計算機システムのパスワードを忘れた場合は、次の URL にある「パスワード初期化申請フォーム」より申請ください。

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

5. 試用制度について

本センターでは、これまでに大規模計算機システムを一度も利用していない、利用有資格者を対象にした試用制度を設けています。利用申請は Web ページから受け付けています。詳細は次の URL をご覧ください。

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

IV. その他

1. 他大学の情報基盤センターの情報について

他大学の情報基盤センターの情報については次の URL をご覧ください。

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

サイバーメディアセンターIT コア棟新営及び吹田本館改修工事について

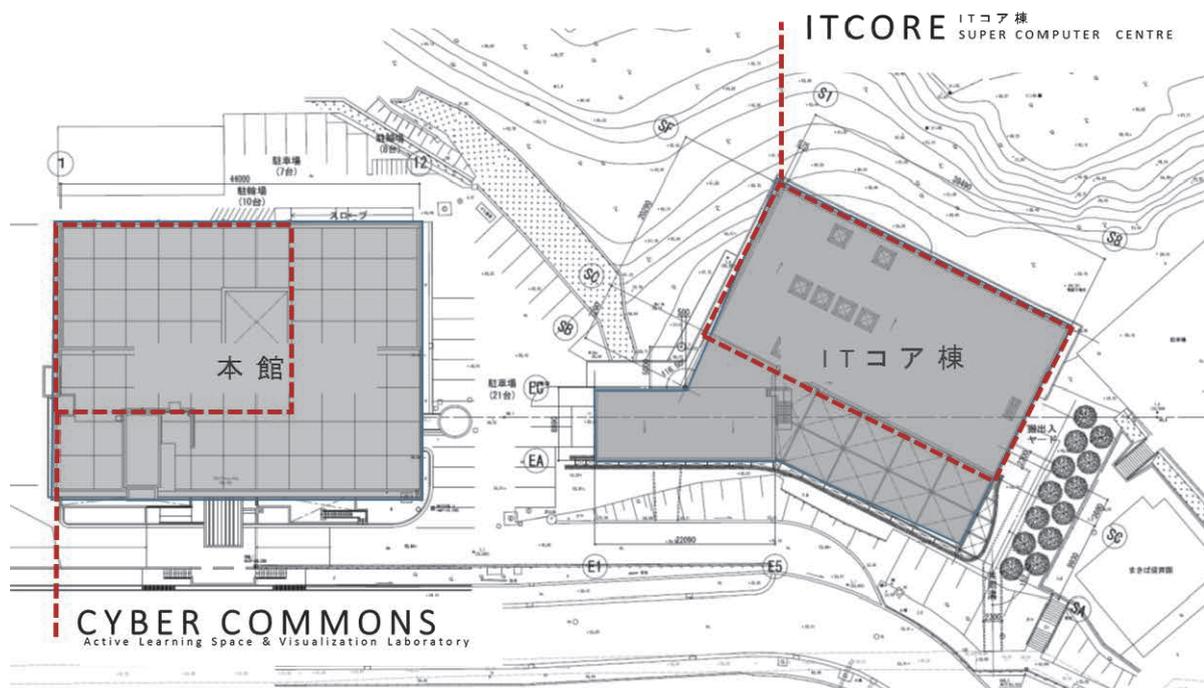
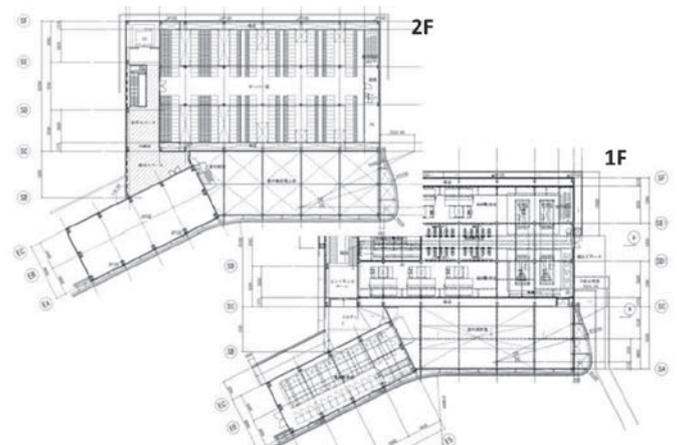
1 概要

サイバーメディアセンターは次期スーパーコンピュータの更新に合わせて、大型計算機と学内の各種サーバ、ODINS 等を集約する新計算機棟（IT コア棟）の建設工事とそれに隣接する吹田本館の耐震改修工事を平成 25 年度より進めており、吹田本館内には学生のアクティブラーニングを支援するサイバーcommonsを設置します。なお IT コア棟は平成 26 年秋に、吹田本館は平成 27 年春に竣工を予定しており、吹田本館にあわせてサイバーcommonsもオープンします。



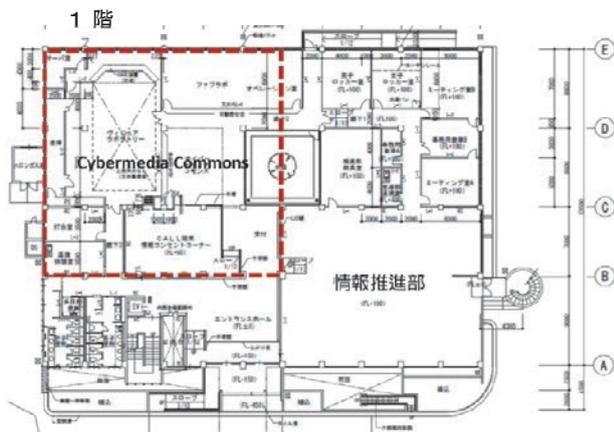
2 ITCORE

IT コア棟は大型計算機を含むデータセンターで、鉄骨造、地上 2 階建、延べ床面積約 2000m²の施設で、電気棟とサーバ棟の 2 棟により構成され、外周を透過性のある金属パネルによって緩やかな曲面のデザインとすることで周囲の景観への配慮を行っています。施設構成としてはメインの計算機・サーバエリアと、空調や電源などの設備関連機器エリアを分離し、1 階を機械設備（約 1000m²）、2 階を 2 重壁構造の計算機・サーバ室（約 600m²）としています。



2 本館改修と CYBER COMMONS

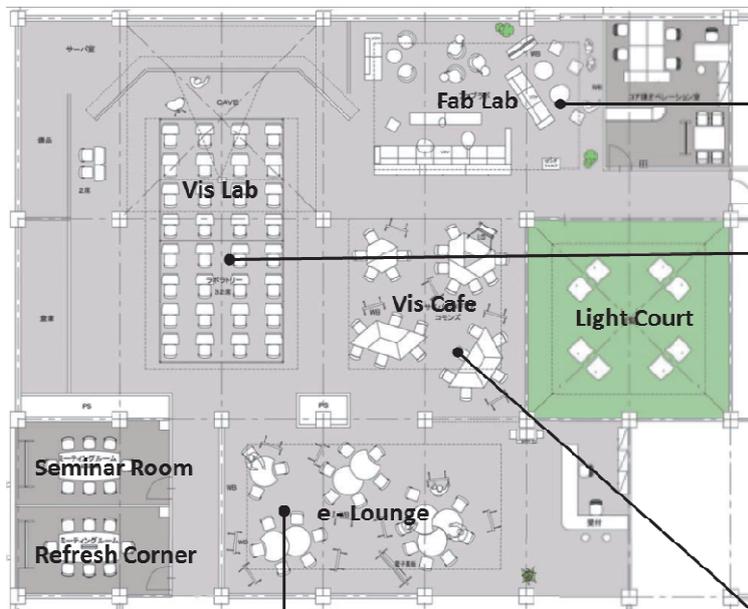
老朽化が進んでいたサイバーメディアセンターの吹田本館 RC 造、地下 1F、地上 3F の建物で延べ床面積 約 3500m² を耐震改修するもので、1 階にこれまで分散していた情報推進部を集約し、大型計算機があったスペースにサイバーcommonsを計画しています。また 2 階はセンターの会議室、センター長室を 3 階には応用情報研究部門、全学支援企画部門の研究室を配置し、B1 階には各種機器の係員室、機械室としています。



サイバーcommonsは学生が自主的に学修するためのアクティブラーニングスペースであり、ここでは電子情報資源へのアクセスはもとより、多様な情報技術のサポートを提供します。また AVS Expressをはじめとする可視化ソフトや大規模立体表示装置、可視化システムから 3次元モデルを生成できる 3D プリンターなどを導入し、これらをコアとして、学生の自主的な学修活動と研究活動を支援するサポート体制の計画を進めています。

CYBER COMMONS

Active Learning Space & Visualization Laboratory



Fab Lab(ファブ・ラボ: 約100m²)
可視化システムから3次元モデルを生成できる3Dプリンターや各種情報機器のチューニング作業ができるワークスペース



Vis Lab(ビジュアライゼーションラボ: 約200m²)
タイルドディスプレイの可視化装置によるシミュレーションと50名程度のインチャージが可能!



e-Lounge(イーラウンジ: 約100m²)
学生月にマルチメディア端末、情報コンセントやダウンロードブースなどを設置し、多様な技術的サポートを受けることができるスペース。



Vis Café(ヴィズ・カフェ: 約100m²)
学生の自主的な学習空間として利用。Vis Labに関連する展示や少人数のミーティングなどができるスペース。

次期スーパーコンピュータ

伊達 進 下條 真司

大阪大学 サイバーメディアセンター

1. はじめに

大阪大学サイバーメディアセンターは、全国の大学の研究者らが学術研究・教育に伴う計算及び情報処理を行う全国共同利用施設として、ベクトル型スーパーコンピュータ SX-8R、SX-9 を提供してきた。このたびの調達では、次期スーパーコンピュータとして NEC 製 SX-ACE の導入が確定し、現在、来る 2014 年 12 月 9 日より正式にサービスを開始すべく、サイバーメディアセンターの教職員が一丸となり準備を進めている。本稿では、本センターに導入される次期スーパーコンピュータ SX-ACE について紹介する。

2. SX-ACE の概要

本センターで導入する SX-ACE は、SX-8R、SX-9 と同様の NEC 製ベクトル型スーパーコンピュータである。そのため、従来の利用者の方々には、比較的親しみやすく、また利用しやすいシステムとなると考えられる。しかし、SX-ACE のハードウェア構成は、“クラスタ化”したものになるため、従来の利用者の方々が SX-ACE の計算性能を引き出すためにはそのハードウェア構成についてある程度の知識を有していることが前提となる。そこで、本稿では、本センターで導入する SX-ACE について、基本的なハードウェア構成と性能、システムソフトウェアと利用イメージの観点からを概説したい。

2.1 ハードウェア構成と性能について

本センターで導入される SX-ACE は、総計 1,536 ノードの構成となる。各ノードは、4 コア (1 コアあたり 69 GFlops の演算性能、ベクトル性能は 64 GFlops) を有するマルチコア型ベクトル CPU、64 GB の主記憶容量を搭載する(図 1)。ノード内においては、図に示す通り、CPU と主記憶間の最大転送能力

は 256GB/s を保有しており、1Byte/Flops の高い CPU 性能にバランスした高メモリバンド幅が実現されている。

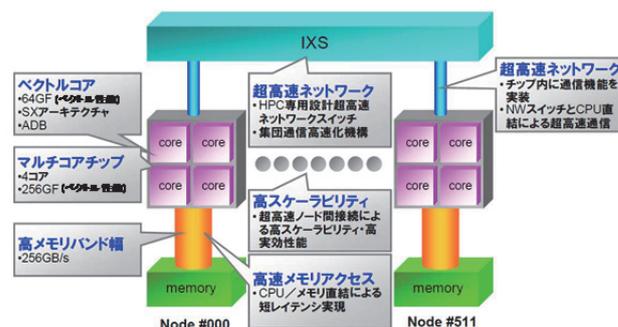


図 1: SX-ACE 1 クラスタ (512 ノード) の構成概要と特徴

これらのノード 512 個は、IXS と呼ばれる専用のノード間接続装置によりノード間接続され、1 クラスタを形成する。ノード間接続装置 IXS は、1 クラスタ 512 ノードを 2 段ファットツリー構成 1 レーンで接続し、そのノード間最大転送性能は入出力双方向それぞれ 4 GB/s となっている。すなわち、1 コアあたり入出力双方向それぞれ 2 GB/s のバンド幅が利用可能な計算となる。

表 1: SX-ACE の基本性能

	1 ノード	1 クラスタ	3 クラスタ
CPU 数	1	512	1536
コア数	4	2048	6144
演算性能	276 GFlops	141 TFlops	423 TFlops
ベクトル性能	256 GFlops	131 TFlops	393 TFlops
主記憶容量	64 GB	32 TB	96 TB

これらのデータから自明ではあるが、まとめると、本センターで導入される SX-ACE の 1 ノード、1 クラスタあたりの理論最大演算性能は 276 GFlops、141

TFlops と計算され、このたび本センターで導入される SX-ACE 3 クラスターの理論最大演算性能は 423 TFlops、主記憶容量の総計は 96 TB となる (表 1)。なお、本センターで導入される SX-ACE のディスク容量は、総容量 2 PB となる。



図 2 : 次期スーパーコンピュータ SX-ACE の外観

図 2 は SX-ACE の外観を示したものである。SX-ACE の特徴は、上述したような高い演算性能特性だけでなく、省スペース化、省電力化にもみられる。近年では、Top500 [1]、Green500 [2] にもみられるように、高性能計算機システムのクラスタ化・大規模化がますます進展しており、データセンターのスペース問題、消費電力の問題はますます深刻なものとなっている。本センターにおいても例外ではなく、今後本センターが高性能な計算機システムを導入・運用・維持・管理していくためには、これらの課題はさけて通ることができない。SX-ACE では、その高密度なノードモジュール設計のため、図 2 に示されるラック 1 本あたりに 64 ノードの搭載が可能であり、本センターで導入する SX-ACE 3 クラスターでは総計 24 本のラックが設置される省スペース化が実現されている。また、SX-ACE の消費電力は、約 1.6 TFlops のベクトル性能値で比較した場合、従来の SX-9 に比較して約 1/10 になっている。本センターでは、新しいデータセンターとして IT コア棟を吹田本館横に建設中であるが、SX-ACE を IT コア棟に設置することで、より高い電力効率で次期スーパーコンピュータ SX-ACE を運用していくことを計画

している。

2.2 システムソフトウェアと利用イメージ

次に、本センターで導入する SX-ACE のシステムソフトウェアと利用イメージについて概説する。本センターで導入する SX-ACE は、オペレーティングシステムとして SUPER-UX R21.1 を採用している。そのため、これまで SX-8R、SX-9 を利用してこられた利用者の方々には、親しみやすく、利用しやすいものとなると期待される点は次期スーパーコンピュータ SX-ACE の利点であるといえる。

さらに、SX-ACE へのジョブ管理は、Job Manipulator と NQS II を中核とした統合スケジューラで行われることとなる。本稿執筆時点では NQS II のジョブキュー設計が完了していないため、その詳細は現時点では記載できないが、ジョブの投入方法自体は、Redhat Linux をベースとしたフロントエンドノードから必要計算資源を記述したスクリプトを NQS II の CUI (Commandline User Interface) を用いて行う、これまでと同様の方法となるため、この点においても、これまで SX-8R、SX-9 を利用してこられた利用者の方々には次期スーパーコンピュータ SX-ACE への移行を比較的スムーズにすすめることができると期待している。

続いて、SX-ACE のファイルシステムについて説明する。上述したように、本センターで導入する SX-ACE では、総容量 2 PB のディスク容量となるが、これらは NEC 独自開発の ScaTeFS (Scalable Technology File System) と呼ばれる高速・分散並列ファイルシステムによって管理される。ScaTeFS は、複数の I/O サーバにメタデータおよびデータを均等に分散させることで、高速な並列 I/O と大量のファイル操作に強いファイルシステムを実現するだけでなく、単一障害点の排除と自動リカバリによる高い耐障害性とデータ保護も同時に実現した高信頼性を確立したファイルシステムでもある。SX-ACE では、この ScaTeFS が大容量ストレージのためのファイルシステムとして採用され、2013 年度に導入した大規模可視化対応 PC クラスタからもアクセス可能とな

る予定である。なお、現在のファイルシステム GFS から新しいファイルシステム ScaTeFS への変更は、利用者の方々が特に意識することはないので安心されたい。

表 2 ソフトウェア開発支援環境・ライブラリ

	種別	ソフトウェア・ライブラリ
SX-ACE クロス環境	C/C++コンパイラ	C++/SX
	Fortran95/2003コンパイラ	FORTRAN90/SX NEC Fortran 2003 compiler
	MPI ライブラリ	MPI/SX MPI2/SX
	HPF コンパイラ	HPF/SX
	デバッグ	NEC Remote Debugger
	性能解析ツール	PROGINF/FILEINF
	数学ライブラリ	FTRACE NEC Ftrace Viewer
科学技術計算ライブラリ	数値計算ライブラリ	ASL ASLQUAD
	統計計算ライブラリ	ASLSTAT
	数学ライブラリ集	MathKeisan (BLAS, BLACS, LAPACK, ScaLAPACK を含む)
Linux 開発環境	コンパイラ, MPI	Intel Cluster studio XE

さらに、SX-ACE は本センターが現在運用する SX-9 の後継機種であるため、現在 SX-8R や SX-9 上で開発、実行されているプログラムを再コンパイル程度で容易に移行することが可能である点は特筆に値する。しかし、前述したように、本センターが導入する次期スーパーコンピュータ SX-ACE では、3 クラスタ 1,536 ノードからなるクラスタ化されたシステムとなるため、より高い計算性能を追求していくためには本センターで導入する SX-ACE のハードウェア構成と特徴を把握したうえで、MPI や HPF 等を駆使する必要性が生じる点には留意されたい。表 2 は、次期スーパーコンピュータシステムで利用可能なソフトウェア開発支援環境・ライブラリをまと

めたものである。サイバーメディアセンターでは、上述した MPI、HPF といった並列化技法を中心に、スーパーコンピュータ SX-ACE の利用方法、SX-ACE でのプログラム開発に関する講習会・情報提供、プログラム相談に関する体制を整備し、ユーザ支援をより一層強化していく所存である。9 月初旬には、次期スーパーコンピュータ SX-ACE の詳細説明会を開催予定であるので、ご都合のつく利用者の皆様には是非ご出席いただければ幸いである。

3. あとがき

このたびの次期スーパーコンピュータ SX-ACE の導入プロセスは、新しいデータセンターである IT コア棟の新設および吹田本館の改修とも関係し、吹田本館の既存システムの移設・移転や、IT コア棟竣工後の工事などの複雑な調整が発生した。本センターでは、提供する大規模計算サービスをできるかぎり停止させることないように努めたものの、9 月 12 日夕方より 10 月 13 日の期間、全システムのサービスを停止せざるを得ない状況となっている。主力であるベクトル型スーパーコンピュータについては、SX-9 を 9 月 12 日(金) 夕方に停止し、次期スーパーコンピュータ SX-ACE を 12 月 9 日(火)にサービスインするまで、長期にわたりシステムが利用できない状態が発生してしまう。SX-ACE については、導入が完了したシステムから試験運用を開始し、利用者様に無料でご利用頂ける期間を設け、システムの不在期間をできるかぎり短縮することを考えている。利用者の皆様方には大変ご迷惑をおかけいたしますが、次期スーパーコンピュータ SX-ACE の積極的なご利用、ひいてはサイバーメディアセンターへのご支援を何卒よろしくお願いいたします。

参考文献

- [1] TOP500 supercomputer site, <http://top500.org/>.
- [2] The Green 500, <http://www.green500.org/>.

利用規程等

・規程関係	127
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	127
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	129
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	131
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内規	131
・附表	133
大規模計算機システム ホスト一覧	133
SX-8R, SX-9及びPCクラスタのジョブクラス一覧	133
2013年度大規模計算機システム稼働状況	135

・ 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) 大学院の学生及びこれに準ずる者
- (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(前号に該当する機関を除く。)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) 日本国内に法人格を有する民間企業等に所属する者(前号に該当する者を除く。)で、別に定める審査に基づきセンター長が認めた者
- (8) 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。ただし、前条第6条の者は、この限りでない。

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、利用者番号を与えるものとする。

2 前項の利用者番号の有効期間は、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項に規定する利用者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、報告書の提出を求められることができる。

3 提出された報告書は、原則として公開とし、センターの広報等の用に供することができるものとする。ただし、利用者があらかじめ申し出たときは、3年を超えない範囲で公開の延期を認めることがある。

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 センターは、利用者が大規模計算機システムを利用したことにより被った損害その他の大規模計算機システムに関連して被った損害について、一切の責任及び負担を負わない。

第15条 センターは、大規模計算機システムの障害その他やむを得ない事情があるときは、利用者への予告なしに大規模計算機システムを停止することができる。

第16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17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あつては、この規程に基づき利用の登録があつたものとみなす。

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。

附 則

この改正は、平成23年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年5月10日から施行する。

附 則

この改正は、平成25年4月1日から施行する。

大規模計算機システム利用負担額一覧

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11条の規定に基づく負担額

(1) スーパーコンピュータ (SX-8R, SX-9, PC クラスタ Express 5800/53Xh) の負担額

	基本負担額	利用可能な計算機資源量					ディスク容量 制限
		シェア値	スーパーコンピュータ				
			SX-8R		SX-9		
			並列CPU数 制限	メモリ制限	並列CPU数 制限	メモリ制限	
コース	1万円	1	4	16GB	4(備考7)	128GB	50GB
	10万円	10	4	32GB	4	256GB	1TB
	50万円	50	8	-	8	512GB	2TB
	100万円	100	-	-	-	-	3TB
	200万円	260	-	-	-	-	4TB
	300万円	450	-	-	-	-	5TB
ディスク容量 追加オプション	1万円	ディスク容量100GB追加につき					
年間負担額	上記負担額で算出した合計額に0.4を乗じ、消費税(8%)を加えて得た額						

備考

- 1 年間負担額は年度の最初の登録時に算出する。
- 2 CPU・メモリなどの計算機資源は、全体の資源量に占める割合が基本負担額で設定されたシェア値に応じた値となるようフェアシェアスケジューリング機能により割り当てられる。なお、PCクラスタExpress5800/53Xhには基本負担額による制限を設けない。
- 3 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。
- 4 上記の基本負担額以外に50万円単位での申請を1,000万円を上限として受け付ける。その場合のシェア値及びディスク容量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。
ディスク容量制限は、50万円につき0.5TBを加算する。
- 5 大学院の学生及びこれに準ずる者が基本負担額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。
- 6 民間企業等に所属する者は、科学研究費補助金での利用又はHPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)で採択された課題での利用を除き基本負担額1万円は利用できないものとする。
- 7 基本負担額1万円でSX-9を利用する場合、CPUは専有利用できないものとする。
- 8 平成26年9月1日以降、計算機資源及びディスクは利用できないものとする。

(2)大規模可視化対応PCクラスタの負担額

	利用区分	基本負担額	利用可能な計算資源	
			割当可能GPU上限数	ディスク容量制限
共有コース (備考8)	500ノード時間まで	14,500円	-	500GB
	1,000ノード時間まで	29,000円		
	5,000ノード時間まで	145,000円		
	10,000ノード時間まで	290,000円		
	30,000ノード時間まで	870,000円		
	50,000ノード時間まで	1,450,000円		
	100,000ノード時間まで	2,900,000円		
占有コース (備考9)	1ノード月	32,000円/月	2	1TB
	1ノード年	320,000円/年		
	4ノード月	128,000円/月	8	1TB
	4ノード年	1,280,000円/年		
	8ノード月	256,000円/月	16	1TB
	8ノード年	2,560,000円/年		
	16ノード月	512,000円/月	32	2TB
	16ノード年	5,120,000円/年		
	24ノード月	768,000円/月	48	2TB
	24ノード年	7,680,000円/年		
	32ノード月	1,024,000円/月		
	32ノード年	10,240,000円/年		
ディスク容量追加オプション	ディスク用容量追加100GBにつき	1,000円/月		
		10,000円/年		
GPU利用オプション	GPU1枚利用につき	1,500円/月		
		15,000円/年		
負担額	上記負担額で算出した合計額に消費税(8%)を加えて得た額			

備考

- 負担額は年度の最初の登録時に算出する。
- 占有コースの場合、3か月以上の連続した期間で利用を受け付ける。
- 同じコースの中で利用区分の変更を行う場合は、基本負担額が増となる場合のみ受け付ける。
- 資源提供状況によっては、希望する資源の提供ができない場合がある。
- 共有コースの場合、コア単位で計算資源を他の利用者と共有し、ジョブ実行の優先度は基本負担額に応じて決まる。占有コースの場合、ノード単位で占有利用できる。
- 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 資源提供状況により割り当てる場合がある。
- 共有コースの利用区分以外に10,000ノード時間単位で申請を受け付ける。その場合の基本負担額は10,000ノード時間を基準に比例するものとする。
- 資源提供状況によっては、占有コースの利用区分以外に1ノード単位で申請を受け付ける場合がある。その場合の基本負担額は1ノードあたの基本負担額を基準に比例するものとし、割当可能GPU上限数の設定は、48を越えない範囲で1ノードにつき2倍の値とする。

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、利用者の研究活動における大規模計算機システムの有用性を確認できるようにす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、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3条第1号から第5号及び第8号のいずれかに該当する者とする。

第4条 利用者は所定の申請手続きを行い、センター長の承認を得なければならない。

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、利用者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 利用可能な1ジョブ当たりの計算機資源は次のとおりとする。

	スーパーコンピュータ		PCクラス
	SX-8R	SX-9	
計算機資源のシェア値	1		
並列CPU数制限	4	4	32
メモリ制限	16GB	128GB	120GB
経過時間制限	1時間	1時間	1時間
ディスク容量制限	50GB		

3 利用有効期間を超えた場合は、利用を停止するものとする。

第7条 利用者は、第5条に規定する利用者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。

附 則

この改正は、平成24年4月1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。）を置く。

第2条 相談員は、共同利用有資格者の中から高性能計算機システム委員会が候補者を推せんし、センター長が委嘱する。

第3条 相談員の任期は、当該委嘱する日の属する年度の末日までとする。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 相談員には、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6条 センターは、相談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7条 相談員には、第5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8条 この内規に定めるもののほか、必要な事項については、高性能計算機システム委員会で検討後、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。

附 則

この改正は、平成22年9月16日から施行し、平成22年7月22日から適用する。

附 則

この改正は、平成25年4月1日から施行する。

・ 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※ (SX-9、SX-8R、汎用コンクラスタ)	login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
ログインサーバ※ (大規模可視化対応 PC クラスタ)	xlogin.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
ファイル転送サーバ	ftp.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、汎用コンクラスタのジョブクラス一覧

計算機	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 CPU 数	利用可能 メモリ数	同時利用 可能ノード
SX-8R	DBG	1 時間 (10 分)	4 CPU	16GB	1 ノード
	SX8F (SXF)	24 時間	8 CPU	120 GB	1 ノード
	SX8L (SXL)	120 時間	32CPU (8CPU×4 ノード)	1000 GB (250GB×4 ノード)	4 ノード
SX-9	DBG9	1 時間 (10 分)	4 CPU	128 GB	1 ノード
	SX9	24 時間	64 CPU (16CPU×4 ノード)	4000 GB (1000GB×4 ノード)	4 ノード
汎用コン クラスタ	HCC-T	制限無し	128 CPU (2CPU×64 ノード)	256 GB (4GB×64 ノード)	64 ノード
	HCC-S	制限無し	64 CPU (2CPU×32 ノード)	128 GB (4GB×32 ノード)	32 ノード
				384 GB (12GB×32 ノード)	32 ノード
HCC-M	制限無し	16 CPU (2CPU×8 ノード)	32 GB (4GB×8 ノード)	8 ノード	

※CPU 数、主記憶の最大値は、[ノード毎の最大値] × [同時利用可能ノード数の最大値] で算出した値です。

※DBG クラス (SX-9 は DBG9 クラス) の経過時間に記載されている括弧内の数字は、CPU 時間の既定値と最大値です。

※HCC クラスの経過時間は無制限にしていますが、メンテナンスにより 2 週間毎に各ジョブクラスを 1 日サービス停止しますので、実質、経過時間は最大 12~13 日までとなります。

大規模可視化対応 PC クラスターのジョブクラス一覧

計算機	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 CPU 数	利用可能 メモリ数	同時利用 可能ノード
大規模 可視化対応 PC クラスタ	VCC	120 時間	200 CPU (20CPU×10 ノード)	3584 GB (64GB×56 ノード)	10 ノード
		336 時間	40 CPU (20CPU×2 ノード)	128 GB (64GB×2 ノード)	2 ノード
	VCC (HPCI 利用)	120 時間	1120 CPU (20CPU×56 ノード)	640 GB (64GB×10 ノード)	56 ノード
		336 時間	40 CPU (20CPU×2 ノード)	128GB (64GB×2 ノード)	2 ノード
	GVC	120 時間	100 CPU (20CPU×5 ノード)	320 GB (64GB×5 ノード)	5 ノード

※CPU 数、主記憶の最大値は、[ノード毎の最大値] × [同時利用可能ノード数の最大値] で算出した値です。

※VCC クラスは HPCI 利用と通常利用で同時利用可能ノード数が異なります。

※GVC は GPU 利用の為のクラスです。

※ジョブクラス一覧表は 2014 年 4 月時点のものになります。利用状況により変更することがありますが、ご了承ください。

2013 年度大規模計算機システム稼働状況

稼働状況

(単位:時間)

事項	月	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	合計	月平均
	稼働時間	計算サービス時間 (A1)	720:00	744:00	720:00	744:00	711:14	720:00	734:30	720:00	744:00	744:00	672:00	735:30	8709:14
	初期化・後処理時間 (A2)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:30	0:00	0:30	0:00	0:00	0:00	0:00	0:30	1:30	0:07
	業務時間 (A3)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
(A)	小計	720:00	744:00	720:00	744:00	711:44	720:00	735:00	720:00	744:00	744:00	672:00	736:00	8710:44	725:53
	保守時間 (B)	0:00	0:00	0:00	0:00	32:16	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	8:00	40:16	3:21
	故障時間 (C)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	その他の時間 (D)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	運転時間 (A+B+C+D)	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	735:00	720:00	744:00	744:00	672:00	744:00	8751:00	729:15
	稼働率 (A/(A+B+C+D)%)	100.00	100.00	100.00	100.00	95.66	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	98.92	---	99.55
	運転日数 (E)	30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30
	一日平均稼働時間 (A/E)	24:00	24:00	24:00	24:00	22:57	24:00	23:42	24:00	24:00	24:00	24:00	23:44	---	23:51

処理状況

項目	SX-8R				SX-9		合計		PCクラスタ	
	バッチ処理		会話処理		バッチ処理		件数	CPU時間 (時:分:秒)	バッチ処理	
	件数	CPU時間 (時:分:秒)	件数	CPU時間 (時:分:秒)	件数	CPU時間 (時:分:秒)			件数	経過時間 (時:分:秒)
4	2,496	66417:47:28	269	31:10:35	3,040	93710:17:31	5,805	160159:15:34	1,821	151741:40:05
5	2,630	68954:21:25	227	18:07:18	2,875	103100:28:41	5,732	172072:57:24	1,908	187782:53:00
6	2,776	82785:53:22	200	12:17:02	3,421	92316:26:59	6,397	175114:37:23	1,942	175358:12:01
7	2,800	89462:53:37	208	99:31:34	2,803	98895:32:50	5,811	188457:58:01	1,985	237771:20:40
8	2,443	78870:52:03	80	3:33:00	2,801	76819:54:44	5,324	155694:19:47	1,304	208638:08:11
9	2,482	77303:55:52	129	10:42:14	3,083	92605:22:49	5,694	169920:00:56	2,206	212326:14:41
10	3,183	89982:09:34	165	6:07:20	3,564	94729:09:49	6,912	184717:26:44	9,494	186691:41:46
11	3,005	91177:20:11	230	16:38:33	3,338	94244:51:44	6,573	185438:50:28	10,332	252409:23:40
12	3,277	99762:37:45	268	94:31:28	2,968	93772:00:42	6,513	193629:09:55	4,324	236242:07:03
1	2,548	90142:53:32	307	33:28:21	3,886	98406:25:46	6,741	188582:47:38	2,166	292880:21:01
2	2,762	83366:09:15	466	104:55:49	2,995	84202:29:23	6,223	167673:34:27	886	201749:46:30
3	2,043	84424:53:07	386	367:44:37	2,043	96441:15:22	4,472	181233:53:06	661	216767:34:49
合計	32,445	1002651:47:11	2,935	798:47:50	36,817	1119244:16:20	72,197	2122694:51:21	39,029	2560359:23:27

処理月	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3
SX-8RのCPU利用率(%)	57.79	57.98	71.87	75.25	69.38	67.15	76.32	79.16	84.38	76.45	77.65	72.60
SX-9のCPU利用率(%)	81.73	86.87	81.84	83.11	83.00	82.65	80.97	81.89	79.08	82.70	78.36	81.97

(注) SX-8R及びSX-9のCPU利用率は、次の計算式により算出している。

SX-8RのCPU利用率=(SX-8RのCPU時間/20ノードの合計サービス時間)/8*100

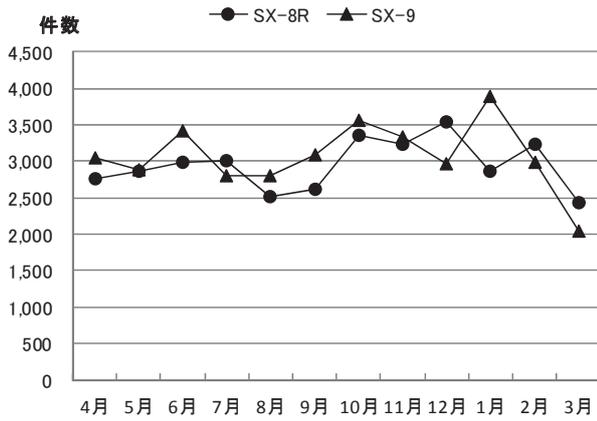
SX-9のCPU利用率=(SX-9のCPU時間/10ノードの合計サービス時間)/16*100

備考

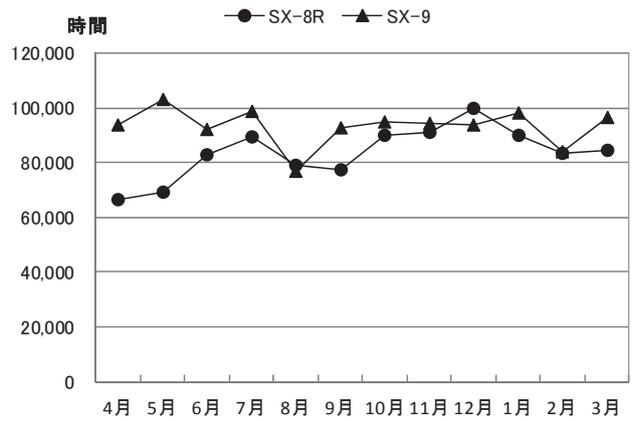
大規模計算機システムの構成

- ・ SX-8R : 20 ノード構成
- ・ SX-9 : 10 ノード構成
- ・ PC クラスタ (Express5800/120Rg-1) : 128 ノード構成
(Express5800/53Xh) : 575 ノード構成

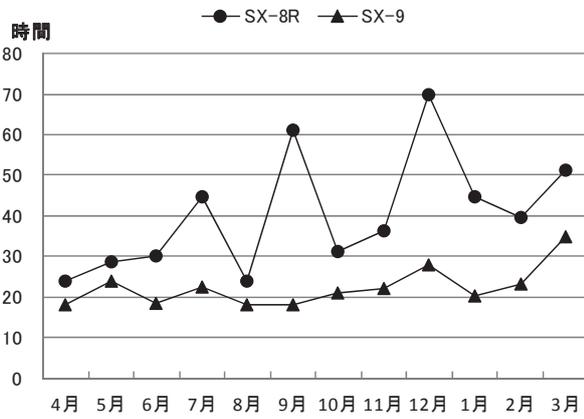
SX-8R, SX-9のジョブ件数



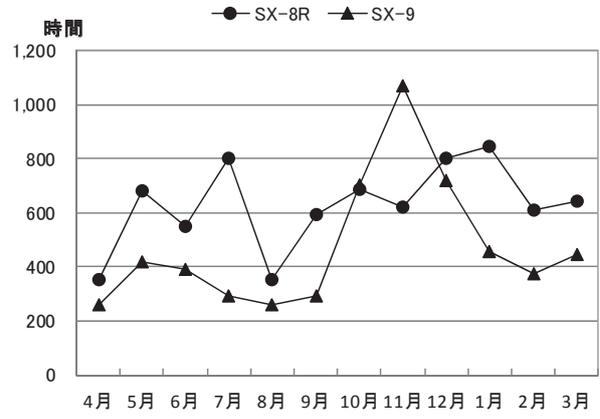
SX-8R, SX-9のCPU時間



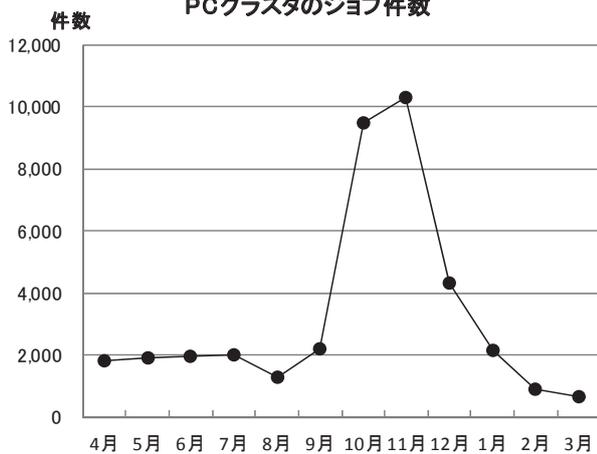
SX-8R, SX-9の平均ターンアラウンド



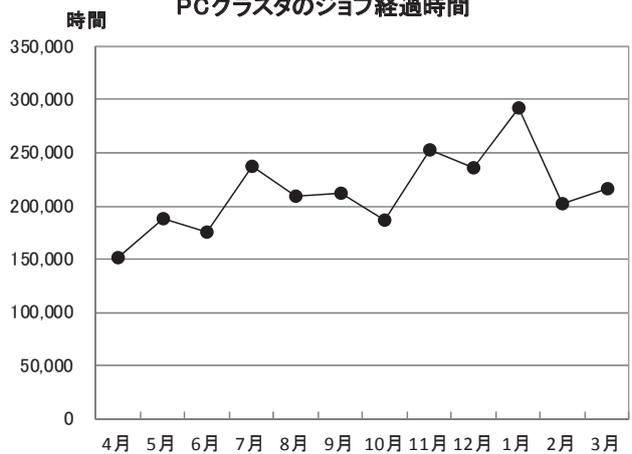
SX-8R, SX-9の最大ターンアラウンド



PCクラスタのジョブ件数



PCクラスタのジョブ経過時間



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 139
- ・大規模計算機システム利用案内 140

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「サイバーメディア HPC ジャーナル」を発行しています。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ています。）

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 Word2010 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 40、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、半角英数 Times New Roman
執筆者氏名 MS 明朝 10Point、なお、姓と名の間及び機関と研究科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、括弧も同様に全角
 - ・ 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 Word 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。
zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp
なお、送信の際、件名を「HPC ジャーナル原稿」と入力くださるよう、お願いします。
4. 電子メールの容量が 5MB 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総務係

【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。

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、広報	情報推進部情報企画課 総務係（本館1F） 電話 06-6879-8804 zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp	8:30～12:00	閉
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（本館1F） 電話 06-6879-8980,8981 zyosui-kikaku-kaikei@office.osaka-u.ac.jp		
利用案内、受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用講習会受付、 計算機マニュアル・図書の閲覧、貸出	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館2F） 電話 06-6879-8808,8812 system@cmc.osaka-u.ac.jp	13:00～17:15	館
利用方法の問い合わせ 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場合は、ホームページでお知らせします。

・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 の変更等が行えます。）	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。
----------------------------	---

広報委員会委員

松岡 茂 登 (委員長、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)
吉野 元 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
降籬 大 介 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
義久 智 樹 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
伊達 進 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
江原 康 生 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
伊藤 雄 一 (大阪大学 クリエイティブユニット)
岩崎 琢 哉 (大阪大学 大型教育研究プロジェクト支援室)

(お願い)

サイバーメディア HPC ジャーナルは、本センター利用者（利用登録者）の皆様に配布しています。お近くの研究者・大学院生の方にも、本冊子をご回覧くださるようお願い申し上げます。

大阪大学サイバーメディア HPC ジャーナル No. 4
2014 年 7 月発行

編集 : 大阪大学サイバーメディアセンター広報委員会

発行 : 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: 06-6879-8804
URL: <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

印刷 : 阪東印刷紙器工業所

表紙デザイン : 阿部 浩和 (大阪大学)

大阪大学サイバーメディアHPCジャーナル
High Performance Computer Journal