CYBERMEDIA HPC JOURNAL Cybermedia Center, Osaka University No. 7

July, 2017.

目 次

特	集:HPCI を利用した研究成果 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	1
	・スパコンに期待する結晶性高分子材料の基礎メカニズム解明 ・・・・・・・・・・・・・	3
	萩田 克美	
大規	現模計算機システム利用者研究報告 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	13
	・固液界面における和周波発生分光スペクトルの第一原理シミュレーション ・・・・・・	15
	大戸達彦	
,	・早期宇宙における巨大ブラックホール種の形成シミュレーション ·····・·・·・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	21
	・ キロテスラ級磁場下における超高強度レーザープラズマ相互作用の物理 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	25
	畑 昌育	
	 格子量子色力学を使った高密度物質の研究 	29
	河野 宏明	25
	・ (加) (小) (小) (元) (元) (市) (元) (中) (中) (中) (中) (中) (中) (中) (中) (中) (中	33
	利女 碱、 压膝 桥 、 敞开 工力、 田弧 陸、 日沖 轩彦	
بر		41
Ľ.	ノメ 一 秋口	41
	・2010 年度入規模計算機シスケム利用による研究成果、論文一見 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	43
		57
	・ $ \pi 22 $ 回入一ハーコンヒューティンクコンテスト(SuperCon2016)報告および	
	第23回スーパーコンビューティンクコンテスト(SuperCon2017)告知 ······	63
	 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	65
	・2017 年度大規模計算機システム利用講習会 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	67
	・2016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 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	68
	・2017 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況 ・・・・・・	76
	・2017 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 ・・・・・・・・・・	77
	・2017 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	78
,	・大規模計算機システム Q&A ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	79
利用	用規程等 ······	83
	· 規程関係 ·····	85
	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 ・・・・・	85
	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 ・・・・・・	87
	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 ・・・・・・	89

•	附表 ••••••••••••••••••••••••••••••••••••	90
	大規模計算機システム ホスト一覧 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	90
	スーパーコンピュータ SX-ACE, PC 及び汎用コンクラスタのジョブクラス一覧 ・・・・	90

- - ・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 ・・・・・・ 95
 - ・大規模計算機システム利用案内 ・・・・・ 96

HPCI を利用した研究成果 — 特 集

スパコンに期待する結晶性高分子材料の基礎メカニズム解明

萩田 克美 防衛大学校 応用物理学科

1. はじめに

スーパーコンピューター(以下、スパコン)は、 1976 年に登場したベクトル計算機 Cray-1 以降、ム ーアの法則(1年半で2倍)に従うかのように計算 処理性能が向上するとともに、多くの基礎的な科学 的成果創出に大きく貢献している。現在、古典分子 動力学(MD)シミュレーションのスパコン大規模計 算は、高分子系材料や分子生物などの研究に欠かせ ないツールとなっている。従来の理論的取り扱いや 実験観察では詳細に調べることができない事柄を、 計算シミュレーションで明らかにすることができ る。高分子物理学の視点では、高分子の最大の特徴 は、長い鎖状の構造を有することである。長い鎖が 互いに絡み合うことで粘弾性を発現し、ゴムのよう な物質が実現されている。1970年代に土井、 Edwards、de Gennes らによるレプテーション理論⁽¹⁾ で、高分子の溶融体の挙動に対する大枠の説明が与 えられた。この理論のポイントは、周りに存在する 他の鎖の束縛により、鎖が自分自身の周りを這うよ うに運動すると考えることである。この理論に従え ば、化学的な詳細によらず、長い鎖状のものは、互 いに絡み合い、遅い緩和を示すと考えられ、シミュ レーションによる実証が可能と期待できる。スパコ ン登場以降、ドイツの Binder らのグループを中心 に、この問題の解決に向け、格子モンテカルロ法や ばねビーズ模型の MD 法によるシミュレーション 研究が精力的に進められてきた。2000年頃の著者 らによる大規模な格子上のモンテカルロ分子シミ ュレーション^(2,3)で、終止符が打たれた。このとき、 スパコンが研究の武器であった。

多くの高分子材料は、溶融状態から冷却されて固 くなった状態で実用に供されている。(なお、高分 子材料の代表格であるゴムは、溶融状態にあり、架 橋により構造を維持する軟らかい状態である。)こ の固くなった状態は、ガラス化や結晶化と密接に関 係している。高分子材料の結晶化は、局所的に鎖が 配向し、結晶構造をとることである。(なお、蛋白 質の結晶化は、蛋白質が規則的に並ぶことであり、 局所的に配向する高分子材料とは若干様相が異な る。)一方で、ガラス化とは、分子運動が凍結し、動 きがなくなる状態である。徐々に冷却しガラス化さ せると、流動性を失うとともに、体積変化が緩やか になることが知られている。鎖長が長い高分子の場 合、結晶とは異なったアモルファスな構造を取る。 現実の高分子材料では、結晶化やガラス化が競合 し、結晶状態とアモルファス状態が共存し、複雑な 物性を示すことが知られている。特に、高分子材料 の破壊挙動には、大きな影響がある。

これらの基礎メカニズムを解明するために、多く の研究がなされている。その中で、最も単純な高分 子として、ポリエチレンの結晶化挙動が、基礎科学 として、長年、多くの研究が行われている。ポリエ チレンは、図1に示すように、エチレン(C₂H₄)が 重合された分子である。



(3) ポリエチレンのBall-Stick描画



図1 ポリエチレンの概要

ポリエチレンの結晶化挙動は、階層構造を持つこ とが知られている⁽⁴⁾。

~1nm: (原子レベルの)結晶構造

- ~20nm: 板状結晶 (ラメラ層内)
- ~1μm: ラメラ層+アモルファス層の積層

~100µm: 球晶

~1mm: 球晶の集合体

原子のスケール(1nm以下)においては、局所的 に結晶構造をとっている。多数本のポリエチレン 鎖の系でも、1本鎖の場合と同じように、ポリエチ レン鎖は折りたたむ振る舞いを示す。それにより 層状の板状結晶が形成される。その板状結晶の厚 みは、10~20nm程度である。板状結晶の中心部は 結晶化の度合いが高く、鎖が曲げられている周辺 部は結晶化の度合いが低い。この層状の板状結晶 は積層し、ラメラ構造を形成する。このとき、層間 の結晶化の度合いが低い部分は、アモルファス構 造となり、アモルファス層と呼ばれる。µmスケー ルでは、球晶と呼ばれる構造を取ること知られて いる。この直径は、100µmのオーダーである。さ らに、球晶の集合体が、mmスケールの構造を形成 している。

現時点での分子シミュレーションのターゲット は、板状結晶やラメラ層のスケールである⁽⁵⁾。「こ の板状結晶がどのように成長していくのか」「破壊 挙動にどのように影響するか」などのメカニズム 解明が、分子シミュレーションに期待されている。 特に、現実材料での物性発現メカニズムにおける 分岐鎖の役割を、直接的に解明できることが、分子 シミュレーションの潜在的強みである。

分子シミュレーションによる取り組みとして、 1本のポリエチレン直鎖の折りたたみは、2000 年 頃に盛んに研究されている⁽⁶⁾。最近では、樋口らが、 ポリエチレンの直鎖の粗視化分子シミュレーショ ンで、意図的に結晶層とアモルファス層を配置し た系を延伸させ、アモルファス層から破壊する様 子を報告している⁽⁷⁾。これは、結晶層がアモルファ ス層に比べて強固であることに由来すると考えら れる。

現実の工業材料用のポリエチレンでは、鎖は完 全な直鎖ではなく、短い部分鎖(炭素数が1~7程 度)を持つ分岐した形状をしている。直鎖に近い HDPE (高密度ポリエチレン、旧 JIS K6748: 1995 で密度 0.942 g/cm³ 以上)から、分岐を多く含む LDPE (低密度ポリエチレン、旧 JIS K6748: 1995 で 密度 0.91~0.93 g/cm3)が製造され、多彩な物性をも とに、多くの応用製品が作られている。LDPE は結 晶化の度合いが低く、柔らかい。一方で、HDPE は、 ラメラ状の結晶構造が形成される。破壊に強いも のとして、従来の LDPE に比べ分岐が少ない L-LDPE (リニア-低密度ポリエチレン、JIS K6899-1: 2000) がある。L-LDPE は、ラメラ層構造を形成す るとともに、ラメラ層とラメラ層の間のアモルフ ァス層に分岐が局在しつつ、互いに絡むことで機 械的物性を良くしている。なお、NMR による構造 解析では、HDPEは、炭素原子1000個あたり、1~ 5 の短い分岐鎖を持ち、L-LDPE では、10~30 と知 られている。短い分岐鎖は、炭素数で3~7程度で ある。

分岐鎖の効果として、ガラス転移温度や結晶化し 始める温度が、低下することが知られている。また、 分岐鎖が多い場合は、分岐鎖がアモルファス層に局 在するために、図2に示すように、結晶層が薄く、 アモルファス層が厚くなると考えられている。これ らの挙動の直接的な検証は、大規模な分子シミュレ ーションに期待される事柄である。さらには、高分 子のトポロジー制御による物性の改良など、シミュ レーションによる予測設計は、工業的な応用として 期待されるところである。本稿では、分岐したポリ エチレン鎖の破壊の理解に向けた準備的シミュレ ーションについて、初歩的な内容から紹介する。



図2 L-LDPE と HDPE の概要

2. 古典分子動力学シミュレーションの概要

古典分子動力学(MD)計算は、高分子を構成する原 子1つ1つの運動をシミュレートする計算手法で ある。与えたポテンシャル関数(力場)に対して、 ニュートン方程式を数値的に解く手法である。電子 の状態を詳しく計算する量子化学計算に比べて、計 算コストの軽い手法であり、現在では、数億原子の システムサイズを扱うことも可能である。

ポテンシャル関数としては、下式に示すように、 「結合力」と「非結合力」の項から構成される。

$$U(r) = \sum_{bond} k_b (b - b_0)^2 + \sum_{angle} k_\theta (\theta - \theta_0)^2$$
$$+ \sum_{dihedral} k_\phi (1 + \cos(n\phi - \delta))^2 + \sum_{improper} k_{\phi_i} (\phi_i - \phi_{i,0})^2$$
$$+ \sum_{nonbond} \varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_{nonbond} \frac{q_i q_j}{\varepsilon_q r_{ij}}$$

この非結合力には、短距離力と、静電相互作用の 長距離力がある。大規模な超並列計算では、この長 距離力に対する扱いが重要である。基本的には、規 定した数値精度を近似する計算手法が用いられる。 PME 法、MSM 法、FMM 法などが知られ、並列プ ロセス数に対するスケーラビリティが異なる。最近 は、PP-PME split という形で、粒子間短距離力と静 電相互作用の計算担当ノードを分割し、長距離力計 算を担うノード数を削減し、全体性能を高める手法 が用いられている。本計算では、静電相互作用を扱 わないため、長距離計算に関する詳細は、割愛する。

ポテンシャル関数の係数は、量子化学計算で得た 近距離の静的構造等を再現するように決定するな どの方法が一般的である。汎用的なパラメータセッ ト(汎用力場)としては、DREIDING⁽⁸⁾、Amber

(GAFF⁽⁹⁾)、Charmm⁽¹⁰⁾がよく用いられている。こ れらの汎用力場は、大まかな近似というべきもので あり、個々の材料特性の再現精度を高めるために、 様々な力場の開発・改良が進められていることを付 記しておく。

ポリエチレンの結晶化の研究では、CH₂を単位と した DREIDING 粗視化ポテンシャルがよく用いら れる。ここで、質量 14 の粒子が、基本単位である。 この粗視化 MD のパラメータは、下記の通りであ る。

 k_b =350 [kcal/Å²], b_0 =1.53 [Å]

 k_{θ} =50 [kcal/rad²], θ_0 =109.471 [deg]

 $k_{\phi}=1.0$ [kcal], n=3, $\delta=0$

ε =0.1984 [kcal], σ =3.6239 [Å]

本研究の粗視化 MD シミュレーションでは、クーロ ン力の寄与は無視し、時間刻みは 5fsec、非結合力 のカットオフ長は 8.7[Å]とした。このような古典 MD の大規模な並列計算は、LAMMPS⁽¹¹⁾、 Gromacs⁽¹²⁾等の汎用パッケージを利用することで、 簡単で効率よく実施することができる。国産アプリ としては、理研 AICS が開発した GENESIS⁽¹³⁾など がある。

3. 準備的なシミュレーション

3.1 1本のポリエチレン鎖の折りたたみの確認

初歩的な確認として、1000 個の炭素原子(正確に は、CH₂ユニット)が連なったポリエチレン直鎖の 折りたたみ挙動を確認した。藤原らの先行研究⁽⁵⁾と 同様の冷却プロセスとした。800K で初期緩和計算 を行い、1nsec の計算後に、50K 降温させて 1nsec 計 算する過程を、100K まで繰り返した。MD ソルバ ーの比較検討のために、LAMMPS、Gromacs(単精 度、倍精度)、GENESIS のそれぞれで独立に、温度 体積一定(NVT)の計算を実施した。なお、LAMMPS と Gromacs の温度制御法は Nose-Hoover 法であり、 GENESIS は、BUSSI 法である。図3に、100K まで 降温させ自発的に折りたませた1本鎖のスナップ ショットを示す。



図3 1本鎖の折りたたみの状況

見た目の差はあるものの、数値誤差の影響であり、 力場が同じであれば、アプリ間の差は小さいと考え られる。なお、ここでは詳細を示さないが、炭素原 子の GAFF 力場パラメータを粗視化したポテンシ ャルと見なして LAMMPS で計算した場合、折りた たみの状況は大きく異なるものであった。

3.2 急冷による部分結晶化の確認

多数本のポリエチレン直鎖が、結晶化することを 確認するために、1000 個の粗視化炭素原子が連な った鎖を125本含む系の予備計算を実施した。800K で十分に初期緩和計算をした後に、800K->500K で は、50K 毎に降温させて 1nsec 計算し、500K->300K では、5K 毎に降温させて 1nsec 計算する過程を実 施した。そのスナップショットを、図4に示す。

320K 以下で、結晶化した部分を見ることができ る。結晶化挙動は、降温速度に依存することが知ら れているので、375K->300K を 5K 毎に降温させ 10nsec 計算する過程を実施した。その結果を、図5 に示す。330K 以下で、結晶化した部分が観察され た。

さらにゆっくりした降温過程の計算ために、 Gromacs(単精度)での計算を行った。5K/10nsec で降温させた結果を図6に示す。5K/10necsで降温 させた場合、335K以下で結晶化した部分が観察さ れた。LAMMPS と Gromacs で、結晶化する温度に 差異が見られた。5K/100nsec でゆっくりと降温させ た場合の結果を、図7に示す。340K で結晶化の挙 動が観察された。また、降温速度が遅いほど、大き な結晶化領域として観察されることがわかる。この ことから、結晶化には、温度が一定値以下であると ともに、鎖が再配置して秩序化するために高分子が 動くことが重要であることが分かる。また、それぞ れの結晶領域は様々な所から生じ、その軸方向はラ ンダムな向きに成長することが分かる。なお、周期 境界条件下では、衝突した結晶の軸方向は、最終的 に周期境界条件の制約を受けることが分かる。



図4 急冷させたポリエチレン直鎖のスライス像 スライスの厚さは 3nm である。



図 5 冷却したポリエチレン直鎖のスライス像 スライスの厚さは 3nm である。375K->300K を 5K/10nsec で降温。



図 6 冷却したポリエチレン直鎖のスライス像 スライスの厚さは 3nm である。375K->300K を 5K/10nsec で降温。Gromacs で計算実施。

(1) 5K/100nsec, 335K, Gromacs (2) 5K/100nsec, 340K, Gromacs



図7 冷却したポリエチレン直鎖のスライス像ス ライスの厚さは 3nm である。375K->300K を 5K/100nsec で降温。Gromacs で計算実施。

4. ポリエチレンの結晶化挙動の可視化観察

前章までで、降温させたポリエチレンは、様々な 所から結晶化が始まり、結晶化領域が衝突する振る 舞いがわかった。より大規模かつより長時間の計算 を実施すれば、結晶化領域が融合し、ラメラ層を形 成すると期待される。しかしながら、このような計 算の実現には、ミリ秒ないし秒単位の長時間計算が 必要と考えられ、現時点では、容易に実現できない。 この実現は、将来のスパコンに期待する事項である。

本章では、アモルファスな様相から、鎖が折りた たみ挙動を介して、自発的にラメラ層を形成する様 子の観察を考える。また、ラメラ層が一定方向に形 成するように、z軸方向へ一軸延伸でマクロな配向 を与え、その後、静置させて観察することとした。

1本の鎖が 1000 個の炭素原子で構成されるポリ エチレン鎖を 1000 本用意し、NPT 計算で 345K ま で降温(5K/Insec)させた後に、10nsec で 100%の 延伸を NVT 計算で行い、その後に、静置させた。 その結果を図8に示す。なお、この系のサイズは、 1辺 30nm 程度の立方体である。結晶の軸が z 方向 に向きやすいことから、パッキングの特徴量で色づ けを行った。黄色い部分は、三角格子状のパッキン グの傾向が強いことを表している。ここでは詳細を 示していないが、340K で静置させた場合も、同様 の結果を得た。なお、350K 以上では、50nsec 経過 後でも結晶化した部分が観察されなかった。より長 時間の静置が必要であると考えられる。

1本の鎖の挙動に着目すると、図8で太く表示し

た1本の鎖のように、比較的短時間で、きれいに折 りたたむ鎖もある。複数の結晶化領域にまたがり、 綱引きのように均衡した鎖もある。長時間の計算で の挙動は興味深いが、将来の課題である。

自発的に形成したラメラ層間の間隔が、実験で知 られる値の10~20nm程度であるかを確認するため に、z方向のセルサイズを2倍とした系も計算した。 その結果を図9に示す。図8と同様に、z方向に、 10nm 程度の大きさの結晶化領域を形成した。ラメ ラ層間隔については、傾向は見られるが、断定する のは難しい。これも将来の課題である。



図8 延伸後に静置したポリエチレンの結晶化領 域形成の様子。スライスの厚さは 8nm である。図の 左上に延伸後からの経過時間を表示。ある1本の鎖 のみを太く表示している。



図 9 延伸後に静置したポリエチレン直鎖のスラ イス像。スライスの厚さは 8nm である。延伸後 200nsec 経過後の結果。(左) 340K、(右) 345K。

5. ポリエチレンの結晶化挙動のトポロジー効果の 予備検討 ~環状鎖と分岐鎖の効果~

ポリエチレンの結晶化のプロセスにおいて、分岐 などのトポロジー効果は大きいと考えられる。トポ ロジー効果の確認として、最初に、環状鎖を調べた。 環状鎖は、末端を持たないことから、ガラス転移温 度は、線状にくらべ大きくなることが期待される。 それにより、結晶化が観察される温度も高くなる。 380K まで、線状の鎖の場合と同じ降温過程とし、 375K->300K は、5K/1nsec と 5K/10nsec で降温させ た。LAMMPS で計算した結果を図10に示す。 5K/1nsec の場合、330K 以下で、5K/10nsec の場合、 345K 以下で、結晶化した部分が観察された。環状 の場合に、結晶化する温度が高くなることを確認し た。

さらに、ゆっくりした冷却の評価として、Gromacs (単精度)で、5K/10nsecと5K/100nsecの計算を行 った。その結果を、図11に示す。5K/10nsecの場 合、350K付近で、5K/100nsecの場合、360K付近で、 結晶化した部分が観察された。環状鎖の結晶化した 温度は、線状の結晶化した温度よりも高い挙動を示 していた。この挙動は温度プロセスやアプリによら ず同様の傾向であった。



図10 冷却した環状ポリエチレンのスライス像。 スライスの厚さは、3nm である。375K->300K を 5K/1nsec と 5K/10nsec で降温。



図11 冷却した環状ポリエチレンのスライス像。 スライスの厚さは、3nm である。375K->300K を 5K/10nsec と 5K/100nsec で降温。Gromacs で実施。

分岐鎖の効果を調べるため、n=3,6 個の炭素原子 で構成される部分鎖を側鎖として、k=4 本の側鎖を ランダムに配置した系について、先の線状鎖や環状 鎖と同様に、降温させて、結晶化の挙動を確かめた。Gromacs で、5K/10nsec と 5K/100nsec で計算した結果を図12と図13に示す。



図12 分岐ポリエチレン(n=3,k=4)のスライス像。 スライスの厚さは、3nm である。375K->300K を 5K/10nsec と 5K/100nsec で降温。Gromacs で実施。



スライスの厚さは、3nm である。375K->300K を 5K/10nsec と 5K/100nsec で降温。Gromacs で実施。

5K/10nsec の場合、335K で結晶化の挙動が見られ た。5K/100nsec の場合、n=3 は、335K、n=6 は、330K で結晶化の挙動が見られた。分岐鎖の効果により、 直鎖の場合に比べて、結晶化を示す温度が低下する ことを確かめた。なお、LAMMPS で、5K/10nsec の 降温過程を計算した場合も、315K で結晶化の挙動 が観察され、直鎖の場合に比べて、結晶化を示す温 度は低かった。結果的に、Gromacs で計算した 5K/10nsec と 5K/100nsec の降温過程の計算結果は、 図 1 4 のように整理でき、トポロジーの効果を明確 に見て取ることができた。



図14 結晶化を示した温度の整理。●印は結晶化
 を確認、×印は確認できずの意味。降温速度は
 (左) 5K/10nsec(右) 5K/100nsec。Gromacs。

本章で実施した計算は、あくまでも、予備的なも のである。鎖の再配置運動性に関わる緩和時間と、 降温速度は密接に関連している。様々な温度に急冷 させて、長時間静置する計算などで、評価する必要 がある。また、結晶化した領域の判別についても、 定量的な評価法の開発検討が必要である。これらの 詳細の検討は、今後の課題である。

6. 分岐を持つポリエチレンの結晶化挙動の検討

ポリエチレン材料における結晶化挙動を調べる ために、短い側鎖をもつ分岐鎖の系の計算を行っ た。特に、ラメラ結晶化した際の分岐側鎖の空間分 布に着目した。1本の鎖に、n個の炭素原子からな る側鎖をランダムな位置に k 本配置した分岐鎖を 考えた。ここで、nは 3,6とし、kは 2,4,10,20 とし た。また、1本の分岐鎖の炭素原子数は、側鎖を含 めて、1000 となるようにした。この分岐鎖が 125 本 ある系を扱った。前章までと同じように、320K ま で 5K/1nsec で降温させ、その後、60nsec の計算を 実施した。n=3 と 6 の結果を図15と図16に示す。 ここで、分岐した側鎖を大きな赤い球で表示した。



図15 結晶化したポリエチレン中での側鎖の分 布の様子。3nm でスライスした像。赤色の球は、側 鎖を表している。1つの側鎖の炭素原子数 n=3。



図16 結晶化したポリエチレン中での側鎖の分 布の様子。3nm でスライスした像。赤色の球は、側 鎖を表している。1つの側鎖の炭素原子数 n=6。 側鎖の本数 k が、2 や4 の場合、側鎖はラメラ結 晶層の外側、すなわち、アモルファス層に押し出さ れていた。k=10 の場合、側鎖が短い n=3 ではラメ ラ結晶層を形成しているが、n=6 では側鎖が存在し ているアモルファス層が広く、結晶層が海島構造の 島の様相を示していた。k=20 の場合、n=3 でも島の ような振る舞いであった。n=6 で本数 k が大きい場 合は、アモルファス層の割合が多く、L-LDPE や LDPE に対応していると考えられる。L-LDPE や LDPE が、HDPE に比べ脆い材料であることに対応 すると考えられる。

7.まとめと今後の課題

部分的に結晶化したポリエチレン分岐鎖の破壊 挙動などの基礎メカニズム解明を目的として、多数 本のポリエチレン鎖の結晶化挙動について、粗視化 分子動力学シミュレーションで準備的計算を実施 し、それらの検討結果を紹介した。マクロに緩やか な配向を与えた環境下で、ポリエチレン鎖が動きな がら折りたたんでいくことで自発的に配置秩序を 形成させ、結晶化していく様子を観察した。また、 側鎖を持つ分岐鎖における、側鎖長や側鎖数に応じ たラメラ結晶領域の構造の違いも確かめた。

今後は、6章までの方法で計算した分岐を持つポ リエチレンについて、延伸させた場合の破壊挙動を 詳しく調べる予定である。また、分岐ポリエチレン に関するMD計算の文献^(14,15)との詳細な比較を行 う予定である。Yeh らのポリエチレン直鎖の延伸破 壊の MD 計算では、アモルファス層でのボイド形 成が延伸速度に依存することを報告している⁽¹⁶⁾。分 岐鎖の効果として、遅い延伸速度でもボイドが発生 すると考えられる。また、分岐がある場合、力が局 所的に集中することで、鎖が切断することも予想さ れる。現実のポリエチレン材料である HDPE、L-LDPE、LDPE の破壊特性の違いの基礎メカニズム を、スパコンでの大規模シミュレーションで解明し たいと考えている。 謝辞

ポリエチレンの結晶化に関する粗視化 MD シミ ユレーション研究は、京都工芸繊維大学 藤原進 先生と鶴岡工業高等専門学校 岩岡伸之 先生との 共同研究として実施しており、議論・アドバイス に感謝いたします。計算の実施等にあたり、

JHPCN 課題を通じ、大阪大学サイバーメディアセ ンターをはじめとする JHPCN スパコンを利用させ ていただき感謝いたします。GENESIS を用いた京 コンピュータでの計算は、課題番号 hp160089 にお いて、初期緩和計算用の高速なアプリ候補の利用 検討として実施しました。計算実施にあたり、 様々の方に種々のご支援をいただいたことに感謝 いたします。

参考文献

- M. Doi, S. F. Edwards, "The Theory of Polymer Dynamics", Oxford University Press, Oxford, (1986).
- (2) K. Hagita, H. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. 71 (2002) 673.
- (3) K. Hagita, H. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. 72 (2003) 1824.
- (4) 戸田 昭彦, "高分子結晶の3次元形態:単結晶と
 球晶",繊維と工業, 63 (2007) 395-400.
- (5) T. Yamamoto, J. Chem. Phys. 139 (2013) 054903.
- (6) S. Fujiwara and T. Sato, J. Chem. Phys. 107 (1997) 613.
- (7) Y. Higuchi, M. Kubo, *Macromolecules* (2017) in press. DOI: 10.1021/acs.macromol.6b02613
- (8) S. L. Mayo, B. D. Olafson, W. A. Goddard, J. Phys. Chem. 94 (1990) 8897–8909
- (9) J. Wang., R. M. Wolf, J. W. Caldwell, P. A. Kollman, and D. A. Case, J. Comp. Chem. 25 (2004) 1157-1174.
- (10) B. R. Brooks, R. E. Bruccoleri, B. D. Olafson, D. J. States, S. Swaminathan, and M. Karplus., *J. Comp. Chem.* 4 (1983) 187-217.
- (11) S. Plimpton, J. Comp. Phys., 117 (1995) 1-19.
- (12) H. J. C. Berendsen, et al., Comp. Phys. Comm. 91 (1995) 43-56.
- (13) J. Jung, T. Mori, C. Kobayashi, Y. Matsunaga, T.

Yoda, M. Feig, and Y. Sugita, *WIREs Comput. Mol. Sci.* **5** (2015) 310-323.

- (14) X. Zhang, Z. Li, Z. Lu, and C. Sun, J. Chem. Phys. 115 (2001) 3916.
- (15) R. Gao, X. He, Y. Shao, Y. Hu, H. Zhang, Z. Liu, B. Liu *Macromol. Theory Simul.* 25 (2016) 303–311.
- (16) I. C. Yeh, J. W. Andzelm, G. C. Rutledge *Macromolecules* 48 (2015) 4228-4239.

大規模計算機システム利用者 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。

 ・固液界面における和属 大戸 達彦 フ 	閉波発生分光スペクトルの第一原 ト阪大学大学院基礎工学研究科	理シミュレーション ・・・・・・15
 ・早期宇宙における巨力 長峯 健太郎 カ 	トブラックホール種の形成シミュ ト阪大学大学院理学研究科	$ u - \dot{\nu} \exists \nu \cdots 21 $
 ・キロテスラ級磁場下に 畑 昌育	こおける超高強度レーザープラズ 大阪大学レーザー科学研究所	マ相互作用の物理 ・・・・・・・ 25
・格子量子色力学を使- 河野 宏明 何	った高密度物質の研究 ・・・・ 左賀大学大学院工学系研究科	••••••••••••••••••••••
 ・流体力学的に見た構成 野崎 一徳、杉山 野原 幹司、阪井 畠中 耕平、中川 苅安 誠 佐藤 耕一 	済時の鼻咽腔閉鎖機能 ・・・・ 千尋、玉川 裕夫 丘芳、山城 隆、古郷 幹彦 真智子	 、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、、

固液界面における和周波発生分光スペクトルの第一原理シミュレーション

大戸 達彦 大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻

1. はじめに

固液界面は、不均一触媒反応や電極反応の起こる 舞台である。固体と分子の相互作用はしばしば反応 活性障壁を下げる効果を持ち、化学反応が溶液中よ りも加速されることがある。そうした固液界面の中 で、酸化チタン/水界面は光触媒作用の発見[1]以来、 最も盛んに研究されている界面の一つである。酸化 チタン表面は、光触媒作用だけでなく、紫外線照射 による超親水化[2]や、セルフクリーニングといった 効果も持つ。触媒反応は、酸化チタン表面に接する わずかな量の水分子が引き起こすため、界面での微 視的な分子構造を知ることは、より効率の良い光触 媒の設計に結びつく。

固液界面の分子構造を知るために、全原子分子動 力学(MD)シミュレーションが広く行われている。 全原子 MD シミュレーションでは、原子に働く力を 何らかのモデルにより記述した上でニュートン方程 式を解き、時間に対する各原子の位置(トラジェク トリ)を得ることで、種々の物理量を計算すること ができる。通常は、原子を質点と考えた上で、原子 間のポテンシャルをモデル化する。例えば原子間が 共有結合で結ばれていれば、その伸縮振動数に対応 する曲率を持つ調和型のポテンシャル、化学結合が なく、van der Waals 相互作用が働くのみであれば Lennerd-Jones ポテンシャルを設定する、といった具 合である。さらに、原子の位置には点電荷を置く。 水のように極性が大きい分子を扱う場合は、点電荷 の量が周囲の環境に応じて変動することを許容す る、分極効果を取り入れることも多い。このような モデル化は多くの分子に関してはよく機能するが、 固体のように電子が非局在化している場合は点電荷 と2体相互作用による近似があまりうまくいかず、 モデル化に工夫が必要となる。

適当なモデルを構築し、シミュレーションを行え

ば、コンピュータ上では平均的な分子の配向、ダイ ナミクスを知ることができる。しかし、そのシミュ レーションを信頼に足るものとするためには、実験 的にも観測可能な物理量を計算し、一致するかどう かを議論することが重要である。界面に存在する分 子はバルクに比べて非常に少数であるため検出は困 難であるが、和周波発生(SFG)分光という手法を用い れば、界面の分子に関する有益な情報を得ることが できる[3]。 SFG 分光では、赤外線と可視光を同時 に照射し、2次の非線形応答によって発生した、和 周波を持つレーザーを検出する。2次の非線形応答 は等方的なバルクからは発生しないため、対称性の 破れた界面近傍わずか数 nm の範囲に存在する、赤 外・ラマン同時活性の振動モードを検出することが できる。さらに、位相敏感な検出法[4]を用いること により、2次の非線形応答関数の虚部を求めること で、双極子モーメントの向きをも知ることができる。 SFG 分光スペクトルをシミュレーションして実験と 比較することで、シミュレーションが現実を正しく 反映したものかどうかを検証すると同時に、実験で は直接見ることのできない分子・原子レベルの構造 に関する知見を得ることができる。我々は、モデリ ングの難しい固液界面に関しても SFG スペクトル をシミュレーションできるよう、手法開発に取り組 んできた。

本稿では、はじめに酸化チタン/水界面に対して界 面での誘起電荷を再現できるような分極力場を構築 した事例を述べる。その後、より汎用性の高い第一 原理 MD 法によって、短いトラジェクトリから SFG スペクトルをシミュレーションする手法を紹介す る。最後に、その手法をアナターゼ型酸化チタン (101)/水界面に適用し、SFG スペクトルをシミュレー ションして実験と比較した事例を述べて結びとす る。

2. 分極を考慮した固液界面用力場の構築

MD 法において分極を考慮するモデルの一つに、 チャージレスポンスカーネル (CRK) 法[5]と呼ばれ る方法がある。このモデルでは、各原子に電荷と、 外部電界に応じて電荷が移動する量を規定するパラ メータ(カーネル)を設定することにより、ある原 子配置における各原子の電荷量を自己無撞着に決定 することができる。我々は、CRK 法を援用して固体 表面の分極を表現する方法を開発した[6]。 CRK 法 を用いて固体の分極を表現するためには、非局在化 した固体中の電荷の動きを再現できる位置にカーネ ルを設置する必要がある。酸化チタンのスラブモデ ル(周期境界条件のもとで表面を表すためのモデル の一つで、固体層と真空層を交互に繰り返すことで、 固体の表面と裏面との相互作用を排除したもの。表 面水平方向には周期境界条件が確保されている。)に 電界を印加すると、図1のように表面に電荷が誘起 される。誘起された電荷の分布は表面水平方向には ほぼ一定であるため、図1のように一定間隔の面の 中心にカーネルを設置するという方法をとる。表面 近傍では多くの電荷が誘起されるため、表面近傍に は密に、バルクでは粗にカーネルを配置する。CRK は電荷密度が最大となる点(ワニエ中心)に置くと 良いが、固体中のワニエ中心は気相の分子の場合と 異なり、TiやOといった原子とは一致しないことが 多い。今回のモデリングにおいても、酸化チタンの バルク部分に関しては特定の原子群の重心の位置、 つまり原子の場所とは異なる地点にカーネルを設置 している。



図1 固体表面における CRK 構築の概念図[6]。

我々は、清浄なルチル型酸化チタン(110)面に対し て、第一原理計算で求めた誘起電荷から CRK パラ メータを構築し、まずは一つの水分子を吸着させて モデルの精度を確認した。図2に示したように、水 分子の吸着前後の電荷の差は第一原理計算の結果を よく再現しており、界面での誘起電荷の様子を良く 表現できていると言える。この結果を踏まえ、新た に構築した分極力場を用いてルチル型酸化チタン (110)/水界面のシミュレーションを行い、界面近傍の 水の密度やダイナミクスに関する情報を得ている [7]。



図2 ルチル型酸化チタン表面に水が吸着した系の誘起 電荷。水が存在しない場合と比較し、第一原理計算によ って計算した電荷の差を青線、CRK モデルから計算した 各カーネル(酸化チタン中のカーネルの位置は W で表さ れている。)における電荷の差を赤いバーで示す[6]。

第一原理分子動力学法による和周波発生分光スペクトルのシミュレーション

第2章で述べたような力場モデルを用いた MD シ ミュレーションは、原子間相互作用を古典的なモデ ルで近似しているため、古典 MD 法と呼ばれる。シ ミュレーションの対象とする分子の性質をよく記述 することができる力場さえ与えられれば、古典 MD 法では~10 万原子、~100 ns 程度(水分子の場合、 図3参照)の系・時間スケールをシミュレーション することができる[8]。しかし、力場を用いたシミュ レーションの場合には、対象となる系が少しでも変 わると新たな力場を構築する必要が生じる。例えば、 第2章で構築した力場は清浄なルチル型酸化チタン (110)面のものであるが、この表面に酸素欠陥や OH 基が生じた場合、それぞれに対応した力場をまた新 たに構築する必要がある。また、力場を構築するた めには、振動分光スペクトルや拡散係数などの物理 量を再現するようにパラメータを決定する必要があ るが、界面に存在する分子はごくわずかであり、参 照すべき物理量を得ること自体が難しい。これらの ことから、分子構造やダイナミクスがよく知られた 系に対して物理量を精密にシミュレーションしよう と思った場合に古典力場は向いているが、例えば固 液界面のように、表面の構造がはっきりとはわから ない状況から現実の構造を探っていくためには、経 験的なパラメータ設定に頼らない計算手法が望まし い。



図3 第一原理 MD (AIMD)、古典 MD (FFMD)、粗視
 化 MD (CGMD) が取り扱える水分子の数とシミュレー
 ション時間を、文献を基に色分けしたもの[8]。

非経験的に安定な電子状態・構造を求めるための 計算手法が、第一原理計算である。第一原理計算で は、与えられた構造に対してシュレディンガー方程 式を解く(もちろん一定の近似は必要となる)こと で電子密度の空間分布を求め、未知の構造に対して もエネルギーと力を計算することが可能である。た だし、その代償として、計算コストが非常に高いと いう問題がある。図3に示したように、高々500 個 程度の水分子に対して、100 ps 程度の時間しかシミ ュレーションすることができない。このような限ら れたスケールのシミュレーションでは、統計平均量 の収束が著しく不利となる。 我々は、通常は少なくとも1nsのトラジェクトリ が必要であったSFGスペクトルを、100ps程度のト ラジェクトリから計算できるよう、新たな速度・速 度相関関数を導出した[9]。この相関関数を用い、は じめに空気/水界面のSFGスペクトルを計算した[9]。 図4のように、3700 cm⁻¹に表面に突き出たOH 結合 の伸縮に由来する正のピーク、3400 cm⁻¹付近に周囲 の水分子と水素結合したOH 結合の伸縮に由来する 負のピークが見られ、最新の実験結果[10]ともよく 一致する。その後、脂質/水界面[11]、空気/TMAO水 溶液界面[12]にもこの手法を応用している。



図4 第一原理 MD を用いてシミュレーションした空気/ 水界面の SFG スペクトル。密度汎関数と van der Waals 相 互作用の有無を組み合わせて4種類の手法を用い、それ ぞれ 80ps のトラジェクトリから計算を行った[9]。

第一原理分子動力学法によるアナターゼ型酸化 チタン(101)/水界面のシミュレーション

4.1 計算方法

比較する実験において酸化チタンの膜がスピンコ ートで作製されたことから、熱力学的に最も安定な 面と言われるアナターゼ型酸化チタン(101)面[13]を シミュレーションすることとした。表面は、清浄な 表面と OH 基が吸着した表面の2種類を用意した。 11.5 Å× 10.4 Å の広さを持つユニットセルに5 層の 酸化チタンスラブと水分子(実際には、時間刻みを 大きくするために重水を使用した)45 個を投入し、 CP2K プログラム[14]を用いて第一原理 MD を行っ た。CP2K プログラムは密度汎関数法に基づいたプ ログラムであり、汎関数は BLYP を用い、Grimme の 方法[15]を用いて van der Waals 相互作用を取り込ん だ。基底関数は DZVP を用い、系の温度は CSVR 法 を用いて 320K に保ちながらシミュレーションを行 った。

4.2 結果と考察

第一原理 MD シミュレーションから計算した SFG スペクトルを図5に示す。清浄なアナターゼ型酸化 チタン(101)/水界面では2次の応答関数の虚部は水 の振動と共鳴する範囲の周波数ですべて正となっ た。このことは、水分子の双極子モーメントが全体 的に酸化チタン表面を向いていることを示してい る。一方、ヒドロキシル基を持つアナターゼ型酸化 チタン(101)/水界面では、表面のヒドロキシル基の水 素が水の方向に向いており、これが 3500 cm⁻¹付近に 負のピークを与える。一方、このヒドロキシル基と 水素結合としている OH 結合の伸縮振動に由来する シグナルは正のピークを与え、またその振動数は強 い水素結合のために 3100 cm⁻¹と小さくなっている。 このことから、アナターゼ型酸化チタン(101)表面に おいては、表面にヒドロキシル基が存在すれば正と 負のピークからなる SFG スペクトル、清浄表面であ ればすべて正の SFG スペクトルが観測されること が予測される[16]。



図5 第一原理 MD によるアナターゼ型酸化チタン(101)/ 水界面の SFG スペクトル(2次の応答関数の虚部)と界 面構造のスナップショット[16]。

上記の計算結果を、測定結果と比較する。実験で は、スピンコートによって 1.5 µm の厚さの酸化チタ ン膜をフッ化カルシウム上に製膜し、即座に 2 mm の厚さの水と接触させる。紫外線を照射して超親水 性(水と表面との接触角が0°)となったことを確 認した上で、酸化チタン側からレーザーを照射して SFG スペクトルを測定した。酸化チタン/水界面に対 する SFG スペクトル測定は以前にも報告がある[17] が、位相敏感な手法で測定が行われたのは今回が初 めてである。測定した2次の応答関数の虚部は、3100 cm^{-1} の正のピークと 3400 cm^{-1} の負のピークからな り、2 種類の水が存在することを示唆する。この結 果はシミュレーションと良く一致しており、解離し てヒドロキシル基となった水と、強い水素結合を持 つ2種類の水が存在することを示している。バルク の水の OH 伸縮振動の振動数は 3400 cm⁻¹ 程度であ り、3100 cm⁻¹という低い振動数を持つ水分子の存在 は酸化チタン/水界面に特有のものである。強い水素 結合によって界面と水の相互作用が強められた結 果、超親水性が実現し、またそのためにはヒドロキ シル基の存在が必要であることがシミュレーション と実験から明らかになった。



図6 (a) SFG スペクトル検出の模式図と(b)SFG スペク トル。(c)位相敏感法によって検出された2次の応答関数 の虚部と実部。(d)位相敏感法での測定結果から構築した SFG スペクトルと通常の SFG スペクトルの比較[16]。

5. おわりに

本稿では、固液界面に対するMDシミュレーショ ンの現状と手法を述べたのち、アナターゼ型酸化チ タン(101)/水界面に対して第一原理計算MD法を適 用し、SFGスペクトルを計算した最新の事例を紹介 した。第一原理MDからSFGスペクトルをシミュレ ーションする手法を確立したことで、古典力場を構 築しにくい固液界面の分子構造を実験との比較の上 で知ることができるようになった。最新の位相敏感 SFGスペクトル測定との協働により、酸化チタン/ 水界面でのヒドロキシル基の存在を示唆することが できた。今後も、様々な結晶構造・面指数・表面構 造の酸化チタンや他の固液界面に本手法を適用する ことで、界面構造を明らかにしていくことが期待で きる。

参考文献

- (1) A. Fujishima et al., Nature **238**, 37-38 (1972).
- (2) R. Wang et al., Nature **388**, 431-432 (1997).
- (3) Q. Du et al., Phys. Rev. Lett. 70, 2313 (1993).
- (4) Y. R. Shen et al., Chem. Rev. 106, 1140-1154 (2006),
 S. Nihonyanagi et al., J. Chem. Phys. 130, 204704 (2009).
- (5) A. Morita et al., J. Am. Chem. Soc. 119, 4021 (1997),A. Morita et al., J. Chem. Phys. 108, 6809 (1998).
- (6) H. Nakamura et al., J. Chem. Theory Comput. 9, 1193-1201 (2013).
- (7) T. Ohto et al., J. Phys.: Condens. Matter 26, 244102 (2014).
- (8) Y. Nagata et al., J. Phys. Chem. B, **120**, 3758-3796 (2016).
- (9) T. Ohto et al., J. Phys. Chem. 143, 124702 (2015).
- (10) S. Yamaguchi, J. Phys. Chem. 143, 034202 (2015), S.
 Nihonyanagi et al., J. Phys. Chem. 143, 124707 (2015).
- (11) T. Ohto et al., J. Phys. Chem. Lett. 6, 4499-4503 (2015).
- (12) T. Ohto et al., J. Phys. Chem. C **120**, 17435-17443 (2016).
- (13) U. Diebold, Surf. Sci. Rep. 48, 53-229 (2003).

- (14) CP2K, http://www.cp2k.org
- (15) S. Grimme et al., J. Chem. Phys. 132, 154104 (2010).
- (16) S. Hosseinpour et al., J. Phys. Chem. Lett. 8, 2195-2199 (2017).
- (17) S. Kataoka et al., Langmuir 20, 1662-1666 (2004), K.
 Uosaki et al., J. Phys. Chem. B 108, 19086-19088 (2004).

早期宇宙における巨大ブラックホール種の形成シミュレーション

長峯 健太郎

大阪大学 大学院理学研究科 宇宙地球科学専攻

1. はじめに

天文学者は古来より遠くの宇宙を観測し、遠方に 存在する暗い天体を観測することでフロンティアを 広げてきた。光の速さが限られているため、遠方の 天体を観るということは、ずっと昔に放たれた光が ようやく地球に到達しているものを見ていることに なり、即ち若い宇宙を見ているのと同じことである。 つまり、我々は宇宙そのものをタイムマシンのよう に利用して、観測的宇宙論の研究を遂行している。

そのような最近の天文観測によって、ビッグバン から数億年経ったばかりの宇宙にも巨大ブラックホ ール(Supermassive black hole; SMBH)が存在すること が示唆されている。これらの SMBH は、通常クエー サー(quasar)と呼ばれる非常に明るい天体で、ジェッ トを吹き出していると考えられており、そのジェッ トが我々の方を向いていると、非常に遠くの宇宙で もその存在を確認することができる。しかし、ビッ グバン膨張宇宙論において、宇宙が始まってから 10 億年程度の(宇宙論的な視点からは)短い時間で、 非常に重い SMBH を作ることが実際に可能なので あろうか。

2. 宇宙論的な構造形成と SMBH

現在、我々は宇宙の標準モデルともいうべき理論 的枠組みを手にしている。それは、ビッグバンと呼 ばれる温度と密度が無限大の状態から時空が生まれ、 その後ずっと膨張し続ける中で銀河などの様々な構 造が成長していくという「ビッグバン膨張宇宙モデ ル」である。宇宙全体のエネルギー密度を100%と すると、普通の物質(いわゆるバリオンと呼ばれる 水素、ヘリウムなどの我々がよく知る元素)が約5%、 暗黒物質(ダークマター)が約25%、残りの約70% がダークエネルギーと呼ばれる未知のエネルギーに よって占められている、一見奇妙な宇宙である。 これは様々な観測データ(宇宙背景放射の温度揺ら ぎ、Ia型超新星への距離、銀河団の個数密度など) を組み合わせた多角的な解析の結果であり、結果の 信頼性は非常に高く、現在の宇宙年齢は約138億年 と見積もられている。ダークエネルギーは、元々ア インシュタインが宇宙項Λ(ラムダ)としてアインシ ュタイン方程式に導入したもので、またダークマタ ーの最有力候補は、質量が重くて衝突断面積の小さ い「冷たい暗黒物質(Cold dark matter; CDM)」であり、 この二つによって占められた宇宙はΛCDM モデル と呼ばれている。

このダークマターとダークエネルギーによって支 配されたACDMモデルでは、まずダークマターが 互いの重力によって引き合い、小さな密度揺らぎが 次第に大きく成長していくことで構造が生まれてい く。ACDMモデルの密度揺らぎパワースペクトル によれば、小さな塊が最初に生まれて、その後それ らが合体集積していくことで「ダークマターハロー」 と呼ばれる大きな天体に成長していく。

このようなACDM モデルをベースに、スパコン を使用して宇宙の構造形成の過程を解くことが可能 であり、この 20 年ほどの間に「数値計算宇宙論 (Numerical Cosmology)」という分野が急速に発展 してきた。

図1(top panel)に示すように、まずダークマターが 寄り集まって構造形成が始まり、中心に見られるよ うなダークマターハローが作られる。このシミュレ ーションでは、zoom-in 手法を用いており、実際に は top panel に示している領域の周辺の、より大規模 な構造も粗い解像度で解いているが、ここに示して いるのは高分解能領域のみである。



図1 Top panel:約30万光年にわたる領域のダーク マター分布。このように宇宙論的な初期条件から SMBHの種が誕生する環境をシミュレーションし て、DCシナリオを検証している。 Middle panel:約 1万光年の領域中心を示しており、ダークマターハ ローにガスが次第に降着している様子を示してい る。Bottom panel:ダークマターハローの中心部分 で、約300光年の領域にガスが等温的に直接崩壊し ている状態を示している[3]。

ダークマターハローのポテンシャル井戸にガスが放 射冷却しながら落ち込んでいって、まず銀河が形成 される。その銀河形成の過程において、超新星爆発 後に星質量程度の小さなブラックホール(BH)が生 まれ、それがガスを吸い込んで SMBH に成長してい くと、かつての理論では考えられていた[1]。

しかし、ビッグバンから 10 億年ほどの間に太陽質 量(M_☉)の 100 億倍の質量(10¹⁰ M_☉)にまで成長 させるのは、如何にスケールの大きな宇宙物理学的 観点から見てもいくつかの問題が存在する。第一に、 それほど重たい SMBH を作るには時間が足りない のではないかという疑問である。LIGOの重力波観 測[2]によって確実になった星質量 BH(≲200 M_☉) は、ビッグバンから数億年程経った頃から初代銀河 の形成と共に生まれ始めると考えられているが、そ れらを 10¹⁰ M_☉にまで成長させるには、1 億倍以上 の成長を実現しないといけないわけである。そのた めには BH 質量を指数関数的に増加させ続ける必要 があるが、輻射やジェットによるフィードバックを 考えると容易ではない。

第二の問題は、熱力学的・流体力学的な問題であ る。ガスを小さな領域に押し込めようとすると断熱 圧縮で加熱するので、効率良く外部に輻射を逃がし て冷却しない限り、ガスは高密度になっていかない。 その輻射が外に出て行こうとする際に外向きの輻射 圧を及ぼし、BHの重力と拮抗して降着が停止して しまうエディントン限界という臨界降着率が存在す る。また降着するガスは往々にして回転しており、 角運動量も保存しないといけないので、外部への角 運動量輸送も同時に効率良く行われないと、たくさ のガスを指数関数的かつ継続的にBH種に降着させ ることは難しい。

3. ダイレクトコラプスシナリオ

上記のような SMBH 形成に関する幾つかの問題 点を解決するために、最近注目されているのがダイ レクトコラプス(Direct Collapse; DC)シナリオと呼 ばれる形成モデルである。これは星質量の BH を作 るのではなく、ガス球を直接崩壊させて最初から 10⁴-10⁵ M_☉の中間質量 BH を作ってしまおうという アイデアである。筆者は平成 25 年度秋から大阪大学 国際共同研究促進プログラム[4]の助成を受けて、米 国ケンタッキー大学のシュロスマン教授と DC シナ リオについて国際共同研究を推進している[5]。

我々は、宇宙論的流体力学コード Enzo AMR (adaptive mesh refinement) code [6]を主に用いて、実 際に DC シナリオが早期宇宙において実現して BH 種が生まれるかどうかを検証している。図1(top panel)に示したように宇宙論的な初期条件を用いて、 ダークマターおよびガスの物質分布や相互作用を重 力と流体力学の法則を用いて、阪大サイバーメディ アセンターのスパコンも利用し並列計算を行ってい る。実際に宇宙論的初期条件から構造形成をシミュ レーションすると、ダークマターハローの多くは回 転楕円体のような歪んだ形をしていて、微小回転を していることがわかる。そのダークマターハローが 重力トルクをガスに及ぼし、角運動量を効率良く引 き抜き、ガスがハローの奥深く(<0.001 光年の小ス ケール)まで落ち込むことが可能であることが最近 の我々の研究により明らかになってきた[3,7]。この 時、ガスは水素とヘリウムの輝線による放射冷却に よってほぼ等温的に 8000 Kelvin 程度の温度を保ち つつ、崩壊していく(図2参照)。



図2:ダークマターハロー内部のガスの密度と温度 分布。色は質量分布を反映している。ほぼ等温的に ~8000Kの温度を保ちつつ、崩壊して密度が高くな っている様子がわかる。

最終的にガスの数密度が n~10¹⁰/cc にまで達してい ることがわかる。このようなシミュレーションでは 中心部分が次第に高密度になっていき、タイムステ ップがより限られた領域において短くなっていくの で、並列計算の load balance が難しく、1 万コアを同 時に効率よく使用するのは無理である。そのため、 実際に各シミュレーションで使用しているのはせい ぜい数百コア程度である。一方、大規模な宇宙論的 N 体計算ならば多くのコア数を効率よく使用するこ とが可能である。

我々はさらに中心領域の構造を詳細に吟味して、 図3のような入れ子状になったガス円盤ができてい ることを発見した[7]。



図3:ダークマターハローの中心部分にできた入れ 子状のガス円盤。上のパネルは約10パーセク(約 33光年)の大きさのガス円盤を示し、下のパネルは ~2.5 pcの円盤に二つの渦巻き状のアームが繋がっ ていて、m=2モードが励起されていることがわかる。

角運動量が徐々に外側のダークマターハローとの相 互作用によって抜かれてガスが中心に向かって落ち ていくが、それにも限界があり最終的には円盤が中 角運動量が徐々に外側のダークマターハローとの相 互作用によって抜かれてガスが中心に向かって落ち ていくが、それにも限界があり最終的には円盤が中 心に形成される。そして、二つの太いフィラメント が中心の円盤に繋がっていて、フーリエ解析により m=2の不安定モードが励起されているのが分かる。 図3のシミュレーションにおいては、中心にできる 大質量天体(BHになる以前の種)をシンク粒子と して扱い、ビッグバンから3-4億年の間にその種が 10⁵ M_☉にまで成長することを確認した。

4. まとめと今後

本稿では、SMBHの種を形成する DC シナリオに 絞って紹介したが、SMBH に関してはその誕生メカ ニズム以外にも大きな謎がいくつもある。その一つ は、各銀河の中心に観測される SMBH が、なぜかホ スト銀河の星質量(特にバルジと呼ばれる球状部分) の約 0.1%の質量を持っていて、SMBH 質量と銀河質 量に正の相関があるということである。つまり、 SMBH はなぜか自分が住んでいるホスト銀河の質量 をよく知っていて、銀河と SMBH が何らかの形で

「共進化」してきたと考えられている。より具体的 には、BHにガスが降着する過程でジェットや輻射 が噴出し、周囲のガスを加熱し影響を与える。この フィードバック効果により銀河内の星形成とSMBH 進化が互いに自己制御しあいながら、ホスト銀河と SMBHが手に手を携えて成長してきたと推測されて いる。しかしその詳細は未解明で、今後さらなる研 究が待たれるところである。

我々は上述の SMBH によるフィードバック効果 を解明するという目的に向けて、まず次の一手とし ては、輻射輸送の効果を DC シミュレーションに取 り入れて、中心部分におけるガスのダイナミクスが 輻射によってどのような影響を受けるのかを調べて いく予定である。

参考文献

 "Formation of supermassive black holes" Volonteri, M., 2010, The Astronomy & Astrophysics Reviews, Volume 18, Issue 3, pp.279-315

- [2] "Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger" Abbott, B. P., et al. (LIGO Collaboration and Virgo Collaboration), 2016, Phys. Rev. Lett. 116, 061102 (doi: 10.1103/PhysRevLett.116.061102)
- [3] "Direct collapse to supermassive black hole seeds: comparing the AMR and SPH approaches" Luo, Y., Shlosman, I., Nagamine, K., 2016, MNRAS, 459, 3217 (doi: 10.1093/mnras/stw698)
- [4] 大阪大学国際共同研究促進プログラム http://www.osaka-u.ac.jp/ja/research/researcher_sp/int ernational_joint
- [5] Research Highlight, Research at Osaka (ResOU), リ ソウ http://resou.osaka-u.ac.jp/en/en/highlight/2016/20160

318

- [6] "ENZO: An Adaptive Mesh Refinement Code for Astrophysics" Bryan, G., et al. 2014, ApJS, 211, 19 (doi: 10.1088/0067-0049/211/2/19)
- [7] "Supermassive black hole seed formation at high redshifts: long-term evolution of the direct collapse" Shlosman, I., Choi, J.-H., Begelman, M.C., Nagamine, K., 2016, MNRAS, 456, 500 (doi: 10.1093/mnras/stv2700)

キロテスラ級磁場下における超高強度レーザープラズマ相互作用の物理

畑 昌育 大阪大学 レーザー科学研究所

1. はじめに

1994 年の CPA 技術の発見[1]により、レーザーの 出力は飛躍的に向上し、2 PW という大出力レーザー を建設することが可能となっている。この出力のレ ーザー光を数ミクロン程度のスポットまで絞ると、 10²² W/cm²という超高強度の光を作り出すことがで きる。我が国では、量子科学技術研究開発機構関西 光科学研究所にて開発されている J-KAREN レーザ ーがこのような超高強度レーザー装置に該当し、そ の各種パラメータは 30 J、30 fs、1 PW となる見込み である[2]。また、大阪大学レーザーエネルギー学研 究センターには、レーザー強度では 10²⁰ W/cm² 程度 と劣っているもののエネルギー量で J-KAREN レー ザーを大きく上回る LFEX レーザーがあり、世界最 高の出力性能を誇っている[3]。そのパラメータは3 kJ、1.5 ps、2 PW である。また、世界的にも大出力 超高強度レーザーの建造が急ピッチで進められてお り、今後、米国、欧州、中国などで複数の装置が稼 働する見通しである。これらのレーザーは主に、核 融合、核物理、宇宙物理といった基礎研究から、発 生する高エネルギー量子線の基礎研究応用・医療応 用といった応用研究まで幅広く利用される。このよ うな状況の中、阪大レーザー研では、FIREX プロジ ェクトという高速点火レーザー核融合研究プロジェ クトが立ちあげられ、今日まで精力的な研究が実 験・理論の両面から行われてきている[3]。

高速点火方式レーザー核融合のシナリオを、図1 に示す。まず、爆縮レーザーを四方八方から照射す る(①)。これにより、ターゲット表面は瞬時にプラ ズマ化し、プラズマ膨張の反作用によりターゲット が圧縮される(②)。そして、最大圧縮時に、噴出プ ラズマのないコーン内に超高強度レーザーを投入し コーンとの相互作用により生成された高エネルギー 電子を用いてコアを加熱する(③)。最後に点火・燃 焼が起こる(④)。研究グループは、これまでの研究 により、本方式の数々の課題を明らかにし、それら の克服に向けて研究を進めてきた。近年大きな問題 となっていることの1つに、図1のステップ③にお いて生成される高エネルギー電子が大きな発散角を 持ち、生成点がコアから離れていると爆縮コアにエ ネルギーを落とせないというものがある。そのよう な中、2013年に高出力レーザーを用いることで、実 験室においてキロテスラ級の強磁場を生成できるこ とが報告され、強磁場を使って、レーザー生成高エ ネルギー電子を効率よくコアまで輸送する方法が提 案された[4、5]。



図1 高速点火方式レーザー核融合のシナリオ

磁場とプラズマとの歴史は長く、磁場閉じ込め核 融合や宇宙プラズマでは数多くの研究がなされてき ているが、レーザープラズマの分野ではそれほど研 究例は多くない。レーザープラズマの特徴として、 非常に短い時間スケール(プラズマ振動の時間スケ ール)と超高強度の電磁波(電子が相対論領域まで 加速される程強い電場)、そして生成されるプラズマ が高エネルギー密度状態であることが挙げられる。 近年生成可能になった強磁場環境と高エネルギー密 度状態(レーザー生成プラズマ)の二つの極限状態 の組み合わせは、これまで実験することのできなか ったパラメータ領域であり、未踏の研究領域である。

本研究では、強磁場中の超高強度レーザーとプラ ズマとの相互作用について相対論的電磁粒子コード を用いた計算機シミュレーションを行い、その物理 を明らかにする。

2. 相対論的電磁粒子コード

相対論的電磁粒子コードとは、荷電粒子の運動方 程式および Maxwell 方程式をカップリングして解く コードであり、電磁場とプラズマとの相互作用を自 己無道着に解くことができる。電磁場は格子量とし て扱われ、Maxwell 方程式を時間・空間的に差分化 する。荷電粒子は粒子として扱い、運動方程式を時 間的に差分化する。計算のアルゴリズムは図2に示 すような順になり、①粒子の位置・速度から電荷密 度・電流密度を計算、②電荷密度・電流密度から電 磁場を更新、③電磁場から力を計算、④力から粒子 の位置・速度を更新となる。このループを計算した い時間分だけ繰り返し、計算を実行する。粒子コー ドの詳細については、C. K. Birdsall の本などを参照 されたい[6]。



図2 粒子コードの計算アルゴリズム

一般に、粒子コードでは、電磁場よりも荷電粒子 の計算が重たいため、粒子のループについて並列化 を行うことで大幅な計算時間の短縮が可能となる。 また、大規模な計算をする場合には、大量のメモリ が必要となるため、領域分割による並列化を行い、 担当する領域の電磁場と粒子のみを解くようにすれ ばよい。

3. 強磁場下レーザープラズマ相互作用

3.1 シミュレーション条件

考える系はシンプルかつ実験に近いものを扱い、 複数回の実行が可能な計算規模(時空間サイズ)に 設定した。レーザーやプラズマのパラメータは実験 に近い条件をなるべく採用した。レーザーは空間的 にはガウシアン、時間的には矩形のプロファイルを 持つものを想定し、最大強度 4×10¹⁸ W/cm²、波長 1 µm、スポット径(FWHM)20 µm、パルス幅半無限の 直線偏光とした。ターゲットは、レーザーのメイン パルスに先行する比較的低強度ではあるが長パルス であるプリパルスによってあらかじめプラズマ化・ 膨張しているとして、スケール長 20 μm のプリプラ ズマ付き CH プラズマを置いた(図3)。そして、外 部磁場として x 方向に平行磁場を印可した。外部磁 場強度は 0、0.5、1、5 kT と振って 500 fs のシミュ レーションを実施した。



図3 ターゲットの初期電子密度

3.2 電場、電子密度、磁場における構造形成

図4に500 fs におけるレーザー周期平均電場強度 および電子密度の二次元プロファイルを示す。磁場 なしと0.5 kT とでは大きな違いはないが、5 kT の場 合には、レーザー場のフィラメント構造が磁力線方 向に直線的に伸びる傾向があることがわかった。



図 4 外部磁場なし(1)と外部磁場(2)0.5 kT、(3)5 kT の場合の t = 500 fs におけるレーザー周期で平均し た電場強度(a)と電子密度(b)の二次元プロファイル これに付随して、電子密度プロファイルにおける構 造も直線的になっている。この現象は外部磁場によ って磁力線垂直方向の運動が阻害されたことによる ものであると考えられる。図5に、外部磁場が 0.5 および5 kT の場合の 500 fsにおけるレーザー周期平 均磁場 Bxの二次元プロファイルを示す。磁場 Bxに おいても構造形成が起きており、初期に印加した磁 場が強められている箇所と弱められている箇所があ ることがわかる。この磁場の強弱は、レーザー場お よび電子密度における構造形成と同じ場所にできて おり、フィラメント内では、電子の排斥が起こって おり、磁場が弱くなっていた。そして、フィラメン ト周辺部では、押し退けられた電子の堆積および磁 場の圧縮が起き、初期磁場よりも強い磁場が生じて いることがわかった。



図 5 外部磁場が(a)0.5 kT および(b)5 kT の場合の t = 500 fs におけるレーザー周期で時間平均した x 方 向磁場の二次元プロファイル

3.3高エネルギー電子特性

x = 4 µm の位置(図3参照)を通過する高エネル ギー電子を観測することで、強磁場下の超高強度レ ーザープラズマ相互作用によって生成される高エネ ルギー電子の特性をみた。図6に電子ビームフルー エンスのy方向分布を示す。新たにシミュレーショ ンを2つ行ったため、磁場なし、外部磁場0.1、0.5、 1.0、5.0 kT の5つのケースのデータを載せている。 図よりわかるように、外部磁場が0.1 kT の場合は、 磁場なしの場合とほとんど結果が変わらないが、0.5 kT を超えてくると電子ビームが局在化してくる。1 kT の場合では、磁場による電子ビームのガイド効果 が顕著に現れており、半値全幅で23 µm とレーザー のスポット径とほぼ同じ値が得られている。さらに 外部磁場が5 kT の場合には、電子ビームフルーエン ス分布にも構造がでており、この構造はフィラメン ト構造を反映していることがわかった。5kT という 強い外部磁場下では、超高強度レーザーによって生 成される MeV 電子でも、そのラーモア半径が1 μm と非常に小さくなるため、生成点における高エネル ギー電子の分布がそのまま維持されて伝播している と考えられる。



図6 ダーケット後方(x=4 μm)で計測した電子 ビームフルーエンスの外部磁場強度依存性

4. おわりに

本研究では、強磁場中の超高強度レーザープラズ マ相互作用の電磁粒子シミュレーションを行い、外 部磁場印加による、電磁場、電子密度における特徴 的な構造形成および顕著な電子ビームガイド効果を 明らかにした。最後に、若手・女性研究者支援萌芽 枠採用により本研究を大きく進展させることができ ましたことに深く感謝申し上げます。

参考文献

- M. D. Perry and G. Morou, Science, 264, 917, (1994).
- (2) http://www.kansai.qst.go.jp/research-1.html
- (3) H. Azechi and FIREX Project Team, J. Phys.: Conf. Ser., 717, 012006 (2016).
- (4) S. Fujioka et al., Sci. Rep., **3**, 1170 (2013).
- (5) T. Johzaki et al., Plasma Phys. Control. Fusion, 59, 014045, (2017).
- (6) C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma physics via computer simulation*, CRC press (2004).

格子量子色力学を使った高密度物質の研究

河野 宏明 佐賀大学 大学院工学系研究科 物理科学専攻

1. はじめに

物質を構成する原子は原子核とそれを周回する電 子で作られている。原子核は陽子と中性子のまわり に中間子が飛ぶ事で核力が働き結合状態を保ってい る。さらに陽子・中性子などの重粒子(バリオン) と中間子はクォークやその反粒子である反クォーク がグルオンという粒子によって媒介される強い相互 作用によって結合して出来ている。現時点では、ク ォークと(電子などの)レプトンが物質を構成する 最小単位であり、そこに光子やグルオンなどによっ て媒介される4つの基本的相互作用が働いて、物質 さらには宇宙を構成していると考えられている。

クォークは物質の最も基本的な構成粒子である が、そこに作用する強い相互作用が文字通り"強い" ため、通常はハドロン(バリオンと中間子の総称) の内部に閉じ込められているという不思議な性質を 持つ。さらにクォーク(厳密に言うと陽子や中性子 を構成しているuとdのクォーク)は本来ほとんど 質量を持っていないが、カイラル対称性の自発的破 れという現象のために大きな質量を獲得し、それに よって物質の質量のほとんどが生み出されている。

クォークの持つ不思議な性質である「閉じ込め」 や「カイラル対称性の自発的破れ」は強い相互作用 に起因していると考えられている。したがって、こ れらの現象は、強い相互作用の基本的理論である量 子色力学(QCD)を用いて研究される。しかし、こ の理論では相互作用が"強い"ため(厳密に言うと 上記の現象がおこる領域で強いため)、摂動計算が使 えない。このため、上記のような現象の解析には、 QCDを計算機上の離散的4次元空間(格子)上で統 計力学的シミュレーションをする格子 QCD 計算と いう非摂動的方法がとられる。(クォークと反クォー クの数が等しい)零クォーク数密度においては、格 子 QCD の計算方法はほぼ確立し、系の温度があが ると、ハドロンがとけてクォークが自由に動き回る クォーク物質(クォーク・グルオン・プラズマとも いう)という状態に連続的に遷移する事が示された。 このような高温のクォーク物質はかって初期宇宙で 存在し、現在の高エネルギー原子核衝突実験でも生 成されていると考えられている。

低温でもクォーク数(バリオン数)密度が大きくな るとハドロンがつぶれてクォーク物質になる事が現 象論的な解析から予測されている。そのようなクォ ーク物質は中性子星などの高密度天体の内部に存在 すると考えられている。しかし、理論的な第一原理 である格子 QCD 計算は、有限クォーク数密度では 符号問題と呼ばれる計算上の問題のために信頼でき る計算結果を出すことができない。この研究は、符 号問題をうまく回避する事で、格子 QCD 計算から 中性子星内部の高密度物質、特にクォーク物質の情 報を引き出そうとする試みである。

2. 符号問題と虚数化学ポテンシャル

2.1 分配関数とインポータンス・サンプリング

格子 QCD 計算による統計力学の計算は、通常、次のように大正準分配関数を場の配位による経路積分の形に書き換えた表式を使って計算される。

$Z = \int DUDqD\bar{q} \exp(-S_{QG} - S_G)$ $S_{OG} = \bar{q}Mq$

ここで、*U*はグルオン(ゲージ)場、*q*はクォーク 場、*S*_{QG}はクォークとグルオンを含む作用、*S*_Gはグ ルオンのみを含む作用である。*M*は、クォークのス ピノル・カラー・フレーバーだけでなく、時空座標 をも行列の足とする行列である。また、この行列は クォーク数についての化学ポテンシャルμを含んで いる。*S*_Gの具体的な形はここでは重要でないので省 略した。

クォーク場については積分を手で実行でき、次の式

が得られる。

$Z = \int DU \det[M] \exp(-S_G)$

後は、グルオン場の経路積分を行えばよいわけだが、 ゲージ場は4次元時空の各点間の辺(リンク)上に 存在し、それぞれが経路積分の積分変数となる。そ れらの多数の積分変数に対して、すべての可能な値 を足し上げなければならず、厳密な計算は実現不可 能である。そこでモンテカルロシミュレーションを する訳だが、その場合でも十分な数の場の配位につ いて足し上げを行う事は難しい。そこで被積分関数

 $det[M]exp(-S_G)$

を規格化したものを確率分布関数と見なし、その確 率に従って、ゲージ場の配位を生成してサンプリン グする事で、少ない配位でよい精度の積分結果を得 る方法(インポータンス・サンプリング)が開発さ れ、零クォーク数密度での計算が実行されている。

2.2 符号問題と虚数化学ポテンシャル

上記では経路積分の被積分関数を確率分布として 解釈し計算を行った。ところが、有限のクォーク数 密度では、被積分関数の中にある行列式が複素数に なり、確率解釈ができなくなる。実際、

 $(\det[M(\mu)])^* = \det[M(-\mu^*)] = \det[M(-\mu)]$ となって、有限の μ では行列式の実性

 $\left(\det[M(\mu)]\right)^* = \det[M(\mu)]$

は、保証されない。したがって、行列式は複素数に なり、しかも、その実部の符号も正負定まらない。 このため、インポータンス・サンプリングの方法が 使えず、信頼できる格子 QCD 計算が行えない。こ れが符号問題である。

1つ注意をしておくと、行列式は複素数になるが、 分配関数は実数になる事は厳密に示す事ができる [1]。最終的な答えは実数なのに、計算の途中になぜ 複素数が現れるのかここでは詳しく述べる紙面がな いが、経路積分を数学的にきちんと定義するために、 ゲージ場の時間成分について虚実の役割を反転させ ている事が1つの原因である。

この問題の解決するために様々な提案がなされて いるが、まだ、決定的な方法は開発されていない。 ここでは、そのうち、虚数化学ポテンシャルを使う 方法に着目した。上の導出からわかるように、もし、 µが純虚数であれば、行列式は

 $(\det[M(\mu)])^* = \det[M(-\mu^*)] = \det[M(\mu)]$ となって実数となる。このため、インポータンス・ サンプリングによる格子 QCD 計算が可能である。 もちろん、虚数の化学ポテンシャルは現実的でない ので、得られた計算結果を解析関数を使って μ の実 数領域に解析接続する必要がある。(参考文献[2]お よびその中の引用文献を参照。)あるいは、未定パラ メータを持った現象論的模型を設定し、そのパラメ ータを虚数領域で決定した後に、実領域の物理を探 究するという方法が提案されている [3]。

ところで、高クォーク数密度のクォーク物質は、 現実世界では、中性子星などの高密度天体内部に存 在すると考えられている。名前からわかるように中 性子星内部では中性子と陽子(あるいは d クォーク と u クォーク)の数にアンバランスが生じている。 このようなアンバランスはアイソスピン化学ポテン シャルという、クォーク数化学ポテンシャルとは独 立な化学ポテンシャルによって記述される。河野ら は、純虚数クォーク数化学ポテンシャルだけでなく、 同時に実数のアイソスピン化学ポテンシャルが存在 する場合でも符号問題がない事を示した [4]。本研 究では、この領域での格子 QCD 計算を実際に行う 事により、そこから中性子星内部のように中性子数 と陽子数にアンバランスがある高密度物質の情報を 引き出す事を試みた。

3. 格子 QCD 計算

3.1 格子 QCD 計算のセッティング

ここでは、実際に計算に用いた格子 QCD 計算のプ ログラムやセッティング等について述べる。(細かい 専門用語については参考文献[2]および[5]等を参 照。)

この研究で計算に用いたプログラムは、中村純氏 らのグループが開発したもの[6]をこの研究用に修 正したものである。このプログラムは、ゲージ(グ ルオン)作用としては Iwasaki improved action を、フ ェルミオン (クォーク) 作用としては 2 フレーバの Clover fermion を用いている。また、ハイブリッド モンテカルロ法により配位の生成を行っている。格 子の大きさは、時間方向が 4、空間方向が 12 である。

3.2 数値計算の実行

計算を行う大型計算機としては、大阪大学サイバ ーメディアセンター(CMC)の SX-ACE を使用した。 CMC からは、96,000 ノード時間の計算時間をサポー トしていただいた。また、これとは別に大阪大学核 物理研究センターからいただいた計算時間の一部を 計算に使用した。

インプットパラメータとしては、系の温度 T とク オークの質量をコントロールする β と κ 、アイソス ピン化学ポテンシャル μ_1 および無次元化された虚 数化学ポテンシャル $\theta = \mu/(iT)$ がある。 β と κ につい ては、参考文献[2]と同じ設定を使用し、 μ_1 につい ては、主にの 3 種類について計算した。 θ について は、 $0 \sim \pi/3$ の領域で 16 点を選び、すべて θ の値に ついて同時に計算を行う並列計算を行った。

ゲージ配位は 40,000 程度生成し、最初の 4,000 を 熱平衡達成までの過程として除き、配位間の人口的 な相関を避けるために 100 ごとに配位を採用して平 均値を計算した。計算した物理量はプラケット変数、 ポリヤコフループ、クォーク数密度およびアイソス ピン数密度である。

4. 数値計算の結果と解析

4.1 高温領域

図1に温度におけるクォーク数密度の虚数化学ポ テンシャル依存性を示す。この場合、クォーク数密 度は純虚数であり、その虚部を示している。誤差を 伴った点が格子 QCD 計算の結果で、線が現象論模 型による結果である。温度は零密度における非閉じ 込め転移の擬臨界温度 T_c=171MeV の 1.35 倍、アイ ソスピン化学ポテンシャルはμ=0.4T である。格子 の有限性を補正するため同じ格子上でのステファ ン・ボルツマン極限(質量のない自由クォークの極 限)でのクォーク数密度で割って、連続的な現象論 模型の同様の値と比較している。現象論模型は、ポ リヤコフループ拡張された南部・ヨナ-ラシニオ (PNJL)模型で、そのパラメータは参考文献[7]で決 定されたものを使っている。高温では現象論模型は 格子 QCD の結果をよく再現していると言える。図 は省略するが、アイソスピン数密度も同じ現象論模 型でよく再現できる。



図1 高温におけるクォーク数密度のθ依存性

図1に示された比率が1にならなかった事は、高 温においても完全に自由なクォークが存在していな い事を意味する。一方、ここで使用した現象論模型 には、クォーク間のベクター型相互作用が取り入れ られている。クォーク間のベクター型相互作用は斥 力を引き起こし、中性子星内部などの高クォーク数 密度状態で星の重力による圧縮崩壊を防ぐ重要な役 割を果たす。上記の格子 QCD 計算結果は、そのよ うな相互作用が存在する可能性がある事を第一原理 計算から導いたもので、大変重要な結果である。

4.2 中間温度領域

図2に中間温度 7=1.08 T。でのクォーク数密度を示 す。温度以外は図1と同じである。中間温度では、 現象論模型は格子 QCD 計算より小さな値を与えてし まう。これは PNJL 模型がクォークを主体とした模型 であり、ハドロンの効果が十分に状態方程式に取り 込めていないからだと考えられる。図は省略するが、 アイソスピン数密度についても同様の事が言える。 温度がさらに低い領域では、模型による再現性はさ らに悪くなる。これらの結果から、現象論模型を改 良して、中間温度領域以下でハドロンの効果を正し く取り込む必要がある事がわかる。



5. おわりに

5.1 まとめ

符号問題をさけるために、虚数クォーク数化学ポ テンシャルと実数アイソスピン化学ポテンシャルが 同時に存在する場合の格子 QCD 計算を行った。こ れは著者が知る限りにおいて世界最初の計算例であ る。高温領域では、格子 QCD 計算の結果は現象論 模型でよく再現できた。一方、中間温度・低温の領 域では現象論模型は格子 QCD 計算の結果より小さ な値を与え、結果を再現できなかった。これは現象 論模型にハドロンの寄与が十分に取り込まれていな いためと考えられる。しかし、高温で現象論模型が 格子 QCD 計算を再現できた事で、九州大学の管野 淳平氏らが参考文献[7]および[8]で行ったような二 相模型を用いた中性子星の解析は的を得たものだと いう事が言える。

なお、これらの結果は、以下に示すように日本物 理学会で遂次発表されている。(本公募研究期間であ る 2016 年度のものだけを表示。)

河野 宏明 他、

格子 QCD を用いた非対称有限密度物質の研究 III、

日本物理学会 2016 年秋季大会、2016 年 9 月 23 日、 宮崎大学(宮崎県宮崎市)

河野 宏明 他、

格子 QCD を使った中性子星内物質の探求 II、 第 122 回日本物理学会九州支部例会、2016 年 12 月 10 日、福岡大学(福岡県福岡市)

5.2 課題と今後の展望

格子 QCD 計算で、信頼できる結果を得るには、配 位数を増やして統計精度をあげ、格子サイズを大き くして連続極限に近づける事が必要である。特に現 状では、解析関数による解析接続をするには、まだ 精度が足りない部分がある。2017 年度も大阪大学サ イバーメディアセンターから計算時間の割り当てを いただいたので、今後も計算を続けてより高い精度 の結果を導きたい。同時に格子 QCD 計算を定量的 に再現できる現象論模型を構築し、中性子星の解析 等に役立てたい。

謝辞

本研究の遂行にあたり様々な助言・助力をいただ いた中村純氏、八尋正信氏、高橋純一氏、石井優大 氏、管野淳平氏、宮原昌久氏、開田丈寛氏に感謝い たします。大阪大学サイバーメディアセンターと大 阪大学核物理研究センターからは計算時間のサポー トをいただきました。ここに謝意を表します。また、 この研究は、科研費(基盤研究 C(No.26400279))のサ ポートも受けております。ここに謝意を表します。

参考文献

- T. Hirakida, et al., Phys. Rev. D 94, 014011(1-13), (2016).
- (2) J. Takahashi, et al., Phys. Rev. D 91, 014501(1-11), (2015).
- (3) Y. Sakai, et al., Phys. Rev. D 79, 096001(1-9), (2009).
- (4) H. Kouno, et al., Phys. Rev. D 85, 016001(1-12), (2012).

- (5) 青木慎也,格子上の場の理論,シュプリンガー
 現代理論物理学シリーズ第3巻,シュプリンガー・フェアラーク東京,2005年.
- (6) C. Choe 他,素粒子論研究 108, No.1, 1-43, (2003).
- (7) J. Sugano, et al., Phys. Rev. D 90, 037901(1-5), (2014).
- (8) J. Sugano, et al., Phy. Rev. D 94, 014024(1-9),
 (2016).

流体力学的に見た構音時の鼻咽腔閉鎖機能

野崎 一徳¹¹、畠中 耕平²¹、中川 真智子²²、杉山 千尋³³、玉川 裕夫¹¹、野原 幹司⁴¹、苅安 誠⁵¹、佐藤 耕 一⁶¹、阪井 丘芳⁴¹、山城 隆⁷¹、 古郷 幹彦⁸⁰

1)大阪大学 歯学部附属病院 医療情報室、2)富士通株式会社、3)大阪大学 歯学部附属病院 顎口腔機能治療部、4)大阪大学 大学院歯学研究科 高次脳口腔機能学講座、5)京都学園大学、6)済生会松阪総合病院、7)大阪大学 大学院歯学研究科 分子病態口腔科学、8)大阪大学 大学院歯学研究科 顎口腔病因病態制御学講座

概要

ヒトは高次脳機能として複雑な言語を符号化し、 それに従って神経刺激を上咽頭・口腔の様々な運動 器官に伝達することで、肺からの呼気による流れ場 を制御することにより音声を生成することが出来 る。更にヒトは構音の際、舌や軟口蓋を自在に制御 することにより鼻腔や口腔を流路や共鳴管として 用いることが出来る。本研究では、軟口蓋が挙上す ることによって生じる鼻腔と口腔を含む声道(気 道)のトポロジー変化が流れ場に及ぼす影響につい て調査した。構音時の気道形状を三次元的に取得す るため、低被ばく線量により時系列での気道形状が 計測可能な Aquillion ONE (東芝メディカル)を用い た。計測情報から有限要素法を用いて気道部分を抽 出した。サイバーメディアセンターに導入されてい る OpenFOAM を用いてラージエディシミュレーシ ョン(LES)解析を行った。その結果、僅かな咽頭 部の(咽頭後壁と口蓋垂の)隙間であっても、鼻腔 に流れが生じ、それにより口腔内での速度の最大値 が減少することが示された。つまり鼻咽腔閉鎖が不 完全な場合、声道のトポロジーが変化し、構音に必 要な前歯付近での流速が得られない可能性が示唆 された。

1. はじめに

1.1 鼻咽腔閉鎖機能とは

「ん」を発音する際に、鼻から空気が流れること は容易に確認できる。鼻炎などにより鼻腔が狭めら れると「ん」が聞き取りにくい音に変化する。「ふ」 と発音する際には、口から空気が流れる。その時、 鼻から空気は流れない。実は、「ん」と発音する際に は口が閉じられ、鼻腔だけに空気が流れる。「ふ」の ときには、鼻腔には一切空気は流れず、口腔にだけ 空気が流れる。その理由は、口蓋垂(「あ」と発音し た際に喉の奥にみられる上舌)が咽頭周囲筋の収縮 と連動して挙上し気道を閉塞させるからである。こ のような気道を閉塞させることを、鼻咽腔閉鎖機能 [1]と呼称している。

1.2 構音とは

言葉は意味を持つ。その意味を伝える最小単位は 単語である。単語は音素から構成されている。音素 には母音と子音がある。日本語では「ん」や「-」、 「っ」を除いて子音は単独では用いられることはな く、母音と組み合わしてモーラ(音節)を構成する。 例えば、「うすい」は「ウ」「ス」「イ」の3モーラで 3音節とカウントされる。この時、「ス」の音素は/s/ /u/となるが、1拍で発音される。母音は喉頭部にあ る声帯が肺からの気流によって振動し流れに周期 的な渦を発生させることで基本周波数が決定され、 また声道(気道)の形状や長さによって共鳴周波数 が決定される[2]。一方で子音は、肺からの気流が咽 頭から鼻腔や口腔に流れる際に発生し、気道の形状 に起因する流れの急激な変化から渦が放出され、そ れが音の要因となる。

1.3 空力音響とは

空気の流れから音が発生する仕組みに関する研 究分野があり、重工分野で特に盛んである。身近な 問題としては、自動車サイドミラーの風切り音や新

幹線のパンタグラフから発生するエオルス音、掃除 機から発生するブロアノイズ、歯科用タービンから 発生するタービン音等がある。空力音は空力音源と して考えられている流体音響テンソル (ライトヒル テンソル)の二階の空間微分から発生される音とし て理解できる。例えば手でまな板上の豆腐の上側表 面を適度な圧力を保ちつつ下面と平行にずらすと、 豆腐にはせん断応力が発生する。流体音音響テンソ ルはこの状態で値を持つ。ずらしていた手を離す と、豆腐は元の形に戻ろうとする。この時、流体音 響テンソルは急激に変化するので、二階の空間微分 値は高い値を持つ。流体力学において用いられてい る流れ場を予測するための方法として、圧縮性ナビ エ・ストークスの式がある。この式を省略無く変形 し、左辺を音の伝播を表す線形波動方程式の形とす ると、右辺は流体音響テンソルの二階の空間微分の 項となる。このことから、流体音響テンソルが高い 値を示せば、音響粒子速度の速い(圧力の高い)音 が伝播することが分かる。

1.4 摩擦子音とは

歯科治療や構音治療においてしばしば問題とな る「さ」行の音は、口腔前方部、すなわち、前歯の 辺りで構音される音節である。特に前歯の歯並びが 悪いと、「さ」行の発音に不自由する場合がある。入 歯などでも前歯付近やかみ合わせに問題があると、 同じく「さ」行の発音に問題があることが多い。「さ」 行の音素は/s/と/a/、/u/、/e/、/o/の組み合わせで音節 を構成しており、「し」だけは構音時の舌の位置が異 なるため、子音の音素が/s/ではない。/s/の音素はこ れまでの研究から、乱流から生じる空力音であるこ とが報告されている[3,4]。口腔内で乱流を生じさせ るために、ヒトは幾つかの特徴的な運動を行ってい る。具体的には

1. 呼気体積流量の増大

2. 鼻咽腔閉鎖

3. 舌前方部の口蓋(上顎)前方部への挙上 を行っている。これらにより前歯付近での流速を増 大させていると考えられている。 1.5 音素と音素を繋ぐ調音結合

「す」のような音節は、/s/と/u/を1拍で発音する。 どこからが/s/でどこからが/u/なのかということに 関しては、連続音声スカログラムで確認することが 出来る。同様に、「うすい」などの単語に関しても、 少々強引ではあるが/u//s//u//i/の4つの音素の調音 結合であると考えることが出来る。ただし、調音結 合時に気道内の流れがどのように遷移するのかに 関しては十分な知見が得られていない。

1.6 母音と摩擦音への遷移時の流れ変化を流体シ ミュレーションで調査

本研究の目的は、「うすい」という単語を対象と し、その時の気道内の気流動態を明らかにし、調音 結合時の流れの変化に関して、乱流を生じさせる際 の3つの特徴的な運動がどのように関係している かについて調査した。

2. 材料と方法

2.1 構音時の気道形状抽出を実現

済生会松阪総合病院には構音時の気道形状変化 を時系列で計測するための高性能 X 線断層写真撮 影装置(Aquillion ONE(東芝メディカル))が導入さ れている。この装置を用いると低被ばく線量下[5] でも秒間20コマ程度で三次元の気道形状が計測 出来る。今回は大阪大学大学院歯学研究科・歯学部 附属病院倫理委員会の承認を得た上で、筆者本人が 被験者となり、被検音「うすいみそしる」を発話し た際の気道形状を計測した。その結果を図1に示 す。



72 volume which consist of 320 dcm

図1 ガントリーが傾斜され、CT 本体後方に設置 されたリクライニング型チェアに座した被験者の 顎顔面領域をスキャン領域に捉えている。4DCT と 呼称されるX線照射型断層像撮影装置により「うす いみそしる」と発音している被験者の気道を72 コ マで計測した[6]。

2.2 複雑な気道形状の構造格子生成を実現

工業デザインでも同様であるが、生体を構成する 様々な臓器の形状はトポロジーの発見が困難であ り、一般的な CAD 技術をそのまま適用することが 困難である。そのため、トポロジーに依存しない、 Building-Cube Method(BCM)を用いた生体形状のメ ッシュ分割が有効な選択肢となる。BCM は計算領 域を直交等間隔格子にブロック分割する。さらに、 物体近傍で格子解像度が必要な箇所では Cube サイ ズを詳細化する。流体計算用アプリケーション OpenFOAM のプレ処理アプリケーションである snappyHexMesh は、BCM で用いられる方法に加え て物体近傍では物体形状に応じた多面体セルを用 いることにより、非構造格子を生成する。本研究で は snappyHexMesh によって生成された気道の非構 造格子を OpenFOAM の入力データとして用いた(図 2)。メッシュサイズは約 500 万要素であった(最 大要素サイズ: 0.137mm) [7]。



図 2 360 枚の DICOM 画像から気道領域のみ抽出 した。

2.3 乱流モデルの利用

乱流は大小様々な渦運動からなる。これらの動き は一見予測不可能なものに感じられるが、乱流の種 類によっては確率統計的なモデルとして表現する ことが可能である。その中でも、ロシアの数学者コ ルモゴロフは、コルモゴロフスケールと呼ばれる法 則性を見つけ出した。コルモゴロフが中心となって まとめた確率論の入門書には、物理実験における観 測の意味を数学(確率)的にとらえる方法について 詳細に記載されており、大数の法則で観測の確から しさが保証されていることにより、確率論的に乱流 のモデル化がなされていることが理解できる。ラー ジエディシミュレーション(LES)は、数値シミュ レーション分野で特に空力音響解析に必要となる 渦の時間変化を精度良く計算するために有効な手 法として多くのアプリケーションにおいて用いら れている。LES の本質は、空間をある大きさ(スケ ール)で分割し、そのスケール以上の流れについて 計算し、それ以下の流れの影響については様々な乱 流モデルを用いて見積もる方法である。原理的に分 割するスケールを細かくするほど渦を直接計算し ている状態に近づくという単純な考え方である。た だし、乱流モデルは非常に複雑な工夫がなされてお り、実験値と最小二乗法で合わせ込んだもの等が主 流である。

3. 結果と考察

3.1 LES による数値流体計算結果

LES 解析は OpenFOAM3.0 の pisoFOAM パッケー ジを用い、乱流モデルに関してはダイナミック・ラ グラジアン・モデルにて実行した。レイノルズ数は 約 1583 した。壁面境界は滑りなし条件とした。図 3は、音節「す」(/s//u/) 調音時の気道内流れの LES 解析結果を示している。上段は「す」調音時の気道 三次元形状を、下段はその形状に関する LES 解析結 果を示しており、コンター(色)は流れの絶対値を 示している。9から10にかけて口蓋垂が挙上し鼻咽 腔閉鎖がなされている。それに伴い徐々に口腔前歯 後方付近の流速が速くなっていることが分かる。

3.2 利用した計算機

今回、OpenFOAM をインストールし実行した計算 機は、サイバーメディアセンターVCC クラスタであ った。各ノード 20 コア装備されており、本研究で は1コマあたり1ノードを割り当て、ベストエフォ ートにジョブを実行した。但し、OpenFOA3.0 に関 して、ノードを股がった MPI 並列計算は達成できな かった。今後、サイバーメディアセンターと相談し、 より大規模な計算を実現する予定である。



Fluid : No-compressible , Newtonian Fluid 0.0 Turbulence : LESmodel(Dynamic Lagrangian model)

図3 音節「す」(/s//u/) 調音時の気道内流れの LES 解析結果:9から10にかけて口蓋垂が挙上し鼻咽腔 閉鎖がなされている。それに伴い徐々に口腔前歯後 方付近の流速が速くなっていることが分かる。

3.3 臨床応用

構音機能に問題がある子供や、矯正治療等による 音声の変化が気になる方、舌癌等によって通常の構 音が困難な方等に、相手に伝えたい事を音にして伝 えられるような治療の実現を目指している。例えば、 本研究の延長線上には、気道内の形状と流れと音の 関係を解き明かすことによって、その人が器質的に 実現可能な形のなかから、聞き取り可能な音節を作 り出すために、戦略的なトレーニング方法を考案す ること等がある。

参考文献

- [1] J. A. Rowlands, "Videofluorography: the role of temporal averaging," Med Phys, vol. 11, no. 2, pp. 129-36, 1984 Mar-Apr, 1984.
- [2] G. Fant, "The relations between area functions and the acoustic signal," Phonetica, vol. 37, no. 1-2, pp. 55-86, 1980.
- [3] K. Nozaki, T. Yoshinaga, and S. Wada, "Sibilant /s/ simulator based on computed tomography images and dental casts," J Dent Res, vol. 93, no. 2, pp. 207-11, Feb, 2014.
- [4] A. Van Hirtum, Y. Fujiso, and K. Nozaki, "The role of initial flow conditions for sibilant fricative production," J Acoust Soc Am, vol. 136, no. 6, pp. 2922, Dec, 2014.
- [5] P. C. Shrimpton, J. T. Jansen, and J. D. Harrison, "Updated estimates of typical effective doses for common CT examinations in the UK following the 2011 national review," Br J Radiol, vol. 89, no. 1057, pp. 20150346, 2016.
- [6] K. Nozaki, H. Tamagawa, C. Sugiyama, K. Nohara, T. Sakai, K. Hatanaka, M. Nakagawa, K. Satoh, M. Kariyasu, T. Yamashiro, M. Kogo, Velopharyngeal Closure Function Strategy in Articulation: Mechanical Dynamics Modeling of Air Flow in the Vocal Tract, 2016 IEEE 16th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (BIBE), 198-203, 2016.

[7] K. Hatanaka, M. Nakagawa, T. Watanabe, K. Nozaki,
H. Tamagawa, C. Sugiyama, K. Nohara, T. Sakai, K. Satoh, M. Kariyasu, T. Yamashiro, M. Kogo, Surface Model Construction from 4D-CT for Articulation Simulation, The 12th World Congress on Computational Mechanics, 2016.
センター報告

・2016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 ・・・・・・・・・・・43
・SC16 出展報告 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 57
・第 22 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2016)報告および 第 23 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2017)告知 ・・・・・・・・・・63
・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・65
・2017年度大規模計算機システム利用講習会 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・67
・2016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 ・・・・・・・・・・・・・・68
・2017 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況 ・・・・・76
・2017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 ・・・・・・・・・ 77
・2017年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況 ・・・・・・・・・・・・・ 78
・大規模計算機システム Q&A ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 79

2016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 2016 年 4 月から 2017 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] 藤原邦夫,佐々木翔平,芝原正彦,"固体壁面 近傍の水分子に凝固現象が与える影響に関 する分子動力学解析", Thermal Science & Engineering, vol. 25, No. 1, pp. 9-16, 2017.
- [2] Fujie Tang, Tatsuhiko Ohto, Taisuke Hasegawa, Mischa Bonn, and Yuki Nagata, "π +- π + stacking of imidazolium cations enhances molecular layering of room temperature ionic liquid at their interfaces", Phys. Chem. Chem. Phys., 19, 2850-2856, 2017.
- [3] 西田修三,岡田浩明,中谷祐介,中友太郎,"発電 所取放水を利用した高閉鎖性海域の流動制 御に関する検討",土木学会論文集,B2,海岸 工学(査読中),2017.
- [4] M. Hirata, S. Okino & H. Hanazaki "Radiation of short waves from the resonantly excited capillarygravity waves", Journal of Fluid Mechanics, vol. 810, pp.5-24, January 2017.
- [5] S. Okino, S. Akiyama & H. Hanazaki, "Velocity distribution around a sphere descending in a linearly stratified fluid", Journal of Fluid Mechanics(accepted).
- [6] Y. Fujimoto and S. Saito, "Interlayer distances and band-gap tuning of hexagonal boron-nitride bilayers", Journal of the Ceramic Society of Japan, 124, 584-586, 2016.
- Y. Fujimoto and S. Saito, "Gas adsorption, energetics and electronic properties of boron- and nitrogen-doped bilayer graphenes", Chemical Physics, 478, 55-61, 2016.
- [8] Y. Fujimoto and S. Saito, "Band engineering and

relative stabilities of hexagonal boron-nitride bilayers under biaxial strains", Physical Review B, 94, 245427_1-8, 2016.

- [9] T. Shiroto et al., "High-density implosion via suppression of Rayleigh-Taylor instability", J. Phys. Conf. Ser. 717, 12051, 2016.
- [10] T. Shiroto et al., "Numerical demonstration of high-Z doping scheme on ignition-relevant scale implosion", Phys. Plasmas 23, 122705, 2016.
- [11] H. Sawada et al., "Flash K α radiography of laser-driven solid sphere compression for fast ignition", Appl. Phys. Lett. 108, 254101, 2016.
- [12] T. Hiejima, "Effects of streamwise vortex breakdown on supersonic combustion", Physical Review E, 93 [4], 043115 (15 pages), 2016.
- T. Hiejima, "Theoretical analysis of streamwise vortex circulation induced by a strut injector", Physical Review Fluids, 1 [5], 054501 (14 pages), 2016.
- [14] D. Muto, H. Terashima, N. Tsuboi, "Characteristics of Jet-Mixing at Supercritical Pressure: Effects of Recess Length and Post Height", TRANSACTIONS OF THE JAPAN SOCIETY FOR AERONAUTICAL AND SPACE SCIENCES, AEROSPACE TECHNOLOGY JAPAN, Vol.14 (2016), Pa_45-Pa_52, No.ists30, 2016.11.
- [15] N. Tsuboi, S. Eto, A. K. Hayashi, T. Kojima ,
 "Front Cellular Structure and Thrust Performance on Hydrogen-Oxygen Rotating Detonation Engine", Journal of Propulsion and Power, Vol. 33, No.1, 100-111, 2017.
- [16] T. Niibo, Y. Morii, M. Asahara, N. Tsuboi, A.K.Hayashi, "Numerical Study on Direct Initiation

of Cylindrical Detonation in H₂/O₂ Mixtures: Effect of Higher-Order Schemes on Detonation Propagation", Combustion Science and Technology, Vol.188, Issue 11-12, pp. 2044-2059, 2016.

- S. Eto, N. Tsuboi, K. Kojima, A. K. Hayashi,
 "Three-dimensional Numerical Simulation of a Rotating Detonation Engine: Effects of the Throat of a Converging-diverging Nozzle on Engine Performance", Combustion Science and Technology, Vol. 188, Issue 11-12, pp. 2105-2116, 2016.
- [18] S. ETO, Y. WATANABE, N. TSUBOI, T. KOJIMA, A. K. HAYASHI, "Numerical Simulation of the Effects of Nozzle on Thrust Performance of Rotating Detonation Engine", Science and Technology of Energetic Materials, Vol.77, No.5, pp.122-127, 2016.
- [19] K. Kishimoto, S. Okada, "Influence of the Defects on the Electronic Structures of Bilayer Graphene", Surf.Sci, 644, 18, 2016.
- [20] A.Yamanaka, S. Okada, "Energetics and electronic structures of graphene nanoribbons under a lateral electric field", Carbon 96, 351, 2016.
- [21] M. Maruyama, S. Okada, "Magnetic Properties of Graphene Quantum Dots Embedded in h-BN Sheet", J.Phys.Chem.C120, 1293, 2016.
- [22] A. Yamanaka, S. Okada, "Influence of electric field on electronic states of graphene nanoribbons under a FET structure", Jpn.J.Appl.Phys.55, 35101, 2016.
- [23] J. Sorimachi, S. Okada, "Influence of fullerene cages on energetics of dipole moment of encapsulated water molecule", Jpn.J.Appl.Phys.55, 04EP02, 2016.
- [24] U. Ishiyama, N.-T. Cuong, S. Okada, "Anomalous electrostatic potential properties in CNT thin films under a weak external electric field ", Appl.Phys.Express 9, 45101, 2016.
- [25] K. Narita, S. Okada, "Geometric and electronic structures of corannulene polymers: Ultra narrow

graphene ribbons with corrugation and topological defects", Chem.Phys.Lett.650, 76, 2016.

- [26] A. Hasegawa, S. Okada, "Effect of structural deformation on carrier accumulation in semiconducting carbon nanotubes under an external electric field", Jpn.J.Appl.Phys.55, 45101, 2016.
- [27] T. Kochi, S. Okada, "Energetics and electronic structure of tubular Si nanoscale vacancies filled by carbon nanotubes", Jpn.J.Appl.Phys.55, 55101, 2016.
- [28] K. Narita, S. Okada, "Geometric and electronic structures of one-dimenisonally polymerized coronene molecules", Jpn.J.Appl.Phys.55, 06GF02, 2016.
- [29] K. Kishimoto, S. Okada, "Electron-state tuning of bilayer graphene by defects", Jpn.J.Appl.Phys.55, 06GF06, 2016.
- [30] J. Sorimachi, S. Okada, "Electrostatic properties of fullerenes under an external electric field: Firstprinciples calculations of energetics for all IPR isomers from C60 to C78", Chem.Phys.Lett.659, 1, 2016.
- [31] T. Kochi, S. Okada, "Effect of an intersection of carbon nanotubes on the carrier accumulation under an external electric field", Appl.Phys.Express
 9, 85103, 2016.
- [32] A. Yamanaka, S. Okada, "Energetics and electronic structure of h-BN nanoribbons", Sci.Rep.6, 30653, 2016.
- [33] Y. Gao, T. Yayama, S. Okada, "Polar properties of a hexagonally bonded GaN sheet under biaxial compression", Appl. Phys. Express 9, 95201, 2016.
- [34] M. Maruyama, N.-T. Cuong, S. Okada, "Coexsistence of Dirac cones and Kagome flat bands in two-dimensional network of hydrocarbon molecules", Carbon 109, 755, 2016.
- [35] R. Taira, A. Yamanaka, S. Okada, "Electronic structure modulation of graphene edges by chemical functionalization", Appl. Phys. Express 9,

115102, 2016.

- [36] S. Furutani, S. Okada, "Electronic properties of pentaorgano [60]fullerenes under an external electric field", Appl. Phys. Express 9, 115103, 2016.
- [37] K. M. Bui, V. A. Dinh, S. Okada, T. Ohno, "Naion diffusion in NASICON-type solid electrolyte: a density functional study", Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 27226, 2016.
- [38] Shin Inada, Nirato Shibata, Michiaki Iwata, Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Takanori Ikeda, Kazuyuki Mitsui, Halina Dobrzynski, Mark R. Boyett, Kazuo Nakazawa, "Simulation of ventricular rate control during atrial fibrillation using ionic channel blockers", Journal of Arrhythmia, 2017 (in press).
- [39] Kubo T, Ashihara T, Tsuboutchi T, Horie M, "Significance of integrated in silico transmural ventricular wedge preparation models of human nonfailing and failing hearts for safety evaluation of drug candidates", J Pharmacol Toxicol Methods, 2017, 83, 30-41.
- [40] Hongwei Chang, Jue Li, Andrew F. James, Shin Inada, Stephanie C.M. Choisy, Clive H. Orchard, Henggui Zhang, Mark R. Boyett, Jules C. Hancox, "Characterization and influence of cardiac background sodium current in the atrioventricular node", Journal of Molecular and Cellular Cardiology, Vol.97, pp.114-124, 2016.
- [41] Hasegawa K, Watanabe H, Hisamatsu T, Ohno S, Itoh H, Ashihara T, Hayashi H, Makiyama T, Minamino T, Horie T, "Early repolarization and risk of arrhythmia events in long QT syndrome", Int J Cardiol 2016, 223, 540-542.
- [42] Satoshi Ii, Shigeo Wada, "Direct numerical simulation of expiratory crackles: Relationship between airway closure dynamics and acoustic fluctuations", Journal of Biomechanics, Vol. 50, pp. 234-239, 2017.
- [43] Hiroyuki Hara et al., "Characteristics of the soft x-ray emission from laser-produced highly

charged platinum plasmas", Applied Physics Express, Vol.9, No.6, pp.066201-1-066201-4, May 27,2016.

- [44] Mihoko Konishi, Taro Matsuo, Kodai Yamamoto, Matthias Samland, Jun Sudo, Hiroshi Shibai, Yoichi Itoh, Misato Fukagawa, Takahiro Sumi, et al., "A Substellar Companion to Pleiades HII 3441", Publications of the Astronomical Society of Japan, Vol.68, No.6, 92, Dec. 2016.
- [45] 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.
- [46] N. Kazuno, T. Tsukahara, M. Motosuke, "Laplace pressure versus Marangoni convection in photothermal manipulation of micro droplet", The European Physical Journal Special Topics, in Press.
- [47] T. Ishida, T. Tsukahara, "Friction factor of annular Poiseuille flow in a transitional regime", Advnces in Mechanical Engineering, Vol.9, No.1(2017), DOI: 10.1177/1687814016683358 (10 pages).
- [48] T. Ishida, Y. Duguet, and T. Tsukahara, "Transitional structures in annular Poiseuille flow depending on radius ratio", Journal of Fluid Mechanics, Vol. 794, 2016, R2 (11 pages).
- [49] 足立理人,大森健史,梶島岳夫,"上昇気泡からの高シュミット数条件下における物質輸送の数値解析手法の開発",日本機械学会論文集,Vol.82,No.839, p.16-00079, 2016.
- [50] 國嶋雄一,梶島岳夫,蔦原道久,"差分格子ボル ツマン法における高次の非線形スキーム(チ ャンネル乱流のDNSによる評価)",日本機械 学会論文集, Vol.82, No.840, p.16-00204, 2016.
- [51] 兼子泰明,大森健史,梶島岳夫,"水面効果を受ける運動翼に働く流体力の数値解析",日本 機械学会論文集, Vol.82, No.841, p.16-00112, 2016.
- [52] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi and Takeo

Kajishima, "Wake structures of a particle in straight and curved flows", Springer Proceedings in Physics, Series Vol.185, pp.189-194, 2016.

- [53] Norikazu Sato, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, Masahide Inagaki, Nariaki Horinouchi, "A consistent direct discretization scheme on Cartesian grids for convective and conjugate heat transfer", Journal of Computational Physics, Vol.321, pp.76-104, 2016.
- [54] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Interaction force and residual stress models for volume-averaged momentum equation for flow laden with particles of comparable diameter to computational grid width", International Journal of Multiphase Flow, Vol.85, pp.298-313, 2016.
- [55] J. D. Baniecki, T. Yamazaki, D. Ricinschi, Q. Van Overmeere, H. Aso, Y. Miyata, H. Yamada, N. Fujimura, R. Maran, T. Anazawa, N. Valanoor and Y. Imanaka, "Strain Dependent Electronic Structure and Band Offset Tuning at Heterointerfaces of ASnO₃ (A = Ca, Sr, and Ba) and SrTiO₃", Scientific Reports 7 41725 (2017).
- [56] K. Horiuti, S. Yanagihara and T. Tamaki, "Nonequilibrium state in energy spectra and transfer with implications for topological transitions and SGS modeling", Fluid Dyn, Res. 48, 021409, 2016.
- [57] M. Matsumoto and G. Miyashita, "Efficiency and stability of pulse compression using SBS in a fiber with frequency-shifted feedback", IEEE Photon. Technol.Lett, Vol. 29, No.1, pp. 3-6, 2017.
- [58] Takashi Ohta, "Turbulence structures in highspeed air flow along a thin cylinder", Journal of Turbulence, Published online, pp.1-15, 07 Mar 2017.

2. 国際会議会議録掲載論文

- Keita Jinno, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi and Toshitake Ando, "Direct Numerical Simulation of a Row of Impinging Jets", Proceedings of the 20th Australasian Fluid Mechanics Conference, USB, 4p, Dec.2016.
- [2] M. Shibahara, T. Suwa, and K. Matsui, "MO-LECULAR DYNAMICS STUDY ON EFFECT OF SLIT STRUCTURE AT NANOMETER SCALE ON TIME AND SPATIALLY RE-SOLVED INTERFACIAL THERMAL RE-SISTANCE DURING CONDENSATION", The 4th International Forum on Heat Transfer, Japan, Nov. 2016.
- [3] G. Uno, M. Shibahara, and Y. Ueki, "MOLECU-LAR DYNAMICS STUDY ON INFLUENCES OF NANOSTRUCTURED SURFACE ON HET-EROGENEOUS NUCLEATION OF LIQUID DROPLETS", The 27th International Symposium on Transport Phenomena, Honolulu, USA, Sep. 2016.
- [4] Okino & H. Hanazaki, "Spectral Analyses of High Prandtl Number Stratified Turbulence", 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM), August 2016.
- [5] Okino & H. Hanazaki, "Direct numerical simulation of stratified turbulence containing a high Prandtl number scalar", RIMS Camp-Style Seminar, Dynamics of wall-bounded shear flows, August 2016.
- [6] H. Hanazaki & R. Inomata, "Numerical simulation of the capillary-gravity waves excited by an obstacle", 69th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics, Bulletin of the American Physical Society 61 (20), p.534, November 2016.
- [7] H. Hanazaki, "Turbulence in a Fluid Stratified by a High Prandtl-Number Scalar", The 25th Workshop on Sustained Simulation Performance ,

Cyberscience Center, Tohoku University, March 2017.

- [8] Y. Fujimoto and S. Saito, "Energetics and scanning tunneling microscopy images of B and N defects in graphene bilayer", Springer Proceedings in Physics, 186, 107-112, 2017.
- [9] M. Hasegawa, "M. Hasegawa, Chiral symmetry breaking, instantons, and monopoles in lattice QCD", Meeting of the working group on theory of hadronic matter under extreme conditions, JINR, Dubna, Russia, 2016.
- [10] Nobuyuki Tsuboi, Keisuke Fujimoto, Daiki Muto, Makoto Asahara, A. Koichi Hayashi, "Three-dimensional Numerical Simulation on Dispersion Process of Unsteady High Pressure Hydrogen Jet Flow", AIAA SciTech 2017, January 2017.
- [11] Tomoyuki Muta, Nobuyuki Tsuboi, Yusuke Maru, Kazuhisa Fujita, "Numerical Study of Aerodynamic Characteristics on Waverider with Elevon and Tail Wing", Thirteenth International Conference on Flow Dynamics, October 2016.
- [12] T. Araki, D. Muto, H. Terashima, N. Tsuboi, "Numerical Simulation for Effects of Pressure on Cryogenic Coaxial Jet under Supercritical Pressure", 2017 AIAA Science and Technology Forum and Exposition, AIAA-2017-1108, Texas, USA, January, 2017.
- [13] N. Tsuboi, A. K. Hayashi, T. Kojima, Y. Morii, "Simulation on Rotating Detonation Engine: Effects of Converging-Diverging Nozzlee, Non-uniform Injection, and Hydrocarbon-fueled Detonation", International Workshop on Detonation for Propulsion 2017, 2016.07.13-15.
- [14] Ryo Haraguchi, Yoshiaki Morita, Taka-aki Matsuyama, Hatsue Ishibashi-Ueda, Hirofumi Seo, "Construction of Computational Cardiac Model with Congenital Heart Diseases based on Isolated Human Hearts - Progress Overview FY2016 -", The 3rd International Symposium on Multidisciplinary Computational Anatomy, Proceedings of

the 3rd International Symposium on Multidisciplinary Computational Anatomy, pp.217-219.

- [15] Ryo Haraguchi, Taka-aki Matsuyama, Yoshiaki Morita, Hatsue Ishibashi-Ueda, Hirofumi Seo, "Cardiac Computational Modeling Project using Human Specimens with Congenital Heart Disease International Forum on Medical Imaging in Asia", Proceedings of International Forum on Medical Imaging in Asia (IFMIA), 2017, pp.217-218.
- [16] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Quickly remapping by novel online phase mapping system complemented by in silico predictions is very useful for confirming the effectiveness of non-PAF ablation(ExTRa Mapping Project)", The 38th Annual Congress of the European Society of Cardiology (ESC Congress 2016), Poster, Rome, 2016/8/27-31.
- [17] Kensuke Sakata, Takashi Ashihara, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Stationary rotors are not therapeutic targets in patients with non-paroxysmal atrial fibrillation?: A clinical study employing a novel "online" real-time phase mapping system (ExTRa Mapping)", Heart Rhythm 2016 Scientific Sessions, Poster, San Francisco, 2016/05/04-07.
- [18] Oda Y., Kiyozumi H., Takeishi K., "Effect of Density Ratio on the Film Cooling with Shaped Cooling Hole and Swirled Coolant", Proc. of Asian Conference on Thermal Sciences 2017 (ACTS2017), ACTS-P00417, Mar. 2017.
- [19] S. Inoue, T. Tsukahara, S. Jakirlić and Y. Kawaguchi, "A Reynolds stress model for drag-reducing viscoelastic turbulent flow", In: Proceedings of 11th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Palermo, Italy, 6 pages, Sep. 21-23 (2016).

- [20] T. Ishida, T. Tsukahara and S. Inooka, "Investigating the lower critical Reynolds number focusing on the turbulent spot and stripe at plane channel flow", In:Abstracts of 11th Euromech Fluid Mechanics Conference (EFMC11), Seville, Spain, #429, Sep. 12-16 (2016).
- [21] K. Kunii, T. Ishida, and T. Tsukahara, "Helical turbulence and puff in transitional sliding Couette flow", In: Abstract of 24th International Congress of Theoretical Applied Mechanics (ICTAM2016), Montreal, Canada, pp.929-930, Aug. 21-26 (2016).
- [22] Shitanro Takeuchi, Suguru Miyauchi, Takeo Kajishima, "Mass transfer of solute and solvent across a deforming permeable membrane", 9th International Conference on Multiphase Flow (ICMF-2016), Firenze, Italy, Abstract 337, 2016.5.
- [23] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Volume-averaged equations for direct numerical simulation of particle-dispersed flow under a grid resolution comparable to particle diameter and Kolmogorov length scale", 9th International Conference on Multiphase Flow (ICMF-2016), Firenze, Italy, Abstract 512, 2016.5.
- [24] Jingchen Gu, Katsuya Kondo, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Direct numerical simulation of heat transfer in dense particle-liquid two-phase media", 9th International Conference on Multiphase Flow (ICMF-2016), Firenze, Italy, Abstract 517, 2016.5.
- [25] Jingchen Gu, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Effects of solid particles on heat transfer in dense particle-liquid two-phase media based on Rayleigh number", Two-phase modelling for Sediment dynamics in geophysical flows (THESIS-2016), Tokyo, 2016.9.
- [26] Yuichi Kunishima, Takeo Kajishima, "A 3D compressible Lattice Boltzmann model and its application to direct simulation of aeroacoustics", 11th Asian Computational Fluid Dynamics Conference (ACFD11), Dalian, China, 2016.9.
- [27] Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Apparent and

actual dynamic contact angles in confined twophase flows", 69th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics, Portland, Oregon, USA, Abstract: M22.00004, 2016.11.

- [28] Hiroshi Otake, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Computation of two-phase flows with an interface-capturing nethod on arbitrarily-shaped polygonal meshes", 69th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics, Portland, Oregon, USA, Abstract: G12.00005, 2016.11.
- [29] D. Ricinschi, "Impact of Magnetic Configuration and Local Electric Dipoles on Electronic Properties of BiFeO₃ with Spatial Bond Length Modulation", CIMTEC 2016 5th International Conference on Smart and Multifunctional Maaterials, Structures and Systems, Perugia, Italy, June 2016
- [30] D. Ricinschi, "First-Principles Study of Dopant and Defect-Induced Charge Transfer with Spin-State Crossover in Multiferroic BiFeO₃", IEEE ROMSC 2016, Iasi, Romania, June 2016.
- [31] M. Matsui, K. Horiuti and K. Tsuboki, "The Super Typhoon - its structure and formation process", Proc. International Workshop on Theoretical Aspects of Near-Wall Turbulence Studies, Kansai Seminar House, Kyoto, June 28-3, 2016.
- [32] K. Horiuti and S. Suzuki, "Contravariant and covariant polymers in elasto-inertial viscoelastic turbulence", Proc. of 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, Montréal, Canada, August 21-26, 2016.
- [33] M. Matsumoto and G. Miyashita, "Pulse compression using stimulated Brillouin scattering in fiber with frequency-shifted loopback", Conference on Lasers and Electro-Optics 2016 (CLEO2016), JTu5A.125, June 7, 2016.
- [34] Macoto Kikuchi, "Finding Folding Funnels in Random Network", Dynamic Days Asia Pacific, Hong Kong, China, December 2016.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] サンムガ,辻本公一,社河内敏彦,安藤俊剛,
 "DNS によるダイナミック制御した噴流の 構造解析",日本機械学会 2015 年度年次大会 講演論文集,DVD, 5p, Sep.2016.
- [2] 神野敬太,辻本公一,社河内敏彦,安藤俊剛,"間 欠制御された多重衝突噴流の DNS",日本機 械学会 2015 年度年次大会講演論文集,DVD, 5p, Sep.2016.
- [3] 神野敬太,辻本公一,社河内敏彦,安藤俊剛,"単
 一・多重衝突噴流に対する間欠制御の DNS",
 第 94 期日本機械学会流体工学部門講演会講
 演論文集, USB, 3p, Nov.2016.
- [4] 神野敬太,辻本公一,社河内敏彦,安藤俊剛,"間 欠制御された単独・多重衝突噴流の構造解析", 日本機械学会東海支部第 66 期総会講演会講 演論文集, USB, 2p, Mar.2017.
- [5] 北原歓伍,辻本公一,サンムガ,社河内敏彦,安藤俊剛,"自由噴流における回転制御のDNS", 日本機械学会東海支部第 66 期総会講演会講 演論文集, USB, 2p, Mar.2017.
- [6] 諏訪孝典,芝原正彦, "スリット状ナノ構造が 凝縮時の界面熱抵抗に及ぼす影響",日本伝熱 学会 第53回日本伝熱シンポジウム講演論文 集,2016.
- [7] 宇野元気,植木祥高,芝原正彦,"ナノメートル スケールの壁面微細構造が凝縮核生成に及ぼ す影響に関する分子動力学的研究",日本伝熱 学会 第 53 回日本伝熱シンポジウム講演論文 集,2016.
- [8] 吉川裕,牛島悠介,"熱フラックスの日周変動 が海面加熱期の混合層深度に与える影響に関 する研究",2016年度海洋乱流研究会,九 州大学,2017年1月.
- [9] 吉川裕,牛島悠介,"熱フラックスの日周変動 が海面加熱期の混合層深度に与える影響 – 緯度依存性に着目して-",2016年度日本 海洋学会秋季大会,鹿児島大学,2016年9月.

- [10] Y. Yoshikawa and Y. Ushijima, "The effect of diurnal cycle of surface heat flux on the temperature structure in the ocean surface boundary layer", Japan Geoscience Union Meeting, Chiba, 2016 年 5月.
- [11] 沖野真也,花崎秀史,"高プラントル数スカラ
 一を含む成層乱流のスペクトル解析",第 53
 回日本伝熱シンポジウム,2016年5月.
- [12] 沖野真也,花崎秀史,"高プラントル数のスカ ラーによる成層乱流の大規模直接数値計算", 京都大学数理解析研究所共同研究集会「高レ イノルズ数の流れを記述するモデルの数理」, 2016年7月.
- [13] 細井聖也,花崎秀史,"物体により励起される 表面張力波 —オイラー方程式の解と弱非線 形理論の解—",京都大学数理解析研究所共同 研究集会 「非線形波動現象の数理とその応 用」,2016年10月.
- [14] 猪又諒祐,花崎秀史,"二層流体中の界面波動
 ーオイラー方程式の解と弱非線形理論の解
 一",京都大学数理解析研究所共同研究集会
 「非線形波動現象の数理とその応用」,2016年
 10月.
- [15] 沖野真也,"塩分成層流体中の乱流と物体まわりの流れ",機械学会関西支部流体工学懇話会, 2016年12月.
- [16] 沖野真也, "塩分成層流体における乱流の大規 模直接数値シミュレーション", Cyber HPC Symposium, 大阪大学サイバーメディアセン ター, 2017年3月.
- [17] 山木陸呂宇,大倉一郎,"曲げとせん断を受けるアルミニウム合金桁の耐荷力",平成28年度土木学会全国大会第71回年次学術講演会発表,2016年9月.
- [18] 諏訪志典,川嶋裕介,川下理日人,藤居由基,田雨時,藤岡弘道,有澤光弘,高木達也,"分子軌道計算によるスペクトルの精度の検討",2016年度第39回ケモインフォマティクス討論会, 静岡大学,2016年9月.

[19] 高谷裕浩,上野原努,水谷康弘, "フォトニック

ナノジェットを利用した表面微細加工に関す る基礎研究",砥粒加工学会誌, Vol.61, No.4, pp179-182, April 2017.

- [20] Shohiro Sho, "A parallel semiconductor device simulation on SX-ACE", NEC user group meeting, Osaka university, Japan, 2016.
- [21] 鍾菁廣,小田中紳二,"メニィコア時代の3次 元ドリフト拡散モデルの並列化手法",応用物 理学会 シリコンテクノロジー分科会第193
 回研究集会, pp.31-35, July 2016.
- [22] 小田哲平,比江島俊彦, "縦渦導入型ストラットから生じる斜め衝撃波と縦渦の超音速燃焼場に対する効果",日本機械学会関西支部第92期定期総会講演会論文集, No.174-1, pp.175, Mar.2017.
- [23] 武藤大貴,寺島洋史,坪井伸幸, "超臨界圧力下
 における極低温同軸噴流への噴射条件の影響",第30回数値流体力学シンポジウム,A03-3,2016,12月.
- [24] 藤本啓佑,武藤大貴,坪井伸幸,朝原誠,"高圧水 素噴流の漏えい挙動に関する 3 次元数値解 析",第48回流体力学講演会/ANSS, 2016,7.
- [25] 藤本啓佑,武藤大貴,坪井伸幸,朝原誠,"高圧水 素噴流の拡散過程の3次元数値解析",日本機 械学会第94期流体工学部門講演会,2016,11.
- [26] 牟田智幸,坪井伸幸,丸祐介,藤田和央,"エレボンを取り付けたWaverider形状の数値解析による空力特性評価",第48回流体力学講演会/
 第34回航空宇宙シミュレーション技術シンポジウム,2016,7.
- [27] 荒木天秀,藤大貴,島洋史,坪井伸幸, "超臨界圧 下における同軸噴流への圧力の影響に関する 数値解析",第48回流体力学講演会/第34回 航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジ ウム,1C12,2016,7.
- [28] 岩佐聡洋,武藤大貴,藤本圭一郎,坪井伸幸,"液
 体燃料ロケットタンク破壊時の推進剤ジェット・主流の干渉メカニズムに関する数値解析",
 日本機械学会 2016 年度年次大会, G0500205,
 2016,9.

- [29] 小塚悟史,武藤大貴,寺島洋史,坪井伸幸,"超臨 界圧下の主流に直交する極低温噴流へ噴射条 件が及ぼす影響",日本航空宇宙学会西部支部 講演会(2016),JSASS-2016-S007, 2016,11.
- [30] 宇崎友規,牟田智幸,坪井信幸,丸祐介,藤田和央, "オービターを搭載したWaveriderの空力特性 に関する数値解析及び風洞試験",日本機械学 会九州支部第70期講演会,502,2017,3.
- [31] 西川佳希,坪井伸幸,伊藤隆,野中聡,"再使用観 測ロケットの空力特性に関する数値解析及び 風洞試験",日本機械学会九州支部第70期総 会・講演会,501,2017,3.
- [32] 江藤成一朗,坪井伸幸,小島孝之,林光一,"3 次 元数値解析によるノズル付きローテーティン グデトネーションエンジンの性能評価:スロ ート形状の推進性能に与える影響",第 60 回 宇宙科学技術連合講演会,2A07,2016.
- [33] 小島孝之,江藤成一朗,坪井伸幸,林光一, "RDE の液水液酸ロケット燃焼器適用に向けた数値 解析",平成28年度宇宙輸送シンポジウム, STCP-2016-004,2017.
- [34] 新甫友昂,吉田啓祐,岩井麻衣子,坪井伸幸,林光
 一,"障害物を有する管内での爆燃から爆轟への遷移に関する2次元数値解析",第54回燃
 焼シンポジウム,E334,2016.
- [35] 岩井麻衣子,吉田啓祐,森井雄飛,坪井伸幸,林光
 ー、"メタン/酸素デトネーションの 2 次元数
 値解析:反応モデルの影響",第48回流体力学
 講演会/第 34 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム、2E06、2016,7.
- [36] 岩井麻衣子,吉田啓祐,森井雄飛,坪井伸幸,林光 一,"炭化水素を用いた火炎と衝撃波の干渉に よる爆轟遷移に関する数値解析 -火炎形状の 影響-",平成28年度衝撃波シンポジウム,1B3-2, 2017,3.
- [37] 吾郷愛由,新甫友昂,坪井伸幸,林光一,"2次元 数値解析によるデトネーション遷移に与える 障害物高さの影響:遷移メカニズムについて", 平成 28 年度衝撃波シンポジウム, 1B4-2, 2017,3.

- [38] 塚本真章,江藤成一朗,坪井伸幸,小島孝之,林光 一,"二次元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内部流れ場の解 明:非理想型噴射口の影響調査",日本機械学 会九州支部第70期総会・講演会,206,2017,3.
- [39] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Targeting Non-Passive Activation Regions by Ex-TRa Mapping System Enhances Efficiency of Ablation for Non-Paroxysmal Atrial Fibrillation", The 81st Annual Scientific Meeting of the Japanese Circulation Society, Kanazawa, 2017/3/17-19.
- [40] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Quick Remapping by ExTRa Mapping System is Very Useful for Confirming the Effectiveness of Non-Paroxysmal Atrial Fibrillation Ablation", The 81st Annual Scientific Meeting of the Japanese Circulation Society, Kanazawa, 2017/3/17-19.
- [41] Kensuke Sakata, Takashi Ashihara, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Minoru Horie, "Relationship between Low-Voltage Areas and Distribution of Non-PAF Drivers Visualized by Novel Online Phase Mapping System: ExTRa Mapping Project", The 81st Annual Scientific Meeting of the Japanese Circulation Society, Kanazawa, 2017/3/17-19.
- [42] 稲田慎,井上優子,柴田仁太郎,山本剛,鈴木信宏, 芦原貴司,池田隆徳,三井和幸,中沢一雄,"12誘 導心電図から期外収縮発生起源同定手法の検 討", MEとバイオサイバネティクス研究会, 口頭発表,東京,2017/3/13-14.
- [43] 鶴岡奨悟,井尻敬,平林晃,稲田慎,白石公, 中沢一雄,"影響範囲を限定した領域拡張によ る心臓の領域分割",日本機械学会第29回バ イオエンジニアリング講演会,口頭発表,名 古屋,2017/1/19-20.
- [44] Shin Inada, Takashi Ashihara, Kazuyuki Mitsui,

Nitaro Shibata, Kazuo Nakazawa, "Three-dimensional method of detecting atrial focal activity using 12-lead electrocardiogram", 第63回日本不 整脈心電学会学術大会, ポスター, 札幌, 2016/7/14-17.

- [45] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Challenge of in silico in developing the innovation of catheter ablation for non-paroxysmal atrial fibrillation: Ex-TRa Mapping Project", The 63rd Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society, Sapporo, 2016/7/14-1.
- [46] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Autonomic nerve activity is not involved in the mechanisms of non-paroxysmal atrial fibrillation: ExTRa Mapping Project", The 63rd Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society, Sapporo, 2016/7/14-17.
- [47] Kensuke Sakata, Takashi Ashihara, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Relationship between visualized wave dynamics and CFAEs in non-paroxysmal AF: A clinical study employing a novel real-time phase mapping system (ExTRa Mapping Project)", The 63rd Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society, Sapporo, 2016/7/14-17.
- [48] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Significance of direct recording of AF wave dynamics rather than detecting indirect indicator of driver/perpetuator for non-PAF ablation (ExTRa Mapping project)", The 63rd Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society, Sapporo, 2016/7/14-17.
- [49] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya

Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Exploration of non-paroxysmal atrial fibrillation drivers by an in silico-integrated online and real-time phase mapping system: ExTRa Mapping Project", The 63rd Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society, Sapporo, 2016/7/14-17.

- [50] 稲田慎,相庭武司,原口亮,芦原貴司,草野研吾, 清水渉,池田隆徳,中沢一雄, "医工連携による 致死性不整脈メカニズム解明への取り組み", 第55回日本生体医工学会大会, 口頭発表 オ ーガナイズドセッション, 富山, 2016/4/26-28.
- [51] 稲田慎,竹村匡正,鈴木信宏,芦原貴司,三井和幸, 柴田仁太郎,中沢一雄, "12 誘導心電図から再 構成したベクトル心電図による心房内自動能 発生部位の3次元位置同定の検討",第55回 日本生体医工学会大会,口頭発表,富山, 2016/4/26-28.
- [52] 重文将,稲田慎,伊井仁志,中沢一雄,和田成生, "左心室の電気生理・力学統合シミュレーション:興奮伝播様式の違いが収縮動態に与える影響",第55回日本生体医工学会大会,口 頭発表,富山,2016/4/26-28.
- [53] 芦原貴司,坂田憲祐,小澤友哉,土谷健,原口亮, 稲田慎,中沢一雄,堀江稔,"オーガナイズドセ ッションOS18「多階層な生体機能に基づく不 整脈疾患における可視化および計算科学的研 究」:慢性心房細動アブレーションに向けたオ ンラインリアルタイム位相マッピングの意 義:ExTRa Mapping研究",第55回日本生体医 工学会大会,口頭発表,オーガナイズドセッ ション,富山,2016/4/26-28.
- [54] 大森健史,前田紘志,小林要佑,梶島岳夫,"微小 流路内の二相流における見かけの動的接触角 と局所の動的接触角",日本混相流学会混相流 シンポジウム,Aug. 2016.
- [55] 和久本剛,小田豊, "Concurrent LESを用いたリ ブ付設衝突噴流場の瞬時構造解析",第 53 回 日本伝熱シンポジウム講演論文集, CD-ROM, A211,2016年5月.

- [56] 藤原司,小田豊,武石賢一郎,"LESデータに基づく熱連成解析手法の予測性能改善に向けた検討",日本機械学会熱工学コンファレンス2016 講演論文集,USB:H135,2016 年 10 月.
- [57] 藤原司,小田豊,武石賢一郎,"LES統計量と高 次GGDH熱流束モデルによる熱連成解析手法 の開発",日本機械学会関西支部第92期定時 総会講演会講演論文集,p.233,2017年3月.
- [58] 山崎龍朗,小田豊,松本亮介,香月正司,"脈動流 下における平板上乱流熱伝達に関するDNS", 日本機械学会関西支部第 92 期定時総会講演 会講演論文集, p.31, 2017 年 3 月.
- [59] 佐久間悠人,田村哲郎,河合英徳,細井友貴,"都 市キャノピーにおける渦構造・拡散挙動に及 ぼす熱的効果のLES",第 24 回風工学シンポ ジウム論文集, pp.61-66, Dec.2016.
- [60] 佐久間悠人,田村哲郎,河合英徳,尾崎央明,"都市ブロック群上の乱流場におけるLES",第30回数値流体力学シンポジウム論文集, Dec.2016.
- [61] 坪井和也,留田貴弘,冨田栄二,長谷川達也,"ル イス数の異なるDNSデータを用いた乱流予混 合火炎の数値計測",第 54 回燃焼シンポジウ ム講演論文集,C132,2016年11月.
- [62] 甲斐祐亮,城崎知至,遠藤琢磨,日永田将,砂原淳, 長友英夫,千徳靖彦,"イオンビーム補助加熱 を用いたCDコア加熱の特性解析",日本物理 学会 2016 年秋季大会,13pKA-6,金沢大学 角 間キャンパス,2016 年9月13日~16日.
- [63] 城崎知至,"イオンビーム駆動高速点火レーザー核融合の特性評価",核融合科学研究所 H28 年度一般共同研究,研究会形式シンポジウム「レーザー核融合炉心プラズマと炉工の 統合的理解」,核融合科学研究所,2017年3月 13日~14日.
- [64] 藤本弦,塚原隆裕, "平面クエット乱流の大規 模構造に関する研究",日本機械学会関東学生 会第 56 回学生員卒業研究発表講演会 講演論 文集,310,2 pages,東京,3月 16-17 日 (2017).
- [65] 仁村友洋,塚原隆裕, "粘弾性流体の回転平面

クエット流におけるDNS解析 ",日本機械学 会関東学生会第 56 回学生員卒業研究発表講 演会 講演論文集,107,2 pages,東京,3月 16-17日 (2017).

- [66] 國井康平,石田貴大,塚原隆裕, "DNSによる遷 移域スライディング・クエット流の乱流間欠 率に関する研究",日本機械学会関東支部第23 期総会・講演会 講演論文集,WS0101-01, 2 pages,東京,3月16-17日 (2017).
- [67] 石田貴大,塚原隆裕, "環状流における周方向 大規模流れに起因した遷移構造の変化",日本 機械学会関東支部第 23 期総会・講演会 講演 論文集, WS0101-02, 2 pages,東京,3月 16-17日 (2017).
- [68] 猪岡翔,石田貴大,塚原隆裕,"下臨界レイノル ズ数付近における乱流斑点から帯への成長に 関する研究",日本機械学会関東支部第23期 総会・講演会 講演論文集,WS0101-04,2 pages, 東京,3月16-17日 (2017).
- [69] 数野信夫,塚原隆裕,元祐昌廣, "マイクロ液滴 駆動へのラプラス圧と温度差マランゴニ対流 による影響",第94期日本機械学会流体工学 部門講演会 講演論文集,0721,2 pages,宇部, 11月12-13日 (2016).
- [70] 石田貴大,Geert Brethouwer,Yohann Duguet,塚原
 隆裕, "粗面クエット流において発生する様々
 な準秩序構造",第 94 期日本機械学会流体工
 学部門講演会 講演論文集,1012,2 pages,宇
 部,11月12-13日 (2016).
- [71] 井上俊,塚原隆裕,川口靖夫,"粘弾性流体の抵抗低減乱流における応力方程式モデルの圧力 歪相関項",第94期日本機械学会流体工学部 門講演会 講演論文集,0319,5 pages,宇部, 11月12-13日 (2016).
- [72] 猪岡翔,石田貴大,塚原隆裕, "乱流斑点の帯状成長に注目した下臨界レイノルズ数の確率論的研究",日本流体力学会年会 2016 講演論文集,3 pages,東京,9月 26-28 日 (2016).
- [73] 國井康平,石田貴大,塚原隆裕, "遷移域スライ ディング・クエット流の局在乱流構造と統計

量に及ぼす壁面曲率の影響",日本流体力学会 年会 2016 講演論文集,4 pages,東京,9月 26-28日 (2016).

- [74] 塚原隆裕,石田貴大,戸倉彰太, "粘弾性流体の 回転平面クエット流におけるロールセル変 調",第44回可視化情報シンポジウム 講演論 文集,F106,2 pages,東京,7月19日-20日 (2016).
- [75] 数野信夫,塚原隆裕,元祐昌廣, "マイクロ液滴の界面張力駆動対流に関する研究",第53回日本伝熱シンポジウム講演論文集,D114,5
 pages,大阪,5月24日-26日 (2016).
- [76] 高木,岡本,岡野, "二成分流体における相分離
 現象を利用した伝熱促進効果"第 30 回数値流
 体力学シンポジウム, A04-3, 2016.
- [77] P. Stoyanova, S. Okamoto, Y. Takagi, Y. Okano, "Numerical simulation of the effect of liquid-liquid phase separation on the convective heat exchange in a microchannel", 化学工学会第 81 年 会, M221, 2017.
- [78] 大西領,深田利昭,竹内伸太郎,松田景吾,梶島岳 夫,"慣性粒子の乱流衝突に対する粒子解像計 算",第30回数値流体力学シンポジウム(東 京)講演論文集,A02-2,2016.12.
- [79] 原田武,梶島岳夫,竹内伸太郎,"境界層中に置 かれた弾性薄膜の運動の不安定化に関する数 値解析",第 30 回数値流体力学シンポジウム (東京)講演論文集, A02-3, 2016.12.
- [80] 平井健志,岡林希依,竹内伸太郎,梶島岳夫,"ジ グザグな3次元壁面パターンによる抵抗低減 に関する数値解析",第30回数値流体力学シ ンポジウム(東京)講演論文集,D03-4,2016.12.
- [81] 花輪理徳,竹内伸太郎,梶島岳夫,"単純せん断 流中のキャノピー層境界における運動量輸送 の解析",第 30 回数値流体力学シンポジウム (東京)講演論文集, D04-2, 2016.12.
- [82] 宮下原弥,松本正行, "光ファイバ中の誘導ブ リルアン散乱を用いたパルス圧縮", レーザー 学会学術講演会第 37 回年次大会, 07pV2, 2017 年1月 24 日.

- [83] 米村建哉,太田貴士,酒井康行,宇都宮啓紀,"乱
 流混合層のDNSにおける水素自着火の観察",
 日本流体力学会 年会 2016, Sep. 2016.
- [84] 江口大樹,太田貴士, "DNSによる粘弾性流体 乱流の空間的および時間的特徴の解明",第64
 回レオロジー検討会, Oct. 2016.
- [85] 島田雄仁,太田貴士,"圧縮性乱流境界層にお ける圧力大規模構造発生の抽出と観察",第94 期流体工学部門講演会,Nov.2016.
- [86] 杉浦龍太朗,太田貴士, "渦キャビテーション を伴う壁乱流の直接数値シミュレーション",
 第 30 回数値流体力学シンポジウ, Dec. 2016.
- [87] 一柳隆史,太田貴士,"非ニュートン粘性流体 乱流へのLESダイナミックモデルの適用性", 日本機械学会北陸信越支部第 54 講演, No. B025, Mar. 2017.
- [88] 安福健祐他5名,"大規模可視化システムを用 いた津波避難誘導灯の誘目性検証実験",日本 図学会2016年度秋季大会(東京)大会学術講 演論文集,pp.51-54,2016年11月.
- [89] 菊池誠,永田新太郎, "Folding Funnel の珍し さ",日本物理学会 2017 年秋の分科会,金沢 大学,2016 年 9 月.
- [90] 菊池誠, "Folding Funnel の珍しさII", 日本物 理学会 2017 年年会, 大阪大学, 2017 年 3 月.

4. 著書

- Y. Fujimoto, "Structure, Stabilities, and Electronic Properties of Smart Ceramic Composites", Sol-Gel based Nanoceramics Materials(Springer Publisher 2017), Chapter 4, pp.113-131.
- [2] 松尾太郎・OCメンバー,"若い散開星団および 運動星団内の惑星および褐色矮星の探査",日 本天文学会,2016年3月,天文月報109-4号 SEEDS特集内の一記事.

5. その他

[1] 清水弘樹,大倉一郎, "面内曲げを受ける縦補

剛されたアルミニウム合金板の最適断面形状 と耐荷力",平成28年度卒業研究.

- [2] 鶴見一恵,大倉一郎, "縦補剛されたアルミニ
 ウム合金板のせん断耐荷力", 平成 28 年度卒
 業研究.
- [3] 藤井祐基,大倉一郎,"面内曲げを受ける縦補
 剛された長方形板の最適断面形状と耐荷力",
 平成28年度卒業研究.
- [4] 西井智紀,大倉一郎,"圧縮を受ける縦補剛さ れたアルミニウム合金板の最適断面形状と耐 荷力",平成28年度修士論文.
- [5] 山中誠矢,大倉一郎,"せん断を受けるアルミ ニウム合金桁の耐荷力",平成28年度修士論 文.
- [6] M. Hasegawa, "Chiral symmetry breaking, instantons, and monopoles in lattice QCD by Supercomputer SX", Annual Report 2015, Topics 2015 of Research Group Supercomputer, RCNP, Osaka University, Japan (2016).
- [7] M. Hasegawa, "Chiral symmetry breaking, instantons, and monopoles in QCD", University of Pisa and INFN, Pisa, Italy (2016).
- [8] M. Hasegawa and A. Di Giacomo, "Chiral symmetry breaking, instantons, and monopoles",
 Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics,
 JINR, Dubna, Moscow, Russia (2016).
- [9] Takashi Asahina, Hideo Nagatomo, Atsushi Sunahara, Tomoyuki Johzaki, Masayasu Hata, and Yasuhiko Sentoku, "Computational study on thermal conduction in magnetized plasmas", Confernce on Laser Energy Science 2016, Yokohama, Japan(May 2016).
- [10] 朝比奈隆志,長友英夫,砂原淳,城崎知至,畑昌育, 千徳靖彦,"レーザーアブレーション領域にお ける強磁場中の非局所熱伝導の特性",日本物 理学会2016年秋季大会,金沢市(2016年9月).
- [11] Takashi Asahina, Hideo Nagatomo, Atsushi Sunahara, Tomoyuki Johzaki, Masayasu Hata, and Yasuhiko Sentoku, "Nonlocal thermal conduction due to laser-generated nonthermal electrons under

strong magnetic fields", 58th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, San Jose, California, USA(November 2016).

- [12] 上塚修平,"高濃度固気二相流を対象とした輻射伝熱 モデルの検討",大阪大学工学部卒業 論文 2017 発表.
- [13] 矢野綾香,中谷和彦,"チミンバルジを標的に したリガンド設計の量子化学的アプローチ", 日本化学会第97春季年会,口頭A口演.
- [14] 丸山実那, "Electronic Properties of sp2 Carbon Networks with Defects and Interface", 学位論文, 筑波大学.
- [15] 山中綾香, "Energetics and Electronic Properties of Edges of Two-dimensional Materials", 学位論 文, 筑波大学.
- [16] Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Apparent and Actual Dynamic Contact Angles in Con- fined Two-Phase Flows", DFD16 Meeting of The American Physical Society, Portland, Oregon, Nov. 2016.
- [17] H. Hara et al., "Feature of soft x-ray emission from laser-produced multi-charged Pt ions", ICXRL 2016, Nara, Japan, May, 2016.
- [18] Hiroyuki Hara et al., "Feature of unresolved transition array emission in carbon window soft x-ray spectral region from a laser-produced platinum plasma-Structure of enhancement and absorption of the soft x-ray emission-", 18th ICPP 2016, Kaohsiung, Taiwan, June, 2016.
- [19] 芝井広,"気球搭載遠赤外線干渉計 FITE の準 備状況報告",大気球シンポジウム(宇宙航空 研究開発機構 宇宙科学研究所),2016年11月.
- [20] Songpol Chaunchaiyakul, Takeshi Yano, Kamonchanok Khoklang, Pawel Krukowski, Megumi-Akai-Kasaya, Akira Saito, Yuji Kuwahara, "Nanoscale Analysis of Interwall Interaction in a Multiwalled Carbon Nanotube by Tip-Enhanced Raman Spectroscopy", APS March Meeting 2016, Baltimore Convention Center, Baltimore MD, USA, 14-18 Mar.(2016).

- [21] Y. Kuwahara, S. Chaunchiayakul, A. Setiadi, P. Krukowski, "Chemical Analysis of Nanomaterials by Tip-enhanced Raman Scattering Spectroscopy", International Workshop on Advanced Materials and Nanotechnology 2016 (IWAMN 2016), VNU University of Science, Hanoi, Vietnam, 3-5 Nov. (2016).
- [22] Y. Kuwahara, S. Chaunchiayakul, A. Setiadi, P. Krukowski, "Chemical Analysis of Nanomaterials by Tip-enhanced Raman Scattering Spectroscopy", The 2nd international symposium on "Recent Trends in Analysis Techniques for Functional Materials and Devices", Icho-Kaikan, Osaka University Japan, 17-19 Jan. (2016).
- [23] 桑原裕司, Chaunchayakul Songpol,高山正浩, Krukowski Pawel,赤井恵,斎藤彰,"探針増強ラマン分光法によるカーボンナノチューブの局所振動解析",2016年度精密工学会秋季大会学術講演会,茨城大学水戸キャンパス,茨城,2016年9月6-8日.
- [24] 國井康平,石田貴大,塚原隆裕, "遷移域スライ ディング・クエット流の局在乱流構造と統計 量に及ぼす壁面曲率の影響",日本流体力学会 誌「ながれ」,475-480,第35巻 第6号 (2016).
- [25] 川口靖夫,塚原隆裕, "界面活性剤水溶液流れの乱流と対流熱伝達",日本伝熱学会誌「伝熱」,
 9-14, 第55巻第231号 (2016).

SC16 出展報告

伊達 進 (准教授)¹ 木戸善之(講師)¹ 吉川隆士 (招へい教授)² Chonho Lee (特任准教授(常勤))² 笹尾朋貴³

応用情報システム研究部門¹ 先進高性能計算機システムアーキテクチャ共同研究部門² 情報推進部情報基盤課³

2016年11月に米国ユタ州 Salt Lake にて開催され た国際会議/展示会 SC16において、当センターの概 要、研究内容、および事業内容を紹介するための展 示ブースの出展を行った。本稿ではその展示内容や 当日の様子等について報告する。

1. はじめに

大阪大学サイバーメディアセンターでは、例年、 米国で開催される国際会議 SC において展示ブース を出展する活動を継続している。SC とは、The International Conference for High Performance *Computing,Networking, Storage,and Analysis* という正 式名称を持つ、IEEE Computer Society および ACM SIGARCH によって開催されている国際会議であ り、ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC) 分野におけるトップレベル会議の一つである。それ と同時に、SC は HPC に関する最新機器や最先端技 術の国際見本市でもある。そのため、北米を中心と した研究者や技術者に限らず、欧州、アジアの研究 者や技術者が集う最大級の国際会議/展示会となっ ており、ここ数年では登録者数は1万人を超える数 字が記録されている。当センターによる展示ブース の出展は、2000年の初出展から数え、今回で17回 目となる。

2016 年の SC (通称 SC16 は、米国ユタ州ソルト レーク市にある Calvin L。 Rampton Salt Palace Convention Center (以下、ソルトレークコンベンショ ンセンター: 図 1)にて、11 月 13 日から 18 日までの 期間に開催された。なお、ソルトレークでの SC の 開催は、2012 年度に続いて 2 度目となり、本セン ターのソルトレークでの展示も 2 度目となる。前回 開催された 2012 年度においては、開催直前に大雪と なり、非常に寒かった記憶があるが、今年度の開催 は比較的温暖であり、日中外をあるくと汗ばむほど であった。ただ、陽が落ちると急激に寒くなり、コー トをきても寒い。 また、非常に乾燥しているため、 唇や喉の乾きと戦わなければならないという事情も あった。 また、ソルトレーク市は海抜 1320 メート ルの高地であるのが関係しているかどうかはわから ないが、とても空気が澄んでいるように感じられた。 これは日常の多忙な生活から解放されたひと時を味 わえていた要因が大きく影響しているのかもしれな い。



図1 ソルトレークコンベンションセンター

ソルトレークは美しい街として知られる。 街並み も美しく、街の周辺にみえる山並みも美しい。 滞在 後半には山並みに冠雪がみられた。

徐々に大規模化傾向にある国際会議・展示会 SC を 収容できるコンベンションセンターを持つ都市が米 国でも数少なく、調整も難しい事情があるようであ る。ソルトレークは1万人規模の参加者を収容でき るコンベンションセンターを有しており SC の開催 が可能であったが、来年 2017 年度の開催はまたもや デンバー(2001、2013 年度に開催)での開催となるよ うである。

2. 展示内容

本年は、以下に紹介する当センターおよび情報推 進部の教職員6名、関連研究部門に配属されている 大学院生3名、サイバーメディアセンターとの共同 研究を推進中のTIS株式会社、NEC中央研究所より それぞれ1名の合計11名という構成で展示ブース の運営に望んだ。展示者の記念撮影風景を図2に示 す。

ブース展示は、11月14日から17日までの4日間 行われた。その間の当ブースへの来訪者数は、ID バッジの読み取り数で数えて 411 名であった。2015 年度の 399 名に比べて 12 名増加している。 今年度 も昨年度同様の 400 名程度の方に本センターの概 要、事業内容、研究活動について紹介・報告できた。 この数字は一昨年もほぼ同数であり、本センターの ブースサイズ、ブース要因規模では上限であるかも しれない。 実際のところ、 ブース来訪者によっては 10 分以上もブースに滞在され、ブース展示要員と話 しをしている方もおられたので、対応人数だけで ブース展示の効果・意義を図れるものではないが、 全体を振り返り、今年度の SC でのアウトリーチ活 動もよい結果を残せたと考えている。 さらにいえ ば、バッジの読み取りは、本センターの展示ポスター を2枚以上見ていただいた方を原則的に行っている ため、1 枚ポスターを見て帰られた方、挨拶にお越 しになられた方などはカウントされていない。その ため、ブースに来訪していただいた方の実際数は、 2-3 割程度多かったと展示者一同考えている。



図 2 SC2016 での記念撮影

応用情報システム	研究部門
スタッフ	下條真司
	伊達進
	木戸善之
大学院生	高橋慧智
	山田拓哉
学部学生	三澤明寬
先進高性能計算機	システムアーキテクチャ共同
研究部門	
スタッフ	吉川 隆士(招へい教授)
	Chonho Lee (特任准教授
	(常勤))
情報推進部情報基	验課
	笹尾朋貴
共同研究者	
	高橋雅彦 (日本電気株式会
	社)
	村木暢哉 (TIS 株式会社)
以下、SC16 にてナ	、阪大学サイバーメディアセン

ターの出展ブースで行った展示内容について紹介す る。(括弧内は担当者名、順不同、敬称略)

About US: Cybermedia Center、 Osaka University (木戸、笹尾)

本ポスターでは、サイバーメディアセンターに関 する概略、特にミッション、取り組みなどについて の紹介を行った。

ブース来訪者からは、大阪の所在地や文化など一 般的な質問から、サイバーメディアセンターが提供 しているアクティブラーニングスペースについて大 学として教育設備などの質問があった。また、学内 だけでなく学外に対しても、施設・サービスを提供 しているという点について、驚く方が多かった。ま た IT コア棟の空調設備等についても説明し、データ センターとしての側面から興味を持っていただける 方々もおり、サイバーメディアセンターの様々な取り組みについても紹介することができた。



図3 ポスター説明を行う木戸

 Large-scale Computing and Visualization Systems at the Cybermedia Center (木戸、笹尾)

本ポスターでは、大規模計算機システム及び大規 模可視化システムの構成や利用状況についての紹介 を行った。

ブース来訪者からは、サイバーメディアセンター の計算機システム、プロセッサ、ファイルシステム、 大規模可視化装置についての質問の他、GPUに関す る質問が多く寄せられた。 質問の多くは、「どれく らい使用されているのか?」又は「どういった用途 で使用しているのか?」といった GPU に関する質問 であった。 特に GPGPU は同時に利用できる数や、 ノード数など、性能に直結する内容に興味を示す来 訪者が多かった。

年々様々な最新技術が登場しており、今回のブー ス展示は技術動向を調査する非常によい機会となっ た。全国の研究者が利用する全国共同利用施設とし て、利用者にとって使いやすいシステムの運用・構 築に、生かしていきたい。



図4 ポスター説明を行う笹尾

 (3) SDN-enhanced MPI: Towards Dynamic and Application-aware Interconnect Architecture (高 橋)

本ポスターでは、当センターで研究開発に取り組 んでいる *SDN-enhanced MPI* フレームワークを紹介 した。 SDN-enhanced MPI は、ソフトウェアにより ネットワークを動的に制御可能にする技術である Software-Defined Networking (SDN) と、HPC 分野に おいて業界標準的に用いられている並列分散プログ ラミングライブラリである Message Passing Interface (MPI) を統合することにより、アプリケーションの 通信性能の向上を目指すフレームワークである。

ブース来訪者の中でも、特に高性能ネットワーク 技術や MPI を専門としている研究者・技術者の方々 が本ポスターに興味を持ってくださった。現在、 SDN-enhanced MPI の主目的はアプリケーションの 性能向上だが、耐障害性や電力性能の向上にも応用 できるのではないか、というご意見もいただいた。



図5 ポスター説明を行う大学院生(高橋君)

 (4) A Proposal of Access Control Mechanism Towards IoT Era (山田、村木)



図6ポスター説明を行う大学院生(山田君)

本ポスターでは、IoT (Internet of Things) 時代の ネットワークのためのアクセスコントロール機構の 研究について紹介を行った。

展示会では、来訪者の方からおおむね好評な反応 をいただくことができた。また、「実際のネットワー クを用いた実証実験を行うべきだ」、「アクセス制御 処理によって生じる遅延はどの程度になるか検証す べきだ」といったフィードバックも頂くことができ た。

(5) Hi-IaaS: High Performance Computing Infrastructure as a Service

(吉川、高橋(雅)、三澤)

掲題について、ポスター展示と動態デモを行った。 GPU マシンや MPI クラスタなどの HPC リソースを JOB ごとにダイナミックに構成変更を行ってユーザ の要求に合わせて提供するシステムである。 計算機センター関係者からは(北大、海洋研、さく らインターネットなど)システム導入時にどのよう な構成にするのか決められなくて困っているとのこ とで、このシステムへの期待を示された。



図7 動態デモの様子

 (6) Towards a Smart Healthcare System for Orthodontic and Dental Treatment (Lee)

このポスターでは、現在サイバーメディアセン ターと大阪大学歯学部附属病院矯正科で行っている 共同研究について、大規模計算機利用のケーススタ ディとして発表した。

まずは高齢化社会に伴う医療費の増加と医師の労

働負担増加への対策を考える事の重要性を述べて、 そこで計算機と情報通信・情報科学技術が担う役割 や方法について来訪者と話し合うことが出来た。

アプリケーションの例として、Deep Learning(深 層学習)技術を利用した画像診断・治療計画書作成 の自動化について説明した。 来訪者の Deep Learning 技術への関心は高く、マルチモダルデータ (画像・テキスト等)の扱いに関する質問が多かっ た。これからの進捗状況や結果について興味を持つ



図8 ポスター説明を行う Lee

3. 他ブースでの活動

本年度のSCでは本センターのブース展示以外にも 研究成果報告が行われたので報告する。

NEC ブースでの事業・研究紹介

"Research Collaboration with NEC towards Software Defined HPC"というタイトルで応用情報システム研 究部門准教授 伊達が展示3日目となる11月13日
2:15pmより研究紹介発表を行った。当該発表では、 本センターに2016年に設立された先進高性能計算
機システムアーキテクチャ共同研究部門と本セン ター間で推進されている研究活動およびその成果に ついて発表した。より具体的には、本センターの利 用者の計算機資源要求の多様化に着眼し、多様化さ れた計算機資源要求に応じて計算機構成を変更する Hi-IaaS コンセプト(上述)について報告した。



図9NECブースで発表する伊達

4. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学サイバーメ ディアセンターの大規模計算機および可視化事業を はじめとし、高性能計算・ネットワーキングに関す る研究成果を欧米を中心とした 400 名強の来訪者に アウトリーチすることができた。 来年度の SC の開 催は米国コロラド州デンバー市で同時期に開催され るが、大阪大学サイバーメディアセンターのプレゼ ンス向上とともに、情報公開、アウトリーチ活動に も引き続き尽力していきたいと考える。

関係各位には更なるご支援とご協力をお願いした い。

当日展示したポスターの PDF や、その他の写真な ど、ここで紹介しきれなかった内容については 下記ウェブページに掲載されています。こちらも ぜひご覧ください:

http://sc. cmc.osaka-u.ac.jp/

第 22 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2016) 報告および 第 23 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2017) 告知

大阪大学サイバーメディアセンター准教授 吉野 元

1. Supercon2016

昨年 2016 年 8 月 22 日から 26 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(SuperCon2016)」が 開催されました。 東日本から 8 チーム、西日本から 12 チームが予選を通過し、本戦に進みました。

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「電脳甲子園」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) 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。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きました。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、2015 年は SX-ACE が使われま

した。 昨年 2016 年は、 東工大 GSIC の TUBAME 2.5 が使われました。

2. 予選

2016年の予選課題は6月1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17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。2016年は37チームが予選に参加しました。 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。2016年の予選課題は、阪大の 作成チームによる「虫食い魔法陣」というものでし た。これは大きさが 3x3 から 6x6 までの魔法陣の盤 面が示され、その一部が虫食い状態になっているも のを正しく完成させるというものです。これを含め、 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け 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。本戦課題は 東工大の作成チームによるグラフの最短経路長に関 する問題でした。実際の本戦では、課題に取り組む 前に、TUBAME、特にその GPU を利用するための オリエンテーションと講義が行われ、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した。 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した。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した。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した。 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 2017 の告知

2017年は8月21日から25日までの5日間での開 催を予定しています。予選課題は5月31日に公表 予定で、課題提出×切は6月16日正午です。使 用するスパコンは、阪大 CMC のSX-ACE の予定で す。本年もチャレンジする高校生・高専生、引率の 先生方など参加者の皆さんに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 らばみなさまもお知り合いの高校生に SuperCon2017 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 SuperCon2018 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。 ぜひ一度御覧ください。

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 降籏 大介

1. 概要

サイバーメディアセンターの教職員をはじめ、大 阪大学の大規模計算機システムの運営、開発、支援 に関わっている関係者は、システムをユーザにより 有効に活用していただくために何が出来るかを日々 考えています。

たとえばその一端として、マニュアル・ドキュメ ント類を充実させること、ユーザからの質問をメー ルなどで受け付け適切に返答するための仕組みの構 築と維持、それらを明文化するための FAQ の整備 などの活動を行っています。そしてそうした活動の 中でもわれわれが重要と考えているのが、ここで紹 介する利用者講習会です。利用者講習会は計算機ユ ーザへ知識を伝える場だというだけでなく、その場 での質問などを通じてユーザと直接やりとり出来る 場でもあり、大変貴重な機会です。そのためしばし ば、大規模計算機システムの運営・開発・管理・支 援などを行っている関係者が立ち会います。

そして、その講習会の内容は、OS である Unix 環 境、スーパーコンピュータのハードウェアについて の概要説明といった入門的内容から、大規模計算を 行う近年のユーザにとって重要な OpenMP, MPI な どの並列計算通信プロトコルの概要からこれらを上 手に使いこなすための各種プログラミング技法の詳 細、各方面の専門家用の特殊なソフトウェア等々、 多岐にわたります。こうした内容はユーザの要望に 沿って、計画されています。詳しくは次ページに掲 載しております表に掲載しておりますが、大規模計 算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を 幅広く対象とし、年に 14~15 回開催しております。 また、より詳細な情報をサイバーメディアセンター 大規模計算機システムの web において掲載してお りますので、ぜひご参照ください。

2. 多忙な方も参加しやすく

近年、学生も研究者も大変に多忙です。これをう けて、サイバーメディアセンターの講習会は原則と して年に2回、ほぼ同じ内容の講習会を時期をずら して開催するように工夫しています。実際には、6 月頃と10月頃に集中的に開催しています。これは、 「学期始まりや学期末の時期は外して欲しい」「あま り遅い時期では、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、また、講習会の受講 が意義あるものになるようにと配慮した結果です。

また、Gaussian などの研究者用専門ソフトウェア の講習会では講師を確保しにくいという問題があり ますが、われわれ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て講習会を開 催しています。

こうした努力の甲斐あってか、これまでに各講習 会ともに一定数のユーザの参加をいただいており、 講習会をユーザの皆様に役立てていただいていると 考えています。

3. 初学者にも優しく

未参加の方にとって、こうした講習会は敷居が高 いと思われがちです。しかし、先に述べたように初 学者も講習会の対象で、1 年間のおおよそ 15 回程度 の講習会のうちおおよそ 1/4 は初学者が対象の内 容のものです。

具体的には、OS である Unix の簡単な操作方法 の解説や、スーパーコンピュータのハードウェアの 概要説明、細かい技法の説明の前に必要となる並列 計算の概念の説明などからなります。スーパーコン ピュータを使うユーザというと、こうした知識やプ ログラミング技法について通じた大変なプロフェッ ショナルばかりと想像されることもありますが、も ちろんそれは違います。どなたも「最初は初心者」 です。そして、細かい技術についてのマニュアルは 豊富に見つかっても基礎的な概念や手法については なかなか良い資料・ドキュメント類が見つからない ということは珍しくないのです。

われわれサイバーメディアセンターでは、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うべく、常に初学者に優し くありたいと考え、講習会を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、われわれは初学者ばかりでなくプロフ エッショナルなユーザへの支援も怠っておりません。 各種の専門的な内容について、多くの講習会を計画 し、そして実施しています。

近年の並列計算プログラミングに必須である MPI についての講習会はもちろんのこと、スーパー コンピュータや大規模並列計算機が活躍の場である 言語 HPF (High Performance Fortran) についての専門 家による講習会、そして、AVS, Gaussian といった 専門分野に特化したソフトウェアの講習会も行って います。

ー部の講習会は、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いて実施しており、技術の非常に微細な部分に至るまで専門的な議論を行うことが出来る機会としてユ ーザーの皆様にご利用いただいております。

5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、われわれサイバーメデ ィアセンターの web

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/ にて常に公開しております。情報は随時更新してお りますので、ぜひ頻繁にご覧になり、ご興味のある 講習会に積極的にご参加ください。皆様のご参加を 常に歓迎いたします。

また、大規模計算機のハードウェア、ソフトウェ ア、そしてユーザの使い方といったものは日々変化 していくものです。上記に述べたように様々な工夫 や努力を通じて開催している講習会ではありますが、 こうした変化に合わせ、講習会のありかたも変化、 進歩していく必要があります。そして、それにはユ ーザの方々からいただく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 あるのです。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。

2017 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
1	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	6月開催	サイバーメディアセンター 降旗 大介 准教授	サイバーメディアセンター 本館
2	スーパーコンピュータ利用入門	6月開催	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	サイバーメディアセンター 本館
3	SX-ACE 高速化技法の基礎	6月開催	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 本館
4	並列コンピュータ 高速化技法の基礎	6月開催	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 本館
5	SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)	6月開催	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 本館
6	SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)	6月開催	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 本館
7	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	9月 開催予定	サイバーメディアセンター 降旗 大介 准教授	サイバーメディアセンター 本館
8	スーパーコンピュータ利用入門	9月 開催予定	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	サイバーメディアセンター 本館
9	SX-ACE 高速化技法の基礎	9月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 本館
10	並列コンピュータ 高速化技法の基礎	9月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 本館
11	SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)	9月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 本館
12	SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)	9月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 本館
13	AVS 可視化処理入門	9月 開催予定	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター 本館
14	AVS 可視化処理応用	9月 開催予定	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター 本館

テレビ会議システムによる講習会配信

	講習会名	開催 日時	開催期間	受講場所
15	Gaussian 講習会	8月 開催予定	東北大学	サイバーメディアセンター 本館

2016 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

◆受講者数

講習会名	由认者数	受講者数		
			学内	学外
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(6/6)	40	34	32	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(6/10)	18	17	13	4
SX-ACE 高速化技法の基礎(6/16)	4	3	2	1
並列コンピュータ高速化技法の基礎(6/17)	5	3	2	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(6/23)	13	11	10	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(6/24)	2	1	0	1
Gaussian講習会(8/30)	6	5	2	3
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/2)	21	10	9	1
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(9/6)	14	12	6	6
SX-ACE 高速化技法の基礎(9/8)	2	2	2	0
並列コンピュータ高速化技法の基礎(9/9)	5	5	4	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(9/15)	3	2	2	0
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(9/16)	1	0	0	0
AVS可視化処理入門(9/27)	8	7	7	0
AVS可視化処理応用(9/28)	7	5	5	0
合計	149	117	96	21

◆受講者の内訳



◆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)



◆開催日は適当でしたか。



◆講習会の時間は適当でしたか。



◆会場の大きさ、場所は適当でしたか。



◆講習会の内容はどうでしたか。



◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



◆講師の進め方はどうでしたか。







◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



◆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。



◆「ある」と回答された方の利用方法



◆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。



2017 年度「 HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の 活動状況

HPCI(High Performance Computing Infrastructure)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、海洋研究開発機構、統計数理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。

利用枠	利用資源	研究課題名
京以外 産業利用課題 (実証利用)	VCC	新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築
京以外 一般課題	VCC	イメージベース超並列有限要素弾塑性解析によるアルミニウム 鋳造合金のき裂発生メカニズムの解明[SPring-8 との連携利用]
京以外 一般課題	SX-ACE	ツイストされた時空縮約モデルの数値的研究
京以外 一般課題	SX-ACE	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
京以外 一般課題	SX-ACE	高圧水素噴流の着火・燃焼現象の大規模数値解析
京以外 一般課題	SX-ACE VCC	極限状態クォーク系の第一原理計算

大阪大学計算機資源を利用する 2017 年度 HPCI 採択課題一覧

2017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。

2017 年度の課題募集には合計 52 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、46 課題が採択されました。このうち 3 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	利用大学		
柏崎 礼生 (大阪大学)	耐災害性・耐障害性の自己検証機能を具備した広域分散プラ ットフォームの国際的展開と HPCI-JHPCN システム資源と の柔軟な連携	北大、東北大、 京大、阪大、 九大		
阿部 洋丈 (筑波大学)	スケジューラと連動した広域データステージングに関する 検証・評価	東大、阪大		
渡場 康弘 (奈良先端科学 大学院大学)	Construction of Universal Visualization as a Service (VaaS) on PRAGMA-ENT	阪大		

2017 年度 学際大規模情報基盤共同利用·共同研究拠点 採択課題一覧

2017 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

大阪大学サイバーメディアセンターでは、大規模計算機システムを活用する研究開発の 育成・高度化支援の観点から、本センターが参画する「ネットワーク型」学際大規模情報 基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)や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)の目的を踏まえつつ、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題や 本センターの大規模計算機システムを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を 公募しています。2017年度は、下記の10課題を採択しました。

代表者名	研究課題名
飯田 英明 様 (理化学研究所)	格子ゲージ理論によるダークマターの研究
伊藤 悦子 様 (大阪大学 核物理研究センター)	有限温度・有限密度2カラーQCDの相図と超流動性の解明
開田 丈寛 様 (九州大学 大学院理学府)	厳密な Z3 対称性を持つ量子色力学による格子計算
金 賢得 様 (京都大学 大学院理学研究科)	水素の室温大量貯蔵・輸送を実現する多孔性材料の 分子ダイナミクスに基づく解明と先導的デザイン
畑 昌育 様 (大阪大学 レーザーエネルギー学研究 センター)	キロテスラ級磁場下における超高強度レーザープ ラズマ相互作用の物理
樋口 公紀 様 (九州大学 大学院理学府)	大規模シミュレーションで見る宇宙初期から現在 に至る星形成史の変遷
若山 将征 様 (理化学研究所)	格子QCDシミュレーションによる南部-ゴールドス トン粒子の質量生成機構の研究

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
河野 宏明 様 (佐賀大学 大学院工学系研究科)	格子量子色力学を使った高密度物質の研究
千徳 靖彦 様 (大阪大学 レーザーエネルギー学研究 センター)	高強度レーザーによるイオン加速の研究
長峯 健太郎 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	宇宙の大規模構造と銀河形成

大規模計算機システム Q&A

2016 年度に当センターに寄せられた質問を掲載しております。 同等の内容を下記の Web ページでも閲覧いただけます。 http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/

Q. 年度途中で資源(ノード時間)の追加は可能でしょうか?

A. はい。可能です。資源追加の申請につきましては、以下の利用者管理 WEB システムから申請頂い ております。

利用者管理システム(要認証)

https://zenkoku-web.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/saibed/

申請手順につきましては、以下のページにまとめておりますので、ご参照ください。

一般利用(学術利用) 資源追加申請

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/

Q. 年度途中で利用負担金の支払い費目や支払い時期を変更できますか?

A. WEB システムからは変更できませんので、下記までご連絡ください。
 大阪大学 情報推進部 情報基盤課 研究系システム班
 Mail: system@cmc.osaka-u.ac.jp
 TEL: 06-6879-8808

Q. ディスク容量を追加した場合、利用期限はいつまでですか?

- A. 年度途中に申し込まれた場合でも、利用期限は年度末までとなります。翌年度にディスク容量を追加しない場合は、データの整理を3月中にお願いいたします。やむを得ない事情がある場合や、間に合わない場合は、ご連絡くださいませ。原則として、事前連絡無しにこちらでデータを削除することはありません。
- Q. ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか?
- A. 当センターのシステムでは、フロントエンドサーバからの SFTP、SSH、SCP 等は使用できません。
 ローカルとフロントエンドサーバ間の SFTP は可能ですので、ご自身の端末を経由していただき、
 転送していただきますよう、お願いいたします。

Q. bash を利用することはできますか?

A. 利用できます。

ただし、ログインシェル(ログイン時の初期シェル)はCシェルとなっており、変更することは出来 ませんので、ログイン度に bash に変更していただく必要があります。 エイリアスなどの設定を行う場合は、「.bashrc」ファイルをご自身で準備いただく必要があります。
また、「.cshrc」内で bash を起動しないようご注意ください。「.cshrc」ファイルで、他のシェルを起 動すると、SFTP が正常に動作しなくなる可能性があります。

Q. usage_view コマンドで表示される「残りノード時間(remaining)」が負の値になっている

A. ノード時間を残高以上に使用した場合(ノード時間を使いすぎてしまった場合)に、そのような表記 になります。

※当センターではノード時間を1日に1度取得しますので、ノード時間の残高以上の計算も実行で きてしまいます。

本来ですと、ノード時間を使い切った時点で、

(1)ジョブの新規投入

(2)投入されている全ジョブの実行

の両方を止めるべきなのですが、当センターのシステムの都合により、(2)を止める機能を搭載でき ていないため、このようなこととなります。

たとえば、8月1日時点で、usage_view が下記のような表示だったとします。残りノード時間 (remaining)は200ノード時間です。

[SX-ACE]

shared use : 300 / 500 node-hour (remaining : 200 node-hour)

仮に、8月1日に SX-ACE で 20 ノードを使った、15 時間のジョブを実行したとしますと、計 300 ノード時間を消費することになります。

8月2日の usage_view は下記のようになり、残りノード時間(remaining)に負の値が表示されます。

[SX-ACE]

shared use : 600 / 500 node-hour (remaining : -100 node-hour)

使いすぎてしまった分については、改めて料金を請求することは御座いませんが、もし年度中に「資源追加」された場合は、使いすぎてしまったノード時間分を追加分から差し引いて処理することになります。

年度を越えた際に、使用されたノード時間の情報は全てリセットされます。

Q. SX-ACE で 2GB 以上のデータを出力し、VCC で読み込むことはできますか?

 A. SX-ACE で 2GB 以上のデータを出力する場合は「F_EXPRCW」オプションを指定する必要があり ます。また、SX-ACE と VCC ではバイトオーダが異なりますので (SX-ACE: ビッグエンディアン、 VCC: リトルエンディアン)、標準の状態では SX-ACE の出力結果を VCC で読み取ることが出来ま せん。「F_UFMTENDIAN」オプションを指定することで、SX-ACE からリトルエンディアンで入出 力されますので、こちらも指定してください。

例

#PBS -v F_EXPRCW= [装置番号] #PBS -v F_UFMTENDIAN= [装置番号] 「F_EXPRCW」オプションを指定した場合、記録のバイト長が8バイト(通常は4バイト) となります。詳細は下記を御覧ください。

FORTRAN90/SX プログラミングの手引 7.2.2.1 順編成ファイルの書式なし記録 https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/secure/manual/SXACE/J/Fortran90_ProgrammersGuide.pdf

従って、「F_EXPRCW」オプションが指定された出力結果を読み込む際には、実行する端末によらず、「記録のバイト長を8バイト」として読み込む必要があります。SX-ACEでは読み込む場合は、「F EXPRCW」オプションを指定すれば、そのまま読み込むことが可能です。

VCC で読み込む場合についてですが、GNU コンパイラ(gfortran)では、「-frecord-marker=8」という オプションを、コンパイル時に指定していただくと、「記録のバイト長を 8 バイト」として読み込 むことが可能です。

Intel コンパイラ(ifort)については、該当するオプションがありませんので、GNU コンパイラをご利用ください。

Q. 標準出力ファイル、標準エラー出力ファイルに対して任意のアクセス権を設定できますか?

A. SX-ACE、VCC から出力される、標準出力ファイル、標準エラー出力ファイルは、umask コマンド で指定したアクセス権に従い、出力されます。フロントエンドサーバ上で umask コマンドを実行し、 指定してください。

HCC については、ステージングの都合上、決まったパーミッションで出力されます。ご了承ください。

※2016 年 8 月時点では標準出力/標準エラー出力ファイルのアクセス権は「-rw-rw-」固定と なり、umask コマンドでも変更することはできませんでしたが、利用者の皆様からの要望を受 け 2016 年 9 月に改修を行いました。

Q. MPI スレーブノードに対して、任意の PATH を指定することは可能でしょうか?

A. ほぼ全ての環境変数は、#PBS -v によって MPI スレーブノードに対しても指定することができますが、いくつかの環境変数はスケジューラ NQSIIの標準機能(#PBS -v)で指定することが出来ません。
 PATH もその一つになります。指定できない環境変数については下記マニュアルの 1.16 qsub(1)をご参照ください。

NQSII利用の手引き(利用者番号での認証が必要です) https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/secure/manual/SXACE/J/NQSII_UsersGuide.pdf

ただし、MPI 実行時オプションをご利用いただくことで、これらの環境変数をスレーブノードに対して設定することが可能です。

Q. ディスク容量を超過した場合、どのくらいの期間でデータが削除されますか?

A. ディスク容量は、基本的に「quota」という Linux のグループやユーザ毎にディスク容量を割り当て る機能を使っています。 「quota」で決められた容量を超過した場合は、対象の領域(home 領域もしくは ext 領域)について、 新規のディスク書き込みができない状態になります。閲覧・削除等は可能ですが、対象の領域に対 して write を行うジョブは全てエラーとなります。

- Q. AVS/Express PCE で、材料毎に解析結果を表示するモジュール select material が使用できない
- A. AVS/Express PCE では select_cells_PARA モジュールを使用することで、材料毎の解析結果を表示することができます。

利用規程等

・規程関係・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	•	••	•	•••	••	• 8	85
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 ・・	•	••	•	••	••	• 8	85
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	亁	••	•	••	••	• 8	87
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	涀		•		••	• {	89
・附表 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	•	••	•	••	••	• (90
大規模計算機システム ホスト一覧 ・・・・・・・・・・・・・・	•		•	•••	••	• 9	90
スーパーコンピュータSX-ACE, PC及び汎用コンクラスタのジョブクラス	一覧	•	•	••	•••	• 9	90

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、専から研究に従事 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 に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っては、この規程に基づき利用の登録 があったものとみなす。 附 則 この改正は、平成13年1月6日から施行する。 附 則 この改正は、平成13年4月1日から施行する。 附 則 この改正は、平成14年4月1日から施行する。 附 則 この改正は、平成14年6月19日から施行し、平成14年4 月1日から適用する。 附 則 この改正は、平成15年4月1日から施行する。 附 則 この改正は、平成16年4月1日から施行する。 附 則 この改正は、平成18年2月15日から施行する。 附 則 この改正は、平成19年9月28日から施行する。 附 則 この改正は、平成20年4月16日から施行する。 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-ACE) の負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
185,000円/年	1ノード

(B) 共有

	基本負担額	利用可能ノード時間
77	10万円	5,700ノード時間
	50万円	28,500ノード時間
	100万円	59,700ノード時間
	150万円	89,500ノード時間
	200万円	125,100ノード時間
	250万円	156,300ノード時間
	300万円	196,100ノード時間
	400万円	272,800ノード時間
	500万円	369,400ノード時間

備考

- 1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(8%)を加えて得た額とする。
- 2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 3 ディスク容量は1申請単位で500GBを割り当てる。ただし、他のディスク容量と合算できない。
- 4 (A) は占有ノード数を追加する場合のみ変更申請を受け付ける。
- 5 (A) の2ノード以上の基本負担額は、1ノードを基準に比例するものとする。
- 6 (A) は資源提供状況により10ノード以上3か月単位の申請を受け付ける場合がある。 その場合の月額の負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- 7 (B) は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付け

(2) 大規模可視化対応PCクラスタの負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
320,000円/年	1ノード

(B) 共有

コース	基本負担額	利用可能ノード時間
	10万円	3,500ノード時間
	50万円	17,500ノード時間
	100万円	35,000ノード時間
	150万円	52,500ノード時間
	200万円	70,000ノード時間

備考

1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(8%)を加えて得た額とする。

2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。

3 ディスク容量は1申請単位で500GBを割り当てる。ただし、他のディスク容量と合算できない。

- 4 (A) は占有ノード数を追加する場合のみ変更申請を受け付ける。
- 5 (A) の2ノード以上の基本負担額は、1ノードを基準に比例するものとする。
- 6 (A) は資源提供状況により10ノード以上3か月単位の申請を受け付ける場合がある。
- その場合の月額の負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- 7 (B) は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付け

(3) ディスク容量追加の負担額

基本負担額	提供単位
10,000円/年	1TB

備考

- 1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(8%)を加えて得た額とする。
- 2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 3 年度の途中は追加申請のみ受け付ける。

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。)及び利用指導員(以下「指導員」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	login.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。 (ホストー覧表には明記していません)

スーパーコンピュータ SX-ACE のジョブクラス一覧

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 core 数	利用可能 最大メモリ	同時利用 可能ノード数
	ACE	24 時間	1024 core (4 core × 256 ノード)	15 TB (60 GB×256 ノード)	256 ノード
共有利用	DBG	20 分	32 core (4 core × 8 ノード)	480 GB (60 GB × 8 ノード)	8ノード
	INT	60分	4 core	60 GB	1ノード
占有利用	myACE	無制限	4 core ×占有ノード数	60 GB×占有ノード数	占有ノード数

大規模可視化対応 PC クラスタ(VCC)のジョブクラス一覧

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 利用可能 経過時間 最大 core 数		利用可能 最大メモリ	同時利用 可能ノード数
土有利田	VCC	120 時間	640 core (20 core × 32 ノード)	1920 GB (60 GB × 32 ノード)	32 ノード
	vee	336 時間	40 core (20 core × 2 ノード)	120 GB (60 GB×2 ノード)	2ノード
共有利用 (GPU利用)	GVC	120 時間	180 core (20 core × 9 ノード)	540 GB (60 GB × 9 ノード)	9ノード
占有利用	myVCC	無制限	20 core ×占有ノード数	60GB×占有ノード数	占有ノード
占有利用 (GPU利用)	myGVC	無制限	20 core ×占有ノード数	60GB×占有ノード数	占有ノード

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 core 数	利用可能 最大メモリ	同時利用 可能ノード数
	H-single	最大 300 時間 程度※	$\begin{array}{c} 2 \text{ core} \\ (2 \text{ core} \times 1 \nearrow - \texttt{F}) \end{array}$	4 GB (4 GB × 1 ノード)	1ノード
	H-small	最大 300時間 程度※	32 core (2 core × 16 ノード)	64 GB (4 GB × 16 ノード)	2~16 ノード
	H-large	最大 300時間 程度※	128 core (2 core × 64 ノード)	256 GB (4 GB × 64 ノード)	17~64 ノード
共有利用	H-mem+	最大 300時間 程度※	64 core (2 core × 32 ノード)	384 GB (12 GB × 32 ノード)	1~32 ノード
	DBG-single	1時間	2 core (2 core × 1 ノード)	4 GB (4 GB × 1 ノード)	1ノード
	DBG-small 1時間		$\begin{array}{c} 4 \text{ core} \\ (2 \text{ core} \times 2 \nearrow - \texttt{F}) \end{array}$	8 GB (4 GB×2 ノード)	2ノード
	DBG-large	1時間	$\begin{array}{c} 4 \text{ core} \\ (2 \text{ core} \times 2 \nearrow - \texttt{F}) \end{array}$	8 GB (4 GB×2 ノード)	2ノード

汎用コンクラスタ(HCC)のジョブクラス一覧

※最大 core 数、最大メモリは、[ノード毎の最大値] × [同時利用可能 最大ノード数] で算出した値で す。

※汎用コンクラスタ(HCC)は、月に1,2回メンテナンスによりサービスが停止します。

メンテナンス日を跨いでジョブを実行することはできませんので、経過時間の制限(elapstim_req)は決まった値ではなく、ジョブを投入した日から次回メンテナンス日までが経過時間の制限となります。

※ジョブクラス一覧表は 2017 年 4 月 1 日時点のものになります。最新の情報は下記の WEB ページを御覧ください。

ジョブクラス表 http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/jobclass/

2016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
稼動	計算サービス時間	钌 (A1)	705:45	744:00	720:00	744:00	705:00	683:00	744:00	720:00	744:00	677:00	672:00	732:00	8590:45	715:53
動時	初期化·後処理時	寺間 (A2)	0:15	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:15	0:01
間	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		706:00	744:00	720:00	744:00	705:00	683:00	744:00	720:00	744:00	677:00	672:00	732:00	8591:00	715:55
保	守時間	(B)	14:00	0:00	0:00	0:00	39:00	37:00	0:00	0:00	0:00	67:00	0:00	12:00	169:00	14:05
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	744:00	720:00	744:00	744:00	672:00	744:00	8760:00	730:00
稼	動率 (A/((A+B+C+D)%)	98.06	100.00	100.00	100.00	94.76	94.86	100.00	100.00	100.00	90.99	100.00	98.39		98.09
運	転日数	(E)	30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30
	日平均稼動時間	(A/E)	23:32	24:00	24:00	24:00	22:44	22:46	24:00	24:00	24:00	21:50	24:00	23:36		23:32

処理状況

項目		スーパーコンピュ	ュータ SX-/	ACE	PCクラスタ							
	共有 占有			占有	大規	模可視化対応PCク	汎用コンクラスタ					
処理月	件数	CPU時間(時)	利用率(%)	占有ノード数	件数	ノード時間積(時)	利用率(%)	件数	ノード時間積(時)	利用率(%)		
4	7,926	246,389.70	72.04	28	1,670	27,541.12	61.70	12,784	149,988.76	41.58		
5	9,856	208,276.68	67.93	32	2,716	31,476.65	68.24	9,168	189,729.85	50.90		
6	9,933	115,148.64	37.52	41	2,980	25,231.45	56.52	15,353	171,592.44	47.57		
7	8,175	105,110.93	34.97	41	985	30,652.86	66.45	5,852	69,519.30	18.65		
8	4,798	109,833.37	38.86	41	2,897	24,089.15	52.22	514	16,183.53	4.34		
9	6,269	121,139.49	38.76	41	5,893	29,365.61	65.78	10,683	296,743.11	82.26		
10	5,696	163,007.72	54.71	41	3,334	28,682.33	62.18	3,642	134,535.42	36.09		
11	8,502	114,238.15	39.69	41	3,457	19,991.76	44.78	10,082	122,407.43	31.72		
12	9,184	109,635.25	36.84	41	2,149	37,104.65	80.44	20,989	130,312.32	32.68		
1	7,023	139,381.97	49.85	41	3,389	32,911.87	71.35	5,681	161,086.62	40.39		
2	6,738	129,446.72	46.12	41	3,526	31,660.33	75.99	3,190	113,537.99	31.52		
3	7,596	245,818.53	77.06	41	1,473	22,589.02	48.97	417	37,261.26	9.34		
合 計	91,696	1,807,427.13	-	-	34,469	341,296.79	-	98,355	1,592,898.02	-		

(注)利用率は、次の計算式により算出している。
 スーパーコンピュータ SX-ACE の利用率
 生 (SX-ACE の CPU 時間/稼働中ノードの合計サービス時間)*100
 大規模可視化対応 PC クラスタ(VCC)の利用率
 モ (VCC のノード時間積/ 56 ノードの合計サービス時間)*100
 モ (HCC のノード時間積/ 575 ノードの合計サービス時間)*100



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	•	•	•	•	•	• •	• 9	5
・大規模計算機システム利用案内 ・・・・・・・・・・・・・・・・・	• •	•	•	•	•	• (• 9	6

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、皆さん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】

 $\overline{7}$ 5 6 7 - 0 0 4 7

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。
- 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)

・サービス内容

ナカサービッカタ	やサービュ中安 だ、声妙出堂		時間			
主なサーレス内谷	体・理船元寺	月~金	土・日・祝日			
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					
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	8:30~12:00	閉			
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、 計算機マニュアルの閲覧	情報推進部情報基盤課 研究系システム班(本館1F) 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1F) 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/
大規模可視化システムホームページ	http://vis.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付けます。 E-mail: system@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) 浦 友 樹 (大阪大学 サイバーメディアセンター) 西 大 前 友 美 (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 籏 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) 一 秀 (大阪大学 サイバーメディアセンター) 小島 森 原 ー 郎 (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 経営企画オフィス)

(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.7 2017 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

