

CYBERMEDIA HPC JOURNAL

Cybermedia Center, Osaka University

No. 1 (初版)



October, 2011.

目 次

特 集	1
・今後のサイバーメディアセンターのビジョン	3
竹村 治雄	
・レーザープラズマシミュレーションとHPC	5
長友 英夫	
・HPCIにおけるサイバーメディアセンターの役割	9
東田 学	
・北ヤード可視化センター構想	13
下條 真司	
 大規模計算機システム利用者研究報告	17
・朝日放送制作 平等院復元CGについて	19
香取 啓志、藤原 宏美、油谷 曜	
・Ge/Siへテロエピタキシャル成長の歪み緩和と刃状転位形成機構	23
藤本 義隆、押山 淳	
・有機一金属界面での準位接続・相互作用に関する第一原理的研究	27
柳澤 将	
・流動層シミュレーションの大規模化と高分解能化	33
辻 拓也、田中 敏嗣	
・磁気流体不安定による星間磁場の增幅機構	39
佐野 孝好	
・格子QCDシミュレーションを用いたQCDの相図の研究	45
永田 桂太郎	
 センター報告	51
・2010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	53
・第17回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2011)	70
・2011年度大規模計算機システム利用講習会	71
・「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	72
・「大規模計算機システムにおける企業利用」の活動状況	73
・2011年度大規模計算機システム利用相談員・指導員	75
・大規模計算機システムFAQ	79
 利用規程等	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試用制度利用内規	88
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員指導員内規	88
大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程	89
ネットワーク専門部会内規	89
・附表	91
大規模計算機システム ホスト一覧	91
SX-8R, SX-9及びPCクラスタのジョブクラスター一覧	91
募 集	93
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

特集

・今後のサイバーメディアセンターのビジョン -----	3
竹村 治雄 大阪大学サイバーメディアセンター	
・レーザープラズマシミュレーションとHPC -----	5
長友 英夫 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	
・HPCIにおけるサイバーメディアセンターの役割 -----	9
東田 学 大阪大学サイバーメディアセンター	
・北ヤード可視化センター構想 -----	13
下條 真司 大阪大学サイバーメディアセンター	

今後のサイバーメディアセンターのビジョン

竹村 治雄

大阪大学 サイバーメディアセンター

1. はじめに

本稿は、2007年8月より4年間サイバーメディアセンター長を経験した者として、今後のサイバーメディアセンターのあり方について、私見を述べるものである。この4年間にサイバーメディアセンターの位置づけは学内外とも大きく変化した。特に、HPCセンターとしても、ネットワーク型の全国共同利用・共同研究拠点としての認定、HPCIコンソーシアム結成に向けた動きへの協力などがあり、従来の全国共同利用施設以上の役割を担うことが期待されている。これらの背景をもとに、HPCセンターとしてのサイバーメディアセンターのあり方について以下に示す。

2. サイバーメディアセンターの現状

従来の全国共同利用施設としてのサイバーメディアセンターは、利用負担金を負担する利用者に対しては広くHPCの利用を認めてきた。その結果、HPCプログラミングの習得目的の利用、萌芽的な研究、そして大規模研究課題まで様々な利用が行われてきた。これらの利用は、今でもセンターのHPCサービスの中核であると考えられる。また、大学で開発された各種ソフトウェア資産の民間での利用を促進するために、文部科学省の委託事業（後に補助金事業）による「先端研究施設共用イノベーション創出事業」を7センターで共同実施してきた。今年度からは、各センターの自主事業として継続しており、今後の展開が期待されるところである。

さらに、平成21年6月には7センターがネットワーク型の学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点としての認定をうけ、こちらについては一括して研究課題を公募し、審査を実施し、採択課題に関しては、文部科学省、各センター、課題申請者が利用負担金を共同負担する形で研究がなされる。また、

一部課題については負担金を免除する形での利用が可能となった。これにより、複数センターの計算資源を利用した高度な研究開発も促進されるようになった。

来年4月に発足を予定しているHPCIコンソーシアムへの準備も着実に進んでおり、本センターは国立情報学研究所と共同で認証系の設計および実装をすすめている。コンソーシアムが発足すると、京コンピュータを頂点とする、HPCインフラが形成され、その上で様々な計算資源を組み合わせた研究開発が可能となり、ビッグデータを用いた科学研究の進展に貢献するものと期待されている。今までセンターの共同利用枠だけでは対応できなかった、より多くの計算リソースを必要とする研究については、こちらの枠での利用が進むこととなると考える。

以上の関係を示したものが図1である。ただし、HPCIコンソーシアムの利用形態については、今後変更される可能性がある。

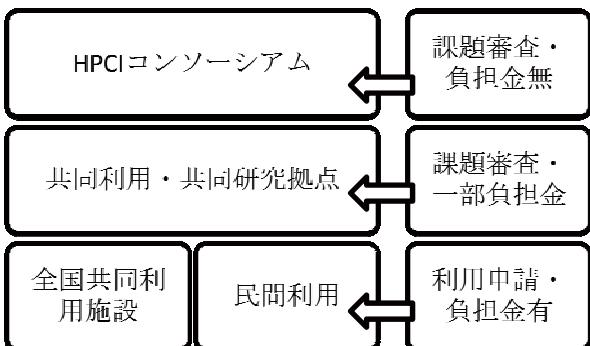


図1：CMCのHPCサービスの現状

3. 今後のありかた

今後のあり方については、様々な考え方があると思われる。サイバーメディアセンターの役割を、計算科学の発展を最新の計算機科学の成果を用いて支

援するセンターと捉え、様々なレベルの利用者に対応しつつ、人材を育成し、同時に環境にも配慮するセンターを目指すのが一つの方向であると思う(図2)。

特に、今まで計算科学的なアプローチが困難であった分野でも、計算機の能力の向上や、シミュレーションアルゴリズムの開発により新たに、計算科学的なアプローチが可能となる分野や、従来は小規模のクラスタで行われている研究に対してのサポート等を通じて、HPC環境の利用の拡大を図ることも必要である。

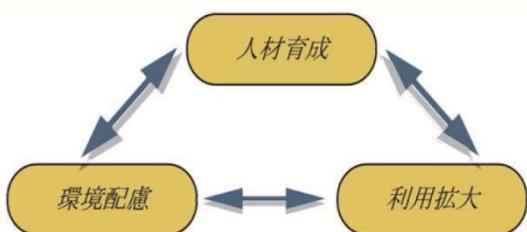


図2：HPCサービスの課題

さて、様々な利用者に対応するとは、計算科学の様々な分野の様々なレベルの利用者に対応することであるが、これを1センターで対応することは難しく、むしろHPCIで全体的な対応を図るべきであろう、しかしながら、サイバーメディアセンターでも、現在の計算リソースであるベクトル並列型のスパコンを活かした形で緩やかに裾野を広げることは可能であると考える。具体的には、仮想化技術を利用し教育用計算機システムをクラスタ計算機としても稼動させ、これをPCクラスタと連携運用することで、クラスタユーザーへのサービスを強化する。これにより、現在の主流であるMPIプログラミングによるHPCユーザへの対応を強化することができる。

さらに、学内の小規模クラスタをCMCに集約し必要に応じてグリッドとして運用ができれば、計算資源の有効活用が図れると同時に、集約による空調にかかるコストの最適化が可能となる。すなわち、環境への配慮が可能となる。これらの実現にはサイバーメディアセンターが研究開発を行ってきたグリッド構築、運営技術を活かすことが可能である。

人材の育成についても、利用負担金収入をポスドクの雇用に用いてプログラミング支援や、可視化支

援による積極的な利用者支援を図ることで、新たなHPCの利用者の獲得につなげることができる。さらにポスドクは、利用者を支援しながら実践的なスキルを獲得することができる。

以上のような取組は、現状の全国共同利用施設の枠組みを発展させつつ、共同利用・共同研究拠点やHPCIコンソーシアムとも、共存が可能である。また、実現のために大阪市等が開発している梅田北ヤードに設置される、ナレッジスクエア内の可視化センター（仮称）との連携が重要である。大学が社会に門戸を開くことで、実社会の様々なニーズを把握し、これを人材育成及び研究開発に活用することに期待したい。

4.まとめ

4年間のセンター長の経験をもとに、サイバーメディアセンターの今後のHPCサービスについて、私見を述べた。これらのことの一朝一夕に実現することは容易ではないかもしれないが、計算科学と計算機科学の発展には必要なステップであると考える。実際、一部は実現に向けた具体的な動きが始まっています、これらがさらに加速されることに期待したい。終わりに、4年間のセンター長業務を執行するに当たり支えていただいた関係諸氏に感謝します。

レーザープラズマシミュレーションと HPC

長友 英夫

大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター（以下、レーザー研）では、主に大型の超高強度レーザーを用いてレーザー核融合、宇宙・惑星科学、超高压物性科学、超高強度科学分野などに関連する多様な研究が行われており、HPC を用いたシミュレーション研究もその一翼を担っている。特に、シミュレーションによる現象の解明、実験設計、解析などニーズは多く、長い歴史もある。ユーザーはシミュレーション研究を専門とする者だけではなく、実験を主とする教員・研究者、学生、共同研究者など幅広い。

物質に高強度レーザーを照射した場合、物質はプラズマ化するが、レーザー強度、物質、現象の時間・空間的な振る舞いなどによって支配的な挙動が異なることから、様々な種類の解析が必要である。当然、解析に応じて異なる計算手法が用いられており、その手法によって HPC の利用形態も異なる。また、シミュレーションによる研究には、共同研究、教育に関する要素も含まれており、これらを効率的に実行できるコンピュータ環境が必要である。また、単に計算するだけでなく、データ解析処理などシミュレーション研究者以外のニーズも増えている。ここでは、レーザー研における代表的なシミュレーション手法例を紹介し、それを踏まえたサイバーメディアセンター(以下、CMC)を中心とする HPC の役割について紹介する。

照射するレーザーの照射強度がそれほど高強度でない場合は、発生するプラズマの速度はマクスウェル分布として近似することができ、マクロ的な、いわゆる（プラズマ）流体近似として扱われる。この場合は一般的な流体シミュレーション手法を応用することが可能でベクトル・並列計算のスーパーコンピュータを有効活用することができる。ただし、同じ流体であっても、プラズマの空間広がりや衝撃波

の詳細な挙動解析など、目的によっては計算格子を固定するオイラー手法から格子を移動させるラグランジュ的手法など多彩である。さらに、輻射輸送、熱伝導、レーザー光線追跡・吸収、物質依存の状態方程式などの様々な数値モデルやデータテーブル参照なども含まれることからシミュレーションコードは大変複雑になっている。

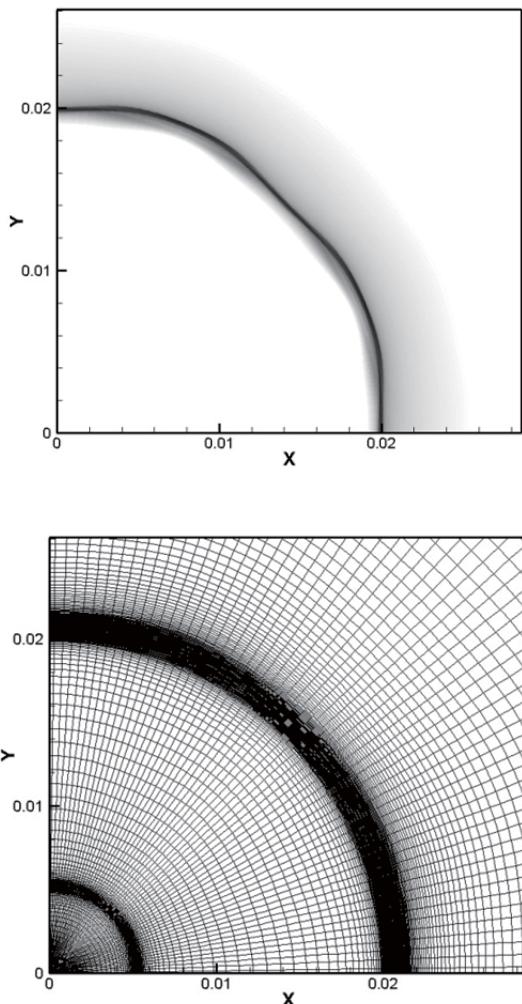


図 1：輻射流体コードを用いたレーザープラズマシミュレーション例。レーザー照射によって加速したターゲット（上）を、計算格子（下）を時々刻々移動させながら、計算時間を進めている。

多くのアルゴリズムはベクトル化が可能で CMC のベクトルマシン (SX-8R、SX-9) を活用している。特に、電子・イオン熱伝導、および多群拡散近似化した輻射輸送解析では多くの拡散方程式を解いているため、領域分割して並列化計算を行うより大きな共有メモリで、ベクトル化演算させると大変効率よく解くことができる。また、新たな数値モデルを追加した場合でも、ほとんど再チューニングすることなくマシン本来の高い性能を生かすことができるのも大きな利点である。これはレーザー研で必要なコード開発に限らず、多くの発展途上のコード開発にとっては非常に重要な利点であり、コードチューニングの専門家が少ない大学、研究室レベルでは開発環境・マシンの選択理由になるのではないかと思う。

一方、レーザーが発生する極めて強い電磁場によって運動が支配される粒子（電子、イオン）のミクロな挙動は、流体近似では扱えなくなる。そのため、粒子に係る力から個々の粒子の運動を直接計算で求める電磁粒子(PIC: Particle-in-Cell)法に基づくコードが用いられる。一般に PIC 法では、解析精度を向上させるためには粒子数を大きくする必要があり、できる限り大きなメモリ領域を確保する必要がある。ベクトル化による性能向上よりも並列度を上げることに重点を置いて PC クラスターマシン(以下、PCC)を利用することが多い。

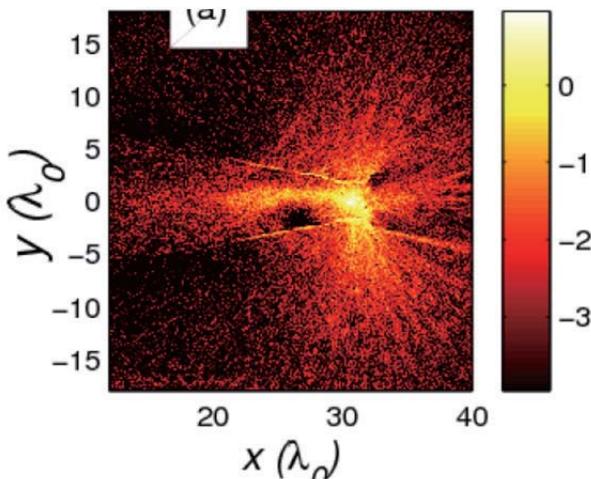


図 2 : PIC 法によるシミュレーション例。超高強度レーザーが左から入射されている。各点が粒子（電子）の分布を表していて運動量、電荷などの情報を持っている。さらに、全空間で電磁場を解いている。

これ以外にも、フォッカー・プランク方程式、分子動力学、モンテカルロ法に基づく手法なども用いられていて、ユーザーにとって適切なマシンの選択が難しい。レーザー研では、利用申請時に計算機室が中心となって、計算規模、手法に応じて CMC の HPC システムかレーザー研内のワークステーション等への利用を勧めている。多様化するコンピュータ環境を効率よく活用するために、このような活動もユーザーサポートの観点では重要である。

様々な解析を追究すると単一のシミュレーションコードでは取り扱えない課題もある。レーザープラズマでも、多階層、マルチフィジックスで取り扱わなければいけない場合もあり、その場合は前述した輻射流体コードや PIC コードを複数のマシン、ジョブで実行、連動させる統合シミュレーションを試験的に CMC で実施させていただいた。ジョブ管理、データ転送などの課題が残されているものの複数コードを連動させる可能性を示すことができた。

現状で、ユーザーにとって最大の問題の一つはコード開発環境である。利用しているシミュレーションコードのほとんどは独自に開発したコードで、市販されているコードはほとんど利用されていない。また、学生や共同研究者も利用することから、隨時モデルの追加、修正をしながら発展を続けている。コード開発において非常に困難な作業としてコードのデバッkingがある。通常は PC あるいはワークステーションで開発したコードを HPC マシンに移し大規模シミュレーションを実施するが、シミュレーション条件によっては単に計算スケールを拡大だけでもトラブルの要因になりうる。MPI 等で並列化したコードを PCC で実行させた場合のコードディバッキングは特に難しい。標準で出力されるエラーメッセージだけではエラーの主因を把握できない場合が多い。ユーザーが色々と原因を追究しても解決できず、結局のところ通信系などのハードウェア障害であったり、ジョブ管理システムのメモリ管理不備などユーザーからは直接把握できない要因でジョブが障害を受けることも多々ある。SX で計算を行っている限りはこのようなトラブルはほぼ皆無であり、時間と労力の節約になる。PCC は発展途上ということ

もあるが、ユーザーフレンドリーなシステムに改善していかないと利用者が離れてしまう恐れがある。

異なるアーキテクチャーのマシンを限られたスタッフで管理することには限界があるのも確かであるので、例えば、CMC では主マシンのアーキテクチャーを限定し、他のアーキテクチャーの利用に関しては他機関と協力して相互利用できる環境を整えるなどの管理面も考慮したシステムを構築することが、結果として管理者、ユーザー双方の利便性向上に役立つのではないだろうか。

一方、今後のマシンのさらなる高性能・大規模化は、利用者にとっては、計算環境の最適な選択を行う必要があるとともに、増大する計算結果のデータ処理環境の整備も重要になる。データのポストプロセスも含めた計算結果の再現性確立、重複や類似した大規模計算の回避、データ共有のためのきめ細かい権限設定、検索機能強化などは今後必要性が増すと予想している。レーザー研では、昨年の実験データ解析システム更新時に、従来の市販データベースを用いた実験データベースシステムを一新し、カスタム設定に長けているシステムを導入した。これによって、実験研究者が実験データ解析とシームレスにシミュレーション解析を行えるような環境を構築することを目指している。今後も HPC のニーズは、多彩で変化も急であると思われるが、CMC の利用、協力を強化しながら研究を進めていきたい。

HPCIにおけるサイバーメディアセンターの役割

東田 学
大阪大学 サイバーメディアセンター

本年 6 月にドイツのハンブルグで開催された ISC'11 (International Supercomputing Conference 2011) で発表された TOP500 リストで、2005 年から「次世代スーパーコンピュータ」として開発されていた「京」が 1 位を獲得した。同時期に開発を競っていた米国 NCSA の “Blue Waters” プロジェクトが頓挫したため「敵失」とも揶揄されているが、ともかく、「平成 23 年 6 月のスーパーコンピュータサイト TOP500 でランキング第 1 位を奪取する」というシステムの性能目標を達成し面目を保ったことになる。ORNL の “Jaguar” が効率 75%、GPGPU をアクセラレータとしたシステムの効率が 40%から 60%という近年の上位システムの中で、効率 93%を実現したことは大きなインパクトがあった。新たに開発された 3D トーラス型インターネットの隣接ノード間での通信遅延が 0.1 マイクロ秒台と伝えられており、この値は現行世代のシステムより一桁短く、次世代という名称に相応しいといえる。

本稿では、次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトの糸余曲折から HPCI に至った経緯と、HPCIにおいて本センターに期待される役割と、将来の利用環境について紹介する。

事業仕分けと HPCI

一昨年度、平成 21 年度冒頭から、次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトの中間評価委員会では性能目標達成の見通しに対して厳しい意見が出されていた。同年 7 月に提出された中間評価委員会の報告書には、「システム構成の見直しが必要であり、特に、スカラ一部に注力し、ベクトル部は縮小または廃止を検討せよ」という要請が記されている。ベクトル部の設計に瑕疵があったわけではない。スカラ一部とベクトル部からなる複合

システムを接続するネットワークに関して、帯域が 100MB/s という仕様しか定まっていなかったため、複合システムのありかたが問われ、一方で、インターネットの帯域を倍増させることによってスカラ一部のみでベンチマーク性能を達成可能な見通しが立ったため、ベクトル部が切り捨てられたことになる。

この報告書が取りまとめられる 2 ヶ月前、NEC から 5 月 14 日付けでプロジェクトから撤退する旨の広報が行われ物議を醸すことになった。NEC のベクトル型スーパーコンピュータを運用する本センターにとって、次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトからの NEC の撤退は大きな懸念となつたが、NEC からはベクトル型スーパーコンピュータ開発継続の広報が散発的に行われており、2011 年 2 月 10 日付けの日経産業新聞においても、「現行ベクトル機 SX-9 が搭載する複数の MPU やネットワーク機能を集約した多コア型の MPU を開発中。ベクトル機を最小構成で業務サーバー 2~4 台分の大きさまで小型化可能」という取材記事が掲載されている。

ともかく、これらを受けて、理研からはスカラ一部単独で性能目標が達成可能となる構成変更案が示されたが、これが行政刷新会議による「事業仕分け」の対象となり、世論の猛反発を受けることとなった。そもそも、次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトが仕分けの対象となったのは、ベクトル部の製造を行わないにも係わらず追加経費 300 億円を要求し、当初の平成 24 年 6 月付けの TOP500 リストで 1 位になる計画に対して導入を 1 年前倒し、かつ、スカラ一部のインターネットの通信帯域を概念設計評価時の構成から 2 倍に増強するという計画変更に対しての判定である。ここまで追加経費を要求してなお「これ世界 1 位に

なる理由はなにがあるんでしょうか、2位じゃダメなんでしょうか」という発言が仕分け人から飛び出したのである。しかし、ノーベル賞受賞者を筆頭にした世論の猛反発を受けて「凍結」の判定は覆され、次世代スーパーコンピュータ・プロジェクトは「革新的ハイパフォーマンス・コンピュティング・インフラの構築」プロジェクト(以下“HPCI”)に名前を変えて存続することになった。ただし、標題にある HPCI 構築に計上された次年度予算は、コンソーシアム形成とシステム基本設計として全体の 1%以下であった。

HPCI コンソーシアムとシステム整備検討 WG

昨年度、平成 22 年度冒頭から、HPCI 検討 WG が組織され、5 月に大阪と東京で開催された意見交換会を経て、5 月 26 日には「HPCI とこの構築を主導するコンソーシアムのグランドデザイン」¹が作成された。グランドデザインでは、次世代スーパーコンピュータを含む HPCI 構築をコンソーシアム²主導で行うことと、準備段階コンソーシアムの参加要件が規定され、ユーザコミュニティ機関(後に「ユーザコミュニティ代表機関」に改称)と HPCI 計算資源提供機関(後に「システム構成機関」に改称)という二つの立場からの機関参加を求める事になった。本センターは、計算資源の共同利用の実績が認められ、計算資源提供機関として同年 7 月から準備段階コンソーシアムに参加している。

10 月には、第 1 回総会が開催され、実質的な検討を HPCI 検討委員会に委ね、さらに、システム整備検討 WG、産業利用促進検討 WG、課題選定体制 WG を設置して検討を進めることになった。このうち、システム整備検討 WG は、「HPCI の基本仕様に関する調査検討」を、東京大学を代表とする情報基盤センター群と国立情報学研究所(以下、NII)そして理研計算科学研究機構に委託し、12 月から本センターを含めて基本仕様の検討を始めた。

¹ http://www.mext.go.jp/b_menu/houdou/22/05/_icsFiles/afieldfile/2010/05/27/1294215_01.pdf

² <http://hpcic.riken.jp/>

HPCI 基本・詳細仕様に関する調査検討

システム整備検討 WG から、HPCI システムイメージ案として図 1 が示され、これを受けて、基本仕様策定では、認証基盤サブ WG、利用支援サブ WG、ストレージ・サブ WG、先端ソフトウェア運用基盤サブ WG、ネットワーク基盤サブ WG を組織し検討を行った。2 回の合宿を含めた検討の結果を、数百ページに及ぶ基本仕様書にまとめ回答し、本年度も引き続いて詳細仕様に関する調査検討を行っている。

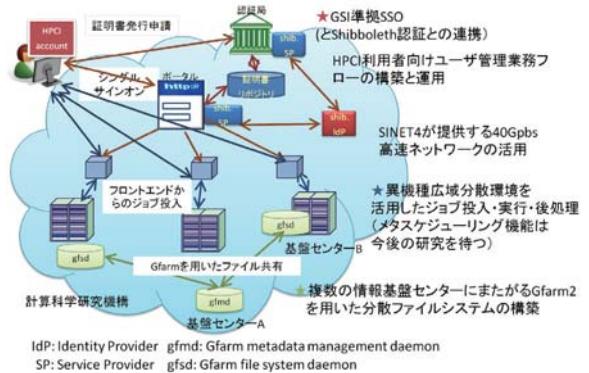


図 1: HPCI システムイメージ (案)

認証基盤サブ WG は、Shibboleth による ID フェデレーションとグリッド PKI (Public Key Infrastructure) を連動させたシングルサインオン環境を実現し、SSH による遠隔ログインや Gfarm によるファイル共有をワンストップサービスとして提供するための枠組みを検討している。ストレージ・サブ WG は、昨年度、文科省最先端研究基盤事業「e-サイエンス実現のためのシステム統合・連携ソフトウェアの高度利用促進」の一環として東大と理研に導入された 20 ペタバイトの大規模ストレージを Gfarm によってサービスするための枠組みを検討している。先端ソフトウェア運用基盤サブ WG は、HPCI に対して IaaS (Infrastructure as a Service) 型のサービスを提供するための枠組みを検討している。ネットワーク基盤サブ WG は、NII が運用している SINET4 を中心に、HPCI のネットワーク基盤のあり方を検討している。

HPCI では、全体を統括するジョブスケジューラの導入は当面想定していない。図 2 に示すように、CUI によるシングルサインオン環境を整備し、スクリプトによるジョブ連携が行える環境を提供する。

その際に、Gfarm によるファイル共有環境を同時に整備し、ワンストップでファイルステージング処理までを可能とする初期設計になっている。

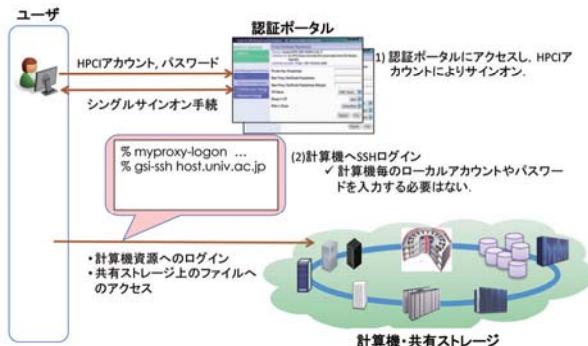


図 2: HPCI におけるシングルサインオン環境

これらの検討結果を踏まえて、本年度、7月5日付で HPCI 準備段階コンソーシアムから「HPCI とその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて」と題した中間報告³が取りまとめられた。コンソーシアムは、この後、法人化が行われ、来年度4月に正式に発足する予定となっている。

HPCI に対する計算資源提供と課題公募型利用

HPCI における本センターの役割であるが、まず、コンソーシアムの HPCI システム構成機関として共用計算資源の提供(保守・運用)が求められている。本センターからは、まずベクトル型スーパーコンピュータ SX-9 と SX-8R を提供する予定であるが、供出する割合については検討中である。さらに、将来的には、国際連携の一環として PRAGMA (Pacific Rim Applications and Grid Middleware Assembly)⁴ に対して資源提供している PC クラスタでの試行を踏まえて、クラウドサービスとして HPCI の枠組みで供出する検討も始めている。さらに、本紙別稿出紹介されている可視化サービスも HPCI に対する大きな貢献になるものと期待している。

³ <http://hpcic.riken.jp/HPC1とその構築を主導するコンソーシアムの具体化に向けて-中間報告-.pdf>

⁴ <http://www.pragma-grid.net/>

HPCI のシステム運用において、認証基盤の維持、管理、調整を NII が担当することになっている。本センターは、NII が主導する CSI (Cyber Science Infrastructure) の構築に関する研究開発と調査に携わっており、グリッド環境の認証基盤をセンター運用業務に適用させるためのミドルウェア開発を行ってきた。HPCI でも引き続いだ NII と共同で認証基盤の基本仕様策定と詳細設計に携わっており、HPCI 向け認証ポータルの開発を行っている。同時に、ユーザ管理支援のための基本仕様策定にも携わり、HPCI 運用事務局が ID 発行や課題申請などの窓口業務を行うポータルの開発を行っている。

HPCI では、現在執り行っている学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN)⁵ 事業と同様の課題公募型の利用受付が行われる。「京」の供用開始が平成 24 年 11 月に予定されていることから、「京」以外の資源も含めて、平成 24 年 6 月から公募が開始できるように準備を進めている。公募に先立って、利用資格者に幅広く HPCI-ID を発行することになっており、その試行を本年 1 月から開始する。さらに先立って、情報基盤センター群では、この夏から HPCI 運用を前提としたシングルサインオン環境の運用準備を進めており、プロトタイプシステムの構築が終わり評価を進めている。

本センターの利用についても、これまで本センターの窓口から独自の利用申請を行って頂いていたが、HPCI の整備が進むにつれて、HPCI 経由での利用に移行していくものと考えている。今後、利用者の視点に立って広報活動を行っていく所存である。なお、これまで取りまとめられた事項は、先の第 4 回 HPCI 検討総会での配付資料⁶に網羅されているのでご参照頂きたい。

⁵ <http://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/>

⁶ http://hpcic.riken.jp/第4回HPCI検討総会_資料.pdf

北ヤード可視化センター構想

下條 真司

大阪大学 サイバーメディアセンター

はじめに

本稿では、現在うめきたで進みつつある北ヤードプロジェクトと当センターがその中で進めようとしている可視化センター構想について述べる。

北ヤードプロジェクトとは

通称北ヤードプロジェクトとは正しくは、うめきた（大阪駅北地区）先行開発区域プロジェクトである。施設名称をグランドフロント大阪と呼ぶ¹。もともとはJRの操車場であったこの地区をどのように開発するかについては、2004年から大阪市が大阪駅北地区まちづくり推進協議会を設置し、議論した大阪駅北地区まちづくり基本計画²に基づき、開発事業者を選定して進められている。2013年春に街開きの予定である。

その基本計画の中では、当初より、通常の単なる開発ではなく、知的創造活動の拠点、いわゆる「ナレッジ・キャピタル」を中心とした街作りがうたわれている。その基本的な考え方を基本計画概要版から抜粋すると、

■新しい産業・技術、文化・価値を生み出し、関西から世界へ発信する知的創造拠点（ナレッジ・キャピタル）の形成

- ・関西のシーズと世界の人材・知識の交流の場
- ・人の交流による新技術・産業・価値の創出の場
- ・市場ニーズの把握と開発・商品化のための交流・展示拠点など

である。大阪の梅田のど真ん中を産業、技術、文化の知的創造拠点にしようというプロジェクトを民間主導で行おうという発想は、我が大阪大学の一つの源流であり、江戸後期の大坂商人たちによ

って設立された学問所であった懐徳堂を彷彿とさせる。

KMO (Knowledge Management Office)

そうはいってもグランドフロント大阪は商業施設、ホテル、ショールーム、劇場などをもつ4棟のビルからなる街である。それを創造拠点たらしめるのは、真ん中2棟の低層階からなるナレッジキャピタルゾーンである³。この中には、様々な大学や研究機関の拠点が集結するナレッジプラザやナレッジオフィススペース、先端技術やそれを用いた展示を見せるフューチャライフショールーム、そして、科学と芸術を融合させた最新技術によるアート展示を集めたサイバーアートセンター、人々があつまるナレッジサロンといった施設が軒を連ねている。

筆者はこれを、都市型サイエンスパークだと理解している。通常は、大学がコアになってその知を求める関連企業やベンチャーなどが集積することで集積が起こる。しかし、大学における知の孤立化、たこつぼ化が問題になる今、大学や研究機関自らがにぎわいやふれあい、イノベーションを求めて、その知をむき出しにして、世に問う場所として都市型のサイエンスパークはあり得るのではと思っている。

日々200万人が乗り降りする大ステーションの駅前という好立地に加えてこの場所を魅力的にしているのが、サイバーアートセンターを代表とする文化、芸術と技術の融合である。ここではメディアアートという最先端の科学技術と向き合ったアートを提示することにより、人々に最新の科学技術に優しく、あるいは時には辛辣に触れる機会

¹ <http://www.grandfront-osaka.jp/concept/naming.html>

² <http://www.city.osaka.lg.jp/keikakuchosei/page/0000020299.html>

³ <http://www.kmo-jp.com/facilities/>

を与える。

昨今イノベーションが重要になってきている。ICTによる急速な社会変革は新しい時代のための従来の延長線上にない新しい技術を求めており、それがイノベーションである。また、科学技術の方は、専門家、細分化が進み、それぞれの研究者にとって、全体を見渡すことが難しくなるとともに、現実社会への適用や影響を見通すことも難しくなってきている。このため、技術を俯瞰してイノベーションを興すことが非常に難しくなってきている。このような科学技術の現状を打破し、イノベーションをもたらすことをデザインを通じてやってみようと言う動きがある。たとえば、スタンフォード大学のDスクールである⁴。Dスクールは、IDEOのデビッドケリーらがスタンフォードに始めたデザインの学校であり、異分野の学生を集めて実際の社会的問題を解決する製品をプロトタイピングにより作らせる。異分野とテクノロジーによるイノベーションを体験させる学校である。社会的なニーズを出発点として課題を解決するために技術を使う体験をさせることにより、イノベーションを体験した人材育成を行うことができる。

可視化センター構想

このような例を見習いつつ、KMOの中には、企業などが大学や研究機関とタッグを組み外部の技術や力を借りてイノベーションを興すことを狙った「オープンイノベーションビレッジ」が開設される予定である⁵。サイバーメディアセンターは、この中の一角で可視化技術によりオープンイノベーションを興すことを狙った「可視化センター」を開設する予定である。ここは、スーパーコンピュータをはじめとするサイバーメディアセンターの計算資源を用いた利用者による産学連携拠点として展開する予定である。

スーパーコンピュータの分野では、従来から

scientific visualizationと呼ばれて、計算結果を可視化することが行われてきた。多くの場合、これは研究者が計算結果を確認したり、そこから新たな知見を得るために行われてきたが、昨今のように研究のアウトリーチ、すなわち、研究結果を一般市民にもわかりやすく説明することが求められるようになると、この可視化の重要性はますます高まっている。研究者以外が見るための可視化のためには、研究者と可視化技術の専門家、場合によっては外部のクリエータなどを巻き込んだ混成チームにより、進める必要があり、可視化のプロセスそのものがオープンイノベーションになる。サイバーメディアセンターにはインタラクションや可視化の専門家もあり、彼らとサイバーのユーザー、外部のクリエータらのコラボレーションにより、科学技術をわかりやすく提示するための可視化を行い、そのことが京コンピュータをはじめとする我が国の計算科学の発展につながればと思っている。また、今回の原発や地震予知を上げるまでもなく、遺伝子組み換え食品や再生医療など我々の社会は科学技術と結びついているにも関わらず、人々が科学技術に無関心でいることは、非常に危険なのである。可視化を通じて、人々の科学技術に対する関心を喚起することも重要である。

可視化センターを想定して、当センターとNICT、京都大学、関西大学などが参加して”Vislab Osaka”というコラボレーショングループを結成し、様々な可視化を行ってきた。

NICTによる太陽地場の地球への影響のシミュレーションはこのようなコラボレーションを通じて可視化された⁶。

これらのコラボレーションの結果は、北ヤードトライアルイベントで展示されている。

おわりに

2013年春の開業を目指し、うめきたでは工事が進められている。しかし、当初のビジョン通り、

⁴ <http://dschool.stanford.edu/>

⁵ <http://www.osakacity.or.jp/distribute/asp/ooiv/index.html>

⁶ <http://www.xooms.co.jp/ja/news.html?start=16>

ここが関西ひいては世界の創造拠点となるかは、
今後の関係者の努力次第である。懐徳堂を設立し
た五同志の精神に学び、関西の一員としてビジョ
ンの実現に何らかの貢献ができればと思ってい
る。

トライアルイベント 2010 の様子



大規模計算機システム利用者

研究報告

【論 文】

- ・朝日放送制作 平等院復元CGについて ----- 19
 香取 啓志 朝日放送株式会社
 藤原 宏美 株式会社アイネックス
 油谷 曜 奈良先端科学技術大学院大学
- ・Ge/Siヘテロエピタキシャル成長の歪み緩和と刃状転位形成機構 ----- 23
 藤本 義隆 東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻
 押山 淳 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻
- ・有機－金属界面での準位接続・相互作用に関する第一原理的研究 ----- 27
 柳澤 将 大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻
- ・流動層シミュレーションの大規模化と高分解能化 ----- 33
 辻 拓也、田中 敏嗣 大阪大学大学院工学研究科機械工学専攻
- ・磁気流体不安定による星間磁場の增幅機構 ----- 39
 佐野 孝好 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター
- ・格子QCDシミュレーションを用いたQCDの相図の研究 ----- 45
 永田 桂太郎 広島大学情報メディア教育研究センター

朝日放送制作 平等院復元 CG について

朝日放送株式会社 香取 啓志

株式会社アイネックス 藤原 宏美 奈良先端科学技術大学院大学 油谷 曜

はじめに

十円硬貨で有名な平等院が、昭和から平成までの60年間に調査した研究成果を反映した番組を朝日放送が制作し（2011年2月放送「平安の美ふたたび」）、CGを株式会社アイネックスが担当した。

更に、フルハイビジョンの4倍という高精細の4K映像に展開することになり、披露は遠隔地（大阪市、武藏野市）からのリアルタイム伝送による上映、さらに記者発表を4月26日奈良先端科学技術大学院大学で行った。（システムソフトは株式会社ビービーアールが担当、ネットワークはNICTのJGN-Xを利用した。）

時を超えて目指したもの

平等院には長年の調査による多くの資料が保管されており、復元図や復元物も注力されている。今回の制作にあたり、仏像実物の三次元レーザースキャンや復元された物を画像として取り込むことにより、精巧でリアルな平安時代の姿を蘇らせることを目指した。

堂内の鮮やかな彩色は、岩絵具などを用いた復元図の筆の跡や濃淡など、実物の雰囲気を損なうことなく再現することに気を配った。部分的に見れば色ムラでも全体を見た時、不思議な柔らかい調和が生まれる。CGをご覧になる機会があればそこから醸しだされる空気感の表現をぜひ感じて欲しい。

さらに光の表現にもこだわった。堂が西を背に建つのは日想願を体現しているためであり、光の表現は特に重要と考えられたからである。CGでは入日を背にする堂を表現、浄土に想いを馳せたであろう人々の気持ちを感じられるようにした。同じく堂内でも、西裳階の窓からさす入日の様子を再現、来迎を思わせる莊厳さを表現した。現存の平等院には西裳階の窓が存在しないため体験不可能な平安の情景である。

復元 CG の利点

建造物の復元として記憶に新しいのは、平成22年の奈良平城宮跡で、総事業費は数百億円という国家プロジェクトである。しかし気軽に各地の建造物を復元する訳には行かない。これに対し、コンピュータを用いて正確に部品データを積み上げて精巧に復元した三次元映像を制作することができる。復元CGの利点は費用を抑えられるだけではない。地下の遺跡を傷つけることもなく、地震火災リスクもない。復元以降の研究により、例えば柱の色や建物の構造が違うことが判明した場合、完成した建造物ではもはや修正不可能でも、CGならすぐに変更が可能である。

また実物は様々な制約を受けることもある。平等院の平成大修理では発掘成果に基づき、池の中島にかかる橋が実際に復元されている。しかし、この新造された橋は参觀者の安全のため、低く、高欄もより太く造作されている。CGでは仏後壁に描かれている橋のように高く、高欄を細身に制作してより雅な橋となっている。（図1）



図1 反橋・平橋

本尊・台座・光背・雲中供養菩薩（23体）は、東京藝術大学が行ったレーザー計測による三次元データ構造及び分析データに基づいた彩色を施している。実物そのものをデジタル化しているのだから限りなく創建時のオリジナルに近い姿だといえるだろ

う。そしてデジタルアーカイブとして朽ちることなく後世に残っていき、ハイテク技術の進化に合わせて4K以上の高精細映像へも進化させられる。

データの可視化でわかったこと

創建期の図面や文献の寸尺を忠実に再現した結果、全体図面には未記載で設置する場所が不明であった天蓋の位置が、3Dモデル完成後に堂内へ組み入れると部材の長さから自ずと収まる場所が判明し、驚きとともに資料の正確さを裏付けることができた。

このように失われた建造物のビジュアル化は、文化財研究にも成果をもたらす。文化財に限らずCGの制作現場でよく遭遇する場面だが、ビジュアル化して初めてわかるることは多々あり、また多くの人の意見を集約しやすい。長らく研究が尽くされている平等院でさえも、今回のビジュアル化が進む中で判明したことや意見を反映したところが多数あり、今後多くの人が目にすることにより判明する事実もありうる。それらを反映させてより一層、いにしえの姿に近づいていくプロジェクトといえる。

4Kの表現力

4Kの表現力には驚くばかりで、ハイビジョン番組制作時には微細すぎてわかりにくかった須弥壇上のラピスラズリの煌きが4Kでは表現できた。彩色の

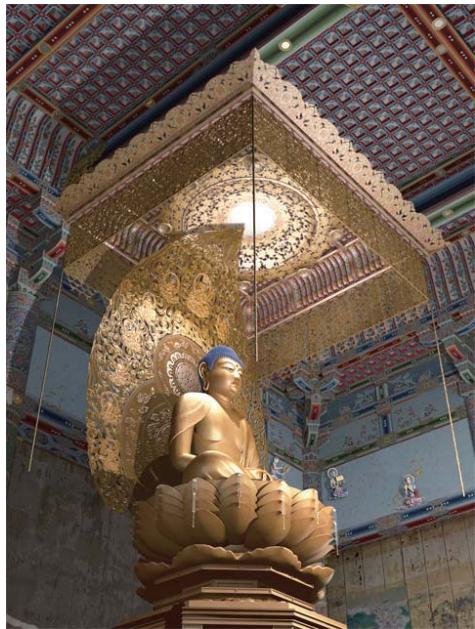


図2 平等院鳳凰堂内

繊細な濃淡もより感じることができ、空気感は格段に増し臨場感を高めてくれている。(図2)

レンダリングは時間がかかる

4K制作にあたり最大の問題は、3Dソフトの演算処理(レンダリング)に時間がかかるという点である。社内マシンをフルに使用しても5分の映像で約半年を要する。

時間がかかる要因は、まず解像度が大きいこと。そして3Dレーザースキャンした仏像モデル(東京藝術大学制作)が24体あり、その膨大なポリゴン数は処理時間を一気に増大させる。(図3、図4)

テレビ映像は1秒に30枚の画像が必要で、5分の映像制作には $5\text{分} \times 60\text{秒} \times 30\text{枚} = 9,000\text{枚}$ の画像が必要になる。1枚のレンダリングに要する時間が30分の場合、187.5日の期間が必要になる。

ハリウッド映画が時間と費用をかけて制作しているのは一般的に知られているが、ドリームワークス¹の2010年3月時点の環境²は、データセンター全体のコア数が1万2,000コア、メモリー96TB、HDDの総量1PB、900人が同時利用と凄まじい環境である。

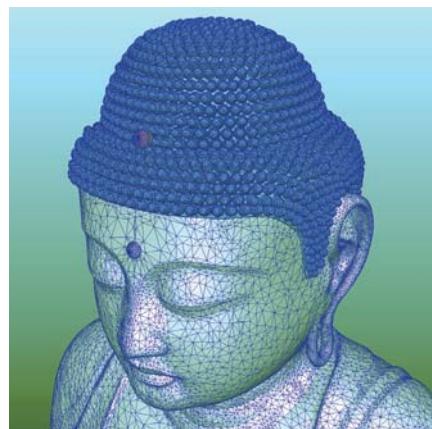


図3 阿弥陀如来ワイヤフレーム

¹ ドリームワークスは、1994年設立のアメリカの映画スタジオ。正式名称は DreamWorks SKG

² ASCII.jp「米DreamWorksを支える、かなりスゴイ制作環境」
2010年3月31日掲載



図 4 雲中供養菩薩像ワイヤフレーム

サイバーメディアセンターのクラスタ

そこで、今回は、大阪大学サイバーメディアセンターのクラスタを用いてレンダリングを行うことにより、大幅に期間の短縮を図った。

■ 利用したクラスタのマシンスペック

8 コア (Intel Xeon E5520 × 2)	12GB RAM
OS : Windows7 64bit × 9 台	Fedora11 64bit × 7 台

■ 期間

2月2日	5台で計算開始
2月15日	4台追加
3月1日	7台追加で全16台の準備完了
3月31日	返却

■ 演算処理の所要時間

1枚あたり 約 20 分 ~ 3 時間 10 分

■ 仏像のポリゴン数

24 体の合計 約 680 万ポリゴン

例 :

- ・阿弥陀如来 約 225 万ポリゴン (図 3)
- ・雲中供養菩薩像北 25 号 約 40 万ポリゴン (図 4)

非圧縮遠隔伝送上映

2011 年 4 月 26 日に制作した 4K 映像を分散遠隔伝送システムを用いて奈良先端科学技術大学院大学に

て上映を行った。

文化財の再現映像のような細部にわたり映像の劣化に対して配慮すべき映像の伝送は、映像の圧縮処理を行わず非圧縮状態で送る必要があり、4K 超高精細 CG 映像の非圧縮映像伝送の場合、6.4 Gbps (bits per second) という膨大なネットワーク帯域が必要とされる。

伝送用の 4K 超高精細映像は上記の膨大な帯域に満たないストレージ I/O の制約を回避するため、“田”の字の形に並べた 4 つのハイビジョン映像に分割して構成されており、遠隔地への映像伝送を行なう場合もハイビジョン映像 4 ストリーム分を同時にを行うことで実現している。技術的に、4K 超高精細映像の表示を正常に行なうためには 4 つの映像の同期処理が必要となり、著しい遅延が発生した場合には正常に表示することができない。

今回は、大阪と東京の 2箇所に 4 面の中の 2 面のハイビジョン映像を分散配置し、東京、大阪 2か所から同時に奈良に同期伝送して 4K 映像に合成表示する実験に成功した。

将来的に実現すべき、映像データの分散アーキテクチャや必要伝送帯域の分散化を考慮したクラウド型トポロジーへの移行にあたり、4 つのストリームを東阪の別拠点から行なう実験を成功させたことは、将来への伝送の可能性を示すために有用であった。

最後に

様々な研究に使用中の貴重な大阪大学のクラスタを利用しました。平等院 CG は、医学の進歩や自然科学技術開発に貢献できませんが、平等院 神居文彰住職は「責任を持って配信する文化の新展開が、希望につながってほしい」と望んでおられ³、社会や歴史研究にも繋がります。作業中に起こった東日本大震災。海外からの観光客が激減し観光業界が低迷する中、日本再興の希望に少しでもつながればと思います。

最後に、ご尽力いただきました関係者の皆様に感謝いたします。

³ 城南新報「創建期の鳳凰堂 CG で」2011 年 04 月 27 日掲載

Ge/Si ヘテロエピタキシャル成長の歪み緩和と刃状転位形成機構

藤本 義隆¹⁾、押山 淳²⁾

¹⁾東京工業大学 大学院理工学研究科 物性物理学専攻

²⁾東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻

1. はじめに

Si系半導体デバイスの性能向上は、その基本素子である電界効果型トランジスタの素子サイズのスケーリング（比例縮小化）と高集積化によって支えられている。しかしながら、微細化による素子の性能向上に限界が見え始めつつあることから、スケーリング則に依存しない新たな性能向上技術の模索が必要となってきた。その一つとして、電気的なキャリア移動度がSiよりも高いGeをSi基板上に作製し、それをトランジスタのチャネルとして利用した高速電子デバイス応用への試みがある。

Si(001)基板上のGe層成長では、それらの4%程度の格子定数の違いから、Ge層は圧縮歪みを受け、Ge層の増加とともに歪エネルギーが増大する。その結果、ある臨界膜厚を超えるとミスフィット転位が発生し、歪エネルギーを解放する。このように生じた転位は、Ge膜の構造的な不均一性などからくる表面荒れや膜質の劣化を招き、ひいてはキャリア移動度の低下などデバイス特性の劣化を引き起こすことが報告されている[1]。近年、このGe膜質の劣化を防ぐ方法として、水素などのサーフアクタントを用いたエピタキシャル成長技術が提案されている[2]。これにより形成されたGe/Siヘテロ構造のGe膜とSi基板の間には、界面に沿って刃状転位が形成され、その結果、高品質なGe膜が作製されることが報告されている[3]。しかしながら、Si基板上のGe膜の成長過程における初期段階での表面形態、転位を引き起こす欠陥構造、いわゆる転位芯構造や、転位が発生する臨界膜厚など基礎的な知見が十分得られていないのが現状である。このため、Ge/Siヘテロ構造

における更なる高品質な結晶膜作製の実現には、Si基板上のGe層成長過程における歪緩和機構と転位発生の基本的性質をマイクロスケール、特に原子レベルの観点から理解することが求められる。

本稿では、Si(001)基板上のGe膜成長における歪緩和機構や刃状転位の形成機構を量子力学の電子論的立場から明らかにするために、密度汎関数理論の第一原理に基づいた高精度電子構造計算を実行し、そこから得られた結果を報告する[4,5]。

2. 計算方法

本研究では、密度汎関数理論(DFT)に基づいた第一原理電子構造計算手法を用いている[6]。この第一原理電子構造計算とは、実験値などの経験的パラメーターを用いず、式(1)に示す1電子のシュレディンガー方程式に対応するようなKohn-Sham方程式を解く方法である[7]。そして、取り扱われている系の全エネルギーから各原子に働く力を求め、その力に沿って原子核の位置を変化させ、全エネルギーの最小値（極小値）を求める。これはちょうど、対象となっている物質のエネルギー的安定構造を求めていることに対応する。このような方法により得られたSi結晶などの固体の構造的特性（格子定数、ボンド長など）は、実験値と比較してもその誤差が1%程度以下であることが知られている。解くべきKohn-Sham方程式は、

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{ext}(r) + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + v_{xc}(r) \right] \varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i \quad (1)$$

と書かれる。ただし、電子密度 $\rho(r)$ は、

$$\rho(r) = \sum_i |\varphi_i(r)|^2 \quad (2)$$

である。ここで、第1項は電子の運動エネルギーを表し、第2項 $v_{ext}(r)$ は原子核からの寄与を含めた外場ポテンシャル、第3項は電子の古典的なクーロン相互作用を表している。最後の第4項 $v_{xc}(r)$ は交換・相關ポテンシャルと呼ばれ、量子的な電子間の相互作用を表わしている。ただし、 $v_{xc}(r)$ は、局所密度近似(LDA)によって近似された関数形を用いている。

具体的な系の構造的安定性や電子特性を調べるために、式(1)で表した Kohn-Sham 方程式の解を数値的に精度良く求めることが必要である。このために、本研究では3次元の空間を有限のグリッドで分割する実空間差分法を採用した実空間密度汎関数理論(RSDFT)コードを用いている[8]。この実空間差分法の主な利点は、①取り扱う系の空間を小さな部分空間に分割することが出来るため、それらを各計算ノードに容易に振り分けることができ並列計算機に向いていている、②取り扱う行列の要素が対角要素附近に集中しているため、行列の演算コストが極めて少なく済むなどが挙げられる。実空間差分法に関する詳細は文献[9]、RSDFT コードについては文献[8]に書かれてある。

3. Ge/Si 系ヘテロエピタキシャル成長と刃状転位

1. 刃状転位の転位芯構造

図1の左図には、巨視的なイメージとしての Si 基板上の Ge 膜とそれらの界面近傍にある刃状転位のイラストを描いている。また、図1の右図には、本研究で提案している転位芯の原子構造として5員環と7員環のペア構造を示している。この欠陥構造を導入することで、Si 基板の約4%の格子不整合を解消するように Ge 結晶を積むことができる。この

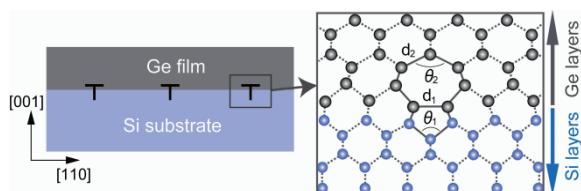


図1 Si基板上のGe膜とそれらの界面近傍にある刃状転位（左図）。5-7員環からなる転位芯の原子構造（右図）。

ため、[110]方向に並んだ24周期構造のSi基板中に、ただ一つの5-7転位芯構造を導入する。このように、転位のある長周期の結晶構造を取り扱うため、ここでは最大で千数百原子群の大規模なDFT計算を実行する必要がある。

2. エピタキシャル成長のエネルギー論

Si基板上に作成されたGe膜の成長過程を議論するために、フィルムエネルギーを

$$\gamma_f = \frac{E - m_{\text{Si}}\mu_{\text{Si}} - m_{\text{Ge}}\mu_{\text{Ge}} - m_{\text{H}}\mu_{\text{H}}}{S} - \Gamma_b \quad (3)$$

として定義する。ここで、 E は系の全エネルギー、 m_{Si} 、 m_{Ge} 、 m_{H} はそれぞれSi、Ge、Hの原子数を、 μ_{Si} 、 μ_{Ge} 、 μ_{H} はそれぞれSiバルク、圧縮されたGeバルク、H₂分子の化学ポテンシャルを表している。また、 S は(001)面の面積を、 Γ_b はスラブモデル計算によって生じる下層の表面エネルギーを示している。この Γ_b は、計算モデルから生じる不必要的エネルギーであるため、全体から差し引かれている。

図2には、転位の存在しない2×1構造と5-7転位構造に関して、式(3)で定義されたフィルムエネルギーのダイアグラムを示している。まず、Ge層に関するフィルムエネルギーの振る舞いを見るために、2×1構造に着目する。この2×1構造は、Ge膜中に転位の欠陥構造が存在しない構造である。Ge層が増加するとともに、フィルムエネルギーが減少していくことが見て取れる。そして、およそ4層になると一定の値 $\gamma_{2\times 1}^\infty$ に近づいていることが分かる。この $\gamma_{2\times 1}^\infty$ は、Ge表面がSi基板との相互作用が無視できるほど、十分Ge層が積まれた時の2×1構造のフィルムエネルギーを示している。そのため、Ge層を4層程度積むと2×1構造のフィルムエネルギーは、それ以上Ge層を積んでも変化しないことが分かる。

次に、図1に示すような5-7転位構造が生じている場合について考える。転位が発生するには、その核となる転位芯がGe膜とSi基板の界面近傍のどの位置でエネルギー的に最も安定であるかを決めることが重要である。なぜならば、転位芯よりも下側のSi基板に近いGe層は圧縮歪みを受けているが、転位芯の上方にあるGe層は、歪みを受けていないためである。そのため、まずエネルギー的に安定な転

位芯の位置を決めるを考える。図 2(a)の転位構造モデル A1 から A3 には、5-7 転位芯が Ge 膜の表面にある場合を表している。このときの A1-A3 モデルでは、積まれる Ge 層の増加とともに、転位芯と Si 基板との間の Ge 層が増加していることに注意する。この場合のフィルムエネルギーの振る舞いは、 2×1 構造の場合と同じように Ge 層が増加すると、フィルムエネルギーが減少していく、やがてある一定値 γ_{DC}^{∞} に近づく。ここで、 γ_{DC}^{∞} は $\gamma_{2\times 1}^{\infty}$ と同様に Ge 表面近くにある 5-7 転位芯と Ge/Si 界面との相互作用が無視できるほど十分小さい場合でのフィルムエネルギーを表している。図 2(b)の結果から、フィルムエネルギーが 4 層で γ_{DC}^{∞} に到達していることから、5-7 転位芯は A2 モデルの位置にあることが、エネルギー的に好まれることが分かる。

次は、いま決定した 5-7 転位芯の上方に Ge 層が積層されていく状況を考える。すなわち、図 2(a)の転位構造モデル B2 から B5 にあるように、構造モデル A2 の表面に Ge 層が作成されていく場合を考える。

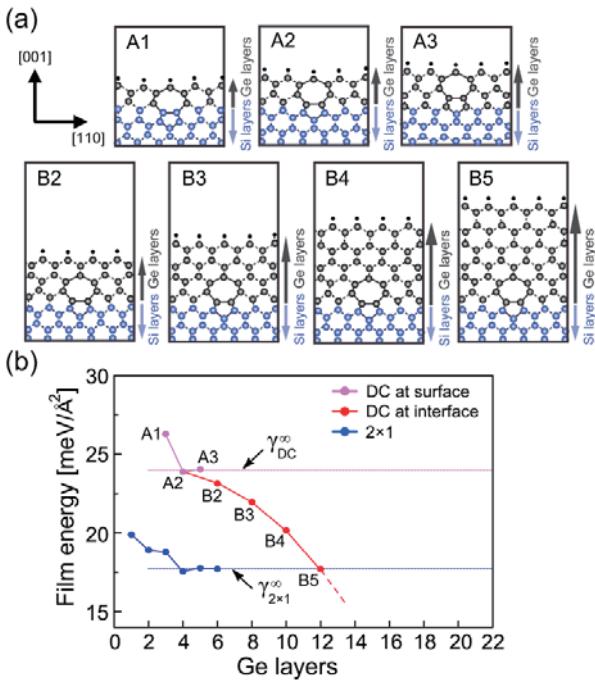


図 2 (a)Ge/Si ヘテロ構造における刃状転位構造図。A1-A3 は、転位芯が Ge 表面に存在する場合、B2-B5 は、転位芯が Ge/Si 界面に存在する場合の転位構造図。(b)フィルムエネルギーの Ge 層数依存性。A1-A3 と B2-B5 はそれぞれ図 2(a)の構造に対応するフィルムエネルギーを表している。

図 2(b)から明らかなように、Ge レイヤーの増加とともにフィルムエネルギー($B2-B5$)が減少していく様子が分かる。そして、ちょうど転位構造 B5 のとき、 2×1 構造のフィルムエネルギー $\gamma_{2\times 1}^{\infty}$ よりも転位構造のフィルムエネルギーが低くなる。これは、Si 基板上の Ge レイヤーが、成長初期段階では 2×1 構造を保っているが、12 層積まれると転位構造 B5 へと変化する。すなわち、転位が発生する臨界膜厚は 12 層であることが分かる。

3. 走査型トンネル電子顕微鏡像

前節で述べたように、Ge 層が 12 層程度積まれると転位が生じることが分かった。このように転位芯は、Ge 膜表面から十分離れた Ge/Si 界面近傍に埋もれているため、その原子構造などの情報を得ることは非常に困難である。ここでは、結晶深部にある転位構造を、Ge 表面を観察することでその位置を検知できる可能性を示す。また、Ge 表面を観測する方法として、走査型トンネル電子顕微鏡(STM)を用いることを提案する。STM は、半導体や金属表面を原子レベルで観測できる有用な方法として広く知られている。STM におけるトンネル電流 I は、表面からの位置 r での状態密度を ρ_s とすると

$$I \propto \int_0^{eV} \rho_s(r, E_F - eV + \epsilon) d\epsilon \quad (4)$$

の関係が成立立つ。ここで、 V は印加される電圧、 E_F はフェルミエネルギーである。したがって、シミュレーションによる STM 像は、表面の状態密度をフェルミエネルギーから印加電圧まで積分することにより求めることができる[10]。

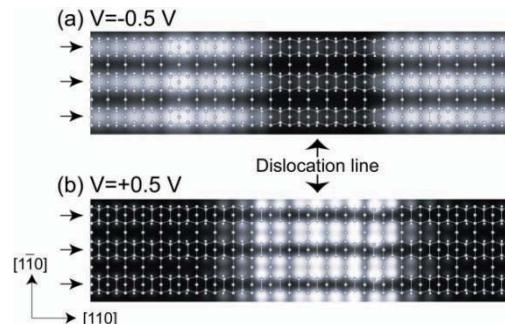


図 3 シミュレーションによる STM 像：(a) 値電子帯、(b)伝導帯に関する像。印加電圧はどちらも 0.5 V とした。

図3には、本計算により得られた転位構造モデルB5(図2(a))のSTM像を示している。図3(a)には価電子帯に関するSTM像を、図3(b)には伝導帯に関するSTM像を示している。これらのSTM像は、構造モデルB5の上方からみていることに対応する。価電子帯のSTM像(図3(a))には、中央付近で暗い(黒い)線が見えることが分かる。また、伝導帯の場合(図3(b))では、逆に中央付近に明るい(白い)線が見られる。これらのSTM像に見られる暗い、あるいは明るい線は、ちょうど転位芯構造の上方にあたる。このように転位が発生すると、[1-10]方向に沿って暗い、あるいは、明るい転位線がSTM像内に極めて明瞭に現れる。

4. まとめ

本稿では、次世代半導体デバイス産業の基盤技術に関するGe/Siヘテロ構造のエピタキシャル成長に関するテーマを紹介した。千数百原子群からなる刃状転位構造の計算モデルを取り扱う必要性から、実空間密度汎関数計算コードを大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピューター上で実行し、基板上の歪みを受けたGe膜成長での歪み開放メカニズムと刃状転位形成過程のエネルギー論を明らかにした。また、刃状転位構造のSTM像の計算を実行し、原子レベルで転位線の観測が可能であることを示唆する結果を得た。

謝辞

本研究の一部は、東京工業大学グローバルCOEプログラム「ナノサイエンスを拓く量子物理学拠点」の支援を受けたことを記し、謝意を表します。また、本稿で紹介した計算は大阪大学サイバーメディアセンターのSX-8RおよびSX-9を主に利用して行ったものです。最後に、本寄稿の執筆を依頼してくださいました大阪大学サイバーメディアセンター広報委員会に感謝いたします。

参考文献

- [1] S. H. Olsen, A. G. O'Neill, D. J. Norris, A. G. Cullis, N. J. Woods, J. Zhang, K. Fobelets: *Semicond. Sci. Technol.* **17** (2002) 655.
- [2] M. Copel, M. C. Reuter, E. Kaxiras, and R. M. Tromp: *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989) 632.
- [3] A. Sakai, T. Tatsumi, and K. Aoyama: *Appl. Phys. Lett.* **71** (1997) 3510.
- [4] Y. Fujimoto and A. Oshiyama: *Phys. Rev. B* **81** (2010) 205309.
- [5] Y. Fujimoto and A. Oshiyama: *AIP Conference Proceedings*, in press.
- [6] P. Hohenberg and W. Kohn: *Phys. Rev.* **136** (1964) B864.
- [7] W. Kohn and L. J. Sham: *Phys. Rev.* **140** (1965) A1133.
- [8] J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, and K. Yabana: *J. Comp. Phys.* **229** (2010) 2339.
- [9] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto: *First-Principles Calculations in Real-Space Formalism*, Imperial College Press, London (2005).
- [10] J. Tersoff and D. R. Hamann: *Phys. Rev. B* **31** (1985) 805; H. Okada, Y. Fujimoto, K. Endo, K. Hirose, and Y. Mori: *ibid* **63** (2001) 195324; Y. Fujimoto, H. Okada, K. Endo, T. Ono, S. Tsukamoto, and K. Hirose: *Mater. Trans.* **42** (2001) 2247.

有機一金属界面での準位接続・相互作用に関する第一原理的研究

大阪大学大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻 柳澤 将

(yanagisawa@cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp)

1. 緒言

現在、ディスプレイ、電界効果トランジスタ、太陽電池をはじめとする電子デバイスでは、シリコンを主とする無機半導体材料が使われているが、Tang らによる初の有機電界発光(EL)素子の開発報告[1]以来、有機半導体を材料とする電子デバイスの研究・開発が企業や大学でさかんに進められてきた。

有機電子デバイスの主な特長として、1. 材料が安価、2. 印刷工程で製造可能なため、安価かつ省エネ性が高い、3. 材料が柔らかく、電子ペーパーなどの応用が可能、などがあり次世代の電子材料として大いに期待されるが、より実用性を高めるため、基礎・応用両面からさらなる研究開発が必要である。

これらのデバイスの動作に共通するのは、キャリア（電子または正孔）が、異なる有機物同士、または有機物と電極との界面で出し入れされることであり、電子構造の観点からは、異層へのキャリア注入障壁がデバイスの動作を本質的に支配すると考えられる。たとえば、電子注入障壁は、金属電極のフェルミ準位と有機物の最低空軌道(LUMO)準位との差で

与えられる（図1）。

有機物と金属表面の界面（有機-金属界面）での電子準位の接続を決める機構について、実験的・理論的に詳細に調べられてきた[2]。一般に有機物と金属表面はファン・デル・ワールス(vdW)引力で弱く相互作用し、界面での準位接続は金属層と有機層で真空準位を揃えるように決まる、と従来考えられてきた。しかし、紫外光電子分光による詳細な測定や、理論的な検討から、そのような仮定が正しくない場合が多いことが分かってきた。真空準位を揃えることによる準位接続の見積もり（図1右）に比べ、界面の相互作用に由来する電気双極子層 Δ の効果で、有機層側の準位が相対的にシフトし、そのシフトの大きさは1 eV以上にもなる（図1左）。

このような界面電気二重層の起源が、実験的・理論的研究の結果をもとに提案されている（図2）[2]。特徴的なのは、相互作用の弱い典型的なvdW相互作用のみの界面でも、表面からしみ出した電荷が、有機分子の電子雲との量子力学的な効果（パウリ反発）で表面側に押し戻され、有機分子側が電気的に正になって電子準位が少なからず下がる、という現象（

ツッシュバック効果）である。

筆者の所属するグループでは、これまで有機電子デバイスと関連のある有機-金属界面での電子準位接続について、第一原理電子状態シミュレーションを用いて精査してきた。その結果、界面での原子・分子スケールの構造、たとえば有機分子の配向や、有機-金属表面間の距離の影響が重要であることが分かってきた。そのような構造は、前述のvdW相互作用や化学吸着相互

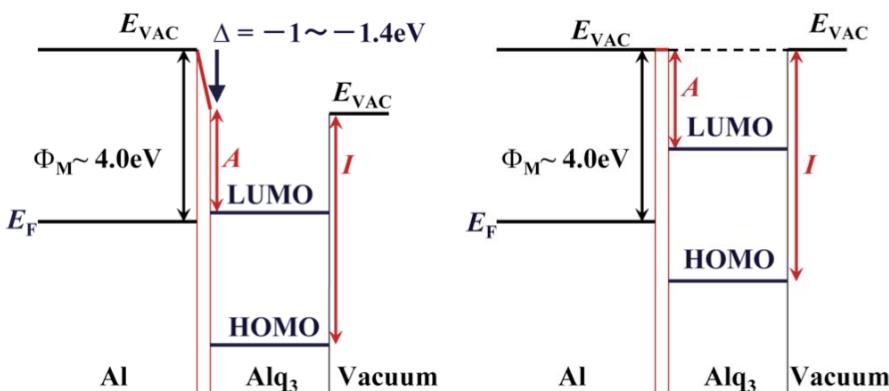


図 1 有機層(Alq₃)と金属層(Al)の界面での電子準位接続の模式図。E_Fは金属層のフェルミ準位、分子の最高占有・最低空軌道をそれぞれ HOMO,LUMO で表している。E_{VAC}は真空準位、Φ_Mは仕事関数である。右は両層で共通の真空準位を仮定しているのに対し、左は界面電気二重層の効果 Δ による準位シフトを示す。数値は、筆者らによる、以前の第一原理計算(J. Chem. Phys. **128**, 244704 (2008))の結果に基づく。

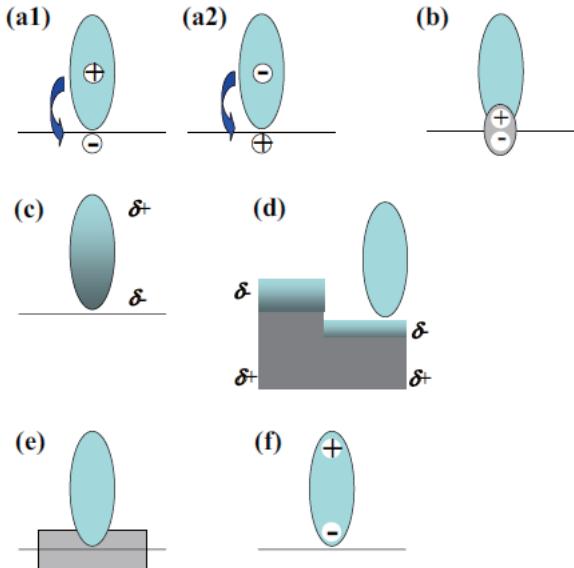


図 2 提案された界面電気二重層の起源の模式図。(a1-2): 電荷移動、(b): 化学結合の形成、(c): 金属表面から受ける鏡像力によって電荷が表面側に偏る、(d): 表面からしみ出した電子雲の再構成 (プッシュバック効果: 詳細は本文)、(e): 界面状態、(f): 分子の永久双極子

作用が複雑に関与して決まると考えられる。

本稿では、最近のグループの成果として i) 有機-金属界面での相互作用の性質についての詳細な研究、ii) 吸着分子-金属表面間距離によってトランジスタの n 型特性を発現させる方法の提案、について紹介する。

2. 計算方法

計算シミュレーションで用いる方法は、量子力学や電磁気学などの基礎的な物理法則に基づいた、第一原理電子状態計算である。実験からの入力パラメータを使わずに固体や表面・界面の電子的・磁気的性質を再現・予測でき、実験的に直接見るのが容易ではない電子そのものの振る舞いをシミュレーションすることが可能である。特に、固体内の複雑な多体電子の効果を、1つの電子が感じる平均的な1電子ポテンシャルで記述する密度汎関数理論(DFT)は、簡便でありながら正確に固体物性の予測・再現が可能であるため、近年、計算機環境の向上とともに様々な物性研究で威力を發揮している。

使用した計算プログラムは、大阪大学大学院工学研究科の森川良忠教授らが開発した Simulation Tools for Atom TEchnology (STATE) コード[3]であ

る。本コードは、金属系や表面系の扱いに特にすぐれ、平面波基底関数による波動関数の展開によって99%超のベクトル化率を有し、MPI で並列化されている。本稿で紹介する計算シミュレーションのジョブは SX9 を使用し、16-32 コア (1-2 ノード)、elapsed time にして最大 10 時間程度の規模で行われた。

前述のように、有機-金属界面では vdW 引力が界面相互作用を支配しているが、vdW 引力は、一般的な DFT 法の 1 電子平均ポテンシャルでは原理的に記述できない長距離間の相互作用である。そこで、界面構造や相互作用エネルギーの精度向上のため、近年提案された、vdW 引力を非経験的に記述する方法(vdW-DF[4])と、半経験的に記述する方法(DFT-D[5])を適用した。計算対象によって方法を変えるのは、これらの方法もまた近似であり、対象とする物質や物性によって信頼性が変わるものである。

3. 計算結果

a) tris-(8-hydroxyquinoline) aluminum (Alq_3) と Mg 表面との界面での相互作用の性質

tris-(8-hydroxyquinoline) aluminum (Alq_3) は、有機 EL 素子などの有力な電子注入材料の物質として知られ、大きな双極子モーメントを持つ分子である。これまで仕事関数の低い Al や Mg 表面との界面での電子的性質について盛んに研究がなされてきた。筆者らは以前からこの物質系の第一原理計算を進めており、 Alq_3 分子が Al や Mg 表面上で化学吸着構造を作る際、分子双極子が界面第一層で向きを揃えることで大きな界面電気二重層を形成することを報告した[6, 7]。

しかし、一見強い化学結合を形成しながら(図 3)、吸着状態の安定性を通常の 1 電子ポテンシャルに基づく DFT 法(DFT-PBE)ではうまく説明できなかった。そこで DFT-PBE 法で得られた吸着構造の安定性を、vdW 引力を取り込んで調べた(vdW-DF 法)。その結果を図 4 に示す。ここで吸着エネルギー E_{ad} は、表面に吸着した単分子層を引きはがし、さらに個々の分子に分解し、分子・表面ともに安定な原子配置になるのに要するエネルギーである。したがって、吸着エネルギーは、

I. 単分子層を引きはがすのに必要なエネルギー
 E_b (mol-sub)

II. 単分子層が個々の分子に分解されるのに必要な
 エネルギー E_b (mol-mol)

III. 分解された分子と引き離された表面が安定な
 原子配置になるのに伴うエネルギー変化
 E_{relax} (mol)、 E_{relax} (sub)

の3種類に分解される。エネルギーの符号は、正が

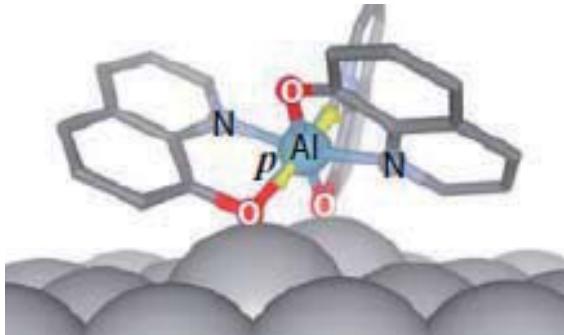


図 3 Alq₃ 分子の、Mg(0001)表面への吸着構造。Mg 表面の原子位置が歪むほどに O 原子との間で強い化学結合が形成される。

吸熱、負が発熱を表している。

結果から分かるのは、次のことである。

- 1) 化学吸着構造での E_b (mol-sub) は DFT-PBE 法でも 110 kJ mol^{-1} 以上と大きく、化学結合による安定化がよく記述されている。
- 2) しかし、 E_b (mol-sub) は、vdW 引力によって 70 kJ mol^{-1} 程度も増える。これは、表面と、それに向かい合う分子の配位子との間で vdW 引力が少なからず働くことに由来すると考えられる。
- 3) DFT-PBE 法による化学吸着エネルギーのみでは、吸着にともなう分子や表面の歪み(E_{relax})が大きく、安定化を打ち消してしまう。結果、吸着エネルギーは 6 kJ mol^{-1} 程度にしかならない。
- 4) 2)で説明したように、vdW 引力を取り込むと吸着エネルギーは 80 kJ mol^{-1} 以上となり、吸着による安定化が正しく説明される。

この時点では DFT-PBE 法で予測された吸着構造での議論であり、vdW 引力を考慮して最適化構造計算を行う必要がある。しかし、最近、vdW 引力を考慮し構造最適化計算も可能なプログラムが登場し[8] 適用したところ、上記の結論を変えることはないこ

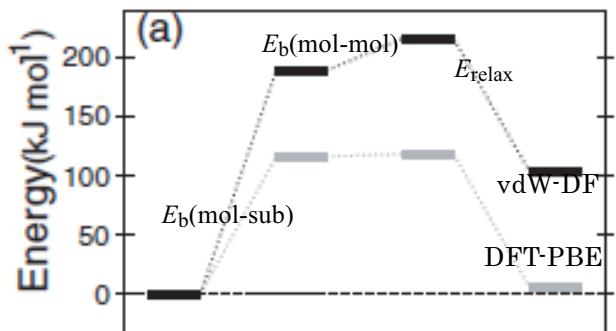


図 4 Alq₃/Mg 界面での吸着エネルギー、および各相互作用エネルギー。黒い太実線が vdW 引力を考慮した場合、灰色実線が DFT-PBE 法のみの場合を表す。最も左が吸着状態で、最も右が、表面と分子が孤立した状態を表す。各相互作用エネルギーの説明は、本文を参照。

とが確認できた[9]。

以上から、この系は化学吸着構造であるが、吸着の安定化には vdW 引力の寄与が重要であることが確認された。また、この有機-金属界面の安定性は、それに加えて化学結合や分子・表面のひずみのせめぎ合いによって決まっていることも分かった。

b) カーボンナノチューブ(CNT)/Au 電界効果トランジスタ(FET)で n 型特性を発現させる方法の提案

カーボンナノチューブ(CNT)は、カイラリティによって金属や半導体の性質を示し、その機械的強さのため、様々な電子デバイスの材料として極めて注目度が高い。その中でも、半導体的 CNT を電界効果トランジスタ(FET)のチャンネル材料として使用する試みが盛んになされている(図 5)。真性半導

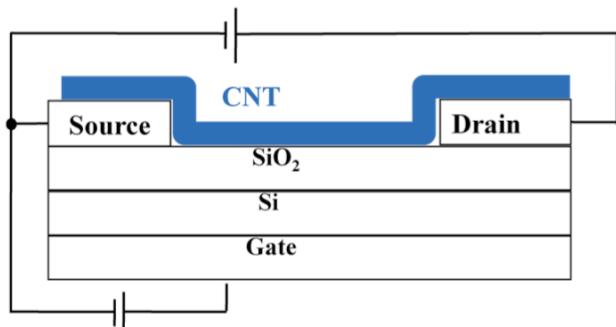


図 5 カーボンナノチューブ(CNT)を用いた電界効果トランジスタの概念図

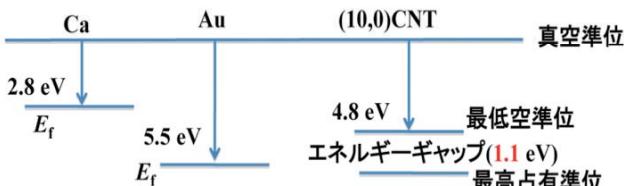
体でキャリアがないため、チャンネルの p/n 型の制御には、

- 1) 雰囲気ガスによる不純物ドーピング

2) 接触電極の仕事関数を変える

のいずれかの処理が必要で、低消費電力の回路を作るには p/n 型の両方が必要なので、この制御技術の確立が求められる。

1)の不純物ドーピングは、技術的試みがさかんになされているが、コスト面などで課題がある。2)について、Au 電極を使用した場合に p 型になり[10]、Ca 電極使用時には n 型になると報告されている[11]。これらの結果は、図 6 に示すように、電極仕事関数の大小によって、電極フェルミ準位(E_F)が CNT の準



位とどう接続するかで容易に理解される。すなわち、

図 6 カーボンナノチューブ(CNT)の電子準位と、各金属表面のフェルミ準位(E_F)との接続の模式図

Au 電極の場合、仕事関数が大きいために E_F が深く、CNT の最高占有準位が近いために p 型となるのに対し、仕事関数が小さく E_F が浅い Ca 電極では、最低空準位が近いために n 型になる。このように電極仕事関数を変えると p/n 型特性を変えられるが、Ca のような低仕事関数電極は反応性が高く容易に腐食されるので、実用上好ましくない。そこで、p/n 型特性の両方を、安定な Au 電極の使用下で発現させることを考える。

緒言でも述べたように、有機分子が金属表面に強く吸着しない場合でも、プッシュバック効果によって、大きな電気双極子層が誘起されて E_F に対する分子準位の接続が著しく変わりうることが分かった。実際、近年の筆者のグループの研究では、ペンタセン分子を金属表面に近づけていくと、分子—表面間の波動関数が混成して化学結合を作らない限りは、近づけるほどに分子準位が E_F に対して下がるのが確認された[12]。

このプッシュバック効果の原理を利用して、Au(111)表面に CNT を押しつけることで、p 型から

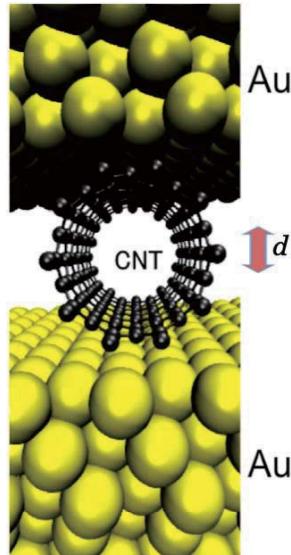


図 7 本研究で用いた Au/CNT/Au 周期的スラブモデルの模式図。図に示す距離 d を変えながら電子状態計算を行った。

n 型特性に変化することを第一原理計算によつて示す。半導体 CNT のモデルとして、カイラリティ(10, 0)、直径 8Å の CNT を考慮し、Au(111) 表面に挟まれた構造を考える(図 7)。この構造では、Au(111) 表面が表面平行方向に周期的に並ぶ周期的スラブモデルとなっており、CNT も周期的な一次元鎖として表され、CNT の軸は $\bar{1}\bar{1}0$ 方向に平行である。

CNT-Au 間の距離(図 7 の d)を変えたときの、Au/CNT/Au 構造での全エネルギー変化を図 8 に示す。ここで、全エネルギー

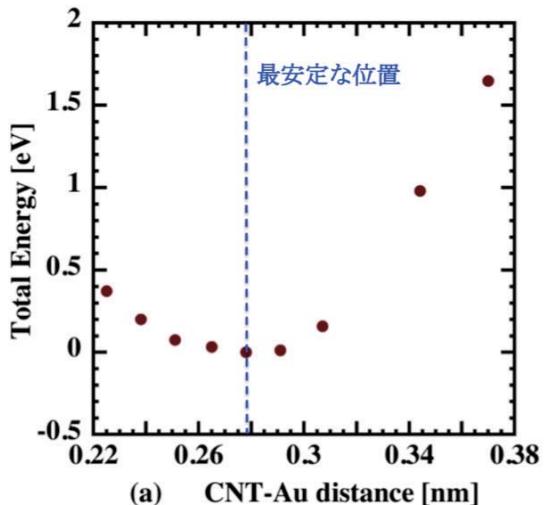


図 8 CNT-Au 表面間距離に対する、Au/CNT/Au 系の全エネルギー変化。最安定な CNT-Au 距離でのエネルギーを 0 とした。

はDFT-D法でCNT-Au間のvdW引力を取り込んで計算しており、 $d = 0.28$ nm付近で最安定となっている。

距離 d を次第に小さくしたときの、CNTの中心附近での局所状態密度(LDOS)を図9に示す。Au表面のフェルミ準位(E_F)をゼロエネルギーとして、 $d =$

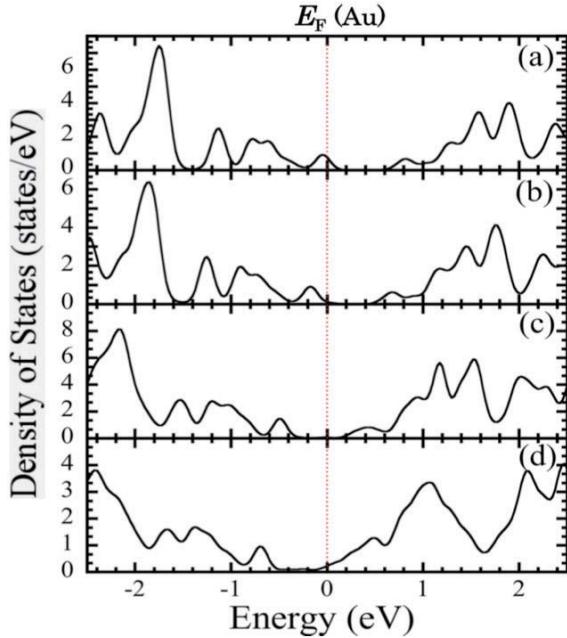


図9 CNTの中心付近での、Au/CNT/Au系の状態密度。(a): $d = 0.40$ nm、(b): 0.37 nm、(c): 0.28 nm、(d): 0.25 nmにそれぞれ対応する。

0.40 nmではCNTの最高占有準位が E_F をまたいでおり、典型的なp型特性を示すのが分かる。それに対し、最低空準位は 1 eV程度高い準位にあるのが分かる。 $d = 0.37$ nm, 0.28 nmと距離を近づけるにつれ、これらの準位は E_F に対して下がってくる様子が分かる。そして、最安定距離よりもやや短い $d = 0.25$ nmでは、最低空準位は E_F に掛かり、n型特性となるのが分かる。このとき、CNTの軸に沿った方向には 0.57 nNの力が残っており、この構造保持のために同じ大きさの力を印加する必要がある。また、 $d = 0.30$ nmの距離でちょうどpからn型特性になることが今回の計算から分かっており、そのときには、CNT軸に沿った方向に -1.0 nN程度の、CNTとAuを引きつける力が働くことも分かった。以上の結果から、CNT/Au界面において、通常観測されるp型特性からn型特性に切り替えるには、CNT-Au距離にして 0.5 Å、構造保持のためにAu

電極に加えるストレスの大きさで 1.5 nNのスケールで構造制御ができればよいと考えられる。

4. 結言、今後の展望

本稿では、実デバイス材料と関係のある有機分子やCNTと、金属表面との界面における電子的性質について第一原理計算による研究成果を述べた。実デバイスの動作を本質的に支配する、金属電極から有機物質層へのキャリア注入障壁を決定する重要な要素として、界面の相互作用に由来する界面電気二重層の生じる起源や、それを制御する方法の提案を行った。これまでの研究成果から、界面双極子を制御する重要なパラメータとして、表面—分子間距離などの界面の原子・分子スケールの構造に注目してきたが、そのような構造を精密に再現するには、ファン・デル・ワールス引力を正確に記述可能な計算法の適用が重要であることも分かった。7-8年前ではそのような計算シミュレーション法を実材料に近い物質系に適用することは現実的ではなかったのが、急速な計算機環境の向上と、それを生かした新しい手法の開発によって今日ではルーチンワークで実行するのが可能になりつつある。

構造の精密決定に加え、界面での電子準位接続を正確に予測する手法が求められる。本稿の研究では、従来の多くの研究で行われたように、DFT-PBE法で計算される1電子準位に基づいて議論している。PBE法や、バルクの計算で代表的な局所密度近似(LDA)では、一般にエネルギーギャップが過小評価されることが知られている。しかし、本稿の研究ではエネルギーギャップの過小評価に加え、金属表面による遮蔽効果が記述されていないために表面付近の準位は光電子分光などで測られる準位と比較して大きく算出される。これらの効果が相殺されて、PBE法などのポテンシャルによる電子準位接続の再現性は定性的にはよい結果を与えていると考えられる[13]が、より高い信頼性で材料物性に資することが求められる。界面での準位接続の再現性が高い方法として混成汎関数法[14]や多体摂動法[15]の適用が現実的に考えられる。本グループでも、SX9を利用し、そのような試みを開始しつつある[16]。

謝辞

本研究では、大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピューターNEC SX9を使用させて頂きました。本研究は、大阪大学大学院工学研究科の森川良忠教授、同大学院理学研究科修士課程の西郷登洋氏、東北大學 WPI-AIMR の濱田幾太郎助教、Rutgers 大の Lee Kyuho 博士研究員との共同研究により進められました。

参考文献

1. C. W. Tang and S. A. VanSlyke, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 913 (1987).
2. H. Ishii, K. Sugiyama, E. Ito and K. Seki, *Adv. Mater.* **11**, 605 (1999), and *references therein*.
3. Y. Morikawa, H. Ishii and K. Seki, *Phys. Rev. B* **69**, 041403 (2004).
4. M. Dion et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 246401 (2004).
5. S. Grimme, *J. Comput. Chem.* **27**, 1787 (2006).
6. S. Yanagisawa, K. Lee and Y. Morikawa, *J. Chem. Phys.* **128**, 244704 (2008).
7. S. Yanagisawa and Y. Morikawa, *J. Phys.: Condens. Matter*, **21**, 064247 (2009).
8. G. Roman-Perez and J. M. Soler, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 096102 (2009).
9. S. Yanagisawa, I. Hamada, K. Lee, D. C. Langreth and Y. Morikawa, *Phys. Rev. B* **83**, 235412 (2011).
10. R. Martel et al., *Appl. Phys. Lett.* **73**, 26 (1998).
11. Y. Noshio et al., *Appl. Phys. Lett.* **86**, 073105 (2005).
12. K. Toyoda, I. Hamada, K. Lee, S. Yanagisawa and Y. Morikawa, *J. Chem. Phys.* **132**, 134703 (2010).
13. J. M. Garcia-Lastra, C. Rostgaard, A. Rubio and K. S. Thygesen, *Phys. Rev. B* **80**, 245427 (2009).
14. J. Heyd, G. E. Scuseria, M. Ernzerhof, *J. Chem. Phys.* **118**, 8207 (2003).
15. F. Aryasetiawan and O. Gunnarsson, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 237 (1998).
16. 柳澤 将、森村英幸、森川良忠、2010 年度日本物理学会秋期大会

流動層シミュレーションの大規模化と高分解能化

辻 拓也、田中 敏嗣
大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻

1. はじめに

粉粒体を気流により流動化させる気系流動層は、粉粒体の乾燥、造粒、混合などの各種粉粒体操作の他、化学反応装置、石炭ガス化炉、燃焼炉など様々な工業的応用に関連して用いられる[1]。気系流動層では、粉粒体の濃厚相中に粒子濃度の希薄な「気泡」と呼ばれる特徴的な中間スケールの構造（メゾスケール構造）が形成されることが知られている。気泡が粉粒体の濃厚相中を上昇することによって、粉粒体層中に大規模な対流を誘起し、さらに気流や粉粒体の混合を促進するなど、流動層中の各種輸送現象に大きな影響を及ぼす。このように流動層内の流動現象には、粒子まわりのミクロスケールの流れから、気泡などのメゾスケール構造と、これが引き起こす装置規模の対流といったマクロスケールの流れまで幅広い空間スケールが存在し、マルチスケール構造を持つものとなっている。

流動層のような気流と粒子が高濃度で混在して存在する、いわゆる高濃度固気二相流に対しても、著者等のグループが提案した離散要素法[2] (Discrete Element Method、以後 DEM) と数値流体力学 (Computational Fluid Mechanics、以後 CFD) をカップリングしたモデルにより、個々の粒子運動の視点に基づく数値シミュレーションが可能となり[3]、様々な応用が行われるようになっている。

他の DEM を用いた数値シミュレーションと同様、流動層の DEM-CFD カップリングシミュレーションに関しても粒子数の課題は大きな問題の一つである。現実の工学的な問題に対する数値シミュレーションを行う場合には、数百万から数千万あるいはそのオーダーを超える膨大な粒子数が必要となる。

他方、例えば粉粒体の濃厚相中での熱・物質輸送特性を知るために、流動する粒子群の間隙における微視的な気流の流れを調べることも重要な課題で

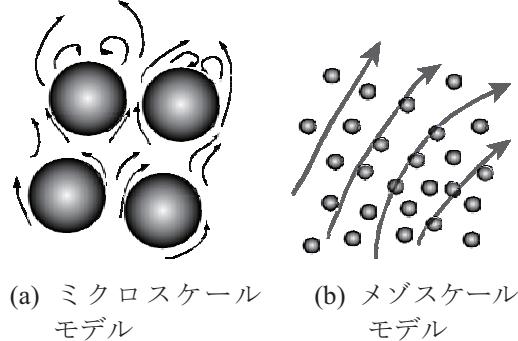


図 1: 計算モデル上の空間スケールの取扱い

ある。本稿では、著者等のグループで行った粒子数が数百万オーダーの大規模数値シミュレーションによる 3 次元気泡の空間構造に関する研究[4-6]と、微視的な視点での固気二相流の高解像度数値シミュレーション[7]について紹介する。

2. 計算モデル上の空間スケールの取扱い

ここでは、流体は気体に限らず液体でもよいので、流体・固体混相流という表現を用いて説明を行う。流体・固体混相流の DEM-CFD カップリングシミュレーションにおいて、粒子モデルの運動を、流体の流れ場と相互作用を考慮してカップリングするモデルには、流体相のモデリングの視点に関して図 1 に示す 2 種類の視点がある。

その一つは、図 1 (a) に示すように個々の粒子スケールよりもミクロな流れ場を、瞬時、瞬時に粒子表面での流体の境界条件（流体速度が粒子表面速度と一致）を満足するように厳密に解くミクロスケールモデルである。この微視的視点での数値解析では、流体の流れの基礎式は、質量保存則と Navier-Stokes 方程式である。粒子表面は流体にとって移動境界となり、界面の各部分に働く圧力とせん断力を介して、粒子と流体は相互作用し合い、粒子に働く流体抵抗

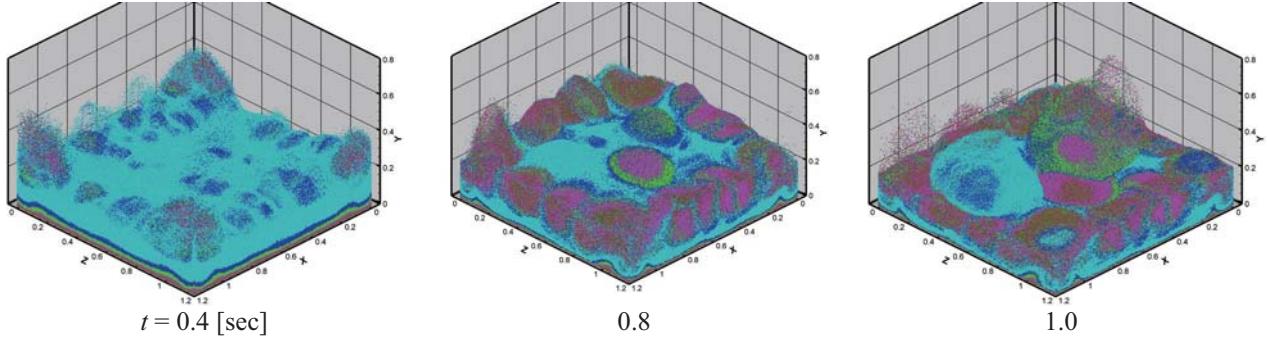


図 2: 気流流れのミクロスケールモデルとメゾスケールモデル

などの流体力は粒子表面での圧力とせん断力を積分して求められる。したがって、粒子に働く流体力を求めるための流体力モデルなどは不要となる。流体に関わるこのミクロな視点に基づく流体・固体混相流の解析例としては埋め込み境界法、Lattice Boltzmann 法、fictitious domain 法などに基づくものがある[7-11]。

上に述べた、個々の粒子スケールより微視的な視点で流れを解像するミクロスケールモデルによる直接数値解析は、流れの予測の精度は高くなるが、同時に計算負荷も大きくなるため、例えば流動層内で形成される気泡の 3 次元構造を捉える計算を行うことは現在でも困難である。計算機の能力の制約により、計算で取り扱える空間スケールの範囲には限界があり、サブ粒子スケールから容器スケールまでのすべてのスケールを解像することはできない。したがって、気泡の 3 次元構造のような、より大きな空間スケールを捉えるためには、解像する流れの最小スケールを大きくしなければならない。図 1 (b) に示すメゾスケールモデルはそのような流動モデルであり、個々の粒子スケールよりも大きなスケールで局所的に平均化された流れを取り扱う。ただし、気泡の構造を解像するには、この局所平均の空間スケールは、発生する気泡のスケールに比べて十分小さな必要がある。また、この流動モデルでは、粒子・流体間の相互作用力は、経験則などに基づくモデルで与える必要がある。熱・物質輸送の扱いに関しても同様である。

3. 3 次元大規模並列計算

3.1 DEM シミュレーションと粒子数

個々の粒子を追跡する DEM 用いた数値シミュレーションでは、取り扱える粒子数は計算機の能力に依存しており、計算機の発達とともに大きくなってきた。DEM を提案した Cundall & Strack[2]以後の、著者等が DEM シミュレーションを行った粒子数の推移を次に示す。

- 197 個(2D) : Cundall & Strack (1979) [2]
- 1000 個(3D) : 田中・石田・辻(1991) [12]
- 2400 個(3D) : 川口・田中・辻(1992) [3]
- 25000 個(3D) : 川口・坂本・田中・辻(1998) [13]
- 900 万個(3D) : 藤本・辻・川口・田中(2007) [5]

括弧内の 2D および 3D はそれぞれ 2 次元計算および 3 次元計算を示す。上記の著者等のグループによる計算は、すべて気流の局所相平均流[13]に対するメゾスケールモデルと DEM のカップリング計算[3]により行われたものである。このような粒子数の大規模化は計算機環境の発展によるものであり、とくに最近の約 1 千万個にせまる大規模化はクラスター型コンピュータによる並列計算により達成されたものである。並列計算を用いることにより、現在では 1 億個レベルの計算も可能となっている。

3.2 3 次元気泡構造

クラスター型コンピュータによる並列計算を用いて求められた流動層 3 次元流動化挙動の数値シミュレーションの結果を図 2 に示す[6]。ここでは局所相平均流[14]に基づく DEM-CFD カップリングモデル[6]が用いられており、一片が 1.2 m の正方形断面

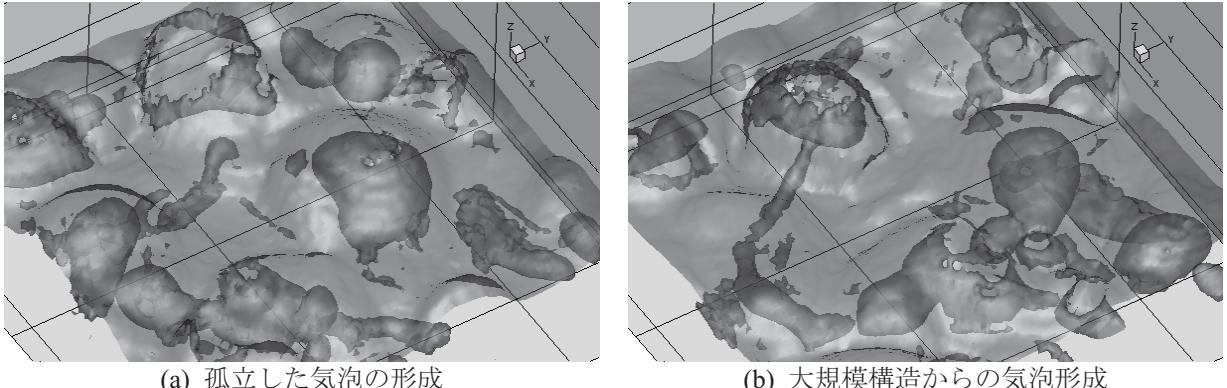


図 3: 3 次元流動層中での気泡構造

形状をもつ流動層内での、粒径 4 mm の球形粒子 450 万個の流動化が求められている。容器底部からは一様な気流の流入が与えられている。その初期粒子層高は約 0.2 m という浅い流動層である。その初期状態において粒子層は鉛直方向に層状に色分けされており、流動化の様子を観察しやすくなっている。並列計算を用いることにより、このように大規模な 3 次元の気泡流動化挙動の数値シミュレーションが可能となった。流動化挙動の時間発展に着目すると、まず、正方形断面の四隅から大きな気泡が吹き抜け、その後、壁面に沿って活発な気泡の発生が見られるとともに流路中央においても大きな気泡が発生している。

実験において、流動層内部での気泡の 3 次元構造を観察することは困難であるが、数値シミュレーションではその内部を容易に可視化することができる。図 3 に空隙率の等値面で可視化された流動層内部で形成されている気泡の 3 次元構造を示す。図 3 (a) および (b) のそれぞれの白い楕円内での気泡形成に着目すると、(a) では単一の気泡が成長する過程が捉えられている。これに対して、(b) では粒子層の底部付近に大規模な紐状の空隙構造が形成され、そこから複数の気泡が発生する過程が捉えられている。(b) の結果における単一の気泡スケールよりもさらに大規模な構造の存在は、このように大規模な計算を行って初めて確認できることであり、本大規模計算の大きな成果である。

4. 微視的流動解析による高精度計算

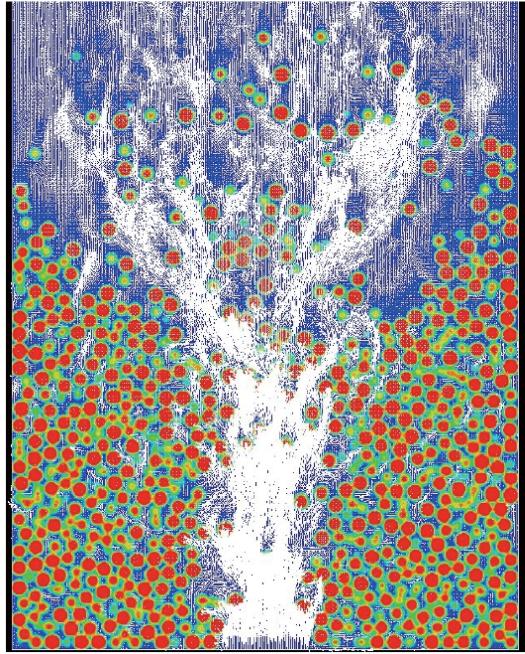
4.1 微視的流動解析

3 章で結果を述べたように、メソスケールモデルを用いることにより気泡などのメソスケール構造の挙動の表現が可能である。しかしながら、この種のモデル計算では、粒子・流体間に作用する流体力は、Ergun 式[15]や Wen & Yu の式[16]などの経験式に基づいて与えられ、これらの経験式が十分に整備されていない、例えば、粒径の異なる 2 成分系の場合や、粒径分布がある場合、メソスケールモデルによる計算は途端に困難となる。また流動層は、熱・物質輸送に関係するプロセスでよく用いられるが、各種モデルの改良なども検討を要する課題である。このように、流れのメソスケールモデルに対する各種モデリングに関して、ミクロスケールモデルによる数値シミュレーションへの期待は大きい。

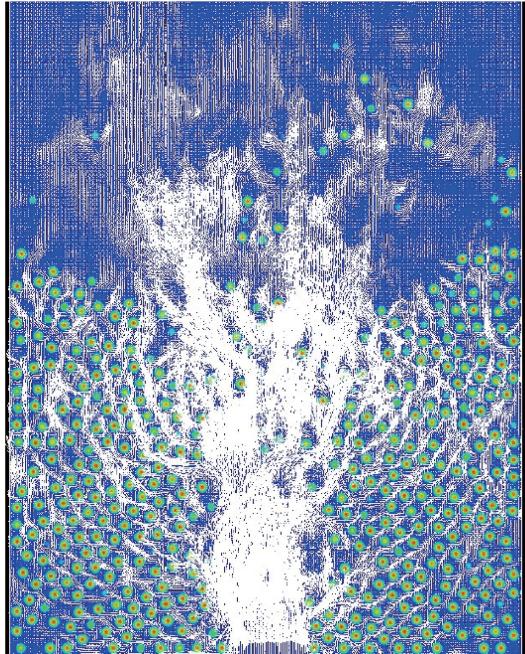
4.2 2 次元噴流層内の微視的流動解析

梶島らにより提案された体積力型埋め込み境界法[9]により流体計算を行い、これを DEM とカップリングすることにより、2 次元噴流層内の流動シミュレーションを行った[7]。サブ粒子スケールの流動構造を解像するため、流体の計算格子は粒径に比べて小さく取られる。体積力型埋め込み境界法では、固定された直交格子を用いて、粒子の占めている空間も含めて流体の流れ場として計算を行う。その際、付加的な外力を加えることにより粒子表面での境界条件を満足させる。

2 次元流動層内の流動の計算結果を図 4 に示す[7]。噴流層容器の寸法は幅 70.4 mm、奥行きが 20 mm、粒子は直径 3.2 mm、密度 910 kg/m^3 の球形粒子であ



(a) 流路中央断面



(b) 壁面近傍

図4: 微視的数値シミュレーションにより求められた気流の流れ

り、2472個の粒子が充填されている。その流動化前の初期層高は55mmである。このように2次元噴流層といつても、完全な2次元ではなく、粒子も流体も3次元の計算を行っている。容器底部では中央の幅8.8mmの気流入口から4.8m/sの一様流速で、空気を仮定した気流が流入する。採用されている流体計算の格子幅は0.4mmであり、粒径の1/8の空間分解能をもつ。

図4(a)および(b)は、それぞれ、流路中央断面および奥行き方向の壁面から0.2mm(粒径の1/16)の断面における粒子断面分布と流体速度場を示している[7]。流体の速度場は細かく分かれにくいが、流速の大きな部分は白く表示されている。まず、噴流層中央の噴流部で大きな気流速度を取っており、噴流層の流動パターンが現れていることが分かる。粒子間隙の細かい流れ場に着目すると、とくに(b)の壁面近傍の流れにおいて、中央の噴流部から斜め上方に向かう高流速の筋状の流れのパターンが形成されていることが分かる。このような粒子スケールのパターンはメソスケールモデルでは解像されないものであり、壁面付近での粒子挙動にどのように影響するのか興味深い。

なお、このような高濃度場では、粒子間隙に粒径

と比べても非常に小さな流れの空間スケールが存在するため、本計算で採用されている粒径の1/8の空間分解能では、まだ解像度は十分ではなく、今後、さらに精度を上げることが望まれる。

5. おわりに

DEM-CFD カップリングモデルによる流動層内流動シミュレーションについて、流体流れ場のメソスケールモデルと並列計算を用いた大規模計算、およびミクросケールモデルによる2次元噴流層内流動に対する計算結果について著者らの研究結果を用いて現状を紹介した。今後はミクrosケールモデルによる計算により、ミクrosケールにおける粒子・流体混相系の物理の理解の深化とメソスケールモデルにおける各種モデルの改善への寄与が期待できる。本稿で示した結果は、大規模計算が可能となって初めて得られるものである。今後の並列計算機のさらなる発展により、より現実的な課題への展開が可能となるものと大きく期待する。

参考文献

- (1) 例えば、流動層ハンドブック、培風館、(1999).
- (2) P. A. Cundall and O. D. L. Strack, *Géotechnique*, **29**, 47-65, (1979).
- (3) 川口寿裕ら、日本機械学会論文集, **58-551B**, 2119-2125, (1992).

- (4) 辻拓也ら, 粉体工学会誌, **44**-3, 173-179, (2007).
- (5) 藤本恵三ら, Proc. 13 SCEJ Symp. on Fluidization & Particle Processing, 253-258, (2007).
- (6) T. Tsuji, et al., Powder Tech., **184**, 132-140, (2008).
- (7) T. Tsuji, et al., Proc. of International Conference on Multiphase Flow, CD-ROM No. 13.1.2, (2010).
- (8) T. -W. Pan, et al., J. Fluid Mech., **451**, 169-191, (2002).
- (9) T. Kajishima, et al., JSME Int. B, **244**, 526-535, (2001).
- (10) M. A. van der Hoef, et al., Annu. Rev. Fluid Mech., **40**, 47-70, (2008).
- (11) 桑木賢也ら, 化学工学会第41回秋季大会研究発表講演要旨集, CD-ROM No.C218, (2009).
- (12) 田中敏嗣ら, 日本機械学会論文集, **75**-534B, 60-67, (1991).
- (13) 川口寿裕ら, 日本機械学会論文集, **64**-619B, 717-723, (1998).
- (14) T. B. Anderson and R. A. Jackson, I & EC Fundamentals, **6**, 527-539, (1967).
- (15) S. Ergun, Chem. Eng. Prog., **48**-2, 89-94, (1952).
- (16) C. Y. Wen and Y. H. Yu, Chem. Eng. Prog. Symposium Series, **62**-62, 100-111, (1966).

磁気流体不安定による星間磁場の増幅機構

佐野 孝好 (大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター)

1 はじめに

磁場は様々な天体现象の進化や構造に大きな影響を与えており、星間磁場のエネルギー密度は星間ガスの熱エネルギーと同程度であるため、星間ガスの運動(重力収縮による星形成過程や、星間乱流現象など)において、磁場の効果は無視できない。また、太陽フレアのような爆発現象や、様々なスケールで存在する宇宙ジェットにおいても、磁気エネルギーが駆動源となっている。したがって、この星間磁場の起源や増幅機構を解明することは、天体物理学において極めて興味深い問題である。

星の進化の最終段階で起こる超新星爆発では、星間空間に衝撃波を放出する。この衝撃波によって形成された高温のシェルは超新星残骸と呼ばれている。超新星残骸に付随する衝撃波は、高エネルギー宇宙線の加速現場であると考えられており、そこでも磁場が重要な役割を果たしていることが知られている。

この超新星残骸の衝撃波近傍で、局所的に非常に強い磁場が存在することが、近年X線衛星の観測によって明らかにされた[1]。その磁場強度は、平均的な星間磁場と比べて数100倍程度にも及んでいる。超新星爆発の頻度、超新星残骸の空間的な大きさを考慮すると、銀河内のあらゆる場所は数百万年に一度の割合で、超新星衝撃波の影響を受けていることになる。つまり、この衝撃波通過に付随する磁場の増幅は、普遍的に起こる可能性が高く、星間磁場の強度進化を考える上で極めて重要な現象であると言える。

衝撃波面近傍で磁場が増幅される機構の一つとして考えられているのが、Richtmyer-Meshkov不安定(RMI)の非線形成長に伴う流体運動である[2]。RMIは非一様な密度分布をしている媒質中に、衝撃波が伝播する際に発生する流体力学的不安定性で、衝撃波通過後に、接触不連続面の揺らぎが増幅し、マッシュルーム型に成長する[3, 4]。この不安定成長は、接触不連続面に生じる渦度に起因していることが特徴となっている。

さて、星間物質のほとんどは水素である。その状態は、熱不安定によって(1)低温で比較的密度の高い分子

成分(分子雲と呼ばれる小さな塊)と(2)それを取り囲む温かく希薄な原子成分に分かれていることが知られている[5]。分子雲と原子ガスの密度差は、およそ10倍程度である。このような非一様密度の星間空間に、超新星爆発による衝撃波が伝播すると、分子雲の境界面でRMIが発生することが予想される。RMIの成長に伴う渦運動は、そこに存在していた星間磁場を圧縮したり引き伸ばしたりすることで増幅させる可能性がある。そこで、我々はRMIによって、どの程度の磁場増幅が実際に可能であるかを定量的に調べるために、二次元磁気流体シミュレーションを用いた解析を行った。

基礎方程式としては、理想MHDを仮定した磁気流体方程式を用いる。この研究では、マッハ数が100に近いような激しい衝撃波を数値的に安定に解ける必要がある。そこで、使用する計算コードとしては、衝撃波に強いGodunov法を磁気流体に拡張した独自のコードを採用している[6]。このコードの最大の特徴は、オペレータ・スプリッティングを用いた時間発展アルゴリズムにある。圧縮性の波に対しては水平磁場の磁気圧を考慮したRiemann問題の厳密解を用いて、一方、非圧縮の波に対してはAlfvén波の伝播を特性曲線法で厳密に解いた結果を用いて、それぞれ時間発展を行っている。このコードは、降着円盤[7, 8]、太陽風[9]、星間乱流[2]など様々な天体现象の数値解析に数多く利用されている。

2 シミュレーション結果

本研究では、問題を単純化するため、RMIの一つのモードのみの成長に着目した上で、磁場の進化を解析している。シミュレーションの計算領域としては、密度 ρ_{H_2} の分子雲と ρ_{H} の星間ガスとの境界近傍を考える。この接触不連続面が、初期に波長 λ 、振幅 α で揺らいでいるとし、そこに星間ガス中を伝播しているマッハ数 M の衝撃波が密度の高い分子雲に向かって時刻 $t=0$ で衝突するという状況を考える。星間物質は宇宙線による電離によって、磁場とほぼカップルしている(理想MHD)と考えてよい。星間磁場としては、衝撃波面と直

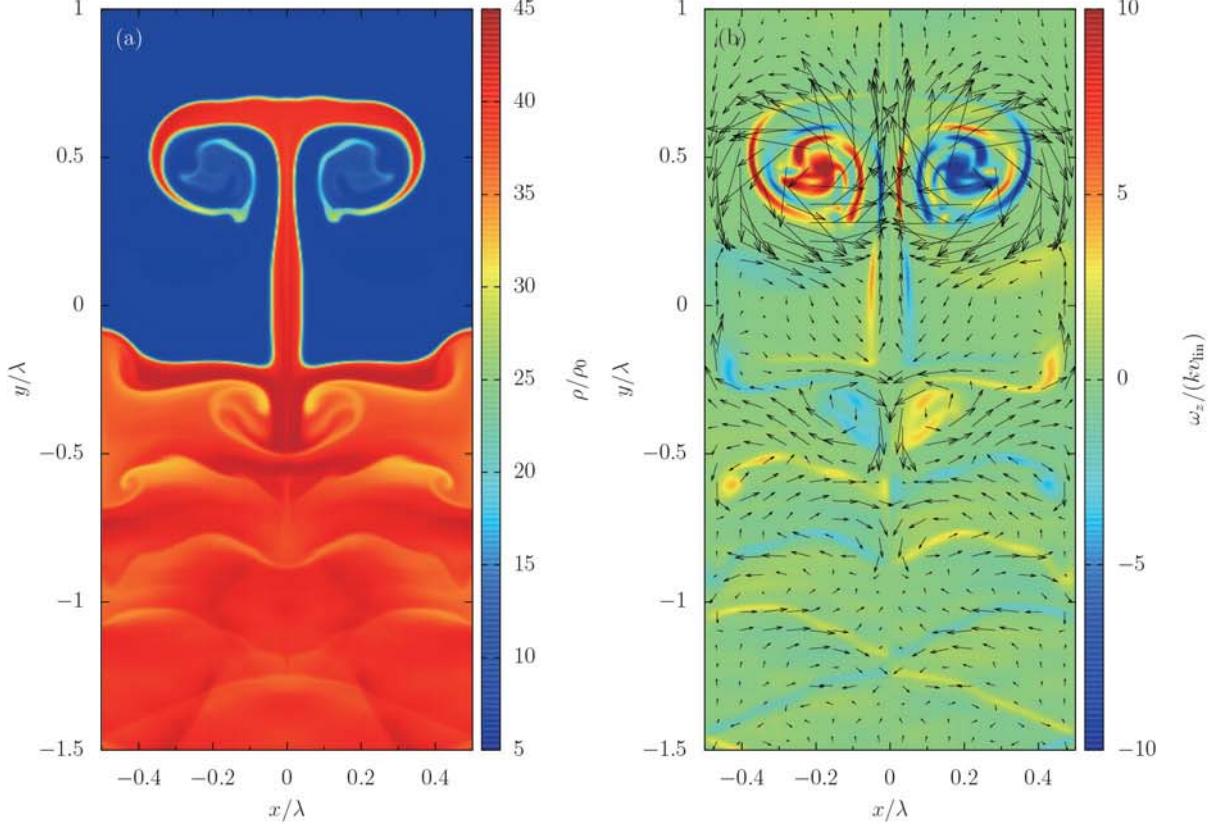


図 1: RMI の非線形成長段階における (a) 密度分布と (b) 湍度分布及び速度ベクトル。モデルパラメータは、揺らぎの初期振幅 $\xi = 0.1$ 、密度比 $\delta = 10$ 、マッハ数 $M = 10$ 、磁場強度 $\beta = 10^8$ である。どちらも RMI の成長時間 t_{RMI} で規格化した時刻 $t/t_{\text{RMI}} = 2\pi v_{\text{lin}} t/\lambda = 10$ でのスナップショット。

行する方向に一様磁場が予め存在しているとする。このような初期条件は、たった 4 つの無次元パラメータで、あらゆる場合を完全に記述することができる。そのパラメータとは、密度揺らぎの波長と振幅の比 $\xi = \alpha/\lambda$ 、密度比 $\delta = \rho_{\text{H}_2}/\rho_{\text{H}}$ 、衝撃波のマッハ数 M 、磁気圧とガス圧の比であるプラズマ $\beta = 8\pi p_0/B_0^2$ (初期磁場の強度を決めるパラメータ) の 4 つである。ここで、 p_0 は初期圧力、 B_0 は初期の磁場強度である。我々は様々な組み合わせについてモデル計算を行い、RMI に伴う磁場の構造や強度の進化を詳しく解析した。

図 1 は RMI の非線形段階での (a) 密度分布、及び (b) 湍度分布である。この図に示しているのは、密度比 $\delta = 10$ 、マッハ数 $M = 10$ の場合である。RMI の成長を長時間追うことができるように、シミュレーションでは接触不連続面と同じ速度で動いている系に乗った計算をしている。したがって、もし不安定成長がなければ、接触不連続面は単に $y = 0$ に止まっていることになる。衝撃波は y の負の方向に伝播して、密度の高い領域 ($y < 0$) に衝突し、その後、通過衝撃波と反射衝

撃波となってそれぞれ逆向きに伝播する。図は RMI の成長時間 t_{RMI} で規格化した時刻 $t/t_{\text{RMI}} = 2\pi v_{\text{lin}} t/\lambda = 10$ でのスナップショットである。ここで、 v_{lin} は RMI の線形成長速度である。ちなみにこの時刻では、通過衝撃波・反射衝撃波とともに、示している図の領域よりも外側に、既に抜けてしまっている。

この図から明らかなように、接触不連続面の初期揺らぎ $\xi = 0.1$ が RMI によって成長して、マッシュルーム型のスパイクが形成されている。図 1(b) の矢印は速度ベクトルを表している。マッシュルームのかさの部分で渦度の絶対値が大きくなり、激しい回転渦運動をしていることがわかる。RMI の成長速度 v_{lin} は解析的に求められており、揺らぎは時間に対して線形の関係で成長することが知られている [10]。我々のシミュレーション結果は、この解析解とよく一致している。衝撃波通過後の高密度領域に振幅は小さいが、複数のスパイクやバブルの成長が見られる。これは、通過衝撃波の作る斜め衝撃波によって生じた渦度によって駆動された小さな RMI の結果と考えられる。

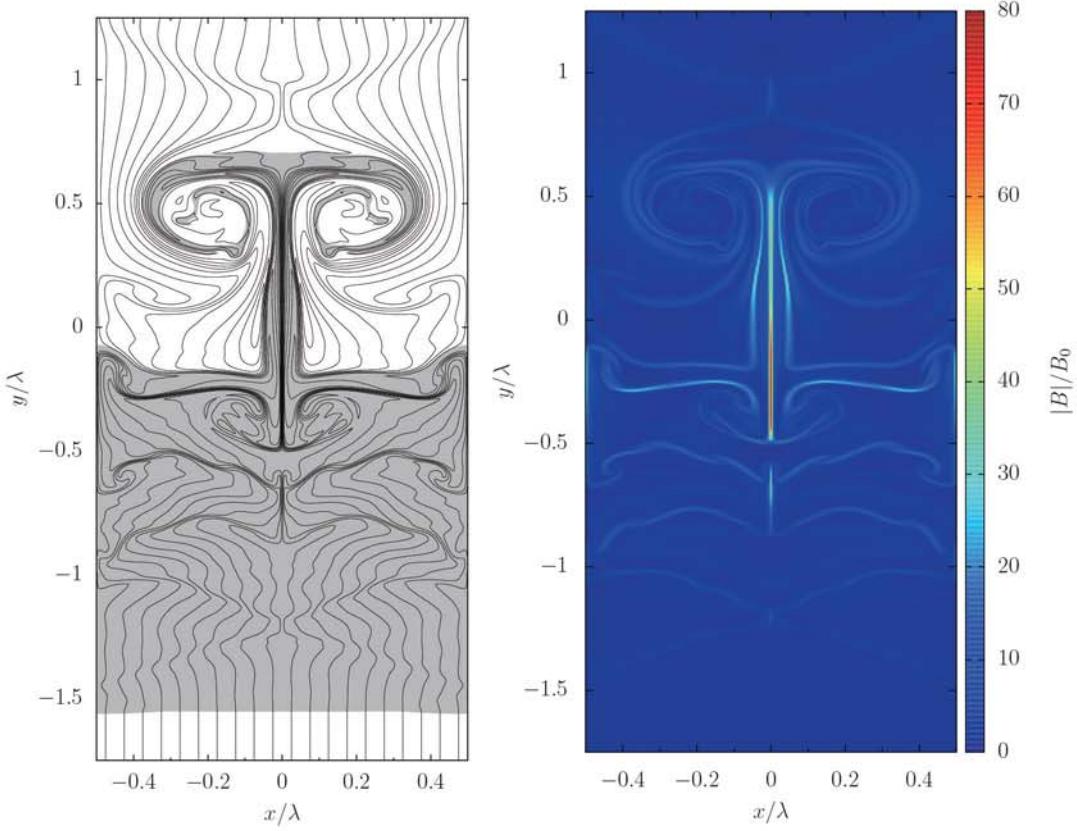


図2: 図1と同じモデル、同じ時刻での(a)磁力線と(b)磁場強度分布。初期磁場は一様 B_y を仮定している(すなはち平行衝撃波)。マッシュルームの軸の中心部に磁力線が集中して、最も磁場が強められていることがわかる。最大強度は初期磁場と比べて約100に達している。

次に、図2は図1と同じモデル計算、同じ時刻における(a)磁力線、及び(b)磁場強度分布である。初期の磁場は非常に弱いもの($\beta = 10^8$)を仮定しているため、この場合の磁場の進化は、流体運動によって受動的に決まっていると考えてよい。元々一様だった磁場がRMIの成長に伴い、複雑な磁力線構造になっている。磁力線の密集している場所が磁場強度の強い場所になるが、図からわかるように、マッシュルームの軸の部分に筋状に強い磁場が集中している。ここでの磁場強度は初期のおよそ100倍になっている。図1(b)の速度分布をみると、接触不連続面近傍の高密度側で、マッシュルームの軸に向かって x 方向に収束していく流れが発生している。これによって、磁束が集められ磁場が増幅されている。一方、軸の部分には y 方向に磁力線に沿つた発散する流れがあり、ほぼ非圧縮的な流体運動になることで、密度の上昇は見られていない。ここで、磁場が増幅されているのは、基本的に高密度領域のみに限られていることも興味深い。この機構によって、分子雲内の磁場だけが選択的に増幅されているのかもし

れない。

図3は増幅された磁場の最大値の時間発展を示している。図の横軸は時間であるが、RMIの成長時間 t_{RMI} で規格化している。まず、図2で示されている $\beta = 10^8$ の場合(黒実線)を見てみると、規格化された時刻 $t/t_{\text{RMI}} \approx 1$ で急速に磁場が増幅され、 $t/t_{\text{RMI}} \approx 10$ 近りで磁場の増幅が飽和している。様々なパラメータで計算した結果、このような振る舞いは、衝撃波のマッハ数 M 、密度比 δ 、初期揺らぎの振幅 ξ にはほとんど依存していないことが明らかになった。

図3には、比較のため、初期の磁場強度を変えた場合の結果も示してある。初期の磁場が強くなると、磁場の増幅率に上限が出てくることがわかる。これは、磁場の効果によってRMIの成長が抑制され、磁場の増幅が止まってしまうことが理由である。流体不安定が磁場の影響を受けるのは、磁気圧がガス圧と同程度になった場合である。このことから、磁場が増幅される上限値は衝撃波通過後のガス圧 p^* とエネルギー等分配となる磁場強度と予想される。実際、我々のシミュレーション

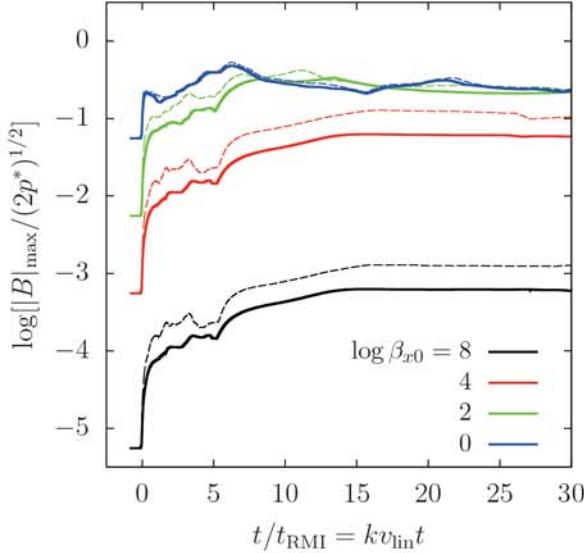


図 3: RMI によって増幅された最大磁場強度の時間発展。初期の磁場強度が弱い場合 ($\beta = 10^8$) から強い場合 ($\beta = 1$) までを示している。実線と破線は解像度の違いで、破線の方がグリッドサイズが半分の高解像度シミュレーションの結果である。初期磁場が弱いと、磁場は約 100 倍まで増幅され、その値でほぼ飽和している。一方、初期磁場が強い場合は、増幅される磁場に上限があり、常に同じ値で飽和している。その飽和磁場強度は、衝撃波通過後のガス圧とおよそエネルギー等分配になる値である。

ン結果もまさにそのようになっている。ちなみに、図 3 には高解像度シミュレーション結果が点線で表されている。この図からは、増幅される磁場の上限値は解像度にも依存していないことがわかる。

増幅後の磁場強度は、衝撃波通過後のガス圧 p^* で決まることがわかったが、そのガス圧は初期の衝撃波速度と密度比で決まっている。図 4 は p^* が初期値でどう決まっているかを示した図である。もしガス圧が衝撃圧縮によって 10^4 倍になれば、磁気圧の上限値も 10^4 倍まで上がることになり、これば磁場強度で言えば 100 倍の増幅に相当する。したがって、密度比が 10 倍程度の星間空間を考えると、マッハ数がおよそ 50 以上であれば、100 倍以上の磁場増幅が可能ということになる。超新星衝撃波の典型的なマッハ数が 100 以上であることを考えると、RMI による 100 倍の磁場増幅は容易に可能であると結論できる。

さらに面白い結果として、図 5 に示した RMI 成長後の磁場の確率密度分布の特徴がある。一般的な乱流磁場の分布とは異なり、RMI によって増幅された磁場の

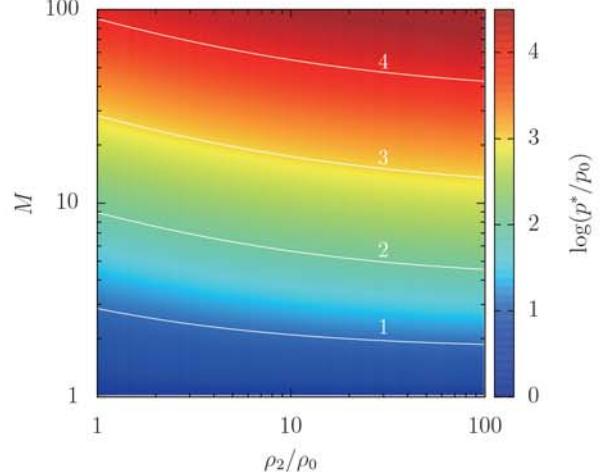


図 4: マッハ数と密度比から決まる衝撃波通過後の圧力の二次元分布図。増幅されうる最大磁場強度は、この p^* で決まっている。 $p^*/p_0 = 10^4$ となるラインが 100 倍以上の磁場増幅が保証する条件を示している。

分布はべき乗則になっている。これは、図 2 で示した平行衝撃波の場合でも、磁場を衝撃波面と平行にした垂直衝撃波の場合でも、似たような分布になっている。ここで注意してほしいのは、我々の計算では RMI のたった一つのモードの進化の結果として、図 5 のような分布が得られている点である。実は、この分布は、星間空間をより詳細に模擬した大規模数値シミュレーションの結果と、極めてよい一致をしている [2]。このことは、RMI による磁場増幅が、実際に星間磁場の強度分布を決める素過程となっている可能性を強く示唆している。

3 今後の展開

我々は RMI が星間磁場の増幅過程として有効であることを、二次元磁気流体シミュレーションを用いて明らかにした。今後は、RMI による磁場増幅過程を実験的に検証する試みにも挑戦していきたいと考えている。実験には大阪大学レーザーエネルギー学研究センターにある激光レーザーを用いる。物質に高強度レーザーを照射することで発生する衝撃波を利用し、不均一な密度分布との相互作用による RMI の成長過程やそこでの磁場強度を計測し、磁場増幅過程を実験的にも確かめていきたい。

また、RMI は天体现象としてだけでなく、例えば慣性核融合の分野でも注目されている。慣性核融合ではレーザーを用いてシェル状の多層ターゲットを爆縮さ

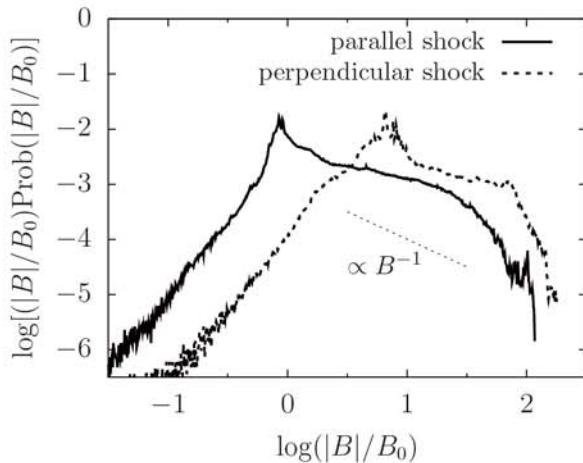


図 5: 磁場の確率密度分布。図 2 で示した平行磁場の場合を実線で、初期磁場を 90 度回転させた垂直衝撃波の場合を破線でそれぞれ示している。磁場がべき乗則分布をしていることが、RMI によって増幅された磁場の特徴と言える。この特徴は、星間磁場のより詳細な大規模シミュレーション結果とよい一致を示していることは興味深い。

せることで、高温高密度状態を形成させる。もし多層のターゲット中を衝撃波が伝播する際に、RMI が成長し、乱流混合が起こってしまうと爆縮の効率が下がるという問題が生じる。すなわち、ここでは不安定を起こさないように制御するというのが目的となる。この分野でも、磁場の効果がまだ十分に考慮されておらず、今後是非このような問題にも取り組んでいきたいと考えている。そのような状況では、天体プラズマのような一流体的な扱いではなく、電子とイオンを区別した二流体的な解析が本質的になることが予想される。そこで今後は、ホール効果などを含めた数値解析に拡張してきたいと考えている。

参考文献

- [1] Y. Uchiyama, F. A. Aharonian, T. Tanaka, T. Takahashi, and Y. Maeda, Nature, 449, 576 (2007).
- [2] T. Inoue, R. Yamazaki, and S. Inutsuka, Astrophys. J., 695, 825 (2009).
- [3] M. Brouillette, Annu. Rev. Fluid Mech., 34, 445 (2002).
- [4] K. Nishihara, J. G. Wouchuk, C. Matsuoka, R. Ishizaki, and V. V. Zhakhovsky, Phil. Trans. R. Soc. A, 368, 1769 (2010).

- [5] H. Koyama, and S. Inutsuka, Astrophys. J., 564, L97 (2002).
- [6] T. Sano, S. Inutsuka, and S. M. Miyama, Astrophys. J., 506, L57 (1998).
- [7] T. Sano, S. Inutsuka, N. J. Turner, and J. M. Stone, Astrophys. J., 605, 321 (2004).
- [8] Y. Masada, and T. Sano, Astrophys. J., 689, 1234 (2008).
- [9] T. K. Suzuki, and S. Inutsuka, Astrophys. J., 632, L49 (2005).
- [10] J. G. Wouchuk, and K. Nishihara, Phys. Plasmas, 4, 1028 (1997).

格子 QCD シミュレーションを用いた QCD の相図の研究

永田 桂太郎

広島大学 情報メディア教育研究センター

1 物質の理解へむけて

クォークとグルーオンは強い相互作用の基本粒子であり、その間の相互作用は非可換ゲージ理論である量子色力学(QCD)により記述される。強い相互作用の世界では通常の温度や密度下では陽子や中性子、原子核が形成される。ビッグバン後のような超高温ではクォークとグルーオンのプラズマ状態(QGP)が形成されると考えられている。中性子星内部のような高密度下での状態についてはカラー超電導などの様々な可能性が指摘されている。このように、QCDは温度や密度などの環境を変えることで多様な状態を形成する。QCDのつくる様々な状態やその間の相転移は物質の微視的な構成やその起源という重要な問題と関係しており、ハドロン物理学の重要な課題の1つとして懸命に調べられている。

QCDの解析はスーパーコンピュータを用いた数値シミュレーションが威力を発揮する分野である。QCDの相図の中で有限密度領域の解析は「符号問題」と呼ばれる問題のため長年にわたり困難な課題であったが、計算手法の改良や計算機の進歩により、近年大きく進展してきている[1, 2]。

我々のグループでは、大阪大学 CMC の NEC-SX9 などのスーパーコンピュータを用いて QCD 相図の研究を行っている。本稿では我々のグループが現在行っている研究を紹介する。

2 有限密度 QCD の符号問題

クォーク化学ポテンシャル μ を持つ QCD の大分配関数は

$$Z(\mu) = \int \mathcal{D}U (\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-S_G} \quad (1)$$

で与えられる。ここで S_G はゲージ作用、 N_f はフレーバ数、 $\Delta(\mu)$ はクォーク伝搬関数の逆行列であり、 $\det \Delta(\mu)$ はクォーク場の経路積分を代数的に実行することで現れる。

QCD は非摂動的性質を持つため、その解析は非摂動的解法である格子 QCD を用いて行われる。格子 QCD では格子状に離散化した作用を考え、その経路積分を

Monte Carlo(MC) 法を用いて数値的に解く。ボルツマン因子 $(\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-S_G}$ は MC 法における確率測度として扱われる。格子 QCD は閉じ込め/非閉じ込め相転移の転移温度や相転移の次数を予言するなど有限温度(ただし $\mu = 0$)系の研究において威力を発揮している。

一方、 $\mu \neq 0$ である場合の解析は「符号問題」と呼ばれる問題のため困難な課題である。クォーク行列は $\mu \in \mathbb{C}$ に対して γ_5 -エルミート性の関係式 $\Delta(\mu)^\dagger = \gamma_5 \Delta(-\mu^*) \gamma_5$ を満たし、これから $(\det \Delta(\mu))^* = \det \Delta(-\mu^*)$ が得られる。この式を用いると、 $\mu \in \mathbb{R}, \mu \neq 0$ に対して $\det \Delta(\mu)$ は一般に複素数となることが示せる。ボルツマン因子が複素数になってしまふため、MC 法が破綻する。これが符号問題である。

3 虚数化学ポテンシャルの方法

符号問題を回避して QCD の相図を調べる方法の1つに虚数化学ポテンシャルの方法がある。化学ポテンシャルが純虚数 $\mu = i\mu_I$ の場合 $\det \Delta(\mu)$ が実数となり、符号問題が存在しない。自由エネルギーや物理量は相転移線を横切らない限り連続であるので、QCD の相図の虚数化学ポテンシャル側で求めた物理量は実側に解析接続する。

相図の虚数化学ポテンシャル領域の性質や閉じ込め/非閉じ込め相境界線の位置などは格子 QCD シミュレーションによって調べられている。2 フレーバに対しては、スタッガードフェルミオンと呼ばれる格子作用を用いたシミュレーションが文献[3, 4, 5]で、Wilson クォーク作用を用いたシミュレーションが文献[6]で行われており、一致した結果が得られている。他にも 3 フレーバ[7]、4 フレーバ[8, 9, 10, 11]などの研究も行われている。

我々のグループでは、クローバ改良型 Wilson 作用とくりこみ群改良型ゲージ作用と呼ばれる改良型作用を用いた研究を行っている。最近の研究[12]では、2 フレーバの場合の閉じ込め相/非閉じ込め相の相境界線を調べるために格子 QCD シミュレーションを行った。格子体積は $\sim (2\text{fm})^3$ 、クォーク質量 ($m_\pi/m_\rho \sim 0.8$) 程度を用いた。熱力学パラ

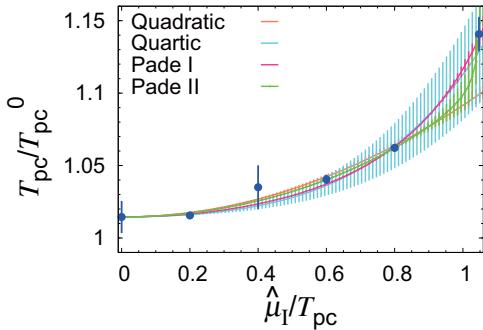


図 1: 虚数化学ポテンシャル領域の閉じ込め/非閉じ込め相の相境界線：モンテカルロシミュレーションによって得られたデータとデータとのフィッティングで決定した 4 種類の試行関数。 $\hat{\mu}_I$ は物理次元での虚数化学ポテンシャル、 $T_{pc} = T_{pc}(\mu_I)$ は化学ポテンシャル μ_I における相転移温度、 $T_{pc}^0 = T_{pc}(0)$ 。

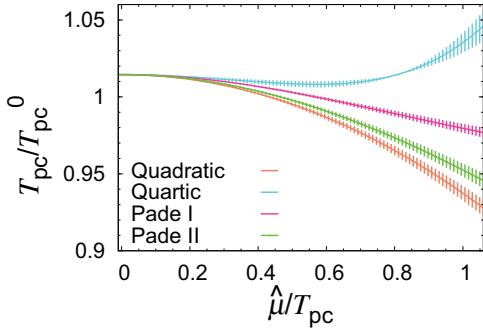


図 2: 実化学ポテンシャル領域の閉じ込め/非閉じ込め相の相境界線。虚数化学ポテンシャル領域の相境界線を解析接続 ($\mu_I^2 \rightarrow -\mu^2$) して得られる。べき級数に対して Pade 近似では収束性が大きく改善している。

メータ (μ_I, T) の様々な値に対してシミュレーションを行い、ポリヤコフループを計算した。ポリヤコフループは閉じ込め相/非閉じ込め相を特徴付ける量であり、その感受率の温度や密度依存性を調べることで相転移点を決定した。

図 1 は格子シミュレーションで得られた相転移点のデータおよび試行関数によるフィットの結果を表している。試行関数としては 2 次関数、4 次関数、および 2 種類の Padé 近似を考えた。4 種類の試行関数の中で 2 次関数はデータを上手く再現しないので、高次項の寄与が存在することがわかる。このような寄与はスタッガード作用 [3] や標準的な Wilson クォーク作用 [6] を用いた計算では得られていないので、作用の改良の結果と考えられる。4 次関数と 2 種類の Padé 近似はデータを同程度に再現している。ただし、4 次関数の結果では他のケースと比べて誤差が大きい。

これらの関数を実化学ポテンシャル側に解析接続した結果が図 2 である。虚数化学ポテンシャル側では関数間の違いが大きく、また、それは化学ポテンシャルが大きくなるほど増大することがわかる。2 次関数と 4 次関数の振る舞いは大きく異なるが、これはべき展開の次数によって漸近的な振る舞いが決まってしまうためであり、べき展開は大きい化学ポテンシャルでの不定性が大きいことを示している。2 種類の Padé 近似の違いは $\mu_I/T \sim 1$ で 2 ~ 3% に収まっており、べき展開に比べて収束性が大きく改善されている。閉じ込め/非閉じ込め相転移の相境界線は Padé 近似の近傍の領域に存在すると推測される。ただし、我々の計算では実際のクォーク質量より大きい値を用いたため実際の相境界線は低温側にシフトするものと考えられる。

虚数化学ポテンシャル領域では、閉じ込め相転移の他にも虚数化学ポテンシャル領域に固有な相転移や周期性などが存在することが知られており [13]、その数値的な検証も重要な課題となっている。文献 [12] では、そのような相転移についても研究を行っている。

4 実化学ポテンシャルの場合へのアプローチ

符号問題はクォーク行列式 $\det \Delta$ の虚数部から発生する。そのため、化学ポテンシャルが実で有限な場合は、符号問題の回避法が必要となり、 $\det \Delta$ の扱い方はその際のポイントの 1 つである。行列式の計算時間は行列のランクの 3 乗に比例する。クォーク行列は大規模行列である

ため、その計算は非常に時間がかかる。テイラー展開などの方法も提案されているが、化学ポテンシャルは Δ に含まれるため、低密度領域を除いては近似を用いず正確に求めることが望ましい。

クオーク行列式には、有限密度系での解析の際に有用な簡約公式が存在する[14, 15, 16, 17, 18]。簡約公式は以下のように導出される。格子QCD作用の時間方向は最近接相互作用と境界条件の項によって構成されており、時間成分の行列として表示すると帶行列のような構造を持っている。この場合行列式の時間成分を代数的に実行することが出来て、行列式のランクを小さくすることができる。このアイデアを実行するとクオーク行列式は

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \xi^{-N_r/2} \det(Q + \xi) \quad (2)$$

と変形される。ここで $\xi = e^{-\mu/T}$ はフガシティである。 C_0, Q はクオーク行列 Δ を時間方向の行列構造に注目して分解、再構築したもので、ランクは Δ に比べて $1/N_t$ に縮小されている。従って、行列式 $\det(Q + \xi)$ の計算時間は $\det \Delta$ の計算時間のおよそ $1/N_t^3$ になり、計算時間が大幅に短縮される。

Q の固有値を λ_n と書くと

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \xi^{-N_r/2} \prod_{n=1}^{N_r} (\lambda_n + \xi) \quad (3)$$

を得る。 C_0, Q は μ に依存せず、従って λ_n も μ に依存しない。 μ 依存性はフガシティ ξ にのみ含まれており、 $\{\lambda_n\}$ を求めれば任意の μ に対して $\det \Delta$ を求めることが出来る。つまり、(3)式は $\det \Delta$ の μ 依存性を解析的に与える式になっている。

Q の固有値の分布を2つの温度に対してプロットした結果を図3に示した。固有値は低温のハドロン相では Z_3 対称に分布し、高温のQGP相では固有値が正の実軸に近づき対称性が破れている。最近の研究では固有値に $\lambda, 1/\lambda^*$ の対称性があり、この対称性によって固有値が2つのスケールに分離することもわかっている。現在は固有値の性質に注目した符号問題の解決可能性を探っている。

簡約公式の応用として、状態方程式のテイラー展開を考えてみる。圧力 p を温度の4乗で割った量のテイラー展開

$$\frac{\delta p(T, \mu)}{T^4} = \sum_{n=2,4,\dots}^{\infty} c_n(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^n, \quad (4)$$

を考える。ここで $\delta p = p(\mu, T) - p(0, T)$ 。簡約公式を用いて求めた c_2, c_4 および c_6 の結果が図4である。クオー

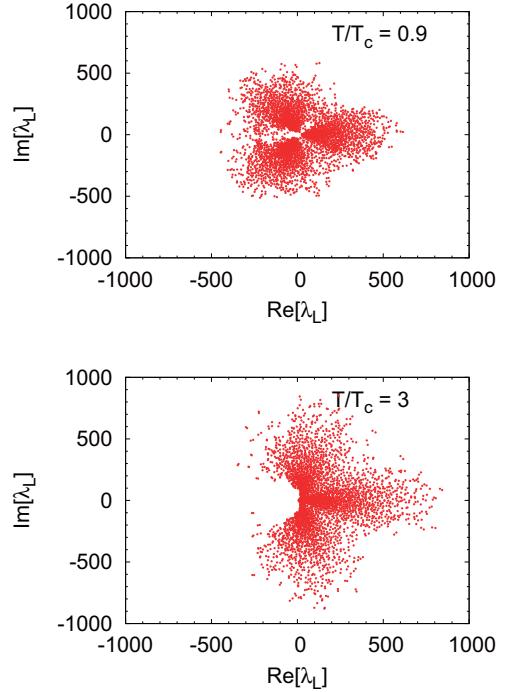


図3: Q の固有値の複素平面上の分布: ハドロン相(上)とQGP相(下)。ハドロン相側では Z_3 対称性がある。

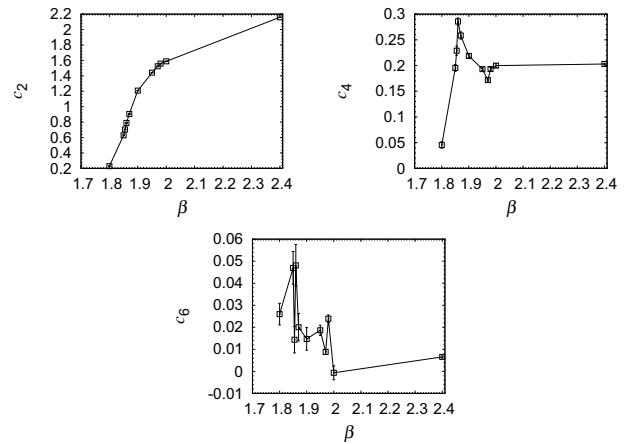


図4: $\delta p/T^4$ の μ/T についての2, 4, 6次のテイラー係数。Stefan-Boltzmann極限での値は $c_2 = 1$, $c_4 = 1/(2\pi^2)$ 。横軸 β は結合定数を表し、 β の大小は温度の高低にそれぞれ対応する。相転移点は $\beta = 1.86$ 近傍に存在する。

クとグルーオンの自由ガスとなるような高温極限 (Stefan Boltzmann 極限) では

$$\frac{\delta p}{T^4} = \frac{N_f}{2} \left(\frac{\mu}{T} \right)^2 + \frac{N_f}{4\pi^2} \left(\frac{\mu}{T} \right)^4 \quad (5)$$

となる。SB 極限の値と比べると c_2 は 2 倍程度、 c_4 は 4 倍程度の値になっている。これは有限体積効果や重いクォーク質量の影響によるものと考えられるが、その検証は今後の課題である。クォーク行列式の化学ポテンシャル依存性が代数的に与えられることが簡約公式の利点の 1 つであるが、これを利用すると高次のテイラーベクトルも容易に計算できる。 c_6 までではテイラーベクトルはよく収束する振る舞いがみられる。より高次の項の計算も容易であるが、高次のベクトルでは統計誤差が大きく精度が低下するため高統計の計算が必要である。

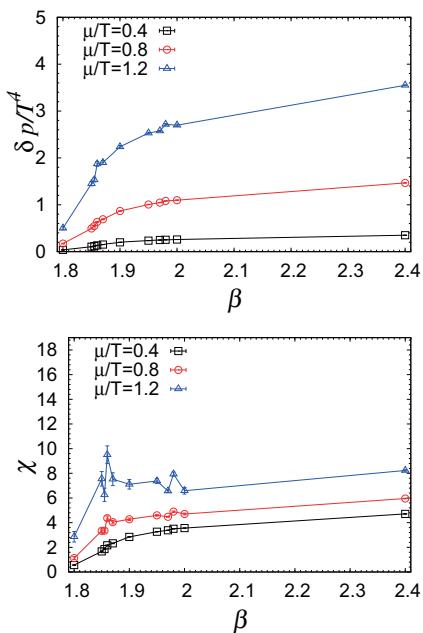


図 5: c_2, c_4, c_6 を用いて求めた $\delta p/T^4$ と χ .

図 5 は $\delta p/T^4$ と感受率 χ の結果を表している。状態方程式 $\delta p/T^4$ は温度の関数としてほぼなめらかな振る舞いをしている。感受率 χ は $\mu/T \leq 0.8$ まではピークを持たず、 $\mu/T \sim 1.2$ では小さなピークを持っている。図の小さなピークが物理的な相転移を表しているかどうかはテイラーベクトルの収束性や有限体積効果などを見積もる必要がある。

ここではテイラーベクトルへの応用を考えたが、簡約公式は様々な問題に応用できる。(3) 式を展開するとクォーク行列式をフガシティの多項式として表現することが出来る。Lee-Yang 零点定理で知られるように、大分配関数のフガシティ多項式としての表現は相転移の解析の有用な

道具となる [19, 20]。その他の応用としては、フガシティ展開を利用してクォーク数を固定した分配関数を導出する方法はカノニカル法と呼ばれ、近年注目されている方法の一つである。

5 今後の展望

格子 QCD を用いた有限密度系の研究は近年大きく進展してきている。符号問題は深刻な問題であるが、様々なアイデアが提案され、研究されている。信頼性を検証する満足いく方法や高密度領域へ適用可能な方法が確立されていないなどまだ多くの課題が残っているが、臨界点を示す結果など物理的に重要な成果も得られるようになってきている。

本稿では我々が現在行っている研究内容を紹介した。数値計算の詳細については説明を省いたが、本研究では多重積分のモンテカルロシミュレーションの他に大規模行列の行列式計算と固有値問題、さらには次元の大きな多項式の係数決定や、倍精度を越える変数の扱いなど数値計算の面でも様々な問題を取り組んでいる。相転移は熱力学極限における現象であるため、その位置や次数の定量的決定のためには有限サイズスケーリングと呼ばれる計算が本質的に重要である。また、相構造はクォーク質量に強く依存するため、より現実の値に近いクォーク質量を用いることも重要である。実化学ポテンシャルの研究は、行列式計算や固有値問題の解法の計算時間とメモリの制約のために、現在のところ小さい格子での計算に限られている。今後の QCD 相図の研究では計算機の進歩だけでなく、行列式計算と固有値解法のアルゴリズム面の改良が鍵となるかもしれない。

本研究の多くの部分は大阪大学サイバーメディアセンターの NEC-SX9 を用いて行った。管理、運営メンテナンスなどに関わっている多くの方々に感謝する。

参考文献

- [1] S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, and T. Takaishi, Prog.Theor.Phys. **110**, 615 (2003), arXiv:hep-lat/0306031.
- [2] P. de Forcrand, PoS **LAT2009**, 010 (2009), arXiv:1005.0539.
- [3] P. de Forcrand and O. Philipsen, Nucl. Phys. **B642**, 290 (2002), arXiv:hep-lat/0205016.
- [4] M. D'Elia and F. Sanfilippo Phys. Rev. **D80**, 111501 (2009), arXiv:0909.0254.

- [5] M. D'Elia and F. Sanfilippo Phys.Rev. **D80**, 014502 (2009), arXiv:0904.1400.
- [6] L.-K. Wu, X.-Q. Luo, and H.-S. Chen, Phys. Rev. **D76**, 034505 (2007), arXiv:hep-lat/0611035.
- [7] P. de Forcrand and O. Philipsen, Phys.Rev.Lett. **105**, 152001 (2010), arXiv:1004.3144.
- [8] M. D'Elia and M.-P. Lombardo, Phys.Rev. **D67**, 014505 (2003), arXiv:hep-lat/0209146.
- [9] M. D'Elia and M. P. Lombardo, Phys.Rev. **D70**, 074509 (2004), arXiv:hep-lat/0406012.
- [10] M. D'Elia, F. Di Renzo, and M. P. Lombardo, Phys.Rev. **D76**, 114509 (2007), arXiv:0705.3814.
- [11] P. Cea, L. Cosmai, M. D'Elia, and A. Papa, Phys.Rev. **D81**, 094502 (2010), arXiv:1004.0184.
- [12] K. Nagata and A. Nakamura, Phys.Rev. **D83**, 114507 (2011), arXiv:1104.2142.
- [13] A. Roberge and N. Weiss, Nucl. Phys. **B275**, 734 (1986).
- [14] P. E. Gibbs, Phys. Lett. **B172**, 53 (1986).
- [15] A. Hasenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys. **B371**, 539 (1992).
- [16] A. Borici, Prog. Theor. Phys. Suppl. **153**, 335 (2004).
- [17] K. Nagata and A. Nakamura, Phys.Rev. **D82**, 094027 (2010), arXiv:1009.2149.
- [18] A. Alexandru and U. Wenger, Phys.Rev. **D83**, 034502 (2011), arXiv:1009.2197.
- [19] T. Lee and C.-N. Yang, Phys.Rev. **87**, 410 (1952).
- [20] C.-N. Yang and T. Lee, Phys.Rev. **87**, 404 (1952).

センター報告

・ 2010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	-----	53
・ 第17回スーパーコンピューティング・コンテスト (SuperCon2011)	-----	70
・ 2011年度大規模計算機システム利用講習会	-----	71
・ 「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	-----	72
・ 「大規模計算機システムにおける企業利用」の活動状況	-----	73
・ 2011年度大規模計算機システム利用相談員・指導員	-----	75
・ 大規模計算機システムFAQ	-----	79

2010 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 2010 年 4 月から 2011 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] Hajime Yoshino, Tomoaki Nogawa and Bongsoo Kim: From the Frenkel-Kontorova model to Josephson junction arrays - the Aubry's transition as a jamming-glass transition, *Prog. Theor. Phys.*, Supplement No. 184, 153, 2010 年.
- [2] Hajime Yoshino and Marc Mezard: Emergence of rigidity at the structural glass transition: a first principle computation, *Physical Review Letters*, 105, 015504, 2010 年 7 月.
- [3] Hajime Yoshino, Tomoaki Nogawa and Bongsoo Kim: Vortex solid phase with frozen undulations in superconducting Josephson-junction arrays in external magnetic fields, *Physical Review Letters*, 105, 257004, 2010 年 12 月.
- [4] Tanaka, T., A. Nakamizo, A. Yoshikawa, S. Fujita, H. Shinagawa, H. Shimazu, T. Kikuchi, K. K. Hashimoto: Substorm convection and current system deduced from the global simulation, *J. Geophys. Res.*, 115, doi:10.1029/2009JA014676, 2010 年.
- [5] Yoshikawa, A., H. Nakata, A. Nakamizo, T. Uozumi, M. Itonaga, S. Fujita, K. Yumoto, T. Tanaka: Alfvénic-coupling algorithm for global and dynamical magnetosphere-ionosphere coupled system, *J. Geophys. Res.*, 115, doi:10.1029/2009JA014924, 2010 年.
- [6] Fujita, S., T. Kikuchi, and T. Tanaka: Formation of the overshielding potential in the magnetosphere-ionosphere compound system during a northward turn of the interplanetary magnetic field revealed from a global MHD simulation, *J. Geophys. Res.*, 115, 2010 年.
- [7] Nishimura, Y., T. Kikuchi, A. Shinbori, J. Wygant, Y. Tsuji, T. Hori, T. Ono, S. Fujita, and T. Tanaka: Direct measurements of the Poynting flux associated with convection electric fields in the magnetosphere, *J. Geophys. Res.*, 2010 年.
- [8] Fujita, S.: The Global MHD Magnetosphere Simulation and Prospect for the Space Weather Prediction, *NICT Journal*, 2010 年.
- [9] Fujita, S., T. Tanaka and T. Motoba: Long-period ULF waves driven by periodic solar wind disturbances, *The Dynamic Magnetosphere*, 2011 年.
- [10] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Ken-ichiro Nakamatsu, Hidenori Sogabe, Shinji Matsui, Masanobu Haraguchi, Toshihiro Okamoto, and Masuo Fukui: Fabrication of Organic Spin-on-Glass Microring Resonator with a Narrow Gap between a Microring Resonator and a Waveguide Using Nanoimprint Lithography, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 49, 7, 072502, 2010 年 7 月.
- [11] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto: Plasmonic Racetrack Resonator for Application to Photonic Integrated Circuits at Sub-Wavelength, *Journal of Nonlinear Optical Physics & Materials*, 19, 4, 583-588, 2010 年 12 月.
- [12] 犬塚修一郎, 町田正博, 松本倫明: Emergence of Protoplanetary Disks and Successive Formation of Gaseous Planets by Gravitational Instability, *The Astrophysical Journal Letters*, Vol. 718, 2, pp. 58-72, 2010 年 8 月.
- [13] 町田正博, 犬塚修一郎, 松本倫明: Emergence of Protoplanetary Disks and Successive Formation of Gaseous Planets by Gravitational Instability, *The Astrophysical Journal*, Vol. 724, 2, pp. 1006-1020, 2010 年 12 月.
- [14] 町田正博, 犬塚修一郎, 松本倫明: ecurrent Planet Formation and Intermittent Protostellar Outflows Induced by Episodic Mass Accretion, *he Astrophysical Journal*, Vol. 729, 1, pp. 42-59, 2011 年 3 月.
- [15] Nabuhiko Suzuki, Toru Sato, Tsung-Shung Harry Lee: Extraction of electromagnetic transition form factors for nucleon resonances with a dynamical coupled-channel model, *Physical Review*, Vol.

- [16] Yoshiyuki Egami, Kikuji Hirose, Tomoya Ono: Time-saving first-principles calculation method for electron transport between jellium electrodes, Phys. Rev. E , 82, 5, 056706, 2010 年 11 月.
- [17] Yoshiyuki Egami, Keita Yamada: First-principles study on quantum-transport properties of single molecule depending on adsorption conditions, Computer Physics Communications, 182, 1, 103-105, 2011 年 1 月.
- [18] 池田浩人, 森脇英恵, 湯川美穂, 岩瀬由紀子, 安藝初美: 抗精神病薬リスペリドンと茶葉カテキンとの相互作用メカニズム (1)エピガロカテキンガレートとの不溶性複合体形成, YAKUGAKU ZASSHI, 130, 11, 1589-1595, 2010 年 11 月.
- [19] Takayuki Yamada, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, Venkat E. Tangirala and Toshi Fujiwara: Detonation Limit Thresholds in H_2/O_2 Rotating Detonation Engine, Combustion Science and Technology, Vol.182, Issue 11&12, 1901-1914, 2010 年 1 月.
- [20] Kengo Tomida, Masahiro N. Machida, Kazuya Saigo, Kohji Tomisaka, Tomoaki Matsumoto: Exposed Long-lifetime First Core: A New Model of First Cores Based on Radiation Hydrodynamics, The Astrophysical Journal Letters, 725, L239-L244, 2010 年 12 月.
- [21] Haraguchi R, Ashihara T, Namba T, Tsumoto K, Murakami S, Kurachi Y, Ikeda T, Nakazawa K, Transmural Dispersion of Repolarization Determines Scroll Wave Behavior During Ventricular Tachyarrhythmias - A Simulation Study -, Circ J, Vol. 75, No. 1, pp. 80-88 (2011).
- [22] Yu Takano, Haruki Nakamura: "Electronic structures of heme a of cytochrome c oxidase in the redox states-Roles of Propionate and Formyl Groups in Electron Transfer-, "Journal of Computational Chemistry, Vol. 31, Issue 5, pp . 954-962, Apr. 2010.
- [23] Kenichi Koizumi, Mitsuo Shoji, Kizashi Yamaguchi, Haruki Nakamura, Yu Takano: "Theoretical studies on electronic structure and magnetic properties of mixed-valence uteroferrin active site, "International Journal of Quantum Chemistry, Vol 111, Issue 3, pp . 702-710, Mar.
- [24] Yu Takano, Yasuhige Yonezawa, Yuichi Fujita, Genji Kurisu, Haruki Nakamura: " Electronic structures of the [4Fe-4S] cluster in dark-operative protochlorophyllide oxidoreductase (DPOR), " Chemical Physics Letters, Vol. 503, Issues 4-6, pp.296-300, Feb. 2011.
- [25] Hong-bo Cai, Kunioki Mima, Tomoyuki Jozaki, Hideo Nagatomo, Atsushi Sunahara, Wei-min Zhou, Rodney J. Mason: "Collimation of relativistic laser-generated high energy electron beams via double cone target in fast ignition scheme", Journal of Physics, Conference Series 244, 022030, Oct.2010.
- [26] Akito SAGISAKA, Alexander S. PIROZHKOVA, Michiaki MORI, Akifumi YOGO, Koichi OGURA, Satoshi ORIMO, Mamiko NISHIUCHI, Jinglong MA, Hiromitsu KIRIYAMA, Shuhei KANAZAWA, Shuji KONDO, Yoshiki NAKAI, Takuya SHIMOMURA, Manabu TANOUE, Atsushi AKUTSU, Hajime OKADA, Tomohiro MOTOMURA, Hiroyuki DAIDO, Kiminori KONDO, Sergei V. BULANOV, Timur Zh. ESIRKEPOV, Shigeki NASHIMA, Makoto HOSODA, Hideo NAGATOMO, Yuji OISHI, Koshichi NEMOTO, Il Woo CHOI, Seong Ku LEE, Jongmin LEE: "Proton Generation and Terahertz Radiation from A Thin-Foil Target with A High-Intensity Laser", The Review of Laser Engineering, Vol.39, No.9, Sep.2010.
- [27] 木村友亮、尾崎典雅、奥地拓生、佐野孝好、清水克哉、宮西宏併、遠藤恭、實井辰也、曾田智史、佐野智一、寺井智之、廣瀬明夫、掛下知行、坂和洋一、兒玉了祐: "高強度レーザー衝撃圧縮を用いたメガバール領域における水の状態方程式計測", 日本惑星科学会誌 遊星人, vol. 20, pp. 36-41, Mar.2011.
- [28] Atsushi Sunahara, Hongbo Cai, Tomoyuki Johzaki, Hideo Nagatomo1, and Kunioki Mima: "EFFECTS OF PRE-FORMED PLASMA INSIDE A GUIDING CONE IN FAST IGNITION SCHEME", Journal of Physics, Conference Series 244, 022079, Oct.2010.
- [29] H. Nagatomo, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Shiraga, H. Sakagami, H. Cai, K. Mima: "Controlling dynamics of imploded core plasma for fast ignition", Journal of Physics, 224, 022050,

Oct.2010.

- [30] T. Sano, N. Ozaki, T. Sakaiya, K. Shigemori, M. Ikoma, T. Kimura, K. Miyanishi, T. Endo, A. Shiroshita, H. Takahashi, T. Jitsui, Y. Hori, Y. Hironaka, A. Iwamoto, T. Kadono, M. Nakai, T. Okuchi, K. Otani, K. Shimizu, T. Kondo, R. Kodama, K. Mima: "Laser-Shock Compression and Hugoniot Measurements of Liquid Hydrogen to 55 GPa", Physical Review B, vol. 83, 054117, 7 pp., Feb.2011.
- [31] 佐藤義永, 永岡龍一, 撫佐昭裕, 江川隆輔, 滝沢寛之, 岡部公起, 小林広明: “ルーフラインモデルに基づくベクトルプロセッサ向けプログラム最適化戦略,” 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol.4, No.3, pp.1-11, May 2011.
- [32] 田中 敏嗣, 辻 拓也: “流動層 DEM-CFD シミュレーションの大規模化と高分解能化,” 粉体と工業, Vol.2, No.12, pp.29-34, Dec.2010.
- [33] Nghiem Thi Minh Hoa, Emi Minamitani, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, "Kondo Effect in the Systems of Magnetic Trimers on a Metal Surface", Journal of the Physical Society of Japan, Vol.79, pp.113706, Nov.2010.
- [34] Emi Minamitani, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "Effect of antiferromagnetic RKKY interaction and magnetic field in a two-impurity Kondo system", Physical Review B, Vol.82, pp.153203, Oct.2010.
- [35] Emi Minamitani, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "Scanning tunneling spectroscopic evidence of crossover transition in the two-impurity Kondo problem", Surface Science, Vol.604, pp.2139, Sep.2010.
- [36] Susan Aspera, Melanie David, Hideaki Kasai, "First principles study of the Adsorption of Water Molecule on Tri-s-triazine based Graphitic Carbon Nitride ($g\text{-}C_3N_4$)", Japanese Journal of Applied Physics, Vol.49, pp.115703, Nov.2010.
- [37] Tien Quang Nguyen, Mary Clare Escaño, Hideaki Kasai, "Nitric Oxide adsorption effects on metal phthalocyanines", Journal of Physical Chemistry B, Vol.114, pp.10017, Jul.2010.
- [38] Allan Abraham B. Padama, Mary Clare S. Escaño, Melanie Y. David, Hideaki Kasai, Hiroyuki Kawai, "First principles investigation for H_2 dissociative adsorption on Ni and Cr-decorated Ni surfaces - An application to alkaline polymer electrolyte fuel cell", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol.8, pp.325, Jun.2010.
- [39] Nghiem Thi Minh Hoa, Emi Minamitani, Wilson Agerico Diño, Bach Thanh Cong, Hideaki Kasai , "Effect of RKKY Interaction on the System of Two Magnetic Atoms on a Metal Surface at Finite Temperatures", Journal of the Physical Society of Japan, Vol.79, pp.074702, Jun.2010.
- [40] Hermawan Kresno Diponoro, Adhitya Gandaryus Saputro, Susan Menez Aspera, Hideaki Kasai, "Density functional theory study on the interaction of O_2 molecule with Cobalt-(6)Pyrrole clusters", Japanese Journal of Applied Physics, accepted.
- [41] Triati Dewi Kencana Wungu, Wilson Agerico Diño, Hermawan Kresno Diponoro, Hideaki Kasai, "Effect of Lithium Absorption at Tetrahedral Site and Isomorphic Substitution on Montmorillonite Properties: A Density Functional Theory Study", Japanese Journal of Applied Physics, accepted.
- [42] Mary Clare Escaño, Tien Quang Nguyen, Hideaki Kasai, "Molecular and electronic tuning of Si/CNT hybrid system", Japanese Journal of Applied Physics, accepted.
- [43] Handoko Setyo Kuncoro, Mamoru Sakaue, Hiroshi Nakanishi, Hermawan Kresno Diponoro, Hideaki Kasai, "First-principles Investigation on Ionization Strength, Volume Expansion, and Water Rotational Rigidity of Small Water Cluster Systems Formed around Sodium(I), Calcium(II), and Iron(II) Ions", Journal of the Physical Society of Japan, Vol.80, pp.024601, Jan.2011.
- [44] Do Ngoc Son, Bach Thanh Cong, and Hideaki Kasai, "Hydronium Adsorption on OOH Precovered Pt(111) Surface: Effects of Electrode Potentiale", Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Vol.11, pp.2983, Apr.2011.
- [45] Mary Clare Escaño, Elod Gyenge, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "Pt/Cr and Pt/Ni catalysts for oxygen reduction reaction: To alloy or not to alloy?", Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Vol.11, pp.2944, Apr.2011.
- [46] Triati Dewi Kencana Wungu, Susan Menez Aspera,

- Melanie Yadao David, Hermawan Kresno Dipojono, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai , "Absorption of Lithium in Montmorillonite: A Density Functional Theory (DFT) Study", Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Vol.11, pp.2793, Apr.2011.
- [47] Ferensa Oemry, Mary Clare Escaño, Hiroyumi Kishi, Shinichi Kunikata, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyoshi Maekawa, Kazuo Osumi, Yoshihisa Tashiro, "Nitrogen Monoxide Adsorption on Pt_4 Clusters Coated on $\gamma Al_2O_3(111)$ Surface", Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Vol.11, pp.2844, Apr. 2011.
- [48] 白川真澄, 中山浩太郎, 荒牧英治, 原隆浩, 西尾章治郎: Wikipedia と Web の情報を組み合わせたオントロジ構築の試み, 電子情報通信学会和文論文誌 D, Vol. J94-D, No. 3, pp. 525-539, Mar. 2011.
- [49] M. Ishikawa, M. Katsura, S. Nakashima, K. Aizawa, T. Inoue, Y. Ikemoto and H. Okamura, "Application of a Modulating Technique to Detect Near-Field Signals Using a Conventional IR Spectrometer with a Ceramic Light Source," e-J. Surf. Sci. Nanotech. 9, 40-45, (2011).
- [50] Y. Ikemoto, T. Moriwaki, T. Kinoshita, M. Ishikawa, S. Nakashima, H. Okamura, "Near-Field Spectroscopy with Infrared Synchrotron Radiation Source," e-J. Surf. Sci. Nanotech. (to be published).
- [51] D.X. Viet and H. Kawamura, "Monte Carlo studies of the ordering of the one-dimensional Heisenberg spin glass with long-range power-law interactions", J. Phys. Soc. Jpn., 79(10), 104708-(1-14), (2010).
- [52] T. Okubo and H. Kawamura, "Signature of a Z_2 vortex in the dynamical correlations of the triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet" J. Phys. Soc. Jpn., 79(8), 084706-(1-6), (2010).
- [53] S. Okumura, H. Kawamura, T. Okubo and Y. Motome, "Novel spin-liquid states in the frustrated Heisenberg antiferromagnet on the honeycomb lattice", J. Phys. Soc. Jpn., 79(11), 114705-(1-7), (2010).
- [54] R.N. Mondal, Md. S. Uddin, S. Yanase: Numerical Prediction of Non-Isothermal Flow Through a Curved Square Duct, International Journal of Fluid Mechanics Research, Vol.37, No.1, pp.85-99, 2010.
- [55] K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, "Origin of Surface-Band Dispersion at the Pentacene/Cu Interface", Appl. Phys. Express, 3, 025701-1-3 (2010).
- [56] T. Kumagai, M. Kaizu, H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga, I. Hamada, and Y. Morikawa, "Symmetric hydrogen bond in a water-hydroxyl complex on Cu(110)", Phys. Rev. B 81, 045402-1-5 (2010).
- [57] M. Sogo, Y. Sakamoto, M. Aoki, S. Masuda, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, " C_{60} adsorbed on platinum surface: An excellent mediator of metal wave function", J. Phys. Chem. C. 114, 3504-3506 , (2010).
- [58] K. Okazaki-Maeda, Y. Morikawa, S. Tanaka, and M. Kohyama, "Structures of Pt clusters on graphene by first-principles calculations", Surf. Sci. 604, 144-154, (2010).
- [59] T. Nakamura, K. Miyajima, N. Hirata, T. Matsumoto, Y. Morikawa, H. Tada, and A. Nakajima, "Electronic structure of hydrogen-terminated silicon surfaces [H-Si(111)] studied by two-photon photoemission", Appl. Phys. A 98, 735-743, (2010).
- [60] I. Hamada, K.H. Lee, and Y. Morikawa, "Interaction of water with a metal surface: Insight from the van der Waals density functional", Phys. Rev. B, 81, 115452-1-6, (2010).
- [61] K. Toyoda, I. Hamada, K.-H. Lee, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, "Density Functional Theoretical Study of Pentacene/Noble Metal Interfaces with van der Waals Corrections: Vacuum Level Shifts and Electronic Structures", J. Chem. Phys., 132, 134703-1-9, (2010).
- [62] H.-J. Shin, J. Jung, K. Motobayashi, S. Yanagisawa, Y. Morikawa, Y. Kim, and M. Kawai, "State-selective dissociation of a single water molecule on an ultrathin MgO film", Nature Materials, 9, 442-447, (2010).
- [63] J. Brede, N. Atodiresei, S. Kuck, P. Lazic, V. Caciuc, Y. Morikawa, G. Hoffmann, S. Blugel, and R. Wiesendanger, "Spin- and Energy-Dependent Tunneling through a Single Molecule with

- Intramolecular Spatial Resolution”, Phys. Rev. Lett., 105, 047204-1-4, (2010).
- [64] T. Taniike, M. Tada, R. Coquet, Y. Morikawa, T. Sasaki, Y. Iwasawa, “A novel mechanism for spectator CO -mediated reaction with unique $cis-(NO)_2$ dimer on a Co_2^+ -dimer/g- Al_2O_3 (110) model catalyst: Density functional theory calculations”, Catal. Today, 154, 118-126, (2010).
- [65] S. Masuda, T. Kamada, K. Sasaki, M. Aoki, and Y. Morikawa, “Chemisorption-induced gap state at organic-metal interface: Benzenethiol on $Pt(111)$ ”, Phys. Chem. Chem. Phys., 12, 10914-10918, (2010).
- [66] K. Lee, Y. Morikawa, and D. C. Langreth, “Adsorption of n-butane on $Cu(100)$, $Cu(111)$, $Au(111)$ and $Pt(111)$: Van der Waals density-functional study”, Phys. Rev. B 82, 155461-1-6, (2010).
- [67] K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, “Density-functional theoretical study of fluorination effect on organic/metal interfaces”, Organic Electronics, 12, 295-299, (2011).
- [68] K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, “Adsorption of Benzene on Noble Metal Surfaces Studied by Density Functional Theory with van der Waals Correction”, J. Nanoscience and Nanotech., 11, 2836, (2011).
- [69] I. Hamada and Y. Morikawa, “A density-functional theory study of water on clean and hydrogen preadsorbed $Rh(111)$ surfaces”, J. Chem. Phys., 134, 154701, (2011).
- [70] S. Saita, A. Kadokura , N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, S. Ohtani, G. Ueno, K. Murata, D. Matsuoka, A. Kitamoto, T. Higuchi: "Displacement of conjugate points during a substorm in a global MHD simulation", Journal of Geophysical Research, doi:10.1029/2010JA016155, in press, accepted 6 April 2011.
- [71] Ebihara, Y., T. Sakanoi, K. Asamura, M. Hirahara, and M. F. Thomsen, Reimeい observation of highly structured auroras caused by nonaccelerated electrons, J. Geophys. Res., 115, A08320, doi:10.1029/2009JA015009, 2010.
- [72] Ebihara, Y., R. Kataoka, A. T. Weatherwax, and M. Yamauchi, Dayside proton aurora associated with magnetic impulse events: South Pole observations, J. Geophys. Res., 115, A04301, doi:10.1029/2009JA014760, 2010.
- [73] Ebihara, Y., M.-C. Fok, T. J. Immel, and P. C. Brandt, Rapid decay of storm time ring current due to pitch angle scattering in curved field line, J. Geophys. Res., 116, A03218, doi:10.1029/2010JA016000, 2011.
- [74] Kitamura, N., T. Nishimura, T. Ono, Y. Ebihara, N. Terada, A. Shinbori, A. Kumamoto, T. Abe, M. Yamada, S. Watanabe, A. Matsuoka, and A. Yau, Observations of very-low-energy (<10 eV) ion outflows dominated by O^+ ions in the region of enhanced electron density in the polar cap magnetosphere during geomagnetic storms, 115, A00J06, doi:10.1029/2009JA015601, 2010. (共著)
- [75] Kikuchi, T., Y. Ebihara, K. K. Hashimoto, R. Kataoka, T. Hori, S. Watari, and N. Nishitani, Penetration of the convection and overshielding electric fields to the equatorial ionosphere during a quasiperiodic DP 2 geomagnetic fluctuation event , J. Geophys. Res. , 115 , A05209, doi:10.1029/2008JA.
- [76] 松中大介, 土井嘉治, 渋谷陽二, エピタキシャル成長における基板のひずみの効果に関する解析, 材料, 59卷・8号・610-615頁, 2010-AUG.
- [77] T. Tsuru, Y. Kaji, D. Matsunaka and Y. Shibutani, Incipient plasticity of twin and stable/unstable grain boundaries during nanoindentation in copper, Physical Review B, 82 卷・2号・024101頁, 2010-JUL.
- [78] Junyoung Park, Yoji Shibutani and Masato Wakeda, Enhancement of Plasticity of Highly Density-Fluctuated $Cu-Zr$ Amorphous Alloy, Materials Transactions, 51 卷・9号・1504-1509頁, 2010-AUG.
- [79] T. Tsuru, Y. Shibutani, Y. Kaji, Nanoscale contact plasticity of crystalline metal: Experiment and analytical investigation via atomistic and discrete dislocation models, Acta Materialia, 58 卷・8号・3096-3102頁, 2010-MAY.
- [80] Kyoung-Won Park, Yoji Shibutani, Michael L.

- Falk, Byeong-Joo Lee and Jae-Chul Lee, Shear localization and the plasticity of bulk amorphous alloys, *Scripta Materialia*, 63 卷・2 号・231-234 頁, 2010-JUL.
- [81] M. Wakeda, Y. Shibutani, Icosahedral clustering with medium-range order and local elastic properties of amorphous metals, *Acta Materialia*, 58 卷・11 号・3963-3969 頁, 2010-JUN.
- [82] 田中展, 松尾幸哉, 渋谷陽二, ポアソン比にみられる 4 位節柔軟節構造体の非線形弾性変形挙動, 日本機械学会論文集(A 編), 76 卷・768 号・1025-1031 頁, 2010-AUG.
- [83] Tomohito Tsuru, Yoshiyuki Kaji and Yoji Shibutani, Minimum Energy Motion and Core Structure of Pure Edge and Screw Dislocations in Aluminum, *Journal of Computational Science and Technology*, 4 卷・3 号・185-193 頁, 2010-JUN.
- [84] 成瀬友博, 渋谷陽二, ボルト締結体の軸方向剛性と曲げ剛性の高精度化, 日本機械学会論文集(A 編), 76 卷・770 号・1234-1240 頁, 2010-OCT.
- [85] 成瀬友博, 渋谷陽二, ボルト締結体の曲げモーメント下における被締結体剛性の非線形特性, 日本機械学会論文集(A 編), 76 卷・771 号・1420-1428 頁, 2010-NOV.
- [86] Tomohiro Naruse and Yoji Shibutani, Equivalent Stiffness Evaluations of Clamped Plates in Bolted Joints under Loading, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, 4 卷・12 号・1791-1805 頁, 2010-DEC.
- [87] 古城直道、樋口誠宏、山口智実、杉本隆史、島田尚一、寺内俊太郎、松田茂敬、松森昇、尾倉秀一：“鋼の超仕上げにおけるダイヤモンド砥石の摩耗抑制”, 日本機械学会論文集, C76, 763, pp.777-783, Mar. 2010.
- [88] 古城直道、樋口誠宏、山口智実、杉本隆史、島田尚一：“炭素拡散に基づくダイヤモンド工具の熱化学研磨”, 日本機械学会論文集, C76, 764, pp.974-980, Apr. 2010.
- [89] N. FURUSHIRO, M. HIGUCHI, T. YAMAGUCHI, T. SUGIMOTO, N. MATSUMORI, H. OGURA, S. SHIMADA: “Development of Mechanochemical Diamond Stone Containing BaSO₄ Abrasive”, *Precision Engineering*, 34, 3, pp.419-424, Jul. 2010.
- [90] N. FURUSHIRO, H. TANAKA, M. HIGUCHI, T. YAMAGUCHI, S. SHIMADA: “Suppression Mechanism of Tool Wear by Phosphorous Addition in Diamond Turning of Electroless Nickel Deposits”, *Annals of the CIRP*, 59, 1, pp.105-108, Aug. 2010.
- [91] Y. Fujimoto and A. Oshiyama: “Atomic structures and energetics of 90° dislocation cores in Ge films on Si(001),” *Physical Review B*, Vol. 81, pp.205309-1-5, 2010.
- [92] S. Yanagisawa, I. Hamada, K. Lee, D. C. Langreth, and Y. Morikawa, "Adsorption of Alq₃ on Mg(001) surface: Role of chemical bonding, molecular distortion, and van der Waals interaction", *Physical Review B*, submitted (accepted for publication on Apr. 14, 2011).
- [93] K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, "Density-functional theoretical study of fluorination effect on organic/metal interfaces", *Organic Electronics*, Vol. 12, no. 2, pp. 295-299, Feb. 2011.
- [94] K. Toyoda, I. Hamada, K. Lee, S. Yanagisawa and Y. Morikawa, "Density functional theoretical study of pentacene/noble metal interfaces with van der Waals corrections: Vacuum level shifts and electronic structures", *Journal of Chemical Physics* Vol. 132, no. 13, 134703 (9 pages), Apr. 2010.
- [95] Horiuti K., Ozawa T., Multi-mode stretched spiral vortex and nonequilibrium energy spectrum in homogeneous shear flow turbulence, *Phys. Fluids*, American Institute of Physics, Vol. 23, No. 3, pp. 035107, Mar. 2011.

2 国際会議会議録掲載論文

- [1] Hideya Nakamura, Vijay Krishna, Ben Koopman, Brij Moudgil: Molecular Dynamics Study of Interactions of C₆₀ with Model Cell Membranes: Influence of Sterol Molecules, Proc. of the World Congress on Particle Technology 6, #HH10 00708, 2010 年 5 月.
- [2] Yasuyuki Koyama, Tatsuya Okuno, Toshihiro Okamoto and Masanobu Haraguchi: Simple coupler for the gap plasmon waveguide,

INTERNATIONAL CONFERENCE ON
NANOPHOTONICS, 2010 年 6 月.

- [3] Masanobu Haraguchi, Hidenori Sokabe, Masamichi Taniguchi, Tatsuya Okuno, Toshihiro Okamoto and Masuo Fukui: Optical resonator in gap Plasmon waveguide, SPIE Optics & Photonics, 2010 年 8 月.
- [4] Hidenori Sokabe, Tatuya Okuno, Masanobu Haraguchi, Toshihiro Okamoto and Masuo Fukui: Compact wavelength selective filer in Gap plasmon waveguide, 11th International Conference on Near-field Nano Optics, Nanophotonics& Related Techniques, 2010 年 8 月.
- [5] Masanobu Haraguchi, Hidenori Sokabe, Tatsuya Okuno, Yousuke Matsuzaki and Toshihiro Okamoto: Gap plasmon waveguide, 3rd German-Japanese Seminar on Nanophotonics, 2010 年 9 月.
- [6] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto: Characteristics of plasmonic racetrack resonators, proceedings of the international conference on Nanophotonics2010, 239, 2010 年 6 月.
- [7] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto: Characteristics of racetrack shape resonators using Surface plasmon polaritons, 11th Intenational conference on near-field optics nanophotonics and related techniques, 2010 年 9 月.
- [8] Daisuke Toma, Yoshiyuki Egami: First-principles study on electron-transport property of molecular chain depending on geometrical conformation, The 13th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN13), 2010 年 11 月.
- [9] Daisuke Toma, Yoshiyuki Egami: First-principles study on electron-transport properties of single-row phenyl chains, 5th International Meeting on Molecular Electronics (ElecMol'10), 2010 年 12 月.
- [10] Hiroto Kataoka, Tetsuro Tamura: Numerical prediction of the peak pressure distributions on square cylinder by LES, 13th International Conference on Wind Engineering, 投稿中, 2011 年 7 月.
- [11] Shigeru Ninagawa: Search for Computationally Universal Cellular Automata Guided by $1/f$ Noise," Proceedings of ALIFE XII, pp. 413 2011.
- [12] K Nozawa, T Tamura "LES one-way coupling of nested grids using scale similarity model", Proc. of the Seventh International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, 2011/07.
- [13] M. Hata, H. Sakagami, A. Sunahara, T. Johzaki, and H. Nagatomo: "Effects of Preformed Plasma of CH Foam on Fast Electron Generation", Journal of Physics, Conference Series 244, 02203, Oct.2010.
- [14] T. Kimura, N. Ozaki, T. Okuchi, T. Mashimo, K. Miyanishi, T. Endo, T. Jitsui, A. Hirose, M. Ikoma, T. Kakeshita, Y. Sakawa, T. Sano, T. Sano, K. Shimizu, T. Terai, R. Kodama: "Static compression experiments for advanced coupling techniques of laser-driven dynamic compression and precompression target", Journal of Physics: Conference Series, vol. 215, 012152, Apr.2010.
- [15] H. Nagatomo, T. Johzaki, K. Mima, H. Shiraga, H. Azechi, A. Sunahara, H. Sakagami, T. Taguchi: "Implosion Physics and Robust Target Design for Fast Ignition Realization Experiment", IAEA, Proceedings of Fusion Energy Conference, CN-180, IFE/P6-12, Oct.2010.
- [16] T. Sano, N. Ozaki, T. Sakaiya, K. Shigemori, M. Ikoma, T. Kimura, K. Miyanishi, T. Endo, A. Shiroshita, H. Takahashi, T. Jitsui, Y. Hori, Y. Hironaka, A. Iwamoto, T. Kadono, M. Nakai, T. Okuchi, K. Otani, K. Shimizu, T. Kondo, R. Kodama, K. Mima: "Hugoniot and temperature measurements of liquid hydrogen by laser-shock compression", Journal of Physics: Conference Series, vol. 244, 042018, 4 pp., Apr.2010.
- [17] Takuya Tsuji, Keizo Yabumoto, Toshihiro Kawaguchi, Toshitsugu Tanaka: "Large-scale parallel DEM-CFD coupling simulation of three-dimensional bubbling gas-fluidized bed, "Proceedings of 6th World Congress on Particle Technology, CD-ROM HH1000502, Apr.2010.
- [18] Takuya Tsuji, Hirotaka Yada, Kaoru Yoshikawa, Toshitugu Tanaka: "Comparison between DNS and DEM-CFD coupling mesoscopic simulation

- for 2-D spouted fluidized bed”, Proceedings of International conference on Multiphase Flow, CD-ROM No.13.1.2, May 2010.
- [19] Yuta Nakagawa, Takuya Tsuji, Takemori Takayama, Norihisa Matsumoto, Toshitugu Tanaka, Yuichi Kadono: “DEM simulation of cohesive soil-pushing behavior by bulldozer blade,” Proceedings of The Joint 9th Asia-Pacific ISTVS Conference and Annual Meeting of Japanese Society for Terramechanics, CD-ROM No.071, Sep.2010.
- [20] N. Tsuboi, Y. Kawakami, K. Ezure, A. Hayashi, E. Yamada, Numerical Study and Performance Evaluation for Pulse Detonation Engine with an Aerospike Nozzle, AIAA-2011-800, 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting, 2011.
- [21] Y. Morii, M. Asahara, N. Tsuboi, A.K. Hayashi, M. Koshi, H. Ogawa, S. Tokudome, The effects of the schemes in inviscid flux on spinning detonation in a round tube, Eighth International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, ISH101, 2010.
- [22] N. Tsuboi, A.K. Hayashi, M. Uchida, T. Fujimori, Three-dimensional simulations of H_2/O_2 , detonation in a round bent tube, Eighth International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, ISH106, 2010.
- [23] P. R Varadwaj, R. Fujimori, K. Kawaguchi; “Fourier Transform Infrared Spectral Investigation of the v_6 band of cyclic- C_3H_2 ” 65th Ohio State University international symposium on molecular spectroscopy, FB11(Columbus, USA) p. 85, 2010, June 25.
- [24] Shirakawa M., Nakayama K., Aramaki E., Hara T. and Nishio S.: Relation Extraction between Related Concepts by Combining Wikipedia and Web Information for Japanese Language, Asia Information Retrieval Societies Conference (AIRS 2010), pp. 310-319, Dec. 2010.
- [25] Tetsuro Tamura, Yasuo Okuda, Takeshi Kishida, Osamu Nakamura, Koichi Miyashita, Akira Katsumura, Masatoshi Tamari: “LES for aerodynamic characteristics of a tall building inside a dense city district”, CWE2010, 2010.
- [26] Tetsuro Tamura: “Application of LES-based model to wind engineering - Implementation of meteorological effects”, CWE2010, 2010.
- [27] Takenobu Michioka, Ayumu Sato, Koichi Sada: “CFD MODEL CONSIDERING MESO-SCALE DISTURBANCE FOR GAS DISPERSION IN AN URBAN DISTRICT”, HARMO14, submitted, 2011.
- [28] Shun Takahashi, Takashi Ishida, Kazuhiro Nakahashi: “Flow Simulation around Ahmed Body by Cartesian-based Method,” 6th Asia Workshop on Computational Fluid Dynamics, Mar. 2010.
- [29] Esmatullah Maiwand Sharify, Norio Arai, Shun Takahashi: “Fluid-Structure Interaction of Body with Elastic Wall,” European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010, Jun. 2010.
- [30] Norimitsu Wakama, Takafumi Aki, and Yukio Iida, Simple and Small Silicon Optical Switch with Silicon Waveguide as a Optical Control Gate, Ext. Abstr. 2010 Int. Meeting for Future of Electron Devices, Kansai, pp. 102-103, May 2010 (May, 2010) (Osaka, May 13-14, 2010).
- [31] N. FURUSHIRO, M. HIGUCHI, T. YAMAGUCHI, S. TERAUCHI, S. MATSUDA, S. SHIMADA: “Tool Wear in Diamond Turning of Steel”, Proc. ASPE 2010 Annual Meeting, Atlanta, U.S.A., vol. 46, pp.431-434, Nov. 2010.
- [32] KIYOSHI HORIUTI, Kazuma Matsumoto. Normal stress difference and drag reduction mechanism in Johnson-Segalman viscoelastic turbulence, 63rd Annual Meeting of the Division of Fluid Mechanics, Bulletin of the American Physical Society, American Physics Society, Vol. 55, No. 16, p. 396, Nov. 2010.
- [33] KIYOSHI HORIUTI. Energy cascade in multi-mode stretched spiral vortices, 6th IMS Turbulence Workshop, Proceeding of 6th IMS Turbulence Workshop, Institute for Mathematical Science, Imperial College, p. 17, Jul. 2010.

3 国内研究会等発表論文

- [1] 岡本 浩行, 山口 堅三, 原口 雅宣, 岡本 敏弘: プラズモニックレーストラック共振器の特性評価, 第 57 回応用物理関係連合講演会, 2010 年 3 月.
- [2] 岡本 浩行, 荒野 智大, 小松 実, 山口 堅三, 中松 健一郎, 松井 真二, 原口 雅宣, 岡本 敏弘: マイクロリング共振器を利用した液体屈折率の計測方法検討, 平成 22 年度電気関係学会四国支部連合大会, 2010 年 9 月.
- [3] 岡本 浩行, 山口 堅三, 原口 雅宣, 岡本 敏弘: プラズモニックレーストラック型共振器における結合長の影響, 第 71 応用物理学会学術講演会, 2010 年 9 月.
- [4] 森脇 英恵, 松原 友規, 池田 浩人, 湯川 美穂, 湯川 英二, 安藝 初美: 市販茶葉抽出飲料服用時のリスペリドン含量低下に対するシクロデキストリン類の添加効果, 日本化学会第 91 春季年会, 2010 年 3 月.
- [5] 森脇 英恵, 池田 浩人, 大山 竜也, 湯川 美穂, 安藝 初美: 茶カテキンと統合失調症治療薬リスペリドンとの複合体形成におけるシクロデキストリン添加効果, 第 46 回熱測定討論会, 2010 年 9 月.
- [6] 池田 浩人, 長尾 優香, 松原 友規, 森脇 英恵, 湯川 美穂, 湯川 英二, 安藝 初美: 緑茶カテキンと統合失調症治療薬リスペリドンとの不溶性複合体形成メカニズム 分子モデリング計算による解明, 日本化学会第 91 春季年会, 2011 年 3 月.
- [7] 森脇 英恵, 松原 友規, 西 美樹, 森永 理香, 池田 浩人, 湯川 美穂, 湯川 英二, 安藝 初美: シクロデキストリン添加によるリスペリドンと緑茶カテキンとの不溶性複合体形成抑制効果, 日本薬学会第 131 年会, 2011 年 3 月.
- [8] 大久保毅, Nguyen Trung Hai, 川村光: 強磁性的次近接相互作用を持つパイロクロア反強磁性体の位相ゆらぎと秩序化, 日本物理学会講演概要集, 65, 1, 517, 2010 年 3 月.
- [9] 大久保毅, Nguyen Trung Hai, 川村光: パイロクロア反強磁性体における Multiple-Q 状態, 日本物理学会講演概要集, 65, 2, 388, 2010 年 9 月.
- [10] 尾曲 克己, 中島 捷久: The binding affinity of swine influenza virus which caused global outbreak in 2009 to human type receptor, 第 10 回蛋白質科学会年会, 2010 年 6 月.
- [11] 尾曲 克己: 新型インフルエンザウイルスの糖鎖認識機構の解析, 第 48 回日本生物物理学会年会, 2010 年 9 月.
- [12] 藤間 大介, 江上 喜幸: 第一原理計算によるビフェニル分子の電気伝導特性予測, 日本物理学年会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月.
- [13] 江上 喜幸, 塚本 茂, 藤本 義隆, 小野 倫也: 第一原理輸送計算によるナノデバイスの機能評価とデザイン, 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011 年 3 月.
- [14] 加門 直洋, 原口 雅宣, 岡本 敏弘, 岡本 浩行: 連結スタブ構造によるプラズモン変調素子の特性, 日本光学会年次学術講演会 Optics & Photonics Japan 2010, 2010 年 11 月.
- [15] 原口 雅宣, 岡本 敏弘: 機能性プラズモニック導波路, 第 58 回応用物理学関係連合講演会, 2011 年 3 月.
- [16] 朝原誠, 坪井伸幸, 林光一, 山田英助: 爆轟限界近傍での直接起爆による酸水素爆轟波の数値解析, 2010 年度 火薬学会秋季研究発表会 講演要旨集, 53 ページ, 2010 年 11 月.
- [17] 朝原誠, 坪井伸幸, 林光一, 山田英助: AUSMDV スキームを用いたデトネーションの衝撃波構造に関する 2 次元数値解析, 第 47 回 燃焼シンポジウム 講演論文集, 390 ページ, 2010 年 12 月.
- [18] 福田幹, Edyta Dzieminska, 林光一, 山田英助, 坪井伸幸: 酸素水素混合気を用いた壁面条件がデトネーション遷移過程に与える影響に関する 2 次元数値解析, 第 48 回燃焼シンポジウム, pp.506-507, 2010 年 12 月.
- [19] Edyta Dzieminska: Propagation of the Flame in the Boundary Layer in the porcess of DDT, 第 48 回燃焼シンポジウム講演論文集, 510, 2010 年 12 月.
- [20] Edyta Dzieminska: The Generation of DDT in the Boundary Layer, 衝撃波シンポジウム講演論文集, 385, 2011 年 3 月.

- [21] 上村 悠歩, 山田 貴幸, 坪井 伸幸, 山田 英助, 林 光一: ローテーティングデトネーションエンジンと既存エンジンとの比較, 平成 22 年度宇宙輸送シンポジウム, 2011 年 1 月.
- [22] 松木 亮治, 坪井 和也, 富田 栄二: 平面予混合火炎における固有不安定性の励起に関する直接数値シミュレーション, 日本機械学会中国四国支部第 49 期総会・講演会講演論文集, pp. 393-394, 2011 年 2 月.
- [23] 飯村拓哉, 吹場活佳, 上村卓也: 遷音速域におけるエアデータセンサシステムの計測特性, 平成 22 年度宇宙輸送シンポジウム, STCP-2010-020, 2011 年 3 月.
- [24] 野崎祐介, 仲村英也, 岩崎智宏, 綿野 哲: 分子動力学シミュレーションによるナノ粒子-細胞膜間の相互作用の解析: C_{60} フラーレンとの相互作用, 日本薬学会第 131 年会 要旨集, 29P-0079, 2011 年 3 月.
- [25] 青木 達也, 坪井 伸幸, 林 光一, 山田 英助: エタノールを用いたパルスデトネーションエンジンの数値解析, 平成 22 年度 衝撃波シンポジウム 講演論文集, pp.245-246, 2011 年 3 月.
- [26] 蜷川繁, I/f ゆらぎにもとづく 2 次元 3 状態万能セルオートマトンの探索, 第 73 会情報処理学会全国大会講演論文集 DVD, 2011 年 3 月.
- [27] “3 次元心室モデルによる心臓不整脈のシミュレーション研究について”, 原口亮, 第 25 回生体・生理工学シンポジウム[オーガナイズドセッション: 心臓電気活動の可視化解析および臨床応用], 2010.9.23-25, 岡山 (2010).
- [28] 原口亮, 芦原貴司, 山口豪, 難波経豊, 池田隆徳, 中沢一雄, “心筋線維走向ねじれは心室較差増大による催不整脈性を抑制する: 3 次元心室壁モデルによる理論的研究”, 第 27 回日本心電学会学術集会, 2010.10.8-9, 大分 (2010).
- [29] 鷹野 優, 米揮 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村春木: “補因子 Fe_4S_4 クラスターの酸化還元反応における電子構造の理論的研究” 第 10 回蛋白質科学会(札幌), June 2010.
- [30] 鷹野 優, 中村春木: “ヘムポルフィリン環の違いによるヘムの電子構造への影響”, 分子科学討論会 2010 大阪, 大阪大学豊中キャンパス(豊中), Sep. 2010.
- [31] 鷹野 優, 米津 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村春木: "Electronic Structures of the Novel [4Fe-4S] Cluster in Dark-operative Protoporphyrin Oxidoreductase", 第 48 回日本生物物理学会, 東北大学川内キャンパス(仙台), Sep. 2010.
- [32] 鷹野 優, 米津 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村 春木: “酸化還元反応における光非依存型プロトクロロフィルド還元酵素中の F_4S_4 クラスターの電子構造の理論的研究,” 第 60 回錯体化学討論会, 大阪国際交流センター(大阪), Sep. 2010.
- [33] 鷹野 優, 米揮 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村春木: "光非依存型プロトクロロフィルド還元酵素中の補因子[4Fe-4S] クラスターの酸化還元反応における電子構造の理論的研究,” スーパーコンピュータワークショップ 2011「分子科学プログラムライブラリの充実にむけて」, 分子科学研究所(岡崎), Jan. 2011.
- [34] 鷹野 優, 米津 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村 春木: "光非依存型プロトクロロフィルド還元酵素中における[4Fe-4S] クラスターの電子構造の理論的研究", 第 3 回バイオスーパーコンピューティングシンポジウム, 理化学研究所計算科学研究機構・甲南大学ポートアイランドキャンパス(神戸), Feb. 2011.
- [35] Yu Takano, Yasuteru Shigeta Kenichi Koizumi, Haruki Nakamura : "Electronic structures of the Cu_2S_2 core of the Cu_A site in cytochrome c oxidase", 51th Sanibel Symposium, The King and Prince Golf & Beach Resort, Georgia, Feb., 2011.
- [36] 野澤剛二郎, 田村哲郎, 「MM5 と LES のスケール相似則によるカップリング」, 土木学会第 65 回年次学術講演会概要集.
- [37] 野澤剛二郎, 田村哲郎, 「LES によるスケール相似則を用いた one-way ネスティング」, 第 24 回数值流体力学シンポジウム講演予稿集.
- [38] 富樫 祐一: “混雑環境下での生体分子機械の動作と反応拡散パターン”, 理研シンポジウム「細胞システムの動態と論理 II」, April 2010.
- [39] Yuichi Togashi: “Formation of Reaction-Diffusion Pathways by Molecular Machines in the Crowded Intracellular Environment”, 日本生物物理学会第 48 回年会, 2P302, Sept. 2010.

- [40] 富樫 祐一, 柳田 敏雄, Alexander S. Mikhailov: “生体分子機械の構造変化と非線形性”, 日本機械学会 第 23 回計算力学講演会(CMD2010), No. 269, Sept. 2010.
- [41] Yuichi Togashi: “Abstract and Coarse-Grained Modeling toward Understanding of the Biomolecular Machinery in the Crowded Intracellular Environment”, RIKEN Quantitative Biology Center (Tentative) Kick-off meeting, Poster 10, Oct. 2010.
- [42] 富樫 祐一: “混雑した細胞内環境における分子機械システム～反応拡散と力学的相互作用が交錯する系のモデリング”, 定量生物学の会 第3回年会, Poster 9, Nov. 2010.
- [43] T. Johzaki, H. Nagatomo, A. Sunahara, H.-B. Cai, S. Ohira, H. Sakagami, K. Mima, Y. Nakao, H. Nakamura, S. Fujioka, H. Shiraga, H. Azechi: "Scaling of Core Heating Performance for FIREX-I", 37th EPS Conference on Plasma Physics, Dublin, アイルランド, Jun.2010.
- [44] H. Nagatomo, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima: "Three-dimensional Core Plasma Dynamics in Cone-guided Implosion for Fast Ignition", 52nd Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Hyatt Regency Chicago, Chicago, IL, USA, Nov.2010.
- [45] T. Sano: "Laser-shock compression of liquid hydrogen and interior structure of gas giant planets", Joint Seminar, Department of Earth Sciences & Department of Physics, University of Hong Kong, Nov.2010.
- [46] T. Johzaki, A. Sunahara, H. Nagatomo, K. Mima, S. Fujioka, H. Shiraga, H. Azechi and FIREX project: "Advanced Concept of High-Energy Coupling Cone for FIREX-I", 11th International Workshop on Fast Ignition of Fusion Targets, Angelicum, Pontificia Università San Tommaso d'Aquino, Largo Angelicum 1, Roma, Italy, Oct.2010.
- [47] T. Johzaki, H. Nagatomo, A. Sunahara, H.-B. Cai, H. Sakagami, Y. Nakao, K. Mima, H. Nakamura, S. Fujioka, H. Shiraga, H. Azechi, and FIREX project group: "Core Heating Scaling for Fast Ignition Experiment FIREX-I", 23rd IAEA Fusion Energy Conference, Daejon, Korea Rep. of, Oct.2010.
- [48] T. Johzaki, H. Nagatomo, A. Sunahara, H.-B. Cai, H. Sakagami, Y. Nakao, K. Mima, H. Nakamura, S. Fujioka, H. Shiraga, H. Azechi, and FIREX project group: "Fast electron guiding by extended double cone", 日米高速点火 WS2010, 和歌山, Oct. 2010.
- [49] T. Johzaki, H. Nagatomo, A. Sunahara, H.-B. Cai, H. Sakagami, K. Mima, H. Shiraga, H. Azechi, and FIREX project group: "Simulation Study of Pre-Plasma Effects on Core Heating in FIREX-I", 52nd Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Hyatt Regency Chicago, Chicago, IL, USA, Nov.2010.
- [50] T. Johzaki: "Fokker-Planck simulations for relativistic fast electron in dense matters", 2nd UK - Japan Winter School in High Energy Density Science, エディンバラ・スコットランド, Jan.2011.
- [51] T. Sano: "Cryogenic hydrogen EOS measurements", 3rd Japan-France Workshop and School on High Density, Les Houches, France, Jan.2011.
- [52] 佐藤義永, 永岡龍一, 撫佐昭裕, 江川隆輔, 滝沢寛之, 岡部公起, 小林広明: “ルーフラインモデルに基づくベクトルプロセッサ向けプログラム最適化戦略”, 2011 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2011), pp. 140-147, つくば, January 18-19, 2011.
- [53] 佐藤義永, 撫佐昭裕, 江川隆輔, 滝沢寛之, 岡部公起, 小林広明: “次世代ベクトルプロセッサ向けプログラム最適化戦略”, 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2010, 神戸, January 17, 2011.
- [54] 田中 敏嗣, 辻 拓也, 小方 康弘, 武藤 真一: “粒子層平坦化操作の DEM 解析と実験による検証”, 第 59 回理論応用力学講演会論文集, pp.315-316, May 2010.
- [55] 上田 修也, 田中 敏嗣, 川口 寿裕, 辻 拓也: “石炭ガス化炉内流動の DEM-CFD カップリングシミュレーション”, 2010 年度粉体工学会春期研究発表会論文集, pp.11-12, May 2010.
- [56] 辻 拓也, 矢田 大貴, 田中 敏嗣: “IB-DEM 法による固気流動層内流れの直接数値計算”, 日本混相流学会年会講演会論文集, pp.14-15, July 2010.

- [57] 田中 敏嗣, 辻 拓也, 小方 康弘, 武藤 真一, 川口 寿裕: "粒子層平坦化操作の DEM 解析と作用力のモデル化", 粉体工学会 2010 年度秋期研究発表会論文集, S1-5, Dec. 2010.
- [58] Tomoya Wakamatsu, Hirotaka Yada, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka: "Direct numerical simulation of flow including dense solid particles having microscopic arrangements", Bulletin of 64th Annual meeting of the Division of Fluid Dynamics, the American Physics Society, Vol.55, No.16, EV6, Nov. 2010.
- [59] 若松 知哉, 辻 拓也, 矢田大貴, 田中 敏嗣: "高濃度固体粒子群と流体間相互作用の直接数値計算", 第 24 回数值流体力学シンポジウム講演論文集, CD-ROM B9-5, Dec. 2010.
- [60] 成田 栄二, 辻 拓也, 田中 敏嗣: "高濃度粒子が存在する流れ場に壁面が及ぼす影響の検討とそのモデル化", 日本機械学会関西支部講演会論文集, No.5-22, Mar. 2011.
- [61] 福山 智之, 辻 拓也, 田中 敏嗣: "DIM-IBM カップリング法による液滴内固体粒子挙動の解析", 日本機械学会関西支部講演会論文集, No.5-24, Mar. 2011.
- [62] 萩原 健一郎, 川口 寿裕, 辻 拓也, 田中 敏嗣: "自由界面を伴う固液二相流解析に向けた DEM -MPS カップリングモデルの構築", 日本機械学会関西支部講演会論文集, No.5-23, Mar. 2011.
- [63] 岸浩史, Allan Abraham B. Padama, 笠井秀明, "触媒表面における NO 分子還元特性に関する理論的解析", 2010 年秋季第 71 回応用物理学会学術講演会, 長崎大学, 2010 年 9 月.
- [64] 小島一希, 南谷英美, 笠井秀明, "金属表面の磁性原子吸着系における一粒子励起スペクトルに対する磁気異方性の影響", 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [65] 谷正則, 坂上護, 中西寛, 笠井秀明, 上谷昌稔, 岡昭範, "グラフェン表面上の $C_7H_{12}ON^+$ カチオン分子吸着に関する理論的研究", 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [66] 三輪邦之, 松中大介, 笠井秀明, "非磁性金属表面上の磁性原子格子系における電子相関効果", 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [67] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, 福谷克之, "銀表面における水素分子のオルソ・パラ転換における共吸着酸素分子の影響の理論的研究", 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [68] 南谷英美, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明, "金属表面上磁性原子対における近藤温度", 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [69] 岸浩史, Allan Abraham B. Padama, 中西寛, 笠井秀明, "第一原理計算による貴金属表面上の NO 分子の吸着構造に関する解析", 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [70] 坂上護, 上羽弘, 宗像利明, 笠井秀明, "固体表面からの二光子光電子放出における正孔散乱とフano干渉の効果", 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [71] 中西寛, 笠井秀明, "Fe ポルフィリン分子と金属電極表面との接合界面構造", 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [72] Saputro Adhitya Gandaryus, Dipojono Hermawan Kresno, Aspera Susan Menez, 笠井秀明, "DFT Study on the Interaction of O_2 Molecule with Co-(6)Ppy Clusters", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [73] Allan Abraham Padama, Melanie Yadao David, 笠井秀明, Kawai Hiroyuki, "Density functional theory investigation on H_2 dissociative adsorption on Ni(111) and Cr-decorated Ni(111) surfaces", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [74] 小島一希, Wilson Agerico Diño, 南谷英美, 笠井秀明, "絶縁層が被覆された金属表面上に吸着した磁性原子における一粒子励起スペクトルに対する磁気異方性の影響", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [75] 谷正則, 坂上護, 中西寛, 笠井秀明, "グラフェン表面におけるイオン液体カチオン分子吸着に関する理論的研究", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [76] 三輪邦之, 松中大介, 笠井秀明, "固体表面上の磁性原子格子系に対する STM 像の解析", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年

- 11月.
- [77] Aspera Susan Menez, Melanie Yadao David, 笠井秀明, "H₂O Molecular Adsorption on the Tri-s-triazine-based graphitic Carbon Nitride (g-C₃N₄): A DFT-based study", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [78] Ferensa Oemry, 中西寛, 笠井秀明, "担体効果の影響を受けたPt原子およびPt₄クラスタ上におけるO₂解離吸着特性", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [79] Wungu Triati Dewi Kencana, Dipojono Hermawan Kresno, 中西寛, 笠井秀明, "FIRST PRINCIPLES CALCULATION STUDY ON THE LITHIUM MONTMORILLONITE: EFFECT OF ISOMORPHIC SUBSTITUTION", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [80] Abdulla Sarhan, 中西寛, 笠井秀明, "銅表面上に吸着されたメラミン分子の電子輸送", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [81] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, "酸素共吸着銀表面における水素分子のオルソ・パラ転換機構", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [82] Mary Clare Sison Escaño, 中西寛, 笠井秀明, "Enhancing Gas-Bimetallic Surface Reaction via Spin Manipulation", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [83] Wahyu Tri Cahyanto, Do Son Ngoc, Elod Gyenge, 笠井秀明, "Methanol Electro-oxidation Mechanism on Rare Metal Surfaces: A DFT Study", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [84] 岸浩史, 国方伸一, 中西寛, 笠井秀明, 玉井幸夫, 大西茂夫, 粟屋信義, "密度汎関数理論に基づくRRAMの伝導性変化に関する解析", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [85] 南谷英美, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明, "表面における2不純物近藤効果の磁場および温度依存性", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [86] 坂上護, 上羽弘, 宗像利明, 笠井秀明, "固体表面のファノ共鳴を介した二光子光電子放出の理論", 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010年11月.
 - [87] 谷正則, 国方伸一, 中西寛, 笠井秀明, "グラフェン表面近傍におけるキャパシタ用電解質の挙動解析", 2011年春季 第58回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 2011年3月.
 - [88] 岸浩史, Allan Abraham Padama, 笠井秀明, "触媒表面におけるNO分子の吸着プロセスに関する理論的解析", 2011年春季 第58回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 2011年3月.
 - [89] Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, "人工光合成デバイスのシミュレーション", 2011年春季 第58回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 2011年3月.
 - [90] 笠井秀明, Wilson Agerico Diño, "燃料電池の課題と展望", 2011年春季 第58回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 2011年3月.
 - [91] Allan Abraham B. Padama, Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyuki Kawai, Shigeaki Murata, "The influence of Mn on the adsorption of H₂ and O on Ni(111) surface", 日本物理学会第66回年次大会, 新潟大学, 2011年3月.
 - [92] 小島一希, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, "絶縁層被覆された金属表面上の磁性原子吸着系におけるスペクトル関数に対する磁気異方性の影響", 日本物理学会第66回年次大会, 新潟大学, 2011年3月.
 - [93] 三輪邦之, 松中大介, 笠井秀明, "金属表面上の磁性原子超格子における電子状態の格子定数依存性", 日本物理学会第66回年次大会, 新潟大学, 2011年3月.
 - [94] Triati Dewi Kencana Wungu, Hermawan Kresno Dipojono, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, "The Effect of Isomorphic Substitution in Montmorillonite: First Principles Calculation Study", 日本物理学会第66回年次大会, 新潟大学, 2011年3月.
 - [95] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, "銀表面上のステップ構造近傍での水素分子の吸着状態", 日本物理学会第66回年次大会, 新潟大学, 2011年3月.

- [96] 南谷英美, Abdulla Ali Abdulla Sarhan, 松中大介, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明, 高木紀明, "Au(111)表面上の鉄フタロシアニン分子に対する第一原理電子状態計算", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [97] 中西寛, 笠井秀明, "水素・ミューオンの固体表面近傍での量子ダイナミクスと電子状態", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [98] 笠井秀明, "表面・界面・固体中のプロトン伝導とその量子ダイナミクス計算", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [99] 坪井伸幸, 森井雄飛, 越光男, 林光一, 爆轟限界における粘性の影響, 第 42 回流体力学講演会/航空宇宙シミュレーション技術シンポジウム 2010, pp. 10, JSASS-2010-2023, 米子, 2010.6.
- [100] 坪井伸幸, 香川岳寛, 吹場活佳, 嶋田徹, ハイブリッドロケット内部流れの解析に向けた前処理型非定常圧縮性低速流れ: 前処理型流束計算法の影響について, 第 54 回宇宙科学技術連合講演会プログラム, 3B03, 2010.11.
- [101] 中山 和俊, 森井 雄飛, 坪井 伸幸, 細田 英明, 林 光一, 内田 正宏, 藤森 俊郎, ダブルエルボ内を伝播する H_2/O_2 デトネーションの数値解析, 第 48 回燃焼シンポジウム, C323, 2010.12.
- [102] 坪井伸幸, 吹場活佳, 嶋田徹, ハイブリッドロケット内部流れの解析に向けた前処理型非定常圧縮性低速流れ, 3次元流れの影響, 平成22年度宇宙航行の力学シンポジウム, 2010.12.(印刷中)
- [103] 武藤大貴, 坪井伸幸, 永井大樹, 浅井圭介, 極超音速流流れにおける30°ランプ周りの衝撃波/境界層干渉に関する3次元数値解析, 平成22年度宇宙航行の力学シンポジウム, 2010.12.(印刷中)
- [104] 香川岳寛, 坪井伸幸, 吹場活佳, 嶋田徹, 前処理型非定常圧縮性流れ場解析による低 Re 数の 3 次元翼の空力特性評価, 日本機械学会九州学生会第 42 会卒業研究発表講演会(No.118-2), pp.109-110, 2011.3.
- [105] P. R Varadwaj, R. Fujimori, K. Kawaguchi; "Fourier Transform Infrared Spectrum of $c\text{-}C_3H_2$ and related ab initio calculations", 第 4 回分子科学討論会, 2A22, 2010 年, 9 月 15 日.
- [106] 比江島 俊彦: "高マッハ数における縦渦の線形不安定性と非線形発達", 日本流体力学会年会 2010 講演論文集, 67, CD-ROM, pp.1-8 Sep. 2010.
- [107] 比江島 俊彦: "超音速縦渦と斜め衝撃波の干涉による渦崩壊について", 第 24 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, B12-2, CD-ROM, pp.1-6 Dec. 2010.
- [108] 白川真澄, 中山浩太郎, 荒牧英治, 原隆浩, 西尾章治郎: 格フレームを考慮した Web 検索スニペット解析による動作関係抽出, 情報処理学会研究報告 DBS 研究会, Vol. 2010-DBS-151, No. 38, Nov. 2010.
- [109] Michio Ishikawa, Makoto Katsura, Satoru Nakashima, Kento Aizawa, Tsutomu Inoue, Yuka Ikemoto, Hidekazu Okamura: "Application of Modulating Technique to Detect Near-Field Signals for Conventional IR Spectrometer with a Ceramic Light Source.", 6th International Workshop on Nano-Scale Spectroscopy and Nanotechnology (NSS6), P34, Kobe, Oct. 2010.
- [110] 石川迪雄, 桂誠, 中嶋悟, 会沢見斗, 井上勉, 池本夕佳, 岡村英一: "セラミック光源を用いた近接場赤外光の変調検出", 日本物理学会, 23aRE-2, 大阪, 2010 年 9 月.
- [111] 石川迪雄, 桂誠, 中嶋悟, 会沢見斗, 井上勉, 岡村英一, 池本夕佳: "セラミック光源を用いた近接場赤外光スペクトルの変調検出", 日本物理学会, 25aHA-1, 新潟, 2011 年 3 月.
- [112] 田村哲郎、岸田岳士、奥田泰雄: "高層建物に作用する風力の変動特性に関する LES", 第24回数値流体力学シンポジウム, D5-1, 2010.
- [113] 道岡武信、佐藤歩: "2次元キャニオン内からのガス放出に関する LES", 第24回数値流体力学シンポジウム, D4-1, 2010.
- [114] 高橋 俊, 新井 紀夫: "マルチレベル格子による流体計算のための基礎研究", 日本計算工学会第 15 回計算工学講演会, May. 2010.
- [115] 山崎 由夢, 高橋 俊, 新井 紀夫: "等間隔直交格子を用いた T 字分岐管内三次元流の解析", 第 42 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2010, Jun. 2010.

- [116] 高橋 俊, 新井 紀夫, 佐々木 大輔, 中橋 和博: “直交格子積み上げ法を用いた非圧縮流れの大規模数値解析”, 第 24 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2010.
- [117] 山崎 由夢, 新井 紀夫, 高橋 俊: “直交格子法による柔軟壁を有する分岐管流れのシミュレーション”, 第 24 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2010.
- [118] Shinagawa, H., H. Jin, Y. Miyoshi, H. Fujiwara, S. Fujita, T. Tanaka, N. Terada, and K. Terada, Development of an ionosphere-atmosphere coupled model for space weather forecast, 38th COSPAR Scientific Assembly, Bremen, Germany, July 18-25, 2010.
- [119] Shinagawa, H., H. Jin, Y. Miyoshi, H. Fujiwara, K. Terada and N. Terada, Ionosphere-Atmosphere Coupled Model for Ionosphere Weather Forecast, 2010 Asia-Pacific Radio Science Conference (AP-RASC'10) Toyama International Conference Center, Toyama, Japan September 22-26, 2010.
- [120] Y. Morikawa, “First-principles theoretical study of benzene/metal and pentacene/metal interfaces”, The 5th edition of the international workshop on “Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI-V)”, Chiba University (Chiba, Japan), Jan. 25-28 2010.
- [121] 森川良忠, 「量子シミュレーションの今後の展望」, 第46回応用物理学会スクール(2010 年春季), 「コンピューターショナル・マテリアルズ・デザイン(CMD)入門」, 東海大学(平塚市), Mar. 17 2010.
- [122] 森川良忠, 「界面におけるナノスケールプロセスの第一原理シミュレーション」, 第57回応用物理学関係連合講演会, シンポジウム「X 線による埋もれた固液界面の精密科学の可能性」, 東海大学湘南キャンパス(平塚市), Mar. 17-20, 2010.
- [123] Y. Morikawa, “Theoretical Study of Dipole Layer Formation at Metal-Organic Interfaces”, The WPI Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR) Annual Workshop, Sendai Excel Hotel Tokyo (Sendai, Japan), Mar. 25-27 2010.
- [124] Y. Morikawa, “First-principles Simulations of Nano-scale Processes at Surfaces and Interfaces”(Tutorial), International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka University Convention Center (Suita, Japan), May 30-June 4, 2010.
- [125] Y. Morikawa, “Theoretical Study of Dipole Layer Formation at Metal-Organic Interfaces”(O-FrI-4), International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka University Convention Center (Suita, Japan), May 30-June 4, 2010.
- [126] Y. Morikawa, “Density functional simulations of hydrogen evolution reaction at the metal/water interface”, CECAM Workshop on Ab initio Electrochemistry, CECAM-HQ-EPFL (Lausanne, Switzerland), July 12-14, 2010.
- [127] 森川良忠, 「有機半導体界面の電子状態: 計算科学で分かること」, 平成22年度飯綱・サイエンスサマー道場「有機半導体の科学」, 飯綱高原ホテルアルカディア(長野市), Aug. 16-18, 2010.
- [128] 森川良忠, 「第一原理シミュレーションによる有機/金属界面の界面電気二重層の解明と制御」, 2010 年電気化学秋季大会, 神奈川工科大学(厚木市), Sep. 2-3, 2010.
- [129] 森川良忠, 「第一原理シミュレーションによるインテリジェント触媒の自己再生機構の解明」, グリーンイノベーションのための表面・界面化学, 分子科学研究所(岡崎市), Oct. 5-6, 2010.
- [130] 森川良忠, 「界面における化学反応過程の第一原理シミュレーション」, 真空・表面科学合同講演会, 第30回表面科学学術講演会, 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学(吹田市), Nov. 4-6, 2010.
- [131] Y. Morikawa, K. Toyoda, I. Hamada, and S. Yanagisawa, “Theoretical Study of Dipole Layer Formation at Metal-Organic Interfaces”, 38th Conference on the Physics and Chemistry of Surfaces and Interfaces (PCSI-38), San Diego, California, USA, Jan. 16-20, 2011.
- [132] 河村 保彦, 武田 光市, 西内 優騎: “[60]フーレン存在下の求核性カルベンの二量化”, 第 34 回有機電子移動化学討論会講演要旨集, pp.38-39, Jun. 2010.
- [133] 肥田 和男, 青野 裕樹, 倉科 昌, 藤永 悅子, 上田 昭子, 西内 優騎, 河村 保彦: “クムレンの付加環化を基軸とした特異な化合物の生成”, 第 21 回基礎有機化学討論会講演要旨集,

pp.116-117, Sept. 2010.

[134] 渡邊 慧, 竹内 翔太, 堀 彰良, 水沢 厚志, 西内 優騎, 河村 保彦: “ミュンヒノン(1,3-オキサゾリウム-5-オレート)と[60]フラーレンとの付加環化反応”, 第 21 回基礎有機化学討論会講演要旨集, p.310, Sept. 2010.

[135] 河村 保彦, 川崎 昂, 西内 優騎: “光照射が誘起する 3-(アロイルメチル)ヘキサ-1,5-ジインの正宗-バーグマン環化”, 2010 年日本化学会西日本大会講演要集, p.125, Nov. 2010.

[136] 河村 保彦, 別宮慎二郎, 西内 優騎: “光バーグマン環化に及ぼすジイン両末端の水素結合の効果”, 2010 年日本化学会西日本大会講演要集, p.125, Nov. 2010.

[137] S. Saita, A. Kadokura , N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, S. Ohtani, G. Ueno, K. Murata, D. Matsuoka, A. Kitamoto, T. Higuchi: "Relative displacement of conjugate point during a course of substorm in a global MHD simulation", The 34th Symposium on Space and Upper Atmospheric Sciences in the Polar Regions(日本東京立川市国立極地研究所), 2010 年 12 月 3 日。

[138] S. Saita, A. Kadokura, N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, K. Murata, D. Matsuoka, G. Ueno, A. Kitamoto, T. Higuchi: "Reconfiguration of the magnetosphere for southward IMF in a global MHD simulation, Workshop on dynamic modeling in geomagnetism", Workshop on dynamic modeling in geomagnetism (日本東京立川市統計数理研究所), 2010 年 7 月 1 日.

[139] S. Saita, A. Kadokura, N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, K. Murata, D. Matsuoka, G. Ueno, A. Kitamoto: "Reconfiguration of the magnetosphere for southward IMF and displacement of conjugate points in a MHD simulation", International Polar Year - Oslo Science Conference (ノルウェー オスロ), 2010 年 6 月 9 日.

[140] Ebihara, Y., T. Kikuchi, N. Nishitani, T. Hori, F. J. Rich, M. -C. Fok, and M. F. Thomsen, Cross-region coupling during the 14-15 December 2006 storm, Western Pacific Geophysics Meeting, Taipei, Taiwan, June 2010.

[141] Ebihara, Y., M. -C. Fok, N. Nishitani, and T. Kikuchi, Consequence of high pressure torus surrounding the Earth, International Space Plasma

Symposium, Tainan, Taiwan, June 2010.

[142] 海老原 祐輔: 磁気嵐におけるリングカレントの減衰過程, 日本地球惑星科学連合大会, 千葉県, 2010.(招待講演)

[143] 海老原 祐輔, 菊池 崇, 家田 章正, 新堀 淳樹, 平木 康隆, 堀 智昭, 西谷 望, 橋口 知之, 上野 玄太, Ohtani Shinichi: GEMSIS-電離圏:擾乱時のグローバルな電離圏電場ポテンシャル分布の導出へ向けて, 日本地球惑星科学連合大会, 千葉県, 2010.

[144] 海老原 祐輔, フォック メイチン, Immel Thomas, Brandt Pontus, リングカレントの早い消失過程: シミュレーションと IMAGE 衛星観測, 地球電磁気・地球惑星圏学会 第 128 回総会及び講演会, 金沢, 2010 年 10-11 月.

[145] 土居立典, 田中宏明, 島田尚一, 橋口誠宏, 古城直道, 山口智実: "Ni の加工におけるダイヤモンド工具の損耗機構", 2010 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, pp.114-115, Sep. 2010.

[146] 土居立典, 田中宏明, 島田尚一, 橋口誠宏, 古城直道, 山口智実: "鉄系金属の超精密切削加工における工具損耗の抑制", 2011 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp.53-54, Mar. 2011.

[147] 田中宏明, 島田尚一: "分子動力学法によるシリコン・カーバイドの延性モード加工への指針", 2011 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp.55-56, Mar. 2011.

[148] Y. Fujimoto and A. Oshiyama: "Formations and stability of 90 degree dislocation cores in Ge films on Si(001)", 30th International Conference on the Physics of Semiconductors, Seoul, Korea, July 2010.

[149] 堀内潔, 多重モード Spiral vortex と非平衡エネルギー・スペクトルの抽出, 共同利用研究集会「乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性」, 九州大学応用力学研究所共同利用研究集会「乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性」講演要旨集, 九州大学応用力学研究所, p. 2, Nov. 2010.

[150] 松本一真, 堀内潔, 粘弹性法線応力差による乱流抵抗低減機構の解明, 日本流体力学会年会 2010, 日本流体力学会誌「ながれ」別冊, 日本流体力学会, Vol. 229, pp. 278, Sep. 2010.

4 その他

- [1] TOYOSHIMA, Masayuki: Base-de-datos de dicionarios portugueses para el estudio de la historiografía de la lengua japonesa de mil quinientos, *Ideias Linguísticas na Península Ibérica (séc. XIV a séc. XIX)*, 865-875, 2010 年 11 月.
- [2] 尾崎典雅、佐野孝好、真下茂、佐野智一、兒玉了祐: "パワーレーザーで拓く超高压と物質の世界", プラズマ・核融合学会誌, vol. 86, pp. 604-610, Oct.2010.
- [3] Yoshiei Sato, Ryuichi Nagaoka, Akihiro Musa, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa, Koki Okabe, and Hiroaki Kobayashi: "A Performance Tuning Strategy under Combining Loop Transformations for a Vector Processor with an On-Chip Cache", International Conference for High Performance Computing, Network, Storage and Analysis (SC10), pp. 135-136, New Orleans, Louisiana, November 13-19, 2010.
- [4] 萩田克美: "粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の計算機科学的高度化検討", 学際大規模情報基共同利用・共同研究拠点第2回シンポジウム(神戸), 2011年1月.
- [5] 萩田克美: "フィラー充填高分子の延伸破壊の大規模MDシミュレーション", 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム(神戸), 2011年1月.
- [6] 幸谷有子、黒木勇、萩田克美: "高分子系粗視化MDの大規模・高品質可視化手法の検討", 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム(神戸), 2011年1月.
- [7] 萩田克美: "高分子材料の粗視化MDシミュレーションの探索的可視化", 第46回CAVE研究会(中央大学, 東京), 2011年3月.
- [8] Katsumi Hagita: "Deformation and fracture of coarse-grained model of filled rubber composites", American Physical Society March Meeting 2011, (Dallas, USA), 2011年3月.
- [9] Katsumi Hagita: "Immersive visualization of coarse-grained molecular dynamics simulation of polymer nano-composite", WWCEKD 2011: The First International Workshop on World Wide Computing Environments for Knowledge Discovery, (大阪), 2011年3月. <大震災のため、会議中止>
- [10] 市川 雄一: "WGM 共振を利用した真球度測定のための光ファイバと球の光結合に関する研究", Osaka University, February 2011.
- [11] S. Yanagisawa, T. Saigo, K. Toyoda, I. Hamada, K. Lee and Y. Morikawa, "Theoretical Study of Electronic Properties at Organic/Metal Interfaces: Interface Dipole and Nature of Organic-Metal Interaction", Third International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, Osaka Univ. Nakanoshima Center, Osaka, JAPAN , November 24-26, 2010.
- [12] S. Yanagisawa, I. Hamada, K. Lee and Y. Morikawa, "'Chemisorption' of Alq3 on metal surfaces: roles of the van der Waals interaction and distortion of adsorbed fragments", International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials (Global COE Program) & Third International Conference on Nanospintrronics Design and Realization (3rd-ICNDR), Osaka, JAPAN, May 30-June 4 2010.

第17回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2011)

時田 恵一郎
大阪大学 サイバーメディアセンター

1 「電腦甲子園」

2011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 (SuperCon2011)」が開催されました。本来は東京工業大学学術国際情報センター (GSIC) 及び大阪大学サイバーメディアセンター (CMC) の両会場を使っての開催ですが、東日本大震災の影響により電力供給が厳しいこともあります。今年は大阪大学会場のみで行われました。

このコンテストは、2名又は3名を1チームとする高校生・高専生の参加者たちが、与えられた課題を解くプログラムを3日間に渡って作成し、最終日にスーパーコンピュータで実行して、解答の正確さや計算の速さを競うもので、そのレベルの高さから、別名「電腦甲子園」とも呼ばれています。

1995年の第1回から2005年の第11回までは東工大 GSIC の単独主催でしたが、2006年の第12回からは阪大 CMC も共同主催しています。富士川以東 50Hz 地域からの 10 チームは東工大で、60Hz 地域からの 10 チームは阪大でプログラミングを行いますが、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た二元中継で行ってきました。

4 日間にも渡る長丁場で、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コンテストです。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年は阪大 CMC の SX-8R, 2009年は SX-9 が使われました。今年は阪大 CMC の SX-8R が使われました。

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。

2 予選

今年の予選課題は、道路網における二地点間の最短経路となる経路の総数を求める問題が出題されま

した。課題は6月1日にウェブに公開され、6月22日正午までに課題を解くプログラムを添えてメールで申し込みます。参加者が2名以上集まらないために、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。

今年の予選には、全国から27校31チームが参加し、例年以上の激戦を勝ち抜いた上位11校11チームが本選出場を果たしました。

3 本選

本選課題は予選課題と変わって、コンテスト用に独自に考案されたゲームを解いて高得点を得るというものです。このゲームは、2次元の盤面に配置された4色のボールを、周囲にある同色の穴から落とすというもので、「なくろん」と名付けられました。以下の参考の URL で実際に「なくろん」で遊べるようになっているので、是非試してみてください。本戦では 250x250 という「巨大なくろん」が出題されました。

熱戦の結果、開成高等学校（東京都）のチーム PANAI（村井翔悟君、秀 郁未君、笠浦一海君）が優勝を果たしました。2位は甲陽学院高等学校（兵庫県）のチーム YAMERO、3位は早稲田高等学校（東京都）のチーム H1ToHAとなりました。また、審査の結果、アルゴリズムを工夫して優れたプログラムを作成したチームに、電子情報学会と情報処理学会から贈られる学会奨励賞は、開成高等学校（東京都）のチーム PANAI に授与されました。

最終日の成果発表会、表彰式の後には懇親会も行われ、高校生・高専生の参加者たちは、両大学の教授、大学院生チューターらとプログラミングや大学生活などについて語り合いました。

参考

SuperCon2011 ホームページ : <http://j.mp/rv2ZDJ>
「なくろん」のページ : <http://j.mp/nYkdH7>

2011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
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化並列化の基礎からチューニングまで)	7月8日	東田助教、レーザー研技術専門職員、情報基盤課職員、NEC	レーザーエネルギー学研究センター 研究棟4階大ホール
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化並列化の基礎からチューニングまで)	9月13日	東田助教、レーザー研技術専門職員、情報基盤課職員、NEC	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
IDL利用入門	9月14日	アイティーティー・ヴィ アイエス、情報基盤課職員	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	9月15日	サイバネットシステム、 情報基盤課職員	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	9月16日	サイバネットシステム	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
MSC Nastran基礎トレーニング	9月13日 ～14日	エムエスシーソフトウェア	エムエスシーソフトウェア 大阪営業所
Marc入門トレーニング	10月13日 ～14日	エムエスシーソフトウェア	エムエスシーソフトウェア 大阪営業所
Patran基礎トレーニング	11月8日 ～9日	エムエスシーソフトウェア	エムエスシーソフトウェア 大阪営業所

テレビ会議システムによる講習会

講習会名	開催日時	開催機関	受講場所
Gaussian 入門	8月9日	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 3階大会議室
スーパーコンピュータの高速化技法	9月1日	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
MPIプログラミング入門	9月2日	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室

「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、北海道大学情報基盤センター、東北大
学サイバーサイエンスセンター、東京大学情報基盤センター、東京工業大学学術国際情報セン
ター、名古屋大学情報基盤センター、京都大学学術情報メディアセンター、大阪大学サイバー
メディアセンター及び九州大学情報基盤研究開発センターの 8 つの共同利用施設を構成拠点と
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及びネットワークな
どの情報基盤を用いて、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきた問題に対して学際的
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各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。

2011 年度の課題募集には合計 41 件の応募があり、2011 年 3 月 7 日に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、39 件が採択されました。この
内、大阪大学では 2010 年度と同じ 6 機関が利用しています。

2011 年度の大阪大学利用課題

受付番号	研究課題名	応募機関	利用大学
JHPCN11-0022	粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の計算機科学的高度化検討	防衛大学校	北大、東大、名大、阪大
JHPCN11-0024	次世代ペタスケール CFD のアルゴリズム研究	東北大学	東北大、名大、阪大
JHPCN11-0027	マルチパラメータサーベイ型シミュレーションを支 えるシステム化技術に関する研究	東京大学	北大、東北大、東大、東工大、名大、京大、阪大、九大
JHPCN11-0029	計測融合オペレーション実現のための大規模計算機 空気冷却風速場の実時間解析	独立行政法人 理化学研究所	東北大、阪大、九大
JHPCN11-0032	学術グリッド基盤の構築・運用技術に関する研究	国立情報学研究所	北大、東北大、東大、東工大、名大、京大、阪大、九大
JHPCN11-0038	グリッドデータファームによる大規模分散ストレー ジの構築とサイエンスクラウド技術の研究	独立行政法人 情報通信研究機構	東北大、名大、阪大、九大

「大規模計算機システムにおける企業利用」の活動状況

全国共同利用施設であるスーパーコンピュータを有する7大学は、2007年7月より2009年3月まで、東京大学を窓口として文部科学省の「先端研究施設共用イノベーション創出事業」に参加し、社会貢献の一環として大学で開発された応用ソフトウェアとスーパーコンピュータの利用を民間企業に提供してきました。また、2009年4月から2011年3月までは、「研究開発施設共用等促進費補助金（先端研究施設共用促進事業）」に移行し、引き続きスーパーコンピュータの利用を民間企業に提供してきました。

2011年度から、7大学それぞれが自主事業に移行し、サイバーメディアセンターも有償でスーパーコンピュータの利用を民間企業に提供しています。

2011年度第1期の募集には2企業の応募があり、この内、1企業を採択しました。

■2011年度 募集日程

- ・2月 2011年度第1期 募集（終了）
- ・5月 2011年度第2期 募集（終了）
- ・8月1日(月) 2011年度第3期 募集 受付開始
- ・8月31日(水) 2011年度第3期 募集 受付締切
- ・9月上旬 ヒアリング実施
- ・9月中旬 審査結果通知
- ・10月 利用開始
- ・11月 2011年度第4期 募集

2011年度第1期企業利用一覧

企業名	申請課題名	利用コース（申請額）	利用期間（計画）
NPO法人バイオグリッドセンター関西	創薬分野におけるHPCの利用促進及び普及・啓蒙	10万円	2011年4月～2012年3月

(企業利用の案内)

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

2011年度大規模計算機システム利用相談員・指導員

【利用相談員】 委嘱期間：2011年4月1日～2012年3月31日

氏 名	所 属	職 名
高木 達也	大阪大学大学院薬学研究科	教 授
武知 英夫	阿南工業高等専門学校 機械工学科	准教授
山井 成良	岡山大学情報統括センター	教 授

【利用指導員】 委嘱期間：2011年4月1日～2012年3月31日

氏 名	所 属	職 名
板野 智昭	関西大学システム理工学部	准教授
武知 英夫	阿南工業高等専門学校 機械工学科	准教授
藤 堅正	近畿大学理工学部	講 師

2011年度大規模計算機利用システム相談員　自己紹介

高木 達也 (たかぎ たつや)

(大阪大学大学院薬学研究科 生命情報環境科学専攻 教授)

大阪大学大学院薬学研究科の高木達也と申します。よろしくお願ひ申し上げます。

数えてみれば、1983年からだと思いますので、大型計算機センター時代からもう28年も、相談員をさせて頂いております。この間、相談内容も大きな変化がありました。当初は、皆さんプログラムを自ら組まれる方ばかりでしたので、Fortran（当時はFORTRAN77）のプログラミング方法が主たる問い合わせでしたが、現在は、アプリケーションの使い方や、基本的な実行時エラーが、主たる質問内容になっています。今後、種々の分野のデータベースや周辺技術の進歩により、更に変化するものと考えております。

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

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

などは、宝の山かも知れません。そのような場合には、どうか一度ご相談下さい。例えば、テキストマイニングやアンケート結果の共分散構造分析、ベイジアンネットワーク法による解析、疫学データの一般化ノンパラメトリック回帰など、適切なデータ解析方法をご提示できるかも知れません。これからは、大量の網羅的実験データを、数理的に解析することにより、情報を得る時代になってきました。これまでよりもっと、実験研究者とデータ解析研究者の密な語り合いが必要だと、私は考えています。

武知 英夫 (たけち ひでお)

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

最近ユーザーになられた学生諸君や近年に質問が寄せられるようになった企業に籍をおく共同研究者の皆さんに、我々(たった三人しかいませんが)のプログラム指導員制度について改めて紹介をさせて頂きたいと思います。プログラム指導員と聞けば専従職員のようですが、我々は質問メールを投稿される方と同じく課金を支払って計算機を使用している現役ユーザーばかりです。Linux 汎用機や SX から得られた情報を相互利益のために共有しようという目的で参画するボランティアグループと思って頂ければと思います。質問を投稿されるユーザーは、システムのエラー情報を我々のグループと一緒に共有するという決意を固めてから送信をお願いします。複数のメンバーから回答メールが届くと、個人情報が不正に転送されたと思い以降の質問メールを急に停止されるユーザーもおられます。幸いなことに我々のグループには頼りになるサイバーメディアセンターの事務職員のバックアップ体制があり、ユーザーの質問に対してプロによるサポートがあることを申し添えます。

山井 成良 (やまい なりよし)

(岡山大学情報統括センター 教授)

岡山大学情報統括センターの山井と申します。平成9年11月まで大阪大学大型計算機センター研究開発部に在籍しておりました。事前にお知らせいただければ、電子メールだけでなくセンターでの直接相談にも応じます。

さて、私の担当領域ですが、大規模計算機システムの基本的な利用法およびネットワークサービス全般とさせて頂きます。遠隔地からの利用に関する相談も歓迎します。

本年度も微力ながら皆様のお役に立てれば幸いです。

2011年度大規模計算機システム利用指導員　自己紹介

板野 智昭（いたの ともあき）

（関西大学システム理工学部 物理・応用物理学科 准教授）

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

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

武知 英夫（たけち ひでお）

（阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授）

SINET が毎日順調に稼働しているためか周りの同僚も自分の科学研究費の申請書が SINET を経由して転送されていることなど関係がないと思っている。従って、指導員が新規ユーザー獲得キャンペーンで足を運んでも学内の反応を得ることなど殆ど期待できない。しかし、誠に有難いことに今年は新規ユーザから登録を得ることができました。ところで、自力でシステムを稼働してきた国立大でも直近のシステム更新を学外にサーバーを置くクラウド契約に切り替える仕様が有力になり、サーバーが国内か国外かで議論になったそうです。大型計算機組織のクラウドサービスを始めて半世紀の経験を有するセンターでクラウドビジネスの拡大を始めてはと思います。

藤 堅正（ふじ けんしょう）

（近畿大学理工学部 電気電子工学科 講師）

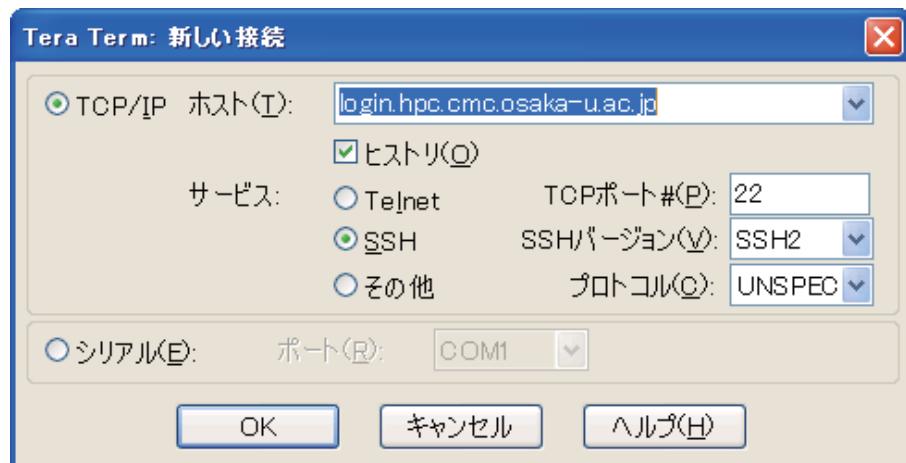
近畿大学の藤です。エネルギー材料（核燃料・原子炉材料）に関する実験系の研究室ですが、核燃料内部の化学状態を検討するための多相化学平衡計算や、燃料被覆管の水蒸気酸化シミュレーションあるいは燃料被覆材と核分裂生成物との固相反応の挙動解析に関する計算でサイバーメディアセンターを利用しておられます。

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

大規模計算機システム FAQ

1. ログインについて

計算機には ssh で接続します。ssh クライアントソフトは Windows 環境では Putty、TeraTerm などが一般的に利用されています。TeraTerm の接続画面を例にとると、ホスト名に(login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp)を指定し、サービスで SSH を選択します。ログインするとホスト名の選択画面が表示されますので、Frontend Terminal(fronta~frontd)の番号(1~4)を入力しフロントエンド端末に接続します。フロントエンド端末でプログラムのコンパイル、ジョブの実行、計算結果の確認など全ての処理を行えます。



2. プログラムのコンパイルについて

プログラムのコンパイルはフロントエンド端末で行います。

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

Intel コンパイラは PC クラスタで実行するロードモジュール(a.out)を作成します。

% sxf90 test.f —— (SX用クロスコンパイラの実行)

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

各コンパイラの使用例

	C	C++	FORTRAN
Intel コンパイラ	% icc test.c	% icpc test.c	% ifort test.f
MPI コンパイラ (MPI-CH 1.2.7p1a)	% mpicc test.c	% mpiCC test.c	% mpif77 test.f % mpif90 test.f
SX用クロスコンパイラ	% sxc++ test.c	% sxc++ test.c	% sxf90 test.f

SX-9 用の場合は "-cfsx9" オプションを利用

※コンパイルオプションの詳細についてはマニュアル等を参照してください。

3. プログラムの実行について

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

キュー名（以下の#PBS -q PCC）を PCC にすることで PC クラスタに、SX9 とすることで SX-9 に、SX8F・SX8L とすることで SX-8R にバッチリクエストを投入できます。なお、スクリプトファイルの作成には、vi などのエディタをご利用ください。

NQS スクリプトの例

```
#!/bin/csh
#
### Sample Script ####
#
#PBS -q PCC          # (バッチリクエストを投入する計算機のキュー名の指定)
#PBS -l cpunum_job=4,memsz_job=15GB,elapstim_req=5:30:00
# (使用するCPU数・メモリ量・時間を指定)

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

バッチリクエストの投入は、qsub コマンドを使います。

正常にバッチリクエストを受け付けるとリクエスト ID(ジョブ番号)が付けられます。

```
qsub [スクリプトファイル名]
Request _12345cmc_ submitted to queue: PCC.
```

受け付けたジョブには リクエスト ID が付けられる。

4. バッチリクエストの確認について

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

% qstat	—— (バッチリクエストの状態を確認)
% sstat	—— (SX-8 のバッチリクエストの実行開始時間を確認)
% sstat9	—— (SX-9 のバッチリクエストの実行開始時間を確認)
% sstat -s 11	—— (PC クラスタのバッチリクエストの実行開始時間を確認)

より詳細な利用方法はこちら

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

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

5. ファイル転送について

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

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

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

6. パスワードの変更について

下記の URL から大規模計算機システムポータルにログインし、「パスワード変更」のタブを選択してください。なお、サーバの passwd コマンドでは変更できませんのでご注意ください。

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

※なお、Mac OS を利用されている場合は Firefox をご利用ください。

7. サポートについて

お問い合わせ頂く内容により担当部署が変わります。

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

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

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

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

なお、利用相談員については下記の URL をご覧ください。

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

- その他、問い合わせ先等の詳細は下記の URL をご覧ください。

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

8. マニュアルについて

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

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

9. 利用資格について

大学等の研究者や大学院生等がご利用になります。利用資格の詳細は下記の URL をご覧ください。

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

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

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

10. 利用負担金について

大規模計算機システムの利用負担金は、登録時に一定額を支払って頂く年間登録制をとっており、登

録後の利用による利用負担金は発生しません。なお、利用負担金の金額に応じてジョブ実行優先順位（フェアシェア値）、並列実行 CPU 数、メモリサイズ、ファイル使用量などの利用可能な資源に制限をかけています。詳細は下記の URL をご覧ください。

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

1.1. 利用申請について

大規模計算機システムを利用される方は「大阪大学サイバーメディアセンター利用申請書」に必要事項を記入・捺印し、情報推進部 情報基盤課 研究系システム班へ提出してください。詳細は下記の URL をご覧ください。

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

1.2. パスワード忘れについて

大規模計算機システムのパスワードを忘れた場合は、下記の URL にあるパスワード変更届に必要事項を記入・捺印し、情報推進部 情報基盤課 研究系システム班へ提出してください。パスワード変更届けは下記の URL からダウンロードしてください。

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

1.3. 試用制度について

本センターでは、これまでに大規模計算機システムを一度も利用していない、利用有資格者を対象にした試用制度を設けています。利用可能な資源は 1 万円の負担金を支払った場合と同等で、利用可能期間は、4 月～9 月に申請の場合は 3 ヶ月間、10 月～3 月に申請の場合は 1 ヶ月間です。利用申請は Web ページから受け付けています。詳細は下記の URL をご覧ください。

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

1.4. 他大学の情報基盤センターの情報について

他大学の情報基盤センターの情報については下記の URL をご覧ください。

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

利用規程等

・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試用制度利用内規	-----	88
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員指導員内規	-----	88
大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程	-----	89
ネットワーク専門部会内規	-----	89
・附表	-----	91
大規模計算機システム ホスト一覧	-----	91
SX-8R、SX-9及びPCクラスタのジョブクラス一覧	-----	91

・規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

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

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

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

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員(非常勤講師を含む。)及びこれに準ずる者
- (2) 大学院の学生
- (3) 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関(前号に該当する機関を除く。)で、センターの長(以下「センター長」という。)が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
- (6) 第1号、第3号又は第4号の者が所属する機関との共同研究に参画している民間企業等に所属し、専ら研究に従事する者
- (7) 日本国内に法人格を有する民間企業等に所属する者(前号に該当する者を除く。)で、別に定める審査に基づきセンター長が認めたもの
- (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号の者は、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 前項の規定にかかるわらず、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できる。

第9条 利用者は、研究の成果を論文等により公表するときは、当該論文等に大規模計算機システムを利用した旨を明記しなければならない。

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

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

第12条 前条の規定にかかるわらず、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つたとき。
- (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。

大規模計算機システム利用負担額一覧

(国立大学法人大阪大学諸料金規則第3条(17)サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用経費負担額)

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

備考

- 1 基本負担額は年度の最初の登録時に算出する。
- 2 各基本負担額の制限内でスーパーコンピュータ、クラスタシステム、ファイルなど計算機資源を利用できる。なお、スーパーコンピュータ、クラスタシステムにおけるCPU・メモリなどの計算機資源は、フェアシェアスケジュール機能により設定したシェア値に応じて割り当てられる。
- 3 基本負担額1万円の場合、登録者数は1名とする。その他の場合、登録者数は特に制限を設けない。
- 4 後期（10月～3月）利用の基本負担額及びファイル追加オプションは、年間負担額の半額とする。
- 5 上記の基本負担額以外に50万円単位での申請を1,000万円を上限として受け付ける。その場合のシェア値及びファイル利用の制限の設定については以下のとおりとする。
シェア値は、300万円未満が基本負担額の1.3倍、300万円以上が基本負担額の1.5倍とする。
ファイル利用の制限は、50万円につき0.5TBを加算する。
- 6 ファイルサーバはファイル使用量の制限内で利用できる。なお、制限値以上の利用は100GB単位での追加オプションとする。
- 7 別に定める試用制度による利用を認められた者は、基本負担額1万円の場合と同じ資源を、登録のあつた月から、前期（4月～9月）3ヶ月間、又は後期（10月～3月）1ヶ月間無料で利用できる。ただし、当該会計年度を越えての利用はできないものとする。
- 8 大学院の学生が基本負担額1万円で利用する場合、負担額を半額とする優遇措置を受けられる。
- 9 民間企業等に所属する者は、科学研究費補助金及び共同研究プロジェクトでの利用を除き負担額を3倍の設定とする。なお、利用期間は四半期単位とし、負担額は年間負担の1/4とする。
- 10 試用制度及び基本負担額1万円でSX-9を利用する場合、ジョブクラス表のデバッグクラス(DBG 9)のみを可能とする。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

附 則

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

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員指導員内規

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

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

第2条 相談員及び指導員は、共同利用有資格者の中から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 相談員及び指導員の任期は、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てオンラインで、第1条第1項のセンター利用相談活動を行うものとする。

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

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

- 2 前項に係る利用経費の負担額は免除する。

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

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

- 2 前項の企画及び実施に当たっては、高性能計算機システム委員会が企画・立案し、教授会の承認を得るものとする。

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

第10条 この内規に定めるもののほか、必要な事項については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。

大型計算機利用大阪地区（第 6 地区）協議会規程

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

第 2 条 本会の事務局を大阪大学サイバーメディアセンター内に置く。

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

2 上記以外で、理事会が特に認めた連絡所は会員とすることができます。

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

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

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

第 5 条 本会は、第 1 条に示された目的を達成するため、次の事業を行う。

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

第 6 条 本会に会長 1 名、理事若干名の役員を置く。

2 本会に幹事若干名を置き、役員を補佐せしめることができる。

3 幹事は、理事会の承認を経て、会長が委嘱する。

第 7 条 会長は本会を代表し、本会の業務を総括する。

2 会長は理事の互選によって定める。

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

第 8 条 理事は会員の互選によって定める。

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

第 9 条 会長は理事会を招集し、その議長となる。

2 理事会は次の事項を審議する。

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

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

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

第 10 条 会長は年 1 回以上総会を招集し、その議長となる。

2 総会は次の事項を審議する。

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

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

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

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

2 専門部会に関し必要な事項は、本会が別に定める。

附 則

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

附 則

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

附 則

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

附 則

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

ネットワーク専門部会内規

第 1 条 大型計算機利用大阪地区（第 6 地区）協議会（以下「第 6 地区協議会」という。）規程（以下「協議会規程」という。）

第 11 条に規定する専門部会として、ネットワーク専門部会（以下「専門部会」という。）を置く。

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

第 3 条 専門部会は、次の各号に掲げるものをもって構成する。

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

第 4 条 専門部会に部会長を置き、第 6 地区協議会会长が指名

する。

2 部会長は、専門部会を招集し、その議長となる。

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

附 則

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

・附表

大規模計算機システム ホスト一覧

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

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

SX-8R、SX-9 及び PC クラスタのジョブクラスター一覧

スーパーコンピュータと PC クラスタのジョブ資源制限値は次のとおりです。

クラス	経過時間		CPU 数		主記憶 (G B)	
	既定値 (分)	最大値 (時間)	既定値	最大値	既定値	最大値
DBG	1(1 分)	1(10 分)	1	4	1	16
SX8F(SXF)	1	24	1	8	1	120
SX8L(SXL)	1	120	1	32	1	1000
SX8L(届出制)	1	240	1	64	1	2000
DBG9	1(1 分)	1(10 分)	1	4	1	128
SX9	1	24	1	64	1	4000
SX9 (届出制)	1	240	1	128	1	8000
PCC	1	720 (4CPU まで) 120 (16CPU まで) 24 (128CPU まで)	4	128	2	512

※CPU 数、主記憶の最大値は、[ノード毎の最大値] × [同時利用可能ノード数の最大値]で算出した値となっています。

※DBG クラス (SX-9 は DBG9 クラス) 、経過時間の括弧内の数字は CPU 時間の既定値と最大値です。

募 集

- ・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について ----- 95

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た研究・開発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. 隨筆
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、括弧は全角
 - ・日本語文中の句読点は半角の“、”“、”を使用せず、全て全角の“、”“。”とする。
 2. Microsoft Word2010 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。

soumu@cmc.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. 原稿ファイルの容量が 10MB を超える場合は、CD-R 等の電子媒体に記録のうえ以下の送付先にお送りください。
- 【原稿の送付先】
〒567-0047
大阪府茨木市美穂ヶ丘5-1 大阪大学情報推進部情報企画課総務係

【注意事項】

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

大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）

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

・開館時間（吹田本館）

センター見学の申込、広報	情報推進部情報企画課 総務係（本館1F） 電話 06-6879-8804 zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp	8:30～12:00 13:00～17:15	閉 館
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（本館1F） 電話 06-6879-8980,8981 zyosui-kikaku-kaikei@office.osaka-u.ac.jp		
利用案内、受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用講習会受付、 計算機マニュアル・図書の閲覧、貸出	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館2F） 電話 06-6879-8808,8812 system@cmc.osaka-u.ac.jp		
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	同 上		

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

・利用相談

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

広報委員会委員

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

サイバーメディア HPC ジャーナルは、計算機利用ニュースの後継として、装い新たに発刊することになりました。

本書は年1回発行し、計算機ユーザーのための情報源として内容をより充実させていく所存ですので、引き続きご愛読下さいますようお願い申し上げます。

(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.1 (初版) 2011年10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/j/>

印刷： 阪東印刷紙器工業所

表紙デザイン：稻田 由美、阿部 浩和(大阪大学)

HPC(High Performance Computer)の頭文字を、これから飛躍する蝶のイメージに重ねてデザインしました。

No. 1 (初版) 2011. 10

ISSN 2186-473X



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

大規模計算機システムホームページ <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/>

