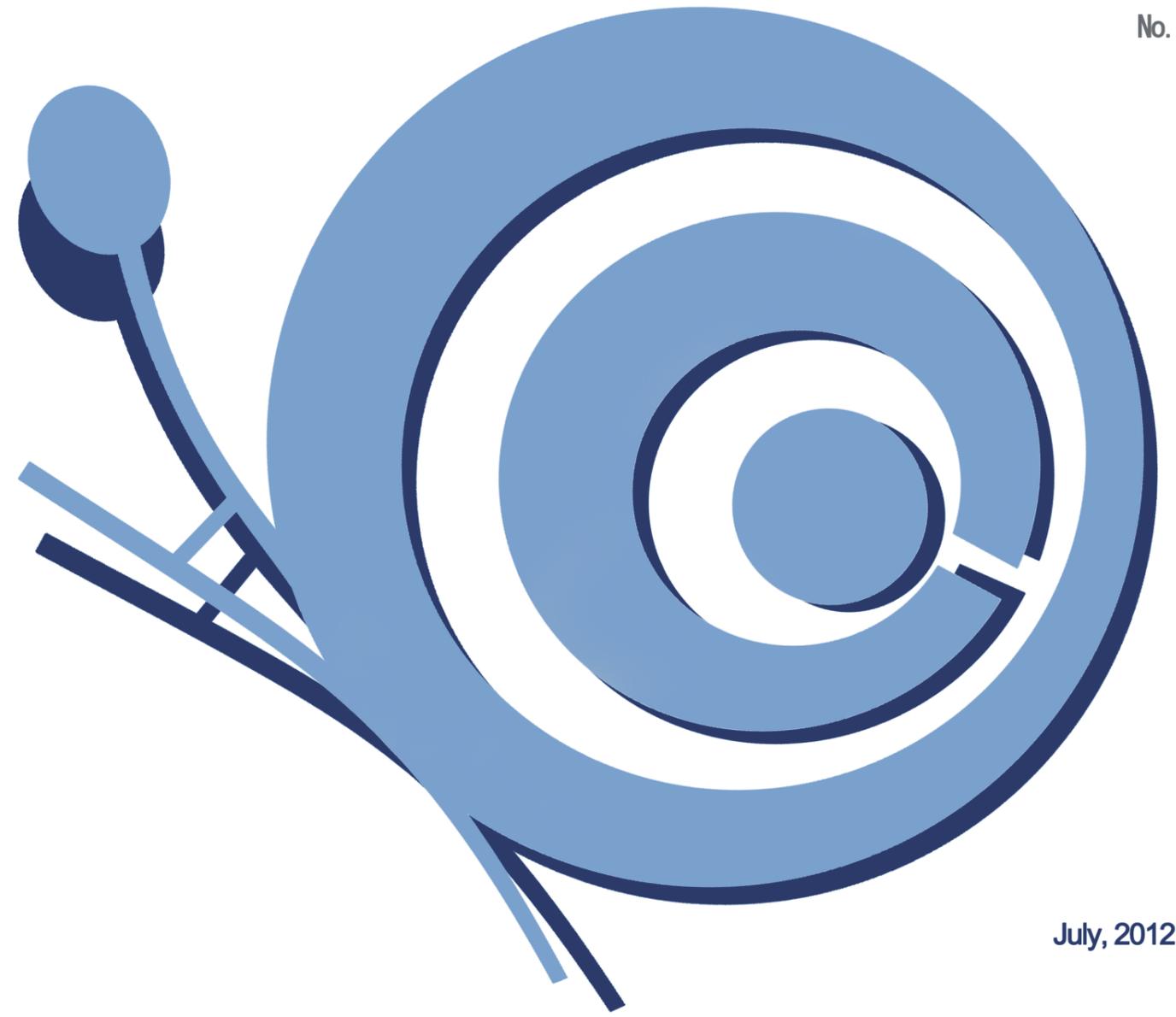


大阪大学サイバーメディアHPCジャーナル
High Performance Computer Journal

CYBERMEDIA HPC JOURNAL
Cybermedia Center, Osaka University
No. 2



目 次

特 集	1
・スーパーコンピュータと半導体	3
小田中 紳二	
・流体構造連成問題の数値シミュレーション	7
梶島 岳夫、竹内 伸太郎	
・GPU コンピューティングの特徴と応用事例	13
安福 健祐	
大規模計算機システム利用者研究報告	17
・高速電子ビームガイディングによる高速点火核融合のコア加熱高効率化	19
城崎 知至	
・原子核の多体共鳴状態の研究	23
明 孝之	
・SX-9 を用いた乱流場における非平衡エネルギースペクトルの抽出	27
高橋 雄太、堀内 潔、増田 雄一	
・格子ゲージ理論におけるエンタングルメント・エントロピー	33
中川 義之	
・First-Principles Calculations of Structure and Magneto-Electric Properties of Co-Doped Bismuth Ferrite	37
Dan Ricinchi	
センター報告	43
・2011 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	45
・第 18 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2012)	64
・2012 年度大規模計算機システム利用講習会	65
・2011 年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	66
・2012 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	74
・2012 年度「大規模計算機システムにおける企業利用」の活動状況	75
・2012 年度大規模計算機システム利用相談員・指導員	76
・大規模計算機システム FAQ	81
利用規程等	89
・規程関係	91
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	91
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	93
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	94
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	94

大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程	95
ネットワーク専門部会内規	95
・ 附表	97
大規模計算機システム ホスト一覧	97
SX-8R, SX-9 及び PC クラスタのジョブクラス一覧	97
募 集	99
・ 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	101
・ 大規模計算機システム利用案内	102

特 集

- スーパーコンピュータと半導体 ----- 3
小田中 紳二 大阪大学サイバーメディアセンター
- 流体構造連成問題の数値シミュレーション ----- 7
梶島 岳夫、竹内 伸太郎 大阪大学大学院工学研究科
- GPUコンピューティングの特徴と応用事例 ----- 13
安福 健祐 大阪大学サイバーメディアセンター

スーパーコンピュータと半導体

小田中 紳二

大阪大学 サイバーメディアセンター コンピュータ実験科学研究部門

1. はじめに

地球環境、情報、生命、ナノテクノロジーなどの科学技術分野において、様々な数理モデルによるシミュレーションを通して、その理解を深め、新たな知見を得る試みが大きく進展している。スーパーコンピューティングによる大規模シミュレーションの実現は科学技術分野に大きな影響を与えている。

近年におけるスーパーコンピューティング技術の進展は大きな波を描いている。1970年代後半のベクトル型スーパーコンピュータの登場が第一期の大きな波といえる。そのスーパーコンピュータの斬新なデザインと当時においては驚くべき性能は、1980年代における科学技術計算分野に大きなインパクトを与えた。さらに、先端LSI技術を導入した日本製ベクトル型スーパーコンピュータは半導体産業、自動車産業、航空機産業などの産業界にも急速に導入され実用化が進むと、米国では、著名な科学者を集めて「科学技術における大規模計算に関するパネル討論会」(1982)がもたれ、有名なLax報告[1]としてまとめられ、米国におけるスーパーコンピュータ技術の必要性に対する警鐘となった。1980年代後半から米国を中心にした超並列計算機と並列計算の研究は大きな盛り上がりを示し、第二期における大きな波となった。その当時、ボストン近郊には並列計算機に関連するベンチャー企業も数多く出現し、HypercubeマシンやConnectionマシンなど様々な並列アーキテクチャーが提案された。しかしながら、1990年代にはいってプロセッサ性能の飛躍的向上に伴い、高性能のパーソナルコンピュータやワークステーションが廉価に手にはいり、クラスタ型コンピュータの開発も進むと、その波は次第に静まっていくかに見えた。しかしながら、2000年代にはいって再び並列計算とスーパーコンピュータへの期待度が増し、第三期のスーパーコンピューティング

の技術的波が到来している。

スーパーコンピュータ技術は、図1が示すように様々な技術が階層を持って構築されており、各階層の技術が驚くべき進展を遂げている。その基礎を支えるのは半導体技術であり、スーパーコンピュータ技術の進展も半導体技術の進展と無縁ではない。半導体技術がスーパーコンピュータ技術の進展にいかに関与してきたかを概観し、今後の技術を展望する。

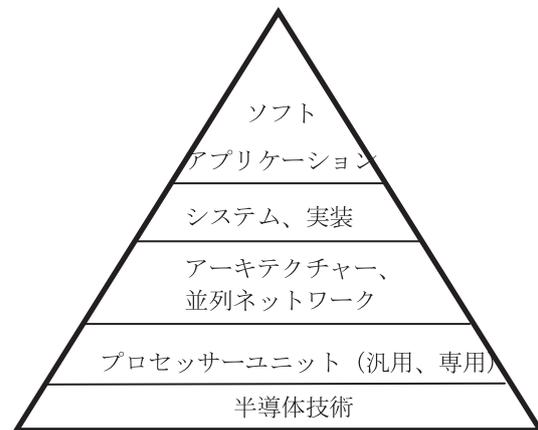


図1：スーパーコンピュータの技術

2. 半導体素子の性能向上

現在、エレクトロニクス機器に用いられている集積回路を構成している半導体素子はCMOSデバイスと呼ばれる電界効果型トランジスタである。この素子は電子が輸送するn-MOSFETと正孔が輸送するp-MOSFETから構成され、その性能の行方がエレクトロニクス機器の性能に大きく関わっている。トランジスタ性能は、その構造によって決まる電場内の電子輸送によって決まり、室温下のその輸送特性はPoisson-Boltzmann方程式系によって記述される。電子輸送特性がわかれば、電気特性としての電流-電圧特性が得られる。

この MOSFET の性能には基本的な設計指針が見出されており、スケーリング則と呼ばれる[2]。それは、トランジスタ構造を縮小し、電源電圧を下げれば、トランジスタ性能が向上するというものである。では、どのように縮小し、どのように電圧を下げていけばよいのか、次の Poisson 方程式の相似変換から考察することができる[3]。

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \frac{q}{\epsilon} (n - p - (N_D - N_A)) \quad (1)$$

ここで、 ϕ はポテンシャル、 n, p は電子・正孔密度、 N_D, N_A は不純物密度、 q は素電荷量、 ϵ は誘電率である。変数に以下のスケーリング

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} &= \phi / \kappa \\ (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) &= (x, y, z) / \lambda \\ (\tilde{n}, \tilde{p}, \tilde{N}_D, \tilde{N}_A) &= (n, p, N_D, N_A) \lambda^2 / \kappa \end{aligned} \quad (2)$$

を施せば、(1)は

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial \tilde{z}^2} = \frac{q}{\epsilon} (\tilde{n} - \tilde{p} - (\tilde{N}_D - \tilde{N}_A)) \quad (3)$$

となり、相似変換となることがわかる。すなわち、電位を $1/\kappa$ 倍し、サイズを $1/\lambda$ 倍、密度を λ^2/κ 倍すれば、ポテンシャルは相似変換する。今、 $\lambda = \kappa$ とし、MOSFET のゲート遅延、消費電力、駆動電流に関する解析式から、表 1 のスケーリング則を得る。

表 1 : スケーリング則

Dimensions,	L, W, T_{ox} ,	$1/\kappa$
Potentials,	ϕ ,	$1/\kappa$
Concentration,	N_D, N_A ,	κ
Electric Field,	E ,	1
Gate Capacitance,	C_g	$1/\kappa$
Current,	I ,	$1/\kappa$
Gate Delay,	τ ,	$1/\kappa$
Clock Frequency	f	κ
Power,	$\frac{1}{2} f C V^2$,	$1/\kappa^2$

ここで、 $1/\kappa=0.7$ とすれば、サイズを 0.7 倍に縮小すれば、ゲート遅延は 30%向上し、消費電力は 1/2 に

なり、さらに、ウェハー当たりを取れるチップ数は 2 倍になることがわかる。半導体技術は微細化することによって、性能向上と経済性、さらに、信頼性向上を達成しており、成長の原動力になっている。

半導体製造プロセスは、ゲート長を代表して、65nm 世代、45nm 世代、32nm 世代などと呼ばれ、世代毎に 0.7 倍に縮小された半導体製造プロセスを開発することによって新しい集積回路が開発されてきた。しかしながら、微細化が進むにつれ、プレナー構造 MOS 論理速度は物理的限界（おおよそ、0.25psec と予測される。）に近づいている。図 2 に、今まで世界で開発された MOSFET のゲート遅延をゲート長を関数にして示している。微細化だけでは性能向上のトレンドを保つことができず、90nm 世代以降、新構造と新材料の導入によって MOS 論理速度の性能向上が図られていることがわかる。

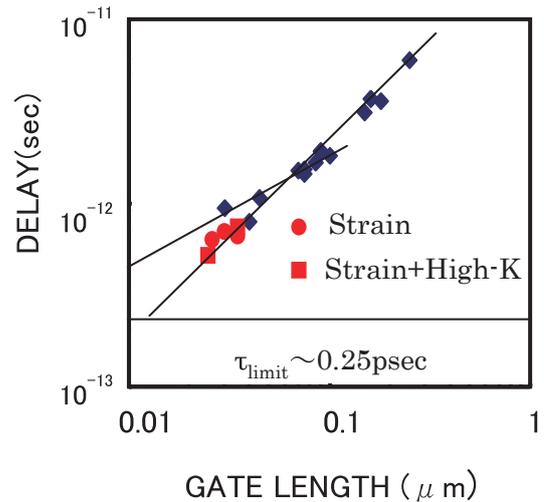


図 2 : ゲート遅延

図 3 に MOSFET 構造を示している。新構造とは、Si-結晶にストレスを加え結晶構造を変形させることによって、電子・正孔の有効質量を変え、輸送特性を向上させる技術である。n-MOSFET には Linear によって引っ張りのストレスを、p-MOSFET には、SiGe を埋め込んで圧縮ストレスを加える構造になっている。また、新材料には、ゲート絶縁膜材料に HfO_2 などの高誘電材料を、ゲート電極に金属材料を導入するものであり、32nm 世代で共に導入された。

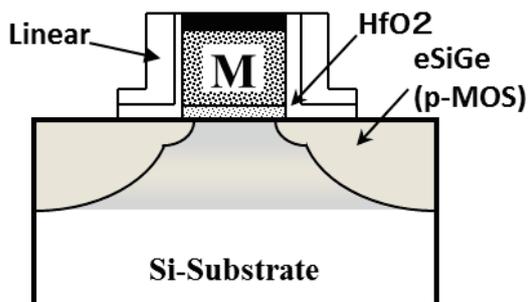


図3：MOSFET構造

3. プロセッサ技術と半導体

プレナー構造 MOS 論理速度の物理的限界を受けて、2005-2006 年頃から、プロセッサ技術に並列処理機能をもたせて、その性能向上をはかると共に、低消費電力化を進める技術となっている。その一つは、マルチコア技術であり、もう一つは、NVIDIA 社などから提供されている SIMD アーキテクチャーを導入した GPU 技術である[4]。この二つのプロセッサ技術は、第三期のスーパーコンピューティングの研究開発を促進し、スーパーコンピュータへの期待度を増している。

表2に近年開発されたスーパーコンピュータと、それに使われたプロセッサと半導体製造プロセス世代をまとめている。Intel 社が提供する PC プロセッサに最先端半導体プロセスが使われており、スーパーコンピュータ用プロセッサには必ずしも最先端の半導体技術が使用されているわけではない。

表2：スーパーコンピュータと半導体

スーパーコンピュータ	プロセッサ	半導体プロセス
京コンピュータ (2011)	SPARC チップ	45nm Bulk CMOS(Fujitsu)
Bluewater(IBM, 2011開発中止)	Power7	45nm SOI CMOS(IBM)
天河(China, 2010)	NVIDIA GPU Intel(Xeon)	40nm bulk CMOS(TSMC)
参考:PC	Intel (Westmere) (2010)	32nm bulk CMOS (第2世代High-K)

2012 年から Intel 社が投入している 22nm 世代は Tri-Gate トランジスタと呼ばれる立体構造を有した新しい MOSFET である。現在、日本企業にはこのタイプのトランジスタ技術を実現する半導体プロセスを量産化する計画はない。今後、日本のスーパーコンピュータ用プロセッサに国産半導体素子技術が使われることはなく、海外ファウンドリーメーカーに製造委託されることになる。この場合、必ずしも先端技術が提供されるわけではない。NVIDIA 社の GPU の製造を請け負っているファウンドリーメーカーの TSMC 社でさえ、このタイプの Multi-gate トランジスタの量産化は 2014 年と言われている。さらに、IBM 社は 45nmSOI/CMOS 技術(Bulk CMOS より高性能)によって開発されたプロセッサ Power7 によって進めていたスーパーコンピュータの開発を 2011 年に中止した。MOSFET 性能向上のために SOI 技術の薄膜化に注力した IBM 社及び開発アライアンス企業は、トランジスタ技術に遅れをとったのではないかと考えられる。今後、IBM がどのような半導体技術でプロセッサの開発を進め、再びスーパーコンピュータ開発に参入するのかが注目される。Intel 社はすでに High-K 技術を有した Tri-Gate トランジスタを実現しており、今後、III-V 族 Tri-Gate トランジスタも視野に入れた開発が進められている [5]。

4. メニコア時代のスーパーコンピューティング

科学技術分野における数値モデルの多くは偏微分方程式で記述されており、偏微分方程式の数値解法は並列計算の中心的課題である。その一つは大規模行列解法

$$Ax = b \quad (4)$$

であり、今、一つは大規模固有値問題

$$Ax = \lambda x \quad (5)$$

の解法である。近年、京コンピュータ上で開発された大規模固有値問題の並列計算手法[6]が密度汎関数法に適用され、大規模材料設計への道を開いているのは、近年におけるよい例である[7]。

並列計算アルゴリズムは、一般には次の基本的要素からなる。すなわち、並列計算のためには、なんらかのブロック化が必要であり、データを各プロセッサエレメントに配信し、そこでロードバランスを保って高速演算を実行し、再び得られた結果を収集することが必要である。このため、そのアルゴリズム性能はコンピュータのアーキテクチャーとも深くかかわることになる。

並列アルゴリズム

1. Parallel: 何らかの Block 化が必要。
2. Distribute: 並列ネットワーク、共有メモリーや分散メモリー構造に関連。
3. Compute: シリアル計算、ロードバランス。
4. Gather: 並列ネットワーク、共有メモリーや分散メモリー構造に関連。

今後、マルチコア CPU は先端半導体素子技術を取り込みながら、ゆるやかなメニコア化に向かって進むと考えられる。このとき、同一チップ内のコア間の通信速度はチップ間通信速度よりも格段に高速になり、並列計算アルゴリズムにおけるデータ配信・収集時間に影響する。このため、先端半導体素子技術を用いたメニコアプロセッサによるスーパーコンピュータの実現は、並列計算アルゴリズム開発にも直接的に影響すると考えられる。また、CPU と GPU との半導体技術に差が出てくる可能性があり、並列計算を行うプロセッサとしての CPU vs GPU の議論を、そこに使われている半導体技術も含めて進めていく必要がある。

5. おわりに

スーパーコンピュータ技術の進展も半導体技術の進展と無縁ではない。プレナー構造 MOS 論理速度の物理的限界を受けて、プロセッサ技術の並列処理機能が進み、スーパーコンピューティングの第三期の技術的波が到来している。先端半導体素子技術を取り込みながら、メニコアプロセッサによるスーパーコンピュータが今後実現されることが期待さ

れ、並列計算アルゴリズム開発にも直接的に影響すると考えられる。どのような半導体技術を使ってスーパーコンピュータを実現していくかは、スーパーコンピューティングのピーク性能だけでなく消費電力にも影響し、今後の実用化と普及にとって重要な要素である。

参考文献

- (1) P.D.Lax(Chairman), Report of the pannel on large-scale computing in science and engineering, 1982.
- (2) R.H.Dennard et al., Design of ion-implanted MOSFET's with very small physical dimensions, IEEE Journal of Solid-State Circuits, vol.9, pp.256-268, 1974.
- (3) G.Baccarani et al., Generalized scaling theory and its application to a 1/4 micrometer MOSFET design, IEEE Trans. on Electron Devices, vol.31, pp.452-462, 1984.
- (4) J.Y.Chen, GPU technology trends and future requirements, Proc. of IEDM, pp.1-6, 2009.
- (5) M.Bohr, The evolution of scaling from the homogeneous era to the heterogeneous era, Proc. of IEDM, pp.1-6, 2011.
- (6) T.Imamura, S.Yamada, and M.Machida, Development of a high-performance eigensolver on a peta-scale next-generation supercomputer system, Progress in Nuclear Science and Technology, vol.2, pp.643-650, 2011.
- (7) J.Iwata, D.Takahashi, A.Oshiyama, T.Boku, K.Shiraishi, S.Okada, K.Yabana, A massively-parallel electronic-structure calculations based on real-space density functional theory, J. Comp., Phys., vol.229, pp.2339-2363, 2010.

流体構造連成問題の数値シミュレーション

梶島 岳夫、竹内 伸太郎

大阪大学 大学院工学研究科 機械工学専攻

1. はじめに

計算流体力学 (Computational Fluid Dynamics, 以下 CFD) の発展の初期段階においては、計算手法の多くはデカルト座標系で考案され、物体形状は直方体の計算格子の合成で表現された。したがって、曲面は階段状の凹凸で近似される。原理的には、計算格子を細かくすれば流れ場の再現精度が向上することは期待できる。しかし、一般に流れは物体表面のごく薄い境界層内で大きく変化し、その領域に格子を集中する方が効率的である。そこで、少ない格子数で境界を精度よく表現するため、物体形状に沿った一般曲線座標において境界適合格子 (boundary-fitted coordinate) を生成する技法が特に航空工学分野で盛んに研究された。さらに、より複雑な形状、多数の物体を含む流れ場に対応するため、流れ場を多面体で座標にとらわれず自由に埋め尽くす非構造格子 (unstructured grid) 法が発展し、現在では市販 CFD ソフトウェアの主流となっている。

この間、格子の品質は計算結果に及ぼす最大の影響因子であり続け、同時に格子生成コストが計算コストに占める割合は増加してきた。一方、本稿で話題にする流体構造連成 (Fluid-Structure Interaction, 以下 FSI) 解析のように複合現象の扱いが主要テーマとなり、物体の運動・変形・トポロジー変化を伴う移動境界に応じて時々刻々と格子を生成することの負担が深刻になってきた。

そこで、再び固定デカルト格子の利用が見直されている。ただし、境界を、前述のような凹凸ではなく、必ずしも境界に適合しない格子の中でスムーズに表現できる埋め込み境界 (Immersed Boundary Method, 以下 IB) 法が注目されている。なお、IB 法という用語の定義や範囲は明確ではなく、かなり任意に用いられている。ここでは、筆者らの独自の解法と、それに様々な機能を組み込んだ方法による計

算例を紹介する。

2. 計算方法

2.1 固定直交格子を用いる流れの計算法

Peskin [1]による当初の IB 法は、Lagrange 的に求められる弾性体上の節点群と Euler 的な流体計算格子について近似デルタ関数を介して相互作用させる方法で、その後 Goldstein [3]によるフィードバックスキームなどの改良が加えられた。大変形する固体境界を有する生体内の流れの解析[4]における著しい成果が知られている。さらに、デルタ関数の近似の高度化[5, 6]、効率的なフィードバック手法[7]、完全陰解法の導入[8] など多くの提案により、精度や効率の改善とともに、より強い連成問題への適用範囲の拡大が続いている。

直接強制力法は、固体表面に近接する流体計算格子において外力を作用させ、必ずしも格子点を通るわけではない固体境界の影響を表現する方法である。外力は、境界が横切る位置に速度を外挿または内挿した値が境界条件を満たすように与える。Verzicco, Mohd-Yusof ら[9]は流体側の近接格子点で処理する方法を提案した。これに対して、Choi ら[10]は固体内の境界に近接する格子点で処理して連続の式を満たす改良を行い、Ikeno-Kajishima[11] は境界での圧力に不整合が発生しない方法を開発するなど、強制力法についても多くの進展がある。

2.2 体積力型埋め込み境界法

筆者らは前節とは別の形式で、流体計算用 Euler 的固定格子と固体計算用 Lagrange 的移動格子を結合させる体積力型 IB 法を開発し[12, 13]、その概念を Velocity-field Overridden by Immersed Solid (VOIS) と表現している。その手順は次のようである。まず、固定格子の全てのセルで流体・固体にかかわらずそ

の速度を与え、流れの支配方程式である Navier-Stokes 式を固定 Euler 格子で計算して時間進行を行う。次に、固体が存在する領域においては、固体の運動と変形を移動 Lagrange 格子で計算し、固体の速度を（流体と固体が共存する Euler セルにおいては固体の体積率を乗じて）上書きする。この上書きによる変更は固定 Euler 格子における体積力として表現される。この方法の著しい特長は、Lagrange 格子で求めた結果で決まる体積力が Euler 格子に使用されることにより、（その大きさに多少の誤差があっても）流体と固体の間の運動量交換には漏れが発生しない Conservative Momentum Exchange (CMX) が実現されることである。

体積力型 IB 法は計算スキームが非常に簡便であることから、多数の物体が混在する固体・流体二相流の解析に適している。開発当初、1000 個以上の球形剛体粒子が周囲の流れや後流に放出する渦列によって相互作用しながら流動する集団現象[12,13]に適用された。さらに、任意形状の物体を含む流れ[14]だけでなく、固体の変形を有限要素法 (Finite-Element Method, 以下 FEM) で扱うことにより大変形する柔軟構造物を含む流れ[15]など、固体構造を扱う様々な方法との親和性に優れた体積力型 IB 法の特性を活かした多機能化が進んでいる。

3. 計算例

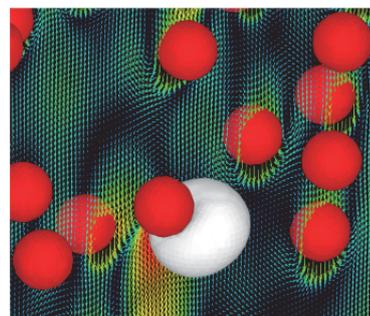
本稿では、固体には可変形性、流体には多成分性を考慮した計算結果を紹介する。複雑な運動に伴う相間の運動量交換に漏れない特性を重視し、FSI の基盤として第 2.2 節で述べた体積力型埋め込み境界法 (VOIS-CMX) を選択する。流体の流れに対する差分法と固体の変形に対する FEM についてはそれぞれ確立された方法、さらに多数の球形剛体粒子を扱う FSI 法 [12, 13] に本質的な変更を加える必要なく、親和性の高い計算アルゴリズムを形成することができた。

3.1 固気液流動

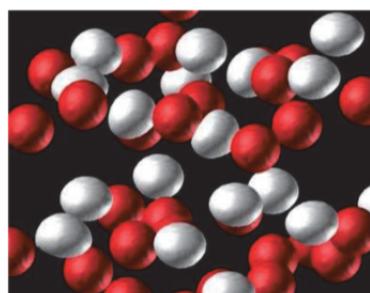
気液または不溶性 2 液体に対して Volume of Fluid (以下 VOF) 法を用い、多相流体の流れの計算に固

体を埋め込む方法[16,17]法によって三相流の解析が可能となる。

固体粒子を含む液中を上昇する気泡のふるまいを調べる目的で実施された計算例を図 1 に示す。固液二相媒体や懸濁液の中を気泡が上昇する場合は、バイオリクター、浮遊選鉱、エアリフトポンプなど広範囲な工業装置で見られ、その性能は気泡の上昇速度や固気の接触頻度に大きく依存する。図 1 では、1000 個あまりの球形剛体粒子群が沈降する中を気泡が上昇する流れ場の三次元解析におけるスナップショットである。気泡周りの流れの観察から、気泡が誘起する剪断流れの中で固体粒子の回転運動による揚力が粒子分布や気泡との位置関係に対して最も影響が大きい場合があることがわかった。



(a) 気泡や粒子の周りの流れ



(b) 気泡群と粒子群の配置

図 1 : 気泡 (白) と固体粒子 (赤) が相互作用

3.2 可変形粒子の流れ

固体の変形を FEM によって求めることにより、大変形する柔軟な固体構造物を含む流れ場を解析することができる。最近では固体も流体も共通の固定格子で扱う full Euler 法[17-20]も研究されている。しかし、必要とされる時空間の解像度は物質の力学特性

が大きく依存する。そこで、われわれは固体と流体のそれぞれに適した手法を用いる分離解法を採用している。すなわち、流体には固定 Euler 格子、固体には移動 Lagrange 格子を用い、それぞれに確立された解法を適用して連成させる[15]。流体計算格子に作用する体積力を固体の FEM ノードに反映させる際に運動量交換の漏れを生じない制約を与える以外には、前述の体積力型 IB 法には特別の変更を加える必要がなく、効率的な計算が実現される。ただし、固体の力学特性には、幾何学的非線形性を考慮するなど、大変形しても支障のないモデルを導入することは不可欠である。

可変形粒子群が相互作用しながら流動する場の計算例を図 2 に示す。この段階では二次元計算である。柔らかい粒子は、継続的な回転運動をしにくい、粒子どうしが衝突しにくいなど、固液間や固体間の相互作用が剛体粒子とは異なり、結果として粗密分布に有意な差が生じ、流体内の移動速度も大きく変化する。なお、流体の計算格子幅は無負荷時の粒子径の 1/20 とかなり粗いが、粒子周りの流れはスムーズに求められている。粒子内部の応力分布を十分な解像度でとらえる FEM を工夫し、並列計算を活用すれば、多数の三次元粒子への適用は困難ではない。

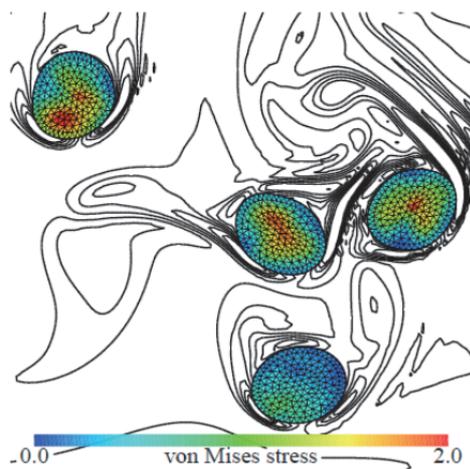


図 2 : 可変形粒子群の流れ

(色スケールは von Mises 応力、等値線は渦度)

三次元計算として、一様な流れの中で一端が固定された弾性板の自励振動を解析した例を図 3 に示す。有名な Tacoma Narrows 橋の崩落や航空機翼の振

動の原因となるフラッター現象は FSI 解析の古典的な課題である。図 3 では、自身が放出する渦により大変形を伴って振動している様子を表している。なお、事前に実施した二次元弾性梁の問題で、振幅や周期が参照データによく一致することを確認している。

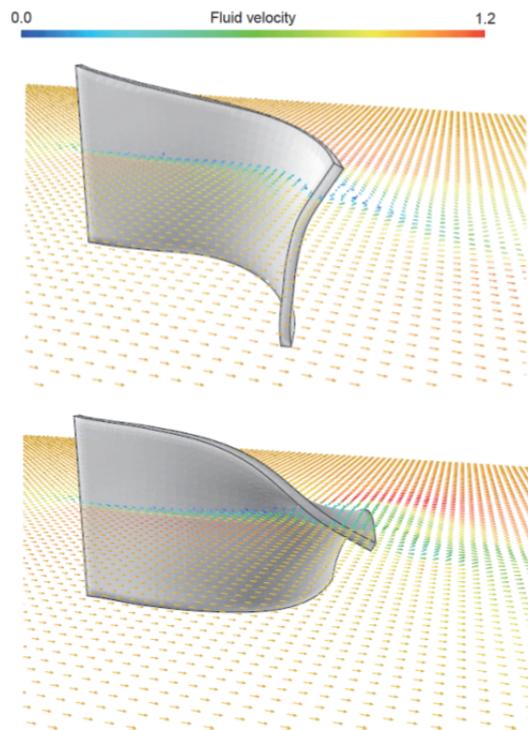


図 3 : 一様流中にある柔軟な板のはためき運動

3.3 声帯を模擬した流路の流れ

発声メカニズムの理解や発声補助機器の開発に関連して、声帯や気道を弾性体で模擬した流路における FSI 解析[21]を行った結果の一例を図 4 に示す。この計算では、声帯の開閉部分を堅い body と柔らかい cover の二層モデルを採用した。しかし、生体組織の力学的特性には不明の点も多い。その一方、任意に特性を与えることができる数値シミュレーションの利点を活かせば、ある機能を発現するための支配因子を分析的に見いだすことも可能である。実際に、気道部分を剛体やヤング率の異なる弾性体で模擬して結果を比較したところ、声帯の振動数にはその影響が無視できないことがわかった。

この課題では、両側の境界が重なり合わずに接触することを有限の時間刻みで実現しなければなら

ず、高周波数で開閉する部分の取り扱いに特別の注意を要した。そこで、Lagrange の未定乗数法で接触モデルを考案し、接触後には固体間の滑りの有無を考慮できる工夫も加えた。二次元計算ではあるが、レイノルズ数 1500 の気流に対して 250Hz で開閉し、概ね知られている人の声域（男性 100~150Hz、女性 200~300Hz）に対応する挙動が再現された。また、図 4 では噴流は渦運動により強いエネルギー散逸を伴っている様子も観察される。

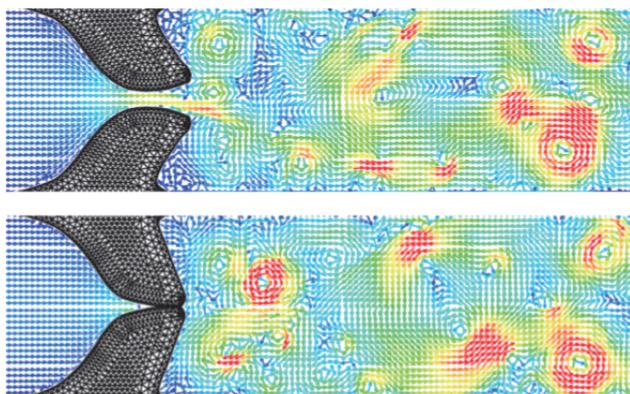


図4: 声帯を模擬した二次元流路内の流れの時系列変化

4. おわりに

工業装置や生体内の熱および物質の輸送には多くの場合、流体が関与している。そのため、熱も含めた界面現象（界面張力、濡れ性、相変化、物質移動など）や反応など、より複合的な現象の扱いは必須である。また、境界のトポロジー変化については、前述の例でも開閉の問題に言及したが、付着、合体、分裂だけでなく、その刹那に固体間に介在する流体膜の潤滑効果はきわめて重要な課題である。それらは単に力任せの大規模計算で押し切れる問題ではないので、理論、実験あるいはマイクロなスケールでのシミュレーションなど、FSI を多機能化するための物理モデルの構築を目的とした研究テーマは無尽蔵であると言えるだろう。

謝辞

本文に掲載した計算例は岩田隆一博士、上山篤史博士、宮内優君をはじめ多くの学生の貢献によるものである。

参考文献

- (1) C. S. Peskin, *J. Comput. Phys.*, **25**-3, 220-252, (1977).
- (2) R. Mittal, and G. Iaccarino, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **37**, 239-261, (2005).
- (3) D. Goldstein, R. Handler, and L. Sirovich, *J. Comput. Phys.*, **105**-2, 354-366, (1993).
- (4) C. S. Peskin, *Acta Numerica*, **11**, 479-517, (2002).
- (5) C. S. Peskin and D. M. McQueen, *SEB Symposium on Biological Fluid Dynamics* (1994).
- (6) R. Cortez and M. Minion, *J. Comput. Phys.*, **161**, 428-453, (2000).
- (7) W.-X. Huang and H.-J. Sung, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **198**, 2650-2661, (2009).
- (8) Y. Mori and C. S. Peskin, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **197**, 2049-2067, (2008).
- (9) R. Verzicco, J. Mohd-Yusof, P. Orlandi, and D. Haworth, *AIAA J.*, **38**-3, 427-433, (2000).
- (10) J.-W. Kim, D.-J. Kim and H.-C. Choi, *J. Comput. Phys.*, **171**-1, 132-150, (2001).
- (11) T. Ikeno and T. Kajishima, *J. Comput. Phys.*, **226**-2, 1485-1508, (2007).
- (12) T. Kajishima, S. Takiguchi, H. Hamasaki and Y. Miyake, *JSME Int. J., Ser.B*, **44**-4, 526-535, (2001).
- (13) T. Kajishima and S. Takiguchi, *Int. J. Heat Fluid Flow*, **23**-5, 639-646, (2002).
- (14) Y. Yuki, S. Takeuchi and T. Kajishima, *J. Fluid Sci. Tech.*, **2**-1, 1-11, (2007).
- (15) S. Takeuchi, Y. Yuki, A. Ueyama and T. Kajishima, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **64**-10/12, 1084-1101, (2010).
- (16) R. Iwata, S. Takeuchi and T. Kajishima, *Multiphase Sci. Tech.*, **22**-3, 233-246, (2010).
- (17) K. Sugiyama, S. Ii, S. Takeuchi, S. Takagi and Y. Matsumoto, *J. Comput. Phys.*, **230**-3, 596-627, (2011).
- (18) S. Ii, K. Sugiyama, S. Takeuchi, S. Takagi and Y. Matsumoto, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **65**-1/3, 150-165, (2011).

- (19) N. Nagano, K. Sugiyama, S. Takeuchi, S. Ii, S. Takagi and Y. Matsumoto, *J. Fluid Sci. Tech.*, **5-3**, 475-490, (2010).
- (20) K. Sugiyama, S. Ii, S. Takeuchi, S. Takagi and Y. Matsumoto, *Comput. Mechanics*, **46-1**, 147-157, (2010).
- (21) S. Miyauchi, T. Omori, S. Takeuchi and T. Kajishima, *ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference*, AJK2011-20009, (2011).

GPU コンピューティングの特徴と応用事例

安福 健祐

大阪大学 サイバーメディアセンター サイバーコミュニティ研究部門

1. はじめに

ここ数年プログラムの処理速度を向上させるための並列コンピューティング手法として、GPU の利用が広がっている。GPU は、スマートフォン、タブレット、PC からスーパーコンピュータに至るまで様々なデバイスに搭載されており、本来のグラフィックス処理から汎用的な数値計算（GPU コンピューティング）も可能となっている。大阪大学サイバーメディアセンターでは、GPU コンピューティングに対応した大規模計算機システムの運用は行われていないが、本稿では近年 HPC 分野でも注目される技術として GPU コンピューティングを取り上げ、GPU の変遷と GPU コンピューティングの開発環境である CUDA の解説および応用事例について紹介する。

2. GPU の変遷

GPU は 1980 年代に登場したグラフィックスワークステーションに搭載されている「ジオメトリエンジン」に端を発し、1990 年代からは、PC やビデオゲーム機にも普及していく。GPU は元々 3D-CG のリアルタイムレンダリングを実現するための専用ハードウェアであり、GPU を通した計算過程は「グラフィックスパイプライン」と呼ばれ、現在までに大きな進化を遂げてきた（図 1 参照）。

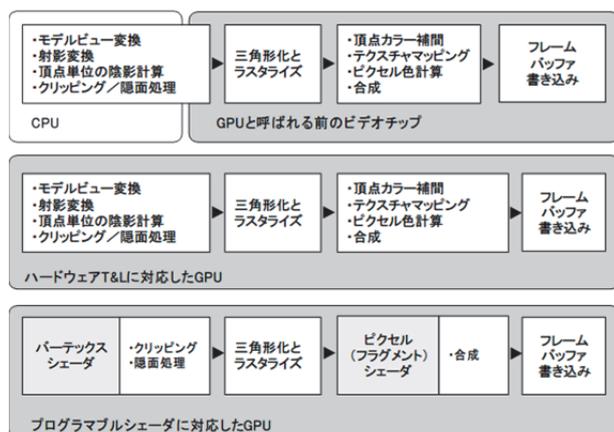


図 1：グラフィックスパイプラインの変化

特に 2001 年に発表された NVIDIA 社の GPU GeForce3 には、グラフィックスパイプラインで行う処理を自由にプログラムできる「プログラマブルシェーダ」という仕組みが搭載され話題となった。プログラマブルシェーダとは GPU 上の演算プロセッサの汎用性を高めたものであり、従来の固定機能ではなく、ソフトウェアとして機能を実装できることにより、多彩なグラフィックス表現が可能になっている。その結果、GPU は安価ながら高い演算性能を持つ並列計算ハードウェアとしても注目されはじめる。プログラマブルシェーダを駆使すれば、グラフィックス処理以外の計算も GPU で実質可能となったのである。実際、科学計算分野ではタンパク質折り畳みシミュレーション、金融分野ではストックオプション価格決定シミュレーション、医療分野では MRI の画像再構成などに GPU が応用されている。またこのようにグラフィックス計算以外に汎目的で GPU を利用することは、GPGPU(General-Purpose computing on GPUs)と呼ばれるようになった。

2006 年 NVIDIA 社が発表した GPU アーキテクチャ G80 では、本格的に GPU を汎用並列計算ハードウェアとして利用するための機能がサポートされる。本来の 3D グラフィックス計算には必要のない仕組みも導入されており、例えば、汎用の統合シェーダの演算ユニットは IEEE の単精度浮動小数点演算の要件を満たすようになり、GPU 上の演算ユニットには、ビデオメモリへの任意の読み取り、書き込みアクセスに加えて、プログラムで管理できる共有メモリと呼ばれるキャッシュへのアクセスもできるようになった。また、プログラム開発環境として CUDA の提供が開始される。これまで GPGPU のプログラム開発にはシェーダと呼ばれるグラフィックス言語を駆使する必要があったが、CUDA では C 言語とほぼ同じ言語仕様になっている。NVIDIA 社は

CUDA を使って GPU を汎用計算に使うことを GPU コンピューティングと呼ぶようになり、従来のシェーディング言語で汎用計算を行っていたときの GPGPU とは区別している。ただ一般的には CUDA を使ったプログラムも GPGPU と呼ばれることが多いのが現状である。

2008 年には、新しい NVIDIA の GPU アーキテクチャとして GT200 が発表される。GT200 では、汎用並列プロセッサとしての機能がさらに強化されている。特に科学計算分野においては待望の倍精度浮動小数点演算がサポートされた。世界で初めてスーパーコンピュータに GPU が搭載されたのも、GT200 アーキテクチャのものである。そのパフォーマンスは 1GPU で 1 TFLOPS に達しており、GPU が 1997 年のスーパーコンピュータの演算性能に追いついたことになる。さらに「Fermi (2010 年)」「Kepler (2012 年)」とアーキテクチャが刷新されるごとに、GPU コンピューティングとしての性能強化が図られている。

3. CUDA の特徴

ここからは GPU コンピューティングの開発環境である CUDA について簡単な解説を行い、その特徴をみていきたい。

3.1 ホストコードとデバイスコード

CUDA には「ホスト」と「デバイス」という概念がある。ホストが CPU と主記憶装置(RAM)のことを指しており、デバイスが GPU とビデオメモリ (VRAM)を指す。CUDA のプログラムは、ホスト上で動作する「ホストコード」と、デバイス上で動作する「デバイスコード」を組み合わせたものになっており、GPU だけではプログラムを動かすことはできない。ホストコードは、CPU によって逐次処理が行われるので、従来の C/C++で書かれたプログラムが動作する。一方のデバイスコードは、GPU によって並列処理を行うため専用の関数を定義する。この関数のことを「カーネル関数」と呼ぶ。CUDA のプログラムの流れは、ホストコードからデバイスコー

ド (カーネル関数) を呼び出すことで、GPU 上で並列計算を行う仕組みになっている (図 2 参照)。

次にカーネル関数を呼び出す具体的な方法について説明する。カーネル関数の実行単位は「グリッド」と呼ばれる。その「グリッド」はいくつかの「ブロック」で構成され、「ブロック」もいくつかの「スレッド」で構成されるという階層構造になっている。そのためホストコードからカーネル関数を実行するときは、「ブロック」の数と「スレッド」の数を指定する必要がある。図 3 に実際のプログラム例を示す。関数を呼び出す際、関数名とカッコ「()」の間に三重カッコ「<<<>>>」を付けて、ブロック数とスレッド数を指定している。

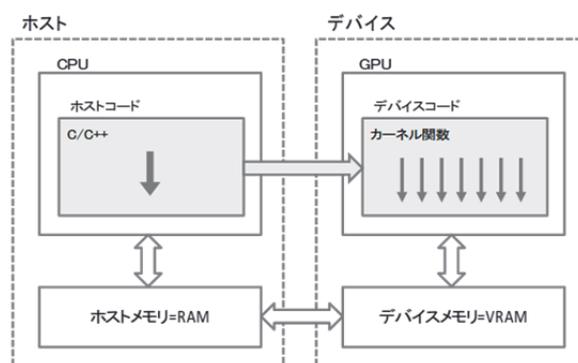


図 2 : ホストとデバイス

```

_global_ void kernel() {
    printf("blockID:%d, threadID:%d\n", blockIdx.x,
threadIdx.x);
}
int main( void ) {
    kernel <<<2, 3>>>();
    cudaThreadSynchronize();
    return 0;
}

```

図 3 : カーネル関数を呼び出すプログラム例

CUDA の「デバイス」「グリッド」「ブロック」「スレッド」という階層は、GPU のハードウェア構成が反映されたものである。「デバイス」が一つの GPU に対応する。グラフィックボードを複数挿すことも可能なので、デバイスが複数ある場合もある。デバイスの下位概念として「グリッド」はある。1 デバイス (1GPU) に 1 グリッドが対応する。

GPU の階層構造を図 4 に示す。GPU には、「スト

リーミング・プロセッサ(SP)」という最小単位の演算プロセッサがある。SPは「CUDA コア」とも呼ばれる。この SP がいくつかまとまって「ストリーミング・マルチプロセッサ(SM)」が構成されている。このプロセッサの階層構造が、CUDA の「スレッド」と「ブロック」に対応している。つまり、ブロックが SM、スレッドが SP に対応している。ハードウェア的に見れば、同一 SM 内の SP 同士のみがスケジューラ、シェアードメモリを共有することになる。

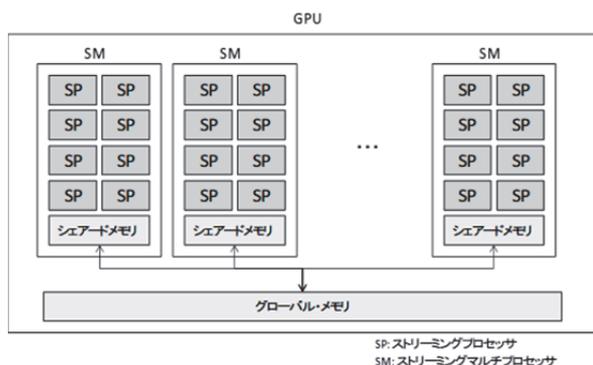


図4：GPUの階層構造

また、CUDA には「ウォープ(Warp)」という概念がある。ウォープとは、ストリーミング・マルチプロセッサ(SM)がスレッドを一つのグループにして管理する単位のことである。SM 内には、一つしか命令管理機能が搭載されていないため、同じウォープ内のスレッドは同じ命令が実行される。これは SIMD(Single Instruction Multiple Data)と呼ばれるプログラミング・モデルである。一方、異なる SM 間のスレッド同士では異なる命令を実行することができ、スレッド全体で見れば、同じプログラムが実行される。これは SPMD(Single Program Multiple Data)と呼ばれるプログラミング・モデルである。SIMD がすべてのスレッドが同じ命令を実行するのに対し、SPMD は、プログラムが同じでもすべてのスレッドで同じ命令が実行されるとは限らない。例えば、プログラム内に if 文のような条件分岐があれば、スレッド間で異なる命令が実行される。しかしながら、SIMD となる同一ウォープ内のスレッドでもプログラムで条件分岐は扱える。CUDA ではその場合ウォープ単位でプログラムの分岐を判断し、ウォープ内のスレッド同士で分岐方向が異なるときは、両方の

分岐先の命令が実行される。ただし、単純に二つの命令を実行してしまうと、計算結果がおかしくなるため、スレッドは命令を実行しながら、その命令を有効にするか、無効にするのかを切り替えている。このように分岐先の命令がすべて実行されるということは、分岐が多くなれば、実行する命令数が増え、その結果、実行速度の低下につながる。このような状態は「ウォープ・ダイバージェント」と呼ばれ、それを避けるため、プログラムではウォープの単位を意識することも必要となる。

3.2 CUDAのメモリモデル

CUDA のスレッドが扱えるデータは「デバイスメモリ」上のデータのみである。ホストコードとデバイスコードではそれぞれメモリ空間が異なっているため、ホストコードでホストメモリ上のデータにアクセスし、デバイスコードでデバイスメモリ上のデータにアクセスする。またホストコード側からデバイスメモリの確保やデータのコピーなど制御を行う必要があり、そのための API が用意されている。

一般的に、CPU でも GPU でもメモリへのアクセス速度が性能上のボトルネックになるケースが多い。CPU がアクセスするホストメモリ(RAM)は、その間にキャッシュメモリと呼ばれる高速小容量のメモリを介して、ホストメモリへのアクセスを減らす仕組みがある。ただプログラマがキャッシュメモリを意識するのは相当パフォーマンスを要求される一部のプログラムに限られている。GPU がアクセスするデバイスメモリ(VRAM)も、GPU がデータを読み書きする際には、GPU 上の高速小容量のオンチップメモリによってデータ転送効率を向上させる階層的なメモリモデルになっている。ただし、デバイスコードはホストコードと異なり、GPU のメモリの種類とその特徴を意識してプログラミングすることで、パフォーマンスが大きく影響される。

CUDA のメモリの種類を図5に示す。この中でも「シェアードメモリ」は同一ブロック内のスレッドでデータを共有することができる高速小容量のオンチップメモリであり、CUDA プログラミングを最適

化するのに非常に重要な役割を果たす。ただし、GPU のアーキテクチャが刷新されるごとに、キャッシュメモリが搭載されるなど、上記のようなハードウェア構造を意識しなくても、ある程度のパフォーマンスが出るようになってきている。

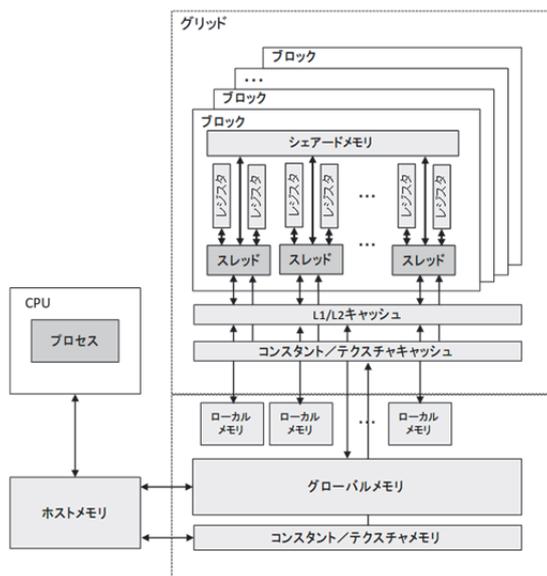


図5: CUDAのメモリモデル

4. 応用事例（群集シミュレーション）

CUDA の具体的な応用事例として群集シミュレーションを取り上げ、CPU のみの逐次処理との性能比較を行った。群れを表現するためのアルゴリズムとしては Boids[1]を使用する。Boids とは、Separation、Alignment、Cohesion の三つの行動ルール（図6）によって鳥や魚の群れを表現するものであり、各個体の動きを運動方程式によって記述し、タイムステップごとにその位置を更新していくものである。

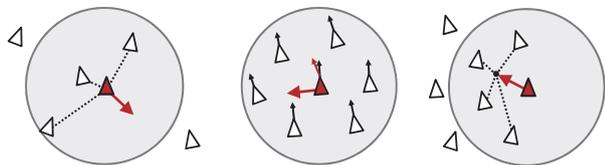


図6: Boidsモデルの三つの行動ルール

個体の数を変化させながら、1ステップにおけるカーネル関数を実行するのに要した時間を計測した結果を図8に示す。CPUの計算では、個体の数が増えると、処理時間が指数関数的に増加しているのに

対し、GPUのほうはほぼ線形となっており、スケーラビリティに優れているといえる。個体の数が少ない段階、特に個体が10程度であればCPUのほうがかえって高速であるが、個体数が増えていくごとに、GPUのほうが高速に処理できていることがわかる。

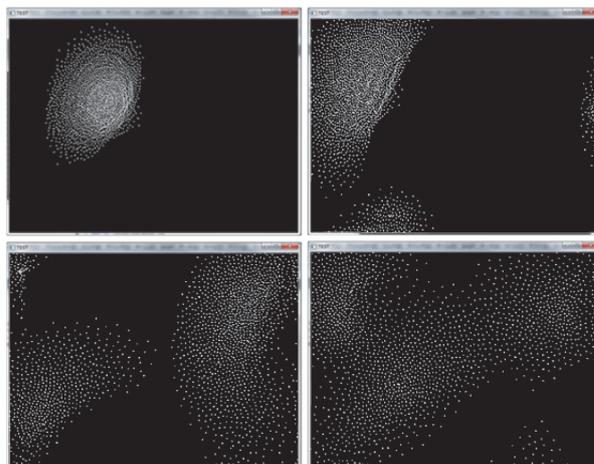


図7: シミュレーションの実行画面

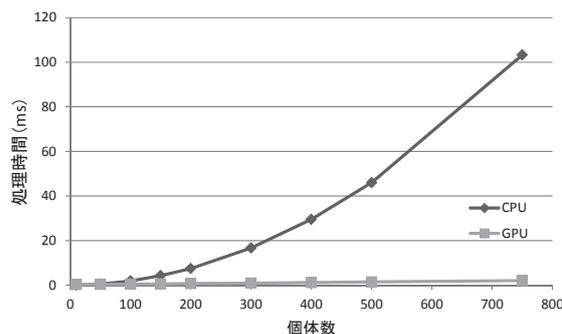


図8: CPUとGPUの比較

5. おわりに

GPU を活用した並列コンピューティングによって、従来リアルタイムでは困難だった汎用計算をインタラクティブにシミュレーションすることができれば、数値計算だけで解析を行っていた研究が飛躍的に進む可能性がある。また、GPUコンピューティングは、本来GPUが性能を発揮する可視化との連携が取りやすいのも特徴であろう。

参考文献

(1) Craig W. Reynolds: Flocks, Herds, and Schools: A Distributed Behavioral Model, Siggraph' 87, pp.25-34, 1987.7

研究報告

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

- 高速電子ビームガイディングによる高速点火核融合のコア加熱高効率化 ----- 19
城崎 知至 広島大学大学院工学研究院

- 原子核の多体共鳴状態の研究 ----- 23
明 孝之 大阪工業大学工学部

- SX-9を用いた乱流場における非平衡エネルギースペクトルの抽出 ----- 27
高橋 雄太、堀内 潔、増田 雄一 東京工業大学大学院理工学研究科

- 格子ゲージ理論におけるエンタングルメント・エントロピー ----- 33
中川 義之 新潟大学大学院自然科学研究科

- First-Principles Calculations of Structure and Magneto-Electric Properties of Co-Doped Bismuth Ferrite -- 37
Dan Ricinchi 東京工業大学大学院総合理工学研究科

高速電子ビームガイディングによる高速点火核融合のコア加熱高効率化

城崎 知至

広島大学 大学院工学研究院 エネルギー・環境部門

1. はじめに

コーンガイド高速電子加熱による高速点火方式レーザー核融合[1]では、超高強度レーザー照射によりコーン内で生成される高速電子がコーンチップから爆縮コアまでの $50\mu\text{m} \sim 100\mu\text{m}$ の距離を伝播し、爆縮コアにてその運動エネルギーを付与し、コアを点火温度まで加熱する。核融合点火を実現し、高利得を達成するには、高速電子ビーム特性のコントロール(加熱レーザーから高速電子へのエネルギー変換高効率化、高速電子スペクトルの最適化、ビーム発散角の最小化、コアまでの高速電子ガイディング等)が最も重要な課題の一つである。これまでの研究[2]より、高速電子ビームは生成時に非常に大きな発散角を有する(全角で $\sim 100^\circ$)事が明らかになり、加熱効率を低下させる主要因となっている。高速電子ビームガイディングの手法として、自己磁場を用いた方法がいくつか提案されている(拡張二重コーン[2]、多層コーン+ガイディングワイヤー[3])。また、外部磁場を印加する方法[4]も提案されている。

本研究では、抵抗性自己磁場による高速電子ビームガイディング方について、2次元輻射流体コード、粒子(2D PIC)コード、フォッカープランク(2D FP)コードを結合した統合シミュレーション[2]によりその基礎特性を評価し、加熱効率向上を目的としたビームガイディングコーンデザインの提案を行った。

2. 高速電子生成時のビーム発散角

2D PIC シミュレーションにより高速電子ビームの発散角を評価した[2]。シミュレーションでは、開き角 30° (全角)の金コーンに強度 $3 \times 10^{19} \text{W/cm}^2$ 、パルス長 1ps の超高強度レーザーを照射し、生成した高速電子の分布関数 $f_{fe}(E, \theta, y, t)$ (E, θ, y および t はエネルギー、運動方向の極角、伝播垂直方向の位置および時間)をコーンチップ内で観測した。シミュレーシ

ョン条件や結果については参考文献[2]に詳述してある。観測した高速電子の角度分布については、“粒子”分布の広がり $f_{fe,n}(\theta) = \iiint f_{fe}(E, \theta, y, t) dt dy dE$ とエネルギーを掛けて評価した“エネルギー”分布の広がり $f_{fe,E}(\theta) = \iiint E \cdot f_{fe}(E, \theta, y, t) dt dy dE$ によって評価した。シミュレーションで得られた角度広がりの一例を図1に示す。両分布とも最大値を1となるように規格化している。また、 $0 \sim \theta$ までに占める割合 $F_{fe,n}(\theta) = \int_0^\theta f_{fe,n}(\theta') d\theta' / \int_0^{2\pi} f_{fe,n}(\theta') d\theta'$ 、 $F_{fe,E}(\theta) = \int_0^\theta f_{fe,E}(\theta') d\theta' / \int_0^{2\pi} f_{fe,E}(\theta') d\theta'$ も同時にプロットした。“粒子”分布ならびに“エネルギー”分布の広がりともに指数関数 $A \exp(-\theta/\Delta\theta)$ によりフィットでき、 $\Delta\theta$ の値は、 $f_{fe,n}(\theta)$ および $f_{fe,E}(\theta)$ に対してそれぞれ 75° と 55° であった。また、ビームエネルギーの50%が $\theta < 30^\circ$ に、90%が $\theta < 60^\circ$ に含まれる。このようにビーム広がりが大きいため、発生した高速電子の多くは爆縮コアに向かわず、結果として加熱効率低

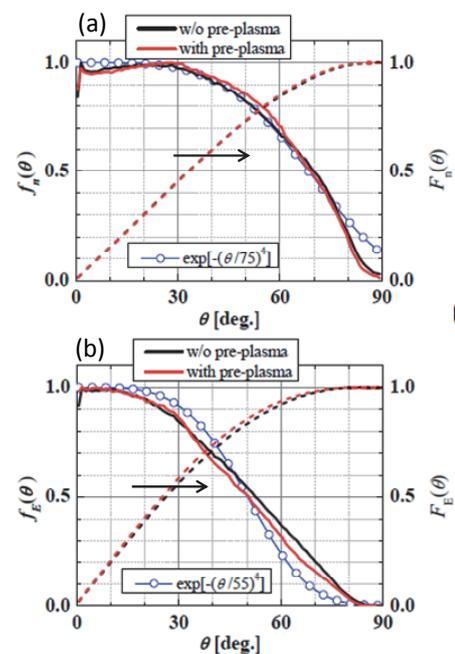


図1 発生した高速電子の(a)“粒子”ならびに(b)“エネルギー”分布の角度広がり。

減の主因となっている。加熱効率向上の方策としては、発生する高速電子の発散角が小さくなるようレーザープラズマ相互作用をコントロールすることがまず挙げられるが、非線形過程である相互作用のコントロールは極めて困難である。そこで我々は、発生後の電子ビームの伝播において、ビームガイディングによる加熱率向上を考えた。

3. 先鋭トンガリチップコーンによる抵抗性自発磁場ガイディング

高密度プラズマにおける磁場の生成は、ファラデーの法則、オームの法則ならびにビーム電流とバルク電子による帰還電流間での準電流中性条件 ($\vec{j}_{fe} = -\vec{j}_{be}$)より導出される。

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \eta(\nabla \times \vec{j}_{fe}) + \nabla \eta \times \vec{j}_{fe} \quad (1).$$

ここで η はプラズマ抵抗率である。(1)式左辺第1項により生成される磁場による高速電子ビームの自己収束効果についてはいくつかの報告が成されている[5,6]。しかし、高速電子ビームの発散角が大きい場合、自己収束効果は期待できない。(1)式左辺第2項は、抵抗率の空間勾配と高速電子ビームの伝播方向とが非平行な場合に磁場が生じることを意味している。高速電子が高抵抗率領域から低抵抗率領域に抜けようとする場合、この磁場は高抵抗率領域に高速電子を閉じ込める効果を持つ[7]。この機構を利用し、高速電子をコアまでガイドする方法として、我々は先鋭トンガリチップコーンを提案した(図2)。通常コーンの先端部(チップ)をコア方向に拡張し、且つ先端部を絞り込むことで、コーン外側壁の物質境界に抵抗性磁場が生成し、高速電子をチップ内に閉じ込め、コア方向へとガイドするとともにビーム径を絞ることが可能と考えた。数 MeV の高速電子を

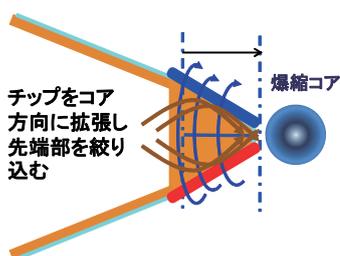


図2 先鋭トンガリチップコーンの概念図。

閉じ込めるためには数 kT の磁場が必要となる。Au のような高Z物質の方が抵抗率の空間勾配が大きく、発生する磁場強度も大きくなるが、このような高Z物質中では高速電子とバルク粒子間の衝突によるエネルギー損失や散乱が大きくなり、ガイディング効果を打ち消す可能性もある。そこで我々は、Zの異なるいくつかの物質(Au, Cu, Al, DLC)について、ガイディング性能並びにコア加熱特性を評価した。

評価は通常のチップ先端部が平坦な Au コーン(チップ部厚み $7\mu\text{m}$)の結果と比較することで行った。

シミュレーションではまず2次元輻射流体コードにより爆縮シミュレーションを行い爆縮コア並びにチップ先端部のプロファイルの評価し、また2D PICコードにより高速電子プロファイルの評価し、両プロファイルを用いて2D FPコードによりガイディング・加熱特性評価を行った。

3.1 爆縮コアプロファイル

コーン付き CD シェルターゲットに対する爆縮シミュレーションより得られた最大圧縮近傍の燃料コアおよびコーンチップ先端部の密度プロファイルを図3に示す。上図が通常先端部がフラットな Au コーン、下図が DLC 先鋭トンガリチップコーンである。燃料コア密度ならびに面密度の最大値、最大値達成時刻にはチップ形状(フラット/先鋭とんがり)や

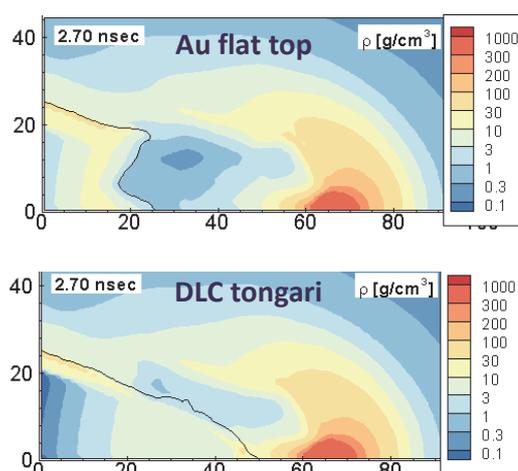


図3 爆縮シミュレーションより得られたコアおよびコーンチップの密度プロファイル。上が通常 Au フラットトップコーン、下が DLC 先鋭トンガリチップコーン。縦横軸は空間座標(r, z)で単位はミクロン。

材質(Au, Cu, Al, DLC)による差異はなく、先鋭トンガリチップによる爆縮への影響はほとんど無い。また、図中の実線はチップと爆縮プラズマの境界を示しており、トンガリチップの場合、若干形状がゆがんではあるが、コア近くまでチップ部が残っており、ガイディング効果が期待される。

3.2 高速電子プロフィール

加熱レーザー照射により発生する高速電子プロフィールは 2D PIC シミュレーションにより評価した。開き角 30° (全角) のコーン (加熱レーザーのプレパルス等により生成されるプレプラズマはないと仮定) に強度 $3 \times 10^{19} \text{W/cm}^2$ 、パルス長 1ps の加熱レーザーを照射した場合に得られた高速電子プロフィールを用いた。図 1 は、この計算より得られた高速電子の角度広がり、図 4 にスペクトルを示す。低エネルギー成分 ($E < 3 \text{MeV}$) はエネルギーの冪乗に従い、高エネルギー成分 ($E > 5 \text{MeV}$) は指数関数でフィットできる。このときの高エネルギー成分の傾斜温度は 3.2MeV であった。

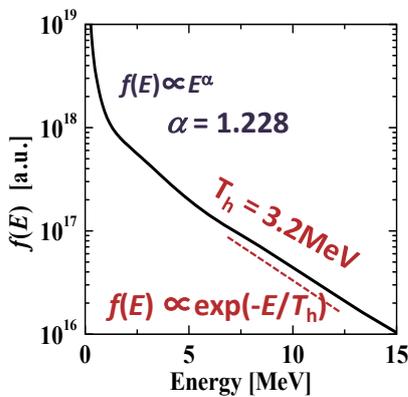


図 4 粒子シミュレーションより得られた高速電子のエネルギースペクトル。

3.3 先鋭トンガリチップコーンによる加熱特性

得られたプラズマプロフィール並びに高速電子プロフィールを用いてコア加熱特性を 2D FP シミュレーションにより評価した。高速電子ビームは爆縮コア中心までの伝播距離が $50 \mu\text{m}$ となるように、図 3 の $r = 13 \mu\text{m}$ の位置から入射した。

高速電子ビーム入射開始から 1ps 経った時点で

の磁場強度分布と高速電子の密度分布を図 5 に示す。上の 2 図が通常の Au フラットトップコーンの場合で、下の 2 図が DLC 先鋭トンガリチップコーンの場合である。Au フラットトップコーンの場合、コーン先端部が爆縮からのプラズマジェットにより押しこまれて変形しており、ここに高速電子が流れることで強い抵抗性自発磁場が形成されている。生成時に大きな発散角を持つ高速電子ビームは、この磁場によりさらに散乱され、コア領域での高速電子密度が低くなり、結果として加熱効率は低くなる。一方、DLC 先鋭トンガリチップコーンの場合、コーン側壁に沿って高速電子をチップ内に閉じ込め、コア方向にガイドする磁場が形成されている。この磁場により、比較的低エネルギーの高速電子はコアへとガイドされるため、高密度コア領域における高速電

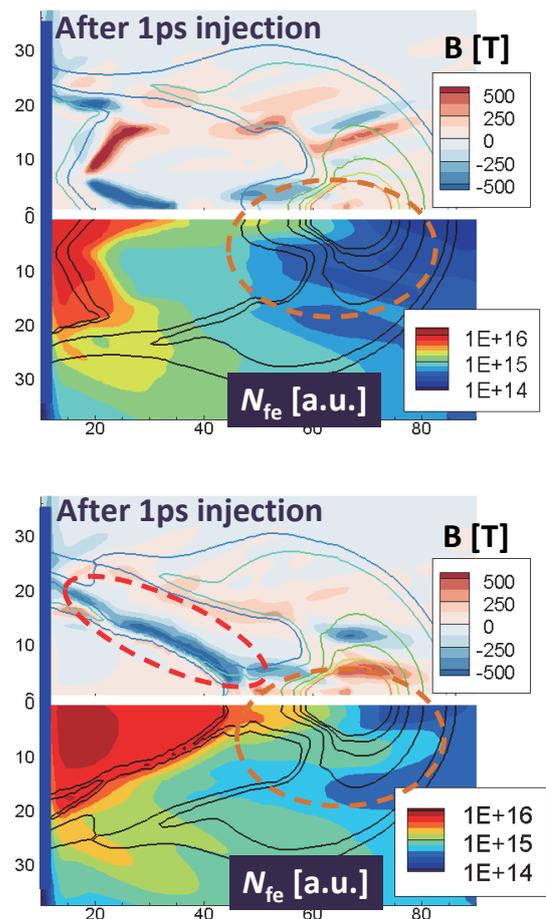


図 5 Fokker-Planck シミュレーションより得られた磁場 B と高速電子密度 N_{fe} の空間分布。上 2 図が Au フラットトップコーンで、下 2 図が DLC 先鋭トンガリチップコーンの結果。

子密度は Au フラットトップコーンの場合よりも高くなって折り、この結果、加熱効率が向上している。

前述したように、抵抗性自発磁場は抵抗率勾配が大きいほど強くなる。よって、高 Z 物質をコーンチップ材として用いた方が磁場強度は強くなる。一方、トンガリチップとしてチップ部を拡張した分、チップ内での高速電子の伝播距離は長くなり、バルク粒子との衝突効果が大きくなり、これは高 Z 材ほど顕著となるため、負の効果も生じる。そこで、チップ材を変えたシミュレーションを行い、加熱特性を比較した。表 I に、異なる材質の先鋭トンガリチップコーンにおけるコーン側壁にできる磁場強度の最大値 B_{\max} とチップ内で高速電子が失うエネルギー ΔE_{tip} 、ならびにコアに付与するエネルギー ΔE_{core} をまとめる。 ΔE_{tip} と ΔE_{core} については、Au フラットトップコーンの値を標準値とし、その値に対する相対値を示す。コーン側壁に生じる抵抗性自己磁場強度は 1kT 程度であり、高 Z 材の方が強くなっていることがわかる。このため、ガイドング効果としては高 Z 材の方が大きくなることが期待される。しかし、伝播距離が長いトンガリチップコーンでは、高 Z 材ほどチップ内での高速電子のエネルギー損失が大きくなっている。結果として、Au トンガリチップコーンの場合は後者の負の効果の方が強くなり、加熱効率は Au フラットトップコーンよりも低くなっている。中 Z 材である Al や DLC のトンガリチップコーンの場合もチップ内でのエネルギー損失は Au フラットトップコーンよりは大きくなっているが、それ以上にガイドング効果が強く、コア加熱エネルギーは Au フラットトップコーンよりも 30%程度高くなった。

表 I 先鋭トンガリチップコーンによるコア加熱特性

チップ材	B_{\max}	ΔE_{tip}^*	ΔE_{core}^*
Au	1510T	2.05	0.9
Cu	1193T	1.98	1.05
Al	1204T	1.32	1.35
DLC	767T	1.47	1.31

*Au フラットトップコーンで得られた値に対する相対値

4. まとめと今後の展望

コーンガイド高速電子加熱による高速点火の加熱率向上を目的とし、抵抗性自発磁場による高速電子ガイドングを可能とする先鋭トンガリチップコーンを提唱し、その特性評価を統合シミュレーションにより行った。中 Z 材の先鋭トンガリチップコーンを用いることで、高速電子ガイドング効果により加熱率を向上できることが示された。

今後、実験による検証や、更なる高強度・長パルスを用いた点火・燃焼クラスへの適用可能性等の評価が必要である。本研究では、輻射流体並びに FP シミュレーションは NEC SX-8 および 9 を用いて、PIC シミュレーションは PC クラスタを用いて行った。いずれも 2 次元シミュレーションである。より実際的なシミュレーションには 3 次元シミュレーションが必要であるが、計算時間やメモリ等の制限により、現状では困難である。特に PIC シミュレーションでは、PC クラスタ 32 ノード (128CPU/512GB memory) を用いた場合でも 2 次元で実スケール (時間・空間ともに) 計算を行うのは困難である。計算コードの高効率化・高並列化を行う必要があるとともに、更なる計算資源の大規模化も期待したいところである。

本研究を遂行するに当たり多大なる支援を受けた大阪大学サイバーメディアセンター並びにレーザーエネルギー学研究室高性能計算機室の方々に感謝する。

参考文献

- (1) R. Kodama, et al., *Nature* **418**, 933 (2002).
- (2) T. Johzaki, et al., *Nucl. Fusion* **51**, 073022 (2011).
- (3) P. A. Norreys, “Recent Energy Transport Experiments on the Valcan Petawatt Laser Facility”, presented at 37th EPS conf. on Plasma Phys., June 2010, Dublin, Ireland.
- (4) D. J. Strozzi, et al., *Bull. APS* **55**, 68 (2010).
- (5) R. L. Robinson, and M. Sherlock, *Phys. Plasmas* **14**, 083105 (2007).
- (6) T. Johzaki, et al., *J. Phys. Conf. Series* **112**, 022091 (2008).
- (7) B. Ramakrishna, et al., *Phys. Rev. Lett.* **105**, 135001 (2010).

原子核の多体共鳴状態の研究

明 孝之

大阪工業大学 工学部 一般教育科

1 背景 – 原子核の共鳴状態 –

原子核は核子とよばれる陽子と中性子から構成される。その原子核は量子力学がよく成り立つ系として知られている。量子力学で説明される現象の一つに、物質を構成する粒子の一部がある有限の寿命をもって放出されるものがある。歴史的に有名な現象は原子核の α 崩壊であり、不安定な原子核が α 粒子 (${}^4\text{He}$ 原子核) を放出して別の核種に変換する。この現象は 1920 年代頃にガモフらによって理論的に解かれ、量子力学に特有のトンネル効果として理解されている。一方、現在の原子核物理では様々な原子核の崩壊の性質を調べることが実験・理論両面で確立し、発展しつつある。原子核が励起され、そのエネルギーが粒子放出のしきい値よりも高いとき、ある寿命を持って崩壊する状態は「共鳴状態」とよばれる。その性質は原子核分野のみならず、宇宙における元素生成の観点からも興味を持たれている。

最近の実験の発展として、自然界に存在する安定な原子核 (安定核) に対して、陽子または中性子のどちらか一方が過剰である特殊な原子核を作ることが可能になった。あえて陽子・中性子の数のバランスを崩したこれらの原子核は不安定核とよばれ、これまで知られている原子核の常識を覆す様々な特徴を示してきた。例えば中性子ハロー構造や、魔法数の破れはその代表例である [1]。今後も不安定核を調べることで、安定核とは異なる新奇な構造や、安定核と不安定核を一括りにした原子核全体の包括的な理解が期待される。

不安定核の構造は謎が多く興味深い一方、理論的には素直に扱えない側面が幾つかある。一つ目は、従来までの標準的な原子核の模型、例えば平均場の仮定から出発する模型や、分子的状态を仮定するクラスター模型等がそのまま適用できるのか未知であること。二つ目は、原子核を結合させる源である核力 (核子間に働く力) について、その性質が安定核と不安定核ではどのように異

なるのか未知であること。陽子どうし、中性子どうしは結合しないが、陽子と中性子は結合する。陽子と中性子の数のバランスが崩れた原子核における核力の働きは興味深い。三つ目は、不安定核で観測される多くの状態が、エネルギー的には過剰な陽子や中性子を複数個放出しても構わない、すなわち粒子放出のしきい値よりもエネルギーが高く、多体の共鳴状態になっていることである。不安定核における共鳴状態が、崩壊しない安定核と比べてどのような違いや類似性を持つのかは解明すべき重要な課題である。

ここでは三つ目の問題に取り組む。不安定核にみられる多体共鳴状態は、原子核の構造を知るうえでの情報源となりうるが、それを理論的に解析するためには複数個の陽子・中性子の放出を扱える理論が必要になる。そこで筆者はこの問題を扱える理論的手法を提案した。実際にはその理論を適用したうえで量子力学がしたがうシュレディンガー方程式を解くが、そのために必要な数値計算のリソースとして大阪大学のスーパーコンピューター SX を利用している。ここでは大阪大学核物理研究センターの全国共同利用における SX を用いて、筆者が得た研究成果について紹介したい。

2 量子力学的共鳴状態の理論的記述

量子力学的共鳴状態を記述する理論 [2, 3] は様々であるが、ここでは筆者が用いている方法を紹介する。「複素座標スケールリング法」(complex scaling method) とよばれる理論であり、構成粒子間の空間座標に簡単な数学的変換を施すことにより、崩壊する共鳴状態を、崩壊しない束縛状態と同じ数学的条件で求める理論である。この理論は元来、数学分野から 1970 年代に提唱されており、現在では原子核に限らず原子・分子系やハドロン系への適用も幅広くされている [4, 5]。数学的証明は文献 [6] で与えられている。

共鳴状態はシュレディンガー方程式の解、すなわち波動関数として求まるが、境界条件が厄介である。詳細は省くが、構成粒子間の距離が互いに十分遠いとき、共鳴状態の波動関数は外向きの波として、その振幅が発散する。一方、束縛状態は振幅がゼロになるため扱いやすい。この共鳴状態の境界条件は、方程式で解くべき自由度が1つの相対運動しかない2体系では大きな問題にならない。しかし不安定核では複数個の陽子、中性子が同時に放出される自由度が存在する。そこで上述の複素座標スケール法を用いて共鳴状態の境界条件を変換することで問題を回避することができる。

ただし、この理論のみで問題が全て解決するわけではなく、変換された多体のシュレディンガー方程式を解くときに、数値精度を十分維持しつつ共鳴状態の波動関数を求めることが必要となる。そのために放出される各粒子間の相対運動を直接解くことが可能な、少数多体系、またはクラスターモデルを適用する。これらのモデルは、原子核を構成する陽子・中性子のうち、その一部分が他の核子と空間的に離れており、かつ結合エネルギーが小さいときに威力を発揮する。原子核の構造は、一般的には一中心の平均場の存在がよく成り立つと理解されるが、その一方、例えば炭素-12 (^{12}C) の励起状態には三つの α 粒子がガスのように緩く結合しあい、空間的に広がった共鳴状態が存在する。このような平均場と大きく異なる状態の記述には上記の少数多体系の手法が有効である [7]。

本研究でも少数多体系の手法に複素座標スケール法を適用して、原子核の共鳴状態を求める。この際、求めるべき真の共鳴状態の波動関数を効率よく再現するために、波動関数に対する基底展開法を用いる。基底関数にはガウス型を採用し、様々なガウス関数の広がり重ね合わせる [8]。重ね合わせの展開係数は系のエネルギーに対して変分的に決まり (正確には双変分という)、共鳴状態が安定して求まる。それはシュレディンガー方程式の固有値問題を解くことに帰着し、基本的に独立な基底数に応じて固有状態が求まる。数値的に求めた共鳴状態のエネルギーは複素数で与えられ、実部は共鳴エネルギーとよばれ、粒子放出のしきい値よりも高い正のエネルギーになる。虚部は崩壊幅を表し、崩壊の寿命の逆数に対応する。束縛状態のエネルギーは実部のみを持ち、それはしきい値からみれば負の値になり、

束縛エネルギーを表す。正のエネルギー状態には、共鳴状態の他に、寿命を持たずにただちに崩壊する連続状態も存在する。共鳴状態と連続状態は両方崩壊する状態であるため区別が難しい場合がある。一方、複素スケール法では、二種類の状態を複素エネルギー固有値の特徴から明確に区別できることが証明されている [6]。そのためには、これらの固有状態と固有値を全て求めることが必要になり、すなわち、大次元の複素固有値問題を解くことが必要になる。この観点からも大規模数値計算が可能なSXの利用が本研究には必然であった。なお、本研究での行列要素の数値計算と固有値問題の解法にはSXのベクトル化機能を活用している。

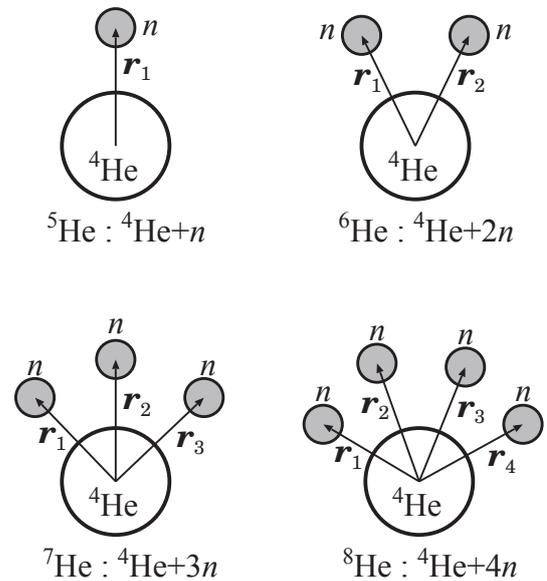


図1: ヘリウム同位体 (^5He から ^8He まで) の座標系 [9]。記号 n は中性子 (neutron) を表す。

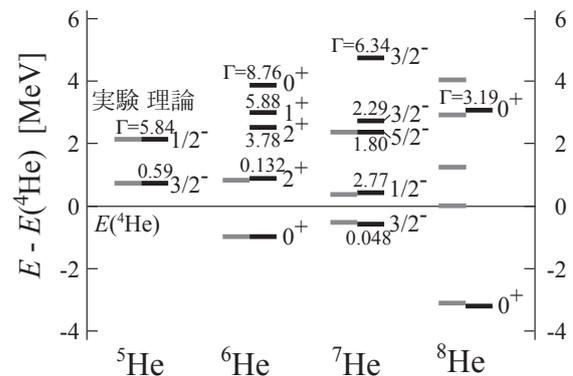


図2: ヘリウム同位体のエネルギー準位 [9]。単位は $\text{MeV} = 10^6 \text{eV}$ である。数値は崩壊幅 Γ であり、寿命の逆数に対応する。

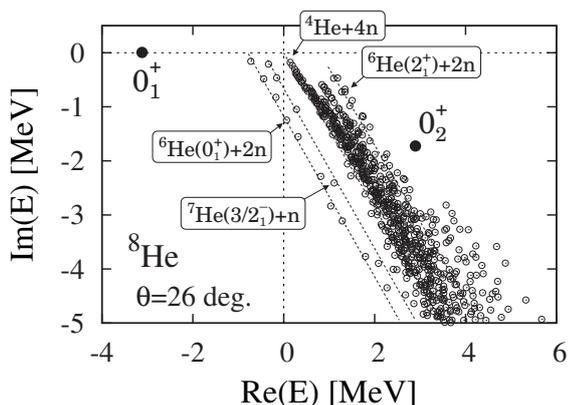


図 3: ^8He の複素エネルギー固有値の分布 [9]。 ^4He のエネルギーを基準としている。

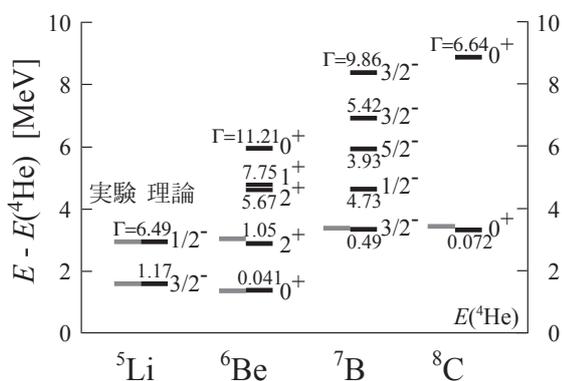


図 4: 陽子過剰核のエネルギー準位 [10]。

3 中性子・陽子過剰核における共鳴状態

ここからは筆者が最近 SX を使って出した成果を報告したい。ヘリウム同位体とその鏡映対称な原子核の共鳴状態の理論的解析である。ヘリウム同位体とは安定な ^4He 原子核に、複数個の中性子を加えて中性子過剰にした原子核である。このときどのような構造変化が見られるのかに興味をもたれている。「鏡映対称」とは、ヘリウム同位体の陽子数と中性子数をそっくりそのまま交換した別種の原子核である。例えば ^5He (陽子数 2、中性子数 3) の鏡映対称核は ^5Li (陽子数 3、中性子数 2) である。中性子過剰な原子核の鏡映対称核は陽子過剰になる。最近の実験技術の進歩により、中性子過剰と陽子過剰の両側面から不安定核の研究が進んでいる。原子核では一般的に鏡映対称性は良く、構造が似ていると認識されているが、これは核力が陽子間に働くクーロン力に比べて強いことと、陽子間と中性子間では性質がほぼ同じ

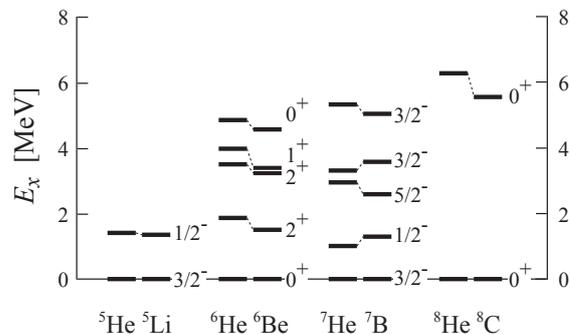


図 5: ヘリウム同位体とその鏡映対称核における励起エネルギー準位の比較。

であるためである。しかし不安定核まで領域を広げた場合に、どの程度対称性が良いのかは未知である。

本研究では、模型として ^4He 核を芯として仮定し、その周りを運動する過剰核子群の運動を解く。したがって過剰な中性子、または陽子の運動の様相を捉えることができる模型である。図 1 には、ヘリウム同位体 ^5He から ^8He まで、最大 4 個の中性子を ^4He 芯核に付加したときの座標系の図である。記号 n は中性子 (neutron) を意味する。過剰中性子を陽子に置き換えると、そのまま陽子過剰核へ適用可能になる。

3.1 ヘリウム同位体の構造

中性子過剰なヘリウム同位体のエネルギー準位を図 2 に示す。詳細な分析は文献 [9] になされている。 ^5He は $^4\text{He}+n$ の 2 体共鳴であり、 ^8He は $^4\text{He}+4n$ の 5 体共鳴になる。図 2 により、様々なスピン-パリティを持つ状態が崩壊幅 Γ まで含めて説明され、なおかつ予言値も与えられている。重要なことは、本研究によりこれらの状態を明確な多体共鳴状態として理論的に認識できることである。実験的にはこれらの共鳴状態が連続状態と重ね合わさって観測されるため、状態の選別が必要になる。実際の原子核の寿命は様々であり寿命が短いものも多い。その場合は理論的予言値との比較が重要になる。図 3 は $^8\text{He}=\text{He}+4n$ の 5 体系からなる複素エネルギー固有値の分布を、スピン 0^+ の状態のみ示したものである。束縛状態 (0_1^+) と共鳴状態 (0_2^+) が明確に得られ、残りの連続状態、例えば $^4\text{He}+4n$ などが区別されることがわかる。固有状態数は全体として約 3 万個の規模になっている。現在まで筆者のグループでは 5 体系の共鳴状態を求める段階まで成功している。ヘリウム同位体は

実験では ^{10}He まで共鳴状態として存在が確認されている。その理論的記述には $^4\text{He}+6n$ の 7 体問題を正確に解くことが要求されており、将来への課題である。

3.2 ヘリウム同位体の鏡映核の構造

次に陽子が過剰な、ヘリウム同位体の鏡映核のエネルギー準位を図 4 に示す。こちらも詳細な分析は文献 [10, 11] に与えられており、陽子間のクーロン力により、先程のヘリウム同位体と比較してどのような構造変化が起こるのかが説明されている。図 5 は中性子過剰側と陽子過剰側の原子核間での励起エネルギースペクトルの比較であり、同じスピン状態に関してエネルギー準位に類似性もあれば、有意の差を確認できるものもある。例えば ^7He と ^7B では、 ^7B に働くクーロン力の影響により鏡映対称性が破れることが理論的に示されており [11]、今後の実験による検証が期待される。

4 おわりに

筆者の研究にとって、全国共同利用研究所である大阪大学の核物理研究センターは欠くことのできない存在であり、センターを通じたスーパーコンピューター SX の利用は研究を進める上で必然的なツールである。本研究のような多体問題を取り扱う研究は、数値計算への依存度が大きく、数値解を求めることで初めて理解できる結果が多い。また基底展開法にしたがう模型の近似解が、真の解に対してどの程度の精度であるのか調べることは重要であり、要求する精度によって数値計算の規模は変化する。その点において SX は、様々な規模の数値計算に対応可能であり、自らの研究計画との調整がおこないやすい施設である。最後に、筆者のような小規模な大学に所属する研究者にとって大規模な計算機が自由に使える環境の存在は非常にありがたく、それにより研究活動が維持されているといっても過言ではない。今後もこのような運用をして下さることを希望している。

参考文献

[1] I. Tanihata *et al.*, Phys. Rev. Lett. **55**, 2676 (1985).

[2] S. Aoyama, T. Myo, K. Katō, and K. Ikeda, Prog. Theor. Phys. **116**, 1 (2006).

[3] N. Hatano, K. Sasada, H. Nakamura, and T. Petrosky, Prog. Theor. Phys. **119**, 187 (2008).

[4] Y. K. Ho, Phys. Rep. **99**, 1 (1983).

[5] N. Moiseyev, Phys. Rep. **302**, 211 (1998).

[6] J. Aguilar and J.M.Combes, Commun. Math. Phys. **22**, 269 (1971). E. Balslev and J.M. Combes, Commun. Math. Phys. **22**, 280 (1971).

[7] Y. Funaki, T. Yamada, H. Horiuchi, G. Röpke, P. Schuck, and A. Tohsaki, Phys. Rev. Lett. **101**, 082502 (2008).

[8] E. Hiyama, Y. Kino and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51**, 223 (2003).

[9] T. Myo, R. Ando, and K. Katō, Phys. Lett. B **691**, 150 (2010).

[10] T. Myo, Y. Kikuchi and K. Katō, Phys. Rev. C **85**, 064306 (2012).

[11] T. Myo, Y. Kikuchi and K. Katō, Phys. Rev. C **84**, 064306 (2011).

SX-9 を用いた乱流場における非平衡エネルギースペクトルの抽出

高橋 雄太、堀内 潔、増田 雄一

東京工業大学 大学院理工学研究科 機械宇宙システム専攻

1. はじめに

流体乱流の特徴は、エネルギーを包含する大きなスケールからエネルギーの粘性による散逸が生じる小スケールに渡る広範なスケールの成分から構成される点にある。前者は、integral スケール (以下、 L)、後者は Kolmogorov スケール (η) と呼ばれるが、Navier-Stokes 方程式

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k \partial x_k} + f_i \quad (1)$$

の直接数値積分(DNS)では、この全てのスケールを網羅する必要が生じる。そのための格子点数は、3次元計算では、概ね $\text{Re}^{9/4}$ のオーダーと見積もられる。ここに、 Re はレイノルズ数を示す。乱流エネルギーのスペクトル $E(k,t)$ は、エネルギーを包含する領域と粘性による散逸の生じる領域、および両者の中間領域から成るが、 Re が大きくなるにつれてこの2スケールの分離が明確になり、両者の中間領域には Kolmogorov の-5/3 乗則[1]と呼ばれるべき乗則に従う波数帯が形成される。エネルギースペクトルの支配方程式は、

$$\frac{\partial E(k,t)}{\partial t} = -2\nu k^2 E(k,t) + T(k,t) + F(k,t) \quad (2)$$

で与えられ、初項は散逸項、第2項の $T(k,t)$ はエネルギー伝達関数、第3項は外力項を表す。 $T(k,t)$ は、

$$T(k,t) = -\frac{d}{dk} \Pi(k,t), \Pi(k,t) = \int_k^\infty T(k',t) dk' \quad (3)$$

と表され、 $\Pi(k,t)$ はフラックス関数である。Kolmogorov 則は、大スケールの渦の小さなスケールの渦へのカスケード過程を記述し、乱流統計理論の基礎を成すが、式(2)において、 $\Pi(k,t)$ が定常的に散逸率 ε に等しい一定値を取るという平衡性を仮定した場合に得られる。正確な乱流解析には、数オクターブに渡る Kolmogorov 則に従う領域を有するデータが必須であるが、その計算に必要な格子点数は飛躍的に増加する。

スペクトルの解析を行うのに有用な流れ場の一つは、全ての空間方向に一様性を仮定する一様等方乱流である。その一様性から、全ての変数のフーリエ級数展開が可能となり、FFT を用いた高速変換が適用できるため、古くから乱流研究の標準的な流れ場となり、同時に各時代におけるスーパーコンピュータのベンチマークテストの対象ともなって来た。過去幾多の大規模計算が行われて来ており、近年で最も著名な計算は、地球シミュレータを用いた 4096^3 の格子点上の計算である [2]。米国では、現在 8192^3 の計算も計画・実行されているようであるが、データの詳細は公開されていないようで、上述の計算は実行後 10 年を経た今日においても最大級の計算となっている。

2. 一様等方乱流の DNS

乱流解析においては、定常な状態での統計量の解析が必要となるため、外力の印加により統計的に定常な状態を実現する場合が多い。本稿で取り上げる流れ場もそうした場である。DNS データの生成には 2048^3 の格子点を用い、流れは非圧縮とし、計算領域の長さを全方向に 2π 、動粘性係数は $\nu=1.38 \times 10^{-3}$ 、時間刻みは $\Delta t=0.0005$ とした。空間の離散化にはフーリエ展開による擬スペクトル法を用いたため、計算負荷の最も大きな要素は、3次元 FFT である。変数の積において発生するエイリアシング誤差は全て $3/2$ 則を用いて除去した。このため、実質的には 3072^3 の格子点数による計算に相当する。時間積分には低記憶容量型 3次精度 Runge-Kutta 法を用いた。DNS の計算は、SX-9 の 4 ノード、計 64 プロセッサを用い、総主記憶容量 2.65 TB で行われた。3次元 FFT は、2方向に 2次元 FFT を施した後に残り 1方向に FFT を施す方式としたため、この 1方向の全てのデータを得るためのデータ通信が発生する。そのため、FFT そのものは、36 Gflops 程度で実行されているが、

全体の実効値は、7 Gflops 程度に低下している。

外力は、時間に関して相関を持たず統計的に等方性が保持されるものとして、独立なガウス乱数ベクトル $\alpha(k)$, $\beta(k)$ を用いてフーリエ空間において、

$$f(\mathbf{k}, t) = \sqrt{\frac{E_f(k)}{16\pi k^4 \Delta t}} \{ \mathbf{k} \times (\alpha(\mathbf{k}) + i\beta(\mathbf{k})) \} \quad (4)$$

$$E_f(k) = \begin{cases} c_f, & (0 \leq k \leq 1) \\ 0, & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

として与え、各ステップごとに注入した[3]。

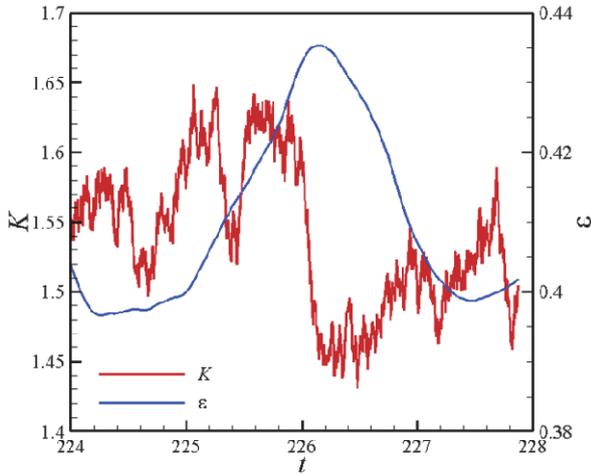


図1 乱流エネルギーと散逸率の時間発展

この乱流場の特性を紹介するために、図1に乱流エネルギーとその散逸率の時間発展を示す。図1には、全計算領域における平均値の時間発展を示したが、以下の特長が見て取れる。それは、両統計量が長時間平均値からの概周期的な変動を示す点、ならびに、散逸率の変動が乱流エネルギーのそれに比べて時間的な遅れを示す点である。この概周期的な変動の存在が本稿で着目する点であるが、これは、実際の乱流場における強い非平衡性の存在を示唆する。以下、全時間帯を、散逸率が増加する時間帯 Phase 1 と減少する時間帯 Phase 2 に分類した解析を行う。

表1に、DNSデータの概要と各Phaseにおける統計量の平均値を示すが、各Phaseは互いに異なる特性を有しており、例えば乱流エネルギーはPhase 1の方がPhase 2よりも大きいのに対し、散逸率はPhase 2の方が大きい事が見て取れる。また、Phase 1における L あるいは Taylor microscale といった長さ

$k_{\max} \bar{\eta}$: grid resolution, R_λ : Taylor microscale Reynolds number, \bar{K} : average kinetic energy, $\bar{\varepsilon}$: average dissipation rate, L : integral length scale λ : Taylor microscale, $\bar{\eta}$: average Kolmogorov length, $\overline{u_i f_i}$: average rate of energy addition

	Total	Phase 1 ($\dot{\varepsilon} > 0$)	Phase 2 ($\dot{\varepsilon} < 0$)
$k_{\max} \bar{\eta}$	2.443	2.448	2.337
R_λ	399.8	404.1	393.4
\bar{K}	1.540	1.549	1.526
$\bar{\varepsilon}$	0.4158	0.4119	0.4216
L	1.384	1.397	1.378
λ	0.1627	0.1639	0.1609
$\bar{\eta}$ ($\times 10^{-3}$)	2.388	2.393	2.379
$\overline{u_i f_i}$	0.410		

表1 2048³ DNS データの諸統計量

スケールがPhase 2における値よりも大きく、Phase 1の方がPhase 2に比べて大きなスケールの渦が存在する事が判る。

上述の時間遅れは、ほぼ $T_L (= L/u')$ の値と一致し、乱流の integral スケールから小スケールへのカスケードの特性時間を与える。また、この概周期的な変動の周期は T_L の数倍となる。ここに、 u' は速度変動の rms 値である。本研究では、非定常性の正確な捕捉のため、統計量、伝達関数、フラックス関数等を細かな時間ステップ（ここでは、1 ステップ置き）で計算している。この計算には多大な時間を要するため、1 ステップ当たり約 380 秒の CPU 時間が必要となる。更に信頼できる統計量を得るには 100 T_L 程度の時間に渡る平均を施す必要があるが、現在までの総計算時間は約 3,800 時間 (150 日) に及ぶものの、7.4 T_L 程度の平均を施したにすぎない現状である。なお、乱流場の格子解像度の指標として用いられている $k_{\max} \bar{\eta}$ 値であるが、通常を目安とされている $k_{\max} \bar{\eta} \approx 1.0$ に較べて、本計算では約 2.5 と大きめな値に設定しているが、これは乱流の散逸場の十分な解像には $k_{\max} \bar{\eta} \approx 3.0 \sim 4.0$ が必要という報告に基づいている [4]。このため、レイノルズ数 R_λ は過去の計算 [2, 3] に比べて低い値となっている。

上述の無視できない強度を持つ概周期的変動の存在は、エネルギースペクトルにも反映されていると

考えられる。すなわち、全時間スケールでの平均を施した場合は Kolmogorov 則に従うスペクトルが抽出されるものの、Phase 1 と Phase 2 に分離した抽出を施した場合は、Kolmogorov 則に従わない可能性も考えられ、特に $-5/3$ 乗と異なる特性的なべき乗則を示すか否かという一つの疑問が生じる。

3. 非平衡エネルギースペクトルの抽出

上述の疑問に対する解答は、統計理論によって与えられる。Yoshizawa [11]は変動スペクトルが示す挙動の解析を目指して、direct-interaction approximation を用いて Kolmogorov の $-5/3$ 乗スペクトルを基本解としたエネルギースペクトルの摂動展開を行い、展開の次項が $-7/3$ の勾配を持つ冪乗成分から成る事を示した。Woodruff and Rubinstein [12] は multi-scale 摂動法を一様等方乱流におけるスペクトル理論で用いられる Heisenburg model に適用した。このモデルは、エネルギー伝達関数のスペクトルをスペクトルの汎関数として近似し、様々な運動スケール間の非線形相互作用の適切な完結を与えるが、同じ $-7/3$ 乗の成分が得られる事を示した。この摂動展開を2次項まで継続すると、次式が得られる。

$$E(k) \approx C_K \varepsilon^{2/3} k^{-5/3} + C_1 \dot{\varepsilon} \varepsilon^{-2/3} k^{-7/3} + C_2 (\ddot{\varepsilon} \varepsilon^{-1} - \dot{\varepsilon}^2 \varepsilon^{-2}) k^{-9/3} + \dots \quad (5)$$

ここに、 $\dot{\varepsilon}$ は散逸率 ε の時間に関する微分であり、この展開のパラメータは $\dot{\varepsilon}/\varepsilon$ となっている。上式は階層的なスケール指数を含んだスペクトルから成り、第2・3項は散逸率 ε の変動によって誘起される。そのため、この式の長時間平均を取ると、第2・3項は消去される。したがって、通常の長時間平均では平衡性を仮定した $-5/3$ 乗のスペクトルのみが抽出されるのに対し、 $\dot{\varepsilon}$ の符号に対する条件付き平均を施し、スペクトルを $\dot{\varepsilon}$ が正值をとる Phase 1 と負値をとる Phase 2 に分類した場合には非平衡成分が得られる可能性が示唆される。そこで、上述の DNS データを用いて非平衡成分の抽出を試みる。

図2に、この条件付き抽出の結果を示す。赤線は全時間帯での平均 $E_0(k)$ を、青線は $\dot{\varepsilon} > 0$ での時間帯の平均スペクトルと $E_0(k)$ との差 $E_1^+(k)$ の絶対値を示し

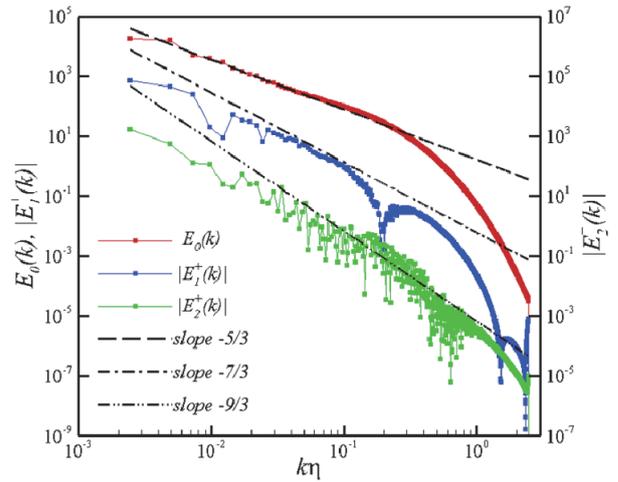


図2 2048³ の DNS データより得られたエネルギースペクトルの分布

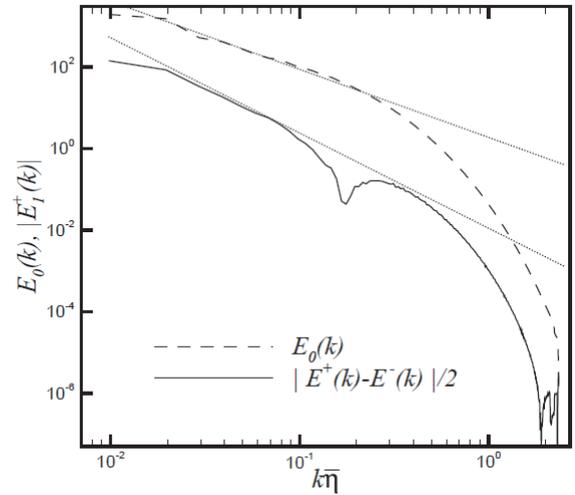


図3 512³ の DNS データより得られたエネルギースペクトルの分布

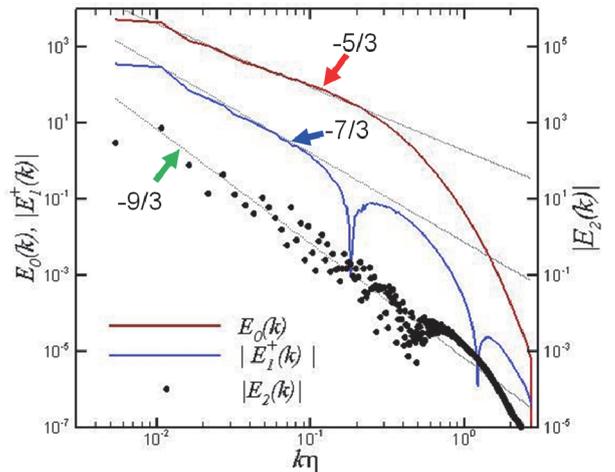


図4 1024³ の DNS データより得られたエネルギースペクトルの分布

ており、中間領域において $E_0(k)$ は $-5/3$ 乗則に、 $E_1^+(k)$ の絶対値が $-7/3$ 乗則に従うことが確認でき、理論の予測通り、実際に $-7/3$ 乗スペクトルが存在する事がわかる。格子点数に対する依存性を見るために、図 3 には 512^3 の DNS データ、また、図 4 には 1024^3 の DNS データを用いた同様な抽出結果を示す。これらの図に見るように、格子点数とレイノルズ数が上がる (512^3 では $R_\lambda=158.8$ 、 1024^3 では $R_\lambda=243.3$) につれて、Kolmogorov の $-5/3$ 乗則ならびに非平衡成分の $-7/3$ 乗則に従って分布する波数領域が拡大する。なお、 512^3 および 1024^3 の場合では、約 $50 T_L$ に渡る統計平均を施しているため、その分布は滑らかなものになっているのに対して、 2048^3 の場合 $-7/3$ 乗からの若干の乖離が見て取れ、統計平均が不十分な事が示唆される。

図 1 に見られる概周期的な変動では、乱流エネルギーの小スケールへのカスケードに伴ってエネルギーが減少して散逸が増加するが、その後、再びエネルギーの増加が起きる。このような再生が可能になるためには、integral スケールのような大きなスケールへのエネルギーの注入が必要であるが、この再生機構を、ここで抽出された非平衡スペクトルによる伝達関数を用いて検証してみる。

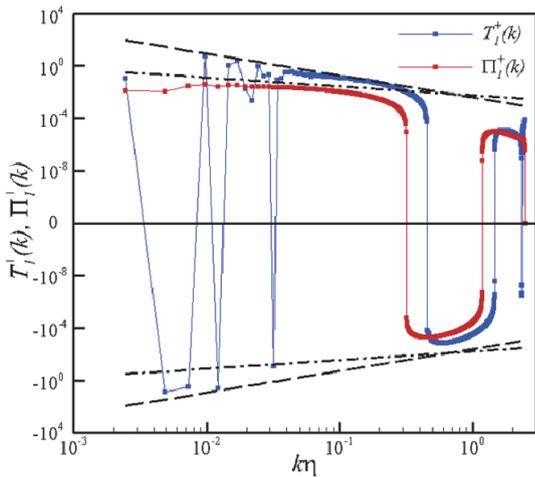


図 5 2048^3 の DNS データより得られた Phase 1 におけるエネルギー伝達関数とフラックスの分布

図 5 に Phase 1 におけるエネルギー伝達関数

$T(k,t)$ とフラックス $\Pi(k,t)$ の分布を示す。 $T(k,t)$ の正值は、その波数におけるエネルギーの gain を示し、負値はその loss を示す。 $k \bar{\eta} \leq 0.01$ の低波数帯では $T(k,t)$ は負値から正值に転じ、 $\Pi(k,t)$ は $k \bar{\eta} \leq 0.3$ の波数帯でほぼ一定の正值を取っている事から、低波数帯では高波数帯へのカスケード (forward scatter) が生じている事が見て取れる。しかしながら、 $k \bar{\eta} \leq 0.5$ の領域には $T(k,t)$ 、 $\Pi(k,t)$ 共に負値の領域が存在し、この領域ではエネルギーの小スケールから大スケールへの逆向きのカスケード (backward cascade) が生じている。なお、図中の破線は理論による $T(k,t)$ と $\Pi(k,t)$ の分布の予測値を示すが、DNS データと一致している。

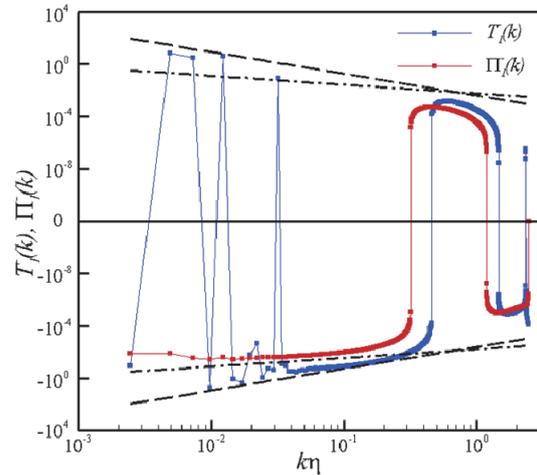


図 6 2048^3 の DNS データより得られた Phase 2 におけるエネルギー伝達関数とフラックスの分布

図 6 に Phase 2 における $T(k,t)$ と $\Pi(k,t)$ の分布を示す。図 5 に見られた backward cascade の領域は低波数帯に拡大し、 $0.03 \leq k \bar{\eta} \leq 0.3$ の領域では $T(k,t)$ 、 $\Pi(k,t)$ 共に負値で、 $k \bar{\eta} \leq 0.03$ では $T(k,t)$ は正值に転じている事から、backward cascade による低波数帯でのエネルギーの蓄積が起きている事が判る。蓄積されたエネルギーは、引き続く Phase 1 において高波数帯へ伝達され、この過程が準周期的に反復される。

式(5)は、 $-7/3$ 乗成分の高次項として $-9/3$ 乗の項が存在する事を示唆する。この項の係数は ε の 2

階微分を含むため、 ε が極大もしくは極小値を取る時間帯での条件付抽出を行なった。その結果を、図 2 の緑色の線と図 4 の黒点で示したが、実際、概ね $-9/3$ 乗の勾配に沿って分布している。この抽出を行なった時間帯は Phase 1 から Phase 2 への遷移期 (Phase T) であり、Phase T においては $-9/3$ 乗項がエネルギー伝達を司る。

4. 非平衡スペクトルと乱流構造の相関

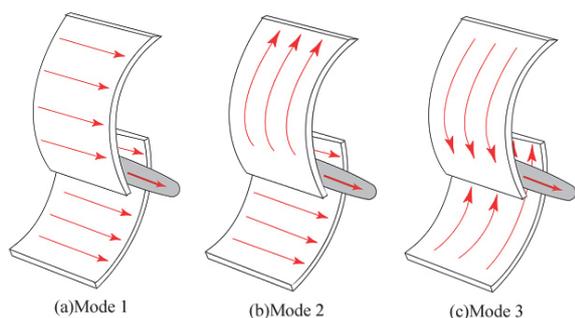


図 7 多重モード spiral vortex の渦層と渦管上における渦度ベクトルの分布 (a) Mode 1, (b) Mode 2, (c) Mode 3。

前節までは、 $-5/3$ 、 $-7/3$ 、 $-9/3$ 乗成分のフーリエ空間での解析を進めて来たが、これらのスペクトルと実空間との相関に関心が持たれる。そこで、本節では、非平衡スペクトルと乱流場中に存在する渦構造との相関に触れる。乱流中の渦構造は旋回運動を伴う管状の渦管と層状の構造を持つ渦層に大別されるが、両者は完全に分離されるものではなく混在した構造がしばしば見出される。Lundgren は、中心部の渦管とその周囲に存在する二葉の螺旋状の渦層とからなる spiral vortex のモデルを提案した[7]。この spiral vortex は、渦管と渦層上の渦度ベクトルの配向によって 3 つのモードに分類されるが[8]、渦層上の渦度ベクトルが渦管上の渦度ベクトルと同一方向に配向するモード 1 (図 7 (a)) は $-5/3$ 乗のスペクトルを誘起し、渦層上の渦度ベクトルが渦管の周方向に配向するモード 3 (図 7 (c)) は $-7/3$ 乗のスペクトルを誘起する [9]。また、渦管の動径方向に分布する渦度の伸長は $-9/3$ 乗のスペクトルを誘起する。DNS データを用いた解析から、3 モードの spiral

vortex が観察される時間帯において、対応するスペクトルが検出される事が示されている。詳細は、文献 [10] を参照されたい。

5. まとめ

本研究では一様等強制方乱流の DNS データを用い、散逸率の条件付き平均を用いることで、長時間平均によって抽出される従来の Kolmogorov の $-5/3$ 乗則に従うエネルギースペクトルに加え、非定常・非平衡性を表わす $-7/3$ 乗および $-9/3$ 乗のスペクトルが存在することを明らかにした。さらに、スペクトルの時間発展は 3 つの Phase から構成され、Phase 1 と Phase 2 では $-7/3$ 乗成分、Phase T では $-9/3$ 乗成分がエネルギー伝達を担うことを示した。

本稿で紹介した非平衡スペクトルに伴うエネルギー伝達機構の解明は、新たな乱流制御手法の提案や large-eddy simulation に用いられる非平衡性を考慮した subgrid-scale モデル開発等のために必須であり、現在、この方向の研究も進められている事を付記する。

謝辞

本研究における DNS 計算の実行と DNS データのポストプロセッシングは、大阪大学サイバーメディアセンターの NEC SX-8R および SX-9 を利用して行われた。この場を借りて、同センターのご協力に感謝したい。

参考文献

- 1) Kolmogorov, A.N. 1941 The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds number. *C. R. Acad. Sci. USSR* **30**, 301-305.
- 2) Kaneda, Y., Ishihara, T., Yokokawa, M. Itakura, K. and Uno, K. 2003 Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in a periodic box. *Phys. Fluids* **15**,L21-L34
- 3) Gotoh, T., Fukayama, D. and Nakano, T. 2002 Velocity field statistics in homogeneous steady

turbulence obtained using a high-resolution direct numerical simulation., *Phys. Fluids*, **14**, 1065-1081.

- 4) Horiuti, K. & Fujisawa, T. 2008 The multi mode stretched spiral vortex in homogeneous isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, **595**,341-366
- 5) Yoshizawa, A. 1994 Nonequilibrium effect of the turbulent – energy -production process on the inertial-range energy spectrum. *Phys. Rev. E* **49**,4065-4071.
- 6) Woodruff, S. L. & Rubinstein, R. 2006 Multiple-scale perturbation analysis of slowly evolving turbulence. *J. Fluid Mech.* **565**, 95-103.
- 7) Lundgren, T. S. 1993 A small-scale turbulence model. *Phys. Fluids A* **5**,1472-1483.
- 8) Lundgren, T. S. 1982 Strained spiral vortex model for turbulent fine structure., *Phys. Fluids*, **25**,2193-2203.
- 9) Pullin, D. I. & Lundgren, T. S. 2001 Axial motion and scalar transport in stretched spiral vortices., *Phys. Fluids*,**13**,2553-2563.
- 10) Horiuti, K. & Ozawa T. 2011 Multi-mode stretched spiral vortex and nonequilibrium energy spectrum in homogeneous shear flow turbulence. *Phys.Fluids*, **23**, 035107.

格子ゲージ理論におけるエンタングルメント・エントロピー

中川義之

新潟大学大学院自然科学研究科

1 はじめに

量子もつれは量子多体系が示す顕著な性質である。量子もつれを示す有名な例はスピン-重項をつくるスピン $1/2$ の二粒子からなる量子力学系である。これは Einstein-Podolsky-Rosen による EPR パラドックスの思考実験の説明にもよく用いられる。この系の量子状態は、それぞれの粒子からなる部分系の状態のテンソル積としては表すことができず、エンタングル状態と呼ばれる。この量子もつれの度合いを測る量がエンタングルメント・エントロピーであり、系の基底状態が量子的にどれだけ複雑かを表す。

近年、エンタングルメント・エントロピーは物性物理や量子コンピューティング、量子情報など様々な分野で盛んに研究されている [1]。その中でエンタングルメント・エントロピーが量子系の秩序変数としての役割を果たすことが明らかにされてきた。例えばイジング模型でのエンタングルメント・エントロピーは、臨界点で発散するが非臨界点で飽和するといった振る舞いを示す。近年では古典的な秩序変数で特徴づけることのできないエキゾチックな量子相も発見されており、エンタングルメント・エントロピーの重要性が指摘されている。

強い相互作用の基礎理論である量子色力学 (QCD) でのエンタングルメント・エントロピーは特に興味深い。QCD は高エネルギー (近距離) で相互作用が弱くなる漸近自由なゲージ理論であり、高エネルギー現象は摂動論を用いることで QCD の基本的自由度であるクォークとグルーオンの相互作用として良く記述されることが知られている。一方低エネルギー (遠距離) ではクォークやグルーオンは陽子や中性子といったハドロン内部に閉じ込められており、ハドロンを有効自由度として考えることで低エネルギー現象をうまく説明することができる。これは QCD の世界では距離のスケールが変わることで有効自由度がクォーク・グルーオンからハドロンへと変化することを意味している。この有効自由度の変化をエンタングルメント・エントロピーの観点から理解しようとするのがこの研究の動機である。

ゲージ理論でのエンタングルメント・エントロピーの計算は、ゲージ/重力対応を用いた研究で大きな進展があった [2, 3]。ゲージ/重力対応というのは、ゲージ理論と、次元の異なる空間上での重力理論との間にある等価性 (双対性) であり、近年活発に研究が進められている。この等価性を用いることで、計算の難しい強結合ゲージ理論における物理量を重力理論の立場から計算することが可能になる。QCD と双対な重力理論はまだ発見されていないが、QCD と良く似た性質をもつ理論において、エンタングルメント・エントロピーが非解析的な振る舞いをする 것이示された [4, 5]。これはある臨界距離を境に系の有効自由度が変化することを意味する。では QCD でも同じように臨界距離のようなものが存在して、系の自由度がそこで突然変化するのだろうか。

本稿では大阪大学サイバーメディアセンター及び核物理研究センターのスーパーコンピュータ NEC-SX を用いて得られた格子ゲージ理論におけるエンタングルメント・エントロピーに関する研究を紹介する¹。

2 エンタングルメント・エントロピー

純粋状態 $|\Psi\rangle$ に対するエンタングルメント・エントロピーは以下のように定義される。図 1 のようにまず全系を二つの部分系 (領域) A と B に分ける。ここで l を部分系 A の x 方向のサイズとする。全系の密度行列は $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ で与えられる。この密度行列に対して領域 B の自由度に関してトレースをとった縮約密度行列

$$\rho_A = \text{Tr}_B \rho = \text{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (1)$$

を考える。これは領域 A の自由度しか観測することができない観測者にとっての密度行列になる。ここで注意すべきなのは、 $|\Psi\rangle$ は純粋状態であったにも関わらず、 ρ_A は混合状態の密度行列になっている点である。エンタングルメント・エントロピーは縮約密度行列の

¹SU(2) での計算については [6]、Migdal-Kadanoff 近似を用いた SU(N) での計算については [7] を参照。

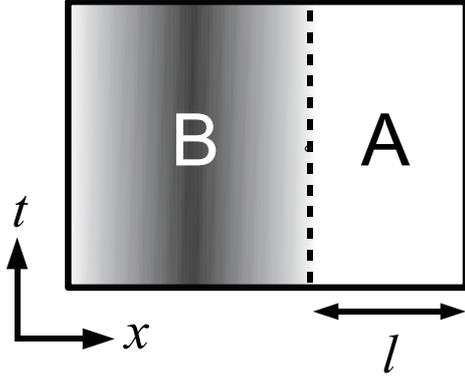


図 1: エンタングルメント・エントロピーは全系を仮想的に部分系に分割したときの量子相関として定義される。 l は部分系 A の x 方向の長さであり、 y 、 z 軸は紙面と垂直な方向になっている。

フォンノイマン・エントロピーとして定義される

$$S_A = -\text{Tr} \rho_A \ln \rho_A. \quad (2)$$

ρ_A にはトレースアウトされた B の量子自由度の情報が入っており、 S_A は領域 A しか観測できない場合に生じる曖昧さを測る量となっている。エンタングルメント・エントロピーがもつ特徴的な性質は文献 [8] にまとめられている。

3 レプリカトリック

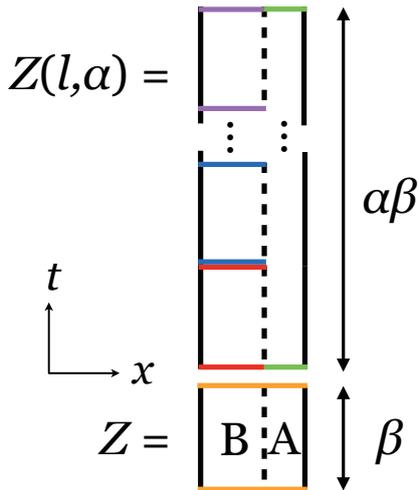


図 2: α カットの入った系の模式図。領域 $A(B)$ では $\alpha\beta(\beta)$ の間隔で周期的境界条件が課される。

エンタングルメント・エントロピーを計算するためにここではレプリカトリックと呼ばれる方法を用いる。導出の詳細は文献 [9] にゆずることとし、ここでは要

点を述べる。式 (2) で定義されるエンタングルメント・エントロピーは $S_A = -\lim_{\alpha \rightarrow 1} \partial / \partial \alpha \ln \text{Tr} \rho_A^\alpha$ という形に表すことができる。ここで系のコピー (レプリカ) を α 個用意し、時間方向にそれらをつなぎ合わせたような変わった系を考える (図 2)。領域 A にある自由度は $\alpha\beta$ の間隔で時間方向に周期的境界条件が課されるのに対し、 B にある自由度は β の周期の境界条件が課される。 $\beta = aN_t$ (a は格子間隔、 N_t は時間方向の格子点の数) は時間方向の格子の大きさである。この系の分配関数を $Z(l, \alpha)$ とすると、縮約密度行列の α 乗のトレースは

$$\text{Tr} \rho_A^\alpha = \frac{Z(l, \alpha)}{Z^\alpha} \quad (3)$$

と表すことができる。ここで $Z = Z(\alpha = 1)$ は図 1 のような我々が考えている系の分配関数である。するとエンタングルメント・エントロピーは

$$S_A(l) = -\lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \left(\frac{Z(l, \alpha)}{Z^\alpha} \right). \quad (4)$$

で与えられる。一般的にエンタングルメント・エントロピーは紫外カットオフ (格子間隔の逆数) とともに発散する項を含むため、格子状で計算する場合は l で微分をとった量を考える方が都合が良い；

$$\frac{\partial S_A(l)}{\partial l} = \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{\partial}{\partial l} \frac{\partial}{\partial \alpha} F[l, \alpha]. \quad (5)$$

ここで $F[l, \alpha] = -\ln Z(l, \alpha)$ は α カットの入った系の自由エネルギーである。このようにレプリカトリックを用いると、図 2 で模式的に描かれるような α 個のカットをもった系の自由エネルギーを計算することで、エンタングルメント・エントロピーを得ることができる。

4 格子 QCD でのエンタングルメント・エントロピーの評価

格子 QCD シミュレーションでは、式 (5) に含まれる微分は有限差分に置き換わり、

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{\partial}{\partial l} \frac{\partial}{\partial \alpha} F[A, \alpha] &\rightarrow \frac{\partial}{\partial l} \lim_{\alpha \rightarrow 1} (F[l, \alpha + 1] - F[l, \alpha]) \\ &\rightarrow \frac{F[l + a, \alpha = 2] - F[l, \alpha = 2]}{a} \end{aligned} \quad (6)$$

で見積もることになる。 $F[l, \alpha = 1]$ は l に依存しないために $\partial F[l, \alpha = 1] / \partial l$ の項は落ちる。あとは式 (6) 中の自由エネルギーの差を計算すればいい。これは格子 QCD では、二つの自由エネルギー $F[l + a, \alpha = 2]$ 、

$F[l, \alpha = 2]$ に対応するような作用 $S_l[U]$ と $S_{l+a}[U]$ を考えることで求めることができる [10, 11]。二つの作用を補完する作用 $S_{\text{int}} = (1 - \gamma)S_l[U] + \gamma S_{l+a}[U]$ でゲージ配位をアップデートすると、

$$\begin{aligned} & F[l + a, \alpha = 2] - F[l, \alpha = 2] \\ &= - \int_0^1 d\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \ln Z(l, \gamma) \\ &= \int_0^1 d\gamma \langle S_{l+a}[U] - S_l[U] \rangle_\gamma. \end{aligned} \quad (7)$$

というように、作用の差の期待値を補完変数で積分することで求めることができる。ここで $\langle \cdot \rangle_\gamma$ は S_{int} を作用として計算したときのモンテカルロ平均である。

ここでは式 (7) の作用の差を $\gamma = 0$ から 1 まで 0.1 刻みで評価し、拡張シンプソン法を用いて積分を評価した。

5 シミュレーションの詳細と結果

本シミュレーションではウィルソンプラケット作用を採用し、擬熱浴法を用いてゲージ配位を生成した。そして 5000 スウィープを熱化のために捨て、100 スウィープごとに式 (7) を計算した。

この計算では γ のステップ数に加え、格子結合定数、 l を変えながらシミュレーションする必要がある。本シミュレーションでは γ のステップ数が 11 点、格子結合定数を $\beta = 5.70$ から 6.00 まで 5 点とさらにそれぞれの β で $l = 1$ から $l = 5 - 6$ まで動かしている²。また格子体積も 12^4 と 16^4 で計算している。このように多くのパラメータを動かして計算する必要があるため、SX では γ のステップ数に対してパラメータ並列計算を行い、さらに β と l を変えた計算を異なるジョブとして走らせた。

図 3 は格子 QCD シミュレーションで得られたゼロ温度でのエンタングルメントエントロピー $S_A(l)$ の l 微分を表している。領域 A と B の境界面の面積 $|\partial A|$ で規格化されている。まず異なる体積 (12^4 と 16^4) の結果が統計誤差の範囲内で一致しているのがわかる。これはエンタングルメント・エントロピーが二つの領域の境界面の面積に比例すること、つまり面積則にしたがうことを示している。熱的エントロピーが一般的に体積則に従うのと対照的である。

図からわかるように、エンタングルメント・エントロピーの l 微分は l とともに小さくなっている。ゲージ/重力対応を用いることで、いくつかの強結合ゲ

²この β は格子結合定数であり、レプリカ法の説明のときに用いた $\beta = aN_t$ とは異なる。図 3 での β も格子結合定数である。

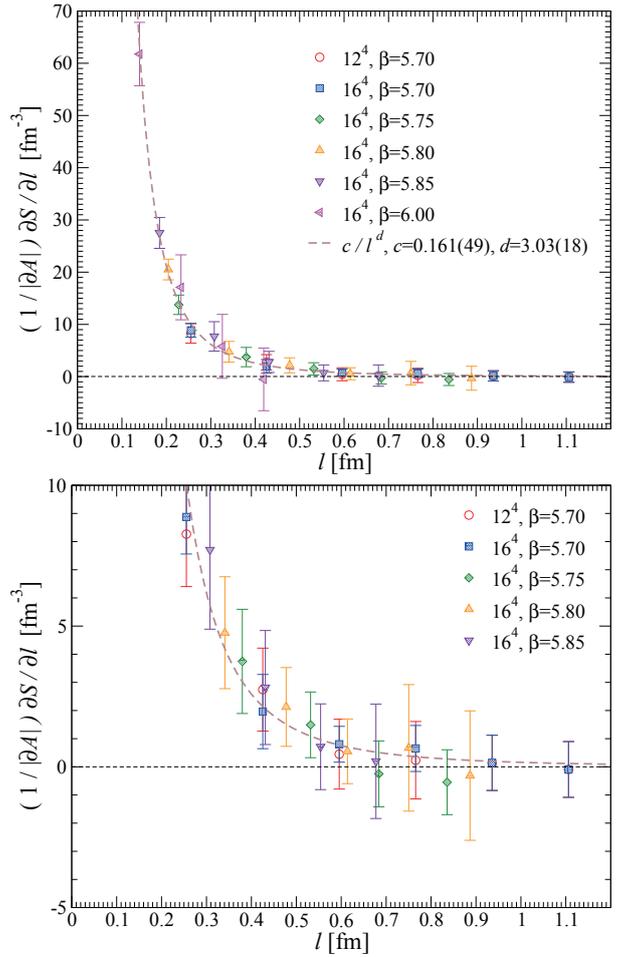


図 3: (上図) ゼロ温度でのエンタングルメント・エントロピーの l 微分。領域 A と B の境界面の面積 $|\partial A|$ で規格化されている。破線はべき関数 c/l^d でフィットして得られた結果である。フィット値はそれぞれ $c = 0.149(48)$ 、 $d = 3.06(20)$ である。(下図) 上図のゼロ付近をズームアップしたもの。

ジ理論ではこの減少がある臨界距離 l^* まで続き、 l^* で不連続になって $l > l^*$ でゼロになることが示された [4, 5]。しかし我々のシミュレーションではこのような非解析的な変化は見られなかった。 $\partial S_A / \partial l$ は l の増加とともに急激に減少するために、 l が大きいところではシグナル・ノイズ比が小さくなる。そのためゲージ/重力対応で見られたような臨界距離が存在する可能性を完全に排除することはできないが、少なくとも $0.4 - 0.5[\text{fm}]$ 以下にそのような臨界距離が存在しないことは結果から見て取れる。これは距離スケールの変化に伴うクォーク・グルーオンからハドロンへの有効自由度の変化が、相転移的に変化するのではなく緩やかに一方から他方へと変わっていくことを示唆している。

l が小さい領域ではエンタングルメント・エントロピーが $1/l^2$ でスケールすること、つまり $\partial S_A / \partial l$ は $1/l^3$ で小さくなるのが次元解析から期待される。こ

の振る舞いを確かめるために、ベキ関数 $\partial S_A / \partial l = c/l^d$ でシミュレーション結果をフィットし、 $c = 0.149(48)$ 、 $d = 3.06(20)$ ($\chi^2/\text{NDF} = 0.192$) というフィット値を得た。これは次元解析から期待される $d = 3$ と良く一致している。

6 まとめ

本稿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 NEC-SX を用いて得られた格子ゲージ理論におけるエンタングルメント・エントロピーに関する研究を紹介した。

サイバーメディアセンター、および核物理研究センターにおけるスーパーコンピュータ NEC-SX は比較的自由に利用することが可能であり、数値計算を行う研究者にとって極めて有用である。サイバーメディアセンターの大規模計算機システムのホームページ (<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/service/sx.html>) にはログイン方法からバッチリクエスト用のスクリプトの作成法、リアルタイムでのバッチジョブの情報など、計算機の利用に必要な情報が充実している。さらにベクトル演算機である NEC-SX でプログラムを高速化させるためのベクトル化・並列化に関する資料も、サイバーメディアセンター大規模計算機システム・ポータルサイト (<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/service/portal.html>) に集められている。スーパーコンピュータの利用に関する講習会も定期的に関わっているため、これらは新規ユーザーにとってもフレンドリーだと思われる。ただ一方でそうしたところで得られるはずの情報が見つけれないという話も聞くため、スーパーコンピュータの利用に際して必要な情報がどこで得られるかということについて周知を強化することで、新規を含めたユーザーの利用環境がより向上されるのではないかと考えている。

最後に、スーパーコンピュータの管理、運営、メンテナンスに関わられている多くの方々に感謝する。

参考文献

- [1] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, *Rev.Mod.Phys.* **80** (2008) 517, [quant-ph/0703044](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0703044).
- [2] S. Ryu and T. Takayanagi, *Phys.Rev.Lett.* **96** (2006) 181602, [hep-th/0603001](https://arxiv.org/abs/hep-th/0603001).
- [3] T. Nishioka, S. Ryu, and T. Takayanagi, *J. Phys.* **A42** (2009) 504008, [arXiv:0905.0932](https://arxiv.org/abs/0905.0932).
- [4] T. Nishioka and T. Takayanagi, *JHEP* **0701** (2007) 090, [hep-th/0611035](https://arxiv.org/abs/hep-th/0611035).
- [5] I. R. Klebanov, D. Kutasov, and A. Murugan, *Nucl.Phys.* **B796** (2008) 274, [arXiv:0709.2140](https://arxiv.org/abs/0709.2140).
- [6] P. V. Buividovich and M. I. Polikarpov, *Nucl. Phys.* **B802** (2008) 458, [arXiv:0802.4247](https://arxiv.org/abs/0802.4247).
- [7] A. Velytsky, *Phys. Rev.* **D77** (2008) 085021, [arXiv:0801.4111](https://arxiv.org/abs/0801.4111).
- [8] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- [9] P. Calabrese and J. L. Cardy, *J. Stat. Mech.* **0406** (2004) P002, [hep-th/0405152](https://arxiv.org/abs/hep-th/0405152).
- [10] G. Endrodi, Z. Fodor, S. Katz, and K. Szabo, *PoS LAT2007* (2007) 228, [arXiv:0710.4197](https://arxiv.org/abs/0710.4197).
- [11] Z. Fodor, *PoS LAT2007* (2007) 011, [arXiv:0711.0336](https://arxiv.org/abs/0711.0336).

First-Principles Calculations of Structure and Magneto-Electric Properties of Co-Doped Bismuth Ferrite

Dan Ricinski

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

1. Introduction

Among the many multifunctional oxide materials that are discovered and studied nowadays, magnetoelectric multiferroics continue to attract considerable attention in view of applications to multiple-level non-volatile memories and spintronic devices [1]. In particular, a lot of research is focused on bismuth ferrite (BiFeO_3 , BFO), due to its relative ease of fabrication under various structures using modern techniques, as well as its intriguing properties (a rich phase transition portrait due to several competing unit cell instabilities, peculiar coupling between ferroelectricity and antiferromagnetism) [2]. However, while BFO is a ferroelectric with large spontaneous polarization, it is antiferromagnetic (AFM) and therefore its magnetization and magnetoelectric coupling are invariably much smaller than would be useful for applications. Thus one of the issues that still requires a satisfactory solution is the enhancement of its intrinsically-weak BFO magnetism and magneto-electric coupling. To that aim, substitutional A and B-site elements added to the perovskite structure of BFO are believed to be effective [3]. Here we report results of first-principles calculations of BFO doped with Co (BFCO), aiming to enhance its ferroelectric and ferromagnetic properties, as well as the coupling between them.

The selection of Co as B-site doping element in BFO was motivated by the intriguing properties of bismuth cobaltite (BCO) and by the desire to investigate the extent to which they are preserved in the compound resulted from BCO combination with BFO. Specifically, the ground structure of BCO does correspond to a so-called super-tetragonal phase with a giant c/a ratio of

about 1.27 and C-type AFM ordering [4-5], while the stress-relaxed BFO crystal structure has rhombohedral symmetry ($R3c$ space group) and G-type antiferromagnetic (AFM) ordering [6]. The significantly different crystallographic symmetries and magnetic ordering of the ground structure for the two end-members of BFCO suggests an interesting question with respect to what would be the most favourable symmetry and magnetic ordering in the mixed compound. Additionally, a super-tetragonal phase of BFO with a c/a ratio of about 1.26 has been reported as possible in several publications [7-8], making the question of whether or not the multiferroic properties of BFCO are BFO-like, BCO-like or entirely different from BFO and BCO even more intriguing. Indeed, one expects enhanced magnetism and magnetoelectric coupling in BFCO compared to its isolated components, due to the uncompensated spin configurations of the B-site magnetic ion (Fe^{3+} and Co^{3+} , with a nominal magnetic moment of $5\mu_B$ and $4\mu_B$, respectively). Moreover, there are reports of different spin configurations for the Co^{3+} ion in BCO as well as a pressure-induced phase transition from high-spin to nonmagnetic low-spin configuration [9-10]. This raises the prospect of a complex interplay between the crystal symmetries, AFM ordering and local spin configurations in BFCO, which might help making steps towards solving the enduring problem of robust magnetoelectric coupling for materials in the family of BFO. To clarify these aspects, in this paper we analyze the structure and multiferroic properties of various BFCO supercells in which the Fe versus Co composition, crystal symmetry and type of antiferromagnetic ordering are varied.

2. Technical Details of First Principles Calculations

All first-principles calculations have been done using the density functional theory, under the spin-polarized local density approximation including the correction for the strongly correlated 3d electrons of Fe and Co (LDA+U), as implemented in the ABINIT package [11]. For the electronic wavefunctions we used plane-waves truncated at 400 eV, while for all chemical elements we have used projected-augmented wave pseudo-potentials [12]. We have included both valence and semicore states into our calculations, specifically Fe's and Co's 3d and 4s electrons, Bi's 6s and 6p electrons, and O's 2s and 2p electrons. The Brillouin zone integrations were done on a 4x4x4 k-point grid and all structural optimizations were performed until atomic forces are smaller than 2 meV/Å.

3 Results and Discussion

In first step, geometry relaxation of BFO and BCO under various symmetries and AFM configurations has been performed. The lowest energy configuration corresponds to a rhombohedral structure with $R3c$ symmetry (having a lattice constant of 5.54 Å and primitive cell angle of 59.7°) and G-type AFM ordering in case of BFO, and to a super-tetragonal structure with $P4mm$ symmetry (having lattice constants of 3.67 Å and 4.66 Å) and C-type AFM ordering in case of BCO. The calculated lattice parameters, the values of local $\text{Fe}^{3+}/\text{Co}^{3+}$ magnetic moment and the determined ground structures were similar to previous reports of first-principles calculation results [11]. The calculated local magnetic moments for Fe^{3+} and Co^{3+} were within 1 μ_B of the expected values for these ions in an ideal chemical configuration, due to the large Fe-O and Co-O covalency effects.

Using a supercell with four BFO formula units and substituting one of the Fe atoms with Co, we have investigated the energetics, structure and magneto-electric properties of 12.5% Co-doped BFO

(further denoted to as 12BFCO) with various crystal symmetries, as illustrated in Fig. 1.

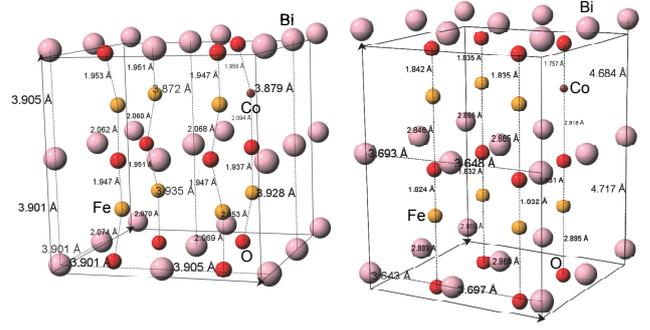


Figure 1: Illustration of 12.5% Co-doped BFCO supercells with $R3c$ (left) and $P4mm$ symmetry (right)

Upon geometry optimization of various supercells, energy considerations based on the results presented in Fig. 2 allowed us to conclude that the most stable structure has rhombohedral symmetry and G-type AFM ordering (similarly with BFO), which was expected for small Co doping content. Among the tetragonal structures of 12BFCO, the one with C-type AFM ordering is energetically favoured over those having G-type and A-type AFM ordering. On the other hand, Fig. 2 also reveals that in the case of 50% Co doped BFO (50BFCO), the tetragonal structure with C-type AFM ordering becomes energetically favored over the other supercells with tetragonal symmetry, as well as over the BFO-like rhombohedral structure. This phase transition occurs because when we substitute Fe with Co to a larger extent, the resulting alloy naturally tends to acquire more of the properties of BCO rather than those of BFO.

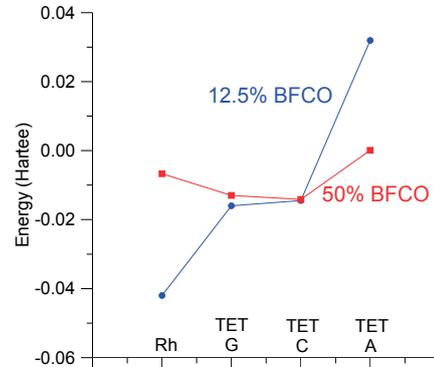


Figure 2: Total energy (referenced to maximum of BFCO50 energy, setting same energy for C-type AFM ordering) of BFCO with various symmetry and Co content

We have further analyzed the structural features of the individual BFO and BCO cells that compose various tetragonal 12BFCO supercells. Specifically, we have examined the spatial distribution of the Fe/Co-O and Bi-O bond length off-centring ratios (this atomic off-centring results from minimizing the total energy/elastic stresses of the supercell during geometry relaxation, yielding a spontaneous polarization) in four perovskite blocks of the tetragonal supercell, as well as the distribution of their tetragonality ratio. The four perovskite blocks selected for analysis are the BCO cell, the BFO cell directly below it, and the diagonally-opposite BFO cells of the above two cells in the upper and lower half of the BFCO12 supercell, respectively (see insets on right of each figure).

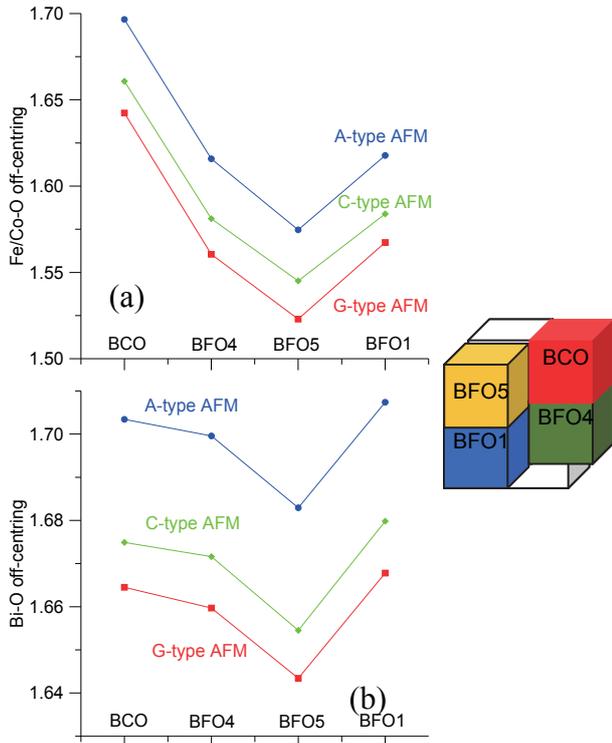


Figure 3: Distribution of Fe/Co-O (a) and Bi-O (b) bond length off-centring ratio in tetragonal BFCO12 supercells

The first important finding is that the magnitude of Bi-O and Fe/Co-O bond length off-centring ratios depends on the type of AFM spin arrangement, while their spatial distribution in the tetragonal BFCO supercell blocks does not. As seen in Figs. 3(a-b), both the Fe/Co-O and Bi-O off-centring ratios are largest in case

of A-type AFM, followed by C-type AFM and followed by G-type AFM. Among the different ABO_3 perovskite blocks, the BCO cell has the largest B-O off-centring, which is to be expected in view of the larger spontaneous polarization calculated by first-principles for BCO, compared to BFO [11]. Interestingly, the smallest Fe-O off-centring was found in the BFO perovskite block diagonally-opposite to BCO in the upper half of the BFCO supercell (further denoted as BFO5), while the two BFO cells directly below BCO (further denoted as BFO4) and diagonally-opposite to it (further denoted as BFO1) in the lower half of the BFCO cell have similar Fe-O off-centring ratio, larger than that of BFO5, but significantly smaller than in BCO. As far as the Bi-O off-centring ratio is concerned, Fig. 3(b) reveals that the smallest value is still found in the BFO5 block, while the largest one occurs in BFO1 block, with BCO having only slightly larger off-centring than BFO4.

Additionally, Figs. 4(a-b) displays the distribution of the tetragonality ratio and spontaneous polarization derived from a point-charge model (using nominal valence charges of Bi^{3+} , Fe^{3+} , Co^{3+} and O^{2-} ions), in tetragonal supercells with various types of AFM ordering. We remark that the spatial distribution of the tetragonality ratio in the BFCO12 supercell (Fig. 4(a)) exhibits similar features with the Bi-O off-centring distribution (Fig. 3(b)), while the spontaneous polarization distribution (Fig. 4(b)) resembles that of the Fe/Co-O off-centring (Fig. 3(a)). However, the tetragonality ratio does not vary significantly when the AFM ordering of the BFCO tetragonal supercell is changed from A-type to C-type, while the G-type AFM ordering continues to provide the smallest c/a from the analyzed tetragonal BFCO12 supercells. On the other hand, the calculation data proves that the spontaneous polarization distribution in the BFCO tetragonal superlattice depends mainly on the Fe/Co off-centring rather than on tetragonality ratio or Bi-O off-centering. Furthermore, an important implication of the

spontaneous polarization dependence on the type of AFM ordering is that in order to enhance the polarization in BFO and related materials, stabilization of usually energetically-unfavourable structures with A-type AFM ordering would be necessary.

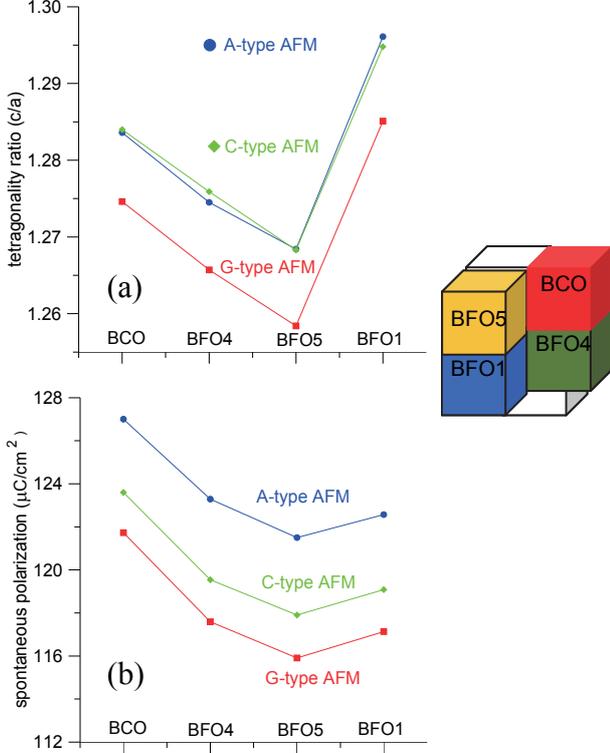


Figure 4: Distribution of tetragonality ratio c/a (a) and spontaneous polarization from point-charge model (b) in tetragonal BFCO12 supercells

The results obtained so far have assumed a high-spin (HS) electronic configuration of the Co atom into the studied BFCO supercells. However, there are previous reports of magnetic moment collapse in BCO under the influence of large external pressures, in which case the Co atom will take on a low-spin (LS) electronic configuration [9-10]. In the case of supercells with mixed BFO-BCO composition, high pressures might be created internally due to structural misfit between the rhombohedral phase of BFO and super-tetragonal phase of BCO in their ground state. Therefore we examined the impact of the Co spin configuration onto the energetics, phase stability, electric/magnetic properties as well as spatial distribution of tetragonality ratio and atomic off-centring in various BFCO supercells.

The calculations have shown that, in contrast to the case of BCO with HS-Co configuration, the rhombohedral structure is the one most energetically-favored among all the supercells with LS-Co that we have analyzed, for both BFCO12 and BFCO50 (Fig. 5). Moreover, since rhombohedral BFCO with a given LS-Co content has a lower total energy than all supercells with equal HS-Co content (irrespective on whether they are rhombohedral or tetragonal), it appears unlikely for the Co atom to ever take a high-spin electronic configuration in BFCO. As mentioned above, this might be a consequence of high internal pressure in BFCO caused by the inherent structural misfit of mixing materials with such dramatically different ground state symmetries and lattice parameters.

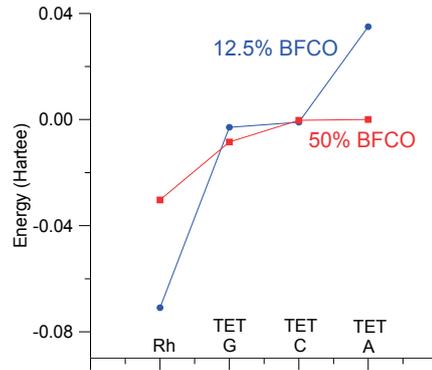


Figure 5: Total energy (referenced to maximum of BFCO50 energy, setting same energy for C-AFM ordering) of BFCO with various symmetry and LS-Co content

The study of atomic off-centring has revealed that the type of AFM ordering has a less significant influence on the magnitude of Fe/Co-O off-centring in Fig. 6(a) (compared to the case of BCO with HS-Co in Fig. 3(a)), while largest Bi-O off-centring is still obtained in case of BFCO12 supercells with A-type AFM ordering, followed by the supercell with C-type AFM ordering and the one with G-type AFM ordering (see Fig. 6(b)).

We have next compared the spatial distribution of A-O and B-O off-centring in ABO_3 blocks of the BFCO12 supercell with HS and LS-Co configurations. We note that in case of LS-Co the BFO4 block exhibits the largest off-centring, while inside BCO blocks the latter is

dramatically reduced, simultaneously with the Co magnetic moment collapse. Further, whereas in case of BFCO12 with HS Co the atomic off-centring increases when passing from the BFO5 to BFO1 block, the perovskite block diagonally-opposite to BCO in the upper half of the BFCO supercell (BFO5) has now larger Bi-O and Fe-O off-centring than those inside BFO1.

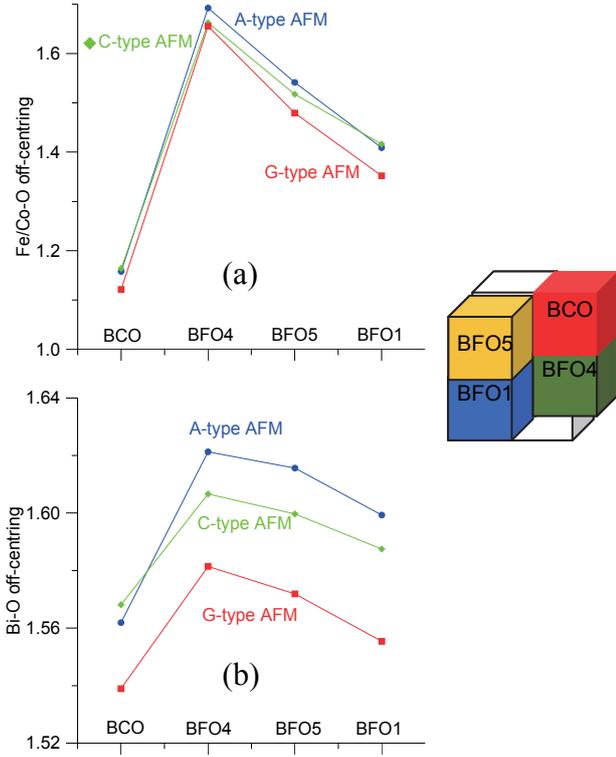


Figure 6: Distribution of Fe/Co-O (a) and Bi-O (b) bond length off-centring ratio in tetragonal BFCO12 supercells with LS-Co

Furthermore, as expected from the previously-reported volume compression induced by the magnetic moment collapse in BCO, the tetragonality ratios of BFCO12 with LS Co are significantly reduced from their giant values calculated in BFCO12 with HS-Co. Particularly, as seen in Fig. 7(a), the BCO perovskite blocks have small c/a ratios irrespective of AFM ordering, while it is only in BFO4 block that the tetragonality ratio has similar values to that of BFO cells inside BFCO12 with HS-Co. (remarkable in this case is also that largest c/a ratio occurs in case of C-type AFM ordering). On the other hand, Fig. 7(b) shows that the spatial distribution of spontaneous polarization derived from the point-charge

model resembles neither that of the Fe/Co-O off-centring, nor that of the Bi-O off-centring.

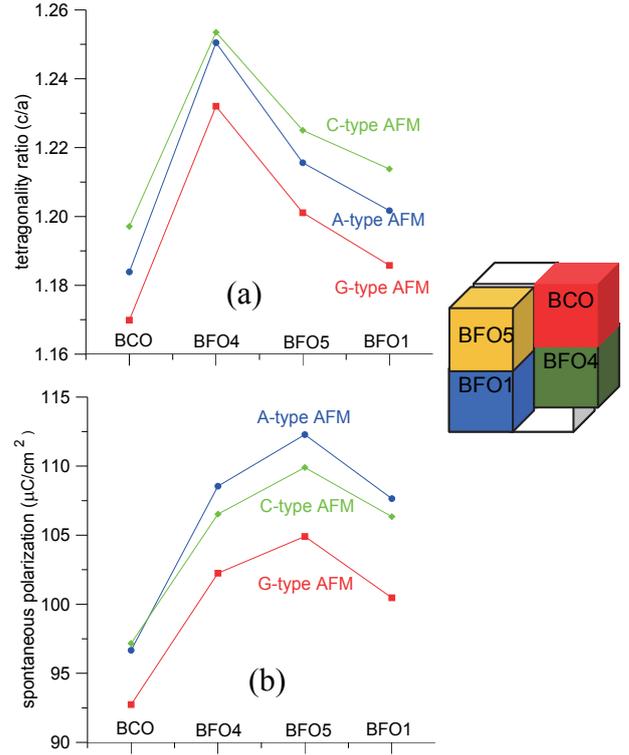


Figure 7: Distribution of tetragonality ratio c/a (a) and spontaneous polarization from point-charge model (b) in tetragonal BFCO12 supercells with LS-Co

Specifically the largest spontaneous polarization was calculated in the BFO5 block (with minimum in the BCO cell, as expected due to the local volume collapse in that cell), which is in fact an exact opposite distribution compared to the case of BFCO12 supercells with HS-Co.

With respect to the magnetoelectric properties, our first-principles calculations revealed that the Co doping can be an effective method to enhance the magnetization of (nominally antiferromagnetic) BFO, from 20 emu/cm^3 in case of 12BFCO (Fig. 8(a)) to 80 emu/cm^3 in case of 50BFCO (Fig. 8(b)). On one hand this was caused by the onset of ferrimagnetic ordering in the BFCO supercells used for calculations, which have incomplete spin compensation due to unequal local magnetic moments at Fe and Co sites. Additionally, while having little influence on the macroscopic magnetization, the type of AFM ordering impacts on the values of the average spontaneous polarization in the supercell, thus proving

that the magnetic and electric interactions in BFCO are intrinsically coupled (the relationship between spontaneous polarization and magnetization of the various supercells can be assessed from Fig. 8). Further, we have shown that the magnetization can be enhanced even more, up to 100 emu/cm^3 in case of 12BFCO and 400 emu/cm^3 in case of 50BFCO, (at the expense of decreasing the tetragonality ratio and the spontaneous polarization) in BFCO supercells where the Co ion takes a low-spin configuration (see Fig. 8).

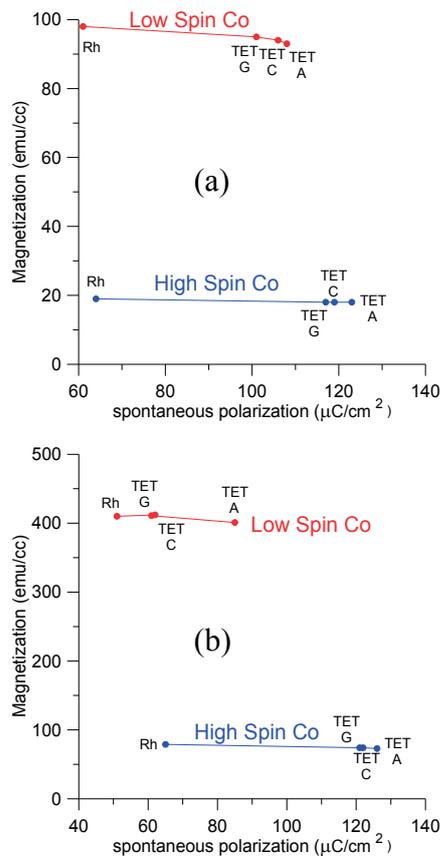


Figure 8: Illustration of magneto-electric coupling in BFCO supercells with various crystal symmetry, AFM ordering, spin configuration for Co ion, for 12.5% Co content (a) and 50% Co content (b)

5. Conclusion

The undertaken first-principles calculations suggest that exploiting the complex interplay between the crystal symmetries, AFM ordering and local spin configurations in Co-doped bismuth ferrite might be helpful in solving the enduring problem of robust magnetoelectric coupling

for materials at room temperature. Specifically, fabricating BFCO thin films where Co is stabilized in a low spin configuration might be a promising method to realize the full potential of these materials. Our results show that a low spin configuration of Co becomes energetically favored in Co-doped BFO and leads to a large magnetization while still maintaining a large polarization (in spite of an overall reduction in tetragonality ratio caused by the local magnetic moment collapse), and therefore it might be the key for achieving the robust magnetoelectric coupling required for the next-generation memory applications.

Acknowledgements

This research was partially supported by the Grants-in-Aid for Scientific Research 21360150 and 24560007 provided by JSPS. All calculations have been done using the HPC system of the Cybermedia Center, Osaka University.

References

- (1) N. A. Spaldin, et al., *Science* **309**, 391, (2005).
- (2) G. Catalan and J. F. Scott, *Adv. Mater.* **209**, 1 (2009).
- (3) J. M. Park, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **48**, 09KB03, (2009).
- (4) A. A. Belik, et al., *Chem. Mater.* **18** 798, (2006).
- (5) Y. Uratani, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **44**, 7130, (2005).
- (6) F. Kubel, et al., *Acta Crystallogr.*, **46**, 698, (1990).
- (7) D. Ricinchi, et al., *J. Phys. Condens. Matter* **18**, L97 (2006).
- (8) R. J. Zeches, et al., *Science* **326**, 977 (2009).
- (9) X. Ming, et al., *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 295902 (2009).
- (10) K. Oka, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 9438 (2010).
- (11) X. Gonze, et al., *Computer Phys. Comm.* **180**, 2582-2615 (2009).
- (12) M. Torrent, et al., *Comput. Mat. Science* **42**, 337, (2008).
- (13) K. Miura, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **49**, 09ME07 (2010).

センター報告

・ 2011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	45
・ 第18回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2012)	64
・ 2012年度大規模計算機システム利用講習会	65
・ 2011年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	66
・ 2012年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	74
・ 2012年度「大規模計算機システムにおける企業利用」の活動状況	75
・ 2012年度大規模計算機システム利用相談員・指導員	76
・ 大規模計算機システムFAQ	81

2011 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 2011 年 4 月から 2012 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] Hidefumi Saito and Takeo Kajishima, “Evaluation of aircraft cabin air quality considering breath by people on board”, *Journal of Fluid Science and Technology*, Vol.6, No.6, pp.962-975, 2011.10.
- [2] Takashi Ohta, Hiroki Sakai, Kie Okabayashi, Takeo Kajishima, “Investigation of interaction between vortices and cavitation in a turbulent shear layer”, *Journal of Fluid Science and Technology*, Vol.6, No.6, pp.1021-1035, 2011.10.
- [3] Takeo Kajishima and Shintaro Takeuchi, “Direct numerical simulation of multiphase flows involving dispersed components with deformable interfaces”, *Heat Transfer - Asian Research*, Vol.40, Issue 4, pp.387-403, 2011.7.
- [4] 大山峻幸, 伊井仁志, 杉山和靖, 竹内伸太郎, 高木周, 松本洋一郎, “フロント・トラッキング法を用いた自由界面と剛体壁における単一気泡の反発現象の解析”, *日本混相流学会誌*, Vol.26, pp. 60-67, 2012.
- [5] Satoshi Ii, Kazuyasu Sugiyama, Shintaro Takeuchi, Shu Takagi, Yoichiro Matsumoto and Feng Xiao, “An interface capturing method with a continuous function: the THINC method with multi-dimensional reconstruction”, *Journal of Computational Physics*, Vol.231, Issue 5, pp.2328-2358, 2012.
- [6] Mohammad Kemal Agusta, Wilson Agerico Diño, Melanie David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, “Theoretical study of hydrazine adsorption on Pt(111): Anti or cis?”, *Surface Science*, Vol. 605, pp. 1347, 2011.
- [7] Wahyu Tri Cahyanto, Ferensa Oemry, Allan Abraham B. Padama, Mamoru Sakaue, Rachid Belkada, Susan M. Aspera, Masahiro Chikaishi, Shinichi Kunikata, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyoshi Maekawa, Kazuo Osumi, Yoshihisa Tashiro, “Favorable pathway of O₂ dissociative adsorption on a single platinum adatom coated on gamma-alumina (111) surface: a density functional theory study”, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 50, pp. 105602, 2011.
- [8] Mary Clare Escaño, Elod Gyenge, Ryan Arevalo, Hideaki Kasai, “Reactivity descriptors of borohydride interaction with metal surfaces”, *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 115, pp. 19883, 2011.
- [9] Mary Clare Escaño, Tien Quang Nguyen, Hideaki Kasai, “Analysis of band gap formation in graphene by Si impurities: local bonding interaction rules”, *Chemical Physics Letters*, Vol. 515, pp. 85, 2011.
- [10] Wahyu Cahyanto, Mary Clare Escaño, Hideaki Kasai, Ryan Laedao Arevalo, “Pt-alloy surfaces for non-activated OOH dissociation”, *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, Vol. 9, pp. 352, 2011.
- [11] Hirofumi Kishi, Abdulla Ali Abdulla Sarhan, Mamoru Sakaue, Susan Meñez Aspera, Melanie Yadao David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Yukio Tamai, Shigeo Ohnishi, Nobuyoshi Awaya, “Controllability of Electrical Conductivity by Oxygen Vacancies and Charge Carrier Trapping at Interface between CoO and Electrodes”, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 50, pp. 071101, 2011.
- [12] Yogi Wibisono Budhi, Hermawan Kresno Dipojono, I. Noezar, Subagjo, Allan B. Padama, Ferry Aldiansyah, Putri V. Kemala, Hideaki Kasai, “Forced Unsteady State Operation to Improve H₂ Permeability through Pd-Ag Membrane during Start-up”, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol.36, pp. 15372, 2011.
- [13] Yuji Kunisada, Mary Clare S. Escaño, Hideaki Kasai, “Surface magnetism in O₂ dissociation -from basic to application-”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 23, pp. 394207, 2011.
- [14] Ryan L. Arevalo, Mary Clare S. Escaño, Hideaki Kasai, “First principles study on the adsorption and dehydrogenation of borohydride on Mn(111)”, *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, Vol. 9, pp. 257, 2011.
- [15] Yuji Kunisada, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, “A First Principles Study of O₂/Ag(111) -Adsorption and Magnetic Properties-”, *Journal of*

- the Physical Society of Japan, Vol. 80, pp. 084605, 2011.
- [16] Hermawan Kresno Dipojono, Adhitya Gandaryus Saputro, Susan Meñez Aspera, Hideaki Kasai, “Density functional theory study on the interaction of O₂ molecule with Cobalt-(6)Pyrrole clusters”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 50, pp. 055702, 2011.
- [17] Triati Dewi Kencana Wungu, Wilson Agerico Diño, Hermawan Kresno Dipojono, 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, Vol. 50, pp. 055701, 2011.
- [18] Kunio Fujiwara and Masahiko Shibahara, “A Molecular Dynamics Study on Wetting Phenomena at a Solid Surface with a Nanometer-Scale Slit Pore”, Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering (投稿中), 2011.
- [19] 川口寿裕, 萩原 健一郎, 乾 真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “液中固体粒子挙動のDEM-MPS解析およびPTV計測”, 日本機械学会論文集, Vol.78, No.786 B, pp. 276-290, 2012.
- [20] Takuya Tsuji, Yuta Nakagawa, Takemori Takayama, Norihisa Matsumoto, Toshitsugu Tanaka, Yuuichi Kadono, “3-D DEM simulation of cohesive soil-pushing behavior by bulldozer blade”, Journal of Terramechanics, Vol.49, No.1, pp. 37-47, 2012.
- [21] 井門孝博, 乾真規, 田中敏嗣, 辻拓也, “MPS法による液滴濡れ挙動の数値シミュレーション”, 粉体工学会誌, Vol.48, No.12, pp. 822-828, 2011.
- [22] 辻拓也, 成田栄嗣, 田中敏嗣, “高濃度粒子を含む流れに壁面が与える影響について”, 粉体工学会誌, Vol.48, No.12, pp. 847-858, 2011.
- [23] Yu Takano, Yasuteru Shigeta, Kenichi Koizumi, Haruki Nakamura, “Electronic structures of the Cu₂S₂ core of the Cu_A site in cytochrome c oxidase and nitrous oxide reductase”, International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 112, Issue 1, pp. 208-218, Jan. 2012.
- [24] Toru Saito, Shusuke Yamanaka, Keita Kanda, Hiroshi Isobe, Yu Takano, Yasuteru Shigeta, Yasufumi Umena, Keisuke Kawakami, Jian-Ren Shen, Nobuo Kamiya, Mitsutaka Okumura, Mitsuo Shoji, Yasunori Yoshioka, Kizashi Yamaguchi, “Possible Mechanisms of Water Splitting Reaction Based on Proton and Electron Release Pathways Revealed for CaMn₄O₅ Cluster of PSII Refined to 1.9 Å X-Ray Resolution”, International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 112, Issue 1, pp. 253-276, Jan. 2012.
- [25] Nor Shahida Mohd Shah and M. Matsumoto, “Analysis and experiment of all-optical time-interleaved multi-channel regeneration based on higher-order four-wave mixing in a fiber”, Optics Communications, Vol. 284, No. 19, pp. 4687-4694, 2011.
- [26] Nor Shahida Mohd Shah, Masaru Sato, and Masayuki Matsumoto, “Adaptive delay control for time-interleaved multi-channel amplitude limiter based on saturation of four-wave mixing in a fiber”, Opt. Express, Vol. 19, No. 22, pp. 21246-21257, 2011.
- [27] M. Matsumoto, “Fiber-based all-optical signal regeneration”, IEEE J. Selected Topics in Quantum Electronics, Vol. 18, No. 2, pp. 738-752, 2012.
- [28] Toshiyuki ENOMOTO, Urara SATAKE, Takahiro MIYAKE and Norikazu TABATA, “A Newly Developed Polishing Pad for Achieving High Surface Flatness Without Edge Roll Off”, Annals of the CIRP, 60, 371-374, 2011.
- [29] Urara SATAKE, Wenxiao WANG, Toshiyuki ENOMOTO and Norikazu TABATA, “Investigation of a Polishing Pad and a Carrier Film for Decreasing Edge Roll Off of Workpiece”, Advanced Materials Research, 325, 476-481, 2011.
- [30] 佐竹うらら, 榎本俊之, 三宅貴大, 田畑憲一, “高平坦エッジ形状を実現する研磨パッドの開発 (二層構造研磨パッドの上層軟質化によるエッジ平坦性の向上)”, 日本機械学会論文集 (C編), 78, 786, 669-676, 2012.
- [31] Daisuke Matsunaka and Yoji Shibutani, “Effects of tensile strain on Ag(111) epitaxial growth by kinetic Monte Carlo simulations”, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 23, No. 26, pp. 265008-1-6, 2011.
- [32] Ryuichi Tarumi, Tomohiro Matsuhisa and Yoji Shibutani, “Numerical analysis for acoustic resonance of one-dimensional nonlinear elastic bar”, Jpn. J. Appl. Phys, Vol. 50, pp. 07HB02, 2011.
- [33] 廣内 智之, 都留 智仁, 渋谷 陽二, “高次 Multi-phase-field モデリングによる粒成長過程の予測”, 日本機械学会論文集A, Vol.77, No.782, pp.1723-1734, 2011.
- [34] Tomoyuki Hirouchi, Tomohito Tsuru and Yoji Shibutani, “Grain Growth Prediction with Inclination Dependence of <110> Tilt Grain Boundary us-

- ing Multi-Phase-Field Model with Penalty for Multiple Junctions”, *Computational Materials Science*, Vol. 53, No. 1, pp. 474-482, 2012.
- [35] Yoji Shibutani, Takuya Nakano, Hiro Tanaka and Yasuo Kogo, “Size effects on deformation mechanism of nanopillars by FIB-CVD using double-cantilever testing”, *Journal of Materials Research*, Vol.27, No.3, pp521-527, 2012.
- [36] Junyoung Park, Yoji Shibutani, “Common errors of applying the Voronoi tessellation technique to metallic glasses”, *Intermetallics*, Vol. 23, pp. 91-95, 2012.
- [37] Ryuichi Tarumi, Hassel Ledbetter and Yoji Shibutani, “Some remarks on the range of Poisson's ratio in isotropic linear elasticity”, *Philosophical Magazine* (accepted).
- [38] Ryuichi Tarumi, Shinpei Yamada and Yoji Shibutani, “Acoustic resonance of a two-dimensional isotropic medium studied by Airy stress function”, *Jpn. J. Appl. Phys.* (in press).
- [39] Ryuichi Tarumi, Tomohiro Matsuhisa and Yoji Shibutani, “Low temperature elastic constants and piezoelectric coefficients of LiNbO₃ and LiTaO₃: RUS measurement and lattice dynamics analysis”, *Jpn. J. Appl. Phys.* (in press).
- [40] 渋谷陽二, 松中大介, 垂水竜一, “ホールペッチ効果の塑性ひずみ依存性と温度依存性”, *材料* (in press).
- [41] Michio Ishikawa, Makoto Katsura, Satoru Nakashima, Kento Aizawa, Tsutomu Inoue, Hidekazu Okamura, and Yuka Ikemoto, “Modulated near-field spectral extraction of broadband mid-infrared signals with a ceramic light source”, *Optics Express*, Vol. 19, Issue 13, pp. 12469-12479, 2011.
- [42] Yoko Kebukawa, Satoru Nakashima, Michio Ishikawa, Kento Aizawa, Tsutomu Inoue, Keiko Nakamura-Messenger, Michael E. Zolensky, “Spatial distribution of organic matter in the Bells CM2 chondrite using near-field infrared microspectroscopy”, *Meteoritics & Planetary Science*, Volume 45, Issue 3, pages 394–405, 2010.
- [43] Yuka Ikemoto, Michio Ishikawa, Satoru Nakashima, Hidekazu Okamura, Yuichi Haruyama, Shinji Matsui, Taro Moriwaki, and Toyohiko Kinoshita, “Development of Scattering Near-Field Optical Microspectroscopy Apparatus Using an Infrared Synchrotron Radiation Source”, *Optics Communications* (in press), 2012.
- [44] K. Iwano, “Incoherence induced by phonon excitations in domain-growth dynamics”, *Role of the domain center-of-gravity motion*, *Phys., Rev. B* 84, 235139-(1-5), 2011.
- [45] Hideo Shiogama, Masahiro Watanabe, Masakazu Yoshimori, Tokuta Yokohata, Tomoo Ogura, James D Annan, Julia C Hargreaves, Manabu Abe, Youichi Kamae, Ryouta O’ishi, Rei Nobui, Seita Emori, Toru Nozawa, Ayako Abe-Ouchi and Masahide Kimoto, “Perturbed Physics Ensemble using the MIROC5 Coupled Atmosphere-Ocean GCM without Flux Corrections”, *Experimental Design and Initial Results. Climate Dynamics*, revised, 2012.
- [46] 中沢一雄, 原口亮, 芦原貴司, 難波経豊, 戸田直, 山口豪, 井尻敬, 高山健志, 五十嵐健夫, 倉智嘉久, 池田隆徳, “心臓モデリングとコンピュータシミュレーションが導く不整脈研究の世界”, *心臓*, Vol. 42, Suppl. 4, pp. 208-215, 2010.
- [47] 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.
- [48] 稲田慎, 原口亮, 中沢一雄, “イオンチャネルモデルを用いた心筋組織における興奮伝播シミュレーション”, *医学のあゆみ*, Vol. 238, No. 3, pp. 223-228, 2011.
- [49] J. Gao, Y. Wang, K.M. Folta, V. Krishna, W. Bai, P. Indeglia, A. Georgieva, H. Nakamura, B. Koopman, and B. Moudgil, “Polyhydroxy Fullerenes (Fullerols or Fullerenols): Beneficial Effects on Growth and Lifespan in Diverse Biological Models”, *PloS one*, 6, e19976, 2011.
- [50] K. Horiuti and T. Ozawa, “Multi-mode stretched spiral vortex and nonequilibrium energy spectrum in homogeneous shear flow turbulence”, *Physics of Fluids*, Vol.23, No.3, 35107, Mar. 2011.
- [51] K. Horiuti and Y. Masuda, “Extraction of nonequilibrium $-7/3$ energy spectrum in experimental measurement turbulence data”, *Bulletin of the American Physical Society*, Vol.56, No.11, 270-271, Nov. 2011.
- [52] K. Horiuti, K. Matsumoto and M. Adachi, “Marked drag reduction in non-affine viscoelastic turbulence in homogeneous isotropic and pipe flows”, *J. Phys.: Conf. Ser.*, Vol.318, 9216, Dec. 2011.
- [53] Yoshitaka Fujimoto and Susumu Saito, “For-

- mation, stabilities, and electronic properties of nitrogen defects in graphene”, *Physical Review B*, Vol. 84, pp. 245446_1-7, Dec. 2011.
- [54] 片岡浩人, 田村哲郎, “LESによる実在市街地上空風の鉛直分布と地表面粗度との関係に関する研究”, *日本建築学会構造系論文集*, Vol. 77, No. 678, 2012.8 (掲載予定) .
- [55] Koichi TSUJIMOTO, Koji AO, Toshihiko SHAKOUCHI and Toshitake ANDO, “Numerical Investigation on Flow Structures and Mixing Performances of Vector-Controlled Free Jet using DNS”, *Journal of Fluid Science and Technology*, Vol. 6, No. 4, pp.401-411, 2011.
- [56] Edyta Dziemińska, Motoki Fukuda, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, “Fast flame propagation in Hydrogen-Oxygen mixture”, *Combustion Science and Technology*, accepted, .
- [57] Edyta Dzieminska, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, and Nobuyuki Tsuboi, “Lewis number profiles in propagating flame and DDT process”, *Science and Technology of Energetic Materials*, accepted, .
- [58] K. Tatsumi, Y. Komori, T. Arakawa, K. Nishitani and K. Nakabe, “Development of a Numerical Model for Single Red Blood Cell Motions in Stationary Fluid in the Presence of Uniform Magnetic Field”, *Progress in Computational Fluid Dynamics*, (投稿中).
- [59] Makoto Asahara, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, and Eisuke Yamada, “Two-dimensional analysis of Hydrogen/Oxygen cylindrical detonation using AUSMDV scheme”, *Archivum Combustions*, Polish Academy of Science, Vol. 30, No. 3, pp. 177-186, 2011.
- [60] Y.Kimura, N.Tsuboi, A.K.Hayashi, E.Yamada, “Numerical Study and Performance Evaluation for Pulse Detonation Engine with Exhaust Nozzle (1st report: Estimation on Performance using a Detailed Reaction Model)”, *Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences*, Vol.55, No.1, pp.51-59, Jan., 2012.
- [61] 町田正博、犬塚修一郎、松本倫明, “Recurrent Planet Formation and Intermittent Protostellar Outflows Induced by Episodic Mass Accretion”, *The Astrophysical Journal*, vol. 729, p42-59, 2011年3月.
- [62] 町田正博、松本倫明, “The origin and formation of the circumstellar disc”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 413, p2767-2784, 2011年6月.
- [63] 町田正博、犬塚修一郎、松本倫明, “Effect of Magnetic Braking on the Circumstellar Disk Formation in a Strongly Magnetized Cloud”, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, vol. 63, p555-573, 2011年6月.
- [64] K. Tomisaka and K. Tomida, “Observational Identification of First Cores: Non-LTE Radiative Transfer Simulation”, *PASJ*, 63, 5, 1151-1164, 2011.
- [65] Kenji Kiyohara, Hiroshi Shioyama, Takushi Sugino, and Kinji Asaka, “Phase transition in porous electrodes. II. Effect of asymmetry in the ion size”, *J. Chem. Phys.*, Vol. 136, 94701, 2012.
- [66] 池田浩人, 森脇英恵, 松原友規, 湯川美穂, 岩瀬由紀子, 湯川栄二, 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 (2) カテキンのgalloyl基の有無が不溶性複合体形成に与える影響”, *YAKUGAKU ZASSHI*, 132(1), 145-153, 2012.
- [67] S.Matsunaga, “Dynamical and thermodynamic properties of Ag⁺ and Cu⁺ halide mixtures”, *Molecular Simulation*, Volume 38, Issue 5, pages 384-388, April 2012.
- [68] M.Kusakabe, S.Takeno, T.Koishi, S.Matsunaga and S.Tamaki, “A theoretical extension for the electrical conductivity of molten salts”, *Molecular Simulation*, Volume 38, Issue 1, pages 45-56, January 2012.
- [69] S.Matsunaga and S.Tamaki, “On the inter ionic potentials of molten salts”, *The European Physical Journal Web of Conferences*, vol.15, 02010, 6pp, 2011.
- [70] Saita, S., A. Kadokura, N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, S. Ohtani, G. Ueno, K. Murata, D. Matsuoka, A. Kitamoto, and T. Higuchi, “Displacement of conjugate point during a substorm in a global MHD simulation”, *Journal of Geophys. Res.*, Vol. 116, A06213, 13 pp., doi: 10.1029/2010JA016155, 2011.
- [71] 渡邊 英伸, 山本 和憲, 村田 健史, 木村 映善, 亘 慎一, 村山 泰啓, 宮地 英生, 荻野 龍樹, 深沢 圭一郎, “3次元可視化パラメータ共有による多地点遠隔ボリュームコミュニケーションシステム”, *電子情報通信学会和文論文誌, D*, J95-D, 5, 2012.

2 国際会議会議録掲載論文

- [1] Byung-jin An, Takeo Kajishima, "Discussion of the influence of turbulence models on unsteady cavitation flows past a hydrofoil", 3rd International Cavitation Forum 2011, 2011.7.
- [2] Chang-hwa Han, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Numerical simulation of turbulent flow past a serrated airfoil", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-02009, 2011.7.
- [3] Toshiaki Fukada, Takeshi Omori, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Direct numerical simulation of flow past a solid particle - Influence of streamline curvature and particle non-sphericity -", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-20007, 2011.7.
- [4] Suguru Miyauchi, Takeshi Omori, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Numerical simulation of unsteady flow through a two-dimensional channel with a vocal cord model", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-20009, 2011.7.
- [5] Kazuyasu Sugiyama, Satoshi Ii, Shintaro Takeuchi, Shu Takagi and Yoichiro Matsumoto, "A Full Eulerian Finite Difference Method for Hyperelastic Particles in Fluid Flows", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-04001, 2011.7.
- [6] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, Suguru Miyauchi, "Fixed-Grid FSI Technique - IB-FEM Coupled Method", Lectures on Computational Fluid-Structure Interaction, pp.45-54, 2012.3.
- [7] Chang-hwa Han, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Numerical Simulation of Reduction of Discrete Frequency Noise by Trailing Edge Serration of Airfoil", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF20-003, 2012.3.
- [8] Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Numerical Simulation of Intermittent Flow through Two-Dimensional Elastic Channel", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF22-005, 2012.3.
- [9] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Comparison of fluid force and movement of an arbitrary-shaped particle in uniform and curved flows", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF25-008, 2012.3.
- [10] Byung-jin An, Takeo Kajishima, "A Prediction Method of Cavitation Surge by Response Analysis of Flow Rate Fluctuation in a Two-Dimensional Cascade", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF26-015, 2012.3.
- [11] Koji Shibata, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Numerical Analysis of Gas-Liquid Interface Instability due to Impinging Jet", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF32-012, 2012.3.
- [12] Shintaro Takeuchi, Takaaki Tsutsumi, Takeo Kajishima, "Effect of solid-liquid heat conductivity ratio on two-phase flow behaviours", International Symposium on Discrete Element Modelling of Particulate Media, No.A025, 2012.3.
- [13] Yukio Kaneda, Yasuyuki Yokota, Yoshitada Morikawa, and Ken-ichi Fukui, "First-Principle Molecular Dynamics Simulation of the Aqueous $\text{Fc}^0 / \text{Fc}^+$ Redox Reaction: Toward the Redox Reaction of Electrode Interface", 7th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Nov. 2011.
- [14] Yasuyuki Yokota, Yukio Kaneda, Yoshitada Morikawa, and Ken-ichi Fukui, "Electrochemical Properties of Ferrocene in Aqueous Solutions Using First-Principle Molecular Dynamics Calculations", International Symposium on Surface Science -Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation- (ISSS-6), Tokyo, Japan, Dec. 2011.
- [15] Kunio Fujiwara and Masahiko Shibahara, "A Molecular Dynamics Study on the Wetting Phenomena at a Solid Surface with a Nanometer Scale Slit Pore", Proceedings of the Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow 2011, 037, CD-ROM, Sep. 2011.
- [16] Kobayashi, T., Shimada, N. and Tanaka, T., "DEM-CFD Coupling Simulation of Fluidized Behavior of Geldart's Group A Particles (A Contact Force Model for Expressing Adhesion Force)", Proc. of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011 (AJK2011-FED), AJK2011-120112011.
- [17] Takuya Miyauchi, Satoshi Oh, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka, "Motion and Temperature of Individual Particles in Two-Dimensional Fluidized Bed with Heat Transfer", Proc. of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011 (AJK2011-FED), AJK2011-120232011.
- [18] Yu Takano, Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, "Electronic structures of the Cu_2S_2 core of the Cu_A site in cytochrome *c* oxidase",

52th Sanibel Symposium, The King and Prince Golf & Beach Resort, Georgia, Feb. 2012.

- [19] D. Matsunaka and Y. Shibutani, "Strain Dependence of Adsorption and Dissociation of NO on Metal Surfaces by First-principles Calculations", 28th European Conference on Surface Science (ECOSS28), Poland, August 2011.
- [20] Munazah Andrabi, Hisato Kondoh, "Genome-wide prediction of POU/SOX factor dependent regulatory modules involved in the developmental processes", Third International Sox Meeting, Grainau, Germany, 2011年9月12日.
- [21] Michio Ishikawa, Makoto Katsura, Satoru Nakashima, Kento Aizawa, Tsutomu Inoue, Yuka Ikemoto and Hidekazu Okamura, "Application of a Modulating Technique to Detect Near-Field Signals Using a Conventional IR Spectrometer with a Ceramic Light Source", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol. 9, pp.40-45, 2011.
- [22] Yuka Ikemoto, Taro Moriwaki, Toyohiko Kinoshita, Michio Ishikawa, Satoru Nakashima and Hidekazu Okamura, "Near-Field Spectroscopy with Infrared Synchrotron Radiation Source", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol. 9, pp.63-66, 2011.
- [23] Inada S, Ashihara T, Haraguchi R, Iwata M, Nakazawa K, "Stability of ventricular fibrillation is altered by wall deformation after the onset of fibrillation", Asia Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session, 2011.
- [24] Haraguchi R, Ashihara T, Tsumoto K, Inada S, Nakazawa K, "Rotational anisotropy prevents transitions of tachycardia to fibrillation in the ventricular wall model with large transmural dispersion of repolarization: a simulation study", Asia Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session, 2011.
- [25] Haraguchi R, "Transmural Dispersion of Repolarization Determines Scroll Wave Behavior During Ventricular Tachyarrhythmias – A Simulation Study", The 4th Global COE International Symposium on Physiome and Systems Biology for Integrated Life Sciences and Predictive Medicine, 2011.
- [26] N. FURUSHIRO, T. YAMAGUCHI, S. TERAUCHI, S. MATSUDA, S. SHIMADA, "Suppression of Tool Wear in Diamond Turning of Steels by Surface Modification - Effect of Carburizing-", Proc. ASPE 2011 Annual Meeting, Denver, U.S.A(CDR), P4, Nov. 13-18, 2011.
- [27] T. KANEEDA, H. TORIGOE, H. IWASHITA, S. SHIMADA, K. OBATA, L. ANTHONY, "Effects of Internal Micro-defects on Diamond Tool Wear in Precision Cutting -- Micro FT-IR Analysis for Internal Micro-defects at the Tool Edge --", Proc. ASPE 2011 Annual Meeting, Denver, U.S.A(CDR), P10, Nov. 13-18, 2011.
- [28] H. Nakamura, Y. Nozaki, and S. Watano, "Molecular Dynamics Analysis of Passive Transport of Fullerene C60 Through Lipid Bilayers", Proc. of the International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT) 2011, # II3- 5, 2011.
- [29] Y. Nozaki, H. Nakamura, T. Iwasaki and S. Watano, "Translocation of Fullerene C60 Through Lipid Membranes with Different Packing Density: A Molecular Dynamics Simulation Study", Proc. of the International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT) 2011, # II3-PO4-5 , 2011.
- [30] Yoshitaka Fujimoto and Atsushi Oshiyama, "Formation and Stability of 90 Degree Dislocation Cores in Ge Films on Si(001)", AIP Conference Proceedings, Vol. 1399, pp. 185-186, 2011.
- [31] Kataoka, H. and Tamura, T, "Numerical prediction of the peak pressure distributions on square cylinder by LES", 13th International Conference on Wind Engineering, Paper No. 190, 2011.7.
- [32] Kazuya Tsuboi, Tatsuya Hasegawa, "An Analysis on Local Burning Velocity and Flame Displacement Speed Using DNS Database", 13th International Conference on Numerical Combustion, p.205, Apr. 2011.
- [33] Kazuya Tsuboi, Tatsuya Hasegawa, "DNS including the Chemical Process on a Solid Surface in Turbulent Premixed Flames", Proceedings of the Eighth KSME-JSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GST04-012, Mar. 2012.
- [34] Y. Yoshikawa and Y. Ide, "The wind-driven turbulence and flow under surface heating", Ocean Sciences Meeting 2012, Saltlake City, USA, 2012年2月20日.
- [35] Koichi TSUJIMOTO, Koji AO, Toshihiko SHAKOUCHI, and Toshitake ANDO, "Mixing and Flow Structures of Vector-Controlled Free Jets using DNS", Seventh International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena(TSFP-7), CD-ROM, pp.1-6, Jul. 2011.
- [36] Tsujimoto, K., Ao, K., Shakouchi, T. and Ando, T., "Direct Numerical Simulation of Vector-Controlled Free Jets", 13 th European Turbulence Conference

Books of Abstract, p.172, Sep. 2011.

- [37] 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.
- [38] Tetsuro Tamura, “Kojiro Nozawa One-way coupling of nested grids in WRF-LES and local LES for turbulent boundary layer”.
- [39] E. Dzieminska, M. Fukuda, A.K. Hayashi, N. Tsuboi, and E. Yamada, “Fast flame propagation and ignition process of DDT in the boundary layer of H₂/O₂ mixture”, 28th International Symposium on Shock Waves, Manchester, 17-22, July 2011.
- [40] Motoki Fukuda, Edyta Dzieminska, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, and Nobuyuki Tsuboi, “Effect of Wall Conditions on DDT in Hydrogen-Oxygen Mixture”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, Paper No. 207, July 24-29, 2011.
- [41] Makoto Asahara, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, “Detailed Shock Configuration of Cylindrical Cellular Detonation”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, Paper No. 324, July 24-29, 2011.
- [42] Takayuki Yamada, Yuho Uemura, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, and Eisuke Yamada, “Physics of Detonation Propagation in Rotating Detonation Engine”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, Paper No. 173, July 24-29, 2011.
- [43] Dzieminska, E., Fukuda, M., Hayashi, A.K., Tsuboi, N., Yamada, E., “Fast Deflagration in the Smooth Tube, in Hydrogen-Oxygen Mixture”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, Paper No. 185, July 24-29, 2011.
- [44] E. Dzieminska, A. K. Hayashi, N. Tsuboi, “Lewis number effect on DDT process and detonation”, The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications - Naha, Okinawa, Japan, 16-B1-4, 16-18 November.
- [45] N. Tsuboi, T. Yamada, A. K. Hayashi, E. Yamada, “Three-dimensional simulation on a rotating detonation engine: Three-dimensional shock structure”, The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications - Naha, Okinawa, Japan, 18-H-2, 16-18 November.
- [46] E. Dzieminska, A.K. Hayashi, E. Yamada, and N. Tsuboi, “Ignition in the boundary layer driven by shock-boundary layer interaction”, 3rd International Workshop on Detonation/Detonation Engine, November 19, 2011.
- [47] A. Koichi Hayashi, Tatsuya Aoki, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, “Bio Fuel and its Pulse Detonation Engine”, 3rd International Workshop on Detonation/Detonation Engine, November 19, 2011.
- [48] A. Koichi Hayashi, Yuho Uemura, Takayuki Yamada, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, “Rotating Detonation Engine Study in AGU”, Plenary Lecture, the 2011 Fall Conference of the Korean Society of Propulsion Engineers, Pusan, Korea, November 24, 2011.
- [49] H. Hosoda*, A. K. Hayashi, E. Yamada, “Numerical analysis on combustion efficiency of nano aluminum particle-oxygen two-phase detonation”, The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications - Naha, Okinawa, Japan, 17-A3-1, 16-18 November, 2011.
- [50] N. Kitabayashi, Y. Wada, T. Mogi, T. Saburi, and A.K. Hayashi, “Experimental Study on Auto-Ignition of High Pressure Hydrogen Jets Coming out of Tubes of 0.1-4.2 m in Length”, 4th International Conference on Hydrogen Safety, San Francisco, Paper No. 257, September 12-14, 2011.
- [51] M. Asahara, N. Tsuboi, A.K. Hayashi, and E. Yamada, “Dependency of Equivalence Ratio on Hydrogen Cylindrical Detonation Induced by Direct Initiation”, 4th International Conference on Hydrogen Safety, San Francisco, Paper No. 257, September 12-14, 2011.
- [52] Edyta Dziemińska, Motoki Fukuda, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, “Fast Flame Propagation in Smooth Tube”, ICDERS - a colloquium organized by the Institute for the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, U.S.A., July 24-29, 2011.
- [53] Y. Komori, T. Arakawa, K. Nishitani, K. Tatsumi and K. Nakabe, “Motion of Red Blood Cell in Stationary Fluid under Uniform Magnetic Field”, Proc. 3rd Int. Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT-2011), 2011 September 22-26.
- [54] K. Tatsumi, R. Kuroki, K. Nishitani, T. Arakawa and K. Nakabe, “Numerical Modeling of Red Blood Cell Suspended in a Channel with Uniform Mag-

- netic Field”, Proc. ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference (AJK2011), 2011 July 24-29.
- [55] Asahara, M., Tsuboi, N. Hayashi, A.K. and Yamada, E., “Dependency of Equivalence Ratio on Hydrogen Cylindrical Detonation Induced by Direct Initiation”, 4th International Hydrogen Safety, paper no.224, 2011.
- [56] Makoto Asahara, Nobuyuki Tsuboi, A.Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, “Detailed Shock Configuration of Cylindrical Cellular Detonation”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Oral 324, 2011.
- [57] Nobuyuki Tsuboi, A.Koichi Hayashi, Youhi Morii, Mitsuo Koshi, “Numerical Simulation on Two-Dimensional Detonation including Boundary Layer Effects”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Oral 187, 2011.
- [58] Takayuki Yamada, Nobuyuki Tsuboi, Yuho Uemura, A.Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, “Physics of Detonation Propagation in Rotating Detonation Engine”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Poster 173, 2011.
- [59] Nobuyuki Tsuboi, Katsuyoshi Fukiba, Toru Shimada, “Three-Dimensional Numerical Simulation on Unsteady Compressible Flow Using Preconditioning Method: Swirling Injector Flowfield in Hybrid Rocket Engine”, Eighth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2011), OS5-15, pp.312-313, 2011.
- [60] N. Tsuboi, T. Yamada, A. K. Hayashi, E. Yamada, “Three-dimensional simulation on a rotating detonation engine: Three-dimensional shock structure”, The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications, 18-H-2, 2011.
- [61] Youhi Morii, Nobuyuki Tsuboi, Hiroyuki Ogasawa, Shinichiro Tokudome, and A. Koichi Hayashi, “Numerical approach to one-dimensional CH₄/O₂ detonation with the reduction model DRG30”, The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications, 17-A1-1, 2011.11.
- [62] Yuichi Togashi, “Modeling Bio-Molecular Machinery in the Complex Environment Inside the Cell”, Proceedings of the 11th IEEE/IPSJ International Symposium on Applications and the Internet, SAINT 2011, p. 266, 2011.
- [63] Kan Watanabe, Nobuo Funabiki, Toru Nakanishi and Masaru Fukushi, “Modeling and Performance Evaluation of Colluding Attack in Volunteer Computing Systems”, Proc. of The International Multi-Conference of Engineers and Computer Scientists 2012, pp.1658-1663, Mar. 2012.
- [64] TOYOSHIMA, Masayuki, “Creation of metallic movable types of Japanese KANJI/KANA by the Jesuits”, (The 7th international conference on Missionary Linguistics, 2012年2月28日～3月2日、University of Bremen, Bremen, Germany, 2012年3月1日; 白井純と共同発表.
- [65] 豊島正之, “金属活字の製作に於ける異体字”, 漢字字体史研究国際シンポジウム「字体規範と異体の歴史」、International symposium on the history of normative glyphs and their variants, 2011年12月16日～18日、東京外国語大学アジア・アフリカ言語文化研究所, 2011.12.18.
- [66] TOYOSHIMA, Masayuki, “Fazer ligações entre dicionários históricos on-line, e manter bases-de-dados distribuídos”, Simpósio sobre a historiografia linguística, CEDOCH, Universidade de São Paulo, Brasil, 2011.9.30 [招待発表].
- [67] TOYOSHIMA, Masayuki, “Arquivos digitais japoneses para a pesquisa da historiografia linguística”, Simpósio internacional "Estudos japoneses na América Latina : Diálogos, perspectivas e projetos conjuntos", 2011.9.26--30, Associação brasileira de estudos japoneses (ABEJ), Centro de estudos japoneses, São Paulo, Brasil, Memorial da América Latina, São Paulo, Brasil, 2011.9.29 [招待発表].
- [68] Shun Takahashi, Norio Arai, “Multidisciplinary Investigation by Fluid-Structure-Motion Integrated Simulation”, IV International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering, June. 2011.
- [69] Esmatullah Maiwand Sharify, Norio Arai, Shun Takahashi, “Fluid-Structure Interaction of Circular Cylinders with Elastic Surface”, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, July. 2011.
- [70] Esmatullah Maiwand Sharify, Junnan Li, Hiroki Saito, Shun Takahashi, Norio Arai, “Experimental Investigation and Numerical Computation of Fluid-Structure Interaction on a Square-Section Cylinder with Elastic Surface”, 6th International Symposium on Advanced Science and Technology in Experimental Mechanics, Nov. 2011.
- [71] Kubota, Y., K. Yamamoto, K. Fukazawa, and K. T. Murata, “Visualization of fluxrope generation pro-

cess using large quantities of MHD simulation data”, The 1st ICSU WDS Conference, Kyoto, Japan, September, 2011.

- [72] Watari, S., H. Kato, K. T. Murata, K. Yamamoto, H. Watanabe, Y. Kubota, and M. Kunitake, “Research environment and information service of Space Weather Cloud”, The 1st ICUSU World Data System Conference - Global Data for Global Science -, Space Weather Workshop, Colorado, USA, April, 2011.
- [73] Y. Yamamoto and T. Kunugi, “MHD heat transfer assessment under blanket design condition utilized molten salt coolant by means of new improved RANS simulation”, 10th International Symposium on Fusion Nuclear Technology, Paper No. 2011.

3 国内研究会等発表論文

- [1] 深田利昭, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “曲がった流れの中における固体粒子に働く流体力および粒子の回転に関する研究”, 第25回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, B05-4, 2011.12.
- [2] 宮内優, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “流体と声帯を模擬した柔軟構造物との相互作用により励起される振動に関する研究”, 第25回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, A07-2, 2011.12.
- [3] 丸谷康二, 梶島岳夫, “準線形近似した Rayleigh-Plesset の式によりベンチュリ管内の気泡の初生を考慮した流れの数値解析”, 第25回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, C07-4, 2011.12.
- [4] 韓昌和, 大森健史, 梶島岳夫, “翼の後縁セレーションによる離散周波数騒音の低減に関する研究”, 第25回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, A08-4, 2011.12.
- [5] 清水康介, 大森健史, 梶島岳夫, “境界適合格子におけるVOF法を用いた自由界面近傍の物体に作用する流体力の解析”, 第25回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, A11-2, 2011.12.
- [6] 丸谷康二, 梶島岳夫, “ベンチュリ管内のキャビテーション流れの数値解析”, 日本機械学会関西支部 第87期定時総会講演会講演前刷集, p.1.37, 2012.3.
- [7] 中西寛, 笠井秀明, “固体表面近傍でのミューオンの非局在効果”, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月.
- [8] 坂上護, 笠井秀明, 石原達己, 中西基浩, “希土類系酸化物における酸素イオン伝導”, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月.
- [9] 岸浩史, 笠井秀明, 田中裕久, 御立千秋, 西畑保雄, “元素戦略プロジェクト -脱貴金属自動車触媒のデザインと実証-, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月.
- [10] Nghiem Thi Minh Hoa, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “Kondo Effect and Magnetic Frustration in a System of Magnetic Trimer on a Metal Surface”, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月.
- [11] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “酸素分子共吸着銀表面上での水素分子のオルソ・パラ転換における分子拡散及び束縛回転状態の影響”, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月.
- [12] 岡耕平, 中西寛, 笠井秀明, “第一原理計算に基づくペロブスカイト型酸化物の強誘電性と構造相転移に関する研究”, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月.
- [13] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “Ag(111)表面上の水素分子のオルソ・パラ転換におけるファン・デル・ワールス力の影響”, 第52回真空に関する連合講演会, 学習院大学, 2011年11月.
- [14] 岡耕平, 中西寛, 笠井秀明, “第一原理計算を用いたペロブスカイト型酸化物の自発分極に関する理論的研究”, 第52回真空に関する連合講演会, 学習院大学, 2011年11月.
- [15] 笠井秀明, “水素アトミクスの理論研究とその展望”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学, 2011年9月.
- [16] Wilson Agerico Diño, “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 2011年秋季大会, 富山大学, 2011年9月.
- [17] 中西寛, “ミュオンがみる固体表面・サブ表面”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学, 2011年9月.
- [18] 中西寛, 笠井秀明, “金属表面近傍での水素・ミューオンの量子状態”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学, 2011年9月.
- [19] Nghiem Thi Minh Hoa, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “A Possible Transition in Systems of Magnetic Trimers on a Metal Surface”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学, 2011年9月.
- [20] Handoko Setyo Kuncoro, Mamoru Sakaue, Hideaki Kasai, “Interaction of Trivalent Transition

- Metal Ions (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) with Water Molecules”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [21] Triati Dewi Kencana Wungu, Febdian Rusydi, Hermawan Kresno Dipojono, Hideaki Kasai, “First Principles Calculations of the Adsorption of Water on Li-Montmorillonite”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [22] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “銀表面上へ吸着した酸素の準安定強磁性状態”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [23] 三輪邦之, 笠井秀明, “金属表面上の分子の振動運動における電子相関効果”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [24] 岡耕平, 中西寛, 笠井秀明, “ペロブスカイト型酸化物の構造相転移と自発分極に関する第一原理的研究”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [25] 岸浩史, Allan Abraham Bustria Padama, 笠井秀明, “NO_x還元触媒表面におけるNO分子のダイナミクスに関する研究”, 2011 年秋季 第 72 回応用物理学会学術講演会, 山形大学, 2011 年 8 月.
- [26] 笠井秀明, “計算機マテリアルズデザイン先端研究事例”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [27] 岸浩史, Allan Abraham Bustria Padama, 笠井秀明, “NO_x還元触媒表面におけるNO分子のダイナミクスに関する研究”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [28] Wahyu Tri Cahyanto, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “Atomic composition of PtRuMo Alloy Catalysts on CO oxidation of Anodic DMFCs”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [29] Mohammad Kemal Agusta, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “Mechanism of hydrazine adsorption on metal surfaces”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [30] Handoko Setyo Kuncoro, Hideaki Kasai, “BOMD study on Structure of Small Water Clusters near 353.15K”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [31] Nghiem Hoa Thi Minh, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “Kondo effect in the systems of magnetic trimers on a metal surface”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [32] Mary Clare Sison Escaño, Tien Quang Nguyen, Hideaki Kasai, “Molecular and Electronic Tuning of Si/CNT Hybrid System”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [33] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “銀表面上での水素分子の核スピン転換における共吸着酸素分子の影響”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [34] Abdulla Ali Abdulla Sarhan, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, “Effect of the Electron-phonon interaction on Transport through Adsorbed Melamine Molecule on Cu Surface”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [35] Wungu Triati Dewi Kencana, Hideaki Kasai, “Study of Adsorbed Water on Li-Montmorillonite”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [36] Nguyen Tien Quang, Hideaki Kasai, “Oxygen dissociative adsorption on Pt₄/CeO₂(111) surface”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [37] Aspera Susan Meñez, Hiroshi Nakanishi, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai, Hiroyuki Kawai, “Role of Surface Distortion on Molecular Adsorption on the Tri-s-triazine-based Graphitic Carbon Nitride Surface: A Specific Analysis on O₂ Molecule Interaction”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [38] Febdian Rusydi, Hideaki Kasai, “The first result on the properties of ground state porphyrin (the study of photosensitizing process in photodynamic therapy)”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シン

- ポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [39] 小島一希, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “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”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [40] 三輪邦之, 松中大介, 笠井秀明, “金属表面に吸着している磁性原子の超格子における電子状態密度”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [41] Saputro Adhitya Gandaryus, Hideaki Kasai, “H₂O₂ dissociation on Co-(6)Ppy Clusters”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [42] Allan Abraham Bustria Padama, Hiroshi Nakaniishi, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “First Principles Investigation of H₂ Dissociative Adsorption on Mn-modified Ni(111) Surface”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [43] 岡耕平, 中西寛, 笠井秀明, “ペロブスカイト型酸化物の自発分極と圧電性に関する第一原理的研究”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [44] Moreno Joaquin Lorenzo Valmorira, Hideaki Kasai, “Selective oxidation of semiconducting Fe-filled SWNT”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [45] Ryan Lacdao Arevalo, Mary Clare Sison Escaño, Hideaki Kasai, “Adsorption and dehydrogenation of borohydride on Mn(111)”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [46] 兼田 有希央, 横田 泰之, 森川 良忠, 福井 賢一, “第一原理分子動力学法によるレドックス活性種の酸化還元電位評価”, 分子科学討論会 2011, 札幌, 2011年9月.
- [47] 兼田 有希央, 横田 泰之, 森川 良忠, 福井 賢一, “第一原理分子動力学計算による水溶液中でのフェロセンの酸化還元特性の評価”, 日本化学会第92春季年会, 横浜, 2012年3月.
- [48] 神谷崇仁, 藤原邦夫, 芝原正彦, “界面微細構造が固液界面での液体分子挙動に及ぼす影響に関する分子動力学的研究”, 第25回数値流体シンポジウム, USB-Memory, Dec. 2011.
- [49] 酒井規行, 辻拓也, 田中敏嗣, “壁面近傍に固定した粒子が乱流特性に与える影響のPIV計測”, 日本機械学会関西支部第87期定時総会講演会講演論文集, No.124-1, p.7-12, 2012.
- [50] 若松知哉, 辻拓也, 田中敏嗣, “修正体積力型埋め込み境界法”, 第25回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, C05-3, 2011.
- [51] 東田恭平, 奥山佳那, 辻拓也, 田中敏嗣, “気系流動層中に存在する粗大物体の挙動予測モデルの開発”, 第25回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, D01-3, 2011.
- [52] 川口寿裕, 萩原健一郎, 乾真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “DEM-MPSカップリング手法による液中粒子群挙動解析”, 第17回流動化・粒子プロセスシンポジウム講演論文集, pp.18-20, 2011.
- [53] 東田恭平, 辻拓也, 田中敏嗣, “気系流動層中に存在する粗大物体の挙動予測モデル開発”, 第17回流動化・粒子プロセスシンポジウム講演論文集, pp.32-35, 2011.
- [54] 宮井慎一郎, 辻拓也, 高山武盛, 田中敏嗣, 永田貴則, 上田匡邦, 近藤開太, “油圧ショベルによる掘削挙動のDEM解析(礫粒子形状の影響について)”, テラメカニクス第32回研究会講演論文集, p.14, 2011.
- [55] スパルマン アドリアヌス ノバドリ, 辻拓也, 田中敏嗣, 高山武盛, 門野裕一, “ブルドーザブレードによる押し土作業のためのベンチスケール実験(豊浦砂とガラス球の比較)”, テラメカニクス第32回研究会講演論文集, p.19, 2011.
- [56] 中川裕太, 辻拓也, 高山武盛, 田中敏嗣, 門野裕一, “ブルドーザブレードによる付着性土砂掘削挙動のDEM解析”, テラメカニクス第32回研究会講演論文集, p.16, 2011.
- [57] 田中敏嗣, “流動層DEM-CFDカップリングシミュレーションの現状と展望(大規模計算, 付着性粒子への展開)”, 第28回製剤と粒子設計シンポジウム講演要旨集, pp. 4-5, 2011.
- [58] 宮井慎一郎, 辻拓也, 高山武盛, 田中敏嗣, 永田貴則, 上田匡邦, 近藤開太, “礫粒子の形状効果を加味した離散要素法による油圧ショベルの掘削解析”, 粉体工学会 2011年度秋期研究発表会講演論文集, pp. 47-48, 2011.
- [59] 中川裕太, 辻拓也, 田中敏嗣, 高山武盛, 門野裕一, “ブルドーザによる付着性土砂掘削挙動の

- 離散要素法解析”, 粉体工学会 2011 年度秋期研究発表会講演論文集, pp.45-46, 2011.
- [60] 井門孝博, 乾真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “DEM-MPSカップリングによる固体粒子間濡れ挙動の数値シミュレーション”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.72-73, 2011.
- [61] 宮内卓也, 王 聡, 辻拓也, 田中敏嗣, “流動状態にある粒子の運動と温度の同時計測”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.382-383, 2011.
- [62] 川口寿裕, 萩原健一郎, 乾真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “液中粒子群挙動のDEM-MPS解析およびPTV計測”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.398-399, 2011.
- [63] 辻拓也, 成田栄嗣, 田中敏嗣, “高濃度粒子を含む流れ場へ壁面が与える影響について”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.400-401, 2011.
- [64] 若松知哉, 辻拓也, 田中敏嗣, “修正体積力型埋め込み境界法の開発”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.402-403, 2011.
- [65] 児林智成, 田中敏嗣, “DEM-CFDカップリングシミュレーションによるA粒子流動層の解析(動的付着力モデルとその適用範囲について)”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.408-409, 2011.
- [66] 西嶋康行, 辻拓也, 田中敏嗣, “2次元流動層内流れの大規模DEM-CFD解析”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.412-413, 2011.
- [67] 宮内卓也, 王 聡, 辻拓也, 田中敏嗣, “2次元流動層内における個々の粒子の運動と温度の同時計測”, 第16回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文集, No.11-13, pp.409-410, 2011.
- [68] 井門孝博, 乾真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “MPS法による液滴挙動の数値シミュレーション”, 粉体工学会 2011 年度春期研究発表会講演論文集, pp.49-50, 2011.
- [69] 児林智成, 田中敏嗣, “動的付着力モデルを用いたA粒子流動層DEM-CFDカップリングシミュレーション(流動と気泡径分布に対する付着力の影響)”, 粉体工学会 2011 年度春期研究発表会講演論文集, pp. 125-126, 2011.
- [70] 辻拓也, 成田栄嗣, 田中敏嗣, “高濃度粒子が存在する流れ場に対して壁面が及ぼす影響に関する検討(メゾスコピックモデルの視点から)”, 粉体工学会 2011 年度春期研究発表会講演論文集, pp.127-128, 2011.
- [71] 鷹野 優, 米澤 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リド還元酵素中の[4Fe-4S]クラスターの電子構造の理論的研究”, 第11回蛋白質科学会, ホテル阪急エキスポパーク(吹田), Jun-11.
- [72] Yu Takano, Yasushige Yonezawa, Yuichi Fujita, Genji Kurisu, Haruki Nakamura, “Density functional study of electronic structures of a characteristic [4Fe-4S] cluster, $[\text{Fe}_4\text{S}_4(\text{SCH}_3)_3(\text{CH}_3\text{COO})]$, in dark-operative protochlorophyllide oxidoreductase”, 7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Waseda University, Tokyo, Sep. 2011.
- [73] Yu Takano, Yasushige Yonezawa, Yuichi Fujita, Genji Kurisu, Haruki Nakamura, “Computational study of electronic structures of a characteristic [4Fe-4S] cluster, $[\text{Fe}_4\text{S}_4(\text{SCH}_3)_3(\text{CH}_3\text{COO})]$, in dark-operative protochlorophyllide oxidoreductase”, XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Ishikawa Prefecture Museum of Art (IPMA), Kanazawa, Ishikawa, Sep. 2011.
- [74] Makoto Kita, Haruki Nakamura, Yu Takano, “Computational study of conformational preferences in intermediates and transition states of the hydrolysis of dimethyl phosphate”, XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Ishikawa Prefecture Museum of Art (IPMA), Kanazawa, Ishikawa, Sep. 2011.
- [75] Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, Yu Takano, “Origin of the variety of the Cu_2S_2 core of the Cu_A site”, XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Ishikawa Prefecture Museum of Art (IPMA), Kanazawa, Ishikawa, Sep. 2011.
- [76] 鷹野 優, 米澤 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村 春木, “Characteristic electronic structures of a novel [4Fe-4S] cluster in dark-operative protochlorophyllide oxidoreductase (DPOR)”, 第48回日本生物物理学会, 東北大学川内キャンパス(姫路), Sep. 2011.
- [77] 鷹野 優, 重田 育照, 奥山 折緒, 小泉 健一, 中村 春木, “シトクロムc酸化酵素、亜酸化窒素還元酵素にみられる Cu_A 部位の Cu_2S_2 コアの電子構造の起源の理論的解明”, 第61回錯体化学討論会, 岡山理科大学(岡山), Sep. 2011.
- [78] 鷹野 優, 重田 育照, 奥山 折緒, 小泉 健一, 中村 春木, “シトクロムc酸化酵素、亜酸化窒素還元酵素にみられる Cu_A 部位の Cu_2S_2 コアの電子構造の起源の理論的解明”, 分子科学討論会 2011 北海道, 札幌コンベンションセンター

- (札幌) , Sep. 2011.
- [79] Yu Takano, Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, “Coordination effects on the electronic structures of the Cu_A site in cytochrome *c* oxidase”, The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-14), The University of Tokyo, Tokyo, Oct. 2011.
- [80] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, “シトクロム*c* 酸化酵素中のCu_A部位の電子構造に関する理論的研究”, スーパーコンピュータワークショップ2012「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」、分子科学研究所(岡崎) , Jan. 2012..
- [81] 岩本 知之, 鷹野 優, 中村 春木, “弾性ネットワークモデルによる基準振動モードを取り込んだβ₂ アドレナリンGPCRのフレキシブルドッキングシミュレーション”, 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻協定講座第1回協定講座シンポジウム「計算アルゴリズムと化学・生物学の融合」、神戸大学統合研究拠点(神戸) , Feb. 2012.
- [82] 鷹野 優, 中田 一人, 山中 秀介, 米澤 康滋, 中村 春木, “Platyus-QM/MMの開発と生体分子電子構造の解析”, 「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発(ナノ)/次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発(ライフ)」公開シンポジウム、ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター(神戸) , Mar. 2012.
- [83] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, “シトクロム*c*酸化酵素のCu_A部位の電子構造の配位子効果に関する理論的研究”, 文部科学省科学研究費新学術領域「コンピュティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」平成24年度研究会、東京大学大学院工学研究科(東京) , Mar. 2012.
- [84] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, “シトクロム*c* 酸化酵素にみられるCu_A部位の電子構造の配位子効果に関する理論的研究”, 日本化学会第92回春期年会、慶應義塾大学, Mar. 2012.
- [85] 松下勝義, 菊池誠, “競合効果に由来する天然変性の可能性”, 新学術領域研究「天然変性タンパク質の分子認識機構と機能発現」、平成23年度第2回領域会議、宮崎, パームビーチホテル, Aug. 2011.
- [86] Katsuyoshi Matsushita, Macoto Kikuchi, “rustration-Induced Intrinsic Disorder of NRST/REST”, The 49th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Himeji Shosha Campus, Univ. Hyogo, Sep. 2011.
- [87] 松下勝義, 菊池誠, “天然変性タンパク質の結合折りたたみにおけるエントロピー効果”, 日本物理学会2011年秋季大会、富山大学五福キャンパス, Sep. 2011.
- [88] 松下勝義, 菊池誠, “天然変性タンパク質結合によるターゲットタンパク質の構造安定化”, 日本物理学会 第67回年次大会, 関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス, Mar. 2012(予定).
- [89] 松下勝義, 菊池誠, “結合と折りたたみの共起におけるタンパク質構造の安定化”, YSM-SPIP2012, 京都基礎物理学研究所研究会, Mar. 2012(予定).
- [90] 松本正行, 小林大禎, “信号再生器が配置された光ファイバ伝送路の情報速度解析”, 電子情報通信学会研究報告, OCS2011-312011年7月.
- [91] 高見昂亮, 高谷裕浩, 林照剛, 道畑正岐, “高アスペクト比形状計測のための光放射圧プローブスタイラス最適形状の光電磁場解析”, 日本機械学会関西学生会学生員卒業研究発表講演会講演前刷集, pp.19-14, Mar. 2012.
- [92] 佐竹うらら, 榎本俊之, “構造解析を用いた高平坦エッジ形状を実現する研磨パッドの開発”, 第18回精密工学会学生会員卒業研究発表講演会論文集, 107-108, 2011.
- [93] 佐竹うらら, 榎本俊之, 田畑憲一, “構造解析を用いた高平坦エッジ形状を実現する研磨パッドの開発”, 2011年度砥粒加工学会学術講演会講演論文集, 25-28, 2011.
- [94] 加納明, 松中大介, 渋谷陽二, “双晶境界近傍での転位の相互作用に関するエネルギー論的検討”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム) , 2011.
- [95] 松中大介, 垂水竜一, 渋谷陽二, “1次元連結はりモデルにおける座屈不安定性の考察”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム) , 2011.
- [96] Seo Junghee, Daisuke Matsunaka, Yoji Shibutani, “First-principles study of adsorption properties of H₂S on metal surfaces”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム) , 2011.
- [97] 廣内智之, 都留智仁, 渋谷陽二, “粒界特性の面方位依存性を考慮したMulti-phase-fieldモデルの構築と粒成長シミュレーション”, 第1回マ

ルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム (第 16 回分子動力学シンポジウム), 2011.

- [98] 中野明宏, 渋谷陽二, “ナノインデンテーションを用いた新たな粒界相互作用指数による欠陥相互作用の評価”, 日本機械学会関西支部第 87 期定時総会講演会講演論文集, 2012.
- [99] 廣内智之, 渋谷陽二, “高次Multi-phase-fieldモデルによる粒成長とEBSD法による実材料組織の対応粒界分布の比較”, 日本機械学会関西支部第 87 期定時総会講演会講演論文集, 2012.
- [100] 加納明, 松中大介, 渋谷陽二, “第一原理計算によるマグネシウム材の変形双晶に及ぼす界面転位の影響”, 日本機械学会関西支部第 87 期定時総会講演会講演論文集, 2012.
- [101] 中野拓也, 渋谷陽二, “通電加熱法によるナノピラーの内部構造変化と力学挙動”, 日本機械学会関西支部第 87 期定時総会講演会講演論文集, 2012.
- [102] 大西 恭彰, 加納 明, 松中 大介, 渋谷 陽二, “分子動力学シミュレーションによるマグネシウム材の基本変形メカニズムの解析”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [103] 正 典子, 中野 拓也, 渋谷 陽二, “表面凝着を考慮したインデンテーションの弾性力学特性”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [104] 宮部 菜苗, 垂水 竜一, 渋谷 陽二, “非線形弾性理論による立方晶の力学的安定性評価”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [105] 行広 健太, 廣内 智之, 渋谷 陽二, “EBSD法による弾性ひずみ場における粒成長過程の考察”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [106] 池田 健二郎, 中野 明宏, 渋谷 陽二, “界面近接場での欠陥間弾性相互作用の解析”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [107] 穂鹿 一穂, 垂水 竜一, 松中 大介, 渋谷 陽二, “ゲージ転位の弾性相互作用と自己組織化”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [108] 松中大介, 加納明, 大西恭彰, 渋谷陽二, “第一原理計算によるMgの変形双晶および界面転位における不純物の効果”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 2012.
- [109] Munazah Andrabi, Hisato Kondoh, “Genome-wide prediction of POU/SOX factor dependent regulatory modules involved in the development of mental processes”, 第 34 回 日本分子生物学会年会, 横浜, 日本, 2011 年 12 月 14 日.
- [110] 稲田慎, 岩田倫明, 原口亮, 芦原貴司, 中沢一雄, “心室筋厚と心室細動の持続性との関係: シミュレーションによる検討”, 第 50 回日本生体医工学会大会, 2011.
- [111] 原口亮, “致死的不整脈防御機構としての心室較差の電気生理学的意義”, 第 50 回生体医工学会, オーガナイズドセッション「心室性不整脈発生のメカニズムの基礎・そして発生の予測から治療まで」, 2011.
- [112] 中沢一雄, “ハイパフォーマンスコンピューティングが拓く不整脈研究”, 日本機械学会第 24 回バイオエンジニアリング講演会シンポジウム: ハイパフォーマンスコンピューティングと生命医療工学, 2012.
- [113] 比江島 俊彦, “異符号の二つの環状渦度を有する超音速縦渦の崩壊について”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, B07-3, pp.1-8, Dec. 2011.
- [114] 小野達也, 比江島俊彦, 須浪徹治, 溝渕泰寛, “非対称楔翼の後縁噴射による超音速燃焼計算”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, B07-2, pp.1-8, Dec. 2011.
- [115] 比江島俊彦, 後藤田浩, 西岡通男, “異符号の 2 重環状渦度場をもつ中空縦渦の不安定性”, 日本流体力学会年会 2011 講演論文集, 3A-23, Sep. 2011.
- [116] 仲村英也, 野崎祐介, 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-細胞膜間相互作用の解析: C60 フラーレンの親水性・疎水性が及ぼす影響”, 日本薬学会第 132 年会研究発表講演要旨集, 30P2-am080, 2012.
- [117] 江端陽一, 仲村英也, 岩崎智宏, 綿野 哲, “機能性金ナノ粒子-細胞膜間相互作用の分子動力学解析”, 日本薬学会第 132 年会研究発表講演要旨集, 30P2-am081, 2012.
- [118] 松本 一真, 堀内 潔, “Dumbbellモデルを用いたBDS-DNSによる乱流抵抗低減機構の解明”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, D003-1, Dec. 2011.
- [119] 片岡浩人, 田村哲郎, “LES結果による実市街地上空気流鉛直分布への粗度パラメータの影響評価”, 日本風工学会誌, No. 127, pp.85-86, 2011.4.
- [120] 片岡浩人, 田村哲郎, “RANS/LESハイブリッド計算法による市街地気流の予測 その 1 合成渦法 (SEM) を用いた流入変動風の作成”, 日本

建築学会大会学術講演梗概集, B-1, pp. 95-96, 2011.8.

- [121] 片岡浩人, 田村哲郎, “合成渦法を用いた流入変動風の生成”, 日本流体力学会年会講演要旨集, p. 322, 2011.9.
- [122] 片岡浩人, “数値流体計算による市街地建物が気流の鉛直分布に与える影響の予測”, 大林組技術研究所報, No. 75, 2010.11.
- [123] 片岡浩人, 田村哲郎, “RANS/LESハイブリッド計算法による市街地気流の予測 その 2 連続条件を満たした合成渦法 (DFSEM) を用いた流入変動風の作成”, 第 24 回数値流体力学シンポジウム, B04-5, 2011.12.
- [124] 片岡浩人, 田村哲郎, “RANS/LESハイブリッド計算法による市街地気流の予測 その 2 連続条件を満たした合成渦法 (DFSEM) を用いた流入変動風の作成”, ながれ, Vol. 31, No.2, 2012.4 (掲載予定) .
- [125] 坪井 和也, 長谷川 達也, “乱流予混合火炎における固体壁面での化学的過程に関するDNSによる検討”, 第 49 回燃焼シンポジウム講演論文集, pp. 224-225, Dec. 2011.
- [126] 辻本公一, 柴田憲孝, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNSによるベクトル制御噴流に対する傾斜角の影響に関する研究”, 日本流体力学会年会 2011 講演論文集(CD-ROM), pp.1-4, Sep. 2011.
- [127] 加藤太志, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DMD法を用いた円形噴流の構造解析に関する研究”, 日本機械学会 2011 年度年次大会講演論文集(CD-ROM), pp.1-5, Sep. 2011.
- [128] 柴田憲孝, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “回転モード下におけるベクトル制御噴流のDNS”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集(USB), pp.1-3, Dec. 2011.
- [129] 加藤太志, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DMD法を用いた円形噴流の構造抽出に関する研究”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集(USB), pp.1-4, Dec. 2011.
- [130] 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 detonation エンジンに関する数値解析”, 第 43 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 2011 講演集, 日本航空宇宙学会, 早稲田大学, 1B05, 2011 年 7 月 7-8 日.
- [131] 坪井伸幸, 山田貴幸, 林光一, 山田英助, 小島孝之, “ローターティングデトネーションエンジンの 3 次元数値解析:回転するデトネーションの 3 次元構造”, 第 43 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 2011 講演集, 日本航空宇宙学会, 早稲田大学, 1B07, 2011 年 7 月 7-8 日.
- [132] 上村悠歩, 林光一, 坪井伸幸, 山田英助, “H₂/Airを用いたローターティングデトネーションエンジンの伝播条件およびメカニズムに関する数値解析”, 第 48 回燃焼シンポジウム講演論文集, 慶應義塾大学, E133, 2010 年 12 月 5 日~7 日.
- [133] 細田英明, 林光一, 山田英助, “ナノアルミニウム-酸素二相デトネーションの粒子径及び濃度依存性に関する数値解析”, 第 48 回燃焼シンポジウム講演論文集, 慶應義塾大学, P204, 2010 年 12 月 5 日~7 日.
- [134] 図斉健太, 林光一, 山田英助, 上村悠歩, “RDEの 3 次元伝播構造と管径依存に関する数値解析”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 東京大学柏キャンパス, 3B3-3, 2012 年 3 月 7 日~9 日.
- [135] Dzieminska Edyta, 林光一, 山田英助, “Shock-boundary layer interactions in a reactive mixture”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 東京大学柏キャンパス, 3C1-5, 2012 年 3 月 7 日~9 日.
- [136] 朝原誠, 林光一, 山田英助, 坪井伸幸, “2 次元円筒デトネーションにおける Sub Transverse Waveの発生と発達”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 東京大学柏キャンパス, 2012 年 3 月 7 日~9 日.
- [137] 上村 悠歩, 林 光一, 坪井 伸幸, 山田 英助, “H₂/Air を用いたローターティングデトネーションエンジンの伝播条件および伝播メカニズムに関する数値解析”, 第 49 回燃焼シンポジウム講演論文集, pp.134-135, Dec. 2011.
- [138] 田村哲郎, 野津剛, 岸田岳士, 勝村章, 奥田泰雄, “高層建物に作用する風圧・風力の高精度化 -非構造格子の導入-”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム, 2011.
- [139] 岸田岳士, 田村哲郎, 奥田泰雄, 中村修, “LESにおける境界層型流入変動風データベースの作成 -三次元角柱への適用-”, 日本建築学会学術講演梗概集, pp137-138, .
- [140] 荒川智樹, 小森優輝, 巽和也, 中部主敬, “一様磁場下の流体中における赤血球運動に関する数値解析モデルの開発”, 日本機械学会第 24 回計算力学講演会, 2011/10/9.
- [141] 小川洋昌, 森井雄飛, 須佐秋生, 坪井伸幸, 林 光一, 遠藤琢磨, “メタン - 酸素予混合気を伝播するデトネーション限界の研究:デトネー

- ション速度に与える粘性の影響”, 火薬学会 2011 年度春季研究発表会, pp.21-24, 2011.5.
- [142] 森井雄飛, 小川洋昌, 坪井伸幸, 小川博之, 徳留真一郎, 林 光一, “簡略化モデルDRG30 を用いたメタン/酸素デトネーションの1次元解析に向けて”, 火薬学会 2011 年度春季研究発表会, pp.59-62, 2011.5.
- [143] 川上祐司, 坪井伸幸, 江連涼介, 林光一, 小島孝之, “エアロスパイクノズルを用いたパルスデトネーションエンジンの推進性能”, 第43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2011, 1B06, 2011.7.
- [144] 坪井伸幸, 山田貴幸, 林光一, 山田英助, 小島孝之, “ローターティングデトネーションエンジンの3次元数値解析: 回転するデトネーションの3次元構造”, 第43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2011, 1B07, 2011.7.
- [145] 坪井伸幸, 香川岳寛, 吹場活佳, 嶋田徹, “前処理法による非定常圧縮性低速流れの3次元数値解析:NACA0012 翼型におけるRe 数効果”, 第43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2011, 2C04, 2011.7.
- [146] 琴浦哲史, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “数値解析によるWaverider の空力特性評価: 揚抗比の評価”, 第43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2011, 2D08, 2011.7.
- [147] 坪井伸幸, 吹場活佳, 嶋田徹, “前処理法を用いた3次元非定常圧縮性流れの数値解析: ハイブリッドロケット内部の旋回流における前処理法の効果”, 第55回宇宙科学技術連合講演会, 3B05, 2011.12.
- [148] 森井雄飛, 坪井伸幸, 小川博之, 徳留真一郎, 林 光一, “ステップ・ソルバーを用いた1次元メタン酸素デトネーションの数値解析”, 第49回燃焼シンポジウム, E134, 2011.12.
- [149] 森井雄飛, 坪井伸幸, 小川博之, 徳留真一郎, 林光一, “メタン/酸素デトネーションの解析における反応モデルの依存性”, 第25回数値流体力学シンポジウム, A12-1, 2011.12.
- [150] 坪井伸幸, 朝原誠, 野々村拓, 林光一, “重み付きコンパクトスキームを用いたデトネーションの数値解析”, 第25回数値流体力学シンポジウム, A12-2, 2011.12.
- [151] 富正人, 津田伸一, 坪井伸幸, 徳増崇, 越光男, “臨界点近傍における酸水素混合系の熱物性評価”, 第25回数値流体力学シンポジウム, B10-5, 2011.12.
- [152] 琴浦哲史, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “粘性計算による疑似Waverider形状の空力特性評価”, 第25回数値流体力学シンポジウム, A03-1, 2011.12.
- [153] 坪井伸幸, 森井雄飛, 朝原誠, 野々村拓, 林光一, 小川博之, “デトネーションにおける新しい数値計算法について”, 平成23年度航空宇宙空力班シンポジウム「航空宇宙工学における空気力学の挑戦2012」, L8, 2012.1.
- [154] 森井雄飛, 坪井伸幸, 小川博之, 寺島洋史, 徳留真一郎, 林光一, “メタン酸素及び水素酸素燃料を用いた狭い管内を伝播する爆轟波の二次元数値解析”, 平成23年度衝撃波シンポジウム, 1B2-4, 2012.3.
- [155] 坪井伸幸, 朝原誠, 野々村拓, 林光一, “重み付きコンパクトスキームを用いた2次元デトネーションの数値解析: 高解像度スキームによる流れ場の詳細構造”, 平成23年度衝撃波シンポジウム, 1B2-6, 2012.3.
- [156] 朝原誠, 林光一, 山田英助, 坪井伸幸, “2次元円筒デトネーションにおけるSub TransverseWaveの発生と発達”, 平成23年度衝撃波シンポジウム, 1B2-6, 2012.3.
- [157] 杉安孝幸, 森井雄飛, 坪井伸幸, 林光一, “水素/空気デトネーションにおける反応モデルの影響の評価”, 平成23年度衝撃波シンポジウム, 3B2-5, 2012.3.
- [158] 村田健輔, 坪井伸幸, 吹場活佳, 嶋田徹, “低Re数における前処理型非定常圧縮性流れ場解析によるNACA0012 翼型の空力特性評価”, 日本機械学会九州学生会(2012) 第43回学生員卒業研究発表講演会, 439, 2012.3.
- [159] 瀬戸口, 武藤, 寺島, 坪井, 越, “LESによる超臨界流体噴流の流体力学的挙動に関する数値解析”, 日本機械学会九州学生会(2012) 第43回学生員卒業研究発表講演会, 434, 2012.3.
- [160] 武藤大貴, 瀬戸口彬, 寺島洋史, 坪井伸幸, 越光男, “前処理型非定常圧縮性解法による噴流構造の数値解析”, 日本機械学会九州支部第65期総会・講演会, 803, 2012.3.
- [161] 成宮匡, 坪井伸幸, 伊藤隆, “数値解析を用いたエアロスパイクノズルの性能評価: 圧力比の影響”, 日本機械学会九州支部第65期総会・講演会, 812, 2012.3.
- [162] 倉本健史, 武藤大貴, 坪井伸幸, 永井大樹, 浅井圭介, “極超音速流れにおける30°ランプ周りの流れ場の3次元数値解析: 平板幅の影響”,

日本機械学会 九州支部第 65 期総会・講演会,
812, 2012.3.

- [163] 富樫 祐一, “混雑した分子機械システムにおける反応・輸送・力学的応答”, 日本物理学会講演概要集, Vol. 66, No. 2, p. 254 (22pPSB-30), Sept. 2011.
- [164] 富樫 祐一, “生体分子機械システムの構造形成～障壁と分子構造変化の効果”, 日本物理学会講演概要集, Vol. 67, No. 1, p. 333 (25pPSA-36), Mar. 2012.
- [165] 吹場活佳, 山田悠太, “伝熱工学的経験式を用いた空気予冷却器の数値解析”, 平成 23 年度宇宙輸送シンポジウム, 印刷中, Jan. 2012.
- [166] 渡邊寛, 船曳信生, 中西透, 福士将, “ボラティアコンピュータリングシステムにおける結託攻撃のモデル化と性能評価”, 電子情報通信学会研究報告, DC-2011-24, pp.25-30, Oct. 2011.
- [167] 渡邊寛, 船曳信生, 中西透, 福士将, “ボラティアコンピュータリングの妨害者対策における抜取検査併用の効果”, 電子情報通信学会研究報告, NS-2011-163, pp.103-108, Jan. 2012.
- [168] K. Hagita, “Coarse-grained simulation approaches of filled polymer nano-composites”, European Workshop on Nano composites and polymer dynamics (Montpellier, France), 2011.6.16-17.
- [169] 萩田克美, 高野 宏, 土井正男, 森田裕史, “粗視化分子動力学によるフィラー充填ポリマーメルトの延伸破壊シミュレーション 2”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, (富山大学), 2011.9.24.
- [170] 萩田克美, “高分子ナノコンポジットの粗視化MDとVR可視化分析”, 第2回計算統計物理学研究会, (金沢大学), 2011.9.25.
- [171] 萩田克美, “没入型可視化装置を用いた3次元複雑形状の空間内探索的観察事例の紹介”, 「バーチャルリアリティ装置による表現法の追求」研究会, (核融合科学研究所), 2011.12.9.
- [172] 萩田克美, “ポリマーナノコンポジットの非線形レオロジーの理解に向けた粗視化分子動力学アプローチ”, MRS-J学術シンポジウム, (横浜情報文化センター), 2011.12.20.
- [173] K. Hagita, “Coarse-Grained Simulation Approaches for Nano-Design of Soft Materials with Mind of Combination among Experiments and Math-Material”, The 2012 WPI-AIMR Annual Workshop, (Sendai, Japan), 2012.2.21.
- [174] K. Hagita, H. Morita, M. Doi, H. Takano, “Glass transition temperature of polymer nano-composites with polymer and filler interactions”, APS March Meeting 2012 (Boston, USA), 2012.2.29.
- [175] 萩田克美, 高野 宏, 土井正男, 森田裕史, “フィラー充填ポリマーメルトのガラス転移温度に対する界面相互作用の影響”, 日本物理学会 2012 年年次大会, (関西学院大学), 2012.3.24.
- [176] 高橋俊, 新井紀夫, “直交格子積み上げ法を用いた重合格子法による流体構造連成解析”, 第16回 計算工学講演会, 2011年5月.
- [177] 水田和希, 西田梨奈, 高橋俊, 新井紀夫, “直交格子を用いた脳動脈瘤の連成解析”, 第25回数値流体力学シンポジウム, 2011年12月.
- [178] 高橋俊, 新井紀夫, “直交格子積み上げ法と境界適合格子を用いた重合格子による数値解析”, 第25回数値流体力学シンポジウム, 2011年12月.
- [179] 亘 慎一, 深沢 圭一郎, 山本 和憲, 森川 靖大, “NICTサイエンスクラウド実験”, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会, 幕張, 2011年5月22日.
- [180] 村田 健史, 亘 慎一, 長妻 努, “NICTサイエンスクラウド”, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会, 2011年5月22日.
- [181] 村田 健史, “e-Space Weather: 新しい宇宙天気Webアプリケーション”, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会, 幕張, 2011年5月22日.
- [182] 亘 慎一, 坪内 健, 森川 靖大, 加藤 久雄, 田中 高史, 品川 裕之, 村田 健史, “宇宙天気クラウドによるリアルタイム磁気圏シミュレーションの解析”, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会, 幕張, 2011年5月22日.
- [183] 亘 慎一, 坪内 健, 加藤 久雄, 田中 高史, 品川 裕之, 村田 健史, “宇宙天気クラウドを活用したリアルタイム磁気圏シミュレーションデータの解析II”, 地球電磁気・地球惑星圏学会 2011 年講演会, 神戸大学, 2011年11月5日.
- [184] 亘 慎一, 加藤 久雄, 村田 健史, 國武 学, 山本 和憲, 渡邊 英伸, 久保田 康文, “宇宙天気クラウドと情報サービス”, 第8回宇宙環境シンポジウム, 東京ビックサイト, 2011年10月18日.
- [185] 久保田 康文, 村田 健史, 山本 和憲, 深沢 圭一郎, 坪内 健, “グローバルMHDシミュレーション磁力線追尾システムによる、太陽風磁場の磁気圏への侵入過程の研究”, 第2回極域科学シンポジウム, 国立極地研究所, 2011年11月16日.
- [186] 久保田 康文, 村田 健史, 山本 和憲, 深沢

圭一郎, 坪内 健, “グローバルMHDシミュレーション磁力線追尾システムによる、太陽風磁場の磁気圏への侵入過程の研究”, 2012 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, 名古屋大学, 2012 年 1 月 25 日.

[187] 山本義暢, 功刀資彰, “高レイノルズ数MHDチャンネル流における内層乱流構造の特性”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2011, 静岡大学, 2011 年 10 月 29-30 日.

[188] 山本義暢, 功刀資彰, “高レイノルズ数MHD乱流場の大規模構造とスケーリング”, 京都大学数理解析研究所共同研究集会 乱流の普遍性と個別性: 流体乱流を通して宇宙を見る, 京都大学, 2012 年 1 月 11-13 日.

4 著書

[1] M. Matsumoto, “Optical regenerators for novel modulation schemes”, in Impact of Nonlinearities on Fiber Optic Communications, S. Kumar Ed. pp. 415-450, Springer Verlag, 2011, 分担執筆.

[2] 渋谷陽二, “塑性の物理 素過程から理解する塑性力学”, 森北出版株式会社, 2011.

[3] 渋谷 陽二, “ナノインデンテーションによる局所的な材料強度評価”, 機械の研究 第 64 巻 第 1 号, 2012.

[4] K. Iwano, “Material designs and new physical properties in MX- and MMX-chain compounds”, Springer, 2012 年出版予定, 一章を執筆.

[5] 中沢一雄, 原口亮, 稲田慎, 芦原貴司, “仮想心臓シミュレーション”, シミュレーション辞典, 2012, 分担執筆.

[6] S. Matsunaga, T. Koishi, M. Saito and S. Tamaki, “Dielectric Screening Properties and Many Body Effects in Molten Salts”, Noble Metals, Dr. Yen-Hsun Su (Ed), InTech, ISBN:978-953-307-898-4, Feb. 2012, pp.3-32.

5 その他

[1] 田中敏嗣, “流動層DEM-CFDカップリングシミュレーション (メゾおよびミクروسケールモデルでの展開)”, 2012, PHARM TECH JAPAN, Vol. 28, No. 4 (2012), pp. 829-833.

[2] 岡田悠悟, 酒井謙一, 北岡慎, 三輪一元, 大石泰男, 竹谷純一, “圧力印加時におけるペンタセンFETの伝導特性”, 2012 年 3 月 24 日, 日本物理

学会第 67 回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス.

[3] 岡田悠悟, 北岡慎, 酒井謙一, 三輪一元, 植村隆文, 大石泰男, 竹谷純一, “圧力印加によるルブレ単結晶トランジスタの伝導特性及び結晶構造の変調”, 2012 年 3 月 24 日, 日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス.

[4] 酒井謙一, 岡田悠悟, 北岡慎, 三輪一元, 大石泰男, 滝宮和夫, 竹谷純一, “高圧下におけるDNTTの電気伝導性と結晶構造”, 2012 年 3 月 24 日, 日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス.

[5] 秦健太郎, 冬広明, 福田貴光, 石川直人, “積層フタロシアニン四量体の酸化状態における電子構造”, 2011 年 9 月, 第 61 回錯体化学討論会, 岡山理科大学.

[6] Yoshitaka Fujimoto, “Nitrogen-Doping Effects on Energetics and Electronic Properties in Carbon Nanotubes and Graphene”, Oct. 2011, BIT's Annual World Congress of Nano-S&T-2011, Dalian, China.

[7] Yoshitaka Fujimoto, “Formation, Stabilities, and Electronic Properties of Nitrogen Defects in Carbon Nanotubes: A Density-Functional Study”, Accepted, in Carbon Nanotubes: Synthesis, Properties and Applications, (Nova Science Publishers, New York).

[8] 坂元玄太, “DEMシミュレーションによる粒子間距離を考慮した充填率と配位数の関係式の検討”, 2012 年 3 月, 平成 23 年度岡山大学工学部物質応用化学科, 学士論文.

[9] K. Tomida, “Radiation Magnetohydrodynamic Simulations of Star Formation Processes”, 2012, PhD Thesis, The Graduate University for Advanced Studies.

[10] Kenichi Dedachi, “Molecular simulation of peptides using the Single Amino Acid Potential force field”, September 2011, Wissenschaftsforum Chemie 2011, Bremen, Germany.

[11] Kenichi Dedachi, Takeshi Nomura, Taku Shimosato, Toshiya Minezaki, Michio Iwaoka, “Molecular simulation of short peptides containing uncommon amino acid residues by using the SAAP force field”, 2011 年 9 月, 第 48 回ペプチド討論会, 札幌.

[12] 出立兼一, 下里卓, 峯崎俊哉, 岩岡道夫, “単一アミノ酸ポテンシャル力場を用いた低分子ペプチドの構造探索”, 2011 年 12 月, 第 25 回分子シミュレーション討論会, 東京.

- [13] Hirohito Ikeda, Tomonori Matsubara, Hanae Moriwaki, Miho Yukawa, Eiji Yukawa, Hatsumi Aki, “Inhibitory Effect of Cyclodextrin on Complexation of Risperidone with Tea Catechin”, August 2011, Hachioji.
- [14] M. Fujisawa, H. Tsutsumi, H. Ikeda, H. Aki, T. Kimura, “On the relationship of the enthalpy of inclusion by cyclodextrins and the interaction energy”, August 2011, Hachioji.
- [15] 池田浩人, 長尾優香, 松原友規, 森脇英恵, 湯川美穂, 湯川栄二, 安藝初美, “薬物と嗜好品の相互作用 I 統合失調症治療薬リスペリドンと緑茶との相互作用解析”, September 2011, Sapporo.
- [16] 松原友規, 森脇英恵, 西美樹, 森永理香, 池田浩人, 湯川美穂, 湯川栄二, 安藝初美, “リスペリドンと緑茶カテキンとの不溶性複合体形成におけるシクロデキストリン類の添加効果”, December 2011, Fukuoka.

第18回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2012)

時田 恵一郎

大阪大学 サイバーメディアセンター 大規模計算科学研究部門

電腦甲子園

今年も2012年8月20日から24日までの5日間にわたって、高校生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2012)」が、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) で開催されます。

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。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。昨年は東工大GSICのTSUBAMEを使用する予定でしたが、震災の影響による夏の電力事情を考慮した結果、阪大CMCのSX-8Rを使うことになり、全国から11チームが阪大CMC豊中教育研究棟会場に集まり熱戦を繰り広げました。

今年も6月1日に予選問題がウェブに発表され、高校生たちは3週間かけて学校や家庭のパソコンを用いて予選問題を解いて、この記事が出る頃には出場チームも決定しているものと思われます。

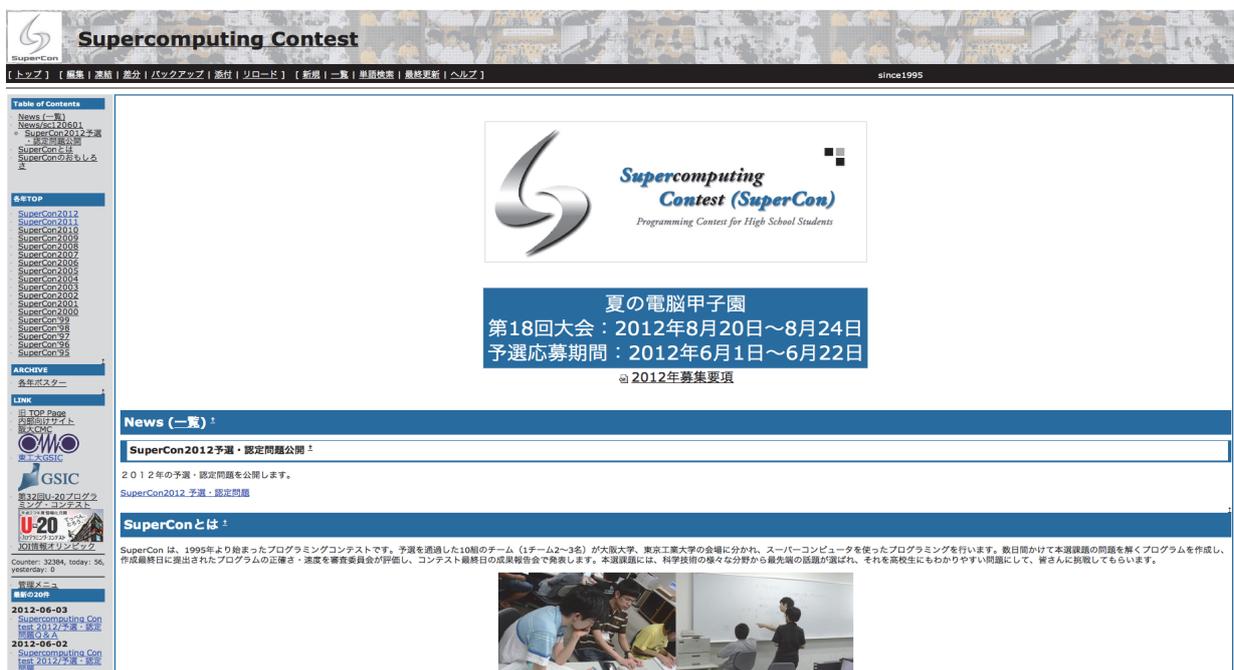
メンバーが複数集まらない場合には、個人で「スーパーコン認定」に応募することもできます。問題のレベルに応じて「スーパーコン1級」、「スーパーコン2級」、「スーパーコン3級」が認定されます。

今年の本選ではTSUBAMEが使われる予定で、TSUBAMEのアーキテクチャーの特長を存分に発揮する本選課題が出題される予定です。

最終日の8月24日には、出場チーム紹介やインタビューなどの成果発表会と優勝チーム及び学会奨励賞などの表彰式が行われます。成果発表会や表彰式は東工大と阪大の両会場で二元開催します。両会場とも公開しますので、興味をお持ちの方は是非高校生たちの素晴らしい成果をご覧くださいと思います。

SuperCon ホームページ :

<http://new-web.gsic.titech.ac.jp/supercon/>



2012年度大規模計算機システム利用講習会

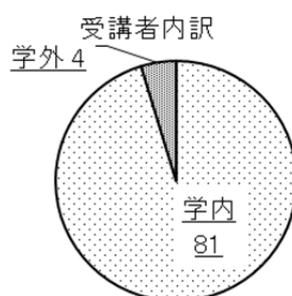
講習会名	開催日時	講師	開催場所
スーパーコンピュータ概要	5月17日	東田(サイバーメディアセンター)	レーザーエネルギー学研究センター 研究棟 4階大ホール
IDL利用入門	6月7日	Exelis VIS (株)	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟 7階会議室
並列プログラミング入門	6月11日	時田(サイバーメディアセンター)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
MPIによる並列プログラミング	6月11日	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
SXにおけるベクトル化・並列化	6月12日	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
スーパーコンピュータ利用入門	6月14日	レーザー研技術専門職員 情報基盤課職員	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟 4階CALL第3教室
IDL利用入門	9月5日	Exelis VIS (株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
スーパーコンピュータ概要	9月	東田(サイバーメディアセンター)	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
スーパーコンピュータ利用入門	9月	レーザー研技術専門職員 情報基盤課職員	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
並列プログラミング入門	9月	時田(サイバーメディアセンター)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
MPIによる並列プログラミング	9月	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
SXにおけるベクトル化・並列化	9月	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
AVS可視化処理入門	9月	サイバネットシステム (株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
AVS可視化処理応用	9月	サイバネットシステム (株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室

テレビ会議システムによる講習会

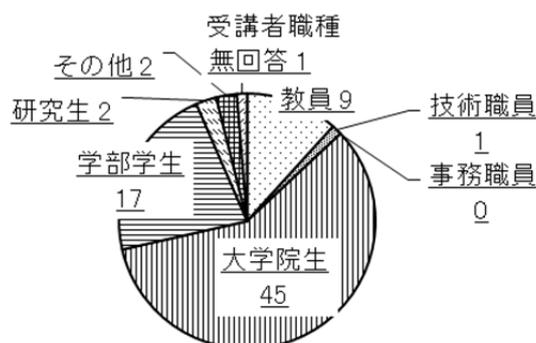
講習会名	開催日時	開催機関	受講場所
Gaussian入門	8月7日	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館3階大会議室

2011 年度大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

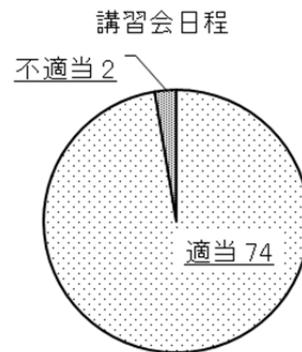
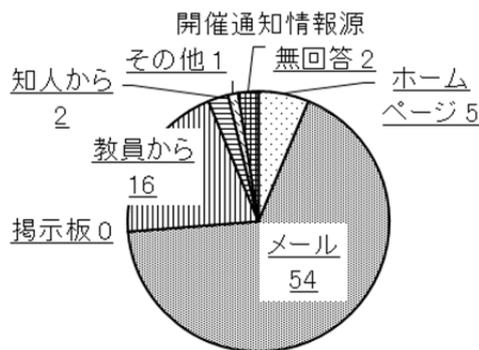
講習会名	開催日時	申込者数	受講者数	受講者数		アンケート回収数
				学内	学外	
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	7月8日(金) 10:00～17:00	42	36	34	2	30
スーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	9月13日(火) 10:00～17:00	36	35	34	1	33
IDL利用入門	9月14日(水) 13:20～17:00	9	7	7	0	7
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	9月15日(木) 13:00～17:00	2	1	1	0	1
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	9月16日(金) 10:00～17:00	7	6	5	1	6
合 計		96	85	81	4	77



講習会名	所属等についてお教えください。									
	所属		職種							
	大阪大学	その他大 学・機関	教員	技術職員	事務職員	大学院生	学部学生	研究生	その他	無回答
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)	29	1	5	1	0	19	5	0	0	0
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)	32	1	2	0	0	20	7	1	2	1
IDL利用入門	7	0	0	0	0	2	4	1	0	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	6	0	2	0	0	3	1	0	0	0
合計	75	2	9	1	0	45	17	2	2	1

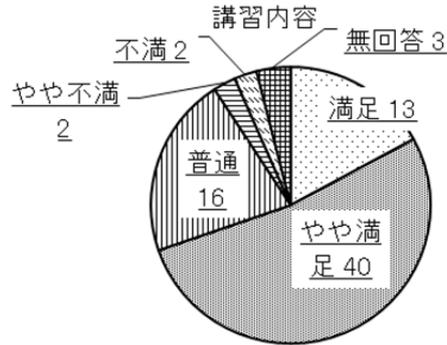
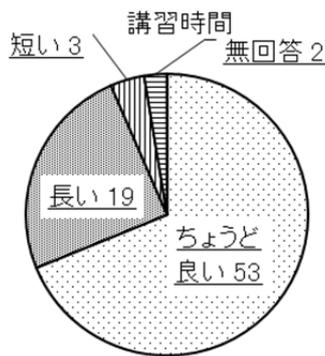


講習会名	今回の講習会についてどのようにお知りになりましたか。 (複数回答可)							今回の講習会の開催日は適切でしたか。	
	ホームページ	メール	掲示板	教員から	知人から	その他	無回答	適切	不適切
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	1	24	0	5	0	1	1	29	1
スーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	1	23	0	6	2	0	1	31	1
IDL利用入門	1	1	0	5	0	0	0	7	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	0	1	0	0	0	0	0	1	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	2	5	0	0	0	0	0	6	0
合計	5	54	0	16	2	1	2	74	2



講習会名	今回の講習会の開催日は適切でしたか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。	
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)	適切	個人的には4~5月が良いが、秋よりはましなので。
	不適切	午後からの講義がかぶっていて、最後の演習に参加できなかったので、できれば土日が都合がよかったです。
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)	適切	前から講習会に出たいと思っていましたが、授業等と重なり、今回は夏休み中でやっと参加できるようになりました。
		もう少し受講可能日を増やしてもらえれば助かります。
		授業がない時期なので時間が調整しやすい。
		夏期休業中の院試後で助かりました。
不適切	9月がベストです。もしくは、8月のお盆明けすぐが良いです。	
	授業期間中でないことが良い。	
	プログラムの作成は主に4月から始めるため、3月頃に講習会が開催されると都合が良い。	
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	適切	授業期間外が良い。 本日は空いていたがMicroも都合がつけば受講したかったので複数日同じ講習を行ってもらえると助かります。 院試が終わって研究が本格化するところなのでちょうど良かった。

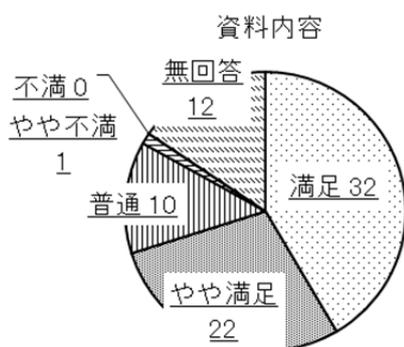
講習会名	今回の講習会の時間は適当でしたか。				今回の講習会の内容はどうでしたか。					
	ちょうど良い	長い	短い	無回答	満足	やや満足	普通	やや不満	不満	無回答
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	22	6	1	1	3	15	7	1	2	2
スーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	20	10	2	1	4	19	7	1	0	1
IDL利用入門	6	1	0	0	1	4	2	0	0	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	4	2	0	0	4	2	0	0	0	0
合計	53	19	3	2	13	40	16	2	2	3



講習会名	今回の講習会の時間は適当でしたか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。	
	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)	長い
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)	短い	実習時間がもう少し欲しい。
	ちょうど良い	2時間位が集中できる丁度良い時間だったと思う。
	長い	初心者の中にはちょうど良い量だった。
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	長い	日にちを分けて行ってもらえば助かります。
	長い	もう少し休み時間がほしかったです。
	短い	途中でだれてしまうため、手を動かしたかったです。
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	長い	もう少し各項目の説明が詳しい方が良い。
	長い	すごくいいねいで良かったのですが、もう少し速くても良かったかと思います。

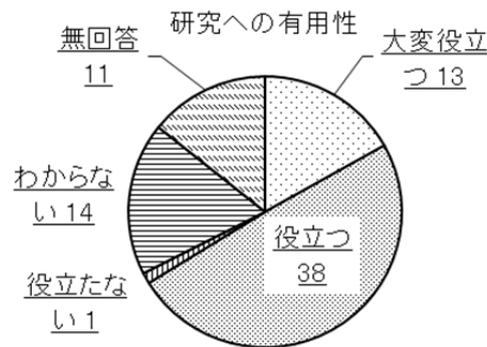
講習会名	今回の講習会の内容はどうか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。				
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	満足	基礎的な部分を知ることができてためになったため。			
	やや満足	もう少し演習で自分で動かす時間があるとうれしいです。			
	普通	内容は良かったのですが、講習会と実習の時間配分を改善してほしいです。実習をもう少し長くしてほしいです。 もう少しゆっくり説明してほしいかった。聞くのが精一杯でした。 不満ではないが、講義が難しかった。			
	やや不満	特に午後の部の対象者がよくわからない。”初心者”と銘打っている割には、ある程度プログラミングを経験していないと理解できないチューニングの話に片寄りすぎではないか。また、テキストをひたすら読んでいくような講義方式は時間の無駄だと感じた。午前の内容はおもしろく良かった。			
	不満	研究室にあるI2coreのPCでの並列化について学びにきたが、SX-9をベースにしたものだったので良くわからなかった。(OpenMPをすればいいのか。)			
	未記入	ベクトル化、並列化について基礎から学べた。			
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)	満足	MPIプログラミング入門が特に参考になりました。			
	やや満足	ベクトル化の基礎は良く理解できたが、ベクトル化の実例なども知りたかった。 スパコンの歴史、機能などの説明があったが、結局何を伝えたいのか分からない。 資料がかなり充実していたため、今後に生かしやすいと思ったため。 MPIの基本を学べて良かった。			
	普通	今回はユーザー向けの説明会だと思っていたが、各スライドの目的が見えなかった。1人目は対象者、目的が分かりにくい。2人目は対象、目的ともに分かり易い。歴史、評価等を知ることは大事だと思うが、使う側にすれば、スカラーとベクトルの違い、スパコン特有のアーキテクチャ等、別の事に重きを置いて欲しい。初心者向けに書いてあるが、スパコンを触るプログラミングをした事あるということが前提？対象者をもっと明確に！ 独学で知らなかったこともありましたが、少し易しめの印象を受けました。何か実習があれば良かったと思います。 MPI入門は私の研究目的には必要なかったかもしれない。並列化、ベクトル化だけで十分だった。			
IDL利用入門	満足	初めて使用したのですが、分かりやすかったです。			
	やや満足	今まで使ったことのないことまで実習できた。			
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	満足	後の方の実習が少し速かった(持参PCが遅かった)が、実習が多くて良かった。 Fortranの説明は不要だった。AVSの使い方を実際にPCを触りながら聞けて良かった。			
	やや満足	Fortranデータの実際の読み込み方法を詳しく知りたかった。 Fortranデータの説明はさらっと流しても良い気がする。(プログラムの内容とか)			

講習会名	今回の講習会の資料はどうでしたか。					
	満足	やや満足	普通	やや不満	不満	無回答
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)	12	8	4	0	0	6
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)	14	9	4	1	0	5
IDL利用入門	1	4	2	0	0	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	1	0	0	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	4	1	0	0	0	1
合計	32	22	10	1	0	12



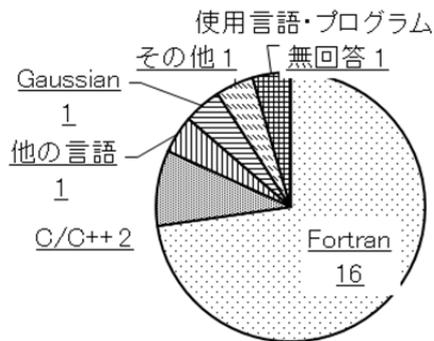
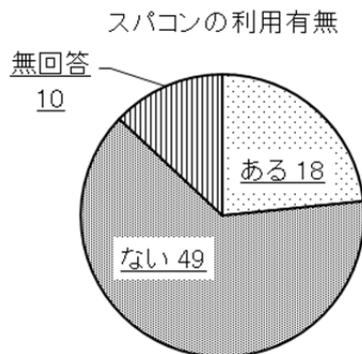
講習会名	今回の講習会の資料はどうでしたか。					
	よろしければ選択した理由をご記入ください。					
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	満足	とても詳しくわかりやすかったので。 プログラム例が参照できるのでわかりやすい。 Fortranの教科書となるような資料やベクトル化、並列化の具体的なやり方が書かれていた。 実習で超初心者の私にも丁寧に説明していただけて大変満足できました。				
	やや満足	演習問題もあり、基礎の内容から掲載されていたので、自身で勉強するのにも役立ちそうです。ただし内容の濃さ多さの割に時間が少なくついていくのがやっとなので、もう少し時間が欲しかったです。 資料はいずれも内容が充実してよかった。資料も殆ど読むだけでわかるため、いちいち読み上げは不要だと感じた。				
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)	満足	詳しく書かれていると思う。わかりやすい。 MPIがなんとなくわかった。Fortranをやり始めたばかりなので為になった。				
	やや満足	質量ともに多め？だが技術資料の確認には使えそう。 近年のスパコン事情がわかりやすく紹介されていた。				
	やや不満	power pointと全く同じだったので、資料だけでは理解しにくい部分があった。				
IDL利用入門	やや満足	わかりやすかったが、それぞれのコマンドの意味をもっと具体的に書いていてくれたらもっと良かった。				
	普通	もう少し初心者以上の内容も入れてほしかった。				

講習会名	今回の講習会は今後の研究に役立ちますか。				
	大変役立つ	役立つ	役立たない	わからない	無回答
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)	4	12	1	8	5
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)	5	17	0	6	5
IDL利用入門	2	5	0	0	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	0	1	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	2	3	0	0	1
合計	13	38	1	14	11



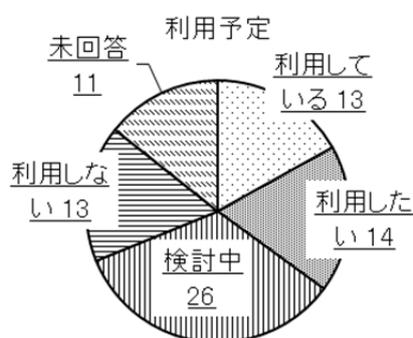
講習会名	今回の講習会は今後の研究に役立ちますか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。				
	大変役立つ	役立つ	役に立たない	わからない	無回答
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	大変役立つ	私は流体解析を行っています。現在はANSYSという流体解析のソフトウェアを使っていますが、それでは境界層遷移を捉えきれず、Fortranに移行予定です。しかし、私自身はFortranが苦手な基礎すら覚えていませんでした。独学では限界もあり教科書もあまり分かりやすいものがなかったので、今回の講習は自分にとってかなり良かったです。プログラムの計算時間を短縮したいので、ベクトル化、並列化など色々試してみたい。			
	役立つ	ベクトル化、並列化に関する知識を修得できた。			
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)	大変役立つ	スパコン使用の必要にせまられています。クラスターを管理しないといけないので。			
	役立つ	電磁界シミュレーションにFortranを使うので。自分の研究にFortranを用いたプログラムを使っているので計算の効率化ができる。シミュレーションコードの高速化を図りたいと考えている。			
	わからない	まだ並列化、ベクトル化したことがなく、やる予定も未定なため。			
IDL利用入門	大変役立つ	IDLを使う研究をしているので。			

講習会名	他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したとがありますか。									
				あると回答されたかたへ。利用方法について。(複数回答可)						
	ある	ない	無回答	作成したプログラムの実行				アプリケーション利用	その他	
Fortran				C/C++	他の言語	無回答	ある	アプリケーション名		
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	18	5	5	2	1	1	1	Gaussian	1
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	20	4	9	0	0	0	0		0
IDL利用入門	0	7	0	0	0	0	0	0		0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	0	1	0	0	0	0	0	0		0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	2	3	1	2	0	0	0	0		0
合計	18	49	10	16	2	1	1	1		1



講習会名	サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。 「利用している」以外を回答された方へ。選択した理由をご記入ください。		
	利用したい	検討中	利用しない
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)	まだ登録したばかりでこれから計算を走らせる予定なので。	試用中。 職務で利用できる事案があれば、積極的に利用してみたい。 お金がかかるため。	
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)		メリットが今月の講習では不明。 現時点でスパコンを使うかすら決めていないため。シミュレーションのメインが電磁界解析で比較的扱いやすい点が多いという点も。 アカウントの申込み方法が面倒。よくわからない。	大規模計算機を利用するほどの数値計算を行わないため。 使用しているプログラムのアルゴリズムがスカラー計算機に適しているため。利用料金が高額である。

講習会名	サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。				
	利用している	利用したい	検討中	利用しない	未回答
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)	3	8	10	3	6
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	5	9	8	4
IDL利用入門	0	0	5	2	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	1	0	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	2	1	2	0	1
合計	13	14	26	13	11



講習会名	その他、ご意見・ご要望があれば些細なことでも結構ですのでご記入ください。
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)	<p>内容の濃さと多さの割に時間が少なかった。説明も資料はまとめられていたが、スライドを読んでいるだけだったので、もう少し説明が欲しかった。</p> <p>午後は寝ている人も多く、一方的に進んでいる感が強い。プロジェクタでのコンパイル、プログラミング、チューニングの実演があればテキストの内容を実感できて良いと思う。</p> <p>GPUに関する講習会があれば参加したい。</p> <p>資料の改訂版を公開して、メールで知らせて頂きたいと思います。</p>
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)	<p>アカウントなどもう少し手軽に使える様にしてもらうと助かります。</p> <p>CUDAの講習会を開催して欲しい。</p>

2012 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況

「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」は、北海道大学、東北大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ 8 つの共同利用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、地球環境、エネルギー、物質材料、ゲノム情報、Web データ、学術情報、センサーネットワークからの時系列データ、映像データ、プログラム解析、その他情報処理一般の分野における、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきたいわゆるグランドチャレンジ的な問題について、学際的な共同利用・共同研究を実施することにより、我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展に資することにあります。本ネットワーク型拠点には上記の分野における多数の先導的研究者が在籍しており、これらの研究者との共同研究によって、研究テーマの一層の発展が期待できます。

2012 年度の課題募集には合計 39 件の応募があり、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、35 件が採択されました。このうち、5 課題が大阪大学を利用することとなっています。

受付番号	研究課題名	課題責任者 所属機関	利用大学
JHPCN12-0007	次世代ベタスケールCFDのアルゴリズム研究	東北大学	東北大、名大、阪大
JHPCN12-0012	高分子系粗視化シミュレーション基盤の計算機科学的な高度化検討	防衛大学校	北大、東大、名大、阪大
JHPCN12-0028	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	情報通信研究機構	東北大、名大、阪大、九大
JHPCN12-0038	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
JHPCN12-0040	大規模計算機空気冷却風速場の実時間解析と移動型ネットワークセンサー連携による計測融合オペレーション	大阪大学	東北大、阪大、九大

2012年度「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年から文部科学省「先端研究施設共用イノベーション創出事業」（平成2009年度から「先端共用施設共用促進事業」）の支援を受け、2010年度末までスーパーコンピュータの利用を民間企業に開放してきました。

2011年度からは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。

2012年度は第1期の募集に1企業の応募があり、1企業を採択しました。

■ 2012年度 募集日程

- ・ 第1期（2月1日～3月5日）：募集終了（申請1件）
- ・ 第2期（5月1日～5月31日）：募集終了（申請無し）
- ・ 第3期（8月募集予定）
- ・ 第4期（11月募集予定）

■ 企業利用一覧

2012年度企業利用一覧

企業名	申請課題名	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	平成24年4月～平成25年3月

2011年度企業利用一覧

企業名	申請課題名	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	平成23年4月～平成24年3月
技術研究組合単層CNT融合新材料研究開発機構	フェムト秒レーザを用いたグラフェン加工シミュレーション	平成23年10月～平成24年3月

■ 企業利用の案内

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

2012 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：2012 年 4 月 1 日～2013 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
外川 浩章	大阪大学核物理研究センター	助 教
福田 優子	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	技術専門職員
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：2012 年 4 月 1 日～2013 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

2012 年度大規模計算機利用システム相談員 自己紹介

たかぎ たつや
高木 達也

(大阪大学大学院薬学研究科 生命情報環境科学専攻 教授)

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。

たけち ひでお
武知 英夫

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

去年からサイバーメディアに飛び込んでくる質問のなかに 64 cpu MPI というのが目につくようになった。個人的には 4 cpu 1 NODE でことは足りているので、マルチノード処理となると時間的に手も足も出ない。そこで、Q&A マニュアルのような素晴らしい情報基盤課の対応を、横目で眺める毎日が続いている。HowTO ものが出版されたのではと疑いたくなるほど最近のユーザーの HPC スキルレベルには目を見張るものがあり、領域分割法だとかデッドロックなどと言われると、対応には相当な時間を要しますが宜しいでしょうかと言わざるをえない。

とがわ ひろあき
外川 浩章

(大阪大学核物理研究センター 助教)

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

ふくだ ゆうこ
福田 優子

(大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 技術専門職員)

大阪大学レーザーエネルギー学研究センターの福田優子です。今年から RCNP の外川さんとともに、CMC の利用相談員として、CMC のすべての利用者の皆様からの相談に協力して対応させていただくことになりました。

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

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

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

2004 年からは、CMC と共催で講習会を開催させていただいています。実際に講習会を受講された方は、聞いてよかったと言ってくれることが多いです。教科書がどんなによくても、講義は受けたほうがいいですよ。講習会やプログラム相談もそれと同じだと思います。大学にいる間に、ぜひ一度は講習会を受講し、スパコンの概念や、ベクトル化・並列化などの基礎知識、さらには高度な並列化、可視化とはなど身につけて卒業していただきたいと希望しています。

最後になりますが、皆様からいただいた質問や、アンケートは大変参考になります。ここが分からない、こんなことを教えてほしいという声も大歓迎です。ひとりでも苦しまず、ぜひお気軽にご質問ください。

やまい なりよし
山井 成良

(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いただきます。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。

2012 年度大規模計算機システム利用指導員 自己紹介

いたの ともあき
板野 智昭

(関西大学システム理工学部 物理・応用物理学科 准教授)

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

さて、私の専門は流体物理で、研究と計算機は切っても切り離せない関係にあります。計算機環境は愛用のラップトップにインストールした Linux で、これまでの研究時間の大半は愛用計算機の前で過ごしてきました。ただし最近では雑用が多く、机の前に座って時間をかけて疑問について熟考するという習慣が激減しています。これも時代の流れかとは思いますが、一生をかけて達成すべきような本当に大きな意義のある仕事にとりかかることが難しい、大変世知辛い世の中に周りの環境は変化していますね。こんなことを国全体を挙げてやっているのでは、現状維持でさえ難しい日本の国力が落ちるばかりではないかと心配していますが、さりとて政治家に立候補しようとは思っていません。話は脱線しました。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。

たけち ひでお
武知 英夫

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

NEC Express5800 PC クラスターの並列ジョブ実行を対象とする CPU 負荷分散解析で強力な解析ツールとして使用できる ITA(Intel Trace Analyzer)のカスタマイズが完成し、昨年からは手元の端末の画面から操作できるようになった。願いが叶うまでに約3年を要したが、自作の FEM プログラムの並列処理を複数の CPU 上で実行している際に時間トレースを取って、CPU 別の負荷分散を可視化して表示できるようになった。最近になって”高速化推進研究活動報告第5号”でプロセス間通信に関する同類記事を発見することがあり、手がけてきた ITA が時代遅れになっていないことを確認できた次第である。

ふじ けんしょう
藤 堅 正

(近畿大学理工学部 電気電子工学科 講師)

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

また、電子エネルギーレベルの計算を少しだけお手伝いすることもあります。何れも専ら FORTRAN を

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

大規模計算機システム FAQ

I. 利用方法

1. ログインについて

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

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

ログインするとメニュー画面が表示されますので、Frontend Terminal(fronta~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、バッチリクエストの投入、計算結果の確認などを行います。



トラブルシューティング

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

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。

トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	コンパイルできない	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		コンパイラのパスが間違っている (Intel MPI)	パス : /opt/intel/mpi/3.2/bin64 コマンド : C : mpiicc、C++ : mpiicpc、 Fortran : mpiifort
		コマンド名が間違っている	
2	コンパイルエラーが発生する	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		オプションの指定が間違っている	
		リンク先ライブラリの指定が間違っている	PC クラスタ用ライブラリか SX 用ライブラリか確認する
		リンカオプションの指定順が違う	リンカオプションは対象ファイルより後、また“-I”は“-L”より後に指定する
		文字コードが「SJIS」、改行コードが「CRLF」になっている (主に Windows 上で作成したファイルを FTP 転送した場合に発生)	以下のコマンドで文字コードを「EUC」、改行コードを「CR」に変換する nkf -e -Lu [ファイル] > [一時ファイル] mv [一時ファイル] [ファイル]
配列のサイズなど、使用メモリサイズが大きい	以下のオプションを指定する Intel コンパイラ : -mcmmodel=large -shared-intel SX クロスコンパイラ : -size_t64 (C/C++)、-ew (Fortran)		

3. プログラムの実行について

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

キュー名 (以下の「#PBS -q PCC」) を”PCC”にすることで PC クラスタに、”SX9”にすることで SX-9 に、”SX8F”または”SX8L”にすることで 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 が付けられます。

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

↑

受け付けたバッチリクエストには リクエスト ID が付けられる。

トラブルシューティング

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

4. バッチリクエストの確認について

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

% qstat	—— (バッチリクエストの状態を確認)
% sstat	—— (SX-8R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)

トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	実行されない	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		NQS スクリプトファイルの”cpunum_job”の値が大きい	指定可能な最大値以下の値を指定する PC クラスタ : 4、SX-8R : 8、SX-9 : 16
		NQS スクリプトファイルの改行コードが「CRLF」になっている (Windows 上で作成したファイルを FTP 転送した場合に主に発生)	FTP 転送時に”テキストモード”で転送するか、以下のコマンドを実行するか、以下のコマンドを実行する nkf -e -Lu [ファイル] > [一時ファイル] mv [一時ファイル] [ファイル]
		NQS スクリプトファイルの最終行に改行がない (csh スクリプトの場合)	最終行にコマンドを記述している場合、改行を入れる
		NQS スクリプトファイルのプログラムの指定が間違っている	指定ファイル名、パス、実行権限、バイナリ形式 (PCC 用、SX-8R 用、SX-9 用) 等を確認する
		NQS スクリプトファイルの”#PBS”行の間に通常のコマンド行がある	”#PBS”行を全て記述後、通常のコマンド行を記述する
2	エラーが発生する	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		プログラム実行中に時間切れになる	NQS スクリプトファイルの”elapstim_req”の値 (経過時間) を大きくする
		メモリが足りない (” Exceeded memory size limit”等のエラーが出る)	NQS スクリプトファイルの”memsz_job”の値 (ノード当たりのメモリサイズ) を大きくする
		” Batch job received signal SIGXRLG1. (Exceeded RLG1 limit)”というエラーが出る	標準出力、標準エラー出力をリダイレクトなどでファイルに出力するようにする
”[エラーコード] [メッセージ] PROG=[ソースファイル] ELN=[行](YYYYY) TASKID=Z”というフォーマットのエラーが出る	[ソースファイル]の[行]を[メッセージ]に従って修正する 最適化による影響の場合は、最適化レベルを落としてリコンパイルする		

5. ファイル転送について

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

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

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

トラブルシューティング

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

6. パスワードの変更について

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

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

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

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

より詳細な利用方法はこちら

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

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

II. サポート、マニュアル

1. サポートについて

お問い合わせ頂く内容により担当部署が変わります。

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

メール (system@cmc.osaka-u.ac.jp)、または電話(06-6879-8812、8813)

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

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

なお、利用相談員については次の URL をご覧ください。

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

- その他、問い合わせ先等の詳細は次の URL をご覧ください。

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

2. マニュアルについて

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

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

Ⅲ. 利用手続き

1. 利用資格について

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

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

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

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

2. 利用負担金について

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

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

3. 利用申請について

大規模計算機システムを利用される方は「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。詳細は次の URL をご覧ください。

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

4. パスワード忘れについて

大規模計算機システムのパスワードを忘れた場合は、次の URL にあるパスワード変更届に必要事項を記入し、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。パスワード変更届は次の 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>

5. 試用制度について

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

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

IV. その他

1. 他大学の情報基盤センターの情報について

他大学の情報基盤センターの情報については次の URL をご覧ください。

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

利用規程等

・ 規程関係	91
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	91
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	93
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	94
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	94
大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程	95
ネットワーク専門部会内規	95
・ 附表	97
大規模計算機システム　ホスト一覧	97
SX-8R、SX-9及びPCクラスタのジョブクラス一覧	97

・ 規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

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

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

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

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

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

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

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

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

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

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

第13条 利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。

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

第14条 センターは、利用者が大規模計算機システムを利用したことにより被った損害その他の大規模計算機システムに関連して被った損害について、一切の責任及び負担を負わない。

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

第16条 センター長は、この規程又はこの規程に基づくた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ついては、この規程に基づき利用の登録があったものとみなす。

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成13年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

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

附 則

この改正は、平成15年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年2月15日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成20年4月16日から施行する。

附 則

この改正は、平成23年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年5月10日から施行する。

大規模計算機システム利用負担額一覧

サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程第11条の規定に基づく負担額

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

備考

- 1 年間負担額は年度の最初の登録時に算出する。
- 2 CPU・メモリなどの計算機資源は、全体の資源量に占める割合が基本負担額で設定されたシェア値に応じた値となるようフェアシェアスケジューリング機能により割り当てられる。なお、PCクラスには基本負担額による制限を設けない。
- 3 基本負担額1万円の場合、登録者数は1名とする。その他の場合、登録者数は特に制限を設けない。
- 4 上記の基本負担額以外に50万円単位での申請を1,000万円を上限として受け付ける。その場合のシェア値及びディスク容量制限の設定については以下のとおりとする。シェア値は、300万円未満が基本負担額の1.3倍、300万円以上が基本負担額の1.5倍とする。ディスク容量制限は、50万円につき0.5TBを加算する。
- 5 大学院の学生及びこれに準ずる者が基本負担額1万円で利用する場合、負担額を半額とする優遇措置を受けられる。
- 6 民間企業等に所属する者は、科学研究費補助金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、当該期間における負担額は、年間負担額の1/4とする。
- 7 基本負担額1万円でSX-9を利用する場合、CPUは専有利用できないものとする。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規

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

第2条 試用制度は、初めてセンターの大規模計算機システムを利用する者（以下「利用者」という。）に一定の期間利用させることによって、利用者の研究活動における大規模計算機システムの有用性を確認できるようにすることを目的とする。

第3条 試用制度を利用することができる者は、大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程第3条第1号から第5号及び第8号のいずれかに該当する者とする。

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

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

第6条 利用者の有効期間は1ヶ月間とする。ただし、当該会計年度を超えることはできないものとする。

2 利用可能な1ジョブ当たりの計算機資源は次のとおりとする。

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

3 利用有効期間を超えた場合は、利用を停止するものとする。

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

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

附 則

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

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年4月1日から施行する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員指導員内規

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る。

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

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

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

第5条 本会は、第1条に示された目的を達成するため、次の事業を行う。

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

第6条 本会に会長1名、理事若干名の役員を置く。

2 本会に幹事若干名を置き、役員を補佐せしめることができる。

3 幹事は、理事会の承認を経て、会長が委嘱する。

第7条 会長は本会を代表し、本会の業務を総括する。

2 会長は理事の互選によって定める。

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

第8条 理事は会員の互選によって定める。

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

第9条 会長は理事会を招集し、その議長となる。

2 理事会は次の事項を審議する。

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

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

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

第10条 会長は年1回以上総会を招集し、その議長となる。

2 総会は次の事項を審議する。

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

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

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

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

2 専門部会に関し必要な事項は、本会が別に定める。

附 則

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

附 則

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

附 則

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

附 則

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

ネットワーク専門部会内規

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

(以下「専門部会」という。)を置く。

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

第3条 専門部会は、次の各号に掲げるものをもって構成する。

- 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地区協議会会長が指名する。

2 部会長は、専門部会を招集し、その議長となる。

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

附 則

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

・ 附表

大規模計算機システム ホスト一覧

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

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

SX-8R、SX-9 及び PC クラスのジョブクラス一覧

スーパーコンピュータと PC クラスのジョブ資源制限値は次のとおりです。

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

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

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

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 ----- 101
- ・ 大規模計算機システム利用案内 ----- 102

大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

（センターでは、大規模計算機システムを利用して研究したことを主体とする内容の広報誌「サイバーメディア HPC ジャーナル」を発行しています。この広報誌に掲載する次の内容の記事を募集しますので、皆様のご投稿をお待ちしています。）

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

* 投稿いただいた方には、掲載した広報誌 5 部を進呈いたします。

【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
 - ・ ページ設定 (Microsoft Word2010 の設定です。)
 - ・ 用紙サイズ A4 縦
 - ・ 1 ページの文字数と行数：行数 40、行送り 18.2pt、1 頁 2 段書き
 - ・ フォント 本文 MS 明朝 10Point
題名 MS ゴシック 14Point、半角英数 Times New Roman
執筆者氏名 MS 明朝 10Point、なお、姓と名の間及び機関と研究科と専攻名の間は半角スペースを入れる。
 - ・ 余白 上 20mm、下 20mm、左右 20mm、印刷形式：標準
 - ・ その他 セクションの開始位置：次のページから開始
用紙の端からの距離：ヘッダ 15mm、フッタ 17.5mm
垂直方向の配置：上寄せ
 - ・ 文字等の設定
 - ・ 年は西暦で記述する。
 - ・ 数字、英字は半角（書式：Times New Roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角
 - ・ 文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に全角
 - ・ 日本語文中の句読点は半角の“、”“。”を使用せず、全て全角の“、”“。”とする。
2. Microsoft Word 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、PDF ファイルに変換してください。
3. 原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。
zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp
なお、送信の際、件名を「HPC ジャーナル原稿」と入力くださるよう、お願いします。
4. 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	閉
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（本館1F） 電話 06-6879-8980,8981 zyosui-kikaku-kaikei@office.osaka-u.ac.jp		
利用案内、受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用講習会受付、 計算機マニュアル・図書の閲覧、貸出	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館2F） 電話 06-6879-8808,8812 system@cmc.osaka-u.ac.jp	13:00～17:15	館
利用方法の問い合わせ スーパーコンピュータ、PCクラスタ等の 利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館2F） 電話 06-6879-8812,8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp		

・サービス時間

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

（注）障害の発生等により、予告なしにサービスを中止することがあります。
計画停電・定期保守によりサービスを停止する場合は、ホームページでお知らせします。

・大規模計算機システムURL

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

・利用相談

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

広報委員会委員

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)
降旗 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)

(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. 2
2012 年 7 月発行

編集 : 大阪大学サイバーメディアセンター広報委員会

発行 : 大阪府茨木市美穂ヶ丘 5-1 (〒567-0047)
大阪大学サイバーメディアセンター
Cybermedia Center, Osaka University
Tel: 06-6879-8804
URL: <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

印刷 : 阪東印刷紙器工業所

表紙デザイン : 稲田 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。