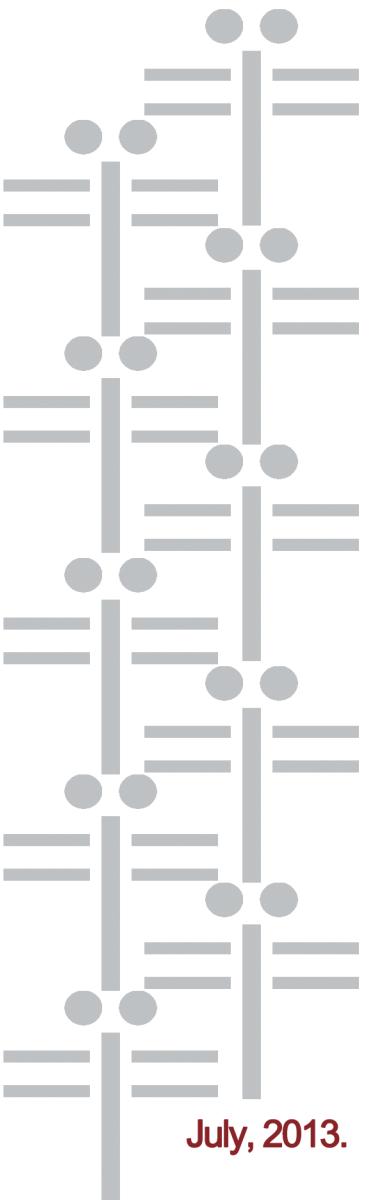


CYBERMEDIA HPC JOURNAL
Cybermedia Center, Osaka University
No. 3



July, 2013.

目 次

特 集	1
・講義「並列プログラミング」の紹介	3
伊野 文彦	
・HPCI 戦略プログラム分野1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤教育プログラム」	5
野崎 一徳、田中 正夫	
 大規模計算機システム利用者研究報告	9
・Particle-in-cell simulation on the mechanism and scalability of Terahertz Generation from atmosphere plasma ionized by two-color fs laser	11
Junghun Shin, Alexei Zhidkov, Zhan Jin, Tomonao Hosokai, Ryosuke Kodama	
・非平衡エネルギースペクトルに基づくLESのSGSモデルの開発	17
玉木 隆宏、堀内 潔	
・格子数値計算を用いた SU(2)ゲージ理論における共形相の研究	27
大木 洋	
・生体分子相互作用の電子論的・博物学的研究	33
山崎 秀樹	
・開いたキャビティを過ぎる流れの直接数値シミュレーション	37
吉田 尚史	
 センター報告	41
・2012年度大規模計算機システム利用による研究成果、論文一覧	43
・第19回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2013)	70
・2013年度大規模計算機システム利用講習会	71
・2012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	72
・2013年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	81
・2013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	82
・2013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	83
・2013年度大規模計算機システム利用相談員	84
・大規模計算機システム FAQ	88
・全国共同利用情報基盤センター顕彰「功績賞」の受賞について	95
・サイバーメディアセンターITコア棟の新営・吹田本館改修について	95
 利用規程等	97
・規程関係	99
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	99
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	101
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	102

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	102
大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程	103
ネットワーク専門部会内規	103
・附表	105
大規模計算機システム ホスト一覧	105
SX-8R, SX-9 及び PC クラスタのジョブクラス一覧	105
2012年度大規模計算機システム稼働状況	106
募 集	109
・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	111
・大規模計算機システム利用案内	112

特 集

- ・講義「並列プログラミング」の紹介 3
伊野 文彦 大阪大学大学院情報科学研究科

- ・HPCI戦略プログラム分野1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤教育プログラム」 5
野崎 一徳 大阪大学大学院基礎工学研究科、大阪大学歯学部附属病院
田中 正夫 大阪大学大学院基礎工学研究科

講義「並列プログラミング」の紹介

伊野 文彦

大阪大学 大学院情報科学研究科 コンピュータサイエンス専攻

1. はじめに

2000年初頭までのCPU(Central Processing Unit)の処理速度(性能)を回顧したい。その時期は、新しいCPUが開発されるたびに動作周波数が向上していたため、CPUを更新すれば、プログラムはより短い時間で実行を終えることができた。

しかし、2004年にIntel Pentium 4プロセッサの動作周波数が3.8GHzに達して以来、電力消費の制約が原因で、動作周波数の向上は頭打ちである。動作周波数を向上させる替わりに、CPUは複数のコアを搭載するマルチコア化により性能を高めている。したがって、プログラムの性能を向上するためには、そのアルゴリズムの並列化が必須である[1]。

また、並列プログラミングが必要とされる領域は、この10年で飛躍的に拡大している。例えば、グラフィクス処理のためのハードウェアGPU(Graphics Processing Unit)は、チップ内に2688個ものコアを持ち、TOP500リストにおいて世界最速(2012年11月現在)のスーパーコンピュータTitanに汎用アクセラレータとして採用されている。もはや携帯電話や自動車向けのCPUでさえマルチコアである。

このような状況に応えるために、大阪大学大学院情報科学研究科では大学院生を対象として、講義「並列プログラミング」および「並列アルゴリズム」を隔年で開講している。本稿では、前者の目標、内容、およびその演習環境について紹介する。

2. 講義「並列プログラミング」

並列プログラミングの醍醐味は、複数のプロセッサを用いて1つの計算を高速化することである。高速化を実現するために、数多の並列計算機やプログラミング言語が開発してきた。これらのうち、本講義ではGPUクラスタを対象として(図1)、OpenMP[2]およびMPI(Message Passing Interface)[3]

を用いてそれぞれノード内およびノード間並列処理を実現し、さらにCUDA(Compute Unified Device Architecture)[4]を用いてノード内処理を加速できることを目指している。

並列プログラムを単に記述できるだけでなく、逐次プログラムに対して高い速度向上率を達成することが重要である。したがって、逐次プログラムのチューニング技術、その性能ボトルネックの分析、ならびに並列アーキテクチャについても解説している。以降では、各々の内容について概略を述べる。

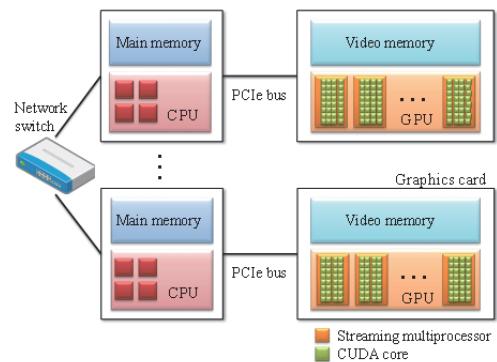


図1：GPUクラスタの概要

2.1 並列計算機の概論

並列プログラムでは、対象の並列アーキテクチャを意識した記述が求められる。例えば、メモリアーキテクチャ(分散メモリや共有メモリ)は、並列プログラムを記述する際の大前提である。また、高い性能を達成するためには、コア間の接続形態やその性能特性について理解しておく必要がある。これらを考慮しない並列プログラムが逐次プログラムよりも低速になることは往々にしてある。メモリー貫性、キャッシュ貫性、ネットワークのトポロジ、2分割帯域幅などについて解説している。

2.2 並列アルゴリズムの入門

OpenMPであれCUDAであれ、プログラムの記述

スタイルは違えど、並列化の本質的な概念は共通である。まず、プログラム内に隠れている性能ボトルネックを特定し、その並列性を見出す。例えば、データ並列性、タスク並列性およびパイプライン並列性などが知られている。この際、アムダールの法則に従い、利用できるコア数に対して速度向上率の上限が十分に大きいことを確認すべきである。

次に、その並列性を効率よく使うために、各コアに対する処理割当やデータ配置を決める必要がある。処理割当はデータ配置と互いに強く依存しているため、この部分がもっとも難しい。並列化の阻害要因であるデータ依存を除去するためのデータ複製やowner computes ルールなどについて学ぶ。

計算量の観点から並列アルゴリズムを分析することも大切である。最適な逐次アルゴリズムに対して、余分なコアや時間を消費しているか否かを調べるためにコスト・ワーク最適の概念やアルゴリズムカスケーディング技術について学ぶ。

2.3 OpenMP と MPI による並列プログラミング

アルゴリズムの並列化が終われば、あとはそれを並列プログラムとして記述すればよい。本講義では、共有メモリ型並列計算機および分散メモリ型並列計算機向けにそれぞれ標準化されている OpenMP および MPI について解説している。

OpenMP では、コンパイラへの指示文を逐次プログラムに挿入するだけで fork-join 実行モデルに基づく並列プログラムを記述できる。メモリ空間を共有することに起因するクリティカルセクションやアトミック操作の概念を学ぶ。

一方、MPI ではメッセージ交換モデルに基づく並列プログラムを記述できる。特に、單一ノード内に格納できない大規模データを扱うためのデータ分割の概念を学ぶ。また、ノンブロッキング通信による通信と計算のオーバラップなど、通信に固有のチューニング技術についても解説している。

2.4 CUDA による GPU 計算

GPU を汎用アクセラレータとして使うための統合

開発環境 CUDA について解説している。階層化されたアーキテクチャ、それを最大限に活用できるスケーラブルなプログラミングモデル、および高い実効メモリ帯域幅を引き出せるメモリ参照の最適化技術などについて学ぶ。また、本来の用途であるグラフィックス処理についても簡単に述べている。

2.5 演習環境について

並列プログラムの実行環境として GPU クラスタを提供している。受講生は SSH 接続できる PC のみを用意すればよい。GPU クラスタは 16 ノードで構成されていて、これらは GbE スイッチおよび Infiniband スイッチで接続されている。各ノードは 4 コアの Xeon プロセッサ、24GB の主記憶、GPU として Tesla C1060 を装備する。OS として Linux ディストリビューションの 1 つである ROCKS を採用していて、クラスタへのジョブはバッチ実行される。

3. おわりに

本稿では、大阪大学大学院情報科学研究科の講義「並列プログラミング」について紹介した。将来の Exa FLOPS (Floating-point Operations Per Second) 時代に向けて並列処理のコミュニティが解決すべき課題は多い。例えば、OpenMP、MPI および CUDA を組み合わせたプログラム記述は大きな労力を必要とする。特に、新しい並列アーキテクチャが開発されるたびにプログラムの書き直しが必要となる現状を打破できる抽象化が望まれる。

参考文献

- (1) H. Sutter, Dr. Dobb's J., **30**, (2005).
- (2) OpenMP Architecture Review Board, OpenMP Application Programming Interface, Version 3.1, (2011).
- (3) Message Passing Interface Forum, MPI: A Message-Passing Interface Standard, Version 3.0, (2012).
- (4) NVIDIA Corporation, CUDA C Programming Guide, PG-02829-001_v5.0, (2012).

HPCI 戰略プログラム分野1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤教育プログラム」

野崎一徳^{†‡} 田中正夫[†]

[†]大阪大学 大学院基礎工学研究科 機能創成専攻

[‡]現在、大阪大学 歯学部附属病院

1. はじめに

HPCI 戰略プログラムは、スーパーコンピュータ「京」を中心とした HPCI（High Performance Computing Infrastructure）を最大限に活用することによって、戦略的に取り組むべき 5 つの研究分野において画期的な成果を産み出し、計算科学技術の飛躍的な発展を目指す文部科学省のプログラムであります。

2012 年 11 月 2 日に、京速コンピュータ「京」（理化学研究所計算科学研究機構、神戸市ポートアイランド）が、世界で初めて LINPAK による密行列演算のベンチマーク結果で 10 Peta Flops を達成しました。京速コンピュータを代表とするハイパフォーマンス・コンピューティングは、生命科学、医療ならび創薬研究において、コンピュータシミュレーションによる定量的な予測科学において大きな貢献をするものと期待されております。特に創薬研究・開発で必要不可欠となっている分子動力学計算等では、10 Peta Flops という性能を有効活用することで、今後わが国の製薬産業界にとって他に先駆けて新たな疾病に対応した薬剤の開発をタイムリーに提供できるような高循環型製薬プラットフォームの構築につながると考えられます。

こうした世界最高規模の高性能計算機も、製薬企業、あるいは大学、研究所ユーザにとって利用可能なシステムとなって、初めて意味が出てくることになります。HPCI は、スーパーコンピュータ「京」を広域分散大規模計算機環境の中心部に組み込み、全国の計算機資源とインターネットを介して結びつけることで、ユーザとスーパーコンピュータ「京」の距離を段階的に近づけるプロジェクトであります。そういう意味で、スーパーコンピュータ「京」だ

けでなく、それに必要な大規模記憶装置、ミドルウェア、アプリケーション、可視化装置等を一つの大きな計算機環境として捉えた時、HPCI の具体的な姿が現れると思われます。

このような HPCI 戰略プログラムの戦略分野 1 「予測する生命科学・医療および創薬基盤」 (<http://www.kobe.riken.jp/stpr1-life/>) における人材育成活動の一貫として、本学大学院基礎工学研究科と大学院情報科学研究科の教員がチームとして教育プログラムを担うこととなり、2011 年 4 月より活動を開始いたしました。本教育プログラムでは、大学院正規学生を主対象とした教育科目と、アウトリーチ活動としての産学連携セミナーとを両輪としています。

2. 大学院生向け教育科目

大学院生を対象とする正規科目としての教育は、本プログラムの主体と位置づけられており、2011 度より本人材育成プログラム科目として内容の改訂・充実を行った「バイオシミュレーション特論」、2012 年度より新たに正規科目とした「バイオインフォマティクス」は、いずれも基礎工学研究科科目部科目として開講していますが、後者については情報科学研究科の教員が主担当となっています。これらは、臨床医工学融合研究教育センターのスキルアップ講座の一部としても位置づけられており、少数ながら学外からの受講者（他大学学生や社会人）も受け入れています。

「バイオシミュレーション特論」の主な内容は、野村泰伸教授（基礎工学研究科）によるバイオシミュレーション特論、計算生理学概論、身体運動機能とその崩壊の数理シミュレーションや、中沢一雄招へい教授（基礎工学研究科・国立循環器病研究セン

ター) の心臓の興奮伝播シミュレーション、さらに、和田成生教授（基礎工学研究科）および筆者らのグループによる循環器、骨格系バイオメカニクスシミュレーションとその演習となります。演習では、心臓の興奮伝播シミュレーションや、骨のリモデリングシミュレーションなどを受講者が実際に実行・体験したり、並列計算を行うための基礎的な知識を習得した上で、実際にバッチキューフォームによる計算実行を実地に体験したりしていただいております。

一方で、「バイオインフォマティクス」では、坂田恒昭特任教授（基礎工学研究科）による、計算科学による新しい創薬に関する講義、江口至洋講師（理化学研究所・当分野副プログラムディレクター）による細胞のシステム生物学と合成生物学、そして、松田秀雄教授（情報科学研究科）のグループによる遺伝子ネットワークの情報解析と実習、萩原兼一教授（情報科学研究科）のグループによる並列計算の医療への応用に関する講義と実習を実施しております。

3. 産学連携・アウトリーチ活動

3.1 産学連携セミナー

アウトリーチ活動として、2011年度の「京速コンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー」を、大阪（阪急グランドビル）と東京（東京国際フォーラム）にて合計2回開催いたしました。2012年度も「スーパーコンピュータ「京」と創薬・医療の産学連携セミナー」として、前年度と同様に、大阪（梅田センタービル）と東京（フクラシア東京ステーション）にて合計2回開催いたしました。いずれも当初想定しておりました参加人数を上回る参加をいただき、充実した交流を行うことができました。

本セミナーは、創薬に直接関係しておられる民間企業からのご講演を中心に構成している点が特徴のひとつであり、幅広い関連分野からご参加をいただいております。このことから、スーパーコンピュータ「京」の産業利用に貢献するための重要な情報交換の場として、本セミナーを利用いただけているのではないかと考えております。一方で、基調講演で

は、今井隆志氏（理化学研究所）による「インシリコ創薬の新機軸：3D-RISM理論（溶媒和の統計力学）に基づくリガンドマッピング法」、泰地弘人氏（理化学研究所）による「スペコン「京」の設計思想と生命科学への展開」、杉本直己氏（甲南大学）による「核酸医薬品創製のためのスペコンへの期待」、奥野恭史氏による「スペコン京の創薬応用への期待：世界最大規模の化合物空間からのインシリコ創薬の実現へ」、そして北野宏明氏（システム・バイオロジー研究機構）による「システムズバイオロジーのための京コンピュータへの期待」といったトピックスを提供することができました。

また本セミナーでは、その時々における「京」利用に向けた進捗状況の紹介を組み入れることで、「京」稼働開始からは、実際に「京」利用をするために、ミニ「京」と呼ばれる同一アーキテクチャの小型スペコンの利用者募集なども行われました。このように、産業界からの「京」への期待の受け皿として、その一端を担うことができているのではないかと考えております。

3.2 シンポジウム・特別講演会

定期的に開催する産学連携セミナーとは別に、時々の企画として、2011年度は、第8回大阪大学医工情報連携シンポジウム「スーパーコンピューティングと医療・バイオ」を大阪大学臨床医工学融合研究教育センターと共に開催しました。その際、所謂ビックデータを視野に入れた中村春木教授（大阪大学蛋白質研究所・当分野マネージャー）による「大量データと大規模計算機による蛋白質の分子シミュレーション」をはじめとする最先端のHPC環境を駆使した話題提供をいただきました。

また関連学会との連携活動として、「予測する生命科学・医療および創薬基盤」教育プログラム特別講演会・シンポジウムを開催し、特別講演として高木周教授（東京大学・戦略課題3予測医療に向けた階層統合シミュレーション代表）から「次世代スペコンの医療応用に向けて」を講演していただきました（図参照）

4. おわりに

HPC は計算科学の進歩に後押しされる形で、少し時間を置きながら徐々に一般的に利用されるようになってきていると思われます。先端研究においては、その計算科学のフロンティアで新たな道を開拓し、そこで活躍することの重要性はいうまでもないと思います。その一方で、HPC 環境を実問題の中での着実な普及を図るために、大学院レベルの講義や実習に HPC のエッセンスを交えながらごく当たり前のこととして HPC 環境を活用できるような人材を着実に育成することが不可欠であると考えています。このような考え方のもとに、本教育プログラムを通じて、コンピュテーションナルフィジオロジー、バイオインフォマティクス、コンピュテーションナルバイオメカニクスなどを中心に、高度な計算機利用を踏まえた教育の推進に寄与することができれば幸いです。

今後は、医療の世界もあらゆる情報の電子化がさらに進行し、それらの膨大なデータが検索可能な時代に突入します。こういった膨大なデータの処理と有効活用は、超高齢化社会に向かう我々の未来を左右する問題となってくることでしょう。この問題に立ち向かうことのできる人材を一人でも多く育成することは、今日的要請のひとつであるといえます。そのためには、HPCI という大規模な資源の統合利用・運用が可能な情報基盤が整備されつつある事は我が国の創薬・医療分野にとどまらず、ひろく産業界にとって喜ばしいことあります。

本教育プログラムの活動につきましては、
<http://hpci.me.es.osaka-u.ac.jp/> を通じて適宜にお知らせしてまいります。幅広く皆様のご参加をお待ちいたしております。



図「予測する生命科学・医療および創薬基盤」
教育プログラム特別講演会・シンポジウム

大規模計算機システム利用者 研究報告

※「研究報告」では、利用者様が大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システムを、どのように利用しておられるのか報告いただいているります。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。

- Particle-in-cell simulation on the mechanism and scalability of Terahertz Generation from atmosphere plasma ionized by two-color fs laser 11
Junghun Shin¹), Alexei Zhidkov²), Zhan Jin²), Tomonao Hosokai²), Ryosuke Kodama^{1,2,3})
1)大阪大学大学院工学研究科、2)大阪大学光科学センター、
3)大阪大学レーザーエネルギー学研究センター
- 非平衡エネルギースペクトルに基づく LES の SGS モデルの開発 17
玉木 隆宏 、堀内 潔 東京工業大学大学院理工学研究科
- 格子数値計算を用いた SU(2)ゲージ理論における共形相の研究 27
大木 洋 名古屋大学 素粒子宇宙起源研究機構
- 生体分子相互作用の電子論的・博物学的研究 33
山崎 秀樹 大阪大学蛋白質研究所
- 開いたキャビティを過ぎる流れの直接数値シミュレーション 37
吉田 尚史 信州大学工学部

Particle-in-cell simulation on the mechanism and scalability of Terahertz Generation from atmosphere plasma ionized by two-color fs laser

Junghun Shin¹⁾, Alexei Zhidkov²⁾, Zhan Jin²⁾, Tomonao Hosokai²⁾, Ryosuke Kodama^{1,2,3)}

¹⁾*Graduate School of Engineering, Osaka University*

²⁾*Photon Pioneers Center, Osaka University*

³⁾*Institute of Laser Engineering, Osaka University*

Introduction

Recent years have seen a growing interest in nonlinear interactions between intense THz electromagnetic fields and materials including warm dense matters, semiconductors, nanostructure materials [1–4]. Generation of intense THz electromagnetic field whose electric field is stronger than 1 MV/cm is critical to pave the way for new studies and applications in this direction. One of the promising approaches is to use plasma as the radiation source. Plasma by its nature does not have damage threshold in contrast to other conventional methods using solid nonlinear crystals [5]. It has been demonstrated that a nonrelativistic laser can efficiently generate THz radiation, given that the laser has two frequency components, namely, a fundamental frequency ω and its second harmonic 2ω [6–9].

One obvious way to increase the THz power with this two-color laser scheme is to increase the incident laser power. However, as the laser intensity increases, nonlinear plasma effects become essential and may negatively result in THz radiation. Despite of numerous experimental works on the topic, there is a clear lack of theoretical and numerical examination of THz radiation during the interaction of realistic femtosecond laser pulses with underdense plasma.

This reflects the numerosity of physical processes that result in THz radiation during the laser pulse irradiation and afterward: the processes of frequency up-shift in the front of a pulse and k vector downshift

in the rear resulting in beat waves; pulse modulation owing to the refraction on the electron density ramp; steep plasma boundary, etc. All instabilities inherent to plasma result in THz radiation in a certain range of wavelengths and in a direction determined by a process of radiation; dispersion effects in plasma on THz radiation occurring at higher density plasma have yet to be understood. Due to the nonlinear nature of those phenomena, it is hardly possible to carry out an analytical examination incorporating all the nonlinear processes involved in the THz radiation emission from strongly ionized air.

It is therefore necessary to look into the interaction between femtosecond laser pulses and underdense plasma with kinetic simulations that self-consistently include plasma and atomic physics [10–13].

In the report, a numerical study on the mechanism and scaling law of THz generation with a co-propagating two-color laser pulse in air is presented for the peak fundamental laser intensities of 10^{14} , 10^{15} and 10^{16} W/cm².

Description of Particle Calculation Method

To take into account the most important effects, the particle-in-cell simulation including ionization kinetics has to be performed. In this work, the variable particle weight method is used to calculate the particle density, which is based on the solution of balance equations for density and energy [14]:

$$dN_i / dt = S_{i-1} N_{i-1} - (S_i + R_i) N_i + R_{i+1} N_{i+1},$$

$$N_e = \sum_{i=1} i N_i, N_D = \sum_{i=0} N_i, dE / dt = 0 \quad (1)$$

where S_i, R_i are the total ionization and recombination rates for i^{th} ion, N_e is the electron density, N_D is the gas density, E is the total energy. The charge growth is calculated as $\Delta Q_M = \pm e \Delta t V_M \sum_{k=0} S_k N_k$ and is

redistributed over all particles in a kinetic cell M with its volume V_M with the correction of their kinetic energy.

In case of optical field by femtosecond laser pulses and within a relatively short time of simulation, recombination can be ignored and the ionization equations in Eq. (1) can be simplified as $dN_i / dt = S_{i-1} N_{i-1}$. The ionization rate is written in the well known approximation [6-9]:

$$S_k = 4\omega_A g_k \left(\frac{I_k}{Ry} \right)^{5/2} \frac{E_A}{E} \exp \left(-\frac{2}{3} \left(\frac{I_k}{Ry} \right)^{3/2} \frac{E_A}{E} \right),$$

where $\omega_A = me^4 / \hbar^3$ and $E_A = m^2 e^5 / \hbar^4$ the atomic frequency and atomic electric field strength; $Ry = m^2 e^4 / 2\hbar^2$, I_k is the potential for ion with charge k ; g_k is a factor ~ 1 , E is an external field strength. The energy conservation is achieved by introducing an atomic current, which provides the Ohmic heating equivalent to the power loss for the ionization:

$$\vec{j} \cdot E^2 = \sum_{k=0} I_k S_k N_k, \text{ to Maxwell equations.}$$

Results and Discussion

To study the characteristics of THz radiation, PIC simulations using FPLaser2D [13] with a moving window were performed for a linearly polarized laser pulse propagating in air under normal pressure. The 2D

calculations are performed for the laser intensity from 10^{14} (which is about the threshold intensity for air) to 10^{16} W/cm² and 90 fs FWHM duration. The calculations are performed for a two-color laser pulse whose wavelength consists of $\lambda = 0.8 \mu\text{m}$ and $\lambda_1 = 0.4 \mu\text{m}$. Both are p-polarized. The total energy in the second harmonic is ~ 0.3 times the energy of

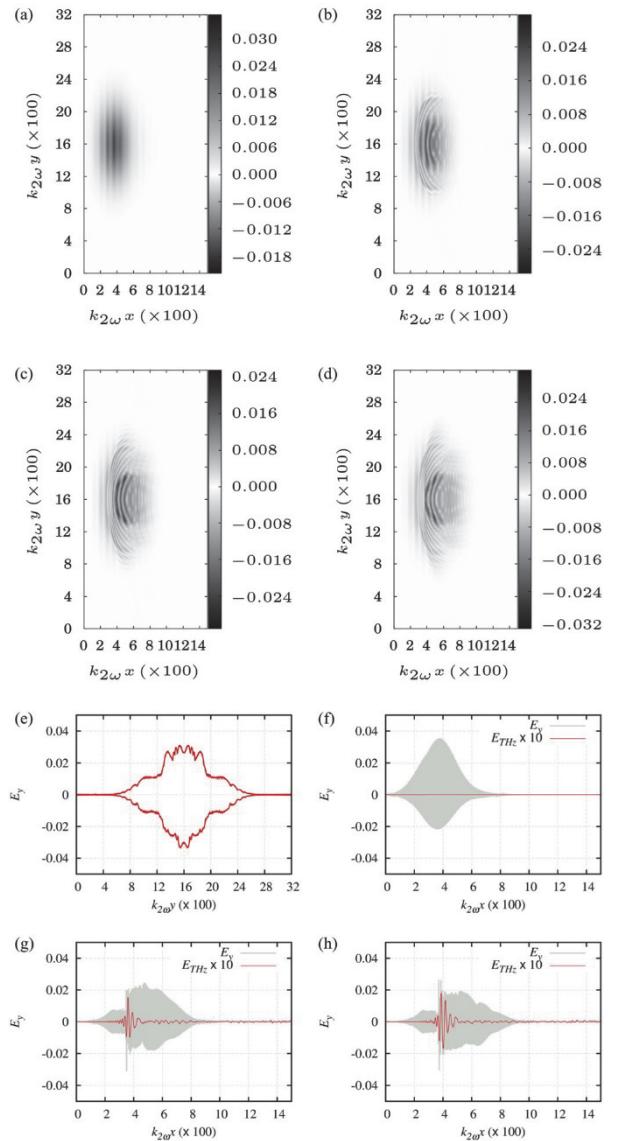


Fig. 1. (a-d) *p*-polarized electric fields over simulation area after 0.1, 2.1, 3.6 and 4.2 ps after propagation in the gas, (e) transverse profile at 4.2 ps, and (f-h) profile along laser propagation axis x corresponding to (a), (c) and (d), respectively. The peak intensity of fundamental pulse is $I_\omega = 10^{16}$ W/cm², and 2ω at $I_{2\omega} = 0.3 I_\omega$.

fundamental harmonic. The focus spot of the fundamental harmonic is chosen to provide the Rayleigh length on the order of 1 mm; the focus spot of the second harmonic is same as that of fundamental harmonic. The size of the simulation window is 320 μm by 150 μm and $\lambda_l/10$ spatial resolution; the kinetic cell is twice as large as the PIC one. The kinetic simulation was simplified by including only nitrogen molecules; the laser pulse is set as Gaussian.

Fig. 1 shows the time evolution of the electric field of the *p*-polarized two-color laser pulse propagating in the air. The intensity of the fundamental pulse is $I = 10^{16} \text{ W/cm}^2$ at the focus point. **Fig. 3** shows the particle densities for electrons and ions under the same simulation condition. The maximal electron density in

this case is $N_e^{\max} = 3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Therefore, plasma is almost fully ionized. The maximal plasma frequency is about $\omega_{\text{pl}} \sim \omega/8$ or $\nu \sim 40 \text{ THz}$. One can see modulations of the laser field strength both in longitudinal and transverse directions. The refraction of laser field by results in the density decrease and, consequently weaker, but further refraction according to the eikonal equation:

$$d\theta/dx = -0.5\nabla_{\perp}[N_e(\theta)/N_{cr}]$$

, where θ is the angle of light beam propagation. This process is nonlinear as seen in **Fig. 1e**. The modulation of the central part of the laser pulse owes the refraction effect while the modulation of pulse wings is the THz radiation. The most powerful part of the THz radiation can be seen in **Fig. 1h** in the middle of the field. The

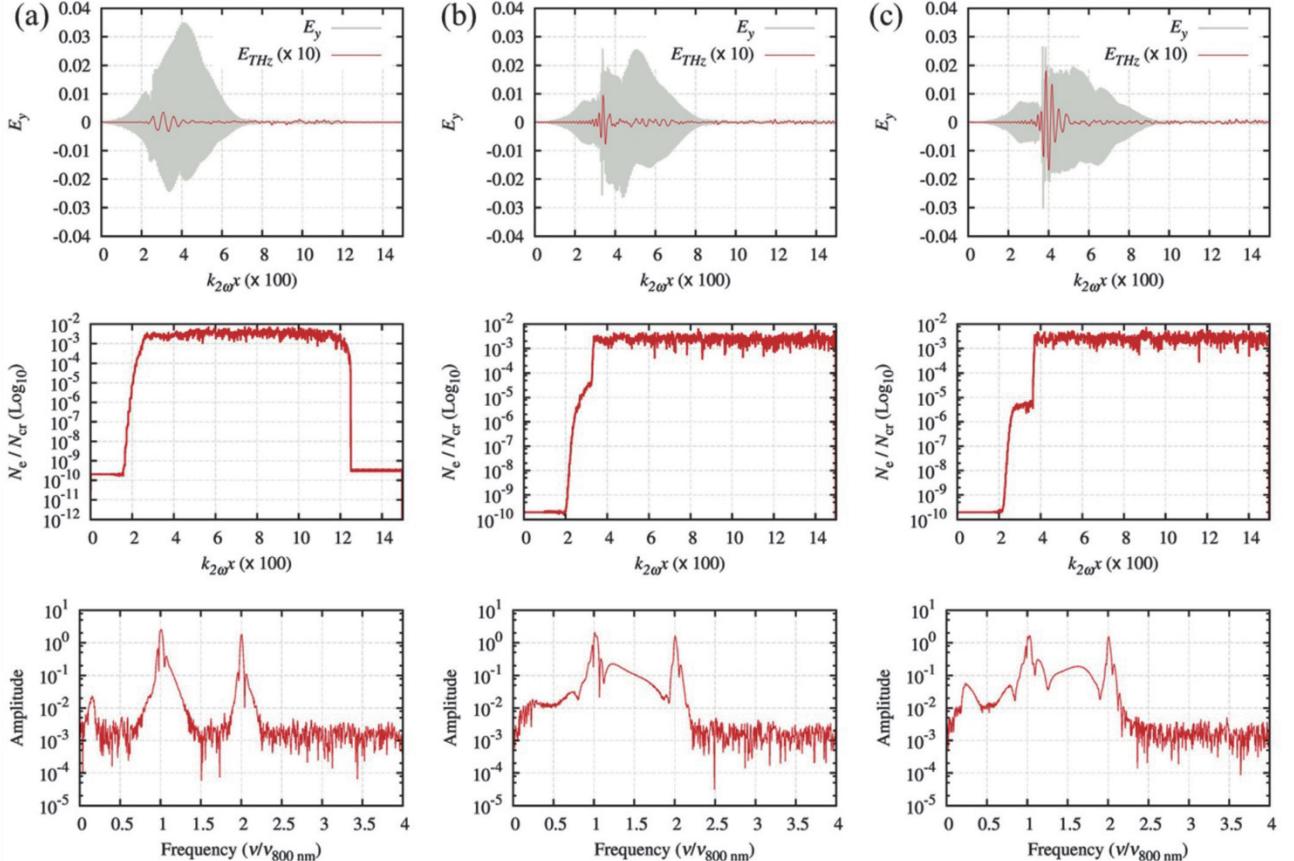


Fig. 2. Temporal evolution of the laser field and THz radiation along with the plasma density and spectra with a laser pulse which comprises of both fundamental and second harmonic components. The peak intensity of fundamental pulse is 10^{16} W/cm^2 . From (a) to (c), they are taken at $t=0.1, 2.1$ and 4.2 ps after laser propagation in the gas.

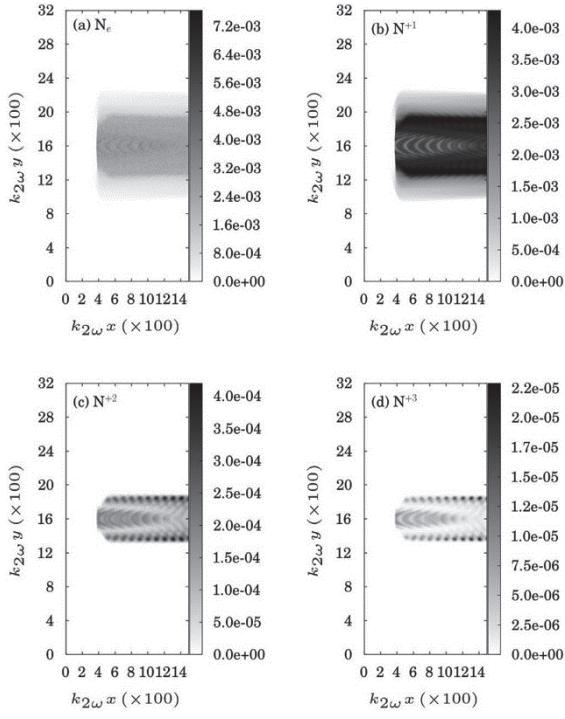


Fig. 3. Electron and ion densities after propagation of a p -polarized two-color laser pulse in air with the peak intensity of ω at $I_\omega = 10^{16}$ W/cm 2 and 2ω at $I_{2\omega} = 0.3 I_\omega$. (a) electron density, (b-d) density of 1+, 2+ and 3+ nitrogen ion, respectively.

Duration of THz impulse is about 7 fs which displays a broad spectrum of that long wavelength radiation. That agrees well with previous theoretical work [15]. THz pulse cuts the laser pulse into two parts: the front part initially responsible for the optical ionization is essentially depleted while the second, rear part has almost intact Gaussian profile.

To reveal the process of THz radiation formation, the temporal evolution of the laser field and THz radiation along with the plasma density and spectra is shown in. **Fig. 3.** The THz radiation is calculated as inverse Fourier transformation with short wavelengths cut-off. One can see that THz radiation occur initially a little bit far from the ionization front. Then the strong steeping of electron density is observed along with the THz power increase. Therefore, the long wavelength

radiation can propagate straightforward. Corresponding spectra exhibit the strong up-shift frequency components for both the fundamental and second harmonics and the correlation between the frequency up-shift and the frequency of THz radiation. It reveals one of the main mechanisms of formation of THz radiation; the ionization current creates beat waves whose characteristics depend on the ionization frequency up-shift. Interference of the beat wave with the second harmonics radiation is the sources of the current oscillating at the frequency of $2\omega_p$ which is responsible for the long wavelength radiation.

We also performed the calculation of two-color p -polarized pulses with lower intensities. The dependence of power of THz radiation on the laser pulse intensity is presented in **Fig. 4** in which the THz power generated by different laser intensities are shown for two THz propagation angle, namely, 0 and 30 degrees. In both cases one can see two different slopes in the curves: up to the laser intensity $I \sim 10^{15}$ W/cm 2 , the power growth is faster than linear, while after the growth is slower than linear. An approximation function can be presented as following: $W \approx A(I/B)^\alpha e^{-B/I}$ with $\alpha = 0.7$, $A = 9 \times 10^{-3}$, and $B = (2 - 3) \times 10^{14}$ W/cm 2 .

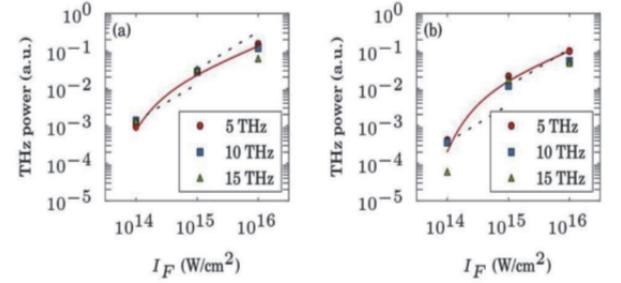


Fig. 4. The dependence of power of THz radiation on the laser pulse intensity at the emission angles at (a) 0° and (b) 30°. Dotted lines indicates linear growth of THz power against the laser intensity.

Conclusion

In conclusion, a numerical study on the mechanism and dependence of THz power radiated from air plasma produced by femtosecond laser pulse with fundamental and second harmonic components is presented. Beat wave generation between waves with and without frequency shift induced by laser-produced plasma is observed and attributed to the formation mechanism of the THz radiation. On the scalability of THz radiation by the two-color laser scheme, we have found strong non-linear dependence of the THz power on the laser intensity. The power growth is faster than linear up to laser intensities on the order of $I \sim 10^{15}$ W/cm², then, the growth becomes slower than the linear; therefore our results show that the conversion efficiency reaches its maximum at $I \sim 10^{15}$ W/cm².

Acknowledgements

Author is grateful for the support of the computer room of ILE and the Cybermedia Center at Osaka University. This study was supported by Japan Science and Technology CREST and Global COE program in Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (Electronic Devices Innovation).

References

- [1] B. E. Cole, J. B. Williams, B. T. King, M. S. Sherwin, and C. R. Stanley, *Nature* **410**, 60 (2001).
- [2] T. Kampfrath, L. Perfetti, F. Schapper, C. Frischkorn, and M. Wolf, *Physical Review Letters* **95**, 187403 (2005).
- [3] P. Gaal, K. Reimann, M. Woerner, T. Elsaesser, R. Hey, and K. Ploog, *Physical Review Letters* **96**, 187402 (2006).
- [4] C. Kübler, H. Ehrke, R. Huber, R. Lopez, A. Halabica, R. Haglund, and A. Leitenstorfer, *Physical Review Letters* **99**, 116401 (2007).
- [5] X.-C. Zhang, Y. Jin, and X. F. Ma, *Applied Physics Letters* **61**, 2764 (1992).
- [6] D. J. Cook and R. M. Hochstrasser, *Optics Letters* **25**, 1210 (2000).
- [7] T. Bartel, P. Gaal, K. Reimann, M. Woerner, and T. Elsaesser, *Optics Letters* **30**, 2805 (2005).
- [8] X. Xie, J. Dai, and X.-C. Zhang, *Physical Review Letters* **96**, 075005 (2006).
- [9] K. Y. Kim, A. J. Taylor, J. H. Glownia, and G. Rodriguez, *Nature Photonics* **2**, 605 (2008).
- [10] M. Chen, A. Pukhov, X.-Y. Peng, and O. Willi, *Physical Review E* **78**, 046406 (2008).
- [11] H.-C. Wu, J. Meyer-ter-Vehn, and Z.-M. Sheng, *New Journal of Physics* **10**, 043001 (2008).
- [12] N. A. Zharova, V. A. Mironov, and D. A. Fadeev, *Physical Review E* **82**, 056409 (2010).
- [13] A. Zhidkov, T. Esirkepov, T. Fujii, K. Nemoto, J. Koga, and S. V. Bulanov, *Physical Review Letters* **103**, 215003 (2009).
- [14] A. Zhidkov and A. Sasaki, *Physics of Plasmas* **7**, 1341 (2000).
- [15] I. Babushkin, W. Kuehn, C. Köhler, S. Skupin, L. Bergé, K. Reimann, M. Woerner, J. Herrmann, and T. Elsaesser, *Physical Review Letters* **105**, 053903 (2010).

非平衡エネルギースペクトルに基づく LES の SGS モデルの開発

玉木 隆宏、堀内 潔

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. 緒言

剥離などの非定常・非平衡乱流場の挙動予測は工学上重要であり、その主な数値シミュレーションには厳密な値が求まるが計算時間が長く非実用的な DNS、時間平均のために非定常乱流場の予測に向かない RANS、局所的空間平均のため非定常乱流場の予測に適していて計算時間の削減が可能なLESがある。

SGS(subgrid-scale)のエネルギースペクトルを用いて GS(grid-scale)から SGS へのエネルギーカスケードの様式を SGS モデルに導入することが可能であるので、エネルギースペクトルの観点から LES の SGS モデリングを行うことは有意義である。

実験データと DNS の解析的アプローチによると、Kolmogorov の平衡の-5/3 乗スペクトル⁽¹⁾からの変動が示されており⁽²⁾⁽³⁾、散逸率の時間微分 $\dot{\varepsilon}$ の正負それぞれの場合で条件付き平均を施してエネルギースペクトルを計算すると、非平衡の-7/3 乗スペクトルなどの高次のスペクトルが存在することが示されている。⁽⁴⁾

しかし、LES で現在汎用されている Smagorinsky モデル⁽⁵⁾では Kolmogorov による平衡の-5/3 乗スペクトルのみに基づいて⁽⁶⁾乱流場の計算を行なっており、非平衡のエネルギースペクトルを考慮に入れていないため、非定常・非平衡乱流場の予測精度が低い。

そこで本研究では非平衡エネルギースペクトルに基づく SGS モデルの開発とその検討を行った。なお乱流場としては非圧縮性強制一様等方乱流を用い、DNS データと LES データの比較により検討する。

2. 支配方程式と SGS モデル

本研究で用いる非圧縮性強制一様等方乱流の支配方程式は次の Navier-Stokes 方程式と連続の式である。

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + f_i \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2)$$

ここで x_i は i 方向の空間座標、 u_i は速度ベクトルの i 方向成分、 ρ は密度、 p は圧力、 ν は動粘性係数、 f_i は外力の i 方向成分である。

LES ではスケールの粗視化として支配方程式に以下のようないきる操作を施し、GS 成分と SGS 成分に分離する。ただし、本研究では Cutoff フィルター式(2.5)を用いている。(Δは格子間隔)

$$f = f + f' \quad (2.3)$$

$$\bar{f} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') G(x - x') dx' \quad (2.4)$$

$$\hat{G}(k_i) = \begin{cases} 1 & (|k_i| \leq \pi/\Delta_i) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (2.5)$$

この操作により LES の支配方程式は次のようにになる。

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + f_i \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.7)$$

ここに、格子以下のスケールの変動の粗視化の帰結として、次のような SGS 応力項が得られ、式(2.6)中に現れる。

$$\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (2.8)$$

この応力を GS 成分と関係づける SGS モデルが必要となる。本研究では以下に述べるような SGS 渦粘性係数モデルを用いた検証を行った。

$$\tau_{ii} = \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} - 2\nu_e \bar{S}_{ij}, \quad \bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.9)$$

ここで ν_e は SGS 渦粘性係数、 δ_{ij} は Kronecker のデルタである。

Smagorinsky モデルでは SGS 成分のエネルギー生成項 P と散逸項 D が等しい(局所平衡仮説)とする。

$$P = -\tau_{ij} \bar{S}_{ij}, \quad D = \nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (2.10)$$

$$D \approx \frac{C_\varepsilon K_G^{3/2}}{\Delta} \quad (2.11)$$

そして SGS エネルギー $K_G (\equiv \tau_{ii}/2)$ と ν_e が決定される。ただし C_ν 、 C_ε はモデルパラメータである。

$$K_G = \frac{C_\nu}{C_\varepsilon} \Delta^2 (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}) \quad (2.12)$$

$$\nu_e = (C_S \Delta)^2 (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij})^{1/2} \quad (2.13)$$

ここで C_S は Smagorinsky 定数である。

一方 1 方程式モデルでは SGS エネルギー方程式を近似することによって K_G のモデル方程式を導出し ν_e を決定する。⁽⁷⁾⁽⁸⁾

$$\frac{\partial K_G}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial K_G}{\partial x_j} = C_\nu \Delta K_G^{1/2} (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}) - \frac{C_\varepsilon K_G^{3/2}}{\Delta} \quad (2.14)$$

$$\nu_e = C_\nu \Delta (K_G)^{1/2} \quad (2.15)$$

ただし、本研究では流れ場として一様等方乱流を用いているため拡散項を無視している。

3. 非圧縮性強制一様等方乱流の DNS と LES

DNS データと LES データの比較により Smagorinsky モデルと 1 方程式モデルの評価をする。

本研究で対象とする流れ場において計算領域の長さは全方向に 2π 、格子点数は DNS が 512^3 、LES が 64^3 、動粘性係数は $\nu=1.35 \times 10^{-3}$ 、時間刻みは $\Delta t = 0.0005$ とした。また境界条件には周期境界条件、空間の離散化にはスペクトル法を用い、DNS では $3/2$ 則を用いてエイリアシング誤差を除去し、LES では非線形項に skew-symmetric form を用いエイリアシング誤差を除去した。時間積分には DNS には低容量型 3 次精度 Runge-Kutta 法、LES は Euler 法と Adams-Bashforth 法を用いた。外力項には低波数領域 ($0 \leq k \leq 2.5$) に速度場に依存する外力(3.1)を各時間ステップに注入する linear forcing⁽⁹⁾を用いた。

$$f_i(k) = A u_i(k) \quad (i = 1, 2, 3) \quad (A = 0.14) \quad (3.1)$$

LES の SGS モデルとして Smagorinsky モデルと 1 方程式モデルを用い、本研究では $C_S = 0.17$ 、 $C_\nu = 0.05$ 、 $C_\varepsilon = 1.0$ とした。1 方程式モデルの時間積分法としては 1 次精度である Euler 法と 2 次精度である Adams-Bashforth 法を使い、LES の初期条件として DNS データに式(2.5)で示したように Cutoff フィルターを施して高波数成分を除去し格子点数を 64^3 にしたもの用いた。Table.1 に計算時のパラメータを示す。

	Total	Phase 1	Phase 2
Re_λ	121.7	129.6	114.1
K	0.464	0.492	0.433
ε	0.0724	0.0724	0.0724
L	1.058	1.081	1.033
λ	0.297	0.306	0.288
$\eta (\times 10^{-2})$	1.371	1.370	1.372
τ_0	1.20	1.18	1.16
$\tau_K (\times 10^{-2})$	13.66	13.66	13.65
τ_L	1.90	1.89	1.92
τ_f	4.65	4.63	4.60
T	11.3	11.0	11.7
$S_{u'} (\times 10^{-2})$	-1.63	-1.98	-1.27
$F_{u'}$	2.78	2.77	2.78
S_{u_x}	-0.5	-0.519	-0.517
F_{u_x}	5.51	5.64	5.38

Table.1 R_λ : Taylor microscale Reynolds number, $K (= u_i^2 / 2)$: Average kinetic energy, ε : Average dissipation rate, L : Integral length scale, λ : Taylor microscale, η : Kolmogorov length, $\tau_0 (= L/u')$: Eddy turnover time according to L , $\tau_K (= (\nu \varepsilon)^{1/2})$: Kolmogorov time scale, $\tau_L (= L/u')$: Eddy turnover time according to L , $\tau_f (= (l_f^2/\varepsilon)^{1/3})$: Characteristic time due to forcing, $T (= l_f/u')$: Eddy turnover time due to forcing, $S_{u'}$: Skewness of velocity fluctuation, $F_{u'}$: Flatness of velocity fluctuation, S_{u_x} : Skewness of velocity derivative ($u_x = \partial u_l / \partial x_l$), F_{u_x} : Flatness of velocity fluctuation.

Fig.1 は DNS データ図で、運動エネルギーと散逸率の空間平均の時間変動を示している。散逸率の運動エネルギーに対するタイムラグは約 2.80 となっている。この値は積分長時間スケールにほぼ一致し、エネルギークースケードの時間スケールを示している。

Fig.2 には DNS データと Smagorinsky モデルと 1 方程式モデルの LES データによる図を示す。Fig.2 より、DNS データと比較すると、Smagorinsky モデルは概して予測精度がよい事が見て取れるが、Time≈280 から Time≈300 において DNS データより大きな値を取ることが分かる。また 1 方程式モデルの Euler 法による計算では、Smagorinsky モデルに比べて Time≈280 の極大値の値は予測精度向上が見られ

るが、Time≈280 以降の値は予測精度向上したとはいはず、特に Time≈260、308 において極値を捉える事が出来ていない。またこの 1 方程式モデルによる予測精度は、時間積分を Euler 法よりも高精度の Adams-Bashforth 法に換えると、悪化することも見てとれる。

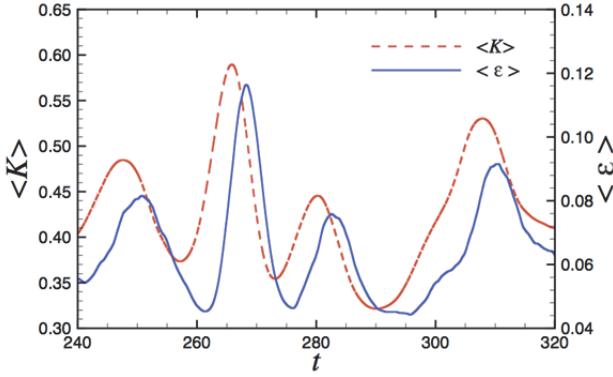


Fig.1 Temporal variations in the turbulent energy ($\langle K \rangle$) and the dissipation rate ($\langle \varepsilon \rangle$) obtained from DNS

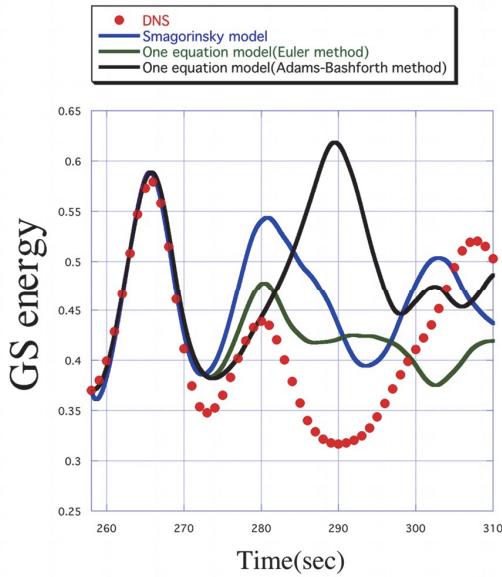


Fig.2 Temporal variations in the GS energy. Filtered DNS data and the results obtained using the Smagorinsky model and One-equation model are shown.

4. DNS で支配的な非平衡エネルギースペクトル

定常・平衡的なエネルギー cascade が起きる慣性小領域のエネルギースペクトルをよく近似する Kolmogorov の $-5/3$ 乗則は

$$E(k) = C_K \varepsilon^{2/3} k^{-5/3} \quad (4.1)$$

と表される。なお ε はエネルギー散逸率を示し、 C_K は Kolmogorov 定数である。Lilly は Smagorinsky モデルが Kolmogorov の $-5/3$ 乗則に対応していることを示し、 C_S の理論値を約 0.2 とした。⁽⁶⁾

非定常・非平衡なエネルギー cascade が起きる慣性小領域のエネルギー cascade については $-7/3$ 乗等のエネルギースペクトルが存在することがよって示されていて⁽⁴⁾、そのエネルギースペクトルは次式で示されている。

$$\begin{aligned} E(k) \approx & C_K \varepsilon^{2/3} k^{-5/3} + C_1 \dot{\varepsilon} \varepsilon^{-2/3} k^{-7/3} \\ & + C_2 \left[\ddot{\varepsilon} \varepsilon^{-1} - \frac{2}{3} \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} \right)^2 \right] k^{-9/3} + \dots \end{aligned} \quad (4.2)$$

第 1 項は平衡成分、第 2 項と第 3 項は散逸率 ε の時間微分を含んでいることから分かるように非平衡成分で、平衡成分からの変動を示す。また長時間平均をとると定常な $-5/3$ 乗成分のみが抽出されることが分かる。

そこで散逸率の時間微分 $\dot{\varepsilon}$ の符号により条件付き平均を施し式(4.3)のように $\dot{\varepsilon}$ が正値をとる Phase 1 と負値をとる Phase 2 に分類する。

$$\begin{cases} E^+(k) = E_0(k) + E_1^+(k) & (\text{when } \dot{\varepsilon} \geq 0 : \text{Phase 1}) \\ E^-(k) = E_0(k) + E_1^-(k) & (\text{when } \dot{\varepsilon} < 0 : \text{Phase 2}) \end{cases} \quad (4.3)$$

ここに、 $E_1^-(k) \approx -E_1^+(k)$ であることに注意すると

$$\begin{cases} E_0(k) = \frac{1}{2} (E^+(k) + E^-(k)) \\ E_1^+(k) = \frac{1}{2} (E^+(k) - E^-(k)) \end{cases} \quad (4.4)$$

である。

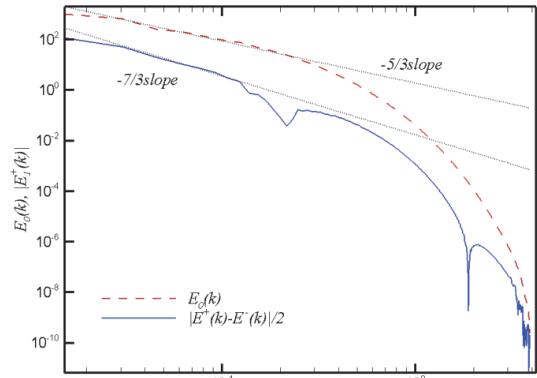


Fig.3 Energy spectra normalized by $(\langle \varepsilon \rangle \nu^5)^{1/4}$ obtained from DNS data are plotted versus $k\bar{\eta}$. Red dash line: $-5/3$ spectrum, Blue solid line: $-7/3$ spectrum.

Fig.3 はこの条件付き平均を用い、DNS データから抽出されたスペクトルの絶対値を示すが、赤線で示した $E_0(k)$ は $-5/3$ 乗の、青線で示した $E_1^+(k)$ は $-7/3$ 乗の勾配を持つことが見て取れる。なお、Kolmogorov 定数は $C_K \approx 1.58$ となる。

また、Table.1 により Phase1 と Phase2 の統計量を見ると、積分長 L とティラー長 λ は、Phase2 における値より Phase1 における値のほうが大きく、Phase1 では Phase2 よりも大きな渦が支配的であると言え、GS エネルギー K は Phase2 における値より Phase1 における値のほうが大きいことと整合している。

次にフーリエ空間上でのエネルギー伝達関数 $T(k)$ とエネルギーflux 関数 $\Pi(k)$ を用いて、非平衡エネルギースペクトルによるエネルギー伝達について述べる。

まずエネルギー伝達関数 $T(k)$ とエネルギーflux 関数 $\Pi(k)$ はそれぞれ式(4.5)(4.6)のように書ける。

$$T(k) = \frac{1}{2} \text{Im} \left[\sum_{k-1/2 \leq |\mathbf{k}'| \leq k+1/2} \tilde{u}_i^*(\mathbf{k}') P_{ijk}(\mathbf{k}') \sum_p \tilde{u}_j(\mathbf{p}) \tilde{u}_k(\mathbf{k}' - \mathbf{p}) \right] \quad (4.5)$$

$$\Pi(k) = \int_k^\infty T(k') dk' \quad (4.6)$$

ただし、 \tilde{u}_i^* は \tilde{u}_i の共役複素数、 P_{ijk} は orthogonalising operator であり、 \mathbf{k} は波数ベクトルである。⁽¹⁰⁾

$-5/3$ 乗スペクトルによるエネルギー伝達関数とエネルギーflux 関数は式(4.7)で、 $-7/3$ 乗スペクトルによるエネルギー伝達関数とエネルギーflux 関数は式(4.8)で表される。

$$T(k) = 0, \quad \Pi(k) = \langle \varepsilon \rangle \quad (4.7)$$

$$T_1(k) = \frac{2}{3} C_K \langle [\dot{\varepsilon}] \rangle \langle \varepsilon \rangle^{-\frac{1}{3}} k^{-\frac{5}{3}}, \quad \Pi_1(k) = C_K \langle [\dot{\varepsilon}] \rangle \langle \varepsilon \rangle^{-\frac{1}{3}} k^{-\frac{2}{3}} \quad (4.8)$$

DNS データを解析すると Fig.4 と Fig.5 が得られる。Fig.4 は Phase 1 におけるエネルギー伝達関数(青実線)とエネルギー伝達関数(赤実線)で Fig.5 は Phase 2 におけるエネルギー伝達関数(青実線)とエネルギーflux 関数(赤実線)である。

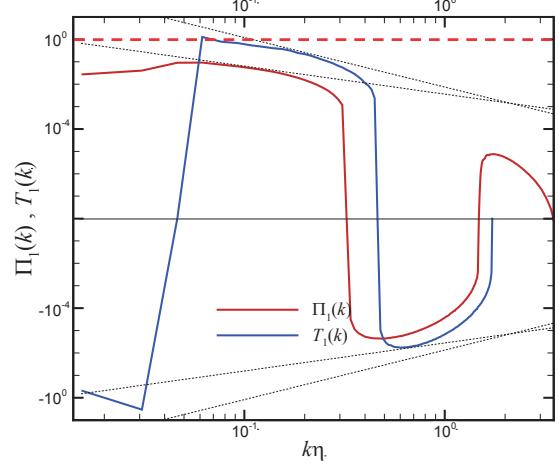


Fig.4 Phase1($\dot{\varepsilon} \geq 0$) Energy transfer function($T(k)$) and Energy flux function($\Pi(k)$)

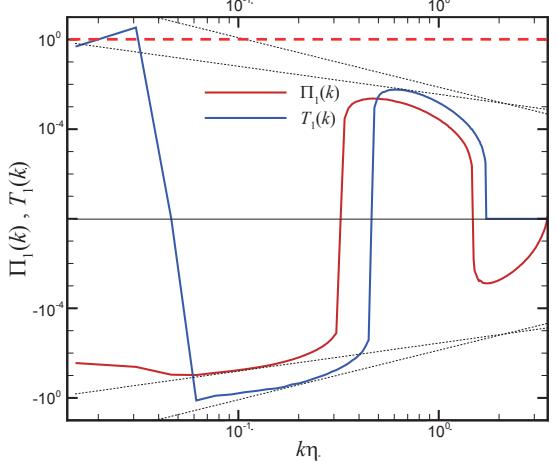


Fig.5 Phase2($\dot{\varepsilon} < 0$) Energy transfer function($T(k)$) and Energy flux function($\Pi(k)$)

Fig.4 の Phase1 における図によると、 $k\eta \leq 0.06$ の低波数帯においてエネルギー伝達関数がほとんど一定の正値をとり、エネルギーflux 関数が負から正に変化しており、大きなスケール GS から小さなスケール SGS への forward なエネルギー cascade が起きている。

Fig.5 の Phase2 における図によると、 $k\eta \leq 0.06$ の低波数帯においてエネルギー伝達関数がほとんど一定の負値をとり、エネルギーflux 関数が正から負に変化しており、小さなスケール SGS から大きなスケール GS への backward なエネルギー cascade が起きている。

式(4.7)と式(4.8)により Fig.4 と Fig.5 に $-5/3$ 乗の平

衡スペクトルに対応する赤破線、-7/3乗の非平衡スペクトルに対応する黒破線を引くことができ、-5/3乗の平衡スペクトルからの変動成分は-7/3乗の非平衡スペクトルが支配的であることが分かる。

5. 非平衡エネルギースペクトルと SGS モデルの関係

平衡状態 $P \approx D$ を仮定した Smagorinsky モデルについて述べる。GS 成分から SGS 成分へのエネルギー一カスケードを示す SGS 散逸項 D は、小スケールにおける全エネルギーの散逸率 ε にはほとんど等しいとみなせて、

$$D = \frac{C_\varepsilon K_G^{3/2}}{\Delta} \approx \varepsilon \quad (5.1)$$

式(5.1)より $K_G \approx \varepsilon^{2/3}$ であるので対応するエネルギースペクトルを $E(k) = C_K \varepsilon^{2/3} k^{-\alpha}$ と仮定すると、 K_G と $E(k)$ は

$$\begin{aligned} K_G &= \int_{\pi/\Delta}^{\infty} E(k) dk = \int_{\pi/\Delta}^{\infty} C_K \varepsilon^{2/3} k^{-\alpha} dk \\ &= \frac{3}{2} C_K \left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^{2/3} \varepsilon^{2/3} \end{aligned} \quad (5.2)$$

と関連付けることができ、

$$\alpha = \frac{5}{3}, \quad C_K = \frac{2}{3} \left(\frac{\pi}{C_\varepsilon} \right)^{2/3} \quad (5.3)$$

と決定される。そして、

$$E(k) = \frac{2}{3} \left(\frac{\pi}{C_\varepsilon} \right)^{2/3} \varepsilon^{2/3} k^{-5/3} \quad (5.4)$$

を次元解析的に得る。得られた式(5.4)より

$$2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij} = 2 \int_0^{\pi/\Delta} k^2 E(k) dk = C_\varepsilon^{-2/3} \pi^2 \Delta^{-4/3} \varepsilon^{2/3} \quad (5.5)$$

これにより、

$$C_\nu = C_\varepsilon / \Delta \quad (5.6)$$

を得る。

前述のように Lilly により Smagorinsky モデルでは -5/3 乗の平衡スペクトルに対応していること⁽⁸⁾が明らかにされている。

次に 1 方程式モデルとスペクトルの対応について述べる。

SGS エネルギーの支配方程式

$$\dot{K}_G = C_\nu \Delta K_G^{1/2} (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}) - \frac{C_\varepsilon K_G^{3/2}}{\Delta} \quad (5.7)$$

であるが、ここで $\tau = \delta t (\delta \ll 1)$ とおき、 $K_G(\tau)$ を摂動展開する。

$$K_G(\tau) = K_0 + \delta K_1(\tau) + \delta^2 K_2(\tau) + \dots \quad (5.8)$$

ここで展開の 0 次解は SGS 生成項(P)と散逸項(D)が等しいと仮定した定常状態の解であり、Smagorinsky モデルに整合する。

$$K_0 = \frac{C_\nu}{C_\varepsilon} \Delta^2 (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}) \quad (5.9)$$

式(5.9)を用いて式(5.7)を書き換えると、

$$\dot{K}_G = \frac{C_\varepsilon}{\Delta} K_0 K_G^{\frac{1}{2}} - \frac{C_\varepsilon K_G^{3/2}}{\Delta} \quad (5.10)$$

次に SGS エネルギー K_G の一次展開

$$K_G(\tau) = K_0 + \delta K_1(\tau) \quad (5.11)$$

の解を求める。式(5.10)より

$$\begin{aligned} \delta \frac{\partial K_G}{\partial \tau} &= \delta \frac{\partial (K_0 + \delta K_1)}{\partial \tau} \\ &= \frac{C_\varepsilon}{\Delta} K_0 (K_0 + \delta K_1)^{1/2} - \frac{C_\varepsilon K_0^{3/2}}{\Delta} \end{aligned} \quad (5.12)$$

式(5.12)において

$$\frac{C_\varepsilon}{\Delta} K_0 (K_0 + \delta K_1)^{1/2} \approx \frac{C_\varepsilon}{\Delta} K_0^{3/2} \left(1 + \frac{\delta}{2} \frac{K_1}{K_0} \right) \quad (5.13)$$

と近似し両辺の $O(\delta)$ の項を比較すると

$$K_1 = \frac{2}{\delta} \frac{\Delta}{C_\varepsilon} \left(\frac{\dot{K}_0}{K_0} \right) K_0^{1/2} \quad (5.14)$$

を得る。-5/3 乗則を用いて K_0 を導出すると式(5.15)

$$K_0 = \int_{\pi/\Delta}^{\infty} E_0(k) dk = \frac{3}{2} C_K \varepsilon^{2/3} \left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^{2/3} \quad (5.15)$$

式(5.14)に式(5.15)を代入する。

$$K_1 = \frac{1}{\delta} \left[2 \left(\frac{2}{3} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta}{\pi} \right)^{4/3} \pi \frac{C_K^{1/2}}{C_\varepsilon} \right] \dot{\varepsilon} \varepsilon^{-2/3} \quad (5.16)$$

そして δK_1 に対応するエネルギースペクトル $E_1(k)$ を $E_1(k) \propto k^{-\beta}$ と仮定して求めると、

$$\begin{aligned} K_1 &= \int_{\pi/\Delta}^{\infty} E_1(k) dk = \int_{\pi/\Delta}^{\infty} C_1 (\dot{\varepsilon} \varepsilon^{-2/3}) k^{-\beta} dk \\ &= \frac{C_1}{\alpha - 1} \left(\frac{\pi}{\Delta} \right)^{1-\beta} \dot{\varepsilon} \varepsilon^{-2/3} \end{aligned} \quad (5.17)$$

式(5.16)と式(5.17)を等しいとすると式(5.18)となる。

$$\beta = \frac{7}{3}, \quad C_1 = 4 \left(\frac{2}{3} \right)^{3/2} \pi \frac{C_K^{1/2}}{C_\varepsilon} \quad (5.18)$$

となり、

$$E_1(k) = 4 \left(\frac{2}{3} \right)^{3/2} \pi \frac{C_K^{1/2}}{C_\varepsilon} (\dot{\varepsilon} \varepsilon^{-2/3}) k^{-7/3} \quad (5.19)$$

を得る。したがって、 K_1 は-7/3 乗スペクトルに対応していることになる。

さらに SGS エネルギー K_G の二次展開

$$K_G(\tau) = K_0 + \delta K_1(\tau) + \delta^2 K_2(\tau) \quad (5.20)$$

の解を求める。式(5.10)より

$$\begin{aligned} \delta \frac{\partial (K_0 + \delta K_1 + \delta^2 K_2)}{\partial \tau} &= \frac{C_\varepsilon}{\Delta} K_0 (K_0 + \delta K_1 + \delta^2 K_2)^{1/2} \\ &\quad - \frac{C_\varepsilon K_0^{3/2}}{\Delta} \end{aligned} \quad (5.21)$$

式(5.21)において

$$\frac{C_\varepsilon}{\Delta} K_0 (K_0 + \delta K_1 + \delta^2 K_2)^{1/2} \approx \frac{C_\varepsilon}{\Delta} K_0^{3/2} \left(1 + \frac{\delta}{2} \frac{K_1}{K_0} + \frac{\delta^2}{2} \frac{K_2}{K_0} \right) \quad (5.22)$$

と近似し、両辺の $O(\delta^2)$ の項を比較すると、

$$K_2(t) = \frac{2}{\delta^2} \frac{\Delta}{C_\varepsilon} \dot{K}_1 K_0^{-\frac{1}{2}} \quad (5.23)$$

を得る。これに式(5.14)を用いると、

$$K_2(t) = \frac{1}{\delta^2} 4 \left(\frac{\Delta}{C_\varepsilon} \right)^2 \left[\frac{\ddot{K}_0}{K_0} - \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{K}_0}{K_0} \right)^2 \right] \quad (5.24)$$

となり、さらに式(5.15)を代入すると

$$K_2(t) = \frac{1}{\delta^2} \frac{8}{3} \left(\frac{\Delta}{C_\varepsilon} \right)^2 \left[\ddot{\varepsilon} \varepsilon^{-1} - \frac{2}{3} \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} \right)^2 \right] \quad (5.25)$$

を得る。 $\delta^2 K_2$ に対応するエネルギースペクトル $E_2(k)$ を同様に求めると、

$$\begin{aligned} K_2 &= \int_{\pi/\Delta}^{\infty} E_2(k) dk = \int_{\pi/\Delta}^{\infty} C_2 \left[\ddot{\varepsilon} \varepsilon^{-1} - \frac{2}{3} \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} \right)^2 \right] k^{-\gamma} dk \\ &= \frac{C_2}{\gamma-1} \left(\frac{\pi}{\Delta} \right)^{1-\gamma} \left[\ddot{\varepsilon} \varepsilon^{-1} - \frac{2}{3} \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (5.26)$$

となり、

$$\gamma = 3, \quad C_2 = \frac{16}{3} \frac{\pi^2}{C_\varepsilon^2} \quad (5.27)$$

を得る。したがって、

$$E_2(k) = \frac{16}{3} \frac{\pi^2}{C_\varepsilon^2} \left[\ddot{\varepsilon} \varepsilon^{-1} - \frac{2}{3} \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} \right)^2 \right] k^{-9/3} \quad (5.28)$$

となり、 K_2 に対応するスペクトルは-9/3乗となる。

以上のことから 1 方程式モデルにおいてエネルギースペクトルは式(5.29)のようになる。

$$\begin{aligned} E(k) &= E_0(k) + E_1(k) + E_2(k) + \dots \\ &\approx C_K \varepsilon^{2/3} k^{-5/3} + C_1 \dot{\varepsilon} \varepsilon^{-2/3} k^{-7/3} \\ &\quad + C_2 \left[\ddot{\varepsilon} \varepsilon^{-1} - \frac{2}{3} \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} \right)^2 \right] k^{-9/3} + \dots \end{aligned} \quad (5.29)$$

摂動展開は-5/3乗スペクトルを示す初項、-7/3乗スペクトルを示す第2項、-9/3乗スペクトルを示す第3項のみで終わらず、無限に項は続く。

以上のように Smagorinsky モデルでは SGS エネルギー K_G に-5/3乗スペクトルのみが加えられ、1 方程式モデルでは SGS エネルギー K_G に-5/3乗スペクトルに加えて非平衡スペクトルによる変動成分の効果が加えられる。

さて、Smagorinsky モデルでは SGS エネルギー K_G に平衡の-5/3乗スペクトル項のみを加えていて、非平衡スペクトルによる変動成分を加えることができない。1 方程式モデルでは K_G に非平衡スペクトルによる変動成分を加えているが無限に項を加えた場合、級数の収束性は保証されない。さらに先ほどの DNS データによるエネルギースペクトル図 Fig.4 と Fig.5 で示したように非定常・非平衡の乱流場においては-5/3乗の平衡スペクトルからの変動成分は-7/3乗の非平衡スペクトルが支配的である。

そこで式(5.8)の摂動展開の第2項で展開を打ち切ることができると考え、次のモデル(Non-equilibrium Smagorinsky モデル)を提案する。

$$K_G = K_0 + K_1 = K_0 + 2 \frac{\Delta}{C_\varepsilon} \dot{K}_0 K_0^{-\frac{1}{2}} \quad (5.30)$$

6. Non-equilibrium Smagorinsky モデルの評価

Non-equilibrium Smagorinsky モデルを評価するため、実際に LES の計算を行った。式(5.30)の初項は式(5.9)により、第2項の計算は式(5.14)より得て次式のように計算した。

$$\begin{aligned} K_1^{(n)} &= 4 \frac{\Delta}{C_\varepsilon} (K_0^{(n)})^{\frac{1}{2}} \\ &\approx 4 \frac{\Delta}{C_\varepsilon} \frac{\sqrt{K_0^{(n)}} - \sqrt{K_0^{(n-1)}}}{\delta t} + 4 \frac{\Delta}{C_\varepsilon} \bar{u}_j \frac{\partial \sqrt{K_0^{(n)}}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (6.1)$$

ただし、(n)の添字は n ステップにおける値を示す。また計算の安定化をするために K_G の値が負になつた場合は、その格子点における K_G を 0 に置き換える clipping 操作を行つた。

Smagorinsky モデル、1 方程式モデル、

Non-equilibrium Smagorinsky モデル計算の結果を述べる。

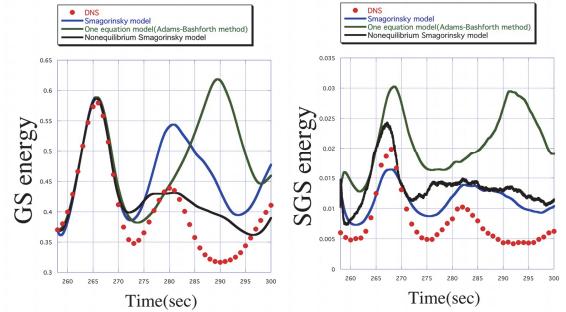


Fig.6 Temporal variations in the GS and SGS energy.

Filtered DNS data and the results obtained using the Smagorinsky model, One equation model and Non-equilibrium Smagorinsky model are shown.

Fig.6 に DNS、Smagorinsky モデル、1 方程式モデル、Non-equilibrium Smagorinsky モデルの LES によって得られた GS エネルギーと SGS エネルギーの比較図を示す。Fig.6 より GS エネルギーにおいて Non-equilibrium Smagorinsky モデルは Smagorinsky モデルと 1 方程式モデルに比べて概して予測精度の改善が見られる。特に Time≈280 の極大値において顕著に予測精度改善が見られ、Smagorinsky モデル、1

方程式モデルのような過大予測が見られない。また Non-equilibrium Smagorinsky モデルはその後の Time \approx 280 から Time \approx 300 においても Smagorinsky モデルと 1 方程式モデルの値より小さく予測されている。

SGS エネルギーにおいては、Non-equilibrium Smagorinsky モデルは Smagorinsky モデルに比べて概して大きな値をとっており、また Time \approx 275 の極小値を Smagorinsky モデルよりも精度よく捉えておらず、これらの点では予測精度が上がったとはいえない。しかし Non-equilibrium Smagorinsky モデルは 1 方程式モデルに比べると概して小さい値をとっており、また Time \approx 295 の極小値を捉えているので予測精度が上がったといえる。

ここで LES の初期速度場として与えられている DNS による速度場は必ずしも実際の LES による値ではないことを留意されたい。LES データが与えられた初期速度に適合するにはわずかに時間が掛かるが、Fig.6 を見ると Non-equilibrium Smagorinsky モデルは Smagorinsky モデル、1 方程式モデルに比べてかなり速く適合する事が分かる。このことから Smagorinsky モデル、1 方程式モデルとは異なり、Non-equilibrium Smagorinsky モデルは時間履歴の効果を導入できているために、この点においては予測精度が改善したと考えることができる。

Fig.7 に DNS と Smagorinsky モデル、1 方程式モデル、Non-equilibrium Smagorinsky モデルの LES による GS エネルギーの自己相関関数($\langle K(t)K(t+\tau) \rangle$)を示す。時間 t に関するアンサンブル平均が自己相関関数の計算には使われている。

Fig.7 により Non-equilibrium Smagorinsky モデルが Smagorinsky モデル、1 方程式モデルの両者に比べて $\tau \approx 15, 30, 41$ の極値においてより正確な予測が出来ていて、GS エネルギーの位相について精度向上が見られる。

SGS のモデリングにおいて最も肝要な点の一つは、GS から SGS へのエネルギー伝達の予測精度にある。Fig.6 より SGS エネルギーの時間発展は GS エネルギーの時間発展に対してタイムラグが存在する事が見て取れる。

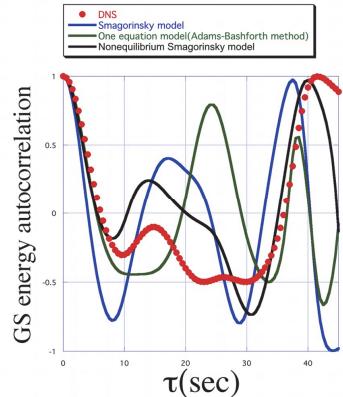


Fig.7 Distributions of autocorrelation of the GS energy.

Filtered DNS data and the results obtained using the Smagorinsky model, One equation model and Non-equilibrium Smagorinsky model are shown.

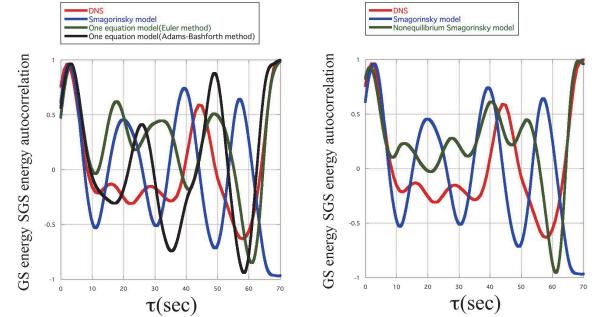


Fig.8 Distributions of the temporal correlation between the GS energy and the SGS energy. Filtered DNS data and the results obtained using the Smagorinsky model, One equation model, and Non-equilibrium Smagorinsky model are shown.

そこで、Fig.8 に DNS と Smagorinsky モデル、1 方程式モデル、Non-equilibrium Smagorinsky モデルの LES による GS エネルギーと SGS エネルギーの相関関数($\langle K(t)K_G(t+\tau) \rangle$)を示す。Fig.8 によると Smagorinsky モデル、1 方程式モデル、Non-equilibrium Smagorinsky モデルのそれぞれが $\tau \approx 2.5$ で極大値をとり、よく予測できている。 $(\tau$ はタイムラグに対応していて Table.1 で示した τ_L に近い値をとっている) それ以降の値では Smagorinsky モデルと 1 方程式モデルは $\tau \approx 16.0, 28.0, 43.0, 70.0$ の極値を捉えることが出来ていないのにたいして、Non-equilibrium Smagorinsky モデルでは、DNS データが極値をとる時刻($\tau \approx 15.0, 22.0, 28.0, 35.0$)が良く予測されている。

これらことから、Non-equilibrium Smagorinsky モデル

ルは SGS へのエネルギー一カスケードと SGS のエネルギー生成を Smagorinsky モデル、1 方程式モデルよりも高精度で予測できていると言える。

7. SGS モデルの考察

本章では、第 6 章で示された Non-equilibrium Smagorinsky モデルの高精度性の検証を行う。

Smagorinsky モデルと Non-equilibrium Smagorinsky モデルを計算(chapter6 参照)し、GS エネルギースペクトルを計算すると Fig.9、Fig.10 のようになつた。

Fig.9 には Smagorinsky モデルによる GS のエネルギースペクトル図を描いた。Fig.9 では-5/3 乗スペクトル、-7/3/乗スペクトル、-9/3 乗スペクトルのそれぞれが-5/3、-7/3、-9/3 の slope に沿つていることが見て取れる。

また Fig.10 に Non-equilibrium Smagorinsky モデルによる GS のエネルギースペクトル図を描いた。Fig.10 においても同様に-5/3 乗スペクトル、-7/3/乗スペクトル、-9/3 乗スペクトルのそれぞれが-5/3、-7/3、-9/3 の slope に沿つていることが見て取れる。

以上のことから Smagorinsky モデルは GS においては-5/3 乗スペクトル、-7/3 乗スペクトル、-9/3 乗スペクトルを捉えているものの、それに対応する SGS 成分への接続がなされていないものに対して、Non-equilibrium Smagorinsky モデルでは 5/3 乗スペクトル、-7/3 乗スペクトル、-9/3 乗スペクトルを捉えていて、-5/3 乗スペクトル-7/3 乗スペクトルについては、SGS 成分への接続が成されている事になる。-9/3 乗スペクトルについてであるが、LES の計算において-9/3 乗スペクトル成分を式(5.30)に負荷すると、計算が不安定化する傾向がある。式(5.9)において $E(k) \propto k^{-9/3}$ とおくと

$$2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij} \approx 2 \int_0^{\pi/\Delta} k^2 E(K) dk \\ = \frac{32}{3} \frac{\pi^2}{C_\varepsilon^2} \left[\dot{\varepsilon} \varepsilon^{-1} - \frac{2}{3} \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon} \right)^2 \right] \int_0^{\pi/\Delta} k^{-1} dk \quad (7.1)$$

となり、積分が発散する。このため、-9/3 乗スペクトルを GS と SGS に接続するのは不適切と考えられる。ここで Fig.9 と Fig.10 に見られるように非平衡成分として-9/3 乗スペクトルは抽出されるが、無視できない大きさの-9/3 乗の line からの逸脱を伴う。

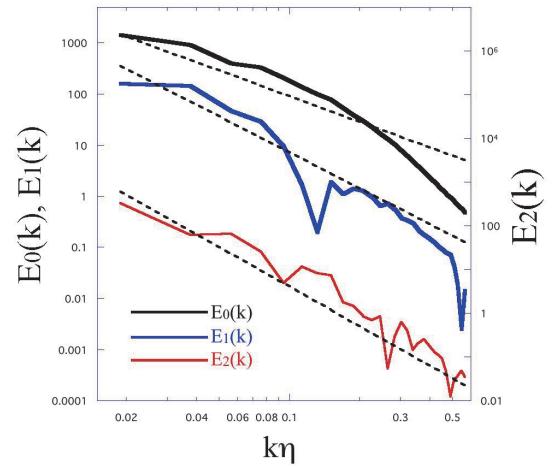


Fig.9 GS energy spectra of Smagorinsky model. Black solid line:-5/3 spectrum、Blue solid line:-7/3 spectrum、Red solid line:-9/3 spectrum、Black broken line: slope lines of each spectrum

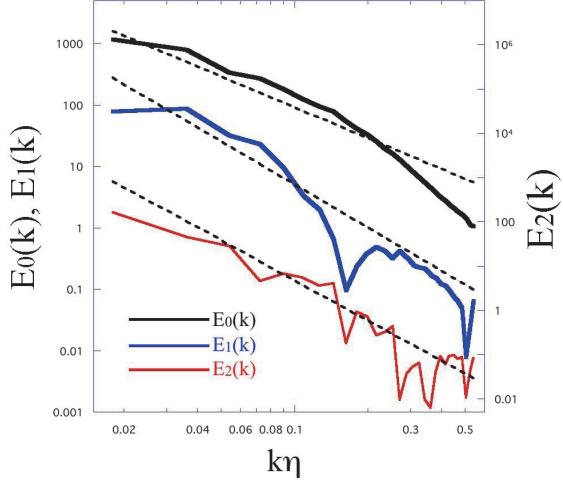


Fig.10 GS energy spectra of Non-equilibrium Smagorinsky model. Black solid line:-5/3 spectrum、Blue solid line:-7/3 spectrum、Red solid line:-9/3 spectrum、Black broken line: slope lines of each spectrum

この原因の一つとしてデータ数が充分でないことがあげられる。これはこの成分が散逸率の極大および極小値の時間帯のみで検出されるためであるが、Phase1 と Phase2 の間の遷移期におけるカスケードの生成に寄与している。しかしながら、摂動展開を用いた理論的導出では-9/3 乗成分には対数補正が負荷されることが示されている。⁽¹¹⁾したがって、厳密な-9/3 乗スペクトルが存在するかは明らかにされておらず、実効的な幕が-9/3 より小さくなり、上述の発散が除去される可能性がある。

8. 結論

本研究では DNS データにおいてその存在が示されていた非平衡エネルギースペクトルを LES の SGS モデルに反映させることを試みた。

- Linear forcing による非圧縮性強制一様等方乱流の DNS データにおいても、過去の検証と同様な非平衡エネルギーが検出される事を示した。
- Smagorinsky モデルを基本解として、1 方程式モデルの摂動展開による近似解を求め、展開の第 2 項と第 3 項に対応するスペクトルが、各々 $-7/3$ 乗と $-9/3$ 乗の勾配を有する事を示した。
- DNS データの解析により、非圧縮性強制一様等方乱流場で $-5/3$ 乗スペクトルからの変動成分は $-7/3$ 乗スペクトルが支配的であることを示し、 $-5/3$ 乗スペクトルに対応する Smagorinsky モデルに $-7/3$ 乗スペクトル成分に対応する項を付加した Non-equilibrium Smagorinsky モデルを提案した。
- 実際の LES 計算においてモデルの検証を行い、Non-equilibrium Smagorinsky モデルが Smagorinsky モデルおよび 1 方程式モデルに比べて、予測精度が高い事を示した。この高精度性が、non-equilibrium Smagorinsky モデルでは、GS のエネルギースペクトルが有する非平衡スペクトルの SGS への接続が行われている事に起因する事を明らかにした。

謝辞

本研究における DNS と LES 計算の実行ならびに、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., The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds number. C.R.Acad.Sci. USSR 30(1941), 301-305.
- (2) Kaneda Y., Ishihara T., Yokokawa M., Itakura K., and Uno A., Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in a periodic box, Phys. Fluids 15(2003), L21-L24.
- (3) Tsuji Y., Intermittence effect on energy spectrum in high-Reynolds number turbulence, Phys. Fluids 16(2004), L43-L46.
- (4) Horiuti K., Ozawa T., Multi-mode stretched spiral vortex and non-equilibrium energy spectrum in homogeneous shear flow turbulence., Phys. Fluids, 23(2011), 035107.
- (5) Smagorinsky J., General circulation experiments with the primitive equation, Monthly Weather Rev. 91(1963), 99-164.
- (6) Lilly D.K., On the application of the eddy viscosity concept in the inertial subrange of turbulence, NCAR Manuscript 123(1966).
- (7) Yoshizawa A., Horiuti K., A Statistically-Derived SGS Kinematic Energy Model for the Large-eddy simulation of Turbulent Flows, J Phys. Soc. Japan 54(1985), 2834-2839.
- (8) Horiuti K., Large Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow by One-equation Modeling, J Phys. Soc. Japan 54(1985), 2855-2865.
- (9) Rosales C., Meneveau C., Linear forcing in numerical simulations of isotropic turbulence: Physical space implementations and convergence properties, Phys. Fluids 17(2005), 095106.
- (10) Domaradzki J.A., Analysis of energy transfer in direct numerical simulations of isotropic turbulence, Phys. Fluids 31(1988), 2747- 2749.
- (11) Horiuti K., Saito K., Energy flux in non-equilibrium energy spectra in steady turbulence., 62nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Bulletin of the American Physical Society 54 (2009), No.18, p.143.

格子数値計算を用いた SU(2) ゲージ理論における共形相の研究

大木 洋

名古屋大学 素粒子宇宙起源研究機構

1. はじめに

素粒子物理の標準模型と呼ばれるものは、強い相互作用、電弱相互作用を含む理論であり、その力学は素粒子現象論を理解する上で重要であるが、解析的に理解する事は極めて難しい。特に強い相互作用を記述する量子色力学(QCD)は、高エネルギー領域で相互作用が弱く、低エネルギーになるにつれて相互作用が強くなる漸近自由という性質を持つため、量子電磁力学で有効であった弱結合定数による摂動論を用いた解析が有効ではない。一方、ウィルソンの提唱した格子ゲージ理論は、時空を格子化することにより、場の理論に内在した紫外エネルギーの発散が存在しないため、場の理論の(格子正則化による)非摂動論的な定式化を与える。実際、その第一原理計算による数値計算は、カイラル対称性の自発的破れの機構からハドロン遷移行列の計算まで多岐にわたり、QCD の理解に多いに役立っている。

近年、格子ゲージ理論の計算を用いた研究は、様々な計算手法の開発と、それを行うコンピュータの性能の飛躍的な進展に伴い、既存の模型に留まらず、QCD を超えた様々な模型の研究に応用出来るようになってきた。これは、単なる非摂動ゲージダイナミクスの理解というだけではなく、標準模型を超えた物理の模型に応用出来る可能性を持つ。特に LHC 実験[1, 2]によりヒッグス粒子と思われる粒子が見つかった現在、標準模型を超えた物理の探索は、素粒子物理学における極めて重要な研究課題であり、大規模数値計算を用いた強結合ゲージ理論の解析が具体的に進められている。本研究では、QCD とは異なるゲージ理論の例として、低エネルギー領域においてゲージ結合定数が非自明な赤外固定点を持ち、スケール不変性(共形不変性)を保つ共形ゲージ理論の可能性に着目し、そのような模型の候補を実際に

数値計算において調べる事が目的である。素粒子現象論的観点からは、電弱対称性の破れの起源がゲージダイナミクスによって引き起こされる、テクニカラー模型[3, 4]の有力な候補としても考えられる。本研究では SU(2)ゲージ群において、基本表現フェルミオンの数が 8 となる模型をその具体的な候補と捉え、その模型に対し格子ゲージ理論の数値計算法を実行し、非摂動ゲージダイナミクスの研究を行った。必要な計算資源として大阪大学大規模計算機 SX システムを用いており、それらの研究の成果についての紹介をしたい。

2. 共形ゲージ理論の候補と赤外固定点

QCD のような漸近自由性を持つゲージ理論において、その基本表現に属するフェルミオンの数(クオークの場合のフレーバー数)を増やしていくと、フェルミオン反フェルミオン対がもたらすスクリーニングの効果により、相互作用が弱められると考えられる。非常に大きなフレーバー数を考えると、最終的には漸近自由性が失われる所以あるが、それらはゲージ結合定数 g のエネルギー μ に対する繰り込み群方程式からある程度理解できる。摂動計算では、

$$\mu \partial g(\mu)^2 / \partial \mu = \beta(g) = -b_1 g^4 - b_2 g^6 + L \quad \text{式(1)}$$

で与えられ、ゲージ結合定数がエネルギーに従ってどのように振る舞うかを決定する。そこに現れる $g(\mu)$ はエネルギー μ における(走る)有効結合定数と呼ばれ、 b_i はそれぞれ摂動計算の各次数での値であり、例えば SU(2)ゲージ理論でフレーバー数が N_f の場合を考えると、

$$b_1 = (11 - N_f) / 12\pi^2,$$

$$b_2 = (272 - 49N_f) / 768\pi^2$$

と与えられる。先ず、ここで結合定数 g が小さい領

域、即ち摂動展開が充分有効であると期待出来る領域を調べる事を考える。その場合、摂動の一次の寄与を考えるだけで良い。上記の b_1 の表式から、 $N_f < 11$ では b_1 が正、即ち $\beta(g)$ が負となることが分かり、これはスケール μ を大きくすればするほど g が小さくなる、つまり漸近自由性を示す事を意味する。また $N_f > 11$ では、 $\beta(g)$ が正となるため、漸近自由性が失われる。我々の興味があるのは、漸近自由性が存在する場合であるが、低エネルギー領域を考えると、次第に g が大きくなるため、より高次の効果を考える必要がある。そこで 2 loop 計算の結果を見てみる。先ず $N_f < 6$ の場合、 $b_2 > 0$ となるため、依然として二次の摂動を考えても $\beta(g) < 0$ となるため、低エネルギー領域で結合定数が大きくなる。このような例は QCD で既に知られており、前章で述べた強結合領域における真空のクォーク対凝縮によるカイラル対称性の自発的破れやクォークの閉じ込め等が起こると考えられている。一方 N_f が 6 以上の場合 $b_2 < 0$ となる。これは、低エネルギーに向かって g が大きくなるが、次第に高次効果のため成長が抑えられ、次第にある値に収束していく事が期待される。その収束する値 g^* は、式(1)の定義より $\beta(g^*) = 0$ の解で与えられ、理論に非自明な赤外固定点が存在する事を示唆している[5, 6]。例えば、8 フレーバー SU(2) ゲージ理論では、 $g^* \sim 12$ である。固定点付近では量子効果によって破れていたスケール不変性が回復するため、そのような固定点近傍の場の理論は共形不变な理論(共形相)と呼ばれる。以上のフレーバー数によるゲージ理論の相構造の振る舞いをまとめると図 1 のように表す事が出来る。図 1 のように、固定点が存在する領域をコンフォーマルウィンドウと呼ばれる。それ以下ではカイラル対称性が破れていると考えられるため、カイラル非対称相と呼ぶ事にする。両者の境界付近では、結合定数がゆっくりと変化するため、walking と呼ばれる近似的スケール不変性が成り立つような領域が存在と考えられている。実際 Schwinger-Dyson 方程式等による解析では、摂動的な $\beta(g)$ の解析では固定点が存在する場合でも、強結合領域に置いて非摂動効果により動的なフェルミオン質量生成が生じる事があり、低エネルギー

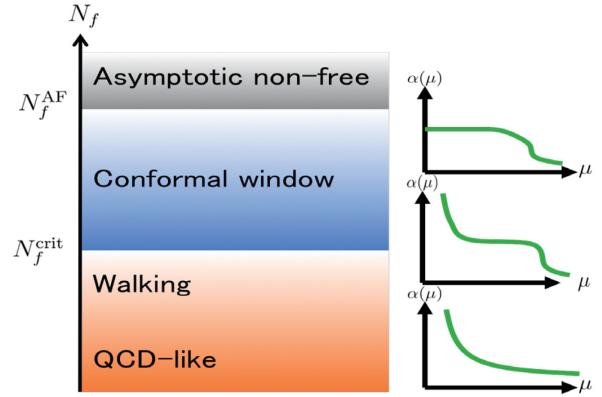


図 1:
フレーバー数に依存するゲージ結合定数の繰り込み群の振る舞いの様子。

一でカイラル非対称相であるような場合が存在する可能性が示唆されている。これら QCD とは異なるゲージ理論は、前章の動機で述べた電弱対称性の破れの起源を未知のゲージダイナミクスによって説明する模型、例えば(ウォーキング)テクニカラー模型[7]の構築に用いられており、素粒子現象論的観点からも大きな関心を持たれている。以上のように、固定点近傍でのゲージ理論の構造は非摂動効果が重要であるため、格子ゲージ理論による非摂動定式化に基づく数値計算が登場する。基本的な問いは、興味のあるゲージ理論において、その理論の相構造(共形相であるかカイラル非対称相であるか)を摂動論の範囲を超えて理解する事であり、これまで両者の理論的性質の違いを利用して幾つかの方法を用いた試みが成されてきた。次章では、その中でも最も直接的な方法である有限体積スケーリング法を用いたゲージ結合定数の繰り込み群変換を用いた方法を説明する。

3. 格子ゲージ理論における有限体積スケーリング法

ここでは、格子 QCD 計算において用いられているゲージ結合定数の繰り込み群変換を行う有限体積スケーリング法について簡単に紹介する[8]。始めに 4 次元の有限体積(L^4)におけるゲージ理論を考え、ある繰り込みスキームで定義されたゲージ結合 $\bar{g}(\mu)$ を考える。ここでスケール μ は有限体積と $\mu = 1/L$ の関係で対応し、同じ事を s 倍された体積(sL) 4

で行えばスケールが $1/s$ 倍された繰り込み群変換に対応する事が分かる。実際の格子理論では、格子間隔 a による理論のカットオフスケール($1/a$)が存在するため、

$$\Sigma(u, s, a/L) = \bar{g}^2(a/sL) \Big|_{g^2(L/a)=u},$$

のように、有限格子間隔上で繰り込みスケールを定義する必要がある。ここで $\Sigma(u, s, a/L)$ は格子間隔 a におけるゲージ結合定数 $g^2 = u$ からスケールを $1/s$ 倍変化させた時の格子化誤差も含めた $\bar{g}(\mu)$ の振る舞いを与える、その連続極限 $\sigma(u, s) = \lim_{a \rightarrow 0} \Sigma(u, s, a/L)$ が、スケールが $1/s$ 変化した時の連続理論での繰り込み群変換に対応する(上記の関数を有限スケーリング関数と呼ぶ)。再度小さな格子体積(L/a)において、今度は $g^2(a/L) = \sigma(u, s) \equiv u'$ となるスケールで、格子間隔を保ったまま体積を s 倍した計算を行い、 $\sigma(u', s) = \lim_{a \rightarrow 0} \Sigma(u', s, a/L)$ を求めれば、これは初めのスケール($1/L$)から考えると $1/s^2$ 変化させた繰り込み群変換に相当する事が分かる。この操作を示したのが図 2 であり、スケールを調節する事によって、異なる二つの格子体積で繰り返しスケーリング関数を計算する事により、格子体積を倍々に大きくする事なく、繰り込み群変換を何度も行う事が出来る。具体的に格子理論で計算可能な $\bar{g}(\mu)$ は、これまでに幾つか考えられており、我々は[9, 10]で提唱された twist された境界条件[11]における Polyakov loop 相関関数から非摂動的に繰り込まれたゲージ結合定数を定義する方法を用いた。その他 QCD で良く用いられているものに Schroedinger functional スキームと呼ばれるものがあり[12]、一般には有限体積格子正則化のもとで二次発散や赤外発散等を生じない、性質の良いものであれば良く、繰り込みスキームの違いは、統計精度や格子化誤差の違いを生じるため、それぞれ必要に応じて適当な繰り込みスキームを用いれば良い。

4. 格子計算と結果

以上の解析を踏まえ、実際の格子ゲージ理論の数値計算を遂行する。本研究のターゲットは SU(2) ゲージ群で 8 フレーバーの基本表現フェルミオンが結

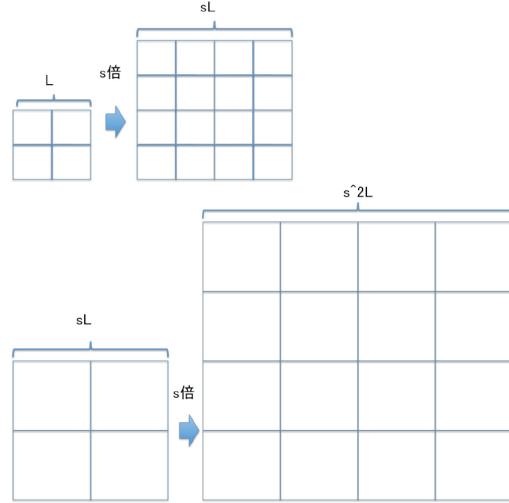


図 2:

有限体積スケーリング法を用いた繰り込み変換の操作。(上)格子間隔を一定に保った状態で、スケール $1/L$ を $s (=2)$ 倍変化($1/sL$)させる。(下)再び一つ目の格子体積において、スケールが $1/sL$ に対応する格子間隔において、格子間隔を保ったまま、再度スケールを s 倍変化させる。

合した理論であり、ゲージ場の格子化はプラケット作用を用い、フェルミオン部分はスタッガードフェルミオン作用を用いた。スタッガードフェルミオンは、連続極限で縮退した 4 フレーバーに対応するものであるが、twist された境界条件で基本表現の場を導入する場合、余分にカラーの自由度に応じた余分のフレーバーを導入する必要があり[13]、その自由度も含めて 8 フレーバー理論に帰着する。我々の目標は、この理論における非摂動的に繰り込まれたゲージ結合定数が非自明な赤外固定点を持つかを調べる事であり、そのため弱結合から強結合領域の幅広い領域における繰り込み群の変化を調べるために、格子体積は、 $L/a=6, 8, 10, 12, 14, 16, 18$ の 6 点をとり、それぞれ $\beta(=4/g^2) = 2 \sim 25$ の範囲において、前述の Polyakov loop 相関関数から定義されるゲージ結合定数を計算した。統計量はそれぞれのパラメータにおいて約 100000 である。スケーリングパラメータ $s=1.5$ とする事で、 $6 \rightarrow 9, 8 \rightarrow 12, 10 \rightarrow 15, 12 \rightarrow 18$ の異なる四つの格子間隔での $\Sigma(u, s, a/L)$ を用いる事が出来る。図 3 の上部は各格子間隔における $\Sigma(u, s, a/L)$ をそれぞれ異なる u において求めたものである。連続極限は各 $\Sigma(u, s, a/L)$ を $(a/L)^2$ の関数で外挿する事で求められ、 $(a/L)^2$ の一次と二次の

外挿のフィットの結果も同時に示した。これより、各 u から $s=1.5$ スケールを変化させた結果 $\sigma(u,s)$ が得られ、これをつなぎ合わせる事により、非摂動論的に計算された有効結合定数の繰り込み群の変化が読み取れる。それを示したのが、図の下部である。繰り込み群の初期値を $\bar{g}(\mu = \Lambda) = 0.75$ とした。この図から明らかなように、Polyakov loop 相関関数を用いて非摂動的に定義されたゲージ結合定数が、高いエネルギーから低エネルギーに渡ってどのように振る舞うかを知る事が出来る。また、低エネルギー領域に向かってゲージ結合定数がある値に収束していく事が分かり、現在の所、統計誤差は大きいが、8 フレーバー SU(2) ゲージ理論において、非自明な赤外固定点の存在している事を強く示唆していると考える事が出来る。当然の事ながら、このようなゲージ結合定数の振る舞いは、通常の QCD や純非可換ゲージ理論のようなカイラル非対称相と考えられる理論におけるそれとは明らかに異なっている。また、前述の 2loop の摂動計算の結果から示唆される振る舞いとも定量的に異なっている事が分かる。こうした固定点の値や繰り込み群の振る舞いに関しては、繰り込みの処方により任意性があるため、今後は異なるスキームを用いた検証や、共形相に特徴的な普遍類の測定を行う等、共形ゲージ理論の持つ性質の解明につなげる研究を行う予定である。

5. まとめ

本稿では、ゲージ理論において非自明な赤外固定点を持つ理論の特徴とその相構造の一般的な性質について議論し、その具体的な理論の候補である 8 フレーバー SU(2) ゲージ理論に対し、格子ゲージ理論の数値計算法を用いて調べられる非摂動論的性質に関する研究の紹介を行った。特に大阪大学大規模計算機 SX システムを使用して得られるゲージ結合定数の繰り込み群変換の計算結果について紹介した。我々の数値計算の結果から、この理論に非自明な赤外固定点の存在する事が示唆され、今まであまり調べられていないかった SU(2) ゲージ理論の相構造の解明に進展をもたらす事が出来ると考えている。今後は、

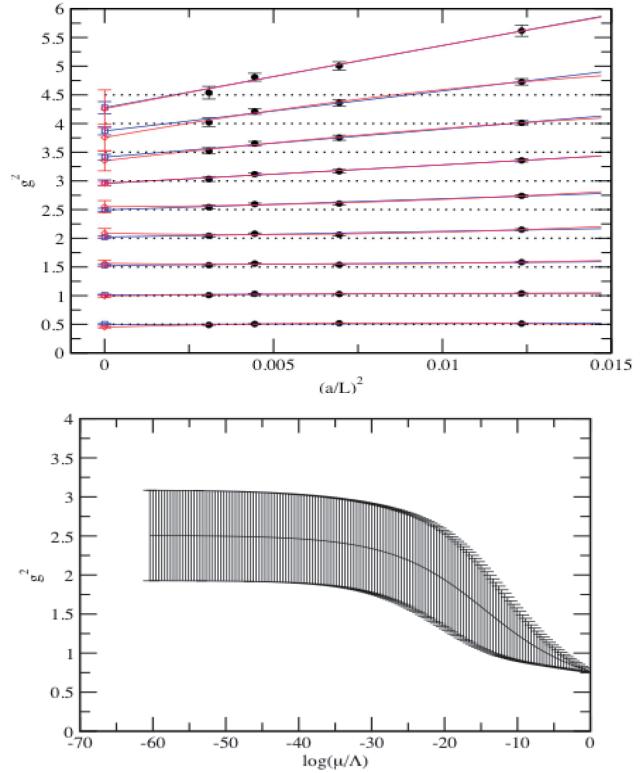


図 3:

(上) $s=1.5$ のステップスケーリング関数の連続極限の様子。青と赤線はそれぞれ $(a/L)^2$ の一次、二次関数の外挿のフィットの結果を示す。(下) 繰り込まれたゲージ結合定数の繰り込み群変換の様子。一次関数の外挿の結果を示す。誤差は統計誤差。低エネルギーに向かって、収束していく様子が分かる。

共形相における場の理論の性質(普遍類)を調べ、またそこから得られた結果をテクニカラー模型等の素粒子現象論へどのように応用するか等、より興味深い研究へと進展させていく予定である。

本研究のような格子ゲージ理論の研究では、全国共同利用研究施設である大阪大学核物理研究センターの計算機システムの存在が非常に重要である。また萌芽的研究、基礎的研究のためには、比較的柔軟且つ迅速に行える本計算機システムの存在がより重要になるとを考えている。また本計算機システムは、ユーザーのための利用環境が優れており、大規模なディスク容量の確保や使いやすいジョブシステム、様々な情報の提供等が成されているので、今後も引き続き運用を行って頂ける事を希望する。最後に、本計算機システムの運用、管理等に関わられている方々に感謝する。

参考文献

- (1) ATLAS (ATLAS Collaboration), Phys.Lett. B716, 1 (2012), 1207.7214;
- (2) CMS (CMS Collaboration), Phys.Lett. B716, 30 (2012), 1207.7235.
- (3) S.Weinberg, Phys. Rev. D**13**, 974 (1976).
- (4) L. Susskind, Phys. Rev. D**20**, 2619 (1979).
- (5) W.E.Caswell, Phys. Rev. Lett.**33**, 244(1974).
- (6) T.BanksandA.Zaks, Nucl. Phys. B**196**, 189(1982).
- (7) K.Yamawaki, M.Bando and K.i.Matumoto, Phys. Rev. Lett. **56**, 1335(1986).
- (8) M. Luscher, P. Weisz and U. Wolff, Nucl. Phys. B **359**, 221 (1991).
- (9) G. M. de Divitiis, R. Frezzotti, M. Guagnelli and R. Petronzio, Nucl. Phys. B **422**, 382 (1994);
- (10)G. M. de Divitiis, R. Frezzotti, M. Guagnelli and R. Petronzio, Nucl. Phys. B **433**, 390 (1995).
- (11)G.'tHooft,Nucl.Phys.B**153**,141(1979).
- (12)M. Luscher, R. Narayanan, P. Weisz and U. Wolff, Nucl. Phys. B **384**, 168 (1992)
- (13)G. Parisi, in Cargese Summer Institute, 1983, report numbers LNF-84-4-P, C83-09-01.

生体分子相互作用の電子論的・博物学的研究

山崎 秀樹

大阪大学 蛋白質研究所

1.はじめに

生体分子の分子認識機構の解明は生命現象を理解するために欠かせない。生体高分子の3次元立体構造はX線結晶解析やNMR構造解析により明らかにされ、World-wide Protein data bank に蓄積され誰でも無償で利用することができる [1]。これら大量の生体電子情報データの博物学がバイオインフォマティックス (BI) である。BI の研究から生体高分子の分子認識には、構造ひずみや静電ストレスや局所的な極性の相補性などが重要であることが分かった [2]。分子認識機構の予測は一般には簡単ではない。例えば新規薬剤開発で重要なタンパク質 - 小分子のドッキング計算において、実験における結合の強さを理論的に再現することは完全には難しい [3]。この際重要なのは結合の強さを表現する関数（スコア関数）である。スコア関数はあるデータセットについて実験値を再現するように作られたもの、物理化学的特徴をもとに定式化されたもの、既存データベースの統計情報に基づくものなど様々なものが提案されており一定の成果を挙げている。しかし作成するスコア関数がフィッティングするデータセットのサイズや多様性、実験値の精度などに依存してしまうことが考えられる。量子化学計算は分子間相互作用エネルギーの実験値を高精度に再現できることに加え、計算の際に初期値として実験値を必要としない。本研究では量子化学計算を用いて生体高分子のモデルにおける分子認識機構やスコア関数の改良について検討したのでその結果を報告する。

2. 分子内・分子間相互作用の電子論理的解析

2-1. 量子化学計算による相互作用解析

高精度な量子化学計算による相互作用エネルギー (E_{cp}) は実験値を定量的に再現することができる。 E_{cp} は複合体の全エネルギー ($E_{complex}$) と各単量体の全エネルギー ($E_{monomer}$) の総和との差として定義される (①)。

$$E_{cp} = E_{complex} - (E_{monomer1} + E_{monomer2}) \quad ①$$

この方法では基底関数重なり誤差を回避するための Counterpoise (CP) 法 [4] などの補正や大きな基底関数を用いる必要がある。また生体系のような多数の溶質、溶媒の複雑な相互作用を解析するには多くの単量体のユニットを定義する必要があり、その数の増加に伴って計算コストも増大する。この問題に対して我々は E_{cp} と QTAIM 解析 [5] (後述 2-2) の特徴量がよく相関することから QTAIM 解析による相互作用エネルギーの利用を提案した [6]。

2-2. QTAIM法による相互作用解析 (E_{ed})

Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM) 解析は電子密度から原子や化学結合が定義でき、化学結合は Bond critical point (BCP) や Ring critical point (RCP) と呼ばれる原子間の電子密度の微分の極値などで表現される。これまでに様々な分子において BCP の特徴量が共有結合や水素結合などの化学結合の強さとよく相関することが報告されている。この方法の利点は、 E_{cp} の場合での凝縮系で必要となる多数の繰り返し計算や CP 補正がいらないことで、QTAIM 解析では一度の量子化学計算で相互作用の強さを算出することができる。また分子間相互作用だけでなく分子内相互作用の強さも見積もることができ

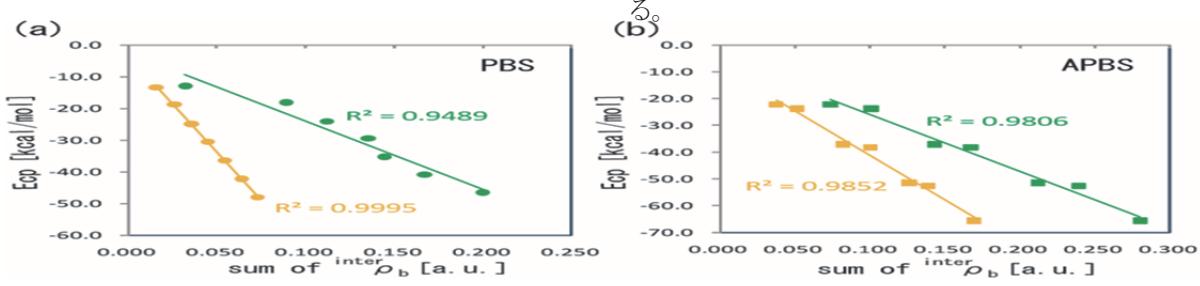


図1 PBS(a)、APBS(b)の E_{cp} と QTAIM 特徴量(BCP(緑)、RCP(黄))の相関

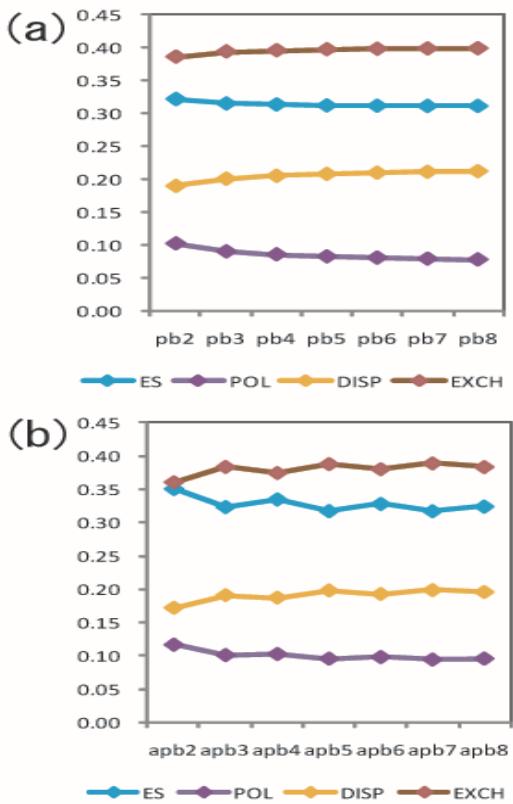


図2 BPS(a)、APBS(b)の分子間相互作用の物理的起源

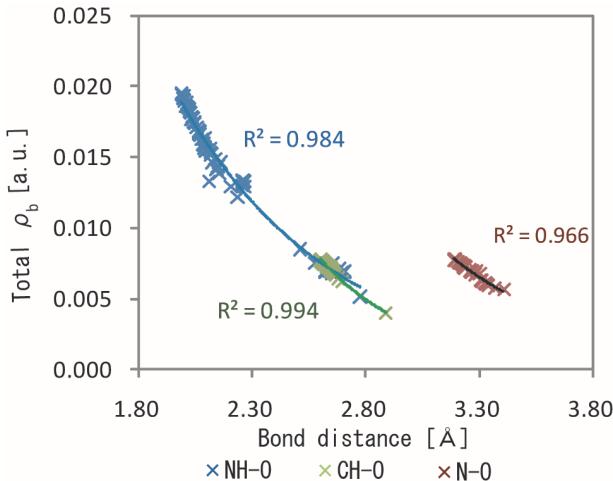


図3

AH の NH-O 間、CH-O 間、N-O 間結合距離と、BCP 電子密度の総和の相関

2-3. LMO-EDA法による相互作用解析

量子化学計算による相互作用の見積もりはEnergy decomposition analyses (EDA)で行うことができる。Localized Molecular Orbital を用いる EDA をLMO-EDA [7] と表記する。この方法では全相互作用エネルギー (Eeda) は静電 (ES)、交換と反発 (EXCH)、分極 (POL)、分散 (DISP) 相互作用エネルギーの和として定義され、全相互作用の物理的起源

が考察できる。加えて各エネルギー項を用いることで力場の作成や改良がスムーズに行える利点がある。また LMO-EDA 法では共有結合で結合している部分構造間の相互作用エネルギーも計算できる。例えば α ヘリックス内部の水素結合相互作用の解析(3-1)では、共有結合があるため Ecp では見積もれないが、LMO-EDA 法では見積もることができタンパク質内部構造の安定性の議論やタンパク質内部の周辺環境に依存した力場作成に有効であると考えられる。

3. 結果

本研究では α ヘリックス、 β シートや光合成反応中心スペシャルペア (SP) の分子内・分子間相互作用を量子化学計算により詳細に解析を行った。

3-1. モデルペプチドの相互作用

水素結合相互作用 (HBI) は分子認識などの多くの生体反応過程で重要である。タンパク質の基本構造である α ヘリックス (AH) やパラレル、アンチパラレル β シート(PBS, APBS) の分子内・分子間相互作用に関する Ecp, Eed, Eeda の結果について報告する。AH はペプチド結合を 2-12 個、PBS、APBS では 2-16 個まで増やしたモデルを作成し DFT-M06-2X/6-31+G(d) レベルで構造最適化を行った。PBS, APBS では、Ecp と分子間 BCP の電子密度の総和 ($\sum^{\text{inter}} \rho_b$) は R^2 がそれぞれ 0.95, 0.98 (図1)、AH では AH と AH を伸長したモデルの全エネルギーの差と $\sum^{\text{intra}} \rho_b$ の R^2 が 0.99 となりどれもよく相関した。また RCP の電子密度の総和 ($\sum^{\text{inter}} \rho_r$) を用いることでさらによい相関も得た (図1)。面白いことに PBS はペプチド結合が増えると Ecp は直線的に変化するのに対して APBS では階段状に変化した。この変化を LMO-EDA 解析により調べたのが図2である。ペプチド結合が増えると PBS では静電相互作用などの各物理的成分の割合はほぼ一定であるのに対して、APBS では各成分の割合がペプチド結合数の偶奇で異なりジグザグになることが分かった。そしてその起源は主に静電相互作用と交換相互作用によることが見てとれた。同様に AH についての LMO-EDA 解析により、分子内水素結合相互作用はペプチド結合部分のみの局所的な構造だけでなく、その周囲のペプチド結合にも依存して結合の強さが

変わることが示唆された。AH の NH-O、CH-O、N-O 結合距離と BCP の電子密度の相関をそれぞれ示したのが図 3 である。一部当てはまりの悪い点があるものの、どのタイプの結合でも構造と QTAIM 特徴量の相関は高かった。このことから QTAIM 解析は分子内・分子間相互作用の強さの考察に使用でき、力場開発への応用も考えられる。

3-2. 光合成反応中心 SP の相互作用

光合成反応中心 (RC) と呼ばれる膜タンパク質中で起こる電荷分離過程は生命にとって必須の過程である。さまざまな実験解析の結果からこの過程の分子メカニズムが明らかになりつつある。X 線結晶解析から RC の 3 次元構造について、膜貫通部位は 5 回膜貫通ヘリックスをもつ 2 つのサブユニット (L, M) からなり、その中に SP などの色素が擬 2 回対称に配置されていることが明らかになっている[8]。この色素群の対称的な配置にもかかわらず、電荷分離は SP を電子供与体として、L 側の色素群のみで起こる。この非対称で高効率な電子移動のメカニズムについては従来から多くの研究が成され、非対称性の起源に関してタンパク質が作る「場」について解析が行われてきた。その中で我々は、*Rhodobacter sphaeroides* (Rbs.) RC の SP^+ のスピン密度の非対称性の起源についてタンパク質が制御しているメチルエステル基とフィチル基の配向の LM 差であること、蛋白質場の極性によりその効果が強調されていることを報告した [9]。また、BI の手法を用いることでこの特徴が一部の例外を除き他の生物種の RC でも共通していることを見出した [9]。このように RC による色素の分子認識は精密に制御されていると考えられる。しかしその原子レベルでの認識機構は完全には理解されていない。そこで本研究では Rbs. 由来 SP に加え、光合成細菌の *Blastchloris viridis* および *Thermochromatium tepidum*、そして Photosystem II (PSII), PSI の SP について分子間相互作用の博物学的研究を行った。PSII では X 線構造の解像度が 2.9、1.9 Å のもの、量子化学計算により構造最適化したモデル (opt) [10] について計算を行った。

図 4(a)、(b) に Rbs.RC 由来 SP とそれを構成するバクテリオクロロフィル (BChla) の構造をそれぞれ

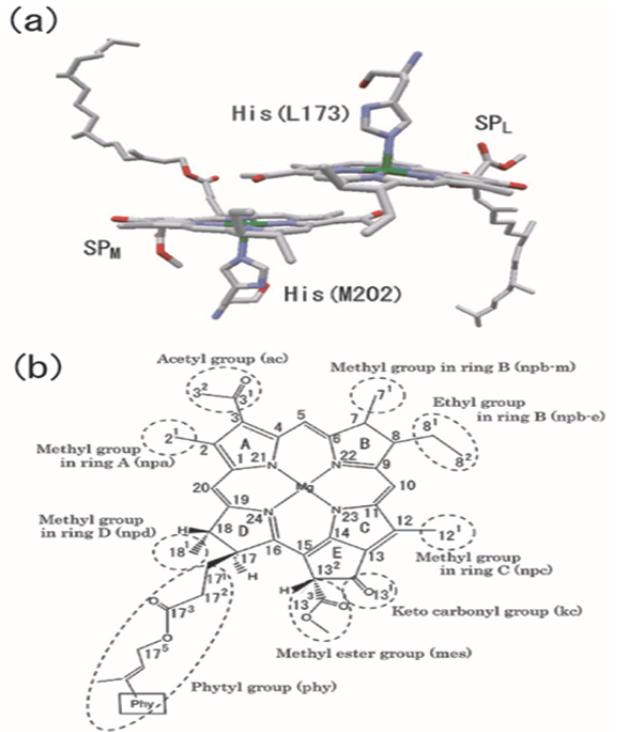


図 4 Rbs.RC 由来の SP の X 線構造(a)と BChla の化学構造(b)

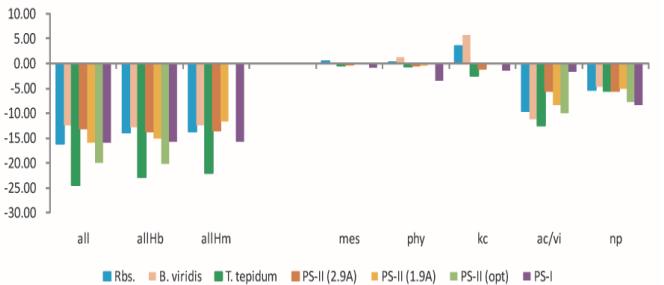


図 5

SP 相互作用の解析 (SPall (側鎖をすべて含むモデル)、SPallHm, SPallH β (SPall に蛋白質主鎖を含む・含まない His を加えたモデル)、メチルエステル(SPmes)、フィチル(SPphy)、ケト(SPkc)、アセチル/ビニル(SPac/SPvi)、非極性基(SPnp)のみを含むモデル)

示した。BChla は中心にマグネシウムを持ちヒスチジン(His) が配位している (図 1(a))。また BChla は様々な側鎖を持つ。His と側鎖の分子間相互作用への影響を図 5 に示す。この結果から SP の相互作用に重要な共通の特徴として、環 A の側鎖 (アセチル基やビニル基) や非極性基の効果が見てとれる。His の影響について詳しく調べるために、Rbs. RC の多数の X 線構造 (複数グループから発表された異なる実験条件による) の中から解像度のよいものなど 22 構造を検討した。その結果、His によって Ecp は -1.0~3.2 kcal/mol 変化し、構造に依存することが分かった。次に Ecp と QTAIM 解析の特徴量の相関を調

べたのが図6である [6]。 R^2 が 0.97 (MP2) , 0.99 (DFT-M06-2X)とよく相関していることがわかる。このことから Ecp は QTAIM 解析の特徴量で代替可能であると考えられる。

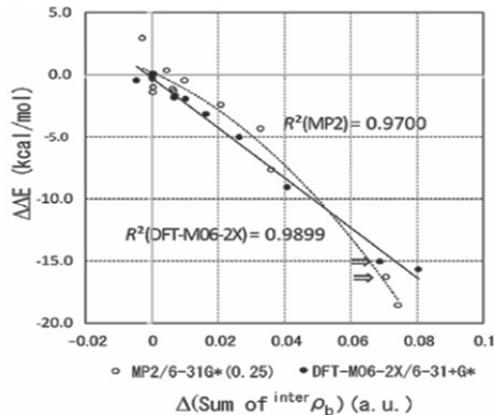


図6 相互作用エネルギーとQTAIM特徴量(ρ_b)の相関

4.まとめ

生体分子の分子認識機構の解明は、生命現象の理解だけでなく薬剤開発などの産業応用でも重要である。本研究では量子化学計算により分子間相互作用の強さを表現する方法を提案し精査した。従来よく用いられる Ecp が QTAIM 解析による Eed とよく相關することが SP と AH、PBS、APBS モデルで示された。従って計算コストを抑えて精度よく結合強さを予測することが可能と考えられる。PBS と APBS の結合強さはペプチド結合が増えると、それぞれ直線的、階段状に変化し LMO-EDA 解析によりその起源が主に静電相互作用や交換相互作用によることが分かった。また様々なタイプの結合長と QTAIM 特徴量はよく相關することが分かった。様々な生物種由来 SP の相互作用の共通の特徴として、環 A の側鎖とその他非極性基の効果が示唆された。

5.謝辞

本研究は大阪大学蛋白質研究所の中村春木教授との共同研究により進められました。本稿で紹介した計算は、大阪大学サイバーメディアセンターの計算資源 (SX-8R, PCC) を主に利用して行ったものです。最後に、本寄稿の執筆を依頼してくださいました大阪大学サイバーメディアセンター広報委員会に感謝致します。

6.参考文献

- (1) H. Berman, K. Henrick, H. Nakamura, J.L. Markley, Nucl. Acids Res., 35, D301-303, (2007)
- (2) K. Kinoshita, H. Nakamura Curr. Opin. Struct. Biol., 13, 396-400, (2003)
- (3) G.L. Warrant et al., J. Med. Chem., 49, 5912-5931, (2004)
- (4) S.F. Boys, F. Bernardi, Mol. Phys., 19, 553, (1970)
- (5) R.F.W. Bader, Atoms in Molecules: A Quantum Theory, Oxford University Press, Oxford, UK, 1990
- (6) H. Yamasaki, H. Nakamura, Chem. Phys. Lett. 536, 129-135, (2012)
- (7) P. Su, H. Li, J. Chem. Phys., 131, 014102, (2009)
- (8) J. Deisenhofer, O. Epp, K. Miki, R. Huber, H. Michel, Nature, 318, 618-624, (1985)
- (9) H. Yamasaki, Y. Takano, H. Nakamura, J. Phys. Chem. B, 112, 13923-13933, (2008)
- (10) S.O.N. Lii Phys Chem Chem Phys, 13, 16022-16027, (2011)

開いたキャビティを過ぎる流れの直接数値シミュレーション

吉田 尚史

信州大学 工学部 環境機能工学科

1. はじめに

開いたキャビティを過ぎる流れ場は、幾何学形状がきわめて単純な形であるにも関わらず、はく離せん断層が自励振動を起こす複雑な流れ場である。この流れ場は、高速列車の車両連結部や航空機が離着陸する際に車輪格納室を開いた状態で飛行する場合など実際の流れ場においても多く存在する。さらに、キャビティ流れの自励振動はそれによる圧力変動がキャビティ音と呼ばれる流力音を発生させる。このようなことから開いたキャビティ流れは流体力学の基本的な問題として、また振動を抑制する流れ制御の典型的な対象として多くの研究が行われてきた。

開いたキャビティ流れの自励振動の特性はこれまで多くの実験研究で明らかとなっている。特に、キャビティのアスペクト比の変化によって、自励振動のモードが分類されることはよく知られている。Knisely and Rockwell[1]やGharib and Roshko[2]によれば、キャビティ長さ L とキャビティ深さ D のアスペクト比 L/D の変化に対して、自励振動のピーク周波数であるストローハル数は図1のように変化し、shear layer mode と wake mode に分類される。さらにshear layer mode はストローハル数の不連続な変化によってmode II と mode III に分けられる。これらの振動モード変化は、流れ場の時空間的な構造の変化による結果であるが、流れの三次元構造を実験

だけで明らかにすることは難しい。

本研究は、Navier-Stokes方程式の直接数値シミュレーションにより、キャビティ流れの三次元空間構造や渦のダイナミックスを解き明かすこととする。そのために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システムを利用して大規模かつ長時間のシミュレーションを行っている。本稿では、数値計算法の概要とシミュレーションの結果について報告する。

2. 数値計算法

支配方程式は三次元非定常非圧縮 Navier-Stokes 方程式と連続の式である。離散化は有限差分法を用い、差分格子は不等間隔スタッガード格子である。空間の離散化には Morinishi ら[3]の二次精度完全保存形スキームを用いる。時間の離散化には Armfield and Street[4]の P2 pressure correction method を用いる。計算領域を図 2 に示す。流入条件は層流ブラジウス境界層速度分布、境界層上方の主流境界と側方はすべり壁条件、流出境界は Sommerfeld 放射条件を用い対流速度は主流速度 U に等しいとする。 U と D に基づくレイノルズ数は 6,000 である。

離散化した式は速度成分と圧力時間変化量についての大規模連立一次方程式となる。係数行列は非対称規則的スペース行列で、反復解法である

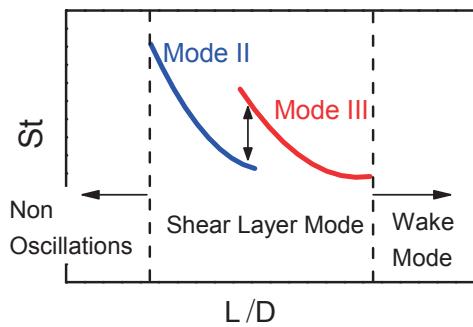


図 1：振動モード変化の概略図

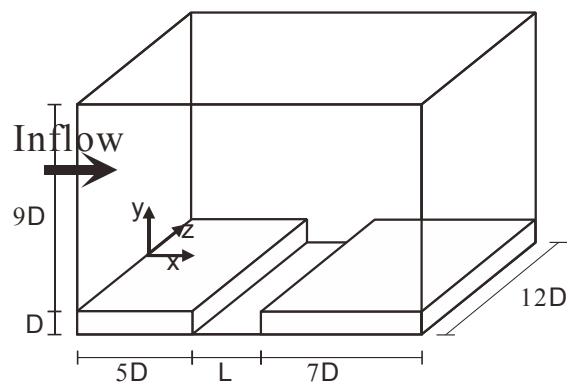


図 2：計算領域

Bi-CGSTAB 法で解く。特に圧力の時間変化量についてのポアソン方程式から導出される連立一次方程式は 1 ステップあたりの計算量の約 95%になるため、Bi-CGSTAB 法の並列化が必須である。本研究では、大阪大学サイバーメディアセンターと日本電気株式会社の協力によって並列化したプログラムを用いた。並列化の方法は行列の前処理に局所 ILU(0)分解 [5]を用いた Bi-CGSTAB 法で、係数行列をブロックに分けてブロック外の係数を 0 としてブロック間の依存関係を無視し、FORTRAN90/SX の並列化指示行を入れて自動並列化コンパイルを行う方法である。ただし、自動並列化機能のため並列可能な CPU 数は 1 ノード内に限られる。このプログラムの開発についてはサイバーメディアセンターの計算機利用ニュース[6]を参照されたい。

3. 計算結果

3.1 計算パラメータと計算時間

キャビティアスペクト比 L/D を 2.0, 2.5, 3.0, 3.5, 4.0, 4.5 とした 6 ケースの計算を行っている。計算機は SX-8R を用い、1 ノード 8CPU で並列計算している。表 1 に主な 3 ケースの格子点数、メモリサイズ、1 ステップ当たりの経過時間(Real time)を示す。

本研究の流れ場は乱流であり、かつ大規模な組織的構造であるコヒーレントストラクチャーが発生する流れ場である。そのため、乱流の統計的性質と大規模構造の周期平均的性質、そして瞬時の非定常な渦構造の性質、といった異なる時間スケールの情報を取り出さなくてはならない。したがって自励振動流が十分に発達した状態において長時間の計算を必要とする。図 3 に $L/D = 2.0, 3.5, 4.0$ におけるキャビティ下流角近傍の y 方向速度成分 v の時間変化を示す。

表 1 : 格子点数・メモリー・計算時間

L/D	Grid points	Memory size (GB)	Real time /step (sec)
2.0	$447 \times 202 \times 240$ (21,670,560)	10.4	34.293
3.5	$617 \times 202 \times 240$ (29,912,160)	14.0	56.877
4.5	$730 \times 202 \times 240$ (35,390,400)	16.3	62.253

す。計算の時刻は流れ場の代表時間 D/U で無次元化した無次元時間である。 $L/D = 2.0$ の速度変動は比較的周期性があり FFT によって得られるパワースペクトルは明確なピーク周波数を持つ。これに対し、 $L/D = 3.5$ の速度変動は複雑でおおよそ $t = 150$ を境に振動周波数が変化する。 $L/D = 4.5$ の速度変動では、おおよそ $t = 70$ までの変動とそれ以降の変動では振動のパターンが大きく変化している。これらの結果から L/D が長くなるにつれて速度変動は複雑化し、十分な統計量を得るにはより長い無次元時間のデータが必要となる。

1 ステップの計算時間刻みは $\Delta t = 0.0005$ である。表 1 より無次元時間で $t = 250$ まで計算するのに要する SX-8R のジョブ時間は、 $L/D = 2.0$ で 4,763 時間、 $L/D = 3.5$ で 7,900 時間である。レイノルズ数 6,000 において無次元時間 250 を現実の空気や水の実時間に換算すると 25 秒である。実験では十分に発達した状態で 30 秒程度のサンプリング測定を行うのが一般的である。したがって、例えば $L/D = 3.5$ のケースでは無次元時間で 500 まで計算してようやく実験と比較できる統計データを得ることができる。その場合のトータルのジョブ時間は、16,000 時間を超える計算が必要となる。

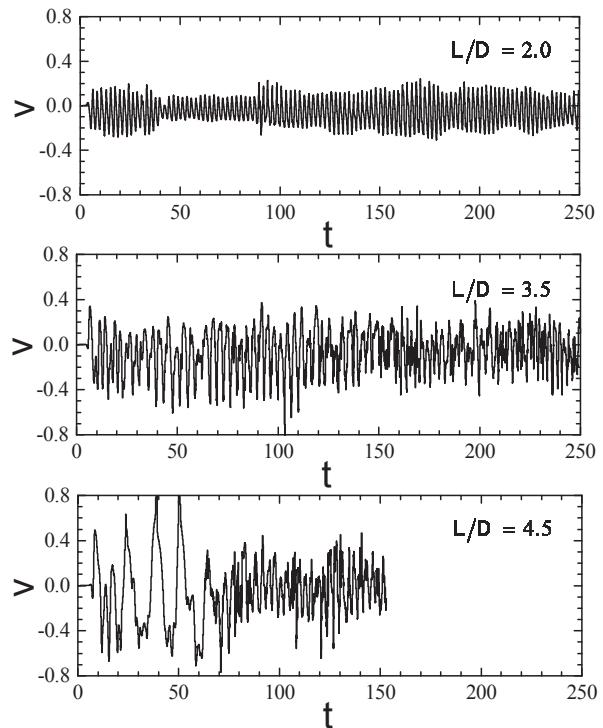


図 3 : キャビティ下流角付近の速度 X の時間変化

3.2 振動モード変化

キャビティアスペクト比 L/D を 0.5 間隔で変えた 6 ケースについて振動モードの変化を変動速度のパワースペクトルより求めたストローハル数の変化で示す。長い L/D の計算は前節で述べたように流れが発達した状態で統計量を計算するには計算の時刻が十分ではないが、パワースペクトルから振動のピーク周波数を求めた。図 4 に L/D に対するストローハル数の変化を示す。 $L/D = 3.0$ と 3.5 の間でストローハル数が不連続に変化していることから、mode II と mode III の変化が明確である。ほぼ同じレイノルズ数で測定された Knisely and Rockwell の実験値と比較するとよく一致している。ストローハル数の計算値が実験値とよく一致することは本研究の計算精度が高いことを示している。

振動モードの違いは自励振動する剥離せん断層の渦構造の違いの結果である。図 5 に mode II である $L/D = 2.0$ の圧力ラプラスアン等値面の時間変化を示す。圧力ラプラスアンの等値面は渦管を表現する。せん断層はケルビンヘルムホルツ不安定によって渦を形成しそれがキャビティ下流角へ衝突する。図 5(a)のキャビティ開口部中央付近に横に直線的に伸びた赤の等値面がケルビンヘルムホルツ不安定によって巻き上がり形成された渦で、主流に対して横方向につながったロール状である。この渦が図 5(b)の状態を経て図 5(c)では下流角に衝突する。Mode II ではせん断層に形成されるロール状の渦は一つで、渦が下流角に衝突した後に次の渦が発生する。

図 6 に mode III の $L/D = 3.5$ の圧力ラプラスアン等値面の時間変化を示す。 $L/D = 2.0$ では横方向のロール渦が形成されたのに対して、 $L/D = 3.5$ では図 6(a)の赤の細長い等値面で示されるような細長い縦方向の渦管が形成され、それが褶曲するように巻き上がり縦渦の集合体としてロール状の構造を形成する。そしてロール状の構造が下流角に衝突する図 6(c)では、キャビティ中央付近で次のロール状の形成が始まっている。Mode III では、キャビティ内のせん断層に二つのロール状に巻き上がる渦構造が存在する。このように、モードが異なる流れ場では、

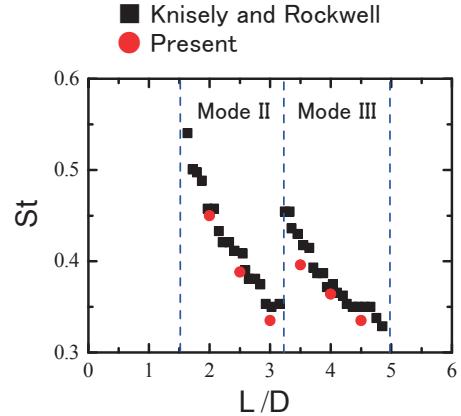


図 4：キャビティアスペクト比に対する
ストローハル数の変化

渦構造が大きく異なることを明らかにした。

4. おわりに

本研究は、開いたキャビティの自励振動流れを直接数値シミュレーションで解明することを目的に行っている。キャビティアスペクト比の違いによる振動モードと流れ場の違いを明らかにするために、6 ケースの直接数値シミュレーションを行っている。これまでそれぞれ数千時間のジョブを実行してきたが、乱流の統計量を求めるには計算時間が不十分で、少なくとも各ケースで無次元時間 500 程度まで計算を進める必要がある。計算機は SX-8R を使用してきた。SX-9 を使用すれば二倍以上の高速化が図ると推測できるが、一回のジョブ時間が 24 時間に限られ使用ユーザも多い。SX-8R の 120 時間ジョブで実行したほうがトータルで効率的であると判断したためである。今後は、スーパーコンピュータシステムの能力をさらに向上させていただき、かつ高速で長時間のジョブが実行できるような環境を作っていただけることを希望したい。筆者の所属する大学では、残念なことに大規模な科学技術計算の研究を行う計算機システムを大学として整備しないことになってしまった。このような環境下で数値シミュレーションの研究をしている者にとっては、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システムを自分の研究室から利用できることは大変有用である。本研究をはじめ様々な研究テーマの大規模シ

ミュレーションを実行できた大阪大学サイバーメディアセンターの関係各位に感謝したい。そして今後ますます利用しやすいシステムを整備していただくことを希望したい。

参考文献

- [1] C. Knisely and D. Rockwell, J. Fluid Mech., **116**, 157-186, (1982).
- [2] M. Gharib, and A. Roshko, J. Fluid Mech., **177**, 501-530, (1987).
- [3] Y. Morinishi, et al., J. Comput. Physics, **197**, 686-710, (2004).
- [4] S. Armfield, and R. Street, Int. J. Numer. Methods Fluids, **38**, 255-282, (2002).
- [5] 矢川元基, 奥田洋司, 計算力学[VII], 129-151, (2002).
- [6] 吉田, 大阪大学 CMC 計算機利用ニュース, **5**(1), 10-11, (2009).

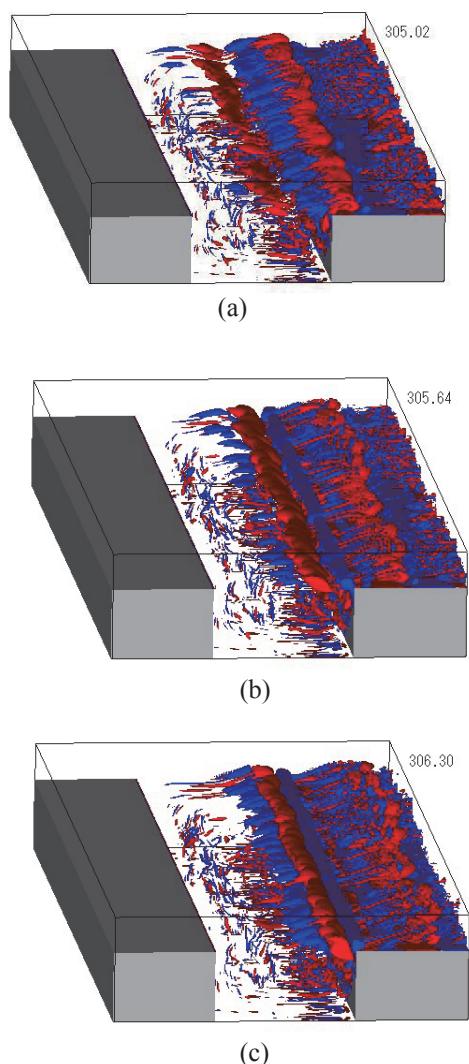


図 5 : $L/D=2.0$ の圧力ラプラスアン等値面
の時間変化

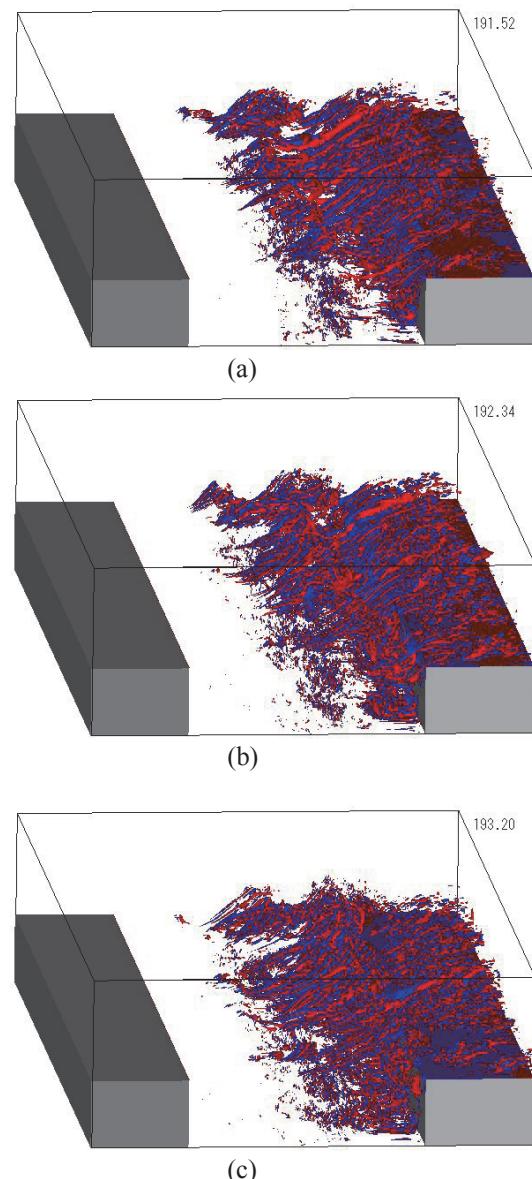


図 6 : $L/D=3.5$ の圧力ラプラスアン等値面
の時間変化

センター報告

・ 2012 年度大規模計算機システム利用による研究成果、論文一覧	43
・ 第 19 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2013)	70
・ 2013 年度大規模計算機システム利用講習会	71
・ 2012 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	72
・ 2013 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	81
・ 2013 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	82
・ 2013 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	83
・ 2013 年度大規模計算機システム利用相談員	84
・ 大規模計算機システム FAQ	88
・ 全国共同利用情報基盤センター顕彰「功績賞」の受賞について	95
・ サイバーメディアセンターITコア棟の新営・吹田本館改修について	95

2012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2012年4月から2013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] Takaaki Tsutsumi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Effect of solid and liquid heat conductivities on two-phase heat and fluid flows", *Discrete Element Modelling of Particulate Media*, Royal Society of Chemistry, pp.21-29, 2012.9.
- [2] Takashi Ohta, Takeo Kajishima, Kazuhiko Mizobata, Kazuki Nakamura, "Influence of density fluctuation on DNS of turbulent channel flow in the presence of temperature stratification", *Flow, Turbulence and Combustion*, Vol. 89, Issue 3, pp.435-448, 2012.
- [3] Tsubasa Ohshima, Takeo Kajishima, "Numerical simulation of flow with phase change using phase boundary conditions based on the kinetic theory of gases", *Journal of Fluid Science and Technology*, Vol.7, No.3, pp.421-433, 2012.
- [4] Byungjin An, Takeo Kajishima, "Transition from rotating cavitation to cavitation surge in a two-dimensional cascade", *Journal of Fluid Science and Technology*, Vol.8, No.1, pp.20-29, 2013.
- [5] Mary Clare Sison Escaño, Ryan Lacdao Arevalo, Elod Gyenge, Hideaki Kasai, "Water co-adsorption and electric field effects on borohydride structures on Os(111) by first-principles calculations", *Journal of Alloys and Compounds*, in press, 2013.
- [6] Ryan Lacdao Arevalo, Mary Clare Sison Escaño, Hideaki Kasai, "Computational mechanistic study of borohydride electrochemical oxidation on Au₃Ni(111)", *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 117, pp. 3818-3825, 2013.
- [7] Wahyu Tri Cahyanto, Ganes Shukri, Mohammad Kemal Agusta, Hideaki Kasai, "Adsorption of formaldehyde and formyl intermediates on Pt, PtRu-, and PtRuMo-alloy surfaces: A density functional study", *Applied Surface Science*, Vol. 266, pp. 405-409, 2013.
- [8] Abdulla Sarhan, Ong Yi Ching, Hiroshi Nakanishi, Katsuyuki Fukutani, Hideaki Kasai, "Dihydride Structures of Deuterium on Germanium (001) Surfaces", *Journal of Applied Physics*, Vol. 113, pp. 023703, 2013.
- [9] Yuji Kunisada, Hideaki Kasai, "Effects of Hindered Rotation on H₂ Nuclear Spin Conversion on Ag(111)", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 82, pp. 023601, 2013.
- [10] Ryan Lacdao Arevalo, Mary Clare Sison Escaño, Andrew Yu-Sheng Wang, Hideaki Kasai, "Structure and stability of borohydride on Au(111) and Au₃M(111) (M = Cr, Mn, Fe, Co, Ni) surfaces", *Dalton Transactions*, Vol. 43, pp. 770, 2013.
- [11] Febdian Rusydi, Mohammad Kemal Agusta, Adhitya Gandaryus Saputro, Hideaki Kasai, "A first principle study on Zinc-porphyrin interaction with O₂ in Zinc-Porphyrin(Oxygen) complex", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 81, pp. 124301, 2012.
- [12] Mohammad Kemal Agusta, Hideaki Kasai, "Theoretical study on hydrazine chemisorption on transition metal surfaces", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 81, pp. 124705-1, 2012.
- [13] Allan Abraham B. Padama, Hideaki Kasai, Yogi Wibisono Budhi, Nelson B. Arboleda, Jr., "Ab initio Investigation of Hydrogen Atom Adsorption and Absorption on Pd(110) Surface", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 81, pp.

- 114705, 2012.
- [14] Triati Dewi Kencana Wungu, Mohammad Kemal Agusta, Adhitya Gandaryus Saputro, Hermawan Kresno Dipojono, Hideaki Kasai, "First principles calculation on the adsorption of water on lithium-montmorillonite (Li-MMT)", Journal of Physics Condensed Matter, Vol. 24, pp. 475506, 2012.
- [15] Mary Clare Sison Escaño, Tien Quang Nguyen, Hideaki Kasai, "Molecular oxygen adsorption on ferromagnetic platinum", Chemical Physics Letter, Vol. 555, pp. 125-130, 2012.
- [16] Abdulla Sarhan, Mamoru Sakaue, Hiroshi Nakaniishi, Hideaki Kasai, "Electron-Vibron Interaction Effects on Scanning Tunneling Microscopy Current through Melamine Adsorbed on Cu(100)", Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 81, pp. 104711, 2012.
- [17] Susan Meñez Aspera, Hideaki Kasai, Hirofumu Kishi, Nobuyoshi Awaya, Shigeo Ohnishi, Yukio Tamai, "Realization of the Switching Mechanism in Resistance Random Access Memory (RRAMTM) Devices: Structural and Electronic Properties Affecting Electron Conductivity in Hafnium Oxide-Electrode"
- [18] Susan Meñez Aspera, Mamoru Sakaue, Triati Dewi Kencana Wungu, Musa Alaydrus, Tran Phan Thuy Linh, Hideaki Kasai, Motohiro Nakanishi, Tatsumi Ishihara, "Analysis of structural and electronic properties of Pr₂NiO₄ through first-principles calculation", Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 24, pp. 405504, 2012.
- [19] Triati Dewi Kencana Wungu, Febdian Rusydi, Hermawan Kresno Dipojono, Hideaki Kasai, "A Density Functional Theory Study on the Origin of Lithium-Montmorillonite's Conductivity at Low Water Content: A First Investigation", Solid State Communication, Vol. 152, pp. 1862, 2012.
- [20] Ryan Lacdao Arevalo, Mary Clare Escaño, Elod Gyenge, Hideaki Kasai, "A theoretical study of the structure and stability of borohydride on 3d transition metals", Surface Science, Vol. 606, pp. 1954, 2012.
- [21] 辻 拓也, 宮内 卓也, 王 聰, 田中 敏嗣, "熱流動層内における個々の粒子の運動と温度の同時計測", 可視化情報, Vol.32, pp.8-13, Apr. 2012.
- [22] 藤原 忍, 辻 拓也, 田中 敏嗣, "高濃度粒子が存在する流れ場に壁面が与える影響について(粒子が移動を伴う場合)", 混相流, Vol.26, pp.489-497, Mar. 2012.
- [23] 宮井 慎一郎, 辻 拓也, 高山 武盛, 田中 敏嗣, "油圧ショベルによる掘削挙動のDEM解析(礫粒子のroundnessの影響について)", テラメカニクス, Vol.32, pp.27-32, May 2012.
- [24] Kenichi Koizumi, Yasuteru Shigeta, Orio Okuyama, Haruki Nakamura, Yu Takano, "Coordination effects on the electronic structure of the CuA site of cytochrome c oxidase", Chemical Physics Letters, Vol. 531, pp. 197-201, Apr. 2012.
- [25] Daigo Shiga, Yasuhiro Funahashi, Hideki Masuda, Akihiro Kikuchi, Masanori Noda, Susumu Uchiyama, Kiichi Fukui, Kenji Kanaori, Kunihiro Tajima, Yu Takano, Haruki Nakamura, Misato Kamei, Toshiki Tanaka, "Creation of a binuclear purple copper site within a de novo coiled-coil protein", Biochemistry, Vol. 51, No. 40, pp. 7901-7907, Sep. 2012.
- [26] Yu Takano, Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, "Density Functional Studies of the Structural Variety of the Cu₂S₂ core of the Cu_A site", International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 112, No. 24, pp. 3756-3762, Dec. 2012.
- [27] Yu Takano, Kizashi Yamaguchi, Haruki Nakamura, "Theoretical studies of effect of protein environment on electronic structures and chemical indices of the active site of oxygenated and deoxygenated hemerythrin", International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 112, No. 4, pp. 497-503, Feb. 2012.
- [28] Katsuyoshi Matsushita and Macoto Kikuchi, "Fr-

- ustration-induced protein intrinsic disorder”, Journal of Chemical Physics, 138(10), 105101(7), 2013.
- [29] Katsuyoshi Matsushita, Munetaka Sasaki, Jun Sato, and Hiroshi Imamura, “Magnon Turbulence in Ferromagnetic Nanocontact”, Journal of the Physical Society of Japan, 82(3), 033801(4), 2013.
- [30] Katsuyoshi Matsushita, Munetaka Sasaki, Tsuyoshi Chawanya, “Chaos in AC-Driven Motion of Confined Magnetic Domain Wall”, Journal of the Physical Society of Japan, 81(6), 063801(4), 2012.
- [31] Tomoyuki Obuchi and Kazutaka Takahashi , “Dynamical singularities of glassy systems in a quantum quench”, Physical Review E, 86, 051125, 2012.
- [32] Tomoyuki Obuchi and Hikaru Kawamura , “Spinand chiral orderings of the antiferromagnetic XY model on the triangular lattice and their critical properties”, Journal of the Physical Society of Japan, 81, 054003, 2012.
- [33] Masayo Inoue, Namiko Mitarai and Ala Trusina, “Circuit architecture explains functional similarity of bacterial heat shock responses”, Physcal Biology, 9, 066003, 2012.
- [34] Hajime Yoshino, “Replica theory of the rigidity of structural glasses”, J. Chem. Phys., 136, 214108, 2012.
- [35] Oda, Y., Takeishi, K. and Miyake, Y., “Numerical Study of Conjugate Heat Transfer in Pin-Fin Channels Based on Large Eddy Simulation Data”, Computational Thermal Sciences, Vol.4, No.3, pp.271-282, Sep. 2012.
- [36] Yuta ENDO, Kazuyuki SAITO, Soichi WATANABE, Masaharu TAKAHASHI, and Koichi ITO, “Experimental Evaluation of SAR around an Implanted Cardiac Pacemaker Caused by Mobile Radio Terminal ”, IEICE Transactions on Communications, vol.E95-B, no.6, pp.2129-2132, Jun. 2012.
- [37] K. Horiuti, K. Matsumoto, and K. Fujiwara , “Remarkable Drag Reduction in Non-affine Viscoelastic Turbulent Flows”, Phys. Fluids 25, 015106, 2013.
- [38] K. Horiuti and T. Tamaki, “Nonequilibrium energy spectrum in subgrid-scale one-equation model in LES”, Bulletin of the American Physical Society, Vol.57, No.11, 270-271, Nov. 2012.
- [39] 金枝敏明, 鳥越治木, 島田尚一, 小畠一志, “無酸素銅精密切削におけるダイヤモンド工具損耗特性—刃先先端部の微小内部欠陥と損耗の関係—”, 研粒加工学会誌, 56, 7, pp.470-474, 2012-7.
- [40] H. Nakamura, Y. Nozaki, and S. Watano, “Computer Simulation of Interaction of Functionalized Fullerenes C₆₀(OH)_n with model cell membrane”, Proc. of the 5th Asian Particle Technology Symposium, pp. 606-607, May, 2012.
- [41] Y. Ebashi, H. Nakamura and S. Watano , “Interaction of functionalized Gold Nanoparticles with Lipid bilayer”, Proc. of the 5th Asian Particle Technology Symposium, pp. 656-657, May, 2012.
- [42] Yamazaki M, Honjo H, Ashihara T, Harada M, Sakuma I, Nakazawa K, Trayanova N, Horie M, Kalifa J, Kamiya K, Kodama I, “Regional cooling facilitates termination of spiral-wave reentry through unpinning of rotors in rabbit hearts”, Heart Rhythm, Vol. 9, pp. 107-114, 2012.
- [43] Ken T. Murata, S. Watari, T. Nagatsuma, M. Kunitake, H. Watanabe, K. Yamamoto, Y. Kubota, H.Kato, T. Tsugawa, K. Ukawa, K. Muranaga, E. Kimura, O. Tatebe, K. Fukazawa and Y. Murayama, “A Science Cloud for Data Intensive Sciences”, Data Science Journal, Volume 12, 10 April 2013.
- [44] M. Kunitake, K. Yamamoto, S. Watari, K. Ukawa, H. Kato, E. Kimura, Y. Murayama, and K. T. Murata, “ SOLAR-TERRRESTRIAL DATA ANALYSIS AND REFERENCE SYSTEM (STARS) - ITS HIGH POTENTIALITY FOR COLLABORATIVE

- RESEARCH”, Advance Publication, Data Science Journal, Volume 12, 10 April 2013.
- [45] Sakaguchi, K., Y. Miyoshi, S. Saito, T. Nagatsuma, K. Seki and K. T. Murata, “ Relativistic electron flux forecast at geostationary orbit using Kalman filter based on multivariate autoregressive model”, Space Weather, Vol.11, 1-11, doi:10.1002/swe.20020, 2013.
- [46] S Watari, H Kato, Ken T. Murata, K Yamamoto, H Watanabe, Y Kubota, and M. Kunitake , “ RESEARCH ENVIRONMENT AND INFORMATION SERVICE OF SPACE WEATHER CLOUD”, Advance Publication, Data Science Journal, 10 April 2013.
- [47] H. Watanabe, K. Yamamoto, T. Tsugawa, T. Nagatsuma, S. Watari, Y. Murayama, and K. T. Murata, “AN INTEGRATED MANAGEMENT SYSTEM OF MULTIPOINT SPACE WEATHER OBSERVATION”, Data Science Journal, Volume 12, 10 April 2013.
- [48] Y. Kubota, K. Yamamoto, K. Fukazawa, and Ken T. Murata, “Visualization of flux rope generation process using large quantities of MHD simulation data”, Data Science Journal, Volume 12, 10 April 2013.
- [49] T. Tsugawa, M. Nishioka, A. Saito, Y. Otsuka, T. Saito, T. Maruyama, T. Nagatsuma, K. T. Murata, and M. Ishii, “High-resolution ionospheric total electron content observations using dense GNSS receiver networks”, ENRI Int. Workshop on ATM/CNS, in print, 2012.
- [50] Michi Nishioka, Yuichi Otsuka, Kazuo Shiokawa, Takuya Tsugawa, Effendi, Pornchai Supnithi, Tsutomu Nagatsuma, Takeshi Murata , “ On post-midnight field-aligned irregularities observed with a 30.8-MHz radar at a low latitude: Comparison with F-layer altitude near the geomagnetic equator”, Journal of Geophysical Research, vol.117, A08337, pp.9, 2012.
- [51] Tetsuya OGAKI, Hidenobu WATANABE, Tsukasa IWAMA, Mitsue Den and Ken T. Murata, “Design and Implementation of File Authentication System Design and Implementation of File Authentication System”, IEICE Technical Report, (in press), 2012.
- [52] Shigeru Fujita, Hisao Yamagishi, Takeshi Murata (Ken T. Murata), Mitsue Den, Takashi Tanaka, “A numerical simulation of a negative solar wind impulse: Revisited”, Journal of Geophysical Research, vol.117, A09219, pp.12, 2012.
- [53] Esmatullah Maiwand Sharify, Shun Takahashi, Norio Arai, “Numerical Computation of Fluid-Structure Interaction on Isolated Stationary Cylinder with Elastic Surface”, Journal of Fluid Science and Technology, Vol. 7, Issue 1, pp. 155-167, DOI: 10.1299/jfst.7.155, 2012.
- [54] Y. Matsushita, S. Furuya and A. Oshiyama, “Floating Electron States in Covalent Semiconductors”, Phys. Rev. Lett., 108, 246404, 2012.
- [55] K. Koizumi, M. Boero, Y. Shigeta, and A. Oshiyama, “Microscopic Mechanisms of Initial Oxidation of Si(100): Reaction Pathways and Free-Energy Barriers”, Phys. Rev., B 85, 205314:1-4, 2012.
- [56] Y. Fujimoto and A. Oshiyama, “Structural Stability and Scanning Tunneling Microscopy Images of Strained Ge Films on Si(001)”, Phys. Rev., B 87, 075323, 2013.
- [57] S. Kyogoku, J.-I. Iwata and A. Oshiyama, “Relation between nanomorphology and energy bands of Si nanowires”, Phys. Rev., B 87, 165418, 2013.
- [58] K. Uchida and A. Oshiyama, “New identification of Metallic Phases of In Atomic layers on Si(111) Surfaces”, Phys. Rev., B 87, 165433, 2013.
- [59] 押山淳, “第一原理に基づく物質計算の現状と展望”, 日本シミュレーション学会誌, 31, 11, 2012.
- [60] 岩田潤一、古家真之介、押山淳, “実空間密度汎関数法コードRSDFTによる大規模第一原理

- 計算”, 計算工学, 17, 22, 2012.
- [61] 古家真之介、岩田潤一、長谷川幸宏、松下雄一郎、押山淳、賀谷信幸, “シリコンナノワイヤのシミュレーションと π -CAVEシステムによる可視化”, 可視化情報学会誌, 32, 138-143, 2012.
- [62] 篠原康、乙部智仁、岩田潤一、矢花一浩, “第一原理計算で探るコヒーレントフォノンの生成機構”, 日本物理学会誌, 67, 685-689, 2012.
- [63] Ken Yoshida, Nobuyuki Matubayasi, Yasuhiro Uosaki, Masaru Nakahara, “Density effect on infrared spectrum for supercritical water in the low- and medium-density region studied by molecular dynamics simulation”, Journal of Chemical Physics, Vol.137, No.19, 194506 (10 pages), Nov. 2012.
- [64] Ken Yoshida, Nobuyuki Matubayasi, Yasuhiro Uosaki, Masaru Nakahara, “Effect of heavy hydrogen isotopes on the vibrational line shape for supercritical water through rotational couplings”, Journal of Chemical Physics, Vol.138, in press, 2013.
- [65] Tsuyoshi NOZU, Tetsuro TAMURA, “LES of turbulent wind and gas dispersion in a city”, Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 104-106, 492-499, 2012.
- [66] Yusuke MARUYAMA and Tetsuro TAMURA, Yasuo OKUDA and Masamiki OHASHI, “LES of turbulent boundary layer for inflow generation using stereo PIV measurement data”, Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 104-106, 373-388, , 2012.
- [67] 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, pp.1203-1210, 2012.8.
- [68] 吉川 裕・鬼塚 剛, “前線近傍で発生する上昇流と下降流”, 沿岸海洋研究, 50 卷, 2 号, 95-101 頁, 2013 年 2 月.
- [69] Yutaka Yoshikawa, “An eddy-driven abyssal circulation in a bowl-shaped basin due to deep water formation”, Journal of Oceanography, 68 卷, 6 号, 971-983 頁, 2012 年 12 月.
- [70] John Philip Matthews and Yutaka Yoshikawa, “Synergistic surface current mapping by spaceborne stereo imaging and coastal HF radar”, Geophysical Research Letters, 39 卷, L17606, 2012 年 9 月.
- [71] Yutaka Yoshikawa, Craig M. Lee, and Leif N. Thomas, “The Subpolar Front of the Japan/East Sea. Part III: Competing Roles of Frontal Dynamics and Atmospheric Forcing in Driving Ageostrophic Vertical Circulation and Subduction”, Journal of Physical Oceanography, 42 卷, 6 号, 991-1011 頁, 2012 年 6 月.
- [72] Ebihara, Y. and T. Tanaka, “Fundamental properties of substorm-time energetic electrons in the inner magnetosphere”, J. Geophys. Res., DOI: 10.1002/jgra.50115, 印刷中.
- [73] Hirohito IKEDA, Tomonori MATSUBARA, Hanae MORIWAKI, Miho YUKAWA, Eiji YUKAWA, Hatsumi AKI, “Inhibitory Effect of Cyclodextrin on Complexation of Risperidone with Tea Catechin”, Netsu Sokutei, Vol. W39, pp6, 2012.
- [74] Hirohito IKEDA, Erika TSUJI, Tomonori MATSUBARA, Miho YUKAWA, Masao FUJISAWA, Eiji YUKAWA, Hatsumi AKI, “Incompatibility between Properciazine Oral Solution and Tea-based Drink”, Chem. Pharm. Bull., Vol. 60, No. 9, pp1207, 2012.
- [75] Takashi Ohta, Takeo Kajishima, Kazuhiko Mizobata and Kazuki Nakamura, “Influence of density fluctuation on DNS of turbulent channel flow in the presence of temperature stratification”, Flow, Turbulence and Combustion, Vol.89, No.3, pp.435-448, Aug. 2012.
- [76] Takashi Ohta, Yuto Usui and Hiroshi Yasoshima, “Predicting Drag-Reducing Wall Turbulence of Surfactant Solution by Direct Numerical Simulation”, Journal of Fluid Science and Technology, Vol.7, No.3, pp.259-274, Aug. 2012.

- [77] Takashi Ohta and Yuto Usui, “A LES Modification for Turbulent Flows of Surfactant Solutions”, Journal of Fluid Science and Technology, Vol.8, No.1, pp.54-64, Mar. 2013.
- [78] Tsuboi, N., Morii, Y., A.K. Hayashi, “Two-dimensional Numerical Simulation on Galloping Detonation in a Narrow Channel”, The Combustion Institute, Vol. 34, pp.1999-2007, 2013.
- [79] Youhi Morii, Nobuyuki Tsuboi, Hiroyuki Ogawa, Shinichiro Tokudome, A. Koichi Hayashi, “Numerical approach to one-dimensional CH₄/O₂ detonation with the reduction model DRG30”, Science and Technology of Energetic Materials, Vol.73, No.6, pp.169-174, 2012.
- [80] K. Tomida, K. Tomisaka, T. Matsumoto, Y. Hori, S. Okuzumi, M. N. Machida, K. Saigo, “RADIATION MAGNETOHYDRODYNAMIC SIMULATIONS OF PROTOSTELLAR COLLAPSE: PROTOSTELLAR CORE FORMATION”, ApJ, 763, 6, 2013.
- [81] Edyta Dzieminska, A. Koichi Hayashi, “Auto-ignition and DDT driven by shock wave - boundary layer interaction in oxyhydrogen mixture”, International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 38, Issue 10, pp. 4185-4193, 2013.
- [82] Kataoka, A., Machida, M. N., and Tomisaka, K., “Exploring Magnetic Field Structure in Star-forming Cores with Polarization of Thermal Dust Emission”, ApJ, 761, 40-, 2012.
- [83] Shinnaga, H., Novak, G., Vaillancourt, J. E., Machida, M. N., Kataoka, A., Tomisaka, K., Davidson, J., Phillips, T. G., Dowell, C. D., Leeuw, L., and Houde, M, “Magnetic Field in the Isolated Massive Dense Clump IRAS 20126+4104”, ApJ, 750, L29-, 2012.
- [84] Machida, M. N. and Matsumoto, T, “Impact of protostellar outflow on star formation: effects of the initial cloud mass”, MNRAS, 421, 588-607, 2012.
- [85] Tanigawa, T., Ohtsuki, K., and Machida, M. N, “Distribution of Accreting Gas and Angular Momentum onto Circumplanetary Disks”, ApJ, 747, 47-, 2012.
- [86] D. Ricinschi, “First-Principles Calculations of Structure and Magneto-Electric Properties of Co-Doped Bismuth Ferrite”, HIGH PERFORMANCE COMPUTER JOURNAL, vol. 2, page 37-42, July 2012.
- [87] J. D. Baniecki, M. Ishii, H. Aso, K. Kurihara, and D. Ricinschi, “Density functional theory and experimental study of the electronic structure and transport properties of La, V, Nb, and Ta doped SrTiO₃”, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, vol. 113, 013701, January 2013.
- [88] Masayuki Matsumoto, “Impact of dispersion slope on performance of fibre-optic-parametric-amplifier-based all-optical amplitude limiter”, Electron. Lett., vol. 49, no. 3, pp.201-202, 2013.
- [89] 佐竹 うらら, 榎本 俊之, “高平坦エッジ形状を実現する研磨パッド特性(加工前エッジ形状がエッジ形状創成過程に及ぼす影響)”, 日本機械学会論文集(C編), Vol.78, No.796, pp.3984-3994, Dec.2012.
- [90] 佐竹 うらら, 榎本 俊之, 廣瀬 研二, “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”, 2012 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, pp.61-62, Sep.2012.
- [91] Yasuhiro Takaya, Masaki Michihata, Terutake Hayashi, Taisuke Washitani, “Dimensional measurement of microform with high aspect ratio using an optically controlled particle with sensing standing wave scale”, CIRP Annals -Manufacturing Technology-, 61/1, pp. 479-482, Aug. 2012.
- [92] Masaki Michihata, Tadaaki Yoshikane, Terutake Hayashi, Yasuhiro Takaya, “New technique for single-beam gradient-force optical trapping in air”, International journal of Optomechatronics, Vol.7, Issue 1, pp.46 - 59, Feb. 2013.
- [93] 渋谷 陽二, “歯形：力学場を介した歯と体全体のつながり”, 日本機械学会論文集A編, Vol. 78, No.786, pp.137-141, 2012.

- [94] Jun Pan, Yoji Shibutani, "Internal Stress Field of Double Cross-slip using Level Set Dislocation Dynamics", Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.6, pp.61-70, 2012.
- [95] Ryuichi Tarumi, Hassel Ledbetter and Yoji Shibutani, "Some remarks on the range of Poisson's ratio in isotropic linear elasticity", Philosophical Magazine, Vol. 92, pp. 1287-1299, 2012.
- [96] R. Tarumi, T. Matsuhsia and Y. Shibutani, "Low temperature elastic constants and piezoelectric coefficients of LiNbO₃ and LiTaO₃: resonant ultrasound spectroscopy measurement and lattice dynamics analysis", Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 51, pp. 07GA02, 2012.
- [97] R. Tarumi, S. Yamada and Y. Shibutani, "Acoustic resonance of a two-dimensional isotropic medium studied using Airy stress function", Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 51, pp. 07GA03, 2012.
- [98] Atsuhiro Koyama and Yoji Shibutani, "Non-Destructive Observations of Internal Micro-Defects Using Scanning Electron-Induced Acoustic Microscope", Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.6, No.6, pp.512-518, 2012.
- [99] 渋谷陽二, 松中大介, 垂水竜一, "ホールペッヂ効果の塑性ひずみ依存性と温度依存性", 材料, Vol. 61, No. 8, pp. 724-729, 2012.
- [100] Tomohiro Naruse and Yoji Shibutani, "Higher Accurate Estimation of Axial and Bending Stiffnesses of Plates Clamped by Bolts", Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.6, No.5, pp.397-406, 2012.
- [101] Tomohiro Naruse and Yoji Shibutani, "Nonlinear Bending Stiffness of Plates Clamped by Bolted Joints under Bending Moment", Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.6, No.7, pp.832-843, 2012.
- [102] Emi Minamitani, Daisuke Matsunaka, Noriyuki Tsukahara, Noriaki Takagi, Maki Kawai and Yousoo Kim, "3.Density Functional Theory Calculation for Magnetism of Fe-Phthalocyanine Molecules on Au(111)", e-J. Surf. Sci. Nanotech., Vol.10, pp.38-44, 2012.
- [103] Emi Minamitani, Noriyuki Tsukahara, Daisuke Matsunaka, Yousoo Kim, Noriaki Takagi and Maki Kawai, "2.Symmetry-Driven Novel Kondo Effect in a Molecule", Phys. Rev. Lett., Vol. 109, pp. 086602-1-5, 2012.
- [104] 荒木 敏弘, 渋谷 陽二, "1.薄板構造柱における軸圧縮不安定挙動の負荷速度依存性", 日本機械学会論文集(A編), 78巻, 792号, pp.1208-1223, 2012.
- [105] S. X. Nakamura, H. Kamano, T.-S. H. Lee, and T. Sato, "Extraction of meson resonances from three-pions photo-production reactions", Phys. Rev. D86, No.11, Dec., 114012 1-11, DOI 10.1103/PhysRevD.86.114012, 2012.
- [106] S. X. Nakamura, H. Kamano, T.-S. H. Lee, and T. Sato, "Neutrino-induced forward meson-production reactions in nucleon resonance region", Phys. Rev. D86, No.9, Nov., 097503 1-5, DOI 10.1103/PhysRevD.86.097503, 2012.
- [107] N. Yamanaka, T. Sato and T. Kubota, "R-parity violating supersymmetric contributions to the neutron beta decay at the one-loop level", Phys. Rev. D86, No. 7 Oct., 075032 1-10, DOI 10.1103/PhysRevD.86.075032, 2012.
- [108] N. Yamanaka, T. Sato and T. Kubota, "A Reappraisal of two-loop contributions to the fermion electric dipole moments in R-parity violating supersymmetric models", Phys. Rev. D85, No.11 June, 117701 1-4, DOI 10.1103/PhysRevD.85.117701, 2012.
- [109] T. Fukuda, K. Hata, and N. Ishikawa, "Observation of Exceptionally Low-Lying $\pi - \pi^*$ Excited States in Oxidized Forms of Quadruple-Decker Phthalocyanine Complexes", J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 14698-14701, 2012.
- [110] 小西美穂子、芝井 広、松尾太郎、山本広大、住 貴宏、深川美里, "太陽系外惑星検出に用いられる画像解析法の性能評価", 日本赤外線学

会誌, 23巻, 1号, 2013年6月発行予定。

- [111] Hiroyuki Okamoto, Sei Onishi, Mai Kataoka, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto, “Characteristics of Double Plasmonic Racetrack Resonator to Increase Quality Factor”, Optical Review, Vol. 20, pp. 26-30, 2013.
- [112] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto, “Experimental demonstration of plasmonic racetrack resonators with a trench structure”, Applied Physics B Lasers and Optics, Vol. 108, pp. 149-152, 2012.
- [113] 渡邊寛, 舟曳信生, 中西透, 福士将, “ボランティアコンピューティングにおけるワーカの性能差を考慮した信頼度計算式の拡張”, 電子情報通信学会論文誌, VOL.J96-D, No.6, (accepted), 2013.
- [114] S. Matsunaga, “Inter-cation interaction in partial dynamic structure factors $S \xi \eta(k, \omega)$ and electrical properties of molten AgI-RbI system”, Physics and Chemistry of Liquids, vol.51, Issue 3, pp.414-428, April 2013.
- [115] S. Matsunaga, “Structural features in molten RbAg₄I₅ by molecular dynamics simulation”, Molecular Simulation, vol.39, Issue 2, pp.119-122, February 2013.
- [116] S. Matsunaga, “Dynamical Behavior Difference between Cu⁺ and Ag⁺ in Superionic AgBr-CuBr”, Lecture Notes in Information Technology, vol.20, pp.309-313, July 2012.
- [117] S. Matsunaga, “Structure and Atomic Dynamics in Molten RbAg₄I₅ by Molecular Dynamics Simulation”, Proc.13th Asian Conf. Solid State Ionics, pp.730-737, July 2012.
- [118] Kenji Kiyohara and Kinji Asaka, “Voltage induced pressure in porous electrodes”, Molecular Physics, Vol. 111, No. 2, 297-308, 2013.
- [119] S. Fujioka, Z. Zhang, N. Yamamoto, S. Ohira, Y. Fujii, K. Ishihara, T. Johzaki, A. Sunahara, Y. Arikawa, K. Shigemori, Y. Hironaka, Y. Sakawa, Y. Nakata, J. Kawanaka, H. Nagatomo, H. Shiraga, N. Miyanaga, T. Norimatsu, H. Nishimura and H. Azechi, “High-energy-density plasmas generation on GEKKO-LFEX laser facility for fast-ignition laser fusion studies and laboratory astrophysics”, Plasma Physics and Controlled Fusion, Vol. 54, p. 124042, 2012 Apr.
- [120] Y. Kuramitsu, Y. Sakawa, S. Dono, C. D. Gregory, S. A. Pikuz, B. Loupias, M. Koenig, J. N. Waugh, N. Woolsey, T. Morita, T. Moritaka, T. Sano, Y. Matsumoto, A. Mizuta, N. Ohnishi, and H. Takabe, “Kelvin-Helmholtz Turbulence Associated with Collisionless Shocks in Laser Produced Plasmas”, Vol. 108, pp. 195004 -1-5, 2012 May.
- [121] H. Shiraga, S. Fujioka, M. Nakai, T. Watari, H. Nakamura, Y. Arikawa, H. Hosoda, T. Nagai, M. Koga, H. Kikuchi, Y. Ishii, T. Sogo, K. Shigemori, H. Nishimura, Z. Zhang, M. Tanabe, S. Ohira, Y. Fuji, T. Namimoto, Y. Sakawa, O. Maegawa, T. Ozaki, K.A. Tanaka, H. Habara, T. Iwawaki, K. Shimada, H. Nagatomo, T. Johzaki, A. Sunahara, M. Murakami, H. Sakagami, T. Taguchi, T. Norimatsu, H. Homma, Y. Fujimoto, A. Iwamoto, N. Miyanaga, J. Kawamura, T. Jitsuno, Y. Nakata, K. Tsubakimoto, K. Sueda, N. Morio, S. Matsuo, T. Kawasaki, K. Sawai, K. Tsuji, H. Murakami, T. Kanabe, K. Kondo, R. Kodama, N. Sarukura, T. Shimizu, K. Mima, H. Azechi, “Integrated experiments of fast ignition targets by Gekko-XII and LFEX lasers”, HIGH ENERGY DENSITY PHYSICS, vol.8, no.3, pp.227-230, 2012 Sep.
- [122] Taichi Morita, Youichi Sakawa, Yasuhiro Kuramitsu, Seiichi Dono, Takao Ide, Sanshiro Shibata, Hidenori Aoki, Hiroki Tanji, Takayoshi Sano, Akiyuki Shiroshita, Jonathan Waugh, Christopher Gregory, Nigel Woolsey, and Hideaki Takabe, “Optical pyrometer system for collisionless shock experiments in high-power laser-produced plasmas”, Review of Scientific Instruments, Vol. 83, pp.10D514-1-3, 2012 Oct.
- [123] Y. Masada, T. Takiwaki, K. Kotake, and T. Sano, “Local simulations of the magneto-rotational

- instability in core-collapse supernovae”, *Astrophysical Journal*, vol. 759, 110, (11pp.), 2012 Nov.
- [124] T. Sano, K. Nishihara, C. Matsuoka, and T. Inoue, “Magnetic field amplification associated with the Richtmyer-Meshkov instability”, *Astrophysical Journal*, vol. 758, 126, (13pp.), 2012 Nov.
- [125] Ph. Nicolaï, M. Olazabal-Loumé, S. Fujioka, A. Sunahara, N. Borisenko, S. Gus'kov, A. Orekov, M. Grech, G. Riazuelo, C. Labaune, J. Velechowski, and V. Tikhonchuk, “Experimental evidence of foam homogenization”, *Physics of Plasmas*, Vol. 19, p. 113105, 2012 Nov.
- [126] Y Kuramitsu, Y Sakawa, T Morita, T Ide, K Nishio, H Tanji, H Aoki, S Dono, C D Gregory, J N Waugh, N Woolsey, A Diziere, A Pelka, A Ravasio, B Loupias, M Koenig, S A Pikuz, Y T Li, Y Zhang, X Liu, J Y Zhong, J Zhang, G Gregori, N Nakanii, K Kondo, Y Mori, E Miura, R Kodama, Y Kitagawa, K Mima, K A Tanaka, H Azechi, T Moritaka, Y Matsumoto, T Sano, A Mizuta, N Ohnishi, M Hoshino and H Takabe, “Laboratory investigations on the origins of cosmic rays”, *Plasma Phys. Control. Fusion*, Vol. 54, pp. 124049-1-7, 2012 Dec.
- [127] S. Ohira, S. Fujioka, A. Sunahara, T. Johzaki, H. Nagatomo, S. Matsuo, N. Morio, J. Kawanaka, Y. Nakata, N. Miyanaga, H. Shiraga, H. Nishimura, H. Azechi, “X-ray backlight measurement of preformed plasma by kJ-class petawatt LFEX laser”, *Journal of Applied Physics*, 112, 2012.
- [128] S. Fujioka, Z. Zhang, K. Ishihara, K. Shigemori, Y. Hironaka, T. Johzaki, A. Sunahara, N. Yamamoto, H. Nakashima, T. Watanabe, H. Shiraga, H. Nishimura and H. Azechi, “Kilotesla Magnetic Field due to a Capacitor-Coil Target Driven by High Power Laser”, *Scientific Reports* 3, Article Number 1170, 2013 Jan.
- [1] Byung-jin An, Takeo Kajishima “Numerical analysis of cavitating flow field with flow rate fluctuation model in a two-dimensional cascade”, Proc. 8th International Symposium on Cavitation , No. 257(USB), 2012.8.
- [2] Takeo Kajishima, Koji Marutani, “Combination of bubbly flow model and cavity source model for the practical numerical simulation of cavitating flows”, Proc. 8th International Symposium on Cavitation, No. 251(USB), 2012.8.
- [3] Azusa Ito, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Numerical analysis of the effect of flexible wall elements on flow behavior”, Proc. 6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, No.3800(CD), 2012.9.
- [4] Takeo Kajishima, Shintaro, Takeuchi, Takaaki Tsutsumi, “Direct numerical simulation of heat transfer in fluid-particle two-phase flow by coupled immersed-boundary and discrete-element methods”, Proc. 7th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, pp.823-826, 2012.9.
- [5] Norikazu Sato, Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, Masahide Inagaki, Nariaki Horinouchi, “Investigation on spatial and temporal accuracy of Cartesian grid method”, International Computational Mechanics Symposium 2012, No.MS7-1-3(USB), 2012.10.
- [6] Tsubasa Ohshima, Takeo Kajishima, “Numerical simulation of film condensation using phase boundary conditions derived from kinetic theory of gases”, International Computational Mechanics Symposium 2012, No.MS12-3-1(USB), 2012.10.
- [7] Takaaki Tsutsumi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Heat transfer and fluid flow of solid-liquid two-phase media of different heat conductivities”, Proc. 65th Annual DFD Meeting, Division of Fluid Dynamics, American Physical Society, Paper No.F1.00113,, 2012.11.
- [8] Shintaro Takeuchi, Takaaki Tsutsumi, Takeo Kajishima, “Behaviors of dispersed particles and

2. 国際会議会議録掲載論文

- heat transfer in buoyant-driven two-phase flows with different solid-liquid heat transfer conductivities”, Proc. 4th International Conference on Computational Methods, ID.151, 2012.11.
- [9] Takeshi Omori, Takeo Kajishima, “Templated and object-oriented design for shared multiphysics software development”, Proc. 4th International Conference on Computational Methods, ID.131, 2012.11.
- [10] Akihito Hiromori, Takumi Kanaya, Hirozumi Yamaguchi and Teruo Higashino, “Performance Evaluation of Mobility-Based Energy-Saving to Control Air-conditioning and Lighting Equipments”, Proceedings of the 2nd IFIP Conference on Sustainable Internet and ICT for Sustainability (SustainIT2012), pp. 1-6, October 2012.
- [11] Takamasa Higuchi, Hirozumi Yamaguchi and Teruo Higashino, “Clearing a Crowd: Context-supported Neighbor Positioning for People-centric Navigation”, Proceedings of the 10th IEEE International Conference on Pervasive Computing (Pervasive2012), pp. 325-342, June 2012.
- [12] Shinichiro Miyai, Tetsuya Katsuo, Takuya Tsuji, Takemori Takayama, Toshitsugu Tanaka, “DEM Modelling of the digging process of gravel: Influence of particle roundness”, Discrete element modeling of particulate media, pp.141-148, RSC Publishing, May 2012.
- [13] Kyohei Higashida, Yoshie Okuyama, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka, “A numerical model for the motion of large object in gas-fluidized bed”, Proceedings of 5th Asian Particle Technology Symposium, No. 163, Jul. 2012.
- [14] Ali Abbas Zaidi, Hirotaka Yada, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka , “ Microscopic DEM-CFD coupling simulation of spouted bed”, 5th Asian Particle Technology Symposium, No. 078, Jul. 2012.
- [15] Katsuyoshi Matsushita and Macoto Kikuchi , “Multicanonical Simulation of Coupled Folding and Binding of Intrinsically Disordered Protein using an Ising-Like Protein Model”, accepted for publication in Journal of Physics: Conference Series, 2013.
- [16] Nobu C. Shirai, Macoto Kikuchi, “Multicanonical simulation of the Domb-Joyce model and the Go model: new enumeration methods for self-avoiding walks”, J. Phys: Conference Series, 掲載決定.
- [17] Hajime Yoshino, “Rigidity of glasses and jamming systems at low temperatures”, AIP conference proceedings, 1518, 244, 2013.
- [18] Ichikawa, Y., Takeishi, K., Oda, Y. and Sugeta, K., “Heat Transfer Enhancement of Impinging Jet Cooling by Circle-Rib”, Proc. of Asian Congress on Gas Turbines 2012, ACGT2012-4122, Aug. 2012.
- [19] Oda, Y., Takeishi, K. and Kozono, S., “LES of Film Cooling Upstream an Airfoil/Endwall Junction to Suppress Horseshoe Vortex and Endwall Heat Transfer”, Proc. of 7th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, CD-ROM, J078, Sep. 2012.
- [20] Koyama, A., Takeishi, K. and Oda, Y., “Heat Transfer Characteristics of V-Shaped Pin-Fin Channels with Wavy Endwalls”, Proc. of 23rd International Symposium on Transport Phenomena, CD-ROM, 160, Nov. 2012.
- [21] Takeishi, K., Oda, Y., Miyake, Y. and Motoda, Y., “Experimental and Numerical Study on the Convective Heat Transfer and Pressure Loss in Rectangular Ducts with Inclined Pin-Fin on a Wavy Endwall”, Proc. of ASME Turbo Expo 2012, GT2012-69625, Jun. 2012.
- [22] Oda, Y., Takeishi, K. and Oshio, T., “Large Eddy Simulation of Film Cooling with Swirling Coolant Air”, Proc. of 23rd International Symposium on Transport Phenomena, CD-ROM, 153, Nov. 2012.
- [23] Satoshi Ii, Shigeo Wada, “A Two-Layer Model for Biological Membrane”, JSME-CMD International Computational Mechanics Symposium 2012 , extended abstract (2 pages), Oct. 2012.
- [24] Yuta ENDO, Kazuyuki SAITO, Soichi WATANABE,

- Masaharu TAKAHASHI, and Koichi ITO, "Evaluation of SAR around an Implanted Cardiac Pacemaker Caused by Mobile Radio Terminal", Proceedings of ISAP2012, pp.680-683, Oct. 2012.
- [25] Yuta ENDO, Kazuyuki SAITO, Soichi WATANABE, Masaharu TAKAHASHI, and Koichi ITO, "Evaluation on Electromagnetic Interference of Implanted Cardiac Pacemaker by Mobile Phone", PIERS Abstracts, p.166, Mar. 2013.
- [26] H. TANAKA, S. HONDA, S. SHIMADA , " Possible Mechanism of Strength Change of Diamond Depending on Thermal Histories Based on Molecular Dynamics Analysis", Proc. euspen 12th International Conference, June 4-7, Stockholm, Sweden, vol. 2, pp.359-362, 2012-6.
- [27] Shin Inada, Takashi Ashihara, Ryo Haraguchi, Tatsuhiko Arafune, Ichiro Sakuma, Masatoshi Yamazaki, Haruo Honjo, Itsuo Kodama, Kazuo Nakazawa, "Epicardial cooling increases opportunity of spiral wave termination: a simulation study", ESC congress 2012, P4144, 2012.
- [28] Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Shin Inada, Takanori Ikeda, Kazuo Nakazawa, "Rotational anisotropy prevents transition of tachycardia to fibrillation in ventricles under the large transmural dispersion of repolarization", APHRS (Asia Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session) 2012, Journal of Arrhythmia, Vol. 28 Supplement, p. 521, 2012.
- [29] Tetsuro TAMURA, Tsuyoshi NOZU, "Introduction of unstructured-grid system on LES for wind pressure estimation on a building in cities", Proc. , BBAA7, 1-10, 2012.
- [30] Yusuke MARUYAMA and Tetsuro TAMURA, Yasuo OKUDA and Masamiki OHASHI , "LES of Fluctuating Wind Pressure on a 3D Square Cylinder for PIV-based inflow turbulence", Proc., BBAA7, 1-8, 2012.
- [31] Kataoka, H. and Tamura, T, "Hybrid RANS/LES Simulation of Wind Flow over An Urban Area", 12th Americas Conference on Wind Engineering,
- (投稿中), 2013.6.
- [32] Ebihara, Y., and T. Tanaka, "Direct impact of substorm on outer radiation belt", American Geophysical Union, 2012.
- [33] K. Tsujimoto, N. Shibata, T. Shakouchi and T. Ando, "DNS of Dynamic Vector-Controlled Free Jets", The 9th European Fluid Mechanics Conference, USB memory, p.1, 2012.
- [34] Ken Naitoh ,Dai Shimizu, Shouhei Nonaka , "Stability limit of supermulti-jets convergence engine operated from startup to extremely-hypersonic conditions: revealed by shock-tube experiments", AIAApaper, 2012-5923, France, 2012.
- [35] Ken Naitoh, Shinichi Tanaka, Takehito Emoto, Yusuke Kainuma, Mistuhide Kurihara, Dai Shimizu, Shouhei Nonaka, Makoto Iseno, Tomoaki Kubota, Seiji Hashimoto, "Supermulti-jets colliding for realizing the Ultimate Engine: proposed by shock tube analysis, computation, and theoretical thought", Proceedings of COMODIA, , Hakata, 2012.
- [36] Ken Naitoh, Korai Ryu, Shunsuke Matsushita, Shinichi Tanaka, Mitsuaki Kurihara, Mikiya Marui, "Weakly-stochastic Navier-Stokes equation and shocktube experiments: revealing the Reynolds' mystery in pipe flows", AIAApaper, 2012-2689, NewOrleans, 2012.
- [37] Ken Naitoh , Dai Shimizu, Shouhei Nonaka, Yusuke Kainuma, and Takehiro Emoto, "The Fifth compression strategy for hypersonic aircar: proposed by three experiments of shock-tube, computation, and thought", AIAApaper, 2012-3314, NewOrleans, 2012.
- [38] Nobuhiro SHINMURA, Tomoaki KUBOTA and Ken NAITOH, "Cycle-Resolved Computations of Stratified-Charge Turbulent Combustion in Direct Injection Engine", JSME International Journal, Vol. 8, No.1, pp.1-14, 2013.
- [39] Takashi Ohta and Hirokazu Kajima, "Structures of Density Fluctuations at a Low-Mach-Number Turbulent Boundary Layer by DNS", Proceedings

- of 7th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer (THMT12), Cicily, Italy, Sep. 2012.
- [40] Keisuke Yamada and Takashi Ohta, "DNS of Turbulent Boundary Layers with Melting and Solidification", Proceedings of International Symposium on Advanced Mechanical and Power Engineering (ISAMPE 2012), Shanghai, China, Nov. 2012.
- [41] N.Tsuboi, K.Fukiba, T.Shimada, "Three-dimensional Numerical Simulation on Unsteady Compressible Flow Using Preconditioning Method in Hybrid Rocket Engine: Effects of Preconditioning Schemes", Ninth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2011), OS3-19, 2012.
- [42] Daiki Mutoh, Nobuyuki Tsuboi, Hiroshi Terashima, Mitsuo Koshi, "Numerical Simulation of Supercritical Jet Structure Using Preconditioning Unsteady Compressible Method", 34th International Symposium on Combustion, 034TF-0309(WIP), July 2012.
- [43] Yuichi Togashi, "Modeling Bio-Molecular Machinery in the Complex Environment inside the Cell", Abstracts of Brock-Kobe Bilateral Workshop on Scientific Computation, May 2012.
- [44] Yuichi Togashi, "Molecular Machine Motion Affects Reaction-Diffusion Patterns in Crowded Systems", Abstracts of Dynamics Days Europe 2012, pp. 124-125, Sept. 2012.
- [45] Yuichi Togashi, "Toward a Theoretical Framework for Reaction Networks in the Cell: Modeling in Consideration of 'Minority' and Beyond", Abstracts of "Paradigm Innovation in Biology: Novel Strategy and Thinking" Symposium, p. 3, Oct. 2012.
- [46] Yuichi Togashi, "'Minorities' may Rule Reaction-Diffusion Processes in the Cell", Abstracts of the 1st International Symposium of the Mathematics on Chromatin Live Dynamics, Mar. 2013.
- [47] Edyta Dziemińska, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, "Ignition in boundary layer in a reactive oxy-hydrogen mixture", 19th World Hydrogen Energy Conference, 3rd - 7th, Toronto, Canada, June 2012.
- [48] 長尾剛史, "Numerical Analysis of Spinning Detonation Dependency on Initial Pressure Using AUSMDV Scheme", 51st AIAA Aerospace Sciences Meeting: The American Institute of Aeronautics and Astronautics(AIAA), 2013 AIAA Aerospace Sciences Meeting, Grapevine, Texas(Dallas/Fort Worth area), 7-10 January 2013.
- [49] M. Matsumoto, S. Kou, and S. Tanaka, "Opto-electronic multi-level signal regeneration", 2013 Conference on Lasers and Electro-Optics, paper No. CM1G.2, to be presented, 2013.
- [50] Satoshi Ii, Kazuyasu Sugiyama, Shu Takagi, Yoichiro Matsumoto, Shigeo Wada, "Full-Eulerian fluid-structure coupling methods toward a blood flow analysis", Advances in Computational Mechanics, Finite Elements in Flow Problems (ACM/FEF 2013), abstract (1 page), Feb.
- [51] Masaki Michihata, Yasuhiro Takaya, Taisuke Washitani, Terutake Hayashi, "Scanning measurement of step height and freeform surface by using optically trapped microsphere", Proc. the 12th euspen international conference, pp.64-67, June 2012.
- [52] Yasuhiro Takaya, Masaki Michihata, Terutake Hayashi, Taisuke Washitani, "Mode selective probing method of micro trench structure using optically trapped probe", Proc. of International Symposium on Optomechatronic Technologies, No.26, Oct. 2012.
- [53] Masaki Michihata, Tadaaki Yoshikane, Terutake Hayashi, Yasuhiro Takaya, "New technique of single-beam gradient-force optical trapping in air condition", Proc. of International Symposium on Optomechatronic Technologies, No.27, Oct. 2012.
- [54] Daisuke Matsunaka, JungHee Seo, Haris Mahyuddin and Yoji Shibutani, "Adsorption and

- dissociation of hydrogen sulfide on metal surfaces: a first-principles calculation”, 29th European Conference on Surface Science (ECOSS29), Edinburgh, September, 2012.
- [55] Daisuke Matsunaka, Yasuaki Ohnishi and Yoji Shibutani, “Effects of Impurities on Twin Boundaries and Twinning Dislocations in Mg Alloys by First-principles Calculations”, 6th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM2012), Singapore, October, 2012.
- [56] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto, “Development of plasmonic racetrack resonators with a trench structure”, Proc. SPIE 8457, Plasmonics: Metallic Nanostructures and Their Optical Properties X, 845723, Aug. 2012.
- [57] Hiroyuki Okamoto, Sei Onishi, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto, “Fabrication of plasmonic racetrack resonators with a trench structure”, Proceedings of International Conference on Nanophotonics 2012, pp. 178, May 2012.
- [58] Kan Watanabe, Nobuo Funabiki, Toru Nakanishi and Masaru Fukushi, “Modeling and Performance Evaluation of Colluding Attack in Volunteer Computing Systems”, Proc. of The International MultiConference of Engineers and Computer Scientists 2012, pp.1658-1663, Mar. 2012.
- [59] Kabin, K., and M. Watanabe, “Magnetic conjugacy at high latitudes in global magnetohydrodynamic (MHD) and empirical models of the magnetosphere”, AOGS-AGU (WPGM) Joint Assembly 2012, Abstract ID ST05-A003, Sentosa, Singapore, 2012年8月14日 (2012年8月13日 – 2012年8月17日).
- [60] Maeda, G., K. Yumoto, H. Kawano, A. Yoshikawa, H. Liu, M. Watanabe, S. Abe, T. Uozumi, and A. Ikeda, “MAGDAS project activities under ISWI”, International Conference on Radiation Belts and Space Weather, Daejeon, Korea, 2012年6月1日 (2012年5月29日 – 2012年6月01日).
- [61] Yumoto, K., A. Yoshikawa, H. Kawano, H. Liu, M. Watanabe, A. Ikeda, G. Maeda, S. Abe, and T. Uozumi, “Formation of Preliminary Center for Capacity Building for Space Weather Research (invited)”, 日本地球惑星科学連合 2012 年大会, 講演番号 PEM10-02 (招待講演), 幕張メッセ国際会議場, 千葉, 2012 年 5 月 25 日 (2012 年 5 月 20 日 – 2012 年 5 月 25 日).

3. 国内研究会等発表論文

- [1] 堤貴昭, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “分散性混相流中の流体-固体相互作用および熱伝達の数値シミュレーション”, 日本計算工学会 第 17 回計算工学講演会 講演論文集, Vol.17, No.G-3-2 (CD), 2012.5.
- [2] 韓昌和, 梶島岳夫, “前縁剥離を伴う二次元翼周りの乱流のLES 解析”, 日本機械学会流体工学部門講演会 講演論文集, No.0135(CD), 2012.11.
- [3] 安炳辰, 梶島岳夫, “二次元翼列における流量変動モデルを用いたキャビテーションサージの数値解析”, 第 16 回 キャビテーションに関するシンポジウム 講演論文集, No.S1-10 (USB), 2012.11.
- [4] 清水康介, 大森健史, 梶島岳夫, “翼近傍の気液二相流の数値解析”, 第 26 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, No.C02-1 (USB), 2012.12.
- [5] 藤田卓也, 大森健史, 梶島岳夫, “濡れ性を有する固体壁面に対する衝突液滴の数値解析”, 第 26 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, No.C03-3 (USB), 2012.12.
- [6] 伊藤あづさ, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “纖維要素を持つ弾性壁面流路と流体の相互作用の数値シミュレーション”, 日本機械学会 第 25 回バイオエンジニアリング講演会 論文集, No.12-4-8, pp.309-310, 2013.1.

- [7] 大本弘喜, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “弾性弁を設置した壁面の能動的形状制御による流体輸送に関する数値解析”, 日本機械学会 関西学生会卒業研究発表講演会 講演前刷集, p. 8.4, 2013. 3.
- [8] 福岡宏紀, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “薄膜のはためきに対する流体と薄膜の密度比の影響”, 日本機械学会 関西学生会卒業研究発表講演会 講演前刷集, p.8.20, 2013.3.
- [9] 佐藤亘, 梶島岳夫, 竹内伸太郎, “固液分散二相流の強制対流熱伝達における現象の数値解析”, 日本機械学会 関西学生会卒業研究発表講演会 講演前刷集, p.9.13, 2013.3.
- [10] 鈴木浩平, 梶島岳夫, 大森健史, “任意多面体格子における二相流解析手法の研究”, 日本機械学会 関西学生会卒業研究発表講演会 講演前刷集, p.9.18, 2013.3.
- [11] 日角友香, 大森健史, 梶島岳夫, “固気液三重線近傍の界面エネルギー不均衡が流動に与える影響に関する分子動力学的考察”, 日本機械学会 関西学生会卒業研究発表講演会 講演前刷集, p.12.10, 2013.3.
- [12] 伊藤あづさ, 宮内優, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “弾性壁に囲まれた流れにおいて流路の弾性が流れに及ぼす影響の数値解析”, 日本機械学会 関西支部第 88 期定時総会講演会 講演論文集, No.134-1, p.2.8, 2013.3.
- [13] 坂上源生, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “複数物体の境界間に現れる薄膜流れを考慮した数値計算法に関する研究”, 日本機械学会 関西支部第 88 期定時総会講演会 講演論文集, No.134-1, p.2.9, 2013.3.
- [14] 宇野隆広, 竹内伸太郎, 梶島 岳夫, “溶液中ににおける固体表面の晶析成長に固体周囲の流れが与える影響の数値的研究”, 日本機械学会 関西支部第 88 期定時総会講演会 講演論文集, No. 134-1, p.1.14, 2013.3.
- [15] 和田悠佑, 山口弘純, 東野輝夫, “レーザレンジスキャナと Wi-Fi Fingerprint を併用した歩行者の位置推定手法の提案”, 情報処理学会研究報告(情処技報), pp. 1-8, 2013 年 3 月 (MBL 研究会).
- [16] Kazuki KOJIMA, Wilson Agerico DIÑO, Masahiko SUZUKI, Tsuneo YASUE, Kazue KUDO, Noriko AKUTSU, Ernst BAUER, Takanori KOSHIKAWA and Hideaki KASAI, “Theoretical Study of Magnetic Anisotropy in Co/Ni Multi-Layers on W(110)”, Journal of the Vacuum Society of Japan, Vol. 56, No. 4.
- [17] 藤原 忍, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “高濃度粒子が存在する流れ場に壁面が与える影響について(粒子が移動を伴う場合)”, 日本混相流学会年会講演会講演論文集, No. F233, Jul. 2012.
- [18] 辻 拓也, 松井 優, 中川 裕太, 田中 敏嗣, 門野 裕一, “ブレードによる含水土砂掘削挙動の DEM 解析”, 粉体工学会 2012 年度秋期研究発表会講演論文集, pp.141-142, Nov. 2012.
- [19] 藤原 忍, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “壁面近傍における高濃度固気混相流の直接数値計算(粒子を含む場合の鏡像境界条件について)”, 第 26 回数値流体力学シンポジウム, No. A01-3, Dec. 2012.
- [20] 松井 優, 辻 拓也, 田中 敏嗣, 吉灘 裕, 門野 裕一, “離散要素法を用いた含水土砂のモデル化とブルドーザブレードによる掘削挙動の数値解析”, 日本機械学会関西支部第 88 期定時総会講演会論文集, p.25, Mar. 2013.
- [21] 宮井 慎一郎, 勝尾 哲也, 辻 拓也, 深野 亮, 田中 敏嗣, 吉灘 裕, “球形度と丸み度を用いた非球形粒子形状のモデル化と離散要素法による礫層のせん断挙動解析”, 日本機械学会関西支部第 88 期定時総会講演会論文集, p.26, Mar. 2013.
- [22] 東田 恒平, 奥山 佳那, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “気泡流動層中に存在する粗大物体の挙動予測モデル開発”, 化学工学会 第 78 年会講演論文集, No.G314, Mar. 2013.
- [23] 西嶋 康行, 辻 拓也, 田中 敏嗣, “流動層内における粒子乾燥過程のDEM-CFDモデル開発”, 化学工学会 第 78 年会講演論文集, No.G313,

Mar. 2013.

- [24] 小田豊, 武石賢一郎, “エントロピー生成に着目したフィルム冷却流れのLES解析”, 第 90 期日本機械学会流体工学部門講演会, pp.161-162, Nov. 2012.
- [25] 小田豊, 武石賢一郎, 香園晋太郎, “対称翼前縁付け根部のフィルム冷却が馬蹄渦と熱伝達に及ぼす影響に関するLES”, 第 49 回日本伝熱シンポジウム, Vol.I+II, pp.383-384, May 2012.
- [26] 高木 洋平, 中本 真義, 岡野 泰則, “局所すべり速度を有する機能性塗膜上乱流の数値シミュレーション”, 化学工学会第 78 年会講演要旨集, F114, Mar. 2013.
- [27] 中本 真義, 高木 洋平, 岡野 泰則, “ヒドログル塗膜による乱流渦抑制と抵抗低減効果に関する数値解析”, 第 15 回化学工学会学生発表会北九州大会, J01, Mar. 2013.
- [28] 伊井仁志, 和田成生, “滑り境界を有する二層膜と流体の連成解析”, 日本機械学会第 25 回バイオエンジニアリング講演会, 講演予稿集(1 ページ), 2013 年 1 月.
- [29] 遠藤雄大, 齋藤一幸, 渡辺聰一, 高橋応明, 伊藤公一, “携帯電話による体内植込み型心臓ペースメーカーの電磁干渉評価”, 2012 年ソサイエティ大会講演論文集, p.314, Sep. 2012.
- [30] 遠藤雄大, 齋藤一幸, 渡辺聰一, 高橋応明, 伊藤公一, “体内植込み型心臓ペースメーカーに生じる干渉電圧の胴体モデル電気定数への依存性”, 2013 年総合大会講演論文集, p.357, Mar. 2013.
- [31] 玉木隆宏, 堀内潔, 柳原慎也, “非平衡エネルギー・スペクトルに基づくSGSモデルの検討”, 日本流体力学会年会 2012’ 講演論文集, A002-3, Sep. 2012.
- [32] 竹生昇平, 堀内潔, “Reconnection過程における非アファイン粘弾性効果”, 日本流体力学会年会 2012’ 講演論文集, E003-3, Sep. 2012.
- [33] 増田雄一, 高橋雄大, 堀内 潔, 辻 義之, “高レインノルズ数乱流場における非平衡エネルギー・スペクトルの抽出”, 日本流体力学会年会 2012’ 講演論文集, C004-3, Sep. 2012.
- [34] 仲村 英也, 江端 陽一, 野崎 祐介, 綿野 哲, “分子動力学シミュレーションを活用した医療用ナノ粒子の設計と細胞膜透過現象の解析”, 第 29 回製剤と粒子設計シンポジウム講演要旨集, pp. 156-157, Oct. 2012.
- [35] 仲村 英也, 江端 陽一, 綿野 哲, “アルカンチオール修飾金ナノ粒子と生体膜の相互作用：分子動力学シミュレーションによる解析”, バイマテリアル学会シンポジウム 2012 予稿集, p. 476, Nov. 2012.
- [36] 江端 陽一, 仲村 英也, 綿野 哲, “表面修飾金ナノ粒子と細胞膜の相互作用の分子動力学シミュレーション”, 粉体工学会 2012 年度秋期研究発表会講演要旨集, pp. 33-34, Nov. 2012.
- [37] 小泉 雄平, 仲村 英也, 綿野 哲, “分子動力学シミュレーションを用いたナノ粒子 - 細胞膜間相互作用の解析 : C60 フラーレンの親水・疎水性が膜透過性に及ぼす影響”, 日本薬学会第 133 年会研究発表講演要旨集, 28amF-012S, Mar. 2013.
- [38] 比江島 俊彦, “縦渦におけるスパイラル組織渦の発達に関わる因子について”, 日本流体力学会年会 2011 講演論文集, 038, CD-ROM, pp.1-3, Sep. 2012.
- [39] 原口亮, 芦原貴司, 稲田慎, 池田隆徳, 中沢一雄, “心筋線維走向ねじれは心室較差増大による催不整脈性を抑制する : 3 次元心室壁モデルによるシミュレーション研究”, 第 29 回日本心電学会学術集会, 心電図, Vol. 32, Suppl. 5, p. 165, 2012.
- [40] 稲田慎, 芦原貴司, 原口亮, 荒船龍彦, 佐久間一郎, 山崎正俊, 本荘晴朗, 児玉逸雄, 中沢一雄, “心外膜局所冷却による除細動の可能性 : 3 次元心室壁モデルを用いたシミュレーションによる検討”, 第 29 回日本心電学会学術集会, 心電図, Vol. 32, Suppl. 5, p. 176, 2012.
- [41] 魚崎 泰弘, 島田 綾乃, 吉田 健, “圧縮流体中におけるトリフェニルホスフィン類の融解挙動”, 第 53 回高圧討論会講演要旨集, pp. 150, 2012 年 11 月.

- [42] 刀坂 大志, 吉田 健, 魚崎 泰弘, “超臨界水中の並進速度相関関数の減衰挙動に対する溶媒和数依存性と水和・脱水和の効果の分子動力学解析”, 第 53 回高圧討論会講演要旨集, pp 223, 2012 年 11 月.
- [43] 刀坂 大志, 吉田 健, 魚崎 泰弘, “分子動力学による超臨界水中の並進速度相関関数の減衰に対する水和・脱水和の影響の解析”, 第 35 回 溶液化学シンポジウム講演要旨集, pp 51, 2012 年 11 月.
- [44] 吉田 尚史, 渡辺 崇, “キャビティ自励振動流の底面駆動法による能動制御の DNS による研究”, 日本機械学会流体工学部門講演会論文集, pp.259-260, Nov. 2012.
- [45] 東矢 俊介, 吉田 尚史, 渡辺 崇, “開いたキャビティを過ぎる三次元非圧縮流れにおける渦構造の解析”, 日本機械学会北陸信越支部第 50 期総会・講演会講演論文集, 1209, pp.1-2, March. 2013.
- [46] 磯貝 政範, 吉田 尚史, “噴流-三角柱系自励振動流における渦構造の数値解析”, 日本機械学会北陸信越支部第 50 期総会・講演会講演論文集, 1210, pp.1-2, March. 2013.
- [47] 坪井 和也, 富田 栄二, 長谷川 達也, “固体壁面での化学的過程が水素-空気予混合火炎の振舞いに及ぼす影響”, 日本機械学会 2012 年度年次大会講演論文集, G060011, Sep. 2012.
- [48] 坪井 和也, 富田 栄二, 長谷川 達也, “固体壁面並びにその近傍での熱化学的条件を考慮した水素-空気予混合火炎のDNS”, 日本機械学会 热工学コンファレンス 2012 講演論文集, pp. 75-76, Nov. 2012.
- [49] 坪井 和也, 富田 栄二, 長谷川 達也, “固体壁面並びにその近傍での化学的過程を考慮した水素-空気乱流予混合火炎のDNS”, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, pp. 478-479, Dec. 2012.
- [50] 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 25 回数値流体力学シンポジウム特集), ながれ, Vol. 31, No.2, pp.181-186, 2012.4.
- [51] 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 3 実市街地を対象とした計算”, 日本流体力学会年会講演要旨集, 2012.9.
- [52] 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 3 実市街地を対象とした計算”, (特集-注目研究 in 年会 2012), ながれ, Vol. 31, No.6, pp.509-512, 2012.12.
- [53] 柴田憲孝, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “直接数値シミュレーションによるベクトル制御噴流の構造解析”, 日本機械学会 2012 年度年次大会講演論文集, CD-ROM, pp.1-4, 2012.
- [54] 小出貴弘, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNS による円形衝突噴流のよどみ領域の非定常解析”, 日本流体力学会年会 2012 講演論文集, USBメモリ, pp.1-3, 2012.
- [55] 小出貴弘, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNS による多重衝突噴流の解析”, 流体工学部門講演会講演論文集, pp.97-98, 2012.
- [56] 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流動・混合特性”, 第 26 回数値流体力学シンポジウム, USBメモリ, pp.1-4, 2012.
- [57] 小出貴弘, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNS による多重衝突噴流の流動特性解析”, 日本機械学会東海支部第 62 期総会・講演会, 掲載予定, 2013.
- [58] 太田 貴士, 笛吹 祐登, “LESによる非ニュートン粘性流体壁乱流の予測”, 日本機械学会 年次大会講演論文集, No. J054045, Sep. 2012.
- [59] 梶間 弘和, 太田 貴士, “低マッハ数乱流境界層における密度変動構造の挙動”, 日本機械学会 年次大会講演論文集, No. J054015, Sep. 2012.
- [60] 三田村 将, 太田 貴士, “弱圧縮性流れ解法によるキャビテーション挙動に伴う圧力波の予測”, キャビテーションに関するシンポジウム (第 16

- 回) 講演論文集, No. S1-9, Nov. 2012.
- [61] 宮下 真人, 太田 貴士, “非ニュートン粘性流体壁乱流のためのLES”, 日本流体力学会 第26回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, No. C08-4, Dec. 2012.
- [62] 坪井伸幸, 林光一, 小島孝之, “ローテーティング デトネーションエンジンの数値解析: 推力性能の評価”, 第44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 2012, 1E09, 2012.7.
- [63] 坪井伸幸, 吹揚活佳, 嶋田徹, “前処理法を用いたハイブリッドロケット内部の3次元非定常圧縮性流れの数値解析: 前処理法の効果”, 第56回宇宙科学技術連合講演会, 3H07, 2012.11.
- [64] 衛藤遙, 坪井伸幸, 琴浦哲史, 丸祐介, 藤田和央, “数値計算によるWaverider形状の空力特性評価: 傾角をつけた条件による揚抗比の変化”, 平成24年度宇宙航行の力学シンポジウム, 論文後刷り.
- [65] 坪井伸幸, 鈴木直洋, 船木一幸, “AGARD-B標準模型を使用したISAS超音速風洞の6分計測(その4)”, 平成24年度宇宙航行の力学シンポジウム, 論文後刷り.
- [66] 琴浦, 坪井, 丸, 藤田, “数値解析による極超音速機の空力特性評価: 単純化したWaverider形状の効果”, 第56回宇宙科学技術連合講演会, 3N05, 2012.
- [67] 琴浦, 坪井, 丸, 藤田, “スペースプレーンの空力形状の研究～ウェーブライダーにおける形状簡易化の影響”, 第13回宇宙科学シンポジウム, 相模原, (ポスター発表), 2013.1.
- [68] 武藤大貴, 坪井伸幸, 寺島洋史, “超臨界圧力下における衝撃波管問題の数値解析: 状態方程式の影響”, 日本機械学会九州支部第66期総会・講演会, 716, 2013年3月.
- [69] 坂井敦絢, 武藤大貴, 坪井伸幸, 寺島洋史, “数値解析による二次元超臨界噴流に対する圧力の影響の評価”, 日本機械学会九州支部第66期総会・講演会, 713, 2013年3月.
- [70] 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の数値解析: 詳細化学反応モデルの影響”, 火薬学会年会講演要旨集, pp.73-76, 2012.0524.
- [71] 杉安孝幸, 森井雄飛, 坪井伸幸, 朝原誠, 林光一, “詳細化学反応モデルを用いた水素/空気/水蒸気円筒デトネーションの数値解析”, 燃焼シンポジウム講演論文集, pp.540-541, 2012.1120.
- [72] 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: 開口比の影響”, 航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2012, 2B06, 2012年7月.
- [73] 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: スパイク形状による影響”, 第56回宇宙科学技術連合講演会, 2H10, 2012年11月.
- [74] 渡辺裕介, 坪井伸幸, 小島孝之, 林光一, “ローテーティングデトネーションエンジンの運転条件と性能評価: 高々度における性能”, 衝撃波シンポジウム, 2013年3月.
- [75] 荒木孝行, 森井雄飛, 坪井伸幸, 林光一, “化学反応モデルを用いたエチレン/酸素デトネーションの数値解析: 2次元解析によるデトネーション波面構造の調査”, 平成24年度衝撃波シンポジウム, 2A2-4, 2013.3.
- [76] 杉安孝幸, 森井雄飛, 坪井伸幸, 林光一, 朝原誠, “詳細化学反応モデルを用いた酸水素デトネーションの数値解析: 水蒸気濃度の影響”, 平成24年度衝撃波シンポジウム, 2A2-3, 2013.3.
- [77] 川上祐司, 坪井伸幸, 小島孝之, 林光一, “数値解析による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評価”, 平成24年度衝撃波シンポジウム, スパイク切断効果, 2A3-1, 2013.3.
- [78] 倉本健史, 武藤大貴, 坪井伸幸, 永井大樹, 浅井圭介, “極超音速流れにおける30°ランプ周りの衝撃波干渉に関する数値解析: スパン幅が流れ場構造に与える影響”, 平成24年度衝撃波シンポジウム, 3C-5, 2013.3.
- [79] 富樫 祐一, “少数分子反応ネットワークの展開”, 理研シンポジウム「細胞システムの動態

- と論理IV」, Apr. 2012.
- [80] 富樫 祐一, “少数分子反応ネットワーク～要素の離散性・多状態性・階層性に注目して”, 分子ロボティクス研究会 4月定例会, Apr. 2012.
- [81] 顧 傑, 富樫 祐一, 羅 志偉, “生体分子機械の粗視化モデリング手法の検証”, 第 56 回システム制御情報学会研究発表講演会 (SCI'12), May 2012.
- [82] Yuichi Togashi, “Cracking Reaction Networks Involving "Minorities" in the Cell: Theoretical and Computational Approaches”, 日本生物物理学会第 50 回年会 講演概要集, p. S1, Sept. 2012.
- [83] 富樫 祐一, “細胞内反応ネットワークと多種・多状態・少數性問題”, 定量生物学の会第 5 回年会, Nov. 2012.
- [84] 富樫 祐一, “粗視化モデルによるタンパク分子の力学応答の解析～網羅的比較研究に向けて”, 日本物理学会第 68 回年次大会 講演概要集第 2 分冊, p. 449, Mar. 2013.
- [85] Edyta Dzieminska, 林光一, “Shock wave - boundary layer interaction driving DDT”, 平成 24 年度衝撃波シンポジウム, 北九州国際会議場, 155-156, 2013 年 3 月 13 日～15 日.
- [86] 林光一, Edyta Dzieminska, 朝原誠, 坪井伸幸, “DDT: Recent Progress”, 第 50 回燃焼シンポジウム, 名古屋, 310-311, 2012 年 12 月 5 日～7 日.
- [87] Edyta Dzieminska, 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, 425-426, 2012 年 3 月 7 日～9 日.
- [88] 櫻澤歩, “ローテーティングデトネーションエンジンの数値解析におけるスケール効果の影響”, ‘日本機械学会’ 関東学生会第 52 回学生員卒業研究発表講演会.
- [89] 朝原 誠, 坪井 伸幸, 野々村 拓, 飯田 遼平, 林 光一, 山田 英助, “Weighted Compact Nonlinear Schemeを用いたデトネーションの数値解析”, 第 26 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, C01-3, Dec.2012.
- [90] 飯田 遼平, 朝原 誠, 林 光一, 坪井 伸幸, 山田 英助, “デトネーションの数値解析への新しいスキームの導入”, 平成 24 年度衝撃波シンポジウム講演論文集, pp.163-166, March.2013.
- [91] 長尾剛史, “AUSMDVスキームを用いた矩形管内を伝播するスピンドートネーションの特性の数値解析”, 火薬学会 2012 年度春季研究発表会 講演、慶應義塾大学, 2012 年 5 月 25 日.
- [92] 長尾剛史, “AUSMDVスキームを用いたスピンドートネーションの初期圧力依存性に関する数値解析”, 日本航空宇宙学会 第 44 回流体力学講演会 講演、富山国際会議場 大手町フォーラム, 2012 年 7 月 5 日.
- [93] 坂元玄太, 押谷潤, 後藤邦彰, 吉田幹生, “DEM による粒子間距離を考慮した見掛け配位数の検討”, 2012 年度 粉体工学会 秋期研究発表会 講演論文集, pp.21-22, Nov. 2012.
- [94] 坂元玄太, 押谷潤, 後藤邦彰, 吉田幹生, “均一径ランダム粒子層における充填率と見掛け配位数の関係式の検討”, 第 6 回 化学工学会 中四国若手CE合宿 要旨集, p.34, Dec. 2012.
- [95] 松本正行、高祥史、田中修平, “光電気変換型 DQPSK 信号再生”, 電子情報通信学会研究報告, OCS2012-43, 2012 年 10 月.
- [96] 松本正行, “光電気変換型DQPSK信号再生器の雑音除去能力”, レーザー学会学術講演会第 33 回年次大会, 29pIV-2, 2013 年 1 月.
- [97] 高原涉, “溶融金属の表面活性元素の周期表依存性に関する分子軌道論的考察”, 溶接学会全国大会講演概要, 第 91 集, pp.250-251, Sep. 2012.
- [98] 藤井 慶太郎, 佐竹 うらら, 榎本 俊之, “大口径シリコンウェーハの高平坦両面研磨加工に関する研究 - 駆動モータ負荷を考慮した加工条件の最適化 -”, 第 20 回精密工学会学生会員卒業研究発表講演会論文集, pp.123-124, Mar.2013.
- [99] 鶴谷 泰佑, 道畑 正岐, 林 照剛, 高谷 裕浩, “光放射圧プローブによる定在場スケールを用いた三次元形状のスキャニング測定（第 2 報）～定在場中のプローブ球の挙動解析～”,

- 2013 年度精密工学会春季大会学術講演会, Mar. 2013.
- [100] 吉兼匡昭, 道畠正岐, 林照剛, 高谷裕浩, “表面微細構造を用いた光放射圧プローブスタイルスの選択的捕捉（第 1 報）～微細構造による吸着力低減および光放射圧増強～”, 2012 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, pp. 491-492, Sep. 2012.
- [101] 松中大介, 加納明, 大西恭彰, 渋谷陽二, “Mg の変形双晶および界面転位における不純物効果に関する第一原理解析”, 日本材料学会第 17 回分子動力学シンポジウム, 2012.
- [102] 松中大介, 大西恭彰, 渋谷陽二, “Mg の変形双晶および双晶転位に関するエネルギー論的解析”, 日本機械学会M&M2012 材料力学カンファレンス, 2012.
- [103] 松中大介, 渋谷陽二, “第一原理計算による鉄表面上の酸素吸着に関する解析”, 日本機械学会第 25 回計算力学講演会, 2012.
- [104] 松中大介, “動的モンテカルロ法を用いた薄膜成長の原子シミュレーション”, 電気学会センサ・マイクロマシン部門大会第 29 回「センサ・マイクロマシンと応用システム」シンポジウム, 2012.
- [105] 松中大介, “1.マグネシウム合金における変形双晶と双相転位に関する原子論的研究”, 第 47 回高性能Mg合金創成加工研究会講演会/新学術領域研究「シンクロ型LPSO構造の材料科学」第 3 回若手交流会・特別研究会, 2012.
- [106] 松中大介, 大西恭彰, 寺本隆慶, 渋谷陽二, “マグネシウム材における双晶変形機構に関する原子論的研究”, 日本金属学会 2013 年春季大会, 2013.
- [107] 林洸樹, 垂水竜一, 譚田真人, 渋谷陽二, “非晶質金属における局所不均一変形の発生と成長 - 分子動力学・連続場変換法による解析 - ”, 日本機械学会関西支部第 88 期定時総会講演会講演論文集, 2013.
- [108] 石岡知大, 渋谷陽二, 垂水竜一, “熱電気弹性場のマルチフィジクス解析による電子線誘起超音波の波動特性”, 日本機械学会関西支部第 88 期定時総会講演会講演論文集, 2013.
- [109] 美馬英人, 渋谷陽二, “平均応力依存性を考慮した非連合流れ則に基づく金属ガラスの有限要素解”, 日本機械学会関西支部第 88 期定時総会講演会講演論文集, 2013.
- [110] 山田晋平, 垂水竜一, 渋谷陽二, “St.Venant-Kirchhoff 型超弾性体に対する共鳴振動解析”, 日本機械学会関西支部第 88 期定時総会講演会講演論文集, 2013.
- [111] 日原啓太, 渋谷陽二, “筋の非線形構成式を用いた咬合状態における頭蓋系力学場の有限要素解析”, 日本機械学会関西支部第 88 期定時総会講演会講演論文集, 2013.
- [112] 濱野貴至, 石岡知大, 梅垣俊仁, 渋谷陽二, 垂水竜一, “断続電子線照射による熱波と音波の共鳴現象の解析”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2013.
- [113] 大町侑平, 日原啓太, 渋谷陽二, “表面筋電計を用いた咬合時の咀嚼筋系の筋活動の計測”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2013.
- [114] 山口悠太, 垂水竜一, 山田晋平, 渋谷陽二, “非線形超音波共鳴理論の構築とその検証”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2013.
- [115] 稲葉築, 渋谷陽二, 垂水竜一, “モンテカルロ法によるゲージらせん転位の安定配置解析”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2013.
- [116] 寺本隆慶, 大西恭彰, 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異方性に及ぼす双晶欠陥エネルギーの影響”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2013.
- [117] 足立篤, 道畠正岐, 林照剛, 高谷裕浩, “WG モード解析に基づくマイクロプローブの直径計測原理に関する研究”, 2012 年度日本機械学会関西学生会卒業研究発表講演会, Mar 2013.
- [118] 上田真一, 道畠正岐, 林照剛, 高谷裕浩, “定在場スケールを用いた光放射圧プローブによる 3 次元形状計測の高分解能化”, 2012 年度日

本機械学会関西学生会卒業研究発表講演会,
Mar 2013.

- [119] 渡邊寛, 福士将, 船曳信生, 中西透, “デスクトップグリッドにおけるワーカの性能差を考慮した信頼度計算式の拡張”, 情報処理学会研究報告, 2012-HPC-137, No.16, pp. 1-8, Dec. 2012.
- [120] 江藤洋香、渡辺正和, “シータオーロラに伴う電離圏対流と沿磁力線電流: データ解析による検証に向けて”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 電磁圏物理学シンポジウム, 九州大学西新プラザ, 福岡, 2013年3月5日 (2013年3月4日—2013年3月5日).
- [121] 渡辺正和, 崎戸伸太郎, 田中高史, 品川裕之, 村田健史, “シータオーロラ形成にともなう電離圏対流と沿磁力線電流: MHDモデリング”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 電磁圏物理学シンポジウム, 九州大学西新プラザ, 福岡, 2013年3月5日 (2013年3月4日—2013年3月5日).
- [122] 小中原祐介, 渡辺正和, 藤田茂, 久保田康文, 品川裕之, 田中高史, 村田健史, “数値シミュレーションによるexchange cell再現の試み”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 電磁圏物理学シンポジウム, 九州大学西新プラザ, 福岡, 2013年3月4日 (2013年3月4日—2013年3月5日).
- [123] 花岡知幾, 渡辺正和, 藤田茂, 田中高史, 品川裕之, 村田健史, “昼側Region2 沿磁力線電流系の起源”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 電磁圏物理学シンポジウム, 九州大学西新プラザ, 福岡, 2013年3月4日 (2013年3月4日—2013年3月5日).
- [124] 渡辺正和, 崎戸伸太郎, 江藤洋香, 田中高史, 品川裕之、村田健史, “シータオーロラ形成にともなう沿磁力線電流と電離圏対流”, 国立極地研究所SuperDARNによる極域超高層大気研究集会, 国立極地研究所, 立川, 2013年2月15日 (2013年2月15日).
- [125] Watanabe, M., S. Fujita, Y. Kubota, H. Shinagawa, T. Tanaka, and T. Murata, “Dungey/interchange

hybrid-type magnetic flux circulation mode in the magnetosphere”, 第3回極域科学シンポジウム 第36回極域宇宙空間シンポジウム, 国立極地研究所, 立川, 2012年11月27 (2012年11月26日—2011年11月30日).

- [126] 花岡知幾, 渡辺正和, 藤田茂, 田中高史, 村田健史, 品川裕之, “Physical processes of dayside region 2 field-aligned currents associated with substorms: An MHD modeling”, 第132回地球電磁気・地球惑星圏学会, 講演番号B006-20, 札幌コンベンションセンター, 札幌, 2012年10月21日 (2012年10月20日—2012年10月23日).
- [127] 渡辺正和, 藤田茂, 久保田康文, 品川裕之, 田中高史, 村田健史, “Dungey型/交換型混成磁気圏磁束循環の数値シミュレーション”, 第132回地球電磁気・地球惑星圏学会, 講演番号B006-27, 札幌コンベンションセンター, 札幌, 2012年10月21日 (2012年10月20日—2012年10月23日).
- [128] 花岡知幾, 渡辺正和, 藤田茂, 田中高史, 品川裕之, 村田健史, “グローバルMHDシミュレーションにおける昼間側で閉じるRegion 2 沿磁力線電流系の生成機構について”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 第8回磁気圏-電離圏複合系における対流に関する研究会, キャンパスプラザ京都, 京都, 2012年9月11日 (2012年9月11日—2012年9月12日).
- [129] 渡辺正和, 花岡知幾, 崎戸伸太郎, “沿磁力線電流の磁気圏クロージャーに関する一考察”, 名古屋大学太陽地球環境研究所 第8回磁気圏-電離圏複合系における対流に関する研究会, キャンパスプラザ京都, 京都, 2012年9月11日 (2012年9月11日—2012年9月12日).
- [130] 渡辺正和, 藤田茂, 久保田康文, 品川裕之, 田中高史, 村田健史, “惑星間空間磁場斜め北向き時の磁気圏大規模磁束循環”, 日本地球惑星科学連合 2012年大会, 講演番号PEM30-P17, 幕張メッセ国際会議場, 千葉, 2012年5月24日 (2012年5月20日—2012年5月25日).

- [131] 花岡知幾, 渡辺正和, 藤田茂, 田中高史, 品川裕之, 村田健史, “磁気圏におけるRegion2 沿磁力線電流の生成機構について”, 日本地球惑星科学連合 2012 年大会, 講演番号PEM26-06, 幕張メッセ国際会議場, 千葉, 2012 年 5 月 22 日 (2012 年 5 月 20 日—2012 年 5 月 25 日).

4. 著書

- [1] 岸浩史、國貞雄治、笠井秀明、CSJカレントレビュー11, “未来を拓く元素戦略 持続可能な社会を実現する化学”, 日本化学会(化学同人, 2013) 第16章 貴金属代替の自動車排出ガス触媒 pp. 124-130.
- [2] 笠井秀明、岸浩史 大阪大学新世紀レクチャード計算機マテリアルズデザイン先端研究事例 II, “抵抗変化メモリの知的材料設計”, 大阪大学出版会, 2012.
- [3] K. Iwano, Chapter 8 of the book titled, “Material Designs and New Physical Properties in MX- and MMX-Chain Compounds”, Springer-Verlag Wien, "Theory of MX Chain Compounds".
- [4] 押山淳(他), “計算と物質(岩波講座「計算科学」第3巻)”, 岩波書店, 2012.
- [5] Kan Watanabe, Masaru Fukushi, Nobuo Funabiki and Toru Nakanishi, “Performance Evaluation of Check-By-Voting for Colluding Attack in Volunteer Computing Systems”, IAENG Transactions on Engineering Technologies, Lecture Notes in Electrical Engineering Volume 186, pp 33-48, 2013, ISBN: 978-94-007-5623-6, Springer.
- the Cu₂S₂ core of the CuA site”, May 2012, JST International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems (MSCRS2012), Nagoya University, Nagoya.
- [3] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, “電子伝達に働くCu_A部位の電子構造に関する理論的研究”, June 2012, 第12回日本蛋白質科学会年会, 名古屋国際会議場(名古屋).
- [4] 龜井 美里, 志賀 大悟, 舟橋 靖博, 増田 秀樹, 野田 勝紀, 内山 進, 福井 希一, 田嶋 邦彦, 菊地 晶裕, 鷹野 優, 中村 春木, 田中 俊樹, “パープル銅タンパク質のde novo 設計”, June 2012, 第12回日本蛋白質科学会年会, 名古屋国際会議場(名古屋).
- [5] 安部 雅人, 志賀 大悟, 鷹野 優, 中村 春木, 田中 俊樹, “新規設計コイルドコイルタンパク質にヘモシアニン銅サイトを構築する試み”, June 2012, 第12回日本蛋白質科学会年会, 名古屋国際会議場(名古屋).
- [6] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, “電子伝達部位Cu_Aの分子構造-電子構造相関の理論的研究”, Sep. 2012, 第6回分子科学討論会 2012 東京, 東京大学本郷キャンパス(東京).
- [7] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, “電子伝達部位Cu_Aの分子構造-電子構造相関の理論的研究”, Sep. 2012, 第62回錯体化学討論会, 富山大学(富山).
- [8] 鷹野 優, 喜多 真琴, 中村 春木, “Computational study of the phosphodiester hydrolysis of RNA by RNase H”, Sep. 2012, 第50回生物物理学会, 名古屋大学(名古屋).
- [9] 神谷 成敏, 真下 忠明, 鷹野 優, 昆 隆英, 栗栖 源嗣, 中村 春木, “Molecular dynamics simulations of dynein motor domain in explicit water”, Sep. 2012, 第50回生物物理学会, 名古屋大学(名古屋).
- [10] Yu Takano, Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, “Computational study of the relationship between the molecular and electronic structures of

5. その他

- [1] Shinji Shimojo, “Cyber Physical Testbed in Umekita”, March 2013, (Invited) the First Asian Workshop on Smart Sensor Systems, Cheju.
- [2] Yu Takano, Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, “DFT studies of the structural variety of

- the Cu_A site”, Oct. 2012, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka University, Toyonaka.
- [11] Yu Takano, Makoto Kita, Haruki Nakamura, “Density functional study of conformational preference of intermediates and transition states in the alkaline hydrolysis of dimethyl phosphate”, Oct. 2012, Conference on computational physics 2012, Nichii Gakkan, Kobe.
- [12] Akifumi Oda, Noriyuki Yamaotsu, Shuichi Hirono, Yu Takano, Shuichi Fukuyoshi, Ryoichi Nakagaki, Ohgi Takahashi, “Evaluations of conformational search accuracy of CAMDAS using experimental three-dimensional structures of protein-ligand complexes”, Oct. 2012, Conference on computational physics 2012, Nichii Gakkan, Kobe.
- [13] 鷹野 優, 喜多 真琴, 中村 春木, “リボヌクレアーゼHIのリン酸ジエステル加水分解反応機構に関する計算化学的研究”, Nov. 2012, 第 26 回分子シミュレーション討論会, 九州大学西新プラザ (福岡).
- [14] 鷹野 優, “分子環境を記述するためのPCM(分極連続体モデル)の使い方と金属蛋白質活性中心への適用”, Dec. 2012, 第 13 回大つくば物理化学セミナー, 城西大学鋸南セミナーハウス(安房).
- [15] 鷹野 優, “Platypus-QM/MMの開発と応用”, Jan. 2013, ISLiMソフトウェア研究開発報告会, 東京大学武田ホール (東京).
- [16] 鷹野 優, “電子伝達部位Cu_Aの分子構造-電子構造相関 -理論計算による機能性遷移金属蛋白質の演繹的デザインを目指して-”, Jan. 2013, 第 42 回三重大学CUTEセミナー, 三重大学(津).
- [17] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, “電子伝達部位Cu_Aの分子構造-電子構造-機能相関”, Jan. 2013, スーパーコンピュータワークショップ 2013, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター (岡崎).
- [18] 真下 忠彰, 福西 快文, 福田 育夫, 神谷 成敏, 鷹野 優, 中村 春木, “GPUを利用したZero-dipole summation法による静電相互作用計算の高速化”, Jan. 2013, 2013 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(HPCS2013), 東京工業大学 (東京).
- [19] 福田 育夫, 神谷 成敏, 荒川 貴将, 真下 忠彰, 鷹野 優, 中村 春木, “A simple non-Ewald scheme for calculating electrostatic interactions of charged particle systems: the zero-dipole summation method and the application to molecular systems”, Jan. 2013, 2013 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(HPCS2013), 東京工業大学 (東京).
- [20] Makoto Kita, Haruki Nakamura, Yu Takano, “Density functional study of the phosphodiester hydrolysis of RNA in RNA/DNA hybrid by RNase H”, Feb. 2013, 53th Sanibel Symposium, The King and Prince Golf & Beach Resort, Georgia.
- [21] 鷹野 優, 中田 一人, 大島 勘二, 山崎 秀樹, 中村 春木, 山中 秀介, “Platypus-QMおよびPlatypus-QM/MMの開発と応用”, Mar. 2013, 「グランドチャレンジ・アプリケーションの研究開発」公開シンポジウム, 東京大学山上会館 (東京).
- [22] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, “電子伝達に働くCu_A部位の分子構造-電子構造相関の理論的研究”, Mar. 2013, 日本化学会第 93 回春季年会, 立命館大学 (草津).
- [23] Katsuyoshi Matsushita and Macoto Kikuchi, “Multicanonical Simulation of Coupled Folding and Binding of Intrinsically Disordered Protein on a Lattice Gas Protein”, Oct/2012, (poster) CCP2012, Kobe.
- [24] Katsuyoshi Matsushita and Macoto Kikuchi, “Effects of metastable structures on intrinsic disorder of protein”, Jun/2013, (poster) The 2nd ISIDP, Yokohama.
- [25] 松下勝義, 菊池誠, “競合が誘起する天然変性の連想記憶模型による表現”, Mar/2013, (ポスター) 日本物理学会第 68 回年次大会 東広島.
- [26] 松下勝義, 菊池誠, “タンパク質の天然変性を生

- み出す競合的相互作用のデザイン”, Sep/2012, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜.
- [27] 白井伸宙、菊池誠, “天然変性タンパク質の構造ゆらぎを生かした密度変化誘起型シグナル伝達過程”, Sep/2012, (ポスター) 日本物理学会、2012 年秋季大会, 20pAB-7 横浜国立大, 横浜.
- [28] Katsuyoshi Matsushita, Kikuchi Macoto, “Structure Stability Control of mSin3 induced by Frustration-Induced Intrinsic Disorder of NRST/REST”, Sep/2012, (ポスター) 日本生物物理学会 第 50 回年会, 名古屋大学 千種キャンパス.
- [29] Nobu C. Shirai and Macoto Kikuchi, “The possible advantage of structural disorder of intrinsically disordered proteins in the new type of signaling mechanism”, Sep/2012, 日本生物物理学会 第 50 回年会, 1B1534 名古屋大学 千種キャンパス.
- [30] 白井伸宙、菊池誠, “天然変性タンパク質の構造ゆらぎを生かした密度変化誘起型シグナル伝達過程”, 2012 年 6 月, (ポスター) 第 12 回蛋白質科学会 1P-060、名古屋国際会議場.
- [31] Katsuyoshi Matsushita and Macoto Kikuchi, “Multicanonical Simulation of Coupled Folding and Binding of Intrinsically Disordered Protein on a Lattice Gas Protein”, Oct/2012, (poster) CCP2012, Kobe.
- [32] Nobu C. Shirai, Macoto Kikuchi, “Multicanonical simulation of the Domb-Joyce model and the Go model: new enumeration methods of self-avoiding walks”, Oct/2012, CCP2012, Kobe.
- [33] Katsuyoshi Matsushita, Munetaka Sasaki, Tsuyoshi Chawanya, “Ac Driven Chaos Motion of Domain Wall Spin-Torque Oscillator”, Oct/2012, (poster) ICAUMS2012, Nara.
- [34] Masayo Inoue, Kunihiko Kaneko, “Cooperative adaptive responses in gene regulatory networks with many degrees of freedom”, Feb/2013, the First Annual Winter q-bio Meeting, Honolulu.
- [35] 松下勝義, 佐々木志剛, 茶碗谷毅, “AC電流により駆動される閉じ込め磁壁のカオス運動”, Sep/2012, (ポスター) 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜.
- [36] 大浦 健志, 小渕 智之, 時田 恵一郎, “(p+r) 体相互作用をもつレプリケータ方程式”, Sep/2012, (口頭発表、19AD-9) 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜.
- [37] 井上雅世, 金子邦彦, “大自由度遺伝子発現制御モデルにおける適応応答の協同的進化”, Sep/2012, (口頭) 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜.
- [38] 井上雅世, 御手洗菜美子, Ala Trusina, “2 つのヒートショック反応系における反応機構の比較”, Sep/2012, (口頭) 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜.
- [39] Masayo Inoue, Namiko Mitarai, Ala Trusina, “Conflicted dissociation constant in two reaction mechanisms for heat shock response”, Sep/2012, (口頭) 第 50 回日本生物物理学会, 名古屋.
- [40] Nobu C. Shirai and Macoto Kikuchi, “New statistical enumeration methods for self-avoiding walks”, Sep/2012, (poster) 第 50 回日本生物物理学会, 名古屋.
- [41] 松下勝義, 佐々木志剛, 茶碗谷毅, “AC駆動される閉じ込め磁壁運動のカオス”, Aug/2012, (ポスター) 京大基研研究会 非平衡系の物理 – その普遍的理解を目指して, 京都.
- [42] 白井伸宙, “拡張アンサンブル法を用いた self-avoiding walk の数の推定”, Oct/2012, (oral) RIMS 研究集会「次世代計算科学の基盤技術とその展開」, Kyoto.
- [43] Nobu C. Shirai, “Statistical enumeration of self-avoiding polygons on a torus”, Jan/2013, (oral) Quantum Information via Statistical Mechanics - Counting Steps toward Realization, Kyoto.
- [44] 井上雅世, 金子邦彦, “大自由度遺伝子発現制御モデルにおける適応応答の協同的進化”, Sep/2012, (ポスター) 広島大学大学院理学研究科 第 4 回公開シンポジウム、広島.
- [45] 小渕智之, “Partition-Function Zeros of Spin

- Glasses and Singularities in Quantum Quench Dynamics”, March/2013, (招待講演) Statistical Physics of Disordered Systems and Its Applications (SPDSA2013) (=Prologue Series V of FSPIP2013), 仙台.
- [46] 小渕智之, “Basis of Effectiveness of Adaptive Cluster Expansion for the Inverse Ising Problem”, Nov/2012, Prologue Series III of FSPIP2013, 神奈川.
- [47] 小渕智之, “Random coding and replica method”, Jun/2012, (招待講演) Overture of FSPIP2013, 東京.
- [48] 増田愛, 佐々木顕, 時田恵一郎, “分子擬態と自己免疫疾患の数理モデル”, Mar/2013, (口頭) 日本物理学会第 68 回年次大会 東広島.
- [49] 増田愛, 佐々木顕, 時田恵一郎, “分子擬態と自己免疫疾患の数理モデル”, Nov/2012, (口頭) RIMS研究集会 第 9 回「生物数学の理論とその応用」, Kyoto.
- [50] 増田愛, 佐々木顕, 時田恵一郎, “分子擬態と自己免疫疾患の数理モデル”, Jan, 2013, (口頭) 研究集会「ウイルス感染と宿主防御の数理モデルの新展開」, Hokkaido.
- [51] Hajime Yoshino and Satoshi Okamura, “Strong reduction of the rigidity of repulsive contact systems at vanishingly low temperatures”, March 2013, APS March meeting, Baltimore, USA.
- [52] Mikami T, Munazah A, Kamachi Y, Kondoh H, “Functional Target Sequence of the Sox2-Pax6 Transcription Factor Complex”, 14 Dec. 2012, Annual Meeting of the Molecular Biology Society of Japan, Fukuoka, Japan.
- [53] J. Schumacher, R. M. Kerr and K. Horiuti, Chapter 2 in “Ten Chapters in Turbulence” ed. by P. A. Davidson, Y. Kaneda and K. R. Sreenivasan, “Structure and Dynamics of Vorticity in Turbulence”, December 2012, Cambridge University Press, Cambridge, U.K..
- [54] 堀内 潔, “乱流場における非平衡エネルギースペクトルのlarge-eddy simulationへの適用”, 2013 年 1月 24 日-25 日, 「平成 24 年度 文部科学省 数学・数理科学と諸数学・産業との連携研究ワークショップ, 亂流の数理解析」, 京都大学数理解析研究所.
- [55] 稲田慎, 芦原貴司, 原口亮, 荒船龍彦, 佐久間一郎, 山崎正俊, 本荘晴朗, 児玉逸雄, 中沢一雄, “心室冷却による除細動の可能性: シミュレーションによる検討”, 2012, 第 51 回生体医工学会大会 オーガナイズドセッション, 生体医工学, Vol. 50, Suppl. 1, p. 125.
- [56] 芦原貴司, 原口亮, 稲田慎, 中沢一雄, “不整脈臨床医はマルチスケールシミュレーションに何を求めるのか?”, 2012, 第 51 回生体医工学会大会 シンポジウム, 生体医工学, Vol. 50, Suppl. 1, p. 93.
- [57] K. T. Murata, “A Science Cloud for Space Weather”, February, 2012, The 1st AOSWA Workshop, Chiang Mai, Thailand.
- [58] K. T. Murata, “Activities of NICT Space Weather Project”, February, 2012, The 1st AOSWA Workshop, Chiang Mai, Thailand.
- [59] K. T. Murata, S. Watari and T. Nagatsuma, “A Virtual Observation Network System for Global Ground-Based Observatories”, August, 2012, AOGS2012, Singapore.
- [60] 村田 健史, “NICTサイエンスクラウドの挑戦”, 2012 年 9 月 10 日, 日本学術会議主催学術フォーラム「データと発見」, 東京.
- [61] Esmatullah Maiwand Sharify, Hiroki Saito, Harasawa Taikan, Shun Takahashi, Norio Arai, “Experimental and Numerical Study of Blockage Effects on Flow Characteristics around a Square-Section Cylinder”, 2012, Proceeding of ISEM-ACEM-SEM-7th ISEM 2012, Taiwan.
- [62] 西田 梨奈, 馬場 拓真, 高橋 俊, 新井 紀夫, 鳥居 正剛, “脳動脈瘤バイパス術を模擬した数値シミュレーション”, 2012, 第 26 回数値流体力学シンポジウム, 東京.
- [63] 斎藤 大樹, 原澤 大幹, 高橋 俊, 新井 紀夫, “管路内における角柱の流体・構造連成振

- 動に関する研究”, 2012, 第 26 回数値流体力学シンポジウム, 東京.
- [64] 斎藤 大樹, 原澤 大幹, Esmatullah Maiwand Sharify, 高橋 俊, 新井 紀夫, “柔軟壁による角柱の流体・構造連成振動の低減に関する研究”, 2012, 第 90 期日本機械学会流体工学部門講演会, 京都.
- [65] 西田 梨奈, 馬場 拓真, 高橋 俊, 新井 紀夫, 鳥居 正剛, “脳動脈瘤のバイパス手術における眼動脈への影響に関する研究”, 2012, 第 90 期日本機械学会流体工学部門講演会, 京都.
- [66] A. Oshiyama, “Materials Design through Computics: Nanostructures of Silicon and Carbon”, July 17-20, 2012, 10th Int. Meeting on High Performance Computing for Computational Science (VECPAR2012), Kobe, Japan.
- [67] A. Oshiyama, “Real-Space Density-Functional Approach to Electronic Properties of Nanostructures”, October 14-18, 2012, Conference on Computational Physics, Kobe, Japan.
- [68] J. Iwata, “Real-space grid density functional theory calculations”, July 12, 2012, Material Simulation in Petaflops era (MASP2012), Kashiwa, Japan.
- [69] J.-I. Iwata, “First-principles electronic structure calculations with K computer”, 2-7 Sep, 2012, Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2012), Pavia, Italy.
- [70] J.-I. Iwata, “First-principles electronic structure calculations for 100,000-atom systems with real-space density functional theory code”, 23-28 Sep, 2012, International Union of Material Research Societies - International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM 2012), Yokohama, Japan.
- [71] J.-I. Iwata, “Large-scale electronic structure calculations with real-space grid density functional theory code”, Sep. 27-28, 2012, International conference on Simulation Technology, Kobe, Japan.
- [72] J.-I. Iwata, S. Furuya, Y. Futamura, T. Sakurai, “Band Structure Calculations of Large-Scale Systems by Sakurai-Sugiura Method”, Oct. 11-13, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka University Hall, Japan.
- [73] 岩田潤一, “第一原理計算による半導体材料設計”, 2013 年 3 月 27 日, 第 60 回応用物理学会春期学術講演会シンポジウム “半導体モデリング・シミュレーション技術の現状と将来展望”, 神奈川工科大学.
- [74] 吉田 健, “高圧高温NMR分光法の開発と超臨界水中のダイナミクス・構造・反応の研究”, 2012 年 5 月, 高圧力の科学と技術, Vol.22, No.2, pp.153-163.
- [75] Kazuya Tsuboi, Tatsuya Hasegawa, “DNS analysis on correlation between local burning velocity and flame displacement speed of turbulent premixed flames”, August 2012, Warsaw, Poland.
- [76] Yutaka Yoshikawa, John P. Matthews, and Yoshihiko Ide, “Surface currents obtained from HF radar and satellite images: Synergistic approach for vertical shear estimation near the surface”, 2012 年 04 月, Radiowave Workshop 2012, PALAIS NEPTUNE, Toulon, France.
- [77] Yoshihiko Ide and Yutaka Yoshikawa, “Effects of diurnal cycle of surface heat flux on the seasonal variation of the wind-driven Ekman flow”, 2012 年 04 月, Radiowave Workshop 2012, PALAIS NEPTUNE, Toulon, France.
- [78] 吉川 裕, “海面加熱下での吹送流と風成乱流のスケーリング則”, 2013 年 3 月, 第 62 回理論応用力学講演会、東京工業大学.
- [79] 佐野由希子, 池田浩人, 川原光喜, 湯川美穂, 藤澤雅夫, 湯川栄二, 安藝初美, “プロペリシアジンと茶系飲料中ポリフェノールとの相互作用”, July 2012, 医療薬学フォーラム 2012 (2012.07.15 発表), Fukuoka.
- [80] Hirohito IKEDA, Yukiko SANO, Tomonori MATSUBARA, Mitsunobu KAWAHARA, Miho YUKAWA, Masaio FUJISAWA, Eiji YUKAWA, Hatsumi AKI, “Drug-Tea Polyphenol Interaction : (II) Incompatibility between Oral Solution of

- Antipsychotic Propericiazine and Tea-based Drink” , August 2012, 15th International Congress on Thermal Analysis and Calorimetry (2012.08.22 発表) , Osaka.
- [81] Mitsunobu KAWAHARA, Rika MORINAGA, Hirohito IKEDA, Tomonori MATSUBARA, Miho YUKAWA, Masao FUJISAWA, Eiji YUKAWA, Hatsumi AKI, “Drug-Tea Polyphenol Interaction : (I) Complexation of Piperazine Derivatives with Green Tea Polyphenol”, August 2012, 15th International Congress on Thermal Analysis and Calorimetry (2012.08.24 発表) , Osaka.
- [82] 井上望, 中島梨恵, 黒田菜月, 山中雅智, 池田浩人, 湯川美穂, 藤澤雅夫, 湯川栄二, 安藝初美, “リスペリドン内用液製剤間における茶カテキンとの不溶性複合体形成の差異”, September 2012, 第 74 回九州山口薬学会大会 (2012.09. 17 発表) , Fukuoka.
- [83] M. Okuyama (speaker) et al. and D. Ricinschi, “Preparation of BiFeO₃ Thin Films by Using Magnetic-Field-Assisted PLD and Dual Ion Beam Sputtering and Their Characterization”, June 2012, International Symposium on Integrated Functionalities, Hong Kong, China.
- [84] J. D. Baniecki (speaker) et al. and D. Ricinschi, “Electronic Transport in Donor Doped Sr_xTi_yO_{3-δ} Thin Films and Bulk Single Crystals: Experimental and Density Functional Studies”, June 2012, International Symposium on Integrated Functionalities, Hong Kong, China.
- [85] D. Ricinschi (speaker) and M. Okuyama, “Multiferroic properties of BiFeO₃-based materials with various spin state of magnetic ions”, December 2012, Asian Meeting on Ferroelectricity, Pattaya, Thailand.
- [86] M. Okuyama (speaker) et al. and D. Ricinschi, “Preparation of BiFeO₃ Films by Magnetic-Field-Assisted Pulsed Laser Deposition and Their Characterization”, December 2012, Asian Meeting on Ferroelectricity, Pattaya, Thailand.
- [87] T. Sato, “Baryon resonances and meson production reactions”, Jan. 15-18, 2013, Hadron physics with high-momentum hadron beams at J-PARC (at KEK, Japan).
- [88] T. Sato, “Neutrino-nucleus reaction from a few hundred MeV to GeV region”, Feb. 11-13, 2013, Future Prospects of Hadron Physics at J-PARC and Large Scale Computational Physics in 2013(at Tokai, Japan).
- [89] T. Sato, “Nucleon Resonance from Coupled Channel Approach for Meson Production Reactions”, Aug. 13-15, 2012, Nucleon Resonance Structure in Exclusive Electroproduction at High Photon Virtualities (at Columbia, South Carolina, USA).
- [90] T. Sato, “Dynamical coupled-channel approach for meson production reaction”, June 20-22, 2012, International Workshop on new partial wave analysis tools for next generation hadron spectroscopy experiments(at Camogli, Italy).
- [91] T. Sato, “Neutrino nucleus reaction in a few nucleon system”, June 11-15, 2012, The 4th International Symposium on Neutrinos and Dark Matter in Nuclear Physics(at Nara, Japan).
- [92] T. Fukuda, K. Hata, K. Yamamoto, A. Fuyuhiro, N. Ishikawa, “Multiple-Decker Phthalocyanines Exhibiting Low Energy Electronic Transition”, 2012 年 9 月, 40th International Conference on Coordination Chemistry, Valencia, Spain.
- [93] 山本和明, 福田貴光, 冬広明, 石川直人, “高積層型フタロシアニン型錯体の合成とその酸化種における赤外領域での $\pi - \pi^*$ 遷移の観測”, 2012 年 9 月, 第 62 回錯体化学討論会, 富山大学.
- [94] 福田貴光, 山本和明, 冬広明, 石川直人, “多層型フタロシアニン酸化種を用いた赤外領域における光吸収帯の観測と電子構造”, 2013 年 3 月, 日本化学会第 93 回春季年会, 立命館大学.
- [95] 山本和明, 福田貴光, 冬広明, 石川直人, “積層型フタロシアニン六量体の合成とその酸化種の電子構造の解明”, 2013 年 3 月, 日本化学会第 93 回春季年会, 立命館大学.

会第93回春季年会, 立命館大学.

- [96] 寺木 悠人 高原文郎, “磁気リコネクションX
ポイント周りからの放射スペクトル”, 2012年
2月, 愛媛大学(愛媛県松山市).
- [97] 小西美穂子, 松尾太郎, 芝井 広, 深川美里, 山本
広大, 須藤 淳, 伊藤洋一, 谷井良子,
HiCIAO/AO188/Subaruチーム, “直接撮像による
系外惑星探査における二種類の解析方法の比
較”, 2012年9月, 日本天文学会2012年秋季年
会、大分大学.
- [98] 小西美穂子, 松尾太郎, 芝井 広, 深川美里, 山本
広大, 須藤 淳, 伊藤洋一, 谷井良子, “Two
analysis methods for direct imaging of exoplanets”,
2012年4月, 第8回太陽系外惑星大研究会, 熱海.
- [99] M. Konishi, T. Matsuo, H. Shibai, M. Fukagawa, K.
Yamamoto, J. Sudo, Y. Itoh, R. Tanii, “Two ADI
analysis algorism in the Random Noise area”, October
2012, SEEDS Workshop, Hakone.
- [100] 花岡知幾, “昼側Region 2沿磁力線電流系の起
源”, 2013年2月, 九州大学大学院理学府地球
惑星科学専攻修士論文, 九州大学.
- [101] 江藤洋香, “シータオーロラに伴う電離圏対流
と沿磁力線電流”, 2013年2月, 九州大学理学
部地球惑星科学科特別研究論文, 九州大学.
- [102] 小中原祐介, “惑星間空間磁場斜め北向き時の
磁気圏構造”, 2013年1月24日, 九州大学理学
部地球惑星科学科特別研究発表会、九州大学.

第19回スーパーコンピューティングコンテスト（SuperCon2013）

名古屋大学情報科学研究科教授・大阪大学サイバーメディアセンター招へい教授 時田 恵一郎

1 世界的にもユニークな「電腦甲子園」

今年も2013年8月19日から23日までの5日間にわたって、高校生・高専生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト（SuperCon2013）」が開催されます。

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

過去の出場者が大学進学後に国際大学対抗プログラミングコンテストで活躍するなど、次世代の情報科学を担う若手育成にも貢献しており、2008年度の文部科学大臣賞も受賞しています。

1995年の第1回から2005年の第11回までは東京工業大学（東工大）学術国際情報センター（Global Scientific Information and Computing Center: GSIC）の単独主催でしたが、2006年の第12回からは大阪大学（阪大）（Cybermedia Center: CMC）も共同主催しています。富士川以東50Hz地域からの10チームは東工大で、60Hz地域からの10チームは阪大でプログラミングを行いますが、Wikiやポリコムなどで相互に交流し、開会式・表彰式などもポリコムを使って二元中継で行ってきました。

5日間にも渡る合宿型で、実際にスーパーコンピュータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなコンテストです。毎年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。2007, 2011年は阪大 CMC の SX-8R, 2009年はSX-9が使われました。今年は東工大 GSIC の Tsubame 2.0 を使って、GPU(Graphics Processing Unit)による超並列計算が有効な問題が出題される予定です。

2 予選

今年の予選課題は6月3日に以下の SuperCon2013 のホームページに公表されます。この予選課題を解

くプログラムを作成し、6月21日正午までにプログラムを含む必要書類を添付してメールで申し込みます。

予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくても学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。例えば、昨年の予選課題は「ナップザック問題」という計算科学の分野では有名な問題を変形したものが出題されました。過去の予選課題、本選課題は SuperCon2013 ホームページに全て掲載されています。

参加者が2名以上集まらない人のために、希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「スーパーコン1級」が認定されます。問題のレベルに応じて2級と3級もあります。

3 本選

本選の初日（8月19日）は開会式で参加チームの紹介、本選課題の発表、攻略法の解説があります。その後、各会場からスーパーコンピュータを遠隔利用するためのオリエンテーションと並列計算についての講義が行われ、チームごとに本選課題を解くためのプログラム設計に入ります。

本選2日目（8月20日）から4日目（8月22日）の午前中まではチームごとにプログラムを作成します。この間コンテストOBを含む大学生・大学院生がチューターとしてバグ取りなどを手伝えます（課題そのものに関する助言はしません）。

最終日の成果発表会、表彰式の後には懇親会も行われます。高校生・高専生の参加者たちと、両大学の教員、学生チューターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

みなさまも周囲の高校生に SuperCon2013への参加を呼びかけて頂ければ幸いです。

参考

SuperCon2013 ホームページ：<http://bit.ly/11eqWsG>

2013年度大規模計算機システム利用講習会

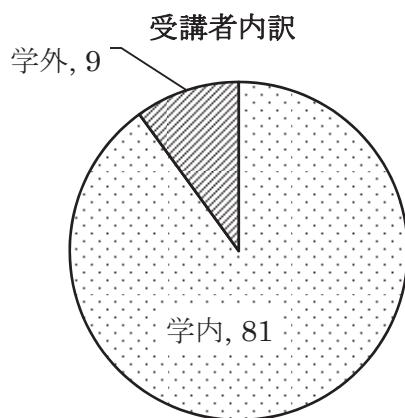
講習会名	開催日時	講師	開催場所
スーパーコンピュータ概要と スーパーコンピュータ利用入門	6月3日(月) 10:00～16:00	馬場(サイバーメディアセンター) 東田(サイバーメディアセンター) レーザー研 技術専門職員 情報基盤課 職員	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
MPIプログラミング入門	6月10日(月) 10:00～17:00	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
スーパーコンピュータと 並列コンピュータの高速化技法の基礎	6月11日(火) 10:00～17:00	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
IDL 利用入門	6月21日(金) 13:00～17:00	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
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	6月27日(木) 10:00～12:00	降旗(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
AVS 可視化処理入門	9月	下條(サイバーメディアセンター) 安福(サイバーメディアセンター) サイバネットシステム(株) 情報基盤課 職員	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
AVS 可視化処理応用	9月	レーザー研 技術専門職員 サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
スーパーコンピュータ概要と スーパーコンピュータ利用入門	9月	馬場(サイバーメディアセンター) 東田(サイバーメディアセンター) レーザー研 技術専門職員 情報基盤課 職員	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
スーパーコンピュータと 並列コンピュータの高速化技法の基礎	9月	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
MPIプログラミング入門	9月	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田教育実習棟 2階 第2教室
並列計算入門	9月27日(金) 13:00～15:00	降旗(サイバーメディアセンター)	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟 7階 会議室

テレビ会議システムによる講習会

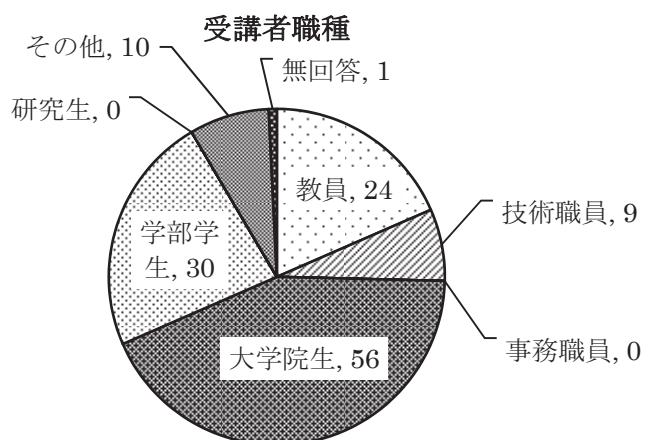
講習会名	開催日時	開催機関	受講場所
Gaussian講習会	8月9日(金) 13:00～15:00	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館3階大会議室

2012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

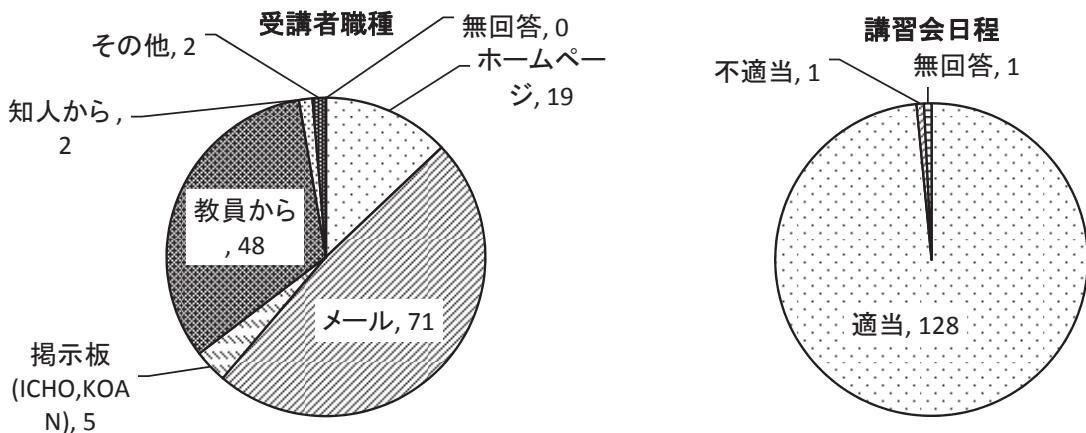
講習会名	開催日時	申込者数	受講者数	学内	学外	アンケート回収数
スーパーコンピュータ概要	5月17日(木) 13:30～16:30	47	45	42	3	34
IDL利用入門	6月7日(木) 13:20～17:00	8	8	8	0	7
並列プログラミング入門	6月11日(月) 10:00～12:00	17	11	10	1	11
MPIによる並列プログラミング	6月11日(月) 13:30～16:30	15	12	11	1	12
SXにおけるベクトル化・並列化	6月12日(火) 10:00～15:00	9	8	7	1	8
スーパーコンピュータ利用入門	6月14日(木) 13:30～16:30	10	6	3	3	6
AVS可視化処理入門	9月3日(月) 10:00～16:00	6	6	6	0	5
AVS可視化処理応用	9月4日(火) 10:00～16:00	2	5	5	0	3
HPCIの利用方法	9月25日(火) 10:00～12:00	9	7	6	1	7
新汎用コンピュータシステム説明	9月25日(火) 13:30～15:30	11	8	8	0	8
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	9月26日(水) 10:00～16:00	14	15	12	3	12
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	9月28日(金) 10:00～17:00	9	9	9	0	7
並列計算機入門	10月3日(水) 13:00～14:30	2	0	0	0	0
MPIプログラミング入門	11月1日(木) 10:00～17:00	7	11	11	0	10
合 計		166	151	81	9	78



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	無回答	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
スーパーコンピュータ概要	29	5	0	8	1	0	15	5	0	4	1
IDL利用入門	7	0	0	1	0	0	3	3	0	0	0
並列プログラミング入門	10	1	0	1	1	0	3	5	0	1	0
MPIによる並列プログラミング	11	1	0	2	1	0	5	3	0	1	0
SXにおけるベクトル化・並列化	7	1	0	1	1	0	3	3	0	0	0
スーパーコンピュータ利用入門	3	3	0	1	1	0	4	0	0	0	0
AVS可視化処理入門	4	1	0	1	1	0	1	1	0	1	0
AVS可視化処理応用	2	0	1	1	0	0	1	0	0	1	0
HPCIの利用方法	6	1	0	4	1	0	1	0	0	1	0
新汎用コンピュータシステム説明	8	0	0	3	1	0	4	0	0	0	0
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	9	3	0	0	0	0	5	6	0	1	0
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	7	0	0	0	0	0	5	2	0	0	0
MPIプログラミング入門	10	0	0	1	1	0	6	2	0	0	0
合計	113	16	1	24	9	0	56	30	0	10	1

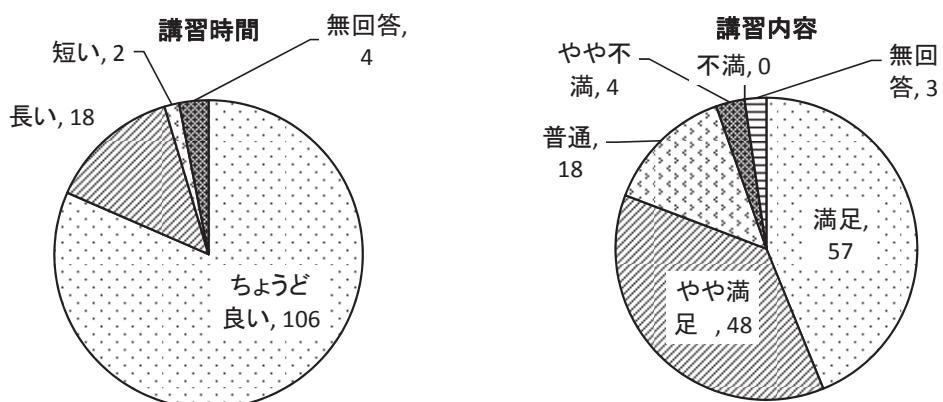


講習会名	今回の講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)							今回の講習会の開催日は適当でしたか。		
	ホームページ	メール	掲示板 (ICHO,KOAN)	教員から	知人から	その他	無回答	適当	不適当	無回答
スーパーコンピュータ概要	5	24	3	4	1	0	0	34	0	0
IDL利用入門	1	2	0	3	1	0	0	6	0	1
並列プログラミング入門	0	6	1	4	0	0	0	11	0	0
MPIによる並列プログラミング	3	7	0	4	0	0	0	12	0	0
SXにおけるベクトル化・並列化	0	3	0	5	0	0	0	7	1	0
スーパーコンピュータ利用入門	4	0	0	2	0	0	0	6	0	0
AVS可視化処理入門	1	3	0	3	0	0	0	5	0	0
AVS可視化処理応用	0	2	0	2	0	0	0	3	0	0
HPCIの利用方法	0	4	0	3	0	0	0	7	0	0
新汎用コンピュータシステム説明	1	6	0	2	0	0	0	8	0	0
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	0	7	0	7	0	0	0	12	0	0
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	1	2	0	5	0	1	0	7	0	0
MPIプログラミング入門	3	5	1	4	0	1	0	10	0	0
合計	19	71	5	48	2	2	0	128	1	1



講習会名	今回の講習会の開催日は適当でしたか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。
スーパーコンピュータ概要	適当 4回生になり研究室に配属されて、丁度落ち着いてきた時期であったから。 大学院生にとってこの時間帯は授業が空いていることが多いので。
IDL利用入門	適当 17:00以降開始なら、なおうれしい。
並列プログラミング入門	適当 研究し始めの時期で少しパソコンに触れ始めた頃なので。
SXにおけるベクトル化・並列化	不適当 必修の授業の講義と被っているため。
AVS可視化処理入門	適当 院試終了後の4年生の受講に丁度良い。授業が無いので教員も参加しやすい。 夏季休暇中であるので。
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	適当 授業期間中でなく講義とかぶらないため。 時間の空けやすい夏季休暇中だから都合が良かった。 正確には、講習会があると聞いた直後だったので、丁度良かった。
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	適当 夏季休暇中で時間が取りやすい。
MPIプログラミング入門	適当 学祭期間であったため。 参加し易い時期(行事が少ない)であること、MPIプログラミングを始めてから少し時間が経っているので、基本の確認ができる良かったと思うから。 授業の無い日だったので良かった。

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
スーパーコンピュータ概要	27	5	0	2	9	14	6	3	0	2
IDL利用入門	5	1	0	1	1	2	3	0	0	1
並列プログラミング入門	9	2	0	0	6	3	2	0	0	0
MPIによる並列プログラミング	10	2	0	0	7	4	1	0	0	0
SXにおけるベクトル化・並列化	7	0	0	1	7	1	0	0	0	0
スーパーコンピュータ利用入門	6	0	0	0	5	1	0	0	0	0
AVS可視化処理入門	4	0	1	0	5	0	0	0	0	0
AVS可視化処理応用	2	0	1	0	2	1	0	0	0	0
HPCIの利用方法	6	1	0	0	2	3	2	0	0	0
新汎用コンピュータシステム説明	8	0	0	0	2	4	2	0	0	0
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	10	2	0	0	4	7	1	0	0	0
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	2	5	0	0	3	4	0	0	0	0
MPIプログラミング入門	10	0	0	0	4	4	1	1	0	0
合計	106	18	2	4	57	48	18	4	0	3

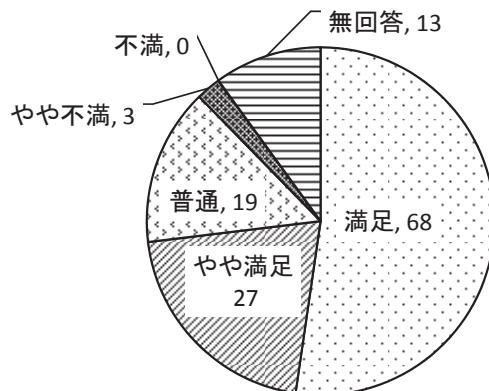


講習会名	今回の講習会の時間は適当でしたか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。	
スーパーコンピュータ概要	ちょうど良い	第一部、第二部、 <u>1時間ずつぐらい</u> がいい。 必要なことは聞けたので、 <u>適当な長さ</u> であった。
並列プログラミング入門	長い	できれば <u>1時間30分</u> でまとめてほしい。
MPIによる並列プログラミング	長い	午後からの続きを <u>長く感じた</u> 。
AVS可視化処理入門	短い	内容が多いので、 <u>時間がたりなかった</u> 。
AVS可視化処理応用	短い	内容が濃いので、 <u>時間が足りない</u> 。
HPCIの利用方法	長い	フローチャートで大まかに説明し、詳細は資料でということにすれば <u>時間を短くできそう</u> 。
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	ちょうど良い	スパコンの説明と実習も含めて <u>ちょうど良い長さ</u> で分かり易かった。
	長い	初心者を意識していたせいか <u>冗長に感じた</u> 。
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	長い	内容が盛り沢山だったので、 <u>2日間に分けて</u> 頂けると有難いと思ったため。 演習があるので理解し易いが <u>詰め込み過ぎ</u> な気がした。
MPIプログラミング入門	ちょうど良い	時間に余裕を持ってゆっくり説明していただくことができたし、質問する時間も十分に用意されていたため。

講習会名	今回の講習会の内容はどうでしたか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。
スーパーコンピュータ概要	満足 <u>聞きたいことを聞くことができたから。</u> <u>HPCI申請の説明が丁寧で分かりやすかったが、ベクトル型/スカラー型の話を重視すべきでは?前半の歴史的なストーリーは1/2くらい減らせると思う。</u>
	やや満足 <u>「京」コンピュータの予定している運用形態についての発表が無かったのが残念</u> である。
	やや不満 <u>スペコンの現状よりもスペコンの基本的なことをもっと教えてほしかったです。ど素人なもので....。</u>
	無回答 <u>用語等分からないものが多くあった。</u> しかしそれはこちらが門外漢で場違いだったからだと思う。 <u>利用実績をもっと見たかった。</u> ユーザーがどんな感じで使えるか、利用の仕方をもっと説明してほしい。(システム、性能は詳しく聞いてもユーザーとしてはどうしようもない。) <u>サイバーメディアセンター機の利用申請の仕方を知りたい。</u>
IDL利用入門	満足 <u>初心者向けで良かった。</u>
	やや満足 <u>基本から復習することが出来た。</u>
	普通 <u>普段から使っているので、応用的なことも知りたかった。</u>
並列プログラミング入門	満足 <u>基本的なところから教えていただけたので、知識のない私にもよく分かり助かりました。</u> <u>先生の話し方や説明も非常に分かりやすかったです。</u>
MPIによる並列プログラミング	やや満足 <u>MPIを使ったことがないので、途中からついていけなくなってしまった。</u>
SXにおけるベクトル化・並列化	満足 <u>個別の質問にも答えて頂けた。</u>
スーパーコンピュータ利用入門	満足 <u>話がとても分かりやすかったです。</u>
AVS可視化処理入門	やや満足 <u>もう少し演習に時間をかけていただきたかったです。</u>
	満足 <u>CMCの方に最初に説明していただいたので可視化の基礎から分かったように思います。</u> <u>分かり易かった。実習が良かった。</u>
AVS可視化処理応用	満足 <u>細かな質問にも対応して頂いて非常に参考になりました。また、場合によってはフルに参加できない場合もあるので質問タイムだけの参加も可能になったことは有難い</u> と思います。
新汎用コンピュータシステム説明	普通 <u>Hadoopはあまり馴染みがなくてよく分かりませんでした。</u>
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	満足 <u>丁寧に説明して頂いたおかげで分かり易かった。</u> <u>学んだ後、実習できたのが良かった。</u> <u>知りたいことの大体全部学べました。</u>
	やや満足 <u>スペコンの利用法が良く分かり、整理できたため。</u> <u>午前とかUNIXとか聞いた内容が多くあった。</u>
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技術の基礎	満足 <u>より効率的なプログラムを作成するための具体的な方法を(手を動かしながら)知ることができたため。演習用のサンプルも入念な準備行われており、非常に取り組み易かったです。</u> <u>最適化の中身など丁寧に解説されていて分かり易かった。</u>
	やや満足 <u>解答はテキストや各ディレクトリに用意するのではなく、後で発表して別の場所から見れるようにもいい気がしました。</u> <u>これから必要になるかも知れないが今の自分の研究にはあまり必要ではなかった。</u>
MPIプログラミング入門	満足 <u>とても基本的なところから丁寧に教えて頂くことができたため。分からなくなった時点ですぐ質問ができるように多くのスタッフの方が待機してくださっていたのがとても良かったと思ったため。</u>
	やや満足 <u>今、研究で使っているシミュレーションをMPIで並列化しようとしているが、そのアプリケーションはC++で動いているためFortranでは難しかった。</u> <u>難しかったですが、並列化がどんなものかを知れて良かったです。</u> <u>ちょっと進行速度が速いと思います。</u>
	普通 <u>初めてのMPI利用だったので難しかった。</u>
	やや不満 <u>内容は私にとって非常に難しかったが、プログラミング学習に対する興味が湧いた。</u>

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
スーパーコンピュータ概要	9	6	11	1	0	7
IDL利用入門	2	2	1	0	0	2
並列プログラミング入門	7	2	1	1	0	0
MPIによる並列プログラミング	10	1	1	0	0	0
SXにおけるベクトル化・並列化	7	1	0	0	0	0
スーパーコンピュータ利用入門	6	0	0	0	0	0
AVS可視化処理入門	1	3	0	0	0	1
AVS可視化処理応用	3	0	0	0	0	0
HPCIの利用方法	4	2	0	1	0	0
新汎用コンピュータシステム説明	2	3	3	0	0	0
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	5	5	0	0	0	2
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	4	1	1	0	0	1
MPIプログラミング入門	8	1	1	0	0	0
合計	68	27	19	3	0	13

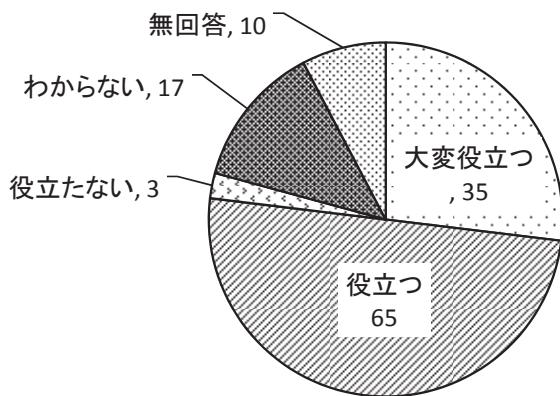
資料内容



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。
スーパーコンピュータ概要	やや満足 利用までの方法が分かり易くまとめてあるから。
IDL利用入門	満足 分かり易かった。
並列プログラミング入門	満足 詳細な使用方法が記載されているから。
MPIによる並列プログラミング	満足 資料は保存しておくと後々役に立ちそう。
スーパーコンピュータ利用入門	普通 カラー印刷が良かった。
AVS可視化処理入門	満足 初心者向けで分かり易かった。
AVS可視化処理応用	やや満足 量が多く消化できなかった。 分かり易かった。講師がスクリーンに映す資料と同じものであるとすごく良い。
HPCIの利用方法	満足 手順に従って書かれているので自習にも使って良い。
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	やや不満 ページを行ったり戻したりすることが多いから。
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	満足 スパコンに必要な情報がすべてのっていたと思う。
MPIプログラミング入門	満足 テーマ毎に分かれており、説明が丁寧で見易かった。参考書を併せて活用できそう。 詳しく書いていたと思う。
	やや満足 Fortranの基礎的なことを知らなかつたが、それなりにMPIについて理解できた。 メインの資料と演習用の資料がリンクして分かり易い。 詳しく充実していると思う。
	やや満足 初心者だったので、もっと細かい資料が良かった。

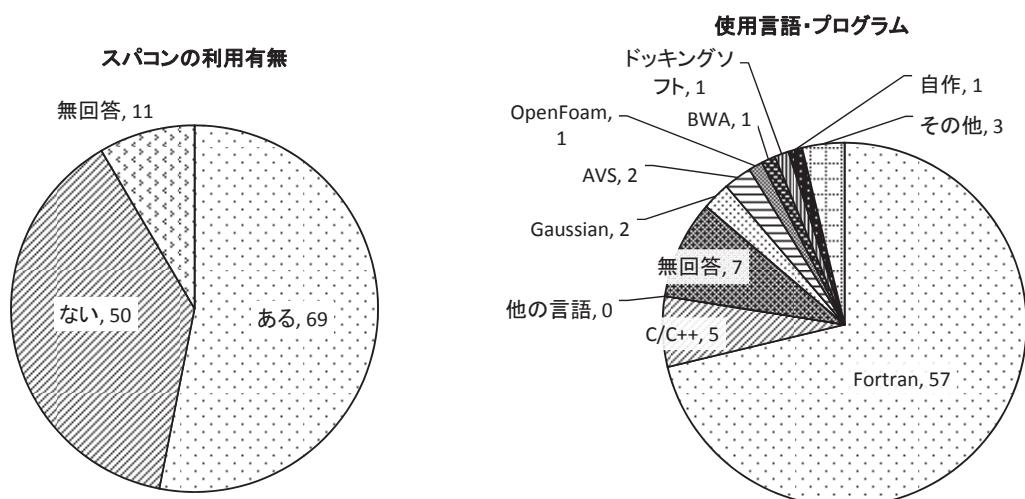
講習会名	今回の講習会は今後の研究に役立ちますか。				
	大変役立つ	役立つ	役立たない	わからない	無回答
スーパーコンピュータ概要	5	12	3	8	6
IDL利用入門	0	5	0	1	1
並列プログラミング入門	1	10	0	0	0
MPIによる並列プログラミング	3	7	0	2	0
SXにおけるベクトル化・並列化	2	5	0	1	0
スーパーコンピュータ利用入門	3	3	0	0	0
AVS可視化処理入門	1	3	0	0	1
AVS可視化処理応用	2	1	0	0	0
HPCIの利用方法	2	5	0	0	0
新汎用コンピュータシステム説明	4	2	0	2	0
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	3	7	0	1	1
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	1	3	0	2	1
MPIプログラミング入門	8	2	0	0	0
合計	35	65	3	17	10

研究への有用性



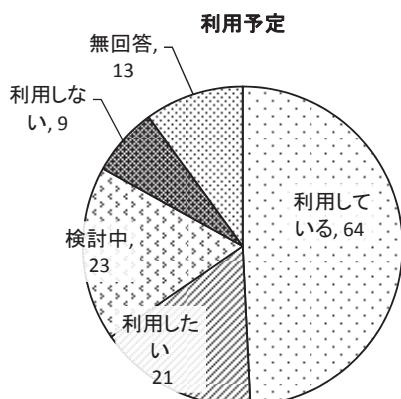
講習会名	今回の講習会は今後の研究に役立ちますか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。	
スーパーコンピュータ概要	役立たない	サイバーメディアセンター機の <u>利用方法</u> が知りたかった。 あくまで概要なので <u>実際の研究</u> に役立つ部分はあまりなかった。
IDL利用入門	役立つ	<u>MRIの画像data</u> 処理に使えそう。
並列プログラミング入門	役立つ	なんとか知っていた <u>並列プログラミング</u> を詳しく教えてもらえたので。
スーパーコンピュータ利用入門	役立つ	今すぐスパコンを1人で使えと言わると、 <u>使える自信</u> がまだ無いからです。
AVS可視化処理入門	役立つ	今後の <u>研究</u> で <u>使用する予定</u> がある。
AVS可視化処理応用	大変役立つ	可視化は <u>プレゼン</u> にも <u>効果的</u> であり、現象の理解にも重要。
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	大変役立つ	研究でSX9を使うから。
	役立つ	今後利用できる。 直接利用することはないと思うが、共同研究でスパコンの出力を扱うこともあるので <u>教養程度</u> に参考になる。
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	役立つ	多くの事を教えていただいたので、後は <u>自分の努力次第</u> 。 プログラムの基礎を思い出し、よく <u>使えるようになった</u> と思う。
	わからない	ベクトル化するほどの長いループを(計算に時間を必要とする) <u>計算するか</u> わからない。
MPIプログラミング入門	大変役立つ	シミュレーションをするときに <u>今後使用すること</u> になると思います。 今までよく分からずに使っていたところの中で明らかになった部分があるので、 <u>より理解を深めた上でMPI</u> を用いることができるため。
		MPIについてよく分かった。 これからMPIに取り組むにあたって効率よく学ぶことができた。
	役立つ	シミュレーションを行うことがあった時に役立つと思った。 シミュレーションにMPIを組み込んで計算させる予定。

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ことがありますか。								
				あると回答されたかたへ。利用方法について。(複数回答可)					アプリケーション
	ある	ない	無回答	Fortran	C/C++	他の言語	無回答	その他	
スーパーコンピュータ概要	15	13	6	12	1	0	2	0	4 ドッキングソフト OpenFOAM 自作 Gaussian
IDL利用入門	2	4	1	2	0	0	0	0	0
並列プログラミング入門	3	8	0	1	1	0	1	1	0
MPIによる並列プログラミング	7	5	0	5	1	0	1	1	0
SXにおけるベクトル化・並列化	3	5	0	2	1	0	0	0	0
スーパーコンピュータ利用入門	6	0	0	5	0	0	1	1	1 Gaussian03
AVS可視化処理入門	3	1	1	3	0	0	0	0	0
AVS可視化処理応用	3	0	0	3	0	0	0	0	0
HPCIの利用方法	7	0	0	6	1	0	0	0	2 BWA AVS
新汎用コンピュータシステム説明	7	1	0	7	0	0	0	0	1 AVS
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	4	7	1	3	0	0	1	0	0
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	5	1	1	4	0	0	1	0	0
MPIプログラミング入門	4	5	1	4	0	0	0	0	0
合計	69	50	11	57	5	0	7	3	8



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。	
スーパーコンピュータ概要	利用している	ペクトル計算機が利用できるから。
並列プログラミング入門	検討中	研究が本格的に始まってからでないと必要かどうかわからないから。 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点として利用予定。
HPCIの利用方法	利用したい	HPCIの公募課題で資源が割り当てられたばかりだから。
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	利用したい	研究で行っているシミュレーションの高速化のため。
	検討中	決定権は持っていない。
	利用しない	単に研究分野的に必要となる場合が少ない。ただ、スパコン利用を選択肢として常に意識したい。
MPIプログラミング入門	検討中	今後の研究活動で必要となりうるため。 お金と相談です。

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	無回答
スーパーコンピュータ概要	10	3	11	2	8
IDL利用入門	2	1	0	3	1
並列プログラミング入門	4	4	1	2	0
MPIによる並列プログラミング	7	3	1	1	0
SXにおけるベクトル化・並列化	4	3	1	0	0
スーパーコンピュータ利用入門	3	2	1	0	0
AVS可視化処理入門	3	0	1	0	1
AVS可視化処理応用	3	0	0	0	0
HPCIの利用方法	5	1	0	0	1
新汎用コンピュータシステム説明	8	0	0	0	0
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	4	2	4	1	1
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	5	0	1	0	1
MPIプログラミング入門	6	2	2	0	0
合計	64	21	23	9	13



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。
スーパーコンピュータ概要	ビデオ撮影が邪魔。 京ではCore単位のメモリー量が少ないと聞いてるのでその対策、実例があれば... <u>サイバーメディアセンター機の利用方法が知りたかった。</u> (HPCI課題申請ではなく普通の利用について。)時間を守ってほしい。
IDL利用入門	本日はありがとうございました。
並列プログラミング入門	タンパクのシミュレーションに関する講座があれば受講したい。
MPIによる並列プログラミング	ありがとうございました。 MPIの例をもう少し見たかったです。
スーパーコンピュータ利用入門	今日はありがとうございました。 基礎的な事が聞けて良かったです。
HPCIの利用方法	プライマリセンター、セカンダリセンターの違いや役割等。 実演していただいたので分かり易かったです。
スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	ありがとうございました。
スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎	情報量が多くすぎた気がした。もっと内容を絞つてもいいかと思った。
MPIプログラミング入門	<u>C/C++での書き方も知りたい。</u> とても良かったです。 viで編集した後の戻り方がわからませんでした。 <u>プロセスと実行のイメージがわきにくい学生がいたので、少し図を加えて頂けると良いか</u> と思います。説明は分かり易かったです。

2013 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況

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

第一回の募集では、大阪大学の資源を利用する課題として 9 件が採択されました。

■ 大阪大学計算機資源を利用する採択課題一覧

利用枠	利用資源	研究課題名	課題責任者 所属機関	利用機関
京以外 一般利用	SX-8R SX-9	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション	九州大学	九州大、東京大、大阪大
京以外 一般利用	SX-8R SX-9 PCクラスタ	スピノーダル分解による乱流抑制効果の解明	大阪大学	大阪大
京 一般利用 H24年度公募	PCクラスタ	大規模計算機空気冷却風速場の高解像度解析と 適応的クラウドロボット技術による実効的な計測融合オペレーション	大阪大学	東北大、九州大、大阪大
京 一般利用 H24年度公募	PCクラスタ	スーパーコンピューターで解き明かす超弦理論の物理	筑波大学	筑波大
京 一般利用 H24年度公募	PCクラスタ 共有DISK	マウス細胞分化の大規模トランスクリプトーム解析	独立行政法人 理化学研究所	独立行政法人 理化学研究所、大阪大
京 一般利用 H24年度公募	SX-8R SX-9	磁場中におけるRichtmyer-Meshkov不安定の非線形成長過程	大阪大学	東京工業大、大阪大
京以外 産業利用	SX-9	南海トラフ巨大地震による長周期地震動評価	東京大学	東京大
京 一般利用 H24年度公募	SX-9	共変型非アファイン粘弹性に基づく界面活性剤添加における 抵抗低減機構の解明	大阪大学	大阪大
京 一般利用 H24年度公募	SX-8R SX-9	レーザープラズマの多次元位相空間シミュレーション	大阪大学	大阪大

2013年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況

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

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

2013年度の課題募集には合計55件の応募があり、東京大学情報基盤センターで開催された課題審査委員会及び運営委員会にて審議され、44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。なお、本年度からは、革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の計算機システム（HPCIシステム）の一部として、当構成拠点が提供する計算機システム（HPCI-JHPCNシステム）を当拠点共同研究の研究資源として運用することになりました。

今後の課題申請については、<http://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>をご覧ください。

受付番号	研究課題名	課題責任者 所属機関	利用大学
jh130007	さまざまなアキテクチャからなる計算機システムの性能評価と最適化	九州大学	北大、東北大、東大、東工大、名大、京大、阪大、九大
jh130018	大規模計算機空気冷却風速場の高解像度解析と適応的クラウドロボット技術による実効的な計測融合オペレーション	大阪大学	東北大、阪大、九大
jh130019	広域分散ファイルシステムに基づく「ビッグテーブル」型の超大規模データ処理系の構築と機能および性能評価	大阪大学	北大、東大、東工大、阪大、九大
jh130040	輻射流体シミュレーションコードの高速化手法に関する研究	大阪大学	阪大
jh131002	分散クラウドシステムにおける遠隔連携技術	北海道大学	東大、東工大、阪大、九大

2013 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。

2013 年度から制度を改め、募集を通年とし、利用負担金も研究者と同じ利用料金体系になりました。

■ 利用中の企業 (2013 年 4 月時点)

- ・NPO 法人バイオグリッドセンター
- ・技術研究組合单層 CNT 融合新材料研究開発機構

■ 企業利用の案内

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

2013 年度大規模計算機システム利用相談員

【利用相談員】 委嘱期間：2013 年 4 月 1 日～2014 年 3 月 31 日

氏 名	所 属	職 名
高木 達也	大阪大学大学院薬学研究科	教 授
外川 浩章	大阪大学核物理研究センター	助 教
福田 優子	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	技術専門職員
山井 成良	岡山大学情報統括センター	教 授
板野 智昭	関西大学システム理工学部	准教授
藤 堅正	近畿大学理工学部	講 師

2013 年度大規模計算機利用システム相談員 自己紹介

高木 達也

(大阪大学大学院薬学研究科 医療薬学専攻 教授)

大阪大学大学院薬学研究科の高木達也と申します。よろしくお願ひ申し上げます。

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

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

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

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、スペコンの整備・運用を行っています。アルゴリズム等の深い相談には対応できませんが、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います。

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。昨年度から 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。しかし、システムが複雑・多様になっており、利用相談も難しくなっていると実感し、勉強になりました。これからは、CMC の先生方とも、もっと協力して対応させていただきたいと思っていますので、よろしくお願ひいたします。

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

2004年からは、CMCと共に講習会を開催させていただいている。実際に講習会を受講された方は、聞いてよかったですと言つてくださることが多いです。特に、昨年度からは、東北大学サイバーサイエンスセンターとも協力して、実習形式の講習会が開催されていて、分かりやすいと好評です。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ね。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、スペコンの概念や、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。ここが分からぬ、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。

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

本年度も微力ながら皆様のお役に立てれば幸いです。

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・応用物理学准教授)

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

さて、私の専門は流体物理で、研究と計算機は切っても切り離せない関係にあります。計算機環境は愛用のラップトップにインストールしたLinuxで、これまでの研究時間の大半は愛用計算機の前で過ごしてきました。ただし最近は雑用が多く、机の前に座って時間をかけて一つの疑問について執念深く熟考するという習慣が激減しています。これも時代の流れかとは思いますが、一生をかけて達成すべきような本当に大きな意義のある実のある仕事にとりかかることが難しい、大変世知辛い世の中に周りの環境は変化しているように感じます。こんなことを国全体を挙げてやっているのでは、現状維持でさえ難しい日本の国力が落ちるばかりではないかと心配していますが、さりとて政治家に立候補しようとは思っていません。話は脱線しました。実験等における学生指導などで最近は大型計算機の使用時間が減っていますが、皆さんのお役に立てればと思っています。

ふじ 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おります。

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

大規模計算機システム FAQ

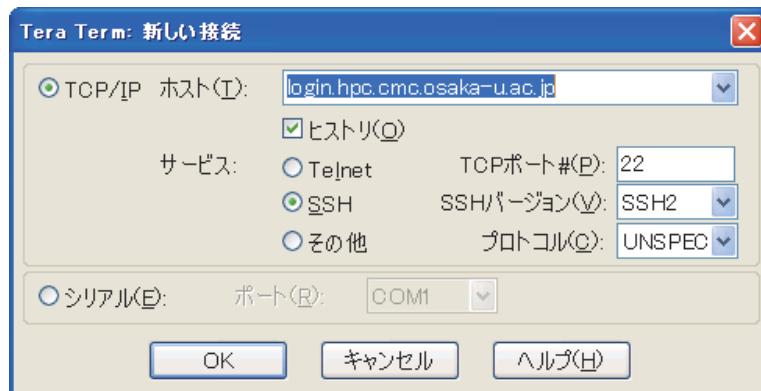
I. 利用方法

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）が間違ってないか	
		パスワードが間違ってないか	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 : mpicc、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
		リンクオプションの指定順が違う	リンクオプションは対象ファイルより後、 また”-l”は”-L”より後に指定する
		文字コードが「SJIS」、改行コードが「CRLF」になっている (主に Windows 上で作成したファイルを FTP 転送した場合に発生)	以下のコマンドで文字コードを「EUC」、 改行コードを「CR」に変換する nkf -e -Lu [ファイル] > [一時ファイル] mv [一時ファイル] [ファイル]
		配列のサイズなど、使用メモリサイズが大きい	以下のオプションを指定する Intel コンパイラ： -mcmmodel=large -shared=intel SX クロスコンパイラ： -size_t64 (C/C++)、-ew (Fortran)

3. プログラムの実行について

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

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

キューネーム	バッチジョブ投入先
SX9	SX-9
SX8F	SX-8R
SX8L	SX-8R
PCC	PCクラスタ

キューネーム	バッチジョブ投入先
HCC-S	汎用コンクラスタ(吹田)
HCC-T	汎用コンクラスタ(豊中)
HCC-M	汎用コンクラスタ(箕面)

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ネームの指定)
#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。	
		キューネームが違う	”#PBS -q”で指定しているキューネームを確認する
		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。

% 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)
% sstatpcc	—— (PCクラスタのバッチリクエストの実行開始時間を確認)
% sstathcc	—— (汎用コンクラスタのバッチリクエストの実行開始時間を確認)

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 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](YYYYYY) 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 InternetExplorer 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ります。また、「講習会資料」のタブを選択すると講習会で使用した資料もご覧になります。

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

III. 利用手続

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ります。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/kigyo/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。パスワード変更届けは次の 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/shiyou.html>

IV. その他

1. 他大学の情報基盤センターの情報について

他大学の情報基盤センターの情報については次の URL をご覧ください。

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

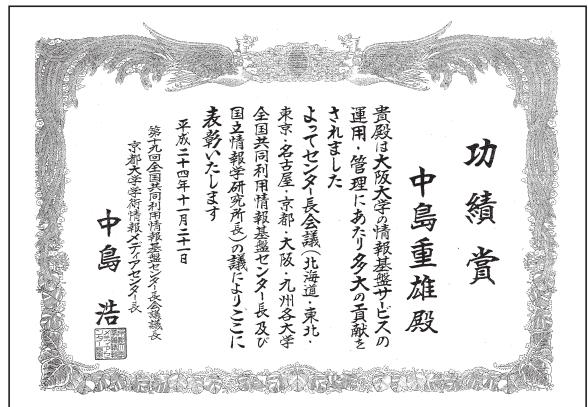
全国共同利用情報基盤センター顕彰「功績賞」受賞について

平成 24 年 6 月 1 日に開催されました、第 19 回全国共同利用情報基盤センター長会議において、本学情報推進部情報基盤課課長補佐中島重雄氏の全国共同利用情報基盤センターへの多大な貢献が評価され、全国共同利用情報基盤センター顕彰「功績賞」の授与が決定されました。

中島重雄氏は、昭和 47 年にサイバーメディアセンターの前身である大型計算機センターに採用となり、今日まで約 40 年間にわたり、大型計算機を主としたシステム運用・管理に携わり、平成 12 年 4 月以降は、キャンパスネットワーク（大阪大学総合情報通信システム（ODINS））の設計・構築の中心的な役割を果たされ、ネットワークの高速化、高度化、セキュリティの強化を進め、大阪大学の教育、研究、業務を支える情報基盤整備に多大なる貢献をされました。

現在は、情報システム全般を担当されるとともに、技術職員の取りまとめ役として活躍されています。

授与式は、平成 24 年 11 月 21 日に第 34 回全国共同利用情報基盤センター研究開発連合発表講演会（右、写真）において行われました。



サイバーメディアセンターITコア棟の新営・吹田本館改修について

このたび、サイバーメディアセンターITコア棟の新営及び本館の耐震改修を行います。

最先端の技術を導入したITコア棟には、平成 26 年度に次期スパコンを設置するとともに、学内の多くのサーバを集約します。これにより、大学全体の計算資源の集約化、クラウド化を効率的に行うことで、IT関連コスト及びCO₂排出量の削減をめざします。

また、吹田本館の耐震改修により、施設を使用する教職員の安全を確保するものです。

さらに、本館には、大規模可視化装置や共同研究スペースとして、ビジュアライゼーション・ラボやサイバーメディアコモンズの設置が予定されており、本センターが目指す高度情報化技術にもとづく全学支援の取り組みを充実させるとともに、グローバル e-サイエンスセンター構想をさらに推し進め、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点として、HPCIの推進、国際的な機関との連携、計算科学・計算機科学の進展に大きく貢献するものです。

新しくなるサイバーメディアセンター吹田本館に是非お越し下さい。

利用規程等

・ 規程関係	99
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	99
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	101
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	102
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員内規	102
大型計算機利用大阪地区（第6地区）協議会規程	103
ネットワーク専門部会内規	103
・ 附表	105
大規模計算機システム ホスト一覧	105
SX-8R, SX-9及びPCクラスタのジョブクラス一覧	105
2012年度大規模計算機システム稼働状況	106

・規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

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

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

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

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

第4条 大規模計算機システムを利用しようとする者は、所定の申請を行い、センター長の承認を受けなければならない。ただし、前条第6条の者は、この限りでない。

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

第5条 センター長は、前条第1項による申請を受理し、適当認めたときは、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、利用経費の負担を要しない。

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

第13条 利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。

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

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

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

第16条 センター長は、この規程又はこの規程に基づく定めに違反した者その他大規模計算機システムの運営に重大な障害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できる。

第17条 この規程に定めるもののほか、大規模計算機システムの利用に関し必要な事項は、センター長が定める。

附 則

- 1 この規程は、平成12年4月1日から施行する。
- 2 大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程(昭和43年9月18日制定)は、廃止する。
- 3 この規程施行前に大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程に基づき、平成12年度の利用承

認を受けた利用者にあっては、この規程に基づき利用の登録
があつたものとみなす。

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成13年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

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

附 則

この改正は、平成15年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年2月15日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成20年4月16日から施行する。

附 則

この改正は、平成23年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年5月10日から施行する。

附 則

この改正は、平成25年4月1日から施行する。

大規模計算機システム利用負担額一覧

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金

基本負担額	シェア値	利用可能な計算機資源量				ディスク容量制限	
		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	4	32GB	4	256GB	1TB	
	50	8	-	8	512GB	2TB	
	100	-	-	-	-	3TB	
	260	-	-	-	-	4TB	
	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ル機能により割り当てられる。なお、PCクラスタには基本負担額による制限を設けない。
- 3 基本負担額1万円の場合、登録者数は1名とする。その他の場合、登録者数は特に制限を設けない。
- 4 上記の基本負担額以外に50万円単位での申請を1,000万円を上限として受け付ける。その場合のシェア値及びディスク容量制限の設定については以下のとおりとする。
シェア値は、300万円未満が基本負担額の1.3倍、300万円以上が基本負担額の1.5倍とする。
ディスク容量制限は、50万円につき0.5TBを加算する。
- 5 大学院の学生及びこれに準ずる者が基本負担額1万円で利用する場合、負担額を半額とする優遇措置を受けられる。
- 6 民間企業等に所属する者は、科学研究費補助金での利用又はHPCI（革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ）で採択された課題での利用を除き基本負担額1万円は利用できないものとする。
- 7 基本負担額1万円でSX-9を利用する場合、CPUは専有利用できないものとする。

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。

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

3 利用有効期間を超えた場合は、利用を停止するものとする。

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

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

附 則

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

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年4月1日から施行する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員内規

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

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

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

第3条 相談員の任期は、当該委嘱する日の属する年度の末日までとする。ただし、再任を妨げない。

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

第5条 相談員には、センター利用相談及び指導の必要上、計算機利用のために特定の番号を与えることができる。

2 前項に係る利用経費の負担額は免除する。

第6条 センターは、相談員に対し相談及び指導上必要な資料もしくは情報を提供するものとする。

第7条 相談員には、第5条第1項の目的以外においても、一定量の大規模計算機システム使用にかかるジョブ優先処理等の特典を与えることができる。

第8条 この内規に定めるもののほか、必要な事項については、高性能計算機システム委員会で検討後、教授会の議を経てセンター長が別に定めるものとする。

附 則

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

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

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

附 則

この改正は、平成25年4月1日から施行する。

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1条に規定する専門部会として、ネットワーク専門部会（以下「専門部会」という。）を置く。

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

第3条 専門部会は、次の各号に掲げるものをもって構成する。

1 協議会規程第3条に規定する会員

2 その他専門部会が必要と認めた者

第4条 専門部会に部会長を置き、第6地区協議会会長が指名する。

2 部会長は、専門部会を招集し、その議長となる。

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

附 則

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

・附表

大規模計算機システム ホスト一覧

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

※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、PC クラスタ、汎用コンクラスタのジョブクラス一覧

スーパーコンピュータと PC クラスタ、汎用コンクラスタのジョブ資源制限値は次のとおりです。

クラス	経過時間		CPU 数		主記憶(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)				
HCC-T	1	制限無し	2	128	4	256
HCC-S	1	制限無し	2	64	4	128
					12	384
HCC-M	1	制限無し	2	16	4	32

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

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

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

2012年度大規模計算機システム稼働状況

稼働状況

(単位 : 時間)

事項	月	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	合計	月平均
稼働時間	計算サービス時間 (A1)	720:00	736:45	707:40	744:00	744:00	720:00	743:00	720:00	730:15	744:00	672:00	734:00	8715:40	726:18
	初期化・後処理時間 (A2)	0:00	0:15	0:15	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:30	0:00	0:00	0:30	1:30	0:07
	業務時間 (A3)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	小計	720:00	737:00	707:55	744:00	744:00	720:00	743:00	720:00	730:45	744:00	672:00	734:30	8717:10	726:25
保守時間 (B)	0:00	7:00	12:05	0:00	0:00	0:00	1:00	0:00	8:15	0:00	0:00	9:30	37:50	3:09	
故障時間 (C)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
その他の時間 (D)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
運転時間 (A+B+C+D)	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	739:00	744:00	672:00	744:00	8755:00	729:35	
稼動率 (A/(A+B+C+D)%)	100.00	99.06	98.32	100.00	100.00	100.00	99.87	100.00	98.88	100.00	100.00	98.72	---	99.57	
運転日数 (E)	30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30	
一日平均稼動時間 (A/E)	24:00	23:46	23:35	24:00	24:00	23:58	24:00	23:34	24:00	24:00	23:41	---	23:52		

処理状況

項目 処理月	SX-8R				SX-9		SX合計		PCクラスタ	
	パッチ処理		会話処理		パッチ処理				パッチ処理	
	件数	CPU時間 (時:分:秒)	件数	CPU時間 (時:分:秒)	件数	CPU時間 (時:分:秒)	件数	CPU時間 (時:分:秒)	件数	経過時間 (時:分:秒)
4	3,173	78254:21:49	285	32:41:34	1,815	92208:17:12	5,273	170495:20:35	2,902	171267:45:44
5	3,189	83953:57:03	413	71:08:37	1,975	89921:10:33	5,577	173946:16:13	3,143	188623:13:19
6	3,875	84879:12:15	436	229:39:34	1,896	97775:32:07	6,207	182884:23:56	2,826	175975:06:41
7	3,891	92487:14:03	444	179:57:15	2,849	101270:12:43	7,184	193937:24:01	2,520	148391:56:09
8	3,078	89720:34:15	348	166:52:31	2,462	103534:46:15	5,888	193422:13:01	2,312	180210:31:51
9	3,258	75217:26:18	361	84:47:39	1,951	91289:31:10	5,570	166591:45:07	2,066	127406:17:20
10	3,210	86132:50:09	452	135:17:36	4,412	98359:47:08	8,074	184627:54:52	3,243	191677:06:30
11	4,460	85025:04:48	546	180:50:49	4,176	99621:58:07	9,182	184827:53:44	4,092	219517:46:32
12	3,960	81505:13:05	473	121:41:10	3,363	98589:51:52	7,796	180216:46:07	3,235	219859:53:22
1	3,930	71028:12:48	380	86:09:47	3,029	97998:06:33	7,339	169112:29:08	3,747	219833:21:18
2	3,304	73456:55:30	329	41:23:35	2,073	86362:42:59	5,706	159861:02:04	1,987	193523:37:47
3	2,692	73055:05:55	271	18:38:11	2,215	94201:04:29	5,178	167274:48:35	1,812	228588:36:28
合計	42,020	974716:07:57	4,738	1349:08:19	32,216	1151133:01:08	78,974	2127198:17:24	33,885	2264875:13:01

処理月	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3
SX-8RのCPU利用率(%)	67.98	71.26	74.87	78.15	75.58	65.96	72.58	74.02	70.19	59.78	68.42	62.31
SX-9のCPU利用率(%)	80.44	81.17	86.76	85.35	87.10	80.49	83.30	86.48	85.66	84.68	80.32	80.57

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

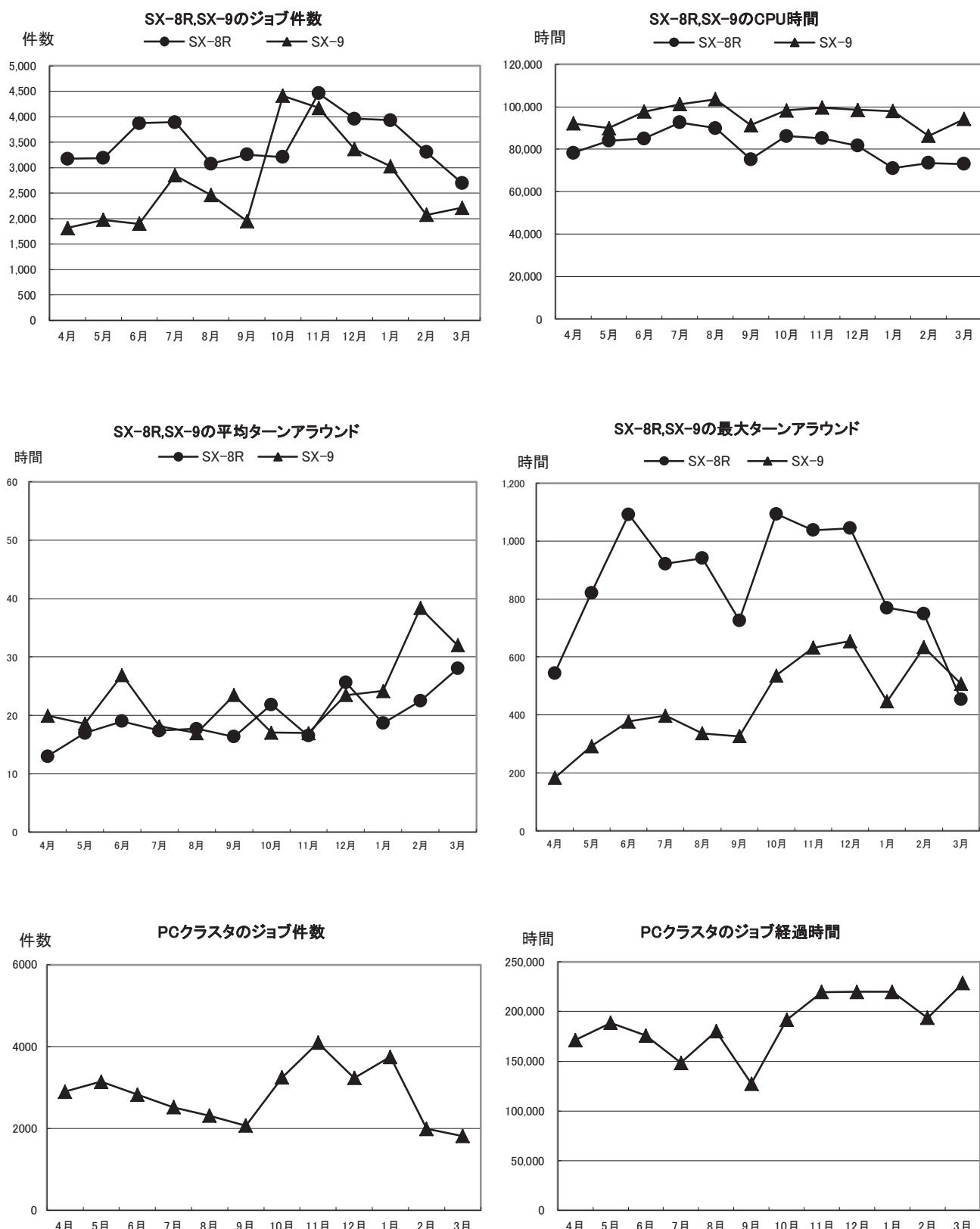
$$\text{SX-8RのCPU利用率} = (\text{SX-8RのCPU時間} / 20\text{ノードの合計サービス時間}) \times 8 * 100$$

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

備考

大規模計算機システムの構成

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



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 111
- ・大規模計算機システム利用案内 112

大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

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

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

*投稿いただいた方には、掲載した広報誌 5 部を進呈いたします。

【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
 - ・ページ設定 (Microsoft Word2010 の設定です。)
 - ・用紙サイズ A4 縦
 - ・1 ページの文字数と行数：行数 40、行送り 18.2pt、1 頁 2 段書き
 - ・フォント 本文 MS 明朝 10Point
題名 MS ゴシック 14Point、半角英数 Times New Roman
執筆者氏名 MS 明朝 10Point、なお、姓と名の間及び機関と研究科と専攻名の間は半角スペースを入れる。
 - ・余白 上 20mm、下 20mm、左右 20mm、印刷形式：標準
 - ・その他 セクションの開始位置：次のページから開始
用紙の端からの距離：ヘッダ 15mm、フッタ 17.5mm
垂直方向の配置：上寄せ
 - ・文字等の設定
 - ・年は西暦で記述する。
 - ・数字、英字は半角（書式：Times New Roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角
 - ・文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に全角
 - ・日本語文中の句読点は半角の“、”“、”を使用せず、全て全角の“、”“、”とする。
2. Microsoft Word 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、PDF ファイルに変換してください。
3. 原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。
zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp
なお、送信の際、件名を「HPC ジャーナル原稿」と入力くださるよう、お願いします。
4. 電子メールの容量が 5MB を超える場合は、CD-R 等の電子媒体に記録のうえ、以下の送付先にお送りください。
【原稿の送付先】
〒567-0047
大阪府茨木市美穂ヶ丘 5-1 大阪大学情報推進部情報企画課総務係

【注意事項】

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

大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）

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

・開館時間（吹田本館）

センター見学の申込、広報	情報推進部情報企画課 総務係（本館1F） 電話 06-6879-8804 zysui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp	8:30～12:00 13:00～17:15	閉 館
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（本館1F） 電話 06-6879-8980,8981 zysui-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 06-6879-8812 system@cmc.osaka-u.ac.jp		
利用方法の問い合わせ スーパーコンピュータ、PCクラスタ等の 利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館2F） 電話 06-6879-8813 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)
降 簾 大 介 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
義 久 智 樹 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
馬 場 健 一 (大阪大学 サイバーメディアセンター)

(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. 3
2013 年 7 月発行

編集：大阪大学サイバーメディアセンター広報委員会

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

印刷：阪東印刷紙器工業所

表紙デザイン：阿部 浩和 (大阪大学)

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