CYBERMEDIA HPC JOURNAL

Cybermedia Center, Osaka University
No. 6

August, 2016.

目　　次

特　集：HPCI を利用した研究成果 ・・・

汎用コンクラスタ（HCC）のジョブクラス一覧 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 93

募　　集 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・

ーHPCI を利用した研究成果ー　　特　集

・極低温超臨界状態における同軸噴流の3次元数値解析 ・・・

極低温超臨界状態における同軸噴流の３次元数値解析

武藤 大貴 [1)]，坪井 伸幸 [2)]

[1)] 九州工業大学大学院 工学府 機械知能工学専攻

[2)] 九州工業大学大学院 工学研究院 機械知能工学研究系

1. はじめに

液体ロケットエンジン、特に酸素と水素を推進剤として利用するエンジンでは、燃料の混合に同軸型の噴射器が広く使用されている。同軸噴射器は、図 1 に示すように、内側噴射口から極低温の液体酸素(LOX)を低速で、外側環状噴射口からはガス状の水素(GH_2)を高速で噴射する。内側と外側噴流の間の速度差によって微粒化・混合を行い、高圧力下で燃焼させることで高い推力を得る。同軸噴射器における混合と燃焼は、噴射器の作動条件や設計パラメータに対して敏感であり、これらは噴射器における保炎、またエンジンで最も深刻な課題の 1 つである燃焼振動の発生に関わってくる[1]。

液体ロケットエンジンにおける噴流の大きな特徴が、圧力が噴射燃料の臨界点を超えた超臨界圧力に達することである。超臨界圧下では流体の表面張力が消失し、噴流には液滴や微粒化は観察されず、混合は気体のような乱流混合に支配される[2]。また超臨界圧下においては、流体は理想気体として扱えず熱力学的状態量の変化に非理想性が現れ、これが噴流の不安定性や温度分布に影響を与える[3], [4]。同軸噴流・火炎の構造は、このような温度や圧力、また噴流速度比といった噴射条件で決まるが、これらに加えて噴射口の出口形状も大きな影響を持つ。ここで重要な形状パラメータとして、図 1 に示す LOX ポストリセスに着目する。リセスとは、内側噴射口を噴射器面からオフセットした形状のことで、実用のロケットエンジンでも内側噴射口直径と同程度の長さのリセスを設けることにより燃焼の安定性を向上することが経験的に知られている。これまでの研究[5]–[7]から、リセスの付与により混合や燃焼が促進されること、さらに内側噴流に大規模な振動が現れることが示唆されている一方で、リセスによる効果が得られなかったとする報告も見られる[8]。エンジン噴射器における混合と燃焼状態の正確な予測・制御には、噴流の流れ場の物理や噴射器形状の効果の理解が必要である。

液体ロケットエンジン同軸噴射器の混合においては、高圧・極低温という環境のため実験による定量データの取得が困難であることもあり、その背景にある物理の理解は未だ十分でない。 本研究は、超臨界圧力下の極低温の同軸噴流について、数値シミュレーションにより噴流のダイナミクスや混合について理解することを目的としている。本稿では、リセス形状の噴流への効果に着目して、ハイブリッド LES/RANS シミュレーションを実施した結果について紹介する。

2. 数値解析法

基礎方程式は 3 次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式である。対流項の空間離散化は AUSM 系スキームの一種である SLAU[9]で評価し、高次精度化として

図１：同軸噴流の流れ場の模式図。

図２：計算領域。

MUSCL 法に van Albada limiter を使用して 3 次精度とした。時間積分は LU-SGS 陰解法[10]を使用し、内部反復により時間精度を確保している。本計算の特徴の 1 つが、超臨界流体の物性を評価するための状態方程式として、Soave-Redlich-Kwong(SRK)状態方程式[11]を採用している点である。SRK 状態方程式は以下のように書かれる。

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a\alpha(T)}{V^2 - bV}$$

$$\alpha = \left[1 + (0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)(1 - (T/T_{cr})^{1/2})\right]^2$$

ここでpは圧力、Tは温度、Vは体積、ωは偏心因子、Rはガス定数、添字crは臨界点である。また$\alpha = 0.42748R^2T_{cr}^2/p_{cr}$、$b = 0.08664RT_{cr}/p_{cr}$である。超臨界圧下の噴流は、微粒化は観察されず定性的にも定量的にも気体噴流として整理できることがこれまでに示されている。したがって同軸噴流は極低温と常温の流体からなる高密度比の気体単相の流れとして取り扱っている。超臨界流体の流れの数値計算手法や近年の動向については寺島ら[12]を参考にされたい。

乱流の取り扱いとして、LES と RANS を組み合わせたハイブリッド LES/RANS 法を採用した。本計算の同軸噴流は、チャンバ、内側・外側噴射口、リセス領域から成る。ここで、LES による壁面近傍の乱流構造の解像は大きな格子点数と計算コストを必要とする。そのため、ハイブリッド LES/RANS 法により、壁面近傍の乱流は解像せずモデル化した RANS 計算を、壁から離れた領域では LES 計算を行った。本手法では、壁近傍の RANS 領域は Spalart-Allmaras モデル[13]により乱流粘性を予測し、壁から離れた領域では陽的な SGS モデルを使用しない Implicit LES(ILES)[14]を行っている。RANS 領域と LES 領域の境界は DDES[15]の考え方を採用して、RANS 領域から LES 領域へ滑らかに乱流粘性を減衰させている。

数値シミュレーションを、Flushed ケース（リセスなし）、Recessed ケース（リセスあり）で行った。図 2 に本解析の計算領域の模式図を示す。Recessed ケースでは、今回はリセス長さを内側噴射口直径の 2 倍とした。計算格子は、チャンバ部、内側噴射器、外側環状噴射器からなる。格子点数は、チャンバ部で格子点数は流れ方向に 451 点、周方向に 155 点、半径方向に 209 点で、噴射器上流も含めた全体の格子点数は Flushed ケースで 1650 万点程度である。壁面上における半径方向の最小格子は、y^+≈1 の位置に格子点を置いている。噴射器壁は断熱非すべり壁とし、流入部には擾乱は与えていない。作動流体は、内側・外側噴流ともに窒素で、内側噴射口から高密度の低温窒素が噴射され、外側噴射口からガス状の常温窒素が噴射される。計算条件は、内側噴流の密度、温度、速度はそれぞれ 522 kg/m^3、122 K、30 m/s、外側噴流が 56 kg/m^3、300 K、130 m/s である。内側噴流のレイノルズ数は内側噴射口直径を基準として 1.9×10^5、外側噴流は外側環状噴射口の外側直径を基準として 4.8×10^5 である。チャンバ部の温度と圧力は，外側噴流と同じ 300 K、5 MPa とした。なお、窒素の臨界圧力、密度、温度はそれぞれ、3.4 MPa、313.3 kg/m^3、126.2 K である。チャンバ圧力は窒素の臨界圧 3.4 MPa を超えた超臨界圧力となっている。

(a) Flushed

(a) Recessed

図３：密度の瞬間場。密度は$\rho^* = (\rho - \rho_{inf})/(\rho_{in} - \rho_{inf})$で無次元化している。

3. 計算結果

図 3 に瞬間の密度分布を示す。密度分布には低温高密度の内側噴流の構造が示されており、内側噴射口ポスト背後から発生した渦構造より噴流の表面が巻き上げられ、また渦構造による周囲流体の巻き込みと渦の崩壊により混合が進んでいく。リセスの有無について着目すると、密度場からは大きな噴流構造の違いは見られないが、Recessed ケースにおいて下流の中心軸近傍で内側噴流がよく混合されているように見える。図 4 に、中心軸状の平均密度・温度分布を示す。内側噴射口の近傍では、噴射密度の保たれる内側噴流のコア領域が見られ、下流にいくにつれて混合により密度低下・温度上昇が起こる。リセスの有無によりコア領域で大きな差異はないものの、下流(x/D>6)において Recessed ケースで密度低下や温度上昇が若干大きくなっており、リセスにより混合の促進が得られていることを示している。

図 5 には圧力の等値面を示している。Flushed ケースでは、噴射器面（チャンバ入り口）から

図４：中心軸上平均密度・温度分布。横軸 x/D は内側噴射口出口からの距離。温度は で $T^* = (T_{\mathrm{inf}} - T)/(T_{inf} - T_{in})$ 無次元化している。

Kelvin-Helmholtz 不安定性に起因する軸対称の渦輪構造が放出され、これが下流にいくにつれて崩壊していく様子が見られる。一方で Recessed ケースでは、より大規模な渦構造が現れていることが分かる。この渦構造は、噴射器面近傍では Flushed ケースと同じように軸対称に近い構造を持っているが、下流では散発的に傾いた渦輪あるいはヘリカル状の渦輪を形成する。図 6 には半径方向速度変動のパワースペクトルを示している。速度変動は、図 5 に示している点で取得した。ポストのすぐ背後である Probe 1 では、58 kHz 程度のピークが見られる。これはポスト背後から周期的に放出される渦構造の周波数である。外側混合層に位置する Probe 2 では、Flushed ケースではせん断層不安定から形成された渦構造の周波数である 110 kHz のピークが見られるが、一方 Recessed ケースでは、46 kHz 程度の低周波数のピークが現れている。これは、図 5 で見られた大規模渦構造の周波数であるものと考えられる。この低周波ピークは下流の中心軸上でも見られる。これについては、噴射器面における速度分布において、リセスの付与により壁近傍の境界層速度勾配が変化したことが大規模な渦輪構造として現れたものと考えている。また、リセスによる大規模構造の発生は、燃焼実験[7]でも見られるとともに、安定性解析からは壁で流れが閉じ込められることによる絶対不安定の励起が示唆されている[16]。大規模構造の生成やそれと混合との関連については、継続して調査を行っている。

4. まとめ

本研究は、超臨界圧・極低温における同軸噴流の

(a) Flushed

(a) Recessed

図５：圧力の当値面。温度で色付けしている（青：122 K、 白：300 K）。

(a) Probe 1: *x/D*=0.5、*y/D*=0.5。 **(b) Probe 2: x_{out}/D=2.0、*y/D*=1.25。** **(c) Probe 3: *x/D*=5.0、*y/D*=0.0。**

図６：半径方向速度変動 *v'*のパワースペクトル。*x/D* は内側噴射口からの距離を、x_{out}/D は外側噴射口からの距離を表す。

構造と混合を理解することを目的としており、本稿では、同軸噴流と、それにリセスを付与した場合の数値シミュレーションを行った結果を紹介した。数値解析手法には、状態方程式として実在気体型の状態方程式を使用し、ハイブリッド ILES/RANS 法による乱流計算を行った。数値シミュレーションにより同軸噴流の混合構造や渦構造を可視化、調査し、またリセスの付与により混合が促進されること、大規模な渦構造が形成されることを示した。現在は、外側・内側噴流の運動量流束比を変化させるなどさらなる噴射条件で計算を実施しており、噴流構造や混合、また形状効果について理解を進めている。

謝辞

本稿で紹介した計算の実行は、HPCI システム利用研究課題(ID: hp150133)の支援を受け、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の SX-ACE を利用させて頂きました。この場を借りて同センターのご協力に感謝致します。また本研究は科学研究費補助金(15H04202)の支援を受けました。

参考文献

(1) 田村洋，ながれ, **24**, 307–314, (2005).

(2) W. Mayer and H. Tamura, J. Propuls. Power, **12**, 6, 1137–1147, (1996).

(3) N. Zong, et.al., Phys. Fluids, **16**, 12, 4248–4261, (2004).

(4) H. Terashima and M. Koshi, J. Propuls. Power, **29**, 6, 1328–1336, (2013).

(5) Kendrick, et.al, Combust. Flame, **118**, 327–339, (1999).

(6) J. Lux and O. Haidn, J. Propuls. Power, **25**, 1, 24–32, (2009).

(7) S. Candel, et.al., Combust. Sci. Technol., **178**, 161–192, (2006).

(8) 谷洋海，他，航空原動機・宇宙推進講演会講演論文集(CD-ROM), JSASS-2011-0011, (2011).

(9) E. Shima and K. Kitamura, AIAA J., **49**, 8, 1693–1709, (2011).

(10) A. Jameson and S. Yoon, AIAA J., **26**, 9, 1025–1026, (1988).

(11) G. Soave, Chem. Eng. Sci., **27**, 1197–1203, (1972).

(12) 寺島洋史，越光男，ながれ, **31**, 351–356, (2012).

(13) P. R. Spalart, et.al., 30th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, AIAA 92-0439, (1992).

(14) J. P. Boris, et.al., Fluid Dynamics Research, **10**, 4–6, 199–228, (1992).

(15) M. L. Shur, et.al., Int. J. Heat Fluid Flow, **29**, 6, 1638–1649, (2008).

(16) M. P. Juniper, J. Fluid Mech., **565**, 171–195, (2006).

Virtual system Coupled Adaptive Umbrella Sampling: An efficient method to compute potential of mean force along a reaction-coordinate

Bhaskar Dasgupta

Institute for Protein Research, Osaka University

1. Introduction

Polyatomic systems are complex because there exist many degrees of freedom to characterize the system. Biomolecular systems are particularly interesting polyatomic systems because of their medical importance. Such systems are characterized by an ensemble of structures (conformational ensemble), by which we want to realize the system in 3N dimensional space (where N is number of atoms present in the system). The free-energy landscape (3N dimensional) is rugged with many local minima (deep and shallow) and pinholes. This ruggedness of free-energy landscape is a crucial bottleneck to quantitatively characterize a system. Therefore, we need efficient methods to sample conformations of the system such that the system can be described with sufficient accuracy.

Any typical sampling method designed to obtain free-energy landscape suffer due to the ruggedness of energy landscape. In other words during the course of sampling the system may be trapped in a local minimum or basin. Therefore we need to come out of the basins and get in the basin not once, but many times if we are interested in computing thermodynamic quantities. Fortunately, a whole bunch of techniques have been proposed to overcome local basin problem, one of which is adaptive umbrella sampling (AUS) [1].

Suppose we want to compute an ensemble of configuration related to a physical process, e.g. binding between two molecules – a process that samples between two extreme scenarios including bound and unbound states. Because such a process can be a rare event kinetically, we need to bias the system to sample between two such states. In AUS, we add a bias to the potential energy of the system in such a way that the resulting energy landscape is free from ruggedness. The bias is function of collective reaction-coordinate (λ) realizing the process that we want to sample. For example, λ may indicate inter-molecular distance (Fig. 1). In AUS, more specifically we add a bias, which is negative of the potential of mean force (PMF) along λ, leading to modified energy,

$$E_m(\mathbf{r}) = E(\mathbf{r}) + RT \ln P_c(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{r}), T) \qquad (1)$$

where, **r** denotes a configuration (3N-dimensional vector), and E is potential energy calculated by empirical force-field equations, T is temperature, R is universal gas constant and P_c is canonical probability distribution of λ at T. If we sample our system using equation (1) for sufficiently long time and generate a trajectory (time-sequence) of λ, the observed probability distribution of λ ($P_{obs}(\lambda,T)$) is uniform [2]. However, note that, if we know the canonical probability distribution in advance, we could compute PMF directly ($\mathrm{PMF} = -RT \ln P_c(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{r}), T)$), which has ample of information to understand conformational details of an ensemble. The word 'adaptive' in AUS refers that the method aims to iteratively update canonical distribution function from an initial guess such that observed probability distribution converges to a uniform function along λ. The necessary update formula is,

$$\ln P_c(\boldsymbol{\lambda}, T)^{(\nu+1)} = \ln P_c(\boldsymbol{\lambda}, T)^{(\nu)} + \ln P_{Obs}(\boldsymbol{\lambda}, T)^{(\nu)} \qquad (2),$$

where λ is the given iteration step.

One of the difficulty of AUS method is that it is still computationally expensive, as many iterations are required for convergence (uniformity of $P_{obs}(\lambda,T)$). Moreover, in many cases of simulation the method fails

Fig. 1. a) Schematic diagram of reaction coordinate (λ) used in VAUS. Top cartoon suggests λ based on distances within one molecule, while bottom cartoon suggests λ between two molecules (currently used). b) Ace-Ala_5-NMe peptides system, dimerization of two peptides was studied. c) PDZ-GluR2 system as a more realistic example. PDZ is shown in green and GluR2 peptide is shown in magenta color.

because of the sensitivity of the biasing function, and artificial ruggedness is introduced in the landscape due to wrong guess of the canonical distribution function and insufficient sampling in an iterative step. To resolve this, method Virtual-system coupled adaptive umbrella sampling (VAUS) is proposed previously [3], and herein improvements of VAUS will be discussed.

2. Theory:

2.1. Virtual-system coupled adaptive umbrella sampling:

In VAUS, we simulate the molecular system (i.e., real system) by coupling it to a virtual system. The virtual system is defined by an array of virtual states. A virtual state (v_k) is defined along reaction coordinate λ and bounded by $\lambda_{k,min}$ and $\lambda_{k,max}$. Two virtual states are overlapping in λ if they are consecutive (i.e. v_k and $v_{k\pm1}$), but non-overlapping otherwise (e.g. v_k and $v_{k\pm2}$). A construction is shown in Fig. 2. Two extreme limits of λ ($\max\{\boldsymbol{\lambda}_{k,\max}\}$ and $\min\{\boldsymbol{\lambda}_{k,\min}\}$) denote the conformational space in which we are interested. During simulation the real molecular system is confined to a virtual state for a predetermined steps of integration (f_{int}), after which transition between two consecutive virtual states (v_l and v_k) are possible based on a probabilistic criteria. After f_{int} steps instantaneous value of λ of the real molecular system is checked to be in the overlapping region of virtual states. If this is true, then the total coupled system (real + virtual) transitions from current virtual state to the allowed virtual state (v_l to v_k). In this way, one effectively samples more in a given window of λ covering wider conformational variety. Therefore, the biasing function is more trained. The theory and actual procedures of VAUS is detailed elsewhere [2]. In summary, we use a modified version of equation 1 and 2 as given below,

$$E_m(\mathbf{r}) = E(\mathbf{r}) + RT \ln P_c\left(\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{r}), v_k, T\right) \qquad (3), \text{ and}$$

$$\ln P_c\left(\boldsymbol{\lambda}, v_k, T\right)^{(\nu+1)} = \ln P_c\left(\boldsymbol{\lambda}, v_k, T\right)^{(\nu)} + \ln P_{Obs}\left(\boldsymbol{\lambda}, v_k, T\right)^{(\nu)} \quad (4),$$

where, probability distributions are jointly parameterized by λ and v_k.

Although VAUS was successful in a previous case

Fig. 2: Virtual-states used in a) Ala-pentapeptide simulation (see Fig. 1b) and b) PDZ-GluR2 simulation (see Fig. 1c).

aimed to sample between bound and unbound states of a dimerization process [3], we found that the method failsto converge in many cases. For example, when we aim to sample a dimerization process of two molecules with large conformational variety owing to their flexibility. One such generic system composed of two peptides where each one is Ace-$(Ala)_5$-NMe (where Ace and NMe are acetyl and N-methyl groups) with no significant conformational preference of the peptide chain. The simulations with VAUS method becomes very computationally demanding due to 1) sensitivity of the biasing forces, 2) finite sampling in each iteration, 3) transition between two virtual states may bring about abrupt change in biasing forces due to mismatch of probability distribution in the overlapping regions and 4) initial guess of bias is not trained over sufficient conformational space. To solve these problems, recently we improved VAUS method, which are briefly discussed below.

2.2. Markov approximated observed probability distribution calculation:

Typically observed probability distribution is calculated from the λ values recorded during the simulation by using number of counts in bins along λ. This disregards time-sequence of λ. To use time-sequence information we first discretize sampling space of λ by using definitions of the bins along λ, then we calculate bin-to-bin transition counts from the recorded trajectory of λ. This gives us a transition probability matrix for transitions between bins for a particular virtual state, which is referred as intra-virtual state transition probability matrix. In a similar way, one can look at trajectory of λ as a sequence of virtual states, because during the simulation total system transitions from one virtual state to other. Therefore, one can calculate transition probability matrix between virtual states, which is referred as inter-virtual state transition probability matrix. Such transition probability matrices can be used to calculate Markov approximated equilibrium counts in each bin, which is free from artifacts of short simulation trajectories. Correspondingly the biasing functions become better trained.

2.3. Iterative polynomial fitting to the observed probability distributions:

In VAUS we calculate observed probability distributions jointly parameterized by λ and v_k, which means that for each virtual state a certain piece of probability distributions is obtained. Typically such pieces of probability distributions are parameterized by n-order polynomials, which require considerable manual intervention. However, pieces of distributions may not

match smoothly in the overlapping regions. For this we invented iterative automatic polynomial fitting. In this approach, n-order polynomials are used to fit a piece of probability distribution with varying polynomial order from 2 to 10 and finding best order that minimizes fitting error. Such an initial fitting uses data from adjacent virtual states (±1 or ±2). Next these fitting parameters are used to reproduce distribution data, which again fitted by polynomials. This process is iterated until we get smooth matching of distributions in the overlapping region. Such technical improvement greatly alleviates abrupt change of forces due to virtual state transitions during simulations.

2.4 De-sensitization of biasing forces:

The update formula in equation 4 needs to be differentiated because we need forces to follow equations of motion. When each term is parameterized by a polynomial, the equation can be viewed as perturbing equation in which canonical distribution is modified by observed distribution in each iterative step. If there is error in current simulation then that will be reflected in polynomial parameterizing observed distribution, making simulation sensitive to the estimation of polynomial coefficients. To de-sensitize the bias a scaling factor is multiplied to those coefficients. We have used a scaling factor of 0.5.

2.5 Initial seed of conformations:

To initiate VAUS, the set of starting conformations should be exhaustively distributed in the configuration space. For this, the system box was split to many rectangular grids and one of the peptide chains was fixed in space and let the other peptide chain diffuse to different grids. We developed an algorithm to traverse all grids by a path most efficiently by combining enumerations of depth-first search. The diffusing peptide chain was allowed to follow the path by an advanced steered molecular dynamics. The break points in the path are approximately centers of grids, and the conformations that reach those break points were used to the initiate canonical simulation under VAUS. This way a large conformational ensemble was retrieved in the first canonical iterative step.

3. Results:

3.1. Binding between Ace-(Ala)$_5$-NMe peptides by VAUS:

We have used this improved version of VAUS procedure to simulate binding between two Ace-(Ala)$_5$-NMe peptides. The simulation involves a box with two peptide chains in explicit water. The system is equilibrated by usual NPT and NVT simulations. The use of grid-based initialization is not used in VAUS simulation. To compare the effectiveness of grid-based initialization in another iterative simulation of VAUS, 221 initial conformations were used which sample exhaustively binding and unbinding poses. The iterative simulations were rerun many times in order to improve our method. Namely, Markov approximated probability distribution calculation and automatic iterative fitting method need to be tested properly. For this, a large GPU-cluster machine was required. We have used Osaka University Cybermedia center GPU computing facility for such an advanced method development. We tested our method to compute potential of mean force along the reaction coordinate for the above Ala-pentapeptide binding (Fig. 3).

In our simulation designing a collective reaction coordinate is of prime importance. The current reaction coordinate properly envisions a binding process, because it is based on inter-peptide distance. The reaction coordinate is the distance between geometric centers of the sets of atoms from peptide chains. However, one must be careful in selecting atoms in peptide chains. After a number of trial-and-error we use Cα and carbonyl O-atom of each Ala-residue to define set of atoms in a peptide chain.

3.2. Active site remodeling during β-sheet augmentation reaction:

To test our method for binding of a larger biomolecular

Fig. 3. Final PMF as obtained from Ala-pentapeptide dimerization study.

complex, we are currently simulating a β-sheet augmentation reaction occurring in a protein-peptide binding. The protein contains PDZ domain (87 amino-acid residues) that binds a small 5-residue peptide from C-terminal of GluR2 receptor protein. The interaction interface consists of β-sheet formed by two β-strands from PDZ domain and one β-strand from 5-residue peptide. We are interested in how the interactions remodel itself and forms a stable complex. The VAUS simulation is used with the reaction coordinate defining inter-molecular distance between two interfaces. The C-peptide fragment is allowed to diffuse out from the interface up to 10 Å. The whole system with water molecules and ions is composed of 18851 atoms, which is large compared to other systems treated by AUS or multicanonical molecular dynamics simulation.

The simulation is currently under operation. However, thanks to the computing facility of Osaka University Cybermedia center, we could parameterize initial simulation details and protocol of our method.

5. Conclusion

We developed a new method to simulate binding event between two molecules. Presently we performed Ala-pentapeptide dimerization to demonstrate capability of our method. We are performing the binding simulation in much larger biomolecular system. The ongoing simulation will provide valuable insight about binding mechanism and putative conformations related to loosely bound states for PDZ domain and C-terminal fragment from GluR2 receptor.

6. Acknowledgement

The author thanks Prof. Haruki Nakamura, Dr. Junichi Higo, and Mr. Gert-Jan Bekker in Osaka University and Dr. Narutoshi Kamiya in RIKEN for fruitful discussion. The author thanks Cyber Media Center, Osaka University, for using a VCC computer system as a HPCI project (hp150146).

References

[1] M. Mezei, Adaptive umbrella sampling: Self-consistent determination of the non-Boltzmann bias, J. Comput. Phys. 68 (1987) 237–248.

[2] J. Higo, J. Ikebe, N. Kamiya, H. Nakamura, Enhanced and effective conformational sampling of protein molecular systems for their free energy landscapes., Biophys. Rev. 4 (2012) 27–44.

[3] J. Higo, B. Dasgupta, T. Mashimo, K. Kasahara, Y. Fukunishi, H. Nakamura, Virtual-system-coupled adaptive umbrella sampling to compute free-energy landscape for flexible molecular docking., J. Comput. Chem. 36 (2015) 1489–1501.

MHD 近似限界に迫る地球磁気圏 MHD シミュレーション

深沢 圭一郎
京都大学 学術情報メディアセンター

1. はじめに

太陽を起源とする太陽風プラズマは地球の磁場と相互作用することで、磁気圏と呼ばれる領域を作り、様々な電磁気現象を宇宙空間だけで無く、地上を含む人類の生活圏に影響を与えています。このような宇宙環境の変動を宇宙天気と呼んでいます。宇宙天気現象がまとめたものが図 1 になります。例えば、大規模な太陽フレアが起きた場合、磁気圏と太陽風プラズマが相互作用することでオーロラが生成され、その中で流れる電流による誘導電流が地上の送電線に流れることで、停電、電子機器の誤作動などが引き起こされます（過去にアメリカ、スウェーデンで実際に停電が起きています）。太陽活動を入力だとすると、磁気圏という関数を通り、その結果としてこのような現象が生成されていると理解できます。そのため、磁気圏を理解することが、宇宙天気の物理的な理解につながります。

地球磁気圏は地磁気の勢力範囲であるために目には見えませんが、非常に大きく、太陽と反対方向に 60 万 km を超えて広がっています。その磁気圏中では、小さな現象では~10 m、大きいものでは~10^8 m スケールで様々な現象が起きており、マルチスケール環境となっています。そのため、探査機を利用したその場観測だけでは、そこで起きる現象を完全に理解できません。そのため、この分野では数値シミュレーションが非常に大きな役割を果たしてきています。近年では、複数探査機による同時観測や観測機器の精度向上により、従来の数値シミュレーションでは対応できない現象が確認されており、更にはそのような現象が磁気圏全体に影響を与えていると考えられてきています。そのため、真の磁気圏、宇宙天気の理解のためにより高解像度な数値シミュレーションが求められています。

ミクロスケールを含む宇宙プラズマの振る舞いを調べる場合、無衝突ボルツマン方程式であるブラソフ方程式やプラズマ粒子の運動を解く粒子法を用いてシミュレーションを行いますが、地球磁気圏のようなマクロな領域では磁気流体力学（MHD）近似がよく成り立つため、MHD シミュレーションを利用して、太陽風プラズマと磁気圏の相互作用といった

図 1：ジオスペースにおける代表的な宇宙天気現象（情報通信研究機構提供）

グローバルな宇宙天気を調べています。地球磁気圏における MHD 近似が成り立つ限界の空間スケールは約 50 km ですが、計算機資源の制限により、2,000 km 程度の解像度が広く用いられており、最新の HPC プロジェクトにより約 600 km の解像度での計算が限定的に実行されているのが現状です。つまり、MHD 近似が成り立つ 10 倍程度の解像度を利用した計算が行われているに過ぎず、我々が今までに見てきた数値シミュレーション結果は、現実の構造とは異なっている可能性があります。実際に 600 km 解像度シミュレーションの結果は、2,000 km 解像度の結果と比べて、磁気圏がダイナミックに変化する様子が示されています。そこで、HPCI 課題の一つとして SX-ACE を用いて、MHD 近似に近い 100km 解像度でシミュレーションを行っています。

2. MHD シミュレーションモデル

宇宙プラズマの密度はとても低いために、その平均自由行程が非常に長くなります。例えば、太陽プラズマの平均自由行程は 1 天文単位（太陽と地球間の距離）にも達します。そのため、宇宙プラズマは基本的に衝突が無いと見なされます。その無衝突プラズマ（宇宙プラズマ）の振る舞いは以下の Vlasov（無衝突 Boltzmann）方程式によって記述されます。

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \vec{v}\frac{\partial f_s}{\partial \vec{r}} + \frac{q_s}{m_s}(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})\frac{\partial f_s}{\partial \vec{v}} = 0 \qquad (1)$$

ここで $\vec{E}$、$\vec{B}$、$\vec{r}$ と $\vec{v}$ はそれぞれ電場、磁場、距離、速度を表します。また、$f_s(\vec{r}, \vec{v}_s, t)$ は位置－速度位相空間における 7 次元分布関数であり、s はイオンや電子など種類を示します。q_s は電荷を m_s は質量を表します。Vlasov 方程式は 7 次元を扱うため、グローバルな領域を解く際に、非常に大きい計算サイズとなってしまいます。そこで、Vlasov 方程式(1)の 0 次、1 次、2 次のモーメントをとり、運動論的効果を無視することで、速度位相空間を平均化することで、下記のような MHD 方程式が得られます。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\mathbf{v}\rho) \\
\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= -(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\mathbf{J} \times \mathbf{B} \\
\frac{\partial p}{\partial t} &= -(\mathbf{v} \cdot \nabla)p - \gamma p \nabla \cdot \mathbf{v} \\
\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B})
\end{aligned} \qquad (2)$$

上から、連続の式、運動方程式、圧力変化の式（エネルギーの式）、最後が磁場の誘導方程式です。簡単に言えば、電磁場を考慮した流体力学方程式と呼べます。詳細は参考文献(1)をご参照ください。

MHD 方程式を解く数値計算法としては、Modified Leap Frog (MLF)法を使用しています(2)。この手法では最初の 1 回を two step Lax-Wendroff 法で解き、続く（l － 1）回を Leap Frog 法で解き、その一連の手続きを繰り返します。l の値は数値的に安定の範囲で大きい方が望ましいので、2 次精度の中心空間差分を採用するとき、数値精度の線形計算と予備的シミュレーションから l = 8 に選んでいます．MLF 法は、two step Lax-Wendroff 法の数値的安定化効果を一部取り入れて、Leap Frog 法の数値的減衰と分散の小さい効果をより多く取り入れた、数値的減衰と分散にバランスの良くとれた一種の組み合わせ計算方法です。今まで様々な計算機上で、この手法による計算の性能評価を行ってきたこともあり、MLF 法を用いることで、過去の結果と比較できる利点もあります。

並列化には MPI を使用して 3 次元領域分割を用いています。SX-ACE では MHD コードを利用したベンチマークの結果により、ベクトル長が長くなる 2 次元領域分割を用いた方が、性能が高くなりますが、3 次元領域分割において、各次元の計算サイズを調整することで同様の性能を出すことが可能となっています。

図 2：SX-ACE における MHD コードの性能

表 1:様々な計算機システム上での MHD コードの性能

	CPU	Rmax [TFlops]	Rpeak [TFlops]	Rpeak /CPU [GFlops]	実行効率 [%]	CPU architecture
SX-ACE	256	65.50	29.20	114.0	45	Vector
K	2768	4194.30	914.12	27.9	22	SPARC64 VIIIfx
FX10	4800	1135.41	234.59	48.9	21	SPARC64 IXfx
FX100	512	576.72	91.49	178.7	17	SPARC64 XIfx
CX400	2952	510.11	104.23	35.3	20	Xeon (SB)
HA8000	1930	500.26	83.42	43.2	17	Xeon (IB)
XC30-HSW	32	16.49	1.37	42.8	8	Xeon (HSW)
SR16000/L2	672	25.27	5.38	8.0	21	POWER6
Xeon Phi 5120	1	1.00	0.08	84.0	8.4	Knights Corner
Tesla K20X	1	1.31	0.15	153.3	11.7	Kepler

3. 性能測定

本稿で紹介している MHD シミュレーションですが、これまでに様々な計算機システム上で計算を行っており、また性能測定も行ってきています。今回 SX-ACE を利用するに当たって、東北大学の江川先生と磯部研究員にご協力をいただき（H27 年 JHPCN 課題として）、前述のように MHD シミュレーションコードを SX-ACE に対して最適化を行いました。図 2 に最適化結果を載せていますが、最終的には weak scaling において 1024 プロセス（256 ノード）を用いて、44.5%の実行効率と 99.997%の並列化効率を達成しています。これまでの MHD シミュレーションの性能評価と今回の結果を比べた結果を表 1 に示しています。実行効率では他のシステムと比べてかなり高い値を達成しており、ノード当たりの実効性能を見てみると、京コンピュータなどを大幅に超える性能を示していることが分かります。HPCI 課題として SX-ACE を利用しており、利用コストについては議論できませんが、いわゆるスーパーコンピュータを利用して計算を行っている身としては、MHD シミュレーションにとって、非常に研究（計算）が進む計算機と言えます。

4. シミュレーション結果

現在、SX-ACE を 256 ノード（1024 コア）用いて、6000×4000×4000 のシミュレーションボックスを解像度 0.015 R_E（1 R_E = 6371 km：地球半径）で計算を行っています。太陽から吹いてくるプラズマである太陽風は磁場（IMF：惑星間空間磁場）も引き連れており、その磁場の向きによって地球磁気圏の構造は大きく変化します。図 3 に IMF が北向き、南向きの場合の計算結果を載せます。図は赤道面のプラズマ温度、プラズマの動き、磁場強度を示しています。

IMF が北向きの計算結果では、磁気圏の側面に沿って渦構造（A）が見えています。地球磁気圏では磁気圏内への太陽風プラズマ流入経路として、磁気圏側面での渦構造によるミキシングが考えられており(3)、実際に地球磁気圏探査衛星が渦構造を観測しています。しかしながら、空間構造把握や変動の時空間分離は探査機の観測からは難しく、数値シミュレーションでの再現が期待されていますが、今まで北向き IMF 印加時のグローバル磁気圏計算においてほとんど渦形成の報告はありません。しかし、今回の計算のような、大規模で高解像度な計算では、その構造が見えてきています。

また、南向きの IMF を印加した場合は、これまでもグローバル磁気圏計算では渦構造が現れやすいことが分かっていました。今回の計算でも渦構造（B）がきれいに見えます。地球のプラズマ対流構造から、従来この渦は太陽と地球を結ぶ線に対称に現れていましたが、ここでは片方にしか現れていません。これも観測ではありましたが、計算では、見えていませんでした。今回の計算から、ごく小さいプラズマ対流が片側だけで渦構造を作っていることが分かっています。

図 3：磁気圏シミュレーション結果（赤道面におけるプラズマ温度とプラズマの動き）

5. まとめ

太陽と地球の間には目には見えませんが、プラズマや磁場が相互作用し、様々な現象が起きています。このような現象を宇宙天気と呼んでいますが、目に見えるものだとオーロラも宇宙天気の一つとなります。このようにオーロラから太陽と地球の間の現象を繋げて研究を行わなければならないので、探査機による観測などでは、限界が有り、数値シミュレーションが大きな役割を果たしています。このような大きな領域を高精細に解く必要があるため、スーパーコンピュータが利用されてきており、現在は SX-ACE を利用して計算を行っています。

SX-ACE は今では世界的に珍しくなったベクトル機ですが、前機種など（SX-9、SX-8）に比べ、実行効率が昔のベクトル機に近くなっているため、シミュレーションを効率的に進めることができています。その結果として、二例ほど紹介しましたが、これまでに見たことが無い計算結果を得られています。

シミュレーション屋としては、速く計算できればどんな計算機システムでも構わないので、現在も SPARC 系や x86 系も利用しています。このような状況でも SX-ACE のように実利用時に大規模で高速に計算ができる計算機（理論性能だけ高い計算機は好ましくない）であれば、ベクトル機の優位性もあるように思います。効率の良く研究を進めるためにも、次世代ベクトル機にも同様の特徴が引き継がれることを祈っています。

参考文献

(1) R. O. Dendy, Plasma Dynamics, Oxford University Press, 1990.

(2) T. Ogino, R. J. Walker, M. Ashour-Abdalla, A global magnetohydrodynamic simulation of the magnetopause when the interplanetary magnetic field is northward, IEEE Trans. Plasma Sci.20, 817.828, 1992.

(3) H. Hasegawa, M. Fujimoto, T.-D. Phan, H. Rème, A. Balogh, M. W. Dunlop, C. Hashimoto & R. TanDokoro, Transport of solar wind into Earth's magnetosphere through rolled-up Kelvin–Helmholtz vortices, *Nature 430*, 755-758, doi:10.1038/nature02799, 2004.

スーパーコンピューターを活用した材料設計第一原理計算の実際

川添　良幸
東北大学　未来科学技術共同研究センター

1. はじめに

スーパーコンピューター（以下、スパコン）の歴史は、1976 年にロスアラモス研究所に納入されたベクトル計算機 Cray-1 に始まる。クロック周波数 80MHz の単一 CPU で、ピーク性能 160MFLOPS を達成した。1981 年に筆者はマックスプランク研究所で原子核理論の研究用に使い、当時の国産機に比べ、その絶対的速さに驚いたことを鮮明に覚えている。その 6 年後に、マルチプロセッサで 800MFLOPS の Cray X-MP が投入された。その後、日米の数社がスパコンを作り始め、クロック周波数と CPU 台数の増大で、ムーアの法則（1 年半で 2 倍の性能向上）が現在に至るまで継続している。日本の計算機メーカのベクトル計算機による寄与には素晴らしいものがあり、ドンガラ氏の世界トップ 500 レポートに一番から相当数が登場した時期もあった。残念ながら、米国との経済摩擦に端を発して独自の CPU を継続的に作れなくなり衰退した。「京」1 台が短期間トップになるレベルでは如何ともしがたい。さらに、この 10 年程はクロック周波数は上がらず、CPU が主メモリーを共有するノードとその中のコアと複雑な構造になることが性能向上の主要因を占め、本稿で示す第一原理計算分野の実効性能が上がらない状態になっていることは利用者である我々にとって大問題である。初期の国産スパコンの様に我々利用者の意見を十分に取り込んで独自開発することなく、カタログ性能のみで判断される現状に問題がある。

HPCI では、従来からの大規模ユーザの分布を基盤にして５戦略分野を設定しているが、第一原理計算は主として「予測する生命科学・医療および創薬基盤」と「新物質・エネルギー創成分野」に関係している。防災・減災に資する地球変動予測と次世代ものづくり分野は、構造計算や流体計算のための有限要素法、そして、物質と宇宙の起源と構造では大規模データ保存・処理も重要になる。特に、第一原理計算で多用される密度汎関数理論（以下 DFT=Density Functional Theory）は、1964 年にコーン教授によって開発された電子多体系の理論で、構築されて 200 年近いナビエ・ストークス方程式に比べれば、未だ 50 年の歴史しかない発展途上の理論である。[1]さらに量子力学の基礎に関係する困難な問題を含むために正しい理解がなされず、特に電子の交換相関相互作用汎関数 E_{xc} が DFT としては与えられていないために、実験値に合うパラメータにより単にスパコンを使って実験的・工業的に興味のある対象物に適用される様になりつつあり、とても本来の第一原理計算とは呼べる状態ではないことに気がついてさえいない現状は嘆かわしい。

2. 本当の第一原理計算

新物質・新材料・新薬を実験以前に設計し、開発時間の短縮と経費の削減を達成する手段として第一原理計算が期待されている。第一原理（first principles、*ab initio*）計算法というのは、電子及び原子核の質量や電荷等の物理の基本的定数以外はパラメータを用いずに、量子力学の基本方程式であるシュレディンガー方程式（相対論的にはディラック方程式）を解くことである。電子多体問題は 3 体問題でも難しい位なので、現実系に対しては極めて困難な数値計算となる。これは量子力学のはじめの頃に、ディラックが「必要な方程式は全て分かった。後は解くだけである」と言ったにも関わらず、今でも「解けていない」程の難問題である。具体的には求めたい物理量ごとに定式化とプログラミングが必要である。例えば基底状態の磁気モーメントを求める場合には DFT は E_{xc} に依らずに相当の高精度計算結果を与える。しかし、

バンドギャップを求めようとすると DFT は理論的に対応出来ず、最低でも GW 近似計算が必須である。超微細構造定数や NMR 化学シフトを算定しようとすれば、芯電子状態が効くので擬ポテンシャル法では対応出来ず、全電子法が必要となる。この様に、求めたい物理量に対応した近似レベルを使うことが有限速度のスパコンによって行う第一原理計算法を理想的な手法とする。

最近では、市販の第一原理シミュレーション計算ソフトウェアが高度化し、ユーザーフレンドリーなため、自分ではプログラムを作成せず、利用するだけという数値計算屋が多くなった。その場合でも、次の節の問題点は正しく理解して活用するようにして欲しい。そうでないと、いつになっても実験先行の材料設計・開発体制のままで、理論設計を基盤にする様になるパラダイムシフトを起こすことは出来ない。

3. 適切な近似レベル

材料・物質の理論的取り扱いには、モデル計算と呼ばれる極めて単純化した手法もあり、代表的な例がハバード模型である。物理量そのものを対象としているために分かり易い。最近では、数値計算により具体的な対象物を扱うことにも多用されている。しかし、電子の多体系はそう簡単にモデル化出来る程単純ではない。我々は、原子や小さい分子に対して知られているフント則（縮退した基底状態ではスピン最大状態が基底状態）が従来の 2 準位模型では本質的な間違いの上での説明であったことを明らかにした。[(2)]これはハバード模型の場合にも適用出来る。2 準位に対して同じ空間波動関数を適用することは本質的に間違っている。系の全ハミルトニアンを解けば、ハバード模型の扱う 2 準位のエネルギー差の多くは空間波動関数の違いから発現していることが分かる。t と U の様な分かり易いパラメータで説明出来る程、電子多体系は単純ではない。もちろん、物理量を分かり易く導出出来る理論体系は望ましく、新たな取り組みが大事であるが、現在までのところ、この様な「都合の良い」理論はない。

量子化学や物性物理の教科書では、水素分子を最初の例題として採り上げる。[(3)]そこに登場するのがハイトラー・ロンドン模型（以下 HL）で、各水素原子の 1s 電子状態をパウリの排他律が成立するように重ね合わせで水素分子の状態を構成する。「電子雲が重なって分子状態が出来る」と言い、電子という実体が雲だと喩えで教えてしまう。実は観測の問題であり、電子は質量が極めて小さいため光を当てると影響を受ける。しかしその範囲は限られていて、その近くにいるとは言えるので、その辺りを雲と呼ぶ。表 1 に示す様に、HL では、原子から分子が構成される時、運動エネルギーT が下がりポテンシャルエネルギーV が上昇するが、全エネルギーE=T+V は低下して安定化する。しかし、実は、これは「自然の摂理に反する」安定化である。2 つの電子は負の電荷を持つ粒子であり、近寄ることで安定化は出来ない。系の安定化要因は原子核と電子の間の引力相互作用であり、図 1 に示すように電子が原子核に近づいて（V が下がって）安定化する。電子はより高速に運動するようになり T は上昇する。クーロン相互作用する多体系の必要条件であるビリアル定理（平衡状態では 2T+V=0）により、T の上昇は V の低下のちょうど半分になる。

図 1．水素分子は、孤立した 2 つの水素原子が各々電子を原子核に引き寄せてポテンシャルを下げることで安定化する。電子雲の重なりは斥力で安定化には逆に働く要因である。

表１．1s 軌道のみを仮定する HL 模型や分子軌道法(MO)はパウリ原理を満たし全エネルギーが低下するので一見正しそうであるが、T と V を別々に算定すると、運動エネルギーを下げる（電子雲を広げる）という方策であることが分かり、自然の摂理に反している。ハートリー・フォック法(HF)はビリアル定理を満たし、正しく分子構築理由を表現する。拡散モンテカルロ法(DMC)によれば、実験値も絶対値で精密に再現できる。

精度の問題ではなく、正負が逆

(eV)	条件	HL	MO	HF	DMC	実験値
ΔE	負	-2.48	-2.88	-3.63	-4.75	-4.75
ΔT	正	-5.01	-4.22	3.63	4.8(1)	
ΔV	負	2.53	1.33	-7.27	-9.6(1)	
$-\Delta V/\Delta T$	2	0.5	0.3	2.0	2.0(1)	

絶対値で一致

原子１個と言え、水素原子以外は多体電子系であり厳密な意味では容易に解ける系ではないが、ハーマン・スキルマン法等で相当の精度の数値計算が可能である。その原子の電子状態を使い、分子や結晶の量子力学計算をするのがハートリー・フォック法を基本とする分子軌道法である。原子に対する近似以外はパラメータを使わないので、第一原理計算本来の計算法であり、高精度計算が可能である。とは言っても、精度を上げるためには原子数の 10 乗というレベルの計算量になってしまい、小さい原子系に限られる。

DFT は縮退のない基底状態に対する電子多体系の厳密な理論であり、多体問題の難しさは全て交換相関汎関数 E_{xc} に込められている。対象電子以外の電子は環境（衣）として扱い、n 電子系の波動関数を 3 次元で記述出来るため、多数の原子を含む系への適用が容易である。実際の数値計算には何らかの E_{xc} を具体的に「与える」必要がある。コーン教授は一様分布電子系を想定した局所密度近似（LDA=Local Density Approximation）を提案し成功している。直ぐに一般化勾配法 GGA が考案され、現在に至るまでこれらが DFT での標準となっている。DFT は基底状態の理論なのだが、実験は基本的に励起状態を経由する。そのため、例えば、半導体の発光波数を決めるバンドギャップは荷電子帯の最上位準位から伝導電子帯の最下位準位の間のエネルギー差として求められる。基底状態の理論の DFT ではこれが出来ない。しかし、入力に設定した準位数だけ対角化した後でエネルギー準位が得られるので、本当は意味のない伝導電子帯の最下位準位を使う。すると実験値より遙かに小さな値になってしまう。これはしょうがないことなのだが、ここで理論の適用範囲を逸脱し、どうせ分からないパラメータなのだからと E_{xc} をいじり、現象論的に実験値を再現する。LDA+U やハイブリッド汎関数である。計算量は $O(n^6)$と増大するが、GW 近似によって伝導電子帯の最下位準位のエネルギーを求める方が理論的には好ましい。最近ではファンデルワールス力の計算を E_{xc} によってパラメータ化するケースが見られるが、ファンデルワールス力は双極子励起状態間の相互作用であり、E_{xc} とは無関係である。我々は独自の全電子第一原理計算プログラム TOMBO(TOhoku Mixed Basis Orbitals *Ab Initio* Simulation Package)[3]に時間依存 DFT（TDDFT）を適用してこの問題解決に当たっている。

この様に第一原理計算は手法自体が未完であり、今後とも開発を継続しなければならない。計算機の進歩に合わせ、原子数を増やして実験的に興味ある物質に適用する。そのために並列化に膨大な時間をかける。もちろん、これも取り組まなければならない重要な課題であるが、DFT 自体の問題を解決してこそ初めて大規模系への適用の意義がある。

4. 具体的例題

4.1 イオン液体による瓦礫からの希少元素抽出

東日本大震災の被害として大量の瓦礫が発生した。この中には電子基板の様な有用元素が多量に含まれている場合があり、その抽出方策が東北発素材技術先導プロジェクト・希少元素高効率抽出領域（リーダー中村崇教授）として検討されている。特

図２．a) $[Br]^-$負イオンを取り囲む水分子（紫は正で黄色は負電荷を表す）。
b) $[NTF_2]^-$負イオンを取り囲む水分子（黄色は正でシアンは負電荷を表す）。白、灰色、青、赤、茶色、緑、黄色の球は、それぞれ水素、炭素、窒素、酸素、臭素、フッ素、硫黄原子を表す。

図３．IBr 及び ITF_2 の粘性の水分依存性の計算結果

にイオン液体を活用する抽出法に集中した研究を推進中である。その中で我々は理論計算を担当し、実験家との共同で有用イオン液体の探索業務に当たっている。[5]

イオン液体は実験室系では有用な物性を有するが、瓦礫処理の様な環境では直ぐに水蒸気を吸って劣化してしまう。我々は実験家との共同で、疎水性のイオン液体の探索とその理由を明らかにした。正負のイオンの組み合わせは膨大であり、実験のみでは迅速な開発が困難である。

イオン液体は極めて粘度が高く、その温度依存性も大きい。網羅的にイオン液体の粘度を測定することは実験のみでは困難な作業となる。特に親水性の場合には純粋なイオン液体ではなく水の混入した物質に対する測定になりかねない。そこで、我々は第一原理計算、古典分子動力学、及び流体計算を組み合わせて理論的に粘度を算定する定式化を行い、種々のイオン液体に適用している。図 3 に親水性(IBr)及び疎水性イオン液体(IFT_2) （イオン液体分子 10 対の系）に対する水分依存性のシミュレーション計算結果を示す。

最終目的である希少元素の抽出に関しては、主として負イオンに各種リガンドを付加したイオン液体を対象とした実験・理論的取り組みを行っている。特に、実験的に困難とされて来たロジウム（Rh）の高効率抽出剤探索を集中的に行っている。

4.2　ペンタグラフェン

実験的には見つかっていない新物質を第一原理シミュレーション計算によって設計した例題としてペンタグラフェンを取り上げる。[6] 炭素の作る安定構造にはダイヤモンドとグラファイトがあると長年教科書に書かれて来た。しかし、1985 年、炭素のナノ構造体である C_{60} フラーレンが見つかってこの概念が崩れ、その後、ナノチューブ、グラフェン（グラファイトの 1 層分の 2 次元構造体）と進展してきた。グラフェンに関する研究が盛んになされ、理論の論文数もうなぎ登りである。フラーレンがサッカーボールの縫い目の重なり位置に原子がある構造であり、五員環は隣り合うことがないことから IPR (=Isolated Pentagon Rule)が成り立つと信じられる様になった。炭素ナノ構造体を扱う教科書にも IPR が登場する。しかし、人間が作る規則には限界がある。我々は五員環のみで構成されるペンタグラフェンが安定構造であることを理論的に証明し、IPR の破綻を示した。図 4 に 3 次元プリンターで作成したペンタグラフェンの模型を示す。

ペンタグラフェンは特徴的な興味ある物性を示す。その一つが負のポアソン比である。通常の物質のポアソン比は正で、ある方向に引っ張れば、体積保存のため、それに直交する 2 方向は縮む。ペンタグラフェンでは、五角形という幾何学が優先し、2 次元面内の一方向に伸び縮みさせると、その垂直方向も同様に伸び縮みする。もちろん、3 次元的には

図４．3D プリンターで作成したペンタグラフェンの模型。金属の質感があり、「実物」を手に取ってみると五角形構造がよく分かる。

厚さが減ったり増えたりして補填している。

我々が第一原理計算によって提案する実験的には見つかっていない物質が存在するはずである、と言い張れる理由は、エネルギー的、動的、熱的な安定性をシミュレーション計算で確認できるからである。特に、物質の動的安定性を格子振動計算で確認する方法は、我々の定式化と最初の論文で示され、その後、一般化した。[7] 実験結果がある場合には、その説明、解析という立場であるが、第一原理計算には予言能力があり、今回の様な新規構造体を実験家に提案することが出来る。（さらに厳密には、クーロン力で相互作用する粒子からなる多体系の必要条件であるビリアル定理及びカスプ条件も確認する。）現在、数グループで実験的な合成が試みられている。筆者は原子核・素粒子理論で博士課程を修了したが、そこでは明らかに理論先行で、実験は理論家の予言の確認に当たる。それに比べ、物性物理、量子化学、バイオ系では、理論は実験の説明という立場が通常であり、何とか抜本的なパラダイムシフトを実現したい。

ペンタグラフェンは完全に 2 次元ではなく、1.3 Åの「厚み」を持つ「薄膜」である。タイルの敷き詰め問題では三角、四角、六角形のみが可能で、正五角形では隙間が出来てしまう。それがちょっと厚みを持たせれば敷き詰め可能になる、というのは幾何学的にも興味を持たれ、さらには建築やデザインでもペンタグラフェン（構造）が注目される様になった。

5. 処理効率

我々が研究対象としている問題に対して、SX-ACE の処理効率をノード数の関数として、第一原理シミュレーション計算で標準的に用いられている VASP(Viena *Ab Initio* Simulation Package)コード [8] を用いて確認した。

1-Butyl-3-methylimidazolium bis (trifluoro-methylsulfonyl) amide ($[BMIM]^+$ $[NTF_2]^-$)イオン液体を具体的対象とした。$[BMIM]^+$ $[NTF_2]^-$の 10 単位を含む単位胞内で原子構造を最適化した。それには 25 回の原子位置移動のサイクルが必要となった。計算対象の全原子数は 400 個（水素=150, 炭素=100, 窒素=30, 酸素=40, フッ素=60, 硫黄=20）であり、DFT 計算としては大規模系に分類される。原子数が多いのでΓ点のみで計算し、標準的なパラメータ設定として電子の交換相関相互作用に PBE の GGA 近似を用いた。電子系の収束には共役勾配（CG=Conjugate Gradient）法を用いた。ノード内の全 4 コアを用いて、同一問題に対して、1 ノードから 128 ノードまで計算を実行した。25 回で原子の最適構造を得るまでの時間をノード数（コア数＝ノード数×4）の関数として図 5 に示す。

SX-ACE 用にチューニングしたコードであるが、DFT 計算の特性から最適な並列度は 16 ノードに留まる。特に問題にすべきはターンアラウンド時間が 16 ノード以上では短縮せず、128 ノードを使った場合には数倍に跳ね上がる。これはノード間通信が増大するからであり、明らかに資源の無駄使いとなる。この例では、16 ノードを使うのが最適ということになる。

図 6 に、図 5 に示した計算のターンアラウンド時間を示す。ウォールクロックから算定したので利用状況によるが、およそ図 1 の 4 分の 1 になっており、ノード内でコアごとの均一処理がなされたことが分かる。

図５. ノード数の関数として同一計算を実行した場合のノードごとの計算時間を示す。1 ノードに比べ、16 ノードでは各ノードが約 10 分の 1 の計算時間になり、並列化が有効に効いている。400 原子を含むこの系では 16 ノードが最適ということになる。

図６. ノード数の関数として、ターンアラウンド時間を示す。4 コア構成の 1 ノードなので理想的には図 5 の 4 分の 1 の時間になるはずである。待ち時間の意味でも 16 ノードが最適であり、それ以上は資源の無駄使いと言える。他の利用者にも多大の迷惑をかけるので、自分のジョブの最適な実行を確認しながら計算すべきである。

図 7 に、1 から 128 ノードを使った計算におけるノードごとに使った最大メモリーサイズを示す。1 ノードの場合の約 6.5GB が、4 ノードでは各ノードで半減する。ただし、全体としては倍増している。それ以上のノードを使う計算を実行するとノード

図７. ノードごとに使った最大メモリーサイズを示す。1 ノードで実行した場合の約 6.5GB が、4 ノードでは各ノードで半減（全体としては倍増）するが、それ以上のノードを使うとノードごとのメモリーサイズが増え始め、128 ノードでは 20GB を超える（全体では 3TB に近い）。SX-ACE では最大使っても 1 ノードで 64GB なので、これ以上は物理的にもメモリー不足になって実行できなくなる。

ごとのメモリーサイズが増え始め、128 ノードでは 20GB を超える。これは全体では 3TB に近い単一ノードの 500 倍のメモリー量を使ったことになる。並列処理の問題として、このように膨大な（分散処理するための）メモリー量の発生がある。メモリーが低価格したと言ってもこのレベルの量になるとやはり高価であり、ネットワーク系も含め、計算実行に当たっては資源の無駄遣いにならないことを意識すべきである。他の問題として、SX-ACE の 1 ノードのメモリーは 64GB なので、これ以上のメモリー量が必要になると、物理的にもメモリー不足になって計算が実行できなくなる（システムが数 GB 使うので実際はもっと少ない）。これは深刻な問題で、高精度の DFT 計算が扱える原子数は限定されてしまう。

DFT の計算時間は $O(n^3$, n=電子数）で増えるので、1 ノードのメモリー64GB を最大限に使う計算は（手法で異なるが、必要メモリー量を $O(n^2)$ とすると、この例題から算定して、3 倍の原子数（1200 個）が可能であるが、ターンアラウンド時間は 10 日程になる。もちろん並列化効率が上がるので、より多く

図８．全 CPU 時間をノード数の関数として示す。1 ノードで約 43 時間で終了したジョブが、256 ノードでは総計では 2,000 倍近くの CPU 時間を消費する。高価なスパコンを活用する限り、このような無駄使いは慎むべきである。（すみませんが、このテスト計算は許して下さい。）

のノードを効率良く使えるようになる。とは言ってもそんなには変わらない。

図 8 は総資源利用量である。1 利用者としてはターンアラウンド時間が短ければ嬉しい。その意味で、この問題では 16 ノードが最適である。しかし、高価なスパコンは他人数でシェアして活用するのが基本である。この図の示すことは、多数の利用者が待ち状態にある場合には 1 ノードによる実行が全体としては最も好ましいことになる。極論すれば、ノードをバラバラに使う、となると高価なノード間接続が不要になり、スパコンのコストは大幅に削減出来る。

6. まとめと今後の課題

大規模数値計算の 2 つの代表と言われるのは第一原理計算と流体計算である。スパコンの進展により流体計算はメッシュ数が膨大に取れるようになり、計算精度は上がったがメッシュ作成が大問題になっているという程の長い歴史を有する「枯れた」手法である。一方、第一原理計算は名前に反して現象論に走っている。実験値の説明は可能でも、未知の材料・物質の設計には問題がある。さらに、クーロン相互作用の特徴として要素ごとの切り分けが出来ず、多数のノード・コアを使っても効率向上が難しい。細線化とコア数増大によるカタログ性能向上のみでは、実験家が興味を持つ対象を扱う「有用な」計算を行おうとすると、今後とも第一原理計算は現象論に走らざるを得なくなる。Power6 で達成した 5GH z の上を行く高速クロックの計算機の開発により、第一原理計算の抜本的進展可能性を期待する、しかし、科学技術専用機の開発は経費上無理で結局、金融関係に適した計算機を使わざるを得ない。原理的に高精度計算が可能で、しかも並列計算効率の良い第一原理計算手法の開発を継続しなければならない。

謝辞

HPCI での大阪大学サイバーメディアセンターの利用により、参考文献(4)及び(5)等に発表した成果を得た。計算実施に当たり、種々のご支援をいただいたことに感謝する。

参考文献

(1) Computational Materials Science, K. Ohno, K. Esfarjani, and Y. Kawazoe, Springer Series in Solid-State Sciences 129 (1999).

(2) Unified Interpretation of Hund's First and Second Rules for 2*p* and 3*p* Atoms, Takayuki Oyamada, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara, J. Chem. Phys., Vol. 133 (2010) pp.16411301-16411319

(3) Diffusion Monte Carlo Study of Correlation in the Hydrogen Molecule, Kenta Hongo, Yoshiyuki Kawazoe and Hiroshi Yasuhara, Int. J. Quantum Chem., Vol. 107 (2007) pp.1459-1467；磁性の根源-85 年も続いた誤解-、川添良幸、金属 Vol. 84 (2014) 690-702.

(4) TOMBO: All-electron Mixed-basis Approach to Condensed Matter Physics, Shota Ono, Riichi Kuwahara, Yoshihumi Noguchi, Ryoji Sahara, Yoshiyuki Kawazoe and Kaoru Ohno, Computer Physics Communications, Vol. 189 (2015) pp. 20-30.

(5) Solvation Mechanism of Task-Specific Ionic Liquids in Water: A Combined Investigation Using Classical Molecular Dynamics and Density Functional Theory,

Yuvaraj, Surya V. J.; Zhdanov, Ravil K.; Belosludov, Rodion V.; Belosludov, Vladimir R.; Subbotin, Oleg S.; Kanie, Kiyoshi; Funaki, Kenji; Muramatsu, Atsushi; Nakamura, Takashi; Kawazoe, Yoshiyuki *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*, Vol. 119 (2015) pp. 12894-12904.

(6) Penta-graphene: A new carbon allotrope, S. H. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. H. Chen, Y. Kawazoe, and P. Jena, *Proc. Natl. Acad. Sci.* (IP=9.674) Vol. 112 (2015) pp. 2372-2377.

(7) First-Principles Determination of the Soft Mode in Cubic ZrO_2, K. Parlinski, Z. Q. Li and Y. Kawazoe, *Phys. Rev. Lett*., Vol. 78(1997) pp.4063-4066.

(8) G. Kresse and J. Hafner, "*Ab initio* molecular dynamics for liquidmetals," *Phys. Rev. B* 47(1993) pp. 558–561; G. Kresse and J. Furthmuller, "Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set," *Phys. Rev. B* Vol. 54 (1996) pp. 11169–11186.

資料１

図１から４までのグラフの元データ

No. of Nodes	No. of Cores	Total CPU time (sec)	CPU time per node (sec)
1	4	155655	155655
4	16	167308	41827
16	64	252329	15770
32	128	587922	18372
64	256	1800429	28131
128	512	16108900	125850
256	1024	294096428	1148814

No. of Nodes	No. of Cores	Total available Memory (GB)	Total Used Memory (GB)	Memory size per node (GB)
1	4	60	6.25	6.25
4	16	240	13.25	3.31
16	64	960	67.50	4.21
32	128	1920	210.00	6.56
64	256	3840	724.00	11.31
128	512	7680	2760.07	21.56
256	1024	15360	11408.03	44.56

大規模計算機システム利用者

研究報告

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

・格子 QCD シミュレーションを用いた高密度 QCD の探索 …… 27
福田 龍太郎　東京大学理学系研究科・理研 BNL 研究センター

・歯茎摩擦音/s/の空力音響シミュレーションと実験による検証 …… 33
吉永 司、和田 成生　大阪大学基礎工学研究科
野崎 一徳　大阪大学歯学部附属病院医療情報室

格子 QCD シミュレーションを用いた高密度 QCD の探索

福田 龍太郎
東京大学 理学系研究科 物理学専攻
理研 BNL 研究センター

1　はじめに

図 1　QCD 相図の概念図

図 1 は、有限温度、有限密度 QCD 相図の概念図である。現在の本分野の重要な課題の 1 つは、図 1 で示されている閉じ込め-非閉じ込め相転移線 ③ が、相図中のどの領域に存在するのかを特定することである。米国のブルックヘブン国立研究所においても、閉じ込め-非閉じ込め相転移線を探る、ビーム・エネルギースキャン実験 (図 1 の ②) が進行中であり、本課題は理論家、実験家が一体となって取り組むべきものであると言える。QCD 相図を一意的に決めるには、第一原理計算である格子 QCD 計算を用いるのが最良であるが、格子 QCD 計算を有限密度系に適用すると負符号問題 [1, 2] と呼ばれる問題に直面し、現状では限られたごく一部の領域 (図 1 の ①) でしか、信頼できる結果が得られていない。筆者は、この問題を解決する糸口を見つけるべく、正準集合の方法 [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] に基づいた格子 QCD シミュレーションを行う。さらに、QCD 相図の低温高密度領域にはカラー超伝導相 (図 1 の ④) の存在が示唆されている。その領域ではダイクォーク [10] が潜在的な自由度として重要な役割を果たしていると考えられているが、その存在は未だ裏付けられていない。そこで筆者は、格子 QCD シミュレーションがダイクォークの存在を支持するかどうかの検証も行う。

2　正準集合の方法に基づいた有限密度 QCD 相構造の解析

2.1　モンテカルロ法と負符号問題

場の量子論の一般論によれば、有限温度 T、有限密度 (有限クォーク化学ポテンシャル μ_q) での物理量 $O(T,\mu_q)$ の期待値 $\langle O(T,\mu_q)\rangle$ は経路積分量子化法を用いると次のように計算できる。

$$\langle O(T,\mu_q)\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\left[O(T,\mu_q)e^{-(\hat{H}-\mu_q\hat{N})/T}\right]}{\mathrm{Tr}\left[e^{-(\hat{H}-\mu_q\hat{N})/T}\right]} = \frac{\int[dA]\ O(T,\mu_q)\det\Delta(T,\mu_q)\ e^{-S_g}}{Z_{GC}(T,\mu_q)}$$

$$Z_{GC}(T,\mu_q) \equiv \int[dA]\ \det\Delta(T,\mu_q)\ e^{-S_g}$$

ここで、$\hat{H}$, $\hat{N}$, Δ, S_g, Z_{GC} は、ハミルトニアン、クォーク数演算子、クォーク行列、ゲージ作用、大分配関数である。A はゲージ場 A_μ の 4 つの成分 $\{A_1, A_2, A_3, A_4\}$ を表しており、積分の測度 $[dA_\mu]$ は $[dA_\mu] = \prod_x \prod_\mu dA_\mu(x)$ と定義されている。この積分は、一般的には超多重積分であり、区分求積法に基づいた様々な手法によってそれを評価することは、我々が現在利用できる計算資源を考えると不可能と言える。そこで、格子 QCD シミュレーションでは、モンテカルロ法を用いて上記の積分値を評価する。本方法では、確率 $P \propto \det\Delta\ e^{-S_g}$ に従って、ゲージ場を生成していき、生成されたゲージ場の集合 $\{A^1,\ldots,A^N\}$ を用いて $\langle O\rangle$ を次のような統計平均で求める。

$$\langle O\rangle \sim \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} O(A^i)$$

しかし、有限密度系ではこの方法は上手くいかない。なぜなら、有限密度系では $\det\Delta$ が複素数になり、モンテカルロ法で用いる確率 P を、もはや確率として扱えなくなってしまうからである。この困難は負符号問題 [1, 2] と呼ばれ、数十年に渡り未解決の問題である。

2.2 負符号問題を回避するための試み : 正準集合の方法

負符号問題を克服するために、本研究では正準集合の方法に着目する。正準集合の方法では正準分配関数 $Z_n(T)$ を用いて、大分配関数を

$$Z_{GC}(T,\mu_q) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} Z_n(T)\, e^{n\mu_q/T}$$

のように展開する。正準分配関数は純虚数クォーク化学ポテンシャル $\mu_q = i\mu_I$ ($\mu_I \in \mathbb{R}$) で計算された大分配関数のフーリエ変換を用いて

$$Z_n(T) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\left(\frac{\mu_I}{T}\right) Z_{GC}(T, i\mu_I)\, e^{-in\mu_I/T} \quad (1)$$

と計算される。純虚数クォーク化学ポテンシャルでは $\det\Delta \in \mathbb{R}$ となるため、モンテカルロ法により $Z_{GC}(T, i\mu_I)$ を求めることができる。その一方で、式 (1) は粒子数 n が大きくなるにつれて激しい振動積分になり、また、Z_n は n の増加に対して非常に早く減衰するので、式 (1) を評価する際には、多倍長精度計算が必要となる。

以上のように、正準集合による格子 QCD シミュレーションでは、原理的に負符号問題を回避できるため、有限密度 QCD 系を解析するための有望な手段と言える。

2.3 大分配関数の計算 : 巻き数展開法

式 (1) を数値的に評価するには、数百セットのゲージ配位に対して、数百から数千個の $Z_{GC}(i\mu_I)$ を計算する必要がある。Z_{GC} の計算にはフェルミオン行列式 $\det\Delta$ の計算が必須であるが、Δ は $4N_cN_V \times 4N_cN_V$ 行列であるため (N_c, N_V はカラー自由度、4 次元時空中の格子点数)、十分大きな 4 次元時空を考えると、$\det\Delta$ の計算コストが非常に高くなる。そこで本研究では、以下で説明する巻き数展開法を用いて、この計算コストを大幅に削減する。

ウィルソンフェルミオンのフェルミオン行列式は

$$\Delta = 1 - \kappa Q_s - \kappa Q_t(i\mu_I) \quad (2)$$

と書かれる。ここで Q_s, Q_t は 3 次元空間内のクォークの伝搬の寄与、虚時間方向のクォークの伝搬の寄与を表す。κ はホッピングパラメーターと呼ばれる係数で、質量が大きい (小さい) とホッピングパラメータは小さく (大きく) なり、クォークの伝搬のしやすさを記述する。フェルミオン行列式を、次のような恒等式を用いて評価する。

$$\det\Delta(i\mu_I) = e^{\log\det\Delta(i\mu_I)} = e^{\mathrm{Tr}\log\Delta(i\mu_I)} \quad (3)$$

式 (3) の最後の表式で、$\log\Delta$ を式 (2) を用いてホッピングパラメータについて展開する。トレースの性質を考えると、式 (3) で寄与を持つのは、4 次元時空中の閉じられたクォークループのみであることが分かる。また、クォークが正 (負) の虚時間方向に 1 つの格子分だけ伝搬すると、格子間隔を a として、クォーク化学ポテンシャルが $e^{+\mu a}(e^{-i\mu_I a})$ だけ現れる。有限温度の場の理論では、虚時間方向は反周期境界条件が課されるので、式 (3) は

$$\begin{aligned}\det\Delta(i\mu_I) &= \exp\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} W_n\, e^{in\mu_I a N_t}\right)\\ &= \exp\left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} W_n\, e^{in\mu_I/T}\right) \quad (4)\end{aligned}$$

と求めることができる。ここで、N_t は虚時間方向の格子点の数であり、最後の等式では $N_t a = 1/T$ という関係を用いている。n は虚時間方向のクォークループの巻きつき数を表しており、負の巻きつき数は、虚時間負方向のクォークループを表す。このフェルミオン行列式の展開は巻き数展開 [11, 12, 13] と呼ばれる。

以上のことより、格子 QCD シミュレーションにより係数 W_n を計算すれば、フェルミオン行列式を評価できる。ここで重要なのは、W_n が化学ポテンシャルに依存せず、化学ポテンシャル依存性は、複素フガシティ $\exp(i\mu_I/T)$ のみに現れることである。このことは、ある化学ポテンシャルにおいて係数の集合 $\{W_n\}$ を 1 度計算すれば、望みのすべての化学ポテンシャルにおいてフェルミオン行列式を計算できることを意味する。従って、この方法を採用すれば、フェルミオン行列式の計算コストを大幅に削減することができる。

2.4 熱力学量の計算

前節の方法でフェルミオン行列式が評価できれば、正準分配関数は式 (1) で求めることができる。正準分配関数が求められれば、圧力 p、粒子数 n、感受率 χ などの熱力学量を次のように求めることができる。

$$\begin{aligned}\frac{\Delta p(\mu,T)}{T^4} &= \frac{p(\mu,T)}{T^4} - \frac{p(0,T)}{T^4}\\ &= \left(\frac{N_t}{N_s}\right)^3 \log\left(\frac{Z_{GC}(\mu,T)}{Z_{GC}(0,T)}\right) \quad (5)\end{aligned}$$

$$\frac{n(\mu,T)}{T^3} = \frac{\partial}{\partial(\mu/T)}\frac{p(\mu,T)}{T^4} \quad (6)$$

$$\frac{\chi(\mu,T)}{T^2} = \frac{\partial^2}{\partial(\mu/T)^2}\frac{p(\mu,T)}{T^4} \quad (7)$$

2.5 数値シミュレーション結果

本研究では、パイ中間子の質量 m_π とロー中間子の質量 m_ρ の比、$m_\pi/m_\rho = 0.8$ で特徴付けられる、2 フレーバーウィルソンフェルミオンを用いて、圧力、粒子数、感受率のバリオン化学ポテンシャル依存性を、5 つの温

図 2　圧力のバリオン化学ポテンシャル依存性

図 3　多変数再重み付け法と正準集合の方法の比較

度 $T/T_c = 1.35, 1.20, 1.08, 0.99, 0.93, 0.84$ で計算した。ここで T_c はバリオン化学ポテンシャル $\mu_B = 0$ での系の相転移温度である。格子サイズは $(N_x, N_y, N_z, N_t) = (8, 8, 8, 4)$ とした。

図 2 は、圧力のバリオン化学ポテンシャル依存性である。T_c よりも上の温度では、$\mu_B/T \sim 5$ 程度まで、T_c よりも下の温度では、$\mu_B/T \sim 3.5$ 程度まで計算できていることが分かる。現在、有限密度格子 QCD シミュレーションの計算可能範囲は、$\mu_B/T \sim 1$ 程度であると考えられており、本研究結果はその制限を超える可能性を秘めていると言える。図 3 は、圧力の計算における、多変数再重み付け法 [14, 15] と正準集合の方法の比較である。正準集合の方法と同様に、多変数再重み付け法も負符号問題を回避するために考えられた手法であり、今日では、低密度系に対する信頼に足る方法であると考えられている。図 3 から分かるように、本研究結果は、多変数再重み付け法の結果と低密度領域で良い一致を見せている。

図 4 は、感受率のバリオン化学ポテンシャル依存性である。系がある密度で相転移を起こす場合、その密度に対応するバリオン化学ポテンシャルで感受率が極大を持つ。図 4 を見てみると、T_c より低いすべての温度で感受率が極大を持つような傾向が見えるが、それは明白ではない。このように、正準集合の方法で計算できるバリオン化学ポテンシャルの領域が制限されてしまうのは、数値計算では式 (2.2) をある有限個の和で打ち切らなければならないからである。この打ち切り誤差を減らすためには、大きな粒子数 n までの正準分配関数 Z_n を正確に求める必要がある。本研究の今後の課題は、まさにこの部分を克服することである。

図 4　感受率のバリオン化学ポテンシャル依存性

3　格子 QCD シミュレーションによるダイクォーク状態の探索

3.1　ダイクォーク描像とは

近年、クォークモデルでは説明できない X, Y, Z と呼ばれるエキゾチックハドロンが続々と見つかっている。X, Y, Z を説明するための代表的なシナリオとして、メソン分子描像、テトラクォーク描像が提案されているが、後者のテトラクォーク描像はダイクォーク描像に立脚している。ダイクォークは元来、QCD によって予言される数多くのエキゾチックな粒子が現れないことを、自然な方法で説明するために数十年前に提案され、その歴史は長いが、2015 年 7 月に、CERN でペンタクォークの存在が実証されたこともあり [16]、ダイクォーク描像の重要性はより高まっている。さらに、QCD の熱力学的側面で重要な低温高密度物質中のカラー超伝導状態でも、クォーク対としてダイクォークが主要な構成要素だと考えられている。上記以外にも、ダイクォーク描像は、様々な QCD 物理で重要な役割を果たしていると長年に渡り考えられており、関心を喚起し続けているが、その存在は未だ裏付けられていないため、その存在と性質を第一原理から議論することは有意義である。

3.2　本研究の意図：格子 QCD シミュレーションは現象論によるダイクォーク描像を支持するか

1 つのグルーオンの交換による相互作用に立脚したモデル [10] は、good diquark と呼ばれるカラー反 3 重項、

図 5　good diquark とその他のダイクォークの質量差

フレーバー反対称、スピン 1 重項の正パリティチャネルで 2 つのクォーク間に引力があることを示唆する。加えて、この good diquark チャネルでのダイクォーク質量が最も軽いと結論されている。

本研究では、格子 QCD 計算を用いて様々なダイクォークの質量を計算し、good diquark が最も軽いかをどうかを調べる。次に、good diquark チャネルでクォーク間の引力が実際に増大するかどうかを調べる。これを定量的に調べるには、ダイクォークの量子数を持った状態においてクォークの密度–密度相関関数を計算し、それが 2 つ のクォークを近づけるにつれ大きくなることを示せれば良い。本研究の目的は、上記の現象論的予言を第一原理計算が支持するか否かを調べ、ダイクォークの存在の妥当性を議論することである。

3.3　格子 QCD シミュレーションでのダイクォーク状態の解析方法

ダイクォーク状態はカラー自由度を陽に含む。従って、格子 QCD シミュレーションによってその状態を調べるには、適切な定式化が必要になってくる。その 1 つの方法は、格子理論に対してゲージ固定を行うことであるが、本研究では、ダイクォークと 1 つの静的クォークを組み合わせて、ゲージ不変なバリオン状態を構成する [17]。本方法を用いると、様々なダイクォーク間の質量差、及びクォークの密度–密度相関関数を well-defined な形で計算できる。

3.4　数値シミュレーション結果

本研究は、現在進行中のプロジェクトであるため、まだすべての結果が出揃っていない。そのため、今回は結果の一例として、様々なダイクォーク間の質量差のみを掲載する。図 5 は、格子サイズ a で無次元化された、good diquark とその他のダイクォークとの質量差である。図 5 を見ると、確かに good diquark が最も軽いということが分かり、格子 QCD シミュレーションと現象論的示唆との間に矛盾は見られない。

4　おわりに

4.1　正準集合の方法

本研究で用いた巻き数展開法は、クォーク質量が十分重い場合に機能する方法であり、決して万能ではない。しかし、本取り組みは、正準集合の方法による結果と先行研究による他の方法での結果を比べつつ、正準集合の方法の妥当性を議論するものとしてリーズナブルであった。筆者は、上記の問題点を克服し、より軽いクォーク質量でのシミュレーションを行うために、3 次元空間内のクォークの伝搬を厳密に評価できる、改良された巻き数展開法を開発し、現在、数値シミュレーションを行っている。

4.2　ダイクォーク状態の解析

本研究は現在進行中のため、様々なダイクォーク間の質量差の結果のみを掲載するに留まったが、密度–密度相関関数のプレリミナリーな結果を見ると、good diquark では 2 つのクォークが近づいていくと、それらの相関が他のチャネルよりも顕著に大きくなる傾向が見て取れる。

参考文献

[1] Ph. de Forcrand PoS (LAT2009)010, 2009.

[2] A. Nakamura, Phys. Lett. 149B (1984) 391.

[3] A. Hasenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys B371 (1992), 539.

[4] P. de Forcrand and S. Kratochvila, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **153**, 62 (2006) [hep-lat/0602024].

[5] A. Li, A. Alexandru and K. F. Liu, Phys. Rev. D **84**, 071503 (2011) [arXiv:1103.3045 [hep-ph]].

[6] A. Alexandru, M. Faber, I. Horvath and K. F. Liu, Phys. Rev. D **72**, 114513 (2005) [hep-lat/0507020].

[7] A. Li, A. Alexandru, K. F. Liu and X. Meng, Phys. Rev. D **82**, 054502 (2010) [arXiv:1005.4158 [hep-lat]].

[8] A. Alexandru, C. Gattringer, H. -P. Schadler, K. Splittorff, J. J. M. Verbaarschot, Phys. Rev. D **91**, 074501 (2015) [arXiv:1411.4143 [hep-lat]].

[9] C. Gattringer, H. -P. Schadler, Phys. Rev. D **91**, 074511 (2015) [arXiv:1411.5133 [hep-lat]].

[10] R. L. Jaffe and F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **91**, 232003 (2003)

[11] X. -F. Meng, A. Li, A. Alexandru and K. -F. Liu, PoS LATTICE **2008**, 032 (2008) [arXiv:0811.2112 [hep-lat]].

[12] C. Gattringer and H. -P. Schadler, Phys. Rev. D **91**, 074511 (2015) [arXiv:1411.5133]

[13] R. Fukuda, A. Nakamura and S. Oka, arXiv:1504.06351 [hep-lat]

[14] Z. Fodor, S. D. Katz, JHEP, 014 (2002). [arXiv:0106002[hep-lat]]

[15] C. R. Alton, S. Ejiri, S. J. Hands, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Ch. Schmidt, L. Scorzato (Bielefeld-Swansea), Phys. Rev. D **66**, 074507 (2002). [arXiv:0204010[hep-lat]]

[16] LHCb collaboration, Phys. Rev. Lett. **115**, 072001 (2015). [arXiv:1507.03414[hep-ex]]

[17] C. Alexandrou, Ph. de Forcrand and B.Lucini, Phys. Rev. Lett. **97**, 222002 (2006)

歯茎摩擦音/s/の空力音響シミュレーションと実験による検証

吉永 司[(1)]　野崎 一徳[(2)]　和田 成生[(1)]
(1) 大阪大学 大学院基礎工学研究科 機能創成専攻
(2) 大阪大学 歯学部附属病院 医療情報室

1. はじめに

歯茎摩擦音/s/とは、日本語のシを除くサ行を発音する際に発生する子音であり、口腔内の空気のジェット流により発生する空力音である。このジェット流は、舌と歯茎の間に形成された狭窄流路から発生し、前歯および唇に当たることにより音になると言われている[1]。この時、発生する音は 4 kHz 以上の高周波数帯のブロードバンドノイズとなる。歯茎摩擦音/s/の発音メカニズムについて、口腔内の空気の流れをモデリングすることにより調べられてきた[2-4]。

また、乱流の数値計算手法の一つであるラージエディーシミュレーション(LES)を用いて、口腔内に発生する流れと音源の関係性について調べられてきた[5-7]。中でも、Nozaki ら[6]は、前歯に衝突した流れの乱れの増加が音源の強度を増幅することを示している。しかし、これらの研究では音源の強度及び分布のみを示しており、その音源からどのような音が発生するのかということは示していない。空力音の数値計算による予測は、低マッハ数の単純な流れであっても格子解像度に大きく影響を受けるため、難しいことが知られている[8]。つまり、空力音の数値計算において、予測した流れ及び音を実験により検証することが必要である。

そこで本研究では、歯茎摩擦音/s/の口腔単純形状モデルにおいて発生する流れ及び音を数値計算により予測し、その結果を実験により検証した。この時、数値計算には 3 種類の格子解像度を持つ計算格子を用い、計算精度に対する格子数及び格子解像度の影響を調べた。この検証により、子音の発音シミュレーションにおいて必要となる格子数及び格子解像度を見積もることができる。

2. 方法

2.1 口腔単純形状モデル

口腔単純形状モデルは咽頭、狭窄流路、上下前歯、口唇を摸擬した矩形流路により構成されている。図１に単純形状モデルの形状を示す。断面積と鉛直方向の長さは歯科用コーンビーム CT により計測した歯茎摩擦音/s/発音時の口腔形状[9]を参考に決定した。

図１：歯茎摩擦音/s/発音時の口腔単純形状モデル

2.2 数値計算手法

予備計算において、呼気流量 400 cm^3/s を上記のモデルに流入すると、最大平均流速は狭窄流路の中央において約 50 m/s となった。この時、流れ場のレイノルズ数($Re = Ud/\nu$)及びマッハ数($M = U/c$)は、狭窄流路の高さ d = 1.25 mm、動粘性係数 ν = 1.5x10^{-5} m^2/s、音速 c = 344 m/s より 4167 及び 0.145 と見積もられた。モデル内の流れのマッハ数は十分低いため($M^2 \ll 1$)、発生する音は流れに影響を与えないと仮定し、本研究では非圧縮流体を仮定した流れ場の計算と音響計算を別々に行った。まず、モデル内の流れ場を LES により計算し、その流れ場の流速変動からライトヒルの音響アナロジーにより音場を周波数領域で計算した[10]。この時、流速変動値は各格子点において離散フーリエ変換により周波数領域に変換した。これらの計算は有限要素法を用いたソフトウェア FrontFlow/blue ver. 8.1[11]により行った。このソフトウェアではベクトル計算機向けの最適化オ

表1:計算条件

全格子数	最小格子幅 (mm)	時間刻み幅(s)	シミュレーション時間 (s)
1千万	2.9×10^{-2}	5×10^{-7}	0.005 - 0.018
3千万	4.9×10^{-2}	5×10^{-7}	0.028 - 0.045
4.5千万	1.7×10^{-2}	1×10^{-7}	0.016 - 0.020

プションがあり、大阪大学サイバーメディアセンターの SX-ACE においてベクトル化率 99.5%で非常に高速に計算を行うことができる。

本研究では全格子数が 1 千万、3 千万、4.5 千万となる 3 つの計算条件を設定した。格子はすべて六面体一次要素である。表 1 に 3 つの格子における計算条件を示す。1 千万格子では隣接する格子幅の変化率が大きく、壁面付近の最小格子幅は 3 千万格子の最小格子幅に比べて小さくなっている。また、3 千万及び 4.5 千万格子では実験でのモデル形状をできるだけ再現するため、狭窄流路入口の角を半径 0.1 mm 丸めた。4.5 千万格子では最小格子幅が他の条件と比べて小さいため、時間刻み幅も小さくなっている。すべての計算において、呼気流量 400 cm^3/s となるように一定流速を入口に与え、壁面はすべりなし境界、出口は圧力一定とした。また、音響計算においては壁面を剛壁、入口出口を Non-reflection 境界条件と設定した。

2.3 実験方法

単純形状モデルは 3D プリンタ(Z printer, 3D systems)により作製し、コンプレッサ(YC-4RS, 山崎)から流量 400 cm^3/s を流入して音を発生させた。この時、上前歯から鉛直下向きに 1.5 mm の位置において水平方向の流速分布を計測した。また、モデルから発生する音をモデル出口から 20 mm の位置において計測した。この時、流速と音はサンプリング周波数 100 kHz と 44.1 kHz で 1 秒間記録した。流速に関しては、平均値と変動値の二乗平均平方根(RMS)を計算し、音は高速フーリエ変換(FFT)によりスペクトルを計算し、シミュレーション結果と比較した。

3. 結果と考察

モデルの狭窄流路から口唇までの、矢状正中面における流速の瞬時値の分布を図 2 に示す。1 千万格子では狭窄流路において流れが大きく乱れ、狭窄から出たジェット流は上下前歯面近傍を流れている様子がわかる。それに対し、3 千万、4.5 千万格子では狭窄流路で流れは乱れず、上前歯付近で旋回流が発生し、1 千万格子と比べて前歯出口のジェット流の向きが変化している様子がわかる。この流れの違いは狭窄流路入口の角の丸めが影響していると考えられる。2.2 節で述べたように、実験でのモデル形状にできるだけ合わせるために 3 千万と 4.5 千万において狭窄の入口に半径 0.1 mm の丸みを持たせており、この丸みが狭窄流路での流れの状態を変化させたと考えられる。

図 2 : モデル矢状正中断面における流速の瞬時値の分布

上前歯下方 1.5 mm における流速分布を図 3 に示す。この時、横軸は下前歯面からの距離を表している。また、実験の記録時間 1 秒間に対してシミュレーション時間が短いため、実験の流速の平均値と RMS 値を 0.004 秒ごとに計算し、1 秒間の標準偏差をエラーバーとして示している。実験における平均

図 3：下前歯 1.5 mm 下方における流速分布

流速の最大値は 1 mm から 1.4 mm まで分布し、3 千万及び 4.5 千万格子の結果はその結果と一致した。それに対し、1 千万格子における最大値は 0.8 mm の位置に現れ、実験に比べて壁面近傍にあることが分る。この最大値の位置の違いは、前歯から出てくるジェット流の向きの違いを表しており、狭窄流路の流れの状態の違いが原因だと考えられる。また、格子数を 3 千万から 4.5 千万まで増やすことにより、1.5 mm から 2.5 mm のジェット流の剥離領域における RMS 値が減少した。この傾向は、同じく剥離領域における格子解像度を増加させた結果と一致している[8]。また、1 千万格子はジェットの主流の位置の影響で、剥離領域の RMS 値は小さく見積もられた。しかし、すべての計算条件において 0 mm から 1.5 mm におけるジェット主流領域においては RMS 値が大きく見積もられており、さらに壁面付近の格子幅を小さくする必要があると考えられる。

モデル遠方 20 mm における音の周波数スペクトルを図 4 に示す。1 千万及び 4.5 千万格子により計算したスペクトルは実験結果と似た傾向を示したのに対し、3 千万格子により計算したスペクトルは 1000 Hz から 2500 Hz にかけて約 10 dB 小さく、3000 Hz にお

図 4：モデル遠方 20 mm における音圧スペクトル

いて約 10 dB 大きく見積もられている。これまでのシミュレーションにおいて、前歯出口におけるジェット流の流速変動が音源の発生に大きく寄与することが分っており[6-7]、3 千万格子においてジェット流の剥離領域の変動値(図 3b)を上手く見積もれなかったことがこの原因と考えられる。つまり、前歯出口の格子解像度を十分高くして、ジェット流の剥離領域の変動値を上手く見積もることが、歯茎摩擦音/s/のスペクトルを予測する上で重要であると示唆された。ただし、1 千万及び 4.5 千万格子においてもジェット主流の RMS 値は大きく見積もられており、今後これらの値が音の特性に与える影響をさらに調べる必要がある。

謝　辞

本研究は博士課程教育リーディングプログラムのヒューマンウェアイノベーション博士課程プログラム及び特別研究員奨励費(15J00413)の助成を受けたものである。また、東京大学生産技術研究所の加藤千幸教授に有益なアドバイスを頂いた。ここに謝意を表す。

参考文献

(1) N. Stevens, J. Acoust. Soc. Am., 50, 1180-92, (1971).

(2) C. H. Shadle, Ph. D. thesis, MIT, (1985).

(3) M. Howe et al., Proc. Math. Phys. Eng. Sci., 461 1005-1028, (2005).

(4) A. Van Hirtum, et al., J. Acoust. Soc. Am., 130,

2128-2138, (2011).

(5) J. Cissoni, et al., IJIEE, 1, 1-3, (2011).

(6) K. Nozaki, et al., J. Comput. Sci., 3, 298-305, (2012).

(7) T. Yoshinaga, et al., Proc. Inter-noise 2015, (2015).

(8) C. Kato, et al., Comput. Fluid., 36, 53-68, (2007).

(9) K. Nozaki, et al., J. Dent. Res., 93, 207-211, (2014).

(10) A. A. Overai, et al., Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., 190, 345-361, (2000).

(11) Y. Guo, et al., 生産研究, 58, 11-15. (2006).

センター報告

・2015 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 …… 39

・SC15 出展報告 …… 57

・第 21 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2015)報告および
第 22 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2016)告知 …… 65

・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介 …… 67

・2016 年度大規模計算機システム利用講習会 …… 69

・2015 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 …… 70

・2016 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況 …… 78

・2016 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 …… 79

・2016 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況 …… 80

・大規模計算機システム Q & A …… 81

2015 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 2015 年 4 月から 2016 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] Takuya Kanazawa, Arata Yamamoto，“Nonrelativistic Banks-Casher relation and random matrix theory for multi-component fermionic superfluids”，Physical Review D，93，16010，2016.

[2] 2 M. Murakami, J. Sanz, Y. Iwamoto，“Stability of spherical converging shock wave”，Physics of Plasmas，July 2015.

[3] H. Hanazaki, S. Nakamura & H. Yoshikawa，“Numerical simulation of jets generated by a sphere moving vertically in a stratified fluid”，Journal of Fluid Mechanics，vol. 765，pp. 424-451，2015.

[4] Motonori Hirata, Shinya Okino & Hideshi Hanazaki，“Numerical simulation of capillary gravity waves excited by an obstacle in shallow water”，Proceedings of the Estonian Academy of Sciences，Vol. 64，No. 3，pp. 278-284，2015.

[5] Machida, M. N. and Nakamura, T.，“Accretion phase of star formation in clouds with different metallicities”，MNRAS，448，1405-1429，2015.

[6] Y. Fujimoto and S. Saito，“Effects of Strain on Carbon Donors and Acceptors in Hexagonal Boron-Nitride Monolayers”，Physical Review B，Vol.93，pp.045402，2016.

[7] H. Zhang. Y. Miyamoto, X. Cheng, A. Rubio，“Optical field terahertz amplitude modulation by graphene nanoribbons”，Nanoscale，7，19012-19017，2015.

[8] Kodai Yamamoto, Taro Matsuo, Hiroshi Shibai, Yoichi Itoh, Mihoko Konishi, Jun Sudo, Ryoko Tanii, Misato Fukagawa, Takahiro Sumi, et al.，“Direct Imaging Search for Extrasolar Planets in the Pleiades”，Publications of the Astronomical Society of Japan，Vol.65，No.4，90，Aug. 2013.

[9] S. Fujioka et al.，“Fast Ignition Realization Experiment with High-Contrast Kilo-Joule Peta-Watt Laser LFEX and Strong External Magnetic Field”，Phys. Plasmas，(accepted).

[10] H. Sawada et al.，“Flash Kα radiography of laser-driven solid sphere compression for Fast Ignition”，Appl. Phys. Lett.，(under review).

[11] S. Kigure, S. Okada，“Nano-Saturn: Theoretical Design of New C60 Inclusion Compounds”，Jpn. J. Appl. Phys.，54，06FF01，2015.

[12] M. Maruyama, S. Okada，“Geometric and Electronic Structures of Polymerized C32 Fullerenes: Electronic Structure Tuning by Fullerene and Carbon Nanotube Filling”，Jpn. J. Appl. Phys.，54，06FF02，2015.

[13] U Ishiyama, N.-T. Cuong, S.Okada，“Threshold voltage variation for charge accumulation in carbon nanotube owing to monatomic defect arrangement”，Jpn. J. Appl. Phys.，54, 06FF04, 2015.

[14] K. Narita, S. Okada，“Electronic structures of Decamethyl C60 under an Electric Field”，Jpn. J. Appl. Phys.，54，06FF09，2015.

[15] T. Igarashi, H. Kawai, K. Yanagi, N.-T. Cuong, S. Okada, T. Pichler，“Manipulation of Localized Transverse Surface Plasmon Resonance in Electricity-selected Single-wall Carbon Nanotubes by Electric Double Layer Carrier Injections”，Phys. Rev. Lett.，114，176807，2015.

[16] S. Kigure, H. Omachi, H. Shinohara, S. Okada, "Nano-Saturn: Energetics of the Inclusion Process of C60 into Cyclohexabiphenylene", J. Phys. Chem. C, 119, 8931-8936, 2015.

[17] H. E. Lim, Y. Miyata, M. Fujihara, S. Okada, H. Omachi, R. Kitaura, H. Shinohara, "Fabrication and Optical Probing of Highly-Extended, Ultrathin Graphene Nanoribbons in Carbon Nanotubes", ACS NANO , 9, 5034 - 5040, 2015.

[18] U Ishiyama, N.-T. Cuong, S. Okada, "Influence of Defects for Carrier Injection In Carbon Nanotubes", Jpn. J. Appl. Phys., 54 , 65101, 2015.

[19] K. Narita, S. Okada, "Radical Spin Interaction in One-dimensional Chain of Decamethyl C60", Chem. Phys. Lett., 634, 129-133, 2015.

[20] D. Matsumoto, K. Yanagi, T. Takenobu, S. Okada, K. Marumoto, "Electrically induced ambipolar spin vanishments in carbon nanotubes", Scientific Rep., 5, 11859, 2015.

[21] M. Maruyama, N.-Thanh Cuong, S. Okada , "Geometric and electronic structures of two-dimensional networks of fused C36 fullerenes", J. Phys. Sco. Jpn., 84, 84706, 2015.

[22] M. Nakamura, S. Yoshida, T. Katayama, A. Taninaka, Y. Mera, S. Okada, O. Takeuchi, H. Shigekawa, "Three-dimensional dynamic probe imaging mechanically activated switching of Si-based single-molecule junction", Nature Comm., 6, 8465, 2015.

[23] T. Kondo, D. Guo, T. Shikano, T. Suzuki, M. Sakurai, S. Okada, J. Nakamura , "Observation of Landau levels on nitrogen-doped flat graphite surfaces without external magnetic fields", Scientific Rep., 5, 16412, 2015.

[24] K. M. Bui, V. A. Dinh, S. Okada, T. Ohno, "Hybrid functional study of the NASICON-type Na3V2 (PO4)3: Crystal and electronic structures, and polaron-Na vacancy complex diffusion", Phys. Chem. Chem. Phys., 17, 30433-30439, 2015.

[25] K. Kishimoto, S. Okada, "Influence of the Defects on the Electronic Structures of Bilayer Graphene", Surf. Sci., 644, 18-23, 2016.

[26] A. Yamanaka, S. Okada, "Energetics and electronic structures of graphene nanoribbons under a lateral electric field", Carbon, 96, 351-361, 2016.

[27] M. Maruyama, S. Okada, "Magnetic Properties of Graphene Quantum Dots Embedded in h-BN Sheet", J. Phys. Chem. C, 120 , 1293-1302, 2016.

[28] M. Maruyama, S. Okada, "Magnetic Properties of Graphene Quantum Dots Embedded in h-BN Sheet", J. Phys. Chem. C, 120 , 1293-1302, 2016.

[29] A. Yamanaka, S. Okada, "Influence of electric field on electronic states of graphene nanoribbons under a FET structure", Jpn. J. Appl. Phys., 55, 35101 , 2016.

[30] J. Sorimachi, S. Okada , "Influence of fullerene cages on energetics of dipole moment of encapsulated water molecule", Jpn. J. Appl. Phys. , 55, 04EP02, 2016.

[31] U Ishiyama, N.-T.Cuong, S. Okada, "Anomalous electrostatic potential properties in CNT thin films under a weak external electric field", Appl. Phys. Express, 9, 45101, 2016.

[32] K. Narita, S. Okada, "Geometric and electronic structures of corannulene polymers: Ultra narrow graphene ribbons with corrugation and topological defects", Chem. Phys. Lett. , 650, 76 - 81, 2016.

[33] Allan Abraham B. Padama, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "Quantum states of hydrogen atom on Pd(1 1 0) surface", Applied Surface Science, Vol.359, pp.687-691 , Dec. 2015.

[34] Joaquin Moreno, Susan Aspera, Melanie David, Hideaki Kasai, "A computational study on the effect of local curvature on the adsorption of oxygen on single-walled carbon nanotubes",

Carbon，Vol.94，pp.936-941，Nov. 2015 .

[35] Ryo Tsuchitani, Hiroshi Nakanishi, Hideyuki Shishitani, Susumu Yamaguchi, Hirohisa Tanaka, Hideaki Kasai，“A theoretical study of how C2-substitution affects alkaline stability in imidazolium-based anion exchange membranes ”，Solid State Inonics，Vol.278，pp.5-10，Oct. 2015.

[36] Hiroki Fukuoka, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima，“Interaction between fluid and flexible membrane structures by a new fixed-grid direct forcing method”，AIP Conf. Proc，1702，No.190014，2015.

[37] 鈴木浩平,大森健史,梶島岳夫，“多面体格子における二相流解析手法の開発（第 1 報，界面の移流法および界面曲率算出法)”，日本機械学会論文集，Vol.81，No.828，p.15-00256 ，2015.8.

[38] 日角友香，大森健史，山口康隆，梶島岳夫，“分子動力学法を用いた接触線の移動を伴う流れの固液境界モデルに関する研究 ”，日本機械学会論文集，Vol.81，No.831，p.15-00409，2015.11.

[39] Shintaro Takeuchi, Takaaki Tsutsumi, Katsuya Kondo, Takeo Kajishima，“Heat transfer in natural convection with finite-sized particles considering thermal conductance due to inter-particle contacts”，Computational Thermal Sciences，(to appear).

[40] Daisuke Takagi, Shintaro Takeuchi and Takeo Kajishima，“Role of Vortical Structures on the Forced Convective Heat Transfer in Oscillation-Controlled Coaxial-Pipe Heat Exchanger”，Journal of Enhanced Heat Transfer，Vol.22 (4)，pp. 345‑369，2015.

[41] T. Moritaka, Y. Kuramitsu et al，“Spontaneous focusing of plasma flow in a weak perpendicular magnetic field”，Physics of Plasmas，vol. 23，pp. 032110，2016.

[42] T. Hiejima，“Stability of compressible streamwise vortices”，Physics of Fluids，27 [7]，74107，10 pages，2015.

[43] T. Hiejima，“Instability of isolated hollow vortices with zero circulation”，Physics of Fluids，28 [4]，44104，12 pages，2016 .

[44] Nagatomo, H., Johzaki, T., Asahina, T., Sunahara, A., Sano, T., Sakagami, H., Mima, K., Fujioka, S., Shiraga, H., Azechi, H. ，“Computational study of magnetic field compression by laser-driven implosion”，Nuclear Fusion，55 (9)，93028，(2015) September.

[45] Fujioka, S., Johzaki, T., Arikawa, Y., Zhang, Z., Morace, A., Ikenouchi, T., Ozaki, T., Nagai, T., Abe, Y., Kojima, S., Sakata, S., Inoue, H., Utsugi, M., Hattori, S., Hosoda, T., Lee, S.H., Shigemori, K., Hironaka, Y., Sunahara, A., Sakagami, H., Mima, K., Fujimoto, Y., Yamanoi, K., Norimatsu, T., Tokita, S., Nakata, Y., Kawanaka, J., Jitsuno, T., Miyanaga, N., Nakai, M., Nishimura, H., Shiraga, H., Nagatomo, H., Azechi, H.，“Heating efficiency evaluation with mimicking plasma conditions of integrated fast-ignition experiment”，Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics，91 (6)，63102，(2015) June.

[46] Johzaki, T., Taguchi, T., Sentoku, Y., Sunahara, A., Nagatomo, H., Sakagami, H., Mima, K., Fujioka, S., Shiraga, H.，“Control of an electron beam using strong magnetic field for efficient core heating in fast ignition”，Nuclear Fusion，55 (5)，53022，(2015) April.

[47] Takayuki Araki, Keisuke Yoshida, Youhi Morii, Nobuyuki Tsuboi, A.Koichi Hayashi，“Numerical Analyses on Ethylene/Oxygen Detonation with Multi-step Chemical Reaction Mechanisms: Grid Resolution and Chemical Reaction Model”，Combustion Science and Technology，Volume 188，Issue 3，346-369，2016.3 .

[48] T.Ishida,Y.Duguet,and T.Tsukahara，“Transitional structures in annular Poiseuille flow depending on radius ratio”，Journal of Fluid Mechanics，Vol. 794，R2 (11 pages)，2016 May.

[49] Fernande Freyermuth, Frederique Rau, Yosuke Kokunai, Thomas Linke, Chantal Sellier, Masayuki Nakamori, Yoshihiro Kino, Ludovic Arandel, Arnaud Jollet, Christelle Thibault, Muriel Philipps, Serge Vicaire, Bernard Jost, Bjarne Udd, John W. Day, Denis Duboc, Karim Wahbi, Tsuyoshi Matsumura, Harutoshi Fujimura, Hideki Mochizuki, François Deryckere, Takashi Kimura, Nobuyuki Nukina, Shoichi Ishiura, Vincent Lacroix, Amandine Campan-Fournier, Vincent Navratil, Emilie Chautard, Didier Auboeuf, Minoru Horie, Keiji Imoto, Kuang-Yung Lee, Maurice S. Swanson, Adolfo Lopez de Munain, Shin Inada, Hideki Itoh, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Eric Wang, Thomas Zimmer, Denis Furling, Masanori P. Takahashi, Nicolas Charlet-Berguerand，“Splicing misregulation of SCN5A contributes to cardiac conduction delay and heart arrhythmia in myotonic dystrophy”，Nature Communications，2016 (accepted) .

[50] 佐久間悠人，田村哲郎，“竜巻の生成機構に関する数値解析的研究”，平成 27 年度日本風工学会年次研究発表会，pp149-150，2015 年 5 月 28 日.

[51] M. Matsumoto，“Simple DQPSK signal regenerator using electrical limiting amplifiers”，IEEE Photonics Journal，Vol. 7 ，No. 6，Article # 7802313，Dec. 2015.

[52] M.Wakayama,T.Kunihiro,S.Muroya,A.Nakamura, C.Nonaka, M.Sekiguchi, H.Wada，“Lattice QCD study of four-quark components of the isosinglet scalar mesons: Significance of disconnected diagrams”，Phys.Rev.D91，094508(2015).

[53] K.Iwano，“Ultrafast electronic photoinduced phase transition in a two-dimensional charge-ordering system”，Phys.Rev.B91(2015)，115108-(1-9).

[54] T.Makiyama,Y.Sakai,T.Saito,M.Ishii, J.Takahashi, K.Kashiwa, H.Kouno, A.Nakamura, M.Yahiro，“Phase structure of two-color QCD at real and imaginary chemical potentials: Lattice simulations and model analyses”, Phys.Rev.D93(2016), 014505(1-18).

[55] H.Kouno, K.Kashiwa, J.Takahashi, T.Misumi M.Yahiro，“Understanding QCD at high density from a Z3-symmetric QCD-like theory”，Phys.Rev.D93(2016)，056009(1-10).

[56] Adriano Di Giacomo, Masayasu Hasegawa，“Monopoles in Maximal Abelian gauge, number of zero modes, and instantons”，HPC journal, Cybermedia Center, University of Osaka，No.5(2015)，21-25，2015.

[57] T.M.Doi, K.Redlich, C.Sasaki, H.Suganuma，“Polyakov Loop Fluctuations in the Dirac Eigenmode Expansion”, Phys.Rev.D92(2015), 94004.

[58] H.Suganuma, T.M.Doi, T.Iritani，“Analytical Formulae of the Polyakov and Wilson Loops with Dirac Eigenmodes in Lattice QCD”，PTEP 2016 (2016)，013B06.

[59] E.Itou, K.Nagata, Y.Nakagawa, A.Nakamura, V.I.Zakharov，“Entanglement in Four-Dimensional SU(3) Gauge Theory”，Accepted by Progress of Theoretical and Experimental Physics (PTEP)，arXiv:1512.01334 [hep-th].

[60] K.Nagata, J.Nishimura, S.Shimasaki，“Justification of the complex Langevin method with the gauge cooling procedure”，Prog.Theor.Exp.Phys.，013B01(2016)，[arXiv:1508.02377].

[61] A.Nakamura, S.Oka, Y.Taniguchi，“QCD phase transition at real chemical potential with canonical approach”，JHEP02(2016)，054.

[62] S.Ohnishi,Y.Ikeda,T.Hyodo,W.~Weis，“Structure of the Lambda(1405) and the K^- d -> pi Sigma n reaction”，Phys.Rev.C93(2016)，025207.

２．国際会議会議録掲載論文

[1] S. Okino & H. Hanazaki,“Prandtl number effects on the decaying and the forced turbulence in stratified fluids”, The 15th European Turbulence Conference, Aug. 2015.

[2] H. Hanazaki, M. Hirata & S. Okino, “Numerical simulation of the resonantly excited capillary-gravity waves”, 68th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics, Nov. 2015.

[3] Takanori Suwa,Yoshitaka Ueki and Masahiko Shibahara, “ MOLECULAR DYNAMICS STUDY ON EFFECTS OF NANOSTRUCTURES ON ADSORPTION ONTO SOLID SURFACE”, The 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, 25NOVEMBER 2015.

[4] Daichi Hirota, Yutaka Oda, Kouta Fujiwara and Masahiko Shibahara, “LARGE EDDY SIMULATION OF LOCAL TIME-MEAN ENTROPY PRODUCTION IN TURBULENT HEAT TRANSFER FIELDS ”, The 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, 25 NOVEMBER 2015.

[5] Urara Satake, Toshiyuki Enomoto, Keitaro Fujii and Kenji Hirose, “Optimization method for double-sided polishing process based on kinematical analysis”, Proceedings of 48th CIRP Conference on MANUFACTURING SYSTEMS, pp.870-874, Jun. 2015.

[6] Urara Satake, Toshiyuki Enomoto, Kenji Hirose and Keitaro Fuji, “Analytical study on double-sided polishing process of 450 mm silicon wafersi for improving global flatness ”, Proceedings of the 8th International Conference on Leading Edge Manufacturing in 21st Century, No. 1008, Oct. 2015.

[7] Masayasu Hasegawa and Adriano Di Giacomo, “ Chiral symmetry breaking, instantons, and monopoles ”, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory, Kobe, Japan, 14 - 18 July 2015.

[8] Masayasu Hasegawa, Adriano Di Giacomo, and Fabrizio Pucci, “Chiral symmetry breaking and monopoles”, The 8th International Workshop on Chiral Dynamics, University of Pisa and INFN, Pisa, Italy, 29 June - 03 July 2015.

[9] Yusuke Yamaguchi, “Wind Tunnel Tests and Numerical Analysis on Attitude Control Using Lateral Jet for a Supersonic Vehicle”, The 30th International Symposium on Space Technology and Science , 2015-e-54, July 2015.

[10] Satoshi Ii, Shigeo Wada , “Computational Study of Airway Closure and Reopening in Crackle Lung Sounds ”, USNCCM13, San Diego , CA, USA, July 26-30, 2015.

[11] Satoshi Ii, Shigeo Wada , “Mechanical relationship between airway closure and sound generation for expiratory crackles ”, IWACOM-III, KFC Hall & Rooms, Tokyo , JAPAN , Oct. 12-14, 2015.

[12] Satoshi Ii, Shigeo Wada , “Computational Study of Crackle Sounds: monolithic approach for airway dynamics and acoustics”, The 8th International Bio-fluid Symposium, Caltech, Pasadena, USA, Feb. 12-14, 2016.

[13] T. Yoshinaga, N. Koike, K. Nozaki, S.Wada , “Study on production mechanisms of sibilant /s/ using simplified vocal tract model ”, Proceedings of Inter-noise 2015, pp 1-6, July 2015.

[14] Shintaro Takeuchi, Takaaki Tsutsumi, Takeo Kajishima, “Heat transfer in particle-dispersed two phase flows considering temperature gradient within the particles ”, ICHMT International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer , Rutgers University , USA , Paper CHT-15-61, 2015.5.

[15] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Deflection of the wake of a particle in

sheared ambient flows ", International Conference of Jets, Wakes and Separated Flows, Stockholm, Sweden, 2015.6.15 .

[16] Takanori Hanawa, Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, " DNS analysis of the interaction between turbulent flow and elastic fibers implanted on a flat plate", 9th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Melbourne, Australia, 2015.6.30.

[17] Takeo Kajishima, Katsuya Kondo, Shintaro Takeuchi, " Numerical simulation of heat transfer in shear flow of liquid-solid two-phase medea by immersed solid approach ", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015, Seoul, Korea , 2015.7.26.

[18] 18 Yuichi Kunishima, Takeo Kajishima, Michihisa Tsutahara, "Simulations of fully developed channel flow by a new high-resolution scheme of the finite-difference lattice Boltzmann mthod", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015, Seoul, Korea , 2015.7.26.

[19] 19 Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, " Direct numerical simulation of heat transfer in liquid-solid two-phase media ", 7th European-Japanese Two-Phase Flow Group Meeting, Zermatt, Switzerland , 2015.10.11.

[20] Takeshi Omori, Takeo Kajishima , " Dynamic contact angle in narrow slit pores ", 7th European-Japanese Two-Phase Flow Group Meeting, Zermatt, Switzerland, 2015.10.11.

[21] Kenshi Hirai, Takeo Kajishima, "Numerical study of aerodynamic characteristic of corrugated thin wing", The Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow 2015, Busan , Korea , ASCHT 15-Mon05-012 , 2015.11.22.

[22] Takeshi Harada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Computational study of heat transfer in particle-laden flow considering temperature gradient within particles and inter-particle lubrication", Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow 2015, Busan, Korea, ASCHT 15-Wed04-003 , 2015.11.22.

[23] T. Moritaka, Y. Kuramitsu and Y-L Liu , "Spontaneous focusing of high-beta plasma flow in ion kinetic regime", International Conference on Extreme Light (ICEL 2015), Bucharest, Romania, November 20.

[24] T. Johzaki, Y. Sentoku, H. Nagatomo, A. Sunahra, H. Sakagami, S. Fujioka, H. Shiraga, T. Endo and FIREX project group, "Magnetic guiding of fast electron beam in imploded spherical solid targets", Japan-US Workshop on Theory and Simulation on the high energy density physics related to the inertial confinement fusion Banshoukaku , Daianji-Onsen, Fukui, Japan, 2016.03.24.

[25] T. Johzaki,Y. Sentoku, H. Nagatomo, A. Sunahara, H. Sakagami, S. Fujioka,H. Shiraga,T. Endo and FIREX project group, "Magnetic Guiding of Electron Beam in Imploded Spherical Solid Targets", 57th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Savannah, Georgia, USA on Nov. 16-20, 2015, 2015.11.20.

[26] T. Johzaki, Y. Sentoku, H. Nagatomo, A. Sunahara, H. Sakagami, S. Fujioka, H. Shiraga,T. Endo and FIREX project group, " Electron Beam Guiding by External Magnetic Fields in Imploded Fuel Plasma ", Ninth International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, IFSA2015, Seattle, Washington, USA on Sep. 20-25, 2015, 2015.09.25.

[27] T. Johzaki, "Electron Beam Guiding by kT-class Magnetic Fields in Fast Ignition", US-Japan Workshop on High Energy Density Physics , San Diego, CA, USA on Aug. 31-Sep.01, 2015, 2015.09.01.

[28] Takuya Tsuji, Junpei Fujimoto, Toshitsugu Tanaka, " DEM-CFD simulation of particle-drying in fluidized bed ", International Powder and Nanotechnology Forum2015 , June. 2015.

[29] Takuya Tsuji , “A numerical model for flows including dense heterogeneous particles”, 6th Asian Particle Technology Symposium , No.OP12-2, Sep. 2015.

[30] Kenta Rai, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka , “DEM-CFD Simulation of Density Segregation in Vibrating Fluidized Bed”, 6th Asian Particle Technology Symposium, No. OP22-3, Sep. 2015.

[31] Takuya Tsuji, Ryoya Nagano, Toshitsugu Tanaka, “Can we separate spatial averaging scale from computational cell size in DEM-CFD mesoscopic simulations?”, 3rd International Workshops on Advances in Computational Mechanics , No.OW8-1-2, Oct. 2015.

[32] Maehara, T., Oda, Y., “Numerical Study on Film Cooling Effect of Gap Leakage Flow at First-Stage Stationary Vane”, Proc. of International Gas Turbine Congress 2015 Tokyo , USB:WePM2B.3, Nov. 2015.

[33] Hirota, D., Oda, Y., Fujiwara, K., Shibahara, M., “ Large Eddy Simulation of Local Time-Mean Entropy Production in Turbulent Heat Transfer Fields”, Proc.of the Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow 2015 (ASCHT 2015), USB:ASCHT15-Mon05-001, Nov. 2015.

[34] Oda, Y., Takano, K., Takeishi, K. , “Large Eddy Simulation of Film Cooling with Swirled Coolant Injected from a Shaped Hole”, Proc. of the Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow 2015 (ASCHT 2015) , USB:ASCHT15-Tue04-013, Nov. 2015.

[35] Tomotaka Niibo, Youhi Morii, Nobuyuki Tsuboi, Makoto Asahara, A.Koichi Hayashi, “Numerical Study on Direct of Cylindrical Detonation in H2/O2 Mixture: Influence of Higher-order Scheme”, 25th ICDERS, No 136, August, 2015.

[36] Seiichiro Eto, Yusuke Watanabe, Nobuyuki Tsuboi, Takayuki Kojima, A. Koichi Hayashi, “3D Numerical Simulation on Rotating Detonation Engine: Effects of Converging-Diverging-Nozzle on Thrust Performance”, 25th ICDERS, No 132, August, 2015 .

[37] Tomoyuki Muta, Haruka Eto, Nobuyuki Tsuboi, Yusuke Maru, Kazuhisa Fujita, “ Aerodynamic Characteristics Study on Waverider for Applying to TSTO”, 30th ISTS, 2015-g-24, 2015 .

[38] K. Fujimoto, D. Muto, M. Asahara, N. Tsuboi, “Numerical Simulation on Dispersion Process of Unsteady High Pressure Hydrogen Jet Flow ” , The First Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC2016) , PRTEC-15066, 2016.3.

[39] Masafumi Shibao, Nobuyuki Tsuboi, Takashi Ito, “ Numerical Simulations of the External Flow Effect on Linear Aerospike Nozzle Performance”, 30th International Symposium on Space Technology and Science, 2015-g-35 , Kobe International Conference Center, 2015.

[40] Yuki Takatori, Nobuyuki Tsuboi, Keisuke Fujimoto, Daiki Muto, Makoto Asahara, “Numerical simulation on low-speed hydrogen jet diffusion”, The 6th International Conference on Hydrogen Safety (ICHS 2015), ID179, October, 2015.

[41] Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, Hiroshi Terashima, “ Effects of the Recess Length on Supercritical Jet Mixing of Co-planar/Axial Injectors”, 6th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS), 487, Krakow, Poland, June 2015.

[42] Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, Hiroshi Terashima, “ Characteristics of Jet-Mixing at Supercritical Pressure for Coaxial Rocket Injector Design ” , 30th International Symposium on Space Technology and Science, 2015-a-40 , Kobe , Japan, July 2015.

[43] Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, Hiroshi Terashima, “Mixing Characteristics of a Recessed Coaxial Jet at Supercritical Pressure”, AIAA SciTech2016, AIAA-2016-0344, San Diego, USA, January,2016.

[44] K. Horiuti, “Energy cascade and drag reduction in

elasto-inertial turbulence diluted with contravariant and covariant polymers", Invited talk, EUROMECH-ERCOFTAC Workshop, Turbulence Cascades, 2-4 December, Lille , France , 2015.

[45] S. Inoue, T. Tsukahara, S. Jakirlić, and Y. Kawaguchi, "A Reynolds-stress model for turbulent flow of a drag-reducing viscoelastic fluid", In: Proceedings of the 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, ASCHT15-Wed02-004 , 5 pages, Korea , Nov. 22-25 (2015).

[46] H. Tatematsu, T. Ishida, and T. Tsukahara, "Structures in laminar plane Couette flows destabilized by system rotation", In: Proceedings of the 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, ASCHT15-Mon05-007, 5 pages, Korea, Nov. 22-25 (2015).

[47] A. Ikegami, T. Tsukahara, and Y. Kawaguchi, "Viscoelastic stress field in turbulent flow behind backward-facing step", In: Proceedings of the 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, ASCHT15-Mon04-006, 4 pages, Korea, Nov. 22-25 (2015) .

[48] T. Ishida and T. Tsukahara, "Turbulent annular pipe flow in subcritical transition regime: Numerical study on heat transfer", In: Proceedings of the 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, ASCHT15-Mon04-009, 4 pages, Korea, Nov. 22-25 (2015) .

[49] T. Ishida and T. Tsukahara, "Turbulent annular pipe flow in subcritical transition regime: Direct numerical simulation of a large domain", In: Proceedings of the ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015 , AJKFluids2015-15472 , 4 pages, Korea July 26-31 (2015) .

[50] A. Ikegami, T. Tsukahara, and Y. Kawaguchi, "nfluence of viscoelasticity on turbulent flow over a backward-facing step", In: Proceedings of the ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015,AJKFluids2015-25251, 4 pages, Korea, July 26-31 (2015).

[51] Kensuke Sakata, Takashi Ashihara, Tomoya Ozawa, Koichi Kato, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazoo Nakazawa, Minoru Horie, "No stationary rotors are observed in patients with non-paroxysmal atrial fibrillation: A combined clinical and in silico study employing a novel real-time phase mapping system (ExTRa Mapping)", The 8th Asia-Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session (APHRS), Melbourne, poster presentation, 2015/11/19-22.

[52] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Koichi Kato, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazoo Nakazawa, Minoru Horie, "Development of a novel real-time phase mapping system, called ExTRa Mapping, using in silico technique for identifying unstable rotors in patients with non-paroxysmal atrial fibrillation", The 8th Asia-Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session (APHRS) , Melbourne, poster presentation , 2015/11/19-22.

[53] Takashi Ashihara, Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Koichi Kato, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Rotor distribution does not always match with the anatomic distribution of complex fractionated atrial electrogram sites in patients with non-paroxysmal atrial fibrillation: A clinical observational study employing a novel real-time phase mapping system (ExTRa Mapping)", The 8th Asia-Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session (APHRS), Melbourne, oral presentation, 2015/11/19-22.

[54] Shin Inada, Takeshi Aiba, Daniel T. Harrell, Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Naomasa Makita, Wataru Shimizu, Takanori Ikeda, Kazuo Nakazawa, "Conduction delay of right ventricular outflow tract and ventricular arrhythmia - A simula-

tion study for Brugada syndrome -", International Congress on Electrocardiology 2015 , Brazil, oral presentation , 2015/6/24-27.

[55] Takashi Ashihara, Tomoya Ozawa, Tetsuhisa Hattori, Koichi Kato, Takeshi Tsuchiya, T Yamaguchi, R Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, "Possible mechanisms of rotor ablation for chronic atrial fibrillation: A simulation study", Heart Rhythm 2015 Scientific Sessions, Boston, poster presentation, 2015/5/13-16.

[56] S. Okamoto, Y. Takagi and Y. Okano, "Interaction between phase separation and turbulence in binary mixture", 2015 Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2015), ASCHT15-Wed03-005, Busan, Korea, November 22-25 (2015) .

[57] Y. Takagi and S. Okamoto, "Suppression of turbulent energy cascade due to phase separation in homogenous binary mixture fluid ", 68th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics (APS DFD 2015), M22.00010, Boston, United States, November 22-24 (2015).

[58] Kazuya Tsuboi, Shingo Morishita, Eiji Tomita, Tatsuya Hasegawa, "Evaluation of Experimental Measurement and Analysis on the Flame Displacement Speed Using DNS Data of Turbulent Premixed Flames", The 10th Asia-Pacific Conference on Combustion, 223, July 2015.

[59] Koichi Tsujimoto, Toma Onodera, Toshiko Shakouchi and Toshitake Ando, "Direct numerical simulation of dynamic-rotational controlled jet ", Proceedings of International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows 2015, USB, 6P., May 2015.

[60] Naoki Koike, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, "Analysis of flow characteristics in rotating impinging jet using DNS", Proceedings of International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows 2015, USB, 6P., May 2015.

[61] Amrugamu Sanmuga,Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshhitake Ando, "Direct Numerical Simulation of Impinging Jet Controlled using Rotating Nozzle ", Proceeding of ASME-JSME-KSME joint Fluids Engineering Conference 2015, USB-memory, 6P., Jul. 2015.

[62] K. Tsujimoto, A. Sanmuga, T. Shakouchi, T. Ando, " Direct Numerical Simulation of Dynamic Rotating Jets", Proceeding of the 15th European Turbulence Conference , USB-memory , 2P., Aug. 2015.

[63] Takashi Ohta, Keisuke Yamada , " Sweeping within the turbulent boundary layer along a melting wall ", Proceedings of 8th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, J023, Sep. 2015.

[64] Takashi Ohta, Naoto Akiyama, " Simulation of Turbulent Boundary Layers of Melting Liquid Metal Flow with a Mushy Layer ", Proceedings of 1st Pacific Rim Thermal Engineering Conference, PRTEC-15104, Mar. 2016.

[65] Adriano Di Giacomo, Masayasu Hasegawa , " Chiral symmetry breaking, instantons, and monopoles", The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory, PoS (Lattice 2015) 313, (Submitted), (arXiv:1512.00359), Kobe, Japan, 2015.

[66] Adriano Di Giacomo, Masayasu Hasegawa, Fabrizio Pucci, " Chiral symmetry breaking and monopoles", The 8th International Workshop on Chiral Dynamics , PoS (CD 2015) 127, (arXiv:1510.07463), University of Pisa and INFN, Pisa, Italy.

[67] T.M.Doi, H.Suganuma, T.Iritani, "Lattice QCD Analysis for Relation between Quark Confinement and Chiral Symmetry Breaking", Quark Confinement and the Hadron Spectrum XI, Saint-Petersburg, Russia, September 8-12 (2014), AIP Conference Proceedings 1701 (2016) 03000.

[68] K.Nagata, J.Nishimura, S.Shimasaki, "Testing a

generalized cooling procedure in the complex Langevin simulation of chiral Random Matrix Theory”, 33rd International Symposium on Lattice Field Theory, PoS LATTICE 2015, 156(2015) [arXiv:1511.08580], Japan, July 14-18 (2015).

[69] Shotaro Oka for Zn-Collaboration, “Exploring finite density QCD phase transition with canonical approach --Power of multiple precision computation--”, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory, PoS(LATTICE2015)166, Kobe, Japan, July 14-18 (2015).

[70] R.Fukuda, A.Nakamura, S.Oka, “Validity range of canonical approach to finite density QCD”, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory, PoS(LATTICE2015)167, Kobe, Japan, July 14-18 (2015).

[71] R.Fukuda, A.Nakamura, S.Oka, et al., “Beating the sign problem in finite density lattice QCD”, The 33rd International Symposium on Lattice Field Theory, PoS(LATTICE2015)208, Kobe, Japan, July 14-18 (2015).

３．国内研究会等発表論文

[1] 沖野真也, 花崎秀史, “成層乱流のプラントル数依存性”, 京都大学数理解析研究所研究集会「乱流を介在した流体現象の数理」, Jul. 2015, 京都大学数理解析研究所講究録（印刷中）.

[2] 沖野真也, 花崎秀史, “成層乱流におけるエネルギースペクトルのプラントル数依存性”, 日本流体力学会年会 2015, Sep. 2015.

[3] 猪又諒祐,沖野真也,花崎秀史, “二層流体中の物体による内部重力波の励起と伝播”, 京都大学数理解析研究所研究集会「非線形波動現象の数理に関する最近の進展」, Oct. 2015,京都大学数理解析研究所講究録（印刷中）.

[4] 奥山優,花崎秀史,沖野真也,平田基徳, “物体により励起された表面張力重力波と短波の生成”, 京都大学工学研究科高等研究院「第 3 回流体基礎工学研究部門公開セミナー」, Mar.2016.

[5] 諏訪孝典,芝原正彦, “スリット状ナノ構造が凝縮時の界面熱抵抗に及ぼす影響”, 日本伝熱学会 第 53 回日本伝熱シンポジウム, 2016 年５月発表予定.

[6] 宇野元気,植木祥高,芝原正彦, “ナノメートルスケールの壁面微細構造が凝縮核生成に及ぼす影響に関する分子動力学的研究”, 日本伝熱学会 第 53 回日本伝熱シンポジウム, 2016 年５月発表予定.

[7] 宮崎靖広,植木祥高,芝原正彦, “ナノ粒子層が固液界面熱抵抗に及ぼす影響に関する分子動力学的研究 ”, 日本伝熱学会 第 53 回日本伝熱シンポジウム, 2016 年５月発表予定.

[8] 藤原邦夫,佐々木翔平,芝原正彦 ,“固体壁面近傍の水分子に凝固現象が与える影響に関する分子動力学解析”, 日本伝熱学会 第 53 回日本伝熱シンポジウム , 2016 年５月発表予定.

[9] 廣田大地,小田豊,藤原航太,芝原正彦, “ LES における局所的なエントロピー生成の予測手法に関する研究”, 日本機械学会 熱工学カンファレンス 2015, No.15-48, 2015 年 10 月 24-25 日.

[10] 山口裕介,吹場活佳,丸祐介, “ 超音速機の姿勢制御におけるジェット噴射位置とマッハ数変化の影響 ”, 平成 27 年度宇宙航行の力学シンポジウム , 相模原, 2015 年 12 月.

[11] 山口裕介,吹場活佳,小野裕太,綿引雅一,丸祐介, “ 超音速機の姿勢制御におけるジェット噴射位置の違いによる影響”, 日本航空宇宙学会第 46 期年会講演会, 東京, 2015 年 4 月.

[12] 山中誠矢,大倉一郎, “せん断を受けるアルミニウム合金桁の耐荷力”, 平成 27 年度土木学会全国大会第 70 回年次学術講演会発表 .

[13] 西井智紀,大倉一郎, “曲げを受ける突起付きアルミニウム合金桁の耐荷力”, 平成 27 年度土木学会全国大会第 70 回年次学術講演会発表.

[14] 鳥畑一博,大倉一郎, “曲げを受けるアルミニ

ウム合金桁の耐荷力”，平成 27 年度土木学会全国大会第 70 回年次学術講演会発表.

[15] 藤井逸人，Agung Setiadi，赤井恵，葛西誠也，金井康，松本和彦，桑原裕司，“単分子吸着によって発現するカーボンナノチューブ素子におけるランダムテレグラフシグナルノイズ”，応用物理学会第 63 回春季学術講演会公演予稿集，21p-S421-11，Mar. 2016 .

[16] 吉永司,小池成彦,野崎一徳,和田成生，“歯茎摩擦音/s/の口腔単純形状モデルを用いた空力音響解析”，日本機械学会 2015 年度年次大会講演論文集，J1050105，pp. 1-5，2015 年 9 月.

[17] 吉川裕，“浅海乱流中の懸濁粒子の振る舞いに関する数値実験”，東シナ海の循環と混合に関する研究会，九州大学，2016 年 2 月.

[18] 片岡浩人，田村哲郎，“実市街地を対象とした都市キャノピー内外の風の予測”，建築学会大会学術講演梗概集（環境工学II），pp. 741-744，2015.9.

[19] 小野佳之，片岡浩人，寺崎浩，河合英徳，坪倉誠，田村哲郎，“建築物の耐風設計への数値流体計算の導入に関する研究　その３”，高層オフィス・高層集合住宅の数値流体計算建築学会大会学術講演会，（投稿中）.

[20] 兼子泰明，大森健史，梶島 岳夫，“気液界面近傍をヒービング運動する翼に働く流体力の数値解析”，第 29 回数値流体力学シンポジウム講演論文集 ，B01-2 ，2015.12.15.

[21] 稲岡拓也，梶島岳夫，“1 方程式型SGSモデルを用いた翼周りのキャビテーション乱流に対するLES”，第 29 回数値流体力学シンポジウム講演論文集，B01-3，2015.12.15.

[22] 國嶋雄一，梶島岳夫，蔦原道久 ，“差分格子ボルツマン法を用いた空力音の直接解析の高レイノルズ数流れへの進展”，第 29 回数値流体力学シンポジウム講演論文集，C08-4，2015.12.16.

[23] 足立理人，大森健史，梶島岳夫 ，“上昇気泡からの高シュミット数条件下における物質輸送の数値解析 ”，日本機械学会 関西支部第 91 期定時総会講演会 講演前刷集 ， M812 ，2016.3.11.

[24] 前田紘志，大森健史，梶島岳夫 ，“Diffuse-Interface法による微小流路内の移動接触線を伴う二相流の解析”，日本機械学会関西支部第 91 期定時総会講演会 講演前刷集，M814，2016.3.11.

[25] 小田哲平,前岡洋平,比江島俊彦 ，“縦渦導入型ストラットを用いた超音速燃焼における当量比の効果について”，日本機械学会 2015 年次大会DVD論文集，G0600303，pp.1-2Sep. 2015.

[26] 城﨑知至，安心院大地，遠藤琢磨，長友英夫，砂原淳，千德靖彦，“ 高速電子ガイディングに要する外部磁場条件”，日本物理学会 第 71 回年次大会 ，東北学院大学泉キャンパス，2016.03.19～22，2015.03.19.

[27] 城﨑知至，“高速点火爆縮コア加熱効率向上に関するシミュレーション”，平成 27 年度レーザープラズマ加速と産業創成に関する研究会，光産業創生大学院大学，浜松，2016.01.18-19，2016.01.19.

[28] 城﨑知至，“高速点火レーザー核融合におけるキロテスラクラス磁場印加効果”，レーザー学会第 483 回研究会「短波長量子ビーム発生と応用」，広島大学，学士会館，2015.12.03.

[29] 城﨑知至，長友英夫，砂原淳，千德靖彦，藤岡慎介，遠藤琢磨，“高速点火レーザー核融合のコア加熱過程に対する外部磁場効果”，第 32 回プラズマ・核融合学会 年会，名古屋大学東山キャンパス，豊田講堂，Nov. 24-27, 2015，2015.11.26.

[30] 城﨑知至,千德靖彦，長友英夫，砂原淳，坂上仁志，藤岡慎介，白神宏之，遠藤琢磨，FIREX プロジェクトグループ，“爆縮で形成される磁場配位における電子ビームガイディング特性”，日本物理学会　2014 年秋季大会，関西大学，大阪，on Sep.16-19, 2015，2015.09.19.

[31] 雷健太,辻拓也,田中敏嗣，“密度 2 成分系振動流動層のDEM-CFDシミュレーション”，第 21 回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム，

pp.25-28，Dec. 2015.

[32] 廣田大地,小田豊,藤原航太,芝原正彦，“LESにおける局所的なエントロピー生成の予測手法に関する研究”，日本機械学会熱工学コンファレンス 2015 講演論文集，USB:E221，2015 年 10 月.

[33] 和久本剛,小田豊，“Concurrent LESによるリブ付設二次元衝突噴流場の乱流熱伝達解析”，日本機械学会熱工学コンファレンス 2015 講演論文集，USB:E224， 2015 年 10 月.

[34] 新甫友昂,森井雄飛,坪井伸幸,林光一，“ 3 次元スピンデトネーションの数値解析における反応モデルの影響”，平成 27 年度衝撃波シンポジウム，3B2-2，2016 年 3 月.

[35] 江藤成一朗,坪井伸幸,小島孝之,林光一，“3 次元数値解析によるノズル付きローテーティングデトネーションエンジンの性能評価:スロートの効果と格子解像度の影響”，平成 27 年度衝撃波シンポジウム，1B3-1，2016 年 3 月.

[36] 岩井麻衣子,吉田啓祐,森井雄飛,坪井伸幸,林光一，“メタン/酸素デトネーションの数値解析：計算手法と化学反応モデルの検証”，平成 27 年度衝撃波シンポジウム，2016 年 3 月.

[37] 牟田智幸,坪井伸幸,丸祐介,藤田和央，“二段式宇宙輸送機Waverider模型の風洞試験”，第５９回宇宙科学技術連合講演会，2B13，2015.

[38] 藤本啓佑,武藤大貴,坪井伸幸,鷹取祐樹,朝原誠，“非定常低速水素噴流の拡散過程の数値解析”，日本流体力学会 年会 2015，No. 136，2015.9.

[39] 藤本啓佑,武藤大貴,坪井伸幸,鷹取祐樹,朝原誠，“低速水素噴流の非定常性に関する３次元数値解析：水素濃度の変動特性 ”，日本航空宇宙学会西部支部講演会 (2015) ，No. S005，2015.9.

[40] 荒木天秀,武藤大貴,寺島洋史,坪井伸幸，“超臨界平行噴流に関する数値解析：噴射条件の影響について”，第 29 回数値流体力学シンポジウム，B03-1，2015. 12.

[41] 岩佐聡洋，武藤大貴，藤本圭一郎，坪井伸幸，“液体燃料ロケットタンク破壊時の推進剤ジェット・主流の干渉構造に関する数値解析”，日本機械学会九州支部講演論文集 第 69 期総会講演会，pp.141‐142，2016.3.

[42] 芝尾将史，坪井伸幸，伊藤隆，“数値解析によるリニアエアロスパイクノズルの側壁効果：圧力比の影響”，第 59 回宇宙科学技術連合講演会，3N03，2015 年 10 月.

[43] 小塚悟史，武藤大貴，寺島洋史，坪井伸幸，“超臨界圧一様流中に直交噴射される極低温水素の数値解析：混合に対する噴射条件の影響”，第 47 回卒業研究発表講演会講演論文集，pp415-416，2015. 3.

[44] 武藤大貴，寺島洋史，坪井伸幸，“超臨界圧力下における極低温同軸噴流の 3 次元数値解析”，第 29 回数値流体力学シンポジウム，B03-2，2015.12.

[45] 鈴木舟，堀内潔，鈴木葵，“Elasto-inertial turbulenceにおける反変・共変高分子の伸長とエネルギー伝達”，第 29 回数値流体力学シンポジウム，講演論文集 E02-2，12 月 15-17 日，九州大学，2015.

[46] 島田俊之，堀内潔，久郷結熙，“反変・共変性要素の添加による圧縮性乱流における抵抗低減の解析”，第 29 回数値流体力学シンポジウム，講演論文集 E02-1，12 月 15-17 日，九州大学，2015.

[47] 戸倉彰太,石田貴大,塚原隆裕，“粘弾性流体の回転平面クエット流に関するDNS解析：ロールセル不安定性の変化”，第 29 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集，博多，12 月 15-17 日(2015)，A04-1 (DVD),4 pages，2015.

[48] 池上明人，塚原隆裕，川口靖夫，“低レイノルズ数バックステップ乱流に対する粘弾性の影響 ”，第 93 期日本機械学会流体工学部門講演会 講演論文集，東京，11 月 7-8 日(2015)，0111,2 pages，2015.

[49] 井上俊,塚原隆裕,川口靖夫，“粘弾性流体の抵抗低減乱流におけるレイノルズ応力方程式モデルの適用”，第 93 期日本機械学会流体工学

部門講演会 講演論文集，東京 ，11 月 7-8 日 (2015)，0606,4 pages，2015.

[50] 石田貴大,塚原隆裕，“二重円管内乱流の亜臨界遷移に関する直接数値シミュレーション”，第 93 期日本機械学会流体工学部門講演会 講演論文集，東京，11 月 7-8 日 (2015)，1513,2 pages，2015.

[51] 塚原隆裕,石田貴大，“平面ポアズイユ流の亜臨界遷移における下臨界レイノルズ数 ”, 日本流体力学会年会 2015 講演論文集，東京，9 月 26-28 日 (2015)，2 pages，2015.

[52] Shin Inada, Daniel T. Harrell, Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Takeshi Aiba, Fumiyoshi Yamashita, Nitaro Shibata, Takanori Ikeda, Kazuyuki Mitsui, Naomasa Makita, Haruo Honjo, Mark R. Boyett, Kazuo Nakazawa，“Multi-scale simulation studies of excitation conduction including cardiac conduction systems and whole ventricles”, 第 93 会日本生理学会大会，札幌，シンポジウム，2016/3/22-24.

[53] Shin Inada, Takeshi Aiba, Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Kengo Kusano, Wataru Shimizu, Takanori Ikeda, Kazuo Nakazawa，“Non-invasive risk stratification of ventricular arrhythmias intiated from right ventricular outflow tract: A simulation study for the Brugada syndrome”，第 80 回日本循環器学会学術集会 ，仙台 ，口頭発表，2016/3/18-20.

[54] Takashi Ashihara,Kensuke Sakata, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazoo Nakazawa, Minoru Horie，“The Current Status and the Future Direction: Significance of online real-time phase mapping during catheter ablation for non-paroxysmal atrial fibrillation: A clinical study using ExTRa Mapping system”，第 80 回日本循環器学会学術集会，仙台，プレナリーセッション，2016/3/18-20 .

[55] 芦原貴司,小澤友哉,坂田憲佑,土谷健,原口亮,稲田慎,中沢一雄,堀江稔，“慢性心房細動のアブレーション治療におけるイノベーション創出に向けたin silicoの挑戦”，第 24 回日本コンピュータ外科学会大会, 東京, シンポジウム，口頭発表，2015/11/21-23.

[56] 稲田慎,吉田秀哉,相庭武司,山下富義,中沢一雄，“Naチャネルの変異に伴う心室筋細胞活動電位の変化のシミュレーション”，第 35 回医療情報学連合大会，沖縄，ポスター発表，2015/11/1-4.

[57] 稲田慎,竹村匡正,鈴木信宏,芦原貴司,三井和幸,柴田仁太郎,中沢一雄 ，“心房での不整脈起源の同定を目指した 12 誘導心電図解析システムの開発”，第 35 回医療情報学連合大会，沖縄 ，口頭発表，2015/11/1-4.

[58] 坂田憲祐,芦原貴司,小澤友哉,土谷健,原口亮,稲田慎,中沢一雄,堀江稔，“慢性心房細動に治療標的となるような定在ローターは存在するか？: ExTRa Mappingによる臨床的観察研究”，第 31 回心電情報処理ワークショップ, 名古屋，口頭発表，2015/10/24-25.

[59] 芦原貴司,坂田憲祐,小澤友哉,土谷健,原口亮,稲田慎,中沢一雄,堀江稔，“慢性心房細動アブレーションにおけるイノベーション実現に向けたin silicoの挑戦: ExTRa Mappingの開発”，第 31 回心電情報処理ワークショップ, 名古屋，口頭発表，2015/10/24-26.

[60] 稲田慎,柴田仁太郎,竹村匡正,鈴木信宏,芦原貴司,三井和幸,中沢一雄 ，“心房の異常自動能発生部位の同定を目指した心電図心房波解析手法の検討”，第 31 回心電情報処理ワークショップ，名古屋，口頭発表，2015/10/24-27.

[61] 重文将,稲田慎,伊井仁志,中沢一雄,和田成生，“興奮伝播様式が左心室変形挙動の与える影響”，日本機械学会第 26 回バイオフロンティア講演会，福岡，口頭発表，2015/10/2-3.

[62] 中沢一雄,小山裕己,中島一崇,井尻敬,稲田慎,黒嵜健一,白石公,五十嵐健夫，“先天性心疾患の心臓レプリカの機能を補完しコンシューマレベルのコンピュータで実用可能なマルチタッチブラウザ”, 第６３回日本心臓病学会学術集会，横浜 ，ビジュアルワークショップ４：

生きた心臓を心臓シミュレーションで再現，招待講演，2015/9/18-20.

[63] Shin Inada, Daniel T. Harrell, Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Takeshi Aiba, Takanori Ikeda, Kazuyuki Mitsui, Haruo Honjo, Nitaro Shibata, Naomasa Makita, Kaichiro Kamiya, Itsuo Kodama, Kazuo Nakazawa,“Can computer simulation technique contribute regenerative medicine?”, The 30th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society and The 32nd Annual Scientific Meeting of the Japanese Society of Electrocardiology , Kyoto, symposium, Program and Abstracts, p. 396, 2015，2015/7/28-31.

[64] Shin Inada, Nitaro Shibata, Takashi Ashihara, Kazuyuki Mitsui, Kazuo Nakazawa,“Analyzing 12 lead ECG to predict the origin of premature ventricular contraction ”, The 30th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society and The 32nd Annual Scientific Meeting of the Japanese Society of Electrocardiology，Kyoto，oral presentation，Program and Abstracts, p. 518, 2015，2015/7/28-31.

[65] Akira Fukui, Takeshi Tsuchiya, Takanori Yamaguchi, Yasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara，“A case with a stable rotor observed during atrial fibrillation using a novel phase mapping system called “ExTRa Mapping” ”，The 30th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society and The 32nd Annual Scientific Meeting of the Japanese Society of Electrocardiology , Kyoto，poster presentation，Program and Abstracts, p. 613, 2015，2015/7/28-31.

[66] Akira Fukui, Takeshi Tsuchiya, Takanori Yamaguchi, Yasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara,“Site with repetitively appearing rotors exhibits high dominant frequency (DF) in atrial fibrillation (AF): An analysis with a novel phase mapping system called “ExTRa Mapping” ”，The 30th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society and The 32nd Annual Scientific Meeting of the Japanese Society of Electrocardiology，Kyoto，oral presentation，Program and Abstracts, p. 538, 2015，2015/7/28-31.

[67] Akira Fukui, Takeshi Tsuchiya, Takanoro Yamaguchi, Tasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara,“Low voltage zone (LVZ) is closely related to repetitively appearing rotors: An analysis with a novel phase mapping system called “ExTRa Mapping” ”，The 30th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society and The 32nd Annual Scientific Meeting of the Japanese Society of Electrocardiology , Kyoto，oral presentation，Program and Abstracts, p. 407, 2015，2015/7/28-31.

[68] Akira Fukui, Takeshi Tsuchiya, Takanori Yamaguchi, Tasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara,“Newly development near-real-time phase mapping system called “ExTRa Mapping” nicely elucidates rotors and it was preferentially located at fibrotic tissue border”，The 30th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society and The 32nd Annual Scientific Meeting of the Japanese Society of Electrocardiology , Kyoto，oral presentation，Program and Abstracts, p. 514, 2015，2015/7/28-31.

[69] Takashi Ashihara, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takeshi Tsuchiya, Takanori Yamaguchi, Akira Fukui, Tomoya Ozawa, Tetsuhisa Hattori, Koichi Kato, Minoru Horie , “Possible mechanisms of effective rotor ablation for chronic atrial fibrillation: A simulation study”, The 30th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society and The 32nd Annual Scientific Meeting of the Japanese Society of Electrocardiology，Kyoto，oral presentation , Program and Abstracts, p. 514, 2015 , 2015/7/28-31.

[70] Takashi Ashihara, Tomoya Ozawa, Takeshi Tsuchiya, Takanori Yamaguchi, Akira Fukui, Ryo

Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, “ Development of a novel real-time phase mapping system using in silico technique for identifying unstable rotors in human atrial fibrillation”, The 30th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society and The 32nd Annual Scientific Meeting of the Japanese Society of Electrocardiology, Kyoto, oral presentation, Program and Abstracts, p. 407, 2015, 2015/7/28-31.

[71] 芦原貴司,黒川洵子,諫田泰成,関野祐子,原口亮,稲田慎,中沢一雄,堀江稔, “In SilicoヒトiPS細胞由来心筋細胞の構築と不整脈研究への応用可能性”, 第 51 回日本小児循環器学会総会・学術集会, 口頭発表, 東京, 2015/7/16-18.

[72] 中沢一雄,井尻敬, 小山裕己,中島一崇,五十嵐健夫,稲田慎,原口亮,奈良崎大士,岩田倫明,芦原貴司,神崎歩,黒嵜健一,坂口平馬,市川肇,白石公, “先天性心疾患心臓の形状抽出と心臓レプリカを想定したマルチタッチブラウザ開発”, 第 51 回日本小児循環器学会総会・学術集会, 口頭発表, 東京, 2015/7/16-19.

[73] 稲田慎,朝井隆裕,竹村匡正,鈴木信宏,芦原貴司,三井和幸,柴田仁太郎,中沢一雄 ,“不整脈起源の同定を目指した 12 誘導心電図解析システムの開発”, 第 54 回日本生体医工学会大会, 名古屋市, oral presentation, 2015/5/7-9.

[74] 芦原貴司,小澤友哉,土谷健,原口亮,稲田慎,中沢一雄,堀江稔, “慢性心房細動の新たな治療戦略に向けて：in silicoによるリアルタイムPhase Mappingシステムの開発 ”, 第 54 回日本生体医工学会大会 , 名古屋, オーガナイズドセッション「心房細動維持機構の可視化と計算科学に基づく新たなアブレーション治療戦略の構築」, 2015/5/7-9.

[75] Akira Fukui, Takanori Yamaguchi, Tasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Takeshi Tsuchiya, “Rotor is not associated with complex fractionated atrial electrograms: A study with (quasi-)real-time mapping system called ExTRa Mapping”, 第 78 回日本循環器学会学術集会, 大阪市oral presentation, 2015/4/24-26.

[76] Akira Fukui, Takanori Yamaguchi, Tasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Takeshi Tsuchiya, “Detection of rotors during atrial fibrillation (AF) using a newly developed (quasi-)real-time phase mapping system called ExTRa Mapping ”, 第 78 回日本循環器学会学術集会, 大阪市, oral presentation , 2015/4/24-26.

[77] Akira Fukui, Takanori Yamaguchi, Tasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Takeshi Tsuchiya, “A newly developed (quasi-)real-time phase mapping system called “ExTRa Mapping” is superior to NavX activation mapping to detect rotor”, 第 78 回日本循環器学会学術集会, 大阪市, oral presentation, 2015/4/24-26.

[78] Takashi Ashihara, Tomoya Ozawa, Tetsuhisa Hattori, Koichi Kato, Takeshi Tsuchiya, Takanori Yamaguchi, Ryo Haraguchi, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Minoru Horie, “Possible mechanisms of rotor ablation for chronic atrial fibrillation: A simulation study”, 第 78 回日本循環器学会学術集会, 大阪市, oral presentation, 2015/4/24-26.

[79] Akira Fukui, Takanori Yamaguchi, Tasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Takeshi Tsuchiya, “Rotor sites is related to high dominant frequency in human atrial fibrillation: A study with (quasi-)real-time phase mapping system”, 第 78 回日本循環器学会学術集会, 大阪市, oral presentation, 2015/4/24-26.

[80] Akira Fukui, Takanori Yamaguchi, Tasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Takeshi Tsuchiya, “Low voltage zone (LVZ) harbors roters: An analysis with a novel (quasi-)real-time phase mapping system called “ExTRa Mapping” ”, 第 78 回日本循環器学会学術集会 , 大阪市, oral presentation , 2015/4/24-26.

[81] Akira Fukui, Takanori Yamaguchi, Yasutsugu Nagamoto, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Takashi Tsuchiya, “Roter during atrial fibrillation frequently meanders along sites with fractionated electrogram”, 第 78 回日本循環器学会学術集会，大阪市，oral presentation ，2015/4/24-26.

[82] 岡本,高木,岡野，“高シュミット混合溶液における相分離ドメインと乱流渦構造の相関”，日本流体力学会年会 2015.

[83] 小池直紀,辻本公一,社河内敏彦,安藤俊剛，“DNSを用いたノズル回転制御下における衝突噴流の熱流動解析”，日本機械学会 2015 年度年次大会講演論文集, DVD, 5p., Sep. 2015.

[84] サンムガ,辻本公一,社河内敏彦,安藤俊剛，“DNS によるダイナミック制御した多重噴流の混合特性”，日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集，USB，3p.，Oct. 2015.

[85] 神野敬太,辻本公一,小池直紀,社河内敏彦,安藤俊剛，“一列に配置された多重衝突噴流のDNS”，第 29 回 数値流体力学シンポジウム講演論文集，DVD，5p.，Dec. 2015.

[86] サンムガ,辻本公一,社河内敏彦,安藤俊剛，“DNSを用いたダイナミック制御による噴流の混合性能”，日本機械学会東海支部第 65 期総会講演会講演論文集, USB, 2p., Mar. 2016.

[87] 小池直紀,辻本公一,社河内敏彦,安藤俊剛，“回転制御下における衝突噴流の熱流動特性”，日本機械学会東海支部第 65 期総会講演会講演論文集，USB，2p.，Mar. 2016 .

[88] 神野敬太,辻本公一,小池直紀,社河内敏彦,安藤俊剛,“間欠制御された多重衝突噴流のDNS”，日本機械学会東海支部第 65 期総会講演会講演論文集，USB，2p，Mar. 2016.

[89] 秋山直登, 太田貴士，“溶融液体金属で形成される乱流境界層の予測”，日本流体力学会　年会 2015，Sep. 2015.

[90] 宇都宮啓紀, 太田貴士，“圧縮性乱流せん断層における多流体混合の直接数値シミュレーション”, 日本流体力学会　年会 2015, Sep. 2015.

[91] 大石恭輔, 太田貴士，“DNSによる壁面粗さ効果と乱流構造の空間的特徴の予測”，第 93 期流体工学部門講演会，Nov. 2015.

[92] 江口大樹, 太田貴士，“直接数値シミュレーションによる粘弾性流体乱流の瞬時構造の観察”，日本機械学会北陸信越支部第 53 講演会，No. 1612，Mar. 2016.

４．著書

[1] Y. Fujimoto ，“First-Principles Computational Design of Graphene for Gas Detection ” Wiley-Scrivener Publishers, USA 2016, pp. 155.

[2] 松尾太郎,OCメンバー，“若い散開星団および運動星団内の惑星および褐色矮星の探査” 日本天文学会，2016 年 3 月，天文月報 109-4 号 SEEDS特集内の一記事.

５．その他

[1] Masayasu Hasegawa and Adriano Di Giacomo, “Chiral symmetry breaking, instantons, and monopoles”，22nd January 2016，Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR, Dubna,Russia.

[2] Adriano Di Giacomo and Masayasu Hasegawa, “Monopoles in Maximal Abelian gauge, number of zero modes, and instantons”，2015，HPC journal, Cybermedia Center, University of Osaka, Japan, No.5.

[3] Adriano Di Giacomo and Masayasu Hasegawa, “Chiral symmetry breaking, instantons, and monopoles”，PoS (LATTICE 2015) 313 (Submitted), 2015, (arXiv:1512.00359).

[4] Adriano Di Giacomo, Masayasu Hasegawa, and Fabrizio Pucci, “Chiral symmetry breaking and monopoles ”， PoS (CD 2015) 127, 2015, (arXiv:1510.07463).

[5] 須藤淳,松尾太郎,芝井広,住貴宏,深川美里,山本広大,小西美穂子,Matthias S. Samland,伊藤洋

一,田村元秀,HiCIAO/AO188/Subaruチーム，“SEEDSによる散開星団での系外惑星探査5：2013年度の進捗報告”，2014年9月，日本天文学会2014年秋季年会.

[6] M. Konishi, T. Matsuo, H. Shibai, K. Yamamoto, J. Sudo, M. S. Samland, M. Fukagawa, Y. Itoh, T. Sumi and SEEDS collaborators，“Direct Imaging Search for Extrasolar Giant Planets around 100 Myr-old Stars with Subaru Telescope”，Dec. 2013，The 5th Subaru International Conference, Hawaii, USA.

[7] 山本広大,松尾太郎,芝井 広,住 貴宏,深川美里,小西美穂子,須藤 淳,Matthias S. Samlnad,伊藤洋一,田村元秀,HiCIAO/AO188/Subaruチーム，“SEEDSによる散開星団での系外惑星探査4”，2013年9月，日本天文学会2013年秋季年会，東北大学.

[8] Matthias S. Samland, T. Matsuo, H. Shibai, K. Yamamoto, M. Konishi, J. Sudo, M. Fukagawa, T. Sumi, HiCIAO/AO188/Subru Team，“SEEDS Direct Imaging Survey of Ursa Major Members”，2013年9月，日本天文学会2013年秋季年会，東北大学.

[9] 山口悠希，平成27年6月23日，精密工学会関西支部2015年度関西地方定期学術講演会.

[10] 山口悠希，平成28年3月16日，精密工学会2016年春季大会学術講演会.

[11] A. Suzuki，“A Direct solver of sparse matrices for fluid problems on a multicore supercomputer”，March, 2016 ，"The 23rd Workshop on Sustained Simulation Performance, 16-17,Tohoku University, Sendai, Japan".

[12] 安部勇輝，“シリンダー状ターゲットへのレーザー内面照射によるキロテスラ級超強磁場の生成と磁気リコネクション実験への応用”，Mar. 2016，日本物理学会第71回年次大会.

[13] 山口裕介，“超音速機の姿勢制御ジェットに対する噴射位置とマッハ数変化の影響”，平成27年度修士論文.

[14] 山木陸呂宇,大倉一郎 ，“曲げとせん断を受けるアルミニウム合金桁の耐荷力”，平成27年度卒業研究 .

[15] 安田諒平,大倉一郎，“圧縮を受けるアルミニウム合金部材の全体座屈と局部座屈の連成座屈強度”，平成27年度卒業研究.

[16] 前田貴公,大倉一郎，“縦補剛されたアルミニウム合金板のせん断耐荷力”，平成27年度修士論文.

[17] 朝比奈隆志,長友英夫,砂原淳,城崎知至,畑昌育,千徳靖彦，“レーザーアブレーション領域における磁化プラズマの電子熱伝導モデルの検証 ”，2015年11月， 第32回プラズマ・核融合学会 年会（名古屋大学）.

[18] 川口靖夫,塚原隆裕，“界面活性剤水溶液流れの乱流と対流熱伝達 ”，(解説論文)，日本伝熱学会誌「伝熱」,第55巻 第231号 (2016),9-14.

[19] 塚原隆裕,石田 貴大，“平面ポアズイユ面流の亜臨界遷移における下臨界レイノルズ数”，(解説論文)，日本流体力学会誌「ながれ」,第34巻 第6号 (2015),383-386.

[20] T. Tsukahara, Y. Kawaguchi，“Elasto-inertial turbulence in subcritical regime of wall-bounded flows”，招待講演，The 3rd International Workshop on Fluid Flow, Heat Transfer and Turbulent Drag Reduction (IWFHT2015), XJTU, Xi'an, China, Dec. 6-8 (2015).

[21] 中沢一雄，稲田慎，原口亮，相庭武司，池田隆徳，芦原貴司，“FSKイオンチャネルモデルを用いた心臓興奮伝播の機能的シミュレーション”，生体医工学，Vol. 53, No. 3, pp. 151-159, 2015.

[22] 稲田慎，Daniel T. Harrell, 原口亮，芦原貴司，蒔田直昌，中沢一雄 ，“コンピュータシミュレーションによるプルキンエ線維起源の心室性不整脈発生機序の検討”，生体医工学，Vol. 53, No. 3, pp. 106-114, 2015.

[23] 芦原貴司，黒川洵子，諫田泰成，原口亮，稲田慎，中沢一雄，堀江稔，“芦原貴司，黒川洵子，諫田泰成，原口亮，稲田慎，中沢一雄，堀江稔”，生体医工学，Vol. 53, No. 3, pp.

100-105, 2015.

[24] M. Wakayama, "Lattice study of four-quark components of the iso-singlet scalar", July 2015, Kobe, Lattice 2015.

[25] M. Wakayama, "Disconnected quark loop contributions to the scalar meson in the lattice QCD", Sep. 2015, Central China Normal University,China, XQCD 2015.

[26] K.Nagata, J.Nishimura, S.Shimasaki, "Gauge cooling for the singular-drift problem in the complex Langevin method --a test in Random Matrix Theory for finite density QCD", arXiv:1604.07717 [hep-lat].

[27] T.Ichihara, K.Nagata, K.Kashiwa, "Test for a universal behavior of Dirac eigenvalues in the complex Langevin method", arXiv:1603.09554 [hep-lat].

SC15 出展報告

伊達 進（准教授）[1]　阿部洋丈（招へい准教授）[1]　木戸善之（講師）[1]　松本哲（特任研究員）[2]　寺前勇希[3]
応用情報システム研究部門[1]　情報メディア教育研究部門[2]　情報推進部情報基盤課[3]

2015 年 11 月に米国テキサス州オースティンにて開催された国際会議/展示会 SC15 において、当センターの概要、研究内容、および事業内容を紹介するための展示ブースの出展を行った。本稿ではその展示内容や当日の様子等について報告する。

1.　はじめに

大阪大学サイバーメディアセンターでは、例年、米国で開催される国際会議 SC において展示ブースを出展する活動を継続している。SC とは、*The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis* という正式名称を持つ、IEEE Computer Society および ACM SIGARCH によって開催されている国際会議であり、ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)分野におけるトップレベル会議の一つである。それと同時に、SC は HPC に関する最新機器や最先端技術の国際見本市でもある。そのため、北米を中心とした研究者や技術者に限らず、欧州、アジアの研究者や技術者が集う最大級の国際会議／展示会となっており、ここ数年では登録者数は 1 万人を超える数字が記録されている。当センターによる展示ブースの出展は、2000 年の初出展から数え、今回で 16 回目となる。

2015 年の SC（通称 SC15 は、米国テキサス州オースティン市にある Austin Convention Center にて、11 月 16 日から 21 日までの期間に開催された。会場であるオースティンコンベンションセンターは、昨年開催されたニューオリンズのコンベンションセンターと比較し、小規模な会場（とはいえ、1 万人を超える SC の参加者を収容できるほどの規模であるので、国内のコンベンション施設とは比較にならない大きさであるが。）である。会場の利便性は非常に高く、コンビニ、スーパーマーケット、レストラン、バーなどがコンベンションセンターを囲むように位置している。そのため、昨年度のニューオーリンズでは展示会場を抜け出すのが億劫になるくらい歩かなければならなかったのであるが、今年度は展示中の昼食などで困ることはなく、展示者も慣れない食生活で苦しむことなく、本センターの展示により一層注力できたようである。

なお、オースティンでの SC の開催は、2008 年度に続いて 2 度目となり、本センターのオースティンでの展示も 2 度目である。徐々に大規模化傾向にある国際会議・展示会 SC を収容できるコンベンションセンターを持つ都市が米国でも数少なく、調整も難しい事情があるようであり、来年 2016 年度も開催経験のあるソルトレーク(2012 年度に開催)での開催となるようである。

2.　展示内容

本年は、以下に紹介する当センターおよび情報推進部の教職員 6 名(招へい教員 1 名を含む)、関連研究部門に配属されている大学院生 4 名、および、昨年度末まで関連研究部門に在籍していた東京大学大学院生 1 名という構成で展示ブースの運営に望んだ。展示者の記念撮影風景を図 1 に示す。なお、記念撮影では、他ブースでの展示活動に従事していた本センターの招へい教員の方にも入っていただいた。

ブース展示は、11 月 16 日から 19 日までの 4 日間行われた。その間の当ブースへの来訪者数は、ID バッジの読み取り数で数えて 399 名であった。2014 年度の 406 名に比べて 7 名減少しているが、この数は誤差の範囲と考える。むしろ、今年度も昨年度同様の 400 名程度の方に本センターの概要、事業内容、研究活動について紹介・報告できたことによって、今年度の SC でのアウトリーチ活動もよい結果を残せたと考えている。さらにいえば、バッジの読み取りは、本センターの展示ポスターを 2 枚以上見ていただいた方を原則的に行っているため、1 枚ポス

ターを見て帰られた方、挨拶にお越しになられた方などはカウントされていない。そのため、ブースに来訪していただいた方の実際数は、2 割程度多かったと展示者一同考えている。

応用情報システム研究部門	
スタッフ	：伊達　進、　木戸善之
招へい教員	：阿部洋丈
	(筑波大学: 招へい准教授)
大学院生：	Dashdavaa Khureltulga
	高橋慧智
	山田拓哉
	清水雅治
	Baatarsuren Munkhdorj（東大）
情報メディア教育研究部門	
スタッフ	：松本　哲(特任助教)
	繁田浩功(特任研究員)
情報推進部基盤課	
技術職員	：寺前勇希

図 1: SC2015 での記念撮影.

以下、SC15 にて大阪大学サイバーメディアセンターの出展ブースで行った展示内容について紹介する。(括弧内は担当者名。順不同、敬称略)。

(1) *About US: Cybermedia Center, Osaka University* **(寺前)**

本ポスターでは、当センターに関する概略（所在地、ミッション、研究部門構成など）についての紹介を行った。

来訪者からは、大阪の所在地や、センターで運用しているスーパーコンピュータについての質問があった。また、学内だけでなく学外に対しても、施設・サービスを提供しているという点について、驚く方が多かった。

図 2: 展示の様子 1.

(2) *Large-scale Computing and Visualization Systems at the Cybermedia Center* **(寺前、伊達)**

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

ブース来訪者からは、プロセッサやファイルシステムについての質問の他、大規模可視化対応 PC クラスタシステムに搭載している「GPU」に関する質問が多く寄せられた。多くは、「GPU をどのように使っているのか？」もしくは「どのくらい使われているのか？」といった質問であったが、来訪者自身からコンパイラやアプリケーションの紹介を受けることもあった。

全国共同利用施設としては、地に足ついた、利用者にとって使いやすいシステムを提供していく必要があるが、年々様々な技術が登場し、取捨選択が難しくなっていると感じる。今回のブース展示は技術動向を調査する非常によい機会となった。得られた知見を、今後のシステム運用・構築に、生かしていきたい。

図 3: 展示の様子 2.

(3) *Architecture of SDN-enhanced MPI Framework* (高橋、 Munkhdorj)

本ポスターでは、当センターの応用情報システム研究部門で研究開発に取り組んでいる SDN-enhanced MPI (Software Defined Networking enhanced Message Passing Interface) フレームワークのアーキテクチャについて紹介した。SDN-enhanced MPI の目標は、MPI を使用した並列分散アプリケーションの通信特性を抽出・解析し、コンピュータクラスタのネットワークをアプリケーションの通信特性に応じて動的に制御することである。

来訪者の方々の多くは、実際にスーパーコンピュータを運用・使用する立場の方であったため、本研究で提案しているシステムのノード数に対するスケーラビリティや、実際の MPI アプリケーションでの性能改善など、実用性について問われる場面が多かった。ネットワーク技術の背景を持つ方からは、SDN のようなクラウドから発展してきたネットワーク技術と、スーパーコンピュータで用いられている高性能ネットワーク技術を結ぶ橋となる研究として期待している、と激励をいただいた。

例年に比べ、本研究に興味を持ち、深い質問や議論をしてくださった方が多かった印象を受けた。来年度展示では、定量的な実験結果や発刊済みの論文を持ち込み、来訪者の方々とより深い議論ができるように準備したい。

図 4: 展示の様子 3.

(4) *Topology-aware and scalable reliability method for SDN MPI_Bcast* (Dashdavaa)

本ポスターでは Software Defined Network を応用した高速な MPI_Bcast の信頼性向上手法について説明した。この信頼性向上手法はトポロジを考慮することにより低遅延の通信をデータ配信を確保するために行っている。

ポスター発表には、高校生から本格的に研究者、大規模計算機や高速ネットワークに関連する企業をしている人までの幅広い知識の来客があった。特に、本ポスターに興味を持ってくれた来訪者たちは実際に Software Defined Networking を企業のサービスや研究に使っていたようであり、どのようなスイッチを使っているか、スイッチでのパケット複製オーバーヘッドなどのような技術的な議論をすることができ有意義であった。

また、本 SC のブース展示でも SDN に関わっている研究者、企業家と連携を作りたい来訪者たちも数多くいた。例えば、実際に運営で SDN を使っている Fabriscale のシニアソフトウェアエンジニアの Cyrille Verrier 氏、SDN プロジェクトをし始めている **Istituto Nazionale di Fisica Nucleare** (INFN)のコンピュータセンター長の Giuseppe Andronico 氏と議論することもできたこともまた有意義であった。

図 5: 展示の様子 4.

図 6: 展示の様子 5.

(5) *Indoor evacuation system with smartphones toward the secure evacuation from a blackouted building* (山田)

災害はしばしば大規模な停電を引き起こす。停電した建造物からの避難は通路の暗さ、避難誘導灯の見えづらさなどのために通常時以上に困難であり、停電時の迅速な避難を支援するシステムが必要とされている。本研究では、スマートフォンの位置を基に避難者の場所を推定し、スマートフォン内蔵のライトを用いて周辺を照らすと同時に避難すべき方向を指示することで停電時の避難を支援するシステムを提案している。

幾人かの来訪者から、着眼点、提案手法がユニークで面白いとのコメントを頂いた。また、想定している災害とはどのようなものかという質問があり、私が今まで地震、津波といった日本で多く発生する災害しか意識していなかったことに気付かされた。更に、スマートフォンの屋内位置推定手法について、来訪者の方とのディスカッションを通し、建造物へ設置するアンカーノード数削減につながるアイディアを得ることができた。

SC での展示を通し、私の研究の今後の発展へと繋がりうる点を知ることができた。得た知見を今後の研究活動へ活かしてゆきたい。

(6) *Does SDN technology make HPC guys happy? – R&D and empirical studies towards HPC with enhanced network controllability-* (阿部)

<ポスターの概要：１段落>

情報通信研究機構(NICT)と本学が共同で実施している、Software Defined Networking (SDN) 技術の HPC 領域への応用に関する研究プロジェクトの全体像と成果概要を紹介するポスターを作成し展示を行った。

HPC において、Ethernet ベースの SDN 技術である OpenFlow を用いるという我々試みは、HPC の主流派から見ればある意味「異端」であり、あまり興味を示さない来場者も居た。しかし、「ネットワークのコントローラビリティは従来の HPC の概念を大きく変えるポテンシャルを持ち得る」という我々のメッセージを冷静に汲み取ることが出来た来場者は総じて熱心に我々の説明に耳を傾けてくれたことが印象的であった。また、とある発展途上国からの来場者は、コストパフォーマンスに優れた Ethernet ベースの技術を使って性能向上を目指しているという点に感銘を受けた様子であった。

SC での展示となると、とかくアメリカの大学や研究機関を意識しがちである。しかし、実際には多種多様なバックグラウンドを持つ研究者や来場者が集まっており、世界に向けたアウトリーチ活動としての効果もあることを今回特に実感した。

図 7: 展示の様子 6.

図 8: 展示の様子 7.

(7) *Mechanism for Handling Network and Virtualized Computational Resources on SDN-enhanced Job Management System* (清水)

本ポスターでは、当センターの応用情報システム研究部門で研究開発に取り組んでいる SDN-enhanced JMS (Software-Defined Networking Job Management System) フレームワークについて紹介した。SDN-enhanced JMS フレームワークの目標は、クラスタにおける計算ノードの使用状況及び計算ノード間のネットワークの使用状況を考慮する、高効率かつ柔軟なジョブ管理システムの実現である。

来場者からは、SDN-enhanced JMS におけるネットワーク制御機能のオーバーヘッドについてや、SDN-enhanced JMS を導入する際にどのような機器が必要になるか等の質問を頂いた。JMS に関する研究では、クラスタ内のネットワークに焦点を当てたものは少なく、興味を持ってくださる来場者が多かった。

HPC 分野に関する深い知識を有する来場者が多く、議論を交わすことにより HPC 分野に関する見識が深まった。今回得た見識を元に研究を進め、来年のポスター発表の際にさらに深い議論を行いたい。

3. NDM2015 & 他ブースでの活動

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

NDM2015

SC15 の併設ワークショップである The 5th International Workshop on Network-aware Data Management (NDM2015)に、2014 年度末までサイバーメディアセンター応用情報システム研究部門に在籍していた、Baatarsuren Munkhdorj 君を筆頭著者として投稿していた論文“Design and Implementation of Control Sequence Generator for SDN-enhanced MPI”が採録されたことから、Baatarsuren Munkhdorj 君が口頭発表を行った（図 9)。

図 9: NDM2015 ワークショップでの様子.

以下、同氏の発表後の感想について記す。

“発表では、会場から2つの質問があった。一つ目は、MPIプログラムとネットワークコントローラ間の

同期に関する質問であり、通知パケットを送信することによるレイテンシーについてであった。2つ目は、ネットワークフローのscalabilityに関する質問であり、今回の提案手法ではネットワークフローのscalabilityを評価したかどうか、また今後の予定について質問された。今回、自身にとって初めての国際ワークショップであり、貴重な経験となった。発表準備の中で一番時間がかかったのは、話の流れとロジックを整理することだった。直前までかなり緊張していたが、発表の時は落ち着いて自分の言葉で話すことができた。発表の時注意したことは、「解決した問題について相手に質問して考えさせること」という指導教員のアドバイスだった。”

NICT ブースでの成果報告

情報通信研究機構（NICT）のブースでは、委託付き共同研究「マルチストリームデータ流通管理技術」のポスター展示、デモンストレーション、ブースプレゼンテーションを行った（図 10）。ポスター展示では、研究での 4 つの研究、「SDN-MPI」「SDN-Visualization」「SDN-JMS」「SDN-Virtual Cluster」のそれぞれの概要やサマリーを紹介し、詳細については大阪大学サイバーメディアセンターや奈良先端科学技術大学院大学など共同研究先のブースへ聴衆を誘導した。

図 10：NICT ブースの様子.

NICT でのブースでは主に「SDN-Visualization」の説明を行い、デモンストレーションでは「SDN-Visualization」にて開発したタイルドディスプレイミドルウェアを用いて行った。異なる解像度のタイルドディスプレイにて画面共有を行う際、解像度の低いタイルドディスプレイへの配送は、ネットワーク帯域を必要以上に使用してしまう。そのためトランスコーダを用い、動的に最適な解像度へ落とすことで、ネットワーク帯域を有効活用できる。開発したタイルドディスプレイミドルウェアでは、SDN 技術を用いタイルドディスプレイへの画面ストリームをトランスコーダへと経路変更し、解像度最適化を行った後、タイルドディスプレイへと転送する。デモンストレーションでのネットワーク環境においては JGN-X/RISE のネットワーク回線を使用した。また、うめきた産学連携拠点 VisLab オフィスに設置したタイルドディスプレイ、産業総合研究所つくばに設置したタイルドディスプレイと、SC 会場間での画面共有環境を構築したが、ネットワークのケーブルカット障害や、ミドルウェアのデバッグなどに時間を取られ、ミドルウェアの一部の機能の展示しかできなかった。ミドルウェア開発は仮想環境で開発、テストが行われていたが、実機環境で一部機能が動作しなかった。そのバグフィックスに手間取り、不完全なデモンストレーションとなったが、次回、このような広域環境でのデモンストレーションを行う際は、事前準備を万全にしたい。

NICT ブースでのプレゼンテーションは、松本特任助教が“Enhancement HPC using SDN”の題目で、ポスター展示と同様に、「SDN-MPI」「SDN-Visualization」「SDN-JMS」「SDN-Virtual Cluster」のそれぞれの概要についての説明とともに、SDN 技術を用いた HPC への貢献や研究の重要性をアピールした（図 11）。十数名が参加し、聴いていただいた。その後、数名の方は研究内容に興味を持っていただき、ポスター展示やデモンストレーションに誘導した。

SDN 技術の特筆すべき点は、ネットワーク管理の一点集中もしくは自動制御、障害検知および障害回避等の柔軟なネットワーク構築にある。SDN 技術を用いた HPC 事例について研究発表を行ってきたが、SDN は HPC のみならず様々な基盤技術として適用する可能性を秘めている。サイバーメディアセンターとしては、HPC 運用やネットワーク基盤を運用する義務があり、こうした柔軟なネットワーク技術の研

究で得られた知見は、業務でも活かされると考えられる。

図 11：NICT ブースで発表を行う松本特任助教.

NEC ブースでの事業・研究紹介

さらに、日本電気株式会社(NEC)の依頼により、応用情報システム研究部門から伊達准教授が、"Towards Flexible Supercomputing"と題して、NEC の設置ブースにおいて、本センターの紹介とともに、本センターの大規模計算機を活用した研究活動や、事例紹介を行うブースプレゼンテーションを行った。具体的には、ユーザシステム仮想化技術 ExpEther を活用した、ユーザからの計算資源要求に柔軟に対応可能な本センターの大規模可視化対応 PC クラスタシステムの実運用事例とともに、Software-Defined Networking (SDN) を活用した High-Performance Computing (HPC) の実現にむけた研究紹介がなされている。また、本センターの大規模計算機事業と可視化事業を紹介するポスターについても設置した(図 12)。

図 12：NEC ブースでの本センターに関する展示.

4. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機および可視化事業をはじめとし、サイバーメディアセンターの高性能計算・ネットワーキングに関する研究成果を欧米を中心とした 400 名弱の来訪者にアウトリーチすることができた。その一方で、「このような研究成果をもっとアピールするべきだ。」「英語での広報をもっと行うべきだ」などの国際的なアウトリーチ活動に尽力すべきだとの激励も数多くいただいた。国内における JHPCN、HPCI を中核とした研究活動とともに、国際的な研究活動を積極的に推進していくことにより、大阪大学サイバーメディアセンターのプレゼンス向上とともに、情報公開、アウトリーチ活動にも引き続き尽力していきたいと考える。

当センターでは次回の SC16 においても展示を行うことを計画している。関係各位には更なるご支援とご協力をお願いしたい。

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

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

第 21 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2015)報告および第 22 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2016)告知

大阪大学サイバーメディアセンター准教授　吉野　元

1. Supercon2015

昨年 2015 年 8 月 17 日から 21 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(SuperCon2015)」が開催されました。 東日本から 10 チーム、西日本から 10 チームが予選を通過し、本戦に進みました。

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

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東京工業大学(東工大)学術国際情報センター(Global Scientific Information and Computing Center:GSIC)の単独主催でしたが、 2006 年の第 12 回からは大阪大学(阪大)(Cybemedia Center:CMC)も共同主催しています。 予選に参加したチームの中から、富士川以東 50Hz 地域からは 10 チームが、 60Hz 地域からはやはり 10 チームが参加します。 東工大と阪大の二つの会場で同時に開催した年は、wiki やポリコムなどで相互に交流し、 開会式･表彰式などもポリコムを使って二元中継で行ってきました。このコンテストは 5 日間にも渡る合宿型で、 実際にスーパーコンピュータを高校生･高専生が使うことができるという、 世界的にも大変ユニークなものです。 原則として毎年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。 2007, 2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が使われました。一昨年 2014 年は、東工大 GSIC の TUBAME 2.5 が使われました。そして昨年 2015 年は、更新されたばかりの阪大 CMC の SX-ACE が使われました。

2 予選

2015 年の予選課題は 6 月 1 日に下記の SuperCon web に公表されました。この予選課題を解くプログラムを作成し、 6 月 19 日正午までにプログラムを含む必要書類を添付してメールで申し込んでもらいました。 2015 年は 65 チームが予選に参加し、本選への選出は非常に狭き門となりました。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくても学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。 例えば、 2015 年の予選課題は、無線中継機と通信しながら動いている複数のロボットの現在位置を、それぞれのロボットが受信している電波の特徴から割り出すというものでした。これも含め、過去の予選課題、本選課題は SuperCon web に全て掲載されています。 また、 参加者が 2 名以上集まらない人のために、 希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「スーパーコン 1 級」が認定されます。 問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

3 本選

本選の初日は開会式で参加チームの紹介、 本選課題の発表、 攻略法の解説がありました。本戦課題は阪大の作成チームによる「化学振動のパターンを見つけよう」というものでした。ベロウソフ・ジャボチンスキー反応に代表される綺麗な振動パターンを示す化学反応がありますが、これをセルオートマトンでモデル化したものです。特に SX-ACE のベクトル計算機としての特徴を活かす問題になるよう心がけました。実際の本戦では､課題に取り組む前に、SX-ACE を利用するためのオリエンテーションとベ

クトル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した。そして、本選 2 日目から 4 日目の午前中まではチームごとにプログラムを作成しました。この間コンテスト OB を含む大学生･大学院生がチューターとしてバグ取りなどを手伝いました。 ただし、課題そのものに関する助言はしません。最終日の成果発表会、表彰式の後には懇親会も行われました。 高校生･高専生の参加者たちと、 両大学の教員、 学生チューターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

4　SuperCon 2016 の告知

2016 年は 8 月 22 日から 26 日までの 5 日間での開催を予定しています。 予選課題は 6 月 1 日に公表予定で、 課題提出〆切は 6 月 17 日正午です。 使用するスパコンは､東工大の TSUBAME2.5 の予定です。 本年もチャレンジする高校生･高専生、引率の先生方など参加者の皆さんに喜んでいただけるよう様々な工夫を凝らそうと関係者一同考えています。本稿が皆様のお目に触れるときには既にスケジュールが進行しているかもしれませんが、もしも可能ならばみなさまもお知り合いの高校生に SuperCon2016 というものがあり､大変に楽しい行事であることを呼びかけてください. また､来年以降、すなわち SuperCon2017 以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

5　Web

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

大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学サイバーメディアセンター准教授　降籏 大介

1. 概要

サイバーメディアセンターの関係者は、導入している大規模計算機システムを如何にしたらユーザにより有効活用してもらえるかを日々考えています。その一環として、マニュアル等の充実、ユーザからの質問をメールなどで受け付ける仕組みの構築、FAQ の整備検討などを行っておりますが、その中でも重要と位置づけているのがここで紹介する講習会です。講習会は大規模システムの開発や管理などを行っている関係者とユーザが直接やりとり出来る場でもありお互いに大変貴重な機会なため、講習会講師だけでない関係者も立ち会うことがしばしばです。そして、その講習会の内容は、スーパーコンピュータの OS としての Unix 環境についてのものやそのハードウェアについての概要説明からはじまり、ユーザにとって重要な並列計算の概要から各種プログラミング技法の詳細や専門家用の特殊なソフトウェアについてのものに至るまで、ユーザの要望に沿ったものとなっていると考えております。次ページに掲載しております表を参照していただきますとわかりますが、大規模計算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を幅広く対象として年に 14～15 回開催しております．さらにサイバーメディアセンター大規模計算機システムの web では、より詳細な情報を掲載しておりますので、ぜひご閲覧ください。

2. 多忙な方も参加しやすく

近年、学生も研究者も大変に多忙です．これをうけて、サイバーメディアセンターの講習会は原則として 年に 2 回、ほぼ同じ内容の講習会を開催するように工夫しています。時期としては毎年、6 月頃と 10 月頃に集中的に開催しています。これは、学期始めや学期末を外して欲しい、あまり年度の後ろ側だと学生の研究開始に間に合わないなどのユーザの声を反映したもので、なるべく多くのユーザが参加できるようにと配慮した結果です。また、Gaussian などの講師を確保しにくい研究者用専門ソフトウェアの講習会については、東北大学と協力してテレビ会議システムを用いることで講師を確保し、講習会を開催しています。こうした努力の甲斐あってか各講習会ともに一定数のユーザの参加をいただいており、ユーザの皆様に役立てていただいていると考えています。

3. 初学者にも優しく

こうした講習会は敷居が高いと思われがちですが、先に述べたように 1 年間におおよそ 15 回程度の講習会を開催しておりますうち、おおよそ 1/4 は初学者が対象の内容のものです。具体的には、Unix の簡単な操作方法についてや、スパコンハードウェアの概要説明、並列計算の概念のみの説明などからなります。スーパーコンピュータを使うユーザというとこうした知識やプログラミング技法について大変なプロフェッショナルばかりかとよく思われがちですが、どなたにも「初めての時」はあるものですし、細かい技術についてはマニュアルが有っても、基礎的な概念や手法についてはどこにも記載が無いということも珍しくないのです。サイバーメディアセンターはこうした点を補い、より広い分野・方面の方にユーザとしてシステムを使ってもらうべく、常に初学者に優しくありたいと考えてこのような構成にしています。

4. プロフェッショナルな方も

もちろん、サイバーメディアセンターはプロフェッショナルなユーザへの支援も怠らず、専門的な内容についても講習会を計画、実施しています。並列

計算のプログラミング技法 MPI についての講習会はもちろんのことスーパーコンピュータや大規模並列計算機が活躍の場である言語 HPF (High Performance Fortran) についての専門家による講習会、そして、AVS, Gaussian といった専門分野に特化したソフトウェアの講習会も行っています。一部の講習会は、大規模計算機システムの開発そのものを行っている会社から技術者を講師として招き、非常に微細な部分に至るまで技術的な話を聞くことが出来る機会としています。

5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、サイバーメディアセンターの web である

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/

にて常に公開しております。随時更新しておりますので、ぜひ頻繁にご覧になり、ご興味のある会に積極的にご参加ください．皆様のご参加を常に歓迎いたします。

また、このように、様々な工夫と努力のうえに行われている講習会ですが、大規模計算機システムのユーザの使い方は日々変わっていくものですから、講習会もそれにあわせて変化、進歩していく必要があります。しかし、それにはユーザの方々の意見がなにより重要です。そのフィードバックの先に、より良い講習会の実現が有ります。ユーザの皆様におかれましては、遠慮をせずに、いつでも構いませんので、講習会についての要望をぜひサイバーメディアセンターまでお聞かせください。

2016年度 大規模計算機システム利用講習会

	講習会名	開催日時	講師	開催場所
1	スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	6月6日(月) 13:30 - 15:00	サイバーメディアセンター 降旗 大介 准教授	サイバーメディアセンター本館 サイバーメディアコモンズ
2	スーパーコンピュータ概要 と スーパーコンピュータ利用入門	6月10日(金) 13:30 - 17:30	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	サイバーメディアセンター本館
3	SX-ACE 高速化技法の基礎	6月16日(木) 13:30 - 17:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター本館
4	並列コンピュータ高速化技法の基礎	6月17日(金) 13:30 - 16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター本館
5	SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)	6月23日(木) 10:00 - 16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター本館
6	SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)	6月24日(金) 13:30 - 16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター本館
7	スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	9月開催 予定	サイバーメディアセンター 降旗 大介 准教授	サイバーメディアセンター本館
8	スーパーコンピュータ概要 と スーパーコンピュータ利用入門	9月開催 予定	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	サイバーメディアセンター本館
9	SX-ACE 高速化技法の基礎	9月開催 予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター本館
10	並列コンピュータ高速化技法の基礎	9月開催 予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター本館
11	SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)	9月開催 予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター本館
12	SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)	9月開催 予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター本館
13	AVS可視化処理入門	9月開催 予定	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター本館
14	AVS可視化処理応用	9月開催 予定	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター本館

テレビ会議システムによる講習会

	講習会名	開催日時	開催機関	受講場所
15	Gaussian講習会(配信)	8月開催 予定	東北大学	サイバーメディアセンター本館

2015 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
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(6/2)	6月2日(火) 13:30 – 15:00	32	28	28	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(6/16)	6月16日(火) 13:00 – 17:00	10	7	7	0
SX-ACE 高速化技法の基礎(6/18)	6月18日(木) 13:00 – 16:00	9	6	5	1
並列コンピュータ高速化技法の基礎(6/23)	6月23日(火) 13:00 – 16:00	5	5	5	0
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(6/25)	6月25日(木) 10:00 – 16:00	8	8	6	2
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(6/30)	6月30日(火) 13:00 – 16:00	4	3	2	1
Gaussian講習会(8/28)	8月28日(金) 13:00 – 17:00	7	6	6	0
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/1)	9月1日(火) 13:30 – 15:00	31	23	23	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(9/15)	9月15日(火) 13:30 – 17:00	13	10	10	0
SX-ACE 高速化技法の基礎(9/17)	9月17日(木) 13:30 – 16:00	9	7	6	1
並列コンピュータ高速化技法の基礎(9/25)	9月25日(金) 13:30 – 16:00	6	3	3	0
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(9/29)	9月29日(火) 10:00 – 16:00	4	2	1	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(9/30)	9月30日(水) 13:30 – 16:00	3	1	1	0
AVS可視化処理入門(10/8)	10月8日(木) 10:00 – 16:00	10	7	3	4
AVS可視化処理応用(10/9)	10月9日(金) 10:00 – 16:00	6	5	3	2
合計		157	121	109	12

受講者内訳

受講者職種

◆今回の講習会についてどのようにお知りになりましたか。（複数回答可）

講習会名	CMC HP	メーリングリスト	大阪大学 HP	掲示板（ICHO）	掲示板（KOAN）	教員から	知人から	その他
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(6/2)	2	19	0	0	2	6	0	1
スーパーコンピュータ概要と スーパーコンピュータ利用入門(6/16)	4	1	0	0	0	1	1	0
SX-ACE 高速化技法の基礎(6/18)	3	1	0	0	0	2	0	0
並列コンピュータ高速化技法の基礎(6/23)	2	0	0	0	0	3	0	0
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(6/25)	3	0	0	0	0	4	0	0
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(6/30)	1	1	0	0	0	0	0	1
Gaussian講習会(8/28)	4	0	2	0	0	1	0	0
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/1)	1	9	2	0	2	3	2	3
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(9/15)	3	3	1	0	1	4	1	0
SX-ACE 高速化技法の基礎(9/17)	1	1	0	1	2	4	1	0
並列コンピュータ高速化技法の基礎(9/25)	1	0	0	0	1	2	1	0
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(9/29)	0	0	0	0	0	1	0	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(9/30)	0	1	0	0	0	0	0	0
AVS可視化処理入門(10/8)	2	0	0	0	0	4	2	0
AVS可視化処理応用(10/9)	2	0	0	0	0	2	2	0
合計	29	36	5	1	8	37	10	6

◆今回の講習会の開催日は適当でしたか。

◆今回の講習会の時間は適当でしたか。

◆会場の大きさ、場所は適当でしたか。

◆今回の講習会の内容はどうでしたか。

◆今回の講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。

◆今回の講習会での講師の進め方はどうでしたか。

◆今回の講習会の満足度は？

◆今回の講習会の資料はどうでしたか。

◆今回の講習会は皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。

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

◆「ある」と回答された方の利用方法

◆サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。

2016年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況

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

■大阪大学計算機資源を利用する採択課題一覧

2016 年度公募で採択された課題（利用期間 2016 年 4 月～2017 年 3 月）

利用枠	利用資源	研究課題名	課題責任者 所属機関
京以外 一般課題	SX-ACE	酸化自由エネルギーの第一原理計算による光合成系の構造解析	東北大学
京以外 一般課題	SX-ACE	First-principles Studies of Ferroelectric Oxide Surfaces and Interfaces	University Malaya
京以外 一般課題	SX-ACE	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション	九州大学
京以外 一般課題	SX-ACE	極低温遷臨界・超臨界状態における同軸噴流の大規模数値解析	九州工業大学
京以外 一般課題	SX-ACE	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション	九州大学
京以外 一般課題	SX-ACE	高シュミット数のスカラーが形成する密度成層流体の流れ	京都大学
京以外 産業利用課題 （実証利用）	大規模可視化対応 PCクラスタ	新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築	バイオグリッドセンター関西

2016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。

2016年度の課題募集には合計47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、39課題が採択されました。このうち6課題が大阪大学を利用することとなっています。

課題代表者	研究課題名	課題代表者 所属機関	利用大学
若谷 彰良	分散メモリ型スーパーコンピュータにおける直接法と反復法の並列化行列解法の研究	甲南大学	東大、京大、阪大
冨永 哲雄	PM-2次元散乱パターンRMC法によるSPring-8実験からの3次元構造モデル構築のHPC利用スキーム構築	JSR株式会社	北大、名大、阪大
萩田 克美	高分子材料系の粗視化MDの次世代大規模HPC利用の基盤的研究	防衛大学校	北大、東大、名大、阪大、九大
森 伸也	次世代トランジスタの量子輸送シミュレーションに関する研究	大阪大学	阪大
柏崎 礼生	耐災害性・耐障害性の自己検証機能を具備した広域分散仮想化基盤に関する研究とその実践的運用	大阪大学	北大、東北大、京大、阪大、九大
渡場 康弘	Toward a resilient software defined infrastructure to support disaster management applications	奈良先端科学技術大学院大学	阪大

2016 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

大阪大学サイバーメディアセンターでは、大規模計算機システムを活用する研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターが参画する「ネットワーク型」学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）や革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の目的を踏まえつつ、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題や本センターの大規模計算機システムを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を公募しています。

本センターが設置する大規模計算機システム公募型利用制度は、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題を募集する**(1)若手・女性研究者支援萌芽枠**、大規模計算機システムを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を募集する**(2)大規模 HPC 支援枠**から構成されます。

■2016 年度公募型利用制度 採択課題一覧（利用期間 2016 年 4 月～2017 年 3 月）

利用枠	利用資源	研究課題名	代表者所属機関
若手・女性研究者支援萌芽枠	大規模可視化対応PCクラスタ	固液界面における和周波発生分光スペクトルの第一原理シミュレーション	大阪大学 基礎工学研究科
若手・女性研究者支援萌芽枠	大規模可視化対応PCクラスタ	鼻咽腔閉鎖時における流路トポロジー変化が呼気に及ぼす影響	大阪大学 歯学部附属病院
若手・女性研究者支援萌芽枠	大規模可視化対応PCクラスタ	キロテスラ級磁場下における超高強度レーザープラズマ相互作用の物理	大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター
大規模HPC支援枠	SX-ACE	格子量子色力学を使った高密度物質の研究	佐賀大学 工学系研究科
大規模HPC支援枠	大規模可視化対応PCクラスタ	初期宇宙における銀河形成と巨大ブラックホール形成	大阪大学 理学研究科

大規模計算機システム Q＆A

2015 年度に当センターに寄せられた質問を掲載しております。
同等の内容を下記の Web ページでも閲覧いただけます。
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/

Q．年度途中で資源(ノード時間)の追加は可能でしょうか？

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

利用者管理システム(要認証)
https://zenkoku-web.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/saibed/

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

一般利用(学術利用) 資源追加申請
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/

Q．ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか？

Ａ．サイバーメディアセンターの大規模計算機システムでは、フロントエンドからの SFTP、SSH、SCP 等は使用できません。ローカルとフロントエンド間の SFTP は可能ですので、ご自身の端末を経由していただき、転送していただきますよう、お願いいたします。

Q．GROMACS を使用することは可能でしょうか？

Ａ．はい。可能です。
現在、VCC（大規模可視化対応 PC クラスタシステム）で提供しております。
利用方法については下記をご参照くださいませ。
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/vcc/gromacs/

なお、SX-ACE で GROMACS を利用することはできません。導入予定も今のところありません。
ご理解のほど、お願いいたします。

Q．SX-ACE で共有ライブラリを使用することはできますか？

Ａ．SX では so 形式(Dynamic Shared Object)には対応しておらず、全て静的リンク用のオブジェクトとなり、オブジェクトコードのファイルのまま取り扱うか、sxar コマンドでアーカイビング(*.a)形式にして使用する必要があります。

Q．リトルエンディアンで書き込みのなされたファイルを読み込んでプログラムを実行することは可能でしょうか？

Ａ．はい。F_UFMTENDIAN 環境変数を指定することで可能です。
ジョブスクリプトの中で、以下のように指定くださいませ。

```
#PBS -v F_UFMTENDIAN= [装置番号]
```

※ご注意

当センターで採用しておりますスケジューラ(NQSII)の仕様で、「setenv」で環境変数を指定すると、マスターノードにのみ有効に働き、スレーブノードには反映されません。(マルチノードジョブの場合です。シングルノードジョブの場合ですと setenv でも問題なく動作します。)

Q．HCC で MPI ジョブを実行すると「/opt/intel/impi/4.1.3/bin/mpirun: line 274: 7046 セグメンテーション違反です」というエラーが表示されます

Ａ．MPI 実行時のコマンドとして「mpirun」を指定されているため、エラーが表示されております。HCC にて MPI をご利用いただく場合は「mpiexec」コマンドをご利用くださいませ。

以下のページに、HCC で MPI を使用する際のスクリプト例を記載しております。
ご一読くださいませ。

MPI 利用方法（HCC）
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/hcc/mpi/

Q．ジョブ投入時に Request could not be routed.Request deleted.というエラーが表示されます

Ａ．投入したジョブクラスに誤りがある可能性があります。ジョブクラスの指定をご確認ください。
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/jobclass/

Q．SX-ACE で MPI を利用した際に表示される実行性能情報(MPIPROGINF)の見方を教えてください

Ａ．出力される情報はマニュアル「MPI/SX 利用の手引き」の「2.13.6 MPI プログラム実行性能情報」をご覧ください。(要認証)
https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/secure/manual/SXACE/J/MPISX.pdf

※ご注意

ノード間を MPI、ノード内は OpenMP で並列化して実行した場合、ユーザ時間：UserTime やシステム時間：SysTime として出力される情報は、プロセス単位の CPU 時間となります。したがって、各コアの実行時間を積算した値が表示され、RealTime:経過時間よりも長い時間が出力されることがありますので、ご注意ください。

Q．計算機のメンテナンス前後に投入したジョブはどのような挙動になるのでしょうか？

A．ジョブの投入時間と経過時間の指定により、実行されるタイミングがやや異なりますが、基本的には正しく実行されます。

※共有利用の場合は、他の利用者の投入状況によって、待ち時間が発生する場合がございます。

(1) メンテナンス前にジョブを投入した場合

投入したジョブの実行終了予定時刻が、メンテナンス開始時刻を超えていた場合、メンテナンス終了後まで実行されません。実行終了予定時刻は、「投入時間」とジョブスクリプトに記載した「経過時間の指定(elapstime_req)」から算出します。

例えば、ジョブスクリプトに「elapstime_req=5:00:00」と記載したジョブを、13:00 に投入した場合、実行終了予定時刻は 18:00 となります。※共有利用の場合は、上記に関わらず、他の利用者の投入状況によって実行されない場合がございます。

(2) ジョブの実行終了予定時刻がメンテナンス開始時刻を超えていない場合

正常に実行されます。(メンテナンスの終了を待たずに実行可能です)

(3) ジョブの実行終了予定時刻がメンテナンス開始時刻を超えている場合

前述の通り、メンテナンス終了後まで実行されません。投入されたジョブは QUE 状態のまま受け付けられ、メンテナンス終了後に実行されます。ただし、「経過時間の指定(elapstime_req)」を調整し、実行終了予定時刻がメンテナンス時刻を超えないようにして、再投入することで、実行できる可能性があります。もしお急ぎの場合は、お試しください。

(4) メンテナンス計画前に、メンテナンス開始時刻を超えるジョブを実行している場合

占有利用等で、長時間のジョブを実行されている方が対象となります。メンテナンス開始までは正常に実行されます。メンテナンス中は、計算を実行できませんので、停止をお願いすることがございますが、ご了承ください。このケースに該当している場合、こちらからご連絡いたします。

(5) メンテナンス中にジョブを投入した場合

メンテナンス終了後まで実行されません。

投入されたジョブは QUE 状態のまま受け付けられ、メンテナンス終了後に実行されます。

(6) メンテナンス後にジョブを投入した場合

正常に実行されます。

利用規程等

・規程関係 …… 87

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程 …… 87

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧 …… 89

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 …… 91

・附表 …… 92

大規模計算機システム　ホスト一覧 …… 92

汎用コンクラスタ（HCC）のジョブクラス一覧 …… 93

・規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

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

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

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

第４条　大規模計算機システムを利用しようとする者は、所定の申請を行い、センター長の承認を受けなければならない。ただし、前条第６条の者は、この限りでない。
２　前項の申請は、大規模計算機システム利用の成果が公開できるものでなければならない。

第５条　センター長は、前条第１項による申請を受理し、適当と認めたときは、これを承認し、利用者番号を与えるものとする。
２　前項の利用者番号の有効期間は、１年以内とする。ただし、当該会計年度を超えることはできない。

第６条　大規模計算機システムの利用につき承認された者(以下「利用者」という。)は、申請書の記載内容に変更を生じた場合は、速やかに所定の手続きを行わなければならない。

第７条　利用者は、第５条第１項に規定する利用者番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第８条　利用者は、当該申請に係る利用を終了又は中止したときは、速やかにその旨をセンター長に届け出るとともに、その利用の結果又は経過を所定の報告書によりセンター長に報告しなければならない。
２　前項の規定にかかわらず、センター長が必要と認めた場合は、報告書の提出を求めることができる。
３　提出された報告書は、原則として公開とし、センターの広報等の用に供することができるものとする。ただし、利用者があらかじめ申し出たときは、３年を超えない範囲で公開の延期を認めることがある。

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

第１０条　利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

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

第１２条　前条の規定にかかわらず、次の各号に掲げる場合については、利用経費の負担を要しない。
(1) センターの責に帰すべき誤計算があったとき。
(2) センターが必要とする研究開発等のため、センター長が特に承認したとき。

第１３条　利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。
(1) 学内経費(科学研究費補助金を除く。)の場合にあっては、当該予算の振替による。
(2) 前号以外の場合にあっては、本学が発する請求書の指定する銀行口座への振込による。

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

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

第１６条　センター長は、この規程又はこの規程に基づく定めに違反した者その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生じさせた者があるときは、利用の承認を取り消し、又は一定期間大規模計算機システムの利用を停止させることがある。

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

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

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

附　則
この改正は、平成１３年1月６日から施行する。
附　則
この改正は、平成１３年４月１日から施行する。
附　則
この改正は、平成１４年４月１日から施行する。
附　則
この改正は、平成１４年6月１９日から施行し、平成１４年４月１日から適用する。
附　則
この改正は、平成15年４月１日から施行する。
附　則
この改正は、平成１６年４月１日から施行する。
附　則
この改正は、平成１８年2月１５日から施行する。
附　則
この改正は、平成１９年9月２８日から施行する。
附　則
この改正は、平成２０年４月１６日から施行する。
附　則
この改正は、平成２３年４月１日から施行する。
附　則
この改正は、平成２４年5月１０日から施行する。
附　則
この改正は、平成２５年４月１日から施行する。

大規模計算機システム利用負担額一覧

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

(1)スーパーコンピュータ(SX-ACE)の負担額

(A)占有

基本負担額	占有ノード数
185,000円／年	1ノード

(B)共有

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

備考

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

(2)大規模可視化対応PCクラスタの負担額

(A)占有

基本負担額	占有ノード数
320,000円／年	1ノード

(B)共有

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

備考

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

(3)ディスク容量追加の負担額

基本負担額	提供単位
10,000円／年	1TB

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

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員内規

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

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

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

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

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

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

２　前項に係る利用経費の負担額は免除する。

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

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

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

附　則

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

附　則

この改正は、平成１９年９月２８日から施行する。

附 則

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

附 則

この改正は、平成２５年４月１日から施行する。

・附表

大規模計算機システム　ホスト一覧

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

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

スーパーコンピュータＳＸ－ＡＣＥのジョブクラス一覧

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

大規模可視化対応ＰＣクラスタ（ＶＣＣ）のジョブクラス一覧

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

汎用コンクラスタ（ＨＣＣ）のジョブクラス一覧

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 CPU 数	利用可能 最大メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用 のみ	H-single	最大 300 時間程度	2CPU (2CPU×1 ノード)	4GB (4GB×1 ノード)	1 ノード
	H-small	最大 300 時間程度	32CPU (2CPU×16 ノード)	64GB (4GB×16 ノード)	2～16 ノード
	H-large	最大 300 時間程度	128CPU (2CPU×64 ノード)	256GB (4GB×64 ノード)	17～64 ノード
	H-mem+	最大 300 時間程度	64CPU (2CPU×32 ノード)	384GB (12GB×32 ノード)	1～32 ノード
	DBG-single	1 時間	2CPU (2CPU×1 ノード)	4GB (4GB×1 ノード)	1 ノード
	DBG-small	1 時間	4CPU (2CPU×2 ノード)	8GB (4GB×2 ノード)	2 ノード
	DBG-large	1 時間	4CPU (2CPU×2 ノード)	8GB (4GB×2 ノード)	2 ノード

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

※汎用コンクラスタ（ＨＣＣ）は、月に 1,2 回メンテナンスによりサービスが停止します。
メンテナンス日を跨いでジョブを実行することはできませんので、経過時間の制限(elapstim_req)は決まった値ではなく、ジョブを投入した日から次メンテナンス日までが経過時間の制限となります。

※ジョブクラス一覧表は 2016 年 4 月時点のものになります。利用状況により変更することがありますが、ご了承ください。

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　・・・・・・・・・・・・・・・・・　97

・大規模計算機システム利用案内　・・・・・・・・・・・・・・・・・

大規模計算機システムを利用して行った研究･開発等の記事の募集について

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

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

＊投稿いただいた方には、掲載した広報誌 5 部を進呈いたします。

【原稿の執筆および提出方法】

１．　原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。

・ページ設定（Microsoft Word2010 の設定です。）

・用紙サイズ　A4 縦

・１ページの文字数と行数：行数　40、行送り　18.2pt、1 頁 2 段書き

・フォント　本文　MS 明朝 10Point

題名　MS ゴシック 14Point、半角英数　Times New Roman

執筆者氏名　MS 明朝 10Point、なお、姓と名の間及び機関と研究科と専攻名の間は半角スペースを入れる。

・余白　上　20mm、下　20mm、左右　20mm、印刷形式：標準

・その他　セクションの開始位置：次のページから開始

用紙の端からの距離：ヘッダ　15mm、フッタ　17.5mm

垂直方向の配置：上寄せ

・文字等の設定

・年は西暦で記述する。

・数字、英字は半角（書式：Times New Roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角

・文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に全角

・日本語文中の句読点は半角の“，”“．”を使用せず、全て全角の“、”“。”とする。

２．　Microsoft Word 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、PDF ファイルに変換してください。

３．　原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。

zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp

なお、送信の際、件名を「HPC ジャーナル原稿」と入力くださるよう、お願いします。

４．　電子メールの容量が 5MB を超える場合は、CD-R 等の電子媒体に記録のうえ、以下の送付先にお送りください。

【原稿の送付先】

〒５６７－００４７

大阪府茨木市美穂ヶ丘５－１　大阪大学情報推進部情報企画課総務係

【注意事項】

１．　お送りいただいた原稿を掲載する際、原稿の修正をお願いすることがありますのでご了承ください。

２．　提出いただいた原稿は、サイバーメディアセンターのホームページにて公開いたしますので、ご了承ください。

大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）

主なサービス内容	係・連絡先等	月～金	土・日・祝日

・開館時間（吹田本館）

センター見学の申込、広報	情報推進部情報企画課 総務係（本館1Ｆ） 電話　06-6879-8804 zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp	8:30～12:00 13:00～17:15	閉 館
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（本館1Ｆ） 電話　06-6879-8980,8981 zyosui-kikaku-kaikei@office.osaka-u.ac.jp		
利用案内、受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用講習会受付、 計算機マニュアル・図書の閲覧、貸出	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話　06-6879-8808,8812 system@cmc.osaka-u.ac.jp		
利用方法の問い合わせ スーパーコンピュータ、PCクラスタ等の 利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話　06-6879-8812,8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp		

・サービス時間

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

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

・大規模計算機システムURL

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

・利用相談

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

広報委員会委員
松　岡　茂　登（委員長、大阪大学 サイバーメディアセンター）
清　川　　清（大阪大学 サイバーメディアセンター）
竹　蓋　順　子（大阪大学 サイバーメディアセンター）
吉　野　　元（大阪大学 サイバーメディアセンター）
降　籏　大　介（大阪大学 サイバーメディアセンター）
義　久　智　樹（大阪大学 サイバーメディアセンター）
小　島　一　秀（大阪大学 サイバーメディアセンター）
森　原　一　郎（大阪大学 サイバーメディアセンター）
伊　藤　雄　一（大阪大学 クリエイティブユニット）
岩　崎　琢　哉（大阪大学 経営企画オフィス）

（お願い）

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

大阪大学サイバーメディア HPC ジャーナル　No.6
2016 年 8 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）

No. 6 2016. 8

ISSN 2186-473X

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

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

Cybermedia Center
Osaka University