

# CYBERMEDIA HPC JOURNAL

Cybermedia Center, Osaka University

No. 9

December, 2019.

大坂大学  
サイバーメディアセンター



## 目 次

<b>特 集：大規模計算機システムとポスト京</b> .....	1
・半導体トランジスタの第一原理デバイスシミュレーション .....	3
森 伸也	
・ポスト「京」に向けた航空交通流の大規模計算と可視化プログラムの開発 .....	7
安福 健祐	
<b>大規模計算機システム利用者研究報告</b> .....	11
・イオン液体の輸送物性解析に向けた分子力場の開発 .....	13
石井 良樹	
・有限温度・有限密度2カラーQCDの相図と超流動性の解明 .....	17
伊藤 悅子	
・複合アニオンに起因した多軌道性と低次元性からうまれる強相関電子物性の研究 .....	21
越智 正之	
・共晶系 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ -Ru の 3-Kelvin 相における界面超伝導の磁場誘起カイラル転移 .....	25
兼安 洋乃	
・高温物質中におけるクォーク間相互作用の微視的伝達機構の解明 .....	29
北澤 正清	
・Z3 対称な量子色力学における格子シミュレーション .....	33
河野 宏明	
・相対論的Vlasov-Fokker-Planck-Maxwell系に対する 電荷・運動量・エネルギー完全保存スキームの開発と実証実験 .....	37
白戸 高志	
・矯正歯科治療後の三次元顔形態を予測する人工知能システムの開発 .....	41
谷川 千尋	
・勾配流法を用いたNf=2+1 QCDのエネルギー運動量テンソルの研究 .....	45
谷口 裕介	
・Particle-in-cellシミュレーションによる 高強度レーザー生成プラズマアンジュレータに関する研究 .....	49
中村 浩隆	
・日本全国の位置情報付き仮想の個票合成手法の精緻化 .....	53
原田 拓弥、村田 忠彦	
・多様な星形成環境における連星形成可能性 .....	57
樋口 公紀	
・沿岸域観測データを同化した広領域・高解像度計算による東京湾の流動・水質の解析 .....	61
松崎 義孝	

• Effects of hole-boring and relativistic transparency on particle acceleration in overdense plasma irradiated by short multi-PW laser pulses	65
矢野 将寛	
• OCTPOUSを用いた格子QCDによるQCD相図の探索	71
若山 将征	
<b>センター報告</b>	75
• 2018 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	77
• SC18 出展報告	91
• 第 24 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2018)報告および 第 25 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2019)告知	97
• 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	99
• 2019 年度大規模計算機システム利用講習会	101
• 2018 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	102
• 2019 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	110
• 2019 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	111
• 2018 年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	112
• 2019 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	113
• 大規模計算機システム Q&A	114
<b>利用規程等</b>	117
• 規程関係	119
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	119
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	121
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規	123
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	123
• 附表	124
大規模計算機システム ホスト一覧	124
スーパーコンピュータSX-ACE、PCクラスタ及びOCTOPUSのジョブクラスター一覧	124
2018 年度大規模計算機システム稼働状況	126
<b>募 集</b>	127
• 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	129
• 大規模計算機システム利用案内	130

# — 大規模計算機システムとポスト京 —

## 特 集

---

・半導体トランジスタの第一原理デバイスシミュレーション ..... 3  
森 伸也 大阪大学 大学院工学研究科

・ポスト「京」に向けた航空交通流の大規模計算と可視化プログラムの開発 ..... 7  
安福 健祐 大阪大学 サイバーメディアセンター

(大阪大学計算機資源を利用するポスト京研究開発枠重点課題は 110 ページに記載)



# 半導体トランジスタの第一原理デバイスシミュレーション

森 伸也

大阪大学 大学院工学研究科 電気電子情報工学専攻

## 1. はじめに

半導体デバイスの微細化が進み、いわゆる 7 nm プロセスで作製され、ゲート長が 20 nm を切るような、な、極めて微細なトランジスタ(Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor, MOSFET)が量産化されています。MOSFET では、サイズの縮小がデバイスの高性能化につながるという、スケーリング則が成り立つため、これまで、高性能化を目指して微細化が行われてきました。しかし、デバイスが極度に微細化された結果、単純なスケーリング則のみによるデバイス性能向上の限界が顕在化してきました。すでに、平面型の MOSFET (図 1(a)) ではゲートの制御性が確保できなくなり、FinFET (図 1(b)) と呼ばれる立体構造のトランジスタが導入されています。ナノシートトランジスタ (図 1(c)) やナノワイヤトランジスタ (図 1(d)) と呼ばれる新構造の導入も検討されています。一方、チャネル材料として、化合物半導体や 2 次元系材料など、従来の Si とは異なる新しい材料を導入することにより、デバイス性能の向上を図るという試みもなされています。さらに、トンネルトランジスタや負性容量トランジスタなど、MOSFET と動作原理が異なるデバイスを導入することにより高性能化を達成することも検討されています。

以上のような新構造・新材料・新原理にわたる多くの選択肢の中から、デバイス開発の指針を早期に得るため、デバイス性能を予測できるシミュレータの開発が望まれています。性能予測のためのデバイスシミュレータの必要性は、古くから指摘されており、2002 年に発表された文献[1]で、すでに、「まず、未踏デバイスに対してその性能を予測し、デバイス開発戦略に役立てるという使い方がある。特に、各種のデバイスが候補にあがっている際に、デバイスの動作限界を知り、どのデバイスをターゲットに開

発するかということは非常に重要な決断である」と述べられています。ただ、計算機性能の問題などにより、新構造・新材料・新原理に柔軟に対応できるようなシミュレータはこれまで実現されてきませんでした。しかし、近年、計算機の性能が著しく向上し、従来は困難なシミュレーションも実現可能になってきました。さらに、材料開発・材料探索の分野では、第一原理計算と呼ばれる、経験的な情報を必要としない計算手法が大きな成功を納めるようになりました。以上のような背景のもと、我々は、文部科学省ポスト「京」重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」の支援を受け、密度汎関数理論に基づくデバイスシミュレータの開発を行なっています。ここでは、その現状について紹介します。

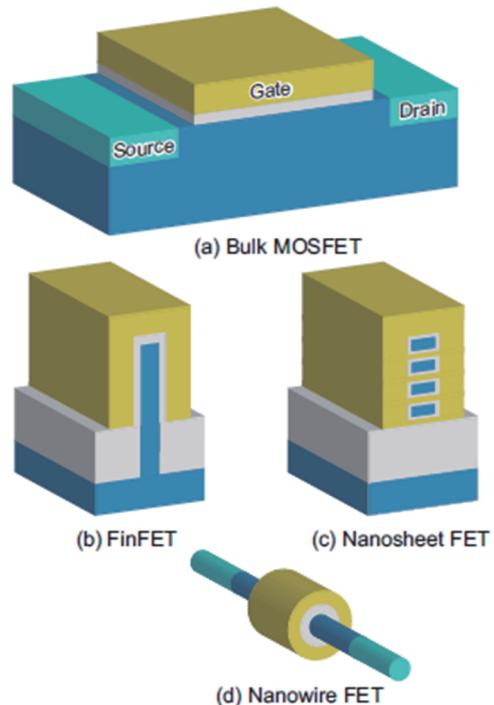


図 1 MOS トランジスタ構造。 (a)平面型の MOSFET、(b)立体型の FinFET、(c)ナノシート FET、(d)細いワイヤ形状のナノワイヤ FET。

## 2. デバイスシミュレーション手法

ドリフト拡散方程式など半古典的な輸送方程式に基づいた半導体デバイスシミュレータが一般的に用いられています [2, 3]。しかし、極めて微細なデバイスの輸送現象には、量子閉じ込めやトンネル効果など量子力学的な効果が重要な役割を演じます[4]。そのため、極微細デバイスを解析対象とする場合、量子効果を考慮できる手法を用いてシミュレータを開発することが必須です。我々は、非平衡グリーン関数(NEGF)法と呼ばれる計算手法を用いてシミュレータ開発を行なっています。NEGF 法では、電子状態を記述する系のハミルトニアンから計算されるグリーン関数が中心的な役割を演じます。従来、電子状態の記述には、有効質量近似、 $k \cdot p$  近似、強束縛近似など、経験的な手法が用いられてきました。しかし、予測機能を持たせるためには、電子状態を第一原理的に求める必要があります。第一原理計算は、種々の定式化が可能ですが、デバイスシミュレータへの応用を図る場合、実空間メッシュを用いた形式が望ましいと考えられます。我々は、東京大学の押山研究室で開発された実空間密度汎関数(Real-Space Density Functional Theory, RSDFT)法コード[5]を用いてデバイスシミュレータの開発を行なっています。

## 3. 第一原理デバイスシミュレータ開発におけるおもな課題

RSDFT-NEGF デバイスシミュレータの開発における主な課題は以下の通りです。

①ハミルトニアン行列のサイズ：NEGF デバイスシミュレータでは、空間を離散化することにより系のハミルトニアンを行列で表現し、ハミルトニアン行列と同サイズの行列の逆行列演算を実行し、系のグリーン関数行列を求めます。そのため、単純に数値計算を行うと、計算量は空間メッシュ数  $N$  の 3 乗に比例して増加し、メッシュ数の違いが計算時間に大きな影響を及ぼします。たとえば、1 nm 直径の Si ナノワイヤの単位胞を考えます。有効質量近似を用いる場合、キャリア電子の波長より十分短い間隔

で空間を離散化する必要があります。室温において、Si 伝導電子の熱波長は 10 nm 程度なので、0.2 nm 間隔で空間を離散化すると、メッシュ数  $N$  は 200 点程度になります。一方、単位胞に含まれる Si 原子数は 20 個程度なので、強束縛近似において、各原子に 10 個の原子軌道を考えると、“メッシュ数” はやはり 200 点程度になります。しかし、第一原理計算の場合、価電子帯の深い状態から電子状態を考慮する必要があるため、扱うべきエネルギー範囲が広くなり、典型的には 20,000 メッシュ点程度が必要となります。すなわち、単純に計算すると、第一原理計算は、経験的な有効質量近似や強束縛近似と比較して、 $(20,000/200)^3=1,000,000$  倍程度の計算時間が必要になります。

②非平衡境界条件：電子状態のみの計算では、周期的な境界条件を課すことができ、計算量を大幅に削減できます。しかし、デバイス中の状態は、ソース・ドレインから電子の出入りがあるため、周期的境界条件を課すことができません。さらに、NEGF 法では、ソースとドレインとが独立に熱平衡にあり、互いに非平衡と仮定するため、一般的には、そのような非平衡境界条件が課せられたチャネルの電子状態を求める必要があります。

③電極の自己エネルギー：ソース・ドレイン電極は粒子溜めであり、十分大きいと仮定されます。NEGF 法では、ソース・ドレイン電極の状態は、電極の自己エネルギーと呼ばれる物理量を用いて記述されます。この電極の自己エネルギーを求めるためには、半無限の電極における散乱問題に関する一般化固有値問題を解かなくてはならず、計算のボトルネックとなります。

## 4. $R$ 行列理論と等価モデル

我々は、 $R$  行列理論と等価モデルとを用いて上述の困難を回避したシミュレータの開発を行なっています。

$R$  行列理論は、共鳴核反応を記述するために Wigner と Eisenbud が提唱した理論です[6]。共鳴核反応を起こす内部領域と外部領域とに空間を分割

し、その境界で、2つの領域をつなぐ  $R$  行列を定義し、散乱断面積などを求めるというのが基本的なアイデアです。デバイスの輸送問題にも応用でき、チャネル（内部領域）とソース・ドレイン電極（外部領域）とにデバイスを分け、その境界で定義される  $R$  行列から、グリーン関数を計算します[7]。 $R$  行列は電極が接続されていない閉じたチャネルを記述するグリーン関数の表面成分に対応します。このことから、 $R$  行列理論を用いることにより、②の困難が解決できると期待されます。 $R$  行列理論を用いることにより、チャネル領域の計算を、閉じた系の計算に変換でき、電極部分は別途計算すれば良くなります。

$R$  行列理論には、分割統治法の一種である  $R$  行列伝搬法という計算手法が知られており、系を、任意のサイズに分割した小さい系の集まりとして、小さい系の  $R$  行列から、系全体の  $R$  行列を再帰的に計算できます [8]。これにより、①の困難が解決できると期待されます。

$R$  行列理論により、チャネルと電極とを分割しても、依然、電極の自己エネルギーの計算は必要です。実際のデバイスでは、抵抗の低いオーミック電極が接続されている限り、デバイス特性は電極の詳細には依存しないと考えられます。数値計算においても、電極とチャネルとの界面において反射が生じない限り、どのような電極を接続しても、デバイス特性は変わらないと考えられます。我々は、電極状態を等価モデル [9]を用いて記述することを試みています。等価モデルとは、大きなサイズのハミルトニアンが記述する広いエネルギー範囲の中で、任意の狭いエネルギー範囲のみを再現できる小さな基底系を抽出したモデルです。電極を等価モデルを用いて記述することにより、③の困難が解決できると予想されます。

## 5. シミュレーション結果

$R$  行列理論と等価モデルとを用いた RSDFT-NEGF デバイスシミュレータの実現に向けて、はじめに、一様な Si ナノワイヤの透過関数を計算しました。

電極部分を等価モデルで記述し、チャネル領域を RSDFT で記述し、直径 1nm の Si ナノワイヤの透過関数の入射電子エネルギー依存性を計算しました。一様なナノワイヤの透過関数は、モード数で決まる整数値をとることが知られています。数値計算の結果、透過関数は数値誤差の範囲で、整数値となることを確認しました。このことから、等価モデルで記述した電極と RSDFT で記述したチャネル領域との界面で、非物理的な反射が生じないことを確認しました。

つぎに、図 2 に示したように、可動電子状態のみを NEGF 自己無撞着ループに組み込んだプロトタイプを作成しました。すなわち、はじめに、RSDFT

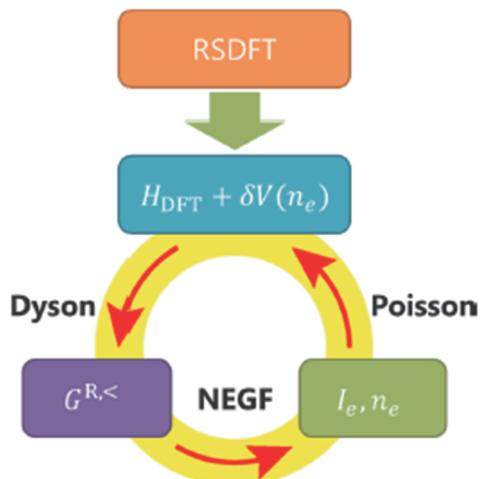


図2 NEGF自己無撞着計算。可動電子  $n_e$  の効果のみを、NEGF自己無撞着ループに取り込んだ場合。

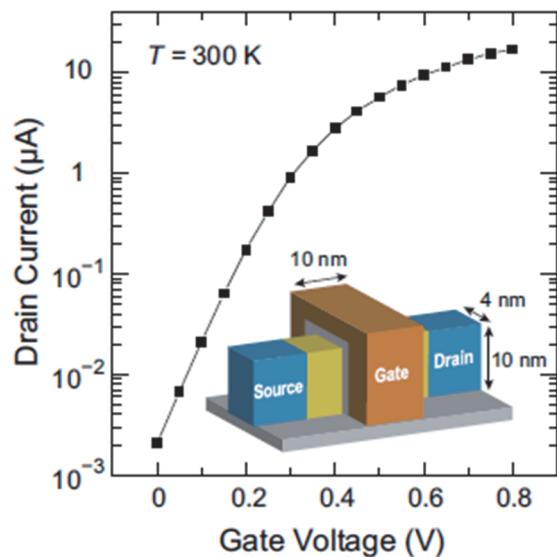


図3 Fin 高さ 10nm、Fin 幅 4nm、ゲート長 10nm の Si FinFET の伝達特性

を用いて価電子帯も含めた電子状態を1回だけ計算しておき、そこで得られたハミルトニアンを用いて、デバイス内の可動電子状態を、NEGF 方程式とポアソン方程式との自己無撞着計算により決定し、伝達特性などのトランジスタ特性を計算しました。図3に、Fin 高さ10nm、Fin幅4nm、ゲート長10nm のSi FinFET の伝達特性の計算結果を示します。京コンピューターで実行し、1,536 CPU を利用し、およそ1 日で計算が完了しました。この計算では、電子状態をRSDFTにより求めているため、有効質量など、電子状態に関する経験的なパラメータの入力が不要です。

図3 の計算では、可動電子状態のみNEGF 自己無撞着ループ内に組み込んでいるため、非平衡状態におけるチャネル領域の誘電応答を考慮することができません。そのため、バルクSi の誘電率をパラメータとして入力して、ポアソン方程式を解いています。しかし、一般的には、ナノ構造中における誘電応答は、バルクの場合と異なると考えられます。そこで、チャネル領域における誘電応答を考慮するため、可動電子状態計算だけでなく、分極電子状態計算もNEGF 自己無撞着ループ内に組み込んだシミュレータを開発しました。図4 に、直径1nm、ゲート長6nm のSi ナノワイヤFET の伝達特性の計算結果を示します。青丸が分極電荷を考慮した場合の結果で

あり、この計算では、誘電率という経験的なパラメータが不要です。図より、バルク Si の誘電率を仮定すると、オン電流を過大に評価することが分かります。

## 6.まとめと今後の展望

*R* 行列理論と等価モデルとを用いた、RSDFT-NEGF デバイスシミュレータの開発状況について紹介しました。現在、分極電荷を考慮しない場合、弾道輸送の範囲で、現実的なデバイスサイズのシミュレーションが可能になっています。しかし、分極電荷を考慮した場合、現状、直径 1nm 程度の小さなデバイスしか扱うことができません。また、室温・有限バイアス下でデバイスを動作させるため、フォノン散乱などの非弾性散乱過程の導入も不可欠です。これらの課題を解決し、予測機能を有するデバイスシミュレータを実現するためには、さらなる計算の効率化と適切なモデル化といった工夫に加え、計算機性能のさらなる向上も必要と考えています。

本研究は、大阪大学の美里劫夏南博士、アドバンスソフト（株）の岩田潤一博士、名古屋大学の押山淳教授との共同研究に基づくものです。

## 参考文献

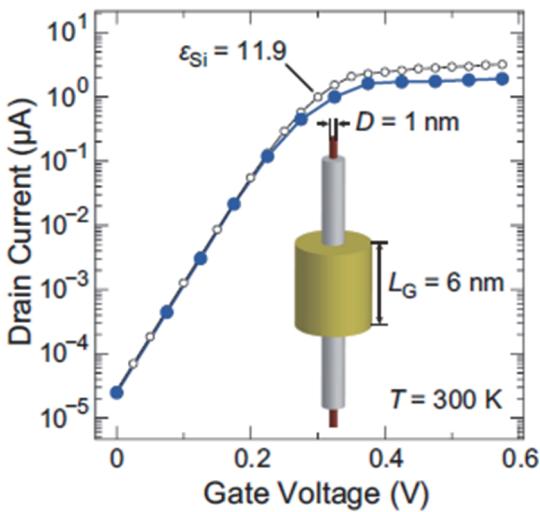


図4 直径1nm、ゲート長6nmのSiナノワイヤFET の伝達特性。青丸は分極電荷を考慮した結果、白丸はバルクSiの誘電率を仮定した結果。

- [1]西謙二、応用物理、**71**, 588 (2002).
- [2]森伸也、応用物理、**86**, 1075 (2017).
- [3]森伸也、応用物理、**87**, 44 (2018).
- [4]森伸也、三成英樹、応用物理、**78**, 540 (2009).
- [5] <https://github.com/j-iwata/RSDFT>
- [6] E. P. Wigner and L. Eisenbud, Phys. Rev., **72**, 29 (1947)
- [7] G. V. Mil'nikov, N. Mori, Y. Kamakura, and T. Ezaki, Appl. Phys. Express, **1**, 063001 (2008).
- [8] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, Phys. Rev. B, **79**, 235337 (2009).
- [9] G. Mil'nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, Phys. Rev. B, **85**, 035317 (2012).

# ポスト「京」に向けた航空交通流の大規模計算と可視化プログラムの開発

安福 健祐

大阪大学 サイバーメディアセンター サイバーコミュニティ研究部門

## 1. はじめに

京コンピュータの後継機ポスト「京」の開発事業（フラグシップ 2020 プロジェクト）では、ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に向けたアプリケーション開発として 9 つの重点課題に加え、ポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として萌芽的課題 4 テーマが設定され、2016 年に 8 つの課題が決定された（表 1 参照）。筆者は、萌芽的課題(2)「複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究」において「堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現」（課題責任者：東京理科大学 藤井孝藏教授、研究期間：2016 年 8 月 1 日～2020 年 3 月 31 日）という課題に参画しており、主に可視化プログラムの研究開発を行っている。

表 1：ポスト「京」萌芽的課題（4 テーマ 8 課題）

萌芽的課題			
01 基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦	02 複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究	03 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明	04 思考を実現する神経回路機構の解明と人工知能への応用
<a href="https://www.rcosriken.jp/fs2020p/">https://www.rcosriken.jp/fs2020p/</a>			
01 基礎科学の挑戦-複合・マルチスケール問題を通して極限の探求 極限の探求に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成 複合相関が織りなす極限マテリアル-原子スケールからのアプローチ	02 多層マルチ時空間スケール社会・経済シミュレーション技術の研究・開発 堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現	03 太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明	04 脳のビッグデータ解析、全脳シミュレーションと脳型人工知能アーキテクチャ ボトムアップで始原的知能を理解する昆虫全脳シミュレーション

本課題で対象としている輸送システムとは、現時点では航空機を対象としている。近年そのシステムは複雑化し、混雑や乗客のトラブル、気象の影響などに対して脆弱となり、日常的に遅延が生じている。本課題は、個別の遅延やトラブルへの効果的な対応の策定を越えて、一定規模の地域や国内全体（さらに将来には国際社会）の大規模輸送手段を一つのシステムと捉え、相互作用を考慮した上で全体最適を

実現、加えてトラブル時の対処が容易な堅牢性を有する運行方式によって安全性と効率性という相反する要求を両立する手法の確立を目指している。このような複雑な社会的課題に対して先端スーパーコンピュータを利用した取り組みはこれまでに例がなく、ポスト「京」開発事業において社会問題を対象とした新たな利用分野の創出を行う観点でも高い意義がある。

本課題の研究体制としては、東京理科大学（藤井孝藏教授）が航空機交通モデル構築・並列化・最適化等の HPCI 利用を担当、東京大学（西成活裕教授、柳澤大地准教授、都築怜理特任助教）が運航数理モデル化およびデータ解析を担当、電子航法研究所（伊藤恵理主幹研究員）が次世代の航空管制システムの設計およびモデル化を担当、大阪大学が大規模並列エージェントモデルの開発と表示技術を担当している。本稿ではその研究成果の一部を紹介する。

## 2. 航空交通流の大規模計算

ポスト「京」に向けたアプリケーション開発の基礎研究として、新しい CA（セルオートマトン）エージェントモデルの開発と並行して、プログラムの並列化とノード間通信手法の検討を行った。二つの手法の通信コストを単純に比較すると、一対一通信が集団通信に勝っていたが、各エージェントの計算負荷が高くなるモデルを開発中であることを考慮し各エージェントの計算負荷を高めた計算を行った結果、集団通信が優位となった。開発中のモデルでは、全ての航空機のデータが各航空機の移動に影響する。この点を考慮した結果、基本的には集団通信が優位と結論づけた。ただし、各エージェントが持つデータ量がプロジェクト進行と共に変わること、複雑性を緩和したモデルのシミュレーションプログラムも同時に開発することから、一対一通信への対応

も考慮しながらプログラム開発を進めている。

また、ポスト「京」に向けたアプリケーションの前段階として、電子航法研究所が開発している FIM 評価用の SPICA シミュレータを京コンピュータに導入した。FIM のシミュレーションにおける時間間隔と途中経過における時間間隔と速度、高度の推移について調べ、FIM を実行した航空機が滑走路に着陸する際には一定の時間間隔になることが確認できた。京コンピュータを使用したことにより、計算速度を 144 倍まで向上させることに成功し、従来 1 シナリオあたり 3 日間かかっていた計算をわずか 30 分にまで短縮した。この成果から、今後実施予定の様々なデータ取得のためのシミュレーションに要する時間を大幅に削減することが可能になった。

### 3. 航空交通流モデルの可視化プログラム開発

シミュレーションによって出力される大量の航空交通流データを理解するため、人間の視覚的な認知能力を活用したインタラクティブな可視化が有効となる。本章では航空交通流モデルとそのシミュレーション結果およびオープンデータとなっている実データを対象に、インタラクティブな探索操作によってデータ同化の検証や最適化結果の有効性を直観的に把握できる可視化システムを紹介する。

#### 3.1 航空交通流モデル

航空交通流は、個々の航空機の相互作用によって全体の挙動が変化する複雑な現象である。そのモデル化には、局所的でシンプルなルール設定で現象の再現が可能といわれるセルオートマトン (CA) を用いる。特にここでは、東京進入管制区内の到着時間間隔調整アルゴリズムとして、Step Back という概念を加えた CA モデル (SBCA) を利用する[1]。SBCA は、1 次元 CA を用いて各セルの中を粒子（航空機）が移動していくことを考え、それぞれの粒子に速度  $s$  (1 ステップに  $s$  セル進めるか) を割り振る。その上で前方間隔  $d$ 、加算距離  $BD$  を設定し、前方間隔の条件に従って、各粒子の総移動距離を加算していくモデルとなる。このモデルは、前方  $d$  個のセル全てが粒子に占領されているセルがある場合は、 $BD$

セル後ろに戻ることで総移動距離を加算していく。

また、粒子が後ろに戻る際、途中に他の粒子が存在する場合は戻ることが出来ずその場に留まるものとする。

図 1 上は SB モデルの時空図を示す。1 行目の白色の粒子は前方間隔（図中の薄灰色のセル）に粒子が存在するが、加算距離上（図中の濃灰色のセル）にも粒子が存在するため、次のステップでもその場に留まっている。それに対して、1 行目の黒色の粒子は前方間隔に粒子が存在し、加算距離上に粒子が存在しないため、次ステップで加算距離分後ろに戻っていることがわかる。

ここでは、日本全体を 8 つのエリアに分割し、それぞれのエリアを出発する航空機が東京管制区内で合流し、最終的に FAF (Final Approach Fix) にて二つのルートに合流して羽田空港に着陸するものと仮定する。具体的な模式図を図 1 下に示す。

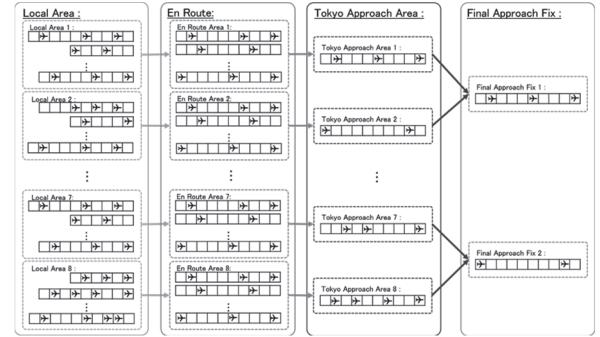
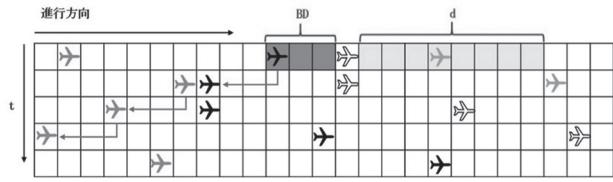


図 1 : SBCA のイメージ

#### 3.2 可視化プログラム

可視化プログラムの特徴は大規模な航空交通流データを高いフレームレートを維持しながらリアルタイムレンダリングし、インタラクティブな操作によって必要なデータを絞り込み、詳細に分析を行うことである。開発環境は C++ をベースにグラフィックライブラリとして OpenGL、GLFW、ImGui、NFD (Native File Dialog) を利用している。以下、可視化プ

ログラムを用いた分析のワークフローを説明する。

可視化プログラムを起動すると、画面にはメインメニューと 3D 地球儀モデルが表示される。3D 地球儀モデルはマウス操作によって任意軸方向の回転、拡大縮小が行える。また 3 次元空間内のカメラを自由に回転して傾けることもでき、自由な角度から 3D 地球儀モデルを表示できる。カメラの持つパラメータとしては投影方法(透視投影または平行投影)、焦点距離がありメインメニューから変更ができる。3D 地球儀モデルの表示オプションとして空港名と位置、ウェイポイント名と位置の表示・非表示をメインメニューから選択できる。

分析はまずメインメニューから航空交通流データのファイルを読み込む。ファイルは CSV 形式で CARATS Open Data のフォーマット[注 1]をベースとしており、時刻に対する便名と航空機の型式および緯度、経度、高度の位置情報からなる。データ読み込み時には全航空機の軌跡データが時系列で生成されるが、コンピュータのメモリ量に応じてそのタイムステップを 1 分単位、2 分単位、4 分単位の 3 段階で指定できる(デフォルトは 2 分単位)。また読み込みデータに指定されたタイムステップのデータが含まれない場合は線形補間が行われる。データが読み込まれると、先頭データの時刻における航空機の位置データから 3D 地球儀モデル上に 3D 航空機モデルが表示され、指定された時間単位で位置データを更新する(初期設定は画面が 1 フレーム進むごとに 1 分経過する。フレームレートが 60 fps の場合は 60 倍の再生速度となる)。ファイルが読み込まれるとサブメニューが表示されており、時系列データの範囲内でのタイムラインがあり、再生、停止、早送り、巻き戻し、任意の時刻への移動が可能となる。前述のマウスの操作によって自由なカメラ視点で航空交通流を表示できる。カメラを傾ければ航空機同士の高低差が視認できる。初期画面は 3D 地球儀モデル全体が表示されているが、画面を拡大して羽田空港周辺を表示すれば、空港内の道路や建物も衛星写真で表示でき、その上空の航空交通流を確認できる。マクロな視点からミクロな視点へ連続的な切り替わ

るときには、3D 航空機モデルのスケールは動的に変化させて航空機の状況を把握しやすいようにし、空港レベルのミクロな視点にくると 3D 航空機モデルが実スケールで表示される。このようにして 3D-CG をベースに航空機の高低差を確認できるとともに、各航空機を常に視認しやすいスケールを自動調整することで直観的な航空交通流の理解を支援する。

可視化プログラムには航空交通流を詳細に分析する主な機能として各航空機の航跡表示がある。表示オプションとしては、データに含まれている全航跡の表示と、表示中の時刻から遡った「任意の時間単位の長さ」での航跡表示がある。航跡を表示することで、ベクタリングやホールディングの発生状況が把握できる。特に時間単位の航跡表示は、近接する航空機同士の近接状態などを視覚的かつ定量的に表現することができる(図 2 参照)。



図 2：可視化プログラムの画面

大規模な航空交通流データから特定の航空機を抽出して表示するため、可視化プログラムでは任意の航空機の選択機能と表示・非表示機能がある。航空機の表示・非表示は、大きく「出発前」「フライト中」「到着後」の 3 パターンで切り替えることができる。

その中からさらにマウスによって選択した航空機の表示・非表示が設定できる。選択操作は、画面のある範囲をマウスでドラッグすることで、その矩形範囲内にある航空機に対し、「選択」「追加選択」「選択解除」を行う。この選択操作の有用な使い方として、CARATS Open Data から特定の空港の出発機、到着機のみを表示することが挙げられる。例えば、羽田空港への到着機のみを表示したい場合、タイムラインを最後まで移動させて、「到着後」の全航空機を表示させる。次に羽田空港に到着した航空機をマウスにより選択した後、表示する航空機を「フライト中」に変更することで、羽田空港への到着機のみが表示される。CARATS Open Data 自体には、出発空港、到着空港の情報が含まれていないが、可視化プログラムのGUI操作によって画面上で容易に航空機をフィルタリングすることができる。表示している航空機のデータのみを保存しておきたい場合は選択した航空機のみファイルの出力も可能である。

可視化プログラム上で行うことができる視覚的な分析方法として、シミュレーションデータと実データの比較、シミュレーション上での最適化前後の比較がある。そのために可視化プログラムは二つのファイルを開くと、3D 航空機モデルは一つの 3D 地球儀モデル上に重なって表示されるが、ファイルごとに別々のサブメニューが表示されている。サブメニューには、タイムライン、航空機と航跡の表示・非表示およびカラー設定があり、色分けして表示することで、一つの画面で二つのデータの軌跡を比較することができる。メインメニューのほうには、共通のタイムラインが表示されており、こちらで操作をすると二つのデータを同時にコントロールすることができる。さらに画面は左右に 2 分割することができ、それぞれの画面に二つのデータを表示して比較する機能がある（図 3 参照）。オプションによって、左右のカメラの位置を別々に操作するか、同時に操作するかを選択できる。画面分割状態で一つのファイルを開いたときは、左右に同じデータが表示されることになり、異なる視点から同じデータを見て分析する

という使い方もできる。

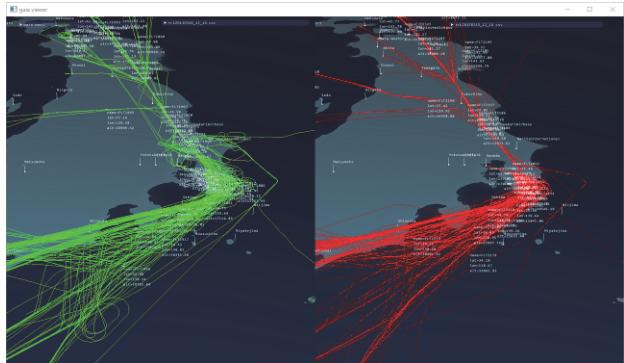


図 3：可視化プログラムによる航跡の比較

#### 4. おわりに

本課題は 2019 年度が最終年度であり、今後ポスト「京」時代およびその先に向けて、航空交通流や空港内の航空機の移動の最適化、構成要素が互いに影響し合う効果を分析・予測する技術を開発し、将来の運航・運用方式の基盤となる最適な交通輸送システムの提案に結びつける。さらにその先に、リアルタイムなスーパーコンピュータ利用の可能性を拓くことを目指している。

本稿で紹介した研究成果は、ポスト「京」萌芽的課題アプリケーション開発「複数の社会経済現象の相互作用のモデル構築とその応用研究（堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現）」（課題番号：170226）の助成を受けたものである。

#### 注

- (1) CARATS Open Data とは一定期間の航空機の位置・時刻情報等について、国土交通省航空局が保有するエンルート管制用レーターと羽田ターミナル管制用レーダーのデータを基に、座標変換等の処理を行ったものである。

#### 参考文献

- (1) 長岡慎介, 安齋洸也, 立川智章, 藤井孝藏, “ステップバックセルオートマトンを用いた羽田空港周辺の航空機渋滞モデルの初期的検討”, 第 64 回理論応用力学講演会(2017).

大規模計算機システム利用者  
研究報告

---

※「研究報告」では、利用者様が大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システムを、どのように利用しておられるのか報告いただいている。今回は、大規模計算機システム公募型利用制度採択者からの研究報告を掲載します。

- ・イオン液体の輸送物性解析に向けた分子力場の開発 ..... 13  
石井 良樹 大阪大学 大学院基礎工学研究科
- ・有限温度・有限密度2カラ一QCDの相図と超流動性の解明 ..... 17  
伊藤 悅子 慶應義塾大学 自然科学研究センター
- ・複合アニオンに起因した多軌道性と低次元性からうまれる強相関電子物性の研究 ..... 21  
越智 正之 大阪大学 大学院理学研究科
- ・共晶系 Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>-Ru の 3-Kelvin 相における界面超伝導の磁場誘起カイラル転移 ..... 25  
兼安 洋乃 兵庫県立大学 大学院物質理学研究科
- ・高温物質中におけるクオーク間相互作用の微視的伝達機構の解明 ..... 29  
北澤 正清 大阪大学 大学院理学研究科
- ・Z3 対称な量子色力学における格子シミュレーション ..... 33  
河野 宏明 佐賀大学 理工学部
- ・相対論的Vlasov-Fokker-Planck-Maxwell系に対する  
電荷・運動量・エネルギー完全保存スキームの開発と実証実験 ..... 37  
白戸 高志 大阪大学 レーザー科学研究所
- ・矯正歯科治療後の三次元顔形態を予測する人工知能システムの開発 ..... 41  
谷川 千尋 大阪大学 歯学部附属病院
- ・勾配流法を用いたNf=2+1 QCDのエネルギー運動量テンソルの研究 ..... 45  
谷口 裕介 筑波大学 計算科学研究センター

• Particle-in-cellシミュレーションによる 高強度レーザー生成プラズマアンジュレータに関する研究	49
中村 浩隆	大阪大学 大学院工学研究科
• 日本全国の位置情報付き仮想の個票合成手法の精緻化	53
原田 拓弥	青山学院大学 理工学部
村田 忠彦	関西大学 総合情報学部
• 多様な星形成環境における連星形成可能性	57
樋口 公紀	九州大学 大学院理学府
• 沿岸域観測データを同化した広領域・高解像度計算による東京湾の流動・水質の解析	61
松崎 義孝	国立研究開発法人 海上・港湾・航空技術研究所
• Effects of hole-boring and relativistic transparency on particle acceleration in overdense plasma irradiated by short multi-PW laser pulses	65
矢野 将寛	大阪大学 大学院工学研究科
• OCTPOUSを用いた格子QCDによるQCD相図の探索	71
若山 将征	大阪大学 核物理研究センター

# イオン液体の輸送物性解析に向けた分子力場の開発

石井 良樹

大阪大学 大学院基礎工学研究科 化学工学領域

## 1. はじめに

イオン液体の構造と物性を記述するための分子力場として、Lopes の OPLS 力場が一般的だが、その分子動力学 (MD) 計算ではイオン間の結合エネルギーを過大評価する。そこで多体効果を考慮する分極力場の開発が進められているが、この力場では計算コストが 1-2 衍程度大きくなる。一方で近年、密度汎関数 (DFT) 法に基づく第一原理計算と電荷解析法を組み合わせることで、凝縮系のイオンの電荷を自己無撞着に決定する方法論が考案された[1]。

そこで本研究では、その手法と Force Fitting 法を組み合わせることで、凝縮系の電荷分布と van der Waals (vdW) パラメータを同時に最適化する方法論を考案した。特に、凝縮系の第一原理 DFT 計算を参照系とし、その結果を再現するように Force Fitting 法を用いて最適化することで、新しいイオン液体系の分子力場の開発を試みた。

## 2. モデル開発に用いる第一原理計算の取扱い

イオン対は 40 とし、*NVT* アンサンブルの MD 計算を Gromacs 2016.5 を用いて実行した。イオン液体はイミダゾリウムイオン、ピロリジニウムイオン、アンモニウムイオンなどをカチオンとする系を対象とした。

MD 計算での平衡化した配置を用いて DFT 法に基づく第一原理計算を行い、イオン *i* の原子サイト *a* の電荷分布  $Q_{ia}$  を評価した。交換相関汎関数は PBE-GGA、基底関数は Gaussian Plane Wave とし、カットオフエネルギーは 500 Ry とした。分散力は DFT-D3 法を用いて評価した。この DFT 計算は、1 ノードでの計算コストが比較的低い CP2K (ver 4.1) を用いて実行した。得られた凝縮系の電子密度から電荷分布への変換手法には Blöchl 法[2]を採用した。それらの手法を用いて、周期境界条件をかけた液体系の第一

原理計算と、周期境界条件のない孤立分子系の第一原理計算をそれぞれ実行することで、溶媒和した分子の電荷分布  $Q_{ia}$  と分子間力  $\mathbf{F}^{\text{DFT}}_i$  を評価した。本研究の分子力場は、電荷分布に Blöchl 電荷を適用し [1]、vdW 相互作用は目的関数

$$\chi_F^2 = \frac{1}{N_s} \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_s} \sum_{i=1}^{N_i} \frac{|\mathbf{F}_i^{\text{DFT}} - \mathbf{F}_i^{\text{LJ}}|^2}{|\mathbf{F}_i^{\text{DFT}}|^2} \quad (1)$$

が最小化するように最適化した。

そのモデルを用いて再度 MD 計算を行い、電気伝導率と輸送係数を、

$$\sigma = \frac{e^2}{k_B V T} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6t} \left\langle \left| \sum_{\text{species}} \sum_i q_i \{ \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0) \} \right|^2 \right\rangle \quad (2)$$

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \left\langle \left| \int_0^t P_{\alpha\beta}(t') dt' \right|^2 \right\rangle \quad (3)$$

を用いてそれぞれ評価した。

## 3. 最適化した分子力場とその輸送係数解析

### 3.1 DEM シミュレーションと粒子数

図 1 に、[C<sub>2</sub>Clim]Cl 系の第一原理計算で得られた力と非分極分子力場の力の相關関係を示す。Force Fitting 法で最適化した非分極分子力場を従来の Lopes 力場[3]と比較すると、最適化した力場は第一原理計算を再現するように改善されていることが分かる。したがって、本研究の非分極分子力場の最適化プロセスは機能していることが期待される。

次に、Force Fitting 法を用いた非分極分子力場の最適化を繰り返して、電荷分布と輸送係数の収束性を検証した。この計算は、MD 計算を数 ns 実行して 50 個のスナップショットを作成し、その 50 個のスナップショットを用いて周期境界条件下での DFT 計算を実行した。また、その系を構成する各分子を、周期境界条件を外した孤立分子系の DFT 計算も並行して実行した。それらの 2 種の DFT 計算を、輸送係数評価の前に各最適化ステップで実施しており、

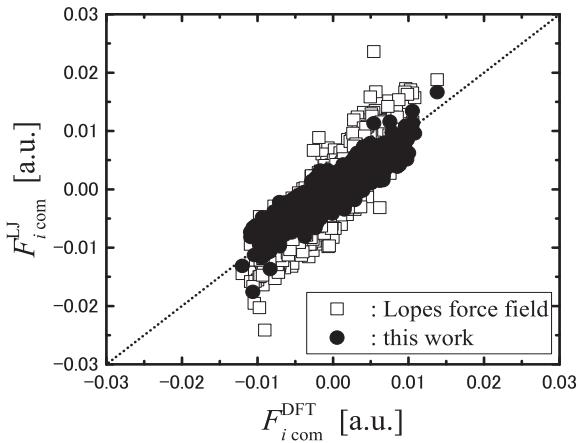


図 1 :  $[C_2C_1imCl]$  系で得られた DFT 計算と分子力場で得られた力の相関関係。Lopes 力場と Force Fitting 法によって最適化した非分極分子力場。

その計算コストは OCTOPUS 汎用 CPU ノードで 48 時間/node 程度となった。 $[C_nC_1im]Cl$  系で各最適化ステップの部分電荷と輸送係数を調べた結果を図 2 に示す。まず電荷分布のみを更新すると、およそ 3 ステップで収束し、輸送係数も収束する傾向を示すことが分かった。これは先行研究の結果と一致する [1]。続けて Force Fitting 法を用いた vdW パラメータ

の最適化を適用したところ、部分電荷も輸送係数も一定値に再度収束する傾向を示すことが分かった。したがって、本研究で提案している Force Fitting 法が一意の物性値を導くものであることが期待される。また Force Fitting 法を用いて最適化された部分電荷は、電荷分布のみの更新で得られた値よりも小さい値を示した。粘性率もそれに応じて減少し、一方で電気伝導率も増加したことから、Force Fitting 法を用いた非分極分子力場の最適化プロセスは、液体系の流動性を増加させることができることが分かった。これは、本研究の最適化プロセスが、凝縮系の分極状態を反映して、実効的に働くイオンの斥力が柔らかくなることと解釈される。

ここで、凝縮系で得られた分極状態の再現性を検証するため、液体系で得られた電荷分布と孤立分子系で得られた電荷分布を様々なイオン液体系で比較した。その尺度として、電荷移動を表す尺度と電荷分布の再配向を反映した分子分極を表す尺度として、次に示す二つの変数  $\Delta Q_{CT}^2$ 、 $\Delta \bar{Q}_P^2$  をそれぞれ評価した。

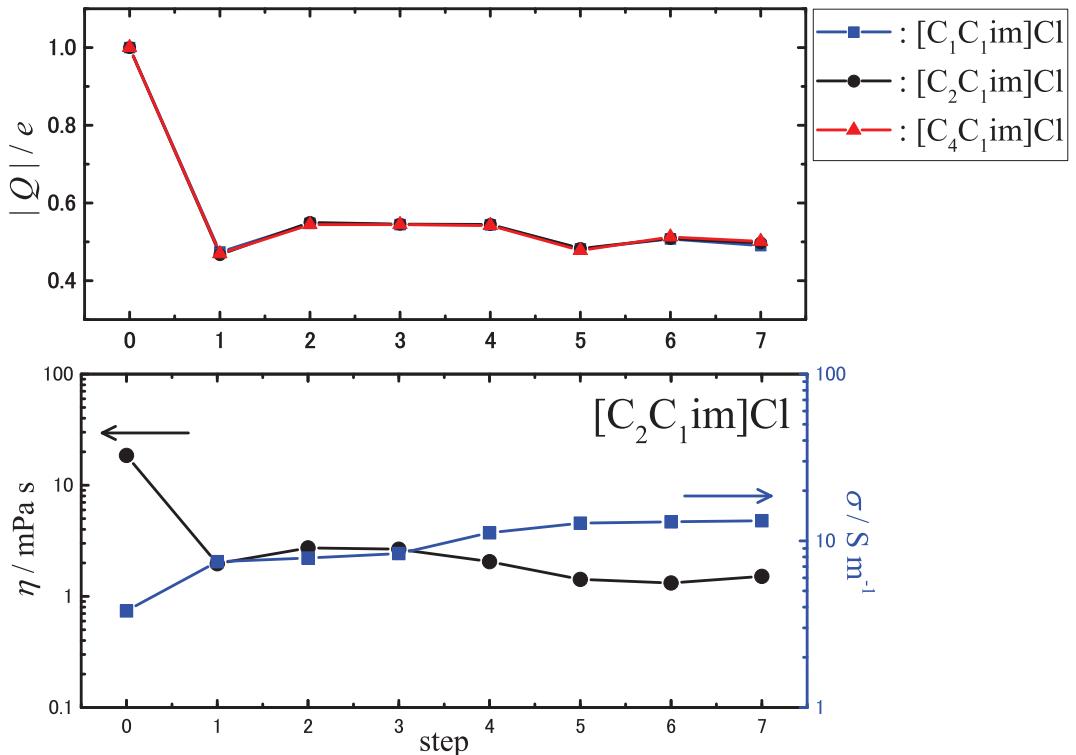


図 2 :  $[C_nC_1im]Cl$  系で得られた部分電荷の収束性（上図）と輸送係数の収束性（下図）。横軸は DFT 計算を繰り返したステップ数を表し、各ステップで非分極分子力場が更新されている。3 ステップまでは電荷分布だけを更新しており、それ以降では電荷分布と vdW パラメータの両方を更新している。

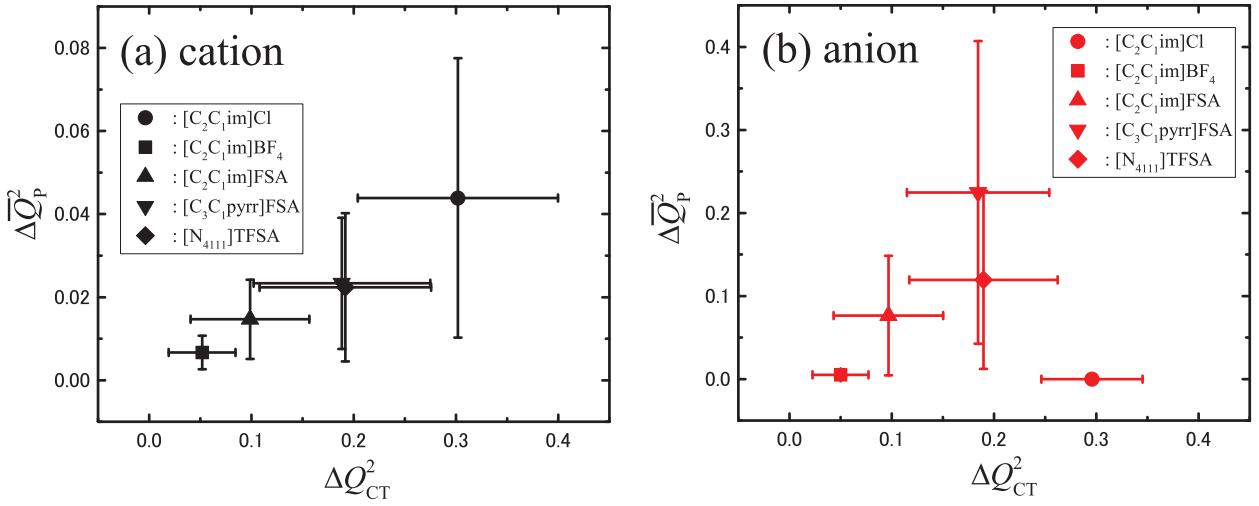


図3：様々なイオン液体系の(a)カチオンと(c)アニオンで得られた電荷移動変数 $\Delta Q_{CT}^2$ および分子分極変数 $\bar{Q}_P^2$ の相関関係。イオン液体は $[C_2C_1im]Cl$ 、 $[C_2C_1im]BF_4$ 、 $[C_2C_1im]FSA$ 、 $[C_3C_1pyrr]FSA$ 、 $[N_{4111}]TFSA$ とし、図中のエラーバーはそれぞれの変数の標準偏差を用いて描画した。

$$\Delta Q_{CT}^2 = \left\langle \left| \sum_a Q_{ia}^{\text{liquid}} - \sum_a Q_{ia}^{\text{gas}} \right|^2 \right\rangle \quad (4)$$

$$\Delta \bar{Q}_P^2 = \left\langle \frac{1}{N_a} \sum_a \left| \frac{Q_{ia}^{\text{liquid}}}{\sum_a Q_{ia}^{\text{liquid}}} - \frac{Q_{ia}^{\text{gas}}}{\sum_a Q_{ia}^{\text{gas}}} \right|^2 \right\rangle \quad (5)$$

これら2つの変数の相関関係を各イオン液体系で調べた結果を図3に示す。上記の表式で考慮する分子分極は、分子を構成する原子サイトの数が少ないほど粗くなるため、 $[C_2C_1im]Cl$ 系のように单原子分子となるClの分子分極を適切に表現するのは難しい。しかし、そのほかのイオン系においては、電荷移動

の程度が大きくなるほど、分子分極の程度は大きくなる傾向が確認できた。電荷分布の再配向は、孤立分子系からの電荷移動の程度が大きくなるほど生じやすいため、この傾向は理想的な挙動と考えられる。そのため本手法で最適化した分子力場は、凝縮系で生じる電荷移動と分子分極を平均的に取り入れた非分極分子力場となっていると期待される。

最適化した非分極分子力場を用いて $[C_nC_1im]Cl$ 系の輸送係数を評価し、実験値と比較した結果を図4に示す。粘性率は実験値を過小評価するが、電気伝

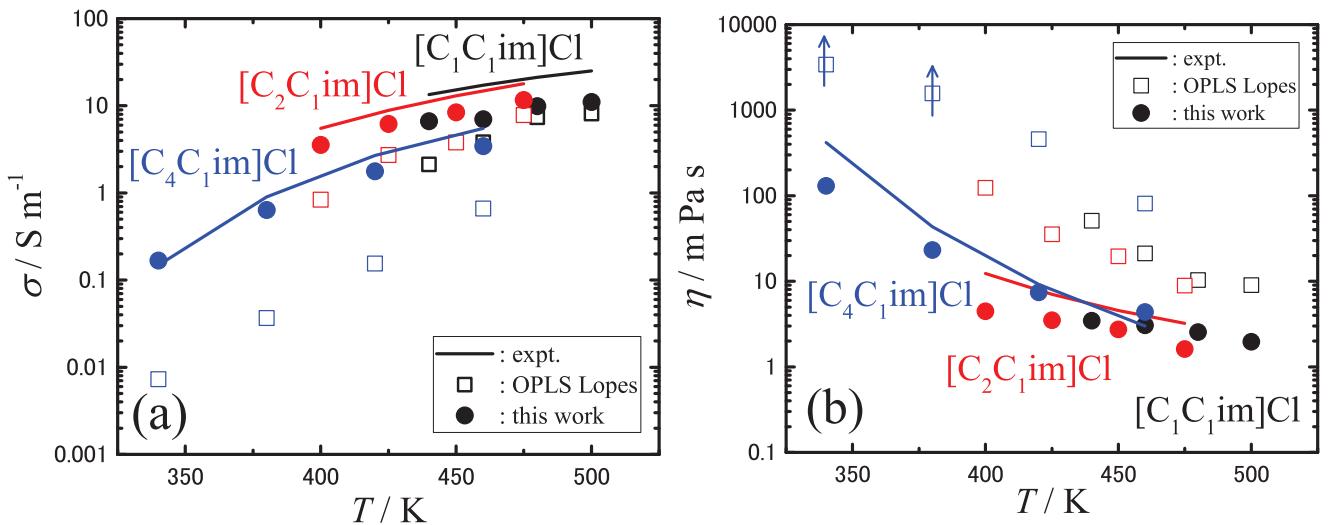


図4： $[C_nC_1im]Cl$ 系イオン液体における(a)電気伝導率と(b)粘性率の計算値と実験値。従来のOPLS力場と、本研究で最適化した最終ステップにおける非分極分子力場を用いて輸送係数を評価した。

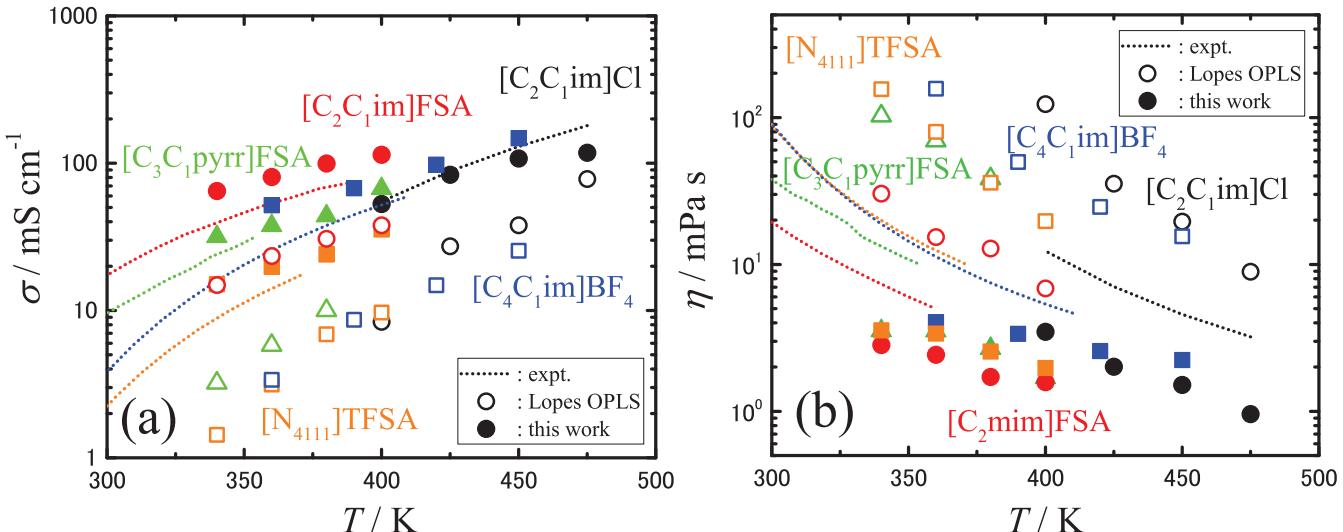


図 5：様々なイオン液体における(a)電気伝導率と(b)粘性率の計算値と実験値。従来の OPLS 力場と、本研究で最適化した最終ステップにおける非分極分子力場を用いて輸送係数を評価した。

導率は実験値と非常に良い一致を示し、従来の Lopes 力場の結果を非常によく改良できていることがわかった。したがって本研究で得られた分子力場は輸送挙動の推算に有効であると考えられる。さらに、様々なイオン液体体系で輸送係数の再現性を検証した結果を図 5 に示す。その結果、電荷分布のみを凝縮系で最適化した分子力場では、部分電荷の寄与が小さい  $\text{BF}_4^-$  などでは改善の程度が小さいことが分かった。一方で、vdW パラメータも同時に最適化すると、組成によらずに同程度の確度を示した。その粘性率は実験値をやや過小評価するが、電気伝導率は非常に良い一致を示した。したがって本研究における分子力場の最適化プロセスは、輸送係数の推算において有力なモデルとなりうることが分かった。

2018 年度 OCTOPUS 公募利用では、この分子力場の最適化プロセスから輸送係数の解析までの全ての計算を実行した。本研究は以下の学会にて発表し、4)の学会ではポスター賞を受賞した。

- 1) Yoshiki ISHII, Ryosuke ISHIZUKA, Nobuyuki MATUBAYASI, Advanced Non-Polarizable Force Field for Ionic Liquids Based on First-Principles DFT Calculation: Development and the Applications to Transport Properties, 日本化学会第 99 回年会, 兵庫, 2019 年 3 月 16-19 日.
- 2) 石井良樹, 石塚良介, 松林伸幸, イオン液体の輸

送特性解析に最適化した分子力学モデルの開発, 化学工学会第 84 回年会, 東京, 2019 年 3 月 13-15 日.

- 3) 石井良樹, 石塚良介, 松林伸幸, Blöchl 電荷解析と Force Fitting 法を用いたイオン液体の非分極力場の開発, 第 32 回分子シミュレーション討論会、つくば, 2018 年 11 月 28-30 日.
- 4) Yoshiki ISHII, Ryosuke ISHIZUKA, Nobuyuki MATUBAYASI, Transport properties of ionic liquids with advanced non-polarizable force fields based on first-principles calculations, Joint EMLG/JMLG Annual Meeting 2018, 名古屋, 2018 年 11 月 4-9 日.
- 5) 石井良樹, 石塚良介, 松林伸幸, 分子力学法による長鎖イミダゾリウムイオン液体の小分子吸収能と輸送物性解析, 化学工学会第 50 回秋季大会, 鹿児島, 2018 年 9 月 18-20 日.
- 6) 石井良樹, イオン液体の輸送物性における構造不均一性の役割の分子論的解明, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 10 回シンポジウム, 東京, 2018 年 7 月 12-13 日.

## 参考文献

- [1] R. Ishizuka and N. Matubayasi, *J. Chem. Theory Comput.*, **12**, 804 (2016); *J. Comput. Chem.*, **38**, 2559 (2017).
- [2] P. E. Blöchl, *J. Chem. Phys.*, **103**, 7422 (1995).
- [3] N. C. Lopes, J. Deschamps and A. H. Padua, *J. Phys. Chem. B*, **108**, 2038 (2004).

# 有限温度・有限密度 2 カラーQCD の相図と超流動性の解明

伊藤 悅子

慶應義塾大学 自然科学研究センター/大阪大学 核物理研究センター/高知大学 理工学部

## 1. はじめに

核力などの強い力が支配的な系のミクロな振る舞いを記述する量子色力学(QCD)は、第一原理計算である格子シミュレーションによる数値的研究により、現実のハドロン質量の再現[文献 1]や、有限温度相転移の定性的・定量的振る舞いの解明[文献 2]において成功をおさめてきた。この格子理論の手法は、知られている唯一の非摂動論的かつゲージ不变な定式化であり、理論的研究と実験結果の強い架け橋ともなっている。

しかしながら、これらの成功は、物質が存在することによる有限密度効果を無視できる場合に限られている。有限密度下における QCD の振る舞いは、中性子星や加速器実験における現実の物理系として存在しているにも関わらず、理論的な理解はもとより、現象論的にも未だよく分かっていない。その主要な理由は、上記の第一原理計算である格子シミュレーションには、有限密度にすると「符号問題」という本質的な困難があり、未だに完全な定式がないためである。

我々の研究の目標は、現実の QCD を記述する SU(3)ゲージ理論のトイ模型である「SU(2)ゲージ理論(2 カラーQCD)の有限温度・有限密度系」を格子シミュレーションで調べ、その相図の決定、さらには各相における系の性質を解明し、現実の有限温度・有限密度 QCD に対する知見を得る事である。

SU(2)ゲージ理論は、紫外領域では漸近的自由性があり、また(密度効果を無視した際の)低エネルギー領域では閉じ込めやカイラル対称性の自発的破れという非摂動論的性質を持つ。これは現実の QCD と同じである。一方で、有限密度 2 カラーQCD 理論は、前述の「符号問題」がないため、格子計算が実現可

能である。

これまでに、有効模型を用いた研究と、我々のグループの研究を含む第一原理計算による研究から下図 1 の様な相図が描けるとわかつってきた。

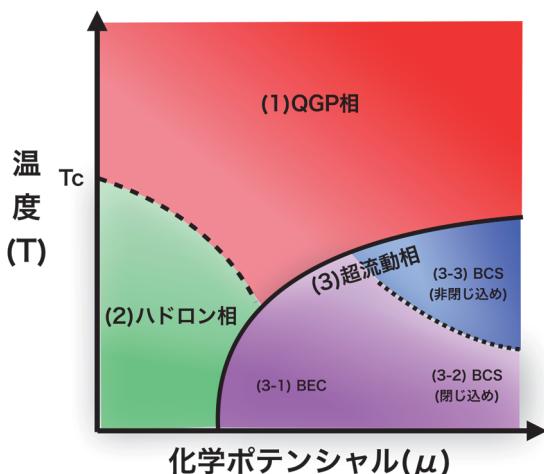


図 1: 有限温度・密度 2 カラーQCD の相構造予想図

ここで、各相の性質は、

### (1) クォーク・グルオン・プラズマ (QGP) 相

閉じ込めなし、カイラル対称性が回復し、ダイクオーケン縮もなし

### (2) ハドロン相

閉じ込めあり、カイラル対称性の自発的破れ、ダイクオーケン縮なし

### (3) 超流動相

ダイクオーケン縮あり

(3-1) ボーズアイシュタイン凝縮 (BEC) 相

(3-2) BCS 相 (閉じ込め、フェルミ面の出現)

(3-3) BCS 相 (非閉じ込め、フェルミ面の出現)

で特徴づけられると考えられている。

しかしながら

●QCD 型理論における「超流動相」の決定的な証拠があるか?

●特に低温高密度下でのトポロジーなど非摂動論的な性質はどうなっているか？  
という点が未だに不明であり、第一原理計算である格子計算の結果が待たれている状況である。

これまでに、SU(2)ゲージ理論に対する数値計算による研究として、スタッガードフェルミオンを用いた4フレーバーに関する研究[文献3]や、2フレーバーに関してWilsonフェルミオンを用いた研究[文献4,5]、スタッガードフェルミオンを用いた研究[文献6]も行われた。しかし、特に低温・高密度領域についての研究は乏しく、文献によって「非閉じ込めのBCS相」が存在するか否かで結論が分かれたり、定性的な理解すら未だ得られていない。

## 2. 符号問題とシミュレーションの不安定性問題

前述のように、ゼロ化学ポテンシャルではQCD(SU(3)ゲージ理論)と類似の非摂動論的性質を持つ、SU(2)ゲージ理論では基本表現が擬実になるために符号問題がなく、第一原理計算が可能である。一方で、符号問題のないSU(2)ゲージ理論においても、低温高密度領域の第一原理計算は困難であることが知られている[文献3,4]。その理由は、フェルミオンの化学ポテンシャル( $\mu$ )が最も軽いハドロンの質量( $m_{PS}$ )の半分を超えると、ダイナミカルにフェルミオン-反フェルミオンの対生成・対消滅が激しく起こり、シミュレーションが不安定になる事にある。また、超流動性を特徴付ける「ダイクォーク凝縮」がダイナミカルに生成されることとも関連する。

## 3. 低温高密度領域でのシミュレーションの実行可能性

今回の研究では、連続極限に近くなるように改良された「岩崎ゲージ作用」と、「ウィルソン格子フェルミオン」を用いた格子作用を用いてシミュレーションを実行した。さらに、高密度領域のシミュレーションの不安定性を回避するため、作用に「ダイクォーク源」の項を導入した。これは[文献3,5]で提案された方法であり、我々は独自にウィルソンフェル

ミオンに対してこの項を取り入れた（ラショナル）ハイブリッドモンテカルロ法のコードを構築した。そして、昨年(2017)度までに、ダイクォーク源を導入した我々の計算手法が、実際に低温高密度領域まで実行可能であることを確認した。

## 4. 相図の決定とトポロジー

今年度は、まず、くり込んだハドロン質量の比( $m_{PS}/m_V$ )が一定となる格子上の質量パラメータ( $\kappa$ )を様々なbetaに対して決定し、その上でゼロ化学ポテンシャルの時のカイラル相転移温度( $T_c$ )の決定、グラディエントフロー法による格子パラメータ(beta)と格子間隔の関係式の決定を行った。それを用いて、 $T=0.43T_c$ (約90MeV)の超低温において、有限密度領域でどのように相が変わって行くかを調べた。

各相の決定には、

- 閉じ込めの秩序変数である「ポリヤコフループ」
  - 超流動性の秩序変数である「ダイクォーク凝縮」
  - フェルミ面の出現を測る「クォーク数密度」
- の3つの物理量を主に測定した。

### 4.1 相図の決定

$T=0.43T_c(\beta=0.8, \kappa=0.1590, N_s=N_t=16)$ における、ポリヤコフループとダイクォーク凝縮の結果を図2に示す。

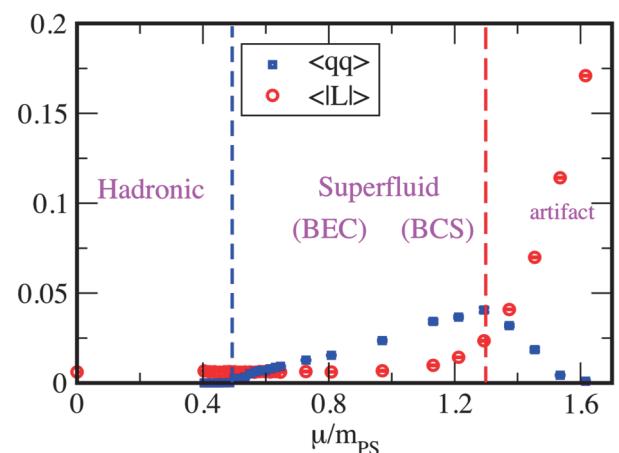


図2:  $T=0.43T_c$ におけるポリヤコフループ(赤)とダイクォーク凝縮(青)の化学ポテンシャル依存性

まず、ダイクォーク凝縮(青)に注目すると、計算不安定性が現れる  $\mu/m_{PS} \sim 0.5$  付近からダイクォーク凝縮の真空期待値がノンゼロとなり、超流動性が現れることができた。この臨界点付近のスケーリング則を調べたところ、カイラル摂動論のリーディングオーダーの値( $\sim 0.5$ )と無矛盾であることもわかった。

次に、ポリヤコフループ(赤)は、非常に高密度領域になるとその値がノンゼロとなり、一見「非閉じ込め」となる事がわかった。この時のポリヤコフループの感受率を調べると  $\mu/m_{PS} = 1.45$  付近でピークを持つ。しかしながら一方で、ダイクォーク凝縮の値は、それより低密度領域である  $\mu/m_{PS} = 1.29$  付近でピークを持ち、より高密度領域では値が小さくなる。このダイクォーク凝縮の振る舞いは格子単位で記述した化学ポテンシャルが格子間隔と同じくらいになる( $a\mu \sim 1$ )と、クォークのプロパゲータの中で化学ポテンシャル項が支配的になりクエンチ近似した場合と同じような状況になることによるアーティファクトと考えられる。

この振る舞いは、これまでにスタッガードフェルミオンを用いた文献[3,6]には見られたが、我々と同じウィルソンフェルミオンを用いた文献[5]には見られなかった。我々の研究では、ダイクォーク凝縮を測定する際に、「ダイクォーク凝縮源に関する再重みづけ法」を新たに導入することで、相図を得るために必要なダイクォーク凝縮源パラメータの外挿を精密にとることができ、この結果を得た。

次に、超流動相の中で、「平均的なクォーク間距離が系の相関長より長い BEC 相」と「フェルミ面が形成されている BCS 相」の 2 種類があるかを調べた。フェルミ面が形成されると、クォーク数密度( $n_q$ )がほぼツリーレベルのプロパゲータから計算できる値( $n_q^{tree}$ )に一致すると考えられる。ツリーレベルの値で規格化したクォーク数密度演算子の期待値を図 3 に示す。

密度を上げていくと、超流動性が現れる  $\mu$

$/m_{PS} \sim 0.5$  でクォーク数密度はノンゼロになり始め、 $\mu/m_{PS} \sim 0.73$  付近でツリーレベルの値と一致し、BCS 的描像が良いことがわかる。以上をまとめると  $T=0.43T_c$  では、

- 0 <  $\mu/m_{PS} < 0.50$  でハドロン相
- $0.50 < \mu/m_{PS} < 0.73$  で BEC 相
- $0.73 < \mu/m_{PS} < 1.29$  で BCS 相(閉じ込め)
- $1.29 < \mu/m_{PS}$  でアーティファクト相

が現れることができた。

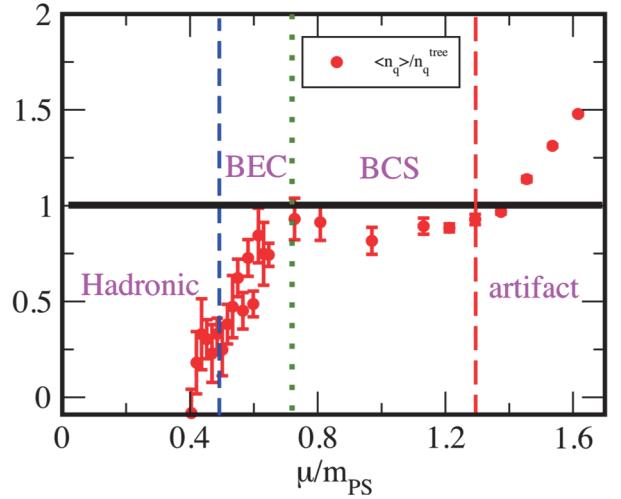


図 3:  $T=0.43T_c$  におけるクォーク数密度の化学ポテンシャル依存性と対応する相

## 4.2 トポロジーの温度・密度依存性

次に、この  $T=0.43T_c$  における各相のトポロジカル感受率を調べた。図 2 にも示したポリヤコフループの値とトポロジカル感受率の結果を図 4 に示す。

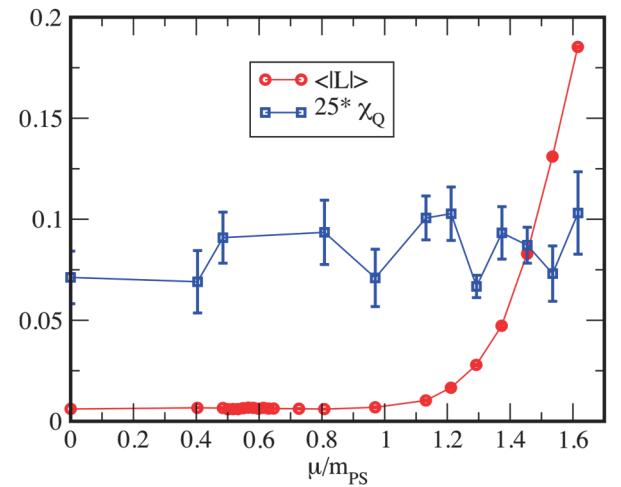


図 4:  $T=0.43T_c$  でのポリヤコフループ(赤)とトポロジカル感受率(青)の密度依存性

この図から、トポロジカル感受率はハドロン・BEC・BCS のいずれの相でも誤差の範囲ではほぼ一定であることがわかる。一方でこれまでの先行研究では、ポリヤコフループの値が大きくなる高密度領域では、感受率が小さくなるという結果が得られていた。我々は、これは温度に依存するのではないかと考え、 $T=0.87T_c$ ( $\beta=0.8, \kappa=0.1590, N_s=32, N_t=8$ )でも同じことを調べた。その結果が図 5 である。これは先行研究の結果と定性的に一致する。

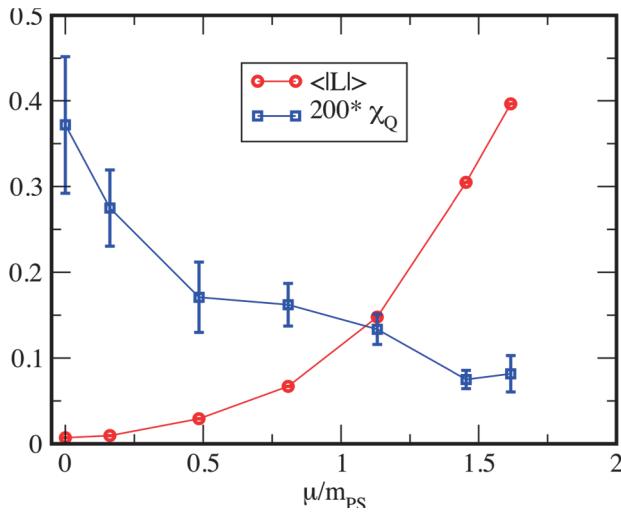


図 5:  $T=0.87T_c$  でのポリヤコフループ(赤)とトポロジカル感受率(青)の密度依存性

この  $T=0.87T_c$  で有限温度領域の相構造を調べると、超流動性の秩序変数であるダイクオーケ凝縮がどの密度領域でもゼロとなり、この温度の高密度領域では、ハドロン相から QGP 相へ転移していることがわかった。

つまり、トポロジカル感受率の密度依存性は、たとえ  $T_c$  より低い温度であっても、その密度領域に現れる相構造に強く依存しているという知見を得た。

## 5. まとめ

有限密度 QCD で最も困難とされる「高密度領域」の定性的な理解を得るために、符号問題のない  $SU(2)$  2 フレーバー理論に注目し、さらに高密度領域まで第一原理計算を可能とするために、ダイクオーケ源を導入する手法を用いて第一原理計算を行った。

特に 2018 年度は、低温有限密度領域における相構

造とトポロジーの振る舞いに注目し、「 $T=0.43T_c$  という超低温領域では高密度領域には非閉じ込めの超流動相が現れないこと」「低温高密度領域のトポロジカル感受率の振る舞いは  $T_c$  より低温でも、さらに温度によって定性的な振る舞いが変わること」の大きく 2 点の新しい知見を得た。

本研究は、高知大学飯田圭氏、石黒克也氏、李東奎氏との共同研究に基づく。

2017 年度に、若手・女性研究者支援萌芽枠に採用していただき、2018 年度は、引き続きサイバーメディアセンター(CMC)の公募型利用制度ならびに学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究(JHPCN)にも採択され、研究を行った。また、CMC の公募型支援枠だけではなく、RCNP による無償サポートによって、CMC の計算資源を利用した。RCNP ならびに核物理コミュニティのサポートにも感謝します。

最後に、本研究を遂行するにあたって、グラディエントフローのコードは、CMC の GPU チェレンジの制度を利用し、非常に高速化されたコードの提供をいただいた。また、日頃からシステムの運営を支えてくださっている方々（寺前さん、勝浦さん）には、いつも迅速かつきめ細かいサポートを頂いており深く感謝致します。

## 参考文献

- (1) S.Durr et al., Science 322:1224-1227,2008
- (2) Y.Aoki et al., Nature 443 675 (2006)
- (3) J.B.Kogut et al., Nucl.Phys. **B642** (2002) 181-209
- (4) S.Muroya et al., Phys.Lett.**B551** (2003) 305-310
- (5) S.Hands et al., Eur.Phys.J. C48 (2006) 193
- (6) V.V.Braguta et al., Phys.Rev.D **94** (2016) no.11, 114510

# 複合アニオンに起因した多軌道性と低次元性からうまれる 強相関電子物性の研究

越智 正之

大阪大学 大学院理学研究科 物理学専攻

## 1. はじめに

酸化物はその豊かな物性から、物性物理学において中心的な研究対象であり続けている。たとえば強相関電子物性に関しては、遷移金属酸化物の研究が非常に活発に行なわれている。そこでは遷移金属元素を変えることで物性が大きく変化することが知られているが、近年、アニオン（酸素）自由度をコントロールすることが注目を集め始めている。具体的には、酸素や窒素などのアニオンを複数有する化合物、複合アニオン化合物に関する研究の進展が著しい[1]。

本研究では特に、遷移金属酸化物において酸素が部分的に水素置換された、遷移金属酸水素化物に注目する。水素置換による効果の一つはキャリアアドープである。たとえば鉄系超伝導体において、酸素のフッ素置換では実現できないような高濃度のキャリアアドープが水素置換によって可能となり、新しい超伝導相と反強磁性相の発見に繋がった[2,3]。また、遷移金属元素の  $t_{2g}$  軌道と水素の  $s$  軌道は対称性が異なるため、酸化物において存在していた結合が酸水素化物では失われる[4-6]。このことに起因して、酸水素化物の電子状態は低次元性が増強されている。一般に強相関物性と次元性の関係は深く、その観点からもこの特徴は興味深い。また、遷移金属元素の置かれる環境が異方的になる、すなわちある方向には酸素元素が配位し、ある方向には水素原子が配位している状況が実現する。その結果として、電子軌道の伸びている方向次第で、その軌道エネルギーが異なることになる。このような環境の変化も、モット絶縁化やそれに付随した磁気秩序などの要因となりうることが知られており、やはり強相関物性という観点から興味深い。

本研究の対象物質である  $\text{Sr}_{n+1}\text{V}_n\text{O}_{2n+1}\text{H}_n$  は、

Ruddlesden-Popper 相にある遷移金属酸化物  $\text{Sr}_{n+1}\text{V}_n\text{O}_{3n+1}$  において一部の酸素が水素置換された化合物であり、水素が秩序配列することが知られている[4-6]。また、反強磁性秩序の存在[4]や、圧力誘起の金属絶縁体転移[6]も実験的に報告されており、強相関物性の舞台としても興味深い。水素が秩序配列しているため理論的に扱いやすい上、様々な強相関手法を適用してきたバナジウム酸化物との比較も可能であり、まだ性質のよくわかっていない強相関複合アニオン化合物の電子状態を調べるために格好の対象であるといえる。しかし強相関物性を調べるという観点からすると、その電子状態をよく記述する「低エネルギー有効模型」が必要不可欠である。本研究[7]は、その低エネルギー有効模型を第一原理的に構築し、さらにはそれを解析すること目的とするものである。ここでは模型構築の部分に関して、これまでに得られた成果を報告する。

## 2. 計算手法

まず Quantum ESPRESSO パッケージ[8,9]を用いた第一原理バンド計算を行なった。そのバンド構造から出発したワニエ関数の構成、および constrained RPA[10]によるハバード模型の有効相互作用の評価には、RESPACK コード[11-15]を用いた。本研究で用いた計算コードはいずれも公開されているフリーのソフトウェアである。最も計算負荷の大きい、constrained RPA における分極関数の計算では、MPI 並列と OpenMP 並列が併用されている。 $\text{Sr}_{n+1}\text{V}_n\text{O}_{2n+1}\text{H}_n$  および  $\text{Sr}_{n+1}\text{V}_n\text{O}_{3n+1}$  について、 $n = 1$  の場合と  $n = \infty$  の場合、それぞれで以降の計算を行なったが、ここでは紙面の都合上、 $n = \infty$  の場合に限定して紹介する。その計算には、OCTOPUS における数百 core 並列の計算を複数回要した。

### 3. 結果

#### 3.1 結晶構造

図1にSrVO<sub>3</sub>およびSrVO<sub>2</sub>Hの結晶構造を示した。ここで示している結晶構造は全て周期的に配列して固体を形成する。酸化物であるSrVO<sub>3</sub>においては、バナジウム元素はどの方向も酸素原子に取り囲まれていることがわかる。つまり、この物質ではx, y, z方向がいずれも等価である。一方、酸水素化物であるSrVO<sub>2</sub>Hにおいては、z方向の酸素だけが水素原子で置換されている。このことによって、z方向への電子の移動積分が強く抑制される（低次元性が生じる）ほか、d<sub>xy</sub>軌道とd<sub>xz/yz</sub>軌道が非等価なものとなる。これらはいずれも酸水素化物特有の性質である。

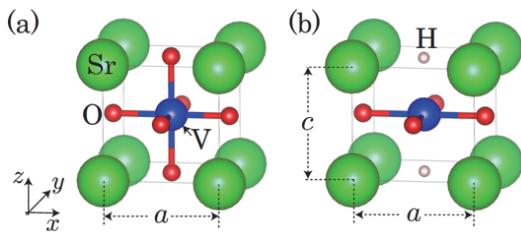


図1：(a) SrVO<sub>3</sub> と(b) SrVO<sub>2</sub>H の結晶構造。描画には VESTA[16]を用いた。

#### 3.2 バンド構造

次に、各物質の電子バンド構造を図2に示す。ここで、黒い点線は第一原理計算によって得られるバンド分散全体を表しており、赤い実線は、ここで注目しているバナジウムのt<sub>2g</sub>軌道の形成するバンド（より正確には、対応するワニエ関数の抽出によって得られるtight-binding模型を用いて描かれるバンド分散）を示している。詳細は割愛するが、例えば図2(b)において、Γ-Z上でt<sub>2g</sub>軌道のバンド分散が殆どない（平らに近い）ことがわかる。これは、上でみたようにz方向に結合が分断されることによる低次元性の表れである。また、低いエネルギーに存在するバンドの塊は、酸素や水素といったアニオンの作るバンドである。赤実線で描かれたバナジウムのt<sub>2g</sub>バンドよりも少しエネルギーの高いバンドはバナジウムのe<sub>g</sub>バンドにあたる。酸化物においてはt<sub>2g</sub>バンドとe<sub>g</sub>バンドはエネルギー的に分離しているが、酸水素化物ではエネルギー的に接近し、バ

ンドが交わっていることがわかる。これは、水素の方向に伸びているe<sub>g</sub>軌道がエネルギー的に安定化していることに対応する。それによる帰結については次の節で言及する。

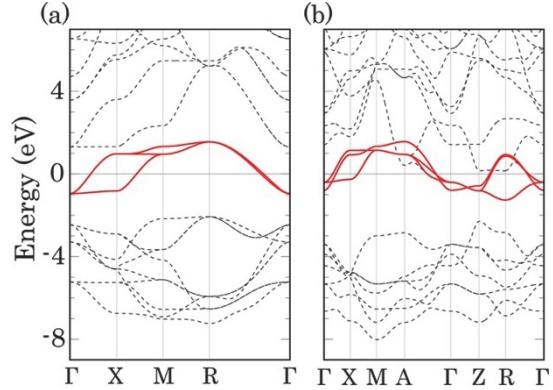


図2：(a) SrVO<sub>3</sub> と(b) SrVO<sub>2</sub>H のバンド構造。

#### 3.3 有効相互作用

先に求めたバンド構造を用いて、constrained RPAによって有効相互作用を求めた。ここで有効相互作用を求める際に重要な条件の一つとして、低エネルギー有効模型にどの自由度を含めるか、ということがある。例えば、dp模型における有効相互作用を求める際は、V-d軌道とO-p軌道以外の電子軌道は、有効模型の自由度として露わに取り扱われることはないが、その代わりに有効相互作用の遮蔽（によるモデルパラメータの変更）という形で間接的に取り込まれることになる。一方、V-d軌道とO-p軌道同士の多体効果については、有効模型を解く際に取り入れるべきものであり、モデルパラメータの変更（遮蔽効果による相互作用の変調）という形で取り入れることはない。

ここではまず、dp(s)模型から出発する。この模型は、V-d軌道、O-p軌道、そして酸水素化物ではH-s軌道を加えた軌道が、模型の自由度として扱われる。得られた値の詳細は割愛する（文献[7]を参照されたい）が、酸水素化物のほうがより強く遮蔽効果が生じることが明らかになった。これは、おそらく水素の安定化によってバンド同士の（特にV-d軌道とそれよりエネルギーの高い軌道の）交わりが強まったためであると考えられる。

次に、d模型を考える。この系はV-d軌道のみが

模型自由度として取り扱われるため、アニオンの原子軌道が遮蔽効果に関わることになる。その結果、相互作用の強弱が逆転することが明らかになった。すなわち、酸水素化物において遮蔽効果がより弱い。これは、図 2(b)のバンド図を見ると理解できる。実際、エネルギーの深いアニオンバンドと V-*d* バンドのエネルギー的な隔たりが、図 2(a)に示した酸化物よりも大きくなっていることがわかる。これは水素の存在によって酸素軌道がより強く安定化したためであると考えられる。そして、エネルギー的に隔たりが大きいほど、電子間斥力の遮蔽効果は弱まる。このような、酸素バンドと *d* バンドの相対エネルギーの変化を通じた遮蔽効果の強弱は、酸化物において理論的に指摘されている[17]。

最後に、*t*<sub>2g</sub> 模型について考える。この模型では、V-*t*<sub>2g</sub> 軌道のみが模型自由度として取り扱われる。ちょうど図 2において、赤実線で示しているバンドのみが模型に含まれ、それ以外のバンド全てが相互作用の遮蔽に関与する、ということになる。表 1 に得られた相互作用パラメータを示した。ここで *t<sub>i</sub>* (*i* = *x*, *y*, *z*) は各方向への最隣接の移動積分、 $\Delta$  は異軌道間の軌道エネルギー準位差を表している。例えば *d*<sub>xy</sub> 軌道はどの場合についても *x*, *y* 方向に結合が強い (*t* の絶対値が大きい) が、SrVO<sub>2</sub>H では水素の配位している *z* 方向への移動積分は *d*<sub>yz</sub> 軌道であっても小さい。これが先に述べた低次元性である。少し脱線したが、相互作用パラメータについては *U*<sup>scr</sup> が遮蔽相互作用、*U*<sup>bare</sup> は遮蔽効果を考えない場合の裸のクーロン斥力を表す。ここでは前者にだけ注目すると、酸水素化物において *U*<sup>scr</sup> が小さい、すなわち遮蔽効果が強く効いていることがわかる。つまり、ここで再び相互作用の（あるいは遮蔽効果の）強弱が逆転したことになる。これは、前節において述べたように V-*t*<sub>2g</sub> バンドが V-*e*<sub>g</sub> バンドと強く交わっていることから、*e*<sub>g</sub> バンドが強く遮蔽効果に関与したことを見ている。

このように、酸水素化物ではかなり特殊（でかつ複雑）な遮蔽効果が起きていることが確かめられた。一般に有効模型を解いて物質の電子状態を解析する

際は、「どの有効模型を選択するか」がしばしば重要になる。ここで見た非自明な遮蔽効果は、今後の解析においてその点に注意する必要があることを示唆している。なおこのようにバンドが強く交わっている (entangle している、という) 場合の constrained RPA は取り扱いが unique ではないため、得られた結果にはやや曖昧さが残ることには留意されたい。今回用いた手法はやや相互作用を過剰に遮蔽する傾向があるといわれているため、その効果もあるだろうと思われる。

	<i>t<sub>x</sub></i>	<i>t<sub>y</sub></i>	<i>t<sub>z</sub></i>	$\Delta$	<i>U</i> <sup>scr</sup> <i>t</i> <sub>2g</sub>	<i>U</i> <sup>bare</sup> <i>t</i> <sub>2g</sub>
SrVO <sub>3</sub>	<i>d</i> <sub>xy</sub>	-0.26	-0.26	-0.03	-	3.42 15.78
SrVO <sub>2</sub> H	<i>d</i> <sub>xy</sub>	-0.25	-0.25	-0.04	-	3.00 16.04
	<i>d</i> <sub>yz</sub>	0.01	-0.42	0.10	-0.45	2.60 15.18
SrCrO <sub>3</sub>	<i>d</i> <sub>xy</sub>	-0.24	-0.24	-0.02	-	2.97 16.18

表 1: いくつかの物質において、本研究で第一原理的に決定されたモデルパラメータ。

#### 4. おわりに

本研究ではバナジウム酸水素化物の有効模型を第一原理的に構築した。特に、水素置換に起因した電子の移動積分の低次元性を明らかにしたほか、constrained RPA に基づいた有効相互作用の評価を行なった。その結果、水素の存在による、特異な電子間斥力の遮蔽効果が生じていることが明らかになった。今後、この有効模型を用いて本物質の強相関効果の解析を進めていきたい。本研究は、新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」の公募研究（課題番号：17H05481）による助成のもとで行なわれた。

#### 参考文献

- (1) H. Kageyama, et al., *Nature Commun.*, **9**, 772, (2018).
- (2) S. Iimura, et al., *Nature Commun.*, **3**, 943, (2012).
- (3) M. Hiraishi, et al., *Nature Phys.*, **10**, 300, (2014).
- (4) F. D. Romero, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, 7556 (2014).
- (5) J. Bang, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 7221 (2014).
- (6) T. Yamamoto, et al., *Nature Commun.*, **8**, 1217 (2017).

- (7) M. Ochi and K. Kuroki, Phys. Rev. B, **99**, 155143 (2019).
- (8) P. Giannozzi, et al., J. Phys: Condens. Matter, **21**, 395502 (2009).
- (9) P. Giannozzi, et al., J. Phys.: Condens. Matter, **29**, 465901 (2017).
- (10) F. Aryasetiawan, et al., Phys. Rev. B, **70**, 195104 (2004).
- (11) T. Fujiwara, S. Yamamoto, and Y. Ishii, J. Phys. Soc. Jpn., **72**, 777 (2003).
- (12) Y. Nohara, S. Yamamoto, and T. Fujiwara, Phys. Rev. B, **79**, 195110 (2009).
- (13) K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn., **77**, 093711 (2008).
- (14) K. Nakamura, Y. Yoshimoto, T. Kosugi, R. Arita, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn., **78**, 083710 (2009).
- (15) K. Nakamura, Y. Nohara, Y. Yoshimoto, and Y. Nomura, Phys. Rev. B, **93**, 085124 (2016).
- (16) K. Momma and F. Izumi, J. Appl. Crystallogr., **44**, 1272 (2011).
- (17) L. Vaugier, H. Jiang, and S. Biermann, Phys. Rev. B, **86**, 165105 (2012).

# 共晶系 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ -Ru の 3-Kelvin 相における 界面超伝導の磁場誘起力イラル転移

兼安 洋乃

兵庫県立大学 大学院物質物理学研究科

## 1. はじめに

$\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ -Ru(SRO-Ru) は、超伝導体である  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ (SRO) (図 1 右図) に、 $\mu\text{m}$  サイズの Ru 結晶 ( $T_c=0.5\text{K}$ ) が析出した共晶系超伝導体 (図 1) である [1,2]。SRO-Ru は電気抵抗において  $T_{\text{onset}}=3\text{K}$  付近より不均一な超伝導転移を示すことなどから、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  のバルク超伝導 ( $T_c=1.5\text{K}$ ) とは異なった Ru 結晶界面付近に局在した界面超伝導が生じている可能性が実験から報告されている [1,3,4]。この 3-Kelvin (3K) 相と呼ばれる界面超伝導について、Ru 金属結晶界面近くに non-chiral 界面状態が生じ、温度を下げると chiral 界面状態になる機構が、ゼロ磁場で SRO のバルク状態を chiral 状態と仮定した場合の理論研究から説明されている [5]。

本研究では、この界面超伝導相において、 $\text{RuO}_2$  面に対する垂直磁場により引き起こされる non-chiral 界面状態からの chiral 状態の安定化と、それに伴う常磁性超伝導電流の生成のメカニズムを説明する。又、これら垂直磁場中の振る舞いは、面内磁場では起こらないことを示す。この磁場方向による chiral 転移の違いは、実験での 3K 相でのトンネル微分コンダクタンスにおけるゼロバイアス異常の磁場-温度依存性と定性的に整合することから、3K 相が低温で漸近する SRO バルク超伝導状態が chiral 状態である可能性を述べる。

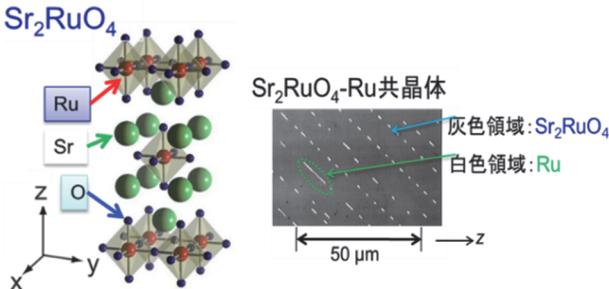


図 1: (右図)  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の結晶構造 [2] と、(左図)  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ -Ru 共晶体の光学顕微鏡写真 [1]

## 2. $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ -Ru の 3-Kelvin 相

### 2.1 Ru 結晶近くに局在した界面超伝導

SRO のバルク超伝導では、Kerr 効果や  $\mu\text{SR}$  による内部磁場の測定により [6,7]、 $T_c$  以下で自発磁化が生じることが報告されている。このことから、SRO の超伝導状態について、時間反転対称性が破れた chiral 状態を仮定する。この chiral バルク状態に界面超伝導が低温で漸近的につながると考えて、さらに Ru 金属界面付近で高くなる超伝導転移の距離依存性を設定する。この 3K 相モデルにおいては、 $T_{\text{onset}}=3\text{K}$  近くで non-chiral 界面状態が生じ、そこからさらに温度が低くなると chiral 界面状態に変化する [5]。

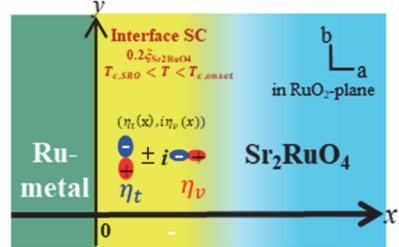


図 2: Ru 金属結晶付近に局在した界面超伝導の秩序変数

この温度低下による chiral 転移を考えるために、chiral  $p$  波 ( $p_x + ip_y$ ):  $\mathbf{d} = \hat{\mathbf{z}}(\eta_x k_x + i\eta_y k_y)$  及び chiral  $d$  波 ( $d_{xz} + id_{yz}$ ):  $\varphi = \eta_z k_z \eta_x k_x + i\eta_z k_z \eta_y k_y = \eta_z k_z (\eta_x k_x + i\eta_y k_y)$  の状態を対象とする。xy 面内の  $\eta_x k_x + i\eta_y k_y$  は chiral 状態に特徴的で、 $z$  軸方向の chiral 軸をもつ chiral 状態を表している。3 次元 chiral  $d$  波の  $k_z$  依存性は、chiral 安定性に対して定量的に寄与するが、定性的には二次元 chiral  $p$  波と同じ議論となる。ここでは、二次元 chiral  $p$  波状態について以下に述べていく。

図 2 のように、 $\text{RuO}_2$  面内に二次元的な chiral  $p$  波状態 [8,9,10] を仮定した場合の、 $y$  方向に無限で平らな Ru 金属界面をもつ系について考える [5]。界面超伝導の領域は、Ru 金属界面近傍でのみ存在している。 $\eta_v$  および  $\eta_t$  は、それぞれ界面に対して垂直およ

び接線方向の成分に対応しており、この秩序変数( $\eta_t, i\eta_v$ )を図2に示している。

3K相のonsetである3K付近からRu金属界面に平行な接線成分 $\eta_t$ のみの一成分状態としてnon-chiral界面状態が出始め、そこから温度が下がると垂直成分 $\eta_v$ が生じて時間反転対称性が破れ、 $\eta_t \pm i\eta_v$ の二成分が結合したchiral界面状態となる。この $\eta_v$ の温度変化による生成は、Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub>/Ruでの準粒子トンネルスペクトロスコピーにおいて測定された、微分コンダクタンスのゼロバイアスピーク(ゼロバイアス異常)が現れるゼロ磁場での温度 $T^*=2.3\text{K}$ [4]に対応していると考えられる(図3)[11]。なぜならば、対ポテンシャルによる電子の散乱条件としてゼロバイアスピークは、秩序変数のRu金属面に対する垂直成分に符号反転がある場合に現れるからである。

## 2.2 ゼロバイアス異常の磁場依存性

前節のゼロ磁場での温度低下によるchiral転移に対して、次は磁場中でのchiral安定性を述べる。図3は、実験でのゼロバイアス異常 $H^*$ と臨界磁場 $H_{c2}$ の磁場・温度依存性を示している[11]。温度の低下によりchiral転移する温度 $T^*$ は、磁場中でゼロバイアス異常が現れる磁場 $H^*$ に連続的につながっており、 $H^*$ は磁場中でのchiral転移に対応すると考える。この $H^*$ は磁場方向により、異なる磁場依存性を示す。図3で、RuO<sub>2</sub>面に対して垂直な向き $\mathbf{H}/\mathbf{c}$ と平行な向き $\mathbf{H}/\mathbf{ab}$ に加えた場合に、 $\mathbf{H}/\mathbf{ab}$ では $H^*$ が $H_{c2}$ と離れているのに対して、 $\mathbf{H}/\mathbf{c}$ では磁場が強くなるにつれて $H^*$ が $H_{c2}$ 近づき、低温側でほぼ一致している。

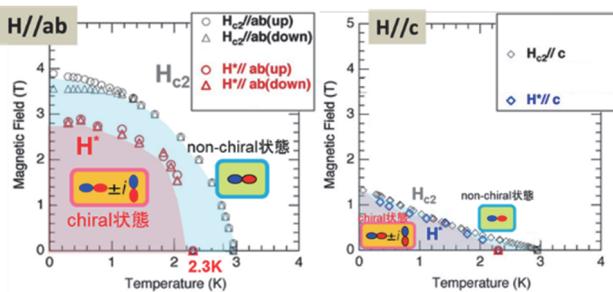


図3：臨界磁場 $H_{c2}$ とゼロバイアス異常 $H^*$ [11]。ゼロ磁場では、 $H_{c2}$ は3K相のonsetにあり、chiral転移は $T^*=2.3\text{K}$ で起こると考えられる。 $\mathbf{H}/\mathbf{c}$ においては、 $H^*$ は、 $H_{c2}$ に近づくが、 $\mathbf{H}/\mathbf{ab}$ では近づかず分離したままである。non-chiral状態は $\eta_t$ だけの一成分状態に相当しており、chiral状態は $i\eta_v$ と $\eta_t$ が結合した縮退した二成分状態である。

この $H^*$ の磁場 $\mathbf{H}/\mathbf{c}$ 依存性は、ゼロ磁場の $T_{\text{onset}}=3\text{K}$ で超伝導 onsetとして生じた $\eta_t$ の一成分状態で表されるnon-chiral状態が、 $\mathbf{H}/\mathbf{c}$ を印加することで $\eta_v$ が誘起されて、縮退した二成分状態 $\eta_t \pm i\eta_v$ のchiral状態に変わることに対応していると考えられる。一方、RuO<sub>2</sub>面に平行な $\mathbf{H}/\mathbf{ab}$ では、このようなchiral転移はおきず、磁場の印加において $H^*$ は $H_{c2}$ に近づかないで常に分離している。

本研究では、この仮説の、界面超伝導相における磁場誘起chiral転移を、3K相モデルに対するGinzburg-Landau(GL)理論により調べ、その機構を磁場による自由エネルギーのエネルギー利得に基づいて説明する。秩序変数の磁場依存性から、磁場による秩序変数の磁場変化によりnon-chiral界面状態からの磁場誘起chiral転移を示し、これに伴い生じる常磁性的な超伝導電流を示す。これらが、界面超伝導状態と磁場効果が合わさることでもたらされる、chiral状態の特徴の一つであることを説明する。

## 3. 3-Kelvin相モデルとGinzburg-Landau理論

図2の3K相モデルに対して、 $\mathbf{H}/\mathbf{z}$ と $\mathbf{H}/\mathbf{y}$ (其々 $\mathbf{H}/\mathbf{c}$ と $\mathbf{H}/\mathbf{ab}$ に対応)での自由エネルギー磁場寄与項の効果を調べて、 $\mathbf{H}/\mathbf{z}$ により2成分秩序変数のchiral状態安定化のためエネルギーが低下することを、 $p$ 波状態に対するGinzburg-Landau方程式[12]の計算から示す。3K相モデルの一つ目の特徴は、Ru金属界面付近で高い $T_c$ を持つことである。これは式 $T_c(x)=T_{c,\text{SRO}}+T_{\text{top}}/\cosh(x/w)$ による $T_c$ の距離依存性により表される[5]。 $w$ はRuと金属の界面付近で臨界温度が局所的に高い領域の幅を示す。もう一つの3K相の特徴として、Ru金属とSRO超伝導接合面での秩序変数の境界条件があげられる[13]。Ru金属界面の効果によって $\eta_v$ が抑制されるため、ゼロ磁場では境界において秩序変数の接線成分 $\eta_t$ の傾きはなく、垂直成分 $\eta_v$ のみ正の傾きを持つ。このような境界条件は、SRO超伝導の垂直成分 $\eta_v$ がRu金属に侵入する長さ $l$ に依存した境界面エネルギー $F_{\text{int}}=(1/l)|\eta_v(R_{\text{Ru}})|^2$ により与えられ[14]、ゼロ磁場での境界における垂直成分の傾きは $(1/l)\eta_v(R_{\text{Ru}})$ 、接線成

分の傾きはゼロに近い（「近い」と書いたのは、これらに更にゼロ磁場での自発磁化による小さな寄与の項が加わっているためである。）[13]。この境界面エネルギーと GL 自由エネルギーとの変分がゼロとなる条件から、境界条件の式が得られる。

この境界条件と共に  $p$  波超伝導に対する GL 方程式を Newton-Euler 法を用いて数値的に解き、自己無撞着に秩序変数  $\eta_v(x), \eta_t(x)$  とベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}(x)$  を得た。数値計算は、大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータ SX-ACE を使用して約 7000 ノード時間の計算を行った。

#### 4. 垂直磁場 $H//z$ による磁場誘起 chiral 転移

計算の結果として、図 4,5 に、温度を固定して垂直・面内磁場をゼロから強くした時の、秩序変数の  $x$  依存性における最大値の磁場・温度依存性を示す。

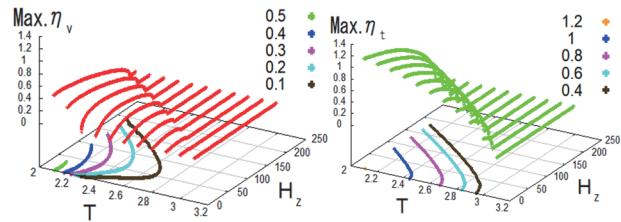


図 4 :  $H//z$  での  $\eta(x)$  の最大値;Max.  $\eta$  の温度・磁場依存性

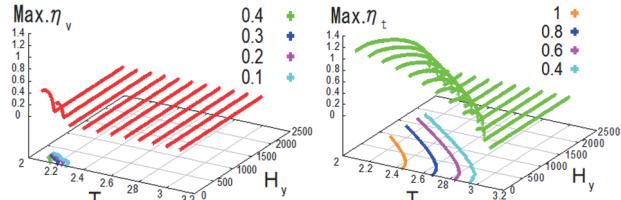


図 5 :  $H//y$  での  $\eta(x)$  の最大値;Max.  $\eta$  の磁場・温度依存性

図 4 では、3K 近くの non-chiral 界面超伝導状態からの垂直磁場  $H//z$  による磁場誘起 chiral 転移が Max.  $\eta_v$  の磁場依存性において見られる。温度 2.3K～3Kにおいて  $\mathbf{H}=0$  でほぼゼロであった  $\eta_v$  が、磁場  $H//z$  の印加により誘起され、磁場の強くなると増加する。これは磁場  $H//z$  による  $\eta_v$  の誘起による、 $\eta_t$  の一成分状態から  $\eta_t \pm i\eta_v$  の二成分状態への変化、つまり non-chiral から chiral 状態への転移に相当している。さらに磁場が強くなると、 $\eta_v$  は  $\eta_t$  と共に減少してゼロになる。これは磁場による対破壊による超伝導状態の消滅に対応している。一方、磁場  $H//y$  では図 5 に示すように、 $\eta_v$  は磁場中で増加することはなく  $\eta_t$

と共に常に減少し、磁場による chiral 状態の安定化は見られない。

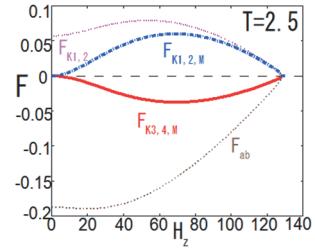


図 6 :  $H//z$  での自由エネルギーの磁場依存性

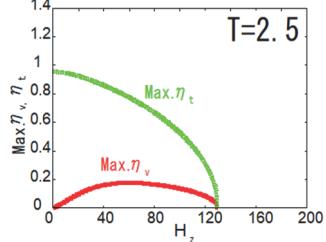


図 7 :  $H//z$  での最大値;Max.  $\eta$  の磁場依存性

これらの磁場方向による chiral 状態安定化の違いは、自由エネルギーの磁場依存項の違いから説明される。係数  $K_j$  を含むエネルギー項  $F_{Kj}$ 、更に vector potential  $\mathbf{A}$  を含む  $F_{Kj,M}$  に着目する。 $H//z$  では、磁場依存項は  $K_{3,4}$  を含む  $F_{K3,4,M} = 2(\gamma A_y)K_{3,4}\{(\partial_x \eta_t)\eta_v - (\partial_x \eta_v)\eta_t\}$  を含んでいるが、この項は  $H//y$  では現れない。この  $F_{K3,4,M}$  は、 $i\eta_v$  と  $\eta_t$  が結合した二成分状態で表される chiral 界面状態のために、 $H//z$  の磁場増加に伴い自由エネルギーを下げる寄与をする。この機構について、以下  $H//z$  磁場中の  $T=2.5$ K の場合を挙げて説明する（図 6）。 $H//z$  での自由エネルギーの磁場依存項  $F_{K1,2} + F_{K1,2,M} + F_{K3,4,M}$  の内、 $F_{K3,4,M}$  は磁場の増加とともにゼロから負に絶対値を大きくする。これは磁場  $H//z$  による  $\eta_v$  誘起に伴う chiral 転移（図 7）を導く自由エネルギー利得に対応している。この chiral 状態の安定化を導く  $F_{K3,4,M}$  の磁場依存性は、他の  $F_{K1,2}$  と  $F_{K1,2,M}$  が磁場中で常に正の値をとり、磁場による対破壊に対応した自由エネルギー増加とは異なる（図 6）。ゼロ磁場からの磁場印加で chiral 状態の安定化を導いた後、さらに磁場を強くすると絶対値は小さくなり、超伝導の消失と共に磁場依存項のエネルギーはゼロとなる（図 6）。

このような図 4,5 での、 $F_{K3,4,M}$  からもたらされる磁場方向による秩序変数の磁場依存性の違いは、2.3 節での仮説のように、Max.  $\eta_v$  が消失する磁場がゼロ

バイアス異常が現れる磁場  $H^*$ に応じ、Max. $\eta_t$ が消失する磁場が臨界磁場  $H_{c2}$  に応じていると考えると、実験での  $H^*$  の磁場方向による磁場依存性の違いと定性的に整合性をもつ。

次に、図 8 に超伝導電流密度の距離依存性を示す。 $F_{K3,4,M}$  から導かれる電流  $j_{y,K34,M}$  は、chiral 界面状態のためのエネルギー利得（図 6）に伴い生じる常磁性的な chiral 電流  $j_{y,K34,M}$  に対応している。この常磁性電流は、non-chiral 界面状態では生じない（図 8）。ここで  $H \parallel z$  中の超伝導電流は、Ru 金属界面に平行な  $y$  軸の沿って流れしており、全超伝導電流密度  $j_{y,K,M}$  は反磁性電流  $j_{y,K12,M}$  と常磁性的な chiral 電流  $j_{y,K34,M}$  の和として得られる。この常磁性 chiral 電流は、現時点では実験で検出されていない。

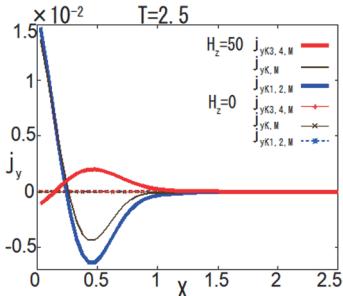


図 8:  $H \parallel z$  での超伝導電流密度の距離依存性

## 5. まとめ

ここで chiral p 波 ( $p_x+ip_y$ ) について示された磁場誘起 chiral 転移のメカニズムは、同様に  $\eta_x k_x + i\eta_y k_y$  を含む chiral d 波 ( $d_{xz}+id_{yz}$ ) : $\varphi = \eta_z k_z (\eta_x k_x + i\eta_y k_y)$ においても定性的に同じ傾向をもつため、磁場中における界面超伝導での chiral 超伝導の性質といえる。この性質より導かれた chiral 安定化の磁場方向による違いは、実験での 3K 相の  $H^*$  の磁場依存性の磁場方向による違いと定性的に一致している。この理論と実験の結果の一貫性は、3K 相が低温で chiral バルク超伝導になると仮定から導かれていることから、SRO のバルク超伝導の候補として chiral 状態を挙げることが出来ると考える。

本研究は、Manfred Sigrist 氏、榎田裕也氏、野村拓司氏、長谷川泰正氏、坂井徹氏らとの共同研究であり、大阪大学 CMC 公募型利用制度と、JSPS-EPSRC による Core to Core Programme “Oxide Superspin

(OSS)”により助成された成果です。一部は榎田裕也氏の修士論文 [15]と論文[16]に含まれます。

## 参考文献

- (1) Y. Maeno, T. Ando, Y. Mori, E. Ohmichi, S. Ikeda, S. Nishizaki, and S. Nakatsuji, Phys. Rev. Lett. **81**, 3765 (1998).
- (2) Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J.G. Bednorz, and F. Lichtenberg, Nature **372**, 532 (1994).
- (3) H. Yaguchi, M. Wada, T. Akima, Y. Maeno and T. Ishiguro, Phys. Rev. B, **67**, 214519 (2003).
- (4) J. Hooper, Z.Q. Mao, K. D. Nelson, Y. Liu, M. Wada, and Y. Maeno, Phys. Rev. B **70**, 014510 (2004).
- (5) M. Sigrist, and, H. Monien, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 2409 (2001).
- (6) G. M. Luke, Y. Fudamoto, K. M. Kojima, M.I. Larkin, J. Merrin, B. Nachumi, Y. J. Uemura, Y. Maeno, Z. Q. Mao, Y. Mori, H. Nakamura, and M. Sigrist, Nature **394**, 558 (1998).
- (7) J. Xia, Y. Maeno, P. T. Beyersdorf, M. M. Fejer, and A. Kapitulnik, Phys. Rev. Lett. **97**, 167002 (2006).
- (8) M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
- (9) Y. Maeno, M. Rice, and M. Sigrist, Phys. Today **54**, 42 (2001).
- (10) A. P. Mackenzie and Y. Maeno, Rev. Mod. Phys. **75**, 657 (2003).
- (11) M. Kawamura, H. Yaguchi, N. Kikugawa, Y. Maeno, and H. Takayanagi, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 531 (2005).
- (12) M. Sigrist, AIP Conference Proceedings **789**, 165-243 (2005).
- (13) H. Kaneyasu, N. Hayashi, B. Gut, K. Makoshi, M. Sigrist, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 104705 (2010).
- (14) P. -G. de Gennes,"Superconductivity of Metals and Alloys" (W.A. Benjamin, Inc., New York), (1966).
- (15) 榎田裕也, 平成 30 年度修士論文, 兵庫県立大学物質理学研究科, (2019).
- (16) H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, and M. Sigrist, in submission.

# 高温物質中におけるクォーク間相互作用の微視的伝達機構の解明

北澤 正清

大阪大学 大学院理学研究科 物理学専攻

## 1. はじめに

宇宙を構成する物質を分解していくと、原子、原子核、核子を経て「クォーク」と呼ばれる素粒子に行き着く。クォークは、現在の宇宙では強い力によって陽子や中性子など内部に閉じ込められており単独で観測されることはない。しかし、ビッグバン開闢直後の超高温の宇宙では相互作用が熱遮蔽効果で弱まることにより、この素粒子が単独の粒子状態として存在する物質「クォーク・グルーオン・プラズマ」が実現していたと考えられている。近年、米国 RHIC や欧州 CERN での加速器実験によって地上での実験によるクォーク・グルーオン・プラズマ状態の観測が実現したのに伴い、この分野の研究は更に重要性を増し、加速している。

初期宇宙がクォーク・グルーオン・プラズマ状態から現在の姿に至る進化の過程を解明するためには、超高温物質中におけるクォーク間相互作用の変質を精密に理解することが極めて重要である。クォーク間相互作用の格子ゲージ理論に基づく第一原理数値シミュレーションは、真空・有限温度を問わず古くから行われてきた。しかし、従来の研究のほとんどは力の強さやポテンシャルを距離の関数として測定するものであったため、計算結果として相互作用の大きさが得られるものの、そのような強さの相互作用が得られる物理的機構を理解することはできなかった。

これに対し本研究では、超高温物質中におけるクォーク間相互作用を微視的な伝達機構に着目して解析することで、相互作用の変質をより基本的な立場から理解することを試みている。この課題を実現するため、本研究では応力テンソルと呼ばれる量を用いた解析を行う。一般に力は、空間に遍在する「場」の歪みによって伝達されるが、応力テンソルはこの歪みを特徴づける物理量である。クォーク系の応力

テンソルの空間分布を格子数値解析によって定量的に測定することで、クォーク間相互作用を、場の歪みという「近接相互作用」的な視点から理解することが可能となる。

この応力テンソルの解析を閉じ込め相転移の臨界温度付近で行い、初期宇宙が経験したこの相転移を理解する鍵となる重要な情報を得ることが本研究の目的である。

## 2. 勾配流法

格子数値シミュレーションにおける応力テンソルの解析は、従来知られていた技法では極めて困難であり、ごく最近までほとんど手が付けられてこなかった。しかし最近、勾配流(gradient flow)[1,2]と呼ばれる技法を用いた全く新しい応力テンソルの解析法が提唱された[2]。この方法を用いると、格子ゲージ理論上で応力テンソルが適切に定義できると同時に、測定誤差を著しく削減し現実的な計算時間で十分な精度の数値計算結果を得ることが可能となる。我々はこれまで、この新しい解析法の数値解析をいち早く実現し、熱力学量の解析などを通してその有効性を実証してきた[3,4,5]。

## 3. 真空における応力テンソルの解析

我々は最近、勾配流法による格子数値計算で真空中にクォークと反クォークが置かれた系の応力テンソル分布を解析した。この解析結果を図 1 の上図に示す[6]。

応力とは面に働く力であり、応力テンソルはこの力の構造を特徴づける物理量である。応力テンソルは空間三次元系では  $3 \times 3$  行列（テンソル）だが、この行列の固有値及び固有ベクトルは、応力の主方向および単位面積あたりに働く力の大きさを表す。応力テンソルの固有値が正の場合、面を通して働く力

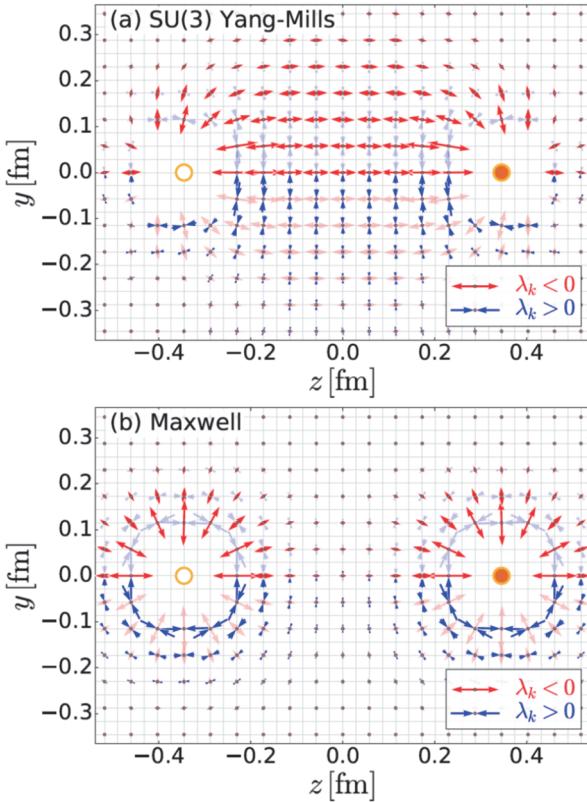


図 1:(a) クォーク・反クォーク系における応力テンソルの固有ベクトルの分布[6]。赤矢印は引力、青矢印は斥力方向。(b) 同様な結果を、電磁気学 (Maxwell 理論) に対して示したもの。

は引力的であり、負の場合は斥力的な相互作用に対応する。このように、応力テンソルの固有値・固有ベクトルを使うことで空間の各点において場の歪みが引き起こす近接相互作用を可視化することができる。

図 1 では、引力的な相互作用に対応する固有ベクトルを赤矢印で、斥力的な相互作用に対応する固有ベクトルを青矢印で示してある。矢印の長さは固有値の平方根に比例している。また、クォーク・反クォーク系の比較対象として、通常の電磁気学で二つの電荷  $q$  および  $-q$  を置いた場合の応力テンソルの空間構造を図 1 の下図に示した。

電磁気学においては、応力テンソルの引力に対応する固有ベクトルは電場の向きと平行である。このことから、図 1 下図の赤線は電場の向き、すなわち力線の方向を表しているといえる。一方、クォーク間の力を伝える非可換ゲージ理論の場合、カラー電場はゲージ依存な概念であり、直接的な観測では

ない。このため、非可換ゲージ理論の力線は電磁気学とは異なり、カラー電場を用いて定義することができない。しかしこの場合にも、応力テンソルはゲージ不变な観測量であるため、図 1 上図の結果は非可換ゲージ理論における力線を初めて可視化したものと言える大変画期的な成果である[6]。

また、図 1 下図では、電磁気学でなじみの深い放射状の力線構造が観測されるのに対し、上図では力線が大きくゆがみ、クォーク・反クォーク間にチューブ状の構造が現れているのが分かる。このような構造はフラックスチューブと呼ばれ、その存在自体は古くから様々な方法で研究してきた。しかし、ゲージ不变な観測量、特に近接作用と密接に関連した応力テンソルを用いてフラックスチューブの構造を明らかにしたのは本研究が初めてとなる[6]。

## 4. 有限温度への拡張

### 4.1 クォーク・反クォーク系

以上の成果は真空におけるクォーク・反クォーク系に関する研究だが、このような解析を有限温度系へと拡張させることで、初期宇宙で実現していたクォーク・グルーオン・プラズマ状態（非閉じ込め状態）を相互作用の立場から理解することが可能となる。特に、閉じ込め相転移の臨界温度付近でこのような解析を行うことで、温度の上昇とともにクォーク間相互作用がどのように変質し、物質が閉じ込めから非閉じ込め状態へと相転移するかを理解することが可能となる。

本年度は、以上のような目的に基づき、有限温度におけるクォーク・反クォーク間の間相互作用の解析を行った。この研究で得られた結果の一例を図 2 に示す。図 2 は、閉じ込め相転移の臨界温度  $T_c$  の約 1.44 倍（約 4 兆ケルビン）という超高温状態におけるクォーク・反クォーク系の応力構造を示したものである。この結果を図 1 の上図と比較すると、真空中で観測されていたフラックスチューブ構造が温度効果によって融解し、閉じ込め相互作用が減衰していることが見て取れる。また、この結果からは力の大きさの減衰のみならず、熱遮蔽効果による相互作用

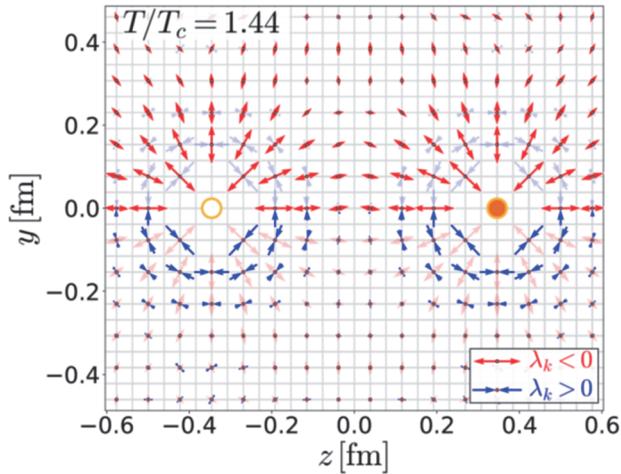


図 2：非閉じ込め相( $T=1.44T_c$ )におけるクォーク・反クォーク系の応力テンソルの固有ベクトルの分布。真空中観測されたフラックスチューブ構造が融解していることが分かる。

の遠方での減衰などを応力テンソルの空間構造から理解することができる。

今後、このような数値解析を様々な温度に対して行い、温度依存性を調べると共に、これらの数値解析結果を用いて閉じ込め・非閉じ込め相転移の物理的機構を明らかにしていくことが課題である。

#### 4.2 単独のクォーク系

非閉じ込め相では、クォーク・反クォーク系に加え、1 個のクォークが置かれた系を解析することもできる。真空中では、クォークの閉じ込めによって 1 個のクォークが置かれた系のエネルギーは無限大となり定義不可能であるため数値解析ができない。しかし、非閉じ込め相転移より高温の状態では 1 個のクォークが置かれた系のカラー遮蔽によってエネルギーが有限となるため、そのような系を数値解析することが可能となる。

本年度の研究で我々は、クォーク・反クォーク系に加え、1 個のクォークが置かれた系の周辺の応力テンソルの分布の解析も行った。このような系は球対称性を持つため、クォーク・反クォーク系とは異なり球座標を用いるのが便利である。図 3 に、クォーク周辺のエネルギー密度及び応力テンソルの各固有値をクォークからの距離の関数として示したものを見た。ただし、図中の黄色で着色した領域は我々の

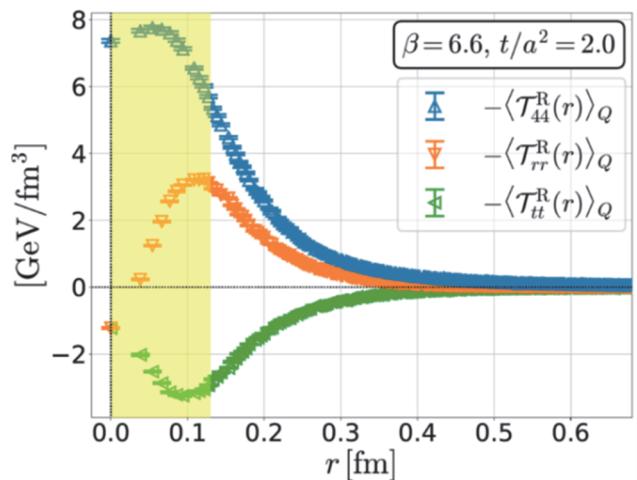


図 3：非閉じ込め相( $T=1.44T_c$ )における、単独のクォーク周辺のエネルギー密度および応力テンソルの固有値。横軸はクォークからの距離。

解析が破綻する領域を示しており、図 3 の結果はこの領域の外でのみ信頼可能である。

この結果を、電磁気学で単独の電荷を置いた場合と比較すると様々な違いを論じることができるが、本記事では専門的になりすぎるため割愛する。また、図 3 で得られた応力テンソルの結果からは、遠方でのカラー電荷の遮蔽の様相や、近距離での running coupling の変化などを解析することが可能であり、今後は数値解析結果を精密化するのと並行してこれらの物理現象の考察にも取り組んでいきたい。

#### 5. 展望

本研究では、勾配流法という全く新しい技法によって突破口が開かれた格子ゲージ理論数値シミュレーションにおける応力テンソルの解析法を用い、真空中及び有限温度でのクォーク系の応力テンソルの構造を調べる研究を行っている。この研究によって、クォーク間相互作用を近接作用的立場から理解することが初めて実現し、現在の宇宙における相互作用の伝達構造や初期宇宙で実現したクォーク・グルーオン・プラズマ状態や閉じ込め相転移の理解に全く新しい光を当てることが可能となった。

今後、現在継続中の有限温度の数値シミュレーションに関して、解析を精密化するとともに温度依存性を系統的に調べる数値解析を行うことが喫緊の課題である。更に、クォーク 3 体、4 体系や、励起状

態の解析などへの拡張も興味深い。また、本研究のこれまでの解析はすべて SU(3)非可換ゲージ理論で行ってきたが、この数値シミュレーションを、動的クォークの効果を取り込んだフル QCD での解析へと拡張することも重要な課題である。勾配流法はフル QCD にも適用することが可能であり、実際我々の研究においてこの手法による熱力学量の解析に成功している[7]。

本研究が切り開いた応力テンソルの研究は、更なる様々な応用可能性を秘めている。まず、本研究がこれまでに取り組んできたのは全て静的なクォーク系の解析だが、この研究を核子や中間子など、動的なクォークで構成されたハドロン中の応力構造の解析へと拡張していくことが極めて興味深くかつ重要な課題である。また、応力テンソルは従来の格子ゲージ理論の技法では解析することのできなかった非等方な系の熱力学量の解析も可能とする[8]。このような解析にもクォーク系と並行して取り組んでおり、今後もさらなる研究を進めていきたい。

## 参考文献

- (1) M. Luscher, JHEP **1008** (2010) 071.
- (2) H. Suzuki, PTEP **2013** (2013) 083B03.
- (3) M. Kitazawa, plenary talk at LATTICE2014 (New York, USA, June 24-28, 2014).
- (4) M. Asakawa, T. Hatsuda, E. Itou, M. Kitazawa, H. Suzuki, Phys. Rev. D**90** (2014) 011501.
- (5) M. Kitazawa, T. Iritani, M. Asakawa, T. Hatsuda, H. Suzuki, Phys. Rev. D**94** (2016) 114512.
- (6) R. Yanagihara, T. Iritani, M. Kitazawa, M. Asakawa, T. Hatsuda, Phys. Lett. B**789** (2019) 210-214.
- (7) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D**96** (2016) 014509.
- (8) M. Kitazawa, S. Mogliacci, I. Kolbe, W.A. Horowitz, arXiv :1903.00241[hep-lat].

# Z3 対称な量子色力学における格子シミュレーション

河野 宏明

佐賀大学 理工学部 物理科学科

## 1. はじめに

高温・高密度におけるハドロン・クォーク物質の研究は、素粒子・原子核物理だけでなく、宇宙論や天体物理学にも強い関係を持つ重要な研究課題である。物質の基本的構成粒子であるクォークは通常は陽子や中性子（総称してバリオン）や核力の正体である中間子の内部に閉じ込められていて、その外部に取り出す事ができないと考えられている。この現象はクォークの閉じ込めと呼ばれ、現在に至るまでも正確な説明がなされていない現象である。

クォークの閉じ込めは、クォークやその反粒子である反クォークの間に働く強い相互作用と呼ばれる力の性質を反映したものであると考えられる。この相互作用は、クォーク間の距離が短い場合は、弱いものである。しかし、1つのクォークを他のクォークや反クォークから引き離そうとすると、相互作用のポテンシャルがどんどん強くなり、引き離すために無限のエネルギーが必要となって、引き離す事ができない。

強い相互作用はグルーオンによって媒介されるが、この力は量子色力学(QCD)と呼ばれる理論で記述されると考えられている。量子色力学における“電荷”は色電荷と呼ばれ、光の三原色に例えて赤・緑・青とよばれる。クォークはこれらの3種類の電荷のどれかを持っており、反クォークはこれらの“補色”的色電荷を持っている。クォークや反クォークの間にグルーオンが飛ぶ事で、力が伝わる。光子（電磁波）で媒介される量子電磁気学と異なり、グルーオン自身が8色の色電荷を持っている事が量子色力学の大きな特徴であり、このためグルーオン間の自己相互作用が存在し、閉じ込めなどの量子電磁気学にはないような不思議な現象を引き起こしていると考えられる。閉じ込めは、結合の強い状況に対応するので、摂動論で説明する事はできず、非摂動的な理

論が必要である。現時点では、非摂動的な理論のうち、もっともシステムティックで信頼性の高いものは、格子量子色力学（格子 QCD）と呼ばれるものであるが、（少なく定性的には）閉じ込めをシミュレーションで再現していると考えられている。

さらに、格子 QCD に基づく、統計力学的計算によれば、高温においては、クォーク間の力が弱くなり、クォークの閉じ込めが破れて、多数のクォーク・反クォークがほぼ自由に動き回るクォーク・グルーオン・プラズ(QGP)とよばれる新状態ができると予測されている。また、高エネルギーの原子核衝突実験では、QGP の実験的な生成の（間接的な）証拠が得られていると考えられている。また、QGP はビッグバンの  $10^{-5}$  秒程度の後の初期宇宙においても存在したと考えられている。格子 QCD によって、これらの状態を記述する状態方程式の計算もなされている。

高温でなくとも、クォークの数が反クォークの数よりもはるかに多いような状態においても、相互作用が変化を受け、クォークの自由状態ができるといふ期待できる。そのような状態は中性子星などの高密度天体の内部に存在すると考えられる。このような状態の情報を理論から得るには、クォーク数に対する化学ポテンシャルを導入した格子 QCD の統計力学的シミュレーションを行えばよい。しかしながら、格子 QCD にクォーク数の化学ポテンシャルを導入すると、符号問題と呼ばれる問題のために計算が非常に難しくなる。

ここでは、符号問題に挑むために、符号問題が弱いと期待できる Z3 対称化された格子量子色力学(以下、Z3-QCD と呼ぶ)を考える。Z3-QCD は低温極限をとると元の理論に一致するので、この結果から通常の理論の低温での結果を導く事ができると期待できる。Z3-QCD は、現在のところ、零化学ポテン

シャルでの計算しか行われていない[1]。ここでは、位相クエンチ近似の下での有限化学ポテンシャルのある Z3-QCD の格子シミュレーションの結果について報告する。

## 2. 符号問題

格子 QCD では、計算機上に格子状の 4 次元空間を作り、その各点にクォークの場を置き、各辺にグルーオンの場を置く[2]。統計力学的な計算を行う場合は、通常は、以下のような大正準分布関数を経路積分表示にして計算を行う。

$$Z = \int DUD\bar{q}D\bar{q} \exp(-S_{QG} - S_G)$$

$$S_{QG} = \bar{q}Mq$$

ここで、 $S_G$  はグルーオンのみを含む作用を、 $S_{QG}$  はクォークとグルーオンを含む作用を表す。 $q$  はクォーク場、 $U$  はグルーオン（ゲージ）場である。 $M$  は、クォークの持つ時空間座標と離散的な自由度を足とする行列であり、和の記号（積分）は省略されている。この行列は、クォーク数についての化学ポテンシャル  $\mu$  を含んでいる。 $S_G$  の具体的な形は、以下の議論では重要でないので、ここでは示さない。

クォーク場  $q$  の積分は形式的に実行でき、次が得られる。

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

残された自由度はグルーオン場の自由度のみであるが、このグルーオン場も多数の自由度を持つので、厳密に足し上げる事は實際には不可能である。そこで、被積分関数

$$\det[M] \exp(-S_G)$$

を規格化したものを確率分布関数として使用することで、インポータンス・サンプリングを行う事でこの積分を近似的に行う。

しかし、有限の実クォーク数化学ポテンシャルがある場合、被積分関数の中の行列式の複素共役が

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

となって、実数かつ有限の  $\mu$  では、行列式は、実性、すなわち

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

が保証されずに、行列式は複素数となり、しかも、

その実部の符号も正負定まらない。したがって、上記のような確率解釈に基づくインポータンス・サンプリングの使用ができなくなる。これが符号問題である。

ただし、分配関数そのものが“物理的でない”という意味でない。行列式は複素数になるが、経路積分後に得られる分配関数は実数になる事は厳密に示す事ができる[3]。最終的な答えは物理的になるが、実際に計算する事が難しくなるのが符号問題である。

符号問題に対する処方箋として、行列式の絶対値をとったものを行列式の代わりに使う方法がある。これを位相クエンチ近似と呼ぶ。行列式の位相の絶対値が大きい場合は、この近似は悪くなる。

## 3. Z3 対称性と符号問題

力学的なクォークがない純ゲージ理論においては、以下のような時間 ( $\tau$ ) 的境界条件を満たすゲージ変換にたいして理論が不変である。

$$g(\tau=0, \mathbf{x}) = z g(\tau=1/T, \mathbf{x})$$

ここで  $T$  は温度であり、 $z$  は Z3 群の要素の 1 つである。この対称性を Z3 対称性と呼び、その対称性を測る秩序変数がゲージ場の時間成分から作られるポリヤコフループである [2]。ポリヤコフループは、純ゲージ場に加えられた重い静的クォークの自由エネルギーと結びついており、ポリヤコフループの期待値が零なら Z3 対称性が守られクォークは閉じ込められ、有限値であれば Z3 対称性が自発的に破れてクォークは自由になっていると判定できる。しかし、力学的なクォークが存在すると、その境界条件が上記のゲージ変換で  $z$  因子だけ変化してしまう。また、クォーク場の変数変換によって、その変化は化学ポテンシャル  $\mu$  が因子  $z$  の位相  $\phi$  分だけ

$$\mu \rightarrow \mu + i\phi \quad (\phi = 0, 2\pi/3, -2\pi/3)$$

と変化したととらえる事もできる。したがって、力学的なクォーク場を含む QCD は Z3 対称でない。

しかし、3 フレーバー( $u, d, s$ )の QCD を考え、それぞれのクォークに、あらかじめ

$$\mu_u = \mu + i2\pi/3$$

$$\mu_d = \mu - i2\pi/3$$

$$\mu_s = \mu$$

という化学ポテンシャルを与えておくと、Z3 変換によって、それぞれのクォークの化学ポテンシャルは変化するが、全体としては変化せず、Z3 対称性は保たれる。このように修正された QCD を Z3-QCD と呼ぶ[4-7]。低温極限では、境界条件は効かなくなるので、Z3-QCD は通常 QCD に近づく。

Z3 対称性は符号問題の強さと関係している。純ゲージ理論や 8 色のクォークを加えた理論は Z3 対称性があり、符号問題がない。Z3-QCD では、符号問題は完全にならないが、弱くなる事が期待される[8]。実際、QCD の有効理論においては、Z3 対称性があると、符号問題がなくなったり[3]、弱くなったりする事[9]が示されている。ここでは位相クエンチ近似による有限化学ポテンシャルのある格子 Z3-QCD のシミュレーションについて報告する。

#### 4. 格子 QCD 計算の設定と実行

格子 QCD 計算のプログラムおよびセッティングは以下の通りである。(専門用語等については、参考文献[2]、[10]等を参照のこと。) 使用したプログラムは、中村純氏らのグループが開発した Lattice Tool Kit [11]を、Z3-QCD に改造したものである。グルーオンの作用としては Iwasaki improved action [12]を、クォークの作用としては 2 フレーバーの Wilson fermion を使用している。ゲージ場の配位生成は、ハイブリッドモンテカルロ法を用いている。格子の大きさは、空間方向が 8 であり、時間方向が 4 である。

計算に使用した大型計算機は、大阪大学サイバーメディアセンター(CMC)の SX-ACE である。CMC からは、96,000 ノード時間の計算時間をサポートしていただいた。また、これとは別に大阪大学核物理研究センターからサポートしていただいた計算時間の一部を計算に使用した。

位相クエンチ近似は、2 フレーバーでないと使えないでの、Z3-QCD では最低 6 フレーバーが必要となる。しかし、ここではクォークの作用の前に因子  $1/3$  をかけることで、零温度極限で 2 フレーバーの通常の QCD になるようにしており、使用したパラメ

ータは通常の 2 フレーバー QCD と同じものである。物理的なパラメータとしては、温度に関する  $\beta=1.8, 1.9, 2.0, 2.1, 2.2$  と密度に関する化学ポテンシャル  $\mu=0, T, 2T, 4T$  である。ただし、位相クエンチ近似の計算なので、 $\mu$  はクォーク数というよりアイソスピニ数に対する化学ポテンシャルに対応する。

ゲージ配位は最大で 10,000 程度生成し、最初の千程度を熱平衡達成までの過程として除いた。また、配位間の人口的な自己相関を避けるために 50 ごとに配位を採用して、物理量を計算した。計算した物理量は、プラケット変数、ポリヤコフループおよび数密度である。

#### 5. 数値計算の結果

ここでは紙数が限られているので、ポリヤコフループの計算結果だけを示す。図 1 に零化学ポテンシャルにおけるポリヤコフループ  $P$  の絶対値の  $\beta$  依存性を示す。 $\beta$  が大きいものが高温に対応する。通常の QCD においては、非閉じ込め転移は連続的なクロスオーバーであるが[13]、Z3-QCD においては 1 次転移を示唆するような急激な転移が見られ、これは先行研究とも一致する[1]。

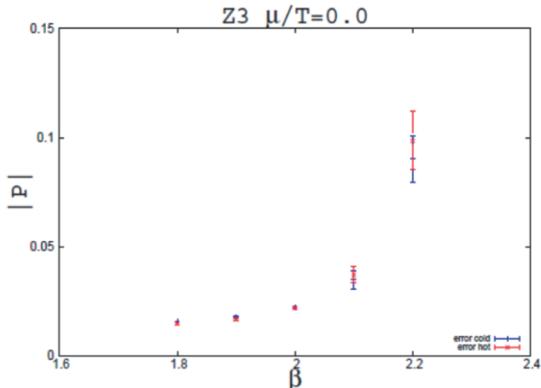


図 1:  $\mu=0$  における  $|P|$  の  $\beta$  依存性

図 2 は、 $\mu=T$  における Z3-QCD におけるポリヤコフループ  $P$  の絶対値の  $\beta$  依存性である。図 1 と同様に、ポリヤコフループの絶対値は高温において急激な増加を見せているが、その変化がよりシャープになっている。化学ポテンシャルの増加が非閉じ込め転移をよりシャープにしている事がわかる。

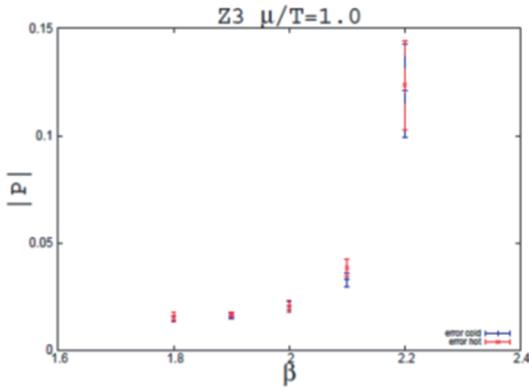


図 2 :  $\mu=T$ における $|P|$ の $\beta$ 依存性

## 6. まとめと今後の展望

符号問題に対する解決策について模索するために、有限化学ポテンシャルのある場合のZ3対称なQCDにおける格子シミュレーションを位相クエンチ近似のもとで行った。Z3-QCDでは、非閉じ込め転移は非連続的な1次転移となると考えられる。転移は化学ポテンシャルが増加するとよりシャープになるとされる。著者が知る限り、これは世界初の計算である。また、これらの結果は、遂次発表されている[14,15]。

ここで行ったのは位相クエンチ近似の計算であるので、化学ポテンシャルはクォーク数に対するというよりも、むしろアイソスピン数に対応するものである。有限クォーク数化学ポテンシャルに対する計算をするには、得られた結果を再重み法で足し上げる必要がある。さらにその結果の零極限をとることによって、低温・高クォーク密度の情報を得る事ができる。これらは今後の課題である。

## 謝辞

本報告は管野淳平氏と開田丈寛氏との共同研究に基づいています。両氏の協力に謝意を表します。また、様々な助言・助力をいただいた中村純氏、三角樹弘氏、伊藤悦子氏、八尋正信氏、柏浩司氏、高橋純一氏、石井優大氏、宮原昌久氏に感謝いたします。大阪大学サイバーメディアセンターと大阪大学核物理研究センターからは計算時間のサポートをいただきました。ここに謝意を表します。また、この研究

は、科研費(基盤研究C (No. 17K05446) )のサポートも受けております。ここに謝意を表します。

## 参考文献

- (1) T. Iritani, E. Itou, T. Misumi, JHEP11, 159 (2015).
- (2) 青木慎也, 格子上の場の理論, シュプリンガーマイクロテクニカ・ジャパン, 2005年.
- (3) T. Hirakida, H. Kouno, J. Takahashi and M. Yahiro, Phys. Rev. D94, 014011 (2016).
- (4) H. Kouno, Y. Sakai, T. Makiyama, K. Tokunaga, T. Sasaki and M. Yahiro, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 39, 085010 (2012).
- (5) Y. Sakai, H. Kouno, T. Sasaki, and M. Yahiro, Phys. Lett. B718, 130 (2012).
- (6) H. Kouno, T. Misumi, K. Kashiwa, T. Makiyama, T. Sasaki and M. Yahiro, Phys. Rev. D88, 016002 (2013)
- (7) H. Kouno, T. Makiyama, T. Sasaki, Y. Sakai, and M. Yahiro, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 40, 095003 (2013)
- (8) H. Kouno, K. Kashiwa, J. Takahashi, T. Misumi, and M. Yahiro, Phys. Rev. D93, 056009 (2016)
- (9) T. Hirakida, J. Sugano, H. Kouno, J. Takahashi, and M. Yahiro, Phys. Rev. D 96, 074031 (2017)
- (10) J. Takahashi, H. Kouno and M. Yahiro, Phys. Rev. D 91, 014501 (2015)
- (11) S. Choe, A. Nakamura, C. Nonaka and S. Muroya, Soryushiron Kenkyu (in Japanese), vol. 108 no.1, 1 (2003)
- (12) Y. Iwasaki, Nucl. Phys. B258, 141 (1985)
- (13) Y. Aoki, G. Endrődi, Z. Fodor, S. D. Katz, and K. K. Szabó, Nature (London) 443, 675 (2006)
- (14) 河野宏明、開田丈寛、管野淳平、“Z3対称性のある格子QCD計算と現象論模型”、第124回日本物理学会九州支部例会、2018年12月8日、大分大学
- (15) 河野宏明、開田丈寛、管野淳平、“Z3対称性と格子QCD計算”、日本物理学会第74回年次大会、2019年3月15日、九州大学

# 相対論的 Vlasov–Fokker–Planck–Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー完全保存スキームの開発と実証実験

白戸 高志

大阪大学 レーザー科学研究所 非平衡輻射プラズマ理論グループ

(現：量子科学技術研究開発機構 六ヶ所核融合研究所 プラズマ理論シミュレーショングループ)

## 1. はじめに

相対論的 Vlasov–Fokker–Planck–Maxwell 系は弱結合プラズマに対する第一原理方程式であり、荷電粒子と電磁場の相互作用を記述する相対論的 Vlasov–Maxwell 系と確率的な衝突過程を記述する相対論的 Fokker–Planck 衝突項により構成される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_s}{\partial t} + \frac{\mathbf{u}}{\gamma} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q}{m} \left( \mathbf{E} + \frac{\mathbf{u} \times \mathbf{B}}{\gamma c} \right) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}} &= \left( \frac{\partial f_s}{\partial t} \right)_c, \\ \left( \frac{\partial f_s}{\partial t} \right)_c &= \frac{\Gamma_{s/s'}}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \cdot \int U(\mathbf{u}, \mathbf{u}') \cdot \left( f_{s'} \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{u}} - \frac{m_s}{m_{s'}} f_s \frac{\partial f_{s'}}{\partial \mathbf{u}'} \right) d\mathbf{u}', \\ U(\mathbf{u}, \mathbf{u}') &= \frac{r^2}{\gamma \gamma' w^3} [w^2 I - \mathbf{u}\mathbf{u}' - \mathbf{u}'\mathbf{u}' + r(\mathbf{u}\mathbf{u}' + \mathbf{u}'\mathbf{u})], \\ \nabla \times \mathbf{B} &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \end{aligned}$$

ここで、 $f$  は分布関数、 $\mathbf{u}$  は単位質量あたりの運動量、 $\gamma$  は Lorentz 因子、 $q$  は電荷、 $m$  は質量、 $\mathbf{E}$  は電場、 $\mathbf{B}$  は磁束密度、 $\mathbf{J}$  は電流密度、 $\Gamma$  は衝突周波数であり、 $(s, s')$  はそれぞれの粒子種を表す。また、 $r = \gamma\gamma' - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}'/c^2$ 、 $w = c\sqrt{r^2 - 1}$  である。

しかしながら、数値シミュレーションでこの系を取り扱う際には、多くの場合保存則が破られ、物理的に信頼できる議論を行うのが難しくなる。運動論的プラズマの数値計算法は particle-in-cell (PIC) 法と Vlasov シミュレーションに二分されるが、特に相対論領域では Lorentz 因子の非線形性のために保存スキームを構築するのは困難であると考えられてきた。保存則を破るような数値エラーが蓄積されると、雪だるま式に更なる数値エラーの蓄積を招くため、保存則の誤差は一般に線形ではなく指數関数的に増幅する。したがって、非保存スキームでは数値計算の信頼性は瞬く間に損なわれるため、運動論プラズマの長時間シミュレーションを実現する上で完全保

存スキームの開発は挑戦的な課題である。先行研究において、PIC 法において運動量とエネルギーを同時に保存するスキームの開発は不可能であるというコンセンサスが得られていることから [1]、本研究では Vlasov シミュレーションにおける完全保存スキーム開発を実施した。本報告書は以下のように構成される。2 章では相対論的 Vlasov–Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー完全保存スキームについて、3 章では相対論的 Fokker–Planck 衝突項に対する質量・運動量・エネルギー完全保存スキームについて報告を行う。4 章は本報告の結論である。

## 2. 相対論的 Vlasov–Maxwell 系

ここでは、相対論的 Vlasov–Maxwell 系に対する完全保存スキームの開発および数値実験について報告を行う。離散方程式を詳細に解説することは紙面の都合上困難であるため、スキーム開発のエッセンスを紹介する。なお、詳細な議論は課題実施期間中に学術誌 Journal of Computational Physics にて出版された我々の論文中で行われているため [2]、そちらを参照されたい。

### 2.1 完全保存スキーム開発のポイント

系の保存則を議論する際、保存量のうち荷電粒子が担当する部分は下に示すような分布関数のモーメント

$$\int \phi f_s d\mathbf{u}$$

として与えられる。ここで、 $\phi$  は荷電粒子一つあたりの任意の保存量、すなわち電荷・運動量・エネルギーを表す。この量の時間発展を考えるには Vlasov

方程式に  $\phi$  をかけて運動量空間で積分を行えばよいが、左辺第3項で部分積分を行うと電磁場との運動量やエネルギー交換を表す項が得られる。同様のことが電磁場に対しても言える。例えば電磁場のエネルギーの時間発展は

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{|\mathbf{E}|^2 + |\mathbf{B}|^2}{8\pi} \right) = \frac{\mathbf{E}}{4\pi} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{\mathbf{B}}{4\pi} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

と表せるため、Ampere–Maxwell の式と Faraday–Maxwell の式を用いて導出することができる。その際、Vlasov 方程式から出てきた運動量・エネルギー交換項が、ここでは積の微分法則を用いることにより異符号で得られる。したがって、これら運動量・エネルギー交換項が相殺することにより、荷電粒子・電磁場の合算値が不变であることを示すことができる。

ところが、数値シミュレーションでは微分や積分を近似的に表現するため、当然のことながら微分・積分に関する諸公式は一般的に誤差を含むものになる。結果として、荷電粒子が電磁場に受け渡す物理量と、電磁場が荷電粒子から受け取る物理量の間に差異が生じ、行き場を失った運動量やエネルギーがシミュレーションを不安定化する。これを防ぐには、離散化したのちも解析的な関係性を満足する、性質のよい差分演算子を用いる必要がある。本研究では、線形な差分演算子の一つである中心差分、および陰的 Runge–Kutta 法を用いた。例えば積の微分法則は

$$\begin{aligned} & \frac{f^{n+1} - f^n}{h} g^{n+1} + g^n \\ &= \frac{f^{n+1} g^{n+1} - f^n g^n}{h} \end{aligned}$$

のように表すことができ、離散化された数学公式と自己無撞着となるように差分スキームを設計することで、保存則を完全に満たすことが可能である。

## 2.2 相対論的 Weibel 不安定性による数値実験

開発した相対論的 Vlasov–Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー保存スキームの妥当性を検

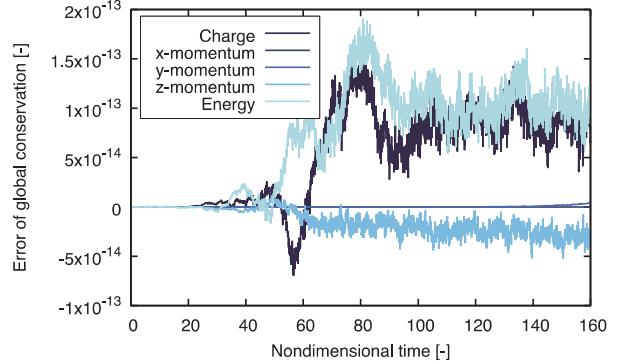


図 1: 相対論的 Weibel 不安定性計算時の電荷・運動量・エネルギー保存則に関する誤差。

証るために、相対論的 Weibel 不安定性による数値実験を行った。Weibel 不安定性は電磁的な不安定性であるため、空間 1 次元、運動量 3 次元で計算格子を配置した。計算対象は水素の完全電離プラズマであり、陽子は等方的、電子は非等方な相対論的 bi-Maxwell 分布により与えた。これに対し、ソレノイダル条件を満足するような磁場の摂動を与えると、線形段階では荷電粒子から磁場に対してエネルギーが指数関数的に輸送される。本研究では、このようなプロセスにおいて保存則が厳密に満足され、物理を正しく記述できるか数値実験を行った。

図 1 に示すのは、相対論的 Weibel 不安定性計算時の電荷・運動量・エネルギー保存則に関する誤差である。倍精度の丸め誤差と空間格子点数の積と同程度であることから、電子計算機の限界まで誤差を抑制することに成功した。特に相対論領域において、従来までは運動量保存とエネルギー保存を両立することは困難であると見なされてきたが、その常識を覆す成果である。また、保存則のみならず線形理論による磁場の增幅率も再現しており、物理を正しく記述できることを確認した。

## 3. 相対論的 Fokker–Planck 衝突項

ここでは、相対論的 Fokker–Planck 衝突項に対する完全保存スキームの開発および数値実験について報告を行う。先ほどと同様に詳細な説明は困難であるため、ポイントを絞って紹介する。なお、詳細な議論はプレプリントサーバーにアップロードした論文中で行われているため、そちらを参照されたい。

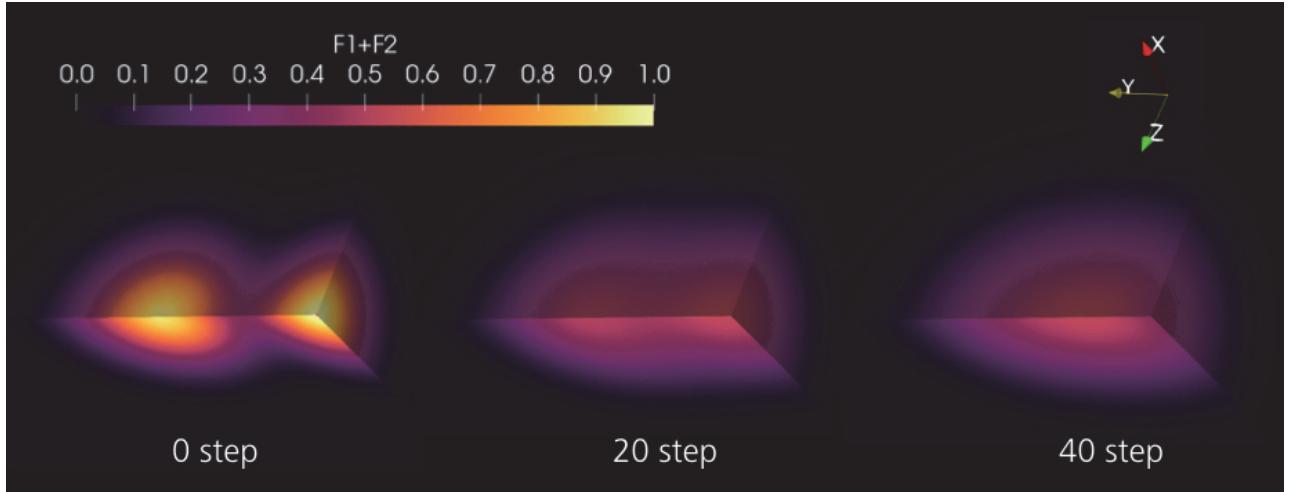


図 2：相対論的熱緩和問題における分布関数の初期条件および時間発展。

この論文は平成31年5月現在学術誌 Physical Review E にて査読中である [3]。

### 3.1 完全保存スキーム開発のポイント

相対論的 Vlasov–Maxwell 系での議論とは異なり、相対論的 Fokker–Planck 衝突項から保存則を導出する際には時間積分の議論が不要である。その代わりに、散乱カーネル  $U(\mathbf{u}, \mathbf{u}')$  に関する以下の数学的な対称性が重要な役割を演じる。

$$U(\mathbf{u}, \mathbf{u}') = U(\mathbf{u}', \mathbf{u}), \\ U(\mathbf{u}, \mathbf{u}') \cdot \mathbf{u}/\gamma = U(\mathbf{u}', \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}'/\gamma'.$$

保存則は先ほどと同様に分布関数のモーメントであり、運動量やエネルギーをかけた上で部分積分を行う。一つ目の条件は運動量保存則、二つ目はエネルギー保存則を導出する際に必要である。

数値計算ではエネルギーの運動量差分という形で  $\mathbf{u}/\gamma$  が得られるため、打ち切り誤差が含まれる。そのため、エネルギー保存に関する等号は一般に成立しない。本研究では、差分演算による打ち切り誤差が含まれた  $\mathbf{u}/\gamma$  や  $\mathbf{u}'/\gamma'$  を用いて散乱カーネルを計算することにより、数値エラーが含まれていたとしても運動量やエネルギー保存が厳密に成り立つように構造保存スキームを構築した。

### 3.2 相対論的熱緩和問題による数値実験

開発した相対論的 Landau–Fokker–Planck 方程式に対する質量・運動量・エネルギー保存スキームの妥当性を検証するために、相対論的な熱緩和問題による数値実験を行った。ここでは空間 0 次元、運動量 3 次元で計算を行った。先ほどの数値実験と比較して空間の次元が落ちているが、Landau–Fokker–Planck 方程式は積分微分方程式であるため、実際の計算負荷はむしろ大幅に増加している。初期条件は図 2 の 0 ステップ目に示すような、異なる平均速度の初期平衡に従う電子・陽電子プラズマである。また、線形理論との比較のために異種粒子衝突のみを考慮した。

図 2 は分布関数の時間発展であり、初期に異なる平衡状態にあった電子・陽電子プラズマが同一の平衡状態を目指して緩和していることがわかる。また、図 3 に構造保存スキームと従来型スキームの保存特性に関する比較を示す。従来型は質量と運動量を厳密に保存する一方、エネルギー保存は丸め誤差よりはるかに大きなオーダーの誤差を示す。それに対して構造保存スキームは、これまで困難であると考えられてきた運動量保存とエネルギー保存を両立していることがわかる。したがって、相対論的 Fokker–Planck 衝突項に対する完全保存スキームの原理実証に成功した。今回は比較的小さな時間刻み幅を採用しているので、図 4 に示すようにエントロピーは単

調増加している。しかしながら、本手法は Boltzmann の H 定理を厳密に満たすものではないため、今後さらなる発展が望まれる。

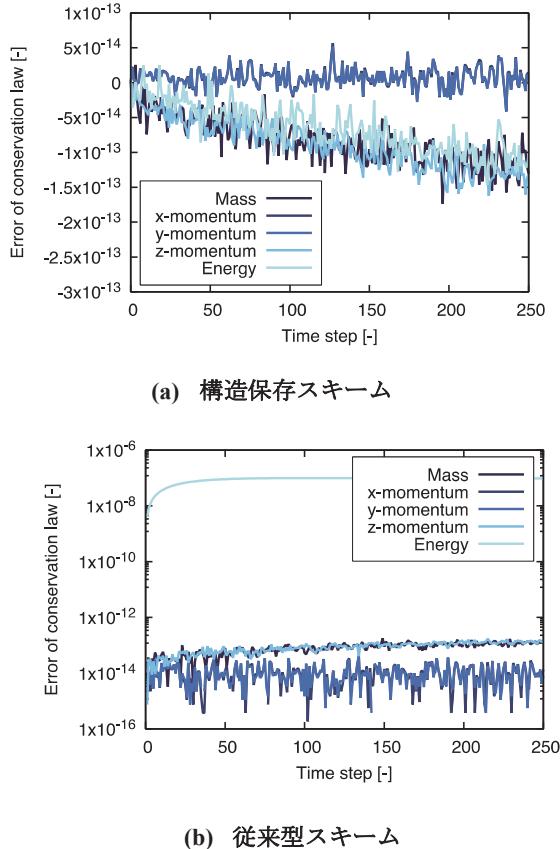


図 3：相対論的熱緩和問題における質量・運動量・エネルギー保存則の誤差。

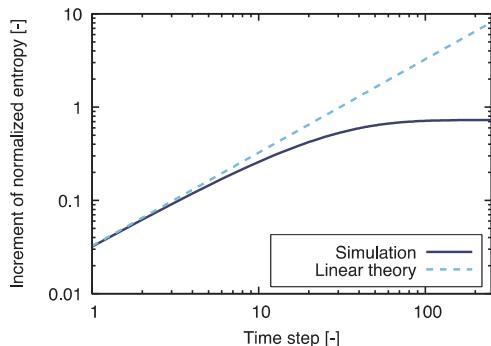


図 4：相対論的熱緩和問題におけるエントロピーの時間発展。

#### 4. おわりに

本研究では、相対論的 Vlasov–Fokker–Planck–Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー保存シミュレーションの実現を目指し、数値スキーム開発と実証実験を行った。計算コストの都合上、相対論的 Vlasov–Maxwell 系と相対論的 Fokker–Planck 衝突項に分けて議論を行ったが、両者を結合すれば当初の目的は達成される。異なる方程式系に対して、微分積分学の数学公式を離散化レベルで満足する構造保存戦略を用いることで、全ての保存則を満足するという共通の目的を達成することができた。

ただし、今回開発した Fokker–Planck 衝突項に対するスキームは積分微分方程式を直接計算するものであり、最良の場合でも計算量は未知変数の数の自乗に比例する。現実的な運動論プラズマの数値計算のためには、これを 1 乗に比例させる必要がある。幸いにも、Rosenbluth のポテンシャル形式を導入すると積分微分方程式を複数の微分方程式により表現できるため [4]、この要請を満足できるであろう。また、相対論的 Fokker–Planck 衝突項では時間積分に関する議論を行わなかったが、保存則ではなく Boltzmann の H 定理を議論するためには必要なものである。今後は、より現実的な計算コストでより物理的に正しい計算を実施するため、さらなる計算物理的研究を推進する予定である。

#### 参考文献

- (1) G. Chen and L. Chacon, Comput. Phys. Commun. **197**, 73-87, (2015).
- (2) T. Shiroto et al., J. Comput. Phys. **379**, 32-50, (2019).
- (3) T. Shiroto and Y. Sentoku, arXiv 1902.07866 (2019).
- (4) M.N. Rosenbluth et al., Phys. Rev. **107**, 1-6, (1957).

# 矯正歯科治療後の三次元顔形態を予測する 人工知能システムの開発

谷川 千尋

大阪大学 歯学部附属病院 矯正科

## 1. はじめに

顔の軟組織の形態を改善することは、矯正歯科治療においては社会心理学的な立場から、重要な治療目標のひとつである[1-5]。しかし、顔の軟組織の形態予測を行う機能をもつとされる市販のソフトウェアで用いられているアルゴリズムの多くは、硬組織と軟組織の移動量が比例関係を有するとの誤った前提に立つものであり、また、比例定数値の指定は術者に依存するなど、予測結果の正当性に関する根拠は乏しい。これまで、上下切歯の後方移動によるわずかな顔面の立体形状の変化を高精度で予測するシステムはなかった。

一方、これまでに我々の研究室は、側貌（二次元）を定量的に評価し、数学的に分類する手法を開発し、報告している。この手法は、専門家の知識に基づいて計測値（特徴変量）を抽出し、抽出された計測値を多变量として同時に扱うことを特徴としている。同手法を用いることで、専門家が注目する僅かな形態の差異を最大化した上で、日本人女性の口唇と鼻を分類することに成功した。[4,5] また、口唇口蓋裂を有する患者を対象として、同手法を三次元の顔画像に適用し、安静時の口唇部形態を三次元的に計測し客観的に分類するシステムを開発した。[3]

臨床現場における診断や治療計画立案では、過去の症例の診断や治療計画、さらにその治療成績を参照しながら、専門医の長年の“経験”により判断を行っている。我々は、これら専門医の長年の“経験”を実装するようなシステムを数値演算処理として行う方法についても過去に提案してきた。[6-8]

そこで、本研究では、上記の研究を発展させ、抜歯に伴う矯正歯科治療後の患者の三次元の顔形態を、過去の症例に照らし合わせて数値演算処理により予測するシステムを構築し、その精度を検証する

事を目的とした。

## 2. 資料と方法

### 2.1 資料の収集

抜歯を伴う矯正歯科治療を行った女性患者 55 名の治療前後の三次元顔面画像および側面位頭部エクス線規格画像（以下、セファロ画像）を資料として、顔面を構成する座標値群と解剖学的特徴点の位置情報を蓄積した。座標系（図 1）を過去の報告[9]に基づいて決定した後、すべての三次元顔面画像に対し、顔の相同モデル Fpre、Fpost（図 2 [9-11]）を HBM-Rugle（メディック社、京都）を用いて生成し、顔の治療による形態変化を表すベクトル群 C を抽出した。ベクトル群 C の性質を検討するために、距離マップと有意差マップを用いて、術前術後にかけての軟組織変化を評価した（図 3）。次に、セファロ画像より顎顔面形態を表す特徴ベクトル P を抽出した。

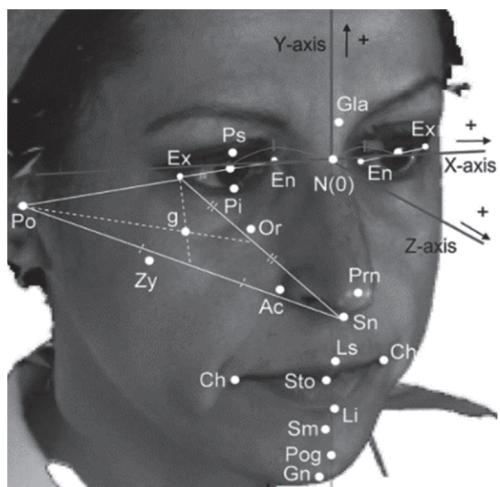


図 1：座標系[9]

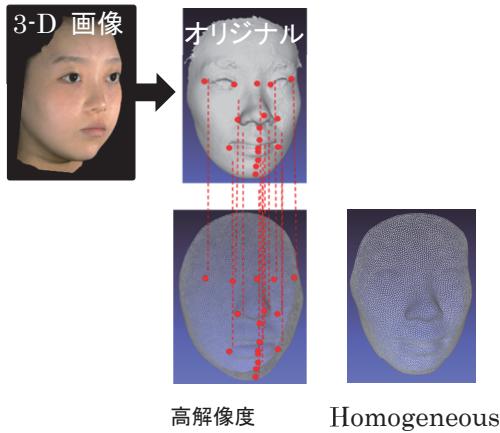


図 2 : 相同モデル[9-11]

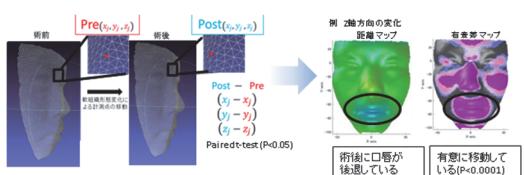


図 3 : 術前から術後にかけての移動量の有意の差の検定 (paired t-test)

## 2.2 システムの構築

新たに入力された特徴ベクトル[Fpre、P]からCを算出する回帰モデルを、深層学習を用いて生成した。回帰モデルにより算出されたCを治療前の顔の相同モデル Fpre(new) に加算することで、治療前の三次元顔形態から治療後の三次元顔形態 Fpost(new) を予測するシステムを構築した（図 4）。

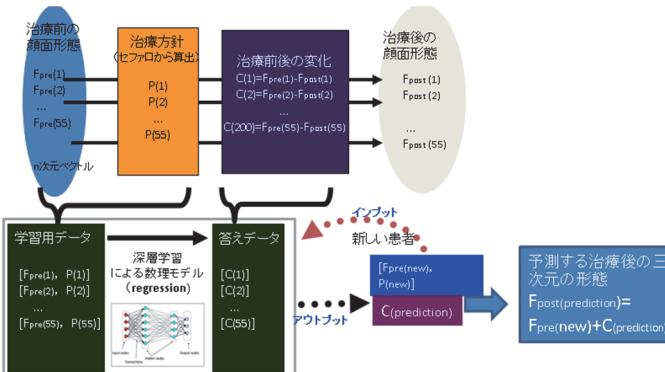


図 4 : 数理モデルの概要

## 2.3 システム性能評価

システム性能を検討するために、11分割交差検証をおこない、システムを用いて予測された顔面表面と実際の治療後の顔面表面の絶対距離を誤差と定義した場合の平均を表 1 の方法を用いて算出し、予測精度を評価した。

表 1 : 誤差 d の平均の方法 (AveEachPt、AveEachPc、TotalAve の計算方法)  $d(i,j)$  は i 番目の患者の j 番目の顔の誤差を表す。

	顔面表面の座標番号				平均	
	$d(1,1)$	$d(1,2)$	$\cdots$	$d(1,j)$	$\cdots$	$d(1,6017)$
	$d(2,1)$		$\cdots$	$d(2,j)$	$\cdots$	$d(2,6017)$
	:			:		:
患者番号	$d(i,1)$	$d(i,2)$	$\cdots$	$d(i,j)$	$\cdots$	$d(i,6017)$
	:			:		:
	$d(55,1)$	$d(55,2)$	$\cdots$	$d(55,j)$	$\cdots$	$d(55,6017)$
平均	$AveEachPt(j=1)$	$AvePtEach(j=2)$	$\cdots$	$AveEachPt(j=i)$	$\cdots$	$AveEachPt(j=55)$
	$StdEachPt(i=1 \cdots 55, j=1)$	$StdPtEach(j=2)$	$\cdots$	$StdEachPt(j=i)$	$\cdots$	$StdEachPt(j=55)$
						TotalAve

## 3. 結果

術前後の軟組織変化を図 5 に示す。口唇部は術後に有意に後退し、鼻・おとがい・頬部は有意に前突していることが示された。セファロ画像より、頭蓋底前後径・顔面高の有意の増加と、下顎実効長の増加に伴う ANB 角の有意な減少、U1 と L1 の有意の舌側傾斜移動を認めた（図 6、P<0.05）。

それぞれの症例における誤差の平均 (AveEachPt) が 1mm 以下の症例を成功と定義した場合に、全体の成功率は 98% であった。平均誤差は 0.69mm であった。最大誤差を示す部位は下唇であった（図 7-8、表 2）

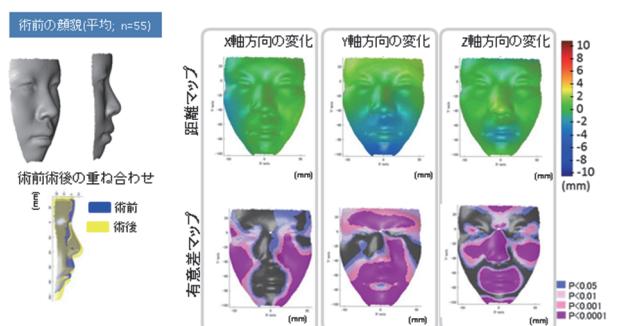


図 5 : 全症例平均の術前術後軟組織変化 (n=55)

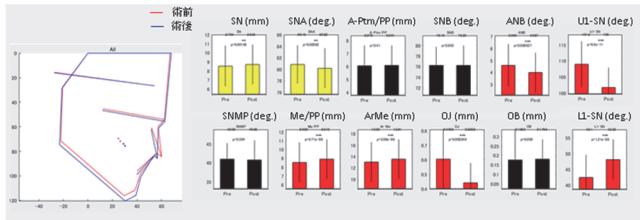


図 6 : 全症例平均のセファロの術前術後変化 (n=55)

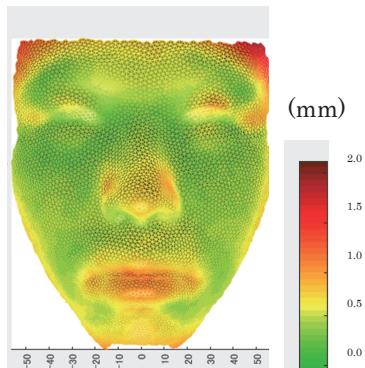


図 7 : 誤差 (予測された顔面表面と実際の治療後の顔面表面の絶対距離)

表 2:誤差の平均、標準偏差、最小、最大(mm)

AveEachPt、AveEachPc の定義は表 1 を参照

	平均	標準偏差	最小	最大
AveEachPc	0.69	0.23	0.28	1.97
AveEachPt		0.17	0.26	1.04

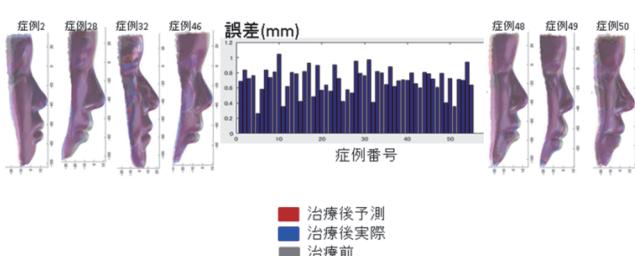


図 8 : 各症例の誤差 (矢印に示した症例を例示した)

#### 4. おわりに

本研究において、抜歯後の三次元顔形態を予測する人工知能システムが開発された。その予測精度は臨床応用可能な範囲であった。

本研究で示された、専門医の“経験”を実装するシステムの構築手法は、今後、他の医療診断や画像処理にも応用可能であると考えられた。[12,13]

#### 5. 謝辞

本研究は、大規模計算機システム公募型利用を通じて、大阪大学サイバーメディアセンターの計算機を利用した成果の一部である。また、本研究は 2018 年度 AMED 橋渡し研究戦略的推進プログラムの支援を受けた。本内容は、第 77 回日本矯正歯科学会学術大会にてポスター発表を行った。

本研究結果は、大阪大学サイバーメディアセンター Lee Chonho 博士の協力を得て、実装された。

#### 参考文献

- [1] Tanikawa C, Takada K. Objective Classification of Nose-lip-chin profiles and Their Relation to Dentoskeletal Traits. *Orthodontics & Craniofacial Research*. Article first published online: 29 MAY 2014 | DOI: 10.1111/ocr.12047
- [2] Tanikawa, C., Yamamoto, T., Yagi, M. and Takada, K.: Automatic Recognition of Anatomic Features on Cephalograms of Preadolescent Children, *Angle Orthod*, **80**, pp. 811–829, 2010.
- [3] Tanikawa, C., Takada, K., van Aalst J. and Trotman, C.A.: Objective 3D assessment of lip form in patients with repaired cleft lip, the cleft palate-craniofacial journal. *Cleft Palate Craniofac J.*, **47**, pp.611-622, 2010.
- [4] Tanikawa, C., Nakamura, K., Yagi, M. and Takada, K.: Lip vermillion profile patterns and corresponding dentoskeletal forms in female adults, *Angle Orthod*, **79**, pp849-858, 2009.
- [5] Tanikawa, C., Kakiuchi, Y., Miyata K., Yagi, M. and Takada, K.: Knowledge-dependent pattern

classification of human nasal profiles, *Angle Orthod*, 77, pp821-830, 2007.

[6] Takada, K., Yagi, M. and Tanikawa, C.: Dependable systems for decisions in clinical dentistry- how electronics implements what dentists know, In : Proc, International Symposium on Advanced Electronics for Future Generations, “Secure-Life Electronics” for Quality Life and Society, The University of Tokyo COE 21, pp15-21, 2005.

[7] Yagi, M., Shibata, T., Tanikawa, C. and Takada, K.: A robust medical image recognition system employing edge-based feature vector representation, In : Proc, Scandinavian Conference on Image Analysis (SCIA), pp534-540, 2003.

[8] Tanikawa, C., Yagi M. and Takada K.: Automated cephalometry: system performance reliability using landmark-dependent criteria, *Angle Orthod*, 79 (6), pp. 1037–1046, 2009.

[9] Tanikawa C, Zere E, Takada K. Sexual dimorphism in the facial morphology of adult humans: A three-dimensional analysis. HOMO. Available online 13 October 2015.

[10] Tanikawa C, Takada K. Test-retest reliability of smile tasks using three-dimensional facial topography. *Angle Orthod*. 2018 May;88(3):319-328. doi: 10.2319/062617-425.1. Epub 2018 Mar 6.

[11] Kono, K., Tanikawa, C., Yanagita, T., Kamioka, H., and Yamashiro, T. (2017). A Novel Method to Detect 3D Mandibular Changes Related to Soft-Diet Feeding. *Front Physiol*. 8:567. doi: 10.3389/fphys.2017.00567

[12] Murata S, Ishigaki K, Lee C, Tanikawa C, Date S, Yoshikawa T: Towards a smart dental healthcare: an automated assessment of orthodontic treatment need, Proc. of International Conference on Informatics and Assistive Technologies for Health-Care, 2017.

[13] Murata S, Lee C, Tanikawa C, Date S: Towards a fully automated diagnostic system for orthodontic treatment in dentistry, In Proc. Of IEEE eScience Conference, 2017.

# 勾配流法を用いた $N_f=2+1$ QCD の エネルギー運動量テンソルの研究

谷口 裕介

筑波大学 計算科学研究センター

## 1. 研究の目的

宇宙論として広く受け入れられているビッグバンモデルによると、宇宙初期には高温高密度の状態が実現されており、そこでは通常ならば核子の中に閉じ込められているクォークとグルーオンが解放されて自由に飛び回るプラズマ状態が実現されていたと予想されている。高温でクォーク・グルーオンプラズマ(QGP)が実現されていることを確かめるために、重イオン衝突の実験が行われ、通常の原子核からプラズマ状態への相転移が起きていることを示すいくつかの証拠が得られている。QGPの存在に対して確証を深めつつある中、実験の興味の対象はQGPの満たすべき状態方程式の解明を始めとするプラズマの物性研究へと移りつつある。その中で注目すべき実験結果がブルックヘブン国立研究所の RHIC 加速器によって得られた。その 2005 年の発表では QGP 中では粒子同士が強く相關しつつ集団運動を行なっており、その性質は流体的であること、流体としては粘性係数が極めて小さく、ほぼ完全流体と見なしでも矛盾がないことが報告された[1]。

この結果を受けて格子 QCD を用いた QGP の粘性係数の数値計算の研究が活発化している。格子 QCD ではクォークとグルーオンの力学を記述する場の理論に基づく第一原理計算が可能であり、重イオン衝突実験と並んで QGP 研究への貢献が期待されている分野である。しかし、現在の粘性係数の計算はクォークを含まないクエンチ近似に基づくものである[2]。これは格子 QCD シミュレーションを用いて QGP の粘性係数を求める時に、主に二つの困難が存在するためである。

一つは格子上ではエネルギー運動量テンソルを保存カレントとしては定義できないという問題である。しかしこれは各演算子に対する繰り込み定数を

非摂動論的に与えることで解決できる。そして、クォークを含まない時のエネルギー運動量テンソルの対角成分に限っては現実的な計算コストでこの繰り込み定数を与えることができる。ただし、粘性係数を引き出すために必要な相関関数はエネルギー運動量テンソルの非対角成分のものであり、ここでは格子上では存在しない回転対称性を仮定することで、これを対角成分からの寄与に置き換えていたという点で不完全な手法である。

二つ目の問題は格子上のユークリッド空間で計算したエネルギー運動量テンソル相関関数から粘性係数を引き出す時に発生する問題である。熱場の理論において粘性係数は相関関数のエネルギースペクトル関数から久保公式を用いることで引き出せるのであるが、虚時間方向を離散化した格子上の相関関数からは原理的には連続関数であるスペクトル関数を引き出すことができないことから来る問題である。この問題に対しては格子点の数を増やし、相関関数の情報精度を上げる以外に原理的な解決法は無く、その意味で計算コストを抑えるためにクォークを取り除いたクエンチ近似が好まれたのである。

## 2. 研究の特色

本研究ではこれらの問題の内、第一の非摂動論的な繰り込みの問題を勾配流(gradient flow)の方法を用いることで根本的に解決することに特徴がある。勾配流の方法とは、理論に現れる全ての場に拡散方程式に従う仮想的な時間発展を課すことで場の量子揺らぎを弱める手法である[3]。

$$\partial_t A_\mu(t, x) = D_\nu G_{\nu\mu}(t, x), \quad (1)$$

ただし、 $A_\mu$  はグルーオン場を表し、 $G_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu -$

$\partial_\nu A_\mu + [A_\mu, A_\nu]$  は場の強さである。相互作用が無い時にはこれら 3 本の方程式は仮想時間  $t$  に従って 4 次元時空中へ拡散して行く様子を表す拡散方程式となる。

近年、この仮想的な時間発展に繰り込み群の流れとしての意味がある事が判明し、格子上の非摂動論的な繰り込みに応用するための手法が開発されてきた[4]。勾配流法による繰り込みはクォーク場を含む場合にも容易に適用でき、エネルギー運動量テンソルの全ての成分を繰り込む事ができる。この繰り込みにおける優位性を生かして、クォークを含む QCD のエネルギー運動量テンソルの相関関数を計算し、そこから QGP の粘性係数を引き出すことが本研究の最終目標である。特に・クォークを含む full QCD の数値シミュレーションを行う、・エネルギー運動量テンソルの非対角成分の相関関数を直接計算する、という二点で世界初の研究となる。また、勾配流法を適用すると、一般に統計誤差が著しく下がり、数値精度が上がることが知られている。この点から、・スペクトル関数の導出に関して、数値精度の面で一定の改善が見込まれることを期待している。

### 3. これまでの発展

我々の研究グループではクォーク・グルーオン・プラズマの研究に関して、主に二つのテーマに取り組んでいる。

- エネルギー運動量テンソルの一点関数から導出されるエネルギー密度、圧力、エントロピー密度等の熱力学量を温度の関数として求めた状態方程式。
- エネルギー運動量テンソルの相関価数から導出される粘性係数等の輸送係数。

更にそれぞれのテーマに対しては計算コストの観点から次の二段階に分けて取り組んでいる。

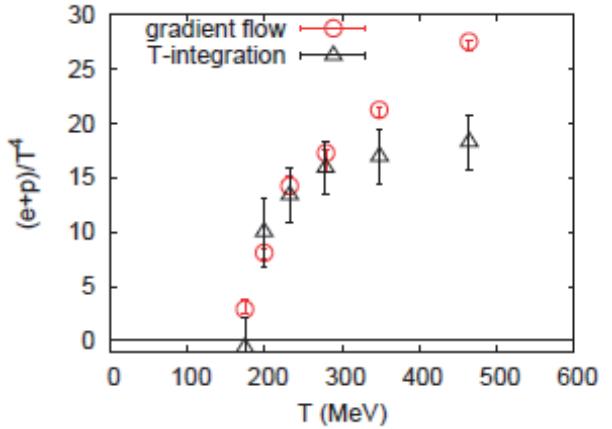


図1: 重いクォークにおけるエントロピー密度。  
横軸は温度。赤丸は今回新たにgradient flow法を用いて導出したものであり、黒三角は従来の方法による計算である。

1. コストを抑えるために up, down クォークの質量を現実のものよりも重くした計算を行い、手法のテストを行う。

2. up, down クォークの質量を現実に即した物理的な値において計算を遂行する。

a.のテーマに関しては重いクォークを用いた 1.の計算を完了し、従来法との比較を行った[5]。図1は（無次元化した）エントロピー密度を温度の関数として描いた状態方程式である。ここで赤丸が gradient flow 法で非摂動論的にくり込んだエネルギー運動量テンソルから直接求めた値である。黒三角は従来から使われていた積分法と呼ばれる手法を用いた結果である。この図からは格子間隔依存性が弱まる低温領域においては gradient flow 法を用いて導出したエントロピー密度は従来法で求めた値と一致していることが読み取れる。

この研究において我々はフレーバー対称性を尊重する目的でウィルソン型のクォークを採用したのであるが、このクォークではカイラル対称性に関連したカイラル凝縮等の計算が困難であった。しかし、今回 gradient flow による繰り込み法を採用したことでのこの困難を回避することができるようになった。この利点を生かしてカイラル感受率の計算を行った（図2）。カイラル凝縮やカイラル感受率はカイラル

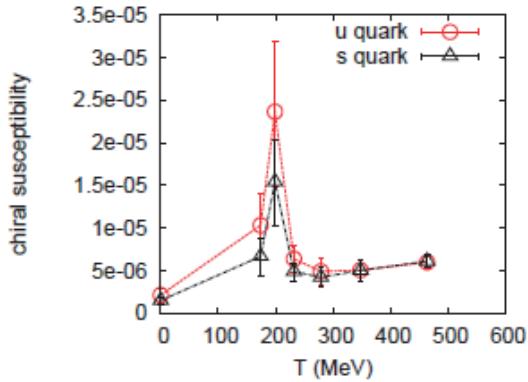


図 2: 温度の関数としてのカイラル感受率。赤丸は up クォーク、黒三角は strange クォークの感受率。

対称性の回復相転移を見るための重要なパラメータである。QCD のクォークにはカイラル対称性と呼ばれる重要な対称性があり、低温では自発的に破れていることが知られている。反対にクォーク・グルーオン・プラズマが実現されるような高温側ではこの対称性は回復している。この二つの相を分けるクロスオーバー相転移の温度はクォークの質量が重い場合には 200MeV 前後にあることが期待されている。その相転移はカイラル感受率のピークとして観測されるのであるが、図 2 に見られるようにその相転移温度が確かに 200MeV 前後であることが確認できた。

b. の輸送係数のテーマに関しては 1. の重いクォークを用いた研究に取り組んでいる。本プロジェクトではエネルギー運動量テンソルの相関関数の計算を行い、そこから粘性係数を引き出す取り組みを遂行した。

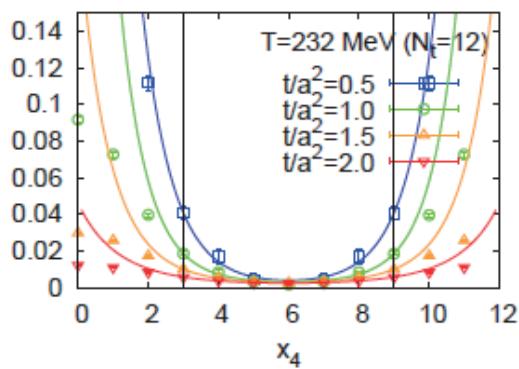


図3: 温度T=232 MeV におけるエネルギー運動量テンソルの2点関数。横軸はユークリッド時間。

図 3 は温度 T=232MeV におけるエネルギー運動量テンソルの 2 点関数  $\Sigma_{\vec{x}} \langle T_{12}(\vec{x}, x_4) T_{12}(0) \rangle$  をユークリッド時間の関数として描いたものである。Gradient flow の仮想時間を変化させた時の様子を色の違いとして書いている。flow 時間を大きくするに従って統計精度が急激に改善していることが見える。

粘性係数をはじめとする輸送係数はエネルギー運動量テンソルの実時間 2 点関数と関係付けられるものであり、図 3 の虚時間相関関数から直接求めることはできない。そのためスペクトル関数を仲立ちとして、虚時間相関関数を解析接続して、実時間相関関数に変換する必要がある。2018 年度の研究ではスペクトル関数の形をモデルからある程度仮定して、相関関数の fit からその形を決定した。図 3 の実線は Breit-Wigner 型のモデルを仮定したフィットである。図 4 は Breit-Wigner 型および hard thermal loop

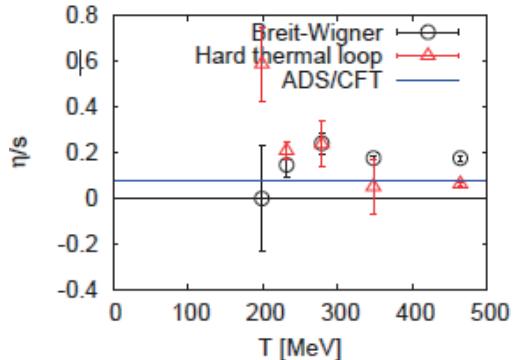


図4: 温度の関数としてのずり粘性係数とエントロピー密度の比。黒丸は Breit-Wigner モデルを仮定した fit から求めた値。赤三角は hard thermal loop モデルを仮定した fit から求めた値。青の実線は AdS/CFT 対応から導出される値  $\eta/s = 1/4\pi$ .

型のモデルを仮定したフィットから引き出されたずり粘性係数を温度の関数として描画したものである。相転移温度以上では実験のモデル fit から求まる  $\eta/s \sim 0.12$  および AdS/CFT の予言である  $\eta/s = 1/4\pi$  と近い値を得ることができている。

#### 4. OCTOPUS による研究の目標

今回大阪大学サイバーメディアセンターの学際大規模共同利用に応募して研究しようとしたのは、2.

の物理的なクォーク質量における、a.のエネルギー運動量テンソルの一点関数の測定である。物理的なクォーク質量における状態方程式を研究するにあたってまず第一に取り組むべきであったのは、全ての温度領域におけるゲージ配位の生成であった。物理的なクォーク質量を採用した場合、QCD は 150MeV 前後の温度でカイラル対称性の回復相転移を起こすことが知られていた。この課題については 2018 年度以前から取り組んでおり、 $157 < T < 548\text{MeV}$  の温度で配位生成を行ってきた。図 5 から見て取れるように  $T > 157\text{MeV}$  においてはカイラル感受率のピークは観測できず、相転移よりも高い温度にいることが判明していた。

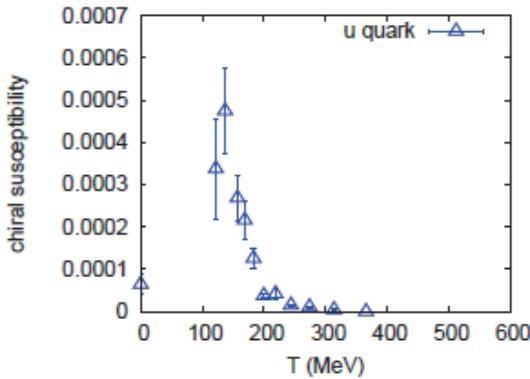


図 5: 物理的なクォーク質量における up クォークのカイラル感受率。横軸は温度。

2018 年度の目標として設定したのは相転移点の確認とその前後の温度におけるゲージ配位の生成である。特に  $T = 137, 122\text{ MeV}$  における配位生成とカイラル感受率の測定を企画した。クォーク質量を物理的な値に設定するとクォークの Dirac 演算子に関する計算量が増大する。更に低温領域では格子体積が増加するため計算コストが膨大となる。これらの温度における配位生成コストは OCTOPUS のみでは負えず、筑波大学学際共同利用(Oakforest-PACS, COMA)、九州大学情報基盤研究開発センター(ITO)に同時に申請をおこない、研究を遂行した。その成果が図 5 に新たに加わった  $T = 137, 122\text{ MeV}$  の二点である。グラフからは  $T = 137\text{MeV}$  にピークがあることが読み取れ、この前後に相転移点があることが明らかとなった。

またエネルギー運動量テンソル一点関数の測定も行い、図 6 の結果を得ている。

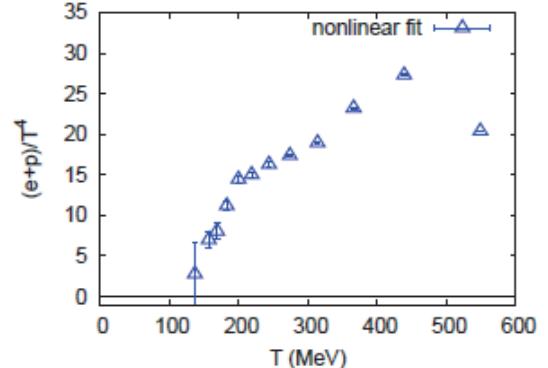


図 6: 物理的なクォーク質量における温度の関数としてのエントロピー密度。

## 5. 今後の展望

物理的なクォーク質量において温度  $T = 137, 122\text{ MeV}$  のゲージ配位生成を行い、カイラル相転移点について暫定的な結果を得ることができた。しかし、これらの二点については統計精度が十分ではなく、2019 年度の資源を用いて十分な数のゲージ配位生成を続けてゆく必要がある。更に相転移温度をより精度よく求めるために  $T = 146\text{ MeV}$  における配位生成を開始している。

## 参考文献

- [1] Y. Akiba *et al.*, arXiv:1502.02730 [nuclex].
- [2] A. Nakamura and S. Sakai, Phys. Rev.Lett. **94**, 072305 (2005).
- [3] M. Lüscher, J. High Energy Phys. **1008**, 071 (2010), Erratum: [J. High Energy Phys. **1403**, 092 (2014)]. J. High Energy Phys. **1304**, 123 (2013).
- [4] H. Suzuki, Progr. Theor. Exp. Phys. **2013**, 083B03 (2013), Erratum: [Progr. Theor. Exp. Phys. **2015**, 079201 (2015)].
- [5] Y. Taniguchi *et al.*, Phys. Rev. D **96**, no.1, 014509 (2017).

# Particle-in-cell シミュレーションによる 高強度レーザー生成プラズマアンジュレータに関する研究

中村 浩隆

大阪大学 大学院工学研究科 電気電子情報工学専攻

## 1. はじめに

近年、量子ビーム技術の進展によって X 線自由電子レーザー(XFEL)という形で X 線領域のレーザーを実現できるようになった。[1-3] その XFEL は基礎研究から産業や国民の生活に役立つ応用研究開発において革新的な成果を創出することが期待されており、XFEL による原子レベルのイメージングやたんぱく質結晶構造解析を飛躍的に発展させる可能性がある。しかし、その研究装置は大型の線形加速器と数百mの長さのアンジュレータから構成されており、その大きさなどの制約から、現在は XFEL 装置を使った実験の機会が非常に限られていると言える。

一方、近年のレーザー技術の進展により 10 TW クラスのレーザーパルスが容易に発生できるようになり、従来では加速器などの大型施設でしか実現できなかつた 100 MeV を超えるようなエネルギーを持つ高輝度電子ビームをテーブルトップサイズ(10m 程度)レーザー装置で生成したプラズマからでも得られるようになった。[4-7] 最近の研究では 1 GeV を超えるようなエネルギーの電子ビームの生成も実現されている。[8, 9] このようなレーザー生成プラズマを用いた加速器を XFEL の電子加速器部分に用いることでシステムの小型化が実現できると期待されている。

またアンジュレータ部の小型化に関する研究も盛んに行われており、磁石の厚みを薄化することで小型化を実現しているが永久磁石を用いた従来の手法では技術的に限界に近くなっていると言える。加速器部と同様にアンジュレータ部もプラズマ中に発生する電磁場を利用して劇的な小型化が可能になると考えられるため、レーザー干渉法 [10] やワイヤー放電プラズマ法 [11]などが提案されている

が実現には至っていない。

本研究ではアンジュレータの小型化を実現するために高強度レーザー生成プラズマを用いたプラズマアンジュレータの新生成法を提案し、その有効性をシミュレーションにより確認した。第 2 章でその手法の原理と利点を説明し、3 章でシミュレーション条件、4 章でその X 線ビーム生成の結果を示している。

## 2. プラズマアンジュレータ生成法の提案

本研究では高強度レーザー生成のプラズマデバイスを利用したアンジュレータの小型化を目指した研究を行った。これまで提案されているプラズマアンジュレータ生成法としてはレーザー干渉法やワイヤー放電プラズマ法などがあるが、前者は周期長を短くするのが困難なため X 線領域のビーム生成が難しく、後者はレーザースポットサイズの制限からアンジュレータの全長を長くすることができないという問題があり実現には至っていない。

この問題を解決するために筆者は図 1 に示すような高強度レーザーを使用した単純な構造のアンジュレータ生成法を提案した。実験配置としてはレーザー加速器などでも使用するガスジェットをターゲットとして高強度レーザーを照射する構造だが、この時あらかじめガスジェットに格子状のマスクを装着することで周期的な密度分布を持たせて、そこにレーザーを照射するというものである。このレーザーと周期的密度構造を持つガスジェットとの相互作用で生成したプラズマに外部から電子ビームを挿入することでその電子を振動させ X 線を放射させる。

この手法は高強度レーザービームが 1 本のみですむことやマスクの格子間隔を調整することで生成される電磁場の周期長を変更することができるこか

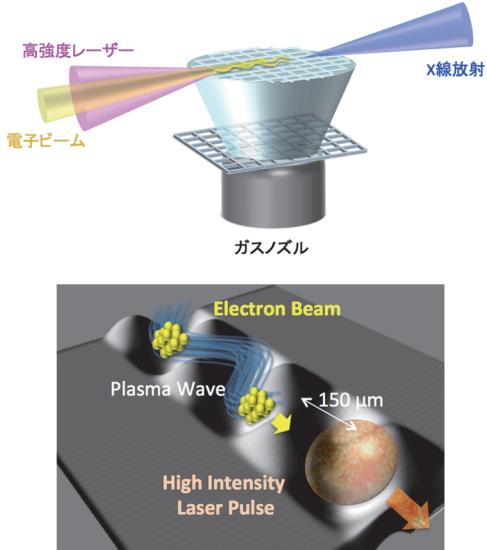


図1：(上) 高強度レーザーを用いたプラズマアンジュレータの新生成法の配置図と (下) 電子ガイドの概念図

らコンパクトなエネルギー可変のアンジュレータとなることが期待される。

### 3. Particle-in-cell シミュレーション法 (PIC 法) の初期条件

第2章で記述したアンジュレータ生成法の有効性を PIC 法を行うことで確認した。

PIC 法とは荷電粒子の相対論的運動方程式と Maxwell 方程式を時間ステップごとに互いに解き進めることによってプラズマや電磁界時間空間発展を行うものであり、次の3つのステップを繰り返し計算していく手法である。(1)粒子の位置、速度から電荷密度、電流密度を求める。(2)電荷密度、電流密度から Maxwell 方程式を用いて電磁場分布を求める。(3)電磁場分布から電磁力を求め、次の時間ステップでの粒子の位置、速度を相対論的運動方程式から求め(1)に戻る。PIC コードの詳しい解説は文献 [12] に示されている。高密度プラズマのシミュレーションは、大量のプラズマ粒子の軌道を計算するため、必要なランタイムメモリーがテラバイト級の大規模並列計算が必要であり SX-ACE システムを使用させていただいた。

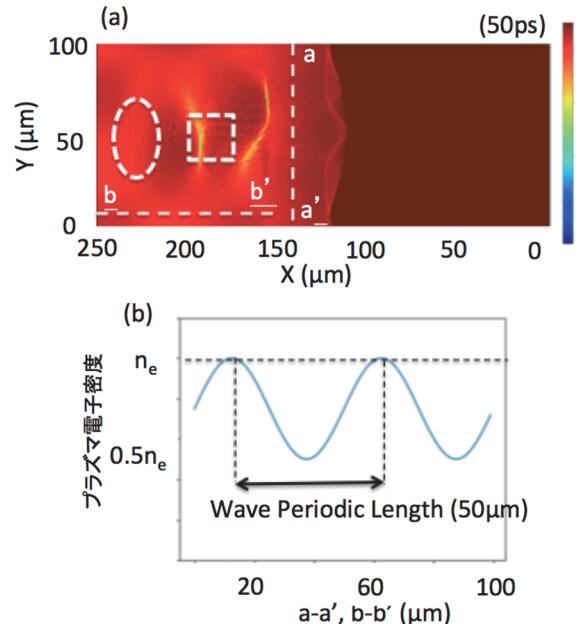


図2：(a) 初期密度プラズマ分布 (プラズマ周期長 50 μm)  
楕円: レーザーパルス位置、四角:電子ビームバンチの位置。  
(b) a-a', b-b'の密度プロファイル、プラズマ電子密度  
 $n_e$  は  $5.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  または  $1.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

計算 Window 内のセルの数は  $3840 \times 800$  とし、レーザーパルスの伝搬に追従する Moving window 法を用いている。計算領域は  $240 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$  でグリッドサイズは X 軸 (レーザー伝搬軸) :  $\lambda/16$ 、Y 軸 (レーザー磁場方向) :  $\lambda/8$  としている。ここで  $\lambda$  はレーザー周波数であり、この計算では  $1 \mu\text{m}$  である。電子はセル当たり 25 個で、イオンの運動は無視している。

図2に周期的密度分布を持つプラズマの初期条件を示している。白色楕円が高強度レーザーパルス位置、四角が外部挿入電子バンチの位置を表しており、レーザーおよびビームの距離は  $70 \mu\text{m}$  としている。レーザーおよび電子ビームは図2の左方向へ伝搬していく。a-a' (Y 軸)、b-b' (X 軸) での初期電子密度のラインプロットを図2(b)に示しており、単純な正弦分布としている。

電子密度最大値  $n_e$  は  $5.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  または  $1.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  で最小値を  $0.5 n_e$  とし、密度の周期長を  $50 \mu\text{m}$ 、 $150 \mu\text{m}$ 、および  $0 \mu\text{m}$  (一様)と設定した。

レーザーパルスのパラメータは波長  $1 \mu\text{m}$ 、集光強度  $1.0 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ 、パルス幅  $20 \text{ fs}$ 、集光サイズ  $20$

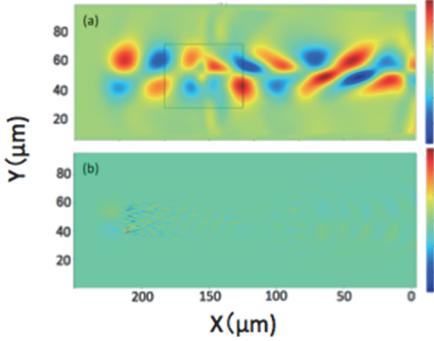


図 3 : プラズマ中に生成された電界分布 (初期密度最大値  $n_e$  (a)  $5.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  (b)  $1.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ )

$\mu\text{m}\phi$  であり、外部挿入電子バンチのパラメータはエネルギー 355 MeV (ローレンツファクター  $\gamma = 700$ )、電荷量 1 pC、ビームサイズ  $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$  と設定した。設定したレーザーや電子ビームのパラメータはレーザー加速器としても容易に得られるパラメータであり、数 m 程度の小型なシステムで得られるレーザー、電子ビームの値とした。

#### 4. プラズマアンジュレータシミュレーション結果

##### 4.1 レーザープラズマ相互作用により生成された電界分布

図 3 にレーザーと周期的密度分布を持つプラズマ(周期長 50 μm)の相互作用により生成された Y 方向(電子ビームの伝搬方向とは垂直方向)の電界分布の例を示している。図 3(a)は電子密度最大値が  $5.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  の場合、図 3(b)は  $1.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  の場合の分布となっている。

図 3(a)では周期的な構造の電界分布が生成されており、電子ビーム伝搬方向の周期長は初期密度分布の長さ 50 μm と一致している。図中の黒い四角の枠は電子ビームの位置を示しているが電子ビームの前方では正負が交互に入れ替わっている分布をしているが、後方では崩れた形状の分布となっている。

一方、図 3(b)ではより高密度のプラズマとの相互作用の結果、電界分布がレーザーパルス近傍のみ発生し、またその分布は複雑な構造をしている。これは高密度領域の不安定な相互作用による。

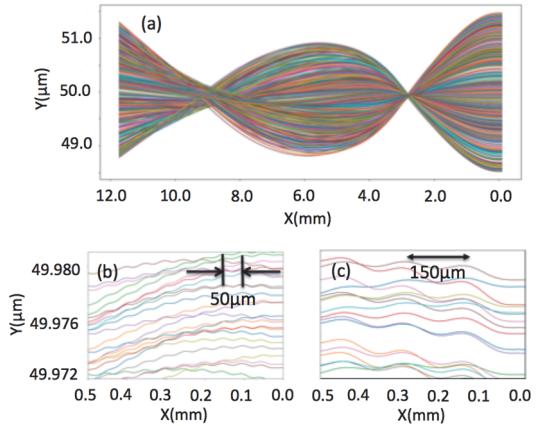


図 4 : (a) プラズマ中での電子ビーム軌道と拡大図 (初期プラズマ周期長(b) 50 μm , (c) 150 μm.)

##### 4.2 周期的構造電界分布中の電子ビームの伝搬

図 4 に周期的電界分布を持つプラズマ中を伝搬する電子ビームの伝搬軌道の結果を示している。図 4(a)は周期長 50 μm、プラズマ密度  $5.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  の場合の 1.5 cm の領域での伝搬軌道を表しており、ビームが発散、収束を繰り返し振動しながら伝搬しているのがわかる。この振動は Budker-Bennett 効果[13]によるプラズマレンズの影響で発生しているが、振動周期が 1.0 cm 以上の長さとなっている。

この場合のそれぞれの電子軌道を拡大したものを図 4(b)に示している。この結果から、電子ビームはそれぞれ 50 μm の周期長で振動していることがわかる。また、プラズマの初期周期長が 150 μm の場合は電子の振動周期長も 150 μm となり、プラズマの初期周期長と一致していることがわかる。

##### 4.3 電子ビームからの X 線放射スペクトル

式(1)[14]を用いて、電子ビームから放射される X 線のエネルギースペクトルをポストプロセス計算により求めた。最終的なスペクトルはそれぞれの電子ビームの軌道に対して計算を行い、電子ビーム密度に応じて重み付けをして合計して算出している。

$$\frac{dI^2}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \omega^2}{4\pi c} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ n' \times (n' \times \beta') \right\} e^{i\omega(t'-n'r(t')/c)} dt' \right|^2 \quad \text{---(1)}$$

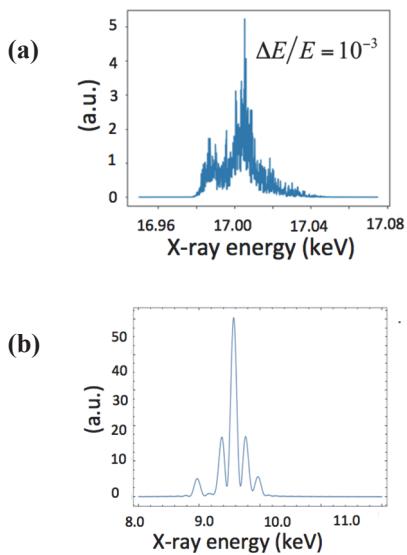


図5：電子ビームから放射されるX線のエネルギースペクトル(初期プラズマ周期長(a) 50 μm, (b) 150 μm)

図5(a)に示したように振動周期長 50 μm の場合は 17 keV の単色 X 線ビームが得られ、150 μm の場合は 9-10 keV の単色 X 線ビームが得られた。

これらの結果からプラズマアンジュレータを用いて単色 X 線ビームが得られることが示され、プラズマの密度周期長を変更することで X 線のエネルギーを制御できることが示された。

## 5. おわりに

エネルギー可変の単色小型X線源の実現を目的として、高強度レーザーを用いた新しいプラズマアンジュレータ生成法を提案し、その有効性を PIC 法により確かめた。

レーザーのエネルギー 10mJ 程度、集光強度  $10^{17}$  W/cm<sup>2</sup>、プラズマ密度  $5.5 \times 10^{17}$  cm<sup>-3</sup>、初期プラズマ周期長 150 μm、電子エネルギー 355MeV の条件で 9-10 keV の単色 X 線ビームの実現を計算により確かめた。

これらの条件を満たす装置は 1-2m 程度で設計することができ、さらにレーザー加速器と組み合わせることで全装置が 5 m 程度の大きさでエネルギー可変単色 X 線発生装置として実現することが可能になると期待できる。

## 参考文献

- (1) T. Ishikawa et al., "A compact X-ray free-electron laser emitting in the sub-ångström region" Nat. Photon. 6, 540 (2012).
- (2) P. Emma et al., "First lasing and operation of an ångstrom-wavelength free-electron laser", Nat. Photon. 4, 641 (2010).
- (3) M. Altarelli et al., "The European X-Ray Free-Electron Laser, Technical Design Report", DESY Hamburg, (2006), <http://xfel.desy.de/tdr/tdr/>.
- (4) T. Tajima and J. M. Dawson, Phys. Rev. Lett. 43, 267 (1979).
- (5) S. P. D. Mangles et al., "Mono-energetic beams of relativistic electrons from intense laser-plasma interactions", Nature, 431, 535-538 (2004).
- (6) C. G. R. Geddes et al., "High-quality electron beams from a laser wake-field accelerator using plasma-channel guiding", Nature, 431, 538-541 (2004).
- (7) J. Faure et al., "A laser-plasma accelerator producing mono-energetic electron beams", Nature, 431, 541-544 (2004).
- (8) Ian Blumenfeld et al., "Energy doubling of 42 GeV electrons in a metre-scale plasma wakefield accelerator", Nature, 445, 741–744 (2007)
- (9) J. Gonsalves et al., "Petawatt Laser Guiding and Electron Beam Acceleration to 8 GeV in a Laser-Heated Capillary Discharge Waveguide", Phys. Rev. Lett. 122, 084801 (2019)
- (10) 鈴木康夫 et al., "電場型プラズマ・アンジェレーターの解析", JAERI research 95-009(1995).
- (11) 池畠 隆 et al., "レーザー干渉共鳴イオン化法を用いたプラズママイクロアンジュレーターの形成", JAERI-Research 95-028 (1995).
- (12) C. K. Birdsall and A. B. Langdon, "Plasma physics via computer simulation", CRC press (2004).
- (13) W. Bennett, "Self-Focusing Streams", Physical Review 98, 1584 (1955).
- (14) J. D. Jackson, "Classical Electrodynamics", Wiley (1965).

# 日本全国の位置情報付き仮想の個票合成手法の精緻化

原田 拓弥<sup>1)</sup>、村田 忠彦<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>青山学院大学 理工学部 経営システム工学科

<sup>2)</sup>関西大学 総合情報学部 総合情報学科

## 1. はじめに

災害対策や経済対策などの政策決定において、全体的な影響だけでなく、その政策の個々の市民への影響を見る必要性が高まっている。その方法の 1 つとして社会シミュレーションへの関心が集まっている [1]。特に個々の市民のシミュレートを可能にする Agent-Based Simulation (以下、ABS) [2]がよく利用されている。ABS は、意思決定主体（人や組織、国など）がもつ特徴を属性や振る舞いとして保持するエージェントを定義し、他のエージェントや環境との相互作用による振る舞いをマクロ・ミクロに観察する手法である。ABS を用いることにより、得られたシミュレーション結果が発生する原因や、エージェントの振る舞い及び環境の変化が双方に与える影響の分析が可能となる。

これまでの多くの社会シミュレーションではモデルを単純化せよという “Keep It Simple, Stupid” (以下、KISS 原理) [3] に基づいてモデル化されていた。KISS 原理に基づくモデルは、少数のパラメータからなるシンプルなモデルであり、社会現象の原理的な理解が主な目的である[4]。したがって、特定の地域・事例・状況などの分析を目的としたシミュレーションを行うためには、一般的な帰結から具体事例へのさらなる推論が求められる。また、現実の社会現象と KISS 原理に基づくモデルを用いたシミュレーションには乖離があり [5]、乖離を埋めるために、シミュレーション結果の補完が必要である [6]。このような状況から、現実社会の複雑な現象を理解するためには、KISS 原理に基づくモデルを逸脱する必要がある [7]。そのため、特定の地域・事例・状況に関するパラメータをもつモデルを用いた社会シミュレーションが期待されている。このようなモデルにおいて、モデルの粒度を現実社会に近づけるほ

ど、エージェントの意思決定においても、可能な限り現実の意思決定主体と同様の振る舞いを模倣する必要がある。

現実社会を模倣するモデル上で、エージェントが現実の意思決定主体を模倣した意思決定をモデルに組み込むためには様々な課題がある。その課題の 1 つがエージェントの保持する属性の設定である。エージェントの属性の設定に政府や行政が収集している戸籍や納税のデータを用いることができれば、現実社会と整合するエージェントの属性の設定が可能であるが、これらの個人の情報は個人情報保護やプライバシーの観点から利活用が困難である。

このような状況から、政府統計をはじめとする利活用可能な統計情報から、仮想的な属性を持つ個人で構成される人工社会（以下、仮想都市）を合成し、その仮想都市の中でどのような事象が発生するかを観察する社会シミュレーションが行われるようになっている[8-10]。市川ら[8]は東京都大島町を対象とし、感染症拡大のシミュレーションを実施するに当たり、500m 四方の人口分布や従業員数などの情報を用いて仮想都市を構築している。花岡[9]は京都市の京町家の取り壊しの分析に当たり、パーソントリップ調査や国勢調査などの情報を用いて仮想都市を構築している。杜ら[10]は日本全国の公的年金制度の所得代替率の考察に当たり、100 分の 1 スケールの仮想都市を合成した。その際に、1 歳階級の人口分布を用いて各エージェントの年齢や性別などの属性を設定した。

これらの研究のように、特定の状況をパラメータとしてもつモデルを用いてシミュレーションを行う場合、研究者はシミュレーションモデルだけでなく、モデルを適用する仮想都市の構築に取り組む必要がある。特に、仮想都市の構築において、エージェン

トが保持する属性の数が増加するほど、妥当な仮想都市の構築が困難となる。仮想都市の構築が研究者の負担となり、新規参入の障壁となっている。

これらの問題を解決するために、統計情報を用いた仮想の個人の属性（以下、仮想個票）を合成する研究が行われている。仮想個票の合成に関する研究の歴史は古く、Synthetic Reconstruction method（以下、SR 法）[11]として知られている。その後、数多くの仮想個票を合成する手法が提案されているが、基本的に SR 法に基づく手法である。Barthelemy ら[12]は、SR 法の弱点として、個人の統計表と世帯の統計表のどちらかに適合する仮想個票の合成ができたとしても、両方に適合する仮想個票の合成が困難であることを指摘している。この課題を解決するため、Gargiulo ら[13]や Barthelemy ら[12]は、個票データのサンプルを用いない合成手法を提案している。Lenormand ら[14]は、SR 法と個票データのサンプルを用いない手法と比較し、前者がよりよく仮想個票を合成できていることを示した。

これらの海外の研究では、それぞれの国において利活用可能な統計情報や世帯構成の特徴に基づいた手法が開発されている[13]。日本の統計表を用いた手法として花岡[15]は個票データのサンプルを用いた手法を提案している。一方、著者ら[16, 17]は個票データのサンプルを用いずに、探索手法の 1 つである Simulated Annealing（以下、SA 法）を用いた手法を提案している。著者らが合成した仮想個票の例を図 1 に示す。図 1 では世帯の属性として、家族類型・所属する市区町村及び町丁目・居住地の位置情報・住宅所有の関係・住宅の建て方属性を、各構成員は年齢・性別・世帯内の役割・就業状態・産業分類・就業形態・企業規模・所得属性を保持している。

本研究では、日本全国、約 1700 市区町村において、従来手法[16]より精緻な仮想個票を 10 セット作成合成する。従来手法は都道府県単位で仮想個票を合成する手法を市区町村単位で適用していた。人口 20 万人未満の市町村では、個人が特定されないように、人口 20 万人以上の市区町村と比べ粗い統計情報のみ公開されている。人口 20 万人未満の市町村を合成

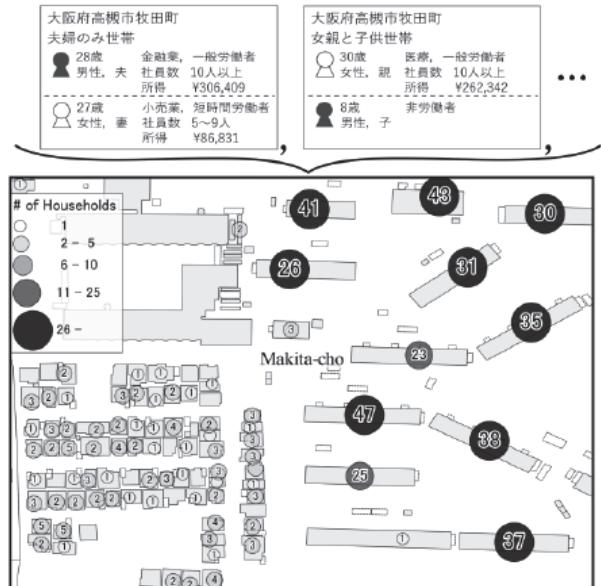


図 1 合成する仮想個票の例

するためには、公開されていない統計表を推計するか、都道府県の統計表を縮小する必要があった。そのため、市区町村単位で合成した仮想個票を統合し、都道府県単位の仮想個票を作成する場合、例え市区町村単位の仮想個票が使用した統計表と完全に一致している場合においても、統合した仮想個票を都道府県単位の統計表と比較すると差異が発生する恐れがあった。

本研究では、各仮想個票が市区町村属性を保持しつつ、都道府県の統計表にも適合する仮想個票の合成手法を提案する。具体的には、ある都道府県を構成する市区町村の仮想個票を一度に合成する。その際に、統計表の調査範囲と仮想個票の市区町村を対応させることにより、統計表の推計や過度な縮小作業が不要となる。

## 2. 従来手法

従来手法[16]は、統計情報を基に作成した仮想個票を、複数の統計表に適合させる手法である。個人の年齢や親子の年齢差の統計表に対して、コンピュータ上で再現した世帯構成のデータ集合（仮想個票）の統計値との誤差を計算し、SA 法を用いて誤差を最小化している。仮想個票は複数の世帯とその構成員である個人によって構成される。著者らの手法は、統計表の対象地域と同じ人口規模の仮想個票

の合成を試みている。

著者らは、対象地域と同じ人口規模の仮想個票を合成するために、世帯数や人口などの統計表通りに初期世帯を合成している。著者らの初期世帯合成法[16]では、家族類型、世帯人員別に初期世帯を合成し、その後に個人の性別と初期の年齢を設定している。初期世帯を合成する際には、国勢調査 人口等基本集計 表 7、表 11、表 16-1 を用いて推計した家族類型、世帯人員別世帯数のデータを用いる。例えば、夫婦と子供世帯において世帯人員数が 8 人の世帯が 100 世帯と統計表に記載されている場合、夫婦と子供世帯における子供が 6 人存在する世帯を 100 世帯合成する。その後、国勢調査 人口等基本集計 表 16-1 を用いて各個人の性別と年齢を設定する。

初期世帯合成後、以下の手続きにより仮想個票と統計表との差を SA 法により最小化する。

- Step 1 仮想個票内の同じ家族類型かつ性別の個人をランダムに 2 人選択する。
  - Step 2 選択した 2 人の年齢を入れ替える。
  - Step 3 仮想個票と統計表との差を計算する。
  - Step 4 メトロポリス法により解を遷移判定する。
  - Step 5 探索回数に達するまで Step1 に戻る。
- Step 3 では、次式を用いて仮想個票と統計表との差を計算している。

$$f(A) = \sum_{s=1}^S \sum_{j=1}^{G_s} |c_{sj} - R_{sj}| \quad (1)$$

ここで、 $A$  は仮想個票、 $S$  は最適化に用いる統計表の数、 $G_s$  は統計表  $s$  の項目数、 $R_{sj}$  は統計表  $s$  の項目  $j$  における統計値である。 $c_{sj}$  は統計表  $s$  の項目  $j$  における仮想個票から作成した仮想の統計値である。

Step 3 では次の統計表との差を計算している。

- 統計表 1 父子年齢差
- 統計表 2 母子年齢差
- 統計表 3 夫婦年齢差
- 統計表 4 単独世帯の男性の人口分布（1 歳階級）
- 統計表 5 単独世帯の女性の人口分布（1 歳階級）
- ⋮
- 統計表 21 夫婦、子供とひとり親世帯の女性の人口分布（1 歳階級）

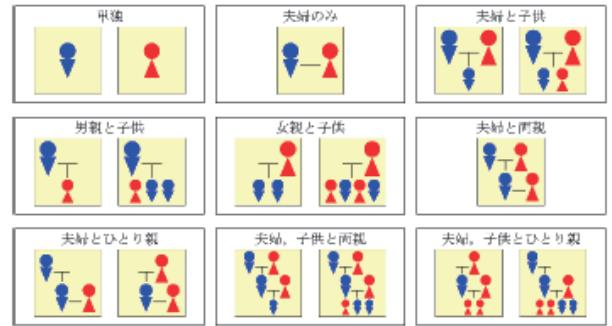


図 2 合成対象の 9 種類の家族類型

なお、統計表 4~21 は図 2 に示す 9 種類の家族類型における男女別の 1 歳階級の人口分布である。人口 20 万人未満の地域においてこれらの統計表は 5 歳階級の人口分布のみ公開されている。そのため、従来手法を用いるためには、5 歳階級を 1 歳階級に推計する必要がある。

### 3. 提案手法

本研究では、市区町村属性を保持しつつ、都道府県下の市区町村を一度に合成する。そのため、従来手法の初期解合成法と SA 法で最小化する統計表、最適化の手続きを変更する。

初期世帯を合成する際には、都道府県下のすべての市区町村を合成する。各市区町村の初期世帯を合成する際には従来手法を用いる。

従来手法と提案手法における SA 法により最小化する統計表とその適用範囲を図 3 に示す。図 3 (a) に示す従来手法では、都道府県下の市区町村を独立に合成していた。そのため、統計表 1~3 を縮小して使用していた。また、人口 20 万人未満の統計表 4~21 は 5 歳階級から 1 歳階級へ推計して使用していた。

図 3 (b) に示す提案手法では、統計表 1~3 は同じ調査範囲で使用する。また、統計表の推計をさける。そのため、人口 20 万人未満の市町村の統計表 4~21 は 5 歳階級の人口分布を用いる。この場合、5 歳階級内の 1 歳ごとの人口に偏りが生じる恐れがあるため、本研究では、次の統計表を追加する。

- 統計表 22 男性の人口分布（1 歳階級）
- 統計表 23 女性の人口分布（1 歳階級）

提案手法の最適化の手続きでは Step 1 を次のように変更する。

人口20万以上	A市	都道府県の(1)	都道府県の(2)	A市の(3)	A市の(4)	…	A市の(21)
	B市	都道府県の(1)	都道府県の(2)	B市の(3)	B市の(4)	…	B市の(21)
	C市	都道府県の(1)	都道府県の(2)	C市の(3)	C市の(4)	…	C市の(21)
人口20万未満	D市	都道府県の(1)	都道府県の(2)	市部の(3)	D市の(4)	…	D市の(21)
	E市	都道府県の(1)	都道府県の(2)	市部の(3)	E市の(4)	…	E市の(21)
人口20万未満	F町	都道府県の(1)	都道府県の(2)	郡部の(3)	F町の(4)	…	F町の(21)
	G町	都道府県の(1)	都道府県の(2)	郡部の(3)	G町の(4)	…	G町の(21)

(a) 従来手法

人口20万以上	A市	A市の(3)	A市の(4)	…	A市の(21)
	B市	B市の(3)	B市の(4)	…	B市の(21)
	C市	C市の(3)	C市の(4)	…	C市の(21)
人口20万未満	D市	D市の(4)	…	D市の(21)	D市の(22)
	E市	E市の(4)	…	E市の(21)	E市の(22)
人口20万未満	F町	F町の(4)	…	F町の(21)	F町の(22)
	G町	G町の(4)	…	G町の(21)	G町の(22)

(b) 提案手法

図3 従来手法と提案手法における統計表の適用範囲（図中の(1)～(23)は統計表の番号である）

Step 1-1 個人をランダムに 1 人選択する。

Step 1-2 後述する条件に該当する個人を選択する。

Step 1-2 では、Step 1-1 で選択した個人によって選択する個人の条件を変更する。Step 1-1 で選択された個人が人口 20 万人以上の市区に属している場合、Step 1-2 では、選択されている個人と同じ市区かつ家族類型かつ性別の個人をランダムに選択する。

一方、Step 1-1 で選択された個人が人口 20 万人未満の市町村に属している場合、以下の候補からランダムに選択する。

- Step 1-1 で選択された個人と同じ市町村かつ家族類型かつ性別の個人
- 人口 20 万人未満の市町村の個人のうち、Step 1-1 で選択された個人と同じ家族類型かつ性別かつ年代の個人

#### 4. 実験結果

本研究では、日本全国の約 1900 市区町村における 2010 年と 2015 年を対象に仮想個票を 10 セット合成する。式(1)により算出した統計表との誤差を表 1 に示す。なお、表 1 の算出には 47 都道府県の統計表 1～21 を用いた。これは、従来手法と提案手法で最小化する統計表の種類と数が異なるためである。

表 1 から統計表との誤差を 92.3% 削減できている。これは、統計表の推定を避けたことと統計表と同じ調査範囲で使用したことにより、都道府県の統計表との誤差を削減できた。

表1 統計表との誤差（10 試行の平均値）

	従来手法	提案手法
統計表との誤差	3,427,773.0	260,563.4
1 人当たりの誤差	0.0295 / 人	0.0022 / 人

#### 5. おわりに

本研究では、日本全国の約 1900 市区町村における、2010 年と 2015 年の統計情報を用いた、図 1 に示す属性をもつ仮想個票を 10 セット作成した。これらの仮想個票は、次の Web サイトで提供を開始している (<http://www.res.kutc.kansai.u.ac.jp/~murata/rss distribution/>)。

#### 参考文献

- (1) J. M. Epstein and R. L. Axtell, MIT Press, (1996).
- (2) K. M. Carley and W. A. Wallace, Springer US, (2001).
- (3) R. Axelrod, Princeton University Press, (1997).
- (4) 高橋真吾, 計測と制御, **52**, 582–587, (2013).
- (5) 出口弘, 計測と制御, **52**, 574–581, (2013).
- (6) 高橋大志, 計測と制御, **52**, 641–647, (2013).
- (7) 寺野隆雄, 人工知能学会誌, **18**, 6, 710–715, (2003).
- (8) 市川学, 出口弘, 計測自動制御学会論文集, **49**, 11, 1012–1019, (2014).
- (9) 花岡和星, 地学雑誌, **118**, 4, 646–664, (2009).
- (10) 杜逆索, 村田忠彦, システム制御情報学会論文誌, **29**, 9, 422–431, (2016).
- (11) A. G. Wilson and C. E. Pownall, Area, **8**, 4, 246–254, (1976).
- (12) J. Barthelemy and P. L. Toint, Transportation Science, **47**, 2, 266–279, (2012).
- (13) F. Gargiulo, et. al., PLoS One, **5**, 1, 266–279, (2010).
- (14) M. Lenormand and G. Deffuant, Journal of Artificial Societies and Social Simulation, **16**, 4, 1–9, (2013).
- (15) 花岡和星, 人文地理, **64**, 3, 195–211, (2012).
- (16) T. Murata, et. al., SICE JCMSI, **10**, 6, 513–519, (2017).
- (17) T. Harada and T. Murata, SICE JCMSI, **10**, 6, 505–512, (2017).

# 多様な星形成環境における連星形成可能性

樋口 公紀

九州大学 大学院理学府 地球惑星科学専攻

## 1. はじめに

宇宙は誕生してから現在まで日々刻々と進化を続けている。この宇宙の力学的・化学的進化を知るためにには、その時代・その環境での星形成を理解することが重要である。というのも、星は宇宙の最も基本的な構成要素であり、その形成過程は、周囲の環境に影響され変化し、また、形成過程で生じる現象が、周囲の環境に影響を与えるからである。

形成過程で生じる現象として、質量放出現象（アウトフロー や ジェット）があげられる。銀河系内の、いわゆる現在の星形成において、普遍的にアウトフロー（低速度成分）やジェット（高速度成分）が観測されている (Richer et al. 2000; Beuther et al. 2002; Swift & Welch 2008; Duarte-Cabral et al. 2013; Wang et al. 2014b; Dunham et al. 2014 他)。これらの現象の駆動メカニズムや星形成に与える影響は、理論的に調べられており、磁場の効果によって駆動し、大部分の角運動量をガス雲中心から外部に輸送できることが示されている (Tomisaka 2000; Banerjee & Pudritz 2006; Machida et al. 2007; Tomida et al. 2015; Tsukamoto et al. 2015 他)。原始星形成時、原始星の周囲には円盤（原始惑星系円盤）が形成される。形成当初の原始惑星系円盤は非常に重いため、自己重力不安定性によって分裂する場合がある。アウトフローによって、十分に角運動量が外部に輸送されなければ、角運動量が分裂片に軌道角運動量として残る可能性が高い。つまり、ガスの分裂が起こり、将来的に連星系が形成する可能性が高くなる。以上より、アウトフローが駆動するかどうかは、角運動量輸送過程を大きく変えるため、極めて重要である。

現在の星形成に関しては観測的にも理論的に調べられており、多くのことが分かってきた。しかし、銀河系外の星形成については、観測的には現在の望遠鏡の分解能では足りず、調べることができない。

そのため、銀河系外の星形成に関して、アウトフロー・ジェットの駆動や分裂に関して、理論的に調べることは、銀河系内外の多様な星形成を理解するための唯一の方法である。

## 2. モデルと数値計算手法

基本的なモデル設定と数値計算手法は、Higuchi et al. (2018, 2019) と同様であるため、そちらを参照されたい。本研究では、初代銀河やスターバースト銀河といった銀河系外環境に焦点を当て、初期にガス雲が持つ金属量 ( $Z/Z_{\text{Sun}} = 0, 10^{-7}, 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}$ ) とイオン化度 ( $C_{\zeta} = 0, 0.01, 1, 10$ ; 宇宙線強度と放射性元素崩壊で生じる  $\gamma$  線強度) を組み合わせ、24通りの極低金属量星形成環境を設定する。金属量は星の進化と関連するため、宇宙の各々の時代に対応する。また、イオン化度は電離源の強度に関係しており、周囲の環境に対応する (Susa et al. 2015; Higuchi et al. 2018, 2019)。

設定した 24 通りの星形成環境それぞれに対して、Bonner-Ebert 密度プロファイルを持つコアを初期条件（中心数密度は  $n_{c,0} = 1.0 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ 、温度は one-zone 計算した結果を引用）とした。それぞれのコアにおいて、初期の熱エネルギーと重力エネルギーの比 ( $\alpha_0$ ) が 0.47、回転エネルギーと重力エネルギーの比 ( $\beta_0$ ) が  $1.84 \times 10^{-2}$  とした。初期に与えた磁場は初期質量磁束比 ( $\mu_0$ ) を 3 と定義し、それぞれの環境に応じた初期磁場強度を与えた。

以上の初期条件のもと、コアから原始星形成まで、多層格子法を用いた non-ideal MHD シミュレーションを行った (多層格子法の詳細 : Machida et al. 2004; Machida et al. 2005; Machida et al. 2007, 2008)。基礎方程式については Higuchi et al. (2018, 2019) と同様である。

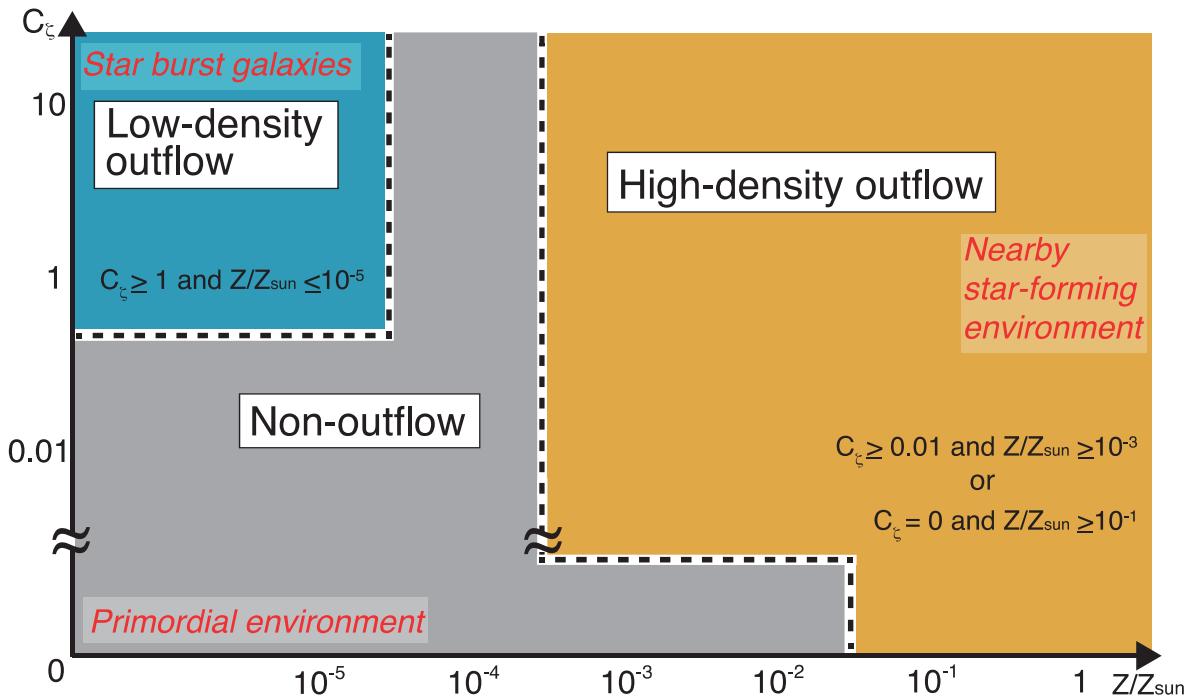


図 1 シミュレーション結果。横軸が金属量、縦軸がイオン化パラメータである。背景オレンジ色領域が太陽系近傍で見られる、first core 段階（数密度  $n > 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ; high-density outflow）で駆動したモデル、背景青色領域が形成過程のより初期段階（数密度  $n < 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ; low-density outflow）で駆動したモデル、背景灰色領域が原始星形成までアウトフローが駆動しなかったモデルである。Higuchi et al. (2019)より引用。

### 3. 銀河系外の星形成過程

#### 3-1. アウトフロー

銀河系内、太陽系近傍の星形成領域では普遍的に駆動するとされるアウトフローだが、銀河系外の星形成領域は望遠鏡の分解能が足りず、調べられてきていない。そこで、銀河系内外の星形成環境を再現し、原始星が形成されるまでに、アウトフローが駆動するかどうかを調べた (Higuchi et al. 2019)。図 1 が、そのシミュレーション結果である。背景オレンジ色、青色の領域では、アウトフローが駆動し、背景灰色の領域ではアウトフローが駆動しなかった。横軸の金属量( $Z/Z_{\text{sun}}$ )は星の進化と関連するため、宇宙の各々の時代に対応する。金属量が増えていくほど、宇宙は時間進化し、 $Z/Z_{\text{sun}} = 1$  が現在に対応する。宇宙初期の星形成環境における星形成過程では、アウトフローは駆動せず、宇宙進化に伴って、星形成過程でアウトフローが駆動するようになることが分かった。そして、その遷移は、およそ、 $Z/Z_{\text{sun}} \approx 10^{-4}\text{--}10^{-3}$  で起こっていることが示唆され

た。アウトフローの駆動メカニズム等、詳細に関しては Higuchi et al. (2019)を参照されたい。

#### 3-2. 分裂・ジェット

Higuchi et al. (2019)の結果から、アウトフローは銀河系外では普遍的に駆動しないことが示唆された。アウトフローによって十分に角運動量が外部に輸送されなければ、角運動量がガス雲中心部に残る。したがって、原始星形成時に、周囲に形成される原始惑星系円盤が分裂する可能性が高くなる。宇宙初期の特に、初代星形成過程では銀河系内の星形成過程よりも連星を形成しやすいことが示されている (Machida et al. 2008) が、初代星形成環境以外での分裂に関して言及していない。そこで、Higuchi et al. (2019)でアウトフローが駆動しなかった金属量領域を中心とし、 $Z/Z_{\text{sun}} \approx 0\text{--}10^{-3}$  における分裂可能性について言及するため、数値シミュレーションを行い、図 2 にシミュレーション結果の 3 次元図を示した。

図 2 のオレンジ線で囲まれた領域では分裂は見

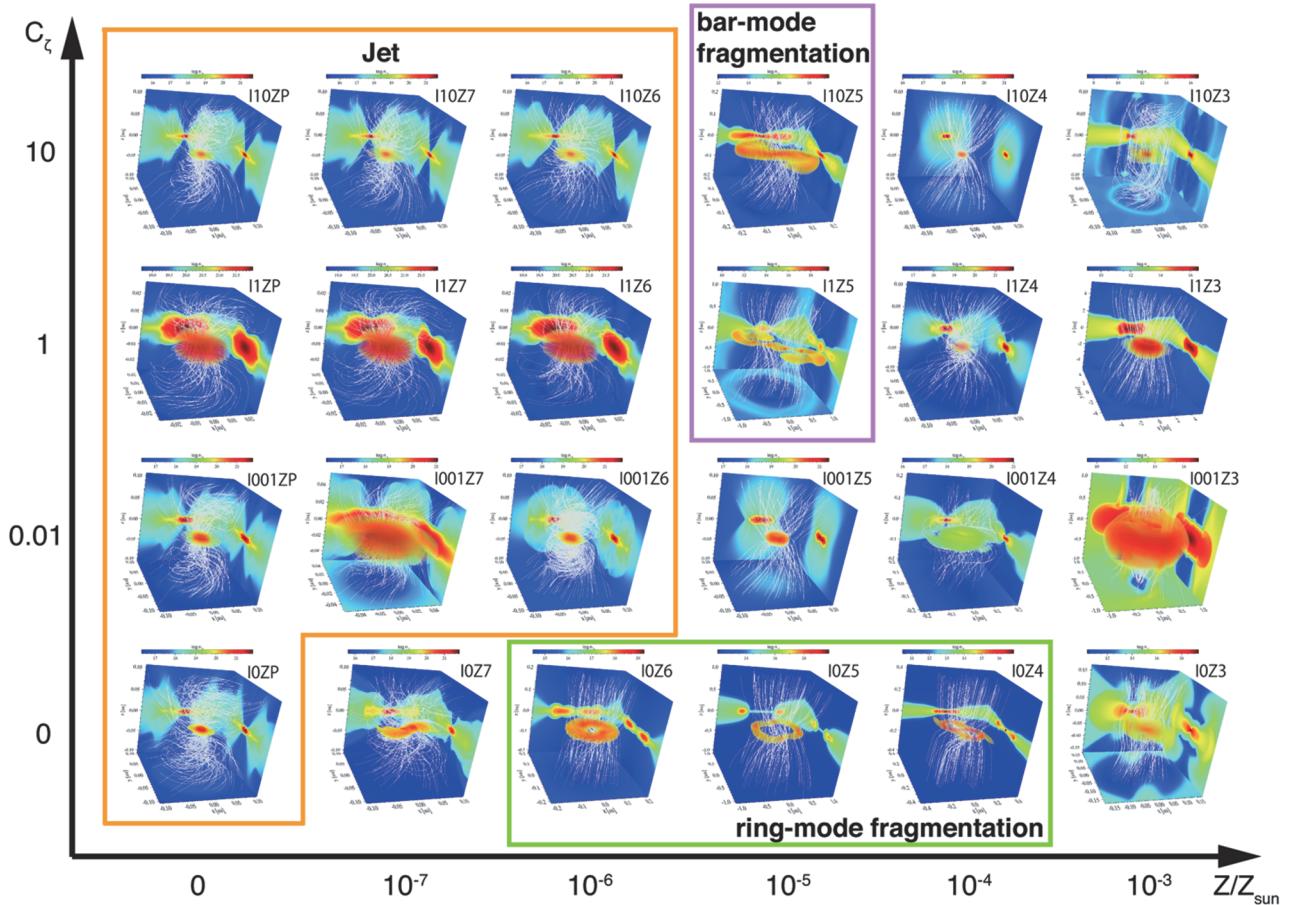


図 2 原始星形成時のシミュレーション結果。横軸が金属量、縦軸がイオン化パラメータである。それぞれの 3 次元図右上にモデル名を記載（例：I0ZP は  $C_\zeta = 0, Z/Z_{\text{sun}} = 0$  を示し、I10Z3 は  $C_\zeta = 10, Z/Z_{\text{sun}} = 10^{-3}$  を示す）。カラーコントアは数密度、白線は磁力線を表す。オレンジ線で囲まれたモデルはジェットが駆動したモデル、紫線、緑線で囲まれたモデルは分裂が見られたモデルである。

られず、単星が中心部に形成され、その原始星からジェットが駆動したことが確認された。初代星形成モデル（モデル I0ZP）の今回の結果は Machida et al. (2008)と整合的な結果となった。

緑線、紫線で囲まれたモデルでは、今回のシミュレーション時間内に、分裂が見られたモデルである。特に紫線で囲まれたモデルは、bar-mode の分裂が見られ、緑線で囲まれたモデルは、ring-mode の分裂が見られた。ring-mode は分裂片間の軌道角運動量が大きくなるため、連星や複数星として生き残る可能性が高い(Matsumoto & Hanawa 2003; Machida et al. 2005, 2008)。線で囲まれていない領域のモデルでは、ジェットや分裂は見られなかったが、比軸対称構造が見られている。

シミュレーションでは、およそ  $Z/Z_{\text{sun}} \leq 10^{-6}$

においては、分裂が確認されず、 $Z/Z_{\text{sun}} \approx 10^{-5}$  において、分裂が多く見られることが分かった。今回、初期に質量磁束比 ( $\mu_0$ ) を 3 と定義し、初期磁場を与えている。磁場強度が強ければ強いほど、分裂が抑制される (Machida et al. 2008)。磁場は分裂を抑制するセンスに力が働くが、今回の状況下でも分裂したモデルは、進化の長い段階において、磁場が散逸しやすい環境であり (Susa et al. 2015; Higuchi et al. 2018)、非常に分裂しやすい環境であることが示された。

#### 4. ブラックホール(BH) 連星形成の可能性

近年ブラックホール(BH)連星の存在が重力波の検出によって明らかになり、この数十太陽質量同士の BH 連星が宇宙のいつ、どこで、どのように誕生す

るかが問題となっている。一般的な BH 連星形成シナリオとして、孤立した 2 つの大質量星からなる連星（大質量星連星）からの形成が挙げられるが、こういった連星形成が起こりやすいのはいつ、どういった環境なのか、まだ議論が続いている。

今回シミュレーションは星形成の前期段階のみの結果であるが、分裂したモデルに関しては、連星が形成されやすい環境であり、星形成後期段階に十分な質量を獲得することができれば、BH 連星になる可能性が存在する。

## 謝辞

今回の研究は、九州大学 町田正博准教授と甲南大学 須佐元教授との共同研究として実施しており、多数の議論・アドバイスをしていただきました。感謝いたします。3D plot に関して、千葉大学 松本洋介さんに多大なる協力をしていただきました。この場をお借りしてお礼申し上げます。また、本研究成果は、大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータシステム SX-ACE を利用して得られたものです。感謝いたします。

## 参考文献

- (1) Banerjee R., Pudritz R. E., 2006, ApJ, 641, 949
- (2) Beuther H., Schilke P., Sridharan T. K., Menten K. M., Walmsley C. M., Wyrowski F., 2002, A&A, 383, 892
- (3) Duarte-Cabral A., Bontemps S., Motte F., Hennemann M., Schneider N., Andre P., 2013, A&A, 558, A125
- (4) Dunham, M. M., Arce, H. G., Mardones, D., et al. 2014, ApJ, 783, 29
- (5) Higuchi, K., Machida, M. N., & Susa, H. 2018, MNRAS, 475, 3331
- (6) Higuchi, K., Machida, M. N., & Susa, H. 2019, MNRAS, stz1079, <https://doi.org/10.1093/mnras/stz1079>
- (7) Machida, M. N., Matsumoto, T., Tomisaka, K., & Hanawa, T. 2005, MNRAS, 362, 369
- (8) Machida M. N., Inutsuka S., Matsumoto T., 2007, ApJ, 670, 1198
- (9) Machida, M. N., Inutsuka, S.-i., & Matsumoto, T. 2008, ApJ, 685, 690
- (10) Matsumoto T., Hanawa T., 2003, ApJ, 595, 913
- (11) Richer J. S., Shepherd D. S., Cabrit S., Bachiller R., Churchwell E., 2000, in Mannings V., Boss A. P., Russell S. S., eds, Protostars and Planets IV. University of Arizona Press, Tucson, p. 867
- (12) Susa, H., Doi, K., & Omukai, K. 2015, ApJ, 801, 13
- (13) Swift, J. J., & Welch, W. J. 2008, ApJS, 174, 202
- (14) Tomida K., Okuzumi S., Machida M. N., 2015, ApJ, 801, 117
- (15) Tomisaka K., 2000, ApJ, 528, L41
- (16) Tsukamoto Y., Iwasaki K., Okuzumi S., Machida M. N., Inutsuka S., 2015, MNRAS, 452, 278
- (17) Wang, L.-Y., Shang, H., Su, Y.-N., et al. 2014, ApJ, 780, 49

# 沿岸域観測データを同化した広領域・高解像度計算による東京湾の流動・水質の解析

松崎 義孝

国立研究開発法人 海上・港湾・航空技術研究所 港湾空港技術研究所

## 1. はじめに

閉鎖性水域の流動や水質の数値シミュレーション（例えば、[1]、[2]）による海上ゴミや海上流出油の漂流予測、青潮や赤潮の発生予測を精緻に行うことが期待されている。一方で、閉鎖性水域では、湾口を経由する外洋水の流入や内湾水の流出が流動や水質の構造に強く影響するため、物理モデルによる数値シミュレーションのみで精度よく予測を行うことは限界がある。精度向上のためには観測データを物理モデルに組み込むことが有効である。観測データを物理モデルに取り込む方法としてデータ同化という手法がある。データ同化はレーダーや衛星で観測されたデータを用いて、気象学や海洋学の分野を中心に活発に開発、利用されている。近年、閉鎖性水域を含む沿岸域においてもデータ同化手法を用いた研究が開始されており、今後さらなる発展が期待されている。

著者は、東京湾を対象とし沿岸域観測データを同化した広領域・高解像度計算を行うことにより、東京湾全体の流動及び水質の3次元構造を再現することを目的とした研究を進めている。特に、外洋水の湾内への流入、内湾水の流出といった流動、塩分、及び水温の構造に着目する。本稿ではその研究内容について紹介する。

## 2. 東京湾の環境データ観測状況

閉鎖性水域の流動・水質を理解する上で東京湾口の流動・水質の観測データは重要である。著者の所属する港湾空港技術研究所では東京湾の湾口を航行するフェリーに流速計、水質計を搭載し、継続して観測を行っている[3]（図1参照）。フェリーに設置している流速計：ADCP（Acoustic Doppler Current Profiler）は超音波を発射することにより鉛直方向に

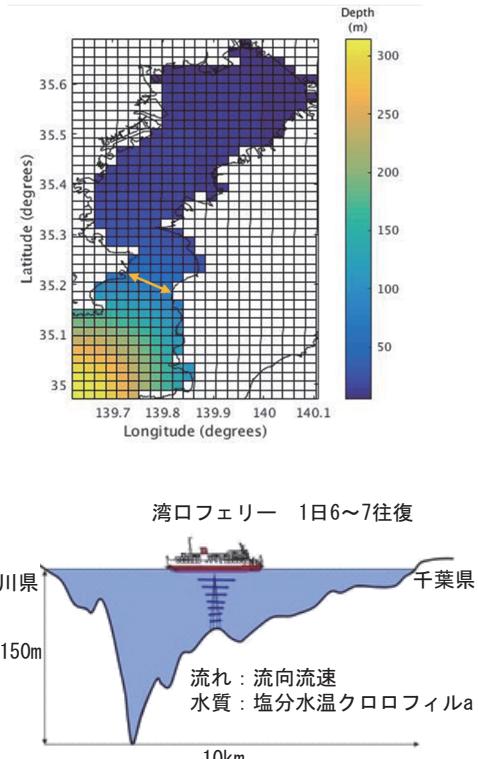


図1：東京湾口を航行するフェリーの航行場所（上）と、観測の模式図（下）。上図の矢印の位置をフェリーが航行している。船底に設置したADCPにより鉛直方向に多層で流速を観測しながら湾口を横断することで、東京湾の水塊の流入出を観測することができる。ADCPによる流速のほか、水質計による塩分、水温、クロロフィルaの観測を行っている。

多層で流速を計測することができる。フェリーは湾口を1日6~7往復しているため、これによって東京湾への水塊の流入出を計測できる。フェリーで観測されたデータを同化に用いることで、湾内の流動及び水質をより詳細に予測することができると言えている。また、観測データは携帯電話回線で研究所のサーバーに転送されており、リアルタイムでデータを活用できる体制が整っている。フェリーの観測は日中のみ行われており、観測データ単体の解

析では連続的な流動の再現に至らないけれども、データ同化により連続的なデータの再現が可能となる点も本研究の特徴である。

また、東京湾では海洋短波レーダーと呼ばれる観測機器を用いた海表面の流速の観測や、環境モニタリングブイを用いた流速及び水質の観測を行っており、これらのデータも研究に使用できる状況にある。

### 3. 東京湾の数値シミュレーションとデータ同化

#### 3.1 低解像度の計算格子を用いたデータ同化のテスト計算

著者は流動水質モデル ROMS(Regional Ocean Modeling System) [2] 及びそのデータ同化モデル ROMS 4D-Var[4]を用いたデータ同化の研究に取り組んでいる。研究の第1段階として、粗い計算格子を用いて東京湾を対象としたデータ同化のテスト計算を行った。計算条件は表1の通りである。同化する観測値は環境モニタリングブイで観測された水温とした。

図2は東京湾を対象とした海面水温の数値シミュレーション結果とデータ同化の結果を示している。東京湾では湾口東側（千葉県側）が温かく、湾口西側（神奈川県側）が冷たいという特徴がある。その特徴を数値シミュレーションのみでは再現できなかった（上側）。一方で、東京湾内の定点観測水温データを数値シミュレーション結果に同化すると、湾口付近の温かい海水の分布が再現できた（下側）。

図3は湾口東側にある環境モニタリングブイの観測点（富浦湾）における水温に関する数値シミュレーション及びデータ同化結果と観測値の比較である。数値シミュレーション（青色線）は観測値（黄色マーカー）よりも2-3度低い値となっている。一方で、データ同化結果（赤色マーカーと線）は観測値に近くなるように水温が高く修正されている。

以上の結果から、データ同化により数値シミュレーションの結果が観測値に近くなるように修正されることが確認された。一方で、黒潮等海流の影響による外洋水の湾内への流入も含めた計算を実施し、湾内の流動水質を詳細に解析するためには、計算領

域に外洋を含める必要がある。また、東京湾の地形を正確に再現するには高解像度の計算を実施する必要がある。そこで次節の広領域・高解像度の数値シミュレーションを実施した。

表1：計算条件

計算領域	経度：E139.4350°—E140.2408° 緯度：N35.0294°—N35.7651° 計算領域は32度回転
計算期間	2014年11月11日から3日間 (助走期間3年11か月)
時間間隔	30 s
格子数	水平方向：20×34 鉛直方向：30（S座標系）
格子サイズ	水平方向 2000 m
開境界条件	水温、塩分：北西太平洋海洋長期再解析データセット[5] 潮位：TPXO8-atlas[6] 流速：外洋の影響は考慮しない
大気境界条件	風、気温、降水、大気圧：気象庁メソ客観解析データ 日射、大気放射：気温、水温、相対湿度、雲量から推算
河川流入条件	流量、水温：主要6河川（江戸川、荒川、中川、多摩川、鶴見川、隅田川）を対象に国土交通省水門水質データベースから算出[7] 塩分：ゼロ

#### 3.2 広領域・高解像度の計算格子を用いた数値シミュレーション

計算領域は図4のように設定した。海流の影響による湾外から湾内への外洋水の流入を計算する場合、外洋も含めた計算が必要となる。そのため、ネスティング格子を採用して、まず外側領域を計算し、その計算結果を反映させて内側領域を細かい計算格子で計算する。計算条件は表2の通りである。

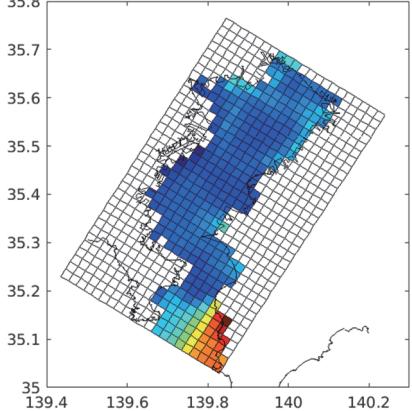
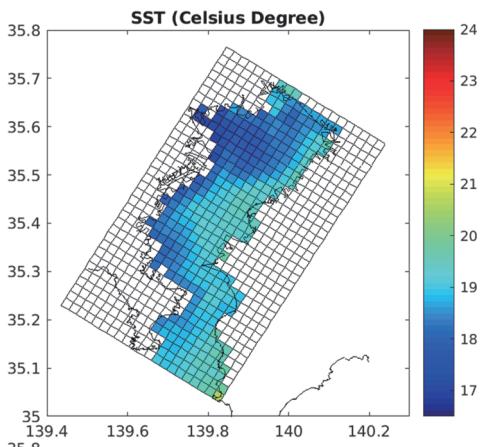


図2：東京湾を対象とした数値シミュレーション（上）とデータ同化（下）の結果の海面水温の比較

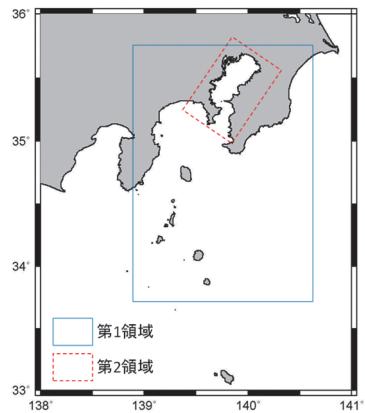


図4：計算領域

表2：計算条件

計算領域	第1領域 経度：E 138.9000°—E 140.5648° 緯度：N 33.6700°—N 35.6980° 第2領域 絏度：E 139.4350°—E 140.2332° 緯度：N 35.0318°—N 35.7612° (32度回転)
計算期間	2014年11月11日から3日間 (助走期間2年11か月)
時間間隔	30 s
格子数	第1領域 水平方向：100×150 鉛直方向：40 (S座標系) 第2領域 水平方向 82×138 鉛直方向：40 (S座標系)
格子サイズ	第1領域 水平方向 1500 m 第2領域 水平方向 500 m
開境界条件	第1領域 水温、塩分、流速：北西太平洋海洋長期再解析データセット[5] 潮位：TPXO8-atlas[6] 第2領域は第1領域と接続
大気境界条件	風、気温、降水、大気圧：気象庁メソ客観解析データ 日射、大気放射：気温、水温、相対湿度、雲量から計算
河川流入条件	流量、水温：主要6河川（江戸川、荒川、中川、多摩川、鶴見川、隅田川）を対象に国土交通省水門水質データベースから算出[7] 塩分：ゼロ

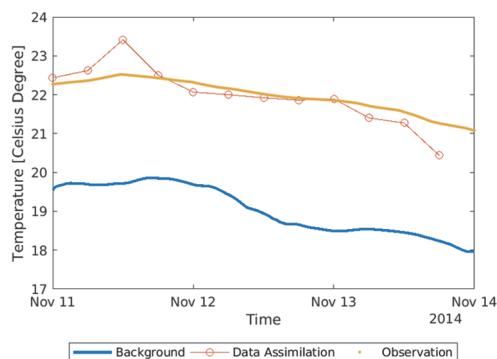


図3：湾口東側の観測点における水温に関する数値シミュレーション及びデータ同化結果と観測値の比較

数値シミュレーション結果の例を示す。図5はフェリー航路における観測と数値シミュレーションの断面平均流速を表す。正が外洋から東京湾内への流入、負が東京湾内から外洋への流入を表す。数値シミュレーションでは上層で流出、中層で流入、下層で流出するという流動構造が再現されており、フェリー観測値と定性的に一致している。図示しないものの、粗い計算格子では東京湾湾口のような水深変化が大きく複雑な地形を再現できない。500 m程度のメッシュで再現可能となってくるため、高解像度の数値シミュレーション及びデータ同化は重要である。フェリー観測では表層約10mは観測機器の制約上観測できないが、数値シミュレーションは再現できている。データ同化により重要な表層の情報を含めて再現することは、東京湾の解析を行う上で重要である。

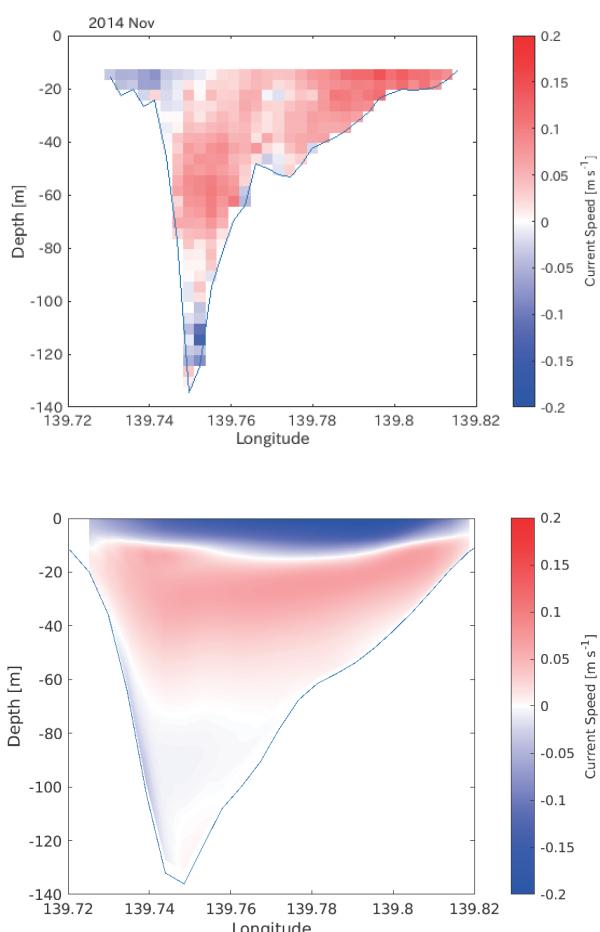


図5：フェリー航路における断面流速。（上）観測値、（下）数値シミュレーション値。

#### 4. おわりに

本研究において、東京湾を対象とした低解像度の計算格子を用いたデータ同化のテスト計算と、高解像度の計算格子を用いた数値シミュレーションを実施した。今後は本検討で得られた高解像度の数値シミュレーション結果にフェリー観測値を同化し、東京湾の流動解析を進める予定である。

#### 参考文献

- [1] 田中, 鈴木, 密度流湧昇流の計算を目的とした三次元沿岸域流動モデルの開発について, 港湾空港技術研究所報告, vol. 49, no. 1, pp. 3–25, 2010.
- [2] A. F. Shchepetkin, J. C. McWilliams, The regional oceanic modeling system (ROMS): a split-explicit, free-surface, topography-following-coordinate oceanic model, *Ocean Modelling*, vol. 9, no. 4, pp. 347–404, 2005.
- [3] 鈴木, 竹田, 東京湾口フェリーによる海洋環境の2003-2005年の観測結果とその特性, 港湾空港技術研究所資料, no. 1134, p. 37, 2006.
- [4] A. M. Moore et al., The Regional Ocean Modeling System (ROMS) 4-dimensional variational data assimilation systems, *Progress in Oceanography*, vol. 91, no. 1, pp. 34–49, 2011.
- [5] N. Usui et al, Four-dimensional variational ocean reanalysis: a 30-year high-resolution dataset in the western North Pacific (FORA-WNP30), *Journal of Oceanography*, vol. 73, no. 2, pp. 205–233, 2017.
- [6] G. D. Egbert, S. Y. Erofeeva, Efficient Inverse Modeling of Barotropic Ocean Tides, *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, vol. 19, no. 2, pp. 183–204, 2002.
- [7] 鈴木, 東京湾の海水交換と貧酸素化に及ぼす淡水流入と風の影響について, 港湾空港技術研究所資料, no. 1276, p. 97, 2013.

# Effects of hole-boring and relativistic transparency on particle acceleration in overdense plasma irradiated by short multi-PW laser pulses

Masahiro Yano

Graduate School of Engineering, Osaka University

## 1. introduction

Recently the power of femtosecond laser pulses has exceeded the petawatt level and is continuously increasing [1]. Intensities over  $10^{23}$  W/cm<sup>2</sup> ( $a_0 \sim 300$ , where  $a_0$  is the normalized laser field [2,3]) at the laser focus have already been reached [4]. Several upcoming projects [5-9] make possible laser intensities exceeding  $I \sim 10^{24}$  W/cm<sup>2</sup> or  $a_0 \sim 10^3$ . That would be a qualitative step forward in high field physics, because the parameter  $ma_0/M$ , where  $M$  is the proton mass, becomes of the order of unity. Such powerful laser pulses can directly accelerate heavy particles up to relativistic energies. Moreover, the effect of relativistic transparency theoretically allows laser pulse propagation through even solid density plasmas. The latter, along with the generation of energetic particles, has been of particular interest.

Specific to the interaction of powerful laser pulses and overdense plasmas is the relativistic effects in the plasma. A multi-PW laser pulse has a normalized vector potential  $a_0 = eE/mc\omega$  [where  $E$  is the amplitude of the laser field and  $\omega$  is the laser pulse frequency] far exceeding unity. Therefore, the group velocity of a laser pulse in plasma  $v_G = \sqrt{1 - 4\pi e^2 N_e / m\omega^2 a_0}$  [2,3] remains positive for electron densities which are  $a_0$  times higher than the critical density  $N_{cr} = m\omega^2 / 4\pi e^2$ . For Ti-Sph laser pulses and the laser intensity  $I = 10^{24}$  W/cm<sup>2</sup>, the maximal density is  $N_{emax} = 2 \times 10^{24}$  cm<sup>-3</sup>. However, the equation for the group velocity is correct only for the electron figure-eight motion which could be restricted by the transverse components of the plasma field. Additionally, the hole-boring process [10-20] can also allow high intensity laser pulses to propagate through a

spatially semi-infinite overdense plasma. Due to the laser ponderomotive force,  $F_p = -\frac{1}{4} \frac{mc^2}{\gamma} \nabla a_0^2$  [2,3] electrons are pushed at the front of laser pulses while the main body of the pulses propagates in a much lower density plasma. Again, such processes as pulse filamentation and other instabilities can drastically diminish this force and finally stop the hole-boring process. How far powerful laser pulses can propagate in a spatially semi-infinite overdense plasma with different density and the domains of validity of such a process have yet to be fully understood.

Another important feature of the interaction of ultra-high intensity laser pulses with plasma is the possibility of direct acceleration of heavy ions by laser pulses. The general solution of particle motion in the plane wave gives [2,3,21-30]:

$$\gamma = \sqrt{(M/m)^2 + p_x^2 + p_y^2}; \quad \gamma - p_x = A; \quad p_y = a_0 \cos(\omega t - \frac{\omega x}{c}),$$

where  $M$  is the ion mass,  $A$  is a constant and  $p$  is normalized by  $mc$ , the particle momentum. If the ion is initially at rest,  $A = M/m$  and  $p_x = mp_y^2 / 2M$ . For  $a_0 > M/m$  the energy of ion becomes relativistic even in a vacuum. In a relativistically transparent plasma, this effect may occur as a self-injection process for ions at the front of a laser pulse.

In this letter, we investigate numerically the dynamics of ultra-intense laser pulses and the generation of energetic particles in spatially semi-infinite, overdense hydrogen plasma. Multidimensional PIC simulations including fully relativistic motions for electrons and ions as well as the classical radiation friction force are performed with high spatial  $\lambda/200$  in 2D and maximal  $\lambda/50$  in 3D using the

code FPlaser [31,32] with the moving window technique. Limited spatial resolution for 3D simulations constrains the range of plasma density and plasma length.

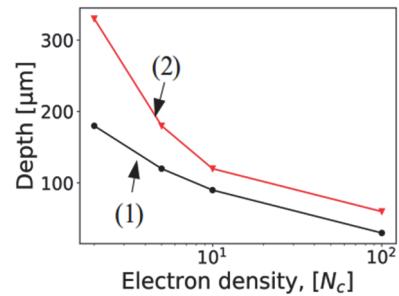
## 2. Simulation Models

Linearly polarized laser pulses with wavelength  $\lambda = 1 \mu\text{m}$  and duration  $\tau = 10 \text{ fs}$  propagate in the  $-x$  (longitudinal) direction from the right to left in a pre-ionized semi-infinite plasma. The laser pulse intensity is varied from  $10^{23}$  to  $10^{24} \text{ W/cm}^2$ , corresponding to  $a_0$  from  $\sim 10^2$  to  $10^3$ . The pulse intensities  $10^{23} - 10^{24} \text{ W/cm}^2$  at the laser focus correspond to energies from  $\sim 0.75 \text{ kJ}$  to  $\sim 7.5 \text{ kJ}$  and powers of  $\sim 75$  to  $\sim 750 \text{ PW}$ . Laser intensities exceeding  $I = 10^{22} \text{ W/cm}^2$  have already been achieved [4] and the maximum laser intensity is approaching  $I=10^{24} \text{ W/cm}^2$  as reported in [5-9], which makes this range of laser intensities interesting for investigation. The initial conditions for the transverse components of the fields are taken as the well-known solution of the para-axial equations [31,32] with the waist  $w_0=5 \mu\text{m}$  and corresponding Rayleigh length  $\sim 75 \mu\text{m}$ . In simulations, the size of the moving window is  $(100 \mu\text{m}) \times (100 \mu\text{m}) \times (110 \mu\text{m})$  to resolve high plasma frequency. The density of the uniform plasma is a parameter ranging from  $N_e = 2N_{\text{cr}}$  to  $100N_{\text{cr}}$ . Such plasma can be produced in a mixture of high  $Z$  gases with hydrogen or in exploding wires [33,34]. However, here we consider pure hydrogen plasma to minimize the number of physical processes. The linear density ramp in the front of the plasma has a length  $L = 10 \mu\text{m}$ . Absorbing boundary conditions are used in the code [31,32].

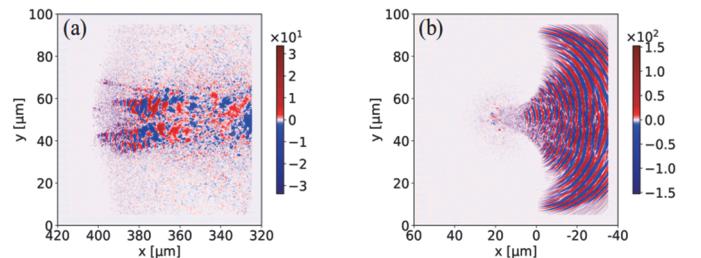
## 3. Results and Discussions

As a result of the simulations, we found that the laser pulses have a finite penetration depth, which depends on the plasma density and initial laser pulse intensity. Typical results are presented in Fig. 1 and Fig.2. In Fig.1 the dependences of the penetration depth,  $L_D$ , for laser pulses with different intensity on the plasma density are shown. The penetration depth is calculated as the distance from

the plasma boundary where the laser pulse vanishes or starts moving backward. Even for double critical density and  $a_0 \sim 10^3$  the penetration depth is finite; for  $I=10^{24} \text{ W/cm}^2$   $L_D \sim 300 \mu\text{m}$  even though  $N_e/N_{\text{cr}}a_0$  remains far less than unity. For  $N_e=100N_{\text{cr}}$  the propagating laser pulse scatters from the boundary. The processes limiting the propagation length can be seen in Fig. 2 where the laser field is given at the stopping point. For lower density, the main reason is the filamentation instability [2,3] as seen in Fig 2a,b, along with the Raman scattering decreasing the pulse intensity. This underlines the role of the hole-boring process in the propagation of laser pulses. Filamented laser pulses cannot form a proper channel for guiding and plasma electrons cannot acquire the energy necessary for the relativistic transparency. With density increase, the transverse plasma field does not allow the 8-figure motion of electrons in the laser field and, as a result, the laser pulse does not penetrate in plasma essentially even though the plasma is still theoretically relativistically transparent. One can see strong scattered light from the plasma surface. With decreasing laser intensity all of the above effects occur earlier and, therefore,  $L_D$  becomes smaller.

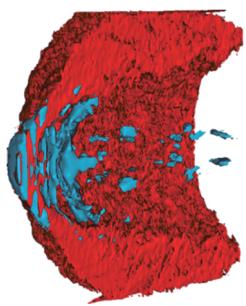


**Fig.1** Plot of penetration length for intensities (1)  $I = 10^{23} \text{ W/cm}^2$ , and (2)  $I = 10^{24} \text{ W/cm}^2$ . The penetration length is shorter for higher electron density and lower laser intensity.

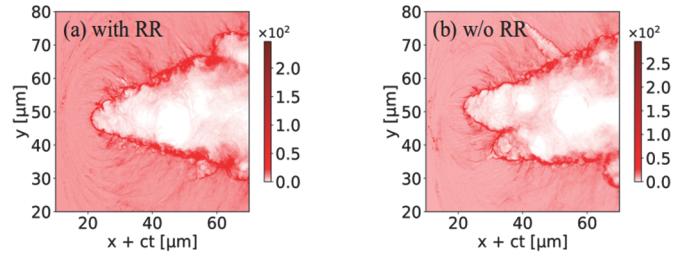


**Fig.2** xy cross-section of a laser pulse at the moment when the pulse propagation stops for (a) initial plasma density  $2 N_{\text{cr}}$ , intensity  $I = 10^{24} \text{ W/cm}^2$ , the time  $t=1300\text{fs}$ , (b) initial plasma density  $100N_{\text{cr}}$ , intensity  $I = 10^{24} \text{ W/cm}^2$ , the time  $t=200\text{fs}$ .

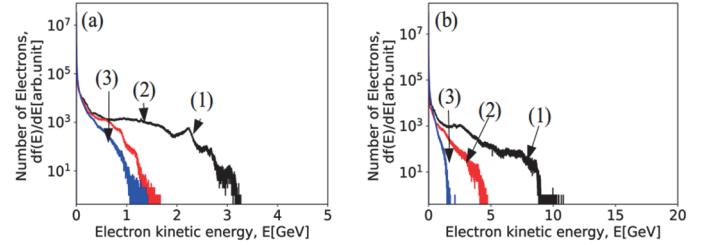
During the laser pulse propagation a plasma cavity having a lower density than the surrounding plasma forms in the pulse wake as seen in Fig.3. This is the result of electron evacuation from the laser axis and further ion Coulomb explosion. Therefore, most of the ions acquire large transverse momenta. The cavity shape is dominated by the dynamics of energetic electrons. In Fig.4 a,b the effect of the radiation friction force is illustrated by the shape of cavities with and without it. One can see that the radiation friction force stabilizes the cavity shape. Since the electron density in the cavity is low, the electron acceleration occurs in an underdense plasma driven by the wake field. The results of electron acceleration can be seen in Fig.5a,b for different intensities. As expected, higher energy electrons appear in low,  $N_e=2N_{\text{cr}}$ , plasma. The maximum electron energy decreases with increasing density reflecting the shortening of the efficient acceleration length in the wake field. The maximum energy increases as  $a_0$  for lower density and increases more slowly at higher density.



**Fig.3** 3D plot of a laser pulse and ion density where  $z > 15 \mu\text{m}$  for initial plasma density  $5N_{\text{cr}}$ , intensity  $I = 10^{24} \text{ W/cm}^2$ , and the time  $t=300\text{fs}$ . Red shows ions. Blue shows a laser pulse. The laser pulse propagates from upper right to lower left.



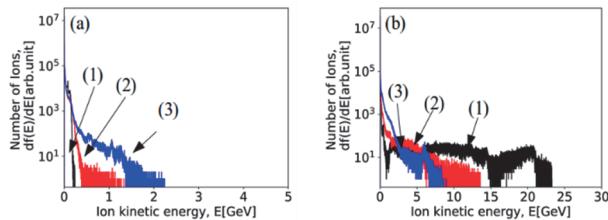
**Fig.4** xy cross-section of ion density at the moment when the pulse propagation stops for the initial plasma density  $10N_{\text{cr}}$ , intensity  $I = 10^{24} \text{ W/cm}^2$ , the time  $t=300\text{fs}$ , (a) with radiation reaction force and (b) without radiation reaction force.



**Fig.5** Electron energy spectrum for (a) intensity  $I = 10^{23} \text{ W/cm}^2$ , (b) intensity  $I = 10^{24} \text{ W/cm}^2$ . Lines (1), (2), and (3) indicate the case for initial densities of  $2N_{\text{cr}}$ ,  $5N_{\text{cr}}$ , and  $10N_{\text{cr}}$ , respectively.

The results for ion acceleration presented in Fig. 6a,b, show a completely different picture from the case of electron acceleration. The ion energy distribution function at the lower laser intensity,  $I=10^{23} \text{ W/cm}^2$ , is shown in Fig.6a. An increase of plasma density results in slower phase velocity of the plasma wake wave. Since background ions are initially accelerated behind the laser pulse due to the Coulomb explosion, efficient injection of these ions into the plasma wake wave can occur when their velocities match the plasma wake phase velocity. At  $N_e=10N_{\text{cr}}$  the maximal energy is near 1 GeV. At low density, the maximal ion energy is rather low of the order of 100 MeV. For plasma with density  $N_e=100N_{\text{cr}}$ , the maximum ion energy is also low. The process of ion acceleration drastically changes for  $I=10^{24} \text{ W/cm}^2$  where direct ion acceleration becomes more dominant. For lower

plasma density,  $N_e=2N_{cr}$ , the direct ion acceleration by the laser pulse serves as an injector of ions into the acceleration phase of the first plasma wave bucket at the front of the laser pulse. Then, a part of such injected ions is accelerated up to 20 GeV. These ions were positioned at the front of the laser pulses in our numerical simulations. With increasing density the direct ion acceleration becomes less efficient for injection as compared to the Coulomb explosion and, therefore, the maximum energy rapidly goes down. The radiation friction force does not affect this mechanism of ion injection and acceleration.



**Fig.6** Ion energy spectrum for (a) intensity  $I = 10^{23} \text{ W/cm}^2$ , (b) intensity  $I = 10^{24} \text{ W/cm}^2$ . Lines (1), (2), and (3) indicate the case for initial densities of  $2N_{cr}$ ,  $5N_{cr}$ , and  $10N_{cr}$ , respectively.

#### 4. Conclusion

In conclusion, we have observed a novel effect of ion acceleration by multi-PW laser pulses in relativistically underdense spatially semi-infinite plasma via fully relativistic PIC simulations including electron and ion motion along with the radiation damping. This acceleration occurs in plasmas with electron densities around 2-10 critical density due to the direct proton acceleration by laser pulses with  $a_0 \sim 10^3$  resulting in proton injection into the acceleration phase of the plasma wave at the front of the laser pulses. Protons with energies up to 20 GeV have been observed for 10 fs laser pulses with intensity  $I=10^{24} \text{ W/cm}^2$  irradiating overdense plasma with  $N_e=2N_{cr}$ . Such a plasma can be produced by a mixture of a high  $Z$  gas and hydrogen. The proton energy rapidly decreases with increasing plasma density. For lower laser intensity the effect vanishes since direct proton acceleration becomes impossible. The behavior of plasma electrons does not show any essential difference from the

conventional physical picture and recent experiments with lower laser intensities: energetic electrons form a broad Maxwell-like distribution with an effective temperature proportional to  $a_0$ .

Limitation of the laser pulse propagation in a theoretically relativistically transparent spatially semi-infinite plasma has been observed over a wide range of laser intensities and plasma densities. Laser pulse filamentation, backward Raman scattering, and the transverse plasma field break the transparency condition  $N_e/N_{cr}a_0 < 1$ .

#### Acknowledgement

This work was supported and funded by the ImPACT Program of the Council for Science, Technology, and Innovation (Cabinet Office, Government of Japan). Part of this work was also supported by the JST-MIRAI Program Grant No. JPMJMI17A1. This work was (partially) achieved through the use of large-scale computer systems at the Cybermedia Center, Osaka University.

#### References

- [1] C. Danson, D. Hillier, and N. Hopps, D. Neely, High Power Laser Sci. Vol. 3, e3, 14 pages (2015).
- [2] E. Esarey and P. Sprangle, IEEE Trans. Plasma Sci. 24, No. 2, 252 (1996); E. Esarey, C. B. Schroeder, and W. P. Leemans, Rev. Mod. Phys. 81, 1229 (2009).
- [3] G. A. Mourou, T. Tajima, and S. V. Bulanov, Rev. Mod. Phys. 78 (2006).
- [4] J. Shin, H. T. Kim, S. K. Lee, J. H. Sung, H. W. Lee, J. W. Yoon, C. Jeon, and C. H. Nam, The 7th Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS2018) (2018)
- [5] C.A. Ur, D. Balabanski, G. Cata-Danil, S. Gales, I. Morjan, O. Tesileanu, D. Ursescu, I. Ursu, and N.V. Zamfir, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 355, 198-202 (2015).
- [6] N. Miyanaga, H. Azechi, K.A. Tanaka, T. Kanabe, T. Jitsuno, J. Kawanakal, Y. Fujimoto, R. Kodama, H. Shiraga, K. Knodo et al. J. Phys. IV Fr. 133, 81–87 (2006).

- [7] J. K. Crane, G. Tietbohl, P. Arnold, E. S. Bliss, C. Boley, G. Britten, G. Brunton, W. Clark, J. W. Dawson, S. Fuchs et al. *J. Phys. Conf. Ser.* 244, 032003 (2010).
- [8] D. Batani, M. Koenig, J. L. Miquel, J. E. Ducret, E. d'Humieres, S. Hulin, J. Caron, J. L. Feugeas, Ph. Nicolai, V. Tikhonchuk et al. *Phys. Scr.* 014016 (2014).
- [9] D. N. Maywar, D. N. Maywar, J. H. Kelly, L. J. Waxer, S. F. B. Morse, I. A. Begishev, J. Bromage, C. Dorrer, J. L. Edwards, L. Folnsbee, M. J. Guardalben et al. *J. Phys. Conf. Ser.* 112, 032007 (2008).
- [10] N. Iwata, S. Kojima, Y. Sentoku, M. Hata, and K. Mima, *Nat. Commun.* 9, 623 (2018)
- [11] M. Tabak, J. Hammer, M. E. Glinsky, W. L. Kruer, S. C. Wilks, J. Woodworth, E. M. Campbell, and M. D. Perry, *Phys. Plasmas* 1, 1626 (1994).
- [12] R. Kodama, P. A. Norreys, K. Mima, A. E. Dangor, R. G. Evans, H. Fujita, Y. Kitagawa, K. Krushelnick, T. Miyakoshi, N. Miyanaga et al. *Nature* 412, 798–802 (2001)
- [13] M. C. Levy, S. C. Wilks, M. Tabak, S. B. Libby, and M. G. Baring, *Nat. Commun.* 5, 4149 (2014).
- [14] S. C. Wilks, W. L. Kruer, M. Tabak, and A. B. Langdon, *Phys. Rev. Lett.* 69, 1383–1386 (1992).
- [15] A. Pukhov and J. Meyer-ter-Vehn, *Phys. Rev. Lett.* 79, 2686–2689 (1997).
- [16] Y. Sentoku, W. Kruer, M. Matsuoka, and A. Pukhov, *Fusion Sci. Technol.* 49, 278–296 (2006).
- [17] N. Naumova, T. Schlegel, V. T. Tikhonchuk, C. Labaune, I. V. Sokolov, and G. Mourou, *Phys. Rev. Lett.* 102, 025002 (2009).
- [18] Y. Ping, A. J. Kemp, L. Divol, M. H. Key, P. K. Patel, K. U. Akli, F. N. Beg, S. Chawla, C. D. Chen, and R. R. Freeman, *Phys. Rev. Lett.* 109, 145006 (2012).
- [19] S. M. Weng, M. Murakami, H. Azechi, J. W. Wang, N. Tasoko, M. Chen, Z. M. Sheng, P. Mulser, W. Yu, and B. F. Shen, *Phys. Plasmas* 21, 012705 (2014).
- [20] A. L. Lei, A. Pukhov, R. Kodama, T. Yabuuchi, K. Adumi, K. Endo, R. R. Freeman, H. Habara, Y. Kitagawa, and K. Kondo, *Phys. Rev. E* 76, 066403 (2007).
- [21] A. Yogo, K. Mima, N. Iwata, S. Tosaki, A. Morace, Y. Arikawa, S. Fujioka, T. Johzaki, Y. Sentoku, H. Nishimura et al. *Sci. Rep.* 7, 42451 (2017)
- [22] H. Daido, M. Nishiuchi, and A. S. Pirozhkov, *Rep. Prog. Phys.* 75, 056401 71pp (2012).
- [23] S. C. Wilks, A. B. Langdon, T. E. Cowan, M. Roth, M. Singh, S. Hatchett, M. H. Key, D. Pennington, A. MacKinnon, and R. A. Snavely, *Phys. Plasmas* 8, 542 (2001).
- [24] R. A. Snavely, M. H. Key, S. P. Hatchett, T. E. Cowan, M. Roth, T. W. Phillips, M. A. Stoyer, E. A. Henry, T. C. Sangster, M. S. Singh et al. *Phys. Rev. Lett.* 85, 2945–2948 (2000).
- [25] T. Esirkepov, M. Borghesi, S. V. Bulanov, G. Mourou, and T. Tajima, *Phys. Rev. Lett.* 92, 175003 (2004).
- [26] L. Yin, B. J. Albright, K. J. Bowers, D. Jung, J. C. Fernández, and B. M. Hegelich, *Phys. Rev. Lett.* 107, 045003 (2011).
- [27] F. Fiuzza, A. Stockem, E. Boella, R. A. Fonseca, and L. O. Silva, *Phys. Rev. Lett.* 109, 215001 (2012).
- [28] D. Haberberger, S. Tochitsky, F. Fiuzza, C. Gong, R. A. Fonseca, L. O. Silva, W. B. Mori, and C. Joshi, *Nat. Phys.* 8, pages 95–99 (2012).
- [29] B. M. Hegelich, B. J. Albright, J. Cobble, K. Flippo, S. Letzring, M. Paffett, H. Ruhl, J. Schreiber, R. K. Schulze, and J. C. Fernández, *Nature* 439, 441–444 (2006).
- [30] S. Palaniyappan, C. Huang, D. C. Gautier, C. E. Hamilton, M. A. Santiago, C. Kreuzer, A. B. Sefkow, R. C. Shah, and J. C. Fernández, *Nat. Commun.* 6, 10170 (2015).
- [31] A. Zhidkov, T. Fujii, and K. Nemoto, *Phys. Rev. E* 78, 036406 (2008)
- [32] M. Yano, A. Zhidkov, T. Hosokai, and R. Kodama, *Phys. Plasma* 25, 103104 (2018)
- [33] T. Vijayan and V. K. Rohatgi, *IEEE T PLASMA SCI. VOL. PS-13, No. 4* (1985)
- [34] N. Iwata, H. Nagatomo, Y. Fukuda, R. Matsui, and Y. Kishimoto, *Phys. Plasmas* 23, 063115 (2016).



# OCTOPUS を用いた格子 QCD による QCD 相図の探索

若山 将征

大阪大学 核物理研究センター(RCNP) 核物理理論研究部門

Department of Physics, Pukyong National University

Center for Extreme Nuclear Matter (CENuM), Korea University

## 1. はじめに

水が個体（氷）－液体（水）－気体（水蒸気）といろいろな相を移り変わるように、量子色力学(QCD)においても相転移現象が存在することが知られている。しかし QCD は強結合の理論ということもあり、相転移点の場所などの基本的なことでさえ現在、解明には至っていない。有限温度・有限密度における QCD 相図の解明は初期宇宙、銀河や星の形成、中性子星やブラックホールなどを理解するための重要なインプットを与えることになる。特に、最近では、中性子星やブラックホールの衝突・合体による重力波の観測[1]やブラックホールの撮影の成功[2]などの成果が挙がっており、QCD 相図解明の重要性が増してきている。

実験ではこれらの問題の解明に向けて、日本の J-PARC(KEK/JAEA)、ドイツの FAIR(GSI)、ロシアの NICA(JINR)のような高エネルギー実験が近い将来稼働することが期待されている。理論では、格子 QCD が QCD の第一原理計算を実行できるほとんど唯一の手法として知られている。

しかし格子 QCD には有限密度系では「符号問題」と呼ばれる困難が存在する。格子 QCD では、ゲージ場に対する経路積分はモンテカルロ法を用いて実行される。ところが有限密度系では、モンテカルロ法を行う際に確率解釈をしている因子が複素数となるために、モンテカルロ法が破綻してしまう。これが「符号問題」であり、QCD の有限密度系を格子 QCD から探索する際には工夫が必要になる。「符号問題」の解決に向けた手法はこれまでに Taylor 展開法や再重み付け法、カノニカル法、2 カラー-QCD など、多くの手法が提唱してきた。特に近年、カノニカル法[3]は高精度多倍長計算と組み合わせること

で急速な発展を遂げている。本稿では、カノニカル法を紹介するとともに、この手法が「符号問題」を解く有力な手法となり得ることをみる。

## 2. カノニカル法

カノニカル法は純虚数化学ポテンシャルの領域では、モンテカルロ法で確率解釈をしている因子が実数となるため、「符号問題」が存在しないという事実を利用する。この章ではその利用方法と歴史について紹介する。

まず、グランドカノニカル分配関数  $Z_{GC}$  はカノニカル分配関数  $Z_C$  を用いて、

$$Z_{GC}(\mu, T, V) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} Z_C(n, T, V) \xi^n \quad (1)$$

と定義できる。ここで、 $\xi$  は  $\xi = \exp(\mu/T)$  で定義されるフガシティと呼ばれる量であり、 $T$  は温度、 $V$  は系の体積を表す。純虚数化学ポテンシャルでの  $Z_{GC}$  に対して Fourier 変換を行うことで、

$$Z_C(n, T, V) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-in\theta} Z_{GC}(\mu = i\mu_l, T, V) \quad (2)$$

と、我々は  $Z_C$  を得る。ここで、 $\theta = \mu_l/T$  である。純虚数化学ポテンシャルでの  $Z_{GC}$  は従来のモンテカルロ法を用いて計算することができるので、式(2)の  $Z_C$  を通じて式(1)から物理的な実数化学ポテンシャルでの  $Z_{GC}$  を構築することができる。

カノニカル法の基本的考えは 1992 年に Hasenfratz と Toussaint によってすでに提唱されていた[3]。カノニカル法の問題点は、式(2)の Fourier 変換を行うときに、 $n$  の値が大きくなると  $\exp(-in\theta)$  の数値が激しく振動するために、 $Z_C$  を正しく求められないところにあった。長年、この問題は形を変えた「符号問題」として認識され、カノニカル法は実用的ではないと

考えられていた。しかし、2016年にこの問題は有効数字の桁落ちが原因であることが指摘された[4]。通常、計算機で扱う倍精度計算(十進法で16桁の計算)で上記の Fourier 変換を行うと、

$$1.234567890123456 - 1.234567890123455 \\ = 1 \times 10^{-15} \quad (3)$$

のような加減法が頻繁に発生し、実質、有効数字1桁しか信用できなくなる。ところが、

$$1.2345678901234561234 \\ - 1.2345678901234550123 = 1.1111 \times 10^{-15} \quad (4)$$

のように、十進法で数百桁の精度を保証する多倍長計算(式(4)の例では十進法で20桁の計算)を行うことで  $Z_C$  が正しく求められるようになり、カノニカル法による有限密度系の探索は有用な手段となり得ることがわかつってきた。

2017年には、 $Z_{CG}$  を求める方法としてクォーク数密度からのアプローチ法が提唱された[5]。この手法はまず、純虚数  $\mu$  領域でクォーク数密度の計算を行う。この領域でのクォーク数密度は高温領域では多项式近似、低温領域では Fourier 展開近似が良く成り立つことが知られており、それを利用することで、より大きい  $n$  に対する  $Z_C(n)$  が得られるようになる。

本稿では、クォーク数密度からのアプローチ法を利用し、十進法で5,000桁の多倍長精度計算を用いることで式(2)の Fourier 変換を実行した。図1にあるように、倍精度計算では  $n > 100$  で  $Z_n = Z_C(n)/Z_C(0)$  における有効数字の桁落ちが起こっているが、多倍長精度計算では桁落ちは発生していないことがわかる。クォーク数密度からのアプローチ法を利用しない倍精度計算の場合、 $n=10$ 程度までの  $Z_n$  までしか求められないという事実に鑑みると、近年におけるカノニカル法は有限密度中での相転移点を調査するための有力な手法にまで発展したと考えられる。

### 3. Lee-Yang の零点

数値計算では、式(1)のフガシティ展開は無限大まで取ることができず、ある有限の上限値  $N_{\max}$  まで打ち切られる。 $N_{\max}$  は系の(ネット)クォーク数の上限値を意味するので、系の自由度は有限の  $N_{\max}$  に

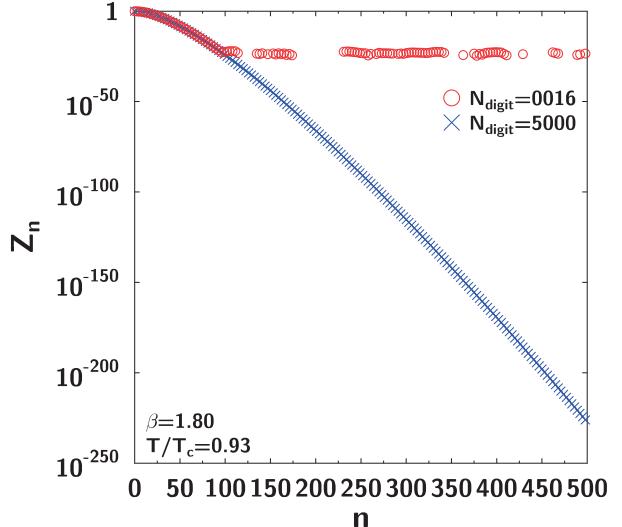


図1：規格化されたカノニカル分配関数  $Z_n = Z_C(n)/Z_C(0)$  のクォーク数  $n$  依存性。赤丸と青バツはそれぞれ倍精度と多倍長精度の計算結果を表す。

よって制限される。自由度が有限である系は実数化学ポテンシャル領域において相転移を持つことは決してないので、実際の相転移の情報を引き出すには工夫する必要がある。

そこで注目するのが、Lee-Yang の定理[6]で知られるグランドカノニカル分配関数の零点(Lee-Yang の零点)である。式(1)のフガシティ展開を有限値  $N_{\max}$  まで打ち切ったとき、フガシティ  $\xi$  を複素数にまで拡張すると、Lee-Yang の零点は  $\xi$  の複素平面上に  $2N_{\max}$  個だけ存在する。 $N_{\max}$  を大きくしていくと、Lee-Yang の零点の個数も増加する。 $N_{\max}$  が無限大の極限で、 $\xi$  の複素平面上で Lee-Yang の零点が集積し留まる場所が実際の相転移に相当する点である。従って、我々は  $\xi$  の正の実軸付近の Lee-Yang の零点の  $N_{\max}$  依存性を調査する。

### 4. 格子 QCD 計算

この章では、格子 QCD 計算から求めた Lee-Yang の零点(LYZ)の結果について紹介する[7]。我々はハイブリッドモンテカルロ法を用いて、ゲージ配位を生成した。空間方向の格子サイズが  $N_s=16$ 、時間方向の格子サイズが  $N_t=4$ 、 $\pi$  中間子と  $\rho$  中間子の質量比が  $m_\pi/m_\rho=0.80$  のもと、格子 QCD 計算を行った。

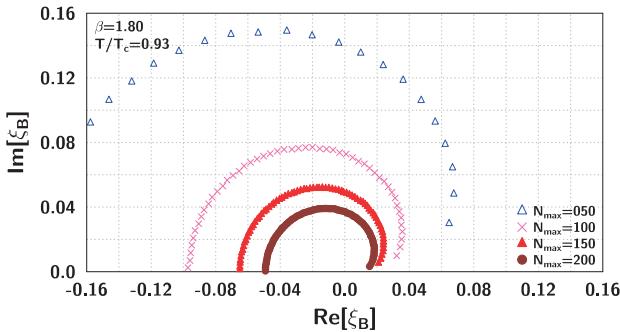


図 2 :  $T/T_c=0.93$  での複素フガシティ平面上における LYZ の  $N_{\max}$  依存性。

数値計算の一部は大阪大学 RCNP/CMC の GPU ノード群を搭載した OCTOPUS 上で行われた。GPU は大規模並列計算を得意とするので、GPU コードを  $16^3 \times 4 (=16,384)$  並列計算ができるように設計した。また Fourier 変換で有効数字の桁落ちが発生しないよう、FMLIB パッケージ[8]を用いて 5,000 桁の多倍長計算を実現した。LYZ の計算では主に OCTOPUS の汎用 CPU ノード群を利用した。しかし、 $N_{\max}=2048$  のように  $N_{\max}$  が大きくなると、汎用 CPU ノード群のメモリ上限値である 192[GByte]ではメモリ不足となるので、その場合にはメモリ上限値が 6[TByte]である大容量主記憶搭載ノード群を用いた。

図 2 は有限温度  $T/T_c=0.93$  での複素フガシティ平面上における LYZ の  $N_{\max}$  依存性を示した。ここで、 $T_c$  はゼロ化学ポテンシャルでの擬相転移温度を表す。我々が興味のあるのは実数化学ポテンシャルでの相転移なので、第一象限にある  $\min(\text{Im}[\xi])$  で定義された LYZ の右端の  $N_{\max}$  依存性に注目する。 $N_{\max}$  が増加するにつれて、LYZ の右端は正の実軸に近くことがわかる。これを 1 次関数または 2 次関数で  $N_{\max}$  が無限大の極限へ外挿し実軸との交点を読み取ることで、 $T/T_c=0.93$ において  $\mu_B/T \sim 5-6$  付近に相転移点が存在すると見積もることができた。ここで  $\mu_B$  はバリオン化学ポテンシャルで  $\mu_B = 3\mu$  と定義される。

## 5. NJL 模型での計算

前章では、格子 QCD を用いて LYZ の分布から相転移点を見積もったが、 $N_{\max}$  が無限大となる物理的

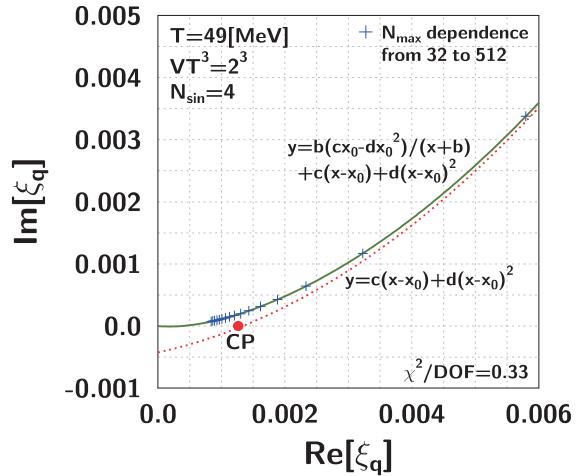


図 3 :  $T=49[\text{MeV}]$  での複素フガシティ平面上における LYZ の右端の  $N_{\max}$  依存性。青プラスが LYZ の右端を表し、赤丸が実数化学ポテンシャル領域で計算された期待される臨界点(CP)に対応する。

状況への外挿手法は確立されておらず、議論すべき問題として残っている。この問題を議論するために、我々は QCD の有効模型のひとつである南部-ヨナラシニオ (NJL) 模型[9]での研究を行う。NJL 模型における相転移構造は既によく知られているため、既知の相転移点とカノニカル法から得られる相転移点を比較することで、有限自由度の効果などの調査が可能となる。

図 3 では、 $T=49[\text{MeV}]$  での複素フガシティ平面上における LYZ の右端の  $N_{\max}$  依存性を示した。 $N_{\max}$  が増加するにつれて LYZ の右端は実軸に近くが、実数化学ポテンシャル領域で計算された期待される臨界点(CP)の上部を通り越して原点へ向かっていることがわかる。この理由は、クォーク数密度からのアプローチ法でクォーク数密度を有限項の Fourier 展開で近似したため、実数化学ポテンシャル領域で相転移が起こらなくなったことによると考えられる。

有限項の Fourier 展開での近似の効果を踏まえ、我々は外挿関数

$$y = \frac{b(cx_0 - dx_0^2)}{x + b} + c(x - x_0) + d(x - x_0)^2 \quad (5)$$

を用いて LYZ の右端の外挿を行うことを考える。ここで、 $y=\text{Im}[\xi]$ 、 $x=\text{Re}[\xi]$  であり、 $b$  と  $c$ 、 $d$ 、 $x_0$  はフィッティングパラメータである。式(5)は基本的に

は  $x=x_0$  まわりでの Taylor 展開のような 2 次関数で構成されている。もし系が  $x=x_0$  で相転移点を持っていれば、 $N_{\max}$  が無限大へ外挿する関数は  $x=x_0$  の点で実軸と交わることが期待される。しかし、有限項の Fourier 展開近似のせいで実数化学ポテンシャル上では相転移点は存在しないため、外挿関数には原点を通るよう第 1 項のような補正項が必要になってくる。LYZ の右端をフィットした式(5)の関数を図 3 に実線で示した。また、Fourier 展開の有限項効果と考えられる第 1 項を差し引いた関数を点線で表した。点線は実数化学ポテンシャル領域で計算された期待される臨界点を再現できていることがわかる。

## 6. おわりに

我々は格子 QCD と NJL 模型において、カノニカル法から計算された LYZ を用いて有限密度中での相転移点の調査を行った。格子 QCD 計算の結果のひとつとして、 $T/T_c=0.93$  において  $\mu_B/T \sim 5-6$  付近に相転移点が存在すると見積もることができた。

しかし、 $N_{\max}$  が無限大となる物理的状況への外挿手法は確立されておらず、議論すべき問題として残っている。そこで我々は NJL 模型での研究を行った。NJL 模型における相転移構造は既によく知られているため、既知の相転移点とカノニカル法から得られる相転移点を比較することで、有限自由度の効果などの調査が可能となる。NJL 模型での計算の結果として、クォーク数密度からのアプローチ法における Fourier 展開の有限項近似の効果の抽出に成功した。また、その効果を外挿関数から差し引くことで期待される相転移点を再現できることができた。

現在、より現実世界に近い空間方向の格子サイズが  $N_s=24$  かつ  $m_\pi/m_\rho=0.48$  のもとでの計算を OCTOPUS 上で実行中である。NJL 模型で理解が深まった LYZ の外挿手法を用いることで、信頼度の高い現実的な相転移構造が得られると期待される。

## 謝辞

本研究は、V. G. Boryakov 氏、D. L. Boyda 氏、V. A. Goy 氏、飯田英明氏、A. V. Molochkov 氏、中村純氏、

V. I. Zakharov 氏、保坂淳氏との共同研究として行われた。また本研究は韓国科学技術情報通信部(MSIT)による韓国研究財団(NRF)の助成を受けている(No.2018R1A5A1025563)。なお本研究の数値計算は、大阪大学 CMC 大規模計算機システム公募型利用制度、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(課題番号: EX18705)と大阪大学 RCNP からの支援の下、NEC OCTOPUS の多大な計算機資源を使用して行われた。さらに CMC 主催の「2018 年度対面利用相談」により、コード開発の有益な助言を頂いた。そして、管理・運営に携わっている多くの方々には、いつも利用者視点でシステムの変更や問題解決をして頂き、安定的に計算機を利用することができた。ここに感謝の意を表する。

## 参考文献

- (1) B. P. Abbott et al. [LIGO Scientific and Virgo Collaborations], Phys. Rev. Lett. **116**, 061102 (2016).
- (2) K. Akiyama et al. [Event Horizon Telescope Collaboration], Astrophys. J. **875**, L6 (2019).
- (3) A. Hasenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys. B **371**, 539 (1992).
- (4) R. Fukuda, A. Nakamura and S. Oka, Phys. Rev. D **93**, 094508 (2016).
- (5) V. G. Boryakov, D. L. Boyda, V. A. Goy, A. V. Molochkov, A. Nakamura, A. A. Nikolaev and V. I. Zakharov, Phys. Rev. D **95**, 094506 (2017).
- (6) C. N. Yang and T. D. Lee, Phys. Rev. **87**, 404 & 410 (1952).
- (7) M. Wakayama, V. G. Boryakov, D. L. Boyda, V. A. Goy, H. Iida, A. V. Molochkov, A. Nakamura and V. I. Zakharov, Phys. Lett. B (2019) (in press) arXiv:1802.02014 [hep-lat].
- (8) D. M. Smith, FMLIB1.3 (2015).  
<http://myweb.lmu.edu/dmsmith/FMLIB.html>.
- (9) Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961); Phys. Rev. **124**, 246 (1961).

# センター報告

---

・ 2018 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	77
・ SC18 出展報告	91
・ 第 24 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2018)報告および 第 25 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2019)告知	97
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	99
・ 2019 年度大規模計算機システム利用講習会	101
・ 2018 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	102
・ 2019 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	110
・ 2019 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	111
・ 2018 年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	112
・ 2019 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	113
・ 大規模計算機システム Q&A	114



# 2018 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 2018 年 4 月から 2019 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] N. Numoto, N. Kamiya, G.-J. Bekker, Y. Yamagami, S. Inaba, K. Ishii, S. Uchiyama, F. Kawai, N. Ito, M. Oda , “Structural dynamics of the PET-degrading cutinase-like enzyme from *Saccharomonospora viridis* AHK190 in substrate-bound states elucidates the Ca<sup>2+</sup>-driven catalytic cycle” , *Biochemistry*, 57, 5289-5300, 2018.
- [2] G.-J. Bekker, B. Ma, N. Kamiya, “Thermal stability of single-domain antibodies estimated by molecular dynamics simulations” , *Protein Sci*, 28, 429-438, 2019.
- [3] Wen Jun Xie, Seoncheol Cha, Tatsuhiko Ohto, Wataru Mizukami, Yuezhi Mao, Manfred Wagner, Mischa Bonn, Johannes Hunger, and Yuki Nagata, “Large Hydrogen Bond Mismatch between TMAO and Urea Promotes Their Hydrophobic Association” , *Chem*, 4, 2615, 2018.
- [4] R. Tanaka, T. Kawata, and T. Tsukahara, “DNS of Taylor-Couette flow between counter-rotating cylinders at small radius ratio” , *International Journal of Advances in Engineering Sciences and Applied Mathematics*, Vol. 10, Issue 2, 159-170, 2018.
- [5] T. Nimura, T. Kawata, and T. Tsukahara, “Viscoelastic effect on steady wavy roll cells in wall-bounded shear flow” , *Fluid Dynamics Research*, Vol. 50, No. 5 , 51414, 2018.
- [6] T. Nimura, T. Kawata, and T. Tsukahara, “Viscoelasticity-induced pulsatile motion of 2D roll cell in laminar wall-bounded shear flow” , *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 74, 65-75, 2018.
- [7] T. Tsukahara, T. Tomioka, T. Ishida, Y. Duguet, and G. Brethouwer, “Transverse turbulent bands in rough plane Couette flow” , *Journal of Fluid Science and Technology*, Vol. 13, Issue 3, JFST0019, 2018.
- [8] K. Nitta and T. Tsukahara, “Numerical demonstration of in-tube liquid-column migration driven by photoisomerization” , *Micromachines*, Vol. 9, No. 10, 533, 2018.
- [9] Y. Fujimoto, “Gas adsorption effects on the stabilities, electronic structures and scanning tunneling microscopy of graphene monolayers doped with B or N” , *Japanese Journal of Applied Physics*, 58, pp.015005\_1-8, 2019.
- [10] T. Haga, Y. Fujimoto and S. Saito, “STM visualization of carbon impurities in sandwich structures consisting of hexagonal boron nitride and graphene” , *Japanese Journal of Applied Physics*, (Accepted).
- [11] T. Konishi, H. Kojima, H. Nakagawa, and T. Tsuchiya, “In search of minimum locating arrays” , Submitted.
- [12] Jingchen Gu, Motoki Sakaue, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima; , “An immersed lubrication model for the fluid flow in a narrow gap region” , *Powder Technology*, Vol.329, pp.445-454, 2018.04.
- [13] Jingchen Gu, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Influence of Rayleigh number and solid volume fraction in particle-dispersed natural convection” , *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.120, pp.250-258, 2018.05.
- [14] Toshiaki Fukada, Walter Fornari, Luca Brandt, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “A numerical approach for particle-vortex interactions based on volume-averaged equations” , *International Journal of Multiphase Flow*, Vol.104, pp.188-205, 2018.07.
- [15] Shintaro Takeuchi, Hiroki Fukuoka, Jingchen Gu, Takeo Kajishima, “Interaction problem between fluid and membrane by a consistent direct discretisation approach”, *Interaction problem between fluid and membrane by a consistent direct discretisation approach*, *Journal of Computational Physic*, Vol.371, pp.1018-1042, 2018.1.
- [16] Kie Okabayashi, Kenshi Hirai, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Direct numerical simulation of turbulent flow above zigzag ripples” , *AIP Ad-*

- vances, Vol.8, Issue 10, 105227, 2018.1.
- [17] Jingchen Gu, Shintaro Takeuchi, Toshiaki Fukada, Takeo Kajishima, "Vortical flow patterns by the cooperative effect of convective and conductive heat transfers in particle-dispersed natural convection", International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.130, pp.946-959, 2019.03.
- [18] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Estimation of fluid force on spherical particle for two-way coupling simulation", International Journal of Multiphase Flow, Vol.113, pp.165-178, 2019.01.
- [19] Shintaro Takeuchi, Suguru Miyauchi, Takeo Kajishima, Asahi Tazaki, "A relation between membrane permeability and flow rate at low Reynolds number in circular pipe", Journal of Membrane Science, 2019.03.
- [20] 宮森由布里・竹内伸太郎・谷京晨・梶島岳夫, “粒子分散混相流の自然対流に特有の反転現象の解析”, ながれ, Vol.37, No.2, pp.119-122, 2018.
- [21] Nicolas Jourdaine, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, Takayuki Kojima, A. Koichi Hayashi, "Three-dimensional numerical thrust performance analysis of hydrogen fuel mixture rotating detonation engine with aerospike nozzle", Proceedings of the Combustion Institute, 37(3), pp. 3443-3451.
- [22] Ayu Ago, Nobuyuki Tsuboi, Edyta Dzieminska & A. Koichi Hayashi, "Two-Dimensional Numerical Simulation of Detonation Transition with Multi-Step Reaction Model: Effects of Obstacle Height", Combustion Science and Technology, Aug-18.
- [23] Y. Kajiwara and N. Mori, "Nonequilibrium Green function simulation of coupled electron-phonon transport in one-dimensional nanostructures", Japanese Journal of Applied Physics, 2019.
- [24] S. Makihira and N. Mori, "Intra-collisional field effect in one-dimensional GaN nanowires", Japanese Journal of Applied Physics, 2019.
- [25] T. Omori, Y. Kobayashi, Y. Yamaguchi and T. Kajishima, "Understanding the asymmetry between advancing and receding microscopic contact angles", Soft Matter, (Accepted), 2019.
- [26] Hidenori Yoshizawa, Daisuke Motooka, Yuki Matsumoto, Ryuichi Katada, Shota Nakamura, Eiichi Morii, Tetsuya Iida, Hiroshi Matsumoto, "A case of severe soft tissue infection due to Streptococcus tigurinus diagnosed by necropsy in which genomic analysis was useful for clarifying its pathogenicity", Pathology International, Volume 68, Issue 5, Pages 301-306, May-18.
- [27] 西田泰士, 本多克宏, "イノベーション加速のための自己組織化マップによる解決手段の可視化", 知能と情報 (日本知能情報ファジィ学会誌), Vol.30, No.2, pp. 543-547, 2018.
- [28] 稲田慎, 柴田仁太郎, 芦原貴司, 中沢一雄, "房室結節における心拍制御機構の解析 コンピュータシミュレーションによる検討一", 計測と制御, Vol. 57, No. 8, pp. 563-569, 2019.
- [29] 芦原貴司, "CLINICAL TOPICS : 非発作性心房細動アブレーションの新機軸提案に向けた臨床・インシリコ融合研究", BIO Clinica 2018, 33, 12, 52-57, 2018.
- [30] Mina Maruyama and Susumu Okada, "Geometric and electronic structures of a two-dimensional covalent network of sp<sub>2</sub> and sp<sub>3</sub> carbon atoms", Diamond and Related Materials, 81, 103-107 (2018), 81, 103-107, 2018.
- [31] Hisaki Sawahata, Mina Maruyama, Nguyen Thanh Cuong, Haruka Omachi, Hisanori Shino-hara, and Susumu Okada, "Energetics and electronic properties of B<sub>3</sub>N<sub>3</sub>-doped graphene", ChemPhysChem, 19, 237-242, 2018.
- [32] Kazufumi Yoneyama, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada, "Mechanical properties of graphene nanoribbons under uniaxial tensile strain", Japanese Journal of Applied Physics, 57, 35101, 2018.
- [33] Yasumaru Fujii, Mina Maruyama, Katsunori Wakabayashi, Kyoko Nakada, and Susumu Okada, "Electronic structure of two-dimensional hydrocarbon networks of sp<sub>2</sub> and sp<sub>3</sub> C atoms", Journal of the Physical Society of Japan, 87, 34704, 2018.
- [34] Yanlin Gao and Susumu Okada, "Electrostatic Properties of Graphene Edges for Electron Emission under an External Electric Field", Applied Physics Letters, 112, 163105, 2018.
- [35] Manaho Matsubara and Susumu Okada, "Field-induced structural control of CO<sub>x</sub> molecules adsorbed on graphene", Journal of Applied Physics, 123, 174302, 2018.
- [36] Sho Furutani and Susumu Okada, "Energetics and electronic structures of chemically decorated C<sub>60</sub> chains", Japanese Journal of Applied Physics,

- 57, 06HB02, 2018.
- [37] Airi Yasuma, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada, “Energetics of edge oxidization of graphene nanoribbons”, Japanese Journal of Applied Physics, 57, 06HB03 , 2018.
- [38] Hisaki Sawahata, Ayaka Yamanaka, Mina Maruyama, and Susumu Okada, “Energetics and formation mechanism of borders between h-BN and graphene”, Applied Physics Express, 11, 65201, 2018.
- [39] Yuya Nagasawa, Takeshi Koyama, and Susumu Okada, “Energetics and electronic structures of perylene confined in carbon nanotubes”, Royal Society Open Science, 5, 180359, 2018.
- [40] Kazufumi Yoneyama, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada, “Energetics and electronic structure of corrugated graphene nanoribbons”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 57, 85101, 2018.
- [41] Sho Furutani and Susumu Okada, “Electronic structure and cohesive energy of silyl-methyl-fullerene and methano-indene-fullerene solids”, Japanese Journal of Applied Physics, 57, 85102, 2018.
- [42] Yasumaru Fujii, Mina Maruyama, and Susumu Okada, “Geometric and electronic structures of two-dimensionally polymerized triptycene: Covalent honeycomb networks comprising triptycene and polyphenyl”, Japanese Journal of Applied Physics, 57, 125203, 2018.
- [43] Mina Maruyama and Susumu Okada, “Energetics and electronic structure of triangular hexagonal boron nitride nanoflake”, Scientific Reports, 8, 16657, 2018.
- [44] A. Sunahara, T. Asahina, H. Nagatomo, R. Hanayama, H. Tanaka, K. Mima, Y. Kato, and S. Nakai, “Efficient Laser Acceleration of Deuteron Ions Through Optimization of Pre-plasma Formation for Neutron Source Development”, Plasma Physics and Controlled Fusion 61, 61, 25002, 10 pages, Nov. 2018.
- [45] Y. Mori, A. Sunahara, Y. Nishimura, T. Hioki, H. Azuma, T. Motohiro, Y. Kitagawa, K. Ishii, R. Hanayama, O. Komeda, T. Sekine, T. Kurita, T. Takeuchi, T. Kurita, E. Miura, and Y. Sentoku, “Modification of single-crystalline yttria-stabilised zirconia induced by radiation heating from laser-produced plasma”, Journal of Physics D 52, D52, 105202, 13 pages, Jan. 2019.
- [46] Mihoko Konishi, Taro Matsuo, Kodai Yamamoto, Matthias Samland, Jun Sudo, Hiroshi Shibai, Yoichi Itoh, Misato Fukagawa, Takahiro Sumi, et al, “A Substellar Companion to Pleiades HII 3441”, Publications of the Astronomical Society of Japan, Vol.68, No.6, 92, Dec. 2016.
- [47] 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.
- [48] Shuhei Shinzato, Masato Wakeda and Shigenobu Ogata, “An atomistically informed kinetic Monte Carlo model for predicting solid solution strengthening of body-centered cubic alloys”, International Journal of Plasticity, in press, 2019.
- [49] A. Yamamoto, “1D anyons in relativistic field theory”, PTEP 2018, 043B03, 2018.
- [50] A. Yamamoto, “Non-Abelian vortex in lattice gauge theory”, PTEP 2018, 103B03, 2018.
- [51] K. Hattori, A. Yamamoto, “Meson deformation by magnetic fields in lattice QCD”, PTEP 2019, in press, 2019.
- [52] S. Pu, A. Yamamoto, “Abelian and non-Abelian Berry curvatures in lattice QCD”, Nuclear Physics B, 933, 53-64, 2018.
- [53] T. Hirakida, E. Itou, H. Kouno, “Thermodynamics for pure SU (2) gauge theory using gradient flow”, Progress of Theoretical and Experimental Physics, Volume 2019, Issue 3, 033B01, Mar-19.
- [54] T. Yamaguchi and K. Iwano, “The Optical Conductivity for a Spin-Peirls Ground State of (TMTTF) 2PF6 with tetramer formation”, Journal of Low Temperature Physics.
- [55] Hiroaki Kouno, “Lattice QCD simulations at finite chemical potentials”, Reports of the Faculty of Science and Engineering, Vol.47, No.2, pp.1-4, 2018.
- [56] Ken'ichiro Nakazato, Hideyuki Suzuki and Hajime Togashi, “Heavy nuclei as thermal insulation for protoneutron stars”, Physical Review, C97, no.3, 35804, 2018.
- [57] M. Zaizen, T. Yoshida, K. Sumiyoshi and H. Umeda, “Collective neutrino oscillations and detectabilities in failed supernovae”, Physical

- Review, D98, 103020, 11 pages, 2018.
- [58] K. Takahashi, K. Sumiyoshi, S. Yamada, H. Umeda and T. Yoshida, “The evolution towards electron-capture supernovae: the flame propagation in collapsing oxygen-neon cores”, *Astrophysical Journal*, 871, 153, 20 pages, 2019.
- [59] H. Nagakura, S. Furusawa, H. Togashi, S. Richers, K. Sumiyoshi and S. Yamada, “Comparing treatments of weak reactions with nuclei in simulations of core-collapse supernovae”, *Astrophysical Journal Supplement Series*, 240, 38, 32 pages, 2019.
- [60] A. Harada, H. Nagakura, W. Iwakami, H. Okawa, S. Furusawa, H. Matsufuru, K. Sumiyoshi and S. Yamada, “On the neutrino distributions in phase space for the rotating core-collapse supernova simulated with a boltzmann-neutrino radiation-hydrodynamics code”, *Astrophysical Journal*, 872, 181, 19 pages, 2019.
- [7] K. Yamasaki, T. Tsukahara, I. Ueno, “Numerical simulation of thermocapillary-driven flow in a free rectangular liquid film with varying volume ratios”, In: *Proceedings of the 29th International Symposium on Transport Phenomena*, ISTP, 29-104, Oct. 30 - Nov. 2018.
- [8] T. Fukuda and T. Tsukahara, “Turbulent heat transfer of transitional regime with large-scale intermittent structure in annular flow”, In: *Proceedings of 12th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements*, 6 pages, Sep. 2018.
- [9] K. Oda, T. Tsukahara, S. Jakirlić, and Y. Kawaguchi, “Reynolds-stress model applied to the drag-reducing viscoelastic turbulent flow over backward-facing step”, In: *Proceedings of 12th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements*, 6 pages, Sep. 2018.
- [10] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, Jingchen Gu, Yuri Miyamori, “Characteristic patterns in natural convection of solid-liquid two-phase media”, 8th European-Japanese Two-Phase Flow Group Meeting (EJTPFGM8), 2018.04.23.
- [11] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, “Immersed boundary methods for numerical simulation of complex flow fields”, Taiwan Society for Industrial and Applied Mathematics (TWSIAM), 2018.05.26.
- [12] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, “Immersed boundary methods for particle-laden flows and fluid-structure interactions with heat and mass transfer”, World Forum and Leading Show for the Process Industries (ACHEMA2018), 2018.06.12.
- [13] Jingchen Gu, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Coupled effects of convection and conduction on heat transfer in solid-liquid two-phase media densely laden with finite-sized particles”, 16th International Heat Transfer Conference (IHTC16), 23828, 2018.08.11.
- [14] Takeo Kajishima, “Direct numerical simulation of inertial particles/droplets in turbulent flows”, Urban Big Data & Simulation Forum 2018, 2018.09.20.
- [15] Daiki Ishikawa, Kie Okabayashi, “Numerical photoisomerization using OpenFOAM”, In: *Proceedings of the 29th International Symposium on Transport Phenomena*, ISTP, 29-104, Oct. 30 - Nov. 2018.

## 2. 國際會議會錄揭載論文

- [1] K. Tsujimoto, K. Jinno, T. Shakouchi and T. Ando, “Numerical Simulation of Intermittently Controlled Multiple Impinging Jets”, the 21st Australasian Fluid Mechanics Conference, USB, 4p, Dec. 2018.
- [2] T. Suzuki, K. Tsujimoto, T. Shakouchi and T. Ando, “DNS of Flow and Heat Transfer Characteristics of Multiple Impinging Jets”, the 21st Australasian Fluid Mechanics Conference, USB, 4p, Dec. 2018.
- [3] Nakatani, Y., Naka, Y., Nishida, S., and Taniguchi, K., “Behavior analysis of scum deposited from a combined sewer system in urban river system”, 15th Estuarine Coastal Modeling Conference (ECM15), June, 2018.
- [4] 多鍋耀介, 中谷祐介, 西田修三, “気候変動が琵琶湖の水温・DOに及ぼす影響とそのメカニズム”, 第 17 回世界湖沼会議, P3-33, 2018 年 10 月.
- [5] K. Matsui, K. Fujiwara, Y. Ueki, and M. Shibahara, “Molecular dynamics study on effects of structure on nucleation of water droplets”, *Proceedings of the 16th International Heat Transfer Conference* (IHTC-16), IHTC16-23792, 2018.
- [6] K. Nitta and T. Tsukahara, “Direct numerical simulation of the liquid-column manipulation by

- study on the hypersonic boundary-layer receptivity to free-stream disturbance over a flat plate”, 12th Asian Computational Fluid Dynamics Conference (ACFD), 0154, 2018.10.15.
- [16] Asahi Tazaki, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Consistent coupling between incompressible velocity and pressure fields with pressure discontinuity across a permeable membrane”, 12th Asian Computational Fluid Dynamics Conference (ACFD), 0120, 2018.10.16.
- [17] Shintaro Takeuchi, Jingchen Gu, Takeo Kajishima, “Vortical structures in natural convection of particle-dispersed two-phase flow”, 12th Asian Computational Fluid Dynamics Conference (ACFD), 0148, 2018.10.16.
- [18] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Effect of flow disturbance around a particle for fluid force estimation in two-way coupling simulation”, 71st Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics (DFD2018), D37.05, 2018.11.18.
- [19] Jingchen Gu, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “An extended lubrication model for fluid flow in narrow gaps”, 71st Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics (DFD2018), A10.05, 2018.11.18.
- [20] Kunichika Tsumoto, Takashi Ashihara, Yasutaka Kurata, Yoshihisa Kurachi, “Reflected conduction caused by subcellular sodium channel redistributions”, Journal of Physiological Sciences, (in press), Mar-19.
- [21] Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Takaya, Yasuhiro Mizutani, “Laser micro machining using a photonic nanojet controlled by incident wavelength”, euspen’s 18th International Conference & Exhibition, Jun-18.
- [22] T.Hiejima, “Development of linear unstable modes in supersonic streamwise vortices using a weighted essentially non-oscillatory scheme”, Proceedings of International Conference on Computational Fluid Dynamics, ICCFD10-054, 11 pages, 2018.
- [23] Toshihiro Iwasa, Keiichiro Fujimoto, Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Simulations of Hydrogen Jet Mixing in Supersonic Crossflow for Liquid Rocket Commanded Destruction”, 12th Asian Computational Fluid Dynamics Conference, 0104, October, 2018.
- [24] Yoshiki Nishikawa, Nobuyuki Tsuboi, Takashi Ito, Satoshi Nonaka, “Numerical Study on Aerodynamic Characteristics of Reusable Vehicle-eXperiment Rocket with Body-flap during Gliding”, 15th International Conference on Flow Dynamics, GS1-30, November, 2018.
- [25] Tomohiro Watanabe, Nicolas H. Jourdaine, Kohei Ozawa, Nobuyuki Tsuboi, Takayuki Kojima, A. Koichi Hayashi, “Three-dimensional Numerical Simulation of Disk Rotating Detonation Engine; Unsteady Flow Structure”, AIAA SciTech2019, AIAA-2019-1498, January, 2019.
- [26] Kensuke Yasufuku, Shinsuke Nagaoka, “Interactive Visualization for Analysis of Air Traffic Model”, Proceedings of the 18th International Conference on Geometry and Graphics, Digital Proceedings (ISBN: 978-3-319-95588-9), pp.1161-1166, Aug. 2018.
- [27] Y. Shinohara, W. Dmowski, T. Iwashita, D. Ishikawa, A. Baron, T. Egami , “Emergence of local slow dynamics of water molecules induced by sodium chloride”, American Physical Society 2018 March meeting, 2018 March .
- [28] Ying-Feng Hsu, Morito Matsuoka, Nicolas Jung, Yuki Matsumoto, Daisuke Motooka, Shota Nakamura, “[Regular Paper] A High-Performance Sequence Analysis Engine for Shotgun Metagenomics through GPU Acceleration”, 2018 IEEE 18th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (BIBE), Oct-18.
- [29] H. Nemura, “Hyperon-Nucleon Interaction from Lattice QCD at  $(m\pi, mK) \approx (146, 525)$  MeV”, arXiv:1810.04046 [hep-lat].
- [30] Yasushi Nishida and Katsuhiro Honda, “Visualization of Potential Technical Solutions by Self-Organizing Maps and Co-cluster Extraction”, SCIS&ISIS2018 (2018 Joint 10th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 19th International Symposium on Advanced Intelligent Systems), pp. 820-825, 2018.
- [31] Yasushi Nishida and Katsuhiro Honda, “A Comparative Study on SOM-Based Visualization of Potential Technical Solutions Using Fuzzy Bag-of-Words and Co-occurrence Probability of Technical Words”, IUKM2019 (Integrated Uncertainty in Knowledge Modelling and Decision Making), pp. 360-369, 2019.
- [32] Shin Inada, Nitro Shibata, Takashi Ashihara, Takanori Ikeda, Kazuo Nakazawa, “Effects of autonomic nerve activity on atrioventricular node

- conduction -A simulation study-”, The 2018 International Congress on Electrocardiology, Oral presentation, 2018/10/17-20.
- [33] Shin Inada, Takeshi Aiba, Ryo Haraguchi, Takashi Ashihara, Kengo Kusano, Wataru Shimizu, Takanori Ikeda, Kazuo Nakazawa, “Arrhythmogenic of right ventricular outflow tract epicardium -A simulation study-”, The 2018 International Congress on Electrocardiology, Oral presentation, 2018/6/28-30.
- [34] Ashihara T, Sakata K, Okuyama Y, Ozawa T, Haraguchi R, Nakazawa K, Tsuchiya T, Horie M, “Modulation of non-PAF driver is not always reflected by the increase in global AF cycle length: ExTRa Mapping project”, Heart Rhythm 2018 Scientific Sessions, Poster, 2018/05/09-12.
- [35] M. M. Dozieres, P. Forestier-Colleoni, C. McGuffey, K. Matsuo, et al, “Emission spectroscopy characterization of an imploded, magnetized cylindrical plasma for relativistic electron transport”, 60th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Nov. 8, 2018.
- [36] Chang Liu et al, “Numerical Design of Zeeman spectroscopy experiment with magnetized silicon plasma generated in the laboratory”, Proceedings of 12th International Conference on High Energy Density Laboratory Astrophysics, (submitted).
- [37] Atsushi Sunahara, Takashi Asahina, Hideo Nagatomo, Ryohei Hanayama, Kunioki Mima, Hiroki Tanaka, Yoshiaki Kato, Sadao Nakai, Ahmed Hassanein, “Numerical simulation for enhanced production of energetic deuteron ions for neutron sources using laser beams”, Bulletin of the American Physical Society, 60th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Volume 63, Number 11, UO6.00003, 2018.
- [38] Kamiya, T., Asahara, M., Miyasaka, T., “Hydrodynamic Instability on Liquid Column Deformation at a High Weber Number”, 14th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, July, 2018.
- [39] K. Horiuti and R. Kanzaki, “A new elastic dumbbell model with variable affinity in multi-scale analysis of polymer-diluted turbulent flow”, 9th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, July 10-13, 2018.
- [40] Yamazaki, T., Oda, Y., Matsumoto, R. and Katsuki, M., “Direct Numerical Simulation of Turbulent Heat Transfer in Pulsating Plane Channel Flows with Different Frequency”, The 16th International Heat Transfer Conference (IHTC-16), Paper No. IHTC16-23774, Aug-18.
- [41] Y. Taniguchi, A. Baba, S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawa, T. Shimojo, A. Suzuki, H. Suzuki, T. Umeda, “Study of energy-momentum tensor correlation function in  $N_f=2+1$  full QCD for QGP viscosities”, Proceeding of Science, LATTICE2018, pp166 (1-7), 2018.
- [42] A. Baba, S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawa, T. Shimojo, H. Suzuki, Y. Taniguchi, T. Umeda, “Measuring of chiral susceptibility using gradient flow”, Proceeding of Science, LATTICE2018, pp173 (1-7), 2018.
- [43] M. Shirogane, S. Ejiri, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, T. Umeda, “Equation of state near the first order phase transition point of SU(3) gauge theory using gradient flow”, Proceeding of Science, LATTICE2018, pp164 (1-7), 2018.
- [44] Remi Konagaya, Tomotaka Kobayashi, Ken Naitoh, Yoshiaki Tanaka, Kohta Tsuru, Kodai Kinoshita, Junya Mikoda, Kenichiro Ashikawa, Hiroki Makimoto, Yoshiki Kobayashi, Shi Lujiang and Sota Shinoda, “Unsteady three-dimensional computations and shock tube experiments of the compression principle of supermulti jets colliding with pulse”, “AIAApaper, 2018-4630, 2018.
- [45] Aya Hosoi, Remi Konagaya, Sota Kawaguchi, Yuya Yamashita, Yasuhiro Sogabe and Ken Naitoh, “Staggered-grid computation of single-point autoignition gasoline engine with colliding pulsed supermulti-jets”, “Proceedings of JSST, 293-296, 2018.
- [46] Yuya Yamashita and Ken Naitoh, “Essential study of influence of rotary valve speed on compression level due to jets colliding in a new high-thermal efficiency engine”, “Proceedings of JSST, 297-300, 2018.
- [47] Tomotaka Kobayashi and Ken Naitoh, “New quasi-stable ratios of physical particles revealed by multi-dimensional Taylor expansion series”, “Proceedings of JSST, 301-304, 2018.
- [48] T. Hirakida, E. Itou, H. Kouno, “Thermodynamics for SU (2) pure gauge theory using gradient flow”, “Proceedings of Science (LATTICE2018), 167, July 22-28, 2018.
- [49] Hideo Matsufuru and Kohsuke Sumiyoshi, “Simulation of Supernova Explosion Accelerated on GPU: Spherically Symmetric Neutrino-Radiation

- Hydrodynamics, “Lecture Notes in Computer Science (ICCSA 2018), vol 10962, July 2 - 5, 2018.
- [50] H. Matsufuru and K. Sumiyoshi, “Simulation of supernova explosion accelerated on GPU: Spherically symmetric neutrino-radiation hydrodynamics, “Lecture Notes in Computer Science book series (ICCSA 2018), Vol. 10962, 440-455, 2018.7.
- [51] H. Matsufuru and K. Sumiyoshi, “Accelerating numerical simulations of supernovae with GPUs, “IEEE Xplore and Computer Society Digital Libraries (CANDAR 2018), 2018.11.
- [52] Etsuko Itou, Kei Iida, Tong-Gyu Lee, “Topology of two-color QCD at low temperature and high density, “Proceedings of Science(LATTICE2018), 168, 7 pages, Jul. 2018.
- [53] M. Wakayama, Y. Murakami, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi and H. Wada, “Mass of a1 Meson from Lattice QCD with the Truncated Overlap Fermions, “JPS Conf. Proc. (QNP 2018), QNP18-077, 2019.
- [54] V. G. Bornyakov, D. L. Boyd, V. A. Goy, H. Iida, A. V. Molochkov, A. Nakamura, A. A. Nikolaev, V. I. Zakharov and M. Wakayama, “Lattice QCD at finite baryon density using analytic continuation, “ICNFP 2017, 182, 02017, 2018.
- [6] 鈴木忠史・辻本公一・社河内敏彦・安藤俊剛, “間欠制御された多重噴流の流動特性”, 日本機械学会東海支部第 68 期総会・講演会講演論文集, USB, 3p, Mar. 2019.
- [7] 越後謙太郎・辻本公一・社河内敏彦・安藤俊剛, “DNSを用いた開花噴流の衝突噴流の流動・伝熱特性評価”, 日本機械学会東海支部第 68 期総会・講演会講演論文集, USB, 4p, Mar. 2019.
- [8] 中谷祐介, 石橋春佳, 西田修三, “河川感潮域の流動・水質に及ぼす海岸埋立ての影響”, 日本流体力学会年会, 2018 年 9 月.
- [9] 谷口和也, 中谷祐介, 西田修三, “寝屋川水系における浮遊汚泥の挙動に関する研究”, 平成 30 年度瀬戸内海研究フォーラム in 神戸, 2018 年 8 月.
- [10] 芦田 肇, 松田 朋己, 佐野 智一, 廣瀬 明夫, “銀 - アルミナ接合機構解明に向けたマルチスケール解析”, 第三回マルチスケール材料力学シンポジウム講演論文集, May. 2018.
- [11] 芦田 肇, 松田 朋己, 佐野 智一, 廣瀬 明夫, “銀 アルミナ接合機構解明に向けたマルチスケール解析”, 第 31 回計算力学講演会 (CMD2018) 講演論文集, November. 2018.
- [12] 宮本智也, 藤原邦夫, 芝原正彦, “凝固界面と微粒子の相互作用に関する分子動力学的研究”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2018, E212, 2018.
- [13] 内田翔太, 藤原邦夫, 吉田順一, 芝原正彦, “固体壁面近傍における水の凝固過程と微粒子の相互作用に関する分子動力学解析”, 第 55 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, G323, 2018.
- [14] 伊井仁志, 竹田圭佑, 越山顕一朗, 和田成生, “流体・構造・音響連成解析による肺クラックル音の理解”, 第 23 回計算工学講演会論文集, Vol. 23, 3 頁, 2018 年 6 月.
- [15] 竹田圭佑, 伊井仁志, 吉永司, 越山顕一朗, 和田成生, “気道および肺実質内の音響伝播モデルを用いた肺音伝播メカニズムの考察”, 日本機械学会第 31 回バイオエンジニアリング講演会講演論文集, 2 頁, 2018 年 12 月.
- [16] 新田圭, 塚原隆裕, “光異性化による円管内液体駆動現象の直接数値解析”, 第 96 期日本機械学会流体工学部門講演会 講演論文集, OS2-24, 4 pages, Nov. 2018.

### 3. 国内研究会等発表論文

- [1] 北原歓伍, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNS による間欠制御された多重噴流の流動特性”, 日本機械学会 2018 年度年次大会講演論文集 CD-ROM, 5p, Sep. 2018.
- [2] 鈴木忠史, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “多重衝突噴流の流動・熱伝達特性のDNS”, 日本機械学会 2018 年度年次大会講演論文集, CD-ROM, 5p, Dec. 2018.
- [3] 鈴木忠史, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNSによる間欠制御された多重衝突噴流の流動・伝熱特性”, 第 96 期日本機械学会流体工学部門講演会, USB, 3p, Nov. 2018.
- [4] 北原歓伍・辻本公一・社河内敏彦・安藤俊剛, “間欠制御された多重噴流のDNS”, 第 96 期日本機械学会流体工学部門講演会, USB, 3p, Nov. 2018.
- [5] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNSを用いた開花噴流の混合と拡散”, 第 96 期日本機械学会流体工学部門講演会,

- [17] 山崎広哉, 塚原隆裕, 上野一郎, “液膜体積比に依存した液膜マランゴニ対流の数値解析”, 第 96 期日本機械学会流体工学部門講演会 講演論文集, OS2-6, 2 pages, Nov. 2018.
- [18] 小田和希, 塚原隆裕, 川口靖夫, “粘弾性流体バックステップ乱流における応力方程式モデルの検証”, 第 96 期日本機械学会流体工学部門講演会 講演論文集, OS1-5, 4 pages, Nov. 2018.
- [19] 長町厚志, 塚原隆裕, “深層学習による粘弾性流体乱流の予測可能性に関する調査”, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会 講演論文集, 033, 4 pages, Nov. 2018.
- [20] 花房真輝, 塚原隆裕, “固体粒子を含むチャネル流における乱流縞構造安定性に関する研究”, 日本流体力学会年会 2018 講演論文集, 4 pages, Sep. 2018.
- [21] 福田雄大, 塚原隆裕, “環状ポアズイユ流における大規模間欠構造を伴う遷移域の乱流熱伝達”, 第 55 回日本伝熱シンポジウム 講演論文集, P142, 6 pages, May. 2018.
- [22] 石田祐二郎, 置田真生, 伊野文彦, 萩原兼一, “並列プログラム自動生成における間接参照の削減によるベクトル計算機向けメモリ参照効率化”, 第 14 回情報科学ワークショップ会議録 (WTCS 2018) , pp. 153–156, (2018-09).
- [23] 石田祐二郎, 置田真生, 伊野文彦, 萩原兼一, “並列プログラム自動生成におけるベクトル計算機向けメモリ参照効率化のための間接参照の削減”, 電子情報通信学会技術研究報告, CPSY2018-20, pp. 115–120, (2018-07).
- [24] 新村 啓介, 加藤 有己, 河原 行郎, “ビット列のソートに基づくリード直接比較による高速省メモリゲノム構造変異解析”, 第 53 回情報処理学会バイオ情報学研究会, 情報処理学会研究報告, 2018-BIO-53 (12), Mar. 2018.
- [25] 加藤 有己, 新村 啓介, 河原 行郎, “配列リード直接比較による高精度省メモリゲノム構造変異解析”, 第 41 回日本分子生物学会年会, 1P-0792, Nov. 2018.
- [26] 井上直樹・小川皓俊・大森健史・山口康隆・梶島岳夫, “固液摩擦係数に対する Green-Kubo 関係式 - 有限サイズ効果についての考察”, 第 55 回日本伝熱シンポジウム, G315, 2018.05.31.
- [27] Kie Okabayashi, “Detailed investigation on vortices in turbulent flow above zigzag riblets”, 第 50 回流体力学講演会／第 36 回航空宇宙数值シミュレーション技術シンポジウム AI-AA/JSASS 合同セッション, 3A08, 2018.07.06.
- [28] 梶島岳夫, “Get Immersed!”, 日本流体力学会年会 2018, 2018.09.05.
- [29] 大森健史・小林要佑・山口康隆・梶島岳夫, “分子動力学法による微視的動的接触角の解析”, 日本流体力学会 年会 2018, 2018.09.05.
- [30] 田崎旭・竹内伸太郎・梶島岳夫, “透過膜表裏の圧力不連続性を考慮した非圧縮速度場と圧力場のカップリング”, 日本流体力学会 年会 2018, 2018.09.05.
- [31] 深田利昭・竹内伸太郎・梶島岳夫, “粒子周り流れの擾乱効果を考慮した流体力の評価手法”, 日本流体力学会 年会 2018, 2018.09.06.
- [32] 小寺裕基・岡林希依・竹内伸太郎・梶島岳夫, 安炳辰, 能見基彦, 大渕真志, “円筒で囲まれた回転-静止円盤間に生じる流れの全体安定性解析”, 日本流体力学会 年会 2018, 2018.09.06.
- [33] 岡林希依, 梶島岳夫, “翼周りのキャビテーション乱流場における間欠的な横渦に関する考察”, 第 19 回キャビテーションに関するシンポジウム, 2018.10.18.
- [34] 乙井瑛伍・岡林希依, “リブレットによる空間発達壁乱流の抵抗低減に関する直接数値シミュレーション”, 第 32 回数値流体力学シンポジウム, D08-2, 2018.12.12.
- [35] 立田康介・大森健史・藤井健博・梶島岳夫, “二次曲面による MOF 法の提案：単一セル情報に基づく界面再構成および界面曲率計算”, 第 32 回数値流体力学シンポジウム, E11-1, 2018.12.13.
- [36] 藤井健博・大森健史・梶島岳夫, “埋め込み境界射影法による動的濡れ現象の定式化”, 第 32 回数値流体力学シンポジウム, E11-4, 2018.12.13.
- [37] 小寺裕基・岡林希依・竹内伸太郎・梶島岳夫・安炳辰・能見基彦・大渕真志, “回転-静止円盤間に生じる流れの全体安定性解析”, 第 32 回数値流体力学シンポジウム, E11-2, 2018.12.13.
- [38] 羅文暘・岡林希依・梶島岳夫, “翼周りのキャビテーション乱流場における横渦の発生メカニズム”, 第 32 回数値流体力学シンポジウム, A11-3, 2018.12.13.
- [39] 吉川 裕, “沿岸域や縁辺海における混合過程”, 日本海洋学会 2018 年度秋季大会沿岸海

- 洋シンポジウム, 2018 年 9 月 25 日.
- [40] Kunichika Tsumoto, Narumi Naito, Takashi Ashihara, Akira Amano, Yoshihisa Kurachi, “Cellular mechanisms underlying anisotropic conduction in ventricle; insights from computational models”, 第 65 回日本心電不整脈学会学術集会, Jul. 2018.
- [41] 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, “フォトニックナノジェットを利用した微細加工に関する研究(第 6 報)-フォトニックナノジェットの発生原理に基づく強度分布制御手法-”, 2018 年度精密工学会秋季大会, 3A(T)51, 2018 年 9 月.
- [42] 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, “フォトニックナノジェットを利用した微細加工に関する研究(第 7 報)-フォトニックナノジェットの強度分布制御に基づいた加工制御”, 2019 年度精密工学会春季大会, L20, 2019 年 3 月.
- [43] 加藤陽介, 比江島俊彦, “2 次元超音速ジェットにおけるせん断渦とマッハ波の発生について”, 日本流体力学会年会 2018 講演論文集, 127, pp.1-3, 2018.
- [44] 比江島俊彦, “超音速 Bachelor 渦の発達におけるエントロピー変動の影響について”, 第 32 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, D07-1, 1-2, 2018.
- [45] 糟谷瑛, 新里秀平, 尾方成信, “データベース駆動型モンテカルロ法を用いた粒界偏析の原子論的解析”, 日本金属学会 2019 年春期(第 164 回) 講演大会, 2019.3.20.
- [46] 荒木天秀, 武藤大貴, 寺島洋史, 坪井伸幸, “エネルギー/圧力発展ハイブリッド法を用いた超臨界極低温噴流における密度接触面の堅牢な数値解析”, 第 35 回流体力学講演会/第 36 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 3C13, 2018, 7.
- [47] 荒木天秀, 武藤大貴, 寺島洋史, 坪井伸幸, “超臨界圧高密度比流れに対するエネルギー/圧力発展ハイブリッド法”, 第 32 回数値流体力学シンポジウム, A10-5, 2015, 12.
- [48] 宇崎友規, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, 小澤晃平, “数値解析及び風洞試験によるオービター搭載Waveriderの空力特性調査”, 第 62 回宇宙科学技術連合講演会, 2F12, 2018, 10.
- [49] 宇崎友規, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, 小澤晃平, “オービター搭載Waveriderの数値解析及び風洞試験による空力特性調査”, 平成 30 年度宇宙航空の力学シンポジウム, 2018.
- [50] 後藤祥太, 小澤晃平, 坪井伸幸, “軸・接線噴射を用いたハイブリッドロケットエンジンのインジェクタ特性解析”, 第 62 回宇宙科学技術連合講演会, P12, 2018.
- [51] 天野泰嗣, 荒木天秀, 寺島洋史, 武藤大貴, 坪井伸幸, “超臨界圧下における主流と直交干涉する極低温噴流構造について : 3-D LES/RANSハイブリッド解析”, 日本機械学会九州支部第 72 期総会・講演会, D12, 2019.
- [52] 吾郷愛由, 坪井伸幸, 小澤晃平 & 林光一, “Artificial Thickening Flame 法を用いた障害物を有する管内でのデトネーション遷移に関する数値解析”, 第 56 回燃焼シンポジウム, 2018/11/14.
- [53] 岩崎幹太, 吾郷愛由, 坪井伸幸, 小澤晃平 & 林光一, “障害物を有する管内での酸水素デトネーション遷移の 2 次元数値解析 : 実験との比較”, 日本機械学会 九州支部 第 72 期総会・講演会, 2019/3/14.
- [54] 渡部友裕, JOURDAINE Nicolas, 小澤晃平, 坪井伸幸, 小島孝之, 林光一, “3 次元数値解析によるディスク型回転デトネーションエンジン内部の流れ場評価”, 第 56 回燃焼シンポジウム, B132, 2018.11.
- [55] 萩野陽輔, 浅井知, 平田好則, “アーク溶接の溶込み予測オンラインシステムの開発”, 溶接学会全国大会講演概要, 102 (2018), pp.6-7, Apr. 2018.
- [56] 岩下拓哉, “実空間で観る液体の原子レベルダイナミクス”, 東京大学物性研究所短期研究会「ガラス転移と関連分野の最先端研究」, 2018 年 5 月 11 日.
- [57] 岩下拓哉, “ガラスと液体の素励起に関する物理”, 日本物理学会領域 10 第 28 回 格子欠陥フォーラム「格子欠陥研究における理論・実験・計算の最前線」, 2018 年 9 月 7 日.
- [58] 岩下拓哉, “計算機シミュレーションによる液体・ガラスの物性研究”, 東北大学金属材料研究所 スパコンプロフェッショナル, No.16, 2018 年 10 月 19 日.
- [59] 井上直樹, 小川皓俊, 大森健史, 山口康隆, 梶島岳夫, “固液摩擦係数に対する Green-Kubo 関係式 - 有限サイズ効果についての考察”, 第 55 回日本伝熱シンポジウム, G315, 2018.05.31.
- [60] 大森健史, 小林要佑, 山口康隆, 梶島岳夫, “分子動力学法による微視的動的接触角の解析”, 日本流体力学会年会, 2018.09.05.

- [61] 根村英克, “ストレンジネスS=-1 系の格子QCD計算に基づく研究”, 日本物理学会第 74 回年次大会, 2019 年 3 月 14-17 日.
- [62] 稲田慎, 柴田仁太郎, 井上優子, 山本剛, 奈良崎大士, 原口亮, 芹原貴司, 池田隆徳, 草野研吾, 三井和幸, 中沢一雄, “12 誘導心電図から再構成したベクトル心電図を用いた心室性不整脈発生起源の推定～シミュレーションによる理論的検討～”, MEとバイオサイバネティクス研究会, 口頭発表, 2018/3/4-6.
- [63] 稲田慎, 柴田仁太郎, 井上優子, 山本剛, 奈良崎大士, 原口亮, 芹原貴司, 池田隆徳, 草野研吾, 三井和幸, 中沢一雄, “コンピュータシミュレーションにより再構成したベクトル心電図の不整脈発生起源同定への応用. 第 38 回医療情報学連合大会”, 第 38 回医療情報学連合大会, 口頭発表, 2018/11/22-25.
- [64] 芹原貴司, 奥山雄介, 小澤友哉, 原口亮, 稲田慎, 中沢一雄, 杉本喜久, 永田啓, “心内心電図処理に基づく心房細動のリアルタイム可視化がもたらすカテーテルアブレーションの変革”, 第 38 回医療情報学連合大会, 口頭発表, 2018/11/22-25.
- [65] Shin Inada, Nitaro Shibata, Takashi Ashihara, Takanori Ikeda, Kazuo Nakazawa, “Simulation study of excitation conduction using three-dimensional atrioventricular node model”, 第 57 回日本生体医工学会大会, 口頭発表, 2018/6/19-21.
- [66] 中 雄誠, 坪井 和也, 富田 栄二, 長谷川 達也, “DNSデータを用いた乱流予混合火炎の数値PIV計測におけるサブピクセル補間にに関する検討”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2018 講演論文集, C211, 2018 年 10 月.
- [67] 中島 良彰、城崎 知至、遠藤 琢磨、金 佑勁、難波 慎一、砂原 淳, “低圧N2 ガス中の Au プラズマからの水の窓領域X線放射機構に関する輻射流体シミュレーション”, 第 35 回プラズマ・核融合学会 年会, 2018/12/4.
- [68] 大西 祐太, 太田 貴士, “水素予混合燃焼を伴う壁乱流DNSによる渦構造変調の観察”, 本流体力学会 年会 2018, Sep. 2018.
- [69] 中辻 佳祐, 太田 貴士, “粗面乱流境界層における乱流構造の観察とその予測”, 日本機械学会 2018 年度年次大会, Sep. 2018.
- [70] 大坂 文哉, 太田 貴士, “クエット乱流における渦構造とキャビテーションの相互作用の観察”, 第 32 回数值流体力学シンポジウム, Dec. 2018.
- [71] 一柳 隆史, 太田 貴士, “乱流境界層における凝固しつつある液体流れのDNS”, 流体工学シンポジウム (第 62 回北陸流体工学研究会), Dec. 2018.
- [72] 佐竹 駿弥, 太田 貴士, “乱流境界層における音源構造の流れ条件への依存性”, 日本機械学会 北陸信越支部 第 56 講演会, Mar. 2019.
- [73] 林 晃弘, 太田 貴士, “粘弹性流体乱流における乱流構造の時間的特徴”, 日本機械学会 北陸信越支部 第 56 講演会, Mar. 2019.
- [74] 玉垣侑也, 草部浩一, 寺西慎伍, 西口和孝, “Nd<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> における 3d/4f局在電子軌道の第一原理有効ハミルトニアンの理論的評価”, 応用物理学会 2016 年第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 11p-S423-7.
- [75] Yusuf Wicaksono, Halimah Harfah, Koichi Kusakabe, “In-plane Magnetoresistance of Graphene in Ni/Graphene/Ni Spin-valve-like Structure: A New Prospective of Spin-logic Device”, 応用物理学会 2016 年第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 11p-M101-20.
- [76] Halimah Harfah, Yusuf Wicaksono, Muhammad Aziz majidi, Koichi Kusakabe, “Influence of Stacking Arrangement of the 2D Materials-Based Spin Valve on Magnetoresistance Performance: A First Principles Study of Ni/hBN/Ni Spin Valve”, 応用物理学会 2016 年第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 11p-M101-21.
- [77] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “主流の脈動を伴う平行平板間乱流熱伝達に関するDNS -脈動周波数の影響-”, 第 55 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, 2018 年 5 月.
- [78] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “平行平板間脈動乱流の対流熱伝達における脈動周波数の影響”, 日本機械学会 2018 年度年次大会講演論文集, Paper No. J0520402, 2018 年 9 月.
- [79] 山村徹, 枝本雅史, 森田太智, 砂原淳, 藤岡慎介, 城崎知至, 山本直嗣, 中島秀紀, “レーザー核融合ロケットにおける円錐形ターゲットの数値解析”, 平成 30 年度 宇宙輸送シンポジウム, STEP-2018-066.
- [80] 木曾一志, 松本正行, “光ファイバ中の誘導ブリルアン散乱を用いた光パルス圧縮”, 電子情報通信学会レーザ量子エレクトロニクス研究会, vol. 118, no. 399, LQE2018-170, pp. 119-112, 2019.
- [81] 君塚肇, 福井浩毅, 尾方成信, “Mg中の転

- 位の底面・柱面間の交差すべり機構に関する原子論的解析”, 日本金属学会 2019 年春期講演大会, 2019 年 3 月 20-22 日.
- [82] 市岡航平, 君塚肇, 尾方成信, “Ti-V 合金におけるマルテンサイト変態の原子論的機構に関する第一原理解析”, 日本金属学会 2019 年春期講演大会, 2019 年 3 月 20-22 日.
- [83] 岩井佑樹, 福井浩毅, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信, “低温下における鉄中らせん転位の移動障壁に関する原子論的解析”, 日本機械学会関西学生会平成 30 年度学生員卒業研究発表講演会, 2019 年 3 月 10 日.
- [84] 大依加奈, 三好宙, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信, “高分子の緩和挙動に関する加速分子動力学解析”, 日本機械学会関西学生会平成 30 年度学生員卒業研究発表講演会, 2019 年 3 月 10 日.
- [85] 高橋操平, 市岡航平, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信, “第一原理計算を用いたバナジウム中の傾角粒界における水素の溶解・拡散挙動に関する研究”, 日本機械学会関西学生会平成 30 年度学生員卒業研究発表講演会, 2019 年 3 月 10 日.
- [86] 福井浩毅, 君塚肇, 尾方成信, “マグネシウム合金中の底面・柱面すべり過程に対する固溶原子と積層欠陥の影響に関する原子論的解析”, 日本機械学会第 31 回計算力学講演会, 2018 年 11 月 23-25 日.
- [87] 高島 康裕, 荒木 拓也, 細見 岳生, 中村祐一, “全点間最短経路探索問題に対するベクトル計算機での高速実装”, 電子情報通信学会技術研究報告 (CAS), vol. 118, no. 295, CAS2018-74, pp. 115-119, 2018 年 11 月.

#### 4. 著書

- [1] Y. Fujimoto, “Design and Analysis of Carbon-Based Nanomaterials for Removal of Environmental Contaminants”, Wiley-Scrivener Publishers, USA 2018, Nanotechnology for Sustainable Water Remediation, Chapter 9, pp.277-300.
- [2] Yutaka Yoshikawa, “Wind-Driven Mixing Under the Earth Rotation”, Elsevier, 2019, Encyclopedia of Ocean Sciences(Third Edition), pp.586-590.
- [3] 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] 中谷祐介, “大規模計算機を利用した内湾・湖沼の流動水質シミュレーション”, Cyber HPC Symposium 2019, 2019 年 3 月.
- [2] Hajime Ashida, Tomoki Matsuda, Tomokazu Sano, Akio Hirose, “Multiscale analysis for clarification of silver - alumina bonding mechanism”, Columbus, Ohio, USA, Oct-18.
- [3] K. Ueno, T. Umeda, Y.Baba, H.Tsubata, T.Nishi, “FDTD computation of lightning currents in a multilayer CFRP panel with a conductivity matrix approach”, 2018 IEEE International Symposium on Electromagnetic Compatibility & 2018 IEEE Asia-Pacific S2018 IEEE International Symposium on Electromagnetic Compatibility & 2018 IEEE Asia-Pacific Symposium on Electromagnetic Compatibility (EMC/APEMC), Singapore symposium on Electromagnetic Compatibility (EMC/APEMC), May-18.
- [4] 塚原隆裕, 國井康平, 石田貴大, Y. Duguet, “環状クエット流における層流一乱流共存場”, 第 64 回「乱流遷移の解明と制御」研究会, Mar. 2019.
- [5] 仁村友洋, 河田卓也, 塚原隆裕, “乱流縞の維持機構: コリオリ安定効果を与えて”, 第 63 回「乱流遷移の解明と制御」研究会, Oct. 2018.
- [6] T. Nimura, T. Kawata, and T. Tsukahara, “Self-sustainability of turbulent stripe in rotating plane Couette flow”, 12th European Fluid Mechanics Conference (EFMC12), Sep. 2018.
- [7] Y. Duguet, T. Tsukahara, T. Ishida, and K. Kunii, “Transitional regimes of annular shear flows”, 12th European Fluid Mechanics Conference (EFMC12), Sep. 2018.
- [8] Y. Duguet, T. Ishida, K. Kunii, and T. Tsukahara, “Spot morphogenesis in annular shear flows”, Euromech Colloquium EC598 - Coherent Structures in Wall-bounded Turbulence: New Directions in a Classic Problem, Aug. 2018.
- [9] K. Nitta, M. Muto, K. Yamamoto, M. Motosuke, and T. Tsukahara, “Study on an in-tube liquid column driven by photoisomerization using OpenFOAM”, Water on Materials Surface 2018 (WMS2018), Jul. 2018, C-08.
- [10] K. Yamasaki, T. Tsukahara, and I. Ueno, “Numerical simulation of the flow patterns induced by thermocapillary effect in a liquid film with varying volume ratios”, Water on Materials Surface

- 2018 (WMS2018), Jul. 2018, C-02.
- [11] T. Tomioka and T. Tsukahara, “DNS of plane Couette flow with roughness in the transitional region”, DNS of plane Couette flow with roughness in the transitional region CCM13), Jul. 2018.
- [12] M. Hanabusa and T. Tsukahara, “DNS of particle-laden turbulent channel flow in transitional regime”, In: Abstract of 13th World Congress on Computational Mechanics (WCCM13), Jul. 2018.
- [13] 仁村友洋, 河田卓也, 塚原隆裕, “粘弹性流体の回転平面クエット流における縦渦のカオス化過程”, 第 20 回複雑流体研究会, Jun. 2018.
- [14] 上馬場洋介, 平安山涼, 石井明男, 君塚肇, 尾方成信, “負熱膨張物質Ca<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> の第一原理フォノンモード解析”, 日本機械学会関西学生会 2018 年度学生卒業研究発表講演会, 2019.3.10.
- [15] 梶島岳夫, “Get Immersed!”, ながれ, Vol.38, No.6, pp.503-506, 2018.12.
- [16] 谷京晨・竹内伸太郎・梶島岳夫, “有限サイズの粒子を含む混相流中の渦構造と熱輸送の特徴”, 伝熱, Vol.58, No.242, pp.16-21, 2018.12.
- [17] 足立理人・大森健史・梶島岳夫, “上昇気泡からの高シミュレーション条件下における物質輸送の数値解析手法の開発”, 日本機械学会流体工学部門ホームページ, 2019.01.
- [18] Yutaka Yoshikawa, “A numerical simulation of surface waves, wave-current interaction, and Langmuir circulations”, The 10th International Workshop on Modeling the Ocean, 2018 年 6 月 25-29 日.
- [19] 宮本 僕平, “Deep learning network by efficient discretisation of stochastic differential equation”, 修士論文発表会, 2019/2/12.
- [20] 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, “フォトニックナノジェットの微細表面創製への応用”, トライボロジスト, 63, 10, 684, 2018.
- [21] 山口拓也, 堀場峻宏, 森藤正人, 近藤正彦, “波長多重通信に向けた新たなフォトニック結晶導波路の分散特性”, 早稲田大学, 2019 年 3 月.
- [22] 今井 雅也, 田邊 一郎, 福井 賢一, “減衰全反射遠紫外 (ATR-FUV) 分光法による金属イオンを含むイオン液体の電子状態解析”, 電気化学会第 86 回大会, 2019 年 3 月 27 日.
- [23] 岩野薫, “2 次元電荷秩序系におけるハイブリッド秩序&励起”, 2019 年日本物理学会年次大会, 2019 年 3 月 16 日.
- [24] LAW King Fai Farley, “Generation of anti-parallel kilo-tesla magnetic field and particle acceleration with laser-driven snail target”, 12th International Conference on High Energy Density Laboratory Astrophysics, 口頭発表, 2018/5/31.
- [25] LAW King Fai Farley, “Non-thermal particle acceleration through magnetic reconnection in laser-driven curved target”, HZDR&ILE&QST Workshop, 口頭発表, 2018/11/27.
- [26] LAW King Fai Farley, “高強度レーザー駆動電流による磁気リコネクション実験”, UJI Reconnection Workshop 2018, 口頭発表, 2018/11/28.
- [27] LAW King Fai Farley, “マルチピコ秒ペタワット LFEX レーザーを用いた湾曲ターゲット中の磁気リコネクション現象の研究”, 第 35 回プラズマ・核融合学会年会, 口頭発表, 2018/12/3.
- [28] LAW King Fai Farley, “Magnetic reconnection experiment by intense laser irradiation of curved target inner surface”, 第 74 回日本物理学会年次大会, 口頭発表, 2019/3/17.
- [29] LAW King Fai Farley, “Laser-driven magnetic reconnection and particle acceleration by snail-shaped target irradiation”, 61st Annual Meeting of the APS(Division of Plasma Physics), ポスター発表, 2018/11/9.
- [30] 杉木章義, “北海道大学ハイパフォーマンス インタークラウドの概要～ハードウェア調達から継続的なソフトウェアの強化～”, Cyber HPC Symposium 2019 基調講演(大阪大学サイバーメディアセンター), 2019 年 3 月 8 日.
- [31] 芝井 広, “気球搭載遠赤外線干渉計FITE実験経過”, 日本天文学会(兵庫県立大学), 2018 年 9 月.
- [32] Y. Taniguchi, “Study of energy-momentum tensor correlation function in Nf=2+1 full QCD for QGP viscosities”, Kellogg Hotel and Conference Center, Michigan State University (USA), July 26 2018.
- [33] Baba, “Measuring of chiral susceptibility using gradient flow”, Kellogg Hotel and Conference Center, Michigan State University (USA), July 26 2018.

- [34] M. Shirogane, “Equation of state near the first order phase transition point of SU(3) gauge theory using gradient flow”, Kellogg Hotel and Conference Center, Michigan State University (USA), July 26 2018.
- [35] 谷口裕介, “QGP粘性係数導出に向けた  $N_f=2+1$  QCDエネルギー運動量テンソル相関関数の研究”, 信州大学(松本市), 2018/9/16.
- [36] 鈴木博, “Thermodynamic quantities in the  $N_f = 2 + 1$  QCD; the case of somewhat heavy ud quarks”, 信州大学(松本市), 2018/9/16.
- [37] 谷口裕介, “QGP粘性係数導出に向けた  $N_f=2+1$  QCDエネルギー運動量テンソル相関関数の研究”, 理化学研究所(和光市), 2018/8/28.
- [38] 金谷和至, “グラジエントフローによる 2+1 フレーバーQCDの状態方程式 -- 格子間隔依存性の検証”, 理化学研究所(和光市), 2018/8/28.
- [39] 谷口裕介, “QGP粘性係数導出に向けた  $N_f=2+1$  QCDエネルギー運動量テンソル相関関数の研究(II)”, 九州大学(福岡市), 2019/3/15.
- [40] 金谷和至, “グラジエントフローによる格子 2+1 フレーバーQCDの熱力学研究”, 九州大学(福岡市), 2019/3/15.
- [41] H. Yoshino, “Glass transitions of patchy colloids in large-d limit”, Unifying Concept in Glass Physics VII, June 14th, 2018.



# SC18 出展報告

渡場 康弘<sup>2</sup>、伊達進<sup>1</sup>、木戸 善之<sup>1</sup>、阿部 洋丈<sup>1</sup>、吉川 隆士<sup>2</sup>、松本 光弘<sup>3</sup>、上田 佑樹<sup>4</sup>

応用情報システム研究部門<sup>1</sup>、先進高性能計算機システムアーキテクチャ共同研究部門<sup>2</sup>、

情報推進部<sup>3</sup>、情報推進部情報基盤課<sup>4</sup>

2018 年 11 月に米国テキサス州 Dallas にて開催された国際会議／展示会 SC18 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／展示会となっている。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が、特に今年は SC 開催 30 周年目にあたりることもあり、参加人数は過去最高の 13,071 人であったと発表されている。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 19 回目となる。

2018 年の SC (通称 SC18) は、米国テキサス州 Dallas 市にある Kay Bailey Hutchison Convention Center Dallas (以下、Dallas Convention Center: 図 1) にて、11 月 12 日から 17 日までの期間に開催された。なお、Dallas での SC の開催は 2000 年度に続いて 2 度目であり、本センターの Dallas での展示は 2 度目となる。Dallas はテキサス州の北部にあり、ア



図 1: ダラスコンベンションセンター

メリカ合衆国南部で有数の大都市である。11 月の Dallas の気候は平均 20°C 程度と比較的温暖で乾燥しているといわれている。実際、到着日などはこのような快適な気候であったが、開催期間中に最低気温が氷点下となるほど冷え込んだため、日本との気温差もあり出展者の体への負担は大きかったと思われる。SC18 の展示が行われる Dallas Convention Center は Dallas のダウンタウンに位置しており、敷地面積は 2,000,000 平方フィートと米国でも有数の大規模なコンベンションセンターである。1,000,000 平方フィートある展示スペースには、3 つの ballroom, 88 室の会議室、1,750 席のシアター、9,816 席のアリーナを備える。このような大規模な展示会場にて、391 もの企業、大学、研究所等がブースにて展示を行った。

## 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 7 名 (招へい教員 1 名含む)、関連研究部門に配属されている大学院生 4 名の合計 11 名という構成で展示ブースの運営に望んだ。展示者の記念撮影風景を図 2 に示す。



図 2 : SC18 での記念撮影

#### 応用情報システム研究部門

スタッフ	伊達 進
	木戸 善之
	阿部 洋丈
大学院生	高橋 慧智
	遠藤 新
	石田 和也
	森本 弘明

#### 先進高性能計算機システム

アーキテクチャ共同研究部門	
スタッフ	吉川 隆士
	渡場 康弘

#### 情報推進部

松本 光弘

#### 情報推進部情報基盤課

上田 佑樹

ブース展示は、11月12日から15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436名であった。訪問者数は2017年度の526名は超えられなかつものの、2015年度の399名、2016年度の411名と近年と同程度の多数の来訪者があった。理由の1つとして、毎年の出展によりブースロケーションが良くなってきたことがあげられ、今年度も436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・報告ができた。昨年度も記載したが、ブース来訪者によっては10分以上もブースに滞在され、ブース展示要員と話をしている方もおられたので、来訪者数だけでブース展示の効果・意義を図れるものではないが、全体を振り返り、今年度もSCでのアウトリーチ活動として良い結果を残せたと考えている。

ブース来訪者の地域別分類(図3)を見ると、開催地の北米エリアからの来訪者が全体の58%(253名)を占めているのがわかる。続いて、日本からの来訪者が17%(73名)、アジアからの来訪者が10%(45名)、欧州からの来訪者が10%(43名)であった。他の内訳には、南米、オセアニア諸国、アフリカなどが含まれており、南極を除く全ての大陸からの来訪者に対して、アウトリーチ活動を行うことができたと言える。

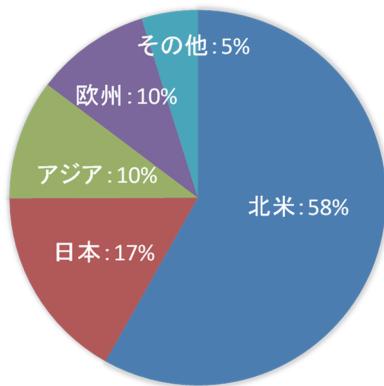


図 3 : ブース来訪者 - 地域別分類

以下、SC18にて大阪大学サイバーメディアセンターで行ったポスター展示の概要について説明する。(括弧内は担当者名。順不同、敬称略)。

#### (1) About Us: Cybermedia Center, Osaka University (松本、上田)

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

大規模計算機システムの他にも、教育系システム

や学内クラウドサービスなど多様なシステム・サービスを提供している点について説明し、サイバーメディアセンターの様々な取り組みについて紹介することができた。中でも、ITコア棟については空調の仕組みに感心いただく場面も多く、データセンターとしての側面から多くの方に興味を持っていただけた。



図4：ポスター説明を行う上田

## (2) Large-scale Computing and Visualization Systems at the Cybermedia Center (松本、上田)

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



図5：ポスター説明を行う松本

来訪者の関心が特に高かったのは、2017年12月から稼働を開始した新システム「OCTOPUS」で、利用条件や利用方法、計算機性能などについて多くの

質問をいただいた。特に、海外からの大規模計算機システム利用や、大規模可視化システムに関する質問が多く、様々な方に興味を持っていただけると共に、今後の更なる利用者拡大につながる展示になったと実感した。

## (3) Secure and High Performance Data Analytics in HPC/Data Center (吉川、渡場)

本ポスターでは、ポケット検査の簡易化を見据え、口腔内画像からポケット値推定を行うポケットチャート自動作成モデルの実現可能性の検証として、提案する注目領域である歯周ポケット部位を拡大、および、歯番特定を容易化するMappingフェーズと、複数方向の口腔内画像に対するポケット推定値を集約するReducingフェーズで構成される、MapReduce型CNNモデルについて説明した。また、このような医療データなどの秘匿データを、外部にある計算機センターの高性能計算機を活用して解析することを可能とする広域セキュア・ステージングシステムの研究開発について説明および動態デモの展示を行った。



図6：ポスター説明、動態デモを行う吉川

#### (4) Novel Mechanisms to Support Scientific Visualization on TDW (木戸、石田)

本ポスターでは、大規模可視化装置の一種である TDW (Tiled Display Wall) を用いた科学的可視化を支援するための研究を紹介した。具体的には、TDW 上の可視化ソフトウェア実行環境をシームレスに切り替えるためのモジュールの開発、および TDW 構成用ミドルウェア SAGE2 のデスクトップストリーミング機能の高解像度化といった研究について述べた。さらに、小型 TDW を用いた SAGE2 のデモ展示も行った。

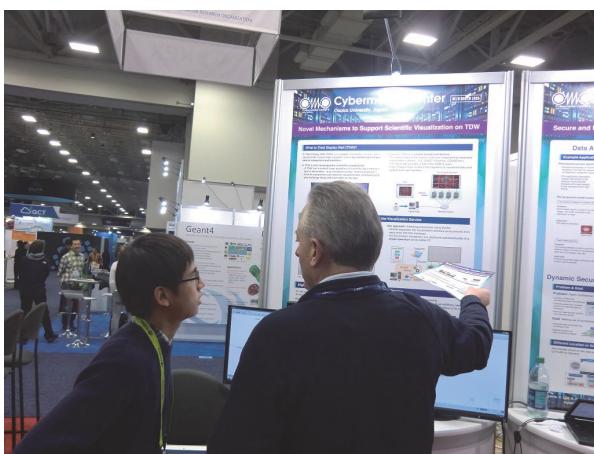


図 7：ポスター説明、デモを行う大学院生（石田君）

ブースの来訪者からは、「可視化ソフトウェアのフレームレート等への影響はどのようなものか」「これらの研究の成果物は CMC の TDW に導入されているのか」などの質問を受けた。また、ハワイ大の Jason Leigh 氏や AIST の Jason Haga 氏といった SAGE2 コミュニティの研究者の方々にもご来訪頂き、本研究の有用性をアピールすることができた。

#### (5) Access Control Based on Dynamic Network Management toward Connected-HPC (森本、高橋)

本ポスターでは、HPC システムがシステム外部に存在する IoT センサやデータストレージ等のデータ資源からオンデマンドにデータを取得できる技術を紹介した。近年の IoT センサの普及により、HPC システムはこれから外部デバイスとつながる環境が求

められる。本技術を説明するとともに、世界各国の技術者や研究者と議論を交わし、この環境の必要性を再認識し、今後の必要になる要件を整理できた。



図 8：ポスター説明を行う大学院生（森本君）

#### (6) Dynamically Optimized Interconnect Architecture Based on SDN (遠藤、高橋、森本)

本ポスターでは、Software-Defined Networking (SDN) 技術を用いてインターネット接続をアプリケーションの通信特性に応じて動的に最適化する研究について紹介した。多くの来訪者からは、「実験で用いている SDN 技術は何か？」「実機の実験で使った OpenFlow スイッチのベンダーは何か？」といった、研究で用いた実験環境に関する質問などを多数いただき、どんな技術やデバイスを用いた研究をしているのかという点について興味を持っていただけたと考える。

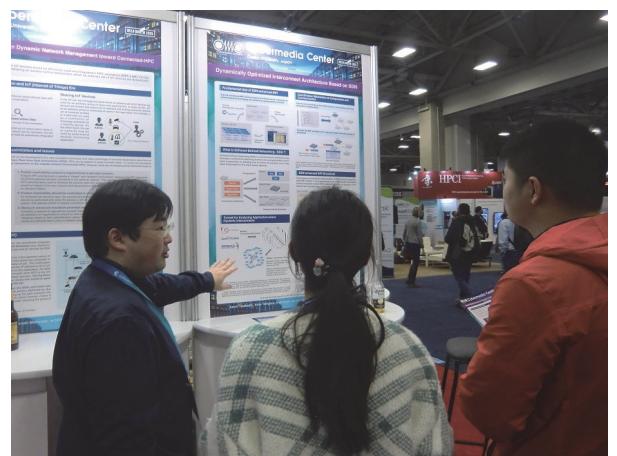


図 9：ポスター説明を行う大学院生（遠藤君）

### 3. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機および可視化事業をはじめとし、高性能計算・ネットワーキングに関する研究成果について欧米を中心とした436名強の来訪者にアウトリーチすることができた。来年度のSCの開催は米国コロラド州デンバー市で同時期に開催されるが、大阪大学サイバーメディアセンターのプレゼンス向上とともに、情報公開、アウトリーチ活動にも引き続き尽力していきたいと考える。

関係各位には更なるご支援とご協力をお願いしたい。

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

**<http://sc.cmc.osaka-u.ac.jp/>**



# 第24回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2018)報告および 第25回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2019)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. Supercon2018

昨年 2018 年 8 月 20 日から 24 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(SuperCon2018)」が開催されました。東日本から 12 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「電腦甲子園」とも呼ばれています。過去の出場者が大学進学後に国際大学対抗プログラミングコンテストで活躍するなど、次世代の情報科学を担う若手育成にも貢献しており、2008 年度の文部科学大臣賞も受賞しています。

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東京工業大学（東工大）学術国際情報センター(Global Scientific Information and Computing Center:GSIC)の単独主催でしたが、2006 年の第 12 回からは大阪大学（阪大）(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きました。このコンテストは 5 日間にも渡る合宿型で、実際にスーパーコンピュータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。2007, 2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が、2015 年と昨年、2017 年は SX-ACE が使われました。

## 2. 予選

2018 年の予選課題は 5 月 30 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 15 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。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくと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。2018 年の予選課題は、阪大の作成チームによる「自己回避ウォークと自己回避ループ」というものでした。これは正方格子の格子点をつなぐ「道」で、同じ点を 2 度と通らない経路の数え上げの問題です。これを含め、過去の予選課題、本選課題は SuperCon web に全て掲載されています。また、参加者が 2 名以上集まらないために、希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「スーパーコン 1 級」が認定されます。問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

## 3. 本選

本選の初日は開会式で参加チームの紹介、本選課題の発表、攻略法の解説がありました。本戦課題は東工大の作成チームによる「量子計算」に関する問題でした。量子計算機が行う計算処理過程を、スパコンシミュレートするというものです。実際の本戦では、課題に取り組む前に、TSUBAME3.0、特にその GPU 機能を利用するためのオリエンテーションと講義が行われ、チームごとに本選課題を解くためのプログラム設計に入りました。そして、本選 2 日目から 4 日目の午前中まではチームごとにプログラムを作成しました。この間コンテスト OB を含む大学生・大学院生がチューターとしてバグ取りなどを手伝いました。ただし、課題そのものに関する助言

はしません。最終日の成果発表会、表彰式の後には懇親会も行われました。本高校生・高専生の参加者たちと、両大学の教員、学生チーチャーたちが、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 2019 の告知

2019年は8月19日から23日までの5日間での開催を予定しています。予選課題は5月29日に公表予定で、課題提出〆切は6月14日正午です。使用するスペコンは、東工大 GSIC の TUBAME 3.0 が使われる予定です。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、もしも可能ならばみなさまもお知り合いの高校生にSuperCon2019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 SuperCon2020 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

<https://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教授 降旗 大介

## 1. 概要

サイバーメディアセンターの教職員をはじめ、大阪大学の大規模計算機システムの運営、開発、支援に関わっている関係者は、システムをユーザにより有効に活用していただくために何が出来るかを日々考えています。たとえばその一端として、マニュアル・ドキュメント類を充実させること、ユーザからの質問をメールなどで受け付け適切に返答するための仕組みの構築と維持、それらを明文化するためのFAQの整備などの活動を行っています。

こうした活動の中でもわれわれが重要と考えているのが、ここで紹介する利用者講習会です。利用者講習会は計算機ユーザへ知識を伝える場だというだけでなく、その場での質問などを通じてユーザと直接やりとり出来る場でもあり、大変貴重な機会です。そのためしばしば、大規模計算機システムの運営・開発・管理・支援などを行っている関係者が立ち会います。

これら講習会の内容は、OSである Unix 環境、スーパーコンピュータのハードウェアについての概要説明といった入門的内容から、大規模計算を行う近年のユーザにとって重要な OpenMP, MPI などの並列計算通信プロトコルの概要からこれらを上手に使いこなすための各種プログラミング技法の詳細、Gaussian や AVS といった各方面的専門家用の特殊なソフトウェア等々、多岐にわたります。こうした内容はユーザの要望に沿って、計画されています。詳しくは次ページに掲載しております表に掲載しておりますが、大規模計算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を幅広く対象とし、年に 14~15 回開催しております(2018 年度は 14 回開催いたしました)。また、より詳細な情報をサイバーメディアセンター大規模計算機システムの web において掲載しておりますので、ぜひご参照ください。

## 2. 多忙な方も参加しやすく

近年、学生も研究者も大変に多忙です。これをうけて、サイバーメディアセンターの講習会は原則として年に 2 回、ほぼ同じ内容の講習会を時期をずらして開催するように工夫しています。実際には、6 月頃と 9~10 月頃に集中的に開催しています。これは、「学期始まりや学期末の時期は外して欲しい」「あまり遅い時期では、学生の研究開始に間に合わない」などのユーザの声を反映したもので、なるべく多くのユーザが参加できるように、また、講習会の受講が意義あるものになるようにと配慮した結果です。

また、Gaussian や AVS などの研究者用専門ソフトウェアの講習会では講師を確保しにくいという問題がありますが、われわれは東北大学と協力してテレビ会議システムを用いて講師を確保したり、当該ソフトウェアの関連会社に講師の紹介を依頼するなどして、こうした専門家向けソフトウェアの講習会を開催しています。

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

## 3. 初学者にも優しく

未参加の方にとって、こうした講習会は敷居が高いと思われるかもしれません。しかし、先に述べたように初学者も講習会の対象で、1 年間のおおよそ 14 回程度の講習会のうちおおよそ 1/4 は初学者が対象の内容のものです。

具体的には、OS である Unix の簡単な操作方法の解説や、スーパーコンピュータのハードウェアの概要説明、細かい技法の説明の前に必要となる並列計算の概念の説明などからなります。スーパーコンピュータを使うユーザというと、こうした知識やプログラミング技法について通じた大変なプロフェッ

ショナルばかりと想像されることもありますが、もちろんそれは違います。どなたも「最初は初心者」です。そして、細かい技術についてのマニュアルは豊富に見つかっても基礎的な概念や手法についてはなかなか良い資料・ドキュメント類が見つからないということは珍しくないです。

われわれサイバーメディアセンターでは、こうした点を補い、より広い分野・方面の方にユーザとしてシステムを使ってもらうべく、常に初学者に優しくありたいと考え、講習会をこのような構成にしています。

#### 4. プロフェッショナルな方も

もちろん、われわれは初学者ばかりでなくプロフェッショナルなユーザへの支援も怠っておりません。各種の専門的な内容について、多くの講習会を計画し、そして実施しています。

近年の並列計算プログラミングに必須である OpenMP や 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いて実施しており、技術の非常に微細な部分に至るまで専門的な議論を行うことが出来る機会としてユーザの皆様にご利用いただいております。

#### 5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、われわれサイバーメディアセンターの web

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

また、大規模計算機のハードウェア、ソフトウェ

ア、そしてユーザの使い方といったものは日々変化していくものです。上記に述べたように様々な工夫や努力を通じて開催している講習会ではありますが、こうした変化に合わせ、講習会のありかたも変化、進歩していく必要があります。そして、それにはユーザの方々からいただく意見がなにより重要です。そのフィードバックの先により良い講習会の実現があるのです。ユーザの皆様におかれましては、遠慮をせずに、いつでも構いませんので、講習会についての要望をぜひサイバーメディアセンターまでお聞かせください。

## 2019 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18日 13:30 – 15:00	サイバーメディアセンター 降旗 大介 教授	サイバーメディアセンター 吹田本館 1階 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20日 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 吹田本館 2階 中会議室
3	SX-ACE 高速化技法の基礎	6月24日 13:30 – 17:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室
4	並列コンピュータ 高速化技法の基礎	6月26日 13:30 – 16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室
5	SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)	6月25日 10:00 – 16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室
6	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	8月29日 13:30 – 15:00	サイバーメディアセンター 降旗 大介 教授	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟 7階 会議室
7	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5日 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 吹田本館
8	SX-ACE 高速化技法の基礎	9月11日 13:30 – 17:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
9	並列コンピュータ 高速化技法の基礎	9月12日 13:30 – 16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
10	SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)	9月19日 10:00 – 16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
11	AVS 可視化処理入門	9月25日 10:00 – 16:00	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
12	AVS 可視化処理応用	9月26日 10:00 – 15:00	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館

### テレビ会議システムによる講習会配信

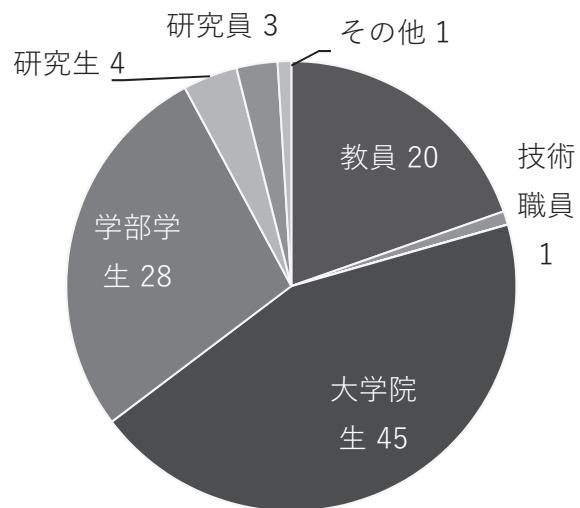
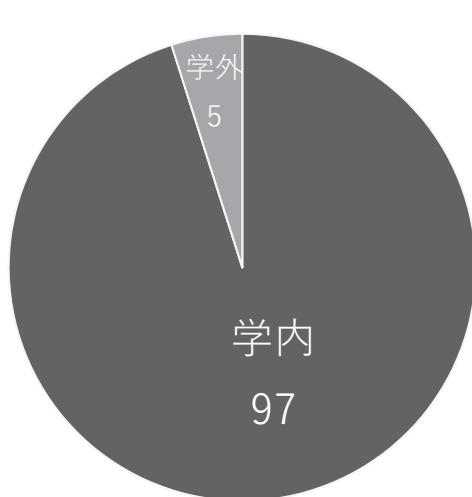
	講習会名	開催日時	開催期間	受講場所
13	Gaussian 講習会	8月21日 13:00 – 15:00	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室

## 2018 年度 大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

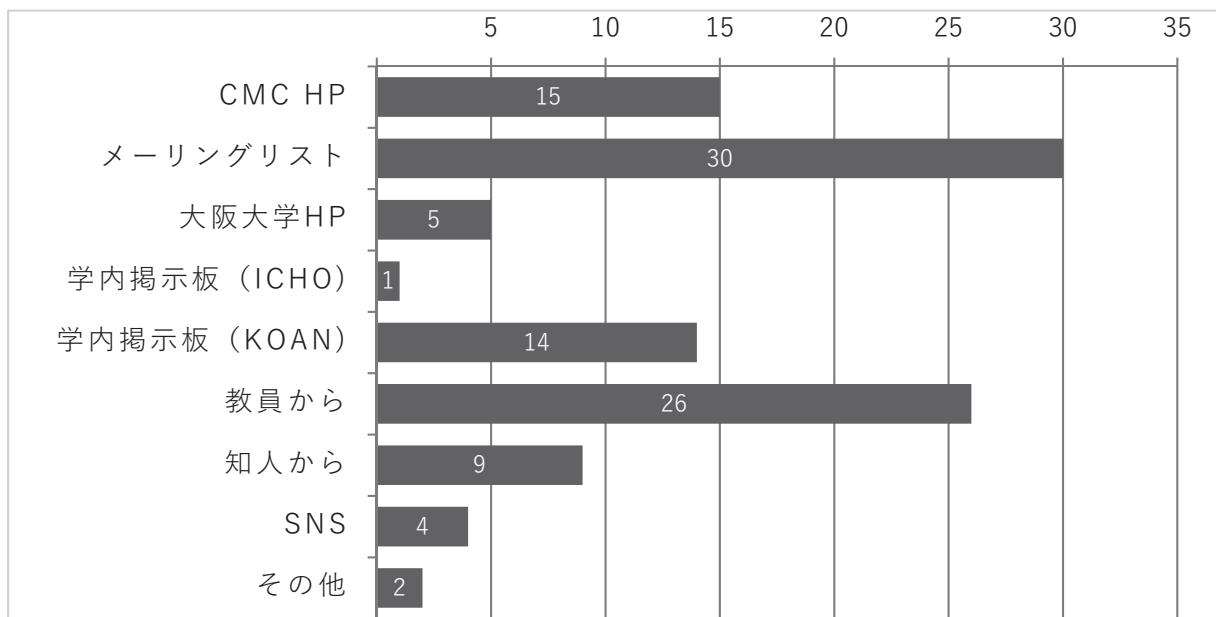
### ◆受講者数

講習会名	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(6/4)	43	32	31	1
スパコン概要とスパコン利用入門(6/5)	30	24	24	0
並列コンピュータ高速化技法の基礎(6/22)	7	4	3	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(6/26)	4	1	1	0
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(6/29)	0	0	0	0
SX-ACE 高速化技法の基礎(7/19)	4	1	1	0
Gaussian講習会(東北大学 映像配信)(8/23)	3	3	3	0
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/10)	18	13	13	0
スパコン概要とスパコン利用入門(9/13)	14	10	10	0
SX-ACE 高速化技法の基礎(9/19)	1	1	1	0
並列コンピュータ高速化技法の基礎(9/20)	4	3	2	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(9/26)	3	2	0	2
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(9/27)	0	0	0	0
AVS可視化処理入門(10/10)	5	3	3	0
AVS可視化処理応用(10/11)	4	5	5	0
合計	140	102	97	5

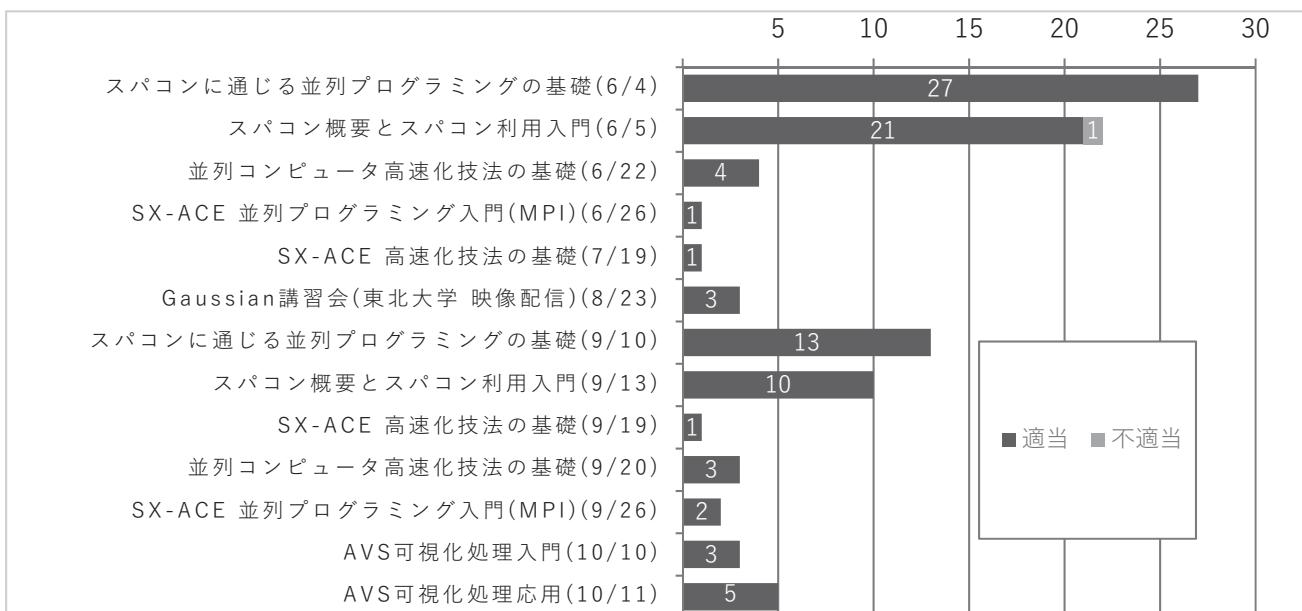
### ◆受講者の内訳



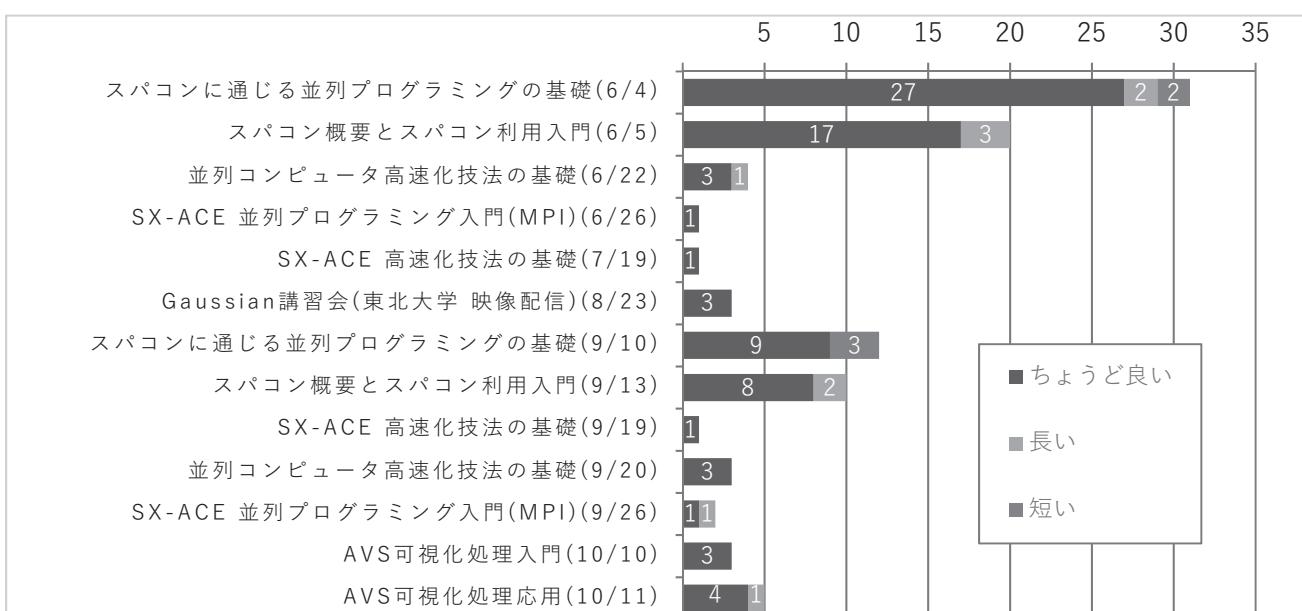
### ◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)



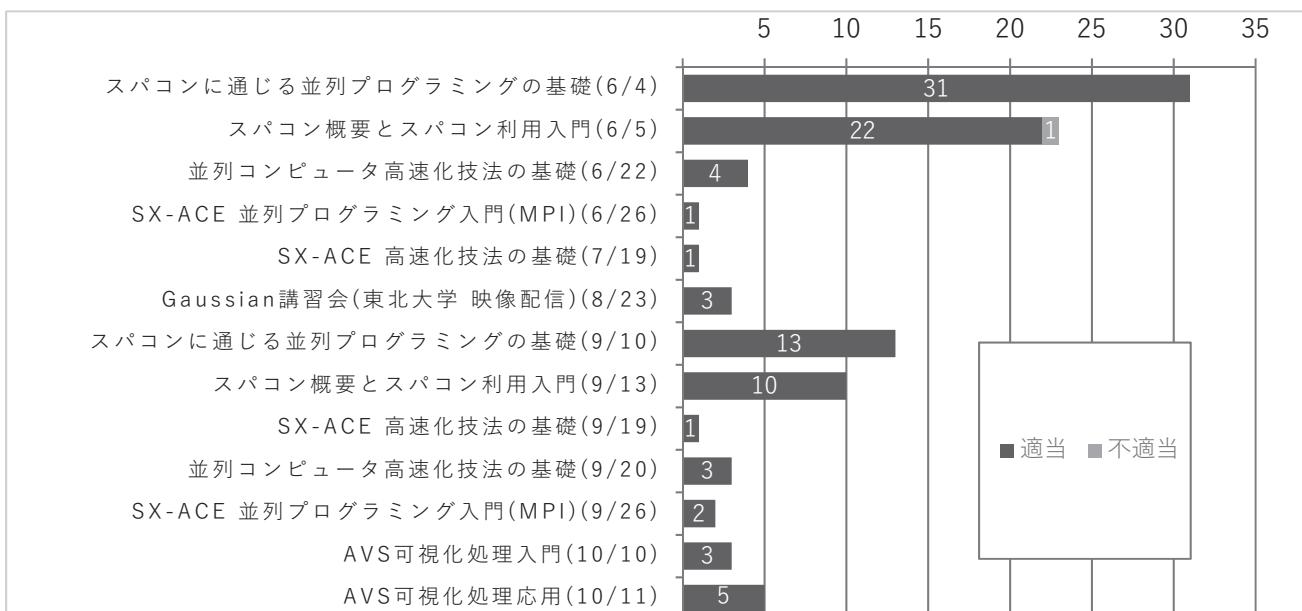
◆開催日は適当でしたか。



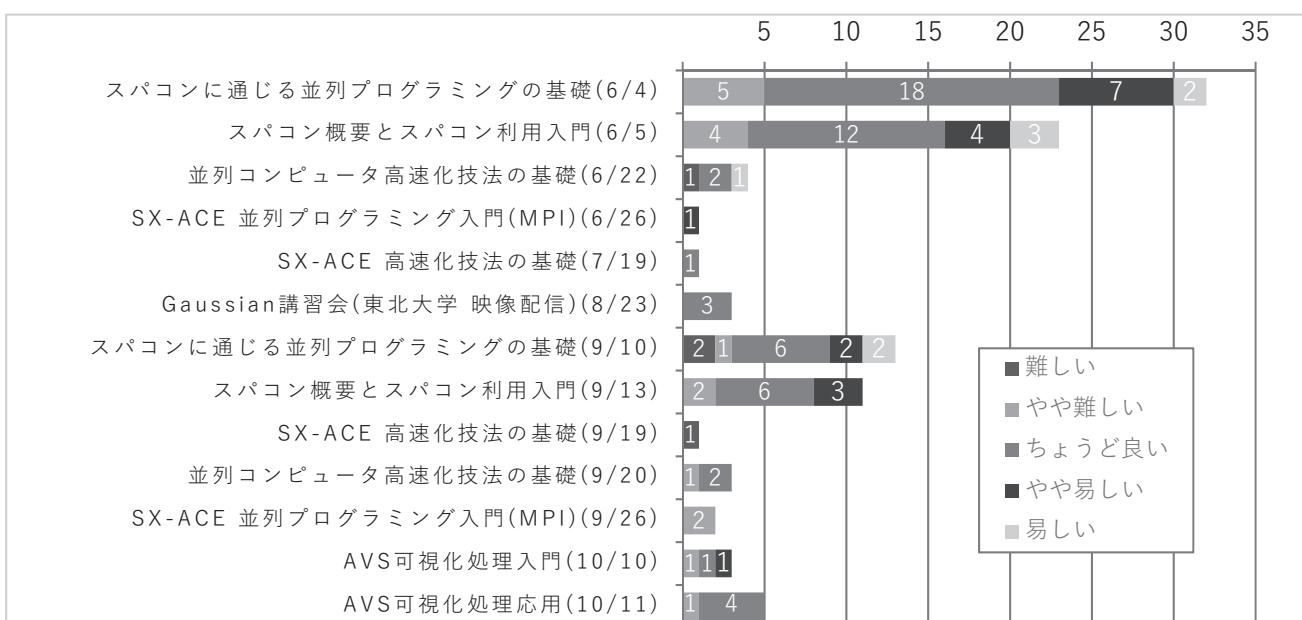
◆講習会の時間は適当でしたか。



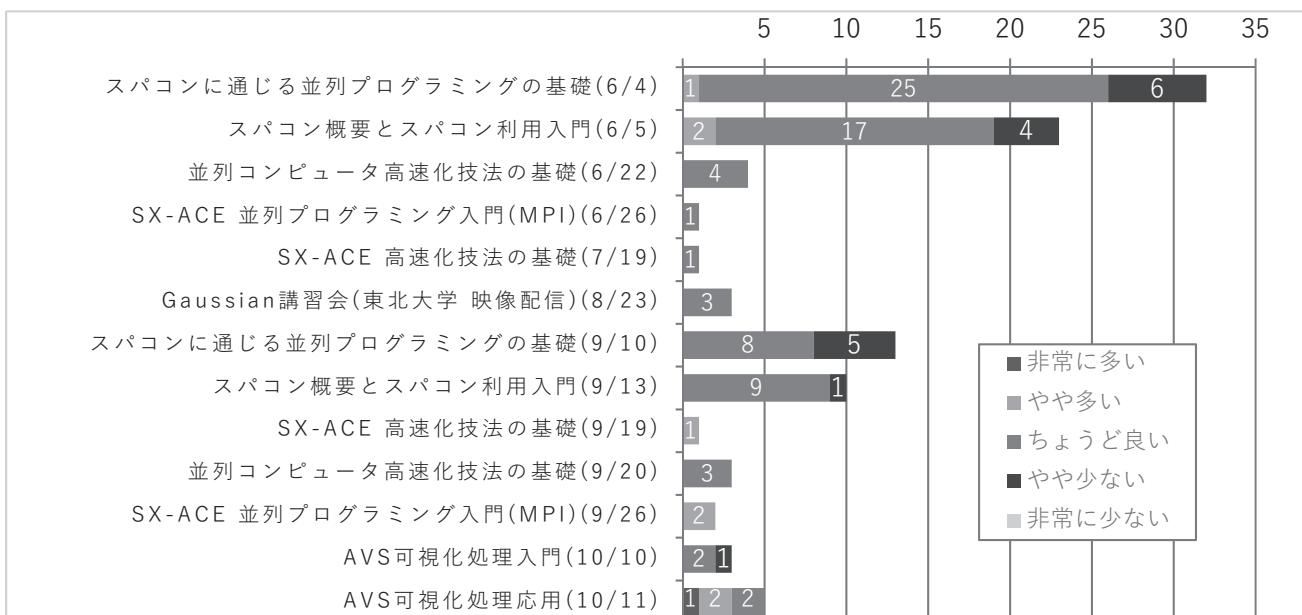
◆会場の大きさ、場所は適当でしたか。



◆講習会の内容はどうでしたか。



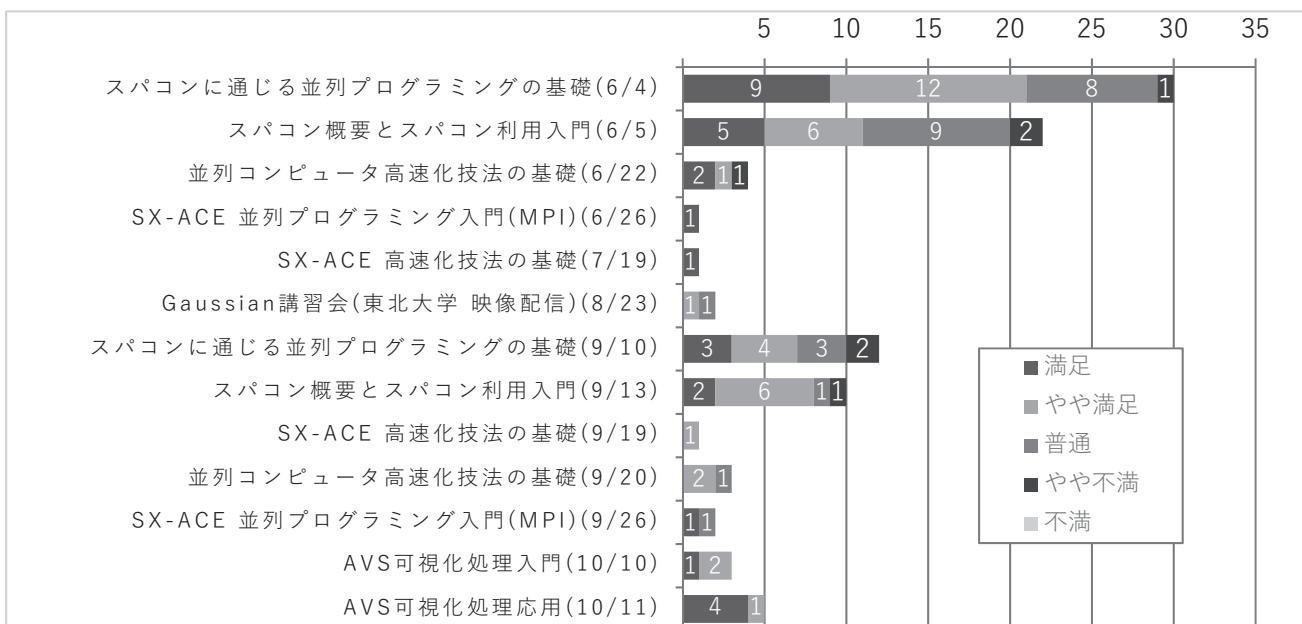
◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



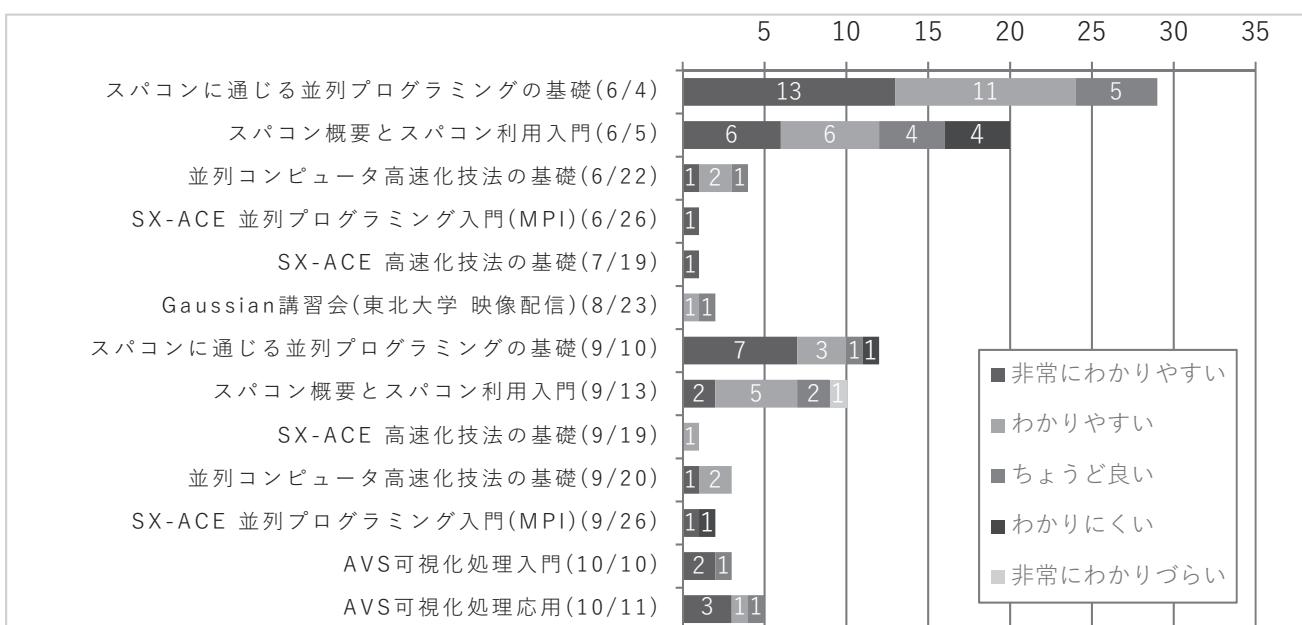
◆講師の進め方はどうでしたか。



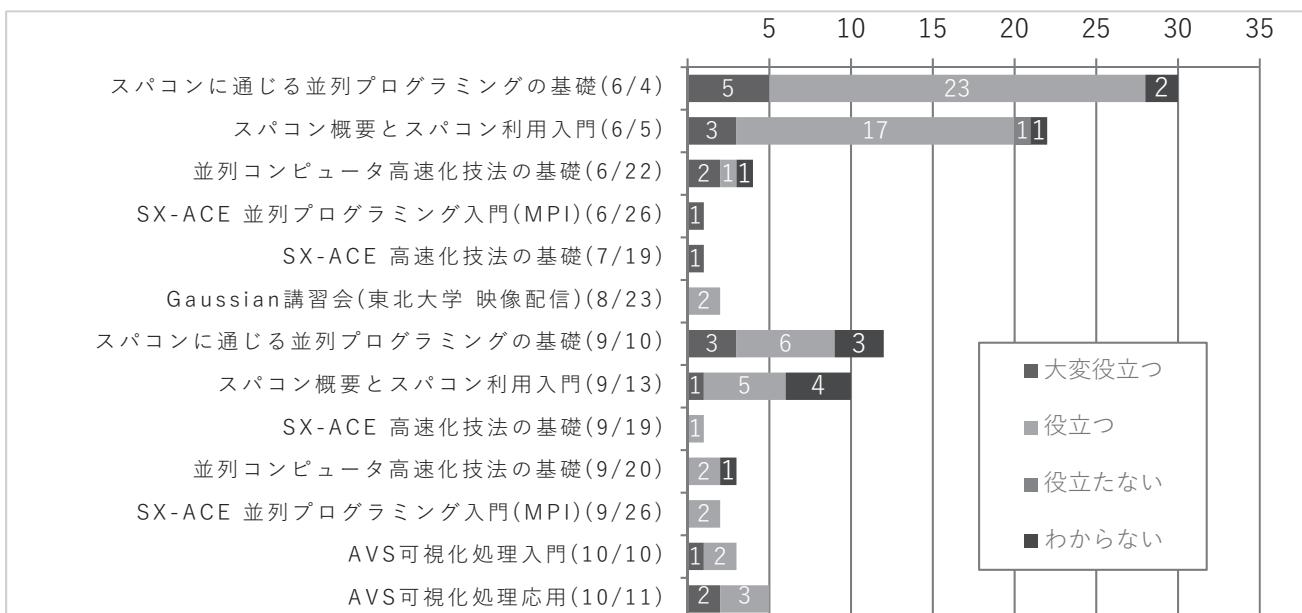
## ◆満足度は？



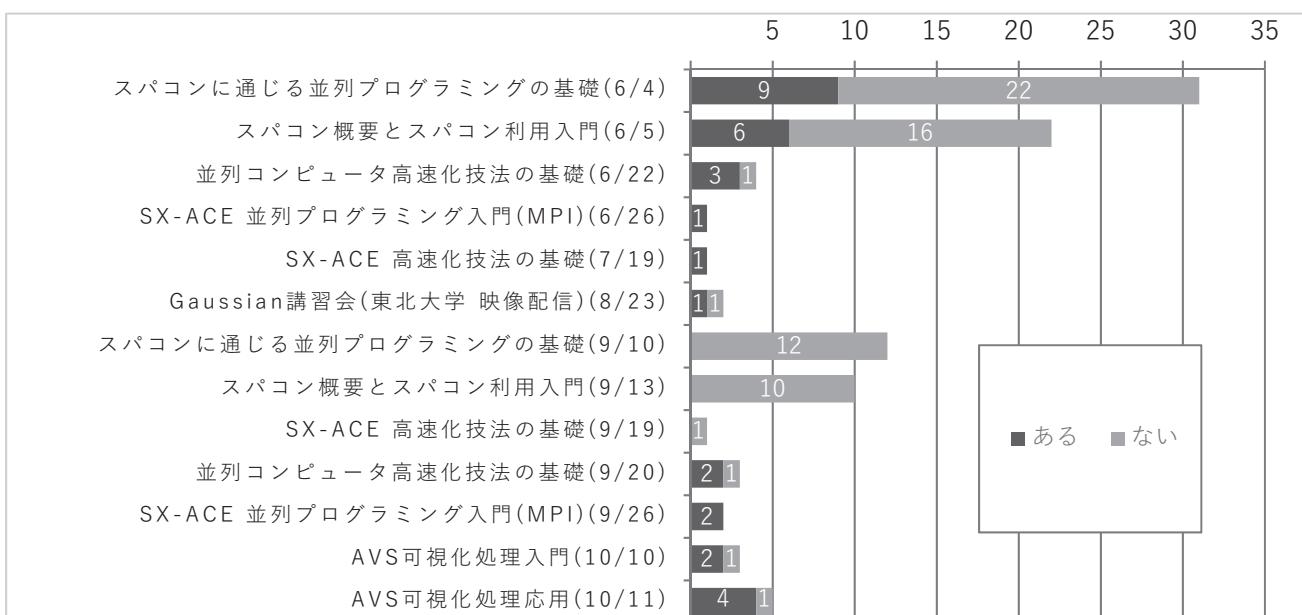
## ◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



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



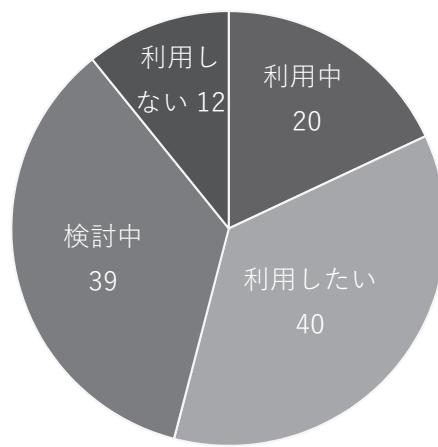
◆ 「ある」と回答された方の利用方法

「ある」と回答された方の利用方法

■ プログラムの実行 ■ アプリケーションの利用



◆ 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。



## 2019 年度「HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 利用」の活動状況

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

### 大阪大学計算機資源を利用する 2019 年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	利用資源	研究課題名
京以外 一般課題	SX-ACE	ツイストされた時空縮約モデルの数値的研究
京以外 一般課題	SX-ACE	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション
京以外 一般課題	SX-ACE	超臨界圧下の主流へ噴射する極低温噴流の大規模数値解析
京以外 一般課題	OCTOPUS	宇宙の大規模構造と銀河形成
京以外 若手人材育成 課題	OCTOPUS	複合アニオン化合物における強相関電子物性の研究
京以外 産業利用課題 (実証利用)	OCTOPUS	PbO <sub>2</sub> 表面と硫酸水溶液界面の第一原理的自由エネルギー解析
京以外 産業利用課題 (実証利用)	OCTOPUS	全原子型分子動力学計算による種々粘着付与剤と樹脂の相溶性評価の検討

### 大阪大学計算機資源を利用する 2019 年度 HPCI 重点・萌芽的課題一覧

利用枠	利用資源	研究課題名
ポスト京 研究開発枠 重点課題	VCC	創薬ビッグデータ統合システムの開発
ポスト京 研究開発枠 重点課題	OCTOPUS	次世代機能性化学品
ポスト京 研究開発枠 重点課題	OCTOPUS	エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー
ポスト京 研究開発枠 萌芽的課題	SX-ACE	堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現
ポスト京 研究開発枠 萌芽的課題	OCTOPUS	破壊とカタストロフィ

## 2019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、平成22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。

2019年度の課題募集には合計65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、58課題が採択されました。このうち12課題が大阪大学と共同研究することとなっています。

### 2019年度 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 採択課題一覧

課題代表者	研究課題名	共同研究拠点
飯田 圭 (高知大学)	高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と有限密度2カラーQCDの相図の決定	京大、阪大
北澤 正清 (大阪大学)	格子量子色力学に基づく初期宇宙の諸性質の精密解析	阪大
鈴木 厚 (大阪大学)	High performance simulations using FreeFem++ on mixed distributed-plus shared-memory architecture	阪大
鈴木 博 (九州大学)	有限温度量子色力学のダイナミクス	阪大、九大
関口 宗男 (国士館大学)	カイラルフェルミオンを用いた格子QCDによる中間子質量生成機構の研究	阪大
谷川 千尋 (大阪大学)	矯正歯科治療後の三次元顔形態を予測する人工知能(AI)システムの開発	阪大
谷口 裕介 (筑波大学)	物理的なクォーク質量におけるエネルギー運動量テンソルの研究	北大、阪大、九大
垂水 竜一 (大阪大学)	格子欠陥力学場のアイソジオメトリック解析	名大、阪大
撫佐 昭裕 (東北大学)	大規模津波浸水被害推計シミュレーションのマルチプラットフォーム向け最適化手法の研究	東北、阪大
村田 忠彦 (関西大学)	リアルスケール社会シミュレーションのための人口合成とその応用	北大、阪大
吉野 元 (大阪大学)	State following of amorphous soft condensed matters : developments of high-performance computational schemes	阪大
若山 将征 (大阪大学)	GPUコードならびに多倍長精度アルゴリズムを用いた有限密度QCDにおける相構造の研究	阪大

## 2018 年度 大規模計算機システム公募型利用制度 (追加募集) 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。2018 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、下記の 7 課題を採択しました。

### 若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
越智 正之 (大阪大学 大学院理学研究科)	複合アニオンに起因した多軌道性と低次元性からうまれる強相関電子物性の研究
北澤 正清 (大阪大学 大学院理学研究科)	高温物質中におけるクォーク間相互作用の微視的伝達機構の解明
白戸 高志 (大阪大学 レーザー科学研究所)	相対論的 Vlasov–Fokker–Planck–Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー完全保存スキームの開発と実証実験
樋口 公紀 (九州大学 大学院理学府)	多様な星形成環境における連星形成可能性
矢野 将寛 (大阪大学 大学院工学研究科)	超高強度レーザーパルスとプラズマの相互作用による時空の歪みの観測可能性

### 大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
河野 宏明 (佐賀大学 教育研究院)	Z3 対称な量子色力学における格子シミュレーション
谷口 裕介 (筑波大学 計算科学研究センター)	勾配流法を用いた Nf=2+1 QCD のエネルギー運動量テンソルの研究

# 2019 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2019 年度も引き続き研究課題の公募を行い、下記の 14 課題を採択しました。

## 若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
Marcus Carl Wallden (大阪大学 情報科学研究科)	Effective Load Balancing for Distributed Large-Scale Volume Rendering Using a Two-layered Group Structure
石井 良樹 (大阪大学 基礎工学研究科)	高イオン電導性を示すイオン性融体の材料探索と物性予測
今井 雅也 (大阪大学 基礎工学研究科)	減衰全反射遠紫外(ATR-FUV)分光法と量子化学計算を用いた電極界面イオン液体の電子状態解析
岩下 拓哉 (大分大学 理工学部)	分子動力学シミュレーションによる水の誘電緩和スペクトルの起源探索
牛島 悠介 (京都大学 理学研究科)	密度成層・地球自転存在における海洋表層乱流混合パラメタリゼーションスキームの開発
大戸 達彦 (大阪大学 基礎工学研究科)	ハイブリッド汎関数を用いた水界面物性の第一原理分子動力学シミュレーション
下山 紘充 (北里大学 薬学部)	マルチスケール MD と剛体ドッキングによる、PPI 反応過程の新しい計算手法の研究
速水 智教 (大阪大学 蛋白質研究所)	多次元仮想座標とカップルした分子動力学法を用いた mSin3 複合体の立体構造探索
原田 拓弥 (関西大学 データサイエンス研究センター)	出生コードを用いた日本全国の位置情報と所得属性付き仮想個票の合成
山口 容平 (大阪大学 工学研究科)	分散協調型エネルギー管理システムのためのエネルギー需要モデルの開発

## 大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
伊藤 悅子 (慶應義塾大学 自然科学教育研究センター)	SU(3)ゲージ理論におけるリサージェンス構造
奥村 幸彦 (香川大学 創造工学部)	高負荷燃焼と NOx 低減の同時機能実現に向けた CO2 フリー燃焼器の開発
谷口 裕介 (筑波大学 計算科学研究センター)	勾配流法を用いた Nf=2+1 QCD のエネルギー運動量テンソルの研究
羽原 英明 (大阪大学 工学研究科)	負荷分散技法を用いた 3 次元粒子シミュレーションによる高密度プラズマ中でのプラズマチャンネル形成の研究

# 大規模計算機システム Q & A

2018年4月～2019年3月に当センターに寄せられた質問を掲載しております。

同等の内容を以下のWebページでも閲覧いただけます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/>

## Q. 年度途中で計算資源やストレージ容量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://manage.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/](http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/)

## Q. 年度途中で利用負担金の支払い費目や支払い時期を変更できますか？

A. WEBシステムからは変更できませんので、下記までご連絡ください。

大阪大学 情報推進部 情報基盤課 研究系システム班

Mail: [system@cmc.osaka-u.ac.jp](mailto:system@cmc.osaka-u.ac.jp)

TEL: 06-6879-8808

## Q. ディスク容量を追加した場合、利用期限はいつまでですか？

A. 年度途中に申し込まれた場合でも、利用期限は年度末までとなります。翌年度にディスク容量を追加しない場合は、データの整理を3月中にお願いいたします。やむを得ない事情がある場合や、間に合わない場合は、ご連絡くださいませ。原則として、事前連絡無しにこちらでデータを削除することはありません。

## Q. ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか？

A. scp コマンドを使用することで可能です。

例えば、カレントディレクトリ下の abc ディレクトリの中のファイル sample.c を、b61234 のホームディレクトリに転送する場合は以下のようないコマンドとなります。

```
scp ./abc/sample.c b61234@localhost:
```

## Q. MPI ジョブの出力ファイルにバイナリデータが書き込まれてしまう

- A. MPI 並列実行を行うプログラムで各プロセスが同名ファイルにデータを出力するよう記述していると、バイナリが書き込まれてしまう場合があります。

大規模計算機システムのような共有ファイルシステムにおいて各プロセスが同名のファイルにデータを出力することは、各プロセスが同一のファイルにデータを出力することと同じであるため、プロセス間で競合が発生した際にデータが破損してしまい、バイナリデータが書き込まれてしまうことがあります。プロセスごとに別名のファイルに出力するか、MPI-IO という MPI 用の入出力インターフェースを利用することで、プロセス間の競合を防ぐことが可能です。

参考：(FAQ)MPI の実行結果を 1 つのファイルに出力したい

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/20170519/>

## Q. Mac OS から Xwindow を使用するアプリケーションを起動できない/動作が重い

- A. XQuarts の仕様変更により、Xwindow を使用する場合に正しく起動しないことがあります。  
対策は以下の 2 点です。

1. MacOS の xterm 上で以下のコマンドを実行してください。XQuarts 2.7.10 以降で、iglx が標準で使えなくなったため、以下のコマンドを実行しないとエラーが出力されます。

```
$ defaults write org.macossforgexquartz.X11 enable_iglx -bool true
```

2. SSH の X 転送を早くするチューニングを実施してください。JavaFX を使用する一部のアプリケーションでは、こちらの設定で若干挙動が軽くなる可能性があります。

```
<.ssh/config 設定例>
Host *
Compression yes
ForwardX11 yes
Ciphers blowfish-cbc,arcfour
```

## Q. ジョブが EXT 状態で止まってしまう

- A. ジョブが EXT 状態で停止する原因の多くは、ディスク使用量の超過が原因です。この場合、停止したジョブの標準エラー出力に「Disk quota exceeded」と出力されます。usage\_view コマンド等で自身のディスク使用量が超過していないか確認してください。  
OCTOPUS の場合、ディスク領域が home 領域と work 領域に分かれており、home 領域には全ユーザー一律で 10GB の制限を設定しています。少し大きなデータを扱うだけで簡単に超過しますので、本格的なプログラムの実行は work 領域をご利用ください。

参考：SX-ACE/VCC のファイルシステムについて

[http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/use\\_filesystem/](http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/use_filesystem/)

参考：OCTOPUS のファイルシステムについて

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus-use/filesystem/>



# 利用規程等

---

## ・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 ..... 119

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 ..... 121

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規 ..... 123

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 ..... 123

## ・附 表

大規模計算機システム ホスト一覧 ..... 124

スーパーコンピュータSX-ACE、PCクラスタ及びOCTOPUSのジョブクラスター一覧 ..... 124

2018年度大規模計算機システム稼働状況 ..... 126



## ・規程関係

### 大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

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

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

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

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員(非常勤講師を含む。)及びこれに準ずる者
- (2) 大学院の学生及びこれに準ずる者
- (3) 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関(前号に該当する機関を除く。)で、センターの長(以下「センター長」という。)が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
- (6) 第1号、第3号又は第4号の者が所属する機関との共同研究に参画している民間企業等に所属し、専から研究に従事する者
- (7) 日本国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では、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障害を生じさせた者があるときは、利用の承認を取り消し、又は一定期間大規模計算機システムの利用を停止させることができる。

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

#### 附 則

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

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

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成13年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

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

附 則

この改正は、平成15年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年2月15日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成20年4月16日から施行する。

附 則

この改正は、平成23年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年5月10日から施行する。

## 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

国立大学法人大阪大学諸料金規則 別表第 17

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

コース	基本負担額	利用可能ノード時間
	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（10%）を加えて得た額とする。  
ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に 5 を乗じ、消費税（10%）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

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

#### 備考

- 1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税（10%）を加えて得た額とする。  
ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に 5 を乗じ、消費税（10%）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) スーパーコンピュータ (SX-ACE)、大規模可視化対応 PC クラスタ 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（10%）を加えて得た額とする。  
 ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に 5 を乗じ、消費税（10%）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。

(4) OCTOPUS の負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
191,000 円／年	汎用 CPU ノード群 1 ノード
793,000 円／年	GPU ノード群 1 ノード
154,000 円／年	XeonPhi ノード群 1 ノード

(B) 共有

コース	基本負担額	OCTOPUS ポイント
	10 万円	1,000 ポイント
	50 万円	5,250 ポイント
	100 万円	11,000 ポイント
	300 万円	34,500 ポイント
	500 万円	60,000 ポイント

(C) ディスク容量追加

基本負担額	提供単位
3,000 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（10%）を加えて得た額とする。  
 ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に 5 を乗じ、消費税（10%）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 1TB 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。
- 8 計算ノードの利用に使用する OCTOPUS ポイントは、使用したノード時間に対して以下の消費係数および季節係数を乗じたものとする。季節係数は前年の利用状況等を鑑み、0 を超える 1 以下の値を設定する。

ノード群	消費係数	季節係数
汎用 CPU ノード群	0.0520	大規模計算機システム WEB ページに記載
GPU ノード群	0.2173	
XeonPhi ノード群	0.0418	
大容量主記憶搭載ノード群	0.3703	

- 9 (C)は年度の途中は追加申請のみ受け付ける。  
 10 (C)は 1 つの申請グループにつき、250TB の追加を上限とする。

## **大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規**

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

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

**第3条** 試用制度を利用することができる者は、大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程第3条に該当する者とする。

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

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

**第6条** 利用者の有効期間は初めて利用する計算機資源毎に3ヶ月間とする。ただし、当該会計年度を超えることはできないものとする。

2 計算機資源当たり500ノード時間を利用できるものとする。ただし、全国共同利用大規模並列計算システムOCTOPUSについては26 OCTOPUSポイントを利用できるものとする。

3 利用有効期間を超えた場合は、利用を停止するものとする。

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

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

### **附 則**

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

### **附 則**

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

### **附 則**

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

### **附 則**

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

### **附 則**

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

### **附 則**

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

### **附 則**

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

### **附 則**

この改正は、平成24年4月1日から施行する。

### **附 則**

この改正は、平成28年4月1日から施行する。

### **附 則**

この改正は、平成30年11月1日から施行し、平成30年4月1日から適用する。

## **大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員内規**

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

2 前項の目的のため、センターに利用相談員を置く。

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

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

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

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

2 前項に係る利用経費の負担額は免除する。

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

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

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

### **附 則**

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

### **附 則**

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

### **附 則**

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

### **附 則**

この改正は、平成25年4月1日から施行する。

・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 (SX-ACE/VCC)	login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
ログインサーバ (OCTOPUS)	octopus.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	1024 core (4 core × 256 ノード)	15 TB (60 GB × 256 ノード)	256 ノード
	DBG	20 分	32 core (4 core × 8 ノード)	480 GB (60 GB × 8 ノード)	8 ノード
	INT	60 分	4 core	60 GB	1 ノード
占有利用	myACE	無制限	4 core × 占有ノード数	60 GB × 占有ノード数	占有ノード数

### 大規模可視化対応 PC クラスタ (VCC) のジョブクラス一覧

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 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	640 core (20 core × 32 ノード)	1920 GB (60 GB × 32 ノード)	32 ノード
		336 時間	40 core (20 core × 2 ノード)	120 GB (60 GB × 2 ノード)	2 ノード
共有利用 (GPU 利用)	GVC	120 時間	180 core (20 core × 9 ノード)	540 GB (60 GB × 9 ノード)	9 ノード
占有利用	myVCC	無制限	20 core × 占有ノード数	60GB × 占有ノード数	占有ノード
占有利用 (GPU 利用)	myGVC	無制限	20 core × 占有ノード数	60GB × 占有ノード数	占有ノード

※ジョブクラス一覧表は 2019 年 4 月 1 日時点のものになります。最新の情報は下記の WEB ページを御覧ください: <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/jobclass/>

## OCTOPUS のジョブクラス一覧

### 汎用 CPU ノード群

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	OCTOPUS	120 時間	3,072 Core (24Core×128 ノード)	24,576 GB (192GB×128 ノード)	128 ノード
	INTC	120 時間	3,072 Core (24Core×128 ノード)	24,576 GB (192GB×128 ノード)	128 ノード
占有利用	myOCTOPUS	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

### GPU ノード群

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	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTOPUS	120 時間	768 Core (24Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
	INTG	120 時間	768 Core (24Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
占有利用	myOCTOPUS	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

### Xeon Phi ノード群

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	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTPHI	120 時間	2,048 Core (64Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
	INTP	120 時間	2,048 Core (64Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
占有利用	myOCTPHI	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

### 大容量主記憶搭載ノード群

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	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTMEM	120 時間	256 Core (128Core×2 ノード)	12TB (6TB×2 ノード)	2 ノード
	INTM	120 時間	256 Core (128Core×2 ノード)	12TB (6TB×2 ノード)	2 ノード

## 2018年度大規模計算機システム稼働状況

### 稼働状況

事 項	月	(単位:時間)													
		4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	合計	月平均
稼動時間	計算サービス時間 (A1)	682:45	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	733:15	672:00	730:00	8698:00	724:50
	初期化・後処理時間 (A2)	0:15	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:15	0:00	0:00	0:30	0:02
	業務時間 (A3)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	(A) 小計	683:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	733:30	672:00	730:00	8698:30	724:52
保守時間 (B)		37:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	10:30	0:00	14:00	61:30	5:07
故障時間 (C)		0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
その他の時間 (D)		0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
運転時間 (A+B+C+D)		720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	672:00	744:00	8760:00	730:00
稼動率 (A/(A+B+C+D)%)		94.86	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	98.59	100.00	98.12	---	99.30
運転日数 (E)		30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30
一日平均稼動時間 (A/E)		22:46	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	23:39	24:00	23:32	---	23:49

### 処理状況

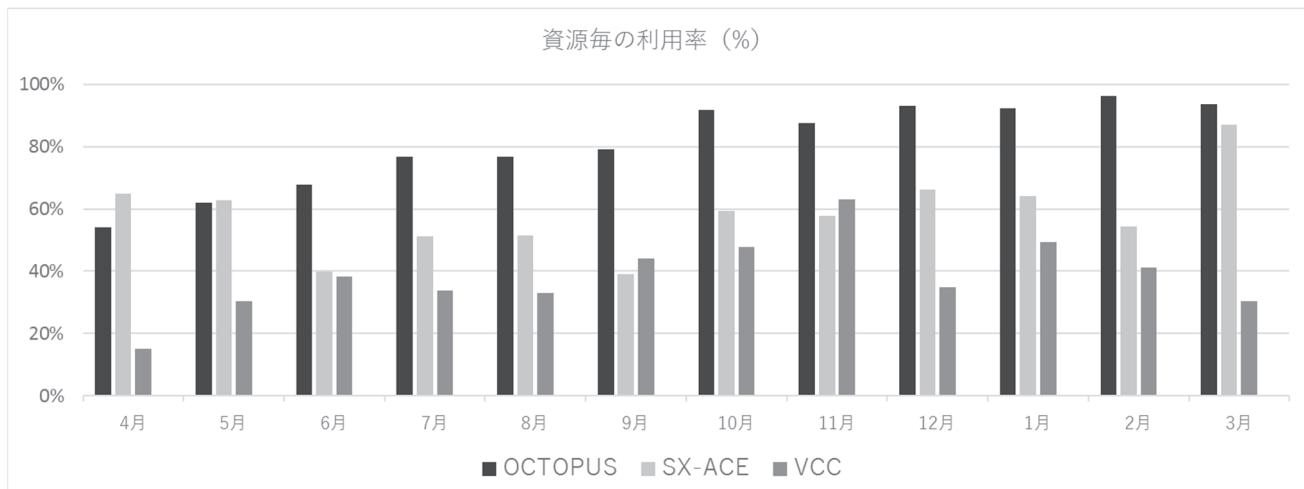
処理月	スーパーコンピュータSX-ACE			大規模可視化対応PCクラスタ			OCTOPUS						
	共有利用		利用率(%)	共有利用		利用率(%)	共有利用		利用率(%)				
	ジョブ件数	CPU時間(時)		ジョブ件数	CPU時間(時)		ジョブ件数	CPU時間(時)					
4月	2,649	163,376	64.8%	450	5,467	14.9%	4,614	112,708	3,360				
5月	2,266	166,355	62.7%	544	7,156	30.4%	4,499	143,789	3,720				
6月	2,955	77,082	66,575	39.9%	815	12,006	6,963	38.2%	12,785				
7月	4,043	128,376	68,667	51.3%	822	10,595	6,639	33.7%	7,347				
8月	8,458	125,187	69,936	51.4%	550	8,982	7,762	32.9%	15,232				
9月	5,087	76,380	65,274	39.0%	479	14,826	6,449	44.0%	8,899				
10月	4,841	168,459	68,999	59.4%	1,127	16,340	7,452	47.8%	34,162				
11月	7,214	146,369	67,680	57.7%	1,144	23,287	7,201	63.1%	13,538				
12月	7,651	211,892	69,936	66.3%	781	12,442	5,041	34.8%	14,197				
1月	7,233	195,255	68,695	64.0%	444	18,829	5,982	49.4%	20,807				
2月	6,675	134,705	63,168	54.4%	222	12,412	6,588	41.1%	21,358				
3月	10,217	357,819	68,620	86.9%	1,669	6,431	8,891	30.4%	60,343				
合計	69,289	1,951,255	808,488	-	9,047	148,773	78,969	-	217,781	2,192,005	48,926	-	-

(注) 利用率は、次の計算式により算出している。

スーパーコンピュータ SX-ACE の利用率 = ( SX-ACE の CPU 時間 / 稼働中ノードの合計サービス時間 ) \* 100

大規模可視化対応 PC クラスタ(VCC)の利用率 = ( VCC のノード時間積 / 稼働中ノードの合計サービス時間 ) \* 100

OCTOPUS の利用率 = ( OCTOPUS のノード時間積 / 稼働中ノードの合計サービス時間 ) \* 100



# 募 集

---

- ・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について ..... 129
- ・大規模計算機システム利用案内 ..... 130



# 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

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

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

\*投稿いただいた方には、掲載した広報誌 5 部を進呈いたします。

## 【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
  - ・ページ設定 (Microsoft Word2010 の設定です。)
    - ・用紙サイズ A4 縦
    - ・1 ページの文字数と行数：行数 40、行送り 18.2 pt、1 頁 2 段書き
    - ・フォント 本文 MS 明朝 10 pt  
題名 MS ゴシック 14 pt、半角英数 Times New Roman  
執筆者氏名 MS 明朝 10 pt、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](mailto: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 35MB 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）

### ・サービス内容

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

### ・サービス時間

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

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

### ・大規模計算機システムURL

大規模計算機システムホームページ	<a href="http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/">http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/</a>
大規模可視化システムホームページ	<a href="http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp/">http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp/</a>
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。)	<a href="https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/portal/">https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/portal/</a>

### ・利用相談

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

## 広報委員会委員

松岡 茂 登 (委員長、大阪大学 サイバーメディアセンター)  
浦西 友樹 (大阪大学 サイバーメディアセンター)  
大前 智美 (大阪大学 サイバーメディアセンター)  
吉野 元 (大阪大学 サイバーメディアセンター)  
降幡 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.9 2019年 12月発行

編集：大阪大学サイバーメディアセンター広報委員会

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

印刷：阪東印刷紙器工業所

表紙デザイン：阿部 浩和 (大阪大学)

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