



CYBERMEDIA HPC JOURNAL
Cybermedia Center, Osaka University
No. 10

January, 2021.

大阪大学 サイバーメディアセンター

2021.10.20

目 次

特 集 : HPCI を利用した研究成果	1
・高分子系における化学ポテンシャルの Chain-Increment 法による全原子計算	山田 一雄、松林 伸幸 … 3
大規模計算機システム利用者研究報告	9
・Accelerating In-Transit Co-Processing for Scientific Simulations Using Region-Based Data-Driven Adaptive Compression	Marcus Wallden … 11
・高イオン伝導性を示すイオン性融体の拡散挙動の考察	石井 良樹 … 15
・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	今井 雅也 … 19
・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	岩下 拓哉 … 23
・圧力変動に伴う運動量の乱流輸送過程に及ぼす成層の影響評価と海洋乱流混合層スキームの改良	牛島 悠介 … 27
・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	大戸 達彦 … 31
・MSDC-MDによる天然変性蛋白質の熱力学解析と構造予測	下山 紘充 … 35
・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	速水 智教 … 41
・出生コードホート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	原田 拓弥、村田 忠彦 … 45
・国民生活シミュレーションに基づく住宅・業務施設のエネルギー需要予測	山口 容平 … 49
・SU(3)ゲージ理論におけるリサーチェンス構造	伊藤 悅子 … 53
・高負荷燃焼とNOx低減の同時機能実現に向けたCO ₂ フリー燃焼器の開発	奥村 幸彦 … 57
・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、金谷 和至 … 61
・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	羽原 英明 … 65
・回転デトネーションエンジンにおける2次元及び3次元数値解析	吉田 悠佑、佐野 拓海、ジェミンスカ エディータ … 69
・CeドープされたYAG結晶における光励起後のFranck Condon緩和の第一原理計算	宮本 良之 … 73

・格子ゲージ理論によるダークマターの研究 - - ダークマターの正体の解明に向けて - -	
.....	飯田 英明、山中 長閑、若山 将征、中村 純 … 75
センター報告	79
・2019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	81
・SC19 出展報告	95
・第 25 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2019)報告および 第 26 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2020)告知	101
・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	103
・2020 年度大規模計算機システム利用講習会	105
・2019 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	106
・2020 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	114
・2020 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	115
・2019 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	116
・2020 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	117
・大規模計算機システム Q&A	118
利用規程等	121
・規程関係	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規程	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負担額一覧	125
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	127
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	127
・附表	128
大規模計算機システム ホスト一覧	128
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	128
2019 年度大規模計算機システム稼働状況	130
募 集	131
・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	133
・大規模計算機システム利用案内	134

— HPCI を利用した研究成果 —

特 集

- ・高分子系における化学ポテンシャルの
Chain-Increment 法による全原子計算 3

山田 一雄、松林 伸幸 大阪大学 大学院基礎工学研究科

高分子系における化学ポテンシャルの Chain-Increment 法による全原子計算

山田 一雄、松林 伸幸

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

高分子は混合自由エネルギーが負に大きい他の高分子や溶液によく混合する。混合自由エネルギーは混合する物質種の混合前後の化学ポテンシャル差であり、この量を評価することでポリマーブレンドのような高分子複合材料の作成可能性を知ることができる。化学ポテンシャルは原子レベルの分子内／分子間相互作用に依存するが、現時点では高分子丸ごとの原子スケール自由エネルギー計算は困難な課題となっている。これは、高分子が非常に柔らかく内部自由度が膨大なために様々な構造形態を取ることができてしまうことに起因している。このような高分子化学ポテンシャル計算の基礎的・実用的重要性から、高分子構造の特徴的な性質を利用した巧妙な計算スキームを確立することが必要とされている。

本稿では、原子スケールのモデルである全原子モデル系において高分子の化学ポテンシャルを計算可能とする chain increment 法について解説する [1]。この手法は、注目している高分子と周囲の分子との分子間相互作用を、高分子を構成するモノマー（あるいはセグメント）と周囲の分子間相互作用の和として表現し、ひとつのモノマーと周囲の分子間相互作用を導入する際の自由エネルギー変化を incremental free energy と定義して溶液理論の枠組みで計算するものである。本研究では、polyethylene (PE) の水溶液、PE、 polypropylene (PP)、 poly(methyl methacrylate) (PMMA)、 and polyvinylidene difluoride (PVDF) 溶融系において chain increment 法を用いて incremental free energy の計算を行った。

溶液理論に基づく自由エネルギー計算法では、高分子鎖中の注目モノマーを「溶質」、そのほかの周辺分子を「溶媒分子」とみなす。「溶媒和」という概念は、この「溶質」と「溶媒分子」の間の相互作用を印加することと定義する。さらに「溶媒和自由エネ

ルギー」を「溶質」－「溶媒」相互作用印加に伴う自由エネルギー変化として定義する。高分子は非常に柔軟であるため、エネルギー表示法(energy representation, ER)のように溶質分子の構造がフレキシブルな系でも適用可能な溶液理論が必要である[2-7]。ER 法は溶液系の密度汎関数理論に基づいており、溶質－溶媒ペア間相互作用エネルギーの分布関数から溶媒和自由エネルギー近似汎関数を定式化するものである。溶質－溶媒相互作用のない始状態とフルにカップルした終状態の端点のシミュレーションにおけるエネルギー分布関数から目的の自由エネルギーを近似的に計算する。中間状態のシミュレーションをパスすることで計算コストが削減される上、近似汎関数を用いたことによる誤差は力場の誤差より大きくならないことが報告されている [8]。また、ER 法は高分子やミセル、脂質膜のような不均一で柔らかいものを含んだ非常に広範な系を高精度・高効率に計算可能であるという特徴がある。例えば、様々な線状高分子への水の溶解を ER 法で計算した結果が報告されている [9, 10]。

2. 理論

本節では古典力学の枠組みにおける incremental free energy の定式化を紹介する。本稿では圧力 P 、温度 T で制御された NPT アンサンブルを想定する。注目分子の化学ポテンシャル μ は(1)式のようになる。

$$\mu = k_B T \log(\rho\lambda) + G^{\text{iso}} + \Delta\mu \quad (1)$$

k_B と ρ はボルツマン定数と注目している分子の平均密度、 λ はドブロイ熱波長を表している。混合ギブス自由エネルギーの評価に重要なのは第 3 項目の $\Delta\mu$ であり、これは周囲の分子との分子間相互作用からの寄与を表している。 $\Delta\mu$ は注目分子を「溶質」、周囲の分子を「溶媒」とみなした際の溶媒和自由エネルギーと解釈できる量である。 $\Delta\mu$ の統計力学的表現を示

したのが(2)式である。

$$\exp(-\beta\Delta\mu) = \frac{\int dV d\psi dX \exp[-\beta(\Psi(\psi) + U(X) + Z(\psi, X) + PV)]}{\int dV d\psi dX \exp[-\beta(\Psi(\psi) + U(X) + Z(X) + PV)]} \quad (2)$$

ここで ψ は着目分子の座標の集合、 V は系の体積、 β は逆温度を表す。 $\Psi(\psi)$ は着目分子の内部エネルギーであり、その他の分子の座標はまとめて X で表し、この分子のみが関与する分子内・分子間相互作用を $U(X)$ で表す。 $Z(\psi, X)$ は注目分子とその他の分子の間の分子間相互作用であり、(2)式の分母のみに現れる。(2)式より、溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ とは、注目分子と他の分子の分子間相互作用 $Z(\psi, X)$ を印加する際の自由エネルギー変化である。

(2)式は厳密だが、溶質が高分子のような大きな分子の場合、 $\Delta\mu$ の straightforward な計算は実質的に不可能である。これは高分子が膨大な分子内自由度を持ち、それゆえたくさんの準安定状態に落ち込むため配位空間上のサンプリングが長大となってしまう事に起因する。この問題を解決するために、高分子が同一モノマーの繰り返し構造から構成されるという事実を考慮した計算手法を提案する。

高分子に働く分子間相互作用がそれを構成するモノマーに働く分子間相互作用の和で表すことができると仮定しよう（相互作用の相加性、 pairwise additive）。高分子中の i 番目のモノマーの座標を ψ_i と定義すると、重合度 N の高分子全体の座標 ψ は $\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N)$ となる。この時、高分子に働く分子間相互作用は

$$Z(\psi, X) = \sum_{i=1}^N W(\psi_i, X) \quad (3)$$

となる。そこで、 i 番目のモノマーにおける増分溶媒和自由エネルギー(incremental free energy of solvation) $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を(4)式で定義する。

$$\exp(-\beta\Delta\mu_i^{\text{incr}}) = \frac{\int dV d\psi dX \exp[-\beta(\Psi(\psi) + U(X) + \sum_{j=1}^i W(\psi_j, X) + PV)]}{\int dV d\psi dX \exp[-\beta(\Psi(\psi) + U(X) + \sum_{j=1}^{i-1} W(\psi_j, X) + PV)]} \quad (4)$$

$i = 1$ の場合、分母の $\sum_{j=1}^{i-1} W(\psi_j, X)$ の項は 0 とする。(4)式から、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は i 番目のモノマーと周囲の分

子の間に働く相互作用を系に印加する際の自由エネルギー変化であることがわかる。この過程の初期状態および終状態がそれぞれ(4)式の分母と分子に対応している。注目している高分子の分子内相互作用 $\Psi(\psi)$ は始・終状態のどちらでも印加されたままであるという点に注意する。(4)式では、 i 番目より後のモノマーがどちらの状態端点でも周囲分子と相互作用しないこと、および、 i 番目より前のモノマーは状態に関係なく分子間相互作用の影響を受ける。高分子の全溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ はこの incremental free energy of solvation $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を用いて

$$\Delta\mu = \sum_{i=1}^N \Delta\mu_i^{\text{incr}} \quad (5)$$

と書くことができる。(5)式は、高分子の $\Delta\mu$ は高分子を構成する各モノマーの分子間相互作用を逐次的に印加していくことで計算されることを示しているため、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は i 番目のモノマーの incremental free energy of solvation と呼ばれる。

高分子の重合度 N が十分大きい時、高分子の端部分（末端モノマー）近傍を除くすべてのモノマーは実質的に等価であると考えられる。この仮定が成立するとき、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ はモノマーのインデックス i および重合度 N に依存しなくなり、(5)式は次のように書き換えることができる。

$$\Delta\mu = N\Delta\mu_i^{\text{incr}} + \sum_{i \in \text{end parts}} (\Delta\mu_i^{\text{incr}} - \Delta\mu^{\text{incr}}) \quad (6)$$

ここで、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は定数となることが期待される高分子内部部分の $\Delta\mu^{\text{incr}}$ である。(6)式より、 N が十分大きいとき $\Delta\mu$ は N に比例することがわかる。従って、高分子の溶媒和自由エネルギー計算にでは、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ の計算が重要となる。

最後に、溶液理論によって $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を計算する近似手法の定式化について説明する。注目する高分子中の i 番目のモノマーを「溶質」、それ以外の分子を「溶媒」とみなす。(3)式のモノマー-溶媒分子間相互作用 $W(\psi_i, X)$ が pairwise additive であることを仮定すると、 $W(\psi_i, X)$ は次のように書き直すことができる。

$$W(\psi_i, X) = \sum_k v(\psi_i, x_k) \quad (7)$$

x_k は k 番目の溶媒分子の座標である。溶媒分子は水のような小分子あるいは高分子のような大きな分子のどちらでもあり得る。混合溶媒系への拡張は容易なので、ここでは単成分溶媒系での定式化のみを紹介する。 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は以下のように書くことができる。

$$\exp(-\beta\Delta\mu_i^{\text{incr}}) = \frac{\int dVd\psi dX \exp[-\beta(\tilde{U}_i(\psi, X) + W(\psi_i, X) + PV)]}{\int dVd\psi dX \exp[-\beta(\tilde{U}_i(\psi, X) + PV)]} \quad (8)$$

ここで

$$\tilde{U}_i(\psi, X) = \Psi(\psi) + U(X) + \sum_{j=1}^{i-1} W(\psi_j, X) \quad (9)$$

は i 番目のモノマーと溶媒の間の分子間相互作用の挿入過程の始状態(分母)と終状態(分子)の両方におけるアンサンブル生成に寄与するポテンシャル関数である。 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は incremental な溶媒和自由エネルギーであり、(拡張された)溶媒和の概念に従って、始状態と終状態をそれぞれ「参照溶媒系」、「溶液系」と呼ぶ事にする。これらの系のアンサンブル平均をそれぞれ $\langle \dots \rangle_0$ と $\langle \dots \rangle$ で表すと、これらは

$$\langle \dots \rangle = \frac{\int (\dots) dVd\psi dX \exp[-\beta(\tilde{U}_i(\psi, X) + W(\psi_i, X) + PV)]}{\int dVd\psi dX \exp[-\beta(\tilde{U}_i(\psi, X) + W(\psi_i, X) + PV)]} \quad (10)$$

$$\langle \dots \rangle_0 = \frac{\int (\dots) dVd\psi dX \exp[-\beta(\tilde{U}_i(\psi, X) + PV)]}{\int dVd\psi dX \exp[-\beta(\tilde{U}_i(\psi, X) + PV)]} \quad (11)$$

で定義される。(8)式で特筆すべきは、着目する高分子中のすべてのモノマーはモノマー同士で互いに相互作用する一方で i 番目より後のモノマーは周囲の分子(溶媒分子)と相互作用しない点である。(5)式で記述された incremental 過程では、着目分子内の相互作用は常に入れたまま高分子と溶媒分子の間の相互作用を逐次的に印加させることになる。

最後に、エネルギー表示溶液理論の枠組みにおける $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ の表現について述べる。以下の連続の式では、簡略化のために添え字 i (着目高分子の incremental モノマーのインデックス)を落とす。溶質-溶媒ペア相互作用 $v(\psi, x)$ の値 ε の瞬間的な分布 $\hat{\rho}(\varepsilon)$ および分布関数を定義する。

$$\hat{\rho}(\varepsilon) = \sum_k \delta(v(\psi, x_k) - \varepsilon) \quad (12)$$

$$\rho(\varepsilon) = \langle \hat{\rho}(\varepsilon) \rangle \quad (13)$$

$$\rho_0(\varepsilon) = \langle \hat{\rho}(\varepsilon) \rangle_0 \quad (14)$$

これらの量を用いるとエネルギー表示法の $\Delta\mu^{\text{incr}}$ は

$$\Delta\mu^{\text{incr}} = \int d\varepsilon \varepsilon \rho(\varepsilon) - k_B T \int d\varepsilon (\rho(\varepsilon) - \rho_0(\varepsilon)) - k_B T \int d\varepsilon \left[\rho(\varepsilon) \log \left(\frac{\rho(\varepsilon)}{\rho_0(\varepsilon)} \right) - \beta(\rho(\varepsilon) - \rho_0(\varepsilon)) \Omega(\varepsilon) \right] \quad (15)$$

と書かれる。 $\Omega(\varepsilon)$ は溶質-溶媒相互作用の導入に伴う溶媒-溶媒相関の変化による寄与を記述する関数である。(15)式の第一項は溶質-溶媒相互作用エネルギーの平均和であり、それ以外の項は溶媒再配向の効果を表している。現行のエネルギー表示法では、 $\Omega(\varepsilon)$ は Percus-Yevick (PY) と hypernetted-chain (HNC) 近似を組み合わせて構成されている。上の手法では近似は溶媒効果のみに入っているが、 $\Psi(\psi)$ で表される着目高分子の分子内エネルギーは厳密である。incremented モノマーは、着目高分子内の他のモノマーからの影響を化学結合を通して非常に強く受けうるため、ER 法が $\Psi(\psi)$ について厳密であるという性質は有用である。

3. 計算手順

本研究で扱う系は PE-水系および PE、PP、PMMA、PVDF の単成分溶融系である。各分子の化学構造を図 1 に示す。系の平衡構造はオープンソースソフトウェアである OpenMM を用いた分子動力学シミュレーション(MD)で生成した。立方体セルに周期境界条件を仮定し、イメージセルとの相互作用には minimum image convention を採用している。PE-水系では水 10000 分子で満たされた系にひとつの PE 分子(重合度 50)が入っている。高分子溶融系に関しては、計算で扱った分子の重合度 N と分子量を表 1 にまとめている。PP と PMMA の tacticity(立体規則性)はアイソタクチックに設定している。高分子および水分子の分子内・分子間相互作用は General Amber force field (GAFF) および TIP3P モデルをそれぞれ使用しており、高分子の部分電荷は CHelpG 法を用いた。MD シミュレーションにおけるポテンシャル関数は(9)式の $\tilde{U}_i(\psi, X)$ である。各系の計算手順を表 2、3 に示す。

PE-水系では $i = 1, 5, 10, \dots, 45, 50$ に関する

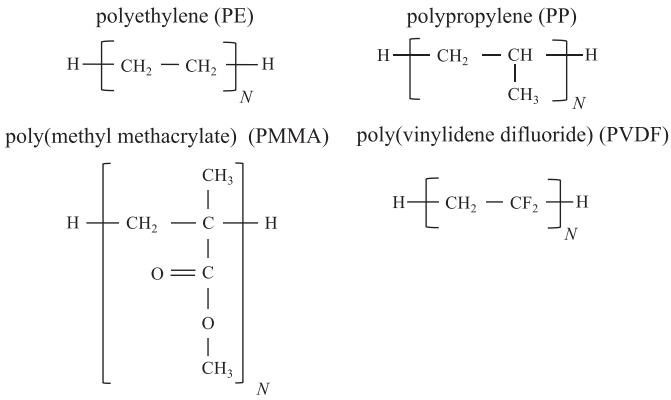


図 1: 本研究で用いた高分子の化学式

incremental free energy of solvation $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ の計算を行った。各 i について、初期構造を変えた 50 個の独立な MD シミュレーションを走らせアンサンブル平均をとることで合計 50 ns 分の平衡状態トラジェクトリから自由エネルギー計算を行った。さらに、エネルギー表示法の近似精度を確かめるために incremental Widom insertion method で $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を計算した。incremental Widom insertion method とは、(7)式で与えられた水に関する全分子間エネルギー相互作用を計算し、そのボルツマン因子のアンサンブル平均から（数値的に）厳密な $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を得る手法である。

高分子	重合度	分子量	分子数	温度 (K)
PE	25	703.3	400	423
PE	50	1404.7	200	423
PE	100	2807.3	100	423
PP	100	4210.0	100	423
PMMA	25	2504.9	400	453
PMMA	50	5007.8	200	453
PMMA	100	10013.6	100	453
PVDF	100	6405.4	100	453

表 1: 溶融系の重合度、分子量、分子数、温度

高分子溶融系では、重合度 $N = 100$ の単成分系においては、 $i = 1, 5, 10, \dots, 95, 100$ について、 $N = 25$ の系では $i = 1, 5, \dots, 20, 25$ 、 $N = 50$ の系では $i = 1, 5, \dots, 45, 50$ について $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ 計算を行なった。高分子の種類と分子量、MD の単位セル中の分子数、系の平衡温度は表 1、シミュレーション手順は表 3 にまと

めてある。表中の T_{target} は PE、PP、PMMA、PVDF でそれぞれ 423、423、453、453 K であり、 T_{high} はアニーリング温度でそれぞれ 483、483、523、523 K に設定した。表 3 の 4 ステップ目は高分子溶融系の平衡化時間を短縮するためのアニーリング過程であり、圧力と温度の値は緩和時間の短縮のために高い値に設定してある。サンプリング間隔は溶液系で 0.25 ps、参照溶媒系で 0.1 ps にそれぞれ設定してある。各モノマーインデックス i について溶液系で 100 個、参照溶媒系で 500 個の独立な初期構造から出発して平衡化およびサンプリング計算を行った。溶液系、参照溶媒系における全サンプリング時間は各 i についてそれぞれ 50 および 250 ns となる。

Step	ensemble	時間 (ps)	温度 (K)	圧力 (bar)
1	Minimization			
2	NVT	100	298	
3	NPT	2000	298	1
4	NPT	1000	298	1

表 2: PE-水系の計算手順

Step	ensemble	時間 (ps)	温度 (K)	圧力 (bar)
1	Minimization			
2	NVT	100	T_{target}	
3	NPT	5000	T_{target}	1
4	NPT	2000	T_{high}	1000
5	NPT	1000	T_{target}	1
6	NPT	500	T_{target}	1

表 3: 高分子溶融系の計算手順

4. 結果と議論

まず、PE-水系の結果を紹介する。incremental free energy of solvation $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は PE 中の i 番目のモノマーと溶媒水分子の間の相互作用を系に印加する過程の自由エネルギー差である。図 2 は厳密法である incremental Widom insertion method と近似法であるエネルギー表示法を用いて計算した $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を PE モノマーのインデックス i についてプロットしたものである。図 2 より、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は末端モノマー $i=1$ を除いて 0.2 kcal/mol の範囲内で一定であることがわかる。

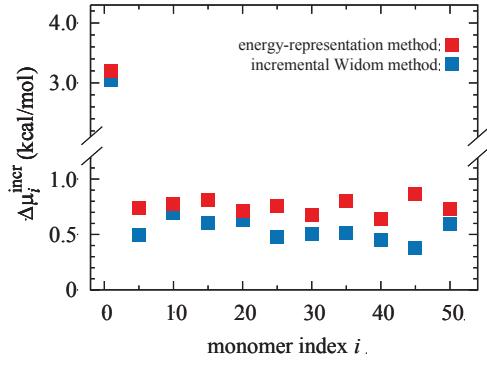


図 2: PE(重合度 50)一水系における incremental free energy $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ のモノマーインデックス依存性。 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は $i = 1, 5, 10, 15, \dots, 50$ で計算

$\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を末端を除いた $i = 5, 10, \dots, 45$ で平均した値はエネルギー表示法で 0.6 kcal/mol、incremental Widom insertion method で 0.8 kcal/mol であることから、近似法であるエネルギー表示法による $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は厳密法である incremental Widom insertion method とよく一致している。

次に高分子溶融系の結果について述べる。これらの系は单成分溶融系であり、着目している高分子は溶媒高分子と同種のものである。図 3 に PE、PP、PMMA、PVDF の $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を示す。エネルギー表示法を用いて計算した結果を i に対してプロットしたものである。 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ が端のものを除いて 0.5 kcal/mol 程度の範囲内で一定の値をとるという結果が見られた。 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ の定常性の範囲は図 2 の PE-水系で見られたものと同程度のものであり、溶媒分子の種類に依らず chain increment 法が有用であることを示している。(15)式にある通り、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は溶質-溶媒間平均相互作用エネルギー $\langle u \rangle_i$ および溶媒再配向の項からなる。現在の取り扱いでは、 $\langle u \rangle_i$ は i 番目のモノマーと他の高分子鎖の間の相互作用エネルギーの平均和である。 $\langle u \rangle_i$ は、相互作用の強さについての直感的で分かりやすい尺度であり、統計的誤差を除いて厳密に計算可能な項でもある。 i に対する依存性は $\langle u \rangle_i$ についても $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ についても同じような挙動を示す。 $\langle u \rangle_i$ は端の部分を除いたすべての i に対して 1 kcal/mol 以下の範囲で一定であり、 $i=1$ において負に大きくなる。また、incremental free energy $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ の $i=5, 10, \dots, 90$,

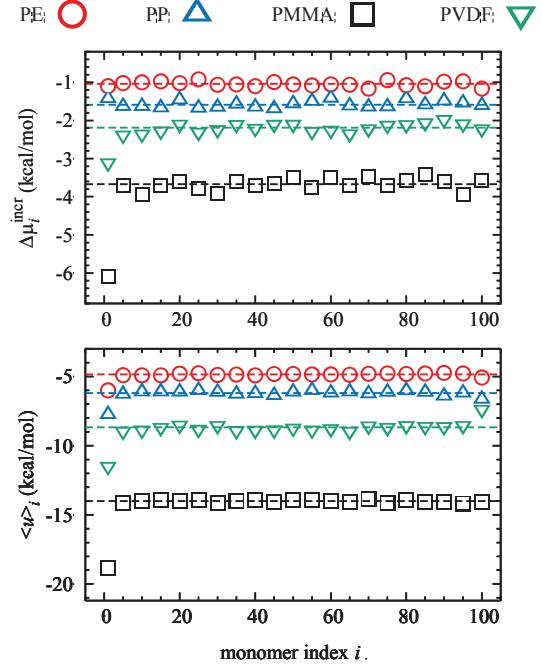


図 3: 高分子溶融系における incremental free energy $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ および溶質-溶媒相互作用エネルギー $\langle u \rangle_i$ のモノマーインデックス依存性。それぞれ $i=1, 5, 10, 15, \dots, 100$ について計算しており、破線は、端のモノマーを除いた平均を示す

95 についての平均値は PE、PP、PMMA、PVDF でそれぞれ -1.0, -1.6, -3.7, -2.2 kcal/mol である。標準偏差はそれぞれ 0.1, 0.1, 0.2, 0.1 kcal/mol であり、最大偏差は 0.1, 0.2, 0.3, 0.2 kcal/mol となった。したがって、平均化された $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ はおよそ 0.1 kcal/mol 程度の精度を持ち、これは高分子種を区別するのに十分な精度となっている。さらに、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ は PMMA > PVDF > PP > PE の順に負に大きな値を取っている。PMMA や PVDF の $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ と $\langle u \rangle_i$ が PP や PE に比べて負に大きいのは極性高分子の方が非極性高分子に比べてより強く相互作用していることを反映し、PP > PE となるのは PP の方が PE に比べてモノマーサイズが大きいことに対応している。

さらに、(6)式に基づいて、重合度 N が 25, 50, 100 のときの高分子の全溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ を評価した。(6)式の $\Delta\mu^{\text{incr}}$ は、 $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ を $i=5, 10, \dots, (N-10)$, $(N-5)$ について平均した値とし、末端部分の $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ には $i=1$ および N での値を用いた。PE と PMMA の全溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ の N に対する

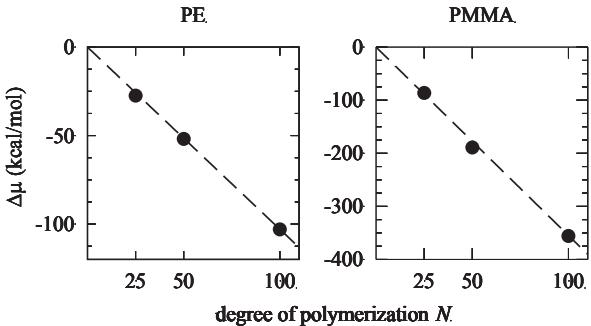


図 4: chain increment 法を用いて見積もった PE と PMMA の全溶媒和自由エネルギー $\Delta\mu$ の重合度依存性

依存性を、図 4 に示す。 $\Delta\mu$ の N に対する線形性は良く、これは末端部分における $\Delta\mu_i^{\text{incr}}$ の $\Delta\mu^{\text{incr}}$ からのずれが今回扱った重合度 N の高分子において無視できることを示している。(6)式で述べたとおり、長鎖高分子の溶媒和自由エネルギーは chain increment 法で計算される $\Delta\mu^{\text{incr}}$ によって決まるが、 $\Delta\mu^{\text{incr}}$ が重合度数十以上程度の高分子の全原子シミュレーションから評価できることを図 4 は示している。

5. おわりに

全原子モデルを用いた高分子系のエネルギー論を展開するために、chain increment 法の開発を行った。この手法では溶媒分子との相互作用を高分子中のモノマーごとに逐次的に印加していく、それに対応する自由エネルギー変化を全体の高分子の化学ポテンシャルを決定するために計算する。increment されるモノマーを溶質、周囲の分子を溶媒とみなし、chain increment に関わる自由エネルギー変化 (incremental free energy of solvation) を溶質–溶媒間相互作用の印加に伴う自由エネルギー変化と定義することでエネルギー表示法を実装した。開発した手法を PE–水系、PE、PP、PMMA、および、PVDF の単成分溶融系に適用した。数値的に厳密な自由エネルギー値を incremental Widom insertion method から PE–水系について別途求め、エネルギー表示法による incremental free energy of solvation の近似値が厳密法の結果とよく一致することを確かめた。高分子溶融系の結果によると、incremental free energy of solvation は高分子の端の部分を除いて一定の値をとることが

わかった。高分子鎖の自由エネルギーは内部部分からの寄与によって決まっており、さらに PE と PMMA について内部部分の incremental free energy of solvation の重合度依存性を調べた結果、平均の incremental free energy は重合度にあまり依存しないことが見出された。 10^4 から 10^5 個程度の原子数の MD シミュレーションから incremental free energy の全原子モデル計算が可能であることを示したことになる。

高分子の溶媒和自由エネルギーを全原子モデルで計算する際には、高分子全体と溶媒分子との相互作用を同時に印加すると多くの計算資源が必要となる。これに対して chain increment 法は相互作用を高分子鎖に沿って逐次的に導入していく。本研究では、chain increment 法を全原子モデルに適用し、MD シミュレーションエネルギー表示溶液理論を組み合わせることで incremental free energy が 0.2~0.3 kcal/mol の精度で得られることを示した。

参考文献

- (1) K. Yamada and N. Matubayasi, *Macromol.*, **53**, 775 (2020).
- (2) N. Matubayasi and M. Nakahara, *J. Chem. Phys.*, **113**, 6070 (2000).
- (3) N. Matubayasi and M. Nakahara, *J. Chem. Phys.*, **117**, 3605 (2002).
- (4) N. Matubayasi and M. Nakahara, *J. Chem. Phys.*, **118**, 2446 (2003).
- (5) N. Matubayasi and M. Nakahara, *J. Chem. Phys.*, **119**, 9686 (2003).
- (6) S. Sakuraba and N. Matubayasi, *J. Comput. Chem.*, **35**, 1592 (2014).
- (7) N. Matubayasi, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 1910 (2019).
- (8) Y. Karino, M. Fedorov, and N. Matubayasi, *Chem. Phys. Lett.*, **496**, 351 (2010).
- (9) T. Kawakami, I. Shigemoto, and N. Matubayasi, *J. Chem. Phys.*, **137**, 234903 (2012).
- (10) T. Kawakami, I. Shigemoto, and N. Matubayasi, *J. Chem. Phys.*, **140**, 169903 (2014).

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。

- Accelerating In-Transit Co-Processing for Scientific Simulations Using
Region-Based Data-Driven Adaptive Compression 11
Marcus Wallden Graduate School of Information Science and Technology, Osaka University
- 高イオン伝導性を示すイオン性融体の拡散挙動の考察 15
石井 良樹 兵庫県立大学 大学院シミュレーション学研究科
- 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 19
今井 雅也 大阪大学 大学院基礎工学研究科
- 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 23
岩下 拓哉 大分大学 理工学部
- 圧力変動に伴う運動量の乱流輸送過程に及ぼす成層の影響評価と
海洋乱流混合層スキームの改良 27
牛島 悠介 京都大学 大学院理学研究科
- 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 31
大戸 達彦 大阪大学 大学院基礎工学研究科
- MSDC-MDによる天然変性蛋白質の熱力学解析と構造予測 35
下山 紘充 北里大学 薬学部

・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 41

速水 智教 大阪大学 大学院生命機能研究科

・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 45

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

・国民生活シミュレーションに基づく住宅・業務施設のエネルギー需要予測 49

山口 容平 大阪大学 大学院工学研究科

・SU(3)ゲージ理論におけるリサーチェンス構造 53

伊藤 悅子 慶應義塾大学 自然科学研究センター

・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 57

奥村 幸彦 香川大学 創造工学部

・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 61

谷口 裕介 筑波大学 計算科学研究センター

金谷 和至 筑波大学 宇宙史研究センター

・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 65

羽原 英明 大阪大学 大学院工学研究科

・回転デトネーションエンジンにおける2次元及び3次元数値解析 69

吉田 悠佑、佐野 拓海、ジェミンスカ エディータ 上智大学 大学院工学研究科

・CeドープされたYAG結晶における光励起後のFranck Condon緩和の第一原理計算 73

宮本 良之 国立研究開発法人 産業技術総合研究所

・格子ゲージ理論によるダークマターの研究--ダークマターの正体の解明に向けて-- 75

飯田 英明 東京大学 物理学科

山中 長閑 京都大学 基礎物理学研究所

若山 将征 大阪大学 核物理研究センター(RCNP)

中村 純 School of Biomedicine, Far Eastern Federal University

Accelerating In-Transit Co-Processing for Scientific Simulations Using Region-Based Data-Driven Adaptive Compression

Marcus Wallden

Graduate School of Information Science and Technology, Osaka University

1. Introduction

Processing capabilities of supercomputers are improving at a rapid pace. However, I/O bandwidth is advancing at a much slower rate. This is one of the most pressing matters facing large-scale scientific simulations. Simulations can generate many tera- or petabytes of data, meaning that it is difficult to save all important data to permanent storage as a result of limited storage capacity or time-consuming I/O operations [1-3]. In-transit co-processing can instead be used to analyze and visualize data for each time step while it is generated.

In-transit co-processing is typically performed on a separate group of nodes, which we call *transit nodes*. Utilizing a separate node group means that co-processing can be performed asynchronously during the simulation stage, resulting in a less strict time limitation compared to other solutions. The data transfers required to perform in-transit co-processing can be accelerated by compressing the simulation data. However, using a lossy compression method could lower the accuracy and detail of regions of interest in the data. It could instead be preferable to selectively compress regions based on their contribution to the simulated phenomenon. Reducing regions which are not of interest would result in less time-consuming data transfers, without any significant loss in data quality.

We have developed an approach, called ATCO, to accelerate in-transit co-processing for large-scale simulations which utilize multivariate and temporal data sets in the form of structured rectilinear grids. In these grids, lightweight computations are adaptively performed in-situ to accelerate the simulation, data reduction, data transfers and co-processing. The importance of *blocks*,

convex and contiguous data regions which make up the simulation data, are determined by utilizing various importance metrics and filters. Such information can then be used to identify important regions, down-sample, reduce, compress or simply remove parts of the data based on user-defined constraints. By this approach, we strive to reduce the data size and the in-transit data transfer time by utilizing multiple reduction and compression methods based on the entropy of the data. The loss of detail in regions of interest can thus be kept at a minimum.

2. Related Work

Determining and analyzing regions of interest in three-dimensional (3D) data sets has been an important topic in many different fields of research, and has as such been explored in many related works [4-8]. However, such research has generally been limited in scope or in its ability to perform multiple analyses to determine block importance. Our approach improves upon this related work by being able to efficiently handle multiple importance analyses and by adaptively utilizing multiple different compression and reduction strategies.

Close to our work is a paper by Dorier et al. [4], in which various importance metrics were used to dynamically reduce unimportant data. Their approach specifically targeted in-situ visualization and supported elementary data reduction. In addition, they utilized load balancing based on a random distribution to balance the load among the available compute nodes. However, their approach only supported the use of a single reduction method.

3. Adaptive In-Transit Co-Processing

Our approach consists of three stages: the in-situ stage,

where importance is calculated and which compression method to use is determined for each block, the *distribution stage*, where generated simulation data is compressed, load balanced and transferred to transit nodes, and the *in-transit stage*, where data is decompressed and restructured on the transit nodes.

A key issue when calculating the importance of individual blocks is data locality. The simulation region is typically allocated in contiguous memory space. However, a block makes up a 3D subset of the simulated region, which leads to low cache hit rates, especially when using small block sizes. Utilizing multiple importance metrics or advanced data access patterns further complicate this issue. Our solution is to dynamically allocate a separate buffer for a block when it is analyzed. Relevant *filters*, which calculate importance metrics and determine which compression methods to use based on user-defined conditions, can then be applied in sequence for each block, leading to low memory overhead and high cache hit rates. This approach also ensures that the generated simulation data of each block only needs to be allocated and copied once, minimizing the overhead introduced by this step. Operating on data allocated on a per-block basis leads to a much higher data locality, meaning that multiple importance calculations can be performed at a lower computational cost.

Which importance metrics and filters to use depends on the used simulation. Similarly, which compression methods to use for which importance values depends on the needs of the researcher. We consider four compression and reduction methods: run-length encoding (RLE), LZ77 [9], Homogeneous (a block's data is reduced to a single value) and Skip (the block is not transferred to any transit node).

The generated simulation data varies throughout the simulation, meaning that the compressed data size is constantly changing. It follows that the need for

compression and data reduction also changes throughout the simulation. It could be preferable to adaptively change filter parameters and the used compression methods based on some criteria. The criteria could be based on the memory usage, execution time or the remaining allocated time on a compute cluster. Rudimentary use of an adaptive condition has been explored in some related work [4]. However, only one condition was used, which limits its application.

We support the use of multiple filters and importance metrics, and a key issue is how to adaptively modify the conditions without affecting the intended flow of analysis. Our solution is to utilize an adaptive *condition window*, by which filter conditions can vary. The value of the condition window can slide one interval of 0.05 between 0.0 and 1.0 between each time step, based on input to the program. Filter conditions can have a defined lower and upper bound. Let c_l and c_h be the lower and upper bounds, respectively, and w be the current value of the condition window. The current value of the filter condition can then be calculated using the equation

$$c_l + (c_h - c_l) \cdot w. \quad (1)$$

This method ensures that the filter condition values adaptively can be changes in a controlled manner, thus retaining the intended flow of the analysis.

4. Double-Planar Richtmyer-Meshkov Instability

To evaluate the proposed approach we devised a double-planar case of the Richtmyer-Meshkov Instability using the simulation program CNS3D.

Initially, all fluids are at rest, other than the shocked incoming air. The shock wave passes from left to right, causing the membranes separating the two fluids to rupture. The membranes are supported on a fine wire mesh with a grid spacing of 0.4 cm. The initial boundary conditions and initial setup are illustrated in Fig. 1. Small initial perturbations increase greatly in size, leading to high Reynolds number turbulent mixing of the two gases. The simulation ran for 15,653 time steps on 32

compute nodes at a resolution of $2401 \times 601 \times 1201$, for a total of 3,228 node hours. Out of all time steps, 80 were analyzed and used for testing purposes. In total, four transit nodes were used for co-processing. A visualization of three time steps of the mass fraction are shown in Fig. 2.

5. Results and Discussion

For testing purposes we devised a filter pipeline, consisting of three filters. Blocks which had a range of 0 were set to use Homogeneous compression. The Homogeneous compression method is lossy. However, since the range of the affected blocks was zero, all information could be retained. Blocks which consisted of more than 90% distinct values were set to use no compression, since lossless compression methods would not be able to compress such data as effectively. All other blocks were set to use RLE compression. The average execution times are displayed in Fig. 3. Using the lossless

RLE method reduced the data transfer time by 35.2% as compared to using no compression. However, the decompression process significantly increased the co-processing time on the transit nodes. Compared to the RLE method, ATCO sped up the decompression process by a factor of 2.0. The speedup compared to using no compression was measured at 1.05. As for the data distribution stage, ATCO achieved a speedup of 1.14 compared to using the RLE method, and a factor of 1.77 compared to using no compression. Interestingly, ATCO was able to achieve better performance in all aspects (compressed data size, compression, transfer and decompression times) compared to the other lossless compression methods used for comparison. This is a result of the fact that ATCO scales with the compression methods which are used in its pipeline; in this case RLE and Homogeneous. This behavior should extend to other compression methods as well.

6. Conclusion

We devised and evaluated a novel approach to perform in-transit co-processing in which the simulation data is analyzed to determine the importance of all regions of data. Such information is then used to simultaneously utilize multiple compression and reduction methods to accelerate the in-transit co-processing while minimizing loss of detail in regions of interest. The approach was able to calculate the importance of regions of data expediently, even in cases where multiple importance metrics were in use. Our approach was able to achieve better performance in all aspects (compressed data size as well as compression, data transfer and decompression times) in all evaluated tests than the methods used for comparison. Compared to a run length encoding compression, our approach achieved speedups of 1.14 and 2 when performing data transfers and data decompression, respectively. The excellent scalability and performance make the approach suitable to be used in tandem with many large-scale simulations which utilize in-transit co-processing to analyze the generated data. In future work

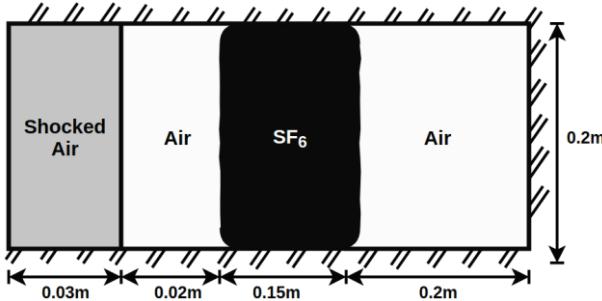


Fig. 1: Initial and boundary condition of the double-planar problem.



Fig. 2: Visualization of the mass fraction of the Richtmyer-Meshkov Instability simulation at recorded time steps 1, 40 and 80.

we plan to extend the approach to work better with in-situ workflows.

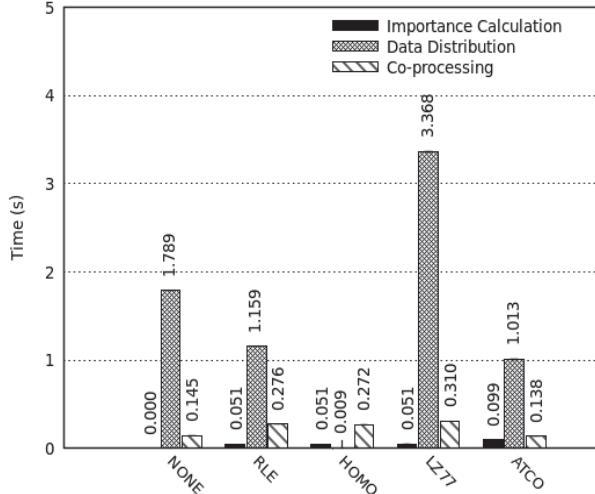


Fig. 3: Average execution times of the three main stages.

References

- [1]. Rivi M, Calori L, Muscianisi G, Slavnić V. In-situ Visualization: State-of-the-art and Some Use Cases. 2012.
- [2]. Yu H, Wang C, Grout RW, Chen JH, Ma K. In Situ Visualization for Large-Scale Combustion Simulations. IEEE Computer Graphics and Applications 2010; 30(3): 45-57.
- [3]. Bennett JC, Abbasi H, Bremer P, et al. Combining in-situ and in-transit processing to enable extreme-scale scientific analysis. In: SC'12: Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis.; 2012: 1-9.
- [4]. Dorier M, Sisneros R, Gomez LB, et al. Adaptive Performance-Constrained In Situ Visualization of Atmospheric Simulations. In: 2016 IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER). 2016: 269-278.
- [5]. Wang C, Yu H, Ma K. Importance-Driven Time-Varying Data Visualization. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 2008; 14(6): 1547-1554.
- [6]. Nouanesengsy B, Woodring J, Patchett J, Myers K, Ahrens J. ADR Visualization: A Generalized Framework for Ranking Large-Scale Scientific Data Using Analysis-Driven Refinement. In: 2014 IEEE 4th Symposium on Large Data Analysis and Visualization (LDAV). 2014: 43-50.
- [7]. Berger MJ, Oliger J. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of Computational Physics* 1984; 53(3): 484-512.
- [8]. Shimokawabe T, Onodera N. A High-Productivity Framework for Adaptive Mesh Refinement on Multiple GPUs. In: Computational Science – ICCS 2019. 2019: 281-294.
- [9]. Ziv J, Lempel A. A universal algorithm for sequential data compression. *IEEE Transactions on Information Theory* 1977; 23(3): 337-343.

高イオン伝導性を示すイオン性融体の拡散挙動の考察

石井 良樹

兵庫県立大学 大学院シミュレーション学研究科

1. はじめに

ケイ酸を主成分とする酸化物ガラスは、高温でも強い共有結合を示すことから、強化ガラスや耐熱ガラス、放射性廃棄物の固化剤などに利用されている。このようなガラスの形成メカニズムを明らかにし、イオンの輸送性能を制御する観点から、我々はこれまで第一原理計算を基にした分極イオンモデルの構築を進めてきた。この分子動力学(MD)計算では、ケイ酸塩ガラスおよびアルミノケイ酸塩ガラスの構造を NMR レベルで再現でき、その架橋酸素のうち、Al-O-Al の結合角は広く分布すること、またその角度分布は修飾子のイオン種やその配位数に依存することを明らかにした[1]。また、大気圧下で平衡化させたアルミノケイ酸塩のイオン伝導率は実験に基づく推算値とよく一致する。そこで本研究では、これまで開発を進めてきた単純溶融塩、すなわち、ハロゲン化物溶融体と酸化物溶融体の分極イオンモデルによる MD 計算を用いて、溶融塩における電気伝導、すなわちイオン伝導率の分子論について考察した。

2. モデル開発に用いる第一原理計算の取扱い

2.1 高温イオン性溶融体のモデリング

本研究で取り扱うケイ酸塩およびアルミノケイ酸塩系の組成は、イオン伝導率の実験値が報告されている MSiO_3 ($\text{M}=\text{Mg}^{2+}, \text{Ca}^{2+}$) または MAlSiO_4 ($\text{M}=\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+$)、 MAlSiO_4 ($\text{M}=\text{Mg}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Sr}^{2+}$) とし、イオン間の相互作用エネルギーは AIM の関数モデル[1,2]

$$\begin{aligned}\phi(r_{ij}) = & \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \frac{q_i \mathbf{r}_{ij} \cdot \boldsymbol{\mu}_j}{r_{ij}^3} f_4^{ij} - \frac{\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{r}_{ij} q_j}{r_{ij}^3} f_4^{ij} \\ & + \frac{\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_j}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathbf{r}_{ij} \cdot \boldsymbol{\mu}_i)(\mathbf{r}_{ij} \cdot \boldsymbol{\mu}_j)}{r_{ij}^5} \\ & + \phi^{\text{rep.}}(r_{ij}) + \phi^{\text{disp.}}(r_{ij})\end{aligned}\quad (1)$$

を用いて評価した。ここで r_{ij} は粒子 i, j 間の距離を、 $q_i, \boldsymbol{\mu}_i$ は粒子 i の電荷と双極子モーメントを、第 6 項

は異方的な斥力関数をそれぞれ表す。各イオンの双極子モーメントと第 6 項に含まれる斥力変数は、自己無撞着条件を満たすように共役勾配法を用いて毎ステップ決定した。また第 1 項から第 6 項までのクーロン項と斥力項の相互作用パラメータは、第一原理計算から得られる各イオンの双極子モーメントと力を再現するように決定した。第 7 項の分散力項に関しては、溶融状態における密度の実験値が報告されていないため、ガラス状態の密度を再現するよう決定した。また本研究では、高温溶融体の電気伝導率の挙動をより詳しく考察するため、単純なアルカリハロゲン化物 MX ($\text{M}=\text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+; \text{X}=\text{F}^-, \text{Cl}^-$) に焦点を当て、その混合塩のイオン伝導率を解析した。

2.2 輸送係数の解析と理論

本研究ではそれらのモデルを用いて MD 計算から、イオン伝導率と粘性率[3]

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

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

をそれぞれ解析した。ここで $\mathbf{r}_i(t)$ は時刻 t におけるイオン i の座標を表し、 q_i はイオン i の電荷を表す。 k_B と e はボルツマン定数と電気素量をそれぞれ表し、 T は絶対温度を表す。 $P_{\alpha\beta}$ は $\alpha\beta$ 方向に対する応力テンソルを示す。このうちイオン伝導率は、核イオンの拡散係数 D_i を用いて、

$$\begin{aligned}\sigma = & \frac{e^2}{k_B T V} \left[\Sigma_i q_i D_i \right. \\ & \left. + \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6t} \Sigma_i \Sigma_j q_i q_j \langle \{ \delta \mathbf{r}_i(t) \cdot \mathbf{r}_i(0) \} \rangle \right]\end{aligned}\quad (4)$$

と分割できる。ここで括弧内の第一項は、イオンの自己拡散に由来する自己相関項であり、第二項は異

なるイオン i,j 間の拡散に伴う相関効果を反映した相互相関項である。このうち自己相関項のみを反映した伝導率は Nernst-Einstein のイオン伝導率 σ_{NE} を表す。この相互相関項を反映した物理量として、電気伝導率をイオン種ごとに分割したイオンの輸率と、相対的な拡散性によって分割した内部移動度の尺度があり、それぞれ相補的な関係性にある[4]。

3. 最適化した分子力場とその輸送係数解析

本稿では紙面の都合から、シリケート系およびアルミノシリケート系高温溶融塩のイオン伝導率の結果について詳述する。

まず AIM を用いて得られたシリケート溶融体およびアルミノシリケート溶融体のイオン伝導率を図 1 に示す。実験値との対応を調べる観点から、シリケート溶融体は高圧をかけた時の物性値の挙動を観測し、またアルミノシリケートは温度が変化したときの挙動を観測した。本研究で得られたイオン伝導率は、比較しうる実験値と良い対応が確認できた。シリケート溶融体のイオン伝導率は 8 GPaあたりで屈曲しており、これは密度の圧力応答が変化したことに起因する。8 GPaより高圧では、圧力応答が小さく、実験値に近いイオン伝導率を示していることから、実在系をよく再現していることがわかる。また図 2 のように、アルミノシリケート溶融体のイオン伝導率の圧力依存性を同様に調べたところ、アルミノシリケート溶融体はシリケート系よりも大きいイオン伝導率を示し、圧力依存性は正となることが分かった。このアルミノケイ酸塩の密度は圧力の増加によって増加しており、これはイオン伝導率における密度の寄与が二つの組成で逆転することを示唆している。

そこでシリケート溶融体とアルミノシリケート溶融体のイオン伝導率における、自己相関項と相互相関項の考察を展開する。図 3 は、シリケート溶融体とアルミノシリケート溶融体の MD 計算から得られたイオン伝導率と Nernst-Einstein の伝導率の値を示す。そのプロットからわかるように、Ca 系の溶融体のイオン伝導率は、Al イオンの存在に限らず、常に

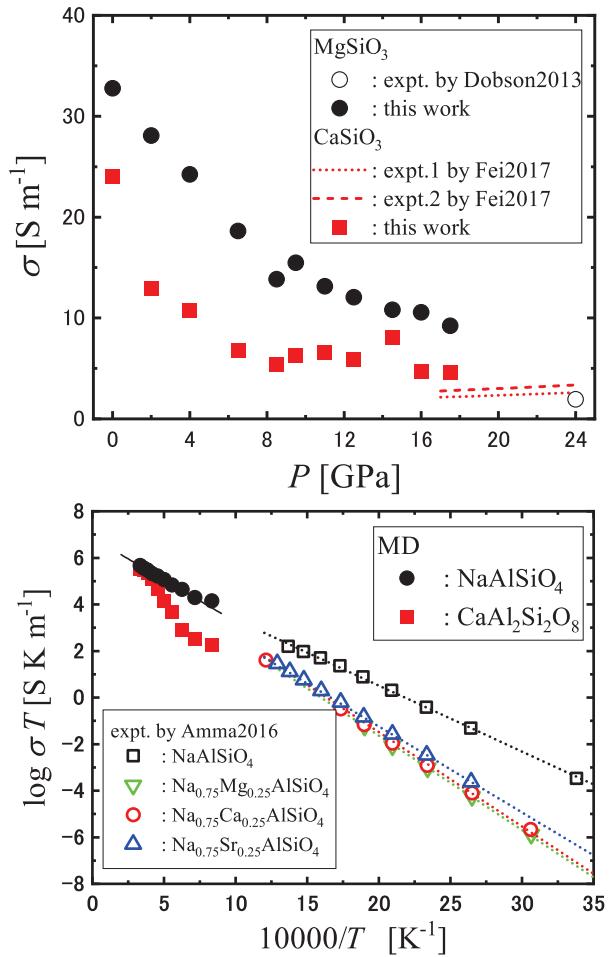


図 1：シリケート溶融体（上図）とアルミノシリケート溶融体（下図）で得られたイオン伝導率の実験値との比較。シリケート溶融体は 2000 K の温度下で高圧を付加したときのイオン伝導性を、アルミノシリケート溶融体は大気圧条件下で温度を変えたときのイオン伝導率を解析した。

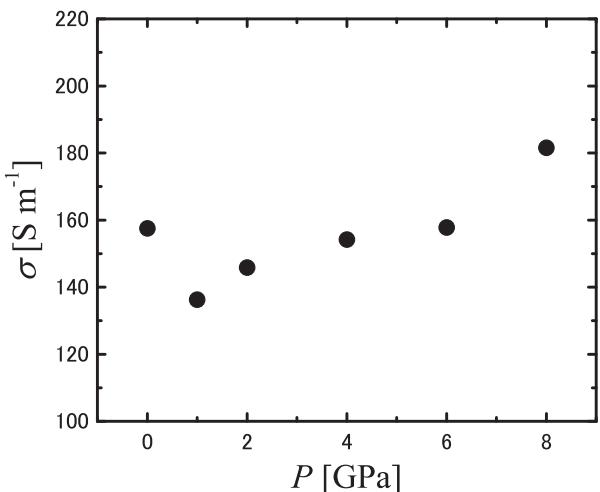


図 2：アルミノシリケート溶融体で得られたイオン伝導率の圧力依存性。温度は 2000 K。

Nernst-Einstein の伝導率よりも小さい結果になっていることが分かる。したがって Ca 系の溶融体では、イオンの相互拡散はイオン伝導率を下げるよう働き、イオン伝導機構を阻害していることが分かった。その一方で Na 系溶融体のイオン伝導率は Nernst-Einstein の伝導率よりも大きい値を示したことから、イオンの拡散における相互相関は、イオン伝導率を向上させるように機能することが分かった。ここでアルミノシリケート溶融体の各イオンの拡散性を、Arrhenius プロットを用いた活性化エネルギーとして算出したところ、Ca は架橋構造形成イオンと同程度の活性化エネルギーを示したが、Na は他のイオンに比べて $1/3$ の活性化エネルギーを示した。これは Na の拡散性が温度環境による変化が緩慢であることを示しており、確かに図 3 からも 3000 K では相互相関が負に働くが、温度が下がるとその符号が逆転する傾向であることが分かる。したがって、Na 系溶融体のイオン伝導率は、低温でも Na 同士がイオン性溶融体の中で積極的に拡散するため、相互相関の負の傾向を発現することが分かった。さらに、その運動もクーロン反発によって強調されると考えられ、その効果が図 2 に示す正の密度依存性の起源となりうることが分かった。

ここで溶融塩系および単純液体系で得られた輸送係数の熱力学因子依存性の解析をフィードバックし、イオン伝導率の密度依存性について考察する。高温イオン性溶融体では、自己拡散係数は数密度の $-1/3$ 乗と充填率の -1 乗に依存する。その一方でイオン伝導率については、数密度の $2/3$ 乗と充填率の $-1/2$ 乗に依存する。この傾向が変化するのは、相互相関項の寄与だけでなく、式(2)の V の除算に起因する。ここでイオン伝導率の体積依存性として考察すると、数密度依存性と充填率依存性がイオン伝導率に対してそれぞれ逆の寄与を示すことが分かる。これはイオン性融体の電荷密度の増加はイオン伝導率を増加させるが、その増加に伴う拡散性の低下がイオン伝導率を減少させることをそれぞれ表す。したがって、図 2 のように圧力および密度增加に伴うアルミノシリケート溶融体のイオン伝導率の増加は、イ

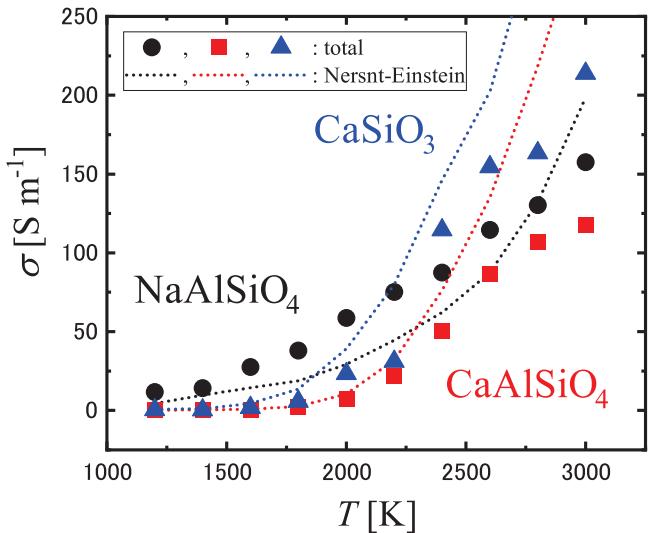


図 3: シリケート溶融体とアルミノシリケート溶融体で得られたイオン伝導率と Nernst-Einstein の伝導率の温度依存性。

オン電荷密度の上昇が、イオンの拡散性の低下を超えて寄与した結果であると予想されることが期待され、相互相関の寄与との関連付けについては、今後の課題である。

2019 年度 OCTOPUS 公募利用では、これらの高温系から室温のイオン液体までを対象としたイオン性融体の分子モデリングを展開し、その DFT 計算から MD 計算、輸送係数の解析までの全てのプロセスを実行した。本研究は以下に示す 11 件の学会にて発表し、4 報の学術論文を発表した。

学会発表

- 1) ○石井良樹, 松林伸幸, 第一原理 DFT 計算を用いたイオン液体の非分極力場の開発力場の開発（口頭）, 第 22 回理論化学討論会, 北海道, 2019 年 5 月 27-29 日.
- 2) ○石井良樹, 高イオン伝導性を示すイオン性融体の材料探索と物性予測（ポスター）, JHPCN 第 11 回シンポジウム, 東京, 2019 年 7 月 11-12 日.
- 3) ○ Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi, "Transport Property Analysis of Ionic Liquids and their Mixtures by Using MD Simulation with Advanced Non-Polarizable Force Field" (Poster), APPChE2019, Sapporo, 2019/9/23-27.

- 4) ○ Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi, "Advanced Molecular Force Fields of Ionic Liquids for Transport Property Analysis: Development on the Basis of First-Principles DFT Calculation" (Oral), APPChE2019, Sapporo, 2019/9/23-27.
- 5) ○石井良樹, 笠井智, 喜古佐太郎, Mathieu Salanne, 大鳥範和, 松林伸幸, 溶融ハロゲン化物と溶融酸化物のイオン伝導率における密度効果の起源（口頭）, 第 51 回溶融塩化学討論会, 北海道, 2019 年 10 月 24-25 日。
- 6) ○石井良樹, Lukman HAKIM, 松林伸幸, 第一原理 DFT 計算を用いたイオン液体の非分極分子力場の開発（口頭）, 第 42 回溶液化学シンポジウム, 宮城, 2019 年 10 月 30 日-11 月 1 日。
- 7) ○ Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi, Kenji Shinozaki, Philip Salmon, Anita Zeidler, Mathieu Salanne, Norikazu Ohtori, "Modelling of Oxide Glasses Based on First-Principles Calculation: Predicting Structural and Transport Properties of Silicates, Aluminosilicates, and Borates" (Poster), PACRIM13, Naha, 2019/10/27-11/1.
- 8) ○ Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi, "Force-Fitted Potential of Ionic Liquids Determined by Self-Consistent Scheme Combining MD and DFT methods" (Poster), ICMS2019, Jeju, 2019/11/3-6.
- 9) ○石井良樹, 松林伸幸, 第一原理計算と Force-Fitting 法を用いたイオン液体の非分極力場の開発（口頭）, 第 10 回イオン液体討論会, 大阪, 2019 年 11 月 21-22 日。
- 10) ○石井良樹, Lukman HAKIM, 松林伸幸, Force-Fitting 法で構築したイオン液体の非分極力場とその輸送物性（ポスター）, 第 33 回分子シミュレーション討論会, 愛知, 2019 年 12 月 9-11 日。
- 11) ○ Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi, "Predicting Transport Properties of Ionic Liquids by Using Molecular Dynamics Simulation with DFT-based Force Field" (Poster), MRM2019, Yokohama, 2019/12/11-14..
- ### 発表論文
- 1) Y. Ishii, N. Yamamoto, N. Matubayasi, B. W. Zhang, D. Cui, R. Levy, "Spatially-Decomposed Free Energy of Solvation Based on the Endpoint Density-Functional Method", *J. Chem. Theory Comput.* 15, 2896-2912 (2019).
 - 2) P. S. Salmon, G. S. Moody, Y. Ishii, K. J. Pizzey, A. Polidori, M. Salanne, A. Zeidler, M. Buscemi, H. E. Fischer, C. L. Bull, S. Klotz, R. Weber, C. J. Benmore, S. G. MacLeod, "Pressure induced structural transformations in amorphous MgSiO₃ and CaSiO₃", *J. Non-Cryst. Solids X* 3, 100024 (2019).
 - 3) F. Wu, S. Roy, A. S. Ivanov, S. K. Gill, M. Topsakal, E. Dooryhee, M. Abeykoon, G. Kwon, L. C. Gallington, P. Halstenberg, B. Layne, Y. Ishii, S. M. Mahurin, S. Dai, V. S. Bryantsev, C. J. Margulis, "Elucidating Ionic Correlations Beyond Simple Charge Alternation in Molten MgCl₂-KCl Mixtures", *J. Phys. Chem. Lett.* 10, 7603 (2019).
 - 4) Y. Ishii, N. Matubayasi, "Self-Consistent Scheme Combining MD and Order-N DFT Methods: An Improved Set of Nonpolarizable Force Fields for Ionic Liquids", *J. Chem. Theory Comput.* 16, 651-665 (2020).
- ### 参考文献
- [1] Y. Ishii, M. Salanne, T. Charpentier, K. Shiraki, K. Kasahara, N. Ohtori, *J. Phys. Chem. C* **120**, 24370 (2016).
 - [2] P. S. Salmon, G. S. Moody, Y. Ishii, K. J. Pizzey, A. Polidori, M. Salanne, A. Zeidler, M. Buscemi, H. E. Fischer, C. L. Bull, S. Klotz, R. Weber, C. J. Benmore, S. G. MacLeod, *J. Non-Cryst. Solids X* **3**, 100024 (2019).
 - [3] J.-P. Hansen, I. R. McDonald, "Theory of Simple Liquids", 3rd Ed., Academic Press.
 - [4] F. Lantelme, H. Grout, "Molten Salts Chemistry: From Lab to Applications", 1st Ed., Elsevier.

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

今井 雅也

大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻

1. はじめに

Li-ion 電池 (LIB) は様々な電子デバイス機器のバッテリーとして、現代社会で幅広く用いられている。実用上は電池性能と安全性の両立が求められるが、汎用電解液である有機溶媒を用いた LIB は、製品劣化や外部衝撃による発火事故が後を絶たず、安全面の問題が山積している。

この問題を解決するために、イオン液体を用いた LIB が考案されている。イオン液体はカチオン・アニオン性の分子（図 1）から構成され、高い電気伝導性・不揮発性・難燃性といった有機溶媒にはない特性を示すため、高性能で安全な LIB 電解液としての応用が期待されている^[1,2]。イオン液体系 LIB の高性能化に向けては、エネルギーキャリアである Li⁺を含むイオン液体が電極界面で起こす反応（電気化学反応）のメカニズム解明が必要不可欠である。その反応メカニズムは、イオン液体分子が金属イオン周りで構築する溶媒和構造やその HOMO / LUMO 準位付近の電子状態に支配されるため、これらの解明がとりわけ重要である（図 1）。

本研究では、減衰全反射遠紫外 (ATR-FUV) 分光法と分子シミュレーションを用い、金属イオン (Li⁺, Ag⁺) を含むバルクイオン液体電解液の溶媒和構造とその電子状態の解明に取り組んだ。

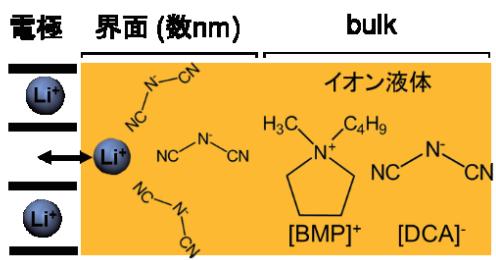


図 1: 電極界面でイオン液体が構築する溶媒和構造モデルと、イオン液体[BMP][DCA]の分子構造。

2. 研究手法

2.1 減衰全反射遠紫外 (ATR-FUV) 分光法^[3]

図 2 に本分光装置全体の光学系を示す。測定サンプルをサファイアプリズムの上に乗せ、全反射条件のもとで測定する。スペクトルの検出領域はエバネッセント波の染み出し領域 (d_p) に制限されるため、光路長は数 10 nm にまで短くなる。また光路全体は N₂ でパージされており、光源として D₂ ランプを採用している。本分光法ではこれらの工夫を施すことにより、従来の電子遷移吸収分光法（紫外可視分光: UV-Vis 法）では得られなかった 150 - 200 nm の吸収スペクトルを測定することができる。当研究室では、種々のイオン液体を対象に遠紫外領域の吸収スペクトルを測定し、その遷移中心となる分子軌道を報告している^[4,5]。本研究では、イオン液体として 1-butyl-1-methyl pyrrolidinium dicyanamide : [BMP][DCA]（図 1）を、添加する金属塩として Li⁺, Ag⁺ の Bis(tetrafluoromethanesulfonyl) imide 塩 (Li[TFSI], Ag[TFSI]) を採用した。それぞれの金属イオンを混ぜたイオン液体電解液を対象とし、そのイオン濃度に依存した吸収スペクトルを 180 - 300 nm の波長範囲で測定した。

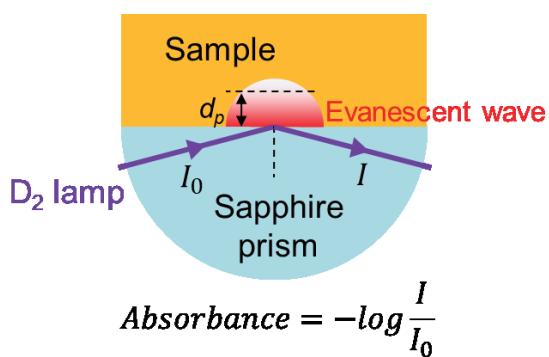


図 2: ATR-FUV 分光法での光学系。

2.2 励起状態計算（時間依存密度汎関数法:TD-DFT）

ATR-FUV 分光法で得られた吸収スペクトルを溶媒和構造（イオンペア状態）とその分子軌道に帰属するために、TD-DFT 法による励起状態計算を実行した。本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ーOCTOPUS を用い、その付属パッケージである Gaussian16.B.01 を採用した。 $[DCA]^-$ の初期構造は DFT 計算による構造最適化に基づいて作成した。基底関数には Diffuse 関数を含む B3LYP-aug-cc-pVTZ を適用し、アニオンの電子の広がりを考慮した。金属イオンとイオン液体アニオンが形成するイオンペア ($Li[DCA]$, $Ag[DCA]$) の初期構造は、文献で報告されている各塩の結晶構造^[6,7]をもとに作成した。全ての TD-DFT 計算に対しても基底関数には Diffuse 関数を用い、Ag 以外の原子には CAM-B3LYP-aug-cc-pVTZ を、Ag には CAM-B3LYP-aug-cc-pVTZ-PP を適用した。励起状態は遷移エネルギーの低い方から 150 の状態を対象に計算し、電子遷移の振動子強度 (Oscillation strength) を算出した。さらに半値幅 0.33 eV の Gauss 関数を用いて、吸収スペクトルの概形を記述した。また、全ての計算は SMD 法^[8]を用い、対象とするイオン液体分子やイオンペアの周囲に存在するイオン液体を連続的な誘電体として反映させた。

3. 結果と考察

3.1 [BMP][DCA]の吸収スペクトルとその分子軌道への帰属

金属イオンを含まない[BMP][DCA]の吸収スペクトルを図 3 の黒線に示す。このイオン液体は 220 - 240 nm のブロードな第 1 吸収バンドと 199.3 nm をピークとする第 2 吸収バンドから構成されることが分かった。TD-DFT 計算の結果、この範囲の吸収スペクトルにはカチオンである[BMP]⁺の分子内電子遷移は寄与せず、2 つの吸収バンドともアニオンである[DCA]⁻の分子内電子遷移 ($\pi \rightarrow Rydberg$ 状態) のみの寄与で構成されることが示唆された（図 4）。

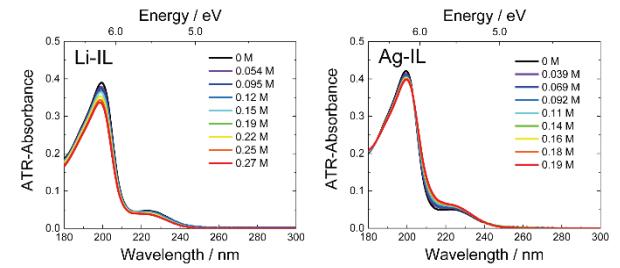


図 3 : [BMP][DCA]に $Li[TFSI]$ を添加した場合 (Li-IL) と $Ag[TFSI]$ を添加した場合 (Ag-IL) の吸収スペクトル。金属イオン濃度はそれぞれの凡例に示した通り。

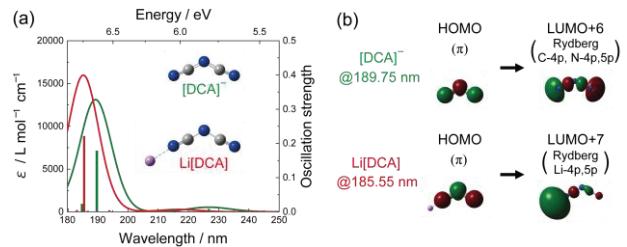


図 4 : (a) 構造最適化で得られた $[DCA]^-$ の分子構造、および励起状態計算で得られた $[DCA]^-$ の振動子強度と吸収スペクトル。(b) 2 つの吸収バンドを与える分子軌道。

3.2 金属塩を含む[BMP][DCA]の吸収スペクトルとその分子軌道への帰属

金属塩を添加した[BMP][DCA]の吸収スペクトルは図 3 の色線で示されている。まず、金属塩のアニオンである $[TFSI]^-$ の吸収スペクトルと溶媒和構造への寄与について述べておく。ATR-FUV 分光法と TD-DFT 計算を用いた過去の研究から、 $[TFSI]^-$ は 180 nm 以下の領域に分子内電子遷移に由来する吸収バンドをもつことが報告されている^[4]。したがって、本研究の波長領域 (180 - 300 nm) には $[TFSI]^-$ の吸収スペクトルは寄与しないと見積もられる。また、金属イオンに対する相互作用の強さは $[TFSI]^-$ よりも $[DCA]^-$ の方が大きいため、同様の状況下ではほとんどの溶媒和アニオンが $[DCA]^-$ であることが報告されている^[9,10]。したがって、得られた吸収スペクトルは金属イオンと相互作用している $[DCA]^-$ と相互作用していない $[DCA]^-$ の 2 種類から構成されていると考えられる。

$\text{Li}[\text{TFSI}]$ を添加した場合、イオン濃度が増加するにつれて第2吸収バンドの短波長（高エネルギー）シフト（ $199.3 \rightarrow 198.6 \text{ nm}$ ）が観測された。一方で、 $\text{Ag}[\text{TFSI}]$ を添加した場合、第2吸収バンドよりも長波長側での吸光度の増大、つまり長波長（低エネルギー）シフトが観測された。両者の対照的なスペクトルシフトの挙動は、 Li^+ , Ag^+ 周りで[DCA]⁻が構築する溶媒和構造が異なる電子状態をもつこと示唆している。

それぞれの溶媒和構造がもつ電子状態と吸収スペクトルの関連性を解明するため、各イオンペア（ $\text{Li}[\text{DCA}], \text{Ag}[\text{DCA}]$ ）のTD-DFT計算を実行した。図5に示した極大吸収を与える振動子に着目すると、 $\text{Li}[\text{DCA}]$ （ 185.55 nm ）の方が $\text{Ag}[\text{DCA}]$ （ 192.22 nm ）よりも短波長側（高エネルギー側）に存在し、分光測定の結果とよく一致している。

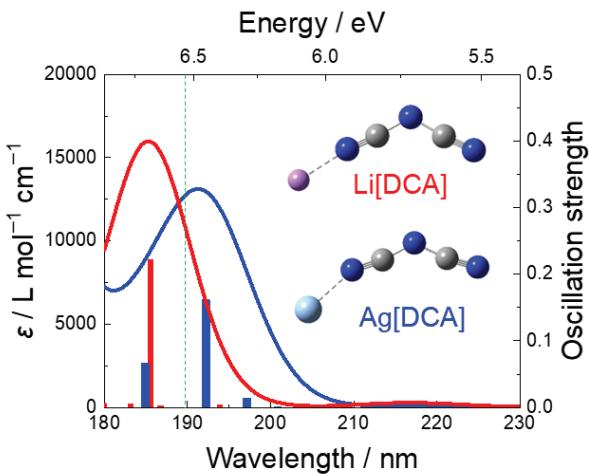


図5： $\text{Li}[\text{DCA}], \text{Ag}[\text{DCA}]$ の初期分子構造とそれぞれの励起状態計算で得られた振動子強度と吸収スペクトル。緑線は図4(a)②に示した大きな振動子強度をもつ波長と同じである。

この電子遷移吸収を与える分子軌道とそのエネルギーダイアグラムを図6に示す。遷移前状態は双方とも[DCA]⁻のπ軌道に電子が局在したHOMOに由来し、ほぼ同じエネルギーをもっている。遷移後状態は双方とも金属イオンのRydberg状態（ $\text{Li}: 4\text{p}_z, 5\text{p}_z, \text{Ag}: 6\text{p}_z$ ）に電子が局在した分子軌道であるが、 $\text{Li}[\text{DCA}]$ より $\text{Ag}[\text{DCA}]$ の方が 0.405 eV だけ安定化し、エネルギーギャップが小さくなることが判明した。これは $\text{Li}[\text{DCA}]$ が $\text{Ag}[\text{DCA}]$ より短波長（高エ

ネルギー）側に吸収ピークをもつことと一致し、分光測定と励起状態計算で整合性が得られた。

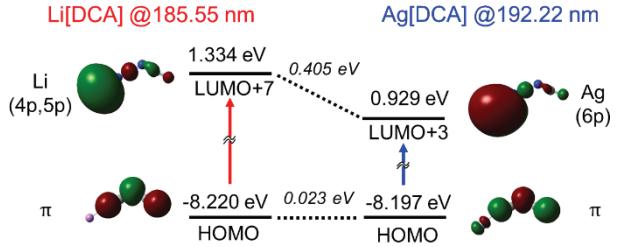


図6： $\text{Li}[\text{DCA}], \text{Ag}[\text{DCA}]$ の極大吸収を与える分子軌道とそのエネルギーダイアグラム。

表1： $\text{Li}[\text{DCA}], \text{Ag}[\text{DCA}]$ の極大吸収遷移を与える遷移後分子軌道を構成する軌道とその寄与度。寄与度の符号は位相差を示す。

	Li[DCA]		Ag[DCA]
Orbital	Coefficients	Orbital	Coefficients
4p_z	1.90294	6p_z	0.91774
5p_z	-1.30929	2p_z	-0.11864
5d_{xz}	-0.21924	5p_z	0.07255
5d_{yz}	-0.18245	4f_{xz}^2	-0.02599
2p_z	0.15269	4p_z	-0.02277

双方の遷移後分子軌道がもつエネルギー差は、それぞれの構成軌道（表1）から説明できる。遷移後分子軌道の主量子数のみに着目すると $\text{Li}[\text{DCA}]$ が $\text{Ag}[\text{DCA}]$ より小さいため、エネルギーも小さくなることが予想されるが、得られた結果とは相反している。 $\text{Li}[\text{DCA}]$ の遷移後分子軌道の方が高いエネルギーをもつのは、位相が反対の $4\text{p}_z, 5\text{p}_z$ の2つの軌道から成り立つ混成軌道が 6p_z よりも多くの節をもつことに由来すると考えられる。

4. おわりに

本研究では、金属イオンを含むイオン液体をATR-FUV分光法で測定し、溶媒和によってイオン液体アニオンに由来する吸収スペクトルが変化すること、またそのシフト方向が金属イオンの種類に依存することが示された。また、TD-DFT法に基づいた励起状態計算でも一貫した結果が得られ、溶媒和構造の電子状態に帰属できた。電子遷移中心となる分子軌道を解析すると、両者の吸収スペクトル差を遷移後

分子軌道のエネルギー差によって説明できることが示唆された。

今後はケモメトリックス手法の1つである多変量スペクトル分解(MCR-ALS法)や分子動力学(MD)計算等の分子モデリングソフトを併用し、より詳細な金属イオン周りの溶媒和構造モデル構築に取り組む予定である。

参考文献

- [1] M. Armand, F. Endres, D. R. MacFarlane, H. Ohno and B. Scrosati, *Nat. Mater.*, **8**, 621 (2009).
- [2] D. R. MacFarlane, N. Tachikawa, M. Forsyth, J. M. Pringle, P. C. Howlett, G. D. Elliott, J. H. Davis Jr., M. Watanabe, P. Simon and C. A. Angell, *Energy Environ. Sci.*, **7**, 232 (2014).
- [3] N. Higashi, A. Ikehata and Y. Ozaki, *Rev. Sci. Instrum.*, **78**, 103107 (2007).
- [4] I. Tanabe, Y. Kurawaki, Y. Morisawa and Y. Ozaki, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 22526 (2016).
- [5] I. Tanabe, A. Suyama, T. Sato, K. Fukui, *Analyst*, **143**, 2539 (2018).
- [6] D. Britton, *Acta Cryst.*, **C46**, 2297 (1990).
- [7] O. Reckeweg, F. J. DiSalvo, A. Schulz, B. Blaschkowski, S. Jagiewlla and T. Schleid, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **640**, 851 (2014).
- [8] A. V. Meranich, C. J. Cramer, F. D. J. Truhlar, *J. Phys. Chem. B*, **113**, 6378 (2009).
- [9] Q. Huang, T. C. Lourenço, L. T. Costa, Y. Zhang, E. J. Maginn, B. Gurkan, *J. Phys. Chem. B*, **123**, 516 (2019).
- [10] P. Nürnberg, E. I. Lozinskaya, A. S. Shaplov, M. Schönhoff, *J. Phys. Chem. B*, **124**, 861 (2020).

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

岩下 拓哉

大分大学 理工学部 共創理工学科

1. はじめに

水の物性研究は、現在も最先端の研究対象として重要な地位を占めている。特に、液体中の水分子の運動に関する根本的問題は未だに明らかにはなってはおらず、分子レベルでの微視的運動とその輸送特性を関連づけることが物理学の挑戦的課題として掲げられている。これは液体中のイオン輸送や生体内の生物学過程、電解質溶液の制御など複雑なプロセスへの基礎的見地を与えるものであり、水の分子運動に関わる分野横断的な学際的研究と密接に関わってくる重要な問題である。

水分子の微視的な運動を理解する上で、着目すべき基本的な物理量のひとつは、水分子がもつ電気双極子モーメントであり、その揺らぎを通して水の誘電率と結びついている。実際、水の誘電緩和実験では、水の双極子モーメントの回転運動のスペクトルを取得することができ、図1のようなデバイ型のピークが得られる。このとき、ピーク周波数から見積もられる配向緩和の特徴的な緩和時間はおよそ9 psであり、光散乱[1,2]や中性子散乱[3]、X線散乱[4]で測定される水の構造緩和時間(約1ps)に比べて非常に遅い緩和挙動を示している。しかしながら、このデバイ型ピークの微視的起源は未解明のままであり、水分子1個の回転運動を反映しているという考え方や他の水分子との協働的な回転運動に起因している説など今もなお論争が続いている[2,3]。

誘電緩和実験の測定量は、分子個々の双極子モーメントが空間的に平均された巨視的揺らぎであるので、分子スケールでの双極子モーメントの空間構造やその運動を直接知ることは困難である。一方、分子動力学シミュレーションは、水分子の双極子モーメントの時空間構造を把握することができる強力な研究手法である。水の配向緩和挙動が、どのように水の構造変化と対応しているのか？その構造緩和と

の対応関係は明らかでなく、配向と構造の動的な関係性の解明が我々の未解決課題として残されている。本研究の目的は、水の古典分子動力学(MD)シミュレーションを用いて誘電緩和スペクトルを計算し、水の分子の双極子モーメントの時空間構造との対応を明らかにすることである。

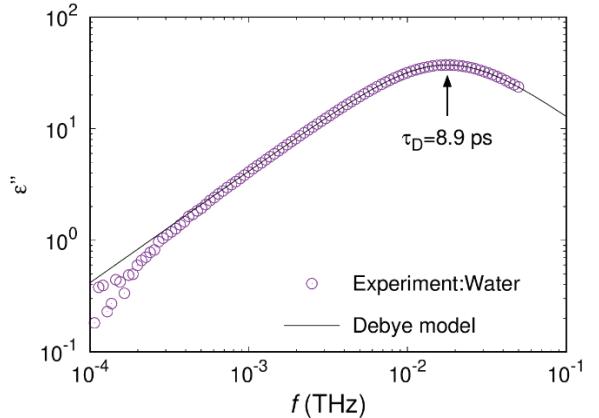


図1：水の誘電緩和スペクトルの実験結果。実線はデバイ関数を用いたフィッティング。

2. 計算モデル

水分子の典型的なモデルであるTIP3P/EwとTIP4P/2005をそれぞれ用いて、常温常圧下で液体の水のMD計算をNPTアンサンブルの下で行った。ここで、分子数Nは125,000であり、分子*i*に対して電気双極子モーメント μ_i を定義すると、時刻*t*での巨視的な電気双極子モーメントは、 $\mathbf{M}(t) = \sum_i^N \mu_i(t)$ と表すことができる。このとき、巨視的な双極子モーメントの時間相関関数は、

$$\Psi_M(t) = \frac{1}{V} \langle \mathbf{M}(t) \cdot \mathbf{M}(0) \rangle$$

で与えられる。そのフーリエ変換から複素誘電緩和スペクトル($\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) - i\varepsilon''(\omega)$)を以下の式のように求めることができる。

$$\varepsilon(\omega) - 1 = \frac{1}{3\varepsilon_0 k_B T} \left(\Psi_M(0) - i\omega \int_0^\infty e^{-i\omega t} \Psi_M(t) dt \right)$$

MD 計算は、LAMMPS を用いて VCC 汎用 CPU ノードで実施した。配向緩和の揺らぎは収束性が悪いため、比較的大きい系と長時間計算を必要とする。したがって、各モデルに対して 5 ノードを使用し、40ns 程度の計算を実施した。TIP3P/Ew と TIP4P/2005 の計算結果は定性的に同じであるため、本稿では主に、TIP3P/Ew の結果を報告する。

3. 誘電特性の時空間解析

3.1 複素誘電率

図 2 は、TIP3P/Ew に対して計算された複素誘電緩和スペクトルである。実部の低周波極限は静的誘電率 $\epsilon'(0)$ に相当し、約 93 である。これは実験値(78.3)よりも非常に大きい値である。TIP3P/Ew は、約 57 であり実験値より小さく、水のモデル依存性は非常に強いことがよくわかる。

また、虚部の誘電損失のピーク周波数は、9.5 ps に相当している。本研究の中心的課題は、このデバイピークの性質を分子レベルで明らかにすることである。

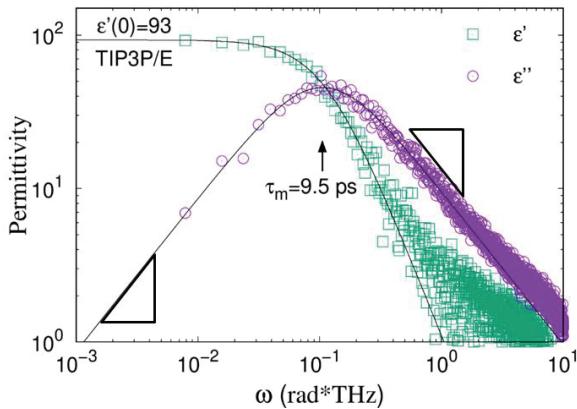


図 2 : TIP3P/Ew の誘電緩和スペクトル。

3.2 複素誘電率の分子レベルへの分解

次に、双極子モーメントの時間相関関数は、以下の式のように自己相関と他粒子間相間に分解することができる[5]。

$$\langle \mathbf{M}(t) \mathbf{M}(0) \rangle = \left\langle \sum_i \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \boldsymbol{\mu}_i(0) \right\rangle + \left\langle \sum_{i \neq j} \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \boldsymbol{\mu}_j(0) \right\rangle$$

前者が、自己(Self)相関項であり、1 分子の双極子モーメントの回転緩和を表している。後者は、分子間

の双極子モーメントの相関を表して他粒子間(Distinct)相関項である。この分解に基づき、複素誘電率は自己相関寄与 ϵ_s と他粒子相関寄与 ϵ_D に分解することができる。

図 3 は、誘電関数の Self 項と Distinct 項をそれぞれ表示している。図 3 (上図) より静的誘電率 $\epsilon'(0)$ の約 80%が Distinct の寄与であることがわかり、高周波の挙動は Self の寄与が支配的であることがわかる。一方、図 3 (下図) の誘電損失をみると、主分散であるデバイピークは Distinct からの寄与がほとんどであることがわかり、そのピークは 11.1 ps にある。また、Self のピークは 3.6 ps であり、Distinct よりも小さい。Self は誘電副分散に対応していると示唆される。したがって、デバイピークは一個の水分子の回転運動ではなく、集団的な回転緩和運動を反映していることが明らかである。このように、誘電緩和スペクトルは、他粒子相間の寄与が非常に大きく、双極子モーメント間の時空間構造の重要性が示唆される結果となっている。

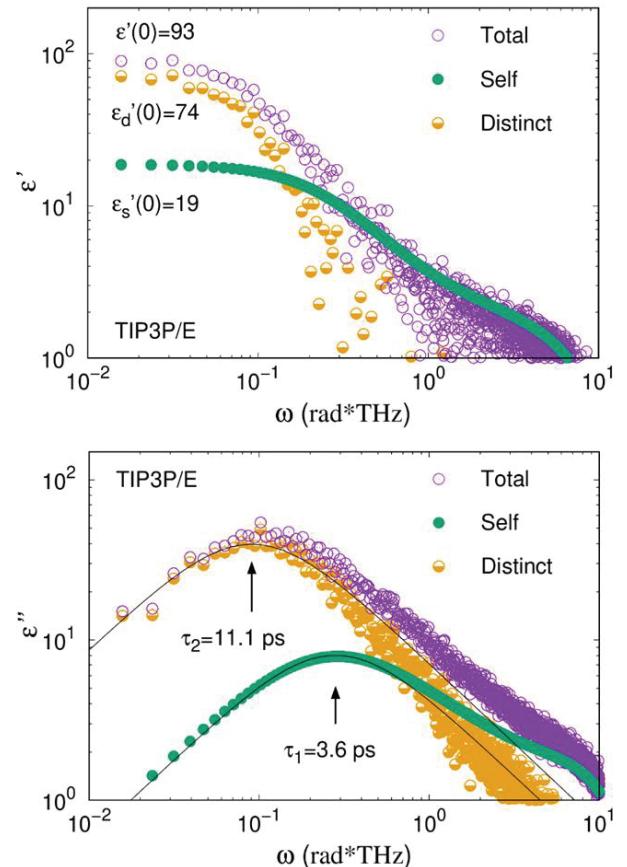


図 3 : TIP3P/Ew の誘電緩和スペクトルへの自己(Self)相関項寄与と他粒子間(Distinct)相間寄与。

3.3 誘電損失の他粒子相関の時空間構造

前節までの結果から、他粒子相関の重要性が明らかとなつた。本節では他粒子相関項に焦点を絞って詳細な解析を行つた。さまざまな解析アプローチを行つたうち、比較的データの質がきれいな結果について報告する。出発点として、他粒子相関は、以下の式のように分子の初期配置依存性の観点で記述することができる。

$$\frac{1}{V} \left\langle \sum_{i \neq j}^N \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \boldsymbol{\mu}_j(0) \right\rangle = \int dr_0 4\pi r_0^2 \rho g_M(r_0, t)$$

ここで、 $g_M(r_0, t)$ は以下の式で与えられる。

$$g_M(r_0, t) = \frac{1}{4\pi r_0^2 \rho V} \sum_{i \neq j}^N \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \boldsymbol{\mu}_j(0) \delta(r_0 - |\mathbf{r}_i(0) - \mathbf{r}_j(0)|)$$

この関数 $g_M(r_0, t)$ は、時刻 $t = 0$ で分子*i*と分子*j*が距離 $r_0 = |\mathbf{r}_i(0) - \mathbf{r}_j(0)|$ にいた時、その後分子ペアの配向時間相関をあらわしている。つまり、配向緩和の分子間の初期配置依存性を意味している。

図4はTIP3P/Ewに対する $g_M(r_0, t)$ の二次元プロットを示している。図4から $r_0 = 5.5 \text{ \AA}$ まで強い時空間相関が存在することがわかり、これは分子の中距離相関の重要性を示唆していることがわかる。また、 $r_0 = 2.6 \text{ \AA}$ の距離にある分子ペアの緩和が最も遅く、その緩和時間は約15 psである。

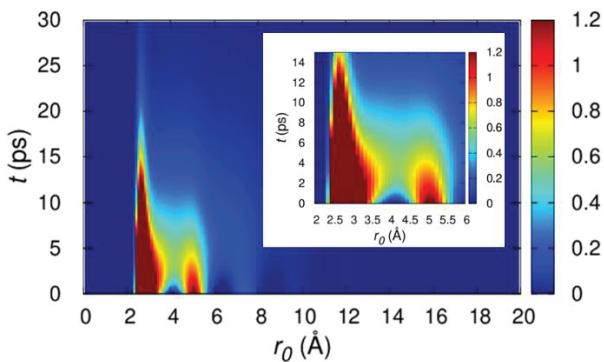


図4：TIP3P/Ewに対する $g_M(r_0, t)$ の二次元プロット。

時刻 $t = 0$ での $g_M(r_0, 0) \equiv g_M(r_0)$ は、水の瞬間構造における双極子モーメントの空間相関を示している。この関数がどのような配向構造を反映しているのかについてはまだ明らかではない。同様に、水の構造

自体も統一された描像は確立されているわけではなく、現在もなお精力的に研究がなされている。図5はMD計算で得られた双極子モーメントの配向空間相関と動径分布関数を示している。 $g_M(r_0)$ は、 $r_0 = 2.6 \text{ \AA}$ で正の第一ピークを示し、酸素原子同士に対する動径分布関数 $g_{OO}(r_0)$ の第一ピークと同じ位置にある。このことから第一近接付近の水の局所構造の配向は正の相関をもち、同じ向きをもつ傾向があることがわかる。また、 $g_M(r_0)$ の正の第二ピークは $r_0 = 5.2 \text{ \AA}$ 付近にあり、これは、どの原子対に対する動径分布関数のピーク位置とも対応しておらず、どのような配向構造が形成されているのかについて新たな課題が残された。

液体の本質的な特徴は、時々刻々と構造が変化しているダイナミクスにある。瞬間的な構造がどれくらい物性に対して決定的な意味をもつのか自明ではない。液体の構造とダイナミクスの両者を考慮して研究を展開することが液体研究の基本の方針とも言える。

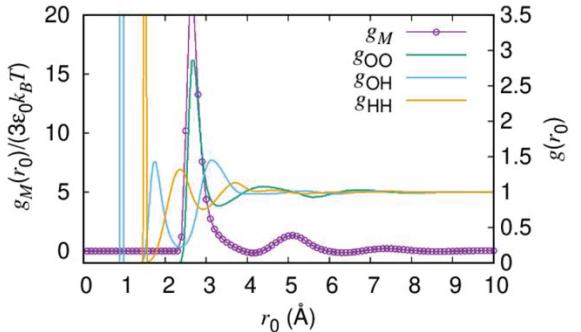


図5：TIP3P/Ewに対する $g_M(r_0)$ と動径分布関数。 g_{OO} は、O-O 間、 g_{OH} は、O-H 間、 g_{HH} は、H-H 間に対する動径分布関数。

3.4 誘電緩和スペクトルの初期配置依存性

最後に、図4で得られた $g_M(r_0, t)$ を時間に関してフーリエ変換することにより、周波数空間における誘電損失の Distinct 項の初期値依存性を議論することが可能になる。この新しい物理量を $\varepsilon_d''(\omega, r_0)$ とおくと、誘電関数の定義式と組み合わせることにより、巨視的な誘電損失の Distinct 項は以下の式：

$$\varepsilon_d''(\omega) = \int_0^\infty dr_0 \varepsilon_d''(\omega, r_0)$$

で与えられる。

図 6 は、 $\epsilon_d''(\omega, r_0)$ の二次元等高線プロットを示している。第一近接($r_0 = 2.6 \text{ \AA}$)周辺の分子は、0.25 rad*THz 付近で誘電損失にピークをもつことがわかる。また、第二ピーク周辺($r_0 = 5.0 \text{ \AA}$)の分子は、0.1 rad*THz 付近にピークを持つことがわかる。これらの結果から、 r_0 が増大するにつれて、ピーク周波数が低周波側に移動していることがわかる。比較のために、巨視的なデバイピークの周波数 ω_D も表示している。

この結果から明らかなように、第一近接にいる分子の誘電損失 ϵ_D への寄与は、 ω_D より早い周波数のピークとして現れていることがわかった。また、そのピーク周波数は Self 項の ϵ_s'' のピーク周波数と近いことがわかり、これは、第一近接にいる分子と自己回転運動の間に強い局所的な相関のためであると示唆される。

図 6 は、誘電損失の時空間構造の情報を豊富に含んでいる一方、その複雑性のため、特定の構造や運動モードとそのデバイピークとの関係を単純に結びつけることは難しい。さらなる定量的な議論や新たなアイデアが必要である。

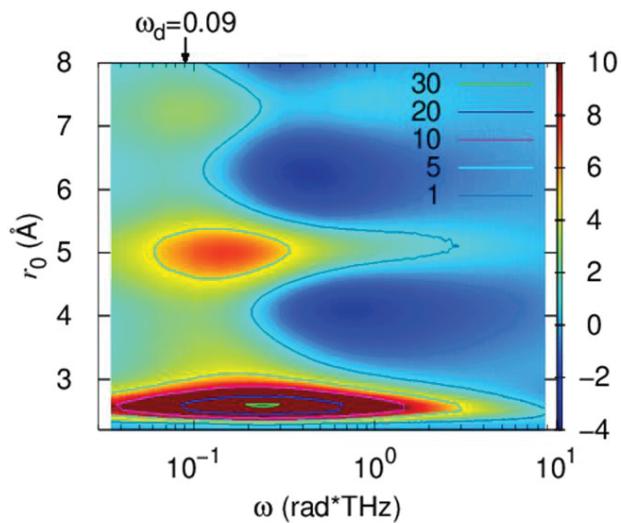


図 6 : TIP3P/Ew に対する $\epsilon_d''(\omega, r_0)$ の2次元プロット。

4. おわりに

本研究では、水の誘電特性であるデバイピークの微視的起源を明らかにするために、水の古典分子動力学シミュレーションを行った。データ解析からそ

の時空間構造を初期構造依存性として可視化することに成功した。本研究は、2017年、2018年に行われた一般利用により得られた予備計算結果を基盤として行われており、2019年度から大阪大学公募型研究利用に採択され、さらなる重点的研究の位置づけで公募型研究を実施した。さらに JHPCN の萌芽型研究課題として認定していただいた。

本研究では、実験結果で得られる巨視的な誘電スペクトルに対して分子レベルの時空間構造がどのように寄与しているのかについての定量的な道筋を明確に示すことができた。特に、デバイピークと水分子間の初期配置依存性の関係性を明らかにした。しかしながら、デバイピークの明確な物理的描像は、明確に示すことはできなかった。本研究では、初期配置の分子間距離の観点で、誘電スペクトルを空間分解したが、別の共通な構造をもつ集合に基づいて空間分解することで、デバイピークの構造的特徴を抜き出すことができるかもしれない。そのためには、新規な物理的考察もまた必要である。今回得られたデータの有効利用や分子模型を用いた古典的手法により、未だに明確になっていない本質的な運動モードを探索していきたいと考えている。

本研究は、中西真大氏との共同研究である。本研究は、2018年度公益財団法人クリタ環境科学振興財団の研究助成を受けたものである。また、本研究の一部は、科研費（若手研究B（No. 17K14371））の支援を受けている。

参考文献

- (1) T. Fukasawa, et al., Phys. Rev. Lett. **95**, 197802 (2005).
- (2) J. S. Hansen, et al., Phys. Rev. Lett., **116**, 237601 (2016).
- (3) A. Arbe, et al., Phys. Rev. Lett., **117**, 185501, (2016).
- (4) T. Iwashita et al., Science Advances **3**, e1603079 (2017).
- (5) S. Saito and I. Ohmine, J. Chem. Phys. **101** 6063 (1994).

圧力変動に伴う運動量の乱流輸送過程に及ぼす成層の影響評価と 海洋乱流混合層スキームの改良

牛島 悠介

京都大学 大学院理学研究科 地球惑星科学専攻

(現: 気象業務支援センター 研究推進部 第一研究推進室)

1. はじめに

海洋の表層では、風や熱に起因する数百 m 以下の規模の乱流が発生し、混合が生じている。海洋表層の流速や水温の鉛直分布はこの乱流混合により決められる。海洋表層の流速は、生態系への影響故に近年問題視されているマイクロプラスチックの輸送過程に影響を与えることが知られており[1]、一方海洋表層の水温、または海面水温は台風などの大気現象やエルニーニョ現象など気候変動に大きな役割を果たすことが知られている[2]。このような海洋中の物質輸送過程や、気象・気候に与える海洋変動を大洋規模あるいは全球規模で診断・予測するためには、海洋大循環モデルと呼ばれる数値モデルが用いられる。この海洋大循環モデルの解像度は十km以上であり、直接的に乱流を再現することはできない。そのため、乱流による鉛直混合をパラメタリゼーションして表現する乱流混合スキームが海洋大循環モデルに組み込まれている。しかしながら、現状の乱流混合スキームは再現性が不十分であり[3, 4]、海洋大循環モデルの再現精度低下の主因であると考えられている。そのため、乱流混合スキームの精度の向上が急務である。

乱流混合スキームでは運動量や熱の鉛直輸送（フラックス）がパラメタリゼーション表現される。例えば、運動量フラックス \bar{uw} (u, w はそれぞれ乱流速度の水平、鉛直成分、上付きバーは平均操作を示す) の時間変化は、大循環モデルが再現しうる平均流 U (水平成分) と浮力加速度の乱流変動成分 b を用いて

$$\frac{\partial \bar{uw}}{\partial t} = \Pi_{31} + T_{31} - 2\bar{uw}\frac{\partial U}{\partial z} + \bar{ub}$$

と表せる。ここで、

$$\Pi_{31} \equiv \overline{\frac{p}{\rho} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right)}$$
$$T_{31} \equiv - \frac{\partial}{\partial z} \left(\overline{u^2 w} + \frac{\overline{pw}}{\rho_0} \right)$$

であり、 p は圧力の乱流変動成分、 ρ_0 は基準密度である。 \bar{uw} を求めるためには圧力相関項 Π_{31} と輸送項 T_{31} の値が必要であるが、 Π_{31} や T_{31} には $\overline{u^2 w}$ などの高次の項が含まれるため解けない。そのため、多くの乱流混合スキームでは、これらの圧力相関項 Π_{ij} と輸送項 T_{ij} を他のパラメータを用いて診断的に見積もっている[5, 6]。しかしながら、これらの診断式の海洋中での妥当性の検証が十分になされていない。特に、圧力相関項 Π_{ij} に関する研究の多くは[7]、航空工学や機械工学などへの応用を念頭になされており、海洋に特徴的な密度成層（浮力加速度の鉛直勾配）の影響を考慮しているものはほとんどない。また、海洋の乱流混合スキームで用いられている従来の圧力相関項の診断式による見積もりにおいても、成層の効果は十分には考慮されていない。我々は、このことが海洋乱流混合層スキームの再現精度を低下させている一因と考える。そこで、本研究では乱流を陽に解像する Large-eddy Simulation (LES) を用いて、従来の圧力相関項の診断式の妥当性を検証し、さらに圧力相関項、そして乱流混合スキームの改善を行った。

2. 圧力相関項の診断式

圧力相関項 Π_{ij} は

$$\Pi_{ij} \equiv \overline{\frac{p}{\rho} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)} \quad (1)$$

で表される。ここで、 x_i ($i = 1, 2, 3$) は (x, y, z) の各成分を示し、 u_i は流速の x_i 成分である。海洋の乱流混合スキームでは、圧力相関項の診断式 Π_{ij}^d として、

$$\begin{aligned}\Pi_{ij}^d = & -C_1 \varepsilon \left(\frac{\overline{u_i u_j}}{q^2} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \\ & + C_2 q^2 \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i} + \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) \\ & - C_3 \left(\overline{u_i b} \delta_{3j} + \overline{u_j b} \delta_{3i} - \frac{2}{3} \overline{w b} \delta_{ij} \right) \\ & + C_4 \left(\overline{u_i w} \frac{\partial U_j}{\partial z} + \overline{u_j w} \frac{\partial U_i}{\partial z} - \frac{2}{3} \overline{u_k w} \frac{\partial U_k}{\partial z} \delta_{ij} \right) \\ & + C_5 \left(\overline{u_i u_k} \frac{\partial U_k}{\partial x_j} + \overline{u_j u_k} \frac{\partial U_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \overline{u_k w} \frac{\partial U_k}{\partial z} \delta_{ij} \right) \quad (2)\end{aligned}$$

が用いられる[5,6]。 ε は乱流運動エネルギー散逸率、 $q^2/2 (\equiv \overline{u_k u_k}/2)$ は乱流運動エネルギーである。各項の係数 C_n は定数である。本研究では、LESで直接計算した Π_{ij} とLESの ε , $q^2/2$, $\overline{u_i b}$, $\overline{u_i u_j}$, U_i から見積もった診断式 Π_{ij}^d を比較し、診断式 Π_{ij}^d の妥当性を検証する。

3. 数値実験の設定

成層が圧力相関項に与える影響を評価し、圧力相関項の診断式の妥当性を検証するために、(1)風有り-熱無し-成層無し実験、(2)風有り-熱無し-成層有り実験、(3)風有り-加熱-成層無し実験、(4)風有り-冷却-成層有り実験、(5)風無し-冷却-成層有り実験、の5通りの実験を行った。風有り実験の風による応力 τ を $\tau = 0.1 \text{ N m}^{-2}$ 、成層有り実験の(成層の効果を表す)浮力振動数 N を $N = 1.0 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ 、加熱実験と冷却実験の海面熱フラックスをそれぞれ、 50 W m^{-2} と -200 W m^{-2} とした。地球自転の影響は考慮せず、コリオリ係数は0としている。空間的には二次の中央差分で差分化し、時間的には二次のルンゲクッタ法で100時間積分を行った。特に言及がない限り、(1)風有り-熱無し-成層無し実験と(2)風有り-熱無し-成層有り実験の結果を示す。

4. 数値実験結果の概要

ここでは(1)風有り-熱無し-成層無し実験と(2)風有り-熱無し-成層有り実験結果の概要を示す。図1は両実験で再現された平均流速 U の時間変化を示している。両実験とも風により海面付近の流速が増加するだけでなく、発生した乱流により運動量が下方に輸送されている。成層の有無による違いを比べると、風有り-熱無し-成層無し実験では海面付近と同程度

の流速がモデル海洋の海底(128 m)付近にも見られる一方で、風有り-熱無し-成層有り実験では運動量が上層に集中しており、成層無し実験に比べて強い流速が海面付近に見られ、下層ではほとんど流速がゼロとなっている。図2は成層有り実験の0、50時間、100時間後の水温の鉛直分布を示している。50時間後、100時間後において、上層ではほぼ鉛直一様な水温分布を、下層では初期と同じ水温分布を持ち、上層と下層の間に強い水温勾配(成層)が存在している。以上のように、成層によって乱流混合の強さが変わり、その結果流速場の鉛直構造も大きく変わる。

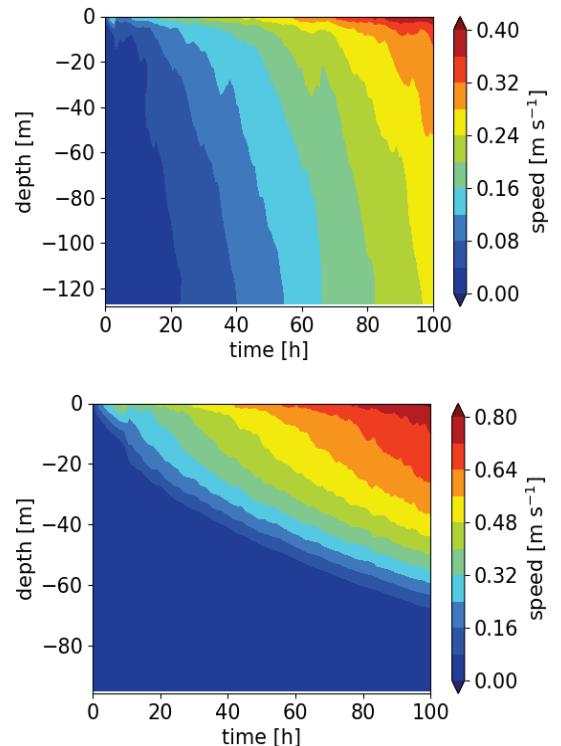


図1：(上) 風有り-熱無し-成層無し実験と(下) 風有り-熱無し-成層有り実験の流速場の鉛直分布の時間変化

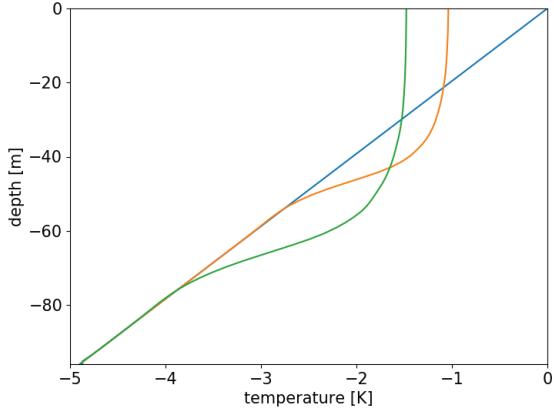


図 2 : (青) 初期、(橙) 50 時間後、(緑) 100 時間後の風有り-熱無し-成層有り実験の水温の鉛直分布

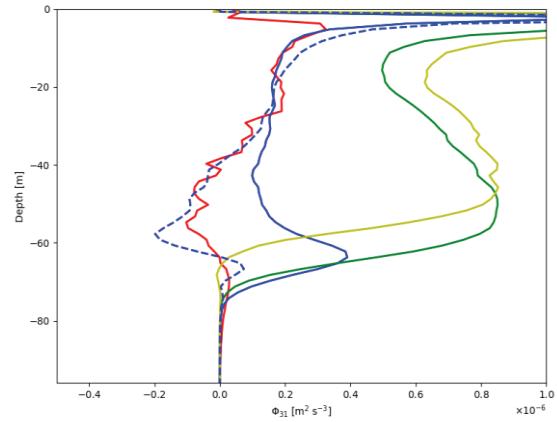
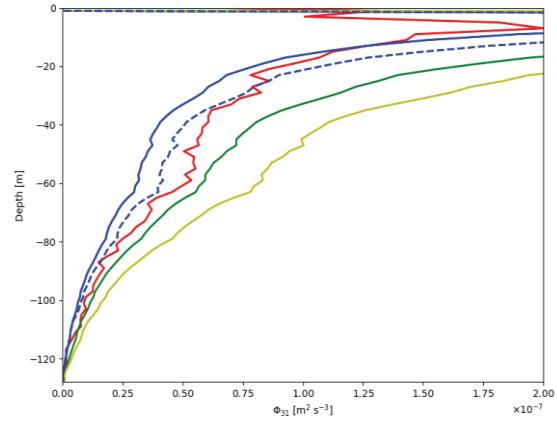


図 3 : (上) 風有り-熱無し-成層無し実験と (下) 風有り-熱無し-成層有り実験の Π_{31} の鉛直分布。赤は LES で直接計算した Π_{31} (式 1)、緑、黄がそれぞれ、Mellor-Yamada モデル、Nakanishi-Niino モデルで用いられている定数 C_n を用いた診断式 (式 2)、青実線は C_n を定数として、最小二乗法から求めた C_n を用いた診断式 (式 2)、青破線は、 C_n が P_s^* と P_b^* に依存するとして、最小二乗法から求めた C_n を用いた診断式 (式 2)

5. 圧力効果のパラメタリゼーションの検証と修正

5.1 従来のパラメタリゼーションの検証

図 3 は風強制実験と風強制-背景成層実験における LES で直接計算した圧力相関項 Π_{ij} と海洋の代表的な乱流混合スキーム (Mellor-Yamada モデル[5]、Nakanishi-Niino モデル[6]) で用いられる圧力相関項の診断式 Π_{ij}^d の鉛直分布を示している。ただし、 Π_{ij}, Π_{ij}^d は 80-100 時間の 20 時間の平均値である。風有り-熱無し-成層無し実験でも風有り-熱無し-成層有り実験でも Mellor-Yamada モデルと Nakanishi-Niino モデルの診断式は LES の圧力相関項を過大評価していることが分かる。その過大評価の原因はこれらのスキームで用いられる C_n の値にあると考え、(1)-(5) の LES 実験のすべての結果から最小二乗法を用いて C_n を評価しなおすと、 $C_1 = 2.1, C_2 = -0.18, C_3 = 0.31, C_4 = 0.59, C_5 = 0.19$ となった。しかし、これらの値を用いても風有り-熱無し-成層無し実験の LES の圧力相関項をわずかに過小評価し、風有り-熱無し-成層有り実験の (40-80m において) 圧力相関項を過大評価してしまう。

5.2 成層の効果の導入

そこで、 C_n に成層の効果を導入する。先行研究[7]では乱流の成熟度の指標として、シアによる乱流生成率 $P_s \equiv -\bar{u}_k w \partial U_k / \partial z$ に対する乱流散逸率 ε の比 $P_s^* (= P_s / \varepsilon)$ を導入し、 C_n が P_s^* に依存するとした。成

層がある場合、浮力も乱流の成熟度に影響を与えるため、本研究では、 P_s^* に加え、浮力による乱流生成率 $P_b \equiv \bar{w} b$ に対する乱流散逸率 ε の比 $P_b^* (= P_b / \varepsilon)$ を導入する。最小二乗法を用いて係数 C_n を求めると、 $C_1 = 2.1 + 0.49P_s^* + 2.2P_b^*, C_2 = -0.11 - 0.044P_s^* + 0.077P_b^*, C_3 = -0.059 + 0.33P_s^* + 0.13P_b^*, C_4 = -0.047 + 0.59P_s^* + 0.33P_b^*, C_5 = 0.33 + 0.12P_s^* - 0.092P_b^*$ となった。この C_n を用いて見積もった診断式 Π_{31}^d は LES で直接計算された圧力相関項 Π_{31} をよく再現することができた (図 3)。

6. 流速場の再現性の検証

修正した圧力相関項の診断式が海洋中の流速や水温の鉛直分布の再現性に与える影響を調べるために、Nakanishi-Niino モデルの圧力相関項の診断式を修正し、修正した乱流混合スキームで再現される流速の鉛直分布を LES の結果と比較する。乱流混合スキームで再現される流速場を得るために、乱流混合スキームを鉛直一次元の数値モデルに組み込み、一次元の数値モデルの運動方程式

$$\frac{\partial U}{\partial t} = - \frac{\partial \overline{uw}}{\partial z}$$

を数値的に解く。(ここで、運動量フラックスは乱流混合スキームから求められる。) 図 4 は 100 時間後における LES の流速の鉛直分布と従来の乱流混合スキームから見積もられた流速の鉛直分布、修正した乱流混合スキームから見積もられた流速の鉛直分布を示している。修正した乱流混合スキームは、従来の乱流混合スキームよりも流速場の再現性が向上していることが確認され、本研究で提案した修正スキームの有効性が確認できた。

7. おわりに

従来の圧力相関項の診断的な見積もりでは成層下で実際の値を過大評価してしまう。従来の定式化に加え、成層の効果を導入することで、診断式の再現性が向上した。その修正した診断式を従来の乱流混合スキームに導入した結果、流速場の再現性が向上した。

参考文献

- (1) V. Onink et al., J. Geophys. Res.: Oceans, 124, 1474-1490 (2019)
- (2) M. Bender et al., J. Geophys. Res. 98, 23245-23263 (1993)
- (3) N. Furuishi et al., J. Oceanogr., 68, 285-294 (2012)
- (4) R. Robertson and P. Hartlipp, Geosci. Lett., 4, 24 (2017)
- (5) G. Mellor and T. Yamada, Rev. Geophys. Space Phys., 20, 851-875 (1982)
- (6) M. Nakanishi and H. Niino, J. Meteorol. Soc. Jpn., 87, 895-915 (2009)
- (7) C. Speziale et al., J. Fluid Mech., 227, 245-272, (1991)

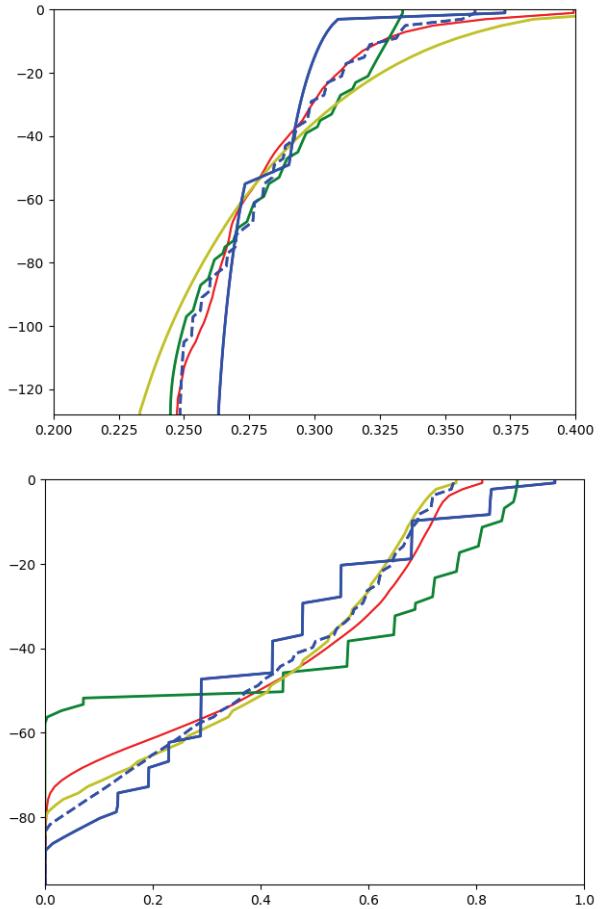


図 4：(上) 風有り-熱無し-成層無し実験と(下)風有り-熱無し-成層有り実験の流速の鉛直分布。赤は LES の結果、緑、黄がそれぞれ、Mellor-Yamada モデル、Nakanishi-Niino モデルの結果、青実線は Nakanishi-Niino モデルの圧力相関項を最小二乗法で求めた定数 C_n を用いた結果、青破線は Nakanishi-Niino モデルの圧力相関項を P_s^* , P_b^* に依存する C_n を用いた結果を示している。

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

大戸 達彦

大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻

1. はじめに

固液界面は、不均一触媒反応や電極反応の起こる舞台である。固体と分子の相互作用はしばしば反応活性障壁を下げる効果を持ち、化学反応が溶液中よりも加速されることがある。また固液界面は光触媒の効果[1]や、親水性・撥水性の違い、セルフクリーニングといった様々な効果[2]を持つ。このような効果は、固体表面に接するわずかな量の水分子によって引き起こされる。そのため、界面での微視的な分子構造を知ることは、より効率の良い触媒材料や新規材料の開発に結びつくことが期待される。

固液界面の分子構造を知るために、全原子分子動力学(MD)シミュレーションが広く行われている。全原子 MD シミュレーションでは、原子に働く力を何らかのモデルにより記述した上でニュートン方程式を解き、時間に対する各原子の位置（トラジェクトリ）を得ることで、種々の物理量を計算することができる。通常は、原子を質点と考えた上で、原子間のポテンシャルをモデル化する。例えば原子間が共有結合で結ばれていれば、その伸縮振動数に対応する曲率を持つ調和型のポテンシャル、化学結合がなく、van der Waals(vdW)相互作用が働くのみであれば Lennard-Jones ポテンシャルを設定する、といった具合である。さらに、原子の位置には点電荷を置く。水のように極性が大きい分子を扱う場合は、点電荷の量が周囲の環境に応じて変動することを許容する、分極効果を取り入れることも多い。このようなモデル化は多くの分子に関してはよく機能するが、固体のように電子が非局在化している場合は点電荷と 2 体相互作用による近似があまりうまくいかず、モデル化に工夫が必要となる。一方、第一原理計算によって原子核にはたらく力を計算すれば、そうしたモデル化に頼ることなくシミュレーションを実行

できる。

適当なモデルを構築し、シミュレーションを行えば、コンピュータ上では平均的な分子の配向、ダイナミクスを知ることができる。しかし、そのシミュレーションを信頼に足るものとするためには、実験的にも観測可能な物理量を計算し、一致するかどうかを議論することが重要である。界面に存在する分子はバルクに比べて非常に少数であるため検出は困難であるが、和周波発生(SFG)分光という手法を用いれば、界面の分子に関する有益な情報を得ることができる[3]。SFG 分光では、図 1 のように赤外線(IR)と可視光(Vis)を同時に照射し、2 次の非線形応答によって発生した、和周波を持つレーザーを検出する。2 次の非線形応答は等方的なバルクからは発生しないため、対称性の破れた界面近傍わずか数 nm の範囲に存在する、赤外・ラマン同時活性の振動モードを検出することができる。さらに、位相敏感な検出法[4]を用いることにより、2 次の非線形応答関数の虚部を求めることで、双極子モーメントの向きをも知ることができる。SFG 分光スペクトルをシミュレーションして実験と比較することで、シミュレーションが現実を正しく反映したものかどうかを検証すると同時に、実験では直接見ることのできない分子・原子レベルの構造に関する知見を得ることができる。我々は、第一原理 MD シミュレーションを用いて SFG スペクトルを再現することができるよう、手法開発に取り組んできた。

本稿では、第一原理 MD 法によって、短いトラジェクトリから SFG スペクトルをシミュレーションする手法を紹介する。この手法を用い、計算精度の高いハイブリッド汎関数を用いて水・空気界面の SFG スペクトルを計算し、それをもとに水の界面物性を記述する精度を評価する手法について述べる。

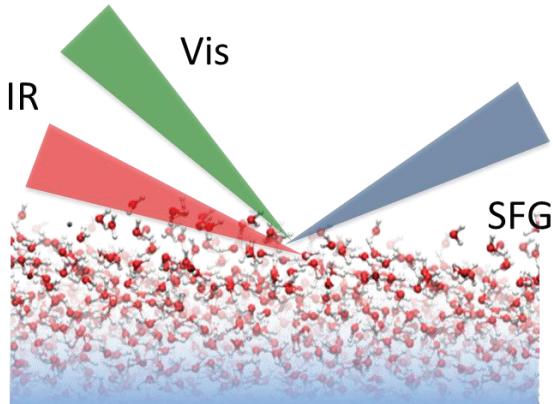


図 1 : 和周波発生(SFG)分光スペクトルの概念図。

2. 第一原理分子動力学法による和周波発生分光スペクトルのシミュレーション

SFG スペクトルのシミュレーションには、原子間相互作用を古典的なモデルで近似する古典 MD 法が広く用いられている。シミュレーションの対象とする分子の性質をよく記述することができる力場さえ与えられれば、古典 MD 法では~10 万原子、~100 ns 程度（水分子の場合、図 2 参照）の系・時間スケールをシミュレーションすることができる[5]。SFG スペクトルを MD のトラジェクトリから計算するためには、分子の双極子モーメントと分極率の相関関数を計算すればよく、数 ns 程度のトラジェクトリがあれば収束した SFG スペクトルを得ることができる。しかし、力場を用いたシミュレーションの場合には、対象となる系が少しでも変わると新たな力場を構築する必要が生じる。また、力場を構築するためには、振動分光スペクトルや拡散係数などの物理量を再現するようにパラメータを決定する必要があるが、界面に存在する分子はごくわずかであり、参考すべき物理量を得ること自体が難しい。これらのことから、分子構造やダイナミクスがよく知られた系に対して物理量を精密にシミュレーションしようと思った場合に古典力場は向いているが、例えば固液界面のように、表面の構造がはつきりとはわからない状況から現実の構造を探っていくためには、経験的なパラメータ設定に頼らない計算手法が望ましい。

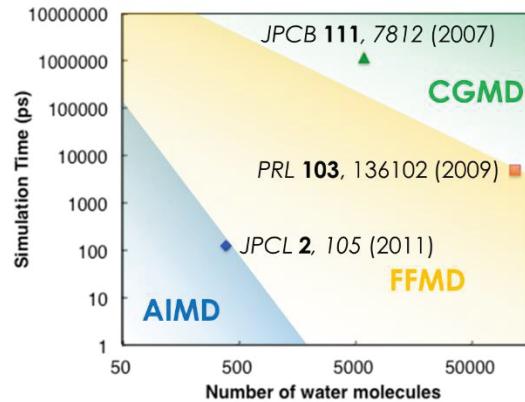


図 2 : 第一原理 MD(AIMD)、古典 MD(FFMD)、粗視化 MD(CGMD)が取り扱える水分子の数とシミュレーション時間を、文献を基に色分けしたもの[8]。

非経験的に安定な電子状態・構造を求めるための計算手法が、第一原理計算である。第一原理計算では、与えられた構造に対してシュレディンガー方程式を解く（もちろん一定の近似は必要となる）ことで電子密度の空間分布を求め、未知の構造に対してもエネルギーと力を計算することができる。ただし、その代償として、計算コストが非常に高いという問題がある。図 2 に示したように、高々 500 個程度の水分子に対して、100 ps 程度の時間しかシミュレーションすることができない。このような限られたスケールのシミュレーションでは、統計平均量の収束が著しく不利となる。

我々は、通常は少なくとも 1 ns のトラジェクトリが必要であった SFG スペクトルを、100 ps 程度のトラジェクトリから計算できるよう、新たな速度・速度相関関数を導出した[6]。この相関関数を用い、はじめに空気/水界面の SFG スペクトルを計算した[9]。図 4 のように、 3700 cm^{-1} に表面に突き出た OH 結合(free OH)の伸縮に由来する正のピーク、 3400 cm^{-1} 附近に周囲の水分子と水素結合した OH 結合の伸縮に由来する負のピークが見られ、最新の実験結果[7]ともよく一致する。その後、脂質/水界面[8]、空気/TMAO 水溶液界面[9]にもこの手法を応用している。

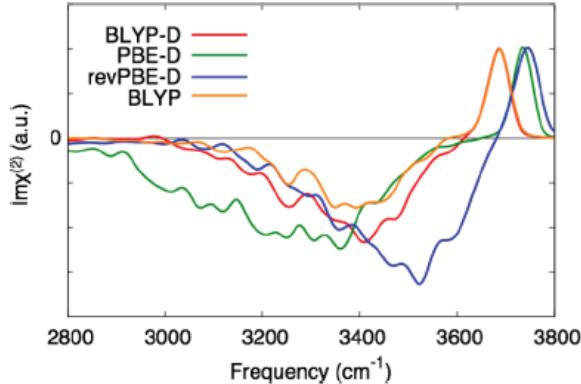


図3: 第一原理MDを用いて計算した空気/水界面のSFGスペクトル。4種類の手法を用い、それぞれ80psのトラジェクトリから計算を行った[6]。

3. SFGスペクトルから得られる物理量に基づいた水の界面物性の評価

前節でSFGスペクトルの比較を行った計算手法は限られたものであり、今後、様々な界面に対して同様の第一原理MDシミュレーションを行うためには、どのような汎関数を用いればよいかを評価するための指針を確立する必要がある。そのためには、例えばバルクの水に対して密度や拡散係数などの物理量が比較されるように、界面の水に対してSFGスペクトルだけではなく、比較・評価を行うための指標を提示する必要がある。

そのための第一段階として、free OHの定義をまず考える[10]。前節でも述べたように、 3700 cm^{-1} のピークは free OH 由来とされるが、一般的な水素結合の定義を用い、「水素結合の相手のいない水」と定めただけでは、図4に示したようにこのピークのみを抽出することができない。そこで、 3700 cm^{-1} のピークを抽出するようにパラメータを変化させ、これを free OH の定義として提案した。このような定義を用いることで、界面において free OH を持っている水の割合、free OH の角度、free OH の寿命といった、実験からも計算からも導き出すことのできる物理量を算出することができる。こうした物理量を多様な計算手法を用いて比較することで、その計算手法がどの程度水の界面物性を記述できるのかを議論することができるようになる。

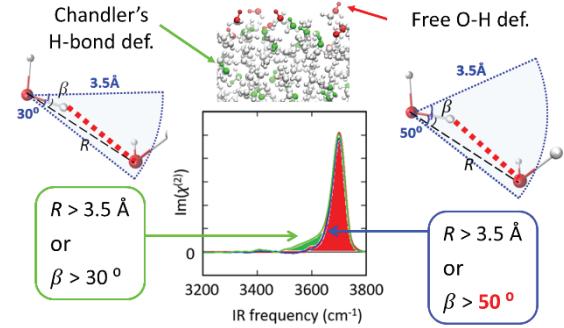


図4: 通常の水素結合の定義(左)と free OH の定義(右)を用いた際の、 3700 cm^{-1} ピークの比較[10]。

4. ハイブリッド汎関数を用いた水の界面物性の評価

4.1. 計算方法

密度汎関数に基づく CP2K プログラム[11]を用いて第一原理MDを行った。BLYP、PBE、revPBE一般化勾配近似(GGA)汎関数、M06-L、B97M-rV メタGGA汎関数、B3LYP、revPBE0、HSE06ハイブリッドGGA汎関数に、vdW相互作用を組み合わせた計算手法の比較を行った。GrimmeのvdW補正[12]のほか、非局所的なvdW補正も採用した。新しいメタGGA汎関数の一つであるSCANについては、Quantum Espressoという平面波を用いた第一原理計算プログラムでCar-Parrinello MDシミュレーションを行った。MDシミュレーションを行ったすべての手法から計算したSFGスペクトルを図に示している。MDのトラジェクトリの長さは、通常のGGAで500 ps以上、ハイブリッド汎関数についても160 ps以上になる。ハイブリッド汎関数については、計算時間の短縮のため、Auxiliary Density Matrix Method (ADMM)[13]を用いた。ADMMによる影響を調べるために、revPBE0-D3(0)についてはADMMの有無それぞれでMD計算を行った。

すべての計算手法を用いてSFGスペクトルを計算しただけではなく、各計算手法が水の界面物性をどれだけ正確に記述できるかの評価も行った。水の密度や動径分布関数といったバルクの性質に加えて、free OHの割合、角度、寿命についても参照値と比較し、その誤差の平均をグラフとして図に示した[13]。

4.2. 結果と考察

図5に示したSFGスペクトルのグラフを見ると、水素結合に由来する 3400 cm^{-1} のピーク、 3700 cm^{-1} のfree OHピークの存在という意味では、どの計算手法も定性的にスペクトルを記述できている。しかし、振動数の再現性にはばらつきがあり、通常のGGAはメタ、ハイブリッドGGAに比べて振動数を過小評価することがわかる。これは、通常のGGAが水素結合の力を過大評価し、水分子のOH結合を実際以上に引き延ばしてしまうためである。またGGAの中には、計測では見られない 3100 cm^{-1} の正のピークを出してしまるものも存在する。

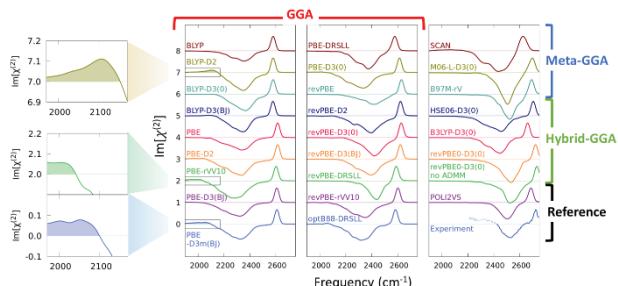


図5：様々な計算手法を用いて計算した水・空気界面のSFGスペクトル[13]。

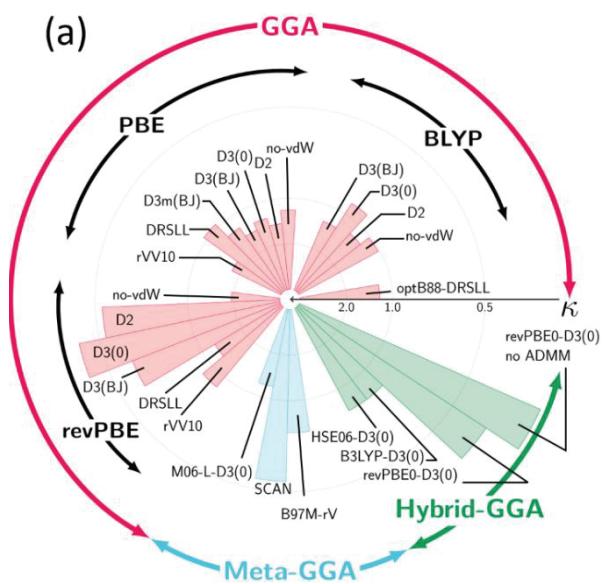


図6：水の界面物性の記述力を表示したパイチャート。パイが大きいほど参照データとの誤差が小さいことを示している[13]。

図6に、水のバルクと界面の物理量について、参考値との誤差を平均した値をパイチャートで示し

た。比較した中ではrevPBE0-D3が最も小さい誤差を示したが、ハイブリッドではないrevPBE-Dも小さな誤差を示すことがわかる。一方で、これまで多く使用されてきたPBEとBLYPの点数はよくない。メタGGAのSCANは良い性能を示すが、SFGスペクトルはほかの計算手法に比べるとブロードであり、スペクトルの再現性という意味での界面水への適正には疑問が残る。

5. おわりに

本稿では、第一原理計算MD法によるSFGスペクトルの計算手法と、SFGスペクトルから実験・計算の両方から得られる物理量をベースとした界面の水の記述力の評価方法を紹介した。この手法を用いて、様々な密度汎関数とvdW相互作用の組み合わせについて比較を行い、revPBE-Dの記述力が優れていることを明らかにした。この手法を固液界面等に適用することで、計算手法の選択の指針と、正確な計算手法に基づいた界面物性の理解が進むことが期待できる。

参考文献

- (1) A. Fujishima et al., Nature **238**, 37 (1972).
- (2) R. Wang et al., Nature **388**, 431 (1997).
- (3) Q. Du et al., Phys. Rev. Lett. **70**, 2313 (1993).
- (4) Y. R. Shen et al., Chem. Rev. **106**, 1140 (2006), S. Nihonyanagi et al., J. Chem. Phys. **130**, 204704 (2009).
- (5) Y. Nagata et al., J. Phys. Chem. B, **120**, 3758 (2016).
- (6) T. Ohto et al., J. Chem. Phys. **143**, 124702 (2015).
- (7) S. Yamaguchi, J. Chem. Phys. **143**, 034202 (2015), S. Nihonyanagi et al., J. Chem. Phys. **143**, 124707 (2015).
- (8) T. Ohto et al., J. Phys. Chem. Lett. **6**, 4499 (2015).
- (9) T. Ohto et al., J. Phys. Chem. C **120**, 17435 (2016).
- (10) F. Tang et al., J. Chem. Theory Comput. **14**, 357 (2018).
- (11) CP2K, <http://www.cp2k.org>
- (12) S. Grimme et al., J. Chem. Phys. **132**, 154104 (2010).
- (13) T. Ohto et al., J. Phys. Chem. Lett. **10**, 4914 (2019).

MSDC-MD による天然変性蛋白質の熱力学解析と構造予測

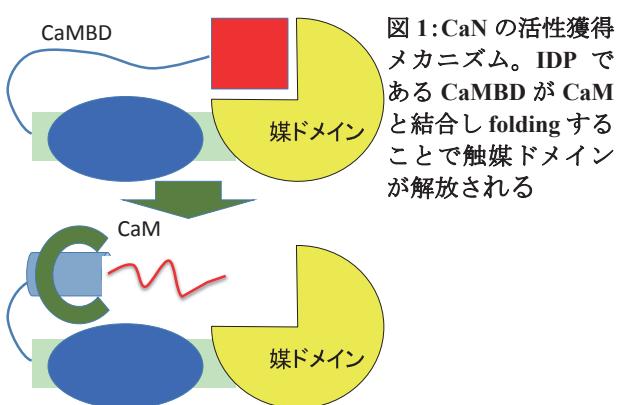
下山 紘充

北里大学 薬学部

1. 序論

多くの蛋白質は溶液中で秩序だった三次元構造へと折れ畳むことが知られている。これは天然構造と呼ばれ、蛋白質の機能と深く関わっている。その一方で、蛋白質の中には溶液中にあるにも関わらず秩序だった構造を持たない蛋白質が存在する（天然変性蛋白質、以下 IDP）。IDP の中には特定の対象蛋白質と結合することでフォールディングし、秩序だった天然構造を獲得するものが存在する。この現象は coupled folding and binding と呼ばれ、蛋白質が情報伝達を行う手段として関心が集まっている。

カルシニューリン(CaN)は細胞内でセリンやスレオニンを脱リン酸化する“分子スイッチ”であり、多くの細胞内反応に関わる重要な蛋白質として知られている。CaN は単独では触媒ドメインが塞がれているが（図1上）、カルモジュリン(CaM)とカルモジュリン結合部位(CaMBD)が結合することによって CaMBD が folding を起こし、結果的に活性を獲得する（図1下）。



蛋白質の性質を調べる手段として、分子動力学(MD)は非常に有用な手法である。しかし蛋白質は多谷構造を持つ自由エネルギー地形(FEL)によって特徴付けられる複雑な系であり、これらの谷は高い自由エネルギーバリアによって隔てられている。この

ため通常の全原子(AAM)-MD はいわゆる kinetic trapping と呼ばれる問題に悩まされることになる。

このような問題を解決するため、拡張アンサンブル法が開発されてきた。例えばレプリカ交換法[1]、マルチバーリック-マルチサーマル法[2]、マルチカノニカル法[3]、Wang-Landau 法[4]、MetaD[5]などである。他にも反応座標の特定の部分をサンプルするアンブレラ法[6]や、反応座標の特定の経路に沿ってサンプルするストリング法[7]などがある。

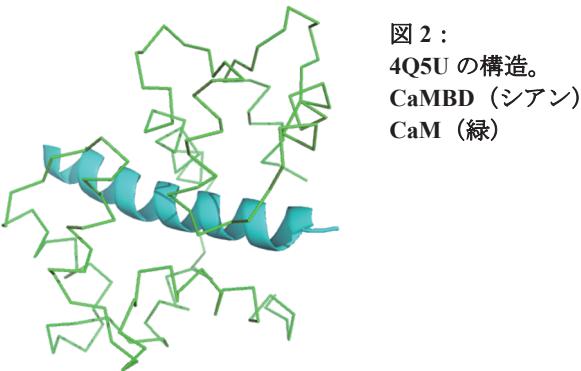
MD を高速化するもう一つの方法は疎視化モデル(CGM)の活用である。CGM は複数の原子を一つの質点として扱う簡易的なモデルであり、精度に劣るが速度に勝る。近年では AAM の精度と CGM の速度を両立させるマルチスケールシミュレーション(MSS)が注目を集めている。MSS は主に三つのタイプに分けることができる。一つ目は AAM と CGM を同時に用いて蛋白質をモデリングする混成モデルである。二つ目は、まず AAM-MD を行い、その結果を用いて CGM の力場を改良して CGM-MD を行うタイプである。force-matching, fluctuation-matching 法が有名である。三つ目は、まず CGM-MD を行い CGM 構造を取得し、その構造情報を元にして AAM-MD を実行するタイプである。

筆者は以前の研究で三つ目のタイプの MSS をマルチカノニカル法と組み合わせ、エネルギー空間上でのサンプリング効率を 10 倍にした[8]。本研究では Multi-scale Divide-and-conquer MD (MSDC-MD) という新しい手法を提唱した。具体的にはアンブレラサンプリングを用い、エネルギー空間の代わりに主成分空間上で MSS を実行した。結果として CaMBD の FEL の算出に成功し、本来単独では得られない CaMBD の天然構造のサンプリングに成功した。また CaMBD が IDP である理由を熱力学的に解明した。

2. 蛋白質と手法

2.1 CaM-CaMBD の複合体

CaMBD は 24 残機の長さであり、CaN の天然構造内において無秩序化しているが、CaM と結合することで α -helix 構造を取ることがわかっている(PDB ID 4Q5U)。図 2 に 4Q5U の構造を示す。



2.2 MSDC-MD の手続き

MSDC-MD の手続きは主に 4 つに分けることができる(図 3)。

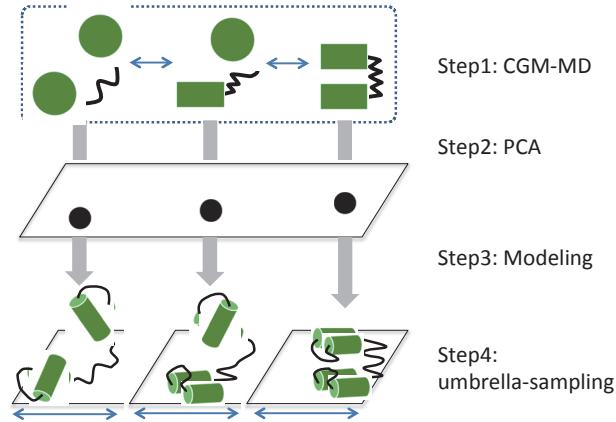


図 3 : MSDC-MD の手続き概要

(ステップ 1) 広い構造空間をサンプルするため、CGM-MD を実行する。本研究では UNRES server を用いた。UNRES は残機あたり二つの相互作用サイトしか持っていないため AAM に比べて 1000-4000 倍早い MD が可能であるとされている。FF2 力場を用いた Langevin Dynamics を 100ns 相当行なった。構造は 1ns 毎に取得した。初期構造は完全に伸びきった構造から始めた。なるべく広い範囲の構造をサンプルするため、T=290, 300, 320, 340, 400 の CGM-MD を行なった。

(ステップ 2) ステップ 1 の CGM トラジェクトリーを一纏めにし、CGM 構造の C α 位置に位置高速をかけながら、主成分分析(PCA)にかけた。回転と並進の影響を取り除くため、RMSD フィッティングを T=290, 1ns の構造に対して行なった。N-,C-末端の揺らぎが大きいため、フィッティングは 5-19 残機に対して行なった。RMSD フィッティングは以下のように書ける。

$$\begin{aligned} \mathbf{r}'_i &= R(\mathbf{r}_i - \mathbf{Q}) \quad \text{for } i = 1 \dots 24 \\ \mathbf{Q} &= \frac{1}{15} \sum_{i=5}^{19} \mathbf{r}_i \\ R &= (A^t A)^{1/2} A^{-1} \end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ は元の座標、行列 R は 3×3 の回転行列であり、行列 A は以下のように書ける

$$A_{ij} = \sum_{k=5}^{19} (r_{ki} - Q_i)(s_{kj} - P_j) \quad \text{for } i, j = 1 \dots 3$$

$$\mathbf{P} = \frac{1}{15} \sum_{i=5}^{19} \mathbf{s}_i$$

ここで s_{kj} は T=290, 1ns の座標である。フィッティング後の座標 $\mathbf{X}' = (\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N)$ を PCA にかけることで固有ベクトルと固有値を算出した。構造の第 n 固有値に対する射影は $v_n = \sum_{i=1 \dots 3N} c^{(n)}_i \cdot X'_i$ である。ここで $\mathbf{c}^{(n)}$ は \mathbf{X}' の分散共分散行列の第 n 固有ベクトルであり、 $(\Lambda)_{ij} = \langle (X'_i - \langle X'_i \rangle) \cdot (X'_j - \langle X'_j \rangle) \rangle$ ($\langle \dots \rangle$ は熱力学平均) に対して以下の方程式を満たす。

$$\Lambda \mathbf{c}^{(n)} = \lambda_n \cdot \mathbf{c}^{(n)}$$

(ステップ 3) v_1, v_2 平面上に射影した構造を「小範囲」に分割した(図 4 点線)。各小範囲に含まれる CGM 構造を MODELLER プログラムによって AAM 構造へ復元した。この際 Ca 構造に位置拘束をかけ、CGM 構造の情報が失われないようにした。なお説明のために各小領域には図 4 のように番号を振ってある。

(ステップ 4) 複数の AAM-MD を復元した AAM から始めた。使用プログラムは改造版 GROMACS で、温度 300K、圧力 1atm になるよう Berendsen 法を用

いた。各 MD は 90ns 程度行なった。この際以下のアンブレラポテンシャルを加えた。

$$\phi(v_m) = \begin{cases} \frac{1}{2}k(v_m^{\min} - v_m)^2 & \text{for } v_m < v_m^{\min} \\ 0 & \text{for } v_m^{\min} \leq v_m \leq v_m^{\max} \\ \frac{1}{2}k(v_m - v_m^{\max})^2 & \text{for } v_m^{\max} < v_m \end{cases}$$

ここで $m = 1 \text{ or } 2$, $k = 0.7 \text{ kJ/mol/nm}^2$, v_m^{\min} と v_m^{\max} は「サンプリング領域」の上限と下限である。サンプリング領域は隣の小範囲と重複するよう設定されており、例えばサンプリング領域 1, 2 のパラメータは $v_1^{\max(1)} - v_1^{\min(2)} = 5 \text{ \AA}$ と設定されている。このため、サンプリング領域 1, 2 の相対重率は $v_1^{\min(2)} \leq v_1 \leq v_1^{\max(1)}$ に含まれるサンプル数 N_1 と N_2 から $\omega_{12} = \log(N_2) - \log(N_1)$ と求めることができる。

ここで力は以下のように書ける。

$$-\nabla\phi(v_m) = \begin{cases} k(v_m^{\min} - v_m)\nabla v_m & \text{for } v_m < v_m^{\min} \\ 0 & \text{for } v_m^{\min} \leq v_m \leq v_m^{\max} \\ k(v_m - v_m^{\max})\nabla v_m & \text{for } v_m^{\max} < v_m \end{cases}$$

R と \mathbf{Q} は $\mathbf{X}_i = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ に依存するため微分される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_m}{\partial X_i} &= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^3 c_{3j+k}^{(m)} \frac{\partial X'_{3j+k}}{\partial X_i} \\ &= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^3 c_{3j+k}^{(m)} \left\{ \sum_{l=1}^3 \frac{\partial R_{kl}}{\partial X_i} (X_{3j+l} - Q_l) \right. \\ &\quad \left. + R_{kl} (\delta_{i,3j+l} - Q_l) + R_{kl} \left(X_{3j+l} - \frac{\partial Q_l}{\partial X_i} \right) \right\} \end{aligned}$$

3. 結果と議論

まず CaMBD の CGM-MD を行い PCA で解析した。構造の散布図が図 4 である。ここで重要なのは小領域 17 の天然構造（大きな+マーク）が CGM 構造によって囲まれている点である。これらの CGM は天然構造に似通っているため、AAM に復元しても天然構造に似た構造になると期待できる。これらの AAM 構造は天然構造をサンプルする上で有益な初期構造になる。ただし CaMBD が IDP であるため、このまま AAM-MD を実行しても全ての構造は無秩序化してしまう。そこでアンブレラポテンシャルを

用いて CaMBD をサンプリング領域内に閉じ込め、無秩序化を防ぎ天然構造のサンプリング確率を大幅に底上げする。

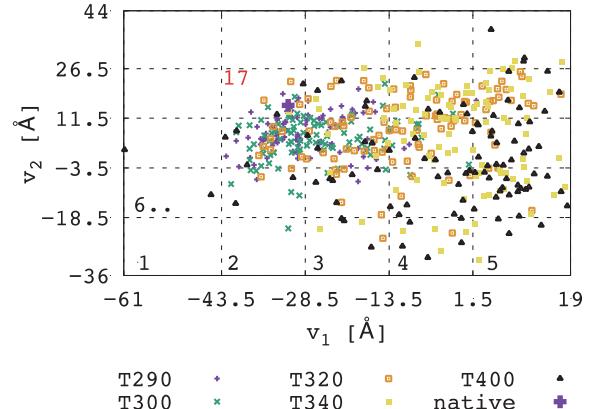
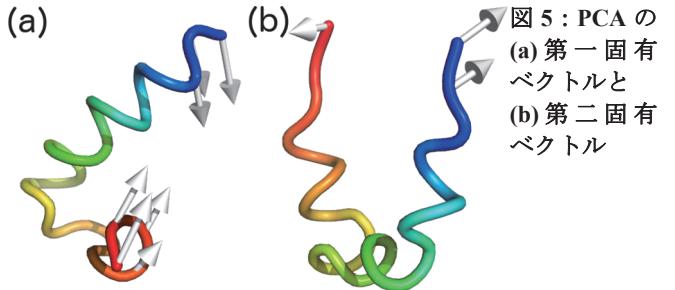


図 4 : CGM-MD の構造の散布図

主成分分析の結果得られた固有ベクトルを図 5 に示す。第一固有ベクトルは折れ曲がり、第二固有ベクトルはねじれ運動に対応していた。



各小領域にある CGM 構造を AAM 構造に復元し、AAM-MD を同時並列的に行なった。全体の FEL は各サンプリング領域の重率から再重率化を行うことで算出した（図 6）。比較のために通常の AAM-MD で得られた FEL を図 7 に示す。図 7 は $v_1 \leq -13, v_2 \leq -4$ の範囲においてサンプルが明らかに足りていないが、図 6 ははっきりと FEL の形状が見える。

CaMBD の天然構造は $-43.5 \leq v_1 \leq -28.5, 11.5 \leq v_2 \leq 26.5$ のくぼみに対応するが、図 6 からはそれよりも低い多谷構造が観測された。これは CaMBD が IDP である熱力学的理由であると言える。

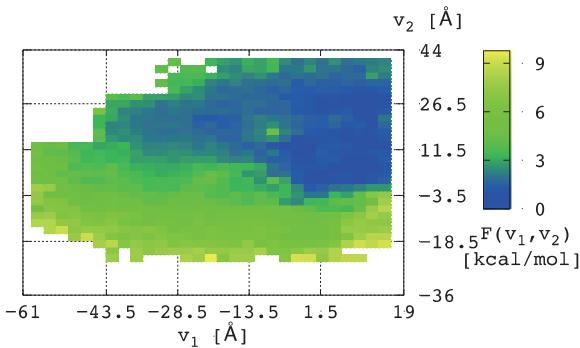


図 6 : MSDC-MD で得られた FEL

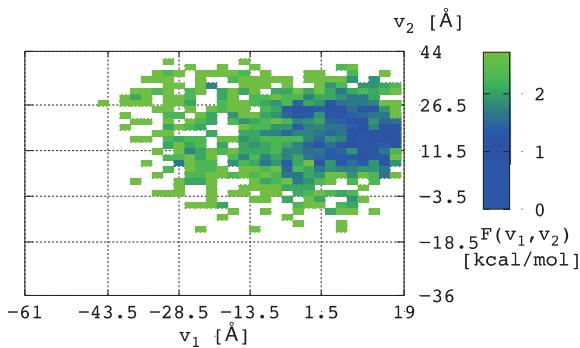


図 7 : 通常の AAM-MD で得られた FEL

また MSDC-MD の精度を比較するため、1 次元の FEL を算出した。MSDC-MD の結果と通常の AAM-MD 結果は統計誤差の範囲で一致していた。

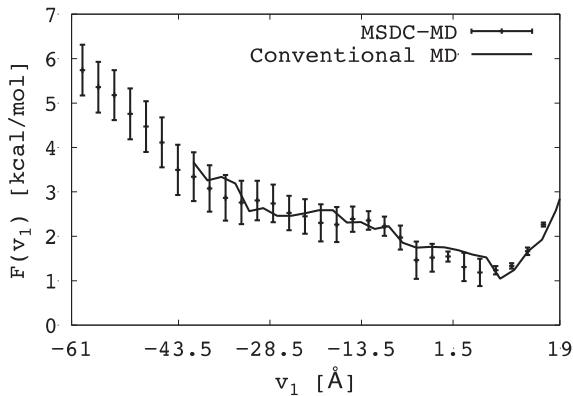


図 8 : 1 次元 FEL の比較。

サンプリングの効率を比較するため、TM スコアの時系列を比較した。TM スコアは二つの蛋白質の構造類似性を表す指標であり 0~1 の値をとる。1 に近いほど互いの構造は似ている。本研究では図 2 の CaMBD 構造に対する MSDC-MD (サンプリング領域 17) の構造の類似性と、同じく AAM-MD の構造の類似性の時系列を解析した (図 9)。

図 9 では上下軸の時間スケールが異なることに注意していただきたい。通常の AAM-MD では 400 ナノ秒の計算を行っても TM スコアは 0.1~0.3 程度にとどまっている。一方で MSDC-MD では 0.3~0.6 の間を 90 ナノ秒の間に頻繁に往復している。これはアンブレラポテンシャルが無秩序化を防ぎ、秩序構造のサンプリング確率を上げている結果であると考えられる。

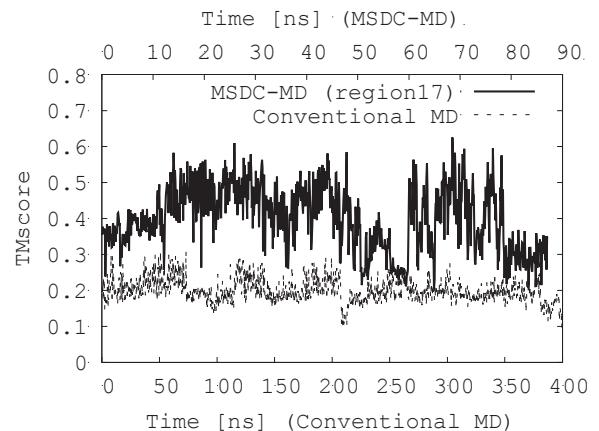


図 9 : TM スコアの時系列

本来 IDP であるはずの CaMBD で TM スコア~0.6 という値をとったのは驚くべき結果である。その構造を図 10 (a) に示す。短い MSDC-MD を CaM にも行い、CaN と CaM のドッキングを行った結果が図 b である。4Q5U に対する RMSD は 7.8 であったが、大まかな位置関係は図 2 と類似していた。

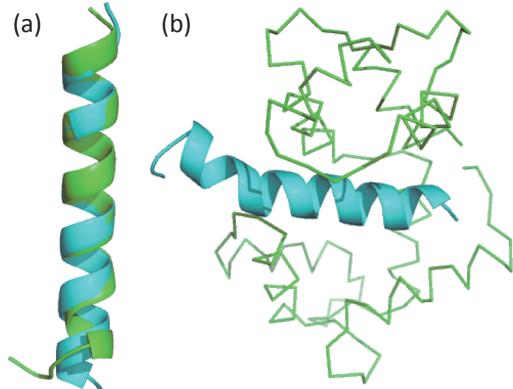


図 10 : (a)MSDC-MD の構造 (緑) と実験構造 (シアン)。(b) ドッキングの結果。色は図 2 に同じ。

4. 終わりに

MSDC-MD は AAM の精度と CGM の速度とアンブレラサンプリングを組み合わせた手法である。本研究で MSDC-MD は IDP の秩序構造のようなレイアイベントのサンプリングを効率的に行うことができる事を示した。また自由エネルギーを算出することで、CaMBD がなぜ IDP なのかということも明らかにした。

本手法の利点は、本来二つの蛋白質を同時に扱わなければならぬところを、別々の MSDC-MD に分けて計算し、ドッキングによって一つに統合できる点である。多体問題に対する計算コストを大幅に削減できることを考えている。今後は本手法をさらに複雑なタンパク質に応用することで、生体反応の問題解明に役立てていきたいと考えている。

参考文献

- (1) Sugita Y. and Okamoto Y. *Chem. Phys. Lett.* **314**, 141–151 (1999).
- (2) Okumura H and Okamoto Y. *Chem. Phys. Lett.* **383**, 391–396 (2004).
- (3) Hansmann, U. H. E. and Okamoto Y. *J. Comput. Chem.* **14**, 1333–1338 (1993).
- (4) Wang, F. & Landau, D. P. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050–2053 (2001).
- (5) Barducci, A. et al. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 20603 (2008).
- (6) Kokubo, H. et al. *J. Comput. Chem.* **32**, 2810–2821 (2011).
- (7) Maragliano, L. et al. *J. Chem. Phys.* **125**, 24106 (2006).
- (8) Shimoyama, H. et al. *J. Chem. Phys.* **133**, (2010).

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

速水 智教

大阪大学大学院 生命機能研究科 生命機能専攻

1. はじめに

タンパク質-リガンド、タンパク質-タンパク質、およびタンパク質-DNA 間の相互作用、あるいはタンパク質のフォールディング過程などに対して計算機シミュレーションを用いてその詳細を研究することは、生体分子の関わる現象を明らかにする上で非常に重要である。それゆえ、様々な分子動力学(MD)シミュレーション手法が開発されてきた。

本研究は、我々の研究グループが新規に開発した Multidimensional Virtual-system coupled canonical MD (mD-VcMD)を用いて、重要な神経疾患に関与するコリプレッサー mSin3B とそれに結合する薬剤候補分子との相互作用を明らかにしようとするものである。

2. mSin3B PAH1 ドメインについて

Neural restrictive silencer factor / RE1-silencing transcription factor (NRSF/REST)は、DNA 上のサイレンサーに結合し神経特異的な遺伝子の発現を抑制するタンパク質である。NRSF/REST の N 末端領域はコリプレッサー mSin3 の Paired Amphipathic Helix 1 (PAH1) ドメインに結合し、histone deacetylase enzyme (HDAC)をリクルートする。mSin3 には結合相手のそれぞれ異なる 4 つの PAH ドメインおよび HDAC 相互作用ドメイン(HID)が含まれる。哺乳類の mSin3 には mSin3A と mSin3B の 2 つのアイソフォームが存在し、機能に若干の違いがある。Nomura らは、NMR を用いてマウスの NRSF/REST および mSin3B PAH1 複合体の立体構造を明らかにした (PDBID : 2CZY) [1]。マウスの mSin3B には PAH ドメインが 3 つ存在し、このうち NRSF/REST と結合する mSin3B PAH1 ドメインと NRSF/REST の複合体構造を図 1 に示す。mSin3B PAH1 ドメインは、4 つの両親媒性のヘリックスバンドルから成る。これらのヘリックスをこれ以降、N 末端側から順に H1、H2、H3、H4 と呼称す

る。また、NRSF/REST の N 末端側転写抑制ドメインは、非結合時では天然変性状態にあるが、mSin3B のクレフトに接近するとヘリックスを形成して mSin3B に結合する。この NRSF/REST のヘリックスは疎水性残基を多く含むアミノ酸配列をもち、また mSin3B PAH1 ドメイン側の結合クレフトも疎水性残基を多く含む。したがって、これらは疎水性相互作用によって結合し安定化している[2]。

3. 計算に使用した系

mSin3B と NRSF/REST 間の疎水性結合を阻害する化合物はダウン症、ハンチントン病、髄芽種、心筋ミオパチー、神経因性疼痛などの神経疾患に対する新規薬剤発見の重要なターゲットとなりうる[3,4]。

Fukunishi らは、in-silico スクリーニングによって NRSF/REST と mSin3B との結合を阻害する多数の化合物の候補を探査した。Nishimura らはこれらの候補分子に対して NMR 等の実験を行い mSin3B との相互作用を調査した。Chemical Shift Perturbation (CSP) の結果から候補分子中最も相互作用の強かった Acitretin を本研究のターゲットとし、シミュレーション

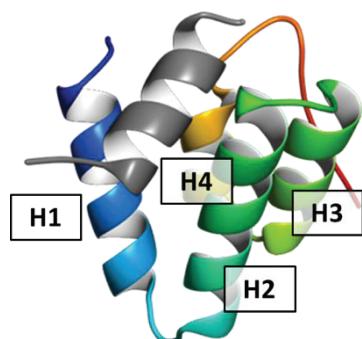


図 1 : NMR で解かれた NRSF/REST と mSin3B PAH1 ドメインとの複合体立体構造。NRSF/REST (グレー) が mSin3B (レインボー) の H1 と H2 の間にあるクレフトに結合している。

ョンを実施した。

本研究では mSin3B PAH1 ドメインとその前後の 74 の残基を使用する。アミノ酸の配列で表すと、 Ace-PVHVE DALTY LDQVK IRFGS DPATY NGFLE IMKEF KSQSI DTPGV IRRVS QLFHE HPDLI VGFNA FLPLG YRID-NH₂ である。先頭の Ace と末尾の NH₂ は電荷を中和するキャップで Acetyl 基と NH₂ 基を意味する。この配列は mSin3B (UniProt ID : Q62141) 全体の 31 番から 104 番に該当する。

Acitretin と mSin3B PAH1 ドメインを含む系を、1 辺約 70 Å の立方体の周期境界条件で作成した。溶媒として水分子と Na⁺および Cl⁻イオンを付加した。イオンは生理食塩水濃度になるように調節し、Na⁺を 29 個、Cl⁻を 29 個付加している。この結果、全体では 33,525 原子になった。平衡化のために NVT と NPT をそれぞれ 20.1 ps と 1.5 ns だけ行い、結果周期境界の 1 辺の長さは 68.90856 Å に変化した。タンパク質の力場は Amber-based hybrid force field ($\omega = 0.8$) を使用し、水分子は TIP3P を使用した。Acitretin の力場に関しては QM 計算をもとに作られたパラメータを使用した。平衡化のための計算にあたっては psygene-G を使用し、中心となる 3D-VcMD 計算は omegagene を使用した。

4. mD-VcMD について

一般的なカノニカル MD では、系がポテンシャルエネルギーの局所的な安定状態に捉えられやすく、実用的な計算時間内のシミュレーション結果から統計集団としての解析を行うには困難があった。そこで、マルチカノニカル MD 法、アンブレラサンプリング法、レプリカ交換法などの手法が開発されてきた。

本研究で用いる mD-VcMD 法[8]は、全原子モデルの系と相互作用する仮想的な状態変数から成る系、すなわち virtual system を導入する点に特徴がある。この virtual system を使用する手法は、Higo らによって V-McMD 法[5]、V-AUS 法[6]としてマルチカノニカル法やアンブレラサンプリング法の一種に適用されてきた。

VcMD 法[7]は特定の反応座標空間をいくつかの

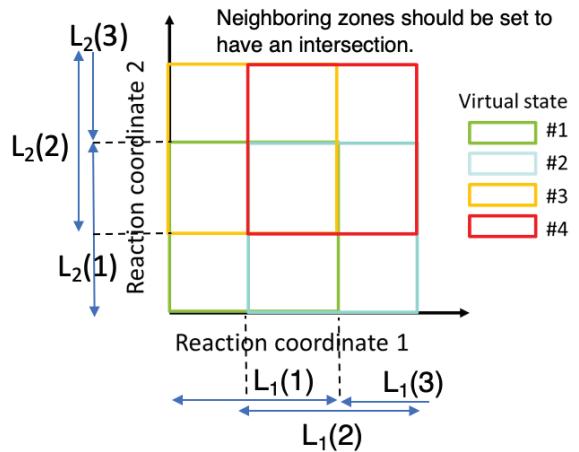


図 2 : 2D-VcMD における virtual system のイメージ。各 virtual state の重なり合う部分で virtual state 間の遷移が起こるが、実際の全原子モデルの運動状態は維持したままである。

領域に分割し、それらの領域に仮想的な系を成す状態変数 L の値を割り当てる（ここではそれを virtual state と呼称する）。ただし、隣り合う状態変数 L は実際の全原子モデルにおける反応座標においては重なり合いを持つ。シミュレーション中にこれらの virtual state 間をランダムウォークするという点ではレプリカ交換法に類似するが、VcMD 法では全ての virtual state で同じ温度のカノニカル MD が見かけ上行われている点が異なる。VcMD を通して最終的に virtual state 同士の相対的な存在比が求められ、それが熱力学的な重みに一致する。詳しくはこれらの論文を参照されたい。

V-AUS 法や VcMD 法はタンパク質の立体構造に関するパラメータを反応座標として使用している。本研究で使用した mD-VcMD 法は、図 2 のように複数の反応座標とそれに対応する仮想系の変数を導入し、VcMD 法を多次元に拡張したものである。

本研究では、図 3 に示すとおり 3 つの反応座標を導入した。反応座標を決めるにあたって、まず Acitretin と mSin3B を構成する幾つかの原子の集まりを合計で 6 つのグループにまとめている。反応座標はこれらのグループの重心間距離として定義される。第 1 反応座標 λ_1 から第 3 反応座標 λ_3 までを図 3 上の点線で示した。

λ_1 は mSin3B の表面上にある NRSF 結合部位（クレフト）の開閉に対応し、 λ_2 と λ_3 はいずれも Acitretin

と mSin3B 間の距離に対応する。Acitretin は直線的な構造をしているので、 λ_2 と λ_3 は Acitretin の head 部分（六員環部分）と tail 部分（六員環の反対）それぞれと mSin3B 間との距離に対応し、Acitretin の head 部分と tail 部分の向きを反応座標上で区別するため指定した。

本研究では 3 つの反応座標を導入したので、以下 mD-VcMD を 3D-VcMD と呼ぶこととする。

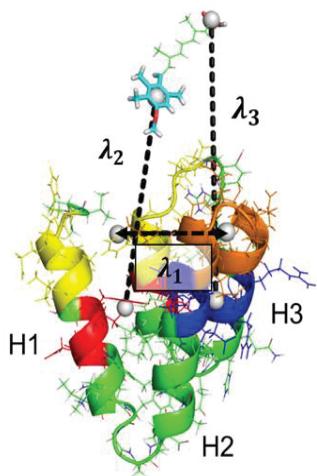


図 3 : Acitretin と mSin3B を含む系における第 1 から第 3 までの反応座標 λ_1 - λ_3 。白い sphere は各グループの重心の位置を示す。これらの重心を結ぶ点線が反応座標である。mSin3B 上のグループは黄、赤、橙、青で色分けされている。

5. 結果

Acitretin-mSin3B 複合体で 3D-VcMD を用いてサンプリングした結果、図 4 のように $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ で張られた 3 次元空間上の自由エネルギー地形が得られる。

この結果から、空間内で最も自由エネルギーの低い領域は、 λ_1 が 12~14 Å、 λ_2 と λ_3 が 10~15 Å の付近に存在していることがわかった。この領域は図 4 の赤い線で示した球状領域にある。準備的に行った mSin3B の Apo 体でのカノニカルシミュレーションでは平衡化後に λ_1 の値は 13.1 Å となり、これは複合体の最安定領域の値と一致する。したがって、Acitretin が存在するかしないかに関わらず、mSin3B はクレフトを閉じた状態が最も安定な立体構造であることがわかる。他方、NRSF-mSin3B 複合体の NMR 構造 (PDBID : 2CZY) を用いて λ_1 を計算すると 16.1

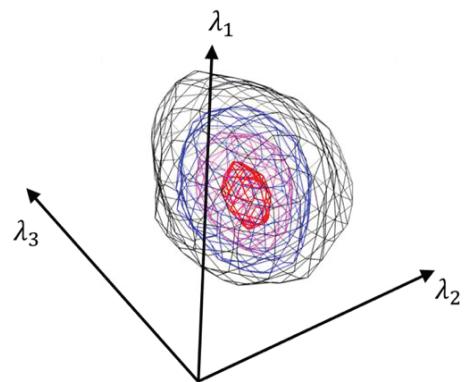


図 4 : Acitretin-mSin3B 複合体の 3 次元自由エネルギー地形。黒、青、ピンク、赤の等密度線の順で自由エネルギーが低くなっていく。

Å であるが、NRSF は Acitretin よりもかなり大きな分子なので λ_1 の値が大きくなつたと推測できる。

図 5 は、H1-H4 のヘリックスの軸と直交する面に對し mSin3B の N 末端側から見た図である。図 5 の黒い等密度線で囲まれた領域は、mSin3B 周辺での Acitretin 分子の重心位置の分布から、Acitretin 分子の存在比 ρ が高かった領域を示している。この存在比 ρ は、3D-VcMD で得られた構造サンプルに對しそれぞれ Acitretin の重心位置を計算し、空間上のボクセルごとに熱力学的重み付き平均をして算出した。

黒色の等密度線で示した存在比の高い Acitretin の領域が mSin3B の周辺にいくつか存在している。これらの領域を以後クラスタと呼称する。図 5 で示すように、H3-H4 が作る平面の溶媒側と、H1-H2 が作る平面の溶媒側に存在比が高く大きな容積のクラスタが存在する。また、H1-H2 間のクレフト、H3-H4 間のクレフト、H4-H1 間のクレフトにも少し小さめのクラスタが計 3 個存在している。H1-H2 間のクラスタを Cluster A、H3-H4 間のクラスタを Cluster B、H4-H1 間のクラスタを Cluster C、および H3-H4 の溶媒側の最も大きなクラスタを Cluster D と以後それぞれ呼称する。NRSF/REST の結合を阻害する位置にあるのは、Cluster A-C の 3 つのクラスタである。

CSP との比較によると、これらのクラスタは Chemical Shift 変化の大きかった mSin3B の残基周辺に存在している。したがって、3D-VcMD の結果は実験結果とも符合している。

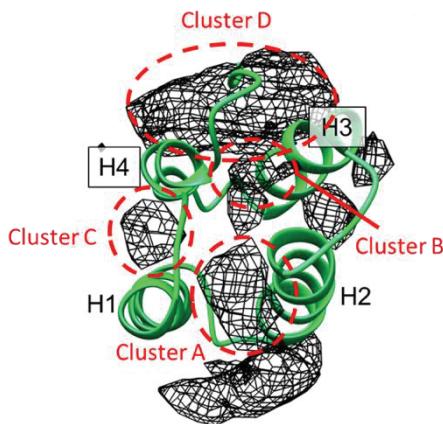


図 5 : mSin3B 近傍における存在比の高い Acitretin の重心の分布。いくつかのクラスタを形成している。

図 6A-B は mSin3B 周辺での Acitretin の向きに関する情報（平均的分子配向）を表している。Acitretin の直線的な構造を利用して、図 6 の矢印はいずれも Acitretin の head(六員環)から tail(六員環の反対側)へ向かう方向を示している。ただし、各矢印はその起点にあるボクセルに含まれる $\rho = 0.01$ 以上の Acitretin の構造を、熱力学的な重みで平均化した形で示している。矢印が長いほど、その方向を強く傾向が強いことを示している。この結果から、クラスタごとに異なる配向性をもつことがわかる。図 6A の赤い矢印と紫の矢印でそれぞれ示している Site A と Site B は、いずれも NRSF の結合部位に近い Cluster A に位置しているが配向は異なっている。したがって、Acitretin が NRSF の結合部位と相互作用する場合には、複数の結合モードが存在すると考えられる。

6. 終わりに

Acitretin-mSin3B 複合体の 3D-VcMD シミュレーション結果は、サンプリングした範囲の 3 次元空間内で極小値を有する滑らかな自由エネルギー曲面をしており、球に近い単純な形をしている（図 4）。反応座標空間での自由エネルギー地形が単純に見えるということは、3D-VcMD を用いると立体構造サンプリングが容易になることを示している。

また、図 5 や 6 で示したように、Acitretin-mSin3B 複合体の 3D-VcMD シミュレーションの結果得られ

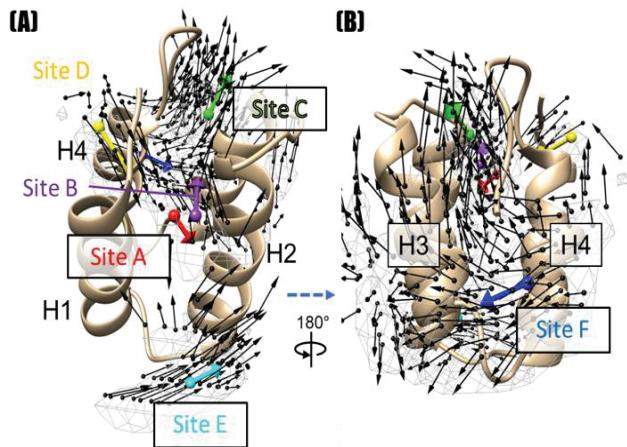


図 6 : mSin3B 近傍における Acitretin の向きの分布。矢印はその位置における熱力学的な重みに基づく平均の向きを表す。

た熱力学的構造アンサンブルを解析することで、リガンド分子が mSin3B のどの位置と相互作用しやすいかや、相互作用位置におけるリガンド分子の方向性に特徴がみられるなどを明らかにした。

このように、mD-VcMD 法はタンパク質とリガンド（タンパク質同士や DNA なども可能である）の相互作用の仕方を詳細に解析する上で非常に有用である。今後は他の薬剤候補分子との間でもシミュレーションを行い、NRSF や mSin3B の働きを阻害する薬剤候補の発見に役立てていく予定である。

文献

- [1] Nomura, M., et. al., J.Mol.Biol., **354**, 903-915, (2005).
- [2] Higo, J., et. al., J. Am. Chem. Soc., **133**, 10448–10458, (2011).
- [3] Ueda, H. et al., Bioorg. Med. Chem. Lett., **27**, 4705–4709, (2017).
- [4] Kurita, J., et. al., Sci. Rep., **8**, 13763, (2018).
- [5] Higo, J., et. al., J. Chem. Phys., **138**, 184106, (2013).
- [6] Higo, J. et al., J. Comput. Chem., **36**, 1489–1501, (2015).
- [7] Hayami, T., et. al., J. Comput. Chem., **39**, 1291-1299, (2018).
- [8] Hayami, T., et. al., J. Comput. Chem., **40**, 2453–2463, (2019).

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

原田 拓弥¹⁾、村田 忠彦²⁾

¹⁾ 青山学院大学 理工学部 経営システム工学科

²⁾ 関西大学 総合情報学部 総合情報学科

1. はじめに

本研究では、母の生年別、出産時の年齢別、出生数の統計表である出生コードを用いて日本全国の仮想個票の合成に取り組む[1]。前年度公募型利用者制度で用いていた従来手法[2]では、ある年度において出生した子と親の年齢差の統計表を用いて仮想個票が合成されていた。したがって、全ての親子の年齢差が、ある1つの年度において調査された親子の年齢差に合わせて最適化されている。そのため、現実社会と異なる傾向をもつ仮想個票が合成される恐れがあった。本研究では、出生コードを用いることで親の出生年ごとの出生の傾向を反映した仮想個票を合成する手法を提案する。

国家的また国際的な災害対策や経済政策において、より精度が高く、きめの細かい対応が求められている。これらの分析と将来の可能性を可視化する社会シミュレーションへの関心が高まっている。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。しかし、KISS 原理では現実社会の複雑な現象のモデル化は不可能であると指摘されている[4]。そのため、可能な限り忠実に現実社会を模倣する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。

このようなモデルを作成するためには、環境のデータと市民のデータが必要となる。環境のデータは地理情報や地域メッシュといった地理情報システムの利用が可能である。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、可能な限り現実社会を模倣する必要がある。

現実社会を可能な限り模倣するエージェントの意思決定の実現には様々な課題がある。その課題の 1

つがエージェントが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できる。しかし、これらの市民のデータ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を生成し、その人工社会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[3, 4]。

統計情報に基づく個票データの合成に関する研究の歴史は古く、合成的再構成法 (Synthetic Reconstruction Method; 以下、SR 法) [5]として知られている。SR 法は、個票データのサンプルをもとに、Iterative Proportional Fitting Procedure (IPFP) を用いて個票データを合成している。なお、本稿では個票データの「復元」ではなく「合成」という用語を用いている。復元の場合、実際の人口構成と同一の個票の復元が期待されるが、合成される個票はあくまでも統計的特徴が類似した仮想的な個票である。Lenormand と Deffuant は[6]、サンプルを用いて合成する SR 法と、サンプルを用いない合成手法とを比較し、後者が個人と世帯をよりよく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用可能な統計表と特徴に基づいた手法が開発されており、他の地域へ適用する際には留意が必要と指摘されている[7]。日本においても、日本の利活用可能な情報と特徴に基づいた仮想個票が合成されている。日本における合成手法として、国勢調査のサンプルを用いた花岡の手法[8]とサンプルを用いない池田の手法[9]がある。

花岡の手法[8]は探索手法の 1 つである Simulated Annealing (以下 SA 法) を用いて、複数の統計表と整合するように国勢調査のサンプルの組み合わせを探索している。そのため、サンプルを用いない手法と比べると短時間で妥当な解を探索できる。しかし、手法に国勢調査のサンプルを使用しているため、国勢調査のサンプルの利用規約により第三者提供できない。一方で、池田らの手法[9]を基にした手法は公開されている統計情報に適合するように SA 法を用いて最適化している。したがって、合成された仮想個票を第三者提供可能である。

これらの国内外の研究を踏まえ、本研究では第三者提供可能な日本の仮想個票を合成するために、池田らの手法[9]をもとにした手法[2]を改良する。従来手法[2]は SA 法を用いて適合させる統計表に、親子の年齢差や夫婦年齢差、人口分布などの統計表を用い、統計表と仮想個票の差を最小化している。親子の年齢差として合成対象年度の人口動態統計における「父の年齢別、出生数」と「母の年齢別、出生数」の統計表を用いている。従来手法[2]では、これらの統計表に整合するように父子と母子のすべての関係を最適化していた。しかし、これらはある 1 つの年度において出生した 0 歳の子とその親について、親の年齢別に集計された統計表である。そのため、従来手法[2]では、全ての親子の年齢差が、ある 1 つの年度において調査された親子の年齢差に合わせて最適化されている。

生年別の出生に関する統計表として出生コードホートが公開されている。出生コードホートとは 1947 年以降、各年の「母の年齢別、出生数」の統計表を「母の生年別、出産時の年齢別、出生数」で整理した統計表である。本研究では従来手法の年齢差の統計表の代わりに出生コードホートを用いて仮想個票を合成する。出生コードホートは日本全国を対象に集計された統計表のみ公開されている。出生コードホートを各都道府県の規模に合わせて調整し、都道府県単位で合成するなど、統計表を過度に調整することは好ましくない結果が得られる[2]。そのため、本研究では、出生コードホートを考慮し、日本全国を一度に合成す

る手法を提案する。

2. 従来手法

従来手法[2]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。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 Step 1 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 における統計量、 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量である。

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 家族類型別、男女別の人口分布
- 統計表 5 男女別人口分布

3. 提案手法

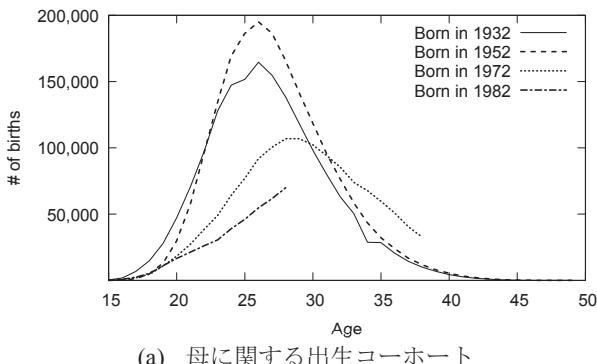
本研究では、従来手法の「統計表1 父子年齢差」と「統計表2 母子年齢差」を出生コホートの以下の統計表に置き換える。

統計表1' 父の生年別、父子年齢差別、出生数
統計表2' 母の生年別、母子年齢差別、出生数

出生コホートとは「親の生年別、出生時の親の年齢別、出生数」が記載された統計表である。出生コホートから1932年生まれ、1952年生まれ、1972年生まれ、1982年生まれの母に関して抽出した図を図1(a)に示す。図1の横軸は出産時の年齢を縦軸は出生数を示している。また、各折れ線は母の生年を示している。図1(a)から母の生年ごとの折れ線の傾向が変化している。特に、出生数のピークの年齢が26歳付近から29歳付近に変化しており、1932年生まれや1952年生まれに比べ、1972年生まれの女性は出産時の年齢が高くなっている。

年齢差の統計表に関して従来手法により合成された、日本全国の仮想個票を用いて作成した「母の生年別、母子年齢差別、出生数の統計表を図1(b)に示す。ここで、出生数とは、仮想個票に含まれる同じ世帯の母と子の年齢の組み合わせから、子を出生した時の母の年齢ごとに集計して求めた値である。横軸は出生時の母の年齢を、縦軸は出生数を示している。図1(b)の生年別の各線は、出生数が異なるものの概ね同じ形状をしている。これは、2010年に出生した子と母の年齢差の統計に対して、全ての母子年齢を最適化した結果である。

図1(a)と図1(b)を比較すると、分布の形状とy軸の値が異なる。図1(a)は出生した子を集計しているが、図1(b)は合成時の出生数を集計している。図1



(a)は子の出生時の親の年齢別の統計表であり、図1(b)の集計は、世帯分離や親（または子）の死別後の世帯を対象としているため、図1(b)は出生数が少なく集計されている。また、母の年齢が5歳階級の統計表を用いていたため、15歳差から19歳差、20歳差から24歳差などの各区間の境界では値の変化量が大きい。加えて、図1(b)のピークは約31歳差であるが、図1(a)では生年毎に異なる。

図1(a)と図1(b)で示したように、出生数と仮想個票から集計される出生数は異なる。本研究では、出生コホートを、国勢調査から推定した「生年別、父の数」と「生年別、母の数」を用いて調整する。

「生年別、父の数」と「生年別、母の数」の推定には国勢調査 人口等基本集計 表15を用いる。国勢調査 人口等基本集計表15は「世帯主との続柄(12区分)、世帯の家族類型(16区分)、年齢(5歳階級)、男女別一般世帯人員」について集計されている。この統計表の家族類型別の年齢と世帯主との続柄を用いて、生年別の父と母の数を推定し、合成データ内の父/母の総数と合うように調整する。「男女別、年齢別、父/母の数」を用いて出生コホートの「生年別、出生時の親の年齢別出生数」を調整する。具体的には、「男女別、年齢別、父/母の数」の年齢から生年を算出し、生年毎に父/母の数と合うように出生時の親の年齢別出生数を調整する。

4. 実験結果

本研究では、国勢調査をもとに日本全国の世帯構成を合成する。合成対象は平成27年国勢調査から50,962,785世帯、その人口は115,552,530人である。探索回数は1人あたり1回、10回、100回、500回

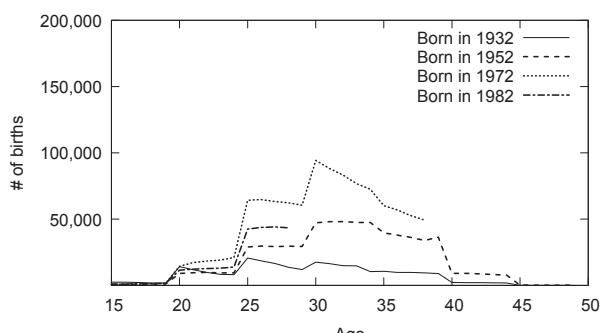


図1：出生コホートと仮想個票から作成したコホートの比較

表 1 : 統計表との誤差

探索回数	誤差の総和	1人あたりの誤差
1回 / 人	130,463,564.6	1.1290
10回 / 人	77,217,391.3	0.6682
100回 / 人	27,555,307.3	0.2385
500回 / 人	23,614,503.8	0.2044

とした。総探索回数はそれぞれ、115,552,530 回、1,155,525,300 回、11,555,253,000 回、57,776,265,000 回である。SA 法の設定として、初期温度を 10.0、収束温度を 0.1 と設定し、冷却関数には指数冷却を用いた。

統計表との誤差を表 1 に示す。表 1 から探索回数を増加するほど統計表との誤差を削減できているが、その効果は限定的である。これは、出生コードホートを用いることで親の出生年毎との出生の傾向を考慮できるものの、提案手法における出生コードホートの調整が不十分であったことが原因である。

5. おわりに

本研究では、従来手法で使用していた年齢差の統計表を出生コードホートに置き換える手法を提案した。従来手法で用いていた年齢差の統計表はある年に出生した 0 歳の子とその親の年齢について集計された統計表である。従来手法では年齢差の統計表を全ての親子の組み合わせに対して適用していた。そのため、親の出生年ごとの出生の傾向が異なる仮想個票が合成されていた。

本研究では、出生コードホートを用いることで親の出生年ごとの出生の傾向を考慮した合成手法を提案した。出生コードホートは親の生年別、出生時の親の年齢別、出生数について集計された統計表である。本研究では出生数を親子の組み合わせ数として用いるため、出生コードホートを親の年齢別、父母の数を推定し、調整して用いた。出生コードホートを用いて合成するためには、出生コードホートの調整方法を十分に検討する必要がある。

著者らは図 2 に例示する日本全国全ての市区町村において仮想個票の合成に成功しており、公的目的

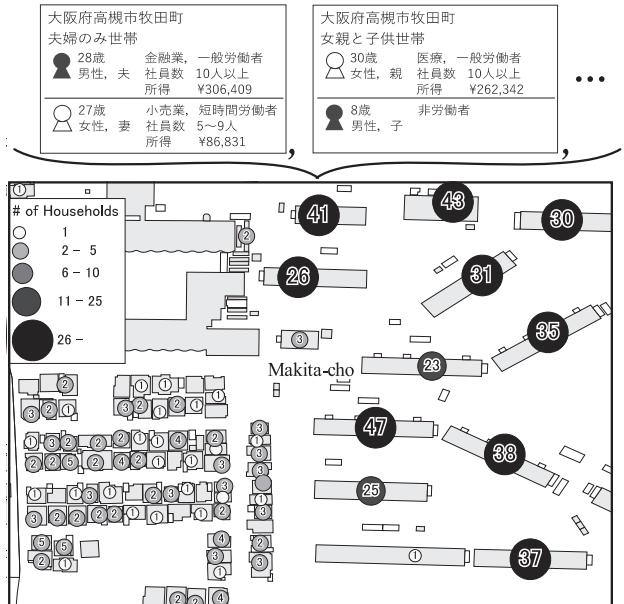


図 2 : 仮想個票の一例
(この地図は国土地理院の基盤地図情報を用いた。)

に限り無償での提供を開始している。利用を希望する研究者の方がおられれば文献[12]の Web フォームから申請いただきたい。

参考文献

- 原田拓弥, 村田忠彦, 計測自動制御学会 システム情報・部門 学術講演会 2019, 554–559 (2019).
- 原田拓弥, 村田忠彦, 計測自動制御学会 システム・情報部門 学術講演会 2018, 6 pages, (2018).
- R. Axelrod, Princeton University Press, (1997).
- 寺野隆雄, 人工知能学会誌, 18, 6, 710–715, (2003).
- 市川学, 計測と制御, 57, 6, 710–715, (2013).
- Y. Goto, Proc. of 2018 IEEE Int. Conf. on Systems, Man, and Cybernetics, 1144–1149 (2018).
- A. G. Wilson and C. E. Pownall, Area, 8, 4, 246–254, (1976).
- M. Lenormand and G. Deffuant, Journal of Artificial Societies and Social Simulation, 16, 4, 1–9, (2013).
- F. Gargiulo, et. al., PLoS One, 5, 1, 266–279, (2010).
- 花岡和星, 地域安全学会論文集, 29, 247–255, (2016).
- 池田心, 他, 第 43 回システム工学部研究会, 11–14 (2010).
- 合成人口データ提供, <http://www.res.kutc.kansai-u.ac.jp/~murata/rsss-distribution/>

国民生活シミュレーションに基づく住宅・業務施設のエネルギー需要予測

山口 容平

大阪大学 大学院工学研究科 環境エネルギー工学専攻

1. はじめに

地球温暖化・気候変動対策として二酸化炭素排出量の大幅削減、早期のカーボンニュートラルの実現が議論されるようになった。これを実現するためには、省エネルギー技術、再生可能エネルギーの普及、電化、水素化などによるエネルギーの転換、再生可能エネルギー等カーボンフリーエネルギー源の出力に合わせた時間的・量的な需要の調整（エネルギー管理）を推進する必要がある。これらの対策は個々の技術としての有効性は確認されているものの、総体として将来におけるエネルギー・システムがどのような構成をし、それをいかに運用すべきか、その結果としてどの程度の二酸化炭素が排出されるか、また、経済的にどの程度の水準で各種エネルギー・サービスが提供されるのか不明確である。このような検討を支援するためには、様々な技術の変化が同時に生じた将来を模擬することができるシミュレータの開発が有効であると考えられる。近年は高い時空間解像度で気象データが提供されるようになり、それらを活用して再生可能エネルギーの発電量の推計等が行われている。一方、エネルギー需要については実態データが広く公開されておらず、データ駆動型のシミュレータは確立されていない。加えて、各種省エネルギー技術が多数導入される将来を想定するためには、手法間の相互作用や、気象など各種条件に対する依存性、人々のライフスタイルなど各種条件を考慮する必要があり、データ駆動型のモデルには機能面で限界がある。建築分野では物理現象論に基づく理論駆動型のモデルが開発されており、一定の進展がみられる。一方、それらを高い時空間解像度で広く展開するためには、気象条件をはじめ、建築、機器・設備、人々の生活行動や建物の運用などに関する膨大なデータが必要となり、技術的に十分な確立がなされていなかった。

このような背景から、著者の研究室では、住宅、業務施設のエネルギー需要を高い時空間解像度で推計するための方法を開発している。以下では住宅のエネルギー需要推計について説明する。詳細は文献[1]に詳しい。

2. エネルギー需要の推計方法

図1に推計方法の概要を示す。図に示すように推計方法は大きく、世帯の生成、エネルギー需要推計のための属性情報の付与、世帯を単位とするエネルギー需要推計の3つの過程に分類される。

世帯の生成過程では、e-Stat[2]に公表されている国勢調査データに基づき、計算対象の地域に居住する全世帯について表1に示す世帯の属性及び住宅仕様の組み合わせを決定する。国勢調査データは小地域と言われる住所の町丁目単位のデータが利用可能であることから、小地域を計算単位とした。本モデルでは表1の項目を表す確率分布を算出し、一様乱数によりランダムサンプリングすることで生成する。サンプリングは非復元抽出とした。

表1：推定する世帯属性・住宅仕様

項目		分類
世帯属性	構成類型	単独、夫婦のみ、核家族、片親世帯(母子、父子)、三世代世帯(両親、片親)
	人数	1-8人
	年齢	0-104歳の5歳ごとの年齢区分
就業・就学形態		フルタイム、パートタイム、小学生、中学生、高校生、短大・専門学校・大学生、その他
職種		管理職、専門職、事務職、販売業、サービス業、保安職、農林漁業、製造業、運輸業、建設業、運搬・清掃・包装業、分類不能の職業
住宅建て方		集合、戸建
所有の仕様	関係	持ち家、公営・都市再生機構・公社の借家、民営の借家、賃貸住宅、間借り
延床面積		0-19 m ² 、20-39 m ² 、40-59 m ² 、60-79 m ² 、80-99 m ² 、100-119 m ² 、120 m ² 以上

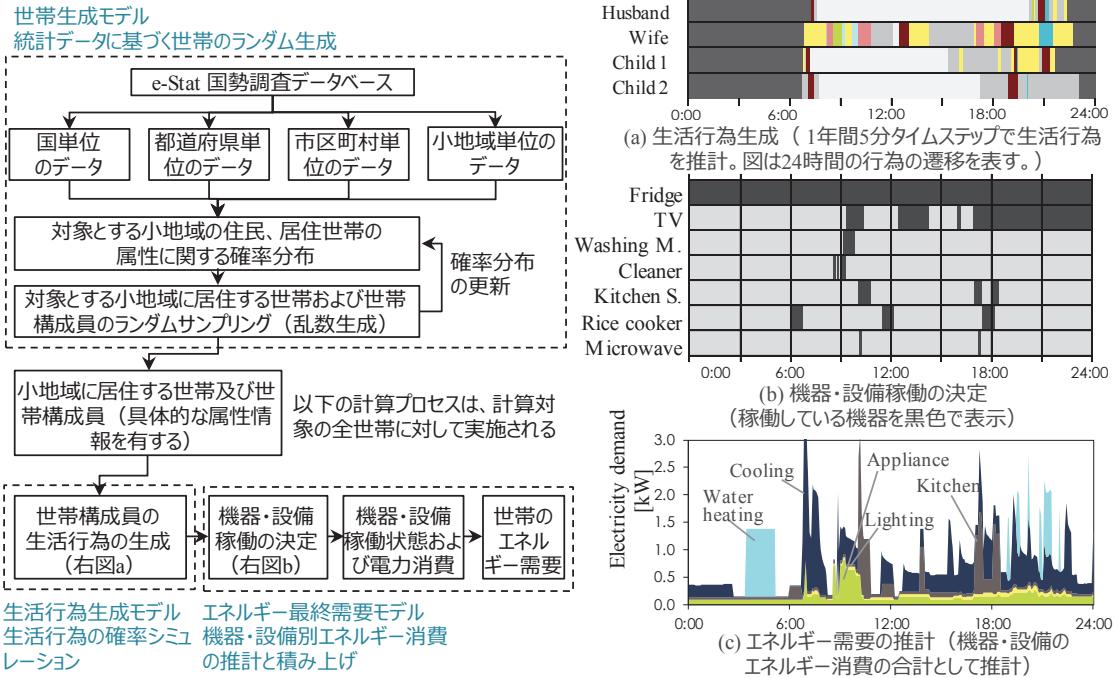


図 1：モデルの概要（左）およびモデルによるエネルギー需要推計手順（右）

次に、生成した世帯に対して住宅の間取り・熱性能、機器・設備の所有状況、生活行動の特性といったエネルギー需要推計パラメータを付与する。これらの条件は世帯生成過程で決定した世帯属性、住宅仕様、加えて、居住地域情報に関連付けて割り当てる。この結果として、世帯の属性や居住地域の影響がエネルギー需要推計結果に反映されることとなる。

エネルギー需要の推計には著者の研究室で開発している Total Residential End-use Energy Simulation (TREES) モデル[3][4]を用いた。本モデルでは、まず、世帯構成員の生活行為を 5 分間隔で生成する。世帯員別の生活行為は睡眠、仕事、外出、テレビ視聴など約 40 種別に分類されており、計算対象日の生活行為の推移が確率生成される[5]。次に生成された生活行為に伴って操作される機器の稼働を決定し、機器の仕様に基づいて決定される機器別エネルギー消費の総和として世帯のエネルギー需要を決定する。テレビや洗濯機などの機器は生活行為と機器稼働の関係を行為実施時稼働確率により規定し、稼働の有無をランダムに決定する。同様に、世帯構成員の在室状況に基づいて照明、空調機器の稼働を決定する。照明では、日射量、住宅仕様を考慮して室内の自然照度を推計して照明の点灯の必要性を判定し、対象

室に設置されている照明の仕様に基づいて点灯時、消灯時の電力消費量を算出する。空調についても同様に自然室温を推計して稼働判定する。空調機器が稼働する場合、快適性条件を満足するために空調機器が製造する熱量を推計し、その熱量を製造するためのエネルギー消費量を算出する。なお、エアコンでは熱製造効率の外気温依存性を考慮する。給湯用途では、給湯行為として洗顔、入浴、炊事（後片付け）、風呂の湯はりを考慮し、各行為に伴って生じる給湯水量と給湯温度を決定する。次に、給湯行為が生じた時刻における上水温度から給湯熱需要を求める。また、浴槽の熱収支から追い炊きの熱量を算出する。上水温度は外気温の関数として与えている。最後に、給湯熱需要に対応する給湯設備の稼働を決定し、給湯設備の仕様に基づいて給湯設備のエネルギー消費を定量化する。

上記の通り照明、空調、給湯用のエネルギー需要を定量化するために気温、湿度、日射量等の気象データを用いた。これら気象データは AMATERASS[6][7]を用い、広域を網羅するデータセットから市区町村の領域からデータを切り出して与えた。これらの高解像度気象データは AMATERASS web[8]にて可視化されている。

3. エネルギー需要の推計結果

上記の通り小地域を単位としてエネルギー需要の推計が可能であるが、本節では市区町村別に推計した電力需要を示す。ここでは全国の市区町村別に500世帯をランダムにサンプリングし、電力需要の世帯平均値を算出した。図2に冬期代表日2017年2月7日、夏期代表日2016年8月9における世帯当たり電力需要推計結果を示す。図では4時、7時、15時、20時、23時の推計結果を表している。図で

はカラーバーで電力需要の大きさを表している。結果の可視化はNICTのAMATERASS web[8]によるものである。なお、冬期、夏期では異なるカラーバーが使用されているので注意されたい。

冬期代表日の結果を見ると、4時において日本海側の地域と四国において比較的高い電力需要がみられる。これらの地域では多く電気温水器が利用されており、深夜電力による蓄熱が行われている。これに対して、関東地方、近畿地方では電力需要が小さ

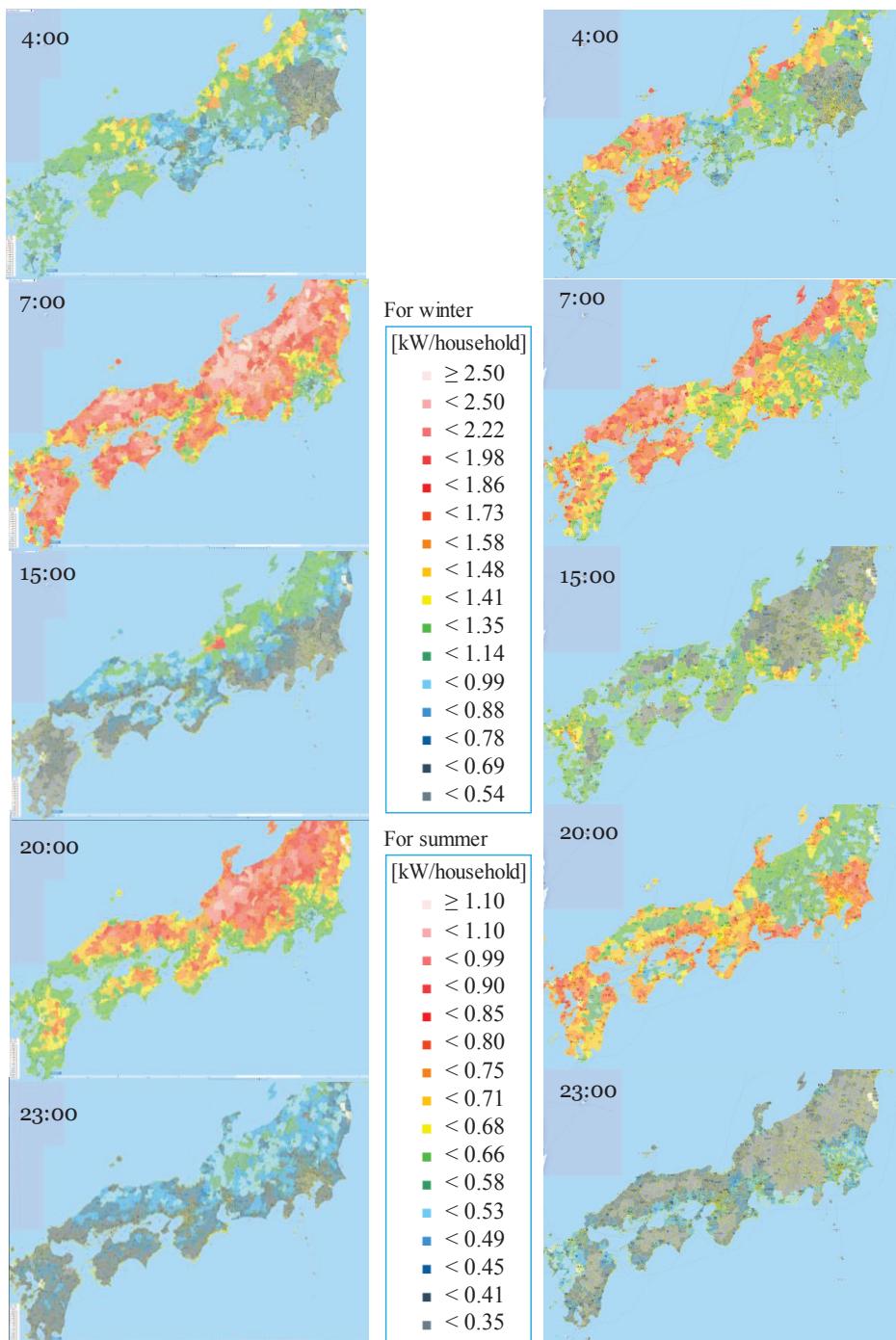


図2：市区町村別の平均電力需要

(左) 冬期代表日 2017年 2月 7日 (右) 夏期代表日 2016年 8月 9日

い。これは都市ガスインフラが利用可能であり、ガス給湯器の比率が高いためである。4時から7時にかけて多くの地域では電力需要が増加する。これは人々が起床し多くの機器が使用されることに起因する。そのほかの時刻も含めて、人口密度が低い地域において電力需要が高く、人口が集中している地域では電力需要が低い傾向がみられる。図において電力需要が高く表示されている地域はその周辺よりも外気温が低く、このような分布が形成された主たる要因は気象条件にある。ただし、図には示していないが、北海道では東北地方よりも電力需要が小さくなつた。これは暖房、給湯において灯油など電気以外が主たるエネルギー源として使用されていることに起因する。

夏期の結果を見ると、冬期とは逆の地域分布がみられ、15時、20時、23時では人口集中地域の電力需要が高い。これは冷房用電力需要の大小に起因する。人口密集地域では外気温が高く、夜間であってもエアコンが使用されている。また、若干であるが都心部では就寝時間が遅く、23時の結果にはその影響も現れている。このような要因により地域的な差異が形成されている。

4. おわりに

これまで建築分野では気象条件、住宅の仕様、給湯・暖房設備の種別、人々の行動が住宅のエネルギー需要に対して大きな影響を持つことを明らかにされてきた。しかし、それらの条件が日本全国でどのように組み合わされ、エネルギー需要が形成されているか明らかにされていなかった。AMATERASSによる高時空間解像度の気象データとエネルギー需要推計モデルを組み合わせることにより、日本全国を対象として、気象条件、住宅ストック、設備・機器ストック、世帯・人口の集積状況を反映し、いかなるエネルギー需要が形成されているか定量化することが可能となった。また、NICTによる可視化により影響因子の時空間的な関係性を理解することができた。今後は、現在の時間断面だけではなく、冒頭に述べたように様々な技術変化が同時に起こった将来的時間断面を想定したエネルギー需要推計を行うこ

と、業務施設を対象とする推計を行うことを予定している。

謝辞

本報告に説明したエネルギー需要推計を大阪大学サイバーメディアセンターで実施するにあたり、大阪大学サイバーメディアセンターの先生方に技術的に支援していただきました。ここに謝意を表します。

本報告は竹中栄晶氏、村田健史氏と著者の研究室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、この研究はJST CREST (JPMJCR15K4)、JSPS 科研費 (20H02312) の助成を受けて実施したものです。

参考文献

- (1) Y. Yamaguchi et al. Proc. 16th IBPSA Conf., 2326–33. doi:10.26868/25222708.2019.211024. (2019)
- (2) 総務省統計局, 2010 年国勢調査,
<http://www.stat.go.jp/data/kokusei/2010/>
(2020.05.22 閲覧)
- (3) A. Taniguchi, A., et al. Energy and Buildings **112**, 80–92, (2016)
- (4) 杉山みなみ他, 日本建築学会環境系論文集 85, 289–98. doi:10.3130/ajje.85.289. (2020)
- (5) Y. Yamaguchi et al. J. Building Performance Simulation 10, 565–581. (2017)
- (6) H. Takenaka et al. J. Geophys. Res. 116, D08215, doi:10.1029/2009JD013337. (2011)
- (7) 太陽放射コンソーシアム, 2020:
<http://www.amaterass.org/> (2020.05.22 閲覧)
- (8) NICT, 2020: AMATERASS Web,
<https://amaterass.nict.go.jp/index.html>
(2020.05.22 閲覧)

SU(3)ゲージ理論におけるリサーチェンス構造

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

物質の基本構成要素である「クォーク」とその間の力を媒介する粒子である「グルオン」は、量子色力学(QCD)で記述される。これらクォークやグルオンは、低温で原子核程度の大きさの中に「閉じ込め」られており、単体で取り出すことができない。このことは、大雑把には結合定数が小さいと仮定した「摂動論」による解析計算で、QCD および SU(3)ゲージ理論が漸近的自由性を持つことと、それらの理論の非摂動論的定式化である「格子ゲージ理論に基づく数値計算」でその特徴が確認されている事によって信じられている。

しかしながら、この解析的な計算のできる「摂動領域」と、格子理論で計算されている「強結合領域」が【途中で相転移することなく一つの理論としてかけているのか?】ということが未だわかつていない。弱結合領域における摂動計算は、格子摂動論を用いて数値的に高次(35 次)の計算が行われ、摂動級数展

開が収束しない事が示唆されている(Bali et al. 2014)。そして、その発散の振る舞いから、ボレル総和法を用いても物理量に不定性が残ると考えられている。

これに対し QCD と同じような性質をもつ量子力学系や 2 次元の模型において、理論の時空を変形すると、摂動級数のボレル和の不定虚部と、その時空に出現する分数電荷をもつトポロジカル・オブジェクトからの不定性が相殺することで「理論がリサーチェンスする」というアイデアが提案されている。近年、様々な低次元模型でこのリサーチェンス構造が確かめられてきた(Unsal et al., Fujimori et al.)。この際に鍵となるのは「分数電荷を持つトポロジカル・オブジェクト」の存在である。近年 4 次元 SU(3)ゲージ理論に対しても、同様な時空変形を行う事でこれまで考えられていなかった「分数電荷をもつインスタントン解」の存在がモジュライ数のカウントから示唆された(Yamazaki-Yonekura, 2017)。

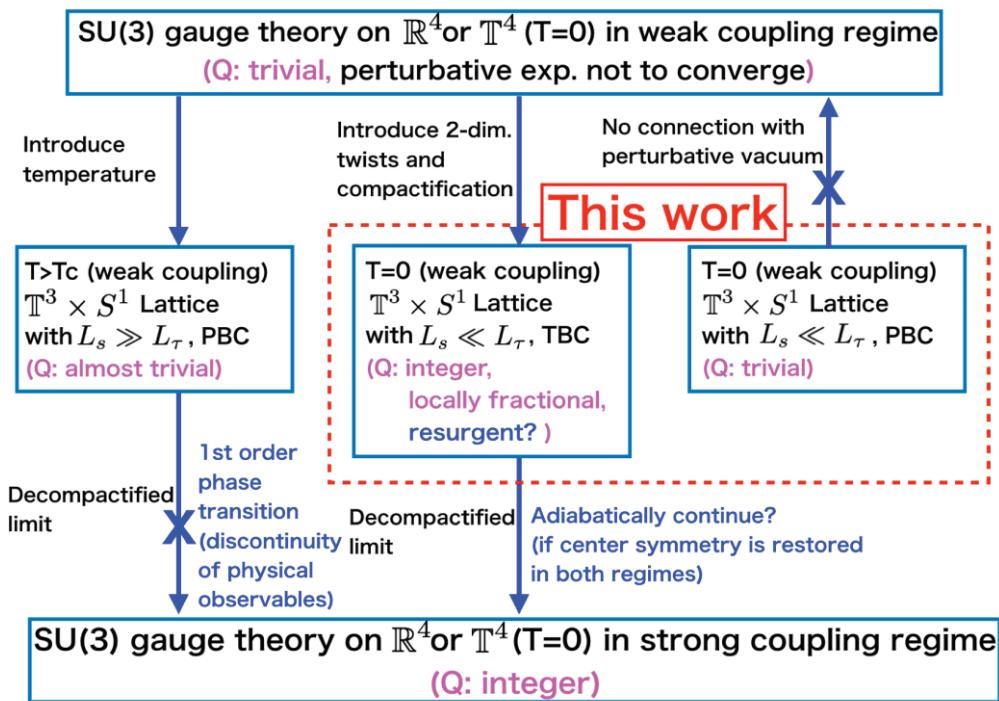


図 1:本研究の位置づけ

本研究では、連続極限で Yamazaki-Yonekura の時空構造になる格子時空での、ゼロ温度 SU(3)ゲージ理論を考える。その時空は、空間の 2 方向をコンパクト化しツイストした境界条件を課したものである。そして、その変形した時空上で「分数電荷をもつトポロジカル・オブジェクト（インスタントン）の存在」「弱結合領域から強結合領域への連続性」「リサーチェンス構造」を、第一原理計算で明らかにする事が本研究の目的である。

特に今年度は、図 1 で示したように、分数インスタントンの存在と、中心対称性と閉じ込めの関係、インスタントン解が運動方程式を満たすかなどについて調べた(文献[1])。

2. ツイストした時空でのトポロジー(理論的背景)

全方向が周期的境界条件を持つ 4 次元トーラス上の SU(3)ゲージ理論には、ヤンミルズ方程式の自己双対(反双対)解が存在しないことは知られている(文献[2])。一方で、4 つの次元全ての方向にツイストした境界条件を課すと、解が存在するがその解は $1/3$ の分数電荷を基本単位とするインスタントン・反インスタントンになる事も文献[2]で示されている。

格子 QCD の分野でしばしば低温領域において非自明なトポロジカル電荷を持つインスタントン解が測定できるのは、低温の格子は格子サイズの大きな格子に対応しており、そのような状況では境界条件の影響が無視できるため本来ならツイストした境界条件で見える解の近似解が見えているに過ぎない。

実際に、時空構造によるインスタントン解の振る舞いの違いを見るためには、低温に保つために虚時間方向の格子サイズは大きくしたまま、空間方向の格子サイズを小さくした状況に対応する。またリサーチェンス構造を見るために弱結合領域でのシミュレーションを行うため、非常に大きな β (格子上の結合定数の逆数) が大きい領域を調べる。

さらに、前述の文献[2]のように 4 次元全ての方向にツイストを行うと、SU(3)ゲージ理論にあるグロー

バースな対称性が $SU(3)/Z_3$ に破れてしまう。これを避けるため、空間 2 つの方向にツイスト境界条件、残りの空間 1 次元と虚時間方向は周期的境界条件を課す。

このセットアップに対応する連続理論は、Witten による文献[3]で議論されており、厳密解の存在が示唆されていた。それによると、この時分数のトポロジカル電荷をもつインスタントン(反インスタントン)が存在し、さらにそのようなインスタントンが現れると、ポリヤコフループの複素位相が変化することが示唆されている。

3. シミュレーションセットアップ

本研究では、格子作用として Wilson-Plaquette ゲージ作用を用い、擬熱浴法と過緩和法を用いて配位を 100 個生成した。格子パラメータは、 $\beta=16.0$, $N_s=12$, $N_\tau=60$ とし、この時、文献[4]によると繰り込んだ結合定数は $g^2 \sim 0.7$ の弱結合領域に対応する。

トポロジカル電荷を調べるため、生成した配位にクーリング法を用いて、ゲージ配位を古典解に近づけた。

4. シミュレーション結果

まず同じ格子パラメータを用いて、4 次元方向全てが周期的境界条件を課した場合と、2 次元部分にツイストした場合で時空全体に生じているトポロジカル電荷を調べた。すると、全方向が周期的境界条件のときは予想通り全ての配位でトポロジカル電荷はゼロとなっていた。一方で、ツイストした時空上には、-2 から+3 の整数のトポロジカル電荷(Q)を持つ配位が現れた。

さらにその各時空での電荷分布を調べると、図 2 のように、虚時間方向の関数として典型的に 4 つの電荷分布が存在することがわかった。

Type I : $Q=0$ で局所的な電荷も全ての τ でゼロ

Type II(a) : Q が整数で、局所的に一つのピークを持

つ

Type II(b) : Q が整数で、局所的に複数のピークを持つ

Type II(c) : Q が整数で、全体的にノンゼロの電荷を持つ

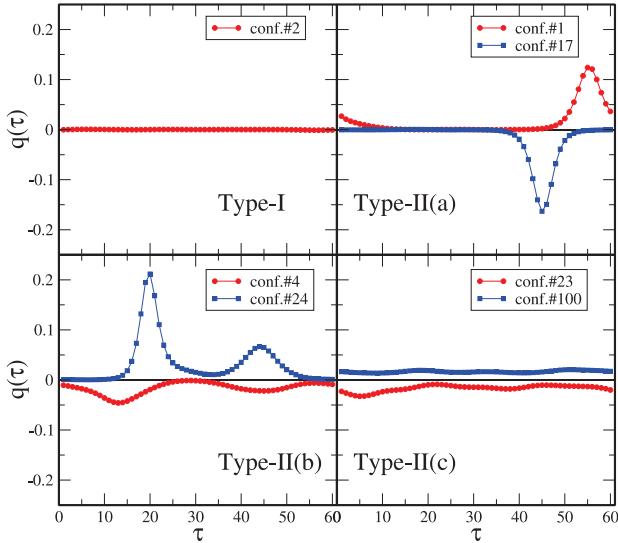


図 2: ツイストした時空上に現れる局所電荷の分布

この中で特に Type II(b)に当たる複数の電荷を持つ配位に注目し各ピークの電荷を足すと、その大きさは全て $1/3$ の整数倍になっていることがわかった。つまり、Type II(b)では時空全体としては整数電荷のインスタントンが生じているように見えるが、その整数インスタントンは複数の分数インスタントンから構成されているとわかった。

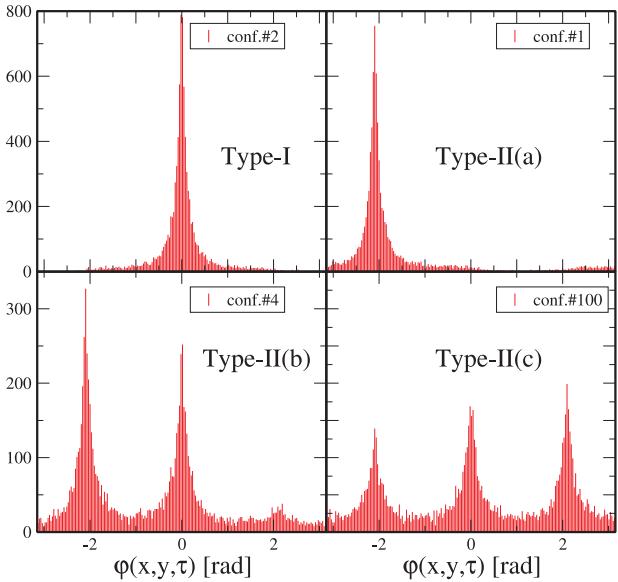


図 3: ポリヤコフループの位相のヒストグラム

次に、それぞれの Type の配位におけるポリヤコフループの様子を調べた。ポリヤコフループの位相を調べると、図 3 のようにタイプによってその分布が異なることがわかる。Type I と II(a)では位相は Z_3 対称な真空のいずれか一つに局在するが、Type II(b)では 3 つのうち 2 つの真空に局在、さらに Type II(c)では 3 つ全ての真空にほぼ均等に存在することがわかる。

局所的に分数インスタントンが生じている配位について、このポリヤコフループの位相（青）と図 1 に示した局所的なトポロジカル電荷（赤）の τ 座標依存性を示したのが、図 4 である。

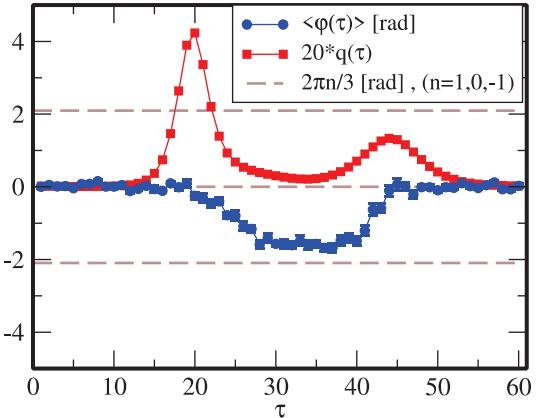


図 4: ポリヤコフループの位相（青）と図 1 に示した局所的なトポロジカル電荷（赤）の τ 座標依存性

これを見ると、赤のデータのピークの位置で、青のデータが値を変えることがわかる。つまり、分数インスタントンが生じたところで、ポリヤコフループの位相が回転することに対応する。これは文献[3]で指摘されていた性質であり、この格子計算によって、その存在が確かめられたことを意味する。

さらに、ポリヤコフループの大きさの格子サイズ依存性も示した。分数インスタントンが生じると、弱結合領域でも中心対称性が回復する。一般には中心対称性が回復することは「閉じ込め」を意味する。しかしながら、弱結合領域は理論的に漸近的自由性がありカラーを持つ粒子も自由に動いているはずである。

これを調べるため、周期的境界条件を課し本当に閉じ込めの起こっている系の格子サイズ($N\tau$)依存性(青)と、ツイストしたの格子計算での格子サイズ依存性(赤)を調べた。すると、本当に閉じ込めが起こっている場合には、データの格子サイズ依存性は見られない。これは既に赤外のエネルギースケールが閉じ込めスケール(ラムダスケール)になっているためである。

一方で、ツイストした時空での計算結果は格子サイズ依存性があり、これはまだ赤外のスケールが閉じ込めスケールではなく、格子サイズになっていることを示す。つまり一見中心対称性が破れていなくても、そのダイナミクスは、従来の閉じ込めと同じではないことを示唆している。

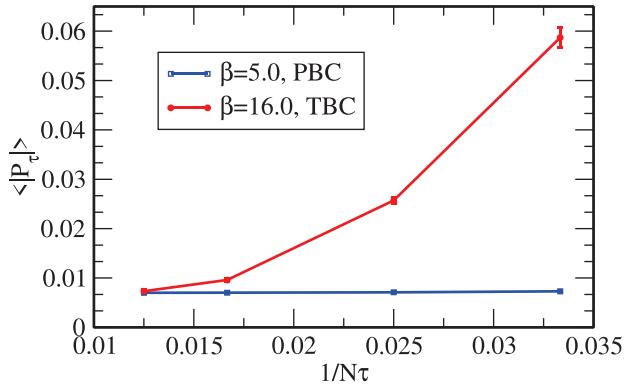


図5：ポリヤコフループの大きさの $N\tau$ 依存性

5. まとめ

本研究では、4次元トーラスのうち、2方向にツイストした時空構造を考えることで、これまでの格子計算では知られていなかった「複数の分数インスタントンから構成される整数インスタントン解」を見し、その性質を調べた。この研究期間中にさらにこの低次元有効模型である CP^N 模型への応用も行い、同じようなツイスト境界条件を課すことで分数インスタントン解が生成されることもわかった(文献[4])。また断熱的連続性についても格子計算による第一原理計算から調べており、今後の発展も期待されている。

最後に、本研究を遂行するにあたって、日頃からシステムの運営を支えてくださっている方々に深く感謝致します。

参考文献

- (1) E.Ito, JHEP 1905 (2019) 093, PoS LATTICE2019, 014
- (2) G. 'tHooft, NPB153(1979)141, Commun.Math.Phys.81 (1981) 267
- (3) E. Witten, NPB202(1982)253
- (4) E.Ito, PTEP2013 (2013) no.8, 083B01
- (5) T. Fujimori, E. Ito, T. Misumi, M. Nitta, N. Sakai, T. Fujimori, E. Ito, T. Misumi, M. Nitta, N. Sakai, Phys.Rev. D100 (2019) 094506, PoS LATTICE2019 (0) 015

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

奥村 幸彦

香川大学 創造工学部 機械システム工学領域

1. はじめに

近年、水素を効率よく運搬・貯留するために水素キャリアとしてアンモニアが注目されている(図1)[1]-[2]。工場では余ったアンモニアを水素用途のみではなく、直接的に CO₂ フリー燃料として熱利用することが実用的観点から望まれる[2]。アンモニア(NH₃)は、H₂ と比較してカロリーベースの高い燃料(383 kJ/mol-NH₃)でありながら、その火炎伝搬速度が低い[2]-[4]ため、即ち難燃性を示すために燃料としての利用度は低い、かつ強制的に燃焼させると大量の NOx (有害排ガス) を生成する。直接燃焼の実現のためには、NH₃ の最適な燃焼方法の設計と燃焼メカニズムの解明が必要である。一般的に、乱流燃焼の場合に高負荷(単位体積当たりの発熱量の増大)が可能となり、ボイラ設計において装置の小型化が可能となる。そこで本研究では、アンモニアを水素保炎により安定燃焼させ、先ずアンモニアの火炎構造を数値計算で明らかにする。火炎構造と新燃料であるアンモニアの燃焼反応を詳細にふまえた上で、高負荷燃焼および低 NOx 化を可能とする狙いがある。

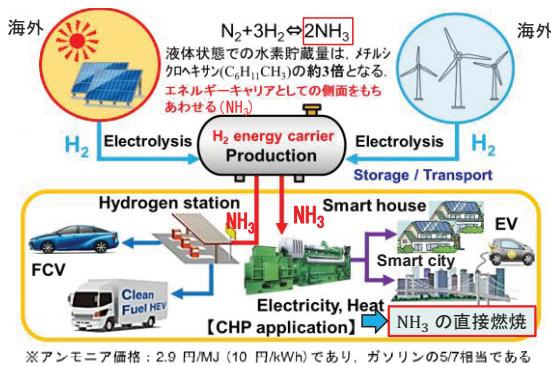


図1: NH₃ キャリアによるサプライチェーンの構想

2. 反応性熱流体計算

2.1 バーナーコンセプトおよび解析手法

図2(写真)に示すように、重管の内側よりそれぞ

れアンモニア、水素、空気を流すことで保炎されたアンモニア火炎が発生する。重管の内側よりアンモニア、水素を別々に 3m/s で流し、高速空気流 U_H、周囲流をそれぞれ 3m/s として生成した火炎を「同軸噴流拡散火炎」と定義する。「3 重噴流拡散火炎」は、バーナー中心から燃料流(NH₃ 及び H₂)を 3m/s で、高速空気流 U_Hを 3.0~11.0 m/s で、周囲空気流を 3m/s でそれぞれ噴出した場合と定義するが、特に高速空気流 U_Hが 8m/s の条件を代表的な 3 重噴流拡散火炎と位置づける。図2右図に示すように、中心軸対称の流れ場を設定した。支配方程式(1)~(9)を解く。

・質量保存方程式(連続の式)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = \rho_0 \quad (1)$$

・化学種の質量保存方程式

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_s u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) + \omega_s \quad (2)$$

・エネルギー方程式

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho h u_j) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + Q \quad (3)$$

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \quad (4) \quad D_s = D = \frac{\mu}{\rho S c} \quad (5)$$

・気体の状態方程式

$$p = \rho R_0 T \sum_{s=1}^N \frac{Y_s}{M_s} \quad (6)$$

・運動量保存方程式(NS 方程式 → RANS)

$$\frac{D U_i}{D t} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-R_{ij}) + \nu \Delta U_i \quad (7)$$

$$R_{ij} = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \frac{\mu_T}{\rho} \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_x} + \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) \quad (8) \quad \mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (9)$$

ρ : 密度 [kg/m ³]	Y_s : 化学種 s の質量分率 [-]
u_j : 流速ベクトルの x_i 方向成分 [m/s]	ρ_0 : 生成消滅項
$S c_s$: 化学種 s のシェミット数 [m/s]	μ : 粘性係数 [Pa·s]
ω_s : 化学反応による Y_s の生成や消滅を示す項	p : 圧力 [Pa]
h : エンタルピー [kJ]	Q : ソース項
λ : 热伝導率 [W/m·K]	R_0 : 一般ガス定数
M_s : 化学種 s の分子量	U_i : 平均流速度 [m/s]
R_{ij} : レイノルズ応力 [m ² /s]	ν : 動粘度 [m ² /s]
k : 乱流エネルギー [m ² /s ²]	ε : 乱流エネルギー散逸率 [m ² /s ³]
δ_{ij} : クロネッカーデルタ	

以下、同軸噴流拡散火炎（層流燃焼）と3重噴流拡散火炎（乱流燃焼）を比較し、火炎構造を調査する。

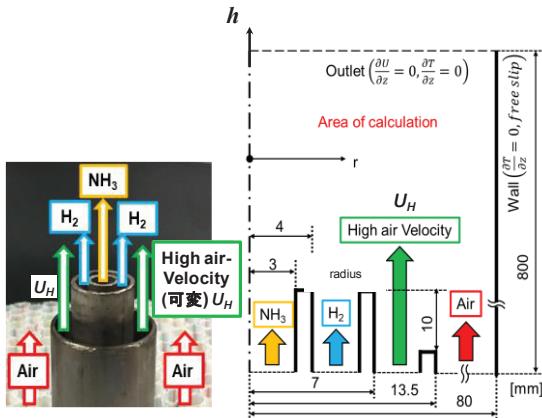


図 2 : 解析モデルの概要図

2.2 計算領域と計算格子

図 3 に示すように、計算領域は 1 重管流入部を原点とし、噴流方向を h 軸に設定した。中心角は、計算負荷を軽減する目的から 5° にし、軸対象設定とした。計算格子点間隔は不等間隔であり、乱流発生領域と考えられるリム付近等では計算格子が細かくなっている。下流域または 中心軸から半径方向に大きく離れた場合には計算格子が粗くなる。計算領域のサイズは流れ方向に 800 mm、半径方向に 80 mm、それぞれのリム厚さは 1 mm、総格子点数は 87963 点である。本研究では素反応機構（GRI Mech 3.0 + Okafor モデル：66 式）を用いて解析を行った[5]-[6]。

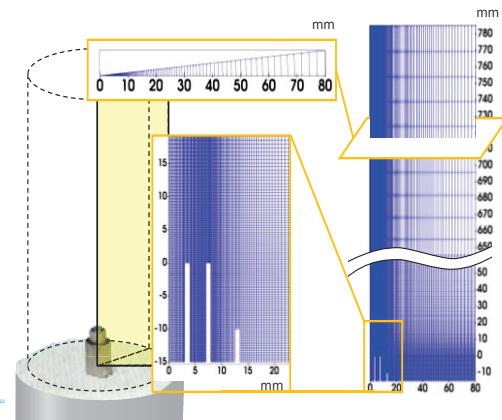


図 3 : 計算領域と計算格子

3. 大規模数値解析の結果と考察

3.1 温度分布に及ぼす高速空気流の影響

3 重噴流拡散火炎における半径方向の温度分布（計算値、実験値）をそれぞれ図 4、図 5 に示す。3

重噴流（乱流混合）では中心軸上の高さ方向 h に対して燃焼反応が急速に進む。上流における中心軸上の温度分布は、燃料のみであるため温度が低く、燃料と空気の共存域(Flame zone)において最高温度に達する。実験値、計算値のどちらも上流火炎基部附近では 2 ピークを有する鞍型分布となり、下流に移行するに伴い正規分布型の温度分布に変化する。

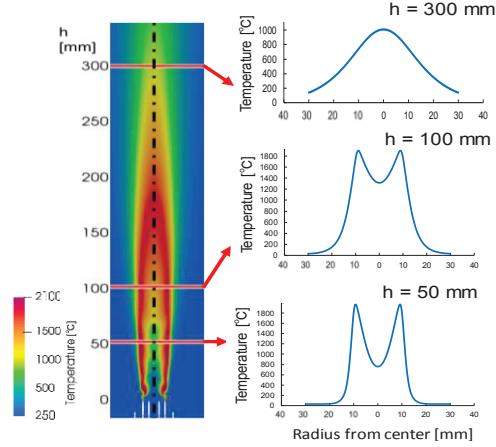


図 4 : 半径方向の温度分布(計算結果 : $U_H = 8.0$ m/s)

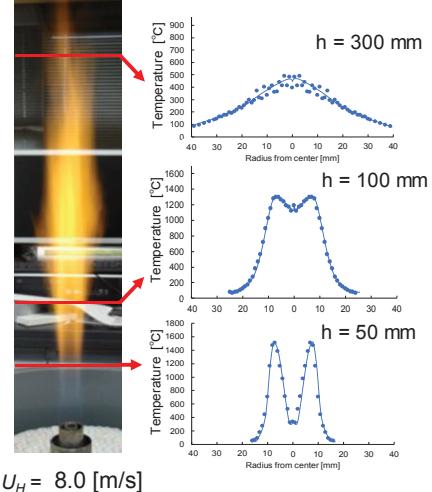


図 5 : 半径方向の温度分布(実験結果 : $U_H = 8.0$ m/s)

ここで、同軸噴流拡散火炎（層流火炎）における温度分布（計算値）を図 6 に示す。反応が緩慢で半径外側への燃料の拡散時間が増加するので、層流での火炎帯の半径が乱流火炎のそれと比較して外側に広がり、火炎長さも 3 重噴流拡散火炎と比較して長い。（図には示さないが、半径方向温度分布および中心軸上温度分布の双方が実験と一致する。）図 7 に、3 重噴流拡散火炎における高さ $h = 14\text{mm}$ 、 28mm 、 111.5mm の高さでの半径方向のせん断層域 ($|dU/dr|$)

を示す。中央流と高速空気流の間で大きな速度差が生じ、強いせん断が生じている。同軸噴流拡散火炎において中心燃料噴流と周囲空気流の間にもう一つの高速空気流が付加され、これにより火炎周辺部に乱れを与えることができ（即ち、強い乱流混合が実現でき）、水素火炎から中心部への高速な熱移動が起こる（図8）。外側から中心部へ高濃度のOH, Hの供給により難燃性NH₃の燃焼が維持される。数値計算においても、乱流混合と反応促進された短い火炎が観測され、安定な高負荷燃焼が実現化できている。

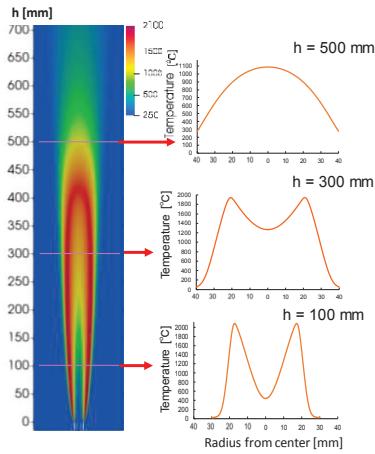


図6：半径方向の温度分布(計算結果： $U_H=3.0\text{m/s}$)

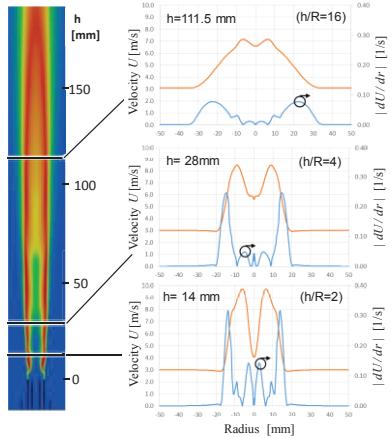


図7：上流から後流に至る半径方向速度とせん断領域分布 ($U_H=8.0\text{m/s}$)

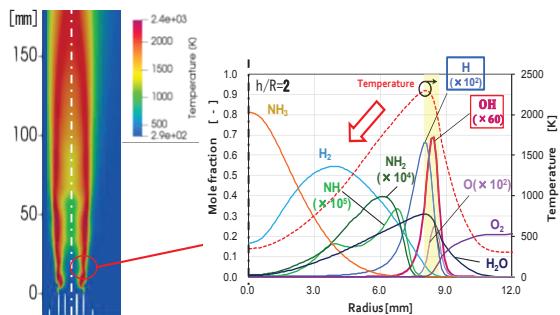
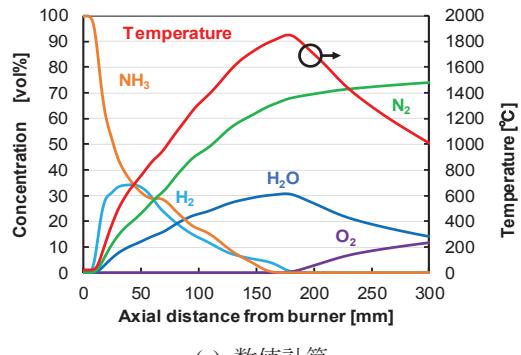


図8：半径方向のラジカル及び温度分布($U_H=8.0\text{m/s}$)

3.2 火炎構造に及ぼす高速空気流の影響

3重噴流拡散火炎の燃焼構造を図9に示す。計算値の中心軸上温度は、バーナー高さ178mmで、実験値では140mm付近で最高値に至る。燃料であるNH₃、H₂は、計算値においては高さ160mm, 180mmで、実験値ではそれぞれの高さ150mm, 200mm付近で消費される。拡散火炎における最高温度は中心軸上NH₃が完全に消費される位置（高さ）と一致する。シミュレーション結果の中心軸上温度分布および化学種分布は実験結果とほぼ一致し、その精度が検証できた。3重噴流拡散火炎（乱流火炎）での中心軸上のH₂濃度は同軸噴流拡散火炎（層流火炎）でのそれと比較して低い。これは、乱流混合により補助水素が乱流燃焼に初期に消費され、軸中心へのH₂の拡散量が低く抑えられるためであった。加えて、3重噴流では乱流拡散係数が大きいため、NH₃火炎の中央に至る燃焼速度が速く、火炎長が短くなる。（難燃性NH₃の高負荷燃焼が実現化できている。）

図には示さないが、層流火炎では強い渦（混合）が発生しないため、乱流火炎と比較して燃料と空気の混合が緩やかに進み、温度も緩やかに上昇する。層流における中心軸上温度、化学種分布及び火炎長においても実験結果と一致することを確認している。



(a) 数値計算

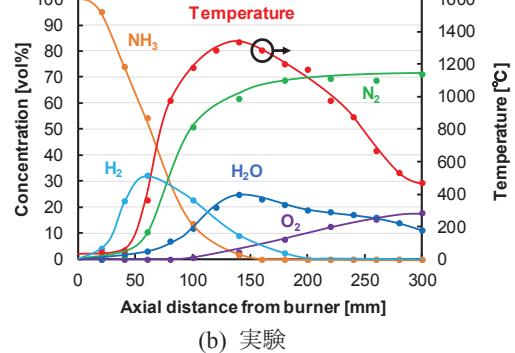


図9：中心軸上での化学種濃度分布 ($U_H=8.0\text{m/s}$)

3.3 火炎安定性に及ぼす高速空気流の影響

図 10 上の写真に示すように、NH₃-air 火炎の発光スペクトルは、黄色～オレンジ色の化学発光を示す。NH₃-air 火炎では 543.6 nm から 650 nm にかけて特徴的な発光スペクトルが観察され、その主たる発光は NH₂スペクトルであることが知られている[2]。

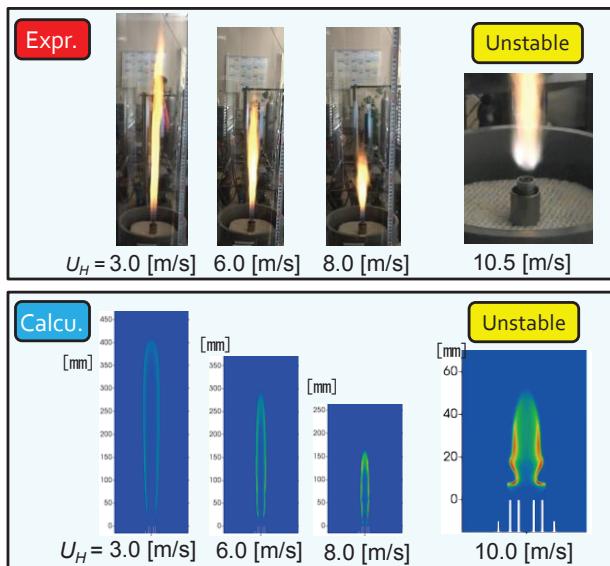


図 10：火炎長に及ぼす可変空気流 U_H の影響

このため、本計算ではバーナーのリムを原点として、 h 軸方向に NH₂ 化学種濃度を抽出することで火炎長が整理された（図 10 下）。可変空気流速を 3 m/s から 10 m/s で変化させたとき、実験では流速の増加とともに火炎長は短くなり、火炎半径も同様に小さくなる。 U_H が 10.5 m/s で不安定となり火炎の浮き上がりが生じた。同様に、計算においても、上記の現象が、即ち流速増加に伴う乱流混合の促進度合がよく一致した。計算では、難燃性のアンモニアが 8~9 m/s 近くの高速気流中でも安定に燃焼維持できること、10.5 m/s で火炎の不安定化が生じる。即ち、安定性の限界がシミュレートできた。不安定性はバーナー基部における火炎振動に起因する。

3.4 NOx 生成に及ぼす流れ場（層流・乱流）の影響

数値計算より、（図には示さないが、）NH₃ 単体燃焼では NOx の最大発生位置で 10000 ppm 超の NOx が発生するのに対し、水素火炎で包含する手法では 2000~3000 ppm まで抑制できることが示された。こ

れにより本バーナーの設計コンセプトの妥当性が示された。加えて、空気中の N₂ を起源とする Thermal NOx 生成と燃料中の N 成分を起源とする Fuel NOx の生成を分離することで NOx の生成機構を明らかにした。Thermal NOx は、リム近傍の水素炎付近でのみ発生し、Fuel NOx 値に比べて小さい。図 12 に、N 系の主要なパス（NOx の生成・消滅反応速度）を示す。乱流火炎では水素-空気の激しい混合により NH 系ラジカルと O ラジカル、OH ラジカルの反応が増大することで、層流火炎に比べて NO 生成が促進されることがわかった。今後、さらに数値シミュレーションを駆使し、バーナー開発を進めていく。

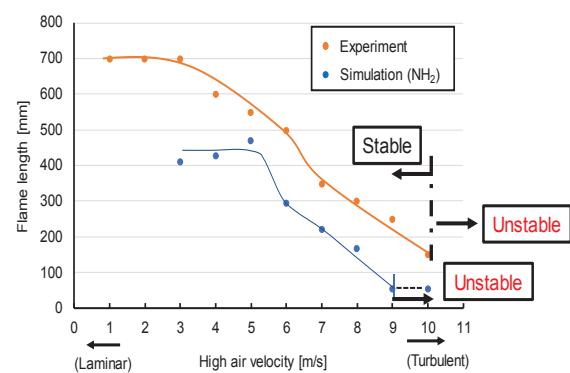


図 11：乱流強さを変数とした安定燃焼の範囲

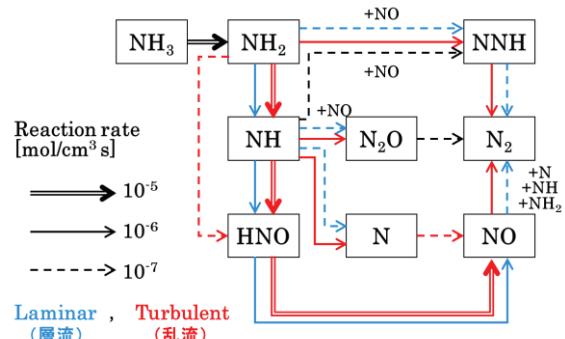


図 12：NO の生成機構（最大発生位置での反応）

参考文献

- [1] Y. Kojima, J. Surface Sci. Soc. Japan 36, 583-588, (2015).
- [2] H. Kobayashi, et al., J. Comb. Soc. of Japan 58-, 41-48, (2016).
- [3] A. Hayakawa, et al., Mech. Eng. J. 2, No.14-00402, (2015).
- [4] U.J. Pfahl, et al., Comb. Flame 123, 140-158, (2000).
- [5] Berkeley, GRI-Mech, <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/>, (2020-02-13 confirmed)
- [6] E.C. Okafor, et al, Comb. Flame 187, 185-198, (2018).

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、金谷 和至*

筑波大学 計算科学研究センター、*筑波大学 宇宙史研究センター

1. はじめに

ビッグバン宇宙論によると、138 億年前の宇宙創世直後では、宇宙全体が極めて高温・高密度の状態にあり、現在我々が知るものとは全く違う物質状態にあったと考えられている。ビッグバンからの膨張・冷却により、宇宙年齢 10^4 秒頃（温度約 1 兆度）に、個々のクォークが特定のハドロンから解放されて飛び回る「クォーク・グルオン・プラズマ(QGP)状態」（高温相）から、クォークが陽子や中性子など（ハドロン）の中に閉じ込められている「ハドロン状態」（低温相）への相転移があったと考えられている。この QCD 相転移により用意された陽子や中性子が重力などで集積し、超新星爆発やブラックホール周辺の物理過程などを経て、生命の発生にも繋がる様々な原子（元素）へと物質進化する。QCD 相転移の解明は、我々の知る元素がいかに創成されたかの初期状態の解明でもあり、宇宙史を理解する上で極めて重要である。

これは複雑で多様な現象であると同時に本質的に非摂動的な問題であり、信頼できる情報を得るためにには、クォークの基礎理論である量子色力学(QCD)の第一原理に直接基づく格子 QCD シミュレーションが不可欠である。これまで多くの研究は、計算量が比較的少ないスタガード型と呼ばれる格子クォークを用いて行われているが、連続極限で現実の QCD を再現することが証明されていないという本質的問題を孕んでいる。我々は、理論的基礎が確立している Wilson 型格子クォークを用いて、QCD 相転移の性質と、相転移近傍の温度でクォーク物質がどのような熱力学特性を示すかの大規模シミュレーション研究を推進している。

2. 研究方法

Wilson 型クォークは、連続極限の正しさが保証

されている反面、有限の格子上ではカイラル対称性を陽に壊しているため、カイラル対称性に関わる物理量に関して格子化誤差が大きく、それを取り除いて物理量を計算するために膨大な計算資源が要求されるという困難があった。

また、並進対称性に伴う保存カレントとして定義されるエネルギー運動量テンソルは系の力学特性を調べる上で基本的な観測量だが（例えば、対角成分はエネルギー密度や圧力などの情報を含み、2 点相関関数から様々な粘性率が導かれる）、格子上では連続的な並進対称性が離散的なものに壊されているため、従来の方法では、5 種類の演算子の非自明なくりこみと混合を非摂動論的に決定するという、複雑で困難な作業が要求されていた。

我々は、Gradient flow（勾配流）に基づいて鈴木博らにより開発された **SFtX 法 (small flow-time expansion method)** を応用して、これらの困難を緩和する[論文 1]。勾配流とは、仮想的な時間パラメータ t (flow-time)を導入して一種の拡散方程式により場の量を変形・平準化(smear)させる手法で、 $t > 0$ ではフローさせた場で作る演算子が紫外発散も同一点特異性も持たないという目覚ましい特性を持っている。SFtX 法は、勾配流のこの有限性を活用して、連続極限のくりこまれた物理量に対応する量を格子上で評価する一般的な計算方法である。格子化により有限格子上では陽に壊されてしまう対称性と結びついた物理量でも直接評価できる。

動的クォークを含まないクエンチ近似 QCD による試験研究によって、SFtX 法の有用性が示されている[論文 2]。我々は、SFtX 法が並進対称性の破れだけでなく、Wilson 型クォークのカイラルの破れの困難にも有効であることに着目し、**2+1 フレーバーの動的クォークを含む現実的 QCD に SFtX 法を応用**した一連の研究を推進している。

3. u,d クォークが重い $N_f=2+1$ QCD での試験研究

動的クォークを含む QCD への応用の第一段階として、s クォーク質量は現実に近いが u,d クォークは現実より重い $N_f=2+1$ QCD を、格子間隔 $a \approx 0.07\text{fm}$ の格子で調べた[論文 3]。温度 $T = 1/(aN_t)$ は、温度軸方向の格子サイズ N_t で変化させる。

エネルギー運動量テンソルの対角成分から計算した状態方程式の結果を図 1 の左に示す。赤丸が SFtX 法の結果で、黒三角は従来の積分法の結果である。 $T < 300\text{MeV}$ ($N_t \geq 8$) で従来の結果を良く再現している。他方、 $T > 300\text{MeV}$ の不一致は、 $O((aT)^2 = 1/N_t^2)$ の格子化誤差が $N_t < 8$ で無視できないことを示唆する。右図には、ud クォークのカイラル感受率を示す。従来の方法では複雑なくりこみや演算子混合が要求されていたが、SFtX 法により直接計算可能になり、Wilson 型クォークとして初めて、相転移温度 190MeV 近傍で明確なピークを示す結果を得た。

図 2 では、位相感受率を示す。位相感受率はアクシオン質量と比例しており、その温度依存性はアクシオンが宇宙暗黒物質の候補となるかの判定で重要なが、格子上では評価の難しい量であった。SFtX 法により、2 種類の評価式 (gluonic と fermionic) で一致する、信頼性の高い結果を得た。

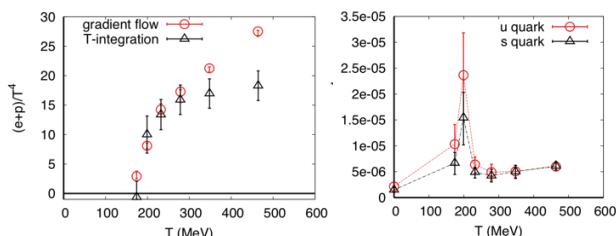


図 1 : u,d クォークが重い $N_f=2+1$ QCD の熱力学。
左:エントロピー、右:カイラル感受率 [論文 3]

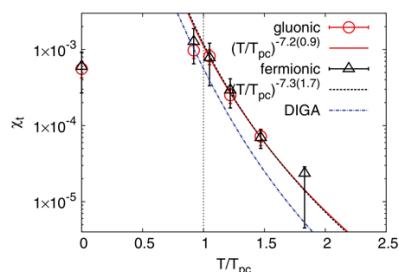


図 2 : u,d クォークが重い $N_f=2+1$ QCD の熱力学。
位相感受率 [論文 4]

4. 現実のクォーク質量の $N_f=2+1$ QCD の研究

この研究を発展させ、現実のクォーク質量（物理点）での研究を推進している[論文 5,6]。ゼロ温度配位として PACS-CS Collaboration が生成したものを活用し、それと同じ格子間隔 $a \approx 0.09\text{fm}$ で有限温度シミュレーションを実行している。SFtX 法により、物理量の観測に関しては計算量を削減ができたが、物理点の配位生成には大きな計算が要求され、様々な計算機資源を動員して系統的な大規模シミュレーションを遂行している。これに加え、2019 年度には、SFtX 法の改良として、くりこみスケールの研究と、マッチング係数における高次項の効果の研究なども行った[論文 6]。

4.1 SFtX 法におけるくりこみスケールの研究

SFtX 法では、求めるくりこまれた物理量を $t > 0$ にフローさせた格子上の演算子とマッチング係数で結びつけ、 $t \rightarrow 0$ の極限を取ることにより物理量を計算する。QCD を含む漸近自由な理論では、 $t \approx 0$ で摂動論が有効であり、マッチング係数を摂動計算できる。

このマッチング係数の計算におけるくりこみスケール μ は、摂動計算が破綻しない限りどんな値をとっても良く、物理量の最終結果は μ に依存しない。通常は、フローさせた演算子の自然なスケールのひとつである $\mu_d = 1/(8t)^{1/2}$ (\sim フローによる平準化範囲のスケール) を取るが、それと同程度ならば何をとっても良い。他方、SFtX 法で $t \rightarrow 0$ 外挿を実行する上で、どこまで大きな t まで利用できるかは実用上重要である。 t が大き過ぎると赤外領域に入り、摂動計算が破綻する。摂動展開の良さは、 μ の取り方で変化する。

図 3 に、くりこみスケールとして、従来の μ_d を使った結果と、最近 Harlander らにより提案された $\mu_0 = 1/(2\pi r t)^{1/2} \approx 1.5 \mu_d$ 、ここで r はオイラー数 [論文 7] を使った結果を比較する。物理点の $N_f=2+1$ QCD で、エントロピー密度（左図）と ud クォークのカイラル感受率（右図）の、無次元 flow-time t/a^2 依存性を示す。 μ_d を使った結果が $t/a^2 \leq 1.5$ までしか無いのは、そこで摂動展開が破綻するからである。他方、 μ_0 で

は、3くらいまで摂動計算可能である。左図より、 μ_0 スケールでより安定した $t \rightarrow 0$ 外挿が可能であり、その結果は μ_d の結果と一致していることがわかる。右図より、 μ_d スケールでは $t \rightarrow 0$ 外挿をどのようにとて良いか分からぬ場合でも、 μ_0 スケールにより線形領域が広がり、 $t \rightarrow 0$ 外挿が可能となる場合があることがわかる[論文 6]。

μ_0 スケールの試験は、u,d クォークが現実より重い場合にも行い、同様の結果を得た[論文 8]。

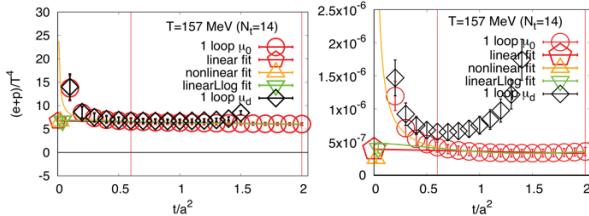


図 3 : SF_tX 法による物理点 $N_f = 2+1$ QCD。
左:エントロピー、右:カイラル感受率 [論文 6]

4.2 物理点 $N_f = 2+1$ QCD の熱力学量

上記の結果を得て、 μ_0 スケールを採用して物理点での熱力学量を評価したものが、図 4 である。ただし、 $T \approx 122\text{-}146\text{ MeV}$ のシミュレーションは進行中で、統計が十分ではない。また、ud クォークが重い場合の経験から、 $T > 247\text{ MeV}$ ($N_t < 8$) では格子化誤差が予想される。いくつかの物理量の挙動から、 $T \approx 122\text{-}146\text{ MeV}$ が相転移近傍の臨界領域にあることが示唆されるが、明確な結論を得るためにには更なる統計が必要である[論文 6]。

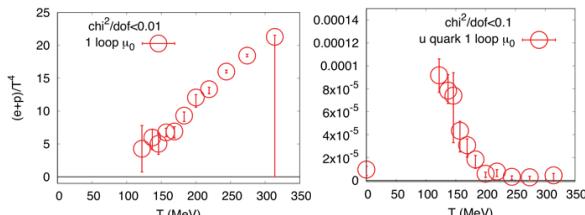


図 4 : 物理点 $N_f = 2+1$ QCD の熱力学。
左:エントロピー、右:カイラル感受率 [論文 6]

5. SF_tX 法における 2-loop マッチング係数

上記の研究は、マッチング係数として Makino-Suzuki による 1 ループ摂動計算の結果[論文 1]を用いたものだが、最近、Harlander らによりエネルギー

運動量テンソルに関するマッチング係数の 2 ループ計算の結果が公表された[論文 7]。 $t \rightarrow 0$ 極限ではどちらも同じ結果を導くはずだが、有限の t からの外挿では、より精密なマッチングを行うことで、よりスムースに外挿できる可能性がある。

その効果を調べるために、十分な統計がある u,d クォークが現実より重い $N_f = 2+1$ QCD で、また、前節の結果を受けて μ_0 スケールを採用して試験した[論文 6, 8]。図 5 左図のエントロピー密度では、1 ループの結果と 2 ループの結果がよく一致していることがわかる。他方、右図のトレース・アノマリでは、 $T > 250\text{ MeV}$ でズレが見える。

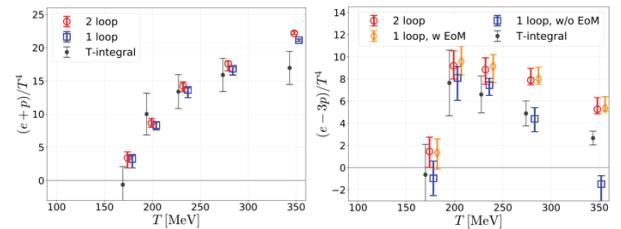


図 5 : 2-loop マッチング係数による ud クォークが重い $N_f = 2+1$ QCD の状態方程式 [論文 8]

実は、Harlander らの 2 ループ計算では、クォークの運動方程式を使って独立な演算子を減らしている。クォークの運動方程式はエネルギー運動量テンソルの対角成分にのみ作用するので、エントロピー密度には影響しないが、トレース・アノマリには効果がある。運動方程式は、SF_tX 法で連続極限外挿を行なった後では効果が無いはずだが、有限格子上では格子化誤差を持ちうる。

高温領域でのズレの原因を明確にするために、Harlander らのマッチング係数の 1 ループ部分だけを取り出してトレース・アノマリを評価したものが、右図の "1-loop, w EoM" である。運動方程式を使った 1 ループの結果と 2 ループの結果はよく一致しており、ズレはクォークの運動方程式によるものであることがわかる。これらは、マッチング係数の高次項の効果そのものは小さいが、 $N_t \leq 10$ の格子では、運動方程式の格子化誤差を無視できないことを示唆している。

6. クォークが重い極限近くの $N_f=2+1$ QCD の相構造

前章までの研究と並行して、1 次相転移を含む相構造の研究手法開発も進めている。1 次相転移領域の端である臨界点は、有限密度 QCD の相図にも現れ、実験的に重要な情報である。臨界点を検出する手法として、再重み付け法とヒストグラム法を組み合わせた手法を開発してきた[論文 9]。

2019 年度には、クォークが重い極限近くの $N_f=2+1$ QCD の相構造の研究を進め、重クォーク展開の高次項の効果や格子間隔依存性の研究を行った[論文 10]。全てのクォークが重い極限で、有限温度相転移は弱い 1 次相転移であることが知られている。クォークを軽くしていくと、クォーク場がスピン系における外部磁場のように作用し、1 次相転移はクロスオーバーに変わる。 $N_f=2$ QCD で重クォーク展開と再重み付け法を使ってポリアコフ・ループのヒストグラムから評価した臨界点を、重クォーク展開を用いて $N_f=2+1$ の相構造に一般化した。

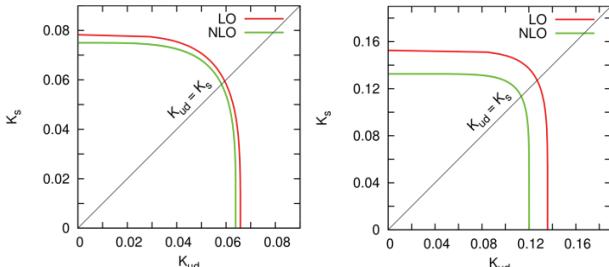


図 6：クォークが重い極限近傍の $N_f=2+1$ QCD の相構造。左: $N_t=4$ 格子、右: $N_t=6$ 格子 [論文 10]

図 6 に、クォークが重い極限近くの $N_f=2+1$ QCD における臨界線を、重クォーク展開で評価した結果を示す。横軸は ud クォーク質量の逆数に対応する ud クォーク ホッピングパラメータで、縦軸は s クォーク ホッピングパラメータ。原点近傍では 1 次相転移だが、クォークを軽くしていくと臨界線を経てクロスオーバーとなる。重クウォーク展開の最低次による臨界線（赤線）が、重クウォーク展開のその次の次数の効果を取り入れると緑線に変化する。左図は $N_t=4$ 格子の結果で、格子間隔がより小さい $N_t=6$ 格子では右図のようになる。これから、格子間隔依存性がまだ大きく、また、連続極限に近づくにつれて重クウォーク展開の収束性が悪くなることがわかる。

定量的予言には N_t をさらに大きくする必要があるが、有限密度では計算コストを抑える上で重クォーク展開が有用であり、より高次の展開でどこまで改良できるかがひとつの方向性と考えられる。

7. OCTOPUS による研究と展望

我々の研究において、OCTOPUS は、有限温度配位生成と解析の一部を担い、重要な寄与を果たしている。2019 年度は、物理点での臨界領域の配位生成などに使った。臨界領域における配位生成は、臨界減速と大きな格子体積により、大きな計算資源を要求する。引き続きシミュレーションを進め、相転移温度の正確な値など、QCD 相転移に関する明確な情報を引き出す計画である。

参考文献

- (1) H. Suzuki, Prog. Theor. Exp. Phys. 2013, 083B03 (2013), Erratum: [*ibid.* 2015, 079201 (2015)]; H. Makino and H. Suzuki, *ibid.* 2014, 063B02 (2014), Erratum: [*ibid.* 2015, 079202 (2015)]; T. Endo, et al., *ibid.* 2015, 053B03 (2015); K. Hieda and H. Suzuki, Mod. Phys. Lett. A 31, 1650214 (2016).
- (2) M. Asakawa, et al., Phys. Rev. D 90, 011501 (2014), Erratum: [*ibid.* 92, 059902 (2015)]; M. Kitazawa, et al., *ibid.* 94, 114512 (2016).
- (3) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 96, 014509 (2017), Erratum: [*ibid.* 99, 059904 (2019)].
- (4) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 95, 054502 (2017).
- (5) K. Kanaya, et al., EPJ Web Conf. 175, 07023 (2018).
- (6) K. Kanaya, et al., PoS LATTICE 2019, 088 (2020).
- (7) Harlander, et al., Eur. Phys. J. C78, 944 (2018).
- (8) Y. Taniguchi, et al., arXiv: 2005.00251 [hep-lat] (2020), submitted to Phys. Rev. D.
- (9) H. Saito, et al., Phys. Rev. D 89, 034507 (2014); R. Iwami, et al., Phys. Rev. D 92, 094507 (2015); M. Shirogane, et al., Phys. Rev. D 94, 014506 (2016).
- (10) S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 101, 054505 (2020).

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 高密度プラズマ中のプラズマチャンネル形成の研究

羽原 英明

大阪大学 大学院工学研究科 電気電子情報通信工学専攻

1. はじめに

大阪大学におけるレーザー核融合研究では、高速点火方式[1]という、核融合燃料の高密度圧縮(爆縮)過程と加熱過程を分離する方式が主流となっている。この方式では球状爆縮の均一性への要求が緩和され、点火燃焼に必要な投入エネルギーが少なくて済むという利点がある。一方、燃料プラズマを高効率に加熱する手法は様々な提案が検討されている段階である。爆縮プラズマの密度分布は中心より指数関数的に減少しており、レーザーは臨界密度と呼ばれる密度領域までしか伝搬できない。そこで高強度レーザーを照射し、生成する高エネルギー電子で燃料を加熱することが主に試みられている。この高強度レーザー強度はいわゆる相対論強度(レーザー電場によって振動する電子のエネルギーが静止質量程度、概ね 10^{18}W/cm^2 以上)であるため、プラズマ中のレーザーの振る舞いは相対論的自己集束など相対論的な効果が無視できない。そのため、高強度レーザーと高密度プラズマとの相互作用を研究するために PIC(Particle-in-cell)法が広く用いられている[2]。この手法は粒子の運動方程式と、電磁場のマクスウェル方程式を連立させ、系の時間発展を観測する手法であり、プラズマ中の粒子は自由運動、電磁場は空間をデバイ長程度のメッシュで離散化した空間格子上で定義される。また粒子は多数の粒子が集まる超粒子として取り扱い、点電荷ではなく広がりを持つ分布を用いることで粒子移動時の数値ノイズを低減させていている。

しかし、我々が実際の実験で扱う系は非常に大きく(空間:ミリメートル、時間:数十ピコ秒)、これは必要となる空間分解能(爆縮プラズマのデバイ長)を考えると1方向 10^5 セル、また必要な時間分解能(プラズマ周波数の逆数)より計算ステップは 10^7

ステップ程度必要であり、更に1セルあたり最低でも10粒子を配置したとしても、全空間で 10^8 以上の粒子運動を計算する必要がある。

このような大規模計算を実行するためにスーパー・コンピュータを用いた計算が行われてきた。特に近年の技術的進歩により大型化が容易となった分散メモリ型のクラスタ並列計算機に向け、様々な実装手法が開発されている[3]。主なものとして、計算体系を空間的に分割し、各 MPI プロセスがそれぞれの領域を計算する領域分割法が広く用いられている。この手法ではそれぞれの領域で計算が閉じており、粒子の領域間移動や境界での電磁場の情報を各プロセス間でやり取りするだけなので通信コストを低く抑えることが可能となる。しかし我々が取り扱う爆縮プラズマでは、各空間における密度の差が非常に大きく、均一に空間を分割すると計算量の大きなプロセスがボトルネックとなり、分割量が多くなるほど全体の計算効率が低下する。さらに粒子も光速に近い速度で移動するために時間的な密度の変動が大きく、必ずしも常に特定の領域の計算負荷が大きいわけではない。このような理由で、現在世界で広く用いられている並列計算対応の PIC コードにおいては、各プロセスが取り扱う領域の大きさを動的に変化させる手法が取られている[4,5]。

我々はこれとは別に、領域は均一に分割するが、負荷の少ないプロセスが、多いプロセスの計算を手助けする手法、Oh!Help[6]ライブラリを我々の PIC コードに実装した。これは各領域を担当するプロセスが主担当領域と副領域を持ち、必要に応じて複数の副領域が計算負荷の大きい領域を分担することでボトルネックを減らし計算効率を大幅に改善する。我々はこれによって米国ロチェスター大学で行われた実験の実スケール計算を行い、計算結果が実験を

よく再現していることを示した。

2. 動的負荷分散手法 Oh!Help

上で述べたように、Oh!Help ではまず空間を均等に分割する。図 1 では例として空間を 16 分割しており、赤い点は空間に点在している粒子を示している。各領域左上にある、黒字で示されたマトリクス番号は主領域の番号を示している。一方、青字は副領域番号を示しており、例えば特に粒子が多い 12 番領域では、5 つのプロセス(00, 10, 11, 20, 31)が副領域としてこの領域の算を担当することを示している。

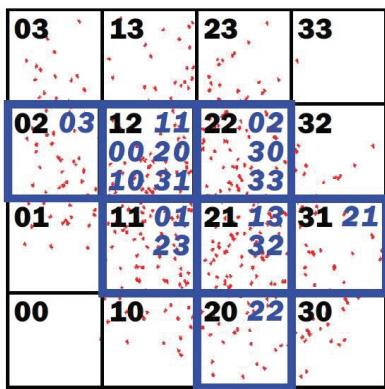


図 1：16 分割された領域の主担当（黒字）と負荷の高い領域を手助けする副担当（青字）

計算の進展により粒子が移動し、負荷が大きい領域が変化した場合は以下のように動的に領域を再割り当てる。まず図 2 上の初期状態のように各領域を粒子が多い順に並べ替え、一番多い領域から、全体の平均粒子数分だけの粒子をあるプロセスに割り当てる。そうするとその領域の未割り当ての粒子数は減少するので、次に 2 番目に粒子数の多い領域の粒子から同様に平均粒子数分だけを別のプロセスに割り当てる。これを繰り返すことで、図 2 下のように各プロセスは主領域と副領域という 2 つの領域を担当するだけで完全な負荷均一が実現されることが数学的に証明されている。時間発展による粒子移動でプロセス間の不均一性が増大した場合、予め設定された負荷分散許容度（図中 α ：全体平均からどれくらいの不均一を許容するかのパラメータ）を超えた場合に再び上に戻り粒子の再割り当てを行う。当

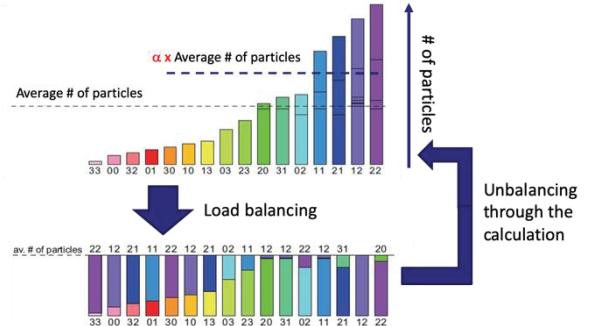


図 2：(上) 各領域に存在する粒子数。右から多い順に並べ替えられている。(下) 各プロセスに振り分けられた粒子。すべてのプロセスは主担当と副担当を合わせると平均粒子数となる。図中の α は不均等許容限度を表すパラメータ。

然、再割り当て過程は計算コストがかかるため、計算の効率化のためには適切な値が存在する。次章では Oh!Help 導入によるパフォーマンスを評価するためのテスト計算の結果を示していく。

3. テスト計算

3.1 線形性検証

まず図 3 のように真空中に方形のプラズマを配置し、極端な密度差がある状況を計算した。体系は 2 次元で、縦横それぞれ 2400 グリッドを取り、その左側中央に総計 2×10^7 粒子のプラズマを配置した。このプラズマに対し左側から高強度レーザーを照射し、プラズマの挙動を観測した。このとき、使用するプロセス数を 32 から 1024 まで変化させスケーラビリティを観測した。計算時間は 150 フェムト秒、負荷分散許容度は 10%（平均粒子数の 10% を上回る不均一性が生じた場合に再割り当て実行）とした。また比較のため不均等許容度をかなり大きく取り、実質的に通常の領域分割法としての計算を行った。

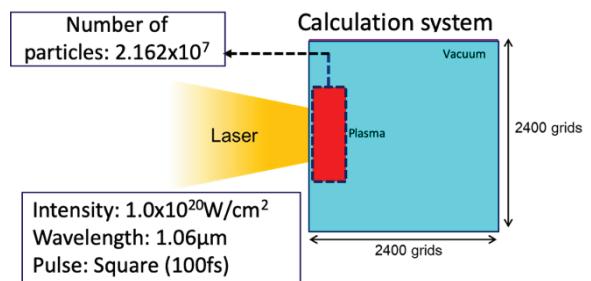


図 3：計算体系

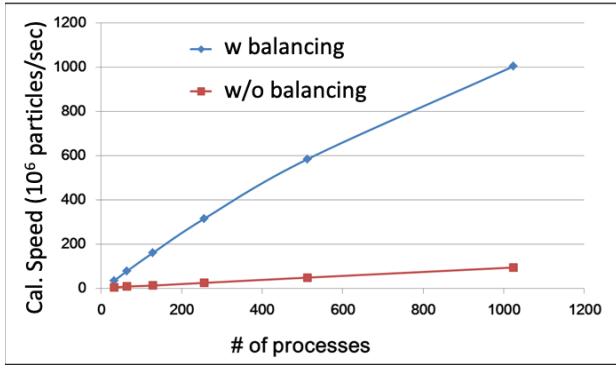


図 4：計算結果

図 4 は横軸に計算で使用したプロセス数、縦軸は単位時間あたりに計算した粒子数を表す指標で、青線と赤線は粒子再割当てあり、なしの場合の結果を示している。再割当てありの結果を見ると、横軸に対してほぼ比例して増加していく様子が見て取れ、プロセス数を増加しても計算効率が低下せず、非常に高いスケーラビリティを保っていることが示された。また赤線の粒子配分がない場合と比べると、計算スピードは 11 倍近く増加しており、このように高い密度差があり、かつ粒子が高いモビリティを持つケースの場合、本手法は非常に有効な手法であることが示された。

3.2 不均等許容度依存性

次に図 5 のような、中心が臨界密度の 10 倍、左右端で臨界密度まで線形に減少する密度分布に対し、左右から強度 10^{20} W/cm^2 のレーザーを照射する、時間とともに不均一性が上昇する体系において、負荷分散許容度の影響を調べた。体系は 1400×480 グリッド、計算時間 200fs、プロセス数は 256 で固定し、 α を 5 から 1000 まで変化させて計算した。

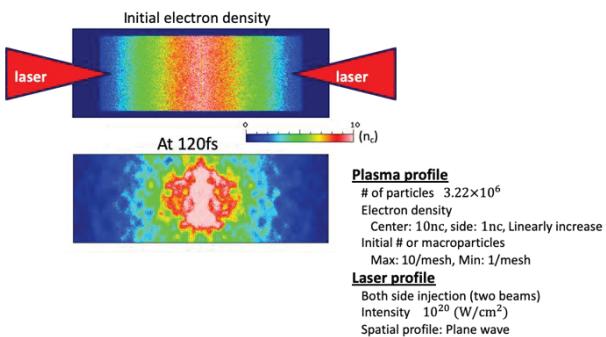


図 5：計算体系

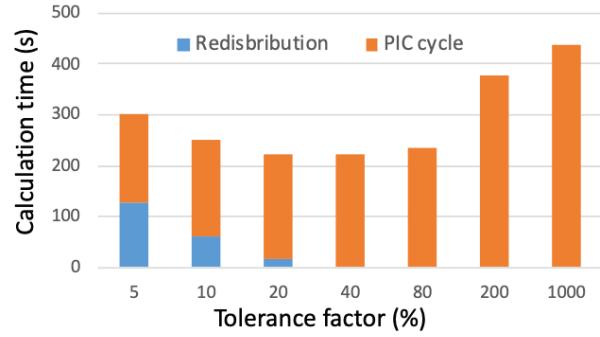


図 6：計算結果

図 6 はその結果を示している。横軸は α 、縦軸は総計算時間を示している。また青いバーが再割り当てに掛かった時間で、オレンジが PIC のサイクルで使用された時間である。この結果より、 α が 5%だと、総計算時間に占める再割当ての時間は 40%以上を占めてしまい、 α を 20%にしたときよりも逆に計算時間が増加していることが示された。今回は 20%が最適であるが、最適値は計算体系によって変わる可能性が高いため、体系サイズや総粒子数などをベースとした α を決定する指標の探索は今後の課題である。

4. 実スケール計算

これらの結果を踏まえ、実験で得られたデータに対し実スケール PIC 計算を行い解析した。図 7 は米国ロチェスター大学の大型レーザー装置で行われた実験で、平板ターゲットに爆縮用レーザーを 2 ビーム照射して 1 次元的に広がるプラズマを生成し、その正面より高強度レーザーを照射し、高強度レーザーの強い光圧によって作られる低密度導波路（プラズマチャンネル）の形成を、様々な照射条件で行った実験である。

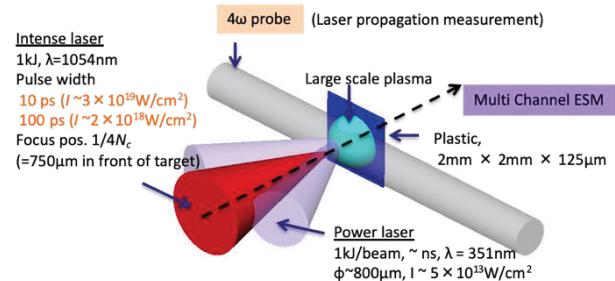


図 7：米国ロチェスター大学におけるプラズマチャンネル形成実験

高密度プラズマ中のプラズマチャンネルの観測は、プラズマの横から照射したプローブ光の屈折角より求めることができる。図8(左)はその一例で、リング状のパターンは、ある特定の密度領域を通過してきたプローブ光を示しており、一番右側のリングは臨界密度付近、左に行くにつれ低密度側から来た光に対応している。赤い三角はレーザーの照射コーンを示しており、この実験ではターゲット表面から750μmの位置に集光するように照射した。中央のリングパターンが崩れている箇所が形成されたプラズマチャンネルを示している。四角点線で囲まれた領域を計算した結果が図8(右)である。プラズマ、レーザー条件は実験のものを用いた。この図は電子密度分布を示しており、実験結果をよく再現している。詳細な解析のためにコードの3次元化を行ったが、観測系の3次元化対応が一部未完了のため、本稿では2次元での計算結果を示している。計算結果の解析により、このプラズマチャンネルの形成には加速電子の電流が作る磁場が大きな役割を果たしていることがわかり、プラズマチャンネルを安定に形成するための指針を得ることができた。

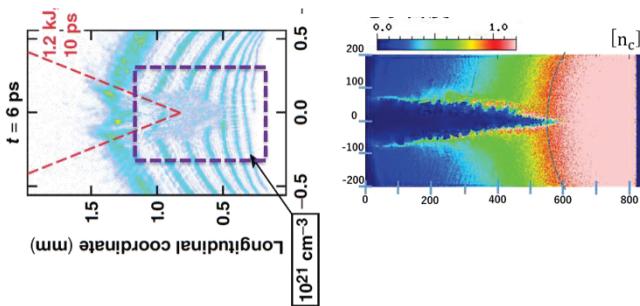


図8：(左) プローブ光によるプラズマチャンネル計測
(右) PICによる実スケール計算

5. おわりに

我々は新しい負荷分散技法である Oh!Help ライブ ラリを用いた PIC コードを開発した。この手法は負荷分散が少ないプロセスが、多いプロセスを手助けすることで動的に全体の負荷バランスを均一化し、特に大規模計算で計算効率を最大限向上させることが可能となる。このコードを用いた評価計算では通常の領域分割法のみでの計算よりも 10 倍以上の高速化が可能であることが示され、負荷分散許容度を

適切に設定することでより計算速度の向上が可能であることを示した。

このコードを用いて米国ロチェスター大学で行われたレーザー実験の実スケール計算を行い、実験結果をよく再現する結果を得るとともに、電磁場の評価から今後の実験に対する指針も得ることができた。

参考文献

- (1) M. Tabak, et al., Phys. Plasmas, **1**, 1626 (1994).
- (2) C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma Physics Via Computer Simulation* (McGraw-Hill, New York 1985).
- (3) H. Sakagami, J. Plasma Fusion Res., **89**, 49-56, (2013).
- (4) OSIRIS manual,
https://web.fnal.gov/collaboration/COMPASS/Documents/Osiris_Slide_120308.pdf
- (5) K. Germaszewski, J. Comp. Phys. **318**, 305 (2016).
- (6) H. Nakashima, et al., ICS s09, 90-99(2009).

回転デトネーションエンジンにおける 2 次元及び 3 次元数値解析

吉田 悠佑、佐野 拓海、ジェミンスカ エディータ

上智大学 大学院理工学研究科 機械工学専攻

1. はじめに

デトネーションエンジンは近年多くの研究者から注目されている。まず、デトネーションとは超音速で伝搬する圧縮波である。その前面は衝撃波となっており、それによって圧力と温度が不連続的に上昇する。結果、化学反応が活性化されてデトネーションが持続される。このデトネーションが持つ熱サイクルはガソリンエンジンに使われるブレイトンサイクルと比較して、熱効率が 20%以上も向上することがわかっている[1]。

二重円筒燃焼器内をデトネーションが周方向に伝播することで推力を得るエンジンを回転デトネーションエンジン(RDE)と呼ぶ。RDE は一度の着火で、燃料を軸方向に供給し続ける間、デトネーションを燃焼器内で持続することが可能である。また、複雑な機構を必要としないので小型化が容易である。これらの理由から RDE は様々な分野への応用が期待されている。

本研究では、2 次元及び 3 次元での数値解析を行い、RDE の性能評価や燃焼器内でのデトネーションの振る舞いと構造を調査した。

2. 計算手法

一般的なデトネーション計算における支配方程式は粘性や熱拡散の影響を無視できるため、オイラー方程式が用いられている。しかし、本研究では将来的に水冷機構を導入するため、粘性と熱拡散の影響を考慮できるナビエストークス方程式を使用している。また、対流項には AUSUMDV スキームと 2 次精度の MUSCL を使用し、非定常項には 3 次精度の TVD Runge-Kutta 法、生成項には部分陰解法を用いた。デトネーションは化学反応を伴って伝播するため、化学反応モデルが必要となる。今回は、詳細反応モデルである UT-JAXA モデルを使用した。これ

らの方程式はすべて Fortran 上でコード化され、坪井ら[2]によって検証されている。

計算領域は図 1 の上側に示す RDE の燃焼室部分を図 1 の下側のメッシュとして作成した。計算コストを考慮して、作成したモデルは実機の 1/10 サイズとなっており、燃焼室後方のノズル部分は定義されていない。これは今後の課題である。燃焼領域の厚さは 1 mm である。メッシュの赤色部分は気体の供給口を表し、緑色の場所は気体の排出口を示している。

図 2 は、図 1 (下) の 3 次元の円筒型計算領域を軸方向に切り開き、厚みを考慮しない 2 次元の計算領域での初期状態を示している。デトネーションは図の下側から上方へ伝搬する。上下の境界は周期的である。左端は燃料供給のインレットで、右端はアウトレットとなる。図中の灰色の部分に段差を設けているのは、伝搬方向を一方向に起こしやすくするためである。橙色の部分は着火領域であり、1 次元デトネーションの計算結果を外挿することで表現している。これは実験を行う際に、デトネーションを燃焼器の外側から挿入することを想定している。

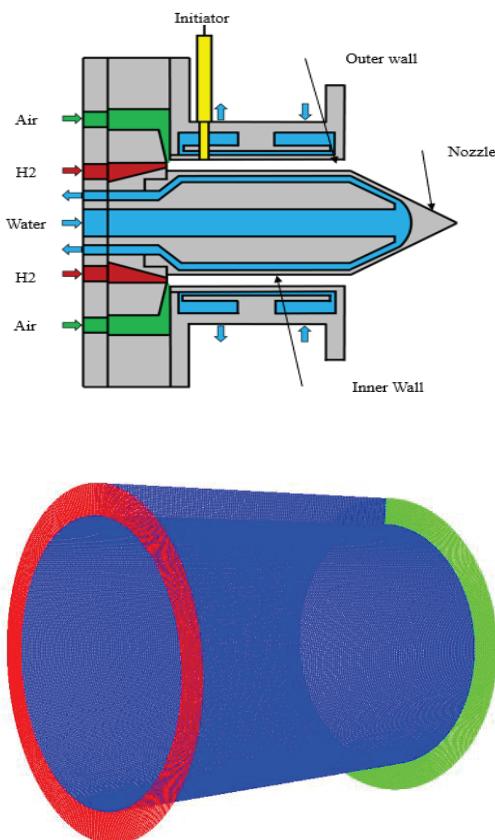


図 1 RDE の断面図（上）、計算モデル（下）

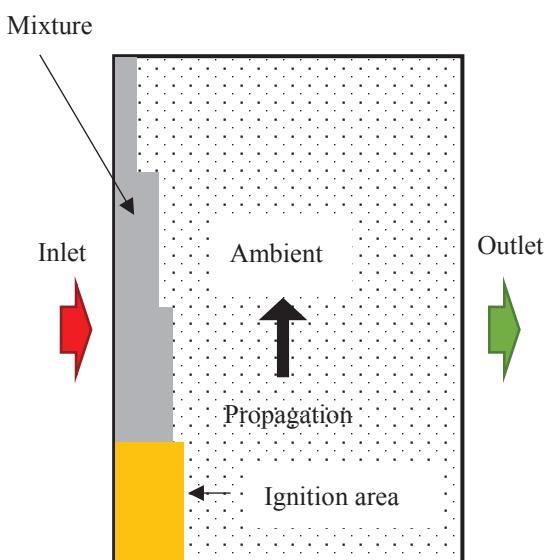


図 2 初期状態

3. 計算結果

今回は比較のために、当量比を 0.8~1.4 の間で表 1 のように変化させ計算を実行した。燃料の供給圧力はすべての条件で 2.0 MPa に設定してある。このシミュレーションにおける燃料は、反応の起こりやすい水素-酸素混合気を使用した。

表 1 計算条件

Number	Mixture type	Equivalence ratio
1.	H ₂ -O ₂	0.8
2.	H ₂ -O ₂	1.0
3.	H ₂ -O ₂	1.2
4.	H ₂ -O ₂	1.4

図 3 は、当量比 1.0 の場合で、3 次元領域における圧力分布を示している。目の粗い等高線は外壁での圧力分布を示し、もう一方は内壁での圧力分布を示している。0.33μs のときと 4.51μs のときを比較すると、内壁と外壁の波前面のギャップが広がっていることがわかる。また、波面の形状が時間経過とともに、直線状態から皺のよった状態に移り変わっていることが確認できた。

図 4 は、外壁の一点での圧力分布を時間経過で当量比ごとにプロットしたグラフである。このグラフから、当量比の変化でデトネーション伝播の傾向に変化がないことがわかる。ピーク値の間隔を比較すると、当量比が高いほど間隔が狭く、低いと間隔が広くなっている。このことから、当量比がデトネーションの伝搬速度に関係していることがわかる。

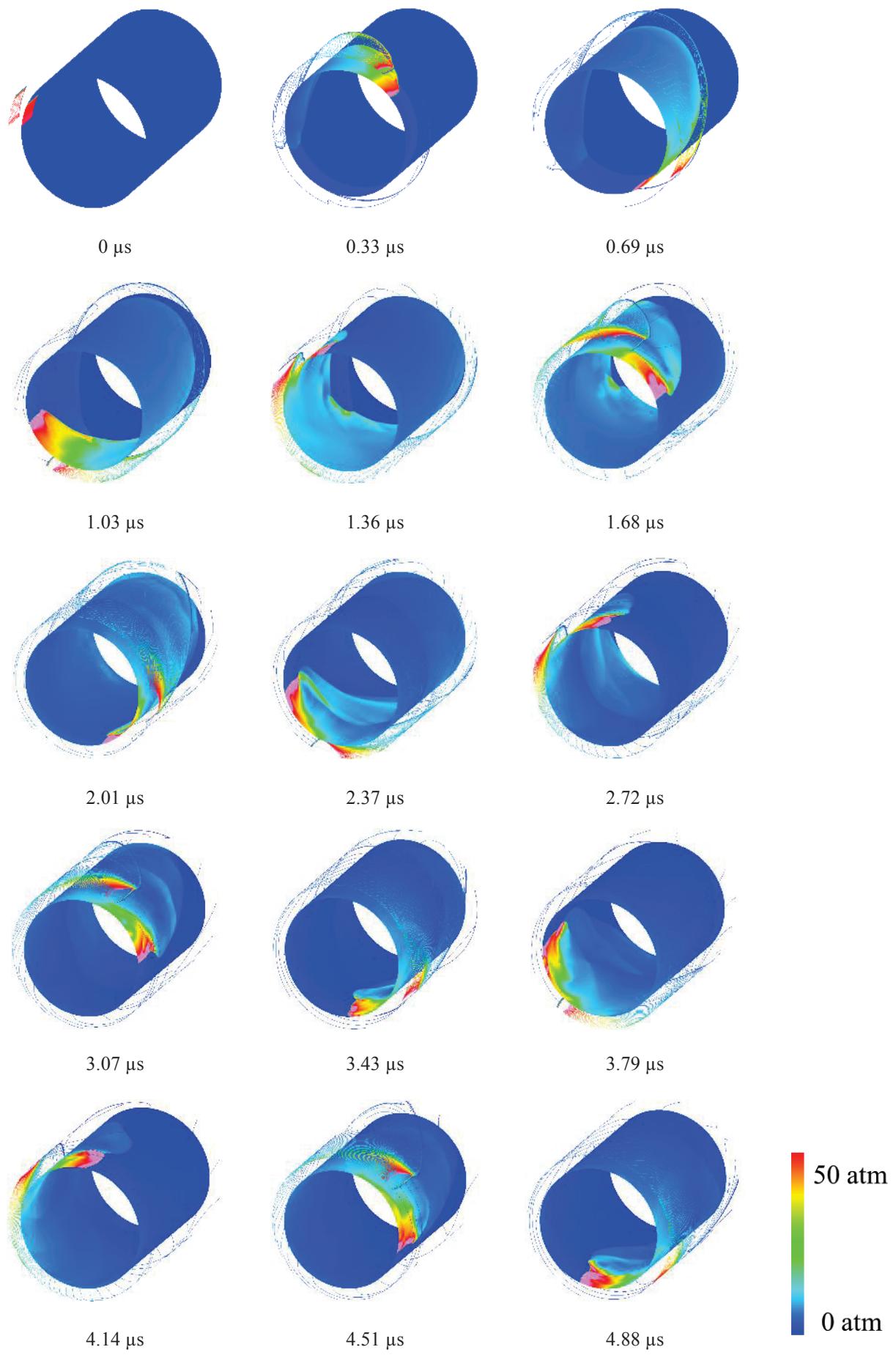


図 3 圧力分布($\varphi = 1$)

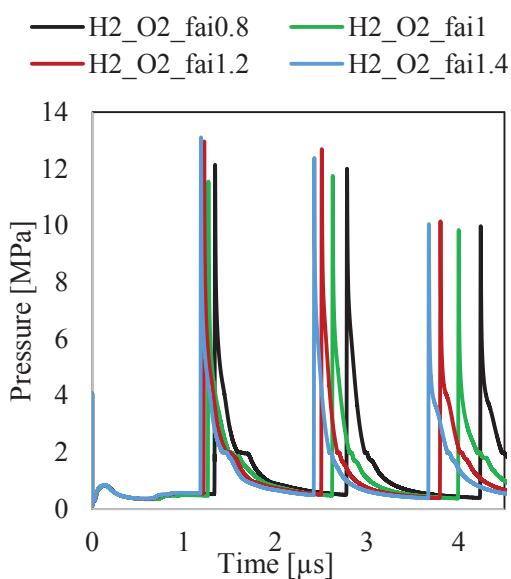


図 4 各当量比の外壁での圧力分布

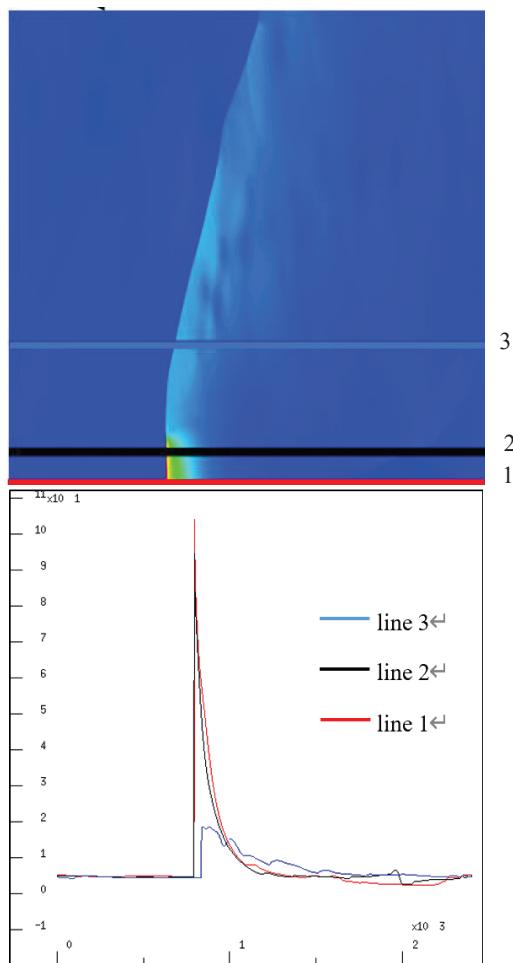


図 5 定義した線の位置（上）、圧力履歴（下）

図 5 は 2 次元解析で圧力履歴を測定した結果である。図 5 の上側では、任意で定義した三本の線の位置を表し、図 5 の下側では、その線上での圧力履歴を示している。赤線(Line 1)はインレット付近での線で、黒線(Line 2)はデトネーション波前面の中央付近を通る線で、青線(Line 3)は斜め衝撃波を通過するよう定義した。図 5 (下) から、デトネーション波を通過する位置で Line 1 と Line 2 が急増するのに対して、斜め衝撃波を通過するときの Line 3 の上昇率が著しく低いことがわかる。

4. おわりに

今回は、3 次元及び 2 次元領域でのデトネーション計算を行った。将来的には 3 次元領域にノズル部分を取り付け、実機サイズでの解析を行う予定である。さらに、RDE に冷却システムを導入し、熱の影響を考慮した計算も行いたい。

5. 参考文献

- [1] P. Wolanski, “Detonative Propulsion,” Proceedings of the Combustion Institute, 34, pp. 125-158, 2013.
- [2] N. Tsuboi, A. K. Hayashi, Y. Matsumoto, Three-dimensional parallel simulation of cornstarch-oxygen two-phase detonation, Shock Waves, Vol. 10, Issue 4, pp. 277-285, 2000.

Ce ドープされた YAG 結晶における光励起後の Franck Condon 緩和の第一原理計算

宮本 良之

国立研究開発法人 産業技術総合研究所 機能材料コンピュテーションナルデザインセンター

1. はじめに

本研究では、古くから研究されている蛍光体における Stokes shift (励起と発光のエネルギー差) の起源に迫ります。イットリウムアルミガーネット(YAG)結晶は不純物をドープすると局在性の高い不純物準位を構成し、その準位間の光遷移による高効率の発光現象が起こるので、様々な光源として使用されてきました。強いレーザー光の光源、白色発光や暖色発光のための赤橙色発光源など様々な用途がありますが、本研究は近年盛んになっている後者の光源開発を理論的にサポートする目的で行われました。

いくつかの研究でセリウム(Ce)をドーパントとして使うと黄色の発光が見えることが報告されていますが、近年産総研のチームが結晶性の高い YAG 結晶に高濃度で Ce をドープすると強い赤色発光（波長 600 nm）が見えることを発見し、0.47 eV の Stokes shift (発光エネルギーの励起光エネルギーからの低下) を観測しました。^[1] 本研究では、その起源として光励起に伴う格子緩和が原因ではないかと考え、電子の励起に伴う電子・格子ダイナミクスを第一原理計算で扱う手法で調べました。計算の結果、光による Ce 原子 4f 軌道から 5d 軌道への電子励起後に、Ce 原子周辺に 4 個配位している酸素原子が急速に Ce に近づき Ce 原子 4f 軌道の準位が約 0.5 eV 上昇することを見出しました。この計算結果は、実験で観測されている Stokes shift を半定量的に説明するものです。

以下に計算の手法と結果の詳細を述べ、今後の展望を述べます。

2. 計算手法

本研究では、電子励起後の格子緩和を時間依存密度汎関数理論(TDDFT)^[2]を用いて検証しました。まず YAG 結晶を一片が 12.128 Å の立方体にイットリウム(Y)原子 24 個、アルミニウム(Al)原子 40 個、酸素(O)原子 96 個入った単位胞の周期境界条件で表します。この結晶に Ce ドーピングを行うと、一部の Y 原子が Ce 原子に置換されることが知られています。密度汎関数理論(DFT)により、単位胞内の原子位置を安定化させたのち、電子の占有数を恣意的に変えて光学選択側で選ばれた準位に 1 電子が励起された状態を近似計算で求めました。（この方法を constraint DFT または ΔSCF と呼びます。）この計算結果を初期条件として、電子の実時間発展計算を TDDFT で計算し、それによる原子核への力場から原子の分子動力学(MD)計算を行いました。計算には第一原理コード FPSEID^[3]を用いました。なお、Y や Ce などの d 電子や f 電子を含む元素を精度よく計算するには projection augmented wave (PAW)^[4] がよく用いられますが、今回は TDDFT 計算を行うにあたり利便性の良い TM 型擬ポテンシャル^[5]を用いました。

3. 計算結果

まず、Ce ドープされた YAG 結晶の電子構造を調べました。図 1 の左側は、Ce ドープされた YAG 結晶構造構造です。単位胞内にある 24 個の Y 原子のうちの 1 個を Ce で置き換えた場合、もともと Y 原子がいた時のように Ce 原子は 4 個の O 原子と安定に結合しています。

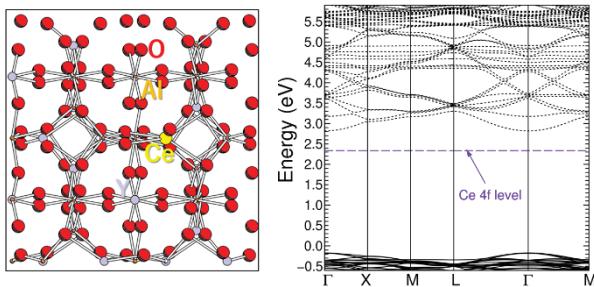


図 1 : (a)Ce ドープされた YAG 結晶構造図と(b)そのバンド構造図

次に Ce ドープされた YAG 結晶のバンド構造を見てみます。図 1 の右がそれです。バンド図中に破線で示したフラットなバンドがあり、これは Ce 4f 軌道成分が主です。光学遷移行列を調べてみると、この Ce 4f 軌道から伝導体中の軌道へ顕著な光遷移確率があり、強い光吸収があることが示唆されます。この伝導体中の軌道は Ce 5d 軌道の成分が主です。

次にこの 4f 軌道から 5d 軌道への電子励起後のダイナミクスを見てみます。図 2 は格子温度が絶対零度という仮想的な初期条件を与えた場合、Ce 原子の 4f 軌道から 5d 軌道への電子励起後の Ce 原子周辺の O 原子の動く方向を矢印で示したものです。

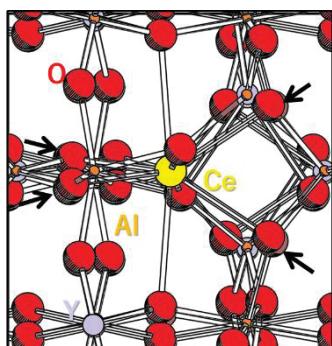


図 2 : 電子励起後の Ce 原子周辺の O 原子の移動方向（黒矢印）

このような O 原子の運動は、格子温度が有限 (300 K まで) の場合にも共通してみられることがわかりました。さらに、このような格子運動は電子準位の変化も引き起こすことがわかりました。

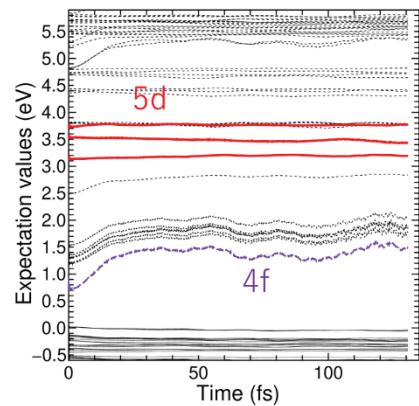


図 3: Ce ドープされた YAG 結晶の Γ 点における、4f から 5d への光励起後の電子準位の時間変化

図 3 は図 2 の格子ダイナミクスが引き起こす電子のエネルギー準位の時間変化を示したものです。この図を見てわかるように、電子励起後からわずか 50 fs (1 fs は 10^{-15} sec) 後に 4f 準位がおよそ 0.5 eV 上昇していることがわかります。この 4f 準位の上昇分と実験で報告されている Stokes shift の値[1]は近似的に近いといえますので、本研究では Stokes shift の起源は電子励起に伴う Ce 原子周辺の O 原子の緩和 (Franck Condon 緩和) であると結論しました。これは格子温度が 300 K までほぼ変わりません。

4. 今後の展望

今後は YAG 結晶に欠陥がある場合の光物性やさらに格子温度が高い状況についてもシミュレーションで調べ、実験的研究を支援する予定です。

5. 参考文献

- [1] H. Nakamura *et al.*, RSC Adv. 10, 12535 (2020).
- [2] E. Runge and E. K. E. Gross, PRL.52, 997 (1984).
- [3] O. Sugino and Y. Miyamoto, PRB,59, 2579 (1999).
- [4] P. E. Blöchl, PRB, 50, 17953 (1994).
- [5] N. Troullier and J. L. Martins, PRB, 43, 1993 (1991).

格子ゲージ理論によるダークマターの研究 — ダークマターの正体の解明に向けて —

飯田 英明¹、山中 長閑²、若山 将征^{3,4,5}、中村 純^{6,3,7}

¹ 東京大学 物理学科

² 京都大学 基礎物理学研究所

³ 大阪大学 核物理研究センター(RCNP) 核物理理論研究部門

⁴ Department of Physics, Pukyong National University

⁵ Center for Extreme Nuclear Matter (CENuM), Korea University

⁶ School of Biomedicine, Far Eastern Federal University

⁷ 理化学研究所 仁科加速器研究センター

1. はじめに

我々の宇宙を構成しているものは、通常の物質(水素、酸素、炭素など)は5%程度で、その6倍近くが未知の物質であるダークマター(暗黒物質)、残りの68%はダークエネルギーと呼ばれるものであることが近年の宇宙の観測から明らかになってきた(図1)[1-4]。

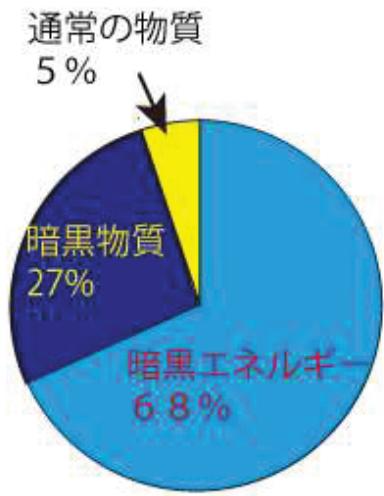


図1：宇宙の組成

ダークマターの存在は天体物理学や宇宙論における物理現象のいくつかの問題を矛盾なく説明する一方で、現在の素粒子の標準理論には、ダークマターの候補となる粒子は含まれていない。さらに、ダークマターは標準理論を構成する粒子と相互作用しない(あるいは非常に弱くしか相互作用しない)。

ダークマターの存在を説明する理論はこれまでに

いくつか提唱されているが、本稿では、暗黒 Yang-Mills 理論(Dark Yang-Mills 理論。以下 DYM と略記)によるシナリオに基づく我々の研究について紹介する[5,6]。この計算は大規模数値計算によって初めて可能となる。

DYM 理論において最も軽い粒子は、標準模型の量子色力学(QCD)におけるスカラーチャンネルのグルーボールに対応する粒子であり、ダークグルーボールと呼ばれる。ダークグルーボールの性質はダークマターに関する観測事実と無矛盾である。また、ダークマター同士の散乱断面積は観測によって制限される。そのため、DYM 理論におけるダークグルーボール間の相互作用を計算し、散乱断面積の観測事実と比較することにより、DYM 理論における未知のスケールパラメータ Λ に対して制限を与えることが可能になる。

2. ダークマターのモデル

ダークマターの候補として、我々は DYM 理論における(ダーク)グルーボールを検討する。グルーボールはグルーオンの束縛状態であり、非摂動的な取り扱いが必須で、格子ゲージ理論による数値シミュレーションが強力な計算方法である。

ダークマター間の散乱は銀河のハローの構造などに強く影響する。そのため、ダークマターの観測からの制限と比較するために、グルーボール間の相互作用を明らかにする必要がある。しかし、グルー

ボールの質量については多くの研究があるが、その相互作用は解析されていない。グルーボールをダークマターと考えるためにはその研究が必須である。

本稿では、比較的最近開発された HAL QCD 法[7,8]によってグルーボール間相互作用のポテンシャルを求める。HAL QCD 法は、元々は核子間相互作用から核力ポテンシャルを求めるために開発されたが、グルーボール間相互作用に対しても適用可能である。また、グルーボール相関関数のノイズは非常に大きいため、このノイズを抑えるためにも、HAL QCD 法の利用は必要不可欠である。さらに、クラスター分解法[9]やスマアリング法[10]、時空間における対称性の性質を利用することにより、統計精度を上げることに成功した。

3. 計算手法と結果

格子ゲージ理論によってグルーボールの相互作用を調べる第一歩として、 $SU(2)$ ゲージ理論における $J^{PC}=0^{++}$ グルーボールの相互作用を計算する。まず、擬熱浴法を用いて、204 万個のゲージ配位を生成した。空間方向の格子サイズ $N_s=16$ 、時間方向の格子サイズ $N_t=24$ で計算を行なった。なお、本研究の計算は CMC/RCNP の大規模計算機 NEC SX-ACE を用いて行われた。

グルーボールの質量は $m=6.40(48)\Lambda$ と得られ、先行研究の結果[11]と無矛盾であることを確かめた。

次に、HAL QCD 法[7,8]からグルーボール間相互作用のポテンシャルを求めるために、グルーボールの 2 点間相関関数を計算する。しかしながら、 $J^{PC}=0^{++}$ グルーボールは真空と同じ量子数を持つため、ノイズが非常に大きい。このノイズは真空の揺らぎが原因であり、それを取り除く手法がクラスター分解法である[9]。時空間距離がグルーボール演算子の位置から離れるほど、その場所からの相関関数へ影響は指数関数的に小さくなる。そこで、グルーボール演算子の位置から十分に離れた場所は相関関数に寄与しないとみなし、その場所からの寄与を取り除く。これにより、真空の揺らぎによるノイズを抑えることが可能となる。グルーボール 2 点間相関関数の計

算において、クラスター分解法の足し上げを行う時空間距離を格子間隔単位で 4 から 12 まで変化させた結果を図 2 に示した。全ての時空間距離の足し上げ

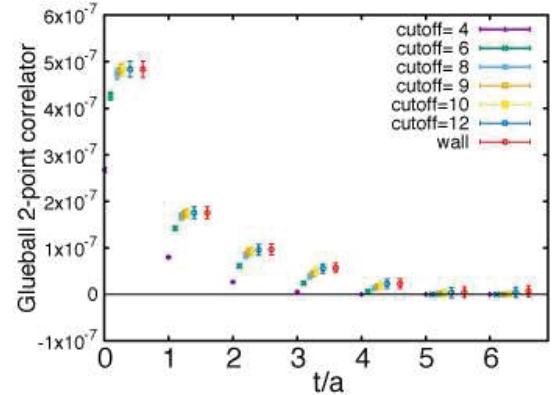


図2：クラスター分解法を用いたグルーボール 2 点間相関関数の結果

を行なった wall 法の結果と比べると、時空間距離が 8 までの足し上げで十分であり、それ以上の足し上げを行うと、真空の揺らぎによりノイズ大きくなることが分かる。我々はクラスター分解法を用いることで、統計誤差を約半分にまで抑えることに成功した。

HAL QCD 法では格子ゲージ理論による数値シミュレーションから南部-Bethe-Salpeter(NBS)波動関数を計算し、時間依存 Schrödinger-like 方程式

$$\left[\frac{1}{4m} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla^2 \right] R(t, \vec{r}) = V(\vec{r}) R(t, \vec{r}) \quad (1)$$

よりポテンシャル V を求める。ここで、非相対論性からポテンシャルは局所的かつ中心力とした。

NBS 波動関数からグルーボール間ポテンシャルを求めた結果を図 3 に示す。近距離で引力となっているが、これは同一格子点を含むためこの寄与は取り除く。すると近距離では斥力となる。また、長距離では非常にノイズが大きい。これは NBS 波動関数が長距離でほぼゼロになるためである。

さらに、我々は得られたポテンシャルを湯川型ポテンシャル

$$V_Y(r) = V_1 \frac{e^{-mr}}{r} \quad (2)$$

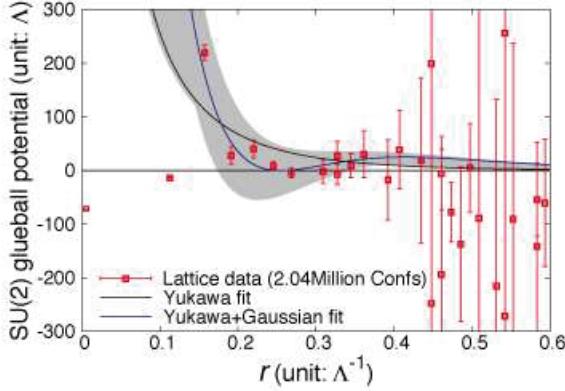


図3：グルーボール間ポテンシャル

および、湯川型+ガウス型ポテンシャル

$$V_{YG}(r) = V_1 \frac{e^{-mr}}{r} + V_2 e^{-(mr)^2/2} \quad (3)$$

でフィットし、 V_Y に対しては $V_1=48(4)$ 、 V_{YG} に対しては $V_1=300(30)$ 、 $V_2=-860(90)\Lambda$ を得た。

このフィットの結果より、散乱の位相のズレと散乱断面積を計算する。散乱の位相のズレ $\delta(k)$ は S 波 Schrödinger 方程式

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + k^2 - mV(r) \right] \phi(r) = 0 \quad (4)$$

を解くことによって得られる。波動関数は漸近的に $\phi(r) \propto \sin[kr + \delta(k)]$ と書ける。低エネルギー極限での散乱断面積は $\sigma = \lim_{k \rightarrow 0} (4\pi/k^2) \sin^2[\delta(k)]$ となることから、 V_Y と V_{YG} に対して、散乱断面積はそれぞれ、 $\sigma = (3.5-3.8)\Lambda^{-2}$ 、 $\sigma = (7.5-8.0)\Lambda^{-2}$ と求まる。異なるフィットによる結果の違いを系統誤差とすると、SU(2) DYM 理論のグルーボール間の散乱断面積は

$$\sigma = (3.5 - 8.0)\Lambda^{-2} \quad (\text{stat. +sys.}) \quad (5)$$

と求まる。

最後に、ダークマターに関する観測事実から DYM 理論の未知のパラメータ Λ に対する制限を与える。ダークマターの散乱断面積に対する最も確実な制限は、銀河ハローと銀河の衝突[12]から

$$\sigma/m < 0.47 \text{ cm}^2/g \quad (6)$$

と与えられている。従って、SU(2) DYM 理論の制限は

$$\Lambda > 60 \text{ MeV} \quad (7)$$

となる。また、ラージ N_c の議論を用いれば、スケールパラメータの下限値を $N_c \geq 3$ に対しても課すことができ、

$$\Lambda_{N_c} > 60 \left(\frac{2}{N_c} \right)^{\frac{4}{3}} \text{ MeV} \quad (8)$$

となる。ラージ N_c による外挿をより正確なものにするために、今後、SU(3)や SU(4)に対する DYM 理論の計算が必要である。

4. おわりに

本稿では、HAL QCD 法を用いてグルーボール間の散乱断面積を計算し、銀河の衝突の観測データから SU(2) の DYM 理論のスケールパラメータに制限を与えた。精度良くグルーボール 2 点間相互作用を計算するには、時間に依存する HAL QCD 法は必要不可欠であり、さらにクラスター分解法はシグナルを改良するのに効果的であった。

グルーボール間ポテンシャルはいくつかの重要な特徴を示す。近距離では、グルーボール間ポテンシャルは斥力となった。この性質の詳しい定式化と振舞いについては今後引き続き検討していく。

本稿では、式(1)で局所的ポテンシャルを仮定した。しかしながら、非局所性による変化の調査も必要である。

さらに、我々は SU(2) DYM 理論に対してのみ散乱断面積の制限を与えた。 $N_c \geq 3$ に対しては、ラージ N_c の議論から制限を与えたが、より精度の良い制限を与えるために、今後、SU(3)や SU(4)に対する DYM 理論の計算を進めていく。

HAL QCD 法、クラスター分解法、スマアリング法などの格子 QCD で開発された手法を活用することで、ダークマターの動的振舞いの研究が可能になりつつある。SX は複雑なプログラムも容易に実装でき、高速に実行できる。しかし、それでも数百万の配位を生成する必要があり、必要な計算資源は膨大になる。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・共同研究拠点と大阪大学 RCNP からの支援が無ければ実現できなかつた。

謝辞

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(課題番号: EX17707)、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(課題番号: jh180058-NAH)と大阪大学 RCNP からの支援の下、NEC SX-ACE 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「2019 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。

また、若山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)。

参考文献

- (10) M. Albanese et al. [APE Collaboration], Phys. Lett. B192, 163 (1987).
 - (11) M. J. Teper, hep-th/9812187.
 - (12) D. Harvey, R. Massey, T. Kitching, A. Taylor and E. Tittley, Science 347, 1462 (2015).
- (1) G. Bertone, D. Hooper and J. Silk, Phys. Rept. 405, 279 (2005). [hep-ph/0404175]
 - (2) D. Munshi, P. Valageas, L. Van Waerbeke and A. Heavens, Phys. Rept. 462, 67 (2008). [astro-ph/0612667]
 - (3) G. Arcadi, M. Dutra, P. Ghosh, M. Lindner, Y. Mam-brini, M. Pierre, S. Profumo and F. S. Queiroz, Eur. Phys. J. C 78, no. 3, 203 (2018). [arXiv:1703.07364 [hep-ph]]
 - (4) M. Battaglieri et al., arXiv:1707.04591 [hep-ph].
 - (5) N. Yamanaka, H. Iida, A. Nakamura and M. Wakayama, arXiv: 1910.01440 [hep-ph].
 - (6) N. Yamanaka, H. Iida, A. Nakamura and M. Wakayama, arXiv: 1910.07756 [hep-lat].
 - (7) N. Ishii, S. Aoki and T. Hatsuda, Phys. Rev. Lett. 99, 022001 (2007).
 - (8) S. Aoki, T. Hatsuda and N. Ishii, Prog. Theor. Phys. 123, 89 (2010).
 - (9) K. F. Liu, J. Liang, and Y. B. Yang, Phys. Rev. D97, no. 3, 034507 (2018) [arXiv:1705.06358 [hep-lat]].

センター報告

・ 2019 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	81
・ SC19 出展報告	95
・ 第 25 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2019)報告および 第 26 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2020)告知	101
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	103
・ 2020 年度大規模計算機システム利用講習会	105
・ 2019 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	106
・ 2020 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	114
・ 2020 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	115
・ 2019 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	116
・ 2020 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	117
・ 大規模計算機システム Q&A	118

2019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2019年4月から2020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] Yohei Ueda, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “Cobalt-catalyzed (E)-Selective Cross-dimerization of Terminal Alkynes via a Mechanism Involving Co(0/II) Redox Cycles”.
- [2] Tatsuhiko Ohto, Mayank Dodia, Jianhang Xu, Sho Imoto, Fujie Tang, Frederik Zysk, Thomas D. Kuehne, Yasuteru Shigeta, Mischa Bonn, Xifan Wu, and Yuki Nagata, “Accessing the Accuracy of Density Functional Theory through Structure and Dynamics of the Water–Air Interface”, *J. Phys. Chem. Lett.*, 10, 4914, 2019.
- [3] Yasushi Nishida, Katsuhiro Honda, “Visualization of Potential Technical Solutions by SOM and Co-clustering and Its Extension to Multi-view Situation”, *Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics (JACIII)*, 2020年.
- [4] Kosuke Higashida, Fabian Brüning, Nagataka Tsujimoto, Kenya Higashihara, Haruki Nagae, Antonio Togni, and Kazushi Mashima, “Monohydride-dichloro Rhodium(III) Complexes with Chiral Diphosphine Ligands as Catalysts for Asymmetric Hydrogenation of Olefinic Substrates”, Submitted.
- [5] Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani and Yasuhiro Takaya, “Comparison of intensity distribution of photonic nanojet according to Gaussian beam and radially polarization beam incidence”, *Precision Engineering*, Vol. 60, pp. 274-279, 2019.
- [6] 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用いたレーザ微細加工に関する研究（第1報）フォトニックナノジェットの基本的加工特性”, *精密工学会誌*, Vol. 86, No. 1, 2020.
- [7] Yuji Sato, Shuhei Shinzato, Takahito Ohmura, Shigenobu Ogata, “Atomistic prediction of the temperature- and loading-rate-dependent first pop-in load in nanoindentation”, *International Journal of Plasticity*, Vol.121, pp.280-292, Oct. 2019.
- [8] D. G. Xie, Z. Y. Nie, S. Shinzato, Y. Q. Yang, F. X. Liu, S. Ogata, J. Li, E. Ma, Z.-W. Shan, “Controlled growth of single-crystalline metal nanowires via thermomigration across a nanoscale junction”, *Nature Communications*, 10 (2019), 4478-1-8.
- [9] 中谷祐介, 戸村祐樹, 西田修三, “非構造格子モデルを用いた瀬戸内海 - 太平洋領域における外洋水の挙動解析”, *土木学会論文集B2*, 査読中.
- [10] 羽原英明, “超高強度レーザーによるギガガウス級磁場生成”, *レーザー研究*, Vol.47, No.9, pp.531-535, Sep. 2019.
- [11] Tao Gong, Hideaki Habara et al, “Direct Observation of Imploded Core Heating via Fast Electrons with Super-Penetration Scheme”, *Nature Communications*, Vol.10, 5614, Dec. 2019.
- [12] T. Hiejima, “Development of specific structures occurring from hyper-breakable vorticity”, *Physics of Fluids*, 31 [7], 71701, 5 pages, 2019.
- [13] T. Hiejima, “Compressibility effects of supersonic Batchelor vortices”, *Physical Review Fluids*, 4 [9], 93903, 26 pages, 2019.
- [14] T. Hiejima and T. Oda, “Shockwave effects on supersonic combustion using hypermixer struts”, *Physics of Fluids*, 32 [1], 16104, 18 pages, 2020.
- [15] T. Hiejima, “On the rapid breakdown of supersonic streamwise vortices with opposite sign double annular vorticity”, *Acta Astronautica*, 168 [3], 220-229, 10 pages, 2020.
- [16] T. Hiejima, “Development of linear unstable modes in supersonic streamwise vortices using a weighted compact nonlinear scheme”, *Computers and Fluids*, 201 [4], 104416, 10 pages, 2020.
- [17] Takashi Ohta and Ryutaro Sugiura, “Numerical prediction of interaction between turbulence structures and vortex cavitation”, *Journal of Turbulence*, Vol. 20, No. 10, pp. 599-625, Nov. 2019.
- [18] H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, and M. Sigrist, “Properties of

- H-T-phase diagram of the 3-K phase in eutectic Sr₂RuO₄-Ru -Evidence for chiral superconductivity”, Physical Review B 100, 214501-1-9, 2019.
- [19] T. Fukuda and T. Tsukahara, “Heat transfer of transitional regime with helical turbulence in annular flow”, International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 82, 108555, 2020.
- [20] K. Kunii, T. Ishida, Y. Duguet, and T. Tsukahara, “Laminar-turbulent coexistence in annular Couette flow”, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 879, 579-603, 2019.
- [21] S. Fujimura, K. Yamamoto, M. Motosuke, and T. Tsukahara, “Numerical study of thermocapillary-driven flow of a micro bubble on locally heated wall”, Heat Transfer Research, in press.
- [22] T. Omori, N. Inoue, L. Joly, S. Merabia, Y. Yamaguchi, “Full characterization of the hydrodynamic boundary condition at the atomic scale using an oscillating channel: Identification of the viscoelastic interfacial friction and the hydrodynamic boundary position”, Physical Review Fluids 4-11, 114201, 2019.
- [23] 野村昂太郎, 沼田龍介, 八柳祐一, 行方大輔, 岩澤全規, 牧野淳一郎, “超並列粒子法シミュレーションプログラム自動生成ツールの紹介～並列プログラミングが初心者にもできる！～”, プラズマ核融合学会誌, "2巻", 第 96 号, 2020.
- [24] C. John, M. Kishimoto, T. Johzaki, T. Higashiguchi, N. Kakunaka, Y. Matsumoto, N. Hasegawa, M. Nishikino, T. Ejima, A. Sunahara, T. Endo, S. Namba, “Enhancement of water-window soft x-ray emission from laser-produced Au plasma under low-pressure nitrogen atmosphere”, Optics Letters 44, DOI: 10.1364/OL.44.001439, 6, 1439-1442, 2019.
- [25] Kumagai K, Toyama H, Ashihara, “T: Impact of box isolation on rotors and multiple wavelets in persistent atrial fibrillation.”, Circ J, 2020;84:419-426.
- [26] Nakamura T, Kiuchi K, Fukuzawa K, Takami M, Akita T, Suehiro H, Takemoto M, Sakai J, Yatomi A, Sonoda Y, Takahara H, Nakasone K, Yamamoto K, Hirata K, Ashihara, “T: Successful modulation of atrial fibrillation drivers anchoring to fibrotic tissue after box isolation using an online real - time phase map-ping system: ExTRA Mapping.”, J Arrhythm, 2019;35:733-736.
- [27] Kodama M, Furutani K, Kimura R, Ando T, Sakamoto K, Nagamori S, Ashihara T, Kurachi Y, Sekino Y, Furukawa T, Kanda Y, Kurokawa, “J: Systematic expression analysis of genes related to generation of action potentials in human iPS cell-derived cardiomyocytes”, J Pharmacol Sci, 2019;140:325-330.
- [28] Takayama K, Ohno S, Ding WG, Ashihara T, Fukumoto D, Wada Y, Makiyama T, Kise H, Hoshiai M, Matsuura H, Horie, “M: A de novo gain-of-function KCND3 mutation in early repolarization syndrome.”, Heart Rhythm, 2019;16:1698-1706.
- [29] Yanlin Gao and Susumu Okada, “Filed emission current from the functionalized graphene edges”, Carbon, Vol. 142, pp. 190-195, 2019.
- [30] Masaki Mieda and Susumu Okada, “Energetics and electronic structures of polymeric all-benzene hole-low-cage and planar networks”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 58, 015002, 2019.
- [31] Kazufumi Yoneyama, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada, “Energetics and electronic structure of gra-phene nanoribbons under the uniaxial torsional strain”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 58, SDDD05, 2019.
- [32] Manaho Matsubara and Susumu Okada, “Electronic structure of thin films of naphthalene under an external electric field”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 58, 075001, 2019.
- [33] Mina Maruyama and Susumu Okada, “Asymmetric field effect carrier accumulation in MoS₂/WS₂ van der Waals heterostructure”, Applied Physics Express, Vol. 12, 075008, 2019.
- [34] Hisaki Sawahata, Susumu Okada, and Mina Maruyama, “Energetics and electronic structures of MoS₂ na-noribbons”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 58, 075002, 2019.
- [35] Yasumaru Fujii, Mina Maruyama, and Susumu Okada, “Three-dimensional covalent networks of sp₂ and sp₃ C atoms: Energetics and electronic properties of polymerized diphenylmethane and tetraphenylmethane”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 58, 085001, 2019.
- [36] Hisaki Sawahata, Susumu Okada, and Mina Maruyama, “Energetics and electronic structures of border between MoS₂ and WS₂”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 58, 095002, 2019.

- [37] Tomonari Mizoguchi, Mina Maruyama, Susumu Okada, and Yasuhiro Hatsugai, “Flat bands and high-er-order topology in polymerized triptycene: Tight-binding analysis on decorated star lattices”, Physical Review Materials, Vol. 3, 114201, 2019.
- [38] Airi Yasuma, Susumu Okada, Yanlin Gao, and Mina Maruyama, “Electronic state tuning of graphene nanoribbons with pyridinic edges by hydrogenation”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 58, 125001, 2019.
- [39] Y. Mori, A. Sunahara, Y. Nishimura, T. Hioki, H. Azuma, T. Motohiro, Y. Kitagawa, K. Ishii, R. Hanaya-ma, 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, DOI: 10.1088/1361-6463/aafa64, 105202, 2019.
- [40] Aya Hosoi, Remi Konagaya, Sota Kawaguchi, Yasuhiro Sogabe, Yuya Yamashita, and Ken Naitho, “Com-putation Optimization of Pressure Wave Reflection on the Piston Surface for Single Point Autoignition Gasoline Engine with Colliding Pulsed Supermulti-Jets Leading to Noiseless-High Compression and Nearly-Complete Air-insulation”, SAE technical paper, 2019-01-0235, Apr, 2019.
- [41] Kota Mitsumoto, Chisa Hotta and Hajime Yoshino, “”, Phys. Rev. Lett., 124, 087201, 2020.
- [42] S. Imaki, A. Yamamoto, “Lattice field theory with torsion”, Phys. Rev., D 100, 054509, 2019.
- [43] Etsuko Itou, “Fractional instanton of the SU(3) gauge theory in weak coupling regime”, JHEP, 1905, 93, 2019.
- [44] T. Fujimori, E. Itou, T. Misumi, M. Nitta, N. Sakai, “Confinement-Deconfinement Crossover in the Lat-tice PN-1 Model”, Phys.Rev., D100, 094506, 2019.
- [45] K. Iida, E. Itou, T. Lee, “Two-colour QCD phases and the topology at low temperature and high density”, JHEP, 2001, 181, 2020.
- [46] T. Yamaguchi, K. Asada, H. Yamakawa, T. Miyamoto, K. Iwano, T. Nakamura, N. Kida, and H. Okamoto, “Photoexcitation of a one-dimensional polarization-inverted domain from the charge-ordered ferroelectric ground state of (TMTTF)2PF₆”, Phys. Rev., B.99, 245104.
- [47] K. Iwano, “Bloch Oscillations Due to Quantum Domain Breathing in One-Dimensional Electronic Pho-toinduced Phase Transitions”, Applied Sciences, 9(12), 2461, 2019.
- [48] S. Ohmura, A. Takahashi, K. Iwano, T. Yamaguchi, K. Shinjo, T. Tohyama, H. Okamoto, “An ef-fective charge model for the one-dimensional Hubbard and extended Hubbard models and its optical properties of large systems using many-body Wannier functions”, Phys. Rev., B100, 235134, 2019.
- [49] M. Delfan Azari, S. Yamada, T. Morinaga, W. Iwakami, Wakana, H. Nagakura and K. Sumiyoshi, “Linear analysis of fast-pairwise collective neutrino oscillations in core-collapse supernovae based on the results of Boltzmann simulations”, Physical Review, D99, 103011, 25 pages, 2019.
- [50] H. Nagakura, K. Sumiyoshi and S. Yamada, “Three-dimensional Boltzmann-hydro code for core-collapse in massive stars III. new method of momentum feedback from neutrinos to matter”, Astrophysical Journal, 878, 160, 10 pages, 2019.
- [51] Y. Suwa, K. Sumiyoshi, K. Nakazato, Y. Takahira, Y. Koshio, M. Mori and R. A. Wendell, “Observing su-pernova neutrino light curves with super-Kamiokande: expected event number over ten seconds”, Astro-physical Journal, 881, 139, 16 pages, 2019.
- [52] S. Abbar, H. Duan, K. Sumiyoshi, T. Takiwaki and M. C. Volpe, “On the occurrence of fast neutrino flavor conversions in multidimensional supernova models”, Physical Review, D 100, 043004, 7 pages, 2019.
- [53] H. Nagakura, K. Sumiyoshi and S. Yamada, “Pos-sible early linear acceleration of proto-neutron stars via asymmetric neutrino emission in core-collapse supernovae”, Astrophysical Journal Letters, L28, 880, 7 pages, 2019.
- [54] H. Sotani and K. Sumiyoshi, “Determination of properties of protoneutron stars toward black hole for-mation via gravitational wave observations”, Physical Review, D100, 083008, 12 pages, 2019.
- [55] K. Sumiyoshi, K. Nakazato, H. Suzuki, Jinniu Hu and H. Shen, “Influence of density dependence of sym-metry energy on supernova simulations”, Astrophysical Journal, 887, 110, 17 pages, 2019.
- [56] S. Furusawa, H. Togashi, K. Sumiyoshi, K. Saito, S. Yamada and H. Suzuki, “Nuclear equations of state for astrophysical simulations based on a Di-

- rac-Brueckner-Hartree-Fock calculation”, Progress of Theoretical and Experimental Physics, D05, 013, 15 pages, 2020.
- [57] M. Delfan Azari, S. Yamada, T. Morinaga, H. Nagakura, S. Furusawa, A. Harada, H. Okawa, W. Iwakami and K. Sumiyoshi, “Fast collective neutrino oscillations inside the neutrino sphere in core-collapse super-novae”, Physical Review, D101 , 023018, 12 pages, 2020.
- [58] S. Abbar, H. Duan, K. Sumiyoshi, T. Takiwaki and M. C. Volpe, “Fast neutrino flavor conversion modes in multidimensional core-collapse supernova models: The role of the asymmetric neutrino distributions”, Physical Review, D101, 043016, 12 pages, 2020.
- [59] H. Shen, F. Ji, J. Hu and K. Sumiyoshi, “Effects of symmetry energy on equation of state for simulations of core-collapse supernovae and neutron-star mergers”, Astrophysical Journal, 891, 148, 10 pages, 2020.
- [60] K. Iida, E. Itou, T.-G. Lee, “Two-colour QCD phases and the topology at low temperature and high density”, JHEP, 2020, 181, 2020.
- [61] M. Wakayama and A. Hosaka, “Search of QCD phase transition points in the canonical approach of the NJL model”, Phys. Lett. , B795, 548-553, 2019.
- [62] M. Wakayama, V. G. Bornyakov, D. L. Boyda, V. A. Goy, H. Iida, A. V. Molochkov, A. Nakamura and V. I. Zakharov, “Lee-Yang zeros in lattice QCD for searching phase transition points”, Phys. Lett., B793, 227-233, 2019.
- [3] M. Shibahara, K. Matsui, K. Fujiwara, and Y. Ueki, “Molecular dynamics study on time resolved interfacial thermal resistance of nanostructured surface during condensation”, The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC), PRTEC-24241, Hawaii, USA, December 2019.
- [4] Kentaro Echigo, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, “Flow and Heat Transfer Characteristics of Multi-Armed Impinging Jet Using DNS”, Proc. the ASME-JSME-KSME 2019 8th Joint Fluids Eng. Conf., USB, AJKFluids2019, 7p, Jul. 2019.
- [5] Koichi Tsujimoto, Kango Kitahara, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, “Numerical Simulation of Intermit-tent-Controlled Multiple Jets”, Proc. the ASME-JSME-KSME 2019 8th Joint Fluids Eng. Conf., USB, AJKFlu-ids2019, 7p, Jul. 2019.
- [6] Kwan Wai Mak, Koichi Osuka, and Teruyo Wada, “Formation of planar structures with rollable and jumpable cu-bic modular robots”, Proceedings of the 3rd International Symposium on Swarm Behavior and Bio-Inspired Ro-botics, USB flash drive, Okinawa, pp. 114-120, Japan, 20-22 November, 2019.
- [7] Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani and Yasuhiro Takaya, “Laser micro machining using a photonic nanojet controlled by intensity distribution of incident laser”, The 14th International Symposium on Measurement Technology and Intelligent Instruments, Paper ID 88, Japan, September 2019.
- [8] Reza Aulia Rahman, Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani and Yasuhiro Takaya, “In-Liquid Laser Na-nomachining by Photonic Nanojet in Optical Tweezers Configuration”, 12th International Symposium on Measurement and Quality Control, pp. 318-328, Republic of Serbia, June 2019.
- [9] Y. Ueki, M. Shibahara, “Thermal Properties of Nanoparticle-Mixed Molten-Salt: Experimental and Molecular Dynamics Study”, Proceedings of the 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference, PRTEC-24065, Dec. 2019.
- [10] Y. Ueki, M. Shibahara, “Numerical modeling of thermal conductivity of nanoparticle-mixed-molten-salt”, Proceedings of 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT 2019), ASCHT2019-181(A225), Sep. 2019.

2. 國際會議會議錄揭載論文

- [1] A. Fujii, K. Fujiwara, Y. Ueki and M. Shibahara, “Molecular Dynamics Simulation on Effects of Nanostructure on Interfacial Thermal Resistance during Condensation”, Proceedings of The 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, A313, Tokyo, Japan, September 2019.
- [2] T. Miyamoto, K. Fujiwara and M. Shibahara, “Molecular Dynamics Study on Interaction between Solidification Interface and Nanoparticle”, Proceedings of The 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, A215, Tokyo, Japan, September 2019.
- [3] M. Shibahara, K. Matsui, K. Fujiwara, and Y. Ueki, “Molecular dynamics study on time resolved interfacial thermal resistance of nanostructured surface during condensation”, The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC), PRTEC-24241, Hawaii, USA, December 2019.
- [4] Kentaro Echigo, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, “Flow and Heat Transfer Characteristics of Multi-Armed Impinging Jet Using DNS”, Proc. the ASME-JSME-KSME 2019 8th Joint Fluids Eng. Conf., USB, AJKFluids2019, 7p, Jul. 2019.
- [5] Koichi Tsujimoto, Kango Kitahara, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, “Numerical Simulation of Intermit-tent-Controlled Multiple Jets”, Proc. the ASME-JSME-KSME 2019 8th Joint Fluids Eng. Conf., USB, AJKFlu-ids2019, 7p, Jul. 2019.
- [6] Kwan Wai Mak, Koichi Osuka, and Teruyo Wada, “Formation of planar structures with rollable and jumpable cu-bic modular robots”, Proceedings of the 3rd International Symposium on Swarm Behavior and Bio-Inspired Ro-botics, USB flash drive, Okinawa, pp. 114-120, Japan, 20-22 November, 2019.
- [7] Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani and Yasuhiro Takaya, “Laser micro machining using a photonic nanojet controlled by intensity distribution of incident laser”, The 14th International Symposium on Measurement Technology and Intelligent Instruments, Paper ID 88, Japan, September 2019.
- [8] Reza Aulia Rahman, Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani and Yasuhiro Takaya, “In-Liquid Laser Na-nomachining by Photonic Nanojet in Optical Tweezers Configuration”, 12th International Symposium on Measurement and Quality Control, pp. 318-328, Republic of Serbia, June 2019.
- [9] Y. Ueki, M. Shibahara, “Thermal Properties of Nanoparticle-Mixed Molten-Salt: Experimental and Molecular Dynamics Study”, Proceedings of the 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference, PRTEC-24065, Dec. 2019.
- [10] Y. Ueki, M. Shibahara, “Numerical modeling of thermal conductivity of nanoparticle-mixed-molten-salt”, Proceedings of 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT 2019), ASCHT2019-181(A225), Sep. 2019.

- [11] Hideaki Habara, "Energy Transportation to the Imploded Core Plasma by Direct Irradiation of Ultra-intense La-ser Beam", Proceedings of 11th Eleventh International Conference of Inertial Fusion Sciences and Applications (IFSA2019), p.298, Sep. 2019.
- [12] Hiroki Makiyama, "Study of Fast Electron Collimation by Self-Generated Magnetic Field in the Imploded Plasma by Using Solid Sphere with Inserted Ni Wire", Proceedings of 11th Eleventh International Conference of Inertial Fusion Sciences and Applications (IFSA2019), p.292, Sep. 2019.
- [13] Keiji Okida, "Influence of Laser Irradiation Position on Fast Electron Propagation", Proceedings of 11th Eleventh International Conference of Inertial Fusion Sciences and Applications (IFSA2019), p.460, Sep. 2019.
- [14] Takashi Ohta, Yuta Onishi, and Yasuyuki Sakai, "Mechanism of Wall Turbulence Modulation With Premixed Hydrogen Combustion", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019, Jul. 2019.
- [15] Akihiro Hayashi and Takashi Ohta, "Investigation of Temporal Variations of Turbulence in Viscoelastic Fluid by DNS", 2019 International Symposium on Advanced Mechanical and Power Engineering, Dec. 2019.
- [16] Takashi Ohta, Takafumi Ichianagi and Taisei Tanaka, "Direct Numerical Simulation of Wall Turbulence of Liquid Solidifying on Wall Surface", The Second Pacific Rim Thermal Engineering Conference 2019, Dec. 2019.
- [17] H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, and M. Sigrist, "Features of chirality generated by paramagnetic coupling to magnetic fields in the 3K-phase of Sr₂RuO₄", JPS Conference Proceedings 30, 011039-1-6, (2020).
- [18] A. K. Hayashi, N. Tsuboi, K. Ozawa, T. Watanabe, N.H. Jourdaine, K. Ishii, H. Kawana, W. Kuwata, K. Ohno, T. Obara, S. Maeda, E. Dzieminska, X. Tang, T. Mizukaki, "Recent Experimental and Numerical Study on Disc-Type RDEs", AIAA Scitech 2020 Forum, Orlando, Florida, AIAA-2020-1169, January 2020.
- [19] Nicolas Jourdaine, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, Xinmeng Tang, Kohei Ozawa, "Simulation of detonation propagation in a two-phase gas/liquid cross flow injection", 27th international colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems, 435, China, August, 2019.
- [20] Tomohiro Watanabe, Kodai Shimomura, Nicolas H. Jourdaine, Kohei Ozawa, Nobuyuki Tsuboi, Takayuki Kojima, Kazuhiro Ishii, A. Koichi Hayashi, "Numerical Simulation on Disk Rotating Detonation Engine: Influence of Internal Flow Field Structure on Performance", AIAA Scitech 2020 Forum, AIAA-2020-2160, Orlando, Florida, January 2020.
- [21] Nobuhiro Kurita, Nicolas Jourdaine, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, A. Koichi Hayashi, Takayuki Kojima, "Three-Dimensional Numerical Simulation on Hydrogen/Air Rotating Detonation Engine with Aerospike Nozzle: Effects of Nozzle Geometries", 2020 AIAA SciTech, AIAA-2020-0688, Orlando, USA, January, 2020.
- [22] Kanta Iwasaki, Ayu Ago, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, A. Koichi Hayashi, "Two-dimensional Numerical Simulation of Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Channels with Obstacles: Effects of Blockage Ratio and Channel Size", 27th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive System, Beijing, China, 267, Aug-19.
- [23] Kanta Iwasaki, Ayu Ago, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, A. Koichi Hayashi, "Two-dimensional Numerical Simulation of Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Channels with Obstacles: Effects of Blockage Ratio and Channel Size", SAKURA Exchange Program in Science, Session 3, Fukuoka, Japan, Aug-19.
- [24] T. Kawata and T. Tsukahara, "Numerical investigation on scale-by-scale Reynolds stress transport in plane Couette turbulence", In: Proceedings of the 11th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP11), Southampton, UK, 6 pages, Jul. 30 - Aug. 2 (2019).
- [25] M. Hanabusa and T. Tsukahara, "Robustness of turbulent stripes in particle-laden channel flows", In: Proceedings of the ASME-JSME-KSME 2019 8th Joint Fluids Engineering Conference (AJKFluids2019), AJKFLU-IDS2019-5149, San Francisco, CA, 6 pages, Jul. 28 - Aug. 1 (2019).
- [26] T. Tsukahara and T. Fukuda, "Turbulent heat transfer in transitional annular Poiseuille flow", In: Proceedings of the 14th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics (HEFAT2019), Wicklow, Ireland, 6 pages, Jul. 22-24 (2019).
- [27] T. Tsukahara, K. Yamasaki, and I. Ueno, "Basic flows and heat transfer of thermal Marangoni

- convection in rec-tangular liquid film”, In: Proceedings of the 14th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics (HEFAT2019), Wicklow, Ireland, 6 pages, Jul. 22-24 (2019).
- [28] K. Takeda and T. Tsukahara, “New knowledge as DP universality class on the subcritical turbulent transitions of wall-bounded shear flows”, In: Abstract Proceedings of 7th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM2019), Taipei, Taiwan, Dec. 18-20 (2019).
- [29] H. Morimatsu and T. Tsukahara, “Parameter dependences of intermittent turbulent regime of annular Couette-Poiseuille flow”, In: Abstract Proceedings of 7th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM2019), Taipei, Taiwan, Dec. 18-20 (2019).
- [30] T. Nimura, T. Kawata, and T. Tsukahara, “Study on viscoelasticity-induced spatio-temporal modulation of roll cells in wall-bounded shear flow”, In: Abstract Proceedings of 7th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM2019), Taipei, Taiwan, Dec. 18-20 (2019).
- [31] S. Fujimura and T. Tsukahara, “Numerical study on flow near the contact line of a locally heated micro vapor bubble”, In: Proceedings of the 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC), PRTEC-24389, Maui Island, USA, Dec. 13-17 (2019).
- [32] K. Oda, T. Tsukahara, and Y. Kawaguchi, “Applicability of Reynolds stress model for drag-reducing turbulent flow over backward-facing step”, In: Proceedings of the 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC), PRTEC-24384, Maui Island, USA, 4 pages, Dec. 13-17 (2019).
- [33] T. Fukuda and T. Tsukahara, “Influence of large-scale intermittent structure on heat transfer in the transition regime of annular Poiseuille flow”, In: Proceedings of the 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC), PRTEC-24208, Maui Island, USA, 4 pages, Dec. 13-17 (2019).
- [34] R. Sakakibara, T. Nimura, T. Tsukahara, and Ishida, “Integrated analysis of direct numerical simulations and nonlinear parabolized stability equations”, In: Proceedings of the 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, I221, Tokyo, Japan, 2 pages, Sep. 3-7 (2019).
- [35] M. Okada, T. Nimura, T. Tsukahara, and. Ishida, “DNS of turbulent transition induced by streamwise sinusoidal roughness in swept flat plate boundary layer,”, In: Proceedings of the 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, I223, Tokyo, Japan, 2 pages, Sep. 3-7 (2019).
- [36] M. Hanabusa and T. Tsukahara, “Study on robustness of turbulent stripe in particle-laden channel flows with/without considering gravitational effect”, In: Proceedings of the 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, I211, Tokyo, Japan, 2 pages, Sep. 3-7 (2019).
- [37] K. Takeda and T. Tsukahara, “Subcritical transition of plane Poiseuille flow as DP universality classes in (2+1) and (1+1) dimensions”, In: Proceedings of the 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, I112, Tokyo, Japan, 2 pages, Sep. 3-7 (2019).
- [38] H. Morimatsu and T. Tsukahara, “Direct numerical simulation of annular Couette-Poiseuille flow: intermittent structures depending on pressure gradient and radius ratio”, In: Proceedings of the 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, I111, Tokyo, Japan, 2 pages, Sep. 3-7 (2019).
- [39] S. Fujimura, K. Yamamoto, M. Motosuke, and T. Tsukahara, “Numerical simulation of thermocapillary-driven flow of a micro vapor bubble on locally heated wall”, In: Proceedings of the 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, A122, Tokyo, Japan, 2 pages, Sep. 3-7 (2019).
- [40] Yusuke Ushijima, Yutaka Yoshikawa, “Mixed layer deepening due to wind-induced shear-driven turbulence and scaling of the deepening rate in the stratified ocean”, Ocean Dynamics, Vol.70, pp.505-512, Jan. 2020.
- [41] Kensuke Yasufuku, “An Interactive Visual Analytics Tool for Air Traffic Flow”, IEEE VIS 2019, Poster, Oct. 2019.
- [42] Kensuke Yasufuku, “Development of Interactive Visualization System for Trajectory Analysis of Air Traffic”, Proceedings of The 12th Asian Forum on Graphic Science (AFGS2019), Digital Proceedings, Invited Lecture, 6 pages, Aug. 2019.
- [43] Nakamura T, Kiuchi K, Fukuzawa K, Takami M, Suehiro H, Akita T, Takemoto M, Sakai J, Yatomi A, Sonoda Y, Takahara H, Nakasone K, Yama-

- moto K, Hirata K, Ashihara, “T: Successful modification of atrial fibrillation drivers anchoring to fibrotic tissue after Box isolation using real-time phase mapping system”, The 12th Asia-Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session (APHRS 2019), Poster, Bangkok (Centara Grand & Bangkok Convention Centre at CentralWorld, Thailand), 2019/10/24-27.
- [44] Haraguchi R, Ashihara T, Matsuyama T, Yoshimoto, “J: Computer simulation of anterograde accessory pathway conduction in Wolff-Parkinson-White syndrome with a simplified model”, Computing in Cardiology (CinC 2019), Poster, Singapore (Matrix), 2019/09/08-11.
- [45] Okuyama Y, Ashihara T, Ozawa T, Fujii Y, Kato K, Sugimoto Y, Nakagawa, “Y: Relationship of the duration of pulmonary vein isolation-refractory non-paroxysmal atrial fibrillation to the middle-to long-term outcome of the ExTRA Mapping-guided ablation.”, the 41st Annual Congress of the European Society of Cardiology (ESC Congress 2019), Poster, Paris (Ile-de-France, France), 2019/08/31-09/04.
- [46] Haraguchi R, Ashihara T, Matsuyama T, Yoshimoto, “J: Computer simulation of accessory pathway conduction in Wolff-Parkinson-White syndrome with a simplified heart wall model”, The 66th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society (JHRS 2019), Oral, Yokohama (PACIFICO Yokohama), 2019/07/24-27.
- [47] H. Nemura, “Hyperon-Nucleon Interaction from Lattice QCD at $(m\pi, mK) \approx (146, 525)$ MeV”, AIP Conf. , Proc. 2130, no. 1, 040005 (2019) [doi:10.1063/1.5118402], 2019.
- [48] Yusei Naka, Kazuya Tsuboi, Eiji Tomita, Tatsuya Hasegawa, “Influence of Particle Diameter on Numerical PIV Measurement Using DNS Data of Turbulent Premixed Flame”, The Proceedings of 12th Asia-Pacific Conference on Combustion, ASPACC2019-1469, Jul-19.
- [49] Eiji Hoashi, Shoki Ko, Takafumi Okita, Makoto Oyaizub and Kentaro Ochiai, “Study on Turbulent Heat Transfer Mechanism inner High-speed Lithium Jet Irradiated by Ion Beam for Fusion Neutron Sources”, 31st Symposium on Fusion Technology (SOFT2020), Dubrovnik, Croatia, 20-25 September 2020.
- [50] Yamazaki, T., Oda, Y., Matsumoto, R. and Katsuki, M, “Effect of Thermal Wall Condition on the Dissimilarity of Momentum and Heat Transfer in Pulsating Channel Flow”, The 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2019), Paper, No. ASCHT2019-165, Sep-19.
- [51] Hidenori Kawai, Maiko Arai, Tetsuro Tamura, “LES coupling with thermal radiation model for actual urban districts with high-rise building cluster -Analysis on intermittent change of turbulent and temperature field -”, The 15th International Conference on Wind Engineering Beijing, China, 385-386, 2019.
- [52] Etsuko Itou, “Resurgence and fractional instanton of the SU(3) gauge theory in weak coupling regime”, 37th International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE2019), PoSLAT-TICE2019(0) 014,, Wuhan, China, 16-22 June 2019.
- [53] Tatsuhiro Misumi, Toshiaki Fujimori, Etsuko Itou, Muneto Nitta, Norisuke Sakai, “Lattice study on the twisted PN-1 models on $\times S^1$ ”, 37th International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE2019), PoSLAT-TICE2019(0) 015, Wuhan, China, 16-22 June 2019.
- [54] 関田丈寛, 河野宏明, 高橋純一, 八尋正信, “有限密度における厳密なZ3 対称性を持つ格子QCD計算”, 原子核研究 2019年夏の学校特集号, 原子核三者若手夏の学校, 滋賀県白浜莊, pp.66-67, 2020年2月.
- [55] Hiroaki Wada, Yuko Murakami, Atsushi Nakamura, Motoo Sekiguchi, Masayuki Wakayama, “Lattice study of meson properties at fine temperature using the truncated overlap fermions”, Proceedings of Science, (LAT-TICE2019)045 (2019), 37th International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE2019), 2019.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DNS を用いた壁面に衝突する開花噴流の流動・伝熱特性”, 日本機械学会2019年度年次大会講演論文集, CD-ROM, 5p, Sep. 2019.
- [2] 鈴木忠史, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “間欠制御下の多重衝突噴流における流動・伝熱特性のDNS”, 日本機械学会2019年度年次大会講演論文集, CD-ROM, 5p, Sep. 2019.
- [3] 田ノ上飛翔, 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

- 解析”，日本機械学会 2019 年度年次大会講演論文集, CD-ROM, 5p, Sep. 2019.
- [4] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “振動制御した多重衝突噴流の DNS”, 第 97 期日本機械学会流体工学部門講演会, USB, 3p, Nov. 2019.
- [5] 鈴木忠史, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “欠多重衝突噴流における噴流間隔が流動・伝熱特性に与える影響”, 第 97 期日本機械学会流体工学部門講演会, USB, 3p, Nov. 2019.
- [6] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DNS を用いた開花噴流の混合特性評価”, 第 97 期日本機械学会流体工学部門講演会, USB, 3p, Nov. 2019.
- [7] 鈴木忠史, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DNS を用いた多数配置された衝突噴流の流動構造及び伝熱特性”, 日本機械学会東海支部第 69 期総会・講演会講演論文集, USB, 2p, Mar. 2020.
- [8] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “傾斜回転させた自由噴流の DNS”, 日本機械学会東海支部第 69 期総会・講演会講演論文集, USB, 2p, Mar. 2020.
- [9] 君塚肇, “ブロック共重合体ラメラ相の変形異方性とキンク形成の粗視化分子動力学計算”, 日本物理学会第 75 回年次大会・共催シンポジウム「ミルフィィーユ構造の材料科学」, 名古屋大学, 2020 年 3 月 16 日.
- [10] 君塚肇, “高分子系ミルフィィーユ構造におけるキンク形成の粗視化分子モデリング”, 日本国金属学会 2019 年秋期講演大会, 岡山大学, 2019 年 9 月 11-13 日.
- [11] 君塚肇, “高分子ラメラ構造における微視的座屈とシェブロン構造形成の粗視化分子動力学解析”, 日本国金属学会研究会 No.82 「微小領域の力学特性評価とマルチスケールモデリング」, 軽井沢, 2019 年 11 月 8-10 日.
- [12] 君塚肇, 岩井佑樹, 福井浩毅, 志賀基之, 尾方成信, “量子反応経路探索手法による鉄中らせん転位のキンク対形成過程の解析”, 日本計算工学会第 24 回計算工学講演会, さいたま, 2019 年 5 月 29-31 日.
- [13] 岩井佑樹, 福井浩毅, 君塚肇, 尾方成信, “量子反応経路探索手法を用いた鉄中らせん転位の移動過程の自由エネルギー地形解析”, 日本国材料学会第 4 回マルチスケール材料力学シンポジウム, 室蘭工業大学, 2019 年 5 月 24 日.
- [14] 大倉大樹, 吉川裕, “台風に対する海洋の応答の非対称性についての数値実験”, 日本地球惑星科学連合 2019 年大会, 千葉市幕張, 2019 年 5 月 26 日.
- [15] 大倉大樹, 吉川裕, “「台風と海洋混合過程の相互作用が台風に与える影響に関する研究」, 「海洋乱流の観測およびモデリングに関する研究集会」, 東京大学共同利用研究集会, 東京大学大気海洋研究所, 2019 年 11 月 15 日.
- [16] 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 8 報)-マイクロ球に照射する集光ビームパラメータによる加工制御-”, 2019 年度精密工学会秋季大会, 静岡大学, L08, 2019 年 9 月.
- [17] 植木祥高, 芝原正彦, “微粒子を懸濁した溶融塩の熱物性 -実験研究と分子動力学的研究-”, 日本機械学会熱工学カンファレンス 2019 講演論文集, H211, Oct. 2019.
- [18] 中谷祐介, 多鍋耀介, 西田修三, “琵琶湖の全層循環と気候変動の影響に関する数値シミュレーション”, 日本流体力学会年会, 2019 年 9 月.
- [19] 加藤有己, 杉原礼一, 森智弥, 河原行郎, “複雑な細胞運命比較のための時系列 1 細胞 RNA-seq データのアラインメント”, 第 42 回日本分子生物学会年会, 1PW-14-2 (oral), 1P-0634 (poster), Dec. 2019.
- [20] 杉原礼一, 加藤有己, 森智弥, 河原行郎, “分岐を考慮した時系列シングルセルデータのアラインメント”, 第 61 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, 2020-BIO-61 (6), Mar. 2020.
- [21] 平井单宇, 比江島俊彦, 新井隆景, “鋭いノーズ形状を持つ極超音速飛翔体の先端に発生する熱流束の予測”, 第 56 回日本航空宇宙学会関西・中部支部合同秋期大会講演論文集, B02, pp. 1-2, 2019.
- [22] 西村海斗, 比江島俊彦, “SR ストラットの燃料噴射角度が超音速燃焼に与える効果”, 第 33 回数值流体力学シンポジウム講演論文集, D10-1, pp. 1-2, 2019.
- [23] Takao Shimamoto, Kunichika Tsumoto, Yasutaka Kurata, Akira Amano, “Coordinately early afterdepolarizations evoked in ventricular tissue trigger reentrant arrhythmias: in silico study”, 第 97 回日本生理学会大会, Mar 2020.
- [24] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Akira

- Amano, Yasutaka Kurata, “Relations between early afterdepolarizations and ventricular lethal arrhythmias in long QT syndrome: a simulation study”, 第 67 回日本不整脈心電学会学術集会, Jul 2020. (発表予定).
- [25] 太田貴士, 一柳隆史, 田中大誠, “液体乱流の DNSにおける凝固組織構造と乱流変調の予測”, 日本流体力学会 年会 2019, Sep. 2019.
- [26] 平田椋大, 太田貴士, “水素燃焼混合層のDNSによるNO_x生成の観察”, 第 17 回日本流体力学会中部支部講演会, Oct. 2019.
- [27] 中辻佳祐, 太田貴士, “粗面乱流境界層のための空間スケーリングおよびそれに基づくLES 解析法の提案”, 流体工学シンポジウム (第 64 回北陸流体工学研究会) , Dec. 2019.
- [28] 佐竹駿弥, 太田貴士, “DNSによる乱流境界層の普遍的音源構造の解明”, 流体工学シンポジウム (第 64 回北陸流体工学研究会) , Dec. 2019.
- [29] 北川雄太, 太田貴士, “壁面垂直方向に運動する壁面に沿う圧縮性乱流の変調予測”, 日本機械学会 北陸信越支部 第 57 講演会, Mar. 2020.
- [30] 田中大誠, 太田貴士, “フェーズフィールド法による過冷却凝固する液体乱流における凝固組織構造の観察”, 日本機械学会 北陸信越支部 第 57 講演会, Mar. 2020.
- [31] 吉田拓矢, 大谷智仁, 武石直樹, 和田成生, “4D-CT画像に基づく左心房内血流動態の推定”, 日本機械学会関西学生会 2018 年度学生員卒業研究発表講演会講演論文集, 1 頁, 2020 年 3 月.
- [32] 荒木天秀, 武藤大貴, 寺島洋史, 坪井伸幸, “超臨界圧高密度比混合層分布の数値評価について”, 第 33 回数値流体力学シンポジウム, D08-4, 2019, 11.
- [33] Taishi Amano, Takahide Araki, Hiroshi Terashima, Daiki Muto, Kohei Ozawa, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Study on Cryogenic Jet/Crossflow Interaction Structures under a Supercritical Pressure”, 32nd International Symposium on Space Technology and Science (ISTS), a91387, Fukui, Japan, Jun-19.
- [34] 大倉毅士, 坪井伸幸, 小澤晃平, 野中聰, 伊藤隆, “再使用ロケット実験機RV-Xの空力特性解析:レイノルズ数効果の影響”, 日本機械学会九州支部第 51 回学生員卒業研究発表講演会, 2020.
- [35] 馬場紘士朗, 坪井伸幸, 丸佑介, 藤田和央, 小澤晃平, “Waverider のオービター先端形状の干渉に関する風洞試験及び数値解析”, 日本機械学会九州支部第 73 期総会・講演会, 2020.
- [36] 坪井伸幸, 馬場紘士朗, 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の空力特性評価 : Re数及びオービター先端形状の影響”, 令和元年度宇宙航行の力学シンポジウム, ISAS/JAXA, 2019.12.10-11.
- [37] 坪井伸幸, ジョーダン・ニコラ, 小澤晃平, 林光一, 小島孝之, “回転デトネーションエンジンの 3 次元数値解析 : エアロスペイクノズルを有する形状の推進性能評価”, 第 51 回流体力学講演会 / 第 37 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2019.07.02-03.
- [38] 坪井伸幸, 栗田暢皓, 林光一, 小島孝之, “回転デトネーションエンジンの 2 次元数値解析-多孔噴射の影響について”, 第 57 回燃焼シンポジウム, 札幌, 2019.11.20-22.
- [39] 坪井伸幸, “Weighted Compact Nonlinear Schemeを用いたデトネーションの数値解析 : デトネーションの構造に与える粘性の影響”, 航空宇宙空力シンポジウム、令和元年度 航空宇宙空力シンポジウム, 有馬温泉, 2L1, 2020.1.24-25.
- [40] 栗田暢皓, 渡部友裕, Jourdain Nicolas, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, 小島孝之, “収縮膨張ノズルを有するローテーティングデトネーションエンジンの 3 次元数値解析 : 推進性能に与えるH2/Air混合気の当量比の影響評価”, 第 51 回流体力学講演会 / 第 37 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 1D18, 2019, 7.
- [41] 栗田暢皓, 渡部友裕, Jourdain Nicolas, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, 小島孝之, “収縮膨張ノズルを有するローテーティングデトネーションエンジンの 3 次元数値解析 : 推進性能に与えるH2/Air混合気の当量比の影響評価”, 第 51 回流体力学講演会 / 第 37 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 1D18, 2019, 7.
- [42] 浦田豊大, 坪井伸幸, 小澤晃平, 岩崎幹太, 竹島直己, 林光一, “高次精度スキームを用いた水素/空気デトネーションの数値解析 : 粘性・拡散の影響について”, 2019 年度衝撃波シンポジウム, 2019.
- [43] 花房真輝, 塚原隆裕, “チャネル流の乱流縞剛性に関する質点粒子ストークス数への依存

- 性”，日本機械学会 第 97 期 流体工学部門講演会 講演論文集，豊橋, OS8-09, 5 pages, 11 月 7-8 日 (2019).
- [44] 小田和希, 塚原隆裕, 川口靖夫, “粘弹性流体 バックスステップ乱流におけるDNSと応力方程式モデル”, 日本機械学会 第 97 期 流体工学部門講演会 講演論文集，豊橋, OS1-14, 3 pages, 11 月 7-8 日.
- [45] 河田卓也, 塚原隆裕, “平面クエット乱流におけるレイノルズ応力スペクトル輸送”, 日本流体力学会年会 2019 講演論文集，東京, 4 pages, 9 月 13 日-15 日 (2019).
- [46] 森松浩隆, 塚原隆裕, “環状クエット・ポアズイユ流において円筒比及び圧力勾配が間欠構造に及ぼす影響”, 日本流体力学会年会 2019 講演論文集，東京, 4 pages, 9 月 13 日-15 日 (2019).
- [47] 竹田一貴, 塚原隆裕, “平面ポアズイユ流亜臨界遷移におけるDP普遍クラスとしての二段階遷移過程”, 日本流体力学会年会 2019 講演論文集，東京, 5pages, 9 月 13 日-15 日 (2019).
- [48] 福田雄大, 塚原隆裕, “環状ポアズイユ乱流において大規模間欠構造がもたらす伝熱促進効果”, 第 56 回日本伝熱シンポジウム 講演論文集, 徳島, K1428, 5 pages, 5 月 29 日-31 日 (2019).
- [49] 山崎広哉, 塚原隆裕, 上野一郎, “自由液膜内温度差マランゴニ対流場における基本流パターン選択”, 第 56 回日本伝熱シンポジウム 講演論文集, 徳島, I133, 5 pages, 5 月 29 日-31 日 (2019).
- [50] 安福健祐, “航空交通流分析のためのインタラクティブ可視化”, SS研汎用VRシステムの活用研究WG, Apr. 2019.
- [51] 大森健史, 山口康隆, 梶島岳夫, “接触線運動の運動方向に対する非対称性（不均一性のない壁面上における局所の前進・後退接触角）”, 混相流シンポジウム, 2019.08.06.
- [52] T. Omori, N. Inoue, L. Joly, S. Merabia, Y. Yamaguchi, “Measuring the hydrodynamic wall position and viscoelastic friction coefficient by molecular dynamics”, APS-DFD, 2019.11.26.
- [53] 赤塚千春、井宮弘人、岩本紘明、生越専介, “Ni(0)/NHC錯体を用いたジフルオロメチルアレーンの炭素-フッ素結合切断反応”, 第 100 回日本化学会春季年会, 発表番号:3H2-38.
- [54] 岩野薫, “2 次元電荷秩序系におけるドメイ
- ン励起について”, α -I3 研究会, 茨城県つくば市, 高エネルギー加速器研究機構, 2019 年 8 月 6 日.
- [55] 稲田慎, 相庭武司, 柴田仁太郎, 原口亮, 芦原貴司, 草野研吾, 清水涉, 池田隆徳, 佐久間一郎, 中沢一雄, “右室流出路における伝導障害が引き起こす心室性不整脈発生メカニズムの検討”, MEとバイオサイバネティックス研究会, 東京 (電気通信大学), 口頭発表, 2020/3/4-6.
- [56] 芦原貴司, “世界初のリアルタイム臨床不整脈映像化システムがもたらす不整脈治療イノベーション: ExTRA Mappingプロジェクト”, 日本機械学会第 32 回バイオエンジニアリング講演会, 金沢 (金沢商工会議所会館), 特別講演, 2019/12/20.
- [57] 芦原貴司, 奥山雄介, 小澤友哉, 原口亮, 稲田慎, 中沢一雄, 重巻憲治, 本山一隆, 杉本喜久, 中川義久, “心房細動のリアルタイム映像化に基づくカテーテル治療の効率化に向けた心内心電図解析改善の取り組み”, 第 39 回医療情報学連合大会, 千葉 (幕張メッセ), 口頭発表, 2019/11/21-24.
- [58] 稲田慎, 相庭武司, 柴田仁太郎, 原口亮, 芦原貴司, 草野研吾, 清水涉, 池田隆徳, 中沢一雄, “コンピュータシミュレーションを用いた右室流出路を起源とする不整脈発生機序の検討”, 第 39 回医療情報学連合大会, 千葉 (幕張メッセ), 口頭発表, 2019/11/21-24.
- [59] 熊谷浩一郎, 木内邦彦, 芦原貴司, “フォアヌーンセミナー2: ExTRA Mappingで拓がる新たなAF治療の可能性”, カテーテルアブレーション関連秋季大会 2019, 金沢 (石川県立音楽堂・ANAクラウンプラザホテル金沢), ディスカッサント, 2019/11/07-09.
- [60] 芦原貴司, “ディベートセッション 2: AF: 持続性心房細動に対する線状焼灼以外の付加的アブレーションは有用である: Pro & Rebuttal from Pro speaker”, 第 66 回日本不整脈心電学会学術大会(JHRS 2019), 横浜 (パシフィコ横浜), ディベート(講演), 2019/07/24-27.
- [61] Tomii N, Jiao J, Yamazaki M, Ashihara T, Sakuma, “I: シンポジウム 3: 不整脈診断におけるAIの現状と未来: Deep neural network for estimation of membrane potential distribution from multiple electrode measurement signals: A simulation study”, The 66th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society (JHRS 2019), Yokohama (PACIFICO Yokohama), Symposium, 2019/07/24-27.

- [62] Ashihara T, Ozawa T, Okuyama Y, Fujii Y, Kato K, Sugimoto Y, Haraguchi R, Nakazawa K, Nakagawa, “Y: シンポジウム 3：不整脈診断におけるAIの現状と未来：Future perspective of online real-time atrial fibrillation visu-alization system aided by artificial intelligence and in silico analysis system”, The 66th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society (JHRS 2019), Yokohama (PACIFICO Yokohama), Symposium, 2019/07/24-27.
- [63] 芦原貴司, “ティータイムセミナー4：令和時代の非発作性心房細動アブレーション：ExTRa Mapping”, 第 66 回日本不整脈心電学会学術大会(JHRS 2019), 横浜 (パシフィコ横浜) , ティータイムセミナー (講演) , 2019/07/24-27.
- [64] Ashihara T, “シンポジウム 3：不整脈診断におけるAIの現状と未来：令和元年は医療AI元年となるのか：その現状と課題”, The 66th Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society (JHRS 2019), Yokohama (PACIFICO Yokohama), Symposium (Keynote Lecture), 2019/07/24-27(25).
- [65] 稲田慎, 柴田仁太郎, 井上優子, 山本剛, 奈良崎大士, 原口亮, 芦原貴司, 池田隆徳, 草野研吾, 三井和幸, 中沢一雄, “ベクトル心電図による心室期外収縮発生部位同定の高精度化を目指したインシリコ研究”, 第 34 回心電情報処理ワークショップ, 横浜 (横浜ベイシェラトンホテル&タワーズ) , 口頭発表, 2019/6/8.
- [66] 芦原貴司, 小澤友哉, 奥山雄介, 藤居祐介, 加藤浩一, 中川義久, 杉本喜久, 原口亮, 稲田慎, 中沢一雄, “標準術式に抵抗性を示す心房細動の維持機構であるローターの映像化と制御：新たな治療戦略の構築に向けて”, 第 58 回日本生体医工学会大会, 沖縄 (沖縄コンベンションセンター), オーガナイズドセッション (口頭発表) , 2019/6/6-8.
- [67] 稲田慎, 相庭武司, 柴田仁太郎, 原口亮, 芦原貴司, 草野研吾, 清水渉, 池田隆徳, 中沢一雄, “右室流出路伝導障害が引き起こす心室性不整脈のメカニズムのシミュレーションによる検討”, 第 58 回日本生体医工学会大会, 沖縄 (沖縄コンベンションセンター), オーガナイズドセッション (口頭発表) , 2019/6/6-8.
- [68] H. Nemura, (for HAL QCD Collaboration), “Hyperon-Nucleon interaction from lattice quantum chromodynamics at almost physical masses”, Frontiers in Lattice QCD and related topics, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, April 15-26, 2019.
- [69] 田中晴也, 鶴野公彰, 辻拓也, 田中敏嗣, “粒子せん断流DEMシミュレーションによる付着力モデルの評価”, 粉体工学会 2019 年度秋季研究発表会, BP-37, Oct. 2019.
- [70] 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－熱的境界条件の影響－”, 第 56 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, 2019 年 5 月.
- [71] Yasuhiro Sogabe and Ken Naitho, “Numerical calculation of engine with atomization effect due to shock wave”, 28th ILASS-Japan Symposium, Yamaguchi Ube, Japan, December, 2019.
- [72] 新井舞子, 河合英徳, 田村哲郎, “熱放射を考慮したLESに基づく実在市街地の気流・熱環境解析に関する検証”, 日本流体力学会年会, 2019.
- [73] 新井舞子, 河合英徳, 田村哲郎, “熱放射・LES 連成解析手法の適用と検証 -実在市街地の乱流場・温度場の解析-”, 数値流体力学シンポジウム, C08-1, 2019.

4. 著書

- [1] 芦原貴司, 村垣善浩 (監修), “スマート医療テクノロジー開発(エヌ・ティー・エス, 2019)”, 第 2 編第 2 章第 3 節 臨床不整脈のリアルタイム映像化システムの開発, pp. 241-248.
- [2] 芦原貴司, 門田一繁 (編集), 田坂浩嗣 (編集), “上級医の循環器治療手技: カテーテルアブレーション(日本医事新報社, 2019)”, 2 章 高周波アブレーション: 2. 非発作性心房細動において rotor アブレーションが有効と思われるのはどのような症例か, pp. 67-77.

5. その他

- [1] 上田耀平, 劍隼人, 真島和志, “(E)-Selective Cross-dimerization of Terminal Alkynes Catalyzed by a Cobalt Complex with a Sterically Demanding Phenanthroline Ligand”, 日本化学会第 100 春季年会、東京理科大学, 2020 年 3 月 23 日.
- [2] J. Yamamoto, Y. Baba, T. H. Tran, and V. A. Rakov, “Simulation of the propagation of lightning electromagnetic pulses in the earth-ionosphere waveguide using the FDTD method in the 2-D spherical coordinate system”, IEEJ Trans. Electrical and Electronic Engineering, vol. 15, no. 3,

- 2020-3.
- [3] J. Yamamoto, Y. Baba, T. H. Tran, and V. A. Rakov, "Simulation of LEMP propagation in the Earth-ionosphere waveguide using the FDTD method in the 2-D spherical coordinate system", Paper Presented at 2018 IWHV, no. HV-18-088, Sendai, Japan, 2018-11.
- [4] 山本純也, 上野航暉, 馬場吉弘, 長岡直人, “電離圏を考慮した雷電磁界パルスの二次元球座標系におけるFDTD解析”, 平成 30 年電気学会B大会, no. 269, 徳島, 2018-9.
- [5] Hajime Kimizuka, "Undulation instability and kink formation of layered block copolymers: A coarse-grained molecular dynamics study", The 10th International Conference on Auxetics and Other Materials and Models with "Negative" Characteristics and 15th International Workshop Poznan, Poland, on Auxetics and Related Systems (Auxetics 2019) Poznan, Poland, September 2-6, 2019.
- [6] 辻本長嵩, 東田皓介, Fabian Brüning, 東原 賢也, 長江 春樹, Antonio Togni, 真島 和志, “不斉ジホスフィン配位子を有するモノヒドリドロジウム(III)錯体を触媒とする単純アルケンの不斉水素化反応”, 日本化学会第 100 春季年会, 東京理科大学, 2020 年 3 月 23 日.
- [7] 仁村友洋, 河田卓也, 塚原隆裕, “回転平面クエット流におけるロールセル構造への粘弾性安定化作用”, 日本機械学会流体工学部門 複雑流体研究会, 同志社大学, 2019 年 6 月.
- [8] Tomohiro Nimura, Takuya Kawata, and Takahiro Tsukahara, "Study on Viscoelasticity-induced Spatio-Temporal Modulation of Roll Cells in Wall-bounded Shear Flow", Asian Pacific Congress on Computational Mechanics, Taipei, Taiwan, December 2019.
- [9] 古賀遼生, 岩下拓哉, “液体の粘度と応力の局所的相関”, 本物理学会 2019 年秋季大会 (岐阜市), 2019 年 9 月.
- [10] 山田爽水, 岩下拓哉, “液体金属における粘度の局所構造起源探索”, 日本物理学会 2019 年秋季大会 (岐阜市), 2019 年 9 月.
- [11] 古賀遼生, 岩下拓哉, “液体の局所粘度の空間相関”, 第 125 回日本物理学会九州支部例会 (佐賀市), 2019 年 12 月.
- [12] 岩下拓哉, “不規則物質の動的欠陥探索と運動論”, レア・イベントの計算科学ワークショップ (名古屋市), 2019 年 12 月.
- [13] 山崎拓真, “荷電コロイドの熱的活性過程の関係”, 2019 スパコンワークショップ (名古屋市), 2019 年 12 月.
- [14] 山田爽水, 岩下拓哉, “局所力学量で見る液体の動力学”, 第 125 回日本物理学会九州支部例会 (佐賀市), 2019 年 12 月.
- [15] 山崎拓真, 岩下拓哉, “荷電コロイドの粘度と熱的活性過程の関係”, 第 125 回日本物理学会九州支部例会 (佐賀市), 2019 年 12 月.
- [16] Reiichi Sugihara, Yuki Kato, Tomoya Mori and Yukio Kawahara, "Alignment of time-course single-cell RNA-seq data with CAPITAL", bioRxiv, doi: <https://doi.org/10.1101/859751>, Nov. 2019.
- [17] 河野宏明, 開田丈寛, 高橋純一, 八尋正信, “厳密なZ3 対称性を持った有効模型と格子QCD”, 日本物理学会第 75 回年次大会概要集, 名古屋大学, 2020 年 3 月 17 日.
- [18] Takuya Yamaguchi, Takahiro Horiba, Masato Morifuji, and Masahiko Kondow, "Transmission Characteristics of a Novel Waveguide Structure for Wavelength Division Multiplexing", Compound Semiconductor Week 2019, MoP-D-3, Nara, Japan, 2019.
- [19] 山口拓也, 森藤正人, 梶井博武, 近藤正彦, “直交格子フォトニック結晶導波路の導波周波数と伝搬損失”, 2019 年電子情報通信学会ソサイエティ大会 C-3-2, 大阪大学豊中キャンパス (豊中市), 2019.9.10-13.
- [20] 兼安洋乃, “研究報告「共晶系Sr₂RuO₄-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」”, 大阪大学サイバーメディアセンター HPCジャーナル No.9 25-28, -2019.
- [21] H. Kaneyasu, “Superconductivity in the eutectic Sr₂RuO₄-Ru, “Directionally Solidified Eutectics Conference -DSEC VI”, University of Salerno, Italy [招待講演, 口頭], 10-13 September, 2019.
- [22] H. Kaneyasu, “The 3 Kelvin phase in the eutectic Sr₂RuO₄-Ru”, Workshop; Strontium Ruthenate ETH Zurich, Switzerland. [ポスター], May 9-11, 2019.
- [23] H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, and M. Sigrist, “Magnetic-field-induced chiral stability of interface superconductivity in Sr₂RuO₄/Ru”, Oxide Super-spin Workshop 2019 (OSS2019) Hoam faculty house at Seoul National University (SNU), Korea. [ポスター], 24-28 June 2019.

- [24] H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, and M. Sigrist, “Features of chirality generated by paramagnetic supercurrents in a magnetic field in the 3K-phase of Sr₂RuO₄”, “International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (SCES ‘19) Okayama Convention Center, Okayama, Japan. [ポスター]”, Sep. 23-28, 2019.
- [25] Toru Yamamura, Masafumi Edamoto, Taichi Morita, Satoru Kawabe, Naoji Yamamoto, Atsushi Sunahara, Hideki Nakashima, “Numerical Study on a Conical Shaped Target for Laser Fusion Rocket”, Eleventh International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, Osaka, Japan, September, 2019.
- [26] 兼安洋乃, 野村拓司, 長谷川泰正, 坂井徹, シグリスト マンフレッド, “磁場中における距離依存性を持つ超伝導の電流とchirality変化”, 日本物理学会 2019年秋季大会(岐阜大学). [ポスター], 2019 年 9 月 10 日～9 月 13 日.
- [27] T. Tsukahara, K. Yamasaki, and I. Ueno, “Basic flows driven by thermal Marangoni effect in rectangular liquid film”, The 8th Symposium on Bifurcations and Instabilities in Fluid Dynamics (BIFD2019), Limerick, Ireland, Jul. 16-19 (2019).
- [28] K. Takeda and T. Tsukahara, “Subcritical transition of plane Poiseuille flow as (2+1) d and (1+1) d DP universality classes”, The 8th Symposium on Bifurcations and Instabilities in Fluid Dynamics (BIFD2019), Limerick, Ireland, Jul. 16-19 (2019).
- [29] 仁村友洋, 河田卓也, 塚原隆裕, “回転平面カエット流におけるロールセル構造への粘弾性安定化作用”, 第 21 回複雑流体研究会, 京都, 6 月 22 日 (2019).
- [30] Yusuke Ushijima, Yutaka Yoshikawa, “The Verification of the Parameterization of the Pressure Strain Correlations in the Ocean Surface Layer”, 3rd International Symposium "Ocean Mixing Processes: Impact on Biogeochemistry Climate and Ecosystem", Tokyo, Japan, May. 2019.
- [31] 牛島悠介, 吉川裕, “安定成層・不安定成層下での海洋表層の圧力-歪み相関のパラメタリゼーションの修正と改善”, 地球惑星科学連合 2019 連合大会 (千葉市) , May. 2019.
- [32] 牛島悠介, 吉川裕, “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”, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 11 回シンポジウム (品川区) , Jul. 2019.
- [33] 牛島悠介, 吉川裕, “海洋表層の乱流運動エネルギー輸送のパラメタリゼーション～安定成層から中程度の不安定成層まで～”, 第六回気象セミナー (伊勢市) , Jul. 2019.
- [34] Yusuke Ushijima, Yutaka Yoshikawa, “Mixed Layer Deepening due to Wind-Induced Shear-Driven Turbulence and Scaling of the Deepening Rate in the Stratified Ocean”, Ocean Sciences Meeting 2020', San Diego, California, USA, Feb. 2020.
- [35] Tomotaka Kobayashi and Ken Naitoh, “Quasi-stability theory with multi-dimensional Taylor expansion: revealing transmutation of atoms in cold fusion”, ICCF-22, Assis, Italy, Sep-19.
- [36] 光元亨汰, 吉野元, “ランダムネスを含まないフラストレート磁性体におけるスピングラス転移の平均場理論”, 日本物理学会、岐阜大学, 2019 年 9 月 13 日.

SC19 出展報告

渡場 康弘²、伊達 進¹、木戸 善之¹、阿部 洋丈¹、吉川 隆士²、寺前 勇希³
応用情報システム研究部門¹、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²、
情報推進部情報基盤課³

2019年11月に米国コロラド州 Denver にて開催された国際会議/展示会 SC19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おり、今年の参加人数は過去最高の13,300人以上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て今回で20回目となる。

2019年のSC（通称 SC19）は、米国コロラド州デンバー市にある The Colorado Convention Center（以下、コロラドコンベンションセンター：図1）にて、11月17日から22日までの期間に開催された。なお、デンバーでのSCの開催は2001年度、2013年度、2017年度に統いて4度目となり、本センターのデンバーでの展示も4度目となる。デンバーはコロラド州の北部にある州都である。デンバーはロッキ



図1：コロラドコンベンションセンター

一山脈の麓にあり、標高1マイル(1,609m)に位置することからマイル・ハイシティ(Mile High City)と呼ばれている。標高1マイルとは富士山の新五合目と同程度であることから空気が希薄なため、頭痛、倦怠感、食欲低下といった症状が出やすいという高地ならではの特徴がある。それゆえ、参加者、特に今回がデンバーでのSCへの参加が初めてであった者は、表には出さないが体調管理においていろいろ苦労があったと思われる。SC19の展示が行われるコロラドコンベンションセンターはデンバーのダウンタウン中心部に位置しており、敷地面積は2,200,000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。584,000平方フィートある展示スペース、2つの大きなballroom、63室の会議室を備えている上、2020年からは新たにballroomや会議室を追加する計画が立てられている巨大施設である。また、コロラドコンベンションセンターの近くにある16番街は、レストランや複合施設が多数あり、その中の移動には無料バスが利用できる。そのため、展示期間中に昼食などで外出するにも非常に利便性の高い環境であった。

2. 展示内容

本年度は、以下に紹介する当センターおよび情報推進部の教職員 6 名（招へい教員 1 名含む）、関連研究部門に配属されている大学院生および学部学生 3 名の合計 9 名という構成で展示ブースの運営に臨んだ。展示者の記念撮影風景を図 2 に示す。



図 2: SC19 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	瀧川 陽平
学部学生	鎌田 将吾 山本 晃平

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
------	----------------

情報推進部情報基盤課

寺前 勇希

ブース展示は、11月18日から21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 423 名であり、2017 年度の 526 名からは減少したものの、2018 年度の 436 名と同じくらい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良く

なってきていることがあげられ、今年度も 423 名のブース来訪者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。今年度も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。ブース展示の効果・意義を来訪者数だけで量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（423 名）の 62%（263 名）を占めているのがわかる。続いて、日本からの来訪者が 20%（83 名）、欧州からの来訪者が 10%（41 名）アジアからの来訪者が 5%（23 名）であった。その他の内訳には中南米、オセアニア、中東、アフリカなどからの来訪者（13 名）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。

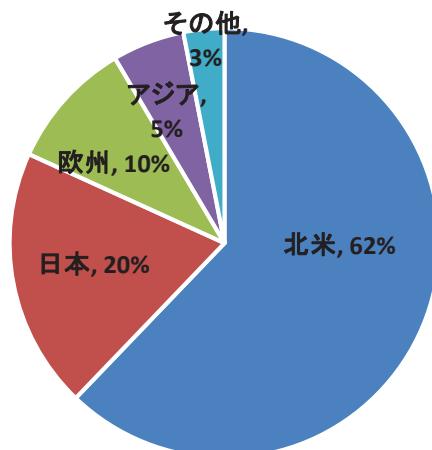


図 3: ブース来訪者 - 地域別分類

以下、SC19 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 (寺前)

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。ブース来訪者からは、大阪の所在地や文化など一般的な質問・雑談や、サイバーメディアセンターの取り組みに関する質問があった。学内にだけでなく、学外に対しても施設・サービスを提供しているという点について、驚かれる方が多い。例年、データセンターとしての側面に興味を持つ方が大勢来訪されるので、今年は IT コア棟の冷却設備、特に水冷に関する図を増やし、詳細に説明するようにしたところ、多くの方からお褒めの言葉をいただいた。

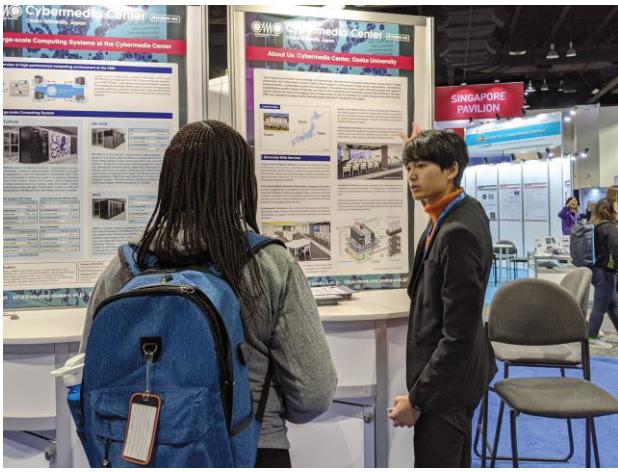


図 4: ポスター説明を行う学部学生（山本君）

(2) Large-scale Computing Systems at the Cybermedia Center (寺前)

本ポスターでは、大規模計算機システムの構成や利用状況についての紹介を行った。ブース来訪者からは、プロセッサ、ファイルシステム、アクセラレータについての質問の他、「どのような分野のユーザが使用しているのか?」「OCTOPUS は、TOP500 には登録しないのか?」といった質問があった。また、SX-ACE および VCC のサービス終了する旨を紹介した際は、「次に導入するシステムはどのような構成になるのか? FPGA や SX-Aurora TSUBASA の使用は検討しているのか?」といった質問があった。サイバーメディアセンターは、スカラプロセッサ、ベクトルプロセッサ、GPU、Xeon Phi といった多様な計算システムを運用しているため、次期システムがどんなものになるのか、来訪者にとっても興味を惹

かれるのかもしれない。

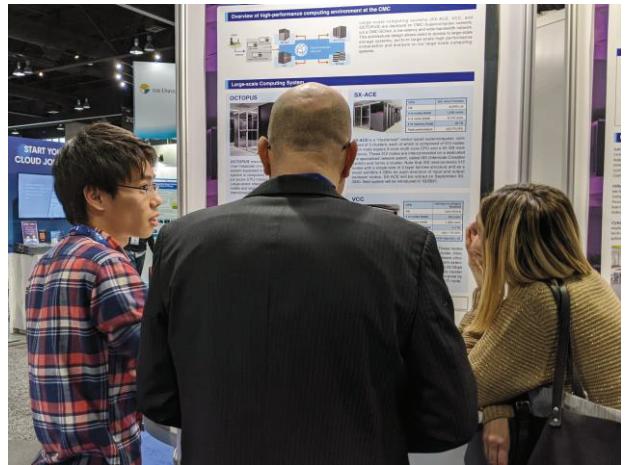


図 5: ポスター説明を行う学部学生（鎌田君）

(3) Feasible Study of Cloud Bursting on OCTOPUS (寺前)

本ポスターでは、NECと共に進めていた研究開発“クラウドバースティング”の紹介を目的とするポスターである。“クラウドバースティング”では、OCTOPUS の混雑緩和と新技術の試行を目的とし、計算機上の処理をパブリッククラウド(Microsoft Azure)に流し込み実行する。来訪者からは、「非常に良いアイデアであり、一時的な負荷軽減という意味で、良いパブリッククラウドの使い方である。」といったお褒めの言葉をいただく一方で、「パブリッククラウドと OCTOPUS 間のネットワーク帯域はボトルネックとなりうる。SINET と Microsoft Azure を接続

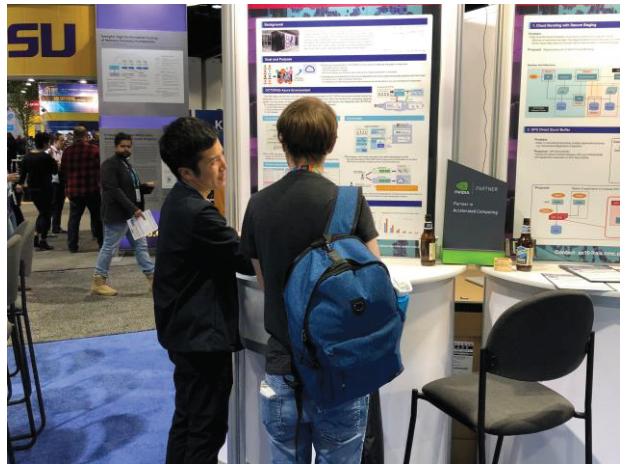


図 6: ポスター説明を行う寺前

するべきではないか?」「バースティングする際のポリシーはどんなものを考えているのか?」といった、実際の運用を見据えた意見があった。

(4) *Cloud Bursting with Secure Staging / GPU Burst Buffer with GPU/NVMe Direct* (吉川)

本ポスターでは、(3)のクラウドバーストを行う際に課題となる計算機センターとクラウド間でのデータの取り扱いについて課題提起と解決手段のひとつを提案した。クラウドバーストの際にはデータをパブリッククラウドに移して置きっぱなしにするか、計算機センターに残す替りにパブリッククラウドからデータへの常時アクセスを許可する必要がありセキュリティ的に懸念がある。そこで、クラウド内で一時的にデータ置き場と計算機リソースを組み、データを移行して処理が終わり次第結果を戻してクラウド内のデータとリソースはすべて廃棄するようにした。ポスターにあわせてデモ展示を行った。クラウドバーストの課題点への提案となっており2つのポスターをあわせてよく理解してもらえた。

また、2つのHPCシミュレーション結果を可視化など次のアプリケーションへ引き継ぐ際にキャッシュ機能と、NVMe～GPU間直接転送を行うことで高速化を図るGPU-BBを提案した。SCの直前にNVIDIAやDDNがDGS2内でNVMe～GPU間の直接転送によるGPUへのデータ転送スループット向上を発表しており、その一連の発表と認識されることが多かった。



図7: ポスター説明を行う学部学生（鎌田君）

(5) *Novel Mechanisms to Support Scientific Visualization on Multi-Display* (木戸)

本ポスターは、マルチディスプレイに関する研究を2つのパートで構成しており、1つはマルチディスプレイ構成用ミドルウェア SAGE2 のスクリーン共有機能の解像度向上に関する研究である。もう1つは、低性能計算機を用いたマルチディスプレイ構成ミドルウェアの研究である。本ポスターの説明に、低性能計算機を持ち込み、デモを試みた。デモはプログラムにバグがありデモシステムを完全に見せることができなかったが、研究進捗を説明し、来場した研究者らと議論、情報交換を行った。

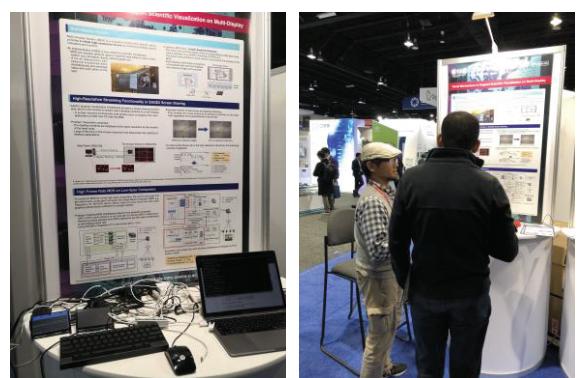


図8: デモ機材と説明を行う木戸

(6) *Towards the Future Supercomputing Services at the Cybermedia Center* (瀧川)

本ポスターでは、ベクトルプロセッサであるSX-Aurora TSUBASAでの高速化手法、およびオープンソースのジョブスケジューラ Slurmでの緊急ジョブ機能の実現可能性について説明した。“SX-Aurora TSUBASAでの高速化手法”では、主にSX-Aurora TSUBASAのメモリ構造を意識した高速化を紹介した。“Slurmでの緊急ジョブ機能の実現可能性”では、地震や津波などの災害時に津波の浸水被害を推定するシステムで採用されているジョブスケジューラの持つ緊急ジョブ機能をオープンソーススケジューラ Slurm で実現することができるかを説明した。来訪者からの“SX-Aurora TSUBASAでの高速化”に対する質問の中には、「倍精度の計算をしているのか?」、「コアの中でパイプライン処理をしているのか?」、「コードの中で並列処理をしているのか?」などと質問された。

か?」、「高速化したシミュレーションではステンシル計算をしているのか?」などの質問があった。

“Slurm での緊急ジョブ機能の実現可能性”に対する質問の中には、「本当にこれだけ早くジョブを復帰させることができるのか?」、「緊急なら全てのジョブを止めてしまってもいいのではない?」などの質問があった。

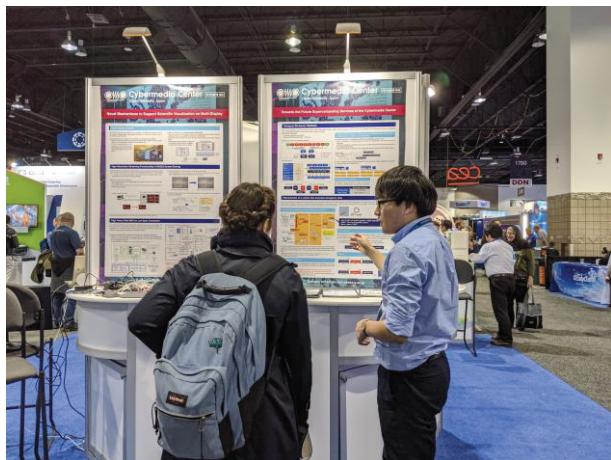


図 9: ポスター説明を行う大学院生（瀧川君）

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をはじめとした本センターの活動や、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 423 名の来訪者にアウトリーチすることができた。来年度の SC の開催は米国ジョージア州アトランタ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 25 回スーパー コンピューティングコンテスト (SuperCon2019) 報告および 第 26 回スーパー コンピューティングコンテスト (SuperCon2020) 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. Supercon2019

昨年 2019 年 8 月 19 日から 23 日までの 5 日間にわたって、高校生・高専生を対象とする「スーパー コンピューティングコンテスト(SuperCon2019)」が開催されました。東日本から 12 チーム、西日本から 8 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ってきました。このコンテストは 5 日間にも渡る合宿型で、実際にスーパー コンピュータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎年交互に両大学のスーパー コンピュータを使います。2007、2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が、2015 年、2017 年は SX-ACE が使われました。

2. 予選

2019 年の予選課題は 5 月 29 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 14 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。2019 年の予選課題は、阪大の作成チームによる「ディープニューラルネットワーク」というものでした。これは Feed-Forward 型のパーセプトロンネットワークを用いた機械学習に関する問題です。既存のパッケージを用いずに、プログラムを自作し、深層学習を行うというものです。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 名以上集まらない人のために、希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「スーパー コン 1 級」が認定されます。問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

3. 本選

本選の初日は開会式で参加チームの紹介、本選課題の発表、攻略法の解説がありました。本戦課題は東工大の作成チームによる「重力多体問題」に関する問題でした。莫大な計算を必要とする重力多体系(銀河系内の天体集合などを模したもの)のシミュレーションを GPU を駆使して高速に行うというものです。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、学生チューターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

4. SuperCon 2020 の告知

2020 年は 8 月 17 日(月)から 21 日(金)までの 5 日間での開催を予定しています。予選課題は 6 月 3 日に公表、課題提出〆切は 6 月 19 日正午です。使用するスパコンは、阪大 CMC の OCTOPUS 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 SuperCon2020 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 SuperCon2021 以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

(追記) 新型コロナウィルス感染拡大予防のため残念ながら本選は急遽中止となりました。なお、予選は行われ、結果が下記 HP に掲載されております。

5. Web

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

大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学サイバーメディアセンター教授 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でき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 105 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 13~14 回開催しております（2019 年度は 13 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 月後半と 8 月末～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配慮した結果です。また、これまで現場での開催のみだった講習会にも 2019 年よりその一部についてオンライン配信を開始し、ユーザがより参加しやすいような形へと拡張しています。

また、Gaussian や AVS、HΦ 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、東京大学から専門家を講師として招待するなどして、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と想っています。

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 13 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、量子多体系アプリケーションである HΦ、各種専門分野で用いられる可視化ソフトウェアである AVS、非経験的分子軌道計算プログラムである Gaussian の講習会も行っています。また、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ーの皆様にご利用いただけております。

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/ 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、ぜひ頻繁にご覧いただき、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。

2020 年度 大規模計算機システム利用講習会

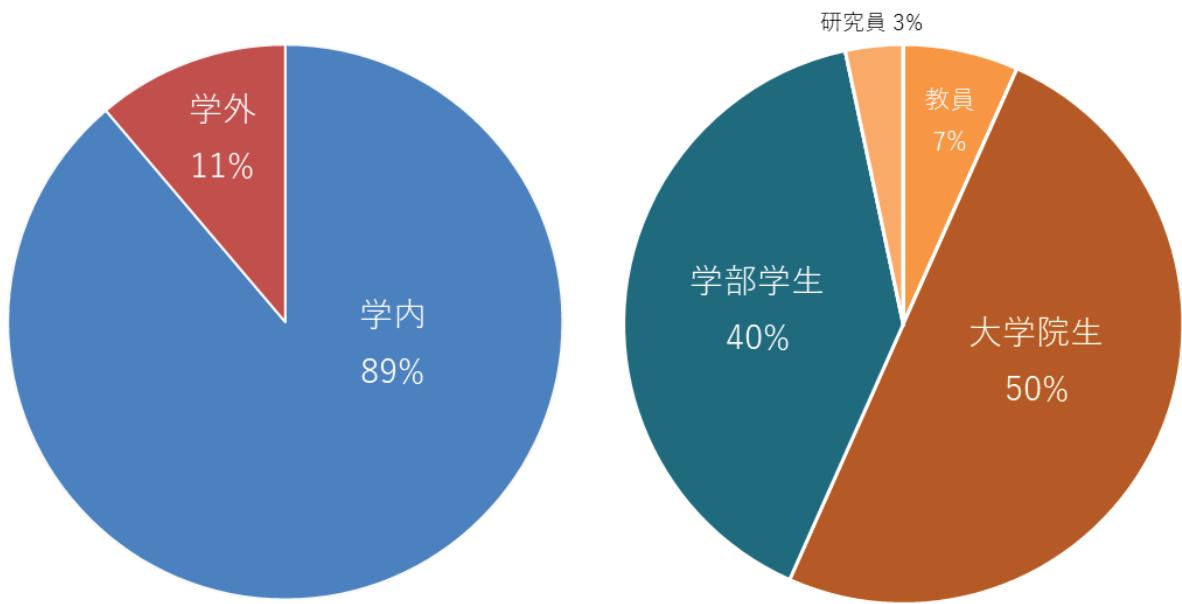
	講習会名	開催日時	講師	開催場所
1	スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	6月22日 13:30-15:00	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授	オンライン配信
2	スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門	6月26日 13:30-17:30	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	オンライン配信
3	SX-ACE 高速化技法の基礎	6月29日 13:30-16:30	日本電気(株)	オンライン配信
4	並列コンピュータ 高速化技法の基礎	6月30日 13:30-15:30	日本電気(株)	オンライン配信
5	並列プログラミング入門(MPI)	7月3日 13:30-17:00	日本電気(株)	オンライン配信
6	スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	9月2日 13:30-15:00	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授	オンライン配信
7	スパコン利用入門	9月10日 13:30-14:30	情報基盤課 技術職員	オンライン配信
8	SX-ACE 高速化技法の基礎	9月16日 13:30-16:30	日本電気(株)	オンライン配信
9	並列コンピュータ 高速化技法の基礎	9月17日 13:30-15:30	日本電気(株)	オンライン配信
10	並列プログラミング入門(MPI)	9月24日 13:30-17:00	日本電気(株)	オンライン配信
11	OpenMP 入門	9月30日 13:30-14:30	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授	オンライン配信
12	AVS 可視化処理入門	10月28日 10:00-16:00	サイバネットシステム(株)	オンライン配信
13	AVS 可視化処理応用特別相談会	10月29日 10:00-15:00 (講習会) 15:00-17:00 (相談会)	サイバネットシステム(株)	オンライン配信

2019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

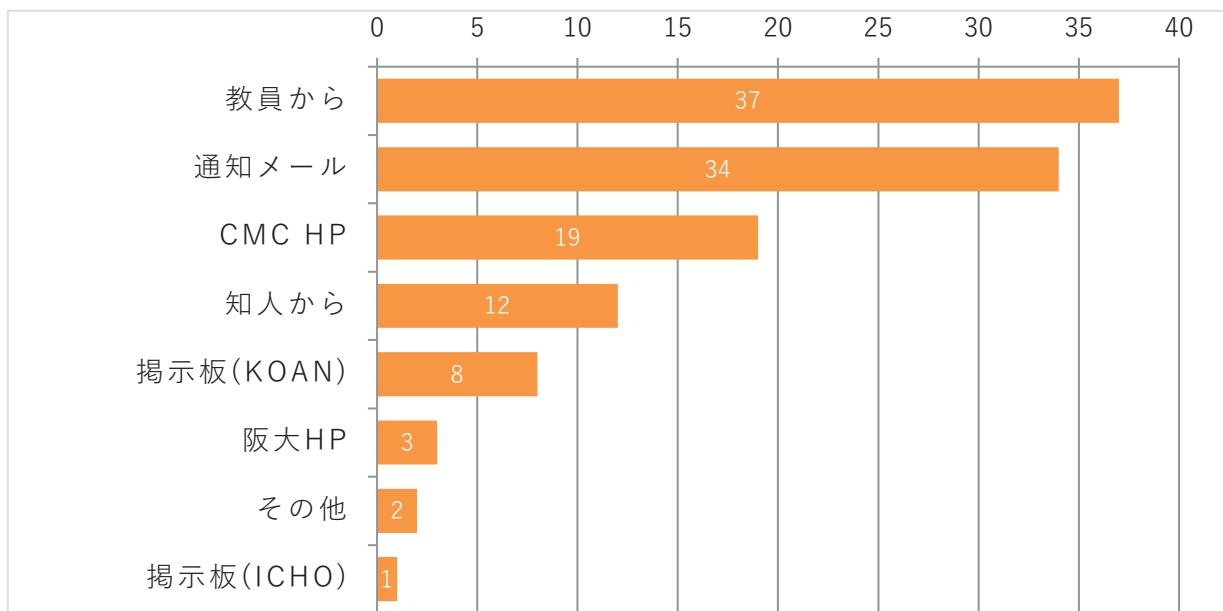
◆受講者数

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(6/18)	37	31	30	1
スパコン概要とスパコン利用入門(6/20)	22	16	15	1
SX-ACE 高速化技法の基礎(6/24)	3	2	1	1
並列プログラミング入門(MPI)(6/25)	12	11	8	3
並列コンピュータ高速化技法の基礎(6/26)	6	6	6	0
Gaussian講習会(東北大学 映像配信)(8/21)	12	8	8	0
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(8/29)	15	11	10	1
スパコン概要とスパコン利用入門(9/5)	20	12	10	2
SX-ACE 高速化技法の基礎(9/11)	8	3	2	1
並列コンピュータ高速化技法の基礎(9/12)	8	6	6	0
並列プログラミング入門(MPI)(9/19)	15	10	6	4
AVS可視化処理入門(9/25)	11	7	7	0
AVS可視化処理応用/ 特別相談会(9/26)	5	2	2	0
合計	174	125	111	14

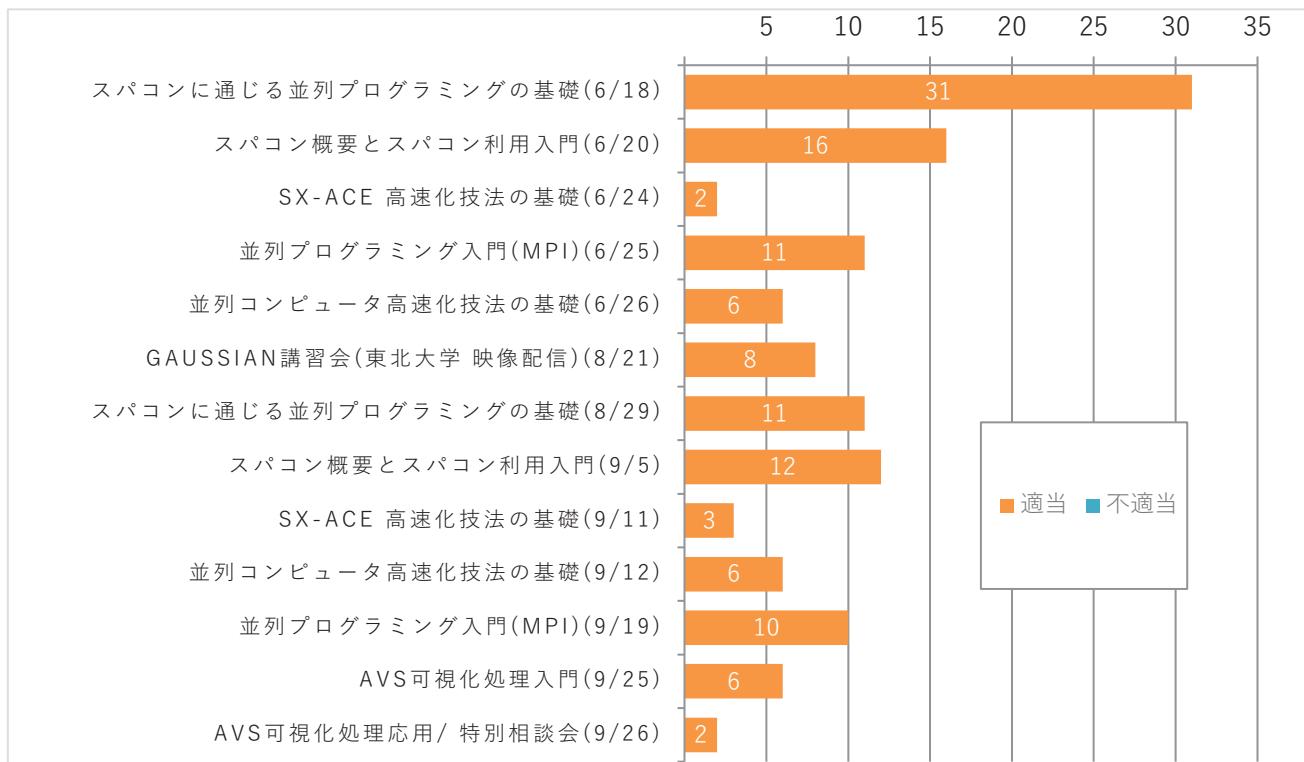
◆受講者の内訳



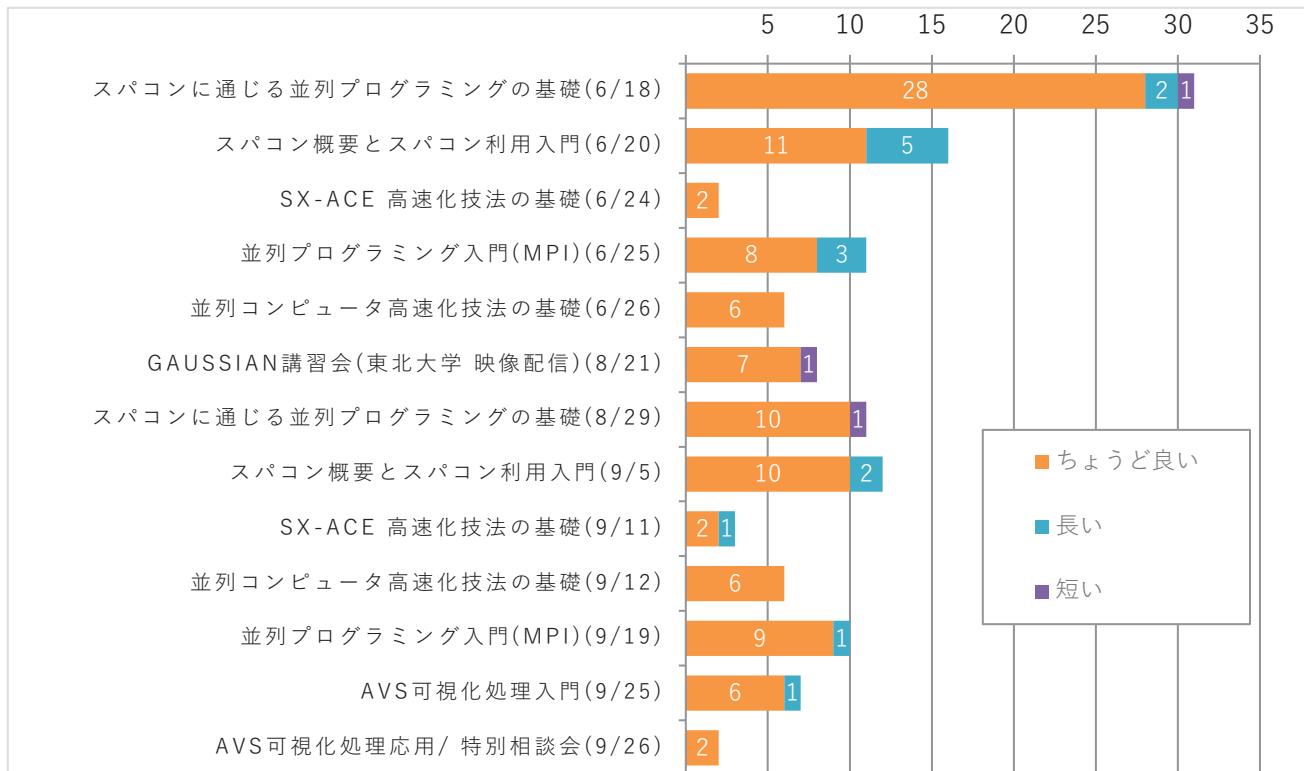
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。（複数回答可）



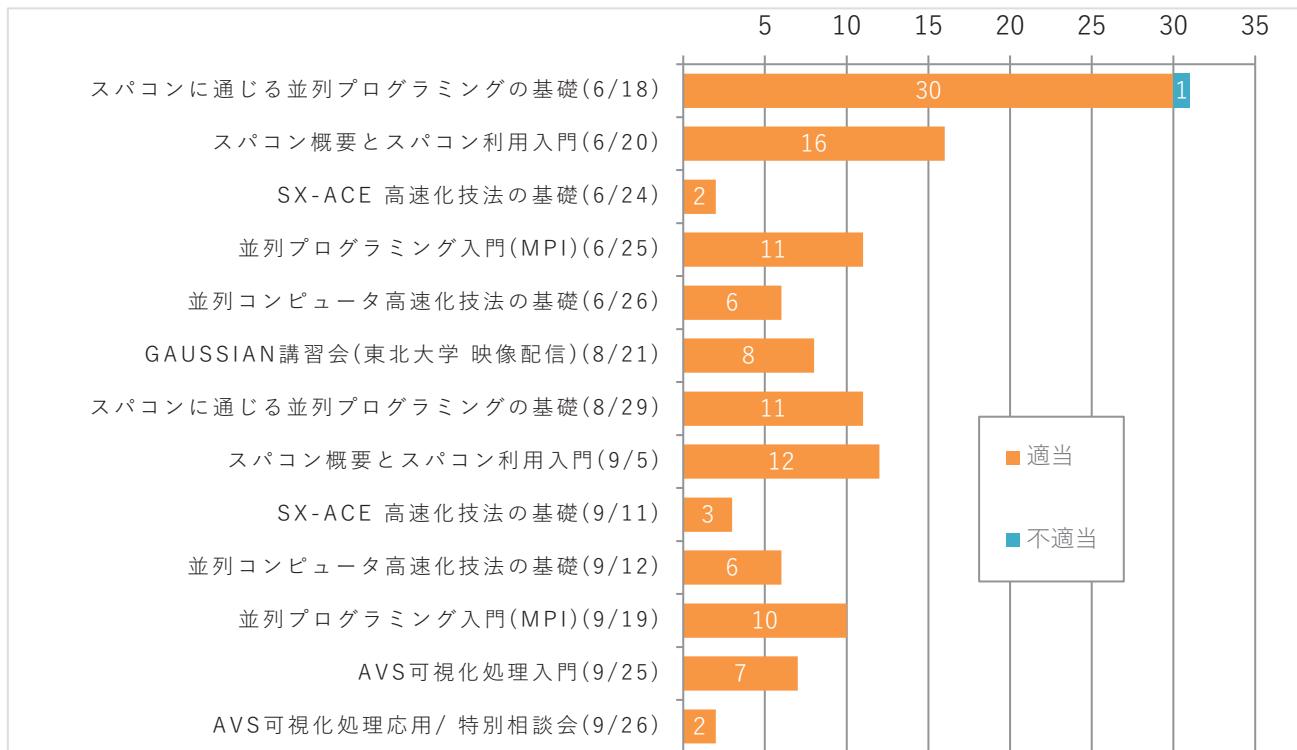
◆開催日は適当でしたか。



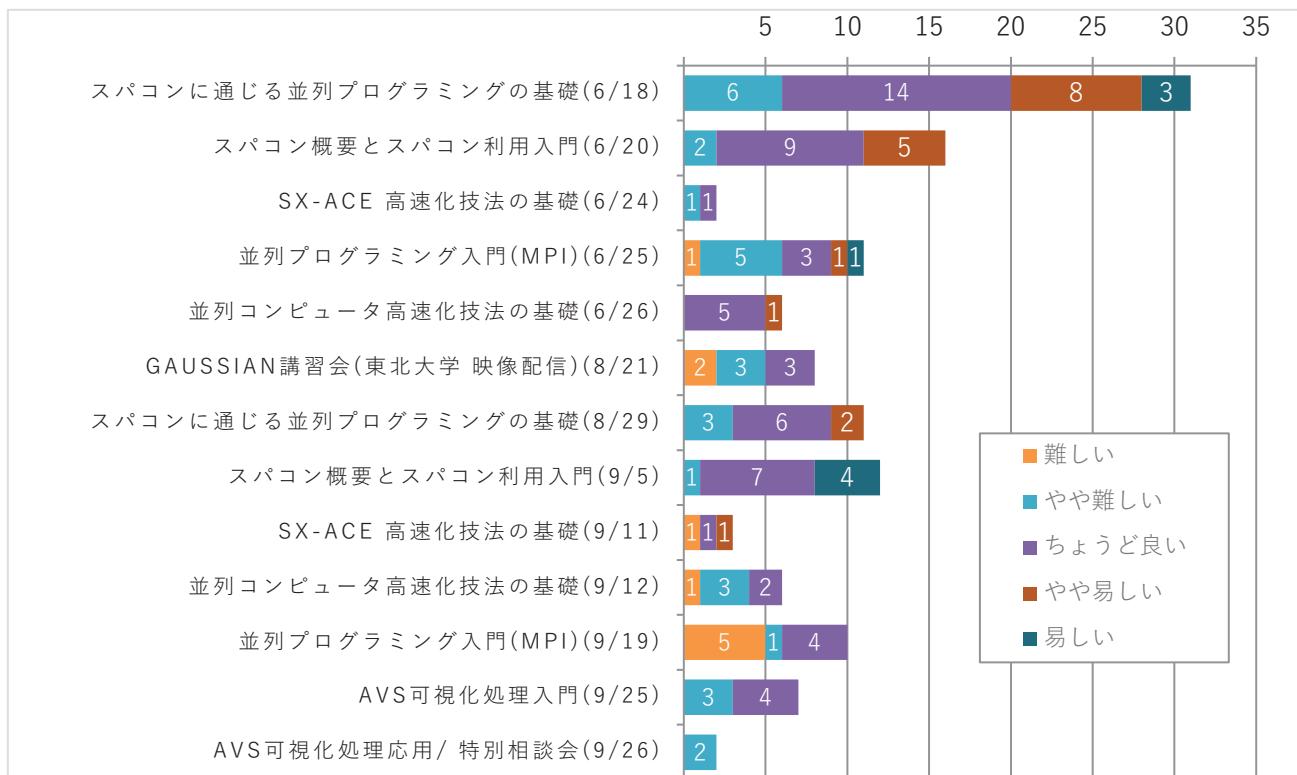
◆講習会の時間は適当でしたか。



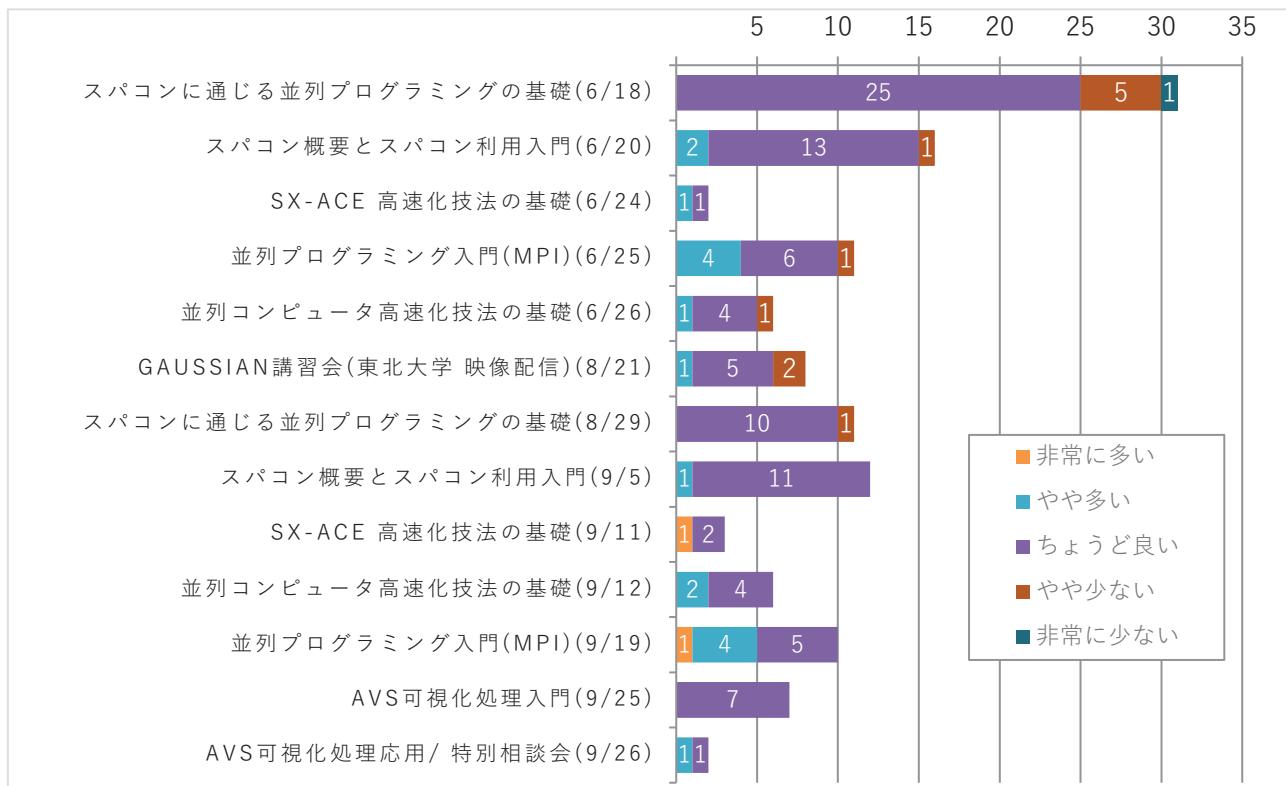
◆会場の大きさ、場所は適当でしたか。



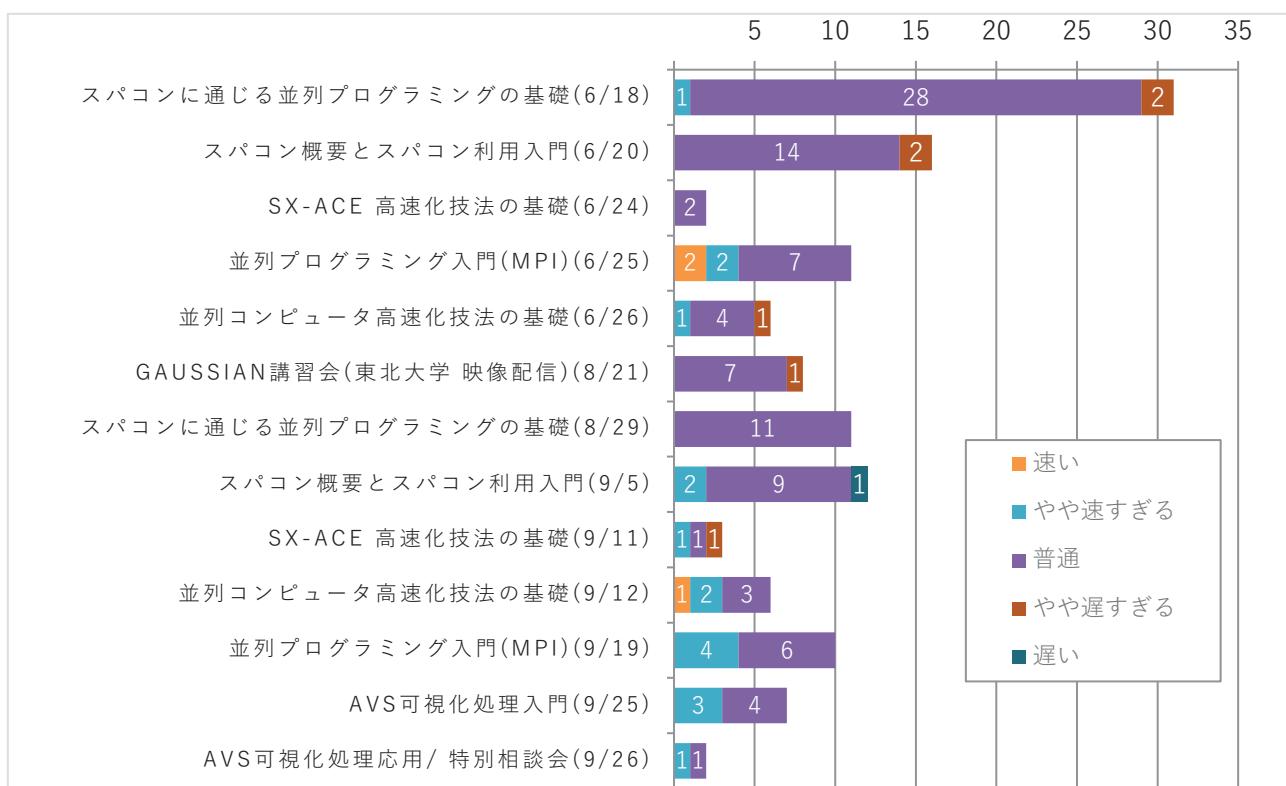
◆講習会の内容はどうでしたか。



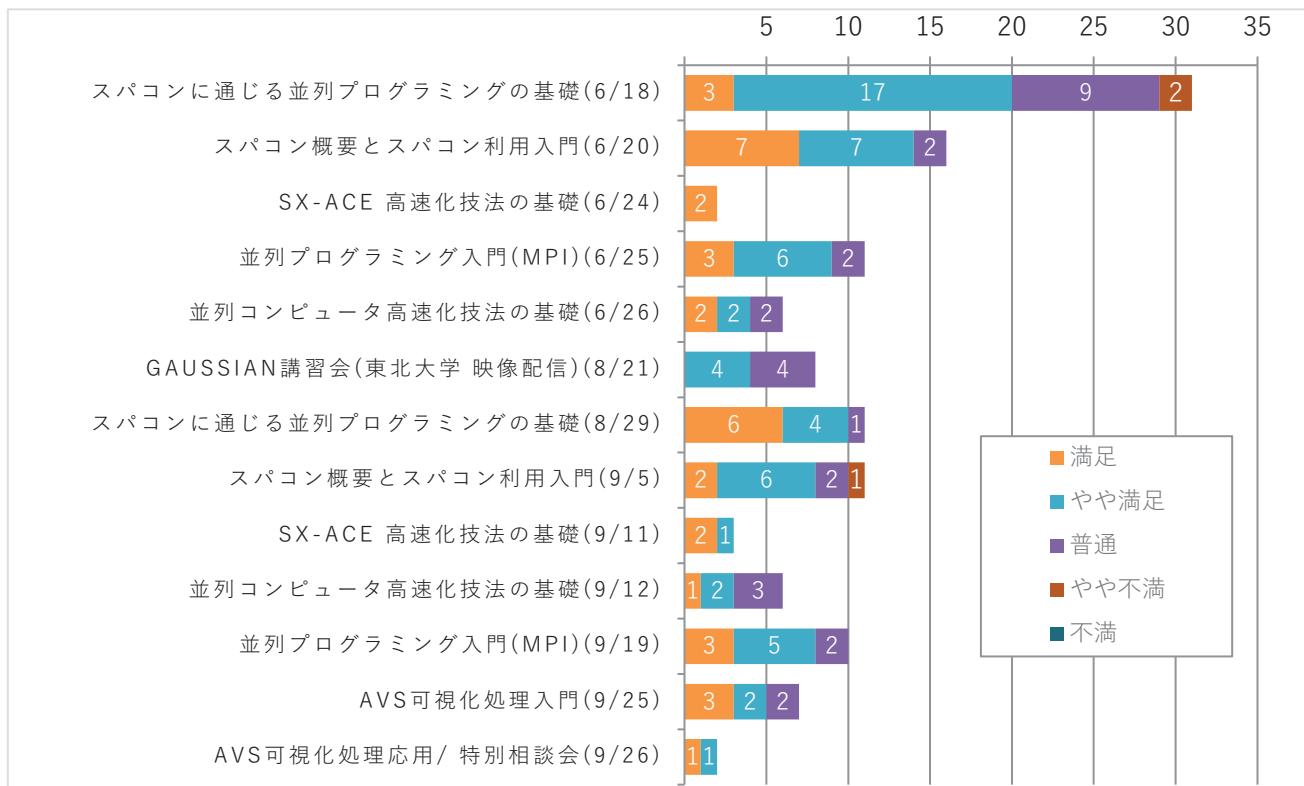
◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



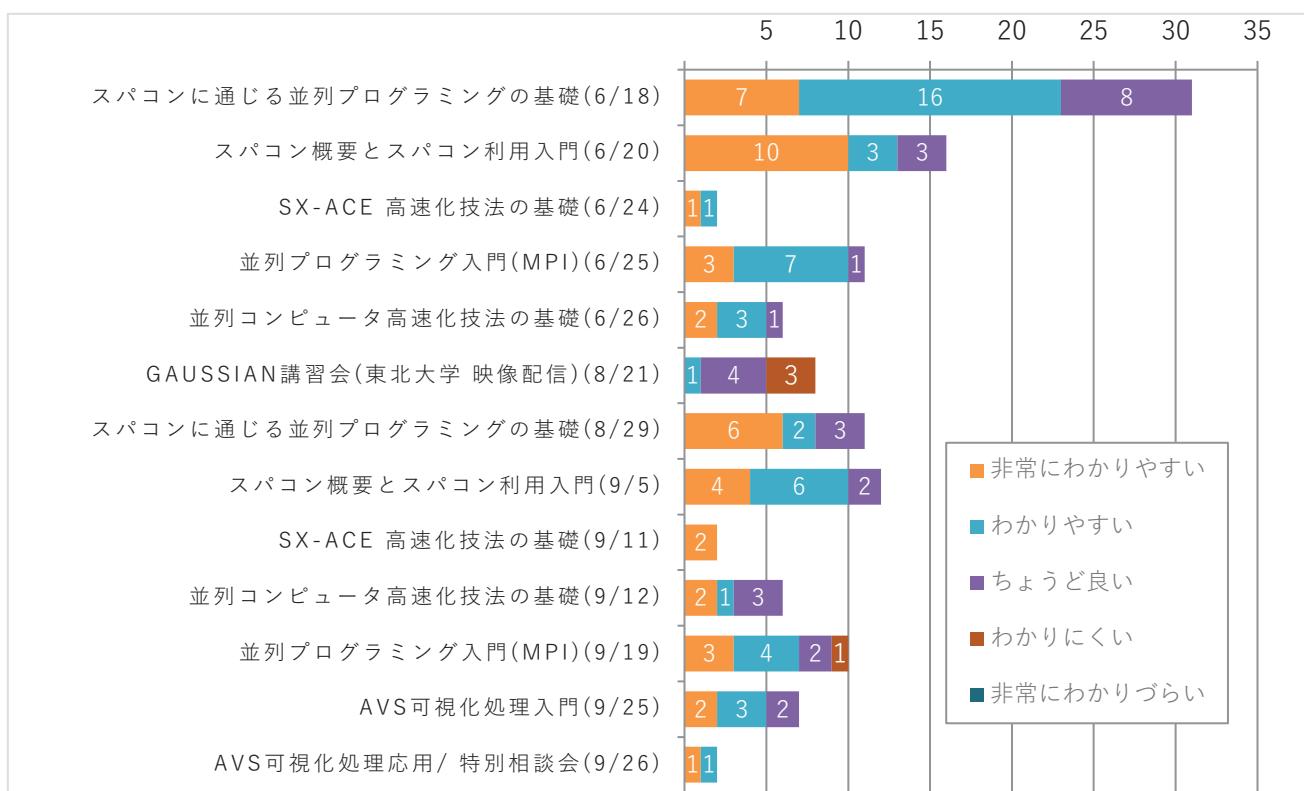
◆講師の進め方はどうでしたか。



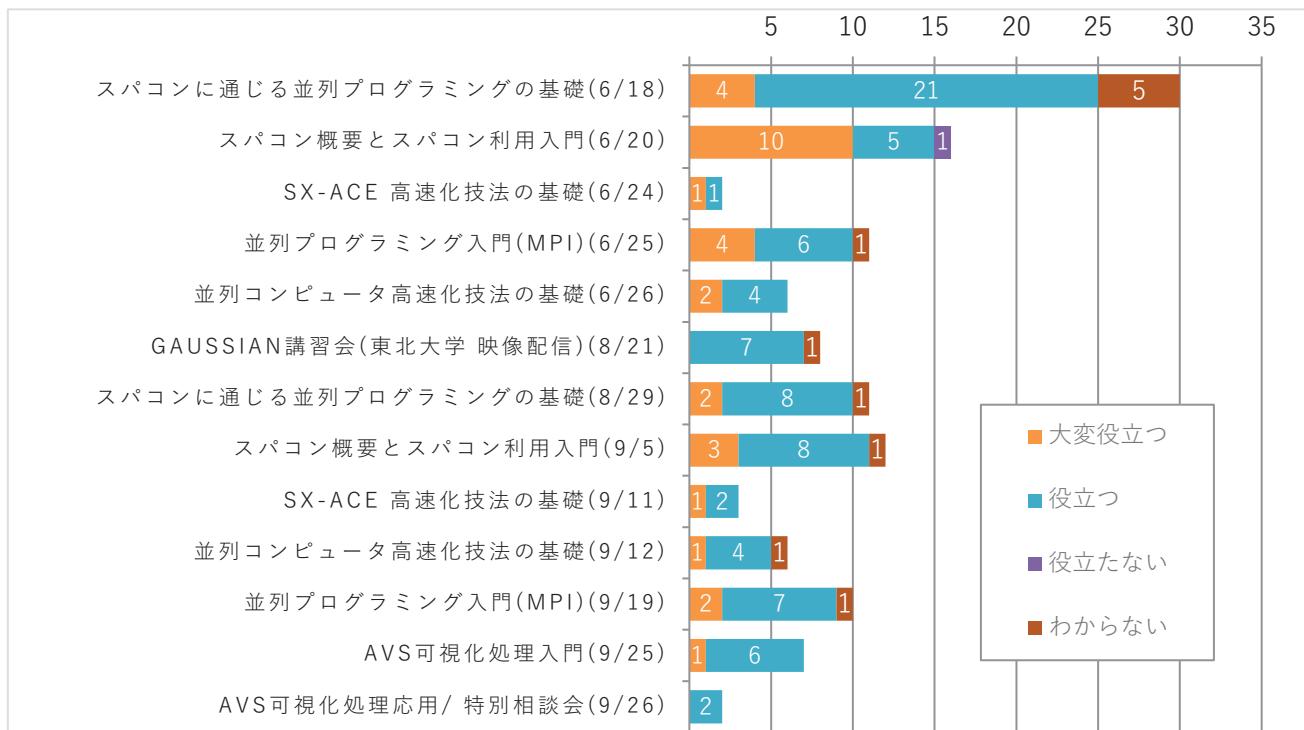
◆満足度は？



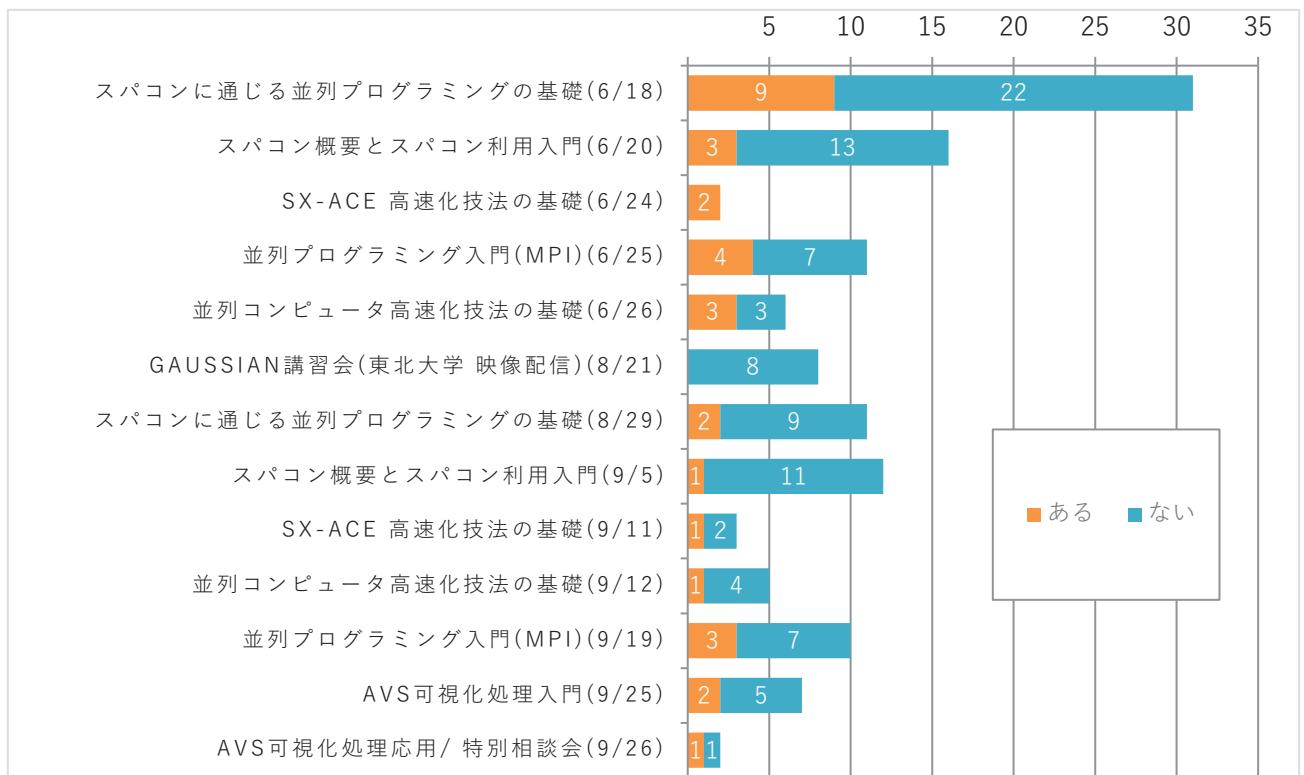
◆講習会の資料はどうでしたか。



◆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。



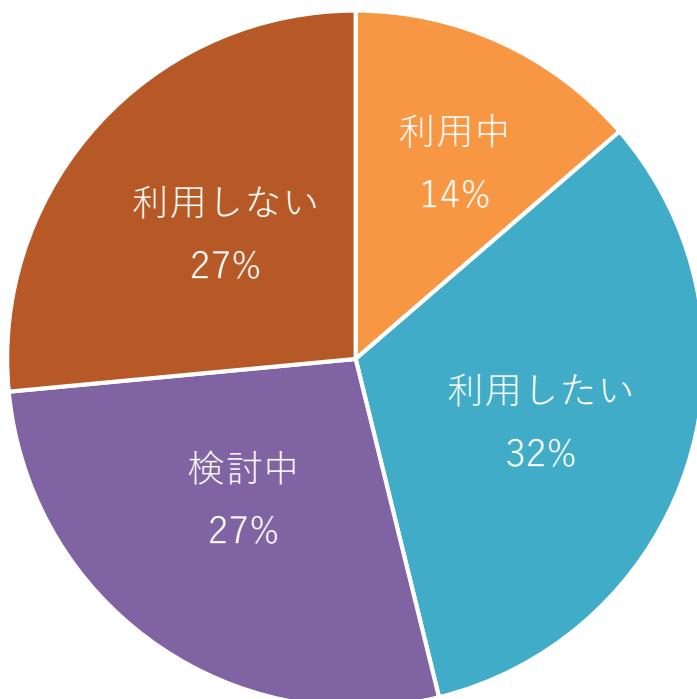
◆ 「ある」と回答された方の利用方法

「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。



2020 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、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。

本センターの計算機資源を利用する 2020 年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	利用資源	研究課題名
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
一般課題	OCTOPUS	動的密度行列繰り込み群法による三角格子反強磁性ハイゼンベルク模型の励起ダイナミクスの解析
一般課題	SX-ACE	低次元材料の静的・動的な強電場への応答とデバイス応用
一般課題	OCTOPUS	大規模ハイブリッド型第一原理シミュレーションによる光合成系の酸素発生機構の解明
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
一般課題	OCTOPUS	QM/MM 法に基づく分子動力学計算による生体内化学反応の自由エネルギー解析
産業利用課題 (実証利用)	OCTOPUS	医学・生物画像認識 Deep learning 応用
産業利用課題 (実証利用)	OCTOPUS	全原子型 MD 計算による粘着付与剤と樹脂、基材のバルク及び界面の親和性評価
若手 人材育成課題	OCTOPUS	遷移金属酸水素化物におけるアニオン配置制御指針の第一原理的探求

本センターの計算機資源を利用する 2020 年度 HPCI 「富岳」成果創出加速プログラム課題一覧

利用資源	研究課題名
OCTOPUS	環境適合型機能性化学品
SX-ACE OCTOPUS	省エネルギー一次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション
SX-ACE OCTOPUS	スーパーシミュレーションと AI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用
OCTOPUS	大規模計算とデータ駆動手法による高性能永久磁石の開発
OCTOPUS	シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで
OCTOPUS	次世代二次電池・燃料電池開発による ET 革命に向けた計算・データ材料科学研究
OCTOPUS	全原子・粗視化分子動力学による細胞内分子動態の解明

2020 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。

2020 年度の課題募集には合計 52 課題が採択されました。このうち以下の 11 課題が本センターと共同研究することとなっています。

課題代表者	研究課題名
鈴木 博 (九州大学)	有限温度量子色力学のダイナミクス
若山 将征 (国士館大学)	GPU コードならびに多倍長精度アルゴリズムを用いた高密度 QCD 物質の研究
齊木 吉隆 (一橋大学)	機械学習に基づくマクロ経済変動の数理モデリング
村田 忠彦 (関西大学)	社会の分析とシミュレーションのための合成人口データ提供システム
柏崎 礼生 (国立情報学研究所)	広域分散プラットフォーム Distcloud を用いたレジリエンスの定量的評価
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
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
兼安 洋乃 (兵庫県立大学)	自発磁化軸に垂直な磁場下における自発磁化スピニ三重項超伝導と電流
石川 晴基 (電気通信大学)	飛行条件に高忠実な航空機エンジン性能評価 - 駆動エンジンと機体の統合流体計算の実現
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数値解析
山口 容平 (大阪大学)	国民生活シミュレーションに基づく住宅・業務施設のエネルギー需要予測

2019 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。2019 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の 2 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
Edyta Dzieminska (上智大学 理工学部)	Rotating detonation engine with water cooling system

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
宮本 良之 (産業技術総合研究所 機能材料コンピュテーションナル デザイン研究センター)	発光ガラス材料における発光効率決定因子の計算科学的探索

2020 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2020 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 10 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
石井 良樹 (兵庫県立大学 シミュレーション学研究科)	自己組織化イオン結晶におけるナノ相分離様態と分子輸送特性の インタープレイ
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固液界面の第一原理分子動力学シミュレーション
岡林 希依 (大阪大学 工学研究科)	ミウラ折り型ジグザグリプレットの実用のための研究
小嶋 秀和 (大阪大学 基礎工学研究科)	分子設計に向けた微孔性高分子膜によるガス分離能の分子動力学シミュレーションによる解析方法の開発
杉浦 拓也 (理化学研究所 数理創造プログラム)	格子 QCD を用いた hidden-charm pentaquark の解析
肥喜里 志門 (大阪大学 基礎工学研究科)	タンパク質-リガンド結合自由エネルギーにおける共溶媒濃度依存性の解明

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
金谷 和至 (筑波大学 数理物質系)	Gradient flow に基づく SFtX 法による物理点 QCD の熱力学特性の研究
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
鈴木 恒雄 (大阪大学 核物理研究センター)	QCD の非可換ビアンキ恒等式の破れ（モノポール）に基づく新しい閉じ込め機構のモンテ・カルロ法による研究
宮本 良之 (産業技術総合研究所 機能材料コンピュテーションナルデザイン研究センター)	発光ガラス材料における光吸収・発光時の電子・格子ダイナミクスの計算科学的探索

大規模計算機システム Q & A

当センターに寄せられた質問を掲載しております。

同じ内容を以下の 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/

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

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。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. 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 領域に分かれています。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/

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/>

Q. OCTOPUS で MPI プログラムを実行した際に"No PBS nodefile found"というエラーが出力される

A. MPI プログラム実行時に \${NQSII_MPIOPTS} を指定していなかった場合、以下のようなエラーが
出力されます。

```
[mpiexec@oct-***] HYDT_bscd_pbs_query_node_list (../../tools/bootstrap/external/pbs_query_node_list.c:23): No PBS nodefile found
[mpiexec@oct-***] HYDT_bsci_query_node_list (../../tools/bootstrap/src/bsci_query_node_list.c:19):
    RMK returned error while querying node list
[mpiexec@oct-***] main (../../ui/mpich/mpiexec.c:621): unable to query the RMK for a node list
```

エラーメッセージ自体は、MPI プログラムの "nodefile"（実行する計算ノードを指定する設定ファイル）が存在しないことを通知しています。OCTOPUS では、\${NQSII_MPIOPTS} を指定いただくことで、自動的に設定されます。

参考：OCTOPUS intelMPI の利用方法について
<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus-use/intelmpi/>

Q. 一度に大量のジョブを投入し、ジョブごとに入力ファイル／実行ファイルを変更したい

A. ファイル名に連続した数値が含まれている場合、パラメトリックジョブという投入方法で、一度に大量のジョブを投入できます。

パラメトリックジョブでは、ジョブスクリプト内の"\$PBS_SUBREQNO"環境変数に、-t で指定した数値（下記の例では 1 から 5 までの数値）が格納されます。qsub すると同時に 5 本のジョブが投入され、a.out に対してそれぞれ異なる入力ファイル（下記の例では input1 から input5）が設定されます。

ジョブスクリプト例(jobscript.sh)

```
#PBS -q OCTOPUS
#PBS -l elapstim_req=0:30:00,cpunum_job=24
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out input$PBS_SUBREQNO
```

投入方法

```
qsub -t 1-5 jobscript.sh
```

qstat の表示例:パラメトリックジョブの場合、1 回の qsub につき 1 件分の表示となります

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	S	Memory	CPU	Elapse	R	H	M	Jobs
123456[1].oct	nqs	username	OC1C	0	QUE	-	-	-	-	Y	Y	Y	1

sstat の表示例:-t で指定した数値分だけ表示されます

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	PlannedStartTime
123456[1].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[2].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[3].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[4].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[5].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -

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 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負担額一覧 125

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 127

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 127

- ・附 表

大規模計算機システム ホスト一覧 128

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 128

2019年度大規模計算機システム稼働状況 130

・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) 日本国内に法人格を有する民間企業等に所属する者(前号に該当する者を除く。)で、別に定める審査に基づきセンター長が認めた者
- (8) 前各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者

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

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

第5条 センター長は、前条第1項による申請を受理し、適当と認めたときは、これを承認し、利用者番号を与えるものとする。

2 前項の利用者番号の有効期間は、1年以内とする。ただし、当該会計年度を超えることはできない。

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

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

第8条 利用者は、当該申請に係る利用を終了又は中止したときは、速やかにその旨をセンター長に届け出るとともに、そ

の利用の結果又は経過を所定の報告書によりセンター長に報告しなければならない。

- 2 前項の規定にかかわらず、センター長が必要と認めた場合は、報告書の提出を求めることができる。
- 3 提出された報告書は、原則として公開とし、センターの広報等の用に供することができるものとする。ただし、利用者があらかじめ申し出たときは、3年を超えない範囲で公開の延期を認めることがある。

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

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

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

第12条 前条の規定にかかわらず、次の各号に掲げる場合についてでは、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ことがある。

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

附 則

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

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

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
92,500 円／6 ヶ月	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 (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) スーパーコンピュータ (SX-ACE) ディスク容量追加の負担額

基本負担額	提供単位
5,000 円／6 ヶ月	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。

(3) 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)	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

※最新の情報は以下の 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
	DBG	10 分	24 Core	192 GB	1 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
	DBG	10 分	24 Core	192 GB	1 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
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

2019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	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	0:00
その他の時間 (D)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
運転時間 (A+B+C+D)	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	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	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	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	24:00	23:39	24:00	23:32	---	23:49

処理状況

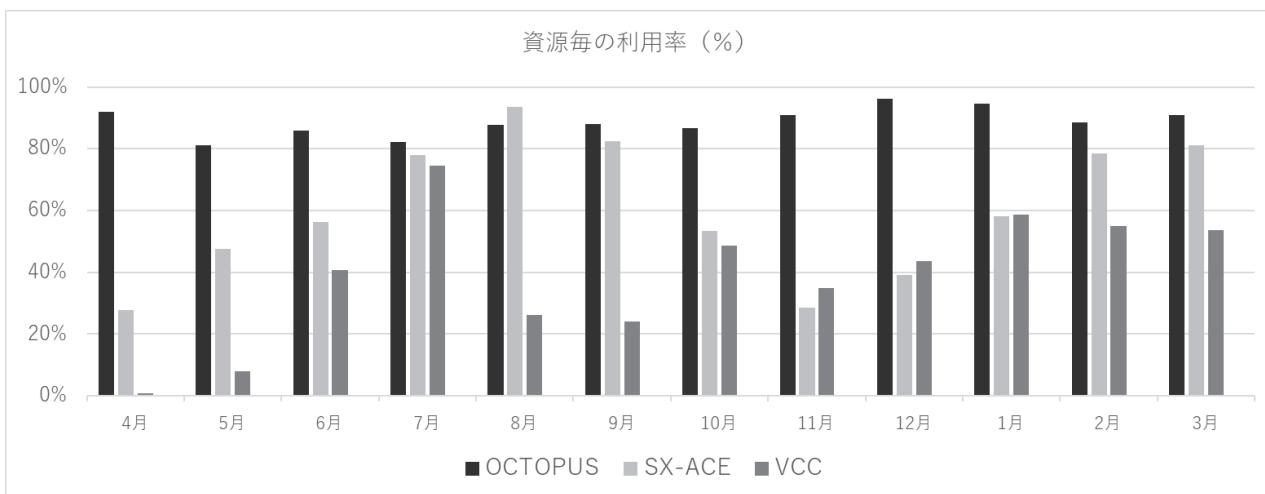
処理月	スーパーコンピュータSX-ACE			大規模可視化対応PCクラスタ			OCTOPUS				
	共有利用		利用率(%)	共有利用		利用率(%)	共有利用		利用率(%)		
	ジョブ件数	CPU時間(時)		CPU時間(時)	CPU時間(時)		ジョブ件数	CPU時間(時)			
4月	3,692	28,761	63,141	27.7%	46	405	0	0.9%	14,877	193,228	91.9%
5月	12,930	111,392	71,424	47.6%	105	2,307	1,740	8.0%	11,737	192,322	81.1%
6月	8,253	162,566	69,064	56.2%	355	14,543	5,700	40.8%	9,136	197,455	86.0%
7月	6,445	377,582	71,424	77.9%	563	31,236	7,044	74.6%	11,844	194,755	82.2%
8月	10,376	588,769	72,168	93.5%	407	7,916	5,550	26.2%	11,806	207,681	87.8%
9月	4,766	419,188	69,840	82.4%	145	5,045	6,880	24.0%	8,989	185,969	88.1%
10月	7,222	171,251	65,497	53.4%	704	13,133	9,873	48.8%	16,164	182,672	86.6%
11月	3,503	60,361	69,840	28.5%	316	6,814	10,470	34.8%	17,664	208,717	90.9%
12月	6,855	115,259	72,168	39.1%	604	11,360	11,095	43.7%	43,247	228,153	96.1%
1月	15,110	235,828	68,912	58.0%	522	15,484	13,320	58.8%	22,244	221,390	94.7%
2月	10,709	315,602	65,184	78.4%	761	12,481	12,952	54.9%	11,106	196,110	88.6%
3月	12,555	567,320	68,773	81.1%	807	12,043	14,180	53.6%	9,603	204,315	90.9%
合計	102,416	3,153,879	827,435	-	5,335	132,767	98,804	-	188,417	2,412,767	-

(注) 利用率は、次の計算式により算出している。

$$\text{利用率} = \frac{\text{CPU時間}}{\text{稼働中ノードの合計サービス時間}} * 100$$

$$= \frac{\text{VCC の CPU 時間}}{\text{VCC のノード時間積}} / \frac{\text{稼働中ノードの合計サービス時間}}{\text{稼働中ノードの合計サービス時間}} * 100$$

$$= \frac{\text{OCTOPUS の CPU 時間}}{\text{OCTOPUS のノード時間積}} / \frac{\text{稼働中ノードの合計サービス時間}}{\text{稼働中ノードの合計サービス時間}} * 100$$



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 133
- ・大規模計算機システム利用案内 134

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
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, 8805 zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp	8:30～12:00 13:00～17:15	閉 館
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（本館1F） 電話 06-6879-8980, 8981 zyosui-kikaku-kaikei@office.osaka-u.ac.jp		
利用案内、受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用講習会受付、 計算機マニュアルの閲覧	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		
利用方法の問い合わせ スーパーコンピュータ、PCクラスタ等の 利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話 06-6879-8812, 8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp		

・サービス時間

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

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

・大規模計算機システムURL

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

・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: system@cmc.osaka-u.ac.jp に質問・相談をお寄せください。 ※お問い合わせの際には、利用者番号をお申し出ください。
----------------------------	--

(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. 10
2021 年 1 月発行

編集： 大阪大学サイバーメディアセンター

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: 06-6879-8805
URL: <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

印刷： 阪東印刷紙器工業所

表紙デザイン：阿部 浩和（大阪大学）

No. 10 2021. 1

ISSN 2186-473X

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

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

