

A decorative background featuring several stylized olive branches. Each branch has a thin, curved stem with several dark grey, elongated, pointed leaves. Small, dark grey, round olives are scattered along the stems. The branches are positioned in the corners and middle of the page, creating a symmetrical, artistic frame.

CYBERMEDIA HPC JOURNAL

Cybermedia Center, Osaka University

No. 8

September, 2018.

目 次

特 集：スーパーコンピューティング事業と可視化サービス利用	1
・ペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ OCTOPUS: Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer ～サイバーメディアセンターのスーパーコンピューティング事業の再生と躍進にむけて～	3
伊達 進	
・Unity と HTC VIVE を利用したシミュレーション結果の 3D-VR 表示入門	21
萩田 克美、松本 茂紀	
大規模計算機システム利用者研究報告	29
・高強度レーザーによる高密度プラズマの加熱シミュレーション	31
千徳 靖彦	
・水素・重水素・トリチウム分子凝縮系の未知物性の解明 —量子分子動力学法によるアプローチ—	35
金 賢得	
・厳密な Z_3 対称性を持つ量子色力学による格子計算	39
開田 丈寛	
・大規模シミュレーションで見る宇宙初期から現在に至る星形成史の変遷	43
樋口 公紀	
・有限温度・有限密度 2 カラー QCD の相図と超流動性の解明	47
伊藤 悦子	
・SX-ACE を用いた格子 QCD による軸性ベクトル中間子の質量計算	51
若山 将征	
・格子量子色力学を使った高密度物質の研究	55
河野 宏明	
・宇宙の大規模構造と銀河形成	59
長峯 健太郎	
・キロテスラ級磁場下における超高強度レーザープラズマ相互作用の物理	63
畑 昌育	
・日本の全世帯の位置情報付き仮想個票データの統計データからの生成	67
原田 拓弥、杉浦 翔、村田 忠彦	
・ゴム材料中のナノ粒子構造に対するディープラーニング画像認識モデルの 分散学習による高速最適化技術手法の検討	71
萩田 克美	
センター報告	75
・2017 年度大規模計算機システム利用による研究成果、論文一覧	77
・SC17 出展報告	91

・ 第 23 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2017)報告および 第 24 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2018)告知	97
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	99
・ 2018 年度大規模計算機システム利用講習会	101
・ 2017 年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	102
・ 2018 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	110
・ 2018 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	111
・ 2017 年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	112
・ 2018 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	113
・ 大規模計算機システム Q&A	114
利用規程等	119
・ 規程関係	121
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程	121
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧	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試用制度利用内規	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利用相談員内規	125
・ 附表	126
大規模計算機システム ホスト一覧	126
スーパーコンピュータ SX-ACE、PC クラスタ及び OCTOPUS のジョブクラス一覧	126
2017 年度大規模計算機システム稼働状況	128
募 集	129
・ 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	131
・ 大規模計算機システム利用案内	132

－ スーパーコンピューティング事業と可視化サービス利用 － 特集

- ペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ
OCTOPUS: Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer
～サイバーメディアセンターのスーパーコンピューティング事業の再生と躍進にむけて～
..... 3
伊達 進 大阪大学 サイバーメディアセンター
- Unity と HTC VIVE を利用したシミュレーション結果の 3D-VR 表示入門 21
萩田 克美 防衛大学校 応用物理学科
松本 茂紀 日立製作所 研究開発グループ

ペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ OCTOPUS: Osaka university Cybermedia center Over-Petascale Universal Supercomputer ~サイバーメディアセンターのスーパーコンピューティング事業の再生と躍進にむけて~

伊達 進

大阪大学 サイバーメディアセンター

1. はじめに

2017年12月、大阪大学サイバーメディアセンターは、スカラ型スーパーコンピュータ OCTOPUS (Osaka university Cybermedia center Over-Petascale Universal Supercomputer)の運用を開始した。このOCTOPUSは、総理論演算性能 1.46 ペタフロップス (Peta Flops: 浮動小数点演算を1秒間に 1460 兆回実行可能) を有する本センター初のペタフロップス級性能を有するスーパーコンピュータである。

このOCTOPUSの実現には、本センターでスーパーコンピュータシステムの運用に携わる教員や技術職員、仕様策定委員らによる2年以上の議論・検討、提案候補ベンダとの打ち合わせ・情報交換がなされており、関係者らにとってはようやく実現にこぎつけた待望のシステムとなった。本稿の筆者はOCTOPUSシステム導入に際して、仕様策定委員長を務めるなど中心的な役割と責任を担う立場でシステム導入に携わった。自画自賛のようでみっともないが、OCTOPUSの調達に限られた予算内で当初想定していた性能目標も達成でき、また、高性能に安定した素晴らしいシステムとして完成できたと考えている。

本稿では、サイバーメディアセンターの事業記録、また、将来の後任者への引き継ぎ・情報共有という視点も含めて、OCTOPUS導入の背景、OCTOPUS調達概要を記したのち、OCTOPUSの構成・特徴について解説したい。なお、OCTOPUSの構成・特徴についてのみ関心がある方は、本稿の1~3節を読み飛ばし、4節から読んでいただくことをお勧めしたい。

2. OCTOPUS 導入の背景・経緯

OCTOPUS導入以前のサイバーメディアセンターにおいては、ベクトル型スーパーコンピュータとし

てSX-ACE、スカラ型スーパーコンピュータとしてHCC (汎用コンクラスタ: Hanyou Computer Cluster) とVCC (大規模可視化対応PCクラスタシステム: PC Cluster for Large-scale Visualization) がサービス提供されていた。しかし、この当時、スカラ型計算サービスとして提供していたHCC、VCCは、スカラ型スーパーコンピュータの利用を切望する利用者にとって切実なる問題を抱えており、スカラ型スーパーコンピュータの拡充が極めて深刻な課題となっていた。

以下、HCC、およびVCCの利用者視点での問題を整理し、HCCの後継として導入されたスーパーコンピュータOCTOPUSがどのような背景から誕生したのかについて記す。

2.1 HCC に対する利用者の失望

HCCは調達「汎用コンピュータシステム」に基づいて2012年に導入されたHPC用途向けPCクラスタシステムである。当該システムは、NEC製計算機Express5800/53Xh 575 台上で稼働させた仮想Linuxをクラスタシステムとして提供するものであった。Express5800/53Xh自体はIntel Xeon E3-1225v2 (4プロセッサコア)、8GBあるいは16GBの主記憶容量を備えており、導入当時は高性能なハードウェア性能を有していたといえる。また、それらの計算機を接続するネットワーク (相互結合網) についてもInfiniBand QDR (Quad Data Rate) で接続されており、最先端のネットワーク性能であったといえる。

しかし、上述の調達「汎用コンピュータシステム」は、サイバーメディアセンターの財政的な事情 (筆者はスーパーコンピューティング事業に携わっていない時期であったので、詳細な事情はわからないのであるが。) もあったのか、サイバーメディアセンタ

一が全学支援業務として行う、教育、CALL、高性能計算、図書館のすべての要望を取り込んだシステムとして一括調達・導入された。言い換えれば、高性能計算サービスを提供する HCC は、「汎用コンピュータシステム」を構成する”一部のシステム”あるいは”一機能”として導入されたことになる。さらに、その”一部のシステム”あるいは”一機能”は、物理的にシステム資源を切り分けるのではなく、当該調達当時に期待の高かった”仮想計算機技術”によりシステム資源を切り分けられる手法が選択されていた。より具体的・技術的には、「汎用コンピュータシステム」の高性能計算に係る機能は、計算機 Express5800/53Xh 上でオペレーティングシステムとして Windows を稼働させ、仮想化技術 Parallels を導入した上で、当該計算機のもつ 4 コアのうち 2 コアを使う Cent OS 6.1 を稼働させ、それらをクラスタ化することで実現されていた。一方、他の 2 コアは教育、CALL 用途に利用される仕組みとなっていた。

仮想計算機技術は、IaaS (Infrastructure As A Service) 型クラウドを実現する用途にも多く利用されており、今日では個別化した計算環境提供のために高性能計算用途での利用実績も報告がある。しかし、HCC 調達・導入当初においては、仮想クラスタで高性能計算環境を提供するというコンセプトが新しすぎたのか、仮想化技術 Parallels から InfiniBand QDR へのパススルー技術利用時の不安定な挙動、MPI (Message Passing Interface) プログラムの不安定な動作などの数多くの技術問題が発生していた。また、高性能計算用途として、性能面での課題があった仮想 Linux クラスタを提供していたことに対する本センターへの不信感も多く寄せられていた。さらに、「汎用コンピュータシステム」を一括に導入した本センター事業間でも当該システムの資源競合に対する問題(例えば、HCC での計算負荷が高まると、教育系システムの挙動(マウスの動きが遅くなる)にも影響がある等の報告)が発生しており、HCC の安定的かつ継続的な運転が困難な状況が発生してしまっている現状があった。

このように、HCC は安定的に高性能を提供するという、スーパーコンピュータとしての基本的な要件

を満たすことができない状況になってしまっており、スカラ型スーパーコンピュータへ期待する利用者の皆様方を失望させる結果となってしまうていた。

2.2 VCC の規模を超える資源要求

スカラ型スーパーコンピュータである VCC は、2013 年の補正予算「高性能汎用計算機高度利用事業「京」を中核とする HPCI の産業利用支援・裾野拡大のための設備拡充」の一環として導入した計算クラスタシステムである。

VCC は、Intel Xeon E5-2670v2 プロセッサ 2 基、64GB の主記憶が搭載された計算ノード (66 ノード)、Intel Xeon E5-2690v4 プロセッサ 2 基、64 GB の主記憶が搭載された計算ノード (3 ノード) を InfiniBand FDR (Fourteen Data Rate) によるインターコネクで接続したクラスタシステムとなっている。また、当該システムは、59 基の NVIDIA 製 GPU Tesla K20 がリソースプール化されている構成となっており、システムハードウェア仮想化技術 ExpEther [1] により、任意の枚数の GPU を計算ノードに比較的高い自由度をもって割り付けることのできる再構成可能システムとしての特徴を有している。そのため、例えば、1 計算ノードに対し GPU 4 枚、1 計算ノードに対し GPU 2 枚といった構成を、利用者の計算要求に応じた設定が可能である。

本システムの利用者の多くは、本システムの性能に不満があるわけではない一方、(1) 高い並列度数でジョブを実行しようとする際の待ち時間の長さ、(2) 本システムで投入できる並列度数のジョブの大きさ、に対して数多くの不満の声を上げていた。これらは、本システムを構成する計算ノード数が 69 と小さいために、本センターのシステム管理上、ノード数の少ない本システムが並列度数の高いジョブをもつ利用者によって占有されることを防止する観点から、ジョブスケジューラのキュー構成の最大並列度数を小さくしていること、本センターの採用するジョブスケジューラの特性上並列度の小さいジョブが並列度の高いジョブに先行して実行される傾向にあることに起因している問題である。

また、当該システムは、上述したように、該当年度でのみ有効である補正予算での導入であるため、通常、本センターが利用者に計算機利用負担金として課す電気代相当分の費用に加え、導入業者による保守運用費用が利用負担金として課されている。そのため、利用者からは、(3) 利用負担金が高い、という不満の声が寄せられていた。

上述のように、OCTOPUS 導入以前においては、本センターではスカラ型スーパーコンピュータとして提供を行っている HCC、VCC に問題・課題を抱えており、本センターにおける高性能計算機事業の品質向上にはスカラ型スーパーコンピュータの拡充が極めて深刻な課題となっていた。このような背景のもと、「汎用コンピュータ」の契約更改をターゲットとして、新スーパーコンピュータシステム OCTOPUS の導入に向けた検討・議論が 2015 年頃より開始することとなった。

3. OCTOPUS 調達の基本方針

HCC の後継となる OCTOPUS の導入は、前調達「汎用コンピュータシステム」の経験を踏まえ、2 節で記載した問題・課題を解決し、高性能計算用途のみに特化した調達とし、大阪大学だけではなく全国の研究者にご利用いただけるようお願いを込め、調達名を「全国共同利用大規模並列計算システム (Large-scale Parallel Computing System for Nation-wide Shared Use)」と設定し、下記のスケジュールで調達を実施した。

2016 年 2 月 17 日 導入説明会
2016 年 7 月 28 日 仕様書案説明会
2017 年 2 月 6 日 入札官報公告
2017 年 2 月 13 日 入札説明会
2017 年 4 月 3 日 入札期限
2017 年 5 月 31 日 開札
2017 年 12 月 1 日 稼働

本節では、上記 OCTOPUS 調達を通じて検討・重視した基本方針について記す。

3.1 基本方針

前節で記したように、本センターの有するスカラ型スーパーコンピュータは、システムの安定性、提供可能な計算資源量で課題があった。また、利用負担金についての要望も多く寄せられていた。そうした背景から、本システムで設定したシステム調達に係る基本方針として、HCC での安定的な稼働・運転による高性能計算サービスを提供できなかった反省を踏まえ、

(1) 安定稼働・運転できること

を最重要方針と定め、

(2) 総理論演算性能 1 ペタフロップス以上であること

を目指し、本センターの脆弱なスカラ型計算資源の増強・拡充をねらった。

3.2 調達概要

OCTOPUS 調達に際しては、利用者の要望・ニーズを把握し、仕様書への反映を行うため、利用者を対象としたアンケートを実施した。より多く回答数を得られるよう、できるだけ簡易な質問項目に限定し、本センターの Web ページで実施した。

アンケートの質問内容としては、希望するスカラ型計算資源に対して、a. 並列利用できる最大ノード数、b. ノードあたりのコア数、c. ノード(コア)あたりのメモリ、d. 利用できるアクセラレータ、のうち、優先する利用基準について、希望するアクセラレータについて、希望するアプリケーションについてを中心として設定した。

その結果、コア数よりもノード数を優先し、メモリーコア型プロセッサおよび GPU については「希望する」「希望しない」がおおよそ半数程度となる結果となった。アプリケーションについては、特定のアプリケーションに対する希望が集中するのではなく、様々なアプリケーションに対する希望があったことがわかった。アンケートのより詳細については、参考文献 [2] を参照されたい。

3.1 節に記した基本方針と利用者ニーズに基づき、新システム OCTOPUS に向けた調達では、調達予算と性能のトレードオフを考慮しつつ、

- * 利用者の多様な計算ニーズを収容可能とするため、単一構成とするのではなく、複数種の計算ノード群からなるハイブリッド型スーパーコンピュータとする
- * 最大利用できるプロセッサコア数よりも最大利用できるノード数を優先する
- * 導入するハードウェア資源であるプロセッサ、アクセラレータが継続的に安定した高性能を提供できるよう冷却方式は、空冷よりも液冷を優先する
- * アプリケーションはオープンソース系ソフトウェアを拡充する
- * ストレージは 3 ペタバイト (PB) 以上を確保する
- * 計算クラスタを構成するノードおよびファイルサーバを 100 Gbps 以上のネットワークで接続すること。任意のノード間でフルバイセクション帯域幅を有する構成、トポロジであることが望ましい

を調達の中核とする仕様策定を行なった。

なお、調達は総合評価方式を採用しており、プロセッサ性能のよいプロセッサを搭載したノード数を多く含むシステム提案、冷却方式として水冷方式を採用したシステム提案、計算ノード間の接続がフルバイセクション帯域幅を有する構成・トポロジであるシステム提案、大容量主記憶搭載ノードに搭載される主記憶容量が大容量であるシステム提案がより高得点となるよう設定した。その結果、本センターの利用できる予算内で、提案候補ベンダ間の競争も働き、本センターの利用者の望む、ノード数を多く搭載し、多様な計算ニーズを収容可能な総理論演算性能 1.46 ペタフロップスのハイブリッド型スーパーコンピュータの調達が実現できたと考えている。

4. OCTOPUS

4.1 OCTOPUS 名称の由来

OCTOPUS は、1 節に示した通り、Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer を略したシステム名称である。本システム名称の背景には、本システムの調達に際して、

1 ペタフロップス以上の性能を有することを目指したこと (over-petascale)、および、幅広い利用者の方に利用されるようにとの思い (universal) が込められている。

また、本センターのこれまでのスーパーコンピュータシステムの名称は、お世辞にも愛着があり覚えやすいネーミングとは言えなかった。OCTOPUS の名称は、そのような観点も考慮されており、大阪から連想されやすいたこ焼き、たこ焼きといえバコという関連性も採用の一因である。

本稿の読者の皆様方には、本稿を通じて、少なくとも「大阪大学サイバーメディアセンターには OCTOPUS というスーパーコンピュータがある」とだけでも理解いただければありがたい。すでにご利用いただいている方には、皆様方の研究成果をまとめられた論文の謝辞欄に OCTOPUS を利用した旨を記載いただき、皆様方の研究成果とともに OCTOPUS のプレゼンス向上に貢献いただければ幸いである。

なお、トリビア的になるが、本システム名称については、3 節で記した、利用者に向けたアンケートの時点で codename: octopus と称して一部公開を行っていた。読者のなかには早くから次期システム名称が OCTOPUS であることに気づかれた方がおられたかもしれない。

4.2 OCTOPUS 計算ノード概要



図 1 OCTOPUS 外観

さて、ようやく本特集の目玉部分である OCTOPUS について説明する。図 1 は本センター IT コア棟サーバ室に設置された OCTOPUS の外観である。上図が IT コア棟 3 階見学室側の外観 (表面)、下図が見学室側から遠い側 (裏面) の外観である。表面には、OCTOPUS の導入・運用開始を記念し、2017 年 8-9 月に実施した OCTOPUS ラックデザインコンテスト [3] の最優秀受賞作品 (図 2) である宮本要子氏のデザインが描画されている。なお、ラックデザインは、「大阪」、「皆に愛される」、「最先端の科学研究」、「スーパーコンピュータ」のキーワードより一般公募を行っている。



図 2 OCTOPUS ラックデザイン

OCTOPUS は、IT コア棟内に区画分けされている 1 区画内の 11 ラック (分電盤ラックを除く) に搭載されている。

表 1 OCTOPUS ノード構成

ノード構成	汎用 CPU ノード 236 ノード(471.24 TFlops)	プロセッサ：Intel Xeon Gold 6126 (Skylake / 2.6 GHz 12 コア) 2 基 主記憶容量：192 GB
	GPU ノード 37 ノード(858.28 TFlops)	プロセッサ：Intel Xeon Gold 6126 (Skylake / 2.6 GHz 12 コア) 2 基 GPU：NVIDIA Tesla P100 (NV-Link) 4 基 主記憶容量：192 GB
	Xeon Phi ノード 44 ノード(117.14 TFlops)	プロセッサ：Intel Xeon Phi 7210 (Knights Landing / 1.3 GHz 64 コア) 1 基 主記憶容量：192 GB
	大容量主記憶搭載ノード 2 ノード (16.38 TFlops)	プロセッサ：Intel Xeon Platinum 8153 (Skylake / 2.0 GHz 16 コア) 8 基 主記憶容量：6 TB
相互結合網	InfiniBand EDR (100Gbps)	
ストレージ	DDN EXAScaler (Lustre/3.1PB)	

図 1 の写真上部にはガラス扉が見えるが、このガラス扉で区切られた空間 (キャッピング空間) を共有するラックに OCTOPUS を構成する機器群は分散搭載されている。具体的には、表面側に空冷 4 ラック、裏面側に水冷 7 ラックの構成である。このキャッピング空間により、それら搭載機器類の発熱を閉じ込め、サーバ室内の冷えた空気と機器類によって温められた空気が混ざらないようにすることで、IT コア棟内の空調効率を高め、低消費電力で高性能を提供する工夫がなされている。

次に、OCTOPUS のシステム構成について解説する。表 1 にノード構成について示す。OCTOPUS は汎用 CPU ノード群 (236 ノード)、GPU ノード群 (37 ノード)、Xeon Phi ノード (44 ノード)、大容量主記憶搭載ノード (2 ノード) の総計 319 ノードから構成される。また、利用者のプログラム開発環境として、フロントエンドサーバ群を 4 基備えている。以下、各ノード群について概説する。

4.2.1 汎用 CPU ノード



図3 汎用 CPU ノード (LX 2U Twin2 Server 406Rh-2) の外観

汎用 CPU ノードには、2017 年後半にリリースされたばかりの最新プロセッサ Intel Xeon Gold 6126 (Skylake, 2.6 GHz, 12 コア) を 2 基、192 GB の主記憶が搭載される。このプロセッサは 1 基あたり 0.9984 テラフロップス (TFlops: 1 TFlops は 1 秒間に 1 兆回の浮動小数点演算を行うことができることを表す) の理論演算性能を供給する。そのため、ノード単体で 1.9968 TFlops の理論演算性能を有しており、OCTOPUS の汎用 CPU ノード群全体で 471.24 TFlops の理論演算性能、45.312 TB の主記憶容量を提供可能である。

この Skylake 世代のプロセッサの最大の特徴は、AVX-512 命令セットがサポートされている点にある [4]。これにより、SIMD (Single Instruction Multiple Data) ベクトル幅が 512 ビットに拡張されており、以前の命令セットでは不可能あるいは困難であったベクトル化が可能となり、並列処理の向上が可能となっている。

なお、CPU ノードは、NEC LX 2U Twin2 Server 406Rh-2 という型番のサーバとして供給され、2 U の筐体に 4 ノードが搭載される構成となっている (図 3)。

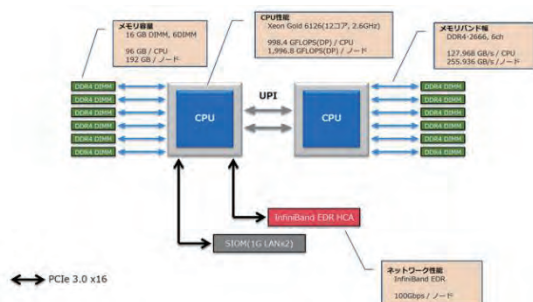


図4 汎用 CPU ノードのブロック図

図 4 に汎用 CPU ノードのブロック図を示す。上述したように、汎用 CPU ノードでは、2 基の Skylake 世代のプロセッサが搭載されている。これらの 2 基のプロセッサソケット間は 2 本の UPI (Ultra Path Interconnect) で接続されており、10.4 GT/s (Gigatransfers per second) \times 2 での通信速度で CPU 間のデータ交換が可能である。また、各 CPU は 6 チャンネルメモリコントローラを通じて 6 枚の DDR4 DIMM-2666 (16GB) と接続されている。そのため、各 CPU は主記憶装置に対して、127.968 GB/s (2666 M \times 8B \times 6 チャンネル) でアクセスが可能であり、ノード全体で 255.936 GB/s のメモリバンド幅を提供する。さらに、CPU ノードは InfiniBand EDR HCA (Host Channel Adapter) を備えるが、InfiniBand EDR HCA は CPU ノード内の 1 CPU に PCI Express 3.0 (Gen3) x16 で接続されており、100 Gbps のデータ送受信が問題なく行える構成となっている。

4.2.2 GPU ノード

図 5 に示す GPU ノードは、CPU ノードと同一のプロセッサ、主記憶を搭載し、アクセラレータとして 4 基の NVIDIA 製 GPU Tesla P100 [5] を備えている。4 基の Tesla P100 は NVIDIA の高速インターコネクト技術 NVLink によって相互接続されており、GPU 間で最大 80 GB/sec の通信を可能にしている。この NVLink に対応した Tesla P100 は、16 GB の HBM2 (High Bandwidth Memory 2) メモリを備えており、理論演算性能 5.3 TFlops (倍精度) を提供する。また、Tesla P100 では、732 GB/s のメモリバンド幅での高速アクセスが可能となっている。



図5 GPU ノード (LX 1U 4 GPU Server 102Rh-1G) の外観

このように、GPU ノード単体では、上述の汎用 CPU ノードの演算性能に加えて、4 基の Tesla P100 の演算性能が利用可能であるため、23.196 TFlops の理論演算性能を有しており、GPU ノード群全体では 858.28 TFlops の理論演算性能、7.252 TB の主記憶容量、2.368 TB の GPU メモリを提供可能である。なお、この GPU ノードは、NEC LX 1U 4GPU Server 406Rh-2 という型番のサーバとして供給され、1U の筐体に 1 ノードが搭載される構成となっている (図 5)。図中やや中央部の 4 つの箱状の部分が Tesla P100 が実装されている部分である。

図 6 に GPU ノードのブロック図を示す。CPU、主記憶、InfiniBand EDR HCA を接続する構成は、上述した CPU ノードと同じ (CPU 間の UPI 接続を除く) であるので、ここでは説明を割愛する。GPU ノードの最大の特徴は、名称が示す通り、4 基の GPU を搭載していることである。前述したが 4 基の GPU 間は、図に示すように、各 GPU から 4 本の NVLink で相互に接続されており、GPU 間では最大 80 GB/sec の通信が可能となっている。また、各 GPU は PCIe ブリッジを経て PCI Express 3.0 (Gen3) x16 で接続されており、CPU-GPU 間の通信は 16 GB/sec で実現される。

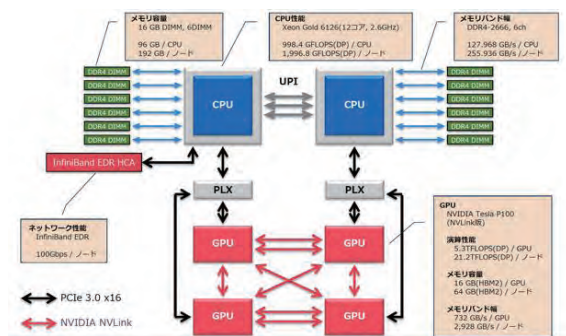


図 6 GPU ノードのブロック図

4.2.3 Xeon Phi ノード

Xeon Phi ノードは、その名前が示す通り、Intel 製 Xeon Phi プロセッサを搭載した計算ノードである。Xeon Phi は、本調達以前の段階では、MIC (Many Integrated Core) アーキテクチャベースのコプロセッサ (co-processor: Knights Corner) としてリリースされていたが、OCTOPUS 調達時には、プロセッサ

製品も利用可能となっていた。OCTOPUS では、利便性の観点から、メニーコア型プロセッサとして Xeon Phi を選択している。Xeon Phi ノードでは、Intel Xeon Phi 7210 (Knights Landing, 1.3Ghz, 64 コア) を 1 基、192 GB の主記憶を搭載している。この Xeon Phi 7210 [6] は、単体で理論演算性能 2.662 TFlops の性能を有しており、Xeon Phi ノード全体では 117.14 TFlops、8.448 TB の主記憶容量が利用可能である。



図 7 Xeon Phi ノード (Express5800/HR10c-M) の外観

さらに、この Xeon Phi 7210 プロセッサには MCDRAM (Multi-Channel Dynamic Random Access Memory) (オンパッケージ HBM メモリ) を 16 GB 搭載しており、フラットモードで利用することによりさらに大規模なメモリ空間を利用可能である。本稿執筆時には、OCTOPUS の MCDRAM 設定はフラットモードとして運用している。この MCDRAM 設定はユーザの要望に応じて、他のキャッシュモード、ハイブリッドモードに適宜変更することも可能であるので、リクエストのある読者の方がおられたらお知らせいただければ幸いである。なお、Xeon Phi ノードでは、Express5800/HR10c-M という型番のサーバとして供給され、2U の筐体に 4 ノードが搭載される高密度構成となっている (図 7)。

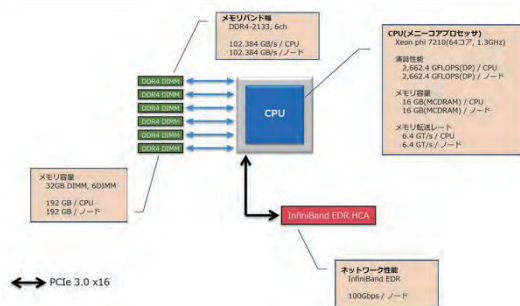


図 8 Xeon Phi ノードのブロック図

図 8 に Xeon Phi ノードのブロック図を示す。Xeon Phi ノードでは、Xeon Phi 7210 プロセッサは 6 チャンネルメモリコントローラを通じて 6 枚の DDR4 DIMM-2133 (64GB) と接続されている。そのため、各 CPU は主記憶装置に対して、102.384 GB/s (2133 M × 8B × 6 チャンネル) でアクセス、すなわち、102.384 GB/s のメモリバンド幅を提供する。CPU、GPU ノードと同様に、Xeon Phi ノードについても、InfiniBand EDR HCA を装備しており、プロセッサとは PCI Express 3.0 (Gen3) x16 で接続されており、ノード内外の通信にストレスなく通信が可能な設計となっている。

4.2.4 大容量主記憶搭載ノード



図 9 大容量主記憶搭載ノード (LX116Rh-7) の外観

大容量主記憶搭載ノードは、その名前の通り、1 ノードあたり 6TB の大容量主記憶を搭載した計算ノードである。本ノードには、Skylake 世代の最新プロセッサ Intel Xeon Platinum 8153 (Skylake, 2.0GHz, 16 コア) が 8 基搭載されており、最大 128 コアでの並列処理が可能となっている。大容量主記憶搭載ノード単体では、8.192 TFlops の理論演算性能を提供可能である。OCTOPUS では、この大容量主記憶搭載ノードを 2 基備えている。なお、大容量主記憶搭載ノードは、7U の筐体の NEC LX116Rh-7 という型番のサーバとして供給されている (図 9)。

図 10 に大容量主記憶搭載ノードのブロック図を示す。大容量主記憶搭載ノードに搭載されているプロセッサ Intel Xeon Platinum 8153 は、CPU ノード、GPU ノードに搭載されるプロセッサよりも上

位クラスに位置づけられ、8 ソケット構成を可能としている。大容量主記憶搭載ノードでは、このプロセッサを 8 基備え、各 CPU が 3 本の UPI で相互に接続されている。また、各 CPU は 6 チャンネルメモリコントローラを通じて 12 枚の DDR4 DIMM-2666 (64GB) と接続される。そのため、各 CPU は主記憶装置に対して、127.968 GB/s (2666 M × 8B × 6 チャンネル) でアクセスが可能であり、ノード全体で 1023.744 GB/s のメモリバンド幅を提供する。また、ノードあたりの総メモリ容量は 6.144TB となる。さらに、図には記載していないが、汎用 CPU ノード、GPU ノード、Xeon Phi ノードと同様に、InfiniBand EDR HCA を装備しており、プロセッサとは PCI Express 3.0 (Gen3) x16 で接続されており、ノード内外の通信にストレスなく通信が可能な設計となっている。

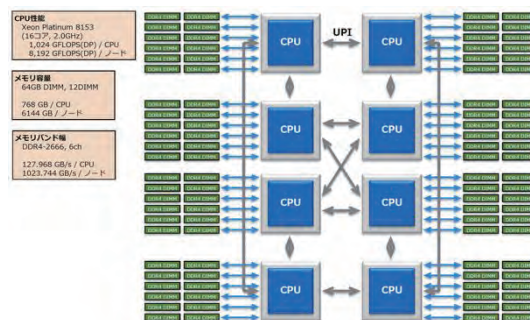


図 10 大容量主記憶搭載ノードのブロック図

4.2.5 フロントエンドノード



図 11 フロントエンドノード(NEC LX 4U-GPU Server 108Th-4G)の外観

OCTOPUS では、利用者の皆様方がプログラム開発を行う環境としてフロントエンドノードを 3 基準備している。図 11 にフロントエンドノードの外観を示す。このフロントノードでは、OCTOPUS の

計算ノードでのプログラム開発が容易に行えるように、最もノード数の多い汎用 CPU ノードと同一のプロセッサである Intel Xeon Gold 6126 を 2 基、主記憶を 192 GB 備えている。

図 12 にフロントエンドノードのブロック図を示す。フロントエンドノードの内部構成は、汎用 CPU ノードのそれと類似するが、CPU 間の接続が 3 本の UPI でなされている点が異なる。また、フロントエンドノードには、NVIDIA Quadro P5000 を搭載している点も異なる。このフロントエンドノードは、計算ノード群（汎用 CPU ノード、GPU ノード、Xeon Phi ノード、大容量主記憶搭載ノード）との通信用に InfiniBand EDR HCA を備えている点はいずれの計算ノードとも同一の点であるが、10GBase-SR を 2 ポート備えている。この 10GBase-SR の 2 ポートは、大阪大学の学内ネットワークである ODINS に接続されており、20 Gbps での高速通信を可能としている。なお、このフロントエンドサーバには、NEC LX 4U GPU Server 108Th-4G という型番が付与されている。

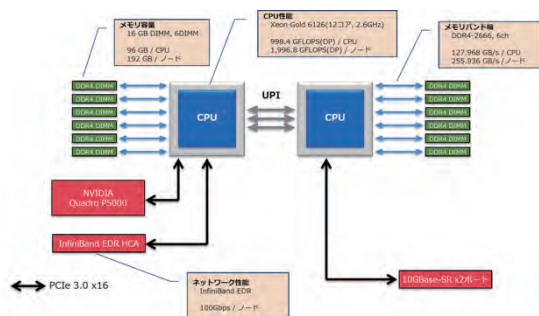


図 12 フロントエンドノードのブロック図

4.3 大容量ストレージ概要

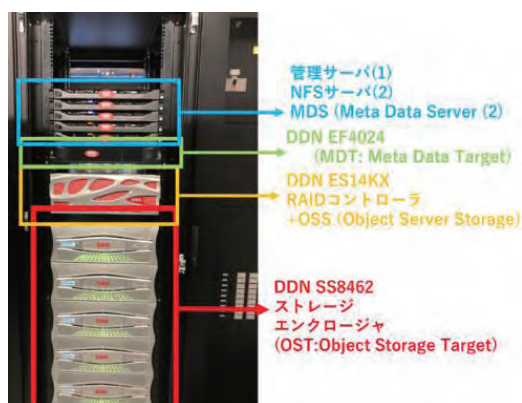


図 13 大容量ストレージの外観

次に OCTOPUS の大容量ストレージについて概説する。図 13 に OCTOPUS の大容量ストレージ外観を示す。

OCTOPUS の大容量ストレージは、3 PB を並列ファイルシステム Lustre ベースのファイルシステムである DDN (DataDirect Networks) 製 ExaScaler [7] を基軸として提供する。OCTOPUS では、わずか 1 ラックに 3 PB を高密度に収容している。

OCTOPUS の大容量ストレージは、ExaScaler ファイルサービス (Lustre ファイルサービス) 実現のためのサーバ群 (Object Storage Server (OSS)、Object Storage Target (OST)、Meta Data Server (MDS)、Meta Data Target (MDT))、ストレージ管理サーバ、および、NFS サーバより構成されている。これらは図 14 に示す通り、相互結合網である InfiniBand EDR ネットワークに接続されており、OCTOPUS への高速なファイルサービスを提供している。

Lustre ファイルシステムは、実際のデータであるファイルと、ファイルに付属するデータ (メタデータ) を分離して管理する点に特徴があり、次の通り動作する。いまクライアントがファイルにアクセスしようとする場合を考える。この時、クライアントはアクセス対象とするファイルがどこに格納されているかといったメタデータが格納された MDT を管理する MDS に問い合わせる。問い合わせを受けた MDS は、アクセス対象のファイルに関するメタデータをクライアントに返す。クライアントは、そのメタデータに基づき、実際のデータが含まれる OST を管理する OSS にアクセスする。

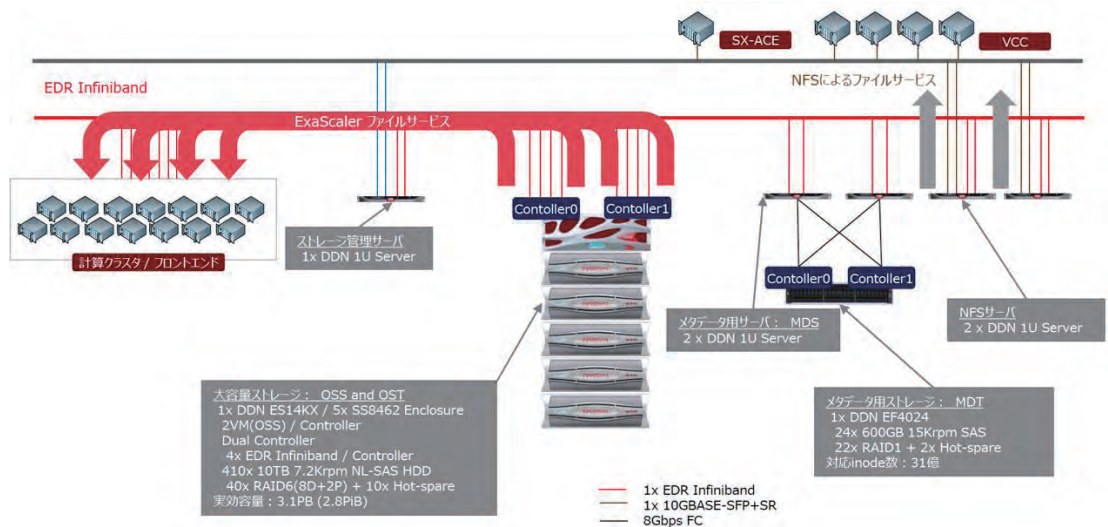


図 14 OCTOPUS ファイルシステムの概要

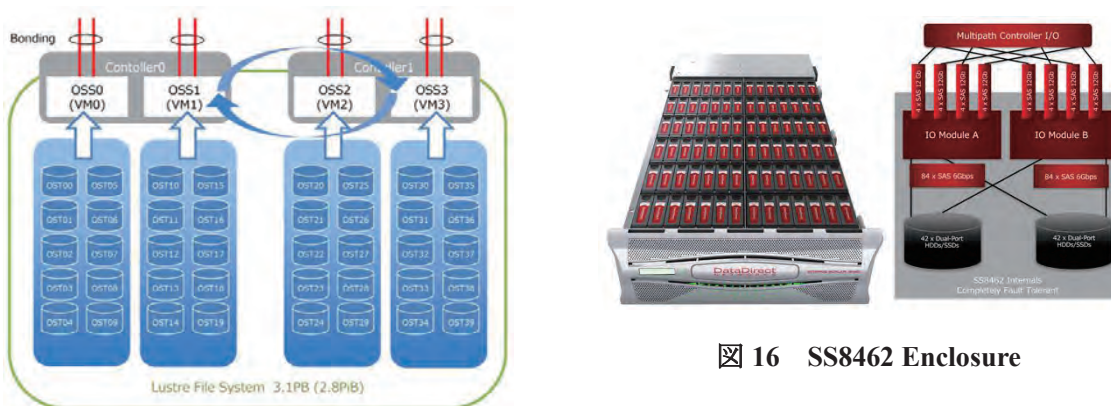


図 15 ES14KX

OCTOPUS の大容量ストレージでは、Lustre ファイルサービスの OSS 機能を DDN 製 ES14KX で提供する。ES14KX では、2 基の RAID コントローラそれぞれに Active/Active の冗長構成設定をされた 2 VM (virtual machine: 仮想計算機) を配備する。この ES14KX は 8 本の InfiniBand EDR コネクションで相互結合網に接続されており、各 VM が 2 本ずつをボンディングし、耐故障性、負荷分散性能を高めたうえで、Lustre ファイルサービスを提供する構成となっている。(図 15)。

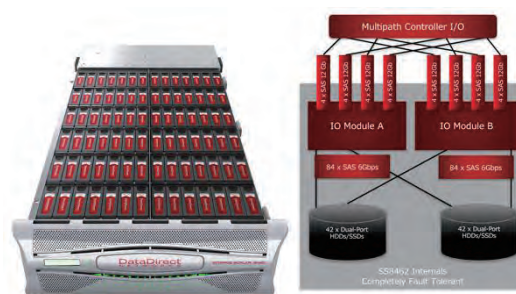


図 16 SS8462 Enclosure

また、OST としては、5 基の DDN SS8462 Enclosure を設置している。この Enclosure は 4U の筐体内に 84 個のドライブを収容可能な高密度ストレージエンクロージャ (図 16) であり、SSD、SAS、SATA の各種ドライブを混在可能である。また、このエンクロージャでは、すべての構成要素が冗長化されており、高い耐障害性を有する構造となっている。OCTOPUS では、10 TB の NL-SAS 7/2krpm HDD 410 個 (82 個 × 5) を 5 基の SS8462 Enclosure 内に格納している。OCTOPUS の Lustre ファイルサービスでは、これら 5 基の

SS8462 エンクロージャー内に格納されている 10 本のディスクを用いて RAID6 (8D+2P) で構成し、各々 RAID 6 ボリュームを LUN (Logical Unit Number) として管理する(図 17)。この筐体間にまたがった RAID6 構成により、OCTOPUS の Lustre ファイルサービスでは、1 エンクロージャーがアクセス不能になったとしてもデータが保護される耐障害性を持たせている。

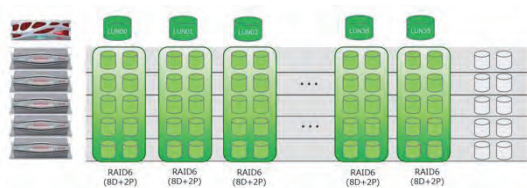


図 17 ストレージ構成

Lustre ファイルサービスを実現する上での重要な役割を担う MDS については、プロセッサとして Intel Xeon E5-2640v4 (2.4GHz, 10 コア) を 2 基、主記憶として 128 GB を備えた 1 U サーバを 2 ノード設置している。各 MDS は、InfiniBand EDR 2 本をボンディングすることにより相互結合網に接続され、Active/Standby の冗長構成により動作する構成となっている。また、実際のメタデータを格納する MDT には DDN EF4024 が採用されており、MDS とは 8 Gbps FC にて冗長構成を持たせて接続される構成となっている。このように、OCTOPUS では、メタデータアクセスについても高い耐障害性を提供し、ユーザのファイルアクセスへの信頼性を高めている。

さらに、補足的ではあるが、OCTOPUS の大容量ストレージでは、近い将来に Lustre ファイルサービスを本センターの他のスーパーコンピュータから利用できるよう、2 基の

NFS サーバを導入している。これらの NFS サーバもまた相互結合網、センター内のスーパーコンピュータネットワークに 2 本ずつのネットワーク接続をもたせた冗長構成としている。

最後に、ストレージ管理サーバであるが、この管理サーバ上にはファイルシステムのモニタリング機能を搭載しており、日々の運用状況の監視に利用されている。

4.3 相互結合網 (インターコネク)

次に、OCTOPUS の相互結合網 (インターコネク) について説明する。本節以前に何度か記載したように、OCTOPUS では、InfiniBand EDR を相互結合網 (インターコネク) として採用している。OCTOPUS を構成する計算ノード群 (汎用 CPU ノード群、GPU ノード群、Xeon Phi ノード群、大容量主記憶搭載ノード群)、ストレージ、フロントエンドサーバ (計算ノードから合計 319 本、ストレージより合計 18 本、フロントエンドノードより 3 本の合計 340 本) を収容するために、OCTOPUS では Mellanox 製 CS7500 InfiniBand Director Switch [8] を導入している (図 18)。

通常、高性能計算クラスタを構成する計算ノード間をインターコネク接続する際、その計算ノード間の通信が他の計算ノード間の通信と干渉しないよう、また、その通信も低遅延で行えるよう、トポロジ構成、帯域等を熟慮する必要がある。また、インターコネクを構成するスイッチ台数の増加は調達コストを増加させ、一方で計算ノード数を減少させてしまう。そのため、予算的な側面からの考慮も必要となる。

事実、OCTOPUS 調達においても、このインターコネクにかかる部分の記載は、導入

されるノード数が仕様書記載の段階では(仕様書ではノード数増加に応じた加点設定としていたため)未定であったこと、また、同様に 100 Gbps の通信性能を有するインターコネクト技術 Intel Omni-Path の提案も可能としたこと (InfiniBand EDR と Omni-Path で利用できるスイッチのポート数が違う：それぞれ 36 ポートと 48 ポート) などもあり、困難を極めた部分であった。調達当初はこれら 36 ポートあるいは 48 ポートのスイッチを用いたファットツリーあるいはハイパーキューブなどのトポロジを想定し、任意のノード間でフルバイセクション帯域幅を有し、低遅延での通信が可能となるインターコネクト構成を想定していたが、OCTOPUS の調達では、非常に高価であるため想定範囲外であった Mellanox 製 CS7500 InfiniBand Director Switch が導入されることとなった。



図 18 CS7500 InfiniBand Director Switch

この CS7500 は、28 U の筐体に 648 EDR ポートを備え、最大 130 Tb/s のノン・ブロッ

キング帯域幅を有し、そのポート間は 0.5 μ s (マイクロ秒) 未満での通信が可能である” モンスタースイッチ “である。現状では、OCTOPUS の CS7500 は、OCTOPUS を構成する計算ノード、ストレージ、フロントエンドノード全てを直取 (この状態では、最大約 70 Tb/s のノン・ブロッキング帯域幅を供給) しており、上述のノード同士が互いに 1 ホップでの低遅延通信を行うことが可能となっている。

4.4 水冷方式

次に、OCTOPUS の調達導入に際して、こだわった部分でもあるサーバの冷却方式について記載する。

3 節で記したが、OCTOPUS 調達の基本方針として、「安定稼働・運転できること」を定め、具体的にはプロセッサ、アクセラレータに液冷を優先することとした。この背景としては、2013 年に竣工した IT コア棟の水冷設備の活用という視点もあるが、プロセッサやアクセラレータの温度上昇による動作周波数低下による性能低下を回避した安定稼働を行いたいという願いがあった。さらに、仕様書策定時に、ターゲットとなりうるプロセッサやアクセラレータの消費電力がそれぞれ 130 W、300 W 前後であろう、という情報を得ていたことは、IT コア棟の空調だけではなく、プロセッサおよびアクセラレータの直接液冷にこだわる主な要因であった。

このこだわりの結果、OCTOPUS の調達では、汎用 CPU ノード、GPU ノード、Xeon Phi ノードの計算ノード群については、空気よりも比熱の高い水を用いて、これらのノード群に搭載されたプロセッサ、アクセラレータで発生した熱を取り去る直接水冷方式を行う

Asetek 社の Asetek Rack CDU Direct-to-Chip (D2C) [9][10]を採用することとなった。以下、この水冷の仕組みについて概説する。

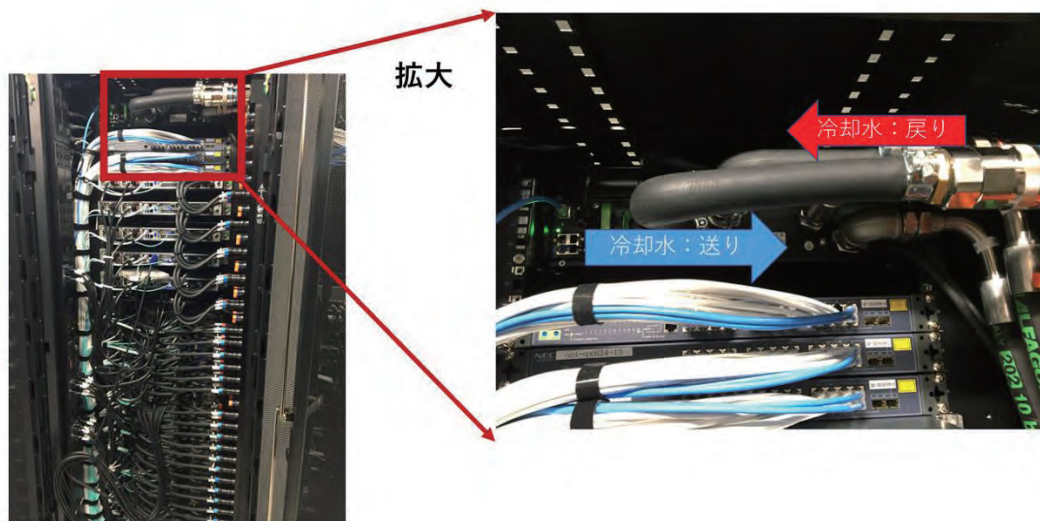


図 19 OCTOPUS 水冷ラック背面

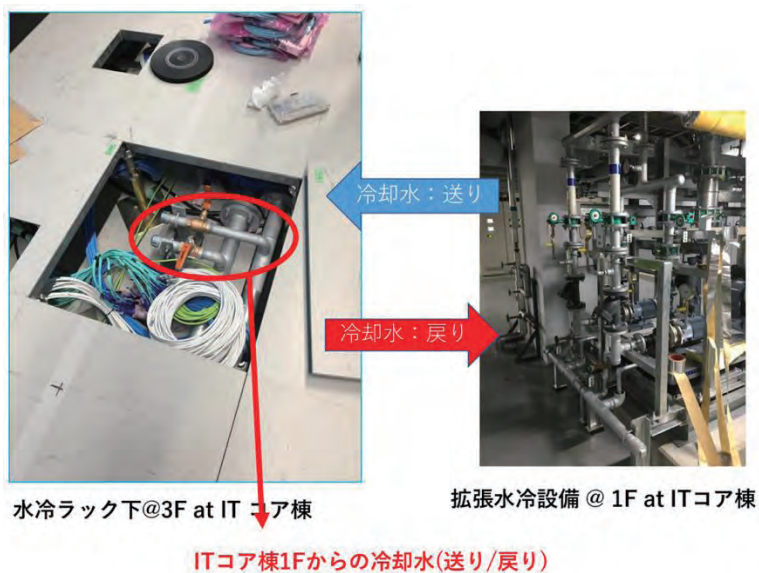


図 20 IT コア棟水冷設備から OCTOPUS への冷却水

図 19 に OCTOPUS の水冷ラック背面を示す。左図を見ると、ラック内のサーバ筐体に対して黒いホースが何本も挿入されていることがわかるが、このホースを使ってサーバ筐体内のプロセッサ、アクセラレータに冷却水を送り、プロセッサ、アクセラレータの熱で温まった水を回収する仕組みとなっている。この冷却水の送り出しと回収をラック単位で行うために、冷却水循環装置 (Coolant Distribution Unit: CDU) がラック上部に配備されており、IT コア棟水冷設備との間で冷却水と暖められた水を交換している (図 19 右)。

なお、プロセッサ、アクセラレータの直接冷却は、図 21、図 22、図 23 に示すコールドプレートと呼ばれるものをプロセッサ、アクセラレータ表面に装着することで行なっている。



図 21 CPU 用コールドプレート

図 20 は IT コア棟水冷設備と水冷ラックへの循環の仕組みを示したものである。左図は設置工事中的水冷ラックの床面を撮影したものである。左図の赤丸で囲んだ部分は、右図の水冷設備との間で冷却水および暖められた水を循環させるための配管である。この配管を各ラックの CDU と接続することで、IT コア棟 1 階冷却設備－IT コア棟 3 階のラック CDU－サーバの冷却水循環を行う。これにより、プロセッサ、アクセラレータで発生する熱を定期的に取り去り、プロセッサ、アクセラレータが動作周波数を低下させることなく高性能を継続的に供給できるように実現している。



図 22 GPU 用コールドプレート



図 23 KNL 用コールドプレート

5. 利用のために

本節では、これまでに説明した OCTOPUS を実際に利用者の皆様にご利用いただくための参考情報を記す。ここまで読んでいただけた読者の皆様方には、ぜひ OCTOPUS のご利用をご検討いただければ幸いです。なお、ここに記載する内容は、本センターの大規模計算機システム (スーパーコンピューティング) 事業の Web ページ [11] にも記載しているので、詳細については当該 Web ページを参照いただければ幸いです。

5.1 利用負担金の考え方

多くの利用者の方の関心が高いのは、計算機利用に伴う負担金であろう。事実、現利用者の方からも負担金についての多くの質問・相談・要望が寄せられている。とりわけ、多く寄せられる要望としては、利用負担金がもう少し安くないか?、あるいは、無料にならないのか? というものである。

スーパーコンピュータ上で大規模なシミュレーションやデータ解析を行う研究者にとっては、どうしても利用負担金が大きくなってしまふ。このことは

容易に想像できる。スーパーコンピューティング事業を担当する者としても、研究者としても、上記の利用負担金に対する要望は痛いほどよくわかる。しかし、言い訳ではないが、サイバーメディアセンターの利用負担金は、計算機利用に相当する消費電力量に基づいており、できるかぎり低額な設定としている。

スーパーコンピュータの保守・運用には、スーパーコンピュータシステムをただ設置し「はい、どうぞ」と置いておくだけではだめで、ハードウェア保守、ソフトウェア整備、テクニカルサポート等の費用も発生する。サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータの調達においては、スーパーコンピュータを構成するハードウェア機器だけでなく、ハードウェア保守、整備・サポートに関する人件費等の運用・保守にかかる費用の多くを含めて調達を行っている。そのため、サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータの利用負担金は、利用者の計算機利用に伴う消費電力量相当のみを負担いただく構造となっている。言い換えれば、スーパーコンピュータを運転するのに必要最低限となる費用だけを利用者に負担いただいている。この利用負担金をゼロにするためには、あらかじめ調達に消費電力を見込んで含めておく、あるいは、どこからかそのための予算をとってくるしかないのが現状である。

ここで、前者でいいのではないかとと思われる読者の方もおられるかもしれない。その場合、消費電力分相当の費用をスーパーコンピュータシステム調達より取り置いておかなければならなくなり、調達できるスーパーコンピュータの規模は小さくならざるを得ない。場合によっては、スーパーコンピュータではなく、ただのコンピュータになってしまい、利用者の計算要望やニーズを充足することはさらに難しくなってしまう可能性が高い。今日科学研究に伴うデータ量はますます大きくなり、計算要求・ニーズもますます大きくなりつつある。結果として、より大規模なシミュレーション、データ分析が可能なスーパーコンピュータの必要性・重要性が高まりつつある。このことを鑑みれば、計算機を利用した利用者自身が消費電力相当分を利用負担金とし

て負担いただく受益者負担が最善ではないだろうか。

電気、水道等の生活ライフラインのように、科学研究のインフラであるスーパーコンピュータの運転にもどうしても費用が発生する。この費用については誰かが払わなければならない構造である。この構造をご理解いただき、OCTOPUS をご利用いただければ幸いである。

5.2 OCTOPUS 利用負担金

さて、前置きが長くなってしまったが、OCTOPUS の利用負担金について説明する。表 2 に設計・策定した負担金制度の概要を示す。OCTOPUS の利用負担金では、OCTOPUS ポイントを導入している。OCTOPUS は、上述してきたように、プロセッサ、アクセラレータの構成が異なる複数のノード群より構成されるハイブリッド型スーパーコンピュータである。そのため、それぞれのノード群ごとに消費電力が異なるため、原則に従えば異なる利用負担金単価となるのが適切であるが、利用者の皆様方にノード毎に契約いただく方式をとることはかなり不便である。そこで、OCTOPUS では、OCTOPUS ポイントを採用することで、利用者は事前にノード種別を確定しておく必要がなく、臨機応変に複数のノードを使い分けることができるよう利用負担金を設定した。

表 2 OCTOPUS 利用負担金

(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	Xeon Phi 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	

設計した利用負担金制度は、ノードを一利用者がある一定期間を予約して占有利用する占有、および、複数の利用者が時間分割で利用する共有の種別がある。占有利用は、サイバーメディアセンターの計算拠点としての一角を担う革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラストラクチャ (HPCI) [12] や、サイバーメディアセンターが参画する学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) [13] で採択された課題の利用を想定しており、多くの場合は共有利用となる。

表 3 OCTOPUS ノード種別消費係数

ノード群	消費係数	季節係数
汎用 CPU ノード群	0.0520	平成 30 年度は 通年 1 で稼動 (季節変動無し)
GPU ノード群	0.2173	
メニーコアノード群	0.0418	
大容量主記憶搭載ノ ード群	0.3703	

表 3 にノード種別の消費係数を示す。表は 1 ノード時間あたりの消費係数を示しており、例えば、汎用 CPU ノードの場合、1 ノードを 1 時間利用した場合、0.0520 OCTOPUS ポイントが消費される。言い換えれば、1000 ポイント (10 万円税別)で、

CPU ノードの 1 ノードを 19230 時間利用できることがわかる。表中季節係数とあるのは、平成 31 年度以降の運用時に前年度の利用状況に基づいて、季節ごとに消費係数を変更することで利用者の計算計画を制御しようとする係数である。一般的に、年度末には、ジョブが多く投入され混雑する傾向にある一方、年度初めには比較的ジョブが走りやすい状況がある。これを緩和するために、例えば、年度初めころには消費係数を低くし、利用者の利用を年度初めに移動させることをねらう。初年度となる平成 30 年度は、季節係数を年間通じて 1 として運用を行う。平成 31 年度以降については、OCTOPUS の平成 30 年度の利用率を鑑みつつ、サイバーメディアセンターに設置されている高性能計算機システム委員会での議論をへて、季節係数を決定していく計画としている。

5.3 公募型利用制度

それでもやはり利用負担金では十分な計算資源量が確保できないという方がおられるかもしれない。その場合は、サイバーメディアセンターの公募型利用制度を通じた計算機利用も可能である。

本センターでは、本センターの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) [12] 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) [13] 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スーパーコンピュータ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する制度を 2016 年度より開始している。本制度には、それぞれ JHPCN および HPCI での課題として採択されることを目的とし、(1) 若手・女性研究者支援萌芽枠、(2) 大規模 HPC 支援枠を設定している。本センターが設置する高性能計算機委員会において厳密な審査の上採択された研究課題については、本センターが研究課題推進のための利用負担金の全額を負担する。また、本セン

ターの施設(会議室)もまた利用可能となる。ただし、その一方で、本センターが開催する公募型利用制度成果報告会での発表、成果報告、発表論文への謝辞記載等の義務も存在するので、その点にご留意いただきたい。

本制度は、例年、11月半ば頃から12月半ば頃までの期間、翌年度の公募型利用制度への課題提案・応募を受け付けている。この応募期間は、科学研究費の応募を終えた後に設定しており、研究者にとって応募しやすい(科研を提出した後に引き続き申請書を記載しないとイケないが。)よう考慮して設定してある。本公募型利用制度の制度設計を行い、運営を行う筆者の立場からは、上記の公募利用制度整備趣旨をご理解頂ける方は、本センタースーパーコンピューティング事業 Web ページ内の公募型利用制度募集要項に従い、是非 OCTOPUS を利用する課題の提案・応募を積極的に検討いただければと思う。

5.4 HPCI & JHPCN

また、上述してきたように、サイバーメディアセンターは、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) [12] 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) [13] に参画している。HPCI では、国立研究開発法人理化学研究所のスーパーコンピュータを中核とし、国内の大学や研究機関の計算機システムやストレージを高速ネットワークで結ぶことにより、全国の HPC リソースを全国の幅広い HPC ユーザー層が効率よく利用できる科学技術計算環境を実現することを目的とする。また、JHPCN においては、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 つの施設を構成拠点とし、超大規模計算機と超大容量のストレージおよび超大容量ネットワークなどの情報基盤を用いて、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・研究基盤のさらなる高度化と恒常的な発展を目的としている。これらの枠組みを利用し

て、サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータを利用することが可能である。

HPCI および JHPCN においても、前節 5.3 で記した公募型利用制度と同様に、課題申請書を記載の上、課題提案・応募を行う必要がある。応募された課題は、それぞれで設置された課題審査委員会で採否が決定される。採択された課題は、利用負担金を研究者が負担することなく利用することが可能となる。例年、JHPCN では12月半ば頃より1月初旬、HPCI では3月頃から5月初旬にかけて課題募集が行われている。本センターのスーパーコンピューティング事業からも Web ページやメーリングリストを通じて、これらの課題募集についてはアナウンスを行っている。HPCI および JHPCN に対して、OCTOPUS を含む本センターのスーパーコンピュータを利用する研究課題を是非提案・応募して頂ければ幸いである。

6. おわりに

本稿では、2017年12月よりサービスを開始したハイブリッド型スーパーコンピュータ OCTOPUS について、その導入の背景、調達概要を記したのち、システム構成・特徴について解説した。OCTOPUS は、総理論演算性能 1.46 ペタフロップス (Peta Flops: 浮動小数点演算を1秒間に 1460 兆回実行可能) を有する本センター初のペタフロップス級性能を有するスーパーコンピュータとなった。冒頭にも記したが、本システムの導入に際しては、センターでスーパーコンピュータシステムの運用に携わる教員や技術職員、仕様策定委員らによる 2 年以上の議論・検討、提案候補ベンダとの打ち合わせ・情報交換がなされており、関係者らにとってはようやく実現にこぎつけた待望のシステムである。OCTOPUS に少しでも興味を持っていただけた方がおられたら、是非ご利用いただければ幸いである。皆様方のご支援がサイバーメディアセンター スーパーコンピューティング事業の再生・躍進につながります。是非とも、率直なご意見、ご要望等のフィードバックを引き続きお寄せ頂きますようお願い致します。

参考文献

- (1) ExpEther Consortium,
<http://www.expether.org/jindex.html>.
- (2) 伊達進, 木越信一郎, “全国共同利用大規模並列計算システム調達の背景”, 大学 ICT 推進協議会 2017 年度年次大会, 2017.
- (3) OCTOPUS ラックデザインコンテスト,
<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/octopus-rack-design/>.
- (4) インテル アドバンスド・ベクトル・エクステンション 512 (Intel AVX-512),
<https://www.intel.co.jp/content/www/jp/ja/architecture-and-technology/avx-512-overview.html>.
- (5) NVIDIA Tesla P100, <http://www.nvidia.co.jp/object/tesla-p100-jp.html>.
- (6) インテル Xeon Phi プロセッサ7210,
<https://www.intel.co.jp/content/www/jp/ja/products/processors/xeon-phi/xeon-phi-processors/7210.html>.
- (7) DDN EXAScaler,
https://ddn.co.jp/products/storage_software/exascal.html.
- (8) Mellanox CS7500 Series,
http://jp.mellanox.com/page/products_dyn?product_family=191&mtag=cs7500.
- (9) ASETTEK, RackCDU D2C (Direct-to-Chip),
<https://www.asetek.com/data-center/oem-data-center-coolers/rackcdu-d2c/>.
- (10) Cybermedia Center, Osaka University Adopts Asetek Liquid Cooling for New Computer System “OCTOPUS”,
<https://www.asetek.com/pressroom/news/2017/cybermedia-center-osaka-university-adopts-asetek-liquid-cooling-for-new-computer-system-octopus/>.
- (11) 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事業, <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>.
- (12) 革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラストラクチャ (High Performance Computing Infrastructure), <http://www.hpci-office.jp/>.
- (13) 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (Joint Usage/Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructure), <https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/>.

Unity と HTC VIVE を利用したシミュレーション結果の 3D-VR 表示入門

萩田 克美¹、松本 茂紀²

¹防衛大学校 応用物理学科、²日立製作所 研究開発グループ

1. はじめに

VR ゲームの普及を受けて、エンターテインメントや建築や医療分野の利用[1-3]のみならず、計算科学研究での VR 活用が急速に進んでいる[4-8]。特に、HTC VIVE[9]をはじめ VR 装置が低価格化し、グラフィックデバイスの性能も向上し、更には Unity[10] や Unreal Engine[11]等のソフトウェア開発環境が発展したことが、強い牽引力となっている。VR 空間内で自由に探索し、シミュレーション結果、特に、複雑な 3 次元構造の空間認知や挙動の把握が促されると期待している。

大阪大学サイバーメディアセンターは、可視化サービス[12]として、多人数でのディスカッション利用が可能な「24 面大型立体表示システム (大阪大学吹田キャンパス)」と「15 面シリンダリカル立体表示システム (グランフロント大阪 9F うめきた拠点)」を一般向けに供用している (図 1)。

それらの有効活用としても、手元の環境でのコンテンツ検討は有意義である。本稿では、手軽な 3D-VR 表示の入門として、動きのないコンテンツに限定し、3D プリンタでも用いられる 3D データを VR 空間中に表示する簡単な方法を明らかにすることで、没入型 3D-VR 可視化装置の活用の機運を高めることを目的とする。

なお、動きのある分子動力学シミュレーションの結果を表示させる場合は、現時点では専門的なプログラムの知識が必要である。例えば、汎用の可視化アプリ VMD[13]や AVS/Express の表示をそのまま 3D-VR に変換するミドルウェア(EasyVR や AVR)を利用する方が、独自に開発するよりも、実務上においては効率的であると考えられる。

本稿では、HTC VIVE と Unity により、3D データを VR 空間中に表示する簡単な手順を紹介する。

(a) 24 面大型立体表示システム



(b) 15 面シリンダリカル立体表示システム



図 1 大阪大学の没入型 3D-VR 可視化装置

2. HTC-VIVE と Unity について

HTC-VIVE は、PC 用の VR ゲームデバイスとして最も普及しているデバイスである。測位方法の工夫により“ルームスケール”での VR が可能となった家庭ゲーム用 VR デバイスである (図 2)。

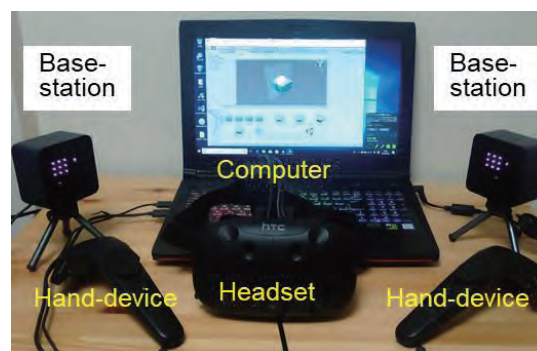


図 2 HTC-VIVE と、GPU 搭載パソコン

Unity はゲームエンジンと呼ばれ、3次元空間内の物体について、描画や物理演算などのパーツやツールが用意されたゲーム開発のための統合環境である。現在、ゲームエンジンとして主流なものは、Unity と Unreal Engine である。Unity は主に個人向けのソフトウェアとして作成されたものである。一方、Unreal Engine はゲーム会社が開発したものである。Unity や Unreal Engine は、個人やアカデミック利用は無料であり、導入が容易である。Unity を使うメリットは、Unreal Engine に比べ Assets という開発素材が充実していることや、インターネット上での情報が多いことが挙げられる。

3. HTC-VIVE のデバイスの準備設定

3.1 VR デバイスの関連ソフトウェアのインストール

HTC VIVE を利用する場合、NVIDIA の最新ドライバをインストール後、ViveSetup を実行して、SteamVR を導入する。手順は以下の通りである。

- (1) 最初に、Windows アップデートを実行するなどして、NVIDIA の新しいドライバを設定する。
- (2) 次に、ViveSetup を通じて、PC ゲーム配信ツール「Steam」をインストールする。(Steam のアカウント作成が必要である。)
- (3) 引き続き、SteamVR をインストールする。時間短縮で ViveSetup を用いない場合は、Steam 中のライブラリで、SteamVR を検索しインストールする。執筆時点でのバージョンは 1515522829 であった。

3.2 VR デバイスの利用準備

次に、HTC VIVE の初期設定を行った (図 3)。

- (1) ケーブル配線を行い、センサーを設置後、SteamVR を起動する。(デスクトップの SteamVR のアイコンをクリックするか、Steam 上で SteamVR をプレイ実行する。)
- (2) ハンドデバイスの電源を ON にして、ヘッドマウントディスプレイとともに、センサーの正面に置いて、デバイスを認識させる。
- (3) ルームセットアップを実行し、プレイエリアを設定した。



図 3 デバイスの認識とルームセットアップ

4. VMD での OBJ ファイルの作成

分子動力学シミュレーションの可視化で良く用いられる VMD では、Wavefront OBJ ファイルを出力することができる。ここでは、表示試験用のデータ作成の手順を示す。

VMD では、Nanotube Builder という機能で、カーボンナノチューブの原子配置を作成することができる (図 4)。作成したモデルを、図 5 のように Ball-stick 表現に変更し、図 6 の手順で Wavefront OBJ 形式のファイルを出力する。Wavefront OBJ 形式では、「.obj」と「.mtl」の 2 つの形式のファイルが出力される。

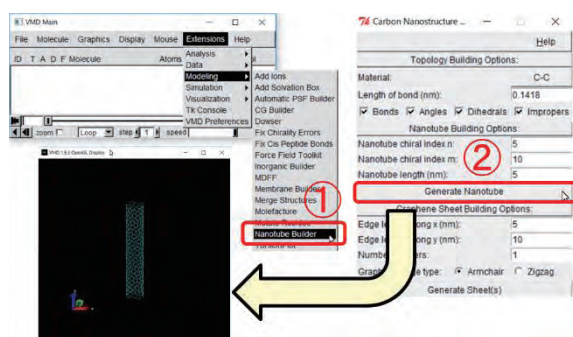


図 4 VMD の Nanotube builder での CNT の作成

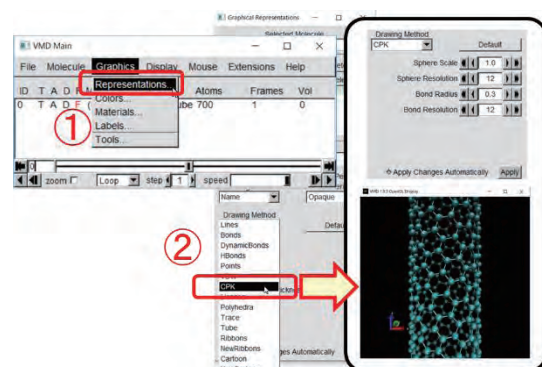


図 5 VMD での Ball-Stick 表示の設定

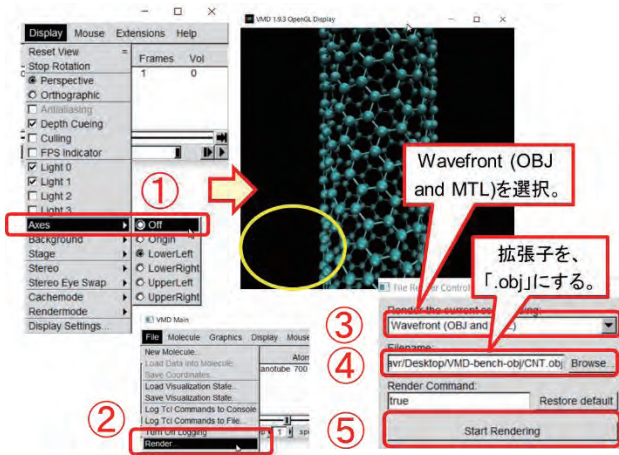


図6 VMDでのOBJファイルのエクスポート

5. Unity を利用したアプリの表示手順

Unity 2017.3 をインストールした後に、Wavefront OBJ のデータを、HTC VIVE で表示させるために必要な操作手順を示す。「VR 用のカメラのセットアップ」と「オブジェクトの配置」の2つのステップを実施する。

5.1 VR 用カメラのセットアップ

(1) Unity を起動しプロジェクトを作成した (図7)。



図7 Unityでの新規プロジェクトの作成

(2) [Window]-[Asset Store]で、Asset Storeに接続し、「SteamVR」を検索した。用いたアセットのバージョンは1.2.3である。「Download」を実行した (図8)。

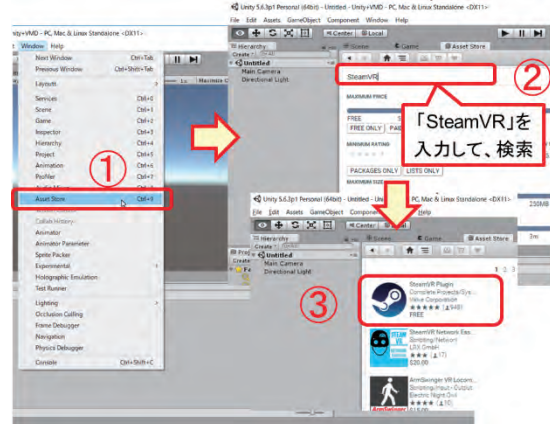


図8 Unityアセット「SteamVR」のダウンロード

(3) 「Import Unity Package」で、「SteamVR plugin」をインポートした。「SteamVR Setting」では「Accept All」を選択し、下側の画面中の Assets に SteamVR のフォルダが作成されていることを確認した (図9)。

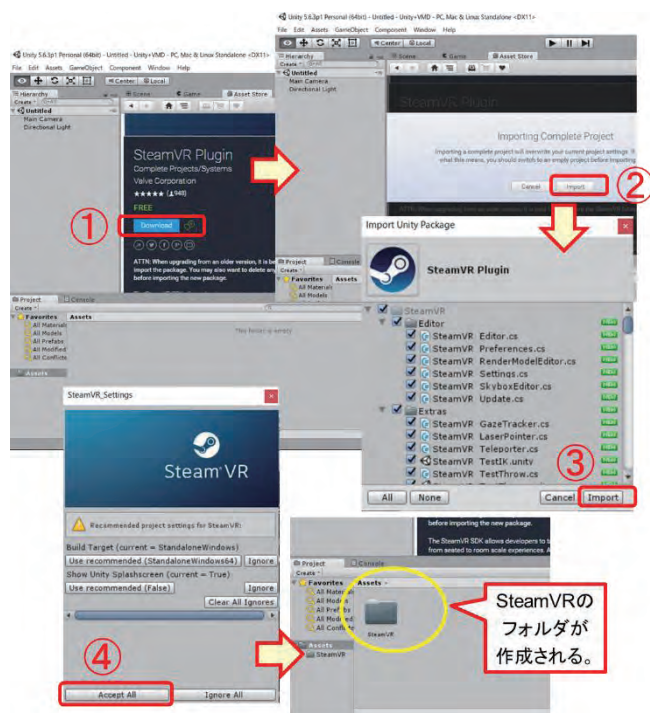


図9 アセット「SteamVR」のインポート

(4) 次に、カメラの設定を行った。具体的には、図10の通り、左側の「Hierarchy」の中にある Main Camera を削除して、[Assets]-[SteamVR]-[Prefabs]の中にある「Camera Rig」を「Hierarchy」にドラッグ&ドロップした。

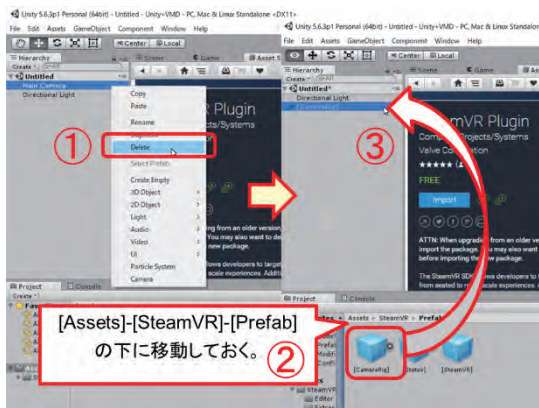


図 10 VR用のカメラの設定

5.2 オブジェクトの配置

(1) 3D-VR データを下側の「Assets」にドラッグ&ドロップした。図 11 には、3D-VR データとして、CNT.obj と CNT.mtl のペアを取り込んだ状態を例示している。Assets 中の「CNT.obj」のアイコンを、左側の「Hierarchy」にドラッグ&ドロップした。この後、中央の「Scene」のウィンドウに、3D オブジェクトが表示された。

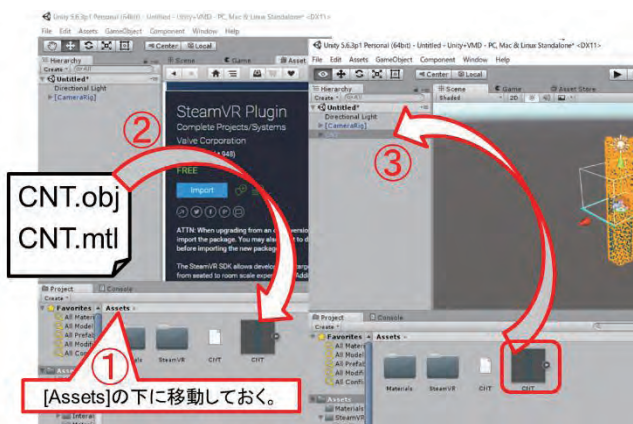


図 11 CNT.obj と CNT.mtl のインポートと、表示設定

(2) オブジェクトの位置や角度、スケールの変更は、左側の「Hierarchy」で対象のオブジェクトを選択した後に、値を変更する。このとき、Play モードが停止状態でなければならない。中央上部の Play ボタンを押し、Play モードを実行した (図 12)。これにより、ヘッドマウント中に、CNT.obj の内容が配置された空間が表示されることを確認した。

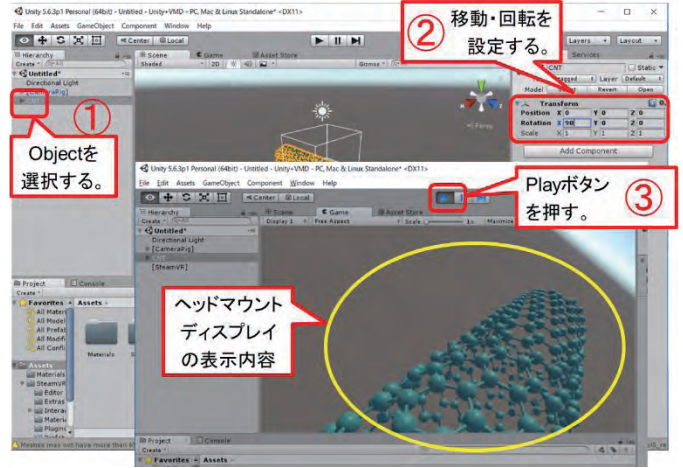


図 12 OBJ の位置調整と VR 表示 (Play モード)

6. 断面カット機能の設定

Unity では「Cross Section Shader」というアセットを用いることで、任意位置での断面カットが実現できる。また「VRTK」というアセットを用いることで、断面位置を VIVE のハンドデバイスにより操作可能となる。Cross Section Shader はバージョン 1.0 を、VRTK のバージョンは 3.2.1 をそれぞれ用いた。

6.1 断面カット機能の追加

(1) Assets Store で、「Cross Section Shader」と「VRTK」をインポートした (図 13)。

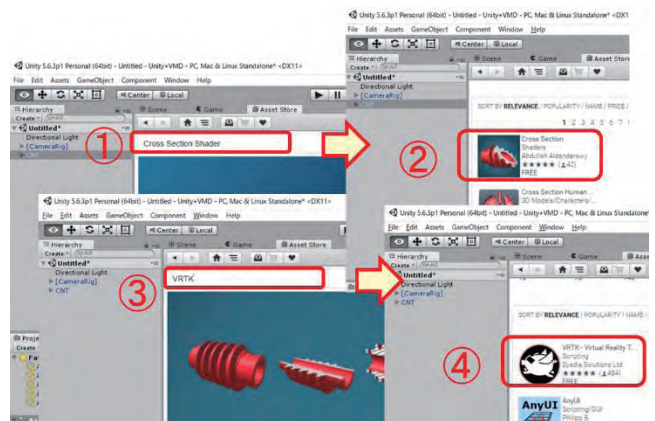


図 13 断面カット機能用のアセットのインポート

(2) 左側の「Hierarchy」の中で、[GameObject]-[3D Object]-[Quad]を選択し、「quad object」を作成した。名前を「Quad」から「Cutting_plane」に変更した。右側の「Inspector」で、「X」と「Y」の値を「3」に

設定した。「Mesh Collider」の項目中の「Convex」のチェックボックスをonにした(図14)。

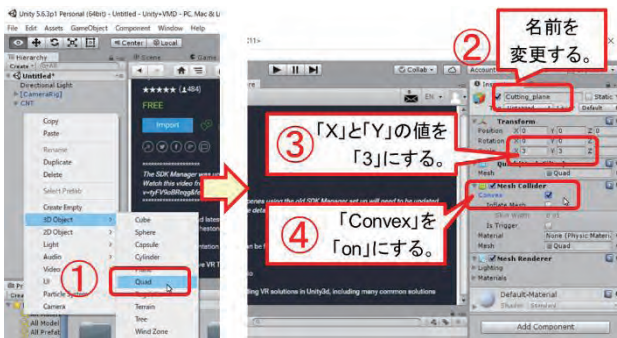


図14 Cutting_planeの設定

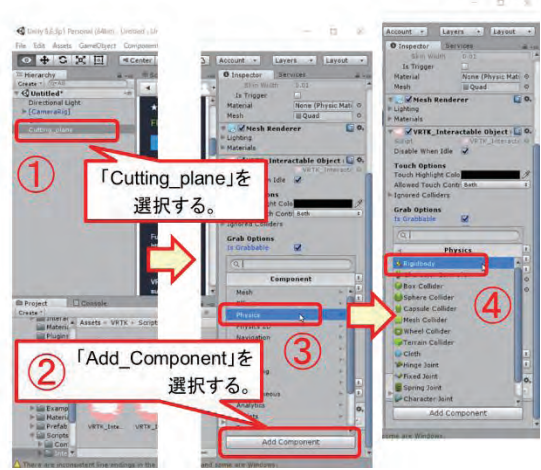


図16 Cutting_planeのRigidbody設定の追加

(3) [Assets]-[VRTK]-[Scripts]-[Interactions]の中にある「VRTK_InteractableObject」を、左側の「Hierarchy」の「Cutting_plane」にドラッグ&ドロップした。右側の「Inspector」で、「VRTK_Interactable Object (Script)」の項目中の「Is Grabbable」のチェックボックスをonにした(図15)。

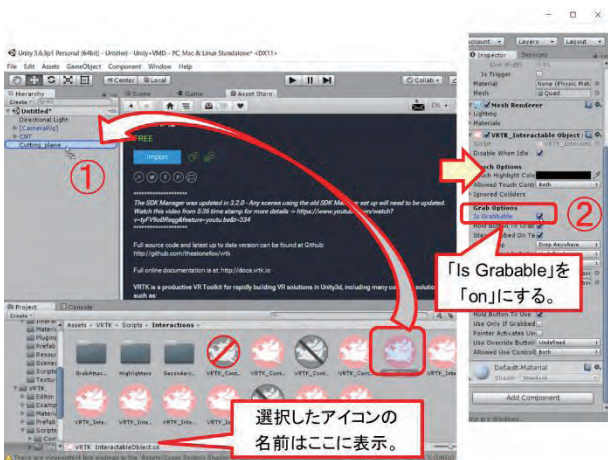


図15 Cutting_planeをGrab可能とする設定

(4) さらに、右側の「Inspector」の「Add Component」で[Physics]-[Rigidbody]を追加した(図16)。新たに追加された「Rigidbody」の項目中の「Is Kinematic」のチェックボックスをonにした。「Use Gravity」をoffにした。[Assets]-[Cross Section Shader]-[Examples]-[Materials]の中の「DoubleFaceTransparent」を、「Cutting_plane」の「Inspector」にドラッグ&ドロップした(図17)。

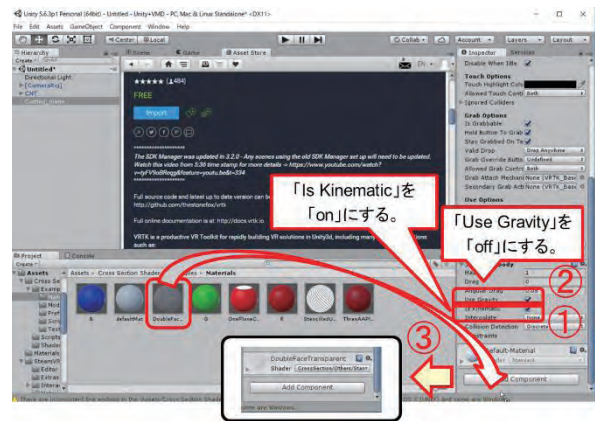


図17 Cutting_planeのRigidbodyの属性設定

(5) Assets/Cross Section Shader/Scriptsの中にあるスクリプト「OnePlaneCuttingController.cs」を、メモ帳で変更した(図18)。

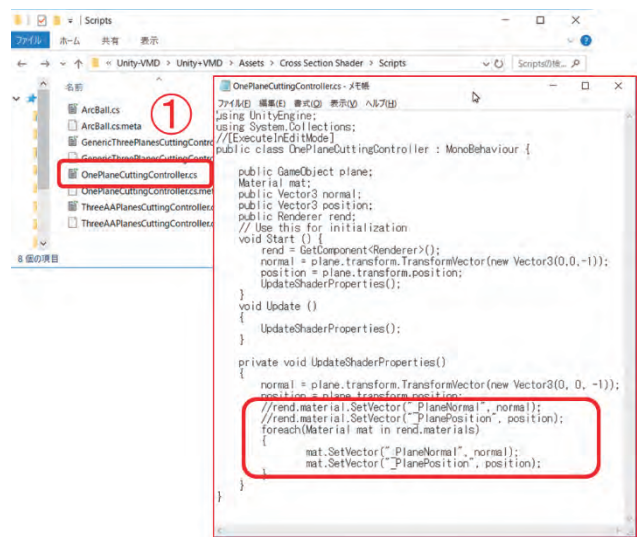


図18 「OnePlaneCuttingController.cs」の変更

(6) 「Assets」中のOBJのアイコンを選択して、右側の「Inspector」にあるImport SettingのMaterialsの中で、Import MaterialsのLocationの項目を、「Use External Materials (Legacy)」を選択し、オブジェクトのShader設定を変更した(図19)。

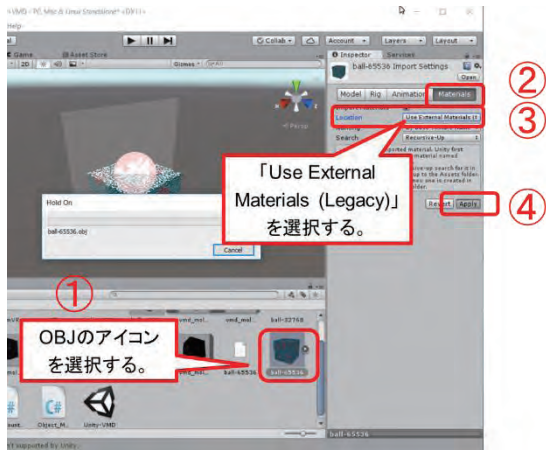


図19 オブジェクトの Shader 設定の変更

(7) 左側の「Hierarchy」中で OBJ データに関連した子オブジェクトのすべてを選択し、[Assets]-[Cross Section Shader]-[Scripts]フォルダの中にあるスクリプト「OnePlaneCuttingController」を右側の「Inspector」にドラッグ&ドロップした。うまくいかない場合は、個別にドラッグ&ドロップした(図20)。

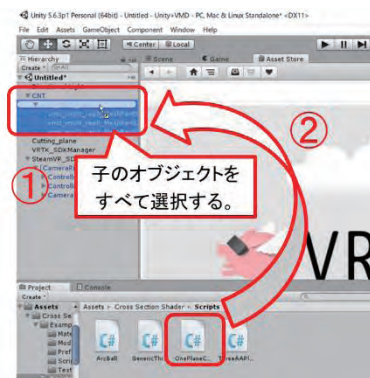


図20 子オブジェクトへの断面スクリプトの設定

(8)子オブジェクトの全てを選択した状態で、左側の「Hierarchy」中の「Cutting_plane」を右側の「Inspector」の項目「One Plane Cutting Controller (Script)」の「Plane」に、ドラッグ&ドロップした(図21)。



図21 子オブジェクトの Cutting_plane の設定

(9) 子オブジェクトのすべてを選択した状態で右側の「Inspector」に表示されるシェーダについて、[CrossSection]-[OnePlaneBSP]を設定した(図22)。

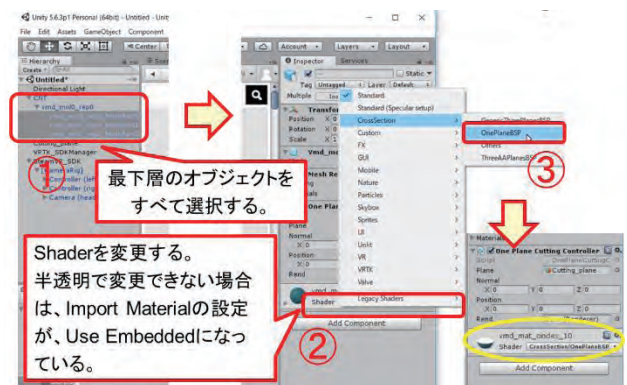


図22 オブジェクト shader への OnePlaneBSP の設定

6.2 VIVE コントローラーのセットアップ

VIVE のハンドデバイスを利用するために、VIVE コントローラーの設定を行った。

(1) 左側の「Hierarchy」で、[GameObject]-[Create Empty]を選択し、2つの GameObject を作成した。名前を、「VRTK_SDKManager」と「SteamVR_SDK」に変更した(図23)。



図23 VRTK_SDK 関連の空のオブジェクトの作成

(2) [Assets]-[VRTK]-[Scripts]-[Utilities]-[SDK]の中
の「VRTK_SDKManager」と「VRTK_SDKSetup」を、
作成した「VRTK_SDKManager」と「SteamVR_SDK」
に各々ドラッグ&ドロップした (図 24)。

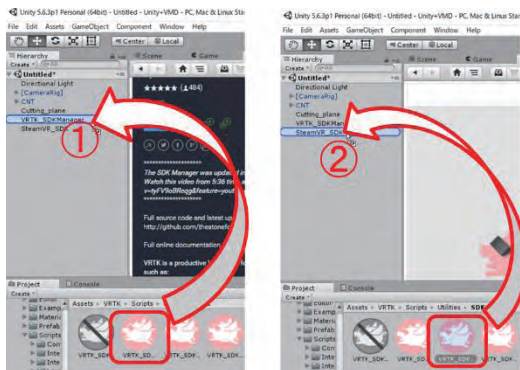


図 24 VRTK_SDK 関連の設定

(3) 左側の「Hierarchy」にある「[CameraRig]」を
「SteamVR_SDK」の下に移動した (図 25)。(もし
くは、いったん、「[CameraRig]」を削除し、
「SteamVR_SDK」の下に追加した。)



図 25 「CaemraRig」の設定 (移動)

(4) 左側の「Hierarchy」で「SteamVR_SDK」を選択
し、右側の「Inspector」で「VRTK_SDK Setup (Script)」
中の「Quick Selection」のプルダウンを「Fallback」
から「SteamVR」に変更した (図 26)。



図 26 VMD での OBJ ファイルのエクスポート

(5) [Assets]-[VRTK]-[Scripts]-[Interactions]の中にある
「VRTK_ControllerEvents」、「VRTK_IntaractGrab」と
「VRTK_InteractTouch」を、「[CameraRig]」の下にあ
る「Controller(left)」と「Controller(right)」にドラッ
グ&ドロップした (図 27)。

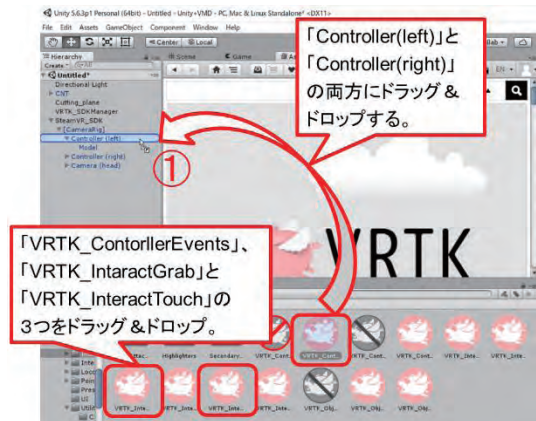


図 27 コントローラーの機能の設定

(6) 「Controller(left)」と「Controller(right)」の
「Inspector」の項目「VRTK_Intaract Grab (Script)」の
中のプルダウン「Grab Button」を、「Grip Press」
から「Trigger Press」に変更した (図 28)。



図 28 コントローラーのトリガーの設定

(7) 左側の「Hierarchy」にある「VRTK_SDKManager」
を選択し、右側の「Inspector」の項目「VRTK_SDK
Manager (Script)」で、「+」のマークを押して、項目
「Setups」を追加した。そのとき、左側の「Hierarchy」
の「SteamVR_SDK」を、右側の「Inspector」の項目
「Setups」の「None (VRTK_SDK Setup)」にドラッグ
&ドロップし「SteamVR_SDK (VRTK_SDKsteup)」
に変わることを確認した (図 28)。

7. おわりに

本稿では、手軽な 3D-VR 入門として、3D プリンタでも用いられる 3D データ (Wavefront OBJ 形式) を VR 空間中に表示する簡単な方法を明らかにした。HTC VIVE のようなゲーム用 VR 装置を、シミュレーションやデータ解析の手軽な結果観察用途に利用し、本格的な結果観察や多人数議論で大阪大学の没入型 3D-VR 可視化装置の活用を期待している。

本稿で紹介した方法で、例えば、図 29 のように、電子顕微鏡 (FIB-SEM) で観察したゴム中に分散したナノ粒子の 3 次元凝集構造を、自由自在な位置から、自由自在な方向の断面を観察することができる。



図 29 電子顕微鏡 (FIB-SEM) で観察してゴム中のナノ粒子の 3 次元構造[14]の断面カット VR 視聴画面の例

今回の検討では、手軽な入門のために、動きのないコンテンツを対象としたが、本来的に Unity はゲーム構築環境であり、動きやゲーム性のあるコンテンツの作成が可能である。今後は、動きのあるコンテンツを扱い、如何に見やすく可視化表現するかの検討も進めていく予定である。

謝辞

本研究は JHPCN 公募課題 (課題番号: 10-MD01, 11-MD02, 12-MD03, jh130028-NA19, jh140026-MD02, 14-NA28, jh150002-NA01, jh160036-NAH) や、HPCI 公募課題 (課題番号: hp130062, hp130122, hp140191) などの実施を通じて得られた知見の一部を活用している。また、一連の VR 可視化技術の検討にあたり、名古屋大学 荻野 正雄准教授、高橋 一郎技官、大阪大学 下條 真司教授、伊達 進准教授、安福 健祐講

師、海洋研究開発機構 川原 慎太郎博士、東京都市大学 宮地 英生教授、サイバネットシステム 黒木 勇博士、日立化成 太田 浩司博士には、有益な議論や助言を得ている。ここに感謝の意を表する。

参考文献

- (1) Stein, J: Why Virtual Reality Is About to Change the World. Time <http://time.com/3987022/> (2015).
- (2) 杉本真樹: VR/AR 医療の衝撃, ボーンデジタル (2017).
- (3) 日本バーチャルリアリティ学会編: バーチャルリアリティ学, (株)工業調査会 (2010).
- (4) Balo, A. R., Wang, M., Ernst, O. P: Accessible virtual reality of biomolecular structural models using the Autodesk Molecule Viewer. Nature Methods, Vol.14 (2017) pp.1122–1123.
- (5) Norrby, M., Grebner, C., Eriksson, J., Boström, J.: Molecular Rift: Virtual Reality for Drug Designers. J. Chem. Inf. Model, Vol.55 (2015) pp.2475–2484.
- (6) García-Hernández, R. J., Kranzlmüller, D.: Virtual Reality toolset for Material Science: NOMAD VR tools. in Lecture Notes on Computer Science Vol.10324 (2017) pp.309-319.
- (7) Hagita, K., Matsumoto, S., Otha, K.: A study of commodity 3D-VR for computational material sciences. 投稿準備中.
- (8) 萩田克美、松本茂紀、高橋一郎、荻野正雄: Unity を利用したシミュレーション結果の VR 表示における可視化処理性能の簡易定量評価法の検討, 投稿準備中.
- (9) <https://unity3d.com/>
- (10) <https://www.unrealengine.com/>
- (11) <https://www.vive.com/>.
- (12) <http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp/>.
- (13) Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K.: VMD - Visual Molecular Dynamics. J. Molec. Graphics, Vol. 14 (1996), pp. 33-38.
- (14) Hagita, K., Higuchi, T., Jinnai, H.: Super-resolution for asymmetric resolution of FIB-SEM 3D imaging using AI with deep learning. Sci.Rep. 8 (2018) 5877.

- 日本の全世帯の位置情報付き仮想個票データの統計データからの生成 67
原田 拓弥、杉浦 翔 関西大学 大学院 総合情報学研究科
村田 忠彦 関西大学 総合情報学部
- ゴム材料中のナノ粒子構造に対するディープラーニング画像認識モデルの
分散学習による高速最適化技術手法の検討 71
萩田 克美 防衛大学校 応用物理学科

高強度レーザーによる高密度プラズマの加熱シミュレーション

千徳 靖彦

大阪大学 レーザー科学研究所

1. はじめに

レーザー工学の発展によりレーザー強度は相対論的強度($>10^{18}$ W/cm²)に達し、高強度レーザーによる固体の直接加熱が可能となってきた。発生するプラズマはフェムト秒からピコ秒といった極めて短い時間で形成され、高密度で熱的非平衡状態にある。レーザーにより加速された高速電子が、プラズマ生成・加熱に強く関与する。また高温プラズマから発生するX線やガンマ線を観測することでプラズマ内部の温度・密度あるいは高速電子分布の測定が行われている。加熱された物質のエネルギー密度は 10^{11} J/m³ (1Mbar)を超え、太陽内部と同様な高エネルギー密度と呼ばれる極限状態になる (図1参照)。

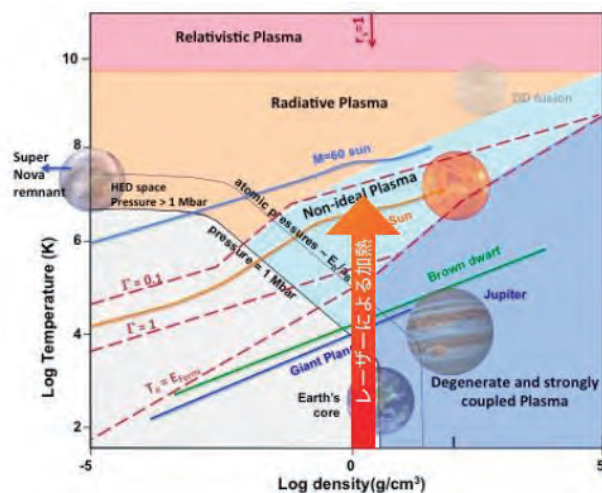


図1 密度と温度のマップ。固体(~ 1 g/cm³)を高強度レーザーで1000万度以上に瞬間的に加熱する。生成されたプラズマのエネルギー密度は太陽の内部状態と同じである。

そのようなプラズマは慣性核融合や、恒星や巨大惑星の内部の物理の観点からも興味深い研究対象である。また、高速電子輸送は数十キロテスラに達する磁場の発生を伴うので、強磁場下におけるプラズマ物性研究としても、近年注目されているとともに、軟X線からガンマ線まで幅広い高輝度X線源としても期待されている。国内では大阪大学レーザー科

学研究所や量子科学技術研究開発機構他で相対論的強度のレーザーを用いた実験が行われており、レーザー核融合[1,2]、高密度プラズマ物性、テラヘルツ波・高調波発生、粒子加速などの研究が展開されている。

高強度レーザーと物質の相互作用は、レーザーのパルス幅がフェムト秒からピコ秒で、スポット径がミクロンスケールであるため、極めて短時間に極小の空間で起こる。そのため現象の観測が難しく、計測されるデータのみでは物理現象の詳細を把握することができない。そこで数値シミュレーションによる実験解析が行われる。高強度レーザー生成高密度プラズマは、熱的に非平衡であるため流体近似が使えないため、プラズマを粒子群とする運動論的なシミュレーションが必要であり、Particle-in-Cell (PIC) と呼ばれるプラズマ電磁粒子コード(以下 PIC コード)が広く使われている。

著者らのグループは多次元 PIC コード(PICLS)を開発し[1]、大規模並列計算機を活用して高強度レーザーの吸収、電子加速、イオン加速および高速電子輸送などの研究を行ってきた。また、相対論クーロン衝突モデルおよびイオン化モデルを開発し、原子過程を含めることで、高エネルギー密度状態のプラズマ生成過程をPICで解明している。

2. 支援枠を活用したシミュレーション

2.1 コードの改善について

今回、「大規模計算機システム公募型利用者制度」の支援を受け、2次元PICLSコードを用いて、高強度レーザーによる高密度プラズマの加熱に関するシミュレーションを行った。シミュレーションの結果を紹介する前に、大規模PICLSシミュレーションの出力部を、対面相談によるアドバイスにより改善することができたので報告する。

高密度プラズマのシミュレーションは、大量のプラズマ粒子の軌道を計算するため、必要なランタイムメモリーがテラバイト級の大規模並列計算が必要である。並列数が高くなるに連れ、CPU 毎に分散している結果を出力すると、ファイル数が膨大になりシステム運用上問題がある。そのため通信してファイルを一箇所に集め合成し出力していたが、大きな配列を割り当てる必要があり、それが大規模計算のネックになっていた。対面相談でのアドバイスにより、並列計算の分散データを通信することなしに、一つのバイナリデータとして書き出す方法 (`mpi_file_set_view`, `mpi_file_write` 等を使用) をアドバイスいただき、コードに反映し、出力ファイル数及びランタイムメモリーの大幅な削減ができた。これにより PICLS コードを利用する他の共同研究者の HPCI 利用の利便性を大幅に向上できたので、ここで CMC での対面相談アドバイスに感謝を表したい。

2.2 爆縮プラズマの加熱のシミュレーション

今回実施したシミュレーションは、レーザー研で行われた高速点火核融合実験の解析を目的とする。実験では図 2 に示すような金コーンに取り付けられた球状ターゲットを、6 ビームのレーザーで爆縮し、最大密度に圧縮されたタイミングで、コーンの側から高強度レーザー[4]を照射して、圧縮したターゲットを加熱し 1000 万度以上の温度を目指している。最大圧縮時のプラズマ密度を初期条件とし (図 3 参照)、加熱の検証を PICSL コードで行った。実験ではドーブした銅の発光から爆縮したプラズマ密度を同定している。データから最大圧縮密度は 10g/cc、つまり密度は初期密度から 10 倍以上に圧縮されている。加熱レーザーを照射する前のプラズマ温度は数万度程度である。

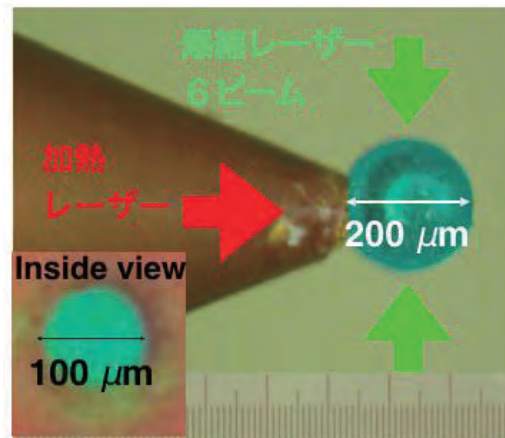


図 2 金コーンに取り付けられた球ターゲット。この球ターゲットを激縮レーザー6ビームで爆縮する。その後、コーン内側から加熱ビームを照射し加熱する。

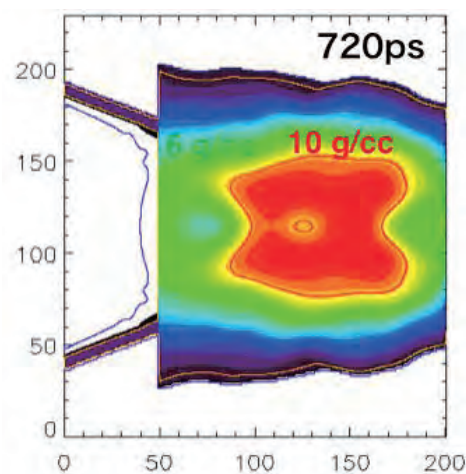


図 3 シミュレーション初期プラズマ密度。実験の最大圧縮時 (爆縮レーザー照射後 720ps) の密度から設定。中心はおよそ固体の 10 倍に圧縮されている。

2.3 シミュレーション条件

シミュレーション空間は $200\mu\text{m} \times 240\mu\text{m}$ (7000 x 8000 グリッド使用)、各グリッドに 25 程度の粒子を配置し、使用したトータル粒子数は 14 億個、必要メモリーは約 300GB、200-400 コアで MPI 並列計算を行った。計算時間は 4 ピコ秒、およそ 5 万ステップである。左側境界から、ピーク強度 $1.6 \times 10^{19}\text{W}/\text{cm}^2$ の加熱レーザーを 1.5 ピコ秒照射した。レーザーのスポットサイズは $50\mu\text{m}$ で、プラズマは実験と同様に数密度 1% で銅イオンを含んでいる。シミュレーションでは、電磁波 (レーザー) の伝播、イオン化、衝突による熱伝播と言った物理過程を自己無撞着に計算する。

実験では銅イオン (完全電離で 29+) が 27 価と 28 価まで加熱でイオン化されている兆候が得られてい

る。銅を 27 価までイオン化するためには背景プラズマの温度が keV 以上に加熱されていることが予測されている。そのため、シミュレーションにおいても、背景プラズマの温度とともに、ドーピングしている銅イオンが 27 価以上にイオン化している領域がどこにあるのかを追跡している。

2.4 シミュレーション結果

図 4 は加熱レーザー照射後 3 ピコ秒程度後のプラズマの温度分布（上パネル）とドーピングした銅イオンが 27+価以上にイオン化している領域（下パネル）を示している。加熱レーザーは左側境界から照射され、プラズマ表面（ $X=50$ ミクロン）で吸収され、プラズマにエネルギーを変換している。表面近傍は 1 億度（10keV）程度に達し、数十ミクロンの領域が 1 千万度（keV）以上に達していることがわかる。また、プラズマの温度上昇に伴い、ドーピングしている銅イオンのイオン化が進み、27+以上の領域が右側に ~ 10 ミクロン/ps 程度のスピードで伝播していくことが明らかになった。実験では $\text{Cu}28+$ からの $\text{He } \alpha$ (8.4keV)や $\text{Cu}27+$ からの Li-like(8.35keV)の X 線スペクトルが観測されているが、これら硬 X 線は、加熱レーザーで加熱された領域から発していることが明らかになった。

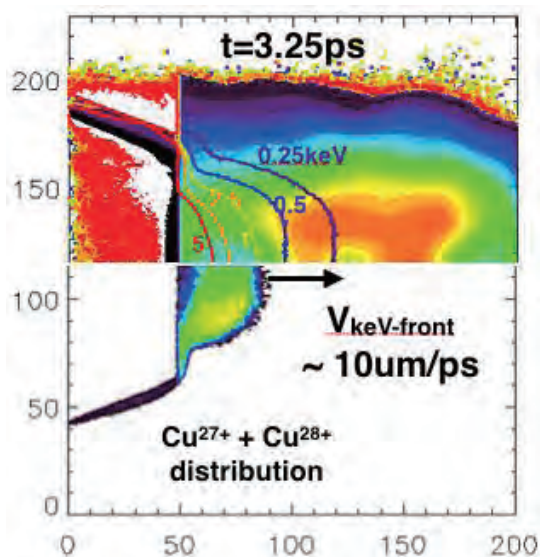


図 4 2次元PICLSによるシミュレーション結果。(上)加熱レーザー照射後 3.25 ピコ秒時のプラズマの温度の等高線図。(下) 27+以上の銅イオンの分布。加熱レーザーは左側から照射されている。レーザー加熱により熱波が伝播し、それに伴いドーピングした銅イオンが高次にイオン化していく様子が見れる。

3. おわりに

レーザー核融合を実現するためには 100 倍に圧縮したプラズマを 5 千万度まで加熱する必要がある。現在はまだ 10 倍の圧縮に止まっているが、加熱レーザーで数千万度まで加熱されることを数値シミュレーションで実証したことに本研究の意義がある。計算結果は実験で得られたデータを説明することができ、加熱理論と実験データの検証を行うことができた。

一般的に高密度プラズマの粒子シミュレーションは、計算すべき粒子数が膨大であり容易ではない。しかし最新のスーパーコンピュータを駆使することで、これまで明らかになっていなかったプラズマの加熱機構が徐々に明らかになりつつある。今後は、3次元シミュレーションを含め、さらに大きなシミュレーションに取り組む必要がある。

Acknowledgement

この研究は平成 29 年度「大規模計算機システム公募型利用者制度」の支援を受け行った。また、科研費 JP15K21767 の支援を受けている。

参考文献

- (1) M. Tabak et al., Phys. Plasmas **1**, 1626 (1994).
- (2) R. Kodama et al., Nature **412**, 798 (2001).
- (3) Y. Sentoku and A. J. Kemp, J. Comput. Phys. **227**, 6846 (2008); R. Mishra, P. Leblanc, Y. Sentoku et al., Phys. Plasmas **20**, 072704 (2013).
- (4) N. Miyanaga et al., J. Phys. IV Fr. **133**, 81 (2006).

水素・重水素・トリチウム分子凝縮系の未知物性の解明 —量子分子動力学法によるアプローチ—

金 賢得

京都大学 大学院理学研究科 化学専攻

1. はじめに

水素は全宇宙で最も豊富に存在する元素であり、総数比は全原子の90%以上を占めるとされる。水素に関する研究は、最も“シンプル”な分子性気体・液体・固体を形成することへの興味から、非常に長い歴史を持つ。最近では、次世代クリーンエネルギー源としても注目されている。

水素は、最小の原子半径を持ち、かつ最軽量の核を持つという特異性によって、プロトン単体はもちろん、エネルギー散逸のある凝縮系に至るまで、様々な局面で強い核量子性を示す。例えば、バクテリオロドプシンなど生体内の水分子配位におけるプロトン移動時のエネルギーバリアの激減[1]は、水素の持つ核量子性が生体の機能そのものに決定的影響を及ぼすことを示唆する。最も“シンプル”な分子性液体・固体であるはずの液体・固体水素も、水素核を古典的に取り扱った場合、液体水素の動径分布関数の第一ピークが劇的に増大してしまうこと[2]、液体水素の拡散係数のシステムサイズ依存性が真逆になってしまうこと[3]が知られている。高圧固体水素においては、結晶構造や分子配向までが劇的に変化することが示唆された。[4,5] これらの差異は、水素核のゼロ点エネルギーによるかさ上げ効果や、核の非局在化による実効体積及び分子内・分子間相互作用の変化に起因する。

2. 従来の手法—経路積分による核量子性の導入

その物理的興味と重要性から、水素の核量子性を記述しようという試みは、これまで膨大な論文を生み出してきた。核量子性を導入する上で最も一般的な手法である Centroid Molecular Dynamics(以後、CMD)法[6]や Ring Polymer Molecular Dynamics(以後、RPMD)法[7]では、平衡状態の量子分配関数の虚数時

間経路積分表示に基づき、「1つの水素分子」を「調和振動子バネでつないだ N 個の古典ビーズ群」として表現する。CMD 法/RPMD 法はこれまで、液体水素における非自明な動径分布関数や拡散係数をはじめとする輸送係数の多くを再現することに成功することで、その確固たる地位を築いてきた。[2,3] しかし、 N 個の古典ビーズ群の平衡分配関数による集団的な特徴づけが必要であるため、平衡の統計量のみが物理的意味を持つ。よって、熱平衡状態における(サンプル数や初期時刻に寄らない)統計量を計算することが標準的で、非平衡系を直接記述することや、実時間における個々の分子や核のダイナミクスを追うことは確立できていない。

これまで最も広く受け入れられている水素凝縮系のモデルポテンシャルは、Silvera-Goldman(以後、SG)ポテンシャルである。[2,3,6,7] SGポテンシャルは、水素分子 H_2 を1粒子とみなし、粒子間距離 r のみの関数として、球対称な分子間相互作用ポテンシャルを与える。この与えられた SG モデルポテンシャル上に、CMD 法/RPMD 法によって上述のように水素核の量子性を取り入れる試みが長く続けられてきた。しかし球対称な SG ポテンシャルは、分子内自由度や分子配向に関する情報が無く、適用される熱力学状態に応じて多数の経験的パラメータの再構成が必要になる。本来ならば各凝縮状態に応じて、分子内結合強度や分子構造が、最も安定な状態に自然に調整されなければいけないところを表現できていないためである。

もうひとつの代表的アプローチは、密度汎関数法(Density Functional Theory、以後 DFT)に基づく第一原理分子動力学法によって逐次的に水素分子や水分子凝縮系の電子ポテンシャル面を計算し、そのポテンシャル面上に CMD 法/RPMD 法によって水素核

の量子性を取り入れる手法である。[1,4,5] 原子描写に基づく DFT は、上述の SG モデルの欠点を克服できるが、標準的な DFT が長距離分散力を表現できないことから、適用は比較的短い分子間距離を持つ超高压固体水素に限定され、飽和蒸気圧下のノーマルな液体や固体には適用されない。[4,5] また、DFT に基づく第一原理分子動力学法は、適用できる分子数やシミュレーション時間に大きな制約があり、特に今の場合には CMD 法/RPMD 法によって核量子性を取り入れるため、計算負荷はさらに増大する。

3. 量子分子動力学法の開発

著者らは最近、核と電子を同時にガウス波束化した波動関数を導入し、時間依存変分原理を課すことで、孤立分子から固体まで、広範な水素分子凝縮系に適用可能な、量子分子動力学法と呼べる新手法 (Nuclear and Electron Wave Packet Molecular Dynamics 法、以後 NEWPMD 法) を開発した。[8,9] NEWPMD 法では、フェルミオンとして陽に電子波束を扱うことでパウリの排他律を取り入れており、モデルポテンシャルや経験的パラメータの導入が一切不要となっている。実際、導出された分子間相互作用ポテンシャルは、Lennard-Jones ポテンシャルに特徴的な長距離分散力を表現できており、これにより、幅広い水素分子凝縮系への適用が可能となった。これ以外にも NEWPMD 法には、①統計平均だけではない水素核の微視的ダイナミクスが実時間で追える、②様々な凝縮状態で分子配向/libration/H-H 振動といった微視的分子内自由度を記述できる、③水素核の時間発展方程式がシンプルな運動方程式の形で書かれているため計算コストが格段に抑えられる、④多彩な非平衡系に適用できる、といった特徴がある。これらは、経路積分に基づく従来の手法には無い、NEWPMD 法独自の優位性である。

実際の水素分子凝縮系のシミュレーションとしては、初期構造として六方最密格子に水素分子をランダム配向させ、目的のモル体積に合わせて、周期境界条件下でシミュレーションボックスサイズと総分子数を設定している。系の平衡化中は、熱浴は波

束の中心速度のみに接触させた。波束幅の自由度を含む他の自由度へは時間依存変分原理によって導出された運動方程式に基づき、エネルギー分配が行われ、最終的に平衡化される。以下で示す結果は全て、長時間平衡化後のマイクロカノニカルシミュレーションから得たものである。

計算コストとしては、並列化しない単一 CPU での計算で、576 個の水素分子 (1152 個の水素核波束と電子波束) 凝縮系の 1 ps のシミュレーションが約 18 分で完了していた。これ自体、経験的パラメータを必要としない第一原理的シミュレーションとしては劇的に速い計算速度である。しかし今回、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公募型利用制度に採択され、直接面談支援を通して、NEWPMD 法プログラムの並列化に成功した。並列化の結果、1200 個の水素分子 (2400 個の水素核波束と電子波束) 凝縮系の 1 ps のシミュレーションが約 9 分で完了するようになり、5 倍以上の高速化を実現した。

4. これまでの主要な結果

実際に NEWPMD 法を用いて、液体水素の動径分布関数や輸送係数を、その異常な温度依存性・システムサイズ依存性まで含めて再現することに成功している。[10] さらに、分子配向/libration/H-H 振動/溶媒和構造といった分子内・分子間自由度の動的挙動を議論することで、液体水素の新たな分子ダイナミクス描写を提起してきた。一方で、安定な六方最密構造を持つ固体水素も実現し、液体とは異なるジグザグ型の近接構造や、実験値に近い安定的な低周波数 (40 cm^{-1}) フォノンモード、そして液体から固体への相転移による libration 振動数の数百 cm^{-1} オーダーや H-H 振動数の数 cm^{-1} オーダーの不連続飛びまでを記述することに成功している。[11] また、実験では未だに達成されていない未知の量子凝縮相である過冷却水素を計算によって初めて実現し、①拡散メカニズムが cage breakout からメゾスケールクラスタ変形へと定性的に変化し温度依存性も変化する、②温度上昇と共に red shift して消えていくボゾ

ンピークが出現する、③10 K 以下の過冷却水素では超流動の前兆現象と思われる水素核の異常な量子性が顕在化することを予言した。[12] 最近では、水素分子系で初めて非平衡（熱伝導）状態を実現し、拡散運動の低下など分子間ダイナミクスの抑制と、H-H 振動スペクトル強度の増幅など分子内ダイナミクスの活性化が、熱流のみによって引き起こされる「動的秩序化」と呼べる新現象が発現することを報告している。[13]

5. 最新の結果—同位体効果—

5.1 系の設定

本研究では、様々な熱力学状態において、水素・重水素・トリチウムの分子間・分子内の構造やダイナミクスに出現する静的・動的な同位体効果を初めて定量的に明らかにする。[14] そのため、3次元の周期的なシミュレーションボックスに 640 分子からなる水素・重水素・トリチウムの分子凝縮系をそれぞれ用意し、① ノーマル液体 (25 K)、② 重水素の凝固点 (18.7 K) よりやや低い弱冷却液体 (18 K)、③ 強冷却液体 (5 K) の特徴的な3つの熱力学状態を作り出した。密度は、重水素の液体の飽和蒸気圧曲線か、それを極低温まで自然延長した各温度での密度で設定し、水素・重水素・トリチウムの全てで同一の温度・密度で比較することで、純粋な同位体効果だけを見極めていく。

5.2 主な結果

まずはテスト計算として、すでに実験結果が存在するノーマル液体における H-H、D-D、T-T の結合長や分子内振動数の同位体依存性が再現できることを確認した。これにより、一切の経験的パラメータなく、分子凝縮系における微視的な結合長や分子内振動数を様々な同位体で再現できることを示した。

その上で、水素・重水素・トリチウムの分子凝縮系に下記の明確な同位体効果が広範な熱力学状態において生じることを見だした。以下、全ての効果は、水素>重水素>トリチウムの順で出現する同位体効果である。

- ① 構造がより液化している。(図 1)
- ② 分子の mobility が高い。
- ③ libration 周波数が高くなる。
- ④ 低エネルギーの集団的運動の振動数(強冷却液体ではボソンピークに相当)が高くなる。
- ⑤ 平均ボンド長がより伸びる一方で、その分布幅は狭くなる。
- ⑥ 分子内振動数と平均ボンド長の温度による変化がより敏感になる。
- ⑦ 平均核波束幅はより広がるが、その分布幅は狭くなる。(図 2)

水素・重水素・トリチウムの分子内・分子間の電子ポテンシャルは全て同一であり、温度と密度も全く同一の条件下で比較しているため、上記の同位体効果は、純粋に核由来の同位体効果から発生したものである。なお本稿では割愛するが、本研究では、上記①~⑦の同位体効果の物理的起源もすべて明らかにしている。[14]

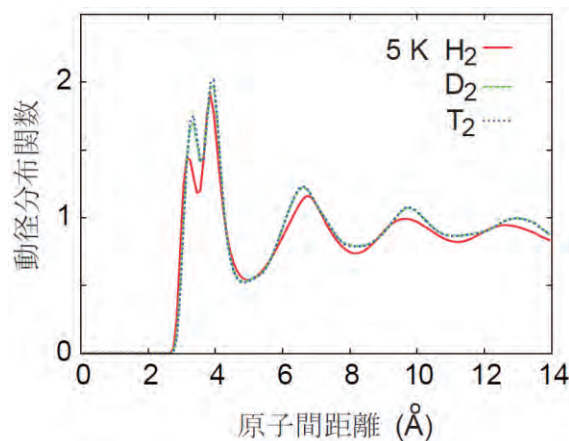


図 1 強冷却液体における動径分布関数。すべての同位体において、動径分布関数の第一ピーク積分でスケールをしている。ノーマル液体や弱冷却液体では動径分布関数に差は出なかったものの、強冷却液体では、水素>重水素>トリチウムの順に液化している様子が見てとれる。

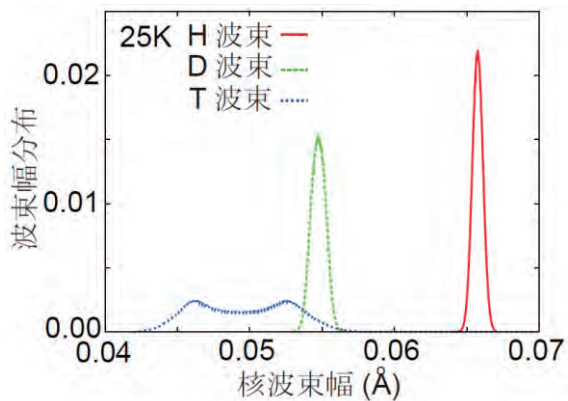


図2 ノーマル液体における核波束幅の分布。平均波束幅は、水素>重水素>トリチウムの順に広がっている。しかし分布幅は、水素>重水素>トリチウムの順に狭まっている。高温のノーマル液体においても、トリチウムでは2ピークの異常に広い核波束幅分布を示す。

6. おわりに

本研究は、水素・重水素・トリチウム同位体分子凝縮系における、同位体に依存した分子内・分子間ダイナミクスを定量的に記述した初めての報告である。今後は、並列化に成功し高速化したプログラムを駆使して、さらに広範な系や熱力学状態に挑戦していく。

参考文献

- (1) M. E. Tuckerman, et al.: Nature **417** (2002) 925.
- (2) Y. Yonetani and K. Kinugawa: J. Chem. Phys. **120** (2004) 10624.
- (3) T. F. Miller III and D. E. Manolopoulos: J. Chem. Phys. **122** (2005) 184503.
- (4) G. Geneste, et al.: Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 155303.
- (5) H. Kitamura, et al.: Nature **404** (2000) 259.
- (6) J. Cao and G. A. Voth: J. Chem. Phys. **100** (1994) 5106.
- (7) I. R. Craig and D. E. Manolopoulos: J. Chem. Phys. **121** (2004) 3368.
- (8) K. Hyeon-Deuk and K. Ando: Chem. Phys. Lett. **532** (2012) 124.
- (9) K. Hyeon-Deuk and K. Ando: J. Chem. Phys. (Communication) **140** (2014) 171101.

- (10) K. Hyeon-Deuk and K. Ando. Phys. Rev. B **90** (2014) 165132.
- (11) K. Hyeon-Deuk and K. Ando: J. Chem. Phys. (Communication) **143** (2015) 171102.
- (12) K. Hyeon-Deuk and K. Ando: Phys. Chem. Chem. Phys. (Communication) **18** (2016) 2314.
- (13) K. Abe and K. Hyeon-Deuk: J. Phys. Chem. Lett. **8** (2017) 3595.
- (14) K. Abe, S. Yamaoka and K. Hyeon-Deuk: J. Phys. Chem. B, in press (2018).

厳密な Z_3 対称性を持つ量子色力学による格子計算

開田 丈寛

九州大学 大学院理学府 物理学専攻

1. はじめに

身の回りの物質は原子で構成され、これはさらにクォークとグルーオンから成る。これらに働く相互作用は「強い力」と呼ばれ、「量子色力学 (QCD)」で記述される。クォーク・グルーオンの系は、温度 (T) やクォーク化学ポテンシャル (μ) を変化させることで様々な状態へと変化し、その様相は QCD 相図で描かれる。低温低密度ではクォークはハドロンに閉じ込められ、高温状態や高密度状態になると、クォークは閉じ込めから解放され、自由粒子として振る舞えるようになる。しかし、QCD 相図において特に高密度領域は未確定であり、様々な手法で研究されている。

QCD 相図を解明する一つの手段として、「格子 QCD 計算」がある。これは QCD の第一原理計算であり、QCD 相図を研究するための強力な手法である。しかし、特に高密度領域 ($\mu/T > 1$) では「符号問題」という数値計算上の問題が生じてしまう。この問題に対して様々な対処法が提案・検証されてきたが、未だ完全な解決には至っていない。

我々は、QCD の Z_3 対称性 (ゲージ変換の中心対称性) を厳密に取り込んだ「 Z_3 -QCD」[1]に注目した。これはゼロ温度において元の QCD と一致することが知られており、また符号問題が弱まると予想されている。この予想については、格子 QCD の有効模型として 3 状態 Potts 模型[2]や effective Polyakov-line 模型[3]を用いて数値計算が行われ、厳密な Z_3 対称性を模型に取り入れることで符号問題が生じる領域が狭まることがわかった。しかし、符号問題が一番深刻な領域を比較すると、問題の深刻度合いは改善されていなかった。そこで、符号問題の対処法の 1 つである「再重み法」の改良を行い、その結果符号問題の深刻さを劇的に改善することに成功した。

そこで本研究では、改良された再重み法に関する再検証を行った。また、有限クォーク化学ポテンシャル領域における Z_3 -QCD の格子計算の準備として、クォーク化学ポテンシャルがゼロでの Z_3 -QCD の格子計算プログラムを構築し、これの計算チェックも行った。

2. 格子 QCD と符号問題

格子 QCD による数値計算では、以下の大分配関数を用いた統計計算が行われる。

$$Z_{QCD} = \int DU \det[M(\mu)] \exp[-S_G]$$

ここで、 U はグルーオン場、 S_G はグルーオンの作用、 $\det[M(\mu)]$ はクォークの作用、 μ はクォーク化学ポテンシャルをそれぞれ表している。グルーオン場 U は格子 QCD では格子点の間で定義されており、格子点の数 \times 方向 (x, y, z, t 方向) の数だけの積分をすることで分配関数 Z_{QCD} を評価することができる。しかし、積分する変数が多すぎるためこれは現実的に不可能である。そこで、被積分関数

$$F = \det[M(\mu)] \cdot \exp[-S_G]$$

を確率分布関数とみなし、その確率に従ってグルーオン場の配位を生成する「重点サンプリング法」が用いられるようになった。この手法により、精度の高い格子 QCD 計算結果を得ることができると。

重点サンプリング法を用いた格子 QCD 計算は、主に零クォーク化学ポテンシャル領域で数々の成功を収めている。しかし、有限クォーク化学ポテンシャル領域ではクォークの作用 $\det[M(\mu)]$ が

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

の関係を満たすため、特に実数クォーク化学ポテンシャル領域では大分配関数の被積分関数が複素数となってしまう、確率分布関数としてみなす

ことができなくなってしまう。これにより、実数クォーク化学ポテンシャル領域では重点サンプリング法を用いた格子 QCD 計算が行えなくなってしまう。これが「符号問題」である。この問題に対して、様々な対処法が考案されてきたが、未だ完全な解決には至っていない。

3. Z₃-QCD、再重み法

3.1 Z₃-QCD

QCD は SU(3) の非可換ゲージ理論であり、Z₃ 群は SU(3) の部分群である。QCD では、Z₃ 対称性はゲージ変換 V に以下の境界条件

$$\begin{aligned} V(x_1, x_2, x_3, x_4 = \beta) \\ = \exp[i(2\pi/3)] V(x_1, x_2, x_3, x_4 = 0) \end{aligned}$$

を課すことで、クォークの境界条件が $\exp[i(2\pi/3)]$ だけ変更してしまうことで破れてしまう。この問題に対し、クォークの境界条件を

$$\begin{aligned} q(x_1, x_2, x_3, x_4 = \beta) \\ = -\exp[i\theta_f] q(x_1, x_2, x_3, x_4 = 0) \\ \theta_f = (2\pi/3)f, f = 0, 1, 2 \end{aligned}$$

とすることで Z₃ 変換に対して不変にすることができる。ここで、添字 f はクォークの種類に対応させ、クォークの質量は全て等しいとする。この境界条件は、上記の Z₃ 変換により元の場合と同様の変更を受けるが、添字 f を改めてクォークの種類に対応するように書き直すことで、変換に対して不変になるようにする。クォーク場にこの境界条件を課したものを「Z₃-QCD」[1]と呼ぶ。これは零温度で元の QCD と一致することが知られており、また符号問題が緩和されると予想されている。

Z₃-QCD は先に有効モデルで研究され、また零クォーク化学ポテンシャル領域での格子計算[4]も実行されている。本研究では、実数クォーク化学ポテンシャル領域での Z₃-QCD による格子計算の準備として、中村氏のグループが開発したプログラム[5]を独自に改良し、これの計算チェックを行った。

3.2 再重み法

符号問題の対処法の1つとして、再重み法が挙げられる。これは確率分布関数が複素数となる系に対して、確率分布関数を $|F|$ としてゲージ場の配位を生成し、

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \langle O \exp[i\theta] \rangle_1 / \langle \exp[i\theta] \rangle_1 \\ \langle O \rangle_1 &= \frac{1}{Z_1} \int DU O |F| \\ Z_1 &= \int DU |F|, \quad F = |F| \exp[i\theta] \end{aligned}$$

として、物理量の期待値を計算する手法である。これは数学的には厳密な書き換えではあるが、再重み因子 $\langle \exp[i\theta] \rangle$ が 0 に近い値を取る時、期待値の誤差が肥大化してしまい、信頼できる結果が得られない。よって、再重み因子は再重み法における符号問題の深刻さの指標として適している。

本研究では、この手法を以下の式に従って改良を行った。

$$\begin{aligned} \langle O \rangle \\ = \langle O \exp[i\theta + \alpha\theta^2] \rangle_2 / \langle \exp[i\theta + \alpha\theta^2] \rangle_2 \\ \langle O \rangle_2 = \frac{1}{Z_2} \int DU O |F| \\ Z_2 = \int DU |F| \exp[-\alpha\theta^2] \end{aligned}$$

ここでは、系の作用の虚部 θ の寄与 $\exp[-\alpha\theta^2]$ を取り入れた。この寄与は、作用の虚部をなるべく小さく抑えるために導入した。本研究では、この改良された再重み法を、格子 QCD の有効モデルとして挙げられる effective Polyakov-line (EPL) 模型[6]を用いて、主に再重み因子のパラメータ α 依存性と体積依存性について調べた。また、Z₃-QCD の考えをもとに EPL 模型を Z₃ 対称化して同様の検証を行った。

4. 数値計算結果

4.1 Z₃-QCD の格子計算

今回の格子計算では、グルーオン作用として Clover gauge action を用い、クォーク作用として Wilson fermion action を用いた。また、格子の大きさは、空間方向を 8、時間方向を 4 とした。Wilson fermion では偶数種類のクォークしか扱えないため、今回は Z₃ 対称性を取り入れるにあたり、クォ

ークの種類を6個とした。グルーオン作用のパラメータとクォーク作用のパラメータの関係については、文献[7]のものを採用した。ここでは、計算する量として QCD の閉じ込め相転移の秩序変数として用いられる Polyakov loop を計算した。

図1と2は、それぞれ低温領域と高温領域における Polyakov loop の複素平面上での分布である。低温領域(図1)では、Polyakov loop は複素平面の原点に集中し、高温領域(図2)では、Polyakov loop の絶対値が有限かつ位相が $0, 2\pi/3, 4\pi/3$ 付近に分布していることがわかる。これは我々が期待した振る舞いであり、今回独自改良した数値計算プログラムは正常に動作していることが確かめられた。

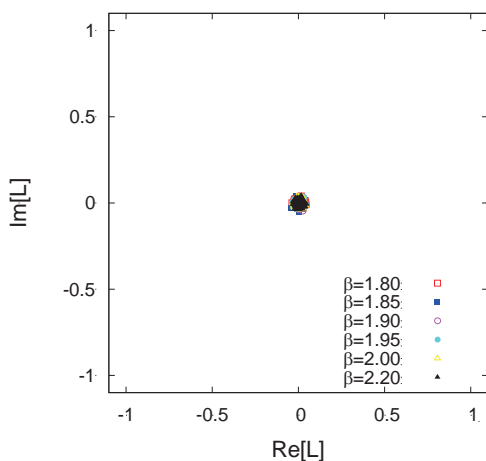


図1 低温領域における Polyakov loop の分布図

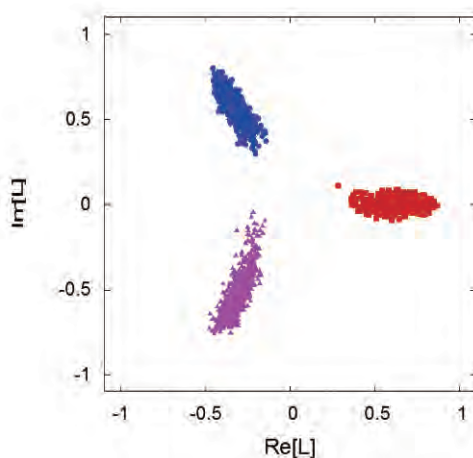


図2 高温領域における Polyakov loop の分布図

4.2 改良再重み法の検証

次に、EPL 模型を用いて、独自に改良した再重み法を用いた数値計算を行い、符号問題の深刻さについての検証を行った。

今回の数値計算では、 α 依存性の検証では空間方向の大きさを8とし、 α を1.0から3.5の範囲で変化させた。また、体積依存性の検証では空間方向の大きさを6、8、12、16とし、パラメータを $\alpha = 3.0$ で固定した。系のパラメータとしては、クォークの質量で規格化した化学ポテンシャル μ/M を0.0から2.0まで変化させた。この計算では、確率分布関数 F_2 を計算する際に一度空間全体での作用を計算する必要がある。そこで、SX-ACE 上では MPI の機能を用いてパラメータ μ/M をスレッド毎に分配して計算を行った。

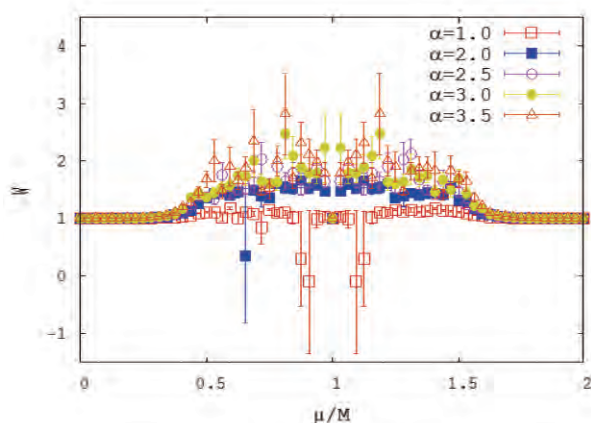


図3 EPL 模型における改良再重み法のパラメータ依存性。ここで空間方向の大きさは8で固定した。

図3は、再重み因子 W の α 依存性を表したものである。改良前の再重み法では、EPL 模型での再重み因子は $0.5 < \mu/M < 1.5$ で0に近い値を取り、符号問題が深刻化していた[3]。しかし、図3からわかるように、改良再重み法では再重み因子が1ないしはそれ以上の値を取るようになった。

$\alpha = 1.0$ では、今回考慮した領域で再重み因子が1に近い値を取るが、 $\mu/M=0.9, 1.1$ 付近では0に近い値を取っており、符号問題が完全に解消されたとはいえない。しかし、次第に α の値を大きくすることで、再重み因子は符号問題が深刻化する領域で1より大きな値を取るようになり、今回用い

た EPL 模型では α を 2.5 以上で設定すると因子が 0 に近い値を取らなくなった。以上のことから、適切なパラメータ α を与えることで、改良再重み法により符号問題が解消されることが示された。ただし、実際にこの手法を、実クォーク化学ポテンシャル領域で格子 QCD 計算に適用する際は、改めて α による再重み因子の振る舞いを調べ、適切な値を決定してやる必要がある。

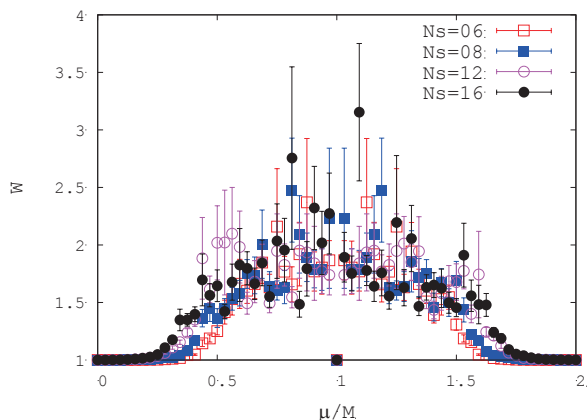


図 4 EPL 模型における改良再重み法の体積依存性。ここでパラメータは $\alpha = 3.5$ で固定した。

次に、図 4 は $\alpha = 3.5$ で固定した際の、改良再重み法における再重み因子の体積依存性を表したものである。体積が大きくなるに従って、因子が 1 より大きくなる領域が広がっていることがわかる。また、 $0.7 < \mu/M < 1.3$ の領域における因子の値は、空間方向の大きさによらずある一定の値に集中していることがみてとれる。このことから、改良再重み法における再重み因子は、比較的空間方向の大きさに依存せず同じ振る舞いをみせることがわかった。

5. まとめと展望

本研究では、(1) 零クォーク化学ポテンシャルにおける Z_3 -QCD の格子計算プログラムの数値計算チェックと、(2) 独自に改良した再重み法のパラメータ依存性と体積依存性を、格子 QCD の有効模型を用いて調べた。

(1) では、 Z_3 -QCD の格子計算で、QCD の Z_3 対称性の秩序変数である Polyakov loop を計算し、こ

れが低温領域では複素平面上の原点に点が分布し、高温領域では Z_3 群の位相に対応する領域に分布した。これは期待したとおりの振る舞いであり、今回用いたプログラムは正常に動作したことを確認した。今後は、これを有限クォーク化学ポテンシャル領域へと計算領域を拡大し、符号問題の影響等について検証を行う。

(2) では、新たに導入したパラメータについては、適切な値を決定してやることで、符号問題が深刻だった領域で問題が解消できることを示した。また、体積依存性については大きな変化は見られなかった。今後は、この改良再重み法を実際に有限クォーク化学ポテンシャル領域での格子 QCD 計算に実装し、符号問題の深刻さの振る舞いを調べる。これにより、格子 QCD 計算でも符号問題を軽減することができれば、有限クォーク化学ポテンシャル領域で物理量の期待値を精度良く計算することが可能となる。

参考文献

- [1] H. Kouno et al., Phys. Rev. D93, 056009 (2016).
- [2] T. Hirakida et al., Phys. Rev. D94, 014011 (2016).
- [3] T. Hirakida et al., Phys. Rev. D96, 074021 (2017).
- [4] T. Iritani et al., JHEP11, 159 (2015).
- [5] S. Choe et al., Lattice QCD Tool Kit in Fortran90, 素粒子論研究 108 巻 1 号 (2003 年 10 月号) 1-43.
- [6] J. Greensite et al., Phys. Rev. D90, 114507 (2014).
- [7] J. Takahashi et al., Phys. Rev. D 91, 014501 (2015).

大規模シミュレーションで見る 宇宙初期から現在に至る星形成史の変遷

樋口 公紀

九州大学 大学院理学府 地球惑星科学専攻

1. はじめに

星は宇宙の最も基本的な構成要素であり、その形成と進化を理解することは、宇宙の力学的・化学的進化を明らかにする上で本質的に重要である。銀河系内の、いわゆる現在の星形成において、普遍的にアウトフローやジェットが観測されている(Richer et al. 2000; Beuther et al. 2002; Swift & Welch 2008; Duarte-Cabral et al. 2013; Wang et al. 2014b; Dunham et al. 2014 他)。そのため、アウトフローやジェットは、星形成過程を理解するための手がかりとなる。というのも、星形成過程には解決しなければならない問題がある。それは、1. 星形成効率の問題（自己重力的に不安定なガス雲が星に変換される割合）、2. 角運動量輸送問題（ガス雲の角運動量が、原始星の角運動量より 5 桁以上大きい）、3. 初期質量関数の問題（形成される星の分布関数がどのようになっているのか）であるが、これらを解決出来るのがアウトフローとジェットである。これらのフローはガスを外部に輸送するとともに、角運動量も輸送することができる。さらに、これらのフローが駆動されると、降着ガスにも影響を与える。ゆえに、アウトフロー・ジェットの駆動やその物理量（運動量、運動エネルギー、質量放出率など）を調べることで、星形成過程を理解できる。

また、星形成過程を理解する上で、磁場の存在も忘れてはならない。磁場は星形成過程での力学的・熱的進化に影響を与える。星形成過程の理解のためには、磁場を考慮した数値シミュレーションが必要不可欠である。それを考慮した非理想 MHD シミュレーションを行った結果、星形成過程で、磁場によってのアウトフローとジェットが駆動されることが示唆された (Machida et al. 2007,

2008 他)。これは、ALMA 望遠鏡のアウトフローの観測においても、総合的な結果が得られている (Bjerkeli et al. 2016; Hirota et al. 2017)。

現在の星形成過程は、アウトフロー・ジェットの観測や理論研究の進展により、理解されつつある。一方で、宇宙初期から現在に至るまでの星形成過程は、多くの謎が存在する。アウトフローやジェットは、現在の観測精度をもってしても、観測することができない。そのため、宇宙初期から現在に至るまでの星形成過程を理解するためには、星形成の非理想 MHD シミュレーションを行う必要がある。

2. モデルと数値計算手法

初期にガス雲が持つ金属量とイオン化度（宇宙線強度と放射性元素崩壊で生じる γ 線強度）を組み合わせ、様々な星形成環境を設定する。金属量は星の進化と関連するため、宇宙の各々の時代に対応する。また、イオン化度は電離源の強度に関係しており、周囲の環境に対応する。そのため、様々な金属量とイオン化度を組み合わせることで、宇宙初期から現在までの星形成環境を再現することが可能である。本研究では、異なる 7 種類の金属量 ($Z/Z_{\text{sun}} = 0, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1$) と、異なる 4 種類のイオン化度 1. 電離源なし（始原的な環境）、2. 天の川銀河と同等の電離源量、3. 天の川銀河の 0.01 倍の電離源量（初代銀河）、4. 天の川銀河の 10 倍の電離源量（スターバースト銀河）を想定している。以上より、28 通りの異なる星形成環境を設定した（詳細や定義は Higuchi et al. 2018 を参照）。

初期条件として、設定した 28 通りの星形成環境それぞれにおいて Bonner-Ebert 密度プロファイルを持つ分子雲コアを用意した。中心数密度は $n_{c,0} = 1.0 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ 、温度は one-zone 計算した結果を用いた。初

期に与えた磁場強度、角速度などは表 1 にまとめている。

以上の初期条件のもと、分子雲コアから原始星形成までの星形成過程について調べるためには、分子雲コア($\sim 10^4$ au)から原始星(~ 0.01 au)というかなり大きな空間スケールをカバーする必要がある。そこで、両スケールをカバーできる nested grid 法を用いて non-ideal MHD シミュレーションを行った(nested grid の詳細については Machida et al. 2004; Machida et al. 2005; Machida et al. 2007, 2008 を参照)。基礎方程式については Higuchi et al. (2018) と同様である。

Model	C_z	Z/Z_{sun}	μ_0	$B_0(\mu\text{G})$	$\Omega_0(\text{s}^{-1})$	$M_{\text{cl}}(M_{\odot})$	$T_{\text{cl}}(\text{K})$	$r_{\text{cl}}(\text{AU})$	Outflow
1	IOZPM3	0		34.1	1.31×10^{-14}	1.08×10^4	198	4.91×10^5	×
2	IOZM3	10^{-5}		33.8	1.31×10^{-14}	1.05×10^4	194	4.87×10^5	×
3	IOZM3	10^{-4}		31.9	1.31×10^{-14}	8.75×10^3	172	4.59×10^5	×
4	IOZM3	10^{-3}	3	24.6	1.31×10^{-14}	3.98×10^3	103	3.52×10^5	×
5	IOZM3	10^{-2}		9.83	1.35×10^{-14}	2.27×10^2	16.4	1.33×10^5	×
6	IOZM3	10^{-1}		10.3	1.62×10^{-14}	1.26×10^2	18.1	9.67×10^4	○
7	IOZM3	1		5.76	1.78×10^{-14}	15.2	5.65	4.49×10^4	○
8	IOI2PM3	0		28.4	1.31×10^{-14}	6.20×10^3	140	4.09×10^5	×
9	IOI2M3	10^{-5}		25.1	1.31×10^{-14}	6.03×10^3	136	4.05×10^5	×
10	IOI2M3	10^{-4}		26.2	1.31×10^{-14}	4.88×10^3	117	3.77×10^5	×
11	IOI2M3	10^{-3}	3	20.0	1.31×10^{-14}	2.15×10^3	68.0	2.87×10^5	○
12	IOI2M3	10^{-2}		9.85	1.35×10^{-14}	2.30×10^2	16.5	1.34×10^5	○
13	IOI2M3	10^{-1}		10.4	1.62×10^{-14}	1.28×10^2	18.2	9.72×10^4	○
14	IOI2M3	1		5.76	1.78×10^{-14}	15.2	5.64	4.49×10^4	○
15	II2PM3	0		12.1	1.31×10^{-14}	4.79×10^2	24.9	1.74×10^5	○
16	II2M3	10^{-5}		12.1	1.31×10^{-14}	4.82×10^2	25.1	1.74×10^5	○
17	II2M3	10^{-4}		12.4	1.31×10^{-14}	5.09×10^2	26.0	1.77×10^5	○
18	II2M3	10^{-3}	3	12.7	1.31×10^{-14}	5.43×10^2	27.3	1.81×10^5	○
19	II2M3	10^{-2}		12.1	1.34×10^{-14}	4.39×10^2	25.0	1.66×10^5	○
20	II2M3	10^{-1}		10.9	1.59×10^{-14}	1.58×10^2	20.1	1.06×10^5	○
21	II2M3	1		6.11	1.78×10^{-14}	18.0	6.34	4.75×10^4	○
22	II02PM3	0		13.5	1.31×10^{-14}	6.56×10^2	31.0	1.93×10^5	○
23	II02M3	10^{-5}		13.6	1.31×10^{-14}	6.64×10^2	31.2	1.94×10^5	○
24	II02M3	10^{-4}		14.0	1.32×10^{-14}	7.25×10^2	33.1	1.99×10^5	○
25	II02M3	10^{-3}	3	15.3	1.32×10^{-14}	9.39×10^2	39.6	2.17×10^5	○
26	II02M3	10^{-2}		15.3	1.34×10^{-14}	8.67×10^2	39.6	2.09×10^5	○
27	II02M3	10^{-1}		12.6	1.55×10^{-14}	2.74×10^2	26.8	1.29×10^5	○
28	II02M3	1		8.03	1.78×10^{-14}	40.1	11.0	6.24×10^4	○

表 1 モデルパラメータ。1, 2 列目はモデル数とモデル名を示す。3–10 列目はイオン化パラメータ (イオン化度を修正するパラメータ)、金属量、質量磁束比、初期磁場強度、初期角速度、分子雲コアの質量、温度、半径を示す。11 列目はアウトフローの駆動(○と◇)、未駆動(×)を示している。

3. 星形成過程の変遷

図 1 に 28 モデルのアウトフロー駆動についてまとめた。分子雲コアから原始星形成までのシミュレーションを行い、アウトフローが駆動したモデルに関してはアウトフロー駆動時 (背景色が赤、緑のパネル)、アウトフローが駆動しなかったモデルはシミュレーション終了時 (背景色が青色のパネル) の x-y 平面のスナップショットを示した。さらに、今回調べた 28 モデルでは、アウトフローが駆動したモデルの中にも、駆動時の密度レンジに違いが見られた (背景緑色: 低密度レンジ $n_c \sim 10^8 \text{cm}^{-3}$ 、背景赤色: 高密度レンジ $n_c \sim 10^{12} \text{cm}^{-3}$)。

背景赤色のモデルは、星形成過程の高密度レンジで形成される準静水圧平衡球 (ファーストコア) からアウトフローが駆動される。というのも、現在の星形成環境 (モデル II2M3) は、ファーストコアスケールで磁気遠心力によってアウトフローが駆動する (Machida et al. 2008; Bate 2014)。モデル II2M3 を含めた背景赤色のモデルはファーストコアが形成され、アウトフローが駆動していることから、現在の星形成過程と同様の過程を経ることが示唆される。

背景緑色のモデルは、星形成過程の低密度レンジでアウトフローが駆動し、シミュレーション終了時まで駆動し続けたモデルである。これらのアウトフローのモーメントフラックス (アウトフロー駆動力) を調べてみたところ、ファーストコアスケールで駆動するアウトフローと同等の値を示すことがわかった。したがって、今回はアウトフローの駆動に着目したため原始星が形成された段階でシミュレーションをとめたが、原始星形成後も長時間吹き続けるのであれば、星形成効率にも影響してくるため非常に重要である。今回この密度レンジでアウトフローが駆動した理由については 4 章で詳しく述べる。

銀河系内の、いわゆる現在の星形成において、普遍的にアウトフローが駆動されていることが観測により確認されているが、今回のモデルでは原始星形成までにアウトフローが駆動しないものも存在した (背景青色)。さらにこれらのモデルでは、数 10au スケールのスパイラルといった非軸対称構造が形成されていることが確認された。したがってアウトフローが出現しなかったモデルでは、非軸対称構造に伴う重力トルクによって、角運動量を中心部から外部へ輸送していることが考えられる。これらのモデルは、アウトフローが駆動されないため、現在の星形成過程とは全く異なる過程を経ることが示唆された。

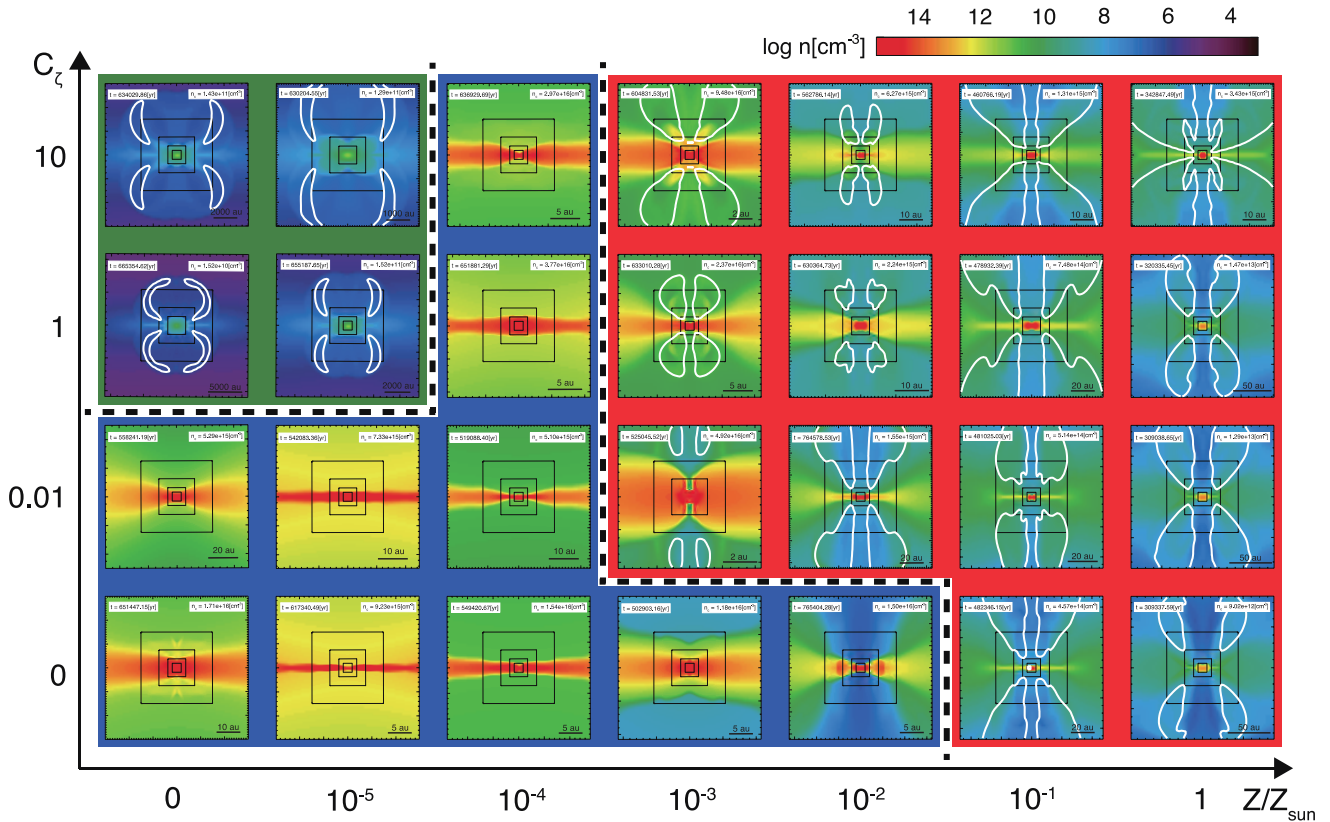


図1 モデルごとのアウトフロー駆動の見取り図。横軸が金属量、縦軸がイオン化パラメータである。背景色が赤色、緑色のパネルはアウトフローが駆動したモデルであり、青色のパネルはアウトフローが駆動しなかったモデルである。それぞれのパネルのカラーコントアは数密度、白の実線はアウトフロー領域で、パネルの上部にスナップショットをとった時の中心数密度と経過時間を示す。黒色の四角で示すのはグリットの境界であり、空間スケールは下部に表記している。

最後に図1をアウトフロー駆動という観点で見ると、星形成は宇宙初期から現在まで同じような過程を経るわけではないことがわかる。イオン化パラメータに多少依存するが、およそ $Z/Z_{\text{sun}} = 10^{-4} - 10^{-3}$ の金属量レンジで、太陽系近傍で観測されているような星形成過程へと遷移することを今回の結果は示している。

4. アウトフロー駆動条件

図2には中心磁場強度の数密度に対する進化を示した。4つの図はアウトフローの駆動の有無で分けられており、(a)と(b)はアウトフローが駆動されなかったモデル、(c)と(d)はアウトフローが駆動されたモデルである。図2は、以下の条件を満たすと、アウトフローが駆動されることを示している。

- (1) 原始星形成前に準静水圧平衡球（コア）が形成される
- (2) 形成されたコアが長く維持される

(3) 磁場とコア付近のガスが強く結合している

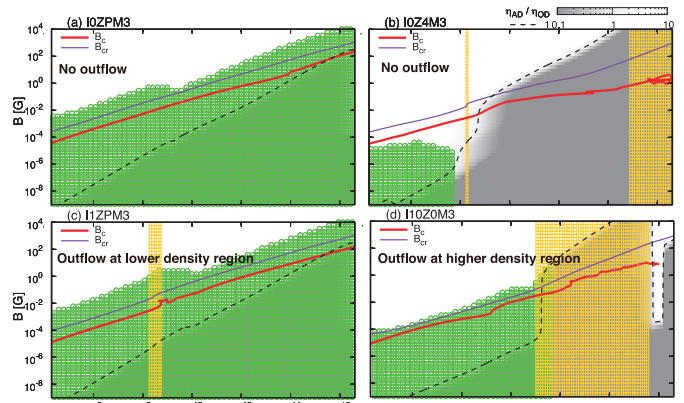


図2 数密度に対する中心磁場強度の進化。4枚の図はそれぞれ、(a) I0ZPM3、(b) I0Z4M3、(c) I1ZPM3、(d) I10Z0M3のモデルである。紫色の実線は臨界磁場強度、赤色の実線は今回のシミュレーション結果の磁場強度を示す。グレースケールは2つの磁場散逸機構のどちらが優勢かを示しており、黒色の点線はその境界を表す。緑色の領域は磁気レイノルズ数が1以上の領域（磁場とガスが強く結合し、磁場が散逸されない領域）、黄色の領域はポルトロピック指数 γ が $4/3$ より大きい領域（準静水圧平衡球が形成される領域）を示す。詳細は Higuchi et al. (2018) を参照。

図2の(a)を見ると、緑色の領域に覆われている(磁場とコア付近のガスは強く結合されている)が、黄色の領域に覆われていない(原始星形成前にコアが形成できていない)。そのため、アウトフローが駆動しなかったと考えられる。図2の(b)では、原始星形成前にコアは形成されていることはわかるが、磁場とコア付近のガスが強く結合していないため、アウトフローが駆動できなかったと考えられる。図2の(c)と(d)では、緑色の領域と黄色の領域が重なっている。つまり(1)–(3)の駆動条件を満たしたため、アウトフローが出現した。モデル I1ZPM3 と I10Z0M3 でアウトフローが駆動する密度レンジが異なった理由は、その駆動条件を満たしたのが、モデル I1ZPM3 では低密度レンジ、モデル I10Z0M3 では高密度レンジであったためである。

5. おわりに

今回、銀河系内の、いわゆる現在の星形成において、普遍的に駆動されるアウトフローという現象に着目し、宇宙初期から現在までの星形成過程の変遷を明らかにしようと試みた。宇宙初期から現在までの星形成環境を金属量とイオン化パラメータを組み合わせて再現し、分子雲コアから原始星形成までを3次元 non-ideal MHD シミュレーションを行うことで調べた。その結果、現在の星形成では普遍的に駆動すると考えられているアウトフローだが、環境が異なれば、駆動しない場合があることがわかった。今回のシミュレーション結果から、太陽系近傍で観測されているような星形成過程への遷移は金属量が $Z/Z_{\text{sun}} = 10^{-4} - 10^{-3}$ で起こることが示唆され、宇宙初期から現在までの星形成過程は、絶えず変化していることが考えられる。

謝辞

今回の研究は、九州大学 町田正博准教授と甲南大学 須佐元教授との共同研究として実施しており、多数の議論・アドバイスをいただきました。感謝いたします。また、本研究成果は、大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータシステ

ム SX-ACE を利用して得られたものです。感謝いたします。

参考文献

- (1) Bate, M. R. 2014, MNRAS, 442, 285
- (2) Beuther H., Schilke P., Sridharan T. K., Menten K. M., Walmsley C. M., Wyrowski F., 2002, A&A, 383, 892
- (3) Bjerkeli P., van der Wiel M. H. D., Harsono D., Ramsey J. P., Jørgensen J.K., 2016, Nature, 540, 406
- (4) Duarte-Cabral A., Bontemps S., Motte F., Hennemann M., Schneider N., Andre P., 2013, A&A, 558, A125
- (5) Dunham, M. M., Arce, H. G., Mardones, D., et al. 2014, ApJ, 783, 29
- (6) Higuchi, K., Machida, M. N., & Susa, H. 2018, MNRAS, 475, 3331
- (7) Hirota, T., Machida, M. N., Matsushita, Y., et al. 2017, Nature Astronomy, 1, 0146
- (8) Machida, M. N., Inutsuka, S., & Matsumoto, T. 2007, ApJ, 670, 1198
- (9) Machida, M. N., Inutsuka, S.-i., & Matsumoto, T. 2008, ApJ, 676, 1088-1108
- (10) Machida, M. N., Matsumoto, T., Tomisaka, K., & Hanawa, T. 2005, MNRAS, 362, 369
- (11) Machida, M. N., Tomisaka, K., & Matsumoto, T. 2004, MNRAS, 348, L1
- (12) Richer J. S., Shepherd D. S., Cabrit S., Bachiller R., Churchwell E., 2000, in Mannings V., Boss A. P., Russell S. S., eds, Protostars and Planets IV. University of Arizona Press, Tucson, p. 867
- (13) Susa, H., Doi, K., & Omukai, K. 2015, ApJ, 801, 13
- (14) Swift, J. J., & Welch, W. J. 2008, ApJS, 174, 202
- (15) Wang, L.-Y., Shang, H., Su, Y.-N., et al. 2014, ApJ, 780, 49

有限温度・有限密度 2 カラー-QCD の相図と超流動性の解明

伊藤 悦子

大阪大学 核物理研究センター

1. はじめに

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

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

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

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

これまでに、先駆的な格子計算による研究や、有効模型を用いた研究、大きなカラー自由度を持った模型による研究から、大雑把に下図 1 の様な相図が描けるものと予想されている。

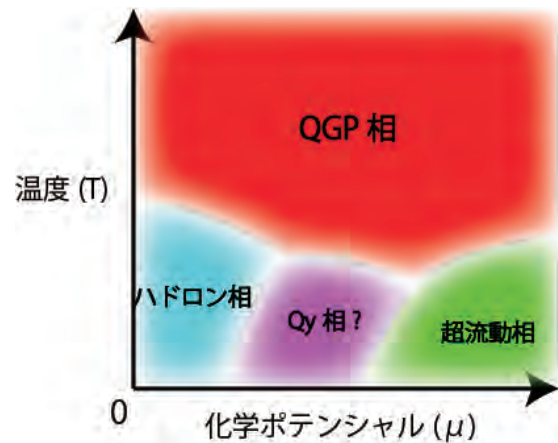


図 1 有限温度・密度 SU(Nc)-QCD の相構造予想図

ここで、各相の性質は、

(1) QGP 相

閉じ込めなし、カイラル対称性が回復し、ダイクォーク凝縮もなし

(2) ハドロン相

閉じ込めあり、カイラル対称性の自発的破れ、ダイクォーク凝縮なし

(3) quarkyonic (Qy) 相

閉じ込めあり、カイラル対称性の回復

(4) 超流動相

閉じ込めなし、カイラル対称性の回復、ダイクォーク凝縮あり

で特徴づけられる、と考えられている。

しかしながら

- 大きな N_c 理論の模型計算から予言された「Qy相」が $SU(2)$ や $SU(3)$ 理論に存在するのか？
 - QCD における「超流動相」の決定的な証拠があるか？
 - 特に低温高密度下でのトポロジーなど非摂動的な振る舞いはどうなっているか？
- という点が未だに不明であり、第一原理計算である格子計算の結果が待たれている状況である。

2. 符号問題とシミュレーションの不安定性問題

前述のように、現実の QCD を記述する $SU(3)$ ゲージ理論に対しては、有限密度下を実現する第一原理計算は符号問題が未だ完全には解決せず、広い温度と化学ポテンシャルの値での相構造に関する研究は実現不可能であるといえる。一方で、ゼロ化学ポテンシャルでは QCD と類似の非摂動的性質を持つ、 $SU(2)$ ゲージ理論にはこの符号問題がなく、第一原理計算が可能である。

一方で、符号問題のない $SU(2)$ ゲージ理論においても、低温高密度領域の第一原理計算は困難であることが知られている。その理由は、フェルミオンの化学ポテンシャル (μ) が最も軽いハドロンの質量 (m_{PS}) の半分以上を超えると、ダイナミカルにフェルミオン-反フェルミオンの対生成・対消滅が激しく起こり、シミュレーションが不安定になる事にある。

これまでに、 $SU(2)$ ゲージ理論に対する数値計算による研究として、スタッガードフェルミオンを用いた 4 フレーバーに関する研究[文献]や、Wilson フェルミオンを用いた 2 フレーバーに関する研究[4,5]も行われたが、特に低温・高密度領域についての研究は乏しく、定性的な理解すら未だ得られていない。

3. 低温高密度領域でのシミュレーションの実行可能性

今回の研究では、連続極限に近くなるように改良された「岩崎ゲージ作用」と、「ウィルソン格子フェルミオン」を用いた格子作用を用いてシミュレーションを実行した。さらに、高密度領域のシミュレ

ーションの不安定性を回避するため、作用に「ダイクオーク源」の項を導入した。これは[3,5]で提案された方法であり、我々は独自にウィルソンフェルミオンに対して近似を使わずこの項を取り入れたハイブリッドモンテカルロ法のコードを構築した。

はじめに、ダイクオーク源を導入した我々の計算手法が、本当に低温高密度領域まで実行可能かどうかを調べた。

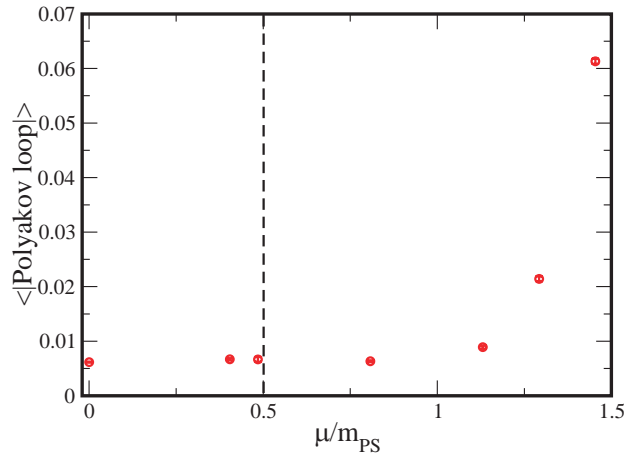


図 2 ある格子パラメータ ($\beta=0.8$, $\kappa=0.159$) におけるポリヤコフループの μ 依存性

図 2 に、格子サイズと質量パラメータを固定した低温での、ポリヤコフループの化学ポテンシャル依存性を示す。

この際、横軸が 0.5 以上では、前述の 2 章で説明したように「不安定性」の問題が起こり、ダイクオーク源項を入れない格子作用では分子動力学ステップを非常に細かくとつても計算が進まない現象を確認した。そのため図 2 では μ/m_{PS} が 0.5 より大きいところでは、ダイクオーク源を入れた格子作用で計算を行った。

その結果、閉じ込めの (近似的) 秩序変数であるポリヤコフループは、 $\mu=0$ ではほぼゼロとなり閉じ込めを示しているが、 μ/m_{PS} が 1 を超えた辺りから徐々に大きくなり、非閉じ込め相に転移していく様子を捉えた。これは、図 1 の期待されている相図の低温領域を計算していることに対応し、低温

で μ を大きくすると非閉じ込めを示す「超流動相」が出現したことを示唆していると考えられる。

4. 相図決定にむけての格子パラメータの探索

計算がもっとも困難である「低温高密度領域」の計算実行可能性が示せたため、次の課題は、図1のような有限温度・有限密度の広い領域での相図の決定である。物理量の温度や密度依存性を求める際には、行っている格子計算における

「理論の赤外領域のスケールが何か」

ということに注意しなければならない。

今回の格子シミュレーションにおいては、

- (1) フェルミオンの質量
- (2) 温度
- (3) (フェルミオンの) 化学ポテンシャル
- (4) 閉じ込めスケール (ラムダ QCD)
- (5) シミュレーションしている格子の体積

の5つのパラメータが存在しており、(4)以外はシミュレーションを行うパラメータで調整できる。そのため、これらの大小関係に留意し、物理的に意味のあるパラメータを取る必要がある。

そこで、ゼロ化学ポテンシャル中の計算を行い、格子上のパラメータと物理的な格子間隔や質量との対応をつけ、格子の大きさと温度の対応、裸の質量と繰り込んだ質量の対応を得た。

4.1 質量の繰り込みによる物理一定線の決定

ウィルソンフェルミオンの質量は、格子上の質量パラメータ (ホッピングパラメータ: κ) でコントロールされる。これは場の理論における「裸の質量」に対応し、足し算のくりこみと掛け算のくりこみが必要である。その繰り込み因子は、格子結合定数(β)に依存するため、各 β に対して「物理的」な質量が一定となるような κ の値に調整する必要がある。

我々は、最も軽い質量を持つハドロンである擬スカラーメソンの質量 (m_{PS}) と次に軽い質量を持つベクトルメソンの質量 (m_V) の比を、様々な(β, κ)に対して計算し、各 β においてその比が0.8になる κ の値を得た。

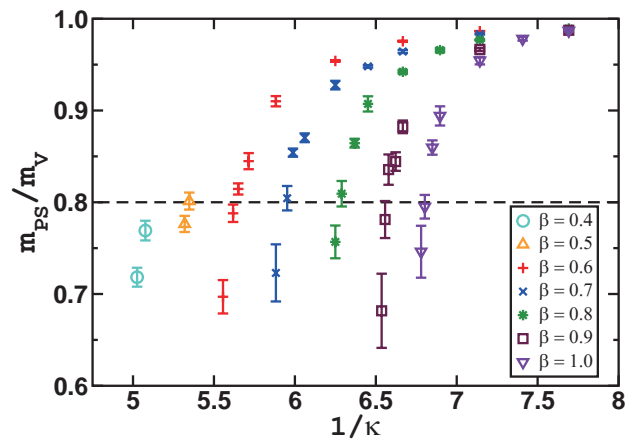


図3 各 β における軽いハドロンの質量比の κ 依存性

4.2 グラディエントフロー法による格子間隔の決定

次に、異なる β におけるシミュレーションにおいて、実際の格子サイズと温度の関係をつけるため、格子上の結合定数(β)と格子間隔(a)の間の対応を求めた。そのために、レファレンススケールとして、最近提案されたグラディエントフロー法によるスケール設定[文献6]を行った。この手法では、質量次元-2を持つ仮想的なフロー時間 (t) と格子上でのエネルギー密度 (E) から無次元量 $t^2 \langle E \rangle$ を測定し、これが一定となるフロー時間を各 β に対して求める。図4の $t^2 \langle E \rangle$ 一定のラインを与える t/a^2 の値の比から、格子間隔の比が求まった。結果として、 $\beta=0.5$ から $\beta=1.0$ までの格子間隔は約3倍の差がある事がわかった。

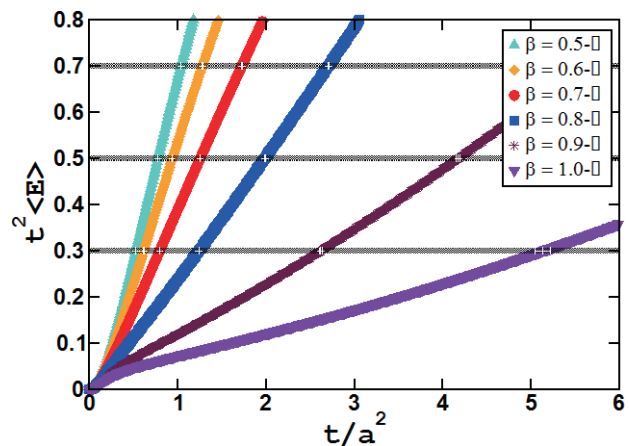


図4 各 β における $t^2 \langle E \rangle$ のフロー時間依存性

5. まとめと今後の展望

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

特に 2017 度は、ダイクォーク源を導入したことで、シミュレーションの不安定性を回避し、非常に高密度領域まで計算が実行可能であることを調べた。

さらに、有限温度・有限密度の広い領域における物理の解明の準備として、格子上のパラメータと連続極限での物理量の対応を与えるのに必要なスケール設定のシミュレーションを行った。

本研究は、高知大学飯田圭氏と李東奎氏との共同研究に基づく。

2017 年度は、若手・女性研究者支援萌芽枠に採用していただき、研究を行った。

2018 年度は、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究(JHPCN)にも採択され、相図の決定と各相における物理的性質の研究を遂行中である。

最後に、本研究を遂行するにあたって、グラディエントフローのコードは、CMC の対面相談制度を利用し、NEC の塩田さんらにご協力頂いた。また、日頃からシステムの運営を支えてくださっている方々（特に寺前さん）には、迅速かつきめ細かいサポートを頂いており深く感謝致します。

さらに、公募型利用制度に応募する際は、RCNP の保坂氏、外川氏、石井氏、池田氏の強い勧めがあった。今回の研究結果は、CMC の公募型支援枠だけではなく、RCNP による無償サポートの計算資源を併用して得られた。RCNP ならびに核物理コミュニティのサポートにも感謝します。

参考文献

- (1) S.Durr et al., Science 322:1224-1227,2008
- (2) Y. Aoki et al., Nature **443** 675 (2006)
- (3) J.B.Kogut et al., Nucl.Phys. **B642** (2002) 181-209
- (4) S.Muroya et al., Phys.Lett. **B551** (2003) 305-310
- (5) S.Hands et al., Eur.Phys.J. C48 (2006) 193
- (6) M. Luescher, JHEP 1008, 071 (2010)

SX-ACE を用いた格子 QCD による軸性ベクトル中間子の質量計算

若山 将征

大阪大学 核物理研究センター 核物理理論研究部門

1. はじめに

本研究のモチベーションの根幹には「質量はどこから来るのか?」という疑問がある。我々の身体の質量は原子核を構成する核子の質量でほぼ決まる。核子の質量はおよそ $939 \text{ MeV} (=1.67 \times 10^{-27} \text{ kg})$ である。そして、核子は基本的に 3 つのクォークからなるが、3 つのクォークの質量を足しても 15 MeV 程度にしかならない。核子の質量の残り 98% がどこから来るのかを解明するには、クォーク・グルーオンを記述する基礎理論である量子色力学(QCD)による理解が必要である。

核子の質量の起源を解明する手がかりになるのが QCD の持つ「カイラル対称性」と「クォークの閉じ込め」の 2 つの性質である。ゼロ温度では、カイラル対称性は自発的に破れており、また、クォークは単体で観測することができない。しかし、約 2 兆度の臨界温度以上になると、クォーク・グルーオンプラズマ相への相転移が起こる。すると、カイラル対称性は回復し、クォークは単体の存在として自由に動き回れるようになると考えられている。従って、核子の状態とバラバラなクォークの状態とを繋ぐ、自発的に破れたカイラル対称性が回復する過程での何らかの情報が引き出せれば、質量生成機構の解明の鍵となり得る。

本研究では、その情報を担うものとして軸性ベクトル中間子に注目した。カイラル対称性において対をなす粒子はカイラル・パートナーと呼ばれ、軸性ベクトル中間子とベクトル中間子はその関係にある。そして、それらの質量は臨界温度以上で縮退することが予想されている[1]。しかし、それらの質量がどのような過程を経て縮退するのかは未だ明確ではない。本研究の目的は、第一原理計算である格子 QCD シミュレーションを用いて、その過程を明らかにすることである。

しかしながら、軸性ベクトル中間子に対する格子 QCD 計算は、ゼロ温度においても、実験値との比較に耐える信頼度の高い結果は得られていない。軸性ベクトル中間子の格子 QCD 計算は 1995 年にヘラーらによって初めて行われ[2]、2008 年にもガトリンガーらによって行われた[3]。しかし、前者はスタグガード作用とウィルソン作用の異なるフェルミオン作用を組み合わせて得られた結果であり、後者は実験値と比較可能な領域への外挿にまで至っていない。そのため、まずはゼロ温度で、軸性ベクトル中間子に対する格子 QCD 計算をきちんと行う必要がある。

2. 格子カイラル対称性を満たすフェルミオン作用

本研究の目的は、温度上昇につれて、カイラル・パートナー同士の質量がどのように変化するかを調査することである。従って、QCD の持つカイラル対称性の性質はフェルミオン作用に取り入れるべき性質である。しかし格子理論では、フェルミオン作用にカイラル対称性等のいくつかの基本的な条件を課すだけで、ダブラーと呼ばれる非物理的なモードが必ず出現する(ニールセン・二宮の定理)[4]。文献[2]でも使用されたウィルソン作用はカイラル対称性を陽に破ることでダブラーを回避している。

この状況を変えたのがルッシャーである。彼はカイラル対称性を格子上に拡張した格子カイラル対称性を提案した[5]。フェルミオン作用が格子カイラル対称性を満たしていても、カイラル対称性を満たさなければ、ニールセン・二宮の定理には抵触せず、ダブラーも回避可能である。格子カイラル対称性を満たすフェルミオン作用は、現在、ドメインウォールフェルミオン(DWF)作用[6,7,8]やオーバーラップフェルミオン作用[9]が提唱されている。本研究では、カイラル対称性を尊重した DWF 作用を用いた。

$m_f a$	m_π/m_ρ	配位数	計算時間/ジョブ
0.08	0.702(2)	3,000	25 時間
0.06	0.652(3)	3,000	32 時間
0.04	0.584(2)	7,964	46 時間

表 1 クォーク質量($m_f a$)、 π 中間子と ρ 中間子の質量比 (m_π/m_ρ)、配位数と 1 ジョブあたりの大よその計算時間。計算時間は SX-ACE 上での相関関数に対するものである。

3. SX-ACE を用いた格子 QCD 計算

3.1 格子 QCD シミュレーションの計算手順

格子 QCD 用いて、軸性ベクトル中間子の質量を得る手順は次の通りである。

- ゲージ配位を生成する。
- ゲージ配位毎に中間子の相関関数を計算する。
- 中間子の相関関数から質量を抽出する。
- クォーク質量を変化させて(a)-(c)の手順を繰り返し行い、実験値と比較可能な領域へと質量の外挿を行う。

特に、手順(a)と(b)は大規模計算を行う必要がある。

手順(a)について、今回扱う格子サイズ $8^3 \times 8^3 \times 24$ に対して真面目にやると、 4×10^5 重積分を何回も実行しなければならない。この計算は不可能なので、モンテカルロ法を用いた。また本研究では、海クォークが存在しないゲージ場（グルーオン場）だけの配位を生成した（クエンチ近似）。この近似の下では、擬熱浴法が有用である。今回は利用可能な計算機資源の関係から、手順(a)は東京大学情報基盤センターの FX10 上で行なった。手順(d)で変化させるクォーク質量($m_f a$)は 0.08, 0.06, 0.04 の 3 点を取り、それぞれに対するゲージ配位の数 は表 1 にまとめた。

3.2 SX-ACE での計算

本節では、大阪大学サイバーメディアセンター (CMC) の SX-ACE 上で行なった手順(b)について詳細に述べる。

本研究では、DWF 作用を用いて、中間子の相関関数の計算を行なった。DWF 作用はカイラル対称性を尊重しているという点でウィルソン作用よりも優れているが、欠点は多大な計算機資源を要することである。相関関数の計算では、大規模線形方程式を解

く部分が最も時間がかかる。格子サイズを $8^3 \times 8^3 \times 24$ とすると、ウィルソン作用の場合、 $(3^4 \times 8^3 \times 8^3 \times 24)$ 次の正方行列に対する線形方程式を解く必要がある。これだけでも大変だが、DWF 作用はウィルソン作用を構成要素に 5 次元方向に拡張した形をしている。さらに逆行列が入れ子構造になっている。そのため、5 次元方向の格子サイズを N_5 とすると、DWF 作用の場合、 $(3^4 \times 8^3 \times 8^3 \times 24 \times N_5)$ 次の正方行列に対する線形方程式を解いた後に、さらにもう一度、同じサイズの方程式を解く必要がある。今回、 $N_5=32$ としたので、DWF 作用の計算時間はウィルソン作用と比較して、およそ数百倍にもなる。このため、DWF 作用は提唱された後も、実際の使用が難しかった。

この計算を行うためには、SX-ACE の性能を最大限に引き出せるようにプログラムをチューニングすることが不可欠である。まず我々は、Lattice Tool Kit Fortran 90 [10] を元に DWF 作用のコード開発を行なった。大規模線形方程式を解く部分は双共役勾配法 (Bi-CG 法) を用いた。そして、SX-ACE はベクトル型計算機なので、ベクトル化率が上がるようプログラム全体のチューニングを行い、ベクトル化率 99.8% を達成した。

しかしながら、我々だけでは SX-ACE を最大限に活用できるプログラムになっていると判断するのは難しい。そこで、8 月 30 日に CMC 主催の「2017 年度第 1 回性能チューニングプログラム」に申請した。プログラムは 12 月 6 日に返却され、5 次元フェルミオン場の配列の順序を変更することで、約 1.2 倍の高速化の実現に至った。各クォーク質量に対する 1 ジョブあたりの大よその計算時間を表 1 に載せた。

ジョブの実行については、以下の通りである。SX-ACE は総計 1,536 ノード、1 ノードあたり 4 コアで構成されている。従って、我々は 4 つのゲージ配位に対する相関関数の計算を同時に行うパラメータ並列を採用し、1 ジョブあたり 1 ノード利用のジョブを作成した。500 ジョブまで投入可能であったため、最大 500 ノード、2,000 並列での計算を行った。

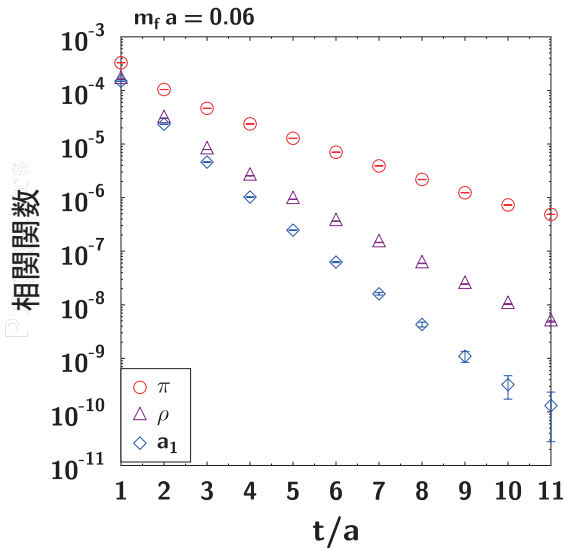


図1 クォーク質量 $m_f a = 0.06$ に対する、各中間子の相関関数の時間依存性。 a は格子間隔である。

4. 軸性ベクトル中間子の質量計算

4.1 各中間子の質量の抽出

手順(b)で得られた、ゼロ温度における各中間子に対する相関関数の結果を図1に示す。赤丸、紫三角、青四角がそれぞれ、 π 中間子(擬スカラー中間子)、 ρ 中間子(ベクトル中間子)、 a_1 中間子(軸性ベクトル中間子)に対応する。なお、時間軸方向に周期的境界条件を課しているため、横軸は、時間軸方向の格子サイズ $Nt=24$ に対して半分までの表示とした。

手順(c)では、中間子の相関関数を双曲線余弦関数 $Z \cdot \cosh(m \cdot t)$ でフィットすることで、中間子の質量 m を抽出できる。 Z は比例係数、 t は時刻である。図2に、異なるクォーク質量ごとに抽出した各中間子の質量を示した。 π 中間子に対してのみ、質量の2乗で表示されていることを注意しておく。その理由は、 π 中間子はその特徴的な軽さから、南部・ゴールドストーン(NG)粒子に対応すると考えられているからである。カイラル対称性が自発的に破れると、NG粒子と呼ばれる質量ゼロの擬スカラー中間子が現れる。しかし、クォークが質量を持つと、カイラル対称性は陽に破れ、NG粒子も質量を持つようになる。この質量の関係性は、ゲルマン・オクス・レナー(GOR)関係式として知られており、NG粒子の質量の2乗はクォークの質量に比例する。

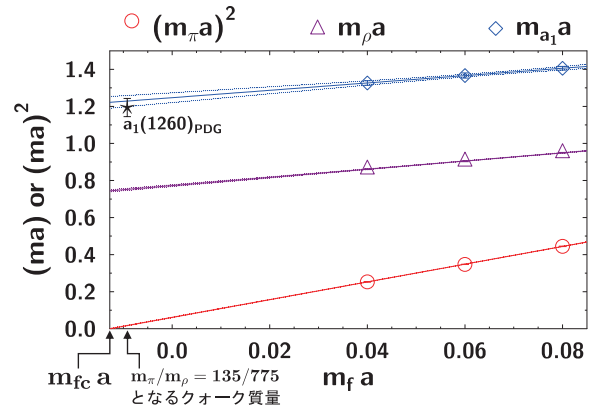


図2 各中間子の質量のクォーク質量依存性。図の左端は π 中間子の質量がゼロになる点に対応。星印は $a_1(1260)$ の質量の実験値を表す。

4.2 格子 QCD 計算と実験値との比較

手順(d)にあるように、格子 QCD 計算の結果を実験値と比較するためには、各中間子の質量の外挿を行う必要がある。外挿の結果は図2に示した。その手順は以下の通りである。

まず GOR 関係式に従い、 π 中間子の質量($m_\pi a$)の2乗をクォーク質量($m_f a$)に対して線形で外挿する。ここで、 a は格子間隔である。格子 QCD 計算では無次元量の値しか得られないので、エネルギーの次元を持った m_π と距離の次元を持った a を掛け合わせた無次元量の形で表れる。そして、 π 中間子の質量がゼロになる極限はカイラル極限と呼ばれる。カイラル極限はクォーク質量がゼロでカイラル対称性が陽に破れていない領域であり、有効模型と比較する場合に有用である。図2では、カイラル極限は左端に対応するが、そのときのクォーク質量はゼロではなく、 $m_{fc} a = -0.0128(4)$ である。これは DWF 作用が、 N_5 が無限大の極限で、初めて格子カイラル対称性を厳密に満たすことに起因する。

現実世界では π 中間子は質量を持つ。従ってカイラル極限の一步手前の点で、格子 QCD 計算の結果に次元を持たせる必要がある。本研究では、その点を質量比(m_π/m_ρ)が実験値と同じ(135/775)になる点 $m_{fp} a = -0.0092(4)$ に選び、 $a = 0.192(2)$ fm の次元を得た。結果、 a_1 中間子の質量 m_{a1} を 1266(43) MeV と得た。ここで、($m_\rho a$)と($m_{a1} a$)は線形的に外挿した。

最も軽い軸性ベクトル中間子 $a_1(1260)$ の質量の実験値は 1230(40) MeV である[11]。この値は図2に星

印として載せた。実験値と格子 QCD 計算の結果を比較すると、誤差の範囲内で一致することが分かる。

5. おわりに

5.1 まとめ

QCD において、質量の生成機構を解明することは大きな課題である。軸性ベクトル中間子はベクトル中間子のカイラル・パートナーであり、有限温度中でのそれらの質量変化を調べることは、質量の生成機構を解明する鍵になり得る。本研究は、第一原理計算である格子 QCD を用いてその調査を行うのが目標である。しかし、軸性ベクトル中間子に対する格子 QCD 計算は、ゼロ温度においても、実験値との比較に耐える信頼度の高い結果は得られていない。そこで、カイラル対称性を尊重した DWF 作用を用いて、ゼロ温度での軸性ベクトル中間子の質量の計算を行なった。そして、 $a_1(1260)$ の質量の実験値と無矛盾な結果を得た。

5.2 有限温度での計算と今後の展望

これまでのゼロ温度での計算で、DWF 作用を用いることで、軸性ベクトル中間子に対して信用できる結果が得られることを確認した。次に、我々はこの計算を有限温度へ拡張する。プログラムのチューニングによって計算機資源を節約できたため、2017 年度中に、こちらの計算も随分と進めることができた。また、有限温度での計算はおよそ 100 時間のジョブを流す必要があった。2017 年 7 月 6 日に、SX-ACE 共用利用での利用可能な経過時間の上限が 24 時間^注から 120 時間に変更されたため、特にプログラムを変更することなく有限温度の計算を始められたこともここに述べておく。

今後は π 中間子のカイラル・パートナーの候補である σ 中間子の計算も検討している。これはより多大な計算量が必要なため、SX-ACE の後継機、若しくは、GPU 搭載の OCTOPUS での計算が期待される。

^注 1 ノード利用に限り経過時間の上限は 48 時間であった。

謝辞

本研究は、国広悌二氏、村上祐子氏、室谷心氏、中村純氏、野中千穂氏、関口宗男氏、和田浩明氏との共同研究として行われた。また本研究の数値計算は、大阪大学 CMC 大規模計算機システム公募型利用制度、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（課題番号: EX17706）と大阪大学核物理研究センターからの支援の下、NEC SX-ACE の多大な計算機資源を使用して行われ、並びに、東京大学情報基盤センターの富士通 FX10 を使用して行われた。さらに、大阪大学 CMC 主催の「2017 年度第 1 回性能チューニングプログラム」により、効率良く計算機資源を使用できるようになり、より多くの研究テーマの遂行が可能となった。そして、管理・運営に携わっている多くの方々には、いつも利用者視点でシステムの変更や問題解決をして頂き、安定的に計算機を利用することができた。ここに感謝の意を表す。

参考文献

- (1) T. Hatsuda and T. Kunihiro, Phys. Rept. **247**, 221 (1994).
- (2) M. Wingate, T. DeGrand, S. Collins and U. M. Heller, Phys. Rev. Lett. **74**, 4596-4598 (1995).
- (3) C. Gattringer, L. Glozman, C. Lang, D. Mohler and S. Prelovsek, Phys. Rev. **D78**, 034501 (2008).
- (4) H. B. Nielsen and M. Ninomiya, Nucl. Phys. **B185**, 20-40 (1981).
- (5) M. Lüscher, Phys. Lett. **B428**, 342 (1998).
- (6) D. B. Kaplan, Phys. Lett. **B288**, 342 (1992).
- (7) Y. Shamir, Nucl. Phys. **B406**, 90 (1993).
- (8) V. Furman and Y. Shamir, Nucl. Phys. **B439**, 54 (1995).
- (9) R. Narayanan and H. Neuberger, Phys. Lett. **B302**, 62-69 (1993).
- (10) S. Choe, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, T. Saito and F. Shoji, Nucl. Phys. **B(PS)106**, 1037 (2002). <http://nio-mon.riise.hiroshima-u.ac.jp/LTK/>
- (11) C. Patrignani et al. [Particle Data Group], Chin. Phys. **C40**, 100001 (2016).

格子量子色力学を使った高密度物質の研究

河野 宏明

佐賀大学 理工学部 物理科学科

1. はじめに

太陽の2倍程度の質量のある中性子星の発見は、素粒子・原子核物理学の研究分野に衝撃的なインパクトを与えた。中性子星は、巨大な星がその終末期に引き起こす超新星爆発で誕生するものと考えられているが、爆発の際、巨大な星の持つ質量の大部分は、外側に向かって飛びちるため、その中心部の残る中性子星の質量はせいぜい太陽の1.5倍程度であると考えられてきた。また、中心部の物質の残存が非常に大きければ、強い重力のため星を内部の圧力で支えられなくなり、ブラック・ホールとなってしまふ。実際、以前より観測されていた中性子星の質量は太陽質量の1.5倍程度のものであったが、近年になって太陽質量の2倍程度の中性子星があいついで発見されたのである。これらの発見は、中性子星内部の物質の圧力が予想より強いものである事、すなわち内部の物質が高密度で“硬くなる”事を意味し、内部物質の状態方程式についての新しい知見となった。状態方程式は、物質のミクロな構造を反映しているので、この事は、ミクロな物理学である素粒子・原子核物理学の研究分野に大きなインパクトを与えたのである。

陽子・中性子などの重粒子（バリオン）や核力を媒介する中間子は、一般に“素粒子”とよばれるが、本当の基本粒子ではなく、クォークやその反粒子である反クォークが、グルーオンというゲージ粒子によって媒介される強い相互作用によって結合して出来ている。現時点においては、クォークと（電子などの）レプトンが物質を構成する最小単位であり、それらに光子やグルーオンなどによって媒介されるいわゆる“4つの基本的相互作用”が働いて、さまざまな物質や宇宙を形作っていると考えられている。

ところで、クォークは物質の最も基本的な構成粒

子であるが、不思議な事に単体では取り出せていない。クォークは色という3種の電荷を持っており、やはり種の色電荷を持つグルーオンと強い相互作用する。強い相互作用は、文字通り“強い”ため、クォークや反クォークは非常に強く結合してハドロン（バリオンと中間子の総称）を構成し、その中に“閉じ込め”られている。この強い相互作用は、“閉じ込め”以外にも、本来非常に軽かったクォーク（厳密に言うと陽子や中性子を構成しているuとdのクォーク）をたいへん重くするという不思議な性質も持ち、この現象はカイラル対称性の自発的破れと呼ばれている。

強い相互作用は量子色力学（QCD）によって記述される。この理論の特徴は、その相互作用のエネルギー依存性にある。粒子間でやりとりをするエネルギーが大きい時（このような時は粒子間が近距離である）は、この相互作用の結合は大きくないが、粒子間でやりとりをするエネルギーが小さい（遠距離）の場合は、結合が非常に大きくなる傾向がある。（遠距離で結合が強くなるため”閉じ込め”がおこる。）このため、この理論においては、高エネルギーの現象については、電磁量子力学などで大きな成果を収めた摂動論が有効であるが、低エネルギー領域では、摂動論は破綻して使用できない。低エネルギーの現象である”閉じ込め”や”カイラル対称性の破れ”を第1原理である量子色力学から解析的に示すことは非常に難しい。しかし、数値的な非摂動的解析方法としては、ウィルソンによって提唱された格子理論があり、この方法を使って、”閉じ込め”や”カイラル対称性の自発的破れ”は、第1原理から解析されるようになった。格子QCDは、有限温度の状態にも適用され、その結果、高温では、閉じ込めが破れて多数のクォーク・グルーオンがプラズマ状態で飛び回るようなクォーク・グルーオン・プラズマ（QGP）

の状態が出現する事が予測され、その新状態の状態方程式についても多くの知見が得られている。さらに、高エネルギー原子核衝突の実験によって QGP の存在が示唆されるに至っている。しかしながら、中性子星内部に存在する高クォーク数（バリオン数）密度物質に関して情報を得ようとすると、有限の(実数)クォーク数化学ポテンシャルのある格子 QCD 計算を行う必要があるが、この場合は符号問題という難問のため、格子計算がうまく実行できない。この問題に挑むために、この研究では、符号問題の存在しない虚数クォーク数化学ポテンシャルや実数アイソスピン化学ポテンシャルを用いた計算を行い、そこから現実の中性子星内物質に対応する実数クォーク数化学ポテンシャルと実数アイソスピン化学ポテンシャルが両方存在する領域の情報を得る事を目指す。

2. 格子と符号問題

格子 QCD では、計算機上の離散化されて次元空間（格子）上に場の変数を乗せて（クォーク場は格子点上、グルーオン場は格子辺上におく）、量子色力学の理論にしたがって、シミュレーションを行う。統計力学の計算を行う場合は、通常は、以下のように大正準分配関数を場の配位による経路積分の形に書き換えた表式を用いる。

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

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

ここで U はグルーオン（ゲージ）場、 q はクォーク場、 S_{QG} はクォークとグルーオンを含む作用、 S_G はグルーオンのみを含む作用を表す。 M は、クォークの持つ離散的な自由度だけでなく、時空座標も行列の足とする行列を示す。この行列は、一般には、クォーク数についての化学ポテンシャル μ を含んでいる。ここでは、 S_G の具体的な形は重要でないので省略する。

クォーク場 q の積分は手で実行でき、次が得られる。

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

この表式において、グルーオン場の経路積分を行え

ばよいわけだが、グルーオン場は 4 次元時空の各点間の辺（リンク）上に存在し、各々が経路積分の積分変数となる。これらの多数の積分変数について、可能な値をすべて足し上げるのは、実質的に実現不可能であり、実際にはモンテカルロシミュレーションによって計算は行われる。その場合でも十分な多くの数の場の配位について足し上げを行う事は難しい。そこで、被積分関数

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

を規格化したものを配位の存在確率分布関数と見なして、その確率に従って、配位を生成して集める事で、少ない配位で高い精度の積分結果を得る方法が用いられる。これをインポートランス・サンプリングと呼ぶ。零クォーク数密度での計算は、このようにして実行され、信頼度の高い結果が得られている。

しかしながら、有限のクォーク数化学ポテンシャルがあると、グルーオン場の積分表式にあらわれる行列式が

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

となって、有限の μ では行列式は、実性、すなわち

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

が保証されず、行列式は複素数になり、その実部の符号も正負定まらない。このため、被積分関数の確率解釈を必要とするインポートランス・サンプリングの方法が使えないので、信頼できる計算結果が得られない。これを符号問題と呼ぶ。ただし、これは被積分関数が“非物理的”という事でない。行列式は複素数になるが、分配関数は実数になる事は厳密に示す事ができるのである[1]。最終的な答えは物理的なので、計算の途中に複素数が現れるのが、符号問題である。

この問題を解決する 1 つの方法として提案されているのが、虚数化学ポテンシャルを使う方法である。 μ が純虚数だと仮定すると、行列式は

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

となって実数となり、インポートランス・サンプリングによる格子 QCD 計算が可能となる。そのようにして得られた結果を解析接続する事によって、今知りたい実 μ 化学ポテンシャルの情報を得る事が期待

できる。(参考文献[2]およびその中の引用文献を参照。) また、QCD に対する適切な有効モデルを設定できれば、そのモデルの未定パラメータを虚数 μ 領域で決定でき、そのようにして得られた有効モデルによって実 μ 領域の解析が可能となる[3]。特に後者の方法は、実 μ 領域に非連続な転移が存在する場合でも有効であると考えられ、実用性が高い。

高クォーク数密度のクォーク物質は、中性子星などの高密度天体内部に存在すると考えられているが、中性子星という名前からわかるように、この星の内部では中性子と陽子（あるいは d クォークと u クォーク）の数は等しくない。このような状況は、アイソスピン化学ポテンシャルという、クォーク数化学ポテンシャルとは独立な化学ポテンシャルによって表される。純虚数クォーク数化学ポテンシャルだけでなく、実数アイソスピン化学ポテンシャルもある場合でも符号問題がない事が河野らによって示されている [4]。この研究では、この場合の格子 QCD 計算を実際に行い、中性子数と陽子数が等しくない高密度物質の情報を求めることを試みた。

3. 格子 QCD 計算の設定と実行

実際に計算に用いた格子 QCD 計算のプログラムやセッティング等は以下の通りである。(専門用語等については参考文献[2]、[5]等を参照の事。)

この研究で使用したプログラムは、中村純氏らのグループが開発した Lattice Tool Kit [6]をこの研究用に修正したものである。このプログラムでは、グルーオンの作用としては Iwasaki improved action を、クォークの作用としては 2 フレーバの Clover fermion を使用している。配位生成は、ハイブリッドモンテカルロ法により行われる。格子の大きさは、時間方向が 4 であり、空間方向が 12 である。

数値計算を行う大型計算機として、大阪大学サイバーメディアセンター(CMC)の SX-ACE を使用した。前年度に引き続き CMC からは、96,000 ノード時間の計算時間をサポートしていただいた。また、これとは別に大阪大学核物理研究センターからいただいた計算時間の一部を計算に使用した。

計算のパラメータには、物理的状況を表すものと、数値計算の実施の上で指定しないといけないものがある。まず、物理的なパラメータとしては、系の温度 T とクォークの質量をコントロールする β と κ 、アイソスピン密度をコントロールするアイソスピン化学ポテンシャル μ_1 および無次元化された虚数化学ポテンシャル $\theta = \mu / (iT)$ がある。 β および κ については、参考文献[2]と同じ設定を使用した。 μ_1 については、主に $\mu_1 T = 0, 0.05, 0.1$ の 3 種類について計算した。 θ は、 $0 \sim \pi/3$ の領域の 16 点について、同時に計算を行う並列計算を行った。

ゲージ配位は最大で 60,000 程度生成し、最初の 4,000 を熱平衡達成までの過程として除いて、配位間の人口的な自己相関を避けるために 100 ごとに配位を採用して、物理量を計算した。平成 29 年度の計算で配位計算はほぼ終了した。計算した物理量は、前年度に引き続き、プラケット変数、ポリヤコフープ、クォーク数密度およびアイソスピン数密度である。

4. 数値計算の結果と解析

前回の報告でクォーク数密度の結果を示したので、今回は、アイソスピン密度の結果を示す。図 1 に温度におけるアイソスピン数密度の虚数化学ポテンシャル依存性を示す。純虚数となるクォーク数密度と異なり、この量は実数となる。誤差を持つ点が格子 QCD 計算の結果であり、線が有効モデルによる結果である。温度は零密度における非閉じ込め転移の擬臨界温度 T_c の 1.35 倍であるので、高温領域であり、アイソスピン化学ポテンシャルは $\mu_1 = 0.4T$ である。格子の有限体積補正として、同じ格子上でのステファン・ボルツマン極限での値で割って、現象論模型の同様の値と比較している。有効モデルは、ポリヤコフープ拡張型南部・ヨナ-ラシニオ (PNJL) 模型であり、パラメータは参考文献[7]で決定されたものを使った。高温領域では PNJL 模型は格子 QCD の結果を (ややオーバーシュート気味であるが) よく再現していると言える。この傾向は他の物理量も同様である。一方、低温では、PNJL 模型は再現性が

よくなく、その改良が必要と思われる。この事は現象論サイドの重要な課題である。

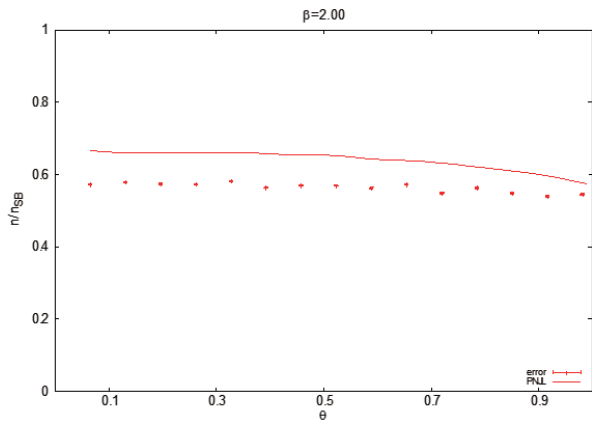


図1 高温におけるアイソスピン数密度の θ 依存性

5. まとめと今後の展望

有限クォーク数密度、有限アイソスピン数密度の情報を得るため、虚数クォーク数化学ポテンシャルと実数アイソスピン化学ポテンシャルが同時に存在する場合の格子 QCD 計算を行った。これは著者が知る限りにおいて世界最初の計算例である。高温領域では、格子 QCD 計算の結果は有効模型でよく再現できた。一方、中間温度・低温の領域では現象論模型は格子 QCD 計算の結果より小さな値を与え、結果を再現できなかった。これは現象論模型にハドロンの寄与が十分に取込まれていないためと考えられる。しかし、高温で現象論模型が格子 QCD 計算を再現できた事で、九州大学の管野淳平氏らが参考文献[7]および[8]で行ったような二相模型を用いた中性子星の解析は的を得たものだという事が言える。今後は、低温領域の格子計算も再現できるような有効模型の研究・改良[9]が課題となる。

なお、これらの結果は、逐次発表されている。(本公募研究期間である平成29年度のものだけを参考文献に表示[10]。)本研究の本体となる格子 QCD 計算は、小規模なものを残して終了したので、付加的な計算を実行して、最終的結果を論文にまとめる予定である。

謝辞

本研究の遂行にあたり様々な助言・助力をいただいた中村純氏、八尋正信氏、柏浩司氏、高橋純一氏、石井優大氏、管野淳平氏、宮原昌久氏、開田丈寛氏に感謝いたします。大阪大学サイバーメディアセンターと大阪大学核物理研究センターからは計算時間の継続的なサポートをいただきました。ここに謝意を表します。また、この研究は、科研費(基盤研究C(No.26400279))のサポートも受けております。ここに謝意を表します。

参考文献

- [1] T. Hirakida, et al., Phys. Rev. D **94**, 014011(1-13), (2016).
- [2] J. Takahashi, et al., Phys. Rev. D **91**, 014501(1-11), (2015).
- [3] Y. Sakai, et al., Phys. Rev. D **79**, 096001(1-9), (2009).
- [4] H. Kouno, et al., Phys. Rev. D **85**, 016001(1-12), (2012).
- [5] 青木慎也, 格子上の場の理論, シュプリンガー現代理論物理学シリーズ第3巻, シュプリンガー・フェアラー東京, 2005年.
- [6] C. Choe 他, 素粒子論研究 **108**, No.1, 1-43, (2003).
- [7] J. Sugano, et al., Phys. Rev. D **90**, 037901(1-5), (2014).
- [8] J. Sugano, et al., Phys. Rev. D **94**, 014024(1-9), (2016).
- [9] J. Sugano, et al., Phys. Rev. D **96**, 014028(1-10), (2017).
- [10] 河野宏明, “虚は実なりー虚数化学ポテンシャルの世界ー”, 研究会「これまでの原子核物理学の潮流と今後の展望」, 2018年3月16日, 九州大学

宇宙の大規模構造と銀河形成

長峯 健太郎

大阪大学 大学院理学研究科 宇宙地球科学専攻

1. はじめに

観測的宇宙論はこの 20 年間に爆発的進展を遂げ、いわゆる「精密宇宙論」と呼ばれる時代に突入した。1990 年代半ばに NASA が打ち上げた COBE、その後 21 世紀に入ってから WMAP、Planck などの衛星計画によって宇宙背景放射の精密な観測が行われ、超新星への距離などの他の観測とも組み合わせることによって、宇宙論パラメータが 10% 以内の精度で決まった。その結果、ダークマターとダークエネルギーに支配された Λ cold dark matter (Λ CDM) モデルが現在の標準宇宙モデルとなった (図 1 参照)。

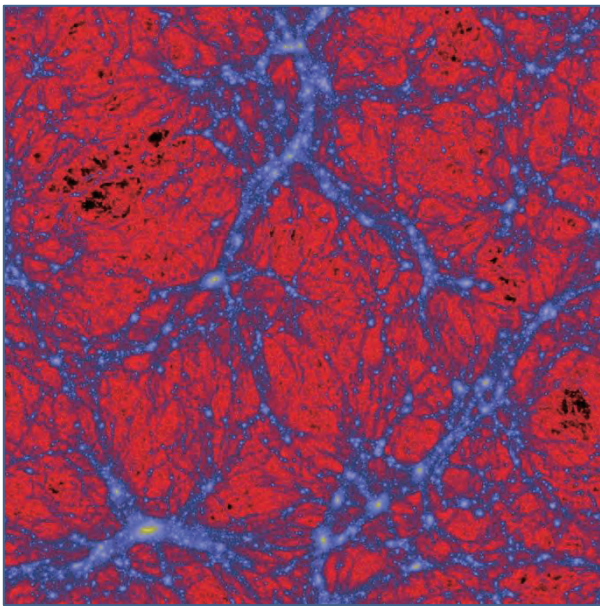


図 1 現在の宇宙における大規模構造 (縦横約 400 万光年の大きさ)。この図は N 体シミュレーションの結果で、宇宙のダークマター分布を示している。青で示されている部分がダークマターが集まったフィラメントやダークマターハローを示し、黒や赤で示されているのが低密度なボイドと呼ばれる領域である。

一方で、ダークマター自身は光を発しないので、光による直接観測は今の所できない。我々は宇宙において光るもの (すなわち星や銀河) もしくは吸収するものを間接的に観測し、宇宙全体のことを学んでいる。つまりバリオンの世界である。その銀河の

統計量である銀河光度関数の宇宙論的進化などは未だに完全には理解されていない。今後 10 年間の研究は精密宇宙論をベースに、宇宙の構造形成をより正確に把握していく『精密構造形成論』へ向かって行こう。

具体的には、ダークマター、ガス、星、メタル、ダストなどがこの宇宙の時空間にどのように分布しているのかを正確に把握するというミッションである。(天文学においてはヘリウムよりも重い重金属をメタルと総称する。) ダークマターとガス (バリオン) 分布に関しては、80-90 年代にすでに一定の研究の進展があり、宇宙論的シミュレーションと観測計画が手を携えて、宇宙における物質分布の理解が深まってきた。それは、銀河の 2 点相関関数や Lyman- α forest (以後 LAF) と呼ばれるキューサー吸収線系の統計的解析によって行われ、銀河間物質 (Intergalactic medium; IGM) がシミュレーション内に見られるようにフィラメント状 (cosmic web) に分布していることが示唆されてきた (図 2 参照)。

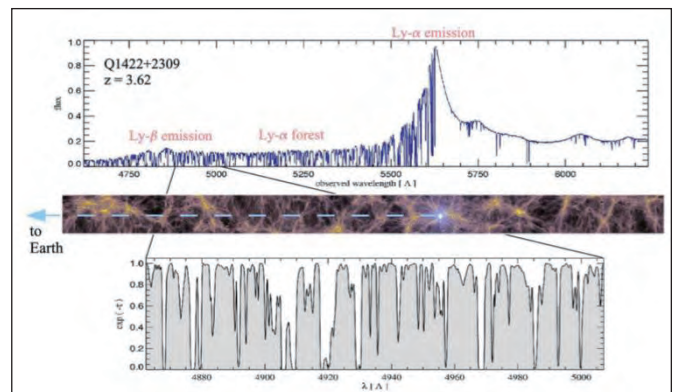


図 2 赤方偏移 $z=3.62$ にあるキューサー (早期宇宙における巨大ブラックホール) からの光が IGM に含まれる中性水素によって一部吸収されることにより、そのスペクトル (上段) に LAF (下段) 吸収線が生じる様子を示している。中段は宇宙論的流体シミュレーション内のガス分布 (Springel et al. 2006)。

2. 宇宙における中性水素の分布と IGM Tomography

21世紀に入ると、Sloan Digital Sky Survey などの大規模サーベイにより中性水素(H_I) 柱密度が高い吸収線系の大規模サンプルが手に入り、銀河と IGM の相互作用や金属分布が研究の焦点となっていた。これらの先行研究により、深い吸収線に対応するガスが高赤方偏移の円盤銀河やその周辺にあるガスに対応していて、金属吸収線は超新星爆発や巨大ブラックホールによってメタルが吹き飛ばされる feedback 過程について重要な情報を与えてくれることがわかってきた。こうした吸収線系から得られる情報は星形成とは独立なため、銀河の光度に頼った観測に比べて無バイアスであるという大きなメリットもある。

また最近では、キューサーよりも高密度に天球面上に分布する高赤方偏移の星形成銀河を背景光源として、影絵のように IGM の空間分布を トモグラフィ (Ly- α 吸収線を利用)によって調べることが可能になってきている(図 3 参照)。すばる望遠鏡では、現在 SUMIRE プロジェクトの初段階の HSC 撮像サーベイが進行しているが、次に多天体分光装置 PFS が 2019 年頃から稼働し、その広視野・高分解能を活かした大規模 IGM tomography 観測が始まる予定である。この世界に先駆けた tomography 観測データを宇宙論的に解釈するためには、宇宙論的シミュレーションによる理論モデルが不可欠であり、それは PFS の主要観測パラメータ(背景光源数や観測時間数など)を決定するためにも重要な役割を果たす。

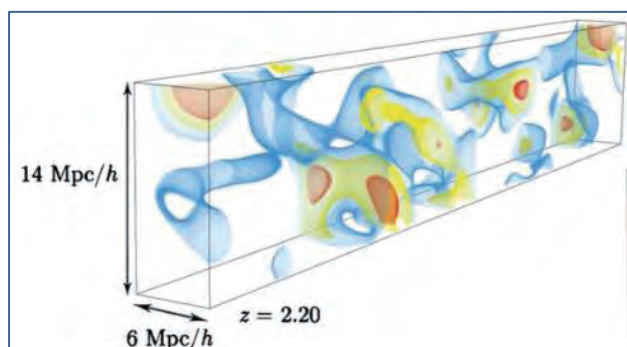


図 3 IGM tomography 観測の一例。24 個の銀河スペクトルを用いて、吸収線の深さに応じて見積もられた $z \sim 2$ の IGM の等密度面 (Lee et al. 2014)。

3. 大規模並列宇宙論的流体計算 (3D)

観測データを宇宙論的な視点から解釈する上で、我々の研究グループが実行する大規模宇宙論的流体シミュレーションは不可欠なものである。我々は、すばる望遠鏡の IGM tomography 観測に対応する理論的予測を行い、『精密構造形成論』に先鞭をつけようとしている。そのために銀河形成モデルを含む宇宙論的流体シミュレーションを実行し、宇宙における全物質の 3 次元分布を時系列で追っている。

我々の研究グループでは Gadget-3 (Springel 2005) という宇宙論的 N-body/SPH コードに、星形成や超新星 feedback に関する物理的モデルを付加した改訂版を作成した。シミュレーションの粒子数としてはガスとダークマターでそれぞれ 2×256^3 , 2×512^3 のものを走らせている(ガスとダークマターがそれぞれ 256^3 , 512^3 粒子ずつあるので、 $\times 2$ となる)。 512^3 粒子数の場合、一つの snapshot が約 20GB で、約 20 snapshot を一つのランでアウトプットする。

高密度領域ではガスがダークマターのポテンシャル井戸に落ち込み、放射冷却によって冷えると銀河形成が始まり、徐々にガスから星が生成される。シミュレーションの中ではその過程を subgrid モデルとしてモデル化しており、条件を満たした場合にガス粒子を徐々に星粒子に変換していく。生成した個々の星粒子にはその質量、形成時期、金属量などがタグとして記録されている。また星から放出される輻射が宇宙空間を満たして宇宙背景紫外線場が生成されることが知られているが、これも空間的に一様なモデル(Haardt & Madau 2012)を適用している。この宇宙背景紫外線場が銀河間物質(Intergalactic Medium; IGM)との輻射電離平衡に達し、ある温度と密度の比例関係 ($T \propto \rho^{\gamma}$)を生む。

宇宙論的シミュレーションといえども、広大な宇宙空間に比べると体積はまだ小さく、観測と比較するためにはシミュレーションの箱をいくつも繋げて light-cone output を作成しなくてはならない。そしてその light cone に何本も視線(Line-of-sight; LOS)を打ち、LAF プロファイルを計算する。図 4 に LOS の具体的な結果の一例を示す。ここではガスの

固有運動によって H_I column density プロファイルと吸収線の位置が微妙にシフトしていることが見て取れる。シミュレーションからは本来ここに示しているよりもより高解像度の吸収線プロファイルが得られるのだが、ここでは実際の PFS 観測の解像度にならざるを得ずとして計算結果を示しているの、下段 3 つのパネルでは吸収線プロファイルがかなり荒く見えている。

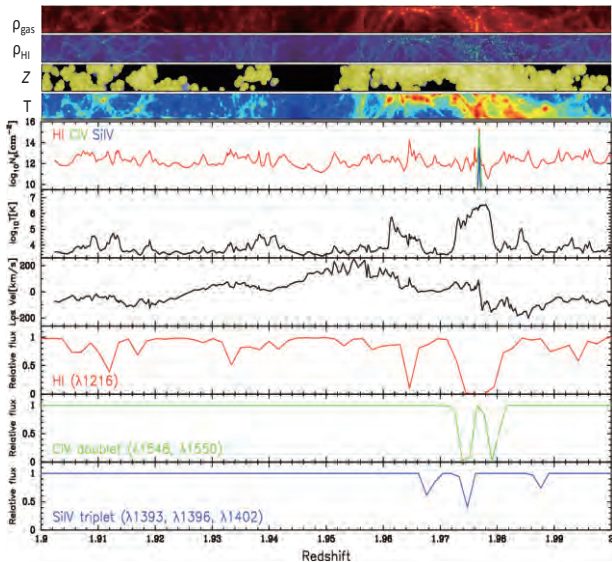


図 4 シミュレーションに実際に打った一本の視線(LOS)から得たデータ。上 4 つの小さなカラーパネルは上からガス密度、中性水素(H_I)、金属量(metallicity)、温度をシミュレーションから切り取ったもの。その下から H_I column density、温度、ガスの固有速度、LAF 吸収線、 CIV 吸収線、 $Si IV$ 吸収線のプロファイルを $z=1.9-2.0$ の赤方偏移区間について示している。

4. その他の初期結果

4.1 Ly- α forest パワースペクトル

既に図 2 と図 4 で紹介した LAF をシミュレーションから計算して統計的に解釈するためには、LOS 方向の 1 次元パワースペクトルを用いる。図 5 にシミュレーションから計算した 1D LAF パワースペクトルを観測データと比較したものを示す。宇宙論においては、視線方向の距離は宇宙膨張を含む速度空間で表現されることが多いので、ここでは横軸は速度波数空間($\propto v^{-1}$ [$s\ km^{-1}$])になっている。低い k の値、即ち large scale 側では概ねシミュレーションと観測データが一致しているが、高い k (small scale)側ではシミュレーションの結果の方が低く出る傾向があ

り、今後さらにその原因を精査していく必要がある。現在の解析によると $P(k)$ を計算する際の速度幅に low- k 側が影響されることがわかっており、観測とのさらなる詳細のすり合わせが必要である。



図 5 シミュレーションから計算した LAF の 1D パワースペクトルを観測データと比較したもの。4 本の曲線はそれぞれ上から下に赤方偏移 $z=2.8, 2.6, 2.4, 2.2$ に対応するもので、赤方偏移進化も含めて大まかにシミュレーションで再現できていることがわかる。

4.2 銀河周辺の中性水素ガス分布

銀河の周辺に中性水素がどのように分布しているのかという点は 10 年以上前から議論されてきている課題である。ダークマターハローのポテンシャルの中にガスが落ち込めば密度が高くなり放射冷却率も高くなるので、水素の中性度も上がると考えられる。しかし、同時に断熱圧縮や Virial shock によりガスが加熱される。また、中心の銀河で星形成が活発に起きれば、超新星爆発によるフィードバックや電離光子も銀河から吹き出てくる。これらの幾つもの効果が同時に働くので、一概に中性度が上がるのか下がるのか分からないところがある。シミュレーションではこれらの物理過程をできるだけ物理的に ab initio に解こうというわけである。

図 6 に数多くの LOS データから銀河との距離 (impact parameter “ b ”) に応じて、水素の中性度を「平均化した吸収の度合い」から測ったものを示す。まず全体的に銀河に近づくほど吸収度が高くなり、中性度が上がっている様子が見て取れる。Impact parameter $b > 1\ cMpc/h$ においては シミュレーショ

ンの結果と観測データはよく合っており、 $b < 1$ cMpc/h の small scale においては平均を計算するときの銀河からの速度幅の取り方に結果が影響されることがよくわかる（4本の線）。観測データもそのバラツキの範囲内に含まれている。このように $b > 1$ cMpc/h の大スケール側でデータとよく一致することは現在の標準宇宙モデルである Λ CDM モデルをサポートするものであり、 $b < 1$ cMpc/h の小スケール側のデータはフィードバックなどの物理に制限をつけるのに役立つと期待される。

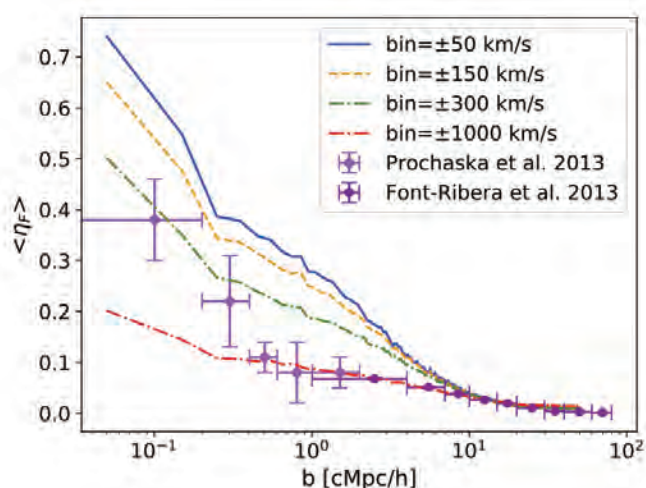


図 6 縦軸に LAF 吸収の平均的度合いを、銀河からの impact parameter (comoving Mpc/h) の関数として表現したもの。 $b > 1$ cMpc/h においては シミュレーションの結果と観測データ (Prochaska et al. 2013; Font-Ribera et al. 2013) はよく合致し、 $b < 1$ cMpc/h の small scale においては分布平均を計算するときの銀河からの速度幅の取り方に結果が影響されることがよくわかる。4本の線がその異なる速度幅の取り方の違いに対応している。観測データもそのバラツキの範囲内に含まれている。

5. 今後の展開

今後は、さらに PFS 観測に対応する擬似 LAF データを作成・解析し、主要観測パラメータの決定にも貢献していく。上述の IGM tomography に加えて、ALMA や SPICA 宇宙望遠鏡計画は銀河に付随するダストの分布に関してもその熱放射データを得るため、我々のシミュレーションと直接比較することで、フィードバックやダストの生成・破壊などの理論モデルの検証が可能である。また、我々は数年後に始まる JWST 宇宙望遠鏡による高赤方偏移銀河についても様々な理論的予測(光度・質量関数など)を提供できる。早期宇宙における矮小銀河形成とそれが作

る電離バブルの研究は、SKA プロジェクトによる宇宙再電離過程の電波観測にも直結している。このように本研究は実際の天文観測データと密接な関連があり、机上の空論ではない。最先端の理論的・数値的テクニックを駆使して実際の観測データとシミュレーションを詳細に比較することで、現在の構造形成理論と宇宙論モデルを検証・発展させていく。

シミュレーションの面では、やはり小スケールにおける解像度の不足が常に課題となっている。そのため H30 年度の計算機資源割り当てによって 1024^3 の粒子数の計算にアップグレードし、simulation box の大きさもより大規模なものにして観測データとの比較に耐えうるものをさらに実行していく予定である。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP17H01111 の助成を受けています。また、ここで紹介した研究内容は、大阪大学の清水一紘研究員、大学院生の藤田勝美さん、IPMU の鈴木尚孝さんと K.G. Lee、及びすばる PFS-galaxy チームとの共同研究の成果です。

参考文献

- (1) V. Springel, et al. Nature, **440**, 1137-1144 (2006).
- (2) K.-G. Lee et al. ApJL, **795**, L12 (2014).
- (3) V. Springel, MNRAS, **364**, 1105-1134 (2005).
- (4) F. Haardt & P. Madau, ApJ, **746**, 125 (2012).
- (5) J. X. Prochaska, et al. ApJ, **776**, 136 (2013).
- (6) Font-Ribera, et al. JCAP, **5**, 018 (2013).

キロテスラ級磁場下における超高強度レーザープラズマ相互作用の物理

畑 昌育

大阪大学 レーザー科学研究所

1. はじめに

本報告は、平成 28 年度に実施された若手・女性研究者支援萌芽枠によって実施された研究をさらに推し進め、平成 29 年度の若手・女性研究者支援萌芽枠の下で実施したものである。したがって前半の報告内容については CMC の HPC Journal, No. 7, p.25-28, July, 2017 のものと同様である。既に背景などご存知の方は、4.強磁場化レーザープラズマ相互作用から読み進められたい。

2. 背景

1994 年の CPA 技術の発見[1]により、レーザーの出力は飛躍的に向上し、2 PW という大出力レーザーを建設することが可能となっている。この出力のレーザー光を数ミクロン程度のスポットまで絞ると、 10^{22} W/cm² という超高強度の光を作り出すことができる。我が国では、量子科学技術研究開発機構関西光科学研究所にて開発されている J-KAREN レーザーがこのような超高強度レーザー装置に該当し、その各種パラメータは 30 J、30 fs、1 PW となる見込みである[2]。また、大阪大学レーザーエネルギー学研究センターには、レーザー強度では 10^{20} W/cm² 程度と劣っているもののエネルギー量で J-KAREN レーザーを大きく上回る LFEX レーザーがあり、世界最高の出力性能を誇っている[3]。そのパラメータは 3 kJ、1.5 ps、2 PW である。また、世界的にも大出力超高強度レーザーの建造が急ピッチで進められており、今後、米国、欧州、中国などで複数の装置が稼働する見通しである。これらのレーザーは主に、核融合、核物理、宇宙物理といった基礎研究から、発生する高エネルギー量子線の基礎研究応用・医療応用といった応用研究まで幅広く利用される。このような状況の中、阪大レーザー研では、FIREX プロジェクトという高速点火レーザー核融合研究プロジェクトが立ちあげられ、今日まで精力的な研究が実

験・理論の両面から行われてきている[3]。

高速点火方式レーザー核融合のシナリオを、図 1 に示す。まず、爆縮レーザーを四方八方から照射する (①)。これにより、ターゲット表面は瞬時にプラズマ化し、プラズマ膨張の反作用によりターゲットが圧縮される (②)。そして、最大圧縮時に、噴出プラズマのないコーン内に超高強度レーザーを投入しコーンとの相互作用により生成された高エネルギー電子を用いてコアを加熱する (③)。最後に点火・燃焼が起こる (④)。研究グループは、これまでの研究により、本方式の数々の課題を明らかにし、それらの克服に向けて研究を進めてきた。近年大きな問題となっていることの 1 つに、図 1 のステップ③において生成される高エネルギー電子が大きな発散角を持ち、生成点がコアから離れていると爆縮コアにエネルギーを落とせないというものがある。そのような中、2013 年に高出力レーザーを用いることで、実験室においてキロテスラ級の強磁場を生成できることが報告され、強磁場を使って、レーザー生成高エネルギー電子を効率よくコアまで輸送する方法が提案された[4、5]。

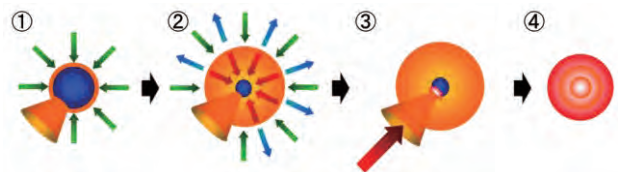


図 1 高速点火方式レーザー核融合のシナリオ

磁場とプラズマとの歴史は長く、磁場閉じ込め核融合や宇宙プラズマでは数多くの研究がなされてきているが、レーザープラズマの分野ではそれほど研究例は多くない。レーザープラズマの特徴として、非常に短い時間スケール（プラズマ振動の時間スケール）と超高強度の電磁波（電子が相対論領域まで加速される程強い電場）、そして生成されるプラズマが高エネルギー密度状態であることが挙げられる。

近年生成可能になった強磁場環境と高エネルギー密度状態（レーザー生成プラズマ）の二つの極限状態の組み合わせは、これまで実験することのできなかったパラメータ領域であり、未踏の研究領域である。

本研究では、強磁場中の超高強度レーザーとプラズマとの相互作用について相対論的電磁粒子コードを用いた計算機シミュレーションを行い、その物理を明らかにする。

3. 相対論的電磁粒子コード

相対論的電磁粒子コードとは、荷電粒子の相対論的運動方程式および Maxwell 方程式をカップリングして解くコードであり、電磁場とプラズマとの相互作用を自己無道着に解くことができる。電磁場は格子量として扱われ、Maxwell 方程式を時間・空間的に差分化する。荷電粒子は粒子として扱い、運動方程式を時間的に差分化する。計算のアルゴリズムは図2に示すような順になり、①粒子の位置・速度から電荷密度・電流密度を計算、②電荷密度・電流密度から電磁場を更新、③電磁場から力を計算、④力から粒子の位置・速度を更新となる。このループを計算したい時間分だけ繰り返し、計算を実行する。粒子コードの詳細については、C. K. Birdsall の本などを参照されたい[6]。

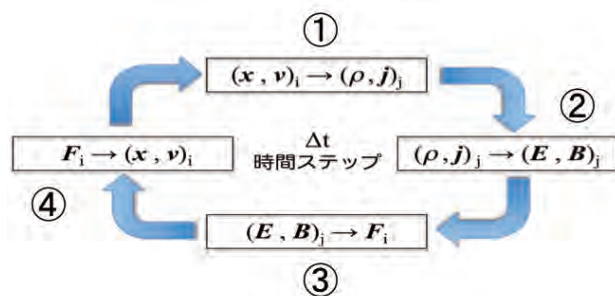


図2 粒子コードの計算アルゴリズム

一般に、粒子コードでは、電磁場よりも荷電粒子の計算が重いため、粒子のループについて並列化を行うことで大幅な計算時間の短縮が可能となる。また、大規模な計算をする場合には、大量のメモリが必要となるため、領域分割による並列化を行い、担当する領域の電磁場と粒子のみを解くようにすればよい。

4. 強磁場下レーザープラズマ相互作用

4.1 シミュレーション条件

考える系はシンプルかつ実験に近いものを扱い、複数回の実行が可能な計算規模（時空間サイズ）に設定した。レーザーやプラズマのパラメータは実験に近い条件をなるべく採用した。レーザーは空間的にはガウシアン、時間的には矩形のプロファイルを持つものを想定し、最大強度 $4 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$ 、波長 $1 \mu\text{m}$ 、スポット径(FWHM) $20 \mu\text{m}$ 、パルス幅半無限の直線偏光とした。ターゲットは、レーザーのメインパルスに先行する比較的低強度ではあるが長パルスであるプリパルスによってあらかじめプラズマ化・膨張しているとして、スケール長 $20 \mu\text{m}$ のプリプラズマ付き CH プラズマを置いた (図3)。そして、外部磁場として x 方向に平行磁場 50 kT を印加し、 600 fs のシミュレーションを実施した。

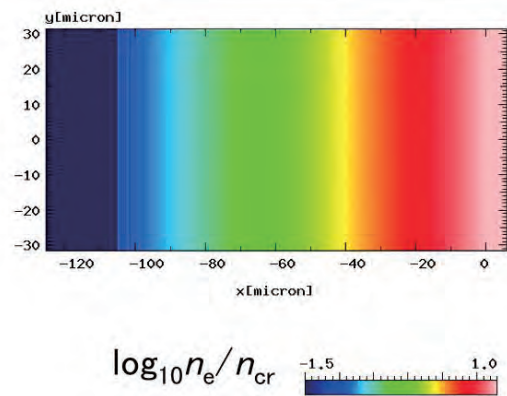


図3 ターゲットの初期電子密度

4.2 高密度磁化プラズマ中のレーザー伝播

図4に200, 300, 400, 500 fsにおけるレーザー周期で平均した電場強度および電子密度の二次元プロファイルを示す。磁場なしの場合に電磁波が侵入できなくなる古典臨界密度(n_{cr})は、 $x = -60 \mu\text{m}$ の辺りで、レーザーが相対論的強度であるため、その効果を考慮した場合には相対論的臨界密度が古典臨界密度の約2倍となり、その密度は $x = -46 \mu\text{m}$ の辺りになる。図4より、非常に強い磁場をかけた場合には、レーザーが古典的臨界密度だけではなく、相対論的臨界密度をも超えて伝播していることがわかる。また、図4 (a-3)を見ると、一部の成分は $x = 24 \mu\text{m}$ の辺りで反射されており、一部成分はさらに高密度領域ま

で侵入していることがわかる。この $x = 24 \mu\text{m}$ における電子密度を調べると $6n_{\text{cr}}$ となっていた。外部磁場に平行に伝播する電磁波の線形分散関係によると、今回のシミュレーションのパラメータの場合、右回りの円偏光成分は臨界密度が消失し、左回りの円偏光成分に対しては臨界密度が $6n_{\text{cr}}$ となる。シミュレーションの結果は、概ね線形分散関係の通りとなっているが、図 4(a-4,5)を見ると後続のパルスが高密度領域に伝播することができなくなっていることがわかる。このことは理論的な予測とは異なる振る舞いであり、なんらかの電磁波伝播の阻害機構があると考えられる。

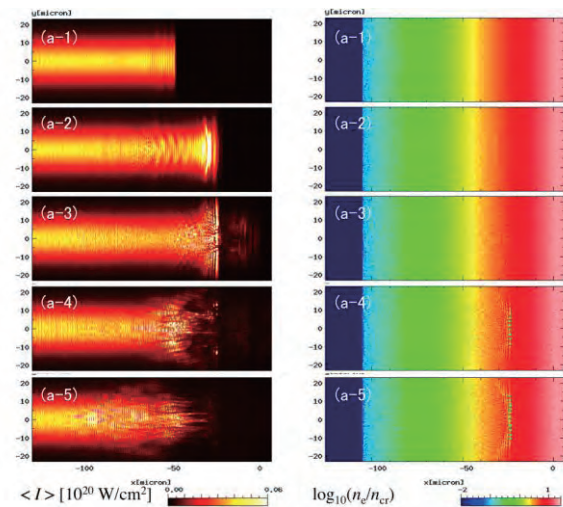


図 4 $t = (1)200, (2)300, (3)400, (4)500, (5)600$ fs におけるレーザー周期で平均した電場強度(a)と電子密度(b)の二次元プロファイル

より詳細にこの現象を調べるために、右回り円偏光のレーザーを用いて一次元的な計算を実施した。この計算では、 y 方向のメッシュを極端に減らすことで一元的な計算を実施している。そして、レーザーは y 方向に関しては一様として、最大強度 $1.37 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$ で打ち続けた。図 5 にその結果として、(a)150, (b)200, (c)250 fs における電磁場エネルギーおよび電子密度の空間プロファイルを示す。黒線は電子密度を、青線は電磁場エネルギーを示している。図 5(b)を見ると、パルスの先頭部分は高密度プラズマ部分を伝播し、真空領域に抜けていることがわかる。また、その際一部の成分がプラズマ後面で反射している。そして、それとは別に、プラズマの前面において、後続のパルスが高密度領域に伝播できな

くなくなると共に反射が起きていることがわかる。さらに図 5(c)の時刻をみると、後続のパルスは全く高密度プラズマ領域に入らないことがわかる。

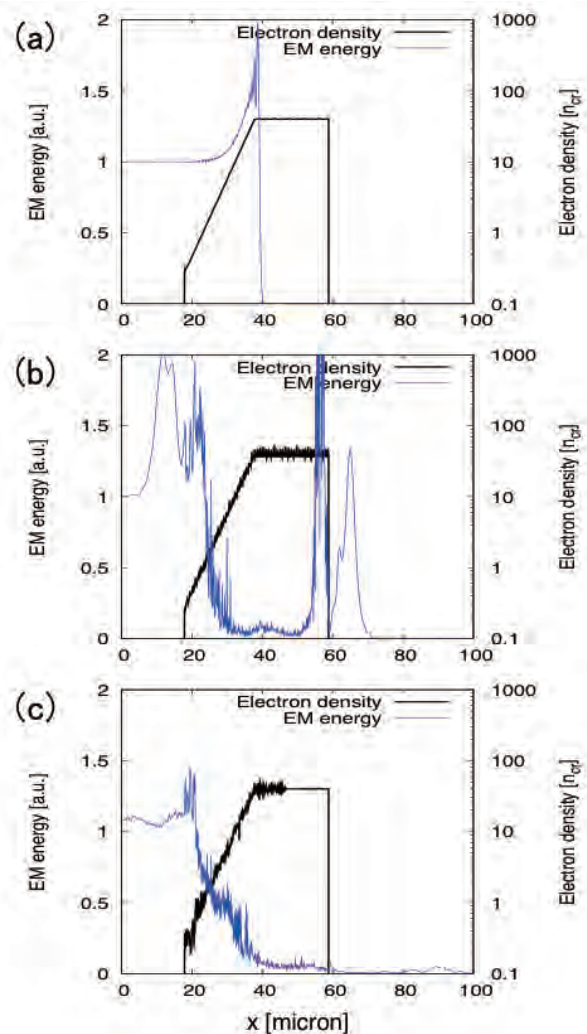


図 5 外部磁場が(a)0.5 kT および(b)5 kT の場合の $t = 500$ fs におけるレーザー周期で時間平均した x 方向磁場の二次元プロファイル

4. 3 右回り円偏光レーザーの伝播阻害要因

前節の結果から、 $x = 25\text{--}40 \mu\text{m}$ の辺りで右回り円偏光レーザーの伝播を阻害する何かが起きていると考えられたため、その領域を詳細に調べた。図 6 に、 $x = 25\text{--}40 \mu\text{m}$ におけるイオンの位相空間 ($x\text{-}P_x$) を示す。150 fs の時には位相空間上ではほとんど動かないイオンが 200 fs の時には $x > 34 \mu\text{m}$ の辺りで縦波を生じてきており、さらに時間の経過した 250 fs では、 $x = 25\text{--}35 \mu\text{m}$ の領域で大振幅の波に成長している様子がわかる。これはイオン音波である。右回り円偏光のレーザーが伝播できにくくなる時刻に波が成長し始め、そして全く伝播できなくなっている

250 fs においてはイオン音波が十分に成長していることが明らかになった。プラズマ中の波動では、一つの波が複数の波に別れたりすることがあるが、この現象においては、入射の右回り円偏光の電磁波（磁場中ではホイッスラー波と呼ばれる）がイオン音波と反射の右回り円偏光の電磁波とに別れており、その結果、後続のパルスが高密度プラズマ領域に侵入できなくなっているということがイオン音波の波長と入射と反射の電磁波の波長を確認することにより明らかになった。

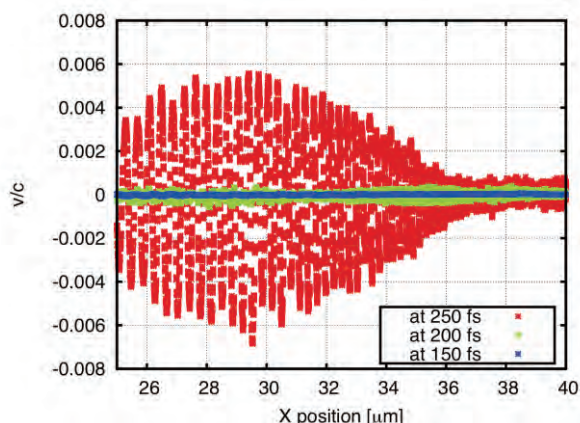


図6 ターゲット後方($x = 4 \mu\text{m}$)で計測した電子ビームフルエンスの外部磁場強度依存性

5. おわりに

本研究では、強磁場中の超高強度レーザープラズマ相互作用の電磁粒子シミュレーションを行い、非常に強い外部磁場印加下における超高強度レーザーの高密度領域伝播について調べた。その結果、線形分散関係の上では、臨界密度のない右回り円偏光レーザーがイオン音波の発生により伝播を阻害され、高密度領域に侵入できなくなることを発見した。最後に、若手・女性研究者支援萌芽枠採用により本研究を大きく進展させることができましたことに深く感謝申し上げます。

参考文献

- (1) M. D. Perry and G. Morou, *Science*, **264**, 917, (1994).
- (2) <http://www.kansai.qst.go.jp/research-1.html>
- (3) H. Azechi and FIREX Project Team, *J. Phys.: Conf.*

Ser., **717**, 012006 (2016).

- (4) S. Fujioka et al., *Sci. Rep.*, **3**, 1170 (2013).
- (5) T. Johzaki et al., *Plasma Phys. Control. Fusion*, **59**, 014045, (2017).
- (6) C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma physics via computer simulation*, CRC press (2004).

日本の全世帯の位置情報付き仮想個票データの統計データからの生成

原田 拓弥¹⁾、杉浦 翔²⁾、村田 忠彦³⁾

¹⁾ 関西大学大学院 総合情報学研究科 総合情報学専攻

²⁾ 関西大学大学院 総合情報学研究科 知識情報学専攻

³⁾ 関西大学 総合情報学部 総合情報学科

1. はじめに

災害対策や経済対策などの政策決定において、全体的な影響だけでなく、その政策の個々の市民への影響を見る必要性が高まっている。その方法の一つとして社会シミュレーションへの関心が集まっている[1]。特に個々の市民のシミュレートを可能にする Agent-Based Simulation (以下、ABS) [2]がよく利用されている。ABS は、意思決定主体 (人や組織、国など) がもつ特徴を属性や振る舞いとして保持するエージェントを定義し、他のエージェントや環境との相互作用による振る舞いをマクロ・ミクロに観察する手法である。ABS を用いることにより、得られたシミュレーション結果が発生する原因や、エージェントの振る舞い及び環境の変化が双方に与える影響の分析が可能となる。

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

いて、モデルの粒度を現実社会に近づけるほど、エージェントの意思決定においても、可能な限り現実の意思決定主体と同様の振る舞いを模倣する必要がある。

現実社会を模倣するモデル上で、エージェントが現実の意思決定主体を模倣した意思決定をモデルに組み込むためには様々な課題がある。その課題の一つがエージェントの保持する属性の設定である。エージェントの属性の設定に政府や行政が収集している戸籍や納税のデータを用いることができれば、現実社会と整合するエージェントの属性の設定が可能である。しかし、これらの個人の情報は個人情報保護やプライバシーの観点から利活用が困難である。

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

これらの研究のように、特定の状況をパラメータとしてもつモデルを用いてシミュレーションを行う場合、研究者はシミュレーションモデルだけでなく、

モデルを適用する仮想都市の構築に取り組む必要がある。特に、仮想都市の構築において、エージェントが保持する属性の数が増加するほど、妥当な仮想都市の構築が困難となる。仮想都市の構築が研究者の負担となり、新規参入の障壁となっている。

これらの問題を解決するために、統計情報を用いた仮想の個人の属性（以下、仮想個票）を生成する研究が行われている。仮想個票の生成に関する研究の歴史は古く、**Synthetic Reconstruction method**（以下、**SR 法**）[11]として知られている。SR 法は、統計調査時に市民や調査員が記入する個票データのサンプルをもとに、**Iterative Proportional Fitting Procedure**（以下、**IPFP**）[12]を用いて仮想個票を生成する手法である。IPFP とは、 N 次元（ N 属性）からなるクロス表の各セルの行や列の総和が統計値に適合するように、繰り返し処理を用いて各セルの値を推計する手法である。その後、数多くの仮想個票を生成する手法が提案されているが、基本的に SR 法に基づく手法である。Barthelemy ら[13]は、IPFP の弱点として、個人の統計表と世帯の統計表のどちらかに適合する仮想個票の生成ができたとしても、両方に適合する仮想個票の生成が困難であることを指摘している。この課題を解決するため、Gargiulo ら[14]や Barthelemy ら[13]は、個票データのサンプルを用いない生成手法を提案している。Lenormand ら[15]は、SR 法と個票データのサンプルを用いない手法と比較し、前者がよりよく仮想個票を生成できていることを示した。

これらの海外の研究では、それぞれの国において利活用可能な統計情報や世帯構成の特徴に基づいた手法が開発されている [14]。本邦の統計表を用いた手法として花岡 [16]は個票データのサンプルを用いた手法を提案している。一方、著者ら[17-19]は個票データのサンプルを用いずに、探索手法の 1 つである **Simulated Annealing**（以下、**SA 法**）を用いた手法を提案している。

本研究では、日本全国、約 1900 市区町村（平成 27 年度国勢調査）において、2000 年、2005 年、2010 年、2015 年における位置情報付きの仮想個票を 10

セット作成する。また、本研究では、図 1 に示す 16 種類の家族類型中、日本の全人口の 95%をカバーする 9 種類の家族類型を対象に、仮想個票を生成する。本研究が生成する仮想個票の例を図 2 に示す。図 2 では世帯の属性として、家族類型・所属する市区町村及び町丁目・居住地の位置情報・住宅所有の関係・住宅の建て方属性を、各構成員は年齢・性別・世帯内の役割・就業状態・産業分類・就業形態・企業規模・所得属性を保持している。

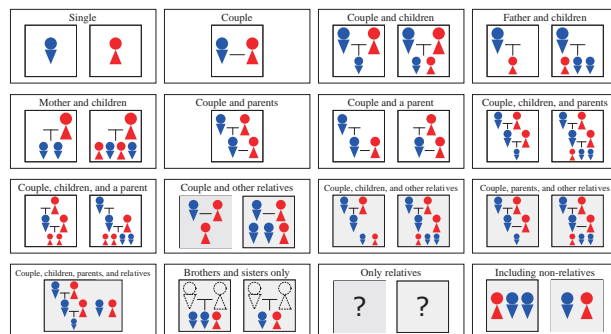


図 1 家族類型一覧（本研究の対象は黄色の 9 種類）

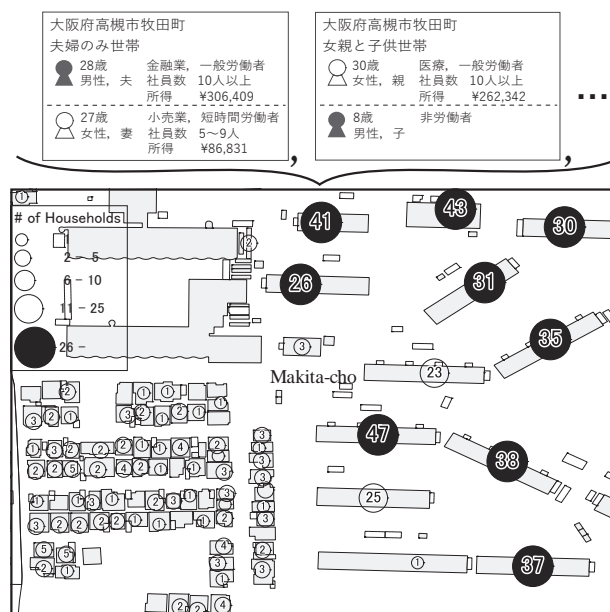


図 2 生成する仮想個票の例

2. 仮想個票生成手法

本研究では 2000 年から 2015 年における日本全国の仮想個票の属性を以下の手順で生成する。

手法1 日本全国の仮想個票の生成（家族類型、年齢、性別、世帯内の役割）[17]

手法2 手法1のデータへの SA 法を用いた住宅所有の関係と住宅の建て方の属性の追加[18]

- 手法3 手法2のデータへのSA法を用いた市区町村単位における町丁目の属性の追加[18]
- 手法4 手法3のデータへの建築物情報を用いた建築物の位置情報の追加[18]
- 手法5 手法1のデータへのSA法を用いた就業状態、産業分類、就業形態、企業規模、所得の属性の追加[19]

2.1 手法1：仮想個票の生成[17]

著者らが提案した仮想個票の生成手法[17]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生成を試みている。

著者らは、対象地域と同じ人口規模の仮想個票を生成するために、対象地域の世帯数や人口などの統計表通りに初期世帯を生成している。著者らの初期世帯生成法[17]では、家族類型、世帯人員別に初期世帯を生成し、その後個人に性別と初期の年齢を設定している。初期世帯を生成する際には、国勢調査 人口等基本集計 表7、表11、表16-1を用いて推計した家族類型（16区分）、世帯人員（16区分）別世帯数のデータを用いる。例えば、夫婦と子供世帯において世帯人員数が8人の世帯が100世帯と統計表に記載されている場合、夫婦と子供世帯における子供が6人存在する世帯を100世帯生成する。その後、国勢調査 人口等基本集計 表16-1を用いて、各個人の性別と初期の年齢を設定する。

初期世帯生成後、著者らは以下の手続きにより、仮想個票と統計表との差をSA法を用いて最小化している。

- Step 1-1 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 1-2 選択した2人の年齢を入れ替える。
- Step 1-3 仮想個票と統計表との差を計算する。
- Step 1-4 メトロポリス法により解を遷移判定する。

Step 1-5 探索回数が規定数以下の場合、Step 1-1に戻る。

Step 1-3 では、以下の式を用いて仮想個票と統計表との差を計算している。

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

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

2.2 手法2～5：仮想個票へ新たな属性の追加[18, 19]

2.1節で生成した仮想個票が保持する属性は4種類であり、これらの属性のみを用いて実現できるシミュレーションは限られている。仮想個票が多様な属性を保持することにより、様々なシミュレーションが実現できる。

著者らは、以下の手順により、仮想個票へ新たな属性を追加している。

Step 2-1 既存の属性と新たに追加する属性とを関連付ける統計表を複数見つける。

Step 2-2 新たに追加する属性を各世帯の構成員にランダムに割り当てる。

Step 2-3 SA法を用いて、Step 2-1の統計表と一致するように割り当てた属性を調整し、統計表と仮想個票との差を最小化する。

上記の手順を用いて、文献[18]では、住宅所有の関係や住宅の建て方、町丁目属性を仮想個票へ追加している。文献[19]では、就業状態・産業分類・就業形態・企業規模・所得属性を仮想個票へ追加している。

3. 生成結果

本研究では、日本全国の約1900市区町村における、2000年、2005年、2010年、2015年を対象に仮想個票を10セット生成する。生成対象の人口及び世帯数の一例を表1に示す。本研究において政令指定都市を対象とする場合、政令指定都市下の行政区を

対象とする。これは、政令指定都市下の行政区は仮想個票を生成する上で必要となる統計表が公開されているからである。表 1 の市区町村数は政令指定都市下の行政区を含み、政令指定都市と図 1 の 9 種類の家族類型に属する個人が存在しない地域を除いた。

仮想個票を生成する際に発生する統計表との差の一例を表 2 に示す。生成時の設定として、探索回数を手法 1 は 100,000 回 / 人、手法 2 は 1,000 回 / 世帯、手法 3 は 10,000 回 / 世帯、手法 5 は 500 回 / 人とし、SA 法のパラメータは初期温度 1.0、収束温度 0.1、指数冷却とした。表 2 から、手法 1 における統計表との誤差は 9,500 前後である。これは、合成対象の約 1 億人に対して、約 9,500 人ほど、統計表と生成した仮想個票に相違があることを示している。手法 2 では約 22 万世帯、統計表と仮想個票に相違がある。手法 3 では統計表と仮想個票に約 400 万人の相違があり、手法 1、2 と比べ大きな誤差が発生している。手法 3 は手法 1 と手法 2 の後に町丁目属性の追加をしている。そのため、手法 3 の統計表との誤差は手法 1 と手法 2 の統計表との誤差の影響を受ける。また、町丁目属性の追加に用いる統計表は粗い統計表しか公開されていない。そのため、手法 1 と手法 2 に比べ統計表の調整や推計が必要となり、仮想個票を統計表に適合させることが困難であった。手法 5 の統計表との誤差は 2010 年に比べ 2015 年が多い。これは、手法 1 の影響を受けた結果、2010 年と比べ 2015 年の統計表との誤差が増加したと考えられる。

表 1 対象の市区町村数、世帯数及び人口

年度	市区町村数	世帯数	人口
2010	1,901	49,389,597	116,161,897
2015	1,891	50,962,785	115,552,530

表 2 統計表との誤差 (10 試行の平均値)

手法	年度	
	2010 年	2015 年
手法 1 世帯構成の生成	9,205.8	9,845.8
手法 2 住宅関連属性の追加	226,151.6	219,943.8
手法 3 町丁目属性の追加	4,165,598.1	4,582,970.5
手法 5 所得関連属性の追加	56,599.0	65,233.0

4. おわりに

本研究では、日本全国の約 1900 市区町村における、2000 年、2005 年、2010 年、2015 年の統計情報を用いた、図 2 に示す属性をもつ仮想個票を 10 セット作成した。本研究により生成した仮想個票の提供を予定しており、希望される研究者がおられれば、関西大学 村田 (murata@kansai-u.ac.jp) まで連絡をいただきたい。

参考文献

- (1) J. M. Epstein and R. L. Axtell, MIT Press, (1996).
- (2) K. M. Carley and W. A. Wallace, Springer US, (2001).
- (3) R. Axelrod, Princeton University Press, (1997).
- (4) 高橋真吾, 計測と制御, **52**, 582–587, (2013).
- (5) 出口弘, 計測と制御, **52**, 574–581, (2013).
- (6) 高橋大志, 計測と制御, **52**, 641–647, (2013).
- (7) 寺野隆雄, 人工知能学会誌, **18**, 6, 710–715, (2003).
- (8) 市川学, 出口弘, 計測自動制御学会論文集, **49**, 11, 1012–1019, (2014).
- (9) 花岡和星, 地学雑誌, **118**, 4, 646–664, (2009).
- (10) 杜逆索, 村田忠彦, システム制御情報学会論文誌, **29**, 9, 422–431, (2016).
- (11) A. G. Wilson and C. E. Pownall, Area, **8**, 4, 246–254, (1976).
- (12) W. E. Deming and F. F. Stephan, The Annals of Mathematical Statistics, **11**, 428–444, (1940).
- (13) J. Barthelemy and P. L. Toint, Transportation Science, **47**, 2, 266–279, (2012).
- (14) F. Gargiulo, *et. al.*, PLoS One, **5**, 1, 266–279, (2010).
- (15) M. Lenormand and G. Deffuant, Journal of Artificial Societies and Social Simulation, **16**, 4, 1–9, (2013).
- (16) 花岡和星, 人文地理, **64**, 3, 195–211, (2012).
- (17) T. Murata, *et. al.*, SICE JCMSI, **10**, 6, 513–519, (2017).
- (18) T. Harada and T. Murata, SICE JCMSI, **10**, 6, 505–512, (2017).
- (19) T. Murata, *et. al.*, Proc. of IEEE SSCI, 471–476, (2017).

ゴム材料中のナノ粒子構造に対するディープラーニング画像認識モデルの分散学習による高速最適化技術手法の検討

萩田 克美

防衛大学校 応用物理学科

1. はじめに

ディープラーニング技術は、ビジネスや産業の応用を中心として、急速に発達している[1-8]。特に、自動運転技術[5]のコアである画像認識の性能が、従来よりも圧倒的に高いことが牽引力である。また、Alpha GO [6]は、ディープラーニング技術の応用として有名である。ディープラーニングは、ニューラルネットワークを用いた機械学習の1つであり、多層のニューラルネットワークを用いることが特徴である。機械学習の主たるタスクは、教師付データの認識、教師なしデータの分類、回帰予測の3つである。様々な分野でこれらのタスクに対して、ディープラーニングが高い性能を示すことが報告されている。また、ソフト環境や入門書も充実し、比較的簡単に利用することができる[9,10]。ゴム材料に関する計算科学的研究でも活用が進んでいる[11,12]。我々は、ゴム中のフィラーの断面像について、ディープラーニングによる画像分類が、従来の HOG 特徴量の SVM による分類よりも、遙かに高性能であることを報告した[11]。また、ディープラーニング技術の1つである SRGAN を用いた超解像化処理について、集束イオンビーム走査型電子顕微鏡 (FIB-SEM) の非対称な解像度での観察における有効性について報告した[12]。ディープラーニングの性能を高めるためには、ネットワーク構成や、様々な閾値パラメータや関数などを最適化する必要がある。これは、ハイパーパラメータの最適化と呼ばれる。

本課題では、ハイパーパラメータの最適化において、遺伝的アルゴリズム等を適用することで、ゴム材料に関するデータに対するディープラーニングの性能を、半自動的に向上させる手法・仕組みの構築に向けて、準備的な検討を実施した。

2. Deep Learning による画像分類と最適化

Deep Learning による画像分類について、情報理論的な側面ではなく、計算機利用の観点で簡単に説明する。畳み込みニューラルネットワーク (CNN) による事例としては、TensorFlow のチュートリアルでの MNIST の手書き数字の分類がよく知られている。この事例では、畳み込み層が3層のモデルが用いられている。MNIST と同じようにデータを準備すれば、顔写真などの任意の画像データに対するディープラーニングは、Tensorflow などのツールを用いて簡単に実施することができる[9]。

2.1 TensorFlow と Keras について

Tensorflow は、Google 社が開発したオープンソースのディープラーニングのライブラリである。Keras は、Tensorflow などを簡便に使うための python ベースのラッパーであり、バランスの良さから広く普及している。図1のように、python 中でモデルを定義するスタイルで利用する。

```
model.add(Activation('relu'))
model.add(MaxPooling2D(pool_size=(2, 2)))
model.add(Convolution2D(64, 3, 3, border_mode='same'))
model.add(Activation('relu'))
model.add(MaxPooling2D(pool_size=(2, 2)))
model.add(Convolution2D(128, 3, 3))
model.add(Activation('relu'))
model.add(MaxPooling2D(pool_size=(2, 2)))
model.add(Convolution2D(256, 3, 3))
model.add(Activation('relu'))
model.add(MaxPooling2D(pool_size=(2, 2)))
model.add(Flatten())
model.add(Dense(1024))
model.add(Activation('relu'))
model.add(Dropout(0.5))
model.add(Dense(256))
model.add(Activation('relu'))
model.add(Dropout(0.5))
model.add(Dense(self.nb_classes))
model.add(Activation('softmax'))
```

図1 Keras でのモデルの記述例

2.2 CNN のハイパーパラメータの最適化

Keras の python スクリプトでは、ネットワークの層の数や、種々のパラメータを系統的に変えた性能評価を簡単に行うことができる。多数のパラメータの探索的な最適化手法としては、単純なグリッドサーチやランダムサーチに加えて、python ベースのライブラリを利用することでより効率的な探索法を、手軽に実施することができる。最近、python の進化計算ライブラリ(Deap)を用いて、遺伝的アルゴリズムで2層 CNN のパラメータ探索をする事例も出てきた[13]。本課題では、ハイパーパラメータの最適化において、進化計算の手法と HPC を活用して、効率化する検討を目的とした。

3. ゴム中フィラーの画像分類の計算機実験

我々は、ゴム中のフィラーの断面像に関して、ディープラーニングの画像分類がどのような特性を持ち、必要な条件や最適な条件がどう決まるかに関心がある。特に、実験データを多数用意することが困難であるため、有意な判断を得るために最低限必要な実験データ数や撮影条件に関する情報を得たい。

3.1 撮影領域やデータ数に応じた性能に関する検討

ゴム中のフィラーの画像分類に関する基礎的な検討を行うために、実験データの代わりに、SPring-8 で計測した結果を「京」を用いて逆問題推定したフィラーの3次元構造のデータを用いた(図2)。末端変性 SBR(M-SBR)と、未変性 SBR(n-SBR)の2種類の3次元構造を得ている。

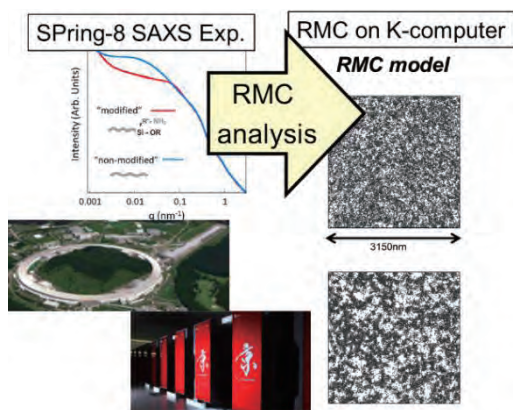


図2 散乱スペクトルからのフィラー構造推定の概要

本検討では、画像データとして、この2種の構造とランダムにナノ粒子を配置した3次元構造(Rnd)から、ランダムな位置でランダムな方向のスライス像を多数作成した。ディープラーニングによる画像認識の性能評価では、学習用、テスト用、評価用の3つのデータセットを利用する(図3)。最初に、撮影領域の大きさと、画像数に対する性能の変化を調べた。評価用の画像数は1000に固定し、学習用とテスト用の画像数を、8000枚毎、2000枚毎、500枚毎とした。撮影領域の大きさは、(250nm)²、(500nm)²、(1000nm)²の3種とした。表1に示すように、画像数が多いほど、正答数が大きくなった。また、(1000nm)²では、500枚毎でも9割の正答率となった。一方で、(500nm)²では、画像数が減ると、n-SBRの正答率が低下した。

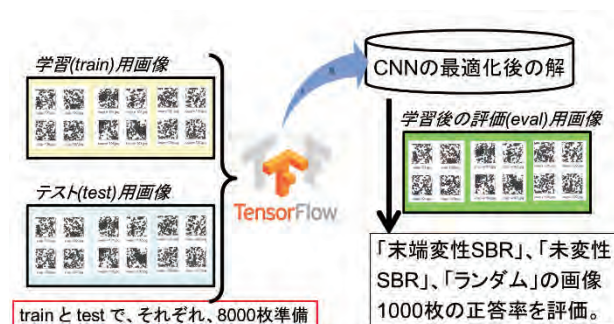


図3 性能評価におけるデータと処理の流れの概要

表1 全結合層の数に対する正答数の挙動

撮影領域	画像数	M-SBR	n-SBR	Rnd
(250nm) ²	8000+8000	434	925	516
(500nm) ²	500+500	981	663	925
	2000+2000	965	791	950
	8000+8000	908	889	993
(1000nm) ²	500+500	914	915	1000
	2000+2000	978	974	1000
	8000+8000	940	995	1000

3.2 FIB-SEM 観察データに対する予備検討

2nm 解像度で FIB-SEM で観察したデータ[14]から、(1000nm)²で880x4枚の画像を取得した。(図4)。M-SBR, n-SBR, Rndの3種類の画像分類を考えた。ハイパーパラメータ最適化の予備検討として、全結合層の数を変えて、正答数の挙動を確かめた(表2)。ディープラーニングのモデルの違いにより、性能が変わることを確かめた。

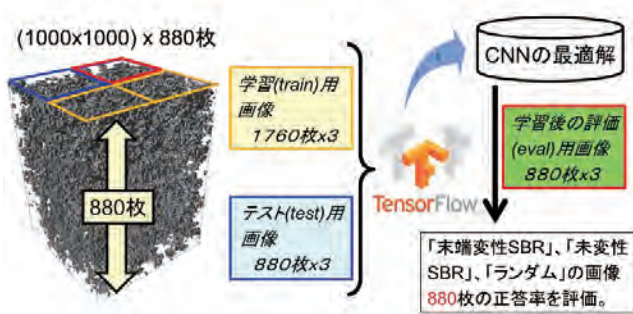


図4 FIB-SEMで観察した3次元像とデータの流れ

表2 全結合層の数に対する正答数の挙動

	M-SBR	n-SBR	Rnd
C4F2	753	767	880
C4F3	744	717	880
C4F4	863	812	880
C4F5	880	766	880
C4F6	878	823	880
C4F7	878	741	880
C4F8	878	833	880
C4F9	880	542	880

3.3 ハイパーパラメータの最適化の検討

基礎的な検討を行うために、3.1 で利用したデータを用いて、ハイパーパラメータの最適化の手法を検討した。最近、ハイパーパラメータの最適化に関しては、多くの研究がなされ、それらの報告がインターネット上でも紹介されている。最終的には、Keras-2 で、python の最適化ツールを併用し、Scikit-learn の GridSearchCV を用いたグリッドサーチやランダムサーチや、Gopt を用いたベイズ最適化、hyperopt を用いた SMBO TPE 探索[15]などのコードが、ゴム中のナノ粒子の断面像のデータに対して動作することを確認した。現在、これらの計算特性や HPC をベースとした処理の最適化について検討し始めたところである。

上記のツールでは、基本的には、シリアルで探索を行い、1つの探索過程で1つのハイパーパラメータセットの学習の計算処理を行う。ディープラーニングの場合、一般に、1つのハイパーパラメータのセットに対する学習には、多くの計算時間を要する。この時間短縮には、1ノードに多数の GPU を搭載した計算装置を用いることが1つの対応である。分散

ノードでの高速化としては、データ並列やモデル並列が考えられるが、これらの検討は今後の課題である。加えて、ハイパーパラメータをシリアルで探索する代わりに、投機的な並列計算で経過時間を高速化する方法も検討する価値は高いと考えられる。さらに、学習済みの結果を再利用することで効率が高められる場合は、その際利用を積極的に行う高速化も重要と考えられる。

4. おわりに

本課題では、ディープラーニングによる画像分類におけるハイパーパラメータの最適化について検討した。Keras-Tensorflow をベースとしたハイパーパラメータの最適化について、実際に動作検証を行った。本課題の計算資源である VCC では、CentOS6 であったため、CUDA7.5、Python3、Tensorflow1.3 などの動作環境整備に多くの時間を費やす結果となった。分散処理については、ノード内のマルチ GPU 利用までは検討したが、ノード間での分散処理の検討は十分にできなかった。現状は、ディープラーニング処理自体の高速化よりも、ハイパーパラメータの探索の高速化の方が、全体性能に与える影響が大きいと思われる。この方向の検討として、効率的な探索法を用いたハイパーパラメータの探索法の検討を引き続き行うとともに、進化的アルゴリズムでハイパーパラメータを探索する方法などの検討を行っていく。

さらに、FIB-SEM などで観察した現実実験のデータに対して、ハイパーパラメータの最適化を検討していく予定である。また、単純な画像分類外にも、高分子材料系の機能-構造関連の予測として、構造に関するデータから、機械的特性などの機能がディープラーニングで予測可能であるかについて検討していく予定である。

謝辞

本研究は、大規模計算機システム公募型利用を通じて、ディープラーニングに関する計算機利用技術を検討した成果の一部である。この公募型利用は、大阪大学 李天鎬博士、名古屋大学 荻野正雄博士、

JSR (株) 富永哲雄博士との共同研究である。また、画像分類の検討に用いたデータは、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」を利用して得られた成果 (課題番号: hp130050, hp140082, hp140239, hp150050, hp150064) を利用している。さらに、JHPCN 公募課題 (課題番号: 10-MD01, 11-MD02, 12-MD03, jh130028-NA19, jh140026-MD02, 14-NA28, jh150002-NA01, jh160036-NAH) や、HPCI 公募課題 (課題番号: hp130062, hp130122, hp140191) などの実施を通じて得られた知見の一部を活用している。

参考文献

- (1) Le Cun, Y., Bengio, Y., Hinton, G.: Deep learning. *Nature* Vol. 521 (2015) pp. 436-444.
- (2) Schmidhuber, J.: Deep Learning in Neural Networks: An Overview. *Neural Netw.* Vol. 61 (2015) pp. 85-117.
- (3) Hinton, G. E., Salakhutdinov, R.: Reducing the dimensionality of data with neural networks. *Science* Vol. 313 (2006) pp. 504-507.
- (4) Russakovsky, O. et al.: Imagenet large scale visual recognition challenge. *Int. J. Comput. Vis.* Vol. 115 (2015) pp.211-252.
- (5) Bojarski, M. et al.: End to End Learning for Self-Driving Cars. arXiv:1604.07316 (2016).
- (6) Silver, D. et al.: Mastering the game of Go with deep neural networks and tree search. *Nature* Vol. 529 (2016) pp. 484-489.
- (7) Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A. *Deep Learning*. MIT Press; <http://www.deeplearningbook.org> (2016).
- (8) Géron, A.: *Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn and TensorFlow*. (O'Reilly Media 2017).
- (9) 有山圭二: TensorFlow はじめました 実践! 最新 Google マシンラーニング, インプレス R&D (2016).
- (10) 有山圭二: TensorFlow はじめました 2 機械学習で超解像, インプレス R&D (2017).
- (11) 萩田克美, 富永哲雄, 曾根卓男, 高橋一郎, Lee Chonho, 荻野正雄: ディープラーニングを用いたゴム中フィラー凝集構造の画像判別の特性評価, *日本ゴム協会誌* 91 (2018) 3-8
- (12) Hagita, K., Higuchi, T., Jinnai, H.: Super-resolution for asymmetric resolution of FIB-SEM 3D imaging using AI with deep learning. *Sci. Rep.* 8 (2018) 5877.
- (13) https://github.com/shibuiwilliam/keras_opt/blob/master/ga_nn.ipynb
- (14) K. Hagita, T. Tominaga, and T. Sone, T.: Large-scale reverse Monte Carlo analysis for the morphologies of silica nanoparticles in end-modified rubbers based on ultra-small-angle X-ray scattering data. *Polymer* Vol. 135 (2018) pp. 219-229.
- (15) Bergstra, J., Bardenet, R., Bengio, Y. and Kegl. B. Algorithms for Hyper-Parameter Optimization, *NIPS* Vol. 24 (2011) 2546-2554.

センター報告

・ 2017 年度大規模計算機システム利用による研究成果、論文一覧	77
・ SC17 出展報告	91
・ 第 23 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2017)報告および 第 24 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2018)告知	97
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	99
・ 2018 年度大規模計算機システム利用講習会	101
・ 2017 年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	102
・ 2018 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	110
・ 2018 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	111
・ 2017 年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	112
・ 2018 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	113
・ 大規模計算機システム Q&A	114

2017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2017年4月から2018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] 福井克成, 廣瀬研二, 佐竹うらら, 榎本俊之, 杉原達也, “Optimization of Polishing Conditions for Reducing Thickness Variation of Wafer in Double-Sided Polishing”, 精密工学会誌, 84巻, 3号, pp. 277-283, 2018年3月.
- [2] 西田修三, 岡田浩明, 中谷祐介, 中友太郎, “発電所取放水を利用した高閉鎖性海域の流動制御に関する検討”, 土木学会論文集B2(海岸工学), 73(3), I_1195-I_1200, 2017.
- [3] K. Fujiwara, M. Shibahara, “Local mass and energy transports in evaporation processes from a vapor-liquid interface in a slit pore based on molecular dynamics”, AIP Advances, (2018) in press, 2018.
- [4] G. Uno, K. Fujiwara, Y. Ueki, M. Shibahara, “Molecular dynamics study on effects of nanostructured surfaces on heterogeneous nucleation of liquid droplets”, Transactions of the JSME (in Japanese), Vol. 84, No. 858, 2018.
- [5] Shohei Araki, Yoshiteru Nasu, Yoshihiro Baba, Vladimir A. Rakov, Mikiyoshi Saito, and Toru Miki, “FDTD Simulation of Lightning Strikes to the 634-m Tokyo Skytree”, eophysical Research Letters, AGU, Plan.
- [6] Yuki Fujii, Yukinori Suwa, Tsunayoshi Takehara, Hitoshi Haneoka, Takeyuki Suzuki, Yusuke Kawashima, Norihito Kawashita, Tatsuya Takagi, Hiromichi Fujioka, Mitsuhiro Arisawa, “Metal-Free Nitrogen-Containing Polyheterocyclic Near-Infrared (NIR) Absorption Dyes: Synthesis, Absorbance Properties and Theoretical Calculation of Substituted 5-Methylisoindolo [2, 1-a] quinolines. ”, The Journal of Organic Chemistry.
- [7] Yoshikazu Ito, Tatsuhiko Ohto, Daisuke Hojo, Mitsuru Wakisaka, Yuki Nagata, Linghan Chen, Kailong Hu, Masahiko Izumi, Jun-ichi Fujita, Tadafumi Adschiri, “Cooperation between holey graphene and NiMo alloy for hydrogen evolution in an acidic electrolyte, ACS catalysis.
- [8] Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Takaya, Yasuhiro Mizutani, “Laser micro machining beyond the diffraction limit using a photonic nanojet”, CIRP Annals - Manufacturing Technology, 66, 1, pp491-494, 2017.
- [9] T. Hiejima, “Streamwise vortex breakdown in supersonic flows”, Physics of Fluids, 29 [5], 054102 (p. 13), 2017.
- [10] T. Hiejima, “Onset conditions of vortex breakdown in supersonic flows”, Journal of Fluid Mechanics, 840 [4], R1, 12, 2018.
- [11] Ken Kishimoto, Susumu Okada, “Fermi level pinning for the carrier accumulation in bilayer graphene with atomic defects by an external electric field”, Applied Physics Letters, 110, 11601, 2017.
- [12] Manaho Matsubara, Susumu Okada, “Effect of a charged impurity on carrier accumulation into graphene by an external electric field”, Applied Physics Express, 10, 25101, 2017.
- [13] Nguyen Thanh Cuong, Susumu Okada, “Suppression of conductivity deterioration of Cu thin films by coating atomic layer materials”, Applied Physics Letters, 110, 131601, 2017.
- [14] Ayaka Yamanaka, Susumu Okada, “Polarity control of h-BN nanoribbon edges by strain and edge termination”, Physical Chemistry Chemical Physics, 19, 9113-9117, 2017.
- [15] Sho Furutani, Susumu Okada, “Electronic properties of electron-doped [6, 6]-phenyl-C61-butyrac

- acid methyl ester and silylmethylfullerene” , Chemical Physics Letters, 678, 5-8, 2017.
- [16] Yanlin Gao, Susumu Okada, “Electrostatic potential barrier for electron emission at graphene edges induced by the nearly free electron states” , Applied Physics Express, 10, 55104, 2017.
- [17] Yanlin Gao, Susumu Okada, “Energetics and electronic structures of thin films and heterostructures of a hexagonal GaN sheet” , Japanese Journal of Applied Physics, 56, 65201, 2017.
- [18] Ken Kishimoto, Susumu Okada, “ Electronic structure of bilayer graphene with defects under an external electric field” , Japanese Journal of Applied Physics , 56, 06GE01, 2017.
- [19] Jun-ya Sorimachi, Susumu Okada, “Porous hydrocarbon networks of pyramidal molecules” , Japanese Journal of Applied Physics, 56, 06GE03 , 2017.
- [20] Taketo Kochi, Susumu Okada, “Electronic Structure of CNT Thin Films with Nanoscale Interfaces under an Electric Field” , Japanese Journal of Applied Physics, 56, 06GE02, 2017.
- [21] Taketo Kochi, Susumu Okada, “Asymmetric carrier accumulation in double-walled carbon nanotube by an external electric field” , Applied Physics Express, 10, 75101, 2017.
- [22] Manaho Matsubar, Susumu Okada, “Carrier injection in nonbonding states of N-doped graphene by an external electric field” , Japanese Journal of Applied Physics, 56, 75101, 2017.
- [23] Remi Taira, Ayaka Yamanaka, Susumu Okada, “Electronic structure and polarity of edge functionalized graphene nanoribbons” , Japanese Journal of Applied Physics, 56, 85103, 2017.
- [24] Jun-ya Sorimachi, Susumu Okada, “Electron filling control of Kagome flat band in 2D hydrocarbon networks of sp² and sp³ C atoms” , Physical Review B, 96, 24103, 2017.
- [25] Yamato A. Saucier, Susumu Okada, Mina Maruyama, “Strain-induced charge transfer and polarity control of a van der Waals heterosheet comprising C60 and graphene” , Applied Physics Express, 10, 95101, 2017.
- [26] Miki Akiba, Susumu Okada, “Mechanical properties of nano-rotors: Energetics of triptycene derivatives” , Japanese Journal of Applied Physics, 56, 105201, 2017.
- [27] Yuya Nagasawa, Susumu Okada, “Energetics and electronic structures of inclusion compounds of large fullerenes and cycloparaphenylenes” , Journal of the Physical Society of Japan, 86, 104702, 2017.
- [28] Mina Maruyama, Susumu Okada, “Interplay between Kagome Flat band and Dirac cone in porous graphitic networks” , Carbon, 125, 530-535 , 2017.
- [29] Manaho Matsubara, Susumu Okada, “Geometric structures of Al nanoparticle adsorbed on graphene under the external electric field” , Japanese Journal of Applied Physics, 56, 125101, 2017.
- [30] Y. Fujimoto, “First-principles theoretical investigation of graphene layers for sensor applications: A review” , Nanomaterials and Nanotechnology, 7, pp. 1-7, 2017.
- [31] Takeshi Omori, Takeo Kajishima, “Apparent and microscopic dynamic contact angles in confined flows” , Physics of Fluids, 29, 11, 112107, 2017.
- [32] Junpei Sugano, Hiroaki Kouno, Masanobu Yahiro, “Properties of 2+1-flavor QCD in the imaginary chemical potential region: A model approach” , Physical Review D, 96, 014028(1)-014028(10), Jul. 2017.
- [33] Takehiro Hirakida, Junpei Sugano, Hiroaki Kouno, Junichi Takahashi, Masanobu Yahiro, “ Sign problem in a Z₃-symmetric effective Polyakov-line model” , Physical Review D, 96 , 074031(1)-074031(17), Oct. 2017.
- [34] Takayoshi Sano, Yuki Tanaka, Natsumi Iwata, Masayasu Hata, Kunioki Mima, Masakatsu Murakami, Yasuhiko Sentoku, “Broadening of cyclo-

- tron resonance conditions in the relativistic interaction of an intense laser with overdense plasmas”, *Physical Review E*, Vol. 96, pp. 043209, Oct. 2017.
- [35] Tomohiro Otani, Takuya Shindo, Satoshi Ii, Masayuki Hirata, Shigeo Wada, “Effect of local coil density on blood flow stagnation in densely coiled cerebral aneurysms: a computational study using a Cartesian grid method”, *Journal of Biomechanical Engineering*, 140(4), 2018.
- [36] 花輪理徳, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “剪断流中のキャノピー層境界における運動量輸送の解析”, *ながれ*, Vol. 36, No. 2, pp. 75-78, 2017. 04.
- [37] Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “A numerical method for interaction problems between fluid and membranes with arbitrary permeability for fluid”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 345, pp. 33-57, 2017. 09.
- [38] Takeshi Omori, Takeo Kajishima, “Apparent and microscopic dynamic contact angles in confined flows”, *Physics of Fluids*, Vol. 29, Issue 11, P112107, 2017. 11.
- [39] Jingchen Gu, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Influence of Rayleigh number and solid volume fraction in particle-dispersed natural convection”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 120, pp. 250-258, 2018. 05 (2017. 12, online published).
- [40] Jingchen Gu, Motoki Sakaue, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “An immersed lubrication model for the fluid flow in a narrow gap region”, *Powder Technology*, Vol. 329, pp. 445-454, 2018. 04 (2018. 01, online published).
- [41] Toshiaki Fukada, Walter Fornari, Luca Brandt, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “A numerical approach for particle-vortex interactions based on volume-averaged equations”, *International Journal of Multiphase Flow*, Online published, 2018. 02.
- [42] Y. Miyamoto, Y. Xiong, T. Okada, M. Morifuji, H. Kajii and M. Kondow, “Optical Coupling Characteristics between a Circular Defect Resonator and a Waveguide in a Two - Dimensional Photonic Crystal Slab”, *Photonic and nanostructures – Fundamentals and Applications*, Plan.
- [43] Sakata K, Okuyama Y, Ozawa T, Haraguchi R, Nakazawa K, Tsuchiya T, Horie M, Ashihara T, “Not all rotors, effective ablation targets for non-paroxysmal atrial fibrillation, are included in areas suggested by conventional indirect indicators of atrial fibrillation drivers: ExTRa Mapping project”, *J Arrhythm*, 34 (In press), 2018.
- [44] 稲田 慎, 柴田 仁太郎, 芦原 貴司, 池田 隆徳, 中沢 一雄, “副交感神経活動が房室結節の電氣的興奮に与える影響: シミュレーションによる検討”, *信学技報*, 117(507):11-16, 2017.
- [45] Mihoko Konishi, Taro Matsuo, Kodai Yamamoto, Matthias Samland, Jun Sudo, Hiroshi Shibai, Yoichi Itoh, Misato Fukagawa, Takahiro Sumi, et al, “Velocity distribution around a sphere descending in a linearly stratified fluid”, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, Vol. 68, No. 6, 92, Dec. 2016.
- [46] Kodai Yamamoto, Taro Matsuo, Hiroshi Shibai, Yoichi Itoh, Mihoko Konishi, Jun Sudo, Ryoko Tanii, Misato Fukagawa, Takahiro Sumi, et al, “Direct Imaging Search for Extrasolar Planets in the Pleiades”, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, Vol. 65, No. 4, 90, Aug. 2013.
- [47] Kohta TSURU, Remi KONAGAYA, Sota KAWAGUCHI, and Ken NAITOH, “Unsteady three-dimensional computations and experiments of compression flow formed by collision of super-multi-jets”, *Journal of Thermal Science and Technology*, Vol. 13, No. 1, Paper No. 17-00367, 2018.
- [48] Sota Kawaguchi, Remi Konagaya, Kohta Tsuru and Ken Naitoh, “Computations for Improving the Performance of a New Hydrogen-Oxygen

- Rocket Engine Based on Supermulti-jets Colliding with Pulse” , AIAA paper, 2018, 0668, Jan. 2018.
- [49] Koki Naruse and Ken Naitoh, “Spatial transition point from laminar flow to turbulence in a pipe with injection revealed by solving a weakly-stochastic Navier-Stokes equation” , AIAA paper, 2018, 0589, Jan. 2018.
- [50] T. Ishida, Y. Duguet, T. Tsukahara, “Turbulent bifurcations in intermittent shear flows: from puffs to oblique stripes” , Physical Review Fluids, Vol. 2, 073902, July 2017.
- [51] T. Ishida, G. Brethouwer, Y. Duguet, T. Tsukahara, “Laminar-turbulent patterns with rough walls” , Physical Review Fluids, Vol. 2, 073901, July 2017.
- [52] S. Chaunchaiyakul, A. Setiadi; P. Krukowski, F. C. Catalan, M. Akai-Kasaya, A. Saito; N. Hayazawa, Y. Kim, H. Osuga, Y. Kuwahara, “Nanoscale Dehydrogenation Observed by Tip-Enhanced Raman Spectroscopy” , The Journal of Physical Chemistry C, 121, 18162, 2017.
- [53] Kota Mitsumoto and Hajime Yoshino, “Orientational ordering of closely packed Janus particles” , Softmatter, May 2018.
2. 国際会議会議録掲載論文
- [1] Nakatani, Y., Naka, Y., Nishida, S., and Taniguchi K., “Behavior analysis of scum deposited from a combined sewer system in urban river system” , 15th Estuarine Coastal Modeling Conference (ECM15), Seattle, Jun 2018.
- [2] K. Fujiwara, M. Shibahara, “Local energy transport in evaporation processes of the liquid in a slit pore based on the molecular dynamics method” , Proc. of the Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, Okinawa, Japan, 27-30 Oct 2017.
- [3] K. Tsujimoto, Sanmuga K. A. , T. Shakouchi, T. Ando, “DNS of dynamic rotating-controlled free jet” , Proceedings of the 6th International Conference On Jets, Wakes and Separated Flows, USB, 6p, Oct 2017.
- [4] K. Kitahara, K. Tsujimoto, T. Shakouchi, T. Ando, “Intermittent Control in Multiple Jets Using DNS” , Proceedings of the Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, USB, 5p, Oct 2017.
- [5] K. Jinno, K. Tsujimoto, T. Shakouchi, T. Ando, “DNS of Intermittently Controlled Impinging Jets” , Proceedings of the Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, USB, 5p, 2017.
- [6] Yusuke Ushijima, Yutaka Yoshikawa, “Diurnal cycle effects of the surface heat flux on the mixed layer depth and sea surface temperature under the stabilizing heat flux” , AGU Fall meeting 2017 (New Orleans, U. S. A), 11-15 Dec 2017.
- [7] Yusuke Ushijima, Yutaka Yoshikawa, “The effect of diurnal cycle of surface heat flux on the ocean mixed layer” , 9th International Workshop on Modeling the Ocean (Yonsei University, Seoul, South Korea), 3-6 Jul 2017.
- [8] A. Musa, “Performance Evaluation of Tsunami Inundation Simulation” , 27th Workshop on Sustained Simulation Performance (Sendai, Japan), 23 March 2018.
- [9] T. Umeda, M. Nakagawa, Y. Baba, N. Nagaoka, H. Tsubata, T. Nishi, H. Fujisawa, “FDTD analysis of lightning current in a CFRP panel” , Asia-pacific international conference on lightning (APL2017) (Krabi: 2017) .
- [10] T. Umeda, Y. Baba, H. Tsubata, T. Nishi, Y. Sato, “FDTD simulation of lightning currents and electric field in a CFRP panel with triangular prism cells” , International Conference on Lightning and Static Electricity (ICOLSE2017) (Nagoya:2017) .
- [11] Doan Sy Long, Yamada Hitoshi, Katsuchi Hiroshi, “Experimental study of rooftop wind on vortex-induced vibration of square cylinders in tandem arrangement” , Proceeding of national symposium wind engineering.

- [12] Doan Sy Long, Yamada Hitoshi, Katsuchi Hiroshi, “Interference effects of rooftop wind on a square-section high-rise building considering local pressure coefficient” , The 15th International Conference on Wind Engineering.
- [13] Jingxue Wang, Pham Van Phuc, Weirong Zhang, Yukio Tamura, Qingshan Yang, “CFD simulations of wind loads on flat-roof-mounted solar arrays for normal wind directions” , The 7th International Symposium on Computational Wind Engineering(CWE 2018).
- [14] Kiyosi Horiuti, “Nonequilibrium subgrid-scale models in LES alternative to the Smagorinsky model (invited)” , 2nd International Workshop on Cloud Turbulence, 8-10 March 2017.
- [15] Kiyosi Horiuti, “Complementary roles of contravariant and covariant dumbbells in polymer diluted turbulence” , International Workshop on glasses and related nonequilibrium systems Nakanoshima center(Osaka Univ.), 21-23 March 2017.
- [16] Kiyosi Horiuti, K. Matsushita, Y. Tsuda, “Universal aspects of contravariant and covariant vector elements in turbulent flows” , Turbulence Conference on Mauna Kea: Recent Advances in Turbulence Research (Mauna Kea, Hawaii), 20-23 June 2017.
- [17] Kiyosi Horiuti, “A hybrid contravariant and covariant elastic dumbbell model for polymer-diluted turbulent flows” , 16th European Turbulence Conference(Stockholm, Sweden), 21-24 August 2017.
- [18] Nobuyuki TSUBOI, Nicolas JOURDAINE, Tomohiro WATANABE, A. Koichi HAYASHI, “Three-dimensional Numerical Simulation on Hydrogen-Oxygen Rotating Detonation Engine with Unchoked Aerospike Nozzle”, AIAA SciTech Forum 2018 Sciences Meeting, 11 Jan 2018.
- [19] Maiko Iwai, Keisuke Yoshida, Youhi Morii, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, “Two-dimensional Numerical Analysis on Shock Flame Interaction in Premixed Gas of Hydrocarbon/Oxygen with Multi-Step Reaction Model” , 26th ICDERS (International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems), 1050, Aug. 2017.
- [20] Maiko Iwai, Keisuke Yoshida, Youhi Morii, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, Tetsuro Obara, Shinichi Maeda, “Numerical Analysis on Shock/Flame Interaction in Hydrocarbon/Oxygen Premixed Gas -Difference in the Propagation Types-” , ISEM 2017(The 6th International Symposium on Energetic Materials and their Applications), O02-3, Nov. 2017.
- [21] Ayu Ago, Tomotaka Niibo, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, “Numerical Study on Effects of Obstacle Shape on Detonation Transition Mechanism” , 26th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS: Boston, USA), Jul 30 - Aug 4 2017.
- [22] Ayu Ago, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, “Numerical analysis on detonation transition in the channel with repeated obstacles - Influence of scale effects and artificial thickening flame -” , The 6th International Symposium on Energetic Materials and their Applications (ISEM:Sakura Hall, Tohoku University, Sendai, JAPAN), Nov 6-10 2017.
- [23] Takashi Ohta, Daiki Eguchi, “Modification of the Spatial Scaling for Turbulent Flow of Viscoelastic Fluids” , The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, Oct. 2017.
- [24] Tatsuya Yonemura, Takashi Ohta, Yasuyuki Sakai, “Influence of Vortical Structures on Ignition in DNS of a Turbulent Mixing Layer with Non-Premixed H₂/air Combustion” , Eleventh Asia-Pacific Conference on Combustion, Dec. 2017.
- [25] Jingchen Gu, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Effect of conductive and convective heat fluxes in dense solid-dispersed two-phase flows” , The

- 3rd International Conference on Numerical Methods in Multiphase Flows(Tokyo), No. B14, 2017. 06.
- [26] Shintaro Takeuchi, “Effect of Temperature Gradient within the Solid Particles on the Heat Transfer in Dense Particle-dispersed Flows” , The 3rd International Conference on Numerical Methods in Multiphase Flows(Tokyo), Keynote lecture 8, 2017. 06.
- [27] Kie Okabayashi, Kenshi Hirai, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Direct numerical simulation on modification of streamwise vortices in turbulent flow above zigzag riblets” , 9th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (TFEC9:Okinawa), No. TFEC9-1273, 2017. 10.
- [28] Yuki Kodera, Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, Kie Okabayashi, “Numerical simulation of axisymmetric laminar flow in rotor-stator cavity” , 9th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (TFEC9:Okinawa), No. TFEC9-1306, 2017. 10.
- [29] Kie Okabayashi, “Drag reduction mechanism of 3D riblets” , Proc. Japan-Korea CFD workshop 2017(Seoul, Korea), pp. 222-223, 2017. 11.
- [30] Takeo Kajishima, “CFD simulation of particle-laden turbulent flows” , 9th Asia Computational Materials Design Workshop(Hanoi, Vietnam), Lecture only, 2017. 11.
- [31] Shintaro Takeuchi, “Numerical simulation of heat transfer in solid-dispersed two-phase media” , The 2nd International Workshop on Numerical Simulations of Particle/Droplet/Bubble-laden Flow (Invited talk, no paper:Yokohama), 2016. 10.
- [32] Shintaro Takeuchi, “Mechanism of oscillation and reversal in particle-dispersed Rayleigh-Benard cells of laminar regime” , US-Japan Workshop on Bridging Fluid Mechanics and Data Science(Tokyo), Abstract , p. 15, 2018. 03.
- [33] Kie Okabayashi, “Large-eddy simulation for cav-
itating turbulent flow around a Clark-Y11. 7% hydrofoil” , US-Japan Workshop on Bridging Fluid Mechanics and Data Science(Tokyo), Abstract, p. 14, 2018. 03.
- [34] A. Suzuki, “A parallel direct factorization with symmetric pivoting for unsymmetric and indefinite matrices in a semi-conductor problem” , SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing(Waseda University, Tokyo, Japan), 口頭発表, 7-10 March 2018.
- [35] 稲田慎, 柴田仁太郎, 芦原貴司, 池田隆徳, 中沢一雄, “副交感神経活動が房室結節の電氣的興奮に与える影響 —シミュレーションによる検討—” , MEとバイオサイバネティクス研究会(東京 機械進行会館), 口頭発表, 2018/3/13-14.
- [36] Sataka K, Ozawa T, Okuyama Y, Haraguchi R, Tsuchiya T, Horie M, Ashihara T, “Long-term effect of non-paroxysmal atrial fibrillation ablation is not reflected by the prolongation of atrial fibrillation cycle length but by the regional organization of wave dynamics detected by novel online realtime phase mapping system just after the ablation.” , American Heart Association (AHA) 89th Scientific Sessions(Anaheim Convention Center), Poster, 2017/11/11-15.
- [37] Sakata K, Ozawa T, Okuyama Y, Haraguchi R, Tsuchiya T, Horie M, Ashihara T, “Not all non-paroxysmal atrial fibrillation drivers are included in complex fractionated electrogram area or low-voltage area: ExTRa Mapping Project.” , The 10th Asia-Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session (APHRS) in conjunction with the Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society (JHRS) 2017(PACIFICO Yokohama), Rapid Firing (English), 2017/09/14-17.
- [38] Inada S, Aiba T, Haraguchi R, Ashihara T, Kusano K, Shimizu W, Ikeda T, Nakazawa K, “Non-paroxysmal atrial fibrillation wave dynamics were determined by age rather than echocardiographic

- measurements or BNP: ExTRa Mapping Project.” , The 10th Asia-Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session (APHRs) in conjunction with the Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society (JHRS) 2017(PACIFICO Yokohama), Oral (English), 2017/09/14-17.
- [39] Inada S, Aiba T, Haraguchi R, Ashihara T, Kusano K, Shimizu W, Ikeda T, Nakazawa K, “Ventricular arrhythmias initiated from conduction delay zone around right ventricular outflow tract epicardium: A simulation study.” , The 10th Asia-Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session (APHRs) in conjunction with the Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society (JHRS) 2017(PACIFICO Yokohama), Oral (English), 2017/09/14-17.
- [40] Ashihara T, Sakata K, Okuyama Y, Ozawa T, Haraguchi R, Fukui A, Yamaguchi T, Tsuchiya T, Horie M, “ExTRa Mapping-guided ablation targeting non-passively activated area is very effective for long-standing persistent atrial fibrillation” , The 10th Asia-Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session (APHRs) in conjunction with the Annual Meeting of the Japanese Heart Rhythm Society (JHRS) 2017(PACIFICO Yokohama), Oral, 2017/09/14-17.
- [41] Sakata K, Ozawa T, Okuyama Y, Haraguchi R, Tsuchiya T, Horie M, Ashihara T, “Not all non-paroxysmal atrial fibrillation drivers are included in complex fractionated electrogram area or low-voltage area: ExTRa Mapping project” , The 39th Annual Congress of the European Society of Cardiology (ESC Congress 2017)(Fira Gran Via, Barcelona, Spain), Poster, 2017/08/26-30.
- [42] Sakata K, Ozawa T, Okuyama Y, Haraguchi R, Tsuchiya T, Horie M, Ashihara T, “ Non-paroxysmal atrial fibrillation wave dynamics were determined by age rather than echocardiographic measurements and BNP: A clinical study using the ExTRa Mapping system” , The 39th Annual Congress of the European Society of Cardiology (ESC Congress 2017) (Fira Gran Via, Barcelona, Spain), Poster, 2017/08/26-30.
- [43] Sakata K, Okuyama Y, Ozawa T, Haraguchi R, Horie M, Ashihara T, “Using large-tip ablation catheter markedly decreases bipolar signal amplitude near spiral wave center but this is not the case with using multi-electrode mapping catheter: A simulation study” , The 39th Annual Congress of the European Society of Cardiology (ESC Congress 2017)(Fira Gran Via, Barcelona, Spain), Poster, 2017/08/26-30.
- [44] Sakata K, Ozawa T, Okuyama Y, Haraguchi R, Tsuchiya T, Horie M, Ashihara T, “Not all non-paroxysmal atrial fibrillation drivers are included in complex fractionated electrogram area or low voltage area: ExTRa Mapping project” , The 44th International Congress on Electrocardiology (ICE)/The 17th Congress of the International Society for Holter and Noninvasive Electrocardiology (ISHNE)(Portland Art Museum , Portland, U. S. A.), Poster, 2017/06/24-27.
- [45] Inada S, Inoue Y, Shibata N, Yamamoto T, Ashihara T, Aiba T, Kusano K, Ikeda T, Mitsui K, Nakazawa K, “Analyzing vectorcardiograms synthesized from 12-lead electrocardiogram to predict the origin of sinus rhythm and premature contraction” , The 44th International Congress on Electrocardiology (ICE)/The 17th Congress of the International Society for Holter and Noninvasive Electrocardiology (ISHNE) (Portland Art Museum, Portland, U. S. A.), Poster, 2017/06/24-27.
- [46] Ashihara T, Sakata K, Okuyama Y, Ozawa T, Tsuchiya T, Haraguchi R, Horie M, “ExTRa Mapping-guided non-passive activation ablation is very effective for non-paroxysmal AF” , Heart Rhythm 2017 Scientific Sessions(McCormick Place, Chicago, U. S. A.), Poster, 2017/05/10-13.
- [47] Toshihiro Iwasa, Keiichiro Fujimoto, Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Simulations of Transverse Jet in Supersonic Crossflow toward an

- Understanding of Interaction Mechanism” , 31st International Symposium on Shock Waves (ISSW)(Nagoya, Japan), SBM000350, July, 2017.
- [48] Satoshi Kozuka, Daiki Muto, Hiroshi Terashima, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Study of Cryogenic Hydrogen Jet in Crossflow under Supercritical Pressures” , Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology(Seoul, Korea), E6-2, October, 2017.
- [49] Yoshiki Nishikawa, Nobuyuki Tsuboi, Takashi Ito, Satoshi Nonaka, “Aerodynamic Characteristics Steady on Reusable Sounding Rocket using Numerical Calculation” , 31th International Symposium on Space Technology and Science(Ehime, Japan), 2017-g-22, May, 2017.
- [50] Tomoki Uzaki, Tomoyuki Muta, Nobuyuki Tsuboi, Yusuke Maru, Kazuhisa Fujita, “A Numerical and Experimental Approaches on Aerodynamic Characteristics of Waverider with Orbiter” , 31th International Symposium on Space Technology and Science(Ehime, Japan), g-21, June, 2017.
- [51] Yamazaki T, Oda Y, Matsumoto R, Katsuki M, “DNS of turbulence heat transfer on the flat plate under pulsating flow conditions” , The 9th International Conference on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA 2017), Paper No. A201, Jul-17.
- [52] Kamiya, T., Asahara, M., Miyasaka, T, “Viscosity effect on the water column deformation and breakup caused by shock wave” , The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (Okinawa, Japan), 口頭発表, October, 2017.
- [53] Kamiya, T., Asahara, M., Miyasaka, T, “Numerical simulation of a water column deformation and breakup by shock wave” , 31st International Symposium on Shock Wave (Nagoya, Japan), ポスター発表, July, 2017.
- [54] T. Nimura, T. Ishida, T. Kawata, and T. Tsukahara, “Modulated roll cells in rotating plane Couette flow of viscoelastic fluid” , Proceedings of the 10th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (Chicago, USA), 2B-3, July 2017.
- [55] T. Nimura, T. Tsukahara, “Viscoelastic effect on roll cells in rotating plane Couette flow” , The 7th International Symposium Bifurcations and Instabilities in Fluid Dynamics (The Woodlands, TX, USA), July 2017.
- [56] T. Tsukahara, S. Inoue, S. Jakirlić, and Y. Kawaguchi, “Reynolds stress model for drag-reducing viscoelastic turbulent flow: a simple model for non-linear term in averaged constitutive equation” , Proceedings of the 6th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (Chennai, India), #177, Dec. 2017.
- [57] R. Tanaka and T. Tsukahara, “DNS of Taylor-Couette flow between counter-rotating cylinders with low radius ratio: Re-dependence and η -dependence” , Proceedings of the 6th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (Chennai, India), #114, Dec. 2017.
- [58] T. Tsukahara, “Numerical study on spatiotemporally intermittent arrangement of laminar-turbulent coexistence as a DP stochastic process” , Abstract of International Symposium on Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (Sendai, Japan), Nov. 2017.
- [59] T. Tsukahara, T. Ishida, G. Brethouwer, Y. Duguet, “Laminar-turbulent pattern in plane Couette flow with one roughened wall” , Proceedings of the Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (Okinawa, Japan), USB, TFEC9-1640, Oct. 2017.
- [60] Y. Yamada, T. Tsukahara, and Y. Hasegawa, “DNS study of viscoelastic flow past a confined cylinder” , Proceedings of the Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (Okinawa, Japan), USB, TFEC9-1101, Oct. 2017.
- [61] S. Inooka and T. Tsukahara, “DNS study on Reynolds-number dependence of spot growth to oblique

- turbulent band in plane Poiseuille flow”, Abstracts of the 16th EUROMECH European Turbulence Conference (Stockholm, Sweden), No. 29564, Aug. 2017.
- [62] T. Nimura and T. Tsukahara, “Turbulent band in rotating plane Couette flow of viscoelastic fluid”, Abstracts of the 16th EUROMECH European Turbulence Conference (Stockholm, Sweden), No. 29570, Aug. 2017.
- [63] Takuya Iwashita, Bin Wu, Wei-Ren Chen, Alfred Baron, Takeshi Egami, “Isotope effects on van-Hove functions for liquid H₂O and D₂O by inelastic X-ray scattering”, American Physical Society 2018 March meeting, 2018 March.
- [64] Y. Kuwahara, S. Chaunchiyakul, A. Setiadi, P. Krukowski, H. Osuga, “Chemical Analysis of Nanomaterials Studied by Tip-enhanced Raman Scattering Spectroscopy”, Collaborative Conference on Materials Research (International Convention Center, Jeju), 2017 28, Jul.
- [65] T. Kitayama, H. Shiraji, O.R. Kizaki, K. Yamamura, K. Endo, “Measurement of a concave spherical mirror with sub-50 pm repeatability by 3D nanop profiler using normal vector tracing”, SPIE Optifab (Rochester, USA), 10448-59, Oct 18, 2017.
- [66] M. Matsumoto, G. Miyashita, and H. Kiso, “Fiber-based SBS pulse compression using Bragg grating reflection feedback of Stokes seed”, Conference on Lasers and Electro-Optics 2017 (CLEO2017), STh3K. 5, May 18, 2017.
3. 国内研究会等発表論文
- [1] 福井克成, 廣瀬研二, 佐竹うらら, 榎本俊之, 杉原達也, “Optimization of Polishing Conditions for Reducing Thickness Variation of Wafer in Double-Sided Polishing”, 2017 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, pp. 239-240, Sep. 2017.
- [2] 藤原邦夫, 芝原正彦, “スリット構造内に存在する液体の蒸発過程時の局所エネルギー輸送に関する分子動力学解析”, 第 54 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, 2017.
- [3] 藤原邦夫, 芝原正彦, “スリット構造内に存在する液体の蒸発過程時の局所エネルギー輸送に関する分子動力学解析”, 日本機械学会 2017 年度年次大会講演論文集, 2017.
- [4] 土屋 達弘, “ブール論理に基づく, 情報システムのテスト・検証のためのアプローチ”, 人工知能学会人工知能基本問題研究会 (SIG-FPAI)研究会資料, vol. B5, no. 3, pp. 1-3, Mar. 2018.
- [5] 神野 敬太, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “間欠制御された衝突噴流における渦構造が与える伝熱性能への影響”, 日本機械学会 2017 年度年次大会講演論文集, CD-ROM, 5p, Sep. 2017.
- [6] 北原 敏伍, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “間欠制御された多重噴流の DNS”, 日本機械学会 2017 年度年次大会講演論文集, CD-ROM, 5p, Sep. 2017.
- [7] 鈴木忠史, 辻本公一, 神野敬太, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “多重衝突噴流の流動・熱伝達特性のDNS”, 第 31 回 数値流体力学シンポジウム講演論文集, DVD, 5p, Dec. 2017.
- [8] 神野敬太, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “間欠制御された多重衝突噴流のDNSにおける流動・伝熱特性の解析”, 日本機械学会東海支部第 67 期総会・講演会講演論文集, USB, 2p, Mar. 2018.
- [9] 北原敏伍, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNSによる多重噴流における間欠制御の流動特性”, 日本機械学会東海支部第 67 期総会・講演会講演論文集, USB, 2p, Mar. 2018.
- [10] 鈴木忠史, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNSによる多重衝突噴流の流動・熱伝達特性の評価”, 日本機械学会東海支部第 67 期総会・講演会講演論文集, USB, 2p, Mar. 2018.
- [11] 牛島 悠介, 吉川 裕, “成層海洋中での風成乱流による混合層深化に関する研究”, 日本海洋学会 2017 年度秋季大会(仙台国際セ

- ンター), 14-15 Oct 2017.
- [12] 上野原努, 高谷裕浩, 水谷康弘, “フォトニックナノジェット of 強度分布制御と位置制御による微細加工に関する研究”, 2017 年度砥粒加工学会学術講演会, C26, Sep. 2017.
- [13] 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4報)-入射光波長制御によるフォトニックナノジェットの強度分布制御-”, 2017 年度精密工学会秋季大会, P03, Sep. 2017.
- [14] 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5報)-3次元 FDTD法によるフォトニックナノジェットの強度分布制御-”, 2018 年度精密工学会春季大会, F68, Mar. 2018.
- [15] 石橋朋樹, 堀辰也, 前田知那美, 中村充利, 谷川竜樹, 山本慎也, 松野健治, “全ゲノム配列情報を用いたショウジョウバエ左右非対称性に以上を示す突然変異群の責任遺伝子の効率的同定”, 新学術領域研究「学術研究支援基盤形成」『先進ゲノム解析研究推進プラットフォーム(先進ゲノム支援)』(拡大班会議), p101, Jan. 2017.
- [16] 矢野将寛, Alexei Zhidkov, 細貝友直, 兒玉了祐, “マルチPWレーザーパルスとアンダーデンスプラズマの相互作用”, 日本物理学会 2018 春季大会(東京理科大学野田キャンパス), Mar. 2018.
- [17] 鈴木智洋, 吉田尚史, 渡辺崇, “開いたキャビティを過ぎる非圧縮流れの三次元渦構造の数値解析”, 日本機械学会北陸信越支部第 55 期総会・講演会, E023, pp. 1-2, Mar. 2018.
- [18] 吉田尚史, 渡辺崇, “二次元オープンキャビティ流れの異なる振動モードの底面駆動能動制御”, 日本機械学会北陸信越支部第 55 期総会・講演会, E024, pp. 1-5, Mar. 2018.
- [19] 比江島俊彦, “超音速流中での渦崩壊の発生”, 日本流体力学会年会 2017 講演論文集, 234, pp. 1-2, 2017.
- [20] 比江島俊彦, “超音速縦渦の線形不安定モードの発達における非線形補間法の精度について”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A05-1, CD-ROM, pp. 1-2, 2017.
- [21] 安福健祐, 長岡慎介, “航空機渋滞モデルのインタラクティブ可視化”, 日本図学会 2017 年度秋季大会(京都) 大会学術講演論文集, pp. 65-66, Dec. 2017.
- [22] 小林 要佑, 大森 健史, 山口 康隆, 梶島 岳夫, “接触線を含む流れの流体力学的記述に関する考察(分子動力学法による解析結果の適切な平均化法について)”, 日本流体力学会年会, Aug. 2017.
- [23] 荻野陽輔, 浅井知, 平田好則, “GMA溶接の熱源モデルと熔融池モデルのカップリングシミュレーション”, 溶接学会全国大会講演概要, 101(2017), pp. 6-7, Sep. 2017.
- [24] 坪井伸幸, 塚本真章, 小島孝之, 林光一, “回転デトネーションエンジンの 2 次元数値解析: 噴射方法の影響”, 第 49 回流体力学講演会/第 35 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2018. 6. 30.
- [25] 坪井伸幸, 渡部友裕, ジュルデ ニコラ, 小島孝之, 林光一, “回転デトネーションエンジンの 2 次元数値解析-水素/空気予混合気に対する性能評価-”, 第 55 回燃焼シンポジウム, 2017. 11. 15.
- [26] 村山健太, 吾郷愛由, 小澤晃平, 坪井伸幸, 林光一, “水素/酸素予混合気を用いた円形障害物を有する管内でのデトネーション遷移に関する数値解析: 火炎伝播形態と格子解像度の影響”, 日本機械学会学生会 第 49 回 卒業研究発表講演会(大分), D12, Mar. 2018.
- [27] 渡部友裕, JOURDAINE. H. Nicolas, 小澤晃平, 坪井伸幸, 小島孝之, 林光一, “水素/空気混合気を用いたローターティンギングデトネーションエンジンの二次元解析による性能評価: 噴射口圧力が比推力に与える影響評価”, 日本機械学会学生会 第 49 回卒業研究発表講演会(大分), D21, Mar. 2018.
- [28] 米村 建哉, 太田 貴士, 酒井 康行, “乱流混

- 合層で発達する渦構造が非予混合水素燃焼に与える影響”, 日本流体力学会 年会 2017, Aug. 2017.
- [29] 楠神 裕貴, 太田 貴士, “溶融, 凝固する壁面乱流境界層の予測”, 日本機械学会 2017 年度年次大会, Sep. 2017.
- [30] 杉浦 龍太郎, 太田 貴士, “DNSによる渦キャビテーションと壁乱流の相互作用の予測”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2017.
- [31] 一柳 隆史, 太田 貴士, “壁乱流中を浮遊する高粘度流体塊の観察”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2017.
- [32] 片桐 佑麻, 太田 貴士, “DNS による乱流境界層から壁面への力学的影響の予測”, 日本機械学会 北陸信越支部 第 55 講演会, Mar. 2018.
- [33] 中辻 佳祐, 太田 貴士, “DNS による粗面乱流境界層の予測と観察方法の提案”, 日本機械学会 北陸信越支部 第 55 講演会, Mar. 2018.
- [34] 河合英徳, 田村哲郎, “粗面都市境界層における気象擾乱を含んだ流入変動風の作成 一空間フィルタリング・リスケーリング手法の展開一”, 日本建築学会大会, 2018.9 (発表予定).
- [35] 河合英徳, 田村哲郎, ラフルバレ, 大西慶治, 坪倉誠, “高層建築物が散在する実都市域に形成される組織構造の特性”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム(京都), B06-4, 2017. 12.
- [36] 河合英徳, 田村哲郎, ラフルバレ, 大西慶治, 坪倉誠, “実市街地の非一様な空間形状が乱流構造に及ぼす影響”, 日本流体力学会年会 2017, 2017. 8.
- [37] 小林要佑, 大森健史, 山口康隆, 梶島岳夫, “接触線を含む流れの流体力学的記述に関する考察 (分子動力学法による解析結果の適切な平均化法について)”, 日本流体力学会年会, 2017. 8.
- [38] 宮森由布里, 竹内伸太郎, 谷京晨, 梶島岳夫, “粒子分散混相流の自然対流に特有の反転現象の解析”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム (京都) 講演論文集, E02-3, 2017. 12.
- [39] 木村修吾, 竹内伸太郎, 岡林希依, 梶島岳夫, “折れ曲がり翼における迎角の安定性に関する数値解析”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム (京都) 講演論文集, D02-1, 2017. 12.
- [40] 大西領, 竹内伸太郎, 松田景吾, 梶島岳夫, “近接する異径粒子間に働く流体力学力に対する数値解析”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム (京都) 講演論文集, E03-2, 2017. 12.
- [41] 石川大樹, 岡林希依, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “極超音速平板境界層における乱れの受容性に関する数値的研究”, 平成 29 年度衝撃波シンポジウム (仙台), 2018. 03.
- [42] Y. Miyamoto, M. Morifuji, H. Kajii and M. Kondow, “Coupling efficiency between a circular defect (CirD) resonator and a waveguide in 2D slab photonic crystal”, The 36th Electronic Materials Symposium (Nagahama, Japan), We1-2, Nov. 8, 2017.
- [43] 西村 智也, 森藤 正人, 梶井 博武, 丸田 章博, 近藤 正彦, “キャリア拡散を考慮したレーザ方程式を用いた円型欠陥フォトニック結晶レーザの特性解析”, 第 64 回応用物理学関係春季学術講演会(横浜), 2017 年 3 月.
- [44] 鍾 菁廣, 森 伸也, 廣木 彰, 小田中 紳二, “量子ドリフト拡散モデルによる III-V 族 FinFET の短チャネル効果解析”, 第 65 回応用物理学関係春季学術講演会, 2018 年 3 月.
- [45] 鍾 菁廣, 森 伸也, 小田中 紳二, “HiQHD コードを用いた新材料 FinFET の短チャネル効果解析”, 第 3 回ポスト「京」重点課題 (7) 研究会, 2017 年 12 月.
- [46] S. Sho, S. Odanaka, “A hybrid MPI/OpenMP parallelization method for a quantum drift diffusion model”, SISPAD 2017, 7-9 September.
- [47] 芦原貴司, 坂田憲祐, 奥山雄介, 小澤友哉, 土谷 健, 原口 亮, 稲田 慎, 中沢一雄, 堀江 稔, 杉本喜久, 永田 啓, “慢性心房細動アブレーションの新たな治療戦略に向けたインシリコの応用”, 第 37 回医療情報学連合大会 (第 18 回日本医療情報学会学術大会: グランキュー

- ブ大阪・大阪国際会議場), 口述, 2017/11/20-23.
- [48] 稲田 慎, 井上優子, 柴田仁太郎, 山本 剛, 芦原貴司, 相庭武司, 草野研吾, 池田隆徳, 三井和幸, 中沢一雄, “ベクトル心電図特徴量と不整脈発生活起源との関係”, 第 37 回医療情報学連合大会(第 18 回日本医療情報学会学術大会: グランキューブ大阪・大阪国際会議場), 口述, 2017/11/20-23.
- [49] 稲田 慎, “コンピュータシミュレーションを用いた心臓電気現象の理解を目指した取り組み”, 平成 29 年度統計数理研究所共同研究集会「生体信号・イメージングデータ解析に基づくダイナミカルバイオインフォマティクスの展開」(統計数理研究所), 2017/10/26-27.
- [50] 芦原貴司, 坂田憲祐, 奥山雄介, 小澤友哉, 原口 亮, 稲田 慎, 中沢一雄, 土谷 健, 堀江 稔, “長期持続性心房細動に対する ExTRa Mappingガイド下非受動興奮領域アブレーションの有用性: ExTRa Mapping Project”, 第 32 回心電情報処理ワークショップ(JSCE2017)/第 27 回体表心臓微小電位研究会/第 14 回心電図伝送システム研究会合同集会(東京 京王プラザホテル), 口述, 2017/06/10.
- [51] 稲田 慎, 井上優子, 柴田仁太郎, 山本 剛, 芦原貴司, 相庭武司, 草野研吾, 池田隆徳, 三井和幸, 中沢一雄, “健常者と患者におけるベクトル心電図特徴量の比較検討”, 第 32 回心電情報処理ワークショップ(JSCE2017)/第 27 回体表心臓微小電位研究会/第 14 回心電図伝送システム研究会合同集会(東京 京王プラザホテル), 口述, 2017/06/10.
- [52] 坂田憲祐, 小澤友哉, 奥山雄介, 原口 亮, 稲田 慎, 中沢一雄, 土谷 健, 堀江 稔, 芦原貴司, “非発作性心房細動における興奮波ダイナミクスは構造的リモデリング指標よりも年齢によって規定される: ExTRa Mapping Project”, 第 32 回心電情報処理ワークショップ(JSCE2017)/第 27 回体表心臓微小電位研究会/第 14 回心電図伝送システム研究会合同集会(東京 京王プラザホテル), 口述, 2017/06/10.
- [53] 荒木天秀, 武藤大貴, 寺島洋史, 坪井伸幸, “圧力発展方程式を用いた超臨界・多成分噴流に関する数値解析”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム, E04-1, 2017. 12.
- [54] 岩佐聡洋, 藤本圭一郎, 武藤大貴, 坪井伸幸, “液体ロケットタンク破壊時の燃料噴流と超音速気流の干渉メカニズム”, 平成 29 年度衝撃波シンポジウム, 1A3-4, 2018. 03.
- [55] 西川佳希, 坪井伸幸, 野中聡, 伊藤隆, 小澤晃平, 武藤智太郎, “再使用実験機の帰還時の空力特性評価に関する数値解析”, 第 61 回宇宙科学技術連合講演会, 1A3-4, 2018. 03.
- [56] 宇崎友規, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “Orbiterを搭載したWaverider模擬形状の数値解析及び風洞実験による空力特性の評価”, 日本航空宇宙学会西部支部講演会 2017, S007, 2017. 11.
- [57] 後藤祥太, 小澤晃平, 宇崎友規, 西川佳希, 坪井伸幸, “強度可変酸化剤流旋回型ハイブリッドロケットにおける酸化剤軸・接線噴射の非定常数値解析”, 日本機械学会九州支部 第 71 期総会・講演会(福岡), B43, 2018. 03.
- [58] 荒木天秀, 寺島洋史, 武藤大貴, 小澤晃平, 坪井伸幸, “極低温超臨界噴流における噴射器壁面の熱的境界条件の影響に関する数値解析: 断熱壁と等温壁の比較”, 第 49 回卒業研究発表講演会(大分), D23, 2018. 03.
- [59] 花浴 匡維, 坪井 和也, 富田 栄二, 長谷川 達也, “乱流予混合火炎のDNSデータを用いた数値レーザートモグラフィ法の構築”, 第 55 回燃焼シンポジウム講演論文集, pp. 22-23, 2017 年 11 月.
- [60] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “主流の脈動を伴う平板上乱流熱伝達に関するDNS”, 第 54 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, Paper No. H1411, 2017 年 5 月.
- [61] 小田豊, 山崎龍朗, 松本亮介, 香月正司, “平行平板間の脈動流における乱流熱伝達のDNS”, 日本機械学会 2017 年度年次大会講演

- 論文集, Paper No. J0520104, 2017年9月.
- [62] 神谷朋宏, 朝原誠, 宮坂武志, “流体力学不安定性および粘性が高速気流中での液柱の変形に与える影響”, 第15回日本流体力学会中部支部講演会(名古屋工業大学), 口頭発表, 2017年12月.
- [63] 河田卓也, 塚原隆裕, “ミニマル領域を用いた平面ジェット乱流の直接数値解析”, 日本流体力学会年会 2017 講演論文集, USB, #210, Aug. 2017.
- [64] 田中椋, 塚原隆裕, “低円筒比の対向回転テトラジェット流の直接数値解析: Re 依存性と η 依存性”, 日本流体力学会年会 2017 講演論文集, USB, #206, Aug. 2017.
- [65] 塚原隆裕, 石田貴大, Duguet Yohann, “環状チャンネル流の局在乱流パターンニング: 円管とチャンネルのホモトピー”, 日本流体力学会年会 2017 講演論文集, USB, #205, Aug. 2017.
- [66] 仁村友洋, 河田卓也, 塚原隆裕, “回転平面ジェット流中のロールセルに対する粘弾性応答のDNS解析”, 日本流体力学会年会 2017 講演論文集日本流体力学会年会 2017 講演論文集, USB, #220, Aug. 2017.
- [67] 桑原裕司, P. Krukowski, S. Chaunchayakul, 赤井恵, 斎藤彰, “発光探針増強ラマン分光法による局所構造・局所化学反応分析”, 第2回マルチスケールサイエンス研究会(弘前大学), 2017年5月6日.
- [68] 後藤晋, 栗田朋幸, “乱流中における反射性フレークの挙動”, 第45回可視化情報シンポジウム(工学院大学), 2017年7月19日.
- [69] 木崎嶺, 白地央樹, 豊吉結衣, 北山貴雄, 山村和也, 宮脇崇, 遠藤勝義, “法線ベクトル追跡型非接触ナノ形状測定法によるパターン付き平面ミラーの形状測定”, 2017年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, 777-778, 2017年9月20日.
- [70] 木崎嶺, 豊吉結衣, 白地央樹, 北山貴雄, 山村和也, 遠藤勝義, “法線ベクトル追跡型非接触ナノ形状測定法による凹球面測定”, 精密工学会 2017年度関西地方定期学術講演会講演論文集, 96-97, 2017年6月29日.
- [71] 光元亨汰, 吉野元, “最密充填ヤヌス粒子における回転自由度の相転移”, 日本物理学会(岩手大学), 2017年9月21日.
- [72] 光元亨汰, 吉野元, “ランダム充填ヤヌス粒子系の回転自由度のダイナミクス”, 日本物理学会(東京理科大学), 2017年3月23日.
- [73] 光元亨汰, 吉野元, “最密充填状態ヤヌス粒子系における非平衡ダイナミクス”, 第7回ソフトマター研究会(京都大学), 2017年10月23日.
- [74] 清水弘樹, 大倉一郎, “面内曲げを受ける縦補剛されたアルミニウム合金板の最適断面形状と耐荷力”, 平成29年度土木学会全国大会第72回年次学術講演会発表.
- [75] 鶴見一恵, 大倉一郎, “縦補剛されたアルミニウム合金板のせん断耐荷力”, 平成29年度土木学会全国大会第72回年次学術講演会発表.

4. 著書

- [1] Y. Fujimoto, “Y. Fujimoto olymer Nanocomposite for Environmental Remediation”, Elsevier, 2018, Chapter 9 pp. 207-220.
- [2] Nobuyuki Tsuboi, Makoto Asahara, Takayuki Kojima, A. Koichi Hayashi, “Numerical Simulation on Rotating Detonation Engine: Effects of Higher-Order Scheme, Detonation Control for Propulsion”, Springer-Verlag, 2017. 12, ISBN3319689053 or 9783319689050.
- [3] Y. Miyamoto, Y. Xiong, T. Okada, M. Morifuji, H. Kajii and M. Kondow, “Optical Coupling Characteristics between a Circular Defect Resonator and a Waveguide in a Two-Dimensional Photonic Crystal Slab”, Photonic and nanostructures - Fundamentals and Applications -, 投稿中.
- [4] 副島京子, 山根禎一, 芦原貴司, 五十嵐都, 荻ノ沢泰司, 加藤律史, 草間芳樹, 栗田康生, 佐藤俊明, 高木雅彦, 丹野 郁, 中井俊子, 八木哲夫, 山城荒平, “心電図検定公式問題集&ガ

- イド：受験者必携！ 2級／3級(日本不整脈心電学会・心電図検定委員会編著:改訂3版)”，メディカ出版，2018，pp. 1-128.
- [5] 芦原貴司，“線維芽細胞と興奮伝導・伝播異常 (Medical Topics Series：不整脈 2017 井上 博編)”，メディカルレビュー社，2017，pp. 20-29.
- [6] 松尾太郎・OCメンバー，“若い散開星団および運動星団内の惑星および褐色矮星の探査”，日本天文学会，2016年3月，天文月報 109-4号 SEEDS特集内の一記事.
5. その他
- [1] Shohei Araki, Yoshiteru Nasu, Yoshihiro Baba, Vladimir A. Rakov, Mikiyoshi Saito, and Toru Miki, “FDTD Simulation of Electromagnetic Pulses at Distances of 27 to 101 km from Lightning Strikes to the Tokyo Skytree”, ISLH2018(Bangkok, Thailand), March 2018.
- [2] 荒木翔平, 那須義央, 馬場吉弘, 齋藤幹久, 三木貫, “高構造物雷撃に伴う電磁界のFDTD解析”, 平成30年電気学会全国大会(福岡, 日本), March 2018.
- [3] Takashi Shiroto, Naofumi Ohnishi and Yasuhiko Sentoku, “Quadratic conservative scheme for relativistic Vlasov--Maxwell system”, 1802. 07238 (2018).
- [4] 白戸 高志, “Investigations of Computational Physics on Inertial Confinement Fusion and High Energy Density Plasmas”, 東北大学博士論文 (2018).
- [5] 白戸 高志, 大西 直文, 千徳 靖彦, “相対論的 Vlasov-Maxwell 離散方程式系に関する数学的研究”, Plasma Conference 2017 (姫路商工会議所).
- [6] 白戸 高志, “相対論的 Vlasov-Maxwell 離散方程式系に関する数学的研究”, 日本物理学会領域2学生優秀発表賞 (2018).
- [7] 上野 航暉, 梅田 晃央, 馬場 吉弘, 長岡 直人, 津端 裕之, 西 孝祐樹, “導電率テンソルを用いたFDTD法による多層CFRPパネルの電流分布解析”, 平成 29 年電気学会 電力・エネルギー部門大会(東京), Sep. 2017.
- [8] 上野 航暉, 梅田 晃央, 馬場 吉弘, 長岡 直人, 津端 裕之, 西 孝祐樹, “導電率テンソルを用いたFDTD法による実寸サイズのCFRPパネルの電流分布解析”, 平成 30 年電気学会 全国大会(福岡), Mar. 2018.
- [9] Law King Fai Farley, “Proton acceleration by inner surface irradiation of snail target”, 日本物理学会第 73 回年次大会, Mar. 2018.
- [10] Law King Fai Farley, “Strong kT magnetic field generation with PW laser and particle acceleration by anti-parallel magnetic field”, 日本物理学会第 73 回年次大会 レーザー学会第 38 回年次大会, Jan. 2018.
- [11] Takashi Asahina, Hideo Nagatomo, Atsushi Sunahara, Tomoyuki Johzaki, Masayasu Hata, Kunioki Mima and Yasuhiko Sentoku, “Nonlocal heat transport under strong magnetic fields in laser ablation region”, 10th International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications (Saint Malo, France), Nov-17.
- [12] 芝井 広, “遠赤外線干渉計FITE フライト計画”, 日本天文学会 (北海道大学), 2017年9月.
- [13] 梅田晃央, 上野航暉, 馬場吉弘, 津端裕之, 西孝祐樹, 佐藤保宜, “CFRPパネルの実寸モデルにおける雷電流分布および端部電界分布のFDTD解析”, 電気学会 放電・開閉保護・高電圧合同研究会(沖縄:2017).
- [14] 梅田晃央, 上野航暉, 馬場吉弘, 津端裕之, 西孝祐樹, 佐藤保宜, “三角柱セルを用いたFDTD法によるCFRPパネルの熱分布解析”, 電気学会 高電圧研究会(久米島:2018)).
- [15] Hiroyuki Hara, “Carbon window soft x-ray emission from dual laser-produced Pt plasmas”, Dublin, Ireland, Nov. 2017.

SC17 出展報告

伊達 進 (准教授)¹ 木戸善之 (講師)¹ 阿部洋丈 (招へい准教授)¹ 吉川隆士 (招へい教授)²

渡場康弘 (特任講師 (常勤))² 勝浦裕貴³ 安福健祐 (講師)⁴

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 サイバーコミュニティ研究部門⁴

2017年11月に米国コロラド州デンバーにて開催された国際会議/展示会 SC17 において、当センターの概要、研究内容、および事業内容を紹介するための展示ブースの出展を行った。本稿ではその展示内容や当日の様子等について報告する。

1. はじめに

大阪大学サイバーメディアセンターでは、例年、米国で開催される国際会議 SC において展示ブースを出展する活動を継続している。SC とは、The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis という正式名称を持つ、IEEE Computer Society および ACM SIGARCH によって開催されている国際会議であり、ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)分野におけるトップレベル会議の一つである。それと同時に、SC は HPC に関する最新機器や最先端技術の国際見本市でもある。そのため、北米を中心とした研究者や技術者に限らず、欧州、アジアの研究者や技術者が集う最大級の国際会議/展示会となっており、ここ数年では登録者数は1万人を超える数字が記録されている。当センターによる展示ブースの出展は、2000年の初出展から数え、今回で18回目となる。

2017年のSC (通称 SC17 は、米国コロラド州デンバー市にある Calvin L. Rampton Salt Palace Convention Center (以下、デンバーコンベンションセンター: 図1)にて、11月12日から17日までの期間に開催された。なお、デンバーでの SC の開催は、2001年度、2013年度に続いて3度目となり、本センターのデンバーでの展示も3度目となる。デンバーはコロラド州の州都であり、別名マイル・ハイシティ (Mile High City) とよばれる。このマイル・ハイとい

う名の由来は、デンバー市は標高1マイル(1609m)にあることによる。そのため、空気も薄く、お酒には酔いやすいという特徴もあるようだ。また、デンバーは一年を通して空気が乾燥している。実際、われわれがデンバーに到着して数日後には、日本との気候が違いすぎることもあるが、乾燥のため、喉が痛いなどの体調不良を訴えるものも多くいた。コンベンションセンターが位置するダウンタウンは米国の都市再開発の成功事例として有名であり、特に中心の16番街はレストランや複合施設が軒を連ねる中、無料のバスの専用路線と歩行者専用エリアが分離され、昼食などで外出するにも非常に快適な環境であった。



図1 デンバーコンベンションセンター

2. 展示内容

本年は、以下に紹介する当センターおよび情報推進部の教職員7名(招へい教員1名含む)、関連研究部門に配属されている大学院生4名、学部学生1名、サイバーメディアセンターとの共同研究を推進中のTIS株式会社より1名の合計13名という構成で展示ブースの運営に望んだ。展示者の記念撮影風景を図2に示す。

ブース展示は、11月13日から16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539名であった。2015年度の399名、2016名の411名に比べて増加している。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もあるかもしれないが、今年度も539名(バッジスキャンできてない方も多いため、それ以上)の方に本センターの概要、事業内容、研究活動について紹介・報告できた。昨年度は、411名のブース来訪者をもって、「この数字は一昨年もほぼ同数であり、本センターのブースサイズ、ブース要因規模では上限であるかもしれない。」と記載したが、この認識が間違えていたようである。昨年度も記載したが、ブース来訪者によっては10分以上もブースに滞在され、ブース展示要員と話しをしている方もおられたので、対応人数だけでブース展示の効果・意義を図れるものではないが、全体を振り返り、今年度もSCでのアウトリーチ活動もよい結果を残せたと考えている。



図2 SC2017での記念撮影

ブース来訪者の地域別分類(図3)を見ると、開催地の北米エリアからの来訪者が全体の59%(316名)を占めているのがわかる。続いて、日本からの来訪者が18%(99名)、欧州からの来訪者が8%(46名)、アジアからの来訪者が9%(48名)であった。またアフリカからの来訪者も年々微増しており、1%(4名)の来訪者があった。その他の内訳には、南米、オセアニア諸国などが含まれており、南極を除く全ての大陸からの来訪者に対して、アウトリーチ活動を行うことができたと言える。

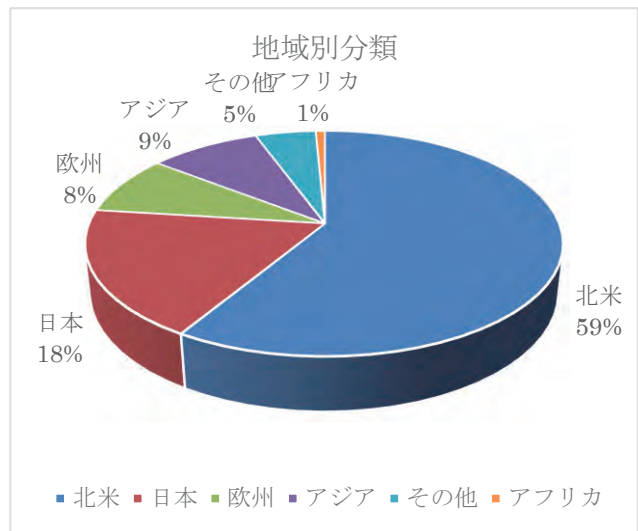


図3 SC17ブース来訪者 - 地域別分類

さらに、国別の統計情報(図4)を見ると、開催国の米国からの来訪者が圧倒的に多く、また日本からの来訪者が次いで多かったことがわかる。図6からわかるように、37カ国539名の来訪者らに本センターの研究展示、活動紹介を通じたアウトリーチ活動実績を得られたことになる。なお、国別分類は、来訪者がSCの登録サイトで自己申請した国名に基づくものであることを記しておく。

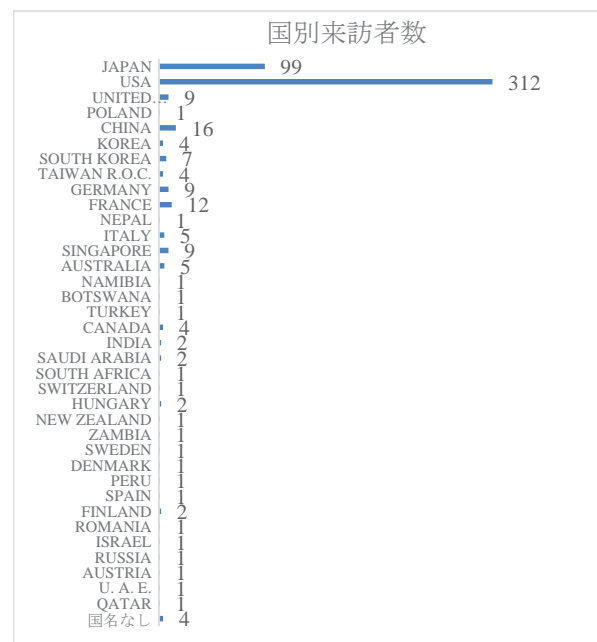


図4 SC17ブース来訪者 - 国別の詳細

<u>応用情報システム研究部門</u>	
スタッフ	伊達 進 木戸善之 阿部洋丈 (招へい准教授)
大学院生	高橋慧智 山田拓哉 遠藤 新 森本弘明
学部学生	松井裕希
<u>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</u>	
スタッフ	吉川隆士 (招へい教授) 渡場康弘 (特任講師 (常勤))
<u>サイバーコミュニティ研究部門</u>	
スタッフ	安福健祐 (講師)
<u>情報推進部情報基盤課</u>	
	勝浦裕貴
<u>共同研究者</u>	
	村木暢哉 (TIS 株式会社)

以下、SC17にて大阪大学サイバーメディアセンターで行な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 (木戸、勝浦)

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。

学内だけでなく学外に対しても、施設・サービスを提供しているという点について驚く方が多く、VR (仮想現実) を体験できる大規模可視化システムに興味を示される方も多かった。また IT コア棟の空調設備等についても説明し、データセンターとしての側面から興味を持っていただける方々もおり、サイバーメディアセンターの様々な取り組みについても紹介することができた。

また、大学の出展ということから、教育サービス

についても興味を持っていただいた来場者もおられ、Cyber Commons でのアクティブ・ラーニング環境の提供などについても紹介した。



図5 ポスター説明を行う木戸

(2) Large-scale Computing and Visualization Systems at the Cybermedia Center (木戸、勝浦)

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

今年の高性能計算機紹介ポスターでは、12月から稼働を開始した新システム「OCTOPUS」に関する質問が多く寄せられた。質問の多くは利用条件や利用方法、計算機性能などで、興味を持ってもらえているというのが伝わってくる内容であった。GPU ノードや大容量主記憶搭載ノードは性能に感心してもらえることも多く、よい計算機を構築したと実感することができた。

年々様々な最新技術が登場するため計算機ユーザの利用目的が多様化しており、これに対応するため OCTOPUS は複数種類のノードを持つハイブリッド型スーパーコンピュータとして構築を行った。しかしながらブースの訪問者には導入していないシステムやアプリケーションの提案を行う方も多く、計算機ユーザのニーズに対応することの難しさと HPC テクノロジーの進化の速さを改めて痛感する展示となった。



図 6 ポスター説明を行う勝浦

(3) Dynamically Optimized Interconnect Architecture based on SDN (高橋、森本、遠藤)

本ポスターでは、アプリケーションの通信特性に合わせて動的再構成可能な相互結合網に関する研究を紹介した。具体的には、Software-Defined Networking (SDN) 技術を活用した高速な MPI 集団通信アルゴリズム、ステージング通信と MPI 通信の競合回避手法、相互結合網のための性能解析ツールなどの研究の概要を述べた。

ブースの来訪者からは、「大規模なクラスタ環境において評価したのか?」「特別なスイッチを導入する必要があるのか?」「相互結合網の種類は Ethernet なのか、InfiniBand なのか?」など、実用性を重視した観点からの質問を多数いただいた。



図 7 ポスター説明を行う大学院生 (遠藤君)

(4) Access Control Mechanism & Resources Sharing Platform for IoT Era (山田、村木)

本ポスターでは、安全な IoT 資源間連携を目的として取り組んでいる 2 つの研究を紹介した。具体的には、SDN (Software-Defined Networking) 技術を活用しネットワーク資源へのアクセスをパケットフローごとに制御する手法と、ネットワークを介した IoT 資源共有プラットフォームについて研究概要を紹介した。

展示会では、「ネットワーク資源へのアクセス制御手法において、認証、認可手法としてどのような技術を採用しているのか」「IoT 資源共有時のプライバシー保護はどのように考えているのか」といった質問を頂いた。さらに、今後の研究発展の可能性について、「ネットワーク資源へのアクセス制御手法は DDos 攻撃対策として応用することができるのではないか」といった意見を頂くことができた。

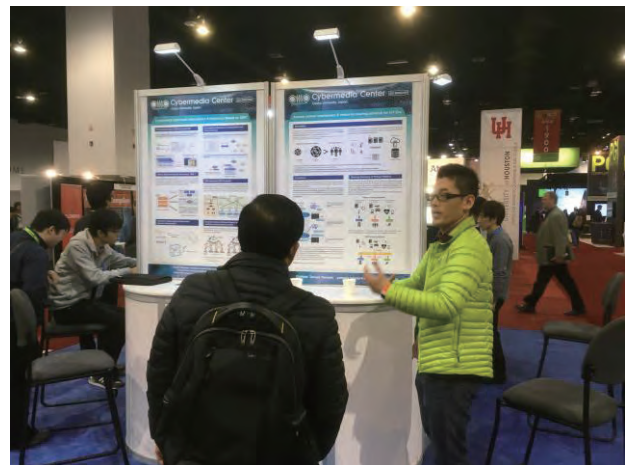


図 8 ポスター説明を行う大学院生(山田君)

(5) Dynamic and Secure Staging for Medical Data to Be Processed in The Computer Center (松井、渡場、吉川)

掲題について、ポスター展示と動態デモを行った。医療データの秘匿度に応じて最適なセキュア技術を組み合わせ、計算機センターの高性能計算機を活用することができるようにするシステムである。多くの来訪者から高性能計算環境の資源提供サービスで秘匿データを扱うためのセキュアな基盤構築の重要性について同意いただけたとともに、IP ネット

ワークより下のレイヤでセキュアなパーティショニング技術を適用した多重防御の構成について興味を持たれた。



図9 動態デモの様子

(6) An Automation of Cephalometric Landmarking using Parallel Deep

(渡場、吉川)

このポスターでは、現在サイバーメディアセンターと大阪大学歯学部附属病院矯正科で行っている共同研究について、大規模計算機利用のケーススタディとして発表した。

特許申請中のため内容についての詳細は差し控えるが、歯学部附属病院がこれまでに蓄積した医療画像、レントゲン写真を折りたたみニューラルネットワークを用いて治療方針に関する情報を収集する手法について説明した。

3. 他ブースでの活動

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

NEC ブースでの事業・研究紹介

“Future Direction of the Cybermedia Center’s Computing Infrastructure with New Supercomputing System OCTOPUS”というタイトルで応用情報システム研究部門准教授 伊達が11月13日 1:00pmより研究紹介発表を行った。当該発表では、2017年12月に導入された(SC開催時はまさに構築中)新スーパーコンピュータシステムOCTOPUSの概要とともに、本センターが描く本センターの人材育成等を視野にいたした将来構想、および将来のスーパーコンピュータシステムに向けた方向性について発表した。



図10 NECブースで発表する伊達

発表の場は、OCTOPUSシステムを構成する要素技術に関連した、Super Micro Computer Inc.、Asetek等のベンダ関係者をはじめ、立ち見もでるほど盛況であり、本センターの活動、研究成果に関するアウトリーチを進めることができた。

4. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機および可視化事業をはじめとし、高性能計算・ネットワークに関する研究成果を、欧米を中心とした500名強の来訪者にアウトリーチすることができた。これは一重に参加したスタッフ、学生の尽力に他ならない。来年度のSCの開催は米国テキサス州ダラス市で同時期に

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 23 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2017) 報告および 第 24 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2018) 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. Supercon2017

昨年 2017 年 8 月 21 日から 25 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(SuperCon2017)」が開催されました。東日本から 10 チーム、西日本から 10 チームが予選を通過し、本戦に進みました。

このコンテストは、2 名又は 3 名を 1 チームとする高校生・高専生の参加者たちが、与えられた課題を解くプログラムを 3 日間に渡って作成し、最終日にスーパーコンピュータで実行して、解答の正確さや計算の速さを競うもので、そのレベルの高さから、別名「**電腦甲子園**」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)(Cybimedia 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来ました。このコンテストは 5 日間にも渡る合宿型で、実際にスーパーコンピュータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。2007、2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が、2015 年と昨年、2017 年は SX-ACE が使われました。

2. 予選

2017 年の予選課題は 5 月 31 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 16 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。2017 は 32 校 42 チームが予選に参加しました。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくても学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。2017 年の予選課題は、東工大の作成チームによる「**品種改良問題**」というものでした。これは作物を交配させるとあるルールに従って「クセ」が親から子に引き継がれるとして、子の「クセ」の制御を行うために交配を設計するというものです。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。本戦課題は阪大の作成チームによる「**オーディオデータの圧縮**」に関する問題でした。各時間刻み幅の間での音量を 16 ビットの整数で表した元の PCM データから、前の時刻に比べて音量が上がった、下がっただけを 1 ビットで表す、という圧縮されたデータ(サイズが 1/16 になる)を作るというものです。実際の本戦では、課題に取り組む前に、SX-ACE、特にそのベクトル化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。本戦で圧縮されたデータを実際音で聴いて皆で楽しむ、というひとときもありました。高校生・高専生の参加者たちと、両大学の教員、学生チューターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

4. SuperCon 2018 の告知

2018年は8月20日から24日までの5日間での開催を予定しています。予選課題は5月30日に公表予定で、課題提出〆切は6月15日正午です。使用するスパコンは、東工大GSICのTUBAME 2.5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るよう様々な工夫を凝らそうと関係者一同考えています。本稿が皆様のお目に触れるときには既にスケジュールが進行しているかもしれませんが、もしも可能ならばみなさまもお知り合いの高校生にSuperCon2018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SuperCon2019以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

5. Web

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

大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学サイバーメディアセンター教授 降旗 大介

1. 概要

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

そ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といった各方面の専門家用の特殊なソフトウェア等々、多岐にわたります。こうした内容はユーザの要望に沿って、計画されています。詳しくは次ページに掲載しております表に掲載しておりますが、大規模計算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を幅広く対象とし、年に14~15回開催しております(2017年度は15回開催いたしました)。また、より詳細な情報をサイバーメディアセンター大規模計算機システムのwebにおいて掲載しておりますので、ぜひご参照ください。

2. 多忙な方も参加しやすく

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

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

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

3. 初学者にも優しく

未参加の方にとって、こうした講習会は敷居が高いと思われるがちです。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15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。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のです。

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 MPI についての講習会はもちろんのこと、スーパーコンピュータや大規模並列計算機が活躍の場である言語 HPF (High Performance Fortran) についての専門家による講習会、そして、AVS, Gaussian といった専門分野に特化したソフトウェアの講習会も行っています。

一部の講習会は、大規模計算機システムの開発そのものを行っている会社から技術者を講師として招いて実施しており、技術の非常に微細な部分に至るまで専門的な議論を行うことが出来る機会としてユーザの皆様にご利用いただいております。

5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、われわれサイバーメディアセンターの web

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

また、大規模計算機のハードウェア、ソフトウェ

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

2018 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4日 13:30-15:00	サイバーメディアセンター 降旗 大介 教授	サイバーメディアセンター 吹田本館 1階 サイバーメディアcommons
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5日 13:30-17:30	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室
3	SX-ACE 高速化技法の基礎	6月19日 13:30-17:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室
4	並列コンピュータ 高速化技法の基礎	6月22日 13:30-16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室
5	SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)	6月26日 10:00-16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室
6	SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)	6月29日 13:30-16:30	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室
7	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	9月 開催予定	未定	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟 7階 会議室
8	スーパーコンピュータ概要と スーパーコンピュータ利用入門	9月 開催予定	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	サイバーメディアセンター 吹田本館
9	SX-ACE 高速化技法の基礎	9月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
10	並列コンピュータ 高速化技法の基礎	9月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
11	SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)	9月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
12	SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)	9月 開催予定	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
13	AVS 可視化処理入門	9月 開催予定	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館
14	AVS 可視化処理応用	9月 開催予定	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館

テレビ会議システムによる講習会配信

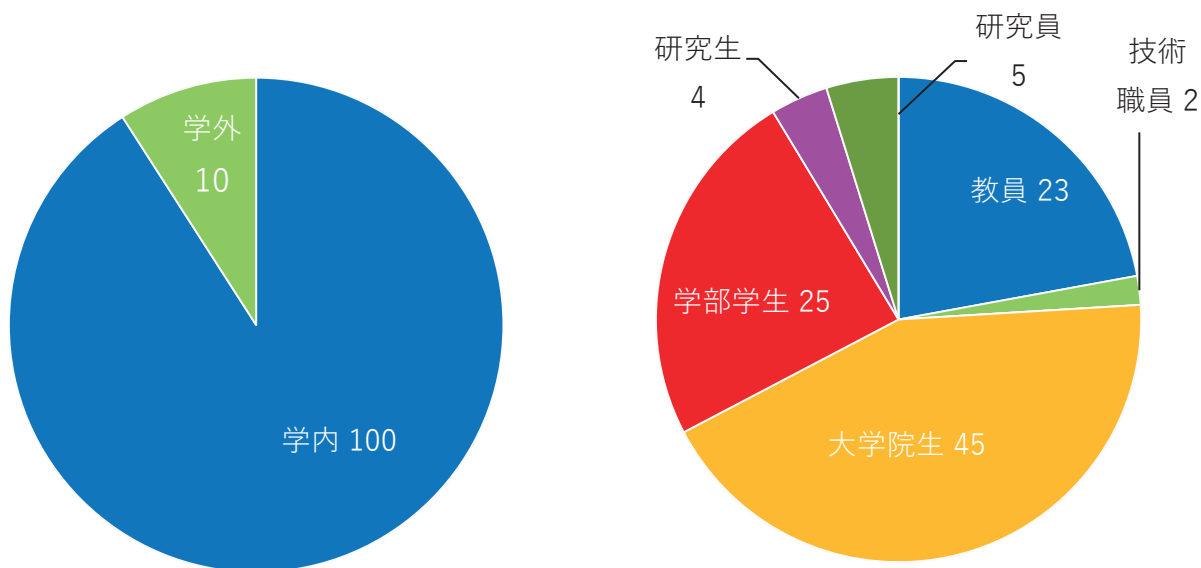
	講習会名	開催日時	開催期間	受講場所
15	Gaussian 講習会	8月 開催予定	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階 中会議室

2017 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

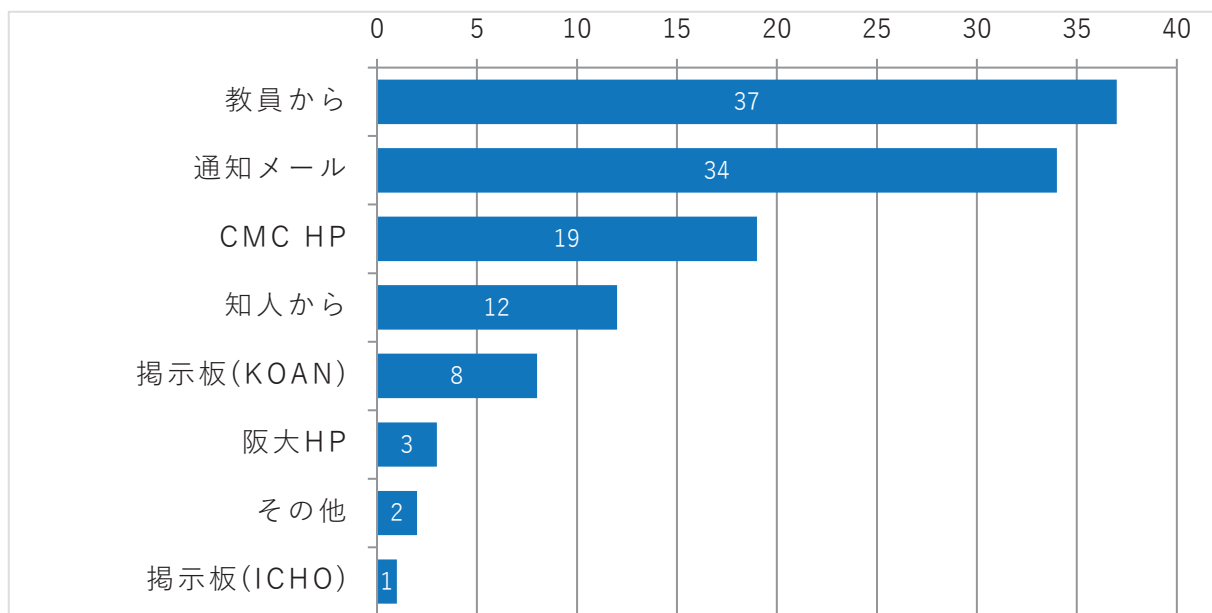
◆受講者数

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(6/6)	40	42	40	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(6/13)	18	14	14	0
SX-ACE 高速化技法の基礎(6/19)	4	4	4	0
並列コンピュータ高速化技法の基礎(6/20)	5	5	4	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(6/26)	13	9	7	2
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(6/27)	2	0	0	0
Gaussian講習会(8/3)	6	2	2	0
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/1)	21	12	12	0
スーパーコンピュータ概要と スーパーコンピュータ利用入門(9/4)	14	3	3	0
SX-ACE 高速化技法の基礎(9/8)	2	1	0	1
並列コンピュータ高速化技法の基礎(9/8)	5	1	1	0
SX-ACE 並列プログラミング入門(MPI)(9/20)	3	2	1	1
SX-ACE 並列プログラミング入門(HPF)(9/27)	1	1	1	0
AVS可視化処理入門(10/23)	8	7	6	1
AVS可視化処理応用(10/24)	7	7	5	2
合計	149	110	100	10

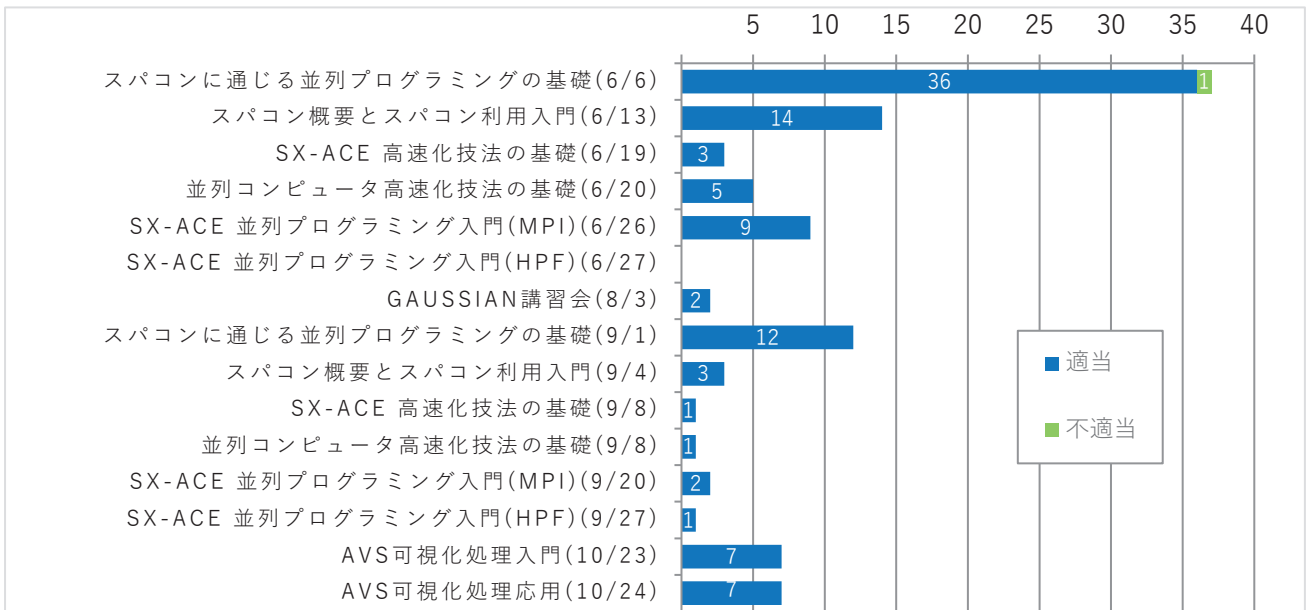
◆受講者の内訳



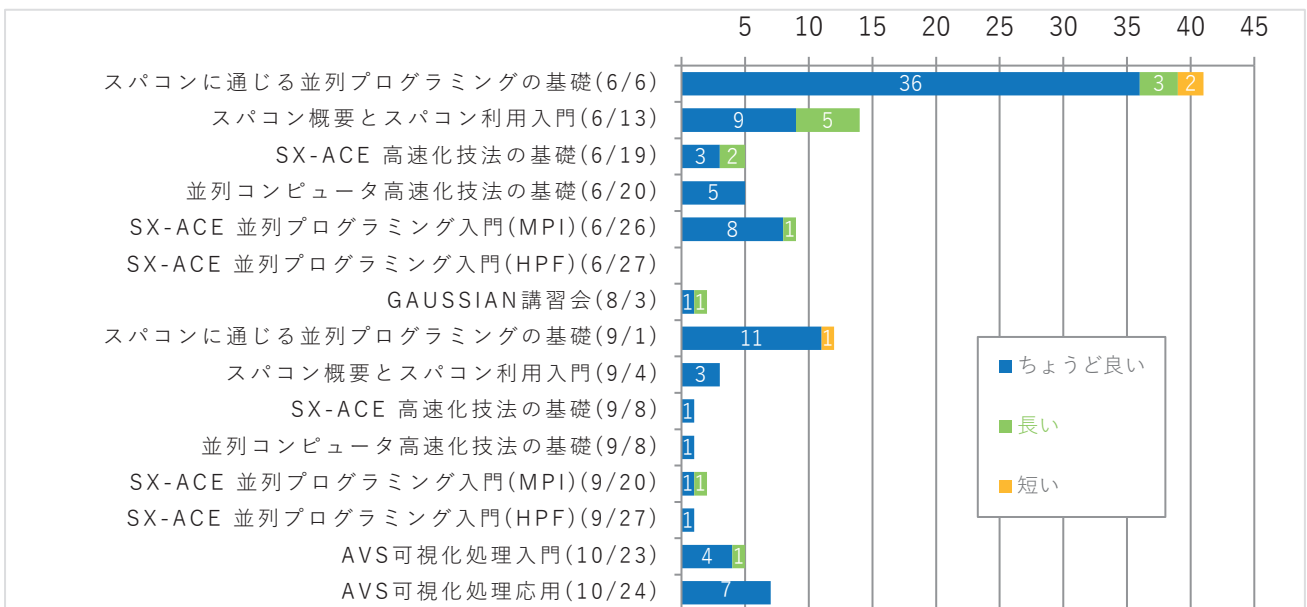
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)



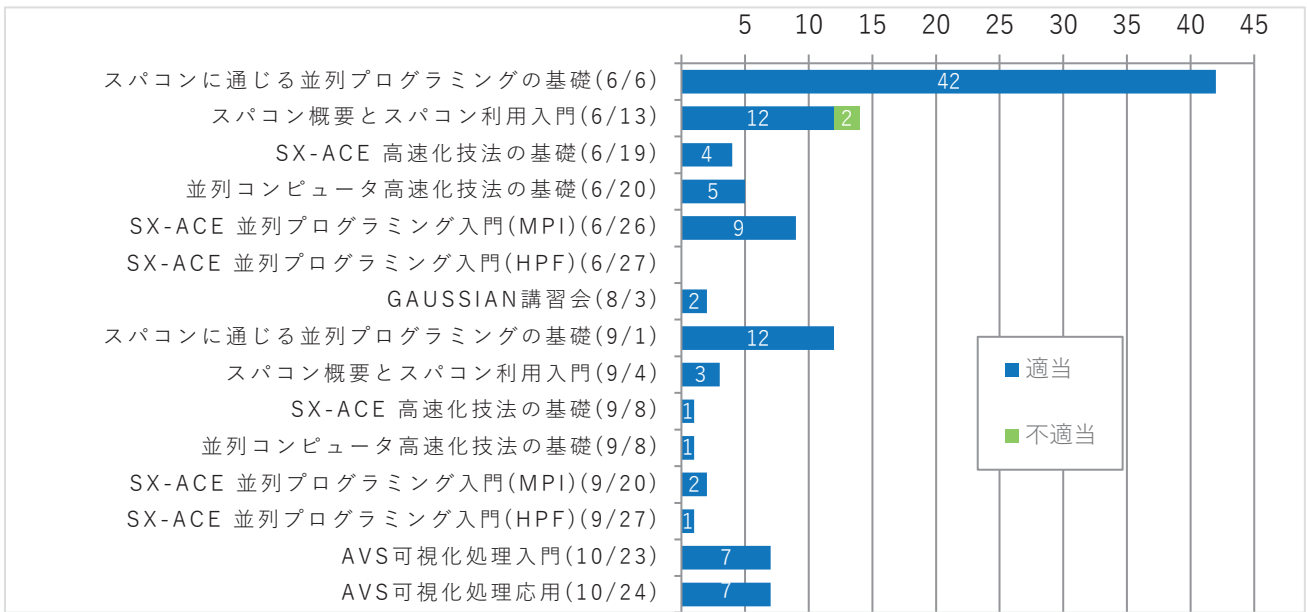
◆開催日は適当でしたか。



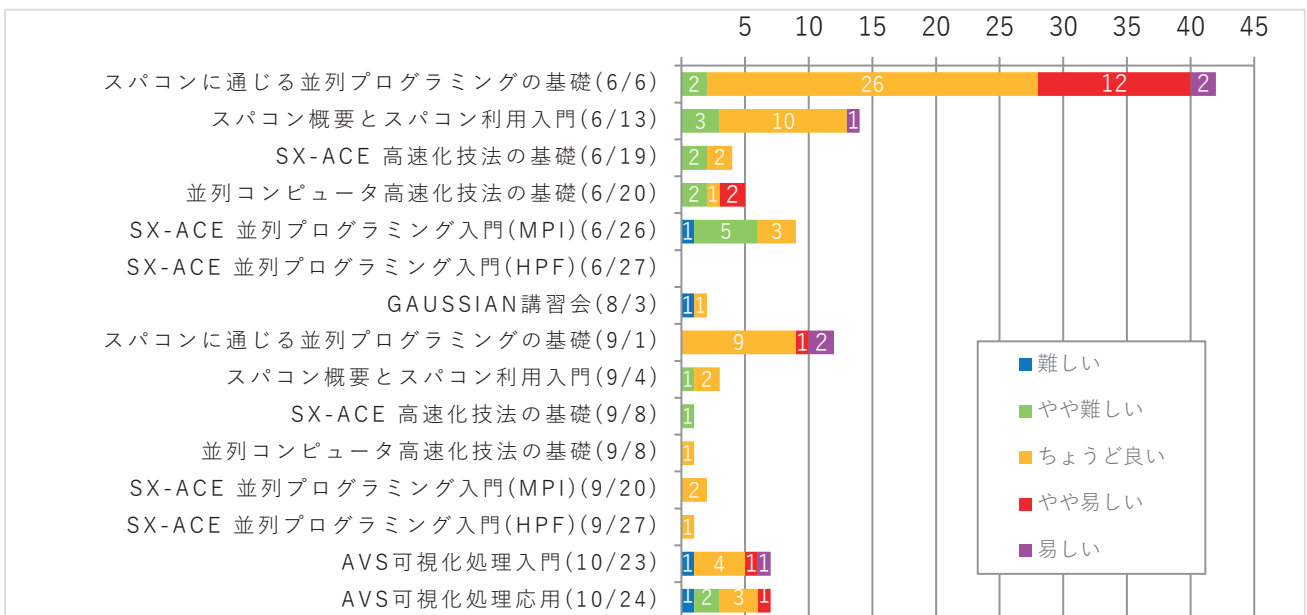
◆講習会の時間は適当でしたか。



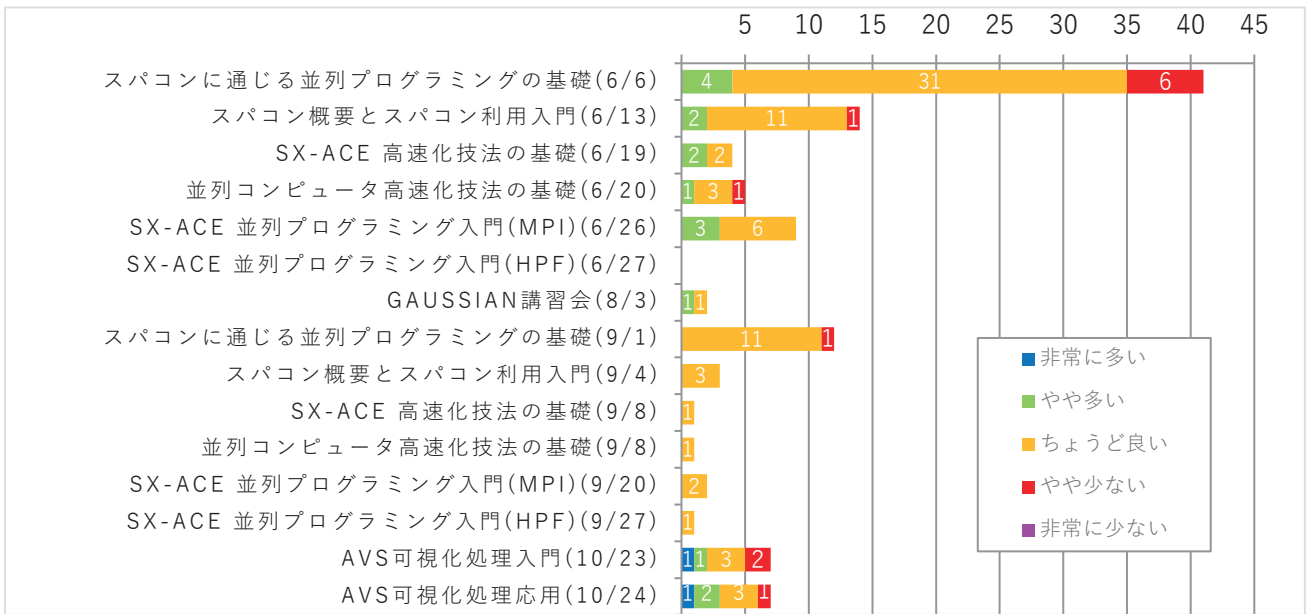
◆会場の大きさ、場所は適切でしたか。



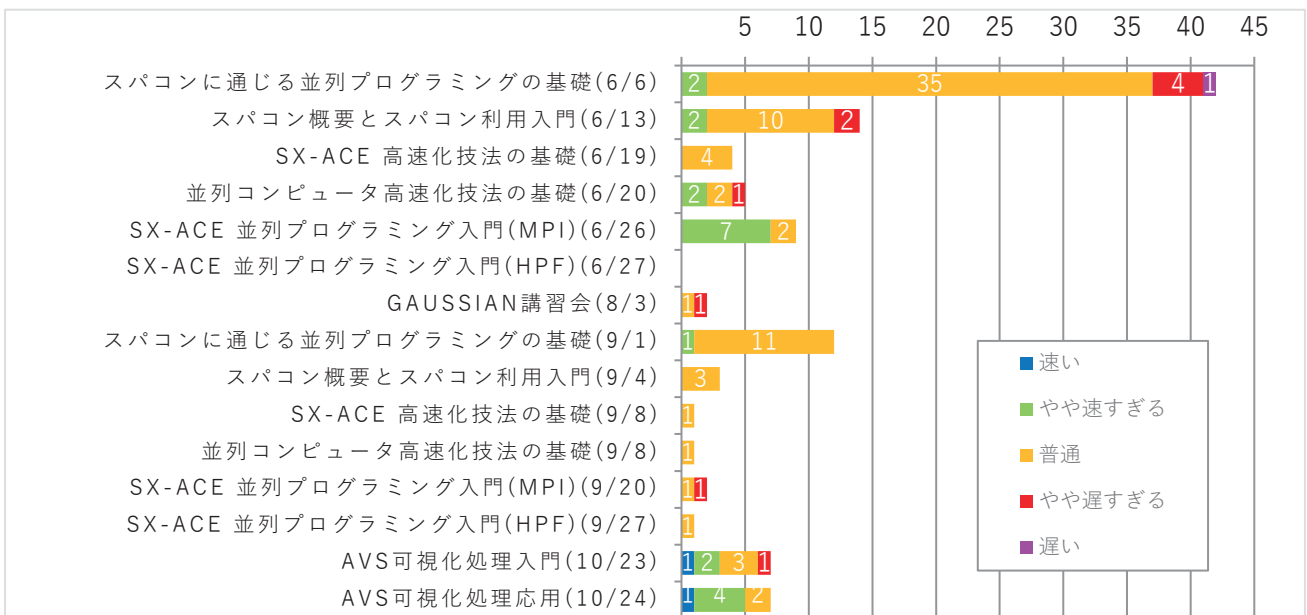
◆講習会の内容はどうでしたか。



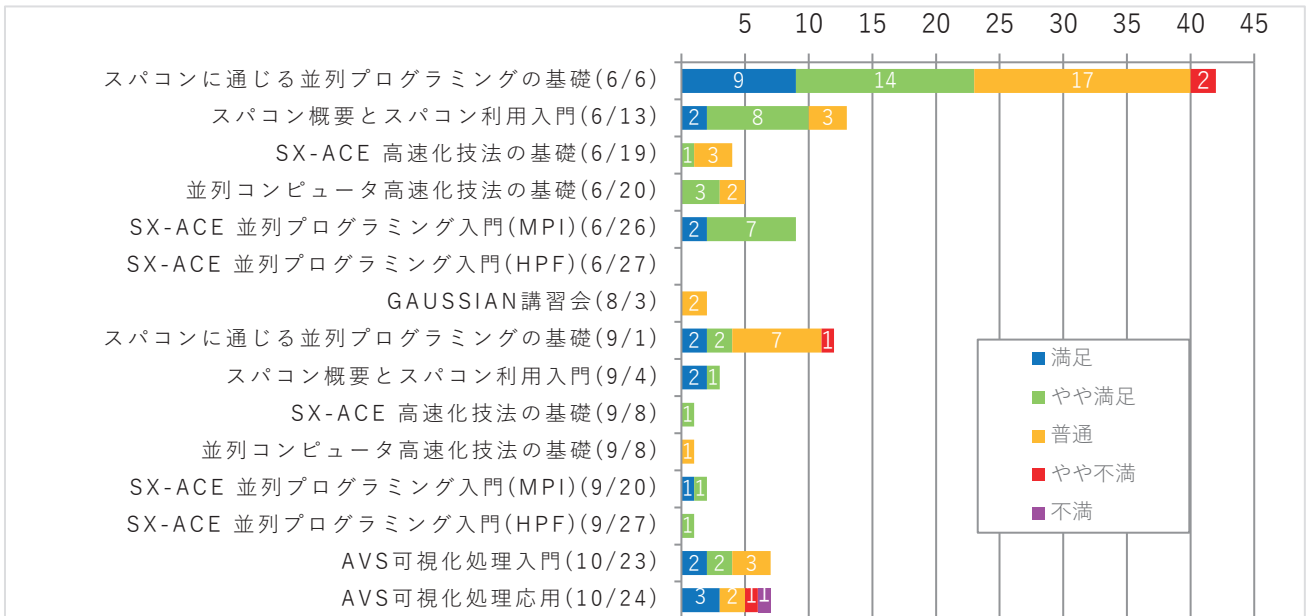
◆講習会で取り扱った内容量はどうか。



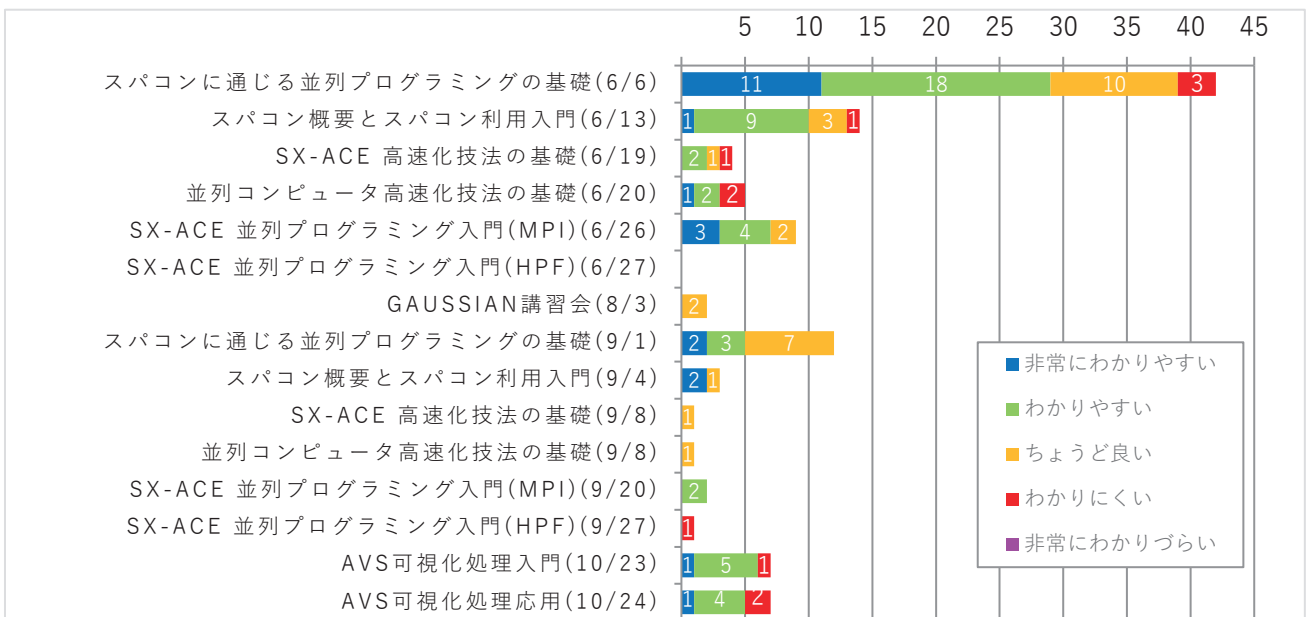
◆講師の進め方はどうか。



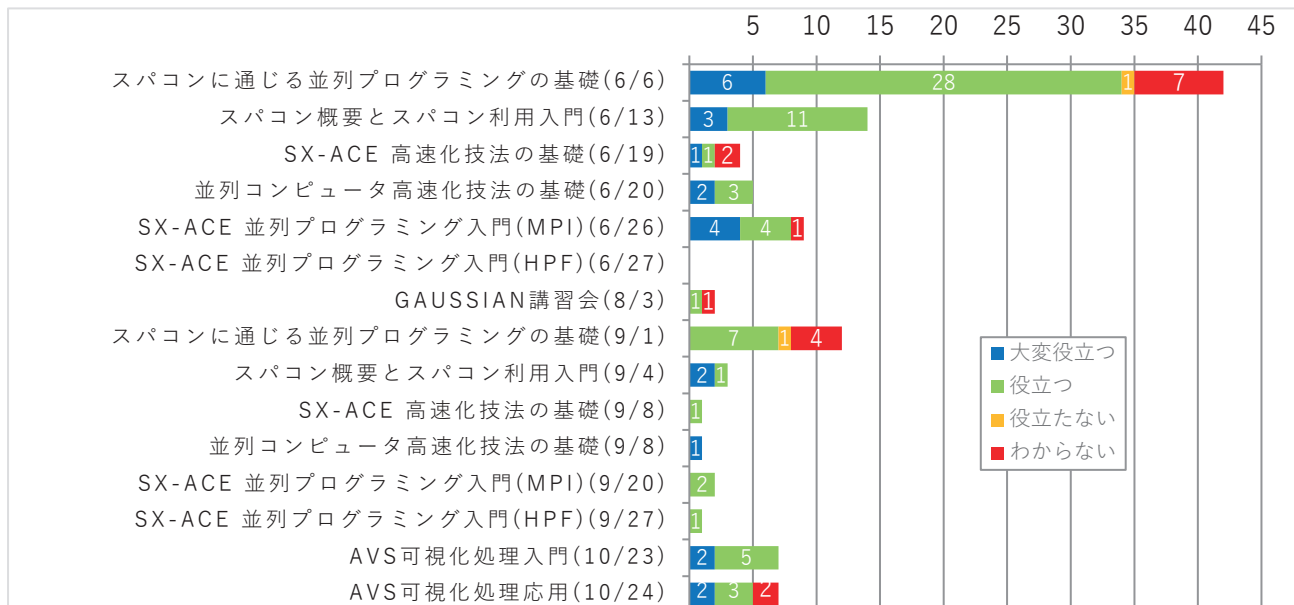
◆満足度は？



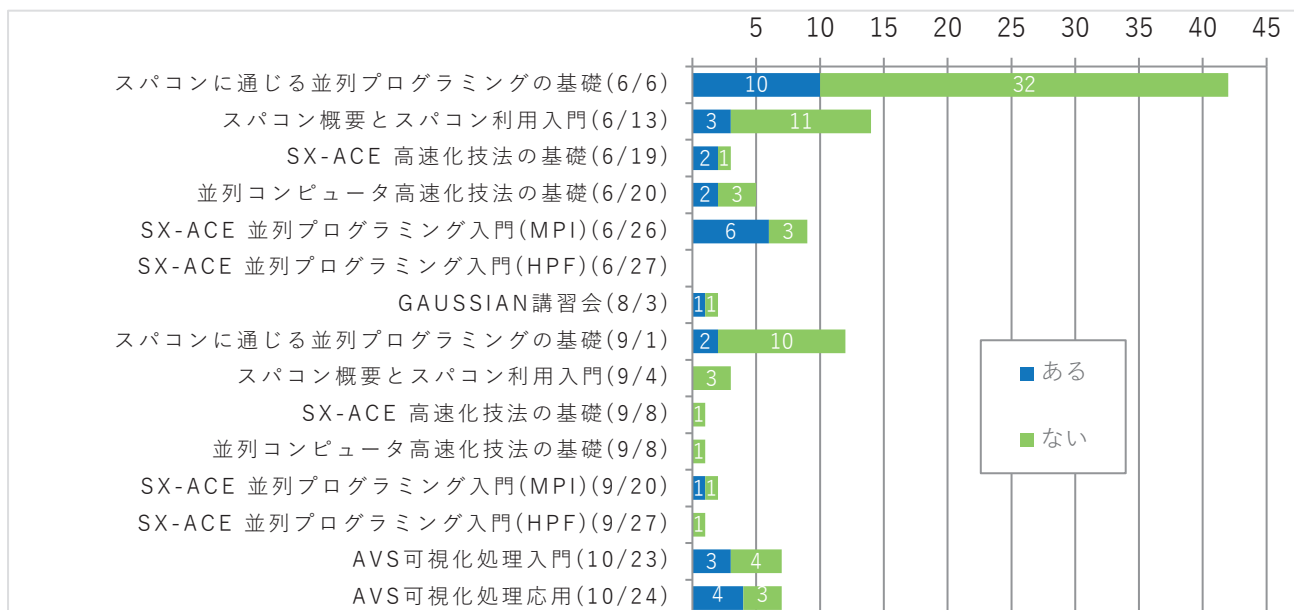
◆講習会の資料はどうか。



◆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。



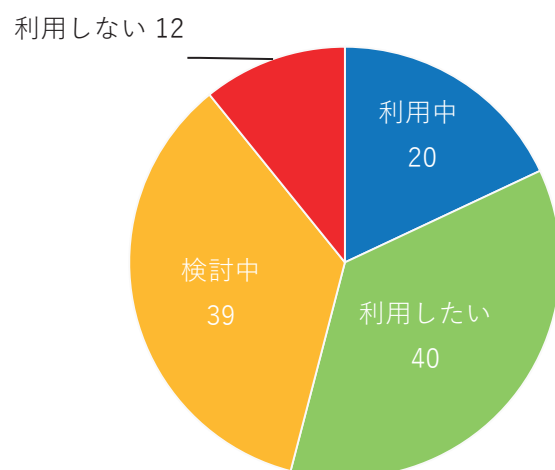
◆「ある」と回答された方の利用方法

「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。



2018年度 「HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 利用」の活動状況

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

大阪大学計算機資源を利用する 平成30年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	利用資源	研究課題名
京以外 産業利用課題 (実証利用)	VCC	新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築
京以外 一般課題	VCC	イメージベース超並列有限要素弾塑性解析によるアルミニウム鋳造合金のき裂発生メカニズムの解明[SPring-8との連携利用]
京以外 一般課題	SX-ACE	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション
京以外 一般課題	SX-ACE	ツイストされた時空縮約モデルの数値的研究
京以外 一般課題	SX-ACE	超臨界圧下の主流へ噴射する極低温噴流の大規模数値解析
京以外 一般課題	OCTOPUS	宇宙の大規模構造と銀河形成
京以外 一般課題	OCTOPUS	Revealing the role of fluoxetine in the anti-depressive effect from the interaction with lipid bilayer and TREK-1: a molecular dynamic study.

2018 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。

平成 30 年度の課題募集には合計 70 件の応募があり、東京大学情報基盤センターで開催された課題審査委員会及び運営委員会にて審議され、52 課題が採択されました。このうち 8 課題が大阪大学を利用することとなっています。

2018 年度 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 採択課題一覧

課題代表者	研究課題名	利用大学
萩田 克美 (防衛大学校)	高分子材料の破壊・構造形成時の 2 次元散乱パターンとディープラーニング分析技術の開発	北大、名大、阪大
垂水 竜一 (大阪大学)	非局所弾性理論に基づく格子欠陥力学場のアイソジオメトリック解析	名大、阪大
鈴木 厚 (大阪大学)	Implementation of parallel sparse direct solver on CPU-GPU hybrid architecture	阪大
撫佐 昭裕 (東北大学)	大規模津波浸水被害推計シミュレーションのマルチプラットフォーム向け最適化手法の研究	東北大、阪大
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	阪大
関口 宗男 (国士舘大学)	ドメインウォールフェルミオンを用いた格子 QCD による中間子質量生成機構の研究	阪大
飯田英明 (理化学研究所)	格子ゲージ理論によるダークマターの研究	阪大
渡場康弘 (大阪大学)	Software-Defined IT インフラストラクチャにおけるオーケストレーションに向けた資源管理システム	阪大

2017 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。平成 29 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、下記の 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
原田 拓弥 様 (関西大学大学院 総合情報学研究科)	日本の全世帯の位置情報付き仮想個票データの統計データからの生成

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
萩田 克美 様 (防衛大学校)	ゴム材料中のナノ粒子構造に対するディープラーニング画像認識モデルの分散学習による高速最適化技術手法の検討

2018 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2018 年度も引き続き研究課題の公募を行い、下記の 7 課題を採択しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
原田 拓弥 様 (関西大学大学院 総合情報学研究科)	日本全国の位置情報付き仮想の個票合成手法の精緻化
中村 浩隆 様 (大阪大学 工学研究科)	3次元 Particle-in-cell シミュレーションによる超高強度レーザー生成プラズママイクロアンジュレータに関する研究
兼安 洋乃 様 (兵庫県立大学大学院 物質理学研究科)	キロテスラ級磁場下における超高強度レーザープラズマ相互作用の物理
谷川 千尋 様 (大阪大学 歯学部附属病院)	矯正歯科治療後の三次元顔形態を予測する人工知能 (AI) システムの開発
若山 将征 様 (理化学研究所)	リー・ヤンの零点分布から探る有限密度 QCD における相構造の研究
石井 良樹 様 (大阪大学大学院 基礎工学研究科)	イオン液体の輸送物性における構造不均一性の役割の分子論的解明
松崎 義孝 様 (海上・港湾・航空技術研究所 港湾空港技術研究所)	沿岸域観測データを同化した広領域・高解像度計算による東京湾の流動・水質の解析

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
伊藤 悦子 様 (高知大学 教育研究部 自然科学系)	有限温度・有限密度 2 カラー QCD の相図と超流動性の解明

大規模計算機システム Q & A

2017年4月～2018年3月に当センターに寄せられた質問を掲載しております。
同等の内容を以下の Web ページでも閲覧いただけます。

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

Q. 年度途中で計算資源やストレージ容量の追加は可能でしょうか？

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

利用者管理システム(要認証)

<https://zenkoku-web.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/saibed/>

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

一般利用(学術利用) 資源追加申請

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/

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

Q. ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか？

A. scp コマンドを使用することで可能です。

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

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

Q. SX-ACE 向け「ar」「ld」コマンドの「sxar」「sxd」についてのドキュメントを閲覧したい

A. ドキュメントという形ではありませんが、sxman コマンドにより、各 SX コマンドのマニュアルを閲覧することが出来ます。下記のようにコマンドを入力してください。

```
sxman sxar  
sxman sxd
```

Q. コンパイル時に "(****) is abnormally terminated by SIGSEGV" というメッセージが表示され中
断する

A. フロントエンドサーバの stacksize の制限を超過している可能性があります。標準では stacksize 10240 kbytes となっておりますので、任意の値に変更し、再度コンパイルを試みてください。stacksize は、下記のコマンドで変更可能です。

```
limit stacksize (任意の値) kbytes
```

この対応でも改善しない場合はご連絡ください。

Q. OpenMP で並列化していない箇所の処理時間が増加している

A. コンパイル時に、OpenMP や自動並列化を使用するオプションを指定した場合、並列化指示行の有無に関わらず、「並列版ライブラリ」がリンクされます。「並列版ライブラリ」の関数(並列版の関数)には通常版ライブラリと比べて、排他制御のために他スレッドのリソースへのアクセスを制限する「ロック処理」が組み込まれています。

並列化指示行を挿入していない箇所で並列版の関数がコールされた場合、1 スレッドで動作するので、実際にロック処理に伴う「他スレッドの処理待ち」が発生するわけではないのですが、例えば、「排他が必要かどうか」といった判定を行う都合で、わずかですが通常版ライブラリより処理時間が増えることとなります。

一回のオーバーヘッドはわずかですが、大量にコールすると、処理時間に大きく影響することとなります。ご注意ください。

Q. MPIの実行結果を1つのファイルに出力したい

- A. MPIを用いた場合、通常はプロセスごとに出力ファイルが生成されます。しかしMPI-IOを用いて出力先を指定することで、各プロセスの出力を1つのファイルにまとめることができます。MPI-IOを使ったプログラム例を、以下で紹介いたします。

ファイルへの出力(書き込み)を行うプログラム例

各プロセスごとにプロセス ID(rank)を取得し、output.dat の任意の位置に出力するプログラムです。たとえば自身のプロセス ID が 4 の場合、output.dat の 16-19 バイト目 (INTEGER 換算で 5 番目) に自身のプロセス ID を書き込みます。プログラムの 8 行目-11 行目が、MPI-IO プログラムになります。

MPI-IO_write.f90

```
1 program sample
2 include 'mpif.h'
3 integer ierr,myrank
4 integer (kind=mpi_offset_kind) idisp
5 call MPI_INIT(ierr)
6 call MPI_COMM_RANK(mpi_comm_world,myrank,ierr)
7 idisp=0+4*myrank
8 call mpi_file_open(mpi_comm_world,'output.dat',mpi_mode_rdwr+mpi_mode_create,mpi_info_null,if
  h,ierr)
9 call mpi_file_set_view(ifh,idisp,mpi_integer,mpi_integer,'native',mpi_info_null,ierr)
10 call mpi_file_write(ifh,myrank,1,mpi_integer,mpi_status_ignore,ierr)
11 call mpi_file_close(ifh,ierr)
12 call MPI_FINALIZE(ierr)
13 stop
14 end
```

ファイルからの入力(読み込み)を行うプログラム例

上記で作成した output.dat からデータを読み込み、print で画面に表示するプログラムです。プログラムの 8 行目-11 行目が、MPI-IO プログラムになりますが、出力用のプログラムから mpi_file_write が mpi_file_read に変わったのみでほぼ変化がありません。

MPI-IO_read.f90

```
1 program sample
2 include 'mpif.h'
3 integer ierr,myrank,out
4 integer (kind=mpi_offset_kind) idisp
5 call MPI_INIT(ierr)
6 call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD,myrank,ierr)
7 idisp=0+4*myrank
```

```

8  call mpi_file_open(mpi_comm_world,'output.dat',mpi_mode_rdwr+mpi_mode_create,mpi_info_null,if
    h,ierr)
9  call mpi_file_set_view(ifh,disp,mpi_integer,mpi_integer,'native',mpi_info_null,ierr)
10 call mpi_file_read(ifh,out,1,mpi_integer,mpi_status_ignore,ierr)
11 call mpi_file_close(ifh,ierr)
12 print '(I2)', out
13 call MPI_FINALIZE(ierr)
14 stop
15 end

```

MPI-IO の各関数については、以下をご参照ください。

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

Q. MPI プロセスをノード毎にラウンドロビンで 1 プロセスずつ割り当てたい。例えば、20 コア × 4 ノードで IntelMPI を使って並列計算する際に、以下のように割り当てたい。

```

node 1 :      rank 0, 4, 8, ..., 76
node 2 :      rank 1, 5, 9, ..., 77
node 3 :      rank 2, 6, 10, ..., 78
node 4 :      rank 3, 7, 11, ..., 79

```

A. VCC(20 コア)4 ノードで並列計算を実行する場合、ジョブスクリプトで

```

#PBS -b 4
mpiexec -ppn 1 -n 80 ./a.out

```

と指定してください。IntelMPI は mpiexec の -ppn オプションに指定した値の数だけ、連続したプロセスをノード毎に割り当てます。したがって、-ppn 1 と指定していただくことで、1 ノードに 1 プロセスずつ割り当てられるようになります。

Q. MPI で並列計算を行う際に、ノード間のネットワーク的な距離の近いノード群を指定して利用できますか？

A. 計算に使用するノードは、スケジューラ側が自動で最適なノードを割り当てるようになっており、利用者様の方では指定することはできません。

Q. SX で計算を実行した際に Core ファイルが出力される(Core Dump が発生する)

- A. 実行中のプログラムが不正なメモリアクセスを行った場合に、実行エラーとなり Core ファイル(core.リクエスト ID という名称のファイル)が出力されます。Core ファイルは、デバッガを使用することで解析が可能です。詳細は以下のマニュアルの「2.4 Core ファイルの調査」をご確認ください。

dbx 利用の手引 : <https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/secure/manual/SXACE/J/dbx.pdf>

pdbx 利用の手引 : <https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/secure/manual/SXACE/J/pdbx.pdf>

なお、デバッガはインタラクティブバッチをご利用ください。

インタラクティブバッチの利用方法 :

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/sx-ace/interactive/>

Q. SX コンパイラの旧バージョンを利用したい

- A. 旧バージョンの SX コンパイラを利用する場合、PATH と環境変数の設定が必要です。現在設定されているバージョンは-V オプションにて確認していただけます。

PATH の設定

コマンドライン上で下記コマンドを実行してください。

(※***には利用したいバージョンを入力します。)

```
set path=(/SX/opt/sxc++/rev***/bin/ $path)    (C++/SX コンパイラ)
set path=(/SX/opt/sxf90/rev***/bin/ $path)    (FORTRAN90/SX コンパイラ)
set path=(/SX/opt/sxf03/rev***/bin/ $path)    (NEC Fortran2003 コンパイラ)
```

環境変数の設定

コマンドライン上で下記コマンドを実行してください。

(※***には利用したいバージョンを入力します。)

```
setenv SX_BASE_CPLUS /SX/opt/sxc++/rev***    (C++/SX コンパイラ)
setenv SX_BASE_F90 /SX/opt/sxf90/rev***      (FORTRAN90/SX コンパイラ)
setenv SX_BASE_F03 /SX/opt/sxf03/rev***      (NEC Fortran2003 コンパイラ)
```

利用規程等

・規程関係	121
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程	121
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧	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試用制度利用内規	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利用相談員内規	125
・附表	126
大規模計算機システム ホスト一覧	126
スーパーコンピュータSX-ACE、PCクラスタ及びOCTOPUSのジョブクラス一覧	126
2017年度大規模計算機システム稼働状況	128

・ 規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2 前項の規定にかかわらず、センター長が必要と認めた場合は、報告書の提出を求めることができる。

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

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

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

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

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

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

第13条 利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。

- (1) 学内経費(科学研究費補助金を除く。)の場合にあつては、当該予算の振替による。
- (2) 前号以外の場合にあつては、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違反した者その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生じさせた者があるときは、利用の承認を取り消し、又は一定期間大規模計算機システムの利用を停止させることがある。

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

附 則

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

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

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成13年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

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

附 則

この改正は、平成15年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年2月15日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成20年4月16日から施行する。

附 則

この改正は、平成23年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年5月10日から施行する。

附 則

この改正は、平成25年4月1日から施行する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧

国立大学法人大阪大学諸料金規則 別表第17

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

(1) スーパーコンピュータ(SX-ACE)の負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
185,000円/年	1ノード

(B) 共有

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

備考

- 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(8%)を加えて得た額とする。
- 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 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。
- (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。
- (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。
- (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。その場合の月額負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- (B)は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付ける。

(2) 大規模可視化対応PCクラスタの負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
320,000円/年	1ノード

(B) 共有

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

備考

- 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(8%)を加えて得た額とする。
- 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 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。
- (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。
- (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。
- (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。その場合の月額負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- (B)は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付ける。

(3) スーパーコンピュータ(SX-ACE)、大規模可視化対応PCクラスタ ディスク容量追加の負担額

基本負担額	提供単位
10,000円/年	1TB

備考

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

(4) OCTOPUSの負担額

(A) 占有

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

(B) 共有

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

(C) ディスク容量追加

基本負担額	提供単位
3,000円/年	1TB

備考

- 1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(8%)を加えて得た額とする。
- 2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 3 ディスク容量は1申請単位で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。

3 利用有効期間を超えた場合は、利用を停止するものとする。

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

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

附 則

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

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年4月1日から施行する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用相談員内規

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

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

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

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

第4条 相談員は、電子メール等を利用しオンラインで、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、一定量の計算機システム使用にかかるジョブ優先処理等の特典を与えることができる。

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

附 則

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

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

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

附 則

この改正は、平成25年4月1日から施行する。

・ 附表

大規模計算機システム ホスト一覧

サーバ名	ホスト名
ログインサーバ (SX-ACE/VCC)	login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
ログインサーバ (OCTOPUS)	octopus.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp

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

スーパーコンピュータ SX-ACE のジョブクラス一覧

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

大規模可視化対応 PC クラスタ (VCC) のジョブクラス一覧

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

※ジョブクラス一覧表は、2018 年 4 月 1 日時点のものです。最新の情報は下記の WEB ページを御覧ください。
い: <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/jobclass/>

OCTOPUS のジョブクラス一覧

汎用 CPU ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能経過時間	利用可能最大 Core 数	利用可能最大メモリ	同時利用可能ノード数
共有利用	OCTOPUS	120 時間	3,072 Core (24Core×128 ノード)	24,576 GB (192GB×128 ノード)	128 ノード
	INTC	120 時間	3,072 Core (24Core×128 ノード)	24,576 GB (192GB×128 ノード)	128 ノード
占有利用	myOCTOPUS	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

GPU ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能経過時間	利用可能最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用可能ノード数
共有利用	OCTOPUS	120 時間	768 Core (24Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
	INTG	120 時間	768 Core (24Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
占有利用	myOCTOPUS	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

Xeon Phi ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能経過時間	利用可能最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用可能ノード数
共有利用	OCTPHI	120 時間	2,048 Core (64Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
	INTP	120 時間	2,048 Core (64Core×32 ノード)	6,144 GB (192GB×32 ノード)	32 ノード
占有利用	myOCTPHI	無制限	24Core×占有ノード数	192GB×占有ノード数	占有ノード数

大容量主記憶計算ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能経過時間	利用可能最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用可能ノード数
共有利用	OCTMEM	120 時間	256 Core (128Core×2 ノード)	12TB (6TB×2 ノード)	2 ノード
	INTM	120 時間	256 Core (128Core×2 ノード)	12TB (6TB×2 ノード)	2 ノード

2017 年度大規模計算機システム稼働状況

稼働状況

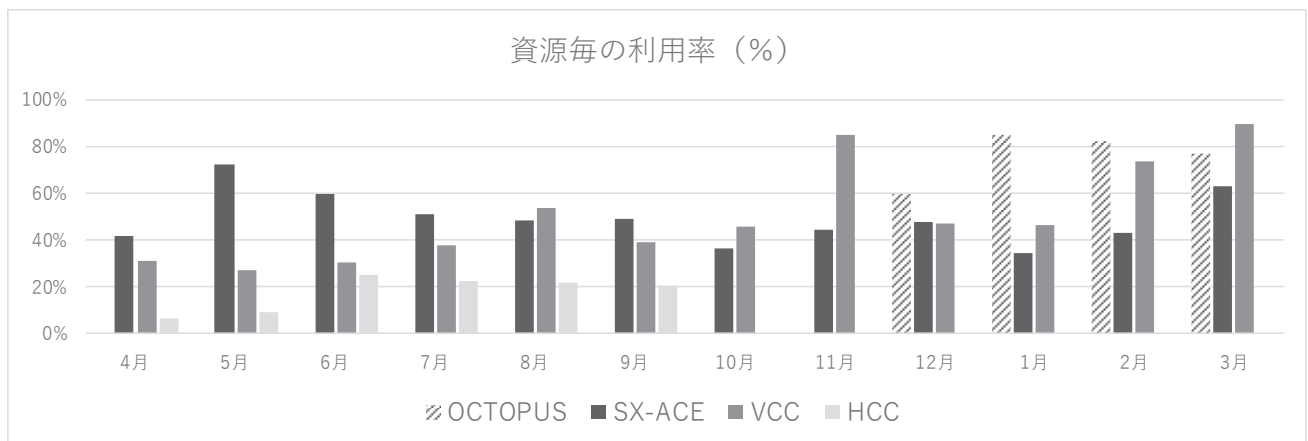
(単位:時間)

事項		月												合計	月平均
		4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3		
稼働時間	計算サービス時間 (A1)	658:45	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	671:30	672:00	709:00	8591:15	715:56
	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	0:00	0:00	0:00	0:45	0:03
	業務時間 (A3)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	小計 (A)	659:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	672:00	672:00	709:00	8592:00	716:00
保守時間 (B)		61:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	72:00	0:00	35:00	168:00	14:00
故障時間 (C)		0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
その他の時間 (D)		0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
運転時間 (A+B+C+D)		720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	672:00	744:00	8760:00	730:00
稼働率 (A/(A+B+C+D)%)		91.53	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	90.32	100.00	95.30	---	98.10
運転日数 (E)		30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30
一日平均稼働時間 (A/E)		21:58	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	21:40	24:00	22:52	---	23:32

処理状況

項目	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(VCC)			汎用コンクラスタ(HCC)			OCTOPUS			
	共有		占有	共有		占有	共有		占有	共有		占有	
処理月	件数	CPU時間(時)	利用率	ノード数	件数	ノード時間積(時)	利用率	件数	ノード時間積(時)	利用率	件数	ノード時間積(時)	利用率
4月	6,353	146,846	41.88%	18	3,136	13,780	31.23%	712	24,399	6.76%	-	-	-
5月	8,208	252,069	72.45%	18	2,306	13,662	27.41%	503	34,600	9.28%	-	-	-
6月	6,793	204,356	59.68%	20	722	15,055	30.70%	1,602	91,805	25.45%	-	-	-
7月	6,837	319,981	51.38%	45	743	19,461	37.99%	1,532	83,735	22.46%	-	-	-
8月	7,939	208,807	48.32%	22	654	27,650	53.87%	1,813	80,840	21.69%	-	-	-
9月	7,981	240,184	49.17%	23	3,392	19,666	39.61%	2,921	75,457	20.92%	-	-	-
10月	8,006	177,345	36.97%	23	1,171	23,767	46.30%	-	-	-	-	-	-
11月	6,376	211,420	44.60%	23	1,580	42,206	84.96%	-	-	-	-	-	-
12月	6,862	227,729	47.98%	23	3,232	24,256	47.27%	-	-	-	18,853	148,380	60.00%
1月	5,938	141,290	34.46%	23	5,193	24,098	46.34%	-	-	-	39,831	218,200	85.50%
2月	6,179	183,536	43.45%	23	1,514	34,406	74.20%	-	-	-	120,235	250,850	82.30%
3月	11,146	387,813	63.23%	23	805	43,479	89.81%	-	-	-	89,404	211,898	77.30%
合計	88,618	2,701,376	-	-	24,448	301,486	-	9,083	390,835	-	268,323	829,328	-

(注) 利用率は、次の計算式により算出している。
 スーパーコンピュータ SX-ACE の利用率 = (SX-ACE の CPU 時間 / 稼働中ノードの合計サービス時間) * 100
 大規模可視化対応 PC クラスタ(VCC)の利用率 = (VCC のノード時間積 / 稼働中ノードの合計サービス時間) * 100
 汎用コンクラスタ(HCC)の利用率 = (HCC のノード時間積 / 稼働中ノードの合計サービス時間) * 100
 OCTOPUS の利用率 = (OCTOPUS のノード時間積 / 稼働中ノードの合計サービス時間) * 100



募 集

- ・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について 131
- ・大規模計算機システム利用案内 132

大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

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

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

* 投稿いただいた方には、掲載した広報誌 5 部を進呈いたします。

【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
 - ・ ページ設定 (Microsoft Word2010 の設定です。)
 - ・ 用紙サイズ A4 縦
 - ・ 1 ページの文字数と行数：行数 40、行送り 18.2pt、1 頁 2 段書き
 - ・ フォント 本文 MS 明朝 10Point
題名 MS ゴシック 14Point、半角英数 Times New Roman
執筆者氏名 MS 明朝 10Point、なお、姓と名の間及び機関と研究科と専攻名の間は半角スペースを入れる。
 - ・ 余白 上 20mm、下 20mm、左右 20mm、印刷形式：標準
 - ・ その他 セクションの開始位置：次のページから開始
用紙の端からの距離：ヘッダ 15mm、フッタ 17.5mm
垂直方向の配置：上寄せ
 - ・ 文字等の設定
 - ・ 年は西暦で記述する。
 - ・ 数字、英字は半角（書式：Times New Roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角
 - ・ 文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に全角
 - ・ 日本語文中の句読点は半角の“、”“.”を使用せず、全て全角の“、”“。”とする。
2. Microsoft Word 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、PDF ファイルに変換してください。
3. 原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。
zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp
なお、送信の際、件名を「HPC ジャーナル原稿」と入力くださるよう、お願いします。
4. 電子メールの容量が 25MB 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 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/
大規模可視化システムホームページ	http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp/
大規模計算機システムポータル (スーパーコンピュータ等についての情報を提供 しています。マニュアルの閲覧、パスワード の変更等が行えます。)	https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/

・利用相談

プログラム、センターの利用に関する 質問・相談	利用相談を電子メールで受付けます。 E-mail: 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。
----------------------------	---

広報委員会委員

松 岡 茂 登 (委員長、大阪大学 サイバーメディアセンター)
浦 西 友 樹 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
大 前 智 美 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
吉 野 元 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
降 籬 大 介 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
義 久 智 樹 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
小 島 一 秀 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
森 原 一 郎 (大阪大学 サイバーメディアセンター)
伊 藤 雄 一 (大阪大学 クリエイティブユニット)
岩 崎 琢 哉 (大阪大学 経営企画オフィス)

(お願い)

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

大阪大学サイバーメディア HPC ジャーナル No. 8
2018 年 9 月発行

編集 : 大阪大学サイバーメディアセンター広報委員会

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

印刷 : 阪東印刷紙器工業所

表紙デザイン : 阿部 浩和 (大阪大学)



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