

全国共同利用版

広報

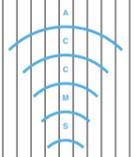
センター共同研究報告

【若手研究者奨励枠】山本義暢、功刀資彰◎齊木吉隆、小林 幹◎清水雅樹◎梅山有和◎長谷川淳也、北川裕也、松田建児◎加藤雄人、大村善治◎後藤 晋、清水雅樹◎金津将庸、山本洋紀、澤本伸克、福山秀直、齋木 潤◎宮原友夫、中辻 博、杉山 弘◎鈴木不律、梶 弘典◎松井 淳、郷 康広、新村芳人◎高木洋平◎川口久文、山田知典、梶 弘典【プログラム高度化支援事業】山本量一◎村田澄彦◎淡路敏之、石川洋一◎梶村好宏◎平原和朗、大谷真紀子、高橋康人、堀 高峰、兵藤 守◎小路真史【大規模計算支援枠】遠山貴巳◎木村欣司、藤澤克樹、中田真秀、山下 真【学術情報メディアセンターコンテンツ作成】塩瀬隆之、元木 環◎元木 環、上田寛人、宮部誠人、林 由華、河原達也、田窪行則

目次

[巻頭言]	
・スーパーコンピュータ共同研究制度の発展に向けて.....	1
牛島 省	
[スーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠)研究報告]	
・T2Kオープンスパコンを用いた高プラントル数流体MHD乱流の大規模直接数値計算.....	2
山本義暢、功刀資彰	
・ローレンツ系の非双曲構造に関する不安定周期軌道解析.....	6
齊木吉隆、小林 幹	
・微粒子懸濁液の粘度特性.....	8
清水雅樹	
・ポルフィリン系色素の太陽電池性能と電子構造の相関の解明.....	10
梅山有和	
・PSII反応中心の励起状態と分子間相互作用.....	12
長谷川淳也、北川裕也、松田建児	
・大規模粒子シミュレーションによる地球放射線帯での相対論的電子加速過程についての研究.....	14
加藤雄人、大村善治	
・自転軸が歳差運動をする球体内に維持される乱流.....	17
後藤 晋、清水雅樹	
・ヒト頭頂間溝における視覚性短期記憶容量を反映したfMRI応答.....	19
金津将庸、山本洋紀、澤本伸克、福山秀直、齋木 潤	
・DNAの円二色性スペクトルと構造との関係.....	21
宮原友夫、中辻 博、杉山 弘	
・固体NMRおよび第一原理計算による有機EL素子の分子構造・凝集構造の解析.....	23
鈴木不律、梶 弘典	
・霊長類ゲノム配列を用いた嗅覚受容体遺伝子の比較解析～三色色覚の発達は嗅覚受容体の進化に影響を与えたのか?.....	26
松井 淳、郷 康広、新村芳人	
・境界埋め込み法による物体形状表現と低風圧型物体周りの流れ.....	28
高木洋平	
・モンテカルロ法による有機固体の電荷輸送シミュレーション.....	30
川口久文、山田知典、梶 弘典	
[プログラム高度化支援事業研究報告]	
・コロイド分散系の直接数値シミュレータKAPSELによる大規模シミュレーションの実現.....	32
山本量一	
・三次元二相流格子ボルツマン法プログラムのMPI並列化と貯留岩の空隙ネットワーク内における二相流動シミュレーション.....	36
村田澄彦	
・沿岸海況予測に向けた高性能ダウンスケーリングモジュール開発.....	40
淡路敏之、石川洋一	
・次世代の宇宙航行推進システム開発のための評価ツール「3次元ハイブリッド粒子コード」の高性能化.....	43
梶村好宏	
・南海トラフ巨大地震発生サイクルの物理的理解.....	47
平原和朗、大谷真紀子、高橋康人、堀 高峰、兵藤 守	
・宇宙プラズマ中におけるミラー不安定性の非線形発展の研究.....	51
小路真史	
[スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠)研究報告]	
・有限温度密度行列繰り込み群法を用いた強相関電子系の動的性質の研究.....	55
遠山貴巳	
・超大規模最適化問題に対する高速計算～京都大学T2Kスパコン上におけるSDPARAの数値計算.....	59
木村欣司、藤澤克樹、中田真秀、山下 真	
[2009年度京都大学学術情報メディアセンターコンテンツ作成共同研究 研究報告]	
・ミクストメディアによる総合博物館における展示研究.....	63
塩瀬隆之、元木 環	
・琉球方言デジタルアーカイブの構築と電子博物館との連携化.....	67
元木 環、上田寛人、宮部誠人、林 由華、河原達也、田窪行則	
[サービスの記録・報告]	
・スーパーコンピュータシステムの稼働状況とサービスの利用状況.....	71
・センター利用による研究成果(平成21年度).....	74
[資料]	
・大型計算機システム利用負担金 別表.....	78
・サービス利用のための資料一覧.....	80
[編集後記]	
・編集後記、奥付.....	81

Cover : Designed by TANI Takushi / T&T Design Lab. (December, 2010)



スーパーコンピュータ共同研究制度の発展に向けて

京都大学学術情報メディアセンター
牛島 省

学術情報メディアセンターでは、スーパーコンピュータ共同研究制度として、現在「若手研究者奨励枠」、「プログラム高度化共同研究」、「大規模計算支援枠」という3種類の共同研究制度を設けています。各制度の概略は以下のとおりです。「若手研究者奨励枠」は、学生および若手研究者の利用負担金の一部を本センターが負担する奨励研究制度であり、「プログラム高度化共同研究」は大規模計算プログラムの高度化・高性能化をソースコードレベルで支援する制度です。また、「大規模計算支援枠」は、特定の期間にわたって大規模計算を実施するために、本センターが計算資源を提供する制度です。

本号では、平成21年度に実施された、これらの共同研究の成果報告を掲載しております。計算科学の各分野において、若手研究者の萌芽的な研究から、スーパーコンピュータを利用しなければ実施不可能な大規模計算、また、計算機科学分野との連携を基盤とするプログラム高度化研究などが、多彩に展開されていることがご理解いただけると思います。

スーパーコンピュータ利用を中核とする、このような共同研究制度に深く関連する動向として、「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」(英文略称: JHPCN)と、京都大学「計算科学ユニット」の2つに触れたいと思います。前者のJHPCNは、文部科学大臣の認定を受けて平成22年4月より開始された公募型共同研究制度で、7大学センターと東京工業大学学術国際情報センターを合わせた8つの情報基盤施設から構成されるネットワーク型拠点において展開されるものです。今年度は、9月1日に東京大学・山上会館にて第1回シンポジウムが開催され、各拠点の活動紹介や、採択37件のポスターセッションが行われました。

一方、「計算科学ユニット」は、京都大学・学際融合教育研究推進センター内に設置された、部局横断的な組織であり、平成22年9月末に内規や構成員が整い、活動が開始されようとしています。計算科学ユニットは、学内の多くの部局で行われている「計算科学」分野の研究者間の交流を促進するとともに、「計算科学」と「計算機科学」の研究者間の連携を図ることを目的としています。このように、研究面では、JHPCNの京大版といった見方もできますが、学内において、より緊密な融合が進められると期待されています。さらに、計算科学ユニットでは、学際的な組織の利点を生かして、次世代の計算科学・計算機科学研究者を育てる教育を提供するとともに、学外関連組織との協力関係を構築することも目指しています。

本センターが提供する共同研究制度等を、上記のような拠点研究や新組織の設置などの動向と調和させ、直接的あるいは間接的・長期的な視点から、利用者および共同研究者に対して有用な制度へと発展させていくことが、今後の活動の重要なポイントであると考えております。スーパーコンピュータをキーワードとする共同利用・共同研究が、より一層発展するよう努力して参りたいと考えております。皆様のご支援・ご指導をどうぞよろしくお願いいたします。

T2K オープンスパコンを用いた

高プラントル数流体 MHD 乱流の大規模直接数値計算

山本 義暢 功刀 資彰

京都大学大学院工学研究科原子核工学専攻

1 はじめに

核融合炉ブランケットにおける冷却材(及び増殖材)の候補の一つであるFLiBe(LiFとBeFの混合熔融塩)^[1]は, 化学的安定性に優れ及びMHD(Magnet Hydrodynamics)圧損の影響を受けにくいといった利点を持つ反面, 材料腐食, トリチウム回収, 伝熱劣化等の問題が指摘されている. 一般に磁場乱流場においては, 液体金属流(低プラントル数流体: $Pr \ll 1$, $Pr = \nu/\alpha$: プラントル数, ν : 動粘性係数, α : 温度拡散係数)を対象とすることが多いため, その伝熱特性の劣化が問題視されることはあまりない. 一方熔融塩であるFLiBeはプラントル数 20-30 程度の高プラントル数流体でありその伝熱特性は乱流熱伝達に依存する.

乱流の直接数値シミュレーション(DNS, Direct Numerical Simulation)は計算機能力の飛躍的發展に伴い, 流体物理を基礎とする各種工学分野において, 理論解析・実験室実験に加えて, 第3の解析手法として確立し, 乱流構造の解明, それに付随する乱流熱・物質移動さらには乱流モデルの評価等において, 重要なツールとなっている. 本研究ではプラントル数 25 程度の高プラントル数流体を対象とするため, 速度場の最小スケール(コルモゴロフスケール)よりもさらに小さいバチエラスケール(プラントル数の 1/2 乗に比例する)に及ぶ温度変動を解析する必要が生じる. 従ってその直接数値計算においては計算負荷が増大し, スーパーコンピュータ上で大規模メモリ・並列計算が不可欠である. そのため現段階においても非磁場下においてもせん断乱流場においてはDNSの実行例は少なく, 磁場下においては皆無である.

そこで本研究では, 高プラントル数 MHD 乱流熱伝達の大規模直接数値計算手法の確立とそれに基づく DNS データベースの構築を目標とする.

2 DNS の概要

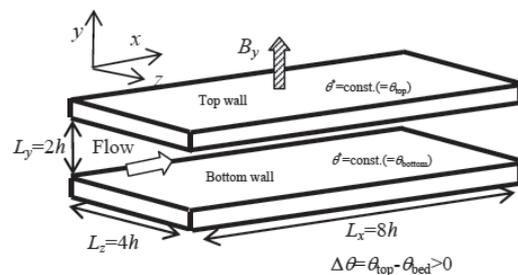


Fig.1 Flow geometry and coordinate system

図1に対象とする流動場の概要及び座標系を示す. 座標系は主流方向をx軸, 鉛直方向をy軸, スパン方向をz軸とした. 流れ場は, 鉛直方向に一定磁場を印加し, 主流方向に一定の圧力勾配($F = u_x^2/h$, u_x : 壁面摩擦速度, h : チャンネル半値幅)により駆動される平行平板間流れである. 加熱条件としては, 上壁加熱の温度差一定条件($\Delta\theta = \theta_{top} - \theta_{bottom} = \text{一定}$, θ_{top} : 上壁温度, θ_{bottom} : 下壁温度)とし, 上・下壁温はそれぞれ一定である. また簡単のため温度場はパッシブスカラーとした.

空間の離散化は, 主流及びスパン方向にフーリエ・スペクトル法, 鉛直方向に2次精度の中心差分を用いた. 時間進行は対流項及び磁場項に2次精度のAdams-Bashforth法, 粘性拡散項にCrank-Nicolson法, 圧力勾配項にEuler陰解法を用いた. また主流及びスパン方向のエイリアジング誤差は3/2則によりこれを除去した.

境界条件は全物理量に対し、主流及びスパン方向に周期境界条件とし、壁面で速度場にno-slip条件、電位ポテンシャルは絶縁壁を仮定し、勾配0、温度は一定とした。

3 高プラントル流体への拡張

本研究では高プラントル数流体の温度場に関しては、計算量を低減するために、水平方向については、温度場にのみ高解像度の格子を用いる。速度場については高波数部分に0を与え、逆フーリエ変換により物理空間に戻すことにより、補間を行う。なお鉛直方向に対しては、速度場に関しても、温度場と同様の高解像度格子を適用する。本手法の妥当性を検討するために、 $Pr=25$ の高プラントル流体解析において、CASE1：速度場及び温度場共に十分な解像度格子(主流・及びスパン方向格子数： $N_x=648, N_z=324$, 格子分解能、 $\Delta x^+=1.8, \Delta z^+=1.8$, ここに上付き添え字+は摩擦速度と動粘性係数により規格化した値であることを示す。)を使用した計算と、CASE2：温度場にのみ高解像度格子(速度場格子数： $N_x=72, N_z=72$, 速度場格子分解能： $\Delta x^+=16.7, \Delta z^+=8.3$, 温度場格子数： $N_x=320, N_z=160$, 温度場格子分解能： $\Delta x^+=3.8, \Delta z^+=3.8$)を使用した計算の比較検討を行った。

図2にCASE2の場合におけるチャンネル中央付近における主流方向変動速度(図2-(1)),速度場と同解像度における温度場(図2-(2))及び高解像度格子を用いた温度場(図2-(3))のコンタを示す。図2-(3)の高解像度の温度場においては速度変動(図2-(1))より細かな温度変動が発生していること、また速度場と同等の解像度の図2-(2)の場合は、微細な温度変動が解像できていないことが確認できる。

図3にチャンネル中央付近における速度場及び温度場の主流方向1次元エネルギースペクトル分布を示す。温度場にのみ高解像度格子を用いたCASE2の場合、最大速度分解能は $k_x h \approx 30$ 程度であるが、温度変動のスペクトルの高波数成分($k_x h > 30$)においても、速度場・温度場共に高解像度格子を用いたCASE1の場合とよく一致する。従って高プラントル流体解析においては、温度場の高波数変動において、速度変動の影響は小さいことが確認できる。

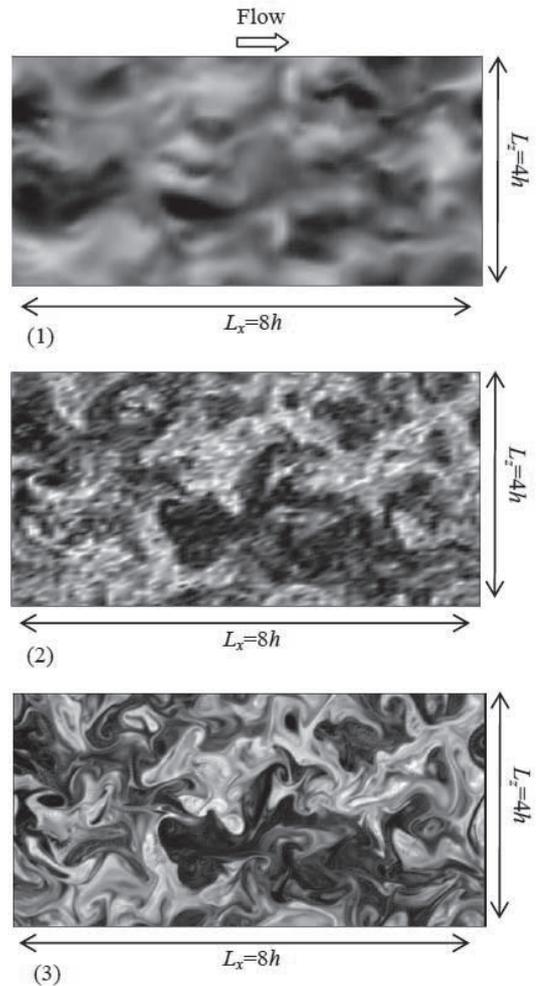


Fig.2 Flow visualization, CASE2, top view,

- (1) Strenwise turbulent velocity,
-2(black) $<u^+<2.0$ (white)
- (2) Turbulent temperature (coarse grid),
-0.15(black) $<\theta/\Delta\theta<0.15$ (white)
- (3) Turbulent temperature (Fine grid),
-0.15(black) $<\theta/\Delta\theta<0.15$ (white)

次に乱流解析において解像度の影響が顕著に現われる物理量である散逸率について検討する。図4-(1)に速度場の散逸率(ε^+)の分布及び図4-(2)に温度散逸率(ε_{θ}^+)の分布を示す。図4-(1)の速度場の散逸率においては、解像度の影響はほとんど見受けられず、CASE2の格子分解能においても速度場は十分な格子分解能を有していることが確認できる。一方図3-(2)の温度散逸率においては、解像度が不足すると、壁近傍で過剰予測していることがわかる。一方温度場にのみ高解像度格子を用いた場合は、速度場・温度場共に高解像度格子を用いた場合との差異は見られない。

以上の通り、高プラントル流体解析において、

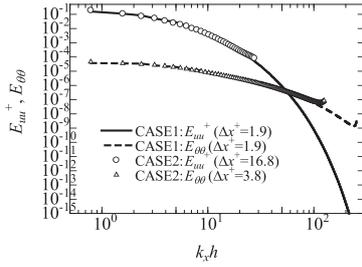
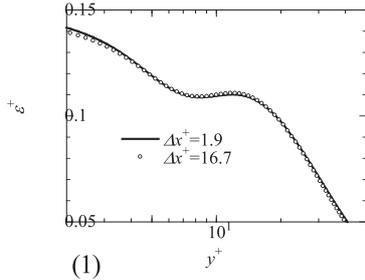
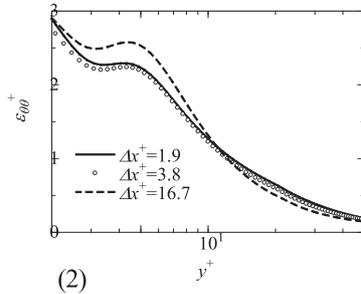


Fig.3 1D energy spectra profiles



(1)



(2)

Fig.4 Grid resolution dependency,

(1)Energy dissipation,

(2)Temperature energy dissipation

温度場のみ高解像度格子を使用する本手法の妥当性が確認できた。また本手法を適用することにより、速度場・温度場共に高解像度格子を使用する場合と比較し、CPU時間を30%程度、メモリ量を45%程度に低減することができた。

4 並列化とその性能評価

大規模直接数値計算へ対応するためには領域分割を用いた並列化が不可欠である。本計算プログラムは既にMPI(Message Passing Interface)を用いて、 y 方向への1次元領域分割(図5(1)参照)が行われている。しかし、 y 方向の3重対角行列解法(Tri-Diagonal Matrix Algorithm, TDMA)の際には、逐次演算となるため、図5(2)に示すように分割方向を y 方向から z 方向に入れ替え(軸転置)を行う必要が生じる。この軸転置は各Rankが全Rankへの通信を行う、いわゆるAlltoall通信

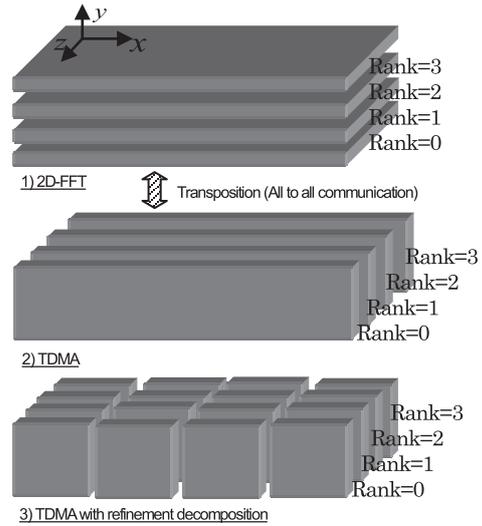


Fig.5 1-D domain decomposition and transposition between 2D-FFTs and TDMA algorithms in case of 4PEs

となり通信負荷が高い。そこで本研究では、TDMA解法は y 方向のみに依存し、その他の方向には独立であることを利用し、軸転置部分を細分化(図5(3)参照)し、通信終了部分については、その他の通信と平行して演算を実行することにより、通信部分の隠蔽を行った。

また y 方向の差分演算用に、各rank間で差分精度に応じた領域(袖部)をオーバーラップさせる必要がある。物理量の更新に伴い、袖部分を各rank間で交換(袖通信)する際、メモリアクセス及び通信を連続とするために y 方向の配列を、プログラミング上、式(1)のように最外配置とした(Fortranの場合)。

$$d(k_y, y, k_z) \rightarrow d(k_y, k_z, y) \quad (1)$$

ここに、 k_y 、 k_z は主流及びスパン方向への波数である。図6に主流、鉛直、スパン方向に288、432、288の格子を使用した場合における計算時間(経過時間)の比較を示す。ここに計算時間はHX600/1ノード(16core)を用いた場合を基準として規格化されている。また48core、96coreを使用したケースは、平成22年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(マルチパラメータサーバ型シミュレーションを支えるシステム化技術に関する研究)を利用して実行した。本並列化における並列化率は99.8%、並列化効率85.6%(16並列と96並列の比較の場合)となり、十分な並列効果が得られた。表1に各計算機システムとの比較を示す。ここに計算速度はHX600/32coreを用いた場合を基準に

して、規格化している。またFX1, Express5800, SR16000 はそれぞれ、32 並列(Flat MPI)を使用している。各計算機システムの理論性能の違いを考慮すると、Express5800 が最も効率良く計算できている。これは Express5800 が、比較的高いメモリバンド幅を持ち、32coreの場合、ノード内並列で実行できることが要因と考えられる。同様に 1 ノード内で計算可能な SR16000 の場合、理論性能の違いを考慮すると、HX600 よりも効率が悪くなっている。この原因は、SMT機能を有効に使えていないためと思われる。一方FX1 の場合、1 ノードあたり 4coreであるため同一MPI並列数で比較すると、ノード間通信の影響でやや不規則になる特徴が伺えた(特に64 並列を超える場合)。HX600 のメモリバンド幅は比較的低いものの、ノード間通信速度と演算速度のバランスが取れているため、Flat MPIの高並列時(96-128)でも良好な並列性能が得られている。

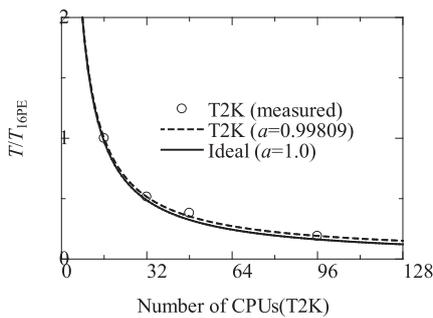


Fig.6 Elapsed time as a function of number of CPUs.

Table1 Comparison of computational speed normalized by HX600/32cores.

	計算速度比
HX600/32core	1.00
HX600/96core	2.71
FX1@名大	1.29
Express5800@東北大	1.58
SR16000@九大	2.02

5 DNS データベースの構築

最後に開発したプログラムを用いて、日米共同研究(Jupiter-II計画)^[2]と同条件下(バルクレイノルズ数 14000, ハルトマン数: $Ha=0-28$, $Pr=5.2$)を対象とした計算を実行した。計算格子は主流, 鉛直,

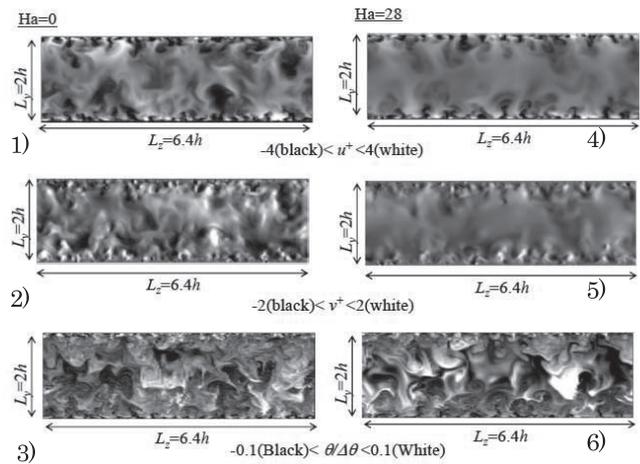


Fig.7 Visualization, end view,1)streamwise turbulent velocity, $Ha=0,2$)vertical turbulent velocity, $Ha=0$, and 3)turbulent temperature, $Ha=0,4$, 5), and 6) is same as 1), 2), and 3) but $Ha=28$, respectively

スパン方向に 288, 432, 288 点の格子を用い、1 ケースあたり約 35 万ステップの時間積分を行い、DNSデータベースを構築した。

図 7 に任意の瞬間における磁場下($Ha=28$)及び非磁場下($Ha=0$)における、主流方向変動速度(図 7-1, 4)), 鉛直方向変動速度(図 7-2, 5))及び温度変動(図 7-3, 6))のコンタを示す。磁場下($Ha=28$)においては、チャンネル中央付近で速度乱れが減衰している。一方温度場においては、磁場下の場合にチャンネル中央付近で大規模な温度変動が生じていることがわかる。これはMHD効果による熱伝達効果の減少により、チャンネル中央付近で温度勾配が生じたことが要因と考えられる。またMHD効果による熱伝達率の変化は実験結果²⁾と良好に一致し本計算結果の妥当性が確認された。

今後は得られた DNS データベースの詳細解析を実行すると共に、 $Pr=25$ (FLiBe)を対象とした大規模計算(格子数:2048x870x1024, メモリ量:700GB 以上)を実行する予定である。

参考文献

- [1] A. Sagara, O. Motojima, K. Watanabe, S. Imagawa, H. Yamanishi, O. Mitarai, T. Sato, H. Chikaraishi and FFHR Group, Fusion Engineering and Design, 29 III, 51(1995).
- [2] T. Yokomine, J. Takeuchi, H. Nakaharai, S. Satake, T. Kunugi, N. B. Morley, and M. A. Abdou, Fusion Sci, and Tech, 52, 625-629(2007).

ローレンツ系の非双曲構造に関する不安定周期軌道解析

齊木 吉隆*

北海道大学大学院 理学研究院 数学部門

小林 幹

京都大学 数理解析研究所

力学系の非双曲構造はさまざまな系に見出されるものの、理解は十分に進んでいない。本研究では、共変リアプノフ解析を用いてローレンツ系の“安定多様体と不安定多様体のなす角度”をカオストラクタ、周期軌道上で計測し、パラメータ変化に伴う接構造の発生と周期軌道の関連を議論する。

1 はじめに

カオストラクタには、一般に無数の不安定周期軌道 (UPO(unstable periodic orbit)) が埋め込まれていることが知られている。また、カオス力学系の不安定周期解は、カオスの重要な特徴である不安定性と回帰性を持ち合わせた解である。そのため、周期軌道はカオス解析において重要な役割を果たし得ることは想像に難くない。ただ、不安定周期軌道は、その不安定性故に、実際に数値的な検出を行なうことに困難を伴うため、これまでに多くの研究がなされているわけではない。本報告では、力学系理論において精力的に研究されている非双曲構造を、系に埋め込まれた周期軌道を用いて解析する。特に、ローレンツ系の安定多様体と不安定多様体の接構造を系に埋め込まれた周期軌道の多様体構造に着目することによって考察する。

2 周期軌道の多様体構造

本報告では、ローレンツ系 ($dx/dt = \sigma(y - x)$, $dy/dt = rx - y - xz$, $dz/dt = xy - bz$ ($\sigma = 10$, $b = 8/3$, r : 変数)) に焦点をあて、その周期軌道の多様体の構造を調べる。近年、力学系の安定 (不安定) 多様体の接空間の基底となる共変リアプノフベクトル (CLV (covariant Lyapunov vector)) を同定する共変リアプノフ解析 (Ginelli *et al.* (2007)) が開発されており、本研究においてもそれを用いている。図 1 は、ローレンツ系のカオストラクタ上で安定多様体と不安定多様体のなす角度出現頻度分布を描いたもので、 $r = 28$ の場合は双曲的である (cf. Tucker(2002)) が、 $r = 30$ から 32 の間で接構造をもつことが示唆される。図 2 は、各不安定周期軌道上の点で安定多様体と不安定多様体がなす最小角度を示したもので、 $r = 28$ のポアンカレ写像周期 $N + 1$ の UPO の中で、UPO $x^N y^1$ (片方を N 回連続でまわり、もう一方を 1 回まわる周期軌道) という系列の UPO 上の多様体間最小角度が最も小さい。それらの系列の UPO を $r = 28$ から r を上げて追跡すると、それらの UPO の多様体間最小角度の順番は保存されながら各サドルノード分岐点に向かって減少していくことが図 3 で確認される。しかしながら、それらの UPO の多様体間最小角度は 0 にはならない。 $r = 28$ で存在する

UPO は $r \nearrow$ 大でおこるサドルノード分岐におけるサドル周期軌道に対応しており、ノード周期軌道は、 $r \searrow$ 小で周期倍分岐をおこす (図 4)。実は、図 5 で確認される様に、ノード周期軌道の周期倍分岐で生まれる 2^n 周期の周期軌道が、 $r \searrow$ 小で不安定した直後で多様体間最小角度が小さくなる。その周期軌道系列を用いることで系の接構造を近似することができると考えられる。さて、 r を 28 から増大させていくと、どの値で接構造がはじめて発生するかということは興味深い問題となるが、その値を推測するには、 r が 28 に近い周期窓を探せばよいはずであり、ポアンカレ写像周期 $N + 1$ の周期軌道の中では、UPO $x^N y^1$ のサドルノード分岐点を調べればよい。図 6 は UPO $x^N y^1$ のサドルノード分岐点を各 N に対してプロットしたものであり、UPO $x^{30} y^1$ の分岐点は $r = 31.667$ 付近であり、図 1 で示唆された接構造発生パラメータと合致している。

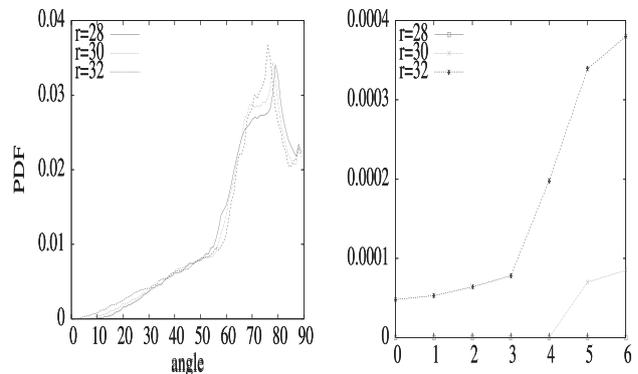


図 1: カオストラクタ上で安定多様体と不安定多様体のなす角度出現頻度分布 ($r = 28, 30, 32$) (左) と詳細図 (右) (r を 28 から 32 に上げると小角度の比率が増加し、 $r = 32$ では 0 度付近に値をもつように見える)

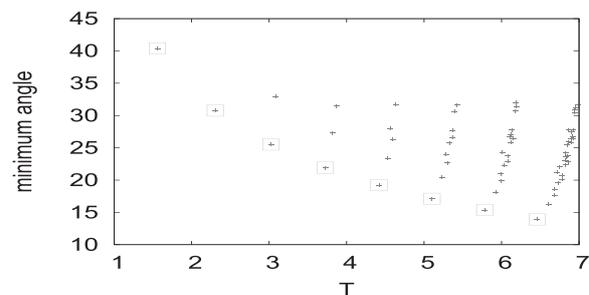


図 2: ポアンカレ写像周期 9 以下の各 UPO ($r = 28$) 上で安定多様体と不安定多様体がなす最小角度 (四角は UPO $x^N y^1$)

*E-mail:saiki@math.sci.hokudai.ac.jp

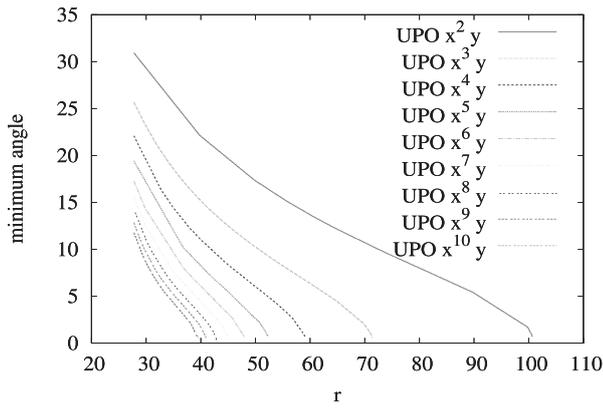


図3: r を 28 から大きくしてサドルノード分岐点まで追跡した $\text{UPO } x^N y^1$ の安定多様体と不安定多様体がなす最小アングル ($\text{UPO } x^N y^1$ の最小アングル順は保存されながら 0 に近づいていく様に見えるが, 実際には 0 には届かず正值に留まる)

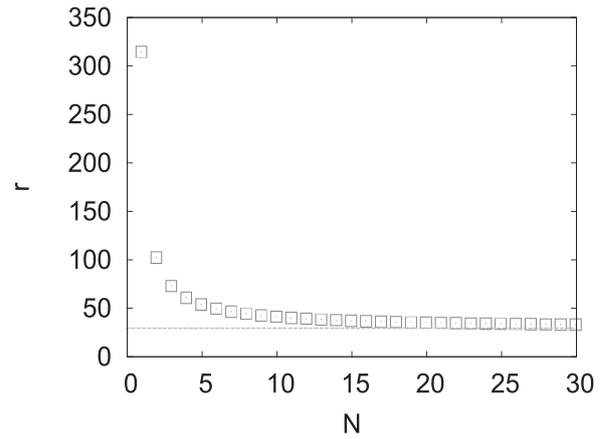


図6: $\text{UPO } x^N y^1$ ($N = 1, \dots, 30$) のサドルノード分岐点 (N に関してサドルノード分岐点は単調減少する (緑の線は $r = 28$ を示す))

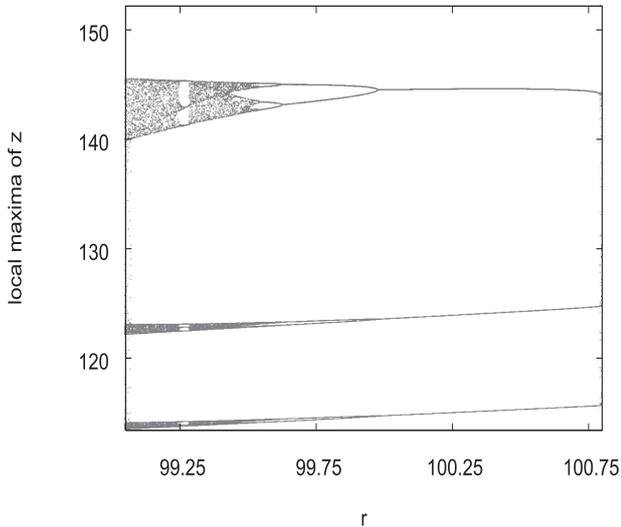


図4: $x^2 y^1$ 周期窓付近の分岐図 (サドルノード分岐点 $r_2^* = 100.795$) (ノード周期軌道の周期倍分岐が確認できる)

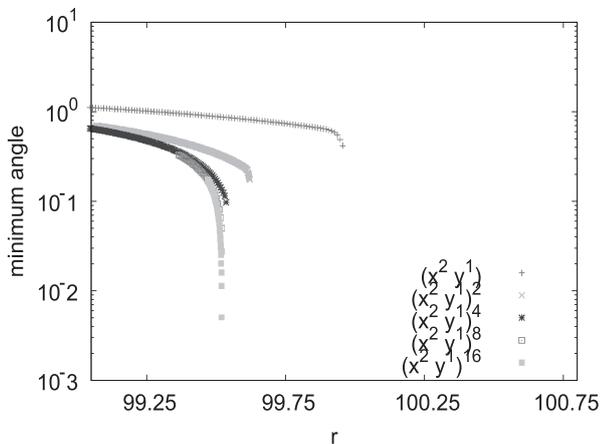


図5: $x^2 y^1$ ノード周期軌道の周期倍分岐周期軌道 (1, 2, 4, 8, 16 倍) の最小アングル

3 まとめ

ローレンツ系で $r: 28 \nearrow$ 大としたときに, 安定多様体と不安定多様体の接構造が発生する. $r = 28$ で多様体間の最小アングルが小さい $\text{UPO } x^N y^1$ に着目するとそれらは $r \nearrow$ 大でサドルノード分岐をおこし, その対となるノード周期軌道は, $r: r_N^* \searrow$ 小で周期倍分岐をおこす. 周期倍分岐で生まれた 2^n 周期の周期軌道が不安定化する部分に着目すると, $n \nearrow$ 大で最小アングルが 0 に近づき接構造を捉えられると結論づけられる. 紙面の関係で詳細に関する記述は割愛させていただくが, 同種の性質が偏微分方程式系 (蔵本・シバシンスキー系) に対しても成り立つことが確認された. なお, このシナリオはエノン写像の特別な状況で得られている数学的結果に類似している.

謝辞

本研究を遂行するにあたり, スーパーコンピュータ共同研究制度 (若手奨励枠) を利用した.

参考文献

- Ginelli F, Poggi P, Turchi A, Chate H, Livi R and Politi P 2007 Characterizing dynamics with covariant Lyapunov vectors *Phys. Rev. Lett.* **99**(13) 130601
- Saiki Y and Kobayashi M U 2010 Numerical Identification of Nonhyperbolicity of the Lorenz System through Lyapunov Vectors *JSIAM Letters* to appear
- Tucker W 2002 A rigorous ODE solver and Smale's 14th problem *Found. Comput. Math.* **2** 53-117

微粒子懸濁液の粘度特性

清水 雅樹 *

*大阪大学大学院 基礎工学研究科 機能創成専攻

1 はじめに

固体粒子懸濁液の粘度推算式は、希薄懸濁液に対する Einstein の粘度式 [1] の提案以降、高濃度懸濁液への拡張や凝集状態を考慮した様々な粘度推算式が提案され、工業的要求を満たす範囲においては、実測値とも定量的に合致するようになっている。しかし、懸濁液の粘度は、その濃度はもちろん、粒子形状、凝集構造、粒子間相互作用などの粒子特性や流動構造に依存し、まだこれらの因子と粘度との関係は十分明らかでない。そこで、複雑な固体粒子懸濁液の流動挙動の定量的評価のために流体-粒子間相互作用を可能な限り現実的に取り入れ、短時間での粘度評価を可能にする数値シミュレーションに取り組んでいる。ここでは、剛体球分散系における粘度の計算値と既存の粘度式との比較、流れの安定性が粒子径に依存することについて報告する。

2 数値計算

平面クエット系を考える。流体運動は非圧縮 Navier-Stokes 方程式に従うとし、壁面では粘着境界条件、流れ方向とスパン方向には、周期境界条件を用いる。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\nabla p + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f} \\ \mathbf{u}(x, y, z = \pm 1) &= \pm \mathbf{e}_x \\ \mathbf{u}(x + L_x, y + L_y, z) &= \mathbf{u}(x, y, z) \end{aligned}$$

ここで、 $Re \equiv LU/\nu$ (L :チャンネル高さの半値, U :上下壁面速さ, ν :動粘性係数) である。粒子-流体の境界は体積力型埋め込み境界法 [2] を用いるため、仮想的な外力 \mathbf{f} を考慮する。

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^n &\equiv \alpha \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{u}^{n+f}}{\Delta t} \\ \mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^{n+f} + \mathbf{f}^n \Delta t = (1 - \alpha) \mathbf{u}^{n+f} + \alpha \mathbf{v}^{n+1} \end{aligned}$$

ここで、 \mathbf{u}^{n+f} は時刻 n から粒子の存在を無視して 1 ステップ時間積分した値である。 α は格子内を粒子が占める体積率である [2]。粘性項には Crank-Nicolson 法を用いて陰的に、非線形項には 2 次の Adams-Bashforth 法を用いて陽的に時間積分する。圧力の Poisson 方程式は周期方向に高速フーリエ変換を用いることで直接解けるため、流体部分の Do ループは、最大で $O(n^3)$ の演算量である。粒子の運動方程式と角運動方程式はそれぞれ、

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \frac{3}{4\pi} \frac{1}{M} \int_V (-\mathbf{f}) dV \\ \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} &= \frac{15}{8\pi} \frac{1}{MR^2} \int_V \mathbf{r} \times (-\mathbf{f}) dV \end{aligned}$$

となる。 $M \equiv \rho/\rho_f$ (ρ :粒子密度, ρ_f :流体密度) は粒子の比重, $R \equiv a/L$ (a :粒子半径) はチャンネル高さに対する粒子径の比である。これらは、2 次の Adams-Bashforth 法を用いて時間積分する。粒子間の衝突は完全弾性衝突とした。

粘度の測定には壁摩擦力 (壁面速度勾配) を用いる。壁面近傍には粒子径程度の厚みの境界層が生じるが、粘度式の導出では壁効果が考慮されていないので、測定値と粘度式を直接比較可能するには注意が必要である。この壁効果が粘度測定値に及ぼす効果は、 $\mu_r O(\frac{a}{L}(\mu_r - 1))$ (μ_r :懸濁液の粘度/流体の粘度 (比粘度)) と見積もることができ、粒子径がチャンネル高さと比較して十分小さいときに粘度式の評価が可能になる。

3 結果

図 1 に計算の全領域における粒子分布と渦度分布を示す。用いた格子数は $512 \times 512 \times 128$ グリッドであり、Thin クラスタシステムの 8 コアを使用して、約 100 時間の実行時間で統計的に定常な状態が得られる。

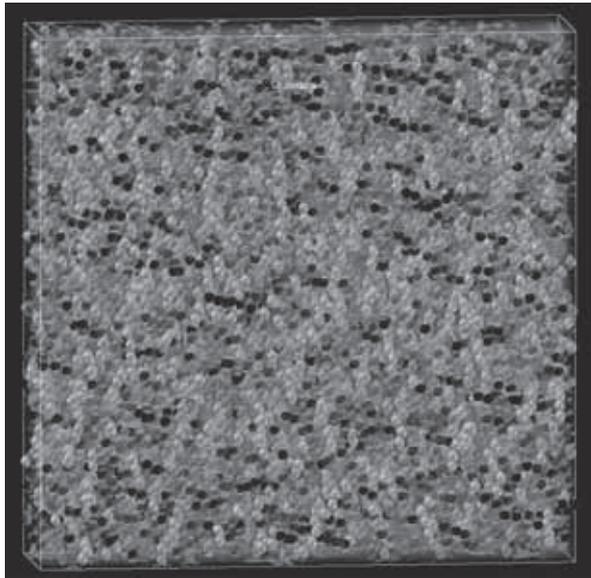


図1：粒子分布と渦度分布, $Re = 1000, M = 2.5, R = 0.025, \phi = 0.1$. グレースケール：粒子の自転速度 (ω_y). カラー：渦度分布.

粒子の存在による粘度の増加は、見かけの Re 数を減少させ流れを安定化させる。一方、粒子の存在は流れに攪乱を与えるという意味では、不安定化の効果をもつ。図2に粒子径が異なる2つの系での流れの様子を示す。左図は乱流状態で、右図は層流を保っている。ここでの乱流遷移は、 Re を変化させた際、比粘度とゆらぎ成分の顕著な増加から示される(左図では臨界 $Re \simeq 500$)。層流を保つ範囲において、比粘度は Re 数に大きく依存せず、ほぼ一定を保つ。図3に粘度の体積率依存性を示す。高濃度における Einstein の粘度式からのずれを、見かけの体積率の増加によるものと仮定し、見かけの体積率を $f(\phi)\phi$ とおく。 f を ϕ の1次まで展開したもので良好な、粘度式の修正が可能である。

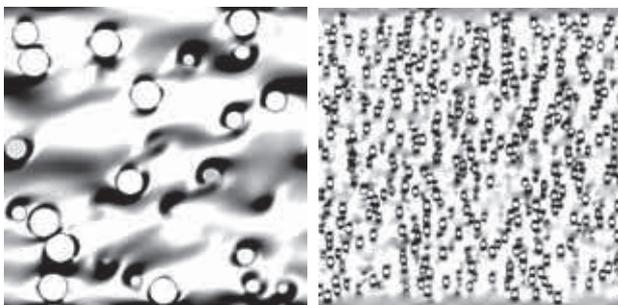


図2： xz 断面内の粒子と渦度の分布, $Re = 1000, M = 2.5$. 左: $R = 0.1$, 右: $R = 0.025$. 粒子の体積率 $\phi \simeq 0.1$.

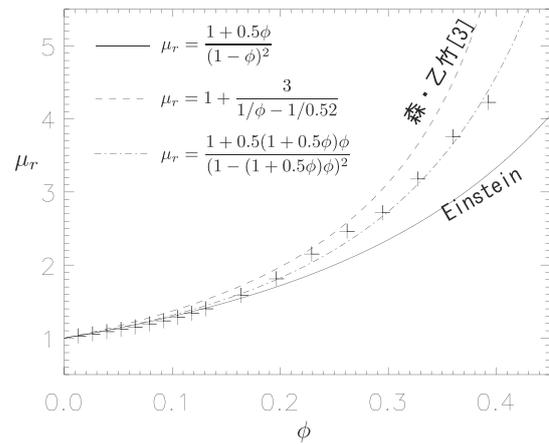


図3：粘度の体積率依存性.

4 まとめ

埋め込み境界法を用いた高解像度数値シミュレーションによって、微粒子懸濁液での粘度特性を調べた。上記に行った数値シミュレーションでのパラメータは、粘度測定装置 (RheoScope, HAAKE 社製) を用いた、 $1 - 10\mu\text{m}$ 程度のシリカ粒子懸濁液の粘度測定における、現実的なパラメータに相当する。本シミュレーションは Thin クラスターの8コアを用いたもので、比較的小規模の計算であり、現実的なパラメータでの粘度計算が容易に行えるようになったことが分かる。

図3に示されるように、粒子の体積率が0.1を超えたあたりから、Einstein の粘度式からのずれが生じるが、この原因として、粒子濃度の増加に従い、それぞれの粒子位置に相関ができ、粒子が一樣に分布しているという仮定が破れることがあげられる。本稿では、見かけの体積率を用いて計算値とのフィッティングを行ったが、この見かけの体積率と粒子位置の相関との関係性を調べるのが今後の課題である。

[参考文献]

- [1] A. Einstein, Ann. Phys., **19**, pp.289, (1906)
- [2] 結城ら, 数値流体力学シンポジウム, **19**, A1-2, (2005)
- [3] 森・乙竹, 化学工学, **20**, pp.488, (1956)

*E-mail: shimizu@me.es.osaka-u.ac.jp

ポルフィリン系色素の太陽電池性能と電子構造の相関の解明

梅山 有和

京都大学大学院工学研究科分子工学専攻

1 緒言

色素増感太陽電池は安価で製造可能な有機太陽電池の一つであり、環境・エネルギー問題への関心の高まりとともに注目されている。現在までにルテニウム錯体と多孔性酸化チタンを用いた系において 11% を越える高いエネルギー変換効率 (η) が報告されているが、ルテニウムは高価で資源制約があるため、金属を用いない、もしくは安価な金属を用いた高効率色素の開発が望まれている。一方、ポルフィリンは、400~450 nm 付近に強い吸収帯 (ソレー帯) ならびに 550~600 nm 付近に比較的強い吸収帯 (Q 帯) を持つため、増感色素として有望視されている[1]。しかしながら、500 nm 付近ならびに 600 nm 以上の領域において光捕集が十分ではない。本研究では、光捕集能の向上を目指した新規ポルフィリンとして、2ヶ所および1ヶ所の meso 位にジアリールアミノ基を導入したポルフィリン *cis*-ZnP、*trans*-ZnP および *mono*-ZnP の合成を行ない、それらの光学・電気化学・色素増感太陽電池特性の評価を行なった (Figure 1) [2]。

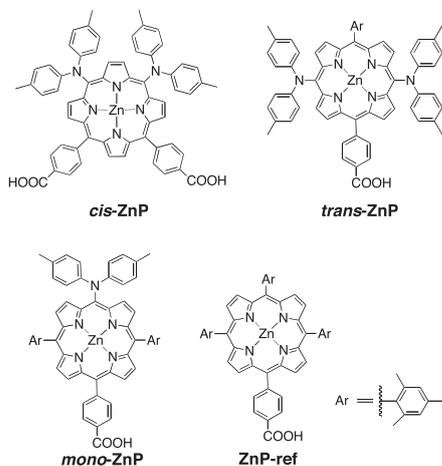


Figure 1. Porphyrin derivatives used in this study.

2 結果と考察

2.1 ポルフィリンの諸物性と色素増感太陽電池への応用

溶液中の吸収スペクトルにおいて Q 帯は ZnP-ref、*mono*-ZnP、*trans*-ZnP、*cis*-ZnP の順に長波長シフトを示す (Figure 2)。蛍光スペクトルにおいても同様の長波長シフトの傾向が観測された。CV 測定により求めた第一酸化電位は *mono*-ZnP ($E_{ox} = 0.83$ V vs. NHE)、*trans*-ZnP ($E_{ox} = 0.78$ V vs. NHE)、*cis*-ZnP ($E_{ox} = 0.77$ V vs. NHE) の順に負側にシフトしており、また ZnP-ref ($E_{ox} = 1.00$ V vs. NHE) と比較し大幅に酸化されやすくなっている。第一酸化電位と励起エネルギー $E_{0,0}$ から励起状態の酸化電位を計算すると、*cis*-ZnP、*trans*-ZnP、*mono*-ZnP ともに $E_{ox}^* = -1.12$ V vs. NHE となり、ポルフィリンの励起一重項状態から酸化チタンへの電子注入およびヨウ素還元対によるポルフィリンラジカルカチオンの還元反応が熱力学的に可能であることがわかる。

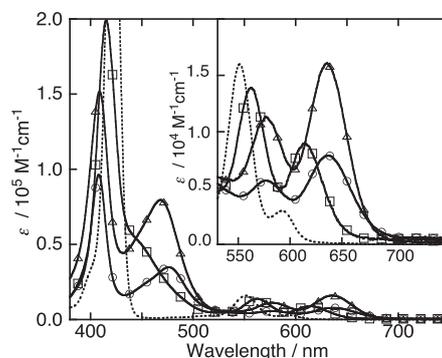


Figure 2. UV-vis absorption spectra of *cis*-ZnP (solid line with circle), *trans*-ZnP (solid line with triangle), *mono*-ZnP (solid line with square) and ZnP-ref (dashed line) in CH_2Cl_2 .

上述のポルフィリン色素を用いて色素増感太陽電池を作製したところ、電流-電圧特性は、*trans*-ZnP ($J_{SC} = 10.7 \text{ mA}\times\text{cm}^{-2}$, $V_{OC} = 0.64 \text{ V}$, $ff = 0.65$, $\eta = 4.4\%$)、*cis*-ZnP ($J_{SC} = 12.3 \text{ mA}\times\text{cm}^{-2}$, $V_{OC} = 0.66 \text{ V}$, $ff = 0.67$, $\eta = 5.4\%$)、*mono*-ZnP ($J_{SC} = 12.0 \text{ mA}\times\text{cm}^{-2}$, $V_{OC} = 0.67 \text{ V}$, $ff = 0.68$, $\eta = 5.5\%$)の順であり、*cis*-ZnP と *mono*-ZnP を用いたセル性能は同程度であった。作用スペクトルを比較すると、*cis*-ZnP と *mono*-ZnP はほぼ一致しており、セル性能の結果と一致している。一方、光捕集効率は *trans*-ZnP を用いた場合、むしろ長波長領域で改善されているにもかかわらず、IPCE 値は低下していた。

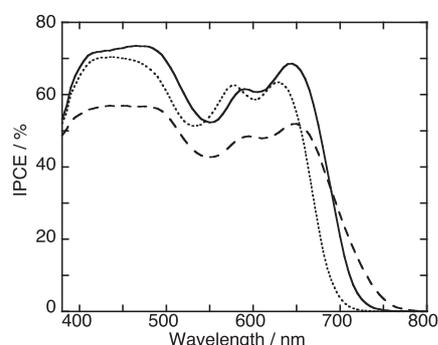


Figure 2. Action spectra of *cis*-ZnP cell (solid line), *trans*-ZnP cell (dashed line) and *mono*-ZnP cell (dotted line).

2.2 理論計算

ポルフィリンの最安定化構造およびそのフロンティア軌道の電子構造について知見を得るために、密度汎関数法 (DFT) による理論計算 (B3LYP) を行った。基底関数系に 3-21G* を選択し、Gaussian03 プログラムを用いた。分子軌道の可視化には Molstudio3.0 プログラムを用いた。Figure 3 に *cis*-ZnP、*trans*-ZnP、*mono*-ZnP および ZnP-ref の最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO) における電子密度分布を示す。一般に、アンカー部位の LUMO の電子密度が大きいほど、励起状態の色素と酸化チタンの 3d 軌道との間の電子カップリングが大きくなることが知られている。*cis*-ZnP と *trans*-ZnP では、*mono*-ZnP および ZnP-ref に比べて、アンカー部位の LUMO の電子密度が低くなっている。このことから、光捕集効率は *trans*-ZnP を用いた場合に長波長領域で改善されているにもかかわらず、IPCE 値は低下していること

の原因として、*trans*-ZnP では酸化チタンへの電子注入効率が低下している可能性が示唆される。

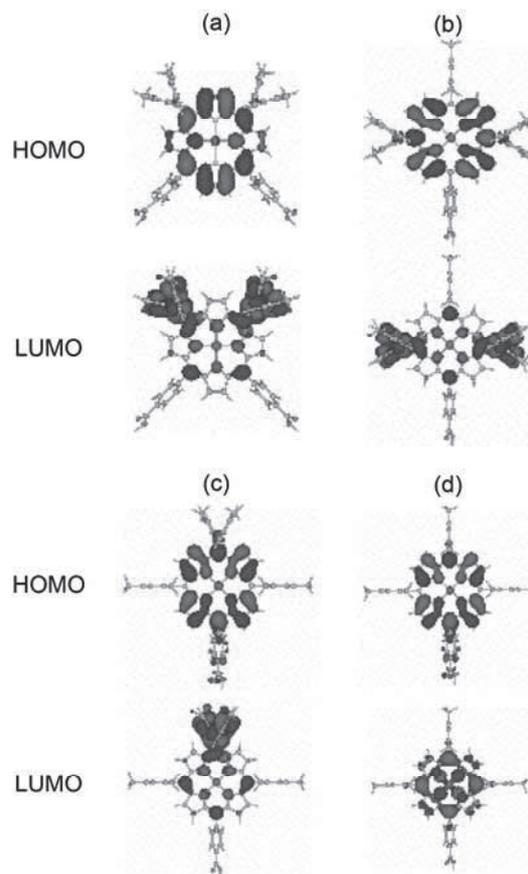


Figure 3. Some sets of molecular orbital diagrams for (a) *cis*-ZnP, (b) *trans*-ZnP, (c) *mono*-ZnP, and (d) ZnP-ref obtained by DFT calculations with B3LYP/3-21G(d).

3 参考文献

- [1] H. Imahori, T. Umeyama and S. Ito, "Large π Aromatic Molecules as Potential Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells", *Acc. Chem. Res.*, **42**, 1809-1818 (2009).
- [2] H. Imahori, Y. Matsubara, H. Iijima, T. Umeyama, Y. Matano, S. Ito, M. Niemi, N. V. Tkachenko and H. Lemmetyinen, "Effects of *meso*-Diarylamino Group of Porphyrins as Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells on Optical, Electrochemical, and Photovoltaic Properties", *J. Phys. Chem. C*, **114**, 10656-10665 (2010).

PSII 反応中心の励起状態と分子間相互作用

長谷川 淳也、北川 裕也、松田 建児

京都大学工学研究科合成・生物化学専攻

光合成色素蛋白質複合体である光化学系 II (PSII) の反応中心 (RC) と紅色細菌反応中心 (bRC) は、進化的に同一の起源を持ち、構造が類似するにもかかわらず、光吸収スペクトルの形状や励起電子移動メカニズムが異なることが知られている。本研究ではシアノバクテリア *T. elongatus* における PSII の RC について、クロロフィル六量体からなる大規模な量子化学計算を行い、励起状態の電子構造を解析し、観測される光吸収スペクトルを帰属した。bRC との励起状態の差異について、色素の空間配置と蛋白質の構造に起源を見出した。更に、励起分子間の相互作用を解析し、単量体の遷移双極子モーメントの重ね合わせの観点からスペクトルの光吸収強度を解析した。

1 イントロダクション

高等植物やシアノバクテリアに存在する PSII は光合成色素蛋白質複合体であり、光エネルギーを用いて水を酸素に変換する極めて重要な役割を担う蛋白質である。近年になって RC の X 線結晶構造が報告された [1]。

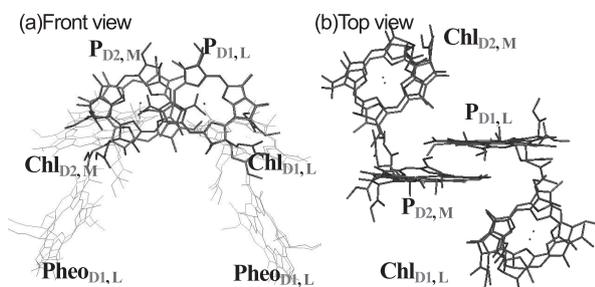


図 1. PSII (緑) と紅色細菌 (赤) の色素六量体。

図 1 のように 6 個のクロロフィルを含む PSII RC は、bRC と構造が類似するにもかかわらず、光吸収スペクトルの形状が bRC と大きく異なる (図 2)。

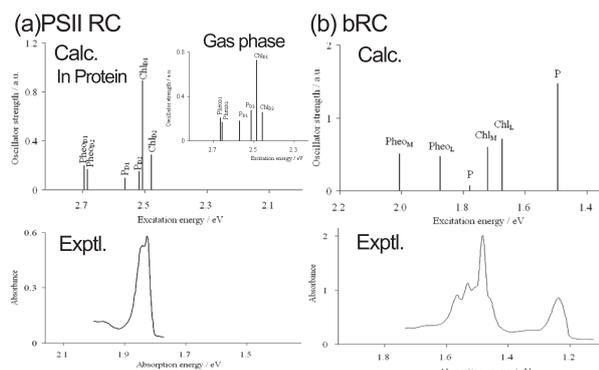


図 2. PSII RC (左) と bRC (右) の励起スペクトル。計算結果 (上) と実験スペクトル (下)。

また、近年の分光実験から、PSII RC での光誘起電子移動は Chl_{D1} から開始されることが示され [2]、bRC との光物性の相違点について関心が持たれている。

2 RC の励起スペクトルと励起子間相互作用

まず X 線結晶構造 [1] をもとに、PSII RC と bRC における色素六量体 (図 1) について CIS/6-31G(d) で励起状態の計算を行なった。図 2b に示すように、bRC ではスペシャルペア (P) の第一励起エネルギーが他の単量体と比べ $0.20 \sim 0.22$ eV ほど低エネルギーシフトしたが、PSII ではあまり変化が観られず、実験結果に合致する結果を得た。また、PSII の励起スペクトルにおいて最も振動子強度が大きい励起状態は、 Chl_{D1} と P_{D2} の第一励起状態のエキシトンカップリングによるものであり、 Chl_{D1} 、 P_{D2} の遷移双極子モーメントが互いに強め合うような相互作用がみられた (図 3)。

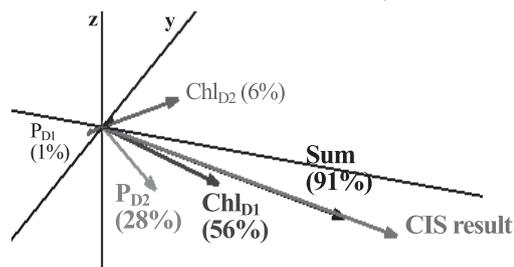


図 3. PSII の第二励起状態の遷移モーメントにおける単量体の寄与。括弧内は波動関数における単量体成分の重み (%)。

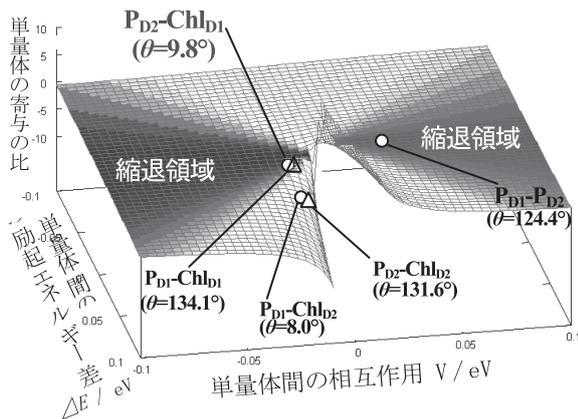


図 4. PSII における励起色素間の分子間相互作用。θ: 単量体の遷移モーメントがなす角、○: J 会合型の相互作用、△: H 会合型の相互作用。

そこで図 4 のようなダイアグラムを考案し、単量体の励起エネルギー(CIS により計算)と単量体間の相互作用(クーロン相互作用の多極子展開により計算)から、励起状態の波動関数における各単量体成分の重みとその会合形式(J または H 会合)を評価できる。その結果、 P_{D2} - Chl_{D1} ペアは縮退領域にあり、遷移モーメントのなす角度が鋭角 (9.8°) であるため、J 会合により第二励起状態の遷移モーメントに相対的に寄与することが理解できる。また、PSII のスペシャルペアにあたる P_{D1} - P_{D2} ペアや P_{D1} - Chl_{D1} ペアも縮退領域にあるが、遷移モーメントのなす角が鈍角であり、光吸収スペクトルの強度には単量体程度の寄与をする。

3 電荷分離状態と蛋白質の効果

次に、電荷分離状態のエネルギー準位を調べた。蛋白質の静電ポテンシャルを考慮すると、 Chl_{D1} から $Pheo_{D1}$ への電荷分離状態の励起エネルギーは 3.68 eV と算出され、考慮しない場合と比較すると約 1.0 eV 安定化することが分かった。これは Chl_{D1} 周辺の静電ポテンシャルが小さいため、より正側に値の大きい $Pheo_{D1}$ への電荷分離状態が安定化されるからである。

4 PSII RC におけるスペシャルペアの弱い相互作用の起源について

bRC とは異なり、PSII RC におけるスペシャルペアの励起エネルギーは低エネルギーシフトを示さない。この原因を明らかにするため、PSII RC

と bRC の X 線構造を詳細に比較した。PSII RC と bRC では P_{D1} - P_{D2} 間の面間距離はほぼ等しいが(図 1b)、PSII では P_{D2} の配向について、対称性を低下させる最大 2 \AA 程度の変位が観られた(図 1a)。また、P-Chl 間で最大 1.5 \AA 程度の色素配向のずれが観られた(図 1b)。そこで PSII RC における P_{D1} , P_{D2} , Chl_{D1} , Chl_{D2} の色素間の配向を段階的に紅色細菌型の配向へと変位させたいいくつかの計算モデルについて励起状態の計算を行なった。その結果、 P_{D2} の配向を bRC 型へ変位させると P の励起エネルギーが著しく減少し(図 5)、P の二量体形成の効果が主因であることが分かった。

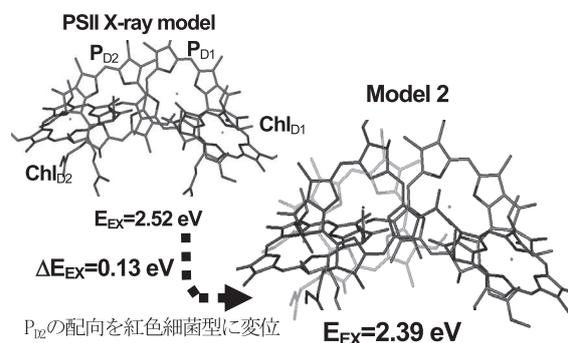


図 5 P の配向と励起エネルギーの変化。

更に、分子軌道とそのエネルギー準位を比較した。PSII では P が非対称に配向するため(図 5)、分子間の結合性と反結合性の軌道間相互作用が互いに打ち消し合い、二量化の効果が小さくなることが分かった。他方で、対称的な紅色細菌型配向(図 5)では P_{D1} と P_{D2} の HOMO どうし、LUMO 同士が良く相互作用するので、HOMO-LUMO gap が著しく低下することが分かった。

また、PSII bRC と bRC で P_{D2} 周辺の蛋白質の構造を比較し、 P_{D2} の配向の起源を検討した。その結果、PSII における P_{D2} の色素配向の変化は D2 subunit の CD helix の変化とよく相関があることが分かった。従って、この変化に対応するアミノ酸配列の自然変異が、励起状態の電子構造に影響を及ぼしたと考えられる。

5 参考文献

- [1] K. N. Ferreira, T. M. Iverson, K. Maghlaoui, J. Barber, S. Iwata, *Science* **2004**, *303*, 1831.
- [2] V. I. Prokhorenko, and A. R. Holzwarth, *J. Phys. Chem. B* **2000**, *104*, 11563.

大規模粒子シミュレーションによる地球放射線帯での 相対論的電子加速過程についての研究

加藤雄人¹、大村善治²

¹東北大学大学院理学研究科地球物理学専攻、²京都大学生存圏研究所

本研究では、地球放射線帯での相対論的高エネルギー電子の生成過程について、大規模並列計算によるプラズマ粒子シミュレーションを用いて研究を行っている。シミュレーション結果の解析から、相対論的電子加速過程ならびにプラズマ波動励起過程における非線形波動粒子相互作用の重要性を示し、特に励起されるプラズマ波動の特性について定量的に明らかとした。

1 はじめに

地球周辺の宇宙空間には放射線帯と呼ばれる、相対論的なエネルギーを持つ粒子が地球を取り巻くようにして分布している領域が存在する。科学衛星による直接観測の結果から、放射線帯を構成する相対論的高エネルギー電子は、磁気嵐(宇宙嵐)と呼ばれる宇宙環境の大規模な擾乱現象に対して敏感に応答し、そのフラックスを大きく変動させることが明らかとなっている。この相対論的電子は、人工衛星の障害の要因となるなどすることから、フラックス変動現象が引き起こされる物理過程を詳細に理解することが、宇宙環境科学・宇宙天気研究の主要な課題の一つとして挙げられている。

我々の研究グループによる近年の研究成果によって、相対論的電子の加速機構と、加速機構において重要な役割を担うとされるプラズマ波動“ホイスラーモード・コーラス放射”の励起プロセスとの双方で、波動による電子の捕捉という非線形波動粒子相互作用の効果の重要性を指摘されている(Katoh and Omura, 2007a,b; Summers and Omura, 2007; Omura et al., 2007, 2008; Furuya et al., 2008; Omura et al., 2009)。互いの物理プロセスの深い関連性が示唆されるこの2つのプロセスの究明には、スーパーコンピュータを用いた大規模計算機実験が唯一の方法論である。本課題

では自己無撞着な大規模粒子シミュレーションを実施し、特に、相対論的電子生成過程において鍵となるプラズマ波動、コーラス放射の発生に至る物理素過程を詳細に議論した。

2 電子ハイブリッドモデル

本研究では独自に開発を進めているプラズマ粒子シミュレーション手法、電子ハイブリッドモデルを用いる。一般的なプラズマ粒子シミュレーションでは、系内に含まれる荷電粒子の運動をPIC法(Particle-In-Cell法)により超粒子として解き進め、その結果生じる電流からMaxwell方程式により電磁場の時間発展を各格子点で解く。電子ハイブリッドモデルでは、背景の冷たいプラズマを流体として扱い、熱的電子のみ粒子として個々の運動方程式を解く。これにより多大なメモリ容量と計算コストが割かれる粒子計算を効率的に行うことが可能となり、背景プラズマの非一様分布の設定も容易となる。

シミュレーションでは、コーラス放射の励起領域である磁気赤道領域を模擬した系を設定(図1)、熱的電子として約7000万個の超粒子を系内に配置する。個々の運動方程式を解き進めることで熱的電子の運動を解き、その結果生じる電流からマクスウェル方程式により、系内の各グリッドでの電磁場の時間発展を解く。熱的電子の初期速度分

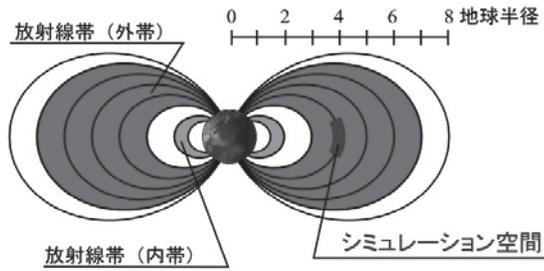


図1：地球磁気圏の放射線帯は内帯と外帯が存在し、特に外帯が磁気嵐に敏感に応答することが明らかとなっている。シミュレーション空間は磁気赤道を中心として設定する。

布に起因するプラズマ不安定によって波動が励起、その後の非線形発展によりコーラス放射が生成されると共に、相対論的電子の加速が生じる様相がこれまでに再現されている。本研究で実施する計算機実験では、コーラス放射発生の初期段階にあたる 20000 電子ジャイロ周期までの時間発展を追跡、Thin クラスタ 32 コアを用いて2週間程度の演算時間を要することから、スーパーコンピュータを用いた高速並列計算が必須な研究課題である。若手研究者奨励枠により割当をいただいた計算機リソースを活用する事で多数の長時間ジョブを実施することができ、非線形波動粒子相互作用による相対論的電子加速過程ならびにプラズマ波動励起過程の本質的理解に向けて必要とされる重要なデータの取得に成功した。

3 コーラス放射発生過程の初期パラメータ依存性

我々の研究グループでは、電子ハイブリッド・コードによる大規模シミュレーションの結果、Maxwell 方程式を FDTD 法で直接的に解く方法でコーラス放射の生成過程を再現することに世界で初めて成功し (Katoh and Omura, 2007a)、その物理素過程を説明する非線形波動成長理論を提唱している (Omura et al., 2008, 2009)。コーラス放射の励起領域である磁気赤道領域を模擬した系を設定、熱的電子として約 7000 万個の超粒子を系内に配置する。個々の運動方程式を解き進めることで熱的電子の運動を解き、その結果生じる

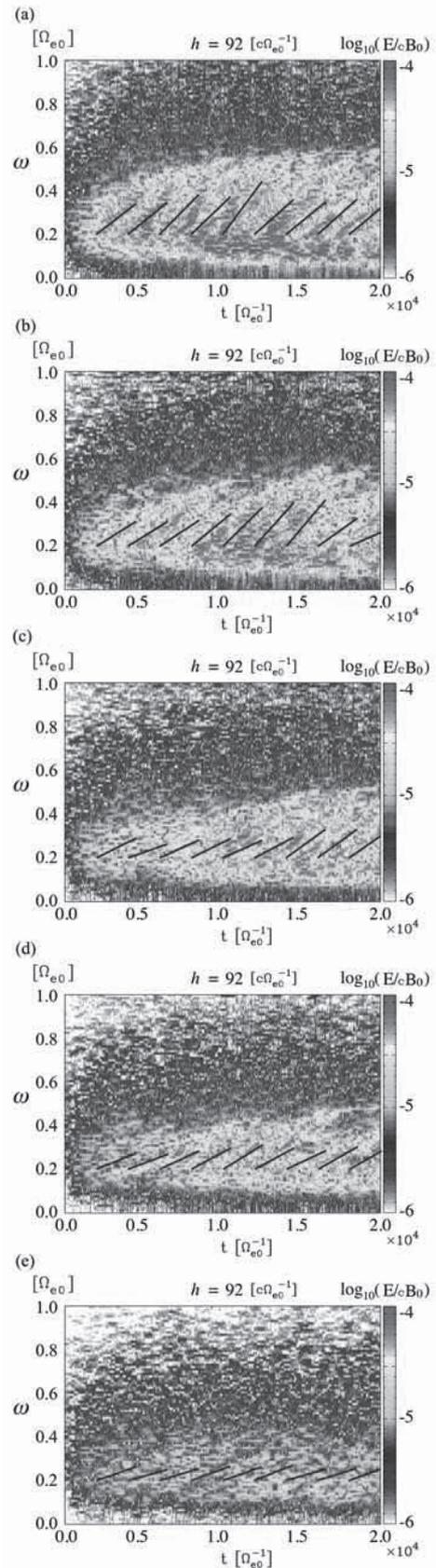


図2：計算機実験により再現されたコーラス放射波動特性のパラメータ依存性 (Katoh and Omura, J. Geophys. Res., in press)。初期値を表1に示す。

Run 1	Run 2	Run 3	Run 4	Run 5
9.6×10^{-4}	8.8×10^{-4}	8.0×10^{-4}	7.2×10^{-4}	6.4×10^{-4}

表 1 : 図 2 に示す 5 つの計算機実験で用いた、磁気赤道における熱的電子の数密度。背景の冷たいプラズマの数密度に対する比で示している。

電流からマクスウェル方程式により、系内の各グリッドでの電磁場の時間発展を解く。熱的電子の初期速度分布に起因するプラズマ不安定によって波動が励起、その後の非線形発展によりコーラス放射が生成され、同時に相対論的電子の加速が生じる様相が再現されている (Katoh and Omura, 2007b; Katoh et al., 2008)。

コーラス放射は、周波数が時間的に上昇するコヒーレントな波動エレメントの集合である。コーラス放射による相対論的電子の加速過程では、この個々の波動エレメントの波動強度や周波数上昇率などの特性が、加速効率を議論する上で重要となる。本研究で共同研究者らと新たに提案している非線形の波動粒子相互作用を基本とする波動励起理論に基づけば、コーラス放射生成のエネルギー源となる熱的電子の速度分布により、励起される波動特性が決定される可能性が指摘されている。本課題では、依存性を明らかにすることを目的として、様々な初期分布の下で計算機実験を実施した。結果を図 2 に示す。この計算機実験では、熱的電子に与える初期数密度を表 1 に示されるように与え、再現されるコーラス放射の波動特性がどのように変化するかを観測した。その結果、熱的電子の数密度が異なる事により、発生するコーラス放射の波動エレメントの周波数上昇率が変化する事が示された。また、周波数上昇率の変化は波動エレメントの持つ振幅に比例する傾向が見取られ、我々の研究グループが提唱する非線形波動成長理論に基づく理論値と非常に良く整合する事が明らかとなった (図 2 中の実線が波動振幅から得られた理論値)。これらの成果は学術誌に投稿されている (Katoh and Omura, *J. Geophys. Res.*, in press)。

本研究により示されたコーラス放射の周波数上昇率のパラメータ依存性は、コーラス放射による相対論的電子加速機構の効率にも深く関与する事が考えられる。今後さらに大規模なシミュレーション

を実施することにより、放射線帯電子生成過程の新しい物理モデルの構築と、その時空間スケールの正確な評価が期待される。実現に向けた課題として、シミュレーションコードの並列化効率のさらなる向上が挙げられており、Nakashima et al. (2009) で提案されたプラズマ粒子シミュレーションでロードバランスを取りつつ領域分割を実現する手法等、最新の並列化手法を活用することで、今後効率的な超並列計算の実現を図る。

参考文献

- [1] Furuya, N., Y. Omura, D. Summers (2008), *J. Geophys. Res.*, **113**, A04224, doi:10.1029/2007JA012478.
- [2] Katoh, Y. and Y. Omura (2007a), *Geophys. Res. Lett.*, **34**, L03102, doi:10.1029/2006GL028594.
- [3] Katoh, Y. and Y. Omura (2007b), *Geophys. Res. Lett.*, **34**, L13102, doi:10.1029/2007GL029758.
- [4] Katoh, Y., Y. Omura, and D. Summers (2008), *Ann. Geophys.*, **26**, 3451-3456.
- [5] Nakashima, H., Y. Miyake, H. Usui, and Y. Omura (2009), *ICS '09: Proceedings of the 23rd international conference on Supercomputing*, pp. 90-99.
- [6] Omura Y., N. Furuya, D. Summers (2007), *J. Geophys. Res.*, **112**, A06236, doi:10.1029/2006JA012243.
- [7] Omura, Y., Y. Katoh, D. Summers (2008), *J. Geophys. Res.*, **113**, A04223, doi:10.1029/2007JA012622.
- [8] Omura, Y., M. Hikishima, D. Summers, and S. Yagitani (2009), *J. Geophys. Res.*, **114**, A07217, doi:10.1029/2009JA014206.
- [9] Summers, D. and Y. Omura (2007), *Geophys. Res. Lett.*, **34**, L24205, doi:10.1029/2007GL032226.

自転軸が歳差運動をする球体内に維持される乱流

後藤 晋^{*}，清水 雅樹[†]

^{*}岡山大学 自然科学研究科

[†]同志社大学 研究開発推進機構

1 はじめに

物体の自転軸が他の軸のまわりを回転する運動を歳差運動とよぶ。こまの回転軸の首振り運動は歳差運動の典型例であるが、他にもたとえば地球の自転軸もゆっくり歳差運動をしていることが知られる。このように、歳差運動は自然界にありふれた運動形態のひとつである。

ところで、自転軸が歳差運動をする球体（以下、歳差球体とよぶ：図1を参照）内に充填された流体の運動は、容器の運動の単純さとは対照的に極めて複雑となる。たとえば、自転角速度の大きさ Ω_s 、球体の半径 a 、流体の動粘性係数 ν で定義される無次元パラメタ（レイノルズ数）、

$$Re = \frac{a^2 \Omega_s}{\nu} \quad (1)$$

が $Re \gtrsim O(10^4)$ であれば、歳差運動の強さを表すパラメタ（ポアンカレ数）

$$\Gamma = \frac{\Omega_p}{\Omega_s} \quad (2)$$

がわずか数パーセントであっても、充填された流体の運動が乱流となることが実験的に示されている [1]。なお、(2) で Ω_p は自転軸の歳差運動の角速度の大きさを表す。

容器の弱い歳差運動（単純運動）が内部流体の乱流（複雑運動）を導くことは応用上興味深い（たとえば、攪拌翼を用いない混合器などへの応用が考えられる）ばかりでなく、地球物理学的な観点からも重要である。これはもしも地球の自転軸の弱い歳差運動が地球内部の電磁流体の乱流運動を維持するとすれば、地球磁場の生成に歳差運動が寄与する可能性が示唆されるためである [2]。実際、これまでに地球物理学的な観点から歳差容器内の流体運動に関する多くの理論、実験、数値シミュレーション研究が行われてきた。しかしながら、歳差容器内の乱流の生成維持機構を明確に説明した研究はこれまでにな

い。これは回転系における高精度の計測が必ずしも容易ではなく、また内部流が容易に乱流化されるために従来までの計算機資源では、乱流状態の精確な数値シミュレーションが難しかったためである。そこで本研究では、歳差運動をする容器としてもっとも単純な場合（自転軸と歳差軸とが直交する歳差球体容器）における乱流の生成維持機構の解明を目指し、大規模数値シミュレーションを行った。

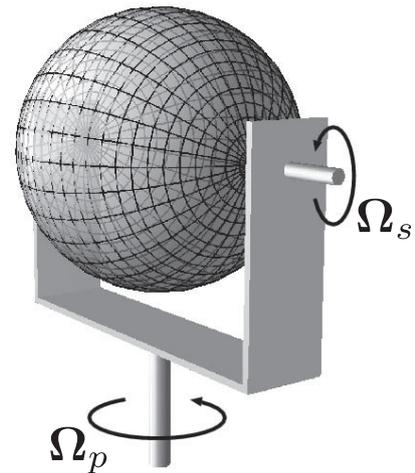


図1:歳差球体（ただし、自転軸と歳差軸とが直交する場合）。

2 数値計算法

歳差球体（図1）内に充填された非圧縮流体（定密度）の運動は、運動方程式（ナビエ・ストークス方程式）、

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + 2\Gamma \mathbf{u} \times \mathbf{e}_p \quad (3)$$

と連続の式、

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4)$$

および、球体の内壁面上の粘着境界条件 ($\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{e}_s \times \mathbf{x}$) に支配される。ただしここで $\mathbf{e}_s = \boldsymbol{\Omega}_s / \Omega_s$ 、 $\mathbf{e}_p = \boldsymbol{\Omega}_p / \Omega_p$ であり、また $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ および $p(\mathbf{x}, t)$ は

位置 \mathbf{x} 、時刻 t における無次元流速および（遠心力ポテンシャルを含む）無次元圧力である。ただし無次元化の代表長さや時間はそれぞれ球体の半径 a と自転角速度の逆数 Ω_s^{-1} とした。また、上の運動方程式 (3) および境界条件は、実験室系に対して角速度 Ω_p で回転する回転系で記述されている。

まず、速度場 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ が連続の式 (4) を厳密に満たすことを保証するため、 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ を2つのスカラー関数 $\Psi(\mathbf{x}, t)$ および $\Phi(\mathbf{x}, t)$ を用いて、

$$\mathbf{u} = \nabla \times (\nabla \times (\mathbf{x}\Phi)) + \nabla \times (\mathbf{x}\Psi) \quad (5)$$

と表す。このとき (3) により、これらのスカラー関数の発展方程式が得られるが、そこには最高で6階の空間微分が含まれる。したがって乱流状態を精密に数値シミュレーションするためには、このような高階の空間微分を高い精度で評価することが不可欠である。

このため本研究ではスペクトル法を用いて空間微分を評価した。すなわち、 $\Phi(\mathbf{x}, t)$ および $\Psi(\mathbf{x}, t)$ を

$$\begin{pmatrix} \Phi(\mathbf{x}, t) \\ \Psi(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} = \sum_{\ell=-L}^L \sum_{m=\ell}^M \sum_{n=|m|, n+m=\text{even}}^N \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_{nml}(t) \\ \hat{\Psi}_{nml}(t) \end{pmatrix} Z_n^m(r) P_m^\ell(\cos\theta) e^{i\ell\phi} \quad (6)$$

と関数展開する。ここで、位置ベクトル \mathbf{x} を球座標系 (r, θ, ϕ) で表現し、展開関数として角度方向 (θ, ϕ) には球面調和関数を、動径方向には文献 [3] で導入された多項式 $Z_n^m(r)$ （ゼルニケ多項式とよばれることもある）を用いた。この多項式を用いることにより、球中心での球座標の特異性の問題が回避され解の解析性が保証される。

また時間積分は、非線形項に対しては2次精度のアダムス・バッシュフォース法、粘性項に対してはクランク・ニコルソン法を用いた。

なお、以上で簡単に述べた歳差球体内流れの数値シミュレーション法については文献 [4] にも詳しい記述がある。

3 結果と展望

乱流が維持される典型的なパラメタの組合せとして、自転の強さの指標であるレイノルズ数を $Re = 10^5$ とし、また歳差の強さの指標であるポアンカレ数を $\Gamma = 0.04$ とした。なお、室内実験 [1] によれば、 $Re = 10^5$ では、このポアンカレ数 ($\Gamma \approx 0.04$) の付近でもっとも発達した乱流が維持されることが示されている。シミュレートされた流れ場の興味深い特徴のひとつを図2に示す。この図中には、渦度 $(\nabla \times \mathbf{u})$ の絶対値が大きな領域が描かれている。球体壁面近傍には境界層とよばれる渦度の集中領域が

存在するが、この図によればこの境界層内部の渦度分布は一様ではなく、球体容器壁面の（容器自転による）運動方向にほぼ平行に並んだ、秩序構造を伴っていることが観察される。このような構造の存在はこれまでにまったく知られておらず、また極めて特徴的であるので、歳差運動による乱流の生成維持機構の解明の鍵のひとつであると想像される。

ところで、以上で行った数値シミュレーションは室内実験と厳密に同一の境界条件および支配パラメタで行われたことを強調したい。室内実験により、歳差球体内のさまざまな流れの現象が見出されている——たとえば、歳差を（図2の場合よりも）強くするとかえって乱流が弱くなり、さらに歳差を強くすると歳差軸（図1の鉛直軸）まわりの旋回流を伴う定常流へと再層流化することが示されている——が、その物理機構や流れ場の3次元構造の詳細のほとんどは未知のままである。しかし本研究によって、歳差球体内流れのスペクトル法による正確な数値シミュレーションがようやく可能になったことで、今後この系の理解が急速に進むことが期待される。

参考文献

- [1] Goto, S., Ishii, N., Kida, S. and Nishioka, M., Turbulence generator using a precessing sphere, *Phys. Fluids*, Vol. 19 061705 (2007).
- [2] Malkus, W. V. R., Precession of the Earth as the cause of geomagnetism, *Science*, Vol. 160 pp. 259-264 (1968).
- [3] Matsushima, T and Marcus, P. S., A spectral method for polar coordinates, *J. Comp. Phys.*, Vol. 120 pp. 365-374 (1995).
- [4] Kida, S., Nakayama, K., and Honda, N., Streamline tori in a precessing sphere at small Reynolds numbers, *Fluid Dyn. Res.*, Vol. 41, 011401 (2009).

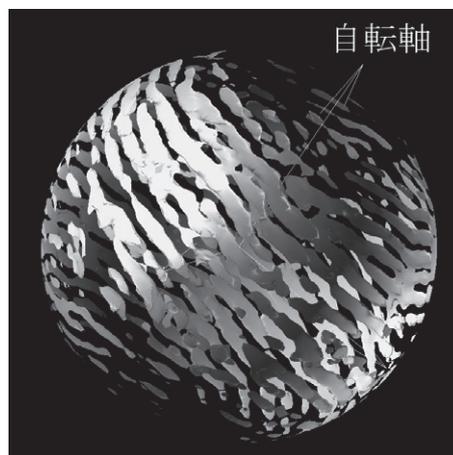


図2:歳差球体内に維持される乱流中の秩序構造。渦度の強い領域を示した。

ヒト頭頂間溝における視覚性短期記憶容量を反映した fMRI 応答

金津将庸¹山本洋紀¹澤本伸克²福山秀直²齋木潤¹¹京都大学大学院人間・環境学研究科 ²京都大学大学院医学研究科高次脳機能総合研究センター

1 はじめに

見た物体を一時的に記憶する機構は視覚性短期記憶（Visual Short-Term Memory, VSTM）と呼ばれる。

VSTM が保持できる物体の個数（容量）は変化検出課題を用いて推定することができ、その上限は物体 3~4 個程度であることが知られている。我々は常に眼前の光景をその細部に到るまで把握しているような直感的印象を持っているが、実はそのごく一部の情報しか保持されていないのである。

VSTM の容量制限に関連する脳領域として頭頂葉の頭頂間溝（Intraparietal Sulcus, IPS）が注目されている。VSTM 課題中に IPS 付近の領域が VSTM 容量と相関した脳活動を示すことが知られている。

興味深いことに、IPS にはレチノトピー、空間的注意、眼球運動など複数のトポグラフィック（空間的情報が大脳皮質上において連続的に表現されている特性）を持つ領域の存在が報告されている。しかし IPS における VSTM とトポグラフィックはこれまで別個に研究されてきており、これら二つの特性を持つ領域が同一のものであるかは未知である。

本研究ではこの問いに答えるため、被験者ごとに IPS のトポグラフィック領域を同定し、次に各領域の脳活動と VSTM 容量との関連を評価した。

2 方法

2.1 トポグラフィックを持つ領域の同定

fMRI による位相符号化法を用いて頭頂間溝のトポグラフィック領域の同定を行った（図 1 a）。

被験者は MRI スキャナ内で 60 秒の周期で視野上を移動するチェッカー刺激を観察しつつ、刺激に空間的注意を向ける課題を行った。角位置方向のマッピングには時計回り・反時計回りの扇形刺激、偏心度方向のマッピングには拡大・縮小するリング刺激を用いた。刺激と同じ周期で有意な fMRI 応答を示したボクセルを抽出し、解剖画像から再構築された大脳皮質表面モデル上に描画した。皮質表面上において刺激の視野上の位置との対応関係が連続的に再現されていた領域をトポグラフィック領域として同定した。

2.2 視覚性短期記憶実験

変化検出課題を用いて VSTM 容量に対応した脳活動を調べた（図 1 b）。被験者は 300ms の間呈示された 1 個から 4 個の形刺激を記憶し、5700ms の保持期間の後、呈示されたテスト刺激が記憶した刺激と同一であるかどうかをボタン押しで回答した。被験者ごとに同定しておいた各トポグラフィック領域の fMRI 応答を抽出し、deconvolution 法を用いてセットサイズ（物体の個数）条件ごとの応答を分離した。被験者の回答から VSTM 容量を推定し（Cowan's K）、セットサイズごとの VSTM 容量と記憶保持期間中におけるトポグラフィック領域の fMRI 応答強度を比較した。

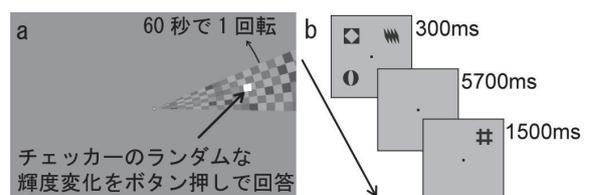


図 1 (a)トポグラフィック領域の同定刺激 (b)視覚性短期記憶課題

3 結果

3.1 頭頂間溝のトポグラフィック領域

8名すべての被験者において、頭頂間溝内に半視野表象を持つ7つのエリア (V7, IPS1, IPS2, IPS3, IPS4, IPS5, SPL1) を同定した (図2)。脳溝に沿って角位置方向の表象が繰返されていた。

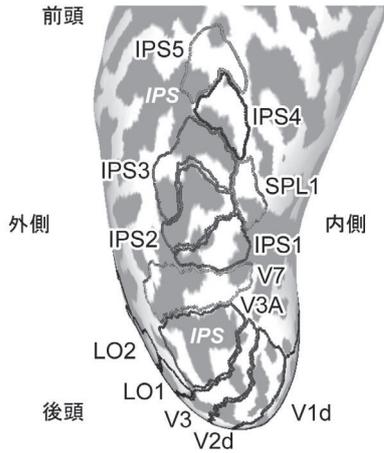


図2 膨らませた大脳皮質左半球表面上に描画したIPSのトポグラフィック領域境界。図の明るい部分は脳回、暗い部分は脳溝を示す。

3.2 頭頂間溝のVSTM関連活動

被験者間で平均した記憶容量はセットサイズ1から3にかけて増加し ($F(3,7) = 4.96, p < 0.01$)、セットサイズ3~4において容量2個程度で上限に達するパターンを示した (図3左)。

記憶保持期間中に記憶容量と同様の活動パターンを有意に示したのは、頭頂間溝中間部の左IPS2および右IPS3であった (図3中、右)。頭頂間溝前部および後部、低次視覚野においてはそのような活動パターンはみられなかった。

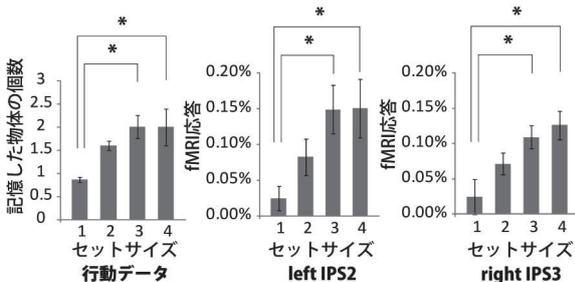


図3 行動データから推定された記憶容量 (左) IPSの記憶保持期間中のfMRI応答 (中、右)

4 まとめ

fMRIを用いて被験者ごとに頭頂間溝のトポグラフィック領域を同定し、さらに各領域の視覚性短期記憶課題中の脳活動を計測した。

記憶保持期間中において、行動データから推定された記憶容量と同様の活動パターンを示したのは頭頂間溝中間部のエリア (左IPS2、右IPS3) であった。これらの領域は記憶容量制限に関連している神経機構を担っていると考えられる。

本研究の結果から、頭頂間溝中間部においては、記憶における刺激の位置情報が脳皮質表面上のトポグラフィーという形態で表現されている可能性が示唆される。今後この仮説の検証を進めていく予定である。

頭頂間溝のトポグラフィック領域の機能分担については未知の点が多い。本研究のように被験者の個人脳モデルに基づいた実験・解析を行い、各領域の機能を解明していくことで、ヒト大脳の機能地図の完成に向けて前進していくことが期待される。

5 参考文献

- [1] S.J. Luck, and E.K. Vogel, The capacity of visual working memory for features and conjunctions, *Nature*, **390**, pp.279-281, 1997.
- [2] J.J. Todd, and R. Marois, Capacity limit of visual short-term memory in human posterior parietal cortex, *Nature*, **428**, pp.751-754, 2004.
- [3] J.D. Swisher, M.A. Halko, L.B. Merabet, S.A. McMains, and D.C. Somers, Visual topography of human intraparietal sulcus. *Journal of Neuroscience*, **27**, pp.5326-5337.
- [4] Y. Xu, and M.M. Chun, Dissociable neural mechanisms supporting visual short-term memory for objects, *Nature*, **440**, 7080, pp.91-95, 2006.
- [5] 山本洋紀, 阿津川智洋, 高橋成子, 福永雅喜, 田中忠蔵, 恵比須俊彦, 梅田雅宏, 江島義道, 機能的MRIによるヒト視覚野の解剖学のおよびレチノトピック構造の解析. *信学技報*, **100**, 330, 2000.

DNA の円二色性スペクトルと構造との関係

宮原 友夫¹、中辻 博¹、杉山 弘²

¹量子化学研究協会、²京都大学理学研究科化学専攻

円二色性スペクトルは DNA の溶液中の構造を調べるために非常によく使われていて、右巻きの B-DNA と左巻きの Z-DNA では反対の符号が測定される。構成分子であるデオキシグアノシンは、B-DNA 中でアンチ型、Z-DNA 中でシン型の構造をしている。二重螺旋構造中では核酸塩基は他の核酸塩基と、水素結合やスタックしている。SAC-CI 法を用いてそれぞれの構造の円二色性スペクトルを計算し、構造と円二色性スペクトルとの関係を明らかにした。

1 はじめに

DNA は多様な構造が可能であるが、その中で典型的な二重螺旋構造として右巻きの B-DNA と左巻きの Z-DNA が有名である[1,2]。この DNA の溶液中での構造を調べるのに円二色性(CD)スペクトルがよく使われている。B-DNA と Z-DNA が全く同じ核酸塩基で構成され、かつ全く同じ配列を持っていたとしても、円二色性スペクトルは Z-DNA と B-DNA とで反対の符号になる[3]。一方、吸収スペクトル(UV)は B-DNA と Z-DNA でほとんど同じである。

デオキシグアノシン(dG)とデオキシシチジン(dC)のみから構成されている B-DNA と Z-DNA の構造の主な違いは、dG が B-DNA でアンチ(anti)型であるのに対し、Z-DNA ではシン(syn)型になっていることである。一方、dC は立体障害のためどちらの DNA 中でもアンチ型になっている。dG のデオキシリボースとグアニンとの二面角は anti-dG と syn-dG とで約 180 度異なっている。また、DNA 二重螺旋中の核酸塩基は、相補的な核酸塩基と水素結合し、隣の核酸塩基とはスタックしている。本研究の目的は、円二色性スペクトルと DNA の構造との関係を理論化学計算から明らかにすることである。

2 計算方法

Gaussian プログラム[4]の中で使用することが

できる SAC-CI 法[5]は分子の基底状態及び、励起状態、イオン化、アニオン化など様々な電子状態を高精度に記述できる電子相関理論であり、多くの研究に利用されその精度と有用性が示されている。この SAC-CI 法を用いて、anti-dG と syn-dG 及び水素結合とスタッキングモデルの円二色性スペクトルの計算を行った。

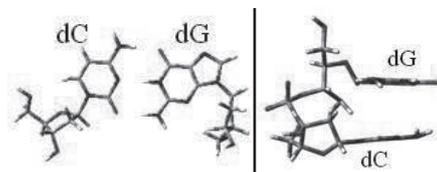


図1 水素結合(左)及びスタッキング(右)の構造

3 デオキシグアノシン(dG)の円二色性スペクトル

図2は anti-dG と syn-dG の SAC-CI 吸収スペクトルを dG の実験スペクトルと比較している。どちらの SAC-CI スペクトルも実験スペクトルとよく一致している。これは強い吸収がいずれも核酸塩基内の $\pi \rightarrow \pi^*$ 励起によるものであり、デオキシリボースの影響が吸収スペクトルにはほとんど現れないためである。従って、吸収スペクトルのみでは dG の構造を決定することができないことが分かる。

図3は anti-dG と syn-dG の SAC-CI 円二色性スペクトルを dG の実験スペクトルと比較している。anti-dG は実験スペクトルとよく一致してい

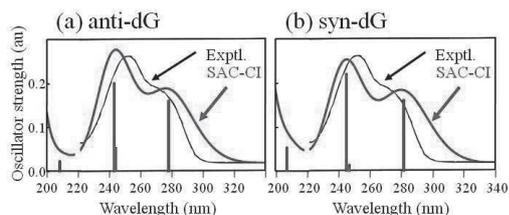


図2 (a) anti-dG 及び (b) syn-dG の SAC-CI 吸収スペクトルと dG の実験吸収スペクトルとの比較。

るが、syn-dG は実験スペクトルと符号が反対になっている。これは円二色性スペクトルでは $\pi \rightarrow \pi^*$ だけでなく、 $n \rightarrow \pi^*$ も大きな強度をもつことと、デオキシリボースの構造がスペクトルの強度や符号に大きな影響を及ぼすためである。SAC-CI 円二色性スペクトルから実験スペクトルがアンチ型であることが分かる。

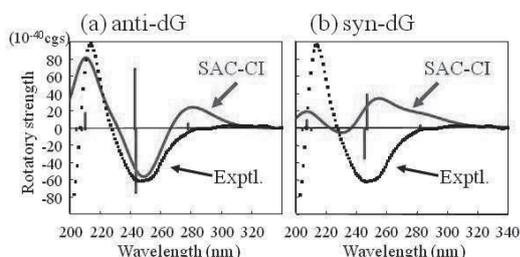


図3 (a) anti-dG 及び (b) syn-dG の SAC-CI 円二色性スペクトルと dG の実験円二色性スペクトルとの比較。

4 水素結合及びスタッキング相互作用

anti-dG と syn-dG の SAC-CI 円二色性スペクトルをそれぞれ B-DNA と Z-DNA の実験円二色性[3]スペクトルと比較すると、250 nm 付近の符号はよく一致している。しかし、Z-DNA の円二色性スペクトルの特徴である 300 nm 付近に現れる負の符号のピークは、anti-dG と syn-dG のどちらも計算されない (図3)。そこで、Z-DNA の X 線構造から水素結合とスタッキング構造 (図1) を取り出し、SAC-CI スペクトルを計算した。

図4 は水素結合とスタッキングモデルの SAC-CI 吸収及び円二色性スペクトルを Z-DNA の実験スペクトルと比較している。吸収スペクトルでは、水素結合モデルの SAC-CI 吸収スペクトルが実験スペクトルとよく一致している。一方スタッキングモデルの SAC-CI 吸収スペクトルではピークが分裂している。これは水素結合により、

最低励起状態の励起エネルギーが 0.4 eV 程高くシフトするためである。円二色性スペクトルでは水素結合モデルの SAC-CI 円二色性スペクトルは anti-dG や syn-dG と同様に 300 nm 付近に強い負の符号を持ったピークは計算されない。一方、スタッキングモデルでは、Z-DNA の実験円二色性スペクトルと同様に、強い負の符号を持ったピークが計算される。以上より、Z-DNA の 300 nm 付近の円二色性スペクトルはスタッキングによる効果であることが示された。

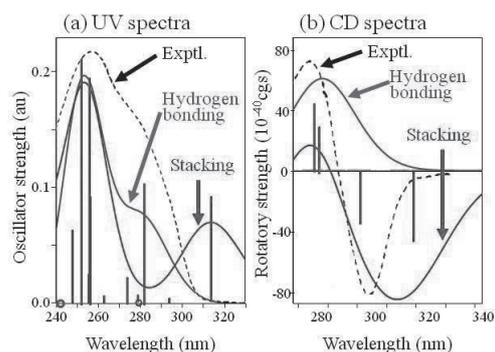


図4 Z-DNA の (a) 吸収 (UV) スペクトルと (b) 円二色性 (CD) スペクトル。実験 (Exptl.) と SAC-CI (Hydrogen bonding 及び Stacking) との比較。

5 まとめ

本研究により DNA の円二色性スペクトルは、デオキシグアノシンとグアニンとの構造及び、隣の核酸塩基との相互作用が重要で、Z-DNA の特徴はスタッキングによるものであることを明らかにした。このように SAC-CI 法は、実験では得ることのできない情報を取得し、化学現象を解明することができる非常に有用な方法である。

6 参考文献

[1] H. Sugiyama, Bull. Chem. Soc. Jpn. **80**, 823 (2007).
 [2] A. Rich, A. Nordheim, and A. H. J. Wang, Ann. Rev. Biochem. **53**, 791 (1984).
 [3] S. Tran-Dinh, J. Taboury, J. M. Neumann, T. Huynh-Dinh, B. Genissel, B. L. d'Estaintot, and J. Igolen, Biochemistry **23**, 1362 (1984).
 [4] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel *et al.*, GAUSSIAN 03, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, 2003.
 [5] H. Nakatsuji, Chem. Phys. Lett. **59**, 362 (1978); H. Nakatsuji, Chem. Phys. Lett. **67**, 329, 334 (1979).

固体 NMR および第一原理計算による有機 EL 素子の分子構造・凝集構造の解析

鈴木 不律、梶 弘典

京都大学化学研究所

1 緒言

有機物質の電荷輸送特性を分子レベルで明らかにすること(どのような分子をどのような凝集状態で用いれば優れた電荷輸送特性が得られるか)は、基礎科学の観点だけでなく、優れた有機EL素子開発の観点からも重要である。通常、有機EL素子は非晶状態で用いられるが、その構造の解析は難しい。そのため、結晶をモデルとした解析が行われることがある。しかしながら結晶化をできるだけ抑制することが求められる有機EL材料においては、結晶でさえその構造解析はしばしば困難となる。例えばAlq₃には α 、 β 、 γ 、 δ 、 ϵ 型の5つの結晶形が存在することが示されているが、少なくとも α 型および δ 型結晶の構造に対しては別々のグループから異なる提案がされており、未だ確定していない。このような状況から、非晶構造のみならず結晶構造に対してもその構造を精密に解析できる新たな手法が必要であると考えられる。本研究ではこの方法論として、周期境界条件下でのNMR化学シフト計算が可能なGIPAW法[1]を用いた解析を行った。今回、二種の構造が提案されている δ -Alq₃について、GIPAW法を用いてそれぞれの結晶構造におけるNMR化学シフト値を求め、報告されている δ -Alq₃のCP/MAS ¹³C NMRスペクトル実測値[2]との比較検討を試みた。

2 実験

Cölleら[3]、および、Rajeswaranら[4]によりそれぞれ報告された2種の δ -Alq₃結晶構造について、セルパラメータおよびAl、C、O、N各原子の座標を各々の文献で報告されている値に固定し、周期境界条件の下でH原子の座標のみについて構造最適化を行った。また、Cölleらの提案した結晶構造については、結晶中の全原子に対する構造最適化計算も行った。この構造最適化には、平面波基底を用いたDFTに基づき、交換相関ポテンシャルに一般化密度近似(GGA)を用いた。GGA汎関数としてはPerdew-Burke-Ernzerhof(PBE)交換相関汎関数を用いた。平面波エネルギーカットオフは27.9 Ry(380 eV)とした。

Cölleら、および、Rajeswaranらにより報告された構造および、上述の最適化計算によって得られた構造について、GIPAW法に基づきNMR化学シフト計算を行った。交換相関ポテンシャルにGGAを用い、GGA汎関数としてはPBE交換相関汎関数を用いた。平面波エネルギーカットオフは80 Ry(1088 eV)とした。構造最適化計算にはCASTEP、GIPAW法に基づく化学シフト計算にはQuantum-Espressoを用いた。粉末X線回折プロファイルの計算にはMercuryを用いた。

3 結果・考察

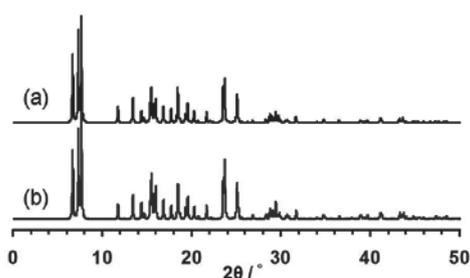


図1. (a) Cölle らによる結晶構造、および、(b) Rajeswaran らによる結晶構造から計算した粉末X線プロファイル。

図1に、Cölleら、および、Rajeswaranらによってそれぞれ報告された δ -Alq₃結晶構造（いずれにおいても分子はfacial体からなる）から求めた粉末X線プロファイルを示す。両構造の粉末X線プロファイルはほぼ完全に一致しており、X線回折測定による両構造の区別や比較検討は困難である。図2にはfacial-Alq₃の分子構造、図3(a)および図3(b)にはそれぞれ γ -および δ -Alq₃の実測のCP/MAS ¹³C NMRスペクトルを示す[2]。図3(a)と異なり、図3(b)では各炭素種に対する共鳴線に分裂が見られる（例えば、C2共鳴線は3本に明瞭に分裂している）。このような共鳴線の分裂は、一分子のfacial-Alq₃では見られない特徴であり[2]、分子間相互作用の影響が示唆される。

図4(a)にはCölleらが報告した δ -Alq₃結晶構造に基づいて計算したNMR化学シフト値を示す。図4(a)の全体的な化学シフト幅は、図3(b)の化学シフト幅と同程度であり、実測をよく再現している。一方、Rajeswaranらが報告した構造より求めた化学シフト値を図4(b)に示す。この構造に対しては全体的な化学シフト幅が実測値に比べ大きく広がっており、実測スペクトルを再現していない。また、各炭素のシグナルの分裂は実測に比べかなり大きくなっていることがわかる。このように、X線回折測定では困難であった両者の区別が、本手法により可能となった。また、Cölleらの示した構造が、Rajeswaranらの構造に比べてより実測に近いこともわかる。ただし、この構造も実測値を完全に再現しているわけではない。例えば、C2共鳴線の分裂はFig. 4(a)においても見られるが、3本が等間隔に分裂する実測とは一致していない。そこで、Cölleらの提案した構造を基に、周

期境界条件下での全原子の構造最適化計算を行い、さらなる構造解析の精密化を試みた。計算結果をFig. 4(c)に示す。Fig. 4(a)、(b)と比較して、全体的な共鳴線の広がりや各共鳴線の位置が良く再現されていることがわかる。特に、H原子のみを最適化した構造では得られなかった、ほぼ等間隔に分裂した3本のC2共鳴線や、C3の1本の共鳴線が実測とよく一致している。

近い将来、非晶構造に対しても同様の解析を行い構造とEL特性の相関を明らかにすることにより、優れた有機EL素子の開発に貢献したいと考えている。

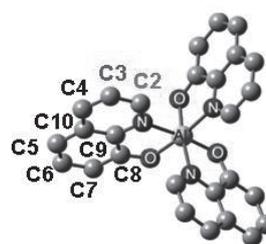


図2. facial-Alq₃の構造と炭素核の番号。

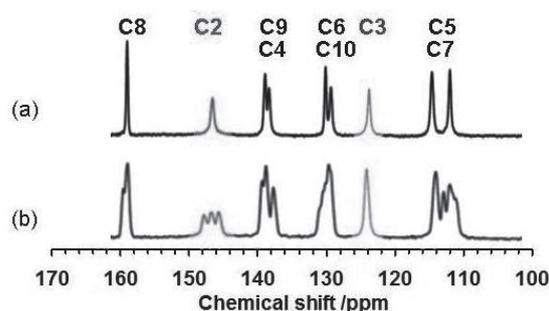


図3.異なる結晶形のAlq₃に対するCP/MAS ¹³C NMRスペクトル。(a) γ -Alq₃、(b) δ -Alq₃。

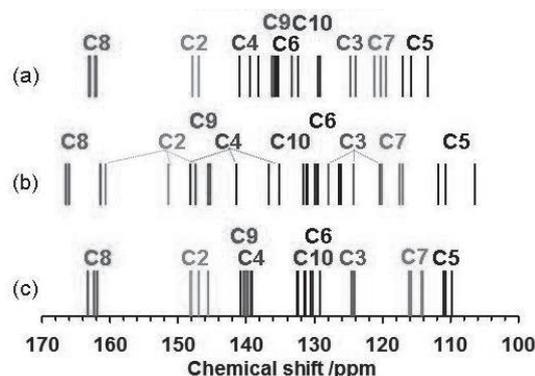


図4. GIPAW法により求めた化学シフト計算値。(a) Cölle らによる結晶構造、および、(b) Rajeswaran らによる結晶構造からそれぞれ求めた計算値。

引用文献

- [1] Pickard, C. J.; Mauri, F. Phys. Rev. B. 2001, 63, 245101.
- [2] Kaji, H.; Kusaka, Y.; Onoyama, G.; Horii, F. J. Am. Chem. Soc. 2006, 128, 4292.
- [3] Cölle, M.; Dinnebier, R. E.; Brütting, W. Chem. Commun. 2003, 23, 2908.
- [4] Rajeswaran, M.; Blanton, T. N.; Klubek, K. P. Zeitschrift Fur Kristallogr. NCS. 2003, 218, 439.

霊長類ゲノム配列を用いた嗅覚受容体遺伝子の比較解析

三色色覚の発達は嗅覚受容体の進化に影響を与えたのか？

松井 淳¹ 郷 康広¹ 新村 芳人²

¹京都大学 霊長類研究所、²東京医科歯科大学 難治疾患研究所

1 はじめに

動物にとって外界を知覚する感覚器官は、種ごとに進化した生態・行動によって多様である。なかでも嗅覚は、危険を避け、食料を獲得し、生殖パートナーを選別するなど、様々な場面で種の存続に関わる重要な感覚器官である。嗅覚の刺激受容は、嗅覚受容体が環境中におい物質を分子認識することにより開始される(図1)。

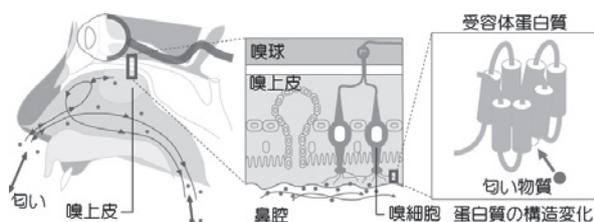


図1. 嗅覚受容体の模式図. 嗅上皮に多数発現した嗅覚受容体によってにおい物質がとらえられる。

7 回膜貫通型の感覚受容体遺伝子において、霊長類の視覚では数個、味覚では数十個の受容体機能遺伝子がゲノム中に存在している。一方、嗅覚の受容体遺伝子はゲノム中最大の多重遺伝子族（遺伝子重複によってゲノム中に複数存在し、相同性が高く類似した機能をもつ遺伝子グループ）で、1種あたり300以上の機能遺伝子を持ち、数万とも言われる多様な匂い物質に対応している。

これまでに霊長類ではヒト、チンパンジー、アカゲザルの全嗅覚受容体遺伝子がゲノムデータから報告されている[1,2]。

2 霊長類の嗅覚受容体遺伝子の同定

嗅覚におけるヒトの特異性、霊長目における嗅

覚遺伝子の進化の道筋を考えるためには、より多くの霊長類ゲノムから網羅的に遺伝子同定をすることが重要となる。我々は、新たに4種の霊長類ゲノム（オランウータン、マーモセット、オオガラゴ、ネズミクツネザル）と霊長目の近縁種であるツパイのゲノム情報から全嗅覚受容体遺伝子を同定し、比較解析した。しかしながら配列データが1種につきおよそ30億塩基（30億文字）のゲノム情報になると、そのデータ量は非常に大きなものとなり、計算機を用いた効率的な配列処理が必要となってくる。

2.1 ゲノムデータについて

比較的高品質のオランウータン、マーモセットのゲノム配列はともに、Washington UniversityのGenome Sequencing Center (<http://genome.wustl.edu>)で解析されたものである。クツネザル、オオガラゴ、ツパイのゲノムデータはBroad Institute (<http://www.broadinstitute.org/>)で解析された。

2.2 嗅覚受容体遺伝子の同定

嗅覚受容体機能遺伝子の同定は先行研究の方法を適用した[3]。また偽遺伝子の同定は、本研究で新たに同定された機能遺伝子を含めた霊長目の機能遺伝子を query として、アルゴリズム BLAST (TBLAST) [4]でそれぞれのゲノム配列に対して相同性検索を行い、類似配列の存在する確率の指標となる E-value ($1e^{-20}$) を基準として抽出した。

3 結果と考察

霊長目は、色覚の発達と引き換えに嗅覚の相対

的な重要性が低下し、その機能を失ったという仮説がある。この仮説によれば、完全な三色色覚をもつ狭鼻猿類（ヒト、類人猿、旧世界ザル）は、そうでない新世界ザルに比べ嗅覚が退化していることになり、なかでも「ヒトの嗅覚は特に退化が著しい」とも言われる。

ここではゲノム配列の精度が高い5種の霊長目（ヒト、チンパンジー、オランウータン、アカゲザル、マーモセット）について比較解析した結果を議論する。

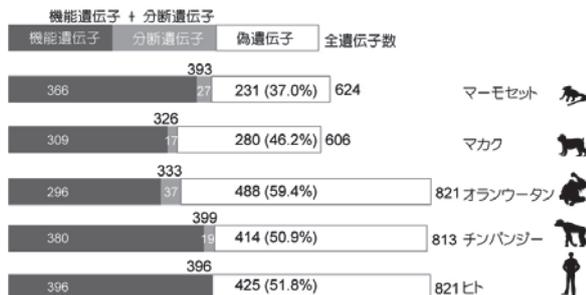


図2. 各霊長類の嗅覚受容体遺伝子数. 分断遺伝子はゲノム配列が完全でないために途切れている遺伝子.

遺伝子数を種間で比較すると(図2)、ヒト、チンパンジー、オランウータンはおおよそ800、マカク、マーモセットはおおよそ600の嗅覚受容遺伝子がゲノム中に存在した。これら総遺伝子数の違いは主に偽遺伝子(機能を失った遺伝子)数の差によるもので、機能遺伝子数はほぼ同数であった。偽遺伝子は機能を失っているため、遺伝子を維持する制約が働かず、ゲノム中から失われやすい。また、機能に直接関わるのは文字通り機能遺伝子である。これまで、嗅覚機能の優劣は「総遺伝子数に占める偽遺伝子の割合」で議論されることが多かったが、偽遺伝子の割合はあまり良い指標でないことがわかった。

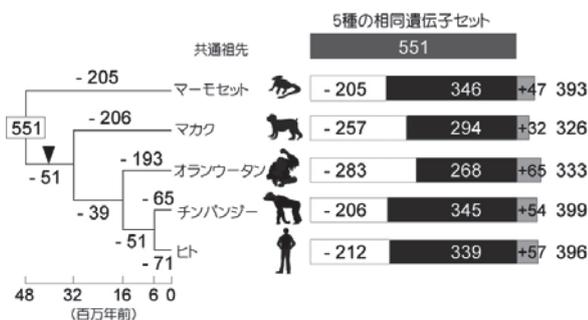


図3. 5種霊長類の嗅覚受容体機能遺伝子の相同遺伝子数の変化. 系統樹の各枝・右の棒グラフに系統ごと・各種で失った相同遺伝子数を示した.

さらに、直鼻猿類5種間で嗅覚受容体機能遺伝子の相同遺伝子(共通の祖先に由来する遺伝子)を同定し、比較解析を行った(図3)。その結果、狭鼻猿類(マーモセット以外の4種)の系統で機能遺伝子は徐々に失われており、「三色色覚の獲得によって嗅覚受容体遺伝子が急激に失われた」ということは「ない」ことが示された(三色色覚の獲得という出来事は嗅覚受容体遺伝子の進化に大きな影響を与えなかったことが示された)。また、直鼻猿類5種の共通祖先がもっていた嗅覚受容体遺伝子は、ヒト、チンパンジー、マーモセットに比べてオランウータン、マカクでより大きく失われており、他の霊長目に比べてヒトの嗅覚はあまり退化していないと考えられる。

4 発表論文

Matsui A, Go Y, Niimura Y (2010) Degeneration of olfactory receptor gene repertoires in primates: no direct link to full trichromatic vision. *Mol Biol Evol* 27: 1192–1200.

5 参考文献

- Niimura Y, Nei M (2003) Evolution of olfactory receptor genes in the human genome. *Proc Natl Acad Sci USA* 100: 12235–12240.
- Go Y, Niimura Y (2008) Similar numbers but different repertoires of olfactory receptor genes in humans and chimpanzees. *Mol Biol Evol* 25: 1897–1907.
- Niimura Y, Nei M (2007) Extensive gains and losses of olfactory receptor genes in mammalian evolution. *PLoS ONE* 2: e708
- Altschul SF, et al. (1997) Gapped Blast and PSI-Blast: a new generation of protein database search programs. *Nucleic Acids Res* 25:3389–3402.
- Katoh K, Kuma K, Toh H, Miyata T (2005) MAFFT version 5: improvement in accuracy of multiple sequence alignment. *Nucleic Acids Res* 33: 511–518.
- Takezaki N, Rzhetsky A, Nei M (1995) Phylogenetic test of the molecular clock and linearized trees. *Mol Biol Evol* 12: 823–833.

境界埋め込み法による物体形状表現と低風圧型物体周りの流れ

高木 洋平

静岡大学工学部物質工学科

1 はじめに

飛行機や船舶、自動車などの輸送機器が流体中を移動する場合、粘性力による乱流摩擦抵抗が発生し、推進効率を低下させる原因となる。そのため、従来より物体近傍の流れを変化させる乱流制御技術が提案されてきた。簡単な制御技術としては物体の表面形状変化が挙げられる。本研究では電線の被覆に凹凸を加えた低風圧型電線に着目し、その抵抗低減効果を数値シミュレーションによって明らかにする。

2 解析対象

本研究で対象とする低風圧型電線の一例を図1に示す。このクレストモデルと呼ばれる形状では、表面に山谷の溝をスパン方向と平行に施し、表面上流から乱流はく離への遷移を促すことによって抵抗を低減させる。円柱の抵抗係数はレイノルズ数とともに減少し、ある一定値付近に落ち着く。そしてレイノルズ数が 10^5 程度になると抵抗値が急激に減少し、これはドラッグクライシスと呼ばれている。台風などの強風環境ではレイノルズ数が 10^4 程度であるため、物体の形状変更によってドラッグクライシスを早期に発現させることが重要となる。

低風圧型電線の被覆形状としては、図1に示し

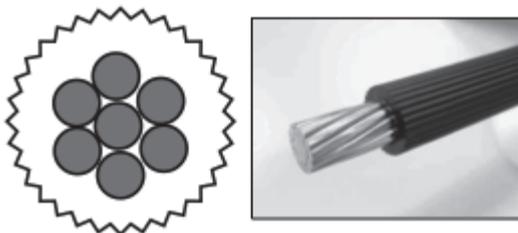


図1 低風圧型電線(クレストモデル)

たクレストモデル以外に、19角形や20角形で表現する正多角形モデル、小さな突起を配置するエンボスモデルなどが考案されている。本数値解析では、正多角形モデル(角数 $n=4,6,8,12,16,20$ 及び円柱)を対象とした流体シミュレーションを行い、角数と抵抗値の関係について調査を行った。

3 数値計算手法

支配方程式は非圧縮性流体を仮定しているため、以下に示す連続の式及びNavier-Stokes方程式である。

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + f_i \quad (2)$$

ここで、 x_i は位置座標、 t は時間、 u_i は速度、 Re は流入速度と物体の外周円半径によって定義されるレイノルズ数である。式(2)中の f_i は境界埋め込み法による体積力項であり、直交格子上で格子を横切る埋め込み境界(Immersed Boundary)^{1,2)}で連続の式を満たすために必要となる。これらの支配方程式は有限差分法によって離散化され、時間積分には対流項にはAdams-Bashforth法、粘性項にはCrank-Nicolson法を用いた。速度と圧力のカップリングにはフラクショナルステップ法³⁾を用いた。

計算格子を図2に示す。上述したように境界埋め込み法を用いているため不等間隔直交格子を採用している。計算格子点数は流れ方向に315、垂直方向に200としている。レイノルズ数は基本的な検証を行うために100とし、流れの三次元性が

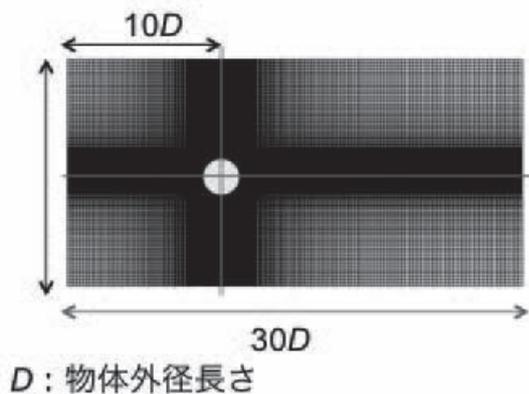


図2 計算格子

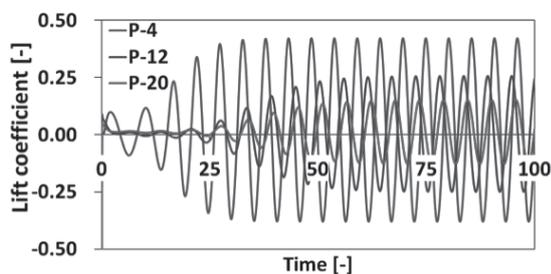


図3 揚力係数の時間変化（四角形、12角形、20角形）

弱いため二次元計算を行った。

4 計算結果

図3に速度場から算出された揚力係数の経時変化を示す。揚力係数は時間的に変動し、初期状態では初期条件の依存性が見られるが、十分に発達した状態では周期的なカルマン渦の発生が見られた。角数 n が増加するにつれて揚力係数の振幅が大きく小さくなり、位相も変化している。

抗力係数及びストローハル数の時間平均値を図4に示す。境界埋め込み法(IBM)とともに境界適合座標 CFD コード(BFC)を用いて行った結果も同時に示してある。まず、ストローハル数に注目すると、IBM・BFC のどちらの結果においても角数の増加とともにストローハル数が減少しているが、相対的な誤差が発生していることがわかる。次に抗力係数に注目すると、BFC の結果では8角形で一定値に漸近しているのに対し、IBM では値のばらつきが見られる。これは IBM では埋め込み境界での速度補間精度によっては壁面せん断応力が正しく評価されないことが原因だと考えら

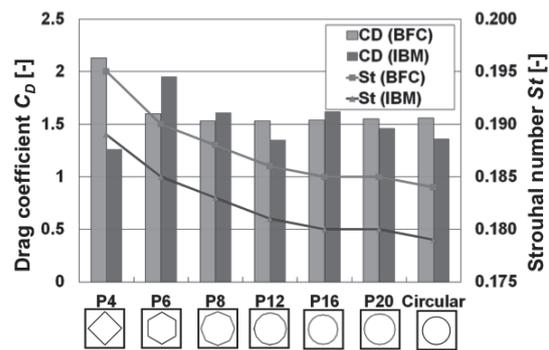


図4 抗力係数及びストローハル数の形状依存性

れる。

5 まとめ

低風圧電線での抵抗低減効果を解明するために、境界埋め込み法を適用した流体シミュレーションコードを開発し、クレストモデルの被覆形状に対して低レイノルズ数における抵抗低減効果を検証した。境界埋め込み法の計算精度検証が不十分であったが、低レイノルズ数では8角形以上になると抵抗値は円柱の値に漸近することがわかった。今後は数値計算精度の向上に取り組み、高レイノルズ数における抵抗低減効果とはく離形態の関連性について明らかにする予定である。

6 参考文献

- 1) R. Mittal and G. Iaccarino, "Immersed boundary methods", *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 37, pp. 239-261 (2005).
- 2) T. Ikeno and T. Kajishima, "Finite-difference immersed boundary method consistent with wall conditions for incompressible turbulent flow simulations", *J. Comp. Phys.*, 226, pp.1485-1508 (2007).
- 3) J. Moin and P. Moin, "Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations", *J. Comp. Phys.*, 59, pp. 308-323 (1985).

モンテカルロ法による有機固体の電荷輸送シミュレーション

川口久文、山田知典、梶弘典

京都大学化学研究所

1 緒言

有機エレクトロルミネッセンス (EL) をはじめとする有機素子において、低消費電力化、長寿命化、環境負荷の低減は重要な課題である。これらの課題の解決には、より効率的な電荷の輸送が必要であるため、これまで電荷輸送の解析に関していくつかの試みがなされてきた。その中で、Bässler らによる Gaussian disorder model [1] が、有機非晶凝集体中の電荷輸送現象を最もうまく説明できるモデルとして知られている。しかし、このモデルにおいても、有機分子を頭わに考えていないことから、実際にどのような分子を合成すればよいのか、どのような凝集状態にすればよいのかという、現実的な設計指針を得ることはできない。この設計指針を得るためには、有機凝集体中の分子の微視的構造、特に分子内の構造や分子間パッキング、と電荷輸送特性との相関を明らかにすることが必須である。これまでの種々のモデルとは異なり、有機分子を頭わに考えた電荷輸送計算法の確立、および、その計算を通しての、有機分子の凝集状態と移動度の相関解明を目指す。

2 計算

本研究では、正孔輸送材料として用いられている TPD (図 1) の結晶に対して Marcus 理論[2]により評価した二分子間(分子ペア)の電荷ホッピング速度定数 k_{CT} を算出し、電極間での電荷輸送現象をモンテカルロ法により計算する手法の確立を行った。

k_{CT} は Marcus 理論に基づいて計算した。ただし、結晶には電場が印可されるため、電荷移動前後の自由エネルギー変化 ΔG が式に含まれる。 ΔG は、電気素量 q 、電場 F 、電荷が 2 分子間を hopping 移動する距離 Δx を用いて、(1) 式より求めることができる。

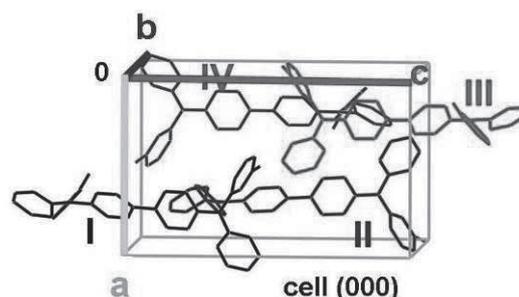


図1: TPD斜方晶の結晶構造

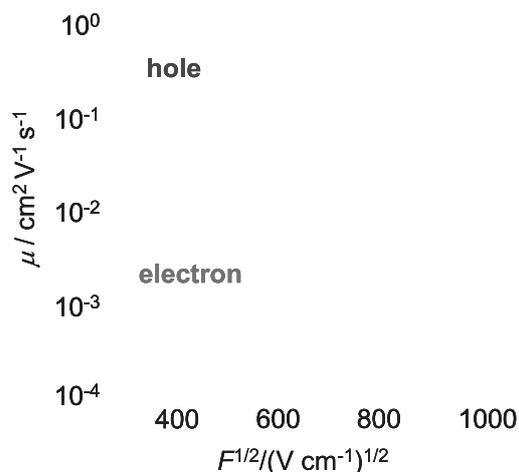


図2: 斜方晶における電荷移動度

$$\Delta G = qF\Delta x \quad (1)$$

膜厚 1 μm の TPD 結晶における電荷移動を、この式より得た k_{CT} を用いて、モンテカルロ法により計算した。この計算により、各結晶軸方向に電界をかけたときの移動度 μ を求めた。また、電荷輸送過程において、各分子ペアに対して hopping が起こった回数を計算した。

3 結果と考察

計算によって得られた斜方晶の移動度を図2に示す。正孔移動度は 10^{-1} - 10^{-2} $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 、電子移動度は 10^{-3} - 10^{-4} $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ となり、2-3 オーダー正孔移動度が高いという結果が得られた。これらの正孔・電子移動度は、ともに実測よりも高い値である。実測値は、結晶に対してではなく非晶膜に対するものであることから、この違いは結晶状態と非晶状態の違いによるものであると考えられるが、今後さらに検討する必要がある。

つぎに、片方の電極から対向電極まで正孔が到達するまでの間に、正孔が分子間で hopping を行う回数を調べた。図3に、斜方晶の c 軸方向に電界を印可した際の、正孔の hopping 回数を示す。横軸は隣接二分子ペアを番号で示してある。縦軸はそれぞれの分子ペアにおいて hopping が起こった回数を示した。正の回数は電界方向に hopping した回数、負の回数は電界方向と逆方向に hopping した回数である。図4は、これら正・負の回数差を取り、電界方向への hopping に実質的に寄与した回数を示した。

図3より、hopping 回数の多い分子ペアは、7, 8, 27, 28、および、4, 6, 31, 33 であることがわかる。これらは、トランスファー積分の大きさを反映している。しかし、これらの hopping 回数の多い分子ペアの中で、実際の電荷移動に寄与しているのは、ペア 4, 6, 31, 33 であり、7, 8, 27, 28 はほとんど寄与していないことが図4からわかる。これは、ペア 7, 8, 27, 28 は、トランスファー積分が大きいかもかわらず、電界方向に対してほぼ垂直に電荷が移動し、無駄なホッピングとなっている一方、ペア 4, 6, 31, 33 はトランスファー積分が大きく、かつ、電界方向への電荷移動に寄与するためである。

以上の結果から、電荷移動に寄与する分子ペアは、電界方向へのベクトル成分を有した、トランスファー積分の大きい特定のペアであることがわかった。上記ペア以外はトランスファー積分が小さいため本研究の条件下では電荷輸送に利用されておらず、それらが電荷輸送の律速になることはなかった。

今後は、本計算手法の妥当性を検証するとともに、非晶状態に対する検討も行い、現実の非晶有機膜中の輸送特性を分子レベルから理解することを目指す。

[1] H. Bässler, Phys. Stat. Sol. (b), 175 15 (1993).

[2] R. A. Marcus and N. Sutin, Biochim. Biophys. Acta, 811 265 (1985).

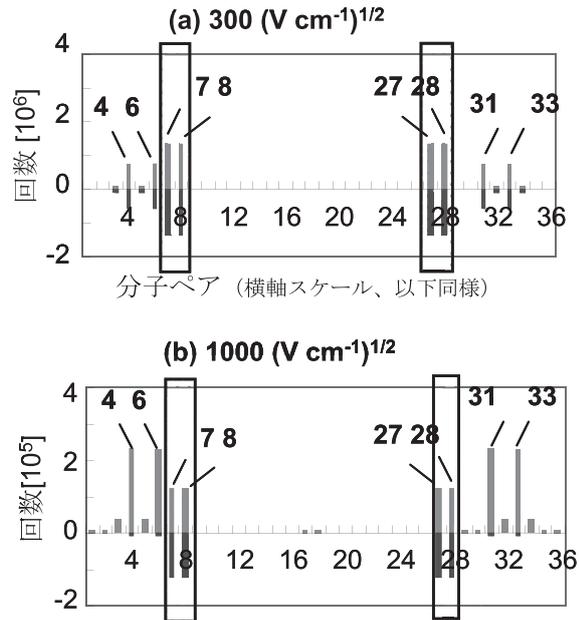


図3：斜方晶正孔輸送c軸方向についての hopping回数(正の回数は電界方向、負の回数は電界方向と逆方向のhopping回数)

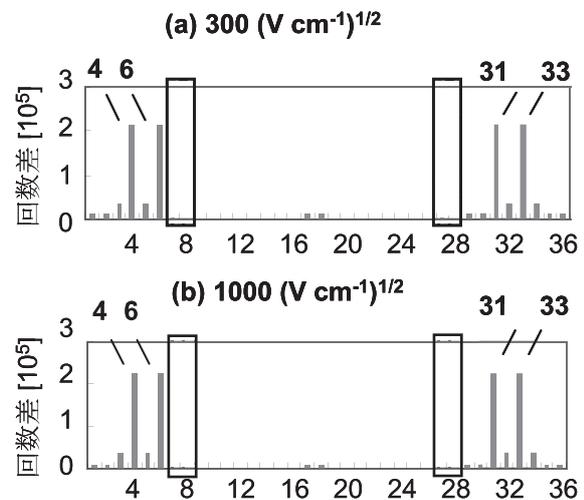


図4：斜方晶正孔輸送c軸方向についての hopping回数差(図3の正と負の回数の差)

コロイド分散系の直接数値シミュレータ KAPSEL による 大規模シミュレーションの実現

山本量一

京都大学大学院工学研究科化学工学専攻

1 はじめに

本研究課題は、プログラム高度化共同研究として、独自に開発したコロイド分散系のためのシミュレーションプログラム (KAPSEL) [1] による大規模計算を実現することを目的としている。KAPSEL を用いると、多数のコロイド粒子が溶媒に分散した系の直接数値計算を高速に行う事が出来る。KAPSEL の特徴は、コロイド粒子の運動と流体の運動との練成問題を、ナビエストークス方程式に基づいて正確に解くことができる点である。KAPSEL を用いることによって、理論的に解明されていない実験事実に対して、明確な説明を与えることが可能である。しかしながら、ナビエストークス方程式に基づいた直接数値計算という性格上、現実的な時間内で大規模計算を行うためには、流体計算コードを高速化・並列化する必要がある。大規模計算が実行できることによって、これまでは理論的に検証することが不可能であった、コロイド粒子同士の運動にみられる長距離相関の実態が明らかになると考えられる。

KAPSEL の特徴は、粒子-流体界面を2次元的な面として明確に定義するのではなく、プロフィール関数を用いてぼやけた界面として表現することにある。[2-5] これによって、煩雑な粒子流体界面の移流計算から開放され、粒子分散系の効率的なシミュレーションが可能となる。本プログラムに施されている並列化手法は、最も時間を消費している FFT に関して、既に並列化された Intel Math Kernel Library(MKL)を移植して用いている。また、全ての並列化可能ループに対して OpenMP によるスレッド並列化を施している。

2 KAPSEL の並列化方針

KAPSEL では、計算負荷の高い単一のホットスポットが明確には存在しないことが並列化を阻害する大きな問題点になっている。そのために、プログラムの全領域に渡って地道な並列化を実現することが求められている。一例として、並列化する前の KAPSEL で粒子沈降計算を実行した場合の消費時間の内訳を図1に示す。最も計算負荷の高い FFT 部分でも全体の 2/3 に過ぎない。

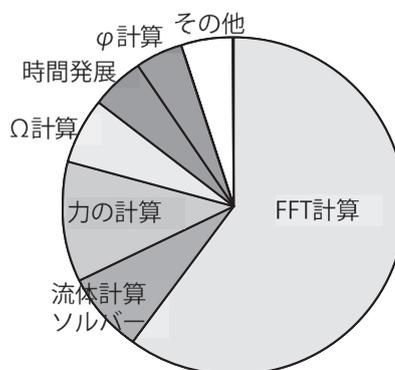


図1: 並列化前の消費時間内訳

これらの問題に対処するために、我々は以下の3つの方針に従い、KAPSEL の高速化をまずは独力で試みた。

- FFT アルゴリズムを大浦の FFT から既に並列化・ベクトル化されており、かつ効率的に計算が実行可能な Intel Math Kernel Library (MKL) に変更した。
- KAPSEL 内の FFT 以外の関数に関して、並

列化可能なループについては、OpenMP を用いた並列化を行った。

- c) 粒子間相互作用力を効率的に計算するために、Cell Linked List 法を実装した。

以上の並列化・高速化を行ったことによりプログラム実行速度は大きく向上し、ノード内の並列（コア数8程度まで）は十分な性能が出ることを確認している。[6-13] しかし、共有メモリー型マシンの使用を前提として OpenMP を使用しているために、この時点では図2と3に示したようにその速度向上率はノード内（8 並列程度）のスケラビリティを得るのみに留まっていた。

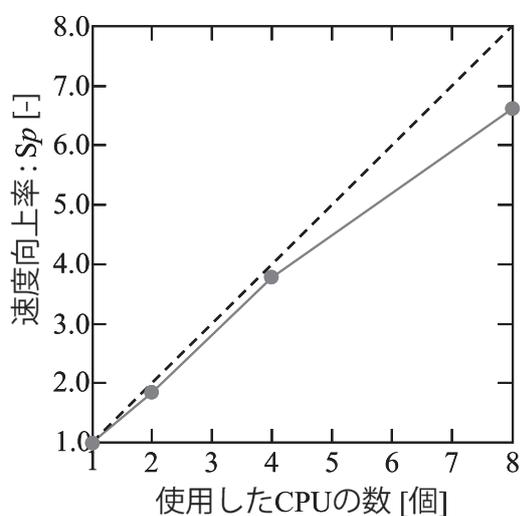


図2: FFT のみの速度向上結果

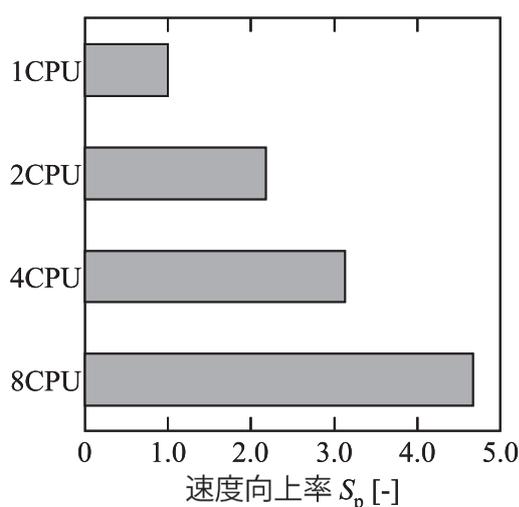


図3: プログラム全体の速度向上結果

今回メディアセンターのプログラム高度化共同研究に採択していただいたことにより、平成20

年度より MPI 並列化による大規模シミュレーションの実現に取り組むことが可能となった。初年度は計算不可の最も大きい FFT の並列化に取り組むとともに、メディアセンターからの助言に基づいて、我々の方で既存のコードに対して以下の対応を行った。

- (1) Value 型の変数の削除
- (2) FFT の実行回数削減

この時点での成果として、OpenMP による並列化を反映したプログラム KAPSEL-2 を 2009 年 8 月に一般公開した[1]。図4は OpenMP 並列でこれまで行った中では最大サイズのシミュレーションのスナップショットである。ここでは、流体ノード 256x256x512、分散粒子数 10 万個のシミュレーションに成功している。



図4 10万粒子の沈降シミュレーションのスナップショット。KAPSEL ホームページ[1]に動画がある。

2年目の昨年度は FFT 部分のさらなる高効率の並列化と、それ以外の部分の並列化に取り組んだ（メディアセンター側）。具体的には、平成21

年度上期に実施した流体計算部のMPI+OpenMPによるハイブリッド並列化による分散処理効果を上げ、百コア程度の高い並列処理に対応するため、メディアセンターによって以下の4点の対応がなされた。

- (1) 粒子計算部の2次元並列化
- (2) 並列数に結果が依存しない乱数発生関数の適用
- (3) 流体計算部の2次元並列化
- (4) FFTの2次元並列化

主要な改善点について以下に概要を説明する。

(2) 並列数に結果が依存しない乱数発生関数

ASISコードでは粒子座標を求める際にはrand関数及びmt19937arc(メルセンヌツイスタ乱数発生器)を使用している。並列化対応されていないこれらの乱数発生器を使用しプロセス並列化を実施した場合、結果の再現性に問題が生じる。粒子並列化チューニングにおいて、結果の再現性を確保するため粒子ごとに独立な乱数系列を作成する必要がある。

粒子1次元並列化時はメルセンヌツイスタ並列版のDynamic Creator(作者:広島大松本氏 <http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/DC/dc.html>)を使用した。乱数系列初期化部の並列化が不可能かつ非常に低速であった。今回は乱数系列初期化の並列化が可能となった新版Dynamic Creatorと、Linuxで使用可能であるdrand48_rを使用する。Dynamic Creator及びdrand48_rを使用するに当たっては、乱数の状態情報を格納する構造体と乱数のSEEDを粒子構造体に追加している

Dynamic Creatorとdrand48_rを比較すると、Dynamic Creatorはメルセンヌツイスタを使用するため乱数アルゴリズムの面では優れているが、乱数初期化のコストが大きく乱数系列を216-1(=65535)までしか作成できない。一方drand48_rは乱数初期化コストが低く、乱数系列を248-1まで作成できるものの、乱数アルゴリズムの面では線形合同法を使用しておりメルセンヌツイスタに劣るものとなっている。

(4) FFTの2次元並列化

FFTのプロセス分割対応を行うため、3次元

FFTを軸方向ごとに分解する必要がある。本プログラムの1次元分割時には、流体/場メッシュの1次元分割に伴いASISコードで使用されていた3次元FFTを2次元FFTと1次元FFTに分解した。今回は流体/場メッシュの2次元分割を行うため、ASISコードで使用されていた3次元FFTをXYZ各方向の1次元FFTに分解する。

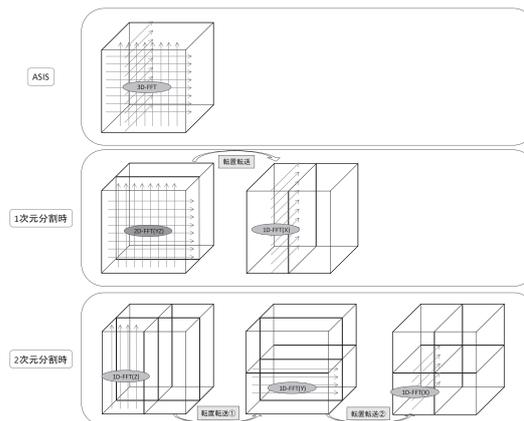


図5 3次元FFTのプロセス分割対応手法

尚、U2u_k、U_k2uなど複数の配列に対しFFTを実行する関数においては、バッファリングを行い複数配列の転置転送を1回で済むようにしている。このためデータのコピー処理が増大するが、高並列時で問題となる転置転送(MPI_Alltoall)による通信レイテンシ削減が見込まれる。

この新しいコードでベンチマークを大規模計算について実施したところ、図6に示すように主要計算部分については100プロセス程度までよい並列化効率を得ていることが明らかになった。

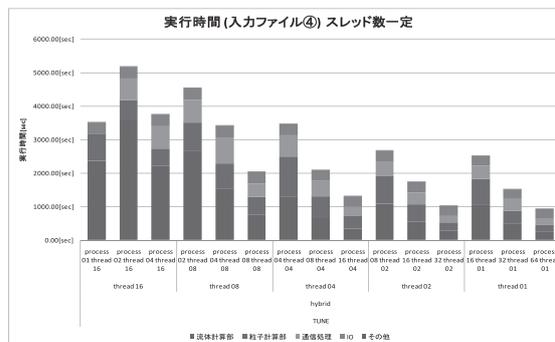


図6 共同研究成果コードの性能 (256x256x256メッシュ、粒子数24000)

3 今後の課題と展開

メディアセンターとの共同研究で得られた新しいコードを用いたベンチマークでは、プログラムの実実行時間は数十プロセスで頭打ちになる傾向が現れている。この主な原因は、ベンチマークに含まれているシミュレーションデータのディスクへの入出力が並列化されていないことにある。現在のコードが使っている **Gourmet/libplatform** という入出力ライブラリに原因があることが明らかなので、並列化入出力機能を有する **HDF** ライブラリへの変更を行っている。これが完了し次第、既存のシミュレーションの 10 倍の大きさの系である 100 万粒子の沈降現象のシミュレーションに取りかかる予定である。粒子沈降現象では流体の影響によって遠距離まで作用する流体力学相互作用の定量的な扱いが重要であり、大規模シミュレーションの実現には大きな意味がある。

参考文献

- [1] KAPSEL:
<http://www-tpm.cheme.kyoto-u.ac.jp/kapsel/>
- [2] Y. Nakayama and R. Yamamoto, A Simulation Method to Resolve Hydrodynamic Interactions in Colloidal Dispersions, *Phys. Rev. E*, Vol.71, No.3, 036707 (2005).
- [3] K. Kim and R. Yamamoto, Efficient simulations of charged colloidal dispersions: A density functional approach, *Macromol. Theory Simul.*, Vol.14, No.4, pp.278-284 (2005).
- [4] K. Kim, Y. Nakayama, and R. Yamamoto, Direct Numerical Simulations of Electrophoresis of Charged Colloids, *Phys. Rev. Lett.*, Vol.96, No.20, 208302 (2006).
- [5] Y. Nakayama, K. Kim and R. Yamamoto, Simulating (electro) hydrodynamic effects in colloidal dispersions: smoothed profile method, *Eur. Phys. J. E*, Vol.26, No.4, pp.361-368 (2008).
- [6] T. Iwashita, Y. Nakayama, and R. Yamamoto, A numerical model for Brownian particles fluctuating in incompressible fluids, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. 77, No.7, 074007 (2008).
- [7] R. Yamamoto, K. Kim, Y. Nakayama, K. Miyazaki, and D.R. Reichman, On the role of hydrodynamic interactions in colloidal gelation, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol.77, No.8, 084804 (2008).
- [8] T. Iwashita and R. Yamamoto, Short-time motion of Brownian particles in a shear flow, *Phys. Rev. E*, Vol.79, No.3, 031401 (2009).
- [9] T. Iwashita, Y. Nakayama, and R. Yamamoto, Velocity autocorrelation function of fluctuating particles in incompressible fluids, -Toward direct numerical simulation of particle dispersions-, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, No.178, pp.86-91 (2009).
- [10] R. Yamamoto, Y. Nakayama, and K. Kim, Smoothed profile method to simulate colloidal particles in complex fluids, *Int. J. Mod. Phys. C*, Vol.20, No.9, pp.1457-1465 (2009).
- [11] T. Iwashita and R. Yamamoto, Direct numerical simulations for non-Newtonian rheology of concentrated particle dispersions, *Phys. Rev. E*, Vol.80, No.6, 061402 (2009).
- [12] Y. Nakayama, K. Kim, and R. Yamamoto, Direct simulation of flowing colloidal dispersions by smoothed profile method, *Advanced Powder Technology*, Vol.21, No.2, pp.206-211, (2010).
- [13] H. Kobayashi and R. Yamamoto, Tumbling motion of a single chain in shear flow: a crossover from Brownian to non-Brownian behavior, *Phys. Rev. E*, Vol.81, No.4, 041807 (2010).
- [14] T. Iwashita, T. Kumagai and R. Yamamoto, A direct numerical simulation method for complex modulus of particle dispersions, *Eur. Phys. J. E*, in print.

三次元二相流格子ボルツマン法プログラムの MPI 並列化と貯留岩の 空隙ネットワーク内における二相流動シミュレーション

村田澄彦

京都大学大学院・工学研究科・社会基盤工学専攻

炭酸ガス排出量の削減方法として研究が進められている地中貯留に関して、貯留層における炭酸ガスの残留挙動を解明するため、格子ボルツマン法を用いて貯留岩の空隙ネットワーク内における水-超臨界 CO₂系の二相流流動シミュレーションを実施している。今回、さらに詳細な検討を行うためスーパーコンピュータ共同研究制度（プログラム高度化支援枠及び大規模計算支援枠）の支援により格子ボルツマン法プログラムを MPI 並列計算対応版に書き換え、より大きな空隙ネットワークモデルに対する計算を行った。ここでは、MPI 化による計算速度の上昇と計算結果について紹介する。

1 はじめに

炭酸ガスの地中貯留は、最も有効な炭酸ガス排出量削減方法として注目されており、我が国では火力発電所など大規模炭酸ガス排出源の近くに広く分布する層位トラップ構造を有する帯水層に炭酸ガスを圧入貯留することが考えられている¹⁾。炭酸ガスの地中貯留での圧入炭酸ガスの流動は、帯水層の空隙を満たす地層水を押し出しながら流動する二相流動となるが、この二相流動によって炭酸ガスは帯水層中に拡散するとともに、一部は残留ガスとしてトラップされる。したがって、帽岩のようなしっかりとしたシール構造を持たない層位トラップ構造では、岩石の空隙構造に起因する炭酸ガスのトラップ機構を正しく理解して炭酸ガスの貯留量の評価と漏洩に対する安全性の評価を実施することが特に重要となっている。

これまで、貯留岩の空隙構造モデルとしてベレア砂岩の空隙構造モデルを用いて、水-超臨界炭酸ガス系の三次元二相流格子ボルツマン法シミュレーションを実施してきた。しかし、その計算領域は1辺が256格子の立方体モデルであり、実計算領域に直すと1辺が0.64mmの立方体でしかなく、空隙構造に起因する炭酸ガスのトラップ機構を十分に捉えることがで

きたとは言えなかった。そのため、より大きな空隙ネットワークモデルに対するシミュレーションが必要であるが、従来のOpenMPによるスレッド並列計算では1ケースのシミュレーションに数カ月を要することがわかり、MPIによるプロセス並列計算が必要不可欠となった。そこで、スーパーコンピュータ共同研究制度（プログラム高度化支援枠及び大規模計算支援枠）の支援を受けて三次元二相流格子ボルツマン法プログラムをMPIによるプロセス並列計算対応版に書き換え、それを用いてより大きい空隙ネットワークモデルに対して計算を行った。

ここでは、三次元二相流格子ボルツマン法（以下、3D2P-LBM）について簡単に説明した後、MPIによるプロセス並列計算への対応方法とそれによる計算速度の向上、空隙ネットワーク内での水-超臨界炭酸ガス系の二相流動のシミュレーション結果について紹介する。

2 3D2P-LBM

本研究では色付き粒子を用いた不混和性二相流格子ボルツマン法を適用し、それに用いる平衡分布関数には Grunau ら(1993)²⁾により提案された静止粒子パラメータを導入する方法を用いた。この方法で

は、時刻 t 、位置ベクトル \mathbf{x} の格子点における赤粒子と青粒子の分布関数をそれぞれ $f_i^r(\mathbf{x}, t)$ 、 $f_i^b(\mathbf{x}, t)$ として、二相流格子ボルツマン方程式を次式で表す。

$$f_i^k(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^k(\mathbf{x}, t) + \Omega_i^k(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

ここに、 k は赤色粒子 r と青色粒子 b のいずれかを示し、 i は仮想粒子の運動方向を示す。また、 $\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)$ は衝突による粒子分布の変化を表す衝突項であり、 \mathbf{c}_i は粒子の運動方向 i に対する格子速度ベクトルである。時刻 t 、位置ベクトル \mathbf{x} の格子点における粒子全体の分布関数 $f_i(\mathbf{x}, t)$ は赤色粒子と青色粒子の分布関数の和で表され、

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^r(\mathbf{x}, t) + f_i^b(\mathbf{x}, t) \quad (2)$$

となる。

また、重力などの体積力を無視する場合、式(1)の衝突項 $\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)$ は次式で表わされる。

$$\Omega_i^k(\mathbf{x}, t) = \left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^A + \left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^B \quad (3)$$

ここに、右辺第1項の $\left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^A$ は局所平衡状態への緩和過程を表現し、流体の粘性の効果を表現する項である。また、右辺第2項 $\left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^B$ は二相界面に作用する界面張力の効果を表現する項である。なお、重力を考慮する場合は、第3項目として体積力を表現する項を追加すればよい。なお、本研究では流体の流動挙動に及ぼす重力の影響は少ないものと考え、重力を無視して計算を行っている。

緩和過程項には次式で表わされる格子 BGK モデル³⁾を適用した。

$$\left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^A = -\frac{1}{\tau_k} \left(f_i^k(\mathbf{x}, t) - f_i^{k(eq)}(\mathbf{x}, t)\right) \quad (4)$$

ここに、 τ は単一緩和時間係数であり、 $f_i^{k(eq)}(\mathbf{x}, t)$ は局所平衡分布関数である。また、界面張力項には Grunau ら²⁾により提案されたモデルを適用して

$$\left(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)\right)^B = A \left| \mathbf{F} \right| \left(\frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{F})^2}{|\mathbf{c}_i|^2 |\mathbf{F}|^2} - G \right) \quad (5)$$

とした。ここに、 A は界面張力の大きさを制御するパラメータであり、 G は格子速度モデルに依存し質量保存則から導かれる係数で、本研究で用いた 3D15Q 格子モデルでは $G=1/3$ となる。また、 \mathbf{F} は局所カラー勾配と呼ばれ、

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = \sum_i \mathbf{c}_i (\rho_r(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t) - \rho_b(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t)) \quad (6)$$

と定義される。ここに、 ρ_r および ρ_b はそれぞれ局所的な赤色流体と青色流体の密度であり、次のように定義される。

$$\rho_r(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i^r(\mathbf{x}, t) \quad (7)$$

$$\rho_b(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i^b(\mathbf{x}, t) \quad (8)$$

3 3D2P-LBM プログラムの MPI 並列化

3D2P-LBM プログラムの MPI 並列化を行うために、三次元 LBM 格子の計算領域をマクロな圧力勾配の方向 (z 方向) に垂直な x 方向と y 方向の 2 次元断面で領域分割を行い、各領域に対してメモリを共有できる 1 コアあるいは 1 CPU あるいは 1 ノードで計算を行う方針とした。用いたスーパーコンピュータシステムは、4 コア/CPU、4CPU/ノードであるので、OpenMP によるスレッド並列も可能なハイブリッド並列で並列化を行うこととした。なお、 z 方向については流入端と流出端において境界条件の設定が必要となるが、今回、その設定に対して分割が困難と判断して、 z 方向には分割しなかった。

具体的には、図 1 に示すように、 xy 断面を領域分割して各領域を一つのプロセスとする。各プロセス間でデータの通信を行うため、図 1 の右に示したように隣接するプロセス領域とオーバーラップする袖部を設ける。これにより、例えば、粒子の並進運動では各プロセスにおいて袖部まで並進運動処理した

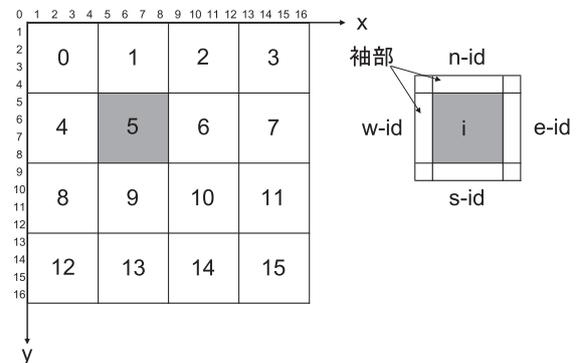


図 1 MPI における領域分割

後、各プロセスの袖部のデータを隣接するプロセスの実データに反映することができる。また、プロセス5からプロセス10などの斜め方向のデータ通信は、 x 方向のデータ通信を行った後に y 方向のデータ通信を行うことにより実現させた。この方法は、斜め方向の単独データ通信を行う方法よりも x 方向、 y 方向のデータ通信に相乗りする形で通信が可能となるため効率がよい。

本 3D2P-LBM プログラムでは界面張力項の計算を行う衝突演算と仮想粒子の並進演算において MPI

によるプロセス並列計算を行い、その他の部分は OpenMP によるスレッド並列計算を行うこととした。

以上の MPI による並列化の効果を確認するため、次節で述べる LBM 格子数が $400 \times 400 \times 400$ のベレア砂岩の空隙ネットワークモデルに対してステップ数 200 の計算を実施した。プロセス数のみを変更して計算した結果とハイブリッド並列で計算した結果をそれぞれ表 1、表 2 に示す。表 1 より、並列化をしない 1 コア 1 プロセスで計算した場合を 1 とすると 16 並列で約 12 倍の計算速度が達成されており、

表 1 MPI によるプロセス並列数と計算時間

コア数	プロセス数	スレッド数	演算時間 (秒)	通信時間 (秒)	IO時間 (秒)	計算時間 (秒)	演算加速倍率	計算加速倍率
1	1	1	15666.59	0.01	90.39	15756.99	1.00	1.00
4	4	1	4457.41	3.13	72.72	4533.26	3.51	3.48
8	8	1	3730.44	11.12	69.56	3811.12	4.20	4.13
16	16	1	1303.38	7.75	131.14	1442.27	12.02	10.93
32	32	1	695.36	16.13	70.12	781.61	22.53	20.16
54	54	1	398.43	12.77	116.07	527.27	39.32	29.88
128	128	1	247.77	22.91	142.45	413.13	63.23	38.14
256	256	1	170.84	16.53	120.67	308.04	91.70	51.15

表 2 ハイブリッド並列数と計算時間

コア数	プロセス数	スレッド数	演算時間 (秒)	通信時間 (秒)	IO時間 (秒)	計算時間 (秒)	演算加速倍率	計算加速倍率
1	1	1	15666.59	0.01	90.39	15756.99	1.00	1.00
4	4	1	4457.41	3.13	72.72	4533.26	3.51	3.48
	1	4	4210.03	0.01	115.29	4325.33	3.72	3.64
8	8	1	3730.44	11.12	69.56	3811.12	4.20	4.13
	2	4	2350.5	2.36	87.59	2440.45	6.67	6.46
16	1	8	2484.67	0.02	130.66	2615.35	6.31	6.02
	16	1	1303.38	7.75	131.14	1442.27	12.02	10.93
	4	4	1271.33	2.82	66.7	1340.85	12.32	11.75
32	2	8	1338.39	2.37	84.94	1425.7	11.71	11.05
	1	16	1354.17	0.01	127.26	1481.44	11.57	10.64
	32	1	695.36	16.13	70.12	781.61	22.53	20.16
	8	4	1118.05	15.34	68.64	1202.03	14.01	13.11
64	4	8	705.93	2.68	68.83	777.44	22.19	20.27
	2	16	783.84	2.01	85.74	871.59	19.99	18.08
	64	1	398.43	12.77	116.07	527.27	39.32	29.88
	16	4	421.6	6.72	64.37	492.69	37.16	31.98
128	8	8	639.62	10.68	63.69	713.99	24.49	22.07
	4	16	438.06	2.64	69.98	510.68	35.76	30.85
	128	1	247.77	22.91	142.45	413.13	63.23	38.14
	32	4	241.22	15.98	72.56	329.76	64.95	47.78
256	16	8	258.7	12.62	62.98	334.3	60.56	47.13
	8	16	402.76	10.42	62.57	475.75	38.90	33.12
	256	1	170.84	16.53	120.67	308.04	91.70	51.15
	64	4	173.24	15.81	69.43	258.48	90.43	60.96
256	32	8	173.49	15.67	76.24	265.4	90.30	59.37
	16	16	165.66	11.73	61.86	239.25	94.57	65.86

OpenMP による 16 スレッド並列の場合（計算時間=1875.76 秒）に比べても 1.3 倍の計算速度が達成されている。また、256 コア 256 プロセスの計算では、計算速度が 1 コア 1 プロセスの場合の 91.7 倍の速度となっており、OpenMP による 16 スレッド並列での計算に比べても 6 倍の計算速度が達成されている。このように、MPI による並列化の効果が顕著に確認できる。

次に、表 2 からわかるように、同じ並列数でもプロセス並列数とスレッド並列数の組み合わせで計算速度が異なっている。例えば、32 プロセス 4 スレッド並列の場合と 8 プロセス 16 スレッド並列の場合とでは並列数は同じ 128 並列となるが、前者の計算速度は、後者の計算速度の 1.4 倍となっている。このように、並列数によってプロセス並列とスレッド並列の最適な組み合わせは異なり、ハイブリッド並列を用いて計算を実行するには、事前に最適な組み合わせを調べておく必要がある。

4 空隙ネットワーク内での二相流動のシミュレーション結果

浸透率レンジが 300md と 900md の 2 種類のベレア砂岩（それぞれ、Sample-1, Sample-2 とする）のマイクロフォーカス X 線 CT スキャナ画像を 2 値化することで空隙部と岩質部に分離し、各スライス断面の 2 値化画像を積み重ねて 3 次元空隙ネットワークモデルを構築した。この空隙ネットワークモデルに対する LBM 格子数は $400 \times 400 \times 400$ 格子であり、キャピラリー数を 6.2×10^4 とし、水-超臨界炭酸ガス系の二相流動シミュレーションを実施した。その結果、図 2 と図 3 に示すように、浸潤過程における炭酸ガスの残留状態を確認することができた。

しかし、さらに大きい $800 \times 800 \times 800$ 格子で大規模計算を行ったところ、予定のタイムステップまで計算を終了することができたものの IO に非常に時間がかかり、最終結果を得ることができなかった。

5 おわりに

3D2P-LBM プログラムの MPI による並列化を行うことで大幅に計算速度の向上を図ることができた。それによって従来より大きい空隙ネットワークモデルを用いて炭酸ガスの残留状態を確認することが

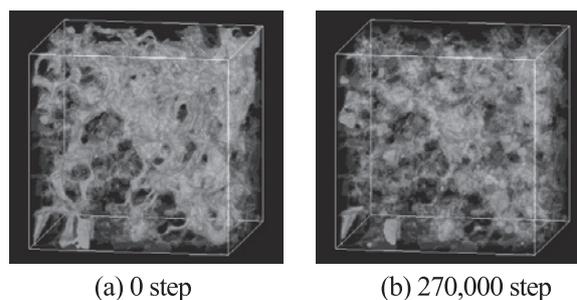


図 2 浸潤過程における CO2 残留状態 (Sample-1)

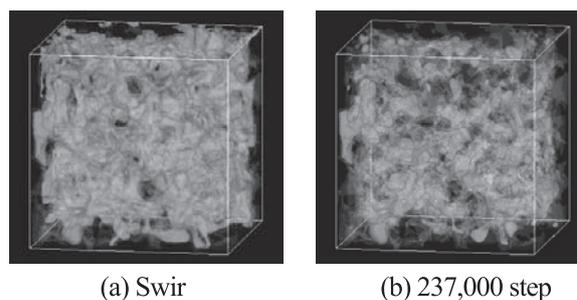


図 3 浸潤過程における CO2 残留状態 (Sample-2)

できた。しかし、さらに大きいモデルになると IO に要する時間が非常に長くなることが判明し、この点については継続してプログラムの改良を実施する計画である。

謝辞

本研究は、京都大学学術情報メディアセンターの平成 21 年度スーパーコンピュータ共同研究制度（プログラム高度化支援枠及び大規模計算支援枠）の支援を受けて実施した。また、ベレア砂岩試料およびその X 線 CT スキャナ画像は石油資源開発（株）よりご提供頂いた。記して謝意を表す。

参考文献

- 1) 経済産業省：CCS2020 我が国における二酸化炭素の分離回収・地中貯留技術研究開発の動向，http://www.rite.or.jp/Japanese/lab/choryu/ccs/ws/4_nishio.pdf (2007)
- 2) D. Grunau, S. Chen and K. Eggert: A lattice Boltzmann model for multiphase fluid flows, Phys. Fluids A, 5, 2557-2562 (1993)
- 3) S. Chen and G. D. Doolen: Lattice Boltzmann method for fluid flows, Annu. Rev. Fluid Mech., 30, 329-364, (1998)

沿岸海況予測に向けた高性能ダウンスケーリングモジュール開発

淡路敏之、 石川洋一

京都大学大学院理学研究科

1 はじめに

沿岸海域は、周辺域の住民の生活や漁業や海運業などの産業活動と密接に関わっている。このため、流動場などの沿岸海域の海況把握や予報は、社会的な重要性は高く、予測結果についての応用範囲も広い。それぞれの目的に応じた高精度な海況予測システムを構築することは、非常に重要な問題である。

このような沿岸における海況予測の応用例として、われわれのグループは（財）日本海洋科学振興財団と協力して、下北半島沖の太平洋において産業活動等に伴う人為起源物質が、海水中に放出された場合、それがどのように拡散・移行するかについての、モニタリングおよび予測を行うシステムの構築に取り組んでいる。

沿岸域における流動場などの海洋循環場の再現性向上のためには、海岸地形、海底地形を精密に再現するための十分なモデル分解能が必要である一方、下北半島沖のように外洋に面した海域では、黒潮、親潮といった大きなスケールの変動の影響を考慮した広い範囲を対象としたモデル計算が必要という、計算機負荷を考えると非常に困難な課題が存在する。このシステムではこの課題を解決するために、広い領域を粗い分解能でカバーするモデルと狭い領域カバーする高分解能モデルをダウンスケールと呼ばれる手法を用いて階層的に組み合わせしており、大きなスケールの海洋変動の影響を受けた沿岸域における詳細な変動の再現を可能とした。本課題では、沿岸域の予測をより効率よく行うために、海洋大循環モデルおよびダウンスケーリングシステムの改良を行うことを目的とする。

2 海洋大循環モデル

2.1 モデルの概要

階層的に組み合わせられたそれぞれのモデルは、われわれのグループで独自に開発されたいわゆる海洋大循環モデル(Ocean General Circulation Model: OGCM)であり、海洋変動を記述するナビエ-ストークス方程式、状態方程式、水温、塩分の移流拡散方程式などからなる偏微分方程式系を有限差分法によって離散化したものである。

並列化手法は MPI ライブラリを用いたプロセス並列とコンパイラの自動並列によるスレッド並列を組み合わせたハイブリッド並列を行っている。MPI を用いたプロセス並列ではモデル領域を水平2次元で分割し、それぞれの隣接する領域との通信が主である。

2.2 ダウンスケーリング

本システムは、北太平洋全域をカバーするモデルを最も外側のモデルとし、このモデルから順に狭い領域のより高分解能モデルへと入れ子(ネスティング)構造をとる階層的なシステムである。内側のモデルは外側のモデルの計算結果から初期条件および境界条件を受け取り計算を行っている。モデルの水平分解能は一番外側の北太平洋モデルは約 13km で、1 段階ネストするたびに 3 倍の分解能とすることにより、一番内側のモデルでは約 1.5km の分解能となっている。図 1 にダウンスケーリングシステムの概要を示す。この高度化課題では、特にこのダウンスケーリングを行うためのネスティング処理を行う部分を主なターゲットとし、並列化効率の向上を目指す。

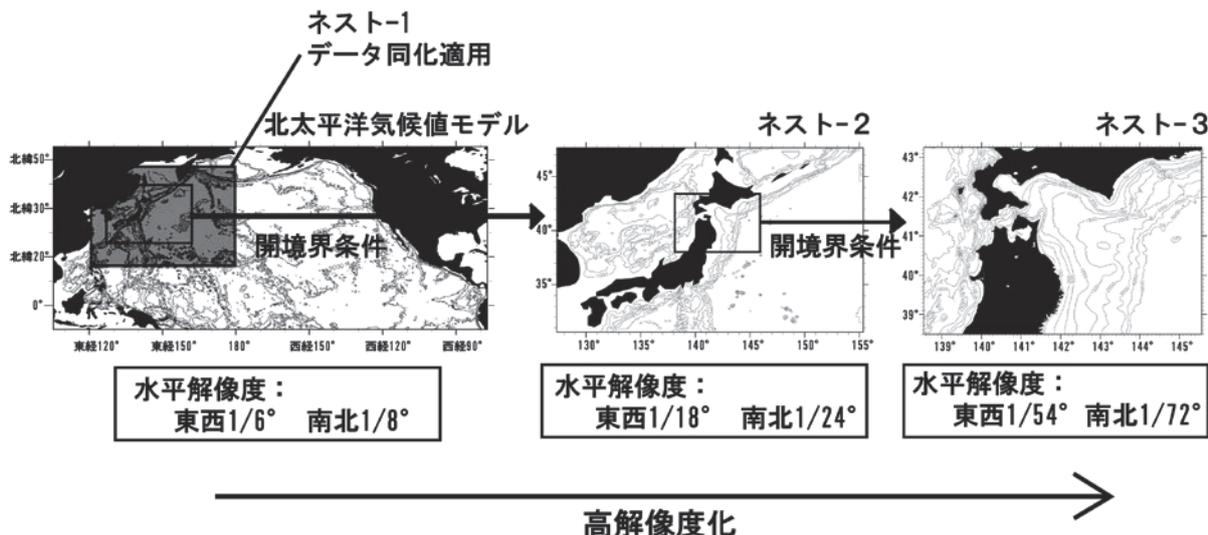


図1：ダウンスケーリングシステムの概要

3 モデルの高度化

3.1 高度化の内容

本課題における高度化として、ネスティング部の高速化および並列化効率の向上を主な目的としているが、ネスティング部と OGCM 本体において、いくつかの点において効率化を阻害している箇所が共通しているため、ネスティング部だけでなく OGCM 本体についても同時に改良を行うこととする。

ネスティング部、OGCM 本体に共通する問題点として、

- 2次元領域分割を行っているが、領域間の通信、特に WAIT 処理のコストが高い
- スレッド並列において並列間のバランスが悪い

ことが問題としてあげられる。その結果、並列数を増やしても計算速度があがらず、効率向上が望まれる。図2はネスティング部の計算速度について、プロセス数、スレッド数を変えて調べたものである。グラフが低い方が計算時間が短く高速であるが、例えば4スレッドのケースでは、16プロセスと、32,64プロセスの場合で計算時間にはほぼ違いはなく、スレッド数、プロセス数を増やしてもそれほど計算速度の向上が見られないことがわかる。

ネスティング処理 (ASIS)

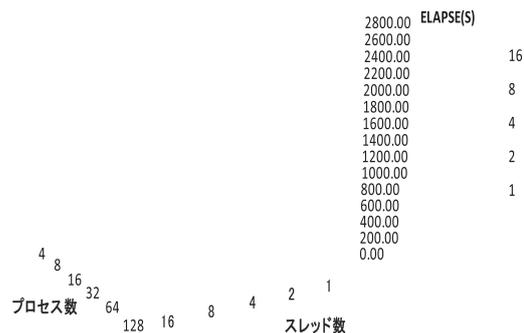


図2：ネスティング部の実行時間(改善前)

これらの問題は、ネスティング部における主要部分の空間補間を行うサブルーチンで通信コストが高く、これを改善することが必要である。

このような問題を解決するために、

- 領域間通信をまとめて行うことにより通信回数を削減し send-receive にかかるオーバーヘッドを減らす。
- 通信量に応じて Normal-send 方式と Send on Request 方式を使い分けることにより効率よく通信を行う。
- OpenMP を用いてスレッド並列を行い、スレッド間の負荷を均等化

といった高速化のための改善を行った。なおこれらの改善点はネスティング部、OGCM 本体ともにほぼ共通である。

3.2 高度化の結果

まず、ネスティング部の高速化の結果について述べる。ネスティング部の問題点として処理の主要部分である空間補間を行うサブルーチンの通信コストが高いことがあげられたが、この問題は領域間通信をまとめて行うことによりオーバーヘッドが削減され、コストが大幅に減少した。図2は改善後のネスティング部の実行時間を示したものである。

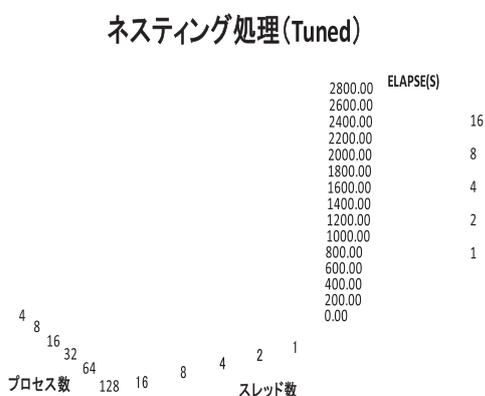


図3：ネスティング部の実行時間(改善後)

改善の結果、プロセス数、スレッド数が増えるに従って、計算速度は順調に向上し、並列化の効果が十分に発揮されるようになった。特に、32プロセス 8スレッド(256 並列)時の計算時間は改善前568.4秒から改善後には270.2秒と半分以下に短縮され、大きな改善の効果が見られた。この改善は主にWAIT処理の軽減とスレッド間の負荷分散がうまくいったことによるものであり、特に通信回数を約40分の1に減らしたことにより通信時間は6分の1に減少したことが大きく効いている。

同様な改善をOGCM 本体に対しても行ったところ、並列化効率が改善し、改善前と比べ約1.5倍の高速化が達成された。

4 まとめ

沿岸域に海況予測のための海洋大循環モデルおよびダウンスケーリングシステムを改良し、並列化効率の向上による高速化を行った。その結果、特にダウンスケーリングにおいて主要な役割を果たすネスティング部において128並列時の計算速度が2倍以上になり、並列化時のスケーリングについても大幅に向上した。このように計算速度が向上するだけでなく、並列化時のスケーリングが改善されたため、より大きな並列数の計算を行うことができるようになり、広範囲をカバーした沿岸域の高分解能モデルを構築することが可能となることが期待できる。

さらに、沿岸域の海況予測を行う際には観測データと数値モデルを組み合わせたデータ同化が有効であるが、その計算負荷は数値モデルに比べて非常に高い。しかしながら、今回行った効率化はデータ同化に対しても有効であるため、沿岸域におけるデータ同化システムを構築する際にも役に立つものである。実際、現在構築中の北海道南部の噴火湾領域を対象にした沿岸域のデータ同化/予測システムにおいても今回行った数値モデルの改良は効果的であり、高い波及効果が見られた。

今後、モデルの高分解能化や広領域化にむけて、さらなる計算速度の向上や並列化効率の向上が必要であると思われるが、そのためには単なる並列処理や負荷バランスの改善だけでなく、演算法やアルゴリズムの改良も行っていく必要があると考えられる。

次世代の宇宙航行推進システム開発のための評価ツール

「3次元ハイブリッド粒子コード」の高性能化

梶村 好宏

宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 宇宙科学情報解析研究系

1 はじめに

本研究課題の目的は、次世代の宇宙航行システムとして期待される「磁気プラズマセイル」(Maneto plasma Sail:以降 MPS と記述)の性能(推力)を、3次元ハイブリッド粒子コードを用いて評価するに際し、評価に用いるシミュレーションプログラムの並列計算のパフォーマンスを向上させることである。

MPS は、宇宙機に搭載したコイルが作る小規模な磁気圏を、宇宙機からのプラズマ噴射によって広範囲に拡大する。そして、高速のプラズマ流である太陽風を拡大磁場で受け止め、電磁気学的に推進力を得る。図1にMPSの概要図を示す。MPSの研究および開発は、JAXAが中心となって実施している実証衛星打ち上げに向けた地上実験に加え、実パラメータ(太陽風や惑星間磁場など)を用いた数値解析による高精度な性能評価が求められている。MPSの性能評価は、プラズマ噴射による磁気圏拡大プロセスや、太陽風と拡大磁気圏との相互作用を詳細に解析する必要がある。さらに、それらを同一の系で評価する為に、宇宙機近傍(メートルオーダー)からの高密度なプラズマ噴射と、噴射プラズマによって拡大された磁気圏と太陽風との相互作用(キロメートルオーダー)を統合的に解析する必要があり、大規模な解析格子が必要、かつ単位格子あたりの粒子数も数値的なノイズを低減させ、適切な評価を行うためには百個オーダーの数が必要となる。よってエンジニアリングツールとして実用に耐えうる性能をもつためには、ツールの高性能化が必須である。



図1: 磁気プラズマセイル概要図

2 解析手法

MPSでは、太陽風や噴射プラズマのイオンダイナミクスによる現象が支配的と考えられ、イオンを粒子として扱う本ハイブリッド粒子モデルが性能評価へのコストパフォーマンスに優れ、大規模解析に向けたツール開発が必須となっている。以下に計算のおおまかな流れを示す。

- [1] 磁場、プラズマの粒子位置、速度の初期設定を行う。その上で電磁場を決定する。
- [2] 格子点上でのイオンの数密度、電流密度をプラズマ粒子の情報から計算する。
- [3] 電場を計算する。
- [4] [1]で設定した磁場と、[3]で求めた電場から、プラズマの運動方程式に基づいて新たなプラズマ粒子の位置、速度を求める。
- [5] サブステップにより電場と磁場の時間変化を計算する。
- [6] [2]~[5]を繰り返し、プラズマの時間変化を

追う。

本課題では、ハイブリッド粒子コードの高度化・高性能化に向けた調査によって明らかとなった並列化効率向上を阻害している要因を改善する。また、本コードの特徴でもあるプラズマの低密度領域における電界計算法について改良を行う。具体的には、電界計算を行うラプラス方程式 (SOR 法によって求解) の並列化に、マルチカラー (4色) SOR 法を採用する。これらの改良により、ノード内スレッド並列化チューニングが施された3次元ハイブリッド粒子モデルを用いた計算が高精度、高速に実施可能となり、MPS の定量的な推力評価が実現可能となる。

3 高度化後の性能評価

本研究課題では、はじめに高度化に向けたプログラム分析を実施し、高度化手法に関する検討および問題点の把握を実施した。コンパイラによる自動並列化のみを用い、16スレッドを用いた並列計算を実施した。その結果から、以下の問題点が挙げられた。(1) 自動並列化効果がほとんど出ていない。(2) 特定モジュールに負荷が集中している。(3) L2 キャッシュミスが目立つ。これらの問題点に対し、本プログラムのチューニング課題として、下記4点について検討を実施し、コードの改良を実施した。

(1) 自動並列化のみでは限界であるため、OpenMPによる並列化を検討する。並列化アルゴリズムは、マルチカラー(4色)SOR法を採用し、現状の処理を並列化可能な処理に改造する。但し、磁場計算処理を行っている部分については、回帰処理を含まないアルゴリズムに変更する。

(2) リストアクセス構造に対して、自動並列では依存関係を認識できないので、指示行により依存関係のない事を知らせる。

(3) 粒子密度、電流密度配列へのスレッド間の足し込み計算の回帰処理を領域分け等により並列性を持たせ並列化する。

(4) L2 キャッシュミスが多いため、配列融

合、ループ融合化し、配列アクセスストライドを1にできるようにする。対象となるのは、粒子計算、電場計算、磁場計算で使用しているx、y、z方向成分の配列について、必ず同時に計算している処理部の配列を統合する。これによりL2キャッシュミスを低減できる。

上記の改良を実施後、チューニング前(ASIS)と後(TUNE)の本プログラムについて、スレッド並列数を変更して実行し、図2に示したような並列台数効果が得られた。逐次処理時を基準とした場合、チューニング前は16スレッドでも全くスレッド並列台数効果が出ていなかったが、チューニング後には16スレッドで5.39倍とスレッド並列台数効果が出ている。

本コードの高性能化において、逐次処理時を基準とした場合、チューニング後のスレッド並列台数効果が16スレッドで5倍程度しか向上しなかった要因として、メモリアクセスが多いParticleルーチン(粒子の位置、速度計算)内で、間接配列アクセスによりキャッシュミスが多発していること、キャッシュミスがスレッドによって様でないため負荷バランスの劣化を招いていることが挙げられる。本問題に対する改善策としては2点存在し、1点目は、MPI並列化が挙げられる。2点目は、粒子座標のソートにより、キャッシュミスを減少させ、逐次性能改善及びスレッド並列処理の負荷バランス改善が見込まれる。

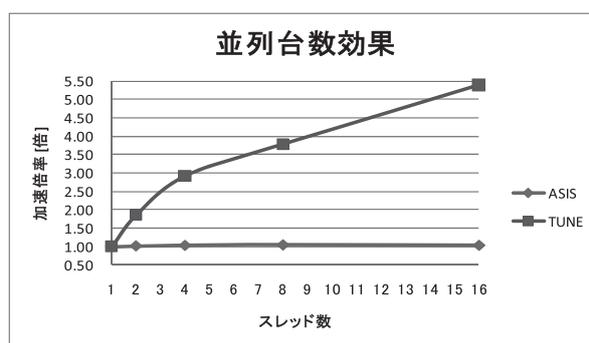


図2: チューニング後の並列台数効果

1点目の改善については短期間では容易ではなく、コストも要することから、2点目の粒子座標のソートによってキャッシュミスを低減させる改善を実施した。具体的には、粒子の座標(X,Y,Z)をZ方向について、計算のタイムステップの100回に

1回ソーティングを実施し、各格子点の電磁場計算の1ループに対して、必要な粒子の情報をキャッシュ内に収めることができるようにした。図3の矢印の先に粒子座標のソートにより台数効果が向上した結果を示す。図では16スレッドの計算に対し、約16倍に向上した結果となっているが、基準となる1スレッドの結果については、粒子座標のソートを実施した結果ではないことから、純粋に16スレッドを用いて16倍に向上しているわけではない。いずれにしても、粒子ソートによって計算速度の高速化が実現されたことは確かである。

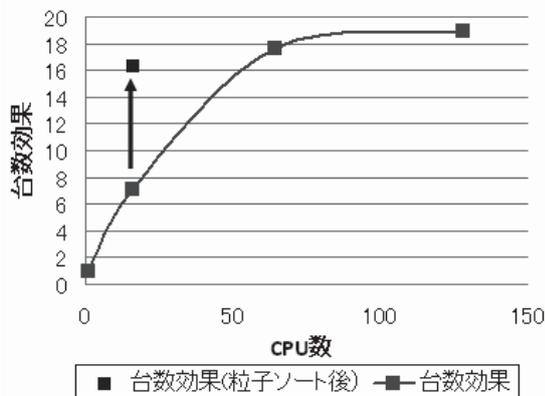


図3：粒子の座標ソーティング実施後の結果

4 磁気プラズマセイルの数値解析結果

上記の改良コードを用い、MPSが動作する実パラメータ（イオンスケール：代表スケールがイオン慣性長（=100km）程度）における数値解析をイオンの粒子効果を考慮して実施し、得られる推力の定量的評価を実施した。解析モデルを図4に示す。コイルに流れる電流によって作られるダイポール磁場を解析体系の中心に配置する。コイルの磁気モーメントの方向は、太陽風方向（図4の-Z方向）とした。解析領域全体に、太陽風イオンをランダムな位置に配置し、太陽風の速度（+Z方向）、密度、温度を与える。時間の経過ごとに-Z方向から+Z方向に向けて太陽風イオンを境界から注入する。さらに、ダイポール磁場の中心近傍から、等方的にプラズマを噴射し、ダイポール磁場、噴射プラズマ、太陽風プラズマの相互作用を時間発展させ、定常時の評価を行う。噴射プ

ラズマについては、噴射位置における β_{in} （噴射プラズマ圧/磁場圧）をコントロールパラメータとして、MPSが得る推力傾向を評価した。解析に用いた格子点数は、800万（ $200 \times 200 \times 200$ 、3次元）であり、格子あたりの粒子数を125個とした。（総粒子数10億個）この時の使用メモリは215GBであり、解析には64CPUを用い2週間の計算を実施した。（先の改良前後の性能比較で5倍程度の性能向上が確認できていることから、計算時間は10週間→2週間に短縮できたものと考えられる。さらに粒子座標によるソーティングにより計算時間は約半分（1週間）になった。）

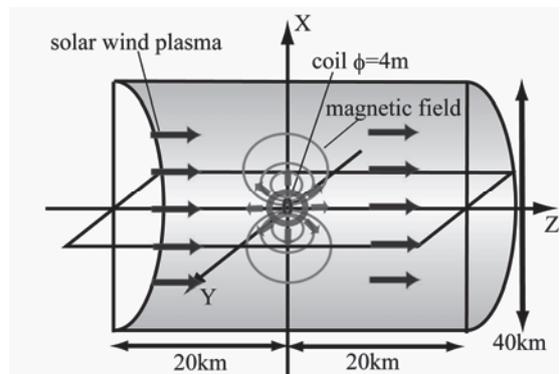


図4：MPS解析モデル図

イオン慣性長スケールにおけるMPSの全系解析（プラズマ噴射によるダイポール磁場の拡大、拡大された磁気圏と太陽風との相互作用を統合した解析）の推力評価を実施した結果、推力の増分を磁気圏拡大によって得るためには、噴射位置において、低 β_{in} （噴射プラズマ圧/磁場圧 < 1 ）のプラズマを噴射することが必要であり、磁気圏境界に生じる誘導電流（推力の発生源）を打ち消さないように磁気インフレーション（プラズマ噴射）を行う必要があることが分かった。これは、先のMHD（電磁流体近似）モデルを用いた検討結果と同じ傾向を示している。図5、6に解析結果を示す。図5は、MPSがターゲットとする磁気圏サイズ（代表長さが2km程度）のダイポール磁場に太陽風プラズマが相互作用し、ほぼ定常状態となった際の磁束密度コンターを示した図である。また図6は、図5で示した解析と同じ条件で、コイル中心近傍から等方的にプラズマを噴出し、磁

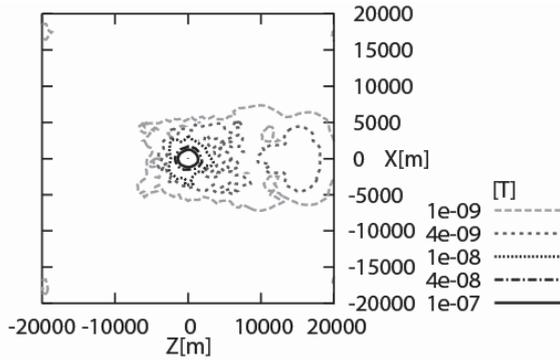


図5：MPS 解析結果：磁束密度コンター図（宇宙機からのプラズマ噴射が無い場合）

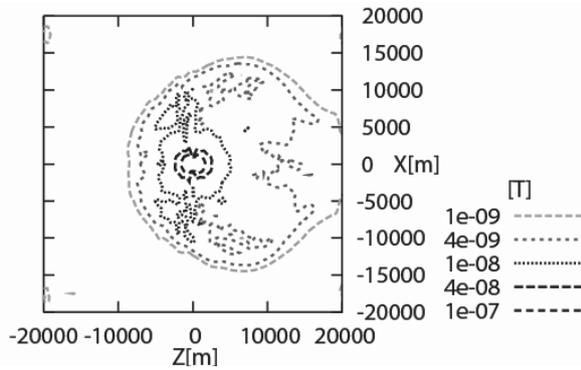


図6：MPS 解析結果：磁束密度コンター図（宇宙機からのプラズマ噴射を行った場合）

気圏を拡大させた際の磁束密度コンター図である。図5と比較し、プラズマ噴射によって磁気圏が拡大されていることが確認できる。推力の定量的な評価については、探査機からの理想的な等方噴射を仮定し、磁気圏拡大のためのプラズマを噴射する以前と比較して、最大で8倍程度の推力増分が得られることを示した（この時の β_{in} 値は0.4）。図7にMPSが得る推力の時間履歴を示す。

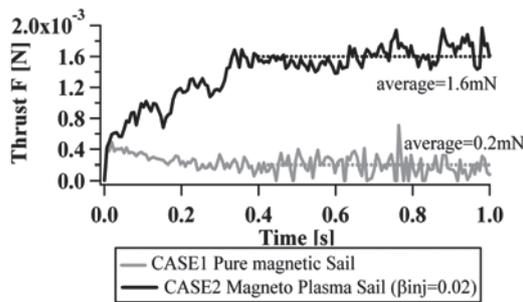


図7：MPS 解析結果：得られる推力の時間履歴

今後、噴射プラズマの β_{in} の値をコントロールし、推力が最大となる噴射パラメータの最適化を実施し、MPS の設計へのフィードバックを行う。また、噴射近傍の解析格子を細分化し、予測推力の精度を向上させるとともに、MPI 並列化を実施し、さらなる高度化、高性能化を実現したいと考えている。

謝辞

本研究を実施するに当たり、平成20年度、21年度スーパーコンピュータプログラム高度化共同研究支援事業に採択いただき感謝申し上げます。またプログラムの性能向上を実施いただきました京都大学学術情報メディアセンターの関係各位に感謝申し上げます。

南海トラフ巨大地震発生サイクルの物理的理解

平原和朗¹・大谷真紀子¹・高橋康人²・堀高峰³・兵藤守³

¹京都大学大学院理学研究科・²同志社大学大学院工学研究科・³海洋研究開発機構

今後 30 年以内に発生すると危惧される、マグニチュード (M) 8 クラスの次期南海トラフ巨大地震の発生予測に向けて、地震発生シミュレーションが行われようとしている。過去の歴史地震を再現する摩擦パラメータを推定し発生予測に繋げるには、コードの高速化が必須である。また、最近発見された長期的・短期的ゆっくり地震や低周波微動の活動は、次期南海トラフ巨大地震発生の指標になる可能性がある。更に 1707 年宝永地震はその震源域が足摺岬を超えて日向灘に達していた可能性がある。このように駿河湾から日向灘におよぶ広い領域で、ゆっくり地震の活動まで再現する、南海トラフ巨大地震発生シミュレーションは、大規模・マルチスケールシミュレーションとなり、膨大な計算時間とメモリを要する。この点からもコードの高速化・省メモリ化が必須である。一昨年度からプログラム高度化支援事業に採択され、コードの高速化・省メモリ化に取り組んでいる。昨年度は Hierarchical-Matrices 法を試みたので、概要を報告する。

1 はじめに

西南日本では、南からフィリピン海プレートが南海トラフ沿いに沈み込み、100-200 年の間隔で繰り返し巨大地震が発生している。震源域は、東から東海・東南海・南海セグメントに分かれ、3 セグメント連動破壊 (1707 年宝永地震)、および東南海・東海セグメント破壊の 30 時間後 (1854 年安政地震) ~ 数年後 (2 年: 1944 年東南海地震・1946 年南海地震) の南海セグメントの非連動破壊といった、再来間隔が 150 年から 90 年、東西セグメントの破壊時間差がほぼ同時から数年といったように変動している。また昭和の地震では、東海は破壊せず、東海地震は毎回破壊するわけではない。以上のように、18 世紀以降の地震だけを見ても、複雑な破壊パターンが見られる。

昭和の地震以降、60 年以上経過した今、今世紀前半中に、M8 クラスの地震が発生すると危惧されている。この巨大地震は、西南日本に大きな被害をもたらす、被害総額は国家予算規模に達すると想定されている。次期南海トラフ地震が、上記述べた連動型/非連動タイプなのか、非連動ならその時間差はどれくらいなのかによって被害状況も大きく変わってくる。

こういった中で、岩石実験から得られた摩擦構成則に基づいて、プレート運動を原動力とする地震発生サイクルシミュレーションにより、過去の地震発生履歴を再現する摩擦パラメータを求め、次期南海地震がいつ、どういった破壊様式で起きるかに迫ろうとする研究が行われている (Hori,2006)。また、最近南海トラフ巨大地震震源域の深部延長域で、通常の地震とは異なる長い時定数を持つ、長期的・短空期的ゆっくり地震や低周波微動が発見され、かつ次期南海トラフ巨大地震の発生前に前兆的な活動変化を示す可能性が指摘され、地震発生を告げる指標となる可能性がある」と注目されている (Ariyoshi et al.,2009)。

これまで震源域は駿河湾から四国沖に取られていた。ところが、1707 年宝永地震の震源域は日向灘に達していた可能性が指摘されたため (古村・今井,2009)、シミュレーションのモデル空間を広げる必要がある。

摩擦パラメータ推定には摩擦構成則の強い非線形性の故、何度も繰り返しフォワード計算を行う必要があり、また上記述べたように、広いモデル領域における、ゆっくり地震の活動度まで含む南海トラフ巨大地震サイクルシミュレーションとなり、膨大な計算時間とメモリを要する。このた

め、こういった大規模・マルチスケールシミュレーションは現状では困難な問題になってくる。これに応えるためには、地震発生サイクルシミュレーションのコードを高速化し、省メモリ化を図る必要がある。このため、一昨年度からプログラム高度化支援事業に採択され、高速化・省メモリ化を図っている。昨年度は Hierarchical –Matrices 法の検討を行ったので報告する。

2 地震発生サイクルシミュレーション

昨年度の報告と重複するが、Hori(2006)に従い、シミュレーションの実際を紹介する。

まず、半無限均質弾性体を仮定し、その中にプレート境界を設定する。プレート境界を小さなセルに区切ると、各セル i での準静的運動方程式は次のように書ける。

$$\tau_i(t) = -\sum_j K_{ij} (\delta_j(t) - V_{pl,j} t) - \frac{G}{2\beta} V_i(t) \quad (1)$$

ここで、 τ_i , V_i , δ_j , $V_{pl,j}$, K_{ij} , G , β は、それぞれ、セル i でのせん断応力、すべり速度、セル j でのすべり、プレート収束速度、セル j での単位すべりによるセル i での応力変化 (すべり応答関数)、剛性率、S 波速度である。これと、速度と状態に依存する摩擦則のうち、composite law (Kato and Tullis, 2006)

$$\tau_i(t) = \sigma_i \left[\mu_* + \Theta_i(t) - a_i \ln \left\{ V_* / V_i(t) + V_* / V_s \right\} \right] \quad (2)$$

$$\frac{d\Theta_i(t)}{dt} = \frac{b_i V_{pl,i}}{L_i} \exp \left[-\frac{\Theta_i(t)}{b_i} \right] \exp \left[-\frac{V_i(t)}{V_c} \right] - \frac{V_i(t)}{L_i} \left[\Theta_i(t) - b_i \ln \left\{ \frac{V_{pl,i}}{V_i(t)} + \frac{V_{pl,i}}{V_s} \right\} \right] \quad (3)$$

を連立させて各プレート境界セルにおけるすべりの発展をシミュレートする。実際には、式(1)と(2)を時間で微分し連立させ、速度の時間微分を得て、これを式(4)と連立させて、時間刻み幅可変の 5 次 Runge-Kutta 法により積分している。

ここでの変数の詳細は Hori(2006)に譲るが、式(2)のように摩擦がすべり速度 V_i と状態変数 Θ_i (その時間発展は式(3)に従う) との関数となっており、 σ_i は法線応力で、式(2)の右辺第 2 項は摩

擦係数となっている)。速度と状態に依存する摩擦構成則と言われる所以である。また、ここで、

a_i, b_i, L_i は、各セル i に与える摩擦特性をコントロールするパラメータで、前者 2 つのパラメータの差が正 (負) だと速度強化 (速度弱) を示し、すべり速度が増すと摩擦が増える (減少する)。

実験データから、これらのパラメータは温度 (すなわち深さ) に依存を示すパラメータであることが分かっている。通常、沈み込み帯での温度構造を考慮して、プレート境界の地震発生域の深さに負の値を、浅部と深部の安定すべり領域に正の値を与えるといったように、主として深さ方向に摩擦パラメータの分布を与え、シミュレーションを行っている。

また、Hori(2006) に見られるように、南海トラフ巨大地震の複雑な発生履歴を再現するためには、3 つの破壊セグメントに対応させて、南海トラフ沿いに、対応する摩擦パラメータを分布させることになる。次期巨大地震の発生予測に向けて、南海トラフで実際に発生している巨大地震の発生履歴を再現するには、 L も含めてパラメータ分布のサーチが必要となり、多くの繰り返し計算を要する。

プレート境界を小さなセルに分割するが、この分割の影響が地震サイクル計算結果に影響を及ぼさないようにするには、分割サイズ h が、

$$h = h^* = cGL / \sigma(b - a) \quad (4)$$

となる必要がある (Rice, 1993) (ここで、 c は分割するセルの形に依存する定数)。通常用いられているパラメータ範囲では、セルサイズは 1km 以下となる。

式(2)と(3)から分かるように、問題の非線形性による繰り返し計算の必要性に加えて、分割セルサイズの要請から来る、セル数の多さにより、地震発生サイクルシミュレーションは、多大な計算時間とメモリを要する、大規模計算となる。

はじめに述べたように、解析領域として西は日向灘沖まで解析範囲を広げる必要がある。また、探索パラメータ領域の範囲を広げると、さらに小さな分割が必要となる。

3 プログラム高度化支援事業での検討

3.1 一昨年度での検討事項

一昨年度はまず、Hori(2006)のコード RSGDX において、並列化効率も含めてコーディングに問題がないかを検討したが、あまり改善する余地は見いだせなかった。

次に、式(2)に見られる、すべり応答関数とすべりの行列・ベクトル積

$$\sum_j K_{ij} (\delta_j(t) - V_{pl,j} t) \quad (5)$$

の部分（またはその時間微分したもの）を検討した。分割したセルの数を N とすると、これには、 $O(N^2)$ の演算回数を要する。問題の空間対称性を利用して FFT を用いて高速化することも試みられているが（例えば、Kato,2008）、南海トラフのような沈み込み帯では、深さ方向にもトラフ軸方向にも対称性を考えられないので、その適用には限界がある。

すべり応答関数行列は密行列であるので、疎行列化を検討した。すべり応答関数は距離のマイナス 3 乗で減衰し、また地震発生時以外の地震間ではすべり速度が小さいので、その積はかなりの部分で小さいと想定される。そこで、ある閾値を設け、積の絶対値が閾値より小さい項をゼロとにおいてシミュレーションを実行したところ、地震が発生しなくなるなど、問題があることが分かった。これは、小さな値でも多くのセルからの寄与があるので無視できないことを意味している。

3.2 Hierarchical-Matrices 法適用の検討

昨年度は、式(5)またはその微分である、すべり応答関数行列とすべり欠損ベクトルの積の高速手法として、Hierarchical-Matrices (H-matrices) 法（例えば、Bebendorf and Rjasanow,2003）の適用を検討した。

H-matrices 法は、密行列のデータを効率的に圧縮する表現方法である。与えられた密行列を階層構造を有するいくつかの小行列に分解し、もとよりも低いランクを有するマトリクスによってその小行列を近似する。この階層構造に基づいて、

加算や乗算といった行列演算、逆行列、前処理などの近似計算を、 $O(N)$ や $O(N \log N)$ の演算量で実行する。この方法は、高速多重極法 (FMM) に比べて、すべり応答関数の形に寄らなくても適用できるので、例えば、不均質弾性体中や、不均質粘弾性媒質中での地震発生サイクル計算にも有効である。

具体的には、式(5)の K_{ij} の密行列にマックスプランク研究から提供されているサブルーチンパッケージ HLib を適用し、H-matrices 作成プログラムと、作成された K_{ij} の行列に相当する supermatrix を入力として、行列—ベクトル積演算を高速に実行するように組み込んだ Runge-Kutta 法による RSGDX 本体プログラムの、2 段階構成として実行する。現状のバージョンでは、1 段階目の H-matrices 作成コードは並列化されていないが、2 段階目の RSGDX 本体のコードは並列化されている。

半無限均質弾性媒質中に傾斜角 10° の平面プレート境界 (600x240km) を設定し、 $N=32,000$ 個の 3 角形セルに分割した際のすべり応答関数行列を例に、H-matrices 作成の手順を述べる：

- 1) セル番号の並び替え：できるだけ距離の近いセル同士が連なるように、セル番号を並び替える。
- 2) η -admissibility 条件 ($\min\{\text{diam}(\mathbf{Q}_r), \text{diam}(\mathbf{Q}_s)\} \leq \eta \text{dis}(\mathbf{Q}_r, \mathbf{Q}_s)$) による小行列への分割： $n \times n$ 小行列 \mathbf{M} の n 個のレシーバおよび n 個のソースセルに対応する領域 (\mathbf{Q}_r および \mathbf{Q}_s) の大きさを $\text{diam}(\mathbf{Q}_r)$, $\text{diam}(\mathbf{Q}_s)$ 、領域間の距離を $\text{dis}(\mathbf{Q}_r, \mathbf{Q}_s)$ とすると、この条件を満たしていなければ、 \mathbf{Q}_r と \mathbf{Q}_s 領域は近いとして更に小行列へ分割し、最小セル数 n_{\min} になるまで分割を続ける。
- 3) 低ランク行列での近似：各 $n \times n$ 小行列をランク $k (< n)$ の $n \times k$ 行列 \mathbf{A}, \mathbf{B} で $\mathbf{M} = \mathbf{A}\mathbf{B}^T$ のように近似する。この際、相対近似精度 ϵ_{ACA} を満たすようにランク k を決める (ACA : Adaptive Cross Approximation 法)。
- 4) 再圧縮：更に各小行列の特異値 (σ_i) を計算し、 $\sigma_i < \epsilon \sigma_1$ に対する小さな特異値を除きランクをさらに下げる。

このようにして得られた H-matrix が図 1 で、分割された小行列内の数字はその小行列を近似したランクを示す ($\epsilon = 10^{-4}$, $\epsilon_{\text{ACA}} = 0.9 \epsilon$)。

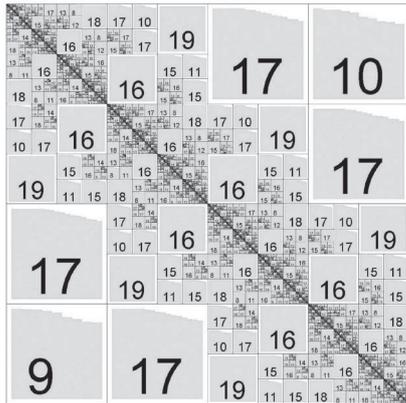


図1 H-matrix 表現の例(N=32,000、 $\epsilon = 10^{-4}$)

ある摩擦分布に対して、 $N=32,000$ でオリジナル RSDGX プログラムによる結果と比較したところ、 ϵ は 10^{-4} 以下の必要があることが分かった(大谷・他,2010)。

セルを分割して、様々な N と ϵ に対し、メモリーサイズと行列・ベクトル積に要する計算時間がどう変わるかを示したものが、図2である。示していないが、 $N=32,000$ でのオリジナルのメモリー量は、約 10GB であり、 $O(N^2)$ で増加する。これに対し、 $\epsilon = 10^{-4}$ 以下では $O(N)$ で増加している。計算時間は最初は $O(N)$ であるが $N=2 \cdot 3 \cdot 10^5$ 程度で急激に増加する。この時、図1に示した H-matrix の外側の小行列のランクが大きくなっていることが分かった。このランクを抑えることで、精度を保ちながら、 $O(N \log N)$ に抑えることが可能でありそうで、検討中である(大谷・他,2010)

色々な制御パラメータに適切な値を用いる必要があるが、このように、H-matrices 法は非常に有力な手法である。

謝辞：センターの中島・岩下両氏、富士通には、高度化支援事業中ご支援をいただいた。謝意を表します。

4 参考文献

Ariyoshi, K. et al., Gondwana Res., 16, 534–544, 2009.

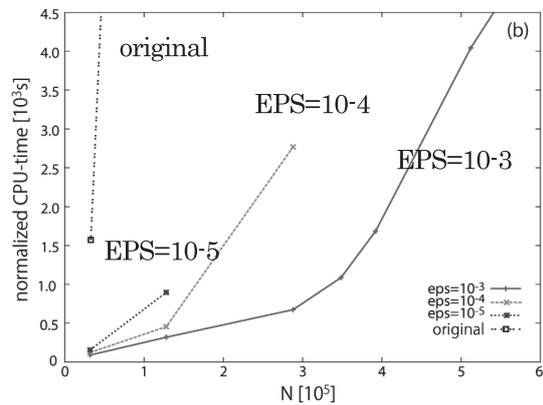
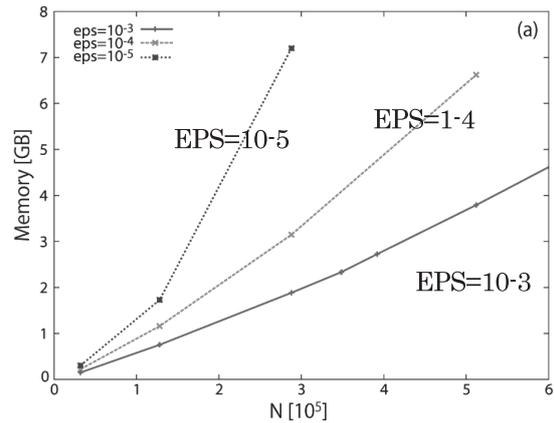


図2 N と ϵ に対するメモリー量と行列・ベクトル積の計算時間

Bebendorf, M. and S. Rjasanow, Computing, 70, 1-24, 2003

古村孝志・今井健太郎：日本地震学会 2009 年秋季大会、京都、2009.

HLib: <http://www.hlib.org/hlib.html>

Hori, T., J. Earth Simulator, 5, 8-19. 2006.

Kato, N. and T.E. Tullis, Geophys. Res. Lett., 26, 643-696, 2001.

大谷・他、日本地震学会 2010 年秋季大会、広島、2010.

Rice, J.R., J. Geophys. Res., 98, 9885-9907, 1993.

宇宙プラズマ中におけるミラー不安定性の非線形発展の研究

小路 真史

京大大学生存圏研究所

1 はじめに

我々人類がその生存圏を宇宙へと広げるために、地球近傍の電磁環境を知ることは、非常に重要である。太陽圏に存在する地球を初めとした惑星は、太陽から絶えず吹き付けられる太陽風という磁場を伴った高温のプラズマ流にさらされている。地球は固有の磁場を持っており、これと太陽風が相互作用することによって地球近傍に磁気圏と呼ばれる様々な興味深い電磁気現象が観測される領域が形成される。その中で、昼側(太陽側)にできるショック波(バウショック)と地球の固有磁場が支配的となる領域の間にマグネトシースと呼ばれる領域が存在する。ここでは、亜音速となった太陽風プラズマ中のイオンが背景磁場に対して垂直な方向にのみ加熱され、平行な方向と垂直な方向で温度が異なる分布を持つ。このような分布は不安定であり、電磁場の変動を伴ってその分布を持つ粒子の熱エネルギーを別のエネルギーに変換しようとする。古くから検討されている線形理論によると、イオンの温度異方性によって励起されるのは L モード電磁イオンサイクロトロン(EMIC)不安定性とミラー不安定性と呼ばれる二つの不安定性であり、それぞれ EMIC 波、ミラーモード波と呼ばれる特徴的な電磁場に、イオンの温度異方性のエネルギーを変換する現象である。これらの電磁波とイオンの波動粒子相互作用を理解することは、マグネトシースで起きる電磁環境を理解するうえで重要である。

二つの不安定性のうち、線形理論においては EMIC 不安定性が有利であると考えられていたが、実際の人工衛星による観測では、ミラーモード波ばかりが観測されてきた。この矛盾を解き明かすためには、第一原理に従った大規模宇宙プラズマ

シミュレーションが不可欠であると考え、本研究ではイオン・流体ハイブリッドシミュレーションによって、これらの不安定性の競合の基礎課程を再現・解析してミラー不安定性が優位に生き残る理由について検討する。また、ミラーモード波は背景磁場の数十パーセントという非常に大規模な磁場構造を形成することから、あとに残る磁場構造を理解することも重要となる。従って、不安定性によって残る最後の磁場構造についても解析を行う必要がある。

2 OhHelp 化されたイオン・流体ハイブリッドコード

2.1 イオン・流体ハイブリッドシミュレーション

宇宙プラズマは非常に希薄な電離気体であるため、無衝突であると仮定できる。無衝突プラズマ中の粒子それぞれは、電磁界を介してエネルギーをやり取りする。また、プラズマは電子と質量が約 1860 倍あるプロトン及び重イオンによって構成されている。従って、電子とイオンの時空間スケールに対する特徴的な量(サイクロトロン半径・サイクロトロン周波数など)も 1860 倍異なる。従って、両方のスケールの問題を同時に解き進めることは困難であり、イオンスケールの問題を考える際には、電子の慣性を無視したモデルで考えることができる。イオン・流体ハイブリッドシミュレーションでは、無衝突プラズマ中のイオンを粒子とし、電子を慣性を無視した電磁流体として扱う。また、電磁界についても、変位電流を無視した Maxwell の方程式を FDTD 法(Finite Difference Time Domain method) によって時間

発展を解き進める。以上、イオンの運動方程式・電子の流体方程式・Maxwell の方程式を交互に解き進めることで、イオンスケールの問題の時間発展を解きすすめることができる。

上記イオン・流体ハイブリッドシミュレーションにおいて、電磁界は離散化された格子に定義された値(オイラー量)として、粒子は運動方程式によってとき進められる連続的な変位・速度(ラグランジュ量)をもつ物として定義されている。これらを同時に解き進めるコードを総称して Particle-in-Cell コード(PIC コード)と呼ぶ。PIC コードにおいては、粒子の位置・速度情報を体積配分することで電荷密度・電流密度の情報として Maxwell の方程式に与え、逆に電磁場の情報を粒子の運動方程式に与える。

2.2 OhHelp[1]

PIC シミュレーションでは、数十億個の粒子の運動方程式を毎ステップ解き進めるため、計算時間のほぼ全てを粒子の計算に費やす。PIC コードの大規模計算を、分散型超並列計算機において効率よく実行するためには、シミュレーション空間を小領域に分割し、それぞれの小領域での計算結果を必要に応じて MPI を介してやりとりを行う「領域分割法」による並列化が必要である。しかしながら、他の流体コードなどとは異なり、PIC シミュレーションでは分割された小領域ごとに存在する粒子にばらつきが生じる。このため、小領域を担当するそれぞれのプロセスごとで計算時間に差が生じてしまい、結果的に十分な並列化効率が得られない。

そのプロセスごとに生じる負荷のばらつきを抑える OhHelp(One-handed Help)が、学術情報メディアセンター中島浩教授によりこれまでに開発された[1]。すでにこの手法は、電子、イオン共に粒子として取り扱うフル粒子コードに適用され、実際に効果があることが示されている。また、現在では OhHelp はライブラリ化され、幅広いコードに適用出来る形となっている。

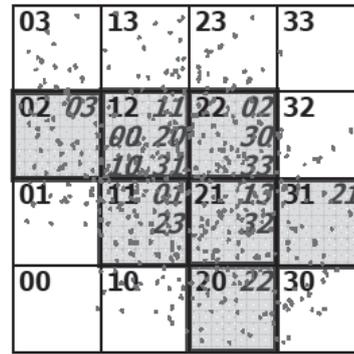


図 1:OhHelp による領域分割

図 1 に示すように、OhHelp は領域を単純に均等分割し、その分割した部分領域を各々のプロセスに「1次担当領域」として割り当てる。図 1 で、黒色の数字はプロセス番号かつそのプロセスの 1 次担当領域の番号を示す。各プロセスの 1 次担当領域にある粒子の数が均衡していれば、すなわち領域 s にある粒子の数 P_s が全ての s で次の不等式を満たすなら、それぞれのプロセスは 1 次担当領域とその中にある粒子を担当する。

$$P_s \leq (P/N)(1 + \alpha) \equiv P_{\text{limit}}$$

ここで、 P は全粒子数つまり全領域にある粒子の合計、 N はプロセスの数、 α はプロセス間の粒子数のバラツキの許容の割合を表し、0 より大きい数とする。図 1 に示すように、不等式を満たさない領域が一つでも存在するときは、OhHelp によって、2 次担当領域に粒子を分割し、担当する粒子数を平均化する。このモードでは一つのプロセス(図 1 では 12 番)を除く全てのプロセスは、平均より多くの粒子が存在している領域を一つだけそれぞれの 1 次担当領域と共に担当する。例えば、図 1 において領域 22 は、青色で示されるプロセス 02, 30, 33 の「2次担当領域」であり、これらのプロセスは領域 22 に存在する粒子の計算を分担する。すなわち粒子数が平均よりも大きな 1 次担当領域を持つプロセスは、その領域を分担するプロセスに粒子の一部を「2次担当粒子」として委譲することで、自身が担当する粒子数を他のプロセスの担当粒子数と均衡させる。

図 2 に OhHelp 化したイオン・流体ハイブリッドシミュレーションの構造を示す。この図では、OhHelp が適用されるシミュレーションコードは領域分割がされており、メインループは主に、

粒子位置更新、粒子転送、電荷・電流密度計算、電磁場計算の4つの要素で構成されている。

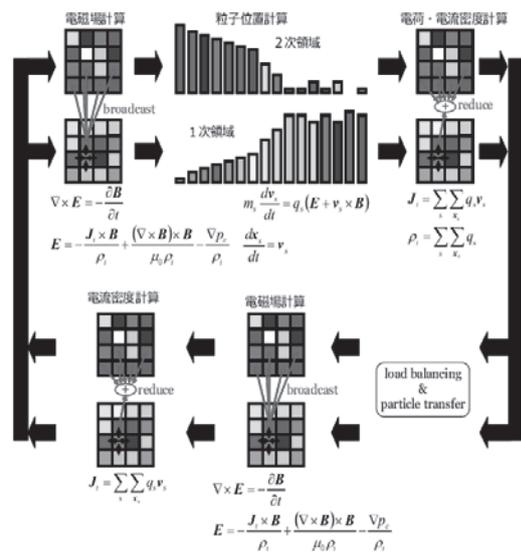


図2: OhHelp 化した粒子・流体ハイブリッドシミュレーションの構造

3 研究の目的

本研究の目的は、地球マグネトシースにおける L モード電磁イオンサイクロトロン(EMIC)不安定性とミラー不安定性の競合関係及び非線形発展の定量的解析である。線形理論解析では、L モード EMIC 不安定性が優位に成長できると考えられているが、実際の観測ではミラー不安定性が支配的に存在する。この矛盾およびミラー不安定性の非線形発展による磁場構造合体、そしてマグネトシースにおける粒子と電磁波のエネルギー変換過程は未解決問題である。これらの問題は理論計算での解析は不可能であるため、大規模計算機実験によってこれらの問題の解析を行う。3次元ハイブリッドコードを利用することで実際のマグネトシースを再現し、内部の磁場構造や波動粒子相互作用を解析することが可能となるため、先に述べたような未解決問題の理解に貢献できる。本研究では、負荷バランス手法である OhHelp をハイブリッドコードに適用し、T2K マシンをはじめとした負荷分散型のスーパーコンピュータにおいて高い計算効率が得られるようにし、これまで困難であった大規模かつ高解像度のシミュレーションを行い、ミラー不安定性の非線形発展を定量的に解析することを目的とする。

4 研究の成果

4.1 負荷分散

学術情報メディアセンター中島研究室との共同研究によってハイブリッド粒子シミュレーションコードへの移植を行った。ハイブリッドシミュレーションは、(1) 粒子速度・位置更新、(2) 電流・電荷密度計算、(3) 電磁場更新の段階から成り立っている。OhHelp アルゴリズムでは、分散メモリ環境で実行され領域が分割されているとともに、粒子配置による負荷を均衡するために各プロセスは2つの部分領域を計算する。これを実現するために(1) データ構造の二重化、(2) 電磁場・粒子計算の二重化、(3) 部分領域間通信の追加、(4) 負荷均衡機構の追加を行い、OhHelp を実装したコードが正しく動作することを確認した。また、すでに OhHelp を適用して良好な結果が得られている全粒子シミュレーションに比べ、ハイブリッドシミュレーションは電磁場の計算負荷が相対的に大きいと、上記の実装では計算と通信のバランスの大幅な見直しを行った。特に Cyclic Leapfrog 法による電磁場計算に関する、通信回数削減と計算量増加のトレードオフポイントを見出すことが可能な設計とした。さらに実用的なシミュレーションに不可欠な、スナップショットやダンプファイルの出力方式も検討し、並列 I/O を用いて並列性能と利便性の両立を図る設計・実装を行った。粒子をシミュレーション空間中に均一に分布させた場合の性能評価の結果を図3に示す。256 プロセスでの実行で 241・456 倍の台数効果が得られることを確認した。また、電磁場計算では通信回数を削減するより計算量増加を抑える方がより効果的であること、およびスナップショットと Weak/Strong Scalability との関係が明らかになった。さらに、Strong スケーリングにおいては、1024 コアまでリニアな台数効果を得ることができた。また、不均一な粒子配置においても、性能劣化がほとんど起きなかったことが確認された。

4.2 ミラー不安定性と EMIC 不安定性の競合過程

2次元、3次元シミュレーション結果の比較に

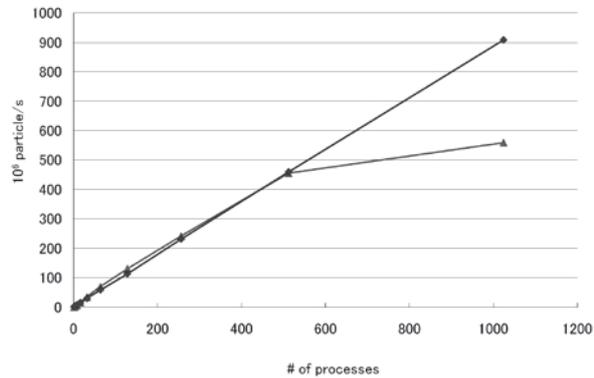


図 3: OhHelp 化されたイオン・流体ハイブリッドシミュレーションのスケール性能。青線、赤線それぞれは均等な粒子配置における weak スケール性能、strong スケール性能を表す。

より、背景磁場に対して斜め方向に波数ベクトルをもつミラーモード波が、平行方向伝搬の L モード EMIC 波よりも 3 次元空間においてより多くのエネルギーを得ることがわかった。これは、空間的に斜め方向のモードの方が 3 次元空間でより多く存在することが原因であり、結果的に線形成長理論で示唆される成長率が小さいにも関わらず、大きく成長することとなる。また、それぞれの非線形発展段階において、EMIC 波は背景磁場に対して平行方向に静電ポテンシャルを形成するため、イオンが加熱され、EMIC 波はエネルギーを失う。一方、ミラーモード波は大きな電場成分を持たないため、プラズマとのエネルギーのやり取りを行わず、長くその磁場構造を空間中に残すことが明らかとなった[2]。さらに、重イオンプラズマとして He⁺⁺(アルファ粒子)をプロトンに対して 4% 仮定したところ、EMIC 波が重イオン加熱を起こし、非線形段階においてより強く減衰することが明らかとなった。

また、2 次元モデルと 3 次元モデルにおいて残るミラーモード波の磁場構造を比較したところ、2 次元モデルにおいてはローカルに磁場が非常に小さくなる magnetic dips と呼ばれる特異な磁場構造が形成され、3 次元モデルにおいては図 4 に示すとおり magnetic peaks と呼ばれる構造が支配的に存在することが明らかとなった。

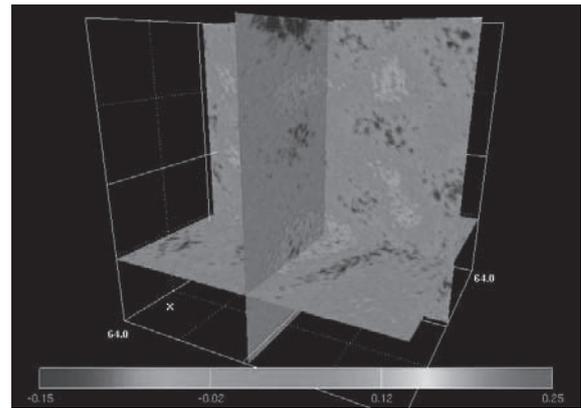


図 4: 3 次元モデルにおけるミラーモード磁場構造

5 まとめと今後の課題

イオン・流体ハイブリッドコードが OhHelp 化されたことによって、従来 2 週間ほどかかっていた大規模計算が約 2 日で終了するまでに高速化された。本共同研究によって OhHelp 化されたイオン・流体ハイブリッドコードを利用し、ミラーモード磁場構造のパラメータ解析や高解像度磁場構造解析へと応用していく。

6 参考文献

[1] H. Nakashima, Y. Miyake, H. Usui and Y. Omura, OhHelp: A Scalable Domain-Decomposing Dynamic Load Balancing for Particle-in-Cell Simulations. In Proc. 23rd Intl. Conf. Supercomputing, pp. 90–99 (2009).

[2] M. Shoji, Y. Omura, B. T. Tsurutani, O. P. Verkhoglyadova and B. Lembege, Mirror Instability and L-mode Electromagnetic Ion Cyclotron Instability: Competition in the Earth's Magnetosheath, J. Geophys. Res., 114, A10203, doi:10.1029/2008JA014038 (2008).

有限温度密度行列繰り込み群法を用いた強相関電子系の動的性質の研究

遠山貴己

京都大学基礎物理学研究所

1 はじめに

物性物理学の基本問題の一つとして、クーロン力によって強く相互作用する電子をもつ凝縮系をどのように記述するかという問題がある。これを強相関電子系の物理と呼んでいる。この物理を理解するため、電子が結晶格子の上にあるとする格子模型から出発する。物理量の振る舞いは結晶格子の次元性に依存する。特に一次元系では、電子の運動領域の制限や一次元系特有の量子効果により、様々な物理量に異常な振る舞いが現れる。

本研究では、有限サイズの一次元格子系を考え、それを記述する量子力学的ハミルトニアンに対して動的密度行列繰り込み群と呼ばれる手法を適用し、有限温度(絶対零度も含む)での各種物理量の動的性質(振動数に依存したスペクトル)を計算する。具体的な模型・物理量は

- (1) 電子・格子相互作用を含んだ一次元モット絶縁体の光学吸収スペクトル
- (2) フラストラーションを持つジグザグ梯子形 XY 模型のカイラリティ相関スペクトル

である。両課題ともに絶対零度での計算は一部行われているが有限温度での計算はない。大規模計算により、絶対零度とともに有限温度におけるスペクトル計算を実行することで上記課題に対する新しい知見を得ることを目指した。

2 有限温度密度行列繰り込み群法 [1]

絶対零度における密度行列繰り込み群法(DMRG)では、密度行列を構成するためのターゲット状態として基底状態を採用する。もし、ターゲット状態としてすべての固有状態を取り扱うことができれば有限温度の計算はすべての温度領域

において厳密に行える。しかし、それは不可能であるため、絶対零度での計算と同じ形式を保ちつつ有限温度での計算可能な DMRG 法を 2008 年に開発した。温度 T 、その逆温度を β とするとき、単一ターゲット状態として以下の形を考える。

$$|\tilde{\xi}\rangle \equiv e^{-\beta\hat{H}/2} |\xi\rangle = \sum_{n=1}^N e^{-\beta\varepsilon_n/2} a_n |\varepsilon_n\rangle$$

ここで、 $|\xi\rangle$ は系全体の任意の状態、 $|\varepsilon_n\rangle$ は固有値 ε_n を持つ固有状態、 $a_n = \langle \varepsilon_n | \xi \rangle$ 、 N は DMRG で扱う系全体の次元数である。ここでボルツマン因子はルジャンドル多項式 $P_l(x)$ を用いて

$$e^{-\beta\hat{H}_s} = \int_{-1}^1 d\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} \sum_{l=0}^{\infty} w_l^{-1} P_l(\varepsilon) P_l(\hat{H}_s)$$

と与えられること(ここで、 \hat{H}_s は $[-1,1]$ の領域にその固有値がスケールされたハミルトニアン、 $\tilde{\beta}$ はそれに対応する逆温度、 $w_l = 2/(2l+1)$)、およびガウス分布関数で規格化されたルジャンドル多項式

$$\langle P_l(\hat{H}_s) \rangle_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-1}^1 d\varepsilon e^{-[(\varepsilon-\hat{H}_s)/2\sigma]^2/2\sigma^2} P_l(\varepsilon)$$

を導入すると(ここで、 $\sigma = 2\pi/L$ 、 L は多項式の展開の打ち切り次数)、ターゲット状態は以下のように与えられる。

$$|\tilde{\xi}\rangle \simeq C_{\beta} \sum_{l=0}^L w_l^{-1} i_l(-\beta/2) \langle P_l(\hat{H}_s) \rangle_{\sigma} |\xi\rangle$$

C_{β} は規格化因子、 $i_l(x)$ は第 1 種変形球ベッセル関数である。 $\langle P_l(\hat{H}_s) \rangle_{\sigma}$ はルジャンドル多項式に関する漸化式から計算できる。

単一ターゲット状態 $|\tilde{\xi}\rangle$ を用いて物理量 \hat{A} をはさむと

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\xi} | \hat{A} | \tilde{\xi} \rangle &= \sum_n a_n^2 e^{-\beta \varepsilon_n} \langle \varepsilon_n | \hat{A} | \varepsilon_n \rangle \\ &+ \sum_{n \neq m} a_n a_m e^{-\beta(\varepsilon_n + \varepsilon_m)/2} \langle \varepsilon_m | \hat{A} | \varepsilon_n \rangle \end{aligned}$$

となる。もし、第 1 項の a_n^2 が n に依存せず、かつ第 2 項がゼロとなれば上式は \hat{A} の期待値のうち分配関数を除いた部分となる。分配関数 Z も $\langle \tilde{\xi} | \tilde{\xi} \rangle$ で同様に与えられることに注意すると、物理量 \hat{A} の期待値が上式から得られることがわかる。この条件は、 $|\xi\rangle$ は系全体の基底 $|\xi_i\rangle$ で展開されることを考慮し、その係数の組を乱数で発生させ、組に関する平均を取ることで達成される。

動的な物理量も単一ターゲット状態 $|\tilde{\xi}\rangle$ とランダム平均の組み合わせで正確に計算することが可能である。動的相関関数 $\chi_A(\omega)$ は

$$\frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \text{Im} \langle \varepsilon_n | \hat{A} \frac{1}{\omega - \hat{H} + \varepsilon_n - i\gamma} \hat{A} | \varepsilon_n \rangle$$

で与えられる。ここで、 γ は小さな正の数である。ルジャンドル多項式による打ち切り次数を非常に大きくとり、上述のランダム平均を行うと動的相関関数は

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z} \int_{-1}^1 d\varepsilon e^{-\beta \varepsilon} \text{Im} \langle \varepsilon | \hat{A} \frac{1}{\omega - \hat{H} + \varepsilon_s - i\gamma} \hat{A} | \varepsilon \rangle \\ |\varepsilon\rangle = \sum_{i=0}^L w_i^{-1} P_i(\varepsilon) \langle P_i(\hat{H}_s) \rangle_\sigma |\xi\rangle \end{aligned}$$

と書ける。 ε_s は ε をハミルトニアンを持つエネルギー領域に再規格化したエネルギーである。上式は最終段階の「測定」で用いる。その前段階では、与えられたサイズでの密度行列の最適化が必要である。絶対零度の動的 DMRG と同様、密度行列を構成するため三つのターゲット状態を準備する： $|\tilde{\xi}\rangle$, $\hat{A}|\tilde{\xi}\rangle$, $(\omega - \hat{H} + \tilde{E} - i\gamma)^{-1} \hat{A}|\tilde{\xi}\rangle$ (ε_s を $\tilde{E} = \langle \tilde{\xi} | \hat{H} | \tilde{\xi} \rangle$ と置き換え)。二番目、三番目のターゲット状態を考慮することにより、励起状態の情報も密度行列の中に含まれることになる。

以上の物理量の計算の中では、その収束性を決定するパラメータが三つある。DMRG の密度行列の次数の打ち切り数 m 、ルジャンドル多項式による展開の打ち切り数、およびランダム平均に用いるサンプル数である。これらの中で、最も重要なパラメータは m である。単一ターゲットを出発点にしていることからわかるように、 m が大きいほ

ど系の多くの状態を取り込んだことになる。有限温度では、絶対零度よりもさらに多くの状態を取り込む必要があるため、温度を上げるほど多くの m が必要となる。 m が増加するほど DMRG の計算は困難になることから、本手法は高温領域ではなく低温領域で有利な手法といえる。

MPI 並列化はプログラム全体に対して施されている。特に計算時間を要する部分は、ルジャンドル多項式の評価の際に現れる、ハミルトニアン行列とベクトルの行列ベクトル積である。いくつかの MPI 並列化技法があるが、今回は最も単純な行列の分割と `allgather` によるベクトルの通信を行った。容易に予想されるように通信時間がこの場合のボトルネックとなる。1024 コアまで用いた MPI+OpenMP 並列による性能評価を行ったが、コア数が多くなると並列効率が悪くなることがわかった。実際の計算では約 300 コアを用いた計算を中心に行った。

3 電子・格子相互作用を含んだ一次元モット絶縁体の光学吸収スペクトル [2]

動的密度行列繰り込み群法を電子・格子相互作用を含んだ一次元ハーフフィールド・ハバード模型 (ハバード・ホルシュタイン模型) に適用し、線形光学感受率 (光吸収スペクトル) を計算した。模型に含まれる物質パラメータは、隣り合う格子点間の電子の飛び移り積分 t 、同一格子点上での電子間のクーロン相互作用 U 、最隣接格子間のクーロン相互作用 V 、フォノンの振動数 ω_0 、電子・格子相互作用定数 g である。

モット・ギャップを超える線形光学感受率のピークのエネルギー位置と温度依存性、さらに格子振動に助けられて線形光学感受率に現れるギャップ内スピン励起構造の位置と形状を調べた。その例として、図 1 に絶対零度でのギャップ内スピン励起とモット・ギャップを超える励起を示す。約千倍も違う強度を同一模型の計算によって表現できるようになり、これまで別々の模型によって議論されてきた高エネルギー励起と低エネルギー励起の物理を同時に議論可能となった。その結果、実験との比較から Sr_2CuO_3 に対する物質パラメータの値を決定できた。

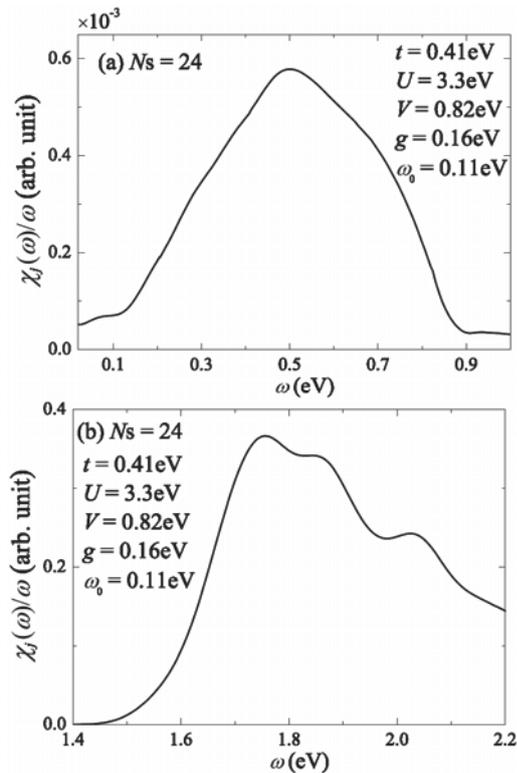


図1 一次元ハバード・ホルシュタイン模型の線形光学感受率. (a)ギャップ内スピン励起と(b)モット・ギャップを超える励起. 24 格子点.

4 フラストレーションを持つジグザグ梯子形 XY 模型のカイラリティ相関スペクトル [3]

最近、磁氣的フラストレーションを持つ低次元量子スピン系が注目を集めている。特にカイラリティと呼ばれる対称性が破れた状態がマルチフェロイクスという現象と関連しているということで多くの研究がなされている。本研究では、上記の低温で有効な有限温度 DMRG を用いて、カイラリティ秩序が現れる最も簡単な模型である一次元ジグザグ梯子 XY 鎖の有限温度での性質を調べた。そのハミルトニアンは最近接および次近接スピン間の反強磁性的相互作用、 J_1, J_2 を含んでおり、この両者の拮抗によりフラストレーション効果が生じる。絶対零度での性質はよく理解されており、 $J_1/J_2 < 0.81$ ではギャップレスなカイラリティ秩序状態、 $0.81 < J_1/J_2 < 3.1$ ではギャップをもつダイマー状態、 $3.1 < J_1/J_2$ ではスピン液体状態となる。カイラリティ秩序状態に対しては、それを特徴付ける

カイラリティ秩序パラメータが僅かな温度で長距離秩序を示さなくなることを静的および動的カイラリティ相関関数の計算で示した。一方、ダイマー状態では、絶対零度では小さな値しか示していなかったカイラリティ相関関数の値が温度上昇とともに増加することを明らかにした。

図2に $J_1/J_2=0.5$ と $J_1/J_2=1$ のカイラリティ相関スペクトルの温度依存性の計算結果を示す。絶対零度でカイラリティ秩序のある $J_1/J_2=0.5$ の場合は、温度とともに単調にスペクトル強度が減少する。一方、ダイマー状態である $J_1/J_2=1$ の場合は、温度上昇とともに、ダイマー形成によるギャップが徐々につぶれ、ギャップを超える温度になると低エネルギー励起が明瞭になる様子が分かる。後者の結果は、ダイマー状態の励起状態の中にカイラリティ秩序を伴った状態が準備されていることを示している。

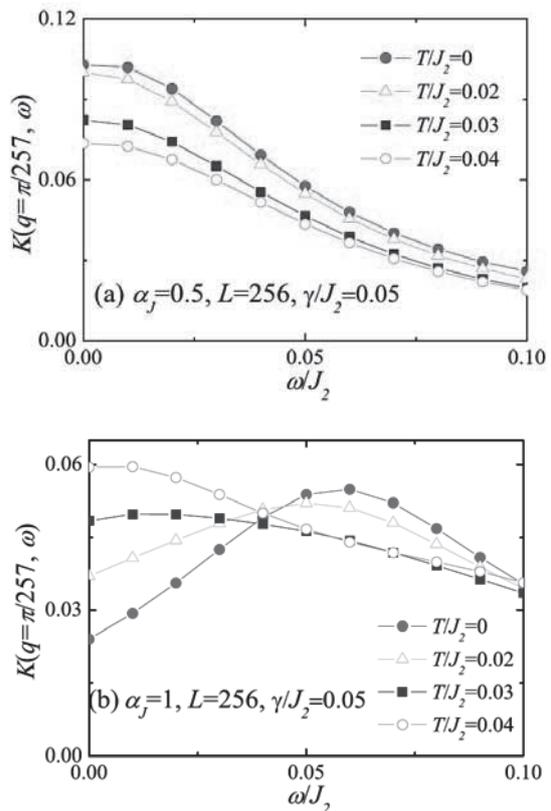


図2 ジグザグ梯子形 XY 模型のカイラリティ相関スペクトル. 256 格子点. (a) $\alpha_J = J_1/J_2=0.5$, (b) $\alpha_J = J_1/J_2=1$.

5 おわりに

物性物理学の基本問題の一つである一次元強相関電子系の動的性質を解明するため、絶対零度と有限温度に対する動的に拡張された DMRG を開発し、いくつかの問題に適用した。基底関数の数を大幅に減らすことで、大きな系でも計算できるようにしたのが DMRG である。しかし、本研究で扱ったような複雑な問題では、精度良い計算結果を得るためにはどうしても大規模な計算が必要となる。我々は、MPI と OpenMP による並列化を DMRG に実装し、大規模計算を進めてきた。今後、次世代スーパーで行われる超大規模計算に適用するには MPI で発生する通信時間の削減が最も重要な課題となる。そのための新しいアルゴリズムを開発している。それを用いることで今後、有限温度まで含めた動的 DMRG による一次元強相関電子系の研究がさらに発展し、物性物理学の基本問題に対する寄与が可能となることを期待している。

参考文献

- [1] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B **78**, 113101 (2008).
- [2] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B, to be published.; arXiv:1007.5166.
- [3] T. Sugimoto, S. Sota, and T. Tohyama, Phys. Rev. B **82**, 035437 (2010).

超大規模最適化問題に対する高速計算

京都大学 T2K スパコン上における SDPARA の数値計算

木村欣司(京都大学大学院情報学研究科), 藤澤克樹(中央大学理工学部経営システム工学科)
中田真秀(理化学研究所情報基盤センター), 山下真(東京工業大学大学院数理・計算科学専攻)

1 研究背景と目的

著者らのグループでは代表的な数理計画問題である半正定値計画問題(SDP)に対する内点法を記述したソフトウェア SDPA の開発・評価・公開を10年以上行っている¹。これらのプロジェクトにおいては、単に問題サイズの大きなSDPを高速かつ正確に解くだけでなく以下の二つの目的の達成も目標にしている。

1.1 オペレーションズ・リサーチ分野での超大規模計算

現実社会における問題に対してまず数理的にモデル化を行った後に、最適化理論を実装して計算機上で解決する手法、つまりオペレーションズ・リサーチの手法は、幅広い分野で用いられ多くの成功を収めてきた。この手法では以下の三つの要素が必要かつ不可欠である。

データ + 最適化理論 + 計算

データは言うまでもなく扱う現実の問題を表すものであり、データの収集や解釈も困難な場合が多いが、大規模な現実問題では扱うべきデータ量は非常に巨大になることが多い。最適化理論は扱う問題を厳密な数学的問題へとモデル化し、解決する手法を与える。そして、計算は数理モデルおよびその解決手法を、現実のデータと結びつけ実際の問題を解決する役割を担っている。

オペレーションズ・リサーチの根幹をなすこれら三つの要素は、オペレーションズ・リサーチの誕生から続く不断の研究により、飛躍的に発展してきた。

データに関しては、収集技術および集積技術の向上により、超大規模データを扱うことが可能となった。最適化理論に関しても、コンピューターサイエンスや数学などの近隣の分野との融合を経て、さらなる進歩を見せている。そして、計算力に関しては、計算機自体の性能の向上および実装方法の工夫や並列化などにより、現在では大規模な問題に対しても超高速で安定な計算が可能となった。

しかし学問が発展すると、過度に細分化されてしまい分野の間の繋がりが希薄となってしまふ。全てが融合されたときにこそ、本来の力を発揮するはずであるのに、現在ではその力が存分に発揮されているとは言い難い。そこで、本研究ではそれぞれの分野で業績や経験を持つ研究者が集結することにより

超大規模データ + 最先端最適化理論
+ 超高速計算

の融合を目指し、今後のオペレーションズ・リサーチ分野での超大規模最適化問題を扱う際の先例となることを目指す。

1.2 最新の情報環境に対応した新世代ソフトウェア実装方式の開発

これまで世界中の多くの成功事例から見ると、最適化問題などの応用数学系分野のソフトウェアの高速&高性能化が達成されていることに疑いはないものの、例えば(1)具体的にコンピュータ内部(ハード&ソフト)でどのような現象が起きているのか(2)どこまで性能を上げることが出来るのか(理論的境界等)(3)実用的な観点からハードの仕様や実行時間に制限が付いたら対応は可能か、といった観点での調査、研究は十分であるとは言い難い状況である。

¹<http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/sdpa/>

よってこれまでの成果を踏まえて以下の方針を定めている。

1. 数理学と情報科学分野の最新の成果を持ち寄り、アルゴリズム&データ構造とソフトウェアの実装を区別しないで同時に考えて組み立てる
2. 多くの事例にも応用できるように、なるべく汎用的なモデルを作る
3. 漸近的に性能が出れば良いのではなく、どの問題サイズでも性能が出るようにする

例えば、現在では CPU の演算性能はコア数の増大と共に急激に上昇しているが、CPU とメモリ間のバンド幅などはあまり向上が見られず、ハードウェア本来の性能を引き出すのが難しくなっている。よって、計算量とデータ移動量の正確な推定を行ったり、データの特性 (疎性, サイズ) と性能値の関係を見極めることによって、神戸に建設中の通称京速計算機などの超大規模スーパーコンピュータでも性能を発揮できるソフトウェアの作成を目指していく。

2 最適化問題に関する最新の傾向について

近年最適化及び関連分野では大きな変化が起きているが、ここで簡単に最適化問題に関する最新の傾向について触れてみたい。

1. 計算量による理論的解析の優劣とソフトウェア実装後に計算機で実行したときの計算結果が大きく異なるという現象が見られる。その理由としては以下のような原因が考えられる
 - (a) 理論的な解析時に想定されている最悪な場合という現象が計算機上で扱うことのできる問題の範囲では起こらない
 - (b) 計算量の評価において、演算量とデータ移動量が混同されている (一般的には後者の方がコストが高い)
2. 最適化ソフトウェアと最新の計算技術の密な融合によって、一部の最適化問題では驚くほど大規模な問題が高速に処理できるようになった

- (a) 混合整数計画問題 (MIP) : CPLEX などの商用ソルバーが有名。前処理によって問題を小規模に変換する技術が重要。
- (b) 巡回セールスマン問題 (TSP) : 数万から 10 万点規模の大規模問題が扱われている²
- (c) 半正定値計画問題 (SDP) : 次節以降を参照

3. 最適化問題の巨大化によって倍精度演算 (仮数部 52bit) の精度不足の問題が顕著になり、4 倍精度や多倍長演算などの高精度計算が用いられるようになった [1]

4. 実用的かつ大規模な最適化問題を解くために理論から実装, パラメータ設定, 大規模並列計算等の各分野の研究者が集結して総力戦を行われるようになった。超大規模 (エクサスケール) 最適化問題解決プロジェクトが開始されている。

3 スパコンによる大規模 SDP の高速計算

計算量の理論から考察すると NP -困難な問題などは問題の大きさが増加するにつれて、必要な計算量が指数関数的に増大するので、ある程度大きな規模では最新の計算技術を用いても最適解を求めることは依然として極めて難しい。しかし近年では主に以下の二つの方法やそれらの方法の組合せによって最適化問題を解く研究がさかんに行われており、アルゴリズムの発展や並列計算の適用などによって目覚ましい成果が達成されている。

1. 超高速, 大容量の計算機を集めて従来より提案されている手法に並列計算の技術を適用して問題を解く。ただし様々な理論的成果を採り入れて、計算時間を減らす工夫を採用している。
2. 近似解法を適用して実用的な時間で優れた近似解を得ることを目指す。

前者の方法ではスパコンの使用が注目を集めている。スパコンは 2009 年秋の事業仕分け作業によって注目を集め、スパコンの存在意義や国産の維持な

²<http://www.tsp.gatech.edu/>

どについて世間も含めて広く議論が行われた。ここで、どのような性質を持つ最適化問題がスパコンでの実行に適しているのかについて、幾つか条件を列挙してみよう。

1. 解くべき問題の規模が非常に大きいこと
2. アルゴリズムの演算量がある程度大きいこと
3. $\frac{\text{演算量}}{\text{データ移動量}}$ の比が十分程度大きいこと
4. 並列計算数に合わせて演算量やデータ移動量がほぼ均等になるように各プロセスに割り振ることができること
5. 並列に動作しているプロセス同士が高速かつ高い信頼性で頻りに通信を行ったり、同期を取る必要がある場合

例えば線形計画問題(LP)に対する主双対内点法 [4] では、入力データに疎性があることが多く、またベクトル演算が中心ということもあって、データを分割して転送するコストの比重が大きくなり大規模な並列計算には向いていない。また最短路問題に対するダイクストラ法ではアルゴリズム内の作業間の依存性が高く、並列して実行できる部分が少ないのでこれもまた向いていない。著者らのグループでは SDP に対する主双対内点法アルゴリズムを並列化したソフトウェア SDPARA [2, 3, 5] の開発、公開を行っている。超大規模な SDP を SDPARA を用いて解いた場合には、上記の 5 条件を満たすことがわかっている。現時点では超大規模な SDP を解くためにはスパコンなどの高性能並列計算機が必須となっている。SDP 以外でも 2 節で述べたように MIP や TSP に対して、スーパーコンピュータ上で大規模並列計算を行うソフトウェアの開発が行われている。

すでに述べたように SDP は幅広い応用分野を持っているが、今回は超大規模 SDP の需要を多く持つ量子化学分野に対する数値実験を紹介しよう(ソフトウェアは SDPARA³ を用いる)。化学または物理分野では原理的にはシュレーディンガー方程式を解くことによって、ほぼ全ての現象を理解することができると言われていたが、具体的な現象としては水分子の挙動、蛋白質の性質、光合成、超電導の仕組みなどがある。しかし、シュレーディンガー方程式を解くのは様々な面で困難を抱えるため、2 次の縮約密度

³<http://sdpa.indsys.chuo-u.ac.jp/sdpa/>

行列の直接変分法という手法の開発、研究が行われている。著者らのグループでは SDPARA や SDPA-GMP [1] などのソフトウェアを用いて、世界で初めて正確に 2 次の縮約密度行列の直接変分を行い、多くの原子・分子に適用することに成功した [5]。特に以下の CH₃(メチルラジカル)、NH₃(アンモニア)、O₂(酸素) から生じる巨大な SDP に対しては、今回(2010 年 3 月)世界で初めて京都大学 T2K スーパーコンピュータ(表 2)を用いて SDPARA によって最適解を求めることに成功し、世界最大規模の SDP を非常に正確に安定して解くことができた⁴(表 1)。今回の数値実験で解いた最も大きな SDP は図 1 のようなブロック対角構造を持っており(CH₃, NH₃ から生じる SDP)、各行列の大きさは 19,460 × 19,460、制約式の数、非零要素の総数は 6,731,930 個にも達する。

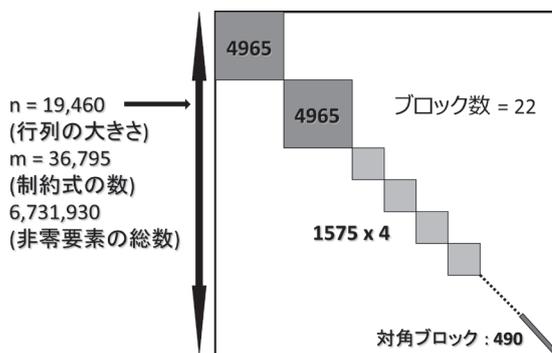


図 1: 超大規模 SDP とブロック対角構造

表 1: 量子化学分野の超大規模 SDP に対する SDPARA の実験結果

問題名(分子名)	総計算時間(秒)
H ₂ O	27,523.8
CH ₃	68,593.4
NH ₃	72,025.6
O ₂	5,943.1

主双対内点法では探索方向を求めるために非常に大きな線形方程式を作成して解くという作業がある。

⁴<http://pr.fujitsu.com/jp/news/2010/05/28.html>

表 2: 京都大学 T2K スーパーコンピュータの構成

CPU	AMD Opteron 8356 2.3GHz x 4
メモリ	32 GByte
NIC	GbE x 2 & Infiniband x 4
今回利用した 計算機資源数	128 ノード 512CPU(2048 コア)

これに有する計算量とメモリ使用量は非常に膨大で、現在の通常の計算機では、搭載しているメモリ量の制限などによって、大規模な SDP に対しては計算機のメモリ上に全データを確保することができない。また計算機上に十分なメモリが備わっていると仮定しても、膨大な計算時間が必要でありスパコン等の計算機が無くては現実的な時間で解くことができないのが現状である。

4 おわりに

理論的に優れた最適化アルゴリズムが実際には役に立たないという例は残念ながら多く、そのことが理論的な研究者と最適化問題と扱う実務家との距離を遠くしていたのも事実である。しかし、近年は良い方向に状況が変化し始めており、本解説で触れた SDP に対する主双対内点法は最近の実装方法や計算技術との融合によって、理論的に優れた特性が大規模問題においても発揮されている。またスパコンの特性を生かして実装を行い高性能な結果を残したということは、今後さらに大規模なスパコンを使いこなすためのソフトウェア技術を確立する上でも大きな成果を残したとも言えよう。

5 謝辞

テキサス州立大学研究員(現米マイクロソフト)の後藤和茂氏には多大な協力と支援を頂きました。本研究は京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠)の支援を受けました。また、一部に中央大学特定課題研究費の支援を受けてソフトウェアの開発を行っております。

参考文献

- [1] 藤澤克樹: 高速化・最適化のための BLAS 入門, 数学セミナー, 588 号, 2010 年 9 月, 50-55.
- [2] 藤澤克樹, 中田和秀, 福田光浩, 山下真, 中田真秀, 脇隼人: 特集:半正定値計画に対するソルバーと応用例, オペレーションズ・リサーチ, **55(7)**, (2010), 386-424.
- [3] 中田和秀, 藤澤克樹, Mituhiro Fukuda, 山下真, 中田真秀, 小林和博: 最適化ソフトウェア SDPA, 応用数理, **18(1)**, (2008), 2-14.
- [4] 小島 政和, 土谷 隆, 水野 眞治, 矢部 博; 内点法, 朝倉書店 (2001).
- [5] K. Fujisawa et al.: SDPA Project : Solving Large-scale Semidefinite Programs, *Journal of the Operations Research Society of Japan*, **50(4)**, (2007), 278-298.

ミクストメディアによる総合博物館における展示研究

塩瀬隆之*(申請代表者), 元木環** (センター代表者)

京都大学総合博物館*, 京都大学学術情報メディアセンター**

共同研究の経緯、目的、概要:

京都大学総合博物館では、日本の X 線研究元年である 1896(明治 29)年に実験で使われた X 線管など、日本の X 線研究で重用された X 線技術史資料が多数所蔵されている。これらの資料を元に、2010 年度、春季企画展「科学技術 X の謎」を開催予定であった。X 線は、いまや病院でのレントゲン写真や空港での手荷物検査にとどまらず、私たちの想像をはるかに超えた多くの分野を支え、京都大学にかぎっても、エックス線装置取扱者の登録数は年間約 1000 名にもものぼる。研究者の専門分野も医学、理学、文学、工学、農学、薬学など多岐に渡り、その幅広い学問分野にもたらされた革新について、技術史の文脈から迫る本企画展は、一般の来館者のみならず学内の多くの研究者や学生、大学院生にとっても大きな学びの機会を提供し得る。また、京都大学の総合大学ならではの学問分野の多様さを一堂に示すことの出来る稀有な機会であるといえる。

しかし、X 線そのものは量子力学への理解を必要とし、その難解な学術的意義や研究者の研究プロセスを広く来館者と共有することは容易ではない。また従来の博物館展示においては、実物展示と展示品目の図録出版という限られたメディアを利用することとどまり、研究者の研究プロセスや展示学習効果をフィードバックして改善につなげる手段を持ち得てはいない。

そこで、本共同研究においては、ビジュアルアイデンティティ(VI)を取り入れた実物展示自体の工夫を行うこと、ユーザエクスペリエンスを考慮して印刷メディア・映像メディアなど複数メディアを効果的に統合してコンテンツを作成し、高い展示学習効果を生むこと、同時にその効果をフィードバックするようなミクストメディア展示手法を開発研究を実施することを目指した。

コンテンツの概要と効果:

2010 年 4 月 29 日～8 月 29 日に開催した、実際の企画展に向けて多数の展示研究の仮説を盛り込んだ展示計画と展示コンテンツを作成・実施した。

企画展 VI (広報デザイン・会場サイン・展示デザイン)

まず企画展名のロゴタイプと京大における 150 年に渡る X 線の研究史(1895-2010)と X 線研究者の増加を表すシンボルマーク、X 線そのものの性質をビジュアル化したマーク 3 種を基本 VI として作成した。ポスターや看板においては、X 線関連研究が必ずしも画像として現れるものばかりではないことを示すため、X 線写真画像の利用をあえて避け、これらの基本 VI と「X 線ってなんだろう?」というキャッチフレーズのみを使用した(図 1)。

このポスターが好評を博したことは、研究者からポスターなどのアンケートの中で質問した来館理由の項目で、「ポスターを見て気になって来館した」という過去の企画展示ではほとんど見られなかった来館理由での回答が多く見受けられたことからうかがえる。



図 1 X 線企画展吊りサイン

企画展示室のデザインにおいては、共同研究のチームの一員である宗本晋准教授(立命館大学・建築計画)も参画し、病院でレントゲンフィルムを撮影する際に使用するシャークカステンをイメージした展示空間とした(図 2)。



図2 展示空間

明治の技術史資料(実験機器の実物)をより効果的に、X線研究に明るくない来館者にも関心を抱きやすいように展示するため、実物資料展示空間の前に二足歩行ロボット、巻貝、鳥の木乃伊(ミイラ)、動物、忍者の剣、X線天文学イメージなど、X線を通して見た多様な研究対象をレントゲンフィルムで展示した。宗本氏により設計された展示ケースに展示されたレントゲンフィルムは、バックライトで照射されることで黒地に白い陰影が淡く浮かび、不思議な魅力を持った写真展示となった(図3)。多くの分野の研究者がそれぞれ見ている世界は、宇宙のように広大なものから細胞の断面のように極小のものまで様々であるが、それぞれ追求する研究の奥に見据えている“美しさ”の一端を展示室で俯瞰することで、よりその美を作り出した機器そのものにも興味をつなげることを目指した。また、近年、レントゲンフィルムそのものが製作されなくなったため、展示に使用したフィルムそのものも新たな技術史資料として、企画展示終了後に収蔵することとなった。

また、解説文はできるだけ減らし、問いかけるような一行キャプションに挑戦した。通常、80~120字の解説文が、40以上の展示品のすべてに付されていると、400字詰め原稿用紙で合計10枚分の解説を読まなければならない。そこで、「きみはどこ?」「どっちがしゃけで、どっちがたらこ?」など、キャプションを読んだ後にじっくりとX線フィルムを見てもらえることを想定して、問いかける一行を用意した。

解説書籍の制作

次に多様な分野の研究者がどのような姿勢でX線技術を活用し、どのような成果を上げているか、最前線の研究紹介を含む多様なコンテンツを盛り込んだ解説本「科学技術Xの謎」(化学同人)を制作、



図3 X線フィルムと実物展示

出版した(図4)。天文学、考古学、医学、薬学、木材構造学など多様な分野での研究者インタビューを実施し、高エネルギー加速器研究機構フォトンファクトリー(PF)でX線研究を進める研究者の48時間ドキュメンタリーや2000年前のエジプトの鳥ミイラのX線撮影と解読の研究者対談など、難易度の高いX線技術を利用した研究を対象としつつも、高校生から社会人までの理解を想定した内容が好評を博し、放射線研究の関連学会や一般化学誌などに多数の書評が紹介された。

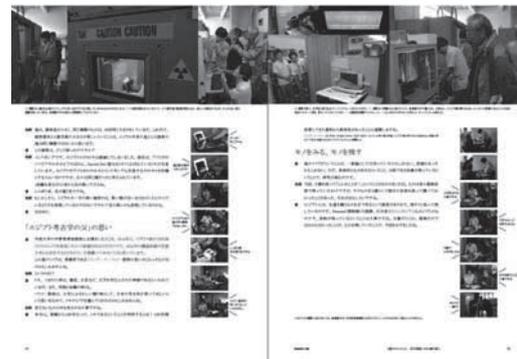


図4 展示では伝えきれないコンテンツ

書籍「科学技術 X の謎—天文・医療・文化財 あらゆるものの姿をあらわす X 線にせまる—」
塩瀬 隆之 (著), 元木 環 (著), 水町 衣里 (著),
戸田 健太郎 (著), 京都大学総合博物館 (監修)
出版社: 化学同人
発行日: 2010年5月14日
ISBN-10: 4759811982
ページ数: 88 ページ

映像コンテンツの制作

(X-CT の仕組み, エックス線の性質を表現)

その他、共同研究とは別立てであるが、ハンズオン展示としては、X線技術に一般来館者が触れることができないため、AR技術を用いたインタラクティブ展示を開発した(図5)。天井から吊り下げた赤外線カメラによってプレートの動きを観測し、そのプレート上にX線写真をオーバーレイすることで疑似的にX線透視体験ができる展示とした。

さまざまなメディアを用いた展示空間においてユーザーエクスペリエンスの統合をはかるには、一貫性のあるビジュアルアイデンティティの確立が重要であることが認識された。

展示評価研究への展開：

本共同研究で実施した展示研究の中でも特徴的な一行キャプションについて、予想通り、来館者アンケートの結果は賛否両論に分かれていた。分かりやすくおもしろいという反応と、解説文をふだんから熟読することに慣れている来館者にとっては、かえって物足りなさが残ってしまい、消極的な解答が多かった。しかし今回の企画展では、これまで博物館に頻繁に足を運んでこなかった来館者に着目し、少しでも博物館の展示に興味関心を持ち、じっくり自らが標本に目を向けるような展示を目指した。



図5 ARを用いた疑似X線透視装置

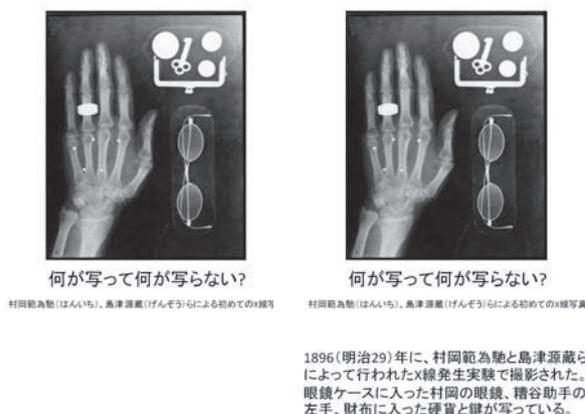
現在、この試みが実際に有意な差をもつか否かについて、注視点計測装置をつかった認知科学実験によって鑑賞者の注意がどのように解説文から展示品に遷移するかを明らかにしようと研究を進めている(図6、7)。

研究成果と今後の展望、波及効果：

本共同研究によってVIや様々な展示研究を盛り込んだ本企画展は、昨年度同時期の実績に比して約1.7倍、18000人もの来館者を得た(図8、9)。これ

は、述べ100紙を越える新聞掲載や、テレビニュースでも4社のべ10回以上、ラジオ5局5番組、一般科学誌で5回など広く本企画についての話題が取り上げられるなど、広く一般にも興味を持たれたこと、展示を見た人、あるいは研究情報を提供頂いた関係者が、実際に展示会場に来場したあと、知人や関係者に自発的に紹介をするということが積み重なった結果といえる。単に格好がよい、などというVIやコンテンツのデザインではなく、研究者の意図が盛り込まれた仕事による効果といえるだろう。

大学博物館は、大学の中で「学術標本の維持、管理」ならびに学術標本を基にした研究支援機能という重要な役割を果たしているばかりではなく、昨今では社会と大学の間をつなぐ連携機能や、同じ大学内における研究者間の交流機能をも期待されるようになってきている。本共同研究を通じてコンテンツを作成したことにより、多様な学問分野にまたがる研究者同士の交流を活性化させたことも成果としてあげることができる。実際に、本企画展を通じて交流が生まれた研究者によって、科研費申請(5件)に結びついたり、研究者同士のネットワーキングを図って実施した「X線シーズ研究とニーズ研究者の出会いの場」(2010年7月7日に実施)では、X線透過撮影や蛍光X線の装置を開発、販売している企業の技術者やSPring-8など放射光施設の研究者と、考古学や古生物学の研究者とが交流し、現在、恐竜の歯の化石、縄文人の下顎、エジプト出土の宝飾品など、X線CT撮影や蛍光X線分析などの新たな研究の可能性を探る共同研究へと発展しつつある。それら新たな研究への展開、最新の動向や成果は、大きな成果の一つであり現在準備中の「科学技術Xの



何が写って何が写らない？

何が写って何が写らない？

村岡範為(はんいち)、島津源蔵(げんぞう)らによる初めてのX線写真

村岡範為(はんいち)、島津源蔵(げんぞう)らによる初めてのX線写真

1896(明治29)年に、村岡範為と島津源蔵らによって行われたX線発生実験で撮影された。眼鏡ケースに入った村岡の眼鏡、摺谷助手の左手、財布に入った硬貨と鍵が写っている。

図6 ひねったキャプションと解説

謎」Webにて報告予定である。

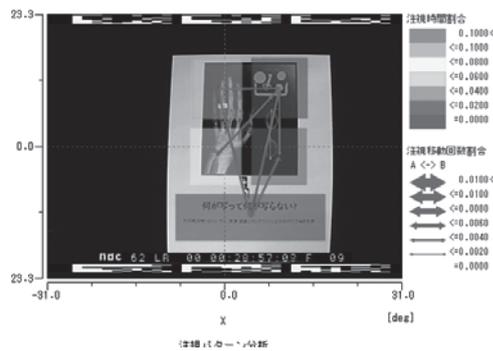


図7 注視点計測装置による評価研究

その他、本共同研究をもとに、展示研究に関する研究報告(口頭発表2件)を行った。

- 1) 塩瀬、元木、水町、石河、川上、博物館の展示鑑賞者の注意をひきつけるひえなったキャプションに関する研究、計測自動制御学会 システム・情報部門学術講演会(SSI2010)、2010年11月
- 2) 塩瀬、水町、戸田、元木、永田、学際融合のための技術史展示:2010年企画展「科学技術 X の謎」を例に、大学博物館等協議会 2010年度大会 第5回博物館科学会、2010年6月

書評例:

高エネルギー加速器研究機構 書籍紹介コーナー

<http://www.kek.jp/ja/library/book/X.html>

展評例:

AMeeT

http://www.ameet.jp/digital-archives/digital-archives_20091124/#page_tabs=0



図8 多数の来館者が訪れる展示会場



図9 食い入るようにX線写真を見る来館者

琉球方言デジタルアーカイブの構築と電子博物館との連携化

元木環*, 上田寛人*, 宮部誠人*, 林由華**,

河原達也* (センター代表者), 田窪行則** (申請代表者)

*京都大学 学術情報メディアセンター

**京都大学大学院 文学研究科

研究概要：本研究は沖縄県宮古島市、特に西原地区の池間語と池間文化を調査して、記述し、その成果をデジタル博物館として研究者および地区の住民たちが自由に見られる形で記録、一部を公開できるようにし、その言語・文化の継承に資することを目的としている。申請者は、研究分担者の言語学者や大学院生達と、この地区の文化と言語を調査し、記録する作業を続けている。欧米では消滅の危機にある言語や文化をデジタルコンテンツとして残すための研究が発達しており、すでに多くのデータが公開されて、研究者だけでなく、その言語・文化の担い手である住民、他地域で同じ問題を抱える住民、さらには一般の人たちもそれらに接することができるが、このような技術はあまり進んでおらず、非常に限られた実験的な試みが行われているだけである。本研究は、この現状に鑑みて、デジタル博物館のプロトタイプとしてデジタルコンテンツを作り、資料を保管すると同時に、その一部を一般に公開し、また、一部を世界の琉球語研究者にアクセスできる形にし、この独自の言語・文化の保存、維持に貢献するものである。また、西原地区以外の琉球語、琉球文化全般に拡張し、ことばと文化を同時に保存・伝承することも視野にいれている

1 研究の背景

現在、琉球の言語はマスメディアの発達や標準語励行のための方言使用禁止の教育・文化政策の浸透により急速に失われかけている。ユネスコの Atlas of the World's Languages in Danger¹⁾ で、厳しい危機状態 (severely endangered)、確定的な危機状態 (definitely endangered)^{2) 3)} と認定されているように、いわゆる「絶滅の危機に瀕した言語」といえる。

こうした中、1970年代半ばには沖縄言語研究センターを中心に方言の記録が始まり、1980年代後半には語彙や動詞、形容詞の他ことわざやまじない、童謡、芝居の脚本等も録音記録に残されている。⁴⁾ 音声・テキストデータの一部は現在「琉球語音声データベース」⁵⁾として Web サイト上で公開されているが、現在ビデオカメラ、PCなどの普及により、調査記録にはデジタル映像データが爆発的に増加しており、それに伴った新たな保存や公開の形態が必要になっている。

また言語学全般においては、グローバル化にともなって世界中で多くの言語が急速に失われていることを背景とし、1990年代末頃より言語ドキュメンテーション研究と呼ばれる、言語の調査記述を行う調査言語学から生まれた研究領域が定義されている。これにより、映像などにより「個別の言語に関して、長期間にわたって幅広い範囲の活動に活用する事が出来る記録（一次デー

タ)を体系的、包括的に蓄積すること」⁶⁾が広まり、ロンドン大学 SOAS による Hans Rausing Endangered Languages Project(HRELP)⁷⁾など、消滅の危機にある言語や文化を次世代へ残していくためのデジタルアーカイブプロジェクトも立ち上がっている。アーカイブスは分野を超えた研究者コミュニティやその言語・文化の担い手である調査された地域住民、一般にも資料に触れることのできるよう公開される事が望ましいとされるが、専門家以外に閲覧・利用しやすいよう公開されているとは言い難い。言語学分野に限らず地域研究におけるフィールドワーク調査の一般的な課題としても、情報提供者(インフォーマント)に調査結果を十分に還元されにくいこと、研究者がその調査の意図を伝え理解を得ることの困難さが指摘されていることから⁸⁾、視聴覚的に訴求力があり、比較的簡便に更新ができる情報技術を活用した地域情報アーカイブシステム(デジタル博物館)の存在が望まれているといえる。

本デジタル博物館は、琉球語宮古池間方言の研究プロジェクトにおいて、データの死蔵を防ぎ共同利用を促進するデジタル博物館の実現を試みるものである。

2 デジタル博物館「ことばと文化-琉球列島」の構築

2.1 博物館の目的・アイデア

本デジタル博物館は、インターネット上に構築されるもので、主に言語学調査で得られた研究資料（言語や文化に関する映像・音声の一次データ）を、言語学者のみならずその言語・文化に関心のある人全て、特にその言語のコミュニティ内の人に提示し、その言語と文化の保存に資する事を目的としている。

しかし、一次データは、そのものだけでは断片的な記録に過ぎず、ただデータを並べただけでは専門家以外の人に関心を与え、データそのものの共同利用を促進することにもならない。そこで、研究者がそれぞれの視点による教材、コンテンツとして「展示」を行うことで専門外にわかるような解説をつける動機に繋がり、それが繰り返されることにより、メタデータの充実も達成されると考えた。例えば、映像を展示することで付された言語学的なメタデータを文化人類学、社会学の研究者が利用したり、文化人類学、社会学の研究者が展示の際に付した儀礼の意味に関するメタデータを言語学者が利用することができるということである。

一般に公開される空間と限定されたメンバーが立ち入ることのできる空間を、機能別に4層構造に分け、データが循環する事によりデータの死蔵を防ぎ共同利用が促進されると考えた(図1)。

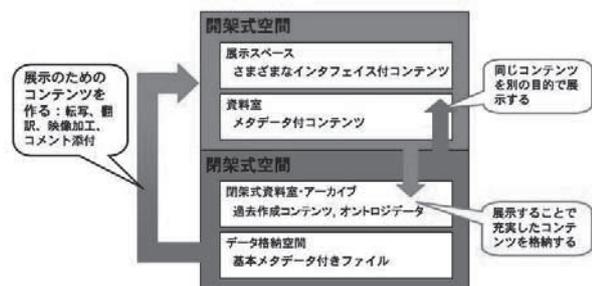


図1 4層の博物館の概念図

2.2 博物館の概要

本デジタル博物館は、琉球語宮古池間方言を母語とする沖縄県宮古島市西原地区をプロトタイプとして作成している。地域が変わっても機能するよう文化人類学や民俗学の総論に使われている次のような項目にコンテンツを分類している。

1. 展示室：地理統計的概観，歴史，西原の生活，西原の一日，西原の一年（一生，食，共同体，行動，

信仰など）

2. 学習室：言語の歴史（系統関係，音韻変化），日常のことば（場面と表現，文法，読本），辞書

3. 資料室：デジタル絵本，映像番組，用語集，関連資料

4. アーカイブス：データ格納庫

2.3 作成コンテンツ

本コンテンツ作成共同研究では、字幕付き映像コンテンツの作成と、その更新システムの開発を行った。

字幕付き映像コンテンツ

まず、地域住民（話者）によって方言で語られるいくつかの映像や音声のデータに、解説テキスト、発話と訳の字幕付コンテンツの作成を行った(図2)。

このコンテンツは、地域住民による映像（方言絵本やオリジナル方言歌劇など）や、言語学習のための教材もおおよそ同じような作りになっており、方言を使うことのできない若年層やこの言葉や文化に初めて触れる人に関心を持ってもらうため、あるいは、調査結果の表現、説明という点においても有用である。こういった映像は、画面のどこに重要なポイントをフレーミングするかコントロール不能であることから、映像と2種類の字幕が被らずに同時に再生が可能なスクリプトを実装した。またそれぞれの字幕は必要に応じて、表示/非表示を選択することができるプレイヤーを実装した。



図2 字幕映像のついた映像コンテンツ

更新システムの開発

このような字幕映像付映像コンテンツのページを作成するには、従来、作成した字幕情報を映

像編集，効果を付けるためのソフトウェア習熟者に渡す，あるいは自らが習得して作業する事が必要であった。例えば本博物館の場合，言語調査チームが記録した映像データと発音・訳のテキストデータ，時間情報をコンテンツ作成チームが受け取り，映像編集ソフトで指定された時間情報を見ながら，手で字幕の映像を作成し，Webサイトへアップロードしていた。

通常，研究者が会話の書き起こしをする場合，あるいは各種言語への翻訳テキストの作成，またその映像内でどういった事が行われているか注釈を付ける場合には，通常，会話の書き起こしや分析などに特化したソフトウェアを使用するため，このテキストデータ・時間情報をもとに半自動的に字幕映像を生成できれば，研究者自身が日常の研究の中で作業が行え，更新性の向上も期待できる。そこで，会話分析などに良く使用される音声・映像データ用アノテーション付与ソフトウェアのひとつ ELAN

(<http://www.lat-mpi.eu/tools/elan/>) で作成した字幕データを Subtitles 文書ファイル形式で書き出し (図 3)，サーバ上のプログラムで，そのファイルを Subtitles 文書ファイル形式から，Flash が読み込める XML 形式に自動変換することをプログラム化し実装した。これにより，字幕テキストとタイムコードの情報を Flash の映像データに反映させて書き出すことができ，図 2 のようなページが作成がテンプレートとして作成可能になった。

これにより，代表的な展示コンテンツを研究者自身が作成する事ができ，より頻繁な情報の更新を促進できる。

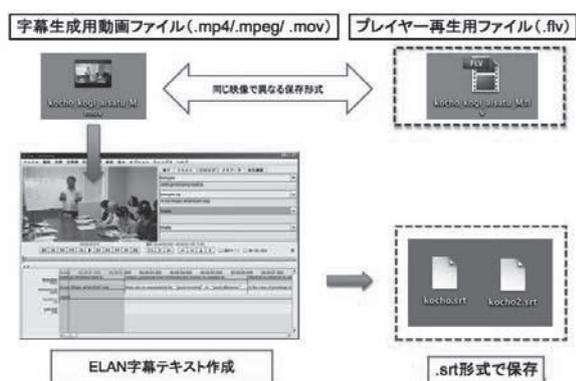


図 3 字幕映像データ生成の素材準備

4 まとめ

本デジタル博物館は，情報処理学会第 75 回デジタルドキュメント研究会，「平成 22 年度情報教育研究集会」において発表され，「映像へコメントを付けるプログラムを使ってみよう」「言語関係の講義で使用したい」などの反響を得た。

現在，隣接言語や琉球語全体を対象の拡大を予定しており，このような「博物館展示」の機能をもつアーカイブシステムの需要とシステム構築と更新機能の必要となっている。サイト全体のテンプレート化し，出来る限り更新を研究者自身でできるようなシステム開発が望まれる。京都大学研究資源アーカイブシステムなどとの連携も視野に入れるとともに，ひきつづき情報学研究者や技術者からの意見を取り入れつつ，共同で研究開発を進める体制を維持，整備していきたい。

5 謝辞

本研究は，京都大学学術情報メディアセンターコンテンツ作成共同研究のほか，京都大学グローバル COE プログラム「親密圏と公共圏の再編成をめざすアジア拠点」の 1 プロジェクトとして実施している。執筆者の他，上田寛人，岩倉正司，高橋三紀子，宮部誠人（学術情報メディアセンター），林由華，車田千種，平井芽阿里の各氏と作成した。また，仲間博之氏，花城千枝子氏，仲間忠氏，赤嶺和子氏，長崎恵長氏をはじめとする地域の皆様にも多大なる協力をいただいた。ここに深く感謝いたします。

参考文献

- [1] UNESCO Atlas of the World's Languages in Danger:
<http://www.unesco.org/culture/ich/index.php?pg=00206>
- [2] UNESCO Intangible Cultural Heritage Endangered languages :
<http://www.unesco.org/culture/ich/index.php?pg=00139>
- [3] 佐々木冠，「日本の言語状況—多様性は失われるのか」，月刊言語 Vol.38，No. 7，pp.8-15，2009
- [4] 狩俣繁久，「危機言語としての琉球方言の研究状況 日本復帰後から今日までの活動についてのおぼえがき」，国立民族学博物館調査報告，No.39，pp.257-267，2003

- [5]琉球大学附属図書館 琉球語音声データベース:
<http://ryukyu-lang.lib.u-ryukyu.ac.jp/>
- [6]中山俊秀, 「新時代の記述言語学 <上>-つながる言語記録にむけて」, 月刊言語 Vol.38, No. 7, pp.66-73, 2009
- [7] The School of Oriental and African Studies (SOAS) ,The University of London, Hans Rausing Endangered Languages Project:
<http://www.hrelp.org/>
- [8]安溪遊地, 「調査されるという迷惑-フィールドに出る前に読んでおく本」, みずのわ出版, 2008

Thin SMP クラスタ運転状況 (2010/4 ~ 2010/9)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

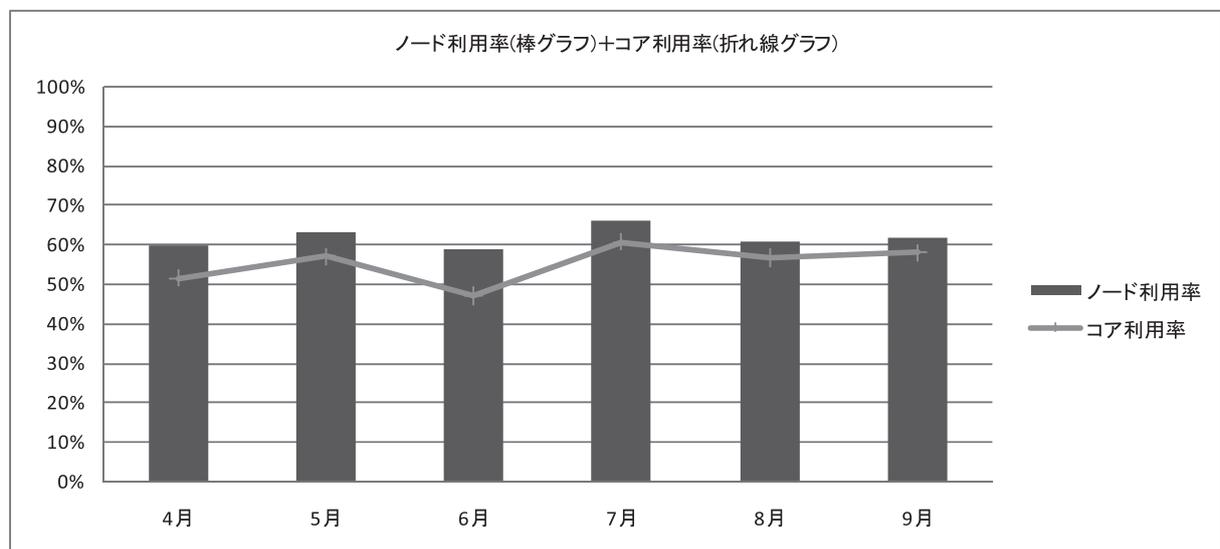
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2010/04/01 0:00	2010/04/01 13:00	13.0
2010/08/02 9:00	2010/08/03 9:00	24.0

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2010/04/23 18:50	2010/04/23 23:50	5.0
2010/05/17 13:30	2010/05/17 17:45	4.3

2) サービス状況

	サービス時間[h]	バッチ						TSS			
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率	セッション数	セッション時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数
4月	702	32,877	132,748	2,133,188	1,878,927	336.2	60%	10,711	4,538	99,440	39.6
5月	740	13,126	161,770	2,485,214	2,037,812	338.8	63%	12,359	6,503	218,603	39.1
6月	720	23,256	147,374	1,991,320	1,833,134	343.4	59%	16,631	8,643	188,054	38.0
7月	744	20,014	162,370	2,661,048	2,496,703	345.1	66%	14,720	7,209	183,597	37.9
8月	720	20,847	170,301	2,402,579	2,259,959	336.8	61%	12,709	5,399	174,137	37.9
9月	720	16,347	179,414	2,461,857	2,335,033	345.5	62%	13,392	9,702	174,816	38.0
計	4,346	126,467	953,977	14,135,207	12,841,567	341.0	62%	80,522	41,994	1,038,647	38.4



※ 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)

※ 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)

※ ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

※ TSS = ログインノード+専用クラスタについてのデータ

Fat SMP クラスタ運転状況 (2010/4 ~ 2010/9)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

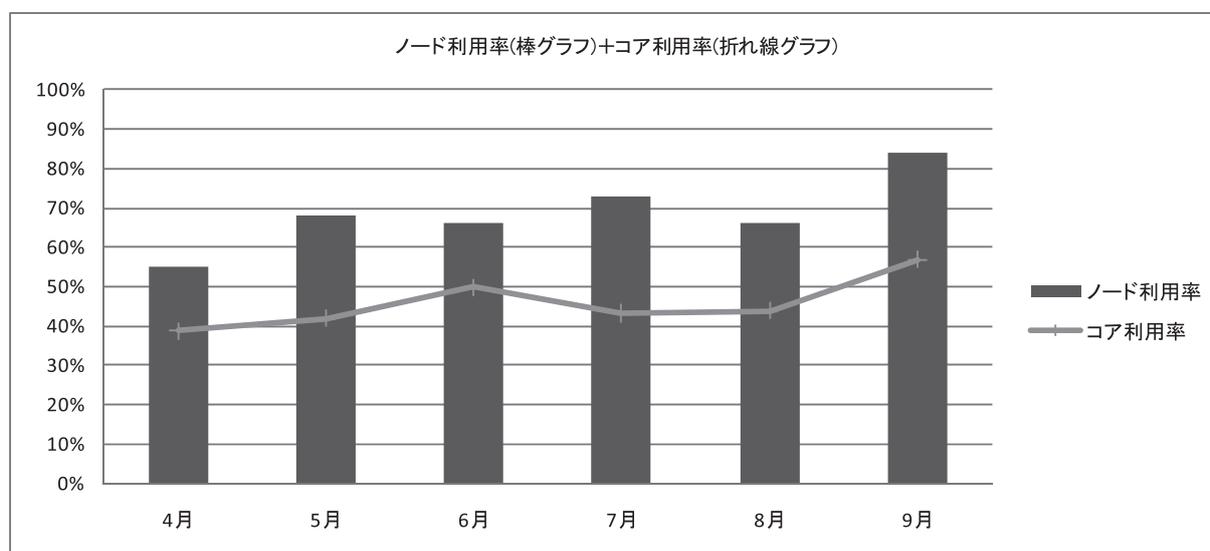
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2010/04/01 0:00	2010/04/01 13:00	13.0
2010/08/02 9:00	2010/08/03 9:00	24.0

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2010/04/23 18:50	2010/04/23 23:50	5.0
2010/05/17 13:30	2010/05/17 17:45	4.3

2) サービス状況

	サービス時間[h]	バッチ						TSS			
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率	セッション数	セッション時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数
4月	702	483	3,486	226,310	231,743	6.9	49%	2,528	1,487	642	1.0
5月	740	717	8,164	258,269	256,399	6.8	65%	1,974	923	1,535	1.0
6月	720	851	6,272	297,344	294,353	7.0	61%	2,344	669	2,071	1.0
7月	744	1,325	10,045	267,853	261,877	6.8	71%	2,158	452	4,128	1.0
8月	720	1,243	9,712	262,527	231,218	7.0	61%	2,008	255	5,944	1.0
9月	720	929	15,863	341,022	277,183	7.0	82%	2,367	203	5,092	1.0
計	4,346	5,548	53,542	1,653,325	1,552,773	6.9	65%	13,379	3,988	19,411	1.0



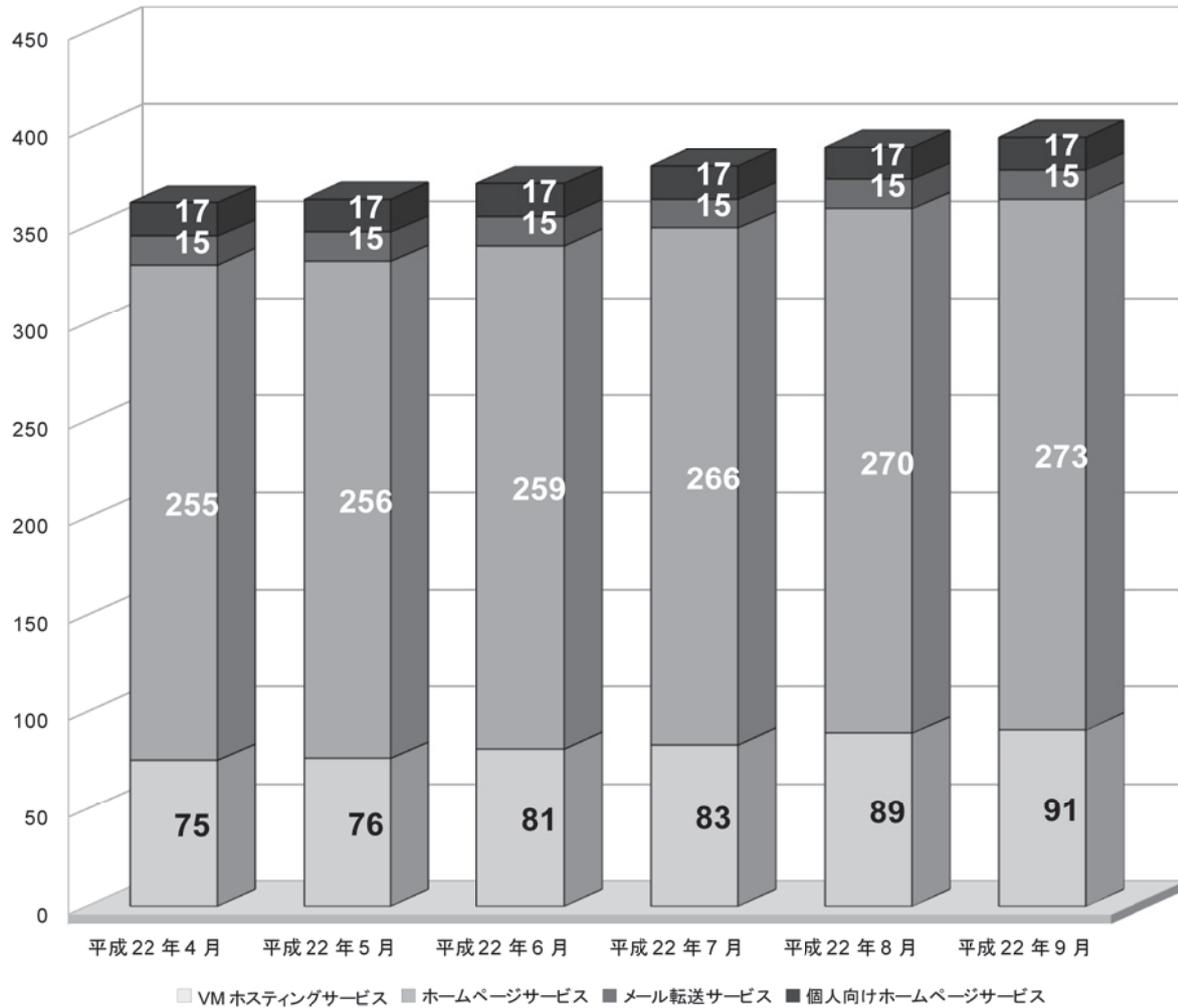
※ 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)

※ 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)

※ ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

汎用コンピュータシステムのサービス状況

1 ホスティング・ホームページサービス利用状況



(平成22年4月から平成22年9月)

大型計算機システム利用承認件数について

平成22年9月末現在大型計算機システムの利用件数は、2,461件となっています。

センター利用による研究成果

—平成 21 年度計算機利用結果報告書から—

- 【3900 心理学・社会学・教育学・文化人類学】
1. Kiyohiro Maeda, Hiroki Yamamoto, Masaki Fukunaga, Masahiro Umeda, Chuzo Tanaka and Yoshimichi Ejima : Neural Correlates of Color-Selective Metacontrast in Human Early Retinotopic Areas : *J Neurophysiol.* Vol.104, pp. 2291-2301, 2010
- 【4300 物理学】
2. Shoji, M., Y. Omura, B. T. Tsurutani, O. P. Verkhoglyadova, and B. Lembege : Mirror instability and L-mode electromagnetic ion cyclotron instability: Competition in the Earth's magnetosheath : *J. Geophys. Res.* Vol.114, A10203, doi:10.1029/2008JA014038 2009
- 【4400 地球科学】
3. 中村武史・竹中博士・岡元太郎・金田義行 : 2009年8月11日駿河湾で発生した地震の3次元HOT - FDMによる波動伝播シミュレーション : 2009年日本地震学会秋季大会講演予稿集 P1-24 , 2009
 4. Ito, M. and T. Satomura : The interannual variation of intraseasonal oscillation linked with the Indian Ocean Dipole Mode : *SOLA*, Vol.5, pp.69-72, 2009
 5. 里村雄彦 : ベンガル湾北部の降水システム : 非静力学モデルに関するワークショップ講演予稿集, pp. A4-A4, 2009
 6. 松本全史・里村雄彦 : 円筒座標系を用いたモデルによる竜巻複合渦の数値シミュレーション : 非静力学モデルに関するワークショップ講演予稿集, ppC1-C1, 2009
 7. 松本全史・里村雄彦 : 竜巻の複合渦の理想化数値シミュレーションによる構造解析 : 日本気象学会 2009年度秋季大会講演予稿集, ppB311-B311, 2009
 8. Yamazaki, H. and T. Satomura : Nonhydrostatic atmospheric modeling using a combined Cartesian grid : *Proc. of 8th Int. SRNWP-Workshop on Nonhydrostatic Modelling*, pp.3-3, 2009
 9. Satomura, T. : Numerical simulation of moving precipitation systems over the northern Bay of Bengal : *Proc. 8th Int. SRNWP-Workshop on Nonhydrostatic Modelling*, pp.27-27, 2009
 10. Yamazaki, H. and T. Satomura : Development of ultra-high resolution atmospheric model : *Abstract of MOCA-09*, pp.MO9.9-29417, 2009
 11. Yamamoto, K., T. Satomura, B. Sysouphantavong, and S. Phonevilay : Nighttime precipitation maximum observed by Vientian radar during boreal summer monsoon period : *Abstract of MOCA-09*, pp.J17.13-23417, 2009
 12. Satomura, T. : Moving precipitation systems over the northern Bay of Bengal : *Abstract of MOCA-09*, pp.J17.59-23311, 2009
 13. Hiroshi Ohno and Tetsuya Takemi : Mechanisms for the intensification and maintenance of numerically simulated dust devils : *Atmospheric Science Letters*, in press, pp. in press-in press
 14. Kosuke Ito, Yoichi Ishikawa, and Toshiyuki Awaji : Specifying Air-Sea Exchange Coefficients in the High-Wind Regime of a Mature Tropical Cyclone by an Adjoint Data Assimilation Method : *SOLA*, Vol.6, pp.13-16,
 15. Kosuke Ito, Yoko Naito, and Shigeo Yoden : Combined effects of QBO and 11-year solar cycle on the winter hemisphere in a stratosphere-troposphere coupled system : *GEOPHYSICAL RESEARCH LETTERS*, Vol.36, pp. L11804- doi:10.1029/2008GL037117
 15. 浦田優美, 久家慶子, 加瀬祐子 : 断層の不連続部分における動的な破壊の乗り移り —摩擦

- 発熱による間隙圧上昇の影響－：月刊地球，
Vol. 31, No. 5, pp. 294-299, 2009
17. 浦田優美, 久家慶子, 加瀬祐子 : Effect of thermal pressurization on dynamic rupture propagation under depth-dependent stress : 日本地球惑星科学連合2009年大会, pp. S148-P003- S148-P003, 2009
 18. Yumi Urata, Keiko Kuge, Yuko Kase : Effect of thermal pressurization on dynamic rupture propagation under depth-dependent stress : AGU Fall Meeting 2009, pp. T23C-1931-T23C-1931, 2009
 19. Shigenori Otsuka and Shigeo Yoden : Temporal-spatial distribution of thin moist layers in the midtroposphere over the tropical eastern Pacific : Journal of Climate, Vol. 22, No. 19, pp.5102-5114, 2009
 20. M. Hikishima, S. Yagitani, Y. Omura, and I. Nagano : Coherent nonlinear scattering of energetic electrons in the process of whistler mode chorus generation : Journal of Geophysical Research, Vol.114, No. A10205, doi:10.1029/2009JA014371, 2009
 21. Tsubouchi, K. : Alfvén wave evolution within the corotating interaction regions associated with the formation of magnetic holes/decreases : Journal of Geophysical Research, Vol.114, No. A02101, doi:10.1029/2008JA013568, 2009
 22. Shimizu, T., Kondoh, K., Shibata, K., & Ugai, M : HD Study for Three-dimensional Instability of the Spontaneous Fast Magnetic Reconnection : Phys. Plasmas , Vol. 16, No. 052903, 2009
 23. Shimizu, T., Kondoh, K., & Ugai, M. : Three-dimensional Non-linear Instability of Spontaneous Fast Magnetic Reconnection : Earth Planets Space , Vol.61, pp.569-572, 2009
 24. Shimizu, T., Kondoh, K., Ugai, M., & Shibata, K. : MHD study of 3d fast magnetic reconnection for intermittent snake-like downflows in solar flares : Astrophys. J., Vol. 707, pp. 420-427, 2009
 25. Miyake, Y., and H. Usui : New Electromagnetic Particle Simulation Code for the Analysis of Spacecraft-Plasma Interactions : Phys. Plasmas, Vol. 16, pp. 062904:1-11, 2009
 26. Kondoh, K. and Ugai, M. : Three-dimensional earthward fast flow in the near-Earth plasma sheet in a sheared field: comparisons between simulations and observations : Ann. Geophys., Vol. 27, pp. 2297-2302, 2009
 27. Kondoh, K., Ugai, M. and Shimizu, T. : Three dimensional configuration of earthward fast plasma flow in the near-Earth plasma sheet : Earth Planets and Space, Vol. 61, pp. 611-614, 2009
【4500 プラズマ理工学】
 28. Umeda, T. : Electromagnetic plasma emission during beam-plasma interaction: Parametric decay versus induced scattering : Journal of Geophysical Research, Vol. 115, No. A1,A01204,doi:10.1029/2009JA014643, 2009
【4600 化学】
 29. K. Fujimoto, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji : Color tuning mechanism in human red, green, and blue cone visual pigments: SAC-CI theoretical study: Bull. Chem. Soc. Jpn., Vol. 82, pp.1140-1148, 2009
 30. J. Hasegawa, M. Higuchi, Y. Hijikata, and S. Kitagawa : Charge-polarized coordination space for H₂ adsorption : Chem. Mater. , Vol. 21, No.9, pp. 1829-1833, 2009
 31. N. Nakatani, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji : Artificial Color Tuning of Firefly Luminescence: Theoretical Mutation by Tuning Electrostatic Interactions between Protein and Luciferin : Chem. Phys. Letters, Vol.469, No.1-3, pp.191-194, 2009
 32. Y. Kiyota, J. Hasegawa, K. Fujimoto, B. werts, and H. Nakatsuji : A multi-core QM/MM approach for the geometry optimization of chromophore aggregate in proteins : J. Comp. Chem , Vol. 30, No.8, pp. 1351-1359, 2009
 33. Y. Ito, H. Takahashi, J. Hasegawa, and N. J.

- Turro : Photocyclization of
2,4,6-Triethylbenzophenones in the Solid
State : Tetrahedron, Vol. 65, No. 3, pp.677-689,
2009
34. T. Miyahara, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji :
Circular Dichroism and Absorption
Spectroscopy for Three-membered Ring
Compounds Using Symmetry-adapted
Cluster-Configuration Interaction (SAC-CI)
Method: Bull. Chem. Soc. Jpn., Vol. 82, No.10,
pp.1215-1226, 2009
35. J. Hasegawa, A. Obata, and K. Matsuda :
Generalizing the bra state in the
symmetry-adapted cluster singles and doubles
method and the second-order perturbation
correction : Chem. Phys. Letters , Vol. 486,
No.1-3, pp. 84-88, 2010
36. J. Hasegawa, T. Ise, K. Fujimoto, A. Kikuchi,
E. Fukumura, A. Miyawaki, and Y. Shiro :
Excited States of Fluorescent Proteins, mKO
and DsRed: Chromophore-protein
Electrostatic Interaction Behind the Color
Variations : J. Phys. Chem. B, Vol.114, No.8,
pp.2971-2979, 2010
37. T. Hirose, J.-y. Hasegawa, and K. Matsuda :
Theoretical Investigation on the Origin of the
CD Signal Reversal for the Closed-ring Isomer
of Diarylethene with Peripheral
 π -Conjugated Substituents : Chem. Lett.
Vol.39, No.5, pp.516-517, 2010
【4700 化学】
38. 川口 久文, 山田 知典, 梶 弘典:有機EL正孔輸
送材料TPDの電荷輸送シミュレーション: 高分
子学会予稿集, Vol. 58, No. 2, pp. 4081-4081,
2009
39. 川口 久文, 山田 知典, 梶 弘典:正孔輸送材料
TPDにおける電荷輸送シミュレーション: 応用
物理学学会学術講演会講演予稿集, Vol. 70, No. 3,
pp. 1215-1215, 2009
40. 川口 久文, 山田 知典, 梶 弘典:モンテカルロ
計算による有機電荷輸送材料の移動度・輸送過
程解析: 京都大学化学研究所第109回研究発表
会講演要旨, pp. 24-24, 2009
【4800 化学】
41. Shigeaki Obata, Satoshi Takeya, Hiroshi
Fujihisa, Kazumasa Honda, Yoshito Gotoh :
Phase Transition Analysis of
5-Aminotetrazole from Room Temperature to
the Melting Point : The Journal of Physical
Chemistry B, Vol.114, pp. 12572-12576, 2010
【4900 応用物理学】
42. M. Okano, T. Yamada, J. Sugisaka, N.
Yamamoto, M. Itoh, T. Sugaya, K. Komori
and M. Mori : Design of two-dimensional
photonic crystal nanocavities with
low-refractive-index material cladding :
Journal of Optics, Vol. 12, No. 1, pp.015108-1
-015108-9, 2009
【5600 統合工学】
43. Tatsuya Nagaoka, Hiroaki Ohta, Koji
Eriguchi, and Kouichi Ono : Numerical Study
on Si Etching by Monatomic Br⁺/Cl⁺ Beams
and Diatomic Br₂⁺/Cl₂⁺/HBr⁺ Beams :
Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 48,
pp. 70219-70221, 2009
44. Hirotaka Tsuda, Koji Eriguchi, Kouichi
Ono, Hiroaki Ohta :
Molecular-Dynamics-Based Profile Evolution
Simulation for Sub-10-nm Si Processing
Technology : Applied Physics Express, Vol. 2,
pp. 116501-1 -116501-3, 2009
45. Y. Yamamoto, T. Kunugi and Y. Tsuji : Effects
of very-large scale structures in a
high-Reynolds turbulent channel flow on
medium-high Prandtl number : Turbulence,
Heat and Mass Transfer 6, K.Hanjalic, Y.
Nagao and S. Jakirlic(ed.), pp.123-126, 2009
46. 清水浩之, 小山倫史, 石田毅, 千々松正和, 藤
田朝雄 : 粒状体個別要素法による一軸圧縮下
における岩石のClass II挙動の解析 : Journal of
MMIJ, Vol. 126, No.1,2, pp.1-9, 2009
47. H.Shimizu, T.Koyama, T.Ishida,
M.Chijimatsu, T.Fujita and S.Nakama :
Distinct element analysis for ClassII
behavior of rock under uniaxial
compression : International Journal of Rock
Mechanics and Mining Sciences, Vol.47,
pp.323-333, 2009

48. 清水浩之, 村田澄彦, 石田毅: 粒状体個別要素法における岩石力学物性の設定に及ぼす粒子数および粒度分布の影響: 材料, Vol. 59, No. 3, pp. 219-226, 2009
49. H.Shimizu, T.Ishida and S.Murata:
THE DISTINCT ELEMENT ANALYSIS FOR
HYDRAULIC FRACTURING
CONSIDERING THE FLUID VISCOSITY :
Proc. of the 43rd U.S.Rock Mechanics
Symposium, pp. 61-62, 2009
50. H.Shimizu S.Murata, T.Ito and T.Ishida :
Distinct Element Modeling for Hydraulic
Fracturing in Unconsolidated Sands : Proc. of
The Sixth International Conference on Flow
Dynamics, pp. 50-51, 2009
51. 大谷敏記, 村田澄彦, 赤工浩平, 岡部孝: 実
岩石における CO₂-水系相対浸透率のキャピ
ラリー数依存性について: 平成 21 年度石油技
術協会春季講演会要旨集, pp. 99-99, 2009
52. Asahiko Matsuda, Yoshinori Nakakubo,
Yoshinori Takao, Koji Eriguchi, and Kouichi
Ono: Modeling of ion-bombardment damage
on Si surfaces for in-line analysis : Thin Solid
Films, Vol.518, No. 13, pp.3481-3486, 2010
53. Kouichi Ono, Hiroaki Ohta, and Koji
Eriguchi : Plasma?surface interactions for
advanced plasma etching processes in
nanoscale ULSI device fabrication: A
numerical and experimental study : Thin
Solid Films, Vol.518, No. 13, pp.3461-3468,
2010
54. Ikkoh Funaki and Hiroshi Yamakawa :
Research Status of Sail Propulsion Using
the Solar Wind : Journal of Plasma and
Fusion Research SERIES, Vol.8,
pp.1580-1584, 2009
55. Y. Kajimura, K.Ueno, I. Funaki, H. Usui, M.
Nunami, I. Shinohara, M. Nakamura, H.
Yamakawa : 3D Hybrid Simulation of Pure
Magnetic Sail including Ion-Neutral
Collision Effect in Laboratory : JOURNAL
OF PROPULSION AND POWER, Vol.57,
No. 666, pp.287-294, 2009
56. 梶村 好宏, 船木 一幸, 西田 浩之, 臼井 英之,
篠原 育, 山川 宏, 中島 秀紀: プラズマ噴射に
よる磁気圏拡大現象におけるイオン粒子効果の
定量評価: 日本航空宇宙学会論文集, Vol. 57, No.
666, pp. 287-294, 2009
- 【5700 生物学】
57. Mariko Kageyama, Masaharu Motokawa,
and Tsutomu Hikida : Geographic variation
in morphological traits of the large
Japanese field mouse, *Apodemus speciosus*
(Rodentia, Muridae), from the Izu Island
Group, Japan : Zoological Science, Vol.26,
pp.266-276, 2009
58. Yi Wu, Masashi Harada, and Masaharu
Motokawa : Taxonomy of *Rhinolophus*
yunnanensis Dobson, 1872 (Chiroptera:
Rhinolophidae) with a description of a new
species from Thailand: *Acta*
Chiropterologica, Vol.11, No. 2, pp.237-246,
2009
- 【6500 農学】
59. Chanseok Ryu, Masahiko Suguri, Mikio
Umeda : Model for predicting the nitrogen
content of rice at panicle initiation stage
using data from airborne hyperspectral
remote sensing : *Biosystems Engineering*,
Vol.104, pp.465-475, 2009.12
60. 柳 讚錫, 村主勝彦, 梅田幹雄: ハイパース
ペクトルセンシングによるチャの収量と品質
推定: 日本農業機械学会誌, Vol. 72, No. 1,
pp. 46-53, 2010. 1
- 【6800 薬学】
61. Fukudo, M., Yano, I., Shinsako, K., Katsura,
T., Takada, Y., Uemoto, S., Inui, K. :
Prospective evaluation of the Bayesian
method for individualizing tacrolimus dose
early after living-donor liver
transplantation. : *J. Clin. Pharmacol.*, Vol.49,
No. 7, pp.789-797, 2009
- 【7200 内科系臨床医学】
62. 金津将庸, 山本洋紀, 澤本伸克, 福山秀直,
齋木潤: ヒト頭頂間溝のトポグラフィック領域
における視覚性短期記憶関連活動: 電子情報通
信学会技術研究報告, Vol. 109, No. 470,
pp. 329-334, 2010. 3

大型計算機システム利用負担金

(2009年4月1日より)

別表1 スーパーコンピュータシステム

コース	タイプ	セット	利用負担額	提供サービス					
				システム	バッチ	システム資源	経過時間 (時間)	ディスク (GB)	利用者 番号
エントリ	—	基本	12,600 円/年	Thin SMP	共有	最大1ノード相当(並列数16、メモリ32GB)	1	60	—
パーソナル	タイプ1	基本	100,000 円/年	Thin SMP	共有	最大2ノード相当(並列数32、メモリ64GB)	168	600	—
	タイプ2	基本	100,000 円/年	Fat SMP	共有	最大2ソケット相当(並列数8、メモリ64GB)	168	600	—
グループ	タイプ1	最小	250,000 円/年	Thin SMP	優先	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	336	2,000	6
		追加単位	250,000 円/年				—	2,000	6
	タイプ1B	最小	300,000 円/年	Thin SMP	準優先	4ノード((16コア、メモリ32GB) × 4)	336	2,400	12
		追加単位	150,000 円/年				—	1,200	6
	タイプ1C	最小	750,000 円/年	Thin SMP	占有	4ノード((16コア、メモリ32GB) × 4)	336	4,000	12
		追加単位	375,000 円/年				—	2,000	6
	タイプ2	最小	400,000 円/年	Fat SMP	優先	4ソケット(16コア、メモリ128GB)	336	4,000	12
		追加単位	200,000 円/年				—	2,000	6
	タイプ2B	最小	240,000 円/年	Fat SMP	準優先	4ソケット(16コア、メモリ128GB)	336	2,400	12
		追加単位	120,000 円/年				—	1,200	6
大規模ジョブ	タイプ1	最小	24,000 円/週(7日)	Thin SMP	優先	4ノード((16コア、メモリ32GB) × 4)	—	—	—
		追加単位	6,000 円/週(7日)				—	—	—
	タイプ2	最小	20,000 円/週(7日)	Fat SMP	優先	4ソケット(16コア、メモリ128GB)	—	—	—
		追加単位	5,000 円/週(7日)				—	—	—
専用クラスター	—	最小	750,000 円/年	Thin SMP	—	4ノード((16コア、メモリ32GB) × 4)	—	4,000	12
	—	追加単位	375,000 円/年				—	2,000	6
ライセンスサービス			20,000 円/年	可視化ソフト(AVS,ENVI/IDL)およびプリポストウェアの1ライセンスにつき					

備考

- 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
 - 大判プリンタサービス
 - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ライセンスサービスの申請には、大型計算機システムの利用者であることが必要である。
- 「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。
「準優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。
「優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。
また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。
「占有」：稼働状況によらず記載値(以上)の計算資源が確保されることを保証する。
- ディスク容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。
- グループコース及び専用クラスターコースのシステム資源は、下記の負担額を支払うことにより増量することができる。
なお増量は各月1日に実施し、増量した資源は当該年度末までの期間にわたって利用されるものとする。

コース	タイプ	追加負担金額(増量単位あたり)	システム資源増量単位	ディスク増量(GB)
グループ	タイプ1	25,000 円/月	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	2,000
	タイプ1B	15,000 円/月	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	1,200
	タイプ1C	37,500 円/月	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	2,000
	タイプ2	20,000 円/月	2ソケット(8コア、メモリ64GB)	2,000
	タイプ2B	12,000 円/月	2ソケット(8コア、メモリ64GB)	1,200
専用クラスター	—	37,500 円/月	2ノード((16コア、メモリ32GB) × 2)	2,000

7. グループコース及び専用クラスターコースを通年でなく利用する場合には、下記の負担額を支払うものとする。
ただし、利用期間は当該年度内に限るものとする。

利用期間			3ヶ月	6ヶ月	9ヶ月
グループ コース	タイプ1	最小	100,000 円	150,000 円	225,000 円
		追加単位	100,000 円	150,000 円	225,000 円
	タイプ1B	最小	120,000 円	180,000 円	270,000 円
		追加単位	60,000 円	90,000 円	135,000 円
	タイプ1C	最小	300,000 円	450,000 円	675,000 円
		追加単位	150,000 円	225,000 円	337,500 円
	タイプ2	最小	160,000 円	240,000 円	360,000 円
		追加単位	80,000 円	120,000 円	180,000 円
	タイプ2B	最小	96,000 円	144,000 円	216,000 円
		追加単位	48,000 円	72,000 円	108,000 円
専用クラス ターコース	—	最小	300,000 円	450,000 円	675,000 円
	—	追加単位	150,000 円	225,000 円	337,500 円

8. グループコース及び専用クラスターコースの利用者番号は利用者あたり年額5,000円を負担することで追加できる。

9. 機関・部局定額制度

他機関又は学内における部局(『国立大学法人京都大学の組織に関する規程』第3章第2節から第11節で定める組織をいう。)の組織が、その組織単位でグループコースサービス(年間)の利用を申請する場合、料金表(年間)に掲載額の1.5倍を利用負担金とする。なお、利用負担金額が150万円未満の場合は100人、150万円を超える場合は、150万円毎に100人までの利用者を認める。

別表2 汎用コンピュータシステム

区分	利用負担額	単位
VMホスティングサービス	126,000円/年	1仮想マシンにつき
ホームページサービス	31,500円/年	1ドメイン名につき
個人向けホームページサービス	12,600円/年	1アカウントにつき
メール転送サービス	12,600円/年	1ドメイン名につき

備考

1. 利用負担額は、総額表示である。
2. 上記表の汎用コンピュータシステムのサービスを利用するためには、大型計算機システムの利用者であることが必要である。
3. ホームページサービス及びVMホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことによりオプションサービスを利用することができる。

オプションサービス種別	利用負担額	単位
データベース(Oracle)	63,000円/年	1アカウントにつき
ストリーミング(Helix)	31,500円/年	1アカウントにつき

4. VMホスティングサービスのシステム資源は、下記の負担額を支払うことにより増量することができる。

種別	利用負担額	単位
ディスク	10,500円/年	100GBにつき
システム資源	100,800円/年	1台につき

システム資源1台とは、CPU:2コア、メモリ:2GB である。

5. VMwareを用いたVMホスティングサービスは、下記の負担額を支払うことにより利用・増量することができる。
ただし、システム資源が非常に限られているためサービスを提供できる場合が限定される。

種別	利用負担額	単位
標準機能サポート	25,200円/年	1仮想マシンにつき
ディスク	10,500円/年	100GBにつき
システム資源	201,600円/年	1台につき

システム資源1台とは、CPU:1コア、メモリ:2GB である。

6. 利用負担額は、当該年度(4月から翌年3月まで)の利用に対して年額として算定するが、年度途中から利用を開始する場合には月数に応じて減額する。

— サービス利用のための資料一覧 —

1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

- Thin SMP クラスタ : thin.kudpc.kyoto-u.ac.jp
 - Exceed onDemand 接続 : thinX11.kudpc.kyoto-u.ac.jp
 - Fat SMP クラスタ : fat.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- ※ ホストへの接続は SSH(Secure Shell)のみ、telnet, ftp は不可

2. 問い合わせ先 & リンク集

- 情報環境機構のホームページ
<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/>
- 学術情報メディアセンターのホームページ
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
- スーパーコンピュータシステムに関する問い合わせ先
 - 利用申請などに関する問合わせ先
【共同利用支援グループ・共同利用担当（北館窓口）】
E-mail : zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7424 / Fax : 075-753-7449
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/>
 - システムの利用など技術的な問合わせ
【コンピューティンググループ】
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7426
URL: <http://web.kudpc.kyoto-u.ac.jp/>
- ホームページ・ホスティングサービスに関する問合わせ先
【学術情報基盤グループ】
E-mail : whs-qa@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7494
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/whs/>
- コンテンツ作成支援サービスに関する問合わせ先
【コンテンツ作成室】
E-mail : cpt@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-9012
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/content/>

編 集 後 記

今、出張で上海にきていますが、地下鉄のプラットホームにはちゃんと転落防止用のホームドアがあるし、車内にはニュースを流す液晶ディスプレイが設置されているし、東京の鉄道などと比べても遜色ない設備ですね。道ゆく人を見ても日本人とあまり違いがわかりませんし、コンビニやスタバもいたるところにありますし、まだ様々な問題を抱えているとはいえ、中国が日本に匹敵する経済大国になったのだということを実感させられます。食事も口に合うので、これまで訪れた諸外国の中では一番快適に過ごさせています。ホテルのテレビが YOSHIBA 製だったのはお約束。

たす

今まで山歩きと言えば、市販の地図に実線として書かれている登山道を歩き頂上に至り下山するのが普通だと思っていましたが、とある勤労者山岳会の方の地図読み山行に参加させていただいたところ、あらかじめ縮尺2万5千分の1の地図をさらに1.5倍に拡大したものとコンパスを用い、地図上の等高線と周りの地形を見比べ、沢の位置や尾根の形状から現在位置を確認しながら歩きますので、道迷いも少なくなり、傾斜さえ緩ければ道のない斜面や沢筋など色々な所が歩けることを経験できました。ただあまり山深く入り過ぎて熊に出くわさないか心配な今日この頃です。

山の家族

京都大学学術情報メディアセンター全国共同利用版広報 Vol. 9, No. 2

2010年 12月 27日発行

編集者 京都大学学術情報メディアセンター
 広報教育委員会・全国共同利用版広報編集委員会
 発行者 〒606-8501 京都市左京区吉田本町
 京都大学学術情報メディアセンター
 Academic Center for Computing and Media Studies
 Kyoto University
 Tel. 075-753-7400
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
 印刷所 京都市中京区壬生花井町3番地
 ニッシャビジネスサービス株式会社

広報編集部会

岩下 武史 (部会長)

平石 拓 (副部会長)

赤坂 浩一

秋田 祐哉

竹田 哲人

高見 好男

疋田 淳一

元木 環

表紙デザイン：谷 卓司

(ティアンドティ・デザインラボ)

