

目次

[巻頭言]

・共同研究拠点発足にあたって 美濃尊彦 1

[スーパーコンピュータ共同研究制度(若手奨励枠)研究報告]

・フラーEN C₆₀誘導体材料における電子輸送 その本質的理解に基づく効率的な新規材料設計 德永 健 2

・色覚を司る錐体視物質におけるカラー・チューニング機構の解明:高精度量子化学計算による理論的研究 長谷川淳也、藤本和宏、中辻 博
長谷川淳也、寺川寿子、加藤愛太郎

・CMT データインパージョンによる2004 年新潟県中越地震・震源域の応力場 余震活動と間隙流体圧の関係 7
寺川寿子、加藤愛太郎

・密度汎関数タイプバイナリゼーション法による単層カーボンナノチューブの核生成シミュレーション 太田靖人 10

・自由エネルギーに基づく高分子からみあい系のダイナミクス 堀尾和史 12

・硫黄吸着Au(111)の走査トンネル顕微鏡観察 黒川 修 14

・高分子のシミュレーション 増渕雄一 16

・連続カオス力学系の不安定周期軌道上の軌道平均値 斎木吉隆 18

・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 20

加藤雄人、大村善治

・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 23

・Laplace 逆変換の数値計算ソフトウェアの開発 藤原宏志 25

・円管内乱流パフの生成維持機構 27

清水雅樹、木田重雄

・有機EL 正孔輸送材料TPD の電荷輸送特性 29

山田知典、梶 弘典、佐藤 徹、田中一義

・靈長類ゲノム配列を用いた嗅覚受容体遺伝子の比較解析 ヒトの嗅覚は他の靈長類よりも劣っているのだろうか? 31

松井 淳、郷 康広、新村芳人

・巨大クラスターイオン衝突における密度効果 青木学聰 33

・3次元大規模並列電磁粒子シミュレーションを用いた科学衛星搭載用波動電界アンテナの特性解析 35

三宅洋平、臼井英之

・密度行列繰り込み群法を用いた有限温度における低次元強相関電子系の研究 曽田繁利 38

・電子構造論に基づくグリコシリ化反応中間体の構造予測及び設計 野上敏材 40

[プログラム高度化支援事業研究報告]

・南海トラフ巨大地震発生サイクルの物理的理 42

平原和朗、光井能麻、堀 高峰

・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 46

淡路敏之、石川洋一、島 茂樹、印 貞治、中山智治

・分子動力学計算プログラムMoDa Caetano R. Miranda... 49

・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 53

・原子・分子過程を取り入れたプラズマの複雑性と構造形成 拡張型3次元電磁粒子コード(EPIC3D)によるシミュレーション研究 57

岸本泰明、斎藤大介、宮園智也

・宇宙プラズマ粒子シミュレーションコードの高度化 61

衛星搭載電界アンテナ特性解析用3次元電磁粒子シミュレーションコードの分散メモリ並列化および高効率化

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

宇宙プラズマにおけるミラー不安定性の非線形発展の研究

臼井英之、三宅洋平、梶村好宏、中島 浩、大村善治、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]

・判別式計算における世界記録への挑戦 木村欣司 65

・格子ボルツマン法を用いた貯留岩の空隙ネットワーク内における流体残留挙動の解明 村田澄彦 70

・分子動力学法によるシリカナノチューブの安定性と力学的特性に関する研究 Caetano R. Miranda... 74

[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 78

・汎用コンピュータシステムのサービス状況 80

・センター利用による研究成果(平成20年度) 81

[資料]

・大型計算機システム利用負担金 別表 86

・サービス利用のための資料一覧 88

[編集後記]

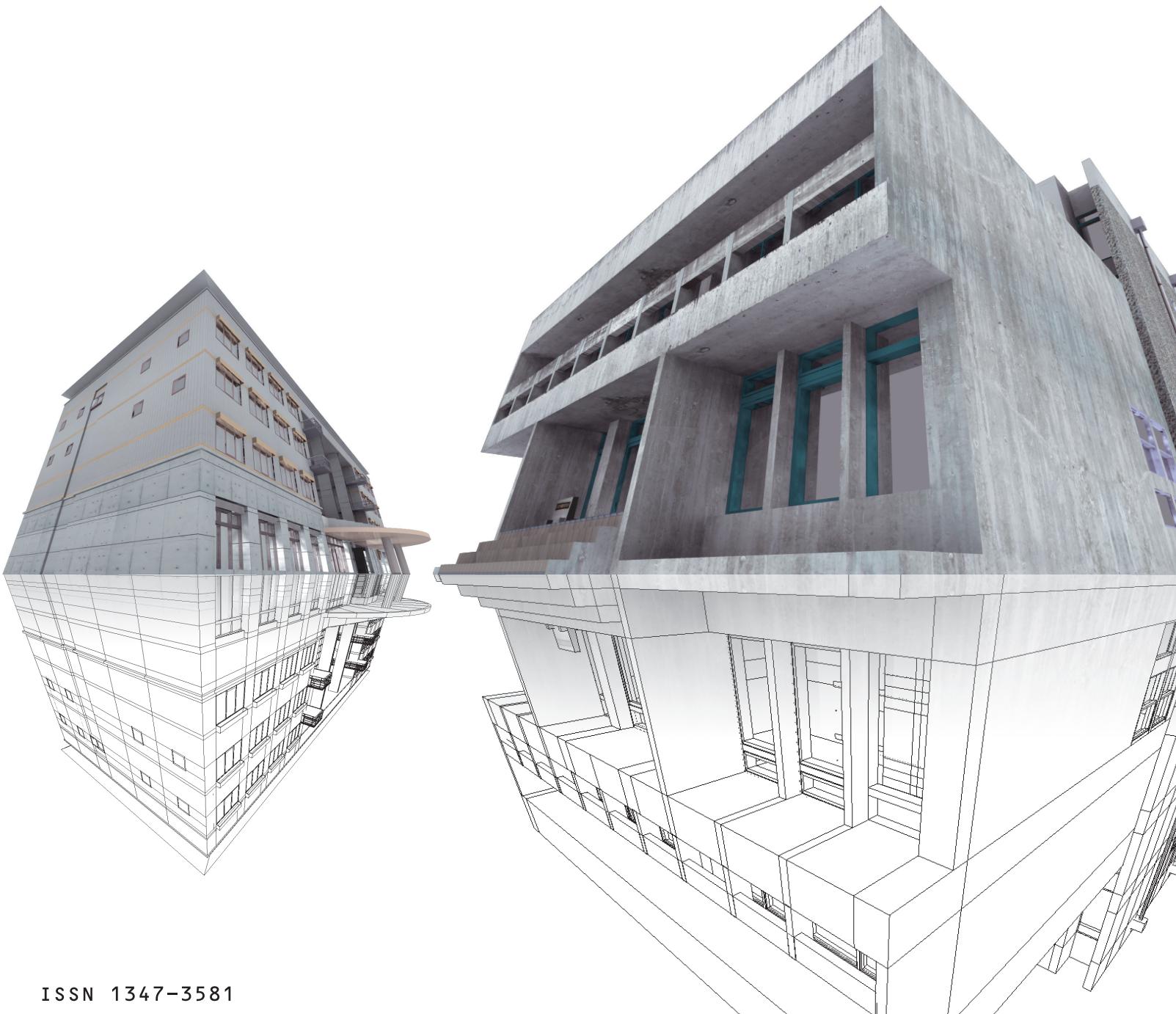
・編集後記、奥付 90

全国共同利用版 [広報]

京都大学学術情報メディアセンター

【特集】スーパーコンピュータ共同研究報告

【若手奨励枠】徳永 健◎長谷川淳也、藤本和宏、中辻 博◎寺川寿子、加藤愛太郎◎太田靖人◎堀尾和史◎黒川 修◎増渕雄一◎斎木吉隆◎加藤雄人、大村善治◎梅山有和◎藤原宏志◎清水雅樹、木田重雄◎山田知典、梶 弘典、佐藤 徹、田中一義◎松井 淳、郷 康広、新村芳人◎青木学聰◎三宅洋平、臼井英之◎曾田繁利◎野上敏材 【プログラム高度化支援事業】平原和朗、光井能麻、堀 高峰◎淡路敏之、石川洋一、島 茂樹、印 貞治、中山智治◎Caetano R. Miranda◎山本量一◎岸本泰明、斎藤大介、宮園智也◎臼井英之、三宅洋平、梶村好宏、中島 浩、大村善治、小路真史 【大規模計算支援枠】木村欣司◎村田澄彦◎Caetano R. Miranda



共同研究拠点発足にあたって

京都大学学術情報メディアセンター長

美濃 導彦

京都大学学術情報メディアセンター（以下：本センター）は2010年度より、学際大規模情報基盤ネットワーク型共同利用共同研究拠点の構成拠点として認定されました。この拠点は、全国共同利用情報基盤センター長会議で議論した結果、各センターが単独で申請するのではなく、東京工業大学を含めたスーパーコンピュータを有する大学の情報基盤センターがまとめてネットワーク型拠点を形成するという形態をとりました。

この拠点では、来年度より正式に共同研究を募集します。基盤センターでのこれまでの共同研究は、計算機を利用する費用を負担するものが中心でしたが、今後の共同研究は、申請者がセンターの教員と一緒にになって、モデリングやアルゴリズムの研究、及び計算機プログラムの開発を行いうものに形態を変えてゆきます。これは、神戸で23年度から稼働する予定の次世代スーパーコンピュータが2万並列のマシンであることを考えると、応用分野の研究者が情報科学の知識や技術なしにアルゴリズムやプログラムを書いていたのではその能力が使いこなせないのではないかという認識に基づいております。このような共同研究を推進することでそれぞれの応用分野で新たなイノベーションが興せるのではないかと思っています。

日本のスーパーコンピュータ戦略は、文科省の各課の縛り争いと予算獲得競争の結果、大学に2種類のスーパーコンピュータを導入するという無駄な投資が続けられております。一つは、大学の基盤センター系におかれている汎用システムで誰でもある程度の負担金を支払えば利用できるものです。もう一つは、特定の応用分野で基盤センター系とは独立に運用されているコンピュータ群で、研究課題を申請し承認されれば無料で使用できるものです。昨今の経済情勢や情報技術の進展から考えれば、このような戦略は二重投資になっているのは明らかです。何らかの形で統合することを考えていかなければなりません。

このような状況ですので、学際大規模情報基盤共同利用共同研究拠点が優れたイノベーションを数多く起こしたという実績を示すことが大変重要になります。基盤センター系の先生方は特にこのようなことを意識して、各研究分野と積極的な共同研究を展開してゆかれるとともに、優秀な人材を計算科学分野で育成してゆく教育に力を注いでいただければ幸いです。利用者におかれましては、これまで以上に情報系の研究者と連携してそれぞれの分野における研究を進めてゆくことがイノベーションにつながると考えていただいて、積極的に共同研究への申請、参加をお願いしたいと思います。

本号では、本センターが平成20年度において行った共同研究制度の報告を中心に記事をまとめました。本センターとしましては、今後は共同研究に重点を置いて運営してゆきますので、利用者の皆様におかれましては、共同研究に関するご意見、ご助言等を積極的にセンターの方へお寄せいただきますようご協力をお願い申し上げます。

フラーレン C_{60} 誘導体材料における電子輸送

その本質的理解に基づく効率的な新規材料設計

徳永 健

九州大学 高等教育開発推進センター

フラーレン C_{60} は有機デバイスの電子輸送材料として知られているが、実際には C_{60} そのものではなく、溶液プロセスに適応できる C_{60} 誘導体にして用いることが多い。このため、 C_{60} よりも C_{60} 誘導体の電子輸送特性に興味が持たれる。本稿では、 $C_{60}X_2$ における「 X の種類・付加位置」と「電子輸送特性」の関係を解明する最近の取り組みとともに、 C_{60} 誘導体材料の効率的な設計手法を紹介する。

1 はじめに

近年、有機 EL や有機 FET に代表される有機デバイスの研究・開発が盛んに行われている。有機半導体材料は、この有機デバイスにおいてキャリア（ホール・電子）の輸送を担う重要なパーツである。実用的な有機半導体材料には、キャリア移動度の大きさはもちろんのこと、低コストのデバイス製造プロセス（溶液プロセス）への適応も求められる。

ホール輸送材料に関しては、ホール移動度が無機半導体材料（非晶性シリコンで約 $1 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ ）に匹敵し、かつ、溶液プロセスに適応した材料が既に提唱されている。一方で、電子輸送材料として使用できる材料は限られているため、現在も新規材料の研究・開発が盛んに行われている。

フラーレン C_{60} （図 1 左）は真空蒸着法による薄膜で $1 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ の電子移動度を達成していることから、電子輸送材料として注目を集めてきた。し

かしながら、実用的な溶液プロセスに対応させるためには、 C_{60} を化学修飾して C_{60} 誘導体（図 1 右）にする必要がある。このとき、まず「 C_{60} と C_{60} 誘導体の電子輸送特性は同じなのか？違うのか？」、という率直な疑問が浮かぶ。また、ひとえに C_{60} 誘導体と言っても、 X の種類・付加位置・付加パターンの組み合わせは多種多様である。このため、種々の C_{60} 誘導体の電子輸送特性を支配する共通因子を特定することができれば、 C_{60} 誘導体を用いた新規材料の開発効率が飛躍的に増加するに違いない。

以前から筆者らは、 C_{60} 誘導体の有機半導体材料としての利活用に興味を持ち、研究を行っている[1,2,3]。本稿では、図 1(a)に示すタイプの C_{60} 誘導体 ($C_{60}X_2$) の電子輸送特性に関する筆者らの最近の取り組みを紹介する[4,5]。

2 電子輸送特性

2.1 Marcus 理論と再配列エネルギー

有機半導体材料の電子輸送特性の評価手法として、Marcus 理論がしばしば用いられる。まず、有機半導体材料における電子輸送を 2 分子間の電子移動反応に簡略化して考える。Marcus 理論によれば、2 分子間の電子移動反応速度定数 k は、

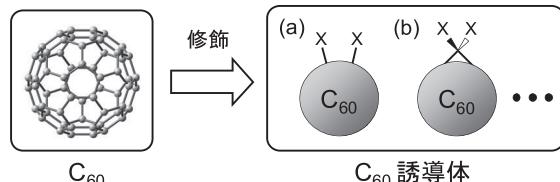


図 1. C_{60} と C_{60} 誘導体の例

$$k = \frac{4\pi^2}{h} \frac{H_{AB}^2}{\sqrt{4\pi\lambda k_B T}} e^{-\lambda/4k_B T} \quad (1)$$

と表される。ここで、 h は Planck 定数 k_B は Boltzmann 定数、 T は温度であり、 λ は再配列エネルギー、 H_{AB} は電子的相互作用と呼ばれる。この式から、 T が一定で H_{AB} が反応系に依存しないと仮定すれば、 λ が小さい反応系ほど k が大きくなり、電子移動が迅速に起こることが分かる。このため、 λ の低減が有機半導体材料の設計における重要なポイントの 1 つとなっている。 λ の具体的な計算方法に関しては、文献[1,2]を参照されたい。

2.2 X の種類・付加位置と再配列エネルギー

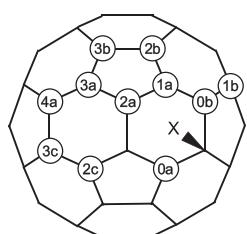


図 2. $C_{60}X_2$ の異性体。2番目の X が 0a - 4a のいずれかに付加する。

$C_{60}X_2$ の異性体として、図 2 に示す 0a - 4a の 11 個を考える。X として、H, C_3H_6COOH , C_4H_8SH を選んだ。COOH 基、SH 基は Langmuir-Blodgett 膜や自己組織化单分子膜の形成を狙いとしてしばしば導入されることから、これらの官能基が C_{60} の電子輸送特性に及ぼす影響を考察する意義は大きい。

図 3 の横軸は $C_{60}X_2$ の異性体 (X の付加位置)、縦軸は再配列エネルギー λ の値を表している。異性体 0a が最小の値 (約 140 meV)、異性体 1a が最大の値 (約 300 meV)、他の異性体は 200 meV 前後の値を有することが分かる。もともとの C_{60} の λ は 129 meV であることから、X の付加によって λ

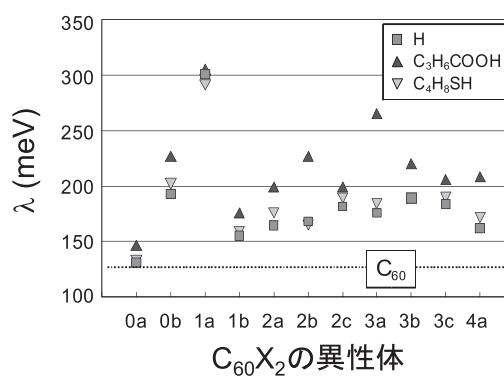


図 3. $C_{60}X_2$ の再配列エネルギー

が増加する（電子移動度が小さくなる）。この図 3 に関して、特筆すべきポイントが 2 つある。

1. λ は X の付加位置に大きく依存する
2. λ は X の種類にそれほど依存しない

C_{60} 誘導体の電子物性は C_{60} 部位の電子物性で概ね決まる。 C_{60} 部位の電子的・幾何学的構造は、X の付加位置によって大きく変化する。これが λ の違いとなって顕著に表れる。一方、 C_{60} と末端の COOH 基・SH 基の間にはアルキル鎖が存在するため、末端の官能基は C_{60} 部位の電子的・幾何学的構造にそれほど影響を及ぼさない。

ただし、図 3 を見ると、 $C_{60}(C_3H_6COOH)_2$ は他に比べやや大きな λ を有することが分かる。アルキル鎖長を $n=5,7$ と増加させるにつれて、 $C_{60}(C_nH_{2n}COOH)_2$ の λ は $C_{60}H_2$ の値に近づくことが分かっている[4,5]。このことから、図 3 の差は、 C_{60} と COOH 基の相互作用に起因すると考えられる。この結果から、COOH 基は SH 基よりも C_{60} と相互作用しやすいが、アルキル鎖長が十分に長ければ、近似的に $C_{60}H_2$ と等価であると考えてよいことが分かる。

3 おわりに

C_{60} と $C_{60}X_2$ の電子輸送特性は異なる。そして、 $C_{60}X_2$ の電子輸送特性を議論する際に注目すべきポイントは「何が付加しているか (X の種類・化学的性質)」ではなく「どこに付加しているか (X の付加位置)」である。

この結果は、実験的にも理論的に有用である。実験的に見ると、X の種類・化学的性質を気にせずに、合成しやすい C_{60} 誘導体を作っても、電子輸送特性への影響は小さいことを意味している。また、理論的に見ると、 $C_{60}X_2$ を $C_{60}H_2$ に簡略化して計算・議論できることから、計算にかかる時間・コストを削減できる。

これらの知見は、 C_{60} 誘導体を用いた有機半導体材料を効率的に設計する上で、強力なツールとなる。

4 謝辞

本研究は、京都大学学術情報メディアセンター
平成 20 年度スーパーコンピュータ共同研究制度
(若手研究者奨励枠) による支援のもとに行われ
た。また、本研究は、京都大学大学院工学研究科 助
教の川畑 弘 博士(現:文部科学省科学技術政策
研究所 上席研究官)と推し進めた研究の一つであ
る。川畑氏には、特に有機物理化学と分子デバイ
スそして知財工学という視点から、当該分野の研
究進捗状況と課題についても議論していただいた。
この場を借りて感謝申し上げる。

5 参考文献

- [1] K. Tokunaga *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **47**, 1089 (2008).
- [2] K. Tokunaga *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **47**, 3638 (2008).
- [3] 徳永 健、月刊『未来材料』、**8**, 24 (2008).
- [4] K. Tokunaga, *Chem. Phys. Lett.* **476**, 253 (2009).
- [5] 徳永 健、川畑 弘、月刊『機能材料』、**29**, 83 (2009).

色覚を司る錐体視物質におけるカラー・チューニング機構の解明： 高精度量子化学計算による理論的研究

^{1,2}長谷川 淳也、³藤本 和宏、²中辻 博

¹京都大学工学研究科合成・生物化学専攻、²量子化学研究協会(QCRI)、³京都大学理学研究科化学専攻

赤・緑・青の色覚を司る錐体視物質におけるレチナール蛋白質について、蛋白質が色素分子の励起エネルギーを制御する物理化学的なメカニズムを解明した。錐体視物質の蛋白質構造を QM/MM 計算により決定した。SAC-CI 法を用いて錐体視物質の励起状態を計算し、赤・緑・青色光に対応する光吸收エネルギーを再現することに成功した。次に物理化学的なメカニズムについての解析を行い、蛋白質が色素上に形成する静電ポテンシャルにより励起エネルギーが制御されることを明らかにした。更に、生物学的な起源を解明するために静電相互作用エネルギーをアミノ酸単位で分割して解析し、アミノ酸のシーケンスに特異的な励起エネルギーの制御機構が存在することを見出した。

1 はじめに

ヒトの網膜には赤・緑・青色光受容体として機能するレチナール蛋白質が存在し、3原色の光をセンシングすることができる¹⁾。これらレチナール蛋白質には色素であるレチナール分子が含まれており、赤・緑・青色光を受けて電子励起されることで色覚のシグナル伝達が開始される¹⁾。つまりレチナール蛋白質の光励起波長を赤・緑・青色光に合うように制御することで色覚が実現されているのである。ところが3種の蛋白質には共通の構造を有するレチナール色素が含まれている¹⁾。従って、蛋白質環境の作用によりレチナール色素の光吸收波長が制御されていることに色覚の分子メカニズムの本質がある。蛋白質が色素分子に働きかける相互作用として、立体的にレチナール色素の構造を歪ませる効果、電磁気学的なクーロン相互作用、量子力学的な相互作用などが考えられるが、いずれが要因であるのか未だ明確な解答には至っていない。本研究では、蛋白質による巧みな光吸收波長制御のメカニズムを理論化学計算により明らかにすることを目的とした。

2 蛋白質の QM/MM 計算と SAC-CI 法

本研究では蛋白質環境は量子化学と分子力学のハイブリッド法であるQM/MM法²⁾を用いて考慮し、

同法を用いて蛋白質の構造最適化を行った。蛋白質全体を量子化学計算する代わりに本質的に重要な相互作用を量子化学計算に取り入れ、それ以外を古典力学的に取り扱う方法である。本研究では図1に示すように、励起状態の記述に必要なレチナール色素とカウンターイオンを量子力学的に扱った。

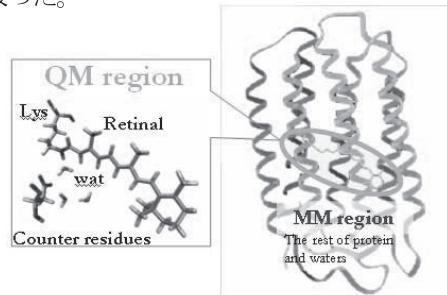


図1. QM/MM 法の概念図。電子状態を記述すべき領域 (QM)とそれ以外(MM)に分割した取り扱いを行う。

また、SAC-CI 法³⁾は我々が開発を進めてきた電子状態理論であり、分子の基底・励起状態を精度良く記述できる方法として確立し、近年 Gaussian プログラムにも導入された。本研究では QM 領域であるレチナール分子の励起エネルギーを計算するために SAC-CI 法を用いた。

3 カラー・チューニングの物理化学的起源

QM/MM 法により最適化された分子構造を用い

て、SAC-CI 法により励起エネルギーを計算したところ、HR, HG, HB 及び rhodopsin (Rh) の実験結果を誤差約 0.05 eV 程度で再現できた^{4,5)}。そこで、この結果と幾つかの異なるモデル計算を行い、励起エネルギーを制御する物理的因子について、色素の構造ひずみ、蛋白質との静電相互作用、カウンター残基の量子効果の寄与を明らかにした(図 2)。その結果、赤、緑、青のスペクトル変化の主因は蛋白質とレチナール色素の静電的な相互作用(図 2 紫)であった⁵⁾。レチナール色素の構造ひずみは、HB において寄与が観られたが、HG や HR における寄与は小さいことが示された。

レチナール蛋白質における色素-蛋白質間の静電相互作用について、その物理的描像を以前に報告した。励起に関わる色素の HOMO と LUMO には分布に偏りがあるため、励起状態には分子内電荷移動性がある。一方、蛋白質の静電ポテンシャルは HOMO と LUMO が分布する領域では大きく異なる。LUMO が分布する領域で著しく負に大きくなるため、HOMO-LUMO ギャップが変化して励起エネルギーが変化する。HB, HG, HR におけるレチナール骨格上の静電ポテンシャルを計算すると、HB > HG > HR の順に LUMO 領域の値が負方向に大きくなるため、この順に励起エネルギーが大きくなるのである。

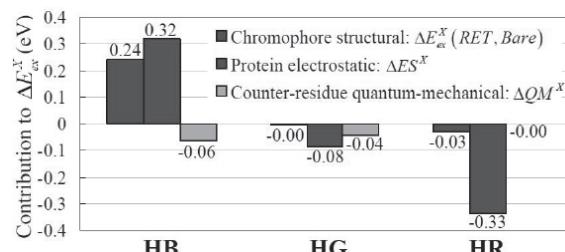


図 2 赤・緑・青色錐体視物質において励起エネルギーシフトにおける物理的効果の寄与。ロドプシンの結果を基準とする。青、紫、薄紫はそれぞれレチナール色素の構造歪み効果、蛋白質の静電的効果、カウンターアミノ酸の量子的効果を表している。

4 カラー・チューニングの生物学的起源

スペクトル制御の主因である静電的な相互作用の生物学的な起源を調べるために、静電相互作用による励起エネルギー変化がどのアミノ酸に由来するかを解析した(図 3)。その結果、レチナール蛋白質におけるアミノ酸シークエンスに特異的な

カラー・チューニング機構が見出された⁵⁾。例えば、186 位のアミノ酸は Rh, HG, HR の励起エネルギーを低エネルギーシフトさせ、HB との差別化がなされている。同様に 181,184 位からなる Cl⁻結合サイトは、HG, HR のみを低エネルギーシフトさせ、それ以外との差別化されている。このようなシークエンスに特異的かつ、系統的なカラー・チューニングにおいて、レチナール蛋白質の分子進化との関連性を見出すことができる。また、ミューテーション実験によるスペクトル変化を理論的なミューテーションにより再現することができ、上記の結果を確認することができた。

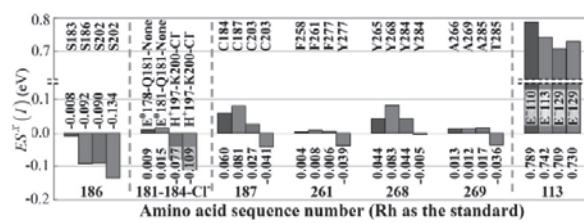


図 3. 赤・緑・青色錐体視物質及びロドプシンにおいて、励起エネルギー制御を担うアミノ酸シークエンスとその寄与。赤、緑、青、灰色グラフはそれぞれ赤・緑・青色錐体視物質、ロドプシンに対応する。シークエンス番号はロドプシンを基準とした。

5 おわりに

最後に、スーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠)によるサポートに感謝致します。

6 参考文献

- Y. Shichida, H. Imai, *Cell. Mol. Life Sci.* **1998**, *54*, 1299; R. M. Boynton, *Human Color Vision*. Holt, Rinehart and Winston, New York, **1979**; H. Kandori, Y. Shichida, T. Yoshizawa, *Biochemistry (Moscow)* **2001**, *66*, 1197.
- A. Warshel, M. Levitt, *J. Mol. Biol.* **1976**, *103*, 227; S. Hayashi, I. Ohmine, *J. Phys. Chem. B* **2000**, *104*, 10678.
- H. Nakatsuji, *Chem. Phys. Lett.*, **1978**, *59*, 362; H. Nakatsuji, *Chem. Phys. Lett.*, **1979**, *67*, 329; H. Nakatsuji, *Chem. Phys. Lett.*, **1979**, *67*, 334.
- K. Fujimoto, J. Hasegawa, S. Hayashi, and H. Nakatsuji, *Chem. Phys. Lett.*, **2006**, *432*, 252-256; K. Fujimoto, S. Hayashi, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji, *J. Chem. Theory Comput.* **2007**, *3*, 605-618.
- K. Fujimoto, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji, *Chem. Phys. Letters*, **2008**, *462*, 318-320; K. Fujimoto, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2009**, in press.

CMT データインバージョンによる 2004 年新潟県中越地震・震源域の応力場

余震活動と間隙流体圧の関係

寺川寿子^{1*} 加藤愛太郎²

¹ 東京大学・理学系研究科・地球惑星科学専攻

² 東京大学・地震研究所・地震火山噴火予知研究センター

*現所属 : Geodynamics, Steinmann-Institute, The University of Bonn

CMT データインバージョン法は、ベイズ的統計推論の手法を用いた信頼のおける新しい応力インバージョン法である。本研究では、ScalAPACK を用いた並列計算用の CMT データインバージョンプログラムを開発し、2004 年新潟県中越地震の震源域を対象とした本手法による応力場の解析を通じて、内陸大地震の余震活動の駆動メカニズムについて検討した。

1 はじめに

2004 年 10 月 23 日 17 時 56 分、新潟県中越地方の浅い地殻内（震源の深さ 13km）で、マグニチュード 6.8 の地震が発生した。本地震は、マグニチュード 5 以上の余震を 5 つも伴うなど、活発な余震活動が観測されたという特徴を持っている。一般に、マグニチュードがおよそ 6 以上の浅い地震には、余震活動が伴うことが多い。しかし、余震を駆動するメカニズムは、いまだに解明されていない。

これまでに、余震のメカニズムとして、本震によって引き起こされた応力場の静的変化 (e.g., King et al., 1994), その応力変化が引き起こす周辺断層群の摩擦特性の変化 (e.g., Toda et al., 2002), 地殻内にトラップされた高圧流体の拡散による間隙流体圧の変化 (e.g., Miller et al., 2004) などが提案されている。一方、興味深い観測事実として、大地震の前後で応力場のパターンが有意に変化したという研究例がある (Hardebeck & Hauksson, 2001)。このような応力場の変化は、多くの場合、地震による静的応力変化に基づいてとらえられ、それは地殻応力レベルがほとんどゼロに近いほど低いことの傍証として解釈されてき

た。しかし、大地震に誘発された間隙流体圧の増加は断層の強度を低下させ、mis-oriented な断层面での地震の発生を促し、応力場のパターンに見かけの変化を引き起こす可能性がある。

本研究では、新潟県中越地震を対象に、ベイズ的統計推論に基づいた信頼のおける CMT データインバージョン法 (Terakawa & Matsu'ura, 2008) による震源域の応力場の解析を通じて、大地震後の流体の拡散に伴う間隙水圧の変化が本地震の余震活動に与えた影響について検討した。データ解析には、並列計算用の線形代数ライブラリである ScalAPACK を用いた CMT データインバージョン法の並列プログラムを用いた。

2 ScalAPACK を用いた CMT データインバージョン法・並列プログラムの開発

CMT データインバージョン法の定式化の詳細は、Terakawa & Matsu'ura (2008) に譲り、本稿ではインバース問題の離散化方法と計算機上の処理に焦点を当てる。本手法は、ベイズ的モデリングと ABIC (Akaike's Bayesian Information Criterion) に基づくインバージョン公式 (Yabuki

& Matsu'ura, 1992) に基づき、まず、応力場の空間変動を表現するのに十分な個数 (M 個) の既知の基底関数を準備し、応力場の各成分 τ_i をそれらの重ね合わせで表現する。そして、重ね合わせの係数を解くべきモデルパラメータとし、次の線形連立方程式を解く。

$$[\mathbf{F}^T \mathbf{F} + \alpha^2 \mathbf{G}] \mathbf{a}_i = \mathbf{F}^T \mathbf{d}_i \quad (i = 1, 6) \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{F} はデータと応力場を結びつけるための $N \times M$ の疎行列 (N はデータ数)、 \mathbf{G} は応力場の滑らかさに関する $M \times M$ の対称帶行列、 \mathbf{d}_i は CMT 解の第 i 成分から成る N 次のデータベクトル、 \mathbf{a}_i は M 次のモデルパラメータベクトル、 α^2 は先驗的拘束条件の掛け具合を決める超パラメータであり、全応力成分で共通の値をとるとする。最適モデルパラメータは、式 (2) で定義される ABIC が最小となる超パラメータ α^2 に対する式 (1) の解である。

$$\begin{aligned} ABIC(\alpha^2) &= 6N \times \\ &\log \left[\sum_{i=1}^6 (\mathbf{d} - \mathbf{F} \mathbf{a}_i^*)^T (\mathbf{d} - \mathbf{F} \mathbf{a}_i^*) + \alpha^2 \mathbf{a}_i^{*T} \mathbf{G} \mathbf{a}_i^* \right] \quad (2) \\ &- 6M \log \alpha^2 + 6 \log \|\mathbf{F}^T \mathbf{F} + \alpha^2 \mathbf{G}\| + C \end{aligned}$$

ここで、 \mathbf{a}_i^* は、ある α^2 を与えたときの式 (1) の解、右辺第 3 項の $\|\cdot\|$ は行列式を表す。本プログラムでは、超パラメータ α^2 を与えて式 (1) を解き、ABIC の値を計算し、この処理を逐次的に繰り返すことにより最適モデルパラメータを求める。このため、連立方程式や固有値の解法、行列演算を繰り返し行う必要が生じ、計算実行時間は問題規模と共に膨大となる。

そこで、並列計算用の線形代数ライブラリーである ScaLAPACK を用いて、 2×4 CPU 用および 2×2 CPU 用の、CMT データインバージョンの並列計算プログラムを開発した。連立方程式の解法には、一般行列を係数とする連立方程式解法ルーチン PDGEMV、対称行列の固有値解法には PDSYEV を用いた。また、ベクトルと行列の基本演算部の高速化を目的に、PBLAS のルーチンである PDGEMM、PDNRM2、PDDOT、PDCOPY、PDLACPY を用いた。並列計算プログラムの開発により、 $650\text{km} \times 650\text{km} \times 100\text{km}$ 程度の領域の応力場を、日本列島域の広域応力場の解析に必要な解像度 (水平方向 20km、深さ方

向 10km) で推定することが可能となった。この解析を京都大学・学術メディアセンターの大型計算機システム (Fujitsu PRIMEPOWER HPC2500) で 8CPU を用いて行うと、計算時間は 1 つの超パラメータ α^2 の値につき 1.8 時間程度となった。もし、メモリ 1GB のシリアルコンピューターで同じ解像度の解析を行うとすれば、解析領域は $130\text{km} \times 130\text{km} \times 100\text{km}$ 程度が限界である。

3 2004 年新潟県中越地震の余震データから求めた震源域の応力場

2004 年新潟県中越地震は、北東一南西の走行を持つ西傾斜の逆断層地震であった。CMT データインバージョン法で推定した日本列島周辺域の広域テクトニック応力場の解析結果 (寺川・松浦, 2009) によれば、本地震の震源域は北西一南東方向に最大圧縮軸を持つ逆断層型の応力場であり、これは本震のメカニズム解と調和的である。一方、開発した並列プログラム (2×4 CPU 用) を用いて、本震後約 1 ヶ月間 (10 月 24 日～11 月 26 日) に発生した約 200 個の余震のメカニズム解

(Kato et al., 2006) を解析し、震源域の詳細な応力場のパターンを推定した。解析対象領域は、本震断層を含む $60\text{km} \times 60\text{km} \times 44\text{km}$ とし、問題の自由度は約 1200×6 であった。得られた応力場のパターンは、北西一南東方向に最大圧縮軸を持つ逆断層型の応力場から、北西一南東方向～東西方向に最大圧縮軸を持つ横ずれ型の応力場へと空間変化しており、とくに、震源上部の浅い領域で横ずれ型の応力場が卓越することがわかった。横ずれ型応力場が卓越する領域は、地震波速度が遅い領域、およびブーゲー重力異常が負となる領域とよい一致を示すことがわかった。

4 まとめ：余震活動と間隙水圧の関係

2 つの応力場のパターンの違いを理解するために、広域テクトニック応力場 (北西一南東方向に最大圧縮軸を持つ逆断層型の応力場) の下で、”地震すべりは既存断層面に働くトラクションの剪断成分の方向に発生する (McKenzie, 1969)” という考え方に基づき、理論的に期待される地震の

メカニズム解を求めた。この結果を、Coulomb の破壊規準に基づいて整理すると、間隙流体圧が高まるほど、横ずれ型の地震が多く発生する傾向があることがわかった。この結果は、2004 年新潟県中越地震の余震活動が流体圧の変化によって駆動された可能性を示唆する。

参考文献

Hardebeck, J. L. & Hauksson E. 2001. Crustal stress field in southern California and its implications for fault mechanics, *JGR*, 106, 21859-21882.

Kato, A., Sakai, S., Hirata, N., Kurashimo, E., Iidaka, T., Iwasaki, T., & Kanazawa, T., 2006. Imaging the seismic structure and stress field in the source region of the 2004 mid-Niigata prefecture earthquake: Structural zones of weakness and seismogenic stress concentration by ductile flow, *JGR*, 111, doi:10.1029/2005JB004016.

King, G. C. P., Stein, R. S. & Lin, J., 1994. Static stress change and the triggering of earthquakes, *BSSA*, 84, 935-953.

McKenzie, D. P. 1969. The relation between fault plane solutions for earthquakes and the directions of the principal stresses, *BSSA*, 59, 591-601.

Miller, S. A., Collettini, C., Chiaraluce, L., Cocco, M., Barchi, M. & Kaus, B. J. P., 2004., Aftershocks driven by a high-pressure CO₂ source at depth, *Nature*, 427, 724-727.

Terakawa, T. & Matsu'ura, M., 2008. CMT data inversion using a Bayesian information criterion to estimate seismogenic stress fields, *Geophys. J. Int.*, 172, 674-685.

寺川寿子・松浦充宏, 2009. 地震学における応力インバージョンの新展開—CMT データインバージョン法による応力場の推定, *地震第2輯*, 61 (in press).

Toda, S., R. S. Stein, & T. Sagiya, 2002. Evidence from the AD 2000 IZU islands earthquake swarm that stressing rate governs seismicity, *Nature*, 419, 58-61.

Yabuki, T. & Matsu'ura, M., 1992. Geodetic data inversion using a Bayesian information criterion for spatial distribution of fault slip, *Geophys. J. Int.*, 109, 363-375.

密度汎関数タイトバインディング法による単層カーボンナノチューブの核生成シミュレーション

太田 靖人

京都大学福井謙一記念研究センター

現所属： 奈良女子大学理学部化学科

単層カーボンナノチューブはナノテクノロジーを代表する物質の一つであり、様々な応用が期待されているが、その生成メカニズムはよく分かっていない点が多い。本研究ではタイトバインディング法に基づいた分子動力学計算法を用い、金属粒子上でカーボンナノチューブの核生成がどのように起こるのかを示す。

1 はじめに

単層カーボンカーボンナノチューブはその優れた物理化学特性のために、配線材料や電界放出ディスプレイ、燃料電池、塗料、走査型顕微鏡の探針、ドラッグデリバリーシステムなど工業から医療まで多分野にわたって様々な応用が期待されている。そのため、産業界では大量生産技術の研究開発が精力的に行われているが、実用的な応用を可能にするには、さらなる技術の向上が必要とされている。単層カーボンナノチューブは主に鉄、コバルト、ニッケルなどの遷移金属触媒を用いて合成されるが、供給される炭素または炭化水素分子などがどのように触媒金属と反応し、ナノチューブの骨格を連続的に形成し続けていくのかはあまりよく分かっていない。

こういった状況の中、我々はdensity-functional tight-binding (DFTB) 法^{1,2}に基づいた量子力学計算法を用い、金属上の単層カーボンナノチューブの実質的な成長シミュレーションに初めて成功した^{3,4,5,6}。このシミュレーションでは単層カーボンナノチューブの短いフラグメントがあらかじめ金属に結合した状態を初期状態とし、ナノチューブと金属の境界付近における気相炭素の反応性が調べられた。このシミュレーションにより、供

給された炭素が金属表面上でポリイン鎖を形成し、これらがナノチューブと金属クラスターを架橋する役割を果たしながら、ナノチューブの側壁を断続的に構築いくことがわかった。本研究ではこのナノチューブの連続成長過程の初期段階である核生成に焦点をあてる。金属表面に直接炭素原料分子を供給し、金属粒子上でナノチューブの核生成がどのように起こるかについて調べた。

2 計算方法

触媒金属粒子として、鉄原子 38 個からなる面心立方型のクラスターを用いた(直径は約 7 Å)¹。この鉄クラスターを 1500 K で 10 ps アニーリングし、5 ps から 10 ps の間でランダムにとりだした 10 個のジオメトリーを 10 本の炭素供給シミュレーションの初期配置とした。炭素供給シミュレーションの時間は 30 ps とし、1 ps おきに C₂ 分子を鉄クラスターに供給した(合計 30 個の C₂ 分子を供給)。この炭素供給シミュレーションの後、炭素供給を停止し、1500 K で 410 ps のアニーリングを行い、金属表面に吸着した炭素クラスターのダイナミクスを追跡した。

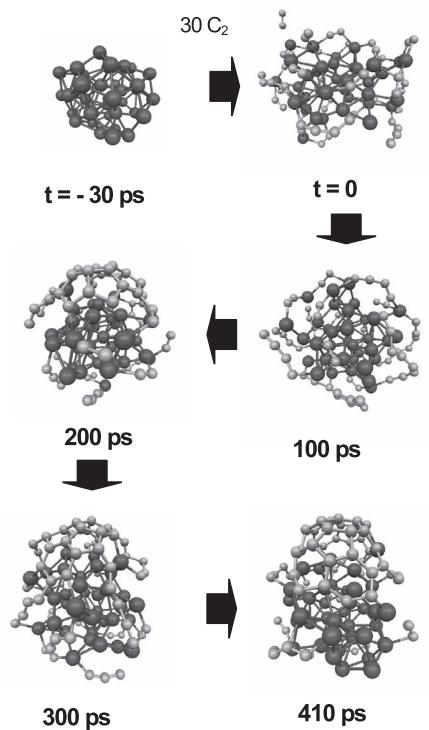


図1 鉄クラスター上での炭素キャップ形成過程
茶色：鉄原子、水色：炭素原子

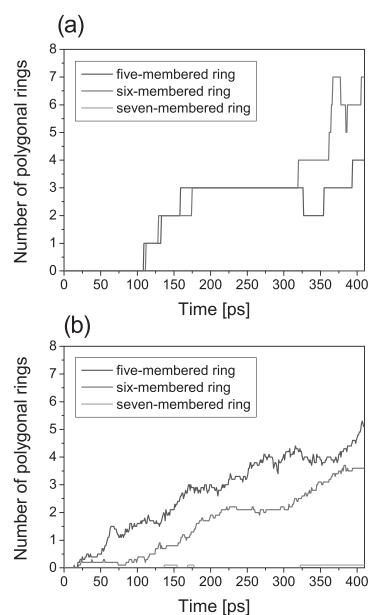


図2 鉄クラスター表面にできた五、六、七員環の数の時間変化。(a) 図1のトラジェクトリー (b) 10個のトラジェクトリーの平均。

3 結果と考察

1500 K での炭素供給シミュレーション(図1、 $t = -30\text{ps} \sim 0$)では、供給された C_2 分子が速やか

に鉄クラスター表面に吸着し、活発に表面拡散を行う様子が観測された。表面上の C_2 分子が互いに反応すると、より長いポリイン鎖の形成が起こり、 $\text{Fe}-\text{C}_n-\text{Fe}$ といったブリッジ型の構造(図1、 $t = 0$)をとることがわかった。

410 ps のアニーリングシミュレーション(図1、 $t = 0 \sim 410\text{ ps}$)では炭素クラスター(主にポリイン鎖)が表面上で拡散しながら互いに反応し、次第に五員環や六員環の炭素ネットワークを形成し、キャップ形の炭素クラスターが金属表面上に構築されていく様子が観測された。図2は五、六、七員環の生成過程をプロットしたものである。図2 b からわかるように炭素核形成の初期段階では五員環が優先的に形成されるが、時間の経過とともに六員環の割合が増加する。これは炭素骨格を構成する C-C 結合の組み換えが炭素クラスターの縁で起こり、五員環からより安定な六員環への再配列が断続的に起きているためである⁷。

本研究により、初めて実質的な金属粒子上での炭素核形成シミュレーションが成功した。今回のシミュレーションにより、金属上の炭素核生成の初期段階では五員環形成が優先的に起こること、また、五員環から六員環への断続的な結合の組み換えが進行しながらキャップ形の炭素クラスターが構築されていくことがわかった。

参考文献

- [1] D. Porezag et al. Phys. Rev. B 51, 12947-12957 (1995).
- [2] M. Elstner et al. Phys. Rev. B 58, 7260-7268 (1998).
- [3] Y. Ohta, Y. Okamoto, S. Irle, K. Morokuma, ACS NANO 2, 1437-1444 (2008).
- [4] Y. Ohta, Y. Okamoto, S. Irle, K. Morokuma, J. Phys. Chem. 113, 159-169 (2009).
- [5] Y. Ohta, Y. Okamoto, S. Irle, K. Morokuma, Carbon 47, 1270-1275 (2009).
- [6] Y. Ohta, Y. Okamoto, S. Irle, K. Morokuma, Phys. Rev. B, 195415 (2009).
- [7] Y. Ohta, Y. Okamoto, P. Alister, S. Irle, K. Morokuma, ACS NANO, submitted.

自由エネルギーに基づく高分子からみあい系のダイナミクス

堀尾 和史

京都大学大学院 工学研究科 分子工学専攻 分子レオロジー分野
(京都大学 化学研究所 複合基盤化学研究系 分子レオロジー研究領域)

1はじめに

溶融状態における高分子ダイナミクスを記述するため、管モデル[1]や一本鎖スリップリンクモデル[2]が提案されている。また、これらの平均場モデルでは考慮されない多数鎖の効果を考えるために、高分子鎖が三次元に網目を組み、交差点をスリップリンク(からみあい)とする多数鎖スリップリンクモデル[3]が提案されている。スリップリンクモデルで考えられているダイナミクスの中で、多数鎖の効果が強く現れるものとして末端部分鎖によるからみあいの生成、解消が挙げられる。一本鎖モデル[4, 5]では、からみあいの生成、解消前後において詳細釣り合いが成り立つと仮定して、平均場中でダイナミクスを記述している。一方、多数鎖モデルでは末端部分鎖とその周囲の部分鎖によってからみあいが生成、解消されているが、その機構は現象論に基づき、十分に検討されているとは言えない。

本研究では、一本鎖モデル[5]で提案された詳細釣り合いの原理に基づくダイナミクスを多数鎖モデルに導入することを検討する。

2 モデル、シミュレーション

本モデルでは高分子濃厚系を分子鎖の三次元の網目として考える。網目中の高分子鎖 α はからみあい点間分子量程度で粗視化した Z_α 個の連続した部分鎖に分割する。高分子鎖 α の部分鎖 i ($i = 1, \dots, Z_\alpha$)はKuhnセグメント数 N_i^α を含んだガウス鎖と仮定する。末端を除く部分鎖の状態変数は両端の座標 \mathbf{R}_i^α , \mathbf{R}_{i+1}^α もしくは両端間ベクトル \mathbf{Q}_i^α (:= $\mathbf{R}_{i+1}^\alpha - \mathbf{R}_i^\alpha$)とセグメント数 N_i^α である。

本モデルのダイナミクスは1)スリップリンクを介したKuhnセグメントの輸送と2)鎖末端部分鎖によ

るからみあいの生成、解消の二つを考える。

まず、任意のKuhnセグメント一つがスリップリンクを介して輸送される確率 W_{s+} とその逆方向へ輸送される確率 W_s を考える。熱平衡状態では W_{s+} , W_s は詳細釣り合いの原理を満たす。また、この遷移を対称と仮定すると、 W_{s+} , W_s は次のように表わされる。

$$W_{s+} = W_s = \tau_K^{-1} \exp[-\Delta F/(2k_B T)] \quad (1)$$

ここで、 ΔF は二状態間の自由エネルギー差、 k_B はボルツマン定数、 T は絶対温度、 τ_K はKuhnセグメントの緩和時間である。

次に、任意の末端部分鎖が周囲の部分鎖とからみあいを生成する確率 W_c と、からみあいを解消する確率 W_d を考える(Fig. 1)。

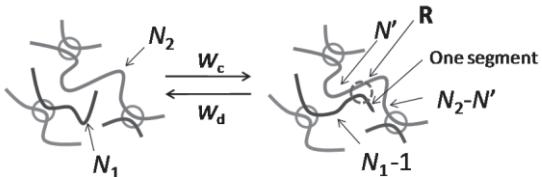


Fig. 1. Schematic representation of the entanglement reconstruction process. Circles and curves denote the slip-links and the chains. An end-strand composed of N_1 segments creates a new slip-link at position \mathbf{R} on a chosen strand composed of N_2 segments. The latter strand is separated into two strands having N' and N_2-N' segments.

Schieberらの一本鎖平均場モデル[5]と同様に、からみあいの解消は末端部分鎖のKuhnセグメント数が $N_i^\alpha = 1$ ($i = 1, Z_\alpha$)のときに一定確率で起こるとする(式(2))。従って、熱平衡状態では W_c は詳細釣り合いの原理より、式(3)で表すことができる。

$$W_d = \tau_K^{-1} \delta_{N_i^\alpha, 1} \quad (2)$$

$$W_c = \tau_K^{-1} \exp[-\Delta F/(k_B T)] (1 - \delta_{N_i^\alpha, 1}) \quad (3)$$

ここで、式(2), (3)のいずれも $i = 1, Z_\alpha$ である。末端部分鎖のからみあう相手の部分鎖は、周囲の部分鎖

から任意に選ばれる。からみあいの生成において、末端部分鎖はFig.1の通り、1個と $N_i^\alpha - 1$ 個のセグメントを持つ部分鎖に二分割される。相手の部分鎖は W_c によって求められる分布関数に従って分割される。新たに作られるスリップリンク位置はガウス分布に従い決定される。

本モデルで考慮する自由エネルギー差 ΔF はガウス鎖の形態エントロピー差から求められる ΔF_{chain} とスリップリンクを導入で生じる自由エネルギー差 $\Delta F_{\text{sliplink}}$ の二つの寄与とする。

$$\Delta F = \Delta F_{\text{chain}} + \Delta F_{\text{sliplink}} \quad (4)$$

任意の状態における F_{chain} は各部分鎖をガウス鎖と仮定したときの自由エネルギーの系内の総和で表される。

$$F_{\text{chain}} = \sum_{\alpha} F_{\text{chain}}^{\alpha} = \sum_{\alpha} \sum_{i=2}^{Z_{\alpha}-1} F_{\text{chain}}^{\alpha,i}(N_i^{\alpha}, \mathbf{Q}_i^{\alpha}, T) \quad (5)$$

$$\frac{F_{\text{chain}}^{\alpha,i}(N_i^{\alpha}, \mathbf{Q}_i^{\alpha}, T)}{k_B T} = \frac{3 Q_i^{\alpha 2}}{2 N_i^{\alpha} a_K^2} + \frac{3}{2} \log \left(\frac{2 \pi N_i^{\alpha} a_K^2}{3} \right) \quad (6)$$

ここで a_K はKuhn長である。

また、スリップリンクの導入により、四部分鎖（ここではそれぞれ $N_b, N_{i+1}, N_j, N_{j+1}$ 個のセグメントから成るとする）の末端が一点に集約されるため、それぞれの形態自由度が下がる。エントロピーの減少による自由エネルギーの増加を抑制するため、スリップリンクの化学ポテンシャル β [4]を設定する。

$\Delta F_{\text{sliplink}}$ は次の表式となる。

$$\Delta F_{\text{sliplink}} \approx \frac{3}{2} \log \left(\frac{3}{2 \pi \beta^2 a_K^2 \left\{ (N_i^{-1} + N_{i+1}^{-1})^{-1} + (N_j^{-1} + N_{j+1}^{-1})^{-1} \right\}} \right) \\ , \beta = \sqrt{c/c_0} \beta' \quad (7)$$

ここで、 c は部分鎖数密度、 c_0 は網目サイズが粘弾性実験データから算出されるからみあい点間平均セグメント数 N_e 程度のときの部分鎖数密度、 β' は定数である。

上記のダイナミクスを基にシミュレーションを行い、鎖が十分緩和したと見られるところで三次元網目の構造を抽出した。ここで、シミュレーション系内の鎖の数密度と基準からみあい点間セグメント数 N_e はポリスチレンのデータ[6]を基に算出した。鎖の長さは、一分子あたりのセグメント数を N_K で表され、 $Z_0 (= N_K / N_e)$ が5, 10, 20となるように N_K を決めた。 $\beta' = 150$ とした。

3 結果、考察

一分子あたりの部分鎖数 Z の分布をFig. 2に示す。一本鎖モデルを基にした理論[7]では、 Z の平衡分布はポアソン分布となる。計算結果はポアソン分布よりもやや鋭くなつたが、定性的には概ね一致している。

4 まとめ

詳細釣り合いの原理に基づいてからみあいの生成、解消ダイナミクスを考えた多数鎖スリップリンクモデルを提案し、一分子あたりのからみあい数分布を検討した。

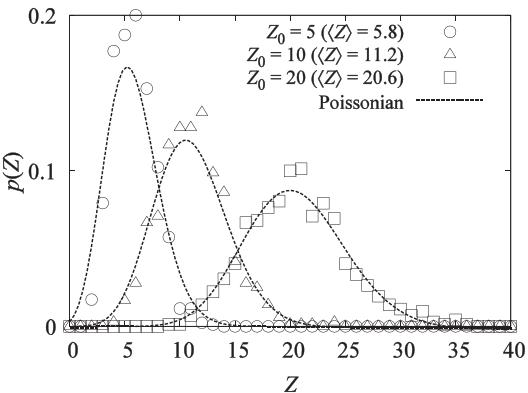


Fig. 2. Probability distributions of Z for $Z_0 = 5, 10$, and 20. Lines represent Poissonian distributions [7] which have the same averages $\langle Z \rangle$ with the simulation results.

参考文献

- [1] M. Doi and S. F. Edwards, *The Theory of Polymer Dynamics*, Oxford Univ. Press, N.Y. (1986).
- [2] C. C. Hua and J. D. Schieber, *JCP*, **109**, 10018 (1998).
- [3] Y. Masubuchi *et al.*, *JCP*, **115**, 4387 (2001).
- [4] J. D. Schieber *et al.*, *J. Rheol.*, **47**, 213 (2003).
- [5] R. Khaliullin and J. D. Schieber, AIP Conf. Proc., **1027**, 339 (July, 2008)
- [6] L. J. Fetters *et al.*, *Macromolecules*, **27**, 4639 (1994)
- [7] J. D. Schieber, *JCP*, **118**, 5162 (2003).

硫黄吸着 Au(111)の走査トンネル顕微鏡観察

黒川 修

工学研究科材料工学専攻

1 はじめに

金表面上への硫黄吸着過程は近年 SAM(Self assembled monolayer)膜の形成過程にチオール基と金表面の結合が利用されていることから再び注目を集めている。しかしながら、最も基本的な系である Au(111)表面への硫黄吸着に関してもいまだ不明な点が残されている。

清浄な Au(111)面は”herringbone”構造と呼ばれる特徴的な表面再構成表面となる。この表面再構成構造では表面第1層に下地の原子層に比べて約4.5%多くの原子が存在している。従って第1層は「部屋の広さより大きな面積の絨毯を引いたよう」になっており、一部が絨毯の皺のように真空側に盛り上がっている。この表面に少量の硫黄吸着を行うと、”herringbone”構造が消失することが知られている(吸着量0.1ML以下)。少量の硫黄吸着が起こったこの表面では硫黄はどのように配置されているのであろうか? LEED (low energy electron diffraction)による観察によると0.3ML程度の吸着量で $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ R30構造に対応する回折パターンが観測される。[1]さらに吸着量が増加した場合には、complex相と名付けられている相が現れることが明らかになっている。一方、吸着量のより少ない場合には局所的な $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造をもつ5x5構造の存在も報告されている[2]が、現在でもこれらの構造の詳細は不明である。このような場合にはより直接的な観察手法であるSTM(走査トンネル顕微鏡)の利用が考えられる。硫黄吸着 Au(111)面に関しても STM によるいくつかの研究が報告されているが、面白いことに前述の $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ の回折を示す構造は STM では観察できない。これらの研究が行われている室温では金表面に吸着した硫黄原子の拡散が速いからであると考えられている。

2 実験結果

図1は室温で硫黄吸着を行った後、液体窒素温度まで冷却を行い、STM観察を行った結果である。低温で拡散が抑制された結果、これまでイメージされなかつた個々の硫黄原子の観察が可能になったと考えられる。図1に示されているように、単独で吸着している硫黄の他にも幾つかの異なる大きさを持つクラスターの存在を確認した。

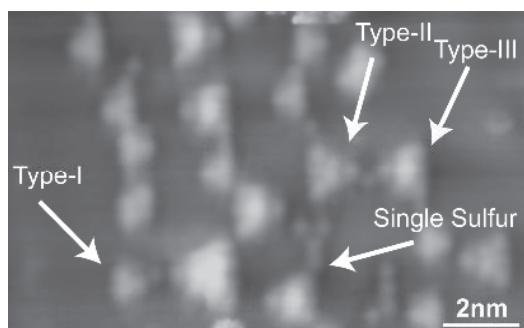


図1：硫黄吸着 Au(111)表面の STM 像。単独で吸着している硫黄のほかに幾つかの異なる大きさのクラスターが存在している。

STM観察ではLEEDなどと異なり、局所的な構造を直接観察することが可能であるが、多くのケースで観察結果からただちに原子構造を決定することはできない。これはひとつにはSTMが試料のフェルミレベル近傍での電子状態密度の変化を捉えているため、原子種の区別が困難であるからである。従って、得られたイメージから原子構造(配置)を決定するためには、一般に理論計算を行う必要がある。多くの場合このような理論計算には非常に大きなコンピュータ資源を必要とするため、実験によって構造の候補がある程度絞られているほうが都合が良い。今回の実験では一番小さなクラスター(Type-I クラスター)に関して、構造のヒントが得られた。図2はその例で、連続して取得されたほぼ同じ領域のSTM像である。

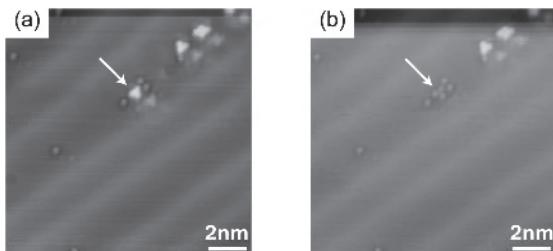


図2 : type-I クラスターの”decay”の例.

最初の像でイメージされているクラスターが次の像では三つの輝点に変化しているのが見て取れる。それぞれの輝点は単独吸着の硫黄と STM 像上の特徴が同じであるため、我々はこれらが硫黄の原子であろうと推測した。そうであれば、観察されたクラスターは3つの3角形状に配置された硫黄に何らかの原子が加わったものであると考えられる。また、その原子は硫黄か金原子のどちらかであるということになる。Au(111)表面への硫黄吸着に関してはこれまで理論計算による研究結果が報告されており、これによると硫黄が表面の繰り返し周期の $\sqrt{3}$ 倍の距離で配置される構造はエネルギー的に安定である[3]。また我々が行った予備的な計算においても $\sqrt{3}$ より近距離に硫黄が並ぶ構造はエネルギー的に不安定である。従って、クラスター内に存在していた原子は Au 原子ではないかと考えられる。クラスターに取り込まれている Au 原子は硫黄吸着に伴って「絨毯の皺」が消滅する際に表面に放出されたものであると考えられる。なお、図2には明るくイメージされるラインが存在しているが、これが先に説明した herringbone 構造の中の「絨毯の皺」に相当する部分であり、このラインの結晶面での方位は既知である、また STM 像上から3つの硫黄の間の距離が求められ、 $\sqrt{3}$ の距離に相当していることが確かめられた。

3 理論計算による構造予測

原子構造のシミュレーションのためのプログラムとして、 RSS21（革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発）より公開されている第一原理計算ソフトウェア「PHASE」を利用した (<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/rss21/>)。このソフトウェアはウルトラソフト疑ポテンシャルを使用し、波動関数を平面波展開することで、計算を

行う。適当な大きさのスラブモデルを作り、実験から予想された $\sqrt{3}$ の距離に配置した3つの硫黄に Au 原子を加えて構造緩和を行った。最も単純には3つの硫黄にひとつの Au 原子を加えた構造が予想されるが、計算の結果 Au 原子を3つ加えた構造のほうがよりエネルギー的に安定であるということが明らかになった。このM3S3 タイプのクラスターは Cu や Ag など他の貴金属に硫黄を吸着させた場合に生成する構造であると考えられており[4]、今回の結果と一致するものである。

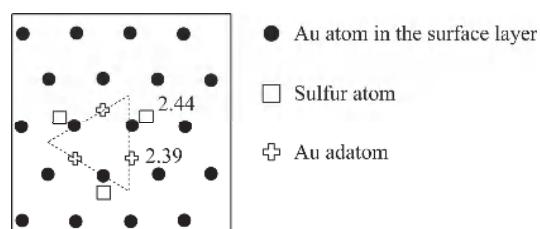


図3 : Au 原子を3つ含むクラスターの原子構造の例。図中の数値は表面からの高さ (Å).

しかしながら、今回の計算ではほぼ同じ生成エネルギーをもつ2つの異なる構造が得られたこと、またそのいずれもが観察された STM 像とは完全には一致しないことから（興味深いことに得られた2つの構造の中間的な構造は STM 像を非常に良く再現する）、クラスター構造に関して明確な結論にはいたらなかった。現在、理論によって得られたクラスターの原子構造と STM 像との関係に関するいくつかの仮説を立て、検証を行っている。

発表論文

S. Kurokawa, Y. Miyawaki, A. Sakai, Jpn. J. Appl. Phys. 48 (2009) art. 08JB12.

参考文献

- [1] B. Min *et al.*, Top. Catal. 36 (2005) 36.
- [2] Y. Miao *et al.*, J. Phys. Chem. 111 (2007) 10904.
- [3] J. Rodriguez *et al.*, J. Am. Chem. Soc. 125 (2003) 276.
- [4] P. J. Feibelman, Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 606.

高分子のシミュレーション

増渕雄一

京都大学化学研究所

1 緒言

プラスチックに代表される高分子は、分子量が巨大で分子設計の自由度が大きく、様々な機能、性能をもつ材料として用いられている。しかし分子レベルの構造と材料として現れる機能、性能との間の相関はきわめて複雑で実験的にもまとまった知見が得られているケースは少ない。そこで分子レベルの構造をとて分子の運動と構造を計算する分子シミュレーションが有力な研究手段として期待できる。ところが高分子は分子量が大きなことだけでなく、それにともなってあらゆる現象の緩和時間が長大で、数秒にも及ぶ。

このような高分子の計算を行うために我々は系の自由度を適当な仮説に基づいて抽出する、いわゆる粗視化モデリングを研究している。一度粗視化モデルが確立できれば、それほど巨大な計算資源は必要としない。しかし粗視化モデリングのために、原子レベルでの計算に基づいて、抽出するに値する重要な自由度の本質を見極めなければならない。分子量が数万から数十万になる高分子を、マイクロ秒程度の時間にわたって追跡する計算のためにはスーパーコンピューターレベルの計算資源が必要である。この計算により、粗視化モデリングのために必要な各種の構造的、動力学的なパラメーターを取得する。得られたパラメーターを用いて粗視化計算を行えば、実用的に意味のある数秒から数十秒レベルでの緩和現象を計算機上で予測できることになり、工学的な意義が大きい。また粗視化モデリングのための自由度抽出を自動的に行う手段ではなく、その良否は実験結果との対応によってのみ決まる。従って系の本質的な理解のために粗視化モデルに基づいた計算および実験との比較は重要である。

本研究では我々が独自に開発を進めている高分

子用の粗視化モデルであるプリミティブチェーンネットワークモデルによるシミュレーションを行い、結果をDNA濃厚溶液の実験と比較した。

2 モデル

高分子はからみあい点間分子量程度の分子量のセグメントが連なった自由連結鎖とする。各セグメントは他の高分子とスリップリンクを介して接続されており、スリップリンクは末端でのみ生成消滅する。高分子のダイナミクスは、スリップリンクの運動、スリップリンクを介したモノマーの輸送、スリップリンクの生成消滅、によって記述される。スリップリンクの運動とモノマーの輸送には、摩擦力、セグメントの張力バランス、セグメント密度の揺らぎに起因する浸透圧、熱運動力が考慮される。

3 結果と考察

図1、図2に線形、非線形粘弾性の予測結果を示す。図1、図2の結果とも実験を定量的に再現する。ここでパラメーターは以下のように決めた。まず最も濃度の高い溶液(31C*)の線形粘弾性に注目し、単位時間 τ と単位分子量 M_0 を決定した。単位弾性率 G_0 (単位応力)は単位分子量と実験で用いられたDNAの濃度 ρ から $G_0 = \rho RT / M_0$ で求めた。次に他の濃度については、

$G_0(\rho) \propto \rho^d$ で書かれる管膨張則により M_0 と G_0 を決めた。ここで指数 $d=2.2$ とした。さらに単位時間 τ については、Rouse時間が濃度によらないと仮定して得られる関係 $\tau(\rho) \propto \rho^{2-d}$ を用いて決めた。

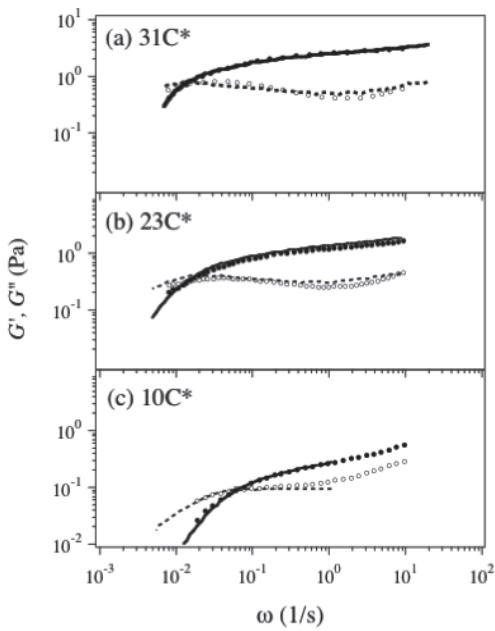


Figure 1 Linear viscoelasticity. Symbols are experimental data.

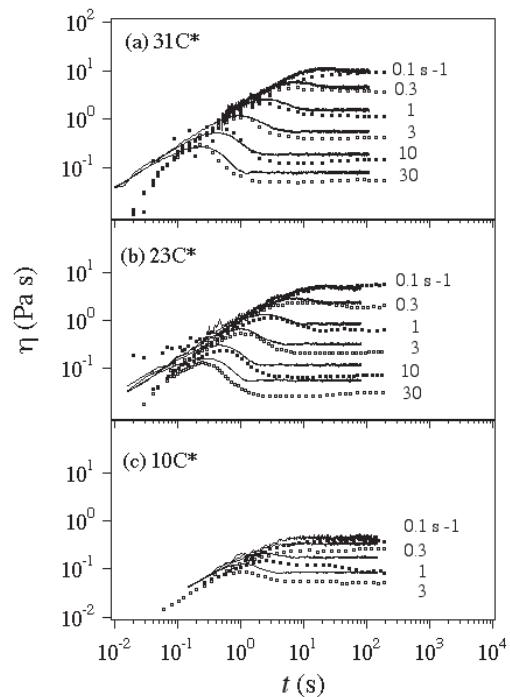


Figure 2 Viscosity growth curves. Symbols are experimental data.

分子の形態を議論するためには、モデルの単位長さである、からみあい点間長さ a が必要である。高分子の Kuhn 長を b 、からみあい点に含まれる Kuhn セグメント数を n_0 、全長を L とすると a は

$a = b\sqrt{n_0} = \sqrt{bL/Z_0}$ と表される。図 3 に濃度 $31C^*$ 、せん断速度 2.7 sec^{-1} での DNA の伸び x の分布関数を示す。 $b=65\text{ nm}$ とすれば分布の形を含めて実験結果を良好に再現することがわかる。

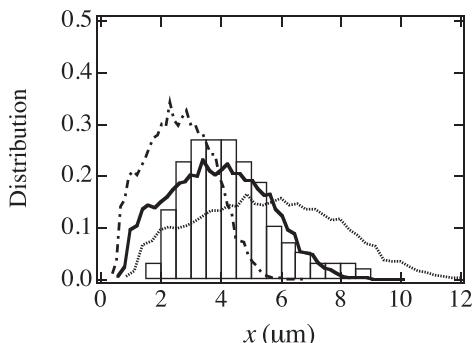


Figure 3 Distribution of x for the $31C^*$ solution in steady shear at 2.7 s^{-1} . Histograms are experimental data. Dashed, solid, and dotted curves are simulation results for $b = 30, 65, 130\text{ nm}$, respectively.

4 結論

濃厚 DNA 水溶液のレオロジーと DNA の形態ダイナミクスをプリミティブチェーンネットワークシミュレーションで検討したところ、レオロジーと形態分布関数は定量的に予測できた。

参考文献

Y. Masubuchi et al., J. Chem. Phys., in print

連続カオス力学系の不安定周期軌道上の 軌道平均値

京都大学 数理解析研究所 斎木 吉隆¹

1 はじめに

カオス力学系は、特に幾何学的アプローチにおいて、そのカオスアトラクタに埋め込まれた不安定周期軌道(UPO)に注目した議論がしばしばなされてきた。一方、近年、流体乱流の分野において、短い周期をもつごく少数の不安定周期軌道を用いて乱流の統計性質や秩序構造を捉えることができるという報告がなされた。Kawahara and Kida [3] は、幾分低いレイノルズ数ながらもナヴィエ・ストークス方程式によって記述されるクエット乱流に埋め込まれた短い不安定周期軌道を検出して、その軌道上の平均速度プロファイルなどがクエット乱流のそれに良く一致することを発見した。一方、Kato and Yamada [2] は、発達した乱流に関するシェルモデルの不安定周期軌道を発見し、1本の軌道によって乱流のコロモゴロフ則や間欠性といった統計性質を再現できることを明らかにした。これらの研究では、周期の短い少数の不安定周期軌道を用いて、カオスの統計性質を近似することに成功している。一般にカオスアトラクタには無限個の不安定周期軌道が埋め込まれており、直観的には、周期の長い不安定周期軌道はカオスの統計性質を近似すると期待できるが、周期の短い不安定周期軌道がこれほどまでにカオスの統計性質を反映するのは驚くに値する。本報告では、周期の短い不安定周期軌道がカオスの統計性質を反映しうる背景を探る目的で、カオス力学系から比較的大きい周期をもつものを含めて網羅的に検出された不安定周期軌道の統計量解析をおこなった。連続カオス力学系の代表例であるローレンツ系から多数の不安定周期軌道を検出し、それら周期軌道上の時間平均量の考察をおこなった。

2 ローレンツ系

古典パラメタにおけるローレンツ系($dx/dt = 10(y-x)$, $dy/dt = 28x - y - xz$, $dz/dt = xy - 10z$)は特異双曲系であり、アトラクタには無限個の不安定周期軌道が稠密に埋め込まれている [6]。ローレンツ

¹本報告の結果は、山田道夫氏(京都大学数理解析研究所)との共同研究に基づき、研究遂行の際には京都大学学術メディア情報センタースーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠)による支援を受けた (saiki@kurims.kyoto-u.ac.jp)。

系の不安定周期軌道はこれまでにいくつかの視点で研究してきた。また、Franceschini et al. [1] や Vishwanath [7] は系統だった不安定周期軌道の検出をおこない、ローレンツ系の不安定周期軌道が適当なシンボルでラベリング可能であることも知られている。本報告では、周期軌道上で Nusselt 数という量の時間平均をとり、その分布を考察した。Nusselt 数は $Nu = 1 + 2xy/bz$ で定義され、軌道上(時間長 T)の Nusselt 数 Nu の時間平均は $\overline{Nu} (= \int_{t=0}^T Nudt)$ である。

まず、ローレンツ系からニュートン・ラフソン・ミーズ法 [4] を用いて数値的に 1000 個以上の周期軌道を検出した。検出された周期軌道の周期は 1.558 と 14.431 の間である。本報告では周期軌道の周期として本来の実数値周期のほかに整数値周期 N_T を用いる。これは、 $z = 27$ をポアンカレ断面に取った際のポアンカレ写像周期であり、直観的には周期軌道がもつ渦数に対応している。図 1 は、検出された周期軌道の整数値周期 N_T に対する個数をあらわしており、指数的な増大を示している。以下の解析は、網羅的に検出されている整数値周期 13 までのものを用いた。なお、11 周期までの周期軌道は完全に網羅

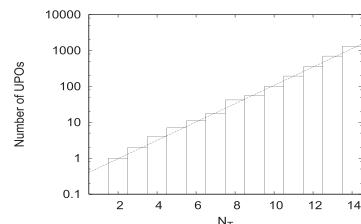


図 1: 検出された整数値周期 N_T ($1 \leq N_T \leq 14$) の不安定周期軌道(UPO)の数(周期に対して指数的な増大を示している)

されている。図 2(左)は、整数値周期 13 までをもつ不安定周期軌道の時間平均 Nusselt 数 \overline{Nu} をプロットしたものである。周期が長くなると多様な \overline{Nu} をもつ様な印象を受ける。そこで同じ整数値周期 N_T をもつものでグループ分けを行なって、もう少し詳細な統計解析を行なう。図 2(右)は、同じ整数値周期 N_T ($6 \leq N \leq 13$) をもつ不安定周期軌道をひとつの集団とみなして、平均 Nusselt 数 \overline{Nu} の出現頻度分布を描いたものである。これによれば、分布はカオス軌道の平均 Nusselt 数 ($Nu = 2.682$) 付近にピークをもち、周期 N_T によらず、ほとんど違いが見られないことが観察される。これを定量的に確認するために分

布の標準偏差を計算したものが図3であり、図3ではさらに同じ程度のカオス軌道断片の平均 Nusselt 数 \overline{Nu} の出現頻度分布の標準偏差を計算して比較している。この図によれば、軌道長が短い場合に、カオス軌道断片は、 \overline{Nu} の散らばりも大きいが、不安定周期軌道の場合には \overline{Nu} はある程度の散らばりでおさまっていることがわかる。すなわち、ローレンツ系の \overline{Nu} は、短い不安定周期軌道を用いることによって長い不安定周期軌道とほぼ同じ程度の確率でカオス軌道の Nusselt 数を近似する、もしくは近似しないということを意味している。なお、この結果は軌道長が短くとも、カオス軌道断片は相空間のさまざまな部分を通り得るが、不安定周期軌道の場合には、そうではないことを示唆している。

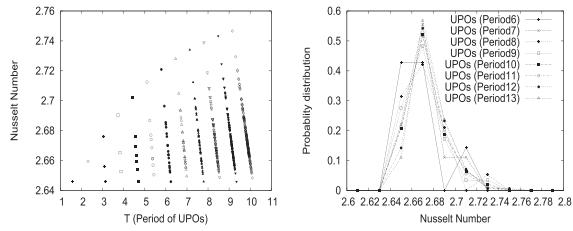


図2: 検出された不安定周期軌道(UPO)($2 \leq N_T \leq 13$)の平均 Nusselt 数 \overline{Nu} (但し、カオス軌道の $\overline{Nu}=2.682$)(左)、整数値周期 N_T ($6 \leq N_T \leq 13$)をもつ不安定周期軌道(UPO)の平均 Nusselt 数 \overline{Nu} の出現頻度分布(刻み幅は0.02) (N_T に依らず、ほとんど同じ様な分布をもつ)(右)

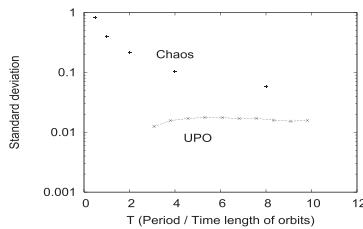


図3: 軌道長 T の 10^6 本のカオス軌道断片の平均 Nusselt 数 \overline{Nu} の出現頻度分布の標準偏差(軌道長 T のカオス軌道断片の \overline{Nu} の標準偏差は $T^{-0.8}$ のベースで減衰)と不安定周期軌道(整数値周期 N_T ($4 \leq N_T \leq 13$))に関する出現頻度分布(図3)の標準偏差(複数の整数値周期 N_T の周期軌道のうち代表的な周期を用いてプロット)の比較

3 まとめ

本報告では、まずローレンツ系に埋め込まれた1000個以上の比較的短い周期をもつ不安定周期軌道を網羅的に検出して、時間平均 Nusselt 数という量に着目して統計解析をおこなった。数値計算の範囲内では、不安定周期軌道の平均 Nusselt 数は、同じ程度の長さをもつカオス軌道断片に比べて、軌道長が短い場合にも散らばりが遙かに小さく、カオスの長時間平均値を近似する傾向にあることがわかった。また、不安定周期軌道をポアンカレ写像周期で分類して、平均 Nusselt 数の出現頻度分布を見ると、ほとんど変化が見られないことが確認された。本報告で紹介したローレンツ系のほかにレスラー系、景気循環モデル[5]、蔵本・シバシンスキ系など、偏微分方程式系を含む複数の連続力学系において同様の性質が確認されており、この統計性質はある程度普遍的なものであることが予想される。今後は、この性質がどういった力学系に対して成り立つか、また、無限に存在する不安定周期軌道がアトラクタにおいてどのように配置しているためにこの性質が生み出されるのかということを探りたい。

参考文献

- [1] Franceschini, V., C. Giberti and Z. Zheng, *Nonlinearity*, **6** (1993) 251–258.
- [2] Kato, S. and M. Yamada, *Phys. Rev. E*, **68** (2003) 25302–25305.
- [3] Kawahara, G. and S. Kida, *J. Fluid Mech.*, **449** (2001) 291–300.
- [4] Saiki, Y., *Nonl. Proc. Geophys.* **14**, 615-620 (2007)
- [5] Saiki, Y. and Yamada, M., *Phys. Rev. E* **79**, 015201(R) (2009).
- [6] Tucker, W., *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, **328**, 1197-1202 (1999), *Found. Comput. Math.*, **2**, 53-117 (2002)
- [7] Vishwanath, D., *Nonlinearity*, **16** (2003) 1035–1056. *Physica D*, **190** (2004), 115–128.

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

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は、磁場を持つ天体で普遍的な粒子加速過程の一つと考えられている。本研究ではこの電子加速過程を、大規模並列計算によるプラズマ粒子シミュレーションにより再現した。シミュレーション結果の解析から放射線帯電子の源である赤道領域での非線形波動粒子相互作用を捕えることに成功し、その非線形過程が生成過程の本質であることを明らかにした。

1 はじめに

地球周辺の宇宙空間には、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おり、放射線帯と呼ばれている。放射線帯の高エネルギー電子は、磁気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知られている。人工衛星の障害の要因となるなどすることから、放射線帯電子の変動現象を理解することは、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。

近年の研究成果により、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が指摘されている (Kato 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、相対論的電子加速過程の物理を詳細に議論した。

2 電子ハイブリッドモデル

本研究ではプラズマ粒子シミュレーションの手法の中でも独自のモデルである、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な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。波動励起から収束に

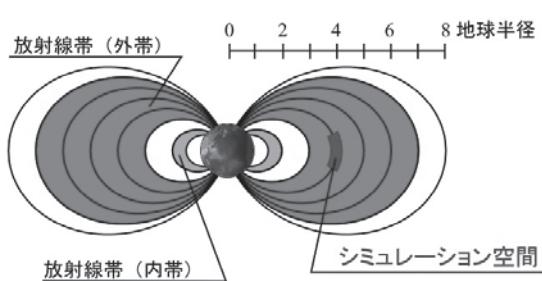


図1：地球磁気圏の放射線帯は内帯と外帯が存在し、特に外帯が磁気嵐に対して敏感に応答することが知られている。シミュレーション空間は磁気赤道を中心として設定する。

至るまでの一連の過程を再現するためには、電子サイクロトロン周期の数千倍までの長時間計算が必要とされる。従来の HPC2500 では 512CPU で 2 週間程度の演算時間を要しており、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。

3 コーラス放射の発生と相対論的電子加速

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た。赤道を起源として生成されたコーラス放射が、南北両極方向に伝搬しつつ成長する様相が見て取れる(図2)。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、相対論的電子の加速が生じる様相を再現した (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

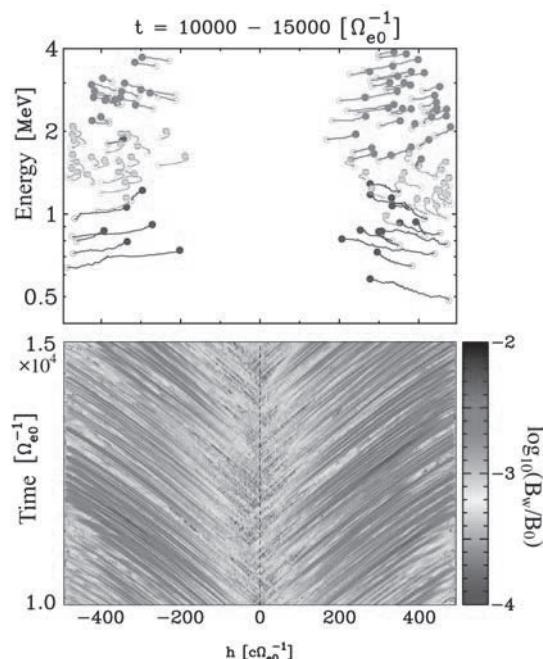


図2：(上図) 加速電子の軌跡と(下図)コーラス放射の伝搬の様子 (Katoh et al., 2008)

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。波動励起から収束に至るまでの一連の過程を再現するためには、電子サイクロトロン周期の数千倍までの長時間計算が必要とされる。一つのパラメータセットでの計算にThin クラスタ 32 コアを利用して 2 週間程度の演算時間を要したが、スーパーコンピュータ共同研究制度（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により、多数の長時間ジョブの実行が可能となり、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。その結果、本研究による理論の予測に合致する結果が得られると共に、計算機実験の結果に基づいて理論の改良がなされる等の成果が得られている。

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る。現在のミュレーションコードでは並列化手法として、演算コストの大部分を占める粒子計算を各プロセスに均一に割り当てる粒子分割法を採用している。この粒子分割法では、ミュレーション領域内での電磁場計算が各プロセスで冗長実行されており、各プロセスに対して担当するミュレーション領域を割り付ける領域分割法が今後の超並列環境に適応する為に必要とされる。しかしながら本研究課題で背景磁場として用いるダイポール磁場中では、粒子は磁気赤道付近に集中し、空間的に非一様となるため、領域分割法を用いた場合のプロセス間のロードバランスが問題となる。この点に関し、Nakashima et al. (2009) ではロードバランスを取りつつ領域分割を実現する新しいアルゴリズムが提案されている。これら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.

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

近年、安価な有機色素を用いて色素増感太陽電池を高効率化することに注目が集まっている。ポルフィリンは可視領域の 400 nm 付近に強いソレー帯、600 nm 付近に適度な Q 帯を有しているために色素増感太陽電池の色素として有望である。しかしながら、500 nm 付近ならびに 700 nm よりも長波長領域の光捕集特性が悪いために、太陽光スペクトルとのマッチングが悪い。一方、ポルフィリンは非対称性を上げることで、吸収が長波長化ならびにブロード化し、しかもソレー帯に対する Q 帯の光吸収能が向上することが知られている。報告者らはこの原理に基づき、メソ位に導入されたナフチル基を β 位で縮環したり、または β 位にキノキサリン基を縮環することを行ってきた [1]。その結果、ポルフィリンの吸収特性が改善され、エネルギー変換効率を大きく向上できることがわかつてきた。本研究では、ベンゾキノキサリンを β 位に非対称に縮環したポルフィリンカルボン酸 (ZnBQA、図 1) を合成し、その電子構造を理論計算により予測し、それを用いた色素増感太陽電池の性能を評価した。

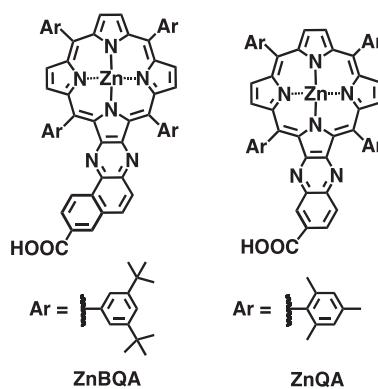


Figure 1. Structures of ZnBQA and ZnQA.

2 結果と考察

2.1 理論計算

ZnBQA の最安定化構造および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 DFT 計算を行なった (図 2)。また、参照系としてキノキサリン縮環ポルフィリン (ZnQA、図 1) に対しても計算を行った (図 3)。分子軌道を見ると、ZnQA の LUMO では吸着部位であるカルボン酸にまで電子密度が非局在化しているが、ZnBQA ではカルボン酸上の電子密度が低くなっていることがわかる。アンカー部位の電子密度が小さいと酸化チタンとのカップリングが弱くなり、電子注入の効率が低くなるということが考えられる。

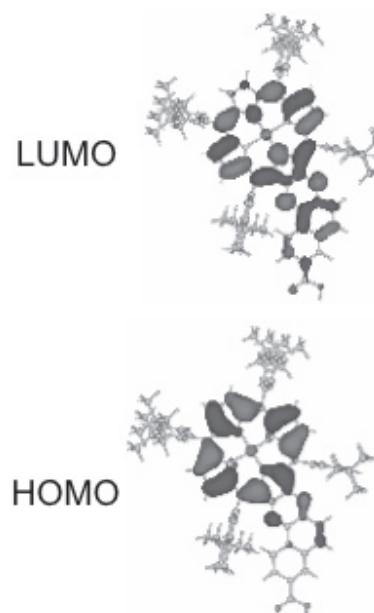


Figure 2. LUMO and HOMO of ZnBQA calculated by DFT methods with B3LYP/3-21G(d) basis set implemented in the Gaussian 03 program package. Molecular orbitals were visualized by GaussView 3.0 software.

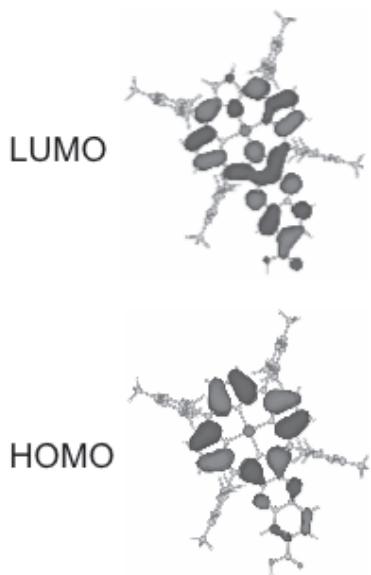


Figure 3. LUMO and HOMO of ZnQA

2.2 ポルフィリンの合成と色素増感太陽電池への応用

ZnBQA はポルフィリン骨格に対応する 2,3-ジケトンクロリンとメチル-5,6-ジアミノ-2-ナフテートをピリジン溶媒中で還流することで縮環反応を行なった後に、亜鉛化、加水分解することで合成した。ZnBQA の構造は NMR および質量分析により同定した。

可視吸収スペクトルを測定したところ、非対称に π 共役系を拡張したにも関わらず、ZnBQA の吸収端はキノキサリン縮環ポルフィリン (ZnQA) に比べて短波長シフトしていた [2]。また、蛍光スペクトルにおいても、ZnBQA の発光ピークは ZnQA に比べて短波長シフトしていた (図 4)。

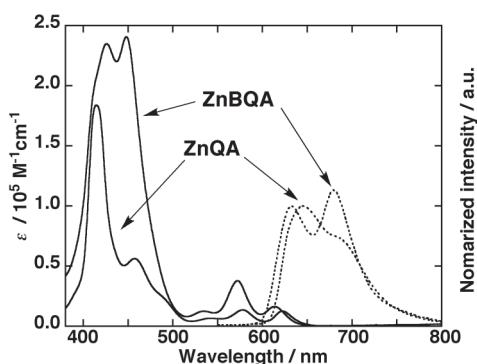


Figure 4. Absorption and fluorescence (excited at 450 nm) spectra of ZnBQA and ZnQA measured in dichloromethane.

ポルフィリン修飾酸化チタン電極は光散乱層を導入した二層型酸化チタン電極を ZnBQA のエタノール溶液 (0.2 mM) に一定時間浸漬することで色素を吸着させ、作製した。封止セルは、電解液に 0.1 M LiI, 0.05 M I₂, 0.6 M butylmethylimidazolium iodide, 0.05 M 4-*tert*-butylpyridine のアセトニトリル:バレロニトリル = 85:15 溶液を、対極に白金を用いることで作製した。セル性能の評価を行ったところ (図 5)、エネルギー変換効率 η の値は 5.1% (短絡電流 $J_{sc} = 11.1 \text{ mA cm}^{-2}$ 、開放電圧 $V_{oc} = 0.68 \text{ V}$ 、曲線因子 $ff = 0.67$) であった。これは、ZnQA を用いた場合の値 ($\eta = 6.3\%$ 、 $J_{sc} = 13.2 \text{ mA cm}^{-2}$ 、 $V_{oc} = 0.71 \text{ V}$ 、 $ff = 0.67$) より低くなっている。ZnBQA の低いエネルギー変換効率は、理論計算の結果から、ZnBQA の低い電子注入効率に起因すると考えられる。

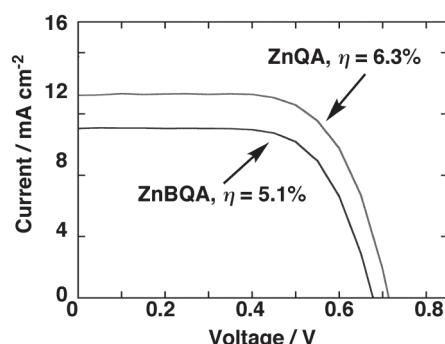


Figure 5. Current-voltage characteristics of ZnBQA- and ZnQA-sensitized TiO₂ cells under AM 1.5 conditions. Conditions for the photovoltaic measurements: electrolyte 0.1 M LiI, 0.05 M I₂, 0.6 M 2,3-dimethyl-1-propyl imidazolium iodide, and 0.5 M 4-*r*-butylpyridine in acetonitrile; input power: AM 1.5 under simulated solar light (100 mW cm⁻²).

3 参考文献

- [1] Imhori, H.; Umeyama, T.; Ito, S. *Acc. Chem. Res.* in press.
- [2] Eu, S.; Hayashi, S.; Umeyama, T.; Matano, Y.; Araki, Y.; Imahori, H. *J. Phys. Chem. C* 2008, 112, 4396.

Laplace 逆変換の数値計算ソフトウェアの開発

藤原宏志*

*京都大学大学院 情報学研究科

1 緒言

本研究は、理工学において現れる Laplace 変換に対して、その逆変換を近似的に求めるための数値計算ライブラリの実装を目的とするものである。

Laplace 変換は、

$$F(p) = \mathcal{L}f(p) = \int_0^\infty e^{-pt} f(t) dt$$

で定義され、理工学における基本的な解析手法として利用されている。その逆変換、すなわち Laplace 変換像 $F(p)$ を与えて原像 $f(t)$ を求める問題も物理や工学で現れる。Laplace 変換の逆変換を求めるための数値計算ライブラリは、報告者の知る限り存在せず、現在でも変換表が索かれることが多い。複素積分に基づく手法や特異値分解に基づく計算手法が提案されているが、いずれも汎用的かつ決定的な手法として確立されるに至っていない。

Laplace 逆変換を実現するまでの困難点は幾つかあるが、そのうち主なものは、原像 $f(t)$ が特異性を有する場合にも変換像 $F(p)$ が滑らになる場合が多いこと、および $F(p)$ から $f(t)$ への対応が自然なノルムで不連続であることなどである。特に後者に起因して、数値計算スキームは数値的に不安定となり、計算過程において丸め誤差および離散化誤差が急激に増大し、数値計算が破綻することが知られている。

本手法では、上述の丸め誤差の問題に対処するため、多倍長計算を利用する。しかし、多倍長計算は一般的なハードウェアで実装されていないため、ソフトウェアで実装された多倍長計算を利用する。ここでは、報告者が独自に実装した多倍長計算ソフトウェアを利用する。この多倍長計算ソフトウェアは、メディアセンターの Thin クラスタ HX600 に搭載される Opteron のアーキテクチャ AMD64 に向け、

アセンブリ言語で実装したものである。しかし、函数方程式の大規模シミュレーションを多倍長計算でおこなう際には記憶域(メモリ)と計算時間が問題となる。これに対して、スーパーコンピュータによる並列計算をおこなうことで、現実的な計算時間で逆変換を得る Laplace 実逆変換の数値計算ライブラリの実装をおこなった。

2 Laplace 逆変換アルゴリズム

本研究でもちいる Laplace 逆変換のアルゴリズムは、2 つの手順で構成される。まず最初に、Laplace 変換作用素に対し、

$$Lf(p) := p\mathcal{L}f(p)$$

の作用素を考える。次に適当な再生核 Hilbert 空間を構成して、そこでの Tikhonov 正則化を適用して得られる第二種積分方程式

$$(\alpha I + LL^*)H_\alpha(\cdot, t) = LK(\cdot, t)$$

の解 $H_\alpha(p, t)$ を求める。ここで、 α は正数、 $K(p, t)$ は構成した再生核 Hilbert 空間の再生核であり、 L^* は L を再生核 Hilbert 空間から、ある適当な重みつき $L^2(0, \infty)$ 空間への写像とみたときの共役作用素である。これで得られる $H_\alpha(p, t)$ を積分核とし、重みつき L^2 空間の内積によって

$$f_\alpha(t) = \langle Lf, H_\alpha(\cdot, t) \rangle$$

によって得られる正則化解 $f_\alpha(t)$ が、原像の適当な意味での近似を与える。これら夫々の手順に高精度離散化を適用して数値計算をおこなうことになるが、上述のとおり Laplace 変換は数値的不安定性を有す

る。そのため、双方の手順を多倍長計算で高精度におこない、丸め誤差の影響の現れない数値計算結果を得る。

また、スーパーコンピュータによる計算資源を利用して多倍長計算の計算桁数を増やすことも可能となり、倍精度数値計算では困難とされる指数減衰の重みつき空間における近似も実現される。

3 多倍長計算での連立方程式ソルバ

本アルゴリズムにおいて最も計算時間を要するのは、上述の第二種積分方程式の離散化により得られる密行列による連立一次方程式の求解であり、並列計算の利用が有効であると考えられる。そのため本研究では、連立方程式に対し、多倍長精度での MPI をもちいたプロセス並列による直接解法ライブラリをおこなった。アリゴリズムには外積形式 Gauss 消去法にもとづく LU 分解を利用し、静的な列サイクリック負荷分散をおこなうものとした。この結果、本アルゴリズムの実現で必要とする規模の数値計算において、16 プロセスおよび 32 プロセスの範囲で、0.99 を超える高い並列化効率を実現するソルバの実装に成功し、スーパーコンピュータによる並列計算をもちいることで、計算時間が大幅な短縮が達成された。

ここで得られた多倍長計算連立一次方程式ソルバは、C++ 言語および Fortran90 用に実装しており、Laplace 変換のみならず、悪条件 (ill-conditioned) な連立一次方程式のソルバとしても有用である。

上述の第二種連立一次方程式において $\alpha = 10^{-100}$ として、離散化で得られる 1000 次の連立一次方程式の 2-ノルムでの条件数はおよそ 10^{100} である。また、10 進 200 桁の精度で 32 プロセスでの解法に有する計算時間は 1 分未満であった。

4 数値計算例

京都大学学術メディアセンターの大型計算機システムに導入されている Maple および Mathematica が Laplace 逆変換の機能を有する。これらの商用ソフトウェアでは、厳密な逆変換を与えるコマンドが提供される一方、常に逆変換が得られるとは限らない。例として、M/D/1 待ち行列に関して現れる

$$\mathcal{L}f(p) = \frac{1-r}{p-r(1-e^{-p})}$$

を考える。これに対しては、Maple 12, Mathematica 7 では逆変換像を得ることはできなかった。

```

*Maple 12 - Untitled (1) - [Server 1]
File Edit View Insert Format Table Drawing Plot Spreadsheet Tools Window Help
with(inttrans);
[addtable, fourier, fouriercos, fouriersin, hankel, hilbert, invfourier, invhilbert, invlaplace, invmelin, laplace, melin, savetable] (1)

F5 := p -> (1 - 0.7) / (p - 0.7 * (1 - exp(-p)));
p -> 0.3
p + (-1) * 0.7 * (1 - e^(-p)) (2)

invlaplace(F5(p), p, t);
3. invlaplace(1 / (10 p - 7 + 7 e^-p), p, t) (3)

```

図 1: Maple12 の結果

```

Untitled-1 *
File Edit Insert Format Cell Graphics Evaluation Palettes Window Help
In[1]:= F5[LP_1] = (1 - 0.7) / (p - 0.7 (1 - Exp[-p]))
Out[1]= 0.3
-0.7 (1 - e^-p) + p

In[2]:= InverseLaplaceTransform[F5[p], p, t]
Out[2]= 0.3 InverseLaplaceTransform[1 / (-0.7 (1 - e^-p) + p), p, t]

```

図 2: Mathematica7 の結果

一方、本研究で提案する手法は図 3 に示す数値計算結果が得られる。

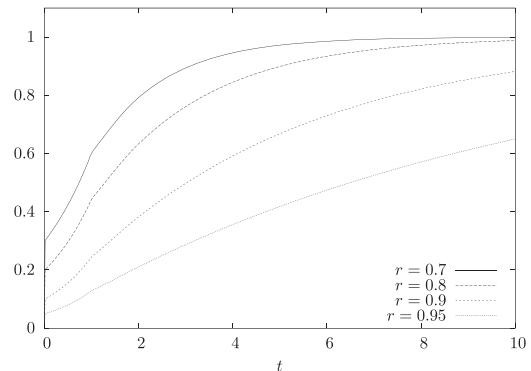


図 3: 本研究による数値計算結果

今後、適切な函数空間の設定やインターフェースの改善などが課題として挙げられる。

円管内乱流パフの生成維持機構

清水 雅樹 * , 木田 重雄 †

*同志社大学 研究開発推進機構

†京都大学 工学研究科

1 はじめに

オズボーン・レイノルズ(1883)の円管内乱流の実験に始まり、壁面を伴う乱流の生成維持機構について数多くの研究がなされてきた。しかし、乱流への遷移は本質的に非線型不安定性によるものであり、また乱流は非常に大きな自由度の状態であるため、乱れの生成維持機構の詳細は未解決のままである。円管内流れにおいて、乱流が維持できる下限の Re 数付近では、部分的な乱流の塊(乱流パフ)が断面平均流速程度の速さで流下する現象が観測される。我々はこの乱流パフを直接数値計算(DNS)によって実現し、乱流パフの上流端での不安定性によって乱れが生成され続け、乱流が維持されていることを提案した。スペクトル法を用いた大規模な DNS が行えた結果、こうした乱れの生成維持過程を調べることができるようになった。

2 数値計算

一様外力 f によって駆動される、半径 a の円管内の非圧縮ニュートン流体の運動を考える。動粘性係数を ν として、レイノルズ数を $Re = fa^3/4\nu^2 = aU/\nu$ と定義する。ここで $U = fa^2/4\nu$ は、ハーゲン-ポアズイユ流が実現したときの中心速度である。流れは壁面すべりなし、管軸方向には周期 L で周期的とする。速度場が $\mathbf{u} = \nabla \times (\hat{\mathbf{z}}\psi) + \nabla \times (\nabla \times (\hat{\mathbf{z}}\phi))$ と表せるスカラー関数 ψ, ϕ を用いて非圧縮ナビエ-ストークス方程式と境界条件を書き換える。

$$\begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix} = \sum_{k=-K}^K \sum_{m=-M}^M \sum_{\substack{n=|m| \\ n+m=\text{even}}}^N \begin{pmatrix} \widehat{\psi}_n^{mk} \\ \widehat{\phi}_n^{mk} \end{pmatrix} \Phi_n^m(r) \exp[i(m\theta + 2\pi kz/L)]$$

とスペクトル展開する。ここに、 r, θ, z はそれぞれ、円管軸を軸とする円筒座標系の動径、方位角、管軸方向の座標で、 $\hat{\mathbf{z}}$ は管軸方向の単位ベクトルである。また、 Φ_n^m はゼルニケ円多項式と呼ばれるものである。これを用いることで管軸上での解析性が保証され、自然に展開できる。展開係数 $\widehat{\psi}_n^{mk}, \widehat{\phi}_n^{mk}$ の時間発展方程式を、粘性項にクランク-ニコルソン法、非線型項に2次のアダムス-バッシュフォース法を用いて数値積分する。壁面での境界条件はタウ法を用いて満足させる。管軸方向の周期については、乱流パフが取まる程度の長さが必要であり、 $L = 16\pi a$ とした。レイノルズ数 Re は比較的パフの様子が変化しない $Re = 3000$ とする。数値計算の空間解像度については、上式の展開の打ち切りモード数を $(N, M, K) = (80, 31, 511)$ とし、時間積分の刻み幅は、 $0.005 a/U$ とする。以下の物理量は、長さ a 、速さ U で無次元化したものを用いる。数値計算の詳細は [1] を参照されたい。

3 結果

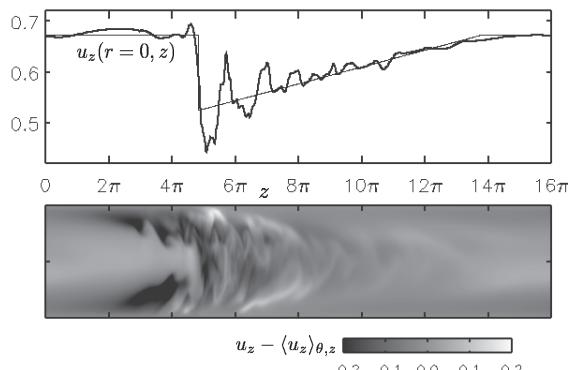


図 1 :乱流パフでの流れ方向速度

図 1 に、上記の数値計算で得られた、流れ場の様子を示す。上図の太線は、管軸上での軸方向速度 $u_z(r = 0, z)$ の計算領域全体にわたる分布である。

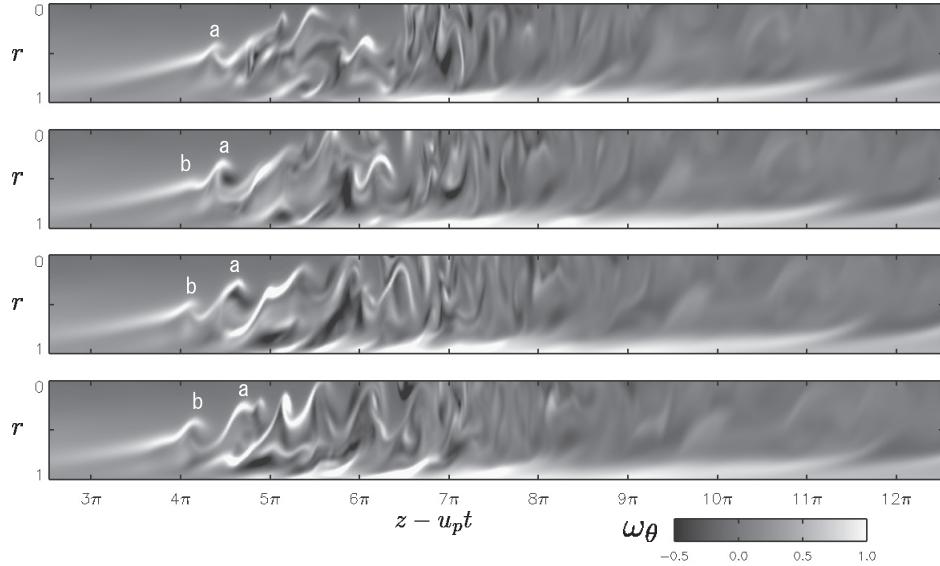


図2：乱流パフ上流端での剪断層の巻き上がり

この図の左方で流速はほぼ一定であるが、 $z = 5\pi$ 付近で急激に大きく減速し、そこから下流に向かって、増減を繰り返しながら徐々にもとの速さに回復する。この速度が急激に減少する付近から下流側が乱流パフとよばれるものである。この乱流パフの部分を、ステップを伴う区分的一次関数と最小自乗法で近似したものを細線で示す。下図は、管軸を含むある平面上での軸方向速度 u_z の変動部分の分布である。縦軸は動径座標で上下辺が円管壁にある。乱流パフの上流端は管の中心部より壁側であり上流側に位置していることがわかる。実際、以下に述べるように、パフ内の乱れは上流端の壁面近傍で生成される。

パフ内は乱流であり、一般の壁面乱流のように低速ストリークとそれに伴う流れ方向渦度が壁面近傍に見られる。この低速ストリークの進行速度はパフの進行速度(～平均流速)より小さく、低速ストリークは取り残されやがて層流領域に出てくる。その結果、上流からやってくる流れとの間で強い剪断層を形成する。この剪断層は、ケルビン-ヘルムホルツ不安定性により巻き上がり、流れ場に変動を引き起こす。図2に低速ストリークの作る剪断層の巻き上がりの様子を、渦度の方位角成分 ω_θ の等高線によって示す。時間は上から下に経過している。記号a, bは、それぞれの巻き上がりを指している。この4枚の図で巻き上がりの1周期分を表している。この低速ストリークの場合、このような巻き上がりが8回繰り返して起こり、その後、低速ストリークは消滅した。低速ストリークには強弱があり、その活動の寿命やそれにともなう巻き上がりの回数はさまざまである。

このような低速ストリークは、パフの中から上流端を横切ってパフ上流に現れ、不安定性によって変動を作り、その変動はさらに複雑に乱れながら、パ

フ内部に入り込みパフの乱れに活力を与える。

4 まとめ

図3に乱流パフの生成維持機構の概略をまとめる。乱流パフの上流端において、剪断層の不安定性が頻繁に起きているために乱流が維持される。不安定になるために十分速い流速が必要であり、この条件が乱流への遷移に関係していると考える。また、乱流パフの長さが維持されるのは、剪断層での乱れの生成と、下流側での散逸がバランスしているためである。乱流パフの生成維持過程の詳細は[2]を参照されたい。

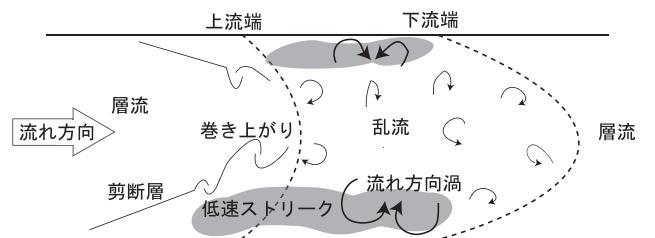


図3：乱流パフの概略図

参考文献

- [1] Shimizu, M. and Kida, S., Structure of a turbulent puff in pipe flow, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 77, pp. 114401-114408 (2008)
- [2] Shimizu, M. and Kida, S., A driving mechanism of a turbulent puff in pipe flow, Fluid Dynamics Research, Vol. 41, pp. 045501-045527 (2009)

有機EL正孔輸送材料TPDの電荷輸送特性

山田知典¹、梶 弘典¹、佐藤 徹^{2,3}、田中一義³

¹京都大学化学研究所、²京都大学福井謙一記念研究センター、³京都大学工学研究科

1. 緒言

近年、有機材料における電荷移動が、基礎的観点のみならず、有機エレクトロルミネッセンス(EL)や有機太陽電池などへの応用的観点からも注目されている。有機材料における分子間電荷移動速度定数 k_{CT} は、Marcus 理論¹により、再配列エネルギー λ とトランスファー積分 H の関数として次式により表わされる。

$$k_{CT} = \frac{4\pi^2}{h} H^2 \frac{1}{\sqrt{4\pi\lambda k_B T}} \exp\left(-\frac{\lambda}{4k_B T}\right) \quad (1)$$

ここで、再配列エネルギーは、電荷移動の際、分子構造の緩和に必要なエネルギーである。トランスファー積分は、分子間での最高占有軌道(HOMO)あるいは最低非占有軌道(LUMO)の重なりを表わすパラメータであり、正孔移動には HOMO の重なり、電子移動には LUMO の重なりを考える。現在までに、種々の有機EL電荷輸送材料について、再配列エネルギーの計算が行われてきた^{2,3}。しかし、トランスファー積分についてはほとんど報告例がない。すなわち、有機EL電荷輸送材料の電荷輸送特性の起源は、明確にされていないのが現状である。本研究では、有機EL正孔輸送材料として広く知られている *N,N'-diphenyl-N,N'-di(m-tolyl)benzidine* (TPD、図1)について、再配列エネルギー、および、結晶構造中におけるすべての隣接二分子のペアについてトランスファー積分を計算した。その結果に基づき、結晶状態における電荷輸送特性について検討した。また、time-of-flight 測定から、TPDの電子移動度は正孔移動度と比べて3-4桁低いことが示唆されているが⁴、この起源について考察を行った。TPDの結晶構造としては、斜方晶⁵と単斜晶⁶が報告されているが、これらは非常に似通っているため、今回は斜方晶についての検討結果を報告する。

2. 量子化学計算

TPDの中性、カチオン、アニオン状態に対し、

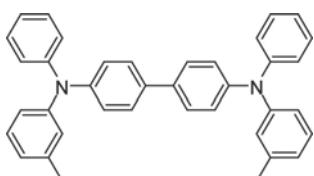


図 1. TPD の化学構造。

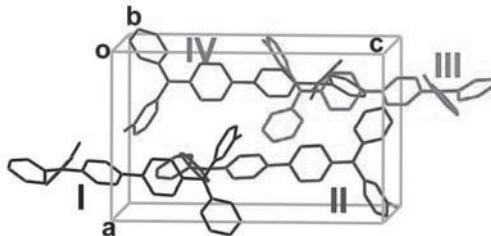


図 2. TPD 斜方晶の単位格子。

密度汎関数法(DFT) B3LYP/6-31G(d)にて構造最適化を行った。得られた構造を用い、拡張Hückel法により、正孔移動にともなう再配列エネルギー λ^+ および電子移動にともなう再配列エネルギー λ^- を計算した。

TPD斜方晶の単位格子を図2に示す。ここで、単位格子中の四分子(I, II, III, IV)間のみならず隣接格子まで考慮し、36通りすべての隣接二分子のペアについて、正孔移動のトランスファー積分 H^+ を計算した。計算は、次式(2)により、拡張Hückel法を用いておこなった。

$$H^+ = \frac{|\beta - \alpha S|}{1 - S^2} \quad (2)$$

ここで、 α , β , S は、それぞれ、 $\alpha = \langle \Phi_{HOMO}^A | H | \Phi_{HOMO}^A \rangle = \langle \Phi_{HOMO}^B | H | \Phi_{HOMO}^B \rangle$, $\beta = \langle \Phi_{HOMO}^A | H | \Phi_{HOMO}^B \rangle$, $S = \langle \Phi_{HOMO}^A | \Phi_{HOMO}^B \rangle$ である。 Φ_{HOMO}^A および Φ_{HOMO}^B は、2つのTPD分子A, Bの孤立状態におけるHOMOである。また、 Φ_{HOMO}^A および Φ_{HOMO}^B のかわりにTPD分子A, Bの孤立状態におけるLUMO (Φ_{LUMO}^A および Φ_{LUMO}^B)を用いて、同様に電子移動のトランスファー積分 H^- を計算した。すべての計算は、京都大学学術情報メディアセンター大型計算機システムにて、Gaussian 03⁷を用いて行った。

3. 結果と考察

3.1. 再配列エネルギー

TPDの再配列エネルギー λ^+ , λ^- の値は、それぞれ、0.15, 0.40 eVであった。 $H^+ = H^-$ と仮定すると、(1)式から、300 Kにおける正孔移動と電荷移動の速度定数の比は、 $k_{CT}^+/k_{CT}^- = 20$ となる。これは、DFTによる報告例 ($k_{CT}^+/k_{CT}^- = 21$)³とよい一致を示すものであるが、上述の、3-4桁異なる実測の電荷移動度の比を説明できるものではないことがわかる。

3.2. HOMO, LUMO

図3にTPDのHOMO, LUMOを示す。これらを比較すると、HOMOは比較的分子全体に存

在することがわかる(ビフェニレンに36%、Nに30%、それ以外に34%)。一方、LUMOはビフェニレン部分に局在化している(ビフェニレンに85%)。

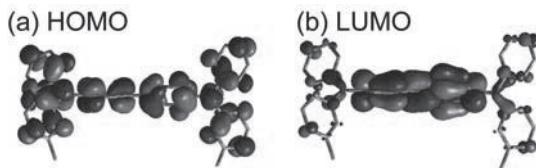


図 3. TPD の HOMO、LUMO。

3.3. トランスファー積分と電荷移動速度定数

TPD 斜方晶における、36通りの隣接二分子について、トランスファー積分の値を図4aに示す。これらの中で、7、8、27、28番のペアでの H^+ の値が大きい(6.4 meV)。これらの組み合わせを図5に示す。詳細な検討の結果、これらのペアでは、特定のフェニルあるいはトリル基の間で分子間距離が短く、HOMO の重なりが大きいことがわかった。一方、 H^- の値は2.4 meV以下である。これは、LUMO がビフェニレン部分に局在化しているため、分子間で重なりにくいためであると考えられる。

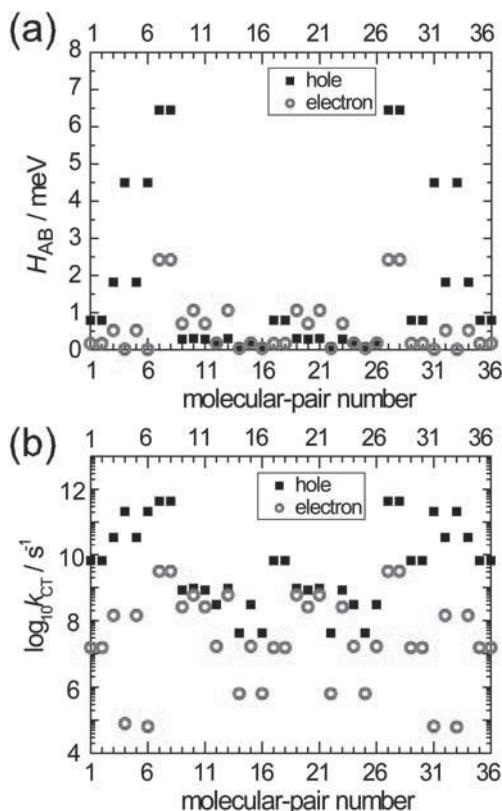


図 4. TPD 斜方晶における36通りの隣接分子ペアに対するトランスファー積分(a)、および、Marcus理論にもとづく300 Kでの電荷移動速度定数(b)。

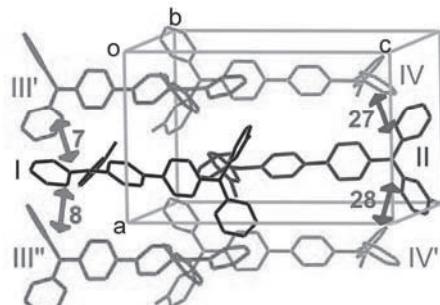


図 5. TPD 斜方晶において正孔移動のトランスファー積分が大きい分子ペア 7、8、27、28。

以上の結果に基づき、式(1)により300 Kにおける電荷移動速度定数を計算した。その結果を図4bに示す。7、8、27、28番のペアで、大きな正孔移動速度定数 $k_{CT}^+ = 4.3 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ が得られた。図5から、7、8番の繰り返し、または、27、28番の繰り返しにより、a軸方向への正孔輸送が有効であることが示唆される。他の隣接二分子のペアに対しては、 $k_{CT}^+ = 4.2 \times 10^7 - 2.1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ であった。一方、電子移動に対しては、 $k_{CT}^- = 6.2 \times 10^4 - 3.1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ と計算された。これは、正孔移動速度定数と比較すると、2-3桁小さい。以上の結果から、TPD の電子輸送特性が低い起源として、大きな再配列エネルギーのみならず、小さなトランスファー積分も大きく影響していることが示された。

4. 結言

TPD が、正孔輸送性に優れる一方、電子輸送性に劣ることに対して検討を行った。その結果、これまで考えられてきた再配列エネルギーのみならず、分子間のトランスファー積分も大きな要因であることが明らかとなった。TPD を含めた有機EL材料は、実際には非晶状態で用いられる。今後、二次元二量子固体NMR法などにより、非晶TPDの分子間パッキング解析を行い、非晶状態における電荷輸送特性についてさらなる検討を行いたいと考えている。

最後になりましたが、スーパーコンピューター共同利用制度によるサポートに感謝いたします。

参考文献

- (1) Marcus, R. A.; Sutin, N. *Biochim. Biophys. Acta* **1985**, *811*, 265.
- (2) Sakanoue, K.; Motoda, M.; Sugimoto, M.; Sakaki, S. *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 5551.
- (3) Lin, B. C.; Cheng, C. P.; Lao, Z. P. M. *J. Phys. Chem. A* **2003**, *107*, 5241.
- (4) Cusumano, P.; Gambino, S. *J. Electron. Mater.* **2008**, *37*, 231.
- (5) Kennedy, A. R. et al., *J. Mater. Chem.* **2002**, *12*, 168.
- (6) Zhang, Z.; Burkholder, E.; Zubietta, J. *Acta Cryst.* **2004**, *C60*, o452.
- (7) M.J. Frisch et al., Gaussian 03, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, 2003.

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

ヒトの嗅覚は他の霊長類よりも劣っているのだろうか?

松井 淳^{1,2} 郷 康広² 新村 芳人³

¹京都大学 霊長類研究所、²京都大学大学院 理学研究科 グローバル COE 特別講座(生物多様性)、
³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り、また危険を避け、食料を獲得し、生殖の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最重要器官のひとつである。霊長類において、さまざまな刺激を受けとる7回膜貫通型の感覚受容体遺伝子のうち、光刺激をうけとる視覚では数個、味覚では化学物質からの刺激を受けとる数十個の機能遺伝子がゲノム中に存在している。

一方、嗅覚の刺激受容は、嗅覚受容体が環境中のにおい物質を分子認識することにより開始されるが(図1)、霊長類の嗅覚受容体遺伝子はゲノム中最大の多重遺伝子族(それぞれの種のゲノム中に複数存在し、相同性が高く類似の機能をもつ遺伝子グループ)である。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情報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には、より多くの種の霊長類ゲノム情報から網羅的に遺伝子同定をすることが最初のステップであり、重要な課題である。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、ネズミキツネザル)と霊長目の近縁種であるツバメのゲノム情報から全嗅覚受容体遺伝子を同定し、ゲノム比較研究を試みた。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

比較的質の高いオランウータン、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。キツネザル、オオガラゴ、ツバメのゲノムデータは 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

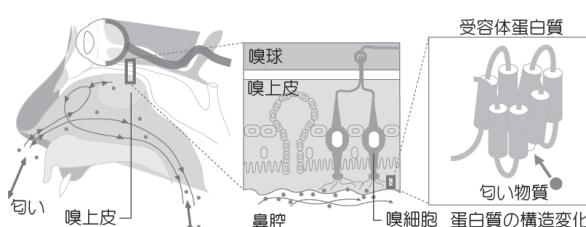


図1. 嗅覚受容体の模式図。嗅上皮に多数発現した嗅覚受容体によってにおい物質がとらえられる。

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靈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(図 2)。

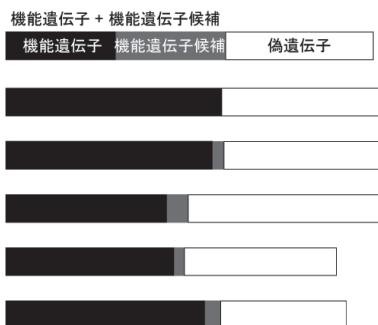


図 2. 各靈長類の嗅覚受容体遺伝子数. 未発表データのため数値は伏せ、グラフの長さで模式的に遺伝子数を示す.

2.3 機能遺伝子の分類

プログラム E-INS-I (MAFFT version 5.8-6.2) [5]によってアラインメントした配列データをもとに系統樹作成 (LINTREE [6]) を行い、機能遺伝子を分類した(図 3)。

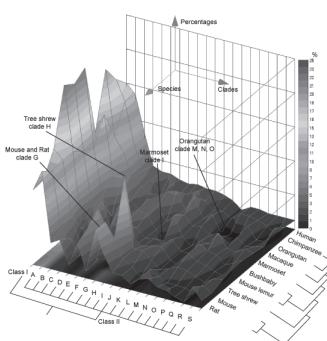


図 3. 各靈長類の嗅覚受容体遺伝子の分類結果. 染色体上のクラスター分類群に大きな違いが存在.

3 結果と考察

靈長目の嗅覚は、進化の過程で色覚の発達と引き換えに相対的な重要性が低下したため機能を失い、ヒトは進化の過程でさらに嗅覚が衰え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ことになる。

ここではゲノム配列の精度が高い 5 種の靈長目（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。

遺伝子数を種間で比較すると、マーモセットの偽遺伝子の割合は、他の 4 種に比べて低いことが分かった。これは先行研究と一致する結果である。しかしながら、マーモセットの機能遺伝子数はヒトやチンパンジーとほとんど同じで、むしろアカゲザルやオランウータンの方が少なかった。このことは、偽遺伝子の割合では機能の優劣を推測できないことを示唆している

機能遺伝子数から推測すると、他の靈長目に比べて、ヒトの嗅覚はそれほど退化していないと考えられる。また、色覚の発達が靈長類の嗅覚受容体遺伝子に与えた影響はこれまで考えられていたよりも小さいことが示唆された。

4 参考文献

1. Niimura Y, Nei M (2003) Evolution of olfactory receptor genes in the human genome. Proc Natl Acad Sci USA 100: 12235–12240.
2. Go Y, Niimura Y (2008) Similar numbers but different repertoires of olfactory receptor genes in humans and chimpanzees. Mol Biol Evol 25: 1897–1907.
3. Niimura Y, Nei M (2007) Extensive gains and losses of olfactory receptor genes in mammalian evolution. PLoS ONE 2: e708
4. Altschul SF, et al. (1997) Gapped Blast and PSI-Blast: a new generation of protein database search programs. Nucleic Acids Res 25:3389–3402.
5. 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.
6. Takezaki N, Rzhetsky A, Nei M (1995) Phylogenetic test of the molecular clock and linearized trees. Mol Biol Evol 12: 823–833.

巨大クラスターイオン衝突における密度効果

青木 学聰

京都大学 大学院 工学研究科 電子工学専攻

1 研究の背景

原子・分子の集合体であるクラスターは、クラスターそのものが持つ物理的化学的性質に加え、新しいイオンビーム材料として注目を集めている。従来のイオンビームで用いる単一の原子、分子に比して、クラスターをイオン化、加速し、標的材料に衝突させることにより、高いスペッタ率、ナノメートル精度での表面平坦化等、従来法では実現が困難とされた照射効果が得られる[1]。これらの照射効果は、原子集団であるクラスターが標的材料表面と衝突する際、クラスター構成原子と標的材料原子との間において、極めて多数、高密度の原子間衝突を生じることによる。この多体衝突現象は、単原子イオンビーム衝突での衝突モデルである、二体衝突の繰り返し(カスケード衝突とも呼ばれる)とは大きく異なり、未だ不明な部分が多い。今回、分子動力学シミュレーションにより、クラスターを構成する原子密度の違いによる多体衝突効果について検証した。

2 クラスターイオン衝突現象の分子動力学シミュレーション

従来のイオンビームと固体表面との相互作用のシミュレーションには、二体衝突モデルの繰り返しによるモンテカルロシミュレーションが広く利用されている[2]。しかしながら、クラスターと固体表面の衝突過程は多数の原子衝突が、極めて狭い範囲において同時に生じるため、衝突に関わる全ての原子の運動を詳細に追跡する必要がある。この方法は分子動力学法の原理そのものであり、クラスター-固体表面の相互作用の解析手法として利用されるようになっている[3]。今回実施した

シミュレーションの概要は以下のとおりである。表面約40nm四方、深さ約20nm、約200万原子からなる、Si(100)の固体表面構造を用意し、これに対し2000個からなるArクラスター(Ar_{2000})を衝突させる。今回のシミュレーションでは、衝突させるクラスターの密度効果を調べるために、Arクラスターの固体状態に置ける密度を標準として、横方向、縦方向それぞれ独立に4倍まで拡張した仮想的なクラスターを用意し、これらの衝突過程を16psにわたり分子動力学法によるシミュレーションを行った[4]。

3 結果と考察

密度の異なる Ar_{2000} クラスターのSi(100)表面への衝突シミュレーション結果を図1に示す。これらのArクラスターは総加速エネルギーにして20keVのエネルギーを持つが、これは個々のAr原子に換算すると 10eVとなる。通常の単原子イオンビームプロセスや、プラズマプロセスにおいては、10eVのエネルギーを持った個々のAr原子が独立にSi表面に衝突しても、表面欠陥や、Si原子の表面脱離はほとんど生じない。しかしながら、この様な低エネルギーの粒子がクラスターとして、局所的に衝突することにより、固体表面にクレーター状の大規模な欠陥が生じることが、シミュレーション結果より示される。また、縦方向、横方向の密度を変化させたシミュレーション結果より、クラスターが固体内部深くに進入する現象は、横方向の広がりに従い、その効果が見られなくなることがわかる。

一連のクラスター衝突により、固体表面に付与されたエネルギー、そして表面より脱離した Si 原子数(スペッタ率)を表1及び2に示す。それぞ

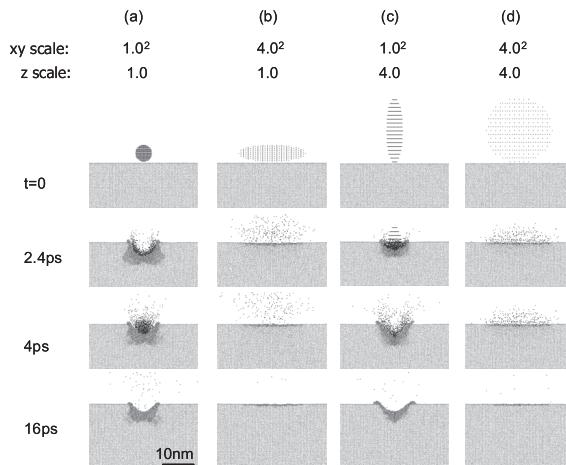


図 1: 密度の異なるAr₂₀₀₀クラスターのSi(100)表面への衝突シミュレーション。クラスターの総加速エネルギーは20keVである。密度は固体状態を標準とし(a)、水平方向のみ(b)、垂直方向のみ(c)、水平、垂直双方(d)の倍率、4倍に拡大したものを示す。

れの条件について各1回の衝突シミュレーションしか実施しなかったため、統計的な揺らぎが存在することを考慮する必要があるが、エネルギー付与に関しては、水平、垂直双方の拡大に伴い、単調に減少する傾向が見られる。一方、スパッタ率については、固体状態に比べて密度が若干減少した場合において、高いスパッタ率が観測される。入射粒子密度が高い場合、クラスター構成原子より付与されるエネルギーは、基板表面原子の変位を生じるための十分な量となる。このとき、一度原子変位が生じると、後続のクラスター構成原子は、エネルギーを失うことなく、次々と基板内部に侵入することとなる。この結果、更に深い位置において原子変位が生成し、クラスターの持つ運動エネルギーの大部分が、原子変位によるクレーター状の欠陥形成に費やされる。一方、入射原子密度が減少した場合、個々のクラスター構成原子が持つ運動エネルギーは、ある程度の時間的間隔を持って、基板表面原子に付与される。このとき、基板表面原子が受け取るエネルギーは、原子変位を生じるまでには至らず、近隣の表面原子との格子間原子振動の励起エネルギーとなる。その結果、最表面の基板原子が脱離する、いわゆるスパッタリングが高効率で発生する。

4まとめと展望

巨大原子集団であるクラスターの固体表面への衝突過程の分子動力学シミュレーションを実施す

表 1: 水平方向、垂直方向に密度を変えた場合に、クラスターより基板に付与されるエネルギー(単位: keV)

| $\frac{z}{xy}$ | (1) ² | (1.26) ² | (1.5) ² | (2) ² | (2.5) ² | (3) ² | (4) ² |
|----------------|------------------|---------------------|--------------------|------------------|--------------------|------------------|------------------|
| 1 | 18.14 | 17.54 | 16.52 | 15.06 | 15.36 | 15.55 | 15.78 |
| 1.26 | 18.11 | 17.23 | 15.94 | 14.46 | 15.02 | 15.37 | 15.75 |
| 1.5 | 17.91 | 16.83 | 15.46 | 14.11 | 14.84 | 15.30 | 15.69 |
| 2 | 17.46 | 16.07 | 14.45 | 13.46 | 14.34 | 15.19 | 15.47 |
| 2.5 | 17.06 | 15.37 | 13.45 | 13.30 | 14.11 | 14.88 | 15.78 |
| 3 | 16.57 | 14.34 | 12.96 | 13.28 | 14.00 | 14.81 | 15.72 |
| 4 | 15.58 | 13.50 | 12.57 | 13.55 | 14.21 | 14.94 | 15.39 |

表 2: 水平方向、垂直方向に密度を変えた場合に得られる、スパッタ率

| $\frac{z}{xy}$ | (1) ² | (1.26) ² | (1.5) ² | (2) ² | (2.5) ² | (3) ² | (4) ² |
|----------------|------------------|---------------------|--------------------|------------------|--------------------|------------------|------------------|
| 1 | 0 | 1 | 6 | 44 | 112 | 34 | 0 |
| 1.26 | 0 | 0 | 3 | 47 | 70 | 22 | 0 |
| 1.5 | 0 | 2 | 14 | 34 | 73 | 39 | 5 |
| 2 | 0 | 1 | 14 | 76 | 49 | 20 | 1 |
| 2.5 | 0 | 8 | 28 | 52 | 27 | 5 | 0 |
| 3 | 1 | 15 | 52 | 82 | 21 | 6 | 0 |
| 4 | 13 | 44 | 58 | 53 | 2 | 0 | 0 |

ることにより、クラスター衝突特有の多体衝突効果について調べた。シミュレーション結果より、クラスターを構成する原子種、個数は同じであっても、密度、構造が変化することにより、衝突によるクレーター形成効果、及びスパッタリング効果が大きく異なることが明らかとなった。

イオンビーム照射による表面加工プロセスへの応用を考えた場合、固体表面内への損傷を低減し、かつ高効率で固体表面原子を除去する必要がある。今回のシミュレーション結果は、直接実験で確認することは困難であるが、この他の分子動力学シミュレーション、及び基礎実験との連携により、個々のアプリケーションにあわせた、最適なクラスター照射条件を求めるための基本的な情報として、活用が期待できる。

参考文献

- [1] I. Yamada, J. Matsuo, N. Toyoda and A. Kirkpatrick, Mat. Sci. Eng. R 34 (2001) 231.
- [2] <http://www.srim.org/>
- [3] Y. Yamaguchi, J. Gspann and T. Inaba, Eur. Phys. J. D, 24 (2003) 315
- [4] <http://hdl.handle.net/2433/8942>

3次元大規模並列電磁粒子シミュレーションを用いた 科学衛星搭載用波動電界アンテナの特性解析

¹三宅洋平²臼井英之^{1,2}京都大学生存圏研究所現所属：¹京都大学学術情報メディアセンター、²神戸大学大学院工学研究科

1 はじめに

将来の科学衛星ミッションで必要とされる高精度な宇宙環境観測に向け、宇宙飛翔体・プラズマ間相互作用が波動観測アンテナの特性・性能に及ぼす影響を定量的に調査する必要性が高まっている。現実的な宇宙プラズマ環境を地上のチャンバー実験で模擬することは困難であるため、数値的手法を用いたアンテナ特性解析ツールを構築し、実用化させる必要がある[1]。本研究では、プラズマの運動論的効果を矛盾なく解き進めることができ可能な3次元電磁粒子計算機実験手法を用いることにより上記の問題を取り組む。

2 シミュレーションモデル

本報告では、特に次期水星探査ミッション Bepi-Colombo に搭載される電界アンテナ MEFISTO の数値モデリング、特性解析について述べる。

本研究で用いる電磁粒子シミュレーションは、プラズマを有限サイズの荷電粒子の集まりとして扱い、電磁界発展を記述する Maxwell 方程式とプラズマの挙動を記述する運動方程式を交互に解き進めていく手法である[2]。我々はこの基本手法をさらに改良し、宇宙飛翔体やアンテナ表面などの非プラズマ物体、その表面から放出される光電子／二次電子を数値モデルとして物理的に正しく扱うことのできるシミュレーションコードの開発を行った[3]。

図 1 に本解析で用いる MEFISTO アンテナの数値モデルを示す。MEFISTO の特徴としては、センサーワイヤとブームの間に設置された「パッ

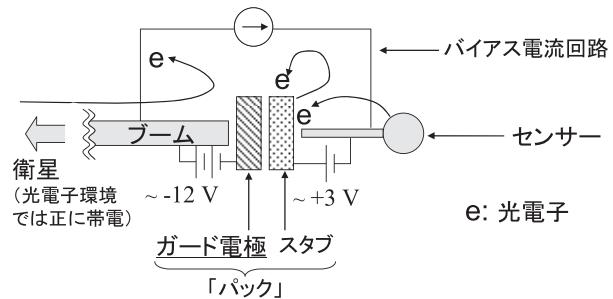


図 1. MEFISTO アンテナ数値モデル（片側）

ク」と呼ばれる部分に、光電子ガード電極が搭載されていることである。このガード電極は電界アンテナの性能に影響を及ぼす衛星（およびブーム）から放出された光電子を排斥し、センサー部分まで到達しないようにする働きがある。我々は Capacity Matrix 法[4]と呼ばれる手法を用いて、パック表面左半分の電位を衛星電位に対して負とすることにより、ガード電極をモデリングした。

図 1 に示したアンテナモデルを背景プラズマで満たした 3 次元計算空間中に配置し、さらにアンテナ軸に垂直方向に太陽光が照射する状況を想定して太陽照射面からの光電子放出を模擬することにより、アンテナ周辺のプラズマ環境を解析した。現実の光電子は背景プラズマ電子に比較して、高密度、低温であることを考慮し、光電子と背景電子のフラックス比は 50、温度比は 1/4 とした。計算格子は $128 \times 128 \times 128$ とし、プラズマ荷電粒子は 1 計算セルあたり 32 個とした。

3 計算結果

衛星本体およびアンテナ部分の電位が定常値に達するまで十分なタイムステップ数計算を行った。その結果、衛星本体とブーム部分は光電子放出により負電荷を失うことにより正に帯電することを確認した。一方、センサー部分にはバイアス電流を衛星から強制的に流すため、センサー電位は周辺プラズマの電位とほぼ等しくなった。

図2に定常状態におけるアンテナ片側周辺の電子密度分布を示す。ただし図2(a)、(b)はそれぞれガード電圧 on、off 時の分布を示している。図よりいずれの場合においても太陽光が照射する衛星表面やアンテナ右面付近を中心に光電子雲が形成されていることが確認できる。ガード電極 off 時にはブーム周辺とパック表面の光電子雲が結合された状態になっている。一方ガード電極 on 時には、センサー周辺部およびブーム周辺の光電子雲が分離されており、ガード電圧の有無が電子分布に大きな影響を与えることが確認された。

次に図3に定常状態における光電子フラックスベクトルを示す。ガード電極 off 時には、センサーの左側にブームからセンサー方向へ向かう光電子流が認められる。これは光電子流によりセンサーと衛星間に電流ループが形成されていることを示唆し、アンテナの特性に影響を及ぼす可能性がある。一方でガード電極 on 時にはセンサーとブームの間に低電位のガード電極が存在するため、センサー側とブーム側の光電子がそれぞれパックから離れる方向に移動し、結果として両者周辺の光電子が分離されていることが確認できる。またセンサー左面側にもブームからセンサー方向へ向かう光電子流は特に見られない。このことからガード電極がセンサー・衛星間の光電子電流カッピングを軽減する働きを持つことがわかる。

今後は光電子電流の影響を最小化するためのガード電圧の最適値をシミュレーションにより、調査する予定である。

4 まとめと今後の展望

以上の結果から、本シミュレーション手法が複雑な光電子環境中でのアンテナ特性定量評価において有力であるとともに、数値ツールとしてガード

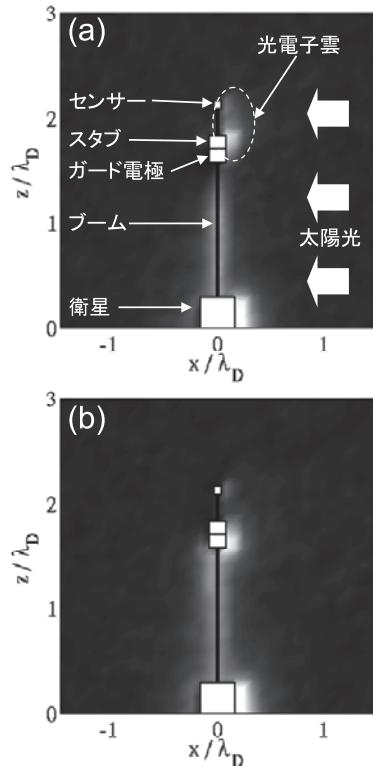


図2. アンテナ周辺の電子密度分布。
(a)、(b)はそれぞれガード電極 on/off 時.

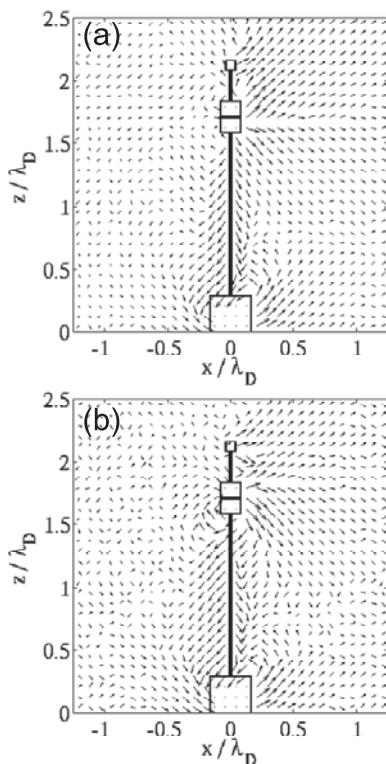


図3. アンテナ周辺の光電子フラックス分布。
(a)、(b)はそれぞれガード電極 on/off 時.

ト電極の最適設計にも貢献可能であることが示された。

今後、シミュレーションで得られたアンテナ特性データを電界アンテナ設計にフィードバックしていくためには、より詳細なアンテナ・衛星形状、現実的なプラズマ・光電子パラメータを導入する必要がある。こうしたシミュレーションは膨大な計算時間・使用メモリを必要とし、効率的な並列計算技術が欠かせない。粒子シミュレーションにおいては計算領域内の任意の位置に粒子が移動し得るため、単純な計算領域分割並列化法では負荷バランスを維持するのが極端に難しい。このため粒子法は流体計算等と比較して高並列計算に不向きであるとされてきた。この、欠点を克服すべく、京都大学の生存圏研究所および学術情報メディアセンターの共同研究により、新負荷分散アルゴリズム OhHelp の開発が行われた[5]。筆者が行った Fortran コンパイラによる自動並列計算では 32 コア程度で並列性能が飽和するのに対し、OhHelp アルゴリズムを適用した領域分割電磁粒子シミュレーション計算では 256 コアでも良好なスケーラビリティが維持されることが確認された。

上記のような新アルゴリズムを適用した大規模並列計算の利用により、従来経験的な知識に大きく依拠してきた電界観測機器開発の質的変換が期待される。こうした試みは従来までに例がなく、成功すれば将来の科学衛星ミッションにおいてより定量的な意味を持った電界データ取得が可能となる。また、OhHelp アルゴリズムは、電界アンテナ特性解析に関わらず、より一般の粒子シミュレーションの高効率並列化手法の開発に大きなインパクトをもたらすことが期待される。

参考文献

- [1] Miyake, Y., H. Usui, H. Kojima, Y. Omura, and H. Matsumoto, *Radio Sci.*, 43, RS3004:1-14, 2008.
- [2] Birdsall, C. K., and A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, McGraw-Hill, 1985.
- [3] Miyake, Y., and H. Usui, *Phys. Plasmas*, 16(6), 062904:1-11, 2009.
- [4] Hockney, R. W., and J. W. Eastwood,

Computer Simulation Using Particles, McGraw-Hill, 1981.

- [5] Nakashima, H., Y. Miyake, H. Usui, and Y. Omura, *Proc. Intl. Conf. Supercomputing*, 23, 90-99, 2009.

密度行列繰り込み群法を用いた有限温度における低次元強相関電子系の研究

曾田 繁利

京都大学基礎物理学研究所

1 諸言

ナノスケールの電子系では、電子間に働くクーロン相互作用が強いため、電子相関の効果が重要なとなる。この強相関効果のため、電子のもつ内部自由度が独自の集団的量子効果を生み出す。1次元的な電子構造を持つ1次元 Mott 絶縁体は巨大な非線形光学応答と超高速な緩和現象を示す。これは、1次元 Mott 絶縁体が光による新しいスイッチングデバイスとしての可能性を秘めた物質であることを示している。したがって、この特異な量子現象を明らかにすることが大いに期待される。

1次元 Mott 絶縁体の様な低次元強相関電子系に対しては、S. R. White によって提案された密度行列繰り込み群法[1]が威力を発揮する。密度行列繰り込み群法は、系を任意のサイズまで広げていく数値繰り込み群の方法であり、ターゲットとなる状態を本来の次元より小さい任意の打ち切り次元 m で最適に表現する。さらに、系に環境の効果を取り込むことで、系を広げたときに残る有限サインズ効果を効果的に打ち消す。DMRG 法は、これまで厳密対角化で取り扱うことが難しかった自由度の大きな系に適用され、特に絶対零度における物理量の計算に対して大きな成果を上げた。さらに、DMRG 法は動的な物理量の計算手法として拡張されている。この手法は上述の1次元 Mott 絶縁体の光学応答を解析する研究手法として採用され、絶対零度における計算により、その量子現象に対する成果が報告されている[2]。そこで、本研究では有限温度での計算を実行することで、この光学応答に対する熱ゆらぎの効果を議論する。そのため、まずこの目的に即した密度行列繰り込み群法の有限温度への拡張を本研究の主要なテーマの一つとした。ここで開発された有限温度密度行列繰り込み群法は、量子現象を議論するうえで

重要な低温側に焦点を絞った方法であり、光学応答を議論するうえで必要な動的な物理量の計算も可能な方法である。本研究ではこの手法を用いてこの光学応答に対する温度依存性の研究を行った。

2 計算手法

本研究では、新たに開発した有限温度密度行列繰り込み群法を採用する[3]。本手法では、まず DMRG 法のターゲット状態として次の線形結合、

$$|\tilde{\xi}\rangle \equiv \sum_n e^{-\beta \epsilon_n / 2} a_n |n\rangle$$

を導入する。ここで、 $|n\rangle$ はハミルトニアンの固有状態、 ϵ_n は対応する固有値、 β は逆温度、 a_n は任意の係数である。ここで、すべての a_n^2 が 1 であると仮定すると、このターゲット状態の内積は分配関数を与える。したがって、上の状態は有限温度における物理量を計算するためのターゲット状態として適切であると考えられる。ところで、このターゲット状態の算出にはすべての固有状態が必要である。しかし、各固有状態を算出することは現実的であるとはいえない。そこで、本研究では各固有状態を算出するのではなく、直交多項式展開法[4]を適用してターゲット状態を直接算出することで効率的な計算を可能にした。

ところで、このターゲット状態はハミルトニアンの固有状態の線形結合である。したがって、ハミルトニアンと非可換な物理量を直接算出することは非対角項が現れるため不可能である。そこで、本手法では物理量の期待値についてランダムサンプリングと平均操作を行う。これにより非対角項は打ち消され、様々な物理量の算出が可能となる。

絶対零度に対する密度行列繰り込み群法の純粋な拡張である本手法は、動的な物理量の計算を絶対零度の場合と同様の手法で計算することが可能

である。テスト計算として、図1に1次元鎖のハバードモデルと呼ばれる系（サイト数 $N_s=8$ 、オンサイトのクーロン相互作用 $U/t=10$ 、ただし t はサイト間の飛び移りのパラメータ）における光学伝導度に対応した電流-電流相関関数の結果を示す。ここでは、密度行列繰り込み群法の打ち切り次数 $m=50$ として計算を実行した。ここでは、直接対角化によって得られた計算も同時に示している。

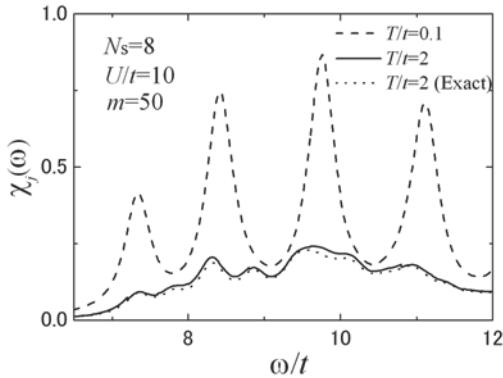


図1：1次元ハバードモデルにおける電流-電流相関関数

まず、温度 $T/t=0.1$ の結果は直接対角化による結果と完全に一致した。一方、 $T/t=2$ の結果は直接対角化による結果との間に差がみられる。これは、密度行列繰り込み群法による誤差であり、 m を大きくすることで厳密な結果との一致が得られる。したがって、本手法は低温側では小さな m で計算可能であることから、低温側で有効な方法であると考えられる。

3 計算結果

本研究では1次元Mott絶縁体の光学応答を調べるために電子-格子相互作用を含む1次元ハバードホルシュタインモデルを採用した。図2にサイト数 $N_s=20$ 、オンサイトの電子間クーロン相互作用 $U/t=10$ 、隣り合うサイトの電子間相互作用 $V/t=2$ 、オンサイトの電子-フォノン間の相互作用 $g/t=0.25$ 、1フォノンあたりのエネルギー $\omega_0=0.5$ における結果を示す。図2より、温度に対応してピークがブロードになることが確認される。このことは、温度により多数の励起状態が現れることから説明される。また、温度に対応してピークが高エネルギー側にシフトしていることが確認され

る。しかしながら、これは有限サイズ効果による影響とも考えられ、より大きな系で計算を行い確認することが必要であり、これはより効率的なアルゴリズムの開発も求められることから、今後の課題である。

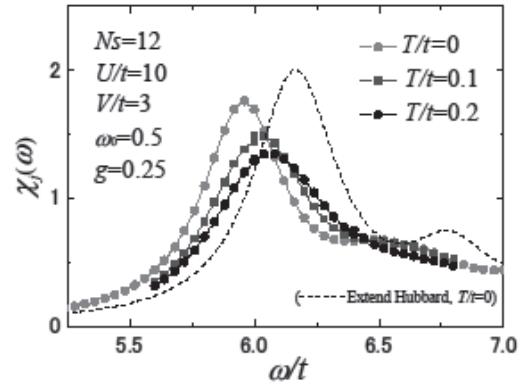


図2：1次元ハバードホルシュタインモデルにおける電流-電流相関関数。破線は、電子-格子相互作用を含まない1次元拡張ハバードモデル（電子間の相互作用は同一）の電流-電流相関関数。

4 まとめ

本研究は、1次元Mott絶縁体の光学応答に対する温度効果を調べることを目的とした。そして、必要な計算手法として新しい有限温度密度行列繰り込み群法を開発した。この手法は低温側で有効な方法であり、動的な物理用も計算可能である。この手法をハバードホルシュタインモデルの電流電流相関関数の計算に適用することで、温度効果により無数の励起状態が顕を出し、ピークをブロードにすることが確認された。

5 参考文献

- [1] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992), Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [2] T. Tohyama and H. Matsueda, Progress of Theoretical Physics Supplement **176**, 165-181 (2008)
- [3] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B **78**, 113101 (2008)
- [4] S. Sota and M. Itoh, “J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 054004 (2007).

電子構造論に基づくグリコシル化反応中間体の構造予測及び設計

野上 敏材

京都大学大学院工学研究科 合成・生物化学専攻

1 はじめに

多様な糖鎖の構造を化学合成するためにこれまで多くのグリコシル化反応が開発されてきた。また近年、合理的な反応中間体設計に基づくグリコシル化反応の開発が盛んに行われている。しかしながら過剰に用いた活性化剤や脱離基由来の副生物が反応系中に混在しており、反応条件の検討のみならずグリコシル化反応の立体選択性発現のメカニズムを解明する上で障害となっている。一方、有機電気化学的手法(電解法)は活性化剤を用いることなく糖供与体の活性化が可能である。従つて電解法がグリコシルトリフラーートなどの反応中間体の発生・蓄積に応用出来れば、グリコシル化反応の中間体設計や立体選択性発現のメカニズム解明に寄与出来ると考え、研究を行っている^{1,2}。

アミノ糖は生物活性を有する糖鎖に多く含まれる重要な单糖であり、アミノ糖の立体選択的グリコシル化反応は糖鎖の化学合成における課題の一つである。最近になって、2-アジド基³や2,3-オキサブリジノン保護基⁴を有する糖供与体を用いた新しい α -選択的グリコシル化反応も開発されたが、 α 体を与える機構は未解明な部分も多い(図1)。

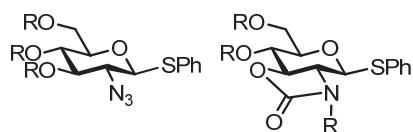


図1. アミノ糖へと変換可能な糖供与体

そこで今回、計算化学的手法を用いてグリコシル化反応中間体、特にアミノ糖を与えるグリコシルスルホニウムイオンの構造を予測した。その上で電気化学的手法を用いて発生させたグリコシルト

リフラートとスルフィドとの反応からグリコシルスルホニウムイオンを調製し、そのNMRによる構造解析結果と計算結果とを比較することにした。

2 アジド基を有するグリコシルスルホニウムイオン

まず、アジド基を有するグリコシルスルホニウムイオン(α 体/ β 体)の構造をHF法および密度汎関数法(B3LYP)により求めた(図2)。

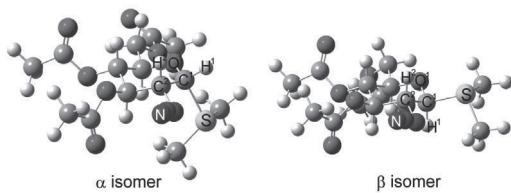


図2. グリコシルスルホニウムイオン α 体・ β 体の最適化構造(B3LYP/6-31G(d))

この構造で着目すべきはアノマープロトンと炭素を含む $H^1-C^1-C^2-H^2$ の二面角とピラン環酸素とアノマー炭素を含む $O^1-C^1-C^2-C^3$ の二面角およびアノマー炭素—硫黄の結合距離である。このうち後者の二面角と結合距離をNMRから直接的に求めることは困難である。B3LYP(HF)法により求めた $H^1-C^1-C^2-H^2$ の二面角をKarplusの式に当てはめて予想される¹H-NMRのカップリング定数は3.9(4.2)Hz(α 体)、9.2(9.2)Hz(β 体)であり、ピラン環の構造を示す $O^1-C^1-C^2-C^3$ の二面角は38.3°(39.7°)(α 体)、60.9°(59.7°)(β 体)と求められ、 α 体はイス型構造から大きく歪んでいることが分かった。また、アノマー炭素—硫黄結合に関しても2.00(1.90)Å(α 体)、1.89(1.85)Å(β 体)と α 体の方が0.10(0.05)Å結合距離が長くなっていた。これらの結果から、ピラン環の構造に関する限り、計算方法によって

大きな差は無いと言える。続いて、対応するグリコシルスルホニウムイオンを調製してNMRにて観測した。具体的には2-アジド基を有するチオグリコシドを低温電解酸化して発生させたグリコシルトリフラーートをNMR管に移し、ここにジメチルスルフィドを添加してグリコシルスルホニウムイオンへの変換を試みた。質量分析から、グリコシルスルホニウムイオンの生成が確認され、NMRからアノマー混合物(α 体/ β 体 45:55)であると分かった(図3)。

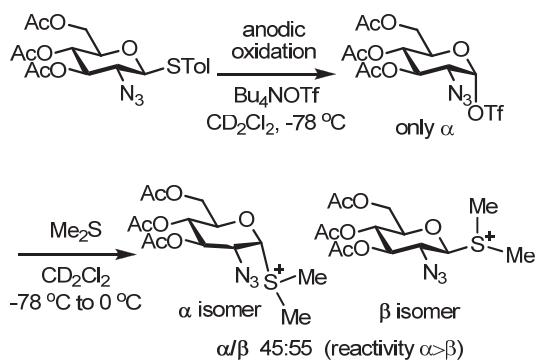


図3. 電気化学的手法を用いたグリコシルスルホニウムイオンの調製

また、¹H-NMRのカップリング定数は4.8 Hz (α 体)、10.3 Hz (β 体)であり、計算によって得られた構造から求めた値3.9 (4.2) Hz (α 体)、9.2 (9.2) Hz (β 体)と良い一致を示した。更に、得られたグリシルスルホニウムイオンに対してメタノールを作用させると α 体から先に消費されて対応するメチルグリコシドを与えるという興味深い知見を得た。これは α 体がイス型構造から歪んでおり、アノマー炭素—硫黄結合長が β 体よりも長いという計算・実験結果を理解する上で重要な実験データである。現在、硫黄上に Ph 基を導入した場合にグリコシルスルホニウムイオンの反応性が増大するという実験結果を得ており、実験と計算の両方からグリコシルスルホニウムイオンのグリコシル化反応中間体としての性質を明らかにしようとしている。

3 オキサゾリジノン保護基を有するグリコシルスルホニウムイオン

グリコシル化反応中間体の反応性を制御する上で保護基は大きな役割を果たしている。前述の

2,3-オキサゾリジノン保護基(図1)のように糖のピラン環と縮環した保護基はピラン環のコンформーションの自由度を奪い、糖供与体の反応性を低下させる半面、選択性を向上させる。実際に反応を行うと β 体のグリコシルスルホニウムイオンのみが定量的に生成するという結果を得ている(図4)⁵。計算(B3LYP/6-31G(d))では α 体の方が1.2 kcal/mol 熱力学的に安定であるため、 β 体は-78°C の低温条件下で速度論的に生成したと考えられる。今後、この β 体のグリコシルスルホニウムイオンを用いて、立体選択性的なグリコシル化反応が可能かを実験的に検証する予定である。

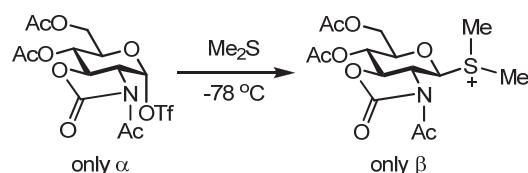


図4. 2,3-オキサゾリジノン保護基を有するグリコシルスルホニウムイオンの調製

4 おわりに

計算化学的に得られたグリコシルスルホニウムイオンの構造は実験結果と良い一致を示し、計算化学的手法はグリコシル化反応中間体の構造予測に利用可能である。今後は計算化学的に得られた中間体の構造を手掛かりに高立体選択性的グリコシル化反応の開発に挑戦したい。最後に、研究はごく初期段階であるにも関わらず、貴重な計算機資源を与えて下さったスーパーコンピュータ共同研究制度と実験研究に対する共同研究者ならびに明治製菓(研究企画賞)による支援に深謝する。

5 参考文献

- Nokami, T.; Shibuya, A.; Tsuyama, H.; Suga, S.; Bowers, A. A.; Crich, D.; Yoshida, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 10922-10928.
- Nokami, T.; Shibuya, A.; Manabe, S.; Ito, S.; Yoshida, J. *Chem. Eur. J.* **2009**, *15*, 2252-2255.
- Manabe, S.; Ishii, K.; Ito, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, *128*, 10666-10667.
- Park, J.; Kawatkar, S.; Kim, J.-H.; Boons, J.-H. *Org. Lett.* **2007**, *9*, 1959-1962.
- Unpublished results.

南海トラフ巨大地震発生サイクルの物理的理

平原和朗・光井能麻・堀高峰

京都大学大学院理学研究科・名古屋大学大学院環境学研究科・海洋研究開発機構地球内部ダイナミクス領域

今後 30 年以内に発生する可能性が 50% 以上と言われる、マグニチュード 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、スーパーコンピュータ上に西南日本を構築してプレートを沈み込ませ、地震を発生させる、地震発生サイクルシミュレーションが行われようとしている。こういったシミュレーションにより、過去に複雑な地震発生履歴を持つ南海トラフ巨大地震発生サイクルを物理的に理解し、次期巨大地震の発生予測に向けての実際的なパラメータを推定するには、シミュレーションコードの高速化が必須である。その高速化に向けて、昨年度からプログラム高度化支援事業に採択されたので、概要を報告する。

1 はじめに

日本列島は、4 つのプレートが収束する地域にあり、東からは太平洋プレートが日本海溝に沿って、東北日本（北米プレートに属している）下に、年間約 9cm の速度で沈み込んでいます。西南日本はユーラシア（またはアムールプレート）に属し、南からフィリピン海プレートが南海トラフ沿いに年 2~6cm の速度で沈み込んでいます。これらのプレート運動により、プレート境界である海溝域ではマグニチュード (M) 8 クラスの巨大地震がおよそ 100 年の間隔で繰り返し発生している。また 1995 年の兵庫県南部地震以降多く発生しているが、内陸でも M7 クラスの地震が活断層沿いに 1000 年以上の間隔で繰り返し発生している。

特に、南海トラフでは、昭和の南海地震発生以降、60 年以上経過し、今世紀前半中に、M8 クラスの地震が発生し、西南日本に大きな被害をもたらすと言われている。南海トラフ巨大地震の発生履歴は、古文書の記述や遺跡に残された液状化跡から推定（地震考古学とも呼ばれる手法）され、684 年以降 1946 年までに 9 回発生し、平均的には 150 年程度の間隔で間隔している。発生した地震を見落としている可能性はあるが、古くは、684 年、887 年、1003/1009 年、1361 年と 200 年を超える間隔で発生しているように見える。最新の



図 1 南海・東南海・東海セグメントと同時破壊時における想定震度（中央防災会議、2003）

3 回の地震は、1707 年、1854 年、1944/1946 年とおよそ 150 年、90 年の間隔で発生している。

また、南海トラフ巨大地震の破壊域は、東から東海、東南海、南海セグメントに別れ（図 1）、複雑な破壊様式をもっている。1707 年宝永地震では、全セグメントがほぼ同時に破壊した。ちなみに、この地震のマグニチュードは 8.6 で日本最大の地震とみられており、この地震の 1 カ月半後に富士山が噴火している。江戸末期に発生した 1854 年安政地震では、まず東側の東南海 + 東海セグメントが破壊し、その約 30 時間後に西側の南海セグメントが破壊した。昭和の 1944 年東南海地震ではその破壊は東海セグメントまで達せず、東海セグメントは未破壊のまま残された（それゆえ明日

起きてもおかしくないと言われ、「東海地震」の発生が長い間、危惧されてきた)。終戦を挟んで 2 年後の 1946 年に西側の南海セグメントが破壊した。

このように、南海トラフの発生間隔はおよそ 150 年程度であるが、90 年～260 年の幅があり、3 つの破壊セグメントはほぼ同時に破壊する場合と、東側セグメントがやや早く破壊する場合、および東海セグメントは毎回破壊するわけではないといった性質があるように見られる。

前に述べたように、こういった複雑な破壊様式をもつ南海巨大地震の発生が間近に迫っていると言われている。というのは、昭和の南海地震は比較的小ぶりで、解放した応力量が小さく、破壊強度およびプレート運動による応力蓄積率が一定であれば、破壊に達するまでの時間が短くなり、その破壊時期は今世紀前半であると考えられている

(時間予測モデルと呼ばれている)。地震発生による被害は西南日本全域に及び、被害総額は国家予算規模に上ると想定されている(中央防災会議, 2003)。

こういった中で、被害軽減に向けて、理学・工学・社会科学・人文科学といった広い分野で、様々な対策が立てられようとしている。次期南海地震がいつ、どういった破壊様式で起きるかが、最大の関心事であるが、非常に難しい問題である。これに答えるため、新たに海底観測システムを開発するなど地震学的にも色々な試みがなされているが、ここでは地震発生サイクルシミュレーションの現状を紹介し、採択されたプログラム高度化支援事業での作業状況を報告する。

2 地震発生サイクルシミュレーション

2.1 プレート境界巨大地震発生モデル

海側プレートが沈み込むとき、陸側プレートとの境界部には摩擦が働きくつついで、陸側プレートを引きずり込んでいく。沈み込みが進行するにつれ陸側プレートの曲がりによる弾性反発力が摩擦力を上回ると、プレート境界にすべり(切れ目)が発生し、陸側プレートが跳ね上がる。このようにして海溝型巨大地震は発生すると考えられている。

プレート運動については、カーナビでおなじみの GPS (Global Positioning System : 全地球測位システム) の登場により、非常に精度よく求められている。南海トラフ沿いにおけるフィリピン海プレートの収束速度に関して言えば、駿河湾における年間 2cm 弱から西にいくにつれ大きくなり、四国沖で 6cm に達することが分かっている。

摩擦に関しては、1970 年代から岩石実験が精力的に行われ、1980 年代には実験結果を説明する、摩擦構成則が得られるようになった。また、1980 年代後半からこの摩擦則を用いて、簡単な系ではあるが、地震発生サイクルシミュレーションが行われるようになった。最近では実際のプレート形狀に摩擦パラメータを分布させ、観測されたプレート収束運動と組み合わせた、実際的な地震発生サイクルシミュレーションが行われるようになってきている。

2.2 地震発生サイクルシミュレーション

ここでは、Hori et al.(2004) および 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)

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

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

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(速度弱化)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)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する。

2.3 地震発生サイクルシミュレーションにおける問題点

プレート境界を小さなセルに分割すると書いたが、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)。通常用いられていく

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。

Horiらのシミュレーションでは、駿河湾から四国沖までを解析領域としているが、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

前のセクションで述べたように、実際的に南海トラフの問題に取り組むには、コードの高速化が必須である。

そこで、昨年度はまず、Hori(2006)のコードにおいて、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、 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。

4 プログラム高度化の今後

今年度も引き続き、プログラム高度化支援事業に採択され、密行列の疎行列化という観点から以下の2つの方法により高速化の検討を行っている。ひとつは、H-matrices法（例えば、Bebendorf and Rjasanow,2003）で、密行列のデータを効率的に圧縮する表現方法である。基本的な考え方としては、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というものである。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、 $\mathcal{O}(N)$ や $\mathcal{O}(N \log N)$ の演算量で実行できるとされている。この方法は、次に述べる高速多重極法にくらべて、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の地震発生サイクル計算にも有効かもしれない。

次の方法は、高速多重極法（Fast Multipole Method: FMM）で、ラプラス場・ヘルムホルツ場などにおける N 体間減衰的相互作用の高速数値計算アルゴリズムである。ラプラス場の場合で $\mathcal{O}(N)$ 、ヘルムホルツ場の場合で $\mathcal{O}(N \log N)$ の計算時間と使用メモリで計算を実行できるとされている。現在、均質全無限弾性体を仮定して、式(5)の部分の高速化を図っている（平原・他,2009）。具体的には、Liu and Nishimura(2006)のチュートリアルコードを参考に分岐構造のコーディングを行った。また、3次元静的弾性問題における多重極展開係数については、Yoshida et al.(2001)を参照して、開発を行っている。

謝辞：センターの中島・高橋両氏にはコードのチューニングおよび密行列の疎行列化手法についてお教えいただいた。また、情報学研究科の西村氏には、FMMの分岐構造アルゴリズムについてお教えいただいた。謝意を表します。

5 参考文献

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

中央防災会議、2003.

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

Hori, T., et al., *Earth Planet. Sci. Lett.*, 228, 215-226, 2004.

平原和朗・光井能麻・堀高峰、日本地震学会 2009 年秋季大会、京都。

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

Kato, N., *J. Geophys. Res.*, 113, B06302, doi:10.1029/2007JB005515, 2008.

Liu, Y.J. and N. Nishimura, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 30, 371-381, 2006.

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

Yoshida, K., N. Nishimura and S. Kobayashi, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50, 525-547, 2001.

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⁽¹⁾, 石川洋一⁽¹⁾, 島茂樹⁽²⁾, 印貞治⁽²⁾, 中山智治⁽²⁾

⁽¹⁾理学研究科地球惑星科学専攻, ⁽²⁾(財)日本海洋科学振興財団

1 はじめに

沿岸域は周辺の住民の生活や産業活動、環境等と密接に関わる重要な海域である。そのため、沿岸海況の把握や予測に対する社会的要請は大きく、予測結果の応用範囲も広い。このような背景から、高精度海況予測システムの構築は重要かつ喫緊の課題とされてきたが、地形の複雑さや諸要素間の非線形フィードバック等のため困難であった。

我々は沿岸海況予測の実利用に道を拓くべく、(財)日本海洋科学振興財団とともに、下北半島沖の北太平洋沿岸に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、どのように拡散・移行していくのか、その効果的モニタリングと予測システムの開発に取り組み始めた。

沿岸域における流動場などの海洋循環場の再現性を向上させるためには、海岸地形、海底地形を精密に再現できるだけの十分なモデル分解能が必要である一方、青森県下北半島沖のような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も考慮できるようモデル設計が必要であるという、計算機負荷を考えると非常に厄介な問題が存在する。この課題を解決するために、本開発システムでは広い領域を粗い分解能でカバーするモデルと狭い領域を高分解能でカバーする2種類のモデルを階層的に組み合わせて、高精度の沿岸海況の推定と予測を行うダウンスケールと呼ばれる手法を用いて、外洋の大きなスケールの変動の影響を適切に反映した詳細な沿岸変動の再現を可能にした。

2 海洋大循環モデル

2.1 モデルの概要と並列化手法

階層的に組み合わすそれぞれのモデルは、我々のグループで独自に開発した京都大学海洋大循環モデルである。これは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、隣接するそれぞれの領域との通信が主である。

2.2 ダウンスケール手法

図 1 に示す本ダウンスケーリングシステムは、北太平洋全域をカバーする最も外側のモデル内に、狭い領域の高分解能モデルを順に入れ子的に(ネスティングするという階層的なシステムで、内側のモデルはその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、計算を行う。モデルの水平分解能は一番外側の北太平洋モデルで約 13km、1段階ネストするたびに 3 倍の分解能とし、一番内側のモデルでは約 1.5km の分解能となるよう設定している。

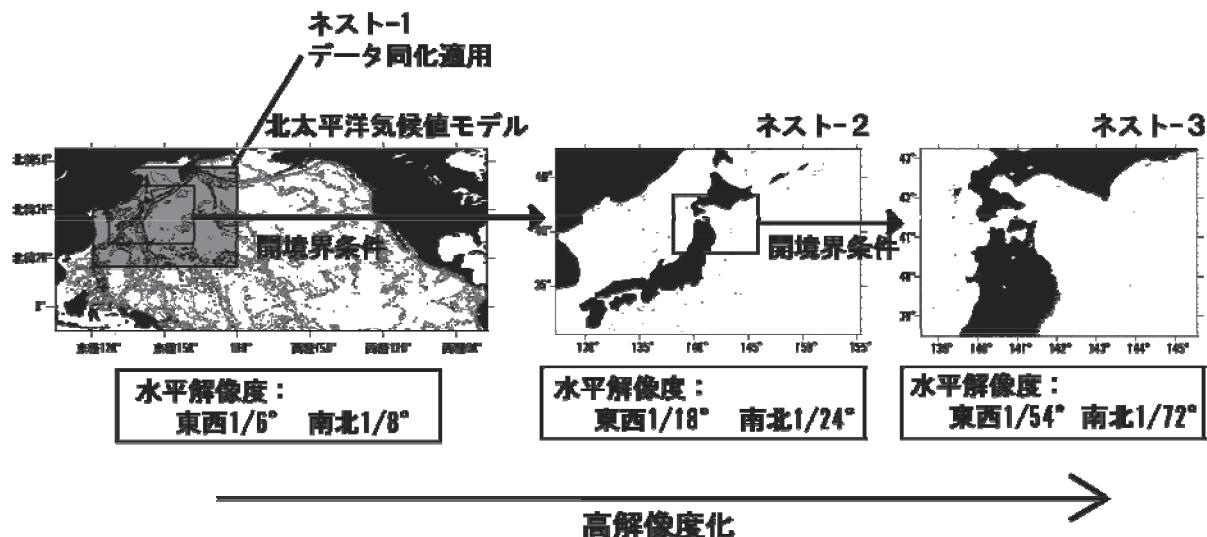


図1：ダウ NSケーリングシステムの概要

3 モデルの計算例

本ダウ NSケーリングシステムを用いて 2008 年を対象とした再現計算の結果について紹介する。

津軽暖流は日本海から津軽海峡を通って太平洋へ流れ込む海流で、冬季には津軽海峡からそのまま本州東岸沿いに南流する沿岸モードが、夏季には津軽海峡通過後しばらく東に流れ、襟裳岬沖で南に旋回する渦モードと呼ばれる流路が従来の観測で指摘されている。

図2は、この沿岸モードと渦モードを本システムで連続なイベントとして初めて再現に成功した例である。図では津軽暖流水の指標として 8°C 以上の領域にハッチをつけてあり、観測で示された沿岸モードおよび渦モードがきれいにモデルで再現されていることがわかる。

図3は図2と同時期における 100m 深の流速分布と水温分布である。沿岸モードおよび渦モード状態における津軽暖流の亜表層流速場に加えて、領域の東側に親潮とみられる強い南向きの流れが見られる。特に夏季は暖かい津軽暖流と冷たい親潮が接する襟裳岬の西側に、強いフロント構造が存在し、親潮と津軽暖流の相互作用が示唆される。親潮の流量とその変動は北太平洋亜寒帯の広い外洋域における風系場などから決まっているので、ネスティングにより沿岸まで詳細にダウ NSケールを行うことの重要性を示す好例である。

より沿岸に目を向けると、渦モードと沿岸モードに対応して、青森県東岸や北海道南岸における流速場が大きく異なることがわかる。したがって、このような津軽暖流の構造の変化は、沿岸の物質輸送過程に大きな影響を与えることが推察される。

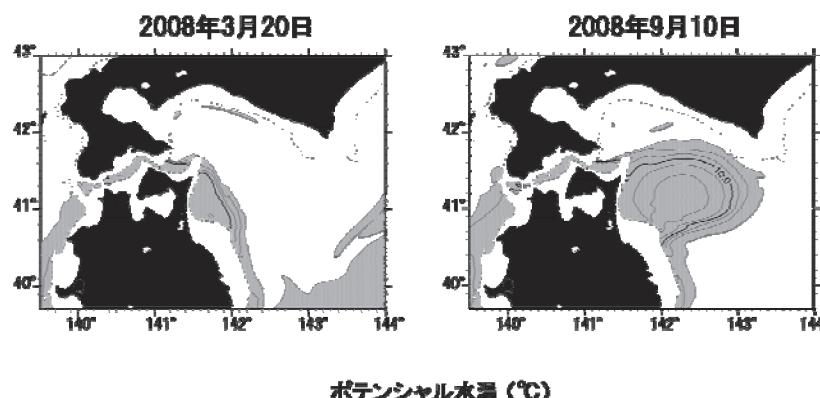


図2：2008年3月20日および9月10日の200m深水温

4 今後の発展

本稿では海洋大循環モデルを階層的に組み合わせたダウンスケーリングシステムとそれにより再現された日本沿岸における海洋循環構造の変動について概説した。今後はこのシステムを発展させて、沿岸域における短周期及び長周期の循環場を再現できるよう高性能・高分解能化を行っていくほか、数値予報についても取り組みたい。その際、モデルを積分して決定論的に将来予測をするだけではなく、自然界に存在する“ゆらぎを考慮し、確率論的に予報を行うアンサンブル予報（複数の予報の組み合わせ）も研究開発予定である。

海洋大循環モデルは物理循環場のみを対象としているが、海洋中の栄養塩やプランクトンの挙動を取り扱う海洋生態系モデルと連結した物理-生態系結合モデルも開発中で、これによりホットな地球環境問題である「海の酸性化」の理解と対策を講じる上で重要な『海宇宙：無機と有機の連鎖の解明』に挑戦したいと考えている。

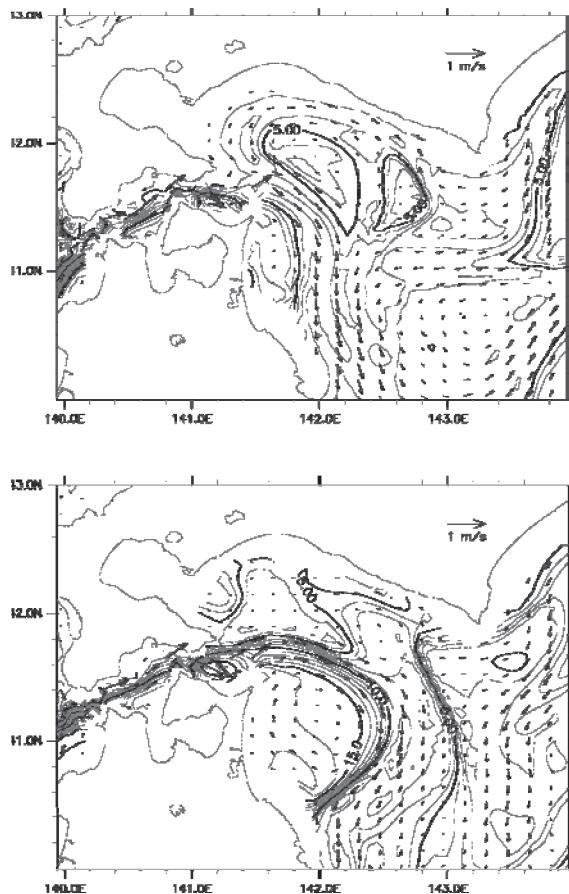


図3：図2と同時期における
100m 深の流速および水温分布

分子動力学計算プログラム MoDa

Caetano R. Miranda

京都大学大学院工学研究科社会基盤専攻

1 MoDa

1.1 プログラムの概要

| | |
|---------|--|
| プログラム名 | MoDa (Molecular Dynamics quasi <i>ab-initio</i>) |
| 利用目的 | 酸化物及びそれと他の物質との相互作用の計算 |
| 使用言語 | Fortran90 |
| ソースの行数 | 24 k 行 |
| 並列化 | OpenMP |
| 使用ライブラリ | 特になし |
| 精度 | 倍精度浮動小数点 |

1.2 処理概要

MoDa は、酸化物の計算に特化した古典分子動力学プログラムである。具体的な応用対象としては、石油増進回収に向けた、水、油及び岩石（酸化物）界面の挙動解析や、水素製造触媒及び水素吸蔵材料開発のための、酸化物と気体の相互作用の解析等がある。当プログラムは、分子動力学計算において、原子間相互作用の計算を行う際に、近傍原子リストによって遠方原子の相互作用をカットオフする手法を用いている。遠方まで作用するクーロン力については、Ewald sum を計算することによって反映している。また、電子スピンの分極効果を扱うことができる点が最大の特徴であり、プログラムの名前 Molecular Dynamics quasi *ab-initio* の由来となっている。

2 チューニング前の状態及び分析

2.1 チューニング前の状態

MoDa は、OpenMP によって計算コストの高い部分（近傍原子リストの作成、クーロン力及び分極効果の計算）にスレッド並列化がなされていたが、並列計算を実行しても計算速度が上がらず、スレッド並列化の効果が出ていなかった。MoDa の目的は水、油及び岩石の相界面の解析や、水素の生産や貯蔵に関する解析を行うことである。そのためには、酸化物表面と水、油等の液体の相互作用（図 2.1）や、多孔質酸化物（図 2.2）と水素や二酸化炭素等の気体との相互作用を、総原子数、数万～数十万レベルで計算する必要があり、並列性能が出ないということは大きな問題であった。また、MoDa の特徴である分極効果の計算は、比較的計算コストが高い。その結果、MoDa は他の古典分子動力学プログラムと比べて、幾分計算量が多く、この点から考えても、並列化の問題は非常に重要であった。



図 2.1 シリカ表面上のアントラセン小滴。多数の原子からなる大きな系である

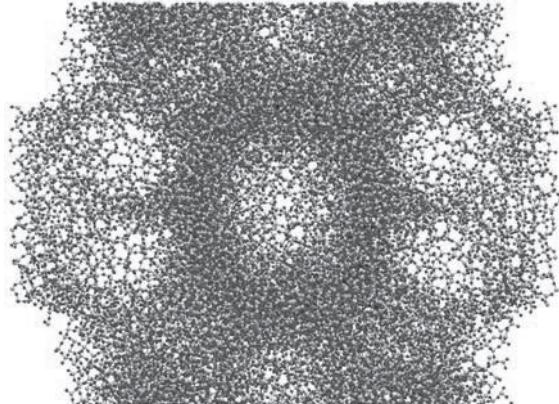


図 2.2 多数の原子から構成される多孔質酸化物（シリカ）の構造



図 2.3 プログラムの分析に用いられたシリカナノチューブの構造

2.2 実行時間及びプロファイル測定結果

測定、分析において、原子総数 864 のシリカナノチューブの構造（図 2.3）を使用し、時間ステップ数は 1000 とした。これらの条件で、4 スレッドでの並列計算とスレッド並列なしの逐次計算を行い、ASIS（現状プログラム）の測定が行われた。なお、計算機は、富士通 HX 600 16 ノード（Quad-Core AMD Opteron 8356 2300 MHz × 4 CPU）が使用された。

2.2.1 並列計算の場合

スレッド並列がスケールしないという状況を確認するために、スレッド並列 OMP 指示行を有効とし、コンパイル及び 4 スレッド並列実行が試みられた。その結果、OMP 指示が有効作動せず、また、スレッド数を大きくすると異常終了することが確認された。従って、実行時間及びプロファイルの取得は不可能であった。

2.2.2 逐次計算の場合

測定の結果、特定のサブルーチン（近傍原子リストの作成、クーロン力及び分極効果の計算）の

計算コストが高いことが確認された。また、実行時間は 4 時間 42 分 43 秒であった。

3 チューニング内容及びその結果

3.1 OMP 指示行の改善

スレッド並列化がなされているサブルーチン内に存在する SHARED 構文と PRIVATE 構文内に変数が指定されていたが、指定内容をレビューしたところ、スレッド並列処理時の PRIVATE 変数と SHARED 変数についての指定にミスがあることが確認された。この指定ミスを修正することにより、スレッド並列実行が可能となり、演算結果も逐次実行と一致することが確認された。

3.2 既存障害の修正

MoDa のモジュール内にコンパイルエラーが発生するソースが確認された。また、演算処理部にも問題が発見され、それらの障害（下記参照）が修正された。

発見された障害

- 構文ミス
write 文に不当なカンマが存在
- USE 文における使用変数の宣言漏れ
- parameter 値の間違い
2 の 31 乗マイナス 1 の値
誤：2147483561 → 正：2147483647
- 関数の型宣言ミス（使用ミス）
real*4 関数であるものを real*8 宣言使用
→ 関数の返却値が大きな値に化ける

3.3 その他の改善案

上記以外にも、いくつかの改善案が提案された（スライドアクセスの改善、ループ順序の入れ替え等）。しかし、それら全てに対して改善を行い実行結果と処理時間の効果が確認されたが、何れも殆ど ASIS（現状プログラム）の処理時間と変わらない結果となった。また、それらの内のいくつは、対応すべき個所が非常に多く存在し、修正作業量の割には改善効果がほとんどなかったため、それらの改善案は効果無しと判断され、改善対象から

除外された。

4 チューニング後のスレッド数毎の実行時間比較

4.1 時間ステップ数 1000 の場合

2.2 節と同様の条件において、チューニングされたプログラムを用いて、幾つかのスレッド数について計算が行われた。それにより、表 4.1、図 4.1 及び 4.2 に示す結果が得られた。

これらの結果から解るように、チューニングによって、スレッド並列効果が現れるようになった。逐次処理時を基準とした場合、スレッド並列による性能向上は、16 スレッドで約 8.3 倍であった。

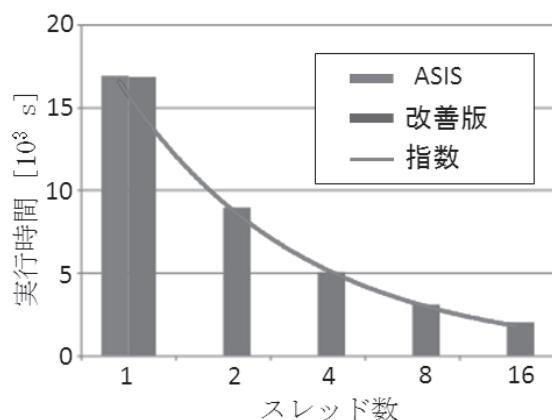


図 4.1 実行時間の比較 (時間ステップ数 1000)

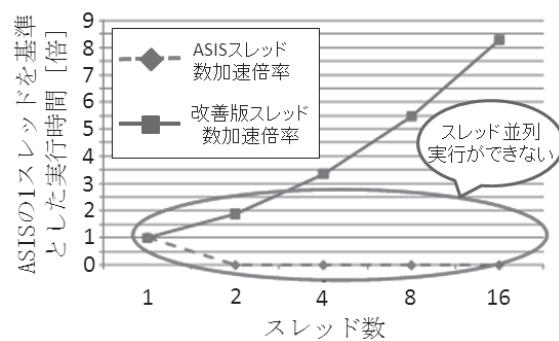


図 4.2 実行時間加速倍率 (時間ステップ数 1000)

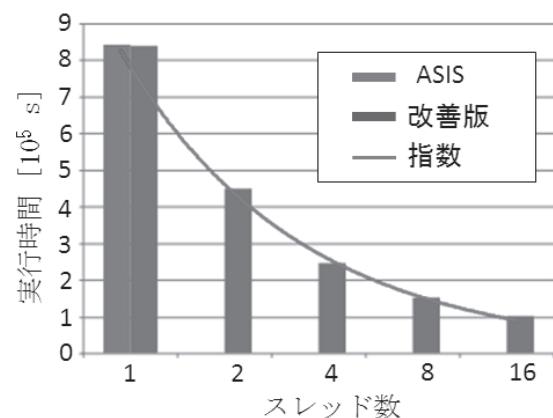


図 4.3 実行時間の比較 (時間ステップ数 50000)

表 4.1 実行時間の比較及び加速倍率 (時間ステップ数 1000)

| 実行スレッド数 | 1 | 2 | 4 | 8 | 16 |
|----------------|-------|------|------|------|------|
| ASIS 実行時間 [s] | 16963 | 実行不可 | 実行不可 | 実行不可 | 実行不可 |
| 改善版実行時間 [s] | 16879 | 9002 | 5078 | 3110 | 2054 |
| スレッド增加性能比 [倍] | 1.0 | 1.9 | 3.3 | 5.4 | 8.2 |
| ASIS スレッド数加速倍率 | 1.0 | — | — | — | — |
| 改善版スレッド数加速倍率 | 1.0 | 1.9 | 3.3 | 5.5 | 8.3 |

表 4.2 実行時間の比較及び加速倍率 (時間ステップ数 50000)

| 実行スレッド数 | 1 | 2 | 4 | 8 | 16 |
|----------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| ASIS 実行時間 [s] | 843785 | 実行不可 | 実行不可 | 実行不可 | 実行不可 |
| 改善版実行時間 [s] | 841616 | 451236 | 247849 | 152845 | 102112 |
| スレッド增加性能比 [倍] | 1.0 | 1.9 | 3.4 | 5.5 | 8.2 |
| ASIS スレッド数加速倍率 | 1.0 | — | — | — | — |
| 改善版スレッド数加速倍率 | 1.0 | 1.9 | 3.4 | 5.5 | 8.3 |

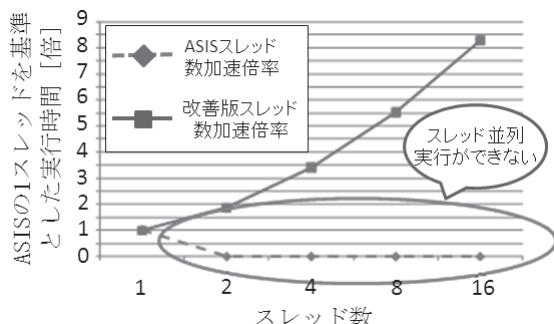


図 4.4 実行時間加速倍率（時間ステップ数 50000）

4.2 時間ステップ数 50000 の場合

4.1 と同様の条件において、時間ステップ数のみ 50000 に変更して計算を行った。その結果を表 4.2 と図 4.3 及び 4.4 に示す

これらの結果から、逐次処理時を基準とした場合、50000 時間ステップでも、16 スレッドで約 8.3 倍のスレッド並列による性能向上が確認された。

5 結論

MoDa は当初からコストの高い演算部に対して OpenMP によるスレッド並列化が図られていた。にもかかわらず並列化の効果が出ない原因は、`!$OMP` 指定行の `SHARED` 構文と `PRIVATE` 構文に指定されている変数の単なる指定ミス（障害）によるものであることが判明した。その他のチューニングについては、効果が出ないため、この部分の修正による性能 UP で今回の効果が出ることになる。

今回のスーパーコンピュータプログラム高度化支援事業の利用によって、当プログラムの性能が大幅に向上了し、非常に大きな系の計算が可能となつた。これにより、当初の目的であった、水、油、岩石界面の相互作用や、水素の生産や貯蔵に関する解析の実施が期待され、MoDa の可能性が飛躍的に高まつた。

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

KAPSEL は、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目的としている。本プログラムの特徴は、コロイド粒子の運動と流体の運動の練成問題を、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。^[1,2] 本プログラムを用いることによって、理論的には未解決の実験事実に対して、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、これまでに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。

2 KAPSEL の並列化方針

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。

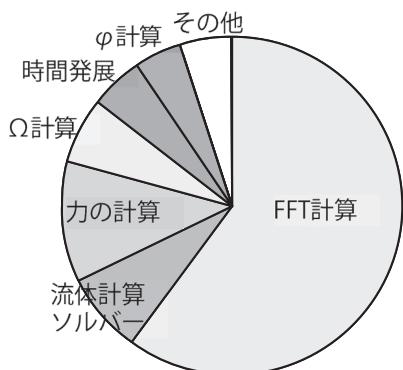


図 1：並列化前の消費時間内訳

KAPSEL では、ナビエストークス方程式を解くアルゴリズムとしてスペクトル法を実装しているため、全計算時間の約 6 割がスペクトル法で実行する高速フーリエ変換(FFT)の計算に消費されている。また、その他の消費時間を KAPSEL 内の関数が細かく消費していることが得られる。このバージョンの KAPSEL の FFT アルゴリズムには、京都大学数理解析研究所の大浦氏が開発した FFT アルゴリズムが採用されている。大浦の FFT アルゴリズムは 1CPU 計算では他の FFT ライブライアリよりも効率的かつ高速であるが、並列化に未対応である。また、FFT が消費する時間がたかだか全体の 6 割程度であるために、FFT のみを並列化しても速度の向上は期待できない。加えて、KAPSEL では粒子間相互作用力を計算するために各ステップ・粒子ごとに他の全ての粒子との距離を計算する All Pair Method を実装している。この方法はアルゴリズムが簡単であるため、粒子数が少ないとには有効な手法であるが、粒子数が増加すると計算量が粒子数の二乗で増加し計算時間の大部分を占めてしまう。

これらの問題に対処するために、我々は以下の 3 つの方針で KAPSEL を並列化・高速化した。

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

3 並列化の現状

3.1 FFT ライブラリ移植結果

本研究で用いた計算機スペックを以下に示す。

- CPU : Intel Xeon Hapertown 3.00 GHz × 2 (=8CPU)
- メモリ: 16 GB

粒子数が非常に少ない計算条件で CPU の数を変化させて計算を行い、FFT のみが消費する時間を測定した。その結果を図 2 に示す。

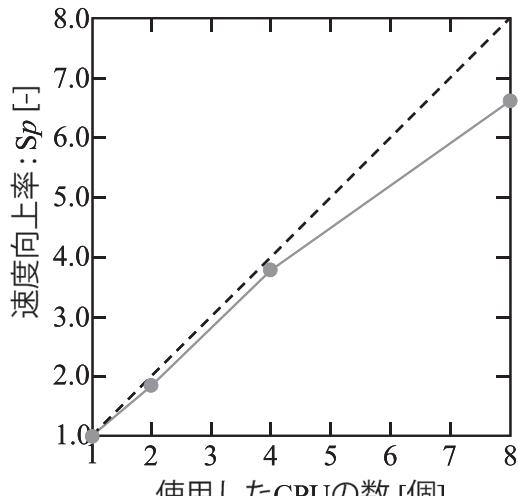


図 2: FFT の速度向上結果

4 並列計算において約 390%、8 並列計算実行時において約 670% の速度向上が得られ、よいスケーラビリティーが確保されていることが得られた。この結果から、FFT ライブラリを MKL のライブラリに変更することは大規模化・高速化において非常に有効な手法であることが確認された。

3.2 OpenMP を用いた並列化結果

KAPSEL 内で FFT 以外に時間を多く消費している関数に関して、OpenMP による並列化を行った。具体的な手法としては、まずコンパイラの性能解析ツール(gprof)を用いて、並列化すべき関数を特定する。その結果に基づいて、関数に含まれるループを OpenMP によって並列化する。その際、並列化領域を大きく設定するために、多重ループの最も外側のループに対して並列化を指示するように設定した。並列化された KAPSEL を用いて CPU の数を変化させて沈降計算を行い、消

費時間を測定した。粒子の数は 1500 個で、系の大きさは 128*128*256 である。このときの体積分率は 0.187 であった。

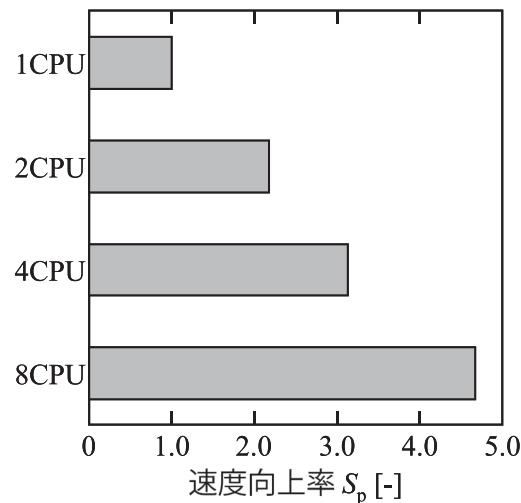


図 3: 速度向上結果

CPU 数と消費時間の関係を図 3 に示す。4 並列で 310%、8 並列で 460% の速度向上が得られた。この結果を元に、式(1)のアムダールの法則から、並列化領域の割合 f_p を計算した。

$$S_p = \frac{1}{(1 - f_p) + \frac{f_p}{p}} \quad (1)$$

その結果、8 並列計算実行時には、KAPSEL のアルゴリズムの中で約 90% が並列化されていることが得られた。8 並列で 460% の速度向上しか得られない原因は、計算負荷が小さい計算を OpenMP で並列化を行う場合、OpenMP におけるスレッド生成のオーバーヘッドの負荷が高くなるためであると考えられる。

3.3 Cell Linked List 法による速度向上結果

All Pair Method の場合と Cell Linked List 法を実装した KAPSEL を用いて、粒子数を 5000 個の場合の沈降計算を行い、消費時間を測定した。その結果、Cell Linked List 法を実装したほうが、10% 計算時間が短縮された。また、平均粒子間距離を計算する関数を呼び出す回数が 64 分の 1 に減少し、消費時間も 50 分の 1 に減少した。数千個の個数でも、明確な速度向上が得られたので、それ以上の個数の計算を行う場合でも、速度向上

が期待できる。

以上の並列化・高速化を行った場合の消費時間の推移の結果を図に示す。FFT の計算が約 25%と減少し、全てのルーチンがほぼ等しく時間を消費していることが得られた。

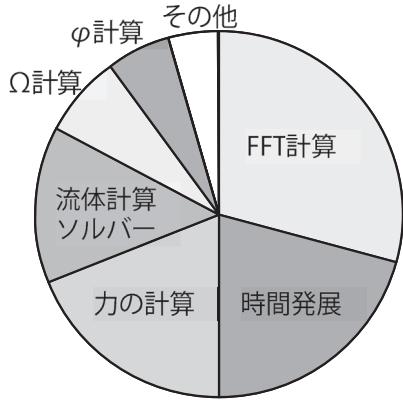


図 4：並列化後の消費時間内訳

3.4 並列計算の正当性の評価

並列計算の正当性を流体中の粒子が流体から受ける抵抗係数 Q を用いて評価した。 Q は以下の式(2)で表される。

$$F = -\frac{6\pi a \eta V_z}{Q(\phi)} \quad (2)$$

体積分率を 0.0010 に固定し、CPU の数を変化させて計算を行い Q を計算した。結果を図 5 に示す。その結果、CPU の数を変化させても、抵抗係数は変化しなかった。よって、並列計算の正当性が証明された。さらに、体積分率を変化させて計算を行った結果を図 6 に示す。計算結果が Zick らの理論的な予測とよく一致することが得られた。

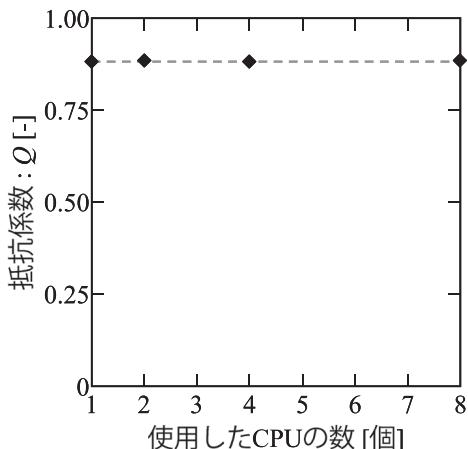


図 5：抵抗係数

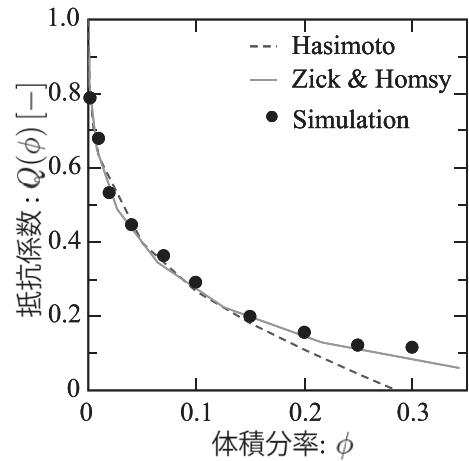


図 6：体積分率を変化させた場合の抵抗係数

4 MPI を用いた並列化

さらなる大規模計算(系の一辺の長さが粒子半径の 100 倍以上)を実行するためには、OpenMP を用いた並列化のみでは不十分である。そこで、京都大学学術メディアセンターのプログラム高度化支援事業との共同研究で、MPI を用いた並列化の実装に向けて現在研究を進めており、その現状を報告する。

現段階での MPI を用いた並列計算の速度向上結果を図 7 に示す。図 7 には、全実行時間、通信で消費される時間、並列計算部、逐次計算部の消費時間を示してある。

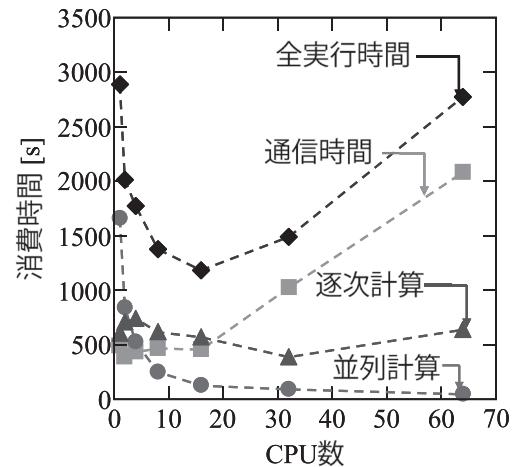


図 7：MPI を用いた並列化の速度向上結果

MPI を用いた並列化において、1 ノード (=16CPU) 以内の計算では使用する CPU の数の増加に伴って速度が向上するが、複数ノードを用いた計算 (=32, 64CPU) では実行時間が長くなつ

てしまう。その主たる原因是、各ノード間の通信に現段階では多くの時間を消費していることである。全実行時間に占める通信時間の割合は、1 ノード以内では 20~30% であるのに対して、2 ノード以上では 60% 以上の時間を占めている。

その原因のひとつに、系の大きさの影響が考えられる。現段階の MPI 並列化はテスト段階であるため、比較的小さな系の計算を行っている。我々が実際に取り組む課題においては、現在の系よりもはるかに大きな系 (512^3 流体ノード + 10 万粒子) を取り扱うことになるので、通信時間の短縮は十分可能である。

今回のセンターとの共同研究により、KAPSEL では高速フーリエ変換(FFT)の回数が過剰であることが判明した。この点についてはすでに改善を行い、オリジナル版の約半分にまで FFT の回数を減らすことに成功した。

5 今後の課題と展開

KAPSEL のコードは、FFT を含む流体計算部分と粒子計算部分に大別される。今回の MPI を用いたテスト計算では、より計算負荷の大きい流体計算部分をターゲットにするために、粒子が 1 個の場合だけを取り扱った。しかし、実際にシミュレーションを行う際には、数千から数万個の粒子の計算を想定しているので、粒子計算部分の並列化も必須である。現状のコードでは、粒子計算部分についても OpenMP を用いた並列化がなされており、コア数 8 程度までは性能が出ることを確認している。図 8 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 $256 \times 256 \times 512$ 、分散粒子数 10 万個のシミュレーションに成功している。

これまでに開発した OpenMP による並列化を反映した新しいバージョンの KAPSEL-2 を、2009 年 8 月に一般公開した[3]。センターとの共同研究は 2009 年度も継続していただいている、100 コア並列程度まで性能が出る MPI 並列コード開発し、流体ノード 512^3 、100 万粒子数の超大規模シミュレーションの実現を目指している。



図 8 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[3]に動画がある。

参考文献

- [1] Takuya Iwashita and Ryoichi Yamamoto, “Short-time motion of Brownian particles in a shear flow”, Phys. Rev. E, 79, 031401 (2009).
- [2] Yasuya Nakayama, Kang Kim and Ryoichi Yamamoto, “Simulating (electro) hydrodynamic effects in colloidal dispersions: smoothed profile method” Eur. Phys. J. E, 26, 361-368 (2008).
- [3] KAPSEL ホームページ
<http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/kapse/>

原子・分子過程を取り入れたプラズマの複雑性と構造形成

拡張型3次元電磁粒子コード(EPIC3D)によるシミュレーション研究

岸本泰明, 斎藤大介, 宮園智也

京都大学大学院エネルギー科学研究所

自然界や実験室におけるプラズマ生成過程では、気体や液体、固体や粉塵・クラスターなど、様々な状態にある物質が、複雑な原子・分子過程や衝突緩和過程などを通して、中性原子や分子、多価イオンや電子などが共存した複雑な状態が作り出される。これらは、Debye長内部のミクロな過程が、摂動としてではなく、力学系としての物質のダイナミックスや基本構造を支配している点に大きな特色がある。このようなプラズマ生成に関わる複雑なダイナミックスや構造形成現象を解明するため、高温プラズマの記述に優れている粒子手法を基礎に、それに原子・分子過程や衝突・緩和過程などのミクロな物理過程を組み込んだ拡張型統合化シミュレーションコード(EPIC3D)の開発を行い、高強度レーザーと物質(クラスター・固体薄膜など)との相互作用のシミュレーションを実現した。

1 はじめに

これまで、核融合プラズマの乱流輸送現象や電磁流体现象を中心に、散逸の微小な高温プラズマの物性が精力的に研究され、理解が進展した⁽¹⁾。一方、自然界のプラズマや実験室・産業応用のプラズマに広く目を転じると、そこでは、固体や液体などの凝集相、気相、あるいは少数多体系としての特性を有するクラスター・粉塵など、様々な状態にある物質が、様々な波長領域の輻射や荷電粒子と相互作用を繰り返しながら、多彩な原子・分子過程や衝突緩和過程、輻射過程を通して、中性原子や分子、多価イオンや電子などが共存した複雑なプラズマ状態を作り出している⁽²⁾。

このようなプラズマは無衝突プラズマとしての特性に加え、デバイ長内部のミクロな原子・分子過程や衝突緩和過程が加わることによって複雑性のレベルは相乗的に増大し、これが起因となって豊富かつ新奇な現象が創出される。成層圏や電離層で発生する放電・雷過程はその典型例であり、それらが有する予測困難な突発的な発生機構や微細な分岐構造は非線形物理学や非平衡統計力学の観点からも興味深い課題であるが、長い研究の歴史にもかかわらず全体像の解明には至っていない。また、各種プラズマの着火過程やエンジンなどの

燃料点火過程、ITER(国際熱核融合炉)等の課題でもあるプラズマ崩壊(ディスラプション)時に生成される相対論領域の大電流逃走電子ビームとアルゴンやネオンなどの希ガスや固体ペレットとの相互作用過程、さらには恒星からの輻射や超新星爆発による相対論的な爆風波と星間物質の相互作用過程などもこれにあたり、対象は広範囲に渡る。多くのプラズマ過程はこのような原子・分子過程に関わる現象を内包しながら、これまで経験的に扱われることが多く、いずれも原理的な解明に至っていない。これは、原子過程や分子過程を含んだプラズマの挙動が極めて複雑であり、そのモデル化が困難なことに起因している。

ここでは、上述のような「無衝突プラズマ」としてのマクロなダイナミックス」と「原子・分子過程や衝突緩和過程、輻射過程などのデバイ長内部のミクロなダイナミックス」の結合によって作りだされる複雑なプラズマ過程を「相乗的複雑性」と位置づけ、この過程によって支配される新奇なプラズマの特性を理解するとともに、そのような特性を生かした様々な応用研究を行うことを目的とする。このため、我々は、マクロな動力学や構造の記述に優れたプラズマ手法を基礎に、電磁場や粒子衝突による原子・分子過程、生成された荷電粒子間の衝突・緩和過程や輻射過程などのデバ

イ長内部のミクロ過程をモデル的に導入した拡張型3次元電磁粒子シミュレーションコード (EPIC3D) を開発した⁽²⁾⁽³⁾。このコードは、媒質を構成する原子や分子のミクロな状態変化（分極・配向、電離・再結合、電子付着、化学反応や電子・陽電子生成など）と、その下での媒質のマクロな集団的相互作用（線形・非線形光学特性、集団的粒子加速、二次輻射など）を自己無撞着に記述することができる。

本稿では、このEPIC3Dの概要（2章）を述べた後、高強度レーザーとクラスター媒質や固体との相互作用シミュレーション（3・4章）⁽⁴⁾⁽⁵⁾⁽⁶⁾を行い、原子・緩和過程が関与した様々な時定数を持った過渡現象やそれに起因する構造形成現象について紹介する。これらの研究で見出された顕著な現象は、いずれも時空間スケールの異なる物理過程が相互作用した結果創出されたものであり、典型的な「相乗的複雑性」と位置づけられる。

2. 拡張型粒子コード (EPIC3D) の概要

EPIC3Dは、超粒子に原子の量子レベルに対応する内部自由度を持たせることにより、種々の電離・再結合過程や衝突緩和過程をモデル的に取り入れている。電磁場は、電磁場形式 (\mathbf{E}, \mathbf{B}) (EPIC3D-EB)、およびポテンシャル形式 (\mathbf{A}, ϕ) (EPIC3D-AP) を用いたMaxwell方程式で記述され、電荷密度 ρ と電流密度 \mathbf{J} は相対論的な運動方程式からCIC(Cloud-In Cell)法を用いて、線形補間、あるいはより高精度の二次関数補間から決定する。EPIC3D-EBは3次元空間メッシュ、EPIC3D-APは3次元のフーリエ変換をそれぞれ使用して場を決定しており、適用する問題に応じて使い分けている。電磁場の入出力を伴う開放系としてのシミュレーションではメッシュコードが便利である。また、長時間のエネルギー保存などを確保するため、電流密度は連続方程式の局所解法に基づいている。これらのコードに、エネルギーおよび運動量を厳密に保存する衝突緩和過程（相対論的モンテカルロ法）および原子過程（光電離過程、電子衝突電離過程、内殻励起過程、オージェ効果等）をモデル的に導入し、電離過程を含むプラズマ生成のダイナミックスを再現する⁽³⁾。

3 レーザーとクラスターとの相互作用

原子クラスターは少数多体系として興味深い研究対象であり、特に高Z物質からなるクラスターとレーザーとの相互作用では、表面の存在に起因した分極モードなど、様々な新奇な物性が出現する⁽¹⁴⁾。ここでは、EPIC3Dを用いて、超高強度極短パルスレーザーとアルゴン (Ar) クラスターとの相互作用の詳細を調べ、電離過程を伴ったクラスターの内部構造やクーロン爆発のダイナミックスについて解析を行う^{(4),(6)}。使用したレーザーは、波長 800nm、パルス長 20fsec、強度 $I=2.7\times10^{17} \text{ W/cm}^2$ であり、これを半径 $a=24\text{nm}$ (原子数 $n_e=1.6\times10^6$) の固体クラスター (数密度 $n_0=2.44\times10^{22} \text{ cm}^{-3}$) に照射する。

Fig. 1(a) は、各時間における電場振幅の等高線を示している。レーザー場は最初クラスター内部に浸透するが、1価に対応する電子スキン長

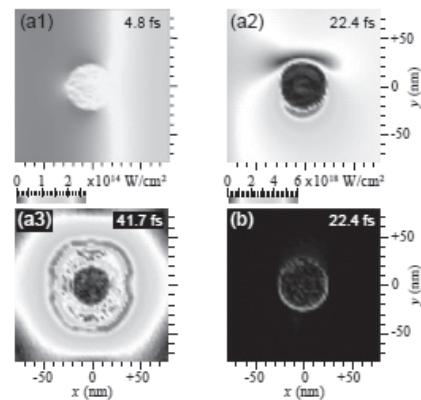


Fig.1 (a) Snap shots of the electric field amplitude at various times. (b) Snap shot of the charge neutrality at $t=22.4\text{fsec}$.

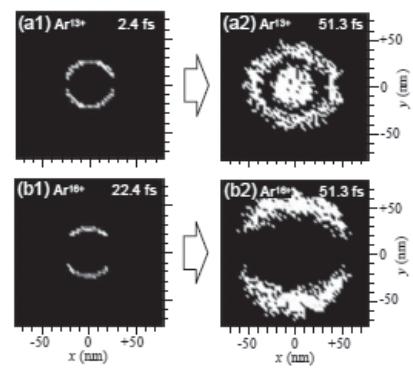


Fig.2 (a) Snap shots of the ion density distribution for the charge state of (a) $q=13$ and (b) $q=16$ at $t=22.4\text{fs}$ and 51.3fs .

($\delta_e = 34$ nm) が $\delta_e > a$ となるため、イオン化の進行とともにクラスター内部のレーザー場は吐き出される (Fig. 1(a1))。その後、多量の電子がクラスター表面から剥ぎ取られ、クラスター表面に両極性電場が発生する (Fig. 1(a1))。そのとき、レーザー電場、レーザー誘起の分極場、および両極性電場の重ね合わせの結果、Fig. 1(a(2)) から分かるように、一方の極では電場強度が増大し、他方の極は弱められる。このときの電場強度は最大 $6 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$ に達するが、この値は真空中におけるレーザー場の最大強度 $2.7 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ を一桁以上 (~22倍) 上回り、Ar¹⁶⁺を生成できる強度に達している。実際その時刻において、Fig. 2(b) に見られるように、クラスターの両極に強電場が生成され、その領域に Ar¹⁶⁺ の分布が観測される (Fig. 2(b1))。

レーザーパルスが通り過ぎると、クラスター内部および外部に二つの電場シース構造が形成されていることが分かる。その一つは、高密度のクラスター核と急速に密度が低下する希薄波伝播領域の境界に位置し、他方は、膨張するイオン前面の外部シースに対応する。内部シースは高エネルギー電子が存在するレーザー核融合ペレットで形成されることが分かっているが、ナノサイズクラスターにおいて見出されたのは本研究がはじめてであろう。

4. レーザーと固体炭素との相互作用

3章のレーザークラスター相互作用研究では、レーザー場が進入できないクラスター内部においても、高価数 ($10 \leq q \leq 16$) のイオンが OFI 過程によってイオン化されることが分かっている。このため、ここではレーザー場が進入できない固体炭素の薄膜中における電離過程の詳細について検討する。レーザーは集光強度 $2 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$ (規格化強度 $a_0 \approx 1$)、波長 820nm、パルス長 100fsec (Gauss 分布形状) であり、これを固体炭素 (Z=6) に垂直照射する。

Fig. 3(a) はレーザーおよび電子・イオンのエネルギーの時間発展、Fig. 3(b) は各価数に対応するイオン数の時間発展を示している。相互作用の前半では C⁺¹-C⁺² が生成されレーザー強度が最大となる。t=90fsec からは C⁺³ を経由して C⁺⁴ が急速に生成され、その後 C⁺⁵-C⁺⁶ も生成されるが、生成率は低い。

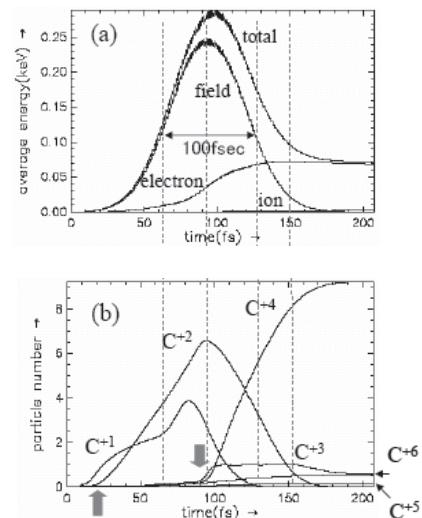


Fig. 3 (a) time history of laser, and electron and ion kinetics energy. (b) time history of ion density with charge state C^q (q=1-6).

成率は低い。

Fig. 4 は、Fig. 3 の各時間に対応したイオンの 2 次元密度分布を示している。2 倍に対応する電離波の伝播の様子が Fig. 4(a) から分かるが、複雑なミクロスケールの突起構造が電離面に形成され、その領域が電離的に不安定であることが分かる。Fig. 4(b) の x=300 付近に見られる構造は Fig. 3 (t=95.7 fs) で見られた “hump” に対応し、その hump は 4 倍の電離面に成長し、Fig. 4(c)-(d) に見られるように、固体中を雪崩的に伝播する。また、Fig. 4 下図は、t=95.7 fs における x 方向の電場を示している。3-4 倍が生成される “hump” の領域に先行して航跡場のパターンに類似した突起構造が出現している。この構造は進行方向に対して振動 (波長 $\lambda \sim 56$ nm) しており、2 倍の密度に対するプラズマ角振動数 ω_p がおよそ $\omega_p \approx kv_e$ (v_e : 高速電子速度) の関係にあることから、高速電子によるプラズマ波の “Cherenkov 放射” であると考えられる。この多数のプラズマ波はその背後で乱流状態となり、その電場による OFI 過程によって電離が引き起こされていることが明らかになった。この乱流領域は x 方向に高速で伝播し、電離面もこれに追随して伝播する。一方、5-6 倍が関与した表面近傍の高密度領域は、4 倍に比べると遅い時間スケールで伝播速度は遅く、電子衝突に起因するものであることが分かった。

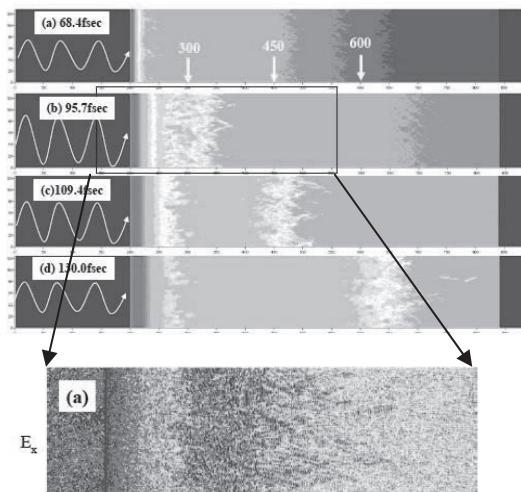


Fig. 4 Ion density distribution in 2 dimensional simulation domain at four different times. Propagation of the ionization front of charge state 4 is seen having a complex finger-like structure. Lower graph shows the distribution of longitudinal electric field E_x at $t=95.7$. Micro-scale finger-like structure corresponds to Cherenkov emission of plasma waves induced by fast electron.

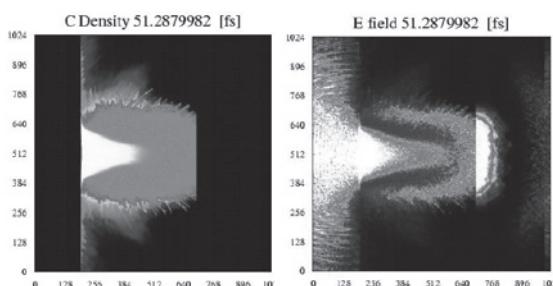


Fig. 5 2-dimensinal simulation of laser—solid carbon with focused laser beam. (a) ion density distribution and (b) corresponding field distribution. Ionization front is self-sustained due to wake field excitation.

Fig. 5 は、Fig. 3・Fig. 4 のシミュレーションを大規模化し、2次元配位で行ったシミュレーションの結果を示している。高強度レーザーに照射された固体炭素薄膜中で電離波伝播の様子を示し、それぞれ固体炭素中における(a) プラズマ密度分布と(b) 勵起された航跡場の空間分布を示す。

6. まとめと今後の課題

本研究では、プラズマの粒子モデルをベースに、原子過程や衝突緩和過程を取り入れた粒子コード

(EPIC3D) の開発を行い、これにより、高強度レーザーとクラスターなどとの物質との相互作用のシミュレーションを行った。いずれも初期状態は大部分中性であり、レーザー場や空間電界、あるいは電子衝突などに起因する原子過程を通してプラズマが生成される。その過程において、ミクロな原子過程や衝突緩和過程と、分極場やプラズマ波などに代表される集団運動を伴ったマクロなプラズマ過程が相乗的に相互作用することにより、新しい時空間構造を持った現象が創出される。

これまででもプラズマ物理学における原子・分子過程は、プラズマ・壁相互作用やプロセスプラズマ分野で精緻な研究として発展してきた。一方、本稿では割愛したが、放電・雷過程などの原子・分子過程が関与した典型例として研究対象となる。構造の起源とも密接に関連したこれらの「古くて新しい問題」にプラズマ物理学や大規模シミュレーションが解明の突破口を開けるか、チャレンジングな取り組みが期待される。

参考文献

- (1) 岸本泰明(編集)：小特集 「異なった時空間スケールが関与する多階層シミュレーション研究－現状からの展望－」 プラズマ・核融合学会誌 79 (No. 5) 460–463 (2003)
- (2) Y. Kishimoto, “Research on Structure Formation of Plasmas Dominated by Multiple Hierarchical Dynamics, Annual Report of the Earth Simulator Center, April 2004–March 2005 (p. 261–264)
- (3) 岸本泰明：「原子・分子過程を含むプラズマの理論・シミュレーションモデル」 プラズマ・核融合学会誌、84、484–491 (2008)
- (4) Y. Fukuda et al. : Phys. Rev. A 73 031201(R) (2006)
- (5) Y. Kishimoto: Femtosecond (by M. Uesaka, Imperial College Press/World Scientific (2005)) : 2. 4. 5. Neutron (135–142)
- (6) T. Masaki and Y. Kishimoto, Journal of Plasma and Fusion Research 81 (10), 643–644 (2005)
- (7) Y. Kishimoto and T. Masaki, J. Plasma Physics 72 (part 6), 971–974 (2006)

宇宙プラズマ粒子シミュレーションコードの高度化

- 衛星搭載電界アンテナ特性解析用3次元電磁粒子シミュレーションコードの分散メモリ並列化および高効率化-
- 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-
- 宇宙プラズマにおけるミラー不安定性の非線形発展の研究 -

臼井英之¹⁾、三宅洋平³⁾、梶村好宏²⁾、中島浩³⁾、大村善治²⁾、小路真史²⁾

1) 神戸大学大学院 工学研究科, 2) 京都大学 生存圏研究所 3) 京都大学 学術情報メディアセンター

1 はじめに

宇宙空間は希薄な電離気体である宇宙プラズマで満たされており、そこで正起する様々なプラズマ現象はプラズマ粒子と電磁場との相互作用に起因する。プラズマは分散性、異方性を持ち、電磁界との間に非線形な相互作用が存在する。この宇宙プラズマ環境の理解および宇宙利用に際して必要となる衛星環境の理解には、計算機シミュレーションが非常に有効な手段である。特に、プラズマの運動論的効果を近似せず解析できる粒子シミュレーションは非線形波動粒子相互作用の解析のみならず、衛星近傍のプラズマ環境解析に重要である。プラズマ粒子モデルでは、多数の代表プラズマ粒子をモデル空間内に一様に配置し、空間格子点で定義された電磁界の時間更新と粒子の速度・位置更新を互いに連動させてモデル空間内のプラズマ現象発展を解き進める。

図1に示すように空間格子点に定義された電磁界成分を更新する際にはプラズマ運動による電流値が必要であり、そのために、個々の粒子の運動量を各空間格子点に集める必要がある。しかし、粒子が空間的にランダムに分布しているため、並列演算による電流計算の高速化は容易ではなく工夫を要する。また、大規模なモデル空間を扱う場合、シミュレーション空間の領域分割を行い各領域を計算ノードに割り当てて並列に解き進める必要がある。しかし、粒子は時間とともにノード間を移動するため、各領域内の粒子数は時間的に一定ではない。このためにノード間の負荷バランス平衡が崩れしていくが、並列高速演算にはこの負荷

バランス維持が重要でありその実現には工夫をする。宇宙プラズマ粒子シミュレーションの高度化・高並列化を行うには、これらの問題を解決する必要があり、本プログラム高度化支援の枠組みでコードの評価、高性能化を学術情報メディアセンターの中島教授らとともに開始した。具体的には3つの課題においてそれぞれ用いられるプログラムの高性能化に向けた評価およびその具体的な方法の検討を行ったので、その概略を報告する。

宇宙プラズマ粒子シミュレーション

数値計算手順

粒子運動に伴う電流成分を粒子位置からグリッド点上に配分

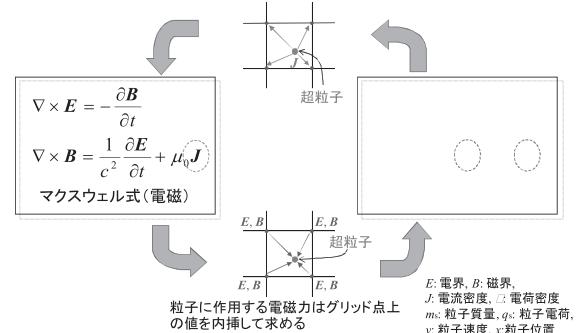


図1：宇宙プラズマ粒子シミュレーション概念

2 衛星搭載電界アンテナ特性解析用3次元電磁粒子シミュレーション

宇宙プラズマで満たされた3次元空間の中に衛星筐体とそれに搭載された電界計測アンテナを金属導体としてモデル化して配置し、衛星近傍のプラズマ環境およびその環境下での電界アンテナ特性をプラズマの運動論的効果を考慮して解析する

新領域分割アルゴリズム (OhHelp)の適用



粒子が多い領域の計算を他のノードが手助け(手助けは自身の領域以外に高々1領域のみ)。

図2：OhHelp の概念図

ことが本研究の主目的である。得られるアンテナ特性はプラズマ波動衛星観測データの校正や将来のアンテナ設計に役立てる。

3次元粒子シミュレーションでは、空間格子点に加えて膨大な数の粒子を用いるため、大容量の主記憶容量が必要であり、高速演算には必然的に複数の計算ノードを用いた並列計算が必要となる。代表的な並列化手法としては、大きなモデル空間を複数の小領域に分割し、それぞれを各ノードに割り当てて並列的に計算を行う「領域分割法」がある。特に、ノードあたりのメモリ容量が少ない場合は、この手法を多用するが、全体として高効率な並列演算を行うためには、各ノードの演算負荷の均衡が必要である。しかし、各ノードに割り当てられた領域の中のプラズマ粒子数は時間的に一定ではなく、粒子は常にノード間境界を越えて移動する。これが原因となってノード間負荷のバ

ランスが悪くなり、結果として分散並列の効率が悪くなる。これを回避する一つの手法として、学術情報メディアセンターの中島浩教授が考案した OhHelp 法([1], [2], [3])がある。基本原理としては、図2に示すように、領域分割において、粒子が多い領域の計算を他のノードが手助けをするが、その手助けは自身の領域以外に高々 1 領域のみ、というものであり、各々の領域の境界は固定されたままで並列化、負荷バランス維持ができる点で画期的な手法である。

今回、計算領域を $64 \times 64 \times 64$ の空間格子で形成し、各格子内に平均 512 個の粒子を初期に配置したモデルを用いて OhHelp 手法の基本特性の取得を行った。計算環境は、Fujitsu HX600 Cluster (Thin ノード) を用い、最大 256 プロセスまで MPI 並列を行った。粒子の初期配置は、一様分布と非一様分布の 2 通りのモデルを用い、それについての性能を取得した。結果を図3に示す。領域を分割せず、全粒子数のみを並列化した場合と比較しても明らかなように OhHelp 手法を用いた場合は非常によいスケーラビリティが得られた。たとえ領域間で粒子数の偏りがあったとしても、OhHelp 手法によりノード間負荷バランスが維持できるため、全体として高効率並列演算が期待できる。

現在、OhHelp のライブラリ化が進められており、今後、ユーザーにとってより使いやすい手法として提供される予定である。並行して、衛星モデルシミュレーションへの応用も準備に取り掛かっている。一方で、計算領域への粒子注入、計算領域からの粒子除去などの機能追加は今後の課題である。

3 3 次元ハイブリッド粒子コードの高性能化

宇宙プラズマのイオンスケールの現象を解析する場合、イオンを粒子、電子を流体として扱うハイブリッド粒子手法がある。このハイブリッド粒子コードを用いて、我々は以下の 2 つの研究を行っている。一つは、次世代の宇宙航行システムとして開発が進められている「磁気プラズマセイル」(Maneto plasma Sail:以降 MPS と記述)の原理検証および推力性能の評価である[4]。もう一つは、

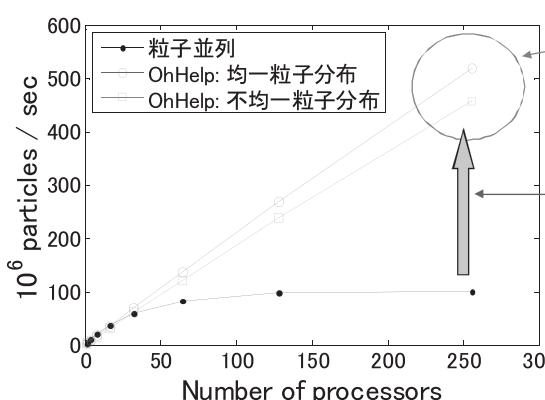


図3：OhHelp 領域分割並列化の性能

地球磁気圏で観測されるミラーモードと呼ばれる磁場擾乱現象の生成メカニズムに関する3次元ハイブリッドシミュレーション研究[5]である。

MPS は、宇宙機に搭載されたコイルが作る小規模なダイポール状の磁気圏を宇宙機からのプラズマ噴射によって拡大し、高速のプラズマ流である太陽風を拡大磁場で受け止め、電磁気学的推進力を得るシステムである。MPSにおいて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。この MPS の性能評価では、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であり、かつ単位格子あたりの粒子数も百個オーダーの数が必要となる。

同じく、ミラーモードプラズマ不安定性の解析においても大規模3次元空間モデルが必須である。これまでの2次元モデルでは空間自由度が低いため温度異方性を持つイオンをエネルギー源とするミラーモード不安定性の成長過程を定量的に正確に解析することができなかった。3次元空間モデルを用いた詳細解析を行うには、格子あたり十分な数の粒子が必要であり、結果として大規模な計算資源が必要となる。

このような大規模シミュレーションを行うには、前節のシミュレーション同様、並列化が必須である。MPS のハイブリッド粒子シミュレーションにおいて注意すべき点は、プラズマの低密度領域における電界発散である。MPS シミュレーションにおいては、そのエラー処理として電界値に関するラプラス方程式を SOR 法によって求解しているが、この部分の並列化については工夫が要する。

今回、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 5 点について検討を実施した。

(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、チェックボード 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必要がある。

(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と考えられる。

(5) MPI 並列化によるプログラム改造を行う。

並列化の対象は 3 次元直交座標系の空間の任意の軸と、粒子計算である。但し、問題によって、粒子計算や真空電磁場の計算は負荷バランスが悪くなることが予想されるため、方法を検討する必要がある。尚、上記のチューニング項目は、段階的に実施可能であり、無駄なチューニング作業が発生することはないと考える。

4 まとめ

膨大な数の粒子を扱うプラズマ粒子シミュレーションの並列高速化は容易ではない。領域分割法においてスケーラビリティを得るには、各ノード間の負荷バランス維持が重要である。今回、その手法として OhHelp 法の導入を試み、その性能評価を開始した。数百プロセッサーを用いた並列演算では台数効果が顕著に現われることがわかった。今後、より高並列な場合についての性能評価を行うと共に、ハイブリッド粒子シミュレーションコードへの移植も視野に入れていく。

5 参考文献

- [1] 中島 浩, 三宅 洋平, 臼井 英之, 大村 善治, Performance Evaluation of OhHelp'ed 3D Particle-in-Cell Simulation, 第 15 回ハイパフォーマンスコンピューティングとアーキテクチャの評価に関する北海道ワークショップ, 2008.
- [2] Hiroshi Nakashima, Yohei Miyake, Hideyuki Usui, and Yoshiharu Omura, OhHelp: A Scalable Domain-Decomposing Dynamic Load Balancing for Particle-in-Cell Simulations. In Proc. Intl. Conf. Supercomputing, pp. 90-99, June 2009.
- [3] Hiroshi Nakashima, OhHelp Load Balancer: A Help to PIC Codes for Flying Peta-Scale Sky, 9th International School for Space Simulations, July 2009.
- [4] 梶村 好宏, 篠原 大介, 野田 賢治, 中島 秀紀, 計算機実験による磁気プラズマセイルの性能評価, 九州大学総理工報告第 29 卷 4 号, 369—373 頁, 2008 年, (平成 20 年 3 月)
- [5] Shoji, M., Y. Omura, R. T. Tsurutani, O. Verkhoglyadova, and B. Lembege, Mirror Instability and L-mode Electromagnetic Ion Cyclotron Instability: Competition in the Earth's Magnetosheath,. J. Geophys. Res., doi:10.1029/2008JA014038, 2009.

判別式計算における世界記録への挑戦

木村欣司

京都大学大学院情報学研究科

1 はじめに

共有メモリのスカラ型並列計算機を用いて、整数係数の多変数多項式行列の行列式と整数係数の多変数多項式を係数に持つ終結式を計算する方法を考える。提案手法の有用性の検証として、富士通のスーパーコンピュータ M9000 を用いて世界記録である 15 次の判別式を計算することを試みる。もちろん、得られた計算結果が、重要な意味を持つことは言うまでもない。判別式は、Strum-Habitch 列の 1 構成要素をなし、それを計算できることは、1 変数代数方程式の根の位置を支配できることになる。根の位置は、系の安定性を支配する。よって、制御理論などの幅広い応用が期待される。さらに、研究科共通科目「シミュレーション科学」における、並列計算のための新しい計算手法開発という話題において、模範例としての役割を担うという意味でも、この挑戦は重要である。この挑戦の過程は、学生にとってとても優れた教材となりえると考えられる。

2 行列式の評価公式

2.1 整数行列の行列式の評価公式

$n \times n$ の行列 A に対して $\det(A)$ の評価は以下のようにおこなう。^[2]

$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \dots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n,1} & \dots & a_{n,n} \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} u_1 &= (a_{1,1}, \dots, a_{1,n}), \dots, u_n = (a_{n,1}, \dots, a_{n,n}), \\ v_1 &= (a_{1,1}, \dots, a_{n,1}), \dots, v_n = (a_{1,n}, \dots, a_{n,n}), \end{aligned}$$

を定義すると、Hadamard の公式より、
 $\det(A)$ の絶対値 \leq
 $\min(\|u_1\|_2 \dots \|u_n\|_2, \|v_1\|_2 \dots \|v_n\|_2) \equiv H.$

2.2 整数係数の多変数多項式行列の行列式の評価公式

整数係数の多変数多項式の 1 ノルムは、係数の絶対値の総和と定義する。

$$\begin{pmatrix} \|a_{1,1}\|_1 & \dots & \|a_{1,n}\|_1 \\ \vdots & & \vdots \\ \|a_{n,1}\|_1 & \dots & \|a_{n,n}\|_1 \end{pmatrix}$$

として Hadamard の公式を適用する。そのときの値を H_1 とすると、整数係数の多変数多項式行列の行列式の係数の絶対値最大 $\leq H_1$ が成立する。詳しくは、[1] を参照されたい。

3 整数係数の多変数多項式行列の行列式の計算法

3.1 提案手法

並列化効率の高い算法として、多変数 Newton 補間を利用する。

$$A = \begin{vmatrix} x + y + z & xy \\ 2 & xyz \end{vmatrix}$$

が与えられたとき、単純な計算により

$$\begin{aligned} A &= b_0 + b_1 z + b_2 z^2 + (b_3 + b_4 z + b_5 z^2)y \\ &\quad + (b_6 + b_7 z)y^2 + ((b_8 + b_9 z + b_{10} z^2) \\ &\quad + (b_{11} + b_{12} z + b_{13} z^2)y \end{aligned}$$

$$+(b_{14} + b_{15}z)y^2)x \\ +((b_{16} + b_{17}z) + (b_{18} + b_{19}z)y)x^2$$

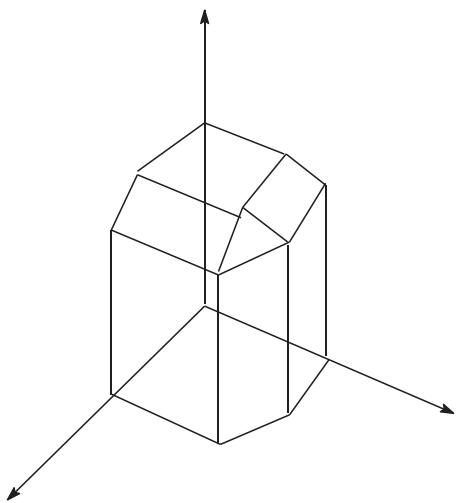
と仮定できる。変数 x の次数の上界は

$$A = \begin{pmatrix} x+y+z & xy \\ 2 & xyz \\ 1 & + \end{pmatrix} \begin{matrix} 1 \\ + \\ 1 \end{matrix}$$

$\max(1+1, 1+1) = 2$ より計算される。

| variable | parameter | total degree |
|-----------|-----------|--------------|
| x | y, z | 2 |
| y | x, z | 2 |
| z | x, y | 2 |
| x, y | z | 3 |
| y, z | x | 3 |
| z, x | y | 3 |
| x, y, z | | 4 |

仮定は、表より得られたものである。0でない可能性のある項(support)によるNewton図形が仮定のように複雑な場合、Newton補間は難しいように思えるがそれは正しくない。[3]に述べた通り、効率的な算法を構成できる。それを、cut面付き多変数Newton補間と呼ぶことにする。cut面付き多変数Newton補間と呼ぶ理由は、仮定のようなNewton図形を図示した場合に、以下のようになるためである。



3.2では、[3]の内容を丁寧に再度繰り返す。我々の算法は、 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ において、補間点でサンプリングを行い、Newton補間を利用して $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ における行列式、

終結式の係数を得た後、最後に中国剩余定理によつて \mathbb{Z} における係数を復元するというものである。

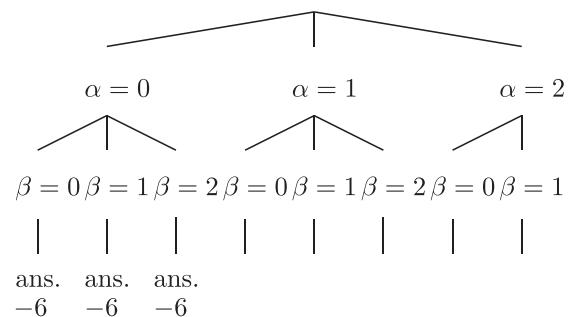
3.2 cut面付き多変数Newton補間

行列式または終結式の解が、

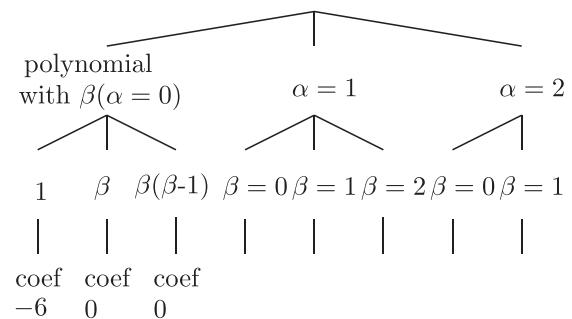
$$(c_0 + c_1\beta + c_2\beta(\beta-1)) \\ + \alpha(c_3 + c_4\beta + c_5\beta(\beta-1)) \\ + \alpha(\alpha-1)(c_6 + a_7\beta + c_8\beta(\beta-1)), c_8 = 0,$$

と仮定できるとする。 c_0, \dots, c_7 は、未知数である。ここでは説明のため \mathbb{Q} 上で表記するが、実際のプログラムでは、 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ を利用して計算する。

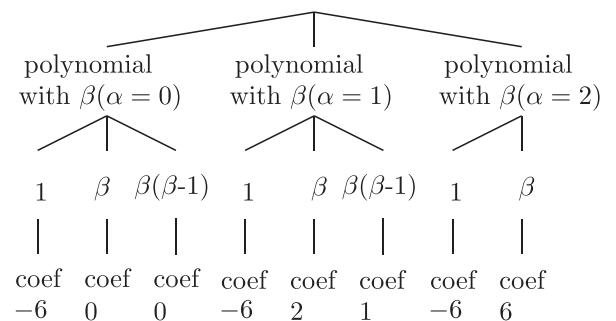
はじめに、 $\alpha = 0, \beta = 0, 1, 2$ における値を計算したとする。



次に、 $\alpha = 0$ においてNewton補間をする。

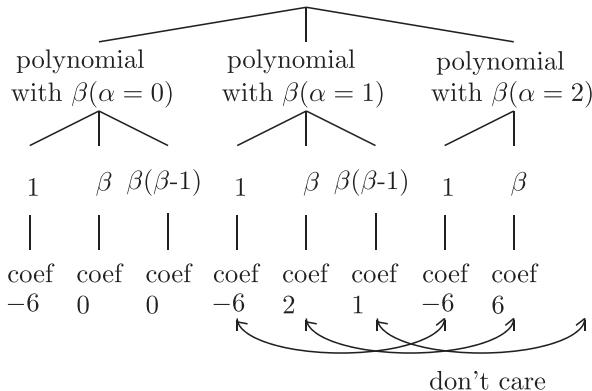


$\alpha = 1, \alpha = 2$ においても同様の計算をおこなう。

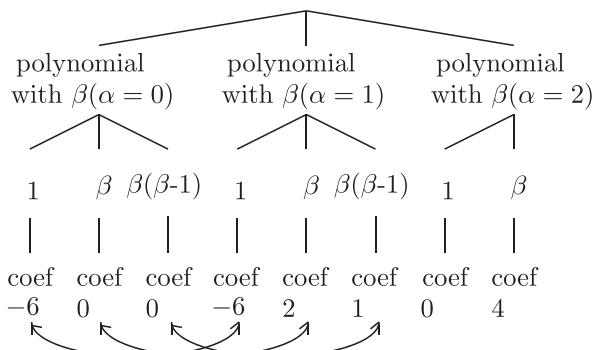


$\beta = 2$ の多項式は、あえて次数 1 で打ち切ってい
る。Newton 補間は、逐次補間であるため、このよう
な途中で打ち切ったものを入力としても正しい計算
ができる。

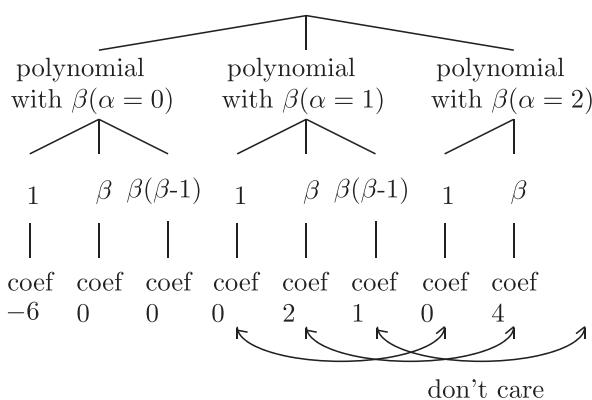
ここからは、多項式を入力として Newton 補間を
する。まず、 $\alpha = 2$ の多項式から $\alpha = 1$ の多項式の減
算をおこない、その結果を再度 $\alpha = 2$ に格納する。



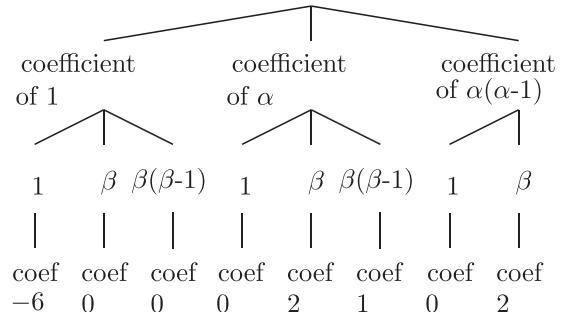
つぎに、 $\alpha = 1$ の多項式から $\alpha = 0$ の多項式の減
算をおこない、その結果を $\alpha = 1$ に格納する。



最後に $\alpha = 1$ の多項式から $\alpha = 0$ の多項式の減算
をおこなうと、多項式を入力とする Newton 補間が
完了する。



以上より、つぎの結果を得る。



3.3 終結式の行列式表現

$\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ における終結式の計算は、 $\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ における Euclid の互除法を用いて行う。しかし、上記の算法のためには、次数に対する上界と係数に対する上界を設定する必要があるため、終結式の行列式表現を必要とする。一つの方法として、Sylvester の表現があり、もう一つの方法として、関孝和と Bezout による表現がある。^[2]

3.4 高次の判別式計算における計算量評価

一般的の入力においての、我々の算法の計算量評価は、現在のところ明確でないため、終結式を用いた高次の判別式の計算を例に、上記の算法の計算量を調べる。各 1 変数の次数上界のみを考慮して、Newton 図形をつくり、その中の項の数を数えたものを (1) で示す。上記のような表を構成した後、Newton 図形をつくり、その中の項の数を数えたものを (2) で示す。(3)=(2)/(1) でサンプリング点を減少させる我々の工夫の効果を示す。次に、答えの項数を (4) に示す。答えの項数 (4) と、Newton 補間を使うために、余剰に必要とされるサンプリング点の数との比 (4)/(2) を (5) に示す。答えの項数 (4) の増加率を、(6) に示す。サンプリング点数 (2) の増加率を、(7) に示す。サンプリング点数の増加率の比 (7) の差を、(8) に示す。

| 次数 | (1) | (2) |
|----|---------------------|--------------|
| 9 | 900000000 | 1397825 |
| 10 | 23579476910 | 8929245 |
| 11 | 681091006464 | 57359796 |
| 12 | 21505924728444 | 370154260 |
| 13 | 737020860878848 | 2397753032 |
| 14 | 27246730957031250 | 15581713800 |
| 15 | 1080863910568919040 | 101534465047 |

| 次数 | (2)/(1)=(3) |
|----|----------------|
| 9 | 0.00155314 |
| 10 | 0.000378687 |
| 11 | 0.0000842175 |
| 12 | 0.0000172117 |
| 13 | 0.00000325330 |
| 14 | 0.00000057187 |
| 15 | 0.000000093938 |

| 次数 | (4) | (4)/(2)=(5) |
|----|-----------|-------------|
| 9 | 26059 | 0.0186425 |
| 10 | 133881 | 0.0149935 |
| 11 | 706799 | 0.0123222 |
| 12 | 3815311 | 0.0103074 |
| 13 | 20979619 | 0.0087497 |
| 14 | 117178725 | 0.0075203 |
| 15 | 663316190 | 0.0065329 |

| (4) の増加率の計算 | (6) |
|---------------------|--------|
| 133881/26059 | 5.1376 |
| 706799/133881 | 5.2793 |
| 3815311/706799 | 5.3980 |
| 20979619/3815311 | 5.4988 |
| 117178725/20979619 | 5.5854 |
| 663316190/117178725 | 5.6607 |

| (2) の増加率の計算 | (7) |
|--------------------------|--------|
| 8929245/1397825 | 6.3880 |
| 57359796/8929245 | 6.4238 |
| 370154260/57359796 | 6.4532 |
| 2397753032/370154260 | 6.4777 |
| 15581713800/2397753032 | 6.4986 |
| 101534465047/15581713800 | 6.5163 |

| (7) の差 | (8) |
|-----------------|--------|
| 6.4238 – 6.3880 | 0.0358 |
| 6.4532 – 6.4238 | 0.0294 |
| 6.4777 – 6.4532 | 0.0245 |
| 6.4986 – 6.4777 | 0.0209 |
| 6.5163 – 6.4986 | 0.0177 |

(8) より、高次の判別式計算における我々の算法の計算量は、 $O(\gamma^n)$ であると予想される。 γ の具体的な数値の決定は、より大きな次数において検討する必要があるため、ここでは省略する。

4 実装

4.1 剰余演算の高速化

$\mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ の体上での演算では、剰余が重要な役割を果たす。 $a, b, c < 2^{16}$, $p < 2^{16}$ の素数において、

$$d = a - b + c < 2^{32},$$

$f = d \% p$ の計算を考える。解 f を 0 から $p - 1$ の範囲に規格化する場合には、概ね調べた範囲では画期的な高速演算は期待できない。解を $f = d \% p$ を 0 から $2p - 1$ の範囲に規格化する場合には、高速な演算が考えられる。準同型定理が成り立つので、計算機の演算として困らない範囲に規格化すればよい。 $a, b, c < 2^{15}$, $p < 2^{15}$ の範囲に狭める。切り捨て演算で、 p の疑似逆元を準備する、

$$M = \frac{2^{32} - 1}{p}.$$

p を固定すると、 M は一定になる。

$$\begin{aligned} \tilde{f} &= (UI)d - (UI)p \\ (UI)((ULL)d - (ULL)M) &>> 32 \end{aligned}$$

ここで、UI は、unsigned int, ULL は、unsigned long long への型変換を表す。すると、 \tilde{f} は、 $\tilde{f} \leq 2p - 1 < 2^{32}$ が成立する。 M は、はじめに一度だけ計算を行えばよいため、この演算では除算を毎回必要としない。

4.2 M9000 の malloc についての注意

<http://docs.sun.com/app/docs/doc/820-1217/aewcv?l=ja&a=view> には、「libc にあるスレッドセーフな malloc() および free() には、内部ブロックを原因とする大きな同期オーバーヘッドがあります。libmtmalloc ライブラリでは、より高速のバージョンが提供されています。libmtmalloc ライブラリを使用するには、リンクに-lmtmalloc を使用してください」という注意が記載されている。

4.3 使用メモリの削減

14 次の判別式を計算するためには、M9000 の 1 ノード分 128 コア、メモリ 0.26TByte を用いて、4 時間 3 分 15 秒が必要であった。この数値から、15 次

の判別式を計算するためには、少なくとも、メモリ 0.26TByte 7=1.82TByte, 128 コアで、4 時間 4 分 7=28 時間 28 分が必要であると考えられる。一方で、スーパーコンピュータ共同研究制度では、64 ソケット (2 ノード、256 コア、メモリ 1.8TByte) という資源で、それを、2 週間利用できる。よって、メモリだけでの世界記録への挑戦は、プロジェクトとして不安定な要因が大きすぎる。そこで、ディスクを使うことにし、子問題 16 個に分割することにする。子問題 16 個の結果を統合することで、最終的な結果を得ることとする。1 子問題当たり 450GByte で済むようになり、1 ノードのメモリの半分で計算が可能となる。よって、1 ノードで同時に 2 解くことができる。2 ノードを借りられることから、同時に 4 問を解くことができるわけである。子問題の 1 問のサンプリング点は、すべて同じ 24532379397 である。総サンプリング点は、24532379397 16 = 392518070352 となる。392518070352/101534465047 = 3.8659 であるから、子問題に分割したことで、元の問題を直接扱うよりも、少なくとも計算時間は、4 倍になる。しかし、1.82TByte 必要な計算が、450GByte で済むようになることの利点のほうが大きい。さらに、64 コア毎に、1 問題を扱えばよいため、2 ノードが協調して計算することができない。1 問題当たりの総コア数が少ないので、並列計算として高い効率を達成できる。以上より、子問題に分割する方針を選んだ。

5 世界記録の詳細

5.1 問題の定式化

15 次の判別式を計算することは、

$$\begin{aligned} g(x) &= 1 - x^{15} + a_{14}x^{14} + \cdots + a_1x + a_0 \\ g'(x) &= 15x^{14} + 14a_{14}x^{13} + \cdots + a_1 \end{aligned}$$

$g(x), g'(x)$ の終結式を計算することと同値である。

5.2 子問題の計算時間

a_{14} に、 $-8, -7, \dots, 6, 7$ の値を代入して、それぞれの場合の終結式を富士通のスーパーコンピュータ M9000 を用いて計算した。

| 問題の種類 | 計算時間 |
|---------------|------------|
| $a_{14} = -8$ | 13 時間 40 分 |
| $a_{14} = -7$ | 13 時間 45 分 |
| $a_{14} = -6$ | 13 時間 45 分 |
| $a_{14} = -5$ | 13 時間 41 分 |
| $a_{14} = -4$ | 13 時間 44 分 |
| $a_{14} = -3$ | 13 時間 44 分 |
| $a_{14} = -2$ | 12 時間 40 分 |
| $a_{14} = -1$ | 12 時間 40 分 |
| $a_{14} = 0$ | 11 時間 45 分 |
| $a_{14} = 1$ | 12 時間 32 分 |
| $a_{14} = 2$ | 12 時間 43 分 |
| $a_{14} = 3$ | 13 時間 39 分 |
| $a_{14} = 4$ | 13 時間 44 分 |
| $a_{14} = 5$ | 13 時間 38 分 |
| $a_{14} = 6$ | 13 時間 46 分 |
| $a_{14} = 7$ | 13 時間 42 分 |

同時に、4 問を解くことができるため、大まかな子問題の計算時間は、14 時間 4=56 時間程度である。

5.3 子問題の結果の統合

CPU:Intel Xeon X7350*16, メモリ 128GByte の計算機の 1 コアを利用して、子問題の結果の統合をおこなった。16 個の子問題を、ハードディスクを利用して統合した。計算時間は、3 時間 23 分であった。以上より、ほぼ 60 時間を費やして、15 次の判別式を手に入れることができた。結果は、663316190 項であった。

参考文献

- [1] A.J. Goldstein, R.L. Graham, A Hadamard-type bound on the coefficient of a determinant of polynomials, SIAM Review 16, 394-395, (1974).
- [2] 高木貞治, 代数学講義(改訂新版), 共立出版, 東京, 1965.
- [3] 木村欣司, 多項式スペクトル分解に付随するグレブナ基底の change of ordering について, 数式処理 J.JSSAC, Vol. 13, No. 2, pp.35-45, (2007).

格子ボルツマン法を用いた貯留岩の空隙ネットワーク内における流体残留挙動の解明

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、貯留層及びその上部の地層における炭酸ガスの残留ガストラップ挙動を解明するため、ベレア砂岩の空隙構造モデルを構築し、それに対して格子ボルツマン法による水-超臨界CO₂系での二相流シミュレーションを実施した。ここでは、シミュレーションの結果、キャピラリー数が小さくなるにしたがって残留CO₂飽和率が増加すること、浸透率が大きいモデルの方が、浸透率が小さいモデルよりも残留CO₂飽和率が大きくなることを示す。

1 はじめに

炭酸ガスの中貯留は、これまで石油鉱業で培ってきた技術をそのまま適用でき、直ぐにでも実行できる即効性のある炭酸ガス排出量の削減方法である。また、我が国においては火力発電所など大規模排出源の近くの沿岸域にも広く分布している層位トラップ構造への地中貯留が主になるものと考えられる¹⁾。

圧入された地層中の炭酸ガスは、圧入圧力と浮力により圧入対象層の空隙を満たす地層水を押し出しながら移動していく。この時、炭酸ガスは地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が、層位トラップ構造は帽岩のようななしきりとしたシール構造を有しないため、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評価ならびに漏洩に対する安全性評価を実施することが重要である。

そこで、本研究ではベレア砂岩の空隙構造モデルに対して水-超臨界CO₂系での排水過程および浸潤過程の二相流格子ボルツマン法シミュレーションを実施して空隙ネットワーク内におけるCO₂の残留挙動について調べるとともに、浸潤過程においてキャピラリー数を変えたシミュレーションを実施して超臨界CO₂の残留飽和率のキャピラリー数依存性について検討した。なお、本研究で設定したキャピラリー数では流

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。

2 二相流格子ボルツマン法

本研究では、Grunauら(1993)²⁾により提案された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色粒子の分布関数を $f_i^r(\mathbf{x}, t)$ 、青色粒子の分布関数を $f_i^b(\mathbf{x}, t)$ として、二相流格子ボルツマン方程式を次のように表す。

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

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、重力を無視する場合、式(2.1)の衝突項 $\Omega_i^k(\mathbf{x}, t)$ は次式で表わされる。

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

ここに、右辺第1項の $(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t))^A$ 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 $(\Omega_i^k(\mathbf{x}, t))^B$ 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項目としては体積力を表現する項を追加すればよい。

緩和過程項には格子BGKモデル^{3)~5)}を適用し、

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

とした。ここに、 τ_k は单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、

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

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 ベレア砂岩の空隙構造モデルの構築

まず、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）に対して撮影された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た。この際、CTスキャナ画像の画素サイズである5.08μmの1/2以下の空隙は画像上で空隙と認識され難いため、各供試体の孔径分布測定結果に基づいてモデルの空隙率

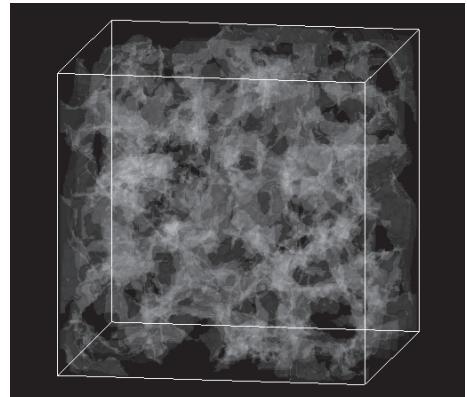


図1 Sample-1の空隙構造モデル。白線で示した立方体領域内の白い部分が空隙、

を3μm以下の孔径の空隙を除いた空隙率にあわせた。次に、このようにして得られた各スライス断面の2値化画像を積み重ねて3次元空隙構造モデルを構築した。なお、マイクロフォーカスX線CTスキャナ画像は、供試体中央部の直径5.2mm、厚さ2.264mmの円柱形領域に対し、画素サイズ5.08μm、スライス厚さ8μmで連続する283断面の画像が撮影されている。構築した空隙構造モデルの例を図1に示す。

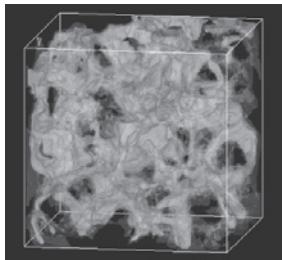
4 格子ボルツマン法によるCO₂の残留挙動のシミュレーション

空隙構造モデルの寸法は、128×128×128(pixel)でこの領域に対して、画素の1/2の幅でLBM格子を区切った256×256×256(lattice)の格子空間でシミュレーションを実施した。

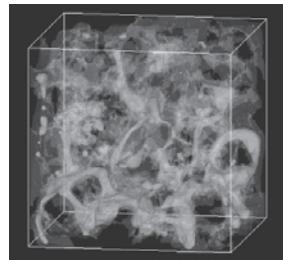
キャピラリー数は、

$$Ca = \frac{\mu U}{\gamma} \quad (9)$$

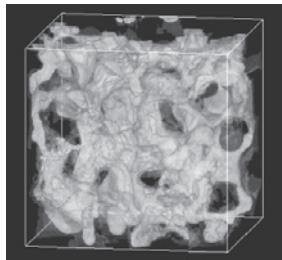
で与えられる。ここで、 U は水のダルシ一流速、 μ は水の粘性、 γ は界面張力である。式(9)からわかるように、キャピラリー数は粘性と界面張力の比を表わし、キャピラリー数が小さくなるほど界面張力が支配的な流れになることを示している。キャピラリー数を 3.1×10^{-3} 、 1.6×10^{-3} 、 6.2×10^{-4} に設定した。具体的には、 μ および γ は流体が決まれば決まるので、シミュレーション時の圧力勾配を変えて U を変化させることでキャピラリー数を変化させた。界面張力及び水の



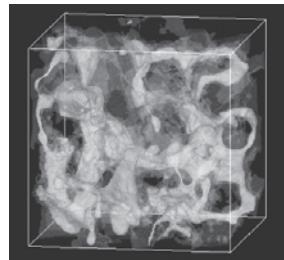
(a) 0 step (S_{wir})



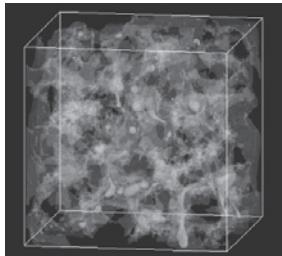
(b) 20,000 steps



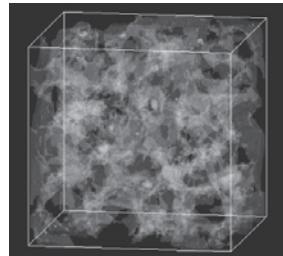
(a) 0 step (S_{wir})



(b) 20,000 steps

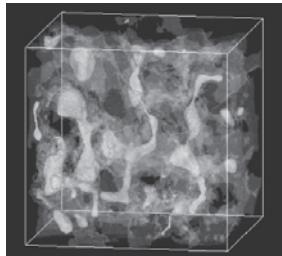


(c) 50,000 steps

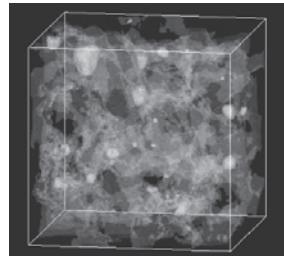


(d) 200,000 steps (S_{gr})

図2 浸潤過程におけるCO₂残留状態の変化。(Sample-1,
 $Ca=3.1\times 10^{-3}$)

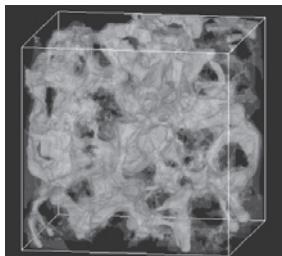


(c) 50,000 steps

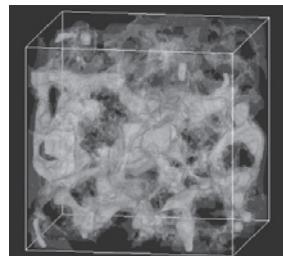


(d) 200,000 steps (S_{gr})

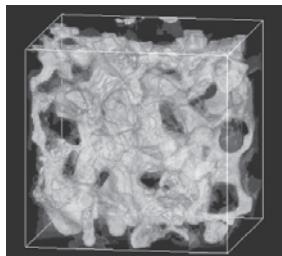
図4 浸潤過程におけるCO₂残留状態の変化。(Sample-2,
 $Ca=3.1\times 10^{-3}$)



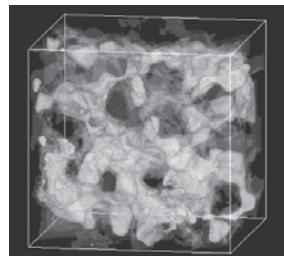
(a) 0 step (S_{wir})



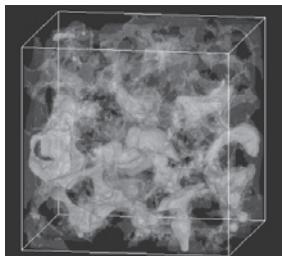
(b) 20,000 steps



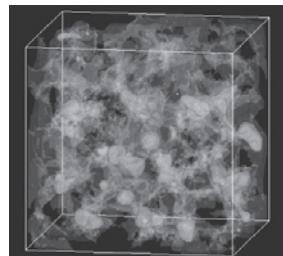
(a) 0 step (S_{wir})



(b) 20,000 steps

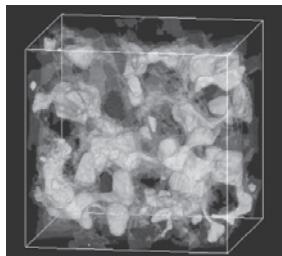


(c) 50,000 steps

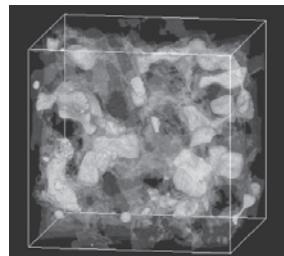


(d) 200,000 steps (S_{gr})

図3 浸潤過程におけるCO₂残留状態の変化。(Sample-1,
 $Ca=6.2\times 10^{-4}$)



(c) 50,000 steps



(d) 200,000 steps (S_{gr})

図5 浸潤過程におけるCO₂残留状態の変化。(Sample-2,
 $Ca=6.2\times 10^{-4}$)

粘性の値を代入してダルシーフlow速を計算すると、キャビラリー数が 3.1×10^{-3} , 1.6×10^{-3} , 6.2×10^{-4} に対してそれぞれ 15.4mm/s , 7.9mm/s , 3.1mm/s となっている。また、空隙壁面における水の接触角を 30 度になるように濡れ性を調整した。

Sample-1 と Sample-2 それぞれに対してキャビラリー数が 3.1×10^{-3} と 6.2×10^{-4} の場合の浸

潤過程におけるCO₂の残留状態の変化を図 2～図 5 に示す。これらの図では、緑色が水を、橙色がCO₂を表わしている。また、各キャビラリー数でシミュレーションを行った時の初期水飽和率 (S_{wir}) および残留CO₂飽和率 (S_{gr}) を表 1 に示す。

表 1 に示すとおり、どちらの空隙構造モデル

表1 各キャピラリー数における初期水飽和率 (S_{wir}) および残留CO₂飽和率 (S_{gr})

| Ca | Sample-1 | | Sample-2 | |
|----------------------|---------------|--------------|---------------|--------------|
| | S_{wir} (%) | S_{gr} (%) | S_{wir} (%) | S_{gr} (%) |
| 3.1×10^{-3} | 67.7 | 0.5 | 63.4 | 1.3 |
| 1.6×10^{-3} | 68.1 | 1.6 | 63.8 | 5.1 |
| 6.2×10^{-4} | 69.0 | 4.8 | 64.5 | 9.6 |

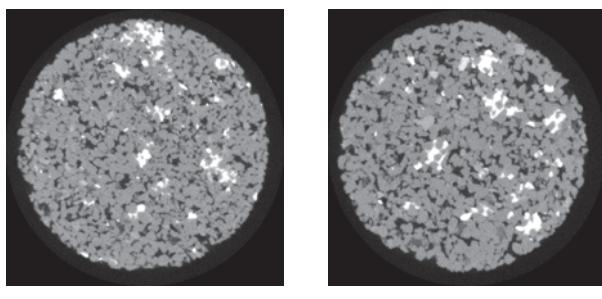


図6 本研究に用いたベレア砂岩のマイクロフォーカスX線CTスキャナ画像

もキャピラリー数が小さくなるにしたがって残留CO₂飽和率は増加している。これは、キャピラリー数が小さくなるにしたがい界面張力の影響が相対的に強くなり、図2～図5に示したように、空隙が狭まったスロート部をCO₂が通過しにくくなり、空隙内に残留するCO₂の量が増加するものと考えられる。また、浸透率が大きいSample-2の方が、浸透率が小さいSample-1よりも残留CO₂飽和率が大きいことがわかる。これは、図6に示したマイクロフォーカスX線CTスキャナ画像からも判断できるように、浸透率が大きいSample-2は浸透率の小さいSample-1に比べて空隙およびスロート部の断面が大きいものが多いと考えられ、図5で顕著に見られるような空隙をまたいだネットワーク型の残留形態を取り易いためと考えられる。

5 おわりに

浸透率レンジが300mdと900mdのベレア砂岩の空隙構造モデルを構築し、それぞれのモデルに対して格子ボルツマン法を用いて水・超臨界CO₂系での排水過程および浸潤過程のシミュレーションを実施した。キャピラリー数を変えて浸潤過程のシミュレーションを実施することで、超臨界CO₂の空隙ネットワーク内での残留挙動

ならびに残留CO₂飽和率のキャピラリー数依存性について検討した。

その結果、どちらの空隙構造モデルでもキャピラリー数が小さくなるにしたがって残留CO₂飽和率が増加することがわかった。また、浸透率が大きい空隙モデルの方が、浸透率が小さい空隙構造モデルよりも残留CO₂飽和率が大きくなることがわかった。今後、層位トラップ構造の空隙構造モデルに対して同様に空隙ネットワーク内でのCO₂の残留挙動について検討していく予定である。

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20年度スーパーコンピュータ共同研究制度（大規模計算支援枠）の支援を受けて実施した。また、本研究で用いたベレア砂岩のマイクロフォーカスX線CTスキャナ画像およびベレア砂岩のコア分析データは、石油資源開発株式会社より提供を受けた。記して謝意を表す。

参考文献

- 1) 経済産業省産業技術環境局 環境政策課地球環境技術室：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/labochoryu/ccsws/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) D. H. Rothman and S. Zaleski : Lattice-gas cellular automata, Cambridge University Press (1997)
- 4) S. Chen and G. D. Doolen : Lattice Boltzmann method for fluid flows, Annu. Rev. Fluid Mech., 30, 329-364, (1998)
- 5) Wolf-Gladrow : Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models, LNM 1725, Springer (2000)

分子動力学法によるシリカナノチューブの安定性と力学的特性に関する研究

Caetano R. Miranda

京都大学大学院工学研究科社会基盤工学専攻

1 はじめに

近年ナノテクノロジーの発展により、ナノ材料デザインへの関心が飛躍的に高まってきている¹⁾。特に、 SiO_2 酸化物（シリカ）は、その豊富な存在量や安定性、幅広い応用可能性から注目を集めている。しかし、ナノスケールでの化学現象の実験的研究は未だ難しく、シリカナノ材料について、十分な研究がなされているとは言い難い。

一方で、計算機を使った分子シミュレーションは、ミクロな構造の挙動を比較的容易に追跡することができ、ナノスケールでの研究に非常に適している²⁾。本研究では、他のナノ材料製造時のリアクターとしての利用が期待される³⁾シリカナノチューブに対して、分子動力学⁴⁾法を用いて解析を行った。シリカナノチューブについては、これまで幾つかの計算化学的研究が行われており、その安定性や力学特性が報告されている^{5), 6)}。今回は、それらの結果との比較を交えながら、TangneyとScandolo (2002)⁷⁾によって提案された、第一原理計算によってフィッティングされた高精度のポテンシャル⁸⁾を用いて、シリカナノチューブの安定性及び力学特性の検討を行った。

2 シミュレーション手法

2.1 計算コード

近年、計算機の計算能力の著しい上昇により、第一原理計算⁸⁾が広く適用される様になってきた。しかし、未だ、大規模または長時間のシミュレーションを行うには、第一原理計算は計算コストが高すぎる。そこで、何かしらの信頼性のある代替案が必要となる。本研究では、電子スピンの分極効果を扱うことのできる古典MDのコードを使

用し、ポテンシャルに関しては、第一原理計算に基づいてパラメタライズされた、シリカの原子間ポテンシャルを採用した⁹⁾。このポテンシャルは、実験及び第一原理計算の結果を良く再現できることが報告されている^{9), 10)}。

2.2 計算の流れ

本研究において考察の対象としているシリカナノチューブを Fig. 1 に示す。Fig. 1 は例として SiO_2 分子 6 個によって構成されるユニット (Fig. 1(a)) の重なりによって作られているナノチューブを示す。ここで、ナノチューブにおいて Si と O により構成される層をリングと呼び、それらを橋渡している O により構成される層をブリッジと呼ぶことにする (Fig. 1(b))。1 つのユニットは 1 つのリング層と 1 つのブリッジ層から構成されている。さらに、1 つのユニット内に n 個の SiO_2 分子を持つチューブを n-fold チューブと呼ぶ。n の値が大きいほど、チューブの半径は大きい。

まず、初期モデルを作成した。安定性と力学的特性の計算に関して、それぞれ 3~24、28、30、35、36 個の SiO_2 分子を持つユニットを 6 つ重ね、これらの構造をナノチューブの初期モデルとした (Fig. 2)。また、初期モデル作成に用いた原子間の距離と角度は、6-fold シリカナノチューブの第一原理計算の結果を参考に決めた。

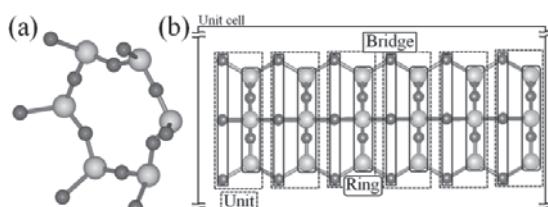


Fig. 1 (a) 6-fold SiO_2 unit (b) Longitudinal view of 6-fold silica nanotube

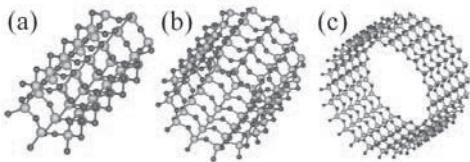


Fig. 2 6-layer silica nanotubes with different radii (a) 6-fold (b) 12-fold (c) 24-fold

それぞれの初期モデルに関して、以下の様な一連の計算を行い、最適化されたナノチューブの構造を得た。最初に、最急降下法によって最適化した。その後、エネルギーが極小値に留まることを避けるため、NVTで300 Kまで加熱し、さらにNVTで100 Kに冷却した。そして再び、最急降下法の計算を行い、力学特性を検討する為のナノチューブの幾何学的な分子構造を得た。これらの構造を用いて以下に示すようなシリカナノチューブが有する各種物理量の計算を行った。なお、ここまで計算は、周期境界条件を用いて、無限の長さのチューブを想定して行われた。

3 結果及び考察

最初にシリカナノチューブに対して、リングの間隔と半径に対するエネルギー依存性を調べた。その結果を用いて、ナノチューブのヤング率とボアソン比を求めた。

3.1 安定性

異なった半径のナノチューブそれぞれについて、長さ方向のセルの大きさ、つまり、リングの間隔を変えながら最適化を行い、それに伴うエネルギーの変化を調べた。その結果、リング間隔に対するエネルギーの値はFig. 3に示すように放物線でよく近似できることが解った。Fig. 3に示すのは、6-foldチューブの場合である。この結果からシリカナノチューブの半径に依存してエネルギーを最少にする最適なリング間隔が存在することが解る。

これと同じ手順をすべての半径のナノチューブに対して行い、チューブの半径に対する最小エネルギーが得られた (Fig. 4)。その結果シリカで構成されるナノチューブにおいては、半径として4、5そして6-foldの場合が最も安定であり、半径が増加するに従って、エネルギーは増大する。この

傾向は Linnolahti ら (2006)^⑥によって行われた第一原理計算の結果に一致する。

3.2 ヤング率

エネルギーと力の関係を用いることで、先述の結果 (Fig. 3) から、シリカナノチューブのヤング率を求める事ができる¹¹⁾。

チューブの伸長 Hl (Δl) を伴う力は、次のように、ポテンシャルエネルギーの I に対する 1 階微分により求められる。

$$F = -\frac{\partial U}{\partial l} \quad (1)$$

また、ヤング率は以下の式で与えられる。

$$Y = \frac{F/A}{\Delta l/l_0} \quad (2)$$

ここで、 l_0 は最小エネルギーを持つ、最適化されたナノチューブの長さ、 A はその断面積である。

最小点の周りでは、ポテンシャルエネルギー U は以下のように表される。

$$U = U_0 + k(\Delta l)^2 \quad (3)$$

ここで、 U_0 は最小のポテンシャルエネルギー、 k は以下のように与えられる定数である。

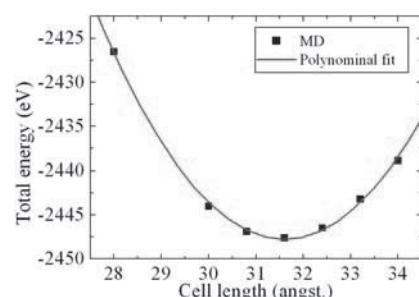


Fig. 3 The effect of the longitudinal length on the energy for 6-fold silica nanotube

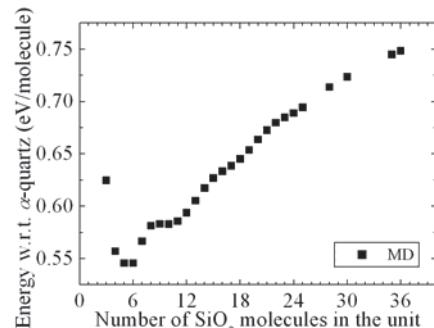


Fig. 4 The effect of the radius of the ring on the energy

$$k = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial l^2} \Big|_0 \quad (4)$$

これらから、ヤング率が次式のように得られる¹¹⁾。

$$\nu = \left(\frac{l}{A} \frac{\partial^2 U}{\partial l^2} \right)_0 \quad (5)$$

本研究では、先のプロット (Fig. 3) は全エネルギーのものであるが、最急降下法は 0 K の下でなされたので、原子の速度は 0 であり、その全エネルギーはボテンシャルエネルギー U に相当する。さらに、ナノチューブに生じた歪は非常に小さいので、それは弾性変形とみなすことができる。

先の結果 (Fig. 3) から、エネルギーの長さに対する 2 階微分が得られる。 ν については 6 層から作られたリラックスしたチューブの軸方向の全体の長さとした。また、断面積 A についてはリラックスしたナノチューブのすべてのブリッジ層の面積の平均とした。これらの値からヤング率を計算した。この手順をすべての半径のナノチューブに対して繰り返し、チューブの半径に対するヤング率を得ることができた (Fig. 5)。ヤング率は半径の増加とともに減少することが確認された。また、十分に大きい半径のチューブではヤング率は収束することが予想される。Fig. 5 には Muralidharan ら (2007)⁵⁾ の結果もプロットしているが、今回の結果は傾向、絶対値ともにそれと一致している。

3.3 ポアソン比

ポアソン比 ν は以下のように定義される¹¹⁾。

$$\nu = \frac{\text{lateral strain}}{\text{longitudinal strain}} = -\frac{\Delta r/r_0}{\Delta l/l_0}$$

$$= -\frac{(r_s - r_0)/r_0}{\varepsilon} \quad (6)$$

ここで、軸歪 $\varepsilon = \Delta l/l_0 = (l_s - l_0)/l_0$ 、 r_s と l_s は歪んでいるチューブの半径と長さ、 r_0 と l_0 は歪んでいないチューブの半径と長さである。

先述の結果 (Fig. 3) から、すべての半径のチューブに対して、エネルギー最小点での半径と、6 層から作られたチューブの軸方向の全体の長さが得られ、これを r_0 、 l_0 とした。ここで、さらに、チューブを 4% 伸長した状態で新たな計算を行い、この結果から、 r_s 、 l_s を得た。なお、半径の計算については、各ブリッジ、リング層の Si、O 原子そ

れぞれについて、層の重心からの距離を計算し、それをすべての層にわたって平均した。

これらの値を用いて、すべての半径のチューブのポアソン比が得られ、それらをチューブの半径に対してプロットした (Fig. 6)。図中の 3 つのプロットは、それぞれ、リング内の Si、O、そしてブリッジ内の O に対して (6) 式で定義されたポアソン比を示している。

この結果から、24-fold 程度までの半径を持つシリカナノチューブは、リング内の原子については負の、ブリッジの原子については正のポアソン比をとることが確認された。これは、チューブが引っ張られた場合、Fig. 7 に示すような変形をしているからだと考えられる。

ちなみに、バルクのシリカが負のポアソン比を持つことは以前に Yeganeh-Haeri ら (1992)¹²⁾ によって報告されている。Fig. 6 には彼らの測定によるバルクシリカのポアソン比 (-0.163) も点線で示してあるが、この値と今回のシリカナノチューブのリング内原子に対するポアソン比の計算値は良く一致している。

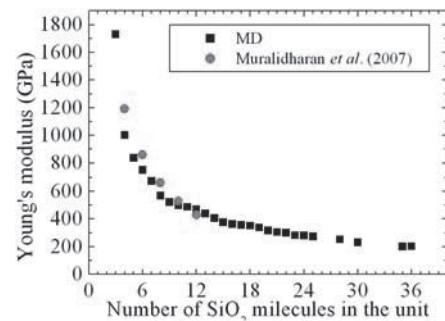


Fig. 5 The relation of the ring size to Young's modulus

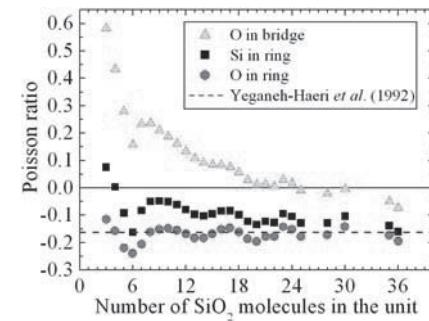


Fig. 6 The relation of the ring size to Poisson ratio (Dash-line means the Poisson ratio by Yeganeh-Haeri et al. for bulk silica.)

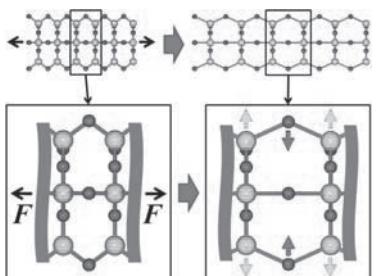


Fig. 7 Axial deformation of silica nanotube

4 おわりに

本研究により、シリカナノチューブの特性について、以下の様な結論が得られた。

- (1) Tangney と Scandolo^⑦によって提案されたポテンシャルを用いてシリカ分子で構成されるシリカナノチューブの構造を決定した。
 - (2) シリカナノチューブのエネルギーは半径によって変化し、4、5、6-fold のシリカナノチューブが最もエネルギーが低く、安定である。
 - (3) シリカナノチューブのヤング率は半径の増加とともに減少し、十分大きな半径では収束することが予想される。
 - (4) シリカナノチューブのポアソン比は、着目する原子によって挙動が変わり、リング内の原子に関しては、負の値をとり得る。
- 参考文献**
- 1) Z. L. Wang and J. Song, "Piezoelectric nanogenerators based on zinc oxide nanowire arrays", *Science*, Vol.312, No.5771, pp.242-246 (2006)
 - 2) J. L. Gole and Z. L. Wang, "SnO_x nanocrystallites supported by silica nanostructures", *Nano Letters*, Vol.1, No.8, pp.449-451 (2001)
 - 3) H. Rafii-Tabar, "Computational physics of carbon nanotubes", Cambridge University Press (2008)
 - 4) S. Okazaki, "Computer simulation no kiso", Kagakudojin (2000)
 - 5) K. Muralidharan, J. Torras and S. B. Trickey, "Energetics and mechanical properties of silica nanotubes", *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol.19, No.38, 386238 (2007)
 - 6) M. Linnolahti, N. M. Kunnunen, and T. A. Pakkanen, "Structural preferences of single-walled silica nanostructures: nanospheres and chemically stable nanotubes", *Chemistry a European Journal*, Vol.12, No.1, pp.218-224 (2006)
 - 7) P. Tangney and S. Scandolo, "An ab initio parametrized interatomic force field for silica", *Journal of Chemical Physics*, Vol.117, No.19, pp.8898-8904 (2002)
 - 8) R. Car and M. Parrinello, "Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory", *Physical Review Letters*, Vol.55, No.22, pp.2471-2474 (1985)
 - 9) Y. Liang, C. R. Miranda, and Sandro Scandolo, "Mechanical strength and coordination defects in compressed silica glass: molecular dynamics simulations", *Physical Review B*, Vol.75, No.2, 024205 (2007)
 - 10) Y. Liang, C. R. Miranda, and Sandro Scandolo, "Infrared and Raman spectra of silica polymorphs from an ab initio parametrized polarizable force field", *Journal of Chemical Physics*, Vol.125, No.19, 194524 (2006)
 - 11) S. Gupta, K. Dharamvir and V. K. Jindal, "Elastic moduli of single-walled carbon nanotubes and their ropes", *Physical Review B*, Vol.72, No.16, 165428 (2005)
 - 12) A. Yeganeh-Haeri, D. J. Weidner, J. B. Parise, "Elasticity of \square -cristobalite: a silicon dioxide with a negative Poisson's ratio", *Science*, Vol.257, No.5070, pp.650-652 (1992)

Thin SMP クラスタ運転状況 (2009/4 ~ 2009/9)

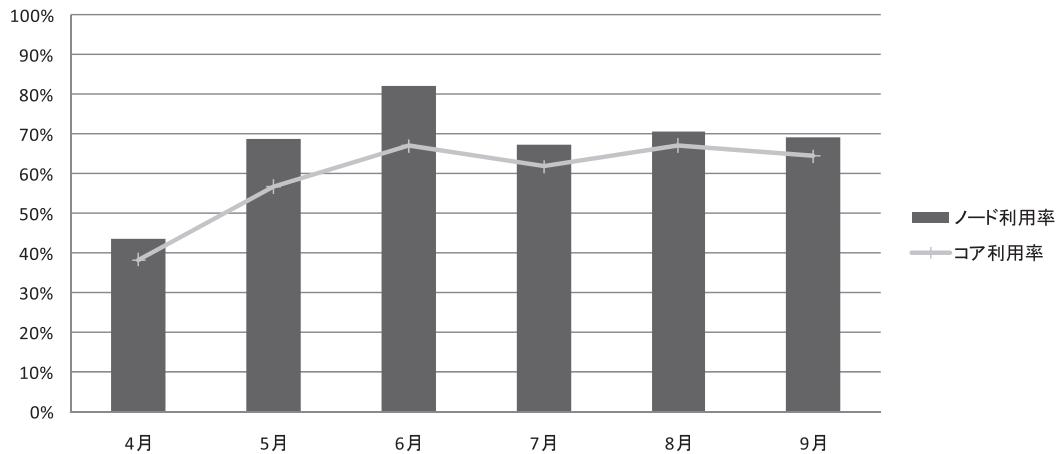
1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

| 保守作業に伴うサービス休止 | | | システムダウン障害発生状況 | | |
|-----------------|------------------|---------|------------------|------------------|----------|
| 保守開始日時 | サービス再開日時 | 保守時間[h] | 障害発生日時 | サービス再開日時 | ダウン時間[h] |
| 2009/04/27 9:00 | 2009/04/27 15:15 | 6.3 | 2009/04/15 20:00 | 2009/04/16 14:20 | 18.3 |
| 2009/07/07 9:00 | 2009/07/08 9:00 | 24.0 | 2009/04/21 8:00 | 2009/04/21 14:00 | 6.0 |
| 2009/08/31 9:00 | 2009/08/31 17:45 | 8.8 | 2009/05/24 2:00 | 2009/05/25 18:05 | 40.1 |
| | | | 2009/07/28 21:10 | 2009/07/29 1:10 | 4.0 |
| | | | 2009/08/19 20:30 | 2009/08/20 2:10 | 5.7 |
| | | | 2009/08/24 17:10 | 2009/08/25 0:45 | 7.6 |
| | | | 2009/09/27 9:00 | 2009/09/27 15:45 | 6.8 |

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 | 689 | 14,464 | 207,347 | 1,233,027 | 1,025,497 | 327.7 | 42% | 8,080 | 32,689 | 22,481 | 38.9 |
| 5月 | 704 | 18,464 | 341,199 | 2,365,689 | 1,980,606 | 373.0 | 68% | 11,615 | 50,921 | 95,766 | 40.0 |
| 6月 | 720 | 51,241 | 332,238 | 2,436,202 | 2,094,324 | 373.0 | 82% | 13,563 | 64,775 | 54,666 | 40.0 |
| 7月 | 716 | 31,827 | 235,244 | 2,040,686 | 1,764,161 | 369.3 | 67% | 12,715 | 57,252 | 75,868 | 39.7 |
| 8月 | 723 | 48,912 | 372,532 | 3,014,100 | 2,446,396 | 369.6 | 70% | 11,645 | 57,033 | 68,909 | 39.7 |
| 9月 | 713 | 30,165 | 211,424 | 2,313,089 | 2,013,479 | 371.0 | 69% | 13,139 | 51,195 | 67,964 | 39.8 |
| 計 | 4,266 | 195,073 | 1,699,983 | 13,402,792 | 11,324,463 | 363.9 | 66% | 70,757 | 313,865 | 385,653 | 39.7 |

ノード利用率(棒グラフ)+コア利用率(折れ線グラフ)



※ 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)

※ 平均ノード稼動数 = 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 (2009/4 ~ 2009/9)

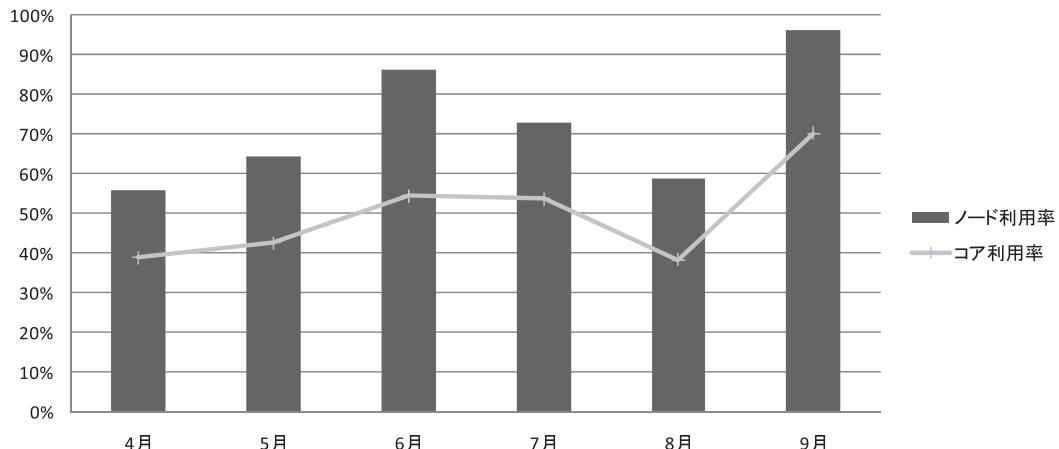
1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

| 保守作業に伴うサービス休止 | | | システムダウン障害発生状況 | | |
|-----------------|------------------|---------|------------------|------------------|----------|
| 保守開始日時 | サービス再開日時 | 保守時間[h] | 障害発生日時 | サービス再開日時 | ダウン時間[h] |
| 2009/04/27 9:00 | 2009/04/27 15:15 | 6.3 | 2009/04/15 20:00 | 2009/04/16 14:20 | 18.3 |
| 2009/07/07 9:00 | 2009/07/08 9:00 | 24.0 | 2009/04/21 8:00 | 2009/04/21 14:00 | 6.0 |
| 2009/08/31 9:00 | 2009/08/31 17:45 | 8.8 | 2009/05/24 2:00 | 2009/05/25 18:05 | 40.1 |
| | | | 2009/07/28 21:10 | 2009/07/29 1:10 | 4.0 |
| | | | 2009/08/19 20:30 | 2009/08/20 2:10 | 5.7 |
| | | | 2009/08/24 17:10 | 2009/08/25 0:45 | 7.6 |
| | | | 2009/09/27 9:00 | 2009/09/27 15:45 | 6.8 |

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 | 689 | 573 | 6,669 | 187,750 | 123,453 | 6.8 | 50% | 2,318 | 20,574 | 1,684 | 1.0 |
| 5月 | 704 | 1,097 | 8,535 | 243,285 | 233,829 | 7.0 | 59% | 2,030 | 14,657 | 1,912 | 1.0 |
| 6月 | 720 | 3,481 | 103,846 | 298,687 | 292,435 | 7.0 | 84% | 2,412 | 22,129 | 561 | 1.0 |
| 7月 | 716 | 7,705 | 31,461 | 299,304 | 289,764 | 7.0 | 69% | 2,038 | 17,728 | 4,966 | 1.0 |
| 8月 | 723 | 17,105 | 38,949 | 215,810 | 216,562 | 7.0 | 53% | 2,022 | 18,525 | 14,423 | 1.0 |
| 9月 | 713 | 5,548 | 42,478 | 369,970 | 380,395 | 7.0 | 96% | 2,914 | 23,939 | 2,183 | 1.0 |
| 計 | 4,266 | 35,509 | 231,939 | 1,614,806 | 1,536,438 | 6.9 | 68% | 13,734 | 117,552 | 25,729 | 1.0 |

ノード利用率(棒グラフ) + コア利用率(折れ線グラフ)



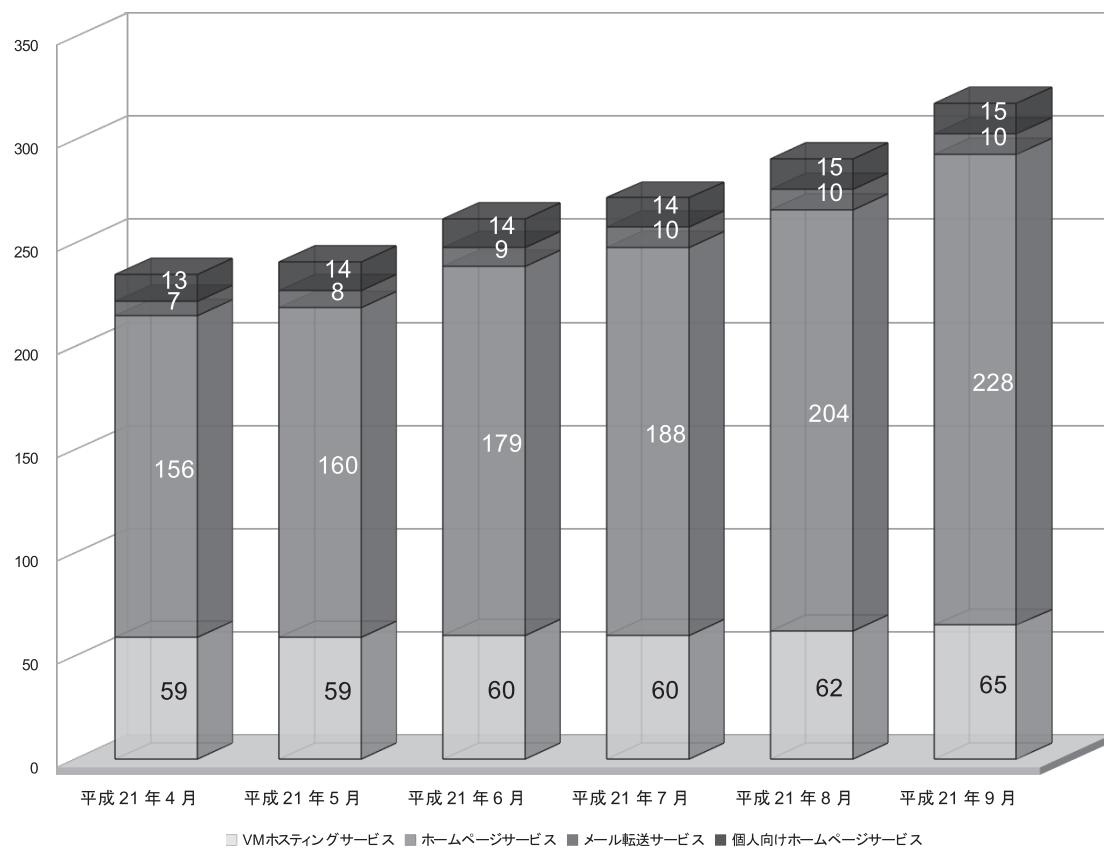
※ 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)

※ 平均ノード稼動数 = 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 21 年 4 月から 9 月)

大型計算機システム利用承認件数について

平成 21 年 9 月末現在大型計算機システムの利用件数は、2,591 件となっています。

センター利用による研究成果

—平成 20 年度計算機利用結果報告書から—

【320 物理学】

1. Shigetoshi Sota and Takami Tohyama : Low-temperature density matrix renormalization group using regulated polynomial expansion : Physical Review B, Vol.78, No.11, pp. 113101-1 - 113101-4, 2008
2. Takami Tohyama and Hiroaki Matsueda : Effect of Electron-Phonon Interaction on Optical Properties in One-Dimensional Mott Insulators : Progress of Theoretical Physics Supplement ,No.176, pp.165-181, 2008
3. Satoshi Higashitaniguchi, Makoto Seto, Shinji Kitao, Yasuhiro Kobayashi, Makina Saito, Ryo Masuda, Takaya Mitsui, Yoshitaka Yoda, Yoichi Kamihara, Masahiro Hirano, and Hideo Hosono : Iron-Specific Phonon Density of States in the Superconductors LaFeAsO_{1-x}F_x and La_{1-x}CaxFePO : Phys. Rev. B, Vol.78, pp. 174507-1 - 174507-5 , 2008
4. M. TANAKA and S. YANASE : The structure and dynamics of coherent vortex tubes in the zero-absolute-vorticity state : Journal of Turbulence, Vol.9, No.44, pp.1-32, 2008

【330 地球科学】

5. Palikone Thalongsengchanh, Shigenori Otsuka, and Shigeo Yoden : A downscale experiment on numerical weather prediction in Indochina region with a mesoscale model : 京都大学防災研究所年報, Vol.51, No.B, pp.457 – 464, 2008
6. 大塚成徳・余田成男 : 热帶対流圏中層に見られる湿潤層状構造の時空間分布に関する数値実験 : 日本気象学会2008年度春季大会講演予稿集, Vol.93, pp.245-245, 2008
7. Palikone Thalongsengchanh, Shigenori Otsuka, and Shigeo Yoden : A down-scale

experiment on numerical weather prediction in Indochina region (Lao PDR) : AOGS 2008, pp.39-39, 2008

8. Shigeo Yoden, Shigenori Otsuka, Palikone Thalongsengchanh, and Tri W. Hadi : An experiment on mesoscale ensemble forecasts with a lagged average method over Indochina region : AOGS 2008, pp.44-44, 2008
9. Shigenori Otsuka and Shigeo Yoden : Numerical experiments on thin moist layers in the tropical mid-troposphere : AOGS 2008, pp.81-81, 2008
10. Shigenori Otsuka and Shigeo Yoden : Numerical experiments on formation processes of thin moist layers in the mid-troposphere over a tropical ocean : The second international workshop on prevention and mitigation of meteorological disasters in Southeast Asia, pp.71-71, 2009

【340 化学】

11. K. Fujimoto, J. Hasegawa, and H. Nakatsuji : Origin of color tuning in human red, green, and blue cone visual pigments: SAC-CI and QM/MM study : Chem. Phys. Letters, Vol.462, No.4-6, pp.318-320, 2008
12. J. Hasegawa, K. Fujimoto, N. Nakatani, H. Nakatsuji : Spectral Tuning Mechanism in Photofunctional Proteins: A SAC-CI Theoretical Study : Frontiers of Computational Science 2008 (Ed., by Y. Kaneda, M. Sasai, and K. Tachibana), pp.1-8, 2008
13. Y. Kiyota, J. Hasegawa, K. Fujimoto, B. Swerts, and H. Nakatsuji : A multi-core QM/MM approach for the geometry optimization of chromophore aggregate in proteins, : J. Comp. Chem., In press. 2009
14. 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, in press, 2009
- 【350 生物学】**
15. Suzuki, S. and M. Motokawa : Geographic variation of cranial morphology of the Japanese weasel (*Mustela itatsi*) : Book of abstract, 26th Mustelid Colloquium, pp.58-58, 2008
 16. 鈴木聰・本川雅治：島嶼におけるシベリアイタチの頭骨形態の変異：2008年度日本哺乳類学会山口大会プログラム・講演要旨集, pp.146-146, 2008
 17. Suzuki, S. and M. Motokawa : Inter- and intraspecific cranial variation of two *Mustela* species : Book of abstract, The 2nd International Symposium of the Biodiversity and Evolution Global COE Project, pp.101-101, 2008
- 【400 応用物理学・工学基礎】**
18. Makoto Okano, Noritsugu Yamamoto, and Kazuhiro Komori : Fabrication and Analysis of GaAs Triangular Two-Dimensional Photonic Crystals on Silicon Wafers : Japanese Journal of Applied Physics, Vol.47, No.9, pp.7453 –7458, 2008
- 【410 機械工学】**
19. Masaki Shimizu, Shigeo Kida : A driving mechanism of a turbulent puff in pipe flow : Fluid Dynamics Research, Vol.41, pp.045501–045527, 2009
- 【420 電気電子工学】**
20. K. Noda, M. Hattori, K. Amari, K. Kobayashi, T. Horiuchi, K. Matsushige : Photocatalytic Hydrogen Production from Gas-Phase Methanol and Water with Nanocrystalline TiO₂ Thin Films in High Vacuum : Mater. Res. Soc. Symp. Proc., Vol. 1056, 1056-HH11-56, 2008
 21. Y. Hosokawa, T. Ichii, K. Kobayashi, K. Matsushige, H. Yamada : Small amplitude frequency modulation atomic force microscopy of lead phthalocyanine molecules using cantilever with very high spring constant : Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 47, No. 7, pp.6125-6127, 2008
 22. Ivo B. Rietveld, N. Suganuma, K. Kobayashi, H. Yamada, K. Matsushige : Electrospray Deposition of Photoresist: A low Impact Method for the Fabrication of Multilayered Films : Macromolecular Materials and Engineering , 293, pp. 325-440 , 2008
- 【430 土木工学】**
23. 岸田 潔, 中島伸一郎, 安原英明, 細田 尚 : 岩盤不連続面の透水試験と三乗則の適用性について : 第38回岩盤力学に関する:Vol. 38, pp. 260–265, 2009
- 【470 工業化学】**
24. Shinya Hayashi, Masanobu Tanaka, Hironobu Hayashi, Seunghun Eu, Tomokazu Umeyama, Yoshihiro Matano, Yasuyuki Araki and Hiroshi Imahori : Naphthyl-Fused π-Elongated Porphyrins for Dye-Sensitized TiO₂ Cells : The Journal of Physical Chemistry C, Vol.112, No.39, pp.15576-15585, 2008
 25. Seunghun Eu, Takashi Katoh, Tomokazu Umeyama, Yoshihiro Matano and Hiroshi Imahori : Synthesis of sterically hindered phthalocyanines and their applications to dye-sensitized solar cells : Dalton Transactions, No.40, pp.5476-5483, 2008
- 【480 総合工学】**
26. Tomoki Minamikawa, Hitoshi Fujimoto, Takayuki Hama, and Hirohiko Takuda : Numerical simulation of two droplets impinging successively on a hot solid in the film boiling regime : ISIJ Int., Vol.48, No.5, pp.611-615, 2008
 27. Hitoshi Fujimoto, Daisuke Ohno, Takayuki Hama, and Hirohiko Takuda : Numerical study of a planar liquid jet impinging on a solid substrate : ISIJ Int., Vol.48, No. 5, pp.603-610, 2008
- 【510 農芸化学】**
28. Miki Akamatsu, Kazuya Nakao, Masaaki

Fujikawa, Ryo Shimizu : QSAR model for passive transport prediction with in silico descriptors- From artificial membrane permeability to human oral absorption - : 第8回薬物の分子設計と開発に関する日中シンポジウム講演要旨, pp. 72-73, 2008

【520 林学】

29. Yamasaki, M. and K. Futai : Host selection by Platypus quercivorus (Murayama) (Coleoptera: Platypodidae) before and after flying to trees : Applied Entomology and Zoology, Vol.43, No.2, pp. 249 – 257, 2008

【730 情報科学】

30. 後藤佑介、義久智樹、金澤正憲 : 帯域幅を考慮した選択型コンテンツの放送型配信における待ち時間短縮手法 : 情報処理学会論文誌, Vol.49, No.5, pp.1692-1701, 2008. 5
31. Y. Gotoh, T. Yoshihisa, and M. Kanazawa: "A Scheduling Method for On-demand Delivery of Selective Contents," : The Fourth International Conference on Mobile Computing and Ubiquitous Networking (ICMU 2008), pp.17-24, Miraikan, Tokyo, Japan, June 2008.
32. 後藤 佑介, 義久 智樹, 金澤 正憲 : "P2Pストリーミング放送における複数端末へのデータ配信手法," : 情報処理学会シンポジウムシリーズ マルチメディア, 分散, 協調とモバイルシンポジウム (DICOMO2008), pp.682-689, 2008.7
33. 鈴木 健太郎, 後藤 佑介, 義久 智樹, 金澤 正憲 : "連続メディアデータ放送のための P2P 配信システムの設計と実装," : 情報処理学会シンポジウムシリーズ マルチメディア, 分散, 協調とモバイルシンポジウム (DICOMO2008), pp.1378-1385, 2008.7
34. Yusuke Gotoh, Tomoki Yoshihisa and Masanori Kanazawa : Method to Select Peers to Reduce Waiting Time in P2P Streaming Broadcasts : Proc. of the IADIS International Conference on Telecommunications, Networks and Systems 2008, pp.120-124, Amsterdam, July 2008.

35. 宋 仁煥、高橋康人、岩下武史、金澤正憲、嶋吉隆夫、天野晃、松田哲也 : 並列計算機上での Kyoto モデルによる興奮伝播シミュレーション : 情報処理学会研究報告「2008 年並列／分散／協調処理に関する『佐賀』サマー・ワークショップ (SWoPP 佐賀 2008)」, 2008-EVA-26, pp.9-14, 2008. 8
36. Yasuhito Takahashi, Takeshi Iwashita, Masanori Kanazawa, Shinji Wakao : Performance Evaluation of IDR(s) Method for Various Nonsymmetric Matrices in Electromagnetic Filed Computations : International Kyoto-Forum on Krylov Subspace Method, pp.103-106, Sept. 2008.
37. Takehiko Demiya, Tomoki Yoshihisa, Masanori Kanazawa : Compact grid: a grid computing system using low resource compact computers, International Journal of Communication Networks and Distributed Systems 2008, Vol. 1, No.2 pp.231 - 247, Sept. 2008. (Special Issue: IEEE Pacific Rim Conference on Communications, Computers and Signal Processing)
38. 高橋康人、美船健、岩下武史、金澤正憲 : 不完全コレスキー分解と FEC 法に基づく新たな前処理による A 法の高速化 : 電気学会静止器・回転器合同研究会資料, SA-08-61,RM-08-68, 2008. 9
39. 高橋康人、徳増正、若尾真治、岩下武史、金澤正憲 : 時間周期有限要素法と EEC 法に基づく非線形過渡電磁場解析の収束特性改善に関する基礎的検討 : 電気学会静止器・回転器合同研究会資料, SA-08-63,RM-08-70, 2008. 9
40. 後藤佑介、鈴木健太郎、義久智樹、金澤正憲 : IP ネットワークにおける分割放送型システムの途切れ時間に関する評価:電子情報通信学会信学技法 IA2008-30, pp. 7-12, 2008. 9
41. Yusuke Gotoh, Tomoki Yoshihisa, Masanori Kanazawa and Yutaka Takahashi : A Scheduling Method to Reduce Waiting Time Considering Transition Probability for Selective Contents Broadcasting : Proc. of

- IEEE International Symposium on Wireless Communication Systems 2008(ISWCS'08), pp.149-153, Oct. 2008. Reykjavik.
42. Yusuke Gotoh, Tomoki Yoshihisa and Masanori Kanazawa : A Method to Reduce Waiting Time for P2P Streaming Systems : Proc. of 6th International Conference on Advances in Mobile Computing & Multimedia (MoMM2008), pp.15-20, Nov., 2008. Linz
43. 後藤 佑介, 義久 智樹, 金澤 正憲, 高橋 豊:インターネット放送のための分割放送型配信システムの設計と実装: 電子情報通信学会論文誌 B, Vol.J92-B, No.01, pp.353-362, 2009. 1
44. 後藤 佑介, 義久 智樹, 金澤 正憲, 高橋 豊:選択確率を考慮した選択型コンテンツの放送型配信における待ち時間短縮手法: 情報処理学会論文誌, Vol. 50, No.2, pp.882-893, 2009.2
45. 三村正人, 河原達也 : 統計的話し言葉変換を用いた音響モデルのlightly supervised training: 日本音響学会研究発表会講演論文集, No.1-5-9, pp.25-26, 2009
46. Randy Gomez and Tatsuya Kawahara : Unsupervised optimization of dereverberation parameters based on the likelihood of speech recognizer : 日本音響学会研究発表会講演論文集, No.1-P-15, pp.155-158, 2009
47. Hiroshi Nakashima, Yohei Miyake, Hideyuki Usui, Yoshiharu Omura : Performance Evaluation of OhHelp'ed 3D Particle-in-Cell Simulation : IPSJ SIG Technical Report, Vol.2009, No.14, pp.1-6, 2009
【999 広領域】
48. Takaaki Aoki, Toshio Seki and Jiro Matsuo : Study of crater formation process with cluster ion impact : Abstract of 16th International Conference on Ion Beam Modification of Materials, pp. PB16-10 - PB16-10, 2008
49. Takaaki Aoki, Toshio Seki and Jiro Matsuo : Study of density effect of large gas cluster Impact : Abstract of 9th conference in a series of international conferences on Computer Simulation of Radiation Effects in Solids (Oral Presentation), pp.35-35, 2008
50. Hirotaka Yagi, Tomoko Mashimo, Yuta Sannohe, Hiroshi Sugiyama : Structural stability analysis of the intermediates in the folding pathway of human telomeric hybrid-1 G-quadruplex based on fragment molecular orbital method. : Nucleic Acids Symposium Series, No.52, pp. 161 – 162, 2008
51. 徳永 健:有機電子材料の量子化学的設計～フラーーエン誘導体～：月刊『未来材料』 9月号, Vol.8, pp.24-30, 2008.9.10
52. Tokunaga, K., Ohmori, S., & Kawabata, H. : Research on Possible Usage of Difluoromethylene Fullerene as Electron-Transport Material : 8th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME 2008) 講演要旨集, pp.PII-57, 2008.12.16
53. 徳永 健, 川畑 弘 : フラーエン C₆₀誘導体材料における電子輸送：その本質の理解に基づく新規材料設計：『月刊 機能材料』 3月号, Vol.29, pp.83-88, 2009.2.5
54. Tokunaga, K. : Signal Transmission through Molecular Quantum-Dot Cellular Automata: A Theoretical Study on Creutz-Taube Complexes for Molecular Computing : Phys. Chem. Chem. Phys., Vol.11, pp.1474-1483, 2009.1.21
55. 徳永 健 : フラーエン誘導体C₆₀X₂の電子輸送特性 : 第36回フラーーエン・ナノチューブ総合シンポジウム 講演要旨集, pp.2P-34, 2009.3.2
56. 徳永 健:分子型量子ドットセルラーオートマトン (QCA) の動的スイッチ挙動に関する理論的研究 : 日本化学会第89春季年会 講演要旨集, pp.1PC-081, 2009. 3.27
57. Takaaki Aoki, Toshio Seki, Satoshi Ninomiya, Kazuya Ichiki, Jiro Matsuo : Study of crater formation and sputtering process with large gas cluster impact by molecular dynamics simulations : Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, Vol.267, No.8-9, pp.1424-1427, 2009

58. Takaaki Aoki, Toshio Seki, Jiro Matsuo :
Study of density effect of large gas cluster
impact by molecular dynamics simulations :
Nuclear Instruments and Methods in Physics
Research Section B, Vol.267, No.18, pp.2999
-3001, 2009

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 | | | 2ノード((16コア、メモリ32GB)×2) | — | 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ノード((16コア、メモリ32GB)×2) | — | 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ソケット(8コア、メモリ64GB) | — | 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 | | | 2ソケット(8コア、メモリ64GB) | — | 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) | | | 1ノード(16コア、メモリ32GB) | — | — | — |
| | 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) | | | 1ソケット(4コア、メモリ32GB) | — | — | — |
| 専用クラスタ | — | 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ノード((16コア、メモリ32GB)×2) | — | 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」：当該カテゴリーのユーザー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 | — | 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コースを通常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 追加単位 | 100,000 円 100,000 円 | 150,000 円 150,000 円 | 225,000 円 225,000 円 |
| | タイプ1B | 最小 追加単位 | 120,000 円 60,000 円 | 180,000 円 90,000 円 | 270,000 円 135,000 円 |
| | タイプ1C | 最小 追加単位 | 300,000 円 150,000 円 | 450,000 円 225,000 円 | 675,000 円 337,500 円 |
| | タイプ2 | 最小 追加単位 | 160,000 円 80,000 円 | 240,000 円 120,000 円 | 360,000 円 180,000 円 |
| | タイプ2B | 最小 追加単位 | 96,000 円 48,000 円 | 144,000 円 72,000 円 | 216,000 円 108,000 円 |
| | 専用クラス タ コース | — — | 300,000 円 150,000 円 | 450,000 円 225,000 円 | 675,000 円 337,500 円 |
| | | | | | |

8. グループコース及び専用クラスタ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

- 利用負担額は、総額表示である。
- 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。
- 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 |

- 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。

- 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。

- 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. サービス・ホスト一覧

- コンピューティングサービス
 - Thin SMP クラスタ
ホスト名 : **thin.kudpc.kyoto-u.ac.jp**
 - Thin SMP クラスタの Exceed onDemand 接続
ホスト名 : **thinX11.kudpc.kyoto-u.ac.jp**
 - Fat SMP クラスタ
ホスト名 : **fat.kudpc.kyoto-u.ac.jp**
※接続は、SSH(Secure SHell) のみ、telnet, ftp は不可
- メールサービス
 - 電子メールサーバ
サーバ名 : **sakura.kudpc.kyoto-u.ac.jp** (IP アドレス : 130.54.9.11)
サポートプロトコル : POP3 および IMAP4 ※SSL 対応
 - メールホスティングサーバ
サーバ名 : **mbox.kudpc.kyoto-u.ac.jp**
サポートプロトコル :
メールの受信には、POP3,IMAP4(利用者認証には、TLS や SSL による暗号化通信)
メールの送信には、SMTP(利用者認証には、「POP before SMTP」) と SMTP AUTH 認証)
 - Web メール (Active! Mail)
サーバ名 : <https://mbox.kudpc.kyoto-u.ac.jp/active-mail/>

2. その他 【問合わせ先 & 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/>
 - (a) 全国共同利用サービスの利用申請に関するページ
<http://web.kudpc.kyoto-u.ac.jp/hpc/infomation>
 - (b) コンピューティングサービスのページ
<http://web.kudpc.kyoto-u.ac.jp/>
- 全国共同利用サービスの利用申請などに関する問合わせ先
【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
- コンピューティングサービスに関する問合わせ先
【コンピューティング担当】
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7426 / Fax : 075-753-7451
- メールサービスに関する問合わせ先
【ネットワーク担当】
E-mail : mail-qa@kudpc.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7432
- ホームページサービスに関する問合わせ先
【学術情報基盤担当】
E-mail : db-qa@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-9003
- 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

編 集 後 記

ここ数年、残暑の厳しさに参ってましたが、今年は少し違いましたね。残暑を感じることなく、秋をむかえました。

昨年11月に引越しをして間もなく1年となります。またあの寒さが戻ってくるのかと思うと少し気分が下がりますが、暖かグッズを用意して春まで頑張ります。いっそ冬眠して…暖かくなるまで…

屋根裏を元気に走り回っている彼等が気になる あ・た・し

アナログ放送が終わる2011年7月24日が刻々と近づいていますが、我が家の中のテレビは未だにブラウン管のアナログテレビです。このテレビは1万円程で購入できたことを思うと、最近のテレビはとても高価でなかなか購入に踏み切れない状況です。

最近ではインターネット回線でのテレビ配信のサービスが始まっているようですが、無料お試しキャンペーンに申し込んでみました。スポーツや音楽の専用チャンネルやビデオオンデマンドと大変魅了的なサービスなのですが、チャンネル選択時にテレビ画面で番組表を確認しようとしても我が家の中の20インチのテレビでは字が小さくて読めません…やはり買い替え時かな～と年末年始の安売りでいいやつを探してみようと思います。

テレビ男

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. 8, No. 2

2009年12月25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部会
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
小畠 孝
疋田 淳一
秋田 祐哉
高見 好男
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)
CG作成：嶺倉 豊
(京都大学 学術情報メディアセンター)