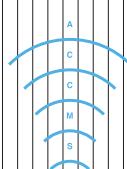


# 全国共同利用版

# ムビ版

## センター共同研究報告(平成23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)】曾川洋光、三田文雄○梅山有和○木田直樹、山村直人、安達泰治○古川晋也○斎木吉隆○金津将庸、山城博幸、山本洋紀、澤本伸克、福山秀直、齋木潤○鬼頭(西岡)宏任、安藤耕司 【プログラム高度化支援事業】平原和朗、大谷真紀子、高橋康人、堀高峰、兵藤守 【スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠)】今寺賢志



## 機構長再任にあたって

情報環境機構長 美濃 導彦

この2年間、情報環境機構長を務めましたが、10月に再任されました。この間、大学全体の情報環境をどうするべきかを大学運営の立場から考えてきました。機構内で議論をする場を設けてこの9月までに大学のICT戦略としてまとめたいと思っていましたが、時間が足らなくて再任後もこの作業を続けています。現状の大学の運営形態を考えますと、大学全体の情報環境は、情報環境機構だけが構築するものではなく教育研究に当たるそれぞれの部局も一緒になって構築しています。このような分散投資のもとでは、トップダウン的に統制のとれた形を目指すのは無理があります。ICT戦略はこのような環境の下、大学全体が同じ目標を共有するためのもので、構成員の方々にわかりやすいものにしたいと思っています。

情報技術が広く社会に浸透した現在では、大学の情報環境は「使いたい人が使う」という先進的な情報環境から、「誰でも使わなければならない」使いやすく安定稼働する情報環境へと変化してきています。この状況を認識し、情報環境機構も基盤技術の提供から情報サービスの提供へと脱皮してゆかなければなりません。のためにやらなければならないことは二つあります。一つ目は、情報環境機構は大学構成員（教職員、学生）に対して情報に関するサービスを提供すると同時に情報に関するあらゆる相談に応じなければならないということです。これは部局の枠を飛び越えて構成員一人一人がお客様であるという立場をとらなければならないことを意味しています。情報サービスは部局に提供するのではなく、すべての構成員個人に提供するものです。そのために、構成員個人を支援することが重要になります。もう一点は、大学の情報環境はディペンダビリティ（常に動いていていつでも信頼して使える：頼れるという概念）を確保しなければならないということです。これまでには、職員の勤務時間や経済的な理由から情報環境の一部が停止するということにそれほど気を使っていませんでした。これは使いたい人が使うサービスだからできたことです。誰もが使わなければならないということは、情報システムが止まると教育、研究、業務が停止することを意味しますので、避けなければなりません。大学の運営もビジネスに近くなってきたと感じるところです。

このような考え方の下、研究支援をどうするのかが共同利用共同研究拠点の大きな課題になってきました。文科省では大学の研究力強化の策が議論されており、世界での競争に勝ち抜くために研究力の強化は欠かせません。大学の情報環境がどのような形で研究力の強化につながるのか、有効な研究支援策とは何なのか、超高速の計算機能を提供することを使命としてきた我々のセンターがそのすそ野を広げていく必要性に迫られています。計算科学を中心にしてどのように研究支援を進めてゆくのかについての議論が深まることを期待しています。

## 分子軌道法計算による光学活性高分子の構造解析

曾川 洋光

三田 文雄

京都大学大学院工学研究科

## 1 緒言

らせん構造は高分子の取りうる代表的な高次構造の一つである。人工らせん高分子の研究はタンパク質、アミロース、DNAなどに代表される天然のらせん高分子の形成原理、機能を解明する上で重要である。アミド基を置換したアセチレンモノマーのロジウム触媒重合によって得られるシス立規則性置換ポリアセチレンは、生体高分子と同様に、分子内水素結合によって安定化されたらせん構造を形成する。筆者らは、アミノ酸の不斉炭素にアルキニル基を置換したモノマーのロジウム触媒重合により、対応する置換ポリアセチレン[poly(1)] (Chart 1) を合成し、溶液赤外線吸収スペクトル、円偏光二色性(CD)スペクトルおよび紫外可視吸収(UV-vis)スペクトル測定などにより、poly(1)が溶液中で水素結合により安定化された巻き方向の片寄ったらせん構造を形成することを見出している<sup>1</sup>。また、溶媒の極性や、アルカリ金属イオンの添加により、そのらせんピッチが変化することや、巻き方向の偏りが逆転することを明らかにしている。本研究は、poly(1)のコンフォメーションに及ぼす溶媒効果の分子軌道法(MO)計算による解析を目的とした。

## 2 実験

半経験的 MO 法アプリケーションである MOPAC 2009, AM1 Hamiltonian を用いて、poly(1) の 12 量体の主鎖二重結合-単結合間の二面角( $\phi$ )を種々変化させながら、コンフォメーションの最適化を行った。また、溶媒効果に関する知見を得るために、溶媒の誘電率をパラメータとして用いる COSMO 法を活用した THF 中でのコンフォメーシ

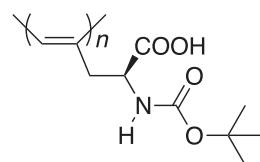


Chart 1. Structure of poly(1).

ョン解析も同様の手法により行った。構造最適化後の各コンフォーマーの座標を使用し、Gaussian 09, ZINDO/S 法により、velocity モードにおける遷移状態におけるパラメータである oscillator strength ( $f_{vel}$ )および rotatory strength ( $R_{vel}$ )を算出した。これらの値にガウス関数に従う重付けを行うことにより<sup>2,3</sup>, UV-vis および CD スペクトルをシミュレーションし、実測値と比較した。

## 3 結果・考察

Poly(1)の 12 量体の構造最適化を真空中および THF 中 (COSMO 法)で行った結果を図 1 に示す。真空中では、poly(1)は  $\phi = -100^\circ$  の時に最安定な構造を取り、右巻きと左巻きの安定構造のエネルギー差は 1.50 kJ/mol/unit となった。これに対して、THF 中では主鎖二面角が  $+130^\circ$  の時に最安定となり、右巻きらせんが左巻きらせんよりも 1.28

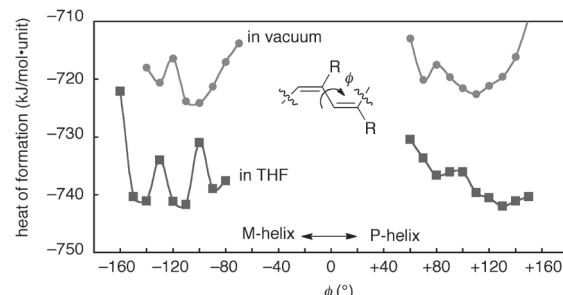


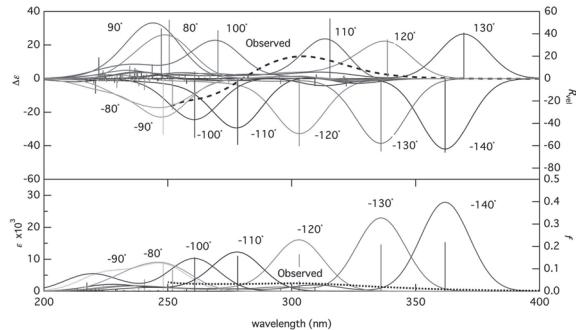
Figure 1. Relationships between the dihedral angle  $\phi$  at the single bond in the main chain of poly(1)-12-mer and the energy calculated by MOPAC2009, AM1 hamiltonian.

kJ/mol·unit 安定であった。真空中、THF 中いづれにおいても、同一の初期座標を用いたが、最安定となるらせん構造の巻き方向は逆となった。COSMO 法を用いることにより、溶媒がコンフォメーションの安定性に与える影響を考慮した構造解析が行えたと推測される。

続いて、poly(1)の THF 中における種々のコンフォーマーの座標を用いて、Gaussian 09, ZINDO/S 法により、 $f_{vel}$  および  $R_{vel}$  を算出し、この値にガウス関数に従う波形を重付けすることにより、CD および UV-vis スペクトルのシミュレーションを行った。結果を図 2 に示す。UV-vis スペクトルにおいては、一部のコンフォーマーのデータを割愛した。また、poly(1)の THF 溶液中における実測値を破線で示した。 $\phi = 130^\circ$  の時、poly(1)は 370 nm 付近に正の単峰性の CD ピークを、ほぼ同波長に UV-vis ピークを示した。今回 AM1 計算でエネルギーが最安定となった poly(1)の構造は、実測値と比較すると、波長、波形とも大きく異なるものとなつた。左巻きらせんの中で最安定構造となつた  $\phi = -110^\circ$  のコンフォーマーは、280 nm 付近に負の CD ピークを示し、 $\phi = 130^\circ$  の場合よりも実測値に近い波長領域にピークを示した。CD スペクトルにおいて最も良い一致を示したのは  $\phi = -90^\circ, 110^\circ$  の場合であった。 $\phi = -90^\circ$  の時、短波長側の負の大きいピークとともに、その強度は弱いものの長波長側に正のピークが観測され、分裂型のコットン効果が再現できていると考えられる。しかしながら、UV-vis スペクトルにおいて  $\lambda_{max}$  は大きく短波長側へとシフトしていた。 $\phi = 110^\circ$  の場合は、分裂型のコットン効果は再現できていないものの、観測された波長は CD および UV-vis スペクトルいずれの場合も実測値と非常に近い値となつた。これらの結果から、COSMO 法により最安定となつた  $\phi = 130^\circ$  のコンフォーマーは、CD シミュレーションの結果より poly(1)が溶液中で形成している実際の構造とは異なつていると推測される。

#### 4 まとめと展望

本研究では、THF 溶液中における poly(1)のコンフォメーション解析を AM1, COSMO 法により行い、さらに Gaussian 09, ZINDO/S 法により、 $f_{vel}$  および  $R_{vel}$  を算出し、CD および UV-vis スペクト



**Figure 2.** Excited-state parameters of velocity mode ( $f_{vel}$  and  $R_{vel}$ ) and CD and UV-vis spectra simulated for conformers of poly(1) with various dihedral angles  $\phi$ , together with the observed spectra of poly(1) measured in THF at 20 °C ( $c = 0.50$  mM) (dotted lines). The  $f_{vel}$  and  $R_{vel}$  values are predicted at the ZINDO/S level, and the 20 transition states from the lowest energy level were chosen.

ルをシミュレーションして、実測値と比較した。MO 計算によりエネルギーが最安定となった構造を基にして得られた理論 CD および UV-vis スペクトルは実測のスペクトルパターンを再現しなかつた。現時点では、溶液中の poly(1)の明確な構造決定には至っていないが、その足がかりとなる結果は得られたと考えられる。今回は THF 中でのコンフォメーションを用いて CD シミュレーションを行つたが、今後は、真空中での解析結果を用いた同様のシミュレーションとの比較、計算精度の高い DTF 計算による  $f_{vel}$  および  $R_{vel}$  の算出とスペクトルシミュレーションを行い、先の MO 計算で得られたコンフォメーションの妥当性の検証を予定している。これらの結果の実験へのフィードバックにより、光学活性置換ポリアセチレンの溶液中のコンフォメーション解析のさらなる進展が期待される。

#### 5 謝辞

本共同研究制度(若手奨励枠)を活用させて頂きましたことを、この場を借りて感謝致します。また、CD および UV-vis シミュレーションの手法をご指導頂きました名古屋工業大学教授稻井嘉人先生、ガウス関数処理の手法をご指導頂きました京都大学准教授竹中幹人先生にこの場を借りて感謝致します。

## 参考文献

1. H. Sogawa, M. Shiotsuki, F. Sanda, *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.* **50**, 2008–2018 (2012).
2. H. Komori, Y. Inai, *J. Phys. Chem. A.* **110** 9099–9107 (2006).
3. S. E. Braslavsky, *Pure Appl. Chem.* **79**, 293–465 (2007).

# 色素増感太陽電池を指向したポルフィリン化合物の開発

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

化石燃料枯渇への懸念や環境問題への配慮から、代替エネルギーとして太陽電池への関心が高まっている。現在では、シリコン太陽電池の実用化が本格化しているが、シリコン太陽電池は高純度シリコンの製造費用が高いという根本的な問題点を抱えている。一方、シリコン太陽電池に変わる太陽電池として色素増感太陽電池が注目されている。色素増感太陽電池は安価に製造でき、カラフルで、しかもフレキシブルという特徴を有する。現在までにルテニウム錯体と多孔性酸化チタンを用いた系において 11% を越える高いエネルギー変換効率 ( $\eta$ ) が報告されている。しかし、ルテニウムは高価で、資源制約もある。そのため、ルテニウム錯体に変わる安価で高性能な色素の開発が求められている。そこで我々は、安価な金属を利用できるポルフィリン錯体に注目し、新規ポルフィリン系色素の開発を行ってきた<sup>1</sup>。特に、キノキサリンが縮環したポルフィリン色素 (ZnPQ, Figure 1) では、キノキサリン環を持たないポルフィリン (ZnP) と比較して、優れた光捕集能と太陽電池性能 (エネルギー変換効率  $\eta = 6.3\%$ ) を実現し

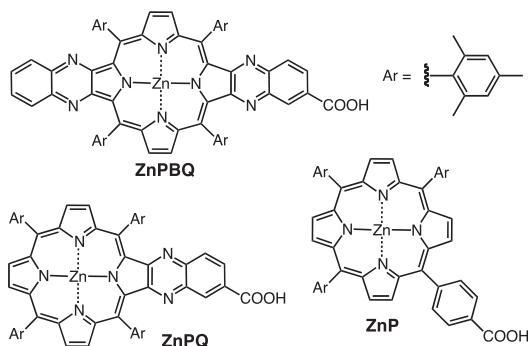


Figure 1. Structures of porphyrin compounds.

た<sup>2</sup>。本研究では、更なる性能の向上を目指し、2つのキノキサリンが縮環したポルフィリン (ZnPQ, Figure 1) を設計し、その合成と物性評価を行った<sup>3,4</sup>。

## 2 結果と考察

### 2.1 新規ポルフィリン色素の諸物性と色素増感太陽電池への応用

ZnPQ、ZnPQ および ZnP のジクロロメタン溶液中の吸収スペクトルを Figure 2 に示す。ZnPQ は ZnPQ および ZnP に比べて幅広い範囲で吸収を示し、吸収端は 680 nm に達することがわかった。また、電気化学測定により求めた ZnPQ の第一酸化電位 ( $E_{ox} = 0.97$  V vs. NHE) は ZnPQ ( $E_{ox} = 0.98$  vs. NHE) と比較して同程度であった。

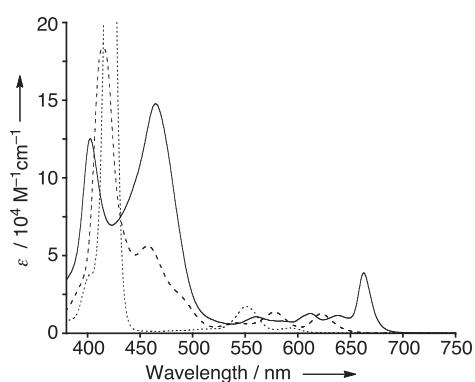


Figure 2. UV-vis absorption spectra of ZnPQ (solid line), ZnPQ (dashed line) and ZnP (dotted line) in  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ .

ZnPQ を酸化チタンに吸着させ、色素増感太陽電池を作製して性能評価を行ったところ、 $\eta =$

4.7% ( $J_{SC} = 10.6 \text{ mA cm}^{-2}$ ,  $V_{OC} = 0.66 \text{ V}$ ,  $ff = 0.67$ ) であった。これは、ZnPQ の場合 ( $\eta = 6.3\%$ ,  $J_{SC} = 13.2 \text{ mA cm}^{-2}$ ,  $V_{OC} = 0.71 \text{ V}$ ,  $ff = 0.67$ ) と比べて低い値となっている。最適条件下での作用スペクトルを Figure 3 に示す。全波長にわたり ZnPQ は ZnPQ よりも IPCE 値が低下しており、電流-電圧特性における  $J_{SC}$  の差と一致している。

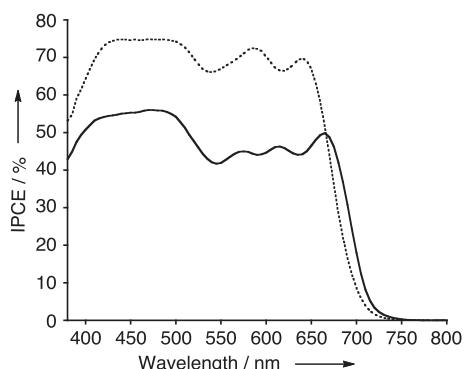


Figure 3. Action spectra of ZnPQ cell (solid line) and ZnPQ cell (dotted line).

## 2.2 理論計算

ポルフィリンの再安定化構造およびそのフロンティア軌道の電子構造について知見を得るために、

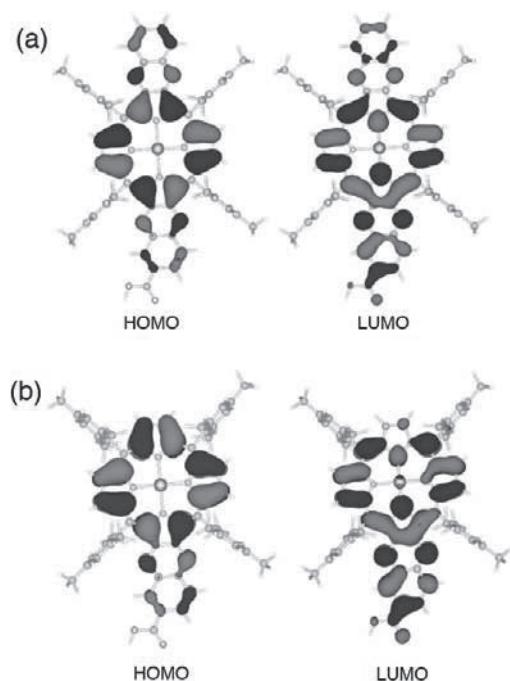


Figure 4. Some sets of molecular orbital diagrams for (a) ZnPQ and ZnPQ obtained by DFT calculations with B3LYP/3-21G(d).

密度汎関数法 (DFT) による理論計算 (B3LYP) を行った。基底関数系に 3-21G(d)を選択し、 Gaussian03 プログラムを用いた。分子軌道の可視化には Molstudio3.0 プログラムを用いた。

Figure 4 に ZnPH および ZnPQ の最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO) における電子密度分布を示す。一般に、アンカーポジションの LUMO の電子密度が大きいほど、励起状態の色素と酸化チタンの 3d 軌道との間の電子カップリングが大きくなることが知られている。ZnPQ では ZnPQ に比べて、アンカーポジションの LUMO の電子密度が小さくなっている。そのため、色素から酸化チタンの伝導帯への電子注入の効率が、ZnPQ を用いた系で低くなっていることが、 $J_{SC}$  値が低下したことの主な原因であると考えられる。このように、本計算結果は実験結果の理論的解釈の一助となった点で意義がある。

## 3 参考文献

- [1] H. Imahori, T. Umeyama and S. Ito, "Large  $\pi$  Aromatic Molecules as Potential Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells", *Acc. Chem. Res.*, **42**, 1809-1818 (2009).
- [2] A. Kira, Y. Matsubara, H. Iijima, T. Umeyama, Y. Matano, S. Ito, M. Niemi, N. V. Tkachenko, H. Lemmetyinen and H. Imahori, "Effects of  $\pi$ -Elongation and Fused Position of Quinoxaline-Fused Porphyrins as Sensitizers in Dye-Sensitized Solar Cells on Optical, Electrochemical, and Photovoltaic Properties", *J. Phys. Chem. C*, **114**, 11293-11304 (2010).
- [3] H. Imahori, H. Iijima, H. Hayashi, Y. Toude, T. Umeyama, Y. Matano and S. Ito, "Bisquinoxaline-Fused Porphyrins for Dye-Sensitized Solar Cells", *ChemSusChem*, **4**, 797-805 (2011).
- [4] H. Imahori, T. Umeyama, K. Kurotobi and Y. Takano, "Self-Assembling Porphyrins and Phthalocyanines for Photoinduced Charge Separation and Charge Transport", *Chem. Commun.*, **48**, 4032-4045 (2012).

# 生体軟部組織に対する非線形有限要素解析

残留応力、血管平滑筋の能動的応力を考慮した血管壁の応力解析

木田 直樹 \* , 山村 直人 \*\* , 安達 泰治 \*

\*京都大学 再生医科学研究所, \*\* 理化学研究所

## 1 はじめに

全身臓器へのエネルギーや酸素の供給ラインである血管は、生命維持に不可欠であり、動脈硬化などによる構造変化は、生命活動の低下につながる。血管の構造や機能は、分子生物学的因子とともに力学因子に大きく影響されているため、応力場やひずみ場などの力学的な解析が必要である。

血管壁の応力解析は、幾何学的及び材料的非線形性、異方性、不均質性、非圧縮性などの力学的な特徴を有する3次元任意形状に対する複雑な境界値問題を解くことであり、有限要素法による数値解析が行われている。外部負荷に対する受動的な応答を記述する構成式には、様々なものが検証されてきたが[2]、血管壁には、残留応力や平滑筋がつくる能動的応力が存在している。残留応力には、応力の極大値を低下させる働きが、能動的応力には、血管内径を変化させ血流を調節する働きがある。

本研究では、血管壁を対象として、受動的な構成式に加え、残留応力および平滑筋の能動的応力を有限要素解析に適用できるように定式化し、応力解析を行う。解析例として、能動的応力が、病態発生に重要な働きをしていることをシミュレーションで示す。

大変形の記述には total Lagrange 法を、非圧縮性条件には摂動 Lagrange 乗数法 [1] を用いる。

## 2 支配方程式、血管壁の定式化

### 2.1 変分原理

血管などの生体軟部組織は、構成式に超弾性体が用いられることが多い、ひずみエネルギー関数  $\Psi(\mathbf{C})$  を用いて、第 2 Piola-Kirchhoff 応力テンソル  $\mathbf{S}$  お

より 4 階弾性テンソル  $\mathbb{C}$  が、

$$\mathbf{S} = 2 \frac{\partial \Psi(\mathbf{C})}{\partial \mathbf{C}}, \quad \mathbb{C} = 2 \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} \quad (1)$$

で与えられる。ここに、 $\mathbf{C}$  は、right Cauchy Gruen 变形テンソルであり、変形勾配テンソル  $\mathbf{F}$  ( $J = \det \mathbf{F} > 0$ ) を用いて、 $\mathbf{F}^T \mathbf{F}$  と定義される。

非圧縮制約条件下に、変位解  $\mathbf{u}$  を求める準静的弾性問題は、 $\mathbf{u}$  とは独立の Lagrange 乗数  $p$  を変数に加えた汎関数  $\Pi_{PL}(\mathbf{u}, p)$  の鞍点  $(\mathbf{u}, p)$  を求める問題に置き換えることができる。汎関数は、

$$\Pi_{PL}(\mathbf{u}, p) = \int_{\Omega_0} \left[ p\{J(\mathbf{u}) - 1\} - \frac{p^2}{2\kappa} + \Psi_{iso}(\bar{\mathbf{C}}) \right] dV + \Pi_{ext}(\mathbf{u}) \quad (2)$$

で与えられる。ここに、 $\kappa > 0$  は penalty 定数を、 $\Pi_{ext}(\mathbf{u})$  は外力のポテンシャルを、 $\bar{\mathbf{C}}$ 、 $\Psi_{iso}(\bar{\mathbf{C}})$  は、 $\mathbf{C}$ 、 $\Psi(\mathbf{C})$  の変形に関与する項をあらわす。鞍点では、 $\mathbf{u}$  および  $p$  に対する  $\Pi_{PL}(\mathbf{u}, p)$  の第一変分が 0 となり、つり合い式と等価な弱形式が得られる。弱形式は、 $(\mathbf{u}, p)$  の非線形方程式となるため、線形近似し、Newton-Raphson 法により解を求める。

### 2.2 血管壁の受動的な構成式

受動的な構成式には、組織学的構造(異方性、不均質性)を考慮した、Holzapfel らの提案した、ひずみエネルギー関数を用いる [2]。

$$\begin{aligned} \Psi_{pas}(\mathbf{C}, \mathbf{A}, \mathbf{G}) = & c_1(I_1 - 3) \\ & + \frac{k_1}{2k_2} \sum_{i=4,6} \left[ \exp\{k_2(I_i - 1)^2\} - 1 \right] \end{aligned} \quad (3)$$

ここに,  $c_1$ ,  $k_1$ ,  $k_2$  は材料定数であり,  $I_1$  は第一ひずみ不变量を,  $I_4$ ,  $I_6$  は, 材料の異方性をあらわす構造テンソル  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{G}$  の偽不变量である.

### 2.3 残留変形勾配テンソル

残留応力は, 残留変形勾配テンソル  $\mathbf{F}_{\text{res}}$  に起因する.  $\mathbf{F}_{\text{res}}$  は, 血管壁の stress free 状態を推定する opening angle 法の結果から求める [2]. 外部負荷で生じる  $\mathbf{F}$  との dot 積  $\mathbf{F}\mathbf{F}_{\text{res}}$  をとることで, 残留応力を考慮した解析を行う.

### 2.4 血管平滑筋による能動的応力

平滑筋の能動的応力を記述する構成式は, Rachev らの実験式を用いる [3]. ひずみエネルギー関数は, 平滑筋のストレッチ  $\lambda_m$  を変数として,

$$\Psi_{\text{act}}(\lambda_m) = A \left\{ \lambda_m + \frac{1}{3} \frac{(\lambda_{\max} - \lambda_m)^3}{(\lambda_{\max} - \lambda_0)^2} \right\} \quad (4)$$

で与えられる. ここに,  $A$  は平滑筋の緊張状態 (生理的状態では,  $A = 50$  kPa) を,  $\lambda_{\max}, \lambda_0$  は, 能動的応力を発生する最大, 最小ストレッチをあらわす.

## 3 解析結果

血管試験片は, 内径 0.71 mm, 外径 1.1 mm, 高さ 0.71 mm の厚肉円管とし, 材料定数は文献 [2, 3] から引用した. 試験片を,  $R$  方向に 9,  $\Theta$  方向に 108,  $Z$  方向に 18 分割し,  $Q_1/P_0$ -六面体要素を用いた. 境界条件は, 内圧  $p_{\text{in}} = 13.33 - 26.66$  kPa (正常血圧-重症高血圧), 軸方向ストレッチ  $\lambda_z = 1.7$  とした. 变形後の血管壁の  $\theta\theta$  成分応力分布を示す (図 1).

1) 残留応力, 能動的応力の有無による比較 (図 1a: 内圧 13.33 kPa). 残留応力は, 応力勾配を減少させ ( $\bullet$ ), 能動的応力は, 応力分布を一様に近づける ( $\square$ ).

2) 能動的応力が応力分布を一様に近づける作用は, 内圧が増加すると破綻する (図 1b).

3) 生体内では, 血管壁の  $\theta\theta$  応力は一様に近いこと, 高血圧により血管壁が内腔側に肥厚することが知られている [3]. 能動的応力を考慮した試験片が, 内側に肥厚し, 壁厚が 1.111, 1.222, 1.333 倍となった時の,  $\theta\theta$  応力分布を示す. 能動的応力の存在する血管壁が内側に肥厚することで, 応力分布が一様に近づくことが確認できる (図 1c: 内圧 26.66 kPa).

## 4 結語

本研究では, 受動的な構成式に加え, 残留応力, 平滑筋の能動的応力を考慮した血管壁の応力解析を有限要素法を用いて行った.

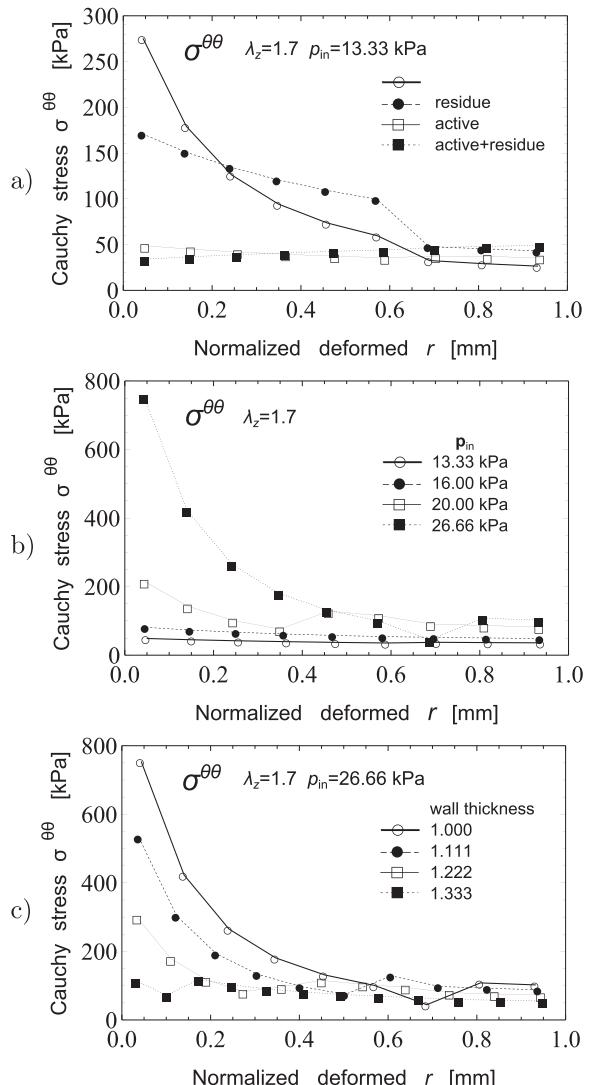


図 1: 円周方向 Cauchy 応力分布. 横軸は変形後の血管壁正規化  $r$  座標 ( $r=0$ : 内壁,  $r=1$ : 外壁).

## 参考文献

- [1] T. Chang, et al. : Computational Mechanics 8 (1991) 221-233.
- [2] G.A. Holzapfel, et al. : Journal of biomechanical engineering 126 (2004) 264-275.
- [3] A. Rachev, et al. : Annals of Biomedical Engineering, 27 (1999) 459-468.

# 有機材料における電荷輸送特性解析

古川 晋也

分子工学専攻 分子材料化学研究室

近年、有機エレクトロルミネッセンス(EL)素子は、新しい光源および次世代ディスプレイとして注目されている。有機ELが、有機分子に電流を流し、発光させるデバイスであることを考えると、その電荷輸送特性がデバイスの特性に大きく影響することは明らかである。しかし、電荷輸送特性を分子論的に理解するには至つておらず、材料の設計指針を得ることは経験則に頼るところが大きいのが現状である。そのため、分子の構造やパッキングと電荷輸送特性との相関を明らかにすることが、今後のさらなる性能向上を目指す上で重要であると考えられる。これらを明らかにすることでより優れた特性を持つ材料の設計指針を得ることを目的とする。また有機材料の電荷輸送特性をより定量的に評価するために計算方法の検討も行った。

## 1 緒言

有機物質の電荷輸送特性を解明することは、有機エレクトロルミネッセンス(有機EL)に代表される有機デバイスの特性を理解する上で極めて重要である。我々の研究室ではこれまでに、Marcus理論[1]に基づき、正孔および電子輸送に対する再配列エネルギーと電荷移動積分を求め、電荷移動速度定数を算出することによりその輸送特性を評価してきた[2,3]。得られた電荷移動速度定数と結晶構造に基づいて、実験的に移動度を測定する際に用いられるTime-of-Flight(TOF)法における電荷輸送を、モンテカルロ法を用いてシミュレートすることで移動度を算出した。本研究では、有機ELにおいて、図1に示した、電子輸送および発光特性を有する材料として広く用いられている tris(8-hydroxyquinoline)aluminium(III) (Alq<sub>3</sub>)、正孔輸送材料として知られている *N,N'*-diphenyl-*N,N'*-di(m-tolyl)benzidine (TPD) の炭素-炭素間を酸素原子で2箇所ずつ架橋した新規材料 HN-D1 および HN-D2 の結晶に対して、Marcus理論に基づいて電荷移動積分および再配列エネルギーを計算し、電荷移動速度定数を算出した。Alq<sub>3</sub>の電荷移動積分に関しては、これまで用いてきた拡張Hückel法に加えてHF法、DFT法に対しても検討を行い、その基底関数依存性を調べることにより、さらに詳細な検討を行った。

## 2 実験

Alq<sub>3</sub>の再配列エネルギーはβ型結晶[4]から抜き出した1分子を初期構造とし、中性、カチオン、アニオン状態においてそれぞれ DFT, B3LYP/6-31G(d)により構造最適化を行い、得られた構造を用いて算出した。電荷移動積分は、結晶中の近接2分子に対して、拡張Hückel法により計算した。合計53ペアに対して計算を行い、それぞれのペアに対して1から53の番号をつけた。そのうち、正孔および電子に対する電荷輸送積分の値が最大であった2分子ペアに対して、さらにHF法およびDFT法により電荷移動積分を求め、その基底関数依存性を調べた。DFT法の汎関数としてはB3LYPおよびPW91を用いた。またガウス型基底関数にはSTO-3G\*、3-21G\*、6-31G\*、6-311G\*を、スレーター型基底関数としてはSZ、DZ、DZP、TZP、TZ2Pを用いた。

HN-D1およびHN-Dは昇華およびtoluene溶媒にて再結晶化させ、X線解析から得た結晶構造を得た。それらの構造から抜き出した1分子を初期構造とし、再配列エネルギーを算出した。電荷移動積分はHN-D1、HN-D2それぞれ結晶中の近接2分子に対して拡張Hückel法により53ペアおよび105ペアに対し、電荷移動積分  $H_{AB}$  を計算した。得られた再配列エネルギーおよび電荷移動積分を用い、電荷移動速度定数  $k_{CT}$  を算出し、モンテカルロ法によるシミュレーションを行うことで移動度の算出を行った。

### 3 結果

$\text{Alq}_3$  の正孔移動および電子移動に対する再配列エネルギー  $\lambda^+$ 、 $\lambda^-$  は、それぞれ  $0.23$ 、 $0.27$  eV であった。図 2 に、結晶中の 53 ペアの近接 2 分子に対して、拡張 Hückel 法により計算した電荷移動積分  $H_{AB}$  の値を示す。ペア 24 に対して正孔移動に対する  $H_{AB}$  の最大値が、また、ペア 41 に対して電子移動に対する  $H_{AB}$  の最大値が得られた。次に、ペア 24 の正孔移動、およびペア 41 の電子移動に対する電荷移動積分と、それぞれの再配列エネルギーから、電荷移動速度定数  $k_{CT}$  を算出した。その結果を図 3 の一番左に示す。拡張 Hückel 法で計算した場合、電子移動に対する速度定数  $k_{CT}^-$  は正孔移動に対する速度定数  $k_{CT}^+$  よりも一桁大きいことがわかる。すなわち、定性的にではあるが、 $\text{Alq}_3$  の電子移動度  $\mu^-$  が正孔移動度  $\mu^+$  より大きいという事実を説明できる。

実測の正孔移動度と電子移動度の比  $\mu^+/\mu^-$  は  $10^{-2}$  程度[5,6]であることから、上記の結果は、まだ一桁のずれがあることがわかる。そこで、HF 法(ガウス型基底関数)、DFT/B3LYP 法(ガウス型基底関数)、DFT/PW91 法(スレーター型基底関数)に対しても計算を行い、それらの比較を行った(図 3)。この図から、HF 法、B3LYP 法、PW91 法いずれの場合も、拡張 Hückel 法の場合よりも大きな値となっていることがわかる。また、HF 法、B3LYP 法に関しては、基底関数によって電荷移動積分値が大きく変化している。一方、PW91 法を用いた場合は、基底関数 SZ の場合を除くとほぼ基底関数に依存しない結果が得られた。特に、TZP, TZ2P を用いた場合、正孔および電子に対する速度定数の比は、それぞれ  $k_{CT}^+/k_{CT}^- = 2.5 \times 10^{-2}$ 、 $2.6 \times 10^{-2}$  であり、実測の正孔移動度と電子移動度の比  $\mu^+/\mu^- = 1.3 \times 10^{-2}$  -  $2.9 \times 10^{-2}$  といよい一致が得られた。

HN-D1 の正孔移動および電子移動に対する再配列エネルギー  $\lambda^+$ 、 $\lambda^-$  は、それぞれ  $0.15$ 、 $0.47$  eV であった。HN-D2 の再配列エネルギー  $\lambda^+$ 、 $\lambda^-$  はそれぞれ  $0.15$ 、 $0.41$  eV であった。再配列エネルギー値が小さいほうが輸送性には有利であることから、この結果からは HN-D1、HN-D2 とともに正孔輸送が電子輸送に対し優位であることがわかる。HN-D1 の正孔移動および電子移動に対する電荷移動積分値  $H_{AB}$  が最大値を持つペアに対する電荷移動速度定数  $k_{CT}^+$ 、

および  $k_{CT}^-$  は  $7.4 \times 10^{13}$ 、 $1.9 \times 10^{10}$  s<sup>-1</sup> であった。HN-D2 の電荷移動積分値が最大値を持つペアに対する電荷移動速度定数  $k_{CT}^+$ 、 $k_{CT}^-$  はそれぞれ  $6.2 \times 10^{13}$ 、 $2.0 \times 10^{10}$  s<sup>-1</sup> であった。この結果、正孔移動に対する速度定数と電子移動に対する速度定数の比  $k_{CT}^+/k_{CT}^-$  は HN-D1 が  $4.0 \times 10^3$ 、HN-D2 が  $3.1 \times 10^3$  となり、ともに 3 衍、正孔移動に対する速度定数が大きいことが示された。モンテカルロ法により算出した正孔に対する移動度  $\mu^+$  の値は、有機 EL において正孔輸送材料に用いられる TPD の移動度  $\mu^+$  に比べ、HN-D1、HN-D2 ともに  $10^2$  倍以上の値を示し、優れた正孔輸送材料であることが示唆される結果が得られた。

- [1] Marcus R. A. et al., *Biochim. Biophys. Acta*, **1985**, 811 265.
- [2] Yamada, T. et al., *Org. Electron.* **2010**, 11, 255.
- [3] Yamada, T. et al., *Org. Electron.* **2011**, 12, 169.
- [4] Brinkmann, M. et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 5147.
- [5] Kepler, R. G et al., *Appl. Phys. Lett.* **1995**, 26, 3618.
- [6] Naka, S. et al., *Synth. Met.* **2000**, 111, 33.

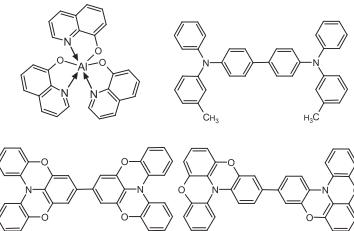


図 1. 分子構造。上段左から  $\text{Alq}_3$ 、TPD、下段左から HN-D1、HN-D2。

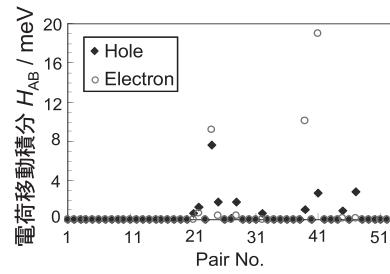


図 2. 拡張 Hückel 法による電荷移動積分の計算結果。

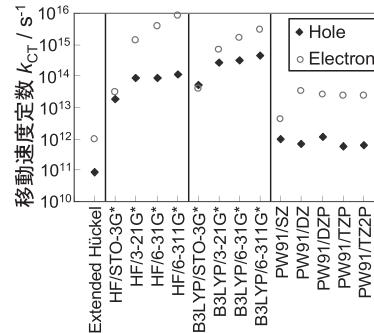


図 3. 種々の計算法および基底関数による電荷移動速度定数の計算結果。

## 蔵本-シバシンスキ一方程式における不安定周期軌道の統計性質

## Statistical Properties of Unstable Periodic Orbits in the Kuramoto-Sivashinsky System

斎木 吉隆\*

Yoshitaka SAIKI

北海道大学大学院 理学研究院 数学部門

Department of Mathematics, Hokkaido University

本研究では、カオス的なふるまいを生み出す偏微分方程式である蔵本-シバシンスキ一方程式に埋め込まれた不安定周期軌道を計算機を用いて多数検出した。そして、不安定周期軌道の統計性質を調べ、カオス軌道上の統計性質との相違を議論した。

Statistical properties of unstable periodic orbits of the Kuramoto-Sivashinsky system are studied in contrast with those of chaotic orbits.

Kuramoto-Sivashinsky system is one of the most famous partial differential equation systems which exhibit chaotic behaviors [1]. The original system  $u_t = -(u^2)_x - u_{xx} - \nu u_{xxxx}$  is written in the Fourier space as  $\dot{b}_k = (k^2 - \nu k^4)b_k - ik \sum_{m=-\infty}^{\infty} b_m b_{k-m}$  with  $u(x, t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_k(t) e^{ikx}$ , where the coefficients  $b_k$  are in general complex variables. Here, we simplify the system by assuming that  $b_k$  are pure imaginary,  $b_k = -ia_k/2$ , where  $a_k$  are real and obtain the evolution equation  $\dot{a}_k = (k^2 - \nu k^4)a_k - \frac{k}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m a_{k-m}$  [2]. We reduce this system to 16 dimensional ODEs and fix  $\nu$  as 0.02991. The system generates two chaotic attractors which are symmetric to each other.

Here we focus on the distribution of time averaged values of a dynamical variable along UPOs of the Kuramoto-Sivashinsky system. We found more than 650 UPOs of the periods from 0.87072 through 12.30608, corresponding from 1 through 14 Poincaré map periods (PERIODs), respectively. Detected UPOs are classified into three types. UPOs embedded in a chaotic attractor are classified into the first type. UPOs outside a chaotic attractor which mediate an attractor merging crisis at a different parameter value are classified into the second type. Before the merging crisis the stable manifold of the UPO forms the basin boundary of two chaotic attractors and the orbit becomes embedded in the big attractor after the merging crisis. Other existing UPOs which are outside a chaotic attractor are classified into the third type.

We investigate time-averaged properties of UPOs of the first type which are embedded in a chaotic attractor. 576 UPOs among all detected UPOs are classified into the first type. In Fig. 1 ( $a_1, a_2$ ) projection of a UPO (right) of the first type is shown in contrast with that of a chaotic attractor (left). We define the Poincaré map

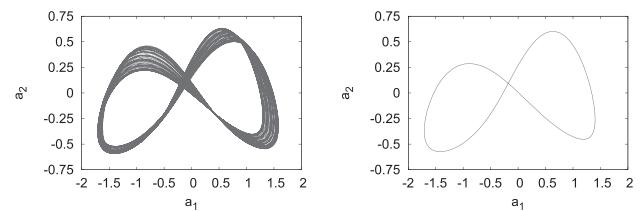


Fig. 1. Projections of a chaotic attractor (left) and a UPO ( $T=0.870729$ ) (right) onto  $a_1$ - $a_2$  plane.

by the Poincaré section  $a_1 = 0$  with  $da_1/dt > 0$ . In our numerical calculation, we identified most of UPOs with PERIOD (period of the Poincaré map) less than or equal to 12.

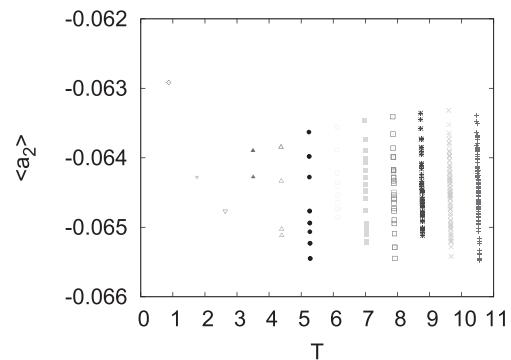


Fig. 2. Time averages  $\langle a_2 \rangle$ s ( $\langle a_2 \rangle \equiv \int_{t=0}^T a_2 / T dt$ ) along UPOs with period  $T$ . UPOs are classified by the PERIODs (period of the Poincaré map), which are distinguished by the symbols.

We now calculate the time average of  $a_2$   $\langle a_2 \rangle \equiv \int_{t=0}^T a_2 / T dt$  along each UPO with period  $T$ .  $\langle a_2 \rangle$ s along UPOs take similar but different values around the average value of  $\langle a_2 \rangle$ s along chaotic segments (-0.06477) (Fig. 2). Then we would like to see the distributions of  $\langle a_2 \rangle$  by classifying UPOs by the PERIODs. Fig. 3 shows the distributions of  $\langle a_2 \rangle$ s along UPOs for PERIOD  $N (= 7, 8, \dots, 12)$ , which are normalized so that the sum over all UPOs is unity for each  $N$ . We can

\* 本研究は京都大学数理解析研究の山田道夫氏との共同研究に基づく。  
E-mail:salki@math.sci.hokudai.ac.jp

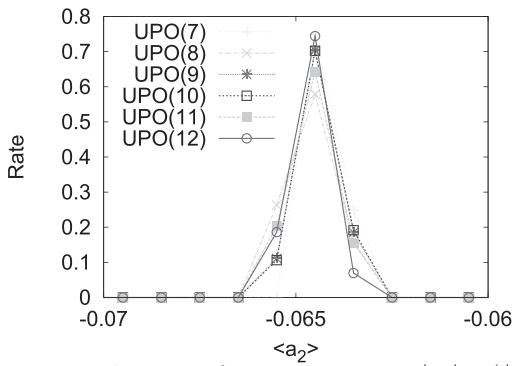


Fig. 3. Distribution of time averages  $\langle a_2 \rangle$ s ( $\langle a_2 \rangle \equiv \int_{t=0}^T a_2/T dt$ ) along UPOs with PERIOD  $N (= 7, \dots, 12)$ , which are similar to each other.

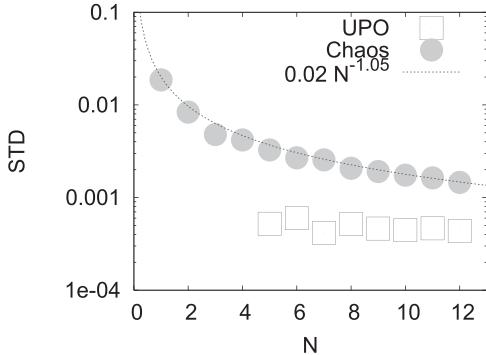


Fig. 4. Standard deviation of the distribution of  $\langle a_2 \rangle$ s along UPOs with PERIOD  $N$ (+), and that along  $10^5$  chaotic segments with the time lengths  $T (= 0.8774 \cdot N)$ (x), with  $0.02N^{-1.05}$ (line) for comparison.

find that the distributions have similar shapes, indicating that even longer UPO is not necessarily suitable for evaluation of  $a_2$  averaged along a long chaotic orbit. This may be contrary to the expectation that an UPO with longer period would give better approximations to statistical properties of chaotic orbits. The property can be seen clearly by comparing standard deviations of  $\langle a_2 \rangle$  of UPOs and segments of chaotic orbits with similar time lengths. Actually in Fig. 4 the standard deviations of the density distribution of  $\langle a_2 \rangle$ s along UPOs with PERIOD  $N$  are nearly constant as  $N$  increases. The figure also shows the standard deviations of  $\langle a_2 \rangle$ s along segments of chaotic orbits with time length  $T = N \cdot 0.8774$ , where 0.8774 stands for the corresponding recurrent time to the Poincaré section. We see that as  $N$  increases, the latter standard deviation decreases nearly as  $N^{-1.05}$ . The difference between the distributions of time averages along UPOs and along segments of chaotic orbits is clearly observed in Fig. 5.

We have investigated time averages of dynamical vari-

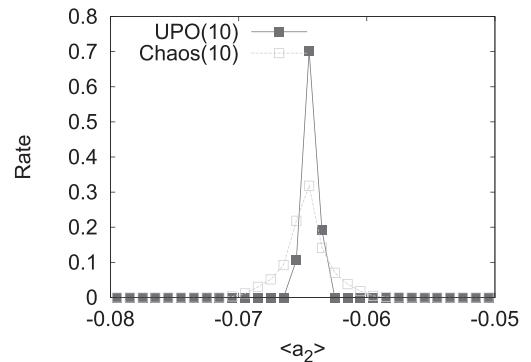


Fig. 5. Distributions of  $\langle a_2 \rangle$ s along UPOs with PERIOD 10 ( $\langle a_2 \rangle = -0.06442$ ) (average period=8.7625) in comparison with that along  $10^5$  chaotic segments with the time-length  $T (= 0.8774 \cdot 10)$  ( $\langle a_2 \rangle = -0.06477$ ). Time averages of  $\langle a_2 \rangle$  along UPOs are localized around the mean value along a chaotic orbit.

ables along UPOs in the Kuramoto-Sivashinsky equation. By using more than 650 UPOs detected from the system we found that time averaged properties along the set of UPOs and a set of segments of chaotic orbits with finite lengths are significantly different from each other. In addition, a longer UPO is not necessarily advantageous compared to a shorter UPO to estimate mean properties of the chaotic state as long as our numerical computations are concerned. The result is similar to those obtained for the case of ODEs (the Lorenz system, the Rössler system and a 6-dimensional business cycle model)[3]. It implies that we can employ a short UPO for the estimation of the mean properties of the chaotic state without significant reduction of plausibility. It has been found in some fluid dynamical systems that only a few UPO with low periods give fairly good approximations to some statistical properties [4]. Our result about the Kuramoto-Sivashinsky equation suggests that the estimation by using a short UPO is as reliable (or unreliable) as that by using a long UPO.

## 参考文献

- [1] Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves and Turbulence*, Springer Series in Synergetics, Vol. 19 (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
- [2] F. Christiansen, P. Cvitanović, and V. Putkaradze, *Nonlinearity* **10**, 55 (1997).
- [3] Y. Saiki and M. Yamada, *Phys. Rev. E* **79**, 015201 (2009).

- [4] G. Kawahara and S. Kida, *J. Fluid Mech.* **449**, 291  
(2001).

# fMRI を用いたヒト頭頂間溝視覚野の集団受容野推定

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

## 1はじめに

頭頂間溝は背側視覚経路に位置し、視覚的注意・眼球運動・視覚性短期記憶など多くの知覚・認知過程に関わる領域であることが知られている。近年、fMRI を用いた研究により頭頂間溝にレチノトピー（網膜部位再現性）を持つ複数の視覚野が存在することが明らかにされてきた[1]。しかし各領域の機能特性については未知の点が多い。

本研究においては、視覚皮質を特徴づける重要な性質である受容野に着目した。受容野とはニューロンの活動を引き起こす空間範囲を指す [2, 3]。fMRI によりボクセル単位の集団受容野 (population receptive field, pRF) を推定し、頭頂間溝視覚野と低次視覚野においてその特性を比較した。

## 2 方法

実験参加者は 12 名であった。刺激として回転

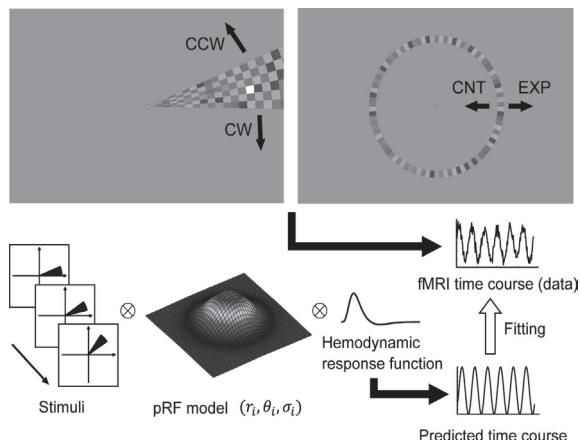


図 1：受容野推定の方法

または拡大・縮小する多色チェックマーク刺激 [4] を用いた (図 1)。頭頂葉付近の領域をより強く賦活させるため、チェックマークのランダムな輝度変化を報告させる注意課題を課した。反時計回り(CCW)、時計回り(CW)、拡大(EXP)、縮小(CNT)の 4 条件を各 1~3 run 行った。各 run は 360 秒 (60 秒 × 6 周) または 660 秒 (60 秒 × 11 周) であった。撮像は 3 テスラ MR 装置 (MAGNETOM Trio, Siemens) を用いて行った (voxel size = 3 × 3 × 3 mm, matrix size = 64 × 64, 30 coronal slices, TR = 2 sec, TE = 30 ms)。

fMRI 応答に前処理 (頭部運動補正、撮像タイミング補正、線形成分除去、コントラストへの変換) を施したのち、実験参加者ごとに解剖画像を用いて作成した大脳皮質表面ポリゴンモデル上にサンプリングした。サンプリングは、モデルの各ノードより半径 3 mm 以内に位置するボクセルの応答を平均することで行った。次にノードごとの時系列応答に 2 次元ガウシアンモデルをフィッティングし、受容野推定を行った (図 1) [3, 4]。得られた各ノードの受容野パラメータ (角位置、偏心度、大きさ) を皮質表面モデル上にマッピングし、角位置マッピングの結果をもとに視覚野の同定を行った。同定された視覚野ごとに受容野パラメータの特性を評価した。

## 3 結果

### 3.1 視覚野の同定

集団受容野角位置マッピングの結果をもとに、頭頂間溝内において 5 つの領域 (IPS0, IPS1, IPS2, IPS3, IPS4) を同定した。IPS0 は横後頭溝

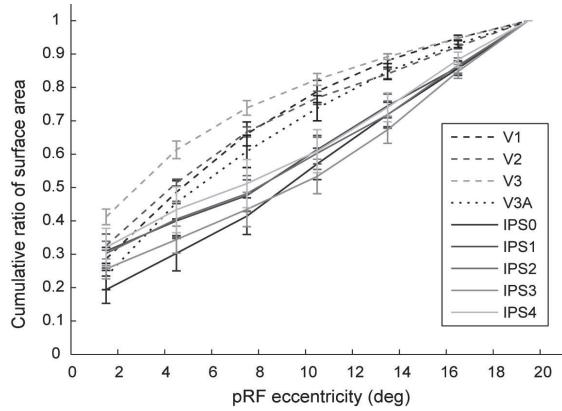


図 2：視野偏心度毎の皮質表面積の累積比率

と頭頂間溝の交点に見出され、IPS1 から先の領域は後頭側から前頭側にかけて位置し、半視野表象が順次繰り返されていた。同様にして低次視覚野 (V1, V2, V3) の同定も行った。

### 3.2 視野偏心度ごとの皮質面積

各視覚野のデータを視野偏心度 3 度ごとの区間に区切り、皮質面積の累積比率を区間ごとに求めた (図 2)。頭頂間溝視覚野においては、周辺視野が皮質面積全体に占める割合が低次視覚野 (V1, V2, V3) に比べて大きかった。このことは、低次視覚野では中心視野部分の処理に多くの資源が割かれているのに対し、頭頂間溝視覚野では周辺視野の処理により多くの資源が割り当てられていることを示す。

### 3.3 受容野の大きさと視野偏心度

視野偏心度 3 度ごとの区間における受容野の大きさの平均を求めた (図 3)。低次視覚野、頭頂間溝視覚野の双方において受容野の大きさは視野偏心度に比例して増大した。これは、中心視野は小さな受容野によってカバーされ微細なスケールの処理が行われ、周辺視野では大きな受容野により大域的な処理が行われていることを示すものである。一方、低次視覚野においては視覚情報処理の階層を上がるにつれて受容野の大きさが系統的に拡大する ( $V1 < V2 < V3$ ) という先行研究と同様の結果が得られた [2, 3] が、頭頂間溝視覚野においては視覚野間で受容野の大きさに差は見られなかった。

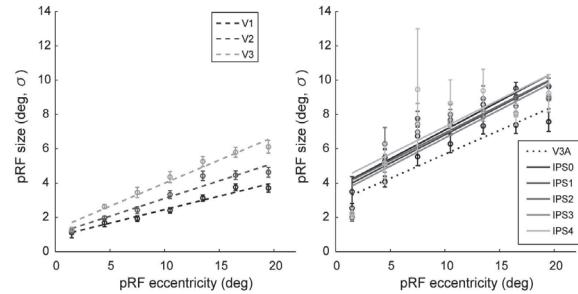


図 3：受容野の大きさと視野偏心度の関係

## 4 まとめ

fMRI を用いて頭頂間溝視覚野の受容野特性を調べることが可能であることが示された。頭頂間溝視覚野では低次視覚野に比べて周辺視野が表象されている割合が大きかった。また低次視覚野同様に受容野の大きさが視野偏心度とともに増大することがわかった。一方、頭頂間溝視覚野においては低次視覚野とは異なり、視覚野間で受容野の大きさに系統的な差がみられなかった。このことは、頭頂間溝の視覚野間の関係は初期視覚野間に見られるような階層構造とは異なり、並列性・独立性が比較的高いことを示唆する。

## 参考文献

- [1] Silver, M. A. & Kastner, S. (2009) Topographic maps in human frontal and parietal cortex. *Trends. Cogn. Sci.*, 13, 488-495.
- [2] Yamamoto, H., Ban, H., Fukunaga, M., Tanaka, C., Umeda, M. & Ejima, Y. (2008) Large- and Small-Scale Functional Organization of Visual Field Representation in the Human Visual Cortex. In Portocello, T. A. & Vellotti, R. B. (eds.), *Visual Cortex: New Research*. Nova Science, pp. 195-226.
- [3] Dumoulin, S. O. & Wandell, B. A. (2008) Population receptive field estimates in human visual cortex. *NeuroImage*, 39, 647-660.
- [4] Swisher, J. D., Halko, M. A., Merabet, L. B., McMains, S. A. & Somers, David C. (2007) Visual topography of human intraparietal sulcus. *J. Neurosci.*, 27, 5326-5337.

# フラグメント分子軌道法を用いた光合成反応中心の電子移動経路解析

鬼頭(西岡)宏任、 安藤耕司

京都大学大学院理学研究科

## 1 INTRODUCTION

光合成や内呼吸などの生体エネルギー変換では、蛋白質環境下における補因子分子(クロロフィルやヘム、鉄硫黄クラスターなど)の間の電子移動反応が重要な役割を果たしている[1]。この電子移動は、補因子間を電子が長距離(5~30Å)トンネル移動することで反応が実現されている。そのため、トンネル媒体である蛋白質の構造や化学的性質が、マーカスの式中の電子的相互作用項( $T_{DA}$ )を介して反応速度( $k_{DA}$ )に大きく影響する[1]。

$$k_{DA} = \frac{\hbar}{2\pi} |T_{DA}|^2 \frac{1}{\sqrt{4\lambda\pi k_B T}} \exp\left[-\frac{(-\Delta G - \lambda)^2}{4\lambda k_B T}\right]$$

有機分子内電子移動反応において、ドナーとアクセプターを結ぶ架橋分子が電子のトンネル移動を媒介するメカニズムは、高精度第一原理電子状態計算を用いて良く調べられている[2]。一方、生体電子移動系では巨大な蛋白質を扱うための計算コストが問題となり、第一原理電子状態計算を用いた研究はほとんど行われてこなかった。

そこで我々は、巨大分子系の電子状態を解くために開発されたフラグメント分子軌道(FMO)法[3]を利用した新しい電子移動理論解析スキームを開発した[4]。FMO法は、巨大分子を小さなフラグメントに分割し、各フラグメントの電子状態を基に系全体のエネルギーを見積もることで計算コストを劇的に減らしている[3]。各フラグメントの計算ステップは独立性が高く並列計算に向いており、GAMESSなどのアカデミックフリーな汎用電子状態計算プログラムに実装され公開されている。常行らが開発した FMO-LCMO 法[5]を利用すると、FMO 計算で出力されるフラグメントの分子軌道係数と軌道エネルギーから、系全体のハミルトニアンや波動関数を求めることができる。

我々のスキームでは、この FMO-LCMO ハミルトニアンを基に、 $T_{DA}$  項の値を一般化マリケン・ハッシュ(GMH)法または架橋グリーン関数(bridge GF)法から、電子移動経路をトンネル電流解析法から計算することで、低計算コストかつ簡便に第一原理精度の理論解析が実行できる[4,6]。

## 2 光合成反応中心の電子移動

図 1(a)は光合成バクテリア *Blastochloris viridis* の反応中心蛋白質である。光捕集系で獲得、輸送された励起エネルギーによりバクテリオクロロフィル(BChl)の対(Special Pair; P)が励起され、L サブユニット側のバクテリオフェオフィティン(H<sub>L</sub>)に電子移動(光誘起電荷分離)が起こる。電荷分離後に、移動した電子が元の P に戻ると、エネルギーが熱として放出されてしまう(電荷再結合)。そこで H<sub>L</sub>からメナキノン(MQ)、MQ からユビキノン(UQ)と電子移動(電荷移動)を連続的に引き起こすことで、電荷分離の距離を大きくして電荷再結合を防いでいる [1]。

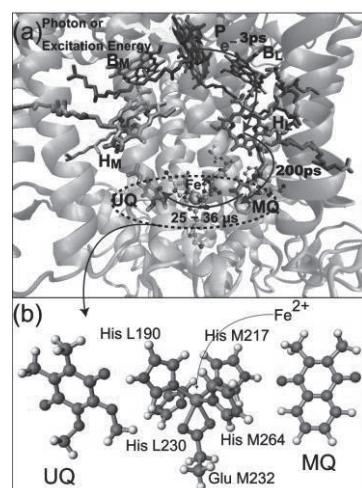


図 1 (a)光合成反応中心と補因子間の電子移動反応、(b)電子状態計算に使用した MQ から UQ への電子移動モデル系

### 3 メナキノンからユビキノンへの電子移動におけるトンネル機構の理論解析

我々の理論解析手法を反応中心(RC)のメナキノン(MQ)からユビキノン(UQ)の電子移動系に適用した結果を紹介する[6]。X線結晶構造データから図1(b)に示した部分を取り出して、電子状態計算に使用した。MQとUQの間には、高スピニン( $S=2$ )状態の非ヘム鉄(Fe<sup>2+</sup>)が存在し、四つのヒスチジン(His)と一つのグルタミン酸(Glu)がFe<sup>2+</sup>に配位している。分光実験から、Fe<sup>2+</sup>を他の二価金属イオンに置換したRCで電子移動速度が野生型RCとほぼ同じであること、Fe<sup>2+</sup>を枯渇させたRCでも半分程度しか遅くならないことが分かっている[7]。この実験結果は、Fe<sup>2+</sup>が電子トンネル移動経路として使われていないことを示していると解釈してきた。そこで、高スピニンFe<sup>2+</sup>状態に加えて、Fe<sup>2+</sup>が低スピニン( $S=0$ )状態にある場合、亜鉛イオンZn<sup>2+</sup>に置換した場合、Fe<sup>2+</sup>を取り除いた場合の理論解析を実行した。

図2は、電子的相互作用項( $T_{\text{DA}}$ )の計算結果である。野生型の $T_{\text{DA}}$ 値をマーカスの速度式に代入すると $9\sim10\mu\text{s}$ の速度値が得られる。これは他のパラメータ推定値( $-\Delta G = 0.07\text{ eV}$ 、 $\lambda = 1.0\text{ eV}$ )の精度も考慮すると、実験値 $25\sim36\mu\text{s}$ と良く対応している。また、マーカス式から速度は $T_{\text{DA}}$ の二乗に比例するため、図2の計算結果は、Fe<sup>2+</sup>の枯渇・Zn<sup>2+</sup>置換の実験結果を再現している。

図3はフラグメント間トンネル電流の計算結果である。高スピニンFe<sup>2+</sup>を含む野生型(a)では、主要トンネル経路としてFe<sup>2+</sup>とHis L190が使われている。一方、低スピニンFe<sup>2+</sup>の場合(b)ではトンネル電流の逆流が大きくなり、図2で示した $T_{\text{DA}}$ 値の減少をもたらしている。Zn<sup>2+</sup>に置換した場合(c)、金属イオンを介するトンネル電流が減少し、MQからHis M217のトンネル電流が大きくなる。金属イオンが欠損した場合(d)は、ほぼHis M217とHis L190のみを使って、トンネル電流がスムーズに流れる結果になった。

我々の解析結果(図3)では、従来の仮説と異なり、金属イオンが主要経路に寄与し、金属イオンの置換・欠損によって経路が大きく変化した。しかし、そのトンネル経路を使って伝播される $T_{\text{DA}}$ 値(図2)は野生型とあまり変わらず、実験結果[7]を再現

する。我々の解析によって、非ヘム鉄イオンを介したトンネル機構の微視的描像を初めて明らかにすることができた[6]。

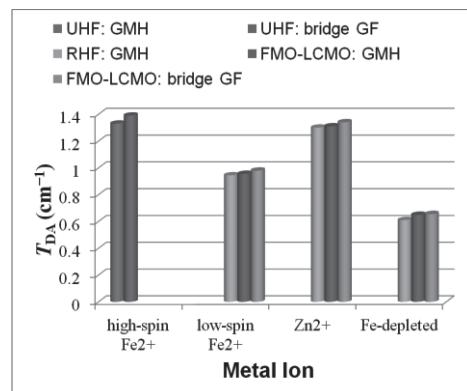


図2. 電子的相互作用の計算結果(基底関数6-31G\*を使用)

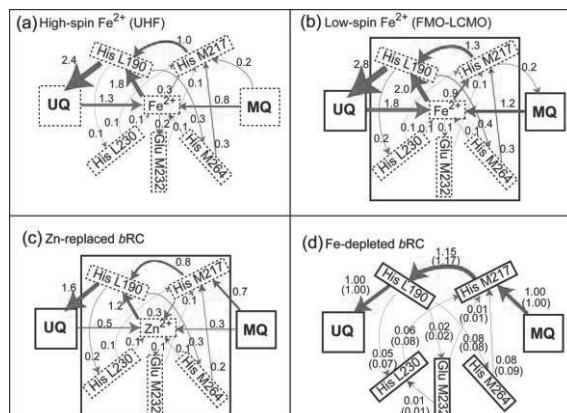


図3. トンネル電流マップ(基底関数6-31G\*を使用)

#### 4 謝辞

本研究は、スーパーコンピュータ共同研究制度(若手奨励枠)と科研費新学術領域研究「π空間」(領域番号2007)による。

- [1] 堀谷俊昭(1998)『光・物質・生命と反応(下)』20章と23章, 丸善株式会社
- [2] H. Nishioka and K. Ando, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 13, 7043 (2011)
- [3] K. Kitaura, et al., *Chem. Phys. Lett.* 313, 701 (1999).
- [4] H. Nishioka and K. Ando, *J. Chem. Phys.* 134, 204109 (2011).
- [5] S. Tsuneyuki, et al., *Chem. Phys. Lett.* 476, 104 (2009).
- [6] H. Kitoh-Nishioka and K. Ando, *J. Phys. Chem. B* (<http://dx.doi.org/10.1021/jp3062948>).
- [7] R. J. Debus, et al. *Biochemistry* 25, 2276 (1986).

## H-matrices（階層型行列）法を用いた準動的地震発生サイクル シミュレーションの省メモリ化・高速化(2)

平原和朗<sup>1</sup>・大谷真紀子<sup>1</sup>・高橋康人<sup>2</sup>・堀高峰<sup>3</sup>・兵藤守<sup>3</sup>

<sup>1</sup>京都大学大学院理学研究科・<sup>2</sup>同志社大学大学院工学研究科・<sup>3</sup>海洋研究開発機構地球内部ダイナミクス領域

2011年3月11日に発生したマグニチュード(M)9.0の東北地方太平洋沖地震を受けて、今後30年以内に発生すると危惧されている、次期南海トラフ巨大地震モデルについて、見直しが行われている。こういった超巨大地震の発生解明・予測に向けて、スーパーコンピュータ上に日本列島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は、大規模・マルチスケールとなり、シミュレーションコードの省メモリ化・高速化が必須である。昨年まで3年間プログラム高度化支援事業に採択され、Hierarchical-Matrices(H-matrices 階層型行列)法による地震発生サイクルシミュレーションの省メモリ化・高速化を行なってきた。その成果について報告する。

### 1はじめに

2011年3月11に発生した東北地方太平洋沖地震はマグニチュード(M)9.0の超巨大地震で、強震動特に巨大な津波を生じ、未曾有の東日本大震災をもたらした。残念ながらこのM9.0超巨大地震の発生を想定できなかったのは事実であるが、1年以上経過した今、陸域のみならず海域のデータから多くのことが分かってきている。これはつい最近実用化された海域での地殻変動観測に負うところが大で、非常に貴重なデータの賜物であるが、依然として地震発生および今後の余効すべりについて解明されているとは言えない。また、西南日本では、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し、被害総額は国家予算規模に上ると想定してきた(中央防災会議,2003)。しかしながら、東北地方太平洋沖地震の発生を受けて、南海トラフ巨大地震の規模およびそれに伴う被害想定が見直され、地震の規模はM9.0、死者・行方不明者は32万人に上るとされている(内閣府、2012、中央防災会議、2012)。

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。なぜM9.0東北地方太平洋沖地震が発生したのか、また次期南海地震がいつ、どういった破壊様式で起きるのかが、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、地震発生サイクルシミュレーションが行われている。大規模マルチスケールになるため、シミュレーションの省メモリ化・高速化が必須である。

これまで地震発生サイクルシミュレーションでは、高速化の手法として、高速フーリエ変換法(FFT)や、高速多重極法(Fast Multipole Method: FMM)の適用が行われてきた。しかしながら、FFTは問題の対称性を必要とし、FMMはすべり応答関数の形に制約があり、地表を含む沈み込み帯のシミュレーションには、現状ではこれらの方法の適用には問題がある(大谷・他, 2010)。

このため、採択されたプログラム高度化支援事業では、Hierarchical-Matrices(H-matrices、階層型行列)法を用いた準動的地震発生サイクルシミュレーションの省メモリ化・高速化に取り組んできた。昨年度報告(平原・他、2011)に重複す

る部分も多いが、まず地震発生サイクルシミュレーションの基礎式、階層型行列 (H-matrices) 法による省メモリ化・高速化の基本的な考え方の説明から報告を始める。

## 2 地震発生サイクルシミュレーション

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  $N$  個の小さなセル（小断層）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 (Hori et al., 2004; Hori, 2006)。

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

ここで、 $\tau_i$ ,  $V_i$ ,  $\delta_j$ ,  $V_{pl,j}$ ,  $K_{ij}$ ,  $G$ ,  $\beta$  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)

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

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

を連立させて各プレート境界セルにおけるすべりの発展をシミュレートする。実際には、式(1)と(2)を時間で微分し連立させ、速度の時間微分を得て、これを式(4)と連立させて、時間刻み幅可変の 5 次 Runge-Kutta 法 (Numerical Recipes, 1992) により積分している。

ここでの変数の詳細は Hori (2006) に譲るが、式(2)のように摩擦がすべり速度  $V_i$  と状態変数  $\Theta_i$  (その時間発展は式(3)に従う) との関数となつており、 $\sigma_i$  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。

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。

## 3 H-matrices (階層型行列) 法の適用

前セクションで述べたように、実際的な大規模マルチスケールシミュレーション問題に取り組むには、コードの省メモリ化・高速化が必須である。

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）の省メモリ化・高速化を考える。分割したセルの数を  $N$  とすると、これには、 $O(N^2)$  のメモリおよび演算回数を要する。このすべり応答関数  $K_{ij}$  はセル  $i$  と  $j$  の距離のマイナス 3 乗で減少する性質を持ち、すべり遅れベクトル積の演算に H-matrices 法を用い、省メモリ化・高速化を図ることが可能である。

H-matrices とは、密行列を階層的な行列に分解し、各小行列を低ランク行列で近似したもので、

密行列を有効に圧縮した元の行列に比べて疎な近似行列表現である (Börm et al., 2009)。この構造に基づき、行列ベクトル積などの行列演算を小さなメモリ量で高速に行うことができる。なお、H-matrices 作成および演算に必要なライブラリー (HLib) は、マックスプランク研究所から公開されている (<http://www.hlib.org/hlib.html>)。

地震サイクルシミュレーションコード RSGDX (Hori, 2006) は、 $N \times N$  すばり応答関数行列の計算を行う部分とこの行列を入力して各セルにおけるすばり発展を計算する部分に分かれている。まず、HLib を用いて、すばり応答関数行列を H-matrices 表現により圧縮して出力するように改良した。この部分は、並列化されていない。従って、T2K オープンスーパーコンピュータシステムでは、1 ノードの共有メモリで使用できるのは 28GB なので、現状では圧縮効率にもよるがおよそ  $N=1,900,000$  セルくらいまでの計算が上限となる。これに対し、すばり発展を計算する部分は並列化を行っている。以下ではプロセス数 64 を用いた計算例を示している (Ohtani et al., 2011)。

半無限均質弾性媒質中に傾斜角  $10^\circ$  の平面プレート境界 (600km x 240km) を設定し、N 個の 3 角形セルに分割した際のすばり応答関数行列を例に、H-matrices 作成の手順を述べると以下のようになる：

1) セル番号の並び替え：できるだけ距離の近いセル同士が連なるように、セル番号を並び替える。

#### 2) $\eta$ -admissibility 条件

$(\min\{\text{diam}(Q_r), \text{diam}(Q_s)\} \leq \eta \text{dis}(Q_r, Q_s))$  による小行列への分割 :  $n \times n$  小行列 M の  $n$  個のレシーバおよび  $n$  個のソースセルに対応する領域 ( $Q_r$  および  $Q_s$ ) の大きさを  $\text{diam}(Q_r)$ ,  $\text{diam}(Q_s)$ , 領域間の距離を  $\text{dis}(Q_r, Q_s)$  とすると、この条件を満たしていないければ、 $Q_r$  と  $Q_s$  領域は近いとして更に小行列へ分割し、最小セル数  $n_{\min}$  になるまで分割を続ける。

3) 低ランク行列での近似：各  $n \times n$  小行列をランク  $k (< n)$  の  $n \times k$  行列 A, B で  $M = AB^T$  のように近似する。この際、相対近似精度  $\varepsilon_{ACA}$  を満たすようにランク  $k$  を決める (ACA 法)。

4) 再圧縮：更に各小行列の特異値 ( $\sigma_i$ ) を計算し、 $\sigma_i < \varepsilon \sigma_1$  に対する小さな特異値を除きランク

をさらに下げる。

上述したように、主として、 $n_{\min}$ ,  $\eta$  は H-matrices の構造を、 $\varepsilon_{ACA}$ ,  $\varepsilon$  は計算精度を決定する。Ohtani et al.(2011)によると、精度の検討の結果、 $\varepsilon = 10^{-4}$  以下に設定する必要があることが分かった。また、同じ問題でセル数 N を変えて検討したところ、例えば、 $\varepsilon = 10^{-4}$  の場合、 $N=128,000$  では、最外側の小行列のランクが 20 であるが、 $N=288,000$  では 98 となり急激に増加する現象が発生することが分かった。

実は、H-matrices を構築する際にもう一つパラメータ  $k_{ACA}$  を用いている。admissible 小行列のランクの決定は、主として  $\varepsilon_{ACA}$  によるが、それに加えて admissible 小行列の取り得る最大のランク  $k_{ACA}$  を指定している。admissible 小行列の各要素に対応するソースセルと観測セルの距離は大きいため、その絶対値は小さい。admissible 小行列の近似精度を相対誤差で見積もっているため、応力評価と言う点ではランクを落としてもそれ程大きな誤差を生じないと期待される。そこで  $N=288,000$ 、 $\varepsilon = 10^{-4}$  の場合、 $k_{ACA}=10,20,40,60,80$  と変化させて、 $k_{ACA}=100$  の場合（この場合はランクは  $\varepsilon_{ACA}$  で決まっている）のすばり速度の時間履歴を比較して、 $k_{ACA}=20$  以上であれば十分な精度を持っていることが分かった (Ohtani et al., 2011)。

このように適切に各種パラメータを設定することによって、計算精度を保ちながら、メモリ量を  $O(N)$ 、演算時間を  $O(N) \sim O(N \log N)$  に抑えることが可能であることが分かった。

以上は説明と前回までのまとめである。以下に昨年度高度化事業で検討した内容について述べる。

## 4 H-matrices (階層型行列) 法適用における並列化性能向上の試み

前述のとおり、H-matrix を作成する部分は並列化されていないが、作成された H-matrix を呼び出し地震発生サイクル計算を行う部分は MPI により並列化されている。上記の問題設定で、N を変え、並列計算に使用するプロセス数 p を変えて並列化性能を見たのが、図 1 である。

セル数 N にあまりよらず、プロセス数 p=100 あたりまでは並列化性能は上がるが、p=100 あた

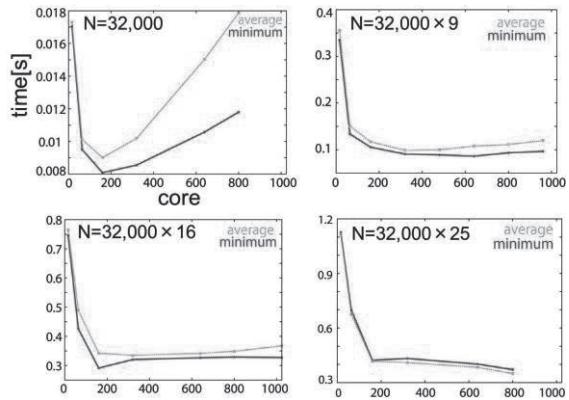


図1 使用するプロセス数( $p$ )あたりの平均および最小CPU時間 ( $N$ はセル数、 $\varepsilon = 10^{-4}$ ,  $k_{\text{ACA}} = 20$ の場合)

りを超えると並列化効率は落ちてくる。

この  $p=100$  程度以上の並列数での並列化性の劣化は、H-matrix の部分行列 rk-matrix の性質に起因して、隣接間プロセスでの冗長計算となる部分が目立ち、その結果に起因していると考えられる。高度化支援の結果、この劣化の大きな原因の1つとなっているプロセス負荷バランスの改善を行うため、H21年度下期には1次元分割並列化から2次元並列化による改善を実施した。しかし、H-matrix の構造に起因した負荷のインバランスが、まだ潜在的に存在していたので、更に改良を行い、スケーラビリティの改善を図った。

2次元分割時の負荷バランスの悪化の原因是、各ランクに対応する小行列の割当個数の差によるもので、まず、rk-matrix の割り振り方を工夫して負荷バランスの改善を図った。具体的には、均等行分割を I 方向、列分割を J 方向とすると、J 方向への列分割後のプロセスへの割り当ては、単純に J 方向の分割幅内のものを割り当てるではなく、あるブロック幅単位にサイクリックにプロセスに割り当て、負荷バランスの改善を図る。この最適ブロック幅はなるべく小行列の最小サイズに近い値とする。

図2は、 $N=288,000$  の場合における、プロセス数  $p$  を変えた時の、1次元分割と2次元ブロックサイクリック分割（それぞれ最適分割パターン

(I 方向\*J 方向)  $p=1: 1*1$ ,  $p=4: 2*2$ ,  $p=16: 4*4$ ,  $p=64: 8*8$ ,  $p=256: 32*8$ ）における演算時間および行列演算時間のスケーラビリティを示す。わずかではあるが、2次元ブロック分割で並列性能

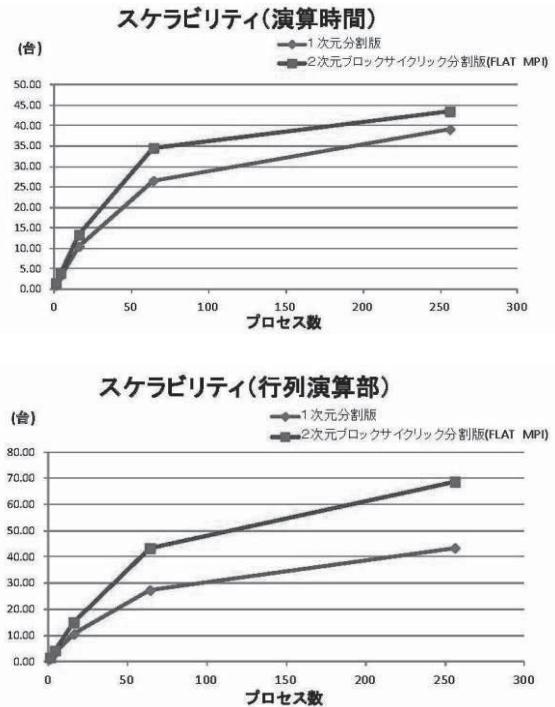


図2 1次元分割と2次元分割におけるスケーラビリティ（上図：演算時間、下図：行列演算時間）比較

の向上が見られる。

演算時間については改善が図られているが、2次元分割の全体時間では、 $p=64$  の時最小になっている。そこで、2次元ブロックサイクリック分割版において、行列演算処理の rk-matrix に対するドット積計算およびベクトル計算部に対して、OpenMP #pragma ディレクティブを明示的に指定してスレッド並列化を行った。また、その他の処理については自動並列化オプションを追加し、ハイブリッド並列実行を可能とした。

ハイブリッド並列実行の場合、4スレッド実行時が最速となり、以後スレッド数を増加しても逆に性能が悪化した。行列演算部のループ回数があまり大きくないため、スレッド数を増やすと逆にスレッド間のオーバーヘッドが大きくなりコストを圧迫する傾向にあると思われる。ハイブリッド並列実行時に最速となるスレッド数を4として、プロセス数を変更させた場合の性能結果は図3の通りである。

この場合、同一コア数の FLAT MPI 実行時と比較すると、演算時間および行列演算部のスケール度合いは劣るが、高コア実行になるほどスケール

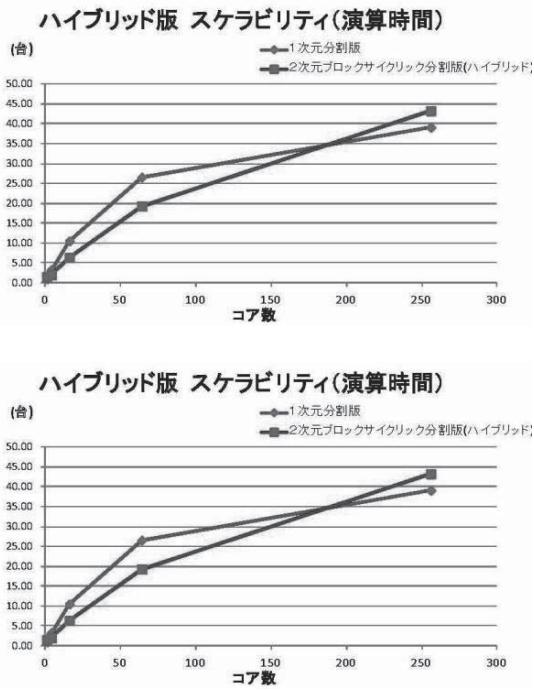


図3 ハイブリッド版におけるスケーラビリティ比較（上図：行列演算時間、下図：演算時間）

傾斜角度が線形に近くなっている。また、通信時間は同一コア数同士を比較すると、ハイブリッド並列実行の方がプロセス数が少なく済むため通信処理が減り、約2倍性能が良い。

またこの場合、コア数256の場合が全体時間もこれまでの計算の中で最小となっている。ハイブリッド並列実行を採用することにより、同一コア数でもプロセス数を抑えることができるので、初期化、通信時間、バリア処理の短縮により全体スループットを上げることができたと思われる。

## 5 終わりに

京大の計算機システムが変わったので、まだ、4で述べた並列化性能の向上部分は使っていないが、3年にわたる高度化支援を受けて、地震発生サイクルシミュレーションコードの、大幅な省メモリ化・高速化が図られ、2011年東北地方太平洋沖地震のような超巨大地震の地震サイクルの繰り返し計算が可能になり、地震発生の解明に大きく役立っている。

H-matrixの具体例として、2011年東北地方太平洋沖地震サイクルシミュレーションの例を示す。

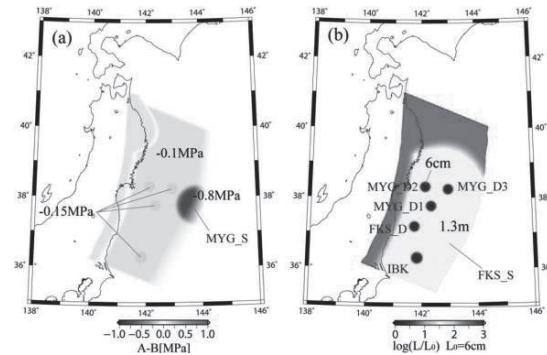


図4 2011年東北地方太平洋沖地震発生サイクルシミュレーションの摩擦パラメータ分布（左図：A-B、右図L）



図5 図4のモデル領域をN=200,704個の三角セルに分割した場合のすべり応答関数のH-matrix表示：数字は小行列のランクを表す。

図4は、2011年東北地方太平洋沖地震サイクルシミュレーションの摩擦パラメータ分布の一例を示したもので、左図は2で述べた摩擦パラメータA-B ( $=\sigma(a-b)$ )、右図はLの分布を表す。この領域をN=200,704個の三角セルに分割してシミュレーションを行なった場合のH-matrixを図5に示す(Ohtani,2012)。この場合、 $n_{min}^2=16^2$ 、 $\epsilon_{ACA}=0.9$   $\epsilon$ 、 $\epsilon=10^{-4}$ 、 $k_{ACA}=30$ といったパラメータを用いていている。数字は小行列のランクを示し結果としてO(N)のメモリ量になっていることが分る。

また、3で述べたNが大きくなるにつれ、外側の小行列のランクが大きくなるという現象に対し、ここではkACAを抑える方策をとっている。しかし、相対近似精度 $\epsilon_{ACA}$ でランクを決めているため、外側小行列では小行列要素の全体値が小さく、相

対近似精度では高精度になりすぎている。そこで、絶対精度でランクを決める方法が提唱されている(Bradley, 2011)。センターメンバーを中心とした我々のグループでは、別の方針として、現在、密行列近似を行う際、行列の規格化に基づいて部分行列の要求 tolerance  $\epsilon$ \_(ACA+)を決定する手法を開発中である(伊田・他, 2012、準備中)ことを付け加えて結びの言葉としたい。

謝辞：センターの中島・岩下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、富士通にはコードの高度化についてお教えいただいた。また、H-matrices 法適用による並列化性能向上の試みの議論及び図は富士通作成の報告書から借用させていただいた。謝意を表します。

最後に、地震発生シミュレーションを行う地球物理学者と計算機科学者の共同研究の場を与えていたいた高度化支援事業に厚く御礼申し上げる。

## 6 参考文献

Bradley, A.M., H-matrix and block error tolerances, arXiv:1110.2807v1[math.NA], 2011.

Börm, S., L. Grasedyck and W. Hackbusch, Hierarchical Matrices, Lecture Note, Max-Planck-Institut für Mathematik, 2006

中央防災会議、2003.

[http://www.bousai.go.jp/jishin/chubou/taisaku\\_nankai/nankai\\_top.html](http://www.bousai.go.jp/jishin/chubou/taisaku_nankai/nankai_top.html)

中央防災会議、2012.

[http://www.bousai.go.jp/nankaitrough\\_info.html](http://www.bousai.go.jp/nankaitrough_info.html)

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・大谷真紀子・高橋康人・堀高峰・兵藤守、全国共同利用広報版、2-30-35, 2011.

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

内閣府、南海トラフの巨大地震モデル検討会, 2012  
[http://www.bousai.go.jp/jishin/chubou/nankai\\_trough/nankai\\_trough\\_top.html](http://www.bousai.go.jp/jishin/chubou/nankai_trough/nankai_trough_top.html) 2012.

Numerical Recipes, Cambridge, 1992.

Ohtani, M., *Master Thesis, Graduate School of Science, Kyoto University*, 2012.

大谷真紀子・平原和朗、日本地球惑星科学連合 2010 年大会、幕張、2010.

Ohtani, M., K. Hirahara, Y. Takahashi, T. Hori, M. Hyodo, H. Nakashima, and T. Iwashita, *Procedia Computer Science*, 4 1456–1465, 2011.

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

# ジャイロ運動論に基づいた位相空間5次元Vlasov方程式による

## 乱流輸送のシミュレーション研究

今寺 賢志

京都大学大学院 エネルギー科学研究所 エネルギー基礎科学専攻

磁場閉じ込め核融合プラズマでは、密度勾配や温度勾配を自由エネルギー源として励起される不安定性の非線形発展の結果、系が乱流状態に移行し、複雑な輸送現象が現出する。このような現象を解明することを目的に、我々は第一原理に基づいた乱流輸送コードの開発を行ってきた。本稿では、平成23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)の基で行った並列化効率の改善成果と、大規模シミュレーションの結果について報告する。

### 1 研究背景

核融合プラズマでは、急峻な温度勾配を自由エネルギー源としてミクロな乱流が発生し、閉じ込めを劣化させる一方、非線形効果による自己組織化過程を通して、マクロな渦構造や層流(帶状流)が生成され、閉じ込めが改善される。このようなミクロとマクロが混在した複雑な揺らぎの微細構造やダイナミックスが、現象を大きく左右する。宇宙・天体プラズマでも、銀河・星形成時における降着円盤内の乱流現象や粒子加速現象などで、同様の過程が重要な役割を果たす。

このようなプラズマのダイナミックスをより正確に再現する方法として、6次元の位相空間に格子を設けて、速度分布関数を連続媒質として数値的に解く Vlasov シミュレーション(核融合プラズマでは、磁力線による旋回運動を平均化した位相空間5次元ジャイロ運動論的 Vlasov シミュレーション [1]) が世界的に広く用いられている。Vlasov シミュレーションは、粒子シミュレーションに比べて数値ノイズが低い半面、高次元の位相空間を直接扱うため、格子点数が膨大となり、位相空間の微細構造を保持したシミュレーションは容易ではない。特に、位相空間の微細渦構造やセパラトリックス近傍での引き伸ばしや畳み込みが、数値散逸(数値エントロピー)を増大させる要因となり、大きな障害となっている。

このような Vlasov シミュレーションの数値計

算手法として、これまでの歴史では、有限差分法や有限体積法を基礎とした解法が広く用いられてきた。それらは、空間微分や数値流束を評価する上で、物理的意味とは独立に、離散化したグリッド値をいかに「滑らか」に結ぶかを第一義の拘束条件としている。一方、我々のグループでは、そのようなシミュレーションに適用する数値計算手法として、支配方程式に基づいて物理的に意味のある拘束条件の下で離散化を行う「多重拘束マルチモーメント概念」を提案してきた [2]。この概念では、複数の物理モーメント値を参照することで精度を確保し、更にそれらを支配方程式のモーメントに沿って独立に時間積分することで、物理的に意味のある多重の拘束条件を課している(表1)。

	従来の差分概念	保存型 IDO 法の概念	多重拘束マルチモーメント概念
独立変数	グリッド値のみ	グリッド値とグリッド間積分値	グリッド値とグリッド間モーメント値
精度の向上	参照する区間を拡げる	参照する区間を拡げる	参照するモーメントの次元を上げる
急峻な構造の捕捉	3次精度の場合 f_{i-1}, f_i, f_{i+1}, f_{i+2} の4点を用いて差分を計算する。 f_i: グリッド値	2次精度の場合 f_i, f_{i+1} の2点を用いて差分を計算する。 ρ_{i+1/2}: グリッド間積分値	4次精度の場合 f_i, f_{i+1}, M_{i+1/2} (m=0,1,2) の3点を用いて差分を計算する。 M_{i+1/2}: グリッド間m次モーメント値

表1: 従来の差分概念と保存型 IDO 法、多重拘束マルチモーメント法の概念の比較

我々は、この概念を用いて、第一原理に基づいた乱流輸送コード（以下 GK5D コード）を開発し [3]、核融合プラズマ中の多階層乱流輸送に関する解析を行ってきた [4, 5]。本稿では、平成 23 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）の基で行った「位相空間 5 次元ジャイロ運動論的 Vlasov コードの並列化効率の改善」、「開放系プラズマ中の非局所輸送現象の解明」、「MHD-イオン系乱流間の多階層相互作用の解明」の 3 点について報告する。

## 2 位相空間 5 次元ジャイロ運動論的 Vlasov コードの並列化効率の改善

本共同研究では、100 テラフロップス級の大規模計算を行うために、位相空間 5 次元  $(x, y, z, v_{\parallel}, v_{\perp})$  GK5D コードに対して、新たに 3 次元  $(x, y, v_{\perp})$  領域分割を導入した。

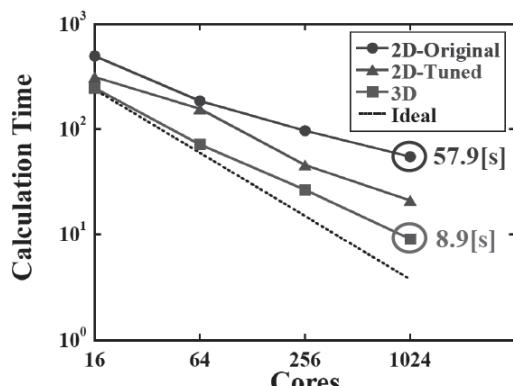


図 1：2 次元領域分割と 3 次元領域分割を用いた場合の計算時間（問題サイズ固定）

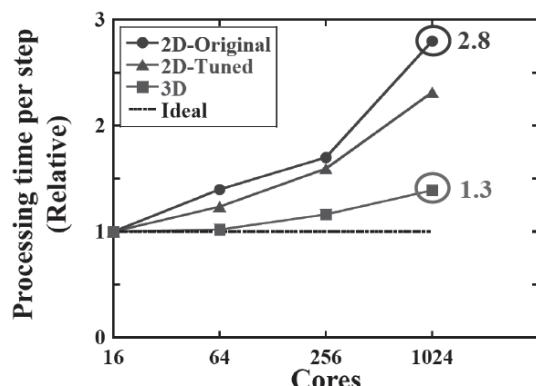


図 2：2 次元領域分割と 3 次元領域分割を用いた場合の 1 ステップあたりの計算時間（メモリ量固定）

図 1 は、従来の 2 次元  $(x, y)$  領域分割と新たに導入した 3 次元  $(x, y, v_{\perp})$  領域分割を用いた場合のそれぞれの計算時間を示している。問題サイズは固定で、2 次元領域分割については配列順序の最適化やキャッシュチューニングなどを行う前と後の両方を示している。この結果から、3 次元  $(x, y, v_{\perp})$  領域分割を用いた場合、チューニング前の 2 次元領域分割を用いた場合と比較して、約 6 倍程度早くなっていることがわかる。

一方、図 2 は、コアあたりのメモリ量を固定した場合のそれぞれの計算時間の相対量を、16 コアの場合を基準に示している。この結果から、3 次元  $(x, y, v_{\perp})$  領域分割を用いた場合、計算時間が半分以下になっていることがわかる。

これらの改善の理由としては、領域分割数を増やしたことによって、大規模計算における袖部の通信コストが下がったことが挙げられるが、さらに位相空間 5 次元 GK5D コードでは、時間発展方程式に  $v_{\perp}$  の空間微分を含まないため、 $v_{\perp}$  方向に袖部のデータ通信を行う必要がそもそもなく、結果として大幅に並列化効率が改善されたものと考えられる。

## 3 開放系プラズマ中の非局所輸送現象の解明

磁場閉じ込め高温プラズマでは、背景温度分布の勾配を不安定性の駆動源として、乱流が励起され、自己組織的に温度分布の緩和が引き起こされる。このような現象の一つとして、臨界温度勾配近傍で温度分布の硬直化を引き起こす Self-Organized Criticality (SOC) が挙げられ、ガウス統計では説明できないような速いスケールで、かつ非局所的な特性を持った輸送と関連していると考えられている。

本共同研究では、GK5D コードを用いることで、そのような非局所輸送が支配的となる開放系プラズマにおける乱流輸送特性を、帶状流の役割を中心に解析した。主な成果は以下の 2 点である。

- (1) 準定常状態では、熱流束は  $f^{-1}$  ( $f$ :周波数) の雪崩的な特性を持ち、温度分布が自己組織的に硬直化することが確認された。これは幅広い周波数領域で輸送現象が起きていること

を示しており、臨界輸送現象においてみられる典型的な特徴である。図3はその際の温度勾配の特性長の空間一時間変化を示している。内側、および外側の双方に大域的な雪崩現象が起きていることがわかり、その際の輸送の相関長を計測したところ、イオンジャイロ半径の15倍程度であり、乱流の相関長は5倍程度、温度分布の特性長は60倍程度であることから、それらの中間的なスケールで輸送が起きていることがわかった。

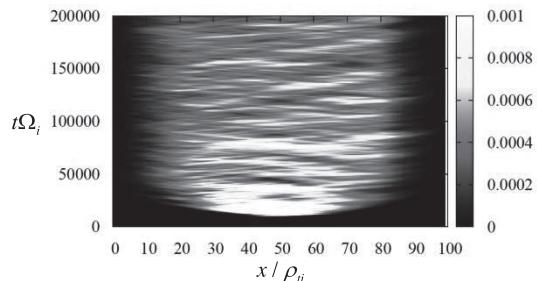


図3：開放系シミュレーションにおける熱流束の空間一時間発展

- (2) 外部からの熱の入出力値を変化させた場合のエネルギーの乱流と帶状成分の時間発展を調べたところ、熱入力の値を増加させても帶状成分はほとんど増加せず、乱流成分のみが増え、結果として帶状流のエネルギー配分率が低下することがわかった(図4)。これは熱輸送係数の増加に対応しており、帶状流のエネルギー配分率の低下が、温度分布の硬直化の一因であると考えられる。帶状流の配分率が増加しない原因としては、帶状流の励起される特性時間と比較して、輸送が半径方向に伝播する時間が早い可能性が考えられる。

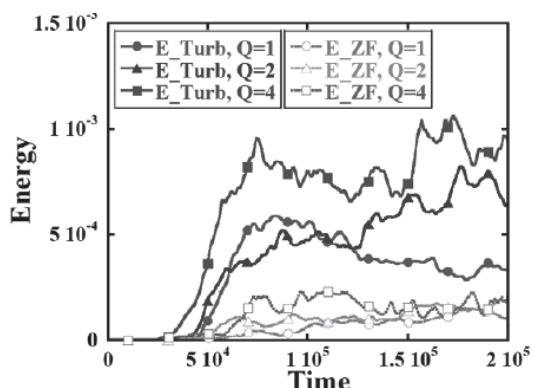


図4：外部からの熱の入力値を変化させた場合の帶状/乱流エネルギーの時間発展

#### 4 MHD-イオン系乱流間の多階層相互作用の解明

典型的な磁場閉じ込め核融合プラズマでは、磁気流体力学的(MHD)不安定性の結果、イオンジャイロ半径の数10倍程度の磁気島が形成される一方、温度勾配を駆動源として、イオン温度勾配(ITG)不安定性が励起され、イオンジャイロ半径程度の乱流構造が形成される。これまでには、単階層シミュレーションによってこれらは個別に解析されてきたが、本共同研究では、GK5Dコードを用いることで、それらの多階層間相互作用を線形領域において解析した。

図5は、ITG不安定性の結果、形成された静電ポテンシャルの空間分布と磁気島構造を示している。磁気島構造に伴う磁力線に沿って、静電ポテンシャルが引き伸ばされていることがわかる。

図6は、磁気島の幅が異なる運動論的シミュレーションによって得られたITGモードの分散関係を示している。磁気島によるモード間結合の結果、異なる波数のモードの成長率が等しくなっていることがわかる。このモード間結合によって、低波数から高波数にエネルギーが遷移し、高波数における有限ラーマー半径効果とランダウ減衰の結果、全体の成長率が小さくなる( $w=7, w=11$ )ことがわかった。一方で、 $w=11.7$ より大きくなると、新たな有理面が形成され、再び不安定化されることがわかった。

ジャイロ流体シミュレーションによる先行研究[6]では、図6で見られたITG不安定性の安定化がより顕著に見られたが、その原因是、両者の異なる散逸のメカニズムにあると考えられる。図7は、磁気島のない配位においてジャイロ運動論モデルとジャイロ流体モデルからそれぞれ得られるITGモードの分散関係を示している。ジャイロ流体モデルでは、特に低波数において散逸による安定化が起きるのに対して、ジャイロ運動論モデルでは低波数でも不安定であり、その違いが、磁気島がある配位での安定化の違いを生んでいるとを考えられる。

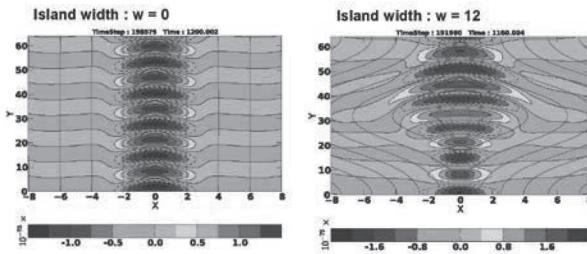


図5：磁気島がない場合（左）とある場合（右）におけるITG乱流構造

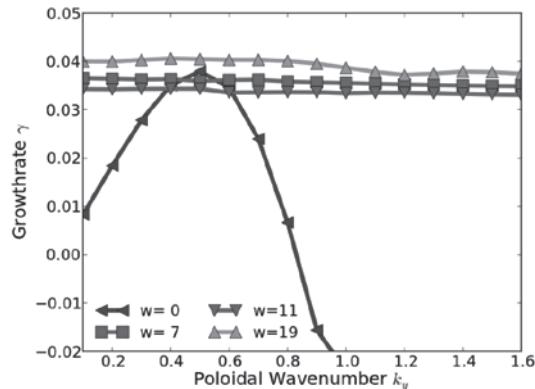


図6：磁気島がない場合（青）と磁気島の幅が  $w=7$ （緑）、 $w=11$ （赤）、 $w=19$ （水色）の場合におけるITGモードの分散関係

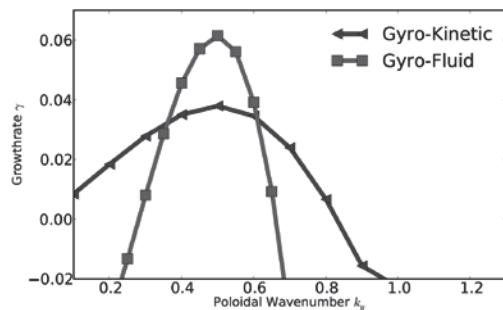


図7：磁気島がない場合における運動論モデル（青）と流体モデル（緑）から得られたITGモードの分散関係

## 5 総括と今後の課題

最後に本共同研究の成果についてまとめると、

- (1) GK5Dコードに対して、新たに3次元( $x, y, v_\perp$ )領域分割を導入することで、従来の2次元( $x, y$ )領域分割と比較して約6倍程度の高速化に成功した。
- (2) GK5Dコードを用いて、大規模な開放系乱流シミュレーションを行い、非局所輸送の基本

特性や、帯状流のエネルギー配分率の低下が温度分布の硬直化の一因であることを明らかにした。

- (3) GK5Dコードを用いて、マクロスケールの磁気島とミクロスケールのイオン系乱流を同時に解く大規模な多階層乱流シミュレーションを行い、ジャイロ流体シミュレーションで行われた同様の先行研究と比較して、イオン系乱流の成長率が磁気島の幅の変化に大きく依存しないことを明らかにした。

今後は、GK5Dコードをより現実に近いトロイダル配位に拡張し、スラブ配位において明らかとなつた物理現象を軸に解析を進めていく。

### Reference

- [1] “Gyrokinetic simulations of turbulent transport”, X. Garbet, Y. Idomura, L. Villard and T.-H. Watanabe, Nucl. Fusion, **50**, 043002 (2010).
- [2] “Numerical method for Eulerian Vlasov simulation based on Multi-Moment scheme”, T. Kawano, K. Imadera, J. Q. Li and Y. Kishimoto, Plasma Fusion Res., **6**, 2401097 (2011).
- [3] “Multi-scale turbulence simulation in magnetic fusion plasma”, J. Q. Li, K. Imadera, Z. X. Wang, P. Hilscher and Y. Kishimoto, Progr. Nucl. Sci. Tech., **2**, 64 (2011).
- [4] “Global profile relaxation and entropy dynamics in turbulent transport”, K. Imadera, Y. Kishimoto and J. Q. Li, Plasma Fusion Res., **5**, 019 (2010).
- [5] “Gyrokinetic study of the local entropy dynamics in turbulent plasmas with zonal flow”, K. Imadera, Y. Kishimoto, J. Q. Li and T. Utsumi, Plasma Fusion Res., **5**, S2050 (2010).
- [6] “Magnetic-island-induced ion temperature gradient mode”, Z. X. Wang, J. Q. Li, Y. Kishimoto, J. Q. Dong, Phys. Plasmas **16**, 060703 (2009).

## システム A 運転状況 (2012年5月～2012年9月)

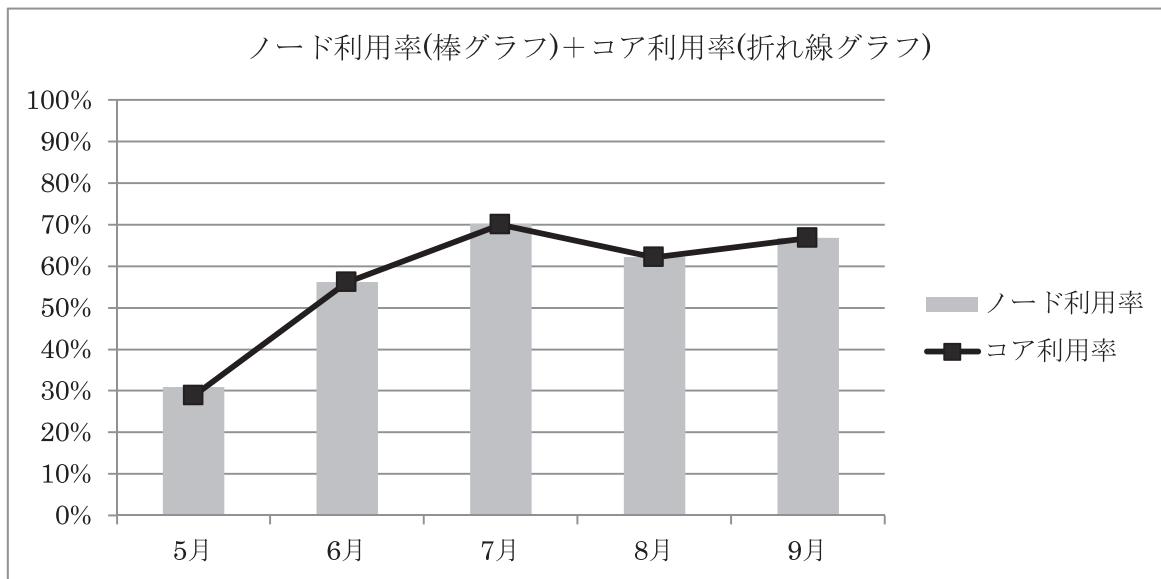
### 1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

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]
2012/05/07 9:30	2012/05/07 11:30	2.00	2012/05/10 10:00	2012/05/14 13:00	99.00
2012/05/17 9:00	2012/05/17 10:00	1.00	2012/05/28 11:30	2012/05/28 15:45	4.25
2012/06/01 17:00	2012/06/04 17:00	72.00	2012/06/22 10:00	2012/06/22 11:30	1.50
2012/08/07 9:00	2012/08/08 9:00	24.00	2012/08/01 11:00	2012/08/01 18:55	7.92
			2012/08/08 9:00	2012/08/08 11:30	2.50
			2012/08/14 6:00	2012/08/14 13:15	7.25

### 2) サービス状況

月	サービス時間 [h]	パッチ					
		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
5月	631.75	21,549	64,426	6,097,070	2,195,100	893.9	31 %
6月	647.50	152,174	69,879	10,500,300	5,676,190	937.0	56 %
7月	744.00	31,329	97,099	15,199,900	11,186,200	938.3	70 %
8月	702.33	25,240	74,833	13,222,200	8,118,760	937.0	62 %
9月	722.00	14,694	77,713	14,243,100	10,855,200	938.5	67 %
計	3445.58	244,986	383,950	59,262,570	38,031,450	928.9	57 %

※ 2012年5月1日 10:00にサービス開始



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源ON状態のノード数の月平均 (10分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

## システムB運転状況 (2012年5月～2012年9月)

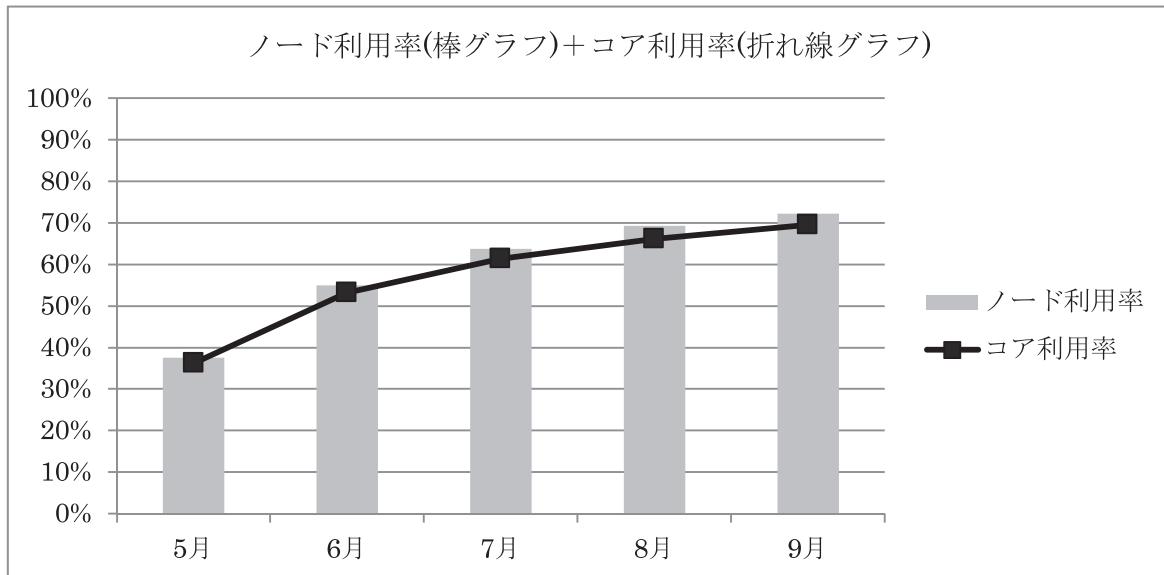
### 1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

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]
2012/06/01 17:00	2012/06/04 17:00	72.00	2012/08/14 6:00	2012/08/14 13:15	7.25
2012/08/07 9:00	2012/08/08 9:00	24.00			

### 2) サービス状況

サービス時間 [h]	バッチ						
		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
5月	734.00	74,414	171,888	2,012,380	1,011,620	595.6	38 %
6月	648.00	160,095	198,139	3,449,500	2,991,940	590.6	55 %
7月	744.00	312,230	212,562	3,965,230	3,246,860	538.9	64 %
8月	712.75	37,364	256,974	3,791,130	2,818,490	526.8	69 %
9月	722.00	77,008	230,731	4,516,280	3,865,710	543.1	72 %
計	3560.75	661,111	1,070,294	17,734,520	13,934,620	559.0	60 %

※ 2012年5月1日 10:00にサービス開始



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源ON状態のノード数の月平均 (10分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

## システムC運転状況 (2012年5月～2012年9月)

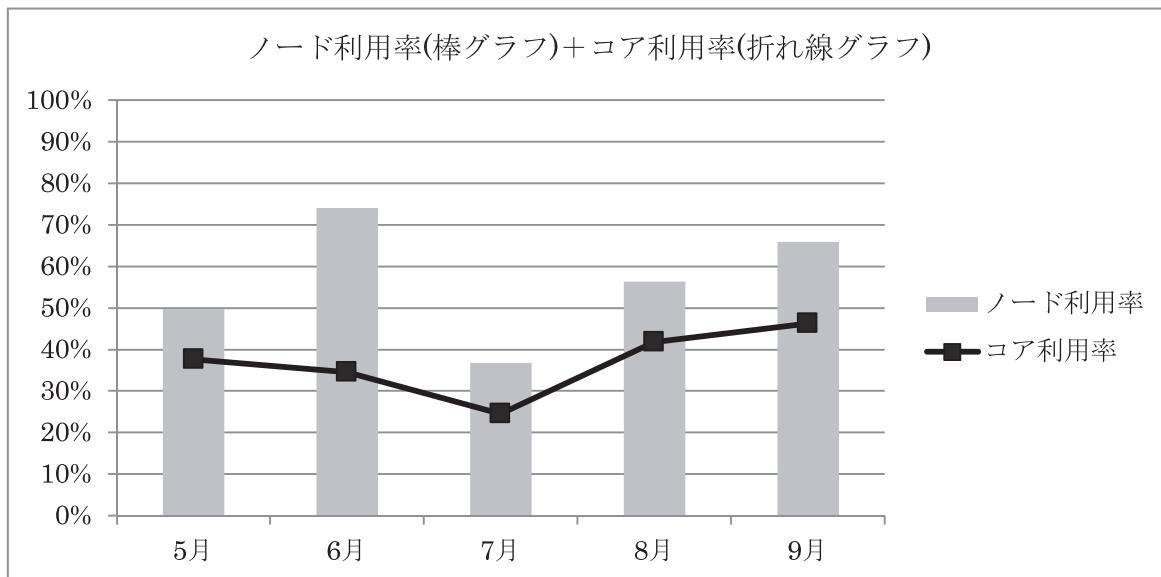
### 1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

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]
2012/06/01 17:00	2012/06/04 17:00	72.00	2012/08/14 6:00	2012/08/14 13:15	7.25
2012/08/07 9:00	2012/08/08 9:00	24.00			

### 2) サービス状況

サービス時間[h]	バッチ						
		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
5月	734.00	814	3,185	99,292	46,784	16.0	50 %
6月	648.00	1,663	13,137	104,298	60,959	16.0	74 %
7月	744.00	2,266	10,170	101,999	63,413	15.8	37 %
8月	712.75	1,925	49,116	149,942	110,244	15.7	56 %
9月	722.00	1,129	18,940	176,844	125,997	15.9	66 %
計	3560.75	7,797	94,548	632,375	407,397	15.9	57 %

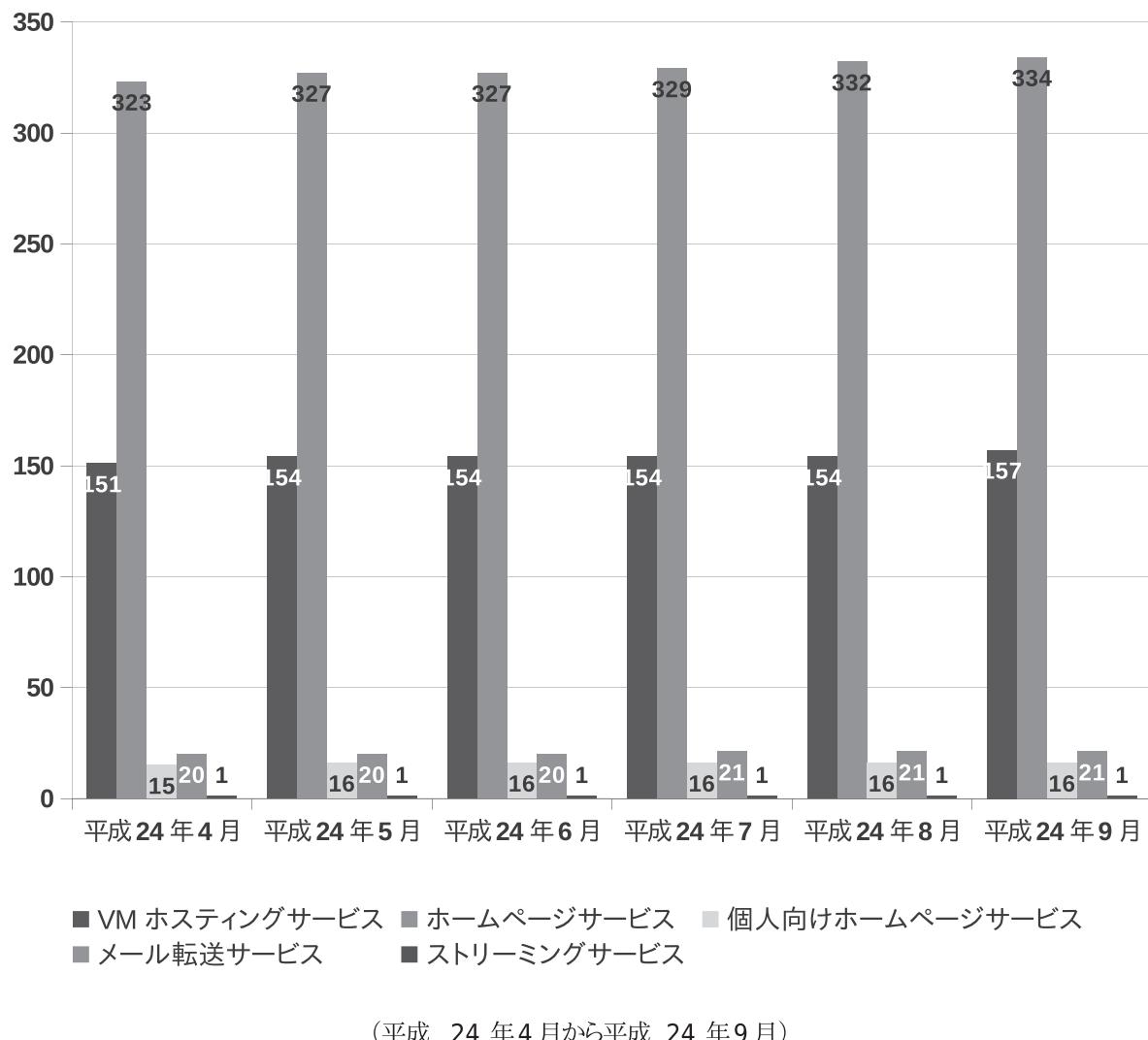
※ 2012年5月1日 10:00にサービス開始



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源ON状態のノード数の月平均 (10分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

## 汎用コンピュータシステムのサービス状況

### 1 ホスティング・ホームページサービス利用状況



## 大型計算機システム利用承認件数について

平成 24 年 9 月末現在、大型計算機システムの利用件数は、2,395 件となっています。

## センター利用による研究成果

—平成 23 年度計算機利用結果報告書から—

### 【1000 情報学】

1. Kenji Rikitake: TinyMT Pseudo Random Number Generator for Erlang: Erlang'12: Proceedings of the 2012 ACM SIGPLAN Erlang Workshop, 67 – 72, 2012

### 【1100 神経科学】

2. 金津将庸・山城博幸・山本洋紀・澤本伸克・福山秀直・齋木潤: fMRI によるヒト頭頂間溝視覚野の集団受容野推定: VISION, Vol.24, No.1, pp. 19 – 19, 2012

### 【4300 物理学】

3. Y. Kanamori, H. Matsueda and S. Ishihara: Photoinduced Change in the Spin State of Itinerant Correlated Electron Systems: Phys. Rev. Lett., Vol. 107, pp.167403-1~167403-1, 2011
4. J. Nasu and S. Ishihara: Orbital Compass Model as an Itinerant Electron System: Europhys. Lett., Vol.97, pp.27002-1~27002-6, 2011
5. 西岡 宏任・安藤 耕司: 光合成細菌反応中心における酸化型 Special pair と c 型 cytochrome 間電子移動反応のトンネリングメカニズムについてのフラグメント分子軌道法を用いた研究: 高次  $\pi$  空間の創発と機能開発・第 7 回公開シンポ ポスター発表(P-44), 2012

6. Hirotaka Kitoh-Nishioka, Koji Ando: Fragment Molecular Orbital Study on Electron Tunneling Mechanism of Electron Transfer Reaction from Heme c-559 to Photo-oxidized Special Pair P960+ in Bacterial Photosynthetic Reaction Center: JST International Symposium on Multi-scale Simulation of Condensed-phase Reacting Systems ポスター発表(P25), 2012

7. 鬼頭-西岡 宏任・安藤 耕司: FMO-LCMO 法を用いた長距離電子移動反応の理論的研究 II: 第 15 回 理論化学討論会 2012 仙台 口頭発表 (2D2b), 2012

8. Hirotaka Kitoh-Nishioka and Koji Ando: Fragment Molecular Orbital Study on Electron Tunneling Mechanisms in Bacterial Photosynthetic Reaction Center: The Journal of Physical Chemistry B, Vol.116, pp.12933 – 12945, 2012

### 【4400 地球惑星科学】

9. Y. Miyake, H. Usui, H. Kojima: Effects of the guard electrode on the photoelectron distribution around an electric field sensor: Journal of Geophysical Research, Vol.116, pp. A05211:1 – 15, 2011
10. Yamazaki, H. and T. Satomura: Non-hydrostatic atmospheric cut cell model on a block-structured mesh: Atmos. Sci. Lett., Vol.13, pp.29~35, 2012
11. Ogohara, K. and T. Satomura: Numerical simulations of the regional characteristics of dust transport on Mars: Adv. Space Res., Vol.48, pp.1279~1294, 2011
12. Y. Nariyuki, T. Hada, and K. Tsubouchi: Nonlinear dissipation of circularly polarized Alfvén waves due to the beam-induced obliquely propagating waves: Phys. Plasmas, Vol.19, No.8, pp.082317 - (8 page), 2012

### 【4600 基礎化学】

13. Ayako Umemura, Stéphane Diring, Shuhei Furukawa, Hiromitsu Uehara, Takaaki Tsuruoka and Susumu Kitagawa: Morphology Design of Porous Coordination Polymer Crystals by Coordination Modulation: J. Am. Chem. Soc, Vol.133, pp. 15506 – 15513, 2011

### 【4700 複合化学】

14. Masashi Shiotsuki, Shohei Kumazawa, Naoya Onishi, Fumio Sanda: Molecular Weight Dependence of Helical Conformation of Amino Acid-Based Polyphenylacetylenes: Journal of Polymer Science Part A: Polymer

Chemistry, Vol. 49, No.22, pp. 4921 – 4925, 2011

【4800 材料化学】

15. 田中 穎・山本剛生: ポリ・シアノビフェニルアクリレートのエンタルピー緩和: 活性化エネルギーモデルと配位モデルの組み合わせによる解析: 第 59 回レオロジー討論会講演要旨集, Vol.59, No. pp. 274 – 275, 2011
16. Yutaka Tanaka: Relaxations in relation to Liquid Crystalline Formation and Glass Transition for Comb-like Polymer: Structural Relaxation as expressed by Entropy Model and Activation Energy Spectrum: Book of Abstracts. International conference on Advanced materials and Nanotechnology (Nepal Chemical Society), pp.50 – 50, 2011
17. Yosuke Yukimoto, Yutaka Tanaka: The Effect of Annealing Temperature on Light Transmittance for a Film Formed from Side-Chain Type Liquid Crystalline Polymer: Abstract, 21st Academic Symposium of MRS-J2011, pp. J-P-03 - J-P-03, 2011
18. Y. Tanaka: The Ring-Forming Parameter For the Network Formation by DGEBA . POP diamine Polymerisation: Introduction of State of Reaction in Diamine Unit: Transactions of the Materials Research Society of Japan, Vol.36, No.3, pp.367 – 370, 2011

【5000 機械工学】

19. Y. Yamamoto and T. Kunugi: Discussion on heat transfer correlation in turbulent channel flow imposed wall-normal magnetic field: Fusion Engineering and Design, Vol.86, pp.2886 – 2890, 2011

【5200 土木工学】

20. Kishida, K., Kawaguchi, Y., Nakashima, S. and Yasuhara, H.: Estimation of shear strength recovery and permeability of single rock fractures in shear-hold-shear type direct shear tests: International journal of Rock Mechanics & Mining Sciences, Vol.48, No.5, pp.782 – 793, 2011
21. H. Yasuhara, N. Kinoshita, H. Ohfuki, D. S.

Lee, S. Nakashima, and K. Kishida: Temporal alteration of fracture permeability in granite under hydrothermal conditions and its interpretation by coupled chemo-mechanical model: Applied Geochemistry, Vol.26, pp.2074 – 2088, 2011

22. 岸田潔, 小林賢一郎, 細田尚, 藤田朝雄, 岸裕和, 葛葉有史, 延藤遵: 慣性項を考慮した単一亀裂グラウト注入モデルと平行平板実験への適用: 材料, Vol.61, No.3, pp.245 – 252, 2012

2012 年度京都大学学術情報メディアセンター  
コンテンツ作成共同研究 募集・採択結果

京都大学学術情報メディアセンターでは、新たな学術・教育コンテンツの開発を行うことを目的とした「コンテンツ作成共同研究」を実施している。独自性・新規性があるコンテンツで、かつ本センターの設備や技能・発想を持ったスタッフとのコラボレーションが効果的な実験的要素の高い提案を広く募るものである。具体的な内容としては、学術教育機関からの教育・研究活動の発信と活動そのものの発展に関わるコンテンツ開発を含む計画、学術教育資源の高度アーカイブ化とその利活用を促進するようなコンテンツ開発、インターフェイス設計などといった実験・研究的要素の高い計画を対象としている。採択された計画は、その実施に必要なコンテンツ作成支援サービス作業工数負担金の一定の範囲内をセンターにて負担される。

本年度も6月4日から7月17日にかけて、コンテンツ作成共同研究の募集が実施された。応募総数は6件であり、コンテンツ作成共同研究企画委員会にて審議された結果、そのうち3件が採択された（表1）。

表1：2012 年度京都大学学術情報メディアセンター コンテンツ作成共同研究採択課題一覧

研究課題名	所属	研究代表者
危機言語ドキュメンテーション のための電子博物館の拡張	九州大学 人文科学研究院	下地理則 准教授
天文・宇宙科学の素材と3次元 立体視及び音楽を用いた広報・ アウトリーチ用映像コンテンツ の開発	京都大学大学院 理学研究科附属天文台	柴田一成 台長
遺跡出土金属製品の保存処理に かんする教育用デジタルコンテ ンツの作成	京都大学大学院 文学研究科	阪口英毅 助教

## **募集要項（抜粋）**

### **募集期間：**

2012年6月4日（月曜日）～7月17日（火曜日）

### **応募資格：**

研究申請代表者は、京都大学学術情報メディアセンターの全国共同利用規程の資格を持つ研究者・教員であること（具体的には以下の通り）。また、本センターの教員が1名以上共同研究者として加わる研究グループであること。

- ・大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員及びこれに準ずる者
- ・大学院の学生及びこれに準ずる者
- ・学術研究を目的とする国又は自治体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- ・科学研究費補助金等の交付を受けて学術研究を行う者
- ・その他センター長が必要と認めた者

### **応募方法：**

所定の様式にしたがって計画書（3ページ）を作成の上、募集期間内に郵送・学内便もしくは電子メールでご提出ください。ご不明な点は事前にご相談ください。

### **審査方法、審査：**

応募された提案は、京都大学学術情報メディアセンターコンテンツ作成共同研究企画委員会において、研究内容の新規性と独自性、計画の妥当性、また、本センターにおけるコンテンツ作成共同研究のための予算の範囲内で実施可能なものかを審査の上採否を決定します。

### **研究の実施、研究成果公開、知財登録：**

採択後は、研究グループとコンテンツ作成室で実施計画を作成し、それに基づき企画を実施することとなります。

研究終了時には、研究報告書をご提出頂き、京都大学学術情報メディアセンター「全国共同利用広報」にて公開することを条件とします。

共同研究の成果として得られたコンテンツは、京都大学産官学連携センター知的財産室ソフトウェア・コンテンツ分野に著作物として登録する、または本学の研究資源アーカイブに研究資源として登録するなど、社会へ公開することを原則とします。（詳細はお問い合わせください）

なお、研究成果の一部は、本センターの共同研究実施例として研究報告から抜粋し、センターWebサイトやパンフレット等へ情報の掲載を行うことがあります。また採択者が本共同研究による研究成果（コンテンツ）を学術論文誌や各種メディア等において公開する場合、本共同研究で開発作成を行ったことを明記してください。

# 大型計算機システム利用負担金

**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)
エントリ	-	基本	12,600 円/年	B	共有	最大1ノード相当((16コア、64GBメモリ)×1)	1	60
パーソナル	タイプA	基本	100,000 円/年	A	共有	最大4ノード相当((32コア、64GBメモリ)×4)	168	1,000
	タイプB	基本	100,000 円/年	B	共有	最大4ノード相当((16コア、64GBメモリ)×4)	168	1,000
	タイプC	基本	100,000 円/年	C	共有	最大2ソケット相当(8コア、384GBメモリ)×2	168	1,000
グループ	タイプA1	最小	200,000 円/年	A	優先	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	336	8,000
		追加単位	200,000 円/年			4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000
		最小	240,000 円/年		準優先	8ノード((32コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600
		追加単位	120,000 円/年			4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	-	4,800
	タイプA3	最小	600,000 円/年	B	占有	8ノード((32コア、64GBメモリ)×8)	336	16,000
		追加単位	300,000 円/年			4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000
		最小	250,000 円/年		優先	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	336	8,000
		追加単位	250,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000
	タイプB2	最小	300,000 円/年	B	準優先	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600
		追加単位	150,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	-	4,800
		最小	750,000 円/年		占有	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	336	16,000
		追加単位	375,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000
	タイプC1	最小	400,000 円/年	C	優先	4ソケット((8コア、384GBメモリ)×4)	336	8,000
		追加単位	200,000 円/年			2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	-	4,000
		最小	240,000 円/年		準優先	4ソケット((8コア、384GBメモリ)×4)	336	4,800
		追加単位	120,000 円/年			2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	-	2,400
	タイプG1	最小	250,000 円/年	B(GPU)	優先	2ノード((16コア、64GBメモリ+1GPU)×2)	336	4,000
		追加単位	250,000 円/年			2ノード((16コア、64GBメモリ+1GPU)×2)	-	4,000
大規模ジョブ	タイプA	最小	20,000 円/週(7日)	A	占有	8ノード((32コア、64GBメモリ)×8)	-	-
	追加単位	5,000 円/週(7日)				2ノード((32コア、64GBメモリ)×2)	-	-
	タイプB	最小	24,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	-	-
	追加単位	6,000 円/週(7日)				2ノード((16コア、64GBメモリ)×2)	-	-
	タイプC	最小	20,000 円/週(7日)	C	占有	4ソケット((8コア、384GBメモリ)×4)	-	-
	追加単位	10,000 円/週(7日)				2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	-	-
専用クラスタ	—	最小	750,000 円/年	B	-	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	-	16,000
	—	追加単位	375,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	-	8,000
ライセンスサービス			20,000 円/年	可視化ソフト(AVS,ENVI/IDL)およびプロポストウェアの1ライセンスにつき				

**備考**

- 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
  - 大判プリンタサービス
  - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ライセンスサービスの申請には、大型計算機システムの利用者であることが必要である。
- 「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。  
「準優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。  
また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。
- 「優先」：定常稼働状況において記載値(以上)の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。  
また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。
- 「占有」：稼働状況によらず記載値(以上)の計算資源が確保されることを保証する。
- ディスク容量はバックアップ領域(最大で総容量の1/2)を含む。
- グループコース及び専用クラスタ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A1	20,000 円/月	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプA2	12,000 円/月	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	4,800
	タイプA3	30,000 円/月	4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプB1	25,000 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプB2	15,000 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	4,800
	タイプB3	37,500 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	8,000
	タイプC1	20,000 円/月	2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	4,000
	タイプC2	12,000 円/月	2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	2,400
専用クラスタ	—	25,000 円/月	2ノード((16コア、64GBメモリ+1GPU)×2)	4,000
	—	37,500 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	8,000

- グループコース及び専用クラスタコースを通年では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	タイプA1	最小 80,000 円	120,000 円	180,000 円
	追加単位 80,000 円	120,000 円	180,000 円	
コース	タイプA2	最小 96,000 円	144,000 円	216,000 円
	追加単位 48,000 円	72,000 円	108,000 円	
グループ	タイプA3	最小 240,000 円	360,000 円	540,000 円
	追加単位 120,000 円	180,000 円	270,000 円	
コース	タイプB1	最小 100,000 円	150,000 円	225,000 円
	追加単位 100,000 円	150,000 円	225,000 円	
グループ	タイプB2	最小 120,000 円	180,000 円	270,000 円
	追加単位 60,000 円	90,000 円	135,000 円	
コース	タイプB3	最小 300,000 円	450,000 円	675,000 円
	追加単位 150,000 円	225,000 円	337,500 円	
グループ	タイプC1	最小 160,000 円	240,000 円	360,000 円
	追加単位 80,000 円	120,000 円	180,000 円	
コース	タイプC2	最小 96,000 円	144,000 円	216,000 円
	追加単位 48,000 円	72,000 円	108,000 円	
タイプG1	最小 100,000 円	150,000 円	225,000 円	
	追加単位 100,000 円	150,000 円	225,000 円	
専用クラスタ	—	最小 300,000 円	450,000 円	675,000 円
		追加単位 150,000 円	225,000 円	337,500 円

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

9. 機関・部局定額制度

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

別表2(汎用コンピュータシステム)

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

備考

1. 利用負担額は、総額表示である。

2. 上記表の汎用コンピュータシステムのサービスを利用するためには、大型計算機システムの利用者であることが必要である。

3. ホームページサービス及びVMホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことによりオプションサービスを利用することができる。

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

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

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

システム資源1台とは、CPU:2コア、メモリ:2GB である。

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

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

システム資源1台とは、CPU:1コア、メモリ:2GB である。

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

別表3 スーパーコンピュータシステム(民間機関利用)

システム	システム資源	経過時間 (時間)	利用負担額	
			ディスク (GB)	利用者 番号
A	8ノード(32コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16
	12ノード(32コア、64GBメモリ)×12)	336	14,400	24
	16ノード(32コア、64GBメモリ)×16)	336	19,200	32
B	8ノード(16コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16
	12ノード(16コア、64GBメモリ)×12)	336	14,400	24
	16ノード(16コア、64GBメモリ)×16)	336	19,200	32

備考

1. 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。

2. 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。

3. 通年では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。

システム	システム資源	利用期間		
		3ヶ月	6ヶ月	9ヶ月
A	8ノード	240,000 円	480,000 円	720,000 円
	12ノード	360,000 円	720,000 円	1,080,000 円
	16ノード	480,000 円	960,000 円	1,440,000 円
B	8ノード	300,000 円	600,000 円	900,000 円
	12ノード	450,000 円	900,000 円	1,350,000 円
	16ノード	600,000 円	1,200,000 円	1,800,000 円

## — サービス利用のための資料一覧 —

### 1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

- システム A : camphor.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム B・C : laurel. kudpc.kyoto-u.ac.jp
  - システム B (SAS 利用時) : sas.kudpc.kyoto-u.ac.jp

※ ホストへの接続は SSH(Secure SHell) 鍵認証のみ、パスワード認証は不可

### 2. 問い合わせ先 & リンク集

- 情報環境機構のホームページ  
<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/>
- 学術情報メディアセンターのホームページ  
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
- スーパーコンピュータシステムに関する問い合わせ先
  - 利用申請などに関する問合わせ先  
【共同利用支援グループ・共同利用第一掛】  
E-mail : zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7424  
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/>  
➢ システムの利用など技術的な問い合わせ  
【研究支援グループ】  
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7426  
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/contact.html>
- ホームページ・ホスティングサービスに関する問合わせ先  
【情報環境支援グループ】  
E-mail : whs-qa@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7494  
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/whs/>
- コンテンツ作成支援サービスに関する問合わせ先  
【コンテンツ作成室】  
E-mail : cpt@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-9012  
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/content/>

# 編 集 後 記

先日正倉院展を見に行った。コバルトブルーが美しいガラスコップなどに混じって地味ではあるが種々の古文書も出陳されていた。千何百年も前の文書がすぐ目の前にある。内容はわからないが、その存在自体がすごいなあといつもながら感心する。昨今、電子書籍というものが急速に普及しつつあるようだ。個人レベルでも紙媒体で残すものはわずかである。さて、今から千年後、電子化された書籍等はどうなっているのだろうか？もし正倉院展クラスの展覧会に出陳されるようなものであれば、その時はどのように展示されるのだろうか？紙に勝る記録はないと、たわいもないことを考えている今日この頃のアナログ人間である。

世捨て人

私は、数十年来の某プロ野球球団のファンであり、かなり長い期間に亘って自他ともに認める熱狂的なファンであった。ただし、今はどちらかといえば、某サッカーチームの応援の方に熱を入れている。このような経験上、ひとつ分かったことがあるが、熱狂的に野球チームを応援するよりも、熱狂的にサッカーチームを応援する方が圧倒的に負担が大きい。これは、どういう理由かというと、野球の試合はシーズン中、ほぼ毎日ある。ということは、一試合負けたとして、その時は当然腹も立つが、翌日にはその日の試合のことを考えて、気分を切り替えることができる。一方、サッカーの試合は通常一週間に一度しかないため、すぐに気分を切り替えるのが難しい。特に連敗してしまったときは、一月以上も憤懣やるかたない気持ちで過ごさねばならないことさえある。こんなことがありながらも、世にサッカーファンが多いのは、やはり勝った時の喜び、ゴールした時の喜びがそれらに優るからかもしれない。

ロマニスタ

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. 11, No. 2

2012年 12月 28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 〒616-8102 京都市右京区太秦森ヶ東町21-10  
株式会社エヌジーピー

広報編集部会

岩下 武史（部会長）	小西 满
平石 拓（副部会長）	斎藤 紀恵
秋田 祐哉	
小林 寿	元木 環
高見 好男	

表紙デザイン：谷 卓司

(ティアンドティ・デザインラボ)

# 目次

## [巻頭言]

- ・機構長再任にあたって ..... 1  
    美濃導彦

## [スーパーコンピュータ共同研究制度(若手研究者奨励枠)研究報告]

- ・分子軌道法計算による光学活性高分子の構造解析 ..... 2  
    曾川洋光、三田文雄
- ・色素増感太陽電池を指向したポルフィリン化合物の開発 ..... 5  
    梅山有和
- ・生体軟部組織に対する非線形有限要素解析～残留応力、血管平滑筋の能動的応力を考慮した血管壁の応力解析 ..... 7  
    木田直樹、山村直人、安達泰治
- ・有機材料における電荷輸送特性解析 ..... 9  
    古川晋也
- ・蔵本-シバシンスキ一方程式における不安定周期軌道の統計性質 ..... 11  
    斎木吉隆
- ・fMRI を用いたヒト頭頂間溝視覚野の集団受容野推定 ..... 14  
    金津将庸、山城博幸、山本洋紀、澤本伸克、福山秀直、齋木潤
- ・フラグメント分子軌道法を用いた光合成反応中心の電子移動経路解析 ..... 16  
    鬼頭(西岡)宏任、安藤耕司

## [プログラム高度化支援事業研究報告]

- ・H-matrices(階層型行列)法を用いた準動的地震発生サイクルシミュレーションの省メモリ化・高速化(2) ..... 18  
    平原和朗、大谷真紀子、高橋康人、堀高峰、兵藤守

## [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]

- ・ジャイロ運動論に基づいた位相空間5次元プラソフ方程式による乱流輸送のシミュレーション研究 ..... 24  
    今寺賢志

## [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 ..... 28
- ・センター利用による研究成果(平成23年度) ..... 32
- ・2012年度京都大学学術情報メディアセンターコンテンツ作成共同研究 募集・採択結果 ..... 34

## [資料]

- ・大型計算機システム利用負担金 別表 ..... 36
- ・サービス利用のための資料一覧 ..... 38

## [編集後記]

- ・編集後記、奥付 ..... 39