Vol.12, No.2 2013

全国共同利用版

広報

センター共同研究報告(平成24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)】梅山 有和◎Jesus Rodriguez Castanon、三田 文雄◎山本 卓也◎斉木 吉隆◎鬼頭(西岡) 宏任、安藤 耕司◎寺田 佳世◎今寺 賢志◎岡本 隆明◎吉田 圭介、牛島 省、宮木 伸、竹内 章人◎山田 正太郎、野田 利弘 【プログラム高度化支援事業】浅井 光輝◎中畑 和之◎野田 利弘 【スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠)】Seong Jin NOH、立川 康人 【研究紹介】武村 直和、岩下 武史、中島 浩

ISSN 1347-3581

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

Vol.12 No.2 号の発刊にあたって

京都大学学術情報メディアセンター
岩下　武史

本号では，学術情報メディアセンターの共同研究に関する報告を掲載いたします．昨年度に実施されました若手研究者の支援事業に関して 10 件，プログラム高度化支援事業について 3 件，大規模計算の支援事業について 1 件の報告をそれぞれ掲載しています．このような報告を特に若手研究者や学生の方にとっての新しい出会いの場として活用頂ければ幸いです．

これまでにセンターサービスにおける広報発行の意義に関し，WEB を中心としたインターネットによる情報提供と紙媒体としての広報誌の役割の差別化について継続的に検討を行ってきました．その中で，紙媒体の良さの一つは「自分にとって一見必要でない情報」に出会う機会が多いということだと考えています．即ち，自分が知りたいと思う情報について調べる場合，インターネットは大変便利ですが，例えば自身の研究分野と異なる分野の研究についてネット上で調べたりすることは稀で，望まない限りそのような機会に乏しいといえます．一方，紙媒体の場合，ぱらぱらとめくるだけでも何からの情報が入ってくることになります．そこに，興味深い図や式，単語を見出すことがあれば，その先に何か新しい繋がりが出てくるかもしれません．例えば，今号の中畑氏（愛媛大学）の原稿では，非破壊検査という応用の中で，有限積分法の GPU における効率的な実装法について述べています．本解析におけるプログラムは原稿中の式(4)〜(6)に見られるように，反復型のステンシル計算となります．一方，反復型のステンシル計算には，他に拡散方程式の差分解析や電磁波解析等の波動解析で用いられる FDTD 法等があります．つまり，応用分野や解法が異なっている場合においても，反復型ステンシル計算を用いている研究では，本原稿で述べられている GPU 向けの実装法が有用となります．このように，異なる応用分野においても同一の解法やプログラム構造が用いられている場合には，これらの研究間において知見を相互に活用することが可能となります．今回の広報における研究報告がなんらかの形でユーザの皆様にとって有用な情報を提供できれば幸いです．

次に，現在のスパコンサービスについて述べさせていただきますと，今号で掲載されている運転状況に見られるように，主たるシステムである Camphor（システム A），Laurel（システム B）について 60%を超える高いノード稼働率が続いています．結果として，ユーザの皆様にとりましてはなかなかジョブが走らないというご不満がある状況かと思います．こうした状況への対応策の一つとして，学術情報メディアセンターでは HPCI への資源提供を強化することを主目的として，新たな並列演算サーバを 2014 年度に導入，運用開始予定です．当該システムはメニーコアプロセッサ（Intel Xeon Phi）を搭載した計算ノードをビルディングブロックとするクラスタシステムとなります．旧来のシステムに加え，新システムについてもユーザの皆様にご活用頂ければ幸いです．センター広報としましても最新のアーキテクチャに基づくプロセッサである Intel Xeon Phi を使ったプログラミングや研究事例の紹介に取り組んでいきたいと考えております．今後も皆様の研究・教育活動に益するところがありますように取り組んで参りますので，センターシステムの利用を含め，どうぞよろしくお願いいたします．

色素増感太陽電池を指向した新奇ポルフィリン系色素の構造と電子構造の解明

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

現在、化石燃料の枯渇と環境へ与える影響が深刻な問題になってきており、太陽電池活用の拡充が期待されている。しかしシリコンに代表される無機太陽電池は、製造コストが高く、広範に普及させることに障害が生じている。一方、有機太陽電池は低コスト、着色による意匠性、柔軟性、軽量という利点が指摘されている。中でも色素増感太陽電池はエネルギー変換効率（η）が高く、次世代のエネルギー源として期待されている。現在までにルテニウム錯体と多孔性酸化チタンを用いた系において11%を越える高いη値が報告されている。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 [1]。特に、キノキサリンが縮環したポルフィリン色素（ZnPQ、Figure 1）を開発し、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（η= 6.3%）を実現した [2,3]。本研究では、更なる性能の向上を目指し、電子供与性基のトリアリールアミンを有するイミダゾールをZnPQに縮環させたZnPQIを設計し、その合成と物性評価を行った [4]。

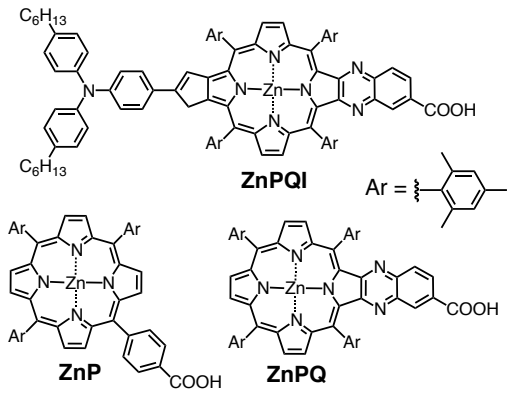


Figure 1. Structures of porphyrin compounds.

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

ZnPQIおよびZnPQ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。ZnPQIはZnPQ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ZnPQIの第一酸化電位（E_{ox} = 0.92 V vs. NHE）はZnPQ（E_{ox} = 0.98 vs. NHE）と比較して低くなった。

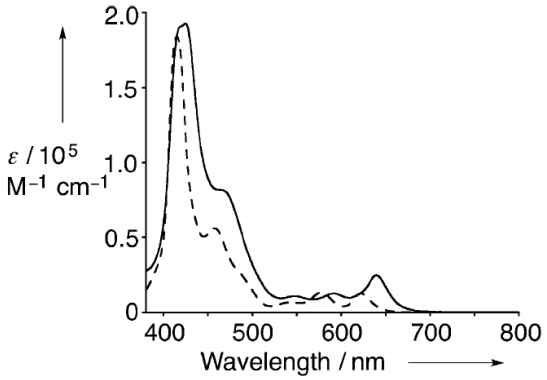


Figure 2. UV/Vis absorption spectra of ZnPQI (solid line) and ZnPQ (dashed line) measured in dichloromethane.

ZnPQI 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、η= 6.8%（J_{SC} = 13.9 mA cm^{-2}、V_{OC} = 0.68 V、ff = 0.71）であった。これは、ZnPQ の場合（η= 6.3%、J_{SC} = 13.2 mA cm^{-2}、V_{OC} = 0.71 V、ff = 0.67）と比べて高い値となっている。最適条件下での作用スペクトルを Figure 3 に示す。吸収の長波長化を反映し、650-750 nm で ZnPQI の IPCE 値は ZnPQ に比べて高くなっている。

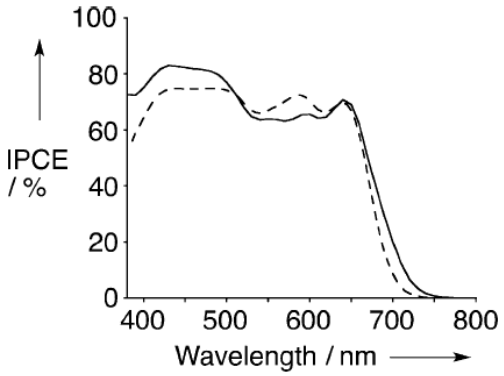


Figure 3. Action spectra of ZnPQI cell (solid line) and ZnPBQ cell (dashed line)

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、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 ZnPQI 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、アンカー部位の LUMO の電子密度が大きいほど、励起状態の色素と酸化チタンの 3d 軌道との間の電子カップリングが大きくなることが知られている。ZnPQI では ZnPQ と同様に、アンカー部位の LUMO の電子密度が大きくなっている。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 と同様に ZnPQI を用いた系でも高くなっており、かつ吸収がブロード化したことが、J_{SC} 値が向上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。

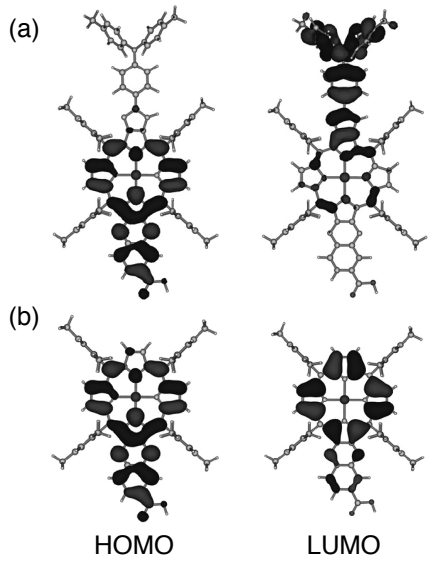


Figure 4. Sets of molecular orbital diagrams for (a) ZnPQI and (b) ZnPQ obtained by DFT calculations with B3LYP/6-31G(d).

3 参考文献

[1] 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).

[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 π-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. Hayashi, A. S. Touchy, Y. Kinjo, Y. Toude, K. Kurotobi, T. Umeyama, Y. Matano, and H. Imahori, “Triarylamine-Substituted Imidazole- and Quinoxaline-Fused Push-Pull Porphyrin for High Performance Dye-Sensitized Solar Cell”, *ChemSusChem*, **6**, 508-517 (2013).

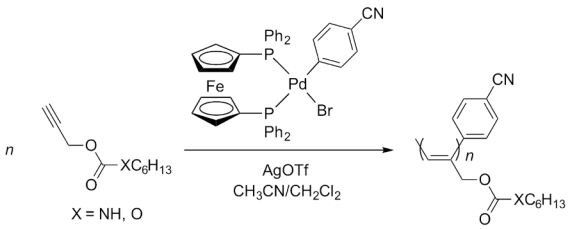
後周期遷移金属錯体触媒を用いる置換アセチレンの重合機構の解析

Jesus Rodriguez Castanon, 三田 文雄*

京都大学大学院工学研究科, *関西大学化学生命工学部

1 緒言

置換ポリアセチレンは剛直な共役主鎖構造に基づく光・電気特性，液晶形成能，気体透過性，刺激応答性などの様々な有用な物性を示すことから，機能性高分子材料として活発に研究されている。置換ポリアセチレンは対応する置換アセチレンモノマーの遷移金属触媒重合により合成される。触媒の中心金属と配位子の設計により，重合活性，生成ポリマーの主鎖の幾何構造，分子量を制御可能である。近年は，高い官能基耐性と，立体規則性の観点から，ロジウム，パラジウムをはじめとする後周期遷移金属錯体触媒が広く用いられている。筆者らはこれまで置換アセチレン重合触媒の構造を, 核磁気共鳴分光法, 単結晶X線構造解析, 元素分析，質量分析等により検討してきた。しかしながら, 触媒によってはこれらの分析が困難で, 十分な知見を得ることができていなかった。また, 重合反応の中間体の観測は極めて困難で，反応機構の解析は不十分であった。本研究では，パラジウム錯体触媒による，カルバメートまたはカーボネート基含有アセチレンモノマーの重合 (Scheme 1) における，配位–挿入反応の各種中間体のエネルギーを計算し，反応機構について考察した。[1)]



Scheme 1. Polymerization of acetylene monomer by [(dppf)PdBr(C_6H_4-*p*-CN)/AgOTf catalyst. Tf = CF_3SO_2.

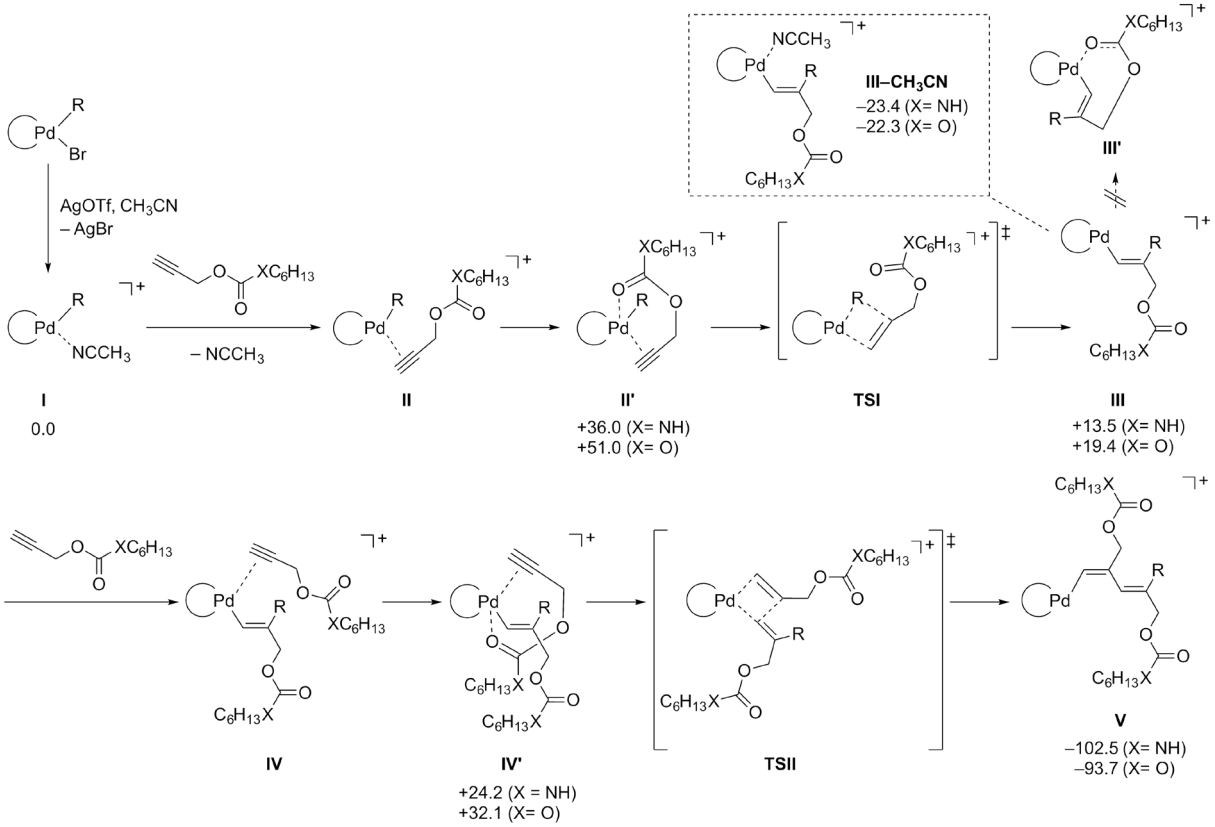
2 計算手法

計算には京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピューター上の Gaussian 09 プログラムを活用し，higher layer (Pd, フェニル基を除く dppf 基，CH≡CCH_2OCONH，CH≡CCH_2OCOO) に密度汎関数法 (DFT, B3LYP/LANL2DZ) を, lower layer に PM6 を用いた ONIOM により行った。

3 結果と考察

Scheme 2 に，dppf，*p*-シアノフェニル基 (R)，CH_3CN に配位された Pd^{II} 種 **I** への 1 番目と 2 番目の置換アセチレンモノマーCH≡$CH_2OCOXC_6H_{13}$ (X = NH, O) の配位–挿入における各中間体の自由エネルギー *G* を示す。**I** は，AgOTf との反応により，Pd 錯体から Br が脱離し，平面四角形の空配位座に CH_3CN が配位して生成する。最初のステップは，Pd に配位している CH_3CN とモノマーとの交換である。モノマーの三重結合部が Pd 中心に配位し，中間体 **II** が生成する。**II** は，モノマーのカルボニル基が垂直方向から Pd に配位した中間体 **II'**に転換する。次のステップは，Pd 中心と R 基の間へのモノマーの 1,2-型挿入である。遷移状態はメタラシクロブタン **TSI** と考えられる。モノマー挿入により **III** を生成する反応は吸熱反応であるが，**III** に CH_3CN が配位した中間体 **III-CH_3CN** の生成は発熱反応である。CH_3CN は中間体の安定化に大きく寄与していると考えられる。**III** あるいは **III-CH_3CN** が生成すると，カルボニル基は立体的な制約で，Pd に配位できない。すなわち，大きな歪みのため **III'**は生成しない。

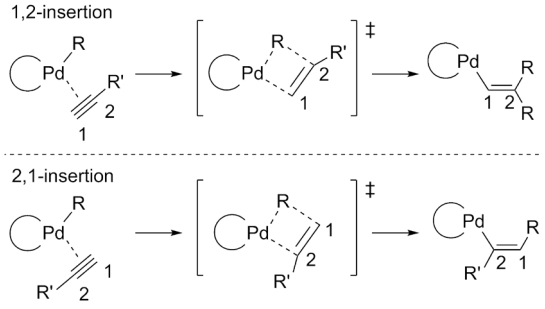
2 番目のモノマーの挿入は，Pd の空配位座へのモノマーの配位による **IV** の生成から始まる。1 番目のモノマーの挿入と同様に, **IV** はモノマーのカルボニル基の垂直方向からの配位により安定化された **IV'**に異性化する。メタラシクロブタン遷移状態 **TSII** を経由して **V** が生成する。**IV'**から **V** への ΔG は，**II'**から **III** の生成，あるいは **II'**から **III-CH_3CN** 生成の ΔG よりも負にずっと大きい。



Scheme 2. Reaction pathway for 1,2-insertion of $CH{\equiv}CH_2OCOXC_6H_{13}$ (X = NH, O) into $[(dppf)Pd^{II}(NCCH_3)(C_6H_4\text{-}p\text{-}CN)]^+$; dppf and C_6H_4-*p*-CN are shown as an arc and R, respectively. The values below the compound numbers represent their relative *G* values (kJ/mol), based on **I**. The counteranion (TfO^-) is omitted for clarity.

このことより，**TSII** 生成の活性化エネルギーは，**TSI** のそれよりも低いと推測される。これは共役が長くなる効果と考えられ，カルバメートとカーボネートモノマーのいずれも同様の結果であった。

アセチレンモノマーのパラジウム錯体への配位–挿入機構として，上述の 1,2-型に加えて，2,1-型がある (Scheme 3)。2,1-型についても同様に各中間体のエネルギーを計算したところ，2,1-型挿入は，1,2-型挿入に比べて配位–挿入時の立体障害がより大きく，エネルギー的に不利であることが確認された。筆者らは，ロジウム錯体触媒によるフェニルアセチレンモノマーの重合機構についても DFT 計算を行い，この場合は本系とは逆に 2,1-型挿入が有利であることを明らかにしている [2]。これは，挿入したモノマーのフェニル基の π-電子がロジウムに配位安定化する効果が，立体障害による効果よりも大きいためである。



Scheme 3. 1,2- and 2,1-insertions.

4 結言

本研究により，これまで明らかにされていなかった，パラジウム錯体触媒によるアセチレン重合の反応機構に関する有用な知見が得られた。本研究成果の活用により，新しい触媒の分子設計と，重合挙動の解析における一層の進展が期待される。

文献

1) J. Rodriguez Castanon, K. Kuwata, M. Shiotsuki, F. Sanda, *Chem. Eur. J.* **18**, 14085–14093 (2012).
2) N. Onishi, M. Shiotsuki, T. Masuda, N. Sano, F. Sanda, *Organometallics* **32**, 846–853 (2013).

メニスカスを有する液膜内マランゴニ対流の流動特性

山本卓也

大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻

1 緒言

気液界面で温度差や濃度差が発生すると局所の表面張力が変化し、界面上で表面張力差が発生する。表面張力差によって駆動する流れはマランゴニ対流として知られ、温度差が発生すると一般に低温部に向かって流れる。マランゴニ対流は浮力対流と共存し、浮力による対流の影響の方が大きい場合が多い。そこで、浮力対流のほとんど発生しない微小重力環境においてのマランゴニ対流の研究が数多く報告されている[1]。

宇宙飛行士のD. Pettit博士は2003年に国際宇宙ステーション(ISS)の中で *'Saturday Morning Science'* と呼ばれる一連の簡単な実験を行った[2]。その実験の一つに温度差マランゴニ対流の観察がある。ステンレスのワイヤを用いて直径50 mm程度の円形枠を作製しその中に水の液膜を張り、ステンレス枠に加熱されたハンダごてを近づけることにより液膜の一部を加熱し、マランゴニ対流を発生させた。その結果、熱源に近づく流れが発生した(*Outward flow* と呼ぶ)。熱源から離れる流れ(*Inward flow*)が予測されたが、それとは逆に向かう流れが観測された。この実験について現在様々な議論がされてきたが[3]、宇宙実験での流れのメカニズムについては判っていない。

そこで、本研究では数値シミュレーションを用いて、宇宙実験で *Outward flow* が発生したメカニズムを解明することを目的とする。特に流れ方向に及ぼす液膜形状に着目し、様々な液膜の形状を用いて非定常三次元数値計算を行った。

2 数値解析手法

本研究では液相領域のみの流体計算を行い、固体領域の非定常熱伝導は近似式を用いて境界条件として与えた。本研究で用いた近似を以下に示す。

(1) 重力の影響は無視できる。
(2) 液膜から周囲気体への熱移動は無い。
(3) 表面張力を除く物性値は温度に依存しない。
(4) 自由表面は流れによって変形しない。

解析領域の概略図をFig. 1に示す。無重力、固液界面が平滑、固液気体の接触点ではピン止めされているとし、Young-Laplace式を用い自由表面形状を推定すると、自由表面形状は球の一部と同じ形状になる。そして、液膜を作製するのに用いる液体積（平坦な液膜の液体積に対する体積比(V/V_0)）によって自由表面形状を決めた[4]。

支配方程式はNavier-Stokes式、連続式、エネルギー式を用いた。境界条件として上下の自由表面には以下の温度差マランゴニ効果の条件を与える。

$$\mu\nabla_n \boldsymbol{u} = -\sigma_T \nabla_t T \qquad (1)$$

ここで、$\boldsymbol{u}$ は速度ベクトル、T は温度、μは粘度、σ_Tは表面張力の温度勾配係数であり、添字 t, n はそれぞれ自由表面に対して接線、法線方向を表す。

また、自由表面上では断熱であるとする。固体壁では、滑りなし条件と以下の近似化された非定常熱伝導を表す条件を用いる[4]。

$$T = T_0 + \frac{q}{A}\cdot\frac{\left(\sqrt{6\alpha t} - r|\theta|\right)^2}{2k\sqrt{6\alpha t}} \qquad (2)$$

ここで、T_0は初期温度、q/Aは熱流束、αは熱拡散率、tは時間、rは液膜半径、θは加熱点からの角度、kは熱伝導率であり、熱流速q/Aの値は実験[2]より熱伝導と輻射の影響を考慮した概算値1.0×10^4 W/m^{2}を用いた。

数値解析にはフリーソースであるOpenFOAMを用い、空間に対して二次精度中心差分、時間に対して陰的オイラー法、速度場と圧力場の連成にはPISOアルゴリズムを用いた。

3　結果と考察

3.1 平坦な液膜(体積比 $V/V_0 = 1$)

平坦な液膜の場合の加熱 3 秒後の流跡線を Fig. 2 に示す。上から見た図(a)、加熱部を横から見た図(b)をそれぞれ示している。Figure 2 より液膜内に上下に対称な渦対が発生していることが判る。しかし、加熱部近傍の渦対の他に流れは発生しなかった。

3.2 歪んでいる液膜(体積比 $V/V_0 \neq 1$)

歪んでいる液膜の場合には平坦な液膜とは異なり、加熱近傍での渦対の他に流れが発生した。Figure 3 に液膜が膨らみ形状($V/V_0 > 1$)、凹み形状($V/V_0 < 1$)の場合の加熱 3 秒後の流跡線を示す。どちらの場合においても加熱部近傍で流跡線が上下に動いている、つまり、平坦な場合と同様に渦対が発生していたが、液膜が膨らんでいる場合には加熱部に向かう液膜表面に平行な二次元流が発生した(*outward flow*)。その一方、液膜が凹んでいる場合には、加熱部から液膜中心に向かう流れが発生した(*inward flow*)。

4　結言

円形液膜内マランゴニ対流の流れの方向性を解明することを目的として液膜形状に着目して数値解析を行った。数値解析によって液膜が凹んでいる場合($V/V_0 < 1$)、実験と逆向きの *inward flow* が発生し、液膜が膨らんでいる場合($V/V_0 > 1$)、実験と同方向の *outward flow* が発生した。これより、D. Pettit 博士が行った実験では液膜が膨らんでいたことにより加熱部に向かう流れが発達し、予測と逆向きの流れが発生したと考えられる。

引用文献

[1] M. Lappa, *Thermal Convection: Pattern, Evolution and Stability*, Elsevier Ltd., Oxford (2004).

[2] D. Pettit, Saturday Morning Science Videos, 2003, see http://mix.msfc.nasa.gov/IMAGES/QTVR/0601211.mov.

[3] H. Kawamura, K. Iwamoto, and H. Harashima, "Let's enjoy the microgravity science with Don Pettit convection experiment in liquid thin film with thin metallic wire ring", J. Jpn. Soc. Microgravity Appl., **23**, 157-160 (2006).

[4] T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano, and S. Dost, "Numerical investigation for the effect of the liquid film volume on thermocapillary flow direction in a thin circular liquid film", Phys. Fluids, **25**, 082108 (2013).

謝辞

本共同研究制度（若手研究者奨励枠）を活用させて頂きましたことを、この場を借りて深謝致します。また、本研究の一部は科学研究費補助金・基盤 B（課題番号 23360343, 25289087）の援助を受けた。

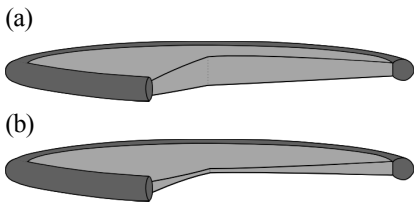


Fig. 1 Schematics of numerical domain: (a) convex water film ($V/V_0 > 1$), and (b) concave water film ($V/V_0 < 1$).

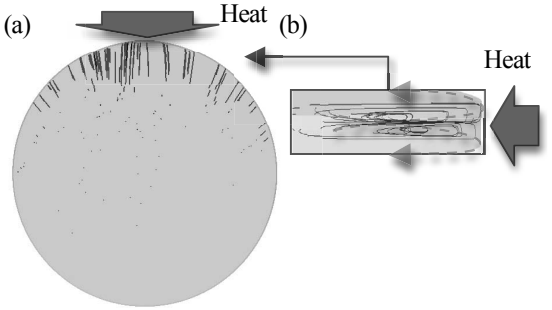


Fig. 2 Path lines in a flat water film at 3 s: (a) top view, and (b) side view.

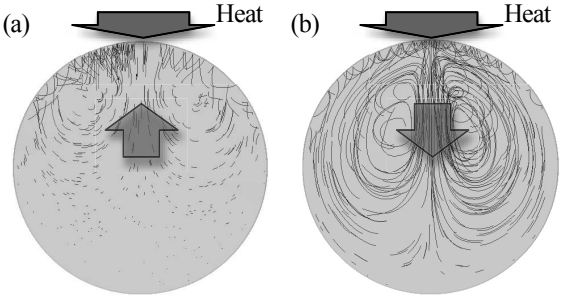


Fig. 3 Path lines in a: (a) convex water film ($V/V_0 > 1$), and (b) concave water film ($V/V_0 < 1$) at 3 s.

ローレンツ系の不安定周期軌道間のネットワーク構造

斉木 吉隆*
一橋大学大学院商学研究科

1 はじめに

カオスアトラクタには多数の不安定周期軌道が埋め込まれており [1], 実際に，それらの不安定周期軌道はカオス力学系において重要な役割を演じている事が様々な研究から明らかになっている．しかしながら，どのような不安定周期軌道がカオスの統計量を良く近似するのか，また，多数の不安定周期軌道の中から良く近似する不安定周期軌道を選び出すための方法などはあまり良く知られていない．本研究ではこれらの疑問に答えるため，ローレンツ系に埋め込まれた一定周期までの不安定周期軌道を大型計算機を用いて網羅的に検出し , それらの間の関係を複雑ネットワーク [2] の観点で考察する．

2 不安定周期軌道間のネットワーク化

以下の手続きに従って, カオス軌道の不規則遷移過程を系に埋め込まれた不安定周期軌道をノードとしたネットワークとして数理モデル化する: (1) 扱うシステムの不安定周期軌道を予め多数個求める．(2) 適当なポアンカレ断面を設定し，予め求めた不安定周期軌道のポアンカレ断面上における位置を記憶し，それらの不安定周期軌道に対して名前を付けておく．(3) ポアンカレ断面におけるカオスアトラクタ上の適当な一点を初期条件として，再びポアンカレ断面を通過するまでカオス軌道の時間発展を計算する．(4) カオス軌道がポアンカレ断面を通過する際に，カオス軌道とユークリッド距離が最も近い不安定周期軌道を選ぶ．その不安定周期軌道の名前を記憶する (ここでは i であるとする)．(5) さらにもう一度ポアンカレ断面を通過するまで時間発展を続ける．(6) 通過したら，再びカオス軌道とユークリッド距離が最も近い不安定周期軌道を選ぶ．その不安定周期軌道の名前を記憶する (ここでは j であるとする)．(7) iという不安定周期軌道と jという不安定周期軌道の間にはリンクが存在するとしてそれらの間に有向リンク $i \to j$ を与える．(8) (3) から (7) を $T(\gg 1)$ 回繰り返す事で不安定周期軌道をノードとしたネットワークを構成する．

*本研究は東北大学 AIMR の小林幹氏との共同研究に基づく．E-mail:yoshi.saiki@r.hit-u.ac.jp

3 ネットワークを用いたカオス解析

ここでは，実際にローレンツ方程式を用いてネットワーク化を行った結果を示す．本研究では，大型計算機を用いて網羅的に検出されたポアンカレ写像周期で 14 周期までの不安定周期軌道を用いて解析する．ポアンカレ写像を定義するために用いたポアンカレ断面は $z = r - 1$ かつ $\dot{z} > 0$ である．ネットワーク化を行う際のアンサンブル数 (T) に関しては，本稿では $T = 10^6$ を扱う．つまり，10^6 回の試行で全てのリンク構造を決定する．$T = 2 \times 10^6$ としてネットワークを構成した場合も，定性的な結果は変わらないことは確認済みである．カオス軌道から得られた周期軌道間ネットワークに対して複雑ネットワーク解析を行う事でカオスの統計量と複雑ネットワークにおいて重要な量との関係を明らかにする．

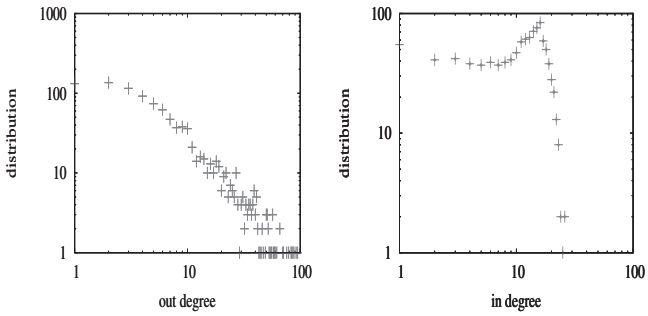


図 1: 不安定周期軌道の出次数 (out-degree) 分布 (左)．入次数 (in-degree) 分布 (右)．

図 1(左) は上記の方法で得られたネットワークにおける出次数分布を表しており，分布はベキ的であることが見て取れる．これは，カオス軌道から得られたネットワークが複雑ネットワークの特徴の一つである”スケールフリー”性を有していることを示唆している．一方，図 1(右) は入次数分布を表しているが，出次数の場合とは異なり，入次数分布はベキ的とはなっていない．すなわち, 極端に大きい入次数を持った不安定周期軌道が存在しないことを意味する．

次に，複雑ネットワークの分野で良く使われている中心性の観点からカオスの統計量を良く近似する重要なノー

ド (不安定周期軌道) を特徴づけることを行う．中心性とはどのノードがネットワークの要かを特徴づける量で，次数中心性や媒介中心性など様々な種類が知られている [2] が, 本報告では次数中心性のみを扱う．

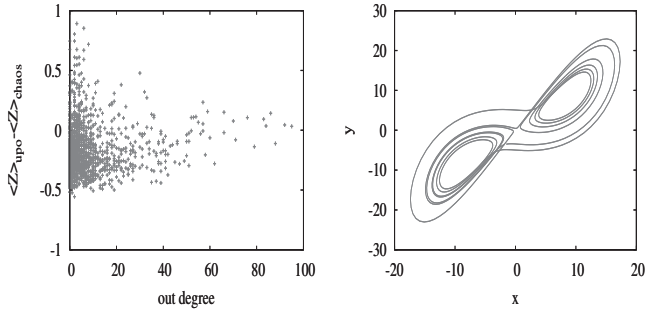


図 2: カオス軌道に沿った z の時間平均と各不安定周期軌道に沿った z の時間平均の差 ($\langle z\rangle_{chaos} - \langle z\rangle_{upo}$) と不安定周期軌道の出次数の関係 (左)．左図で扱った不安定周期軌道の中で最も大きな中心性を持った不安定周期軌道 (周期 9.7) (右)．

図 2(左) は変数 z の時間平均をカオス軌道に沿って行った値と不安定周期軌道に沿って行った値とのずれの出次数依存性を示した．出次数が大きいほど，両者のずれは小さくなる傾向があることがわかる．従って，z の平均値に関しては，出次数が大きい不安定周期軌道ほどカオス統計を良く近似する不安定周期軌道になる傾向にあるということである．図 2(右) は，ここで扱った中で外次数が最も大きい不安定周期軌道の軌道の x-y 平面への射影である．この不安定周期軌道は非常に良くカオスの統計を近似する軌道となっている. なお, 以上の解析はポアンカレ写像周期 12 までの不安定周期軌道を用いた結果である．

次に，z の平均値だけでなく，他のもう少し高次の統計量に関しても同様の結果が得られるかを確かめる．以下はポアンカレ写像周期 14 までの不安定周期軌道を用いた結果である. 図 3(左) は変数 z の 3 次モーメントをカオス軌道に沿って時間平均した値と不安定周期軌道に沿って時間平均した値とのずれの出次数依存性を示している．z の平均値の場合と同様に，z の 3 次モーメントに関しても出次数が大きい不安定周期軌道がカオスの統計を良く近似する不安定周期軌道であると言える．図 3(右) はリアプノフ指数をカオス軌道に沿って平均した値と不安定周期軌道に沿って平均した値とのずれの出次数依存性を示している．上記に示した他の統計量と同様に，出次数が大きい不安定周期軌道がカオスのリアプノフ指数を良く近似する傾向にある．z の平均値量のような低次の統計量だけでなく，z^3 のようなより高次な統計量や不安定指数に関

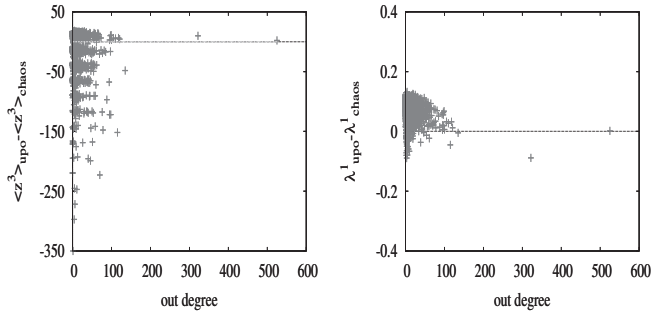


図 3: カオス軌道に沿った z^3 の時間平均と各不安定周期軌道に沿った z^3 の時間平均の差 ($\langle z^3\rangle_{chaos} - \langle z^3\rangle_{upo}$) と不安定周期軌道の出次数の関係 (左)．カオス軌道のリアプノフ指数 λ^1_{chaos} と各不安定周期軌道のリアプノフ指数 λ^1_{upo} の差 ($\lambda^1_{chaos} - \lambda^1_{upo}$) と出次数の関係 (右)．

しても出次数との相関は強いと言える．

4　まとめ

本研究では，ストレンジアトラクタに埋め込まれた不安定周期軌道の間をカオス軌道が不規則に遷移する現象を，ネットワークの観点から数理モデル化する方法を提案した．さらに，構成されたネットワークから得られる特徴量を用いて，カオスの解析を行った．とくに，ネットワークにおける中心性と，カオスの統計量を良く近似する不安定周期軌道との関係を調べた．結果として，出次数中心性の高い不安定周期軌道が，カオスの統計を良く近似する傾向にあるという結果を得た．

本報告では，次数中心性のみに焦点を当てたが，その他の中心性がカオスのどの性質と結びついているかという課題も非常に重要である．

参考文献

[1] E. Ott, Chaos in Dynamical Systems, Cambridge Univ. Press,Cambridge, 1993.

[2] 増田直紀, 今野紀雄, 複雑ネットワーク-基礎から応用まで, 近代科学社, 2010.

フラグメント分子軌道法を用いたタンパク質中電子移動の高精度経路解析法の開発

鬼頭(西岡)宏任[a)], 安藤耕司

京都大学大学院理学研究科（[a]現所属: 名古屋大学大学院理学研究科)

1 INTRODUCTION

蛋白質中でおこる電子移動反応は、光合成や内呼吸などの生体エネルギー変換に重要な役割を果たしている。光合成反応中心蛋白質や、チトクロムやアズリンなどの金属蛋白質に対する分光研究から、蛋白質環境下のトンネル効果によって、電子は10〜30Åもの長距離を移動していることが分かっている[1]。そこで我々は、蛋白質環境が電子移動を媒介する詳細なメカニズムを明らかにするために、大規模系のための量子化学計算手法であるフラグメント分子軌道(FMO)法[2]を利用した電子移動経路解析法の開発を行った。

FMO 法は、蛋白質などの巨大分子を小さなフラグメントに分割し、フラグメント単量体とフラグメント二量体を他のフラグメントの静電ポテンシャル下で解いたエネルギーから、分子全体のエネルギーを計算する[2]。このオリジナルの FMO 法(FMO2)に対して、計算コストは増えるが、フラグメント三量体補正まで考慮した FMO3 法を用いると、全系エネルギーに対する計算精度は大きく改善される[3]。FMO 法には全系の波動関数を求めることが出来ないという欠点があったが、常行らのフラグメント分子軌道線形結合(FMO-LCMO)法の開発によって解決された[4]。同グループは、FMO3 結果に基づく LCMO 計算(FMO3-LCMO)から、三量体補正が全系の波動関数の精度も大きく改善することを示した[5]。

これまで我々は、FMO2-LCMO 法を適用して得た分子軌道関数を基に、電子移動の経路を解析する手法を開発し[6,7]、光合成系への適用を行ってきた[7,8]。今回は、解析手法を FMO3-LCMO を使ったものに拡張し、三量体補正が電子移動経路の結果をどの程度改善するか検証を行った。

2 MODEL & METHODS

本研究では、トリプトファン(Trp)とプロリン(Pro)からなる Trp-$(Pro)_3$-Trp ペプチド(図 1)をモデル系として採用し、Trp 間のホール(正孔)の長距離移動に対して我々の理論を適用した。FMO 計算では、炭素原子間の共有結合を切断(図中の破線)した五つのフラグメントを用いた。$(Pro)_3$ ブリッジが電子移動を媒介する強度は、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)法で求めた電子的相互作用(T_{DA})から評価した[6,7]。反応速度はこの T_{DA} の二乗に比例する[1]。$(Pro)_3$ブリッジ中の電子移動経路は、トンネル電流解析法から解析した[6,7]。

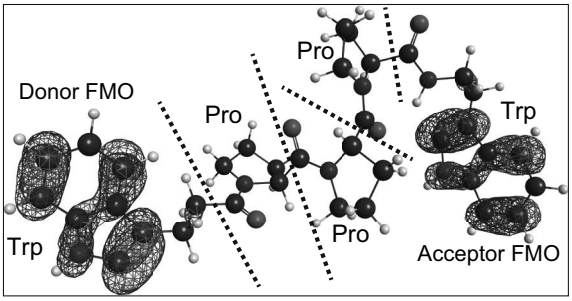


図 1 Trp-(Pro)3-Trp ペプチド

GMH 法には、クープマンスの定理から、全系の荷電状態を中性として得られる最高占有軌道(HOMO)と、その一つ下のエネルギーの軌道(HOMO-1) を使用した[7]。Bridge GF 法とトンネル電流解析法では、図 1 中に示した 左端の Trp フラグメント単量体の HOMO にあった電子が、右端の Trp フラグメントの HOMO へ移動するとして計算を行った[6,7]。（従って、ホールは右端

Trp から左端 Trp に移動するとみなす。)

本研究では全て 6-31G(d)基底関数を用いた。今回のように、いわゆるダブルゼータ以上の基底関数を使用し、共有結合の切断を伴う FMO-LCMO 計算を行う場合、切断部分の基底関数が両側のフラグメントでダブルカウントされることから生じる線形従属性を取り除く必要がある[5]。そこで我々は、フラグメント分子軌道線形結合を(価電子+内殻電子)軌道空間に制限する FMO-LC(VC)MO 計算を行うことで、基底関数の次元を減らし、線形従属性の問題を回避した。この手続きは、電子移動解析の計算コストの大幅な削減にもなっている [6,7]。

3 RESULTS

通常の全電子 Hartree-Fock(RHF)計算から求めた全エネルギーに対する FMO 計算の誤差は、

FMO2: 2.26 milli-Hartree (1,42 kcal/mol)

FMO3: 0.0349milli-Hartree (0.0219 kcal/mol)

となり、三体補正を考慮することによって大きく改善される。

次に T_{DA} の計算結果を下記の表に示す。参照とする RHF では、全波動関数を(価電子+内殻電子)軌道空間に射影した[7]。表から分かるように、T_{DA} の計算結果は計算方法に大きく依存せず参照値を良く再現している。

Method	GMH ($\times 10^{-2}$cm^{-1})	Bridge GF ($\times 10^{-2}$cm^{-1})
RHF	10.2	10.0
FMO3-LC(VC)MO	11.0	10.2
FMO2-LC(VC)MO	9.86	9.21

最後に、トンネル電流を図２にプロットした。FMO2-LC(VC)MO の電子移動経路(c)と比べて、FMO3-LC(VC)MO(b)は、マイナーなカレント分布も含め RHF の結果(a)を良く再現している。

4 SUMMARY

Trp-(Pro)3-Trp モデル系に対する解析から、共有結合の切断を伴う FMO 計算では、三量体補正が電子移動経路の結果を大きく改善することを明らかにした。今回の解析結果をふまえて、今後、現実的な蛋白質系での経路解析を行う予定である。

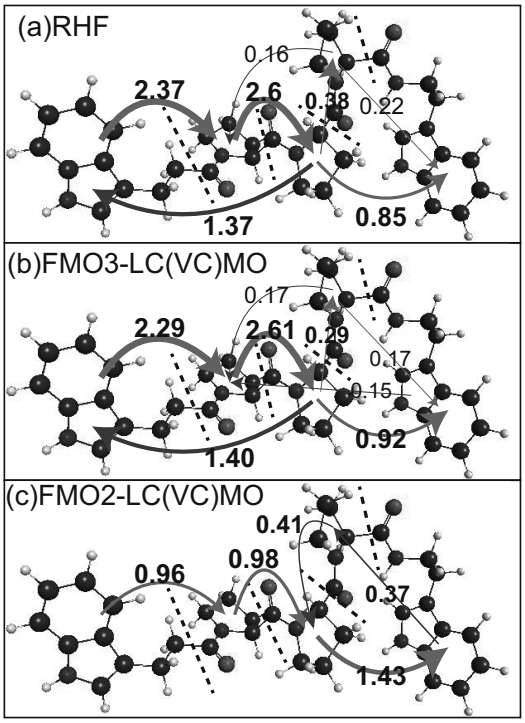


図 2　フラグメント間トンネル電流マップ

5 ACKNOWLDGEMENTS

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] 垣谷俊昭(1998)『光・物質・生命と反応(下)』20 章と 23 章, 丸善株式会社

[2] K. Kitaura, et al., *Chem. Phys. Lett.* **313**, 701 (1999).

[3] D.G. Fedorov, K. Kitaura, *J. Chem. Phys.* **120**, 6832 (2004).

[4] S. Tsuneyuki, et al., *Chem. Phys. Lett.* **476**, 104 (2009).

[5] T. Kobori, et al., *J. Chem. Phys.* **139**, 094113 (2013).

[6] H. Nishioka and K. Ando, *J. Chem. Phys.* **134**, 204109 (2011).

[7] H. Kitoh-Nishioka and K. Ando, *J. Phys. Chem. B,* 116, 12933 (2012).

[8] 鬼頭-西岡 宏任、安藤耕司 “光合成反応中心における長距離電子移動の経路解析” 第 4 章 1 節, 高次π空間の創発と機能開発(監修: 赤阪健、大須賀篤弘、福住俊一、神取秀樹) シーエムシー出版.

分子軌道計算を用いた水溶性ポリアセチレンの高次構造解析

寺田 佳世

奈良先端科学技術大学院 大学物質創成科学研究科

1 緒言

Rh 触媒を用いた重合によって得られるシス立体規則性の高い置換ポリアセチレンは、側鎖に光学活性な置換基を導入することで、巻き方向の片寄ったらせん構造を形成することが知られている。このらせん構造は、熱、pH、極性溶媒などの外部刺激に応答して、らせん反転やピッチ変化、ランダムコイルへの転移などの構造変化を起こす。我々はこれまでに、置換ポリアセチレンの刺激応答性を活用した新規機能性生体材料の開発を目的として、水溶性および生体適合性を付与する置換基である双生イオン型のベタイン基をポリアセチレン側鎖に導入し、CD スペクトルなどを用いた高次構造の検討を行ってきた。その結果、例えばカルボキシベタイン基を側鎖に有するポリ（プロパルギルアミド）の poly(**1**)（Chart）は、有機溶媒中と水中でとり得る構造が異なること、温度変化や pH 変化に応答して構造が変化することなどが明らかとなった。しかし、具体的にどのような二次構造変化が起きているのかについて、詳しい情報は得られていない。そこで本研究では、分子モデリング、分子シミュレーション計算によって、ポリマー構造の最適化や溶媒依存性などに関する解析を行うことを目的とした。

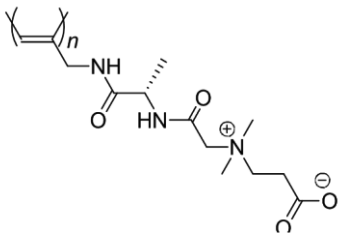


Chart. Poly(**1**)の構造

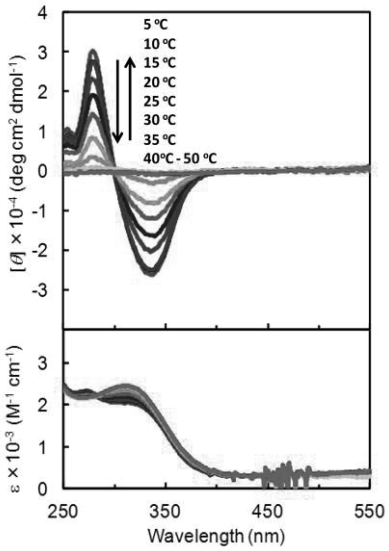


Figure 1. poly(**1**)の水中における CD および UV-vis スペクトル

2 実験

まず spartan という分子モデリングソフトを用いて、分子力学計算(MMFF94、水中)により **1** の 12 量体の主鎖単結合の二面角（ϕ）を 10° ずつ変化させて分子力学計算によりエネルギーを求め、コンフォメーションの最適化を行った。ここで得られたコンフォメーションの座標を用いて、Gaussian 09、ZINDO/S 法によって Poly(**1**)の励起状態計算を行い、velocity モードにおける遷移状態におけるパラメータである rotatory strength (R_{vel})および oscillator strength (f)を低エネルギー側からそれぞれ 20 個算出した。これらの値に半値幅を 14 nm としたガウス分布に従う波形の肉付けを行うことにより、CD および UV-vis スペクトルをシミュレーションし、実測値との比較を試みた。

3　結果･考察

1 の 12 量体の主鎖二重結合-単結合間の二面角(ϕ)を 10° ずつ変化させてエネルギーをプロットした (Figure 2)。Poly(**1**)は、ϕが-80° のときに最も安定であり、右巻きらせんより左巻きらせんの方が 9 kJ/mol・unit 安定であった。

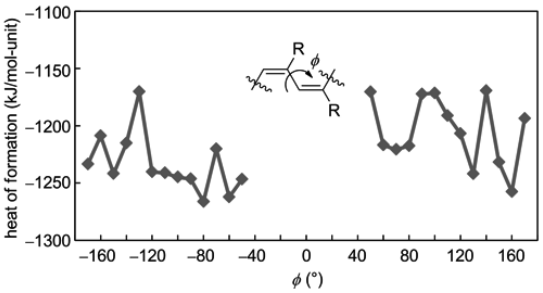


Figure 2. **1**-12 量体の主鎖単結合の二面角ϕに対するエネルギープロット

再安定となったϕが-80° のときの座標に対して､poly(**1**)の水中における CD および UV-vis スペクトルのシミュレーションを行った。その結果を Figure 3 に示す。CD スペクトルにおいて 300-340 nm 付近に長波長側から、負、正の分裂型のコットン効果が、UV-vis スペクトルにおいて 333 nm を λ_{max} とする単峰性のピークが観測された。水中で観測された実測の CD および UV-vis スペクトル (Figure 1) は、このシミュレーションとある程度一致し､Poly(**1**)は水中で左巻きのらせん構造を形成していることが示唆された。

4　結言･今後の展望

今回、ソフトウェア Spartan を使用し、分子力学(MM)計算による poly(**1**)のコンフォメーションの最適化を行った。そして最安定となった座標に対して、ソフトウェア Gaussian 09 を使用し、ZINDO/S 法による励起状態計算を行い R_{vel} および f を求めた。これらのパラメータを用いて､poly(**1**)の CD および UV-vis スペクトルシミュレーションを行った。その結果、MM 計算より再安定となった **1** の 12 量体の構造が、実際のポリマーが水中で形成する構造と類似していることを確認することに成功した。

今回の研究期間内に Poly(**1**)の水中でのコンフォメーションの予測は行えたが、有機溶媒中や高温での解析はまだ行えていない。MM 計算による最安定構造の予測は、水以外の溶媒中においては困難であるため、有機溶媒中のコンフォメーション解析は他の計算手法を用いて構造最適化を行う必要がある。分子軌道法(MO)法、密度汎関数(DFT)法では、溶媒分子を連続誘電体として考慮した COSMO、SCRF、PCM 法や、溶媒の分子としての性質を反映させた QM/MM 法を用いることができるため、有機溶媒中における構造解析が可能になる。また MO、DFT 法では異なる温度下での構造計算も可能である。そこで今後ソフトウェア MOPAC や Gaussian を用いて MO 法や DFT 法で構造最適化を行うことで、今回達成できなかった有機溶媒中や高温において Poly(**1**)が形成する構造に関する詳細な情報を得ることができると期待される。構造解析により得られた最安定構造の整合性については、今回と同様の手法によるスペクトルシミュレーションにより検討可能であると考えられる。また、今回は ZINDO/S 法のみを用いたが、TD-DFT 法による励起状態計算も合わせて行うことにより、スペクトルシミュレーションの精度をより増すことも可能であると推測される。

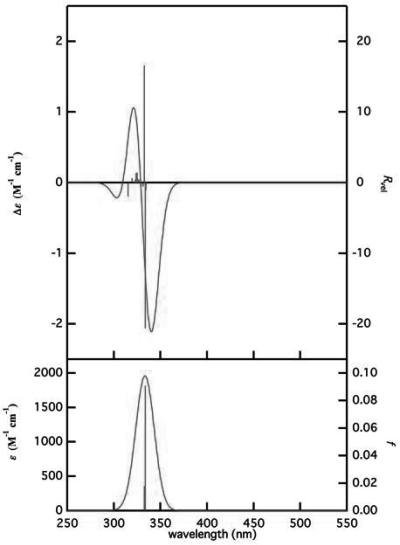


Figure 3.　poly(**1**)の CD および UV-vis スペクトルシミュレーション結果

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。

核融合プラズマにおける第一原理に基づいた乱流輸送シミュレーション

今寺　賢志

京都大学大学院 エネルギー科学研究科 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 24 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）の基で行った(A)開放系プラズマ中の過渡的な変化に対する輸送の応答解析、(B)MHD-イオン系乱流間の多階層相互作用に関する解析、(C)トロイダルコードへの拡張について報告する。

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（帯状流）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）。

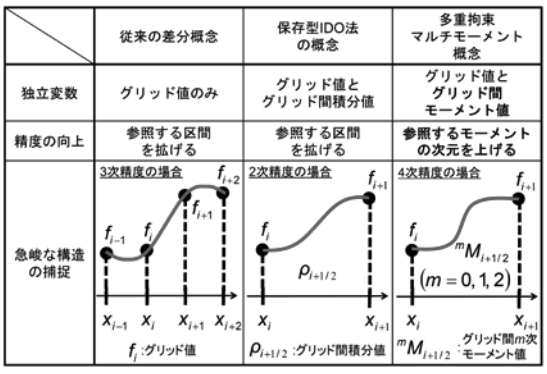


表 1：従来の差分概念と保存型 IDO 法、多重拘束マルチモーメント法の概念の比較

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 GKMUST 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]。本稿では、平成 24 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）の基で行った「開放系プラズマ中の過渡的な変化に対する輸送の応答解析」、「MHD-イオン系乱流間の多階層相互作用に関する解析」、「トロイダルコードへの拡張」の 3 点について報告する。

2　開放系プラズマ中の過渡的な変化に対する輸送の応答

核融合プラズマ中の乱流輸送に対するこれまでの解析アプローチは、ある空間点の流束と勾配の一意的関係に準拠した「局所輸送」の考え方が基本であった。しかし、過渡的な変化に対する輸送の応答を調べる研究が進展するにつれ、単純な局所輸送モデルでは説明できない現象が数多く観測されるようになった。例えば、L（低閉じ込め）モードから H（高閉じ込め）モードへの遷移過程における広範囲での温度上昇の同時性や、ペレットや不純物入射によって生じるコールドパルスの弾道的伝搬がそれに該当し、プラズマ輸送が質的に非局所・非拡散であることが示唆されている。

そこで本研究では、これまで行ってきた多階層乱流シミュレーションの結果から、ミクロ（～mm）スケールの乱流と帯状流に代表されるメゾ（～cm）スケールの揺動間の非線形結合が非局所・非拡散的なダイナミックスに深く関与しているとの着想に基づき、外部からの熱の入出力を考慮したシミュレーションにおいて、途中で input power を切った場合にどのように乱流、および径電場が応答するかについて解析を行った。

図 1(a)は熱流束を縦軸、温度勾配を横軸としたリサージュ曲線を示している。power を切ると温度分布の緩和が起きるものの、power を入れないケースに較べて高い温度勾配で定常状態が維持されていることがわかる。これは臨界温度勾配の上方遷移に対応するが、原因としては、図 1(b)からわかるように、power を切ると径電場が大きく生成されたためと考えられる。その要因としては、power を入れている間は、径電場が励起される特性時間と比較して弾道的な輸送が半径方向により早く伝播しているのに対し、power を切ると遅くなり、結果として径電場が強く形成されたものと考えられる。

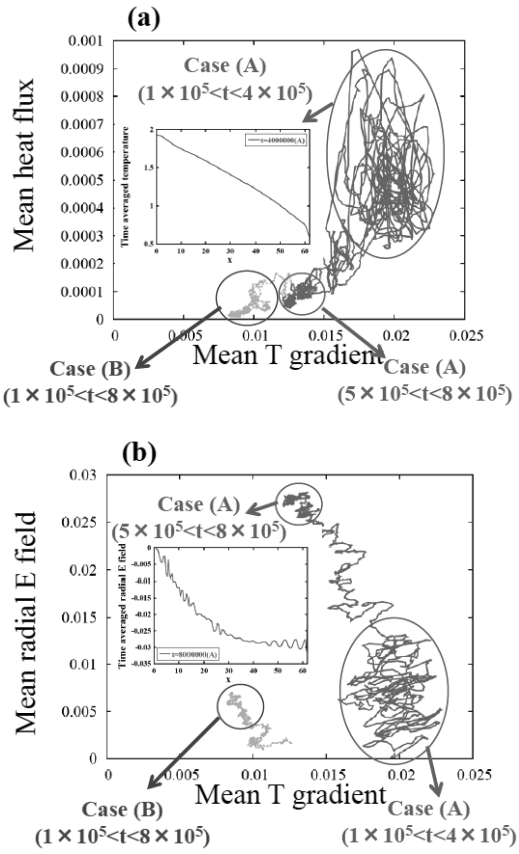


図 1: (a)乱流輸送に伴う熱流束、および(b)径電場を縦軸、温度勾配を横軸としたリサージュ曲線。Case (A)は $t<4\times10^5$ で外部からの入力が on、$t>4\times10^5$ で off、Case (B)は常に off。

3　MHD-イオン系乱流間の多階層相互作用

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、我々はその両者の効果を考慮したジャイロ運動シミュレーションを行うことで、それらの多階層間相互作用を解析した [5]。

図 2 は、各磁気島幅に対する ITG モードの成長率のポロイダル波数依存性を示している。磁気島によるモード間結合の結果、異なる波数の成長率が等しくなり、高波数における Landau 減衰や有限ラーマー半径効果(FLR)による散逸によって全体の成長率が減少することがわかった$(w=6,12)$。一方で、流体モデルでの結果 [6]と比較すると、その減少は小さく、さらに、磁気島が十分大きい場合$(w=18)$、逆に不安定化されることが確認された。これは、磁気島が増大するとそれに伴って新たな有理面が形成され、モード幅が狭い短波長 ITG モードがその影響をより強く受けるためであることが新たに明らかとなった(図 3 参照)。

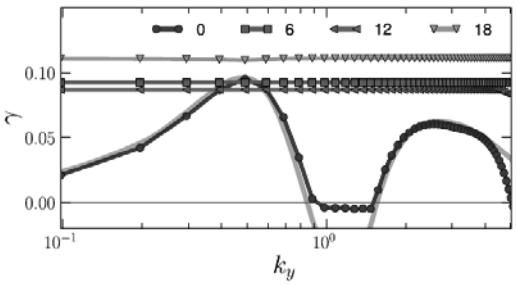


図 2: 異なる磁気島の幅$(w=0,6,12,18)$に対するイオン系乱流の分散関係

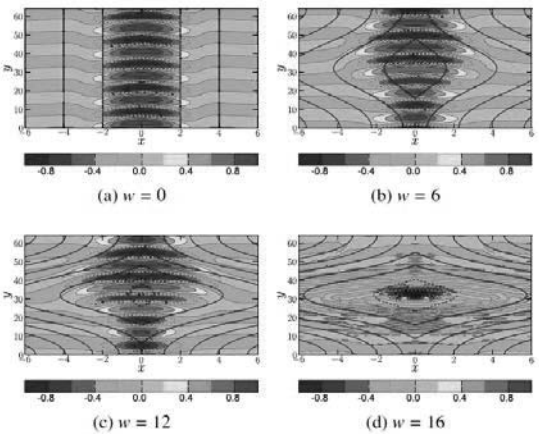


図 3: 異なる磁気島の幅$(w=0,6,12,18)$に対する静電ポテンシャルの構造

4　トロイダルコードへの拡張

2 章、および 3 章はスラブ配位における解析結果であったが、より現実に近いトロイダル配位の解析を行うことは極めて重要である。そこで本研究では、GKMUST コードをトロイダル配位に拡張し、まず線形においてベンチマークテストを行った。用いたジャイロ運動論的 Vlasov 方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\frac{dr}{dt}\frac{\partial f}{\partial r}+\frac{d\theta}{dt}\frac{\partial f}{\partial \theta}+\frac{d\varphi}{dt}\frac{\partial f}{\partial \varphi}+\frac{dv_{\parallel}}{dt}\frac{\partial f}{\partial v_{\parallel}}=0 \quad (1)$$

$$\frac{dr}{dt}=-\frac{1}{rB}\frac{\partial\langle\Phi\rangle_{\phi}}{\partial\theta}-\frac{v_{\parallel}^2+\mu B}{R_0}\sin\theta$$

$$\frac{d\theta}{dt}=\frac{1}{rB}\frac{\partial\langle\Phi\rangle_{\phi}}{\partial r}+\frac{v_{\parallel}}{qR}-\frac{v_{\parallel}^2+\mu B}{rR_0}\cos\theta$$

$$\frac{d\varphi}{dt}=\frac{v_{\parallel}}{R}$$

$$\frac{dv_{\parallel}}{dt}=-\frac{1}{qR}\frac{\partial\langle\Phi\rangle_{\phi}}{\partial\theta}-\frac{1}{R}\frac{\partial\langle\Phi\rangle_{\phi}}{\partial\varphi}-\mu B\frac{r\sin\theta}{qR}$$

$$+\frac{v_{\parallel}}{R_0}\left(\frac{\partial\langle\Phi\rangle_{\phi}}{\partial r}\sin\theta+\frac{\partial\langle\Phi\rangle_{\phi}}{\partial\theta}\frac{\cos\theta}{r}\right)$$

$$-\frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2}-\left(\frac{1}{r}+\frac{1}{n_0(r)}\frac{\partial n_0(r)}{\partial r}\right)\frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2}-\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\theta^2}$$

$$+\Phi=\frac{1}{n_0(r)}\left(\iint\langle f\rangle_{\phi}\,dv_{\parallel}d\mu-n_0(r)\right) \quad (2)$$

$(r,\theta,\varphi,v_{\parallel},\mu)$はジャイロ中心座標、$f$ はイオン分布関数、$<\Phi>_{\phi}$はジャイロ平均された静電ポテンシャル、$n_0(r)$ はイオンの平衡密度、$B=B_0R_0/(R_0+r\cos\theta)$は磁場をそれぞれ表している。5 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 シミュレーションの場合、数値流体力学と同様のアプローチが適用可能であるが、問題点としては、

- 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、高効率並列化が必要
- 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るため、適切な数値計算手法が必要

が挙げられる。そこで本研究では、まず前者の対策として、(r,θ,μ) の 3 次元領域分割法を採用した。計算のフローチャートは以下の通りである。

(1) $f(r,\theta,\varphi,v_{\parallel},\mu)$ を Fourier 変換し、$f(r,k_{\theta},k_{\varphi},v_{\parallel},\mu)$ を計算。その際に座標を集団通信(MPI_ALLtoALL)で転置させることを利用して、(r,θ,μ) 領域分割を$(k_{\theta},k_{\varphi},\mu)$ 領域分割に変更。

(2) 領域分割されていないr方向に対して有限差分法を用いることで式(2)を計算し、$\Phi(r,k_\theta,k_\varphi)$を求める。
(3) 逆Fourier変換を施すことで$\Phi(r,\theta,\varphi)$を求める。その際に座標を集団通信で転置させることを利用して、(k_θ,k_φ,μ)領域分割を(r,θ,μ)領域分割に戻す。
(4) (r,θ)方向に関する$\Phi(r,\theta,\varphi)$の裾値を、隣接するCPUに一対一通信(MPI_SENDRECV)で送る。
(5) 式(1)を有限差分法を用いて計算し、$f(r,\theta,\varphi,v_\parallel,\mu)$を時間発展させる。
(6) (r,θ)方向に関する$f(r,\theta,\varphi,v_\parallel,\mu)$の裾値を隣接するCPUに一対一通信で送る。

後者の対策としては、前述の多重拘束マルチモーメント法を用いる予定であるが、初期のベンチマークテストのため、本計算では4次精度中心差分法を用いた。

図4(a)はCyclone DIII-D base parameter [8]と呼ばれる典型的な物理パラメーターを用いて行った際のイオン温度勾配乱流(ITG)モードの線形成長率を、図4(b)はポロイダル断面における最も不安定なモードの静電ポテンシャルを示しており、他の文献とよい一致を見せている。また図5は、帯状流の無衝突減衰テスト [9]の結果であり、他の文献に加え、理論計算で得られた収束値ともよい一致を見せている。

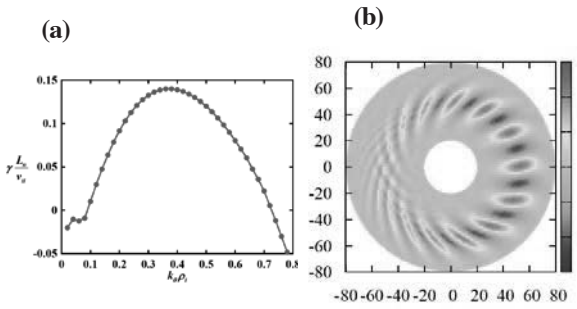


図4：Cyclone DIII-D base parameter を用いた際のITG モードの(a)線形成長率と(b)最も不安定なモードのポロイダル構造

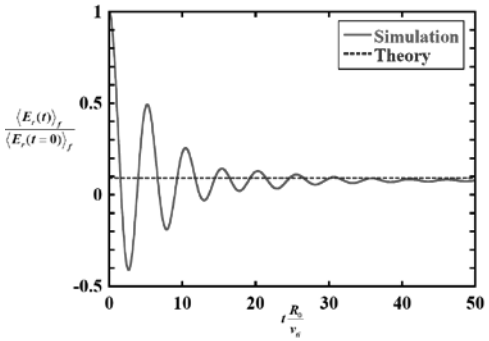


図5：初期値で規格化された径電場の時間発展。実赤線が数値計算結果、青点線が理論計算で得られた収束値 [9]に対応。

5　総括と今後の課題

本研究では、スラブ配位における開放系プラズマ中の過渡的な変化に対する輸送の応答解析と、MHD-イオン系乱流間の多階層相互作用に関する解析、さらにはスラブコードのトロイダル配位への拡張を行った。

今後は、トロイダルGKMUST コードを非線形に拡張し、スラブ配位において明らかとなった過渡的な変化に対する応答や、多階層相互作用を軸に解析を進めていく予定である。

Reference

[1] Y. Idomura, L. Villard and T.-H. Watanabe, Nucl. Fusion **50**, 043002 (2010).

[2] T. Kawano, K. Imadera, J. Q. Li and Y. Kishimoto, Plasma Fusion Res. **6,** 2401097 (2011).

[3] J. Q. Li, K. Imadera, Z. X. Wang, P. Hilscher and Y. Kishimot, Progr. Nucl. Sci. Tech. **2**, 64 (2011).

[4] K. Imadera, Y. Kishimoto and J. Q. Li, Plasma Fusion Res. **5**, 019 (2010).

[6] P. P. Hilscher, K. Imadera, J. Q. Li and Y. Kishimoto, Plasma Fusion Res. **8**, 2403040 (2013).

[7] Z. X. Wang, J. Q. Li, Y. Kishimoto and J. Q. Dong, Phys. Plasmas **16**, 060703 (2009).

[8] A. M. Dimits, *et al.*, Phys. Plasmas **7**, 969 (2000).

[9] F. L. Hinton and M. N. Rosenbluth, Plasma Phys. Control. Fusion **41**, 653 (1999).

実河川に繁茂する植生の揺動の数値解析

岡本　隆明

京都大学大学院工学研究科社会基盤工学専攻水理環境ダイナミクス分野

1　研究目的

河道内植生群落は河道の流下能力に大きな影響を及ぼしている．環境保全上，河道内の全ての植生群落を除去することは不可能であるため，流水の阻害となる植生群落のみを正確に評価して伐採することが求められる．しかしながら，実河川の植生の多くは柔軟性を有し流れによって変形するため，植生の伐採位置・量による流下能力の改善効果については十分な知見は得られていない．

そこで本研究では植生群落内外の流れを水路実験及び数値解析することで，植生群落の伐採による抵抗特性・粗度係数の変化を定量評価し，河道内樹木群落の維持管理のための知見と手法を提供する．

植生にかかる抗力を数値解析し，植生変形形状を把握することで正確に評価することで植生群落の伐採位置・量による抵抗特性・粗度係数の量的に知ることができ，植生群落を保護した上で河川管理するための手法を提供する．また本研究では植生にかかる抗力を数値解析し，植生変形形状を正確に評価することで数値計算モデルも精度を向上させる．これにより樹木群落による流況変化を正確に数値シュミレーションすることが可能とし，樹木群落による河床の地形変化・群落の拡大状況を将来予測するなど有意義なデータを提供する．

2　計算結果

本研究では Large Eddy Simulation (LES)を用いて，柔軟植生流れを数値計算した．植生変形によって抵抗係数は大きく変化することが知られているため，植生の変形形状を詳細に調べた．表 1 に本研究の計算条件を示す．スーパーコンピュータを利用することで計算格子の数を大幅に増やすことが可能となり(図 1)，１つ１つの柔軟な植生要素を計算領域上に正確に再現した(図 2) ．柔軟植生は水流によって大きく変形するが，変形形状は植生群落内での位置によって大きく変化することがわかった．すなわち，植生群落の上流端では植生は水流によって大きくたわみ, 倒伏する. しかし，上流側の植生によって流れが遮蔽されるため，下流にいくにしたがって植生のたわみは小さくなる(図 3).

乱流構造の変化に着目して研究し，柔軟植生の変形は大規模組織渦の発達過程とも密接な関係があることがわかった．すなわち，植生群落の上流側では植生の揺れは小さいが，群落内を下流にいくにしたがって植生は起き上がり，組織的な揺動をするようになる．これは植生先端部には組織渦が発生したが下流にいくにしたがって発達していったためである(図 4).

また計算領域を大きくとることが可能となったので，横断方向の計算格子数を増やして数値解析し大規模渦の３次元構造について考察した．数値解析結果から大規模渦は横断方向に位相差をもち，かぶり水深の低いケースほど組織構造の横断方向スケールが小さくなることを解明した(図-5). 植生流れの組織乱流が横断方向に非一様な構造をもつことは既往研究(Ghisalberti & Nepf (2005))の可視化実験によって確認されているが，詳細な実験データは得られていない．今後植生乱流の研究を進めていく上で，今回スーパーコンピュータを用いた数値計算結果から大変有用なデータが得られた．

表-1 計算条件

Case	$\lambda = ah$	L_v (cm)	B_v (cm)	H (cm)	h (cm)	H/h	U_m (cm)	Fr	Re
A-10	1.56	1.6	1.6	15.0	5.0	3.0	12.0	0.10	18000
B-10	0.78	1.6	3.2	15.0	5.0	3.0	12.0	0.10	18000
C-10	0.39	3.2	3.2	15.0	5.0	3.0	12.0	0.10	18000
C-20	0.39	3.2	3.2	5.0	5.0	1.0	10.0	0.14	5000
C-21	0.39	3.2	3.2	6.3	5.0	1.3	10.0	0.13	6300
C-22	0.39	3.2	3.2	7.5	5.0	1.5	10.0	0.12	7500
C-23	0.39	3.2	3.2	10.0	5.0	2.0	10.0	0.10	10000
C-24	0.39	3.2	3.2	12.5	5.0	2.5	10.0	0.09	12500
C-25	0.39	3.2	3.2	15.0	5.0	3.0	10.0	0.08	15000
C-26	0.39	3.2	3.2	20.0	5.0	4.0	10.0	0.07	20000

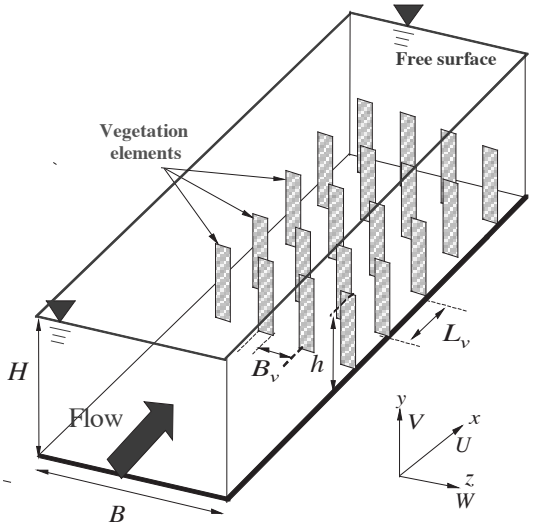


図-1 計算領域

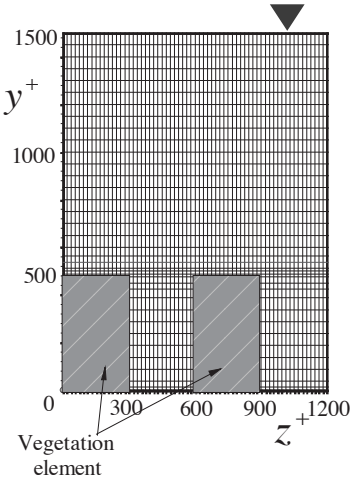


図-2 計算メッシュ

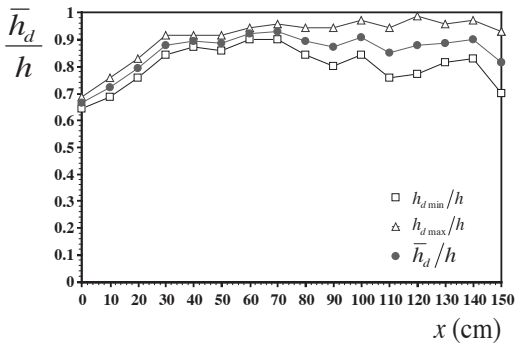


図-3 柔軟植生変位の流下方向変化

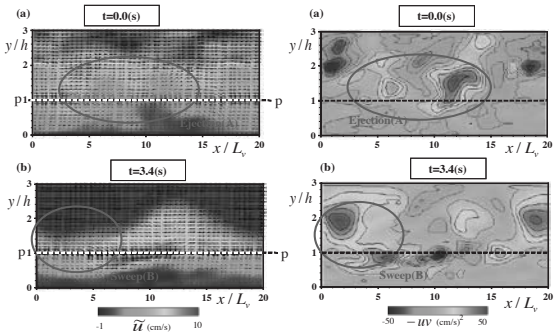


図-4 瞬間流速ベクトルと瞬間レイノルズ応力分布（縦断面）

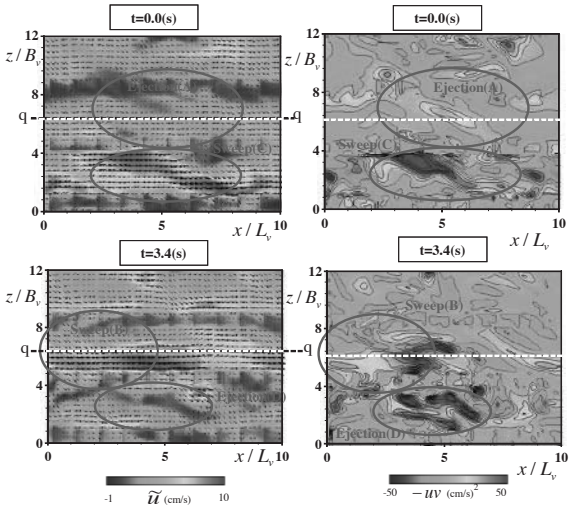


図-5 瞬間流速ベクトルと瞬間レイノルズ応力分布（水平面）

流水中の自然石に働く流体力の評価

吉田 圭介[1], 牛島 省[2], 宮木 伸[3], 竹内 章人[1]

[1]岡山大学大学院 環境生命科学研究科, [2]京都大学 学術情報メディアセンター, [3]京都大学 工学研究科

1 諸言

近年，河川のインフラ整備では構造物の堅牢さに加えて自然環境への調和が要求されており，現地で調達した自然の素材（石や木など）を用いた河川構造物が河道内に設置される場合がある．例えば，適度な空隙を有する水制工や根固工（**図 1**）や水深寸法以上の巨石を河道に配置した巨石投入工法は，川の流れに多様性をもたせて河川景観を創造したり，水生生物の生息環境を保全するなどの効果がある．

しかし，コンクリート構造物とは異なり，自然石を用いた工法では材料の要素が画一ではなく，構造物の流水に対する力学的応答（治水機能）が明確ではない場合がある．現在，実務では技術者の経験や既往の実験例（マニュアル[1]など）からこうした構造物の安全度を推定するのが通例であるが，これには労力や費用が多くかかる上，射流などの急変流場では計測そのものが困難であるため，設計の信頼性は必ずしも十分ではないと指摘されている[2].

そこで，本研究では固気液多相場の数値解析法[3]を利用して，一様な開水路等流場の底面に設置された自然石に働く流体力を解析し，併せて行った室内模型実験との比較から数値解析法の妥当性を検討することとした．本研究の最終目標は，流水中の自然石に働く流体力を精度良く評価できる解析手法を確立し，水工学の実務に資することである．

2 実験

本研究では長さ 16m，幅 0.6m，高さ 0.4m，勾配 1/1000 の可変勾配型循環水路(**図 2** 参照)を用いた．座標系は図に示す通りである．実験では自然石をアクリル製の水路底面に接着して通水し，流水中の流体力と周辺の流れ場を測定した．河川の自然石は通常，上流から下流に沿って徐々に扁平な形状を呈するが，本研究では**図 3** に示すように表面の凹凸や粗さが明瞭な石を用いている．

図 1 根固工の例（椹野川）

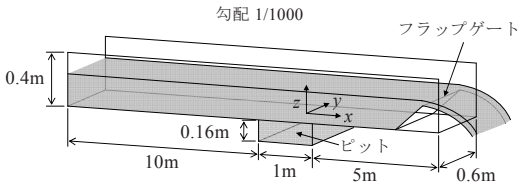


図 2 実験水路，計測ピット及び座標系

表 1 実験条件表

Case	流量Q [l/s]	断面平均流速V [m/s]
1	40	0.33
2	60	0.50
3	80	0.67

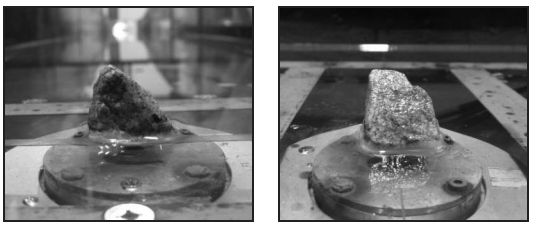


図 3 実験で用いた自然石 (左 : 石 A, 右 : 石 B)

流体力の計測では水路のピット内中央部に四分力計(東京計測社製，Y116M2 型)を設置し，自然石に働く抗力・揚力を 30Hz の時間解像度で測定した．水流の流速計測には 2 次元電磁流速計(KENEK 社製，VM-802H 型)を用い，開水路の底面境界層が十分に発達して，主流速の鉛直分布が対数則分布を示

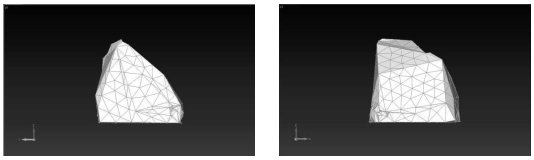


図 4　自然石の 4 面体分割（左：石 A，右：石 B，**図 3** 参照）

表 2　数値解析条件表

時間刻み Δt [s]	5.0×10^{-4}
計算時間 T [s]	25.0
空間格子幅 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ [mm]	(5.0, 4.8, 3.8)
計算領域 (L_x, L_y, L_z) [m]	(1.0, 0.125, 0.1)
流入条件	断面平均流速
流出条件	自由流出
側壁・水面条件	Slip 条件
底面条件	Nonslip 条件

すことを確認した．また，水深の計測にはポイントゲージを使用し，等流場であることを確認した．実験条件は**表 1** に示す通りである．

3　数値解析

本研究では牛島ら[3]の数値解析手法を用いて，自然石に働く流体力を解析した．牛島らの手法では固気液多相場を一流体モデルとして扱い，混合体に対する連続式と運動方程式を非圧縮性条件の下で DNS（直接数値計算）により解く．また，任意形状の固体は四面体要素の集合として表現され，固体領域に働く流体力は抗力係数などの経験的なパラメータからではなく，直接的に適切に算定される．

本研究では実験で用いた自然石（**図 3** 参照）の 3 次元形状測定を行って，数値解析に必要なデータを作成した（**図 4** 参照）．数値解析の条件は**表 2** に示す通りである．解析では自然石を剛体とみなした．また，解析では直方体格子を用い，x, y, z 各方向に均一に格子分割を行っている．なお，負荷軽減のため，解析では領域分割による並列計算を行っている．

4　結果と考察

図 5，**図 6** は数値解析結果の一例であり，水路中央の鉛直断面における流速場と渦度コンター，および底面近くの水平面内の渦度コンターを各々示した．自然石周辺では周期的な渦構造が生成され，それらが移流された後に拡散する様子が観察される．

図 7 には水理実験と数値解析から求めた，流量毎

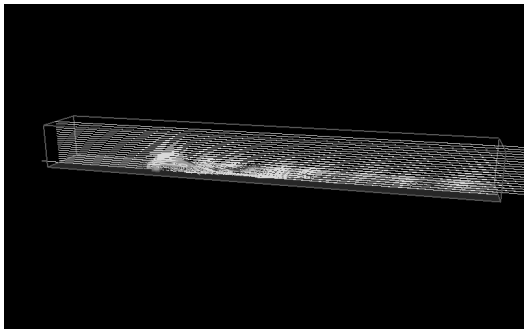


図 5　自然石周辺の流れ場の様子（水路中央の鉛直断面，流速ベクトルと渦度コンター，石 A）

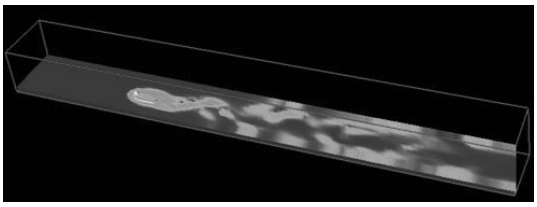


図 6　自然石周辺の流れ場の様子（底面近くの水平断面，渦度コンター，石 A）

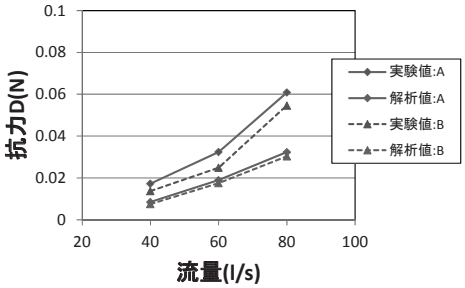


図 7　流量と抗力の関係（石 A と石 B）

の抗力の算定値を示す．実験値と解析値を比較すると，定性的には流量と抗力には比例関係が認められる．一方，定量的には解析値の方が小さい値を示す．この要因として，境界条件や，自然石と水路底面の接着条件など，詳細な条件の相違が考えられる．今後は条件の詳細を検討するなどして，流体力評価の再現性を向上させたい．

5　参考文献

[1] (財)土木研究センター：護岸ブロックの水理特性試験法マニュアル（第 2 版），2003.

[2] 怜熊公子，前野詩朗，吉田圭介，高田大資，山村明：射流場の護岸・根固めブロックに作用する流体力評価，水工論文集，第 57 巻，I_691-I_696, 2013.

[3] 牛島省，福谷彰，牧野統師：3 次元自由水面流中の接触を伴う任意形状物体運動に対する数値解法,土木学会論文集 B，Vol.64，pp.128-138，2008.

水～土骨格連成有限変形問題を対象とした土構造物・地盤系の固有振動解析

山田正太郎 1)　　野田利弘 2)

1) 名古屋大学大院 工学研究科 社会基盤工学専攻
2) 名古屋大学 減災連携研究センター

1　はじめに

本研究では、水～土骨格連成有限変形解析コード ***GEOASIA***[1] により、地盤とその上部に構築された盛土を対象に土構造物・地盤系全体の地震直前の固有振動数および固有振動モードを算出し、地盤と土構造物がそれぞれ大きく変形するモードを抽出する。さらに、各モードに対応する固有振動数付近に卓越振動数を有する2種類の地震波を入力波として、地震応答解析を行い、卓越する固有振動モードの違いが、土構造物・地盤系の変形破壊挙動に大きく影響を与えることを示す。

なお、同解析手法から得られる固有値問題は複素固有値・複素固有ベクトルを解とする大規模なものとなるため、スーパーコンピュータを利用して、上記の問題を解くことにした。

2　解析条件

計算は二次元平面ひずみ条件で行った。水平地盤上に盛土を施工した場合を考えた。計算に用いた有限要素メッシュと境界条件を図1に示す。この図に示す土構造物・地盤系に対し、固有振動解析と地震応答解析を行った。

3　固有振動解析結果

固有振動解析によって得られた初期(圧密放置後)の固有振動モードのうち、地盤が大きく変形するモード(MODE 1)と盛土が大きく変形するモード(MODE 2)を図2に示す。なお、本論文では固有振動モードが複素固有ベクトルの実部と虚部の線形結合で表されるが、ここでは、複素固有ベクトルの虚部で表されるモードのみを示している。

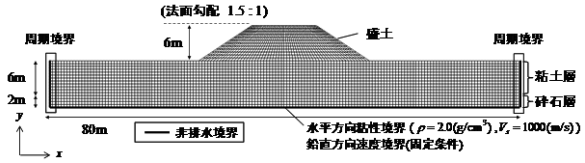
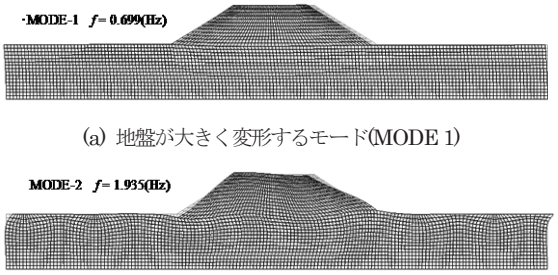


図1　有限要素メッシュと境界条件



(a) 地盤が大きく変形するモード(MODE 1)

(b) 盛土が大きく変形するモード(MODE 2)

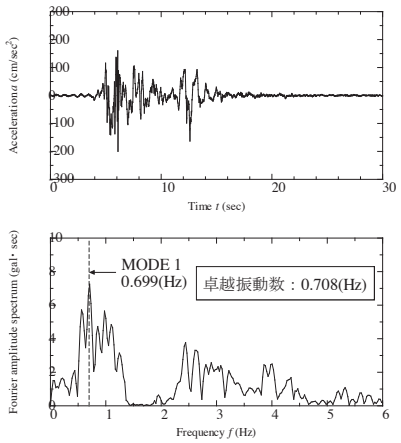
図2　固有振動数および固有振動モード(虚部)

4　地震応答解析結果

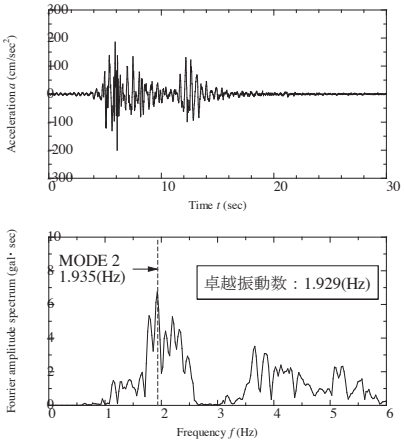
入力地震波の加速度履歴およびフーリエ振幅スペクトルを図3に示す。WAVE 1はMODE 1に、WAVE 2はMODE 2に対応する固有振動数に卓越振動数を合わせた地震波である。地盤底面の全節点の水平方向に課せられた粘性境界に、これらの地震動を入力した。

図4に地震中から地震後にかけてのせん断ひずみ分布の推移を示す。WAVE 1，WAVE 2どちらを入力した場合でも地震後に遅れ破壊を生じている様子が見て取れる。せん断ひずみの進展過程に着目すると、WAVE 1では、地震中に砕石層上端から粘土層中央へとせん断ひずみが進展していることが分かる。その後、時間の経過とともに地盤から盛土へとひずみが進展し、遅れ破壊を生じている。一方、WAVE 2では、地震中に砕石層上端

にひずみが集中するものの、盛土、地盤ともに大きな変形は生じていない。しかし、時間が経過するにつれて、まず盛土に滑り面が発生し、その後地盤内へ滑り線が進展していることが分かる。つまり、地震波が有する卓越振動数の違いによって、遅れ破壊過程に大きな違いが見られることが分かった。



(a) WAVE 1



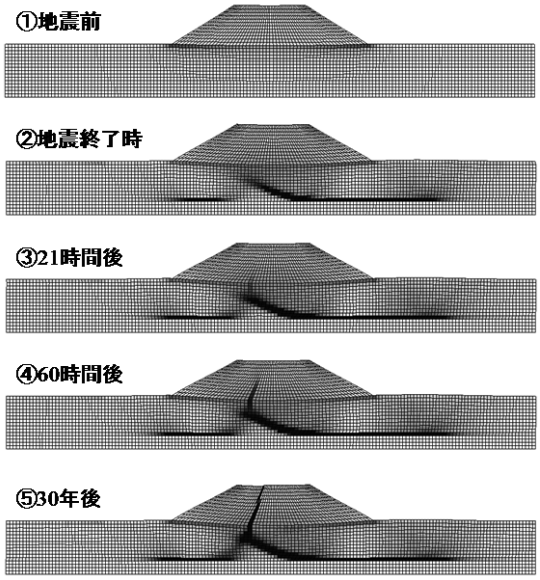
(b) WAVE2

図３　入力地震波

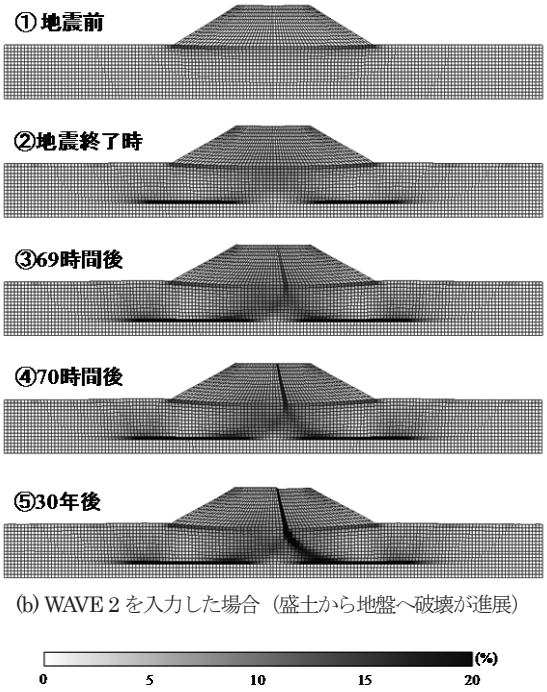
5　結論

本研究では、地盤の初期値・境界値問題に対して、固有振動数および固有振動モードを計算した上で、土構造物・地盤系に対して地震応答解析を行った結果、地震動の卓越振動数が異なれば、異なる固有振動モードが卓越して現れ、地震中、地震後の破壊を含む地盤変形の進行はその固有振動モードの影響を強く受けることを示した。

最後に、スーパーコンピュータ共同利用制度に感謝いたします。



(a) WAVE 1 を入力した場合（地盤から盛土へ破壊が進展）



(b) WAVE 2 を入力した場合（盛土から地盤へ破壊が進展）

図４　せん断ひずみ分布

6　参考文献

1) Noda et al. (2008): Soil-water coupled finite deformation analysis based on a rate-type equation of motion incorporating the SYS Cam-slay model, *Soils and Foundations*, **45**(6), pp. 771-790.

コンクリート材料の物質拡散・非線形力学を連成した経年劣化シミュレータ

浅井 光輝

九州大学大学院工学研究院　社会基盤部門

コンクリートの経年劣化は，中性化・アルカリシリカ反応・塩害等さまざまな要因がある．その多くは力学的要因と化学的要因が複雑に連成しており，劣化メカニズムを詳細に把握したうえで合理的な対策することは困難である．そこで，コンクリート内部での物質の浸透・拡散現象と同時に，亀裂・はく離損傷等の現象を再現可能なシミュレータを開発した．

同シミュレータを用い，コンクリートアリカリシリカ反応時に観測される自由表面での複雑なひび割れが定性的に再現することができた．材料劣化の促進実験結果との比較検証することで計算の信頼性を確保するためにも大規模計算が不可欠であり，現在は大規模並列計算への対応を実施中である．

1　緒言

コンクリート構造物の経年劣化の要因は，中性化・アルカリシリカ反応(ASR)・塩害等のさまざまな現象が考えられる．その多くは力学的要因と化学的要因が複雑に連成しており，劣化メカニズムを詳細に把握したうえで合理的な対策を行うことは非常に困難である．コンクリート内部での物質の浸透・拡散現象は，材料内部の膨張あるいは劣化の起点となり，微視的な亀裂，材料界面でのはく離等の損傷を招く．また逆に，微視的な損傷を受けた領域は，拡散現象において高速に物質が拡散する経路となり，物質が局所的な領域に拡散しやすくなる．以上のように，拡散問題と力学の損傷問題は両者が双方向に連成する現象であり，材料劣化の微視的なメカニズムを解明していくには，連成現象までを再現可能なシミュレータが必要となる．

写真１　ASR による損傷事例

そこで本研究では，まずコンクリート材料のさまざまな劣化要因の中から ASR を取りあげ，連成解析を実施することで，ASR 現象の特徴的な損傷である亀甲状のひび割れパターン（Fig.1 を参照）を再現することを目標とし，コンクリート材料をモルタルと骨材，そして両者の界面の３相に分けたメゾコンクリート材料モデルを用いた数値解析モデルの確立を試みた．

2　拡散膨張・不連続面進展の連成解析

ASR とはコンクリート材料の母材であるモルタル内部のアルカリイオンと介在物である骨材が反応し，骨材表面にゲル状の物質が生成されることで内部膨張が生じ，この内部膨張に伴い材料界面のはく離，あるいは母材内部に微視的なひび割れが進展していくものと考えられている．この一連の流れをモデル化するものとした．

コンクリート中へのイオンの浸透には拡散，移流，吸着などの現象が考えられるが，本研究においては拡散現象のみを考慮するものとした．基本的には，非定常拡散解析と内在物膨張に伴う不連続面進展解析とも有限要素法で解析を行い，この両者を組み合わせることで，拡散膨張を考慮した不連続面進展解析手法の構築を行うことにした．このコンクリートのアルカリ骨材反応を想定した

連成解析の手順を図１に示す.

解析手順としては，まず非定常拡散問題を解き拡散物質の空間分布を予測する．次に，濃度の空間分布の結果を基に膨張力を決定する．この際，膨張力によって引張り応力が基準値を超え不連続面と判定される領域（要素）は，拡散係数の高い仮想空隙領域に置換し，再び拡散問題を解く．以上の手順を繰り返すことで，浸透・拡散に伴う不連続面進展解析を実施する.

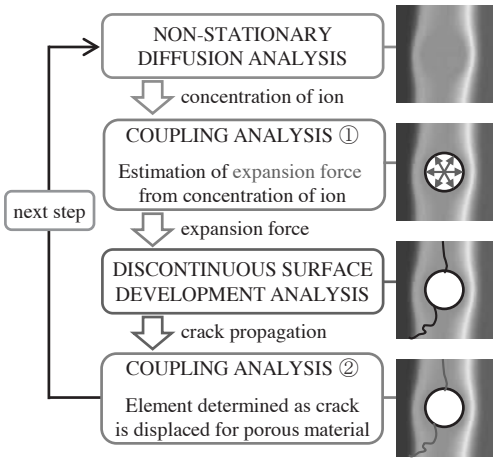


図1　拡散膨張・不連続面進展の連成解析フロー

2.1 ASR 反応に伴う骨材膨張のモデル化

アルカリシリカ反応では，コンクリート内のアルカリ反応性骨材と微細空隙中のアルカリ溶液が化学反応することにより生成するアルカリシリカゲルが吸水，膨張し骨材周辺からひび割れが進展する．本研究ではアルカリシリカゲルの吸水による体積膨張を骨材の体積膨張として表現した．具体的には，骨材要素のみに次式に示すように濃度に比例した膨張ひずみを与えることにした.

$$\begin{aligned}\left\{\varepsilon^c\right\} &= \left\{\varepsilon_x^c \quad \varepsilon_y^c \quad \varepsilon_z^c \quad \gamma_{xy}^c \quad \gamma_{yz}^c \quad \gamma_{zx}^c\right\}^T \\ &= \left\{\alpha c \quad \alpha c \quad \alpha c \quad 0 \quad 0 \quad 0\right\}^T\end{aligned} \tag{1}$$

ここで，α は膨張係数，cはイオン濃度を表す．この膨張ひずみをもとに膨張力を評価し，力学計算においてはこの力を駆動力とした非線形問題を解く.

2.2 損傷モデルによる不連続面の表現

損傷モデルでは連続体損傷力学を導入し，損傷変数 D を用い，要素剛性（材料割線係数）を段階的に減少させる．損傷変数は $0 \leqq D \leqq 1$ であり，D=0 のときには健全な状態を示し，D=1 は最終的な破壊状態を表す．損傷に伴う微小空隙の発達は材料の剛性低下を引き起こすため本研究では弾性係数の低下によって損傷状態を表わす.

$$D = \frac{E_0 - E}{E_0} \tag{2}$$

E_0 は非損傷状態の弾性係数，E は損傷後の弾性係数である．$\boldsymbol{C}_e$ を一般的な等方弾性テンソルとすると，損傷を考慮した材料構成則は以下のように規定される.

$$\boldsymbol{\sigma} = (1-D)\mathbf{C}^e : \boldsymbol{\varepsilon}^e \tag{3}$$

コンクリートは引張り応力に弱い材料であり，圧縮強度に比べて引張強度は，約 1/10 程度である．そこで，圧縮と引張強度の相対的な影響度を考慮した相当ひずみを用いて破壊損傷を定義することが望ましい．本研究では Peerlings ら [1]が提案した圧縮域と引張域の強度比を考慮した相当ひずみ(4)の両者を用いることにした.

$$\begin{aligned}\varepsilon_{eq} = &\frac{m-1}{2m(1-2\nu)} I_1 \\ &+ \frac{1}{2m}\sqrt{\left(\frac{m-1}{1-2\nu} I_1\right)^2 + \frac{2m}{(1+\nu)^2} J_2}\end{aligned} \tag{4}$$

ここで，I_1 はひずみの 1 次不変量，J_2 は偏差ひずみの 2 次不変量であり，m はコンクリートの圧縮強度と引張強度の比，ν はコンクリートのポアソン比を示す.

この相当ひずみを用い，損傷の進展則に従うものとした.

$$D = 1 - \frac{\kappa_0}{\kappa}\left[1 - A + A\exp\left\{-B(\kappa - \kappa_0)\right\}\right] \tag{5}$$

ここで A，B は損傷の進展を表すパラメータ，κ は材料が過去に受けた最大の相当ひずみである．図２に示すように，κがκ_0 となると損傷が開始するものとし，対応して損傷変数 D は非ゼロの値を持ち始め，最終的には完全な損傷状態を示す 1.0 に漸近する.

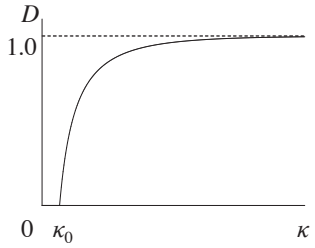


図２　損傷パラメータ D の発展則

2.3 損傷係数による拡散係数の変動

先に説明した損傷モデルを用いれば，微視的なクラックが成長することで段階的に剛性を低下していく過程を表現できる．その損傷係数を参照しながら，拡散係数も空隙に相当した大きな値c_Bへと段階的に変化させることにした．具体的には，損傷係数を用いて以下の式により損傷後の拡散係数c_Dを与えるものとした．

$$c_D = c + D(c_B - c) \tag{6}$$

3　解析事例

3.1 解析条件

上記の解析手法を用い，3 次元コンクリートモデルを解析した結果を報告する．図 3 に示す解析モデルは 100mm 立法のコンクリートを研磨し，1mm 間隔で断面をスキャンした画像から作成した [2]．画素を 1mm に調整し，ボクセル要素によりモデルを作成したため，総要素数は 100 万である．

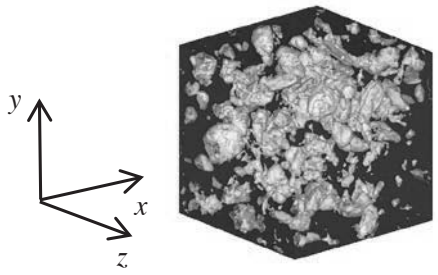


図 3　3D コンクリート解析モデル

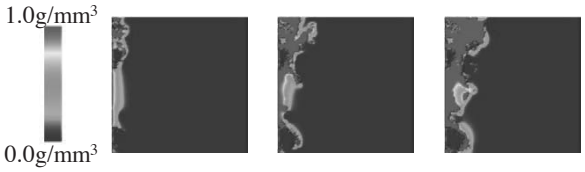
解析に用いた物性値は表-1 にまとめて示す．その他，損傷モデルのパラメータは A=0.99, B=100, m=10 とした．境界条件としては，yz 平面以外，全面の変位を拘束し，非拘束面である yz 平面(x=1)から拡散物質を浸透させるものとした．

表-1　材料パラメーター一覧

	弾性定数 (GPa)	ポアソン比	κ_0(損傷開始相当ひずみ)
モルタル	20	0.25	2.0×10^{-4}
界面	20	0.25	5.0×10^{-5}
骨材	60	0.25	—

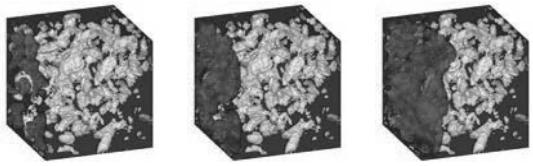
3.2 解析結果

解析結果として，ここでは本研究で採用した損傷モデルを用いた場合と，簡易的に完全に脆性的材料として扱い瞬時に応力解放するモデル（完全脆性モデル）を採用した場合の結果の両者を示す．損傷モデルを用いた場合の結果として，図 4 にはアルカリイオン分布，応力分布，損傷領域(損傷定数が 1 の領域)を示し，図 5 は 2500 日後の自由表面上の損傷パラメータの分布図を示す．また，図 6 には完全脆性モデル採用時の結果を示す．



(a) アルカリイオン分布

(b) 最大主応力分布



(c) 損傷領域分布

250 日後　　1,000 日後　　2,500 日後

図 4　損傷モデルによる解析結果

図 5　2500 日後の自由表面内の損傷定数分布

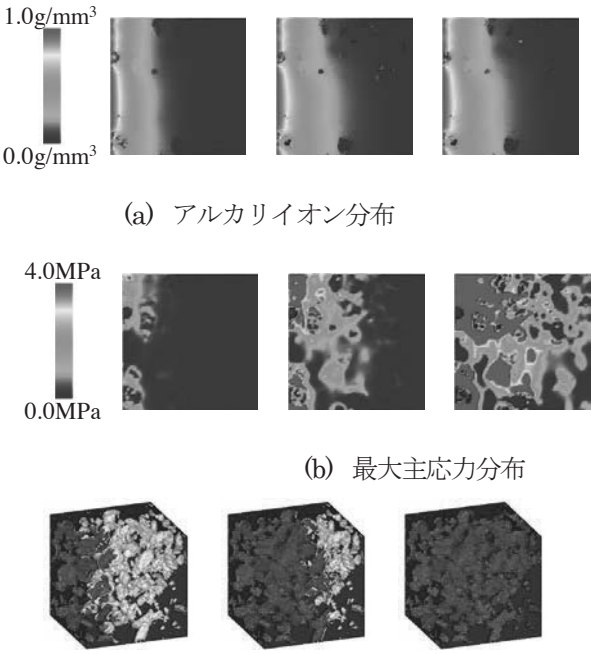


図 6　完全脆性モデルによる解析結果

図 6 に示す完全脆性モデルを採用した場合には，アルカリイオンが骨材に到達すると応力が高くなり，骨材周辺のみに不連続面が進展していく．2,500 日後以降には，ひび割れの進展が止まり，モルタルへとひび割れが進展せず，表面での損傷は観測できなかった．

一方，図4に示す提案手法である損傷モデルを導入した結果では，段階的に損傷が進展しながら，骨材周辺での膨張力が継続して外部へと伝達することで，ひび割れがモルタル中へと進展する過程を解析できた．結果として図5では，アルカリシリカ反応の特徴である表面上の亀甲状のひび割れパターンを定性的に表現することができた．

4　結語

本研究では，物質の濃度に併せて介在物表面が膨張し，かつ膨張時には物質を消費しないものと仮定した上で，非定常拡散解析と内在物膨張に伴う不連続面進展解析とを組み合わせた連成解析手法を開発した．解析手法としては，非均質材料の微視構造のモデル化に優れ，かつ要素除去により 3 次元問題のひび割れの進展を簡易的に表現できるボクセル FEM をベースとした. ボクセル FEM では，要素サイズが小さいことを前提として，各要素は完全に脆性的な材料モデルを用いた例も多いが，実際には有限の要素サイズを有しており，またそのサイズは完全に微細なひび割れ間隔とは一致しないため，本研究では損傷理論を導入することでその矛盾の解消を試みた.

両者を連成させる基本的なフローを提案し，内部膨張により不連続面が進展する様子を解析した. この際，ひび割れ進展のモデル化方法として損傷モデルを導入し，提案手法の妥当性について検討した.

損傷モデルを導入した連成解析手法では，損傷部分の剛性を段階的に減少させることで，モルタル部分にも損傷が段階的に進展する様子を再現することが可能となった．また，解析に用いるパラメータの値を変更すれば，モルタルへのひび割れ発生時間，およびひび割れ損傷幅などの損傷進展挙動を調節可能であることを確認している.

今後は，解析対象を拡大させ，実際に供用時に発生するコンクリート板での亀甲状のひび割れの再現等を試み，本手法の妥当性を検証していく予定であり,それに向けた大規模並列化を実施中である．これに際して，京都大学学術メディアセンター平成 24 年度プログラム高度化共同研究支援事業に採用いただいた成果として,現在では 1000 万要素以上を用いた解析が可能となった．また，平成 25 年の同支援事業にも採択いただき，現在はメモリ分散化を実施しており，数千万から億単位の要素を用いた解析を目指している.

参考文献

1) R. H. J. Peerlings, R. de Borst, W. A. M. Brekelmans and M. G. D. Geers, Gradient-enhanced damage modeling of concrete fracture, Mech. Cohes.-Frict. Mater., 3, pp.323-342, 1998.
2) 浅井光輝, 山岸道弘, 寺田賢二郎, 永井学志, 非局所型有限要素法の開発とその破壊挙動解析への適用，土木学会論文集，No.759, pp.233-245, 2004.

GPUコンピューティングによるイメージベースFITの効率化

中畑 和之 *

*愛媛大学大学院理工学研究科

1 はじめに

経年劣化した構造部材の健全度を非破壊的に評価するために，超音波や電磁波を用いた検査が行われている．これらの波動は不可視であるため，シミュレーションを援用して数値的に伝搬経路を推定することが行われている．著者らは，これまでに有限積分法 [1](Finite Integration Technique: FIT) とイメージベース処理 [2] を組み合わせた弾性波動のシミュレーション手法 [3] について研究を行ってきた．FIT は，支配方程式 (偏微分方程式) をセルと呼ばれる微小正方形 (2 次元)or 立方体 (3 次元) で領域積分した後，その積分方程式を離散化する方法である．時間方向には，陽的に解の更新を行う．イメージベース処理によって，2 次元解析ではベクター図やデジカメ等の画像から，3 次元解析では CAD，CT 写真，表面凹凸データ等のデジタル画像から数値モデルを作成でき，プリプロセスの労力を減らすことによって，多様な対象に対して容易にシミュレーションを行うことができる．平成 22 年度のプログラム高度化支援事業でイメージベース FIT を改良して頂き，マルチコアによる大規模な計算が可能となった．その性能は学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の平成 23 年度共同研究において検証され，1000 コア利用時でも並列化性能がリニアに発現することを示した [4].

一方，グラフィックボード上の集積回路である Graphics Processing Unit(GPU) を科学技術計算に応用する動きが年々加速している．GPU を画像処理専用のプロセッサとしてだけではなく，並列計算ユニットとして利用する試みは General purpose computing on GPU (GPGPU) と呼ばれている．京都大学においても GPU の計算機が新たに整備され，サブシステム B では 1 ノードあたり 1 基の GPU(NVIDIA 社の Tesla M2090) がマウントされており，最大で 64 基の GPU が並列で利用できる．GPU1 基あたり 512 個の並列処理コアが搭載されているため，計算のアルゴリズムによっては CPU 並列計算よりも GPU 計算の方が，FLOPS が大きくなることが報告されている [5].

平成 24 年度のプログラム高度化事業では，イメージベース FIT を GPU で並列計算した場合の効率改善についてアドバイスを頂いた．高度化前に，CUDA Fortran を用いた著者自身のコードによって，ある程度の性能が出現できていたが，分析依頼の結果，以下のような性能向上の余地があることが分かった．

- GPU コードの実行形式 (カーネル) およびデバイスメモリ (GPU 側のメモリ) の利用について最適化の余地があること．
- 複数の GPU を使用する場合，MPI によってデバイス間のメモリ転送をしているが，その際の通信を最適化する余地があること．
- 波動伝搬を可視化するために領域内の物理量を定期的に出力しているが，そのときにデバイスメモリからホストメモリ (CPU 側のメモリ) にデータを転送する必要があり，このプロセスを隠蔽するための方策が必要であること．

ここでは，以上のような要因に対する改善策，およびその成果について報告する．

2 計算機の仕様と開発環境

2.1 検証に用いた GPU 計算機

本研究では，サブシステム B を利用した．GPU ボードとして NVIDIA 社の Tesla M2090 が 1 ノードあたり 1 基マウントされている．M2090 には，512 個の CUDA コアとよばれる最小単位の演算処理ユニットが内蔵されている．この CUDA コアが 32 個

集まって 1 つのストリーミング・マルチプロセッサ (SM) を形成する．SM 内部には，高速メモリであるレジスタに加え，シェアードメモリ，L1 キャッシュ等のオンチップメモリ (計 64KB) がある．GPU のメモリ階層は，L2 キャッシュを経由して，グローバルメモリ，ローカルメモリ，テクスチャ，コンスタントメモリ等のデータを記憶する DRAM(GDDR5) に繋がっている．メモリバンド幅は 177GB/s(公称値) であり，サブシステム B 上の CPU(DDR3) のそれと比べると 1.7 倍程度大きい．従って，この大きいバンド幅を有効利用することが GPU 計算の高速化の 1 つのアプローチとなる．しかし，GPU1 基あたりの DRAM は 6GB であり，大規模な計算を行う場合には，複数の GPU を使用することになる．本研究では，最大 8 基の GPU を用いて検証を行った．

2.2 開発環境

2.2.1 CUDA Fortran

ここでは，プログラミング環境として CUDA Fortran を用いた．CUDA Fortran を提供するのは，現在のところ PGI 社のみであり，ここでは PGI Accelerator Fortran Ver.12.8 for Linux(CUDA Toolkit 4.1) を用いた．CUDA Fortran のプログラムは，CPU を動作させるホスト用コードと GPU を動作させるデバイス用コードの 2 つのコードから成り立つ．ホスト用コードには，通常のプログラミングの他に CUDA のランタイム API，Built-in のベクトル型宣言，およびデバイス用コードを呼ぶ call 文等が含まれている．

2.2.2 CUDA の階層構造

図 1 に示すように，CUDA はグリッド，ブロック，スレッドという並列計算の粒度単位を持っている．下向きの波線矢印で示したスレッドが計算を行う最小単位であり，そのスレッドの集まりがブロック，ブロックの集まりがグリッドとなる．ブロックとスレッドは 3 次元的な構造をしており，それぞれ最大数が決められている．図 1 上側に示すように，1 つのグリッド内の 1 方向のブロックの最大数は 65535 個である．また，1 ブロック内で使用できるスレッドの最大数は，x_1 方向が 1024 個，x_2 方向が 1024 個，x_3 方向が 64 個である．ただし，1 ブロック内の合計スレッド数は 1024 個までという制限がある．なお，ブロックやスレッドの ID は構造体で管理される．

プログラム実行時に，グリッド上にカーネルを生成し，スレッドそれぞれがそのカーネルを実行する．従って，GPU 上の各プロセッサは SIMD 型のデータ

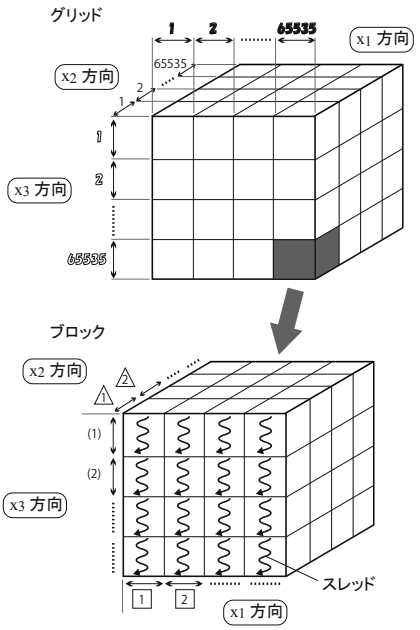


図 1: CUDA Fortran における計算の階層．

処理を実行することになる *.

3 FIT への GPU 計算の導入

3.1 有限積分法 (FIT)

イメージベース FIT の詳細な定式化については，過去の論文 [3] で記載されているので，ここでは概略について述べる．本論文では，2 次元弾性波動場を対象とし，波動の伝搬方向は (x_1–x_2)，偏向方向は面外 (x_3) とする．この場合の弾性波は SH(Shear Horizontal) 波と呼ばれる．x_3 軸方向の粒子速度を v_3，せん断応力を τ_{31}，τ_{32} とおいたとき，SH 波の伝搬を支配する運動方程式および構成式は以下となる．

$$\rho(\boldsymbol{x})\dot{v}_3(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \tau_{31}(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_1} + \frac{\partial \tau_{32}(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_2} \tag{1}$$

$$\frac{\dot{\tau}_{31}(\boldsymbol{x},t)}{\mu(\boldsymbol{x})} = \frac{\partial v_3(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_1} \tag{2}$$

$$\frac{\dot{\tau}_{32}(\boldsymbol{x},t)}{\mu(\boldsymbol{x})} = \frac{\partial v_3(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_2} \tag{3}$$

ここで，$\dot{()}$ は時間 t に関する偏微分 ($\partial/\partial t$) を表す．上式で，ρ は材料の密度，μ はせん断弾性係数を表し，等方性材料の場合には横波音速との関係式 $c_T = \sqrt{\mu/\rho}$ が成立する．

*CUDA におけるカーネルは if 文等の分岐命令も実行できるため，厳密な SIMD 処理ではなく，NVIDIA 社は SIMT(Single Instruction Multiple Thread) と呼んで区別して表記している．

離散化後は，陽的に解を更新するアルゴリズムとなる．x_1 方向の配列要素を i，x_2 方向のそれを j とすると，上式の方程式は次のように解くことになる．

$$V_3(i,j) \Leftarrow V_3(i,j) + \delta_1[T_{31}(i+1,j) - T_{31}(i,j)] + \delta_2[T_{32}(i,j+1) - T_{32}(i,j)] \quad (4)$$

$$T_{31}(i,j) \Leftarrow T_{31}(i,j) + \varepsilon_1[V_3(i,j) - V_3(i-1,j)] \quad (5)$$

$$T_{32}(i,j) \Leftarrow T_{32}(i,j) + \varepsilon_2[V_3(i,j) - V_3(i,j-1)] \quad (6)$$

ここで，

$$\delta_1 = \delta_2 = \frac{\Delta t}{\rho_{ij}\Delta x}, \quad \varepsilon_1 = \frac{\bar{\mu}\Delta t}{\Delta x}, \quad \varepsilon_2 = \frac{\bar{\bar{\mu}}\Delta t}{\Delta x} \quad (7)$$

である．ここで，$\Leftarrow$ は右辺の計算結果を左辺に代入することを示す．上式で，Δx と Δt は，それぞれセル長および時間ステップ刻みであり，また，$\bar{\mu}$ は x_1 方向に隣り合うセル，$\bar{\bar{\mu}}$ は x_2 方向に隣り合うセルにおいて μ の平均化処理を実行した値である．

3.2 スレッドと配列

図 2 に示すように，計算領域が大きい場合には配列を副領域に分配する †．図 1 では，ブロックとスレッド共に 3 次元配列で説明をしたが，SH 波伝搬問題の FIT は 2 次元解析であるので，ここではブロックとスレッドは 2 次元配列とする (x_3 方向のブロック，スレッド数は共に 1 とする)．

図 2 に配列の割り当ての概要を示す．この例では，計算領域を 4 つの副領域に分割する．副領域を 1 つのグリッドとし，副領域①では点線で囲んだ上下のブロックに分かれているとする．グリッド内部のブロックの大きさは CUDA Fortran の構造体表記を用いて表される，この場合，gridDim%x=1, gridDim%y=2 となる．また，1 つのブロックには 8 つの配列がある．本研究では，1 つの配列の計算 (例えば式 (4) における $V_3(1,1)$ の更新) に 1 つのスレッドを割り当てる．図 2 の①における 1 つのブロックでは，x_1 方向のスレッド数は 4，x_2 方向のスレッド数は 2 となる．これは，blockDim%x=4, blockDim%y=2 と記述される．従って，1 つのグリッドでは，x_1 方向に (gridDim%x)×(blockDim%x) 個，x_2 方向に (gridDim%y)×(blockDim%y) 個の粒度でスレッドが作られることになる．

†GPU はメモリバンド幅が大きいので，1 つのデバイスで計算可能なメモリ量である場合は，副領域に分割することは避けた方がよい．

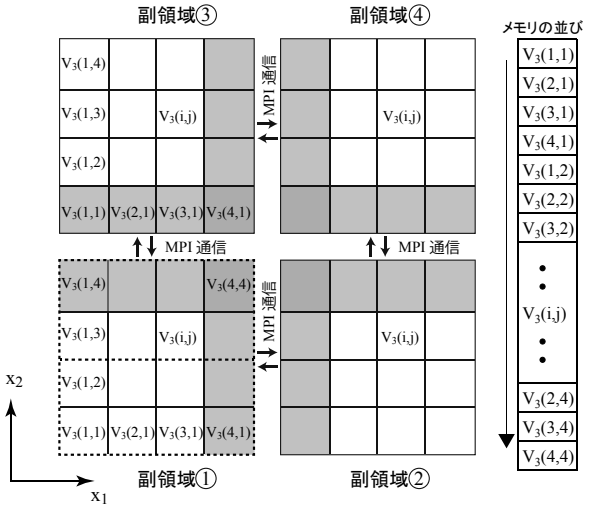


図 2: 左 : FIT で用いられる 2 次元配列のインデックス，および副領域と袖通信．右 : Fortran における 2 次元配列のメモリ上の並び．

Fortran の特徴として，図 2 の右側に示すように，配列は i のインデックスが先に動く順番でメモリ上に並ぶ．従って，ブロック内でメモリが連続するのは，x_1 方向に並ぶ場合であることに注意する．これは，CUDA Fortran でも同様である．また，実際，スレッド処理は 1 ワープ (32 スレッド) 単位で行われるため，スレッド数は 32 の倍数が推奨されている．

3.3 マルチ GPU 計算

ここでは，1 つの副領域の計算を 1 つのデバイスにタイアップする．すなわち，マルチプロセスに分割後，1 つの CPU プロセスが 1 つの副領域を担当する．その 1 つのプロセスに 1 つの GPU デバイスを割当てて，マルチ GPU 計算を行う．本研究では，2 次元 MPI 通信を用いて，プロセス間のデータ通信を行っている．2 次元 MPI 通信時には，隣接する副領域の間で袖部 (図 2 に示す色づけした帯部分) を交換する必要がある．本研究では，上述のように 1 プロセスと 1 デバイスをタイアップさせているため，まずホスト側のメモリにデバイス側からデータを転送し，次にホストメモリを介して交換したデータをデバイスメモリに送るという段階を踏んでいる．ここでは，できるだけ最小限の通信となるように，V_3 成分のみを通信に用いている．なお，通信ライブラリとして MPI-1 と MPI-2 をサポートする MVAPICH2 (Ver. 1.8.1) を用いた．図 3 にプログラム高度化前のフローチャートを示す．なお，V_3 は数値積分によっ

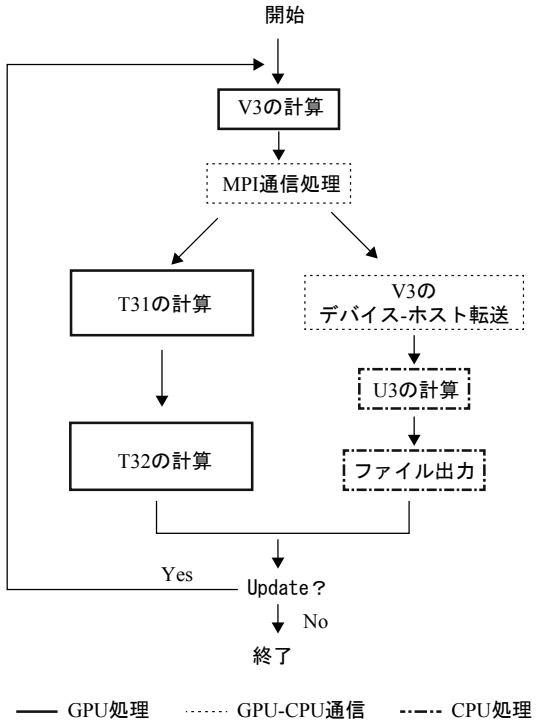


図 3: プログラム高度化前のフローチャート.

て変位 U_3 に変換して，ファイル出力している．

4 高速化・効率化のための改良

4.1 カーネルの最適化およびデバイスメモリの利用方法

オリジナルのコードでは共有メモリを多用していたが，NVIDIA の Fermi アーキテクチャでは，アクセスパターンを大幅に改善したり，データを再利用するのでなければ，共有メモリを使用するメリットは少ない．従って，ここでは共有メモリの使用を廃止した．また，廃止に伴うデバイスメモリアクセスのバンクコンフリクトは発生していないことを確認した．一方，共有メモリ上に保有していた媒質の材料定数等は，コンスタントメモリ上に配置した．また，Fortran はユーザ定義の構造体が使用できるが，コアレスド・アクセスを妨げていたため，これを廃止した．この結果，オリジナルコードに比べて約 1.5 倍のカーネルの高速化を達成できた．

4.2 マルチ GPU 時のデバイス間のメモリ転送

図 2 に示すように，FIT の場合，MPI 転送の対象となる配列は副領域の袖部 1 層だけで良い．しかし，高度化前のプログラムでは，配列全体をデバイス-ホスト間でコピーしていた．この理由は，副領域①と③の通信の場合には，袖部のメモリが連続するためデバイス-ホスト間の通信はコアレスド・アクセスが可能であるが，副領域①と②の通信ではメモリが不連続となってしまうため，これを避けるために単純に全部をコピーしていた．しかし，今回，GPU 上の不連続メモリを転送用バッファに高速に詰め込む新しいカーネルを作成した．この結果，MPI 転送において，8GPU の並列時で約 1.5 倍の高速化が達成できた．

4.3 結果出力時のデバイスメモリからホストメモリへの転送時間の隠蔽

4.1 節のカーネル最適化によって，律速段階はカーネルではなくなり，ホスト処理であるファイル出力の方が時間を要するようになってしまった．高度化前は，図 3 に示すように，ファイル出力の前に V_3 は U_3 に変換しており，これらはすべてホスト処理されていた．ここでは，図 4 に示すように U_3 の変換をカーネル上で行い，ファイル出力を次の時間ステップにすることで，V_3 の計算とオーバーラップするようにした．この結果，高度化前のコードに比べて，1GPU 計算時で約 3.2 倍の高速化が達成できた．

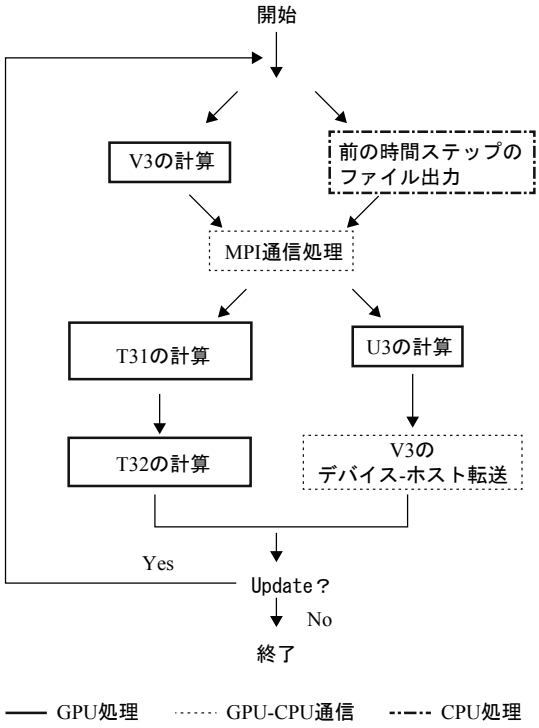


図 4: プログラム高度化後のフローチャート (ファイル出力時間を隠蔽処理によって短縮している).

5　非破壊検査への応用

チューニングして頂いたコードを用いて，非破壊検査の欠陥再構成シミュレーションを実施した．これは全波形サンプリング処理 (FSAP) 方式 [6] による開口合成法を模擬したものであり，アレイ探触子を用いて欠陥を再構成する．図 5 の上部に示すような欠陥配置を想定し，試験体上部に 32 素子のアレイ探触子を設置した．FSAP 方式のシミュレーションでは，素子数分 (32 回) の超音波の送信を行う必要がある．モデルの大きさは 200 万要素，時間更新は各回につき 5000 ステップである．解析対象が PC でも十分実行可能な大きさであったので，ここでは Windows 版の PGI コンパイラと NVIDIA GeForce GTX680 を用いて検証を行った．図 5 の下部に，欠陥の再構成結果を示す．欠陥の位置および大きさを精度良く再現できている．なお，再構成に要した計算時間は約 10 分であり，これまでの非破壊検査シミュレーションツールとしては類を見ないほど高速化を実現できた．

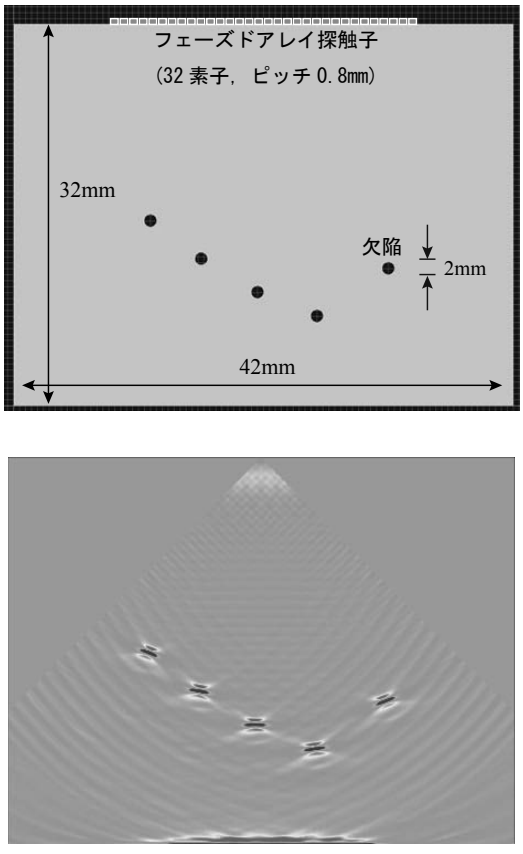


図 5: FSAP 方式による 5 つ穴の再構成結果 (FIT による計算波形を利用).

6　まとめ

今回，カーネルの最適化，MPI 通信の効率化についてご指導を頂いた．改善の過程で，律速段階がカーネルではなく，ホスト処理（ファイル出力）へとシフトした．従って，FIT の計算過程を見直し，ファイル出力を隠蔽することを試みた．これらの結果，当初のコードに比べて大幅な高速化が実現できた．この成果を非破壊検査に応用し，欠陥の再構成シミュレーションが実時間で実施できることを示した．スパコンの高度化で得られた技術が，PC レベルに移転できたことは非常に意義がある．今後の課題は， MPI 転送時間の隠蔽，無反射境界層 (PML) の効率化，さらには 3 次元大規模問題への応用を試みていきたい．

謝辞：　有益なご助言を頂いた「スーパーコンピュータシステム共同研究企画委員会」の皆様，並びに，チューニングコードを提供して頂いたクレイ・ジャパン・インクの武田大輔氏に感謝を申し上げます．

参考文献

[1] P. Fellinger, R. Marklein, K.J. Langenberg and S. Klaholz, “Numerical modeling of elastic wave propagation and scattering with EFIT –elastodynamic finite integration technique”, *Wave Motion*, **21**, pp.47-66 (1995).

[2] K. Terada, T. Miura and N. Kikuchi, “Digital image-based modeling applied to the homogenization analysis of composite materials”, *Computational Mechanics*, **20**(4), pp.331-346 (1997).

[3] K. Nakahata, J. Tokunaga, K. Kimoto and S. Hirose, “Large scale simulation of ultrasonic wave propagation in concrete using parallelized EFIT”, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, **2**(11), pp.1462-1469 (2008).

[4] 樫山和男，牛島省，寺田賢二郎，岡澤重信，木村一郎，中畑和之，浅井光輝，松本純一，岩下武史，小山田耕二: マルチフィジックスおよび最適化問題に向けたハイパフォーマンス計算力学, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 平成 23 年度共同研究 中間報告書, 11-NA04 (2011).

[5] T. Okamoto, H. Takenaka, T. Nakamura and T. Aoki, “Accelerating large-scale simulation of seismic wave propagation by multi-GPUs and three-dimensional domain decomposition”, *Earth, Planets and Space*, **62**, pp.939-942 (2010).

[6] 中畑和之, 竹内裕幸, 木本和志, 斜角探傷用アレイ探触子を用いた FSAP 方式による内部欠陥の超音波画像化, 日本機械学会論文集, A 編, 77 巻, 779 号, pp.106-116 (2011).

人工島／埋立地等の耐震性評価を目的とした 動的／静的水～土骨格連成有限変形解析コードの高度化

野田利弘

名古屋大学　減災連携研究センター

1　研究背景と本事業の目的

日本の戦後の経済発展は、東京、名古屋、阪神地域などの大規模太平洋沿岸地域に生産活動に依拠してきたところが大きい。この間、当該沿岸地域では、軟弱な沖積地盤上に浚渫土などを利用して埋立地や人工島を大規模に造成してきた。ところがこのような人工地盤は、兵庫県南部地震や東北太平洋沖地震などの地震のほかには、巨大地震に見舞われたことがない。

名古屋大学地盤力学グループでは、これまでに開発してきた動的／静的水～土骨格連成有限変形解析コード（GEOASIA® [1], [2]）を用いて、上記の粘土や砂からなる自然堆積地盤とその間の中間土からなる人工島・埋立地や、地盤と土構造物システムについて、地震中・地震後の二次元・三次元地震応答解析を実施し、巨大地震発生時の耐震性の再評価や問題点・課題の抽出等を行ってきた。具体的には、自然堆積（沖積・洪積）粘土～砂互層地盤、および人工島をモデル化した後、予想される巨大地震を入力して、自然・人工地盤とその上の護岸や盛土、建物基礎、各種埋設施設の数秒から数分までの地震中およびその後の数日から数十年までの地震後の耐震性を解析的に評価してきた（例えば、図１）。

しかしながら、当該解析コードは高速化を実現するための並列化が一部で OpenMP を用いて施されているだけで、また（パソコン／WS での計算実現を意図していたため）使用できるソルバが PARDISO に限定しているなど、チューニングが十分でなかった。このため、大規模な解析領域を対象にした高速計算を常態的に実現することが難しい状況となっていた。

このような中、京都大学学術情報メディアセンターの平成 24 年度プログラム高度化支援事業の追加募集に応募し、10 月に採択をいただいた。当該事業（共同研究）では、第一段階として、上記の課題を有する当該解析コードを、MPI または OpenMP と MPI とのハイブリッド並列化を図るとともに、他のソルバの利用も検討に入れて、大規模・高速化計算が実現できるよう高度化・高性能化を図ることであった。このため主として、当該解析コードにおける、接線剛性マトリクス作成ルーチンにおける OpenMP と MPI とのハイブリッド並列化を実現するとともに、ソルバについて直接法として MUMPS [3]を、反復法として PETSc[4] などを組み込み、スーパーコンピュータを用いてそれらの効果を、主に三次元解析と有限要素数が多い二次元解析について検証した。

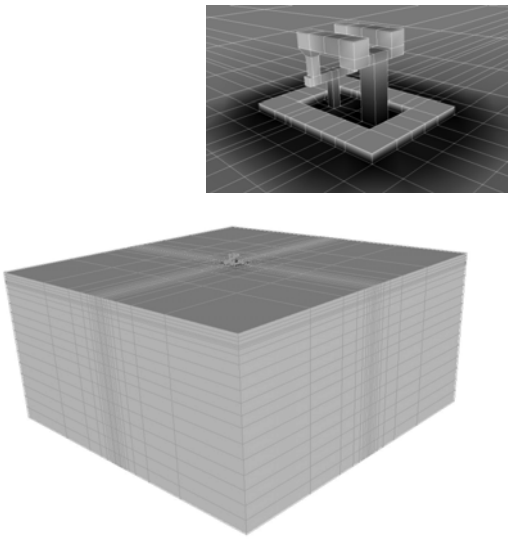


図１　軟弱地盤上の構造物の三次元応答解析事例
（せん断ひずみ、右上：中央付近の拡大図）

2　動的／静的水～土骨格連成有限変形解析コードの概要

一般に、土は土粒子が構成する土骨格とその間隙に水と空気が存在する、すなわち固体、液体および気体からなる三相混合体である。間隙に空気がない場合、あるいは実質上空気がないとみなされる場合は、間隙に水だけが存在することになるが、このような土を飽和土と呼び、空気がある場合を不飽和土と呼ぶ。当該解析コードは、固液二相混合体理論（例えば、[5], [6]）に基づいて、この飽和土からなる地盤が盛土や地震外力などの荷重を受けた場合に生じる変形や破壊の力学挙動を求める。当該解析コードには、土骨格の構成式として報告者らが開発してきた弾塑性構成式（SYS Cam-clay model [7]）を搭載し、同一の理論（弾塑性理論）のもとで、砂から粘土までその間に稠密に存在するあらゆる土をすべて計算対象にする（All Soils）。また、変形を通じて破壊へ至る進行性破壊や液状化していた砂地盤がやがて示す圧密変形など、地盤の安定状態から不安定状態へ、そして不安定状態からまたつぎの安定状態へ、時間的にも空間的にも連続して解く（All States）。さらにここでは、外力形態として静的問題と動的問題を区別せずに、どちらの問題も解析を連続して進める（All Round）。

当該解析コードの定式化または求解における主な特徴は、次の点である。①混合体である飽和土の運動方程式を、飽和土からの間隙水の出入りに伴う「体積変化拘束式」の下で解く必要があるため、一相系材料を扱う場合よりも解くべき元が多い。②土骨格の弾塑性的特性、つまり材料非線形性を考慮するとともに、地盤や土構造物の刻々の幾何的形状変化、つまり幾何的非線形性をupdated Lagrangian 法を用いて考慮するため、運動方程式を時間微分し、躍度（＝加加速度＝加速度の一階時間微分）を有する速度型の運動方程式を用いる。③空間的には有限要素法を用いて展開するとともに、時間積分においては躍度が線形的に変化すると仮定しつつ、Wilson の θ 法[8]を拡大的に用いて、位置ベクトルの時間に関する三階の連立常微分方程式を連立一次方程式に展開し、①の体積変化拘束式と連立して解く。④最終的には、非対称疎行列を係数行列とするこの連立一次方程式を解くことになるが、材料的・幾何学的の両非線形であるためイタラティブに処理する。このとき、これまでは、計算機はパソコン／WS で、ソルバには PARDISO を用いて解を求めている。⑤地震中の計算時間間隔 1/1000 程度～地震後 100 年程度までの圧密変形のための計算時間間隔 1 年程度と広範な時間帯を対象に計算する。

3　直接法ソルバMUMPS または反復法ソルバ PETSc を用いたハイブリッド並列化の検討

ソルバの PARDISO の部分を、プロセス並列が可能な直接法ソルバ MUMPS およびに反復法ソルバ PETSc に置き換え、係数行列作成サブルーチン（以下 KGRMAT と書く）の OpenMP と MPI のハイブリッド並列化を行い、速度向上性を含め計算結果がオリジナルのコードと一致するかどうかの動作検証を行った。ここで、直接法ソルバの中から MUMPS を用いたのは非対称行列を対象にした MPI 並列が可能で、継続利用性の観点から入手が比較的容易であったためである。また、PETSc を用いたのは、MPI 並列可能性など加えて、非常に多くのユーザコミュニティがあり、ドキュメント、例題なども非常に充実しているからである。

図２は、図１とほぼ同等の有限要素メッシュを用いて検証した三次元解析の結果を示す。なお、二次元解析についても検証を行っているが、省略する。計算結果はオリジナルの解析コードの結果と一致し、まずスレッド並列だけでなくプロセス並列が可能であることを確認した。全体の計算速度においては、シリアル（p1t1）比から見て PETSc によって MUMPS よりもやや高速化が図られる一方、KGRMAT においては OpenMP 並列による計算時間短縮（ただし、PETSc のスレッド並列効果はない）が図られ、並列度が 16（p1t16）程度であればPARDISO と同様の計算時間になることが分かった。また、PETSc を用いた場合においては、全体の計算時間のうち KGRMAT と PETSc 以外の「その他」の部分が占める比率が、並列度 128（p8t16）で 80/96 であることがわかり、高速計算を実施する上で、KGRMAT などの MPI 通信量削減や、ソルバと KGRMAT 以外の箇所の並列

化等によるチューンが必要なことも明らかになった。

なお、他の解析事例から MUMPS で可能な計算が PETSc では実現できない場合もあり、行列の性質に関する課題も明らかになった。

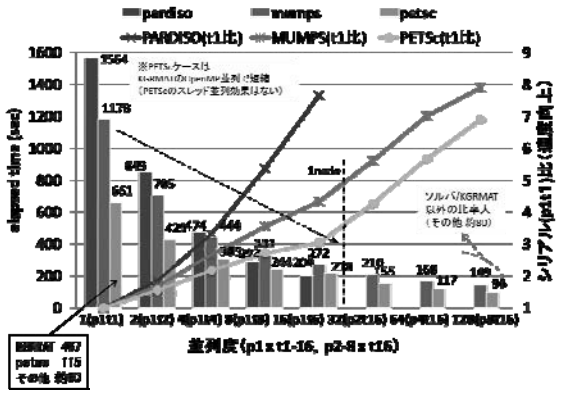


図２ 動作検証結果

4 おわりに

本事業の採択から半年足らずの間に、OpenMP と MPI によるハイブリッド並列化が可能であることがわかる一方、課題がいくつかあることがわかってきた。大規模計算を実現するためには、その解決とともに領域分割法の採用などな抜本的な検討も必要である。幸いなことに、H25 年度の支援事業にも採択いただき、ソルバ・KGRMAT 以外の部分の並列化なども継続的に進んでいる。

今後、大規模計算が可能となれば、巨大地震を経験していない戦後の埋立地・人工島や数多くの土構造物などにおける巨大地震発生時の問題点・課題の抽出や耐震・防災対策の代替案の検討に繋がるだけでなく、当該学問分野の高度化にも貢献できるものと信じている。

謝辞　京都大学学術情報メディアセンターの牛島省教授には本事業をご紹介いただくとともに、本事業に直接携わっていただいた同センターの中島浩教授・岩下武史准教授とクレイ・ジャパン・インクの方々には本報には現れてこない事項も含め、今もなお、数多く検討いただいている。ここに謝意を表します。

なお、スパコン使用にあたっては、JSPS 科研費 20126012 の助成を受けた。

5 参考文献

[1] Asaoka, A. and Noda, T. (2007): All soils all states all round geo-analysis integration, *Int. Workshop on Constitutive Modelling - Development, Implementation, Evaluation, and Application,* Hong Kong, China, 11-27.

[2] Noda, T, Asaoka, A. and Nakano, M.(2008): Soil-water coupled finite deformation analysis based on a rate-type equation of motion incorporating the SYS Cam-clay model, *Soils and Foundations*, 48(.6), 771-790.

[3] MUMPS: MUltifrontal Massively Parallel sparse direct Solver, http://graal.ens-lyon.fr/MUMPS/index.php

[4] PETSc: Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation, http://www.mcs.anl.gov/petsc/

[5] de Boer, R.(1998): Theory of porous media -past and present-, *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 78, 441-466.

[6] 西村直志（1999）: 第 3 章土質力学, 地盤工学ハンドブック, 地盤工学会, 51-64.

[7] Asaoka, A., Noda, T., Yamada, E., Kaneda, K. and Nakano, M. (2002): An elasto-plastic description of two distinct volume change mechanisms of soils, *Soils and Foundations*, 42(5), 47-57.

[8] Wilson, E. L., Farhoomand, I. and Bathe, K. -J. (1973): Nonlinear dynamic analysis of complex structures, *Earthquake Engineering and Structural Dynamics,* 1, 241-252.

パーティクルフィルタを用いた分布型降雨流出シミュレーションの高度化と不確実性評価

Seong Jin NOH[1], 立川康人[2]

[1]Korea Institute of Construction Technology, [2]京都大学大学院工学研究科 社会基盤工学専攻

高精度な洪水予測は、洪水被害を軽減するために不可欠である。この研究では、パーティクルフィルタという、モデルの形式と水文量の確率分布の種類に限らずに適用できるデータ同化手法を流出モデルに導入して水文予測の高精度化を図るとともに、流出モデルの不確実性を評価する。特に多数のモデルを同時に実行する計算機能力が要求されるパーティクルフィルタを適用するため、超高速、かつ並列処理が可能なスーパーコンピュータを駆使する。パーティクルフィルタで分布型水文モデルの状態量を更新する方法を、桂川流域(面積 : 887 km²)の洪水予測に適用し、予測精度の改善を確認した。また、不確かさを評価するために、レーダー雨量の推定に用いるパラメータ値と水文モデルのパラメータ値の両方を、水文モデルの状態量とともに同時に同化し、統合的に入力データと予測モデルの不確実性を推定した。スーパーコンピューティング環境を駆使した新たな降雨流出予測システムの開発の適用性を確認することができた。今後、分布型流出モデルおよびパーティクルフィルタを基本とする高精度の実時間流出予測が期待される。

1 概要

治水施設を設計したり、リアルタイムで河川流量や水位を予測したりするためには、降雨量から河川の流量や水位を求める必要がある。それに関する水循環の数値シミュレーションシステムでは、自然現象の単純化、降雨・河川流量の測定誤差等、様々な要因に基づく不確実性が避けられず、予測情報の提供においては、予測値とともにその不確実性を評価することが極めて重要である。特に洪水は世界で最も一般的な自然災害であるが、様々な不確実性のために、必要な予測時間のもとでの正確な洪水予測は十分になされていない。

データ同化に基づくアンサンブル予報技術は、明示的に水文モデルによる予測と観測の両方の不確実性を定量化し、 新しい観測値を得るたびに、水文モデルの状態量（ときにはパラメータ値も同時に）を逐次に更新する方法である。パーティクルフィルタは非線形システムのデータ同化手法として、モデルの形式と水文量の確率分布形によらず適用できる手法で、観測情報や予測システムの不確かさを評価しつつ精度の高い予測情報を提供する極めて有望な手法であるが、多数のモデルを同時に実行する計算機能力が要求される。そこで、この研究では、超高速、かつ並列処理が可能なスーパーコンピュータを駆使することで、従来にない分布型降雨流出シミュレーションシステムの高度化を実現し不確実性を評価する。パーティクルフィルタで分布型水文モデルの状態量を更新する方法を、桂川流域（面積 : 887 km²）の洪水予測に適用して予測精度の改善が確認する。分布型流出モデルにおいて、水文プロセスの異なる時間スケールに起因する遅延応答に対処するために、ラグ(lag)フィルタリングアプローチを適用する。また、不確かさを評価するため、レーダー雨量の推定と水文モデルの両方のパラメータを、水文モデルの状態量とともに同時に同化し、統合的に入力データと予測モデルの不確実性を推定する。

2　同化手法

2.1 ベイジアンフィルタリング

次のような動的システムを考える。

$$x_k = f(x_{k-1}, u_k) + \omega_k \qquad \omega_k \sim N(0, W_k) \quad (1)$$

$$y_k = h(x_k) + \nu_k \qquad \nu_k \sim N(0, V_k) \quad (2)$$

ここで、x_k と y_k は時刻 k におけるシステムと観測状態を示す n_x 次元のベクトルである。f は、システム方程式、h は観測方程式である。ω_k と ν_k はそれぞれモデル誤差と観測誤差、W_k と V_k は、誤差の共分散行列である。ベイジアンフィルタリング理論では、システムおよび観測モデルが非線形、非ガウスの場合、解析的に観測ベクトル $\mathrm{y}_{1:k} = \{\mathrm{y}_i, \mathrm{i} = 1, \ldots, k\}$ における現在の状態 x_k の事後確率密度分布(posterior probability density distribution)を求めることが不可能である。この場合には、パーティクルフィルタなどのシミュレーションベースのアンサンブル方法を使用して、事後分布を近似的に求めることができる。

2.2 パーティクルフィルタ

パーティクルフィルタおよび逐次モンテカルロ法とは動的システムの状態やパラメータ推定問題を状態空間の中の多数の粒子の数値計算により近似的に解く方法である。現時刻までの状態系列の事後分布は、各粒子に適切な重み値を与えることで重み付き粒子群が目的分布の近似となるようにする方法である。

$$p(x_k \mid y_{1:k}) \approx \sum^{n} w_k^i \delta(x_k - x_k^i) \quad (3)$$

ここで、x_k^i と w_k^i は、それぞれ i 番目の状態（"粒子"）と、その重みで、$\delta()$ は、ディラックデルタ関数である。重みは時間ごとに更新され、前時刻の重み w_{k-1}^i と現時刻の観測データ y_k を観測モデルに代入して各粒子の尤度 $p(y_k \mid x_k^i)$ に比例する重み値を得る。

$$w_k^i \propto w_{k-1}^i p(y_k \mid x_k^i) \quad (4)$$

上述した逐次インポータンスサンプリング（SIS）アルゴリズムがパーティクルフィルタの基礎をなす方法である。SIS アルゴリズムには、縮退現象(sample degeneracy)という、数回の反復計算後に、重みが 1 つの粒子に集中され、他の粒子の重みが 0 になる問題点が指摘されている。そこで、逐次インポータンスリサンプリング（SIR）パーティクルフィルタでは、各時刻、重みに比例する確率で粒子の復元抽出を行い、現時刻のフィルタ分析に従う粒子群を得る。

2.3 ラグ(lag)フィルタリングアプローチ

流域では、降雨、浸透、地表面水、地下水、河川の流れなど、異なる水文プロセスが、異なる時間スケールで動いている。また、河川流量は降水が地表面に到達して浸透し、地中流・地表面流が発生して流下する時間ラグを持つ状態量である。本研究では、水文プロセスの異なる時間スケールに起因する遅延応答に対処するための枠組みとして、ラグ(lag)フィルタリングアプローチを次の手順で適用する。

1) 現時刻 k の予測を得るため、過去の時刻 $k-j$ から計算を開始する。

2) 時刻 $k-j+1$ で、システム状態変数を保存する。

3) 粒子が現在の時間ステップ k に到着したら、各粒子の重みをパーティクルフィルタの方法で推定する。

4) 推定した重みに従って、粒子をリサンプリングする。リサンプリング中に、時刻 $k-j+1$ の粒子を現時刻 k の重みに従ってリサンプリンする。

更新された時刻 $k-j+1$ の状態量は次の時刻 $k+1$ の予測値を計算するとき（ステップ 1)）に、予測計算の初期条件として使用する。

3　状態量更新による洪水予測

3.1 シミュレーションの概要

開発したデータ同化法を桂川流域(面積：887 km²)の洪水予測に適用した。日吉ダムからの放流量データは対象流域の上端からの入力データとして用い、水文モデルではダム下流の降雨流出を予測の対象とする。使用した水文モデルは物理的分布型流出モデルである WEP (water and energy transter processes)モデルである。WEP の状態量は、土壌水分量、表面流出、地下水位、熱フラックス成分、斜面や河川の流出などである。水文モデルの空間分解能は 250m であり、時間更新間隔 1 時間とした。アンサンブルシミュレーションは

オープンメッセージパッシング･インタフェース（openMPI）の並列計算技術を適用して京都大学のスーパーコンピュータで実行した。

3.2 シミュレーションの結果

表 1 はシミュレーションの期間と観測結果を、図 1 は 6 時間先の流量予測結果を示している。降雨データは観測値を予測値として用い、完全に降雨予測がなされた状態を仮定している。データ同化を適用していない場合(Open loop)は、大幅に河川流量を過小評価しているが、パーティクルフィルタの場合、予測値が観測値とほぼ一致し、データ同化によって、水文モデルの状態量が適切に更新されたことが分かった。図 2 は予測時間ごとの予測シミュレーションの二乗誤差(RMSE)を示している。パーティクルフィルタによる更新の効果が 24 時間先まで継続していることが確認できる。

表1．シミュレーションの期間と観測結果

観測地点	シミュレーションの期間	最大流量 (m^3s^{-1})	降水量 (mm)
桂	2003 年 8 月 1−31 日	361	258

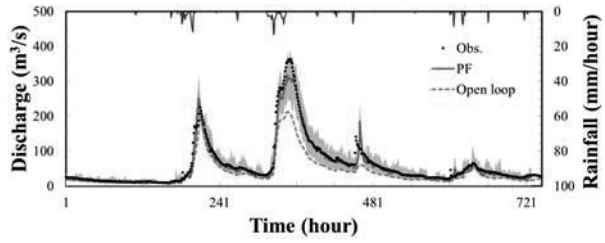


図1．6 時間先の流量予測結果と観測の比較

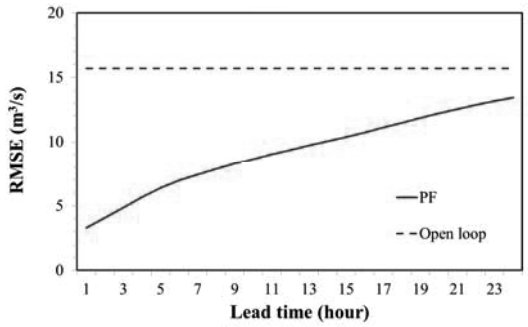


図2． 予測時間ごとの二乗誤差(RMSE)

4 入力データとモデルパラメータの不確実性評価

4.1 シミュレーションの概要

ここでは、レーダー雨量変換方程式と水文モデルのパラメータを、パーティクルフィルタにより同時に推定する。適用した流域は、前節で説明した桂川流域の日吉ダムの上流域で、六甲山に位置する空間分解能 250m、観測半径 80km の X-MP レーダーのデータを使用する(図 3)。このレーダーは、水平および垂直方向の 2 つの偏波（マルチパラメータ, MP）を使用して、次の式で降雨量を推定する。

$$R = B \cdot Z_{HH}^{\ b} \qquad K_{DP} < K_{DP_thres} \qquad (5)$$

$$R = C \cdot K_{DP}^{\ c} \qquad K_{DP} > K_{DP_thres} \qquad (6)$$

ここで、Z_{HH} と K_{DP} は、X-MP レーダーから観測される観測値であり、K_{DP_thres} によって式(5)、(6)で降雨強度に変換される。B、b、C、c は、通常、地上観測によって較正されるパラメータである。本研究では、4 つのレーダパラメータの中で、B と C の 2 つのパラメータ値を、水文モデルのパラメータと同時に推定する。水文モデルは、前のセクションで使用した WEP モデルより簡単な構造の分布型水文モデルを適用し、そのモデルが持つ不確実性の高い 4 つのパラメータを推定する。

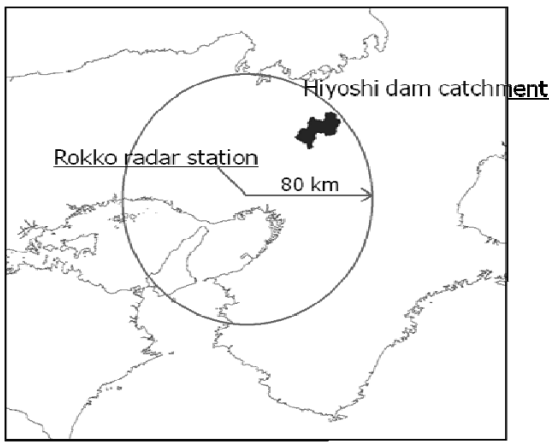


図3． 日吉ダム流域と六甲山 X-MP レーダー

4.2 シミュレーションの結果

図 4 はレーダパラメータ、B、C とモデルパラメータ K_{DP} をパーティクルフィルタにより推定したものである、その時間的な変化を示している。各パラメータが観測値とのデータ同化によって不確実性の範囲が減少していることが確認できる。図 5 と 6 はレーダパラメータのフィルタリング適用の有無による流量計算結果の違いを示している。レーダとモデルのパラメータの同時フィルタリングで流量計算の精度が大きく向上することが確認できる。

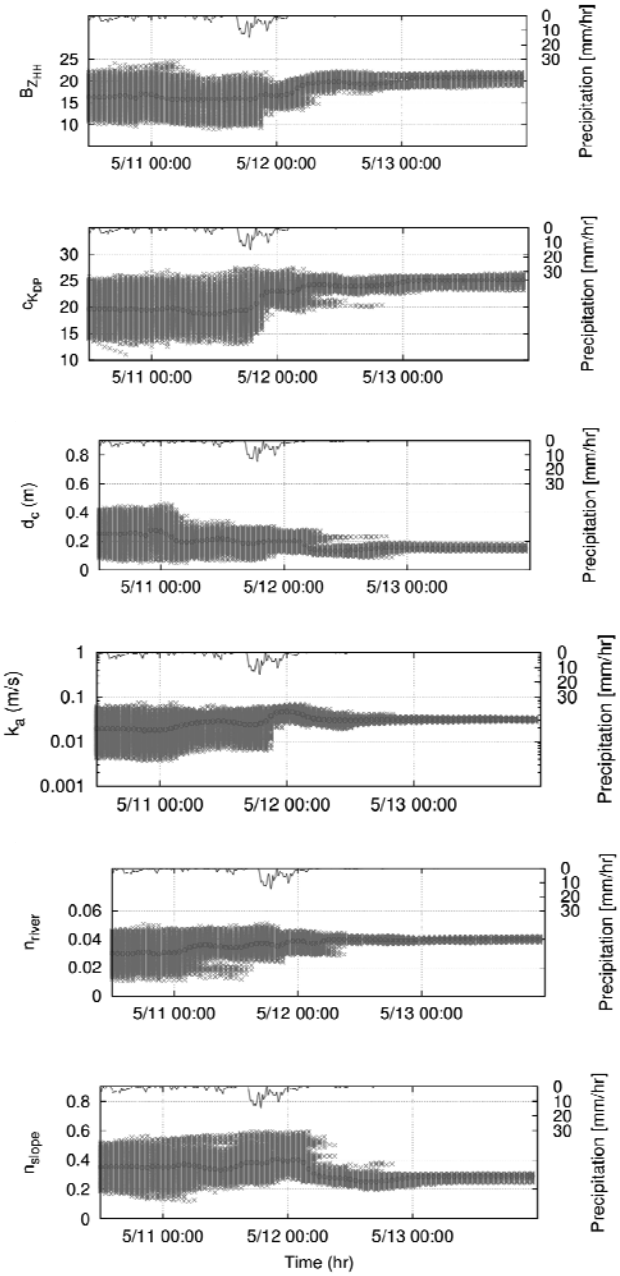


図 4. パラメータ分布の変化

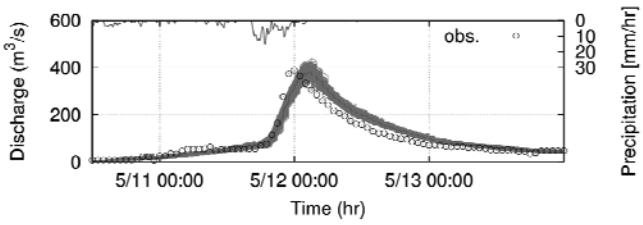


図 5. レーダパラメータをフィルタリングする場合

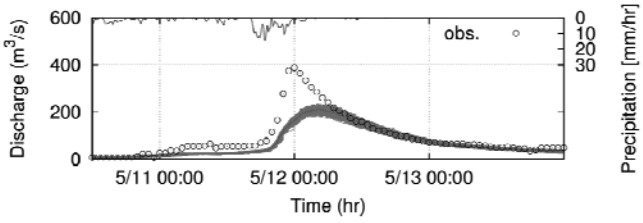


図 6. レーダパラメータをフィルタリングしない場合

5 まとめ

本研究では、パーティクルフィルタを、流出モデルに導入して水文予測の高精度化を図るとともに、流出モデルの不確実性を評価した。スーパーコンピューティング環境を駆使した新たな降雨流出予測システムの開発の適用性を確認し、分布型流出モデルを基本とする高精度の実時間流出予測が期待される。

6 参考文献

S. J. Noh, Y. Tachikawa, M. Shiiba, and S. Kim, “Applying sequential Monte Carlo methods into a distributed hydrologic model: lagged particle filtering approach with regularization,” Hydrol. Earth Syst. Sci., vol. 15, pp. 3237-3251, 2011.

S. J. Noh, Y. Tachikawa, M. Shiiba, and S. Kim, “Ensemble Kalman filtering and particle filtering in a lag-time window for short-term streamflow forecasting with a distributed hydrologic model,” J. Hydrol. Eng., ASCE, in press.

SIMD 演算を考慮した fill-in 戦略を用いた IC 分解前処理

武村 直和 * 岩下 武史 †，中島 浩 †

*京都大学大学院情報学研究科
†京都大学学術情報メディアセンター

1 はじめに

近年，多くのプロセッサが演算性能向上のために一命令で複数のデータを処理する SIMD(Single Instruction Multiple Data) 演算器を備えている．例えば，x86 系のプロセッサで利用できる SIMD 拡張命令セットとして SSE(Streaming SIMD Extensions) や Intel AVX(Advanced Vector eXtensions) が知られている．また，これらの SIMD 命令において，一命令で処理できるデータ量（SIMD 幅）も増加の傾向にある．こうした背景から，数値シミュレーションにおいて，プロセッサの演算性能を十分に利用するためには SIMD 命令の活用が重要となってきている [1][2]．そこで，本研究では，有限要素解析等により生ずる連立一次方程式の求解法としてよく用いられる ICCG 法（より正確には，IC(0) 分解前処理付き共役勾配法）に対して，SIMD 演算を利用することによる性能改善を試みる．

ICCG 法は線形反復法の一種で，反復計算における主要な計算核は前処理部分の前進後退代入計算と共役勾配（CG）法に含まれる疎行列ベクトル積である．そこで，本稿ではこれらの二つの計算核，特に従来からベクトル化・並列化が困難であるとされてきた前進後退代入計算を中心に，SIMD 演算を利用した性能改善法について述べる．

本研究では，計算プラットフォームとして x86 系のスカラ型プロセッサを用いる．疎行列演算において，このようなスカラ型のプロセッサにおける SIMD 演算機構を活用する方法として，SIMD 幅に応じたサイズを持つ密行列演算を導入する手法がある．そこで，著者らは ICCG 法において小規模な密行列演算を導入することによる性能改善手法について検討を行った．

本稿では，上記の検討の結果として，前処理行列をブロック化し，ブロック内での fill-in を考慮する IC 分解前処理（IC(B) 前処理と表記する）を提案する．本手法では，IC(0) 前処理と比べ，分解中に許容される fill-in が増加することによる前処理行列の近似度の向上，即ち ICCG 法における収束性の向上が期待できる．一方，提案手法の導入により，一般に一反復あたりの計算量は増加する．これは，非零ブロック内の要素はすべて非零要素として扱われることによる．従って，提案する前処理が IC(0) 前処理と比べて有利となるかどうかは，収束性向上（反復数の低減）と一反復あたりの計算時間の増加のトレードオフにより決まる．しかし，提案手法を用いた場合，反復中の主要な計算核である代入計算と行列ベクトル積はブロック毎の密行列計算により構成され，本計算に対しては SIMD 演算を活用することが期待できる．つまり，SIMD 演算により，ブロック化に伴う計算量増加の影響を相殺できれば，収束性向上に伴って全体の計算時間を削減することが期待できる．本稿では，フロリダ大学の行列データベースを利用した数値実験より，提案する前処理の有効性について，IC(0) 前処理との比較から検証する．

2 疎行列計算の SIMD 化

2.1 SIMD 演算

SIMD は一命令で複数のデータを処理する技術であり，x86 CPU 向けの SIMD 拡張命令セットとして SSE や Intel AVX がある．これらの命令セットを用いて効率的に SIMD 演算を行うには以下の条件がある．プロセッサ上での演算は 1. メモリからレジスタへのデータのロード → 2. レジスタ上のデータによ

る演算 → 3. レジスタからメモリへのデータのストア の順で行われる．ここで，1. のロードと 3. のストアを効率的に行うには処理するデータがメモリ上で連続に存在することが望ましい．これは，非連続のデータを扱う際には gather や scatter といった低効率な処理が必要となるためである．また，2. の演算を SIMD 化するには一度に行う演算に依存性がないことが必要となる．

ICCG 法は非構造メッシュによる有限要素解析等で用いられることが多いため，通常の実装手法では、代入計算や疎行列ベクトル積において間接参照が必要となる．上記のとおり，間接参照はメモリに対して非連続なデータアクセスとなることが多く，SIMD 演算の効率性の点では好ましくない．そこで，本研究では次小節で述べる疎行列のブロック化を行う．

2.2 疎行列のブロック化

行列全体をブロックサイズ $n_l \times n_w$ のブロックに分け，非零要素を含む非零ブロックのみをブロック毎にメモリに格納する．この時，非零ブロックに含まれている零要素も格納することで，各非零ブロックは密行列として扱われる．疎行列ベクトル積や代入計算をブロック単位で行うことで，ブロック内で SIMD 演算を利用可能となる [3].

CRS 方式は，疎行列のデータ格納形式として最もよく使われる方式で，係数行列の非零要素の情報のみを格納する．それに対し，本研究では非零ブロックを単位としたデータ格納形式である Block CRS 形式を用いる．本形式では，非零ブロックの行・列に関する位置情報については CRS 形式を用い，各要素の値については非零ブロックを単位として順に一次元配列に格納する．図 1 の様なサンプル行列を CRS 形式で格納する場合，図 2 に示すような 3 つの一次元配列を用いる．また，同じ行列を BCRS(2×2) 形式で格納する場合，図 3 のようになる．ここで，BCRS($n_l \times n_w$) 形式はブロックサイズ $n_l \times n_w$ の Block CRS 形式を表す．

2.3 ブロック化された疎行列による行列・ベクトル積

係数行列を CRS 形式で格納した場合，疎行列・ベクトル積 $\boldsymbol{Ap}=\boldsymbol{q}$ の計算は，一般に図 4 の様に記述さ

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & a_{24} \\ 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{pmatrix}$$

図 1: サンプル行列

val=$\{a_{11},a_{13},a_{22},a_{24},a_{33},a_{34},a_{44}\}$
col_ind=$\{0,2,1,3,2,3,3\}$
row_ptr=$\{0,2,4,6,7\}$

図 2: CRS 形式

れる．この場合，乗算ベクトル $\boldsymbol{p}$は col_ind 配列を用いて間接的に参照されるため，非連続なメモリアクセスを要し，SIMD 演算の有効利用を阻害する．

次に，係数行列をブロック化し，Block CRS 形式を用いて格納した場合，密行列として扱われる非零ブロックに対して SIMD 演算が利用可能となる．本研究で用いる x86 系プロセッサの場合，SIMD 演算を用いた実装法として，ディレクティブによる場合と C++組み込み関数による場合の二種類がある．ここで，後者の場合について，BCRS(2×2) 形式で行列を格納した場合の SIMD 化された疎行列・ベクトル積を図 5 に示す．

3 IC(B) 分解前処理

3.1 前処理付き共役勾配法

共役勾配 (CG) 法は連立一次方程式

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b} \tag{1}$$

を解くための Krylov 部分空間法の一つであり，係数行列 $\boldsymbol{A}$ が正定値かつ対称である場合に用いることができる [4, 5].

bval=$\{a_{11},0,0,a_{22},a_{13},0,0,a_{24},a_{33},0,a_{34},a_{44}\}$
bcol_ind=$\{0,1,1\}$
brow_ptr=$\{0,2,3\}$

図 3: BCRS(2×2) 形式

```
//  Compute Ap=q
for(i=0; i<N; i++){
  q[i]=0.0
  for(j=row_ptr[i]; j<row_ptr[i+1]; j++){
    q[i]+=val[j] × p[col_ind[j]]
    }
  }
```

図 4: CRS 形式を用いた疎行列ベクトル積

```
//  Compute Ap=q
__m128d XA0, XA1, XP0, XP1, XQ0;
Iofs=0;
Vofs=0;
for(k=0; k<Nd; k++){
  XQ0  = _mm_setzero_pd();
  for(j=brow_ptr[k] ;j<brow_ptr[k+1];j++){
    Jofs = bcol_ind[j]*2;
    XP0 = _mm_load1_pd(&p[Jofs]);
    XP1 = _mm_load1_pd(&p[Jofs+1]);
    XA0 = _mm_load_pd(&bval[Vofs]);
    XA1 = _mm_load_pd(&bval[Vofs+2]);
    XA0 = _mm_mul_pd(XA0,XP0);
    XQ0 = _mm_add_pd(XQ0,XA0);
    XA1 = _mm_mul_pd(XA1,XP1);
    XQ0 = _mm_add_pd(XQ0,XA1);
    Vofs+=4;
  }
 _mm_store_pd(&q[Iofs],XQ0);
 Iofs+=2;
}
```

図 5: BCRS(2×2) 形式を用いた疎行列ベクトル積

CG 法の収束性を改善する方法として前処理がある．これは$\boldsymbol{A}$ を近似した前処理行列$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M_L}\boldsymbol{M_L^T}$を用いて前処理を行い，解く方程式を

$$(\boldsymbol{M_L^{-1}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{M_L^{-T}})\boldsymbol{M_L^T}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{M_L^{-1}}\boldsymbol{b} \qquad (2)$$

とすることで収束性を向上させる方法である．

3.2 IC(0) 分解前処理

CG 法に対してよく用いられる前処理として，係数行列$\boldsymbol{A}$= $\{a_{i,j}\}$ を不完全コレスキー分解 (IC 分解) することで得られる$\boldsymbol{LDL^T}$ ($\approx \boldsymbol{A}$) を前処理行列とする IC 分解前処理がある．IC 分解による求まる対角行列$\boldsymbol{D}$= $\{d_{i,j}\}$と上三角行列$\boldsymbol{U} = \{u_{i,j}\}$ ($=\boldsymbol{L^T}$) は次のように表せる．

$$d_{i,j} = \begin{cases} a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{k,i}^2 d_{k,k} & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \qquad (3)$$

$$u_{i,j} = \begin{cases} (\ a_{i,j} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{k,i}u_{k,j}d_{k,k})/d_{i,i} & \\ \qquad\qquad (i < j \cap\ f_{i,j} = 1) & (4) \\ 1 \qquad\qquad (i = j) & \\ 0 \qquad\qquad (otherwise) & \end{cases}$$

ここで，行列を IC 分解する際に，$a_{i,j} = 0$であっても，$u_{i,j} \neq 0$ となることを fill-in と呼ぶ．従って，行列$\boldsymbol{F}$= $\{f_{i,j}\}$ は fill-in を制御するために用いられ，これにより前処理行列の非零パターンを変える事ができる．

$\boldsymbol{F}$を次のように定めた時，fill-in は全て棄却され$\boldsymbol{A}$の上三角部分と$\boldsymbol{U}$の非零パターンは等しくなり，これを IC(0) 分解と呼ぶ．IC(0) 分解によって得られる行列による前処理を IC(0) 分解前処理と呼び，単に ICCG 法という場合には IC(0)-CG 法を指すと考えるのが一般的である．

$$f_{i,j} = \begin{cases} 1 & (a_{i,j} \neq 0) \\ 0 & (a_{i,j} = 0) \end{cases} \qquad (5)$$

3.3 IC(B) 前処理

IC(0) 分解により生成される前処理行列は係数行列と同じ非零パターンを有しており，前処理過程である代入計算において効果的に SIMD 演算を利用することは難しい．そこで本稿では，ブロック化した疎行列に対する IC 分解の手法として IC(B,n_l×n_w) 分解を提案する．

提案手法では，まず係数行列をブロックサイズ n_l×n_w でブロック化し，非零ブロックを BCRS 形式で格納する．次に，IC 分解において，各ブロック内での fill-in を許容して分解を行う．即ち，本手法は，非零ブロックに含まれる要素の行・列番号の集合を B と表した場合，$\boldsymbol{F}$として次式を用いて分解することと定

義できる．

$$f_{i,j} = \begin{cases} 1 & ((i,j) \in B) \\ 0 & (otherwise) \end{cases} \quad (6)$$

本手法では，非零ブロック内の fill-in が許されるため，fill-in を一切考慮しない IC(0) 分解前処理と比べ収束性の向上が期待できる．また，この場合，前進・後退代入計算は，ブロック内で密行列計算として扱われる．その結果，非対角ブロックに対する代入計算は図 5 に示した疎行列・ベクトル積と同様に SIMD 化することができる．なお，対角ブロックについては処理に逐次性があるため，SIMD 化は行わない．

4　数値実験

4.1　実験条件

本稿では，フロリダ大学の Matrix Collection[6] の行列データを用いた数値実験結果について報告する．Matlix Collection データベースから，問題サイズが大きく，右辺ベクトルが提供されている対称行列問題を選び，実験の対象とした．数値実験に用いた計算機環境を表 1 に示す．今回の実験では，1 コアによる実行とし，SIMD の効果について検証を行う．ICCG 法の収束判定基準は，相対残差が 10^{-7} 以下となった時点とした．ここで相対残差とは初期残差に対する残差の 2 ノルムの比 $||r||_2/||r_0||_2$ である．IC(B) 前処理と BCRS 形式におけるブロックサイズには，(1×2), (2×1), (2×2), (1×4), (4×1), (4×4) を用いる．

表 1: 実験環境

プロセッサ	Intel Xeon E5-2670 (1 コアのみ使用)
メモリ	64GB
コンパイラ	Intel Compiler 13.1.0

4.2　数値実験結果

IC 分解前処理のための代入計算には分解により得られた前処理行列が用いられ，これは CG 法中の疎行列ベクトル積で用いられる係数行列とは異なっている．従って，提案手法である IC(B) 前処理を用いた場合においても係数行列の格納形式として CRS 形式を利用することや，IC(B) 前処理と異なるブロックサイズを用いた BCRS 形式を使用することは可能である．そこで，まず疎行列ベクトル積における BCRS 形式の有効性について検証を行った．表 2 に parabolic_fem,thermal2,G3_circuit の行列データを用いた疎行列ベクトル積 100 回分の計算時間を示す．いずれの数値実験においても，BCRS(2×1) 形式を利用した場合が最良の結果となった．CRS 形式との比較では，扱われる行列要素の数は増加しているもののブロック内の計算に SIMD 計算が導入されたことによる効果が大きく，結果として CRS 形式を上回る性能が得られた．今回扱った行列は対称行列であるため，ブロックサイズ (1×2) と (2×1) および (1×4) と (4×1) はそれぞれ計算量が等しいが，ブロックサイズ (2×1) と (4×1) の方が計算時間が短い．従って，ブロック内でリダクション演算が必要となるブロックサイズ (1×2) や (1×4) の利用は避けるのが良いと考えられる．

表 2: 疎行列ベクトル積の比較

	計算時間 [s]		
	parabolic_fem	thermal2	G3_circuit
CRS	0.79	2.75	2.14
BCRS(1×2)	0.90	3.03	2.15
BCRS(2×1)	**0.73**	**2.31**	**1.59**
BCRS(2×2)	1.01	2.88	2.23
BCRS(1×4)	1.17	3.34	2.62
BCRS(4×1)	1.03	2.69	1.98
BCRS(4×4)	2.08	5.49	3.75

次に，表 3 に IC(0) 分解前処理と提案手法である IC(B) 分解前処理の比較を示す．ここでは疎行列ベクトル積のための係数行列の格納形式としては，最も結果が良かったブロックサイズ (2×1) の BCRS 形式を用いる．3 つの数値実験の全てにおいて，適切なブロックサイズを設定することにより提案手法は IC(0)-CG 法を上回る性能を実現している．いずれのデータセットの場合でも，ブロックのサイズが大きい方が fill-in 増加の効果が大きく，収束性が向上しているが，一反復あたりの計算時間も増加している．G3_circuit

では，ブロックサイズを (4×4) とした場合の収束性の向上幅が大きく，最も大きいブロックを使用した場合が最良となった．一方，parabolic_fem と thermal2 では，それぞれブロックサイズ (2×1)，(2×2) の時に最も計算時間が最短となる結果となった．

表 3: IC(B) 前処理と IC(0) 前処理の比較

parabolic_fem

	反復回数	計算時間 [s]	時間/反復 [s]
IC(0)	678	12.8	1.88E-2
IC(B,1×2)	629	12.3	1.95E-2
IC(B,2×1)	620	**12.1**	1.96E-2
IC(B,2×2)	588	12.2	2.08E-2
IC(B,1×4)	590	13.1	2.22E-2
IC(B,4×1)	560	13.0	2.31E-2
IC(B,4×4)	463	14.5	3.13E-2

thermal2

	反復回数	計算時間 [s]	時間/反復 [s]
IC(0)	1657	114	6.90E-2
IC(B,1×2)	1666	104	6.25E-2
IC(B,2×1)	1629	101	6.20E-2
IC(B,2×2)	1604	**96**	5.98E-2
IC(B,1×4)	1622	106	6.51E-2
IC(B,4×1)	1525	101	6.62E-2
IC(B,4×4)	1415	121	8.54E-2

G3_circuit

	反復回数	計算時間 [s]	時間/反復 [s]
IC(0)	184	9.82	5.34E-2
IC(B,1×2)	156	8.06	5.17E-2
IC(B,2×1)	154	8.07	5.24E-2
IC(B,2×2)	93	4.67	5.03E-2
IC(B,1×4)	122	6.60	5.41E-2
IC(B,4×1)	121	6.50	5.37E-2
IC(B,4×4)	51	**3.36**	6.59E-2

5 おわりに

ICCG 法において，係数行列をブロック化し，ブロック内の fill-in を許容する IC(B) 分解前処理を提案した．本手法では，各ブロックを密行列として扱うことができ，前進・後退代入計算をブロック単位で SIMD 化することができる．また，IC(0) 前処理と比べて許容される fill-in が増加するため，前処理効果の改善（反復数の低減）が期待できる．フロリダ大学の行列データベースを用いた数値実験によって，適切なブロックサイズを設定することで提案手法により，IC(0) 前処理と比べて求解に必要な計算時間の短縮が可能であることを示した．

参考文献

[1] 中島 研吾, 前処理付きマルチスレッド並列疎行列ソルバー情報処理学会研究報告, 2013-HPC-139, 6, pp.1-6 (2013).

[2] 西田 晃, 複数アーキテクチャ上での疎行列ベクトル積の性能最適化手法, 情報処理学会計算機アーキテクチャ研究会報告, 2009-ARC-186, 7, pp.1-8 (2009).

[3] Samuel Williams, Leonid Oliker, Richard Vuduc, John Shalf, Katherine Yelick and James Demmel, Optimization of sparse matrix-vector multiplication on emerging multicore platforms, *Parallel Computing*, 35, (2009), pp. 178-194.

[4] Richard Barrett et al., *Templates for the Solution of Linear System : Building Blocks for Iterative Methods*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987.

[5] Yousef Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*(2nd), Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.

[6] The University of Florida Sparse Matrix Collection, http://www.cise.ufl.edu/research /sparse/matrices/.

システム A 運転状況 （2013 年 4 月 ～ 2013 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

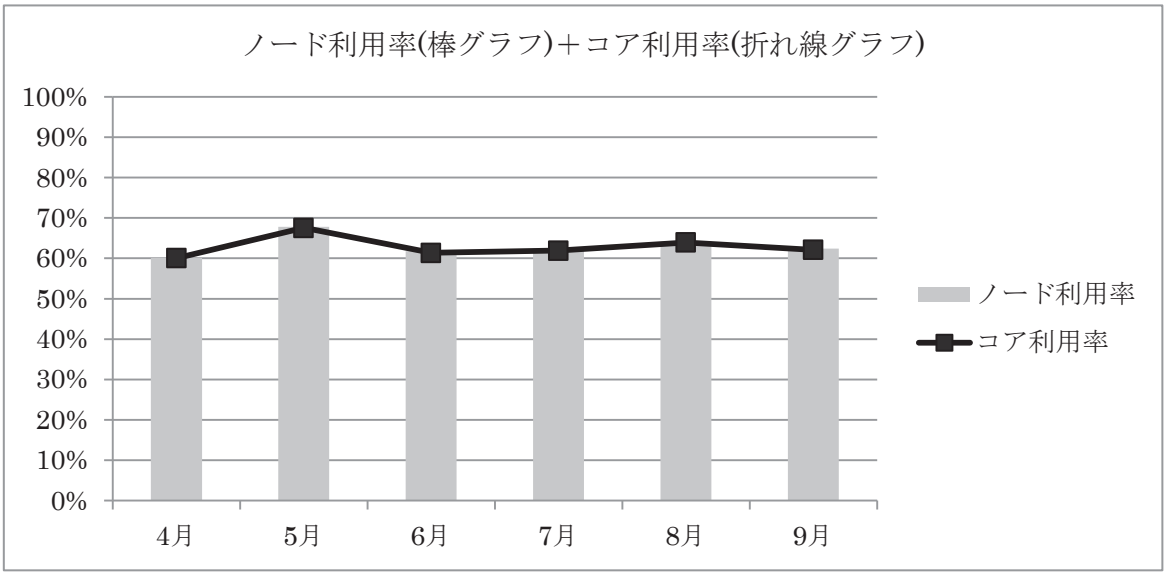
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2013/04/01 0:00	2013/04/02 9:00	33.00
2013/06/11 9:00	2013/06/11 20:00	11.00
2013/08/06 9:00	2013/08/07 9:00	24.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
2013/07/03 23:25	2013/07/04 5:40	6.25
2013/07/20 18:14	2013/07/20 18:32	0.30
2013/07/23 10:30	2013/07/23 19:00	8.50

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
4 月	687.00	105,507	102,169	12,428,500	9,982,010	939.9	60 %
5 月	744.00	40,155	121,387	15,411,300	11,949,000	939.9	68 %
6 月	709.00	17,789	98,261	12,937,900	10,320,600	939.8	62 %
7 月	728.95	21,005	120,975	14,529,200	11,096,500	939.7	63 %
8 月	720.00	19,082	124,330	13,918,300	10,852,000	939.8	64 %
9 月	720.00	19,038	121,665	13,183,600	10,468,200	939.9	62 %
計	4308.95	222,576	688,787	82,408,800	64,668,310	939.8	63 %



- 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 （2013 年 4 月 ～ 2013 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

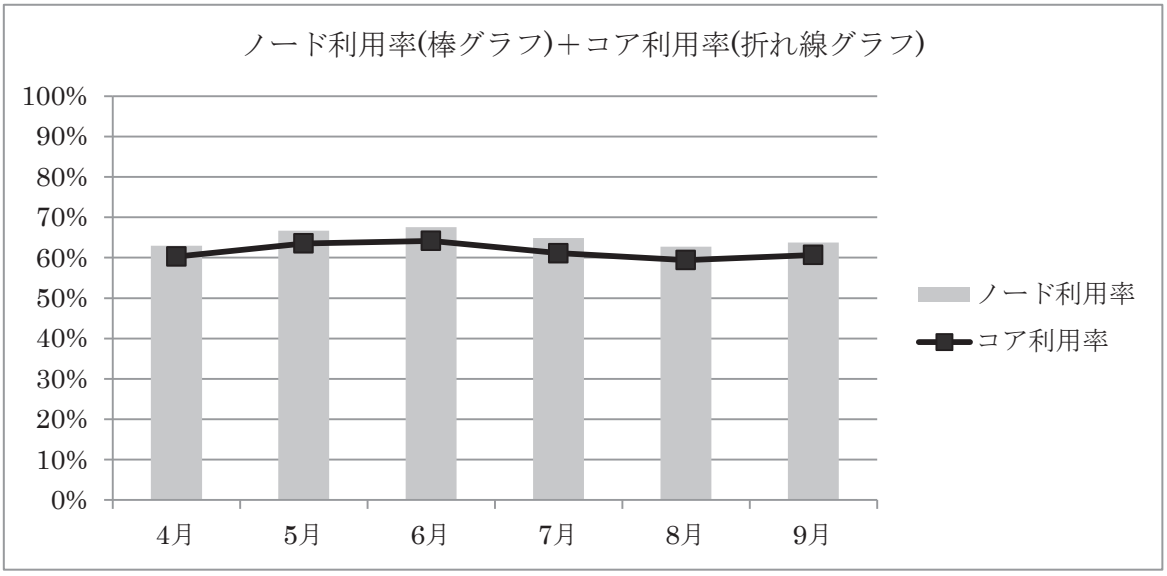
保守開始日時		サービス再開日時		保守時間[h]
2013/04/01	0:00	2013/04/02	9:00	33.00
2013/06/11	9:00	2013/06/11	20:00	11.00
2013/08/06	9:00	2013/08/07	9:00	24.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時		サービス再開日時		ダウン時間[h]
2013/07/17	9:40	2013/07/17	10:10	0.50
2013/07/23	10:30	2013/07/23	19:00	8.50

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
4 月	687.00	66,103	263,934	3,648,490	300,156	556.9	63 %
5 月	744.00	83,587	174,377	4,058,320	326,492	557.0	67 %
6 月	709.00	60,252	434,553	4,154,320	333,411	551.1	68 %
7 月	735.00	121,759	398,277	3,998,060	316,426	556.9	65 %
8 月	720.00	129,387	279,907	4,005,990	327,144	543.7	63 %
9 月	720.00	387,864	251,454	3,671,620	305,383	551.1	64 %
計	4315.00	848,952	1,802,502	23,536,800	1,909,012	552.8	65 %



- 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 （2013 年 4 月 ～ 2013 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

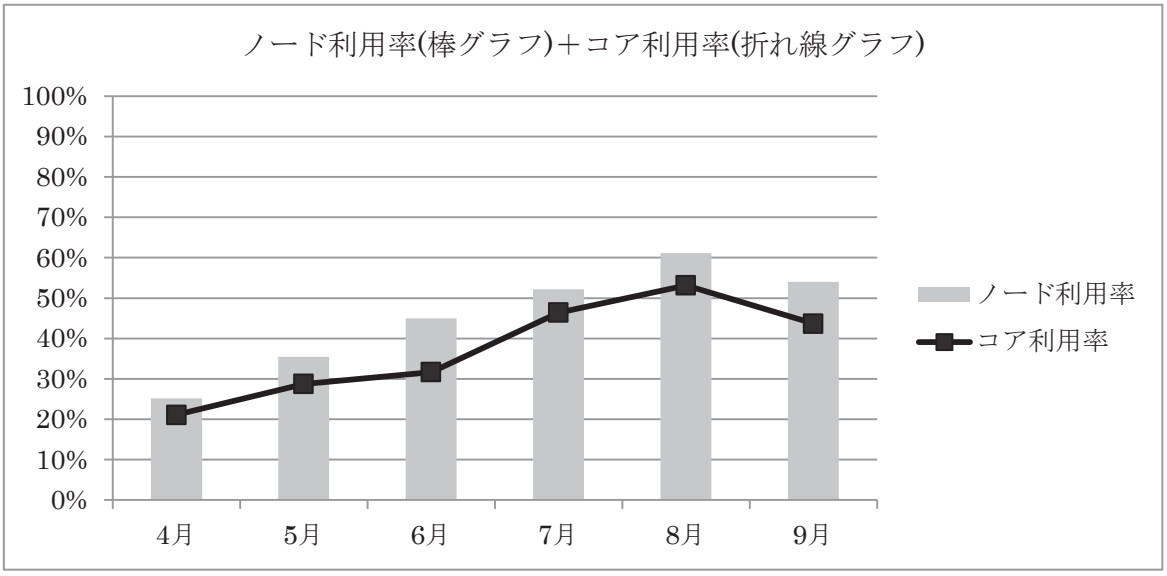
保守開始日時		サービス再開日時		保守時間[h]
2013/04/01	0:00	2013/04/02	9:00	33.00
2013/06/11	9:00	2013/06/11	20:00	11.00
2013/08/06	9:00	2013/08/07	9:00	24.00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時		サービス再開日時		ダウン時間[h]
2013/07/17	9:40	2013/07/17	10:10	0.50
2013/07/23	10:30	2013/07/23	19:00	8.50

2）サービス状況

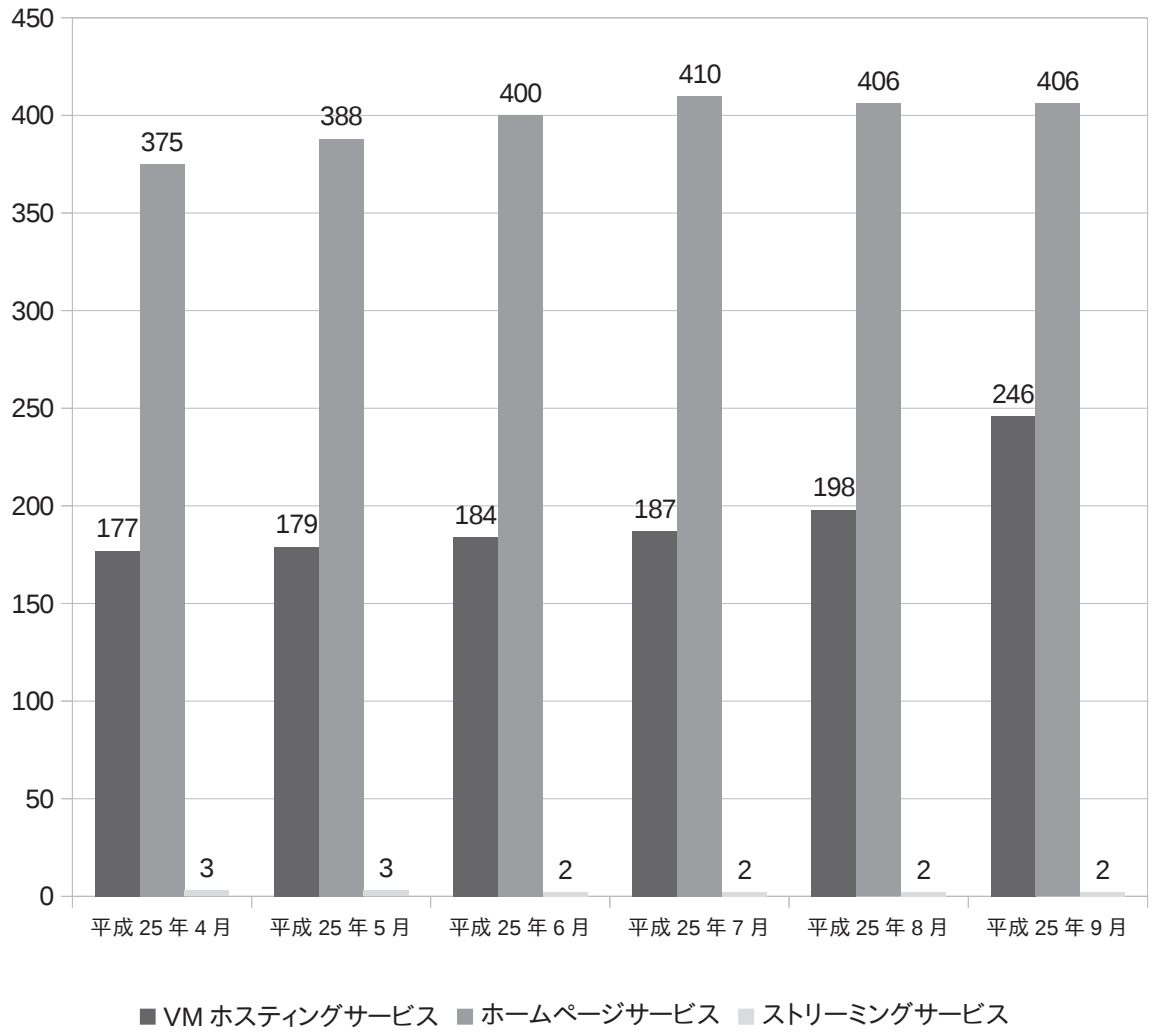
	サービス時間[h]	バッチ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4 月	687.00	913	3,112	66,072	46,270	16.0	25 %
5 月	744.00	1,761	7,326	111,538	64,946	16.0	35 %
6 月	709.00	1,295	9,854	108,761	76,927	15.8	45 %
7 月	735.00	1,172	7,183	166,717	122,342	16.0	52 %
8 月	720.00	928	7,425	209,175	124,625	15.7	61 %
9 月	720.00	536	8,769	144,123	99,357	16.0	54 %
計	4315.00	6,605	43,669	806,386	534,467	15.9	45 %



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

汎用コンピュータシステムのサービス状況

1　ホスティング・ホームページサービス利用状況



（平成　25 年4 月から平成　25 年9 月）

大型計算機システム利用承認件数について

平成 25 年9 月末現在、大型計算機システムの利用件数は、　2,694　件となっています。

センター利用による研究成果

―平成 24 年度計算機利用結果報告書から―

【1000　情報学】

1. Takeshi Iwashita, Yu Hirotani, Takeshi Mifune, Toshio Murayama & Hideki Ohtani : Large-scale time-harmonic electromagnetic field analysis using a multigrid solver on a distributed memory parallel computer : Parallel Computing, Vol.38, pp.485 – 500, 2012
2. 河合直聡, 岩下武史, 中島　浩:ブロック化赤 - 黒順序付け法に基づく並列マルチグリッドポアソンソルバ: 情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム（ACS）, Vol 5, No.3, pp.1 – 10, 2012
3. 野瀬田裕樹, 河合直聡, 岩下武史, 高橋康人, 美舩　健, 中島　浩：並列境界要素解析フレームワークの設計と実装: 先進的計算基盤システムシンポジウム論文集（SACSIS2012）, pp.69 – 70, 2012
4. Yasuhito Takahashi, Takeshi Iwashita, Hiroshi Nakashima, Tadashi Tokumasu, Masafumi Fujita, Shinj Wakao, Koji Fujiwara, Yoshiyuki Ishihara : Parallel Time-Periodic Finite-Element Method for Steady-State Analysis of Rotating Machines : IEEE Trans. Magnetics, Vol.48, No.2, pp.1019–1022, 2012
5. Takeshi Iwashita, Yasuto Takahashi, Hiroshi Nakashima : Algebraic Block Multi-Color Ordering Method for Parallel Multi-Threaded Sparse Triangular Solver in ICCG Method : Proc. Intl. Parallel and Distributed Processing Symp., 2012
6. Tasuku Hiraishi, Tatsuya Abe, Takeshi Iwashita, Hiroshi Nakashima : Xcrypt: a Perl Extension for Job Level Parallel Programming : Proc. Intl. WS. High-performance Infrastructure for Scalable Tools, 2012
7. Masatoshi Kawai, Takeshi Iwashita, Hiroshi Nakashima, Osni Marque : Parallel Smoother Based on Block Red-Black Ordering for Multigrid Poisson Solver : Proc. Intl. Mtng. High-Performance Computing for Computational Science, 2012
8. Yohei Miyake, Hideyuki Usui, Hirotsugu Kojima, Hiroshi Nakashima : Plasma Particle Simulations on Stray Photoelectron Current Flows Around a Spacecraft : J. Geophysics Rearch, Vol.117, No.09210, pp.1 – 13, 2012
9. Tasuku Hiraishi, Masaru Ueno, Tatsuya Abe, Takeshi Iwashita, Hiroshi Nakashima : Xcrypt in Lisp : A Scripting System for Job Level Parallel Programming in Lisp: Proc. Intl. Lisp Conf., 2012
10. Yasuhito Takahashi, Tadashi Tokumasu, Masafumi Fujita, Takeshi Iwashita, Hiroshi Nakashima, Tadashi Tokumasu, Masafumi Fujita, Shinj Wakao, Koji Fujiwara, Yoshiyuki Ishihara : Parallel Time-Periodic Finite-Element Method for Fast Magnetic Field Analysis of Induction Motors : Proc. 15th Biennial Conf. Electromagneti Field Compuation, 2012
11. Kazuki Semba, Koji Tani, Takashi Yamada, Takeshi Iwashita, Yasuhito Takahashi, Hiroshi Nakashima : Parallel Performance of Multi-threaded ICCG Solver Based on Algebraic Block Multi-color Ordering In Finite Element Electromagnetic Field Analyses : Proc. 15th Biennial Conf. Electromagneti Field Compuation, 2012
12. 南　武志, 岩下武史, 中島　浩：冗長な計算を伴わない 3 次元 FDTD 法の時空間タイリング: 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム(ACS), Vol.6, No.1, pp.56 – 65, 2013
13. 仙波和樹, 山田　隆, 岩下武史, 中島　浩, 高橋康人, 美舩健：実応用有限要素電磁場解析における折り畳み前処理を用いた反復解法の有効

性：電気学会論文誌, Vol.133, No.2D, pp.203 – 213, 2013

14. Takeshi Iwashita, Akihiro Ida, Masatoshi Kawai, Hiroshi Nakashima : Performance Evaluation of Multi-threaded Iterative Solver on Recent Processors : Proc. 2013 SIAM Conf. Computational Science and Engineering, 2013
15. Tasuku Hiraishi, Masaru Ueno, Tatsuya Abe, Motoharu Hibino, Takeshi Iwashita, Hiroshi Nakashima : Xcrypt on Lisp: A Scripting System for Job Level Parallel Programming in Lisp : International Lisp Conference, pp. 107 – 114, 2012
16. Tasuku Hiraishi, Tatsuya Abe, Takeshi Iwashita, Hiroshi Nakashima : Xcrypt: A Perl Extension for Job Level Parallel Programming : Second International Workshop on High-performance Infrastructure for Scalable Tools (WHIST 2012), pp. 1 – 9, 2012
17. 上野　優, 平石　拓, 日比野元春, 岩下武史, 中島　浩：ジョブ並列スクリプト言語 Xcrypt における RPC に基づく多言語対応：情報処理学会第 92 回プログラミング研究会, pp.1 – 14, 2013
18. 松井　健, 平石　拓, 八杉昌宏, 馬谷誠二：高速版 Barnes-Hut 多体シミュレーションの並列実装：先進的計算基盤システムシンポジウム（SACSIS2012）, pp.1 – 8, 2012
19. 松井　健, 平石　拓, 八杉昌宏, 馬谷誠二：ワークスティーリングフレームワークにおける集団通信機能：並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ（SWoPP2012）, pp.1 – 8, 2012
20. 日比野元春, 南　武志, 平石　拓, 岩下武史, 中島　浩：Xcrypt を用いた 3 次元 FDTD 法プログラムの自動チューニング：日本応用数理学会年会（JSIAM2012）, pp.277 – 278, 2012

【2000　環境学】

21. 小森友里, 里村雄彦：領域気象モデル（WRF）を用いたインドシナ半島西岸沖の降水極大の再現実験：日本気象学会 2012 年度秋季大会予稿集,Vol.102, pp.P387 - P387, 2012
22. 塘三千代, 里村雄彦：火星をイメージした地形風の数値シミュレーション: 日本気象学会 2012 年度秋季大会予稿集, Vol.102, pp.P162 – P162, 2012
23. Ogohara, K. & Satomura, T. : Climatology of Dust Haze Expansion on Mars : AOGS-AGU (WPGM) Joint Assembly 2012
24. Nattapon Mahavik, Takehiko Satomura, & Somchai Baimuang : Z-R parameter variation using conventional weatehr radar in the middle of Indochina peninsular : 日本気象学会 2012 年度秋季大会予稿集, Vol.102, pp.P383 -P383, 2012
25. Nattapon Mahavik & Takehiko Satomura : Calibration of weather radar for analyzing precipitation distribution in Thailand : 日本気象学会 2012 年度秋季大会予稿集, Vol.102, pp. P143 - P143, 2012
26. Yuri Komori & T. Satomura : The precipitation peak off the western coast of Indochina Peninsula : Proc. 2nd Int. Workshop on Nonhydrostatic Numerical Models, pp. 95 – 96, 2012

【2300　ゲノム科学】

27. 大和勝幸, 河内孝之：見えてきたゼニゴケゲノム：植物科学最前線, Vol.3, pp.71 – 83, 2012
28. Shigeyuki Tsukamoto, Satoshi Hirao, Lixy Yamada, Hitoshi Sawada, Kimitsune Ishizaki, Takayuki Kohchi, Katsuyuki T. Yamato : Transcriptomic and proteomic analyses of sperm of Marchantia polymorpha L. : 第 54 回日本植物生理学会年会　要旨集, pp.356 – 356, 2013

【3900　心理学】

29. 川島康裕, 山城博幸, 山本洋紀, 村瀬智一, 梅田雅宏, 樋口敏宏：照明強度のヒト大脳視覚野活動への影響 : fMRI 研究 : 平成 24 年度照明学会第 45 回全国大会講演要旨集, pp.8-17 - 8-17, 2012

【4100　数学】

30. 新谷　誠：5 元体上のいくつかの Optimal Linear Code について：2012 年度応用数学合同研究集会, pp.62 – 63, 2012
31. Kiori Obuse, Shin-ichi Takehiro & Michio

Yamada : Weak interaction between zonal jets on a β plane : Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol.30, No.1, pp.111 – 127, 2013

【4200　天文学】

32. Kenji Hasegawa, Benoit Semelin : The impacts of ultraviolet radiation feedback on galaxies during the epoch of reionization : Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Vol.428, No.1, pp.154 – 166, 2013
33. Kenji Hasegawa, Benoit Semelin : Impacts of ultraviolet radiation feedback on the cosmic reionization history : AIP conference proceedings, Vol.1480, pp.267 – 270, 2012
34. Masayuki Umemura, Hajime Susa, Kenji Hasegawa, Tamon Suwa, Benoit Semelin : Formation and Radiative Feedback of First Objects and First Galaxies : Progress of Theoretical and Experimental Physics, pp.306 – 328, 2012

【4400　地球惑星科学】

35. Kei Nishina, Yoichi Ishikawa & Toshiyuki Awaji : Impact of simultaneous assimilation of intermediate velocities derived from Argo float trajectories together with temperature and salinity profiles in a high-resolution 4-dimensional variational data assimilation system : 4th Argo Science Workshop, Venice, Italy, 2012
36. Kei Nishina, Yoichi Ishikawa & Toshiyuki Awaji : Impact of surface drifter data for “ocean weather forecast” - an example of mesoscale variability in the Kuroshio Extension Region : 4th Internatiional Workshop on Modelliing the Ocean, Yokohama, Japan, 2012
37. 仁科　慧, 淡路敏之, 石川洋一 : 中規模変動の再現性向上に対する Argo による水温・塩分観測値と中層流速推定値の同時同化の有効性 : 日本海洋学会秋季大会, 静岡, 2012
38. 鵜沼　昂, 竹見哲也 : 高分解能計算による 2012 年 5 月 6 日につくば市付近で発生した竜巻の再現実験 : 日本流体力学会 2012 年度年会拡張要旨集, USB, 15, pp.1 – 3, 2012
39. 鵜沼　昂, 竹見哲也 : 2012 年 5 月 6 日につくば市付近で発生した竜巻の領域気象モデルによる再現実験 : 平成 24 年度京都大学防災研究所研究発表講演会講演要旨 C03, pp.1 – 1, 2013
40. Y. Miyake, H. Usui, H. Kojima, H. Nakashima : Plasma particle simulations on stray photoelectron current flows around a spacecraft : Journal of Geophysical Research, Vol.117, pp. A09210:1 – 13, 2012
41. 石井翔大, 内山雄介, 宮澤泰正 : 黒潮続流フロント周辺におけるサブメソスケール渦の発生機構 : 2013 年度日本海洋学会春季大会・講演要旨集, 2013
42. 甲斐田秀樹, 内山雄介, J.C. McWilliams : 超高解像度 3 次元海洋モデルによる砕波帯 - 陸棚相互作用の解析 : 2013 年度日本海洋学会春季大会・講演要旨集, 2013
43. 栗山貴生, 内山雄介, 宮澤泰正 : 流路変動に伴う黒潮系水塊の瀬戸内海への波及について : 2013 年度日本海洋学会春季大会・講演要旨集, 2013
44. Uchiyama, Y., Ishii, T., Tsumune, D. & Miyazawa, Y : Coastal dispersal of radionuclides released from the Fukushima Nuclear Power Plant : AGU Fall Meeting 2012, San Francisco, CA, USA, 2012
45. Ishii, S., Uchiyama, Y. & Miyazawa, Y. : Submesoscale Frontal Dynamics in the Kuroshio Extension Jet : AGU Fall Meeting 2012, San Francisco, CA, USA, 2012
46. Kuriyama, T., Uchiyama, Y. & Miyazawa, Y. : Impact of the Kurishio paths on oceanic and estuarine circulations in and around Seto Inland Sea, Japan : AGU Fall Meeting 2012, San Francisco, CA, USA, 2012
47. 宮地哲朗, 榎本　剛, 太田洋一郎, 三好建正, Hann-Ming Henry Juang : NCEP-GFS を用いた Atmospheric River の予報実験 : 研究集会「週間及び 1 か月予報における顕著現象の予測可能性」, pp.76 – 80, 2012
48. Kei Nishina,Yoichi Ishikawa, Toshiyuki Awaji : Simultaneous assimilation of surface drifter data, satellite and in-situ observations for improved estimates of meso-scale variability in the Kuroshio Extension Region :

Journal of Oceanography, Vol.69, No.2, pp.175 – 190, 2013

49. 鹿倉洋介, 深畑幸俊, 平原和朗:プレート運動と地震発生に伴う西南日本内陸活断層の長期的な破壊関数の変化:地球惑星科学連合 2012 年大会, No.SSS38-11, 2012
50. 鹿倉洋介, 深畑幸俊, 平原和朗:昭和東南海・南海地震後のプレート間固着分布を考慮した西南日本内陸活断層のクーロン破壊関数の長期変化:日本地震学会 2012 年秋季大会, No.P1-67, 2012

【4500　プラズマ科学】

51. Masafumi Shoji, Yoshiharu Omura & Lou-Chuang Lee : Multidimensional Nonlinear Mirror-mode Structures in the Earth ' s Magnetosheath : Journal of Geophysical Research, Vol.117, pp.A08208 - A08208, 2012
52. Masafumi Shoji , Yoshiharu Omura : Precipitation of Highly Energetic Protons by Helium Branch Electromagnetic Ion Cyclotron Triggered Emissions : Journal of Geophysical Research, Vol.117, pp.A12210 - A12210, 2012

【4600　基礎化学】

53. A. J. Page, C.-P. Chou, B. Q. Pham, H. Witek, S. Irle & K. Morokuma : Quantum Chemical Investigation of Epoxide and Ether Groups in Graphene Oxide and Their Vibrational Spectra : Phys. Chem. Chem. Phys., Vol.15, pp. 3725 – 3735, 2013
54. L. Ding, L. W. Chung, K. Morokuma : Reaction Mechanism of Photo-induced Decarboxylation of the Photoactivatable Green Fluorescent Protein: An ONIOM(QM:MM) Study : J. Phys. Chem. B, Vol.117, pp.1075 – 1078, 2013
55. A. J. Page, T. Isomoto, J. Knaup, S. Irle & K. Morokuma : Effects of Molecular Dynamics Thermostats on Descriptions of Chemical Non-Equilibrium : J. Chem. Theo. Comp, Vol. 8, pp.4019 – 4028, 2012
56. J. Kim, A. J. Page, S. Irle & K. Morokuma : The Dynamics of Local Chirality during SWCNT Growth: Armchair versus Zigzag Nanotubes : J. Am. Chem. Soc, Vol.134, pp. 9311 – 9319, 2012
57. M. A. Addicoat, A. J. Page, Z. E. Brain, L. Flack, K. Morokuma & S. Irle : Optimization of a Genetic Algorithm for the Functionalization of Fullerenes : J. Chem. Theo. Comp, Vol.8, pp.1841 – 1851, 2012
58. T. Kawatsu , J. Hasegawa : Sequentially Coupled Hole-Electron Transfer Pathways for Bridge-Mediated Triplet Excitation Energy Transfer : J. Phys. Chem. C, Vol.116, No.44, pp.23252 – 23256, 2012
59. J. Hasegawa, K. J. Fujimoto & T. Kawatsu : A Configuration Interaction Picture for a Molecular Environment Using Localized Molecular Orbitals : The Excited States of Retinal Proteins: J. Chem. Theo. Comp., Vol.8, No.11, pp.4452 – 4461, 2012
60. T. Kawatsu, K. Matsuda & J. Hasegawa : Singlet Excitation Energy Transfer Mediated by Local Exciton Bridges : J. Phys. Chem. C, Vol.116, No.26, pp.13865 – 13876, 2012
61. T. Kawatsu , J. Hasegawa : Excitation Energy Transfer in GFP-X-CFP Model Peptides (X=amino acids): direct vs. through-bridge energy transfers : Intern. J. Quantum. Chem, Vol.113, No.4, pp.563 – 568, 2013
62. J. Hasegawa , K. Matsuda : Theoretical study of the excited states and the redox potentials of unusually distorted β -trifluoromethylporphycene : Theor. Chem. Acc., Vol.130, No.2-3, pp.175 – 185, 2011
63. T. Kawatsu, K. Matsuda & J. Hasegawa : Bridge-Mediated Excitation Energy Transfer Pathways through Protein Media: a Slater Determinant-Based Electronic Coupling Calculation Combined with Localized Molecular Orbitals : J. Phys. Chem. A, Vol.115, No.39, pp.10814-10822, 2011
64. Y. Kitagawa, K. Matsuda & J. Hasegawa : Theoretical Study of the Excited States of the Photosynthetic Reaction Center in Photosystem II: Electronic Structure,

Interactions, and Their Origin : Biophys. Chem., Vol.159, No.2-3, pp.227 – 236, 2012
65. J. Hasegawa, T. Kawatsu, K. Toyoya & K. Matsuda : Chemical-intuition based LMO transformation simplifies excited-state wave functions of peptides : Chem. Phys. Letters, Vol.508, No.1-3, pp.171 – 176, 2011
66. Yasuhito Karino , Nobuyuki Matubayasi : Interaction-component analysis of the urea effect on amino acid analogs : Phys.Chem. Chem. Phys., Vol.15, No.12, pp.4377 – 4391, 2013
67. Tomonori Kawakami, Isamu Shigemoto & Nobuyuki Matubayasi : Free-energy analysis of water affinity in polymer studied by atomistic molecular simulation combined with the theory of solutions in the energy representation : J. Chem. Phys., Vol.137, No. 23, pp.234903-1 - 234903-9, 2012
68. Kazuhiro Takemura, Hao Guo, Shun Sakuraba, Nobuyuki Matubayasi & Akio Kitao : Evaluation of protein-protein docking model structures using all-atom molecular dynamics simulations combined with the solution theory in the energy representation : J. Chem. Phys., Vol.137, No.21, pp.215105-1 - 215105-10, 2012
69. Hideaki Takahashi, Atsushi Omi, Akihiro Morita & Nobuyuki Matubayasi : Simple and exact approach to the electronic polarization effect on the solvation free energy: Formulation for quantum-mechanical/ molecularmechanical system and its applications to aqueous solutions : J. Chem. Phys., Vol.136, No.21, pp.214503-1 - 214503-12, 2012
70. Munetaka Takeuchi, Nobuyuki Matubayasi, Yasuo Kameda, Babak Minofar, Shin-ichi Ishiguro, & Yasuhiro Umebayashi : Free-Energy and Structural Analysis of Ion Solvation and Contact Ion-Pair Formation of Li+ with BF4 − and PF6 − in Water and Carbonate Solvents : J. Phys. Chem B, Vol.116, No.22, pp.6476 – 6487, 2012
71. Yoshino, J., Nakamura, Y., Kunitomo, S., Hayashi, N. & Higuchi, H. : Synthesis of tris(4-amino-2,6-dimethylphenyl)borane and facile extension of its pi-conjugated system by utilizing the reactivity of the amino groups : Tetrahedron Lett., in press , 2013
72. Kano, N., Furuta, A., Kambe, T., Yoshino, J., Shibata, Y., Kawashima, T., Mizorogi, N. & Nagase, S. : 2,2'-Diborylazobenzenes with double N-B coordination: control of fluorescent properties by substituents and redox reactions : Eur. J. Inorg. Chem., pp.1584 – 1587, 2012
73. 吉野惇郎, 中村優里, 國友静香, 林　直人, 樋口弘行 : トリ(p-アミノフェニル)ボラン誘導体の合成と性質：日本化学会近畿支部・高分子学会北陸支部合同福井大会(平成 24 年度北陸地区講演会と研究発表会), 2012
74. 吉野惇郎, 中村優里, 國友静香, 林　直人, 樋口弘行 : トリ(p-アミノフェニル)ボラン誘導体の合成, 構造, および性質：日本化学会第 93 春季年会, 2013

【5000　機械工学】

75. Naoto Yanagawa, Tetsuaki Takeda, Shumpei Funatani : Numerical Analysis of Control of Natural Circulation by Injection of Helium Gas : 6th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology HTR2012, pp.1 – 5, 2012
76. 柳川直澄, 武田哲明, 舩谷俊平, 野村真司 : He ガスを用いた自然循環流の制御に関する数値解析：日本原子力学会関東・甲越支部第１１回若手研究者発表討論会: pp.8 – 9, 2012
77. 上田　桂, 西川雅章, 北條正樹, 武田一朗 : 繊維よれを含む繊維強化複合材料の圧縮強度に関する座屈分岐解析：第４回日本複合材料合同会議講演論文, pp.(1A-05)1 - (1A-05)2, 2013
78. 加藤幹, 西川雅章, 田渕雄一郎, 北條正樹 : PEFC 電極マイクロポーラス層用薄膜構造体の細孔構造による押込み変形への影響の評価：電気化学会・第 53 回電池討論会講演論文集, pp.363 – 363, 2012
79. 津村祐介, 新玉重貴, 西川雅章, 北條正樹 : CFRP 積層板初期破壊に及ぼすボイドの影響の

評価：日本機械学会・第 20 回機械材料・材料加工技術講演会講演論文集, pp.(614)1 - (614)6, 2012
80. 津村祐介, 新玉重貴, 西川雅章, 北條正樹 : 画像解析による繊維位置探索を用いた CFRP90° 層内部のひずみ定量化：第 37 回複合材料シンポジウム講演論文集, pp.(A-19)1 - (A-19)2, 2012
81. 後藤　聡, 西川雅章, 北條正樹 :マイクロボンド法による炭素繊維への熱硬化性樹脂の接着・硬化過程の観察：第 37 回複合材料シンポジウム講演論文集, pp.(A-28)1 - (A-28)2, 2012
82. 松田慎平, 西川雅章, 北條正樹：高分子複合材料の緩和時間の温度依存性解析：日本機械学会 M&M2012 材料力学カンファレンス講演論文集, pp.(OS0902)1 - (OS0902)3, 2012
83. 上田　桂, 西川雅章, 北條正樹, 武田一朗：繊維未含浸部を有する複合材料の圧縮強度に関する有限要素解析：第 54 回構造強度に関する講演会講演論文集, pp.288 – 290, 2012
84. Masaaki NISHIKAWA, Masaki HOJO & Satoshi GOTO : Finite Element Simulation for Curing and Adhesion Process of Epoxy Resin to Carbon Fiber : Proc. of International Conference on Composite Interfaces (Interface 21), pp.(OR41)1 - (OR41)4, 2012
85. 藤井勧人：二次元振動噴流の発振制御に関する数値解析：日本機械学会 2012 年度年次大会 DVD 論文集, 2012
86. 松田直樹, 琵琶志朗, 林高弘：材料非線形性の高感度測定のためのラム波モードの考察: 第20回超音波による非破壊評価シンポジウム講演論文集, pp.29 – 30, 2013
87. 藤原　忍, 辻　拓也, 田中敏嗣：高濃度粒子が存在する流れ場に壁面が与える影響について（粒子が移動を伴う場合）：混相流, Vol.26, pp.489 – 497, 2013
88. K. Higashida, Y. Okuyama, T. Tsuji & T. Tanaka : A numerical model for the motion of large object in gas-fluidized bed : Proceedings of 5th Asian Particle Technology Symposium, No.163, 2012
89. Z.A. Ali, H. Yada, T. Tsuji & T. Tanaka : Microscopic DEM-CFD Coupling Simulation of Spouted Bed : Proceedings of 5th Asian Particle Technology Symposium, No.078, 2012
90. S. Miyai, T. Katsuo, T. Tsuji, T. Takayama & T. Tanaka : DEM Modelling of the digging process of gravel: Influence of particle roundness : Discrete element modeling of particulate media, pp.141 – 148, 2012

【5100　電気電子工学】

91. Hiromitsu Awano, Hiroshi Tsutsui, Hiroyuki Ochi & Takashi Sato : Bayesian Estimation of Multi-Trap RTN Parameters using Markov Chain Monte Carlo Method : IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Sciences, Vol. E95-A, No.12, pp.2272 – 2283, 2012
92. Hiromitsu Awano, Hiroshi Tsutsui, Hiroyuki Ochi & Takashi Sato : Multi-Trap RTN Parameter Extraction Based on Bayesian Inference : International Symposium on Quality Electrical Design (ISQED) (Santa Clara,CA), 2013

【5200　土木工学】

93. 伊藤靖晃, 白土博通, 野澤剛二郎：等方性乱流場における構造基本断面の空気力の空間相関特性:日本流体力学会年会 2012, pp.229-1 - 229-2, 2012
94. 伊藤靖晃, 白土博通, 野澤剛二郎 : LES による正方形角柱の変動空気力の空間相関評価に関する検討: 数値流体力学シンポジウム, pp.E10-2-1 - E10-2-6, 2012
95. 伊藤靖晃, 白土博通, 野澤剛二郎 : LES による等方性乱流場における変動空気力の空間相関評価に関する検討：構造工学論文集, Vol.59A, pp.616 – 626, 2013
96. 鳥生大祐, 牛島　省：多相場モデルによる自由水面流中の砂面変形の数値解法：計算工学講演会論文集, Vol.17, No.E-1-1, 2012
97. 鳥生大祐, 牛島　省：多相場モデルを用いた多孔質体内の自然対流の３次元計算：土木学会論文集 B1(水工学), Vol.69, No.4, pp.I_613 - I_618, 2013
98. Kishida, K., Sawada, A., Yasuhara, H. & Hosoda, T. : Estimation of Fracture flow

considering the inhomogeneous structure of single rock fractures : Soils and Foundations, Vol.53, No.1, pp.105 – 116, 2013

99. 崔　瑛, 野々村政一, 井浦智美, 岸田　潔, 木村亮 : 小土被り土砂地山でのトンネル掘削における事前地山改良工の効果に関する解析的検討 : 土木学会論文集 F1（トンネル工学）特集号, Vol.68, No.3, pp.I_27 - I_37, 2012

100.藤岡　奨, 牛島　省 : 収束計算を伴う界面捕捉手法による３次元 PLIC のアルゴリズム : 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol.68, No.2, pp.I_207~I_216, 2012

101.山下　遼, 藤岡　奨, 牛島　省 : 自由水面流中の接触を伴う複雑形状物体運動の並列計算法 : 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol.68, No.2, pp.I_171~ I_178, 2012

102.藤岡　奨, 牛島　省 : 界面の平面近似によるフラックス評価を用いた VOF 関数移流計算 : 17 回計算工学講演会講演論文集, pp.E-2-3, 2012

103.山下　遼, 藤岡　奨, 牛島　省 : 流体との力学的連成を考慮した接触を伴う複雑形状物体運動の並列計算法 : 第 17 回計算工学講演会講演論文集, pp.B-4-3, 2012

104.中畑和之, 中　民矢, 飯田洋志, 石井　武, 松田吉人 : EMFIT を用いた電磁波の伝搬解析とアレイアンテナを用いた鉄筋の映像化シミュレーションへの応用 : コンクリート構造物の非破壊検査論文集, Vol.4, pp.253 – 262, 2012

105.中畑和之, 田中貴之 : GPU 計算を用いたイメージベース EFIT の高速化と超音波計測による解析妥当性の検証 : 土木学会論文集 A2(応用力学), Vol.68, No.2, pp.I227 - I236, 2012

106.K. Nakahata, K. Kimoto : Reconstruction of flaws in heterogeneous media using image-based FIT and time reversal approach: Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.6, No.6, pp.771 – 781, 2012

107.K. Nakahata, K. Terada, T. Kyoya, M. Tsukino & K. Ishii : Simulation of ultrasonic and electromagnetic wave propagation for nondestructive testing of concrete using image-based FIT : Journal of Computational Science and Technology, Vol.6, No.1, pp.28 – 37, 2012

108.Nurmalia, N. Nakamura, H. Ogi, M. Hirao & K. Nakahata : Mode conversion behavior of SH guided wave in a tapered plate : NDT & International, Vol.45, pp.156 – 161, 2012

【5300　建築学】

109.石川浩一郎、松下千裕 : 屋根型単層ラチスシェルの地震荷重伝達能力に限界づけられるトラスアーチ架構の動的挙動と保有耐力評価 : 日本建築学会構造系論文集, Vol.78, No.683, pp.101~110, 2013

【5400　材料工学】

110.Y. Hinuma, F. Oba, Y. Kumagai, & I. Tanaka : Ionization potentials of (112) and (11-2) facet surfaces of CuInSe2 and CuGaSe2 : Physical Review B, Vol.86, No.24, pp.245433-1-245433-7, 2012

111.M. Choi, F. Oba, Y. Kumagai, & I. Tanaka : Antiferrodistortive-like oxygen-octahedron rotation induced by the oxygen vacancy in cubic SrTiO3 : Advanced Materials, Vol.25, No.1, pp.86 – 90, 2013

112.R. Ishikawa, N. Shibata, F. Oba, T. Taniguchi, S. D. Findlay, I. Tanaka, & Y. Ikuhara : Functional complex point-defect structure in a huge-size-mismatch system : Physical Review Letters, Vol.110, No.6, pp.065504-1-065504-5, 2013

113.Mary Clare Sison Escano : Water co-adsorption and electric field effects on borohydride structures on Os(111) by first principles calculations : Journal of alloys and compounds, in press, 2013

114.大場史康, チェ・ミンソク, 熊谷　悠, 田中　功 : SrTiO3 における酸素空孔の特異な原子・電子構造 : 日本金属学会 2013 年春期(第 152 回)講演大会概要, pp.270 – 270, 2013

115.横山智康, 藤田達也, 林　博之, 大場史康, 田中　功 : 第一原理計算による Cu2O 基中間バンド型太陽電池の光吸収層の設計 : 日本金属学会 2013 年春期(第 152 回)講演大会概要, pp.271 – 271, 2013

【5500　プロセス工学】

116.山本卓也、高木洋平、伴　貴彦、岡野泰則、水口　尚 : 液膜内マランゴニ対流に及ぼすメニス

カス形状の影響に関する数値解析：第 44 回化学工学秋季大会, pp.N108 - N108, 2012
117.T. Yamamoto, Y. Takagi, T. Ban, Y. Okano, H. Minakuchi, & S. Dost : Numerical investigation for the effect of meniscus geometry on thermocapillary flow in a thin liquid film : 23rd International Symposium on Transport Phenomena, pp.43 – 43, 2012
118.山本卓也, 高木洋平, 伴　貴彦, 岡野泰則, 水口尚：リング状液膜内マランゴニ対流に及ぼすメニスカス形状の影響に関する数値解析：日本マイクログラビティ応用学会第 26 回学術講演会, pp.21A06 - 21A06, 2012
119.山本卓也, 高木洋平, 伴　貴彦, 岡野泰則, 水口尚：円形液膜内マランゴニ対流の三次元シミュレーション：第 26 回数値流体力学シンポジウム, pp.C04-1 - C04-1, 2012
120.山本卓也, 高木洋平, 岡野泰則:液膜上サーモキャピラリー流れ方向に及ぼす液膜形状の影響に関する数値解析：化学工学会第７８年会講演要旨集, pp.F102 - F102, 2013
121.T. Yamamoto: A three-dimensional simulation of thermocapillary flow in a circular thin liquid film under zero gravity : Proceedings of the 29th International Symposium on Space Technology and Science (ISTS-29), Vol.2013-s-84-e, 2013
122.T. Yamamoto, Y. Takagi, & Y. Okano : Three-dimensional simulation of thermocapillary flow in a circular thin concave and convex liquid film under micro-gravity : Proceedings of 8th International OpenFOAM Workshop, 2013
123.T. Yamamoto, Y. Takagi, Y. Okano, & S. Dost : Numerical investigation for the effect of the liquid film volume on thermocapillary flow direction in a thin circular liquid film : Physics of Fluids, Vol . 25, pp.082108 – 082108, 2013
124.山本卓也、高木洋平、岡野泰則：静止液膜形状の影響を考慮した円形液膜内温度差マランゴニ対流に関する数値解析：化学工学第４５回秋季大会要旨集, Vol.K119, 2013

【5600　総合工学】

125.建部勝利, 藤本　仁, 浜　孝之, 宅田 裕彦：移動平板上の水膜流へ衝突する複数棒状水噴流の流動特性：CAMP-ISIJ, pp.1047 – 1047, 2012
126.齊藤翔造, 吹場活佳, 丸　祐介, 室伏洋希：微小重力実験機の姿勢制御ジェットと超音速流の干渉に関する風洞実験：平成 24 年度宇宙航行の力学シンポジウム講演集, 2012

【5700　基礎生物学】

127.Yutaka Satou, Tadasu Shin-i, Yuji Kohara, Nori Satoh & Shota Chiba : A genomic overview of short genetic variations in a basal chordate, Ciona intestinalis : BMC Genomics, Vol.13, pp.208 – 208, 2012

【6800　薬学】

128.東　巧, 小林祐輔, 竹本佳司: β－ターンミミックを用いたアミノウレア触媒反応の機構解析：反応と合成のシンポシンポジウム, Vol.38, pp.208 – 209, 2012

【9999　その他】

129.Takahiro Murashima, Masatoshi Toda, & Toshihiro Kawakatsu : Multiscale simulation for soft matter: Application to wormlike micellar solution : AIP Conference Proceedings, Vol.1518, pp.436 – 439, 2012
130.Takahiro Murashima, Masatoshi Toda, and Toshihiro Kawakatsu : Multiscale Fluid Dynamics Simulation Applied to Micellar Solution : NIC Series, Vol.46, pp.187 – 192, 2013

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）	利用者番号
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	8
		追加単位	200,000 円/年			4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	−	8,000	8
	タイプA2	最小	240,000 円/年		準優先	8ノード((32コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16
		追加単位	120,000 円/年			4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	−	4,800	8
	タイプA3	最小	600,000 円/年		占有	8ノード((32コア、64GBメモリ)×8)	336	16,000	16
		追加単位	300,000 円/年			4ノード((32コア、64GBメモリ)×4)	−	8,000	8
	タイプB1	最小	250,000 円/年	B	優先	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	336	8,000	8
		追加単位	250,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	−	8,000	8
	タイプB2	最小	300,000 円/年		準優先	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16
		追加単位	150,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	−	4,800	8
	タイプB3	最小	750,000 円/年		占有	8ノード((16コア、64GBメモリ)×8)	336	16,000	16
		追加単位	375,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	−	8,000	8
	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	16
		追加単位	200,000 円/年			2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	−	4,000	8
	タイプC2	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	16
		追加単位	120,000 円/年			2ソケット((8コア、384GBメモリ)×2)	−	2,400	8
	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	8
		追加単位	250,000 円/年			2ノード((16コア、64GBメモリ + 1GPU)×2)	−	4,000	8
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	16
		追加単位	375,000 円/年			4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	−	8,000	8
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

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. 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。
   1） 大判プリンタサービス
   2） 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
3. 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。
4. 「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。
5. 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。
6. 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
	タイプG1	25,000 円/月	2ノード((16コア、64GBメモリ + 1GPU)×2)	4,000
専用クラスタ	—	37,500 円/月	4ノード((16コア、64GBメモリ)×4)	8,000

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

利用期間			3ヶ月	6ヶ月	9ヶ月
グループコース	タイプ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
	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
	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
	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
	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
	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
	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
	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 コース	—	最小	300,000 円	450,000 円	675,000 円
		追加単位	150,000 円	225,000 円	337,500 円

8. グループコース及び専用クラスタ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	72,000円／年	1仮想マシンにつき
ホームページサービス	6,000円／年	1ドメイン名につき
ストリーミングサービス	6,000円／年	1申請につき

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. 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 CPU、メモリ、ディスクを増量することができる。

区分	利用負担額	単位
CPU増量	18,000円／年	2コアにつき（最大8コアまで）
メモリ増量	18,000円／年	8GBにつき（最大64GBまで）
ディスク増量	18,000円／年	200GBにつき（最大1,000GBまで）

4. VM ホスティングサービスにおいて VMware を用いる場合は、下記の負担額を支払うことにより VMware の利用及び CPU、メモリ、ディスクを増量することができる。ただし、システム資源が限られているためサービスの提供を限定することがある。

区分	利用負担額	単位
VMware利用	72,000円／年	1仮想マシンにつき
CPU増量	36,000円／年	2コアにつき（最大8コアまで）
メモリ増量	36,000円／年	8GBにつき（最大64GBまで）
ディスク増量	18,000円／年	200GBにつき（最大1,000GBまで）

5. ホームページサービス及びストリーミ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公開スペースの上限を拡大することができる。

区分	利用負担額
公開スペース20GBプラン	3,000円／年
公開スペース50GBプラン	9,000円／年

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)	ディスク(GB)	利用者番号	利用負担額
A	8ノード(32コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16	960,000 円/年
	12ノード(32コア、64GBメモリ)×12)	336	14,400	24	1,440,000 円/年
	16ノード(32コア、64GBメモリ)×16)	336	19,200	32	1,920,000 円/年
B	8ノード(16コア、64GBメモリ)×8)	336	9,600	16	1,200,000 円/年
	12ノード(16コア、64GBメモリ)×12)	336	14,400	24	1,800,000 円/年
	16ノード(16コア、64GBメモリ)×16)	336	19,200	32	2,400,000 円/年

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合わせ先
  - 利用申請などに関する問合わせ先

  【共同利用掛】
  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

狭いながらも新居に住み始め４年目となりました。１年目に縁があって甲斐犬の雌をペットショップで見つけ飼い始めたのですが、翌年偶然同じ店で同犬種の雄を見つけ、我が家には２頭の甲斐犬が同居しています。甲斐犬は秋田犬紀州犬柴犬等と同じく日本古来から本土に住む日本犬です。日本犬は洋犬と対象的に保守的で飼い主以外の人間には慣れにくいとのことですが個体差もあるようです。身体の小さめな雌の方は警戒心が強く散歩のときもよく人に吠えますが、雄の方は対照的に人好きで初対面の人でも犬好きな人には馴れ馴れしく抱きついたりします。
先日犬の散歩中に公園で段ボール箱に捨てられた猫（スコティッシュ）を拾い飼うことになり、現在犬２頭猫１匹と同居の動物数が増えつつあります。

動物家族

2013 年も 12 月になり、2014 年が近づいています。来年はサッカーファンにとってのビッグイベントＷ杯がブラジルで行われます。先日、組み合わせ抽選会が行われ、コロンビア、ギリシャ、コートジボアールと同じ組になりました。早くも楽な組み合わせだとか、いやいや実際にはかなり厳しいぞといった様々な意見がメディアやネット上で取り交わされています。確かに個人的な第一印象は、グループリーグ突破の可能性は高いぞと楽観的なものでしたが、よくよく考えてみると欧州の中でギリシャはフィジカルも強く、守備も堅いため、どちらかといえば日本が苦手とするタイプであり、コートジボアール、コロンビアとも圧倒的なフィジカルとスピードを有する世界的選手が存在しており、とても楽観視はできないと思いなおした所です。日本も海外で活躍する選手を含め、技術とスタミナの両方に長けた選手を擁しており、他国からすると侮れない力をもっています。来年のＷ杯での日本の活躍、期待したいです。

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. 12, No. 2

2013 年　12 月　20 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）
　平石　拓　（副部会長）
　秋田　祐哉　　小西　満
　小林　寿　　斎藤　紀恵
　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）

目次

[巻頭言]
・Vol.12, No.2 号の発刊にあたって 1
岩下 武史
[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]
・色素増感太陽電池を指向した新奇ポルフィリン系色素の構造と電子構造の解明 2
梅山 有和
・後周期遷移金属錯体触媒を用いる置換アセチレンの重合機構の解析 4
Jesus Rodriguez Castanon、三田 文雄
・メニスカスを有する液膜内マランゴニ対流の流動特性 6
山本 卓也
・ローレンツ系の不安定周期軌道間のネットワーク構造 8
斉木 吉隆
・フラグメント分子軌道法を用いたタンパク質中電子移動の高精度経路解析法の開発 10
鬼頭(西岡) 宏任、安藤 耕司
・分子軌道計算を用いた水溶性ポリアセチレンの高次構造解析 12
寺田 佳世
・核融合プラズマにおける第一原理に基づいた乱流輸送シミュレーション 14
今寺 賢志
・実河川に繁茂する植生の揺動の数値解析 18
岡本 隆明
・流水中の自然石に働く流体力の評価 20
吉田 圭介、牛島 省、宮木 伸、竹内 章人
・水～土骨格連成有限変形問題を対象とした土構造物・地盤系の固有振動解析 22
山田 正太郎、野田 利弘
[プログラム高度化支援事業研究報告]
・コンクリート材料の物質拡散・非線形力学を連成した経年劣化シミュレータ 24
浅井 光輝
・GPUコンピューティングによるイメージベースFIT の効率化 28
中畑 和之
・人工島／埋立地等の耐震性評価を目的とした動的／静的水～土骨格連成有限変形解析コードの高度化 33
野田 利弘
[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]
・パーティクルフィルタを用いた分布型降雨流出シミュレーションの高度化と不確実性評価 36
Seong Jin NOH、立川 康人
[研究紹介]
・SIMD演算を考慮したfill-in戦略を用いたIC分解前処理 40
武村 直和、岩下 武史、中島 浩
[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 45
・センター利用による研究成果(平成24年度) 49
[資料]
・大型計算機システム利用負担金 別表 57
・サービス利用のための資料一覧 59
[編集後記]
・編集後記、奥付 60

Cover : Designed by TANI Takushi / T&T Design Lab. (December,2013)