

平成25年度北海道大学情報基盤センター共同研究成果報告書

1. 研究領域番号 A1
2. 研究課題名 計算科学フロンティア
3. 研究期間 平成25年 4月 1日 ~ 平成26年 3月31日
4. 研究代表者

氏名	所属機関・部局名	職名	備考
中村 知裕	北海道大学・低温科学研究所	講師	

5. 研究分担者

氏名	所属機関・部局名	職名	備考
大宮 学	北海道大学・情報基盤センター	教授	
遠藤 俊徳	北海道大学・情報科学研究科	教授	
山崎 和思	北海道大学・情報科学研究科	博士課程	
斉木 吉隆	一橋大学・大学院商学研究科	准教授	
米田 剛	北海道大学・大学院理学研究院	助教	
須田 潤	中京大学・工学部電気電子工学科	准教授	
高井 伸雄	北海道大学・大学院工学研究院	准教授	
重藤 迪子	北海道大学・大学院理学研究院	研究員	
西垣 肇	大分大学・教育福祉科学部	准教授	
阿部 祥子	水産総合研究センター・日本海区水産研究所	研究員	

6. 共同研究の成果

下欄には、当該研究期間内に実施した共同研究の成果について、その具体的内容、意義、重要性等を、共同研究申請書に記載した「研究目的」と「研究計画・方法」に照らし、800字~1,000字で、できるだけ分かりやすく記載願います。文章の他に、研究成果を端的に表す図表を貼り付けても構いません。なお、研究成果の論文・学会発表等を行った実績（発表等の予定を含む。）があれば、あわせて記載して下さい。

本共同研究により、本学情報基盤センターのスーパーコンピュータ HITACHI SR16000 をプラットフォームとする計算科学研究を進め、(1)地震工学、(2)フォノン物性、(3)流体数理、(4)生物物理学、(5)海洋力学において、下記の成果を得た。

(1)地震工学: 都市直下で発生する内陸浅発地震では、地震基盤上面で回折する地震波が励起される可能性があり、そのメカニズムを明らかにすることは強震動予測手法の高度化において重要である。本研究では、2010年に札幌市直下で発生した石狩地方中部の地震に対して、産業技術総合研究所に

(研究成果のつづき)

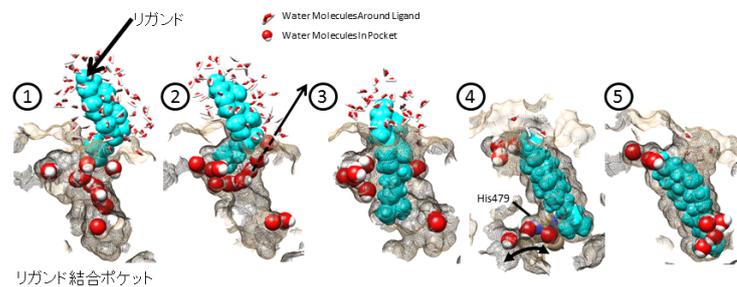
よる3次元地下構造モデルを用いて広帯域3次元差分シミュレーションを実施した。震源パラメータを変えた検討により、地震基盤回折波の励起効率を明らかにした。

(2) **フォノン物性**：ラマンレーザー用酸化物結晶の材料設計において、高利得特性を示す分子振動モードのフォノンスペクトル幅の狭帯域化現象を解明することが注目されている。本研究では灰重石構造結晶 (SrMoO_4 など) を対象として、第一原理等による大規模計算を行い、高利得特性を示す分子振動モードのフォノンスペクトル幅の狭帯域化現象とフォノンバンドギャップの関係を明らかにした。

(3) **流体数理**：流体乱流において渦管構造は重要な秩序構造である。数学的にはリーマン予想、ポアンカレ予想などと並んでミレニアム7大難問にも挙げられたナビエ・ストークス方程式（流体方程式）の解の存在と一意性とも深く関連している。本研究では乱流中で渦度が強い領域では渦度ベクトルの向きが揃う傾向があると推測し、それを確認するための計算方法の考案と予備計算を行った。

(4) **生物物理学**：ROR γ リガンド結合ポケットと生理的リガンドである 20α ヒドロキシコレステロールとの結合シミュレーションを行い以下の結果を得た：①リガンド結合は疎水的相互作用で惹起される②ポケットは当初リガンドより体積が小さかった。しかし、

水分子の排出とポケットの体積の増大で必要な体積を動的に確保した。③ポケットの開口部分はリガンド結合を阻害しなかった。以上、核内レセプターのリガンド認識機構を初めて示すことができたと考えている。



核内レセプターへのリガンド認識過程シミュレーション結果

(5) **海洋力学**：潮流や浮力フラックスにより形成される海底上のジェットとその不安定から生じる渦は、海洋における水塊形成や物質循環に重要な役割を果たしている。本研究では海底上ジェットについて調べて新しい不安定モードを見つけ、その線形段階における波数・成長率・位相速度といった特性やモードの選択条件、および非線形段階における振る舞いについて明らかにした。

論文・学会発表等

Miki U. Kobayashi and Yoshitaka Saiki, Manifold structures of unstable periodic orbits and the appearance of periodic windows in chaotic systems, *Physical Review E* 89, 022904:1-6, 2014.

Jun. Suda, Petr. G. Zverev, "Investigation of phonon band gap and Raman active phonons for SrMoO_4 Crystal", *Vibrational Spectroscopy* Vol. 71 pp.6-11 2014/3 (in press).

Jun. Suda, "Investigation of anharmonicity in rotational phonon mode for BaWO_4 Crystal" *Vibrational Spectroscopy* Vol. 72 pp. 33-36 2014/5 (in press).

重藤迪子・笹谷努・高井伸雄, 内陸浅発地震によって励起されたDiffracted P and S wave, 日本地球惑星科学連合2013年大会, SSS33-14, 幕張, 2013年5月.

重藤迪子・笹谷努・高井伸雄, Diffracted SH waveの励起効率の検討, 日本建築学会大会学術講演梗概集, 構造II, 21129, 札幌, 2013年8月.

Jun. Suda, "Investigation of the lowest frequency mode and heat capacity for scheelite PbWO_4 by Raman spectrometry and first-principles calculations", XXIV. International Conference on Raman Spectroscopy, Jena, Germany 2014/8 (to be submitted).

阿部祥子, 中村知裕, 三寺史夫. 海底上ジェットの不安定. 日本海洋学会 2014 年度春季大会, 2014 年 3 月 26-30 日, 東京.