



TOHOKU
UNIVERSITY

ISSN 0286-7419

東北大学
サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報

SENAC

Vol.42 No.2 2009-4

SENAC 2009-4



Supercomputing System
Cyberscience Center
Tohoku University
www.ss.isc.tohoku.ac.jp

大規模科学計算システム関連案内

<大規模科学計算システム関連業務は、サイバーサイエンスセンター本館内の情報部情報基盤課が担当しています。>

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/>

階	係・室名	電話番号(内線) e-mail	主なサービス内容	サービス時間
				月～金
一階	共同利用支援係 (受付)	022-795-3406(3406) FAX:022-795-6099 uketuke@isc.tohoku.ac.jp	各種申請書、講習会、利用相談、広報、センターへの質問や要望の受付等	8:30～17:15
	利用相談室	022-795-6153(6153) sodan05@isc.tohoku.ac.jp	計算機利用に関するプログラミング、ライブラリ、アプリケーション、統計解析、ネットワーク等の相談	14:00～16:00
	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧	8:30～21:00
	利用者入出力室	(3443)	大判プリンタ、DAT装置等の利用	8:30～21:00
三階	庶務係	022-795-3407(3407) syomu@isc.tohoku.ac.jp	庶務に関すること	8:30～17:15
	会計係	022-795-3405(3405) kaikai@isc.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請求に関すること	8:30～17:15
	共同研究支援係	022-795-6252(6252) rs-sec@isc.tohoku.ac.jp	共同研究、計算機システムに関すること	8:30～17:15
	共同利用支援係	022-795-6251(6251) uketuke@isc.tohoku.ac.jp	ライブラリ、アプリケーションに関すること	8:30～17:15
	ネットワーク係	022-795-6253(6253) net-sec@isc.tohoku.ac.jp	ネットワークに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095(6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC端末機(X端末)	8:30～21:00

() 内は東北大学内のみの内線電話番号です。青葉山・川内地区以外からは頭に 92 を加えます。

本誌の名前「SENAC」の由来

昭和33年に東北地区の最初の電子計算機として、東北大学電気通信研究所において完成されたパラメロン式計算機の名前で SENAC-1 (SENdai Automatic Computer-1) からとって命名された。

[研究成果]

NAREGI による広域ベクトル型スーパーコンピュータ連携

—ベクトルコンピューティングクラウドの実現に向けて—

江川隆輔[†], 大泉健治^{††}, 伊藤英一^{††}, 山形正明^{†††}, 神山典^{†††}, 金野浩伸^{†††},
東田学^{††††}, 大西健太郎^{††††}, 遠藤直弥^{††††}, 山崎潤一^{††††}, 関充男^{††††},
岡部公起[†], 小林広明[†]

[†]東北大学サイバーサイエンスセンター スーパーコンピューティング研究部

^{††}東北大学情報部情報基盤課

^{†††}日本電気株式会社 文教・科学ソリューション事業部

^{††††}大阪大学サイバーメディアセンター

^{†††††}NECシステムテクノロジー株式会社 第一公共システム事業部

1. はじめに

超高速コンピュータ網形成プロジェクト(National Research Grid Initiative : NAREGI)は, 世界標準に準拠した実運用に耐えうる品質のグリッド基盤ソフトを開発することを目的として 2003 年に開始された産学官連携による研究開発プロジェクトです[1]. 同プロジェクトにおいて精力的に開発が進められている NAREGI グリッドミドルウェアは, 広域に点在する研究開発拠点の大規模計算資源を密に連携することで, 各計算資源の効率的な利用だけではなく, これまで不可能であった大規模計算を実現可能な基盤として注目されています. また, ベクトル型スーパーコンピュータは, 流体計算, 構造解析などに代表される大規模科学技術計算を高い実効効率で処理することが可能であり, 最先端の研究開発や製品の設計開発における重要な演算基盤として, 広く利用されています.

本稿では, 将来のベクトル型計算基盤の一つの在り方として“ベクトルコンピューティングクラウド”の実現に向けた, 東北大学サイバーサイエンスセンターと大阪大学サイバーメディアセンターの取り組みについて述べます. この取り組みは, NAREGI プロジェクトの基盤ソフトウェアである NAREGI グリッドミドルウェアと両センターで運用されているベクトル型スーパーコンピュータ NEC SX シリーズの仮想化技術に基づき, 複数のベクトル型スーパーコンピュータシステムの効率的な利用とこれまで不可能であった超大規模ベクトルコンピューティング基盤の実現を目的としています.

2. ベクトルコンピューティングクラウド

本節では, ベクトルコンピューティングクラウド基盤の構想, 本取組みの基本構成要素である NAREGI グリッドミドルウェアに基づくシステム構成, ベクトルプロセッサの仮想化計算資源である GRIDVM for SX について説明します.

2.1 ベクトルコンピューティングクラウドの概要

現在, 国内, または世界に点在するベクトル型コンピュータを利用するには, 図 1 に示すように, ユーザは各ベクトルコンピュータサイトにアクセスし, コンパイル・実行という手順を踏むこととなります. しかし, 各ベクトルサイトはベクトル型スーパーコンピュータに対する高いニーズにより, 常に高い稼働率で運用されています[2]. この様な状況下で, 様々な異なる規模のジョブを効率よく実行可能なベクトルコンピューティング環境が強く求められています. また, 近年の高精度計算に対する高い要求により, 各サイトの計算資源を超えた超大規模計算実行環境への要求が年々高まっています. そこで, 我々はベクトルコンピューティングクラウド基盤を構築することで, これらの要求を満たすことができると考えています.

図2にベクトルコンピューティングクラウド基盤の概略図を示します。ベクトルコンピューティングクラウド基盤では、各ベクトルサイトの計算資源を仮想化することで、ユーザが複数のベクトルコンピュータシステムを一つの超大規模ベクトルスーパーコンピュータシステムとして利用可能なシングルサインオン環境を提供します。ユーザ・ジョブスケジューラは仮想化された膨大なベクトル計算資源の中から、これまでよりも柔軟、且つ効率的にジョブの規模に応じたベクトル計算資源を特定し、ジョブを投入・実行することが可能となります。これにより効率的なベクトルスーパーコンピュータシステムの運用が可能となり、ユーザは長いキューイング状態を回避することが期待できます。また、複数の大規模ベクトルスーパーコンピュータシステムを仮想化し、超大規模ベクトルスーパーコンピューティングシステムを構築することで、これまで不可能であった規模の計算が可能になります。本技術の拡張により、2012年に稼働が期待されている次世代スーパーコンピュータも仮想化されれば、ユーザがシングルサインオンであらゆる規模のベクトル型スーパーコンピューティングサービスを楽しむようになることが期待できます。

我々は、このベクトルコンピューティングクラウド基盤を確立するために、NAREGIグリッドミドルウェアに着目し、同ミドルウェアに基づくベクトルコンピューティングクラウド基盤の構築を目指します。次に、NAREGIグリッドミドルウェアを用いたベクトルコンピューティングクラウド基盤のシステム構成について述べます。



図1：従来の利用環境

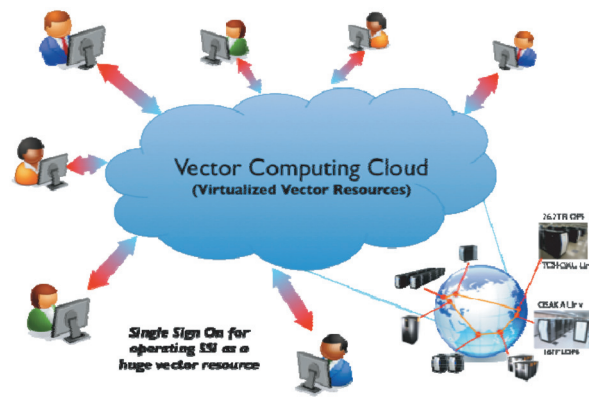


図2：ベクトルコンピューティングクラウド環境

2.2 システム構成

本稿で提案するNAREGIグリッドミドルウェア ver.1.1によるベクトルコンピューティングクラウド基盤のシステム構成を図3に示します。NAREGIグリッドミドルウェア(2009年4月現在 ver.1.1)、および関連情報は国立情報学研究所のwebサイトで公開されていますので、詳細は(<http://www.naregi.org/>)をご覧ください。このシステムは、各ベクトルコンピュータサイトがそれぞれ、ポータル(Portal)、ユーザ管理サーバ(User Management Server : UMS)、仮想化組織管理サービス(VO Management Service : VOMS)、スーパースケジューラ(Super Scheduler : SS)、情報サービス (Information Service : IS)、NAREGI用仮想SX計算資源管理ミドルウェア (GRIDVM for SX)から構成されます。各コンポーネントの主な機能は以下の通りです。

- Portal : 仮想化されたシステムのインターフェース群の提供
- UMS/ VOMS : ユーザ・サーバの認証・管理
- IS : グリッドを構成する計算資源の管理、各計算資源稼働状況の収集蓄積
- SS : 利用者ジョブに要求に応じた資源を探索し、スケジューリング
- GRIDVM for SX : 計算資源を仮想化による計算資源の同期制御およびメタコンピューティング環境の提供

各サイトのベクトルコンピュータ資源の連携は、それぞれのSSがリザーベーション・キャッシュ・サービス(Reservation Cache Service : RCS)を介して連携することで実現します。RCSは複数のサイトの計算資源の情報を常に監視し、各SSの要求を調停・管理します。これにより、ユーザはポータルサイトにログイン後、個人・サーバの認証を受け、ポータルサイトに用意されているワークフローツール、グリッド可視化システム等を用いて、複数の計算資源を一つの計算システムとして扱い、ジョブを投入することができます。投入されたジョブはSS, RCSに渡され、RCSによって仮想化されたGRIDVM for SXにスケジューリングされた後、実行されます。この間、各サイト・各サイト間のSSとISは定期的に同期をとることで、常に最新の資源情報を集積・蓄積していきます。

しかし、現状公開されているNAREGI ver.1.1が提供しているGridVMはベクトル型スーパーコンピュータであるNEC SXは対応していません。ベクトルコンピューティングクラウド基盤を実現するためには、NAREGI ver.1.1で提供されているGridVMをNEC SX用に移植する必要があります。

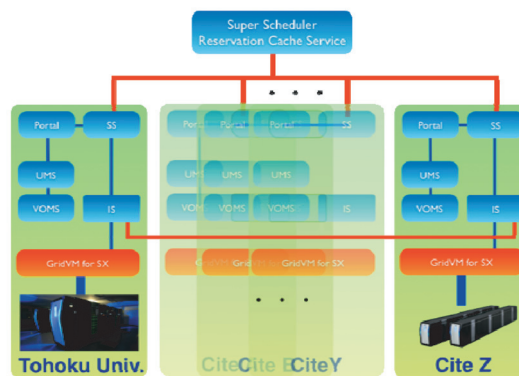


図3：ベクトルコンピューティングクラウドシステム概念図

2.3 GRIDVM for SX

GRIDVM for SXは、NAREGI ver. 1.1のGridVMをベクトル型スーパーコンピュータシステム(NEC SX)上で利用可能にし、また本センターのスーパーコンピュータシステム固有の運用性向上と機能強化を目的に開発されました。開発にあたっては、NAREGI ver.1.1が提供している機能のうち、ジョブ管理機能、情報プロバイダ機能、資源利用量制限機能をSX用に移植するとともに、当センターの大規模科学計算システム固有の機能強化として、ローカルジョブとGRIDジョブの共存の強化、NEC SX固有のMPIのサポートを実現しました。次に、各機能の特徴を説明します。

ジョブ管理機能では、当センターの大規模科学計算システムのローカルスケジューラであるNEC製NQSIIとその拡張モジュールであるJobManipulatorを用いて、資源予約を行う予約ジョブと資源予約を行わない非予約ジョブをサポートし、その混在を可能にしています。情報プロバイダ機能では、NEC SXの各種ハード・ソフトウェア情報、グリッド環境で利用可能なローカルスケジューラのキュー情報、ジョブのステータス情報をNAREGIグリッドミドルウェアに登録することができます。また、グリッド環境にある各ベクトルサイトにおいて、システム管理者が指定したポリシーに基づき、ジョブが利用する資源量を監視し、且つ必要なジョブ制御を行う機能を実装しています。これらの機能をNAREGI ver.1.1のインターフェースに基づいて実現できるように移植を行いました。次に、当センター運営を考慮した固有の強化機能として、NAREGI ver.1.1ではサポートされていなかったローカルジョブとGRID予約ジョブの共存を、ジョブ毎に資源を分割すること無く可能にしています。また、NAREGI ver.1.1におけるMPI実行は、GridMPIを使用したものに限定されています。これをNAREGI ver.1.1のJSDL仕様を変更することなく、MPI/SXによるMPI非予約ジョブの実行を可能にしています。

これらの移植・新機能開発により、GRIDVM for SX では、通常の運用と NAREGI に基づくグリッド運用の共存を可能にし、効率的なシステム運用を実現します。次章では実際のアプリケーションを用いた NAREGI 環境と GRIDVM for SX の動作確認を行います。

3. 評価実験

我々が提案するベクトルコンピューティングクラウド基盤の実現可能性の確認と今回開発した GRIDVM for SX の動作検証と評価を目的として、当センターの SX-9 システムと大阪大学サイバーメディアセンターの SX-9 システムを用いて実証実験を行いました。今回評価に用いたシステム構成を図 4 に示します。今回の評価では各センターの SX-9 システム 1 ノード (16CPU) に、NAREGI ver.1.1 と GRIDVM for SX を用いた環境を構築しました。東北大学・大阪大学の両センター間は CSI グリッド網によって結合されています。RCS は大阪大学に配備し、東北大学のポータルからログインし、東北大学、大阪大学、双方へジョブの投入を行うことで動作検証を実施致しました。以下に操作の流れに沿って、動作を確認していきます。

はじめに当センターで立ち上げた、図 5 に示すポータルサイトにログインします。WFT(Work Flow Tool)を選択すると、図 6 に示す WFT ウィンドウのユーザディレクトリに、今回の評価で用いる評価プログラム用の Work Flow アイコンを確認することができます。本稿における評価では実際に東北大学サイバーサイエンスセンターで実行されている SMP16 並列のプログラム (xxx-01, xxx-06, xxx-01-s)と MPI16 並列のプログラム (xxx-10) を用います。"xxx"は"SX9"が東北大学、"CMC"が大阪大学での実行のために用意した Work Flow アイコンを示しています。

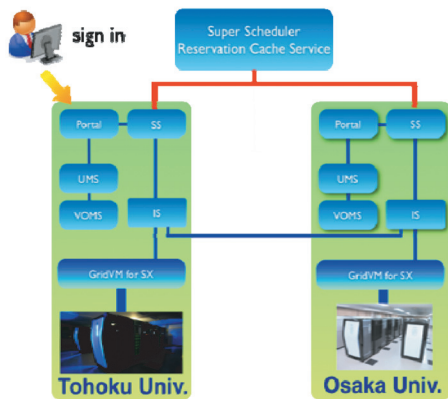


図 4 : 評価システム

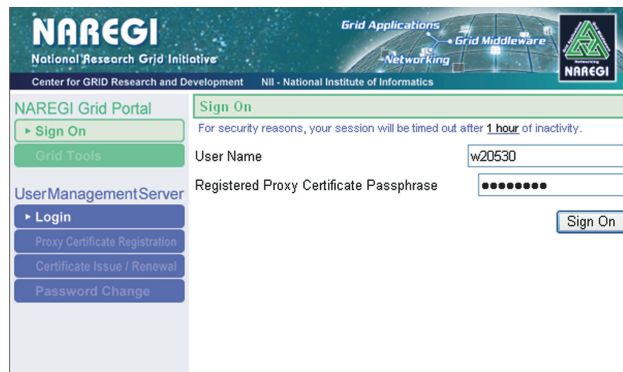


図 5 portal ログイン画面

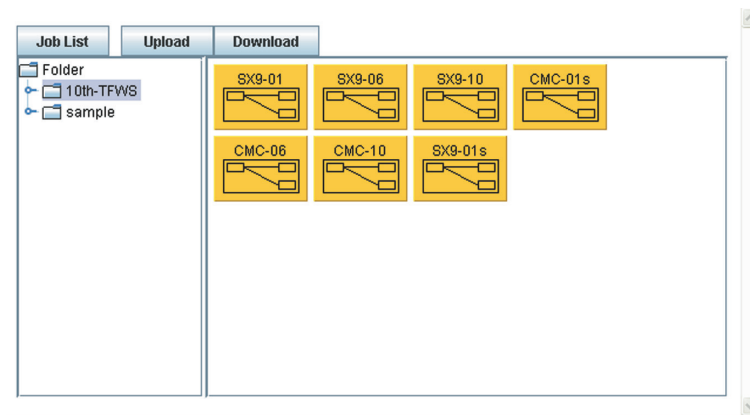


図 6 Work Flow Tool ウィンドウ

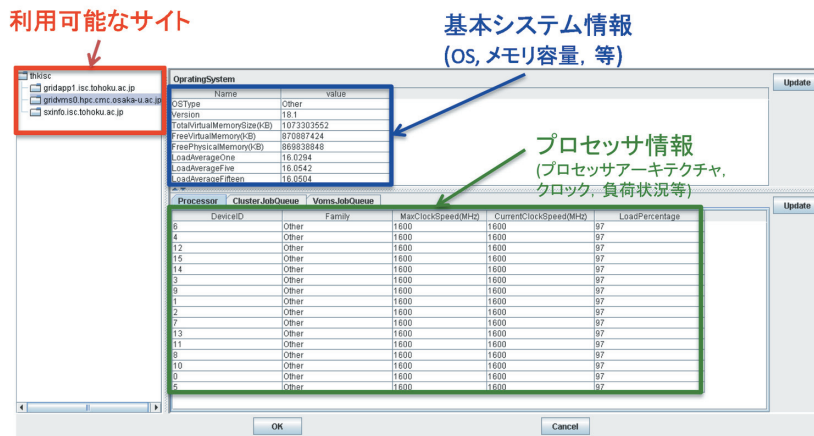


図 7: サイト情報の確認

各 Work Flow アイコンを開き、そのプロパティを確認することで図 7 に示す様に、利用できるサイト、各サイトのシステム基本情報、稼働状況を確認することが可能であり、ユーザ・スケジューラは適切なサイトでジョブを実行することが可能になります。図 7 の赤い箇所に着目すると東北大学と大阪大学の計算資源が利用できることが確認できます。また、青い箇所では大阪大学サイバーメディアセンターの SX-9 システム 1 ノード分の基本情報、緑の箇所では 1 ノードを構成する 16 個の CPU の負荷状況をそれぞれ確認することができます。このとき、大阪大学の SX-9 ノードの全 CPU が 1.6GHz(スカラ部)、ピーク性能に対して 97% の負荷で稼働しています。次に WFT から、実行する Work Flow アイコンを選択し、ジョブを実行すると図 8, 9 に示す様に各ジョブのステータスを確認することができます。このとき、大阪大学の計算資源が高負荷状態であるため、東北大学の SX-9 へジョブの投入を行いました。図 8 はジョブを実行中の状態を示し、図 9 はジョブが完了した状態を示しています。

本評価では、東北大学のポータルにログインし、先に述べた 3 つの SMP, MPI 16 並列全てのプログラムを当センター、大阪大学サイバーメディアセンターで実行し、今回構築した環境で正常に動作することを確認しました。今回の評価ではノード内の評価だけではありますが、シングルサインオンで、複数サイトの SX-9 ベクトルスーパーコンピュータを利用、ノード内の SMP, MPI 並列プログラムの実行が可能であることを確認しました。



図 8 ジョブステータス(実行状態)



図 9 ジョブステータス (終了状態)

4. おわりに

本稿では、ベクトルコンピューティングクラウド基盤構築の第一歩として、東北大学、大阪大学の広域ベクトル型スーパーコンピュータ連携について述べました。NAREGI グリッドミドルウェアによるグリッド環境の構築と GRIDVM for SX の開発により、両センターの計算資源を仮想化し、シングルサインオンで双方の計算資源の利用が可能であることを示しました。今後は、詳細な性能評価、ノード間を跨ぐ超大規模並列処理の評価、および多数のベクトルコンピュータを有する組織との連携により、ベクトルコンピューティングクラウド基盤の構築に取り組んで行く予定です。併せて、portal に実行可能なジョブクラスのみを表示することで、ユーザが物理的に各サイトの計算資源を意識することなく、複数の計算資源を効率的に利用できる計算環境の開発を行いたいと考えております。

また、サイバーサイエンスセンター、スーパーコンピューティング研究部では、2012 年度に稼働が予定されている理化学研究所の次世代スーパーコンピュータにおける効率的な大規模ベクトル演算実行、スカラ・ベクトル混在の大規模演算実行の要素技術の確立と言う視点に於いても、全国共同利用情報基盤センター群（7 センター、国立情報学研究所、筑波大学、東京工業大学）における本格的なグリッド環境構築[3]と併せて本研究を推進して行く予定です。

謝辞

本プロジェクトは、平成 20 年度国立情報学研究所 CSI 委託事業として行われました。また、本稿を執筆するにあたり多くの方々にご協力ご支援を賜りました。国立情報学研究所 リサーチグリッド研究開発センター合田憲人教授、同 GOC グループ川井優様には NAREGI 環境構築に際して、多大なるご協力を頂きました。ここに深く感謝申し上げます。

参考文献

- [1] 超高速コンピュータ網形成プロジェクト, <http://www.naregi.org/>.
- [2] 小林広明, "東北大学サイバーサイエンスセンター～新大規模科学計算システム SX-9 全国共同利用施設としての役割～," SX-9 導入披露&SENAC50 周年記念式典・講演会資料集, pp.21-35, 2008 年 11 月.
- [3] 小林泰三, "基盤センターにおけるグリッド連携," 大阪大学スーパーコンピュータシンポジウム, 2008 年 10 月.

[研究成果]

非共有結合性配位部位を持つ 4-ヒドロキシプロリンアミドアルコールの不斉マイケル反応 および不斉アルドール反応の機構解明

— Gaussian 分子軌道法計算による遷移状態の探索 —

東北大学大学院理学研究科
甲 千寿子*・権 垠相

東北薬科大学
中野 博人・奥山 祐子・竹下 光弘

1. はじめに

近年、金属を含まない有機触媒が、金属廃棄物の環境や人体に及ぼす悪影響や、地球上の金属資源の枯渇という問題を回避できる環境調和型のため、注目を集めている。さらに、合成原料が天然から大量かつ安価に得られ、低コストでの実用化・工業化も期待できることも利点である。この有機分子触媒の代表として、L-プロリンが挙げられ、それを基盤としたアミノ酸誘導体が多数開発されている。プロリン誘導体は不斉アルドール反応や不斉マイケル反応に有効であり、他にもカルボニル α 炭素のアミノ化、アミノメチル化、ヒドロキシメチル化、アミノオキシ化などにも有効性を示すことが知られている[1]。これらの反応は、キラル中心の立体を制御しながら炭素-炭素結合を形成する有用な反応であり、様々な有用化合物合成の鍵反応として使用されているが、これら反応の両方に有効な有機分子触媒は殆ど報告されていない。

そこで、我々は、単一の反応だけではなく、複数の反応に有効性を示す不斉有機分子触媒の開発を計画した。例えば、4-ヒドロキシプロリンアミド型触媒 **2** はマイケル反応に有効であり、プロリン-2-アミドアルコール型触媒 **3** はアルドール反応に有効であることが、最近報告された[2], [3]。我々はこれらの触媒 **2**, **3** の要素であるプロリン環上の4位に水酸基と2位にアミドアルコール部位を併せ持つ4-ヒドロキシプロリンアミドアルコール **1** を合成することを立案した(図1)。触媒 **1** は、マイケル反応においては基質との配位に使用されていない側1位のアミドアルコール型非共有結合性配位部位が、分子内水素結合を形成し、不斉空間を制御するための立体制御因子として働き、一方、この側鎖はアルドール反応においては非共有結合性配

*連絡先 甲 千寿子(東北大学G-COEフェロー)

〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-07 東北大学大学院工学研究科化学・バイオ棟 106 号室
TEL/FAX:022-795-4132; Email:ckabuto@m.tains.tohoku.ac.jp

位部位としての機能にスイッチすることが示唆される(図2)。基質の性質によって有効な配位部位を使い分けることによって高いエナンチオ選択性を達成できることが期待され、このコンセプトは異なる他の反応へも拡張可能であると期待できる。

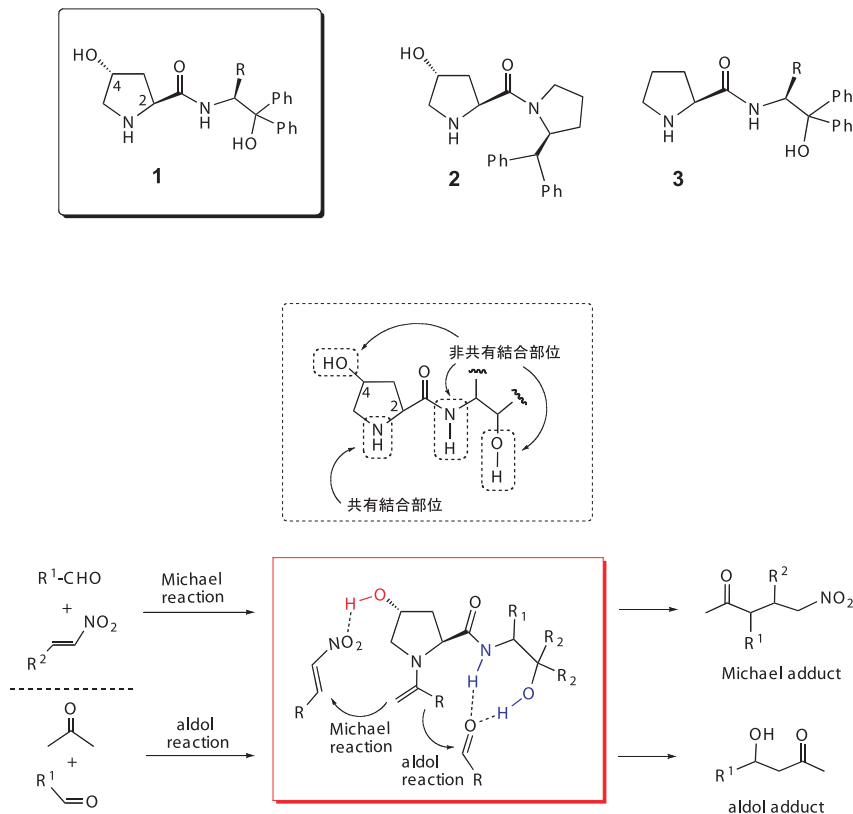


図2 触媒設計のコンセプト

設計した触媒 **1a** を用いてそれぞれの反応を試みた (図3)。最初に、**1a** を用いてブチルアルデヒドとニトロスチレンとの不斉マイケル反応を検討した。その結果、**1a** を 20 mol% 使用し反応を行ったところ、98% の化学収率と 98% ee の優れたエナンチオ選択性で目的の付加体 **4** を与えた。

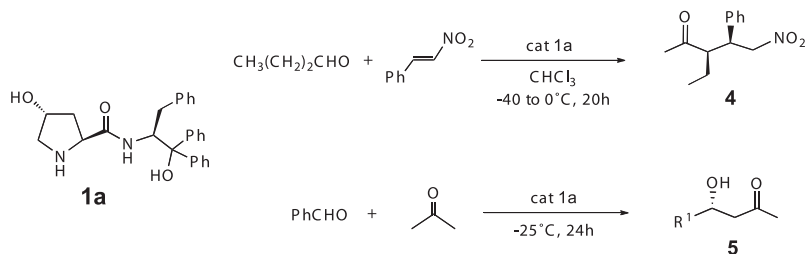


図3 有機分子触媒**1a**を用いる不斉マイケル反応と不斉アルドール反応

次に、同様に触媒 **1a** を用いてベンズアルデヒドとアセトンとの不斉アルドール反応を検討した。その結果、**1a** を 5 mol% 使用し反応を行ったところ、71% の化学収率と 99%*ee* のほぼ完全なエナンチオ選択性で目的の付加体 **5** を与えた。これらの結果より、4-ヒドロキシプロリンアミドアルコール **1a** が両方の反応に対して予想通り有効な不斉触媒活性を示すことが明らかとなった。

これらの反応機構を明らかにするために分子軌道法による量子化学計算を行った。類似の単一系触媒反応に対する同基底関数を用いた Gaussian DFT 計算は報告されている[2], [4]。これらの結果とも合わせて、複数の反応部位を持つ **1a** の触媒反応に対して、前述した我々の「触媒設計のコンセプト」と実験結果を理論的に証明するためにも本研究は学術的に意義のあることと考えた。

「金属を含まない有機分子触媒を用いた反応は、分子軌道法計算を適用する上でも非常に利点である」ということを、ここで記述しておきたい。

2. *ab initio* 分子軌道法による計算

すべての計算は、東北大学サイバーサイエンスセンターのGaussian (Revision B.04) パッケージソフトを利用し、B3LYP/6-31G(d) 基底関数を用いて、密度汎関数法 (DFT) により行った。

2.1 回転異性体(Conformer) の存在と安定構造の探索

不斉有機分子触媒、4-ヒドロキシプロリンアミドアルコール **1a** は、2つの反応活性部位をもつために多くの回転異性体が存在する。その優位構造の検索 (コンフォメーション解析) には半経験的計算方法を適用することにした。Spartan'06 [5]を用いて、回転可能な結合の角度を連続的に変化させ、そのエネルギープロファイルを算出した (図4)。この計算によって、**1a** の骨格構造は2つの結合の回転 (C3-C4とC5-C6) に依存すること、結合の回転によって2つの準安定な回転異性体が存在することが判明した。これらの安定な異性体には2つのタイプの分子内環状水素結合が存在することも分かった。ひとつは、N-H---O=C結合による5員環水素結合を形成するもの (1Aと1C)、もうひとつは、C=O---H-O結合による7員環水素結合形成 (1Bと1D) である。こうして、**1a** の骨格に対しては4種類の構造にしぼることができた。ただ、**1a** にはベンジル置換基が導入されているためにこの部位での回転異性体 (結合 C5-C7) も考慮に入れなければならない。その回転にも2つの安定な異性体が存在することが

判明した。このベンジル基は「不斉反応の選択性に立体的に関与している」とも考えられるために計算で外すことができなかつた。結局、触媒 **1a** に対して、 $2 \times 2 \times 2 = 8$ 個の回転異性体を考慮に入れなければならなかつた。いずれも Gaussian プログラムの DFT 計算を用いて構造の最適化を行い、以下の遷移状態の初期構造のモデル作製に利用した。

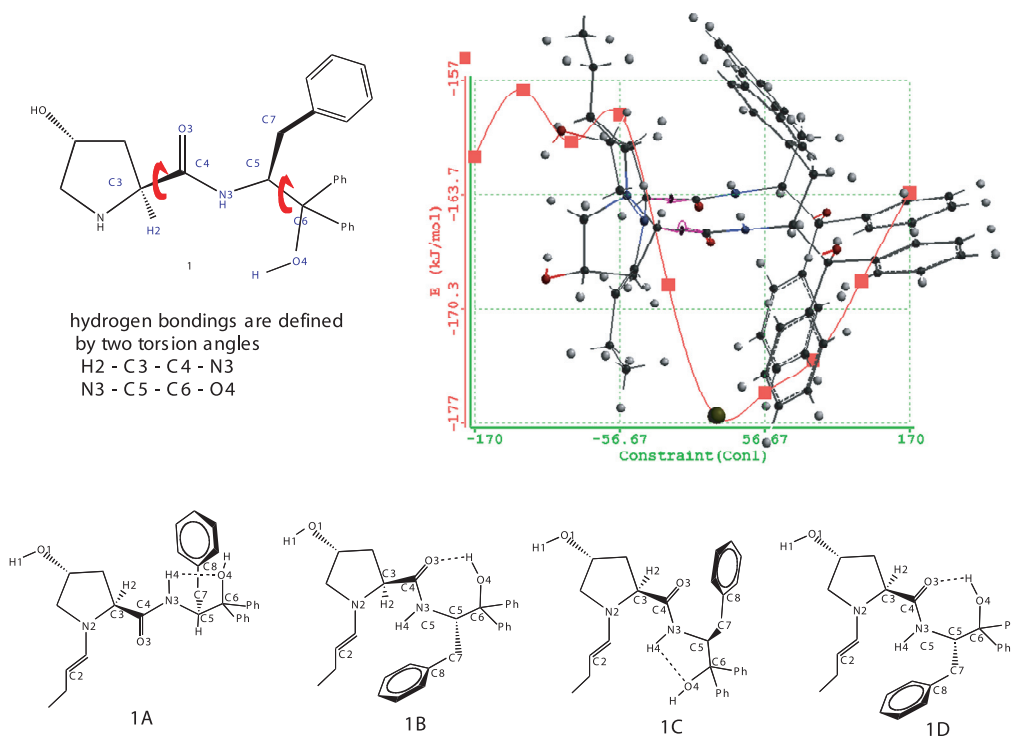


図4 回転異性体の探索とその安定構造

2.2 遷移状態 (Transition State) の初期構造決定

反応機構を解明するということは「真の遷移状態の構造」を決定することでもある。そのためには、まず、反応経路を考察しなければならない。例えば、触媒 **1a** とニトロスチレンのマイケル反応では以下の反応経路が考えられる。

- 原系 (R:Reactant) : 触媒 **1a** とニトロスチレンが独立に存在した状態 (2 分子反応の場合は各々の分子のエネルギーの和)
- 錯形成系 (IC:Initial Complex) : ニトロスチレンが近づき錯形成した状態* (エネルギー的には準安定構造)
 *この状態を反応系 (Reactant) と呼ぶこともある。

- ・ 遷移状態 (TS:Transition State) : 反応過程で極大のエネルギーをもつ状態
- ・ 生成系 (P:Product) : 反応により新たな分子が形成した状態
(反応生成物ではなく, 反応の最終段階の構造)

Gaussian プログラムには反応の反応系 (この場合は錯形成状態) と生成系の構造を入力して遷移状態構造を求める方法 (QST2またはQST3オプションを用いたSTQN法) がある。しかしながら, 2, 3の遷移状態に適用してみたが, 計算時間があまりにもかかるのでこの方法は断念した。次に, 前の回転異性体探索と同様に, Spartan'06プログラムを用いて反応部の結合距離を変化させ, そのポテンシャル曲線から遷移状態構造を求める (エネルギー極大) 簡易方法を適用してみた。そのままの構造から, B3LYP/6-31G(d) 基底関数での最適化を行うと失敗することが多かった。そこで, 構造の一部を固定(Freeze)して簡単に分子力場計算を用いて最適化を行った構造を初期座標とすると, かなり良好な結果が得られた。

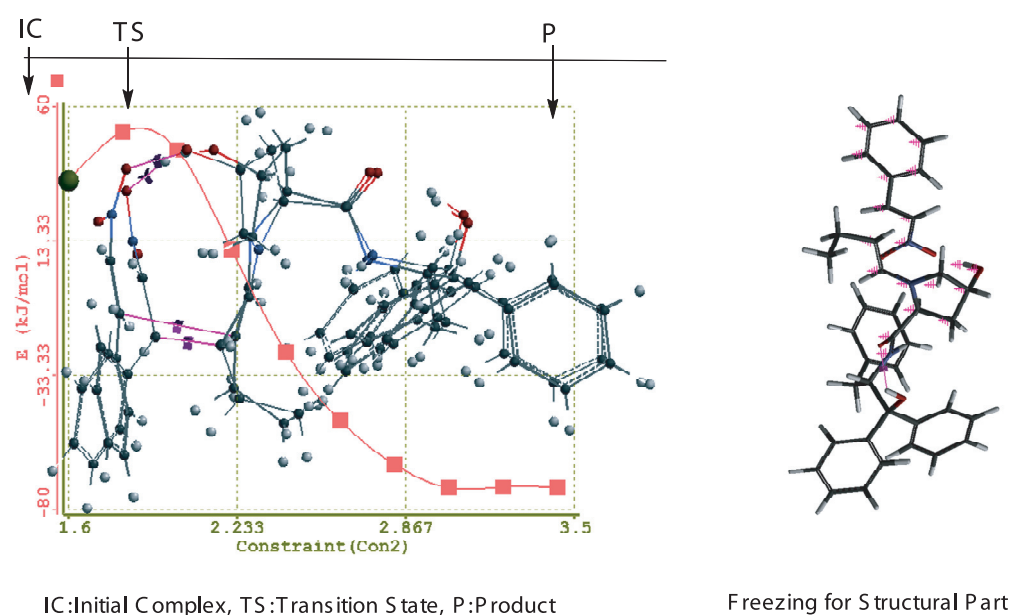


図5 Spartanプログラムによる遷移状態構造探索

2.3 遷移状態の確認と活性化エネルギーの算出

遷移状態の安定性を正確に評価するためには, 以下の過程での計算が必要である。

[手順1] 遷移状態構造を最適化する。

[手順2] 振動解析を行い、真の遷移状態であることを確認する。

振動解析 (Freq) の結果、虚の振動数 (imaginary frequency) が一つしかないこと、その振動のベクトルが反応座標の方向を向いていることが条件、それらを満たさないときは真の遷移状態ではない。

[手順3] IRC (極限的反応座標) 計算を行い、反応の詳細を解析する。

IRC = reverse および IRC = forward で計算し、初期錯形成構造 (Initial Complex) と生成系構造 (Product) が正しく得られることを確認する。

[手順4] IRCの計算で得られた反応の初期錯形成構造 (IC) を最適化する。

[手順5] 反応に関与するそれぞれの分子の構造を最適化する。

原系 (Reactant) のエネルギーは関与する分子のエネルギーの和である。

錯形成エネルギーは、初期錯形成構造 (IC) と原系のエネルギーの差である。

[手順6] 全てのエネルギーに対してゼロ点補正を行う。

振動解析の計算結果に出力される。

[手順7] 活性化エネルギーを算出する。

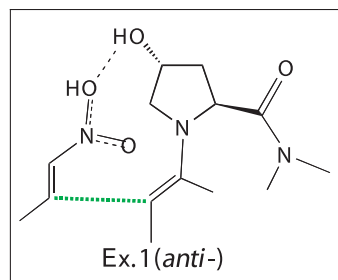
遷移状態 (TS) と初期錯形成構造 (IC) のエネルギーの差で表される。

最終的にはこの活性化エネルギーの比較から反応機構を考察する。

2.4 マイケル反応への応用

まず、**1a** とニトロスチレンのマイケル反応への計算の過程を示す。

類似反応 (Ex.1) に対する Gaussian DFT 計算結果を参考にすると、以下の2つの反応経路が可能であると予想できる [2]。



- ・ エナミン部が *anti*-配位の状態にある触媒 **1a** にニトロスチレンが *Si*-面から攻撃する場合、(*R,R*)-生成物を与える (以下の表、図では mic-TS-*anti* で表示)
- ・ エナミン部が *syn*-配位の状態にある触媒 **1a** にニトロスチレンが *Re*-面から攻撃する場合 (*S,S*)-生成物を与える (以下の表、図では mic-TS-*syn* で表示)

こうして、16通り (前述した *anti*, *syn* に対してそれぞれ8通り) の初期遷移構造に対して最適化を行った。結局、エネルギー的に不安定な mic-TS-*syn* の中には、遷移状態であることの条件を満たさない構造がいくつかあり、それらは除外した。

さらに、触媒 **1a** は2つの水酸基を有するため、ニトロスチレンがアミドアルコール部の水酸基(O4-H)と水素結合を作成した遷移状態も考えられる。*anti*-型および *sin*-型攻撃に対するいくつかのモデルを作製し最適化をおこなったが、条件を満たす構造はひとつだけであった (mic-TS5-*anti*)。そして、その活性化エネルギーも再安定の構造に比べてはるかに高く ($\Delta E_a = 5.30$ kcal/mol), この反応機構は否定することができた。すなわち、マイケル反応ではアルドール部位への配位は起こらないことが証明できた。計算結果を表1にまとめ、その平面構造と立体構造を図6に示した。

表 1 a : DFT-Calculation Results for the Michael reaction

	mic-TS1- <i>anti</i>	mic-TS2- <i>anti</i>	mic-TS1m- <i>anti</i>	mic-TS2m- <i>anti</i>
Transition State				
H1---O2 (Å)	1.840	1.894	1.901	1.879
N1---N2 (Å)	2.883	2.887	2.890	2.887
C1---C2 (Å)	2.054	2.052	2.047	2.037
C6-C5-C7-C8 (°)	-63 (<i>syn</i>)	158 (<i>anti</i>)	175 (<i>anti</i>)	-84 (<i>syn</i>)
N3-C5-C6-O4 (°)	-55 (NH---OH)	85 (CO---HO)	-62 (NH---OH)	87 (CO---HO)
H2-C3-C4-O3 (°)	-138 (<i>anti</i>)	155 (<i>anti</i>)	158 (<i>anti</i>)	-179 (<i>anti</i>)
Energy (hartrees)	-2012.246565	-2012.245252	-2012.243989	-2012.240030
Δ Energy (kcal/mol)	0.00	0.82	1.62	4.10
	mic-TS3- <i>anti</i>	mic-TS4- <i>anti</i>	mic-TS5- <i>anti</i>	
Transition State				
H1---O2 (Å)	1.758	1.758	1.834	
N1---N2 (Å)	2.917	2.913	3.205	
C1---C2 (Å)	1.992	1.978	2.101	
C6-C5-C7-C8 (°)	176 (<i>anti</i>)	178 (<i>anti</i>)	180 (<i>anti</i>)	
N3-C5-C6-O4 (°)	-61(NH---OH)	84 (CO---HO)	-75(H---O---H)	
H2-C3-C4-O3 (°)	48 (<i>syn</i>)	45 (<i>syn</i>)	40 (<i>syn</i>)	
Energy (hartrees)	-2012.238186	-2012.2369198	-2012.242655	
Δ Energy (kcal/mol)	5.26	6.05	2.45	

表 1 b : DFT-Calculation Results for the Michael reaction

	mic-TS1- <i>syn</i>	mic-TS2- <i>syn</i>	mic-TS1m- <i>syn</i>	mic-TS2m- <i>syn</i>	mic-TS3- <i>syn</i>
Transition State					
H1---O2 (Å)	1.860	1.889	1.862	1.905	1.863
N1---N2 (Å)	2.899	2.960	2.942	2.945	2.948
C1---C2 (Å)	2.054	2.017	2.053	2.010	2.028
C6-C5-C7-C8 (°)	-62 (<i>syn</i>)	-172 (<i>anti</i>)	-175 (<i>anti</i>)	-88 (<i>syn</i>)	177 (<i>anti</i>)
N3-C5-C6-O4 (°)	-50 (NH---OH)	86 (CO---HO)	-63 (NH---OH)	88 (CO---HO)	85 (CO---HO)
H2-C3-C4-O3 (°)	155 (<i>anti</i>)	-164 (<i>anti</i>)	-119 (<i>anti</i>)	-152 (<i>anti</i>)	-32 (<i>syn</i>)
Energy (hartrees)	-2012.237838	-2012.234831	-2012.236441	-2012.229234	-20.233177
Δ Energy (kcal/mol)	0.00	1.89	0.88	5.40	2.92

表 1 c : DFT-Calculation Results for the Michael reaction

	mic-TS1-anti	mic-TS2-anti	mic-TS1-syn	mic-TS2-syn	mic-TS5-anti
Transition State					
Energy (hartrees)	-2012.246565	-2012.245252	-2012.237838	-2012.23483	-2012.24265
Reactant					
Energy (hartrees)	-2012.250822	-2012.249320	-2012.249375	-2012.24798	-2012.25466
$\Delta E(\text{kcal/mol})$	0.00	0.94	0.0	0.87	
$\Delta E(\text{kcal/mol})$	0.00		0.91		-2.43
Initial Complex					
H1---O1 (Å)	1.986	1.949	2.065	2.056	1.934
NH---O=N (Å)	-	-	-	-	2.166
N1---N2 (Å)	3.075	3.076	3.257	3.270	3.651
C1---C2 (Å)	3.308	3.387	3.675	3.656	3.423
C6-C5-C7-C8 (°)	-62 (syn)	165 (anti)	-62 (syn)	178 (anti)	178 (anti)
H2-C3-C4-O3 (°)	-55 (NH---OH)	83 (CO---HO)	-55 (NH---OH)	86	34(none)
N3-C5-C6-O4 (°)	-161 (anti)	167 (anti)	-160 (anti)	-161 (anti)	-74 (syn)
Energy (hartrees)	-2012.263127	-2012.262424	-2012.258629	-2012.25715	-2012.26765
Complex	-7.72	-7.28	-5.81	-4.88	-8.15
Activation Energy	10.39	10.78	13.05	14.01	15.69
ΔE_a (kcal/mol)	0.00	0.39	2.66	3.62	5.30

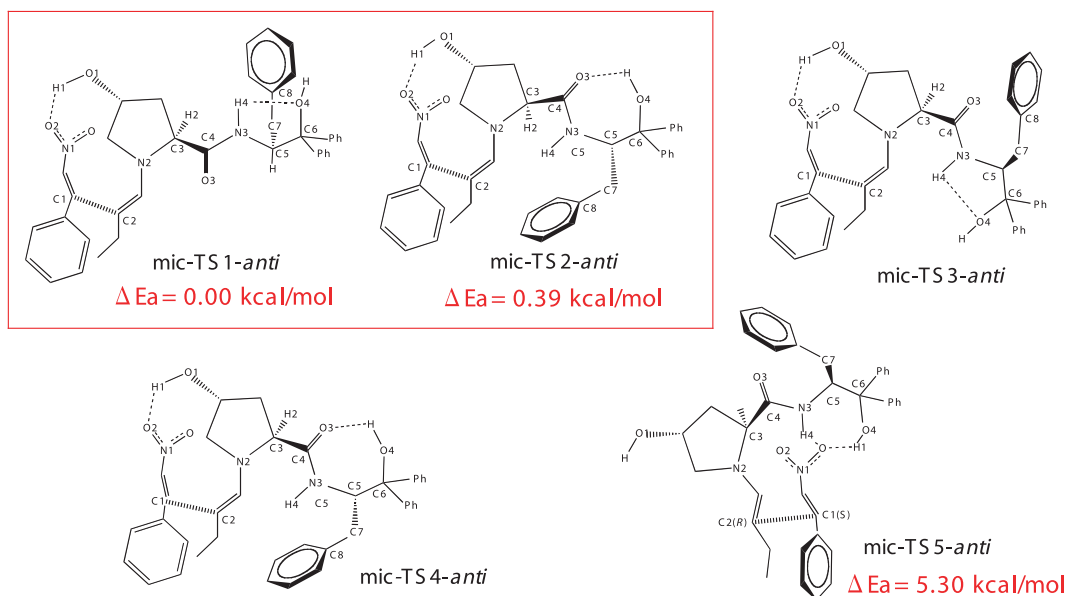
ベンジル基の回転による異性体は、mic-TS1m-antiのように表示

Transition State(TS): 遷移状態 ; Reactant(R): 原系 ; Initial Complex(IC): 錯形成状態

Energy: 全エネルギー ; 最適化構造の結合距離(Å), 結合回転角(deg)

Complex Stabilization: 錯形成による安定化エネルギー : (IC-R) のエネルギー差

Activation Energy: 反応の活性化エネルギー(Ea) : (TS-IC) のエネルギー差



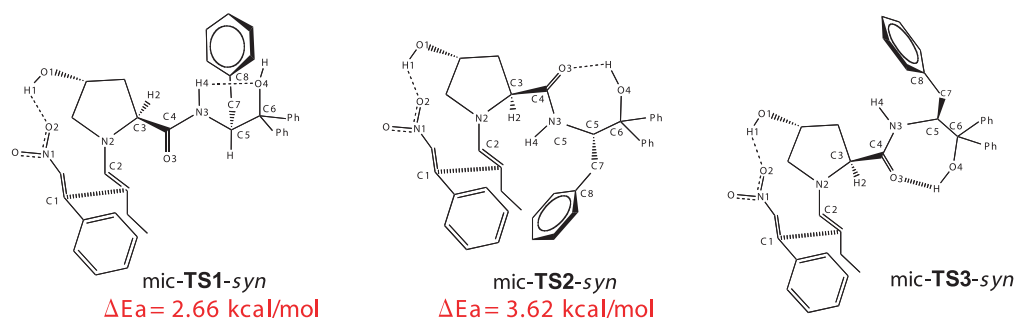


図6a 遷移状態構造の平面図; ΔE_a : 活性化エネルギー差: 安定性の目安

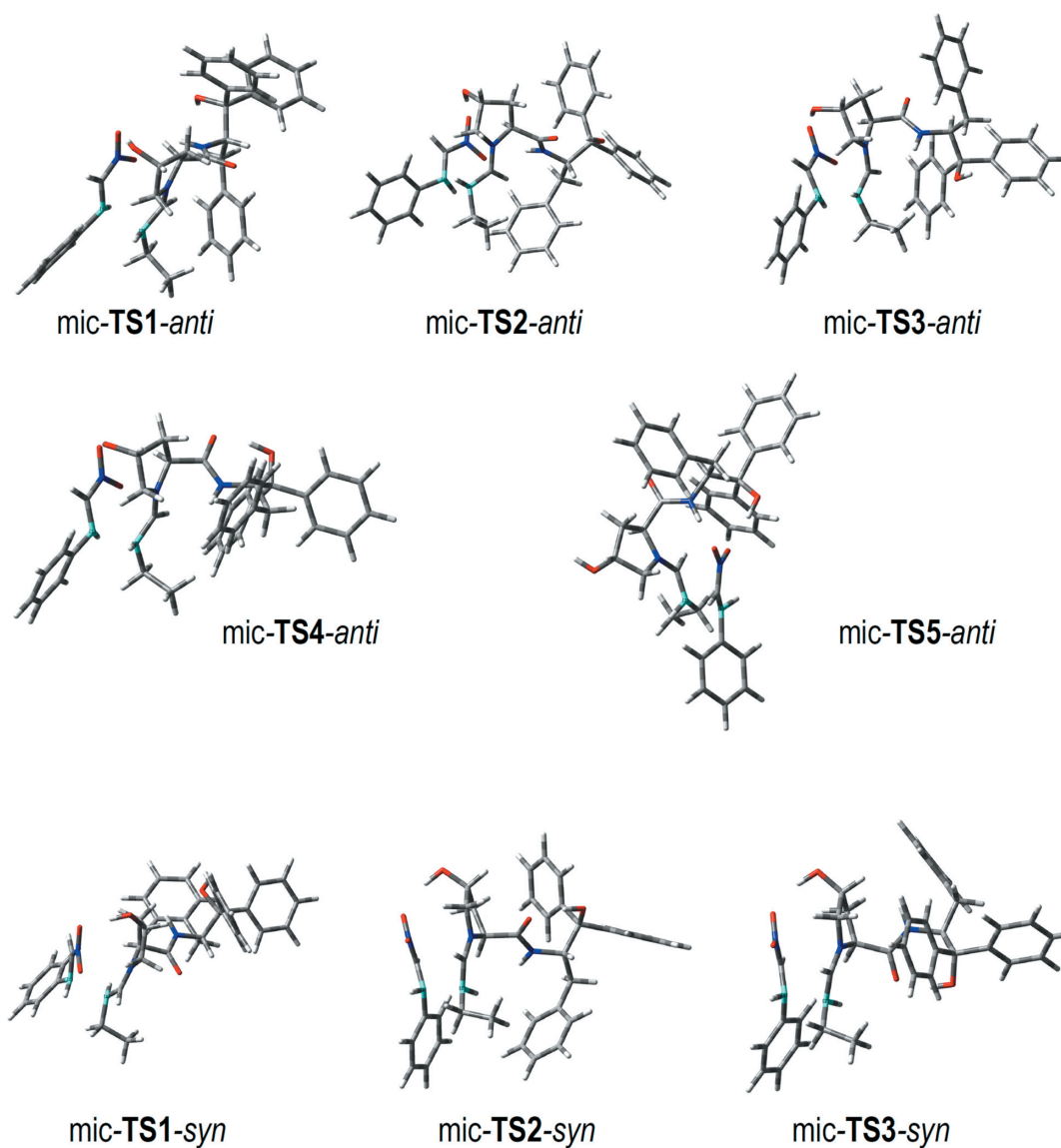
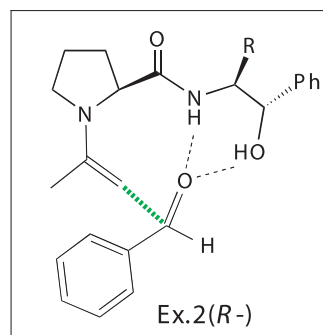


図6b 遷移状態構造の立体図: 青色の原子が反応結合部位

2.5 アルドール反応への応用

類似反応(Ex.2)に対する Gaussian DFT 計算結果によると、可能な遷移状態の異性体は、生成物の絶対配置がそれぞれ *R*-体, *S*-体に対して2個ずつ存在することが明らかであった。さらにベンジル基の回転に対して2個、合計8個の構造を初期座標として最適化を行った。その主な計算結果を表2にまとめ、その平面構造と立体構造を図7に示した。



また、プロリン環の側鎖に付加した水酸基とベンズアルデヒドとの水素結合をもつ遷移状態も想定でき、2, 3のモデルで最適化を行ったがすべて反応系に戻ってしまった。モデル的に無理な構造であると思われる。すなわち、アルドール反応でもマイケル反応部位での配位は起こらないことが証明できた。

表 2 : DFT-Calculation Results for the aldol reaction

Transition State	al-TS1-(<i>R</i>)	al-TS1-(<i>S</i>)	al-TS1m-(<i>R</i>)	al-TS2-(<i>R</i>)
O1---H2 (Å)	1.803	1.838	1.851	1.895
O1---H1 (Å)	1.761	1.724	1.736	1.688
C1---C2 (Å)	1.895	1.858	1.929	1.797
C02=C2---C1-C01 (°)	177	-154	176	175
N1-C5-C6-O2 (°)	-70	-72	-68	63
C6-C5-C7-C8 (°)	177 (<i>anti</i>)	-171 (<i>anti</i>)	-116 (<i>eclipse</i>)	106
H3-C3-C4-O3 (°)	46 (<i>syn</i>)	60 (<i>syn</i>)	48 (<i>syn</i>)	38 (<i>syn</i>)
Energy (hartrees)	-1804.414446	-1804.406519	-1804.410107	-1804.3940
Δ Energy(kcal/mol)	0.00	5.15	2.72	12.78
Reactant				
Energy (hartrees)	-1804.417724	-1804.417723	-1804.412349	-1804.4059
Δ Energy(kcal/mol)	0.00	0.00	3.37	7.37
Initial Complex				
O1---H2 (Å)	2.186	2.128		
O1---H1 (Å)	1.923	1.890		
C1---C2 (Å)	3.210	3.200		
C01=C1---C2-C02 (°)	155	-165		
N1-C5-C6-O2 (°)	-71	-71		
C6-C5-C7-C8 (°)	-176 (<i>anti</i>)	-179 (<i>anti</i>)		
H3-C3-C4-O3 (°)	45 (<i>syn</i>)	48 (<i>syn</i>)		
Energy (hartrees)	-1804.430104	-1804.430581		
Complex Stabilization	-7.77	-8.07		
Activation Energy	9.83	15.10		
Δ Ea (kcal/mol)	0.0	5.27		

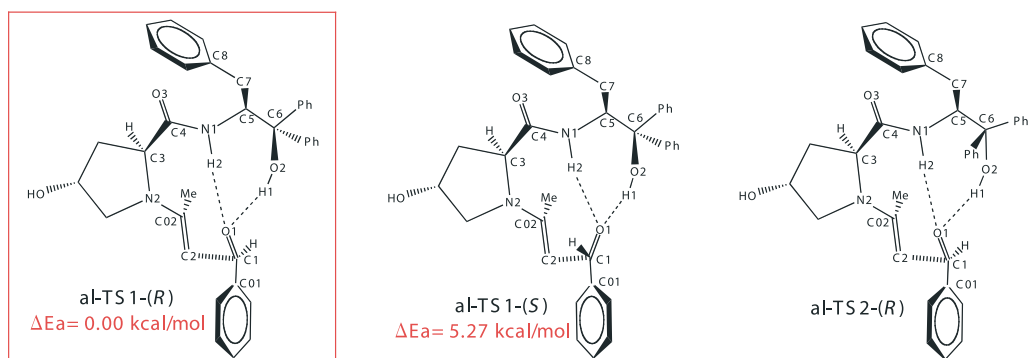


図7a 遷移状態構造の平面図; ΔE_a : 活性化エネルギー差: 安定性の目安

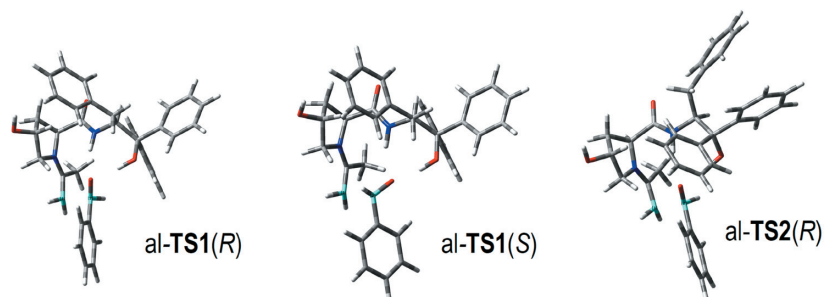


図7b 遷移状態構造の立体図: 青色の原子が反応結合部位

3. 結果と考察

以下, 結果をまとめてみる。

- ・ マイケルおよびアルドールの2つの反応配位部をもつ触媒 **1a** においても, 単独反応と同様な反応経路で, それぞれ独立に進行する。
- ・ マイケル反応では, アルドール反応配位部に環状水素結合が形成されるため, その立体制御によって反応選択性がさらに高まると予想される。そこには, 2通りの水素結合様式が存在するがそのエネルギー差はほとんどない。

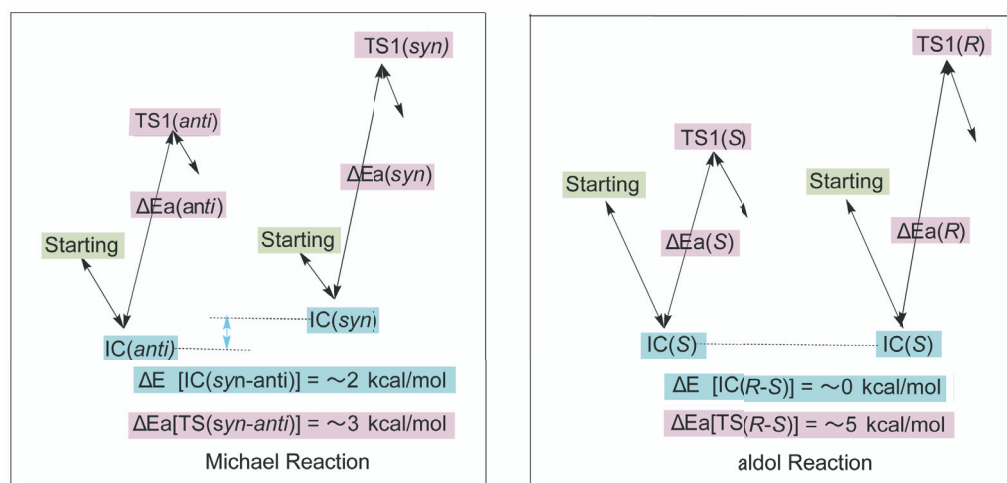


図8 反応のエネルギーダイアグラム

2つの反応過程のエネルギーダイアグラム(図8)に示すように、マイケル反応では2つの可能な反応経路において、反応系における初期の錯形成状態(IC)で~2kcal/molのエネルギー差が生じ、遷移状態の活性化エネルギーで~3 kcal/molの差が生じること。一方、アルドール反応では、錯形成状態(IC)ではほとんどエネルギー差がなく、遷移状態の活性化エネルギーで~5 kcal/molの差が生じることが明らかになった。これらの数字は高いエナンチオ選択性を物理量で正確に証明したことになる。

なお、本研究は最近の学術雑誌に報告した[6]。

4. おわりに

本研究の量子化学計算は東北大学サイバーサイエンスセンターのGaussianパッケージソフトを利用して行うことができた。一般に、化学反応機構の真の遷移状態を確認してその反応経路を明らかにすることはそう簡単なことではない。幸運にも、類似の反応の計算結果が報告されていたこともあり、試行錯誤のモデル模索もあったが、我々の「触媒分子設計のコンセプト」とその「実験結果」を理論的に裏付けることができた。実際、本計算の構造原子数はかなり多いため、通常の手持ちの計算機(Gaussian 03 計算可能)ではかなりの時間と労力を要するものと思われる。

ここで「量子化学計算の専門家でもない著者らが、センターの計算機を利用して(メンテナンスはすべてお任せ)、10万円の負担金(減額制度で100万円分の計算)で、ほぼ2ヶ月で(多量のjobを同時に計算できるため)、ひとつの研究成果を挙げることができた」ということを強調したい。

そのようなこともあって、本稿では初心者でも理解できるように計算経過とその結果を詳細に記述した。是非、一般の実験化学者が身近にあるセンターの便利なシステムを利用して「量子化学計算」に挑戦することをお勧めしたい。

参考文献

- [1] Y. Hayashi, *J. Synth. Org. Chem. Jpn.*, **2005**, 63, 464.
- [2] C. Palomo, S. Vera, A. Mielgo, E. Gomez-Bengoa, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2006**, 45, 5984-5987.
- [3] M. Raj, Vishnumaya, S. K. Ginotra, V. K. Singh, *Org. Lett.*, **2006**, 8, 4097-4099.
- [4] Z. Tang, F. Jiang, X. Cui, L.-Z. Gong, Ai-Q. Mi, Y. -Z. Jiang, Y. -D, Wu, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, **2004** 101, 5755.
- [5] Spartan'06 for Windows Wavefunction, Inc. Irvine CA, USA.
- [6] Y. Okuyama, H. Nakano, Y. Watanabe, M. Makabe, M. Takeshita, K. Uwai, C. Kabuto, E. Kwon, *Tetrahedron Letters*, **2009**, 50, 193-197.

[研究成果]

連鎖反応モデルから想定される深部低周波微動の特徴

- Character of deep low-frequency tremors based on chain reaction model -

#有吉 慶介*1・堀 高峰*1・金田 義行*1

Jean-Paul Ampuero*2

松澤 暢*3・日野 亮太*3・長谷川 昭*3

*1 独立行政法人 海洋研究開発機構 地震津波・防災研究プロジェクト

*2 カリフォルニア工科大学

*3 東北大学大学院理学研究科附属地震・噴火予知研究観測センター

1. はじめに

防災科学技術研究所が展開する高感度地震観測網 (Hi-net) は、全国の約 800 地点で日本全土をほぼ網羅するかたちで地面の揺れを常時観測している。Obara (2002) [1] では、その膨大なデータを用いて地震波形の解析を進めたところ、日本周辺の沈み込み帯のうち、西南日本において、深さ 30km 付近のプレート境界面に沿って、低周波性の微動が発生していることを発見した (図 1)。この微動は火山帯での活動とは関係がないことから、深部低周波微動と呼ばれ、近年では世界各地の沈み込み帯で発見されている [2]。

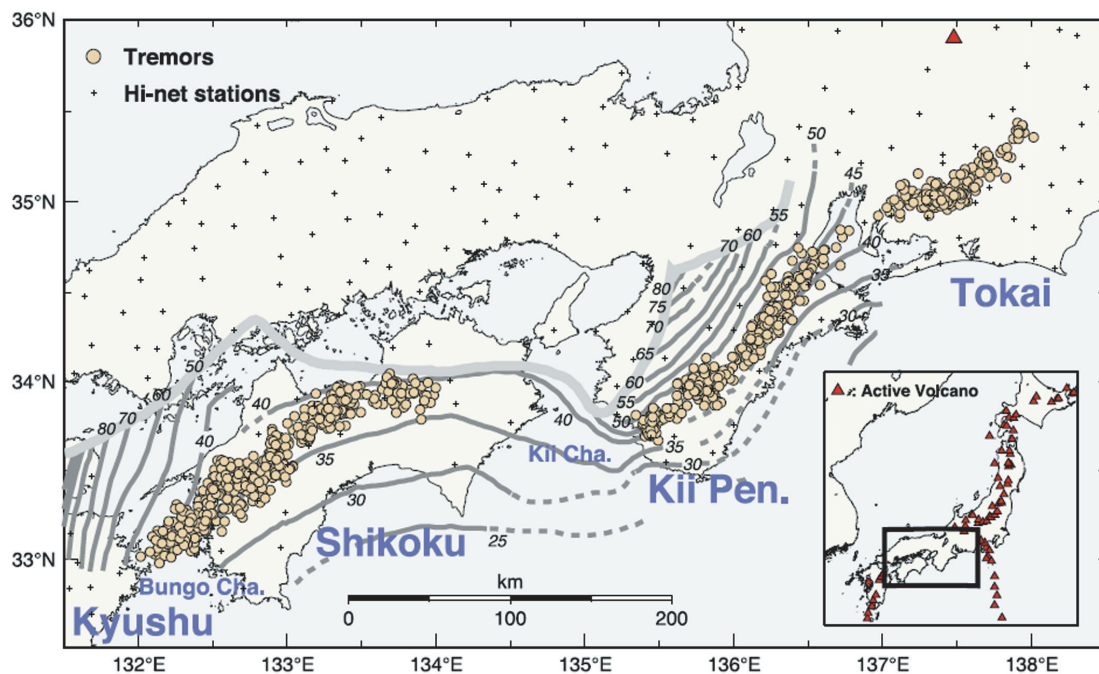


図 1. 深部低周波微動の震源分布. 数値はプレート境界面の等深線 [1].

微動活動の大きな特徴として、その多くは、5~15 km/day の移動速度を伴い、等深線に沿って移動していることが挙げられる [3] (図 2)。そのパターンは複雑で、区分化されているものもあるが、たまに区分を突き抜けて移動しているものもみられる。また、移動方向も単方向のみならず、双方向に伝播しているものもある。発生間隔は、四国地方で短く、紀伊半島~東海地方の方が相対的に長い傾向がみられるが、深さ 30km より浅いところでは、東海・東南海・南海地震発生帯が存在するので、大地震発生前に活動の変化がみられる可能性も考えられる。

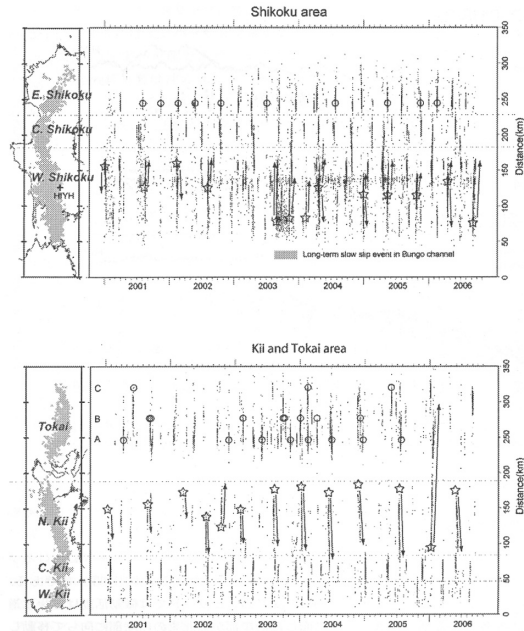


図 2. 深部低周波微動震源の時系列 [3].

では一体、なぜ深部低周波微動が発生するのだろうか？そのメカニズムの候補として、【仮説一】流体の移動 [1]、【仮説二】摩擦特性の不均質性 [4]、などが挙げられる。具体的には、【仮説一】では温度・圧力条件によって、岩石の相転移に伴う含水鉱物の脱水反応が生じ、水の流動に伴って発生したというモデルであり、【仮説二】は、深部低周波微動が発生するところでは、東海・東南海・南海地震といった巨大地震が発生する領域とは摩擦特性が少し異なって、小規模な地震しか発生しないというモデルである (図 3)。

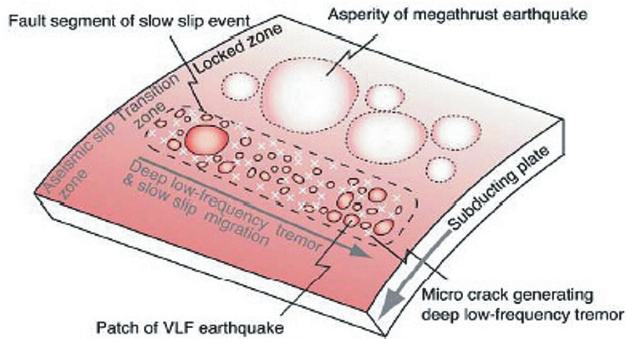


図 3. 【仮説二】に基づく深部低周波微動のモデル概念図 [4]。アスペリティサイズが大きいところで巨大地震が発生し、小さいところで低周波微動・超低周波微動が発生すると考えたもの。

一方で、地震発生後にアスペリティ周辺に余効すべりと呼ばれる地震波を伴わず、人間では揺れを感じないほどゆっくりしたすべりが広がり、そのすべりが他の小さなアスペリティを飲み込むと次々と連鎖的に破壊するというモデルも提唱されている [5] (図4). 特に小アスペリティが深部に存在する場合、連鎖して発生した地震は、通常よりもゆっくりすべる低周波性の傾向がみられることが、数値シミュレーションから示された [6]. このような連鎖破壊過程が低周波微動を励起する原因の一つとなっている可能性もある.

そこで、本研究では、巨大地震発生帯の深部側にある小アスペリティ同士の連鎖破壊によって深部低周波微動が発生するという新たな【仮説-3】を数値シミュレーションから説明することを試みる.

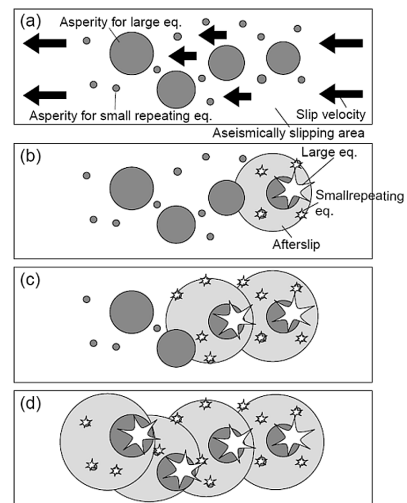


図4. 連鎖破壊過程の模式図 [5].

2. 3次元沈み込みプレート境界モデル

東海～東南海～南海沖にかけてみられる深部低周波微動の発生現象について、連鎖破壊によるものと想定したモデルを図5に示す. プレートの傾斜角は 15° , 計算領域の外側は、 4cm/year で定常的に沈み込みプレート運動が続いているものとする. また、海溝軸 (Strike) 方向に沿って、周期的境界条件を与え、東海～東南海～南海沖のように巨大アスペリティが続いている場合を想定した. また、深さ $27\text{-}33\text{km}$ の範囲では、流体 (主に水) が存在するため有効法線応力が 51MPa と低くなる、高い間隙水圧が生じているという説 [7] を採用した.

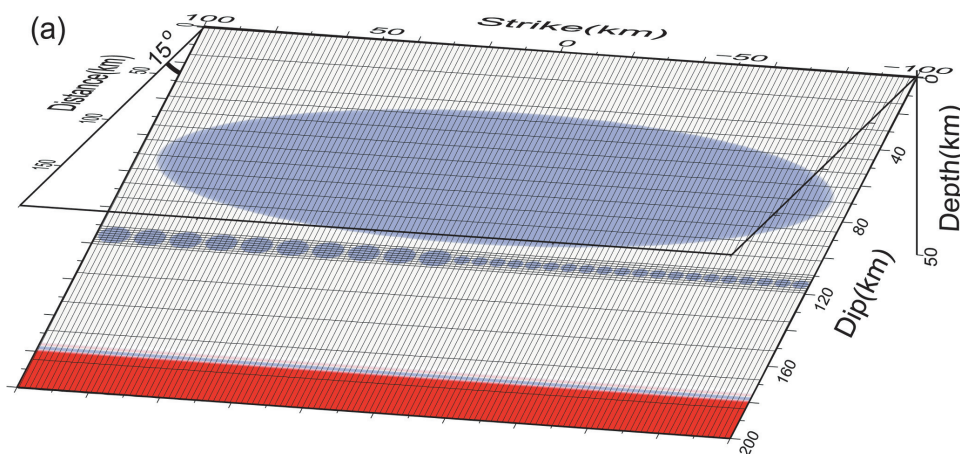


図5. 沈み込みプレート境界面上の摩擦特性分布図. 赤色系が粘性のように速度増加と共に摩擦力が増大する安定すべり域, 青色系が速度増加 (低下) と共に摩擦力が低下 (増大) する不安定すべり (地震が発生しやすいアスペリティ) 領域を示す. 計算メッシュは8倍ほど拡大したもので、実際には約 22 万個ある.

本研究で適用する数値シミュレーションは、均質半無限弾性体中にある3次元プレート境界面にすべり速度/状態依存摩擦構成則を用いたものであり、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究によって開発された、SX-9向けに最適化されたプログラムコードを適用することで、時空間に関して高い分解能を有した大規模な計算を実行することが可能となっている [6].

3. 連鎖反応モデルから予想される深部低周波微動の特徴

深部低周波微動が連鎖破壊しながら伝播する過程の一例を図6に示す。(a)~(e)まで時間を追ってみると、小アスペリティ (No. 10) で低周波性の微動が発生し、その後は左(東)側に連鎖的に伝播している様子がみられる。一方 (b) では、小アスペリティ (No. 2) から低周波微動が発生し、その後は右(西)側へゆっくりした伝播速度で進んでいる。(e) では、小アスペリティ (No. 3) で両者が交差し、低周波微動よりも高速すべりをもつ、通常の地震に近い性質をもつイベントが発生していることが分かる。

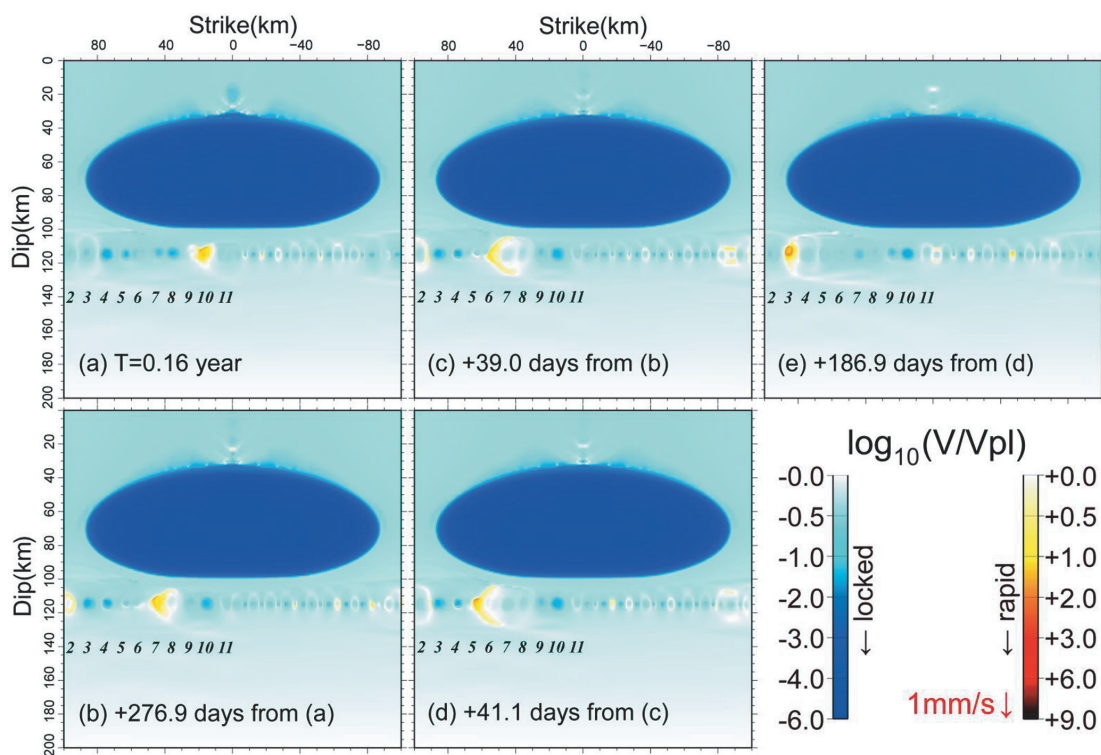


図6. 図5の沈み込みプレート境界面上におけるすべり速度のスナップショット (連鎖破壊過程の例). V_{pl} は定常的な沈み込み速度 4cm/year に対応し、暖色系が高速すべり、寒色系が固着を示す. イタリアック体の番号は、アスペリティの指標に対応する.

次に、隣接するアスペリティが固着している場合の例を図7に示す。ここで、小アスペリティ (No. 4) に注目すると、隣接する小アスペリティ (No. 3, 5) と破壊のタイミングが交互にずれるため、No. 4 が破壊する時には No. 3, 5 は固着しているため、すべりが阻害されてしまい、結果として通常の低周波微動よりもさらにゆっくりとした超低周波微動 [4] が発生していることが分かる。

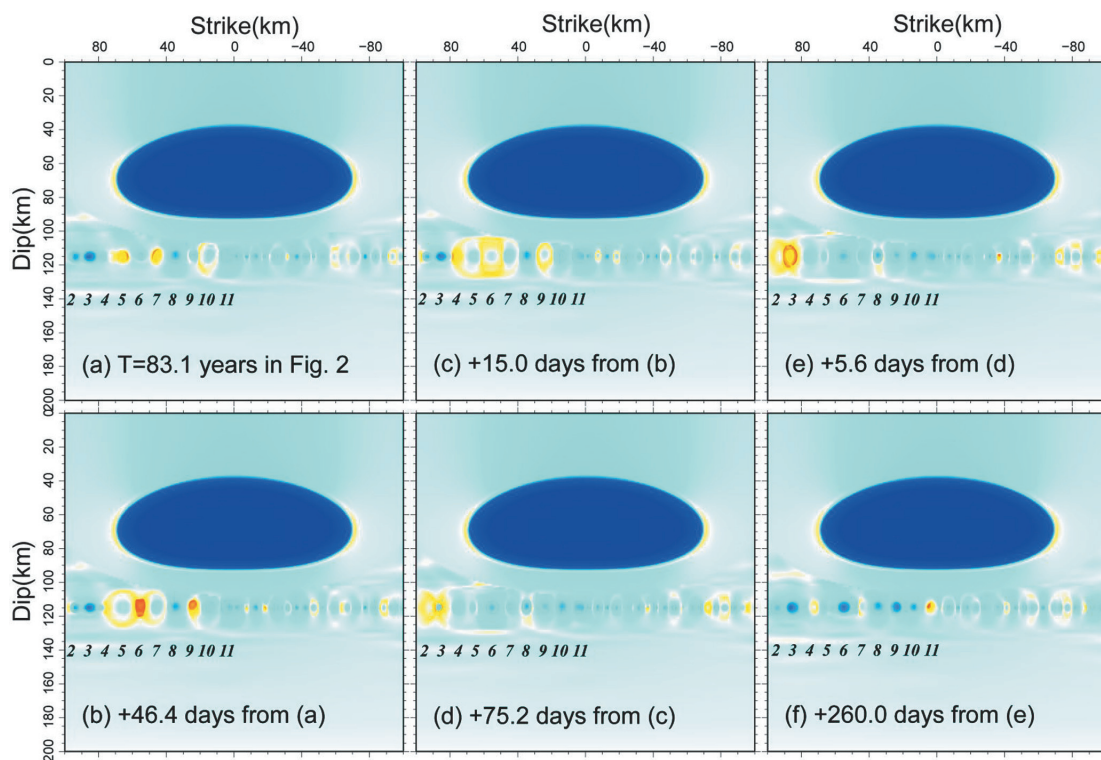


図7. 超低周波微動の発生過程の一例。図の見方は図6を参照。

これらの結果より、沈み込みプレート境界面上の深さ 30km 付近で通常の地震・低周波微動・超低周波微動といった様々なタイプのイベントが発生する要因として、摩擦特性が異なるという物性的な要素の他に、小アスペリティ間のすべりの相互作用（応力擾乱）によっても発生するということが数値シミュレーションから示された。

4. 今後の課題と展望

イベントに伴う応力降下量やアスペリティ内の平均的なすべり速度についてシミュレーション結果と GPS 観測で推定された結果を比べると、ほぼ一致している (表1)。このことは、余効すべり伝播速度という別の物理過程から推定された”高い間隙水圧の存在”という説 [7] によって、深部低周波微動が説明できる可能性を示唆するものである。

表 1 : 小アスペリティ(半径 2.5km, 5km)内で平均した応力降下量とすべり速度の比較

	Recurrence Time (year)	Stress Drop (MPa)	Slip Velocity (m/sec)
Simulation	0.5~0.8 (r=2.5km)	0.02~0.08	10^{-8} ~ 10^{-6}
	1.1~1.7 (r=5km)		
Observed	1.2 [8]	0.04~0.06 [9]	3.2×10^{-8} [9]

3章では数値シミュレーションから確実に結論づけられるものだけを述べたが、他にも面白いことが見えつつある。その一つとして破壊の伝播方向を挙げると、図6に示したように半径5kmの小アスペリティの方が半径2.5kmの微小アスペリティ(図5参照)よりも片側方向に伝播する割合が多くなる傾向がみられ、双方向伝播の頻度は微小アスペリティの方が相対的に高い傾向がみられる。この傾向を図2の観測結果に当てはめると、紀伊半島沖の深部低周波微動の伝播方向が片側に伝播するイベントが卓越しており、四国沖では双方向伝播が卓越していることから、紀伊半島沖の方が四国沖よりもアスペリティのサイズが相対的に大きいと考えられる。この推定を発生時間間隔について照らし合わせると、図2では紀伊半島沖の方が相対的に発生時間間隔が短くなっているが、低周波イベントの発生時間間隔はアスペリティが大きいほど長くなること(簡単に言うと、大地震の方が発生間隔は長くなる)とも調和する。

一方で、本研究で示された移動伝播速度は0.03~3 km/dayとなっており、観測から推定された5~15 km/day [1,2,10]よりも有意に遅いため、伝播速度も定量的に再現できるようなモデルを構築することが、発生頻度について定量的に議論する上で必要となろう。

一般に、アスペリティのサイズが小さいほど応力擾乱に対して敏感に連鎖反応する。一方で、地震に伴う前駆的な応力擾乱は、地震の規模が大きいほど増大する。従って、東海・東南海・南海地震のような巨大地震発生帯の近傍にある低周波微動の活動についても変化が生じ、図2とは異なる移動現象がみられると期待される。本研究の最終目的はまさにそこにあり、スーパーコンピューターを用いた大規模な数値シミュレーションによる現象の再現によって、深部低周波微動を大地震発生前の検知ツールとして活用する手法を見出すことが、今後取り組むべき大きな研究目標である。

[1] Obara, K., 2002. Nonvolcanic deep tremor associated with subduction in southwest Japan. *Science* **296**, 1679-1681.

[2] Rogers, G., Dragert, H., 2003. Episodic tremor and slip on the Cascadia subduction zone: the chatter of silent slip. *Science* **300**, 1942-1943.

[3] 小原一成, 2007. スロー地震と水, *地学雑誌*, **116**, 114-132.

[4] Ito, Y., Obara, K., Shiomi, K., Sekine, S., Hirose, H., 2007. Slow earthquakes coincident with

episodic tremors and slow slip events. *Science* **315**, 503–506.

[5] Matsuzawa, T., Uchida, N., Igarashi, T., Okada, T., Hasegawa, A., 2004. Repeating earthquakes and quasi-static slip on the plate boundary east off northern Honshu, Japan. *Earth Planets Space* **56**, 803–811.

[6] 有吉慶介・松澤暢・長谷川昭, 2006. 相似地震震源域における非相似地震発生の可能性, *SENAC* **39**, 131-138.

[7] 有吉慶介・松澤暢・長谷川昭, 2005. 沈み込みプレート境界における余効すべり伝播速度の空間分布, *SENAC* **38**, 3-11.

[8] Miller, M. M., Melbourne, T., Johnson, D. J., Summer, W. Q., 2002. Periodic slow earthquakes from the Cascadia subduction zone. *Science* **295**, 2423.

[9] Miyazaki, S., Segall, P., McGuire, J., Kato, T., Hatanaka, Y., 2006. Spatial and temporal evolution of stress and slip rate during the 2000 Tokai slow earthquake. *Journal of Geophysical Research* **111**, B03409.

[10] Hirose, H., Obara, K., 2005. Repeating short- and long-term slow slip events with deep tremor activity around the Bungo channel region, southwest Japan. *Earth Planets Space* **57** (10), 961-972.

白

[研究成果]

地球の温暖化で変化した日本南岸の黒潮流路の選択特性

関根義彦

三重大学大学院生物資源学研究科海洋気候学教室

1. はじめに

大気中の二酸化炭素などの温室効果ガスの増加により地球の温暖化が進み、大気の大循環の変化とその影響を強く受ける海洋循環についてはいろいろと注目すべき問題があります。本論では日本南岸の黒潮の直進流路や大蛇行流路の選択特性の変化について議論することになります。

日本南岸の黒潮には図1に示すように代表的な流路として直進流路と大蛇行流路があります。一般に地球自転によるコリオリ力の大きさを示すコリオリのパラメータの緯度変化により、強い海流は黒潮や湾流のように大洋の西側に生じます。この強い流れは一般的に大陸棚斜面上では流路が比較的安定であり、その下流の大洋底上の海域で不安定な蛇行を行います。図1のような大陸棚沖で安定した大蛇行を行うのは黒潮だけです。

黒潮のみが安定した大蛇行を行う理由は図1からも推定されるように、伊豆海嶺という変わった海底地形があり、日本の陸地の存在で陸岸が南北方向というより東西方向に走り、地震の発生からも予想されるように海洋のプレートが日本の方に押し寄せるために大陸棚斜面が急ですぐに大洋底に落ち込むためです。北アメリカの東海岸は南北に走るため東西方向からの傾きが大きく、陸棚斜面も緩やかで海溝もなく斜面の面積が大きくなっています。以上の黒潮が定常な大蛇行を行う根本的な理由は温暖化の影響も受けず、今も変わりません。

2. 1970年代の黒潮の数値実験

従来より日本南岸の黒潮流路の力学については多くの研究があります。図2に示したのは1977年頃当時仙台の片平にあった東北大学の大型計算機センターのコンピュータ(ACOS 700)で計算した黒潮の数値実験のモデルと結果です。このモデルでは密度が一様な順圧モデルを仮定しており、コリオリの力のために流れは鉛直方向に一様になり、伊豆海嶺などの等深線に沿う流れが卓越します。流れが等深線を横切ると鉛直方向に流れの伸縮が生じ、新たな渦が発生して定常状態は得られません。図2左図の流入流速を増加させた場合が右図ですが、流速増加によっていろいろな流れの変化が生じます(Sekine, 1980)。

図2は東北大学の大型計算機センターで初めて行われた地球流体力学関連の数値実験であり、メモリーや計算速度との関連から密度成層を含む詳細な黒潮の数値実験は当時の大型計算機を独占して長時間使うことが必要となり、なかなか大変でした。現在のパソコンはメモリーが豊富で図2のモデルの100日程度の時間積分は5分位の計算時間で実行することができます。1970年代は現在のパソコンよりやや劣る計算能力を持つ計算機が大学に一つしかなく、図2のモデルの計算時間は当時の大型計算機で30分位でした。皆で共有して使うため、カードで入力してから1時間もかかって計算が終わりました。この時代の状況と比較すると現在の計算機の普及には目を見張るものがあります。

天気予報と本質的に同じ海洋の流体力学の数値解では注意しなければならぬ点が多数あります。外洋の大きなスケールではコリオリ力と圧力傾度力がバランスするために、その残り

に予知する時間変化が含まれることとなります。これは困った問題で、圧力傾度力は圧力を P としてベクトルの $\text{grad } P$ で現されるため rot を取って、有名な公式 $\text{rot}(\text{grad } P) = 0$ を用います。 $\text{rot } V$ (V は速度ベクトル) を扱い、運動方程式ではなく渦度方程式を解くこととなります。

海域と考えられる所に格子点を配置して、差分式をそのまま計算すると津波のような極めて速度の速い波を計算することになり、数値計算の時間間隔を極めて小さくする必要があります。格子点の計算では CFL 条件があり、格子点間隔を波が伝播する時間や移流で流される時間よりも、時間間隔を小さくする必要があります。これを守らないと光速よりも速い海流が生じるようになり、計算機が計算不能を示します。これを防ぐ方法はいくつかありますが、一番確実なのは海面に蓋をすることです。これにより海面で発散が無くなり、それをうまく使うために流線関数を用います。流線関数を用いると $\text{rot}(V)$ はポアソンの方程式となり、渦度方程式で求めた新しい $\text{rot}(V)$ について流線関数を求めることとなります。

実は渦度方程式の $\text{rot}(V)$ の計算よりもポアソンの方程式の流線関数の計算の方が計算量が圧倒的に多く実際の計算のほとんどとなります。ポアソンの方程式の計算で有力なもの ADI 法ですが (Mitchell, 1969 など)、考えている海が長方形でない場合には SOR 法が使われます (岸保, 1968 など)。SOR 法は Gauss-Seidel 法のようなポアソンの方程式をきちんと差分化するよりも少し大きい変化を与えることで速い収束を狙ったものです。SOR 法ではその変化の割合である緩和定数の決定が微妙です。Frankel (1950) による格子点の数から求める公式がありますが、計算時間が最小になる緩和定数を与えればはかぎらず、初期の 10 ステップ位で最適値をいろいろとサーチして決めてから計算を実行します。

3. 黒潮流路の選択特性

図 1 に示した黒潮の二つの安定な流路の選択状況についてみると、1975 年以前の 10 年はほぼ直進流路であり、1976 年から 1988 年までは大蛇行流路が卓越して生じ、1989 年以降は再び直進流路が卓越して生じています。

黒潮の流路については前にも述べたように北岸の東西方向からの傾きが特に重要であり、この北岸の傾きの違いの影響を調べたものが図 3 です。北岸が東西に走っている場合、初期の岸沿いの流れは不安定となり、大蛇行が発生します (図 3 a)。岸が 10 度傾いた場合 (図 3 b) には蛇行の振幅が小さくなりますが蛇行は生じます。ところが岸が 20 度以上傾いた場合 (図 3 c d) には初期の岸に沿う流れは安定で、蛇行は生じません。南北に走る岸があると岸に沿う流路が生じやすいことが理解されます。南北の岸沿いに西進する惑星ロスビー波がトラップされるためです。

このため陸岸が東西方向に走るモデルでは、図 4 a に示すように黒潮の流れが小さい時に大蛇行流路、大きい時に直進流路となります。この力学では西向き惑星ロスビー波と東向き黒潮の流れの移流効果のバランスとなり、移流効果が大きくなると蛇行が下流に流されて直進流路になり、流れが小さいと両者がバランスして定常な大蛇行流路となります。これに対して陸の東西方向からの傾きをモデル化すると (図 4 b)、図 3 からも推量されるように岸に沿う流れの特性が強くなり、離岸して大蛇行流路を生じるためには岸に沿う傾向を上回る強い東向きの流れが必要となり、大きい流速の時に大蛇行流路、小さい時に直進流路となります。この結果が 2000 年あたりまで黒潮の流路選択特性と考えられていました。

4. 最近の黒潮流路選択特性

1989 年以降の直進流路が卓越する黒潮流路の選択特性に関連して、図 5 に 1975 年以降の 4 つの大蛇行流路の平均パターンを示します。この図は海上保安庁が出している海洋速報を用いて都井岬から犬吠埼までの黒潮流路の離岸距離を月ごとに求め、各大蛇行の出現期間全

体で離岸距離を平均したものです。1975年に発生した大蛇行は室戸岬沖から紀伊半島沖にかけて離岸距離が大きく御前崎以東で小さいのに対し、1981年以後の大蛇行は紀伊半島で離岸距離が小さく、御前崎以東で離岸距離が大きくなっています。

図5の伊豆海嶺上の流路をみると、1975年発生の大蛇行は斜線部で示した水深1000mで浅い海域が切れている比較的深いゲート領域を通っていますが、1981年以後の大蛇行はゲート領域の南側を通る傾向があり、伊豆海嶺の海底地形効果を受けていることが考えられます。黒潮が伊豆海嶺の上に乗ると大蛇行に伴う低気圧渦(図1のL)がより早くスピンドウンして、大蛇行が消滅します。つまり、1975年にできた大蛇行はうまく四国海盆にマッチして長期間存在したのに対し、1981年以降の大蛇行は東の下流に形成され、四国海盆にうまくマッチしていないことが示唆されます。

1981年以降の黒潮大蛇行の東側への移行は前にも述べたように黒潮流速が増大して東に流されることに起因します。東シナ海では1975年発生の大蛇行期間より1981年以降の大蛇行期間の方が黒潮流量が大きいことが示されており(Qiu and Miao, 2000)、トカラ海峡の潮位差の解析からも同様な結果が得られています(関根と陳, 2003)。これらにより1989年以降の直進流路の卓越はこの流速増大に伴い大蛇行が下流にながされ、伊豆海嶺の地形効果で消滅していることが考えられます。よって黒潮の流速が相対的に小さい時に大蛇行が可能ということになり、黒潮流路の流速への依存性は図6のようになります。およそ1999年以前では図4bに示されたように上の矢印の範囲が考えられましたが、それ以降は下の矢印の範囲に移行したということです。結果的に黒潮流速が多い時に大蛇行流路だったのが、最近では流速の少ない時に大蛇行流路という結論になっています。後者は図4aの結果と同じことになりますが、図4aでは伊豆海嶺の地形効果を考慮していない点が大きく異なります。つまり図4aでは惑星ロスビー波と黒潮の東向きの移流効果のバランスだったのに対し、後者では伊豆海嶺の海底地形効果による蛇行流路の消滅が主体となっています。

5. おわりに

地球の温暖化による影響はいろいろな面で厳しいものがあります。これに関連したことで、一般に研究することは犯人らしき人を逮捕する警察とある面で共通点があります。研究の目的を設定することは犯人のめぼしをつける過程とよく似ています。犯人にめぼしをつけることが特に重要であることは明らかですが、研究でも目的の設定で因果関係の無いものに注目したら大変なことになると思います。今日の不安定な状態にある大気や海洋の研究では、研究の目安を設定して考察すること、つまり犯人の推定をすることが難しくなっています。最近の社会でも新しい犯罪というか手口の巧妙な犯罪が多くなり、この面でも研究と犯人捜査は似た面があります。

かつて1970年代の前半に東北大のある先生が授業中『流体力学は乱流になると非線形で解析的には解けず、計算機によるごり押し数値計算になる。見通しが悪く、頭の良い人はやらない方が良い。』といわれたことがあります。当時は微分方程式などの解析解が貴重であると考えられていた時代なので、大気や海洋の数値実験などをやろうと考えていた学生には厳しい指摘でした。頭の良い人とは解析的な数学に強い人のことか、計算機べったりになる人への非難か、数値解の内容を計算機でよく工夫して理解すれば解析解と同じような解析はできるはず、などなどいろいろと考えました。今日この点について考えてみると、解析的に解けるような研究問題が残り少なくなり、計算機で大量の計算をするような研究が多くなる傾向があります。『解析解が数値解より数段上ですばらしい』という格言も、現在は少し意味が薄れているかもしれません。

参考文献

- [1]Akitomo, K., T. Awaji and N. Imasato : Kuroshio path variation south of Japan. 1 Barotropic inflow-outflow model. J. Geophys. Res., **96**, pp.2549-2560 (1991).
- [2]Frankel, S.P. : Convergence rates of iterative treatments of partial difference equations. Math. Tables Aids Comput. **4**, pp.65-75 (1950).
- [3]岸保勘三郎 : 数值予報新講, 地人書館, pp.180(1968).
- [4]Mitchell, A.R. : Computational methods in partial differential equations. John-Wiley. pp.251 (1969).
- [5]Qiu, B and W. Miao : Kuroshio path variations south of Japan. Bimodality as a self-sustained internal oscillation. J. Phys. Oceanogr., **30**, pp. 2124-2137 (2000).
- [6]Sekine, Y. : A numerical experiment for bottom effect of the Izu Ridge on path of the Kuroshio . On the formation of stationary current path with an increase in volume transport. Sci. Rep. Tohoku Univ., Ser. 5 Geophysics **27**, pp.19-25 (1980).
- [7]Sekine, Y: Coastal and bottom topographic effects on the path dynamicsof the western boundary current with special reference to the Kuroshio south of Japan. La mer **26**, pp.99-114 (1988).
- [8]関根義彦, 陳 苗陽 : 離岸距離の解析による日本南岸の黒潮流路の変動特性. 海の研究, **12**, pp.277-289 (2003).
- [9]Yasuda, I., J.H. Yoon and N. Sugihara : Dynamics of the Kuroshio large meander - Barotropic model-. J. Oceanogr. Soc. Japan, **41**, pp.259-273 (1985).

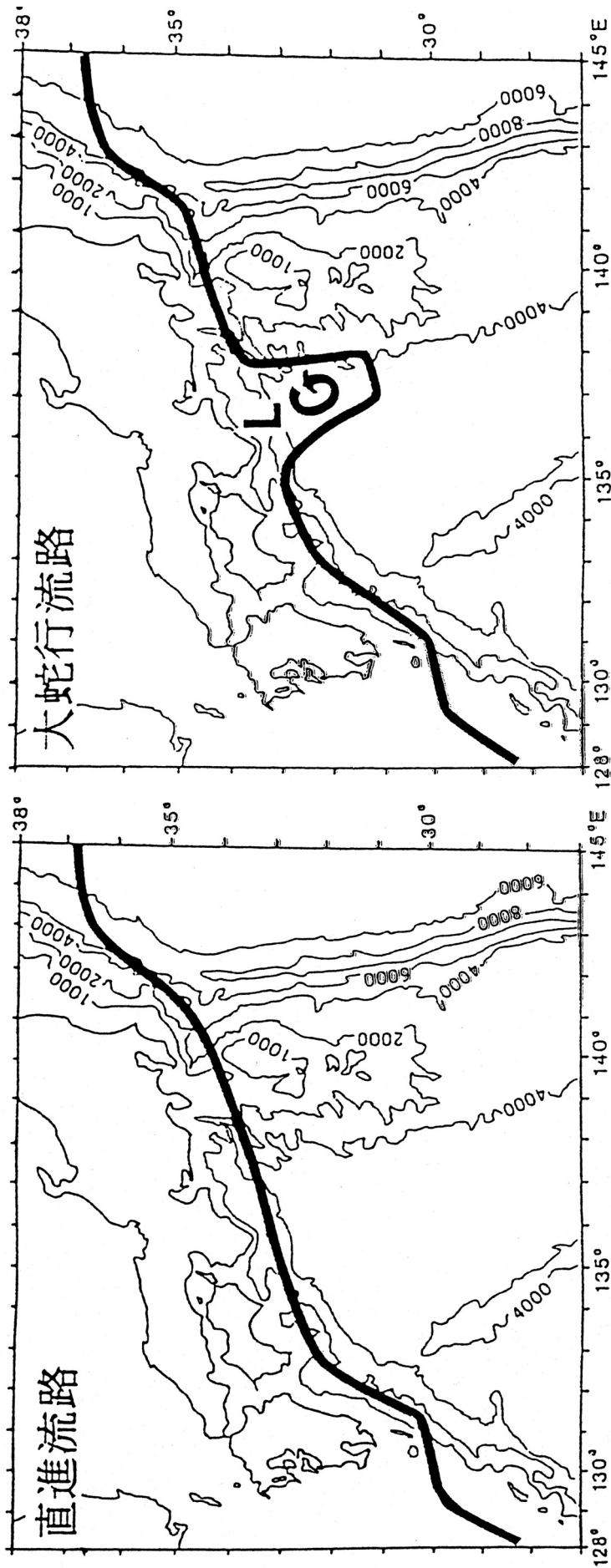


図1 日本南岸の黒潮の二つの代表的な安定した流路。直進流路（左図）と大蛇行流路（右図）。大蛇行に伴う低気圧循環をLで示した。

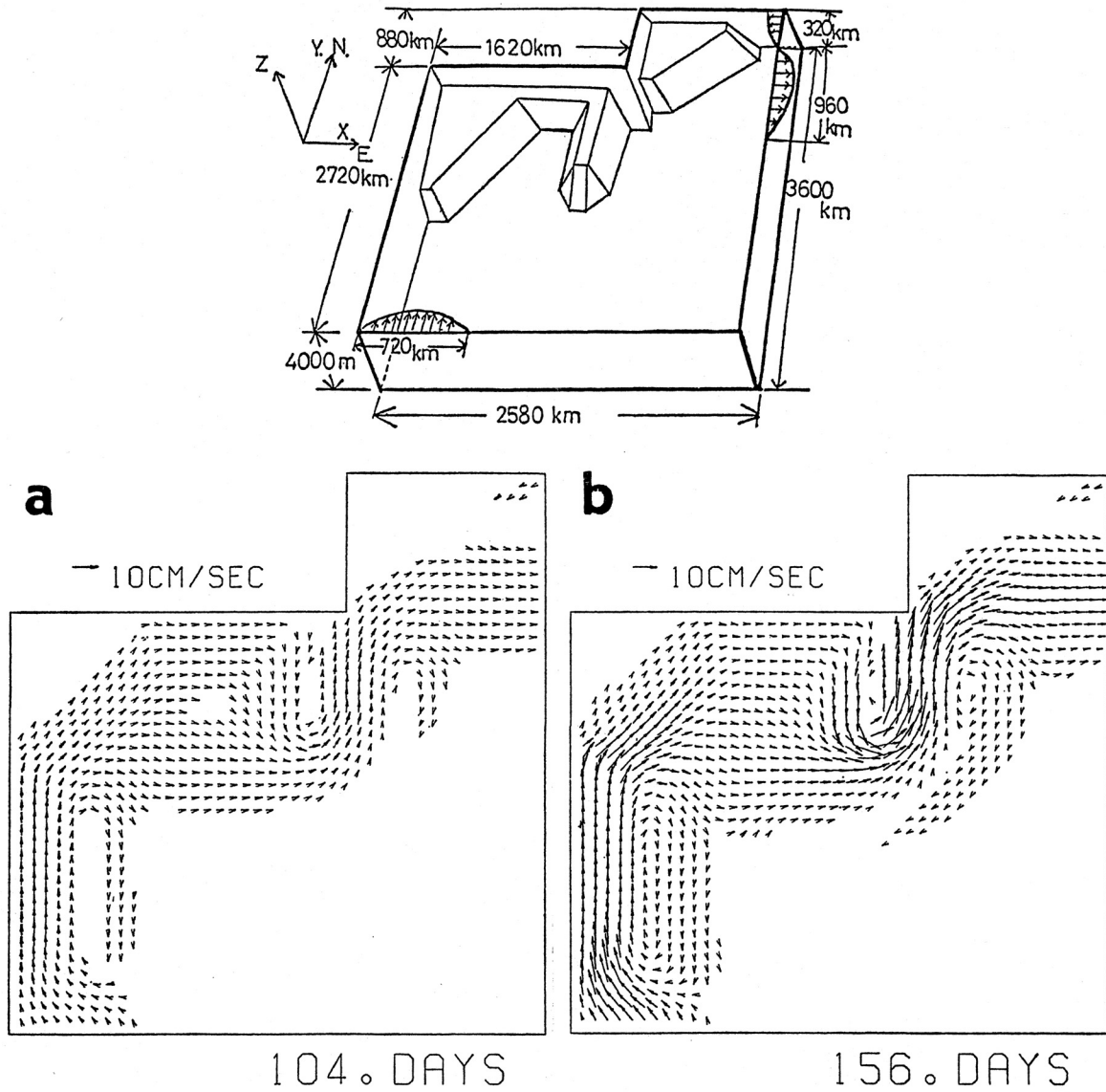


図2 黒潮に及ぼす伊豆海嶺の海底地形効果を調べた数値モデルの模式図（上図）と結果（下図）。（a）流入出の質量輸送を 30Sv（ $1\text{ Sv} = 10^6\text{ m}^3\text{ sec}^{-1}$ ）にした場合、（b）質量輸送を 30 Sv から 80 Sv に増加させた場合。

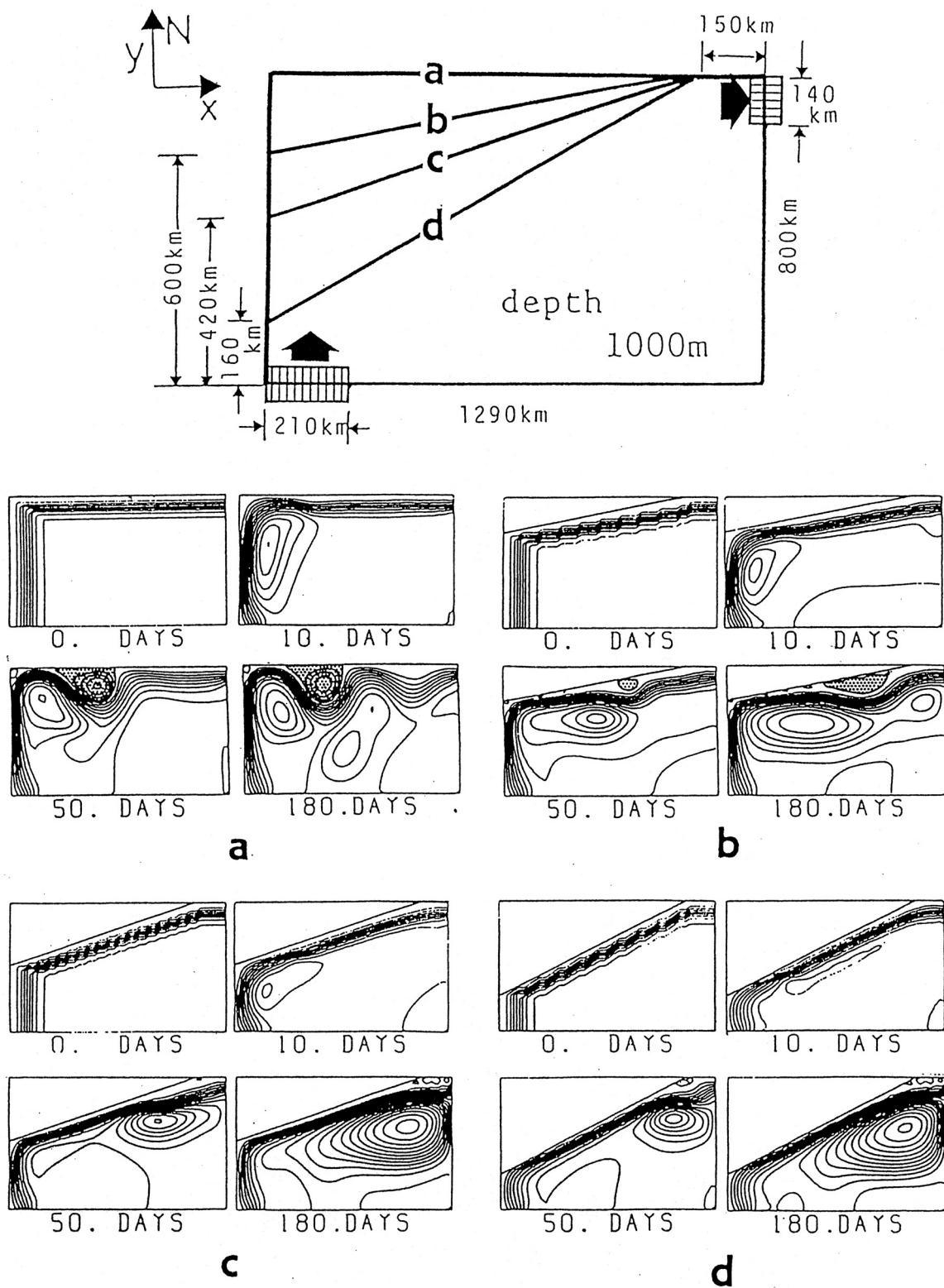


図3 北岸の東西方向からの傾きの差異を調べた数値モデルの模式図（上図）と結果（下図）（Sekine (1988)）。（a）北岸の東西方向からの傾きが無い場合、（b）10度傾いた場合、（c）20度傾いた場合、（d）30度傾いた場合。流線関数の間隔は5 Sv で、低気圧循環である負の流線関数の領域を斑点で示した。

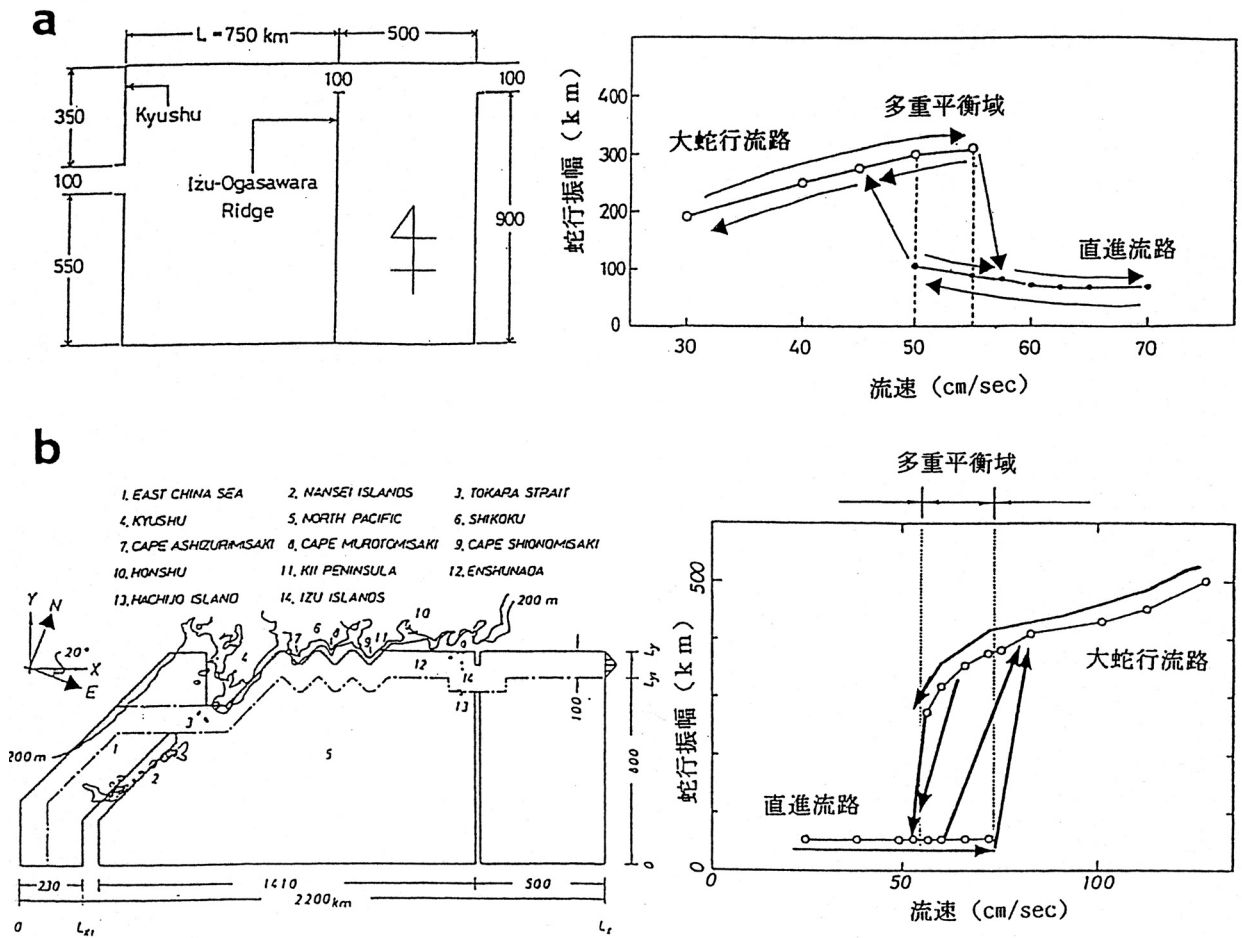


図4 黒潮の流路を調べた数値モデル実験の模式図(左図)と結果として得られた流路の蛇行振幅の流入流速への依存性(右図)。

(a) Yasuda et al. (1985) の場合、(b) Akitomo et al. (1991) の場合。

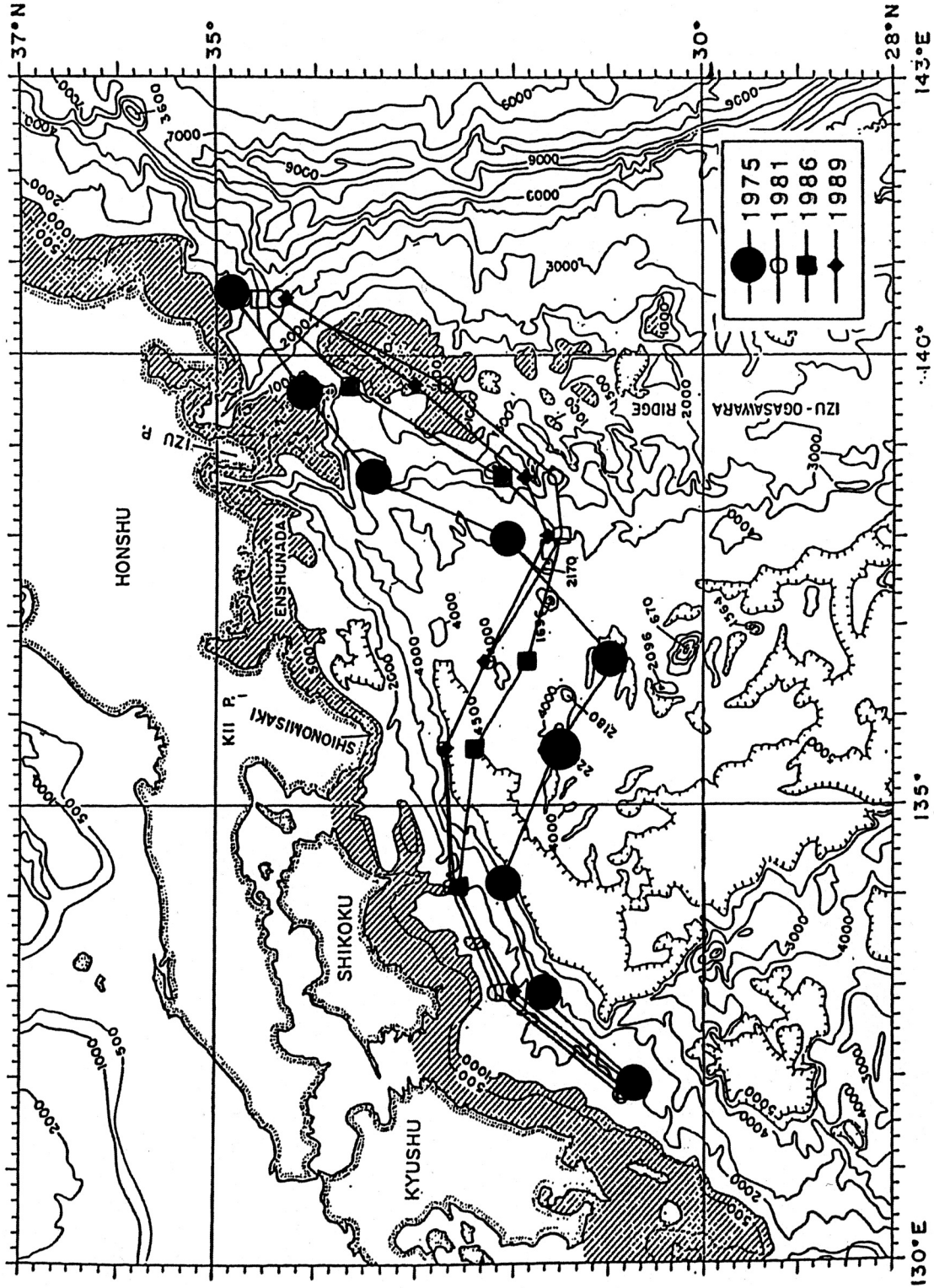


図5 離岸距離から示した黒潮大蛇行の平均的な流路のパターン(関根と陳, 2003)。各大蛇行の標記はその大蛇行の形成年として右下に示した。

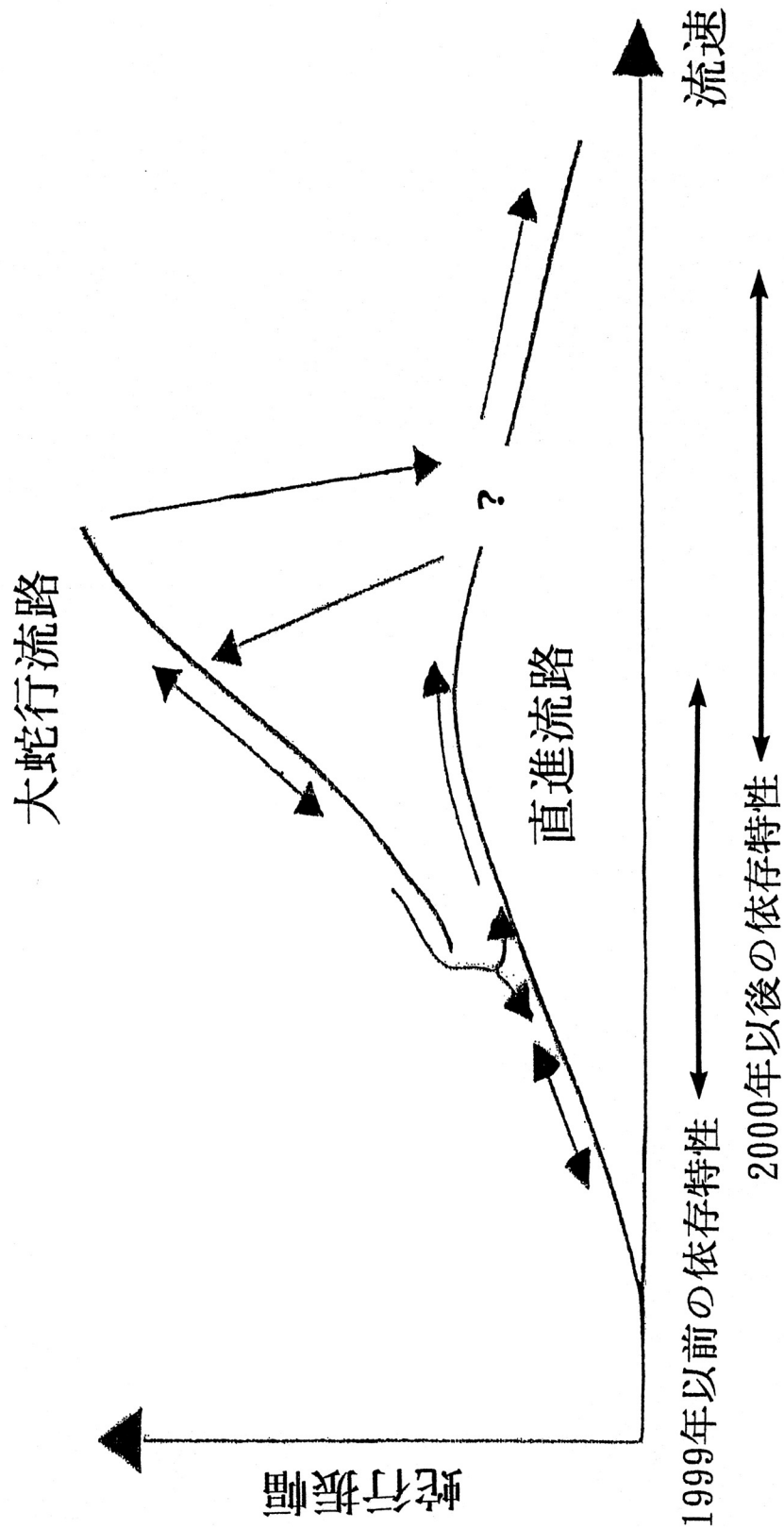


図6 黒潮の流路の黒潮流速依存性。1999年と2000年の境は概ねの境である。

[共同研究成果]

小形レンズアンテナの3次元 FDTD 解析

井上大聡 佐藤弘康 澤谷邦男 水野皓司*

東北大学大学院工学研究科

*東北大学電気通信研究所

1. はじめに

近年、テロ・犯罪等によって安全・安心な社会が脅かされてきており、危険物を所持する不審者を迅速に検知する手段が望まれている。マイクロ波、ミリ波を用いたイメージングは人が所持している危険物の検知を実現する技術として期待されており、特にパッシブイメージングは人や物から放射される熱雑音をパッシブに(発信器を使用せずに)受信し、衣服下の危険物を検知・映像化が可能な技術であるため実用化が期待されている(図1, [1], [2])。受信信号が熱雑音という極めて微弱なものであることおよび高画質を得るため、高効率・高分解能のレンズアンテナが要求される。

筆者らはこれまで、効率よくレンズと整合する軸対称指向性、高分解能を得るための狭い開口幅、高感度を得るための広帯域特性を持つ対せき形フェルミアンテナ (Antipodal Fermi Antenna, APFA) の設計を FDTD 法[3]を用いて行ってきた[4]-[7]。多数の構造パラメータを有する APFA の設計には電磁界解析が有効であるが、レンズの設計には一般に光線追跡法が用いられる。しかしながら、アンテナは波長程度の大きさを持ち、像面に配置されるアンテナの放射特性を考慮したレンズアンテナの電磁界解析が望まれる。また、装置の小型化を図るためにも、レンズ口径がミリ波帯において数十λの小形レンズの特性を明らかにすることが望まれる。

以上の背景を踏まえ、本報告ではミリ波パッシブイメージング用小形非球面アルミナレンズ[8]の特性、および APFA を一次放射器とする小形レンズアンテナの特性を得る目的で、3次元 FDTD 解析を行った結果を述べる[9]-[11]。

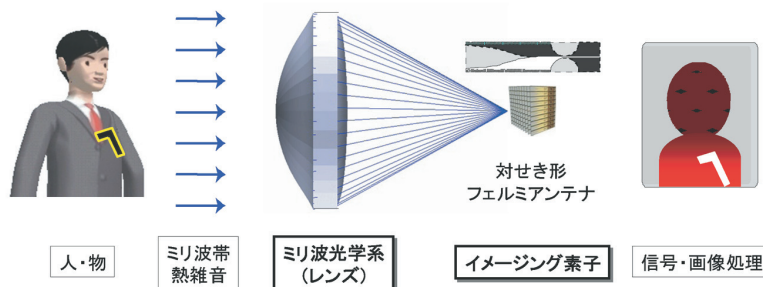


図1 ミリ波パッシブイメージングの概念図

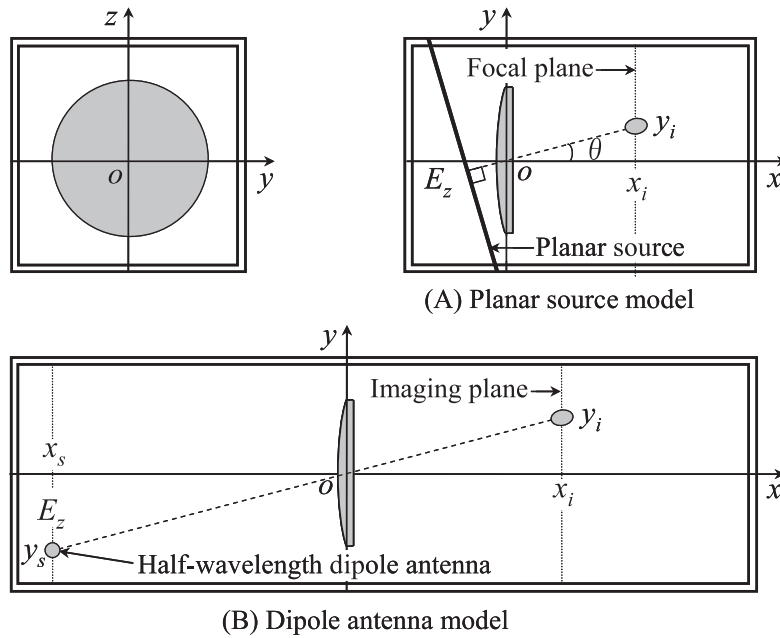


図2 解析モデル (A)平面波入射, (B)半波長ダイポールアンテナ励振

2. レンズの FDTD 解析

2. 1 レンズの構造と解析モデル

レンズは設計周波数を 35GHz ($\lambda = 8.57 \text{ mm}$)とし, 比誘電率が $\epsilon = 9.73$ (アルミナ), 直径 $D = 104.4 \text{ mm}$ (12.2λ), 厚さ $t = 10 \text{ mm}$ (1.17λ)とする. レンズ曲面は光線追跡法を用いて F 値が 1 となるように設計されており, 非球面構造を持っている. レンズの表面には周波数 35GHz に対する整合膜 ($\epsilon = 3.02$, 厚さ 1.2 mm, ポリエーテルエミド) が貼り付けてある[8].

解析モデルを図 2 に示す. レンズの中心を原点に取り, 平面波入射, 及びダイポールアンテナを波源として用いた. 平面波入射モデルを用いて焦点距離を, ダイポール波源モデルを用いて像面距離を求められる. FDTD 解析において, セルサイズは $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.25 \text{ mm}$, タイムステップ数は 50,000, 励振はガウスパルスとした. 吸収境界条件には 8 層の PML (Perfectly Matched Layer) を用いた. また, レンズから波源までの距離を x_s , レンズから像面までの距離を x_i とする.

2. 2 解析結果

レンズから 200 mm 程度離れた波源の像を得ることを想定し, ダイポールアンテナが $(x_s, y_s, z_s) = (-200 \text{ mm}, 0, 0)$ に置かれた場合の 35 GHz の電界 E_z の強度分布を FDTD 解析により求

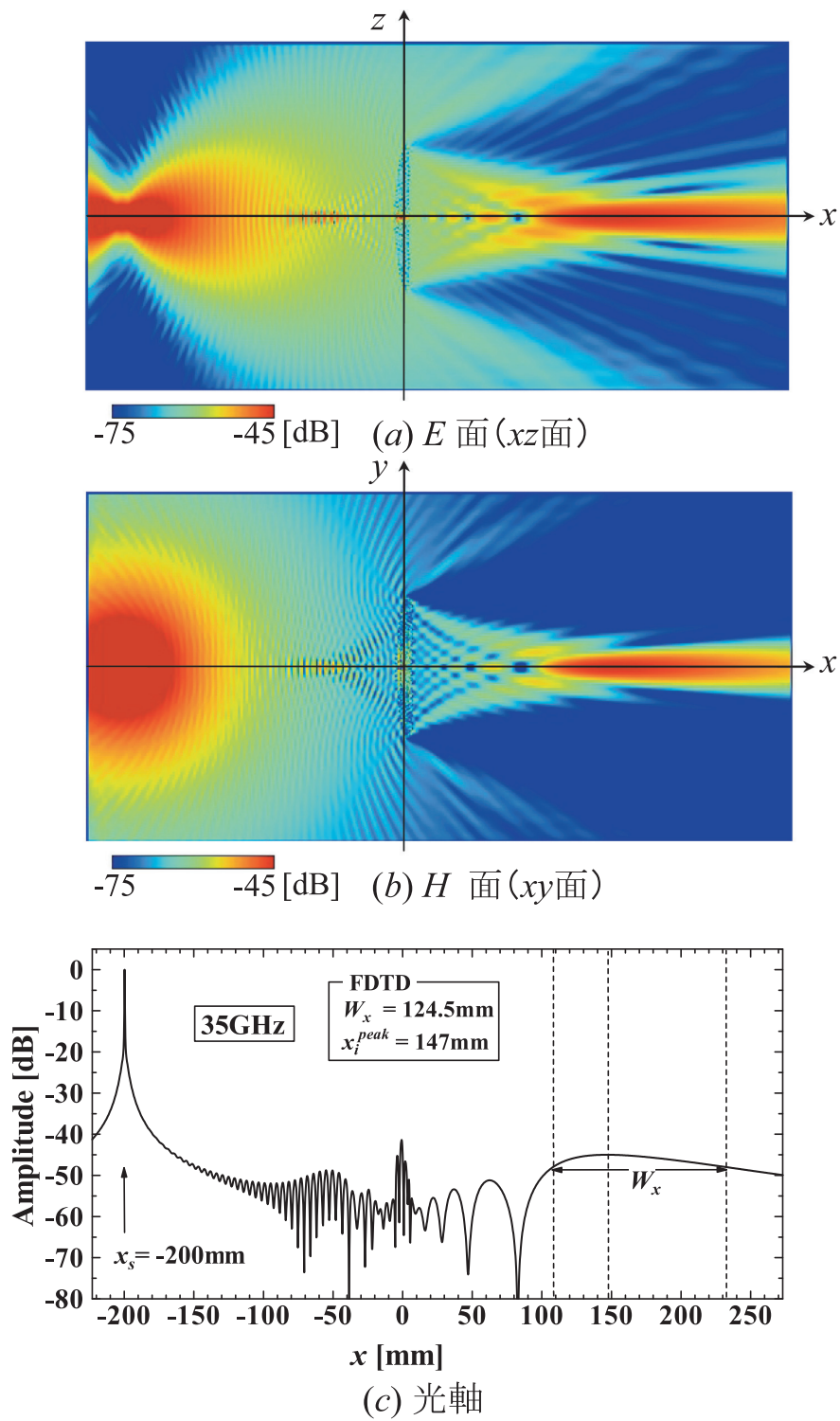


図3 電界強度分布 (ダイポールアンテナ, E_z 成分, $(x_s, y_s, z_s) = (-200\text{ mm}, 0, 0)$, 給電点における振幅で規格化), (a) xy 面 ($z = 0$), (b) x 軸 (光軸) 上

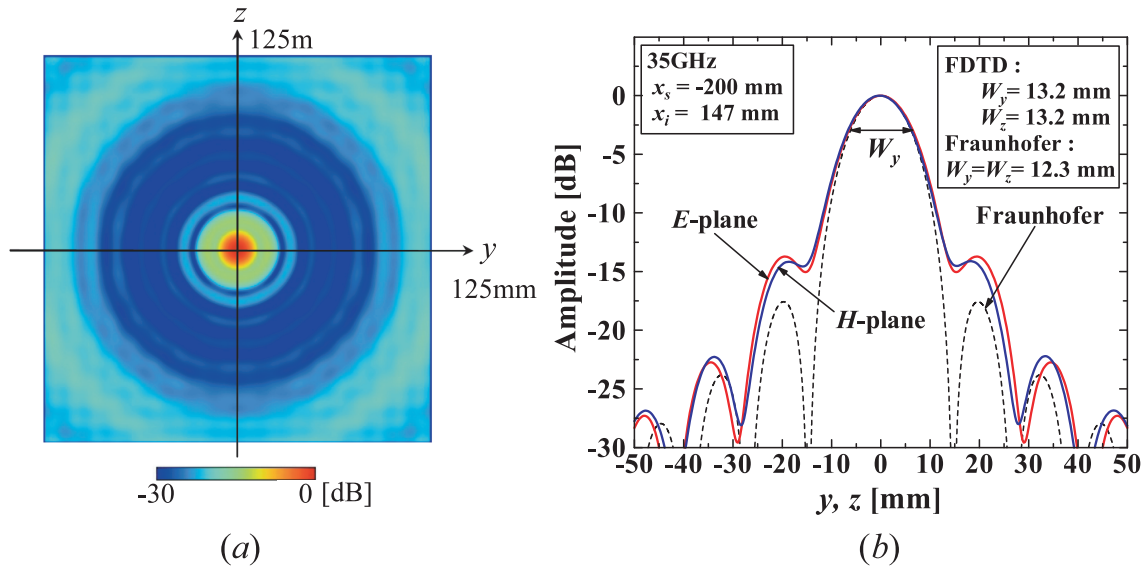


図4 $x_i = 147 \text{ mm}$ における回折パターン (E_z 成分, $(x_s, y_s) = (-200 \text{ mm}, 0)$, 最大振幅で規格化), (a) yz 面, (b) ダイポールアンテナの E 面と H 面

めた. これを図3に示す. 振幅はダイポールアンテナの給電点における値で規格化した. 図3(a)はダイポールアンテナの E 面を含む xz 面, 図3(b)は H 面を含む xy 面の分布である. ダイポールアンテナから放射された電界がレンズを介して結像される様子がわかる. E 面と H 面共にレンズ端部における回折が観測されている. また, ダイポールアンテナの E 面の指向性, H 面の無指向性を基にする分布の違いが観測されており, 特に $x > 0$ のレンズ近傍の領域 (フレネル領域) の振幅分布の違いは興味深い. 図3(c)は光軸 (x 軸) に沿う分布である. $x_s = -200 \text{ mm}$ の位置から伝搬損失による振幅の減衰が観測されているが, レンズ内部において共振しており振幅が上昇している. また, $x < 0$ のレンズ近傍では反射の影響により半波長周期の定在波が観測されている. $x > 0$ の領域では像面距離 $x_i^{peak} = 147 \text{ mm}$ において振幅が最大となり, 光線追跡法によって光学的に得られた像面距離 192 mm とは異なる結果であった. 光軸 (x 軸) に沿う方向の 3dB 幅は $W_x = 124.5\text{mm}$ (14.5λ) であり, 広い焦点深度が得られた.

$x_i^{peak} = 147 \text{ mm}$ における電界強度分布 (回折パターン) を図4に示す. 振幅は最大値で規格化した. 図4(a)は yz 面の分布, 図4(b)は E 面 (z 軸) と H 面 (y 軸) を含む分布である. 比較のため, (b)には円形開口に平面波が入射した場合の遠方近似 (フランホーファー近似) に基づく回折パターン

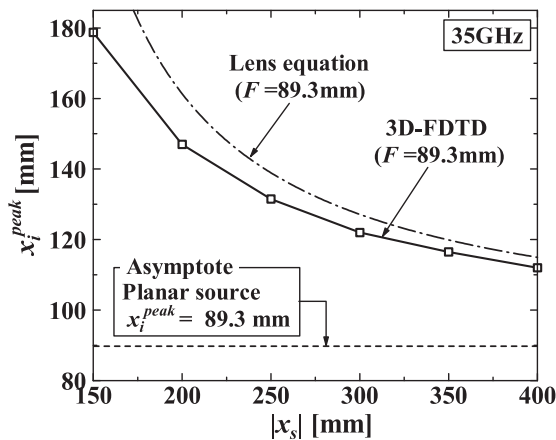


図5 波源距離に対する像面距離の変化

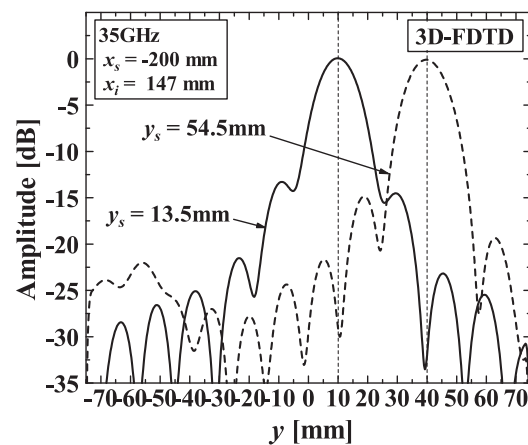


図6 $y_s = 13.5 \text{ mm}, 54.5 \text{ mm}$ のときの回折パターン

$$E(R) = \frac{\pi D^2}{2} \left[\frac{J_1(R)}{R} \right], \quad R = \frac{\pi D r}{\lambda x_i} \quad (1)$$

を合わせて示した. ここで D はレンズ口径, λ は波長, x_i は像面距離であり, J_1 は第1種ベッセル関数である. 図4(a)の分布においてほぼ円形の回折像が観測され, 図4(b)の分布においては E 面, H 面共にほぼ一致する回折パターンが観測された. 式(1)の第1暗線(エアリーディスク)位置は $r = 14.7 \text{ mm}$ であるが, FDTD法による計算値では暗線の位置がほぼ等しいものの, 振幅は -15 dB 程度の高い値であった. 3dB 幅 W_y, W_z は FDTD 解析値が 13.2 mm , 式(1)が 12.3 mm の概ね等しい値であった. 式(1)は遠方近似であるため両者が必ずしも一致する必要はなく, むしろレンズの厚さやレンズ端部の回折波, フレネル領域における電磁界のふるまいを含む FDTD 解析結果が高精度と考えられる.

レンズとダイポールアンテナの距離(波源距離) x_s を変化させたときの像面距離 x_i^{peak} の変化, および図2の平面波入射の解析モデル(A)を用いて得た焦点距離 F を図5に合わせて示す. 平面波入射の解析で得られた焦点距離は $F = 89.3 \text{ mm}$ であり, ダイポールアンテナがレンズから離れるにつれて像面距離 x_i^{peak} は F に漸近する. 参考までに, F と x_s , およびレンズの公式

$$\frac{1}{x_s} + \frac{1}{x_i} = \frac{1}{F} \quad (2)$$

により算出した像面距離 x_i^{peak} (一点鎖線) も示した. レンズ公式で求めた像面距離は FDTD 法により求めた像面距離とは異なる結果が得られた.

ダイポールアンテナを y 方向に移動したときの像面における回折パターンを計算した. W_y の広がり光学における収差を表しており, 収差が小さくなる y の範囲でぼけの少な

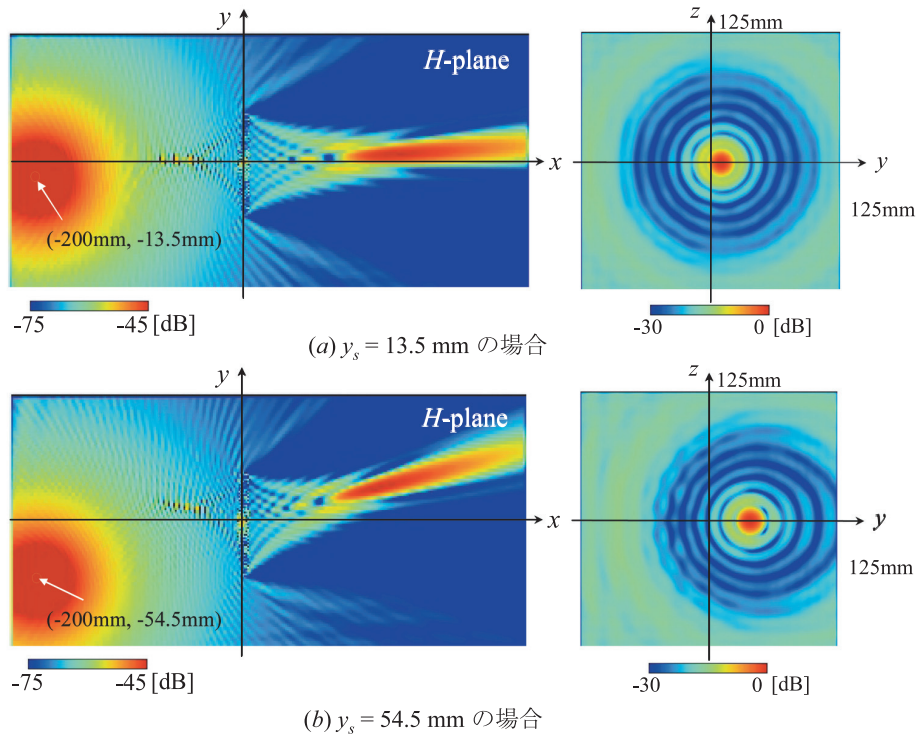


図7 y_s を変化したときの電界強度分布 (ダイポールアンテナ, E_z 成分)
 (a) $y_s = 13.5$ mm の場合, (b) $y_s = 54.5$ mm の場合

い視野が決まる. $y_s = 13.5$ mm, 54.5mm のときの回折パターンを図6に, 電界強度分布を図7に示す. $y_s = 54.5$ mm まで大きくしても W_y の変化, および振幅の低下も小さく, サイドローブはむしろ改善する結果が得られた. 以上の結果から, 距離 $x_s = -200$ mm の物体面では視野 100 mm \times 100 mm においてぼけの無い画像が期待できるものと考えられる.

3. APFA レンズアンテナの FDTD 解析

3. 1 APFA の位相中心

前節で求めたレンズの焦点距離 F の位置に1次放射器を配置してレンズアンテナを構成することを考える. パッシブイメージングにおいて, 検出するミリ波帯の熱雑音電力はアンテナの帯域に比例するため, 広帯域特性を持つアンテナが望まれる. 本稿では受信アンテナとして広帯域特性, およびレンズを見込む角度を照射する軸対称指向性を有する対称形フェルミアンテナ (APFA) を用いたレンズアンテナを解析する[9]. APFA は 35GHz を設計周波数として幅 λ , 長さ 4λ である.

初めに APFA の複素振幅放射パターンを FDTD 解析により求め, APFA の位相中心 p_x

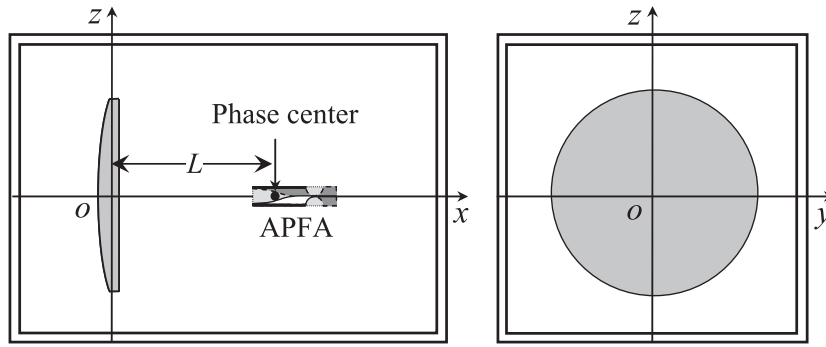


図8 APFAを素子とするレンズアンテナの解析モデル

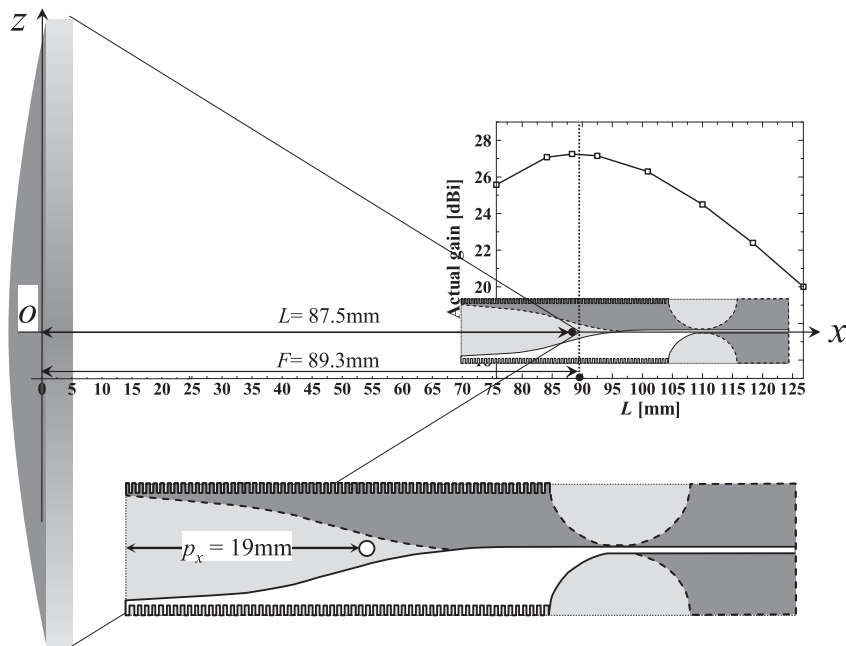


図9 レンズと位相中心間の距離 L を変化したときの APFA レンズアンテナの動作利得

を求めた。位相中心とは、その位置を中心とした場合に指向性の位相が一定となる位置である[6]。本稿では紙面の都合上導出過程を省略するが、APFAのE面とH面の位相中心の平均値として定義した位相中心は、アンテナ先端から $p_x = 19\text{mm}$ であった。これをアンテナの形状と共に図9に示す。

3.2 解析結果

APFA レンズアンテナの解析モデルを図8に示す。レンズとAPFAの位相中心間の距離を L とし、 L を変化させたときのレンズアンテナの動作利得を求めた。これを図9に示す。レンズとアンテナの相対的な大きさがわかるように工夫してある。 $L = 87.5\text{mm}$ のときに最大の動作利得 27.2dBi が得られた。この結果から、2節で得られたレンズの焦点距離 $F =$

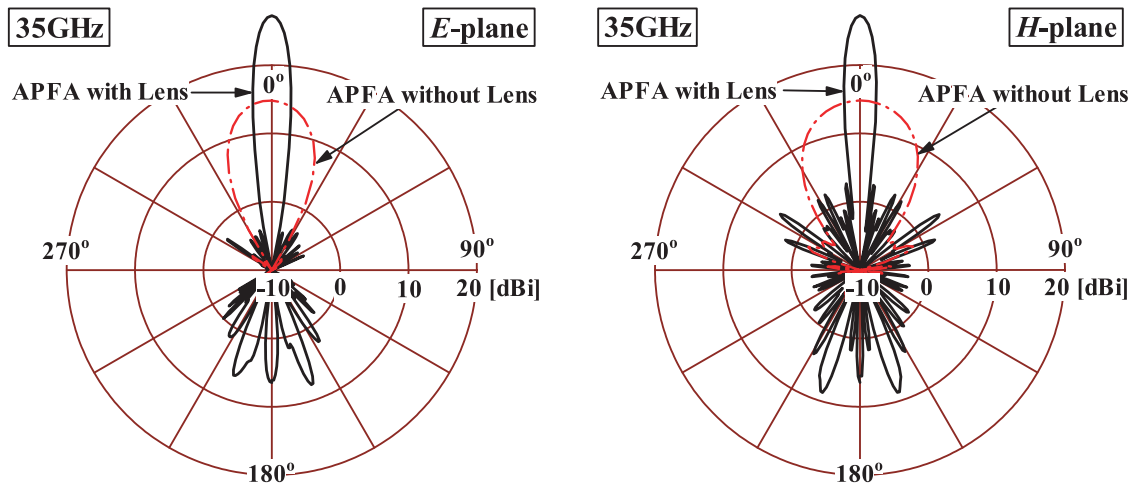


図 10 APFA レンズアンテナの動作利得パターン

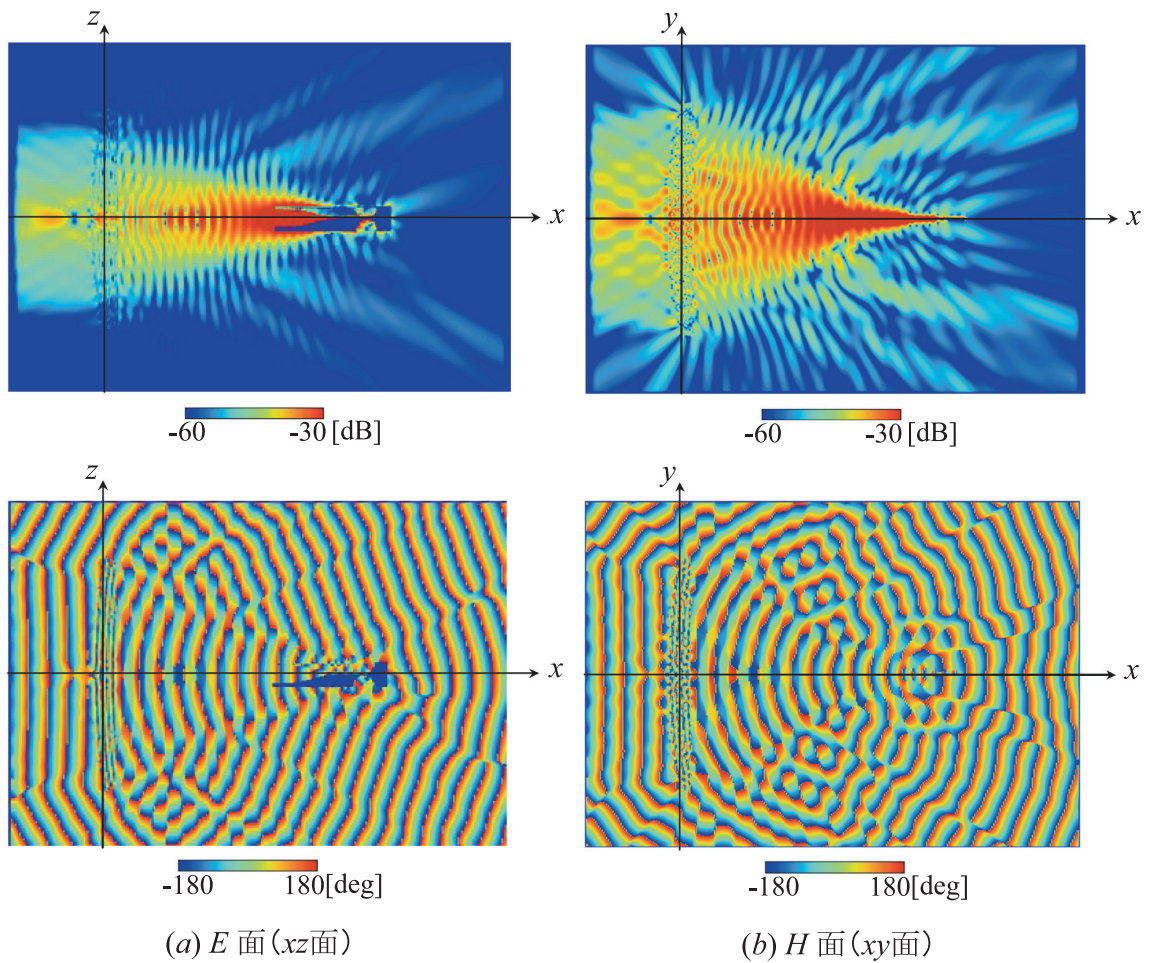


図 11 APFA レンズアンテナの電界 E_z 分布 (上段: 振幅, 下段: 位相)

(a) APFA の E 面 (xz 面), (b) APFA の H 面 (xy 面)

89.3 mmの位置に位相中心を一致させたときにレンズアンテナの効率が最大となることがわかった。 $L = 87.5$ mm のときの動作利得パターンを APFA の動作利得パターンと共に図 10 に示す。 APFA レンズアンテナのビーム幅は E 面, H 面それぞれ 6.8° , 6.2° の値が得られた。 $L = 87.5$ mm のときの APFA レンズアンテナの E 面と H 面の電界 E_z 分布を図 11 (a), (b) にそれぞれ示す。 図の上段は振幅分布, 下段は位相分布である。 E 面と H 面共にレンズの開口面において概ね一様な振幅と位相が得られていることがわかる。 実効開口面積は E 面の方がわずかに狭いが, これは APFA 単体の E 面放射パターンのビーム幅が H 面よりもわずかに狭いため, レンズの端部まで照射できなかったためと考えられる。 また, E 面と H 面の振幅分布双方において, レンズの表面における反射によって生じた後方放射が観測されている。 特に H 面の場合の反射が大きく, その効果は図 10 の動作利得パターンのバックローブとして観測されている。

4. むすび

小形レンズの基礎特性について3次元 FDTD 解析を用いて評価した。 また, 対せき形フェルミアンテナを1次放射器とするレンズアンテナの FDTD 解析を行った。 その結果, 光線追跡法や近似解析では得難い知見が得られた。 また, APFA レンズアンテナの動作利得を最大にするためには, APFA の軸対称指向性に加え, レンズの焦点距離と位相中心を一致させる必要があることが解析により明らかとなった。 なお, APFA のように複雑な構造を有するアンテナの3次元電磁界解析には, 大規模なメモリと高速演算処理が不可欠であり, スーパーコンピュータの利用が不可欠であることを付してむすびとする。

謝辞

本研究の一部は東北大学情報シナジーセンター(現東北大学サイバーサイエンスセンター)のスーパーコンピュータを利用し, 同センターとの共同研究で行われたものである。 また, 研究にあたっては同センターの有益なご指導と多大な協力をいただいた。 なお, 本研究の一部は文部科学省安全・安心科学技術研究プロジェクト「ミリ波パッシブ撮像装置の開発」(研究代表者佐藤弘康)の助成を得て行われた。

参考文献

- [1] K. Mizuno, "Millimeter wave imaging technologies (Invited)," Proc. 2001 Asia-Pacific Microwave Conference, pp.394-398, Taipei, Dec. 2001.
- [2] 佐藤弘康, 澤谷邦男, 水野皓司, 植村 順, 武田政宗, 高橋 順一, 山田 康太, 森近 慶一, 平井晴之, 新倉 広高, 松崎 智彦, 中田 淳, "77GHz 帯ミリ波パッシブ撮像装

- 置の開発", 2009 電子情報通信学会総合大会, CS-4-1, 松山, 2009.
- [3] 宇野亨, FDTD 法による電磁界およびアンテナ解析, コロナ社, 1998.
- [4] Y. Takagi, H. Sato, Y. Wagatsuma, K. Mizuno, and K. Sawaya, "Study of High Gain and Broadband Antipodal Fermi Antenna With Corrugation," Proceedings of 2004 International Symposium on Antennas and Propagation (ISAP'04), 1B2-1, pp69–72, Sendai, 2004.
- [5] H. Sato, Y. Takagi, Y. Wagatsuma, K. Mizuno, and K. Sawaya, "Time Domain Characteristics of Broadband Antipodal Fermi Antenna and Its Application To Through Wall Imaging," 2005 International Symposium on Antennas and Propagation (ISAP'05), Vol. I, pp. 387–390, Seoul, Korea, 2005.
- [6] H. Sato, K. Nakanishi, and K. Sawaya, "Delay Center of Broadband Antipodal Fermi Antenna and Its Application To Localization of Conducting Scatterer," 2007 International Symposium on Antennas and Propagation (ISAP'07), 1A4-5, pp. 41–44, Niigata, 2007.
- [7] H. Sato, Y. Murakami, K. Sawaya, and K. Mizuno, "FDTD Analysis of 81-element Antipodal Fermi Antenna Array with Axially Symmetric Array Element Pattern," IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium, San Diego, USA, 2008.
- [8] 的野 春樹, 我妻 壽彦, 水野 皓司, "ミリ波帯小型パッシブイメージング装置, "2004 年電子情報通信学会ソサイエティ大会, C-2-107, 2004.
- [9] 井上 大聡, 村上 仁康, 佐藤 弘康, 澤谷 邦男, 水野 皓司, "誘電体レンズアンテナの 3 次元 FDTD 解析, "2007 年電子情報通信学会総合大会, 名古屋, Mar. 2007.
- [10] 井上 大聡, 佐藤 弘康, 澤谷 邦男, 水野 皓司, "ミリ波パッシブイメージング用誘電体レンズの 2 次元 FDTD 解析, "電子情報通信学会技術研究報告, AP2007-142, pp.117-122, 沖縄, Jan. 2008.
- [11] 井上 大聡, 佐藤 弘康, 澤谷 邦男, 水野 皓司, "ミリ波イメージング用小形誘電体レンズアンテナの設計, "電子情報通信学会技術研究報告, AP2008-131, pp.115-120, 金沢, Nov. 2008.

[共同研究成果]

二次元スリットを有する流路における乱流及び乱流熱伝達の直接数値シミュレーションとそのモデル予測に関する研究

牧野 総一郎¹, 河村 洋¹, 岩本 薫²

¹ 東京理科大学 理工学部 機械工学科

² 東京農工大学 工学部 機械システム工学科

二次元スリットを有する流路における乱流及び乱流熱伝達の直接数値シミュレーション(DNS: Direct Numerical Simulation)を実施した。スリット後流域に見られる非対称現象や、その現象が熱流動特性に与える影響、スリット後方の乱流構造などを精査した。加えて、同様の乱流場において、ラージ・エディ・シミュレーション(LES: Large Eddy Simulation)及びレイノルズ平均乱流モデル計算(RANS: Reynolds Averaged Numerical Simulation)を実施して、それらの結果をDNSの結果と比較することで、実用的な乱流モデル計算に有用な知見を取得した。また、これらの情報を Web 上で乱流データベースとして世界に発信した。

1. 緒言

乱流中における輸送現象を理解することは、乱流熱伝達や乱流抵抗、さらには流体機械、熱機関等の設計においても極めて重要である。しかし、乱流は三次元、無限自由度、非定常、不安定、強非線形及び散逸を含む極めて複雑な力学系であるため、その現象の理解は容易ではない。このため、古くから実験や理論を中心に数多くの研究が続けられてきた。これらの研究に加え、近年では、計算機の急速な性能向上に伴い、数値計算を用いた乱流研究も盛んとなっており、乱流現象を予測、解明するために必要不可欠な研究手段となっている。乱流の数値計算手法は、直接数値シミュレーション(DNS: Direct Numerical Simulation)、ラージ・エディ・シミュレーション(LES: Large Eddy Simulation)、レイノルズ平均乱流モデル計算(RANS: Reynolds Averaged Numerical Simulation)の3つに大別され、それぞれの手法が対象となる課題に応じて選択され、重要な役割を果たしている。例えば、DNSはモデル化を一切行わない計算手法で、その信頼性の高さから、乱流現象の理解や解明、各種乱流モデルの評価・開発に欠かせない手法である。一方、設計時などの実用計算では、計算負荷の比較的小さなRANSやLESが幅広く選択され、工学的に重要なツールとなっている。

加えて、物体周りの流れや、形状の変化する流路内の流れなど、工学的に重要な流れ場は、その境界条件が複雑となる場合が多い。特に乱流場では、平均速度や平均圧力、乱流統計量などの空間的変化が単純ではなくなるため、その予測も一層困難となる。このような流れ場の多くは、衝突や剥離、再付着を伴う。そのため、従来よりバックステップ流(例えば、[1-3])を代表として、リブ周り(例えば、[4-7])や粗面を有する流路内の流れ(例えば、[8,9])など、剥離や再付着を伴う乱流場の数値実験が盛んに行われてきた。一方、著者の知る限り、本研究の対象であるスリットを有する流路における乱流場の詳細な数値実験は行われていない。スリットは流量の制御や効果的なスカラー混合のために工学的に幅広く用いられている。また、スリット近傍では、大規模な剥離や再付着、衝突の他に、流れの収縮も伴うより複雑な乱流場となる。従って、スリット近傍の乱流場を詳細に解析することは、スリットの工学的用途のみなら

ず、各種乱流モデルの予測精度の検証などにも貢献することができると考えられる。

また、スリット後方では、コアンダ効果の影響により、時間平均流が壁垂直方向に対して非対称となる[10-13]。この現象は、急拡大流路内の層流および乱流場にも見られる(例えば、[14-21])。このような非対称現象の発現により、壁面摩擦係数やヌセルト数の分布が、上下壁面間で大きく異なることがわかっている[10-13]。従って、スリット後方の配管減肉現象や熱伝達性能を高精度に予測するためには、このような非対称現象の予測が不可欠である。また、スリット後流の乱流統計量において、流れの収縮や加速の効果により、バックステップ乱流場では観察できない現象が生じる。乱流モデル計算を用いた場合、このような流れの収縮の効果が再現可能かどうかを検証することは重要である。

以上より、本研究の目的を以下にまとめる。

- スリットを有する流路内の乱流及び乱流熱伝達の DNS を実施し、スリット後流の特徴的な乱流構造や乱流統計量、乱流熱伝達性能を精査する。
- 同様の乱流場において LES 及び RANS を実施し、それぞれのケースを DNS の結果と比較・考察することで、実用計算に有用な知見を得る。

2. 計算手法

計算対象は、Fig. 1 に示すようにスリットを有する平行平板間流である。流れ(x)方向、スパン(z)方向には周期境界条件を、壁垂直(y)方向には滑りなし条件をそれぞれ課す。温度の境界条件は、下壁面を低温一定、上壁面を高温一定に保ち、その温度差を一定とした。また、スリットを構成する物体は、非常に優れた熱伝導性を仮定している。すなわち、下部側は下壁と同じく低温一定、上部側は高温一定である。流れは平均圧力勾配を課すことで駆動している。DNS の場合は、 $Re_{\tau_0} (= u_{\tau_0} \delta / \nu) = 10 - 1500$ 、バルク平均速度に基づくレイノルズ数では $Re_b (= u_b \delta / \nu) = 40 - 7800$ の層流域から乱流域に渡るまでの広範囲の計算を実施した。ここで、 u_{τ_0} はスリットが存在しないと仮定した場合に流れを駆動している平均圧力勾配から算出される壁面摩擦速度、 ν は動粘性係数、 δ はチャンネル半幅、 u_b はバルク平均流速を示す。DNS と比較する LES と RANS におけるレイノルズ数は、 $Re_{\tau_0} = 1500$ ($Re_b \sim 7800$) に設定した。スリットのスリット幅とチャンネル全幅の比 β は 0.5 とした。

2.1. Direct Numerical Simulation

流れの支配方程式は、次式に示す連続の式と Navier-Stokes 方程式及びエネルギー方程式である。

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial x_i^*} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + \frac{\partial (u_i^* u_j^*)}{\partial x_j^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \frac{1}{Re_{\tau_0}} \frac{\partial}{\partial x_j^*} (2S_{ij}^*) - \frac{\partial \langle p_x^* \rangle}{\partial x_1^*} \delta_{1i} - f_i^* \tag{2}$$

$$\frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\partial (u_j^* T^*)}{\partial x_j^*} = \frac{1}{Pr \cdot Re_{\tau_0}} \frac{\partial^2 T^*}{\partial x_j^{*2}} \tag{3}$$

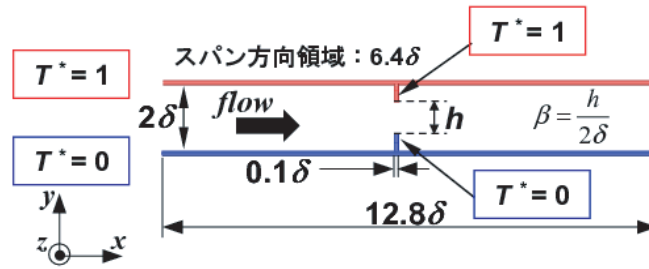


Fig. 1 Configuration of computational domain.

Table 1 Computational conditions.

(a)DNS:

Re_{τ_0}	10-20 (4cases)	30-60 (9cases)	1500
Re_b	40 - 110	180 - 3100	7800
β	0.5		
Pr	0.71		
Domain size	$12.8\delta \times 2\delta \times 6.4\delta$		
Grid number	$128 \times 96 \times 64$	$512 \times 128 \times 256$	$1024 \times 256 \times 512$
$\Delta x / (v / \langle u_{\tau} \rangle_{ave})$	1.10	3.84	4.94
$\Delta y_{min} / (v / \langle u_{\tau} \rangle_{ave})$	0.021	0.235	0.260
$\Delta y_{max} / (v / \langle u_{\tau} \rangle_{ave})$	0.898	5.29	6.25
$\Delta z / (v / \langle u_{\tau} \rangle_{ave})$	1.10	3.84	4.94

(b)LES and RANS:

Case	SMc	SMf	KEc	KEf1	KEf2	KWc1	KWc2	KWf
Re_{τ_0}	1500		1500			1500		
Model	Smagorinsky model		Low-Reynolds number $k-\epsilon$			Low-Reynolds number $k-\omega$		
Grid number	$128 \times 32 \times 32$	$128 \times 64 \times 32$	128×64	128×96	128×128	128×64	128×64	128×96

上付き文字*は、壁面摩擦速度 u_{τ_0} 、チャネル半幅 δ 及び上下壁面温度差 ΔT で無次元化されていることを示す。 S_{ij} はひずみ速度テンソルで、 $S_{ij}^* = 1/2 \cdot (\partial u_i^* / \partial x_j^* + \partial u_j^* / \partial x_i^*)$ である。 T は温度、 Pr はプラントル数である。 Table 1(a) に、本 DNS における計算領域長さ、メッシュ数、及び空間解像度を示す。空間解像度に関しては、 $Re_{\tau_0} = 10 - 20$ の場合は $Re_{\tau_0} = 20$ のケースの解像度を、 $Re_{\tau_0} = 30 - 600$ の場合は $Re_{\tau_0} = 600$ のケースの値を記載している。なお、壁面摩擦速度は x 方向に変化するため、空間解像度は実際に算出される壁面摩擦速度 u_{τ} の x 方向の空間平均値 $\langle u_{\tau} \rangle_{ave}$ を用いて算出したものである。

速度成分及び圧力はスタッガード格子点上に定義される。計算格子には、 x 、 z 方向に等間隔格子を適用し、 y 方向には壁近傍とスリットのふちの高さにおいて格子密度が大きくなるような不等間隔格子を用いた。離散化手法は有限差分法を用い、速度と圧力のカップリングには SMAC (Simplified Marker and Cell method) 法を用いた。時間離散化には、 y 方向の粘性項に 2 次精度 Crank-Nicolson 法を、その他の項に省記憶 3 次精度 Runge-Kutta 法を用いた。空間離散化には 2 次精度中心差分を用いた。圧力ポアソン式は、 x 方向と z 方向に FFT (Fast Fourier Transform) を適用し、各波数に対して y

方向に TDMA(Tri-Diagonal Matrix Algorithm)を用いて解いた。また、スリットは、Fadlum [22]の提唱する直接強制的境界埋め込み法を用いて表現した。

2.2. Large-Eddy Simulation

支配方程式は、粗視化された連続の式と Navier-Stokes 方程式及びエネルギー方程式である。SGS (Sub Grid-Scale)モデルには Van Driest 関数を含む Smagorinsky モデルを用いた。Smagorinsky 定数は $C_s=0.1$ とした。詳細に関しては参考文献[23]を参照されたい。Table 1(b)に、本 LES における格子点数などを示す。計算領域は DNS の場合と同様である。計算格子には、 z 方向に等間隔格子を適用し、 x 方向にはスリット近傍で格子密度が大きくなる不等間隔格子を、 y 方向には壁近傍とスリットのふちの高さにおいて格子密度が大きくなるような不等間隔格子を用いた。計算アルゴリズムは基本的には DNS の場合と同様であるが、 y 方向の粘性項以外の項の時間離散には、3 次精度 Adams-Bashforth 法を適用した。また、圧力ポアソン式は、 z 方向にのみに FFT を適用し、各波数の x - y 断面に対して ADI(Alternating Direction Implicit)法を用いて解く。DNS と同様にスリットは境界埋め込み法を用いて表現した。

2.3. Reynolds-Averaged Numerical Simulation

支配方程式は、レイノルズ平均された連続の式と Navier-Stokes 方程式及びエネルギー方程式である。乱流モデルには低レイノルズ数型 k - ω モデル[24]及び低レイノルズ数補正された k - ε モデル[25]を用いた。各モデルの詳細に関しては参考文献 [23]を参照されたい。Table 1(b)に、本 RANS における格子点数などを示す。計算領域は DNS の場合と同様である。2次元(x - y 断面)計算を行い、格子は LES の x - y 断面格子と等しく設定し、計算手法も LES とほぼ同様である。全ケースとも非定常計算を実施したが、本条件では収束解において顕著な非定常性は見られなかった。また、 k - ω モデルの計算には、汎用ソフト FLUENT6.3 を用いた。この場合、空間離散手法には有限体積法を用い、速度と圧力のカップリングには上記の方法と同様に SMAC 法を用いた。オイラー陰解法により時間離散を行い、空間離散には 2 次精度風上差分を用いた。格子は上記の格子と同様に、壁近傍、スリットの周辺で格子数を増加させる構造格子を用いた。なお、FLUENT6.3 を用いて標準 k - ε モデルの計算も実施している。その結果、非対称現象の再現などにおいて、本研究の標準 k - ε モデルの結果との差はなく、また、平均流速分布の差も小さいことを確認している。

3. 結果及び考察

3.1. DNS を用いたスリット後乱流場の解析

3.1.1. スリット後方の乱流構造

スリット後方の乱流構造について調べるために Fig. 2 に $Re_{\varepsilon,0}=100$ の場合の渦構造を示す。渦領域は速度勾配テンソルの第二不変量の等値面により定義される。渦の可視化領域はスリット下流域のチャンネル下半分である。スリット直後のせん断層において、Kelvin-Helmholtz(K-H)不安定によるスパン方向に伸びた比較的大規模な渦構造が観察される (Fig. 2 の A)。これらの K-H 渦は下流への移動に伴い 3 次的に変形する。この変形過程において、Fig. 2 の B に示すような流れ方向の縦渦を介した編み目状の複雑な構造が観察できる。このような縦渦を介した一連の構造は、乱流混合層やバックステップ乱流場のせん断層における渦構造と類似している[26,27]。さらに下流域では

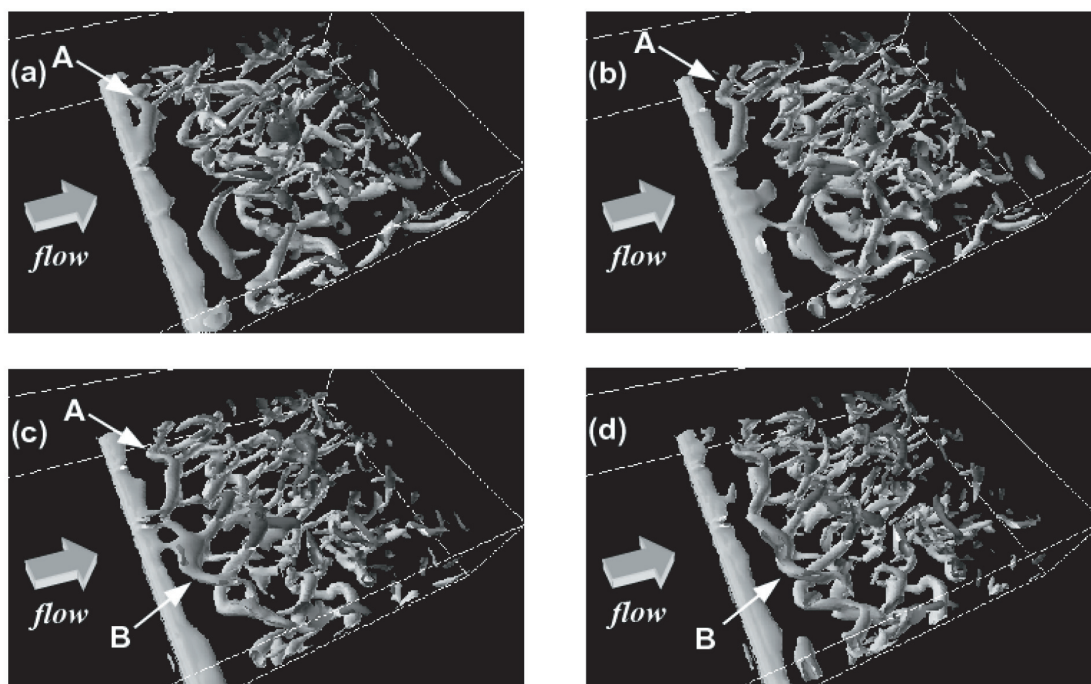


Fig. 2 Vortex structures behind the slit at $Re_{\tau 0}=100$. (a) $t^*=32600$; (b) $t^*=33000$; (c) $t^*=33400$; (d) $t^*=33800$.

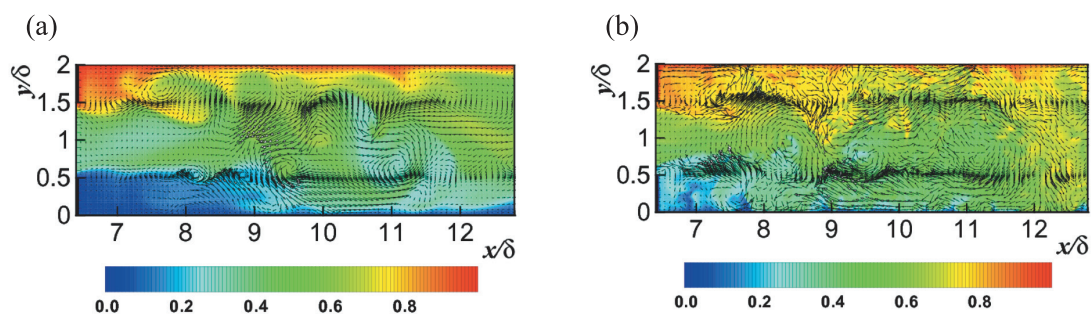


Fig. 3 Instantaneous temperature and fluctuation vectors in the range of $6.4 < x/\delta < 12.8$ at $z/\delta = 3.2$. (a) $Re_{\tau 0}=100$; (b) $Re_{\tau 0}=600$.

より小さな渦へ崩壊し、それらの渦はせん断層だけでなくチャネル中央部や壁付近においても観察される。次に、 $z/\delta=3.2$ の x - y 断面におけるスリット後方の渦構造と温度場の混合の関係について考察する。Fig. 3 に $Re_{\tau 0}=100$ 及び 600 のケースの瞬時の温度分布と変動速度のベクトルを示す。両ケースともに、温度場の大規模な巻き込みが生じている領域とほぼ対応して、旋回流が生じている様子が観察できる。また、レイノルズ数の増加に伴って変動速度の空間分布がより煩雑となり、それに対応して温度場の混合も促進される様子がわかる。

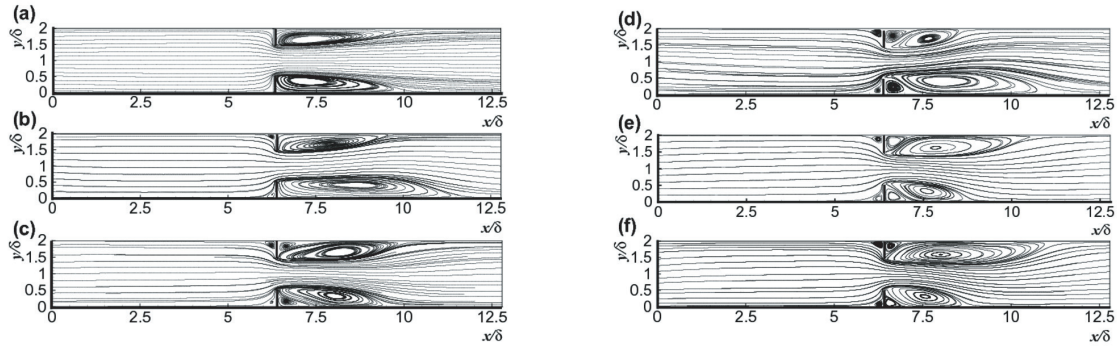


Fig. 4 Time-averaged streamlines. (a) $Re_{\tau_0}=20$; (b) $Re_{\tau_0}=50$; (c) $Re_{\tau_0}=100$; (d) $Re_{\tau_0}=300$; (e) $Re_{\tau_0}=600$; (f) $Re_{\tau_0}=1500$.

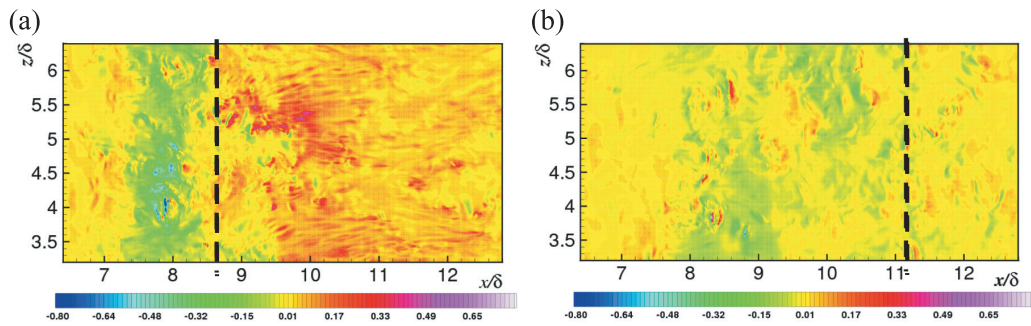


Fig. 5 Wall shear stress in the range of $6.4 < x/\delta < 12.8$ and $3.2 < z/\delta < 6.4$ for $Re_{\tau_0}=1500$. (a)on the lower wall; (b)on the upper one.

3.1.2. スリット後方の非対称現象と壁面摩擦応力

Figure 4 に $Re_{\tau_0}=20, 50, 100, 300, 600$ 及び 1500 の場合の時間平均流線図を示す. スリット後流において時間平均流が壁垂直方向に非対称となっていることが分かる. 本研究では, $Re_{\tau_0} < 20$, すなわち $Re_b < 110$ までは流れ場は完全に対称である. $Re_{\tau_0} \sim 120$ 付近で対称性が崩れ流れ場は非対称へと遷移する. その後, $Re_{\tau_0} = 1500$, すなわち, $Re_b=7800$ までレイノルズ数を増加させても流れ場は非対称のままであることがわかった. 上下どちらに傾くかは, 計算の初期に用いる乱れ場と計算発展に伴うランダムな非対称性に依存し, 確率は上下それぞれ 50% である. また, 時間進行に伴い, 傾く方向が変化することはない. すなわち, 例えば一度下方に傾くと, 以後下方に傾いたまま安定し続ける.

次に非対称現象が壁面摩擦に与える影響について考察する. Figure 5 に $Re_{\tau_0}=1500$ の場合の上下壁面における無次元壁面摩擦応力分布 $\tau_w^* (= 1/Re_{\tau_0} \cdot \partial U^*/\partial y^*|_{\text{wall}})$ を示す. ここで $U^* = U/u_{\tau_0}$, $y^* = y/\delta$ であり, U は流れ方向の平均流速を示す. 点線は上下壁におけるそれぞれの時間平均再付着位置を示す(再付着位置は壁面壁垂直方向速度勾配 $\partial U^*/\partial y^*|_{\text{wall}}=0$ となる点とする). 流れが偏る側, すなわち, ここでは下壁側(Fig. 5(a))において, 再付着位置の上流側に強い負の領域(青色)が存在し, 再付着後は顕著な正の

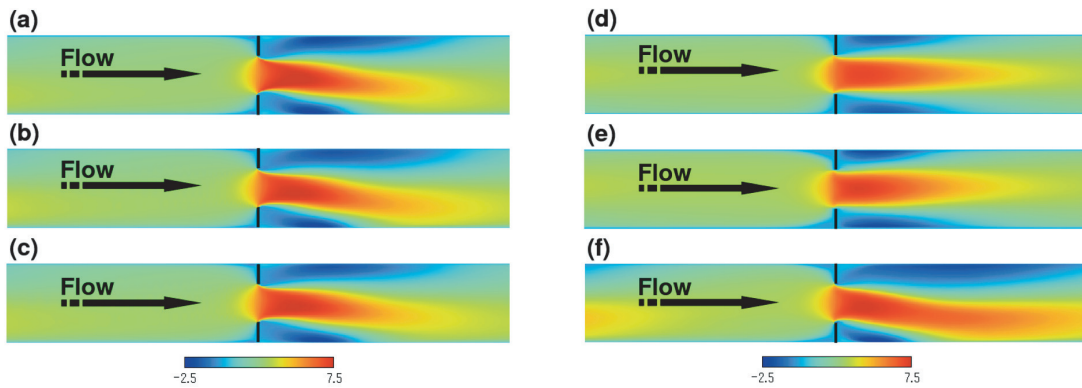


Fig. 6 Time-averaged streamwise velocity. (a)DNS; (b)SMc; (c)SMf; (d)KEf1; (e)KWc1; (f)KWc2.

領域(赤色)が観察できる。他方、上壁側(Fig. 5(b))においては、下壁側のような顕著な値を有する領域が存在しない。従って、スリット後方の非対称流において、流れが偏る側では偏らない側と比して、壁面摩擦応力が顕著に増大することがわかる。

3.2. スリット後流の予測に関するDNS, LES及びRANSの比較

3.2.1. スリット後流の非対称現象の予測

本節では、LES及びRANSを用いた場合の、スリット後方の非対称現象の予測精度に着目する。Fig. 6に各計算手法の流れ方向の時間平均された無次元流速分布を示す。Fig. 6では考察のため、非対称現象を発現する場合は下方に傾いたケースのみを採用している。SMc, SMf及びKWc2に関しては、DNSにおいて観察されるスリット後方の非対称現象を再現できることがわかる。他方、KEf1及びKWc1はほぼ対称に計算される。従って、LESは壁垂直方向の格子数に依らず非対称現象を予測できることがわかる。RANSでは、KWc2とKWfの k - ω モデルのみ非対称現象を再現できることがわかった(KWfについての図は省略)。 k - ϵ モデルは、壁垂直方向の格子数を64に減少させた場合(KEc)、また128と増加させた場合(KEf2)も、ほぼ対称に計算されることを確認している。 k - ϵ モデルを用いた場合は、壁付近において付加的な粘性が k - ω モデルのそれと比べて大きくなる(図略)。従って k - ϵ モデルは、実効的にはより低いレイノルズ数の流れとなるため、非対称現象を再現しにくいと考えられる。次に k - ω モデルの格子数の影響について考察する。KWc1とKWc2は格子数は同一であるが、KWc1は $y^+ < 5$ までに5点、その後 $y^+ \sim 50$ 付近に第6点目を設ける格子、一方、KWc2は、同様に $y^+ < 5$ までに5点設け、その後 $y^+ < 50$ までに更に5点設けた格子を用いている。ここで、 y^+ は $y^+ = y/(v/u_{\tau 0})$ と定義する。KWc1では非対称性を再現しにくく、KWc2では再現されることを考慮すると、 k - ω モデルにおいて非対称性を再現するためには、 $y^+ < 50$ 付近まで十分な格子がなければならないことがわかる。

3.2.2. 各計算手法/モデルの計算コスト及び計算精度

本研究のDNS, LES及びRANSの計算コストや計算精度を比較するために、Table 2に、それぞれの場合の総格子点数、1スカラーCPUで計算を実行したと仮定した場合

Table 2 Comparison of DNS, LES and RANS.

	DNS	LES	$k-\epsilon$	$k-\omega$
総格子点数	約 1 億 5000 万点	約 25 万点	約 1 万点	約 1 万点
計算時間(1 スカラーCPU 当り)	約 80000 時間	約 100 時間	1 時間	1.5 時間
非対称現象の再現	-	◎	×	○
C_{fmax} の誤差	-	+5%	-30%	+15%

のおおよその計算時間、非対称現象の予測性能及び計算精度の一例として、スリット後流域の壁面摩擦係数の最大値の DNS からの誤差を示す。DNS の必要計算時間は 80000 時間、すなわち約 9 年以上必要となる(実際は大規模並列計算を行っているので、500 時間程度)。一方、LES は約 100 時間、 $k-\epsilon$ モデルは 1 時間、 $k-\omega$ モデルは 1.5 時間程度で済むことから、RANS、特に数値計算的に安定で短時間で計算可能である $k-\epsilon$ モデルが優位であることは明確である。一方、計算精度に着目すると、非対称現象を予測できない $k-\epsilon$ モデルは壁面摩擦応力のピーク値を大幅に過小評価することがわかる。非対称現象の予測が可能な $k-\omega$ モデルでも誤差は 15% であるのに対し、LES の誤差は 5% であり、精度に着目すれば LES が有効であることは言うまでもない。しかし、 $k-\omega$ モデルの 15% も許容の範囲かもしれないし、値のオーダーが大体合っていれば良いのであれば、 $k-\epsilon$ モデルでも十分かもしれない。それは、計算の目的(例えば、求められる精度はどの程度か、開発期間はどの位か、使用可能な計算資源はどの程度か)によってユーザーが決定することであり、その際に最も重要となることは、Table 2 からわかるように、ユーザーが、用いる計算手法/モデルに関して最良の選択を行うことである。従って、本研究のようなモデルの比較研究では、単にモデル/計算手法の優劣を競うのではなく、各モデルの特徴や計算コストを明確にして、実用計算に有用な情報を提供することが最も重要であると言える。

4. 結論

1. スリット直後のせん断層において Kelvin-Helmholtz 不安定により大規模な渦が形成される。この大規模渦は下流へ向かうにつれ、3 次元的に歪められ、最終的により小さな構造へ崩壊する。
2. $Re_b > 110$ では、スリット後方において、コアンダ効果の影響により時間平均流が壁垂直方向に非対称となることがわかった。また、流れが偏る側では、反対側と比べて壁面摩擦応力のピーク値が大きくなることを明らかにした。
3. LES は格子数に依らずスリット後方時間平均流の非対称現象の予測が可能であることを示した。RANS に関して、 $k-\epsilon$ モデルは壁近傍の付加粘性を過大評価するため非対称現象の予測には適していない。一方、 $k-\omega$ モデルは壁近傍に十分な格子を確保すれば、非対称現象の予測が可能であることを明らかにした。
4. DNS, LES 及び RANS の比較により、世界的にもオリジナルな乱流場において、計算手法やモデルによる計算精度/計算負荷などの違いを明確に示し、実用計算に有用な知見を提供した。
5. 本研究で得られた成果の一部を Web 上にて乱流データベースとして世界に発信した(<http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/index.html>)。

謝辞

DNS の大部分には東北大学情報シナジーセンター（現 東北大サイバーサイエンスセンター）の計算機 SX-7/7C を用いて行った。また、本研究は、私学・学術フロンティア推進事業「ホリスティックアプローチによる計算科学の新展開」による支援を受けている。ここに記して謝辞を表す。

参考文献

- [1] Friedrich, R. and Arnal, M., "Analysing turbulent backward-facing step flow with the lowpass-filtered Navier-Stokes equations", *J. Wind Engng. Indust. Aerod.*, 35 (1990), 101-128.
- [2] Le, H., Moin, P. and Kim, J., "Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step", *J. Fluids Mech.* 330 (1997), 349-374.
- [3] Avancha, R. V. R. and Pletcher, R. H., "Large eddy simulation of the turbulent flow past a backward-facing step with heat transfer and property variations", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 23 (2002), 601-614.
- [4] Leonardi, S., Orlandi, P., Smalley, R. J., Djenidi, L. and Antonia, R. A., "Direct numerical simulation of turbulent channel flow with transverse square bars on one wall", *J. Fluids. Mech.*, 491 (2003), 229-238.
- [5] Yakhot, A., Liu H. and Nikitin N., "Turbulent flow around a wall-mounted cube; A direct numerical simulation", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 27 (2006), 994-1009.
- [6] Kawamura, F., Seki, Y., Iwamoto, K. and Kawamura H., "DNS of heat transfer in turbulent and transitional channel flow obstructed by rectangular prisms", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 28 (2007), 1291-1301.
- [7] Sewall, E. A., Tafti, D. K., Graham, A. B. and Thole, K. A. "Experimental validation of large eddy simulations of flow and heat transfer in a stationary ribbed duct", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 27 (2006), 243-258.
- [8] Nagano, Y., Hattori, H. and Houra, T., "DNS of velocity and thermal fields in turbulent channel flow with transverse-rib roughness", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 25 (2004), 393-403.
- [9] Krogstad, P. -A., Andersson, H. I., Bakken, O. M. and Ashrafiyan A., "An experimental and numerical study of channel flow with rough walls", *J. Fluids. Mech.*, 530 (2005), 327-352.
- [10] Makino, S., Iwamoto, K. and Kawamura, H., "Vortex structures and turbulent statistics in turbulent flow behind an orifice", *Proc. 5th Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, 2 (2007), 823-828.
- [11] Makino, S., Iwamoto, K. and Kawamura, H., "Turbulent structures and statistics in turbulent channel flow with two-dimensional slits", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 29 (2008), 602-611.
- [12] 牧野 総一郎, 岩本 薫, 河村 洋, "矩形オリフィス後流における乱流熱伝達の直接数値シミュレーション", *Thermal Science & Engineering*, 15-4 (2007), 175-183.
- [13] Makino, S., Iwamoto, K. and Kawamura, H., "DNS of turbulent heat transfer through two-dimensional slits", *Progress in Comp. Fluid Dyn.*, 8 (2008), 397-405.
- [14] Cherdrón, W., Durst, F. and Whitelaw, J. H., "Asymmetric flows and instabilities in symmetric ducts with sudden expansion", *J. Fluids. Mech.*, 84 (1978), 13-31.
- [15] Cherdrón, W., Durst, F. and Whitelaw, J. H., "Asymmetric flows and instabilities in symmetric ducts with sudden expansion", *J. Fluids. Mech.*, 84 (1978), 13-31.

- [16] Fearn, R. M., Mullin, T. and Cliffe, K. A., "The plane symmetric sudden-expansion flow at low Reynolds numbers", *J. Fluids. Mech.*, 211 (1990), 595-608.
- [17] Durst, F., Pereira, J. C. F. and Tropea, C., "Nonlinear flow phenomena in a symmetric sudden expansion", *J. Fluids. Mech.*, 248 (1993), 567-581.
- [18] 太田 照和, 柳岡 英樹, 畑 孝典, "二次元対称急拡大流路内流れと熱伝達の数値解析", *日本機械学会論文集*, B 60-579 (1994), 3930-3936.
- [19] Alleborn, N., Nandakumar, K., Raszillier, H. and Durst, F., "Further contributions on the two-dimensional flow in a sudden expansion", *J. Fluids. Mech.*, 330 (1997), 169-188.
- [20] 太田 照和, 柳岡 英樹, 渋谷 一幸, 中島 円, 吉川 浩行, "急拡大矩形流路内のはく離流れと熱伝達の数値解析", *日本機械学会論文集*, B 66-648 (2000), 2109-2116.
- [21] Escudier, M. P., Oliveira P. J. and Poole, R. J., "Turbulent flow through a plane sudden expansion of modest aspect ratio", *Phys. Fluids.*, 14 (2002), 3641-3654.
- [22] Fadlum, E. A., Verzicco, R., Orlandi, P. and Mohd-Yusof, J., "Combined Immersed-Boundary Finite-Difference Methods for Three-Dimensional Complex Flow Simulations", *J. Comp. Phys.*, 161 (2000), 35-60.
- [23] 牧野 総一郎, 生田 貴大, 河村 洋, 岩本 薫, 武田 哲明, "矩形オリフィス後流の予測に関する DNS, LES 及び RANS の比較", *第21回数値流体力学シンポジウム* (2007), CD-ROM.
- [24] 安部 賢一, 長野 靖尚, 近藤 継男, "はく離・再付着を伴う乱流場への適用を考慮した k - ϵ モデル", *日本機械学会論文集*, B 58-554 (1992), 3003-3010.
- [25] Wilcox, D. C., "Comparison of Two-Equation Turbulence Models for Boundary Layers with Pressure Gradient", *AIAA Journal*, 31-8 (1993), 1414-1421.
- [26] Comte, P., Lesieur, M. and Lamballais, E., "Large- and small-scale stirring of vorticity and a passive scalar in a 3-D temporal mixing layer", *Phys. Fluids.*, A 4 (1992), 2761-2778.
- [27] Neto, A. S., Grand, D., Metais, O. and Lesieur, M., "A numerical investigation of the coherent vortices in turbulence behind a backward-facing step", *J. Fluids Mech.*, 256 (1993), 1-25.

[大規模科学計算システムの利用法]

ライブラリ・アプリケーションの紹介

(2009 年 4 月)

共同利用支援係

はじめに

本センター大規模科学計算システムでは、プログラミングのための科学技術計算ライブラリや、構造解析、分子軌道計算、統計データ解析、グラフ処理等々の各アプリケーションソフトウェアを、利用者の幅広い要望にお応えしてサービスしております。

この稿では、スーパーコンピュータ・並列コンピュータ上でサービスしているライブラリプログラム、アプリケーションソフトウェアの紹介をします。

表1 サービス一覧表

システム	プログラミング言語	ライブラリ	アプリケーション
スーパーコンピュータ SX-9 super.isc.tohoku.ac.jp	Fortran90/SX C++/SX	ASL/SX MathKeisan for SX	
並列コンピュータ TX7/i9610 gen.isc.tohoku.ac.jp	Fortran95 C++	ASL MathKeisan	Gaussian03 MSC.Marc Mentat Sas Mathematica Matlab

ライブラリ、アプリケーションの紹介は、以下の URL の本センター大規模科学計算システムホームページにも掲載しております。

大規模科学計算システム ホームページ(以下「ホームページ」)

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/>

本文中、関連 Web ページについて、ホームページからのリンクを記載しております。ホームページから項目をクリックして参照ください。ライブラリ、アプリケーションの紹介は、ホームページの「ライブラリ」、「アプリケーション」にあります。本稿中の内容は 2009 年 4 月現在のものですので、今後のバージョンアップや利用方法の最新情報については、これらの Web ページを随時ご確認ください。

ご利用の前に

シエルの初期設定

大規模科学計算システムでは、お勧めの環境設定を用意しております。これにより、パスなどの基本的な設定、また各アプリケーションの環境変数等が自動的に設定されます。これは、利用登録時に個々のIDにあらかじめ行っておりますので、通常は作業の必要はありません。

ライブラリやアプリケーションが利用できないという場合は、この設定が変更されていることが考えられます。以下の Web ページを参照してご確認ください。

「ホームページ」 → 「アプリケーション」 → 「シエルの初期設定」
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/init.html>

接続、ファイル転送

スーパーコンピュータ、並列コンピュータへの接続方法やファイル転送の方法については、
「ホームページ」 → 「ログイン・転送等」 → 「リモートログインについて」
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/Rlogin/>

「ホームページ」 → 「ログイン・転送等」 → 「ファイル転送について」
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/FTP/>
を参照ください。

Windows から X アプリケーションを 利用する方法

ほとんどのアプリケーションの実行に、X Window System 環境の設定が必要です。
Microsoft Windows から X window System アプリケーションを利用するための方法については、以下を参照ください。

「ホームページ」 → 「ログイン・転送等」 → 「Windows からの X アプリケーションの利用」
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/>

ライブラリ

スーパーコンピュータ SX-9

Fortran90/SX,C++/SX 用

科学技術計算ライブラリ ASL/SX

数学ライブラリ MathKeisan for SX

並列コンピュータ TX7/i9610

Fortran95,C++ 用

科学技術計算ライブラリ ASL

数学ライブラリ MathKeisan

科学技術計算ライブラリ **ASL/SX**、**ASL**

ASL/SX は SX シリーズ用の科学技術計算ライブラリで、数値計算が必要とされるさまざまな分野の数値シミュレーションプログラムの作成を強力に支援します。

ASL/SX はスーパーコンピュータのベクトル機能を十分利用した基本機能、アルゴリズムレベルからスーパーコンピュータに対応した高速機能、SX の並列機能を十分発揮する並列機能の 3 つの機能から構成されています。また、並列コンピュータにも **ASL** が提供されており、分散開発に最適です。

次のような数値計算分野に対応しています。

< 基本機能 >

基本行列演算, 連立 1 次方程式(直接法), 連立 1 次方程式(反復法), 最小二乗法, 固有値・固有ベクトル, フーリエ変換とその応用/時系列分析, 近似・補間, スプライン関数, 数値微分, 数値積分, 方程式の根, 極値問題・最適化, 常微分方程式・積分方程式, 特殊関数, 乱数

< 高速機能 >

行列のデータ格納変換, 連立 1 次方程式(直接法), 対称連立 1 次方程式(反復法), 最小二乗法, 固有値・固有ベクトル, 高速フーリエ変換(FFT), スプライン関数, 3 次元境界要素法用の数値積分法

< 並列処理機能 >

基本行列演算, 連立 1 次方程式(直接法), 固有値・固有ベクトル, フーリエ変換とその応用/時系列分析

プログラミング言語・コンパイラ

ASL/SX (スーパーコンピュータ)

Fortran90/SX ・ `sxf90,sxmpif90`

C++/SX ・ `sxcc,sxmpicc`

ASL (並列コンピュータ)

Fortran95 ・ `f95,mpif95`

C++ ・ `cc,mpicc`

利用方法

ASL/SX、ASL ライブラリは自動的にリンクされます。設定は特に必要ありません。

コンパイルはすべて並列コンピュータ上で行います。

プログラムのコンパイルについては、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」の「コンパイル」および「新スーパーコンピュータ SX-9」の「スーパーコンピュータ SX-9 利用ガイド」を参照ください。

ASL/SX のコンパイル

```
[gen ~]$ sxf90 source.f      ベクトル版 ASL/SX がリンクされます
```

```
[gen ~]$ sxf90 -Pauto source.f 並列版 ASL/SX がリンクされます
```

```
[gen ~]$ sxcc source.c
```

ASL のコンパイル

```
[gen ~]$ f95 source.f
```

*C 言語の場合は、オブジェクトを作成した後、f95 で ASL ライブラリをリンクする。

```
[gen ~]$ cc -c source.c
```

```
[gen ~]$ f95 -nofor_main source.o -laslcint -lasl
```

コンパイル後の実行方法については、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」の「プログラム実行」および「スーパーコンピュータ SX-9」の「スーパーコンピュータ SX-9 利用ガイド」を参照ください。

マニュアル

PDF 形式マニュアルを提供しています。

各マニュアルは、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の以下のディレクトリにあります。
gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、`acroread` コマンドでご覧ください。

[FORTRAN]

ASL/SX /usr/ap/ASL-man-super/PDF/ASL_SX/pdf/

- 1main.pdf : 基本機能編 第 1 分冊
(基本行列演算、連立 1 次方程式(直接法、反復法))
- 2main.pdf : 基本機能編 第 2 分冊
(最小二乗法、固有値・固有ベクトル、フーリエ変換とその応用/時系列分析)
- 3main.pdf : 基本機能編 第 3 分冊
(補間・近似、スプライン関数、数値微分、数値積分、方程式の根、極値問題・最適化)
- 4main.pdf : 基本機能編 第 4 分冊
(微分方程式とその応用、特殊関数、乱数、ソート・順位付け)
- 5main.pdf : 高速機能編
- 6main.pdf : 並列処理機能編

[C/C++]

ASL/SX /usr/ap/ASL-man-super/PDF/CINT_SX/pdf/

- 1main.pdf : 基本機能編 第 1 分冊
(基本行列演算、連立 1 次方程式(直接法、反復法))
- 2main.pdf : 基本機能編 第 2 分冊
(最小二乗法、固有値・固有ベクトル、フーリエ変換とその応用/時系列分析)
- 3main.pdf : 基本機能編 第 3 分冊
(補間・近似、スプライン関数、数値微分、数値積分、方程式の根、極値問題・最適化)
- 4main.pdf : 基本機能編 第 4 分冊
(微分方程式とその応用、特殊関数、乱数、ソート・順位付け)
- 5main.pdf : 高速機能編
- 6main.pdf : 並列処理機能編

[FORTRAN]

- ASL** /usr/ap/ASL-man-gen/PDF/ASL/
1MAIN.PDF : 基本機能編 第1分冊
(格納モードの変換、基本行列演算、最小二乗法、固有値・固有ベクトル)
2MAIN.PDF : 基本機能編 第2分冊
(連立1次方程式(直接法))
3MAIN.PDF : 基本機能編 第3分冊
(連立1次方程式(反復法)、対称連立1次方程式(反復法)、非対称連立1次方程式(反復法))
4MAIN.PDF : 基本機能編 第4分冊
(フーリエ変換とその応用/時系列分析)
5MAIN.PDF : 基本機能編 第5分冊
(微分方程式とその応用、数値微分、数値積分、3次元境界要素法用の数値積分法、補間・近似、スプライン関数)
6MAIN.PDF : 基本機能編 第6分冊
(特殊関数、乱数、ソート・順位付け、方程式の根、極地問題・最適化)
8MAIN.PDF : 並列処理機能

[C/C++]

- ASL** /usr/ap/ASL-man-gen/PDF/CINT/
1MAIN.PDF : 基本機能編 第1分冊
(格納モードの変換、基本行列演算、最小二乗法、固有値・固有ベクトル)
2MAIN.PDF : 基本機能編 第2分冊
(連立1次方程式(直接法))
3MAIN.PDF : 基本機能編 第3分冊
(連立1次方程式(反復法)、対称連立1次方程式(反復法)、非対称連立1次方程式(反復法))
4MAIN.PDF : 基本機能編 第4分冊
(フーリエ変換とその応用/時系列分析)
5MAIN.PDF : 基本機能編 第5分冊
(微分方程式とその応用、数値微分、数値積分、3次元境界要素法用の数値積分法、補間・近似、スプライン関数)
6MAIN.PDF : 基本機能編 第6分冊
(特殊関数、乱数、ソート・順位付け、方程式の根、極地問題・最適化)
8MAIN.PDF : 並列処理機能

印刷版マニュアルは、本センター本館1階 利用相談室に備えてあります。

数学ライブラリ集 MathKeisan for SX 、 MathKeisan

MathKeisan for SX および **MathKeisan** は NEC のハイパフォーマンス・コンピュータ用に高度に最適化された数学ライブラリ集です。

MathKeisan for SX および **MathKeisan** に含まれるライブラリは以下のとおりです。

※MathKeisan for SX および MathKeisan のいくつかのサブルーチンについては、同機能のものが ASL/SX および ASL にも含まれています。

ASL/SX、ASL は、さらに日本電気製マシン用に最適化されたライブラリですので、同機能であれば、ASL/SX および ASL の利用をお勧めします。

BLAS	ベクトル、行列の基本演算
LAPACK	高性能コンピュータ用連立一次方程式、固有値解析
ScaLAPACK	連立一次方程式、固有値解析 (MPI による並列版、PBLAS を含む)
BLACS	ベクトル、行列の基本演算のためのメッセージパッシングライブラリ
PARBLAS	共有メモリ用の並列版 BLAS (for SX のみ)
CBLAS	BLAS の C インタフェース
SBLAS	スパース BLAS (ACM Algorithm 692 参照)
FFT	HP VECLIB 並びに SGI/CRAY LIBSCL 3.1 のインタフェースを持つ FFT
PARFFT	HP VECLIB 並びに SGI/CRAY LIBSCL 3.1 のインタフェースを持つ共有メモリ用の並列版 FFT (for SX のみ)
METIS	行列、グラフの並べ替え、分割ライブラリ
ParMETIS	行列、グラフの並べ替え、分割の並列版ライブラリの並列版 METIS (MPI による並列版)
SOLVER	対称疎行列線形問題の直接法ソルバ
ARPACK	大規模固有値解析

プログラミング言語・コンパイラ

MathKeisan for SX (スーパーコンピュータ)

Fortran90/SX ・ `sxf90,sxmpif90`

C++/SX ・ `sxcc,sxmpicc`

MathKeisan (並列コンピュータ)

Fortran95 ・ `f95,mpif95`

C++ ・ `cc,mpicc`

利用方法

各ライブラリをリンクするには、コンパイル時にオプションを指定します。
それぞれのリンク用オプションについてはマニュアルを参照してください。

Fortran/SX で LAPACK をリンクする例

```
[gen ~]$ sxf90 source.f -llapack -lblas
```

コンパイルはすべて並列コンピュータ上で行います。

プログラムのコンパイル、コンパイル後の実行方法については、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」の「コンパイル」、「プログラムの実行」および「スーパーコンピュータ SX-9」の「スーパーコンピュータ SX-9 利用ガイド」を参照ください。

マニュアル

HTML形式のマニュアルを提供しています。

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、以下のコマンドでご覧ください。

スーパーコンピュータ SX-9 用

```
[gen]$ w3m /usr/ap/MathKeisan-man/SX-9/J/cover.html
```

並列コンピュータ用

```
[gen]$ w3m /usr/ap/MathKeisan-man/gen/J/cover.html
```

アプリケーション

非経験的分子軌道計算プログラム **Gaussian03**

Gaussian プリポストシステム **MolStudio**

汎用構造解析プログラム **MSC.Marc / MSC.Marc Mentat**

構造解析用汎用プリプロセス **MSC.Patran**

数式処理プログラム **Mathematica**

科学技術計算言語 **MATLAB**

データ解析システム **SAS**

非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian

Gaussian は、Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージです。広範囲にわたる非経験的モデルおよび半経験的モデルをサポートしております。

本センターの Gaussian には、以下のような特長があります。

- * 最大 16 並列までの並列処理が行え、実行時間の短縮が可能です。
- * スクラッチファイル(テンポラリファイル)を専用の高速ディスクに置くことにより、ファイル入出力時間が短縮されます。

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ Gaussian03 RevE.01

利用方法

Gaussian のプリポストシステムとして MolStudio を提供しております。

「MolStudio」 <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/molst.html>

Gaussian の利用方法は

「Gaussian の使い方」 <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/gaussian/> をご覧ください。以下は抜粋です。

実行コマンド

Gaussian のインプットファイルは、拡張子を .com とします。(例: e2_01.com)

※インプットファイルを Windows のエディタで作成した場合、拡張子.com のファイルは Windows では実行ファイルと認識されるため、誤ってダブルクリックなどでインプットファイルを実行しないようご注意ください。また、ファイル転送ソフトで gen に転送する際には、アスキーモードを指定して転送を行ってください。

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、subg03 コマンドに、キュー名と入力プログラム名を指定することにより、バッチリクエストとして実行が行われます。

e2_01.com を解析するコマンド例

(subg03 コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子 .com を省きます)

```
[gen ~]$ subg03 a16 e2_01
```

subg03 コマンドで指定できるキュー

キュー名 (ジョブクラス)	利用可能 CPU 数 (並列数)	CPU 時間	メモリサイズ制限 (GBytes)
as	4	無制限	8
a8	8	無制限	64
a16	16	無制限	128

データの大きさなどにより選択してください。

バッチリクエストの状態確認、キャンセルについては、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」の「バッチ処理」を参照ください。

16 並列実行の指定

こちらでサービスしている Gaussian では、16 並列までの並列処理が可能です。
大きな分子の解析にぜひご利用ください。

16 並列で実行するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの `%NProc=16` を追加します。
手入力の場合は、テキストエディタで先頭行に追加、MolStudio 等ではインプットファイル作成画面の Link 0 section の項に追加してください。

実行時には、`subg03` コマンドでキュー `a16` を指定してください。

使用メモリ量の指定

実行して「メモリ量が足りない」というエラーになった場合は、Link 0 コマンド `%Mem=` で使用メモリ量を増やしてください。

16 並列、メモリ 16GB の設定をしたインプットファイル e2_01.com を実行する例

```
[gen ~]$ cat e2_01.com ← インプットファイルの内容を表示
%NProc=16      ← 並列数
%Mem=16Gb     ← メモリ量
# RHF/6-31G(d) Pop=Full Test

Formaldehyde Single Point

0 1
C  0.  0.  0.
O  0.  1.22  0.
H  .94  -.54  0.
H -.94  -.54  0.

[gen ~]$ subg03 a16 e2_01
```

実行結果

計算が終了すると、インプットファイル名に拡張子.log がつけられた結果ファイル (例: e2_01.log) が作成されます。計算結果をはじめ、CPU 時間などの計算機使用量に関する情報もここに含まれます。

正常終了ならば、このファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian 03.」というメッセージが出力されます。

ファイルの末尾を表示する `tail` コマンドで確認できます。

```
[gen ~]$ tail e2_01.log
:
Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 30.7 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 11 Int= 0 D2E= 0 Chk= 8 Scr=
1
Normal termination of Gaussian 03 at Mon Nov 1 12:00:00 2006.
```

結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル等を参照ください。

チェックポイントファイル

チェックポイントファイルは、デフォルトで作成される結果ファイル(.log ファイル)より詳細な結果が出力され、計算をやり直したり、結果を画像表示するためなどに使用されます。

チェックポイントファイルを出力するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの %Chk=チェックポイントファイル名 を追加します。

マニュアル

[1]~[4]のマニュアルは本センター本館1階 利用相談室に備えてあります。

- [1] 電子構造論による化学の探求 第二版,ガウシアン社,1998
- [2] Gaussian 03 User's Reference
- [3] Gaussian 03 Programmer's Reference
- [4] Gaussian 03 IOps Reference
- [5] Gaussian 03 Online Manual,<http://www.gaussian.com/>

Gaussian プリポストシステム **MolStudio**

MolStudio は、分子軌道計算プログラム Gaussian のプリポストシステムです。

Windows98/98SE、WindowsMe、WindowsXP、WindowsNT4.0 / Windows 2000 搭載のパソコンなどで動作し、入力データの作成、計算結果の可視化を 3 次的に行うことができます。

バージョン

R4

お申し込み

利用ご希望の方に、Molstudio の CD-ROM を貸し出しいたします。
(メーカーでのサポートは終了しております。)

利用条件

- ・大規模科学計算システムの利用者番号を持っている方
- ・当センターでサービスしている Gaussian のプリポストとして利用する方
- ・東北大学内の方

CD-ROM は、お手数ですが当センターまで直接取りにいらしてください。

お申し込みは、以下の内容のメールでお願いいたします。

宛先：東北大学サイバーサイエンスセンター内 共同利用支援係
(SENAC 表紙裏の「大規模科学計算システム関連案内」をご覧ください)

件名：MolStudio 利用申請

内容：

お名前と利用者番号： 身分： 所属： 学内の電話番号： 取りに来られる予定日時：
--

利用方法

CD-ROM を入れると、自動的にインストールが開始されます。
データ作成方法などについてはマニュアルを参照ください。

並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の Gaussian で解析を実行する手順

1. 入力データ作成後、Gaussian のインプットファイルとしてエクスポートします。
エクスポートの手順は、マニュアル「2.7 Gaussian 入力データのエクスポート」を参照してください。拡張子は「.gjf」とします。
2. インプットファイルを gen.isc.tohoku.ac.jp に転送します。
3. gen.isc.tohoku.ac.jp にログインし、mv コマンドによりインプットファイルの拡張子を「.com」に変更します。

転送したインプットファイル h2o.gjf の拡張子を .com に変更するコマンド

```
[gen ~]$ mv h2o.gjf h2o.com
```

4. subg03 コマンドにより解析を実行します。
5. 結果ファイルを転送し MolStudio で表示します。
チェックポイントファイル(.chk)は、Gaussian のユーティリティコマンドにより書式付(.fchk)に変換後転送してください。

マニュアル

インストール時に、PDF 形式のマニュアルが Molstudio インストールディレクトリに作成されます。

また、NEC の MolStudio の Web ページで公開されている MolStudio ワークブック (目的別に具体的な MolStudio の操作手順を解説) も参照ください。

汎用構造解析プログラム **MSC.Marc / MSC.Marc Mentat**

MSC.Marc は有限要素法による非線形汎用構造解析プログラムです。世界中で広く利用され最も評価を受けているプログラムの一つで、その扱える解析は以下の通り非常に広範囲にわたっています。

線形／大変形／弾塑性／剛塑性／破壊／熱伝導／動的非線形／境界非線形流体と固体の連成／電気電動と熱伝導の連成／熱と応力の連成

MSC.Marc Mentat は、汎用構造解析プログラム Marc の会話型プリ／ポストプロセッサとして、有限要素モデルの作成および解析結果の表示が行えます。

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ MSC.Marc 2007r1 64bit

利用方法

Marc のプリポストプロセッサとして、Mentat の他に MSC.Patran も提供しております。

「MSC.Patran」 <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/patran.html>

Marc/Mentat の利用方法は

「MSC.Marc の使い方」 <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/marc/> をご覧ください。以下は抜粋です。

run_marc コマンドでの解析実行

実行コマンド

Marc の入力ファイルは、拡張子を .dat とします。(例: job_name.dat)

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、run_marc コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、バッチリクエストとして解析が行われます。

(バッチリクエストは **am** (Marc 専用、CPU 時間無制限、最大メモリ 8GB) というキューに投入されます)

job_name.dat を解析するコマンド例

(run_marc コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子 .dat を省きます)

```
[gen ~]$ run_marc -jid job_name -v n
```

バッチリクエストの状態確認、キャンセルについては、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」の「バッチ処理」を参照ください。

run_marc の入力オプション

オプション	説明
-jid (-j) <i>job_name</i> (必須)	入力ファイル名 <i>job_name.dat</i> を指定
-cpu <i>秒数</i>	cpu 時間の制限。
-ver yes(デフォルト) (-v) no	バッチリクエスト投入前に確認する。 バッチリクエストをただちに投入する。
-user (-u) <i>user_name</i>	ユーザサブルーチン <i>user_name.f</i> を指定

その他のオプションは、「マニュアル C 編 プログラム入力 付録 B 表 B-2」を参照ください。

解析結果

バッチリクエストが終了すると、主に以下のようなファイルが作成されます。

```
job_name.out    (解析結果)
job_name.log    (解析ログ)
job_name.t19    (ポストファイル)
job_name.sts    (ステータスレポートファイル)
job_name.batch_err_log (エラーログ)
```

解析時の指定によって、この他にもファイルが作成されます。

それらのファイルの概要は、「マニュアル C 編 プログラム入力 付録 B 表 B-1」を参照ください。

終了番号 (exit number)

解析結果ファイル(job_name.out)の末尾にある marc exit number により、正常に終了したかエラー終了か、エラー終了の場合はその原因がわかります。

終了番号を確認する

(tail コマンドで job_name.out の末尾を表示)

```
[gen ~]$ tail job_name.out
*****
MSC.Marc Exit number 3004

check marc exit passed
[gen ~]$
```

終了番号	説明
3004	正常終了
13	入力データにデータエラーが検出された。
2004	剛体変位が発生している、または全体剛性マトリクスが非正定マトリクスになっている。
3002	指定したリサイクル数内で収束しない。

この他の番号については、「マニュアル C 編 プログラム入力 付録 A」を参照ください。

プリポストプロセッサ Mentat からの解析実行

Mentat の起動

Mentat の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

```
yourhost$ ssh -X -Y 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen ~]$ mentat
```

※ Windows からの利用については、
「Windows からの X アプリケーションの利用」 <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/>
をご覧ください。

解析実行

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

メインメニュー → →

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。
(バッチリクエストは **am** (Marc 専用、CPU 時間無制限、最大メモリ 8GB) というキューに投入されます)

* バッチリクエストの状態確認、キャンセルについては、「ホームページ」 → 「並列コンピュータ」
の「バッチ処理」を参照ください。

* スタティックメニュー → MARC INPUT FILE

とすることで、run_marc コマンド用入力ファイル(.dat ファイル)を作成することができます。

サンプルプログラム

Marc

マニュアル E 編に掲載されている例題が、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の
/usr/ap/msc/marc2007r1/demo/にあります。コピーしてご利用ください。

Mentat

マニュアル「ユーザガイド」に掲載されている例題のプロシジャファイルが、並列コンピュータ
gen.isc.tohoku.ac.jp の/usr/ap/msc/mentat2007r1/examples/marc_ug/にあります。コピーしてご利用く
ださい。

マニュアル

PDF 形式マニュアルを提供しています。

各マニュアルは、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の以下のディレクトリにあります。
gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、**acroread** コマンドをご覧ください。

和文(MSC.Marc2003 版) /usr/ap/msc/mentat2007r1/doc/japanese/
vola.pdf : A 編 理論およびユーザー情報
volb.pdf : B 編 要素ライブラリ
volc.pdf : C 編 プログラム入力
vold.pdf : D 編 ユーザーサブルーチンおよび特別ルーチン
vole.pdf : E 編 例題集
new_features.pdf : 新機能ガイド

marc_ug.pdf : ユーザーガイド
 mt_help_ref.pdf : Mentat 2003 ヘルプリファレンス
 xsec_adden.pdf : ドキュメント補足資料

English version /usr/ap/msc/mentat2007r1/doc/
 vola.pdf : Volume A:Theory and User Information
 volb.pdf : Volume B:Element Library
 volc.pdf : Volume C:Program Input
 vold.pdf : Volume D:User Subr /outines and Special Routines
 vole.pdf : Volume E:Demonstration Problems
 release_guide.pdf : release Guide

有限要素法プログラム汎用プリポストプロセッサ **MSC.Patran**

MSC.Patran は、有限要素法構造解析プログラム MSC.Nastran 用として開発されたプリポストプロセッサです。本センターでは Marc の利用を補強するためにサービスしております。

MSC.Patran は多くの CAD に対応するダイレクトインターフェースを介して、正確で迅速な CAD 形状のインポートが可能です。さらに優れた特長として、高水準のメッシュ作成機能や可視化機能に加え、Marc との親和性が高いことが挙げられます。

バージョン

MSC.Patran2007r2 Windows 版

お申し込み

利用条件

- ・大規模科学計算システムの利用者番号を持っている方
- ・本センターでサービスしている Marc のプリポストとして利用する方
- ・東北大学内の方

会費制でのサービスとなります。

利用ご希望の方は、共同利用支援係 までお問い合わせください。

数式処理プログラム **Mathematica**

Mathematica は Stephen Wolfram によって作られた、プログラミング言語を備えた数式処理システムです。**Mathematica** の機能は、数値計算、記号計算、グラフィックスという 3 つに大別でき、この 3 つが 一体となって使いやすいインターフェイスを提供しています。

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ version 5.2

利用方法

Mathematica の起動

[X Windows 版]

Mathematica の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

```
yourhost$ ssh -X -Y -L 7100:gen.isc.tohoku.ac.jp:7100 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen ~]$ mathematica
```

※ Windows からの利用については、
「Windows からの X アプリケーションの利用」 <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/>
をご覧ください。

[テキスト版]

```
[gen ~]$ math
```

Mathematica の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料 や、Webなどを参照ください。

マニュアル・参考資料

オンラインマニュアル(英文) が公開されています。以下のページを参照ください。

「ホームページ」 → 「アプリケーション」 → 「Mathematica」
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/math.html>

参考資料

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。
ステーブンウルフラム Mathematica ブック (日本語版) : トッパン
Mathematica 方法と応用 : サイエнтиスト社
Mathematica プログラミング技法 : アジソン ウェイスレイ

科学技術計算言語 **MATLAB**

MATLAB は高機能な数値計算機能と多彩な可視化機能を備えた技術計算ソフトウェアです。科学的、工学的分野の様々な数値計算(特に行列演算)、データ解析、シミュレーション、およびビジュアライゼーションのための統合環境を提供しています。

サービスホスト・バージョン

gen2.isc.tohoku.ac.jp ・ Release 2006b (Ver7.3)

Toolbox

センターで導入している Toolbox です。

- MATLAB
- Simulink
- Communications Blockset
- Communications ToolboxControl
- System Toolbox
- Extended Symbolic Math
- Fixed-Point Toolbox
- Fuzzy Logic Toolbox
- Image Processing Toolbox
- MATLAB Compiler
- Model Predictive Control Toolbox
- Neural Network Toolbox
- Optimization Toolbox
- Partial Differential Equation Toolbox
- Real-Time Workshop
- Robust Control Toolbox
- Signal Processing Blockset
- Signal Processing Toolbox
- Simulink Accelerator
- Simulink Control Design
- Simulink Fixed Point
- Simulink Response Optimization
- Simulink Verification and Validation
- Spline Toolbox
- Statistics Toolbox
- Symbolic Math Toolbox
- System Identification Toolbox
- Wavelet Toolbox

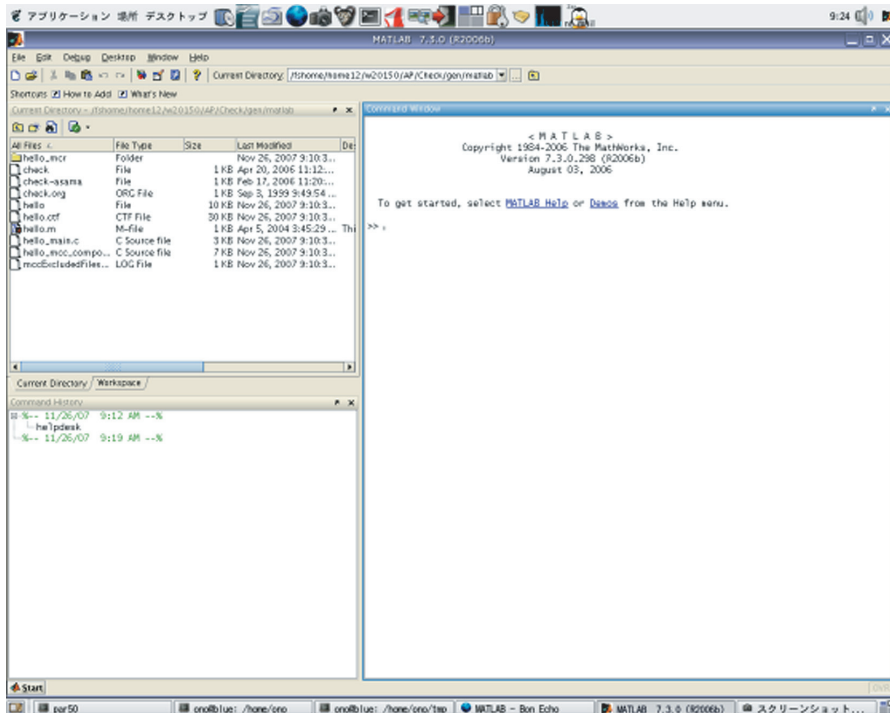
利用方法

MATLAB の起動

MATLAB の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。さらに gen2.isc.tohoku.ac.jp にログインし、matlab コマンドを実行します。

```
yourhost$ ssh -X -Y 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen ~]$ ssh -X -Y 利用者番号@gen2.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen2 ~]$ matlab
```

※ Windows からの利用については、
「Windows からの X アプリケーションの利用」<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/>
をご覧ください。Java 版 MATLAB が起動されます。



MATLAB の基本的な使い方は、マニュアル・参考資料などを参照ください。

サンプルプログラム

MATLAB には豊富なデモがありますので、ご利用ください。
MATLAB 上で、demo コマンドを実行すると、デモ画面が開きます。

マニュアル・参考資料

マニュアル

日本語オンラインマニュアルが公開されています。以下のページを参照ください。

「ホームページ」 → 「アプリケーション」 → 「MATLAB」

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/matlab.html>

参考資料

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

- MATLAB による制御理論の基礎：野波健蔵，東京電機大学出版局
- MATLAB による制御のためのシステム同定：足立修一，東京電機大学出版局
- Remi Vaillancourt: はやわかり MATLAB：芦野隆一，共立出版
- MATLAB ハンドブック：小林一行，秀和システム
- MATLAB グラフィックス集：小国 力，朝倉書店
- MATLAB と利用の実際：小国 力，サイエンス社

Matlab によるグラフ描画：西村竜一（広報誌 SENAC Vol.37 No.1 (2004-1)）

高機能数値計算・可視化機能ソフト MATLAB の基本的な使い方
（広報誌 SENAC Vol.29 No.4 (1996-10)）

データ解析システム SAS

SAS(Statistical Analysis System) は、基本システムである BaseSAS ソフトウェアを中心とした汎用統計パッケージです。

サービスホスト・バージョン

gen2.isc.tohoku.ac.jp ・ SAS 9.1.3 Service Pack 3

導入プロダクト

当センターで導入している SAS プロダクトです。

Base SAS
SAS/ETS
SAS/GRAPH
SAS/STAT

利用方法

対話型ディスプレイマネージャでの実行

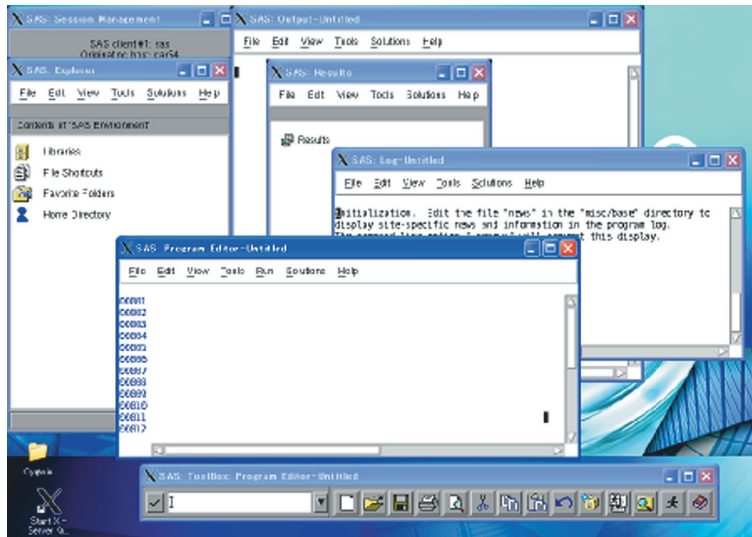
対話型ディスプレイマネージャとは、ウィンドウ画面を使って対話形式で SAS システムに命令を与えたり、メッセージを受けとることの出来る処理モードです。

SAS の起動

SAS の起動には、並列コンピュータに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。さらに gen2.isc.tohoku.ac.jp にログインし、sas コマンドを実行します。

```
yourhost$ ssh -X -Y 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen ~]$ ssh -X -Y 利用者番号@gen2.isc.tohoku.ac.jp
:
[gen2 ~]$ sas
```

※ Windows からの利用については、
「Windows からの X アプリケーションの利用」 <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/X-Win/>
をご覧ください。



Log、Output、Program Editor、ToolBox、Results、Explorer の 6 つのウィンドウが開きます。
 Program Editor ウィンドウで、SAS プログラムを作成した後、Program Editor ウィンドウ上のメニュー「Run」→「Submit」で、プログラムが実行されます。
 結果は Output ウィンドウに出力されます。

■ コマンドでの実行 ■

X Window System 環境でなくとも、SAS の利用が可能です。

実行コマンド

SAS の入力ファイルは、拡張子を .sas とします。(例: test01.sas)

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、さらに gen2.isc.tohoku.ac.jp にログインし、sas コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、会話型処理として実行が行われます。

例) test01.sas を実行する

(sas コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子 .sas を省きます)

```
gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後
[gen ~]$ ssh gen2.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
:
[gen2 ~]$ sas test01
```

実行結果

実行後、カレントディレクトリに 2 つのファイルが作成されます。

test01.lst (実行結果)
 test01.log (ログ)

SAS の基本的な使い方は、参考資料などを参照ください。

参考資料

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

SAS によるデータ解析入門[第2版]：東京大学出版会

SAS による共分散構造分析：東京大学出版会

SAS による実験データの解析：東京大学出版会

SAS による統計分析入門：八巻邦次（広報誌 SENAC Vol.35 No.2 (2002-7)）



[解説記事]

大規模科学計算システムにおける高速ファイル転送

後藤英昭¹ 大泉健治² 高橋洋一² 花岡勝太郎²吉田 智³ 岡崎昌夫³ 山形正明³ 菅雄一郎³ 金野浩伸³¹ 東北大学サイバーサイエンスセンター スーパーコンピューティング研究部² 東北大学情報部 情報基盤課 共同研究支援係³ 日本電気株式会社 文教・科学ソリューション事業部

1 はじめに

サイバーサイエンスセンター (旧称・情報シナジーセンター) 大規模科学計算システムのスーパーコンピュータシステムは、5年ごとに更新されてきました。平成20年3月に稼働を開始した現行のSX-9システム [1] の総合演算性能は26.2TFLOPSで、前システムのSX-7 (2.1TFLOPS) と比較すると12倍以上、前々代からは100倍以上になります。機種更新における計算機利用の動向で興味深いことは、演算性能が上がると、シミュレーションの精度が上げられたり、投入されるジョブが増加したりすることにより、ほどなくして演算資源の限界まで使われるようになることです。

演算量の増加は、扱うデータのサイズにも反映されます。ファイルサーバの使用量は、平成18年3月に1.5TB前後であったものが、平成20年3月には3TB、本年3月には17TB前後まで増加しました。利用者数の増減はほとんどないため、利用者あたりのファイルサイズが増加していることとなります。大規模科学計算システムにおいて、小さなデータを入力して巨大なデータが得られたとして、そのデータを同じシステムの上で解析して、グラフ化できる程度のコンパクトなデータに変換できるならば、最終的には小さなファイルの転送だけで済むでしょう。しかし、計算結果によっては巨大なデータを研究室に持ち帰ったり、他大学のシステムにコピーしたりといった利用形態も生じます。

現在、100Mbps以下のネットワークで接続されている研究室が多いでしょうから、仮に90%のデータ転送能力が得られたとしても、100GBのファイルの転送に2.5時間以上かかることとなります。これを十分速いとするか、遅いとするかですが、近年のPCの著しい高性能化や、今後の計算機の性能向上、Gigabit Ethernet (GbE) の普及、グリッドの台頭などを考えると、ずいぶんと遅い物に見えてきます。高速なデータ転送ができるようになれば、今までより自由に、すばやいデータ処理が可能になり、計算機の利用形態の自由度も増すことでしょう。

本稿では、GbEの利用を前提として、特殊なネットワーク機器を用意することなく、高速なファイル転送を実現する方法を探ってみます。現在の大規模科学計算システムはGbEで学内ネッ

トワーク TAINS に接続されています。学内では建物まで GbE が通っている所が多いため、館内ルータから研究室まで GbE を引くことができれば、それだけでもある程度の高速化は達成できるでしょう。

一方、ネットワークの帯域幅の改善ばかりではなく、ファイル転送に使うソフトウェアも適切に選ばなければ、高速なデータ転送は望めません。現在、当センターでは Secure Shell (scp, sftp コマンド等) によるファイル転送のみがサポートされています。しかしながら、Secure Shell にはデータの暗号化によるオーバーヘッドがあるので、そのデータ転送能力は一般に FTP に劣ると言われています。本稿では、様々な条件とツールでファイル転送速度を測定し、実際にどれぐらいの性能が得られるのかを見てみることにします。

2 使用機材と実験環境

大規模科学計算システムでは、スーパーコンピュータ SX-9 に直接ではなく、並列コンピュータ gen に対してファイル転送を行います。gen のハードウェアは NEC TX7/i9610 で、8 コア分の Intel Itanium2 (1.6GHz) が搭載されています。OS には SUSE LINUX Enterprise Server 9 が使われています。

センター内にあるスーパーコンピューティング研究部の研究室に、測定用の PC を二台用意しました。使用機は Lenovo ThinkCentre A61e Ultra Small で、いずれも AMD Athlon X2 BE-2350 (Dual-core, 2.1GHz) が搭載されています。ネットワークのコントローラは Broadcom BCM5786 です。openSUSE Linux 11.1 を導入し、ファイルサーバとして動かしている方を、以下では PC2 と呼びます。もう一台はクライアント PC として、以降 PC1 と呼びます。PC1 には openSUSE Linux 11.1 と、比較用に Windows XP (SP3) を導入しました。

研究室のネットワークは、センター建物のルータに GbE で接続されています。この研究室は大規模科学計算システムのファイアウォールより外側にあり、学内ネットワーク TAINS の幹線は通りませんが、TAINS 経由の接続に近くなっています。

測定に用いるファイルとして、手元にあった Tru64 UNIX (Alpha プロセッサ) 用の netscape の実行形式 (約 17.7MB) と、それを 100MB になるまで繰り返して継ぎ足したものの、二種類を用意しました。

3 ファイル転送速度の評価

3.1 使用ツールとサーバプログラム

FTP によるファイル転送は、ID とパスワード、データがすべて平文で (暗号化なしに) ネットワークを流れることから、セキュリティ上の問題があるとされています。しかしながら、FTP はデータ転送効率に優れたプロトコルなので、盗聴の危険性のないローカルなネットワークなどでは現在でもしばしば使われています。GbE によるファイル転送能力の限界を探るために、まずは PC

対 PC (GbE L2 スイッチ経由) と PC 対 gen で FTP による速度測定を行ってみることにします。

今回の測定では、Linux に標準で付属している ftp コマンドを使用しました。サーバ用のプログラムには、これも OS 付属の pure-ftpd を用いました。

SSL による暗号化をサポートし、従来の ftpd と上位互換を有する、vsftpd というサーバプログラムがあります [2]。これに lftp [3] などのクライアントプログラムを組み合わせると、ID とパスワードを暗号化し、必要に応じてデータも暗号化して送ることが可能です。ユーザ認証にかかる時間はわずかなので、データを暗号化しないようにすれば、FTP と同程度の効率になることが期待されます。暗号化がない分、セキュリティ面の不安が残りますが、大規模科学計算における巨大なデータが盗聴されたとして、意味のある情報として悪用される可能性を考えれば、それほどの驚異ではないかもしれません。問題があるとすれば、プログラムコードなど秘密にしたいものを、いつもの操作でうっかりとネットワークに流してしまうなどの操作ミスが考えられます。今回の性能評価ではサーバ側 (gen, PC2) に vsftpd を用い、クライアントの lftp コマンドを用いてファイルを得します。

インターネット越しのファイル転送では、旧来の FTP に代えて、Secure Shell の sftp や scp が現在よく使われています。Linux で動く Secure Shell には幾つかの異なる実装がありますが、SUSE Linux をはじめとするほとんどのディストリビューションで採用されている、OpenSSH を使いました。Windows 上では、これも有名な WinSCP を使いました。

Secure Shell ではデータの暗号化が常に行われるため、この処理による速度低下があります。しかし、最近の高速なプロセッサを搭載したコンピュータでは、Fast Ethernet (100Mbps) が簡単に飽和してしまいます。GbE では FTP に速く及ばない速度になることが多いようです。また、scp では Round Trip Time (RTT) の大きな遠隔地の通信で極端に効率が落ちることが知られており、通信に用いるバッファのサイズを自動最適化することで速度低下を抑える、“High Performance SSH/SCP – HPN-SSH” と呼ばれる実装が開発されています [5]。HPN-SSH は米ピッツバーグスーパーコンピューティングセンターによって開発・公開されているもので、OpenSSH に対するパッチとして提供されています。HPN-SSH の論文 [6] によると、グリッドコンピューティングのミドルウェアの他、多くの研究機関で利用実績があり、HP-UX 等の OS にも組み込まれているようです。

HPN-SSH には、データを暗号化せずに転送するオプションもあります。これを利用すれば、ユーザ認証の部分は保護しつつ、FTP に迫る効率が得られる可能性があります。

3.2 PC-PC 間の速度評価

はじめに、GbE と使用機材の限界を見るために、PC を一台の GbE スイッチで結んだ単純なネットワーク構成で、FTP によるファイル転送速度を測定しました。結果を表 1 に示します。

ftp については、コマンドで表示された速度を記入してあります。lftp コマンドには速度表示がないので、time コマンドを用いて経過時間を測りました。データ転送部分のみの時間を測りたいのですが、その手段がないので、仕方なく上のような方法をとっています。ユーザ認証の時間が

表 1: ファイル転送速度の比較 - PC 対 PC

プログラム			平均速度	
PC1	方向	PC2	サイズ 17.7MB	サイズ 100MB
ftp	←	pure-ftpd	112MB/s	110MB/s
lftp	←	pure-ftpd	73.7MB/s	104MB/s
lftp	←	vsftpd	95.6MB/s	109MB/s
scp	←	sshd	30.5MB/s	41.5MB/s
hpn-scp	←	hpn-sshd	30.6MB/s	41.5MB/s
hpn-scp-nocipher	←	hpn-sshd	50.5MB/s	83.3MB/s

オーバーヘッドとして含まれるので、サイズの小さいファイルでこの影響が相対的に大きくなり、平均速度が低めに出ています。ホームディレクトリの .netrc に ID とパスワードを記入することで、自動ログインさせています。

ftp, lftp とともに、一回目はファイルを読み出すのにディスクアクセスが発生するので、この影響を避けるために、OS のディスクキャッシュにファイルが入った二回目以降で、安定したと思われる時間を採用しました。書き込み側のディスクの影響を抑えるために、転送されたデータはデータシンク (/dev/null) に捨てています。実際にファイルに書き出した場合は、ハードディスクとキャッシュの速度に律速されます。

FTP 系のいずれの組み合わせでも 100MB/s を越える転送速度が出ていて、換算すると 800Mbps にもなり、GbE としては相当に高速なものと思われます。数年前に、高級なネットワークカードでも 700Mbps 止まりだったり、300Mbps も出ないような廉価なネットワークコントローラをよく目にしていたので、今回の測定結果には少々驚きました。

続いて、Linux に標準装備の scp と sshd (いずれも OpenSSH-5.1p1 より)、HPN-SSH (最適化処理あり)、および HPN-SSH (データ暗号化無し) を用いてファイル転送速度を測りました。HPN-SSH は OpenSSH-5.1p1-hpn13 v5 を prefix 以外はデフォルトのオプションのままにコンパイルしたものを使用しました。scp が表示する速度がおかしいようなので、先の lftp と同様に time コマンドを使って、ユーザ認証も含む経過時間を測定しています。RSA 公開鍵暗号方式を用いて自動ログインしています。

標準の scp/sshd でも 41.5MB/s (332Mbps) の速度が得られており、Fast Ethernet ではボトルネックになることがわかります。RTT が小さいため、HPN-SSH の最適化だけでは改善効果がありません。

HPN-SSH の scp にオプション `-oNoneSwitch=yes -oNoneEnabled=yes` を付けて起動し、暗号化を無効にした状態でデータ転送時間を測ってみました。FTP 系には及びませんが、83.3MB/s (666Mbps) という高速度が得られました。

表 2: ファイル転送速度の比較 - PC 対 gen

プログラム			平均速度	
PC1	方向	gen	サイズ 17.7MB	サイズ 100MB
lftp	←	vsftpd	32.8MB/s	40.0MB/s
scp	←	sshd	23.0MB/s	31.4MB/s
hpn-scp-nocipher	←	hpn-sshd	44.2MB/s	73.0MB/s
vsftpd	→	ftp	91.7MB/s	93.5MB/s
sshd	→	scp	22.1MB/s	28.2MB/s

3.3 PC-gen 間の速度評価

大規模科学計算システムの利用を想定して、PC と並列コンピュータ (gen) の間でファイル転送速度を測定しました。結果を表 2 に示します。

セキュリティ上の理由により、gen では通常の FTP のサービスは停止しています。今回は評価のために vsftpd を試験的に動かしました。ID とパスワードは必ず暗号化するような設定にしました。

lftp でデータを平文で転送しているにも関わらず、40MB/s で頭打ちになりました。期待したよりも低い値ですが、それでも Fast Ethernet の帯域幅をはるかに越えます。

HPN-SSH の暗号化無しでは 73MB/s という速度が得られました。GbE の実効的な速度としては、これでもかなり速い方です。PC のローカルのディスクに 100MB のファイルを書き込んだ場合は、ディスクドライブに律速されて 67MB/s となりました。

反対方向のファイル転送についても詳しく調べたかったのですが、gen に lftp が用意できなかったため、通常の ftp の結果だけを示します。ファイルを /dev/null に捨てる方法で 93.5MB/s , gen のローカルディスク (/tmp) に書き出す状態で 87MB/s という高い速度が得られました。ただし、ID とパスワードが暗号化されないこと、ユーザ側にサーバを立ち上げなければならないという点で、この手法はお奨めできません。

3.4 WinSCP によるファイル転送

Windows 上で利用できる scp/sftp クライアントとして、WinSCP が有名です。グラフィカルな表示で大変便利なものですが、使っていて「遅いんじゃないか?」と思ったことはないでしょうか。今回、WinSCP 4.1.8 (ビルド 415) を使って PC-PC 間のファイル転送速度を測ってみたので、紹介します。

WinSCP は、デフォルトの状態では sftp モードでファイル転送を行います (Secure Shell には 2 つのモードがあります)。オプションで scp モードに切り替えることが可能です。平均の速度は

表示されないのので、ファイル転送中に画面に表示される値がピークで安定したところを見計らって、その時の値を拾いました。二つのファイルでほぼ同じ値になるので、100MB の方だけ示すと、sftp モードで 1560KB/s, scp モードで 2850KB/s となりました。受信側の PC には書込速度が公称値 90MB/s(最大) の SSD (Solid State Drive) が搭載されており、ドライブに律速されているわけではありません。念のために受信側の PC を AthlonX2 5200+ (Dual-core, 2.6GHz), Windows Vista の組み合わせに変更してみましたが、scp モードで 3200KB/s 程度になりました。Linux の scp と比べて一桁も遅いことがわかります。実装上の問題かもしれません。

以上のように、大容量のファイルを転送するのに WinSCP は不向きなことがわかりました。

4 おわりに

大規模科学計算システムの並列コンピュータ gen を対象に、GbE の普及を見越して様々なファイル転送方式の速度調査を行いました。近年の高速な計算機では Secure Shell の scp でも Fast Ethernet が容易に飽和することから、研究室まで GbE を引く価値はあると言えるでしょう。

今回は RTT の大きい遠隔地に GbE の環境を用意できなかったのので、特に HPN-SSH の評価はほとんどできませんでした。学内の別キャンパスや、国内遠隔地での評価は、今後の課題にしたいと思います。

vsftpd や HPN-SSH を使えば、ID とパスワードは保護しつつ、暗号化無し的高速なデータ転送が可能です。データ暗号化無し的高速ファイル転送の需要があれば、これらのサービスを提供する価値がありそうです。本稿では残念ながら、読者がすぐに試することができる方法をほとんど示すことができませんでした。今後、利用者の意見を聞きながら、ネットワーク環境の改善につなげていければ良いと考えています。

参考文献

- [1] 情報基盤課システム管理係, サイバーサイエンスセンタースーパーコンピューティング研究部, “スーパーコンピュータシステム SX-9 利用ガイド,” 東北大学サイバーサイエンスセンター大規模科学計算機システム広報 SENAC Vol.41, No.2, pp.19-33 (2008).
- [2] vsftpd - Secure, fast FTP server for UNIX-like systems : <http://vsftpd.beasts.org/>
- [3] LFTP - sophisticated file transfer program : <http://lftp.yar.ru/>
- [4] WinSCP - Free SFTP Client, Secure File Transfer Protocol, Secure FTP : <http://winscp.net/eng/index.php>
- [5] High Performance SSH/SCP - HPN-SSH : <http://www.psc.edu/networking/projects/hpn-ssh/>
- [6] Chris Rapiere, Benjamin Bennett, “High Speed Bulk Data Transfer Using the SSH Protocol,” Mardi Gras Conference 2008, ACM.

[報告]

創造工学研修の実施報告

— スパコンを使って計算科学・計算機科学のおもしろさを体験 —

滝沢寛之[†] 江川隆輔[‡] 笹尾泰洋[†] 佐野健太郎[†] 山本悟[†] 小林広明[‡][†] 東北大学大学院情報科学研究科 [‡] 東北大学サイバーサイエンスセンター

1. はじめに

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、計算科学・計算機科学分野での教育貢献・人材育成を目的として、大学院・学部における講義実習等の教育目的でのスーパーコンピュータ利用に対する負担金(利用料金)免除プログラムの試行が平成 20 年度から始まりました。この制度では、ベクトル並列型スーパーコンピュータ NEC SX-7C システムを教育目的に利用することができます。東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-7C は 5 ノード(40CPU)構成で、合計 640Gflop/s の理論演算性能と 640GB のメモリ容量を有するシステムです。同制度を利用することによって、ベクトル化、共有メモリ型並列処理(OpenMP 等)、分散メモリ型並列処理(MPI 等)など、計算科学分野のシミュレーション開発で広く用いられている様々な高速化技術を実際のスーパーコンピュータを使って学ぶことができます。

本稿では、同制度を利用して行われた東北大学工学部 1 年生向けの研修について報告します。

2. 創造工学研修 「君もスパコンプログラマ ～SX から PS3 までを使いこなす～」

東北大学工学部では、創造性を養うことを目的として学部 1 年生を対象に少人数制の授業科目「創造工学研修」を実施しています。学生は多彩なテーマの中から自分のやりたいテーマを自由に選択して取り組むことができます。平成 20 年度には、151 種類もの研修テーマが用意されました。以下、創造工学研修に関する説明を東北大学工学部のウェブページから抜粋します。

本研修は学生が自らの意志と発想により、与えられた課題あるいは自ら設定した課題について着想力と想像力を駆使して問題解決の道筋を模索し、実現するための方法・手段を学ぶことに意義があり、特にその『過程』を重視しています。学生諸君が、様々な分野において独創的な研究で世界をリードしている教官の助言・指導のもとに、「研究」の香りをかきながら、グループ研修の「コミュニケーションとチームワーク」を楽しみ、「発見」に驚き、「創造」の喜びを味わうことができる絶好の機会です。また、研修テーマは学生の所属系によらずに選択ができるようになっており、幅広い知識を習得する場でもあります。

筆者らは、この研修に平成 18 年度から参加しました。平成 18 年度には東北大学情報シナジーセンター(現在のサイバーサイエンスセンター)に設置されていた NEC SX-7 システムを用い、ベクトル化の効果を確かめる研修を行いました。また、平成 19 年度には、SCEI PlayStation3(PS3)に搭載されている Cell Broadband Engine(CBE)プロセッサを用いて、(理論性能上は)スーパーコンピュータに匹敵するような性能を有するコンピュータが身近にもあることを体験してもらいました。

これら 3 年間を通じて、筆者らが開講してきた研修における一貫した目的は以下の通りです。

コンピュータの動作原理からソフトウェア開発の実際までを学び、プログラム作成のための基礎知識を身につける。さらに、様々な工学分野で重要な役割を果たしている数値シミュレーションの基礎を学び、それを題材として実用的なプログラムの作成に挑戦し、その重要性和難しさを学ぶ。

スーパーコンピュータを使うには？

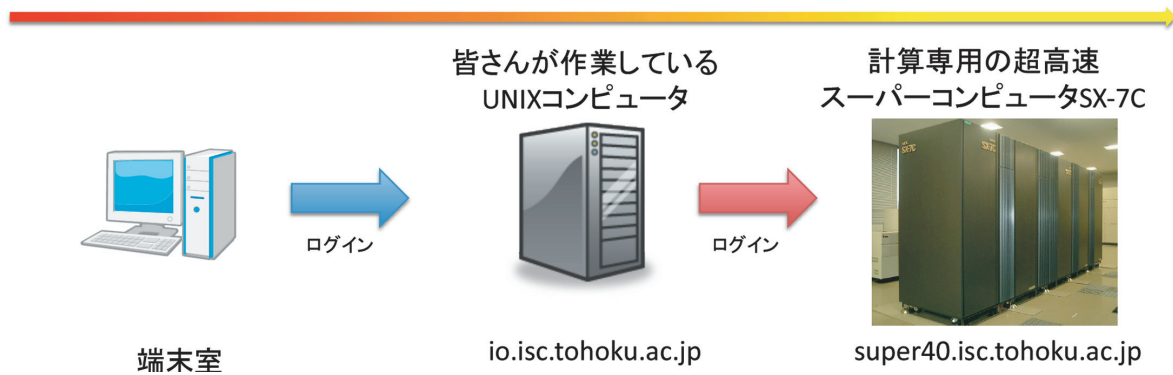


図1 研修におけるスーパーコンピュータ利用方法

平成 20 年度には、創造工学研修として、「君もスパコンプログラマ ～SX から PS3 までを使いこなす～」というテーマを企画しました。4 日間の集中講義と約 1 ヶ月間の自習(週 1 回)という実施形態で、基礎的な数値計算の高速化に挑戦するという形式で研修を行いました。まだ通常の C 言語ですら学んでいない学部 1 年生にとって本テーマで扱う内容が難しいことは当初から予想されましたが、とにかくスーパーコンピュータを使ってもらうことでより多くの学生が計算科学・計算機科学に興味を持ってもらうことを期待して行われました。定員枠 10 に対して定員通り 10 名の学生が履修登録を行い、9 名の学生が実際に受講しました。

3. 研修の概要

この研修を遂行する上で必要不可欠な知識やコンピュータの使い方をわずか 4 日間の集中講義で教えるのは大変難しいことでしたが、簡単なループ計算を OpenMP で並列化し、その効果を見ることを最終目標にして以下のような日程で集中講義を行いました。

9月22日

13:00～14:30 全体説明 (担当者：滝沢寛之)

本研修の主旨や日程、実施方法などを説明しました。

14:40～16:10 UNIX の使い方 (担当者：江川隆輔)

サイバーサイエンスセンター5階端末室の使い方に関する講義です。端末室に設置されている Windows PC 上で X サーバのソフトウェアを起動して UNIX システムを遠隔利用する方法から始まり、ファイルシステム、ファイル操作、プログラムのコンパイルと実行の方法について説明しました。

研修におけるスーパーコンピュータ利用方法の概略を図 1 に示します。広く普及している Linux システム(図 1 中の io.isc.tohoku.ac.jp)をフロントエンドとして利用しますので、使い慣れたツール群を使ってプログラミングを行うことができます。プログラミングやファイル操作などは Linux システム上で行い、クロスコンパイラによって SX-7C 用の実行ファイルを作成し、その実行のみを SX-7C 上で行いました。

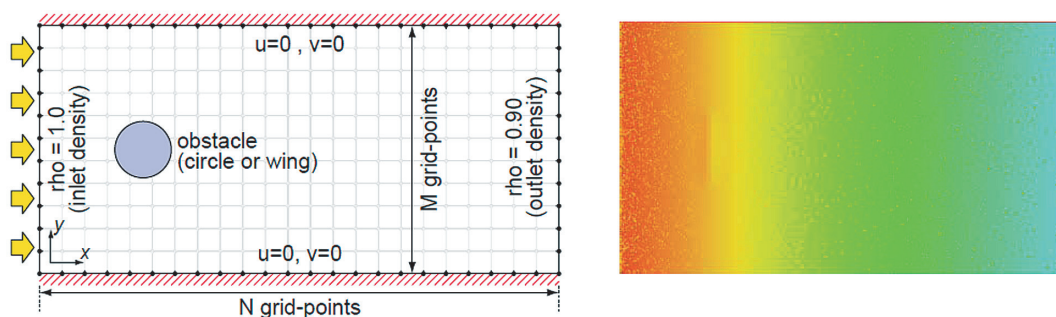


図2 研修で対象とした2次元流体シミュレーション

9月24日

13:00~16:10 C言語入門 (担当者: 笹尾泰洋)

ニュートン法やマチンの公式に基づく円周率の計算を題材にして、本研修を進めていく上で必要不可欠なC言語の基礎を説明しました。具体的には、

- ✓ Makefile の仕組みとコンパイル
- ✓ ヘッダファイル
- ✓ 関数
- ✓ 配列
- ✓ ポインタ

について、学部1年生が理解しやすいように配慮しながら説明しました。

9月25日

13:00~16:10 数値解析入門 (担当者: 佐野健太郎)

数値計算例として、2次元流体シミュレーションをフラクショナルステップ法で行うコードを説明しました(図2参照)。サンプルコードでは、実行時間の90%以上が圧力を算出するためのポアソン方程式の計算(ヤコビ法)で費やされていることを示しました。

9月26日

13:00~14:30 スパコンとは (担当者: 小林広明)

スーパーコンピュータで使われている高速化技術と、それを利用するためのソフトウェア開発の概要を紹介しました。

14:40~17:50 OpenMP 入門 (担当者: 滝沢寛之)

並列処理の必要性と、それを実現するためのプログラミング手法の一つとしてOpenMPの基礎を説明しました。上述の2次元流体シミュレーションのコードを題材として、計算時間を費やしている部分を特定し(図3)、その部分を並列化することでOpenMPによる高速化の効果を確認しました。

上記の集中講義で得た知識や研修中に貸し出した参考文献に基づいて、受講学生はおよそ1ヶ月の間、週一回のペースで図2の2次元流体コードの高速化に取り組みました。「着想力と想像力を駆使して問題解決の道筋を模索し、実現するための方法・手段を学ぶことに意義があり、その過程を重視する」という創造工学研修の趣旨を踏まえ、受講学生は3人一組でチームを組み、それぞれ独自に高速化を試みました。

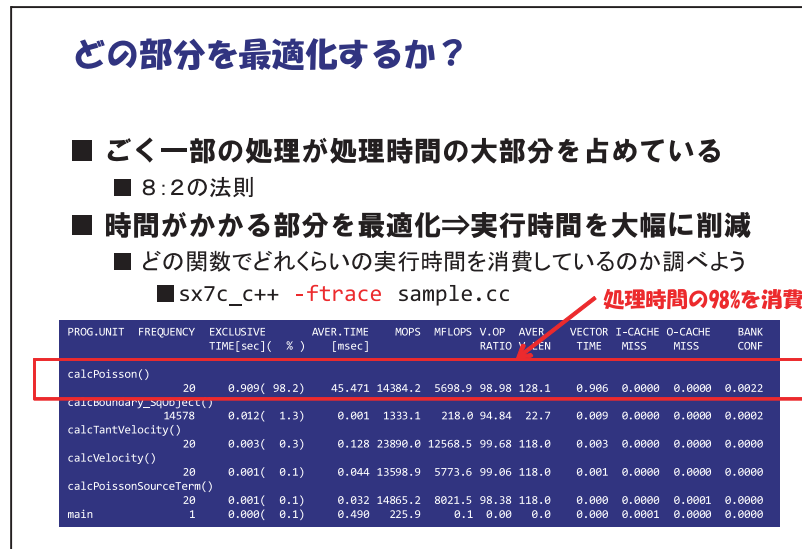


図 3 性能解析方法の説明

各グループ共にポアソン方程式の計算をヤコビ法から他の解法に置き換えるなどの試みをしました。ガウスザイデル法を使うことで、ヤコビ法で記述されたサンプルコードよりも反復回数を減らすことに多くのグループで成功しましたが、そのままでは並列化できないために実行時間を短縮するのは難しかったようです。

なお、研修テーマ名にもあるように、筆者らの研究室にある PS3 を使って同等の 2 次元流体シミュレーションコードの高速化に挑戦してもよいと言ったのですが、CBE プログラミングを希望したグループは残念ながらありませんでした。

本研修に関する筆者らの反省点・今後の課題として、C 言語も十分に習得していない学部 1 年生に対する適切な課題設定が挙げられます。平成 18 年度の創造工学研修では、課題が簡単すぎて工夫の余地がなくなっていました。一方、平成 19 年度の創造工学研修では、CBE プロセッサの性能を活かすために様々な知識が要求されるため、一般的な学部 1 年の学生には理解が難しい内容になってしまいました。平成 20 年度、研修時間が限られている割には健闘したグループもありましたが、最終的に実行時間の短縮には至らなかったことから、もう少し難易度を下げた課題の設定が望ましいのではないかと思います。学生がやりがいと達成感の両方を堪能できるような適切な難易度の課題を、今後も学生の反応を見ながら探っていかなければならないと考えています。

4. さいごに

研修の最後に学生が提出したレポートから推測すると、多くの学生が本研修を通じてプログラミングの難しさとおもしろさを体感することができたようです。また、研修中に貸与した参考図書やインターネット上で収集した情報に基づいて様々な角度から課題に取り組んだ様子が見取れることから、受講学生にとって有意義な研修になったのではないかと思います。今後もこのような研修を継続的に実施していくことで、計算科学・計算機科学の裾野を広げる活動を続けて行きたいと思います。このような研修実施の場を与えていただきました東北大学サイバーサイエンスセンターの関係者各位に厚く感謝いたします。

最後に、本研修のティーチングアシスタントとして大活躍してくれた東北大学大学院情報科学研究科の初田義明氏と松永哲弥氏にも深く感謝いたします。

[報告]

大型コンピュータのサービスに携わって

情報基盤課 システム管理係 加藤 昇

この3月で、定年を迎えました。42年の間、数年ごとに更新される大型コンピュータの管理・運用に関わることができ、充実した仕事をさせていただきました。これまで関わってきたコンピュータの中で懐かしい運用状況などを振り返ってみたいと思います。

最初のコンピュータとの出会いは、昭和42年の東北大学計算センターにおいてでした。計算センターには東北大学とNECで共同開発したSENAC-1の後継機であるNEAC-2230というコンピュータが稼動していました。最初の仕事は、教官の指導の元で2人の先輩と共に、このコンピュータのオペレーションと運用管理を行うことでした。このNEAC-2230はトランジスタ式のコンピュータでプログラムやデータの inputs は紙テープで、出力はラインプリンタでした。計算処理はバッチ処理のみで、処理するプログラムとデータ数十件を事前に磁気テープに入力しておき、1件処理するごとに磁気テープから読み込んで計算処理するというものでした。NEAC-2230は昭和38年から稼動しており、当時は計算需要に追いつけない状態でした。そのため、長時間ジョブ等は昭和40年に発足した東京大学大型計算機センターに計算依頼をしていました。東京大学にはHITAC 5020 Eが稼動していましたが、航空便を利用してもターンアラウンドは1週間ぐらいかかっていました。2年後の昭和44年には発足した東北大学大型計算機センターに異動となり、その後は、表1に示すような汎用コンピュータの運用に関わることができました。

大型計算機センター発足時のコンピュータはNEAC2200シリーズモデル500/700で、最初の1年間はモデル500 4台でサービスし、その後はモデル700 2台でサービスするものでした。当時、モデル700は国内で計画されていたコンピュータの中では最高の性能で、1年後に移動開始の予定でしたが、開発が遅れて2年後になりました。

NEAC2200シリーズになってからは入力媒体が紙テープからカードに代わり、技術職員も10名を超える人数となりま

表1:汎用コンピュータの変遷

昭和44年 1月	NEAC2200-500
昭和46年 4月	NEAC2200-700/500
昭和51年 10月	ACOS700
昭和54年 11月	ACOS900 II
昭和57年 1月	ACOS1000
昭和59年 12月	HFP
昭和62年 10月	ACOS2020
平成5年 1月	ACOS3900/20
平成9年 1月	NX7000/460 他
平成14年 1月	TX7/AzusA
平成18年 3月	TX7/i9610 他



NEAC2200 シリーズモデル 500 の全景写真

した。数名ごとのグループで午前と午後に分かれて、コンピュータの監視やシステム制御・ジョブ制御を行うためにシステム操作卓からコマンドを入力するオペレーションや、利用者から計算依頼カードを受け取って、計算機に入力して計算結果のリストを返却ボックスに入れるという作業などを行っていました。

TSS(Time Sharing System)利用については、東北大学は大型計算機センター発足時から特に力をいれており、昭和44年6月から、山形大学、岩手大学、福島大学に協力していただいて実験を開始しました。当時、TSSは国内での経験がほとんどない状態で、試験運用における利用者実験での要求を取り入れて、昭和45年11月には正式運用を開始しました。このときの利用は専用回線限定で、端末台数は33台でした(回線速度50bps:32台、1200bps:1台)。その後、端末も序々に増えて、昭和50年には65台、昭和53年には104台(50bps:89台、1200bps:15台)の端末が利用できるようになりました。公衆回線によるTSS利用は昭和54年5月から利用できるようになりました。

当時、多くの利用者が青葉山地区におりましたので、工学部電気系の一室(昭和51年以降は計算センター)に計算依頼、計算結果の返却ボックスをおき、毎日、午前と午後の2回、片平キャンパスと青葉山キャンパス間を車で運搬していました。これは、昭和57年1月に青葉山分室ができるまで続きました。

昭和57年1月にはACOS1000への更新に併せて、青葉山の計算センター内に本センターの青葉山分室を開設しました。分室にはカードリーダー、プリンタ、磁気テープ装置、端末などを設置して、40GHzのミリ波で接続し、センター本館の利用と全く同じように利用することができました。年に2~3回、大雨の時にはミリ波回線が切れることがあり、一時利用ができなくなることもありました。

また、このミリ波を運用するのに無線従事者が必要で、技術職員が特殊無線の免許をとって無線局を開局して運用を行いました。当時、電波管理局の検査官が2~3年に1回、無線局の検査に来ることがありました。

昭和60年5月には、UNIXと電子メールの利用を目的としてVAX11/750を導入し、サービスを開始しました。これは副システムとして約150名の方が登録して利用され、平成3年3月のUNIXワークステーションの導入まで運用しました。

大型計算機センター発足時の計算サービス時間は10:00~17:00まで、繁忙期は10:00~21:00までとなっていました。昭和50年ごろには10:00~23:00までとなり、昭和55年ごろの繁忙期には10:00~翌日8:00までとなりました。17時以降の計算機のオペレーションは学生アルバイトや派遣社員などで対応しました。昭和57年ごろより無人運転するためにカード入力や結果の取り出しを利用者自身で行うデマンド方式にしました。また、付帯設備(障害時の自動通報や計算機、空調機の自動電源切断など)の工事などを行い、昭和60年9月より17:00以降は完全無人化によるサービスを実現しました。

一方、スーパーコンピュータは表2に示すとおりで、初期のSX-1,SX-2は汎用コンピュータのバックエンドとしてサービスし、SX-3R/44RになってからはOSがUNIXとなり、ワークステーション等から直接利用できるようになりました。SX-4/128H4以降は並列処理が可能となり、初期のSX-1からベクトル型スーパーコンピュータの運用を行ってきました。

電卓やパソコンなどのなかった時から今日まで大型コンピュータと関わることができ、そして、楽しく仕事させていただき、大変幸せでした。最後に、お世話になった先生方、事務部の皆様、技術職員の皆様に感謝申し上げます。そして、サイバースサイエンスセンターの益々の発展を祈念します。

表2：スーパーコンピュータの変遷

昭和61年5月	SX-1
平成元年2月	SX-2N
平成6年1月	SX-3/44R
平成10年1月	SX-4/128H4
平成15年1月	SX-7
平成20年3月	SX-9

[大規模科学計算システムニュース]より

大規模科学計算システムニュースに掲載された記事から転載しています。

平成21年度講習会計画 (No.84)

No.	名 称	開 催 月 日	内 容 概 略
1	UNIX入門	5月18日(月)	<ul style="list-style-type: none"> ・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方 ・プログラムの実行方法
2	スーパーコンピュータ SX-9の利用法	5月19日(火)	<ul style="list-style-type: none"> ・自動ベクトル化 ・自動並列化 ・利用法
3	スーパーコンピュータの 高速化技法	5月20日(水)	<ul style="list-style-type: none"> ・ベクトル化による高速化技法 ・並列化による高速化技法
4	MPIプログラミング入門	5月21日(木)	<ul style="list-style-type: none"> ・MPIによる並列プログラミングの基礎 ・利用法
5	並列コンピュータの利用法	5月22日(金)	<ul style="list-style-type: none"> ・最適化 ・並列処理 ・利用法
6	ネットワークと セキュリティ入門	8月4日(火)	<ul style="list-style-type: none"> ・ネットワークの基本的な仕組み ・ネットワークの危険性と安全対策
7	MATLAB入門	8月5日(水)	<ul style="list-style-type: none"> ・MATLABの基本的な使い方
8	Gaussian入門	8月25日(火)	<ul style="list-style-type: none"> ・Gaussianの基本的な使い方
9	MARC入門	9月18日(金)	<ul style="list-style-type: none"> ・MARCの基本的な使い方
10	UNIX入門	10月19日(月)	<ul style="list-style-type: none"> ・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方 ・プログラムの実行方法
11	スーパーコンピュータ SX-9の利用法	10月20日(火)	<ul style="list-style-type: none"> ・自動ベクトル化 ・自動並列化 ・利用法
12	スーパーコンピュータの 高速化技法	10月21日(水)	<ul style="list-style-type: none"> ・ベクトル化による高速化技法 ・並列化による高速化技法
13	MPIプログラミング入門	10月22日(木)	<ul style="list-style-type: none"> ・MPIによる並列プログラミングの基礎 ・利用法
14	並列コンピュータの利用法	10月23日(金)	<ul style="list-style-type: none"> ・最適化 ・並列処理 ・利用法

備考：この年間計画は、予定であることをお含みおきください。

・詳細、申込みについてはウェブサイト (<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/kosyu.cgi>) を、ご覧ください。

(共同利用支援係)

事務組織の改編について (No.86)

4月1日から東北大学サイバーサイエンスセンター内情報部情報基盤課の事務組織の一部が改編されました。主な係とサービス内容は以下のとおりです。

共同利用支援係では、各種申請書・講習会・利用相談等の受付とライブラリ、アプリケーションを担当します。共同研究支援係では共同研究、計算機システム全般に関して担当いたします。詳細は、以下の表をご参照ください。

今後とも利用者サービスに努めてまいりますので、よろしくお願い申し上げます。

大規模科学計算システム関連案内

＜ 大規模科学計算システム関連業務は、サイバーサイエンスセンター本館内の情報部情報基盤課が担当しています。 ＞
<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/>

階	係・室名	電話番号 (内線) e-mail	主なサービス内容	サービス時間
				月～金
一階	共同利用支援係 (受付)	022-795-3406 (3406) FAX : 022-795-6099 uketuke@isc.tohoku.ac.jp	各種申請書、講習会、利用相談、 広報、センターへの質問や要望 の受付等	8:30～17:15
	利用相談室	022-795-6153 (6153) sodan05@isc.tohoku.ac.jp	計算機利用に関するプログラミ ング、ライブラリ、アプリケー ション、統計解析、ネットワー ク等の相談	14:00～16:00
	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧	8:30～21:00
	利用者入出力室	(3443)	大判プリンタ、DAT装置等の利 用	8:30～21:00
三階	庶務係	022-795-3407 (3407) syomu@isc.tohoku.ac.jp	庶務に関すること	8:30～17:15
	会計係	022-795-3405 (3405) kaikai@isc.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請 求に関すること	8:30～17:15
	共同研究支援係	022-795-6252 (6252) rs-sec@isc.tohoku.ac.jp	共同研究 、計算機システムに関 すること	8:30～17:15
	共同利用支援係	022-795-6251 (6251) uketuke@isc.tohoku.ac.jp	ライブラリ、アプリケーション に関すること	8:30～17:15
	ネットワーク係	022-795-6253 (6253) net-sec@isc.tohoku.ac.jp	ネットワークに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095 (6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC端末機 (X端末)	8:30～21:00

・()内は東北大学内のみの内線電話番号です。青葉山・川内地区以外からは頭に92を加えます。

・**太字**は主な変更箇所です。

(共同利用支援係)

— SENAC 執筆要項 —

SENAC のサイズは、前号 Vol. 42, No. 1 より B5 判から A4 判に変更になりました。

広報 SENAC は、広く利用者の便を計るために、下記の要項にしたがった投稿も記載いたします。

1. お寄せいただきたい投稿内容

次のような内容の投稿のうち、当センターで適当と判定したものを掲載します。その際に原稿の修正をお願いすることもありますのであらかじめご了承ください。

- ・一般利用者の方々が関心をもたれる事項に関する論説
- ・センターの計算機を利用して行った研究論文の概要
- ・プログラミングの実例と解説
- ・センターに対する意見、要望
- ・利用者相互の情報交換

2. 執筆にあたってご注意いただく事項

- (1)原稿は横書きです。
- (2)術語以外は、「常用漢字」を用い、かなは「現代かなづかい」を用いるものとします。
- (3)学術あるいは技術に関する原稿の場合、200 字程度のアブストラクトをつけてください。
- (4)参考文献は通し番号を付し末尾に一括記載し、本文中の該当箇所に引用番号を記入ください。
 - ・雑誌：著者, タイトル, 雑誌名, 巻, 号, ページ, 発行年
 - ・書籍：著者, 書名, ページ, 発行所, 発行年

3. 原稿の提出方法

原稿のファイル形式は Word を標準としますが、PDF での提出も可能です。サイズ*は以下を参照してください。ファイルは電子メールで提出してください。

—Word の場合—

- ・用紙サイズ：A4
- ・余白：上=30mm 下=25mm 左右=25mm 綴じ代=0
- ・標準の文字数（45 文字 47 行）

<文字サイズ等の目安>

- ・表題=ゴシック体 14pt 中央 ・副題=明朝体 12pt 中央
- ・氏名=明朝体 10.5pt 中央
- ・所属=明朝体 10.5pt 中央
- ・本文=明朝体 10.5pt
- ・章・見出し番号=ゴシック体 11pt~12pt

*余白サイズ、文字数、文字サイズは目安とお考えください。

4. その他

- (1)執筆者には、希望があれば別刷 50 部を進呈します。50 部を超える分については、著者の実費負担とします。別刷の希望部数等は投稿の際に申し出てください。
- (2)投稿予定の原稿が 15 ページを超す場合は以下まで前もってご連絡ください。
- (3)初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (4)原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係
e-mail uketuke@isc.tohoku.ac.jp
TEL 022-795-3406

編集後記

先日、元センター長の根元義章教授の最終講義を聴講しました。根元先生は、大型計算機センター（情報シナジーセンター）の助教授・教授あるいはセンター長を長年務められ、その間あるいはその後も、常にセンターのあるべき姿や進むべき道を示され、牽引されてきました。現センターのほとんどの教職員は先生からの薫陶を受け、その教えは今もセンターのスパコン運用の確固たる礎になっており、それが現在の SX-9 の高い利用率につながっていることには疑いがありません。

最終講義のタイトルは「継承と創出」でした。今後もこれまでのセンターの優れた伝統を絶えることなく継承し続け、その上で、新しいセンターを創出していくことが大事であると、新年度を迎えるにあたり改めて思い直した今日この頃でした。（なんだか今回は堅い文章になってしまいました。）幸いにして、今後も根元先生は、東北大学の理事として引き続き手腕を振るわれます。恩返しできるようなセンターの一員になるよう、努力したいと思います。（T.M）

この3月でシステム管理係長と会計係長が定年退職されました。システム管理係長は記事にもありますように学内の計算センターから始まり、大型計算機センターそして現在のサイバーサイエンスセンター（情報部情報基盤課）と四十数年間に亘り利用者サービスに尽くされてきました。会計係長は最後の3年がセンターで勤務となり大学そしてセンターの変革に尽力されました。両係長とも、本当にありがとうございました。

今月号の記事に、Gaussian を利用しての研究成果が報告されています。Gaussian はセンターで提供しているアプリケーションの中でも利用頻度の高いものの1つです。このアプリケーションを使用して、「2ヶ月間に亘り多量のジョブを実行し、ひとつの研究成果を挙げる事ができた。」とありますが、センター職員としては何よりの報告です。（E.I）

SENAC のサイズの変更について

昭和43年の発刊以来 SENAC のサイズは B5 判を採用してまいりましたが、編集部会にて約半年をかけ検討の結果、時代の趨勢、執筆者の便宜等もかんがみ前号 (Vol.42, No.1) より A4 判に変更いたしました。

SENAC 編集部会

小林広明 曾根秀昭 水木敬明 後藤英昭 江川隆輔
伊藤英一 山内 斎 小野 敏 大泉健治 斉藤くみ子

平成 21 年 4 月発行
編集・発行 東北大学
サイバーサイエンスセンター
仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3
郵便番号 980-8578
印刷 大成印刷株式会社

システム一覧

計算機システム	ホスト名	機種
スーパーコンピュータ	super. isc. tohoku. ac. jp	SX-9
並列コンピュータ	gen. isc. tohoku. ac. jp	TX7/i9610

サービス時間

利用システム名	利用時間帯
スーパーコンピュータ	連続運転
並列コンピュータ	連続運転
館内利用	月曜日～金曜日は8:30～21:00、 土・日・祝日は閉館

ジョブクラスと制限値

計算機システム	処理	ジョブクラス	CPU時間	メモリ容量
スーパー コンピュータ	会話型	(4cpu)	1時間	8GB
	バッチ 処理	ss (4cpu)	1時間	256GB
		s (4cpu)	無制限	32GB
		p8 (8cpu)	〃	512GB
		p16 (16cpu)	〃	1024GB
		p32 (32cpu)	〃	1024GB×2
		p64 (64cpu)	〃	1024GB×4
並列 コンピュータ	会話型	(4並列)	1時間	8GB
	バッチ 処理	as (4並列)	無制限	8GB
		am (Marc専用)	〃	8GB
		a8 (8並列)	〃	64GB
		a16 (16並列)	〃	128GB
		a32 (32並列)	〃	256GB
		a64 (64並列)	〃	512GB

大規模科学計算システム関連案内

<大規模科学計算システム関連業務は、サイバーサイエンスセンター本館内の情報部情報基盤課が担当しています。>

<http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/>

階	係・室名	電話番号(内線) e-mail	主なサービス内容	サービス時間
				月～金
一階	共同利用支援係 (受付)	022-795-3406(3406) FAX:022-795-6099 uketuke@isc.tohoku.ac.jp	各種申請書、講習会、利用相談、広報、センターへの質問や要望の受付等	8:30～17:15
	利用相談室	022-795-6153(6153) sodan05@isc.tohoku.ac.jp	計算機利用に関するプログラミング、ライブラリ、アプリケーション、統計解析、ネットワーク等の相談	14:00～16:00
	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧	8:30～21:00
	利用者入出力室	(3443)	大判プリンタ、DAT装置等の利用	8:30～21:00
三階	庶務係	022-795-3407(3407) syomu@isc.tohoku.ac.jp	庶務に関すること	8:30～17:15
	会計係	022-795-3405(3405) kaikai@isc.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請求に関すること	8:30～17:15
	共同研究支援係	022-795-6252(6252) rs-sec@isc.tohoku.ac.jp	共同研究、計算機システムに関すること	8:30～17:15
	共同利用支援係	022-795-6251(6251) uketuke@isc.tohoku.ac.jp	ライブラリ、アプリケーションに関すること	8:30～17:15
	ネットワーク係	022-795-6253(6253) net-sec@isc.tohoku.ac.jp	ネットワークに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095(6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC端末機(X端末)	8:30～21:00

() 内は東北大学内のみの内線電話番号です。青葉山・川内地区以外からは頭に 92 を加えます。

本誌の名前「SENAC」の由来

昭和33年に東北地区の最初の電子計算機として、東北大学電気通信研究所において完成されたパラメロン式計算機の名前で SENAC-1 (SENdai Automatic Computer-1) からとって命名された。

目次

東北大学サイバーサイエンスセンター

大規模科学計算システム広報 Vol.42 No.2 2009-4

[研究成果]

NAREGIによる広域ベクトル型スーパーコンピュータ連携

—ベクトルコンピューティングクラウドの実現に向けて—

.....江川隆輔、大泉健治、伊藤英一 1
山形正明、神山典、金野浩伸
東田学、大西健太郎、遠藤直弥、山崎潤一、関充男
岡部公起、小林広明

非共有結合性配位部位を持つ4-ヒドロキシピロリンアミドアルコールの

不斉マイケル反応および不斉アルドール反応の機構解明.....甲千寿子 7

— Gaussian 分子軌道法計算による遷移状態の探索 —

権垠相
中野博人
奥山祐子
竹下光弘

連鎖反応モデルから想定される深部低周波微動の特徴

.....有吉慶介、堀高峰、金田義行 19
Jean-Paul Ampuero
松澤暢、日野亮太、長谷川昭

地球の温暖化で変化した日本南岸の黒潮流路の選択特性.....関根義彦 27

[共同研究成果]

小形レンズアンテナの3次元 FDTD 解析.....井上大聡 37

佐藤弘康
澤谷邦男
水野皓司

二次元スリットを有する流路における乱流及び乱流熱伝達の

直接数値シミュレーションとそのモデル予測に関する研究.....牧野総一郎 47

河村洋
岩本薫

[大規模科学計算システムの利用法]

ライブラリ・アプリケーションの紹介.....57

[解説記事]

大規模科学計算システムにおける高速ファイル転送

.....後藤英昭、大泉健治、高橋洋一、花岡勝太郎 81
吉田智、岡崎昌夫、山形正明、管雄一郎、金野浩伸

[報告]

創造工学研修の実施報告

—スパコンを使って計算科学・計算機科学のおもしろさを体験—

.....滝沢寛之、江川隆輔 87
笹尾泰洋、佐野健太郎
山本悟、小林広明

大型コンピュータのサービスに携わって.....加藤昇 91

[大規模科学計算システムニュース]より.....93

平成21年度講習会計画(No.84)

事務組織の改編について(No.86)

執筆要項.....95

編集後記.....96



再生紙と大豆の油を主成分とした「ソイインク」を使用しています。