



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.3 2009-7

SENAC 2009-7



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) kaikei@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(SEN dai Automatic Computer-1)からとって命名された。

[共同研究成果]

直接数値シミュレーションを用いた温度場乱流境界層の研究

藤堂 公浩* 岩本 薫** 河村 洋***

*東京理科大学 理工学研究科 機械工学専攻

**東京農工大学 大学院工学府 機械システム工学専攻

***諏訪東京理科大学 システム工学部 機械システム工学科

1. 緒言

地球環境問題の中でも地球温暖化・ヒートアイランド現象は非常に深刻な問題である。これら
の諸問題を解決するためには熱伝達特性の現象理解が必要不可欠である。特に乱れを伴う固体壁
上の流れ場（壁乱流）は簡単な形状であるため、熱伝達特性の解明に用いられている。熱伝達特
性を解析する際には、実験と並び数値シミュレーションが欠かせないツールである。熱伝達を伴
う壁乱流の数値シミュレーションでは、数値的な取り扱いが易しいチャンネル乱流を対象とした直
接数値シミュレーション(DNS) が広く行われ、多くの成果を挙げている。他方、乱流境界層は実
験的には広く対象とされてきたが、主流(x) 方向に空間発達する性質により、計算対象としてチャ
ネル乱流よりも扱い難く、DNS 等の数値シミュレーションに関する研究はチャンネル乱流に比べ
ると少ない[1-3]。空間発達する境界層を扱うためにいくつかの手法が提案されており、限られた範
囲内のレイノルズ数、プラントル数におけるDNS が行われている。

本研究では無限に広い一枚の平板上を流れる乱流境界層を対象とし熱伝達を伴った計算を
行う。速度及び温度の最小スケールのバチェラスケール(η)・コルモゴロフスケール(η_θ)を
満たす程の格子幅を有し、乱流境界層の外層に生じる大規模構造を捉えるほどの大きな計算
領域を有する計算条件を計算対象とする。主流流速 U_∞ 、入口の99%速度境界層厚さ δ_0 、動
粘度 ν で定義されるレイノルズ数 $Re_{\delta_0}(=U_\infty \delta_0 / \nu)$ で2600と9090の2ケース行い、 $Re_{\delta_0}=2600$
の時にはプラントル数0.71及び2の計算を、 $Re_{\delta_0}=9090$ の時にはプラントル数0.71, 1, 2, 5の
計算を行った。特に $Re_{\delta_0}=9090$ の計算において格子点数が $4096 \times 768 \times 640$ の計算を行って
おりメインメモリ 1TBの計算を行っている。このレイノルズ数 2ケース、プラントル(Pr)数 4
ケースの計算を行いレイノルズ数依存性及びプラントル数依存性について検証を行った。過
去のDNS計算ではBellら[2] の $Pr=2$ の計算が最高プラントル数のため、本研究が世界最高の
プラントル数を有する温度場乱流境界層のDNSである。また、本研究では他の研究に比べ格
子幅を狭く定義し、計算領域も十分取った計算を行っており、より厳密な計算を行っている。

2. 数値解析方法

2.1 計算手法

計算対象の概略図を図1 に示す。支配方程式は、非圧縮性流体における連続の式、Navier-Stokes
方程式、及びエネルギー方程式である。流れは一様な主流により駆動される。スパン(z) 方向には
周期境界条件を、壁面ではnon-slip 条件をそれぞれ課した。境界層は主流(x)方向に発達する特徴
を持つため、主流方向に周期境界をかけることができない。空間発達する乱流境界層を扱うため、
流入境界条件にLund[4]及びKongら[5]の提案した手法を用いた。計算条件を表1 に示す。ここで、
 U_∞ は主流流速、 δ_0 は入口における99% 境界層厚さ、 δ_2 は運動量厚さ、 ν は動粘性係数である。
また、温度 θ は $\theta^* = (\theta - \theta_0) / (\theta_\infty - \theta_0)$ で定義される(θ_0 は壁面温度、 θ_∞ は主流温度)。温度
の境界条件は、壁温一定条件とした。 Pr 数は0.71, 1, 2, 5 とし、入口の境界層厚さ δ_0 で定義され
るレイノルズ数 $Re_{\delta_0}(=U_\infty \cdot \delta_0 / \nu) = 2600, 9090$ と設定した。

連続の式とNavier-Stokes 方程式のカップリングにはSMAC法を用いた。時間積分には、粘性項
の壁垂直(y) 方向に二次精度Crank-Nicolson 法を、それ以外の項には二次精度ルンゲクッタ法をそ
れぞれ用いた。空間離散化には、全方向に二次精度中心差分を適用した。

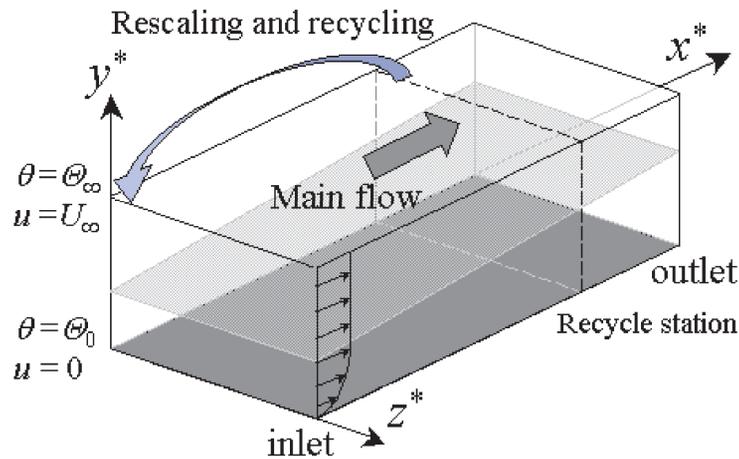


図 1 計算領域

表 1 計算条件

レイノルズ数	$Re_{\delta 0}$	2600		9090			
	Re_{τ}	140 ~ 190		380 ~ 460			
	$Re_{\delta 2}$	291 ~ 422		1000 ~ 1200			
プラントル数	Pr	0.71	2	0.71	1	2	5
分割数	N_x	1728		4096			
	N_y	256		768			
	N_z	256		640			
計算領域	L_x	$21.6 \delta_0$		$16.2 \delta_0$			
	L_y	$3.0 \delta_0$		$3.0 \delta_0$			
	L_z	$6.4 \delta_0$		$6.4 \delta_0$			
バッチェラスケール	η_{θ}^+	5.3	3.1	6.5	5.5	3.8	2.5
格子幅	Δx^+	1.8		1.7			
	Δy^+	0.1 ~ 4.5		0.15 ~ 3.7			
	Δz^+	3.5		4.0			
格子幅	$\Delta x^+ / \eta_{\theta}^+$	0.33	0.56	0.26	0.31	0.44	0.69
	$\Delta y^+ / \eta_{\theta}^+$	-	-	-	-	-	-
	$\Delta z^+ / \eta_{\theta}^+$	0.65	1.10	0.61	0.72	1.03	1.63
時間刻み	Δt^+	0.141		0.024			
統計時間	t^+	5656		7000			
リサイクルステーション	X_d^*	16.2		12.15			

2.2 プログラム性能

本研究では、信頼性の高い DNS を行うため、速度場及び温度場における最小スケールを出来る限り捉え得る、細かな格子幅を設定する必要がある。本計算における格子幅は、境界層を対象とした DNS の研究に比べ約 10 倍細かく、また、総格子点数は、最大で約 5 億点である (図 2)。また、本研究と過去に行われた研究のプラントル数とレイノルズ数の比較を図 3 に示す。本研究では、 $Re \delta 2 = 1000$ の時に $Pr = 5$ の計算を行い温度場乱流境界層において世界最高のプラントル数の計算を行った。計算に最低必要なデータは直交座標データ、速度・圧力・温度の 3 次元データであり、その他、各種乱流統計量等の一次元データを含めると、使用メモリは約 1 TB を要した。

東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-9 にて本計算プログラムを実行した。SX-9 は、最新のベクトル型スーパーコンピュータであるため、多重ループを多く使用する流体計算にとって、非常に有用な計算マシンである。また、SX-9 のスペック上 MPI を用いて計算を行う場合、最大

4 TB のメインメモリを使用可能であるため、本研究の高解像度の DNS を行うにあたりとても重要な要素となっている。

本プログラムは MPI を用いてノード間並列計算を行っている。SX-9 を使用する際に MPI の詳細な使用方法など同センター・スタッフの方にアドバイスを頂き、MPI 計算を可能とすることができた。

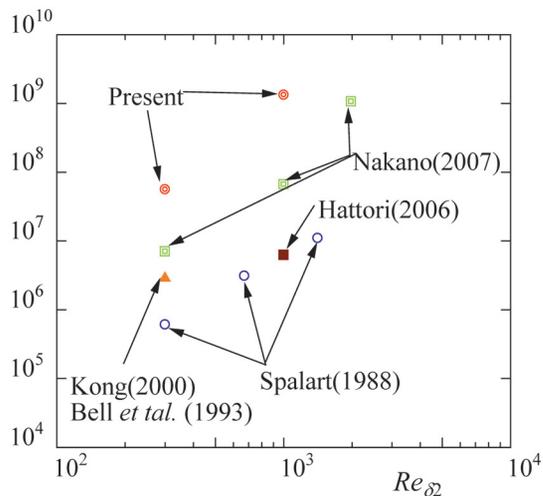


図 2 乱流境界層 DNS における総格子点数

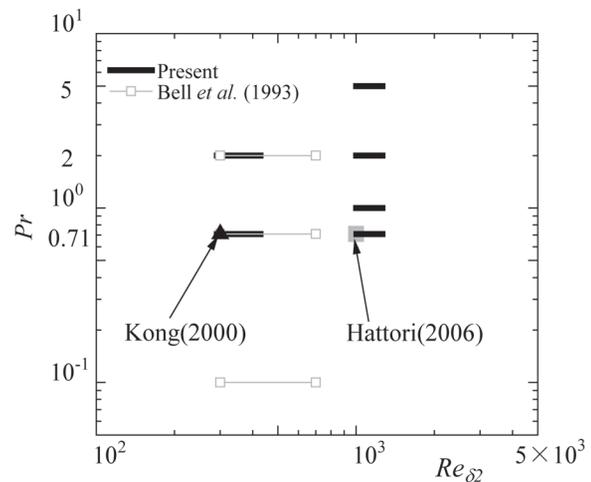


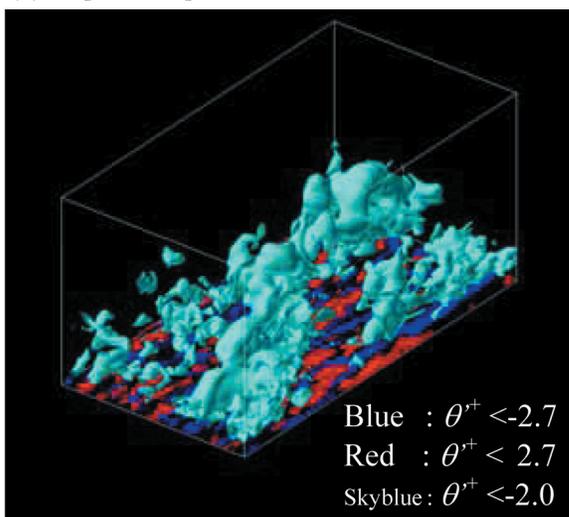
図 3 温度場乱流境界層 DNS の Re_{δ_0} , Pr 数

3. 結果及び考察

3.1 瞬時場の可視化

図4 に瞬時の温度変動および速度変動・圧力分布の可視化を示す。境界層外端の負の温度変動が現れる箇所において速度・温度変動を比較するため、等高値を低く設定した。壁面近傍では正負の温度・速度変動を表示し、外層では負の温度・速度変動を表示した。また表示している領域は計算領域の一部である。図4 に示す領域は主流方向 $6.3 \delta_0$ 、壁垂直方向 $3.0 \delta_0$ 、スパン方向 $3.2 \delta_0$ の領域を表示した。壁面近傍では主流方向速度変動・温度変動共にストリーク構造が確認できる。対し、壁面遠方 $y/\delta_0 > 0.5$ の領域では大規模な負の主流方向速度変動および温度変動が存在することが分かる。

(a) θ^+ [$Pr=0.71$]



(b) u_x

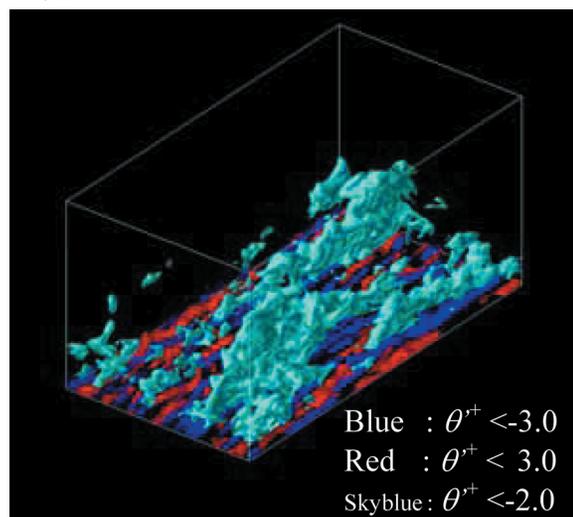


図 4 瞬時場 ($Re_{\delta_0} = 9090$)

また、 $Re_{\delta_0} = 9090$ における速度・温度変動の(y-z) 断面図を図5 に示す。壁面近傍では負と正の変動が交互に存在し、ストリーク構造が確認される。対し境界層外端ではプラントル数によらず大規模な温度変動に違いは現れないものの、プラントル数増加に伴い温度変動が微細化した。特に平行平板間流の場合、チャンネル半幅 δ の時に 1.0δ の構造がある事が知られているのに対し、境界層では瞬時場データより境界層の場合は約 $2.0\delta_{99}$ であることが分かる。また、速度変動・温度変動はプラントル数に関わらず外端で一定の間隔を有しており、プラントル数依存性は確認されなかった。

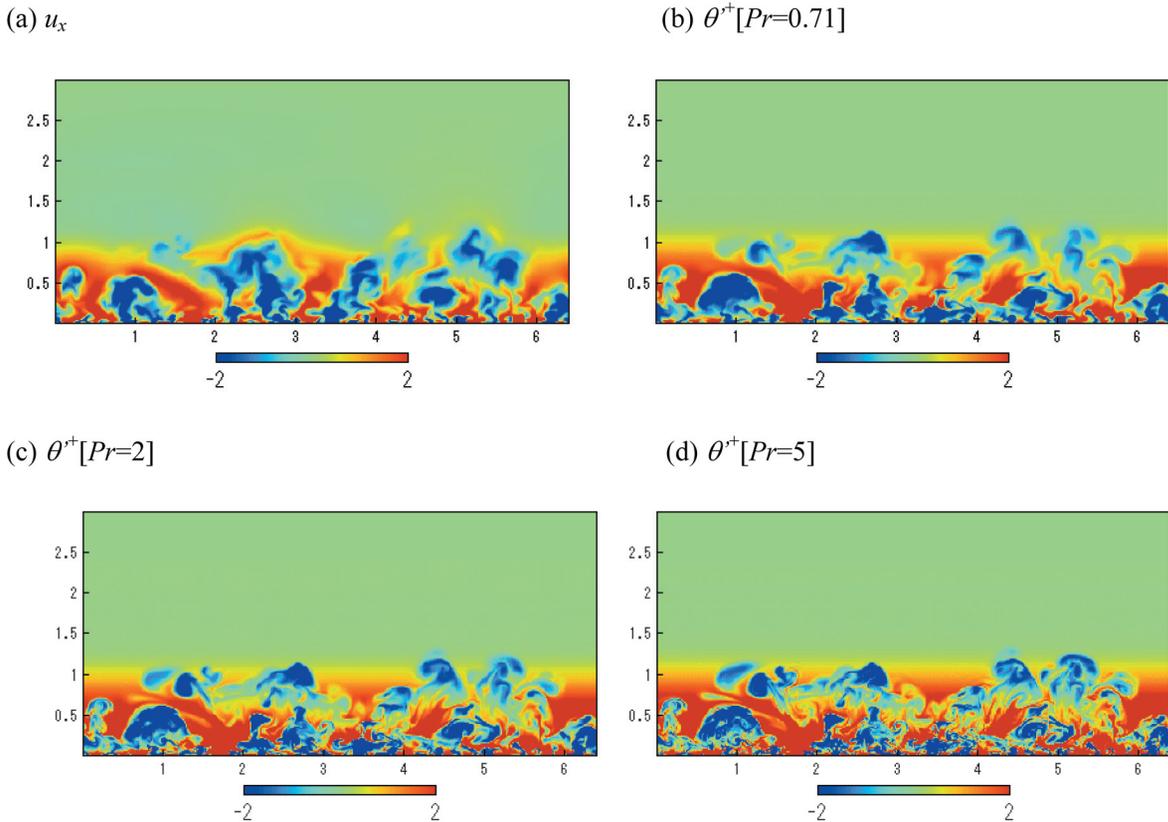


図 5 (y-z)断面図 ($Re_{\delta_0} = 9090$)

3.2 スタントン数

スタントン数は熱伝達を表す無次元数であり、以下の式で表す事が出来る。

$$St = \frac{Nu}{Re \cdot Pr} \tag{1}$$

図6 にスタントン数を示す。ここで、 $Re_{\Delta_2} = \Delta_2 U_{\infty} / \nu$ である(Δ_2 : エンタルピー厚さ)。スタントン数に関して、Kays & Crawford[6] は以下の経験式を提唱している。

$$St = C \left(\frac{1-n}{C} \right)^{n/(n-1)} Re_{\Delta_2}^{n/(n-1)} \tag{2}$$

ここで、

$$n = 0.1879 Pr^{-0.18}, \quad C = 0.02426 Pr^{-0.895} \tag{3}$$

である。空気流である $Pr = 0.71$ の実験および計算は数多く行われているが、Kays & Crawford の経験式、Kongら[5]のDNS、およびHoura & Nagano[7], Ames & Plesniak[8], Barrett & Hollingsworth[9] の実験データも比較のためプロットする。計算結果はKays & Crawford の経験式、Kong らのDNS(BL, $Re_{\delta_2} = 300$)およびHoura & Nagano[7] の実験データと良く一致した。

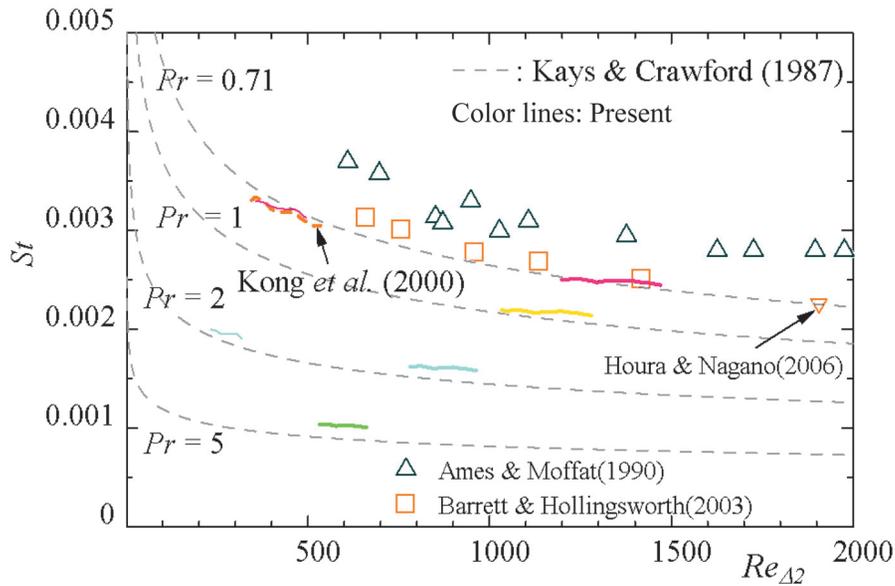


図 6 スタントン数

3.3 平均温度分布

平均流速分布を図7に示す. 比較のために乱流境界層の実験データに基づいて作られたKader[10]の経験式, Kawamuraら[11](UHF, $Re_{\tau} = 180$), Kozukaら[12](UHF, $Re_{\tau} = 395$)のDNS結果および, Subramanian & Antonia[13], Houra & Nagano[7]の実験結果をプロットした. Kaderの経験式は以下のように記述される.

$$\Theta^+ = Pr y^+ + \exp(-\Gamma) + \left\{ 2.12 \ln \left[\left(1 + y^+ \right) \frac{2.5(2 - y/\delta_{99})}{1 + 4(1 - y/\delta_{99})^2} \right] + \beta(Pr) \right\} \exp(-1/\Gamma) \quad (4)$$

ここで,

$$\Gamma = \frac{10^{-2} \times (Pr y^+)^4}{1 + 5Pr^3 y^+}, \quad \beta = (3.85 Pr^{1/3} - 1.4)^2 + 2.12 \ln(Pr) \quad (5)$$

である. 全プラントル数で伝導底層の領域($y^+/\delta_{\theta}^+ \leq 1$)においてKaderの経験式, KawamuraらのDNS結果及びKozukaら(UHF, $Re_{\tau} = 395$), Lundら(BL, $Re_{\delta 2} = 300$)のDNS結果と良く一致した. また, 対数則域では $Pr = 5$ ではそこまで顕著に表れないものの, 全プラントル数で対数則域が存在することを確認した. 実験値に比べHoura & Naganoの結果と良く一致したものの, Subramanian & Antoniaに比べ高い値となった. これはSubramanian & Antoniaの結果が流入近くの実験データであり, 十分に発達していないためだと考えられる.

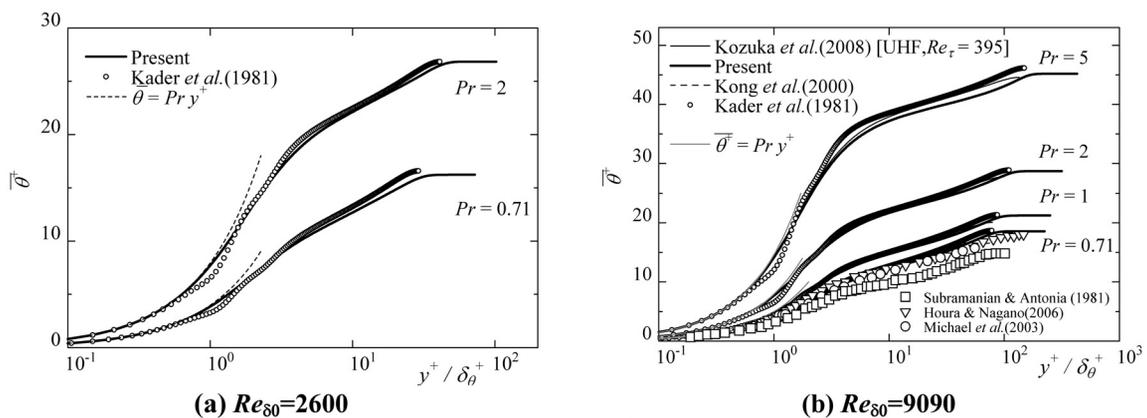


図 7 平均温度分布

3.4 乱流プラントル数

乱流プラントル数を図8 に示す. 乱流プラントル数は

$$Pr_t = \frac{\nu_t}{\alpha_t} = \frac{\overline{u'v'}}{\overline{v'\theta'}} \frac{d\theta/dy}{du/dy} \tag{6}$$

であらわすことが出来る. 比較のために乱流境界層の実験データに基づいて作られたKawamuraらのDNS結果(UHF, $Re_\tau=180, Re_\tau=395$) およびSubramanian & Antonia, Houra & Nagano, Blackwell[14], Hollingsworth[15]の実験結果をプロットした. プラントル数が低い場合において, 乱流プラントル数は壁面近傍で, $Pr_t \approx 1$ となることが, 平行平板間流の結果より分かっており, 良く一致した. しかしながら, 実験値とは一致しなかった. これは実験では壁面近傍での測定が困難なため, 誤差が生じたと考えられる. また壁面漸近において $Pr=5$ の時に, 約1.3程度と高くなった. これは, Pr 数の増加とともに, 速度変動と温度変動の最小スケールが異なるため, 相関が低くなるためである. 壁から離れるに従い乱流プラントル数が減少し約0.7まで単調減少する. そして約 $y/\delta_{99}=0.8$ を境に増加する. 壁面近傍に関しては $Re_{\delta_0}=2600, 9090$ 共に平行平板間流とよく一致した. しかし, 境界層厚さ付近において境界層の方が平行平板間流(チャンネル半幅)に比べ値が高くなった. これは $R_{u\theta}$ 時系列データや瞬時場データより境界層厚さ近傍において温度変動 θ' と主流方向速度変動 u' の挙動に違いが現れるためである.

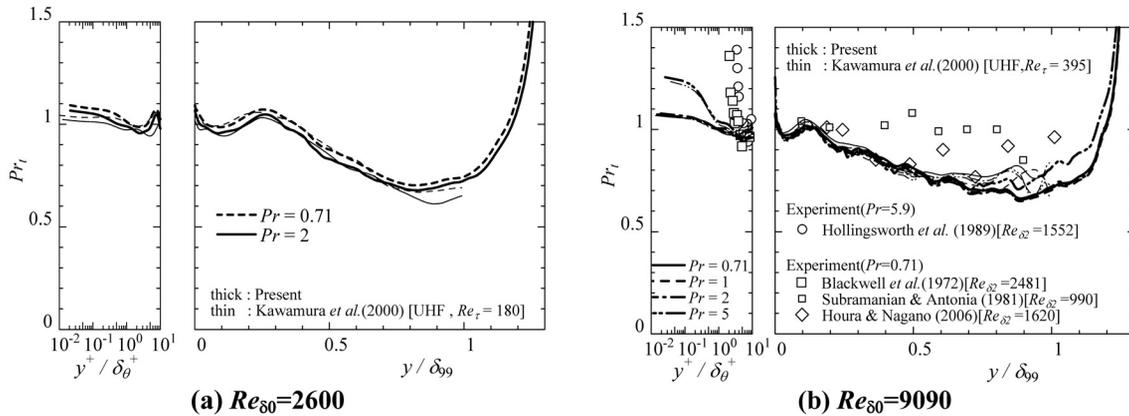


図 8 乱流プラントル数

3.5 時間スケール比

時間スケール比(time scale ratio) を図9 に示す. 時間スケール比は, 温度変動が散逸される時間スケール($\tau_\theta = k_\theta/\varepsilon_\theta$)と速度変動が散逸される時間スケール($\tau = k/\varepsilon$)の比であり, 以下のように記述される.

$$R = \frac{\tau_\theta}{\tau} = \frac{k_\theta/\varepsilon_\theta}{k/\varepsilon} \tag{7}$$

温度伝導底層では, 平行平板間流において R/Pr でよくリスケーリングされる事が知られており, 境界層でも同様に R/Pr でリスケーリングされた. 壁から離れた位置において時間スケール比はプラントル数増加に伴い増加する. 特に, 境界層厚さ付近において平行平板間流に比べ高くなっている. このことは, 境界層厚さにおいて速度変動に比べ温度変動が散逸せず, 残る事を示している. そのため, 境界層厚さ付近において高いプラントル数の温度変動変動が散逸されずに微細構造として残る事を示している. このことは, 断面図である図5で高プラントル数の方がより構造が微細化することと関係している.

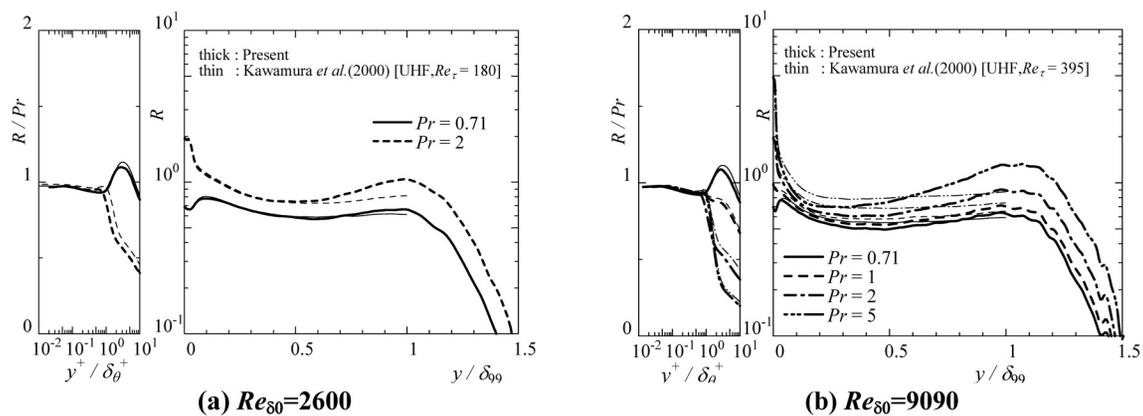


図 9 時間スケール比

3.6 One-dimensional energy spectra

速度および温度変動の 1 次元エネルギースペクトル $E_{u_i u_i}, E_{\theta\theta}$ は k_z をスパン方向の波数として、

$$\int_0^{\infty} E_{u_i u_i}(k_z) dk_z = \overline{(u_{irms}^+)^2} = \overline{u_i^+ u_i^+} \quad (8)$$

$$\int_0^{\infty} E_{\theta\theta}(k_z) dk_z = \overline{(\theta_{irms}^+)^2} = \overline{\theta^+ \theta^+} \quad (9)$$

の関係がある。式(8), (9) から分かるようにエネルギースペクトルは波数空間において、単位波数あたりのエネルギー含有率を表している。スペクトル強度に波数 k_m をかけた量を Pre-multiplied Spectra と呼び、横軸を波数または波長 $\lambda_m = 2\pi/k_m$ の対数に対してプロットしたとき、エネルギー含有率を示す指標となることが知られている。本研究では、乱流構造のスパン方向スケールを定量的に得ることを目的として、図10 にスパン方向の波長 λ_z^+ に対して Pre-multiplied Spectra をプロットした。Pre-multiplied Spectraによって現れるピーク波長 (Most Energetic Wavelength, 以下MEW) は流れ場の空間的構造の平均間隔に良く一致することが知られている。

壁近傍において、 u および θ 成分についてのMEWは λ_z^+ でおよそ100 の一定値を示しており、壁面近傍の順秩序的なストリーク構造の間隔に良く一致している。壁からの距離が大きくなると、MEWは一定値 $\lambda_z/\delta_{99} = 2.0$ を有している。 $Re_{\delta_0} = 2600$ の場合では壁面近傍においてその位置における固有のピークを有している。対し、 $Re_{\delta_0} = 9090$ の場合では壁面近傍においてその位置における固有のピークに加え乱流コア領域のMEWのピーク位置 $\lambda_z/\delta_{99} = 1.0$ を有している事が見受けられる。これは、大規模構造が内層の構造に影響を及ぼしているということが考えられる。 $Re_{\delta_0} = 2600$ の時に表れない原因はレイノルズ数が低いため外層構造に顕著な構造が表れないためである。

4. 結言

零圧力勾配の乱流境界層を対象に、大規模な直接数値シミュレーションを行った。レイノルズ数は $Re_{\delta_0} = 2600, 9090$ に設定し、各レイノルズ数においてプラントル数を $Pr = 0.71, 2$ ($Re_{\delta_0} = 2600$) および $Pr = 0.71, 1, 2, 5$ ($Re_{\delta_0} = 9090$) とした。高レイノルズ数の場合でも、スパン方向の領域サイズを大きく取りまた外層においても最小スケールの渦を捕らえるほどの細かい格子幅を定義することで、乱流構造を捉え、外層における乱流構造について議論した。また、平行平板間流と比較を行い、境界層特有の構造を明らかにした。本研究では $Pr = 5$ の乱流境界層DNS を初めて計算し、平衡平板間流と壁面近傍で良く一致する傾向を得た。また、境界層外端での統計量を取得することにより、境界層外端構造の特徴を得た。

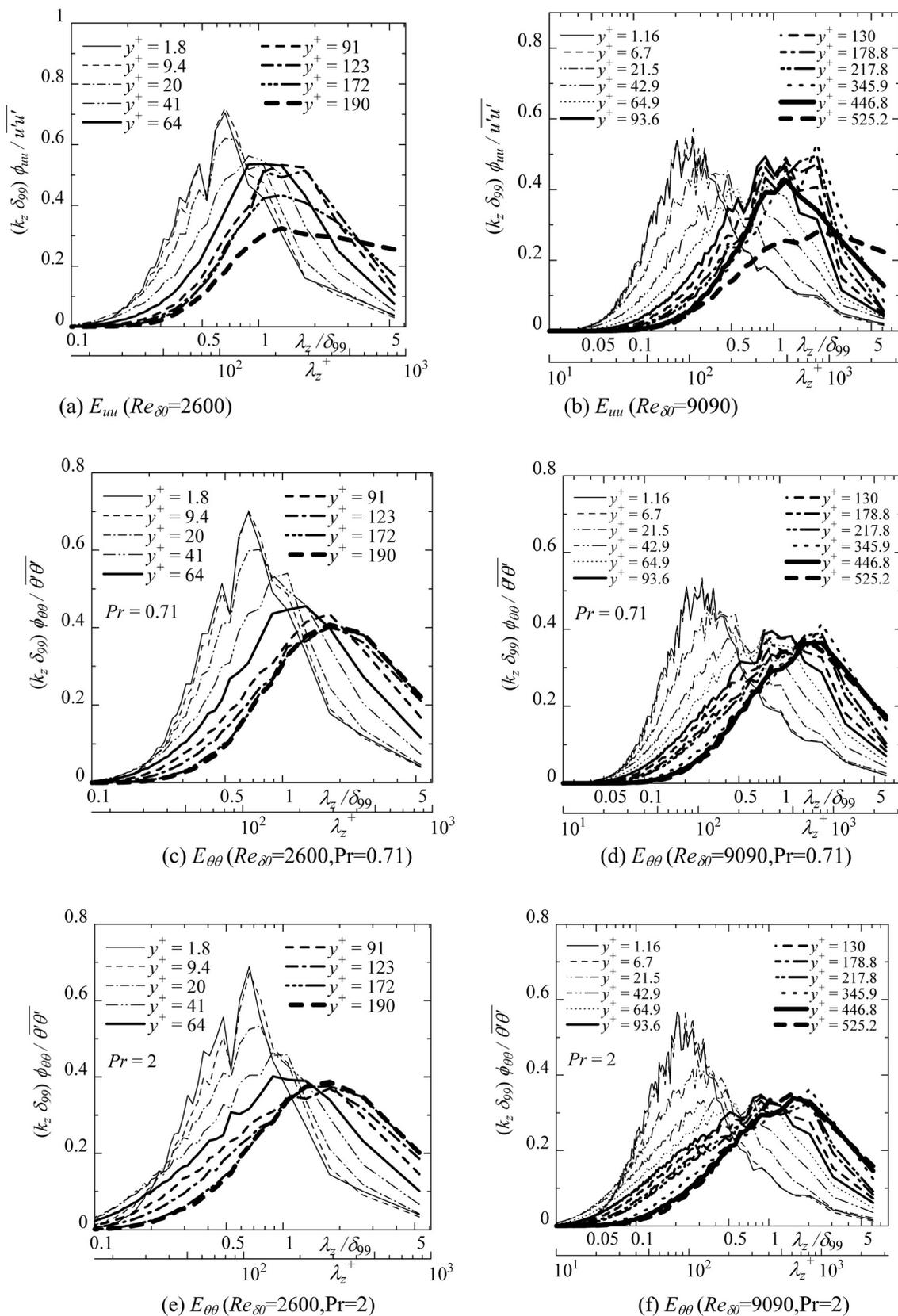


図 10 Pre-multiplied エネルギースペクトル分布. (a), (b) E_{uu} ; (c), (d) $E_{\theta\theta}$ for $Pr = 0.71$; (e), (f) $E_{\theta\theta}$ for $Pr = 2$; (a), (c), (e), $Re_{\delta_0} = 2600$; (b), (d), (f), $Re_{\delta_0} = 9090$.

謝辞

本研究は、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することで実現することができた。また、MPI 計算をするにあたり同センター関係各位に有益なご指導とご協力をいただいたことに感謝する。

参考文献

- [1] P. R. Spalart., “Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $R_\theta = 1410$.”, *J. Fluid Mech.*, **187**, pp. 61-98, 1988.
- [2] D. M. Bell and J. H. Ferziger., “Turbulent boundary layer DNS with passive scalars.”, *Near-Wall Turbulent Flows.*, pp. 327-336, 1993.
- [3] H. Hattori, T. Houra and Y. Nagano., “Direct numerical simulation of stable and unstable turbulent thermal boundary layers.”, *Int. J. Heat and Fluid Flow.*, **28**, pp. 1262-1271, 2007.
- [4] T. S. Lund., “Generation of turbulent inflow data for spatially-developing boundary layer simulations.”, *J. Comput. Phys.*, **140**, pp.233-258, 1998.
- [5] H. Kong, H. Choi and J. S. Lee., “Direct numerical simulation of turbulent thermal boundary layers.”, *Physics of Fluids.*, **12**, pp.2555-2568, 2000.
- [6] W. M. Kays, M. E. Crawford and B. Weigand., “Convective Heat and Mass Transfer, 4th ed.”, (McGraw-Hill, New York), 2004.
- [7] T. Houra and Y. Nagano., “Effects of adverse pressure gradient on heat transfer mechanism in thermal boundary layer.”, *Int. J. Heat and Fluid Flow.*, **27**, pp. 967-976, 2006.
- [8] F. E. Ames and M. W. Plesniak., “The influence of large scale, high intensity turbulence on vane aerodynamic losses, wake growth, and the exit turbulence parameters.”, Proc., International Gas Turbine and Aeroengine Congress and Exposition, Houston, TX, ASME Paper 95-GT-290, 1995.
- [9] M. J. Barrett and D. K. Hollingsworth., “Heat transfer in turbulent boundary layers subjected to free-stream turbulence-part 1: experimental results.”, *Journal of Turbomachinery.*, **125**, pp. 232-241, 2003.
- [10] B. A. Kader., “Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers.”, *Int. J. Heat and Mass Transfer.*, **24**, pp. 1541-1544, 1981.
- [11] Kawamura, H., Abe, H. and Shingai, K., “DNS of turbulence and heat transport in a channel flow with different Reynolds and Prandtl numbers and boundary conditions.”, *Turbulence, Heat and Mass Transfer 3 (Proc. of the 3rd International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer)*, Nagano, Y., Hanjalic, K. and Tsuji, T. (Eds.), Aichi Shuppan, pp. 15-32, 2000.
- [12] M. Kozuka, Y. Seki and H. Kawamura., “Reynolds and Prandtl number effects on the turbulent heat transfer in a channel flow through high spatial resolution DNS.”, *Proceedings of 2007 Annual Meeting.*, Japan Society of Fluid Mechanics, 2007.
- [13] C. S. Subramanian and R. A. Antonia., “Effect of Reynolds number on a slightly heated turbulent boundary layer.”, *Int. J. Heat and Fluid Flow.*, **24**, pp. 1833-1846, 1981.
- [14] B. F. Blackwell, W. M. Kays and R. J. Moffat , “The Turbulent Boundary Layer on a Porous Plate : An Experimental Study of the Heat Transfer Behavior With Adverse Pressure Gradients.”, Report HMT-16, Thermosciences Division, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Aug., 1972.
- [15] D. K. Hollingsworth, W. M. Kays and R. J. Moffat , “Measurement and Prediction of the Turbulent Thermal Boundary Layer in Water on Flat and Concave Surfaces.”, Report HMT-41, Thermosciences Division, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Sept., 1989.

白

[共同研究成果]

平行平板間乱流熱伝達におけるスカラー散逸場のDNS解析

小塚 信* 河村 洋**

*東京理科大学 理工学研究科 機械工学専攻

**東京理科大学 理工学部 機械工学科

1. 諸言

乱流に関わる現象は、自然界、産業界を通じて我々の生活に深く関与している。乱流は無限自由度、非定常、不安定であり、非線形、散逸性を含む極めて複雑な力学系であるため、その挙動はもとより制御は極めて困難である。しかし、この乱流を精度良く予測し自在に制御できれば、流体抵抗の低減、流れの剥離や流体音の抑制、あるいは熱や物質の混合の促進などを通じ、省エネルギー化や環境負荷の低減に対して貢献できる。

壁乱流による熱や物質輸送を伴うケースは工学的アプリケーションで数多く見られるため、重要な研究対象のひとつである。壁付近の微細渦の周囲には特徴的な乱流構造が存在しており、乱流熱伝達や乱れエネルギーの生成・散逸・拡散などと密接に関連している。また、熱・流体工学と他分野との融合領域で起こる化学反応や相変化などを伴う熱流体现象には今だ、未解明な部分が多い。従って、壁付近の流れのダイナミクス及びそれらが熱・物質輸送に与える影響を解明し、様々な条件下における熱流動現象を把握することは工学的に非常に重要である。

現在では、乱流現象を予測、解明するために、直接数値シミュレーション(DNS)が必要不可欠な研究手段とされている。DNSはモデル化を用いないために計算負荷が問題となるが、その厳密性は評価に値し、乱流モデルの構築や乱流熱輸送現象の解明に関して果たす役割は大きい。従来までは、計算機の制約上、低レイノルズ数、低プラントル数が解析対象とされてきた[1,2]。近年、大型計算機環境の整備が進み、実用的なより高いレイノルズ数やプラントル数における乱流熱伝達のDNSが可能となってきた[3-5]。

乱流熱伝達のDNSにおいては、温度拡散の最小スケール η_0 (Batchelor scale)を捉えるほどの高い空間解像度が必要とされる。次式に示すように、 η_0 は速度場の最小スケール η (Kolmogorov scale) に対して、解析的にプラントル数 Pr の $-1/2$ 乗に比例することが知られている。

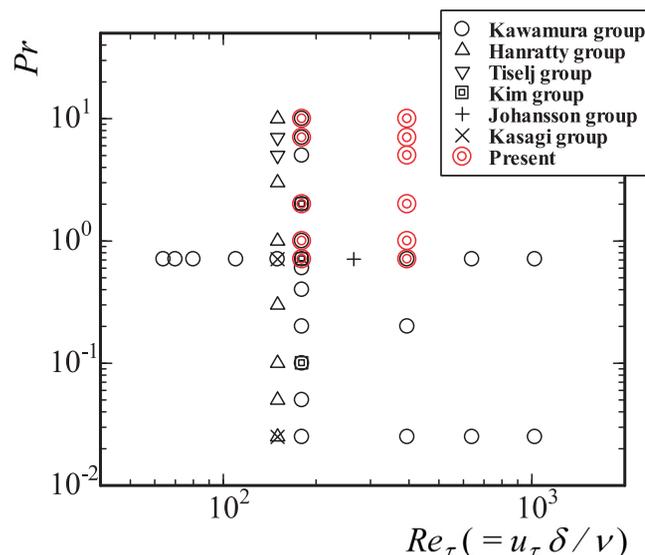


図1 平行平板間乱流熱伝達のDNSにおけるレイノルズ数とプラントル数.

$$\eta_\theta = \eta \cdot Pr^{-1/2} \tag{1}$$

つまり、 Pr が 1 よりも大きくなれば、熱輸送に対する格子幅をさらに細かくしなければならず、より多くの計算資源が要求される。このような理由により、熱輸送を伴う乱流の DNS は主に、低 Pr ($Pr < 1$) において計算が実施されており、1 以上の比較的高い Pr についてはあまり行われていない(図 1 参照)。また、比較的高い Pr における DNS では、平均温度分布や熱伝達率などの低次統計量に対する Pr 依存性や温度場における大規模構造を調査することを主な目的としていたため、空間解像度は η_θ よりも粗く設定されているものがほとんどであった[5,6]。乱流エネルギー散逸率やスカラー散逸率の収支などの高次統計量は、高精度な乱流モデル開発において重要であるため、高次統計量を取得する際には、 η_θ を解像できる空間解像度を設定する必要がある。

そこで本研究では、 η_θ をできる限り捉え得る細かな空間解像度を用いて平行平板間乱流熱伝達の高解像度 DNS を実施し、比較的高いプラントル数の熱伝達特性をより正確に評価することを主な目的とする。乱流エネルギー散逸率、スカラー散逸率の収支などの高次統計量や小スケールスカラー散逸構造におけるレイノルズ数とプラントル数の影響を調査する。また同様の乱流場において既存乱流モデルのアプリオリテストを行い、実用計算モデルの構築に有用な知見を得る。

2. 解析対象

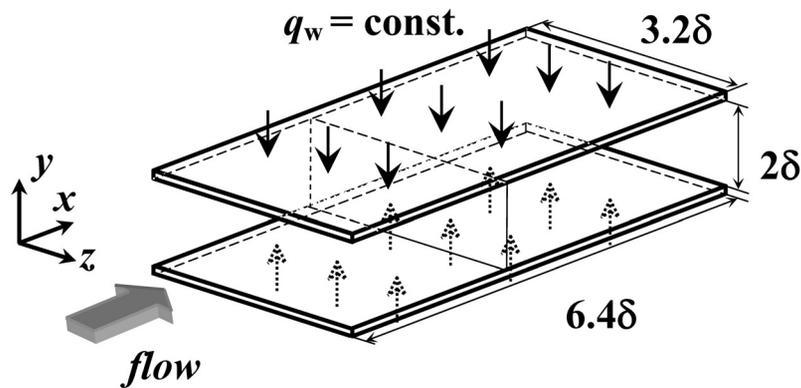


図 2 解析対象.

解析対象を図 2 に示す。流れ場は非圧縮性のニュートン流体とし、平均圧力勾配により駆動される十分に発達した平行平板間乱流である。壁面上では滑り無し条件とし、無限に広い平行平板を模擬するため、主流(x)方向及びスパン(z)方向には周期境界条件と適用した。本研究で用いられるレイノルズ数は、壁面摩擦速度 u_τ 及びチャンネル半幅 δ で定義されるレイノルズ数 $Re_\tau (=u_\tau \delta/\nu)$ で $Re_\tau=180, 395$ の計算を行った。ここで ν は動粘性係数である。

温度場の境界条件は、上下壁面等熱流束加熱条件を適用した。乱流拡散による熱輸送の基礎的性質を調査するため、浮力の影響は考慮していない。本研究で扱うプラントル数は、 $Pr = 0.71, 1.0, 2.0, 5.0, 7.0, 10$ であり、空気から水に相当する流体を対象としている。

3. 数値解析手法

3.1 支配方程式

速度場の支配方程式は、連続の式及び Navier-Stokes 方程式である。ここで、 u_i は速度、 p は圧力、 t は時間である。各方程式において、 $i=1, 2, 3$ はそれぞれ、 x 方向、壁垂直(y)方向、 z 方向を示す。上添え字(+)は u_τ 及び ν で、(*)は δ でそれぞれ無次元化されている。上添え字(')は、瞬時

値から平均値を引いた変動分を意味する.

$$\frac{\partial u_i^+}{\partial x_i^*} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial u_i^+}{\partial t^*} + u_j^+ \frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^*} = -\frac{\partial p'^+}{\partial x_i^*} + \frac{1}{Re_\tau} \frac{\partial^2 u_i^+}{\partial x_j^{*2}} - \frac{\partial \bar{p}^+}{\partial x_1^*} \delta_{i1} \quad (3)$$

加熱条件として等熱流束加熱条件を課す場合、壁面上での熱的境界条件を0とするために、次のように温度偏差 θ を用いる. この時、統計的に平均化された温度は x 方向に対して線形的に増加する. それゆえ、壁面摩擦温度 $T_\tau (=q_w/\rho c_p u_\tau)$ により無次元化された瞬時の温度 $T^+(x^*, y^*, z^*)$ は以下のように変換される.

$$T^+(x^*, y^*, z^*) = \frac{d\langle \bar{T}_m^+ \rangle}{dx^*} x^* - \theta^+(x^*, y^*, z^*) \quad (4)$$

ここで、 $\langle \bar{T}_m^+ \rangle$ は混合平均温度である. 本研究対象では、主流方向の温度勾配は一定値で与えられるので、エネルギー方程式は以下のように表わされる.

$$\frac{\partial \theta^+}{\partial t^*} + u_j^+ \frac{\partial \theta^+}{\partial x_j^*} = \frac{1}{Re_\tau \cdot Pr} \frac{\partial^2 \theta^+}{\partial x_j^{*2}} + \frac{u_1^+}{\langle u_1^+ \rangle} \quad (5)$$

本DNSにおける一様熱流束とは、瞬時における局所の熱流束は変化するが、空間平均された熱流束は一定であることを意味している.

3.2 計算手法

連続の式とNavier-Stokes方程式のカップリングにフラクショナル・ステップ法を、空間的離散化には有限差分法を用いた. 対流項の離散化には、スペクトル法との比較で良い一致が確認されているコンシステント・スキーム[7]を適用する. 主流方向とスパン方向に四次精度中心差分を、壁垂直方向には二次精度中心差分を用いた. また、壁垂直方向は不等分割格子としている. 時間進行は、壁垂直方向の粘性項に対しては、二次精度クランク・ニコルソン法を、その他の項に対しては二次精度アダムス・バッシュフォース法を適用した. その他の計算手法に関する詳細は[3,4]を参照されたい.

3.3 プログラム性能

本計算プログラムは、昨年度の共同研究において最適化を施したプログラムをベースに、今回の研究目的に則したコードへと拡張したものである. 昨年度、コンパイル時に2000行を超える大規模なDOループでは、OpenMPによる並列化が効率的に行われなかったという問題が生じた. サイバーサイエンスセンター・スタッフの方と共同で原因究明を行ったが、この問題が生じた理由を突き止めることはできなかった. 分割の仕方を変えて何通りかコンパイルしてみたところ、2000行未満であれば正しく並列化されることがわかった. 今年度はこの経験を参考に、大規模ループを避けるようコードの拡張・並列化を実施した.

表1にProginfの一例を示す. ここで、計算プログラムの解析条件は、 $Re_\tau = 395$, $Pr = 1.0$, 7.0 とし、 $70,000\text{step}$ (無次元時間 $t^* = tu_\tau/\delta = 0.70$)に亘って解析を行ったものである. 総格子点数は昨年度と同様、最大で5億点であり、平行平板間乱流熱伝達のDNSにおいては、世界一細かな空間解像度を設定した. 使用メモリは約150GBを要した. 平均ベクトル長、ベクトル演算率共に昨年度同様高い値を示しており、本計算プログラムにおける並列化が有効に行われていることがわかる.

表1 プログラム性能(SX-9 利用).

CPU 時間 [h:m:s]	1203:20:1
MOPS 値	75503.03
MFLOPS 値	43748.99
MOPS 値 (実行時間換算)	1206453.89
MFLOPS 値 (実行時間換算)	699059.89
平均ベクトル長	255.97
ベクトル演算率[%]	99.86
メモリサイズ[MB]	147,520
プロセッサ同時実行時間	(16 並列時)
Conc. Time(>= 1)(sec)	271107.94
Conc. Time(>= 2)(sec)	271096.92
Conc. Time(>= 3)(sec)	271096.76
Conc. Time(>= 4)(sec)	271096.68
Conc. Time(>= 8)(sec)	271096.53
Conc. Time(>=16)(sec)	265820.72

4. 結果及び考察

4.1 スカラー散逸場と乱流エネルギー散逸場の可視化

壁面近傍におけるスカラー散逸率 ε_θ と乱流エネルギー散逸率 ε の瞬時場における違いを明らかにするために、図3に、 ε_θ^+ 及び ε^+ に関する時系列データを可視化した。スカラー散逸率 ε_θ^+ と ε^+ は、以下のように定義される。

$$\varepsilon_\theta^+ = \frac{1}{Pr} \left(\frac{\partial \theta^+}{\partial x_k^+} \right)^2 \tag{6}$$

$$\varepsilon^+ = \left(\frac{\partial u_i^+}{\partial x_k^+} \right)^2 \tag{7}$$

図3において、(+) は、速度勾配テンソルの第二不変量 II^+ の負値が最大となる位置を表わしている。第二不変量 II^+ は次式で与えられる。

$$II^+ = \frac{\partial u_j^+}{\partial x_i^+} \frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^+} \tag{8}$$

第二不変量が負となる領域は、管状渦を表わすものとしてよく用いられている。

式(6), (7)より、 $Pr \approx 1$ の時、両者の定義式は非常に良く似ている。従って、 ε_θ^+ 及び ε^+ の分布は類似すると考えられる。図3(a)より、強い乱流エネルギー散逸率は渦内部(渦芯)とその周囲に形成される。一方、 $Pr = 0.71$ におけるスカラー散逸率の場合、渦芯部にはほとんど存在せず、主

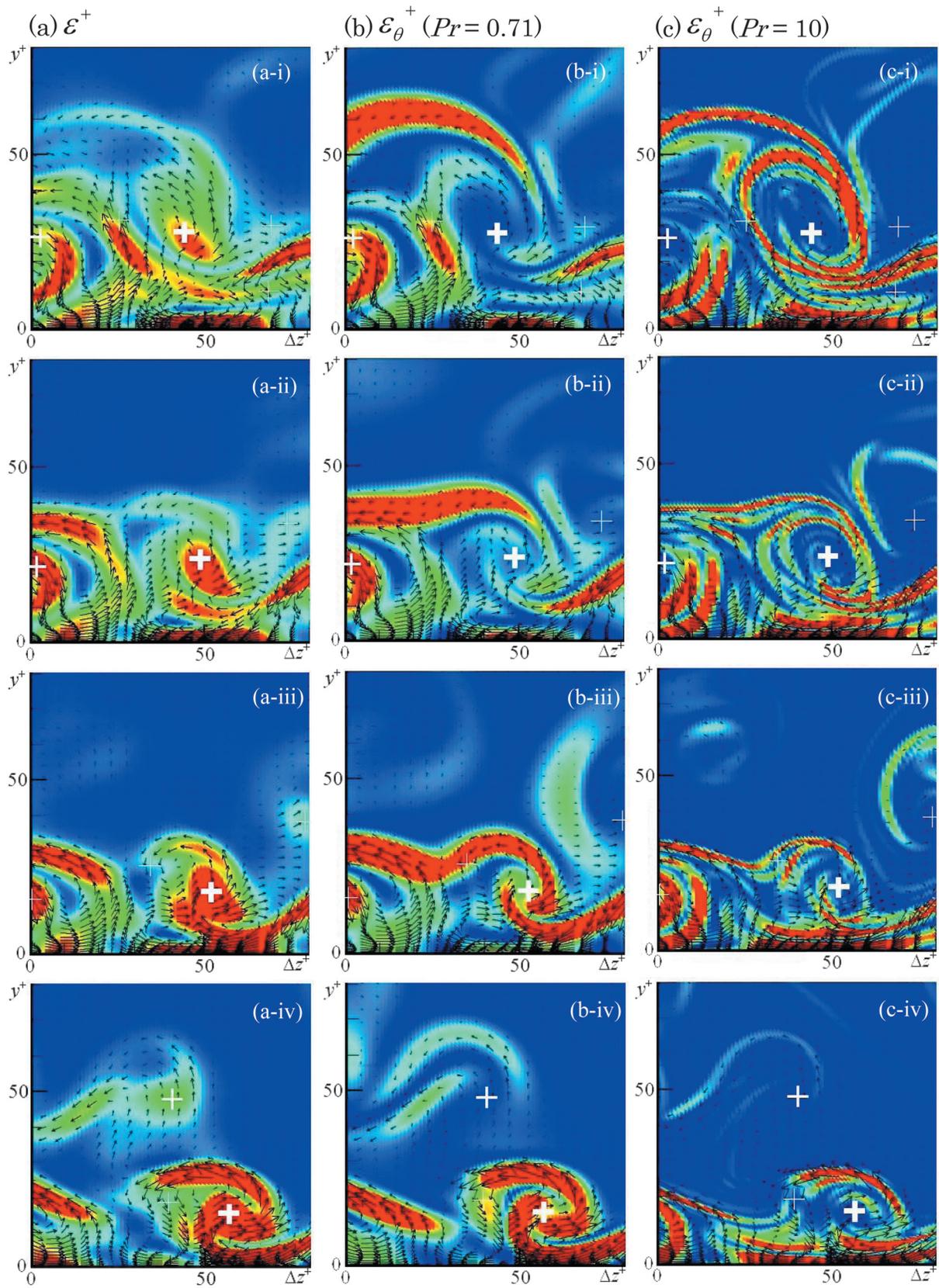


図3 乱流エネルギー散逸率 ε^+ とスカラー散逸率 ε_θ^+ に関する時系列データの可視化. 時間変化は $i \rightarrow iv$ である. (+) は変形速度テンソルの第二不変量 II^+ の負値が最大となる位置を表わしており, 太い線ほど大きな値 (強い渦運動) を示している. ベクトルは渦度変動 (ω'_3, ω'_2) を示している. なお, (b) 及び (c) は同一速度場の下で計算されている.

に周辺部に形成されることがわかる(図 3 (b)参照). 渦周辺部で形成された温度勾配が継続的な変形を受けることにより温度勾配が渦中央付近にまで到達するようになるので, 強い ε_θ^+ は渦芯部においても生じるようになる(図 3 (b-i)→(b-iv)参照). 図 3 (c)より, Pr が増加すると, スカラー散逸構造は微細になり, また, シート状の構造は薄くなることわかる.

4.2 スカラー散逸率と乱流エネルギー散逸率の収支

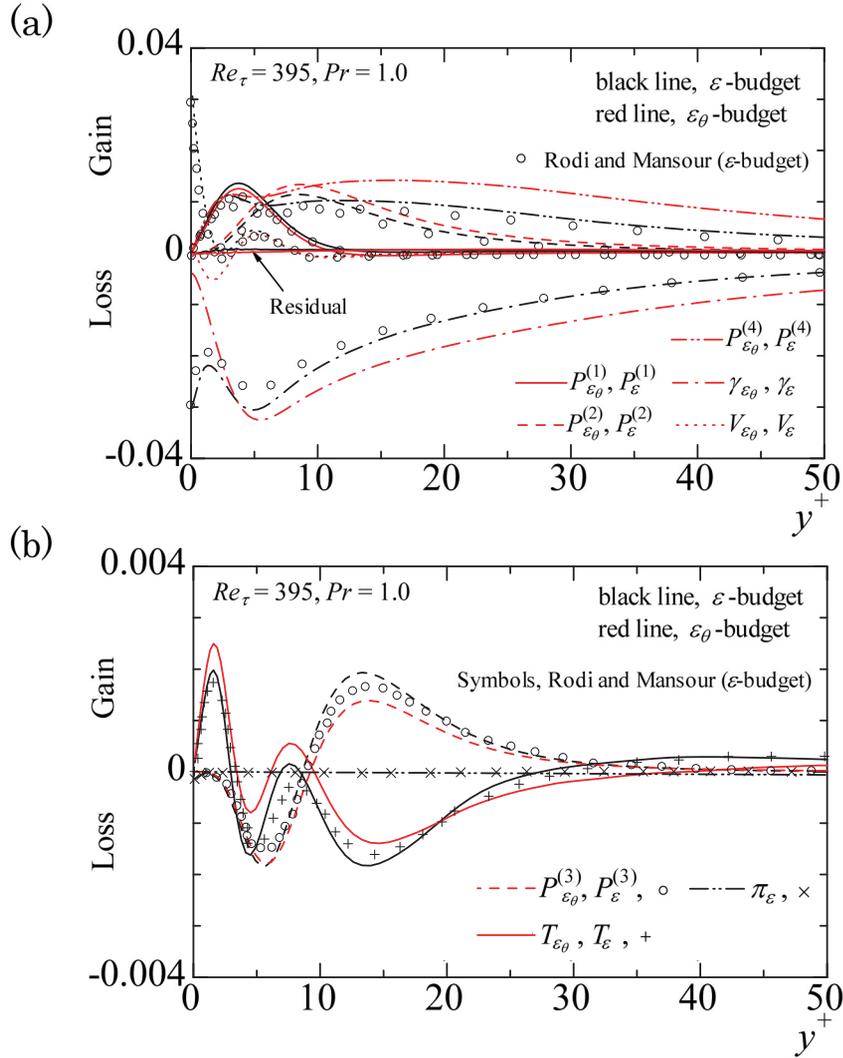


図 4 ε_θ^+ と ε^+ の収支 : (a) 値の大きな項, (b) 比較的値の小さな項.

スカラー散逸率と乱流エネルギー散逸率の輸送方程式の各項の分布を比較するために, 両者の収支を図 4 に併せて示す. 比較のため, Rodi et al. [8]による結果も同図に示す. エネルギー方程式から導出される厳密な ε_θ^+ の輸送方程式は以下のように書ける.

$$\frac{D\varepsilon_\theta^+}{Dt^+} = P_{\varepsilon_\theta}^{(1)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(2)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(3)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(4)} + T_{\varepsilon_\theta} + V_{\varepsilon_\theta} - \gamma_{\varepsilon_\theta} \quad (9)$$

Production by mean temperature gradient:

$$P_{\varepsilon_\theta}^{(1)} = -\frac{2}{Pr} \frac{\partial u_j^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial \theta^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial \theta^+}{\partial x_j^+} \quad (10)$$

Production by mean velocity gradient:

$$P_{\varepsilon\theta}^{(2)} = -\frac{2}{Pr} \overline{\frac{\partial\theta^+}{\partial x_j^+} \frac{\partial\theta^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial u_j}{\partial x_k^+}} \quad (11)$$

Gradient production:

$$P_{\varepsilon\theta}^{(3)} = -\frac{2}{Pr} \overline{u_j' \frac{\partial\theta^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial^2\theta^+}{\partial x_j^+ \partial x_k^+}} \quad (12)$$

Turbulent production:

$$P_{\varepsilon\theta}^{(4)} = -\frac{2}{Pr} \overline{\frac{\partial u_j'^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial\theta^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial\theta^+}{\partial x_j^+}} \quad (13)$$

Turbulent diffusion:

$$T_{\varepsilon\theta} = -\frac{1}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j^+} \left(\overline{u_j'^+ \frac{\partial\theta^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial\theta^+}{\partial x_k^+}} \right) \quad (14)$$

Viscous diffusion:

$$V_{\varepsilon\theta} = \frac{1}{Pr^2} \frac{\partial^2}{\partial x_j^+{}^2} \left(\overline{\frac{\partial\theta^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial\theta^+}{\partial x_k^+}} \right) \quad (15)$$

Dissipation:

$$\gamma_{\varepsilon\theta} = \frac{2}{Pr^2} \overline{\left(\frac{\partial^2\theta^+}{\partial x_k^+ \partial x_j^+} \right)^2} \quad (16)$$

一方, ε^+ の輸送方程式の厳密形は, Navier-Stokes 方程式を変形することにより, 以下のように与えられる.

$$\frac{D\varepsilon^+}{Dt^+} = P_{\varepsilon}^{(1)} + P_{\varepsilon}^{(2)} + P_{\varepsilon}^{(3)} + P_{\varepsilon}^{(4)} + T_{\varepsilon} + V_{\varepsilon} + \pi_{\varepsilon} - \gamma_{\varepsilon} \quad (17)$$

Mixed production:

$$P_{\varepsilon}^{(1)} = -2 \overline{\frac{\partial u_j'^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial u_i'^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial u_i}{\partial x_j^+}} \quad (18)$$

Production by mean velocity gradient:

$$P_{\varepsilon}^{(2)} = -2 \overline{\frac{\partial u_i'^+}{\partial x_j^+} \frac{\partial u_i'^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial u_j}{\partial x_k^+}} \quad (19)$$

Gradient production:

$$P_{\varepsilon}^{(3)} = -2 \overline{u_j'^+ \frac{\partial u_i'^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^+ \partial x_k^+}} \quad (20)$$

Turbulent production:

$$P_{\varepsilon}^{(4)} = -2 \overline{\frac{\partial u_j'^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial u_i'^+}{\partial x_k^+} \frac{\partial u_i'^+}{\partial x_j^+}} \quad (21)$$

Turbulent diffusion:

$$T_\varepsilon = -\frac{\partial}{\partial x_j^+} \left(\overline{u_j^{r+} \frac{\partial u_i^{r+}}{\partial x_k^+} \frac{\partial u_i^{r+}}{\partial x_k^+}} \right) \quad (22)$$

Viscous diffusion:

$$V_\varepsilon = -\frac{\partial^2}{\partial x_j^{+2}} \left(\overline{\frac{\partial u_i^{r+}}{\partial x_k^+} \frac{\partial u_i^{r+}}{\partial x_k^+}} \right) \quad (23)$$

Pressure diffusion:

$$\pi_\varepsilon = -2 \frac{\partial}{\partial x_k^+} \left(\overline{\frac{\partial p^{r+}}{\partial x_j^+} \frac{\partial u_k^{r+}}{\partial x_j^+}} \right) \quad (24)$$

Dissipation:

$$\gamma_\varepsilon = 2 \left(\overline{\frac{\partial^2 u_i^{r+}}{\partial x_k^+ \partial x_j^+}} \right)^2 \quad (25)$$

スカラー散逸率の輸送方程式における各項の定義式は、乱流エネルギー散逸率輸送方程式の対応する項と非常に良く似ている。このことは、スカラー散逸率輸送方程式における各項の分布が、乱流エネルギー散逸率輸送方程式のそれと類似することを示している。図4より確かに、スカラー一場と速度場における各項の分布は、全体的に良く似た挙動を示すことがわかる。しかし、有意な差異が $y^+ < 5$ の領域において $\gamma_{\varepsilon_\theta}^+$ と γ_ε^+ に見られる(図4(a)参照)。両者に違いが生じた理由を調べるため、速度変動と温度変動に関する壁面漸近展開式(26)~(29) [9,10]を用いて、式(16)及び(25)に関する壁面漸近挙動を求める。

$$u^{r+} = b_1 y^+ + c_1 y^{+2} + d_1 y^{+3} + \dots \quad (26)$$

$$v^{r+} = c_2 y^{+2} + d_2 y^{+3} + \dots \quad (27)$$

$$w^{r+} = b_3 y^+ + c_3 y^{+2} + d_3 y^{+3} + \dots \quad (28)$$

$$\theta^{r+} = b_\theta y^+ + d_\theta y^{+3} + \dots \quad (29)$$

$$\gamma_{\varepsilon_\theta}^+ = A_{\varepsilon_\theta} + C_{\varepsilon_\theta} y^{+2} + \dots \quad (30)$$

$$\gamma_\varepsilon^+ = A_\varepsilon + B_\varepsilon y^+ + C_\varepsilon y^{+2} + \dots \quad (31)$$

$$A_{\varepsilon_\theta} = \frac{4}{Pr^2} \left\{ \overline{(b_{\theta,1})^2} + \overline{(b_{\theta,3})^2} \right\}$$

$$A_\varepsilon = 4 \left\{ 2 \left(\overline{c_1^2} + \overline{c_2^2} + \overline{c_3^2} \right) + \overline{(b_{1,1})^2} + \overline{(b_{1,3})^2} + \overline{(b_{3,1})^2} + \overline{(b_{3,3})^2} \right\}$$

$$B_\varepsilon = 48 \left\{ \overline{c_1 d_1} + \overline{c_2 d_2} + \overline{c_3 d_3} \right\} + 16 \left\{ \overline{b_{1,1} c_{1,1}} + \overline{b_{1,3} c_{1,3}} + \overline{b_{3,1} c_{3,1}} + \overline{b_{3,3} c_{3,3}} \right\}$$

$$C_{\varepsilon_\theta} = \frac{2}{Pr^2} \left\{ \overline{(b_{\theta,11})^2} + \overline{(b_{\theta,33})^2} + 2 \overline{(b_{\theta,13})^2} + 36 \overline{d_\theta^2} + 12 \left(\overline{b_{\theta,1} d_{\theta,1}} + \overline{b_{\theta,3} d_{\theta,3}} \right) \right\}$$

$$C_\varepsilon = 2 \left\{ \overline{(b_{1,11})^2} + \overline{(b_{1,33})^2} + \overline{(b_{3,11})^2} + \overline{(b_{3,33})^2} \right\}$$

$$\begin{aligned}
 &+ 16 \left\{ \overline{(c_{1,1})^2} + \overline{(c_{1,3})^2} + \overline{(c_{2,1})^2} + \overline{(c_{2,3})^2} + \overline{(c_{3,1})^2} + \overline{(c_{3,3})^2} \right\} \\
 &+ 24 \left\{ 3 \left(\overline{d_1^2} + \overline{d_2^2} + \overline{d_3^2} \right) + 4 \left(\overline{c_1 e_1} + \overline{c_2 e_2} + \overline{c_3 e_3} \right) + \overline{b_{1,1} d_{1,1}} + \overline{b_{1,3} d_{1,3}} + \overline{b_{3,1} d_{3,1}} + \overline{b_{3,3} d_{3,3}} \right\} \\
 &+ 8 \left\{ \overline{(b_{1,13})^2} + \overline{(b_{3,13})^2} \right\}
 \end{aligned}$$

式(30)より、 $B_{\varepsilon_\theta} = 0$ となることがわかる。また、図4(a)より、 $B_\varepsilon < 0$ と考えられる。 C_{ε_θ} 及び C_ε は、ほとんど二乗の項で構成されているため、 $C_{\varepsilon_\theta} > 0, C_\varepsilon > 0$ と考えられる。以上より、 $y^+ < 5$ で観察された $\gamma_{\varepsilon_\theta}^+$ と γ_ε^+ の分布の違いは、壁面漸近展開式における y^+ の係数が異なることに起因している。詳細な式展開や証明は、当研ホームページ(<http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/>)に掲載されている。

4.3 スカラー散逸率の収支におけるレイノルズ数・プラントル数依存性

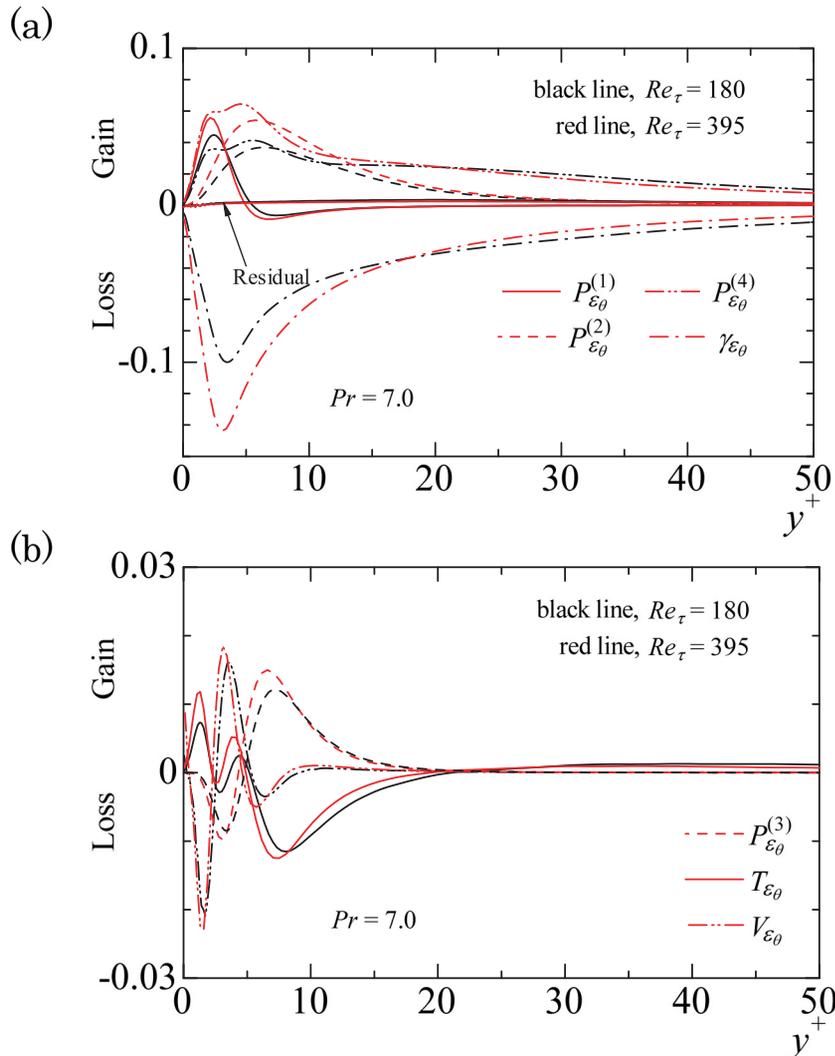


図5 $Pr = 7.0$ におけるスカラー散逸率の収支：(a) 値の大きな項，(b) 比較的値の小さな項。

プラントル数 $Pr = 7.0$ におけるスカラー散逸率の収支を図5に示す。Abe et al. [11]は、 $Re_\tau = 180 \sim 640$ の範囲では、 $Pr = 0.71$ におけるスカラー散逸率の収支に対するレイノルズ数の影響は、乱流エネルギー散逸率のそれと非常に似た傾向を示すと指摘している。彼らは、 $P_{\varepsilon}^{(1)}, P_{\varepsilon}^{(2)}, P_{\varepsilon}^{(4)}$ は

壁面近傍でレイノルズ数の影響を受ける一方で、 $P_\varepsilon^{(3)}$ にはレイノルズ数依存性がほとんど存在しないことを報告している。図5より、より高いプラントル数である $Pr = 7.0$ においても、生成項のレイノルズ数依存性に関して同様の傾向が見える。つまり、 $Re_\tau = 180 \sim 395$ の範囲では、 $P_\varepsilon^{(3)}$ に対するレイノルズ数の影響はチャンネル幅全域にわたり無視できるほど小さく、他の生成項はレイノルズ数の増加に伴い壁面近傍に見られるピーク値が増加する。

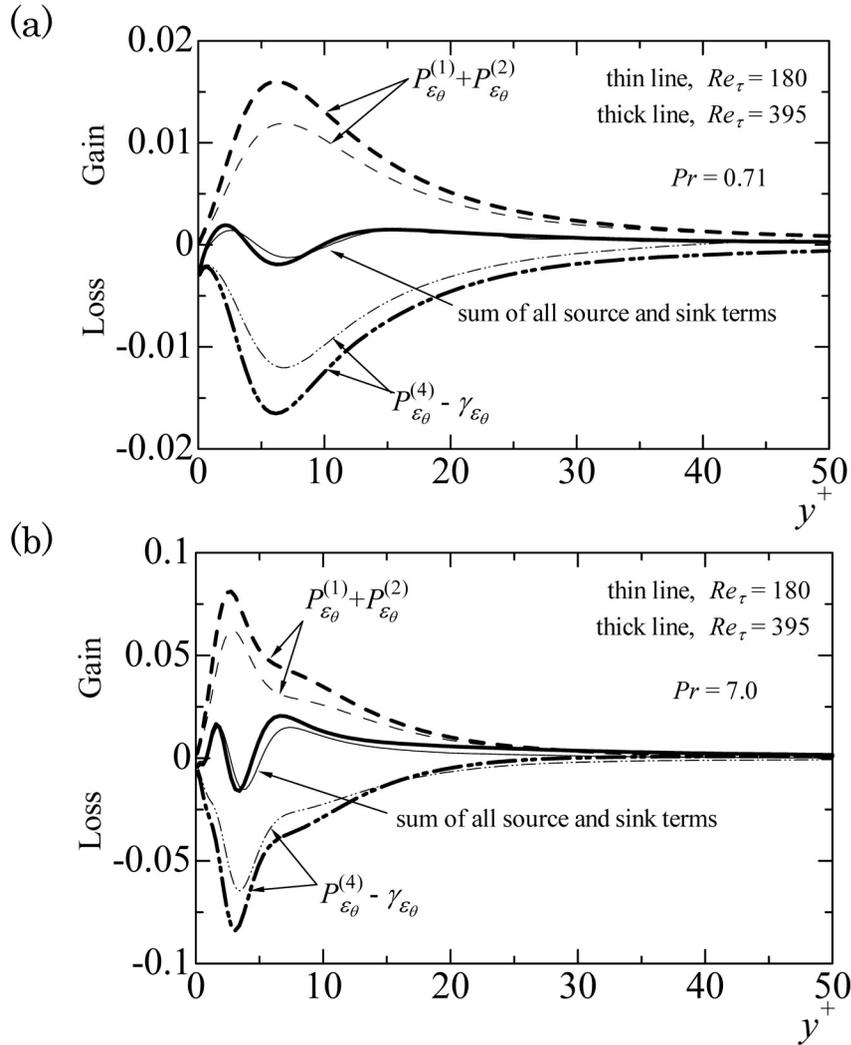


図6 スカラー散逸率の輸送方程式における各項の和 : (a) $Pr = 0.71$, (b) $Pr = 7.0$.

スカラー散逸率の輸送方程式における各項の和を図6に示す。Rodi et al. [8] は ε の収支について調査し、いくつかの生成項の和は壁面近傍でレイノルズ数の影響を大きく受けるが、生成項と消散項の和(sum of all source and sink terms)はレイノルズ数の影響をあまり受けないと述べている。スカラー散逸率の収支についても同様に、 $Re_\tau = 180 \sim 395$, $Pr = 0.71 \sim 7.0$ の範囲では、 $P_{\varepsilon_\theta}^{(1)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(2)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(3)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(4)} - \gamma_{\varepsilon_\theta}$ に対するレイノルズ数の影響は小さいことがわかる(図6参照)。Rodi et al. [8] はさらに、 $P_{\varepsilon_\theta}^{(1)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(2)}$, $P_{\varepsilon_\theta}^{(4)} - \gamma_{\varepsilon_\theta}$ についても精査し、壁から離れた領域ではどちらの項にも顕著なレイノルズ数依存性は観察されないが、壁面近傍ではレイノルズ数が増加するにつれて両者とも増加することを報告している。図6より、 ε の収支同様、 $Pr = 0.71 \sim 7.0$ における ε_θ の収支についても良く似た傾向を示す。すなわち、壁から離れた領域における $P_{\varepsilon_\theta}^{(1)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(2)}$, $P_{\varepsilon_\theta}^{(4)} - \gamma_{\varepsilon_\theta}$ の分布に、有意なレイノルズ数依存性は観察されない。一方で、壁面近くでは、レイノルズ数の増加に伴いピーク値が増加し、明確なレイノルズ数依存性が存在する。

4.4 スカラー散逸率輸送方程式モデルのアプリオリテスト

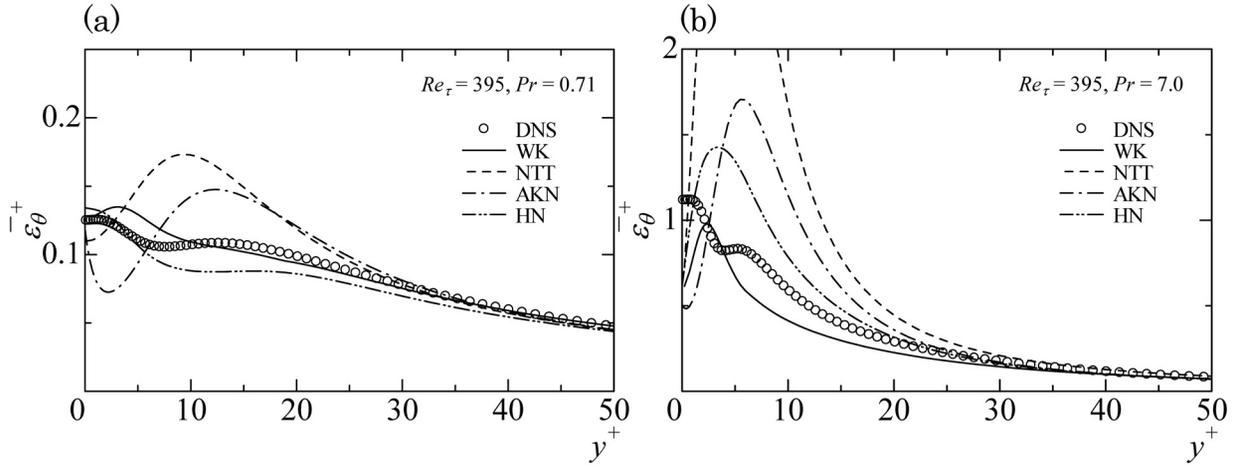


図7 スカラー散逸率のモデル予測：(a) $Pr = 0.71$, (b) $Pr = 7.0$.

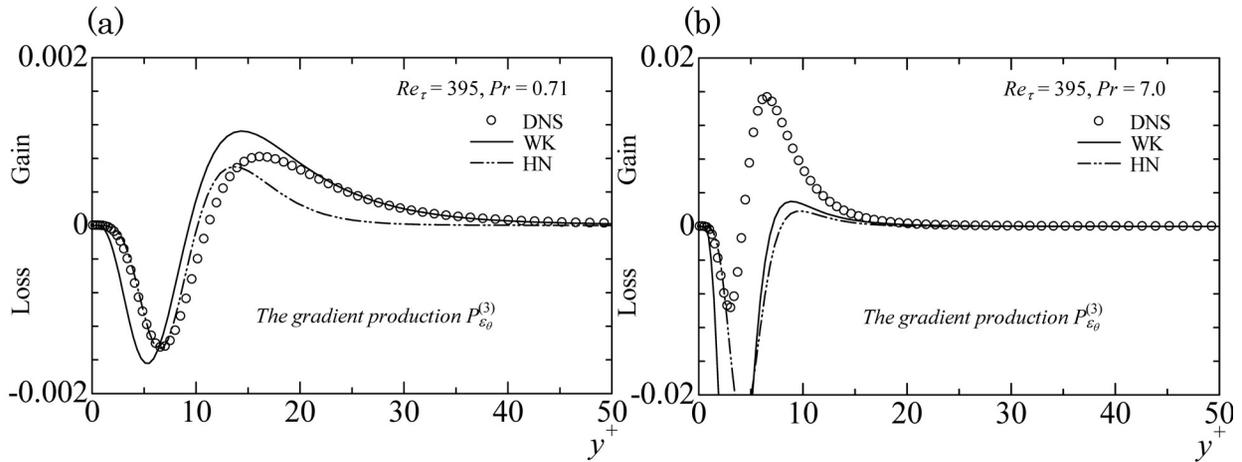


図8 Gradient production 項のモデル予測：(a) $Pr = 0.71$, (b) $Pr = 7.0$.

スカラー散逸率の輸送方程式モデルの評価を行う。モデルによる結果と本研究で得られた DNS データを比較することで、より高精度なモデルの構築に資する有用な知見を得る。今回はスカラー散逸率 ε_θ ($\tilde{\varepsilon}_\theta$) の収支に対するプラントル数依存性に注目するため、レイノルズ数は、 $Re_\tau = 395$ で一定とし、 $Pr = 0.71, 7.0$ の 2 ケースの計算を行う。Nagano et al. [12] (以降, NTT), Abe et al. [13] (以降, AKN), 若尾ら [14] (以降, WK), Hattori et al. [15] (以降, HN) が考案したモデルをテストする。厳密に調査するため、 ε_θ ($\tilde{\varepsilon}_\theta$) を除く全ての乱流統計量は、本研究の DNS データの値を代入した。使用したモデル式やモデル定数・関数などは、上述の論文を参照されたい。

スカラー散逸率のモデル予測の結果を図 7 に示す。図 7 (a) に見られるように、 $Pr = 0.71$ の場合、壁から離れた領域では全ての評価モデルは DNS と良く一致している。壁面に近づくとき、 $y^+ < 20$ の領域で顕著な差異が見られる。WK と HN は、比較的良好に予測できている。プラントル数が増加すると、壁から離れた領域では DNS と良い一致を示すものの、壁面近傍では全てのテストモデルが DNS と著しくずれる(図 7 (b) 参照)。壁面上では、 ε_θ^+ の壁面漸近展開より、

$$\frac{\partial \varepsilon_\theta^+}{\partial y^+} = 0 \tag{32}$$

が得られる(式(6)参照)。プラントル数が $Pr = 0.71$ の場合、WK, NTT, HN がこの関係式を満足している。しかし、 $Pr = 7.0$ の場合では、これらのモデルは壁面漸近挙動の予測が困難となる。

AKN が評価モデルの中で最も良い予測を示している。

生成項 $P_{\varepsilon_\theta}^{(3)}$ のモデル予測を図 8 に示す。この項は、他の生成項や支配的な項に対して 1/10 のオーダーなので、全体の収支から見れば、 $P_{\varepsilon_\theta}^{(3)}$ の寄与分は小さい。しかし、スカラー散逸率輸送方程式のモデリングに重要な T_{ε_θ} や $P_{\varepsilon_\theta}^{(1)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(2)'} + P_{\varepsilon_\theta}^{(3)} + P_{\varepsilon_\theta}^{(4)} - \gamma_{\varepsilon_\theta}$ と同じオーダーであるため、 $P_{\varepsilon_\theta}^{(3)}$ の厳密なモデル式を開発することは非常に重要である。プラントル数 $Pr = 0.71$ の場合、WK 及び HN のモデル予測は DNS と良く一致している。しかし、 $Pr = 7.0$ の場合では、これらのモデルは $P_{\varepsilon_\theta}^{(3)}$ を過大評価しており、プラントル数の増加に伴い差異が著しく増加する。

以上まとめると、今回テストした既存モデルは、 $Pr \approx 1.0$ のケースでは比較的有効な予測を示すことがわかった。しかし、プラントル数が 7.0 まで増加すると、いずれのモデルも壁面近傍におけるスカラー散逸率やその収支を正確に予測することが困難となる。各評価モデルは、高プラントル数に関する正確な情報が少ない頃に開発されたモデルなので、DNS との違いがでてしまうのは当然である。従って、広範なプラントル数の影響を考慮したスカラー散逸率輸送方程式モデルを構築する必要がある。

5. 結言

本研究では、スカラー場における最小スケールをできる限り捉え得る細かな空間解像度を用いて、平行平板間乱流熱伝達の DNS を実施し、スカラー散逸率の収支に対するレイノルズ数・プラントル数依存性やスカラー散逸構造を調査した。また、スカラー散逸率輸送方程式モデルのアプリオリテストを行った。以下に得られた知見を示す。

- スカラー散逸場と乱流エネルギー散逸場は、定義式がお互いに非常に良く似ているにも関わらず、空間的な分布は異なることがわかった。強いスカラー散逸は主に微細渦の周囲に形成される一方で、乱流エネルギー散逸は、渦芯部及び渦周囲に形成される。温度勾配が渦運動により継続的な変形を受けることにより、強いスカラー散逸場は渦芯付近にも生じるようになる。
- スカラー散逸率と乱流エネルギー散逸率の収支を比較し、壁面近傍における $\gamma_{\varepsilon_\theta}^+$ と $\gamma_{\varepsilon_\theta}^+$ の分布の違いが見られる。これは、両者の壁面漸近展開式における y^+ の係数の値に起因している。
- レイノルズ数 $Re_\tau = 180 \sim 395$ の範囲で、 $Pr = 0.71$ と $Pr = 7.0$ におけるスカラー散逸率の収支に対するレイノルズ数の影響を調査し、各項のレイノルズ数依存性は $Pr = 0.71 \sim 7.0$ では、良く似た傾向を示すことがわかった。
- 生成項と消散項の和に対するレイノルズ数の影響は、 $Re_\tau = 180 \sim 395$, $Pr = 0.71 \sim 7.0$ の範囲において、チャンネル全体にわたり小さい。
- スカラー散逸率輸送方程式モデルのアプリオリテストを実施し、本研究のレイノルズ数とプラントル数の範囲では、プラントル数が増加するにつれ、既存モデルの予測精度は大幅に減少することがわかった。プラントル数 $Pr = 0.71$ の場合、WK 及び HN のモデル予測は DNS と良く一致している。しかし、 $Pr = 7.0$ の場合では、これらのモデルは、 $P_{\varepsilon_\theta}^{(3)}$ を過大評価しており、プラントル数の増加に伴い差異が著しく増加する。

謝辞

本研究は、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することで実現することができた。OpenMPによる並列化やデータ処理の高速化等の際には、センタースタッフから有益なご指導とご協力をいただいた。記して感謝の意を表す。

参考文献

- [1] Kim, J. and Moin, P., "Transport of passive scalars in a turbulent channel flow", *Turbulent Shear Flows 6*, Springer, Berlin, pp. 85-96, 1989.
- [2] Kasagi, N., Tomita, Y. and Kuroda, A., "A direct numerical simulation for passive scalar field in a turbulent channel flow", *ASME Journal of Heat Transfer*, **114**, pp. 598-606, 1992.
- [3] Kawamura, H., Abe, H. and Matsuo, Y., "DNS of turbulent heat transfer in a channel flow with respect to Reynolds and Prandtl number effects", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, **20**, pp. 196-207, 1999.
- [4] Abe, H., Kawamura, H. and Matsuo, Y., "Surface heat-flux fluctuations in a turbulent channel flow up to $Re_\tau = 1020$ with $Pr = 0.025$ and 0.71 ", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, **25**, pp. 404-419, 2004.
- [5] Tiselj, I., Pogrebnyak, E., Li, C., Mosyak, A. and Hetsroni, G., "Effect of wall boundary condition on scalar transfer in a fully developed turbulent flume", *Phys. Fluids*, **13**, pp. 1028-1039, 2001.
- [6] Na, Y., Papavassiliou, D. V. and Hanratty, T. J., "Use of direct numerical simulation to study the effect of Prandtl number on temperature fields", *Int. J. Heat and Fluid Flow*, **20**, pp. 187-195, 1999.
- [7] 鈴木哲也, 河村洋, "乱流の数値シミュレーションにおける差分式の整合性", *日本機械学会論文集 B*, **60-578**, pp. 3280-3286, 1994.
- [8] Rodi, W. and Mansour, N. N., "Low Reynolds number $k-\varepsilon$ modelling with the aid of direct simulation data", *J. Fluid Mech.*, **250**, pp. 509-529, 1993.
- [9] 社団法人日本機械学会編, 新編 伝熱工学の進展 第二巻, 養賢堂, 1996.
- [10] Antonia, R. A. and Kim, J., "Turbulent Prandtl number in the near wall region of a turbulent channel flow", *Int. J. Heat and Mass Transfer*, **34**, pp. 1905-1908, 1991.
- [11] Abe, H., Antonia, R. A. and Kawamura, H., "Transport equations for the enstrophy and scalar dissipation rate in a turbulent channel flow", *Proc. 7th Int. Symp. on Engineering Turbulence Modelling and Measurements*, Vol 3, pp. 750-755, 2008.
- [12] Nagano, Y., Tagawa, M. and Tsuji, T., "An improved two-equation heat transfer model for wall turbulent shear flows", *Proc. ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference*, Vol. 3, pp. 233-240, 1991.
- [13] Abe, K., Kondoh, T. and Nagano, Y., "A new turbulence model for predicting fluid flow and heat transfer in separating and reattaching flow-II Thermal field calculations", *Int. J. Heat and Mass Transfer*, **38**, pp. 1467-1481, 1995.
- [14] 若尾泰文, 河村洋, "平行平板間乱流における線形性原理に基づくスカラー輸送のモデリング", *日本機械学会論文集 B*, **62-603**, pp. 3934-3942, 1996.
- [15] Hattori, H. and Nagano, Y., "Rigorous formulation of two-equation heat transfer model of turbulence using direct numerical simulations", *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*, **33**, pp. 152-180, 1998.

白

[研究成果]

密度汎関数理論によるナノ・バイオ計算

押山 淳

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

1. はじめに

物理学においては、実験物理学と理論物理学ふたつのアプローチが古くから認識されていたが、ここ四半世紀における計算機の発達と計算方法論の開拓により、計算物理学という第三のアプローチが重要になってきている。この状況は、他の自然科学および社会科学の諸分野においても同様であろう。特にナノサイエンス、バイオサイエンスの領域においては計算科学的アプローチが欠かせない。それは、ナノ・バイオ構造体では、空間的にはナノメートル(10^{-9} m)のスケール、時間的にはフェムト(10^{-15})秒からピコ(10^{-12})秒で起こる現象の解明が重要であり、実験的にはなかなかアクセスできない状況に突入しているからである。精度の高い信頼できる計算の果たす役割は大きい。

物質は原子核と電子で構成されている。それらは量子力学で記述される粒子あるいは波動であり、互いに相互作用し合っている。その意味で物質は量子多体系ということができ、従って、物質科学あるいはナノ・バイオサイエンスにおける精度の高い計算科学的手法は、量子論に立脚していることが必要である。しかも経験的なパラメータを含まない物理学の第一原理に基づいた計算科学的手法により、初めてその精度が裏打ちされる。しかしそれは、云うは易く行うは難いことであって、相互作用している量子多体系ほど難しい系はこの世の中にあまり存在しない。

密度汎関数理論はそうした量子多体系を扱うひとつの手法である。多体系を有効一粒子系の問題に還元するひとつの手法であり、比較的簡便なわりには、実際の物質の諸性質を驚くほど精度良く説明、さらには予測することができる。本稿では、密度汎関数理論、および我々が次世代スーパーコンピュータを視野に入れて開発している実空間密度汎関数法の簡単な説明に続いて、ナノ・バイオ系におけるいくつかの計算例を紹介し、現時点での、密度汎関数理論に立脚した計算科学的アプローチの現状を報告したい。

2. 密度汎関数理論

2.1 基礎

密度汎関数理論 (Density Functional Theory: DFT) によれば、相互作用している多電子系の全エネルギー E は電子密度 $n(\vec{r})$ の汎関数として、

$$E[n] = \int v_{\text{ext}}(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + \iint \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}d\vec{r}d\vec{r}' + F[n] \quad (1)$$

と書けることが厳密に証明できる[1]。ここで $v_{\text{ext}}(\vec{r})$ は外場ポテンシャルであり、原子核からのポテンシャルエネルギーあるいは電磁場のポテンシャルエネルギーを表している。右辺第二項は古典的な意味での電子間相互作用エネルギーである。 $F[n]$ は電子系の運動エネルギーおよび量子論的な相互作用エネルギーである。どのような物質であれ、その物質の個性に依らない電子系の相互作用の性質だけで決まるようなユニバーサルな汎関数 F が存在するというのが密度汎関数理論の骨子である。電子密度は、一般に多電子系の波動関数を用いて表すことができるが、ここで準粒子 (相互作用の衣を着た電子) の軌道関数 $\varphi_i(\vec{r})$ の絶対値の2乗で表すことにする[2]。

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\varphi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2)$$

すると(1)は、

$$E[n] = \int v_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + \sum_i \int \varphi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \varphi_i(\mathbf{r})d\mathbf{r} + E_{\text{XC}}[n] \quad (3)$$

となる。 $E_{\text{XC}}[n]$ のことを交換・相関 (exchange-correlation) エネルギーとよび、電子系における量子効果を表している。交換・相関エネルギーを2体の密度ゆらぎ相関関数で表すことはできるが、実際は近似を導入する。局所密度近似 (Local Density Approximation: LDA)、一般化密度勾配近似 (Generalized Gradient Approximation: GGA)、ハイブリッド近似 (Hybrid Approximation) などがよく用いられる。

さて次のステップは、(3)で表される系の全エネルギーを、波動関数が規格化されているという拘束条件のもとで、最小化することである。それは軌道関数についての変分をとった変分方程式にほかならず、

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{\text{XC}}[n]}{\delta n} \right\} \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}) \quad (4)$$

を得る。ここで ε_i は変分法における Lagrange の未定乗数であり、今の場合、状態 i の固有エネルギーに対応している。(4)は Kohn-Sham 方程式とよばれ、1電子に対するシュレディンガー方程式と形式的に同じ形をしているが、量子多体効果である E_{XC} を含んでいる。また左辺の演算子は電子密度の汎関数であり、電子密度は(4)を解いて得られる軌道関数を用いて(2)のように表されているので、(2)と(4)は consistent に解く必要がある。これは SCF (Self Consistent Field) 計算とよばれ、再帰的手法により行われる。

DFT 計算において、最も時間が費やされるのは Kohn-Sham 方程式の解を得るプロセスである。標準的には $\varphi_i(\mathbf{r})$ を基底関数系によって展開し、その展開係数を求めることが行われる。一昔前までは、左辺の演算子の行列を構成し、その行列を対角化するのが普通であったが、現在では計算の大規模化に伴い、(3)そのものを展開係数について再帰的に最小化することにより、(4)の解を得ることが行われている。再帰的最小化の方法としては、共役勾配法、残差最小化法などが使われる。

電子と原子核から構成される系の全エネルギーは、(3)で表される電子系のエネルギー、電子-原子核の相互作用エネルギーに加えて、原子核系のエネルギーを加えたものである。その全エネルギーを、原子核の位置について微分し符号を反転させたものが、その原子核にかかる力である。その力に沿って原子核の位置を変化させ、全エネルギーの極小値を得る事ができれば、それが自然界で出現する物質の安定あるいは準安定構造に相当する。また原子核に働く力を用いて、分子動力学計算を行えば、物質での原子のダイナミクスを追えることになる。

2.2 実空間密度汎関数理論コード

Kohn-Sham 軌道関数 $\varphi_i(\mathbf{r})$ を展開する基底関数系としては平面波基底がよく用いられる。それは平面波の数を系統的に増やして全エネルギーの収束値をみることにより、實際上、完全基底関数系での計算値を得ることができるためである。しかし平面波基底にはふたつの困難がある。第一は軌道関数の満たすべき境界条件に関連したものである。平面波で展開した場合、軌道関数は必然的に周期的境界条件を満たすことになる。結晶の Bloch 波動関数は、実際周期的境界条件を満たしているが、分子・クラスター、結晶中の欠陥などに関連した波動関数はそうではない。平面波で展開するためには、

スーパーセルというターゲットを周期的に並べた系を扱うしかない。第二の困難は、コンピュータのアーキテクチャに関連したものである。ペタフロップスを超える演算能力が期待される次世代スーパーコンピュータは、各プロセッサがいわゆるベクトル型であるか否かに関わらず、必然的に 10000 – 100000 ノードの超並列アーキテクチャとなる。平面波基底を用いた計算においては、フーリエ変換が頻繁に行われるが、Fast Fourier Transform (FFT) の演算は、全ノード間の通信を伴い、超並列アーキテクチャでは大きな重荷となる。

こうした平面波展開による計算の問題点は、実空間に格子を導入し、波動関数、電子密度等をこの格子上の各点で表現し、計算をその格子上で実行する実空間密度汎関数法によって回避できる。この手法では、実空間のセルを各ノードに割り当てることにより、自然な形の並列コードが作成可能であり、FFTを必要としないために、通信は本質的に局所的なものとなる¹。また、計算結果の完全性は、格子点間の間隔を系統的に狭めていき、収束値を検討することによって達成される。軌道関数が満たすべき境界条件に対しては、実空間処理ではいかなる条件も対応可能であり、その点においても既存の基底関数系による展開に比して魅力的である。我々は、並列アーキテクチャ上でのこうした実空間処理コード [RSDFT (Real-Space Density Functional Theory) コードとよんでいる] の開発・高度化を計算機科学者、工学者との共同で行っている[3,4]。

計算機アーキテクチャを意識したコードの最適化には、計算機科学分野の研究者との連携が重要である。RSDFTは、ベクトル機、並列機のいずれでも高いパフォーマンスを示しているが、並列機での最適化は、筑波大学PACS-CSシステム²をプラットフォームとして、計算機科学分野との共同で行われ、1000-2000 ノード使用時の全体の実効性能はおおよそ 20%程度である。また最も負担の重いグラム・シュミット正規直交化計算では、理論ピーク性能の 7、8 割程度の実効性能を示している。一例としてそこで行ったアルゴリズム変更を紹介しよう。通常のグラム・シュミット直交化計算は、 ϕ_i をターゲットベクトル、 ψ_i を正規直交化されたベクトルとすると、

$$\begin{aligned}
 \psi_1 &= \phi_1 \\
 \psi_2 &= \phi_2 - \psi_1(\psi_1, \phi_2) \\
 \psi_3 &= \phi_3 - \psi_1(\psi_1, \phi_3) - \psi_2(\psi_2, \phi_3) \\
 \psi_4 &= \phi_4 - \psi_1(\psi_1, \phi_4) - \psi_2(\psi_2, \phi_4) - \psi_3(\psi_3, \phi_4) \\
 \psi_5 &= \phi_5 - \psi_1(\psi_1, \phi_5) - \psi_2(\psi_2, \phi_5) - \psi_3(\psi_3, \phi_5) - \psi_4(\psi_4, \phi_5) \\
 \psi_6 &= \phi_6 - \psi_1(\psi_1, \phi_6) - \psi_2(\psi_2, \phi_6) - \psi_3(\psi_3, \phi_6) - \psi_4(\psi_4, \phi_6) - \psi_5(\psi_5, \phi_6) \\
 &\dots
 \end{aligned} \tag{5}$$

という手順で行われる。これは典型的なベクトル積計算であり、BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) のレベル 1 のルチーンで実行される。ところが、この右辺の 4 行目以降の演算の最初の 4 項目までは、

$$(\phi_4, \phi_5, \phi_6) - (\psi_1, \psi_2, \psi_3) \begin{pmatrix} {}^t\psi_1 \\ {}^t\psi_2 \\ {}^t\psi_3 \end{pmatrix} (\phi_4, \phi_5, \phi_6) \tag{6}$$

¹ 実空間での並列化に加えて、各軌道関数の処理に関する並列化も可能であり、計算規模と計算を実行するプラットフォームの能力の 2 つの要素に依存した最適な方針の検討が重要である。

² PACS-CS (Parallel Array Computer Systems for Computational Sciences)は、筑波大学計算科学研究センターで開発された並列計算機であり、2.8 GHz の Xeon を用いた独自開発の 2560 ノードが 3 次元 hyper cross bar network で接続された、理論ピーク性能 14.3 TFLOPS のシステムである。

という行列積の形に書き換えることができ、これにより BLAS3 のルーチンを用いることで、格段に高速化される。そこで図 1 のように、ブロック化処理とそこでの最適データ量をチューンすることにより、理論ピーク性能とほぼ同等の実効性能が実現されている。

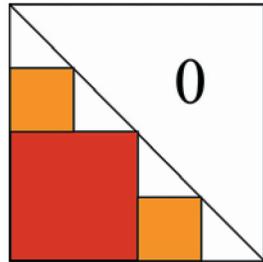


図 1: グラム・シュミット正規直交化を行列積計算で行う概念図。下三角行列を計算する際に、正方形領域を図の赤、橙のように再帰的に構成し、その中の演算を行列積計算として実行する。

3. ナノ系への応用

さて本節では、前節で説明した DFT による物質計算の例をいくつか紹介しよう。

3.1 シリコンナノドットのイオン化エネルギー、電子親和力、励起エネルギー

物質の基本的な量としてイオン化エネルギー I と電子親和力 A があげられる。この二つの量から物質の第一励起エネルギー Δ は、 $\Delta = I - A$ と与えられる。 I と A は、 N 個から成る電子系の全エネルギーを E_N とすると、 $I = E_{N-1} - E_N$ 、 $A = E_N - E_{N+1}$ 、と書ける。無限結晶の第一励起エネルギーを、電子数の異なる系での全エネルギー差である I と A とから求めることは原理的に不可能であり、密度汎関数理論においては、(4) の Kohn-Sham 準位の最高占有状態と最低非占有状態との差として求めることが多い (HOMO-LUMO ギャップ)。しかしクラスター計算ではイオン化エネルギー、親和力ともに直接計算可能であり、さらに系のサイズを大きくした収束値を得ることにより、無限結晶での値をシミュレートできる。図 2 は Si ナノドット (直径 5.6 nm ~ 7.6 nm、Si 原子数 4006 ~ 10701、端末端水素原子数 1000 ~ 2000) に対する、そうした全エネルギー差による第一励起エネルギーと、従来からの HOMO-LUMO ギャップによる値のサイズ依存性である。これは世界最大規模の DFT 電子状態計算である。図 2 からわかるように、両者は系統的に異なる。詳細な解析により、その差は、ナノドットに電子を 1 個加えた時のエネルギー上昇に相当していることが明らかとなった。

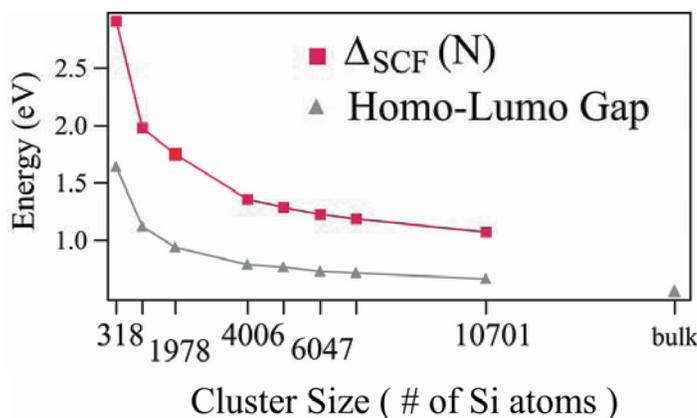


図 2: Si ナノドットの第一励起エネルギーのドットサイズ依存性。赤はイオン化エネルギーと電子親和力の差から求めた第一励起エネルギーで、青は Kohn-Sham 準位から求めた HOMO-LUMO ギャップ。

3.2 新しい体心正方シリコンとゲルマニウムの電子物性

DFT は物質構造を正確に予測できる利点があるが、交換相関エネルギーに対する現時点での近似では、電子励起エネルギーの定量的計算は難しい。現在もっとも実際的な処方箋は、DFT によって構造を定め、GW 近似 (無限次摂動理論における自己エネルギーをグリーン関数 G と繰り込まれた相互作用 W の積で表す近似) によって励起エネルギーを計算するアプローチである。このアプローチによ

り、Si および Ge の新しい結晶相を見出した[5]。

ポストスケーリングのシリコンテクノロジーにおいては、Si および関連物質に加えて高誘電体物質などの新たな材料系をテクノロジーに取り込み、その物性を活用することが重要に成ってきている。それに加えて、前節で紹介したような、ナノ構造における新奇物性の発現も重要である。さらにはダイヤモンド構造以外の新たな構造の Si あるいは Ge が発見されれば、そしてそれらが新奇な物性を示すならば、そのインパクトは計り知れない。

図3は我々のDFT+GW計算によって発見された体心正方 (body center tetragonal: bct) 格子をもつ結晶相の原子配置である。最安定のダイヤモンド構造に比べて原子1個あたり0.1 eV程度エネルギーは高いが準安定な構造であることが見出された。注目すべきは、全ての原子は、典型的な半導体と同様に最近接原子と4配位を形成しているにも関わらず、bct-Si ではギャップは顕著に狭くなり、bct-Ge ではそれが消失し半金属となることである (図4)。すなわち4配位では、 sp^3 の軌道混成により、tetrahedral な配置の最近接原子は結合軌道と反結合軌道を形成し、それらの間にはギャップが生じるというのが、固体物理の教科書に書かれていることである。今回の我々の結果は、たとえ4配位であって、ボンドの結合角度の変調により、金属が出現することを示している。

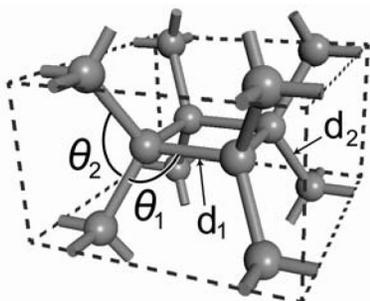


図3: DFT 計算で見出された体心正方格子を形成する Si と Ge の新しい結晶相。

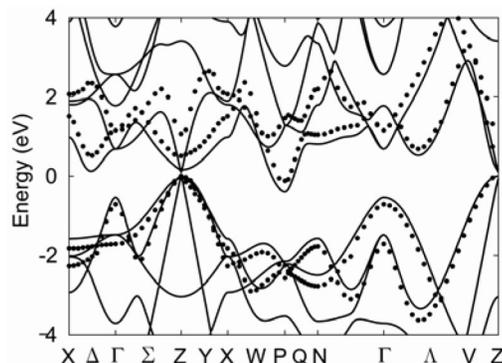


図4: 体心正方 Ge のバンド構造。フェルミ準位の位置をエネルギーの原点にとっている。ブリルアンゾーンの Z 点に正孔、P 点付近に電子が存在する反金属となっている。実線が LDA 近似、ドットが GW 近似による計算値。

3.3 窒化物半導体中カチオン空孔の強磁性

GaN, InN, AlN などの窒化物半導体は直接ギャップ半導体として赤外から紫外までの波長領域をカバーする光デバイスの基幹材料である。他の化合物半導体に比べて、有害な元素を含んでいない点からも将来有望な物質群と云えよう。さらにこれら物質群は、近年スピントロニクス材料としても有望視されている。すなわち、磁性不純物原子をドーピングすることによって強磁性が室温において発現していることが報告されている。しかし、磁性不純物原子1個当りの磁気モーメントが異常に大きいなど、従来の常識では理解できない現象が報告されている。我々は、電子相関の効果を積極的に取り入れたDFT+U (Gdの局在した4f電子状態での電子相関効果をオンサイト・エネルギーUで取り入れる方法) の手法によりGdドーピングGaNの電子状態を計算した。すると、図5のようにGd周囲のカチオン空孔が強磁性的にスピン偏極することが見出された。さらにカチオン空孔のみが存在する系でも強磁性状態が出現することが見出された。これは窒化物半導体においては、カチオン原子と窒素原子の原子半径が顕著に異なることにより、カチオン空孔周囲の窒素原子は、半導体に特徴的なヤーン・テラー歪を起こすことができず、代わりに電子同士の量子論的相互作用により、スピン偏極により安定化するためである。半導体における全く新奇な強磁性相の出現が予測される[6]。

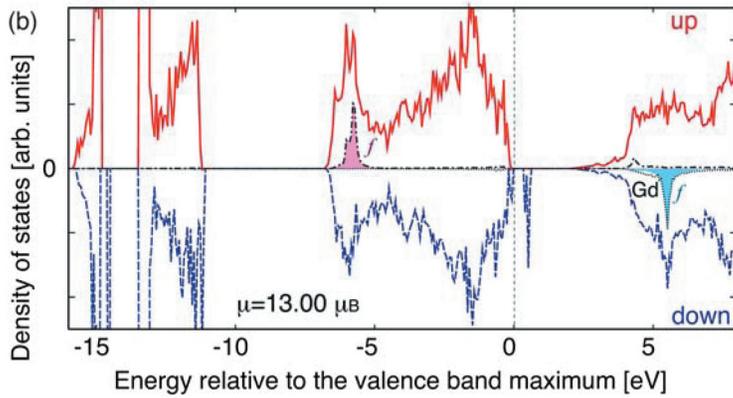


図 5 : DFT+U 計算による Gd+Ga 原子空孔での電子状態密度。上段が多数スピン、下段が少数スピンの状態密度であり、13.0 ボア磁子のスピン偏極が見出された。

3.4 ナノキャパシターでの量子効果

電子デバイスにおいて、キャパシタンスはコンダクタンスと並んで基本的な特性量である。微細化と高機能化の進む現状では、デバイス構造はナノメートルスケールであり、それは波動関数の広がりには匹敵するサイズとなっている。キャパシタンスにおける量子効果の解明が急務である。円筒状のチャネル、ゲート構造（サラウンディング・ゲート構造）は、ポストスケーリング時代のシリコンテクノロジーにおいて、電界効果トランジスターの究極構造と目されている。そこでは炭素ナノチューブの特性的優位性を用いたサラウンディング・ゲート電界効果トランジスターの開発が行われている。

我々は、多層炭素ナノチューブからなる円筒構造に対するキャパシタンスを、DFT によって調べ、ふたつの独立な量子効果が見出された[7]。ひとつは波動関数の浸みだしによる有効電極間の減少に伴う、キャパシタンスの増大である。もうひとつは、1次元構造に特有な、電子状態密度における Van-Hove 特異性による、キャパシタンスの顕著なバイアス電圧依存性である（図 6）。さらに図 7 のような三重炭素ナノチューブの最外側と最内側に電極をつないで電荷を注入すると、中に挟まれた炭素ナノチューブは誘電分極し、キャパシタンスの増大が見られた。この誘電分極から見積もった、ナノチューブ 1 本の誘電率は 1.88 となった。これは SiO₂ などの典型的ゲート絶縁膜の値と同程度である[8]。

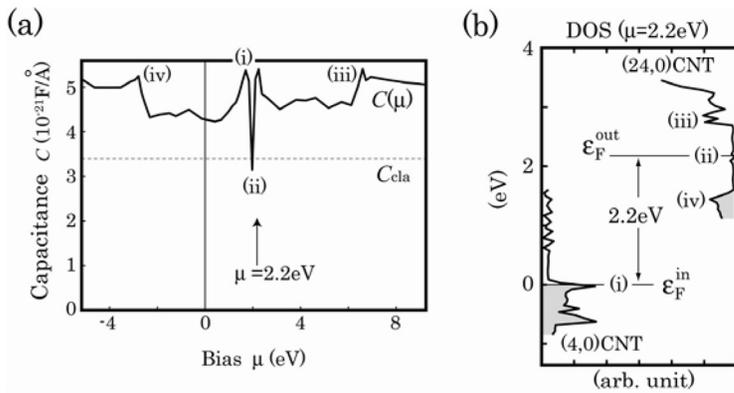


図 6: (a) 二重壁炭素ナノチューブ(4,0)@(24,0)におけるキャパシタンスのバイアス電圧依存性。スパイク状のバイアス電圧依存性は、(b)に示す状態密度の特異性と 1 対 1 に対応している。

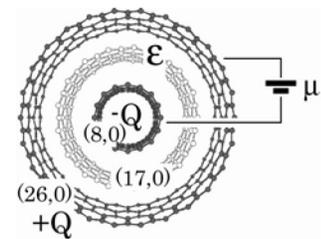


図 7: 三重炭素ナノチューブの模式図。バイアス電圧 μ により、外側チューブに $+Q$ 、内側チューブに $-Q$ の電荷が蓄えられている状況。

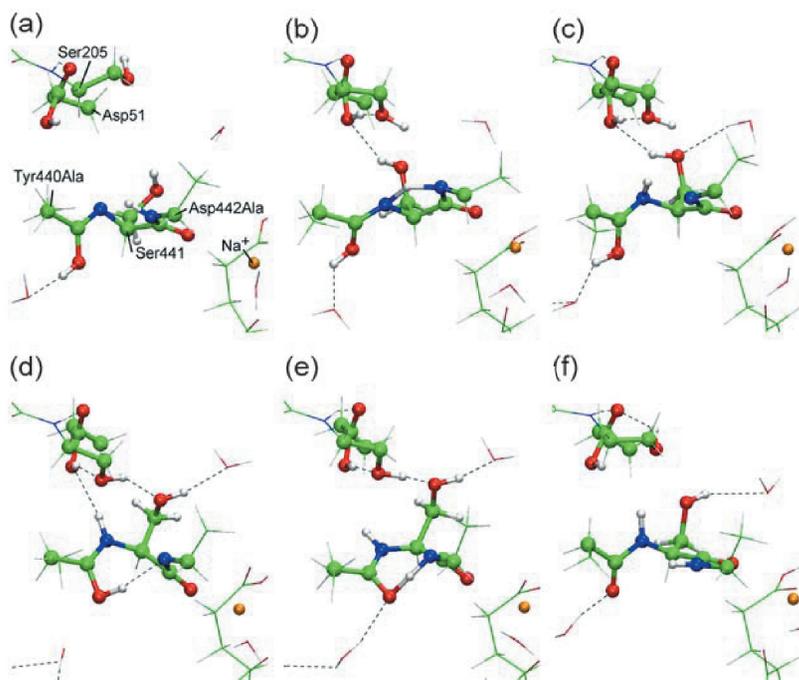


図 8: ペプチド結合を横切るプロトン輸送反応の原子プロセス。緑、青、赤、白丸が、炭素、窒素、酸素、水素原子を表している。シトクローム酸化酵素の内膜から移動してきたプロトンは、Tyr440 の酸素原子に配位する(a)。一方ペプチド鎖の上方に位置するプロトンは Asp51 に引き抜かれ、目的地に到達する。ペプチド鎖バリエードの下方に位置するプロトンは隣のアミノ酸の助けを借りて上方に移動する [(b) – (f)]。

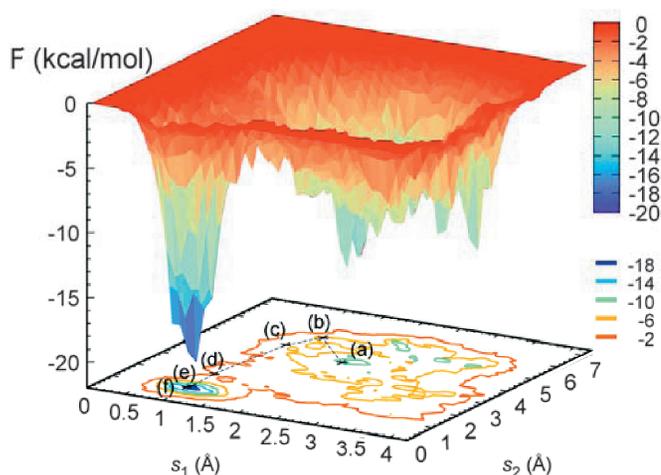


図 9: 図 8 の化学反応 [(a) – (f)] に沿った自由エネルギーのプロフィール。(a) から (f) への反応障壁は、その逆のプロセスのそれより小さく、この反応の一方方向性を示している。

4. バイオ系への応用

密度汎関数理論はバイオ系に対しても有効である。蛋白質等のバイオ物質での反応中心では、量子力学で記述される化学反応が起きている。計算生命科学には量子論が必要なのである。一方、生命科学においてはダイナミクスが重要である。量子論で記述される電子のダイナミクスはフェムト秒のオーダーである。一方、原子構造のダイナミクスはピコ秒、ナノ秒さらにはミリ秒のスケールである。そこには 10^{12} ものスケールの違いがある。そのマルチスケール現象を扱うのに、我々は Car-Parrinello 分子動力学法とメタダイナミクス法を結合した手法を採用している。詳細は原著論文を参照していただくことにして、計算例をひとつだけ紹介しよう。

4.1 シトクローム酸化酵素でのプロトン移動機構

シトクローム酸化酵素はミトコンドリア内膜に位置し、生物の呼吸作用の最終段階で、プロトンを膜内から膜間に輸送し、それによって ATP 合成反応を促す極めて重要な蛋白質である。牛由来のシト

クローム *c* 酸化酵素の結晶構造を元に、X線回折構造をもとにして見出されたプロトン移動経路 (H-path) では、Tyr440-Ser441間のペプチドグループが連続的な水素結合のネットワークを妨げており、従来のD-またはK-pathにおけるプロトン輸送とは異なる機構が必要となっていた。我々は、Car-Parrinello 分子動力学法とメタダイナミクス法を結合した手法により、Tyr440-Ser441間および Ser441-Asp442間の空間的に近接したふたつのペプチドグループを介した多段階反応により、共有結合を介したプロトン輸送が可能であることを示した[9,10]。これは、水分子などの他の因子を必要としない新規のプロトン輸送機構である (図8、図9)。

5. おわりに

以上駆け足で、我々のグループでの密度汎関数法計算の紹介を行った。密度汎関数理論は有用なものではあるが、完全ではない。実際、上述した体心正方格子 Si、Ge の研究では、準粒子スペクトルに対する、より精度の良い近似である GW 近似が必要であった。その意味で、計算手法の開拓は、計算物質科学、生命科学の推進には欠かせない。逆に応用計算と実験との比較により、新たな手法開拓の必要性が認識されてくる。理論、計算、実験が三位一体となって科学の進展を促すという構図である。さらに、我々の実空間密度汎関数理論コードの開発に見られるように、計算手法を計算機上で具体化、高速化するためには、計算機科学 (computer science) と計算科学 (computational science) の密な共同が重要である。まさに異分野間の共同が、豊かな可能性を生み出していくひとつの例と云えよう。

謝辞

本稿で紹介した研究は、内田和之、合田義弘 (以上東京大学)、岩田潤一、高橋大介、白石賢二 (以上筑波大学)、藤本義隆 (東京工業大学)、Boero Mauro (Louis Pasteur 大学)、神谷克政 (兵庫県立大学) との共同によるものです。また、本稿で紹介した計算は東北大学サイバーサイエンスセンターの SX7-C および SX9 システムを主に利用して行ったものです。

参考文献

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, (1964) B864; M. Levy: Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) **76**, 6062 (1979).
- [2] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [3] J.-I. Iwata, K. Shiraishi and A. Oshiyama, Phys. Rev. B **77**, 115208 (2008).
- [4] J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, and K. Yabana, J. Comp. Phys, to be published (2009).
- [5] Y. Fujimoto, T. Koretsune, S. Saito, T. Miyake, and A. Oshiyama, New Journal of Physics **10**, 083001 (2008).
- [6] Y. Gohda and A. Oshiyama, Phys. Rev. B **78**, 161201 (R) (2008).
- [7] K. Uchida, S. Okada, K. Shiraishi and A. Oshiyama, Phys. Rev. B **76**, 155436 (2007).
- [8] K. Uchida and A. Oshiyama, Phys. Rev. B (2009) in press.
- [9] K. Kamiya, M. Boero, M. Tateno, K. Shiraishi and A. Oshiyama, Journal of the American Chemical Society **129**, 9663 (2007).
- [10] K. Kamiya, Y. Shigeta, A. Oshiyama, AIP conference proceedings "Theory and Application of Computational Chemistry", AIP Conference Proceedings **1102** 257 (2009).

[報 告]

東北大学と理化学研究所が協定締結 —計算科学・計算機科学など関連分野の研究領域において連携・協力—

- * 東北大学と理研との間で研究開発、人材交流を推進し、研究開発を加速
- * 計算科学によるイノベーションの創出、国際的な人材の育成などを旨す
- * 共同利用型のスーパーコンピュータを運用する機関と協業体制の整備を推進

平成 21 年 4 月 14 日（火）、文部科学省において、東北大学と理化学研究所における連携協力協定締結の調印式が行われました。調印式では、最初に文部科学省 研究振興局 舟橋情報課長より挨拶があった後、東北大学のサイバーサイエンスセンター小林センター長より、連携協力に関する背景、東北大学のベクトルコンピューティングに関する最近の成果、東北大学がリードする計算科学分野、東北大学と理化学研究所とで重点的に進める研究課題についての説明があり、理化学研究所の次世代スーパーコンピュータ開発実施本部渡辺プロジェクトリーダーより、理化学研究所の「次世代スーパーコンピュータ」プロジェクト（平成 18 年～24 年度、総事業費 1,154 億円）に関する説明がありました。最後に東北大学の井上明久総長と理化学研究所の野依理事長からの挨拶があり、協定書への署名の後、両者は固い握手を交わしました。

この協定では、広範な計算科学、計算機科学およびこれらに関連する研究領域において連携・協力し、国産の高性能計算技術の研究開発だけではなく、理論と実験、計算科学と計算機科学の融合など、広範な学際領域の開拓を図り、計算科学によるイノベーションの創出、国際的に活躍できる人材の育成、人材交流を目指します。



サイバーサイエンスセンターとシュトゥットガルト大学高性能計算センターが 高性能計算に関する研究協定を締結

平成 21 年 4 月 21 日（火）、本センター大会議室において、サイバーサイエンスセンターとシュトゥットガルト大学高性能計算センターにおける研究協定締結の調印式が行われました。協定の締結は、本センターの小林広明センター長とシュトゥットガルト大学高性能計算センターのマイケル・レッシュセンター長との間で調印されました。

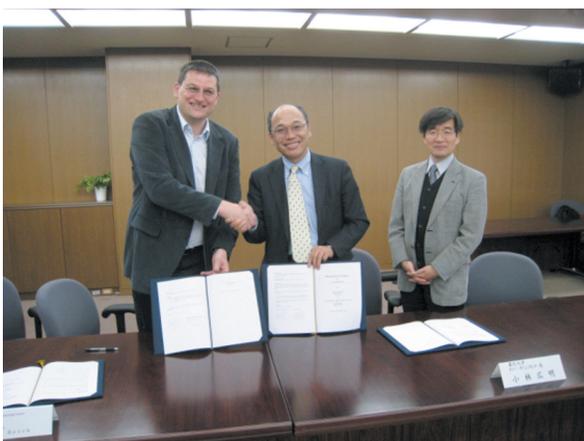
この協定は、これまで築いてきた高性能計算に関する協力関係をより一層強化発展させるために締結され、具体的には次の事項について連携・協力を推進していきます。

1. 技術交流・情報交換及び人材交流・人材育成
2. セミナー、シンポジウム等の共同実施
3. 技術的な評価のためにコンピュータシステム及びプログラムの相互利用
4. コンピュータプログラムや高性能計算技術に関する共同研究等による研究開発

また、両センターは次の事項について共同研究・開発を推進します。

1. ハイブリッドコンピュータアーキテクチャ
2. 大規模ベクトル並列処理技術
3. マルチフィジックス、マルチスケール連成計算技術

シュトゥットガルト大学は 1829 年に創立され、現在 14 学部、21,000 人の学生を擁する工科大学で、契約ベースの研究活動は、全ドイツの大学の中で最大の規模を誇り、実践に役立つ効率的な研究活動を行っています。高性能計算センターはシュトゥットガルト大学に併設された国立計算センターで、ドイツの大学だけでなく、産業界にあらゆる目的に対応した計算リソースを提供するサービスを実施しているほか、科学技術計算のためのツールの提供、科学技術計算の専門技術も提供しています。同センターはドイツ教育省が高性能コンピューティング基盤の整備を目的に立ち上げたプロジェクト「D.GRID」と、EU がヨーロッパにおける高性能コンピュータシステムの構築を目的に立ち上げたプロジェクト「PRACE」の両プロジェクトから支援を受けております。



グリッド上で世界最大級の広域ベクトル型スーパーコンピュータ連携を実現 —大規模ベクトル計算クラウドも視野に—

東北大学サイバーサイエンスセンター、大阪大学サイバーメディアセンター、情報・システム研究機構 国立情報学研究所および NEC は、このたび、国立情報学研究所が研究開発した NAREGI ミドルウェアを活用して、遠隔にある 2 つのベクトル型スーパーコンピュータをひとつのシステムとして仮想化してプログラムを実行し、世界最大級のベクトル型スーパーコンピューティング環境の実現が可能であることを実証いたしました。

ベクトル型コンピュータは、流体計算や構造物の力学計算、新物質探求や気象計算などに代表される大規模科学技術計算を高い実行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設計における重要な基盤として広く利用されています。東北大学では、NEC 製 SX-9 16 ノード (最大ベクトル理論性能 26.2TFLOPS)、大阪大学では同じく SX-9 10 ノード (同 16.4TFLOPS) を導入しており、両者は学術情報ネットワーク (SINET3) で高速接続されています。

また NAREGI ミドルウェアは、広域に点在する研究開発拠点の大規模な計算リソースを高速ネットワークで密に連携させ、仮想的にひとつの巨大なコンピュータと見做すことで、従来の個別コンピュータシステムの利用のみでは困難であった大規模並列シミュレーションなどを、効率的に実行することが可能です。今回、新たに SX-9 のローカルスケジューラ (NQS) と高い親和性を持たせた "GridVM for SX Vector Computer" を開発し、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強化しました。これにより、グリッド環境においてもベクトル計算資源の効率的な利用が可能となり、さらに、センター通常ジョブとグリッドジョブの共存によって世界に先駆けたクラウド型計算サービスの提供が可能となります。

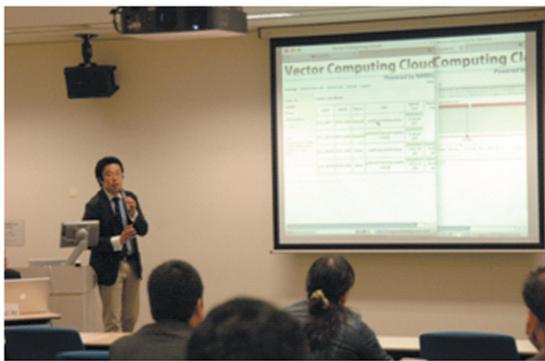
今回の実証実験では、共有メモリおよび分散メモリ用の並列プログラミングライブラリを用いて、並列化された電磁界分布シミュレーション用のプログラムを、東北大学と大阪大学の SX-9 上を接続して実行させました。クラウド基盤構築の第一歩として、今回開発した SX-9 用 GridVM を NAREGI ミドルウェアに導入することにより、両計算センターの計算資源の仮想化を実現するとともに、処理負荷状況の自動的な判断によってジョブの最適な振分け実行が、2 つのスーパーコンピュータ間で可能であることを、実証いたしました。

今後は、ベクトル型スーパーコンピュータを保有するより多くの組織との連携により、利用者の利便性を高め、応用ソフトウェアの全体としての実行効率向上やコスト低減を実現する、新しい時代の学術情報基盤「ベクトル計算クラウド」の実現に向けて取り組む予定です。その結果、以下のような先進的な科学技術計算環境を構築することができると期待されます。

- ・ 利用者の望む条件 (最短時間、最低コスト等) を自動的に判断してジョブを実行
- ・ 利用者の望むアプリケーションの存在場所を自動的に探索してジョブを実行
- ・ 利用者のプログラムが最も効率的に動作する計算資源 (例えば流体計算のためのベクトル計算機) を自動的に探索してジョブを実行

- ネットワーク上の計算資源を統合、仮想化することで、利用者に対して統一的な利用環境で、高性能計算サービス、および大学発アプリケーションサービスを提供

なおこの取り組みは、国立情報学研究所が推進する最先端学術情報基盤（CSI: Cyber Science Infrastructure）整備の一環として行っているものです。



2009年6月2日（火）に小林広明センター長らが出席して記者発表を行いました。

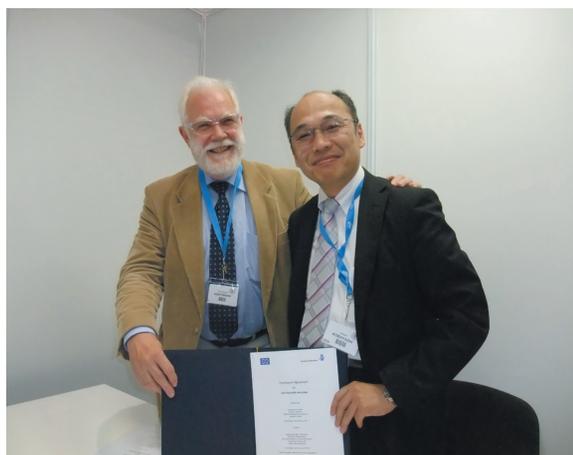
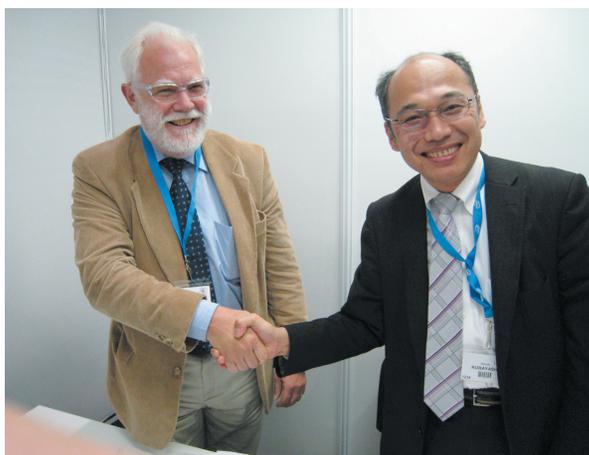
サイバーサイエンスセンターとドイツ気象庁が 高性能計算に関する協定を締結

平成 21 年 6 月 23 日 (火)、ドイツハンブルグにおいて、サイバーサイエンスセンターとドイツ気象庁における研究協定締結の調印式が行われました。協定の締結は、本センターの小林広明センター長とドイツ気象庁ヴォルフガング・クッシュェ長官との間で調印されました。

この協定は、これまで築いてきた高性能計算に関する協力関係をより一層強化発展させるために締結され、具体的には次の事項について連携・協力を推進していきます。

1. 最新の高性能計算機の調達、および運用
2. 高性能計算の為にデータベース、および大型ストレージシステムの運用・開発
3. 高並列計算システムの為にプログラミング技術の開発
4. 将来のペタ、エクサフリップを実現する高性能計算システムのアーキテクチャに関する調査
5. システムを運用するために必要な基盤構築

ドイツ気象庁(DWD)は、ドイツ共和国連邦交通・建設・都市開発省に属し、最新のベクトル型スーパーコンピュータ SX-9(45.8Tflop/s)を駆使して、ドイツおよびその近隣諸国に対して気象予測および災害警報等のサービスを行っております。DWD のサービスは、安全な道路交通システムや航空システムの維持に不可欠であり、安全・安心な一般社会生活を実現する重要な役割を果たしています。さらに、高精細で複雑な物理現象を解明する新しい気象予測モデルの研究開発等にも取り組み、気象分野における最先端の研究機関でもあります。



SENAC - 1 が情報処理学会「情報処理技術遺産」に認定されました

大泉充郎初代センター長が NEC と共同で開発し、1958 年に完成した、東北大学最初の電子計算機であるパラメトロン計算機 SENAC-1 が、2009 年 3 月 2 日付けで社団法人情報処理学会の「情報処理技術遺産」に認定されました。

情報処理技術遺産は、先人の努力の結晶である情報処理技術関連の歴史的文物を将来に長く保存し、次世代人の学ぶよすがとして伝えることを目的に、その時代において獨創性または新規性が著しかったものや性能が格段に優れていたもの等の認定指針に該当し、現存する台数が極めて少ないもの、保存状態がよいもの等の基準を満たしているものを情報処理学会・歴史特別委員会が認定するものです。

SENAC-1 は、語長を 2 進 48 桁にして高精度演算を可能にする等、きわめて斬新な設計構想であり、当時の技術レベルを知る上でも貴重なものとして「情報処理技術遺産」に認定されました。

この情報処理技術遺産については、社団法人情報処理学会のホームページの情報処理技術遺産のページで紹介されています。

- ・情報処理技術遺産のページ

(<http://museum.ipsj.or.jp/heritage/index.html>)

- ・SENAC-1 のページ

(<http://museum.ipsj.or.jp/heritage/senac-1.html>)

○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 S E N A C Vol. 42 No. 1 2009-1

(SX-9 導入披露&SENAC50 周年記念式典・講演会特集号)

(http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/refer/pdf_data/v42-1_ALL.pdf)



[研究報告]

キャンパスユビキタス環境，グリッド環境等の 情報基盤技術の研究開発

東北大学サイバーサイエンスセンター / ¹⁾現 NEC

後藤英昭，大和純一¹⁾，若山永哉¹⁾，曾根秀昭，江川隆輔，小林広明，水木敬明

東北大学情報部 ²⁾情報基盤課 / ³⁾情報推進課

大泉健治²⁾，伊藤英一²⁾，森 倫子²⁾，千葉 実²⁾，澤田勝己²⁾，安西従道³⁾

※ この記事は、「国立情報学研究所・平成 20 年度 CSI 委託事業報告交流会(ネットワーク・e-Science 系)」(平成 21 年 5 月 18 日，学術総合センター)の報告資料の内容を転載したものです。

1. 委託業務の実施内容

東北大学サイバーサイエンスセンターは，最先端学術情報基盤(CSI)の構築に関して，次の事項の研究開発と調査を行った。

- 1) キャンパスユビキタスネットワークによる連携基盤の実現
- 2) グリッド環境の整備・運用
- 3) SINET3 ノードの高度化
- 4) 認証連携

研究開発と調査の実施内容および得られた成果を次節以下に述べる。

2. キャンパスユビキタスネットワークによる連携基盤の実現

2.1 概要

CSI 構築において安全・安心なキャンパスユビキタスネットワークを実現するために，H17 年度からサイバーサイエンスセンターに「最先端学術情報基盤研究室 (CSI 研究室)」を設置し，大学間無線 LAN ローミングの方式の研究開発を行っている。H19 年度までに継続開発してきた方式をベースとして，キャンパスネットワークにおける構築・運用面と利用者の容易さ，および通信セキュリティと安定性などに関してより優れた方式の提案及び詳細設計と技術的評価を行い，実用化に向けたプロトタイプシステムの開発・構築を行った。また，このために必要となる機器を確保し，最先端学術情報基盤の実践的構築に資す

る人材の育成を行った。H18年度に日本に導入した国際無線 LAN ローミング基盤 eduroam に関して、国内における主導的立場での運用実務や他大学の接続支援、教育活動、欧州・アジア太平洋州各国との国際的な運用および調整などを行った。

大規模なキャンパス無線 LAN システムを容易に構築し、かつ安全性と相互運用性(ローミング)を実現できるように、無線 LAN システムの構成方法について技術的検討および実証実験を行った。また、認証連携システムが未構築の高等教育機関でも無線 LAN ローミングのサービスを利用することを可能にするため、「eduroam 代理認証システム」を構築してその試行的利用を公開した。

2.2 業務内容と成果、およびその効果

(1) eduroam JP の国内運用、研究開発と情報展開・教育活動及び海外連携

国際無線 LAN ローミング基盤 eduroam を、国立情報学研究所ネットワーク運営・連携本部認証作業部会 eduroam グループを主体とし、東北大学が主導して H18 年度に日本に導入した。その後も国内運用の責任機関として運用実務と研究開発を継続し、H20 年度は新たに 4 大学(名古屋大学, 山形大学, 大阪大学, 尚絅学院大学)の接続を支援した。

ウェブサイト www.eduroam.jp にて eduroam 設定のノウハウなどの情報公開を行った。また、岩手大学, 山形大学における講演や、平成 20 年度ネットワークセキュリティ技術研修(NII)の講師を務めるなどの情報展開・教育活動を行った。以上により、国内の学術情報基盤の高度化に貢献した。

eduroam の運用の国際連携について、TERENA TF-Mobility 会合 (7 月, スウェーデン), TERENA Networking Conference 2008 (5 月, ベルギー) や APAN ミーティング(8 月, ニュージーランド)に CSI の代表として参加して、諸外国との情報交換と報告および議論を行った。たとえば、eduroam のアジア太平洋地域の運用の要となる APAN eduroam RADIUS proxy システムの安定運用のために、APAN eduroam のセカンダリサーバを管理している香港のスタッフと技術的な情報交換を行い、大きく貢献した。また、オーストラリア AARNet に設置されている APAN eduroam プライマリサーバの不具合について、AARNet のスタッフと共同でトラブルシューティングを行い、不具合の原因調査の技術指導により、国際的な技術供与も行った。

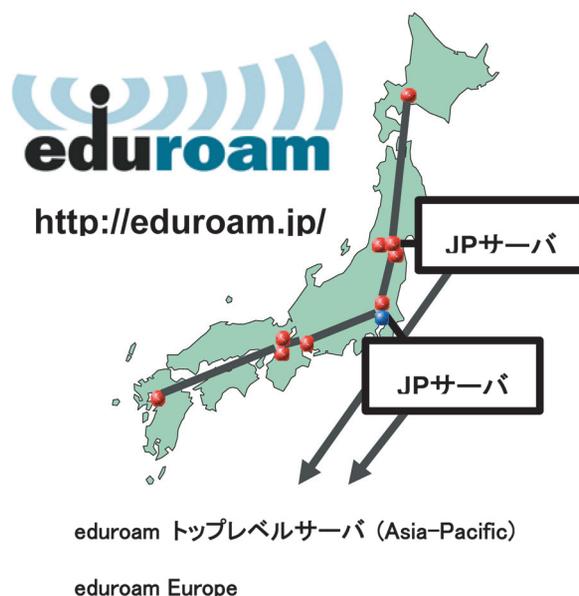


図 2.1 日本における eduroam (2009 年 5 月現在)

(2) 大学間無線 LAN ローミング方式の開発

安全・安心なキャンパスユビキタスネットワークを実現する大学間無線 LAN ローミングの方式の研究開発として、前年度まで開発した Proxy VPN に基づく方式をベースとして、実用化に向けたプロトタイプシステムの開発・構築を行い、試作したプロトタイプを用いてシステム分析を行い、eduroam のような大規模な認証連携基盤に対応できるようにスケーラビリティや安定性の向上について検討した。試作したプロトタイプを用いてシステム分析を行い、機関間の信頼関係、セキュリティ、管理性、ユーザビリティの分析・整理と、機能配置の考察を行った。また、遠隔接続における安定性と効率の分析のために、PPTP/OpenVPN の特性分析・評価を行った。

開発手法では、所属機関から提供される利用者の属性情報と、訪問先機関のポリシーを突き合わせて、訪問先機関のローカルリソースへのアクセス制御ができるようになった。また、IP アドレスが訪問先機関ではなく所属機関から端末に振り出されるため、利用者の故意または無意識の不正利用における責任所在の明確化や、利用者追跡の手間の軽減が実現でき、これらは CSI において大変有用な性質である。

これらの研究成果を APAN ミーティングや ITRC ミーティング、電子情報通信学会総合大会などで発表した。

また、将来のオープンソース化と他大学への提供に備えて、ソースコードとライセンスの整理を行った。

(3) 大規模無線 LAN ローミング基盤の利便性と安全性向上

国内外の eduroam の運用、およびヨーロッパの eduroam コミュニティにおける調査などを通して、大規模なローミングシステムにおける様々な問題を検討・整理した。ローミングシステムにおける利用者のロケーションプライバシーと、アカウント情報の漏洩の問題に関して、擬名 ID に基づいた安心・安全な認証連携手法を研究開発し、「eduroam 代理認証システム」を構築して国内の高等教育研究機関に公開、運用を開始した。この方式によって、eduroam 加入機関が ID プロバイダ(IdP)や RADIUS サーバを持つ必要を中央的組織などが肩代わりすることが可能になり、eduroam 参加の裾野を大きく広げる役割も期待される。また、将来の Shibboleth(シボレス)/SAML 等による認証連携との整合性も高く、CSI における理想的な無線 LAN ローミングの像に大きく近づいたものと言える。

他機関訪問時に訪問先機関 IP アドレスの払い出しをうけて利用することによるコンテンツアクセス制御などへの副作用問題の一解決方法として、ゲスト用ネットワークを SINET3 の L3VPN に収容する構成について検討し、実際にネットワークを構築して実証実験を行った。

さらに、無線アクセスポイント設置の制約を大幅に緩和して設置ネットワークの管理者に求めるべき技術スキルと負担を軽減しながら、無線 LAN 用ネットワークの安全性を維持して設計自由度を高め、運用の利便性を向上することができるセンター集中管理型アクセスポイント方式を開発し、広域あるいはプライベートなネットワーク上で自動トンネリングを行う可搬型無線アクセスポイントを試作した。この方式では、アクセスポイントの設定をあらかじめ大学のセンター等で済ませて貸し出し、これを設置するとき特に設定作業を行わなくても様々な末端ネットワークに接続でき、全学向けや eduroam などの無線 LAN サービスを容易に提供できる。例えば、出先の会議場などにおいて、会場敷設のインターネット接続機能を借りて会議参加者に一時的に無線 LAN サービスを提供するといったことも、極めて容易に行うことができる。また、無線端末が行う通信はアクセスポイントからセンターまでの区間ですべてトンネルの中を通るため、アクセスポイントを接続するネットワークの安全と通信の秘密が自動的に保たれ、運用ポリシーに抵触しにくいという利点がある。試作機は学内外の 6 箇所以上において実証試験運用を行い、正常動作と高い利便性の機能を確認した。

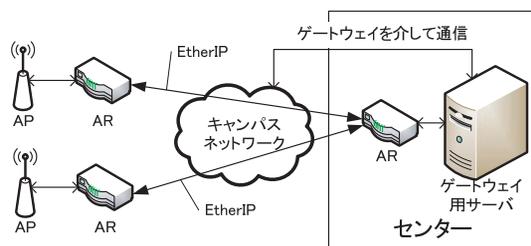


図 2.2 センター集中管理型アクセスポイント

2.3 発表資料リスト (H20 年度)

- (1) 大和純一, 若山永哉, 渡邊義和, 後藤英昭, 山野悟, 曾根秀昭, "大規模キャンパス無線 LAN の構成と機器の要件," 第 23 回インターネット技術第 163 委員会研究会 -ITRC meet23- (2008.5.15, 名古屋大学).
- (2) 後藤英昭, 渡邊義和, 曾根秀昭, "大学間無線 LAN ローミングのためのリソースアクセス制御手法," 情報処理学会研究グループ報告 第 23 回インターネット技術, 第 163 委員会研究会 -ITRC meet23- / 第 8 回 CMS 研究発表会, pp.9-12 (2008.5.16 名古屋大学).
- (3) 後藤英昭, "平成 19 年度 CSI 委託事業報告 -- 東北大学," 国立情報学研究所 平成 19 年度 CSI 委託事業報告交流会 (ネットワーク・e-Science 系) 予稿集, pp.60-64 (2008.6.11 学術総合センター中会議場).
- (4) Hideaki Sone, "Updates on Recent Activities in eduroam-JP," TERENA TF-Mobility (2008.7.8 Umeå, Sweden).
- (5) Hideaki Sone, "UPKI Activities - July 2008 -," TERENA TF-EMC2 (2008.7.9-10 Umeå, Sweden).
- (6) Yoshikazu Watanabe, Hideaki Goto, Hideaki Sone, "Resource Access Control for Wireless LAN Roaming Systems," 2008 International Symposium on Applications and the Internet (SAINT2008) Workshops, pp.281-284 (Turku, Finland, July 2008).
- (7) Hisaya Wakayama, Junichi Yamato, Hideaki Goto, and Hideaki Sone, "Policy-Based Access Control for Secure and User-Friendly WLAN Roaming Systems," 26th Asia-Pacific Advanced Network Meeting (APAN26) (Queenstown, New Zealand, Aug. 2008).
- (8) 大和純一, 若山永哉, 渡邊義和, 後藤英昭, 曾根秀昭, "Proxy VPN によるセキュアでユーザフレンドリーな無線ローミング," 2008 年電子情報通信学会ソサイエティ大会 通信講演論文集 2,B-16-3, p.311 (2008.9.16-19 川崎市).
- (9) 後藤英昭, "学内ローミングおよび国際ローミングに対応した情報科学研究科・新無線 LAN システムの構築について," 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.4, pp.37-43 (2008.10).
- (10) 後藤英昭, "UPKI 事業と大学間無線 LAN ローミングの実現," 情報処理講演会 (情報処理学会東北支部共催) (2008.10.14 山形大学工学部(米沢キャンパス)).
- (11) Hideaki Sone, "Mobile Access Roaming Technology and Its Application," 4th China-Korea Annual Meeting on Advanced Networking (2008.10.27).
- (12) 大和純一, 若山永哉, 後藤英昭, 曾根秀昭, "EtherIP を用いたセンター管理型キャンパス無線 LAN," 第 30 回全国共同利用情報基盤センター研究開発連合発表講演会研究開発論文集(No.30), pp.25-32 (2008.11).
- (13) 曾根秀昭, "海外の大学間認証連携と UPKI," シングルサインオン実証実験中間報告会 (国立情報学研究所) (2008.11.10).

- (14) 後藤英昭, "キャンパス無線 LAN のユーザ認証と国際無線 LAN ローミング基盤 eduroam," ネットワークセキュリティ技術研修, 国立情報学研究所・教育研修事業 (2008.11.13 大阪).
- (15) 後藤英昭, "学内ローミングおよび国際ローミングに対応した情報科学研究科・新無線 LAN システムの構築について," 東北大学サイバーサイエンスセンター TAINS ニュース 2008.12.25, No.36, pp.17-22 (2008.12).
- (16) 大和純一, 若山永哉, 後藤英昭, 曾根秀昭, "EtherIP を用いたセンター管理型キャンパス無線 LAN," 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.42, No.1, pp.137-144 (2009.1).
- (17) 若山永哉, 大和純一, 後藤英昭, 曾根秀昭, "プロキシVPN方式による無線LANローミングの評価," 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集 BS-11-1, pp.137-138 (2009.3.17-20 松山市).
- (18) 大和純一, 若山永哉, 後藤英昭, 曾根秀昭, "大規模キャンパス無線 LAN ローミングにおける代理認証システム", 電子情報通信学会 2009 年総合大会講演論文集 BS-11-2, pp.139-140 (2009.3.17-20 松山市).

3. グリッド環境の整備・運用

3.1 概要

利用者が、計算資源の設置場所を意識せずに、必要とする規模のベクトル計算環境をシングルサインオンで得ることが可能なベクトルコンピューティングクラウドの実現を目指して、平成 20 年度は、これまで取り組んできたグリッド環境整備を更に進展させ、実用的なグリッド環境構築と実証実験を行った。具体的には NAREGI ver.1.1 によるグリッド環境の構築と、当センターが有するベクトル型スーパーコンピュータシステム (NEC SX) を NAREGI ver. 1.1 上で利用するための GridVM for SX の開発を行った。この開発に基づき、大阪大学サイバーメディアセンターが有する SX-9 システムと NAREGI によるベクトル型スーパーコンピュータの広域 SX 連携実験を行った。あわせて、国立情報学研究所(NII), 7センター, 東京工業大学, 筑波大学との大規模グリッド実証実験のための環境を構築した。

3.2 業務内容と成果, およびその効果

(1) GridVM for SX の開発

NAREGI ver. 1.1 において、ベクトル型スーパーコンピュータシステム (NEC SX) を利用可能にし、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、GridVM for SX を開発した。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、ローカルジョブとグリッドジョブの共存の為の強化、NEC SX 固有の MPI のサポートを実現した。

各機能, および強化した点は下記の通りである。

- ・ **ジョブ管理機能**

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 NQS II 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た。

- ・ **情報プロバイダ機能**

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の NAREGI グリッドミドルウェアへの登録を可能にした。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た。

- ・ **強化機能**

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た。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たが, 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た。

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可能にしている。

(2) NAREGI による広域ベクトル型スーパーコンピュータ連携実験

NAREGI ver.1.1 と開発した GridVM for SX を用いて, 図 3.1 に示す大阪大学サイバーメディアセンターの SX-9 (1 ノード) と当センターの SX-9 (1 ノード) を用いたグリッド環境を構築した。両センターのベクトルコンピュータ資源の連携 (ベクトルコンピューティングクラウド) は, それぞれのスーパースケジューラ (Super Scheduler : SS) がリザベーション・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た。東北大学・大阪大学の両センター間は SINET3 に設定した CSI グリッド網によって結合し, RCS は大阪大学に配備した。図 3.2 に示す東北大学に設置した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, 結果の確認を行うことで動作検証を実施した。評価には当センターで実際に実行されている SMP 16 並列, MPI 16 並列のプログラムを用いた。構築したシステムでは, 図 3.3 に示すように東北大学, 大阪大学, 各サイトの計算資源の状況を portal で確認し, 図 3.4 に示す様にジョブの実行完了を確認する

ことができた。NAREGIによるグリッド環境の構築と GridVM for SX の開発により、両センターのベクトル計算資源を仮想化し、シングルサインオンで双方のベクトル計算資源をシングルシステムイメージとして有効利用できることを示した。

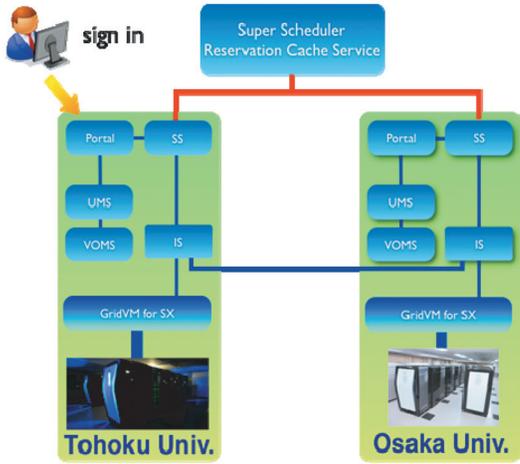


図 3.1 評価システム



図 3.2 portal ログイン画面



図 3.3 サイト情報の確認

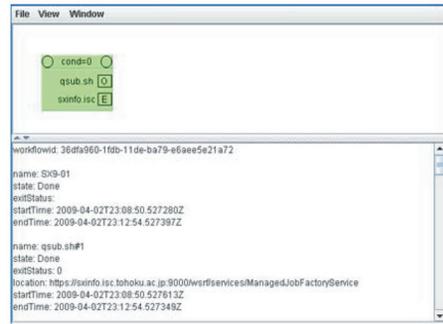


図 3.4 ジョブステータス (終了状態)

(3) 基盤センターグリッド連携環境の構築

前述の東北大学、大阪大学によるベクトルコンピューティングクラウドの構築の取り組みと併せて、図 3.5 に示す NII, 7センター, 東工大, 筑波大学による基盤センターグリッド連携環境実現へ向けた取り組みとして、NII を GOC とする基盤センターグリッド網の計算資源として当センターの SX を利用可能な環境を構築した。これにより、NAREGI を用いた異種複数のプラットフォームからなる超大規模スーパーコンピュータグリッド基盤の構築が可能であることを明らかにした。現在、グリッドタスクフォース主導の下、NII, 7センター, 筑波大学, 東工大によるスーパーコンピュータグリッドの実運用へ向けた取り組み

を継続的に行っている。

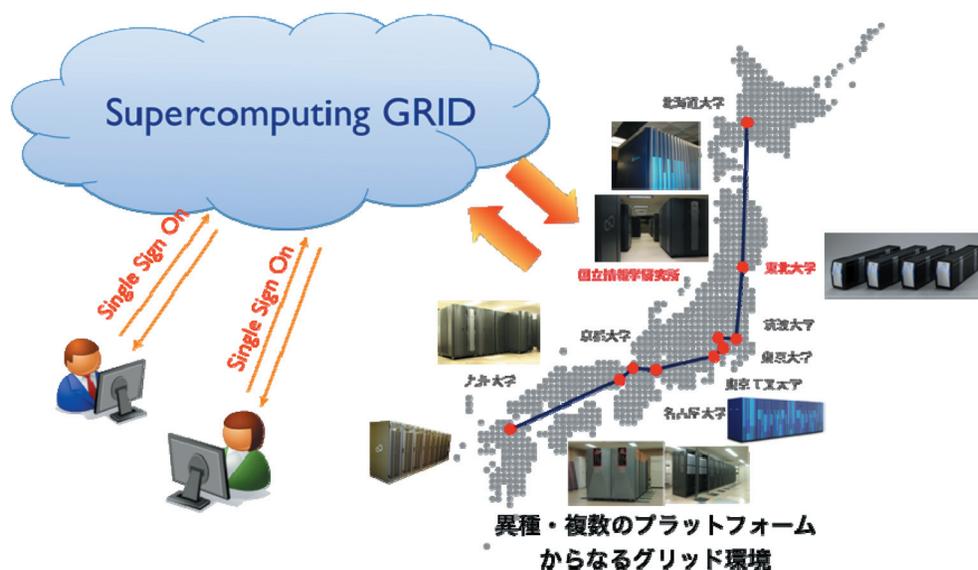


図 3.5 基盤センタースーパーコンピュータグリッド連携

3.3 発表資料リスト

- (1) Hiroaki Kobayashi, "Lessons Learned from 1-Year SX-9 Experience and toward the Next Generation Vector Computing," 10th teraflop workshop, Stuttgart, Mar. 2009.
- (2) 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, "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-, " 東北大学サイバーサイエンスセンター広報誌 SENAC vol.42, no.2, pp.1・6, Apr. 2009.

4. SINET3 ノードの高度化

4.1 概要

東北地域の大学等と SINET を接続するノードとしての本学は、H19 年度までに、これまで本委託業務で得られている知見や先行的経験を活かし極めて順調に SINET3 へ接続を切り替えることに成功しており、H20 年度においても順調に東北地域及び学内のネットワーク環境の高度化と運用技術の調査研究を実施し、次の SINET4 に向けた検討・準備も着々と進んでいる。また同時に、SINET3 の普及・活用のための啓発活動も行った。

4.2 業務内容と成果, およびその効果

H19 年度において実施した SINET3 への接続の切り替えを踏まえ、SINET ノードの高

度化のための運用技術の調査と研究開発を継続し、東北地域の学生や研究者・職員に対して学術研究及び教育活動の情報ライフラインとしての SINET3 の接続環境を維持することができた。次の SINET4 への接続に向けた検討・準備も着々と進んでいる。

また、東北学術研究インターネットコミュニティ (TOPIC) と協力し、NII からの講師による研修会等を東北地域のネットワーク責任者や担当者を対象に実施し、SINET3 の普及や活用に著しく貢献しているとともに、通信回線の経済的高速化や格差解消に向けたオープンフォーラム的な先駆けの取り組みともなっている。

表 4.1 SINET3 ノードの高度化に関する研修会の開催

TOPIC 研修会 (春)	TOPIC ネットワーク担当職員研修会 (秋)
日時：平成 20 年 4 月 24 日～25 日 場所：仙台国際センター NII からの講演 (プログラム抜粋)： 「UPKI におけるサーバ証明書発行 について」 「SINET3 の利用について」	日時：平成 20 年 9 月 25 日～26 日 場所：天童ホテル NII からの講演 (プログラム抜粋)： 「SINET3 の新サービスの展開」 「UPKI 認証連携基盤によるシングルサ インオン実証実験について」

5. 認証連携

5.1 概要

H19 年度に引続き、認証作業部会が実施する「サーバ証明書発行・導入における啓発・評価研究プロジェクト」に参加し、サーバ証明書の試行運用を継続するとともにその評価を行い、東北地域における普及にも務めた。

また「UPKI シングルサインオン実証実験」にも積極的に参加し、検証に貢献した。

5.2 業務内容と成果、およびその効果

前年度に引続き、認証作業部会が実施する「サーバ証明書発行・導入における啓発・評価研究プロジェクト」に参加し、学内において 8 部局 50 件のサーバ証明書を発行する実績を得た。

啓発面で、東北地区国立大学法人等技術職員研修において、本学人事課との協力のもと、「【実技】ネットワーク技術～サーバ証明書～」を企画し、東北地域の現場レベルにおけるサーバ証明書発行・導入の臨床的普及を実施した。

表 5.1 サーバ証明書発行・導入に関する職員研修の開催

平成 20 年度東北地区国立大学法人等技術職員研修 【実技】ネットワーク技術 ～サーバ証明書～
日時：2008 年 9 月 12 日 9:00～11:40 頃 場所：東北大学サイバーサイエンスセンター本館・5 階・端末機室 担当：水木敬明, 後藤英昭(東北大学 サイバーサイエンスセンター 研究開発部), 森倫子, 澤田勝己(東北大学 情報部情報基盤課 ネットワーク係) サポート：小森和樹(東北大学 加齢医学研究所), 桑野龍(東北大学学際科学国際高等研究センター)

また「UPKI シングルサインオン実証実験」にも積極的に参加し、学内において統合認証基盤の企画・構築を検討する情報シナジー機構認証 WG が中心となって Shibboleth IdP を一早く試行的に立ち上げ、ヘルプデスク・実証実験支援チームの協力も得てシングルサインオン認証の動作検証や技術的項目等の検証に貢献した。この成果の概要は、UPKI シンポジウム（2 月 23 日）にてポスターセッションへ出展を行い、報告した。

5.3 発表資料リスト

- (1) 東北地区国立大学法人等技術職員研修 「【実技】ネットワーク技術～サーバ証明書～」教材
- (2) 「UPKI シングルサインオン実証実験」ポスター, UPKI シンポジウム（2009 年 2 月 23 日）ポスターセッション

白

[Web 版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。

利用負担金割引制度の実施について (No.87)

大規模科学計算システムを有効に活用していただくために、平成 11 年度より、利用額に応じて負担額を軽減する割引制度を実施してきました。平成 21 年度は下記のとおり実施しますのでご利用願います。

平成21年度の利用負担金割引制度の内容

- ① 割引制度の対象はスーパーコンピュータと並列コンピュータの演算負担経費です。ファイル負担経費および出力負担経費は含まれません。
- ② 割引対象の期間は平成 21 年 4 月 1 日から平成 22 年 3 月 31 日までです。
- ③ 支払責任者ごとに集計した累計利用額に応じて、負担額はつぎのように減額されます。
- ④ 申請などは不要で、すべての支払責任者(利用者)が適用となります。

利用額	負担額
10 万円まで	利用額と同じ
10 万円を超え 100 万円まで	10 万円
100 万円を超え 400 万円まで	(100 万円を超える利用額の 1/2)+ 10 万円
400 万円を超え 800 万円まで	(400 万円を超える利用額の 1/3)+ 160 万円
800 万円を超え 1500 万円まで	(800 万円を超える利用額の 1/4)+ 292 万円
1500 万円以上	(1500 万円を超える利用額の 1/5)+ 467 万円

(共同利用支援係)

非線形構造解析汎用プログラム

MSC.Marc2007/Mentat2007のサービス開始について (No.87)

Marc/Mentat のバージョンを MSC.Marc2007/Mentat2007 として運用を始めましたのでお知らせ致します。旧バージョンのものは暫定的に run_marc2005、mentat2007 というコマンドで利用できます。2009 年 4 月 1 日(水)よりサービスを開始しておりますのでご利用下さい。

サービス開始日： 2009 年 4 月 1 日 (水)
 ホスト名： gen (並列コンピュータ)

▼ MSC.Marc2007/Mentat2007

バージョン名： ver2007r1

起動コマンド： run_marc, mentat

新機能の概要、機能の詳細についてはマニュアル[1]リリースガイドをご覧ください。

マニュアル： PDF 形式マニュアルを gen 上で提供しています。

並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp にログインし、acroread コマンドで
 ご覧ください。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: /usr/ap/msc/mentat2007r1/doc/

[1] release_jpn.pdf： リリースガイド(日本語)

英文マニュアル

- [2] vola.pdf : Volume A : Theory and User Information
- [3] volb.pdf : Volume B : Element Library
- [4] volc.pdf : Volume C : Program Input
- [5] vold.pdf : Volume D : User Subroutines and Special Routines
- [6] vole.pdf : Volume E : Demonstration Problems
- [7] users.pdf : User's Guide
- [8] reference.pdf : Python Tutorial and Reference Manual

和文(2003版) gen: /usr/ap/msc/mentat2007r1/doc/japanese/

- [1] vola.pdf : A編 理論およびユーザー情報
- [2] volb.pdf : B編 要素ライブラリ
- [3] volc.pdf : C編 プログラム入力
- [4] vold.pdf : D編 ユーザーサブルーチンおよび特別ルーチン
- [5] vole.pdf : E編 例題集
- [6] marc_ug.pdf : ユーザーガイド
- [7] mt_help_ref.pdf : Mentat 2003 ヘルプリファレンス
- [8] xsec_adden.pdf : ドキュメント補足資料

(共同利用支援係)

平成21年度の共同研究について (No.87)

本センターでは、大規模科学計算システムの利用者と共同でプログラムやアルゴリズムを開発する共同研究を行っています。平成21年度はスーパーコンピュータで実行するプログラムのベクトル化・並列化および並列コンピュータでの並列化に関する共同研究が対象テーマです。

今年度の募集に応募されたものについてライブラリ・共同研究専門部会で審査の結果、以下の9件が採択されましたのでお知らせします。

	申請者	所属	研究課題
1	小野 高幸	東北大学大学院 理学研究科 地球物理学専攻	惑星磁気圏における波動粒子相互作用についての計算機実験
2	岩崎 俊樹	東北大学大学院 理学研究科 地球物理学専攻	大気大循環モデルと非静力学数値モデルに関する研究
3	中橋 和博	東北大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻	直交格子 CFD ソルバーの高速化に関する研究
4	澤谷 邦男	東北大学大学院 工学研究科 電気・通信工学専攻	高分解能レンズアンテナの3次元 FDTD 解析

5	押山 淳	東京大学大学院 工学系研究科	実空間密度汎関数法コードの高速化・多機能化 とナノ・バイオサイエンスへの応用
6	塚原 隆裕	東京理科大学 理工学部 機械工学科	大規模計算領域を用いた直接数値シミュレー ションによるチャンネル内遷移流の研究
7	岩本 薫	東京農工大学大学院 工学府機械システム 工学専攻	壁面乱流における流動抵抗制御の大規模数値 解析
8	小野 倫也	大阪大学大学院 工学研究科 精密科学専攻	第一原理に基づく大規模電子状態・量子輸送特 性計算プログラムの開発
9	森川 良忠	大阪大学 産業科学研究所	第一原理分子動力学法プログラム STATE-Senri の高度並列化

(スーパーコンピューティング研究部，共同研究支援係)

平成21年度 研究開発公募課題(第一次募集分)の採択について (No.87)

標記の第一次募集分(2月20日〆切)に応募されたものについて、ライブラリ・共同研究専門部会で審議の結果、次に示す課題が採択されましたのでお知らせいたします。

No.	開発課題	職名	開発者	所属	対象システム	備考
07-01	量子計算シミュレータの開発	教授	鎮目 浩輔	筑波大学 図書館情報 メディア研究科	・スパコン ・並列コン	継続
08-01	宇宙論的構造形成シミュレーションコードの開発	准教授	野口 正史	東北大学 理学研究科 天文学専攻	・スパコン ・並列コン	継続
08-02	大規模科学計算向け汎用数値ソフトウェア基盤 SSI の SX-9 上への移植と性能評価	計算科学専門 研究員	西田 晃	中央大学 理工学研究所	・スパコン	継続
08-03	揺動散逸モデル付き微小整数型格子流体法シミュレーションコードの開発	客員 教授	松岡 浩	東北大学 電気通信研究所	・スパコン	継続

(スーパーコンピューティング研究部，共同研究支援係)

計算科学・計算機科学人材育成のための スーパーコンピュータ無償提供の試行について (No.88)

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、今年度に引き続き平成 21 年度も大学院・学部での講義実習等の教育目的での利用について、無料（ただし、利用状況によっては上限を設定する場合があります）でベクトル並列型スーパーコンピュータ SX-7C（5 ノード、40CPU、640Gflop/s、640GB メモリ）システムをご利用いただける制度の試行をいたします。現在、後期からの利用の募集をしております。

利用を希望される場合は、以下の情報を添えて、edu-prog@isc.tohoku.ac.jp までお申し込みください。

- ・ 講義担当者氏名
- ・ 同所属
- ・ 同連絡先（住所、電話、電子メール）
- ・ 講義名
- ・ 講義実施日時（1 セメスターの中で実習を予定している回数）
- ・ センターでの実習利用希望の有無（必要であれば、予定日）
- ・ 講義シラバス
- ・ 講義ウェブ（もし用意されていれば）
- ・ 受講者数（予定）
- ・ 必要とする理由（利用目的：例えば、高速数値実験の研修を行うなど）
- ・ 期待できる教育効果
- ・ その他（センターへの要望等）

なお、講義終了後、簡単なアンケートをお願いすることがあります。たくさんのお申し込みをお待ちしております。不明な点は、edu-prog@isc.tohoku.ac.jp まで電子メールでお問い合わせください。

(スーパーコンピューティング研究部，共同利用支援係)

平成21年度の利用相談について (No.88)

今年度も利用相談室での利用相談を5月11日(月)より開始いたしました。毎日午後2-4時まで面談、電話、メール等で相談を受け付けます。次頁の表は各テクニカルアシスタントの主な担当分野ですが、本センターの利用に関する相談は、曜日に関わらずすべて対応いたしますのでお気軽にご相談ください。利用相談室には各種マニュアル、書籍も揃えておりますのでそちらもご活用ください。

弘前大学、秋田大学、山形大学でも利用相談を受け付けます。次頁の表を参考にしてご利用ください。

《 サイバーサイエンスセンター本館 利用相談室 》

仙台市青葉区荒巻字青葉6-3 (もよりのバス停は「情報科学研究科西」)

Tel : 022-795-6153 学内内線 92-6153 (2-4時以外は、022-795-3406で受け付けます。)

e-mail* : sodan05@isc.tohoku.ac.jp

*e-mailによる相談は常時受け付けておりますが、曜日、時間帯、相談内容によっては、回答まで時間がかかる場合があります。あらかじめご了承ください。

平成21年度利用相談日程と担当分野 (本館)

時間・曜日	テクニカルアシスタント	主な担当分野
午後2時 4時	月 江川 隆輔 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> ・スーパーコンピュータ ・センター利用入門
	火 長田 有人 (理学研究科) 小野 敏 (情報基盤課共同利用支援係)	<ul style="list-style-type: none"> ・アプリケーション全般 (Gaussian 他) ・センター利用入門
	水 沢田 雅洋 (理学研究科) 大泉 健治 (情報基盤課共同研究支援係)	<ul style="list-style-type: none"> ・並列コンピュータ ・スーパーコンピュータ
	木 坂本 修一 (電気通信研究所)	<ul style="list-style-type: none"> ・アプリケーション (MATLAB, SAS) ・センター利用入門
	金 花岡勝太郎 (情報基盤課共同研究支援係)	<ul style="list-style-type: none"> ・大判プリンタ ・センター利用入門
*上記以外の時間帯に面談・電話での相談を希望の方は、共同利用支援係 (1階窓口) まで相談内容をお申し出ください。担当者に取り次ぎます。		

平成 21 年度利用相談日程と相談分野（他機関）

大学名	相談場所・日時	テクニカルアシスタント	相談分野
弘前大学	理工学部 1 号館 322 号室 水曜 10:30-12:30	佐藤 裕之	スーパーコンピュータ, 並列コンピュータ, 端末・ログイン, ショブ操作, Fortran, ベクトル化, ASL, 利用申請
弘前大学	理工学部 2 号館 0405 室 月曜 16:00-18:00	宮本 量	端末・ログイン, Fortran, C/C++, Gaussian
秋田大学	工学資源学部 1 号館 337 室 木曜 14:00-16:00	田中 元志	スーパーコンピュータ, 端末・ログイン, ファイル, ジョブ操作, Fortran, C/C++, MATLAB, 課金, 利用申請, メール, WWW
山形大学	学術情報基盤センター (小白川キャンパス) 金曜 10:00-12:00	板垣 幸由	端末・ログイン, ファイル, TOPIC/インターネット(組織間接続), メール, WWW, ウィルス対策ソフト, サーバ証明書
	工学部 7 号館 245 号室 水曜 10:00-12:00	高野 勝美	端末・ログイン, ファイル, Fortran, MATLAB
	学術情報基盤センター 米沢分室 月曜 10:00-12:00	鈴木 勝人	端末・ログイン, Fortran, TOPIC/インターネット(組織間接続), メール, ウィルス対策ソフト

(共同利用支援係)

平成21年度 研究開発公募課題(第二次募集分)の採択について (No.89)

標記の第二次募集分 (5月22日〆切) に応募されたものについて、ライブラリ・共同研究専門部会で審議の結果、次に示す課題が採択されましたのでお知らせいたします。

No.	開発課題	職名	開発者	所属	対象システム	備考
09-01	多目的並列有限要素 コード GeoFEM の移 植	准教授	三浦 哲	東北大学大学院 理学研究科	スパコン 並列コン	新規

(スーパーコンピューティング研究部, 共同研究支援係)

費目別の請求書発行について (No.89)

支払責任者が学外、学内にかかわらず、支払費目名の入った利用負担金請求書を希望する場合は、あらかじめ shiharai コマンドで支払順位、支払費目、支払予算額を指定してください。不明な点がある場合は、共同利用支援係(022-795-6251)へお問い合わせください。

(会計係, 共同利用支援係)

利用負担金額の表示コマンドについて (No.89)

本センター大規模科学計算システムでは、利用者の利用額と支払責任者ごとの利用額・負担額を表示するためのコマンドとして `kakin`, `skakin` があります。これらのコマンドは、並列コンピュータ (`gen. isc. tohoku. ac. jp`) にログインして使用します。

コマンド名	機 能
<code>kakin</code>	利用者ごとの利用額を各システム、月ごとに表示
<code>skakin</code>	支払責任者ごとに集計した利用額と負担額を表示 (負担額は割引制度に基づいた金額)

いずれも、前日までご利用いただいた金額を表示します。コマンド使用例は大規模科学計算システムウェブページをご覧ください。

利用金額の表示

http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/futankin.html#futan_2

利用負担金割引制度

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

(共同利用支援係)

文部科学省
研究開発施設共用等促進費補助金（先端研究施設共用促進事業）
先端的大規模計算利用サービス2009年第二期公募説明会のご案内（No.90）

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、文部科学省が2007年度から開始した「文部科学省 研究開発施設共用等促進費補助金（先端研究施設共用促進事業） 先端的大規模計算利用サービス」（旧「先端研究施設共用イノベーション創出事業」）を通して、産学連携共同研究におけるサイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータ学術利用支援を行っております。これまで5件の課題が本学との産学連携共同研究として、本事業に参画しております。なお本事業に採択されますと、サイバーサイエンスセンターが有するベクトル型スーパーコンピュータをトライアルユースで最大1年間、無料で活用することができます。

現在、またはこれまで大学・民間企業との産学連携共同研究を推進しており、今後当センターのスーパーコンピュータの利用を予定している方、当センターのスーパーコンピュータを用いた新たな産学連携共同研究を予定している方には、是非、この「先端的大規模計算サービス」を有効に活用して戴ければと存じます。

4月1日より行われる2009年度第二期の公募締め切りは9月4日となっております。これに伴いまして、2009年度第二期公募説明会を下記の日程にて開催いたします。ご興味ある方は、是非、東北大学サイバーサイエンスセンター・本事業窓口までご連絡ください。

2009年度 先端的大規模計算利用サービス 第二期公募説明会

日時：2009年7月15日（水）13:30～

場所：東北大学サイバーサイエンスセンター 5階 大会議室

参加申し込み：

氏名、所属、E-mail アドレス、電話番号を明記の上、電子メールにて
innovation@isc.tohoku.ac.jp

宛に参加申し込みを行ってください。（※申し込み締め切り7月14日（火））

2009年 第二期公募日程

7月1日（水）	受付開始
9月4日（金）	受付締め切り
9月下旬	採択通知
10月1日（木）	利用手続き開始

※文部科学省 研究開発施設共用等促進費補助金（先端研究施設共用促進事業） 先端的大規模計算利用サービスの詳細は、以下のWebサイトをご参照ください

URL: <http://kyoyo.itc.u-tokyo.ac.jp/>

問い合わせ先
東北大学サイバーサイエンスセンター
情報部情報基盤課 共同利用支援係
電話：022(795)3406、Fax：022(795)6099
E-mail：innovation@isc.tohoku.ac.jp
(スーパーコンピューティング研究部，共同利用支援係)

高速ファイル転送の試験サービス (No.90)

現在、ファイルサーバ上のプログラムやデータファイルを外部に転送する際はSSHによるファイル転送(SFTP, SCP)をご利用いただいております。この転送方式は、安全性を確保するために利用者番号、パスワードおよび転送ファイルの情報をすべて暗号化して転送します。そのため、盗聴による情報漏えいの危険性はなく安全ですが、転送速度はあまりよくないことが知られております¹。

今回、安全性を確保しながら転送速度を改善するために、FTP over SSL/TLS による方式を採用し、試験的にサービスすることにします。本方式では、利用者番号とパスワードについてはこれまでどおり暗号化により保護されますが、データ(ファイル)転送は暗号化せず平文で転送し、転送速度のスピードアップをはかることが可能です。データに関してそれほど厳密な安全性が必要でなく、かつ大容量のファイルを少しでも速く転送したいユーザにご利用いただければと考えております。なお、従来のSSHによるファイル転送(SFTP, SCP)も引き続きサービスします。

参考までに、学内LAN接続のPC(センター内設置、100Mbpsネットワーク)との転送速度は、5.7MB/sec から 10.81MB/sec と約 1.9 倍に向上しております。脚注1の記事にはGbE(Gigabit Ethernet)環境で実験したデータも載っておりますのでご参照ください。

試験サービス期間 : 平成22年3月31日(予定)まで

利用登録制 : FTP over SSL/TLSの利用は、登録制とします。利用希望の方は、利用者番号氏名及び所属を添え下記のメールアドレスへお送りください。サブジェクト

(件名)は、“FTP利用登録申請”と付けてください。

共同研究支援係 rs-sec@isc.tohoku.ac.jp

クライアントソフト : SSL/TLSに対応したFTPクライアントソフトが必要になります。

表1に、接続環境と対応ソフトを示します。

表1: 接続環境とクライアントソフトの対応表

接続元の環境 (OS)	クライアントソフト	特徴
UNIX/Linux	lftp コマンド	最近の多くのLinuxディストリビューションには標準で含まれています。基本的には従来のftpコマンドと同様に利用することができます。 lftp --help や man lftp で、使い方を表示することができます。
Windows XP/Vista	FileZilla Client (フリー) Staff-FTP (フリー) 等	シェアウェアを含めると数種のソフトがあるようですが、フリーで導入できるものは少ないようです。 FileZillaに関しては、センターのWebサイト ² にインストール、設定手順を載せましたのでご参照ください。

(共同研究支援係、スーパーコンピューティング研究部)

¹ 後藤他, “大規模科学計算システムにおける高速ファイル転送”, 広報誌 SENAC Vol.42, No.2(2009-4), <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/refer/senac.html>

² 共同研究支援係, “ファイル転送ソフト FileZilla Client 導入ガイド”, <http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/FTP/index.html>

白

— SENAC 執筆要項 —

SENACのサイズは、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

今号も、大規模科学計算システムを数値実験などに使われた利用者の方々から研究の成果をたくさんご寄稿いただきました。当センターは、このシステムの全国共同利用運用に加えて、全国共同利用機関としての研究開発にも注力してきました。とくに、他大学からの訪問者にネットワークを安全に使わせるためのキャンパスユビキタスネットワーク技術について、認証連携応用に基づく構成技術の研究開発に取り組み、その成果を他大学にも普及させていますが、概要の紹介を掲載しました。ほかにも、最先端のスーパーコンピューティングの研究について他機関との連携の協定を結んでおりますが、そのような力強い活動を本号から感じ取っていただければ幸いです。(H.S)

毎年、杉花粉が一段落した頃から花粉症の症状が表れ、梅雨入りのあたりまで続きます。今年もその症状が現れてきました。これが治まれば梅雨入りかな、と花粉症で季節を感じています。

本年4月に、情報基盤課の係の再編が行われ、庶務、会計、共同利用支援、共同研究支援、ネットワークの5係体制となりました。同時に、庶務係が3階に移動し、1階には共同利用支援係が入りました。これまで以上に、本センターが全国共同利用施設として利用者の皆様にとってよりよいサービスを提供し、利用しやすいセンターとなるため、裏方として今後もセンターに貢献したいと思います。

(I.Y)

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 7 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

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.3 2009-7

SENAC 2009-7

[共同研究成果]

- 直接数値シミュレーションを用いた温度場乱流境界層の研究 藤堂 公浩 1
岩本 薫
河村 洋
- 平行平板間乱流熱伝達におけるスカラー散逸場のDNS解析 小塚 信 11
河村 洋

[研究成果]

- 密度汎関数理論によるナノ・バイオ計算 押山 淳 25

[報告]

- ・東北大学と理化学研究所が協定締結
—計算科学・計算機科学など関連分野の研究領域において連携・協力— 33
- ・サイバーサイエンスセンターとシュトゥットガルト大学高性能計算センターが
高性能計算に関する研究協定を締結 34
- ・グリッド上で世界最大級の広域ベクトル型スーパーコンピュータ連携を実現
—大規模ベクトル計算クラウドも視野に— 35
- ・サイバーサイエンスセンターとドイツ気象庁が高性能計算に関する協定を締結 37
- ・SENAC-1が情報処理学会「情報処理技術遺産」に認定されました 38

[研究報告]

- キャンパスユビキタス環境, グリッド環境等の情報基盤技術の研究開発 39
後藤 英昭、大和 純一、若山 永哉、曾根 秀昭、江川 隆輔
小林 広明、水木 敬明、大泉 健治、伊藤 英一、森 倫子
千葉 実、澤田 勝己、安西 従道

[Web版大規模科学計算システムニュース]より 51

- ・利用負担金割引制度の実施について (No.87)
- ・非線形構造解析汎用プログラム MSC.Marc2007/Mentat2007の
サービス開始について (No.87)
- ・平成21年度の共同研究について (No.87)
- ・平成21年度 研究開発公募課題 (第一次募集分) の採択について (No.87)
- ・計算科学・計算機科学人材育成のためのスーパーコンピュータ無償提供の
試行について (No.88)
- ・平成21年度の利用相談について (No.88)
- ・平成21年度 研究開発公募課題 (第二次募集分) の採択について (No.89)
- ・費目別の請求書発行について (No.89)
- ・利用負担金額の表示コマンドについて (No.89)
- ・文部科学省 研究開発施設共用等促進費補助金(先端研究施設共用促進事業)
先端大規模計算利用サービス2009年第二期公募説明会開催のご案内(No.90)
- ・高速ファイル転送の試験サービス (No.90)

- 執筆要項 61
編集後記 62



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。