



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.4 2009-10



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

SENAC 2009-10



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。

[共同研究成果]

蔵王おろしに伴った非定常風の数値実験

沢田雅洋、岩崎俊樹
東北大学理学研究科

蔵王おろしの3次元的な風の観測を行い、観測で捉えられた非定常な風の形成過程を明らかにするため、水平格子 100m を用いて非静力学モデルによる数値実験を行った。その結果、蔵王風下側には波長約 20km の山岳波が形成し、それに伴って地表付近に強・弱風域の縞状のパターンが見られた。発達した山岳波の中で、非定常な風が再現され、それは山岳波に伴う風の鉛直シアや細かな地形に起因することが示唆された。

1. はじめに

蔵王おろしとは北西からの季節風が卓越する冬季において、蔵王山系から太平洋側へ吹き下ろす強風のことである。おろしは下層での風の鉛直シアや乱気流などを伴うので、おろしの詳細な構造や振舞を知ることは航空気象において有用である。仙台空港は蔵王風下側に位置するため、北西からの季節風の影響を強く受ける。そこで、2008年2月13-18日において仙台空港でドップラーライダー[1,2]を用いた風の観測を行い、おろしの3次元的な構造や風の時間変動を捉えることを試みた。ライダー観測結果から、下層で風向が主風向（西風）と逆向きの風向（東風）になる数百 m スケールの領域が捉えられ、それが下流へ移流するように見えた。このような風向（風速）の急激な変化は航空機の浮力を急激に変化させ、安全な運航に支障を来す。そこで観測された逆風域の詳細な構造やその形成要因を調べるため、水平格子 100m を用いて蔵王おろしの再現実験を行う。計算には約 40GByte の物理メモリを要し研究室のワークステーションでは計算できないため、サイバーサイエンスセンターの NEC SX-9 を 2node、32cpu を使用した。

おろし風の過去の観測研究の1つとして、ロッキー山脈の風下で起きたおろし風の事例があげられる[3]。航空機を用いたおろし風の直接観測によって、風下側の山腹でのおろし風、及びその上空で大きな振幅を持つ山岳波の鉛直構造が捉えられた。この事例の詳細なメカニズムを調べるため、2次元モデルを用いた数値的研究が行われた[4]。この数値実験によると、山岳で発生した重力波は上方に伝播し、圏界面付近で砕波が起こり、よどみ層が形成される。このよどみ層は臨界層（風速がゼロになる高度）として働く。上方に伝播した山岳波は臨界層で反射し、下層の山岳波と共鳴して風速の強化が起こると述べた。これらの研究結果に基づき、おろし風の理論的なモデルが構築された[5]。この理論モデルは鉛直に一様な風速と成層（大気安定度）に対して、乱気流域（よどみ域）の高度、強風の強さ、山岳による抵抗を予測した。この理論は2次元モデルの数値実験などによって合理的であることが確認されている[6]。理論的な解釈をするため山を越える流れを浅水流とみなすと、フルード数（流入側の流速と外部重力波の位相速度の比： $Fr = U/(gh)^{1/2}$ ）の値によって流れの形態が異なることが知られている[7]。しかし、実際の地形は3次元的な構造をしており、鞍部の形状に応じて山脈を越える風の振舞は砕波の位置や強風域の広がりが大きく異なる[8]。このような複雑地形における山越え気流の詳細な構造を知るため、ドップラーライダーでの観測を行い、その事例に対する数値実験が行われている[9]。アルプス山脈風下で航空機搭載ライダーを用いて上空から地上付近まで観測を行い、エアロゾルをトレーサとして捉えられた鉛直構造と3次元の数値モデルで再現した場がよく一致することを示した。このように山越え気流に伴う観測や数値実験は数多く行われているが、水平スケールの小さい、非定常な現象についての研究は少ない。そこで、本研究ではライダーで観測された下層大気の非定常な振舞をした風と、その環境場の特徴に注目する。

2. 数値実験の概要

2.1 数値モデル

ここで用いた数値モデルは気象庁・気象研究所で共同開発されたもので、現業の局地予報モデルとして使用されている[10]。基礎方程式系には完全圧縮形の運動・熱力学方程式を使用する。雲を表現するため、モデルは有限差分法を用いており、移流スキームは水平に4次精度のフラックス型、鉛直に2次精度中央差分に加え、波数分散性に伴う偽の極値の出現を抑えるためフラックス補正を併用する。効率的な並列計算を行うため、重力波は水平方向には陽的に、鉛直方向には陰的に扱う HE-VI 法を使用する。

乱流混合過程は改良型 Mellor-Yamada Level 3 スキーム (MYNN) [11,12]を用い、水平解像度 0.1km の時は乱流エネルギーのみを予報するもの[13]を用いた。雲微物理過程には混合比 (空気 1kg 中の水物質質量) のみを予報する 1-moment のバルク法を用いる。積雲対流パラメタリゼーションは水平解像度 5km の場合のみ使用し、それより高解像度の場合は使用しない。地表面からの運動量・熱・水蒸気フラックスはバルク法を用いる[14]。側面境界には重力波の反射などが起きないようにダンピング層を適用する。

2.2 実験設定

大気の初期値・境界値には気象庁のメソ客観解析 MANAL (水平解像度 10km) を使用した。海面水温は東北大学川村研究室で公開されている 0.05 度格子 (約 5km) のデータを使用した。これらのデータから、水平解像度 5km→1.5km→0.5km→0.1km と入れ子状に計算を行う (力学的ダウンスケーリングと呼ばれる)。計算領域は図 1 に示す通りである。鉛直には 60 層取り、高度 1km 以下では 40m 間隔とした。標高データは NASA で公開されている 3 秒角格子 (約 90m) データ (Shuttle Radar Topography Mission digital topographic data) から作成した。この他に山岳波に対する水平解像度の感度実験として、3km、2km、1km の格子間隔で、他の条件を ex0.5 と同様にしてそれぞれ実験 (ex3, ex2, ex1) を行った。

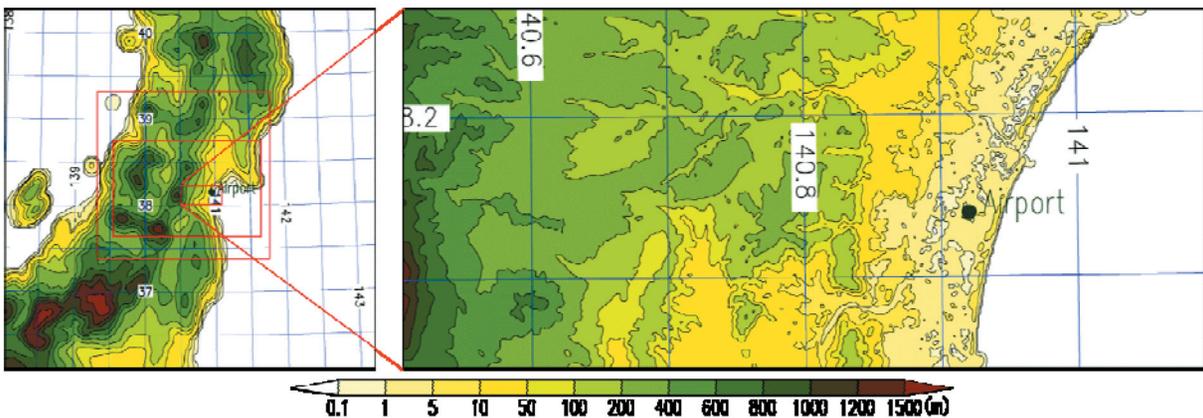


図 1 : 左図は一番外側から ex5, ex1.5, ex0.5, ex0.1 の計算領域の標高を示す。右図は ex0.1 の詳細図である。

表 1 : 各実験設定の概要。

実験名	ex5	ex1.5	ex0.5	ex0.1
格子サイズ	5km	1.5km	0.5km	0.1km
計算領域	450×450km	210×210km	180×120km	50×24km
乱流混合過程	MYNN	MYNN	MYNN	Deardorff
計算時間	24時間	21時間	9時間	4時間
初期値・境界値	MANAL	ex5	ex1.5	ex0.5

2.3 SX-9 上での処理について

本モデルは並列計算のため MPI が実装されている。よって SX-9 上で並列計算するには MPI ライブラリによる並列処理か、自動並列化 (-Pauto) による並列処理の 2 通りが可能である。処理の容易さでは自動並列が便利なので、これまでは自動並列を使用していた。しかし、使用する cpu 数が増加すると並列化効率が悪くなる傾向があった。そこで大規模な計算をより効率的に行うため、サイバーサイエンスセンターとの共同研究の一環として調査して頂いた。その結果、本モデルでは MPI を使用した場合、自動並列に比べて 2 倍近い処理速度が確認された。特に使用する cpu 数の増加とともに、その差が顕著になる傾向が報告された。そこで、ここでは MPI を用いた並列処理を用いた。細かなプログラムの修正も行われ、それによっても 1.5 倍程度の高速化がなされた。また、出力するファイル容量が多いため (数百 GB)、出力する際のバッファサイズを環境変数 “F_SETBUF” を適切に設定することで、出力処理の高速化も図った。

3. 数值実験結果

図 2 は ex0.5 においての地表面から高度 10m での風速分布を示す。風は 15-24JST で平均したものである。蔵王風下である宮城県域では弱風域 (青色の領域) と強風域が交互に見られる。弱風域の幅は 10km 前後である。モデルによる再現性を確かめるため、同じく時間平均した地上観測値 (図 2 の赤矢印) と比べると、風向・風速ともに大まかには一致し、28 地点での風向・風速の 2 乗平均平方根誤差 (RMSE) はそれぞれ 43 度、3.0m/s であった。時間平均せずに各時間 (15-24JST)、各地点 (28 地点) での風向・風速の RMSE を計算すると、それぞれ 69 度、3.4m/s で、風向のずれが 1.5 倍以上大きくなった。非定常な場を捉えるには風向の改善が望まれる。

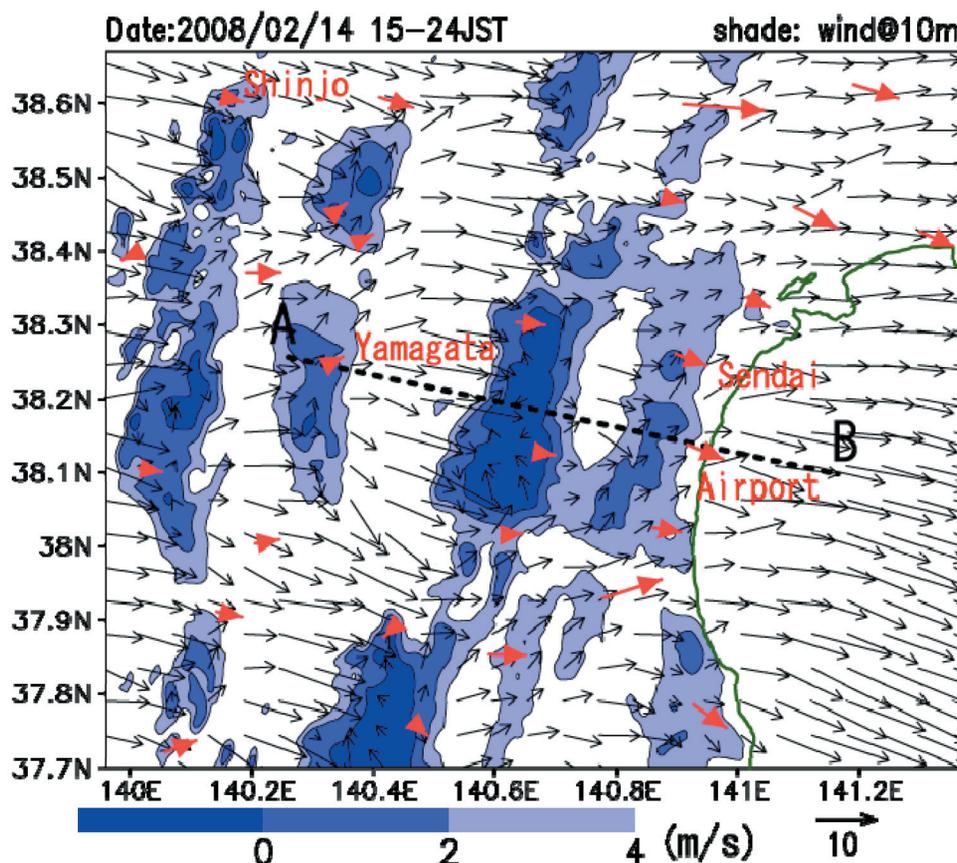


図 2 : ex0.5 の地表面から高度 10m の風の水平分布。風ベクトルは 15-24 時の平均値を示す。赤い矢印は地上観測値。青色は主風向風速の小さい領域を表す。

おろし風の鉛直構造を調べるため、図2上の線ABに沿った鉛直断面を示す(図3)。加えて、水平解像度の依存性を確認するため、水平解像度3km, 2km, 1kmの実験結果も示す。ex0.5を見ると、山岳波に伴って上昇流・下降流の交互のパターンが卓越し、波長は約20kmである。この山岳波に伴って、地上付近の強風・弱風域の交互のパターンが形成されることが分かる。水平解像度の影響を見ると、3km格子では山岳波をあまり捉えられず、2km格子である程度再現され、1km/0.5km格子ではほぼ同じ構造になる。これより、1km格子で山岳波の特徴を十分に捉えていると考える。

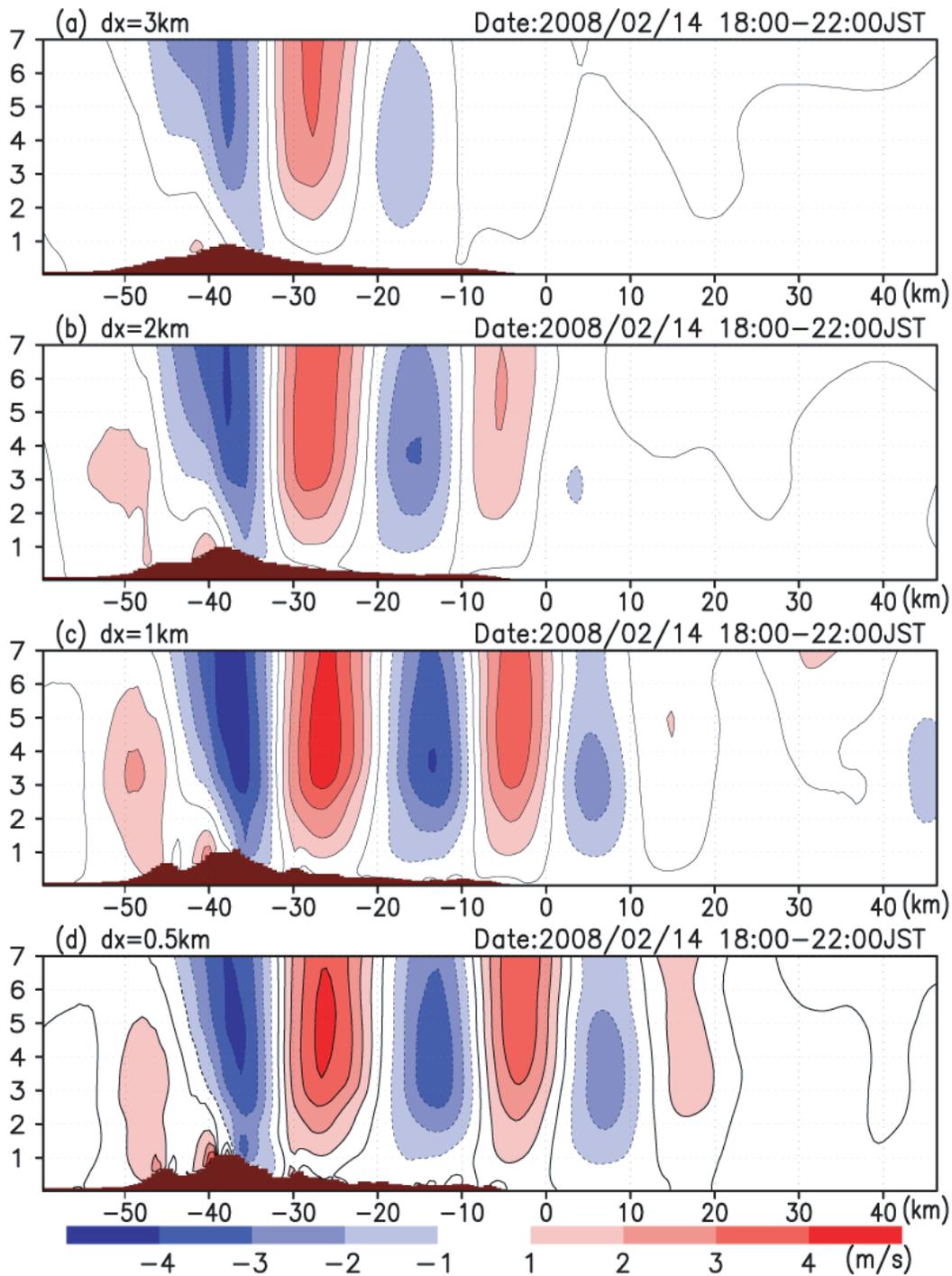


図3：図2における線ABでの鉛直断面図。上から水平解像度が3km, 2km, 1km, 0.5kmの実験結果を示す。横軸は仙台空港からの距離(km)を示す。カラーは上昇流(赤色)、下降流(青色)、下層の茶色の部分は地形を表す。

乱れの強い領域（乱流エネルギーの大きい領域）を調べるため、ex0.5 における乱流エネルギーの分布を示す（図 4）。乱流エネルギーは山頂風下側の下層付近で大きい。乱れの大きい領域が下流側に伸びている様子も見られる。鉛直断面図から、この事例では大きな乱流エネルギーを持つのは下層 2 km 以下に限られた。特徴的な構造として、高度 0.4–1.0 km で山岳波に伴う上昇流域（経度 140.65E–140.7E、140.85E–140.9E）において乱流エネルギーの大きい領域が形成される。これは主に風のシアによって乱流エネルギーが生成されるためである。仙台空港で周囲よりやや大きな乱れを持つのは主にシア生成項による。また、海上では全体的に乱流エネルギーが大きく、浮力によって乱流エネルギーが生成されるためである。

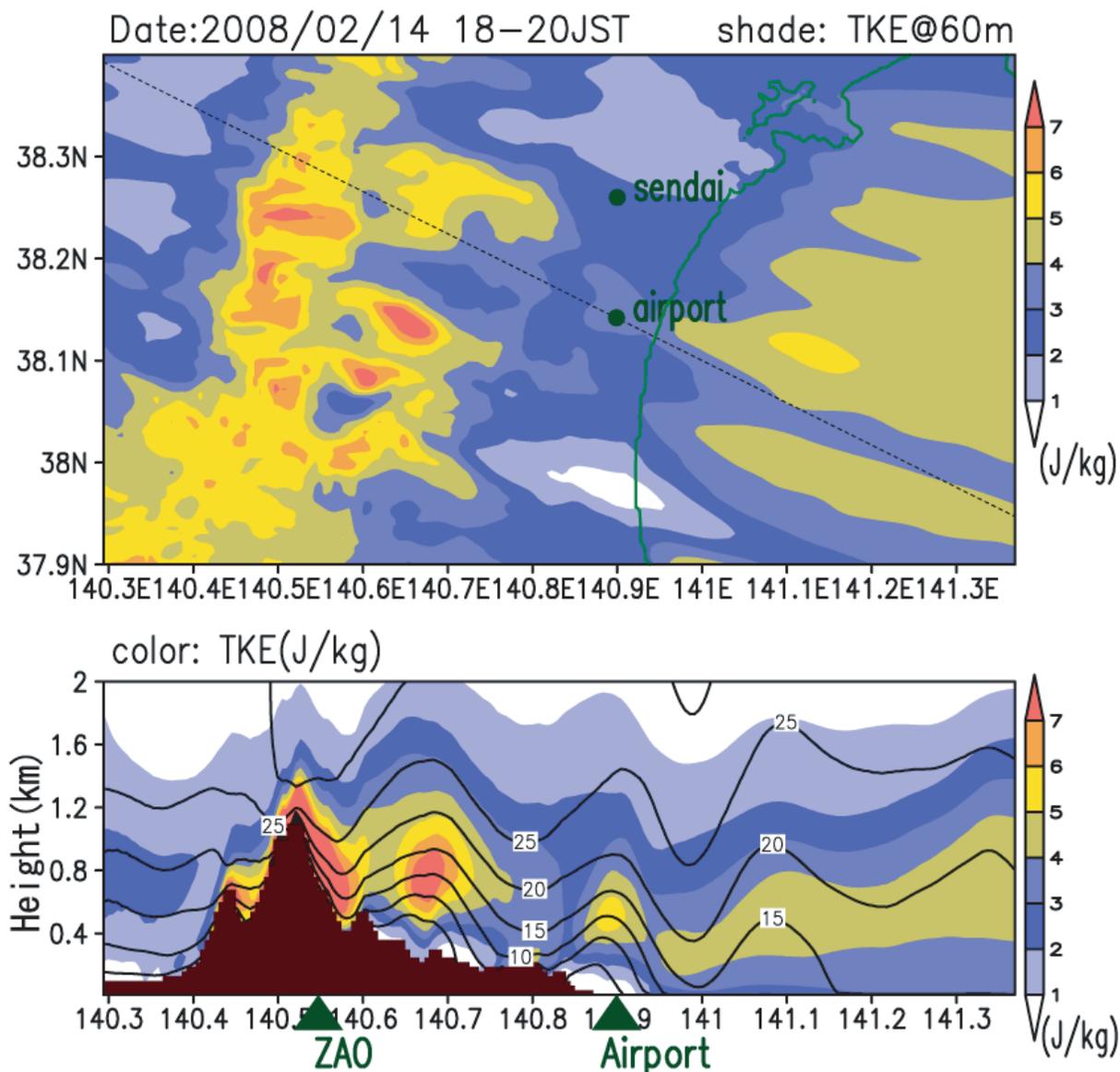


図 4 : ex0.5 の乱流エネルギーの水平/鉛直分布。上図のカラーは地面から高度約 1km 以下で平均した乱流エネルギー、下図のカラーは乱流エネルギー、コンターは断面に沿った風速を表す。これらの物理量は 18–20JST の 2 時間で時間平均している。描画領域は 100km × 50km。

非定常な風の詳細な構造を示すため、図 5 に ex0.1 での風の水平分布を示す。風速分布は山岳波に対応して、大まかには仙台空港の上流側で弱く、下流側で強い。詳細な風速分布をみると、

幅 0.5-1km の筋状の構造が見られ (ストリークと見られる)、時間とともに変動する。筋状構造の変動に注目すると、仙台空港の上流側の弱風域は徐々に下流側に移動していく様子が分かる。下流側では強風域が徐々に発達し、下流側に移動する様子も見られる。これらの構造は ex0.5 で見られた筋状の構造と水平スケールが異なる。また、変動する時間スケールも異なり、ex0.1 では数分で構造が変化するが、ex0.5 では数十分維持されることが多い。

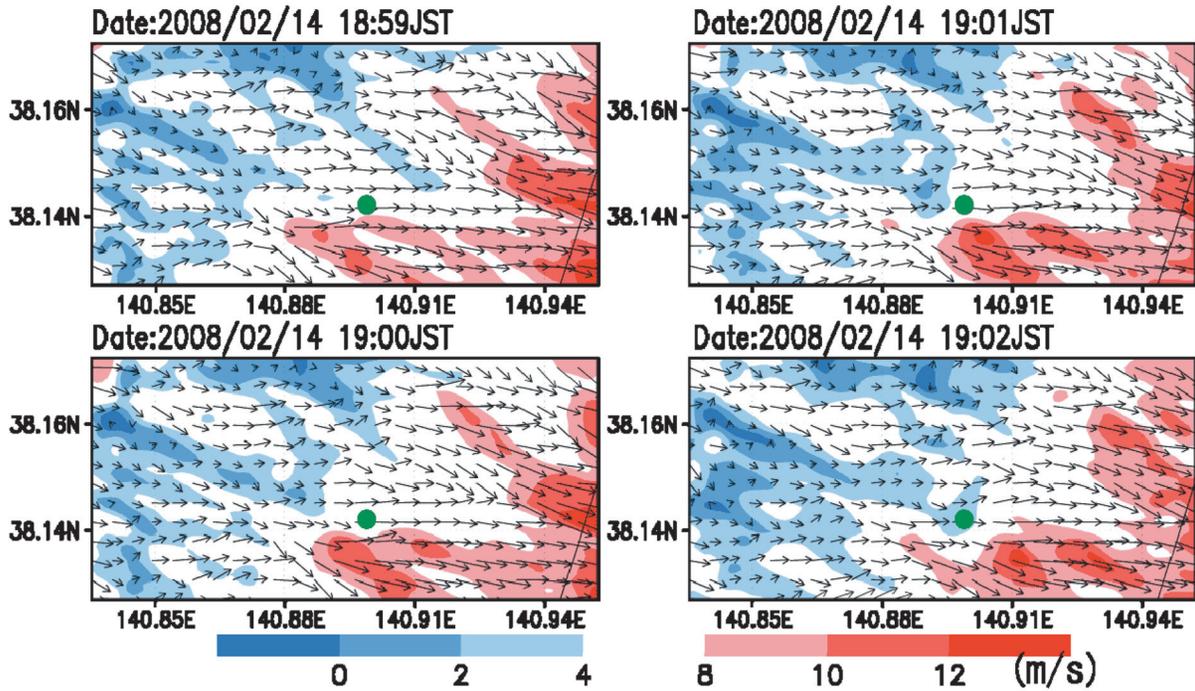


図 5 : ex0.1 における高度 60m での風の水平分布。カラーは主風向の風速を表し、青色が弱風域、赤色が強風域を示す。描画領域は 10km × 5km。緑点は仙台空港の位置。

図 5 で見られた非定常な風は水平渦や鉛直渦の形成・移流に対応すると考えられる。そこで、どちらの渦成分が主要因か調べるため、水平渦度と鉛直渦度の大きさの水平分布を図 6 に示す。ここで、水平渦度 $\omega_h = (\omega_x^2 + \omega_y^2)^{1/2}$ 、鉛直渦度 $\omega_z = |\omega_z|$ それぞれ定義する。 ω_x 、 ω_y 、 ω_z は渦度の 3 成分 (x, y, z 方向) を表す。渦度の大きさのみに注目するので、渦の回転方向 (値の正負) は無視する。図 6 より、全体的に水平渦度が鉛直渦度よりも大きく、風の変動の要因であることが分かる。水平渦度の分布から、渦擾乱の卓越した領域が筋状に見え、その幅は 1km 程度である。この筋状の水平渦も数分スケールで変動する。

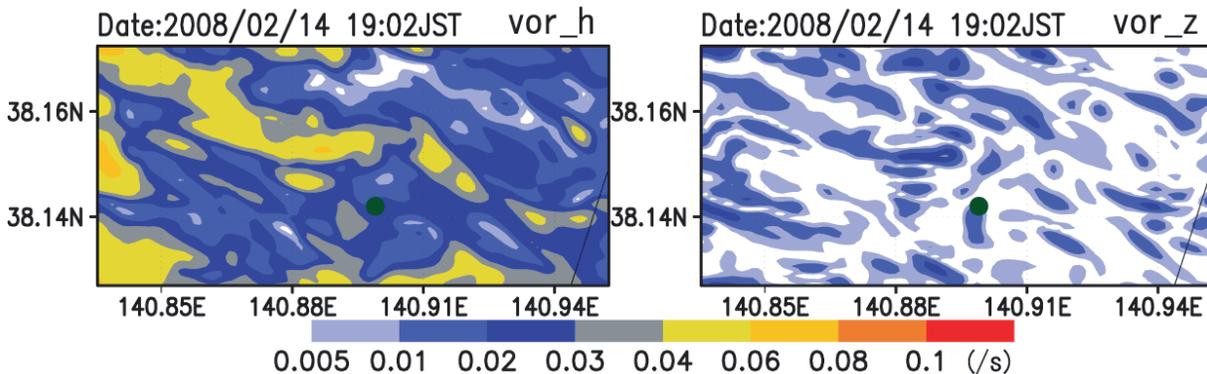


図 6 : ex0.1 における高度 60m での水平渦度 (左図) と鉛直渦度 (右図) の水平分布。描画領域は 10km × 5km。緑点は仙台空港の位置。

下層では水平渦度は主に水平風の鉛直シアに伴って形成され、山岳波や地形に起因して鉛直シアが形成されると考えられる。そこで、これらの渦度の分布に細かな地形がどの程度影響するのか調べるため、ex0.1の実験において標高データのみをex1.5と同様にした実験ex0.1_org1.5を行い、渦度分布を比較する。図7はex0.1とex01_org1.5の地形と渦度分布を示す。ここでは渦度の大きさ $\omega_h = (\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2)^{1/2}$ を用い、その時間変動の大きさは標準偏差を用いて表した。値が大きい部分は渦の変動が激しい部分(乱れの大きい部分)にあたる。急峻な地形を持つex0.1は滑らかな地形であるex0.1_org1.5に比べて、大きな変動域がある。どちらの実験でも変動の大きい領域が下流側に伸びる構造が捉えられた。但し、その位置は異なる。仙台空港の北側では、ex0.1_org1.5では変動の大きい領域が下流側に伸びるが、ex0.1では顕著ではない。詳細な地形を使うことは乱れの分布を精密に捉えるのに重要であることが分かる。

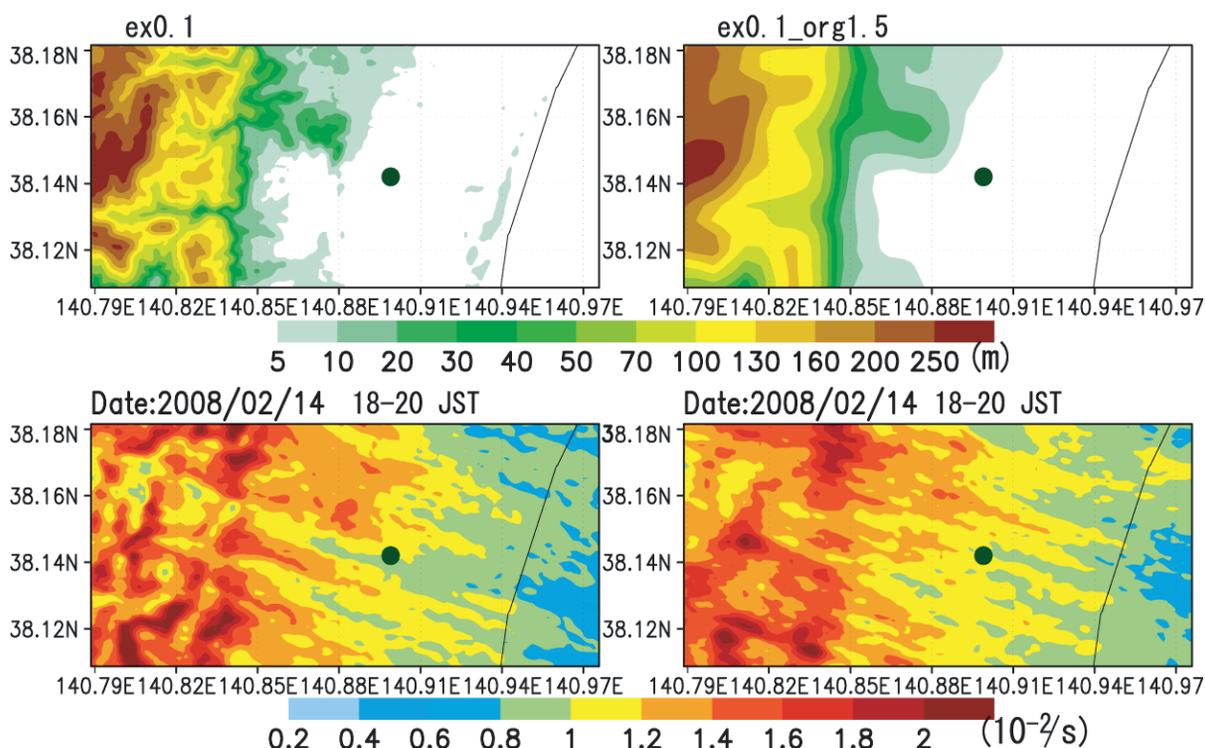


図7：標高分布（上図）と高度60mの渦度の変動の大きさの水平分布（下図）。左図はex0.1、右図はex0.1_org1.5(標高のみ1.5kmに合わせた実験)を示す。ここでは渦度の変動の大きさは18-20JSTでの時間平均値からの標準偏差で表す。

4. まとめ

ドップラーライダーで捉えられた非定常で、水平スケール数百mの逆風域やその環境場の特徴を調べるため、蔵王おろしの数值実験を行った。その結果、蔵王風下で卓越した山岳波に伴って地表付近でも強風域と弱風域のパターンが見られた。また、乱流エネルギーの大きい領域(乱れの強い領域)も山岳波と対応しており、これはシア生成項に起因する。非定常な風は山岳波に伴うシアが形成する水平渦が1つの要因で、細かな地形も変動の卓越する位置に影響する。特に、ストリーク状に伸びる変動の大きい領域は地形に起因する。このような乱れの強い領域を予め知ることはポテンシャル予報を行うのに非常に有用であり、非定常な現象の再現性を改善することが重要である。その1つとして、データ同化を用いてドップラーライダーの実況データと気象モデルを組み合わせ、初期値の改善を行い、空港での気象実況監視予測システムの構築を目指したい。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究「気候モデルの高速化に関する研究」として行われました。スーパーコンピュータ SX-9 上での数値モデルの高速化において、同センター関係者各位に有益なご指導を頂きました。特にプログラムのチューニングにあたって、同センター伊藤様、大泉様、NEC 金野様に多大なご協力を頂きました。この場を借りて感謝致します。使用した数値モデル JMA-NHM は気象庁・気象研究所より貸与して頂きました。本研究は科学研究費補助金基盤研究 (A) (課題番号 19204046、代表者 岩崎俊樹) の助成により実施されました。

参考文献

- [1] Ishii, S., K. Sasaki, K. Mizutani, T. Aoki, T. Itabe, D. Matsushima, W. Sha, A. Noda, M. Sawada, M. Ujiie, Y. Matsuura, and T. Iwasaki, 2007: Temporal evolution and spatial structure of the local easterly wind “Kiyokawa-Dashi” in Japan Part I: Coherent Doppler lidar observations. *J. Meteor. Soc. Japan.*, **85**, 797-813
- [2] Iwai, H., S. Ishii, N. Tsunematsu, K. Mizutani, Y. Murayama, T. Itabe, I. Yamada, N. Matayoshi, D. Matsushima, W. Sha, T. Yamazaki and T. Iwasaki, 2008: Dual-doppler lidar observation of horizontal rolls and near-surface streaks. *Geophys. Res. Lett.*, **33**, 1-5
- [3] Lilly, D. K., 1978: A severe downslope windstorm and aircraft turbulence event induced by a mountain wave. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 59-77.
- [4] Peltier, W. R. and T. L. Clark, 1979: The evolution of finite-amplitude mountain waves. Part II. Surface wave drag and severe downslope windstorms, *J. Atmos. Sci.*, **36**, 1498-1529.
- [5] Smith, R. B., 1985: On severe downslope winds. *J. Atmos. Sci.*, **42**, 2597-2603.
- [6] Durran, D. R. and J. B. Klemp, 1987: Another look at downslope winds. Part II: Nonlinear amplification beneath wave-overtaking layers. *J. Atmos. Sci.*, **44**, 3402-3412.
- [7] Saito, K., 1992: Shallow water flow having a lee hydraulic jump over a mountain range in a valley of variable width. *J. Meteor. Soc. Japan*, **70**, 775-782.
- [8] Saito, K., 1994: A numerical study of the local downslope wind “Yamaji-kaze” in Japan Part3: Numerical simulation of the 27 September 1991 windstorm with a non-hydrostatic multi-nested mode1. *J. Meteor. Soc. Japan*, **72**, 301-329.
- [9] Gohm, A., G. J. Mayr, A. Fix, and A. Giez, 2008: On the onset of bora and the formation of rotors and jumps near a mountain gap. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **134**, 21-46.
- [10] Saito, K., J. Ishida, K. Aranami, T. Hara, T. Segawa, M. Narita, and Y. Honda, 2007: Nonhydrostatic Atmospheric models and operational development at JMA. *J. Meteor. Soc. Japan*, **85B**, 271-304.
- [11] Nakanishi, M. and H. Niino, 2004: An improved Mellor-Yamada level 3 model with condensation physics: Its design and verification. *Bound.-Layer Meteor.*, **112**, 1-31
- [12] Nakanishi, M. and H. Niino, 2006: An improved Mellor-Yamada level-3 model: Its numerical stability and application to a regional prediction of advection fog. *Bound.-Layer Meteor.*, **119**, 397-407
- [13] Deardorff, J. W., 1980: Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Bound.-Layer Meteor.*, **18**, 495-527.
- [14] Beljaars, A. C. M. and A. A. M. Holtslag, 1991: Flux parameterization over land surfaces for atmospheric models. *J. Appl. Meteor.*, **30**, 327-341.

[共同研究成果]

メゾ周期構造体における電磁波散乱の高精度数値計算

岩長 祐伸

物質・材料研究機構 305-0044 つくば市並木 1-1

メゾスコピック（メゾ）スケール周期構造体、とくに2次元周期構造体における電磁波散乱問題の高精度な数値計算について述べる。この種の問題を周波数領域で扱うときにはフーリエ係数で表したマクスウェル方程式を解くことが常套的手法であり、実行時にフーリエ係数を有限次で切断して数値計算することになる。単純な切断では得られない解の高速な収束を得るためのアルゴリズムを紹介し、開発したコードによる計算実例と SX-9 上での高速化の現状について述べる。

1. はじめに

これまで数年間にわたって人工的な周期構造における光学応答の高精度な数値計算について東北大学サイバーサイエンスセンターと共同研究を展開してきた [1-3]。その内容は1次元周期系に始まり [1]、メタマテリアルのような新分野への応用 [2]、遺伝アルゴリズムとの組合せによる未踏な機能性構造の探索・発見 [3,4] と多岐にわたってきた。フォトニック結晶やメタマテリアルといった金属材料をふくむ人工構造体の物理光学や新しい光機能性材料の開発にはさらに自由度の大きい2次元系構造に研究を広げることは自然な展開である。その過程で開発したコードについて本稿では述べることにする。

具体的なアルゴリズムなどを解説するまえにメゾ構造体を数値計算することの意味について、すこし一般的な観点から触れておきたい。このスケールでの電磁波散乱問題に詳しい方はここから次節に進んでくださればよい。

よく言われるようにメゾスケールとは5 ナノメートル（ $1\text{ナノ}=10^{-9}$ ）程度から数十マイクロメートル（ $1\text{マイクロ}=10^{-6}$ ）程度の大きさを指す。マクロより小さく、ナノより大きいという意味でメゾ（中間）である。このスケールの電磁波はマクスウェル方程式によって精度よく記述できることは周知である。それより小さいナノスケールでは量子力学的な効果が現れるためにマクスウェル方程式を基礎とするソフトウェアを使って機械的に計算しても結果は実際とは合わなくなってくる。これもまた良く知られた事実である。つまり、メゾ構造体はマクスウェル方程式の適用範囲の下限にあたる。本稿での対象はメゾスケールの単位構造をもつ周期的構造体とする。以下では単にメゾ周期体と呼ぶ。

学部生向けの教科書の電磁気学によく慣れ親しんだ方にはマクスウェル方程式は常に紙と鉛筆で解けるといって「確信」があるかもしれない。特殊関数を使えばどんな場合にも解析解が得られると思われるかもしれないが、実際には四角柱ですら解の基底となる特殊関数はなく、何らかの基底による無限次までの展開が必要になる。したがって、対象の形状に制限を加えないという一般的な条件下で、電磁波散乱問題を解くには数値的な解法が必要不可欠である。マクスウェル方程式を数値的に高精度に解くことこそが最も信頼できる、本質的な解法なのである。

近年、マクスウェル方程式を時間領域または空間領域、周波数領域で解く多数の数値計算ソフトウェアが販売されるようになって、数値的な解法へのアクセスが容易になり、原理的な理由からというよりは便法として数値的な方法は日常的に使われるようになってきている。一方で、ワ

ークステーションに代表される PC プラスアルファの計算機による計算では精度、速度の面でいまだに十分ではない。この点については第 3 節で具体的な計算例について触れながら再度述べることにする。

第 2 節ではフーリエ係数のマクスウェル方程式を高速に解くためのアルゴリズムについて解説し、第 3 節では計算の実例と SX-9 での動作の現状について触れる。

2. フーリエ展開の有限次切断と高速収束アルゴリズム

フーリエ変換自体はよく知られた数学的な手法である。この節ではメゾ周期体にマクスウェル方程式を応用する場合を具体例として、その高速収束アルゴリズムに関して説明する。しかしながらこのアルゴリズムは特殊なものではなく、多くの数理モデルにも適用可能なアルゴリズムであり、多方面に応用可能である。そのようなアルゴリズムに興味を抱く本誌の読者もあると考え、この節でやや詳しく説明することにする。

2.1 アルゴリズムの基本形

まず座標 r の複素数値関数 f, g, h がつぎのような積の関係にあるとしよう。

$$h(r) = f(r)g(r) \tag{1}$$

関数 $f \sim h$ が周期を a とする関数であるとき、

$$h(r) = \sum_n h_n \exp(2\pi i n r / a) \tag{2}$$

のように展開でき、 $h(r+a) = h(r)$ をみたく。それぞれの関数のフーリエ係数についてつぎの式が成り立つ。

$$h_n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f_{n-m} g_m \tag{3}$$

このとき和は添字 m を無限に走らせているかぎり、式 (3) は数学的に正しいが、数値計算をする上では必ず有限次で切断することになる。つまり、

$$h_n^{(M)} = \sum_{m=-M}^M f_{n-m} g_m \tag{4}$$

で表されるような量 $h_n^{(M)}$ を扱うことになる。その際に数値計算上の効率を上げるために、いかに小さな M で厳密な値を近似できるかが問題になる。このような問題は数値計算の分野ではよく知られたものであり、比較的扱いやすい場合（たとえば関数 f, g がともに連続である場合）には高速フーリエ変換法がすでに開発されていることは周知であろう。

目下の問題は電磁気学で式 (4) のような表式が現れるときには、物理学的な要請、つまり境界条件があるために、関数 f が不連続関数で積 fg が連続になるような条件が付加される。このときには式 (4) は著しく収束が遅くなることが知られている。つまり、巨大な M を用いないと

$$h_n^{(M)} \approx h_n \tag{5}$$

という良い近似を担保できない。實際上、既存のスーパーコンピュータのリソースでは式 (5) を満たす大きな M に到達することは困難であり、実用上は式 (4) の表式は使えないことになる。そこで高速アルゴリズムの発見 [5] がブレイクスルーとなったのである。最初に 1 次元周期系にたいしてアルゴリズムが発見され、つづいて今回用いた 2 次元周期系のアルゴリズム [6] が報告された。1 次元系が理解できれば、2 次元系は自然な拡張であるから、この小節では 1 次元系につい

て説明を進める。

式 (4) のような単純な有限次の切断にかわって見出されたのは、次式の積であった [5]。

$$\hat{h}_n^{(M)} = \sum_{m=-M}^M \llbracket 1/f \rrbracket_{n,m}^{-1} g_m \quad (6)$$

記号について説明すると、式 (4) の成分 f_{n-m} を行列の (n,m) 成分とみなして、 $\llbracket f \rrbracket_{n,m}$ と書くこと

にすると、行列 $\llbracket f \rrbracket$ が定義できる。つねに $f \neq 0$ がみたされるときには、同じ記法を用いて $1/f$ の行列を構成し、その逆行列を用いて新たなフーリエ積の式 (6) を作ると、高速な収束を得られる。この新方式を逆積ルールと呼ぶことにする。数学的には、式 (4) が各点収束であるのにたいして、式 (6) は概一様収束ということになり、実用上の高速化が実現できる。一見トリッキーな式変形であるが、このアルゴリズムによって、周波数領域における光学スペクトルの計算が可能になり、市販の RCWA (Rigorously Coupled Wave Approximation) 法のソフトウェアの根幹技術を与えた点で大きな波及効果を生んだ発見だったといえる。

2.2 逆積ルールを適用した2次元周期系のマクスウェル方程式

この小節では2次元周期系に逆積ルールを適用してえられるマクスウェル方程式を示すことにする。図1のように直交 xyz 座標系を設定して、 xy 平面内で周期性をもち、 z 軸方向に有限厚さをもつメゾ周期体を考える。なお、文献 [6] では直交座標系でない、より一般的な場合を扱っており、共形、反共形座標を使ったマクスウェル方程式を導いているが、本稿では基本的な考え方を説明することに重点をおいて、直交座標系の場合について述べる。

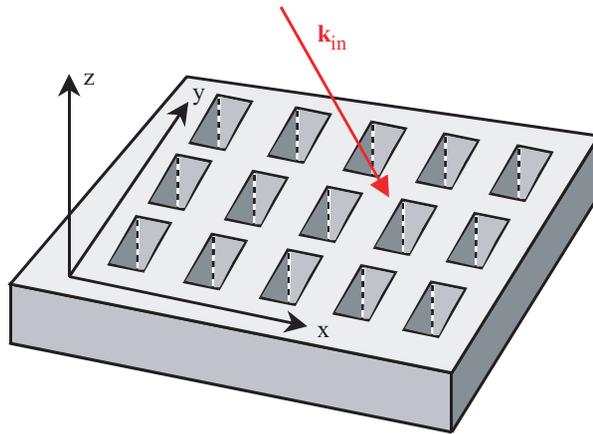


図1 周期構造体と xyz 座標。周期構造は xy 面内に無限に広がり、 z 軸方向有限の厚さをもつとする。入射平面波は波数ベクトル \mathbf{k}_{in} で決まる方向に進みながら xy 面に照射する配置を考え、このときの光学応答 (反射、透過、回折) が電磁波散乱として観測される。

電場 \mathbf{E} 、磁場 \mathbf{H} を使ったマクスウェル方程式はつぎの表式である。

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (7)$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (8)$$

ただし、真電流の寄与はない場合を考えている。これらに加えてつぎの構成的な関係式を加える。

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (9)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mu_0 \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (10)$$

真空中の誘電率を ε_0 、透磁率を μ_0 とし、物質による比誘電率を ε 、比透磁率を μ とする。いま光の周波数 ($\sim 10^{14}$ Hz) を考察の対象とするから、比透磁率は 1 としてよい [7]。メゾ周期体の周期性は比誘電率によって表現される。つまり、比誘電率に空間依存性 $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$ があり、

$$\varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{d}_i) = \varepsilon(\mathbf{r}) \quad (11)$$

をみたす。ここで \mathbf{d}_i は x 軸方向または y 軸方向の単位周期ベクトルを表す ($i=1$ または 2)。

さらに、線形応答の範囲では全ての電磁波は重ね合わせで表現できるから、電磁波の時間依存性は単一周波数による振動成分を考えればよい。つまり、

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t), \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t) \quad (12)$$

とする。

時間依存性を式 (12) のように仮定し、周期層におけるマクスウェル方程式 (7)、(8) を成分で明示的に書き下すと、つぎの式 (13)–(18) のようになる。

$$\partial_y E_z - \partial_z E_y = i\omega \mu_0 H_x \quad (13)$$

$$\partial_z E_x - \partial_x E_z = i\omega \mu_0 H_y \quad (14)$$

$$\partial_x E_y - \partial_y E_x = i\omega \mu_0 H_z \quad (15)$$

$$\partial_y H_z - \partial_z H_y = -i\omega \varepsilon_0 \varepsilon(x, y) E_x \quad (16)$$

$$\partial_z H_x - \partial_x H_z = -i\omega \varepsilon_0 \varepsilon(x, y) E_y \quad (17)$$

$$\partial_x H_y - \partial_y H_x = -i\omega \varepsilon_0 \varepsilon(x, y) E_z \quad (18)$$

これらの方程式から周期層の電磁波固有状態を求める。周期層内での電磁波は xy 成分に関して周期性があるから、

$$E_x(x, y, z) = \sum_{m,n} E_{xmn}(z) \exp(i\alpha_m x + i\beta_n y) \quad (19)$$

$$\alpha_m = \alpha_0 + 2\pi m / d_1 \quad (20)$$

$$\beta_n = \beta_0 + 2\pi n / d_2 \quad (21)$$

の形に展開できる。ここで α_0, β_0 はそれぞれ入射平面波の波数ベクトル \mathbf{k}_{in} の x, y 軸への射影成分、 d_1, d_2 はそれぞれ x, y 軸方向の周期長である。ほかの成分 E_y, H_x などもすべて同様に展開できる。また、比誘電率もその周期性から

$$\varepsilon(x, y) = \sum_{m,n} \varepsilon_{mn} \exp[2\pi i(m/d_1 + n/d_2)] \quad (22)$$

と展開できる。

つぎに周期層の固有方程式をえるために E_z 成分を消去する。式 (18) を

$$E_z = -\frac{1}{i\epsilon_0\epsilon(x,y)}(\partial_x H_y - \partial_y H_x) \quad (23)$$

のように変形する。なお、比誘電率 ϵ はつねに0でない。式 (14) から E_z 成分を消去して整理すると、つぎの式 (24) をえる。

$$\partial_z E_x = i\omega\mu_0 H_y - \frac{1}{i\omega\epsilon_0} \partial_x \left[\frac{1}{\epsilon(x,y)} (\partial_x H_y - \partial_y H_x) \right] \quad (24)$$

各成分 E_x, H_y などに式 (19) のような展開式を代入して元のマクスウェル方程式をフーリエ係数方程式に書き換えるのであるが、この際に第 2.1 節で述べた逆積ルールを使う必要が出てくる。

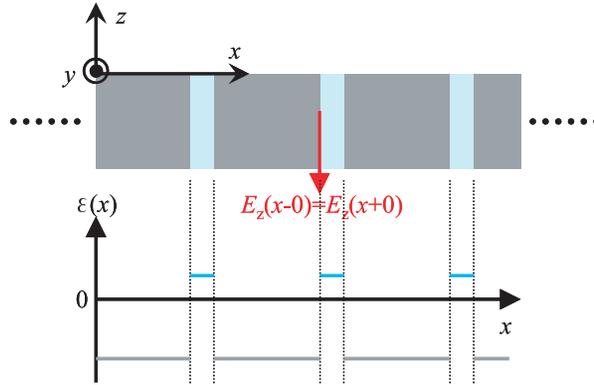


図2 (上) メゾ周期体の xz 断面図。灰色部が金属、水色部が誘電体を模している。(下) 典型的な比誘電率の空間分布。

ここで周期層でのマクスウェル境界条件を考えると、図2上に模式的に示しているように E_z 成分については境界条件によって周期層の任意の点で連続である。一方、比誘電率は周期層内で周期的な空間分布があり、図2下に例示しているように境界で不連続な分布をしている。典型的な例として、金属(灰色部)と誘電体(水色部)からなる周期層を考えると、金属部では比誘電率(の実部)は負で誘電体の比誘電率は正の値をとる。つまり、 $\epsilon(x,y)$ は周期的な不連続関数である。

以上のことに注意すると、式 (23) はちょうど式 (1) と類似の形をしており、左辺は連続関数、しかし右辺の $1/\epsilon$ は不連続な周期関数となっている。したがって、式 (24) の右辺第2項の中括弧[]内の積には逆積ルールを適用してフーリエ係数を抽出しなければならない。

以上からつぎのフーリエ係数の方程式が得られる。

$$\frac{\omega\epsilon_0}{i} \partial_z E_{xmn} = k_0^2 H_{ymn} - \alpha_m \sum_{j,l} [\epsilon]_{mn,jl}^{-1} (\alpha_j H_{yjl} - \beta_l H_{xjl}) \quad (25)$$

ここで k_0 は真空中の光の波数を表し、 $k_0 = \omega/c_0$ である(c_0 は真空中の光の速度)。また、添字

が2次元的になったので、行列 $[\epsilon]$ の定義をすこし拡張して、

$$[\epsilon]_{mn,jl} = \epsilon_{m-j,n-l} \quad (26)$$

と定める。式 (26) の右辺は式 (22) で定義される係数である。同様の考え方にしたがって、適宜逆積ルールを適用していくと、ほかの成分に関する方程式が導かれる。

$$\frac{\omega \varepsilon_0}{i} \partial_z E_{ymn} = -k_0^2 H_{xmn} - \beta_n \sum_{j,l} [\varepsilon]_{mn,jl}^{-1} (\alpha_j H_{yjl} - \beta_l H_{xjl}) \quad (27)$$

$$\frac{\omega \mu_0}{i} \partial_z H_{xmn} = \alpha_m (\alpha_m E_{ymn} - \beta_n E_{xmn}) - k_0^2 \sum_{j,l} [\varepsilon]_{mn,jl} E_{ymn} \quad (28)$$

$$\frac{\omega \mu_0}{i} \partial_z H_{ymn} = \beta_n (\alpha_m E_{ymn} - \beta_n E_{xmn}) + k_0^2 \sum_{j,l} [\varepsilon]_{mn,jl} E_{xjl} \quad (29)$$

式 (28)、(29) のなかに新たな記号が出てきたが、以下のように定義される。まず、

$$\varepsilon(x, y) = \sum_{a,b} [\varepsilon]_{ab}(y) \exp[2\pi i(a-b)x/d_1] \quad (30)$$

$$\varepsilon(x, y) = \sum_{a,b} [\varepsilon]_{ab}(x) \exp[2\pi i(a-b)y/d_2] \quad (31)$$

によって係数行列 $[\varepsilon]_{ab}$, $[\varepsilon]_{ab}$ を定義し、さらに

$$[\varepsilon]_{mn,jl} = \left[\left([1/\varepsilon]^{-1} \right)_{nl} \right]_{mj} \quad (32)$$

$$[\varepsilon]_{mn,jl} = \left[\left([1/\varepsilon]^{-1} \right)_{mj} \right]_{nl} \quad (33)$$

によって式 (28)、(29) にある行列を構成する。括弧内が逆行列になっているのは逆積ルールを適用した結果である。フーリエ係数の単純な有限次切断ではこのような逆行列をとる操作が一切入ってこないが、その代わりに数値的な収束は実際上望めないことになる。

式 (25)、(27)–(29) が逆積ルールを適用した 2 次元周期系におけるフーリエ係数表示のマクスウェル方程式である。ここまでメゾ周期体の周期性は比誘電率の空間分布によって表現してきたが、その値についてはまったく制限をかけずにマクスウェル方程式を書き換えてきた。したがって、この方程式は任意の材料からなるメゾ周期体における電磁波状態を記述できるものであることを改めて記しておく。

2.3 固有値方程式と散乱行列

前節でえられた周期層の電磁波状態の固有値方程式 [式 (25)、(27)–(29)] はつぎのように行列形式にまとめて書くことができる。

$$\partial_z \begin{pmatrix} \langle E_1 \rangle \\ \langle E_2 \rangle \\ \langle H_1 \rangle \\ \langle H_2 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & F \\ G & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle E_1 \rangle \\ \langle E_2 \rangle \\ \langle H_1 \rangle \\ \langle H_2 \rangle \end{pmatrix} \quad (34)$$

ベクトル $\langle E_1 \rangle$ などはフーリエ成分 E_{1mn} を適切に並べ替えて構成する。いまベクトル $\langle E_1 \rangle$ が N 成分だとすると、式 (34) 右辺の行列サイズは $4N \times 4N$ になる。行列 F 、 G のサイズはともに $2N \times 2N$ である。ベクトル成分の z 依存性が $\exp(iyz)$ に比例するとおくことができ、式 (34) の左辺で

$$\partial_z \rightarrow i\gamma$$

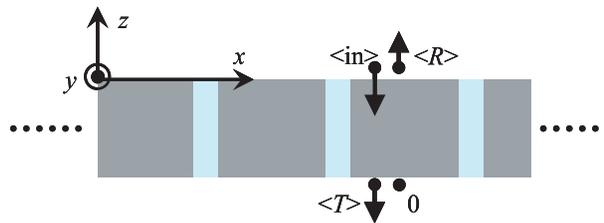
と置き換えることで固有値 γ を求める問題に帰着される。

その固有値問題をそのまま数値的に解くことも一法であるが、別法もある。つまり、式 (34) から磁場成分を消去することができる。これによって、固有値方程式の次元が $2N \times 2N$ に下がる。その意味でつぎの式 (35) は縮約した固有値方程式ということができる。

$$(FG + \gamma^2) \begin{pmatrix} \langle E_1 \rangle \\ \langle E_2 \rangle \end{pmatrix} = \vec{0} \quad (35)$$

式 (34) と式 (35) は数学的には等価であるが、数値計算の実行時には CPU 時間の短縮が重要な課題であるから、両者の比較は 3.2 節で行う。

ひとたび周期層の固有状態（固有値 γ と固有ベクトル）が分かると、あとは入射層、周期層、基板層の固有状態を散乱行列アルゴリズムで結び、入力（入射光の入射角度、偏光の情報）から出力（反射光、透過光、回折光の強度、位相）をえることができる。散乱行列は帰納的に構成できるから、周期層は何層積層していてもよく、これによって自動的に 3 次元的な構造も計算対象に含まれていることを指摘しておきたい。



$$\begin{pmatrix} \langle T \rangle \\ \langle R \rangle \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \langle in \rangle \\ 0 \end{pmatrix}$$

図 3 散乱行列 S による入力と出力の関係。透過成分のベクトル $\langle T \rangle$ には透過方向の回折光の情報もすべて含まれている。反射成分のベクトル $\langle R \rangle$ についても同様である。

散乱行列の構成法などについての詳細についてはすでに文献 [1] で紹介したとおりであり、ここでは繰り返さないことにする。

3. 数値計算の実例

3.1 光学スペクトルの計算例

ここでは開発したコードによる 2 次元メゾ周期体の光学スペクトルの一例を示す。金属材料、とくに銀からなる周期体の単位胞を図 4 の上段に示している。黒線で示す単位胞は銀（灰色部）と空気（白色部）からなっており、 x 、 y 方向に周期的に並ぶことでメゾ周期体を構成する。単位胞は一辺 600 nm の正方形とする。図 4(a) は回折格子状の構造体であり、図 4(b) は縦線と矩形が並んだ 2 次元パターンからなるメゾ周期体である。より現実的な設定にするために、メゾ周期体の z 軸方向の厚みは 60 nm として石英基板の上にあるとする。銀の比誘電率は文献値 [8] を使用し、空気、石英の比誘電率をそれぞれ 1.00、2.13 とした。

入射平面波はメゾ周期体に空気側から基板に向かって垂直に入射する場合を考え、入射偏光は

x 偏光とする ($\mathbf{E}_{in} \parallel x$)。このときの反射 (R 、赤線)、透過 (T 、青線) スペクトルを図 4 の下段に示している。図 4(a) は典型的な回折格子であり、1 次元周期系である。その反射のディップは表面プラズモン共鳴に対応している。金属のメゾ周期体はプラズモン起源の共鳴状態をもつことからプラズモニック結晶と呼ばれる。

一方、図 4(b) の 2 次元的なプラズモニック結晶は単位胞中央に縦 400 nm、横 160 nm の矩形の穴が開いているために光学的な特性が大きく変化する。とくに 1.5 eV より低エネルギー側での透過率が大きく、対応して反射率が小さい。これは図 4(a) の 1 次元系では見られない性質である。実際反射率は 100% 近い。図 4(b) において単位胞内で金属が占める面積比の減少分よりもはるかに反射率が低下していることは注目し値する。入射光の波長は 1000 nm 程度であるが、400 nm × 160 nm の矩形や幅 80 nm のスリットを効率的にすり抜けていくという直感的な描像を描くことができる。図 4(a) のようなスリットのみではこのようなことは起こらず、また単位胞内に矩形孔のみがある場合も起こらない。微細構造の組み合わせによって図 4(b) の低エネルギー側の高い透過率が可能になっている。図 4 での光学スペクトルの計算精度は 1% 未満と見積もることができ、高い精度での数値計算が実行できている。プラズモニック共鳴のより詳細な理解を得るためには入射角度、偏光を変えて光学スペクトルを精査することおよび電磁場分布を検証することなどが必要であるが、やや専門的になりすぎるので計算実行時間の比較に移ることにする。

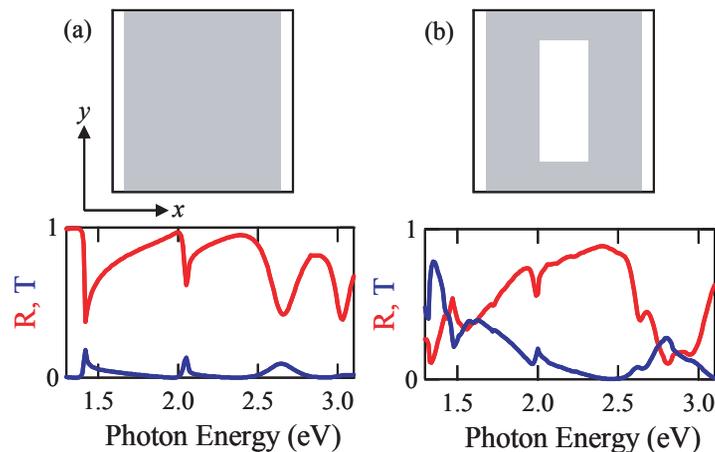


図 4 (a) 回折格子状単位胞とその反射 (R 、赤線)、透過 (T 、青線) スペクトル。(b) 2 次元周期構造をもつ単位胞とその反射、透過スペクトル。黒線の単位胞は一辺 600 nm の正方形である。灰色部分が銀、白色部が空気を表している。

3.2 計算実行時間の比較

この節では計算実行時間を多面的に比較する。最初に固有値方程式を式 (34) のままで解く場合と式 (35) のように縮約して解く場合を比較する。その後 SX-9 とワークステーション (WS) でのコードの運用における経験について述べ、読者の参考に資したい。

まず、固有値方程式を縮約する効果について述べる。単純に考えると、式 (34) の行列サイズは $4N \times 4N$ で、式 (35) では $2N \times 2N$ であるから、後者が高速になることは明らかなように感じられる。しかしながら、式 (34) の行列は対角成分がすべて 0 であることから固有値を求める過程が大幅に簡単になる。たとえば行列式を計算することを考えてみれば必要な掛け算の回数が一

般の行列に比べて激減する。したがって、筆者は後者が速いとはいえ、その差はあまり大きくないのではないかと当初予想していた。図 4(b) に示した単位胞をもつプラズモニック結晶の光学スペクトル計算（データ点 181 点）を例に比較した結果を表 1 にまとめた。コードは自動並列化のみのオプションでコンパイルして、SX-9 の p16 上で実行した。

結果をみると、縮約版の高速化が目立つ。フーリエ係数の切断回数にあたる N が比較的小さい範囲では縮約版はおよそ 1/4 の時間で計算できる。しかし N が大きくなってくると、縮約版の計算時間は 1/6 より小さくなっている。時間差が広がっていく印象が強い。また、並列化率が縮約版のほうが大きい。これは式 (34) の固有値、固有ベクトルを求める際に並列化が著しく阻害されていると考えられる。対角ブロックの成分がすべて 0 であるような特殊な行列を扱うことが ASL 関数がやや不得手なのかもしれない。計算時間などには大きな差が出たが、使用メモリに関しては両者に大差はない。計算精度を追求するときにはもう少し大きい N での計算実行も必要であるから、縮約版の使用は必須といえる。

N	元のまま:式 (34)			縮約版:式 (35)		
	CPU time (s) *	並列化率**	使用メモリ (GB)***	CPU time (s)	並列化率	使用メモリ (GB)
225	2121	2.56	0.96	599	6.24	1.024
441	11589	1.62	1.984	2529	4.06	1.920
729	45108	1.44	4.288	7804	3.74	4.096
1089	138174	1.41	8.704	21415	3.91	8.384

それぞれの定義は次のとおり。*ログファイルのReal Time (s)。
User Time/Real Time。*ログファイルの値。

表 1 固有値方程式を縮約しない場合とした場合での計算時間などの比較。
CPU time は図 4 のスペクトルを一つ計算するのに要した時間。

同じコードを 4 並列まで可能な WS でも実行してみた。行列の固有値問題を解くために ASL 関数の代わりに LAPACK を使用した。経験的に言って、並列数などを同じ条件下で WS で実行すると約 30 倍時間がかかる。WS の CPU 単体の処理速度は SX-9 上の CPU とクロック数では大差ない。後者はベクトル型演算ができる利点があるにせよ、決定的な理由ではないだろう。また WS はメモリ 64 GB を搭載しており不足することはない。それにもかかわらずこの違いが起こる原因として、WS 上のコンパイラがコードの大部分を並列化できないこと (SX-9 では自動並列化でほとんど並列化される)、固有値問題を解くのが遅いことが挙げられる。現実的な時間内に結果を得て、研究を進めるという立場からすると、WS を使うことは選択肢にないと言ってよい。大型計算機においては、ハードウェアはもちろんのこと、コンパイラなどのソフトウェアの重要性を改めて認識した次第である。今後も SX-9 の後継開発がハード、ソフトの両面で進んでいくことを期待したい。

4. まとめ

電磁気学の基礎方程式であるマクスウェル方程式を周期系に適用する際に生じるフーリエ係数の有限次切断問題について述べ、数値的に高速な収束性を示すアルゴリズムをかなり詳細に説明してきた。やや詳細に踏み込みすぎている感もなくはないが、物理現象を取り扱う基礎方程式(熱

伝導方程式、流体方程式、シュレーディンガー方程式など)には境界での接続条件をみたすように成り立つものが多く、同じようなアルゴリズムで効率的に数値計算できる物理現象も少なくないと考えられる。その意味で、逆積ルールによるフーリエ係数の取り扱いはかなり普遍的な手法として、これから様々な場面で利用されていくであろう。

ひとたび各周期層の固有電磁波状態を精度よく求めることができれば、散乱行列法によって系全体の光学応答を求めることができる。また、積層構造にも対応できることから、3次元的な周期構造体も自動的に計算対象になった。

開発したコードを具体的なプラズモニック結晶に応用して、光学スペクトルを計算し、単位胞によって大きく異なる光学特性を例示した。その例をつうじて現実的な計算時間で結果を得ることを確認した。さらに計算実行時間について比較して、縮約した固有値方程式が SX-9 上での運用に適していることも明らかにしてきた。

謝辞

本研究を通じて開発したコードは東北大学サイバーサイエンスセンターの大泉氏をはじめとするセンター職員の方々のご支援によって改良されたものである。ここに謝意を表したい。

参考文献

- [1] 岩長, 「散乱行列法を用いたフォトニック結晶の光学応答解析」 SENAC **39**(3), 25–32 (2006).
- [2] 岩長, 「メタマテリアルにおける有効光学定数の決定法と応用」 SENAC **40**(3), 5–14 (2007).
- [3] 岩長, 「遺伝アルゴリズムを用いた光機能性人工構造体の探索」 SENAC **41**(3), 43–51 (2008).
- [4] M. Iwanaga, “Optically deep asymmetric one-dimensional plasmonic crystal slabs: Genetic algorithm approach,” J. Opt. Soc. Am. B **26**(5), 1111–1118 (2009).
- [5] L. Li, “Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures,” J. Opt. Soc. Am. A **13**(9), 1870–1876 (1997).
- [6] L. Li, “New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings,” J. Opt. Soc. Am. A **14**(10), 2758–2767 (1997).
- [7] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, and P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media*, 2nd ed. (Pergamon, New York, 1984) p. 268.
- [8] P. B. Johnson and R. W. Christy, “Optical Constants of the Noble Metals,” Phys. Rev. B **6**(12), 4370–4379 (1972).

[共同研究成果]

第一原理に基づく大規模電子状態・電子輸送特性計算

— 電子輸送特性計算モジュールの高速化 —

小野倫也¹、江上喜幸²、後藤英和¹¹大阪大学大学院工学研究科、²長崎大学工学部

我々は、実空間差分法に基づく第一原理シミュレーションコードを開発するとともに、これを用いてナノ構造の原子・電子状態や電子輸送特性を予測する研究を行っている。本稿では、開発中の電子輸送特性計算プログラムの高速化について述べるとともに、これを用いて C_{60} フラーレン分子鎖の電子輸送特性計算を行った結果について述べる。

1. はじめに

電子デバイスの微細化と高機能化が進むにつれ、ナノスケールの構造体(ナノ構造体)の電気伝導に対する興味が高まってきている。ナノ構造体のバリスティック伝導現象についての実験的証拠は、走査型トンネル顕微鏡やブレイクジャンクション、リソグラフィーといった技術を用いて電極間にナノスケールの間隙を作成し、その間に挟まれた原子鎖や分子を流れる電流を測定することによって得られている。金属原子鎖系では、電極同志の接触点を引き伸ばしていくと電極間に数原子からなる原子鎖が形成される。この原子鎖を流れる電流は量子効果を受け、コンダクタンスが $G_0 (=2e^2/h; e$ は電気素量、 h はプランク定数) の整数倍に量子化されることが金の原子鎖について最初に報告された。その後、いくつかの金属でこのようなコンダクタンスの量子化が確認された。また、分子系に関しても、ベンゼンチオールや DNA 分子、自己組織化単分子膜 1 層のコンダクタンスの測定結果なども報告されている。分子系については、結果にはまだ検討の余地があると思われるが、新たな機能を持つ材料の可能性として興味深い。本研究グループでは、これまで実空間差分法を用いた第一原理電子状態計算法[1, 2]の開発と、それをさらに応用した電子輸送特性計算手法の開発を行ってきた。一般に電子輸送特性計算は電子状態計算に比べて多くの計算量が必要であり、大規模計算を行うには電子輸送特性計算をいかに早く行うかが鍵となる。本稿では、電子輸送特性計算の高速化と改良されたプログラムを用いて C_{60} 分子の 1 次元鎖の電子輸送特性を計算した結果について紹介する。

2. 電子輸送特性計算の高速化

図 1 に示すような半無限に続く電極に挟まれたナノ構造体の電子輸送特性を求める方法は、大きく 2 つに分けられ、ひとつは散乱波動関数を直接計算する方法である。この方法には、Lippmann-Schwinger 方程式[3-5]を解く方法や Recursion-transfer-matrix 法[6]、また、最近我々の研究グループによって開発された Overbridging boundary-matching (OBM) 法[2, 7]などがある。もうひとつは、散乱波動関数を求めずに無限系の非平衡グリーン関数を用いて透過確率を計算する方法である。本計算コードでは OBM 法を用いている。これらの計算手法の詳細は参考文献に譲るとし、本章では OBM 法の概略と高速化のポイントのみを紹介する。

散乱波動関数を得るには、散乱の境界条件を満たす Kohn-Sham 方程式の解を求めればよい。電子が左側電極から j 番目のチャンネルを通過して入射する場合の境界条件は

$$\Psi(z_k) = \begin{cases} \Phi_L^{in}(z_k) + \sum_{i=1}^N r_i \Phi_i^{ref}(z_k) & (k \leq 1) \\ \sum_{i=1}^N t_i \Phi_i^{tra}(z_k) & (k \geq N_z) \end{cases} \quad (1)$$

である。ここに、 $\Phi_L^{in}(z_k)$ 、 $\Phi_i^{ref}(z_k)$ 、 $\Phi_i^{tra}(z_k)$ は、図1に示すように、それぞれバルク電極内の入射波、反射波、透過波を表す。また、 r_i は反射確率振幅、 t_i は透過確率振幅である。(1)式の境界条件を Kohn-Sham 方程式

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

に課すと、次のような $N_x \times N_y \times N_z$ 元の連立方程式が得られる。

$$\begin{bmatrix} E - \hat{H}_T - \tilde{H} \\ \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi(z_1) \\ \Psi(z_2) \\ \vdots \\ \Psi(z_{N_z}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_z^\dagger \Phi_L^{in}(z_0) - \Sigma_L^r(z_1) \Phi_L^{in}(z_0) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

ここで、 x 、 y 、 z 方向にはそれぞれ N_x 、 N_y 、 N_z のグリッドがあるとし、 E は入射電子のエネルギー、 \hat{H}_T は散乱領域のハミルトニアン、 B_z は差分近似の係数項からなる $N_x \times N_y$ 次元の行列、 Σ_L^r は電極のセルフエネルギー、 \tilde{H} は1番目と N_z 番目の $N_x \times N_y$ 次元ブロック対角要素以外が0の行列で、1番目と N_z 番目の要素は電極のセルフエネルギーである。また、入射波としては進行波を考えれば十分であるが、正しい散乱解を得るには、反射波と透過波として進行波だけでなく指数関数的に激しく増減するエバネッセント波も考慮する必要がある。これら変数の厳密な定義および計算方法については、参考文献[2, 7, 8]を参考にされたい。

共役勾配法を用いて(3)式の連立方程式を解くわけであるが、電子輸送特性計算を高速に行うにはいかに少ない反復回数で解くかが鍵になる。共役勾配法の場合、前処理を行えば反復回数が少なくて済むことが分かっており、前処理行列 \hat{P} が係数行列 $[E - \hat{H}_T - \tilde{H}]$ の逆行列に近ければ近いほど前処理行列と係数行列の積が対角的になり早く収束する。今回我々は Kohn-Sham 方程式の運動エネルギー項が(3)式の係数行列の中で支配的であると考え、 $1/2\Delta$ に対応する行列の逆行列

$$\hat{P}_{ij} = \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (4)$$

を前処理行列にすることを考えた。しかし、(4)式のままでは0で無い要素が多すぎ、前処理行列を作用させるために必要な計算が多すぎる。そのため次のように簡便な形に置き換えた。

$$[\hat{P}f](\mathbf{r}) = c_0 f(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{r}'=h(\pm 1, \pm 1, \pm 1)} c_1 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \quad (5)$$

ここで、 f は共役勾配ベクトル、 $c_0 = 1$ 、 $c_1 = \exp(-\alpha)$ 、 α は前処理行列の形を決定する任意パラメータであり、今回は1.8~3.0の間で変えた。このように前処理を施した場合の効果、ナト

リウム単原子鎖の電子輸送特性計算に適用して調べた。計算は、東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-9 の 1CPU を用いて行った。計算モデルを図 2 に示す。1～5 個の原子からなるナトリウム原子鎖が金属電極間に挟まれている。ここでは、計算を簡単にするため jellium という仮想金属を電極に用いている。原子鎖を構成するナトリウム原子の数と収束解を得られるまでに要した計算時間の関係を図 3 に示す。原子鎖が長くなるにつれ計算時間がリニアに増加しているが、これは (3) 式の連立方程式の変数が増えていくからである。ここで注目すべきは、いずれの場合においても前処理を施すことにより計算時間が半分から 3 分の 2 に短縮されており、前処理が高速化に効果があったことが分かる。

3. C_{60} フラーレン分子鎖の電子輸送特性

改良した計算コードを用いて、 C_{60} フラーレン分子鎖の電子輸送特性を計算した。図 4(a) に、計算モデルを示す。 C_{60} フラーレン分子鎖は、モノマーあるいはダイマーの状態での金の jellium 電極で挟まれており、電極表面とは二重結合で結ばれている。モデルの原子構造は、電極に挟まれていない孤立状態での C_{60} フラーレン分子を第一原理計算で構造最適化した後、端の原子と jellium 表面の距離が 0.9 bohr になるように電極で挟み、再び構造最適化した。実空間差分法におけるグリッドの幅を 0.5 bohr とし、ポテンシャルが急峻に変化する原子の近傍のみ Timesaving double-grid 法 [9] を用いて 0.17 bohr とした。原子核からのクーロンポテンシャルは、ノルム保存型擬ポテンシャル [10] を用い、電子間相互作用は、密度汎関数理論における局所密度近似 [11] を用いた。電極間に挟まれた分子の波動関数は OBM 法を用いて求め、コンダクタンスはランダウアーの公式 [12] を用いて計算した。

C_{60} フラーレン分子鎖のコンダクタンスは、モノマーの場合 $1.13G_0$ 、ダイマーの場合 $0.11G_0$ であった。モノマーとダイマーのコンダクタンスを比べてみると、ダイマーの方が極端に小さい。このようにダイマーのコンダクタンスが小さくなる理由は、分子内のある部分で多くの電子が散乱されるためである。図 5 に電気伝導に関わる電子の電子密度分布と電流分布を示す。入射電子の多くは、電極と分子の結合部分で散乱されている。特に注目すべき点は、分子内での散乱はほとんどないにもかかわらず、ダイマーの場合、結合部分でも電子が散乱されているところである。このことから、ダイマーよりもモノマーの方が、コンダクタンスが大きくなるのが理解できる。しかし、この結果は、 C_{60} フラーレン分子鎖が導電性ワイヤーとして利用できる可能性を否定するものである。そこで、分子の結合部分での散乱を抑えるべくフラーレンにリチウム原子を内包させたところ図 5(c) に示すように結合部分での散乱が抑えられ、コンダクタンスは $0.88 G_0$ まで回復した。図 4(b)、4(c) に分子鎖に平行な方向の電子の局所状態密度分布を示す。この図は、分子鎖に垂直な断面上で状態密度を積分したものであり、横軸が分子鎖軸、縦軸がエネルギーであり、色の濃い部分が電子の状態密度が高いところである。コンダクタンスの計算は、フェルミレベル近傍で測定しているため、フェルミレベル近傍の状態密度の変化に注目すればよい。リチウム原子が挿入されていない分子鎖 [図 4(b)] と挿入された分子鎖 [図 4(c)] の状態密度を比べると、挿入された場合の方が分子の結合部分でフェルミレベルでの状態密度が増えていることが分かる。これは、リチウム原子のクーロンポテンシャルにより、非占有である分子同士をつなぐ準位がフェルミレベル近傍まで下がったため、この準位を使って電子が流れるようになったためである。以上の結果より、フラーレンのみでは導電性分子ワイヤーとして機能しないが、金属原子を内包させることにより導電性分子ワイヤーとして機能させることが可能であることが分かった。この計算結果の詳細は、参考文献 13 にて紹介してある。

4. まとめ

実空間差分法を用いた第一原理電子状態・電子輸送特性計算手法とそれに基づく計算コードを

開発した。電子輸送特性いわゆる「電子のダイナミクス」を明らかにしようとする研究は、ナノ電子デバイスの研究・開発にとって重要なスキームであると考えられる。本研究で開発した計算方法により計算負荷を減少させることが可能となり、より大規模で具体的なモデルに対する正確な電子輸送特性計算を行うことが可能となった。まだ共役勾配法のような収束計算に高速化の余地は残るが、さらに改良を重ねていけば、次世代電子デバイスのデザインと開発に対して大きな貢献ができるツールになるものと考えている。

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。また、研究にあたっては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。また、大阪大学グローバルCOEプログラム「高機能化原子制御製造プロセス教育研究拠点」、文部科学省科学研究費補助金・特定領域研究「次世代量子シミュレータ・量子デザイン手法の開発」(課題番号:17064012) および「カーボンナノチューブナノエレクトロニクス」(課題番号:19054009) の支援を受けたことを記し、謝意を表します。

参考文献

- [1] J. R. Chelikowsky, N. Troullier, K. Wu and Y. Saad, *Phys. Rev. B* **50**, 11355 (1994)
- [2] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto and S. Tsukamoto, *First-Principles Calculations in Real-Space Formalism*, Imperial College Press, London (2005)
- [3] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* **1**, 223 (1957)
- [4] N.D. Lang, *Phys. Rev. B* **52**, 5335 (1995)
- [5] S. Tsukamoto and K. Hirose, *Phys. Rev. B* **66**, 161402 (2002)
- [6] K. Hirose and M. Tsukada, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 150 (1994)
- [7] Y. Fujimoto and K. Hirose, *Phys. Rev. B* **67**, 195315 (2003)
- [8] L. Kong, M.L. Tiago and J.R. Chelikowsky, *Phys. Rev. B* **73**, 195118 (2006)
- [9] T. Ono and K. Hirose, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5016 (1999)
- [10] N. Troullier and J.L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991)
- [11] J.P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981)
- [12] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer and S. Pinhas, *Phys. Rev. B* **31**, 6207 (1985)
- [13] T. Ono and K. Hirose, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 026804 (2007)

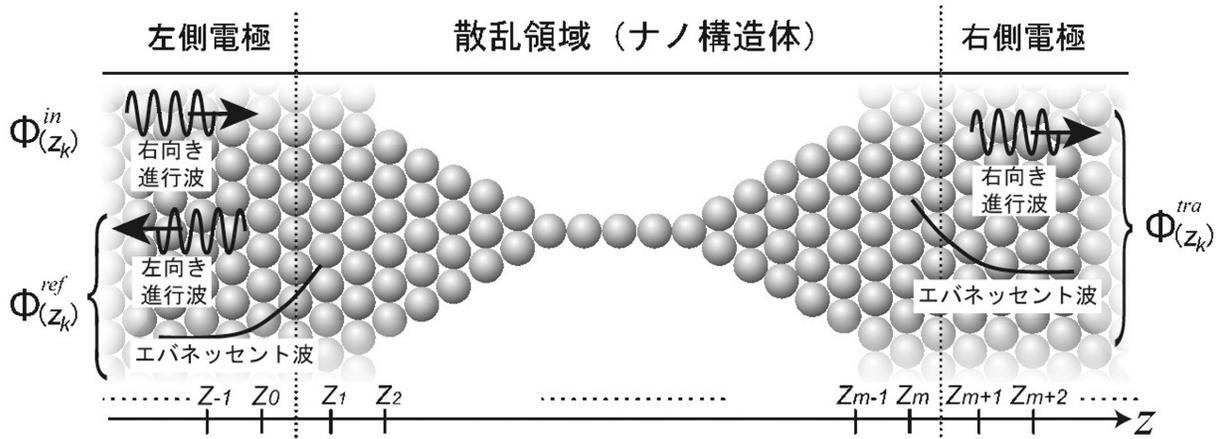


図1 半無限に続く2つの電極に挟まれたナノ構造体のモデル
(160nm×58nm)

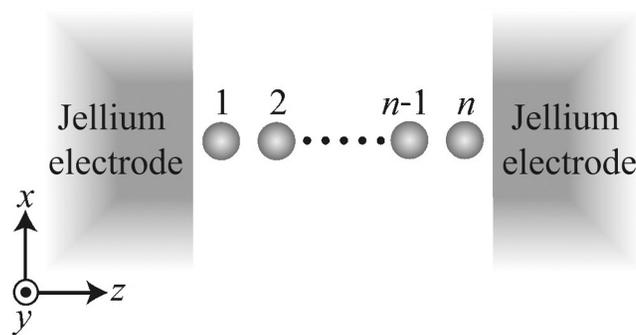


図2 ナトリウム原子鎖が jellium 金属電極間に挟まれた計算モデル
(80nm×42nm)

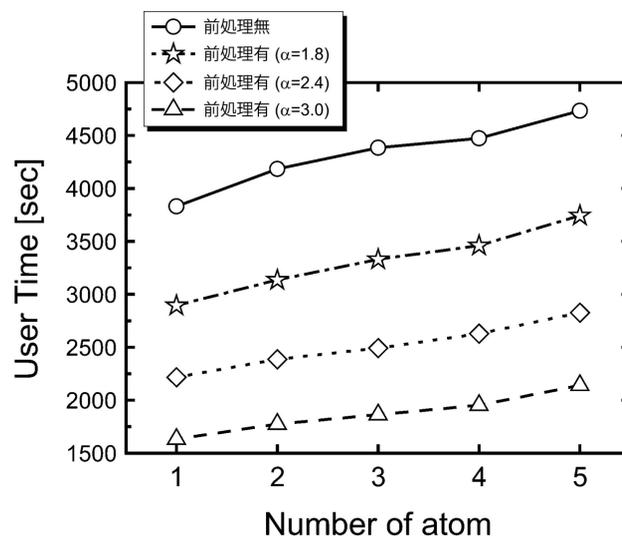


図3 原子鎖を構成する原子数と計算時間
(80nm×68nm)

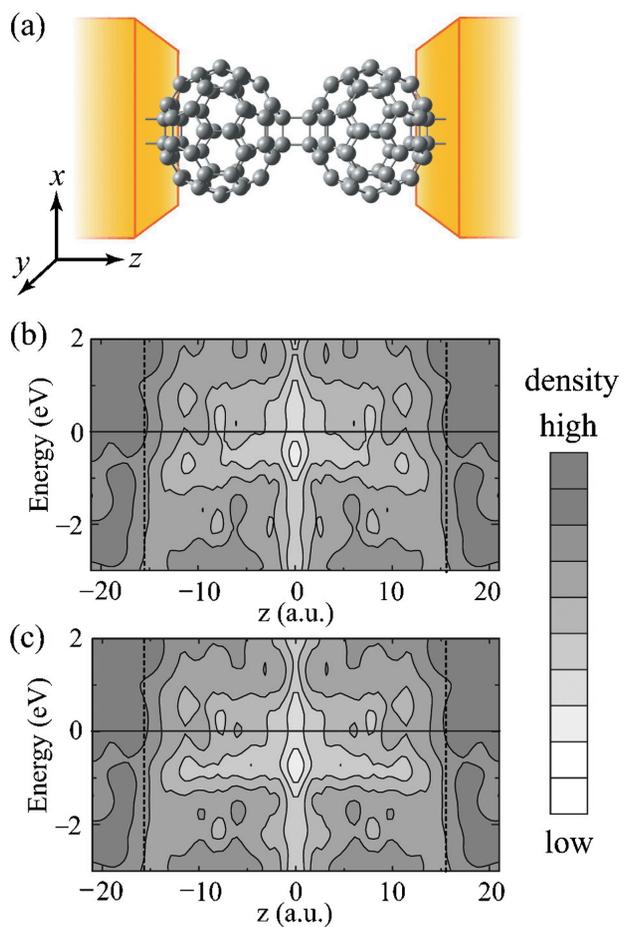


図 4 C₆₀ フラーレン分子鎖の計算モデル(a)。リチウムを挿入前の断面の局所状態密度分布(b)。リチウムを挿入後の断面の局所状態密度分布(c)。参考文献 13 より転載。
(80mm × 120mm)

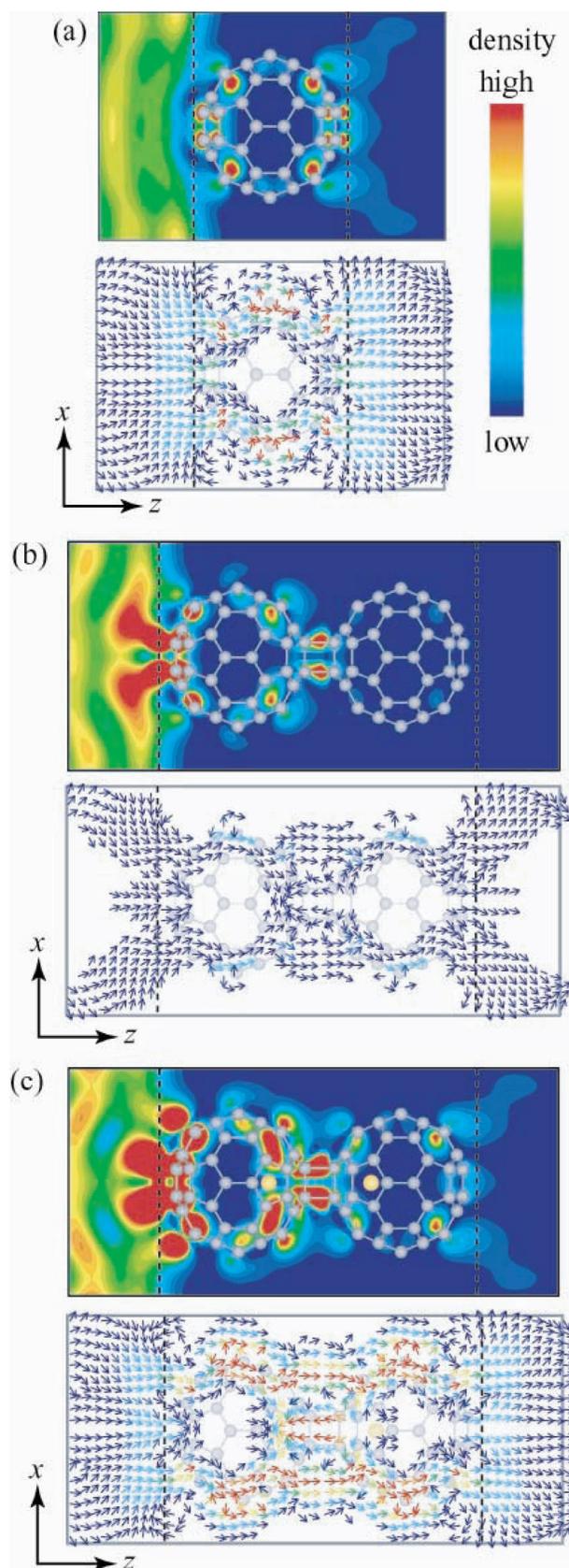


図 5 伝導に関わる電子の電子密度分布(上)と電流分布(下)。フェルミエネルギーでの左の電極から入射した電子の分布を示している。C₆₀ モノマー(a)、C₆₀ ダイマー(b)、Li@C₆₀ ダイマー(c)。参考文献 13 より転載。

(80mm × 220mm)

白

[研究成果]

ポテンシャル勾配を駆動力とする物質拡散方程式の数値解析における α マルティプリケーション法の提案

横堀壽光、大見敏仁（東北大学大学院工学研究科）

根本剛直（現、東北大学大学院工学研究科、東京エレクトロン（株））

上杉智冶（現、住友金属（株））

1. 緒言

固体内の物質拡散問題は、水素拡散誘起脆化機構、高温クリープ条件下での空孔拡散によるポイドおよびその連結による微視粒界き裂発生・成長機構、LSIにおける空孔拡散機構により発現するエレクトロマイグレーションおよびストレスマイグレーションの数値解析問題として広範囲にわたって扱われる。しかしながら、水素あるいは空孔の拡散駆動力となる局所応力勾配あるいは電場のポテンシャル勾配項が拡散方程式において数値解の収束性と安定性（振動解の制御）に大きく影響することから、十分な収束性と安定性を有する解を得ることが困難であった。また、この方程式が本来、現象論の物理として、現象を合理的に記述するためには、拡散項間での相互作用に関わる未定係数の設定が必要であるとされ、その設定が困難であった[1]。

本稿では、これらの問題について、著者のグループで検討してきた結果について述べる。

2. 非可逆輸送過程における現象論的拡散方程式[2]

一般化流量を J_k とし、一般化力を X_k とすると非線形現象論的關係は式（1）で表される。

$$J_k = \sum_{l=1}^m \alpha_{kl} X_l \quad k=1 \sim m \quad (1)$$

ここに相互干渉係数には式（2）の關係が成立する。

$$\alpha_{kl} = \alpha_{lk} \quad (2)$$

また、 X_l は式（3）に示すように、ポテンシャル勾配により表され、それによる流量は式（4）で表される[2,3]。

$$X_l = -\nabla \phi_l \quad (3)$$

$$J_l = Cv = CBX_l = C \frac{D}{RT} (-\nabla \phi_l) \quad (4)$$

ここに、 C ：拡散物質の濃度、 D ：拡散係数、 $\nabla \phi_l$ ：ポテンシャル勾配、 R ：気体定数、 T ：絶対温度である。一例として、水素原子が局所応力場のもとで、金属格子間を拡散する場合の濃度勾配と局所応力勾配項からなる拡散による流量は以下のように表される[3]。

$$J_1 = -\alpha_{11} \frac{D}{RT} C \nabla \phi_1 - \alpha_{12} \frac{D}{RT} C \nabla \phi_2 \quad (5)$$

$$\phi_1 = RT \ln C \quad (6)$$

$$\phi_2 = -\sigma_p \Delta V \quad (7)$$

ここに、 $\sigma_p = \frac{1}{3}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)$ は、体積変化に寄与する静水圧応力、 ΔV は、 σ_p の下で、水素が格子間に侵入するときの格子間体積変化である[4]。

式(6)、(7)を(5)に代入すると式(8)を得る。

$$J_1 = -\alpha_{11} D \nabla C + \alpha_{12} \frac{D \Delta V}{RT} C \nabla \sigma_p \quad (8)$$

また、濃度変化は式(9a)、(9b)となる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla J_1 = \alpha_{11} D \nabla^2 C - \alpha_{12} \frac{D \Delta V}{RT} \nabla (C \nabla \sigma_p) \quad (9a)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C - \alpha_{12} \frac{D \Delta V}{RT} (\nabla C \cdot \nabla \sigma_p + C \nabla^2 \sigma_p) \quad (9b)$$

式(9b)は $\alpha_{11}=1$ としている[5-7]。また、保存系(弾性)のとき $\nabla^2 \sigma_p = 0$ となる。

式(9b)は熱伝導および拡散の方程式であり Crank-Nicolson 法により差分に離散化し、SOR法により多元連立方程式の数値解析として解かれる。

Dが時間の影響を受けない場合は、式(9)は式(10)により無次元化することにより、見かけ上拡散係数に依存しない形となり、拡散係数の影響は、無次元化時間から有次元時間に変換するときに数式的に現れることになる。これを式(11)に示す[5,6]。

$$r^+ = \frac{r}{a}, C^+ = \frac{C}{C_0}, t^+ = \frac{Dt}{a^2} \quad (10)$$

$$\frac{\partial C^+}{\partial t^+} = \nabla^2 C^+ - \alpha_{12} \frac{\Delta V}{RT} (\nabla C^+ \cdot \nabla \sigma_p + C^+ \nabla^2 \sigma_p) \quad (11)$$

3. き裂先端近傍の水素拡散・凝集物理モデルと α マルチプリケーション法の検証[5,6]

き裂先端の局所静水圧応力場は弾塑性境界に最大値を有する Fig.1 に示すような応力場となる。応力場として解析解を用いる場合もあるが一般的には、応力解析は弾塑性有限要素法による解析を行う方が、水素濃度分布解析シミュレータとしての機能は高いので、本稿ではその方法については後述する。

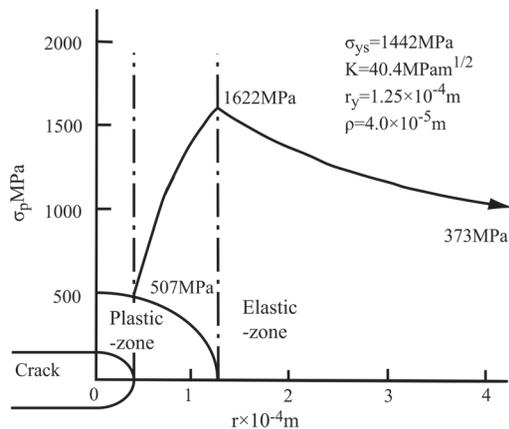


Fig.1 Local elastic-plastic stress field around a crack tip.

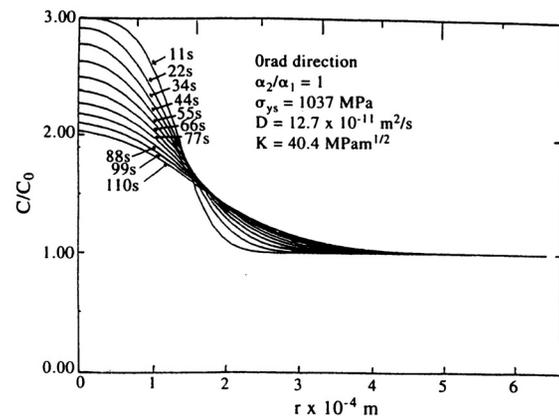


Fig.2 Numerical results on the hydrogen distribution along the $\theta = 0$ rad direction under the elastic-plastic stress field. ($\alpha_{12}=1$)

この局所応力場の下で、腐食反応などにより、き裂先端から水素が湧き出して、拡散する挙動の解析を $\alpha_{12}=1$ として、式 (11) により行った結果を Fig.2 に示す[5,6]。この拡散方程式は、右辺第2及び第3項が働けば、水素を弾塑性境界である静水圧応力最大部に凝集させる式となっている。また、この解析に用いた降伏応力を有する材料は、実際に水素脆化を起こす領域の材料である。しかしながら、Fig.2 は水素を、この位置に凝集させる結果とはなっておらず、一様拡散挙動を示していることがわかる。そこで、式 (11) の右辺第1項から第3項の次元解析を行い、各項の水素拡散挙動に及ぼす影響度を検証した。その結果を Fig.3 に示す。本結果から、応力勾配に関わる右辺第2、第3項は、拡散項である右辺第1項に比べて、1～2オーダー低く、また、右辺第3項は、弾性応力場では保存系であるため、恒等的に零になっている。

すなわち、式 (11) において、 $\alpha_{12}=1$ とすると、第2項、第3項は第1項に殆ど影響を与えないことになり、このままでは、局所応力勾配項の影響が考慮された式とはなっていない[5-7]。

ところで、この拡散方程式は、現象論を記述するものとして導かれたものであることから、現実に則した α を用いることが必要であり、その値の選定が困難であるとの指摘がある[1]。従って、局所応力勾配項の影響を考慮する場合は、実験的にその影響があるとされる降伏応力レベル材料において、右辺第2および第3項を右辺第1項と競合的になる程度に α_{12} により増幅させる必要がある[5,6]。

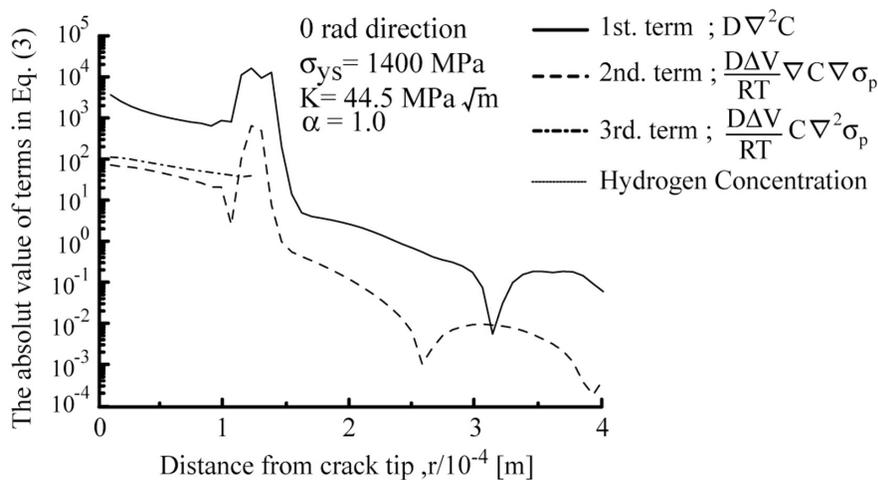


Fig.3 The absolute value of each term in the right hand side of Eq.(11) at $\alpha_{12}=1$.

このような考え方から、筆者らは、式 (11) に示すように、応力勾配項に、増幅係数として α をかける α マルティプリケーション法を提案してきた[5,6]。本方法により、降伏応力が 1442MPa の高強度材について水素拡散解析を行った結果を Fig.4 に示す。弾塑性境界である静水圧応力最大部に明確に水素が凝集する結果が得られた[5-7]。この方法を用いて、系統的な解析を行うと、水素凝集による水素脆化機構が発現する降伏応力レベルが 1000MPa 以上であり、水素脆化を誘起しない降伏応力レベルが 400MPa 以下となる結果を得た[7](Fig.5)。また、水素脆化感性を表すパラメータとして式 (12) が得られた[7]。これは、実験による経験的な結果とも一致していることから、今後、本方法により水素脆化発現性の理論的予測が可能となろう。また、以上のことから、拡散方程式としては、 α マルティプリケーション法を用いることの合理的と考えられる。

$$HE \text{ parameter} : HE = \left(\frac{D}{b^2} \right) \left(\frac{\sigma_{ys}}{E} \right)^6 \left(\frac{K}{E\sqrt{b}} \right)^{-4.5} \quad (12)$$

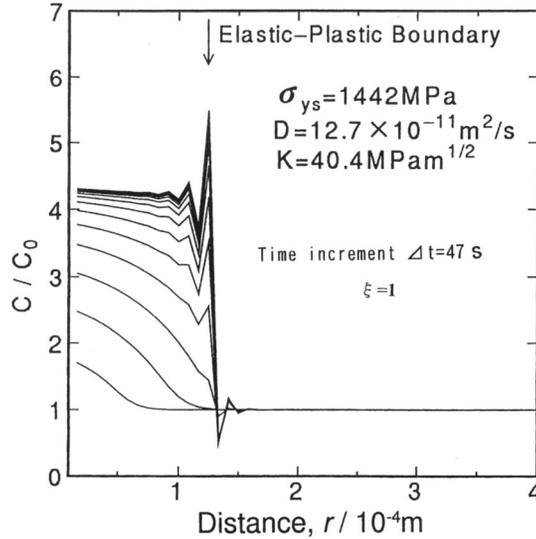


Fig.4 Numerical results on the hydrogen concentration and distribution along the $\theta=0$ rad direction around crack tip under the elastic-plastic stress field. ($\alpha_{12}=100$)

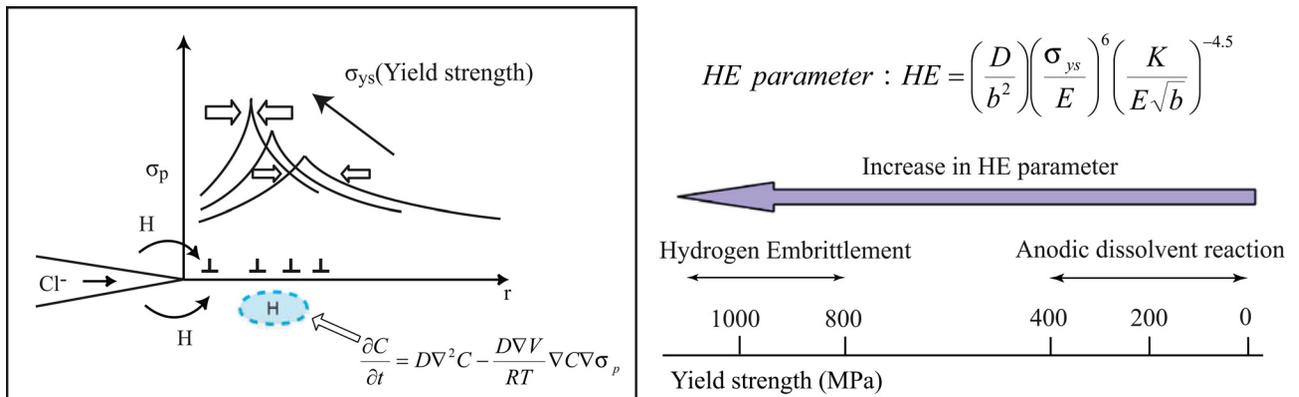


Fig.5 The estimation results of the sensitivity of hydrogen embrittlement by HE parameter.

ここに、 b : バーガースベクトル、 E : 室温でのヤング率、 σ_{ys} : 降伏応力、 K : 応力拡大係数である。系統的解析から得られた HE パラメータの降伏応力に対する概算値を Fig.5 に示す[7]。

4. 拡散方程式の数値解法と収束性[5,6]

本拡散方程式は、局所応力勾配項である右辺第 2 項が、応力勾配と濃度勾配の正負で濃度の増減が逆になることから、解の不安定性を誘発する要因として作用する。そのために、数値解の収束性と安定性の観点からの工夫が必要となる。

拡散方程式をクランク・ニコルソン法により差分表示すると、式 (13 a)、(13 b) のように表される。方程式の係数行列は対角行列となっており、SOR 法により解を求めることが出来るが行列 $[X]$ 中の非零成分を下三角行列 (1 成分ベクトル)、対角項 (2~3 成分ベクトル)、上三角行列 (1 成分ベクトル) の 3 つのブロックにまとめて記憶させ、SOR 法による方程式を式 (14) のように定式化して、非零成分のみについて数値解析を行った。この方法は、零成分の計算を除いて、丸めの

いても、局所応力勾配が急峻である場合は、右辺第2項が、振動解を誘起することがある。著者らは式(15)の応力場の式を用い、解が振動解とならずに安定に収束する条件として、経験的に式(16)の条件を満たすことが必要であることを示してきた[5,6]。

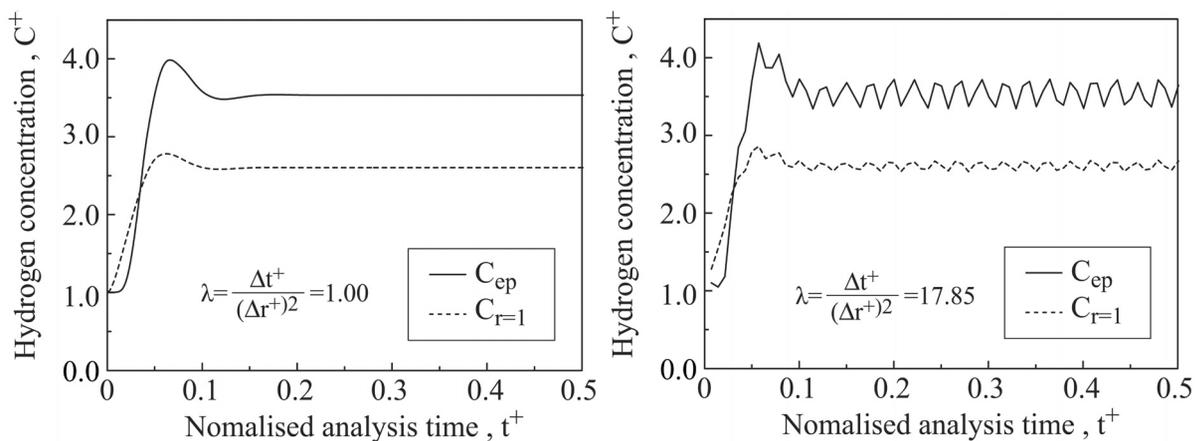
$$\lambda = \frac{\Delta t^+}{(\Delta r^+)^2} \leq \lambda_c \quad (16)$$

λ_c の値は、局所応力場の勾配により変り、応力勾配が急峻であるほど、小さな値となる。水素濃度解の振動および収束例を Fig.6 に示す。 C_{ep} および C_r は、弾塑性境界およびき裂先端での水素濃度の時間変化挙動を示しており、 λ_c が大きくなると、解の振動を生じることがわかる。著者らの既に報告した論文では、塑性域がさらに小規模であり、応力勾配も急峻であったことから、 $\lambda_c=0.4$ であった[5,6]。比較的緩やかな応力場においては、このような条件を考慮する必要は生じないが、式(15)に示すような応力勾配が急峻な解析解による応力場を用いるときは、解の安定性維持のために、式(16)の条件が必要となってくる。

水素脆化は、小規模降伏で、応力勾配が急峻な場合に顕著に見られることから、このような安定性に関する検証も必要である。

また、解が刻み幅に依存せず一定の解へ収束する変数領域として式(17)の条件が必要であることも示した[5,6]。

$$\Delta r^+ \leq 0.025, \Delta t^+ \leq 0.001, \Delta \theta \leq 0.13 \quad (17)$$



(a) Numerical results under stable condition (λ is low.)
 (b) Numerical results under unstable condition (λ is high.)

Fig.6 The time sequential characteristic of hydrogen concentration at the elastic-plastic boundary (C_{ep}) and at the crack tip ($C_{r=1}$).

また、Fig.4 から分かるように、局所応力勾配が急峻である時、水素濃度が凝集する箇所と、それに逆対応して、減少する箇所が生じることがある。しかし、水素濃度が減少して負となることは非現実的であるので、われわれの解析では、潜在する初期水素濃度、 C_0 の0.5倍以下にはならないとして C_0 が0.5より小さい値をとる場合は、 $C_0=0.5$ として解析している。

6. 差分法(FDM)と有限要素法(FEM)の融合解析 (FDM-FEMハイブリッド法)

式(11)の応力誘起水素拡散解析において、応力勾配項を、式(15a)および(15b)に示す弾性および塑性力学により導かれる解析解を用いた場合は、得られる数値解は、鋭い濃度の変化特

性が得られるが、種々の構造体の形態に則した解析を行うには、応力場の解析に有限要素法を用いることが有効である。

著者らは、応力場の解析を有限要素法で行い、応力勾配を計算して、これを式(11)の水素拡散方程式に代入して、差分解析により水素凝集濃度を解析する方法を提案した(FDM-FEMハイブリッド法[12])。

従来、このような水素拡散方程式は、応力解析も拡散解析もすべてFEMにより解析する方法が提示されている[13]。しかし、この方法では、応力解析のみならず、水素拡散解析においても、要素の水素濃度を要素節座標で表す形状関数で近似して解析するばかりでなく、最終的に導かれる1階微分方程式を差分により解析することも必要となる。著者らの提案するFDM-FEMは、応力勾配をFEMにより解析し、この値を用いて水素濃度を拡散微分方程式の差分解析により直接求めることから、水素濃度に近似的形状関数を用いる必要がなく、精度および計算時間短縮を向上させることが可能となる。但し、この方法では、FEM解析および差分解析に則した要素分割を行うため、FEMの要素節点と差分の格子節点が一致しない。そこで、Fig.7に示すように、FEMで得られた隣接する4要素の応力値の平均値を4要素の共通節点の応力値としてもとめ、これを差分格子点に補間して差分格子点の応力値とした。この応力値から差分近似による応力勾配を求め、拡散方程式に代入した。補間の方法の概略をFig.8に示す。FDMとFEMは連動して解析できるようにしている。

各応力条件での計算時間は以下のとおりである。なお、現在、解析はIntel Visual Fortran Compilerを用いて、通常のパーソナルコンピュータを用い、Fortranで解析している。

FDM格子節点数、3100、FEM節点数、3327、要素数、6444で解析したときの計算時間(PC、Intel Visual Fortran Compiler)は以下のとおりであった。

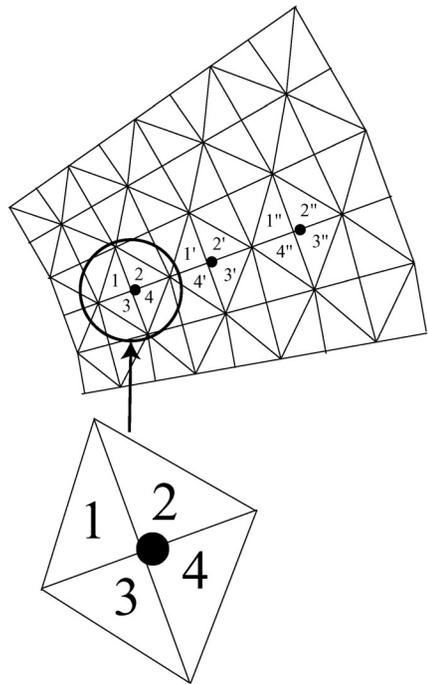


Fig.7 Calculation of the average stress obtained from the neighboring elements.

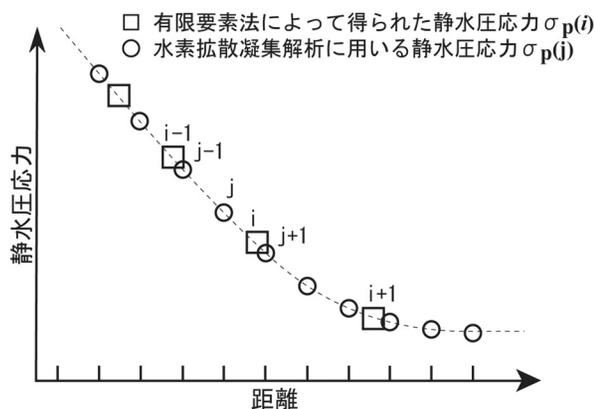


Fig.8 Interpolation of hydrostatic stress obtained from FEM to the grid for FDM analyses.

(1) 一定応力下での弾塑性応力場における水素拡散・凝集挙動

・ 差分解析 (拡散) 約 10 秒 弾塑性応力解析 (FEM) 30~40 秒

(2) 弾塑性繰り返し応力条件における水素拡散・凝集挙動 (9cycles)

- ・ 2~3分 (差分+解析解表示弾塑性応力場) [14] Hill および Creager-Paris の応力場の解析的表示式を使用。
- ・ 55分 (差分+弾塑性有限要素法) 疲労の FEM 解析における各負荷応力段階で、随時、拡散解析を差分で行っていく [12]。具体的には、負荷 1Cycle 毎に 33950STEP の応力計算と差分計算となる。

LSI 配線における、応力と電場の競合下での空孔拡散 (エレクトロマイグレーション) 解析の取り扱いについては、著者らの過去の論文に記載されている [15]。また、第 21 回計算力学講演会フォーラムにて本論文の基礎となる背景が論じられている [16]。

7. 結論

- (1) 応力勾配を駆動力とする物質拡散方程式について、物質拡散凝集挙動に及ぼす本基礎方程式の各項の力学的効果を明らかにした。
- (2) 相互干渉効果として、拡散方程式の応力勾配項に重み係数を付加する、 α マルティプリケーション法を提案し、この方法により得られた結果とその意義について論じた。
- (3) 応力誘起物質拡散方程式の数値解法として、応力解析を有限要素法 (FEM) で行い、この応力勾配を用いた拡散方程式を拡散物質濃度に関する差分法で解く方法 (FDM-FEM法) について述べ、その計算時間を示した。

謝辞

本研究で行った解析は、東北大学サイバーサイエンスセンター (旧東北大学大型計算機センター) の SX シリーズを用いて開発が行われてきた。また長年にわたる研究の中で、計算機使用と使用に関する多くの助言を頂いたことを感謝する。

参考文献

- [1] R.A.Oriani, J. Phys. Chem. Solids, 30(1969), 339
- [2] Y.C.Fung, 「固体の力学」(1970)訳、大橋、村上、神谷、培風館
- [3] P.G.Shewmon, 「固体内拡散」(1976)訳、笛木、北沢、コロナ社
- [4] H.P.Leeuwen, Corrosion, 31-2(1975)42
- [5] T.Yokobori, Jr., T.Nemoto, K.Satoh and T.Yamada, Tra. Japan Soc. Mech. Eng., 59, 565 (1993) 104
- [6] A.T. Yokobori Jr., T. Nemoto, K. Satoh, T. Yamada, Engng. Fract. Mech., 5 (1996) 47
- [7] A.T. Yokobori Jr., Y. Chinda, T. Nemoto, K. Satoh, T. Yamada, Corrosion Science 44 (2002) 407
- [8] S.V.Patanker, Numerical heat transfer and fluid flow., McGraw-Hill, New York (1980)
- [9] M.Creager and P.C.Paris, Int.J.Fracture Mech. 3(1967)247
- [10] R.Hill, The Mathematical Theory of Plasticity, Oxford University Press, (1954)
- [11] W.F.Ames, 工学における非線形偏微分方程式 I 下(1965)訳 三村、小西、産業図書
- [12] 横堀 (壽)、大見, 第 51 回材料強度と破壊総合シンポジウム論文集, 51(2007)71
- [13] P. Sofronis, R.M. McMeeking, J. Mech. Phys. Solids, 37 (1989) 317
- [14] A.T.Yokobori, Jr., T.Uesugi, M.Sendoh and M.Shibata, Strength, Fracture and Complexity, An Int. J., 1(2003)187

- [15] 村川、横堀、根本、三浦, 日本金属学会誌, 70(2006)987
- [16] 横堀 (壽)、大見、根本、上杉, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, フォーラム「水素脆化研究の新展開」(2008)CDrom, 日本機械学会

白

[報 告]

平成21年度 TOPIC ネットワーク担当職員研修会を仙台で開催しました

東北大学サイバーサイエンスセンター ネットワーク研究部
東北大学情報部情報基盤課 ネットワーク係

平成 21 年 9 月 28 日(月)から 9 月 29 日(火)にわたり、仙台市の秋保温泉・岩沼屋において、平成 21 年度 TOPIC ネットワーク担当職員研修会を開催しました。

この研修会は、東北学術研究インターネットコミュニティ TOPIC が主催となり、一泊二日の合宿形式を基本として、東北各県の持ち回りで、毎年 1 回秋季に開催されています。今回の研修会は、仙台 NOC および東北大学サイバーサイエンスセンターが中心となり、その開催準備や運営にあたりました。

約 100 名の方々にご参加いただき、たいへん盛会となりました。セッション 1 では、国立情報学研究所 (NII) の方々に講師をお願いし、学術認証フェデレーションや SINET に関する最新の状況や計画のご講演を頂戴しました。セッション 2 は、仮想化や教育等に関する話題を中心にセッションを組みました。セッション 3 は、TOPIC 会員組織における事例紹介の場となっており、熱心な質疑応答が行われました。セッション 4 では、セキュリティや安全・安心をキーワードに、大変有益な内容の講演が行われました。

なお、来年度の TOPIC ネットワーク担当職員研修会は、岩手県内において開催される予定です。

研修内容：

[セッション 1]

- ・学術認証フェデレーションの試行運用について
- ・SINET3 update&SINET4 の計画

[セッション 2]

- ・「仮想化技術を活用した情報処理システム」として
 - (1)東北学院大学土樋情報処理センター新システムについて
 - (2)ストレージソリューションの事例紹介
- ・KNOPPIX の教育利用とデスクトップ仮想化技術との融合

[セッション 3]

- ・アクティブディレクトリとの連携認証
 - eduroam、SSO システム構築について
- ・東北地区高専体育大会抽選会ライブ中継について
- ・taRgrey を前段に用いた spam 対策

- ・ 東北大学キャンパスネットワークの更新について
- ・ 未知ウィルス検知技術

[セッション 4]

- ・ インタラクティブ教材を活用したセキュリティ教育の推進
- ・ 情報通信研究機構(NICT)受託案件「インシデント分析の広域化・高速化技術に関する研究開発」実証実験へのご協力依頼
- ・ イントラネットセキュリティ
不正端末検知、ネットワーク監視、資産/ライセンス管理
- ・ 安否確認システム事例紹介
- ・ 平成21年上半期におけるインターネット治安情勢



[解 説]

高速ファイル転送の試験サービス

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。

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>

ファイル転送ソフト FileZilla Client 導入ガイド

— FTP over SSL/TLS による高速ファイル転送 —

共同研究支援係、スーパーコンピューティング研究部

FileZilla client は、フリーで公開されているファイル転送クライアントソフトです。このガイドは、Windows へのインストール手順、設定方法及びファイル転送手順を、SSL/TLS による当センターへの接続を例に紹介します。本稿で解説している FileZilla Client のバージョンは 3.2.4.1 ですが、最新版の 3.2.7.1(2009.9 時点)でも同様に利用できることを確認しています。

1. インストール

1. 1 ダウンロード

FileZilla のサイト <http://filezilla-project.org/> から、FileZilla Client をダウンロードします (図 1)。Windows 用のファイルは 2 種類用意されているようです。ここでは FileZilla_3.2.4.1_win32-setup.exe (推奨) を選択します (図 2)。自動でダウンロードが開始されない場合は、[Click here to download manually](#) をクリックしてファイルを保存します (図 3)。



図 1 トップ画面

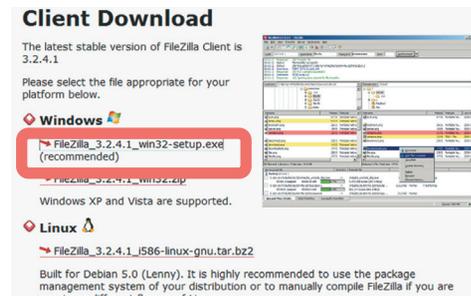


図 2 ダウンロード画面



図 3 ダウンロード画面のつづき

1. 2 インストール

ダウンロードしたファイル FileZilla_3.2.4.1_win32-setup.exe をダブルクリックしてインストール作業を始めます。以降インストーラの問い合わせには、全て既定値を設定しています。

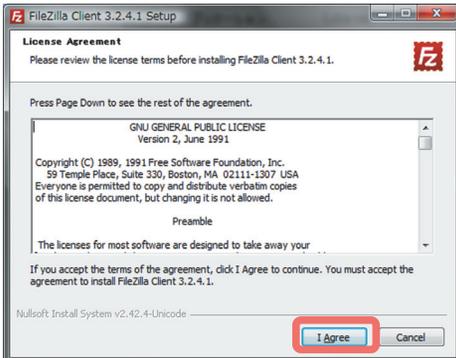


図 4 ライセンス同意

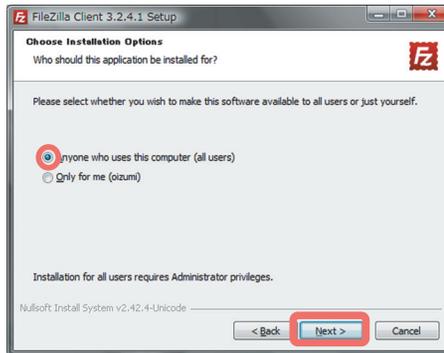


図 5 FileZilla 利用者の設定

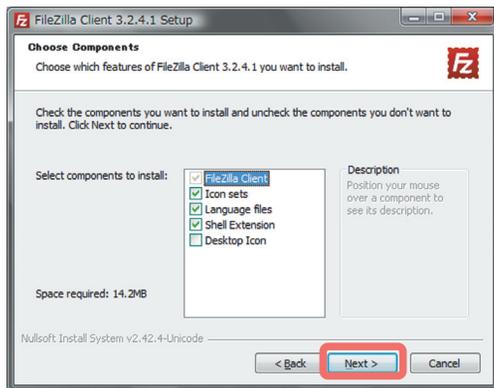


図6 コンポーネントの選択

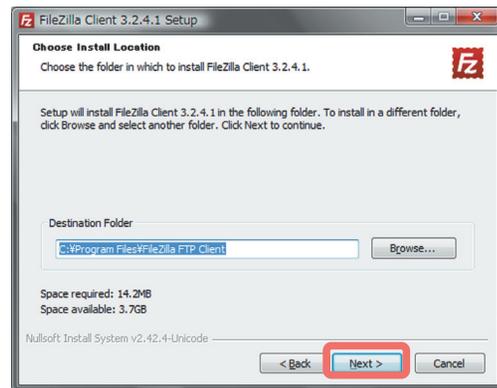


図7 インストールフォルダの選択

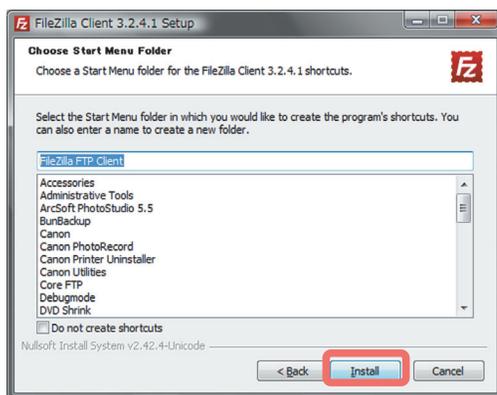


図8 メニューフォルダの選択とインストール開始

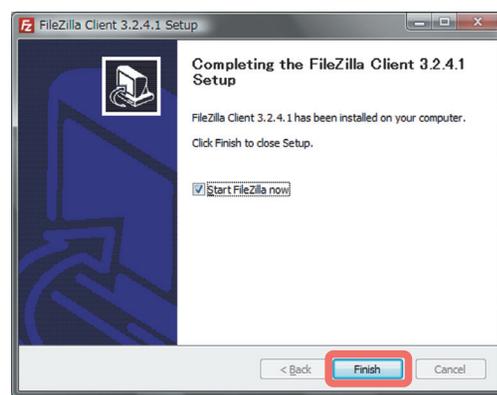


図9 インストール終了

インストールが正常終了すると、FileZilla が自動で起動します（図10）。

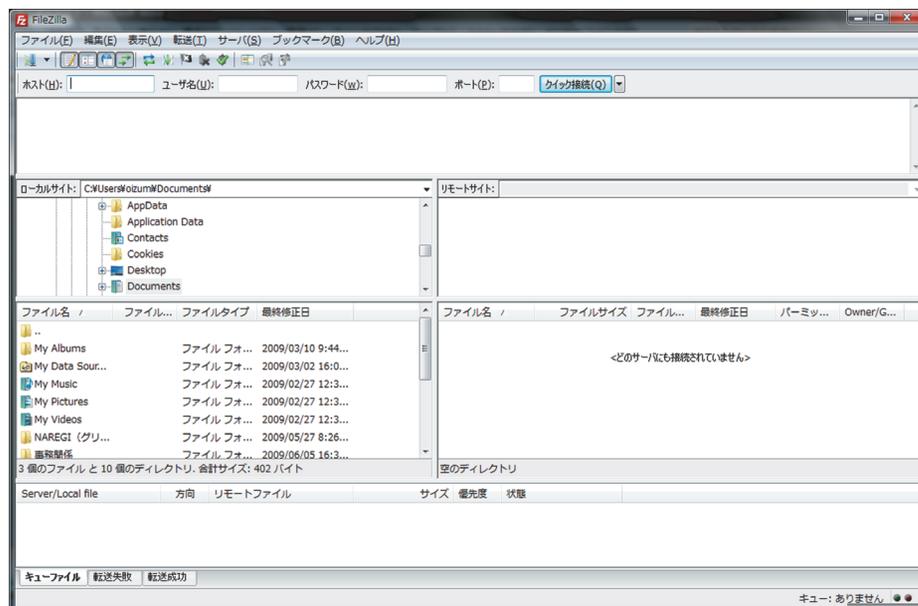


図10 起動画面

2. 各種設定

センターの並列コンピュータシステムに接続する設定を行います。まず、設定値を入力する画面を表示させます。起動画面左上の [ファイル] → [サイトマネージャ] をクリックすると、設定値を入力する画面 (図 1 1) が表示されますので、[新しいサイト] をクリックして各種設定値を入力します。

ここでは、並列コンピュータシステムに **FTP over TLS/SSL** 方式の暗号化通信を用いて接続する例を示します。表 1 の設定値①から⑥までを入力し、最後に [了解] をクリックして設定は完了です (図 1 2)。なお、**FTP over TLS/SSL** 方式のファイル転送を利用するには、センターへ利用者登録が必要です。くわしくは最終章「4. おわりに」を参照ください。



図 1 1 サイトマネージャ画面

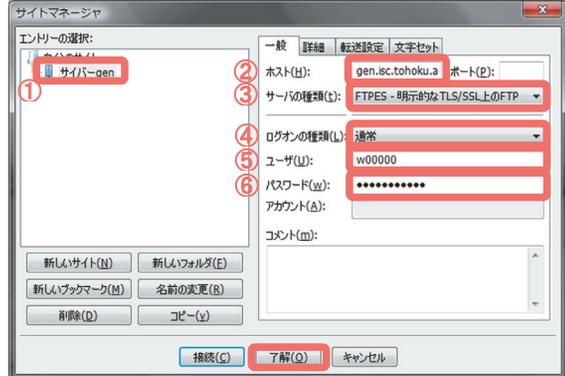


図 1 2 設定値を入力

表 1 設定項目と設定値

項目	設定値	備考
①新規サイト	例：サイバー-gen	この設定に対して、適当な名称をつけます。
②ホスト	gen.isc.tohoku.ac.jp	並列コンピュータシステム
③サーバの種類	FTPES - 明示的な TLS/SSL の FTP	暗号化通信の設定
④ログオンの種類	通常	—
⑤ユーザ	(利用者番号)	当センターの利用者番号
⑥パスワード	(パスワード)	当センターのパスワード

3. 使い方

3. 1 接続

並列コンピュータシステムに接続します。画面左上 [サイトマネージャを開く] アイコンの右 [▼] をクリックすると、2. の①で設定した名称 [サイバー-gen] が表示されますのでクリックします (図 1 3)。続いて「不明な証明書」ウィンドウが表示されますが、そのまま [了解] をクリックします (図 1 4)。(センターのプライベート認証局で発行した証明書のため、不明な証明書と表示されます。) 画面右側に並列コンピュータシステムのディレクトリ構成が表示されると、接続は完了です (図 1 5)。



図 1 3 接続アイコン



図 1 4 証明書

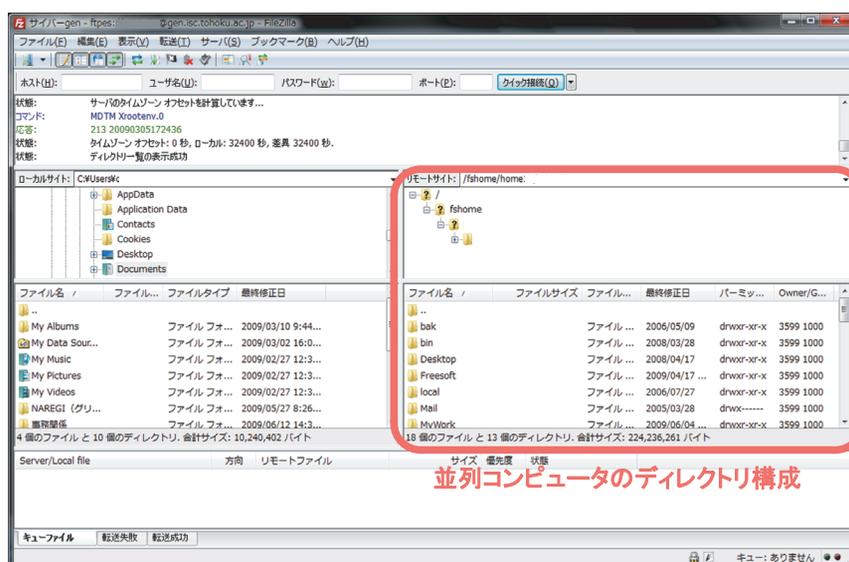


図 1 5 接続画面

3. 2 ファイル転送

画面左半分のローカルサイトが Windows パソコンのフォルダで、右半分のリモートサイトが並列コンピュータシステムのホームディレクトリです。転送したいファイルまたはフォルダを、目的のサイトにドラッグ&ドロップするだけで転送が開始されます (図 1 6)。

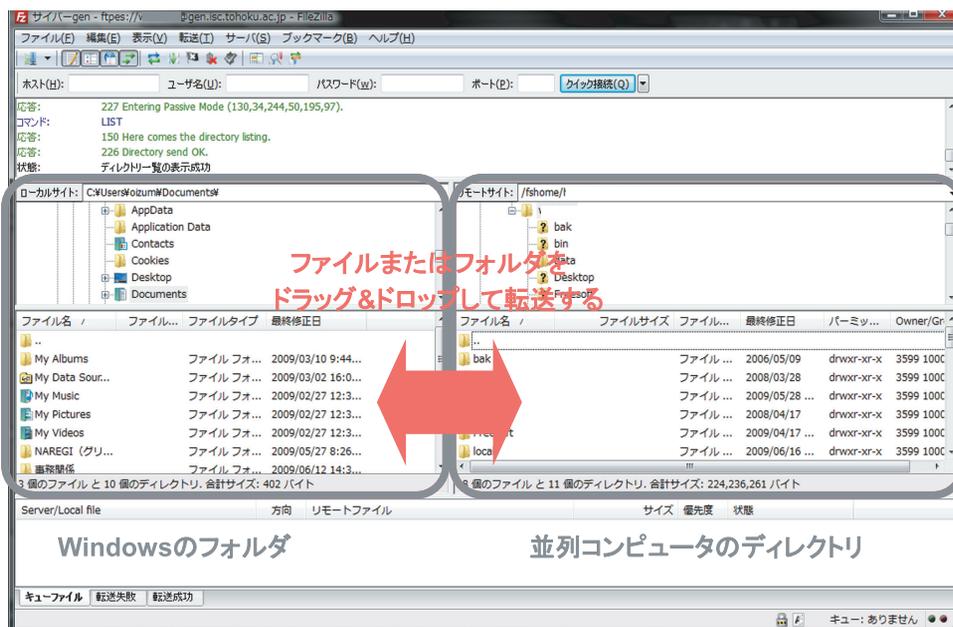


図 1 6 ドラッグ&ドロップによるファイル転送

例えば、並列コンピュータ上の data ディレクトリの全ファイルを Windows の Documents フォルダに転送するとします。まず、画面右リモートサイトに data ディレクトリを見つけ、画面左のローカルサイトが Documents フォルダであることを確認します。次に、data ディレクトリをドラッグし画面左枠内の余白あたりにドロップすると、data ディレクトリ以下全てのファイル転送が始まり、画面下キューファイルに転送状況が表示されます (図 1 7)。転送が終了するとキューファイルから表示は消え、結果に応じて転送成功または転送失敗に転送記録が残ります。

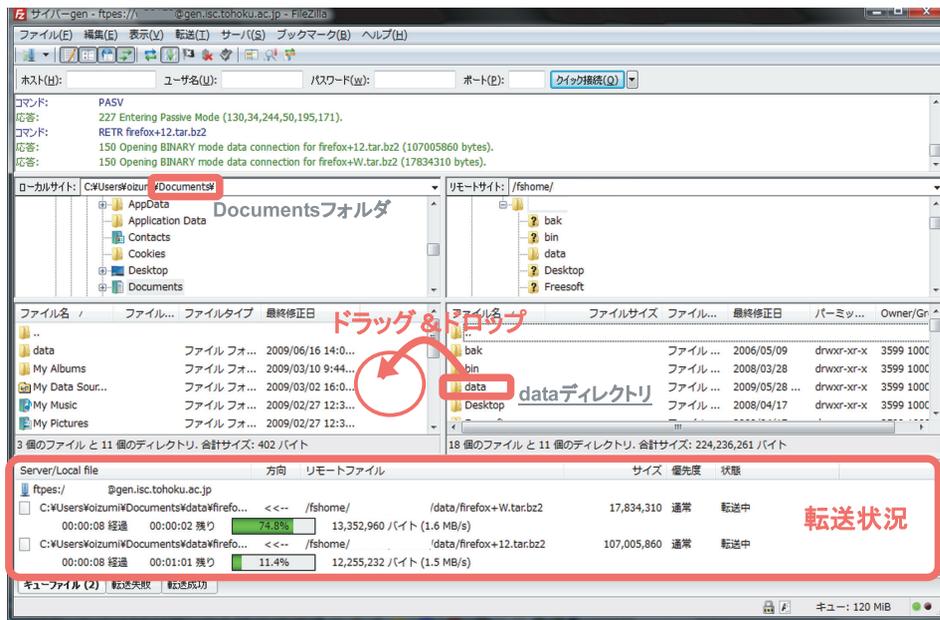


図 1 7 data ディレクトリの転送例

ドラッグ&ドロップ方式以外にも、ファイル名やディレクトリ名を右クリックして操作メニューを表示させ転送する方法もあります。用途に合わせてご利用ください。

4. おわりに

FileZilla Client を用いたファイル転送について、インストールから設定、転送まで基本的な手順を解説しました。今回紹介した FTP over TLS/SSL を利用するには、センターへの利用者登録と FileZilla client のような TLS/SSL 対応の FTP クライアントソフトが必要です。センターでの TLS/SSL による暗号化通信は、利用者番号とパスワード通信のみ暗号化し、データ転送は暗号化せず平文で通信することで転送速度の高速化を実現しております。SSH (SFTP, SCP) による転送速度が思わしくない等、ファイル転送を少しでも速くしたいとお考えの方はぜひお試しください。

FTP over TLS/SSL 試験サービス

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 利用申請”としてください。
共同研究支援係 rs-sec@isc.tohoku.ac.jp

[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。

費目別の請求書発行について (No.93)

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。

(共同利用支援係, 会計係)

利用負担金額の表示コマンドについて (No.93)

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)



サイバーサイエンスセンター前
整備中の青葉山新キャンパス



— 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

夏も終わり、すっかり秋めいてまいりました。最近、なぜか、時間の経過が非常に速く感じるこの頃です。

今年の夏はドイツのシュトゥットガルト大学高性能計算センター(HLRS)に、研究員として赴くチャンスをいただき、約6週間のドイツ生活を満喫してまいりました。HLRSは、当センターと同じベクトル型の計算機だけでなく、汎用クラスタ、GPUクラスタ等、様々な大規模計算機を運用しているドイツで最大、ヨーロッパ有数の大型計算機センターです。HLRSのメンバーとの研究生活は、好奇心・探究心を刺激される日々の連続でした。また、日本とは大きく異なる環境での日常生活は、はじめての一人暮らしを始めたときのように、如何に周りの人間に支えられて、自分が生活をしているのかを改めて痛感させられるものでした。HLRSで得た経験、学んだことをサイバーサイエンスセンターの運営、今後の研究生活に反映していけるよう、がんばっていきたいと思います。ドイツから戻り2週間しか経ちませんが、脂っこい肉料理、山盛りの芋料理を懐かしく感じています・・・。(R.E)

本年4月に情報基盤課内で組織の改編が行われ、システム管理係がなくなり新たに共同利用支援係、共同研究支援係ができました。わたしが東北大学に勤務した当初は大型計算機センターという名称で、次に情報シナジーセンターとなり、現在ではサイバーサイエンスセンターと名称を変えています。また、現在わたしの名刺の肩書きにはセンターという文字はなく情報部情報基盤課となっております。これまで組織や係の名称は変われども業務内容に大きな変化はなかったのですが、今回は2部屋に机を持ち1階と3階を往復する毎日です。1階で仕事をするようになってから利用者の皆様と接する機会が格段に増えました。これまで以上に利用者の立場にたったサービスを提供していきたいと日々感じております。(また、1階と3階の移動にはなるべく階段の使用を心がけたいと思います。)(S.O)

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 10 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.4 2009-10

[共同研究成果]

- 蔵王おろしに伴った非定常風の数値実験…………… 沢田 雅 洋 1
岩崎 俊 樹
- メゾ周期構造体における電磁波散乱の高精度数値計算…………… 岩長 祐 伸 9
- 第一原理に基づく大規模電子状態・電子輸送特性計算…………… 小野 倫 也 19
江上 喜 幸
後藤 英 和

[研究成果]

- ポテンシャル勾配を駆動力とする物質拡散方程式の数値解析における
 α マルティプリケーション法の提案…………… 横堀 壽 光 27
大見 敏 仁
根本 剛 直
上杉 智 治

[報告]

- 平成21年度 TOPIC ネットワーク担当職員研修会を仙台で開催しました…………… 37

[解説]

- 高速ファイル転送の試験サービス…………… 39
- ファイル転送ソフト FileZilla Client 導入ガイド…………… 40

[Web 版大規模科学計算システムニュース] より…………… 45

- ・ 費目別の請求書発行について (No.93)
- ・ 利用負担金額の表示コマンドについて (No.93)

執筆要項…………… 47

編集後記…………… 48

