TOHOKU
UNIVERSITY

ISSN 0286-7419

SENAC 2010—4

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.43 No.2 2010—4

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

大規模科学計算システム関連案内

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

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

階	係・室名	電話番号(内線) e-mail	主なサービス内容	サービス時間 月～金
一階	共同利用支援係 （受　付）	022-795-3406(3406) FAX:022-795-6099 uketuke@isc.tohoku.ac.jp	各種申請書、講習会、利用相談、広報、センターへの質問や要望の受付等	8:30～17:15
	利用相談室	022-795-6153(6153) sodan05@isc.tohoku.ac.jp	計算機利用全般に関する相談 大判プリンタ、利用者端末等の利用	14:00～16:00 8:30～21:00
	利用者談話室	(3444)	各センター広報の閲覧	8:30～21:00
	展　示　室(分散コンピュータ博物館)		歴代の大型計算機等の展示	8:30～17:15
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ト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。

[大規模科学計算システムの利用法]

並列コンピュータ Express5800の利用法

情報部情報基盤課　共同研究支援係　共同利用支援係
サイバーサイエンスセンター　スーパーコンピューティング研究部

はじめに

並列コンピュータ Express5800 は、最大 32 並列による並列処理やベクトル化に不向きなプログラムの高速な演算が可能であり、また Gaussian 等アプリケーションプログラムも、より高速化されています。バッチ処理においては、ジョブ管理システム NQS II を使用しています。この資料では、Express5800 の利用法について説明します。

システム構成

システム構成は、既設のシステムを含め図1のようになっています。

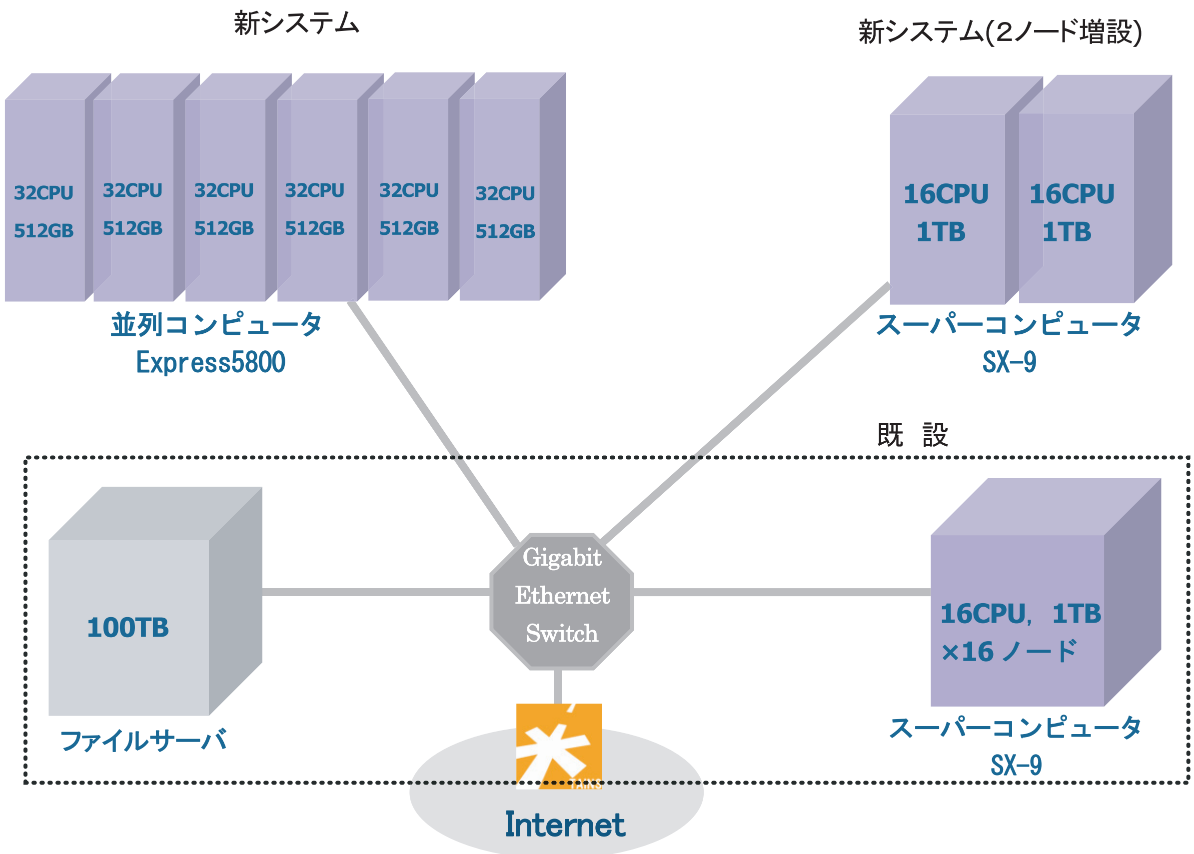


図1　システム構成

並列コンピュータ Express5800

並列コンピュータ Express5800 の1つのノードは、Intel 最新の 64 ビットプロセッサを 32 台と 512GB の主記憶装置を搭載しています。1CPU あたり 9.06GFLOPS の計算能力を有しますので、ノードあたりの最大演算性能は 289.92GFLOPS となります。ベクトル演算に不向きなプログラムの高速な実行が可能です。また、スーパーコンピュータ SX-9 のフロントエンドサーバとしての役割も担っています。

スーパーコンピュータ SX-9

スーパーコンピュータ SX-9 は、既設のシステムに 2 ノード増設し、合計 18 ノードで構成されます。並列処理はノード内 16 並列まで可能で、自動並列化、OpenMP、MPI を使った並列処理が実行できます。複数のノードを使用した並列処理は、MPI プログラムの利用により最大 64 並列まで実行可能です。

ログイン

並列コンピュータ Express5800 にログインします。ログインは、SSH(Secure SHell)を利用します（リスト1）。はじめて接続する場合、コマンド入力後
”Are you sure you want to continue connecting (yes/no)?”
と問い合わせがありますので yes を入力してからパスワードを入力します。

リスト1　並列コンピュータへのログイン

```
yourhost$ ssh  gen.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号
Password: パスワード

[利用者番号@gen ~]$
```

Windows からログインする場合は、Putty 等 SSH 対応のリモート接続ソフトをご利用ください。

センターに利用登録すると、図１すべてのサーバが利用可能となります。
ログイン名とパスワードは各サーバで共通です。ログイン名は利用者番号を用い、パスワードは初期パスワードが設定されていますので yppasswd コマンドで速やかに変更してください（リスト2）。また、パスワードはセキュリティ保護のためときどき変更することをお奨めします。利用登録時のログインシェルは csh を設定しています。tcsh 等に変更したい場合は ypchsh コマンドをご利用後、再ログインしてください（リスト3）。
ホームディレクトリはファイルサーバの「/uhome/利用者番号」となります。NFS(Network File System)によるファイル管理を行っていますので、スーパーコンピュータ、並列コンピュータから共通に利用できます。

リスト2　パスワードの変更

```
gen00$ yppasswd
Changing password for x2xxx9.
Changing password x2xxx9
(current)UNIX Password: 現在のパスワード
New UNIX password: 新しいパスワード
Retype new UNIX password: 新しいパスワード（再度）
Password: all authentication tokens updated successfully.
```

リスト3　ログインシェルの変更（tcsh への変更例）

```
gen00$ ypchsh
Changing NIS account information for x2xxx9 on gen00.
Please enter Password: パスワード

Changing login shell for x2xxx9 on gen00.
To accept the default, simply press return.
Login Shell [/bin/csh]: /bin/tcsh
The login shell has benn changed on kanri-ux.
```

並列コンピュータの日本語環境は、UTF-8 となっております。日本語を表示させる場合には、接続ソフトウェアの文字コードを UTF-8 としてください。

プログラミング言語、ライブラリ

プログラミング言語および科学技術計算用ライブラリとして表1に示すものが利用できます。なお、ASL はコンパイル時のライブラリ指定(-l オプション)は不要です。

表1　プログラミング言語およびライブラリ

Fortran95	ISO/IEC 1539-1:1997,自動並列化, OpenMP
C++	ISO/IEC 14882:1998,自動並列化, OpenMP
MPI	並列処理ライブラリ
ASL	Fortran95 用科学技術計算ライブラリ
Math Kernel Library	数値演算ライブラリ

ファイルエディット

ソースファイルは、並列コンピュータの emacs エディタまたは vi エディタで作成します。研究室等のパソコンにあるソースファイルを利用するには、gen.isc.tohoku.ac.jp にファイル転送してください。送り元のホストが Windows の場合、転送モードの設定を"ASCII"にすることで適切な改行コードで転送できます。転送手順につきましては、Web ページ（http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/USE/FTP/index.html）をご参考ください。

コンパイル

●Fortran （自動並列・OpenMP）

【形式】 **f95** オプション ソースファイル名

主なオプション

-parallel	自動並列化機能を利用する。
-openmp	OpenMP を利用する。
-O0	最適化を無効にする。
-O1	最適化を行うが、コードサイズが増える最適化は行わない。
-O2 または -O	一般的な最適化を行う。（規定値）

-O3	高度の最適化（プリフェッチ、スカラリプレスメント、ループ変換等）を行う。
-ip	インライン展開を行う。
-c	コンパイルのみ行う。（リンクはしない）
-o	実行可能形式のオブジェクトファイルの名前を指定する。省略時は a.out になる。
-w90	非標準 Fortran 機能に関する警告メッセージを抑止する。
-r8	精度の自動拡張を行う。（倍精度化）
-help	オプションの種類と説明を表示する。

ソースファイル名

Fortran のソースプログラムファイル名を指定します。複数のファイルを指定するときは、空白で区切ります。
ソースファイル名には、サフィックス.f90 か.F90（自由形式）、または.f か.F（固定形式）が必要です。

●Fortran（MPI）

【形式】**mpif95** オプション MPI ソースファイル名

主なオプション

-O0	最適化を無効にする。
-O1	最適化を行うが、コードサイズが増える最適化は行わない。
-O2 または -O	一般的な最適化を行う。（規定値）
-O3	高度の最適化（プリフェッチ、スカラリプレスメント、ループ変換等）を行う。
-ip	インライン展開を行う。
-c	コンパイルのみ行う。（リンクはしない）
-o	実行可能形式のオブジェクトファイルの名前を指定する。省略時は a.out になる。
-w90	非標準 Fortran 機能に関する警告メッセージを抑止する。
-r8	精度の自動拡張を行う。（倍精度化）
-help	オプションの種類と説明を表示する。

ソースファイル名

Fortran のソースプログラムファイル名を指定します。複数のファイルを指定するときは、空白で区切ります。
ソースファイル名には、サフィックス.f90 か.F90（自由形式）、または.f か.F（固定形式）が必要です。

●C/C++（自動並列・OpenMP）

【形式】**cc** オプション ソースファイル名

主なオプション

-parallel	自動並列化機能を利用する。
-openmp	OpenMP を利用する。
-O0	最適化を無効にする。

-O1	最適化を行うが、コードサイズが増える最適化は行わない。
-O2 または -O	一般的な最適化を行う。(規定値)
-O3	高度の最適化(プリフェッチ、スカラリプレスメント、ループ変換等)を行う。
-ip	インライン展開を行う。
-c	コンパイルのみ行う。(リンクはしない)
-o	実行可能形式のオブジェクトファイルの名前を指定する。省略時は a.out になる。
-help	オプションの種類と説明を表示する。

ソースファイル名

C/C++のソースプログラムファイル名を指定します。複数のファイルを指定するときは、空白で区切ります。
ソースファイル名にはサフィックス .c 、C++プログラムのソースファイル名にはサフィックス .cc または .C が必要です。

●C/C++ (MPI)

【形式】**mpicc オプション ソースファイル名**

主なオプション

-O0	最適化を無効にする。
-O1	最適化を行うが、コードサイズが増える最適化は行わない。
-O2 または -O	一般的な最適化を行う。(規定値)
-O3	高度の最適化(プリフェッチ、スカラリプレスメント、ループ変換等)を行う。
-ip	インライン展開を行う。
-c	コンパイルのみ行う。(リンクはしない)
-o	実行可能形式のオブジェクトファイルの名前を指定する。省略時は a.out になる。
-help	オプションの種類と説明を表示する。

ソースファイル名

C/C++のソースプログラムファイル名を指定します。複数のファイルを指定するときは、空白で区切ります。
ソースファイル名にはサフィックス .c 、C++プログラムのソースファイル名にはサフィックス .cc または .C が必要です。

プログラムの実行

コンパイルして作成された実行形式ファイルを実行するには、以下の2つの処理方法があります。通常はバッチ処理を利用します。

バッチ処理

バッチ処理は、実行の手続きをジョブという単位でジョブ管理システムに登録し、一括に処理します。ジョブ管理システムはNQSⅡ(Network Queuing SystemⅡ)を用意しており、ジョブの操作はNQSⅡのコマンドで行います。通常のプログラム(長時間実行するプログラム、並列実行するプログラム等)はバッチ処理で実行します。

会話型処理

会話型処理は、コマンドラインでプログラムを実行する形式です。CPU 時間や使用できるメモリサイズに制限がありますので、短時間の演算やデバッグ作業にお使いください。

バッチ処理

プログラムの実行は、NQSⅡのコマンドを用いて操作します。図2は作業の流れを示しています。まず NQSⅡにプログラムの実行を依頼するため、実行の手続きを書いたシェルスクリプトファイルを作成します。作成したファイルはバッチリクエストとして NQSⅡに投入することで、実行の依頼をします。NQSⅡではキューと呼ばれる実行クラスがあり、並列数やメモリサイズの違いにより複数のキューを設定しています。プログラムに合わせ適切なキューを1つ選択し投入します。リクエストの順番が来ましたら、NQSⅡは自動的に実行します。

リクエスト投入後は、リクエスト状態の確認やキューの込み具合等の確認、また投入済みのリクエストをキャンセルすることも可能です。プログラムが終了するとリクエストはキューの情報から消え、標準出力ファイルと標準エラー出力ファイルが出力されます。

バッチリクエストの作成
↓
バッチリクエストの投入　　qsub コマンド
↓
バッチリクエストの状態確認　　qstat コマンド
↓　　　　↓
バッチリクエストの終了　　バッチリクエストのキャンセル　　qdel コマンド

図2　NQSⅡによるリクエストの流れ

バッチリクエストの作成

バッチリクエスト用のシェルスクリプトファイルを作成します。プログラムの実行手続きを、通常のシェルスクリプトと同じ形式で記述します。csh スクリプトと sh スクリプト、どちらでも記述できます（以降、解説は csh スクリプトとします）。リクエストファイル名は任意です。

リスト4はバッチリクエストファイルの一例です。実行形式ファイル　a.out　を実行する手続きを記述しています。

リスト4　バッチリクエストファイル例

# test job-a	コメント行
cd work	作業ディレクトリへ移動
a.out	実行形式ファイル名

- #が先頭の行は、コメント行です。動作には影響しません。
- cd work で作業ディレクトリ（実行形式ファイルのあるディレクトリ）へ移動します。省略するとホームディレクトリを指定したことになります。
- a.out　はコンパイルして作成した実行形式ファイルです。あらかじめ会話型処理で作成しておきます。自動並列、OpenMP 用オブジェクトも、同じ形式で指定します。

●作業ディレクトリの指定

NQSⅡ用の環境変数のひとつとしてPBS_O_WORKDIR 変数があります。この変数には、qsubコマンドを実行した時点のカレントディレクトリが設定されます。

NQSⅡの作業ディレクトリは規定値でホームディレクトリとなりますので、通常 cd コマンドで実行ファイルのある作業ディレクトリに移動する必要があります。 PBS_O_WORKDIR 変数を設定することで、ディレクトリの具体名を記述する必要がなくなります。

リスト5　バッチリクエストファイル（環境変数 PBS_O_WORKDIR の指定）

```
# test job-a1
cd $PBS_O_WORKDIR                  作業ディレクトリを環境変数で指定
a.out
```

●実行時のデータファイル指定

Fortran で、入出力ファイルを割り当てる環境変数はFORTnです。（n が 1～9 の場合には 0 をつけず 1 桁で指定します）

　　正しい指定方法:　　setenv FORT2 datafile
　　間違った指定方法:　setenv FORT02 datafile

リスト6　バッチリクエストファイル（入出力ファイルの指定例）

```
# test job-b
setenv FORT1 datafile            装置番号１に、ファイル datafile を割り当てる
cd $PBS_O_WORKDIR
a.out < infile > outfile         標準入出力ファイルはリダイレクションでも可能
```

バッチリクエストの投入

プログラムの実行は、作成したバッチリクエストを NQSⅡに投入して行います。投入されたリクエストは、順番が来ると自動的に実行されます。

【形式】　**qsub** オプション　バッチリクエストファイル名

システムからのメッセージがリスト7の形式であれば、リクエストは正常に受け付けられています。リクエストID(1234)は一意なもので、リクエストの状況確認やキャンセル等、ジョブの操作の際に必要となります。

リスト7　qsub コマンドの実行例

```
gen$ qsub -q a8 job-a
Request 1234.job submitted to queue: a8.
```

主な qsub コマンドオプション

-q	リクエストを投入するキュー名(クラス名)を指定します。(必須)
-N	リクエスト名(ジョブ名)を指定します。指定がなければ、バッチリクエストファイル名がリクエスト名になります。
-o	標準出力のファイル名を指定します。指定がなければ、リクエスト投入時のディレクトリに「リクエスト名.o リクエスト ID」のファイル名で出力されます。
-e	標準エラー出力のファイル名を指定します。指定がなければ、リクエスト投入時のディレクトリに「リクエスト名.e リクエスト ID」のファイル名で出力されます。
-j o	標準エラー出力を標準出力と同じファイルへ出力します。
-l cputim_job=hh:mm:ss	実行打ち切りの CPU 時間を指定します。設定時間は、時:分:秒を hh:mm:ss の形式で指定します。この指定がなければ無制限となります。並列処理で実行するときは、各プロセスの合計 CPU 時間を指定します。
-m b	リクエストの実行が開始したときにメールが送られます。
-m e	リクエストの実行が終了したときにメールが送られます。
-M メールアドレス	リクエストに関するメールの送信先を指定します。指定がなければ、「利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp」宛に送られます。

●キュー

-q オプションで指定するキュー名の一覧です。単一 CPU で実行するプログラムは as、並列プログラムは a8,a16,a32 のいずれかに投入します。並列数に応じて適切なキューにリクエストを投入してください。並列用のキュー(a8,a16,a32)を利用するには、並列用のオブジェクトを作成している必要があります。am、am2 は、アプリケーションプログラム Marc 専用キューです。

表2 キュー名

キュー名 (ジョブクラス)	利用可能 CPU 数 (並列数)	CPU 時間	メモリサイズ制限 (GBytes)
as	1	無制限	16
am(Marc 専用)	1	無制限	16
am2(Marc 専用)	1	無制限	128
a8	8	無制限	128
a16	16	無制限	256
a32	32	無制限	512

●qsub コマンドオプションの埋め込み

qsub コマンドに毎回オプションを入力することもできますが、手間を省くためバッチリクエストファイルに指定しておくこともできます。

指定方法は、最初のシェルコマンドより前の行に、#PBS という文字列を先頭に指定します。#PBS の後に空白を一文字以上入れ、指定したいオプションを続けます。一行に複数のオプション指定も可能です。リスト5は、2行目で a8 クラスのキューを指定(-q)、3行目で標準エラー出力を標準出力ファイルにひとまとめにする(-jo)、さらにリクエスト名を reqname とする(-N)を、それぞれ指定しています。

またコマンド列と埋め込みオプションに、同じオプションを指定した場合にはコマンド列の方を有効とします。

リスト8　バッチリクエストファイル（オプションの埋め込み）

```
# test job-a2
#PBS -q a8                    埋め込みオプション
#PBS -jo -N reqname           埋め込みオプション（複数）
cd $PBS_O_WORKDIR
a.out
```

バッチリクエストの状態確認（1）

投入したリクエストの状態を表示します。実行待ち状態のときは、待ち順も表示します。

【形式】　**qstat**

リスト9　qstat コマンド表示例

```
gen$ qstat
  RequestID      ReqName  UserName Queue     Pri STT S   Memory  ACCPU Elapse R H M Jobs
  -------------- -------- -------- -------   --- --- - -------- ---- ------ - - - ----
  370.job        reqname   x2***9    a8        0 RUN  -  732.1B 42350 43012  Y Y Y    1
1:371.job        jobA     x2***9   a16        0 QUE  -  0.0B       0     0   Y Y Y    1
1:373.job        jobB     x2***9   a32        0 QUE  -  0.0B       0     0   Y Y Y    1
```

主な表示項目の解説

RequestID	リクエストID 待ち状態(QUE)のリクエストについては、先頭に待ち順の番号がつきます。番号がないのは、実行中(RUN)です。
ReqName	リクエスト名
UserName	ジョブの所有者
Queue	キュー名
STT	ステータス （QUE:待ち、RUN:実行中）
Memory	使用メモリサイズ （Byte）
ACCPU	演算時間(sec)／並列演算の場合、使用CPUの総演算時間 （sec）
Elapse	経過時間 （sec）

システム内に自分のジョブが存在しない場合は、ヘッダのみ表示されます。

リスト10　ジョブの終了

```
gen$ qstat
RequestID      ReqName  UserName Queue     Pri STT S   Memory  ACCPU Elapse R H M Jobs
-------------- -------- -------- -------   --- --- - -------- ---- ------ - - - ----
                                                            ヘッダのみ表示されます。
```

バッチリクエストの状態確認（2）

キューの情報を表示します。各ジョブクラスの件数が表示されますので、サーバの混雑度がわかり

ます。

【形式】　**qstat -Q**

リスト11 -Q オプションの表示例

```
gen$ qstat -Q
[EXECUTION QUEUE] Batch Server Host: job
========================================
QueueName       SCH JSVs ENA STS  PRI  TOT ARR WAI QUE PRR RUN POR EXT HLD HOL RST SUS MIG STG CHK
--------------- --- ---- ------- ---- ------------------------------------------------------------
a16               0    0 ENA ACT   32    1   0   0   0   0   1   0   0   0   0   0   0   0   0   0
a32               0    0 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
a8                0    0 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
am2               0    0 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
am                0    0 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
as                1    4 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
p16               1    4 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
p32               1    2 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
p8                1    0 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
s                 0    1 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
ss                0    1 ENA ACT   32    0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
--------------- --- ---- ------- ---- ------------------------------------------------------------
 <TOTAL>                                5   0   0   2   0   3   0   0   0   0   0   0   0   0   0
--------------- --- ---- ------- ---- ------------------------------------------------------------
```

枠で囲った箇所が、並列コンピュータのキューです。

主な表示項目の解説

QueueName	キュー名
TOT	リクエストの総数
QUE	待ちの件数
RUN	実行中の件数

バッチリクエストのキャンセル

投入済みのリクエストを取り消すこともできます。

【形式】　**qdel** リクエストID

リスト12 qdel コマンドの表示例

```
gen$ qdel 1234
Request 1234.job was deleted.
```

会話型処理

会話型処理は、短時間の演算やデバッグ作業に使用します。一般的なUNIXを利用する手順と同様で、コマンドラインから実行形式ファイル名を入力し実行する形式です(リスト13)。表3は会話型処理の制限値です。

リスト13 会話型処理の例(a.outを実行する)

```
yourhost$ ssh gen.isc.tohoku.ac.jp -l 利用者番号        genにログインする
     :
gen$ a.out
  (実行中)
gen$
```

表３　会話型処理の制限値

CPU時間(時間) (並列処理は総CPU時間)	メモリサイズ (GBytes)	同時使用CPU台数 (並列数)
1	8	4

MPIプログラムの実行

MPIプログラムは、mpirunコマンドを使用して実行します。

リスト14 MPIプログラム用バッチリクエストファイル例

```
# test job-a                  コメント行
cd work                       作業ディレクトリへ移動
mpirun -n 32 a.out            実行形式ファイル名
```

・-n または-npは起動させるプロセス数を指定します。(省略時は1となり並列されません)

ハイブリッド並列プログラムの実行(MPIと自動並列/OpenMPを組み合わせた並列)

ハイブリッド並列プログラム実行時は「プログラム並列数＝MPI 並列数×SMP 並列(自動並列/OpenMP)」になります。MPIプログラムの並列数はmpirunコマンドの-nオプションで制御し、自動並列/OpenMP並列数はOMP_NUM_THREADS環境変数で制御します。

リスト15 ハイブリッド並列プログラム用バッチリクエストファイル例
(MPI並列数4、自動並列数8の32並列で実行する場合)

```
# test job-a                  コメント行
setenv OMP_NUM_THREADS 8      自動並列/Open MPでの並列数
cd work                       作業ディレクトリへ移動
mpirun -n 4 a.out             実行形式ファイル名
```

その他

プログラムの使用メモリサイズ

プログラムを実行した際、使用するメモリサイズをバイト単位で表示します。あらかじめ、必要とするメモリサイズが判断できます。なお、allocate 等で動的に確保するメモリサイズは含まれません。

【形式】　**size** 実行形式ファイル名

```
gen$ size a.out
1046912 + 140272 + 418928 = 1606112        1,606,112 バイト使用します
```

バイナリファイルの扱い(Fortran の場合)

他のサーバで作成したバイナリファイルを扱う場合、注意が必要です。センターでは、並列コンピュータ Express5800 のエンディアン仕様は Big-Endian に設定しております。もし Little-Endian 仕様のバイナリファイルを扱う場合は、環境変数 F_UFMTENDIAN の設定をクリアします。

Little-Endian 仕様のファイルを扱う設定（csh 形式）

【形式】　**unsetenv F_UFMTENDIAN**

マニュアル

現在準備中です。

アプリケーションプログラム

表4は、アプリケーションプログラム一覧です。それぞれの詳しい利用方法は、センターの Web ページをご覧ください。

Web ページ「アプリケーションプログラム」 http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/

●表4　アプリケーションプログラムとサービスホスト

アプリケーションソフトウェア		サービスホスト
分子軌道計算ソフトウェア	Gaussian	gen.isc.tohoku.ac.jp
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica	
汎用構造解析プログラム	MARC/Mentat	
対話型解析ソフトウェア	MATLAB	
統計解析システム	SAS	

おわりに

ジョブ管理システム NQSⅡを中心に利用方法の解説と、アプリケーションプログラムの紹介をしました。研究の強力なツールとしてセンターのシステムをご活用いただければ幸いです。ご不明な点、ご質問等ございましたら、お気軽にセンターまでお問い合わせください。

[大規模科学計算システムの利用法]

ライブラリ・アプリケーションの紹介

（2010 年 4 月）

共同利用支援係

はじめに

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

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

サービス一覧表

システム	プログラミング言語	ライブラリ	アプリケーション
スーパーコンピュータ SX-9 super.isc.tohoku.ac.jp	Fortran90/SX C++/SX	ASL MathKeisan for SX	
並列コンピュータ Express5800 gen.isc.tohoku.ac.jp	Fortran95 C++	ASL Math Kernel Library	Gaussian09,03 MSC.Marc Mentat Sas Mathematica Matlab

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

大規模科学計算システム ホームページ(以下 「ホームページ」)
http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/

本文中、関連 Web ページについて、ホームページからのリンクを記載しています。ホームページから項目をクリックして参照ください。ライブラリ、アプリケーションの紹介は、ホームページの 「ライブラリ」、「アプリケーション」にあります。本稿中の内容は 2010 年 4 月現在のものですので、今後のバージョンアップや利用方法の最新情報については、これらの Web ページを随時ご確認ください。

ご利用の前に

シェルの初期設定

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

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

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

接続、ファイル転送

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

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

Windows から X アプリケーションを利用する方法

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

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

ライブラリ

スーパーコンピュータ SX-9

Fortran90/SX,C++/SX 用

- 科学技術計算ライブラリ **ASL**
- 数学ライブラリ **MathKeisan for SX**

並列コンピュータ Express5800

Fortran95,C++ 用

- 科学技術計算ライブラリ **ASL**
- 数学ライブラリ **Math Kernel Library**

科学技術計算ライブラリ　ASL

ASL(Advanced Scientific Library)は、科学技術計算の広範な分野の数値シミュレーションプログラムの作成を強力に支援する数学ライブラリです。ASL を用いることによって、難解な数値計算アルゴリズムの詳細に煩わされること無く高度な科学技術計算プログラムを作成することができます。次のような数値計算分野に対応しています。

＜基本機能＞
基本行列演算,連立 1 次方程式(直接法),連立 1 次方程式(反復法),最小二乗法,固有値・固有ベクトル,フーリエ変換とその応用／時系列分析,近似・補間,スプライン関数,数値微分,数値積分,方程式の根,極値問題・最適化,常微分方程式・積分方程式,特殊関数,乱数,行列のデータ格納変換,連立 1 次方程式(直接法),対称連立 1 次方程式(反復法),最小二乗法,固有値・固有ベクトル,高速フーリエ変換(FFT),スプライン関数,3 次元境界要素法用の数値積分法

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

プログラミング言語・コンパイラ

スーパーコンピュータ

Fortran90/SX　・　sxf90,sxmpif90
C++/SX　・　sxcc,sxmpicc

並列コンピュータ

Fortran95　・　f95,mpif95
C++　・　cc,mpicc

利用方法

ASL ライブラリは自動的にリンクされます。設定は特に必要ありません。

コンパイルはすべて並列コンピュータ上で行います。
プログラムのコンパイルについては、「ホームページ」 → 「スーパーコンピュータ SX-9」の「スーパーコンピュータシステム SX-9 利用ガイド」、「並列コンピュータ」の「並列コンピュータの利用ガイド」を参照ください。

スーパーコンピュータのコンパイル

```
[gen00 ~]$ sxf90 source.f         ベクトル版 ASL がリンクされます
[gen00 ~]$ sxf90 -Pauto source.f  並列版 ASL がリンクされます

[gen00 ~]$ sxcc source.c
```

並列コンピュータのコンパイル

```
[gen00 ~]$ f95 source.f
```

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

```
[gen00 ~]$ cc -c source.c
[gen00 ~]$ f95 -cxxlib -nofor_main source.o -laslcint -lasl
```

マニュアル

PDF 形式マニュアルを提供しています。

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

[FORTRAN]

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

1main.pdf　：基本機能編 第 1 分冊
(基本行列演算、固有値・固有ベクトル)
2main.pdf　：基本機能編 第 2 分冊
(連立1次方程式(直接法))
3main.pdf　：基本機能編 第 3 分冊
(連立1次方程式(反復法))
4main.pdf　：基本機能編 第 4 分冊
(フーリエ変換)
5main.pdf　：基本機能編 第 5 分冊
(微分方程式とその応用)
6main.pdf　：基本機能編 第 6 分冊
(特殊関数、乱数)
8main.pdf　：並列処理機能編

[C/C++]

/usr/ap/ASL-man-super/PDF/CINT/pdf/

1main.pdf　：基本機能編 第 1 分冊
(基本行列演算、固有値・固有ベクトル)
2main.pdf　：基本機能編 第 2 分冊
(連立1次方程式(直接法))
3main.pdf　：基本機能編 第 3 分冊
(連立1次方程式(反復法))
4main.pdf　：基本機能編 第 4 分冊
(フーリエ変換)
5main.pdf　：基本機能編 第 5 分冊
(微分方程式とその応用)
6main.pdf　：基本機能編 第 6 分冊
(特殊関数、乱数)
8main.pdf　：並列処理機能編

数学ライブラリ集 MathKeisan for SX 、 Math Kernel Library

MathKeisan for SX は NEC のハイパフォーマンス・コンピュータ用に高度に最適化された数学ライブラリ集です。Math Kernel Library は、Intel プラットフォーム用に最適化された数値演算ライブラリです。

MathKeisan for SX および Math Kernel Library に含まれるライブラリは以下のとおりです。
※MathKeisan for SX および Math Kernel Library のいくつかのサブルーチンについては、同機能のものが ASL にも含まれています。ASL は、日本電気製マシン用に最適化されたライブラリですので、同機能であれば、ASL の利用をお薦めします。

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

プログラミング言語・コンパイラ

MathKeisan for SX（スーパーコンピュータ）

Fortran90/SX ・ sxf90,sxmpif90
C++/SX ・ sxcc,sxmpicc

Math Kernel Library（並列コンピュータ）

Fortran95 ・ f95,mpif95
C++ ・ cc,mpicc

利用方法

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

スーパーコンピュータで LAPACK をリンクする例

```
[gen00 ~]$ sxf90 source.f -llapack -lblas
```

マニュアル

[MathKeisan]

HTML 形式のマニュアルを提供しています。
gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、以下のコマンドでご覧ください。

スーパーコンピュータ SX-9 用
```
[gen00 ~]$ w3m /usr/ap/MathKeisan-man/SX-9/J/index.html
```

[Math Kernel Library]

以下の URL を参考としてください。
インテル MKL http://www.xlsoft.com/jp/products/intel/perflib/mkl/index.html?tab=0

アプリケーション

非経験的分子軌道計算プログラム　**Gaussian09, 03**

Gaussian プリポストシステム　**MolStudio**

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

構造解析用汎用プリプロセッサ　**MSC.Patran**

数式処理プログラム　**Mathematica**

科学技術計算言語　**MATLAB**

データ解析システム　**SAS**

非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian

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

本センターのGaussianには、以下のような特長があります。
* 最大16並列までの並列処理が行え、実行時間の短縮が可能です。
* スクラッチファイル(テンポラリファイル)を専用の高速ディスクに置くことにより、ファイル入出力時間が短縮されます。

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ Gaussian09 RevA.02
Gaussian03 RevE.01

利用方法

Gaussianのプリポストシステムとして MolStudio を提供しております。
「MolStudio」 http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/molst.html
Gaussianの利用方法は
「Gaussianの使い方」 http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/gaussian/
をご覧ください。以下は抜粋です。

実行コマンド

Gaussianのインプットファイルは、拡張子を .com とします。(例: e2_01.com)
※インプットファイルをWindowsのエディタで作成した場合、拡張子.comのファイルはWindowsでは実行ファイルと認識されるため、 誤ってダブルクリックなどでインプットファイルを実行しないようご注意ください。 また、ファイル転送ソフトで gen に転送する際には、アスキーモードを指定して転送を行ってください。

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、 subg09(gaussian03 利用時には、subg03 を利用ください)コマンドに、キュー名と入力プログラム名を指定することにより、バッチリクエストとして実行が行われます。

e2_01.com を解析するコマンド例
(subg09 コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子 .com を省きます)

```
[gen00 ~]$ subg09 a16 e2_01
```

subg09 コマンドで指定できるキュー

キュー名 (ジョブクラス)	利用可能CPU数 (並列数)	CPU時間	メモリサイズ制限 (GBytes)
as	1	無制限	16
a8	8	無制限	128
a16	16	無制限	256

データの大きさなどにより選択してください。

16 並列実行の指定

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

16 並列で実行するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの %NProc=16 を追加します。

手入力の場合は、テキストエディタで先頭行に追加、 MolStuidio 等ではインプットファイル作成画の Link 0 section の項に追加してください。

実行時には、subg09 コマンドでキュー a16 を指定してください。

使用メモリ量の指定

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

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

```
[gen00 ~]$ cat e2_01.com   ← インプットファイルの内容を表示
 %NProc=16     ← 並列数
 %Mem=16Gb     ← メモリ量
 # RHF/6-31G(d) Pop=Full Test

 Formaldehyde Single Point

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

[gen00 ~]$ subg09 a16 e2_01
```

実行結果

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

正常終了ならば、このファイルの末尾に 「Normal termination of Gaussian 09.」というメッセージが出力されます。

ファイルの末尾を表示する tail コマンドで確認できます。

```
[gen00 ~]$ tail e2_01.log
  :
 Job cpu time:  0 days  0 hours  0 minutes 30.7 seconds.
 File lengths (MBytes):  RWF=   11 Int=    0 D2E=    0 Chk=    8 Scr=
1
 Normal termination of Gaussian 09 at Mon Nov 1 12:00:00 2006.
```

結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル 等を参照ください。

チェックポイントファイル

チェックポイントファイルは、デフォルトで作成される結果ファイル（.log ファイル）より詳細な結果が出力され、計算をやり直したり、結果を画像表示するためなどに使用されます。チェックポイントファイルを出力するには、ルートセクションに Link 0 コマンドの%Chk=*チェックポイントファイル名* を追加します。

マニュアル

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

[1] 電子構造論による化学の探求 第二版,ガウシアン社,1998
[2] Gaussian 09 User's Reference
[3] Gaussian 09 IOps Reference
[4] Gaussian 09 Online Manual,http://www.gaussian.com/

Gaussian プリポストシステム MolStudio

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

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

バージョン

R4

お申し込み

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

利用条件（以下の条件をすべて満たしている方）
- 大規模科学計算システムの利用者番号を持っている方
- 当センターでサービスしている Gaussian のプリポストとして利用する方
- 東北大学内の方

CD-ROM は、お手数ですが当センターまで直接取りにいらしてください。お申し込みは、以下の内容のメールでお願いいたします。

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

件名 ：MolStudio 利用申請

内容 ：

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

利用方法

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

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

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

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

```
[gen00 ~]$ mv h2o.gjf h2o.com
```

4. subg09 コマンドにより解析を実行します。
5. 結果ファイルを転送し MolStudio で表示します。
   チェックポイントファイル(.chk)は、Gaussian のユーティリティコマンドにより書式付(.fchk)に変換後転送してください。

マニュアル

インストール時に、PDF 形式のマニュアルが Molstudio インストールディレクトリに作成されます。
また、NEC の MolStudio の Web ページで公開されている MolStudio ワークブック（目的別に具体的な MolStudio の操作手順を解説）も参照ください。

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

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

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

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

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ MSC.Marc /mentat 2008r1

利用方法

Marc のプリポストプロセッサとして、Mentat の他に MSC.Patran も提供しています。
「MSC.Patran」 http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/patran.html
Marc/Mentat の利用方法は
「MSC.Marc の使い方」 http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/marc/
をご覧ください。以下は抜粋です。

run_marc コマンドでの解析実行

実行コマンド

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

gen.isc.tohoku.ac.jp にログイン後、 run_marc コマンドに入力ファイル名を指定し実行することにより、バッチリクエストとして解析が行われます。
(バッチリクエストは **am** (Marc 専用、CPU 時間無制限、最大メモリ 16GB)というキューに投入されます)

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

```
[gen00 ~]$ run_marc -jid job_name -v n
```

run_marc の入力オプション

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

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

解析結果

バッチリクエストが終了すると、主に以下のようなファイルが作成されます。

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

解析時の指定によって、この他にもファイルが作成されます。
それらのファイルの概要は、「マニュアル C 編プログラム入力 付録 B 表 B-1」を参照ください。

終了番号（exit number）

解析結果ファイル(job_name.out)の末尾にある marc exit number により、正常に終了したかエラー

終了か、エラー終了の場合はその原因がわかります。

終了番号を確認する
(tail コマンドで job_name.out の末尾を表示)

```
 [gen00 ~]$ tail job_name.out
*************************************************************

                                  MSC.Marc Exit number 3004

           check marc exit passed
[gen00 ~]$
```

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

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

プリポストプロセッサ Mentat からの解析実行

Mentat の起動

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

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
  :
[gen00 ~]$ mentat
```

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

解析実行

Mentat 上でモデルを作成し、解析のための設定を行った後、

メインメニュー [JOBS] -> [RUN] -> [submit1]

という操作をすることで、バッチリクエストとして解析を実行します。
(バッチリクエストは **am** (Marc 専用、CPU 時間無制限、最大メモリ 16GB)というキューに投入されます)

スタティックメニュー $\boxed{\text{FILES}}$ -> MARC INPUT FILE $\boxed{\text{WRITE}}$

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

サンプルプログラム

Marc

マニュアル E 編に掲載されている例題が、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の /usr/ap/MSC/marc2008r1/demo/にあります。コピーしてご利用ください。

Mentat

マニュアル「ユーザガイド」 に掲載されている例題のプロシジャファイルが、並列コンピュータ gen.isc.tohoku.ac.jp の/usr/ap/MSC/mentat2008r1/examples/marc_ug/にあります。コピーしてご利用ください。

マニュアル

PDF 形式マニュアルを提供しています。

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

和文(MSC.Marc2003 版)　/usr/ap/MSC/mentat2008r1/doc/japanese/

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

English version　/usr/ap/MSC/mentat2008r1/doc/

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

有限要素法プログラム汎用プリポストプロセッサ MSC.Patran

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

MSC.Patran は多くの CAD に対応するダイレクトインターフェースを介して、正確で迅速な CAD 形状の

インポートが可能です。さらに優れた特長として、高水準のメッシュ作成機能や可視化機能に加え、 Marc との親和性が高いことが挙げられます。

バージョン

MSC.Patran2010 Windows 版

お申し込み

利用条件（以下の条件をすべて満たしている方）
- 大規模科学計算システムの利用者番号を持っている方
- 本センターでサービスしている Marc のプリポストとして利用する方
- 東北大学内の方

利用ご希望の方は、 共同利用支援係 までお問い合わせください。

数式処理プログラム Mathematica

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

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ version 7.01.0

利用方法

Mathematica の起動

[X Windows 版]

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

```
yourhost$ ssh -X -L 7100:gen.isc.tohoku.ac.jp:7100 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
  :
[gen00 ~]$ mathematica
```

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

[テキスト版]

```
[gen00 ~]$ math
```

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

マニュアル・参考資料

オンラインマニュアル(英文) が公開されています。以下のページを参照ください。
「ホームページ」 → 「アプリケーション」 → 「Mathematica」
http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/soft/math.html

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

科学技術計算言語 MATLAB

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

サービスホスト・バージョン

gen.isc.tohoku.ac.jp ・ Version 7.10(R2010a)

Toolbox

センターで導入している Toolbox です。

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

Statistics Toolbox
Symbolic Math Toolbox
System Identification Toolbox
Wavelet Toolbox

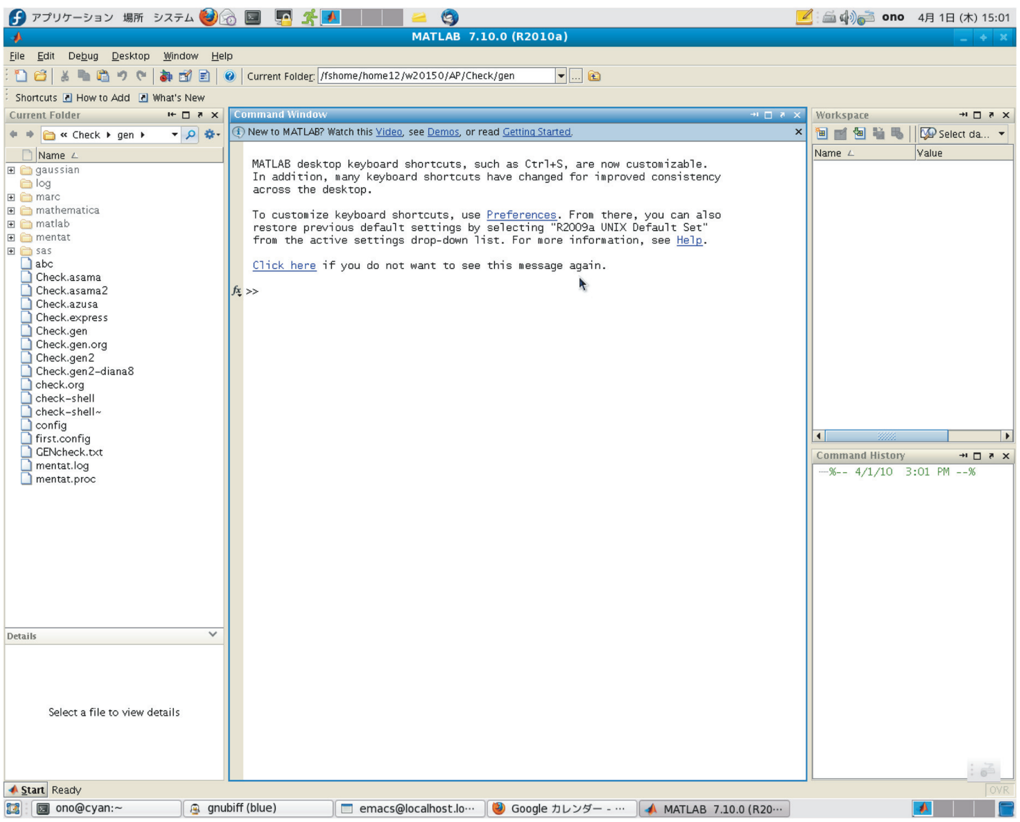
利用方法

MATLAB の起動

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

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
  :
[gen00 ~]$ matlab
```

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



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

サンプルプログラム

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

マニュアル・参考資料

マニュアル

日本語オンラインマニュアルが公開されています。以下のページを参照ください。

「ホームページ」 → 「アプリケーション」 → 「MATLAB」

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

参考資料

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

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

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

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

データ解析システム SAS

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

サービスホスト・バージョン

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

導入プロダクト

当センターで導入している SAS プロダクトです。

Base SAS
SAS/ETS
SAS/GRAPH
SAS/STAT

利用方法

対話型ディスプレイマネージャでの実行

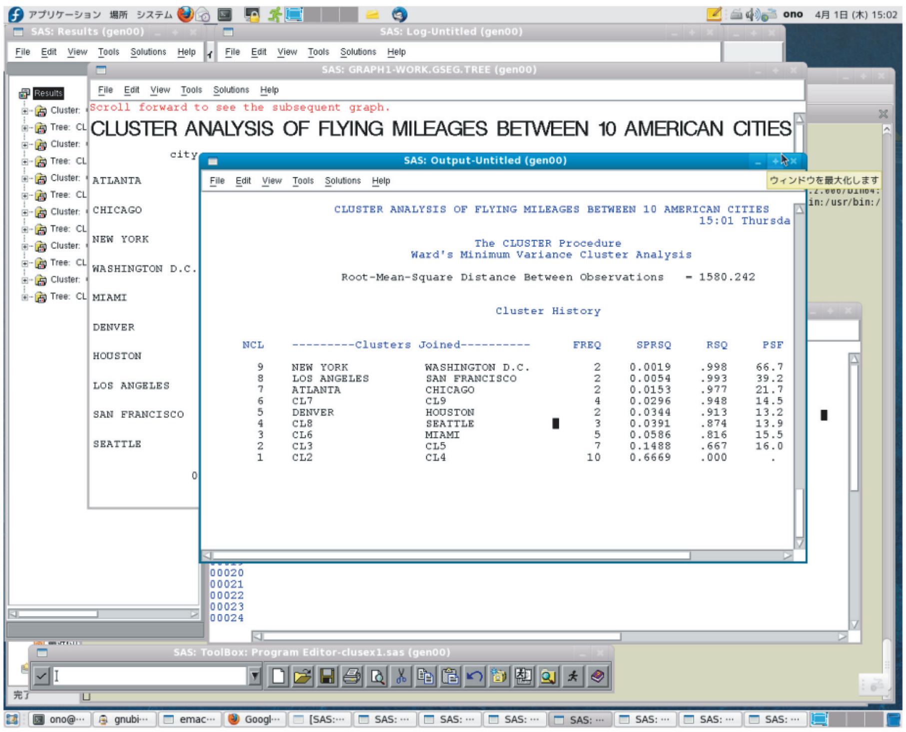
「対話型ディスプレイマネージャ」とは、ウィンドウ画面を使って対話形式で SASシステムに命令を与えたり、メッセージを受けとることの出来る処理モードです。

SAS の起動

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

```
yourhost$ ssh -X 利用者番号@gen.isc.tohoku.ac.jp
  :
[gen00 ~]$ sas
```

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



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

コマンドでの実行

X Window System 環境でなくとも、SAS の利用が可能です。

実行コマンド

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

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

例）test01.sas を実行する
（sas コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子 .sas を省きます）

```
[gen00 ~]$ sas test01
```

実行結果

実行後、カレントディレクトリに 2 つのファイルが作成されます。

test01.lst　　（実行結果）
test01.log　　（ログ）

SAS の基本的な使い方は、参考資料などを参照ください。

参考資料

本センター本館1階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

SAS によるデータ解析入門[第 2 版] ： 東京大学出版会
SAS による共分散構造分析 ： 東京大学出版会
SAS による実験データの解析 ： 東京大学出版会

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

白

［共同研究成果］

2次元フォトニック結晶共振器のFDTD解析

佐藤弘康　渡辺貴之　澤谷邦男　川上彰二郎*

東北大学大学院工学研究科，*株式会社フォトニックラティス

1.　はじめに

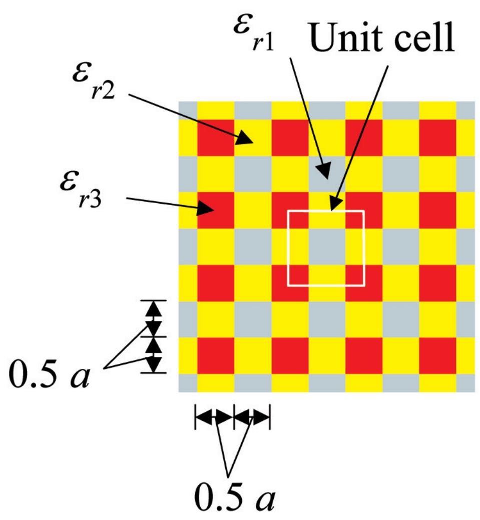
FDTD法 (Finite-Difference Time-Domain Method)[1] は，任意形状の誘電体を含む電磁界解析が容易な数値解析法として広く使われている．近年はフォトニック結晶，メタマテリアルなどの人工結晶の電磁界解析設計にも用いられてきており，周期構造がもつ多数のパラメータと分散特性との関係の解明，所望の分散特性を得るための構造の最適化，数値解析による現象の発見等に利用されている．

フォトニック結晶とは，誘電率の大きく異なる2種類以上の誘電体を光の波長程度の格子定数を持つように周期的に配列した人工的な複合誘電体結晶である．この結晶中において光が複雑に多重散乱を起こすため，分散性，異方性などの光学特性や，フォトニックバンドギャップ(Photonic Band Gap, PBG)などのさまざまな特性が現れる[2]. これらの特性を持つ完全周期構造の一部に欠陥を与えて共振器や導波路を構成すれば，理論上は Q 値が無限大の共振器や無損失の光伝送が可能であるが，実際には周期構造は有限であるので，この場合の共振器や伝送路の Q 値や損失を数値的に明らかにする必要がある．

これまでのフォトニック結晶による共振器や導波路は，完全バンドギャップの閉じ込め効果を利用したもの[3]-[5]であり，完全バンドギャップが必要であるとされてきた．しかし，完全バンドギャップが存在しなくても，波長サイズの空間に無損失で電磁エネルギーが局在する波動が存在すること，つまり Q 値が無限大となる共振器や，無損失伝送が可能な導波路が実現できることが川上により示された[6]. そこで本研究では，FDTD法を用いた完全周期構造の解析，および有限周期の結晶共振器の解析手法について述べるとともに，完全バンドギャップの有無にこだわらず，新たな構造のフォトニック結晶共振器の数値解析を行うことを目的とする[7-9].

2．完全周期構造のFDTD解析

図1に示すフォトニック結晶は，3種類の方形誘電体が格子定数 a の周期構造となっている方形誘電体結晶である．この方形誘電体結晶は，完全周期構造において完全バンドギャップをもたないが，共振器構造では Q 値が無限大となり，導波路構造では無損失に伝搬する導波モードが存在するという，これまでの常識に対して反例となる現象をもつこと



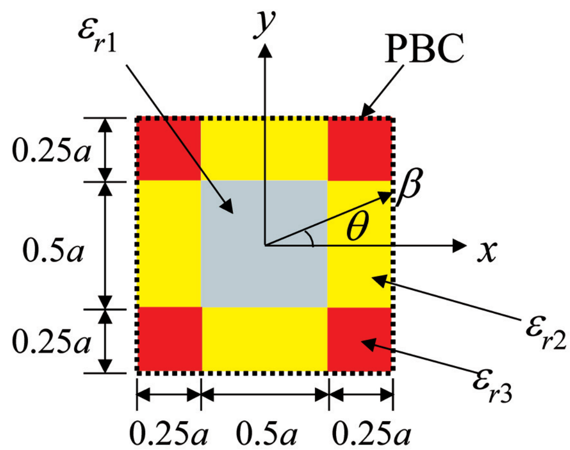


図 1　方形誘電体結晶　　　図 2　完全周期構造の FDTD 解析モデル

が厳密に示されている[6]. 図 1 に示す方形誘電体結晶の完全周期構造を解析するため，周期境界条件(Periodic Boundary Condition, PBC) を FDTD 解析に適用する．周期境界条件は，格子定数 a で表される単位セル中の電磁界と，単位セルの外側の電磁界を関係づける Froquet の定理（または Bloch の定理）に基づいている．完全周期構造において電磁波が θ_0 方向に位相定数 β で伝搬する場合，電磁界の PBC として

$$E(x+ma, y+na, \omega) = E(x, y, \omega) \times \mathrm{e}^{-j\Psi_{x0}} \times \mathrm{e}^{-j\Psi_{y0}} \tag{1}$$

$$\Psi_{x0} = \beta a \cos\theta_0,\ \Psi_{y0} = \beta a \sin\theta_0 \tag{2}$$

が成り立つ．ここで，m，n は整数である．この PBC を FDTD 法に適用する．本稿では，

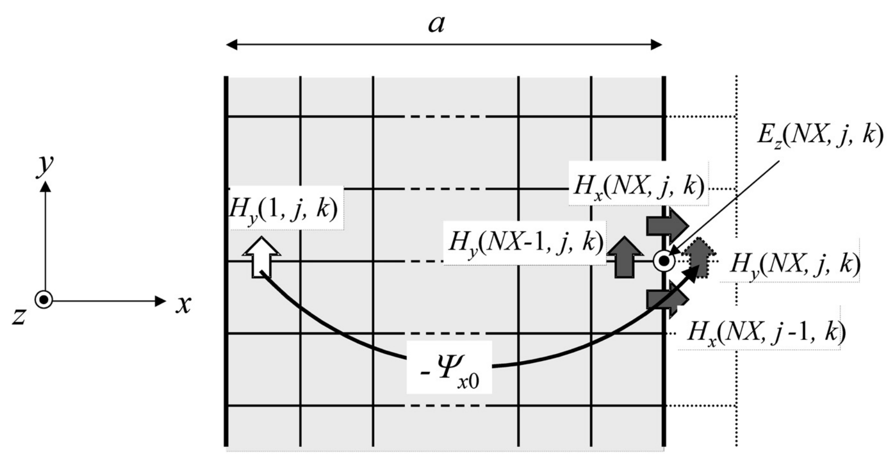


図 3　周期境界条件を用いた FDTD 解析法

進行方向に対して電界が垂直であるTEモード (E_z, H_x, H_y) について解析する．FDTD法の解析モデルを図2に示す．解析領域の内部は通常のFDTD計算を行い，単位セルの境界上の電界を計算するときにPBCを用いる．例えば，$i=NX$ における z 方向の電界 $E_z(NX, j, k)$ を計算する際，x 方向の磁界 $H_x(NX, j, k)$，$H_x(NX, j\text{-}1, k)$ と y 方向の磁界 $H_y(NX, j, k)$，$H_y(NX-1, j, k)$ が必要である．ここで，PBCを用いると，解析領域の外にある $H_y(NX, j, k)$ は $H_y(1, j, k)$ の位相を Ψ_{x0} 遅らせた値に等しく，

$$H_y(NX, j, k) = H_y(1, j, k)\mathrm{e}^{-j\Psi_{x0}} \tag{3}$$

が得られる．したがって，周期境界上の電界 $E_z(NX, j, k)$ は

$$\begin{aligned} E_z^{n+1}(NX, j, k) &= E_z^{n}(NX, j, k) \\ &+ \frac{\Delta t}{\varepsilon\Delta x}\left(H_y^{n+\frac{1}{2}}(1, j, k)\mathrm{e}^{-j\Psi_{x0}} - H_y^{n+\frac{1}{2}}(NX-1, j, k)\right) \\ &- \frac{\Delta t}{\varepsilon\Delta y}\left(H_x^{n+\frac{1}{2}}(NX, j, k) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(NX, j-1, k)\right) \end{aligned} \tag{4}$$

と表すことができ，同様にして他の周期境界上の電界成分を求めることができる．

比誘電率 ε_{r1}, ε_{r2}, ε_{r3} をそれぞれ1, 2, 3，セルサイズを $a/40$，タイムステップ数を70000とし，給電はガウスパルスを用いた．分散特性のFDTD法による解析結果を厳密解[6]とともに図4に示す．図4の横軸は規格化波数 β/k_0，縦軸は規格化周波数 fa/c である．Γ, X, Mは，図4中に示したブリュリアンゾーンにおいてΓを基点とした波数ベクトルの方向を表

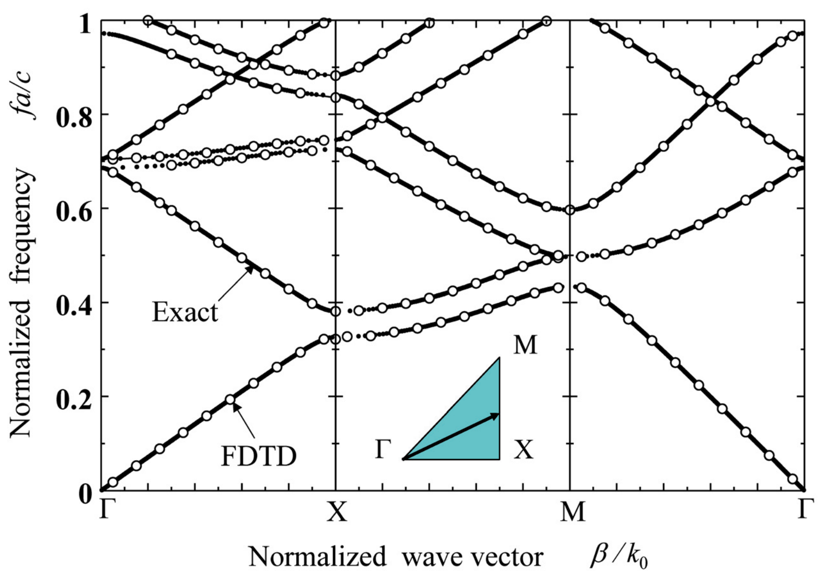


図4　方形誘電体結晶の分散特性

（$\varepsilon_{r1}=1$, $\varepsilon_{r2}=2$, $\varepsilon_{r3}=3$，丸印：FDTD法，実線：厳密解）

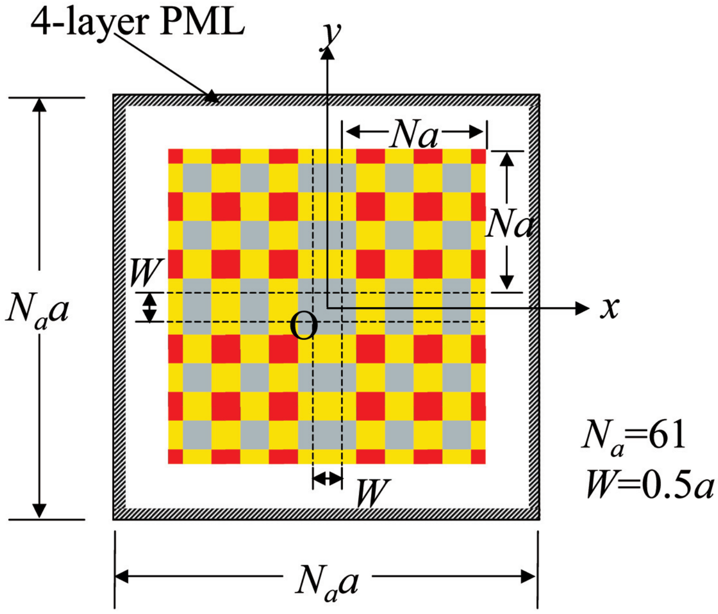


図 5　方形誘電体結晶共振器の FDTD 解析モデル（$N = 2$, $W = 0.5\ a$ の場合）

している．厳密解と FDTD 法による結果は良く一致しており，PBC を用いた FDTD 解析結果の妥当性が確認された．また，ΓX, XM, MΓのそれぞれにバンドギャップは存在するが，すべての方向について同時にバンドギャップが存在する周波数はなく，完全バンドギャップは存在しないことを確認した．

３．共振器の FDTD 解析

方形誘電体結晶を用いた共振器の FDTD 解析を行う. 図 1 に示す 3 種類の誘電体からなる方形誘電体結晶の基本格子が x, y 方向にそれぞれ周期数 $2N$, つまり長さ $2Na$ だけ並んでいる構造において，x, y 方向それぞれに対して中心部分の周期構造を幅 W だけ広げることで，交差状の格子欠陥を与えて共振器を構成する．$N = 2$, $W = 0.5a$ のときの解析モデルを図 5 に示す．セルサイズを $a/8$，共振器の周りは真空とし，吸収境界条件として 4 層の PML (Perfectly Matched Layer) を用いた．給電点および観測点はともに共振器の中心 O とし，タイムステップ数は 10000 とし，給電はガウスパルスを用いた．給電パルスの帯域は用途に応じて変化させる必要がある. 共振器の共振周波数を広帯域にわたり探索するため,規格化周波数が $fa / c = 1$ までを含む広帯域パルスを使用した.

周期数 $N = 10$ のときの規格化共振周波数を求めた結果，$fa/c = 0.547$ が得られた．完全周期構造における厳密解では $fa/c = 0.552$ であり[6]，周期数をさらに増加させることにより漸近するものと考えられる．$fa/c = 0.547$ における中心軸上の電界 E_z 分布を，$fa/c = 0.552$

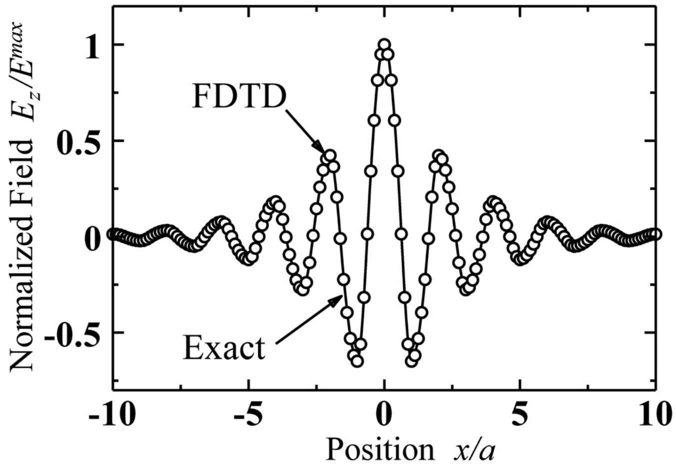


図 6　方形誘電体結晶共振器の中心軸上の電界 E_z 分布
（丸印：FDTD 法，$fa/c = 0.547$，実線：厳密解，$fa/c = 0.552$）

における厳密解とともに図 6 に示す．共振周波数はわずかに異なるものの，ほぼ一致した波形が得られた．なお，FDTD 法を用いて無限周期構造を解析するためにはいかなる位相速度の電磁波であっても吸収境界が吸収する必要があるが，励振が広帯域である場合には吸収できない帯域もあり，プラズマやメタマテリアル等の FDTD 解析を含めて課題を残している．

共振器の性能を Q 値で評価する．ここで $1/Q$ は損失の大きさを表し，損失の小さな共振系では Q 値は大きくなる．一般に共振器の Q 値は

$$Q = 2\pi f \frac{\text{共振器に蓄えられるエネルギー}}{\text{1秒間に失われるエネルギー}} \tag{5}$$

で定義される．実際の共振器における Q 値は放射損，導体損，誘電体損，または外部との結合による損失によるそれぞれの Q 値の逆数の和で求められるが，本稿では共振器の構造に対する性能を評価することを目的とし，放射損のみ考慮する．

共振器の Q 値を求める計算手法として，入力インピーダンスの周波数特性を用いて Q 値を求める方法がある．この場合，共振器の Q 値は

$$Q = \frac{\omega_c}{2\Delta\omega} \tag{6}$$

で与えられる．ここで，ω_c, $2\Delta\omega$ はそれぞれ中心周波数，$|Z_{in}| \geq |Z_{in}|_{\max} / \sqrt{2}$ となる帯域幅である．この方法は，入力インピーダンスが正確に求められる場合に有効である．FDTD 法は時間領域における解析手法であり，フーリエ変換を用いて周波数特性を得るためには電磁界の時間応答が十分収束するまで計算する必要があるが，Q 値の大きい共振器を解析す

る場合は収束しにくいため，莫大な計算量を必要としてしまう．そこで，本稿では蓄積エネルギーの減衰から Q 値を求める方法を用いる．この方法は時間領域で Q 値を求められる方法であり，Q 値は

$$Q = \frac{\omega_c}{2\alpha} \tag{7}$$

で求められる．ここで，α は時間に対する電磁界の減衰定数である．この方法では収束していない電磁界の時間応答を用いて Q 値を算出可能であるが，Q 値が大きくなるにつれて減衰が小さくなるため，正確なαの算出のためには長い計算時間が必要となる．給電に広帯域パルスを用いて共振器の Q 値を求める場合，応答波形は多数の共振モードを含んだ変調波となり Q 値の算出が困難となる．そのため，共振器の共振周波数を中心周波数としたバーストパルスを使用した．

$W = 0.5a$ において周期数 N を変化させたときの Q 値を共振器に閉じ込められた電力とともに図 7 に示す．閉じ込められた電力は各周期数について共振器の中心軸上の電界分布を求め算出した．周期数の増加とともに Q 値が指数関数的に増加した．また，周期数 N に対する Q 値の傾きは閉じ込められた電力の傾きとほぼ等しい．この結果から，Q 値は周期数 N を増加するにつれて指数関数的に無限大まで増加していくものと考えられる．

周期数 $N = 10, 15$ の場合について方形誘電体結晶共振器の電界$|E_z|$分布を求めた結果を図 8 に示す．図中には共振器のサイズを白線で示した．$N = 10, 15$ のいずれの場合についても共振器の内部に電界が閉じ込められている様子がわかる．$N = 10$ の場合，共振器の外側に電界がわずかに漏れている様子が確認できるが，$N = 15$ の場合は電界の閉じ込めが強くなり外側への漏れが低下している様子がわかる．

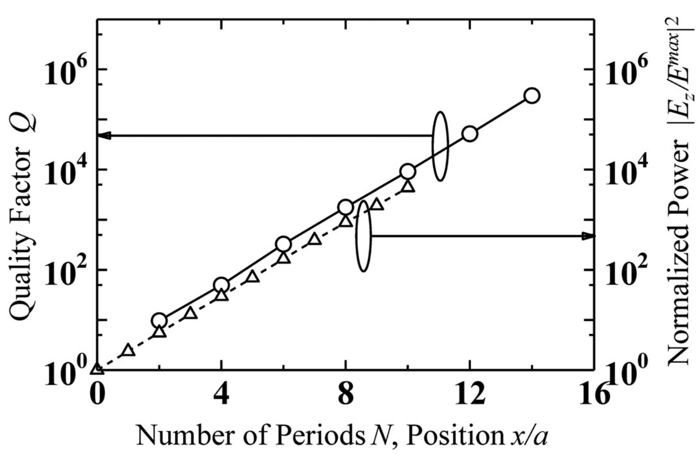
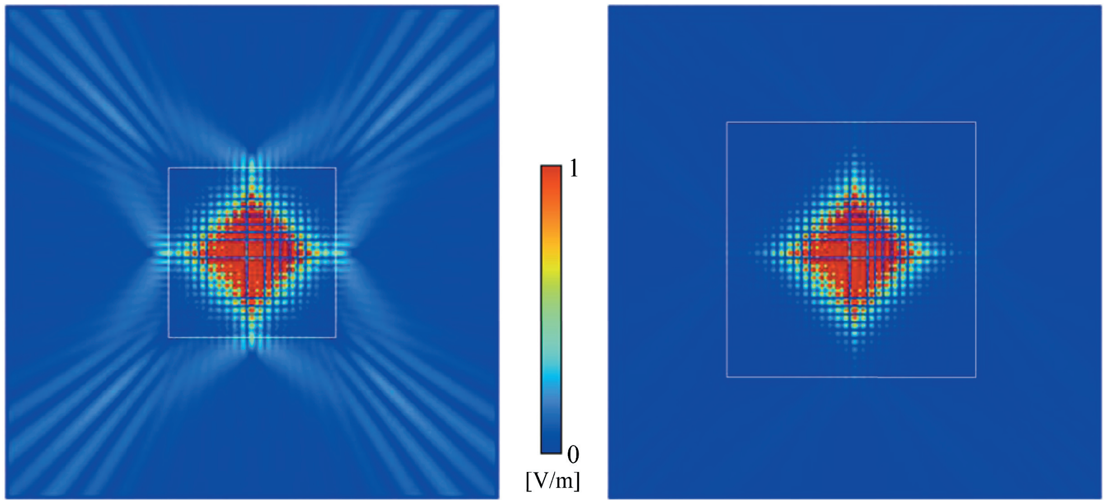


図 7　周期数 N に対する方形誘電体結晶共振器の Q 値（$W = 0.5a$, $fa/c = 0.547$）



(*a*)　$N = 10$　　　　　　　　　　　　(*b*) $N = 15$

図 8　方形誘電体結晶共振器の電界$|E_z|$分布（$W = 0.5a$, $fa/c = 0.547$）

４．ダイアモンド型誘電体結晶の FDTD 解析

方形誘電体結晶は$\varepsilon_{r1} = 1$, $\varepsilon_{r2} = 2$, $\varepsilon_{r3} = 3$ の 3 種類の誘電率が必要であるため，方形誘電体結晶の誘電率分布を 2 種類の誘電率で近似的に構成可能なダイアモンド型誘電体結晶について検討した．考案したダイアモンド型誘電体結晶共振器を図 9 に示す．ダイアモンド型誘電体結晶は比誘電率が$\varepsilon_{r1} = 1$, $\varepsilon_{r3} = 3$ の 2 種類の誘電体で構成し，方形誘電体結晶のε_{r2}が$\varepsilon_{r2} = (\varepsilon_{r1} + \varepsilon_{r3}) / 2$ で与えられるような誘電率分布を持たせたものであり，このような構造は厳密解を得ることは容易ではない．

$\varepsilon_{r1} = 1$, $\varepsilon_{r2} = 2$, $\varepsilon_{r3} = 3$ の方形誘電体結晶とダイアモンド型誘電体結晶について完全周期構造の分散特性，および共振器構造とした場合の共振周波数における中心軸上の電界 E_z

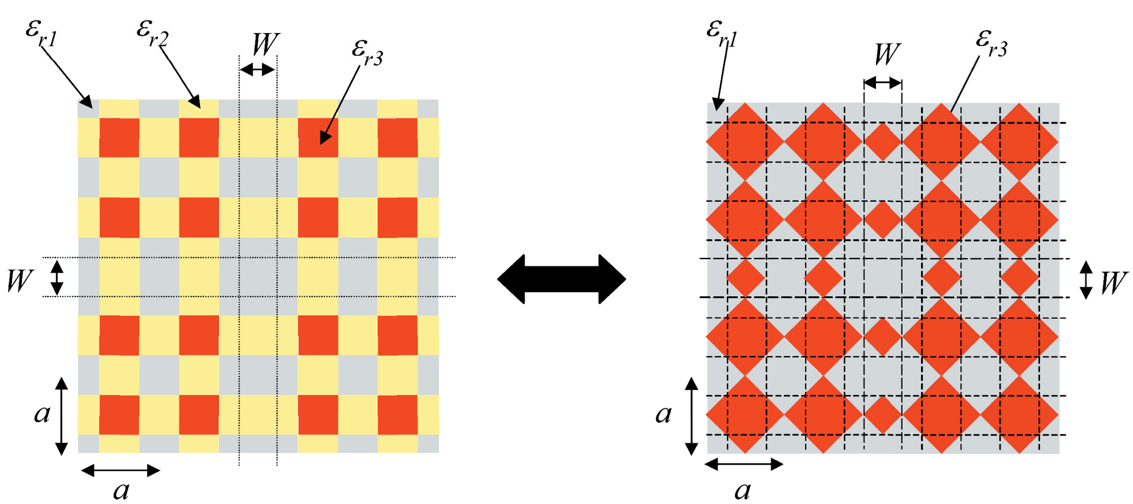


図 9　方形誘電体結晶共振器の誘電率分布のダイアモンド型誘電体結晶による近似

分布をそれぞれ図 10，11 に示す．完全周期構造の解析ではセルサイズを $a/40$，タイムステップ数は 70000 とし，周期境界条件を用いた．一方，共振器構造の解析では $W = 0.5\ a$，$N = 10$，セルサイズを $a/8$，タイムステップ数を 20000 とした．共振器構造の解析において，方形誘電体共振器の場合は$(fa/c, Q) = (0.547, 9290)$，ダイアモンド型誘電体共振器の場合は$(fa/c, Q) = (0.558, 21480)$が得られた．これらの結果から，各結晶の分散特性はほぼ等しく，共振周波数もほぼ等しいが，エネルギーの閉じ込め効果はダイアモンド型が強いことがわかる．ダイアモンド型の閉じ込め効果が比較的強い理由としては，$\varepsilon_{r2} = 2$ がないために欠陥の境界における誘電率の変化が急峻であることや，ダイアモンド構造の突起によるエネルギーの集中などが考えられる．

$\varepsilon_{r1} = 1$, $W = 0.5\ a$，$N = 10$ のダイアモンド型誘電体共振器において，比誘電率ε_{r3}を変化させたときの共振周波数および Q 値を求めた結果を図 12 に示す．誘電率が高くなるにつれて共振周波数が低くなり，ある値に収束していく様相が観測されている．また，Q 値は誘電率の増加とともに高くなっていることがわかる． なお，ε_{r3} が 6 以上の場合の Q 値は求めていない．これはタイムステップ数 20000 の計算時間では電界の減衰が小さいために減衰定数を算出できないためであり，さらに計算時間を長くする必要があることを意味するとともに，非常に高い Q 値を有する共振器の FDTD 解析が困難であることも意味している．

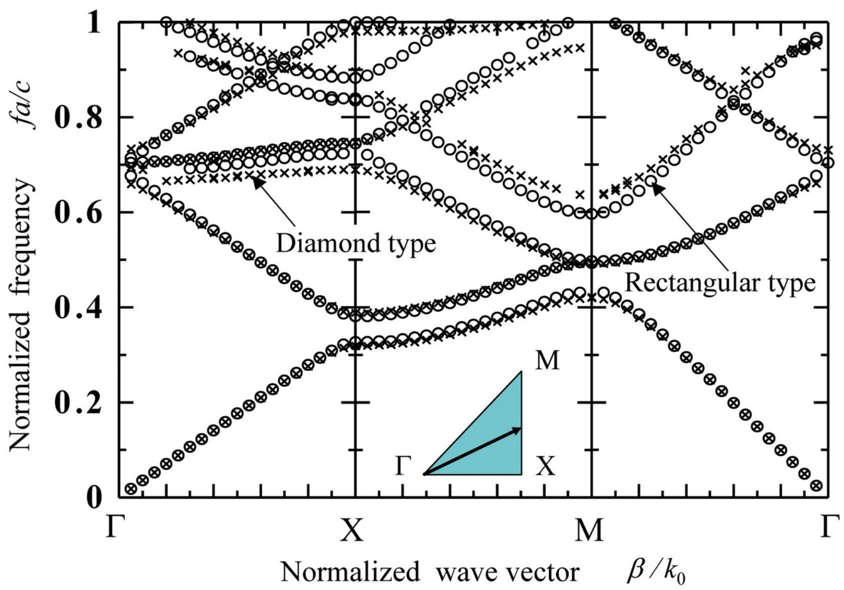


図 10　方形誘電体結晶とダイアモンド型誘電体結晶の分散特性の比較

（方形型：$\varepsilon_{r1} = 1$, $\varepsilon_{r2} = 2$, $\varepsilon_{r3} = 3$，ダイアモンド型：$\varepsilon_{r1} = 1$, $\varepsilon_{r3} = 3$）

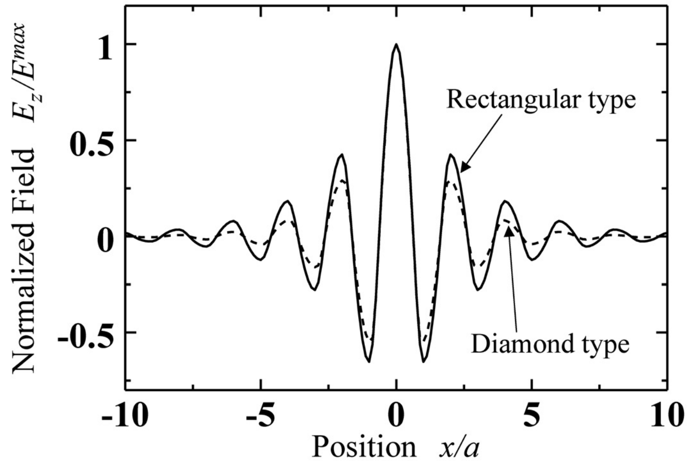


図 11　方形誘電体結晶共振器とダイアモンド型誘電体結晶共振器の中心軸上の電界 E_z 分布（方形型：$fa/c = 0.547$，ダイアモンド型：$fa/c = 0.558$）

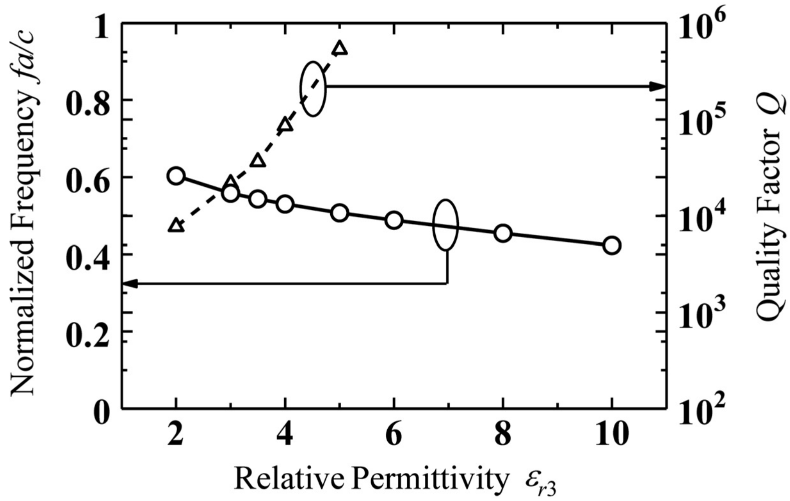


図 12　比誘電率ε_{r3}を変化させたときのダイアモンド型誘電体結晶共振器の規格化共振周波数および Q 値（$\varepsilon_{r1} = 1$, $W = 0.5\ a$，$N = 10$）

５．むすび

2 次元フォトニック結晶の完全周期構造と有限周期の共振器について FDTD 解析を行った．分散特性と電界分布は厳密解と良く一致しており，FDTD 法解析の妥当性が確認された．また，完全バンドギャップを持たない方形誘電体共振器の誘電率分布をダイアモンド型の誘電体共振器で近似し，分散特性，電界分布，Q 値を評価した．その結果，方形誘電体共振器の約 2 倍の Q 値が得られることを示した．

なお, ダイアモンド型共振器のように複雑な構造を有するフォトニック結晶の解析には FDTD 解析が有用であり, 高い Q 値の共振器を解析するためには大規模なメモリと高速演

算処理技術を備えたスーパーコンピュータの利用が不可欠であることを付してむすびとする.

謝辞

本研究の一部は東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用し，同センターとの共同研究で行われたものである．また，研究にあたっては同センターの有益なご指導と多大な協力をいただいた.

参考文献

[1] 宇野亨，FDTD 法による電磁界およびアンテナ解析， コロナ社，1998.

[2] E.Yablonovitch, “Photonic band-gap structure,” *J. Opt. Soc. Am. B,* vol. 10, pp.283-295, 1993.

[3] F. Gadot et al., “Photonic Band Gap Materials for Devices in the Microwave Domain,” *IEEE Trans. Magn.* Vol. 34, pp. 3028-3031, Sept, 1998.

[4] T. Ochiai, J. Sanchez-Dehesa, “Localized defect modes in finite metallic two-dimensional photonic crystals,” The American Physical Society, physical review b, vol. 65, 245111, 2002.

[5] M. Okano et al., “Analysis and design of single-defect cavities in a three-dimensional photonic crystal,” The American Physical Society, physical review b, vol. 66, 165211, 2002.

[6] S. Kawakami, "Analytically solvable model of photonic crystal structures and novel phenomena," J. Lightwave Technol, vol. 20, pp. 1644 -1650, 2002.

[7] 渡辺貴之, 佐藤弘康, 澤谷邦男, 川上彰二郎, "2 種類の誘電体によるフォトニック結晶共振器の数値解析," 電子情報通信学会 2003 年総合大会, C-2-76, March 2003.

[8] 渡辺貴之, 佐藤弘康, 澤谷邦男, 川上彰二郎, “フォトニック結晶の２次元FDTD 解析”, 平成 14 年度電子情報通信学会東北支部連合大会，1B17,p55, Aug, 2002.

[9] 佐藤弘康, 渡辺貴之, 澤谷邦男, 川上彰二郎, “フォトニック結晶に用いる PML 吸収境界条件の検討”，平成 14 年度電子情報通信学会東北支部連合大会，1B16, p54, Aug, 2002.

［共同研究成果］

降着円盤における磁気回転不安定性の数値実験

齋　和人、寺田　直樹、加藤　雄人、小野　高幸
東北大学大学院理学研究科地球物理学専攻

降着円盤内部における乱流生成メカニズムと考えられている磁気回転不安定性に関して、3 次元磁気流体数値シミュレーションを行った。計算では、層化モデルと非層化モデルと呼ばれる代表的な 2 つの円盤モデルを扱った。2 つのモデルにおいて得られた結果を比較したところ、使用する円盤モデルが異なることで不安定の成長の仕方が異なるという結果が得られ、層化モデルでは非層化モデルに比べて不安定が成長する波長が長波長側へシフトすることが示唆された。

1. はじめに

降着円盤とは、原始星やブラックホールなどの天体の周りを取り巻くガスが、その天体の周りを回転運動し、重力と遠心力の釣り合いにより円盤状の構造を形成したものである。中心天体周りを回転している円盤ガスは中心天体へ少しずつ落下していることが観測から分かっており[1]、このことを質量降着と呼ぶ。この質量降着は、“円盤内が乱流状態となっており、乱流によって生じる応力(以下、乱流応力)が効率的に角運動量を外側に輸送している”、とすることで説明が出来る。その乱流生成のメカニズムとして最有力と考えられているのが磁気回転不安定性(magneto-rotational instability、以下、MRI)である。MRI によって生じる円盤内乱流(以下、MRI 乱流)は、質量放出[2]や惑星形成[3]など降着円盤で生じる現象に大きく影響を及ぼすことが指摘されており、MRI 乱流による乱流応力の決定要因の解明が必要とされている。

磁気回転不安定性(MRI)

降着円盤の円盤ガスは重力と遠心力がほぼ釣り合い、回転運動をしていると考えられている。中心天体からの距離を R、中心天体の質量を M_*、万有引力定数を G としたとき、重力と遠心力の釣り合いから、回転角速度は $\Omega=(M_*/R^3)^{1/2}$ と得られる。従って、円盤ガスの回転速度は $u_\phi=R\Omega\propto R^{-1/2}$ となり、円盤の内側に行くにつれて回転速度が速くなった差動回転した状態になっていることが分かる。

MRI は、磁気流体力学(magneto hydrodynamics、以下、MHD)において、差動回転する回転円筒内で生じる不安定性であり、現在、MRI によって発生する乱流の性質を決定している物理量を理解するために、数値シミュレーション研究が盛んに行われている。磁場や速度場の各変数において、その平均値からのズレ(δf)が平均値に対して十分小さい場合($\delta f=f-f_0\ll 0$、f_0は変数 f の平均値)、MHD 方程式(後述)中に現れる δf の 2 次以上の項の影響を無視出来る。このような場合を線形段階と呼び、δf が時間とともに大きくなっていく(成長する)状態を不安定と呼ぶ。図 1 は、MRI の線形成長の様子を模式的に示したものである。円盤ガスが完全電離した流体であるとして、始めに図 1 の左図のように、磁力線(図 1 の緑色の矢印)が降着円盤を垂直に貫いている場面を考える。ただし、図中の四角い箱は流体要素を、青い矢印は速度を、赤い矢印は力を表している。次に、図 1 の真中図のように、同じ磁力線に繋がれた 2 つの流体要素が、元の回転の軌道から少しだけズレたとする。すると、角運動量の保存から内側へ移動したものは速く回転し、外側へ移動したものは遅く回転する。この速度差によって磁力線は引き伸ばされていくが、磁力線は元に戻ろうとするため、流体要素には磁気張力が働く。磁気張力は速度差を小さくする方向へ働くため、重力と遠心力のバランスが崩れ、内側へ移動していた流体要素はさらに内側へ、外側へ移動していた方はさらに外側へ移動しようとする。このようにして、始めは小さな揺らぎだったものが大きな変動へと成長していくという不安定が MRI である。

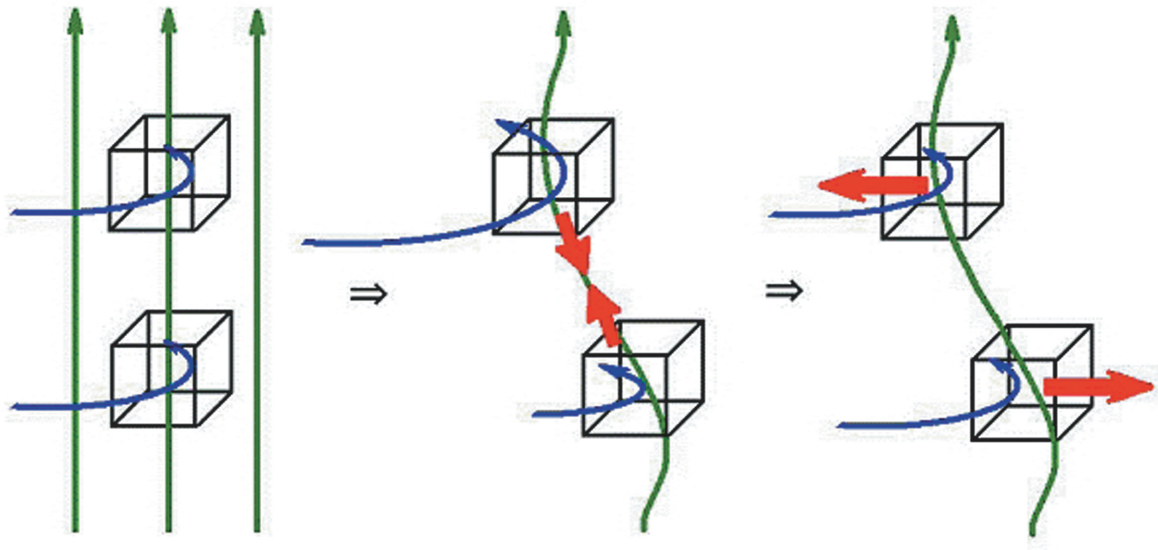


図１　　MRI の線形成長の模式図

円盤モデル

MRI の研究で用いられる代表的な円盤モデルには、計算領域中で密度と圧力が一様な、非層化モデルと、中心天体による重力の円盤に垂直な成分を考慮し、それと釣り合うようにガスを配した、層化モデルの 2 種類がある。非層化モデルでは、Balbus と Hawley をはじめとした不安定の線形解析から、MRI の最大成長率が $\mathrm{Im}(\omega_{max})=0.75\Omega$、最大成長波長が $\lambda_c=8\pi v_{Az}/(15)^{1/2}\Omega$ と得られている[4, 5]。ただし、$v_{Az}=B_z/(\mu_0\rho)^{1/2}$ は z 方向の Alfven 速度、μ_0 は真空中の透磁率、ρ は密度、B_z は磁場の z 方向成分である。また、MRI 乱流によって生じる乱流応力(《w_{xy}》)を決定している物理量も特定されており、《w_{xy}》$=(0.74\pm0.27)\rho(L_z\Omega)(\lambda_c\Omega)$ という関係式が得られている[6]。ただし、L_z は計算領域サイズを表している。

一方、層化モデルにおける乱流応力の関係式は得られておらず、今も研究が行われている。層化モデルに関する多くの研究が行われているが、特に非層化モデルで影響が示唆されていた、計算領域サイズ(L_z)や線形段階における最大成長波長(λ_c)に関する依存性はあまり取り上げられていない。また、線形段階については、Salmeron と Wardle らを始めとした層化モデルにおける線形解析が行われているが[7]、解析の都合上、円盤の赤道面(回転ベクトルに垂直で中心天体を通る面)に境界条件を設定する必要があるため、赤道面に節が存在する摂動のみを取り扱っており、最大成長率に関する議論のみで、最大成長波長に関する議論は行われていない。最大成長波長(λ_c)は、非層化モデルにおいて乱流応力を決定する物理量となっていたため、層化モデルにおいても最大成長波長が乱流応力に対して大きな影響を持っていることが考えられる。

乱流応力を決定している物理的な要因の特定の一助とするために、層化モデルと非層化モデルの線形段階における振る舞いの相違点、特に最大成長波長の相違点、を明らかにすることを目的として研究を行った。本稿では、それによって得られた結果について報告する。

2. 手法

Local shearing box

MRI 乱流の空間スケールは降着円盤の大きさに比べて小さいため、数値計算によって MRI を再現するためには、円盤ガスの回転に乗った座標系において、円盤の一部分だけを切り取りその内部におけるガスの運動を追いかける local shearing box[6]が有効である(図 2)。Local shearing box では、円

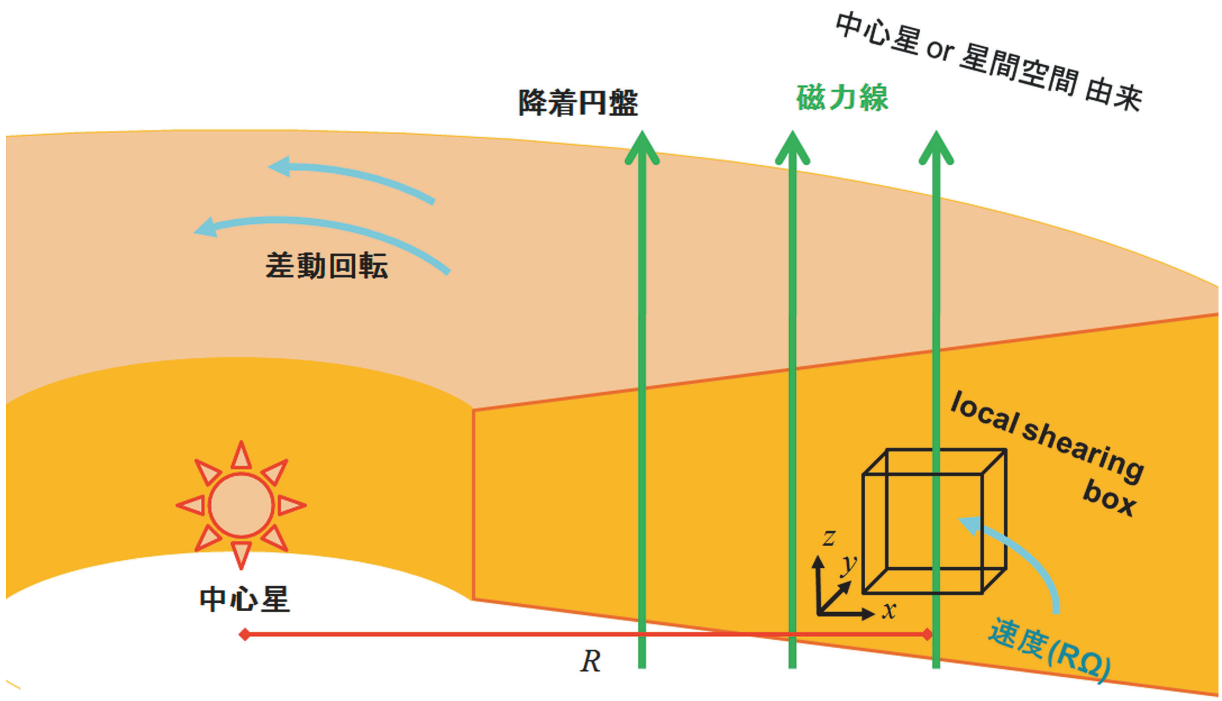


図２　　降着円盤内の local shearing box の模式図

盤の狭い領域のみを取り扱うため、曲率による影響は小さいものとして無視することができ、3 次元直交座標として計算が出来る。今後は、回転面内で中心天体から距離Rだけ離れた場所を原点にとり、中心天体から離れる方向に x 軸を、円盤ガスの回転方向に y 軸、円盤ガスの回転ベクトルと同じ向きに z 軸をとった座標系の下で議論していく。円盤ガスは差動回転しているため、円盤ガスの回転に乗った座標系においても、$\mathbf{V}_0 = -(3/2)\,\Omega x \mathbf{e}_y$ という速度差が生じる。ただし、$\mathbf{e}_y$ は y 方向の単位ベクトルを表している。

磁気流体力学(MHD)方程式系

計算に使用する方程式系は、理想 MHD 方程式系とする。今回、速度の円盤ガスの回転に由来する成分($\mathbf{V}_0$)は既知の量であるから、速度を $\mathbf{V}_0$ とそれ以外の成分 $\mathbf{v}$ に分離し、$\mathbf{v}$ の時間発展のみを解くこととする。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left((\mathbf{v}+\mathbf{V}_0)\cdot\nabla\right)\rho = -\rho(\nabla\cdot\mathbf{v}) \tag{1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \left((\mathbf{v}+\mathbf{V}_0)\cdot\nabla\right)\mathbf{v} = \frac{1}{\mu_0\rho}(\mathbf{B}\cdot\nabla)\mathbf{B} - \frac{1}{2\mu_0\rho}\nabla\mathbf{B}^2 - \frac{1}{\rho}\nabla p - 2\Omega\mathbf{e}_z\times\mathbf{v} - \Omega^2 z\mathbf{e}_z - (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{V}_0 \tag{2}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla\times\left((\mathbf{v}+\mathbf{V}_0)\times\mathbf{B}\right) \tag{3}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \left((\mathbf{v}+\mathbf{V}_0)\cdot\nabla\right)p = -\gamma p(\nabla\cdot\mathbf{v}) \tag{4}$$

ただし、t は時間、$\mathbf{B}$ は磁場、p は圧力、γ は比熱比を表している。ここでは、円盤の回転に乗った座標系を考えているため、運動方程式(式(2))中にはコリオリ力(右辺第 4 項)が含まれている。運動方程式の右辺第 5 項は、中心天体による重力の z 方向成分を表しており(x 方向成分に関しては、遠心力と

の釣り合いを考えているため方程式中には現れない)、後に紹介する層化モデルの計算の場合のみに使用する。

計算コード

数値計算コードには、自作した RCIP-MOCCT 法[8]を採用しており、さらに、非線形波の非物理的な減衰を抑えるための独自の改良が加えてある。この計算手法は、非保存系の式を用いて計算しており、変数に加えて微分値の時間発展も解くため計算量が増えてしまうという短所を持つが、波形の位相遅延誤差が他の計算コードに比べて小さく、伝搬特性に優れているという長所を持っている。今回用いている local shearing box では、背景の速度 $\mathbf{V}_0$ に乗って変動が伝搬していくため、波形の伝搬特性に強みを持つ RCIP-MOCCT 法が適していると言える。

モデル

計算領域は、x 方向に－0.5H～0.5H、y 方向に－0.5πH～0.5πH、z 方向に－0.5H～0.5H とし、各方向に 64 格子点を用いた。ただし、H はスケールハイトと呼ばれ、円盤の厚さを表す。境界条件は、y、z 境界に周期境界条件を使用し、x 境界には、背景の速度($\mathbf{V}_0$)によって時間とともにズレていく分を考慮した、ズレ周期境界条件[6]を採用した。

計算に使用した初期条件を表 1 にまとめた。Run1 では非層化モデルを想定し、Run2 では層化モデルを想定している。Run2 では運動方程式中に中心天体由来の重力の z 方向成分(式(2)の右辺第 5 項)を加える。z 方向には、この中心天体由来の重力と圧力勾配が釣り合った静水圧平衡を想定し、密度と圧力に z 方向の勾配を与える。今回は 2 つのモデルの違いを見るため、モデルの違い以外は同じになるよう、赤道面(z＝0) における密度、圧力、磁場が同じになるように設定しており、赤道面でプラズマβ(＝8πp/$\mathbf{B}^2$：磁場圧力に対するプラズマ圧力の比)は同じになっている。MRI を励起するために初期の微小な摂動が必要であるが、計算コードの制約上、磁場の初期条件は∇・B＝0 を満足している必要があるため、初期磁場は空間一様とし、微小な摂動は速度成分にのみ与えた。速度成分に与えた微小な摂動は、様々な波数が存在できるよう乱数で与えており、最大値が音速($c_s=(\gamma p/\rho)^{1/2}$)の 100 分の 1 程度になるようにしてある。また、比熱比は $\gamma=5/3$ とし、$\Omega=1/1000$ とした。

この場合、非層化モデルにおける最大成長波長は $\lambda_c=0.46H$ となり、これを波数に直すと $n_z=2.18$[1/H]となる。ここでは、z 方向には周期境界条件を適用しているため、波数が $n_z=2$[1/H]の摂動が成長率 0.75Ω で最大成長すると予想される。

表 1　　計算に用いたパラメータ

	Run1(非層化モデル)	Run2(層化モデル)
密度	1	$\exp\left(-z^2/2H^2\right)$
圧力	10^{-6}	$10^{-6}\exp\left(-z^2/2H^2\right)$
速度	v_x、v_y、v_z：振幅が $c_s/100\gamma$ 以下の乱数 ※MRI の初期摂動	
磁場	$B_x=B_y=0$ $B_z=(2\pi)^{1/2}\times10^{-4}$	

3. 結果

2 章で説明した設定のもと、東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-9 を 8CPU 用いて並列計算を行った。計算毎に、使用したメモリサイズは約 9.2 Gbyte で、計算時間は実時間で 3 時間強程度を要した。

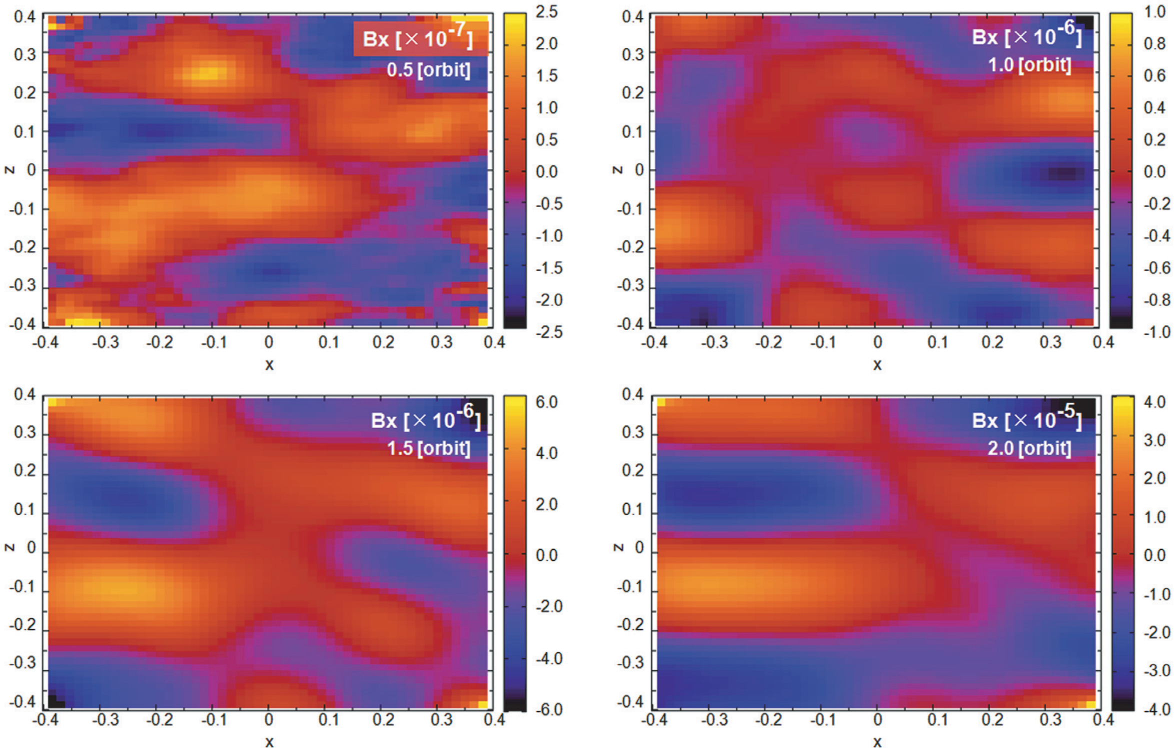


図 3　　Run1(非層化モデル)における磁場の x 方向成分の時間変化

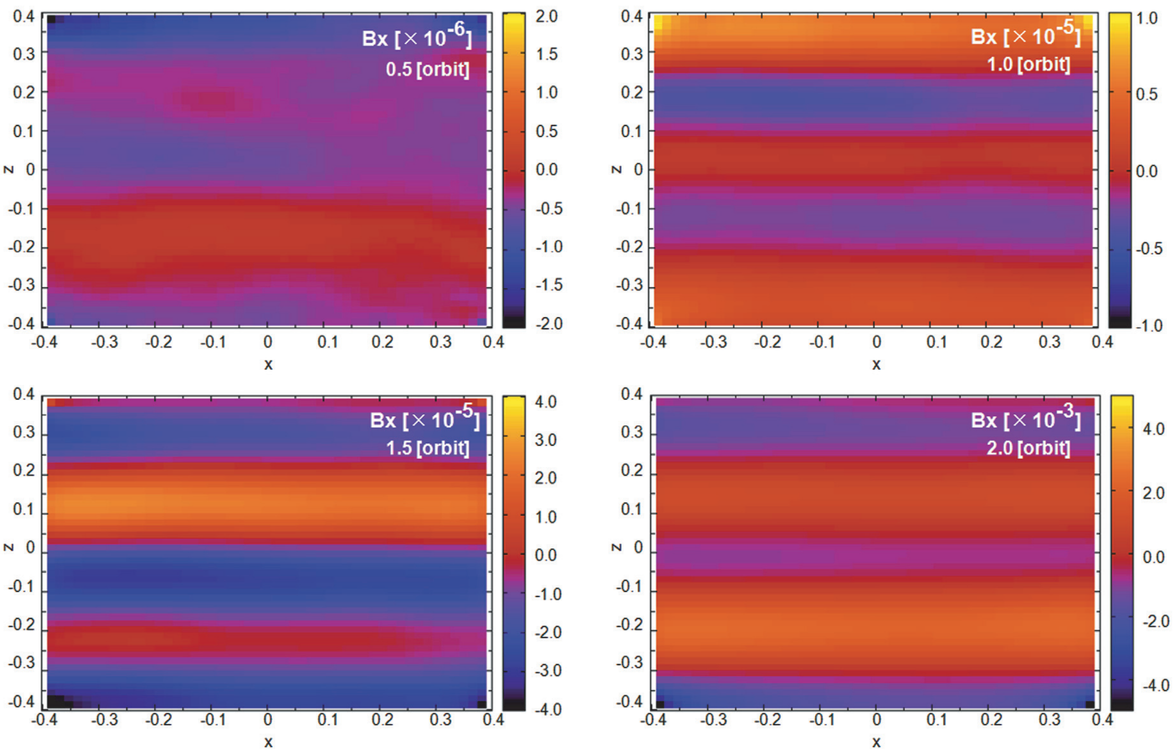


図 4　　Run2(層化モデル)における磁場の x 方向成分の時間変化

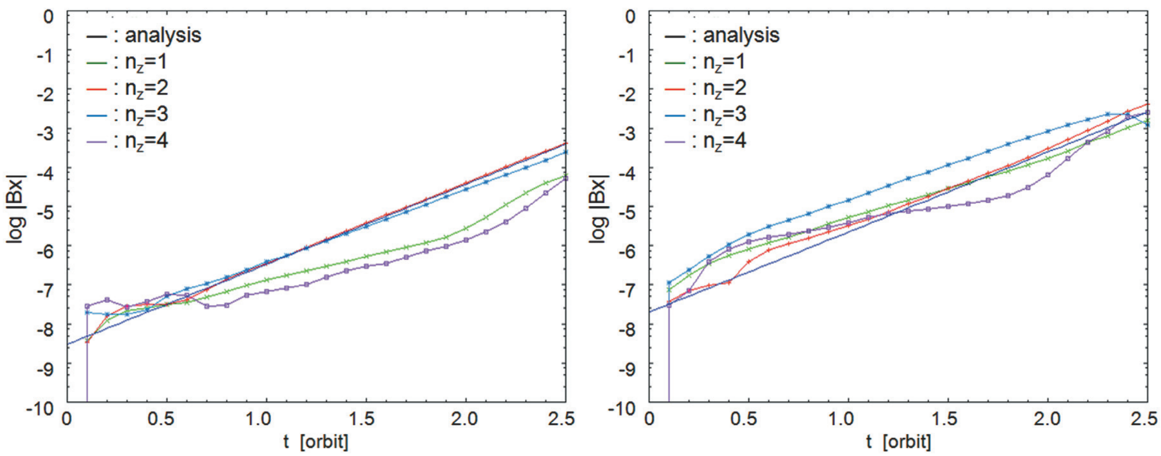


図５　　磁場の x 方向成分が含む摂動の振幅の時間発展の様子
(左)Run1(非層化モデル)、　(右)Run2(層化モデル)

図３は、非層化モデルにおける計算結果のうち、y=0 の断面(x-z 面)における磁場の x 方向成分の時間発展の様子をカラーコンターで示したものである。横軸に x 軸、縦軸に z 軸、カラーコンターで磁場の x 方向成分を表しており、左上図、右上図、左下図、右下図はそれぞれ時刻が t=0.5、1.0、1.5、2.0[orbit(=2π/Ω)]の時の様子を表している。ただし、MRI は円盤 1 回転(orbit)で、摂動が約 110 倍にも増幅する不安定であるため、カラーコンターのスケールはそれぞれの図毎に見やすくなるようとっており、異なっている。図 3 から、始めの t=0.5[orbit]では細かな変動も見られるが、最終的に t=2.0[orbit]では、z 方向の波数が n_z=2[1/H]の摂動が卓越している様子が見て取れる。

一方、図 4 は、層化モデルの計算結果を、図 3 と同じように並べたものである。こちらの場合、z 方向の波数が n_z=3[1/H]の摂動が卓越している様子が見て取れる。

層化モデルと非層化モデルで得られた結果から、成長率と波数の関係を論じるために、磁場の x 方向成分を z 方向にフーリエ変換し、それを x-y 方向に平均化を行うことで得られた、n_z=1,2,3,4[1/H]の摂動の振幅の時間変化を図 5 に示した。図 5 の左側が非層化モデルを、右側が層化モデルの結果を表しており、縦軸にそれぞれの波数の振幅を対数スケールでとり、横軸に時間 t[orbit(=2π/Ω)]をとっている。緑、赤、青、紫の実線はそれぞれ n_z=1, 2, 3, 4[1/H]を表しており、藍色の直線は非層化モデルにおける線形理論から得られた最大成長率を表している(傾きには意味があるが、切片に意味は無い)。ただし、境界条件による影響を取り除くため、$-0.4H<x<0.4H$、$-0.4\pi H<y<0.4\pi H$、$-0.5H<z<0.5H$ の範囲におけるデータを使用している。

図 5 左図では、t=0.9～1.9[orbit]の間において、いずれの線も直線状に分布しており、線形成長をしていることが分かる。一方、t=2.0[orbit]以降では、n_z=1, 4[1/H]の摂動が急激な成長を示しているが、これは t=2.0[orbit]付近で、n_z=2, 3[1/H]の摂動が初期磁場($(2\pi)^{1/2}\times10^{-4}$)に匹敵する大きさになっていることから、非線形な影響が現れているものと分かる。このことから、初期磁場を越えない範囲で曲線が比較的直線状に分布している区間を、線形成長段階と位置付ける。図 5 左図の非層化モデルでは、前述のように t=0.9～1.9[orbit]を線形成長段階とする。同様に、図 5 右図の層化モデルでは、t=0.8～1.7[orbit]を線形成長段階とする。

また図 5 の右図からは、波数 n_z=1, 3[1/H]の摂動も n_z=2, 4[1/H]の摂動と同様に成長している様子が見られ、層化モデルの線形解析では予想はされていたが確認はされていなかった、z=0 で腹が現れる摂動についても、MRI で成長している様子を確認することが出来る。図 4 と図 5 の右図において n_z=3[1/H]の摂動が卓越しているように見えるが、図 5 右図の傾きに着目すると、n_z=3[1/H]と n_z=2[1/H]は同じような傾きを示していることから、初期条件において n_z=3[1/H]の摂動が大きくなってしまったため全体として卓越しているように見えるが、同じ程度の成長率であることが分かる。

表２　　線形成長率

モデル	成分	成長率(Im(ω))			
		n_z=1[1/H]	n_z=2[1/H]	n_z=3[1/H]	n_z=4[1/H]
Run1 非層化モデル	B_x	0.44 Ω	0.74 Ω	0.68 Ω	0.45 Ω
	B_y	0.47 Ω	0.75 Ω	0.69 Ω	0.44 Ω
Run2 層化モデル	B_x	0.56 Ω	0.66 Ω	0.65 Ω	0.32 Ω
	B_y	0.58 Ω	0.66 Ω	0.63 Ω	0.27 Ω

図５で示したものと同じ解析を磁場の y 方向成分に対しても行っており、図５において線形成長段階と位置付けた区間における結果から、線形成長率を計算し、表２にまとめた。表２から、非層化モデルの波数 n_z=2[1/H]の摂動で成長率が 0.75 Ω と最大値と成っていることが分かる。これは、線形解析[4, 5]から得られている、波数 n_z=2[1/H]に対応する成長波長と成長率の関係と 99%で一致しており、良い一致を示している。このことから、我々の計算が現象を正しく再現していることを確認できる。

２つのモデルの結果を比較してみると、波数 n_z=3[1/H]の摂動は、どちらのモデルでもほとんど同じような成長率を示していることが分かる。また、波数 n_z=1[1/H]の摂動では、非層化モデルに比べて層化モデルの方が大きな成長率を示しており、それとは逆に、波数 n_z=2[1/H]の摂動では小さな成長率を示している。このことから、層化モデルの方では非層化モデルに比べて、最大成長波長が長波長側へシフトしていることが示唆される。

4. まとめ

本稿では、MHD 数値シミュレーションによって、層化モデルと非層化モデルにおける MRI の成長の様子の違い、特に、最大成長波長の違いについて検証を行った。その結果、

- 非層化モデルの計算では、線形解析で得られている成長率、成長波長とほとんど同じ結果が得られ、本稿で報告した数値実験の結果が現象を正しく再現していることが確認された。
- 層化モデルと非層化モデルの結果の比較から、非層化モデルに比べて層化モデルの方では、最大成長波長が長波長側へシフトしていることが示唆された。

今回の結果から、２ つのモデルでは線形成長の段階から異なる振る舞いを示しているため、層化モデルにおいても、非層化モデルで検証されていたパラメータに対する依存性を再度検証する必要性を示唆している。特に、非層化モデルで乱流応力を決定している最大成長波長と計算領域サイズに対する依存性に関する検証は、乱流応力を決定している物理量の解明の鍵になると考えられる。

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平成 21 年度共同研究である「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」を進める中で得ることができた。同センターとの共同研究としてシミュレーションコードの開発が進められ、共同研究を通じて多くの有益な助言を頂き、SX-9 の持つ演算性能の活かした高効率な演算を行うことが出来た。

参考文献

[1] Gullbring., Erik, Lee Hartmann, Cesar Briceno, and Nuria Calver, Disk accretion rate for T Tauri stars, *The Astrophysical Journal*, **492**, 323, 1998

[2] Suzuki, T. K., S. Inutsuka, Disk winds driven by magnetorotational instability and dispersal of protoplanetary disks, *The Astrophysical Journal*, **691**, 49-54, 2009

[3] Johansen, A., J. S. Oishi, M-M. M. Low, H. Klahr, T. Henning, and A. Youdin, Rapid planetesimal formation in turbulent circumstellar disks, *Nature*, **448**, 1022-1025, 2007

[4] Sano, T., and S. M. Miyama, Magnetorotational instability in protoplanetary disks. I. On the global stability of weakly ionized disks with ohmic dissipation, *The Astrophysical Journal*, **515**, 776-786, 1999

[5] Balbus, S. A., and J. F. Hawley, A powerful local shear instability in weakly magnetized disks. I. Linear analysis, *The Astrophysical Journal*, **376**, 214-222, 1991

[6] Hawley, J. F., C. F. Gammie, and S. A. Balbus, Local three-dimensional magnetohydrodynamic simulations of accretion disks, *The Astrophysical Journal*, **440**, 742-763, 1995

[7] Salmeron, R., and S. M. Wardle, Magnetorotational instability in stratified, weakly ionized accretion discs, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **345**, 992-1008, 2003

[8] Kudoh, T., K. Shibata, Magnetically driven jets from accretion disks. II. Nonsteady solutions and comparison with steady solutions, *The Astrophysical Journal*, **476**, 632-648, 1997

［共同研究成果］

壁面からの高分子滲出を伴う平行平板間乱流の数値シミュレーション

越 雅彦 *　　　岩本 薫 *　　　村田 章 *

* 東京農工大学　大学院工学府　機械システム工学専攻

1. 緒言

水に微量の直鎖状高分子を添加することにより，乱流摩擦抵抗は著しく減少する．これは Toms 効果として知られている [1]．過去の実験的研究より，Toms 効果が速度場に与える影響について以下の知見が得られている [2-4]．主流方向の平均速度分布は，粘性底層/緩和層の厚みが増し，対数則が上方にシフトする．平均速度分布の変化に伴い，粘性応力が増加し，レイノルズせん断応力は減少する．変動速度強度については，主流方向の成分が増加し，その他の方向の成分は減少し，非等方性が増す．Toms 効果による乱流摩擦抵抗低減効果や速度場の変化は，乱流準秩序構造の変化によると考えられているが，物理的な機構はまだ十分解明されているとは言えない．

他方，数値計算を用いることによって，実験では計測が難しい壁面近傍の乱流準秩序構造を知ることができ，摩擦抵抗低減機構の解明に非常に有用である．梶島・三宅 [5] は添加高分子の効果を多数の離散要素モデルを混入させせることによって近似し，これをニュートン流体に加えた乱流の DNS を実施した．その結果，上記の実験結果を再現することに加えて，離散要素モデルは流れ方向に配向し，壁垂直方向の渦度を抑制していることを示し，高分子の運動に関して新たな知見を得た．黒田ら [6] も同様の DNS を実施し，離散要素モデルのパラメータが抵抗低減効果・流体場に与える影響を調べた．また，離散要素モデルが流れ方向に配向することによって，主流方向に軸を持つ渦の伸張を抑制することを示した．

近年の乱流制御に関する発展として，壁面摩擦係数とレイノルズせん断応力の恒等式 (以後，FIK 恒等式と呼ぶ) の導出が挙げられる [7]．FIK 恒等式によると，乱流摩擦抵抗低減を得るためには，壁面近傍のみならず壁面から離れた領域でのレイノルズ応力の抑制が重要である．しかし，壁面から離れた領域の大スケールの乱流準秩序構造を直接操作することなしに，壁面近傍の乱れのみを抑制することにより，壁から離れた領域におけるレイノルズ応力が間接的に減少し，大きな抵抗低減効果を得る事ができることが示されている [8]．

Toms 効果と FIK 恒等式より，壁面近傍のみに高分子を混入することが出来れば，効率良く抵抗低減効果を得ることが期待される．近年，この効果を応用した新たな船舶用塗料の研究開発が行われている．新たな船舶用塗料は，配合された高分子が徐々に海中に溶出することにより持続的に Toms 効果を得る機構を有する．本研究では，この船舶用塗料における溶出メカニズムを簡略化した壁面より高分子滲出を伴う流れにおいて，離散要素モデルを用いたチャネル乱流の DNS を行い，抵抗低減率に対する壁面からの高分子滲出の影響について明らかにする．

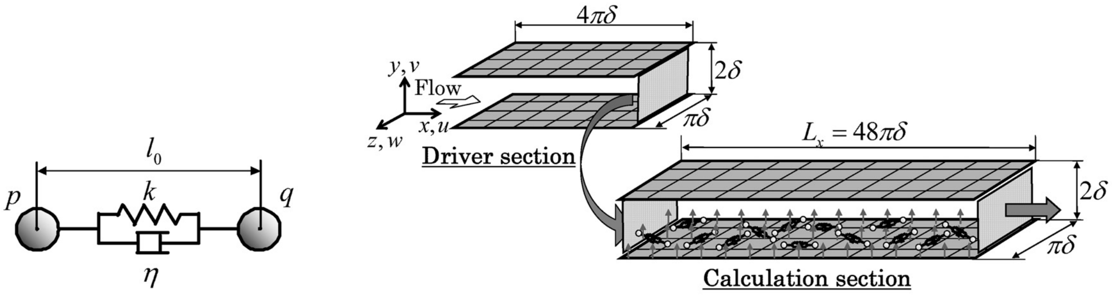
2. 数値計算法

2.1 離散要素モデル

梶島ら [5] は，高分子溶液のレオロジー特性 [9] に基づきばね-球モデルを構築した (図 1(a) 参照)．このモデルは，鎖状の高分子をダンベル状要素として粗視化したものであり，2 球 (p, q) のみで高分子の質量を表現する．本計算では，梶島ら [5]，黒田ら [6] と同様の離散要素モデルを用いる．重要な離散要素モデルのパラメータは，弾性を表すばね定数 k，粘性を表すダッシュポット係数 η，高分子鎖の自然長を表すばねの自然長 l_0 である．

離散要素モデルに関する特性を以下に示す．

1. 球に加わる流体力は，並進運動に対するストークス抵抗のみで近似され，回転は考慮されない．



(a) Discrete-element model.　　　　　(b) Computational domain.

Fig. 1　Discrete-element model and computational domain.

2. モデル化する高分子は水溶性と仮定することにより，離散要素とニュートン流体の密度は等しく，重力の影響はないものとする．
3. 球と壁面は弾性反射とする．
4. 要素間の絡み合いや衝突は無視する．
5. 要素モデルの体積による流体の体積控除は考慮しない．

以上より，球の運動方程式は式 (1)，(2) となる．

$$m\frac{dv_{pi}}{dt} = f_{pi} - \frac{k\xi}{1-\left(\frac{\xi}{\xi_{max}}\right)^2}\frac{x_{pi}-x_{qi}}{l} - \eta(v_{pi}-v_{qi}) \tag{1}$$

$$m\frac{dv_{qi}}{dt} = f_{qi} - \frac{k\xi}{1-\left(\frac{\xi}{\xi_{max}}\right)^2}\frac{x_{qi}-x_{pi}}{l} - \eta(v_{qi}-v_{pi}) \tag{2}$$

$$f_{pi} = 6\pi\mu r(u_{pi} - v_{pi}) \tag{3}$$

$$f_{qi} = 6\pi\mu r(u_{qi} - v_{qi}) \tag{4}$$

ここで，下付き i は i 方向，v_{pi}，v_{qi} は球の各方向速度，m は球の質量である．f_{pi}, f_{qi} は球に加わる力を表し，ストークス抵抗 (式 (3)，(4)) で表される．x_{pi}, x_{qi} は球の位置を表す．また，l はばねの長さ，l_0 はばねの自然長，l_{max} はばねの最大長，$\xi \equiv l - l_0$ はばねの伸び，$\xi_{max} \equiv l_{max} - l_0$ は最大伸びである．ニュートン流体の粘性係数を μ，球の半径を r，球 $(p\ ,\ q)$ の中心位置での流体の速度を u_{pi}，u_{qi} で表す．また，ばねの長さに上限を持たせるために非線形ばねを用いた．

2.2 計算条件

計算領域を図 1(b) に示す．計算領域はドライバ部と計算部に分かれており，計算部においては下壁面 $(y = 0)$ より一様高分子吹出しを与えている．流体側の境界条件は，ドライバ部において壁面上では滑りなし条件，流れ方向 (x) 及びスパン方向 (z) には周期境界条件とし，計算部において壁面上では滑りなし条件，スパン方向には周期境界条件，流れ方向は，流入・流出境界とし，流出条件 $(x = L_x)$ には対流流出条件を用いた．また，離散要素モデルの境界条件は，流れ方向に流入・流出境界条件，壁面では弾性反射条件，スパン方向に周期境界条件とした．格子解像度は，計算部及びドライバ部において，x，z 方向は等間隔格子 ($\Delta x^+ = 8.8$，$\Delta z^+ = 4.4$)，壁に垂直な方向 (y) は壁面近傍で格子を密にした不等間隔格子 ($\Delta y^+ = 0.93 \sim 5.97$) を設定する．格子数は，$x$，$y$，$z$ 方向それぞれ，計算部 $3072 \times 96 \times 128$，ドライバ部 $256 \times 96 \times 128$ である．ここで，上付き $^+$ は摩擦速度 $u_{\tau 0}$ とニュートン流体の動粘度 ν により無次元化されたものを表す．また，上付き * は断面平均流速 U_m とニュートン流体の密度 ρ_f，チャネル半幅 δ により無次元化されたものを表す．摩擦レイノルズ数は $Re_{\tau 0} = u_{\tau 0}\delta/\nu = 180$ とし，流れを駆動させる平均圧力勾配 (一定) より $u_{\tau 0}$ を算出した．

速度成分および圧力はスタガード格子点上に定義される．空間離散化には，2 次精度中心差分法を用いた．時間進行には SMAC 法 (Simplified Marker and Cell method) を用い，y 方向の粘性項には 2 次精度 Crank-Nicolson 法，その他の項には省記憶型 3 次精度 Runge-kutta 法を用いた．

Table. 1　Program information in SX-9.

CPU time [h:m:s]	465:41:6	Memory Size [MB]	30848
MOPS	4277.54	MOPS (concurrent)	39614.97
MFLOPS	1059.03	MFLOPS (concurrent)	9807.84
A. Vector Length	248.21	V. Op. Ratio[%]	98.98

流体の支配方程式は以下の式となる．

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{5}$$

$$\rho_f \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + F_i \tag{6}$$

$$F_i = \frac{1}{V} \sum_{x_{ei} \in V} (-f_{ei}) \quad (e = p, q) \tag{7}$$

ここで，u_i は流体の各方向速度，p は圧力，F_i は要素により流体に働く力を表す (式 (7))．

2.3 離散要素パラメータ

離散要素モデルのモデルパラメータは，これまでの計算 [10] において最も抵抗低減効果の大きい，$k^+ = 0.3$，$\eta^+ = 405$，$l_0^+ = 36$ とした．また，ばねの最大長 $l_{max} = 2l_0$，球の半径 $r^+ = 1.5$ とした．壁面からの一様高分子吹出しは，速度 $V_b^+ = 4 \times 10^{-3}$，1 粘性時間，1 粘性面積当りの吹出量 (吹出し個数)N_b[個$/((\nu/u_{\tau 0}^2)(\nu/u_{\tau 0})^2)$] は，$N_b = 2.6 \times 10^{-5}$, 5.2×10^{-5} の 2 ケースとした．吹出量 N_b を増加させることは，一様吹出し速度は変化しないので，滲出させる高分子溶液の濃度を増加させることに対応する．要素の初期配向は，x-z 平面上で局所せん断方向に配向させた．局所せん断方向は $tan^{-1}(\tau_{wz}/\tau_{wx})$ より計算した．$\tau_{wx} = \frac{\partial u}{\partial y}$，$\tau_{wz} = \frac{\partial w}{\partial y}$ はそれぞれ，x 方向，z 方向の局所壁面せん断応力である．

2.4 プログラム性能

本計算において，Lagrange 的に扱う離散要素モデル (2 球) を追跡するプログラムコードには，if 文の繰り返しが多い点，ベクトル化の困難なルーチンが存在する点により，Euler 的な扱いである流れ場の計算よりも当然，計算負荷が大きくなる．本計算プログラムでは，多数の離散要素モデルの運動を個々に計算するため，OpenMP を用いたノード内並列処理及びベクトル演算化を行った．また流体と離散要素の相互作用力の計算は並列化及びリストベクトル演算化を行い，高速化を図った．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，摩擦レイノルズ数 $Re_{\tau 0} = 180$，計算領域 $L_x, L_y, L_z = 48\pi\delta, 2\delta, \pi\delta$，格子点数 $N_x \times N_y \times N_z = 3072 \times 96 \times 128$，総要素数 $N_e = 9,338,880$ とし，$200,000$ steps (無次元時間 $t^* = 32.5$) に亘って解析を行ったものである．使用メモリは約 30GB を要した．平均ベクトル長，ベクトル化演算率共に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．

3. 壁面高分子滲出における抵抗低減効果

3.1 瞬時場の可視化

吹出量 $N_b = 5.2 \times 10^{-5}$ における，計算部での流れ場 (瞬時の流れ場及び要素の可視化) を図 2(A) に示す．青い線状の物体は要素を表し，流れ方向に行くに従いチャネル中央へと拡散している．また要素濃度は流れ方向に増大しており，下流においてチャネル内は要素により満たされる．そこで，図 2(A) から要素を取り除いたものを図 2(B) に示す．白の等値面で示される渦構造は，流れ方向に行くに従い減少しており，それに伴い高速・低速ストリーク (高速；赤の等値面，低速；淡青の等値面，ストリーク構造；高速・低速流体がスパン方向に並ぶ構造) の間隔が大きくなる．本研究では下壁面からの一様吹出し速度が小さいため，乱流構造の変化はあまり見られない．

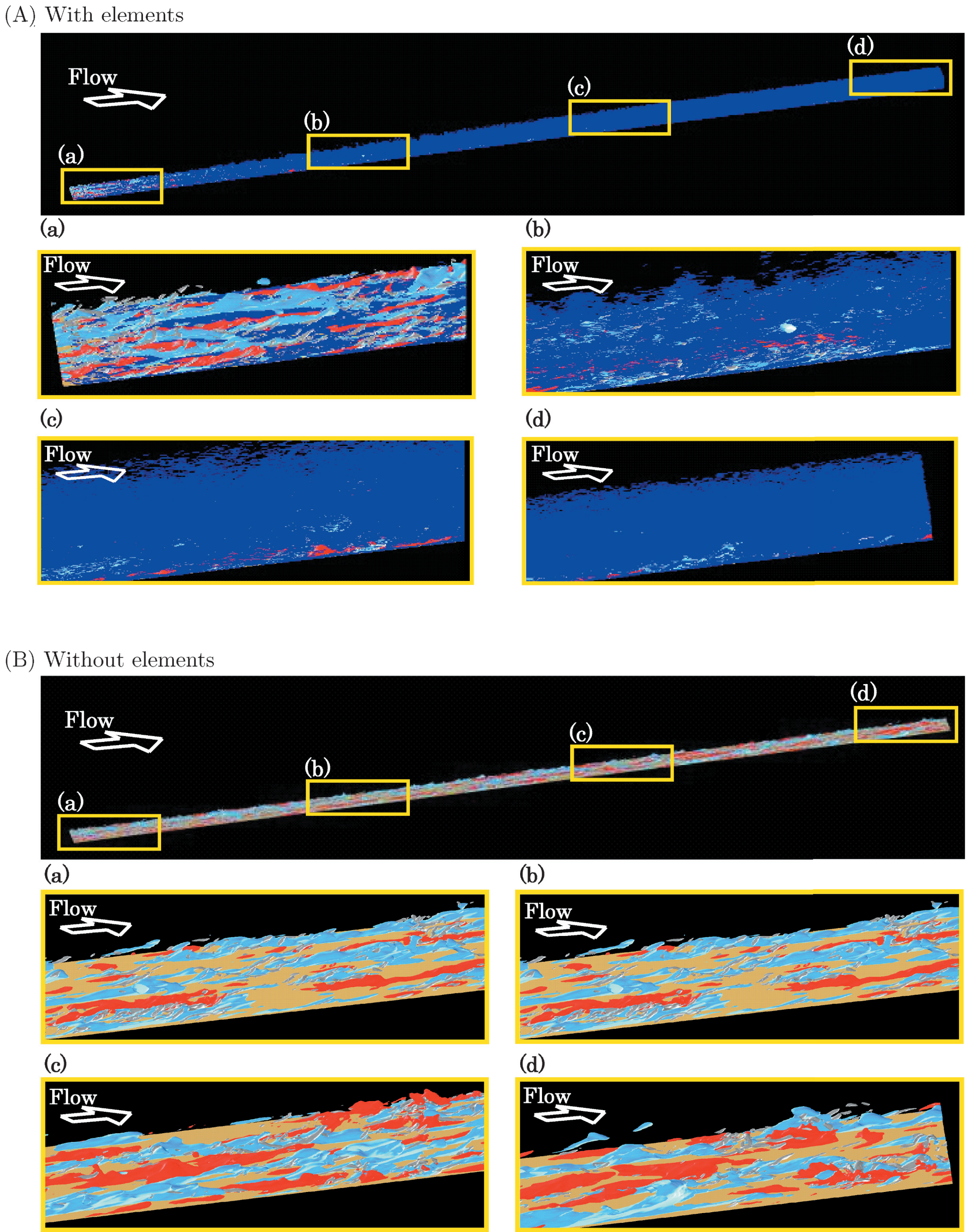


Fig. 2　Visualization of instantaneous flow field for the case of $N_b = 5.2 \times 10^{-5}$ at fully-developed state. (a) $x = 0$, (b) $x = 1/3L_x$, (c) $x = 2/3L_x$, (d) $x = L_x$; top, all computational domain view, bottom, part view. Blue object(line), element; red iso-surface, high-speed region($u'^+ > +3$); sky blue iso-surface, low-speed region($u'^+ < -3$); white iso-surface, vortical structure regions ($II^+ = (\partial u_i^+/\partial x_j^+)(\partial u_j^+/\partial x_i^+) < -0.03$).

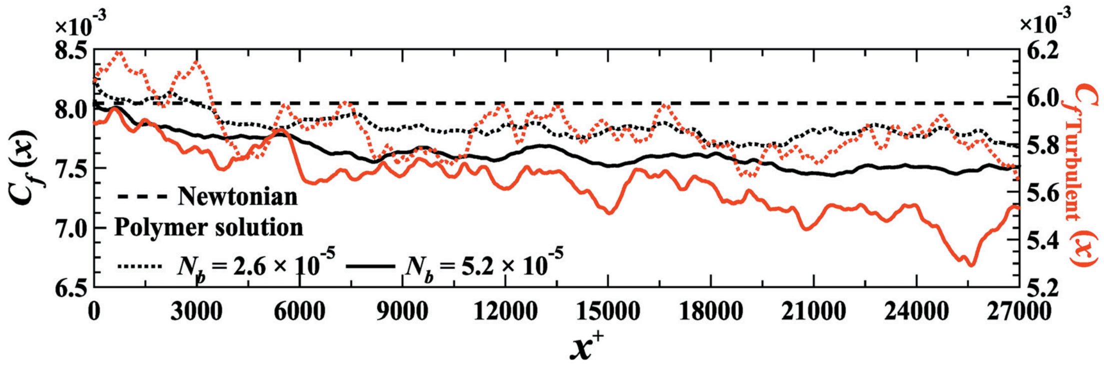


Fig. 3　Local skin friction coefficient.

3.2　抵抗低減効果

局所壁面摩擦係数 $C_f(x)$ は以下の式で定義される．

$$C_f(x) = \frac{\overline{\tau_w(x)}}{\frac{1}{2}\rho_f U_m^2(x)} \tag{8}$$

ここで，$\tau_w(x)$ は局所壁面せん断応力，$U_m(x) = \frac{1}{2\delta}\int_0^{2\delta}\overline{u(x)}dy$ は断面平均流速，$^-$ は z 方向，時間方向平均操作である．図 3(左軸) に上下壁平均の局所壁面摩擦係数の流れ方向変化を示す．上下壁平均の局所壁面摩擦係数は下壁面の τ_w の減少により流れ方向に減少する．また吹出量 N_b(滲出濃度) が大きいほど，抵抗低減効果が大きくなっている．

局所壁面摩擦係数 $C_f(x)$(上下壁平均) は以下の様に分解される [7].

$$\begin{aligned} C_f(x) = & \frac{12}{Re_m} + 12\int_0^2 (1-y^*)(-\overline{u'^*v'^*})dy^* + 12\int_0^2 (1-y^*)(-\overline{u^*}\,\overline{v^*})dy^* \\ & - 6\int_0^2 (1-y^*)^2 I''^*_x dy^* + 6\int_0^2 (1-y^*)^2 F''^*_1 dy^* + 6\int_0^2 (1-y^*)^2 \left(-\frac{\partial p''^*}{\partial x^*}\right) dy^* \end{aligned} \tag{9}$$

ここで，* は $2U_m$ と δ で無次元化された値を表し，$Re_m = 2U_m\delta/\nu$，$I_x^* = \frac{\partial(\overline{u^*u^*})}{\partial x^*} - \frac{1}{Re_m}\frac{\partial^2\overline{u^*}}{\partial x^*\partial x^*}$，$f''^*(x,y) = \overline{f^*(x,y)} - 0.5\int_0^2\overline{f^*(x,y)}dy^*$ である．右辺各項はそれぞれ，層流寄与項，乱流寄与項，壁面垂直方向対流寄与項，流れ方向対流寄与項，要素による付加応力寄与項 (ポリマー寄与項)，圧力寄与項である．$C_f(x)$ に対する乱流寄与項の流れ方向変化を図 3(右軸) に示す．壁面摩擦係数 $C_f(x)$ の減少に伴い乱流寄与項も減少しており，抵抗低減効果の主要因は乱流寄与項の減少により生じている．

図 4(a)，(b) に乱流寄与項の被積分項である重み付レイノルズせん断応力分布を示す．重み付レイノルズせん断応力は下流に行くに従い，主に $20 < y^+ < 60$ で減少する．よって緩和層での重み付レイノルズせん断応力の減少により抵抗低減効果が生じている．

図 5(a)，(b) に y 方向濃度分布を示す．ここで縦軸は n_e/n_{e0} を示しており，数密度 $n_e(x,y) = \overline{\frac{N_e(x,y)}{\Delta x\Delta y L_z}}$，平均数密度 $n_{e0} = \frac{N_s}{L_xL_yL_z}$，ある格子中に含まれている要素数 $N_e(y)$，計算領域に含まれている要素数 N_s である．$n_e/n_{e0} = 1$ の場所は一様混入の濃度であり，$n_e/n_{e0} > 1$ は平均濃度よりも局所的な濃度が高い領域を示す．いずれの吹出量においても，流れ方向に行くに従いチャネル中央部の濃度が徐々に増大する．また粘性低層 $(y^+ < 5)$ では乱流による混合作用が抑えられるため，高濃度の領域 $(n_e/n_{e0} \geq 10)$ が形成される．流れ方向に行くに従い，壁面近傍 $(y^+ \sim 3)$ から緩和層 $(y^+ \sim 30)$ までの濃度が増加し，要素がその領域での乱れを減衰させレイノルズ応力の間接的な減少により抵抗低減効果を増大させている．図 6 に $x^+ = 4.4$(滲出開始位置) 及び $x^+ = 27000$(最下流:滲出量最大) における要素の y 方向濃度分布を全ての吹出量 N_b について示す．吹出量 N_b(滲出濃度) を増加させると，壁面近傍 $(y^+ \sim 3)$ から緩和層 $(y^+ \sim 30)$ までの濃度が増大している．よって壁面近傍の乱流拡散をより抑制し，抵抗低減効果を増大させる．

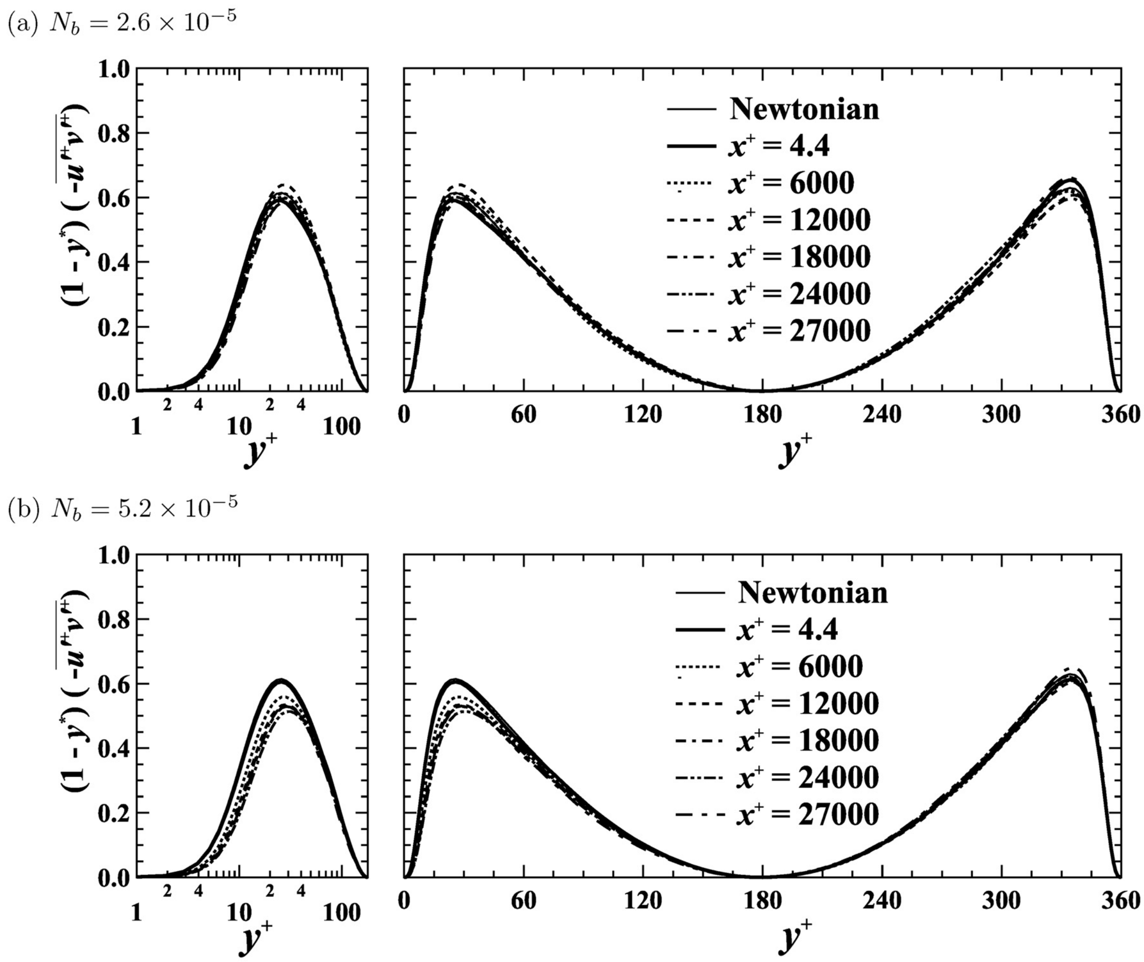


Fig. 4　Distribution of weighted Reynolds shear stress.

4. 結論

平行平板間乱流において，高分子溶出を簡略化した下壁面からの高分子滲出を模擬した数値計算を実施し，以下の知見を得た．

1. 下壁面からの高分子滲出を行うことにより抵抗低減効果を確認した．局所せん断応力分布は高分子滲出を模擬した場合，流れ方向に減少した．これは，下壁面からの一様高分子滲出により要素濃度が流れ方向に増加するためである．
2. FIK 恒等式 [7] より，局所壁面摩擦係数の減少は主に乱流寄与項の減少により生じる．乱流寄与項の被積分項である重み付レイノルズせん断応力分布は，下流に行くに従い主に $20 < y^+ < 60$ で減少する．よって緩和層での重み付レイノルズせん断応力の減少により抵抗低減効果が生じている．
3. 吹出量 (滲出濃度) が増加するほど，壁面近傍 ($y^+ \sim 3$) から緩和層 ($y^+ \sim 30$) までの濃度が増大し，抵抗低減効果が大きくなる．

謝辞

本研究は，東北大学サイバーサイエンスセンターの大規模科学計算システム及びスーパーコンピュータ SX-9 を利用することで実現した．OpenMP による並列化やリストベクトル化等の際には，貴センタースタッフから有益なご助言とご協力を頂いた．記して感謝の意を表す．

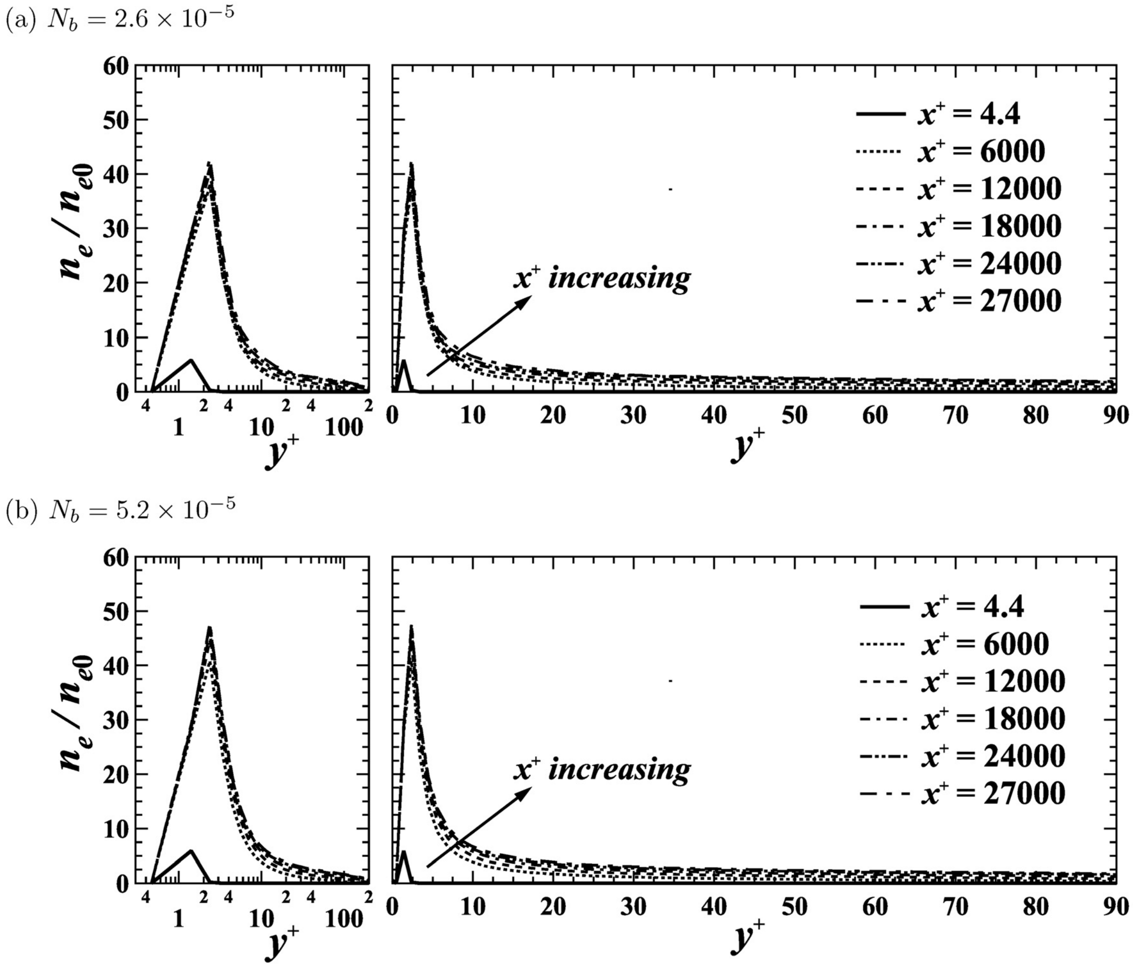


Fig. 5　Distribution of y-direction element concentration.

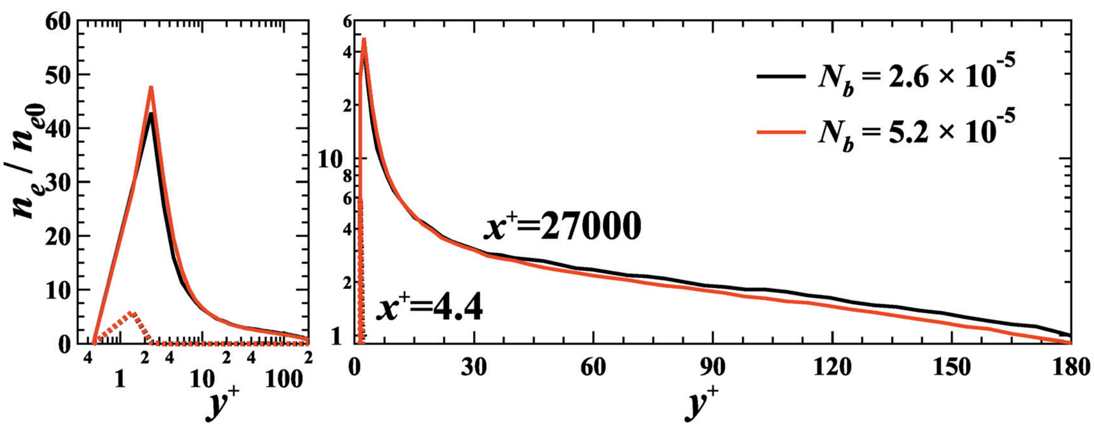


Fig. 6　Distributions of y-direction element concentration.

参考文献

[1] Toms, B. A., Some Observations on the Flow of Linear Polymer Solutions through Straight Tubes at Large Reynolds Numbers, *Proceedings of the 1st International Congress on Rheology*, pp.135-141, 1948.

[2] Lumley, J. L., Drag reduction in turbulent flow by polymer additives, *Journal of Polymer Science:Macromolecular Reviews*, Vol.7,No.1, pp.263-290, 1973.

[3] Virk, P. S., Drag Reduction Fundamentals, *AIChE Journal*, Vol.21,No.4, pp.625-656, 1975.

[4] Berman, N. S., Drag Reduction by Polymers, *Annual Review of Fluids Mechanics*, Vol.10, pp.47-64, 1978.

[5] Kajishima, T. and Miyake, Y., Drag Reduction by Polymer Additives in Turbulent Channel Flow Simulated by Discrete-Element Models, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol.64,No.627, pp.3636-3643, 1998.

[6] Kuroda, A., Saido, S. and Kudo, K., Mechanism of Drag Reduction by Addition of Dumbbell-like Small Elements in Tubulent Channel Flow, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol.70,No.690, pp.303-310, 2004.

[7] Fukagata, K., Iwamoto, K. and Kasagi, N., Contribution of Reynolds Stress Distribution to the Skin Friction in Wall-Bounded Flows, *Physics of Fluids*, Vol.14, L73-L76, 2002.

[8] Iwamoto, K., Fukagata, K., Kasagi, N. and Suzuki, Y., Friction Drag Reduction Achievable by Near-Wall Turbulence Manipulation at High Reynolds Numbers, *Physics of Fluids*, Vol.17, 011702, 2005.

[9] Bird *et al.*, Bird, R. B., Curtiss, C. F., Armstrong, R. C. and Hassager, O., *Dynamics of Polymeric Liquids*, Vol.2, John Wiley and Sons, Inc., 1987.

[10] Koshi, M., Iwamoto, K., Murata, A., Mochizuki, S. and Kawaguchi, Y., Direct Numerical Simulation of Turbulent Flow with Near-Wall Concentrated Polymer Additives Using a Spring-Dumbbell Model, *Proc. 19th Int. Symposium on Transport Phenomena*, pp.5 (In CD-ROM), 2008.

［研究成果］

火星におけるピックアップ O^+イオンの生成率の太陽風動圧依存性

寺田香織 [1], 寺田直樹 [1], 藤原均 [1], 加藤雄人 [1], 笠羽康正 [1]
[1] 東北大学大学院理学研究科

我々は、火星におけるピックアップ O^+イオンの生成率の太陽風動圧依存性を、磁気圏シース―電離圏―外圏結合モデルと磁気圏磁気流体力学（MHD）モデルを結合して調査し、その値を太陽風動圧の関数として定量的に求めた。ピックアップ O^+イオンの生成率は、①イオノポーズ高度と②外圏の高エネルギー酸素原子密度、③電荷交換反応率及び電子衝突電離率の３つのパラメーターに依存する。本研究により、ピックアップ O^+イオンの生成率は、太陽風動圧が大きくなるほど増加し、太陽風動圧が 1.43 nPa のときの生成率（$\sim 3\times10^{24}$ ions s^{-1}）は、太陽風動圧が 0.36 nPa のときの生成率（$\sim 4\times10^{22}$ ions s^{-1}）よりも約２桁大きくなることが分かった。本結果は、火星の O^+イオン流出の調査において、高い太陽風動圧条件下での調査が重要となることを示唆するものである。

1. はじめに

現在の火星は地球に比べて大気が薄く、その気候は寒冷で乾燥している。しかしながら、近年の衛星探査による流水地形の発見等から、かつては分厚い大気をもつ温暖で湿潤な惑星であったと考えられる。火星に存在した大量の大気・水が失われた主要因は、宇宙空間への大気の流出である可能性が高いと考えられており [1]、流出機構の解明は火星の重要なサイエンスターゲットの１つに挙げられている。

Phobos2 衛星及び Mars Express 衛星は、火星からの大規模な O^+イオンの流出を観測した [2-4]。O^+イオンの流出において最も重要な流出機構の一つは、イオノポーズ上空で新たに生成された O^+イオンの太陽風によるピックアップである。太陽風中で生成された O^+イオンは、太陽風の誘導電場によって速やかに加速を受けてサイクロトロン運動を始める。この加速された O^+イオンの一部はそのまま宇宙空間へ流出する。その他の O^+イオンはその惑星規模と同等程度の大きなサイクロトロン半径のために火星大気に再突入するが、十分な速さで突入した一部の O^+イオンは衝突した大気粒子を宇宙空間にはじき飛ばすことがある。

本稿では、この火星からの大気流出に大きく関わっているピックアップ O^+イオンの生成率を太陽風動圧の関数として定量的に求める。ピックアップ O^+イオンは、主に火星昼側の外圏で、中性酸素原子が太陽 EUV 放射による光電離及び電荷交換反応、電子衝突電離によってイオン化されることによって生成される。従来の O^+イオンの生成率の計算の大部分は、太陽風動圧の変化を考慮してこなかった。しかしながら、Mars Express 衛星の観測結果は、O^+イオンを含む重イオンの流出率と太陽風動圧の間に強い相関があることを示している [5]。

Kaneda et al. (2009) は、外圏の中性酸素原子密度及びイオノポーズ高度が太陽風動圧に依存することを示した [6]。このことは、太陽風にさらされる中性酸素原子の量が太陽風動圧に依存することを示唆する。太陽風と電離圏の境界であるイオノポーズは、太陽風動圧と電離圏のプラズマ圧が釣り合う位置に形成される。太陽風動圧が電離圏のプラズマ圧よりも大きい場合は、太陽風磁場が電離圏に進入していく。したがって太陽風動圧が大きいときほどイオノポーズ高度は低くなる。また、外圏に存在する高エネルギー中性酸素原子は電離圏の O_2^+イオンと電子の解離再結合反応によって生成されるため、太陽風動圧が大きくなり電離圏の厚みが薄くなるほど準定常状態における外圏の高エネルギー酸素密度は小さくなる（図 1）。さらに、太陽風動圧が大きくなる程太陽風フラックスが大きくなるので、電子衝突電離率及び電荷交換反応率が大きくなる。

本稿は、ピックアップ O^+イオンの生成率の太陽風動圧依存性を調べるために、①イオノポーズ高度と②外圏の高エネルギー酸素原子密度、③電荷交換反応率及び電子衝突電離率の３つのパラメーターを太陽風動圧の関数として、光電離及び電荷交換反応、電子衝突電離による O^+イオンの生成率を計算した。イオノポーズ高度と酸素原子密度の計算には Kaneda et al. (2009) の磁気圏

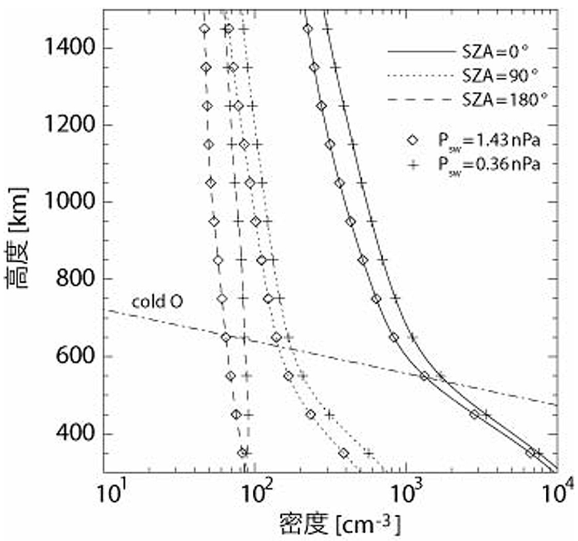


図 1：太陽風動圧（Psw）が 0.36 nPa と 1.43 nPa の場合の、準定常状態における高エネルギー酸素原子密度の高度分布。鎖線は低エネルギー酸素原子密度である。

シース―電離圏―外圏結合モデル [6] を、電荷交換反応率と電子衝突電離率の計算には Terada et al. (2009) の 3 次元磁気流体力学 (MHD) モデル [7] を用いた。また、本研究のパラメーターは全て太陽活動極小期（バイキング着陸機観測時）の値を採用している。

2. ピックアップ O^+イオン生成率の計算方法

ピックアップ O^+イオンは主に次の 3 つの反応によって生成される。

光電離　　　　　：$h\nu$ + O　　O^+ + e　　(1)

電荷交換反応　　：H^+ + O → H + O^+　　(2)

電子衝突電離反応：e + O → O^+ + e + e　　(3)

それぞれの反応による O^+イオンの生成率は、$f_{ph}n_O$、$f_{ch}n_O$、$f_{ell}n_O$（f_{ph}：光電離率、f_{ch}：電荷交換反応率、f_{ell}：電子衝突電離率、n_O：中性酸素原子密度）で与えられる。光電離率 f_{ph} は太陽活動極小期において 1 AU で 2.38×10^{-7} s^{-1} [8] であり、これは火星軌道では 1.0×10^{-7} s^{-1} になる。電荷交換反応率 f_{ch} は、

$$f_{ch} = n_p v_p \sigma \tag{4}$$

で得られる。n_p はプロトン密度、v_p はプロトン速度（群速度＋熱速度）、σ は衝突断面積で値は 8×10^6 cm^2 [9] である。電子衝突電離率 f_{ell} は、

$$f_{ell} = n_e \nu \tag{5}$$

で得られる。n_e は電子密度、ν は電子 1 個当たりの衝突率であり電子温度の関数である [10]。ピックアップ O^+イオンの生成率は、これら 3 つの反応による O^+イオンの生成率を、イオノポーズ上空の昼側全領域にわたって積分して求める。ただし、太陽風動圧が電離圏の最大プラズマ圧（0.89 nPa）よりも大きい場合は、イオノポーズ近傍で電離生成された O^+イオンは電離圏の下向き対流によって速やかに電離圏下層域に運ばれてしまい宇宙空間へと流出できないので、この下層に運ばれる領域の生成率は除いている。以下では下層へと運ばれる領域の上限高度を流出高度と呼ぶ。イオノポーズ高度及び中性酸素原子密度の計算には Kaneda et al. (2009) の磁気圏シース―電離圏―外圏結合モデル [6] を、電荷交換反応率及び電子衝突電離率の計算に必要なプロトン密度及びプロトン速度、電子密度、電子温度の計算には Terada et al. (2009) の 3 次元 MHD モデル [7] を用いた。イオノポーズ高度と中性酸素原子の高エネルギー成分の密度、電荷交換反応率、電子衝突電離率は太陽風動圧の値によって異なる。火星軌道における太陽風動圧は通常 0.4

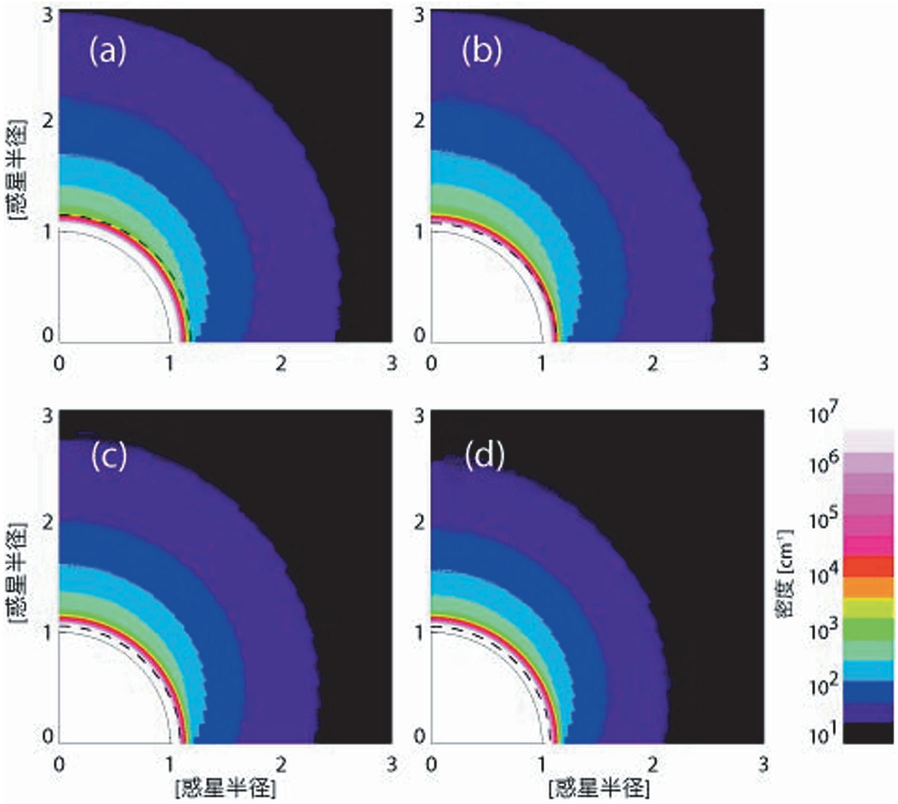


図 2：太陽風動圧が(a)0.36 nPa、(b)0.64 nPa、(c)0.99 nPa、(d)1.43 nPa のときの、準定常状態における中性酸素原子密度。破線はイオノポーズの位置を示す。

nPa から 1.5 nPa 程度で変化する。そこで、本研究では太陽風動圧が 0.36 nPa、0.64 nPa、0.99 nPa、1.43 nPa の 4 通りについて計算を行った。図 2 は各太陽風動圧時のイオノポーズ高度と中性酸素原子密度である。

3. 計算結果と考察

図 3 は、3 つのパラメーター、すなわち①イオノポーズ高度、②高エネルギー中性酸素原子密度、③電荷交換反応率及び電子衝突電率のいずれか 1 つのみを太陽風動圧の関数とし、他の 2 つのパラメーターは太陽風動圧が 0.36 nPa の場合の値に固定したときのピックアップ O^+イオンの生成率である。ただし、電荷交換反応率と電子衝突電離率のみを太陽風動圧の関数とした図 3(c)の縦軸は、電荷交換反応と電子衝突電離の 2 つの反応による生成率であり、光電離による生成率は入っていない。

図 3(a) は、イオノポーズ高度のみを太陽風動圧の関数とした場合の結果である。0.36 nPa から 0.99 nPa にかけて生成率が指数関数的に増加している。これは太陽風にさらされる中性酸素原子の量が増加するためである。イオノポーズは太陽風動圧と電離圏のプラズマ圧が釣り合うところに形成されるため、太陽風動圧が大きいほど低高度に形成される。図 4 は天頂角 0° におけるイオノポーズ上空の中性酸素原子のカラム密度を示している。赤色の破線は各イオノポーズ高度に対応する太陽風動圧であり、その高度での電離圏のプラズマ圧に等しい値になっている。図 4 には電離圏の最大プラズマ圧である 0.89 nPa 以上は含まれていない。太陽風動圧が 0.4 nPa よりも小さくイオノポーズ高度が 500 km よりも高高度に形成されているあいだは太陽風動圧の増加に伴う中性酸素原子のカラム密度の増加はゆるやかであるが、太陽風動圧が 0.4 nPa よりも大きくイオノポーズ高度が 500 km よりも低高度になるとカラム密度の増加率は増大する。こ

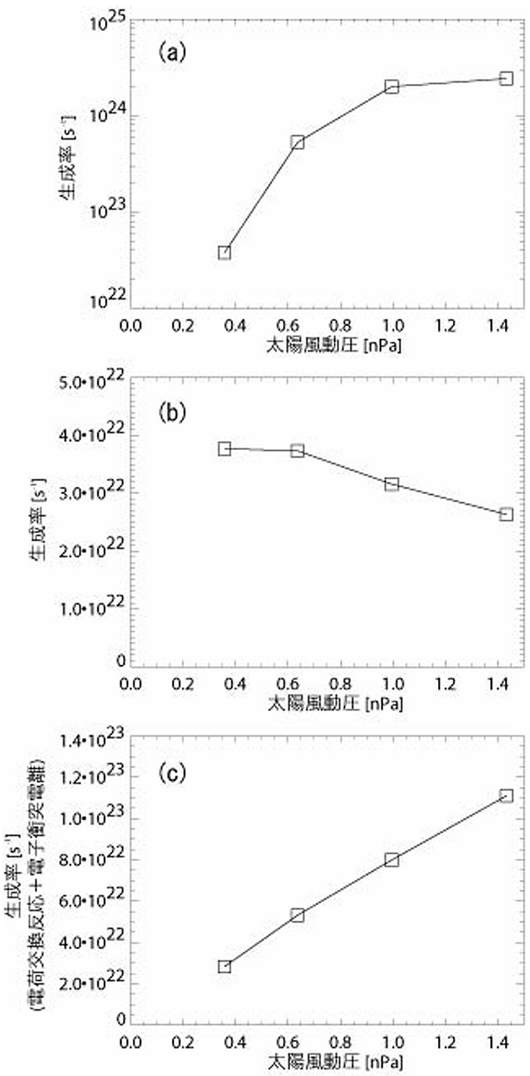


図３: (a)イオノポーズ高度、(b)高エネルギー中性酸素原子密度、(c)電荷交換反応率と電子衝突電離率のみを太陽風動圧の関数とした場合のピックアップ O^+イオンの生成率。

れは高度約 550 km のところで、酸素原子の主成分が高エネルギーのものからスケールハイトのより小さい低エネルギーのものへと変わるからである（図 1)。図 3(a)に見られる指数関数的なピックアップ O^+イオン生成率の増加は、0.4 nPa 以上での急激な中性酸素原子のカラム密度の増加に起因している。太陽風動圧が電離圏の最大プラズマ圧（0.89 nPa）よりも大きくなると、太陽風磁場が電離圏中に進入する。しかし、このような過動圧時にはイオノポーズから電離圏下層への下向きの対流が存在し、イオノポーズ近傍で生成された O^+イオンはその下向き対流によって電離圏下部に速やかに運ばれる。そのため、太陽風動圧が 0.89 nPa を超えると、太陽風動圧の増加による流出高度の変化は小さく、その結果宇宙空間へと流出するピックアップ O^+イオンの生成率はほとんど増加しない。

図 3(b) は、高エネルギー中性酸素原子密度のみを太陽風動圧の関数とした場合の結果である。準定常状態における高エネルギー中性酸素原子密度は太陽風動圧が大きいときほど小さくなるので（図 1、2)、太陽風動圧が大きくなるとピックアップ O^+イオンの生成率は小さくなる。太陽風動圧が 1.43 nPa の場合の生成率は 0.36 nPa の場合の約 2/3 倍である。しかし、図 3(a) のイオノポーズ高度の変化による生成率の増加と比べるとその減少幅ははるかに小さく、高エネルギー酸素原子密度の変化が生成率の変化に与える影響は小さいといえる。

図 3(c) は、電荷交換反応率及び電子衝突電離率のみを太陽風動圧の関数とした場合の結果である。但し、光電離による生成率は含まれていない。太陽風動圧は、太陽風の質量密度の１乗と速度の２乗に比例するが、ここでは質量密度のみ変化させた。太陽風動圧の増加に比例して太陽風のプロトン密度及び電子密度も増加するため、この２つの反応による生成率も太陽風動圧に比例して増加する。

最後に、３つのパラメーター全てを太陽風動圧の関数として生成率の計算を行った。表１は、各太陽風動圧時の光電離、電荷交換反応、電子衝突電離の３つの反応によるピックアップ O^+イオンの生成率と、これら３つの生成率を足し合わせた総生成率である。総生成率は太陽風動圧が増

表１: ピックアップ O^+イオンの生成率

太陽風動圧 [nPa]	光電離 [s^{-1}]	電荷交換反応 [s^{-1}]	電子衝突電離 [s^{-1}]	総生成率 [s^{-1}]
0.36	9.34×10^{21}	1.10×10^{22}	1.80×10^{22}	3.83×10^{22}
0.64	3.61×10^{23}	1.37×10^{23}	1.14×10^{23}	6.13×10^{23}
0.99	1.46×10^{24}	2.41×10^{23}	3.37×10^{23}	2.04×10^{24}
1.43	1.70×10^{24}	3.17×10^{23}	7.64×10^{23}	2.78×10^{24}

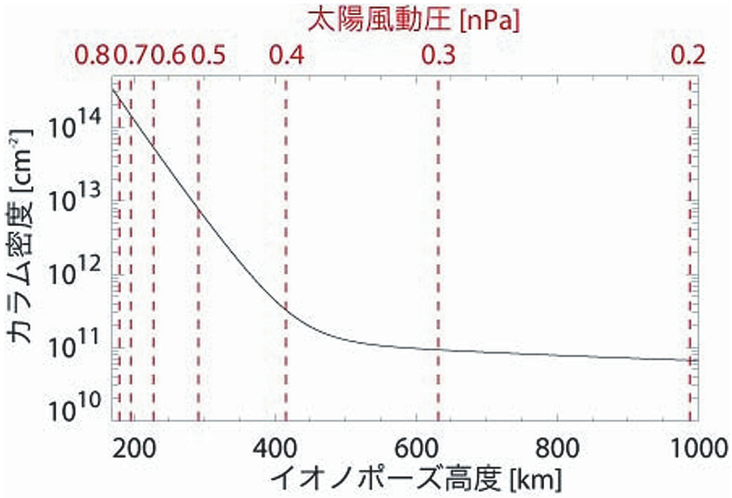


図 4：天頂角 0°における イオノポーズ上空の中性酸素原子のカラム密度。

加する程大きくなり、太陽風動圧が 1.43 nPa の場合の生成率は、0.36 nPa の場合よりも約 2 桁も大きくなっている。いずれの反応でも生成率の増加がみられるが、特に顕著なのは光電離である。太陽風動圧が 0.36 nPa の場合は 3 つの反応による生成率は同程度であるが、太陽風動圧が 0.64 nPa 以上では光電離が主生成源となり、総生成率の半分以上を占める。図 3 が示すように太陽風動圧の増加による生成率の指数関数的増加は、イオノポーズ高度が下がり低高度に大量に存在するスケールハイトの小さな低エネルギーの中性酸素原子が太陽風にさらされることが原因である。しかし、イオノポーズのすぐ上には magnetic barrier region が形成されて電荷交換反応率、電子衝突電離率共に小さくなるため、電荷交換反応及び電子衝突電離はイオノポーズ高度低下による生成率の増加が抑えられる。さらにこのことより、電荷交換反応率と電子衝突電離率は太陽風動圧に比例して増加するが（図 3(c)）、太陽風動圧が大きいときには光電離が主生成源であるため、総生成率の変化に対して電荷交換反応率と電子衝突電離率の変化が与える影響は小さいといえる。以上より、ピックアップ O^+イオンの生成率は太陽風動圧に大きく依存し、それは主に太陽風動圧によってイオノポーズ高度が変化するためであるということが分かる。

4. まとめ

本稿は、ピックアップ O^+イオン生成率の太陽風動圧に対する依存性を調べるために、①イオノポーズ高度と②高エネルギー酸素原子密度、③電荷交換反応率及び電子衝突電離率を太陽風動圧の関数にして、火星軌道における通常の太陽風動圧の変動範囲である 0.36 nPa から 1.43 nPa 時のイオノポーズ上空での O^+イオンの生成率を計算した。その結果、太陽風動圧が増加するほどピックアップ O^+イオンの生成率も増加し、太陽風動圧が 1.43 nPa のときの生成率（$\sim 3\times 10^{24}$ ions s^{-1}）は、太陽風動圧が 0.36 nPa のときの生成率（$\sim 4\times 10^{22}$ ions s^{-1}）よりも約 2 桁大きくなることが分かった。高エネルギー酸素原子密度、電荷交換反応率及び電子衝突電離率の変化が与える影響は小さく、生成率の増加は主に、イオノポーズ高度が低くなり、低高度に大量に存在する低エネルギーの酸素原子が電離して生成された O^+イオンが太陽風にさらされることに起因する。また、この結果から火星の O^+イオンの流出を調査する際は太陽風動圧が大きいときが重要であるといえる。

謝辞

本研究を進めるにあたり御指導いただきました京都大学の町田忍教授に深く謝意を表します。
本研究は、東北大学グローバル COE プログラム「変動地球惑星学の統合教育研究拠点」の支援を受けています。また、本研究の計算には、東北大学サイバーサイエンスセンターの SX-9 及び宇宙航空研究開発機構の JSS システム、情報通信研究機構のスーパーコンピュータシステムを用いました。関係する全ての皆様にここに深く謝意を表します。

参考文献

[1] Lammer, H., H. I. M. Lichtenegger, C. Kolb, I. Ribas, E. F. Guinan, R. Abart, and S. J. Bauer (2003), Loss of water from Mars: Implications for the oxidation of the soil, *Icarus*, *165*, 9-25.

[2] Lundin, R., A. Zakharov, R. Pellinen, H. Borg, B. Hultqvist, N. Pissarenko, E. M. Dubinin, S. Barabash, I. Liede, and H. Koskinen (1989), First measurement of the ionospheric plasma escape from Mars, *Nature*, *341*, 609-612.

[3] Verigin, M. I., et al. (1991), On the problem of the Martian atmosphere dissipation: Phobos 2 TAUS spectrometer results, *J. Geophys. Res.*, *96*, 19,315-19,320.

[4] Barabash, S., A. Fredorov, R. Lundin, and J. Sauvaud (2007), Martian atmospheric erosion rates, *Science*, *315*, doi:10.1126/science.1134358.

[5] Lundin, R., S. Barabash, A. Fedorov, M. Holmstrm, H. Nilsson, J. –A. Sauvaud, and M. Yamauchi (2008), Solar forcing a planetary ion escape from Mars, *Geophys. Res. Lett.*, *35*, L09203, doi:10.1029/2007GL032884.

[6] Kaneda, K., N. Terada, and S. Machida (2009), Solar-wind control of the hot oxygen corona around Mars, *J. Geophys. Res.*, *114*, E02007, doi:10.1029/2008JE003234.

[7] Terada, N., H. Shinagawa, T. Tanaka, K. Murawski, and K. Terada (2009), A three-dimensional, multispecies, comprehensive MHD model of the solar wind interaction with the planet Venus, *J. Geophys. Res.*, *114*, A09208, doi:10.1029/2008JA013937.

[8] Torr, M. R., and D. G. Torr (1985), Ionization frequencies for solar cycle 21: Revesed, *J. Geophys. Res.*, *90*, 6675-6678.

[9] Stebbings, R. F., A. C. H. Smith, and H. Erhardt (1964), Charge transfer between oxygen atoms and O+ and H+ ions, *J. Geophys. Res.*, *69*, 2349-2355.

[10] Cravens, T. E., J. U. Kozyra, A. F. Nagy, T. I. Gombosi, and M. Kurtz (1987), Electron impact ionization in the vicinity of comets, *J. Geophys. Res.*, *92*, 7341-7353.

[研究成果]

イオ関連デカメートル電波発生源の準定常構造に関する計算機実験

松田和也 [1]、三澤浩昭 [1]、寺田直樹 [2]、加藤雄人 [2]
1: 東北大学大学院理学研究科惑星プラズマ大気研究センター
2: 東北大学大学院理学研究科地球物理学専攻

独自に開発した static Vlasov code を用いて、木星の衛星イオに関連して放射されるデカメートル電波（Io-DAM）発生源の定常構造をシミュレートし、Io-DAM 観測特性の成因を探った。その結果、発生源の定常構造は、木星とイオの同一の電磁環境において複数存在し、2 層の加速層を有する構造において、電流や各加速層の電圧は、加速層の高度や木星とイオの電磁環境に依存することが判明した。また、異なる電波源に観られる Io-DAM の上限周波数の傾向は、電離圏密度の差異に起因する可能性が示唆された。

1. はじめに

木星デカメートル電波（DAM）は 1955 年に初めて発見された[1]。木星の衛星イオとその大気は、木星の自転とほぼ同期して回転している周囲のプラズマと相互作用しており、DAM の内、この相互作用の結果放射されている電波を Io-DAM と呼ぶ。Io-DAM は、異なる 2 種類の時間スケールのバースト現象に分類される。長時間継続する L-burst は、その継続時間の長さと発生源と目される沿磁力線加速領域の時間的安定性との類似性から、イオの下流側に形成される準定常的な加速領域内部でサイクロトロンメーザー不安定（CMI）と呼ばれるプラズマ不安定を介して励起されていると考えられている[2]が、その成因の詳細は未解明である。放射される電波の性質は発生源のプラズマと磁場の状態によって決定される。ゆえに、加速領域の性質と、その木星とイオというプラズマ供給源の電磁環境への依存性を調べることで、イオの火山活動や太陽紫外線量の変動などに対する電波の性質の応答を予測することができる。この予測に基づき、未解明である Io-DAM の観測特性の起源を究明することを目的とし、static Vlasov code と呼ばれる、定常状態における Vlasov 方程式の解を導出するコードを独自に開発し、数値実験を行った。

2. 計算手法の概要

シミュレーションは沿磁力線方向の 1 次元空間において、木星電離圏の exobase から自転赤道に位置し自身の火山活動に起因する濃いプラズマを纏うイオまでを扱う。以下、このシミュレーション空間を系と呼ぶ。電離圏、イオ近傍磁気圏の両境界において、各種プラズマの系への入射方向の速度分布を定義する。速度分布は bi-Maxwellian とし、Voyager 探査機の観測に基づき、密度、温度、温度異方性を設定する。本稿で使用したパラメータを表 1 に示す。系の内部では無衝突プラズマを仮定し、プラズマは Liouville の定理に従うものとする。境界

間電位差は、イオ関連電子加速現象に起因するオーロラの観測[3]から示唆されている 30kV に固定する。沿磁力線空間には 64 点の格子点を等間隔に配置した後、電離圏から 1～2 格子間に 15 点を等間隔に配置する。なお、空間格子点は電離圏境界から数えることとする。また、速度空間には磁力線に平行な速度方向に 30 点、垂直な速度方向に 60 点の格子点数を用意する。

表 1　境界条件に用いた速度分布のパラメータ。括弧内の記号 M は磁気圏の種、記号 I は電離圏の種を表す。磁気圏の種は[4]、電離圏の種は[5], [6]を参照した。

species	N [cm^{-3}]	$T_\perp$ [eV]	$T_\perp/T_\parallel$
cold e^- (M)	2498	5	1
hot e^- (M)	2	200	1
e^- (I)	30000	0.1	1
H^+ (M)	58	8.6	1
H^+ (I)	30000	0.1	1
O^+ (M)	1163	50	1
S^+ (M)	291	50	1
S^{2+} (M)	494	50	1

定常状態におけるプラズマは準中性条件を満たす。すなわち、空間の電荷密度は無視できるほど小さい。static Vlasov code において、空間は有限個の空間格子点で分割されるため、準中性条件は、

$$\rho_i = 0 \quad (i = 1 \sim 79)$$

と表される。ここで、ρ は電荷密度、添え字 i は格子点番号を表す。電荷密度は各空間格子点の電位に非線形に依存するため、準中性条件は各空間格子点の電位を変数とした連立非線形方程式である。この準中性条件を満たす解、つまり各格子点の電位を、Newton 法により探査する。すなわち、初期条件として電位プロファイルを指定した後、

(1) 各種プラズマの位相空間密度を速度空間について積分し電荷密度を算出する

(2) $\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \left(\partial\rho_i / \partial\phi_i\right)^{-1} \rho_i^n$　により電荷密度が 0 に近づく方向へ電位を修正する

というプロセスを、(1)で算出される電荷密度が閾値以下になるまで繰り返し行う。ここで、ϕ は電位、添え字 n、n+1 は繰り返し回数を表す。位相空間密度を速度空間について積分する際に、境界から入射された位相空間素片について、全エネルギーと磁気モーメントの保存以外に、accessibility と loss を考慮する。ここで、accessibility とは、ある素片が供給された境界から計算格子点まで位相空間上で連続した軌跡を描いて到達しているかどうかを意味する。素片は、供給された境界の対岸の境界まで到達し対岸の境界において系外に流出するもの、系内で反射し供給された境界まで戻るもの、の 2 通りに分類される。loss とは、到達している素片が対岸の境界から流出するかどうかを意味する。解として沿磁力線電位プロファイルが得られれば、準中性条件を満たす各種プラズマの位相空間密度も得られる。

3. 結果と考察

先行研究[2]では“準中性条件を満たす定常解は、同一の境界条件下において複数存在すること”が可能性として言及されてはいた。しかし、本研究ではこのことが具体的に示された。木星－イオの電磁環境では、解は 1 層、あるいは複数層の加速層を有する電位分布に収束する。ここで、加速層とは連続した 2 格子点間に大きな電位の飛びが存在する構造を指す。2 層の加速層を有する解の典型例を図 1 に示す。加速層は準中性条件を満たすことが可能な範囲にのみ存在が可能である。その存在可能範囲は、他の加速層の高度や境界条件に依存する。以下、高度は電離圏境界から沿磁力線方向に測られた距離を意味する。CMI により電波を励起するには、加速層以下の高度において、電離圏電子より磁気圏電子の密度が大きいことが必要である[7]。加速層が 1 層のみの解では、この条件を満たすことができないため、Io-DAM の発生源は 2 層の加速層の間の領域であると考えられる。そのため、2 層の加速層を有する解の性質と、その木星とイオの電磁環境の変動に対する応答に関して研究を進め、以下の知見を得た。

各加速層の電圧と系を流れる電流は系における各加速層の高度に依存することが判明した。低高度加速層の高度が高い場合、低高度加速層の電圧、電離圏プロトンによる電流が小さくなる。この例として、図 2 に一定の高高度加速層高度における、電圧、電流の低高度加速層高度依存性を示す。一方、高高度加速層の高度が高い場合、高高度加速層の電圧、磁気圏電子による電流が大きくなる。この例として、図 3 に一定の低高度加速層高度における、電圧、電流の高高度加速層高度依存性を示す。本研究では境界間電位差は固定されているので、ある加速層の電圧が大きくなると、他方の加速層の電圧は小さくなる。また、電流は電離圏境界での電流密度である。これらの結果は以下のように考えることで理解できる。

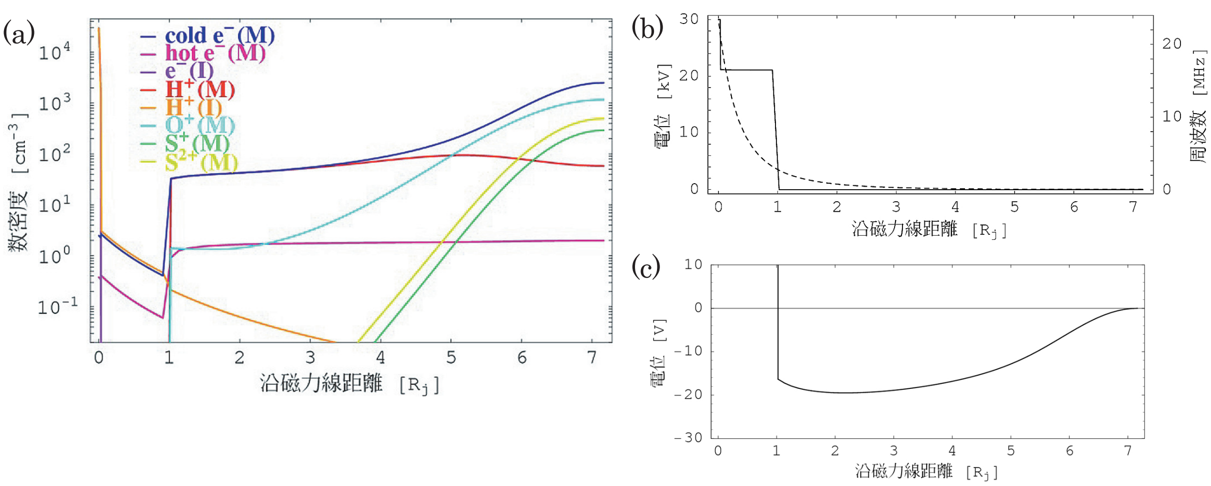


図 1　2 層の加速層を有する解の典型例。低高度加速層は格子点 5~6、高高度加速層は格子点 24~25 に存在する。横軸は電離圏境界からの沿磁力線距離を表す。(a) 各種プラズマの数密度。(b) 電位（実線）と電子サイクロトロン周波数（点線）。(c) 電位の 0V 近傍の拡大図。

位相空間素片の異なる 2 点での密度への寄与の比は

$$\frac{dn(v_{\|}, v_{\perp})}{dn_0(v_{0\|}, v_{0\perp})} = \frac{B}{B_0}\left|\frac{v_{0\|}}{v_{\|}}\right|$$

のように表される。ここで、n は数密度、$v_{\|}$（$v_{\perp}$）は素片の磁場に対して平行（垂直）方向の速度、B は磁場強度である。添え字 0 の付された変数は添え字なしの変数と異なる空間点での値であることを示す。この式から、2 点の間に十分強い加速があり、$v_{\|}$が大きくなると、基本的に n は減少することがわかる。低高度加速層の高度が高い場合、低高度加速層直下の電離圏プロトン密度が小さくなるため、発生源での準中性条件を満たすために、低高度加速層の電圧が小さく、加速層でのプロトン密度減少を抑えた解に収束する。このとき、低高度加速層まで到達できるプロトンが減少し、その結果、磁気圏側境界まで到達し正味の電流に寄与する素片

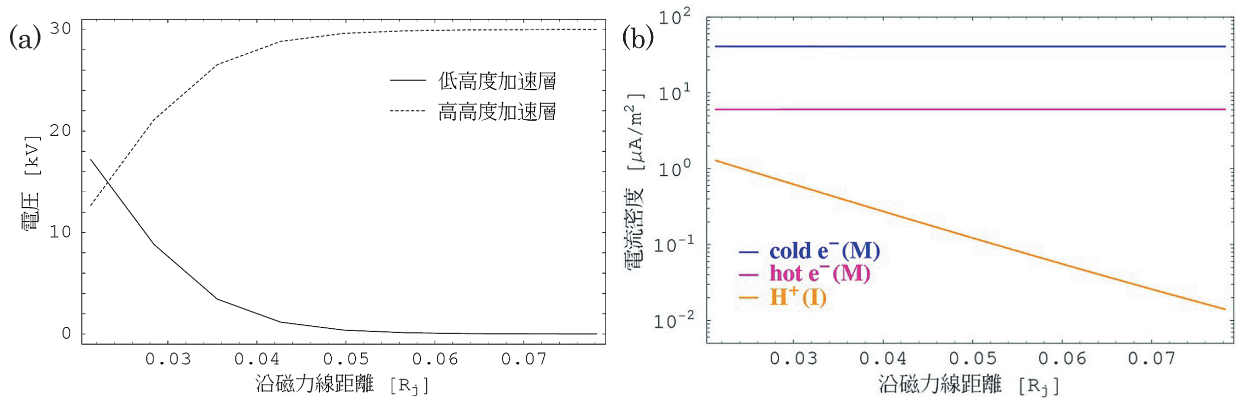


図 2　高高度加速層が格子点 24~25 に存在する場合の系の性質の低高度加速層高度依存性。横軸は電離圏境界から低高度加速層までの沿磁力線距離を表す。(a) 低高度（実線）、高高度（点線）加速層の電圧。 (b) 電離圏境界での電流密度。

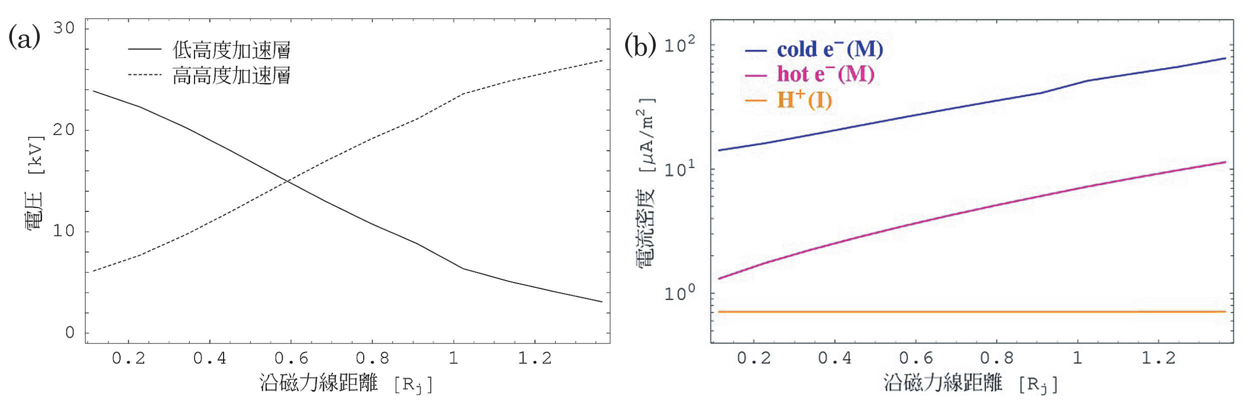


図 3　低高度加速層が格子点 5~6 に存在する場合の系の性質の高高度加速層高度依存性。横軸は電離圏境界から高高度加速層までの沿磁力線距離を表す。(a) 低高度（実線）、高高度（点線）加速層の電圧。(b) 電離圏境界での電流密度。

も少なくなる。他方、高高度加速層高度の上昇による各加速層の電圧の変動は、主に高高度加速層直下の電離圏プロトン密度の低下に起因している。磁気圏電子による電流、すなわち電離圏側境界まで到達可能な素片の量も、概して高高度加速層まで到達できる素片の量で決まるため、その高度に影響される。

系の性質は境界条件にも依存する。磁気圏の各種プラズマの密度、温度が小さい場合、概して高高度加速層の電圧、磁気圏電子による電流が小さくなり、高高度加速層の形成可能高度範囲は高くなる。一方、電離圏の密度、温度が小さい場合、概して低高度加速層の電圧、電離圏プロトンによる電流が小さくなり、低高度加速層の形成可能高度範囲は低くなる。

Io-DAM の特性は、発生源であると考えられる 2 層の加速層の間の領域の電磁環境によって決定される。前述の系の性質は、次のように Io-DAM の特性に影響を与えると考えられる。CMI により励起されるのはおよそ電子サイクロトロン周波数の波であり、この周波数は高度の減少とともに単調に増加する。低高度加速層以下の高度では電離圏電子の密度が磁気圏電子の密度を上回るため、CMI は bump-in-tail 不安定と呼ばれるプラズマ不安定と競合するとともに、電離圏電子の加熱に波のエネルギーが消費され、十分な強度の波動を励起できなくなる[7]。ゆえに低高度加速層の高度が低い場合、励起可能な上限周波数が高くなる。一方、高高度加速層の電圧や発生源の密度は、波のエネルギー源である電子の運動エネルギーの量に影響するため、Io-DAM の強度と関係していると考えられる。

Io-DAM には、Io-A、Io-B と呼ばれる、電波強度が特に強い電波源が存在する。両者はほぼ同じ磁力線を発生源とするが、地上から観た場合、その発生源はそれぞれ夕側と朝側に存在する。今まで Io-DAM のローカルタイム (LT) への依存性は明確には示されてこなかったが、本研究の結果に基づくと、LT から予想される電離圏密度の差異は Io-A と Io-B の観測特性の非対称性として現れてもよいはずである。電離圏の性質上、朝側に発生源のある Io-B の方が電離圏密度は小さいことが期待される。境界間電位差がイオ（磁気圏）側の要請で決まる[8]とすると、Io-B では Io-A に比べ、低高度加速層の形成可能高度範囲は低いため、低高度加速層の高度は低く、なおかつ電離圏プロトンによる電流は小さくなる傾向があると考えられる。シミュレーションの結果では、これら全ての条件を満たす Io-B の発生源は、Io-A に比べ、励起可能な上限周波数が高く、高高度加速層の電圧が大きいことになる。この上限周波数の予想は、観測されている Io-A と Io-B の差異の傾向と一致している[9]。ゆえに、Io-DAM に観られる上限周波数の非対称性の原因として、太陽紫外線による電離圏密度の差異が関係していることが示唆される。一方、電波強度については、Io-B の強度は 30MHz 程度の比較的高周波数において Io-A より強い傾向が観測されている[10]。この観測結果と電離圏密度との関連性は、今後の研究課題の 1 つである。

4. まとめ

独自に開発した static Vlasov code を用いて、Io-DAM 発生源の定常構造と、関連する Io-DAM の特性に関して研究を進め、以下の知見を得た。

発生源の一般的な特徴として、準中性条件を満たす定常解は、同一の境界条件下において複

数存在することを見出した。各加速層の電圧と系を流れる電流に関して、低高度加速層の高度が高い場合は低高度加速層の電圧と電離圏プロトンによる電流は小さくなること、高高度加速層の高度が高い場合は高高度加速層の電圧と磁気圏電子による電流が大きくなることを示した。また、解の性質の境界条件への依存性に関して、磁気圏の各種プラズマの密度、温度が小さい場合は、概して高高度加速層の電圧と磁気圏電子による電流は小さく、高高度加速層の形成可能高度範囲は高くなること、電離圏の密度、温度が小さい場合は、概して低高度加速層の電圧と電離圏プロトンによる電流は小さく、低高度加速層の形成可能高度範囲は低くなることを明らかにした。

以上の結果に基づき、異なるローカルタイムに存在する発生源の Io-DAM に観られる特性の差異について解釈を行った。Io-B では Io-A に対し、電離圏密度が小さいことが予想されるが、このとき Io-B では、低高度加速層の高度は低く、その結果上限周波数は高くなる傾向が期待された。この予想は観測されている Io-A と Io-B の上限周波数の傾向と一致しており、Io-DAM の上限周波数は、太陽紫外線に起因する電離圏密度の差異による影響を受けている可能性が示唆された。

謝辞

本研究の実験結果の一部は、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を利用して得られたものです。関係する全ての皆様にここに深く感謝申し上げます。

参考文献

[1] Burke, B. F., and K. L. Franklin (1955), Observations of a variable radio source associated with the planet Jupiter, *J. Geophys. Res.*, 60, 213–217.

[2] Su, Y.-J., R. E. Ergun, F. Bagenal, and P. A. Delamere (2003), Io-related Jovian auroral arcs: Modeling parallel electric fields, *J. Geophys. Res.*, 108, doi:10.1029/2002JA009247.

[3] Gérard, J.-C., J. Gustin, D. Grodent, P. Delamere, and J. T. Clarke (2002), Excitation of the FUV Io tail on Jupiter: Characterization of the electron precipitation, *J. Geophys. Res.*, 107, doi:10.1029/2002JA009410.

[4] Bagenal, F. (1994), Empirical model of the Io plasma torus: Voyager measurements, *J. Geophys. Res.*, 99, 11043–11062.

[5] Eshleman, V. R., G. L. Tyler, G. E. Wood, G. F. Lindal, J. D. Anderson, G. S. Levy, and T. A. Croft (1979a), Radio science with Voyager 1 at Jupiter - Preliminary profiles of the atmosphere and ionosphere, *Science*, 204, 976– 978.

[6] Eshleman, V. R., G. L. Tyler, G. E. Wood, G. F. Lindal, J. D. Anderson, G. S. Levy, and T. A. Croft (1979b), Radio science with Voyager at Jupiter - Initial Voyager 2 results and a Voyager 1 measure of the Io torus, *Science*, 206, 959– 962.

[7] Winglee, R. M., and P. L. Pritchett (1986), The generation of low-frequency electrostatic waves in association with auroral kilometric radiation, *J. Geophys. Res.*, 91, 13,531–13,541.

[8] Delamere, P. A., F. Bagenal, R. E. Ergun, Y.-J. Su (2003), Momentum transfer between the Io plasma wake and Jupiter's ionosphere, *J. Geophys. Res.*, 108, doi:10.1029/2002JA009530.

[9] Wilson, R. G. (1968), Fifth Source of Jupiter Decametric Radiation, *Nature*, 220, 1215–1218.

[10] Smith A. G., G. R. Lebo, N. F. Six, Jr., T. D. Carr, H. Bollhagen, J. May, and J. Levy (1965), *Astrophys. J.*, 141, 457–477.

白

[先端的大規模計算利用サービス利用成果]

民間航空機空力設計への適用のための大規模空力シミュレーション技術の開発

― エンジンスラストリバーサ空力解析技術開発 ―

村山光宏，竹中啓三
三菱航空機株式会社

三菱航空機株式会社では、平成20年度第2期より、先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービスの枠組みで、東北大学殿所有ベクトル計算機、SX-7Cを利用させて頂いている。この大規模計算機を活用し、民間航空機の空力設計に適用可能な、大規模空力解析技術に関する要素技術開発を実施してきた。開発した要素技術を設計に適用する事で、空力設計における開発リスクの低減、機体性能要求の達成や開発スケジュールキープが期待できる。本論文では、空力要素技術のなかでも、特に大規模解析が要求されるエンジンスラストリバーサ（逆噴射装置）の解析技術について紹介する。

1. はじめに

三菱重工業株式会社では、平成15年度より独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構殿の助成を受け、環境適応型高性能小型航空機に関する要素技術の研究開発を進めて来た。その内容は、空気力学、空力弾性、材料／構造、装備、飛行制御等の各要素技術や、多分野統合最適設計システムの研究など非常に広範囲にわたっている。要素技術開発を進める際には、最先端の技術を開発に迅速に適用する必要があることから、社内の研究開発だけではなく、宇宙航空研究開発機構殿、東北大学殿等の外部研究機関との共同研究を通じて産官学の技術を結集し、世界レベルの技術競争力を獲得、保持している。

三菱航空機株式会社ではその成果を発展させ、更なる高度化に向けた研究開発を行っている。現在、当社では環境負荷低減の為、同クラスの現行ジェット旅客機の燃費に対して、機体の軽量化・低抵抗化と新エンジンの搭載を含めて2割程度もの燃費削減を目標とした機体の設計開発を行っている（呼称MRJ、図1参照）。

開発した要素技術は汎用的に民間航空機設計に適用可能であるが、当社では、その先駆けとして、開発した要素技術を小型民間機の設計に適用し、効果を評価している。

これまでに計算流体力学（CFD）を用いた空力設計ツールに関しては、航空機の全機解析のような複雑形状へ対応可能な非構造格子法の適用を核として、解析格子生成の高速化や形状生成自動化、多目的最適化技術との融合、高精度非定常フラッタ解析、高精度空力騒音解析などの解析・最適化技術の要素技術開発を実施し、高度化を図ってきた。しかしながら、解析ツールの高度化に伴い、その解析規模も飛躍的に大きくなってきている。翼面上の流れの剥離や非定常現象が支配的ではない巡航時の設計には、風洞試験・飛行試験と並び、既にCFDが主要な空力設計ツールとなってきている。しかし、設計で要求される機体の離陸から巡航、着陸停止までの一連の運用エンベロープ全域での評価規模は数10万ケースにものぼり、これまでの計算技術及び計算機能力では実現困難であることから、その大部分を簡易解析や風洞試験等の他の評価手段に依存している状況であった。設計効率の向上や、他の評価手段との相互補完的利用による設計・評価精度の向上・設計リスク低減の為には、より多数のケースの評価を所定期間で実現する為の計算技術及び計算機能力の向上が必須である。

三菱航空機株式会社は、平成20年度第2期より、先端的大規模計算シミュレーションプログラ

ム利用サービスの枠組みで、東北大学殿所有ベクトル計算機、SX-7C を利用させて頂いている。この大規模計算機を活用し、民間航空機の空力設計に適用可能な、大規模空力解析技術に関する要素技術開発を実施してきた。開発した要素技術を設計に適用する事で、空力設計における開発リスクの低減、機体性能要求の達成や開発スケジュールキープが期待できる。本論文では、特に大規模解析が要求されるエンジンスラストリバーサ（逆噴射装置）の要素技術開発状況について紹介する。

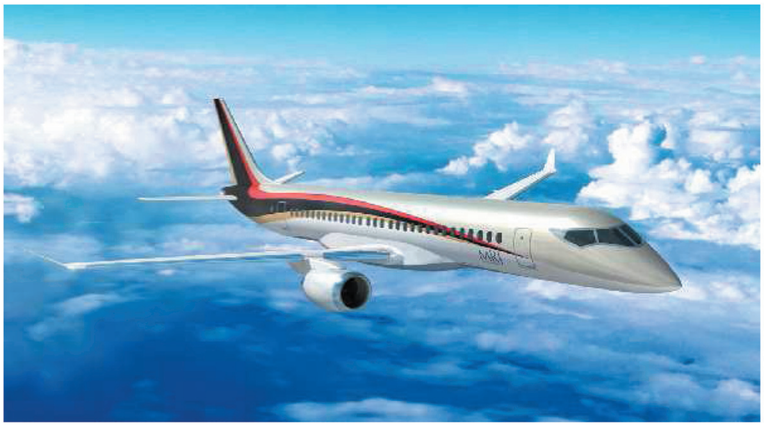


図 1 MRJ 完成予想図

2．　エンジンスラストリバーサ空力設計に関する要素技術開発

2．1　エンジンスラストリバーサ空力設計の課題

エンジンスラストリバーサ（逆噴射装置）は、主に航空機の着陸時にエンジン排気を逆噴射させることにより、スポイラ等による空力ブレーキと脚によるブレーキを補助し、着陸距離を短縮させるために用いられている。特に、雪氷滑走路等の条件時には制動性能確保に必須であり、エアラインからの強い要求もある。

高バイパス比エンジンが主翼下側に設置されている形態の民間ジェット機においては、図 2 に示されるような、エンジンナセル後部が後方へスライドし、カスケードと呼ばれる吹き出し口からエンジンのファン排気のみを逆噴射させるカスケード型のスラストリバーサが広く普及している。通常、片舷側のエンジンにつき独立した十数個のカスケードから構成され、各カスケードで独立に逆噴射の前方・側方噴射角度を調整している。

空力設計としては、スラストリバーサからの噴流と機体との複雑な空力干渉を正確に把握し、エンジンインレットへの逆噴射噴流の再吸い込みや地面上の石などの異物吸い込みによるエンジンへの悪影響を避け、スラストリバーサの運用速度域の設定、必要な制動力とスラストリバーサ作動時の操縦安定性確保、噴流と機体（機器）との干渉の制御などの多数の設計要求を満足する必要がある。各カスケードからの逆噴射の前方･側方噴射角度を調整して噴流と機体との干渉を減らす等により、これらすべての設計要求を満足するように各カスケードの噴射角度を設計する。また、必要とする逆推力、及び設定した噴出し角度を達成できるように、各カスケードを構成するカスケードベーン自体の設計も重要となる。

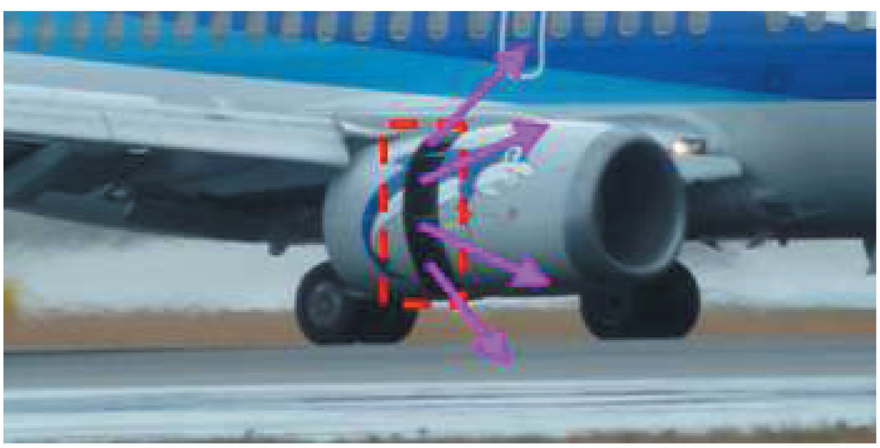
従来、スラストリバーサの設計は経験則と大規模な風洞試験によって実施されてきた。風洞試験では、エンジンの吸い込み、ジェット排気、逆噴射流の模擬や、噴流発生時の模型に作用する空気力の計測方法等に技術課題がある。加えて、風洞試験模型の縮尺では数 mm のサイズとなるカスケード形状の模擬も困難である。そのため、スラストリバーサの風洞試験には非常に大規模か

つ複雑な模型及び試験設備が要求され、試験コストも非常に大きくなっていた。また、風洞試験によって、カスケードの噴流噴出し角の機体性能や操縦安定性に対する感度情報を取得する為には、多大な試験ケース・カスケード交換作業が必要となる。このように従来のスラストリバーサ設計は、大規模風洞試験と飛行試験（地上走行試験）での試行錯誤的な経験に大きく依存した設計であり、再設計が必要になった場合には、設計コストとスケジュールに対する影響が大きいという設計リスクがある。

このような設計リスクの低減については、巡航時の設計においては既に実用化された設計ツールである CFD をスラストリバーサ設計に適用することが望まれる。しかし、その適用に際しては、（1）前縁スラットや後縁フラップのような高揚力装置を展開した多翼素形態に加え、スピードブレーキ等を含む解析形状の複雑さに起因する解析格子生成の困難さ、（2）エンジン吸気・排気や十数個にも及ぶ各カスケードからの噴流模擬、地面模擬等の境界条件の複雑さ、（3）複雑形状解析と大規模な剥離流やカスケードからの噴流の干渉などの非常に複雑な流れ場の解像のための高密度格子の使用に起因する解析規模と解析時間の長大化、が主な適用の阻害要因であった。

そこで、解析技術に関しては、非構造格子生成技術の高度化、大規模並列化計算技術及び汎用的な境界条件設定ツールの要素技術開発等により克服し、東北大学殿の大型計算機を利用させて頂く事により、本格的なスラストリバーサの解析技術を確立した。以降に、その解析例を紹介する。

(a) スラストリバーサ未展開時



(b) スラストリバーサ展開時

図 2　中部国際空港にて撮影の Boeing737 型機

２．２　CFD 解析コード

CFD 解析には、東北大学で開発された TAS (Tohoku University Aerodynamic Simulation) code[1]-[5]をベースとした解析コードを使用した。ソルバーは圧縮性 Reynolds-Averaged Navier-Stokes 方程式を基礎方程式としたセル節点有限体積法による非構造格子法ソルバーである。流束評価には HLLEW 法[6]を用い、U-MUSCL 法により高次精度化[7]を行った。時間積分には LU-SGS 陰解法[8]を用いた。乱流モデルには Menter SST ２方程式モデル[9]-[10]を用いた。非構造格子として、四面体、プリズム、ピラミッドからなるハイブリッド計算格子を用いている。なお、今回の解析に用いるような高揚力装置とスピードブレーキを展開した複雑な航空機全機離着陸解析形状に対して、表面格子から空間格子まで約１日で高品質の粘性計算用の格子が作成可能である。

計算ソルバーはスカラー計算機･ベクトル計算機の双方に対応可能にチューニングされており、効率の良い計算領域分割による MPI 並列化を用いて大規模並列計算を実現している。

２．３　解析技術適用例

２．３．１　カスケードベーン解析

図 3 にカスケード２次元断面の模式図を示す。カスケードベーンの設計にあたっては、図に示すような Bull-nose 部における流れの剥離による運動量損失や、各カスケードベーン背後の急激な加速による流れの剥離による運動量損失等を減らし、必要とする逆推力及び設定した噴射角度を達成できるように設計を行う必要がある。本節では実際の設計を踏襲し、後述する噴流流向・流速計測風洞試験の為のカスケード設計の実施例を紹介する。

２次元 CFD 解析によるスラストリバーサ噴流の前方噴射角度に関するカスケードベーン設計前後の解析結果（マッハ数分布）を図 4 に示す。ファンノズル部にノズル圧力比の境界条件を与え、カスケードを通過し一様流中に吹き出す流れ場を模擬し、噴流が設定した噴射角度になるようカスケードベーン形状の設定を行った。図には設計前後のカスケードベーン形状は示されていないが、設計により設定した噴射角度を適切に達成できている様子がわかる。

設計したカスケードの妥当性に関しては、図 5 に示す簡易エンジンナセル模型を用いた噴流流向・流速計測風洞試験により確認を行った。5 孔ヨーメータを用いてカスケードからの噴流の圧力を計測し、流速と流向の妥当性を確認する試験である。試験は三菱重工業名古屋航空宇宙システム製作所　2m 低速風洞にて実施した。対応する CFD 解析として、図 6 に示すスラストリバーサエンジン単体に対して CFD 解析を行った。この解析では先に述べた 2 次元 CFD 解析とは異なり、ファンノズル部からカスケード部のエンジン内部流については直接解かず、カスケード出口面に対して設定した噴射角度と総温、総圧、マッハ数の境界条件を与えて各カスケードからの噴流を模擬している。なお、簡易エンジンナセル模型を用いた風洞試験と対応させるために、本解析結果ではエンジン吸気・排気条件は模擬していない。

図 7 にスラストリバーサエンジン単体 CFD 解析結果の総圧等値面を示す。主翼及び胴体への噴流の衝突及び機体空気力との干渉を避ける為に、各カスケードで前方・側方噴射角度を調整し吹き出し方向を上下に分けている様子がわかる。図 8 に風洞試験結果と CFD 解析結果のカスケード噴流の M/Mj 分布比較（M:気流 Mach 数, Mj:供給空気の理論 Mach 数）を示す。なお、Mj は次式で表される。

$$M_j = \sqrt{\frac{2}{\gamma-1}\left\{\left(\frac{p_t}{p_{atm}}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}-1\right\}} \tag{1}$$

ここで、p_t はダクト内総圧、P_{atm} は大気圧である。風洞試験結果と CFD 解析結果は、噴流中心(高M/Mj領域)の位置と噴流の広がり方、及びM/Mjのピーク値や半径方向の分布も概ね一致しており、カスケードベーンが設計通りに機能している様子が確認できる。

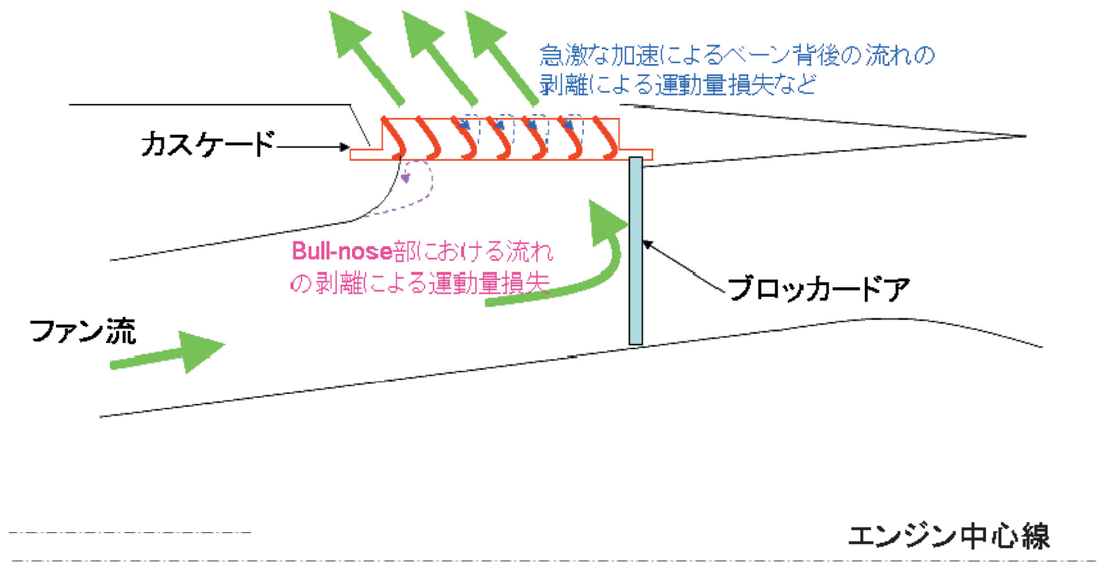
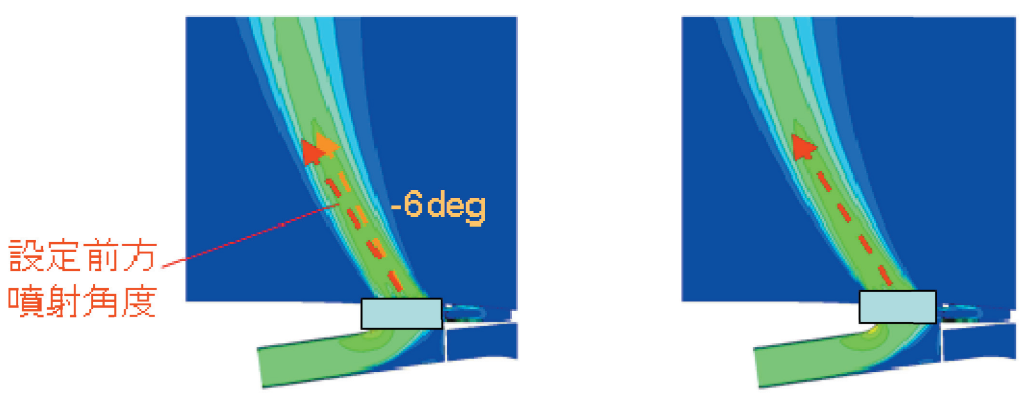
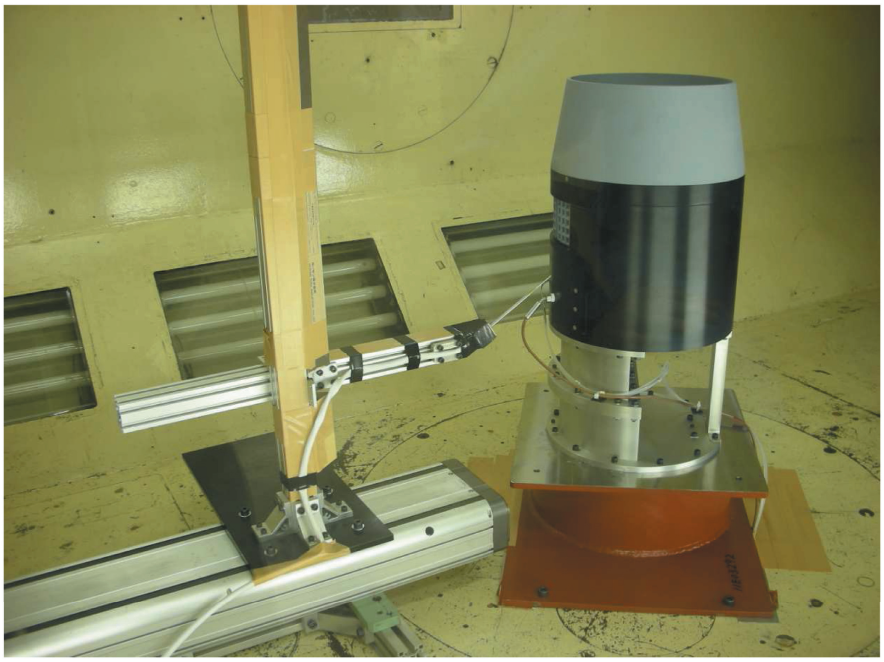


図３　カスケード２次元断面の模式図

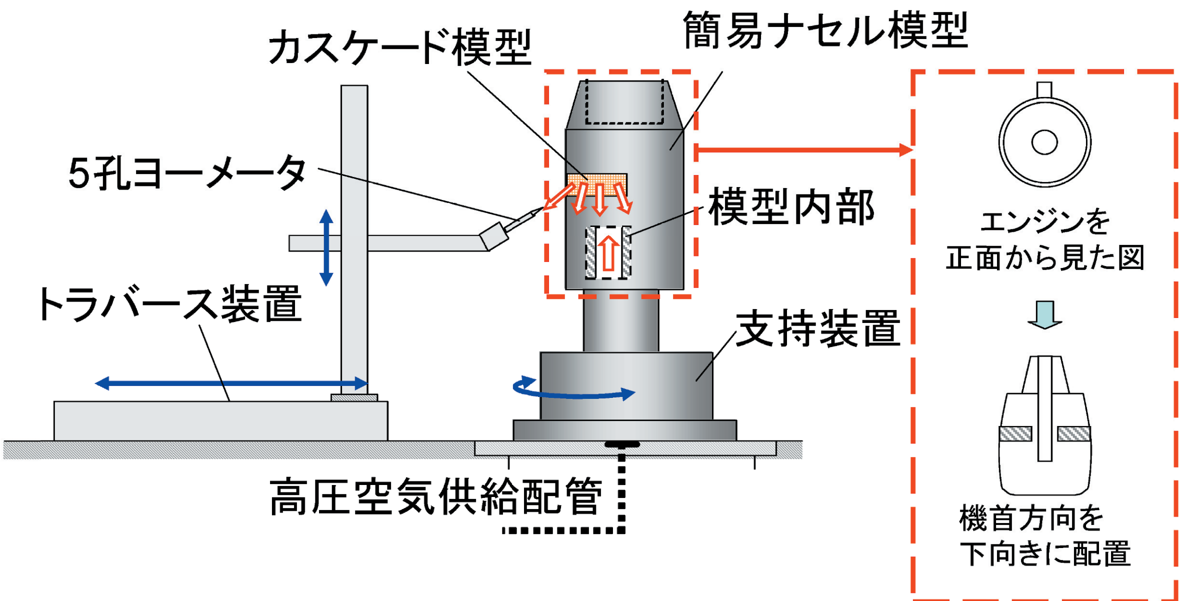


(a) 設計前　　(b) 設計後

図４　カスケードベーン２次元形状　設計例

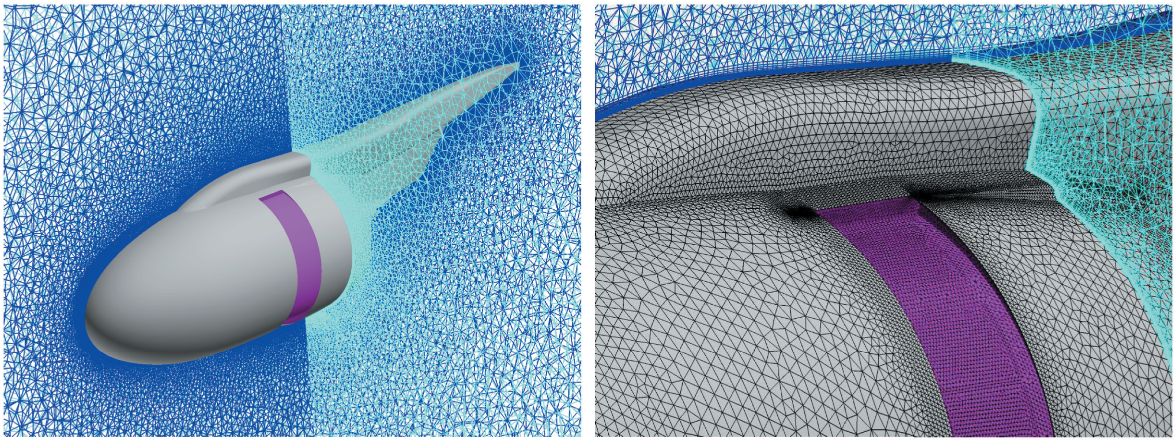


(a) 試験模型写真



(b) 試験概要図

図5　スラストリバーサ噴流　流速・流向確認試験（MHI　2m 低速風洞）の概要



(a) 鳥瞰図　　(b)パイロン近傍拡大図

図 6　スラストリバーサエンジン単体 CFD 解析格子

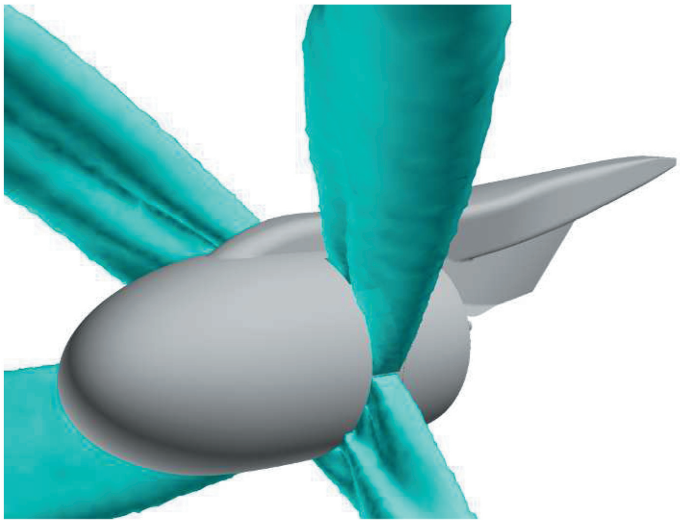
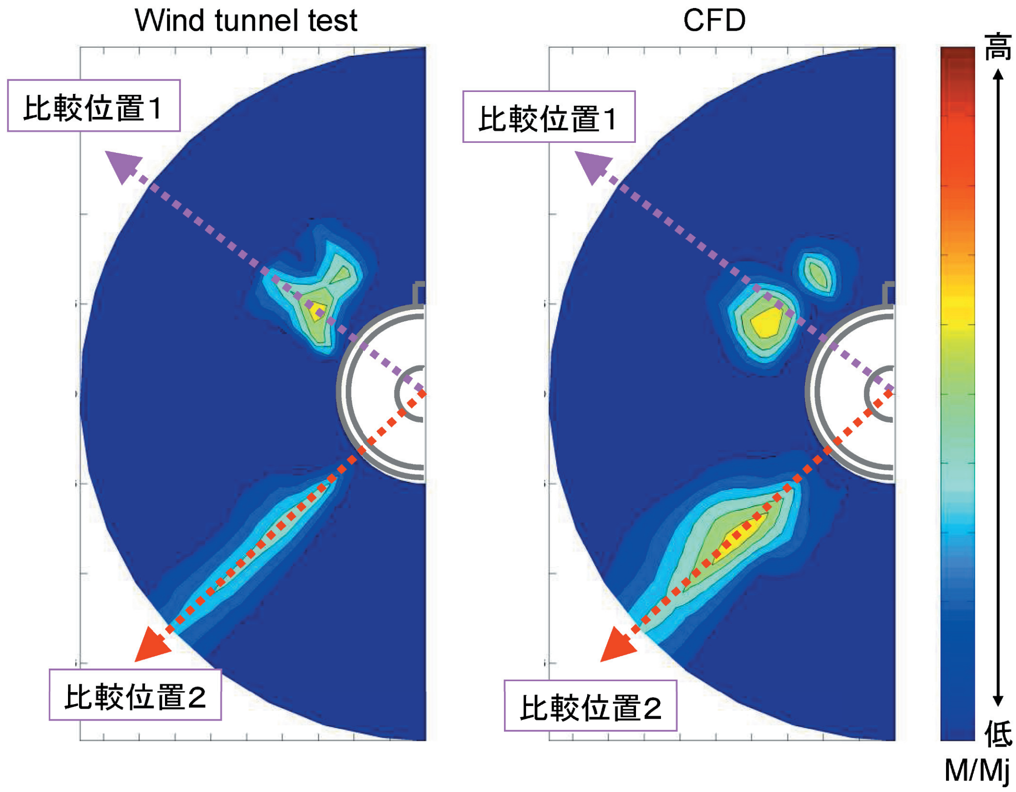
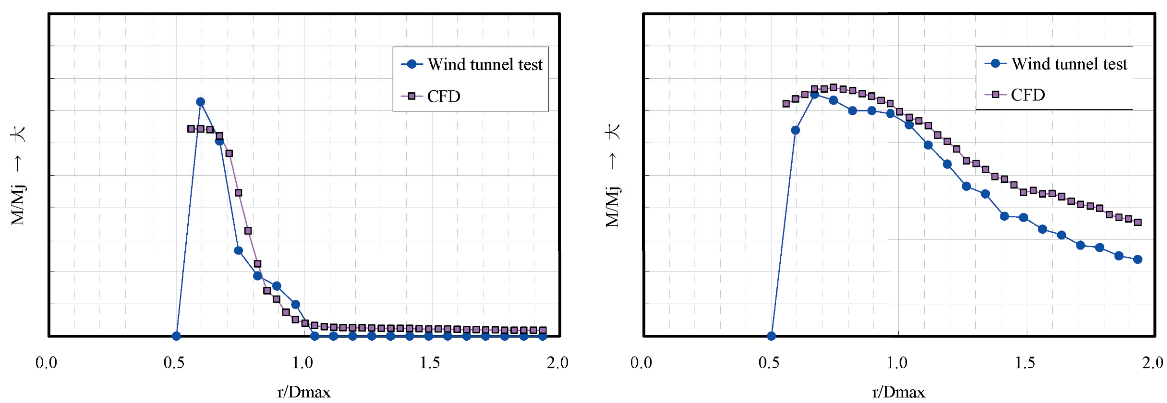


図 7　スラストリバーサエンジン単体 CFD 解析結果　総圧等値面



(i) 風洞試験結果　　(ii) エンジン単体 CFD 解析結果

(a)等高線比較 (エンジン正面図)



(i) 比較位置 1　　(ii) 比較位置 2

(b) 半径方向の分布比較(r:エンジン中心からの距離, Dmax:エンジン最大直径)

図 8　カスケード噴流　M/Mj 分布比較 (M:気流 Mach 数, Mj:供給空気の理論 Mach 数)

２．３．２　全機着陸形態 CFD を用いたスラストリバーサ吹き出し角度最適化設計

図 9 にスラストリバーサ全機 CFD 解析用計算格子の一例を示す。着陸時の地面接地後の形態であり、前縁スラット及び後縁フラップとスピードブレーキが展開されている。フラップ可動部を覆うフラップトラックフェアリングも含め、着陸時の機体形態を忠実に模擬している。格子点数は約 1500 万点、格子要素数は約 4500 万要素である。

解析は東北大学サイバーサイエンスセンター　SX-7C 32CPU(理論性能 512GFLOPS)を利用している。本解析の実行性能は約 100G FLOPS であり、解析時間は約 1 日である。

この実行性能は現行のスカラー計算機では数百コアの解析に相当する。数百コアの解析では、高い並列化効率を維持する事は容易ではなく、少ない CPU で高い演算性能を発揮できるベクトル計算機向きのアプリケーションであると考えられる。

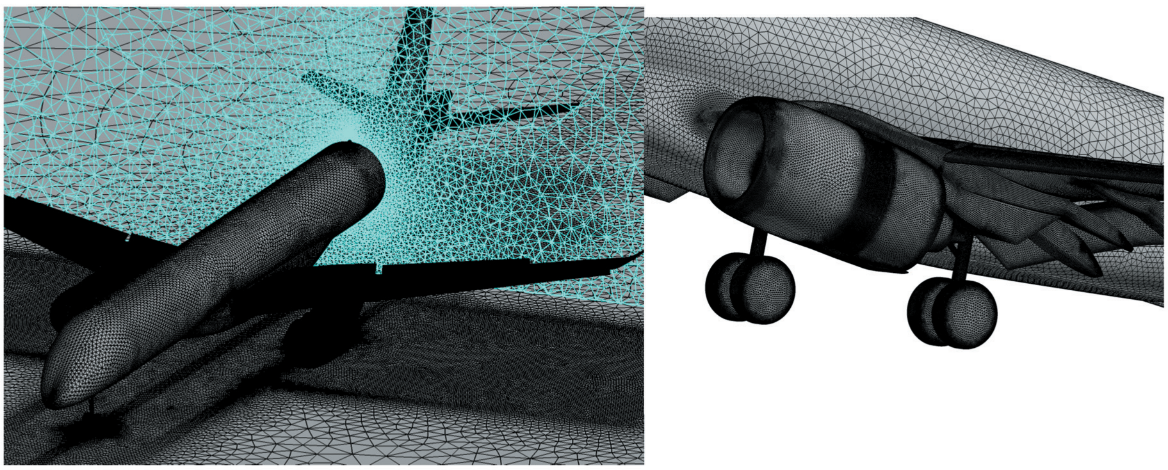


図 9　スラストリバーサ全機 CFD 解析用計算格子の例

図 10 に解析結果の一例を示す。スラストリバーサ部に関しては前述のスラストリバーサエンジン単体 CFD 解析と同様にカスケード出口面に境界条件を与えている。また、エンジン吸気・排気も適切に模擬し、地面に関しては移動地面境界条件を課して模擬している。

図 10 に示される解析結果では、内翼上側のカスケードからの噴流が胴体に直接衝突・干渉している様子や、内翼下側のカスケードからの噴流が一旦地面に衝突した後、主流に押し戻されて巻き上がり、エンジンインレットに再吸込みされている様子がみられ、エンジンへの悪影響の可能性がある。また、外翼上側のカスケードからの噴流が主翼上面の広範囲を通過し、スピードブレーキの効きを悪くしている様子がわかる。スラストリバーサ作動により、エンジン逆推力によるブレーキ力が増加するが、一方、逆噴射流と機体の空力干渉による機体の空力抵抗減少と揚力増加による脚のブレーキ力減少が見られるため、機体との空力干渉を減らす事も重要である。

本 CFD の活用により各カスケードからの複雑な逆噴射流の軌跡を把握でき、噴流と機体の空力干渉を減らし、かつエンジンへの再吸込みを遅らせてスラストリバーサ作動可能速度域を広げるための各カスケードの噴射角度の設計方針を決定できる。

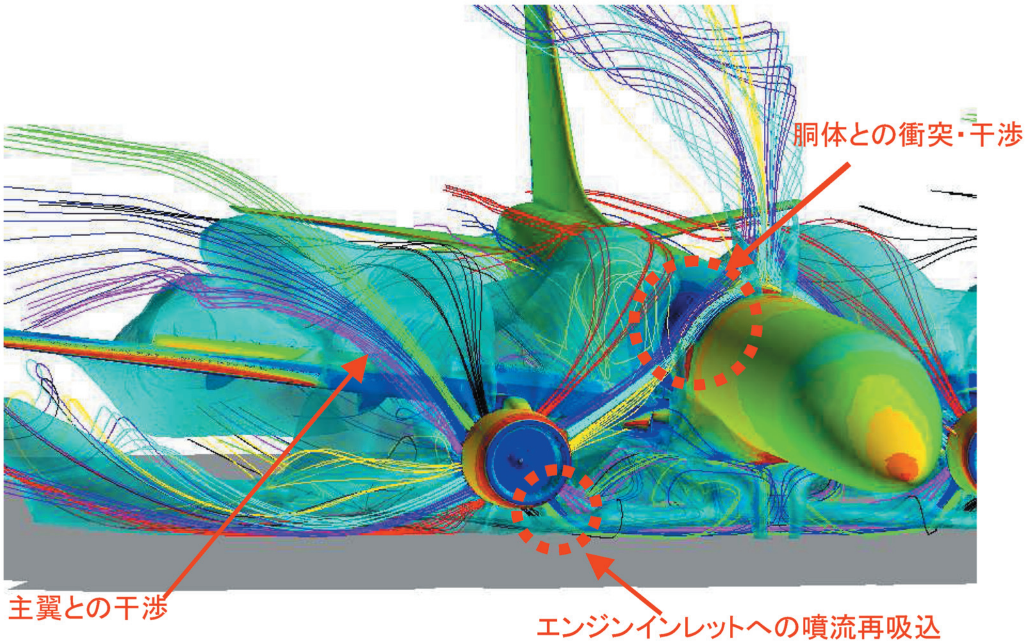


図 10　スラストリバーサ全機 CFD 解析結果例（機体表面 Cp・流線・総圧等値面）

スラストリバーサ作動時の制動力に関しては、CFD の検証を目的として、三菱重工名古屋航空宇宙システム製作所　2m 低速風洞にて、スラストリバーサ機体干渉検討用簡易低速風洞試験を実施した。本風洞試験は、エンジン・スラストリバーサ部を図 11 に示されるような簡易的な逆推力ノズルに変更しており、実機のカスケード噴出しパターンと詳細は異なるものの、逆噴射流と機体の空力干渉の規模を調べたものである。CFD と風洞試験結果との比較を図 12 示す。図 12 には機速 110kt 及び 60kt において逆推力を変化させた際の制動力（=逆推力＋機体空力抵抗＋脚による摩擦抵抗）の変化を示している。CFD 結果に関しては各機速において運用上想定されている逆推力時において、カスケードの噴射角度を変えたいくつかの結果についてプロットしている。風洞試験結果と CFD 解析結果は良い一致を示しており、CFD 解析結果の妥当性が示されている。

CFD では地面境界条件（固定地面（固定地面板）や移動地面（Moving belt 地面板））の影響、模型支持部との干渉、更にはエンジン吸気・排気模擬の有無によるカスケード噴流と機体の空力干渉の変化など、風洞試験で模擬する事が難しい部分を詳細に評価が可能であり、風洞試験結果と CFD 結果の相互補完的利用によって設計・評価精度の向上・設計リスク低減が期待できる。

図 11　スラストリバーサ機体干渉検討用簡易低速風洞試験（MHI　2m 低速風洞）

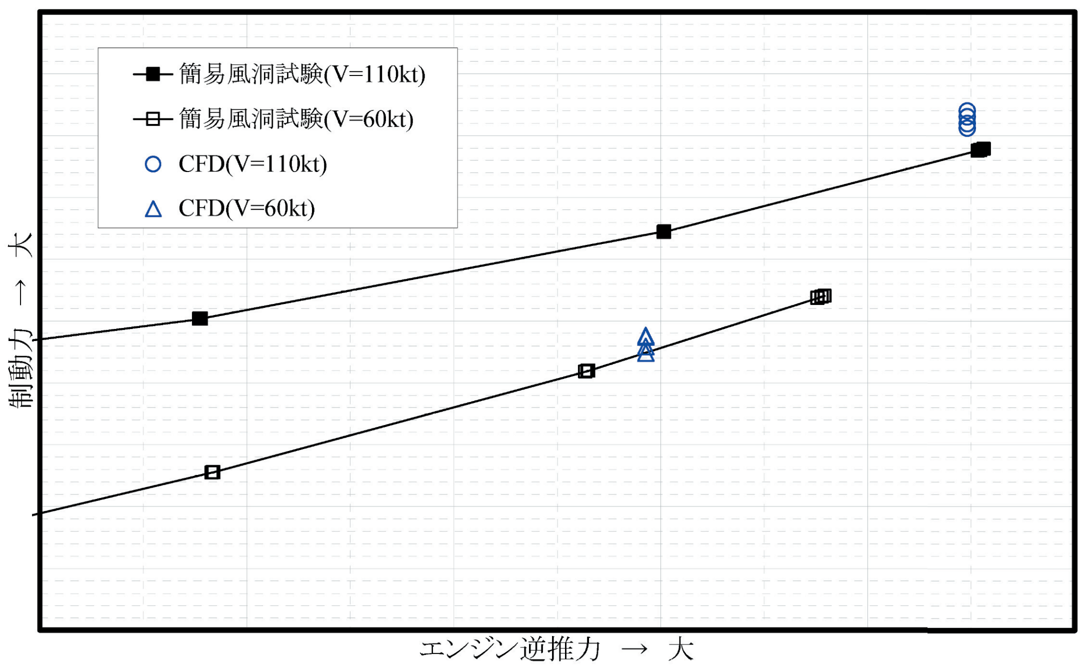


図 12　機体制動力（=逆推力＋機体空力抵抗＋脚による摩擦抵抗）比較評価結果

3.　おわりに

平成 20 年度 先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービスを利用させて頂き、世界でもトップレベルの計算機環境を利用する事で、これまで実施が困難であった航空機の実運用に沿った離陸から巡航、そして着陸停止までの一連の代表条件を評価できる解析ツールの開発が可能となった。特に全機離着陸高揚力装置展開形態や全機スラストリバーサ作動形態に対する CFD 解析の本格的な設計適用は世界にも例が見られず、本要素技術の適用によって、空力設計に関する開発リスク低減、機体性能要求の達成や開発スケジュールキープが期待できる。

謝辞

本技術開発は、文部科学省　先端研究施設共用促進事業　先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービスの枠組みにて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できた。解析コード技術開発に関しては東北大学殿、宇宙航空研究開発機構殿にご協力いただいた。計算機利用と解析コードチューニングにあたり、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。ここに感謝の意を表します。

参考文献

[1] Nakahashi, K., Togashi, F., Fujita, T., and Ito, Y., “Numerical Simulations on Separation of Scaled Supersonic Experimental Airplane from Rocket Booster at Supersonic Speed,” AIAA Paper 2002-2843, June 2002.

[2] Murayama, M. and Yamamoto, K., “Comparison Study of Drag Prediction for the 3rd CFD Drag Prediction Workshop by Structured and Unstructured Mesh Method,” AIAA Paper 2007-0258, Jan. 2007.

[3] Ito, Y. and Nakahashi, K., “Surface Triangulation for Polygonal Models Based on CAD Data,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 39, Issue 1, 2002, pp. 75-96.

[4] Sharov, D. and Nakahashi, K., “A Boundary Recovery Algorithm for Delaunay Tetrahedral Meshing,” Proceedings of 5th International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations, Mississippi State, Mississippi, 1996, pp. 229-238.

[5] Ito, Y. and Nakahashi, K., “Improvements in the Reliability and Quality of Unstructured Hybrid Mesh Generation,” *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 45, Issue 1, May 2004, pp. 79-108.

[6] Obayashi, S. and Guruswamy, G. P., “Convergence Acceleration of an Aeroelastic Navier-Stokes Solver,” *AIAA Journal*, Vol. 33, No. 6, 1995, pp. 1134-1141.

[7] Burg, C., “Higher Order Variable Extrapolation For Unstructured Finite Volume RANS Flow Solvers,” AIAA Paper 2005-4999, 2005.

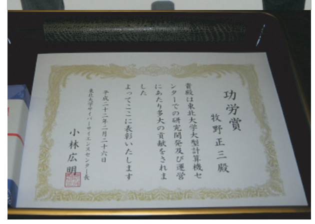
[8] Sharov, D. and Nakahashi, K., “Reordering of Hybrid Unstructured Grids for Lower-Upper Symmetric Gauss-Seidel Computations,” *AIAA Journal*, Vol. 36, No. 3, 1998, pp. 484-486.

[9] Menter, F. R., “Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications,” *AIAA Journa*l, Vol. 32, No. 8, August 1994, pp. 1598-1605.

[10] Menter, F. R., Kuntz, M., and Langtry, R., “Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model,” *Turbulence, Heat and Mass Transfer 4, ed*: K. Hanjalic, Y. Nagano, and M. Tummers, Begell House, Inc., 2003, pp. 625 - 632.

［報告］

平成21年度サイバーサイエンスセンター顕彰について



平成 21 年度サイバーサイエンスセンター顕彰表彰式が行われました。

サイバーサイエンスセンターでは、平成 21 年度から、本センターを利用し顕著な貢献があった方や、永年にわたり本センターの運営に貢献した方などに対する顕彰制度を設けました。

第１回目の本年度は、本学大学院工学研究科の牧野正三教授に功労賞が授与されました。

表彰式は、平成 22 年２月 26 日（金）午後１時から本センター講義室で行われた第８回情報シナジー研究会冒頭に行われ、小林広明センター長から牧野正三教授へ表彰状と副賞が手渡されました。

牧野正三教授は、平成７年に本センターの前身である大型計算機センターの教授に就任と同時に同センターの研究開発部長となり、先端科学分野の研究者の要望を取り入れながら、平成 9 年に並列コンピュータ NX7000/460、Exemplar/X、ACOS3900、平成 10 年にはスーパーコンピュータ SX-4 の導入を推進し大規模科学計算システムの利用環境を飛躍的に高められました。また、センター教授就任中はもとより、大学院工学研究科へ異動されてからも本センターの各種委員としてセンター運営に多大な貢献をされました。

表彰式は、牧野教授がセンター在任中の思い出などを話され、終了しました。

『受賞者挨拶』

東北大学大学院工学研究科　　　　　　　　牧野　正三

平成７年４月から平成 13 年５月まで研究開発部長として在任しました牧野です。このたび、サイバーサイエンスセンターから功労賞を頂き、大変ありがとうございました。連絡を頂くまでこのような賞があることを知らなくてびっくりしました。連絡を頂いた時には頂いてよいかどうか正直躊躇しました。

私の在任中に、センター収入は平成５年度に記録した最高の１億３千万円に比べて半減し、私が離任する直前の平成 12 年度には６千万円ぐらいになりました。そのため在任中は、歴代の事務長、歴代の会計掛長、岡部先生、伊藤システム管理掛長（当時）、加藤システム運用掛長（当時）等の皆さんとほとんど毎週集まっては、利用者の先生方にもっと利用してもらうためにどのように働きかけるかを相談し、全く知らない先生方に電話をかける飛び込み営業を行ったりしました。それでも足りないのでどこを節約するか、あるいは新たな予算をどこから獲得するかなどの努力をしましたが、センターの先生方に配分する予算を大幅に減額したり、非常勤職員の一部の方には他部局に移動して頂いたり、本部の予算を利用するために職種を変更して頂いたりと、関係された皆様に多大なご迷惑をおかけする次第となりましました。関係の方々に深くお詫び申し上げます。

そのような活動の中から、現在も続いている定額制や共同研究制度、高速化推進活動などの提案があり、センターの熱烈なファンを生む要因となり、またセンターの収入もある程度安定する結果となりました。これもひとえにセンターの皆様のお陰と感謝しております。

私は３月末で退職いたしますが、在任中のご厚誼に厚くお礼申し上げるとともに、サイバーサイエンスセンターの益々の発展と、センター教職員の皆様のご健康をお祈り申し上げます。

［報告］

情報処理学会分散コンピュータ博物館認定式が行われました

　情報処理学会分散コンピュータ博物館認定式が、３月９日（火）午前９時３０分から東京大学小柴ホールで行われ、小林広明センター長が出席し、認定書とプレートが白鳥則郎情報処理学会会長から授与されました。

「分散コンピュータ博物館」とは、規模は小さいながら、貴重な資料を蒐集、展示しており、より多くの方々にその存在を知っていただき、利用してもらえるようそれらを情報処理学会の分散コンピュータ博物館として認定する制度です。

　当センター展示室は、東北大学大型計算機センターで使われたコンピュータを中心にパラメトロン・トランジスタ・LSI のパッケージや装置などを保存し、技術の発展をわかりやすく展示していることが、認定に至った理由となっています。

＜情報処理学会　認定式関連ウェブページ＞

http://www.ipsj.or.jp/07editj/history/2010heritage2.html

[Web 版大規模科学計算システムニュース] より

利用負担金について（No.100）

すでにお知らせのとおり、4 月に並列コンピュータシステムが更新され演算性能が向上されます。利用負担金については従来と同じになります。みなさまのご利用をお待ちしております。並列コンピュータ更新の詳細（性能、試験運用、正式運用のスケジュール等）は、大規模科学計算ニュース No.95、No.96 をご覧ください。

負担金項目と負担額

区　分	項　目	負　担　額
演　算 負担経費	スーパー コンピュータ	バッチ処理　演算時間　1 秒につき 0.4 円
		会話型処理　演算時間　1 秒につき　2 円
	並　列 コンピュータ	バッチ処理　演算時間　1 秒につき 0.1 円
		会話型処理　演算時間　1 秒につき 0.2 円
ファイル負担経費		1MB・ 日につき 0.1 円
出 力 負 担 経 費		大判プリンタによるカラープリンタ用紙 1 枚につき 600 円

1. 負担額算定の基礎となる測定数量に端数が出た場合は、切り上げる。
2. 並列コンピュータで並列処理した場合の演算時間は経過時間とする。

（共同利用支援係）

利用負担金割引制度の実施について（No.100）

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 22 年度も以下のとおり実施しますのでご活用願います。

平成 22 年度の利用負担金割引制度の内容

1. 実施期間は平成 22 年 4 月 1 日から平成 23 年 3 月 31 日までです。
2. 実施の対象はスーパーコンピュータ、並列コンピュータの演算負担経費です。したがって、ファイル負担経費および出力負担経費は含まれません。
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。
5. 1～4 について、先端研究施設共用促進事業以外の民間等外部の機関による利用には適用されません。

表 1　負担金割引制度の利用額と負担額

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）

平成22年度講習会計画（No.100）

No.	名　　称	開催時期	講　師	内 容 概 略
1	ＵＮＩＸ入門	5月18日㈫	江川　隆輔	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方 ・プログラムの実行方法
2	スーパーコンピュータ ＳＸ－９の利用法	5月19日㈬	小野　敏　他	・自動ベクトル化 ・自動並列化 ・利用法 ・見学
3	新並列コンピュータの利用法	5月20日㈭	小野　敏 ＮＥＣ	・最適化 ・並列処理 ・利用法 ・見学
4	ＭＡＴＬＡＢ入門	6月18日㈮	陳　国躍 (秋田県立大)	・MATLAB の基本的な使い方
5	センター紹介	7月28日㈬	小林　広明	・センター紹介 ・新システムの紹介 ・分散ｺﾝﾋﾟｭｰﾀ博物館披露 ・見学
6	ネットワークと セキュリティ入門	8月2日㈪	水木　敬明	・ネットワークの基本的な仕組み ・ネットワークの危険性と安全対策
7	Ｇａｕｓｓｉａｎ入門	8月3日㈫	岸本　直樹 (理学研究科)	・Gaussian の基本的な使い方
8	スーパーコンピュータの高速化技法	9月1日㈬	ＮＥＣ	・ベクトル化による高速化技法 ・並列化による高速化技法
9	ＭＰＩプログラミング入門	9月2日㈭	ＮＥＣ他	・MPI による並列プログラミングの基礎 ・利用法
10	ＵＮＩＸ入門	9月6日㈪	後藤　英昭	・UNIX システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方 ・プログラムの実行方法
11	ｽｰﾊﾟｰｺﾝﾋﾟｭｰﾀと並列ｺﾝﾋﾟｭｰﾀの基本的な利用法	9月7日㈫	小野　敏　他	・自動ベクトル化・自動並列化 ・利用法 （No.2、No.3 の講習会から基礎的な内容を抜粋した講習会です。）
12	ＭＡＲＣ入門	9月8日㈬	内藤　英樹 (工学研究科)	・MARC の基本的な使い方
13	Mathematica入門	9月10日㈮	横井　渉央 (情報科学研究科)	・Mathematica の基本的な使い方

注：この年間計画は、予定であることをお含みおきください。詳細は順次ウェブサイト(http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/)でお知らせします。申込開始は 4 月上旬を予定しています。申込みはウェブページ(http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/kosyu.cgi))からお願いします。募集定員は各講習会 20 名（No.6 のみ 30 名）。

（共同利用支援係）

研究成果リスト提出のお願い（No.100）

平素、本センターの大規模科学計算システムをご利用いただきありがとうございます。
本センターでは、学術研究を支える世界最高水準の大規模科学計算システムの導入と利用環境の整備・拡充を行い、研究の発展に資することを心掛けてまいりました。今後もシステムの整備を進めていくには、大規模科学計算システムが多くの研究分野で必要不可欠であり、かつ研究成果が得られていることを広くアピールしていく必要があります。
つきましては、本センター大規模科学計算システムを利用して得られた研究成果を、下記により提出くださるようお願い申し上げます。なお、提出していただく研究成果は、平成21年度中に発表されたものとします。

記

1．研究成果リスト：著者名、論文名、掲載誌（巻号頁）、発表年

2．提出方法　　　：電子メールでお願いします。
提出先メールアドレス　　seika@isc.tohoku.ac.jp

3．締切り日*　　　：平成22年4月16日（金）
＊ 掲載後、締切日が5月14日(金)まで延長になりました。

4．問合せ先　　　：共同利用支援係（022-795-6251,uketuke@isc.tohoku.ac.jp）

論文等への利用の明記について

研究成果を論文等で発表する場合には、本センターを利用した旨を明記してください。

－ 記入例 －
「本研究の実験結果の一部は、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を利用して得られた。」
Part of the experimental results in this research were obtained using supercomputing resources at Cyberscience Center, Tohoku University.

（共同利用支援係）

利用者入出力室の機器移設について（No.101）

『利用者入出力室をご利用の皆様へ』

４月９日(金)から、１階 利用者入出力室でサービスしていた以下の機器は、向かいの部屋（部屋名　利用相談室）に移設します。

サービス機器
- 利用者用端末
- 入出力サーバ
- 大判プリンタ
- 無線 LAN

（共同研究支援係）

新並列コンピュータでのアプリケーションサービスについて（No.101）

並列コンピュータの更新に伴い、サービスしている各アプリケーションのバージョンが変更になりますのでお知らせいたします。どうぞご活用ください。

MSC.Marc/Mentat 2008r1
Gaussian03 RevE.01
Gaussian09 RevA.02
Mathematica 7.01.0
MATLAB (R2010a) ver 7.10.0.499
SAS 9.1.3

ご利用になって不具合等ございましたら、利用相談メールアドレス（sodan05@isc.tohoku.ac.jp）までお問い合わせください。

利用方法については、http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/service/AP/をご覧ください。

（共同利用支援係）

平成22年度の共同研究について（No.102）

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22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11件が採択されましたのでお知らせします。

No.	申請者	所　属	研究課題
1	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
2	河野　裕彦	東北大学大学院 理学研究科 化学専攻	大規模・高精度計算用量子化学計算プログラムの並列化・ベクトル化
3	稲津　大祐	東北大学大学院 理学研究科 地球物理学専攻	海底鉛直地殻変動検出のための数kmスケールを解像する全球海底圧力モデリング
4	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電磁プラズマ不安定についての計算機実験
5	澤谷　邦男	東北大学大学院 工学研究科 電気・通信工学専攻	宇宙太陽発電システム用大規模アレーアンテナの数値解析
6	中橋　和博	東北大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻	Building-Cube MethodによるCFDソルバーの実用化に関する研究
7	山本 悟	東北大学大学院 情報科学研究科 情報基礎科学専攻	次世代タービン複雑流動の大規模シミュレーション技術の開発
8	森川　良忠	大阪大学大学院 工学研究科精密科学 応用物理学専攻	超高速第一原理電子状態計算コードの開発
9	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ネル内遷移流の研究
10	岩本 薫	東京農工大学大学院 工学部機械システム工学専攻	脈動円管内乱流における摩擦抵抗低減効果の最適化
11	岩長　祐伸	独立行政法人 物質・材料研究機構	プラズモニック構造探索による光機能性材料の設計

（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 研究開発公募の報告（No.102）

平成21年度の研究開発がつぎのように終了しましたのでお知らせいたします。

No.	開発課題	開発者	所　属	報　　告	備考
07-01	量子計算シミュレータの開発	鎮目浩輔	筑波大学図書館情報メディア研究科	SX-9用の次のプログラムを開発した。 1.確率振幅でのシミュレータ 2.密度行列でのシミュレータ 3.状態の可視化のため、密度行列のwigner関数を作成するプログラム 4.密度行列でのシミュレータでmpiを用いるもの	終了
08-01	宇宙論的構造形成シミュレーションコードの開発	野口正史	東北大学大学院理学研究科	前年度は､水素分子による冷却を正しく組み込めたことが確認できた。本年度は、HD分子の放射冷却を組み込みを目標とし簡単な放射冷却率の組み込みは完了した。現在はパラメータを変化させHD分子による冷却を調べている段階である。	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	西田　晃	九州大学情報基盤研究開発センター	前年度は、http://www.ssisc.org/にてSX-9対応版を公開した。本年度は､アプリケーションの改善するとともに性能測定･最適化するためのベンチマークの作成･評価を行ったこれらの成果は上記ホームページにてBSD ライセンスにて一般公開している。	終了
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	松岡　浩	東北大学電気通信研究所	前年度は、2次元流体シミュレーションで格子点数を様々に変化させ生成する計算条件の比較を行った。本年度は、3次元モデルに発展させ効率よく計算できるプログラムを作成した。	終了
09-01	多目的並列有限要素コードGeoFEMの移植	三浦　哲	東北大学大学院理学研究科	プログラムの移植、コンパイル作業等を実施しGeoFEMが稼動できる状態にある。	終了

（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22年度 研究開発公募課題の採択について（No.102）

標記の第一次募集分（2 月 19 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
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
10-01	超 SIMD ビット演算による低消費電力流体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	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）

平成22年度第二次研究開発の公募について（No.102）

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、大規模科学計算システムにおけるライブラリを充実し研究者の利便性を向上させるため、平成 22 年度の第二次ライブラリ研究開発を以下の要領で募集します。

本センターは利用者の新規ライブラリ研究開発に対して計算機利用時間の提供等の援助を行います。新規にライブラリを研究開発する研究者及び既に開発されてライブラリに登録したいプログラムをお持ちの方も応募できます。

∞∞∞∞∞　ライブラリ研究開発募集要領　∞∞∞∞∞

１．ライブラリ研究開発の目的及び援助

本センター大規模科学計算システムにおけるソフトウェア・ライブラリの充実及び利用手段の拡充等を目的とし、本センターは研究開発計画に対して計算時間の提供等や、既に開発されているプログラムをライブラリへ登録する場合の計算時間の提供等の援助を行います。

２．研究開発対象分野

研究開発対象分野としては、次のような分野で、当該ライブラリが他の利用者の利用に寄与するものに限ります。

（１）基礎および応用プログラムに関するもの
（２）計算機言語に関するもの
（３）その他計算機利用全般に関するもの

３．応募者の資格

本センター大規模科学計算システム利用有資格者。なお、大学院生は研究開発計画の開発協力者になることはできますが応募者になることはできません。

４．応募締切日

平成 22 年 5 月 21 日（金）

５．応募方法

応募される方は、本センターのウェブサイト

（http://www.ss.isc.tohoku.ac.jp/guide/YOSHI/）の

各種申請用紙を利用して電子メールで申し込みください。

６．研究開発の要件

（１）研究開発期間は当該年度内とし、継続する場合は翌年度に再び申請することができます（３年まで）。

（２）既に研究開発されたものの登録について、計算時間の提供は当該年度とし、その中でライブラリへの登録等の諸作業も行っていただきます。

（３）研究開発の終了あるいは年度末には、研究開発報告書を提出してください。

（４）完成したプログラム等は、他の利用者が利用できる形で本センターに提出してください。その際、プログラム等の利用説明書もあわせて提出してください。

７．研究開発課題の選考

申請された研究開発課題は、本センターにおいて本制度の趣旨に適合しているか否かを審査し、平成 22 年 6 月末までに選考結果を公表する予定です。

８．申請・問い合わせ先

ライブラリ研究開発の申請および問い合わせ等は下記へお願いします。

共同研究支援係　　TEL ： 022-795-6252

E-mail ： rs-sec@isc.tohoku.ac.jp

（スーパーコンピューティング研究部，共同研究支援係）

― SENAC 執筆要項 ―

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～400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

本号の記事にもありますように、本センターの１階展示室が情報処理学会の分散コンピュータ博物館に認定されました。認定手続きの際に多くの所蔵物・展示物の確認を行いましたが、私自身学生時代にお世話になった資料(マニュアル）やコンピュータ機器（の部品）を目にし、カードをぶちまけてひどい目にあったことなど、その当時のことを懐かしく思い出しました（さすがに、パラメトロン計算機の利用経験はありませんが(^_^))。カードパンチ機、操作卓（コンソール)、活字ドラム式ラインプリンタ、磁気テープ装置など、昔のコンピュータ機器は、動作がわかるものが多く、これらの動作音で計算室が賑やかだったように思います。センター展示室には、センターで導入した汎用コンピュータやスーパーコンピュータ本体、初代地球シミュレータ（２ノード)、そして往年のパソコン名機PC-9801/Macintosh、ボードコンピュータ TK80 などが手に触れられるような形で展示されておりますので、是非一度お越しください。[H.K]

先日、演算システムのシャットダウン作業に立ち合いました。ファンの回転音や空調機の稼働音等様々な騒音で賑わっていた部屋が、電源が切れた瞬間気が抜けたように静まり返りました。物音一つ立てないサーバはやけに大きく感じられ、"ただの箱"とはまさにこの事だと気付かされました。

この号がお手元に届くころには、新並列コンピュータシステムと増強されたスーパーコンピュータシステムの運用が始まり、普段の賑やかな光景に戻っていることでしょう。電源やソフトウェアによって演算システムが動いているのは当然のことですが、それ以上に利用者のみなさまからお寄せいただく成果やご質問ご意見こそが原動力であり、"ただの箱"を"万能な箱"にでも"宝箱"にでも変えられると信じています。今年度も、新システムともどもセンターをよろしくお願い申しあげます。[K.O]

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

平成 22 年 4 月発行
編集・発行　東北大学
サイバーサイエンスセンター
仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3
郵便番号　980-8578
印　刷　大成印刷株式会社

システム一覧

計算機システム	ホスト名	機　種
スーパーコンピュータ	super.isc.tohoku.ac.jp	SX-9
並列コンピュータ	gen.isc.tohoku.ac.jp	Express5800

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　(非並列)	無制限	16GB
		am　(Marc専用)	〃	16GB
		am2　(Marc専用)	〃	128GB
		a8　(8並列)	〃	128GB
		a16　(16並列)	〃	256GB
		a32　(32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.43 No.2　2010−4